



# Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Feb 1, 2016 – 08:19 PM GMT

PDB ID : 4RH7  
Title : Crystal structure of human cytoplasmic dynein 2 motor domain in complex with ADP.Vi  
Authors : Schmidt, H.; Zalyte, R.; Urnavicius, L.; Carter, A.P.  
Deposited on : 2014-10-01  
Resolution : 3.41 Å(reported)

This is a Full wwPDB X-ray Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.  
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/XrayValidationReportHelp>  
with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

---

The following versions of software and data (see [references ⓘ](#)) were used in the production of this report:

MolProbity : 4.02b-467  
Mogul : 1.7 (RC4), CSD as536be (2015)  
Xtriage (Phenix) : 1.9-1692  
EDS : rb-20026688  
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)  
Refmac : 5.8.0135  
CCP4 : 6.5.0  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : trunk26865

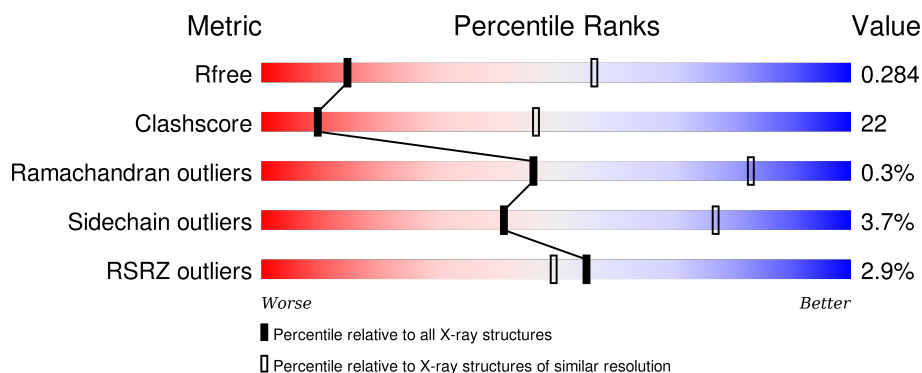
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

## *X-RAY DIFFRACTION*

The reported resolution of this entry is 3.41 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)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
$R_{free}$	91344	1049 (3.52-3.32)
Clashscore	102246	1032 (3.50-3.34)
Ramachandran outliers	100387	1002 (3.50-3.34)
Sidechain outliers	100360	1003 (3.50-3.34)
RSRZ outliers	91569	1054 (3.52-3.32)

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the electron density. The red, orange, yellow and green segments on the lower 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  $\leq 5\%$ . The upper red bar (where present) indicates the fraction of residues that have poor fit to the electron density. The numeric value is given above the bar.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	3450	

The following table lists non-polymeric compounds, carbohydrate monomers and non-standard residues in protein, DNA, RNA chains that are outliers for geometric or electron-density-fit criteria:

Mol	Type	Chain	Res	Chirality	Geometry	Clashes	Electron density
2	AOV	A	4401	-	-	X	-

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Type	Chain	Res	Chirality	Geometry	Clashes	Electron density
3	MG	A	4404	-	-	-	X

## 2 Entry composition [i](#)

There are 5 unique types of molecules in this entry. The entry contains 22816 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

In the tables below, the ZeroOcc column contains the number of atoms modelled with zero occupancy, 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.

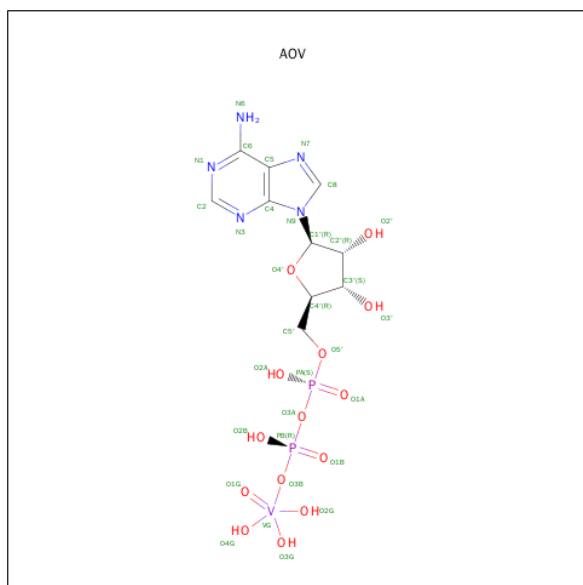
- Molecule 1 is a protein called Green fluorescent protein/Cytoplasmic dynein 2 heavy chain 1.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	A	3005	Total	C	N	O	S	0	0	0
			22697	14414	3922	4263	98			

There are 6 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1089	GLY	-	LINKER	UNP Q8NCM8
A	1090	SER	-	LINKER	UNP Q8NCM8
A	1413	ARG	LYS	VARIANT	UNP Q8NCM8
A	2871	GLN	ARG	VARIANT	UNP Q8NCM8
A	3680	VAL	ALA	VARIANT	UNP Q8NCM8
A	4308	VAL	-	EXPRESSION TAG	UNP Q8NCM8

- Molecule 2 is ADP ORTHOVANADATE (three-letter code: AOV) (formula:  $C_{10}H_{17}N_5O_{14}P_2V$ ).

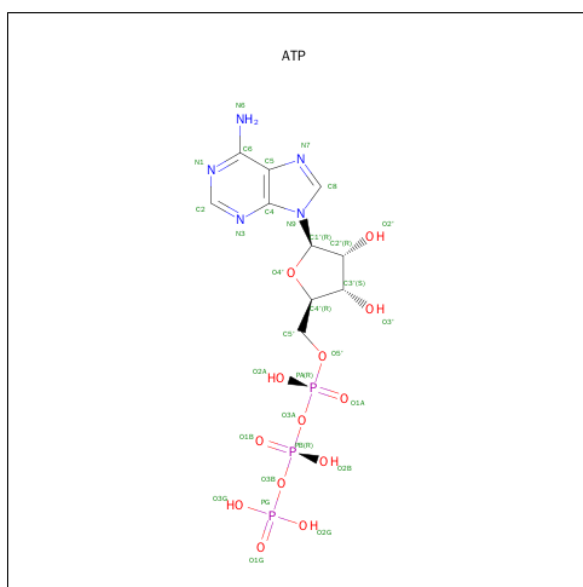


Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf
2	A	1	Total	C	N	O	P	V	0	0
			32	10	5	14	2	1		

- Molecule 3 is MAGNESIUM ION (three-letter code: MG) (formula: Mg).

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	A	2	Total	Mg	0	0
			2	2		

- Molecule 4 is ADENOSINE-5'-TRIPHOSPHATE (three-letter code: ATP) (formula:  $C_{10}H_{16}N_5O_{13}P_3$ ).



Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
4	A	1	Total	C	N	O	P	0	0
			31	10	5	13	3		

- Molecule 5 is ADENOSINE-5'-DIPHOSPHATE (three-letter code: ADP) (formula:  $C_{10}H_{15}N_5O_{10}P_2$ ).



Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
5	A	1	Total	C	N	O	P	0	0
			27	10	5	10	2		
5	A	1	Total	C	N	O	P	0	0
			27	10	5	10	2		







Q4236	R4147	K4030	G3929	L3826	P3705	G1N	Y3516	V3352
L4237	A4146	F4031	G3929	T3829	L3710	G1N	A3517	D3357
D4238	L4149	D4032	D3932	T3830	L3711	LYS	F3518	N3363
S4239	A4150	R4033	N3933	E3831	L3718	ILE	R3525	
P4240	I4151	E4034	Y3934	L3836	E3719	D3612	R3533	
S4241	Q4152	S4037	Y3939	K3837	L3720		D3536	F3366
	N4153	E4038	Y3943	L3840	E3721		F3367	L3368
	W4154	E4039	L3944	R3841	L3629		F3369	L3370
V4245	K4157	S4041	Y3944	R3842	L3629		S3371	S3371
	L4164	P4042	V3952	T3843	A3632		T3372	F3372
	S4165	V4043	I3953	Y3844	L3633		R3373	R3373
W4252	E4166	I4046	ASP		F3634		N3374	N3374
I4253	T4167	VAL	VAL	W3847	E3736		P3375	P3375
P4254	S4171	N4051	PHE	K3854	L3740		N3376	N3376
Q4255	E4172	Q4052	ASN		Y3750		P3377	P3377
		N4053	GLN	N3857	F3755		F3378	F3378
E4265	D4177	S4054	ARG	T3858	R3756		V3555	V3555
C4266	L4180	N4055	ASN	R3859	R3755		C3560	C3560
I4267	L4181	L4056	LYS	R3860	R3756		L3563	L3563
S4268	L4182	I4057	LYS				D3567	D3567
L4269	R4184	I4072	SER	L3864	R3759		N3570	N3570
P4270	Q4185	L4073	F3965	E3871	A3760		F3571	F3571
V4271	E4186	S4074	P3966	Q3875	L3762		F3575	F3575
	A4188	I4076	V3969	R3877	A3771		R3576	R3576
I4284	G4192	I4077	S3970	E3876	R3776		R3577	R3577
D4285	R4193	L4078	C3975	R3877	R3780		G3578	G3578
W4286	K4199	Q4080	S3976	T3881	R3781		P3581	P3581
P4287	F4200	V4090	I3984	P3882			R3582	R3582
C4288	A4201	L4094	E3989	W3885	V3785		L3583	L3583
G4290	A4202	L4097	D3990	Y3900	R3788		F3584	F3584
N4291	S4203	V4100	D3991	T3903	L3789		Q3585	Q3585
Q4292	W4204	T4105	F3996	D3904	V3791		E3586	E3586
D4293	I4208	L4106	P3999	L3906	L3792		N3587	N3587
W4295	Q4214	L4106	A4000	F3907	E3793		Y3492	Y3492
I4296	I4215	V4111	N4001	D3908	R3794		L3493	L3493
Q4297	I4217	L4118	I4002	G3909			D3590	D3590
C4298	L4220	L4118	Q4007	K3911	R3802		T3591	T3591
I4302	L4221	P4124	Q4017	Q3914	F3805		V3595	V3595
F4303	L4222	W4127	L4021	N3914	T3810		VAL	VAL
K4305	E4223	P4134	G4022	N3915			GLY	GLY
N4306	G4224	P4134	R4023	E3916	R3814		ASP	ASP
Q4307	S4226	P4137	S4024	F3917	P3815		NET	NET
V4308	F4227	L4138	R4025	H3919			LEU	LEU
	D4228	Y4140	T4026	G3920	P3819		ARG	ARG
	G4229		A4027	L3921	L3820		LYS	LYS
	N4230		G4028	L3922	L3821		ALA	ALA
	Q4231		S4029		L3822		ASP	ASP
	L4232						SER	SER

## 4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	C 2 2 21	Depositor
Cell constants a, b, c, $\alpha$ , $\beta$ , $\gamma$	136.03Å 487.15Å 276.46Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	56.60 – 3.41 56.54 – 3.41	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	62.2 (56.60-3.41) 62.2 (56.54-3.41)	Depositor EDS
$R_{merge}$	(Not available)	Depositor
$R_{sym}$	0.10	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ <sup>1</sup>	1.49 (at 3.40Å)	Xtriage
Refinement program	REFMAC 5.8.0073	Depositor
R, $R_{free}$	0.237 , 0.285 0.239 , 0.284	Depositor DCC
$R_{free}$ test set	3914 reflections (5.29%)	DCC
Wilson B-factor (Å <sup>2</sup> )	108.2	Xtriage
Anisotropy	0.050	Xtriage
Bulk solvent $k_{sol}$ (e/Å <sup>3</sup> ), $B_{sol}$ (Å <sup>2</sup> )	0.25 , 110.2	EDS
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
L-test for twinning <sup>2</sup>	$\langle  L  \rangle = 0.44$ , $\langle L^2 \rangle = 0.27$	Xtriage
Outliers	0 of 77975 reflections	Xtriage
$F_o, F_c$ correlation	0.92	EDS
Total number of atoms	22816	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å <sup>2</sup> )	121.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 2.94% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

<sup>1</sup>Intensities estimated from amplitudes.

<sup>2</sup>Theoretical values of  $\langle |L| \rangle$ ,  $\langle L^2 \rangle$  for acentric reflections are 0.5, 0.375 respectively for untwinned datasets, and 0.333, 0.2 for perfectly twinned datasets.

## 5 Model quality [i](#)

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

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: AOV, MG, ATP, ADP

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  >5	RMSZ	# Z  >5
1	A	0.61	2/23147 (0.0%)	0.78	5/31474 (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	6

All (2) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	2275	PHE	CB-CG	-5.18	1.42	1.51
1	A	2826	GLU	CD-OE2	5.06	1.31	1.25

All (5) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	2426	ARG	NE-CZ-NH1	-5.89	117.35	120.30
1	A	2275	PHE	CB-CA-C	-5.82	98.76	110.40
1	A	1915	CYS	CA-CB-SG	5.68	124.22	114.00
1	A	4253	ILE	CB-CA-C	-5.50	100.59	111.60
1	A	2426	ARG	NE-CZ-NH2	5.42	123.01	120.30

There are no chirality outliers.

