



## wwPDB EM Map/Model Validation Report ⓘ

Apr 10, 2016 – 01:48 PM BST

PDB ID : 3J67  
EMDB ID: : EMD-5757  
Title : Structural mechanism of the dynein powerstroke (post-powerstroke state)  
Authors : Lin, J.; Okada, K.; Raytchev, M.; Smith, M.C.; Nicastro, D.  
Deposited on : 2013-12-22  
Resolution : 34.00 Å(reported)  
Based on PDB ID : 4AKI

This is a wwPDB EM Map/Model Validation Report for a publicly released PDB/EMDB entry.  
For rigid body fitted models, validation errors reported here could stem from errors in the original structure(s) used in the fitting.  
We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto:validation@mail.wwpdb.org)  
A user guide is available at  
<http://wwpdb.org/validation/2016/EMValidationReportHelp>

---

MolProbity : 4.02b-467  
Mogul : unknown  
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et. al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : trunk27241

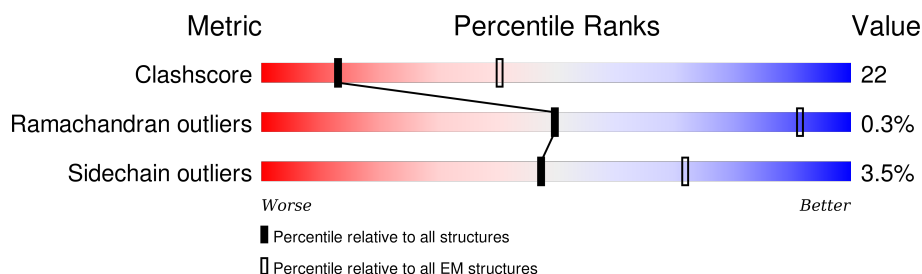
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*ELECTRON MICROSCOPY*


The reported resolution of this entry is 34.00 Å.

Percentile scores (ranging between 0-100) for global validation metrics of the entry are shown in the following graphic. The table shows the number of entries on which the scores are based.



Metric	Whole archive (#Entries)	EM structures (#Entries)
Clashscore	114402	924
Ramachandran outliers	111179	726
Sidechain outliers	111093	686

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains. The red, orange, yellow and green segments on the bar indicate the fraction of residues that contain outliers for  $\geq 3$ , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. A grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions  $\leq 5\%$ .

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	2286	 64% 33% . .

## 2 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 18105 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

In the tables below, the AltConf column contains the number of residues with at least one atom in alternate conformation and the Trace column contains the number of residues modelled with at most 2 atoms.

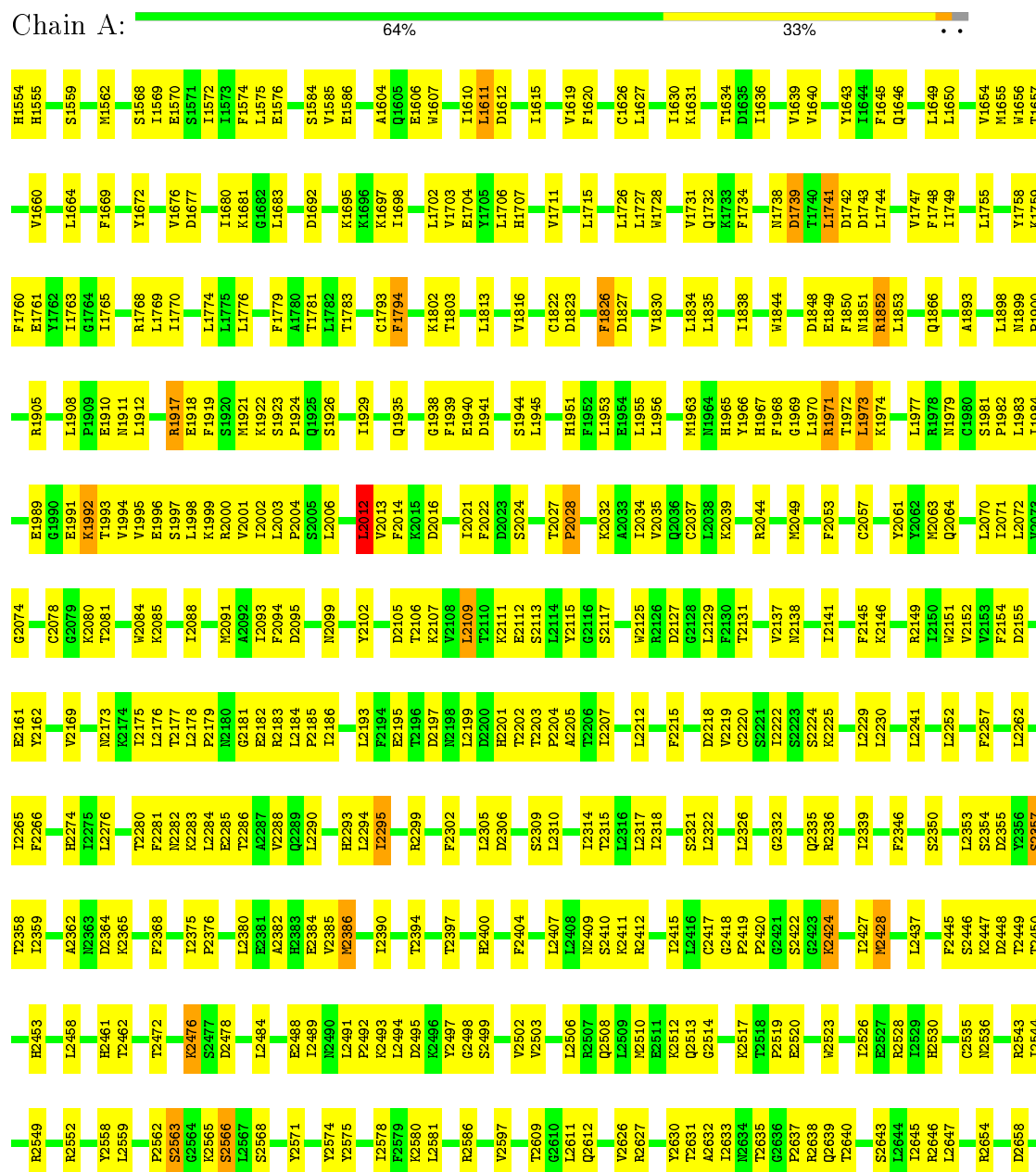
- Molecule 1 is a protein called Dynein motor domain.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S		
1	A	2245	18105	11610	3004	3403	88	0	0

### 3 Residue-property plots

These plots are drawn for all protein, RNA and DNA chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of errors displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry. Residues are color-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. Stretches of 2 or more consecutive residues without any outlier are shown as a green connector. Residues present in the sample, but not in the model, are shown in grey.

- Molecule 1: Dynein motor domain



I4029	V3926	H3838	K3735	F3641	I3525	T3372	LYS	R2911	V2677
L4033	Y3927	I3839	K3736	S3645	F3530	L3373	THR	C2912	I2816
L4034	W3934	L3840	T3737	I3646	D3531	L3373	LEU	M2917	I2817
Q4035	F3935	Q3845	T3740	V3656	L3534	S3400	SER	M2917	D2686
Q4036	F3935	M3846	T3740	V3656	L3534	S3400	SER	M2917	G2687
S4037	I3939	S3847	L3744	F3657	E3537	F3406	ILE	M2920	E2819
E4038	T3943	L3848	L3744	I3658	M3538	L3407	LEU	M2938	S2691
E4039	R3944	S3849	L3760	LYS	M3541	D3409	VAL	M2938	I2822
E4040	L3945	W3850	L3760	SER	M3541	H3413	F3301	T2941	L2694
L4045	L3945	S3851	E3766	ARG	M3541	H3413	E3302	D2942	V2707
L4048	V3946	K3852	F3767	ARG	K3544	M3414	K3303	E2829	N2708
L4048	P3947	T3853	F3768	THR	K3544	L3415	E3304	ILE	L2712
L4048	H3948	Y3854	V3769	THR	D3547	T3416	E3304	VAL	L2728
E4054	G3949	L3855	V3769	ARG	L3547	V3417	W3306	PRU	L2835
P4055	F3950	H3858	W3772	ALA	I3549	I3418	K3307	GLU	L2835
L4059	S3951	S3859	N3773	ARG	K3550	L3429	VAL	VAL	M2738
L4059	Y3955	T3862	I3774	T3669	Y3555	L3429	ASN	ASN	D2839
W4062	D3960	A3865	V3777	R3670	Y3555	R3439	LYS	LYS	E2840
L4063	F3963	A3865	V3778	V3671	R3565	L3440	GLU	GLU	P2841
Q4064	A3964	E3869	A3779	I3674	L3566	L3440	LEU	LEU	D2842
L4065	Y3967	K3870	N3780	L3677	L3570	Q3453	VAL	PHE	L2843
L4070	N3978	F3871	N3784	Y3683	M3577	D3459	THR	THR	Q2845
N4072	N3978	K3872	Y3785	Y3683	M3577	P3460	GLU	GLU	H2755
Y4073	N3979	F3874	F3786	S3687	L3578	I3461	ILE	PRU	M2757
E4074	I3980	M3875	T3787	S3687	E3579	I3462	GLN	GLN	E2757
Q4077	P3981	T3876	R3792	L3690	N3580	S3463	T2960	T2960	L2759
A4078	W3982	C3877	K3799	D3691	E3582	R3464	I2961	I2961	G2760
K4079	A3983	H3878	K3799	K3692	L3583	L3465	R2962	R2962	A2761
S4084	V3985	L3884	L3803	F3694	L3587	I3466	D2963	D2963	S2762
T4085	V3993	P3885	L3803	K3695	L3587	S3467	Y2977	Y2977	R2763
L4088	Y3994	A3886	S3807	M3696	L3590	P3473	K2981	K2981	K2766
M4092	G3995	P3887	K3808	L3697	K3591	A3473	V2982	V2982	L2769
	I3998	L3888	E3809	M3698	K3592	R3476	G2983	G2983	L2769
		L3889	S3810	A3699	E3593	I3481	V2984	V2984	T2770
		Q3890	L3811	M3700	E3593	I3481	N2985	N2985	R2771
			K3812	T3701	N3596	G3482	P2986	P2986	F2772
			L3813	M3702	N3596	D3483	R2987	R2987	V2773
			L3816	F3703	L3601	D3483	S2988	S2988	L2779
			G3817	C3704	L3601	V3488	P2988	P2988	K2780
			S3818	L3705	F3607	I3505	G2990	G2990	Q2783
			I3819	F3708	F3607	I3505	L3010	L3010	P2784
			N3820	E3717	D3612	F3508	V3017	V3017	K2785
			N3821	E3717	L3614	L3509	L3024	L3024	L2786
			L3822	L3720	V3615	R3510	L3024	L3024	H2787
			N3823	T3721	Y3618	S3511	V3028	V3028	R2788
			Y3824	T3721	V3618	R3512	LEU	LEU	F2795
			A3825	V3725	G3622	V3513	LYS	LYS	L2799
			S3832	V3725	G3622	F3518	V2902	V2902	L2799
			K3833	E3728	I3628	V3519	VAL	VAL	L2903
			G3836	S3729	I3628	T3520	ASN	ASN	S2905
			G3837	M3631	M3631	N3521	LEU	LEU	P2906
							ASN	ASN	T2812
									T2813

