



Full wwPDB EM Validation Report ⓘ

Nov 19, 2022 – 07:33 AM EST

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 initial model : 4AKI

This is a Full wwPDB EM Validation Report for a publicly released PDB entry.

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

A user guide is available at

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/EMValidationReportHelp>
with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

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

EMDB validation analysis : 0.0.1.dev43
MolProbity : 4.02b-467
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
MapQ : 1.9.9
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.31.3

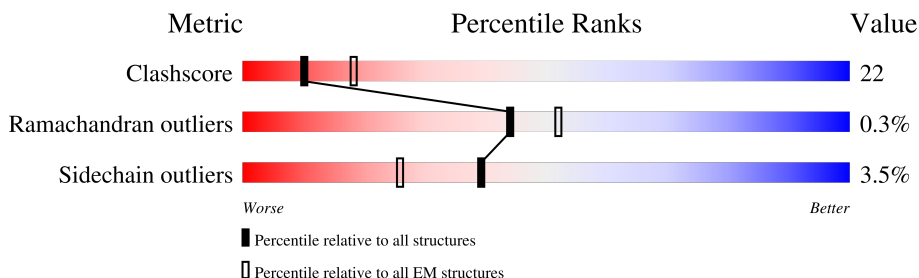
1 Overall quality at a glance