All (6) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	2238	LEU	Peptide
1	A	2247	GLU	Peptide
1	A	2275	PHE	Peptide
1	A	2310	SER	Peptide
1	A	2416	LYS	Peptide
1	A	2659	VAL	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	22697	0	21503	995	0
2	A	32	0	12	12	0
3	A	2	0	0	0	0
4	A	31	0	12	4	0
5	A	54	0	24	10	0
All	All	22816	0	21551	996	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 (996) 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:3581:PRO:HA	1:A:3584:PHE:CE1	1.16	1.63
1:A:2284:LYS:CE	1:A:2401:GLN:HG3	1.33	1.55
1:A:2284:LYS:HE3	1:A:2401:GLN:CG	1.49	1.40
1:A:3291:LEU:O	1:A:3294:HIS:CE1	1.75	1.39
1:A:3581:PRO:CA	1:A:3584:PHE:CE1	2.04	1.38
1:A:2284:LYS:CD	1:A:2353:ARG:HH22	1.37	1.37
1:A:2659:VAL:CG2	1:A:2811:TRP:HE1	1.45	1.30
1:A:2847:VAL:CG1	1:A:2849:PRO:HD2	1.61	1.30
1:A:3291:LEU:O	1:A:3294:HIS:ND1	1.63	1.29
1:A:2284:LYS:HD2	1:A:2353:ARG:NH2	1.47	1.27
1:A:2473:MET:HE2	1:A:2502:TRP:CD2	1.70	1.26
1:A:3238:PHE:HZ	1:A:3243:PHE:CD1	1.51	1.25
1:A:4030:LYS:HG3	1:A:4034:GLU:OE1	1.34	1.21

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2660:GLY:HA3	5:A:4406:ADP:O1A	1.34	1.21
1:A:4054:SER:HB3	1:A:4057:ILE:CD1	1.71	1.19
1:A:2592:LEU:HD21	1:A:2707:GLN:OE1	1.37	1.19
1:A:2284:LYS:HG3	1:A:2401:GLN:OE1	1.38	1.18
1:A:3238:PHE:CZ	1:A:3243:PHE:CD1	2.32	1.18
1:A:4054:SER:CB	1:A:4057:ILE:HD12	1.73	1.17
1:A:1690:PRO:HA	1:A:1798:TYR:OH	1.47	1.15
1:A:2004:LYS:HG3	1:A:2006:TYR:CE1	1.82	1.14
1:A:2659:VAL:CB	1:A:2811:TRP:HE1	1.61	1.13
1:A:2131:ARG:HA	1:A:2138:ARG:NH2	1.66	1.11
1:A:4100:VAL:HG12	1:A:4105:THR:HG21	1.31	1.10
1:A:4100:VAL:HG12	1:A:4105:THR:CG2	1.83	1.08
1:A:2473:MET:CE	1:A:2502:TRP:CE2	2.14	1.08
1:A:2847:VAL:HG12	1:A:2849:PRO:CD	1.83	1.08
1:A:4171:SER:HB2	1:A:4308:VAL:O	1.54	1.08
1:A:2661:ARG:O	1:A:2665:THR:HG23	1.55	1.06
1:A:3581:PRO:HA	1:A:3584:PHE:CZ	1.89	1.06
1:A:4100:VAL:HA	1:A:4105:THR:HG22	1.36	1.06
1:A:1867:ARG:NH1	2:A:4401:AOV:O3B	1.89	1.05
1:A:3580:HIS:O	1:A:3584:PHE:CZ	2.08	1.05
1:A:1716:ASP:CG	1:A:1745:ARG:NH2	2.10	1.05
1:A:2659:VAL:CG2	1:A:2811:TRP:NE1	2.20	1.03
1:A:2607:LEU:HD23	1:A:2634:LEU:CD1	1.86	1.03
1:A:3291:LEU:HD12	1:A:3294:HIS:CE1	1.95	1.02
1:A:4100:VAL:HA	1:A:4105:THR:CG2	1.90	1.02
1:A:2607:LEU:CD2	1:A:2634:LEU:HD12	1.89	1.01
1:A:2607:LEU:HD23	1:A:2634:LEU:HD12	1.01	1.01
1:A:2653:LEU:HB3	1:A:2661:ARG:HG2	1.44	1.00
1:A:2473:MET:HE2	1:A:2502:TRP:CE2	1.47	0.98
1:A:2284:LYS:HE3	1:A:2401:GLN:CB	1.93	0.98
1:A:3581:PRO:CA	1:A:3584:PHE:HE1	1.56	0.97
1:A:2284:LYS:CE	1:A:2353:ARG:HH22	1.76	0.96
1:A:2811:TRP:HB2	1:A:2816:MET:CE	1.96	0.96
1:A:2359:LYS:O	1:A:2360:ASP:OD1	1.83	0.96
1:A:2284:LYS:CE	1:A:2401:GLN:CG	2.23	0.96
1:A:2847:VAL:HG12	1:A:2849:PRO:HD2	0.97	0.95
1:A:3511:LYS:NZ	1:A:4021:LEU:O	1.98	0.94
1:A:2284:LYS:HD2	1:A:2353:ARG:HH22	0.79	0.93
1:A:2659:VAL:HG23	1:A:2811:TRP:HE1	1.33	0.93
1:A:4054:SER:HB3	1:A:4057:ILE:HD12	0.94	0.92
1:A:4100:VAL:CG1	1:A:4105:THR:HG21	1.98	0.92

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:4171:SER:CB	1:A:4308:VAL:O	2.16	0.92
1:A:1584:PRO:HB2	1:A:1587:THR:CG2	1.98	0.92
1:A:3581:PRO:CB	1:A:3584:PHE:HE1	1.82	0.92
1:A:1896:HIS:CD2	1:A:1929:ILE:HG23	2.05	0.92
1:A:3238:PHE:HZ	1:A:3243:PHE:HD1	0.98	0.91
1:A:1716:ASP:OD2	1:A:1745:ARG:NH2	2.03	0.91
1:A:2847:VAL:CG1	1:A:2849:PRO:CD	2.42	0.91
1:A:2659:VAL:HB	1:A:2811:TRP:HE1	1.33	0.91
1:A:2284:LYS:CD	1:A:2401:GLN:HG3	2.01	0.90
1:A:2284:LYS:HE2	1:A:2401:GLN:HG3	1.51	0.90
1:A:1662:LEU:HD11	1:A:1697:GLU:HB3	1.54	0.90
1:A:1584:PRO:HB2	1:A:1587:THR:HG22	1.55	0.89
1:A:4057:ILE:HD13	1:A:4149:LEU:HD23	1.54	0.89
1:A:3581:PRO:HA	1:A:3584:PHE:HE1	1.08	0.88
1:A:3291:LEU:C	1:A:3294:HIS:CE1	2.46	0.88
1:A:1674:THR:HG22	1:A:3925:ALA:HA	1.54	0.88
1:A:1716:ASP:OD1	1:A:1745:ARG:NH2	2.06	0.88
1:A:2004:LYS:CG	1:A:2006:TYR:CE1	2.56	0.88
1:A:2659:VAL:HB	1:A:2811:TRP:NE1	1.88	0.88
1:A:1796:LYS:HD3	1:A:1797:GLY:N	1.88	0.87
1:A:1690:PRO:CA	1:A:1798:TYR:OH	2.22	0.87
1:A:2284:LYS:CD	1:A:2353:ARG:NH2	2.19	0.87
1:A:2284:LYS:HE3	1:A:2401:GLN:HG3	0.88	0.87
1:A:2660:GLY:CA	5:A:4406:ADP:O1A	2.22	0.87
1:A:3377:PRO:CB	1:A:3378:PHE:HB2	2.05	0.86
1:A:4100:VAL:CA	1:A:4105:THR:CG2	2.53	0.86
1:A:4030:LYS:HB2	1:A:4034:GLU:HG3	1.57	0.85
1:A:2284:LYS:CE	1:A:2353:ARG:NH2	2.36	0.85
1:A:2660:GLY:O	1:A:2664:ILE:HD13	1.76	0.85
1:A:2284:LYS:HG3	1:A:2401:GLN:CD	1.97	0.84
1:A:2592:LEU:CD2	1:A:2707:GLN:OE1	2.24	0.84
1:A:4171:SER:C	1:A:4308:VAL:O	2.16	0.83
1:A:2510:ASP:O	1:A:2522:TYR:OH	1.96	0.83
1:A:2659:VAL:HG23	1:A:2811:TRP:NE1	1.87	0.83
1:A:2284:LYS:HD2	1:A:2353:ARG:CZ	2.07	0.83
1:A:1716:ASP:OD1	1:A:1745:ARG:CZ	2.27	0.82
1:A:2811:TRP:HB2	1:A:2816:MET:HE2	1.61	0.82
1:A:2004:LYS:HG3	1:A:2006:TYR:HE1	1.41	0.82
1:A:4057:ILE:HD13	1:A:4149:LEU:CD2	2.09	0.82
1:A:2658:GLY:HA3	1:A:2870:SER:HB3	1.62	0.81
1:A:3291:LEU:HA	1:A:3294:HIS:CE1	2.16	0.81

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2055:ASP:OD1	1:A:2420:ARG:NH2	2.14	0.81
1:A:1716:ASP:OD2	1:A:2065:SER:HA	1.80	0.81
1:A:4171:SER:CB	1:A:4305:LYS:CB	2.59	0.80
1:A:1554:ALA:HA	1:A:1560:LEU:HD12	1.63	0.80
1:A:2288:ILE:HD11	1:A:2425:VAL:HG21	1.63	0.80
1:A:3238:PHE:CZ	1:A:3243:PHE:HD1	1.85	0.80
1:A:4171:SER:HB3	1:A:4305:LYS:CB	2.12	0.80
1:A:4057:ILE:CD1	1:A:4149:LEU:CD2	2.60	0.80
1:A:3291:LEU:HD12	1:A:3294:HIS:HE1	1.46	0.79
1:A:2575:THR:HG21	1:A:2645:SER:OG	1.80	0.79
1:A:3857:ASN:HB2	1:A:3975:CYS:SG	2.21	0.79
1:A:4100:VAL:CG1	1:A:4105:THR:CG2	2.57	0.79
1:A:1715:CYS:SG	1:A:1743:PHE:HA	2.22	0.79
1:A:3377:PRO:HB2	1:A:3378:PHE:HB2	1.65	0.78
1:A:3640:LEU:HG	1:A:3642:PHE:CE2	2.18	0.78
1:A:2263:ILE:HD13	1:A:2441:ILE:HA	1.65	0.78
1:A:3640:LEU:HG	1:A:3642:PHE:CZ	2.20	0.77
1:A:3581:PRO:HA	1:A:3584:PHE:CD1	2.11	0.77
1:A:1513:GLN:HG3	1:A:1514:LEU:N	2.00	0.76
1:A:2847:VAL:HG13	1:A:2849:PRO:HD2	1.66	0.76
1:A:2658:GLY:HA3	1:A:2870:SER:CB	2.16	0.76
1:A:3291:LEU:C	1:A:3294:HIS:ND1	2.40	0.76
1:A:4304:LEU:HD12	1:A:4305:LYS:N	2.00	0.76
1:A:4171:SER:CA	1:A:4308:VAL:O	2.33	0.76
1:A:3512:ILE:HG23	1:A:4021:LEU:CD2	2.16	0.76
1:A:4030:LYS:CG	1:A:4034:GLU:OE1	2.28	0.75
1:A:2811:TRP:HB2	1:A:2816:MET:HE3	1.66	0.75
1:A:2821:GLU:HB2	1:A:2852:LEU:HD13	1.68	0.75
1:A:3291:LEU:CA	1:A:3294:HIS:CE1	2.70	0.75
1:A:2473:MET:HE2	1:A:2502:TRP:CE3	1.91	0.74
1:A:3760:ALA:HA	1:A:3788:TRP:CH2	2.22	0.74
1:A:2810:GLY:O	1:A:2811:TRP:HD1	1.70	0.74
1:A:4208:LEU:O	1:A:4214:GLN:NE2	2.20	0.74
1:A:2685:TYR:HB2	1:A:2718:VAL:HG21	1.68	0.73
1:A:2135:ALA:HA	1:A:2138:ARG:CB	1.71	0.73
1:A:4057:ILE:CD1	1:A:4152:GLN:HE22	2.01	0.73
1:A:2659:VAL:CB	1:A:2811:TRP:NE1	2.41	0.73
1:A:1696:THR:OG1	2:A:4401:AOV:O2B	2.05	0.73
1:A:1583:ASP:N	1:A:1584:PRO:HD2	2.02	0.73
1:A:1896:HIS:HA	1:A:1929:ILE:HD13	1.69	0.73
1:A:2205:ARG:NH2	1:A:2429:SER:OG	2.20	0.73

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2653:LEU:CB	1:A:2661:ARG:HG2	2.17	0.72
1:A:3587:ASN:OD1	1:A:3590:ASP:OD2	2.07	0.72
1:A:1752:SER:OG	1:A:3755:MET:O	2.06	0.72
1:A:1283:ASP:HB3	1:A:1353:GLU:OE2	1.89	0.72
1:A:1693:THR:HG23	1:A:1817:MET:O	1.89	0.72
1:A:1460:GLY:HA3	1:A:1655:TYR:HD2	1.54	0.72
1:A:2135:ALA:N	1:A:2138:ARG:HG3	1.73	0.71
1:A:1801:ARG:NH1	1:A:2064:GLU:OE1	2.23	0.71
1:A:1690:PRO:HD2	1:A:1818:SER:HA	1.72	0.71
1:A:2661:ARG:O	1:A:2665:THR:CG2	2.37	0.71
1:A:1514:LEU:CD1	1:A:1534:PHE:CE1	2.74	0.71
1:A:1279:ILE:HD12	1:A:1293:LYS:HG3	1.71	0.71
1:A:3642:PHE:HA	1:A:3648:TRP:NE1	2.06	0.70
1:A:3881:ILE:HG23	1:A:3882:PRO:HA	1.72	0.70
1:A:4100:VAL:HG12	1:A:4105:THR:HG23	1.72	0.70
1:A:3512:ILE:HD12	1:A:3513:ASN:HB2	1.72	0.70
1:A:2607:LEU:CD2	1:A:2634:LEU:CD1	2.61	0.70
1:A:3966:PRO:HB2	1:A:3969:VAL:HG12	1.73	0.70
1:A:2004:LYS:CG	1:A:2006:TYR:HE1	2.00	0.70
1:A:2658:GLY:CA	1:A:2870:SER:HB3	2.21	0.70
1:A:4100:VAL:CB	1:A:4105:THR:CG2	2.70	0.70
1:A:2135:ALA:HA	1:A:2138:ARG:HB2	1.72	0.69
1:A:1587:THR:OG1	1:A:1590:GLY:HA3	1.93	0.69
1:A:3847:TRP:HH2	1:A:3900:TYR:HB2	1.56	0.69
1:A:4097:LEU:HD13	1:A:4111:VAL:CG1	2.23	0.69
1:A:2867:ALA:HA	1:A:2871:GLN:OE1	1.93	0.69
1:A:1900:GLN:OE1	1:A:1900:GLN:N	2.22	0.68
1:A:4236:GLN:O	1:A:4239:SER:OG	2.10	0.68
1:A:3291:LEU:C	1:A:3294:HIS:HD1	1.95	0.68
1:A:2284:LYS:CG	1:A:2401:GLN:HG3	2.22	0.68
1:A:2274:TYR:CE2	1:A:2428:CYS:HB3	2.28	0.68
1:A:4057:ILE:HD11	1:A:4152:GLN:HE22	1.57	0.68
1:A:1665:THR:OG1	1:A:1666:PRO:HD2	1.94	0.67
1:A:1397:ILE:HD12	1:A:1398:ARG:N	2.09	0.67
1:A:2719:HIS:ND1	1:A:2720:PRO:HD2	2.09	0.67
1:A:1752:SER:CB	1:A:3755:MET:O	2.43	0.67
1:A:4222:LEU:HD23	1:A:4223:GLU:N	2.09	0.67
1:A:4046:LEU:HD11	1:A:4138:LEU:HD13	1.77	0.67
1:A:3877:ARG:CZ	1:A:3943:TYR:OH	2.42	0.67
1:A:1540:CYS:SG	1:A:1599:LEU:HD12	2.35	0.67
1:A:3837:LYS:HB2	1:A:3984:ILE:HG23	1.75	0.67