## 4 Experimental information

Property	Value	Source
Reconstruction method	TOMOGRAPHY	Depositor
Imposed symmetry	POINT, Not provided	Depositor
Number of images	Not provided	Depositor
Resolution determination method	FSC 0.5	Depositor
CTF correction method	Not provided	Depositor
Microscope	FEI TECNAI F30	Depositor
Voltage (kV)	300	Depositor
Electron dose ( $e^-/\text{\AA}^2$ )	Not provided	Depositor
Minimum defocus (nm)	6000	Depositor
Maximum defocus (nm)	8000	Depositor
Magnification	13500	Depositor
Image detector	Generic GATAN (2k x 2k)	Depositor

## 5 Model quality [i](#)

### 5.1 Standard geometry [i](#)

The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with  $|Z| > 5$  is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z  > 2$	RMSZ	$\# Z  > 2$
1	A	0.59	1/18472 (0.0%)	0.82	12/24968 (0.0%)

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	A	0	1

All (1) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	2872	GLU	CG-CD	7.51	1.63	1.51

All (12) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1741	LEU	CB-CG-CD1	8.43	125.33	111.00
1	A	1973	LEU	CB-CG-CD1	-7.36	98.48	111.00
1	A	2872	GLU	OE1-CD-OE2	-7.28	114.56	123.30
1	A	2866	LEU	CA-CB-CG	6.14	129.43	115.30
1	A	1769	LEU	CA-CB-CG	6.05	129.21	115.30
1	A	2866	LEU	CB-CG-CD1	6.04	121.28	111.00
1	A	2012	LEU	CA-CB-CG	5.82	128.68	115.30
1	A	3577	MET	CG-SD-CE	5.71	109.34	100.20
1	A	1611	LEU	CB-CG-CD2	-5.42	101.79	111.00
1	A	1776	LEU	CB-CG-CD1	-5.27	102.04	111.00
1	A	1769	LEU	CB-CG-CD1	5.25	119.92	111.00
1	A	1917	ARG	NE-CZ-NH2	-5.09	117.75	120.30

There are no chirality outliers.

All (1) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	1739	ASP	Peptide

## 5.2 Too-close contacts

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in the chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen atoms added and optimized by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes within the asymmetric unit, whereas Symm-Clashes lists symmetry related clashes.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	18105	0	18146	780	0
All	All	18105	0	18146	780	0

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 22.

All (780) close contacts within the same asymmetric unit are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1620:PHE:HD1	1:A:1760:PHE:CZ	1.58	1.20
1:A:4033:LEU:CD1	1:A:4035:GLN:HB2	1.76	1.16
1:A:3534:LEU:CD1	1:A:3618:TYR:HE2	1.59	1.15
1:A:1992:LYS:HG3	1:A:2024:SER:HB2	1.17	1.13
1:A:3525:ILE:HD11	1:A:3646:ILE:HG22	1.25	1.13
1:A:2141:ILE:HD12	1:A:2146:LYS:HE2	1.20	1.13
1:A:2707:VAL:HB	1:A:2712:LEU:HD11	1.19	1.11
1:A:3777:VAL:HG11	1:A:3895:PHE:HE1	1.07	1.10
1:A:2380:LEU:HD13	1:A:2390:ILE:HD11	1.34	1.08
1:A:2111:LYS:HD3	1:A:2161:GLU:HG3	1.18	1.08
1:A:3530:PHE:CD1	1:A:3618:TYR:HD2	1.71	1.08
1:A:2107:LYS:HE3	1:A:2495:ASP:OD2	1.51	1.08
1:A:3024:LEU:HD11	1:A:3303:LYS:HG3	1.31	1.08
1:A:1645:PHE:HB3	1:A:1765:ILE:HG22	1.34	1.07
1:A:2380:LEU:HD22	1:A:2384:GLU:OE1	1.54	1.07
1:A:2494:LEU:HD13	1:A:2498:GLY:CA	1.85	1.07
1:A:3303:LYS:HA	1:A:3306:TRP:CD1	1.90	1.07
1:A:2920:TRP:HB2	1:A:2989:PRO:HG3	1.06	1.06
1:A:2488:GLU:HB3	1:A:2491:LEU:HD12	1.36	1.05
1:A:1992:LYS:CG	1:A:2024:SER:HB2	1.86	1.05

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2494:LEU:CD1	1:A:2498:GLY:HA2	1.85	1.05
1:A:1823:ASP:HB2	1:A:1852:ARG:O	1.56	1.05
1:A:1645:PHE:HB3	1:A:1765:ILE:CG2	1.86	1.04
1:A:2988:SER:HB3	1:A:2989:PRO:HD2	1.04	1.04
1:A:2707:VAL:CB	1:A:2712:LEU:HD11	1.89	1.03
1:A:1983:LEU:HD22	1:A:1997:SER:OG	1.58	1.02
1:A:2988:SER:HB3	1:A:2989:PRO:CD	1.90	1.02
1:A:2386:MET:HB2	1:A:2627:ARG:HD3	1.42	1.01
1:A:2448:ASP:HB2	1:A:2829:GLU:OE2	1.59	1.00
1:A:1822:CYS:HB2	1:A:1853:LEU:HD21	1.43	1.00
1:A:2476:LYS:H	1:A:2476:LYS:CD	1.74	1.00
1:A:3777:VAL:CG1	1:A:3895:PHE:HE1	1.74	0.99
1:A:3534:LEU:HD12	1:A:3618:TYR:HE2	1.24	0.98
1:A:2380:LEU:CD1	1:A:2390:ILE:HD11	1.93	0.98
1:A:1620:PHE:CD1	1:A:1760:PHE:CZ	2.50	0.98
1:A:3534:LEU:CD1	1:A:3618:TYR:CE2	2.45	0.98
1:A:3303:LYS:O	1:A:3306:TRP:HD1	1.43	0.98
1:A:3777:VAL:HG11	1:A:3895:PHE:CE1	1.97	0.97
1:A:3406:PHE:HB2	1:A:3513:VAL:CG1	1.94	0.97
1:A:1802:LYS:HG2	1:A:1921:MET:HG3	1.47	0.96
1:A:2476:LYS:H	1:A:2476:LYS:HD3	1.26	0.95
1:A:2064:GLN:OE1	1:A:2091:MET:HE1	1.66	0.95
1:A:1970:LEU:HD13	1:A:1974:LYS:HE3	1.46	0.94
1:A:3534:LEU:HD12	1:A:3618:TYR:CE2	2.01	0.94
1:A:3024:LEU:CD1	1:A:3303:LYS:HG3	1.96	0.94
1:A:2988:SER:CB	1:A:2989:PRO:HD2	1.97	0.94
1:A:2787:HIS:HA	1:A:3460:PRO:HD2	1.49	0.94
1:A:2386:MET:CB	1:A:2627:ARG:HD3	1.95	0.94
1:A:3460:PRO:O	1:A:3463:SER:HB2	1.67	0.94
1:A:4065:LEU:HD11	1:A:4070:ILE:HD11	1.48	0.94
1:A:1645:PHE:CB	1:A:1765:ILE:HG22	1.96	0.93
1:A:3530:PHE:CD1	1:A:3618:TYR:CD2	2.56	0.93
1:A:3509:LEU:CD1	1:A:3513:VAL:HG21	1.98	0.93
1:A:1620:PHE:HD1	1:A:1760:PHE:HZ	1.07	0.93
1:A:4033:LEU:HD11	1:A:4035:GLN:HB2	1.47	0.92
1:A:2563:SER:HB3	1:A:2566:SER:H	1.35	0.92
1:A:2111:LYS:HD3	1:A:2161:GLU:CG	2.00	0.91
1:A:2400:HIS:CD2	1:A:2559:LEU:HD13	2.06	0.91
1:A:2137:VAL:O	1:A:2141:ILE:HG23	1.69	0.91
1:A:2400:HIS:NE2	1:A:2559:LEU:HD13	1.86	0.90
1:A:3737:THR:HB	1:A:3740:THR:OG1	1.70	0.90

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1992:LYS:HE2	1:A:2024:SER:O	1.71	0.90
1:A:1939:PHE:CD2	1:A:1940:GLU:O	2.26	0.89
1:A:1823:ASP:CB	1:A:1852:ARG:O	2.20	0.89
1:A:2787:HIS:HA	1:A:3460:PRO:CD	2.03	0.89
1:A:2446:SER:H	1:A:2449:THR:CG2	1.86	0.89
1:A:4033:LEU:HD13	1:A:4035:GLN:HB2	1.54	0.88
1:A:3946:VAL:HG12	1:A:3950:PHE:O	1.72	0.88
1:A:2446:SER:H	1:A:2449:THR:HG23	1.39	0.88
1:A:1726:LEU:HD12	1:A:3984:GLN:HB3	1.55	0.88
1:A:2787:HIS:HA	1:A:3460:PRO:CG	2.02	0.88
1:A:1866:GLN:OE1	1:A:1911:ASN:HB2	1.73	0.88
1:A:1924:PRO:HB2	1:A:1929:ILE:HD11	1.56	0.88
1:A:1562:MET:HB3	1:A:1569:ILE:HD11	1.55	0.87
1:A:2064:GLN:NE2	1:A:2091:MET:SD	2.47	0.87
1:A:2920:TRP:HB2	1:A:2989:PRO:CG	1.99	0.87
1:A:3534:LEU:HD13	1:A:3618:TYR:HE2	1.39	0.86
1:A:3303:LYS:O	1:A:3306:TRP:CD1	2.28	0.86
1:A:1649:LEU:HD11	1:A:1704:GLU:HG3	1.57	0.86
1:A:2787:HIS:HA	1:A:3460:PRO:HG2	1.56	0.85
1:A:2494:LEU:HD13	1:A:2498:GLY:HA2	0.94	0.85
1:A:2112:GLU:HB3	1:A:2117:SER:HB2	1.57	0.85
1:A:2141:ILE:CD1	1:A:2146:LYS:HE2	2.06	0.85
1:A:1940:GLU:HB2	1:A:1989:GLU:O	1.77	0.84
1:A:3024:LEU:HD11	1:A:3303:LYS:CG	2.07	0.84
1:A:3656:VAL:HG13	1:A:3677:LEU:HB3	1.59	0.84
1:A:2131:THR:HG22	1:A:2176:LEU:HD21	1.59	0.84
1:A:2106:THR:OG1	1:A:2154:PHE:HB3	1.78	0.84
1:A:2274:HIS:HE1	1:A:2326:LEU:O	1.61	0.84
1:A:2766:LYS:HE2	1:A:2890:THR:HB	1.58	0.84
1:A:2336:ARG:HD3	1:A:2355:ASP:OD2	1.77	0.84
1:A:2745:ILE:HG23	1:A:2756:MET:HE1	1.57	0.83
1:A:1649:LEU:CD1	1:A:1704:GLU:HG3	2.08	0.83
1:A:2488:GLU:HB3	1:A:2491:LEU:CD1	2.08	0.82
1:A:2488:GLU:CB	1:A:2491:LEU:HD12	2.09	0.82
1:A:2920:TRP:CB	1:A:2989:PRO:HG3	2.01	0.82
1:A:2111:LYS:NZ	1:A:2161:GLU:HG2	1.94	0.82
1:A:2755:HIS:HB2	1:A:2911:ARG:O	1.79	0.82
1:A:1604:ALA:HA	1:A:1607:TRP:NE1	1.95	0.81
1:A:1849:GLU:HG2	1:A:1899:ASN:ND2	1.95	0.81
1:A:3303:LYS:HA	1:A:3306:TRP:NE1	1.95	0.81
1:A:3923:VAL:HG23	1:A:4038:GLU:HA	1.62	0.81