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	158937	4297
Ramachandran outliers	154571	4023
Sidechain outliers	154315	3826

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the map. The red, orange, yellow and green segments of the bar indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria respectively. 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 EM map (all-atom inclusion $< 40\%$). The numeric value is given above the bar.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	2286	<div> <div>10%</div> <div>64%</div> <div>33%</div> <div>••</div> </div>

2 Entry composition

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.

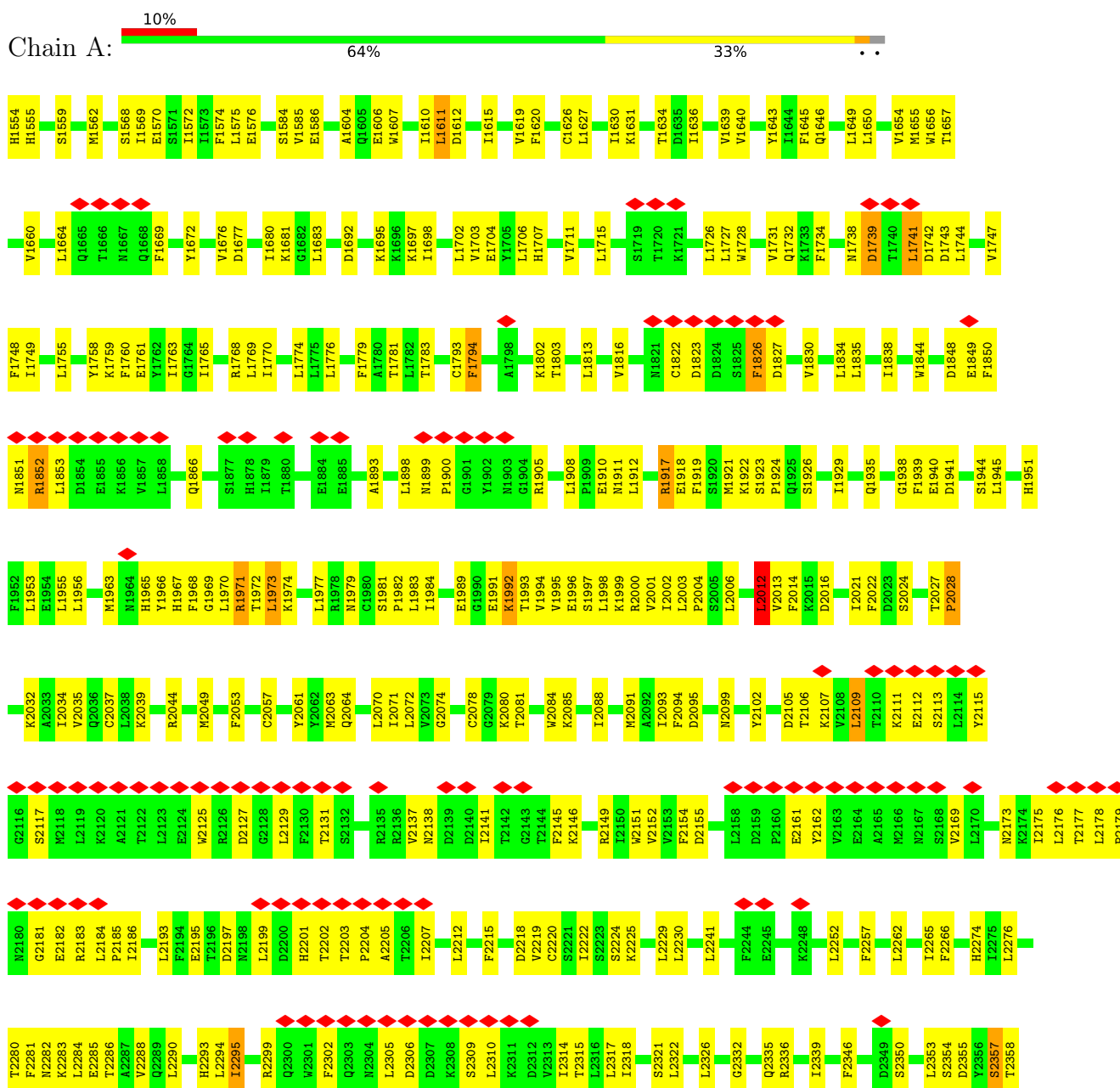
- Molecule 1 is a protein called Dynein motor domain.