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2131:ARG:HA	1:A:2138:ARG:CZ	2.24	0.67
1:A:1514:LEU:HD12	1:A:1534:PHE:HE1	1.58	0.67
1:A:2390:GLU:O	1:A:2391:ASN:CB	2.43	0.67
1:A:2473:MET:HE1	1:A:2502:TRP:CE2	2.12	0.66
1:A:1514:LEU:HD12	1:A:1534:PHE:CE1	2.30	0.66
1:A:4154:TRP:NE1	1:A:4172:GLU:OE2	2.28	0.66
1:A:3099:TYR:O	1:A:3103:LEU:N	2.29	0.66
1:A:3814:HIS:ND1	1:A:3815:PRO:O	2.21	0.66
1:A:2450:LEU:HD11	1:A:2460:TRP:HB3	1.78	0.66
1:A:2284:LYS:HG3	1:A:2401:GLN:CG	2.25	0.66
1:A:2242:VAL:O	1:A:2269:GLN:NE2	2.28	0.66
1:A:2265:THR:HB	1:A:2266:PRO:CD	2.26	0.66
1:A:4171:SER:O	1:A:4308:VAL:O	2.13	0.66
1:A:2518:HIS:N	1:A:2519:PRO:HA	2.10	0.66
1:A:2109:ARG:NH2	2:A:4401:AOV:O3G	2.28	0.66
1:A:2295:CYS:SG	1:A:2430:ILE:HG13	2.35	0.66
1:A:3847:TRP:HH2	1:A:3900:TYR:CB	2.09	0.66
1:A:4051:ASN:N	1:A:4051:ASN:OD1	2.29	0.66
1:A:1624:TRP:CD2	1:A:3917:PHE:HB3	2.31	0.66
1:A:1662:LEU:HD11	1:A:1697:GLU:CB	2.25	0.65
1:A:2135:ALA:H	1:A:2138:ARG:HG3	1.56	0.65
1:A:3374:ASN:ND2	1:A:3377:PRO:HD2	2.10	0.65
1:A:4030:LYS:HB2	1:A:4034:GLU:CG	2.25	0.65
1:A:2212:VAL:HA	1:A:2215:TRP:HE3	1.62	0.65
1:A:4215:ILE:HB	1:A:4217:ILE:HD11	1.77	0.65
1:A:2816:MET:HB2	1:A:2856:LEU:HD21	1.78	0.65
1:A:4307:GLN:HG3	1:A:4307:GLN:O	1.97	0.65
1:A:2292:PRO:O	1:A:2295:CYS:HB2	1.96	0.65
1:A:2131:ARG:CA	1:A:2138:ARG:NH2	2.52	0.65
1:A:1693:THR:CG2	1:A:1817:MET:O	2.44	0.65
1:A:2004:LYS:HE3	1:A:2006:TYR:CZ	2.32	0.65
1:A:4057:ILE:CD1	1:A:4149:LEU:HD22	2.27	0.65
1:A:2354:LEU:HD23	1:A:2355:VAL:N	2.12	0.65
1:A:2168:LEU:O	1:A:2169:VAL:C	2.34	0.65
1:A:1696:THR:OG1	1:A:1741:ASP:OD1	2.15	0.64
1:A:2362:ASN:HD21	1:A:2406:MET:HB2	1.62	0.64
1:A:2651:LEU:HD23	1:A:2653:LEU:HD21	1.78	0.64
1:A:1584:PRO:HB2	1:A:1587:THR:HG21	1.77	0.64
1:A:2473:MET:CE	1:A:2502:TRP:CD2	2.63	0.64
1:A:2135:ALA:N	1:A:2138:ARG:CG	2.38	0.64
1:A:2656:ARG:NH1	1:A:2783:ASP:OD1	2.31	0.64

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2442:TYR:O	1:A:2446:LEU:HB2	1.97	0.64
1:A:1938:GLU:OE2	1:A:1938:GLU:N	2.31	0.64
1:A:2653:LEU:HB3	1:A:2661:ARG:CG	2.25	0.63
1:A:3273:GLN:OE1	1:A:3276:VAL:N	2.31	0.63
1:A:4025:ILE:HD12	1:A:4025:ILE:N	2.14	0.63
1:A:3871:HIS:NE2	1:A:3875:GLN:OE1	2.32	0.63
1:A:1482:GLU:OE1	1:A:1658:ASN:ND2	2.32	0.63
1:A:1752:SER:HB3	1:A:3755:MET:O	1.99	0.63
1:A:3762:LEU:C	1:A:3762:LEU:HD12	2.18	0.63
1:A:2261:PRO:O	1:A:2445:TYR:OH	2.08	0.62
1:A:1279:ILE:HD12	1:A:1293:LYS:CG	2.28	0.62
1:A:4220:LEU:HB2	1:A:4245:VAL:HG13	1.80	0.62
1:A:1499:TRP:CZ3	1:A:1503:LEU:HD11	2.34	0.62
1:A:2264:GLN:HA	1:A:2268:MET:HG3	1.80	0.62
1:A:3374:ASN:HB2	1:A:3820:ILE:HD11	1.82	0.62
1:A:3080:LYS:CB	1:A:3087:ALA:HB2	2.30	0.62
1:A:1715:CYS:O	1:A:1716:ASP:OD1	2.18	0.62
1:A:4052:GLN:HA	1:A:4055:ASN:OD1	1.98	0.62
1:A:3836:LEU:HD23	1:A:3991:ASP:CB	2.30	0.62
1:A:2660:GLY:HA3	5:A:4406:ADP:PA	2.38	0.62
1:A:2664:ILE:N	1:A:2664:ILE:HD12	2.14	0.62
1:A:2699:GLN:NE2	1:A:2704:GLU:OE1	2.33	0.62
1:A:3511:LYS:CE	1:A:4021:LEU:O	2.48	0.61
1:A:2375:VAL:HA	1:A:2378:LEU:HD12	1.82	0.61
1:A:2239:ALA:O	1:A:2240:THR:HG23	2.00	0.61
1:A:1472:HIS:ND1	1:A:1490:VAL:O	2.33	0.61
1:A:2597:LYS:HB2	1:A:2645:SER:HB3	1.82	0.61
1:A:1645:VAL:HG12	1:A:1646:ASP:H	1.66	0.61
1:A:4057:ILE:HG23	1:A:4152:GLN:OE1	2.01	0.61
1:A:4281:VAL:HG21	1:A:4304:LEU:HD23	1.81	0.61
1:A:2335:CYS:HG	1:A:2347:ARG:C	2.04	0.61
1:A:3238:PHE:CZ	1:A:3243:PHE:CG	2.86	0.61
1:A:3755:MET:HG3	1:A:3785:VAL:HG21	1.83	0.61
1:A:3238:PHE:CZ	1:A:3243:PHE:HB2	2.36	0.61
1:A:1509:LYS:NZ	1:A:1512:GLU:OE1	2.34	0.61
1:A:4030:LYS:HG3	1:A:4034:GLU:CD	2.16	0.61
1:A:3377:PRO:HB2	1:A:3378:PHE:CB	2.29	0.61
1:A:2517:ASN:CB	1:A:2519:PRO:HB3	2.31	0.60
1:A:4265:GLU:O	1:A:4288:CYS:CB	2.49	0.60
1:A:3374:ASN:HD22	1:A:3377:PRO:HD2	1.66	0.60
1:A:2517:ASN:HB3	1:A:2519:PRO:HB3	1.82	0.60

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2265:THR:HB	1:A:2266:PRO:HD2	1.83	0.60
1:A:3904:ASP:O	1:A:3908:ASP:N	2.34	0.60
1:A:2284:LYS:CG	1:A:2401:GLN:CG	2.79	0.60
1:A:3292:LYS:O	1:A:3295:LEU:HB2	2.01	0.60
1:A:2288:ILE:HD11	1:A:2425:VAL:CG2	2.32	0.60
1:A:2284:LYS:NZ	1:A:2353:ARG:NH2	2.49	0.60
1:A:1795:GLY:HA3	1:A:1798:TYR:HD1	1.66	0.60
1:A:4217:ILE:HD12	1:A:4217:ILE:N	2.17	0.60
1:A:1583:ASP:N	1:A:1584:PRO:CD	2.64	0.60
1:A:2816:MET:CB	1:A:2856:LEU:HD21	2.32	0.59
1:A:1662:LEU:HB3	2:A:4401:AOV:C6	2.31	0.59
1:A:3837:LYS:O	1:A:3841:MET:N	2.30	0.59
1:A:2659:VAL:O	1:A:2659:VAL:HG22	2.01	0.59
1:A:2363:LEU:N	1:A:2364:PRO:HD2	2.17	0.59
1:A:3372:THR:HG22	1:A:3374:ASN:H	1.67	0.59
1:A:2548:PHE:HA	1:A:2551:ILE:HD12	1.84	0.59
1:A:3245:CYS:SG	1:A:3249:GLU:HB2	2.43	0.59
1:A:4100:VAL:CA	1:A:4105:THR:HG21	2.30	0.59
1:A:2011:LYS:NZ	1:A:2367:ASP:OD2	2.33	0.59
1:A:1943:LEU:HA	1:A:1995:ALA:HB2	1.85	0.59
1:A:2284:LYS:HD2	1:A:2353:ARG:NH1	2.17	0.59
1:A:4281:VAL:HG21	1:A:4304:LEU:CD2	2.32	0.59
1:A:2353:ARG:HG2	1:A:2354:LEU:N	2.16	0.59
1:A:2847:VAL:CG1	1:A:2849:PRO:CG	2.80	0.59
1:A:2135:ALA:CA	1:A:2138:ARG:HB2	2.30	0.59
1:A:3512:ILE:CG2	1:A:4021:LEU:CD2	2.80	0.59
1:A:1747:GLU:HB3	1:A:1750:VAL:HG23	1.84	0.59
1:A:3844:TYR:HA	1:A:3847:TRP:HB2	1.85	0.58
1:A:4306:ASN:O	1:A:4307:GLN:HB3	2.03	0.58
1:A:3585:GLN:NE2	1:A:3585:GLN:O	2.36	0.58
1:A:2335:CYS:SG	1:A:2347:ARG:O	2.58	0.58
1:A:1554:ALA:CA	1:A:1560:LEU:HD12	2.32	0.58
1:A:2357:TYR:C	1:A:2358:LEU:HD23	2.24	0.58
1:A:3711:LYS:HG2	1:A:3740:LEU:HD13	1.85	0.58
1:A:2162:TYR:HB2	1:A:2199:ASN:O	2.03	0.58
1:A:1973:MET:SD	1:A:2074:ARG:NH1	2.77	0.58
1:A:2185:HIS:CE1	1:A:2189:ILE:HD11	2.39	0.58
1:A:3591:THR:HG21	1:A:3632:ALA:HB1	1.85	0.58
1:A:1584:PRO:CB	1:A:1587:THR:HG22	2.31	0.58
1:A:3781:ASN:H	1:A:3810:THR:HB	1.67	0.58
1:A:1796:LYS:HD3	1:A:1797:GLY:H	1.67	0.58

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3877:ARG:NH1	1:A:3943:TYR:OH	2.37	0.58
1:A:2544:GLU:N	1:A:2544:GLU:OE1	2.37	0.58
1:A:2676:LEU:O	1:A:2676:LEU:HD23	2.04	0.58
1:A:1986:SER:OG	4:A:4403:ATP:O2B	2.16	0.57
1:A:1496:VAL:HA	1:A:1499:TRP:NE1	2.18	0.57
1:A:2858:ILE:O	1:A:2861:SER:OG	2.16	0.57
1:A:2625:LEU:HB3	1:A:2627:ILE:HD13	1.85	0.57
1:A:2366:LEU:HD11	1:A:2415:HIS:HB3	1.85	0.57
1:A:1437:LEU:CD2	1:A:1441:LEU:HD12	2.34	0.57
1:A:2462:SER:O	1:A:2465:LYS:N	2.37	0.57
1:A:3621:GLU:HG3	1:A:3622:ARG:N	2.19	0.57
1:A:3492:TYR:O	1:A:3495:LEU:HB3	2.05	0.57
1:A:2095:GLU:OE2	4:A:4403:ATP:O3G	2.23	0.57
1:A:3067:LEU:O	1:A:3071:LYS:N	2.38	0.57
1:A:1514:LEU:CD1	1:A:1534:PHE:HE1	2.16	0.57
1:A:1397:ILE:HD12	1:A:1398:ARG:H	1.69	0.57
1:A:2739:TYR:HB3	1:A:2744:LEU:HD21	1.87	0.57
1:A:3525:ARG:NH2	1:A:3721:GLU:OE1	2.38	0.57
1:A:4220:LEU:HB3	1:A:4302:LEU:HD21	1.84	0.56
1:A:1440:ILE:HD11	1:A:1453:HIS:CG	2.40	0.56
1:A:4054:SER:HB3	1:A:4057:ILE:CG1	2.34	0.56
1:A:3921:LEU:HD23	1:A:3922:LEU:N	2.19	0.56
1:A:2130:LEU:O	1:A:2138:ARG:NE	2.38	0.56
1:A:2643:VAL:HG11	1:A:2651:LEU:CD1	2.36	0.56
1:A:3640:LEU:HD12	1:A:3642:PHE:CE1	2.40	0.56
1:A:3642:PHE:HA	1:A:3648:TRP:CD1	2.40	0.56
1:A:1534:PHE:HB2	1:A:1539:LEU:HD11	1.86	0.56
1:A:3245:CYS:SG	1:A:3249:GLU:CB	2.93	0.56
1:A:3291:LEU:O	1:A:3294:HIS:HE1	1.74	0.56
1:A:1908:SER:N	1:A:1964:GLU:OE2	2.39	0.56
1:A:4164:LEU:HD13	1:A:4214:GLN:O	2.05	0.56
1:A:3864:LEU:HD23	1:A:3903:ILE:HD12	1.87	0.56
1:A:4204:TRP:CZ2	1:A:4248:CYS:SG	2.99	0.56
1:A:3580:HIS:O	1:A:3584:PHE:CE2	2.55	0.56
1:A:3577:ARG:O	1:A:3584:PHE:HZ	1.89	0.56
1:A:3249:GLU:N	1:A:3249:GLU:OE1	2.39	0.56
1:A:3591:THR:CG2	1:A:3632:ALA:HB1	2.36	0.56
1:A:4100:VAL:CB	1:A:4105:THR:HG23	2.35	0.56
1:A:1353:GLU:HB3	1:A:1354:PRO:HD3	1.87	0.56
1:A:2565:LEU:HG	1:A:2566:ASP:O	2.06	0.56
1:A:2810:GLY:O	1:A:2811:TRP:CD1	2.58	0.55