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3645:SER:HB3	1:A:3890:GLN:HE21	1.45	0.81
1:A:3303:LYS:C	1:A:3306:TRP:HD1	1.84	0.80
1:A:3799:LYS:O	1:A:3803:LEU:HG	1.82	0.80
1:A:1630:ILE:HG22	1:A:1655:MET:SD	2.21	0.80
1:A:2362:ALA:HB3	1:A:2365:LYS:O	1.81	0.80
1:A:2332:GLY:HA2	1:A:2335:GLN:HB2	1.62	0.80
1:A:2476:LYS:NZ	1:A:2528:ARG:HD2	1.97	0.80
1:A:2064:GLN:OE1	1:A:2091:MET:CE	2.29	0.80
1:A:4033:LEU:CD1	1:A:4035:GLN:CB	2.60	0.79
1:A:3303:LYS:CA	1:A:3306:TRP:CD1	2.66	0.79
1:A:3530:PHE:HD1	1:A:3618:TYR:HD2	1.31	0.79
1:A:1604:ALA:HA	1:A:1607:TRP:CD1	2.18	0.78
1:A:1970:LEU:HD12	1:A:1971:ARG:N	1.99	0.78
1:A:1956:LEU:HB3	1:A:1968:PHE:CE2	2.18	0.78
1:A:3509:LEU:HD12	1:A:3513:VAL:CG2	2.13	0.78
1:A:2181:GLY:O	1:A:2182:GLU:HG3	1.83	0.78
1:A:2707:VAL:CG1	1:A:2712:LEU:CD1	2.61	0.77
1:A:2064:GLN:OE1	1:A:2151:TRP:HH2	1.67	0.77
1:A:2476:LYS:HG2	1:A:2478:ASP:O	1.85	0.76
1:A:3460:PRO:O	1:A:3463:SER:CB	2.32	0.76
1:A:2032:LYS:O	1:A:2035:VAL:HG12	1.85	0.76
1:A:3534:LEU:HD11	1:A:3614:LEU:HD23	1.67	0.76
1:A:2107:LYS:HE2	1:A:2499:SER:HB3	1.67	0.76
1:A:3816:LEU:HD23	1:A:3847:SER:OG	1.86	0.76
1:A:3525:ILE:CD1	1:A:3646:ILE:HG22	2.13	0.76
1:A:1939:PHE:HD2	1:A:1940:GLU:O	1.67	0.76
1:A:2563:SER:HB2	1:A:2566:SER:OG	1.86	0.75
1:A:1620:PHE:CD1	1:A:1760:PHE:HZ	1.96	0.75
1:A:3939:ILE:HG13	1:A:4010:LEU:CD2	2.16	0.75
1:A:3946:VAL:CG1	1:A:3950:PHE:O	2.34	0.75
1:A:2745:ILE:HG23	1:A:2756:MET:CE	2.17	0.75
1:A:2411:LYS:HG2	1:A:2530:HIS:HE1	1.51	0.74
1:A:1569:ILE:HA	1:A:1584:SER:HA	1.70	0.74
1:A:3406:PHE:HB2	1:A:3513:VAL:HG11	1.69	0.73
1:A:2176:LEU:O	1:A:2183:ARG:HA	1.88	0.73
1:A:3406:PHE:HB2	1:A:3513:VAL:HG12	1.69	0.73
1:A:1744:LEU:HA	1:A:1760:PHE:CE2	2.23	0.73
1:A:3534:LEU:HD13	1:A:3618:TYR:CE2	2.19	0.73
1:A:2707:VAL:CG1	1:A:2712:LEU:HD11	2.18	0.73
1:A:2201:HIS:CE1	1:A:2497:TYR:HA	2.24	0.73
1:A:2112:GLU:HB3	1:A:2117:SER:CB	2.19	0.73

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1956:LEU:HB3	1:A:1968:PHE:HE2	1.53	0.73
1:A:3871:PHE:CZ	1:A:3873:MET:HB2	2.22	0.73
1:A:2707:VAL:HB	1:A:2712:LEU:CD1	2.09	0.73
1:A:1822:CYS:SG	1:A:1850:PHE:HA	2.29	0.72
1:A:1940:GLU:HG3	1:A:1941:ASP:H	1.52	0.72
1:A:1645:PHE:CB	1:A:1765:ILE:CG2	2.61	0.72
1:A:1849:GLU:HG2	1:A:1899:ASN:HD22	1.53	0.72
1:A:1983:LEU:HD21	1:A:2000:ARG:HD2	1.69	0.72
1:A:3566:LEU:HA	1:A:3583:LEU:CD2	2.18	0.72
1:A:2787:HIS:CA	1:A:3460:PRO:HD2	2.20	0.72
1:A:2111:LYS:HZ2	1:A:2161:GLU:HG2	1.51	0.72
1:A:3618:TYR:N	1:A:3618:TYR:CD1	2.54	0.71
1:A:3525:ILE:HD11	1:A:3646:ILE:CG2	2.15	0.71
1:A:3777:VAL:CG1	1:A:3895:PHE:CE1	2.63	0.71
1:A:3303:LYS:CA	1:A:3306:TRP:HD1	2.02	0.71
1:A:3774:ILE:O	1:A:3778:VAL:HG23	1.91	0.71
1:A:3530:PHE:HD1	1:A:3618:TYR:CD2	2.04	0.70
1:A:3792:ARG:HB2	1:A:3955:TYR:CD1	2.26	0.70
1:A:2175:ILE:HG12	1:A:2183:ARG:HB3	1.74	0.70
1:A:1774:LEU:HD21	1:A:1922:LYS:O	1.91	0.70
1:A:3645:SER:HB3	1:A:3890:GLN:NE2	2.06	0.70
1:A:2960:THR:HB	1:A:2963:ASP:HB2	1.73	0.70
1:A:1612:ASP:HA	1:A:1615:ILE:CD1	2.21	0.70
1:A:3871:PHE:HZ	1:A:3873:MET:HB2	1.56	0.70
1:A:2125:TRP:CZ2	1:A:2178:LEU:HD13	2.28	0.69
1:A:3305:ARG:O	1:A:3307:LEU:N	2.24	0.69
1:A:2514:GLY:O	1:A:2523:TRP:CH2	2.45	0.69
1:A:4033:LEU:HD13	1:A:4035:GLN:CB	2.21	0.69
1:A:2203:THR:HG22	1:A:2205:ALA:H	1.56	0.69
1:A:3330:TYR:OH	1:A:3346:LEU:HD22	1.92	0.69
1:A:2003:LEU:HA	1:A:2006:LEU:HD12	1.74	0.69
1:A:2386:MET:HB3	1:A:2627:ARG:HD3	1.75	0.68
1:A:1970:LEU:HD13	1:A:1974:LYS:CE	2.20	0.68
1:A:1967:HIS:C	1:A:1968:PHE:HD1	1.97	0.68
1:A:3848:LEU:HD21	1:A:3852:LYS:HE3	1.75	0.68
1:A:1646:GLN:NE2	1:A:1758:TYR:OH	2.26	0.68
1:A:3979:ASN:O	1:A:3981:PRO:HD2	1.92	0.68
1:A:3785:TYR:HE2	1:A:3859:VAL:HG22	1.57	0.68
1:A:1995:VAL:HG21	1:A:2024:SER:HB3	1.74	0.68
1:A:3509:LEU:HD12	1:A:3513:VAL:HG21	1.75	0.68
1:A:3509:LEU:CD1	1:A:3513:VAL:CG2	2.68	0.68

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3837:GLY:O	1:A:3871:PHE:HD1	1.77	0.68
1:A:2294:LEU:HB3	1:A:2317:LEU:HD22	1.74	0.68
1:A:2285:GLU:HB2	1:A:2412:ARG:NH2	2.08	0.68
1:A:2293:HIS:CE1	1:A:2409:ASN:HB3	2.29	0.68
1:A:3850:TRP:NE1	1:A:3854:TYR:HB3	2.08	0.68
1:A:3566:LEU:HA	1:A:3583:LEU:HD21	1.76	0.68
1:A:2252:LEU:HD21	1:A:2310:LEU:HD23	1.76	0.68
1:A:2745:ILE:HG12	1:A:2756:MET:HE3	1.76	0.68
1:A:3509:LEU:HD11	1:A:3513:VAL:HG21	1.76	0.67
1:A:2107:LYS:CE	1:A:2495:ASP:OD2	2.37	0.67
1:A:1983:LEU:HB3	1:A:1993:THR:HG23	1.75	0.67
1:A:2419:PRO:O	1:A:2424:LYS:HE3	1.93	0.67
1:A:2080:LYS:HG2	1:A:2215:PHE:CE1	2.30	0.67
1:A:2305:LEU:HD11	1:A:2368:PHE:CG	2.29	0.67
1:A:1698:ILE:O	1:A:1702:LEU:HG	1.94	0.67
1:A:1744:LEU:HA	1:A:1760:PHE:CD2	2.29	0.67
1:A:2476:LYS:HZ1	1:A:2528:ARG:HD2	1.59	0.67
1:A:2493:LYS:HG3	1:A:2494:LEU:H	1.60	0.67
1:A:2293:HIS:NE2	1:A:2409:ASN:HB3	2.09	0.67
1:A:1630:ILE:HA	1:A:1634:THR:HG22	1.75	0.67
1:A:3998:ILE:HG21	1:A:4004:LEU:HG	1.77	0.66
1:A:3935:PHE:HB2	1:A:4014:VAL:HG11	1.76	0.66
1:A:1822:CYS:SG	1:A:1849:GLU:O	2.53	0.66
1:A:3473:ALA:HB3	1:A:3476:ARG:O	1.96	0.66
1:A:1626:CYS:SG	1:A:1639:VAL:HG11	2.35	0.66
1:A:1703:VAL:HG13	1:A:1770:ILE:HD13	1.78	0.66
1:A:3979:ASN:C	1:A:3981:PRO:HD2	2.16	0.66
1:A:2631:THR:O	1:A:2635:THR:HG22	1.96	0.66
1:A:2141:ILE:HD12	1:A:2146:LYS:CE	2.12	0.66
1:A:2220:CYS:SG	1:A:2224:SER:HB2	2.36	0.65
1:A:2495:ASP:O	1:A:2498:GLY:N	2.30	0.65
1:A:2707:VAL:CG1	1:A:2712:LEU:HD12	2.26	0.65
1:A:1645:PHE:CG	1:A:1765:ILE:HG22	2.32	0.65
1:A:3819:ILE:O	1:A:3823:ASN:HB2	1.96	0.65
1:A:2448:ASP:HB2	1:A:2829:GLU:CD	2.17	0.65
1:A:3566:LEU:CD1	1:A:3570:LEU:HD11	2.26	0.65
1:A:3566:LEU:O	1:A:3570:LEU:HG	1.97	0.65
1:A:2382:ALA:O	1:A:2385:VAL:HG12	1.96	0.65
1:A:2290:LEU:HD13	1:A:2407:LEU:HD23	1.79	0.65
1:A:1706:LEU:CD2	1:A:1935:GLN:HG2	2.27	0.65
1:A:2842:ASP:O	1:A:2845:GLN:HG2	1.97	0.65