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

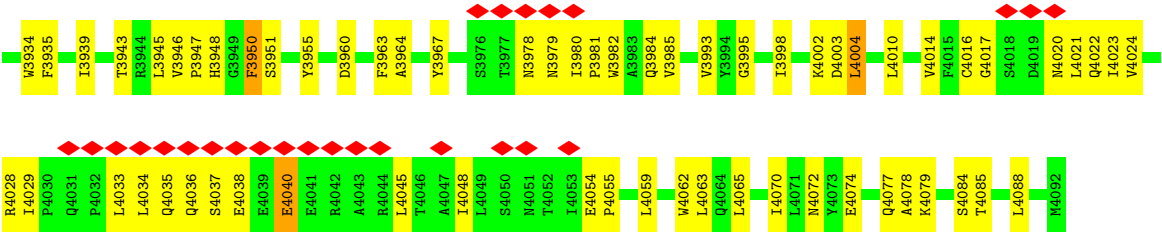
3 Residue-property plots

These plots are drawn for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of the various outlier classes displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry and atom inclusion in map density. 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. A red diamond above a residue indicates a poor fit to the EM map for this residue (all-atom inclusion < 40%). 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



S3849	W3772	L3677	M3576	I3466	V2984	D2868	K2785	R2646	H2530	F2445	I2359
W3850	M3773	Y3683	M3577	S3467	N2985	E2872	L2786	L2647	C2535	F2446	V2360
V3851	I3774	Y3684	E3578	F3470	P2986	L2873	H2787	R2654	N2536	K2447	I2361
T3853	S3687	Y3685	I3580	A3473	S2988	V2874	R2788	D2658	R2543	D2448	A2362
T3854	L3690	L3346	D3581	G3474	P2989	D2875	L2792	V2677	T2544	T2449	I2363
L3855	D3691	K3350	L3582	R3475	G2990	V2878	L2793	D2678	R2549	T2450	I2364
H3858	L3692	K3351	L3583	R3476	L3010	V2881	D2794	K2679	H2453		I2365
V3859	K3693	L3353	L3587		V3017	L2881	F2795		L2458		I2366
T3862	F3694	K3354			L3024	L2890	L2799	P2682			I2367
A3865	K3695	K3355				T2891		N2583	H2461		I2368
E3866	M3696	V3358				T2891		Q2684	T2462		S2369
H3868	L3697	K3359				C2892		L2685			S2370
E3869	M3698	V3360				M2902		L2686			F2371
F3870	A3699	D3361				L2903		G2687			C2372
T3871	M3700	R3365				S2905		S2691			S2373
M3872	T3701	D3368				P2906		L2694			E2374
K3873	M3702	T3372				R2911		V2707			I2375
F3874	F3703	L3373				C2912		N2708			P2376
T3875	L3705	S3400				M2917		L2712			S2377
K3876	F3708	F3406				W2920		L2728			L2380
S3877	E3711	L3407				M2938		L2738			E2381
T3878	S3712	L3408				F2939		M2755			A2382
H3878	E3713	D3409				F2940		L2757			H2383
L3884	Q3714					T2941		L2758			E2384
F3885	E3717					D2942		L2759			V2385
A3886	L3720					F2943		G2760			K2386
P3887	T3721					I2E		A2761			I2390
L3888	Y3725					VAL		S2762			T2394
K3889	V3726					PRO		R2763			T2397
D3890	E3728					GLU		K2766			H2400
R3894	S3729					VAL		L2769			F2404
E3898	S3730					GLU		T2755			L2407
D3899	D3731					ASN		M2756			L2408
T3906	F3735					LYS		L2757			N2409
V3911	L3736					GLU		L2758			S2410
G3912	T3737					LEU		G2760			K2411
F3915	V3738					VAL		A2761			R2412
F3916	D3739					PHE		S2762			I2415
G3918	T3740					GLU		R2763			L2416
T3920	N3741					LEU		K2766			C2417
S3921	D3742					GLN		L2769			G2418
G3922	R3743					T2960		T2770			P2419
V3923	T3744					I2961		R2771			F2420
W3924	R3745					D2963		F2772			G2421
S3925	L3760					Y2977		V2773			S2422
F3927	L3766					K2981		L2779			I2523
V3926	E3767					V2982		K2780			I2526
S3927	F3768					G2983		Q2783			G2423
	V3769							P2784			K2424
											I2427
											K2428
											L2437



4 Experimental information

Property	Value	Source
EM reconstruction method	TOMOGRAPHY	Depositor
Imposed symmetry	POINT, C1	Depositor
Number of tilted images used	Not provided	
Resolution determination method	FSC 0.5 CUT-OFF	Depositor
CTF correction method	Not provided	
Microscope	FEI TECNAI F30	Depositor
Voltage (kV)	300	Depositor
Electron dose ($e^-/\text{\AA}^2$)	100	Depositor
Minimum defocus (nm)	6000	Depositor
Maximum defocus (nm)	8000	Depositor
Magnification	13500	Depositor
Image detector	GENERIC GATAN (2k x 2k)	Depositor
Maximum voxel value	152.188	Depositor
Minimum voxel value	98.743	Depositor
Average voxel value	122.468	Depositor
Voxel value standard deviation	7.227	Depositor
Recommended contour level	126.3	Depositor
Tomogram size (\AA)	492.8, 354.816, 492.8	wwPDB
Tomogram dimensions	50, 36, 50	wwPDB
Tomogram angles ($^\circ$)	90.0, 90.0, 90.0	wwPDB
Grid spacing (\AA)	9.856, 9.856, 9.856	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	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
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 [i](#)