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2382:LEU:HD21	1:A:2402:ILE:HD13	1.87	0.55
1:A:2664:ILE:O	1:A:2668:VAL:HG23	2.05	0.55
1:A:4220:LEU:O	1:A:4221:LEU:HD23	2.06	0.55
1:A:2402:ILE:N	1:A:2402:ILE:HD12	2.21	0.55
1:A:1813:ARG:HD3	1:A:1814:PRO:HD2	1.89	0.55
1:A:1824:LEU:O	1:A:1828:VAL:HG23	2.06	0.55
1:A:1282:GLU:HA	1:A:1287:ARG:O	2.06	0.55
1:A:3581:PRO:HB3	1:A:3584:PHE:HE1	1.69	0.55
1:A:4137:PRO:O	1:A:4140:TYR:HB3	2.07	0.55
1:A:1667:LEU:HD22	1:A:1819:HIS:O	2.06	0.55
1:A:1260:ILE:HD12	1:A:1317:TYR:HB2	1.87	0.55
1:A:3239:ASP:O	1:A:3242:ARG:HG2	2.06	0.55
1:A:2536:ARG:HG2	1:A:2545:LEU:HD22	1.88	0.55
1:A:3570:MET:SD	1:A:4017:GLN:HB3	2.47	0.55
1:A:3294:HIS:CE1	1:A:3295:LEU:HG	2.42	0.55
1:A:2767:TYR:CE2	1:A:2771:ARG:HD2	2.42	0.55
1:A:2592:LEU:HD22	1:A:2645:SER:O	2.05	0.55
1:A:1694:GLY:HA3	2:A:4401:AOV:H8	1.89	0.55
1:A:2348:PRO:HB3	1:A:2354:LEU:HB2	1.88	0.55
1:A:1716:ASP:CG	1:A:1745:ARG:HH22	1.97	0.55
1:A:2390:GLU:O	1:A:2391:ASN:HB3	2.07	0.55
1:A:3718:LEU:HD13	1:A:3720:ILE:HB	1.89	0.55
1:A:1408:LEU:HA	1:A:1411:CYS:SG	2.46	0.55
1:A:2659:VAL:HG21	1:A:2811:TRP:NE1	2.20	0.55
1:A:3238:PHE:CE1	1:A:3243:PHE:HB2	2.41	0.55
1:A:1439:GLU:HB2	1:A:1440:ILE:HD12	1.87	0.55
1:A:1835:PHE:CE2	1:A:1894:GLU:HB3	2.42	0.55
1:A:2230:TYR:OH	1:A:2266:PRO:O	2.24	0.54
1:A:4051:ASN:O	1:A:4055:ASN:N	2.40	0.54
1:A:3991:ASP:OD1	1:A:3991:ASP:N	2.40	0.54
1:A:1996:LEU:O	1:A:2000:GLY:N	2.36	0.54
1:A:2167:SER:O	1:A:2168:LEU:C	2.43	0.54
1:A:1925:VAL:HG23	1:A:1926:PHE:HD1	1.72	0.54
1:A:1810:GLN:HG3	1:A:3732:ASP:HB2	1.90	0.54
1:A:3658:GLU:OE1	1:A:3658:GLU:N	2.41	0.54
1:A:3291:LEU:C	1:A:3294:HIS:HE1	2.08	0.54
1:A:3512:ILE:CG2	1:A:4021:LEU:HD21	2.38	0.54
1:A:1711:LEU:HD12	1:A:1731:LEU:HD21	1.89	0.54
1:A:2536:ARG:NH1	1:A:2549:ASP:OD2	2.41	0.54
1:A:4025:ILE:HG22	1:A:4027:ALA:N	2.24	0.54
1:A:2134:PRO:O	1:A:2135:ALA:HB3	2.08	0.53

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3854:LYS:O	1:A:3857:ASN:HB3	2.07	0.53
1:A:1645:VAL:HG12	1:A:1646:ASP:N	2.23	0.53
1:A:3296:LYS:C	1:A:3298:SER:H	2.10	0.53
1:A:1663:VAL:CG2	1:A:1829:ILE:HD11	2.38	0.53
1:A:4057:ILE:HD12	1:A:4149:LEU:CD2	2.35	0.53
1:A:3750:TYR:HA	1:A:3776:TRP:O	2.08	0.53
1:A:2663:THR:OG1	5:A:4406:ADP:H5'1	2.09	0.53
1:A:4051:ASN:O	1:A:4055:ASN:OD1	2.27	0.53
1:A:4308:VAL:O	1:A:4308:VAL:HG12	2.08	0.53
1:A:2135:ALA:CA	1:A:2138:ARG:CB	2.56	0.53
1:A:4147:ARG:O	1:A:4151:ILE:HG12	2.08	0.53
1:A:2450:LEU:O	1:A:2453:ASN:O	2.27	0.53
1:A:4265:GLU:O	1:A:4288:CYS:N	2.35	0.53
1:A:3740:LEU:O	1:A:3740:LEU:HD12	2.07	0.53
1:A:1411:CYS:O	1:A:1414:SER:OG	2.19	0.53
1:A:1879:LEU:HD12	1:A:1897:ILE:HG23	1.90	0.53
1:A:2396:GLY:C	1:A:2397:LEU:HD22	2.28	0.53
1:A:2689:GLN:HG3	1:A:2690:PHE:N	2.24	0.53
1:A:4199:LYS:CD	1:A:4255:GLN:HG2	2.39	0.53
1:A:1709:GLN:HG3	1:A:1709:GLN:O	2.09	0.53
1:A:2041:VAL:CG2	1:A:2050:SER:CB	2.87	0.53
1:A:1376:ARG:O	1:A:1379:MET:HB3	2.08	0.53
1:A:2249:LEU:HB2	1:A:2448:PRO:HG3	1.91	0.53
1:A:3577:ARG:HA	1:A:3584:PHE:HE2	1.72	0.53
1:A:2660:GLY:HA2	5:A:4406:ADP:PB	2.49	0.53
1:A:1590:GLY:C	1:A:1591:ILE:HG13	2.29	0.53
1:A:3299:ARG:HH21	1:A:3322:LYS:HD3	1.73	0.53
1:A:2639:ARG:O	1:A:2642:ARG:HG2	2.09	0.52
1:A:3864:LEU:CD2	1:A:3903:ILE:HG21	2.39	0.52
1:A:1624:TRP:CZ2	1:A:3906:LEU:HD13	2.44	0.52
1:A:1472:HIS:HA	1:A:1490:VAL:O	2.10	0.52
1:A:1343:ASN:OD1	1:A:1344:HIS:N	2.42	0.52
1:A:3212:THR:HG23	1:A:3213:TYR:CD2	2.44	0.52
1:A:3262:ASP:N	1:A:3262:ASP:OD1	2.42	0.52
1:A:1993:ARG:HB2	1:A:2003:VAL:HG11	1.92	0.52
1:A:3296:LYS:HA	1:A:3300:LEU:HD21	1.92	0.52
1:A:2848:ASP:N	1:A:2849:PRO:HD2	2.24	0.52
1:A:2004:LYS:HE2	1:A:2006:TYR:OH	2.09	0.52
1:A:4052:GLN:HA	1:A:4055:ASN:CG	2.29	0.52
1:A:2175:GLY:CA	1:A:2196:LEU:HD23	2.39	0.52
1:A:2389:ASP:N	1:A:2393:GLU:O	2.43	0.52

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:4188:ALA:O	1:A:4192:GLY:N	2.42	0.52
1:A:3238:PHE:CA	1:A:3242:ARG:HH21	2.23	0.52
1:A:4199:LYS:CE	1:A:4255:GLN:HG2	2.39	0.52
1:A:2650:SER:HB2	1:A:2803:CYS:HB3	1.91	0.52
1:A:1691:ALA:HB1	1:A:2105:ALA:HA	1.91	0.52
1:A:4265:GLU:O	1:A:4288:CYS:HB3	2.09	0.52
1:A:1908:SER:HB2	1:A:2113:ILE:HA	1.91	0.52
1:A:3675:ILE:HD11	1:A:3693:PHE:HB2	1.92	0.52
1:A:3324:LEU:HG	1:A:3325:ILE:N	2.25	0.52
1:A:2131:ARG:HA	1:A:2138:ARG:HH22	1.64	0.52
1:A:4046:LEU:CD1	1:A:4138:LEU:HD22	2.40	0.52
1:A:1861:HIS:HB2	1:A:2112:MET:SD	2.50	0.52
1:A:2254:PHE:O	1:A:2595:HIS:HE1	1.92	0.52
1:A:1896:HIS:CD2	1:A:1929:ILE:CG2	2.88	0.52
1:A:4026:THR:O	1:A:4027:ALA:HB3	2.10	0.52
1:A:4204:TRP:CE2	1:A:4248:CYS:SG	3.03	0.52
1:A:2254:PHE:O	1:A:2595:HIS:CE1	2.63	0.52
1:A:3218:PRO:HD2	1:A:3221:LEU:HD12	1.92	0.52
1:A:1631:ARG:O	1:A:1642:VAL:HG13	2.10	0.52
1:A:2486:VAL:HB	1:A:4106:LEU:HD21	1.91	0.52
1:A:1811:LEU:N	1:A:1811:LEU:HD12	2.25	0.52
1:A:3635:SER:O	1:A:3639:THR:HG23	2.09	0.52
1:A:2774:GLN:N	1:A:2774:GLN:OE1	2.42	0.52
1:A:1398:ARG:O	1:A:1402:LEU:HG	2.09	0.52
1:A:1408:LEU:O	1:A:1411:CYS:SG	2.67	0.52
1:A:2577:GLY:HA3	1:A:2602:LEU:HD11	1.92	0.52
1:A:2465:LYS:O	1:A:2468:LEU:HB3	2.10	0.51
1:A:3965:PHE:HB3	1:A:3966:PRO:CD	2.40	0.51
1:A:3877:ARG:HB2	1:A:3885:TRP:CD1	2.46	0.51
1:A:2823:LEU:HD13	1:A:2826:GLU:OE1	2.09	0.51
1:A:2133:GLN:O	1:A:2138:ARG:HD2	2.11	0.51
1:A:4100:VAL:CG1	1:A:4105:THR:HG23	2.35	0.51
1:A:1285:GLN:O	1:A:1287:ARG:HG3	2.10	0.51
1:A:3380:PRO:HD2	1:A:3383:ALA:HB3	1.92	0.51
1:A:3640:LEU:CD1	1:A:3648:TRP:CZ2	2.93	0.51
1:A:2263:ILE:HD11	1:A:2444:ALA:HB3	1.93	0.51
1:A:4052:GLN:HA	1:A:4055:ASN:ND2	2.26	0.51
1:A:1800:GLY:C	1:A:1801:ARG:HG3	2.29	0.51
1:A:1993:ARG:HG3	1:A:1994:ALA:N	2.25	0.51
1:A:3240:LEU:HA	1:A:3243:PHE:HB3	1.92	0.51
1:A:3577:ARG:NH2	1:A:3577:ARG:HB3	2.26	0.51

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2592:LEU:HD11	1:A:2707:GLN:OE1	2.10	0.51
1:A:1628:LYS:HB2	1:A:3917:PHE:CZ	2.46	0.51
1:A:1806:ASP:OD2	1:A:3730:GLY:N	2.43	0.51
1:A:2284:LYS:NZ	1:A:2401:GLN:N	2.59	0.51
1:A:2811:TRP:CE2	1:A:2869:PRO:HB3	2.46	0.51
1:A:3325:ILE:HA	1:A:3369:PHE:O	2.11	0.51
1:A:3515:MET:HA	1:A:3822:LEU:HD13	1.93	0.51
1:A:2847:VAL:HG13	1:A:2849:PRO:CD	2.30	0.50
1:A:3640:LEU:HD12	1:A:3648:TRP:CZ2	2.46	0.50
1:A:3586:GLU:O	1:A:3587:ASN:HB3	2.11	0.50
1:A:1472:HIS:C	1:A:1473:ILE:HD12	2.31	0.50
1:A:1804:LEU:HD12	1:A:1805:PRO:HD2	1.92	0.50
1:A:3577:ARG:CZ	1:A:3577:ARG:HB3	2.42	0.50
1:A:2187:GLU:HG2	1:A:2191:ASN:OD1	2.11	0.50
1:A:1697:GLU:OE2	1:A:2072:ASP:HB3	2.12	0.50
1:A:1973:MET:HG3	1:A:2070:LEU:HD23	1.94	0.50
1:A:1458:PHE:HB3	1:A:1461:ILE:CD1	2.42	0.50
1:A:3881:ILE:CG2	1:A:3882:PRO:HA	2.41	0.50
1:A:3514:ASN:O	1:A:3515:MET:HB2	2.11	0.50
1:A:1728:PHE:CZ	1:A:1758:ILE:HD11	2.47	0.50
1:A:2294:GLY:O	1:A:2496:PRO:HG2	2.11	0.50
1:A:3932:ASP:OD1	1:A:3932:ASP:N	2.45	0.50
1:A:1802:GLN:N	1:A:1802:GLN:OE1	2.45	0.50
1:A:3910:ALA:O	1:A:3911:LYS:HG3	2.12	0.50
1:A:3291:LEU:HA	1:A:3294:HIS:ND1	2.27	0.50
1:A:2004:LYS:CE	1:A:2006:TYR:CZ	2.95	0.50
1:A:1337:GLU:O	1:A:1341:ASN:ND2	2.45	0.50
1:A:4227:PHE:CD2	1:A:4232:LEU:CD2	2.94	0.50
1:A:2284:LYS:CG	1:A:2401:GLN:OE1	2.33	0.49
1:A:2659:VAL:HG21	1:A:2811:TRP:CD1	2.47	0.49
1:A:4171:SER:HB2	1:A:4305:LYS:CB	2.39	0.49
1:A:1499:TRP:CE3	1:A:1503:LEU:HD11	2.47	0.49
1:A:2078:MET:HG3	1:A:2082:GLU:HB3	1.94	0.49
1:A:2318:CYS:HB2	1:A:2360:ASP:O	2.12	0.49
1:A:2363:LEU:HD22	1:A:2363:LEU:N	2.27	0.49
1:A:2769:THR:HA	1:A:2772:ILE:HD12	1.94	0.49
1:A:1388:VAL:HG13	1:A:1389:THR:N	2.27	0.49
1:A:3291:LEU:CA	1:A:3294:HIS:ND1	2.75	0.49
1:A:1582:GLU:C	1:A:1584:PRO:HD2	2.33	0.49
1:A:2173:MET:HB3	1:A:2426:ARG:NH1	2.27	0.49
1:A:3922:LEU:C	1:A:3922:LEU:HD13	2.32	0.49