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2514:GLY:HA3	1:A:2523:TRP:CZ2	2.32	0.65
1:A:2512:LYS:O	1:A:2513:GLN:HB2	1.97	0.65
1:A:2095:ASP:CG	1:A:2149:ARG:NH2	2.50	0.64
1:A:2779:LEU:HD23	1:A:2812:ARG:O	1.98	0.64
1:A:3618:TYR:N	1:A:3618:TYR:HD1	1.94	0.64
1:A:3459:ASP:OD2	1:A:3461:ILE:HG12	1.97	0.64
1:A:3998:ILE:CG2	1:A:4004:LEU:HG	2.27	0.64
1:A:1826:PHE:HE1	1:A:1853:LEU:HD22	1.62	0.64
1:A:3566:LEU:HD13	1:A:3570:LEU:CD1	2.27	0.64
1:A:2285:GLU:HB2	1:A:2412:ARG:HH22	1.62	0.64
1:A:1938:GLY:O	1:A:1989:GLU:HB3	1.98	0.64
1:A:1612:ASP:HA	1:A:1615:ILE:HD11	1.78	0.64
1:A:2728:LEU:HD12	1:A:2771:ARG:CZ	2.27	0.64
1:A:3010:LEU:HD21	1:A:3317:SER:HB3	1.79	0.64
1:A:2315:THR:HG21	1:A:2350:SER:HB3	1.80	0.64
1:A:3737:THR:OG1	1:A:3740:THR:HB	1.98	0.63
1:A:3303:LYS:HD2	1:A:3306:TRP:CD1	2.33	0.63
1:A:1953:LEU:CD1	1:A:1973:LEU:HB3	2.27	0.63
1:A:1970:LEU:CD1	1:A:1974:LYS:HE3	2.24	0.63
1:A:3641:PHE:HA	1:A:3889:LEU:HD21	1.81	0.63
1:A:1738:ASN:O	1:A:1739:ASP:OD1	2.16	0.63
1:A:1995:VAL:HG22	1:A:2022:PHE:CE2	2.33	0.63
1:A:2222:ILE:HG23	1:A:2284:LEU:HD11	1.79	0.63
1:A:2563:SER:CB	1:A:2566:SER:OG	2.47	0.63
1:A:1827:ASP:HB3	1:A:1830:VAL:HG12	1.81	0.63
1:A:1991:GLU:O	1:A:1995:VAL:HG23	1.99	0.62
1:A:3785:TYR:CE2	1:A:3859:VAL:HG22	2.33	0.62
1:A:3792:ARG:HB2	1:A:3955:TYR:CE1	2.34	0.62
1:A:2282:ASN:HB3	1:A:2552:ARG:HG3	1.82	0.62
1:A:3307:LEU:HA	1:A:3310:THR:HB	1.81	0.62
1:A:1748:PHE:CD2	1:A:1755:LEU:HD22	2.34	0.62
1:A:2536:ASN:HB2	1:A:2543:ARG:HE	1.64	0.62
1:A:3583:LEU:O	1:A:3587:LEU:HG	2.00	0.62
1:A:1992:LYS:HG3	1:A:2024:SER:CB	2.11	0.62
1:A:1562:MET:CB	1:A:1569:ILE:HD11	2.29	0.62
1:A:1967:HIS:O	1:A:1968:PHE:HD1	1.82	0.62
1:A:2632:ALA:HB3	1:A:2647:LEU:HD21	1.80	0.62
1:A:1996:GLU:O	1:A:2000:ARG:HG3	2.00	0.62
1:A:2386:MET:CB	1:A:2627:ARG:CD	2.77	0.61
1:A:1969:GLY:O	1:A:1972:THR:HB	2.01	0.61
1:A:3530:PHE:CE1	1:A:3618:TYR:CD2	2.88	0.61

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1826:PHE:CE1	1:A:1853:LEU:HD22	2.35	0.61
1:A:2394:THR:H	1:A:2397:THR:HB	1.64	0.61
1:A:3912:GLY:O	1:A:3915:PHE:CE2	2.53	0.61
1:A:3409:ASP:HB3	1:A:3518:PHE:HB2	1.81	0.61
1:A:3700:MET:HB3	1:A:4085:THR:HG21	1.81	0.61
1:A:3330:TYR:CE2	1:A:3346:LEU:HD13	2.36	0.61
1:A:1726:LEU:CD1	1:A:3984:GLN:HB3	2.30	0.61
1:A:1574:PHE:HB3	1:A:1576:GLU:H	1.65	0.61
1:A:1692:ASP:O	1:A:1695:LYS:HB3	2.00	0.61
1:A:1851:ASN:HD21	1:A:1899:ASN:HB2	1.66	0.60
1:A:2151:TRP:HE3	1:A:2193:LEU:HD11	1.64	0.60
1:A:1630:ILE:CG2	1:A:1655:MET:SD	2.89	0.60
1:A:2677:VAL:HG11	1:A:2686:LEU:HD21	1.83	0.60
1:A:2427:ILE:HD12	1:A:2559:LEU:CD2	2.31	0.60
1:A:2332:GLY:HA2	1:A:2335:GLN:CB	2.31	0.60
1:A:3817:GLY:H	1:A:3821:ASN:HB2	1.66	0.60
1:A:1900:PRO:HB3	1:A:1905:ARG:HA	1.83	0.60
1:A:2785:LYS:HD3	1:A:3482:GLY:O	2.01	0.60
1:A:1620:PHE:HA	1:A:1760:PHE:CE1	2.37	0.60
1:A:1983:LEU:HD21	1:A:2000:ARG:CD	2.31	0.60
1:A:3886:ALA:N	1:A:3887:PRO:HD2	2.16	0.60
1:A:2755:HIS:NE2	1:A:2835:LEU:HG	2.17	0.60
1:A:1656:TRP:O	1:A:1660:VAL:HG12	2.01	0.60
1:A:2640:THR:HG23	1:A:2643:SER:H	1.66	0.60
1:A:2293:HIS:CE1	1:A:2409:ASN:CB	2.84	0.60
1:A:2941:THR:HG22	1:A:2942:ASP:H	1.67	0.60
1:A:4065:LEU:HD11	1:A:4070:ILE:CD1	2.28	0.59
1:A:3618:TYR:O	1:A:3622:GLY:N	2.34	0.59
1:A:2380:LEU:HD11	1:A:2390:ILE:HD11	1.83	0.59
1:A:3303:LYS:HA	1:A:3306:TRP:HE1	1.67	0.59
1:A:2728:LEU:HD12	1:A:2771:ARG:NH2	2.17	0.59
1:A:3429:LEU:HD21	1:A:3439:ARG:HB3	1.83	0.59
1:A:3948:HIS:NE2	1:A:4072:ASN:CG	2.55	0.59
1:A:2476:LYS:N	1:A:2476:LYS:CD	2.52	0.59
1:A:1940:GLU:HG3	1:A:1941:ASP:N	2.18	0.59
1:A:2071:ILE:HB	1:A:2212:LEU:HD12	1.85	0.59
1:A:2034:ILE:HD12	1:A:2061:TYR:CZ	2.38	0.59
1:A:3737:THR:HB	1:A:3740:THR:CB	2.33	0.58
1:A:2155:ASP:OD1	1:A:2549:ARG:NH2	2.35	0.58
1:A:4024:VAL:HG11	1:A:4062:TRP:CD2	2.38	0.58
1:A:2339:ILE:HG23	1:A:2353:LEU:HB3	1.83	0.58

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3541:MET:HA	1:A:3544:LYS:HG2	1.83	0.58
1:A:2241:LEU:HD13	1:A:2299:ARG:HH11	1.68	0.58
1:A:2489:ILE:HG22	1:A:2535:CYS:HB3	1.84	0.58
1:A:2257:PHE:HD1	1:A:2262:LEU:HD11	1.69	0.58
1:A:2081:THR:O	1:A:2085:LYS:HB2	2.02	0.58
1:A:3945:LEU:O	1:A:3948:HIS:O	2.21	0.58
1:A:4033:LEU:HD12	1:A:4035:GLN:N	2.18	0.58
1:A:2476:LYS:N	1:A:2476:LYS:HD3	2.09	0.58
1:A:3810:SER:O	1:A:3838:TRP:HB2	2.03	0.58
1:A:3555:TYR:HE1	1:A:3593:GLU:HG2	1.68	0.58
1:A:1559:SER:HB3	1:A:1572:ILE:HG22	1.86	0.58
1:A:1779:PHE:O	1:A:1783:THR:HG22	2.03	0.58
1:A:1984:ILE:HG21	1:A:1989:GLU:HG3	1.84	0.58
1:A:2201:HIS:NE2	1:A:2497:TYR:O	2.37	0.58
1:A:2419:PRO:O	1:A:2424:LYS:CE	2.52	0.58
1:A:3592:LYS:O	1:A:3596:ASN:HB2	2.03	0.58
1:A:2446:SER:H	1:A:2449:THR:HG21	1.67	0.58
1:A:2787:HIS:CA	1:A:3460:PRO:HG2	2.32	0.58
1:A:3851:VAL:HG13	1:A:3855:LEU:HD23	1.84	0.58
1:A:2437:LEU:H	1:A:2437:LEU:HD12	1.69	0.58
1:A:4021:LEU:HD23	1:A:4023:ILE:HG13	1.85	0.58
1:A:2354:SER:OG	1:A:2357:SER:HB2	2.02	0.58
1:A:3537:GLU:OE1	1:A:3618:TYR:OH	2.21	0.58
1:A:2476:LYS:HZ2	1:A:2528:ARG:HD2	1.68	0.57
1:A:3519:VAL:HG13	1:A:3521:ASN:ND2	2.19	0.57
1:A:2380:LEU:HD13	1:A:2390:ILE:CD1	2.23	0.57
1:A:3912:GLY:O	1:A:3915:PHE:CZ	2.57	0.57
1:A:2938:MET:SD	1:A:3321:ILE:HG21	2.45	0.57
1:A:2808:LEU:HD21	1:A:2856:LEU:HD12	1.86	0.57
1:A:1704:GLU:OE2	1:A:1768:ARG:NH1	2.37	0.57
1:A:2131:THR:HG22	1:A:2176:LEU:CD2	2.34	0.57
1:A:2846:GLY:O	1:A:2849:TYR:HB3	2.04	0.57
1:A:2784:PRO:HG2	1:A:2817:ILE:HD13	1.84	0.57
1:A:2111:LYS:CD	1:A:2161:GLU:HG3	2.13	0.57
1:A:2336:ARG:CD	1:A:2355:ASP:OD2	2.51	0.57
1:A:1781:THR:HG21	1:A:1919:PHE:CD1	2.39	0.57
1:A:4037:SER:HB3	1:A:4040:GLU:HB3	1.87	0.57
1:A:1939:PHE:O	1:A:1940:GLU:HB3	2.05	0.57
1:A:1706:LEU:HD21	1:A:1935:GLN:HG2	1.86	0.57
1:A:3939:ILE:HG13	1:A:4010:LEU:HD22	1.86	0.57
1:A:4017:GLY:HA3	1:A:4021:LEU:HD12	1.87	0.57