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: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:3530:PHE:CD1	1:A:3618:TYR:HD2	1.71	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:1823:ASP:HB2	1:A:1852:ARG:O	1.56	1.05
1:A:2494:LEU:CD1	1:A:2498:GLY:HA2	1.85	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:CD	1:A:2476:LYS:H	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:3024:LEU:CD1	1:A:3303:LYS:HG3	1.96	0.94
1:A:3534:LEU:HD12	1:A:3618:TYR:CE2	2.01	0.94
1:A:2787:HIS:HA	1:A:3460:PRO:HD2	1.49	0.94
1:A:2988:SER:CB	1:A:2989:PRO:HD2	1.97	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:3509:LEU:CD1	1:A:3513:VAL:HG21	1.98	0.93
1:A:3530:PHE:CD1	1:A:3618:TYR:CD2	2.56	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:3303:LYS:O	1:A:3306:TRP:CD1	2.28	0.86
1:A:3534:LEU:HD13	1:A:3618:TYR:HE2	1.39	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:2112:GLU:HB3	1:A:2117:SER:HB2	1.57	0.85
1:A:2494:LEU:HD13	1:A:2498:GLY:HA2	0.94	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:1956:LEU:HB3	1:A:1968:PHE:CE2	2.18	0.78
1:A:1970:LEU:HD12	1:A:1971:ARG:N	1.99	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:2032:LYS:O	1:A:2035:VAL:HG12	1.85	0.76
1:A:3460:PRO:O	1:A:3463:SER:CB	2.32	0.76
1:A:2107:LYS:HE2	1:A:2499:SER:HB3	1.67	0.76
1:A:3534:LEU:HD11	1:A:3614:LEU:HD23	1.67	0.76
1:A:3816:LEU:HD23	1:A:3847:SER:OG	1.86	0.76
1:A:1939:PHE:HD2	1:A:1940:GLU:O	1.67	0.76
1:A:3525:ILE:CD1	1:A:3646:ILE:HG22	2.13	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:2745:ILE:HG23	1:A:2756:MET:CE	2.17	0.75
1:A:3946:VAL:CG1	1:A:3950:PHE:O	2.34	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:2176:LEU:O	1:A:2183:ARG:HA	1.88	0.73
1:A:3406:PHE:HB2	1:A:3513:VAL:HG11	1.69	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:2707:VAL:CG1	1:A:2712:LEU:HD11	2.18	0.73
1:A:3534:LEU:HD13	1:A:3618:TYR:CE2	2.19	0.73
1:A:2201:HIS:CE1	1:A:2497:TYR:HA	2.24	0.73
1:A:1956:LEU:HB3	1:A:1968:PHE:HE2	1.53	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2112:GLU:HB3	1:A:2117:SER:CB	2.19	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:3303:LYS:CA	1:A:3306:TRP:HD1	2.02	0.71
1:A:3525:ILE:HD11	1:A:3646:ILE:CG2	2.15	0.71
1:A:3774:ILE:O	1:A:3778:VAL:HG23	1.91	0.71
1:A:3777:VAL:CG1	1:A:3895:PHE:CE1	2.63	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:1774:LEU:HD21	1:A:1922:LYS:O	1.91	0.70
1:A:2175:ILE:HG12	1:A:2183:ARG:HB3	1.74	0.70
1:A:2960:THR:HB	1:A:2963:ASP:HB2	1.73	0.70
1:A:3645:SER:HB3	1:A:3890:GLN:NE2	2.06	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:2514:GLY:O	1:A:2523:TRP:CH2	2.45	0.69
1:A:3305:ARG:O	1:A:3307:LEU:N	2.24	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:1970:LEU:HD13	1:A:1974:LYS:CE	2.20	0.68
1:A:2386:MET:HB3	1:A:2627:ARG:HD3	1.75	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:3785:TYR:HE2	1:A:3859:VAL:HG22	1.57	0.68