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2045:PRO:O	1:A:2048:VAL:HG22	2.13	0.49
1:A:4038:ASN:O	1:A:4042:PRO:HD3	2.13	0.49
1:A:1825:ILE:O	1:A:1829:ILE:HG12	2.12	0.49
1:A:2362:ASN:HB2	1:A:2363:LEU:HD22	1.94	0.49
1:A:2473:MET:CE	1:A:2502:TRP:CE3	2.79	0.49
1:A:2512:GLU:OE2	1:A:2579:ARG:HG3	2.12	0.49
1:A:1547:PHE:CE1	1:A:1606:ASN:HB3	2.48	0.49
1:A:1862:TYR:CD2	1:A:1864:TRP:CH2	3.01	0.49
1:A:2284:LYS:CE	1:A:2401:GLN:CA	2.91	0.49
1:A:1896:HIS:O	1:A:1900:GLN:OE1	2.30	0.49
1:A:3587:ASN:OD1	1:A:3590:ASP:CG	2.51	0.49
1:A:1879:LEU:O	1:A:1882:GLN:N	2.43	0.49
1:A:3674:GLN:O	1:A:3677:VAL:HB	2.13	0.49
1:A:2683:ARG:NH2	1:A:3305:GLN:O	2.46	0.49
1:A:2320:ALA:HA	1:A:2364:PRO:HA	1.95	0.49
1:A:3847:TRP:CH2	1:A:3900:TYR:HB2	2.41	0.49
1:A:2175:GLY:HA2	1:A:2196:LEU:HD23	1.93	0.49
1:A:1695:LYS:NZ	2:A:4401:AOV:O1G	2.44	0.49
1:A:2625:LEU:HD22	1:A:2627:ILE:HD13	1.94	0.49
1:A:3636:LEU:HA	1:A:3639:THR:OG1	2.12	0.49
1:A:4253:ILE:HG22	1:A:4254:PRO:HD2	1.95	0.49
1:A:2223:PHE:CE2	1:A:2224:HIS:HB2	2.47	0.49
1:A:3300:LEU:HA	1:A:3323:THR:O	2.13	0.49
1:A:2530:GLU:O	1:A:2531:ALA:C	2.51	0.49
1:A:2051:TRP:C	1:A:2052:ILE:HD13	2.34	0.49
1:A:2819:ILE:HB	1:A:2820:PRO:HD3	1.95	0.49
1:A:3577:ARG:HA	1:A:3584:PHE:CE2	2.48	0.48
1:A:1696:THR:HA	1:A:1790:THR:HG21	1.95	0.48
1:A:1514:LEU:HD11	1:A:1534:PHE:CE1	2.47	0.48
1:A:2274:TYR:HE2	1:A:2428:CYS:HB3	1.76	0.48
1:A:3536:ASP:O	1:A:3543:ARG:NH1	2.46	0.48
1:A:4171:SER:OG	1:A:4308:VAL:HG12	2.13	0.48
1:A:2579:ARG:C	1:A:2580:HIS:CD2	2.87	0.48
1:A:2284:LYS:HZ1	1:A:2401:GLN:N	2.11	0.48
1:A:2041:VAL:HG21	1:A:2050:SER:CB	2.43	0.48
1:A:2459:ILE:HD12	1:A:2519:PRO:HD2	1.95	0.48
1:A:2749:LEU:N	1:A:2750:PRO:CD	2.76	0.48
1:A:4030:LYS:HB2	1:A:4034:GLU:CD	2.34	0.48
1:A:4222:LEU:HD22	1:A:4225:CYS:O	2.13	0.48
1:A:2396:GLY:O	1:A:2397:LEU:HD22	2.13	0.48
1:A:1516:LYS:HD3	1:A:1638:HIS:HB3	1.94	0.48

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1939:LEU:HD23	1:A:1939:LEU:O	2.14	0.48
1:A:1280:ASP:HA	1:A:1289:MET:O	2.13	0.48
1:A:1276:PHE:HE1	1:A:1388:VAL:HA	1.79	0.48
1:A:2723:LEU:N	1:A:2723:LEU:HD22	2.29	0.48
1:A:3291:LEU:O	1:A:3295:LEU:HG	2.14	0.48
1:A:1378:ILE:O	1:A:1382:ILE:HD12	2.13	0.48
1:A:2529:TYR:O	1:A:2533:ARG:HG2	2.13	0.48
1:A:3829:THR:HG22	1:A:3831:GLU:HG3	1.96	0.48
1:A:4043:VAL:HG21	1:A:4118:LEU:CD2	2.44	0.48
1:A:1749:SER:O	1:A:3756:GLY:CA	2.61	0.48
1:A:3374:ASN:HB2	1:A:3820:ILE:CG1	2.44	0.48
1:A:4046:LEU:HD12	1:A:4138:LEU:HD22	1.96	0.48
1:A:2284:LYS:HD2	1:A:2353:ARG:HH12	1.79	0.48
1:A:3296:LYS:O	1:A:3296:LYS:HD2	2.14	0.48
1:A:1792:ASN:HB3	1:A:1798:TYR:CE2	2.49	0.48
1:A:1795:GLY:HA3	1:A:1798:TYR:CD1	2.48	0.48
1:A:1943:LEU:HA	1:A:1995:ALA:CB	2.44	0.48
1:A:3347:GLN:HG3	1:A:3352:VAL:CG2	2.44	0.48
1:A:3238:PHE:HA	1:A:3242:ARG:HH21	1.79	0.47
1:A:3245:CYS:SG	1:A:3249:GLU:HB3	2.53	0.47
1:A:4188:ALA:HB1	1:A:4193:ARG:O	2.14	0.47
1:A:3238:PHE:N	1:A:3242:ARG:HH21	2.12	0.47
1:A:1716:ASP:OD2	1:A:2065:SER:CA	2.57	0.47
1:A:2168:LEU:O	1:A:2171:THR:OG1	2.26	0.47
1:A:2625:LEU:HD22	1:A:2627:ILE:CD1	2.44	0.47
1:A:1879:LEU:N	1:A:1879:LEU:HD23	2.29	0.47
1:A:2345:VAL:HG21	1:A:2398:GLU:HB2	1.96	0.47
1:A:3256:GLU:OE1	1:A:3290:TRP:NE1	2.47	0.47
1:A:3219:GLU:OE1	1:A:3219:GLU:N	2.47	0.47
1:A:2848:ASP:N	1:A:2849:PRO:CD	2.77	0.47
1:A:3966:PRO:HB2	1:A:3969:VAL:CG1	2.43	0.47
1:A:1987:THR:O	1:A:1988:LEU:C	2.49	0.47
1:A:3629:LEU:HD22	1:A:3680:VAL:HG21	1.95	0.47
1:A:4270:PRO:HA	1:A:4283:ASN:HB3	1.97	0.47
1:A:2235:ARG:HB3	1:A:2237:ARG:CG	2.44	0.47
1:A:2238:LEU:N	1:A:2238:LEU:HD22	2.28	0.47
1:A:2208:PHE:O	1:A:2209:THR:C	2.51	0.47
1:A:1902:LEU:HD21	1:A:1918:PHE:HZ	1.78	0.47
1:A:2659:VAL:CG2	1:A:2811:TRP:CD1	2.95	0.47
1:A:2643:VAL:HG11	1:A:2651:LEU:HD11	1.96	0.47
1:A:3640:LEU:CD1	1:A:3642:PHE:CE1	2.96	0.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3877:ARG:HH22	1:A:3996:PHE:HA	1.80	0.47
1:A:2230:TYR:N	1:A:2239:ALA:HB1	2.28	0.47
1:A:2704:GLU:O	1:A:2705:ALA:HB3	2.14	0.47
1:A:2632:GLU:OE2	1:A:2812:SER:N	2.48	0.47
1:A:4072:ILE:HG23	1:A:4073:LEU:N	2.30	0.47
1:A:4077:ILE:O	1:A:4080:GLN:HB3	2.15	0.47
1:A:1742:GLU:OE2	2:A:4401:AOV:O2G	2.32	0.47
1:A:2495:THR:H	1:A:2498:ILE:HG12	1.80	0.47
1:A:3321:GLY:HA3	1:A:3363:ASN:OD1	2.13	0.47
1:A:1643:GLN:HG3	1:A:1647:SER:O	2.14	0.47
1:A:4033:ARG:O	1:A:4037:SER:N	2.46	0.47
1:A:1792:ASN:OD1	2:A:4401:AOV:O2G	2.32	0.47
1:A:1993:ARG:HB2	1:A:2003:VAL:HG21	1.95	0.47
1:A:1746:LEU:HB3	1:A:1751:LEU:HD21	1.96	0.47
1:A:3197:LEU:HD12	1:A:3197:LEU:C	2.35	0.47
1:A:3291:LEU:CD1	1:A:3294:HIS:HE1	2.23	0.47
1:A:2764:VAL:O	1:A:2767:TYR:HB3	2.14	0.47
1:A:1280:ASP:OD1	1:A:1290:LYS:HE3	2.14	0.47
1:A:1815:VAL:HA	1:A:3929:GLY:HA2	1.97	0.47
1:A:2319:SER:N	1:A:2322:THR:OG1	2.42	0.47
1:A:1732:VAL:HB	1:A:1781:VAL:HG23	1.96	0.47
2:A:4401:AOV:O4G	2:A:4401:AOV:O2B	2.33	0.47
1:A:2639:ARG:O	1:A:2643:VAL:HG23	2.14	0.47
1:A:1440:ILE:HD11	1:A:1453:HIS:CD2	2.49	0.47
1:A:2447:GLU:HB3	1:A:2448:PRO:HD3	1.97	0.47
1:A:2469:LEU:HD22	1:A:2560:TRP:HZ2	1.80	0.47
1:A:3357:ASP:N	1:A:3357:ASP:OD1	2.48	0.47
1:A:2004:LYS:CG	1:A:2006:TYR:CZ	2.98	0.46
1:A:2166:THR:OG1	1:A:2171:THR:HG23	2.15	0.46
1:A:1508:LYS:O	1:A:1512:GLU:HB2	2.15	0.46
1:A:1529:VAL:C	1:A:1531:PRO:HD3	2.36	0.46
1:A:3771:ALA:HA	1:A:3805:PHE:CD1	2.50	0.46
1:A:2019:LEU:O	1:A:2035:THR:HG21	2.14	0.46
1:A:2256:ASN:OD1	1:A:2257:GLY:N	2.48	0.46
1:A:2076:LEU:HD12	1:A:2077:THR:N	2.31	0.46
1:A:2297:LYS:HZ3	5:A:4405:ADP:PB	2.38	0.46
1:A:2607:LEU:O	1:A:2610:VAL:N	2.48	0.46
1:A:1444:SER:HB3	1:A:1496:VAL:HG22	1.96	0.46
1:A:3337:TYR:N	1:A:3338:PRO:HD2	2.31	0.46
1:A:3560:CYS:HA	1:A:3563:LEU:HG	1.98	0.46
1:A:2502:TRP:HE1	1:A:2531:ALA:HB2	1.81	0.46