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1911:ASN:OD1	1:A:1912:LEU:N	2.38	0.57
1:A:4022:GLN:HG2	1:A:4022:GLN:O	2.05	0.57
1:A:1619:VAL:HG12	1:A:1760:PHE:HD1	1.70	0.56
1:A:1965:HIS:HD2	1:A:2212:LEU:CD2	2.18	0.56
1:A:3631:MET:CE	1:A:3698:MET:HG3	2.36	0.56
1:A:2627:ARG:NH1	1:A:2630:TYR:CE2	2.74	0.56
1:A:1940:GLU:CB	1:A:1989:GLU:O	2.51	0.56
1:A:3538:ASN:HB3	1:A:3541:MET:HG2	1.87	0.56
1:A:1620:PHE:CZ	1:A:1743:ASP:HB3	2.40	0.56
1:A:1995:VAL:HG22	1:A:2022:PHE:CD2	2.40	0.56
1:A:2137:VAL:O	1:A:2141:ILE:CG2	2.50	0.56
1:A:2127:ASP:O	1:A:2131:THR:OG1	2.23	0.56
1:A:3839:ILE:HG23	1:A:3873:MET:HG3	1.86	0.56
1:A:2868:ASP:HB2	1:A:2872:GLU:OE1	2.06	0.56
1:A:1852:ARG:HG3	1:A:1852:ARG:O	2.06	0.56
1:A:2220:CYS:SG	1:A:2224:SER:CB	2.94	0.56
1:A:2305:LEU:HD11	1:A:2368:PHE:CD1	2.41	0.55
1:A:2514:GLY:C	1:A:2523:TRP:CH2	2.80	0.55
1:A:2707:VAL:HG12	1:A:2712:LEU:CD1	2.37	0.55
1:A:2386:MET:HB3	1:A:2627:ARG:CD	2.36	0.55
1:A:2106:THR:HG1	1:A:2154:PHE:HB3	1.71	0.55
1:A:3440:LEU:HD23	1:A:3462:ILE:HD12	1.88	0.55
1:A:2151:TRP:CE3	1:A:2193:LEU:HD11	2.41	0.55
1:A:2786:ILE:O	1:A:3460:PRO:HB2	2.07	0.55
1:A:1983:LEU:HB3	1:A:1993:THR:CG2	2.36	0.55
1:A:1627:LEU:HD11	1:A:1631:LYS:HE3	1.89	0.55
1:A:2410:SER:O	1:A:2411:LYS:HB2	2.06	0.55
1:A:3683:TYR:O	1:A:3687:SER:HB2	2.07	0.55
1:A:2788:ARG:HG3	1:A:3459:ASP:HA	1.89	0.55
1:A:2707:VAL:HG12	1:A:2712:LEU:HD12	1.89	0.54
1:A:2064:GLN:CD	1:A:2091:MET:CE	2.75	0.54
1:A:1823:ASP:HB2	1:A:1853:LEU:HD23	1.88	0.54
1:A:2563:SER:CB	1:A:2566:SER:H	2.15	0.54
1:A:2002:ILE:HB	1:A:2014:PHE:CE2	2.42	0.54
1:A:3877:CYS:SG	1:A:3884:LEU:CD2	2.96	0.54
1:A:2181:GLY:C	1:A:2182:GLU:HG3	2.27	0.54
1:A:4023:ILE:HD12	1:A:4029:ILE:HD11	1.87	0.54
1:A:4059:LEU:HA	1:A:4063:LEU:HD13	1.89	0.54
1:A:2141:ILE:HG22	1:A:2145:PHE:HB2	1.90	0.54
1:A:2230:LEU:HD23	1:A:2288:VAL:HG13	1.90	0.54
1:A:2707:VAL:CB	1:A:2712:LEU:CD1	2.72	0.54

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2064:GLN:OE1	1:A:2151:TRP:CH2	2.55	0.54
1:A:1849:GLU:CG	1:A:1899:ASN:ND2	2.70	0.54
1:A:1970:LEU:C	1:A:1970:LEU:HD12	2.28	0.54
1:A:1645:PHE:CZ	1:A:1649:LEU:HD22	2.43	0.54
1:A:2305:LEU:CD1	1:A:2368:PHE:CD1	2.91	0.54
1:A:2063:MET:HB3	1:A:2070:LEU:HD11	1.90	0.54
1:A:3566:LEU:HD13	1:A:3570:LEU:HD11	1.86	0.54
1:A:2002:ILE:HG22	1:A:2006:LEU:HD11	1.88	0.54
1:A:3703:PHE:CE1	1:A:3766:GLU:HG2	2.43	0.54
1:A:3509:LEU:HD12	1:A:3513:VAL:HG23	1.88	0.54
1:A:2336:ARG:HG2	1:A:2355:ASP:OD1	2.08	0.53
1:A:3817:GLY:H	1:A:3821:ASN:CB	2.21	0.53
1:A:3440:LEU:CD2	1:A:3462:ILE:HD12	2.38	0.53
1:A:2173:ASN:HB3	1:A:2175:ILE:HG22	1.90	0.53
1:A:3566:LEU:CA	1:A:3583:LEU:HD21	2.37	0.53
1:A:3612:ASP:O	1:A:3615:VAL:HG22	2.08	0.53
1:A:2786:ILE:HG12	1:A:2821:ASN:HA	1.90	0.53
1:A:2833:THR:HG21	1:A:2841:PRO:HD2	1.91	0.53
1:A:3547:ASP:HA	1:A:3550:LYS:HB3	1.91	0.53
1:A:2787:HIS:HB3	1:A:3461:ILE:HG23	1.91	0.53
1:A:3481:ILE:O	1:A:3483:ASP:N	2.36	0.53
1:A:2450:THR:H	1:A:2453:HIS:CE1	2.27	0.53
1:A:1981:SER:HB3	1:A:1982:PRO:HD3	1.91	0.53
1:A:1979:ASN:O	1:A:1983:LEU:HD13	2.09	0.53
1:A:2095:ASP:CG	1:A:2149:ARG:HH22	2.11	0.53
1:A:3656:VAL:CG1	1:A:3677:LEU:HB3	2.36	0.53
1:A:2201:HIS:CE1	1:A:2497:TYR:CA	2.91	0.53
1:A:2419:PRO:O	1:A:2424:LYS:NZ	2.42	0.52
1:A:3946:VAL:HB	1:A:3947:PRO:HA	1.91	0.52
1:A:1604:ALA:HA	1:A:1607:TRP:HE1	1.72	0.52
1:A:2788:ARG:HB2	1:A:3459:ASP:HB3	1.91	0.52
1:A:2795:PHE:CE2	1:A:2799:LEU:HD11	2.44	0.52
1:A:2488:GLU:CD	1:A:2491:LEU:HD11	2.29	0.52
1:A:2339:ILE:HG12	1:A:2353:LEU:HD23	1.91	0.52
1:A:2012:LEU:HD13	1:A:2016:ASP:OD2	2.10	0.52
1:A:1620:PHE:HA	1:A:1760:PHE:HE1	1.74	0.52
1:A:1822:CYS:SG	1:A:1849:GLU:C	2.88	0.52
1:A:2462:THR:HG22	1:A:2476:LYS:HA	1.90	0.52
1:A:2285:GLU:CB	1:A:2412:ARG:NH2	2.73	0.52
1:A:3017:VAL:HG21	1:A:3313:PHE:CE2	2.44	0.52
1:A:3692:LYS:HE3	1:A:3898:GLU:HB3	1.91	0.52

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2578:ILE:HG21	1:A:2630:TYR:HB2	1.91	0.52
1:A:3911:TRP:HH2	1:A:3926:VAL:CG1	2.23	0.52
1:A:3951:SER:HB2	1:A:4002:LYS:HD2	1.91	0.52
1:A:4065:LEU:O	1:A:4065:LEU:HD12	2.10	0.52
1:A:4021:LEU:HD23	1:A:4023:ILE:CG1	2.40	0.52
1:A:1803:THR:HG21	1:A:1848:ASP:OD1	2.10	0.52
1:A:1939:PHE:HD1	1:A:1939:PHE:H	1.57	0.52
1:A:2302:PHE:HA	1:A:2310:LEU:HD11	1.92	0.52
1:A:3995:GLY:HA2	1:A:3998:ILE:HD13	1.91	0.52
1:A:4034:LEU:HD23	1:A:4034:LEU:O	2.10	0.52
1:A:2115:TYR:OH	1:A:2162:TYR:O	2.23	0.52
1:A:3854:TYR:O	1:A:3858:HIS:HB2	2.10	0.51
1:A:1650:LEU:HD11	1:A:1747:VAL:HG11	1.92	0.51
1:A:2494:LEU:HD12	1:A:2494:LEU:O	2.10	0.51
1:A:2645:ILE:CD1	1:A:2686:LEU:HG	2.40	0.51
1:A:1606:GLU:O	1:A:1610:ILE:HG12	2.11	0.51
1:A:2102:TYR:HB2	1:A:2152:VAL:HG22	1.93	0.51
1:A:1645:PHE:HB2	1:A:1697:LYS:HG3	1.91	0.51
1:A:3934:TRP:CB	1:A:4023:ILE:HD13	2.41	0.51
1:A:1707:HIS:O	1:A:1711:VAL:HG23	2.10	0.51
1:A:3737:THR:OG1	1:A:3740:THR:CB	2.59	0.51
1:A:1926:SER:HA	1:A:1929:ILE:HD13	1.92	0.51
1:A:2177:THR:HG22	1:A:2183:ARG:HG2	1.91	0.51
1:A:3839:ILE:CG2	1:A:3873:MET:HG3	2.41	0.51
1:A:3645:SER:CB	1:A:3890:GLN:HE21	2.19	0.51
1:A:3787:THR:HG22	1:A:3875:MET:HB2	1.93	0.51
1:A:1963:MET:HB3	1:A:1966:TYR:CD2	2.45	0.51
1:A:3877:CYS:SG	1:A:3884:LEU:HD22	2.50	0.51
1:A:1645:PHE:HZ	1:A:1768:ARG:HD2	1.75	0.51
1:A:2476:LYS:HZ2	1:A:2528:ARG:HB2	1.76	0.50
1:A:2084:TRP:HE3	1:A:2088:ILE:HD12	1.76	0.50
1:A:2476:LYS:H	1:A:2476:LYS:HD2	1.73	0.50
1:A:2400:HIS:NE2	1:A:2559:LEU:CD1	2.67	0.50
1:A:3855:LEU:HD12	1:A:3859:VAL:HG23	1.93	0.50
1:A:3845:GLN:OE1	1:A:3878:HIS:HB2	2.12	0.50
1:A:1849:GLU:CG	1:A:1899:ASN:HD22	2.22	0.50
1:A:2034:ILE:CD1	1:A:2061:TYR:CZ	2.95	0.50
1:A:3737:THR:CB	1:A:3740:THR:CB	2.89	0.50
1:A:3645:SER:CB	1:A:3890:GLN:NE2	2.74	0.50
1:A:3566:LEU:HD11	1:A:3570:LEU:HD11	1.92	0.50
1:A:2290:LEU:HD23	1:A:2321:SER:HA	1.92	0.50