1:A:3979:ASN:O	1:A:3981:PRO:HD2	1.92	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:2294:LEU:HB3	1:A:2317:LEU:HD22	1.74	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3509:LEU:CD1	1:A:3513:VAL:CG2	2.68	0.68
1:A:3837:GLY:O	1:A:3871:PHE:HD1	1.77	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:2252:LEU:HD21	1:A:2310:LEU:HD23	1.76	0.68
1:A:3566:LEU:HA	1:A:3583:LEU:HD21	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:1983:LEU:HB3	1:A:1993:THR:HG23	1.75	0.67
1:A:2107:LYS:CE	1:A:2495:ASP:OD2	2.37	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:1698:ILE:O	1:A:1702:LEU:HG	1.94	0.67
1:A:2305:LEU:HD11	1:A:2368:PHE:CG	2.29	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:2293:HIS:NE2	1:A:2409:ASN:HB3	2.09	0.67
1:A:2493:LYS:HG3	1:A:2494:LEU:H	1.60	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:2631:THR:O	1:A:2635:THR:HG22	1.96	0.66
1:A:3979:ASN:C	1:A:3981:PRO:HD2	2.16	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:1645:PHE:CG	1:A:1765:ILE:HG22	2.32	0.65
1:A:2707:VAL:CG1	1:A:2712:LEU:HD12	2.26	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:2290:LEU:HD13	1:A:2407:LEU:HD23	1.79	0.65
1:A:2382:ALA:O	1:A:2385:VAL:HG12	1.96	0.65
1:A:3566:LEU:O	1:A:3570:LEU:HG	1.97	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:2512:LYS:O	1:A:2513:GLN:HB2	1.97	0.65
1:A:2514:GLY:HA3	1:A:2523:TRP:CZ2	2.32	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:3459:ASP:OD2	1:A:3461:ILE:HG12	1.97	0.64
1:A:3618:TYR:N	1:A:3618:TYR:HD1	1.94	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:2285:GLU:HB2	1:A:2412:ARG:HH22	1.62	0.64
1:A:3566:LEU:HD13	1:A:3570:LEU:CD1	2.27	0.64
1:A:1612:ASP:HA	1:A:1615:ILE:HD11	1.78	0.64
1:A:1938:GLY:O	1:A:1989:GLU:HB3	1.98	0.64
1:A:2728:LEU:HD12	1:A:2771:ARG:CZ	2.27	0.64
1:A:2315:THR:HG21	1:A:2350:SER:HB3	1.80	0.64
1:A:3010:LEU:HD21	1:A:3317:SER:HB3	1.79	0.64
1:A:3737:THR:OG1	1:A:3740:THR:HB	1.98	0.63
1:A:1953:LEU:CD1	1:A:1973:LEU:HB3	2.27	0.63
1:A:3303:LYS:HD2	1:A:3306:TRP:CD1	2.33	0.63
1:A:1970:LEU:CD1	1:A:1974:LYS:HE3	2.24	0.63
1:A:1738:ASN:O	1:A:1739:ASP:OD1	2.16	0.63
1:A:3641:PHE:HA	1:A:3889:LEU:HD21	1.81	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:1827:ASP:HB3	1:A:1830:VAL:HG12	1.81	0.63
1:A:2563:SER:CB	1:A:2566:SER:OG	2.47	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:2282:ASN:HB3	1:A:2552:ARG:HG3	1.82	0.62
1:A:3792:ARG:HB2	1:A:3955:TYR:CE1	2.34	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:3307:LEU:HA	1:A:3310:THR:HB	1.81	0.62
1:A:3583:LEU:O	1:A:3587:LEU:HG	2.00	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:1992:LYS:HG3	1:A:2024:SER:CB	2.11	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:1630:ILE:CG2	1:A:1655:MET:SD	2.89	0.60
1:A:2151:TRP:HE3	1:A:2193:LEU:HD11	1.64	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:1900:PRO:HB3	1:A:1905:ARG:HA	1.83	0.60
1:A:2332:GLY:HA2	1:A:2335:GLN:CB	2.31	0.60
1:A:2785:LYS:HD3	1:A:3482:GLY:O	2.01	0.60
1:A:3817:GLY:H	1:A:3821:ASN:HB2	1.66	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: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:2755:HIS:NE2	1:A:2835:LEU:HG	2.17	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:2728:LEU:HD12	1:A:2771:ARG:NH2	2.17	0.59