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1534:PHE:CB	1:A:1539:LEU:HD11	2.45	0.46
1:A:3864:LEU:HD21	1:A:3903:ILE:HG21	1.97	0.46
1:A:2287:PHE:HA	1:A:2426:ARG:O	2.15	0.46
1:A:3347:GLN:HG3	1:A:3352:VAL:HG22	1.96	0.46
1:A:3560:CYS:HB3	1:A:3705:PRO:HG3	1.97	0.46
1:A:1363:LYS:O	1:A:1366:THR:OG1	2.33	0.46
1:A:2284:LYS:HE3	1:A:2353:ARG:NH2	2.29	0.46
1:A:2664:ILE:CD1	1:A:2664:ILE:N	2.78	0.46
1:A:1411:CYS:SG	1:A:1412:GLN:N	2.89	0.46
1:A:1518:CYS:HB2	1:A:1534:PHE:CZ	2.51	0.46
1:A:3587:ASN:OD1	1:A:3590:ASP:HB2	2.16	0.46
1:A:3780:LYS:HA	1:A:3810:THR:HB	1.96	0.46
1:A:1747:GLU:O	1:A:1750:VAL:HB	2.15	0.46
1:A:4229:GLY:O	1:A:4230:ASN:HB2	2.16	0.46
1:A:2004:LYS:HG2	1:A:2006:TYR:CE1	2.47	0.46
1:A:1624:TRP:HB3	1:A:3917:PHE:CB	2.46	0.46
1:A:2155:TRP:CZ3	1:A:2208:PHE:HB2	2.51	0.46
1:A:2077:THR:HA	1:A:2083:ARG:HG2	1.97	0.46
1:A:3563:LEU:HD11	1:A:3571:PHE:CD2	2.50	0.46
1:A:1446:ASN:HB3	1:A:1449:VAL:HB	1.98	0.46
1:A:1719:ILE:HG22	1:A:1723:SER:HB3	1.96	0.46
1:A:2213:PHE:HB3	1:A:2219:SER:HA	1.98	0.46
1:A:4057:ILE:CG2	1:A:4152:GLN:OE1	2.63	0.46
1:A:2041:VAL:HG23	1:A:2050:SER:CB	2.45	0.46
1:A:2360:ASP:HB3	1:A:2363:LEU:HD23	1.97	0.46
1:A:3621:GLU:HG3	1:A:3622:ARG:H	1.81	0.46
1:A:3216:ALA:O	1:A:3391:ASN:ND2	2.48	0.46
1:A:4199:LYS:HD2	1:A:4255:GLN:HG2	1.96	0.46
1:A:3505:ILE:HG21	1:A:3575:PHE:HA	1.98	0.46
1:A:4177:ASP:O	1:A:4180:LEU:HB2	2.16	0.46
1:A:2307:GLN:OE1	1:A:2307:GLN:HA	2.16	0.46
1:A:2134:PRO:HB2	1:A:2136:GLU:HG3	1.98	0.46
1:A:1401:LEU:HA	1:A:1404:ILE:HD12	1.96	0.46
1:A:1982:GLY:HA3	1:A:2169:VAL:HG21	1.98	0.46
1:A:1499:TRP:HZ3	1:A:1503:LEU:HD11	1.80	0.46
1:A:3325:ILE:HG22	1:A:3326:ILE:N	2.30	0.46
1:A:2223:PHE:CG	1:A:2224:HIS:N	2.84	0.46
1:A:4177:ASP:OD1	1:A:4177:ASP:N	2.49	0.46
1:A:3701:LYS:HE2	1:A:3989:GLU:OE1	2.16	0.45
1:A:2805:VAL:O	1:A:2806:LEU:HD23	2.17	0.45
1:A:3292:LYS:O	1:A:3296:LYS:N	2.49	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2130:LEU:HD13	1:A:2142:GLU:HG2	1.97	0.45
1:A:3512:ILE:HG23	1:A:4021:LEU:HD23	1.97	0.45
1:A:2292:PRO:HG2	1:A:2432:TYR:HE1	1.82	0.45
1:A:3819:PRO:HA	1:A:3822:LEU:HD12	1.98	0.45
1:A:3685:ARG:O	1:A:3686:LEU:C	2.53	0.45
1:A:3499:ALA:HA	1:A:3502:MET:HE2	1.98	0.45
1:A:2392:LEU:HD12	1:A:2392:LEU:N	2.31	0.45
1:A:2447:GLU:N	1:A:2448:PRO:CD	2.78	0.45
1:A:3299:ARG:NH2	1:A:3320:PHE:O	2.48	0.45
1:A:2650:SER:O	1:A:2803:CYS:HB2	2.16	0.45
1:A:4090:VAL:HG12	1:A:4094:LEU:HD12	1.97	0.45
1:A:2311:THR:OG1	1:A:2312:GLN:N	2.50	0.45
1:A:3970:SER:OG	1:A:3970:SER:O	2.34	0.45
1:A:2164:VAL:O	1:A:2166:THR:HG23	2.16	0.45
1:A:3721:GLU:HG3	1:A:3826:LEU:HD11	1.98	0.45
1:A:3261:ASP:OD1	1:A:3262:ASP:N	2.50	0.45
1:A:1654:GLU:HB3	1:A:1707:GLY:O	2.17	0.45
1:A:1955:ILE:CG2	1:A:1956:PRO:HD2	2.46	0.45
1:A:3272:LEU:HD23	1:A:3272:LEU:C	2.37	0.45
1:A:2593:PRO:HG2	1:A:2597:LYS:HA	1.99	0.45
1:A:2460:TRP:HE1	1:A:2519:PRO:HB2	1.80	0.45
1:A:4227:PHE:HD2	1:A:4232:LEU:CD2	2.28	0.45
1:A:2749:LEU:HB3	1:A:2750:PRO:HD3	1.98	0.45
1:A:2235:ARG:HB3	1:A:2237:ARG:HG2	1.98	0.45
1:A:3279:PHE:HA	1:A:3370:LEU:HD12	1.99	0.45
1:A:4184:ARG:HG3	1:A:4252:TRP:CD2	2.52	0.45
1:A:2327:LEU:O	1:A:2328:LEU:C	2.53	0.45
1:A:3577:ARG:O	1:A:3584:PHE:CZ	2.69	0.45
1:A:4097:LEU:HD13	1:A:4111:VAL:HG12	1.98	0.45
1:A:4025:ILE:CD1	1:A:4025:ILE:N	2.79	0.45
1:A:1601:LEU:HD21	1:A:1832:SER:HB3	1.99	0.45
1:A:1741:ASP:O	1:A:1742:GLU:CB	2.64	0.45
1:A:2870:SER:OG	1:A:3385:SER:HB2	2.17	0.45
1:A:4025:ILE:HG22	1:A:4027:ALA:H	1.81	0.45
1:A:2495:THR:HB	1:A:2496:PRO:HD2	1.99	0.45
1:A:1663:VAL:N	2:A:4401:AOV:N1	2.64	0.45
1:A:2651:LEU:HD12	1:A:2651:LEU:N	2.32	0.45
1:A:1624:TRP:CE3	1:A:3917:PHE:HB3	2.51	0.45
1:A:4134:PRO:HG2	1:A:4140:TYR:HA	1.99	0.45
1:A:1274:ALA:HB1	1:A:1388:VAL:CG1	2.47	0.45
1:A:1708:ARG:NH1	1:A:1784:ASN:O	2.49	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:4201:VAL:HG12	1:A:4202:ALA:H	1.81	0.45
1:A:1906:THR:HG21	1:A:1918:PHE:CZ	2.52	0.45
1:A:2007:THR:HG21	1:A:2384:TYR:CE2	2.52	0.45
1:A:1381:ASP:O	1:A:1385:ASP:HB3	2.17	0.45
1:A:3580:HIS:C	1:A:3584:PHE:CZ	2.86	0.45
1:A:4057:ILE:CD1	1:A:4152:GLN:NE2	2.77	0.45
1:A:1560:LEU:HD23	1:A:1560:LEU:HA	1.80	0.45
1:A:3368:LEU:HD23	1:A:3369:PHE:N	2.32	0.45
1:A:1820:PRO:O	1:A:1822:ASN:OD1	2.35	0.45
1:A:1787:ILE:O	1:A:1788:PHE:CD1	2.70	0.45
1:A:2004:LYS:HG2	1:A:2006:TYR:OH	2.17	0.44
1:A:2041:VAL:HG23	1:A:2050:SER:OG	2.17	0.44
1:A:3640:LEU:CG	1:A:3642:PHE:CZ	2.98	0.44
1:A:3847:TRP:HH2	1:A:3900:TYR:CG	2.35	0.44
1:A:2382:LEU:CD2	1:A:2402:ILE:HD13	2.47	0.44
1:A:3732:ASP:HA	1:A:3733:PRO:HD3	1.81	0.44
1:A:1372:ASP:OD1	1:A:1376:ARG:NH1	2.49	0.44
1:A:1749:SER:O	1:A:3756:GLY:HA3	2.17	0.44
1:A:3200:LEU:N	1:A:3201:PRO:CD	2.80	0.44
1:A:2411:ARG:CB	1:A:2414:ARG:CZ	2.94	0.44
1:A:1315:SER:O	1:A:1318:TYR:HB3	2.17	0.44
1:A:4057:ILE:HG12	1:A:4152:GLN:OE1	2.17	0.44
1:A:2004:LYS:CE	1:A:2006:TYR:OH	2.64	0.44
1:A:1550:ASP:O	1:A:1554:ALA:N	2.49	0.44
1:A:2517:ASN:HB3	1:A:2519:PRO:CB	2.47	0.44
1:A:3864:LEU:HD21	1:A:3903:ILE:CG2	2.47	0.44
1:A:4134:PRO:CG	1:A:4140:TYR:HA	2.48	0.44
1:A:1547:PHE:O	1:A:1551:VAL:HG23	2.17	0.44
1:A:4001:ASN:ND2	1:A:4241:SER:HA	2.33	0.44
1:A:1591:ILE:HB	1:A:1592:LEU:HD12	1.98	0.44
1:A:1444:SER:CB	1:A:1496:VAL:HG22	2.47	0.44
1:A:1719:ILE:HG13	1:A:2079:PRO:HB3	2.00	0.44
1:A:2213:PHE:HA	1:A:2216:ALA:HB3	1.99	0.44
1:A:1699:VAL:HG11	1:A:1788:PHE:CD2	2.52	0.44
1:A:2503:VAL:HG13	1:A:2504:LEU:CD1	2.48	0.44
1:A:1671:CYS:O	1:A:1675:LEU:HG	2.16	0.44
1:A:1278:LEU:HD12	1:A:1278:LEU:N	2.32	0.44
1:A:2711:LEU:O	1:A:2712:LEU:HD23	2.17	0.44
1:A:2002:VAL:HG12	1:A:2003:VAL:N	2.30	0.44
1:A:1862:TYR:CD2	1:A:1864:TRP:HH2	2.36	0.44
1:A:3577:ARG:HD2	1:A:3589:TRP:CH2	2.53	0.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3291:LEU:CA	1:A:3294:HIS:HE1	2.25	0.44
1:A:2821:GLU:HB2	1:A:2852:LEU:CD1	2.44	0.44
1:A:3755:MET:N	1:A:3755:MET:CE	2.81	0.44
1:A:1401:LEU:HB2	1:A:1402:LEU:HD23	2.00	0.44
1:A:2168:LEU:O	1:A:2171:THR:N	2.50	0.44
1:A:4288:CYS:SG	1:A:4290:GLY:CA	3.06	0.44
1:A:3193:ILE:HG22	1:A:3197:LEU:HD23	1.99	0.44
1:A:4286:VAL:HG13	1:A:4287:PRO:HD2	2.00	0.44
1:A:1474:THR:HG22	1:A:1474:THR:O	2.16	0.44
1:A:2643:VAL:CG1	1:A:2651:LEU:HD11	2.48	0.44
1:A:3755:MET:CG	1:A:3785:VAL:HG21	2.47	0.44
1:A:4040:LEU:HD22	1:A:4118:LEU:HD23	1.99	0.44
1:A:4266:CYS:HB3	1:A:4285:ASP:HB3	1.98	0.44
1:A:2629:LEU:HD12	1:A:2629:LEU:N	2.32	0.44
1:A:3587:ASN:OD1	1:A:3590:ASP:CB	2.66	0.44
1:A:3965:PHE:CB	1:A:3966:PRO:CD	2.94	0.44
1:A:1624:TRP:CG	1:A:3917:PHE:HB3	2.52	0.44
1:A:1810:GLN:HG3	1:A:3732:ASP:CB	2.48	0.44
1:A:2730:LEU:HB3	1:A:2802:LYS:HG3	2.00	0.44
1:A:3654:ASN:O	1:A:3682:ARG:NH1	2.50	0.44
1:A:1276:PHE:CD2	1:A:1292:ILE:HD12	2.53	0.44
1:A:1713:PHE:HB2	1:A:1740:PHE:CD1	2.52	0.44
1:A:2284:LYS:HE3	1:A:2401:GLN:CA	2.46	0.44
1:A:4307:GLN:O	1:A:4308:VAL:HG23	2.18	0.44
1:A:3837:LYS:HB2	1:A:3984:ILE:CG2	2.45	0.44
1:A:2000:GLY:O	1:A:2001:LYS:C	2.54	0.44
1:A:2717:PHE:CD1	1:A:2723:LEU:HD21	2.53	0.44
1:A:2038:ALA:HA	1:A:2041:VAL:HG12	2.00	0.43
1:A:4227:PHE:HD2	1:A:4232:LEU:HD21	1.84	0.43
1:A:3217:ALA:O	1:A:3222:ARG:NE	2.51	0.43
1:A:3999:PRO:HG2	1:A:4002:ILE:HG12	2.00	0.43
1:A:3244:LEU:HA	1:A:3244:LEU:HD22	1.85	0.43
1:A:3285:SER:O	1:A:3288:THR:OG1	2.26	0.43
1:A:2579:ARG:O	1:A:2580:HIS:CD2	2.71	0.43
1:A:1506:GLU:OE2	1:A:1510:THR:OG1	2.36	0.43
1:A:3581:PRO:CA	1:A:3584:PHE:CZ	2.73	0.43
1:A:1397:ILE:O	1:A:1398:ARG:C	2.56	0.43
1:A:3273:GLN:OE1	1:A:3276:VAL:O	2.36	0.43
1:A:1500:LEU:HA	1:A:1503:LEU:HG	2.00	0.43
1:A:1274:ALA:HB1	1:A:1388:VAL:HG11	2.00	0.43
1:A:4202:ALA:HA	1:A:4249:PHE:O	2.19	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3802:LYS:O	1:A:3805:PHE:HB3	2.18	0.43
1:A:1699:VAL:CG1	1:A:1788:PHE:CD2	3.01	0.43
1:A:2765:PHE:O	1:A:2768:PHE:HB3	2.18	0.43
1:A:1973:MET:HG3	1:A:2070:LEU:CD2	2.49	0.43
1:A:1458:PHE:HB3	1:A:1461:ILE:HD12	1.98	0.43
1:A:1859:GLN:HB2	1:A:1862:TYR:CD2	2.53	0.43
1:A:4030:LYS:O	1:A:4034:GLU:HB2	2.18	0.43
1:A:4100:VAL:HB	1:A:4105:THR:HG23	1.99	0.43
1:A:4147:ARG:HG2	1:A:4172:GLU:O	2.19	0.43
1:A:2052:ILE:HB	1:A:2092:PHE:CE1	2.53	0.43
1:A:3185:ARG:O	1:A:3189:GLN:NE2	2.51	0.43
1:A:3673:GLN:HA	1:A:3676:LEU:HD12	2.01	0.43
1:A:4124:PRO:HD2	1:A:4127:TRP:CE3	2.53	0.43
1:A:2284:LYS:CE	1:A:2401:GLN:CB	2.77	0.43
1:A:2004:LYS:HB3	1:A:2050:SER:HA	2.00	0.43
1:A:1558:HIS:HB3	1:A:1560:LEU:HG	1.99	0.43
1:A:1603:ILE:O	1:A:1606:ASN:HB2	2.19	0.43
1:A:4201:VAL:HG23	1:A:4253:ILE:CD1	2.48	0.43
1:A:3654:ASN:O	1:A:3657:CYS:HB3	2.19	0.43
1:A:2114:PHE:C	1:A:2115:LEU:HD12	2.39	0.43
1:A:4100:VAL:N	1:A:4105:THR:HG21	2.34	0.43
1:A:3374:ASN:ND2	1:A:3377:PRO:CD	2.78	0.43
1:A:1518:CYS:HB2	1:A:1534:PHE:CE1	2.53	0.43
1:A:3281:ILE:HD12	1:A:3391:ASN:HB3	1.99	0.43
1:A:2805:VAL:C	1:A:2806:LEU:HD23	2.39	0.43
1:A:3686:LEU:HD22	1:A:3690:MET:SD	2.59	0.43
1:A:1294:ASP:O	1:A:1297:ASP:HB3	2.19	0.43
1:A:1855:LEU:HD12	1:A:1855:LEU:C	2.39	0.43
1:A:1281:TYR:O	1:A:1288:THR:HA	2.19	0.43
1:A:2201:ASN:OD1	1:A:2201:ASN:N	2.51	0.43
1:A:4227:PHE:CD1	1:A:4227:PHE:C	2.92	0.43
1:A:2590:GLN:HG3	1:A:2591:PRO:HD3	2.01	0.43
1:A:1475:ALA:HB1	1:A:1484:VAL:O	2.19	0.43
1:A:2288:ILE:HD12	1:A:2426:ARG:O	2.19	0.43
1:A:2357:TYR:O	1:A:2358:LEU:HD23	2.19	0.43
1:A:2296:GLY:CA	5:A:4405:ADP:O1A	2.67	0.43
1:A:2312:GLN:HB2	1:A:2351:CYS:SG	2.59	0.43
1:A:2745:GLU:N	1:A:2746:PRO:HD2	2.34	0.43
1:A:3510:SER:HA	1:A:3516:TYR:HB2	2.00	0.43
1:A:3577:ARG:HD2	1:A:3589:TRP:CZ3	2.54	0.42
1:A:3239:ASP:OD1	1:A:3239:ASP:N	2.52	0.42