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1749:ILE:HD13	1:A:1813:LEU:HD22	1.92	0.50
1:A:2637:PRO:O	1:A:2639:GLN:NE2	2.44	0.50
1:A:2034:ILE:CD1	1:A:2061:TYR:CE2	2.95	0.50
1:A:3848:LEU:HD12	1:A:3884:LEU:HD12	1.93	0.50
1:A:1917:ARG:HD2	1:A:3963:PHE:CE2	2.46	0.50
1:A:3350:LYS:HA	1:A:3353:LEU:HD12	1.94	0.50
1:A:1706:LEU:HD22	1:A:1935:GLN:HG2	1.93	0.50
1:A:1677:ASP:HA	1:A:1680:ILE:HD12	1.93	0.50
1:A:2111:LYS:CD	1:A:2161:GLU:CG	2.84	0.50
1:A:2654:ARG:HH22	1:A:2691:SER:HB2	1.77	0.50
1:A:3323:ASN:HD21	1:A:3361:ASP:H	1.58	0.50
1:A:2109:LEU:HD13	1:A:2129:LEU:HD23	1.94	0.50
1:A:1748:PHE:CE2	1:A:1755:LEU:HD22	2.47	0.50
1:A:2762:SER:O	1:A:2763:ARG:HB2	2.12	0.50
1:A:3725:VAL:HG22	1:A:3731:ASP:HA	1.93	0.50
1:A:2839:ASP:O	1:A:2841:PRO:HD3	2.12	0.49
1:A:4033:LEU:HD12	1:A:4036:GLN:H	1.77	0.49
1:A:3911:TRP:HH2	1:A:3926:VAL:HG12	1.77	0.49
1:A:2295:ILE:HG12	1:A:2314:ILE:HD12	1.93	0.49
1:A:2960:THR:HG22	1:A:2961:ILE:N	2.27	0.49
1:A:3978:ASN:O	1:A:3981:PRO:CD	2.60	0.49
1:A:1570:GLU:HB2	1:A:1585:VAL:HA	1.93	0.49
1:A:1983:LEU:HD21	1:A:2000:ARG:NE	2.27	0.49
1:A:2514:GLY:CA	1:A:2523:TRP:CZ2	2.96	0.49
1:A:3979:ASN:C	1:A:3981:PRO:CD	2.80	0.49
1:A:2169:VAL:HG13	1:A:2186:ILE:HG12	1.94	0.49
1:A:2780:LYS:HD3	1:A:2813:THR:HG22	1.93	0.49
1:A:3459:ASP:OD2	1:A:3461:ILE:CG1	2.61	0.49
1:A:2385:VAL:HG23	1:A:2574:TYR:HD1	1.77	0.49
1:A:2427:ILE:HD12	1:A:2559:LEU:HD22	1.93	0.49
1:A:3946:VAL:HA	1:A:3947:PRO:C	2.33	0.49
1:A:2860:THR:HG22	1:A:2865:LEU:O	2.13	0.49
1:A:1645:PHE:CD2	1:A:1765:ILE:HG22	2.48	0.49
1:A:2448:ASP:CB	1:A:2829:GLU:OE2	2.47	0.49
1:A:3307:LEU:O	1:A:3311:LYS:N	2.27	0.49
1:A:1967:HIS:NE2	1:A:2204:PRO:HB3	2.28	0.49
1:A:1657:THR:HG21	1:A:1734:PHE:O	2.12	0.49
1:A:3692:LYS:HE3	1:A:3898:GLU:O	2.12	0.48
1:A:3373:LEU:O	1:A:3373:LEU:HD23	2.13	0.48
1:A:2645:ILE:HD11	1:A:2686:LEU:HG	1.94	0.48
1:A:1626:CYS:HB2	1:A:1643:TYR:CD2	2.48	0.48

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2064:GLN:NE2	1:A:2091:MET:CE	2.76	0.48
1:A:1911:ASN:OD1	1:A:1912:LEU:HG	2.13	0.48
1:A:3566:LEU:HD13	1:A:3570:LEU:HD12	1.95	0.48
1:A:2982:VAL:HG12	1:A:2983:GLY:N	2.27	0.48
1:A:3671:VAL:O	1:A:3674:ILE:HG22	2.13	0.48
1:A:2828:LEU:HD13	1:A:2902:MET:SD	2.53	0.48
1:A:2354:SER:OG	1:A:2357:SER:CB	2.61	0.48
1:A:1849:GLU:OE2	1:A:1899:ASN:ND2	2.47	0.48
1:A:2364:ASP:O	1:A:2365:LYS:HG2	2.13	0.48
1:A:3462:ILE:O	1:A:3465:LEU:N	2.44	0.48
1:A:4065:LEU:C	1:A:4065:LEU:HD12	2.33	0.48
1:A:1683:LEU:HB3	1:A:1702:LEU:HD21	1.96	0.48
1:A:1626:CYS:SG	1:A:1639:VAL:CG1	3.01	0.48
1:A:2074:GLY:O	1:A:2197:ASP:HA	2.13	0.48
1:A:1731:VAL:HG12	1:A:1732:GLN:N	2.29	0.48
1:A:1826:PHE:CE1	1:A:1853:LEU:CD2	2.96	0.48
1:A:3737:THR:CB	1:A:3740:THR:HB	2.44	0.48
1:A:2112:GLU:CB	1:A:2117:SER:HB2	2.35	0.48
1:A:2002:ILE:HB	1:A:2014:PHE:HE2	1.78	0.48
1:A:4084:SER:O	1:A:4088:LEU:HG	2.14	0.48
1:A:1664:LEU:HD23	1:A:1669:PHE:HZ	1.77	0.48
1:A:1794:PHE:HD1	1:A:1802:LYS:HB3	1.79	0.48
1:A:3353:LEU:HD23	1:A:3358:VAL:HG11	1.95	0.48
1:A:3721:THR:O	1:A:3725:VAL:HG23	2.14	0.47
1:A:1636:ILE:O	1:A:1640:VAL:HG23	2.15	0.47
1:A:2741:HIS:O	1:A:2745:ILE:HG13	2.15	0.47
1:A:3541:MET:HB2	1:A:3607:PHE:HE1	1.78	0.47
1:A:1844:TRP:CD1	1:A:1893:ALA:HB3	2.50	0.47
1:A:2358:THR:HG22	1:A:2359:ILE:N	2.29	0.47
1:A:2084:TRP:CZ3	1:A:2085:LYS:HG3	2.49	0.47
1:A:1681:LYS:HE2	1:A:1939:PHE:CE1	2.50	0.47
1:A:2105:ASP:OD2	1:A:2508:GLN:HB2	2.15	0.47
1:A:3967:TYR:HE2	1:A:3985:VAL:HA	1.80	0.47
1:A:3612:ASP:O	1:A:3615:VAL:CG2	2.63	0.47
1:A:2580:LYS:HG2	1:A:2586:ARG:HH22	1.79	0.47
1:A:3415:ILE:HD13	1:A:3453:GLN:HG3	1.97	0.47
1:A:2445:PHE:HA	1:A:2449:THR:HG21	1.97	0.47
1:A:3877:CYS:SG	1:A:3884:LEU:HD21	2.55	0.47
1:A:3703:PHE:HE1	1:A:3766:GLU:HG2	1.79	0.47
1:A:2835:LEU:HD23	1:A:2911:ARG:HB2	1.97	0.46
1:A:2878:VAL:HA	1:A:2881:ILE:HD12	1.97	0.46