1:A:3303:LYS:HA	1:A:3306:TRP:HE1	1.67	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:CD	1:A:2476:LYS:N	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:2155:ASP:OD1	1:A:2549:ARG:NH2	2.35	0.58
1:A:2339:ILE:HG23	1:A:2353:LEU:HB3	1.83	0.58
1:A:3541:MET:HA	1:A:3544:LYS:HG2	1.83	0.58
1:A:3737:THR:HB	1:A:3740:THR:CB	2.33	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:4024:VAL:HG11	1:A:4062:TRP:CD2	2.38	0.58
1:A:2241:LEU:HD13	1:A:2299:ARG:HH11	1.68	0.58
1:A:2257:PHE:HD1	1:A:2262:LEU:HD11	1.69	0.58
1:A:2489:ILE:HG22	1:A:2535:CYS:HB3	1.84	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:2476:LYS:HD3	1:A:2476:LYS:N	2.09	0.58
1:A:4033:LEU:HD12	1:A:4035:GLN:N	2.18	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:3555:TYR:HE1	1:A:3593:GLU:HG2	1.68	0.58
1:A:3810:SER:O	1:A:3838:TRP:HB2	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:2354:SER:OG	1:A:2357:SER:HB2	2.02	0.58
1:A:2437:LEU:H	1:A:2437:LEU:HD12	1.69	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:4021:LEU:HD23	1:A:4023:ILE:HG13	1.85	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:2808:LEU:HD21	1:A:2856:LEU:HD12	1.86	0.57
1:A:2938:MET:SD	1:A:3321:ILE:HG21	2.45	0.57
1:A:3912:GLY:O	1:A:3915:PHE:CZ	2.57	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:2784:PRO:HG2	1:A:2817:ILE:HD13	1.84	0.57
1:A:2846:GLY:O	1:A:2849:TYR:HB3	2.04	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:O	1:A:4022:GLN:HG2	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:1940:GLU:CB	1:A:1989:GLU:O	2.51	0.56
1:A:2627:ARG:NH1	1:A:2630:TYR:CE2	2.74	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:2127:ASP:O	1:A:2131:THR:OG1	2.23	0.56
1:A:2137:VAL:O	1:A:2141:ILE:CG2	2.50	0.56
1:A:2868:ASP:HB2	1:A:2872:GLU:OE1	2.06	0.56
1:A:3839:ILE:HG23	1:A:3873:MET:HG3	1.86	0.56
1:A:1852:ARG:O	1:A:1852:ARG:HG3	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:2386:MET:HB3	1:A:2627:ARG:CD	2.36	0.55
1:A:2707:VAL:HG12	1:A:2712:LEU:CD1	2.37	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:1627:LEU:HD11	1:A:1631:LYS:HE3	1.89	0.55
1:A:1983:LEU:HB3	1:A:1993:THR:CG2	2.36	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:2064:GLN:CD	1:A:2091:MET:CE	2.75	0.54
1:A:2707:VAL:HG12	1:A:2712:LEU:HD12	1.89	0.54
1:A:1823:ASP:HB2	1:A:1853:LEU:HD23	1.88	0.54
1:A:2002:ILE:HB	1:A:2014:PHE:CE2	2.42	0.54
1:A:2563:SER:CB	1:A:2566:SER:H	2.15	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:2064:GLN:OE1	1:A:2151:TRP:CH2	2.55	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2707:VAL:CB	1:A:2712:LEU:CD1	2.72	0.54
1:A:1849:GLU:CG	1:A:1899:ASN:ND2	2.70	0.54
1:A:1970:LEU:HD12	1:A:1970:LEU:C	2.28	0.54
1:A:1645:PHE:CZ	1:A:1649:LEU:HD22	2.43	0.54
1:A:2063:MET:HB3	1:A:2070:LEU:HD11	1.90	0.54
1:A:2305:LEU:CD1	1:A:2368:PHE:CD1	2.91	0.54
1:A:2002:ILE:HG22	1:A:2006:LEU:HD11	1.88	0.54