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3493:LEU:N	1:A:3494:PRO:CD	2.82	0.42
1:A:3230:THR:HG23	1:A:3235:LEU:O	2.19	0.42
1:A:3238:PHE:CZ	1:A:3243:PHE:CB	3.01	0.42
1:A:4057:ILE:HD12	1:A:4149:LEU:HD22	1.98	0.42
1:A:3512:ILE:HG23	1:A:4021:LEU:HD21	1.95	0.42
1:A:4288:CYS:SG	1:A:4290:GLY:C	2.97	0.42
1:A:2652:LEU:HD22	1:A:2805:VAL:HG13	2.01	0.42
1:A:2851:PHE:CE2	1:A:3201:PRO:HB2	2.54	0.42
1:A:3336:LEU:N	1:A:3336:LEU:CD2	2.82	0.42
1:A:2664:ILE:HD12	1:A:2664:ILE:H	1.83	0.42
1:A:2606:ASP:O	1:A:2610:VAL:HG23	2.19	0.42
1:A:2200:LEU:HD12	1:A:2205:ARG:HA	2.01	0.42
1:A:2167:SER:O	1:A:2170:GLY:N	2.52	0.42
1:A:2301:LEU:HD13	1:A:2357:TYR:CE1	2.55	0.42
1:A:2503:VAL:HG13	1:A:2504:LEU:HD13	2.01	0.42
1:A:1515:LEU:HD13	1:A:1538:ILE:HG23	2.01	0.42
1:A:2212:VAL:HA	1:A:2215:TRP:CE3	2.48	0.42
1:A:2163:VAL:HG23	1:A:2164:VAL:HG23	1.99	0.42
1:A:4227:PHE:CD2	1:A:4232:LEU:HD21	2.54	0.42
1:A:4072:ILE:HB	1:A:4186:GLU:HG3	2.00	0.42
1:A:4075:PHE:O	1:A:4078:LEU:HB2	2.20	0.42
1:A:2029:TRP:HE1	1:A:2031:ASP:HA	1.84	0.42
1:A:3374:ASN:HB2	1:A:3820:ILE:CD1	2.47	0.42
1:A:3321:GLY:HA2	1:A:3366:PHE:HB2	2.02	0.42
1:A:1593:GLU:N	1:A:1593:GLU:OE1	2.47	0.42
1:A:3545:GLN:HA	1:A:3548:ILE:HG22	2.01	0.42
1:A:1731:LEU:HD23	1:A:1731:LEU:HA	1.91	0.42
1:A:1862:TYR:HB3	1:A:1864:TRP:CH2	2.54	0.42
1:A:2193:ILE:HG21	1:A:2209:THR:HG22	2.02	0.42
1:A:1684:GLY:O	1:A:1812:PHE:HA	2.19	0.42
1:A:2041:VAL:HG21	1:A:2050:SER:HB2	2.01	0.42
1:A:2135:ALA:C	1:A:2138:ARG:H	2.23	0.42
1:A:1514:LEU:HD11	1:A:1534:PHE:CD1	2.54	0.42
1:A:4134:PRO:HG2	1:A:4140:TYR:CA	2.50	0.42
1:A:3277:CYS:SG	1:A:3368:LEU:CD2	3.07	0.42
1:A:2276:LYS:N	1:A:2277:PRO:HD2	2.35	0.42
1:A:3788:TRP:HD1	1:A:3788:TRP:O	2.03	0.42
1:A:4271:VAL:HA	1:A:4302:LEU:O	2.19	0.42
1:A:3248:SER:O	1:A:3252:ILE:HG13	2.20	0.42
1:A:3299:ARG:HE	1:A:3322:LYS:HD2	1.84	0.42
1:A:2652:LEU:HD23	1:A:2652:LEU:C	2.40	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3860:ARG:HB3	1:A:3907:PHE:CD2	2.55	0.42
1:A:3583:LEU:HG	1:A:3583:LEU:H	1.68	0.42
1:A:2662:ARG:NH1	1:A:2662:ARG:HG2	2.35	0.42
1:A:3518:PHE:N	1:A:3518:PHE:CD1	2.87	0.42
1:A:1866:LEU:HD12	2:A:4401:AOV:O4'	2.20	0.42
1:A:4281:VAL:CG2	1:A:4304:LEU:HD23	2.48	0.42
1:A:2517:ASN:HB2	1:A:2519:PRO:HB3	1.99	0.42
1:A:2296:GLY:HA2	5:A:4405:ADP:O1A	2.20	0.42
1:A:3512:ILE:HD12	1:A:3513:ASN:CB	2.46	0.42
1:A:1481:GLY:O	1:A:1591:ILE:HD13	2.20	0.42
1:A:1693:THR:HG21	1:A:1817:MET:HB2	2.01	0.42
1:A:2076:LEU:HD12	1:A:2077:THR:H	1.85	0.42
1:A:4030:LYS:O	1:A:4034:GLU:N	2.44	0.41
1:A:3965:PHE:HB3	1:A:3966:PRO:HD3	2.02	0.41
1:A:3847:TRP:CH2	1:A:3900:TYR:CG	3.08	0.41
1:A:1906:THR:HG22	1:A:1910:PHE:CE1	2.55	0.41
1:A:3919:HIS:HB2	1:A:3944:LEU:HB3	2.03	0.41
1:A:1688:TYR:CD1	1:A:1688:TYR:C	2.93	0.41
1:A:1624:TRP:HZ2	1:A:3906:LEU:HD13	1.85	0.41
1:A:1986:SER:HB3	1:A:2095:GLU:OE2	2.19	0.41
1:A:3836:LEU:O	1:A:3840:LEU:HD13	2.19	0.41
1:A:3567:ASP:O	1:A:3570:MET:HB2	2.19	0.41
1:A:3309:ASN:OD1	1:A:3309:ASN:N	2.53	0.41
1:A:1962:ALA:O	1:A:1965:LEU:HB3	2.19	0.41
1:A:2460:TRP:CH2	1:A:2523:VAL:HG11	2.55	0.41
1:A:2230:TYR:O	1:A:2239:ALA:HA	2.20	0.41
1:A:3836:LEU:HD23	1:A:3991:ASP:HB3	2.00	0.41
1:A:2276:LYS:N	1:A:2277:PRO:CD	2.83	0.41
1:A:2153:LEU:HD22	1:A:2157:LEU:HD11	2.03	0.41
1:A:3915:TRP:O	1:A:3918:VAL:HB	2.20	0.41
1:A:3934:TYR:C	1:A:3934:TYR:CD1	2.93	0.41
1:A:1691:ALA:HA	2:A:4401:AOV:O1G	2.20	0.41
1:A:1982:GLY:HA2	4:A:4403:ATP:C5'	2.50	0.41
1:A:1496:VAL:HA	1:A:1499:TRP:HE1	1.84	0.41
1:A:2186:ASP:HB3	1:A:2238:LEU:HD21	2.01	0.41
1:A:3214:LEU:HD12	1:A:3214:LEU:N	2.35	0.41
1:A:1514:LEU:HD23	1:A:1538:ILE:CD1	2.50	0.41
1:A:1289:MET:CE	1:A:1379:MET:HG2	2.51	0.41
1:A:2296:GLY:HA2	5:A:4405:ADP:H5'1	2.03	0.41
1:A:3551:LEU:HD13	1:A:3555:VAL:HG23	2.02	0.41
1:A:3790:PRO:O	1:A:3794:LYS:HB2	2.20	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3270:VAL:O	1:A:3273:GLN:HB3	2.19	0.41
1:A:1440:ILE:HD11	1:A:1453:HIS:CB	2.51	0.41
1:A:1563:ILE:O	1:A:1566:GLN:HB3	2.20	0.41
1:A:3238:PHE:CG	1:A:3238:PHE:O	2.72	0.41
1:A:3648:TRP:CZ3	1:A:3662:PRO:HG3	2.56	0.41
1:A:3249:GLU:HA	1:A:3252:ILE:HD12	2.03	0.41
1:A:1849:PHE:CE2	1:A:1869:LEU:HB2	2.56	0.41
1:A:2335:CYS:SG	1:A:2348:PRO:HA	2.60	0.41
1:A:1690:PRO:CD	1:A:1818:SER:HA	2.48	0.41
1:A:2223:PHE:CD2	1:A:2224:HIS:HB2	2.55	0.41
1:A:4153:ASN:O	1:A:4157:LYS:HG2	2.21	0.41
1:A:4166:GLU:HG2	1:A:4167:THR:N	2.36	0.41
1:A:2534:LEU:HD12	1:A:2534:LEU:N	2.36	0.41
1:A:1591:ILE:O	1:A:1592:LEU:HB2	2.21	0.41
1:A:2152:ALA:O	1:A:2156:VAL:HG23	2.21	0.41
1:A:4238:ASP:OD1	1:A:4239:SER:N	2.54	0.41
1:A:3759:GLN:O	1:A:3762:LEU:HG	2.21	0.41
1:A:1925:VAL:HG23	1:A:1926:PHE:CD1	2.53	0.41
1:A:1388:VAL:CG1	1:A:1389:THR:N	2.84	0.41
1:A:4072:ILE:O	1:A:4075:PHE:HB3	2.21	0.41
1:A:1718:GLY:HA2	1:A:1746:LEU:HD12	2.03	0.41
1:A:1729:VAL:O	1:A:1732:VAL:HG22	2.21	0.41
1:A:3505:ILE:HD11	1:A:3578:GLY:HA3	2.03	0.41
1:A:3502:MET:HE1	1:A:3551:LEU:HD12	2.03	0.41
1:A:1486:PHE:CD1	1:A:1506:GLU:OE1	2.74	0.41
1:A:2524:LEU:HD12	1:A:2564:ILE:HG21	2.03	0.41
1:A:1352:LEU:O	1:A:1356:PHE:N	2.47	0.41
1:A:2067:ASN:O	1:A:2071:ASP:HB2	2.20	0.41
1:A:2421:PHE:HA	1:A:2424:ILE:HD12	2.02	0.41
1:A:2573:TYR:CZ	1:A:2601:LYS:HG3	2.56	0.41
1:A:1640:CYS:SG	1:A:1641:CYS:N	2.94	0.41
1:A:4291:ASN:OD1	1:A:4294:GLN:HB2	2.21	0.41
1:A:1480:GLU:CD	1:A:1480:GLU:H	2.25	0.41
1:A:2230:TYR:OH	1:A:2270:ARG:N	2.53	0.41
1:A:2689:GLN:CG	1:A:2690:PHE:N	2.83	0.41
1:A:2338:ILE:HD11	1:A:2345:VAL:HG13	2.03	0.41
1:A:1906:THR:CG2	1:A:1910:PHE:CE1	3.04	0.41
1:A:3552:GLN:O	1:A:3555:VAL:HB	2.21	0.41
1:A:3512:ILE:CG2	1:A:4021:LEU:HD23	2.52	0.40
1:A:1591:ILE:HG22	1:A:1592:LEU:N	2.36	0.40
1:A:3640:LEU:CD1	1:A:3642:PHE:CZ	3.04	0.40

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2156:VAL:HG13	1:A:2200:LEU:HD21	2.04	0.40
1:A:1693:THR:HG21	1:A:1817:MET:CB	2.51	0.40
1:A:2523:VAL:O	1:A:2527:VAL:HG23	2.21	0.40
1:A:1624:TRP:CD1	1:A:3914:GLN:HB2	2.56	0.40
1:A:2739:TYR:CB	1:A:2744:LEU:HD21	2.51	0.40
1:A:3686:LEU:O	1:A:3689:ALA:HB3	2.21	0.40
1:A:3230:THR:CG2	1:A:3235:LEU:O	2.70	0.40
1:A:1980:PRO:O	1:A:1983:ALA:HB2	2.21	0.40
1:A:3202:LYS:O	1:A:3206:LEU:HG	2.21	0.40
1:A:1710:VAL:HA	1:A:1737:TRP:O	2.20	0.40
1:A:1789:ILE:HG13	1:A:1789:ILE:O	2.21	0.40
1:A:3387:VAL:HG12	1:A:3388:THR:N	2.36	0.40
1:A:1539:LEU:O	1:A:1543:GLU:HG2	2.21	0.40
1:A:3675:ILE:HD11	1:A:3693:PHE:CB	2.49	0.40
1:A:4075:PHE:C	1:A:4075:PHE:CD1	2.94	0.40
1:A:2296:GLY:C	5:A:4405:ADP:O1A	2.60	0.40
1:A:3670:SER:OG	1:A:3673:GLN:HG3	2.22	0.40
1:A:2553:THR:HG22	1:A:2557:GLN:NE2	2.36	0.40
1:A:3687:GLN:HB3	1:A:4007:GLN:OE1	2.22	0.40
1:A:2399:ASN:C	1:A:2400:ILE:HD12	2.41	0.40
1:A:1741:ASP:O	1:A:1742:GLU:HB2	2.21	0.40
1:A:2174:ASN:HA	1:A:2426:ARG:HD2	2.03	0.40
1:A:1982:GLY:HA2	4:A:4403:ATP:H5'1	2.04	0.40
1:A:4288:CYS:HG	1:A:4290:GLY:C	2.24	0.40
1:A:2766:ASN:O	1:A:2769:THR:HB	2.21	0.40
1:A:3710:LEU:CD1	1:A:3736:GLU:CD	2.89	0.40
1:A:2664:ILE:CD1	1:A:2664:ILE:H	2.34	0.40
1:A:2453:ASN:ND2	1:A:2512:GLU:HA	2.36	0.40
1:A:1986:SER:HA	1:A:1989:TRP:NE1	2.37	0.40
1:A:4200:PHE:HB2	1:A:4252:TRP:CZ3	2.57	0.40
1:A:3858:THR:HG23	1:A:3859:HIS:N	2.36	0.40
1:A:2659:VAL:HG13	1:A:2659:VAL:O	2.21	0.40
1:A:3755:MET:HB2	1:A:3780:LYS:O	2.21	0.40
1:A:2175:GLY:HA3	1:A:2196:LEU:CD2	2.51	0.40
1:A:3277:CYS:SG	1:A:3368:LEU:HD23	2.61	0.40
1:A:4073:LEU:O	1:A:4077:ILE:HG13	2.21	0.40
1:A:3486:ASP:O	1:A:3490:ASP:N	2.42	0.40
1:A:3588:GLU:HA	1:A:3633:LEU:HD11	2.03	0.40
1:A:1567:LEU:HB3	1:A:1607:ILE:HD11	2.04	0.40
1:A:3939:VAL:HG22	1:A:4296:ILE:HG22	2.04	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 X-ray entries followed by that with respect to entries of similar resolution.