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3807:SER:O	1:A:3808:LYS:HB2	2.16	0.46
1:A:2654:ARG:NH1	1:A:2658:ASP:OD1	2.49	0.46
1:A:3690:LEU:HD23	1:A:3694:PHE:HB3	1.96	0.46
1:A:3924:TRP:O	1:A:3927:TYR:HB3	2.15	0.46
1:A:3592:LYS:O	1:A:3596:ASN:N	2.48	0.46
1:A:3934:TRP:HB3	1:A:4023:ILE:HD13	1.97	0.46
1:A:2027:THR:HA	1:A:2028:PRO:HD3	1.47	0.46
1:A:3889:LEU:HG	1:A:3894:ARG:HD3	1.95	0.46
1:A:3833:LYS:HZ3	1:A:3862:THR:HG21	1.81	0.46
1:A:2318:ILE:O	1:A:2322:LEU:HB2	2.16	0.46
1:A:2627:ARG:NH1	1:A:2630:TYR:CD2	2.84	0.46
1:A:2125:TRP:CZ2	1:A:2178:LEU:CD1	2.97	0.46
1:A:1683:LEU:HD22	1:A:1698:ILE:HG23	1.96	0.46
1:A:1554:HIS:O	1:A:1555:HIS:HB2	2.15	0.46
1:A:3303:LYS:C	1:A:3306:TRP:CD1	2.74	0.46
1:A:1586:GLU:HG3	1:A:1765:ILE:H	1.81	0.46
1:A:1995:VAL:HG22	1:A:2022:PHE:HE2	1.80	0.46
1:A:2286:THR:HA	1:A:2412:ARG:NE	2.31	0.46
1:A:1945:LEU:HD13	1:A:1994:VAL:HG21	1.98	0.46
1:A:1660:VAL:HG13	1:A:1728:TRP:CH2	2.51	0.46
1:A:2274:HIS:CE1	1:A:2326:LEU:O	2.54	0.46
1:A:2571:TYR:HA	1:A:2574:TYR:HB2	1.97	0.46
1:A:1748:PHE:HD2	1:A:1755:LEU:HD22	1.77	0.46
1:A:3631:MET:HE1	1:A:3698:MET:HG3	1.98	0.45
1:A:1968:PHE:CD1	1:A:1968:PHE:N	2.84	0.45
1:A:3995:GLY:HA2	1:A:3998:ILE:CD1	2.46	0.45
1:A:3760:LEU:HD21	1:A:4078:ALA:HA	1.99	0.45
1:A:1992:LYS:CG	1:A:2024:SER:CB	2.78	0.45
1:A:2199:LEU:O	1:A:2201:HIS:N	2.49	0.45
1:A:3809:GLU:HB3	1:A:3810:SER:H	1.53	0.45
1:A:2422:SER:H	1:A:2424:LYS:HZ1	1.65	0.45
1:A:2783:GLN:HG2	1:A:2816:ILE:HB	1.99	0.45
1:A:2112:GLU:HB3	1:A:2117:SER:OG	2.16	0.45
1:A:1910:GLU:HB2	1:A:3846:MET:HA	1.98	0.45
1:A:2280:THR:HA	1:A:2283:LYS:HD2	1.99	0.45
1:A:3509:LEU:CG	1:A:3513:VAL:HG21	2.45	0.45
1:A:2204:PRO:HA	1:A:2207:ILE:HD12	1.97	0.45
1:A:2358:THR:CG2	1:A:2359:ILE:N	2.80	0.45
1:A:3308:ASN:O	1:A:3312:GLN:HB2	2.16	0.45
1:A:3579:GLU:O	1:A:3582:GLU:N	2.43	0.45
1:A:2984:VAL:C	1:A:2986:PRO:HD3	2.37	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3338:ASN:H	1:A:3341:GLU:HB2	1.82	0.45
1:A:3566:LEU:HD23	1:A:3587:LEU:HD11	1.99	0.45
1:A:1953:LEU:HD11	1:A:1973:LEU:HB3	1.98	0.45
1:A:1759:LYS:HE3	1:A:1761:GLU:OE2	2.17	0.45
1:A:2417:CYS:O	1:A:2558:TYR:HA	2.17	0.45
1:A:2197:ASP:HB3	1:A:2549:ARG:HD2	1.99	0.45
1:A:2749:LEU:HD12	1:A:2773:VAL:HG12	1.99	0.45
1:A:3470:PHE:CE1	1:A:3488:VAL:HG21	2.52	0.45
1:A:2021:ILE:HG22	1:A:2022:PHE:HD1	1.82	0.45
1:A:2447:LYS:HE3	1:A:2493:LYS:HD3	1.99	0.44
1:A:2099:ASN:HA	1:A:2149:ARG:O	2.17	0.44
1:A:3508:PHE:O	1:A:3512:ARG:HG2	2.16	0.44
1:A:1611:LEU:O	1:A:1615:ILE:HG23	2.18	0.44
1:A:3330:TYR:CD1	1:A:3334:PHE:CD2	3.05	0.44
1:A:2262:LEU:HA	1:A:2265:ILE:HD12	1.99	0.44
1:A:1951:HIS:O	1:A:1955:LEU:HB2	2.17	0.44
1:A:2386:MET:HB3	1:A:2627:ARG:NE	2.32	0.44
1:A:3330:TYR:CE1	1:A:3334:PHE:CD2	3.05	0.44
1:A:1660:VAL:CG1	1:A:1728:TRP:CH2	3.01	0.44
1:A:3964:ALA:HB2	1:A:3993:VAL:HG11	1.99	0.44
1:A:3319:GLU:HA	1:A:3359:LYS:O	2.17	0.44
1:A:2155:ASP:OD1	1:A:2195:GLU:HG3	2.17	0.44
1:A:1803:THR:HG21	1:A:1848:ASP:CG	2.37	0.44
1:A:2760:GLY:O	1:A:2761:ALA:HB3	2.18	0.44
1:A:2646:ARG:NH1	1:A:2687:GLY:H	2.15	0.44
1:A:2517:LYS:NZ	1:A:2520:GLU:OE1	2.48	0.44
1:A:2494:LEU:HB2	1:A:2499:SER:N	2.32	0.44
1:A:1940:GLU:CG	1:A:1941:ASP:H	2.22	0.44
1:A:1793:CYS:SG	1:A:1918:GLU:HG2	2.57	0.44
1:A:3010:LEU:HD22	1:A:3320:LEU:HD12	1.99	0.44
1:A:3821:ASN:O	1:A:3825:ALA:HB2	2.17	0.44
1:A:1559:SER:CB	1:A:1572:ILE:HG22	2.47	0.44
1:A:4034:LEU:C	1:A:4034:LEU:HD23	2.38	0.44
1:A:2037:CYS:SG	1:A:2094:PHE:HB2	2.57	0.44
1:A:3461:ILE:C	1:A:3463:SER:N	2.70	0.44
1:A:1973:LEU:O	1:A:1977:LEU:HG	2.18	0.44
1:A:2861:ARG:HD2	1:A:2866:LEU:HD13	2.00	0.44
1:A:3702:MET:HB3	1:A:3767:PHE:HZ	1.83	0.44
1:A:1926:SER:HA	1:A:1929:ILE:CD1	2.48	0.44
1:A:3979:ASN:O	1:A:3981:PRO:CD	2.64	0.44
1:A:2707:VAL:HG11	1:A:2712:LEU:CD1	2.45	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1826:PHE:O	1:A:1826:PHE:CG	2.70	0.43
1:A:2072:LEU:HD11	1:A:2193:LEU:HD23	2.00	0.43
1:A:2354:SER:H	1:A:2357:SER:HB2	1.83	0.43
1:A:2738:MET:HG2	1:A:2769:LEU:HD21	2.00	0.43
1:A:2404:PHE:CZ	1:A:2428:MET:HG2	2.53	0.43
1:A:2446:SER:N	1:A:2449:THR:HG23	2.19	0.43
1:A:2266:PHE:HD1	1:A:2326:LEU:HD21	1.83	0.43
1:A:2458:LEU:HG	1:A:2484:LEU:HD21	1.99	0.43
1:A:4033:LEU:CD1	1:A:4035:GLN:N	2.82	0.43
1:A:4033:LEU:HD13	1:A:4035:GLN:CG	2.49	0.43
1:A:3869:GLU:O	1:A:3870:LYS:C	2.56	0.43
1:A:1672:TYR:O	1:A:1676:VAL:HG23	2.19	0.43
1:A:2988:SER:CB	1:A:2989:PRO:CD	2.71	0.43
1:A:2578:ILE:CG2	1:A:2630:TYR:HB2	2.49	0.43
1:A:2061:TYR:O	1:A:2064:GLN:HG2	2.17	0.43
1:A:2503:VAL:HA	1:A:2506:LEU:HD12	2.01	0.43
1:A:2109:LEU:CD1	1:A:2129:LEU:HD23	2.49	0.43
1:A:1741:LEU:O	1:A:1742:ASP:HB2	2.19	0.43
1:A:1967:HIS:C	1:A:1968:PHE:CD1	2.85	0.43
1:A:1646:GLN:OE1	1:A:1763:ILE:HG12	2.18	0.43
1:A:3696:MET:SD	1:A:3760:LEU:HD23	2.59	0.43
1:A:1681:LYS:HE2	1:A:1939:PHE:CZ	2.53	0.43
1:A:1611:LEU:O	1:A:1615:ILE:HG12	2.19	0.43
1:A:1706:LEU:HD21	1:A:1935:GLN:CG	2.48	0.43
1:A:1620:PHE:CA	1:A:1760:PHE:CE1	3.01	0.43
1:A:2178:LEU:HB3	1:A:2179:PRO:HD2	2.01	0.43
1:A:3544:LYS:O	1:A:3548:LEU:HB2	2.19	0.43
1:A:2982:VAL:CG1	1:A:2983:GLY:N	2.82	0.43
1:A:2375:ILE:HG22	1:A:2376:PRO:O	2.18	0.43
1:A:3784:ASN:ND2	1:A:3865:ALA:O	2.52	0.43
1:A:3407:LEU:HD23	1:A:3518:PHE:CE2	2.53	0.43
1:A:1650:LEU:O	1:A:1654:VAL:HG23	2.19	0.43
1:A:1991:GLU:O	1:A:1994:VAL:HB	2.19	0.42
1:A:3767:PHE:HB3	1:A:3769:VAL:HG23	2.00	0.42
1:A:4033:LEU:HD12	1:A:4033:LEU:C	2.39	0.42
1:A:1822:CYS:SG	1:A:1850:PHE:CA	3.04	0.42
1:A:3785:TYR:CD1	1:A:3785:TYR:N	2.87	0.42
1:A:4074:GLU:HA	1:A:4077:GLN:HE21	1.84	0.42
1:A:3628:ILE:HG13	1:A:3705:LEU:HD23	2.00	0.42
1:A:2707:VAL:HG11	1:A:2712:LEU:HD12	2.00	0.42
1:A:2111:LYS:HZ3	1:A:2161:GLU:HG2	1.76	0.42