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	2995/3450 (87%)	2834 (95%)	153 (5%)	8 (0%)	46	83

All (8) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1820	PRO
1	A	3965	PHE
1	A	1589	SER
1	A	1645	VAL
1	A	3375	PRO
1	A	4027	ALA
1	A	1529	VAL
1	A	3952	VAL

### 5.3.2 Protein sidechains [i](#)

In the following table, the Percentiles column shows the percent sidechain outliers of the chain as a percentile score with respect to all X-ray entries followed by that with respect to entries of similar resolution.

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	2286/3065 (75%)	2201 (96%)	85 (4%)	41	77

All (85) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1307	CYS
1	A	1392	THR
1	A	1465	CYS

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1513	GLN
1	A	1536	SER
1	A	1570	LYS
1	A	1705	LEU
1	A	1737	TRP
1	A	1739	CYS
1	A	1744	ASN
1	A	1787	ILE
1	A	1796	LYS
1	A	1944	LYS
1	A	1977	ILE
1	A	1997	CYS
1	A	1999	THR
1	A	2050	SER
1	A	2064	GLU
1	A	2116	SER
1	A	2178	HIS
1	A	2248	ASP
1	A	2253	ASP
1	A	2258	LEU
1	A	2322	THR
1	A	2435	ARG
1	A	2521	ASP
1	A	2570	ASP
1	A	2615	LEU
1	A	2627	ILE
1	A	2635	GLU
1	A	2661	ARG
1	A	2782	MET
1	A	2821	GLU
1	A	2875	PHE
1	A	3239	ASP
1	A	3262	ASP
1	A	3279	PHE
1	A	3309	ASN
1	A	3336	LEU
1	A	3343	ASP
1	A	3357	ASP
1	A	3391	ASN
1	A	3397	SER
1	A	3495	LEU
1	A	3518	PHE

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	3582	GLU
1	A	3583	LEU
1	A	3584	PHE
1	A	3590	ASP
1	A	3640	LEU
1	A	3641	CYS
1	A	3652	TYR
1	A	3667	LYS
1	A	3671	LEU
1	A	3688	SER
1	A	3690	MET
1	A	3718	LEU
1	A	3755	MET
1	A	3761	ASP
1	A	3762	LEU
1	A	3792	LEU
1	A	3821	LEU
1	A	3842	ARG
1	A	3847	TRP
1	A	3877	ARG
1	A	3904	ASP
1	A	3921	LEU
1	A	3976	SER
1	A	4023	ARG
1	A	4026	THR
1	A	4030	LYS
1	A	4031	PHE
1	A	4032	ASP
1	A	4051	ASN
1	A	4100	VAL
1	A	4164	LEU
1	A	4180	LEU
1	A	4201	VAL
1	A	4215	ILE
1	A	4228	ASP
1	A	4246	LEU
1	A	4268	SER
1	A	4293	ASP
1	A	4298	CYS
1	A	4302	LEU

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (13) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1792	ASN
1	A	1810	GLN
1	A	2140	ASN
1	A	2178	HIS
1	A	2269	GLN
1	A	2362	ASN
1	A	2391	ASN
1	A	2580	HIS
1	A	2595	HIS
1	A	2777	HIS
1	A	3738	GLN
1	A	3742	ASN
1	A	4214	GLN

### 5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

## 5.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains [i](#)

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

## 5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

## 5.6 Ligand geometry [i](#)

Of 6 ligands modelled in this entry, 2 are monoatomic - leaving 4 for Mogul analysis.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds (or angles) for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds (or angles) that are observed in the model and the number of bonds (or angles) that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. 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  $|Z| > 2$  is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	$\# Z  > 2$	Counts	RMSZ	$\# Z  > 2$
2	AOV	A	4401	3	26,34,34	1.08	2 (7%)	30,56,56	2.44	9 (30%)



Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z  > 2	Counts	RMSZ	# Z  > 2
4	ATP	A	4403	3	24,33,33	0.91	1 (4%)	31,52,52	2.55	4 (12%)
5	ADP	A	4405	-	22,29,29	1.12	2 (9%)	27,45,45	1.99	5 (18%)
5	ADP	A	4406	-	22,29,29	1.11	2 (9%)	27,45,45	2.26	7 (25%)

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the chemical component dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	AOV	A	4401	3	-	0/12/39/39	0/3/3/3
4	ATP	A	4403	3	-	0/18/38/38	0/3/3/3
5	ADP	A	4405	-	-	0/12/32/32	0/3/3/3
5	ADP	A	4406	-	-	0/12/32/32	0/3/3/3

All (7) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
5	A	4405	ADP	C4-N3	-2.08	1.32	1.35
2	A	4401	AOV	C2-N3	2.10	1.35	1.32
4	A	4403	ATP	C5-C4	2.34	1.45	1.40
5	A	4405	ADP	C5-C4	2.36	1.45	1.40
5	A	4406	ADP	C5-C4	2.38	1.45	1.40
5	A	4406	ADP	PB-O1B	2.91	1.60	1.51
2	A	4401	AOV	C5-C4	3.12	1.47	1.40

All (25) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
5	A	4406	ADP	N3-C2-N1	-7.99	122.78	128.89
4	A	4403	ATP	N3-C2-N1	-7.91	122.83	128.89
4	A	4403	ATP	PA-O3A-PB	-7.78	110.88	132.73
2	A	4401	AOV	N3-C2-N1	-7.33	123.28	128.89
4	A	4403	ATP	PB-O3B-PG	-6.20	111.86	132.67
2	A	4401	AOV	PA-O3A-PB	-5.93	116.47	132.99
5	A	4405	ADP	N3-C2-N1	-4.84	125.19	128.89
5	A	4405	ADP	C4-C5-N7	-4.80	105.06	109.48
2	A	4401	AOV	C4-C5-N7	-4.47	105.36	109.48
5	A	4405	ADP	C2'-C1'-N9	-4.36	107.64	114.29
2	A	4401	AOV	C2'-C1'-N9	-4.24	107.82	114.29
5	A	4406	ADP	C2'-C1'-N9	-3.91	108.31	114.29

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
5	A	4405	ADP	PA-O3A-PB	-3.63	120.50	132.67
5	A	4406	ADP	PA-O3A-PB	-3.20	121.94	132.67
4	A	4403	ATP	C4-C5-N7	-3.01	106.71	109.48
5	A	4406	ADP	C4-C5-N7	-2.97	106.75	109.48
2	A	4401	AOV	C4'-O4'-C1'	-2.65	106.80	109.72
2	A	4401	AOV	O2B-PB-O1B	-2.48	111.30	118.70
2	A	4401	AOV	O3A-PA-O1A	-2.38	103.09	108.79
5	A	4406	ADP	O2A-PA-O1A	2.19	124.41	112.53
5	A	4406	ADP	O4'-C4'-C3'	2.21	109.60	105.15
2	A	4401	AOV	O3B-PB-O3A	2.27	104.98	100.46
5	A	4405	ADP	O2B-PB-O1B	2.29	117.96	110.58
5	A	4406	ADP	O3B-PB-O2B	2.93	118.52	107.38
2	A	4401	AOV	O2B-PB-O3A	3.18	117.47	108.79

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

4 monomers are involved in 26 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
2	A	4401	AOV	12	0
4	A	4403	ATP	4	0
5	A	4405	ADP	5	0
5	A	4406	ADP	5	0

## 5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

## 5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

## 6 Fit of model and data ⓘ

### 6.1 Protein, DNA and RNA chains ⓘ

In the following table, the column labelled ‘#RSRZ> 2’ contains the number (and percentage) of RSRZ outliers, followed by percent RSRZ outliers for the chain as percentile scores relative to all X-ray entries and entries of similar resolution. The OWAB column contains the minimum, median, 95<sup>th</sup> percentile and maximum values of the occupancy-weighted average B-factor per residue. The column labelled ‘Q< 0.9’ lists the number of (and percentage) of residues with an average occupancy less than 0.9.

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å <sup>2</sup> )	Q<0.9
1	A	3005/3450 (87%)	-0.30	87 (2%) 55 49	39, 110, 274, 477	0

All (87) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	3130	LEU	8.3
1	A	2975	ASP	6.0
1	A	3136	SER	5.6
1	A	2942	SER	4.8
1	A	2946	ALA	4.6
1	A	3134	LEU	4.5
1	A	2949	GLN	4.2
1	A	2945	ASP	4.1
1	A	3133	LEU	4.0
1	A	3138	GLY	4.0
1	A	2915	ASN	3.9
1	A	2953	LEU	3.8
1	A	3139	GLN	3.8
1	A	3123	THR	3.8
1	A	2918	ALA	3.8
1	A	3135	ASN	3.7
1	A	3131	GLU	3.7
1	A	2964	VAL	3.6
1	A	2909	ALA	3.6
1	A	2947	SER	3.6
1	A	2911	VAL	3.5
1	A	2907	ALA	3.4
1	A	3238	PHE	3.3
1	A	2937	GLN	3.3
1	A	2956	LEU	3.3
1	A	3142	SER	3.3
1	A	3137	VAL	3.3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	2938	MET	3.2
1	A	1579	THR	3.2
1	A	3019	GLY	3.2
1	A	2951	THR	3.1
1	A	4030	LYS	3.1
1	A	3156	ALA	3.0
1	A	3128	ARG	2.9
1	A	4056	LEU	2.9
1	A	3533	ASN	2.9
1	A	1318	TYR	2.9
1	A	3144	LEU	2.8
1	A	3642	PHE	2.8
1	A	2935	ALA	2.8
1	A	3910	ALA	2.7
1	A	4029	SER	2.7
1	A	2902	SER	2.7
1	A	3451	ILE	2.7
1	A	2912	ASP	2.7
1	A	4031	PHE	2.7
1	A	2906	GLU	2.7
1	A	4026	THR	2.7
1	A	1321	PHE	2.6
1	A	3132	GLU	2.6
1	A	3143	GLU	2.6
1	A	3187	ASN	2.6
1	A	3154	GLU	2.6
1	A	1653	TYR	2.6
1	A	3125	ASP	2.6
1	A	3025	GLY	2.6
1	A	2944	GLN	2.5
1	A	3159	GLU	2.5
1	A	3129	LYS	2.5
1	A	3121	LYS	2.5
1	A	3153	SER	2.5
1	A	3127	LYS	2.5
1	A	3155	ALA	2.4
1	A	3448	GLN	2.4
1	A	3141	VAL	2.4
1	A	2962	GLU	2.3
1	A	3037	PHE	2.3
1	A	3126	ARG	2.3
1	A	3168	THR	2.3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	A	2900	GLY	2.3
1	A	2943	MET	2.3
1	A	3119	ASN	2.3
1	A	2950	LYS	2.3
1	A	2939	ILE	2.2
1	A	2941	VAL	2.2
1	A	2952	GLU	2.2
1	A	2979	LYS	2.2
1	A	2919	GLY	2.2
1	A	2933	ASP	2.2
1	A	2893	ARG	2.1
1	A	3076	PRO	2.1
1	A	2965	VAL	2.1
1	A	3145	LYS	2.1
1	A	2922	SER	2.1
1	A	4057	ILE	2.1
1	A	3460	SER	2.0
1	A	3274	SER	2.0

## 6.2 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains [i](#)

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

## 6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

## 6.4 Ligands [i](#)

In the following table, the Atoms column lists the number of modelled atoms in the group and the number defined in the chemical component dictionary. LLDF column lists the quality of electron density of the group with respect to its neighbouring residues in protein, DNA or RNA chains. The B-factors column lists the minimum, median, 95<sup>th</sup> percentile and maximum values of B factors of atoms in the group. The column labelled 'Q< 0.9' lists the number of atoms with occupancy less than 0.9.

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	LLDF	B-factors(Å <sup>2</sup> )	Q<0.9
3	MG	A	4404	1/1	1.00	0.22	3.95	22,22,22,22	0
4	ATP	A	4403	31/31	0.97	0.18	0.37	49,80,97,108	0
5	ADP	A	4406	27/27	0.95	0.20	-0.10	66,85,103,111	0

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	LLDF	B-factors( $\text{\AA}^2$ )	Q<0.9
5	ADP	A	4405	27/27	0.97	0.18	-0.29	42,46,57,61	0
2	AOV	A	4401	32/32	0.98	0.20	-0.40	41,69,88,93	0
3	MG	A	4402	1/1	0.99	0.21	-0.63	31,31,31,31	0

## 6.5 Other polymers

There are no such residues in this entry.