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2786:ILE:HD12	1:A:3460:PRO:CG	2.49	0.42
1:A:2178:LEU:HB2	1:A:2182:GLU:H	1.83	0.42
1:A:1781:THR:HG21	1:A:1919:PHE:CE1	2.55	0.42
1:A:1568:SER:HB2	1:A:1816:VAL:HG21	2.01	0.42
1:A:1822:CYS:HB2	1:A:1853:LEU:CD2	2.31	0.42
1:A:2640:THR:O	1:A:2643:SER:HB3	2.20	0.42
1:A:1715:LEU:HG	1:A:1727:LEU:HD22	2.02	0.42
1:A:3414:MET:O	1:A:3418:ILE:HG12	2.19	0.42
1:A:2306:ASP:HB2	1:A:2309:SER:HB3	2.02	0.42
1:A:1965:HIS:HD2	1:A:2212:LEU:HD23	1.85	0.42
1:A:2708:ASN:O	1:A:2712:LEU:HD13	2.20	0.42
1:A:2829:GLU:HA	1:A:2832:ASN:HD22	1.84	0.42
1:A:3810:SER:HB3	1:A:3837:GLY:HA2	2.01	0.42
1:A:2510:MET:O	1:A:2513:GLN:NE2	2.53	0.42
1:A:3464:ARG:O	1:A:3467:SER:O	2.38	0.42
1:A:3777:VAL:HG12	1:A:3895:PHE:CE1	2.53	0.42
1:A:2138:ASN:ND2	1:A:2185:PRO:O	2.52	0.42
1:A:1939:PHE:CD1	1:A:1939:PHE:N	2.87	0.42
1:A:2411:LYS:HG2	1:A:2530:HIS:CE1	2.41	0.42
1:A:3785:TYR:CE2	1:A:3859:VAL:HG13	2.54	0.42
1:A:2225:LYS:HD2	1:A:2281:PHE:CZ	2.55	0.42
1:A:3505:ILE:O	1:A:3510:ARG:NH1	2.53	0.42
1:A:2609:THR:HA	1:A:2612:GLN:O	2.20	0.42
1:A:3728:GLU:CG	1:A:4079:LYS:HE2	2.49	0.42
1:A:1998:LEU:CD1	1:A:2022:PHE:HZ	2.32	0.42
1:A:2141:ILE:CG2	1:A:2145:PHE:HB2	2.49	0.42
1:A:2088:ILE:HG12	1:A:2151:TRP:CZ2	2.55	0.42
1:A:2755:HIS:HB3	1:A:2912:CYS:SG	2.60	0.42
1:A:3848:LEU:O	1:A:3849:SER:C	2.59	0.42
1:A:2385:VAL:HG23	1:A:2574:TYR:CD1	2.53	0.42
1:A:2905:SER:HA	1:A:2906:PRO:HD2	1.85	0.42
1:A:2575:TYR:HD1	1:A:2578:ILE:HD11	1.83	0.42
1:A:2760:GLY:HA3	1:A:2766:LYS:HD3	2.01	0.42
1:A:1830:VAL:O	1:A:1834:LEU:HG	2.19	0.42
1:A:1575:LEU:O	1:A:1576:GLU:HB3	2.20	0.42
1:A:2489:ILE:HD11	1:A:2506:LEU:HD13	2.02	0.42
1:A:1727:LEU:O	1:A:1731:VAL:HG23	2.20	0.42
1:A:2001:VAL:O	1:A:2004:PRO:HD2	2.20	0.42
1:A:2044:ARG:HH21	1:A:2093:ILE:HD11	1.85	0.42
1:A:4045:LEU:O	1:A:4048:ILE:HG22	2.20	0.42
1:A:3534:LEU:HD12	1:A:3618:TYR:CZ	2.52	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2053:PHE:HB2	1:A:2219:VAL:HB	2.02	0.41
1:A:3461:ILE:C	1:A:3463:SER:H	2.22	0.41
1:A:3978:ASN:O	1:A:3981:PRO:HD3	2.20	0.41
1:A:2095:ASP:OD1	1:A:2149:ARG:NH2	2.53	0.41
1:A:2492:PRO:CB	1:A:2502:VAL:HG11	2.49	0.41
1:A:2758:LEU:HD22	1:A:2917:MET:SD	2.60	0.41
1:A:3612:ASP:C	1:A:3615:VAL:HG22	2.41	0.41
1:A:1898:LEU:HD11	1:A:1908:LEU:CD2	2.50	0.41
1:A:2786:ILE:HD12	1:A:3460:PRO:HG2	2.02	0.41
1:A:2012:LEU:HD12	1:A:2013:VAL:N	2.35	0.41
1:A:2568:SER:HA	1:A:2597:VAL:HG21	2.02	0.41
1:A:3365:ARG:HD2	1:A:3368:ASP:OD2	2.19	0.41
1:A:2034:ILE:HD12	1:A:2061:TYR:CE2	2.55	0.41
1:A:1965:HIS:HD2	1:A:2212:LEU:HD21	1.85	0.41
1:A:3808:LYS:HA	1:A:3808:LYS:HD3	1.89	0.41
1:A:3799:LYS:HG3	1:A:3803:LEU:HD11	2.03	0.41
1:A:2512:LYS:O	1:A:2513:GLN:CB	2.66	0.41
1:A:2420:PRO:HD3	1:A:2536:ASN:HD21	1.85	0.41
1:A:3544:LYS:HE3	1:A:3607:PHE:CD1	2.55	0.41
1:A:2109:LEU:HB3	1:A:2113:SER:HB2	2.03	0.41
1:A:2563:SER:C	1:A:2565:LYS:H	2.23	0.41
1:A:2574:TYR:HB3	1:A:2626:VAL:HG11	2.03	0.41
1:A:2762:SER:O	1:A:2763:ARG:CB	2.68	0.41
1:A:2860:THR:HG21	1:A:2867:LEU:HD12	2.02	0.41
1:A:3833:LYS:NZ	1:A:3862:THR:HG21	2.36	0.41
1:A:2276:LEU:HD21	1:A:2415:ILE:HG21	2.03	0.41
1:A:4020:ASN:ND2	1:A:4028:ARG:HD3	2.35	0.41
1:A:2225:LYS:HG2	1:A:2229:LEU:HD12	2.02	0.41
1:A:1702:LEU:HA	1:A:1702:LEU:HD23	1.86	0.41
1:A:2766:LYS:CE	1:A:2890:THR:HB	2.39	0.41
1:A:3846:MET:HG3	1:A:3847:SER:N	2.35	0.41
1:A:3939:ILE:HG13	1:A:4010:LEU:HD23	1.98	0.41
1:A:1966:TYR:CZ	1:A:2006:LEU:HD23	2.55	0.41
1:A:2418:GLY:O	1:A:2424:LYS:HE3	2.21	0.41
1:A:2852:LEU:HG	1:A:2856:LEU:HD13	2.03	0.41
1:A:2985:ASN:N	1:A:2986:PRO:CD	2.84	0.41
1:A:2891:ILE:HD11	1:A:2903:ILE:HD11	2.03	0.41
1:A:4033:LEU:CD1	1:A:4035:GLN:H	2.34	0.41
1:A:3671:VAL:HA	1:A:3674:ILE:HG22	2.03	0.41
1:A:3772:TRP:HZ3	1:A:3780:ASN:HD22	1.68	0.41
1:A:3413:HIS:O	1:A:3417:VAL:HG23	2.21	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:4054:GLU:HA	1:A:4055:PRO:HD3	1.97	0.41
1:A:3590:LEU:HD12	1:A:3593:GLU:HB2	2.02	0.40
1:A:2977:TYR:HD1	1:A:2981:LYS:HG3	1.86	0.40
1:A:2488:GLU:HB3	1:A:2491:LEU:CG	2.51	0.40
1:A:2175:ILE:HG13	1:A:2184:LEU:C	2.42	0.40
1:A:3330:TYR:CZ	1:A:3346:LEU:HD13	2.55	0.40
1:A:2229:LEU:HD11	1:A:2285:GLU:HG3	2.02	0.40
1:A:1794:PHE:CD1	1:A:1802:LYS:HB3	2.56	0.40
1:A:2761:ALA:O	1:A:2892:CYS:CB	2.69	0.40
1:A:2336:ARG:HG2	1:A:2355:ASP:CG	2.41	0.40
1:A:2332:GLY:HA2	1:A:2335:GLN:CG	2.52	0.40
1:A:3570:LEU:HD23	1:A:3580:ASN:CG	2.41	0.40
1:A:3951:SER:HB3	1:A:4003:ASP:OD2	2.22	0.40
1:A:2819:GLU:HB3	1:A:2891:ILE:HG22	2.03	0.40
1:A:3813:ILE:HG22	1:A:3840:LEU:HD23	2.04	0.40
1:A:3024:LEU:HD13	1:A:3303:LYS:HG3	1.92	0.40
1:A:3330:TYR:O	1:A:3334:PHE:HB2	2.22	0.40
1:A:2039:LYS:HG2	1:A:2049:MET:HG3	2.03	0.40
1:A:3832:SER:O	1:A:3836:GLY:N	2.45	0.40
1:A:2581:LEU:HD13	1:A:2633:ILE:HG22	2.03	0.40
1:A:1835:LEU:O	1:A:1838:ILE:HG22	2.22	0.40
1:A:3708:PHE:CZ	1:A:3720:LEU:HD21	2.57	0.40

There are no symmetry-related clashes.

## 5.3 Torsion angles [i](#)

### 5.3.1 Protein backbone [i](#)

In the following table, the Percentiles column shows the percent Ramachandran outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all EM entries.

The Analysed column shows the number of residues for which the backbone conformation was analysed, and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	2237/2286 (98%)	2137 (96%)	93 (4%)	7 (0%)	46 83

All (7) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	2990	GLY
1	A	3306	TRP
1	A	3482	GLY
1	A	2519	PRO
1	A	3980	ILE
1	A	2562	PRO
1	A	2028	PRO

### 5.3.2 Protein sidechains ⓘ

In the following table, the Percentiles column shows the percent sidechain outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all EM entries.

The Analysed column shows the number of residues for which the sidechain conformation was analysed, and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	2039/2078 (98%)	1967 (96%)	72 (4%)	43 74

All (72) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1794	PHE
1	A	1826	PHE
1	A	1852	ARG
1	A	1923	SER
1	A	1944	SER
1	A	1971	ARG
1	A	1992	LYS
1	A	1999	LYS
1	A	2012	LEU
1	A	2057	CYS
1	A	2078	CYS
1	A	2109	LEU
1	A	2202	THR
1	A	2218	ASP
1	A	2295	ILE
1	A	2346	PHE
1	A	2357	SER
1	A	2386	MET
1	A	2424	LYS
1	A	2428	MET

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	2461	HIS
1	A	2472	THR
1	A	2476	LYS
1	A	2526	ILE
1	A	2544	ILE
1	A	2563	SER
1	A	2566	SER
1	A	2611	LEU
1	A	2638	ARG
1	A	2694	LEU
1	A	2822	ILE
1	A	2833	THR
1	A	2843	LEU
1	A	2853	LEU
1	A	2856	LEU
1	A	2865	LEU
1	A	2873	LEU
1	A	2875	ASP
1	A	2911	ARG
1	A	2920	TRP
1	A	3301	PHE
1	A	3329	ILE
1	A	3332	THR
1	A	3355	LYS
1	A	3372	THR
1	A	3400	SER
1	A	3418	ILE
1	A	3531	ASP
1	A	3538	ASN
1	A	3548	LEU
1	A	3565	ARG
1	A	3601	LEU
1	A	3618	TYR
1	A	3677	LEU
1	A	3717	GLU
1	A	3729	SER
1	A	3735	LYS
1	A	3737	THR
1	A	3744	LEU
1	A	3811	LEU
1	A	3871	PHE
1	A	3884	LEU

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	3899	ASP
1	A	3906	THR
1	A	3917	THR
1	A	3943	THR
1	A	3950	PHE
1	A	3960	ASP
1	A	3982	TRP
1	A	4004	LEU
1	A	4016	CYS
1	A	4040	GLU

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (35) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1622	GLN
1	A	1646	GLN
1	A	1736	GLN
1	A	1745	ASN
1	A	1851	ASN
1	A	1873	GLN
1	A	1899	ASN
1	A	1951	HIS
1	A	1965	HIS
1	A	1979	ASN
1	A	2068	GLN
1	A	2099	ASN
1	A	2274	HIS
1	A	2282	ASN
1	A	2293	HIS
1	A	2383	HIS
1	A	2409	ASN
1	A	2459	HIS
1	A	2530	HIS
1	A	2536	ASN
1	A	2634	ASN
1	A	2683	ASN
1	A	2688	ASN
1	A	3323	ASN
1	A	3338	ASN
1	A	3420	ASN
1	A	3497	HIS
1	A	3521	ASN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	3542	GLN
1	A	3588	ASN
1	A	3624	HIS
1	A	3780	ASN
1	A	3890	GLN
1	A	4020	ASN
1	A	4077	GLN

### 5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

### 5.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains ⓘ

There are no non-standard protein/DNA/RNA residues in this entry.

### 5.5 Carbohydrates ⓘ

There are no carbohydrates in this entry.

### 5.6 Ligand geometry ⓘ

There are no ligands in this entry.

### 5.7 Other polymers ⓘ

There are no such residues in this entry.

### 5.8 Polymer linkage issues ⓘ

There are no chain breaks in this entry.