1:A:3566:LEU:HD13	1:A:3570:LEU:HD11	1.86	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:3440:LEU:CD2	1:A:3462:ILE:HD12	2.38	0.53
1:A:3817:GLY:H	1:A:3821:ASN:CB	2.21	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:1981:SER:HB3	1:A:1982:PRO:HD3	1.91	0.53
1:A:2450:THR:H	1:A:2453:HIS:CE1	2.27	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:1604:ALA:HA	1:A:1607:TRP:HE1	1.72	0.52
1:A:3946:VAL:HB	1:A:3947:PRO:HA	1.91	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:2012:LEU:HD13	1:A:2016:ASP:OD2	2.10	0.52
1:A:2339:ILE:HG12	1:A:2353:LEU:HD23	1.91	0.52
1:A:2488:GLU:CD	1:A:2491:LEU:HD11	2.29	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:2285:GLU:CB	1:A:2412:ARG:NH2	2.73	0.52
1:A:2462:THR:HG22	1:A:2476:LYS:HA	1.90	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:1803:THR:HG21	1:A:1848:ASP:OD1	2.10	0.52
1:A:4021:LEU:HD23	1:A:4023:ILE:CG1	2.40	0.52
1:A:4065:LEU:HD12	1:A:4065:LEU:O	2.10	0.52
1:A:1939:PHE:HD1	1:A:1939:PHE:H	1.57	0.52
1:A:2115:TYR:OH	1:A:2162:TYR:O	2.23	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:1650:LEU:HD11	1:A:1747:VAL:HG11	1.92	0.51
1:A:3854:TYR:O	1:A:3858:HIS:HB2	2.10	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: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: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:1926:SER:HA	1:A:1929:ILE:HD13	1.92	0.51
1:A:3737:THR:OG1	1:A:3740:THR:CB	2.59	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:2084:TRP:HE3	1:A:2088:ILE:HD12	1.76	0.50
1:A:2476:LYS:HZ2	1:A:2528:ARG:HB2	1.76	0.50
1:A:2400:HIS:NE2	1:A:2559:LEU:CD1	2.67	0.50
1:A:2476:LYS:H	1:A:2476:LYS:HD2	1.73	0.50
1:A:3845:GLN:OE1	1:A:3878:HIS:HB2	2.12	0.50
1:A:3855:LEU:HD12	1:A:3859:VAL:HG23	1.93	0.50
1:A:1749:ILE:HD13	1:A:1813:LEU:HD22	1.92	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:2290:LEU:HD23	1:A:2321:SER:HA	1.92	0.50
1:A:2637:PRO:O	1:A:2639:GLN:NE2	2.44	0.50
1:A:3566:LEU:HD11	1:A:3570:LEU:HD11	1.92	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3645:SER:CB	1:A:3890:GLN:NE2	2.74	0.50
1:A:3737:THR:CB	1:A:3740:THR:CB	2.89	0.50
1:A:1917:ARG:HD2	1:A:3963:PHE:CE2	2.46	0.50
1:A:2034:ILE:CD1	1:A:2061:TYR:CE2	2.95	0.50
1:A:3350:LYS:HA	1:A:3353:LEU:HD12	1.94	0.50
1:A:3848:LEU:HD12	1:A:3884:LEU:HD12	1.93	0.50
1:A:1677:ASP:HA	1:A:1680:ILE:HD12	1.93	0.50
1:A:1706:LEU:HD22	1:A:1935:GLN:HG2	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:2295:ILE:HG12	1:A:2314:ILE:HD12	1.93	0.49
1:A:3911:TRP:HH2	1:A:3926:VAL:HG12	1.77	0.49
1:A:4033:LEU:HD12	1:A:4036:GLN:H	1.77	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:2169:VAL:HG13	1:A:2186:ILE:HG12	1.94	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:2780:LYS:HD3	1:A:2813:THR:HG22	1.93	0.49
1:A:2385:VAL:HG23	1:A:2574:TYR:HD1	1.77	0.49
1:A:3459:ASP:OD2	1:A:3461:ILE:CG1	2.61	0.49
1:A:2427:ILE:HD12	1:A:2559:LEU:HD22	1.93	0.49
1:A:2860:THR:HG22	1:A:2865:LEU:O	2.13	0.49
1:A:3946:VAL:HA	1:A:3947:PRO:C	2.33	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:1657:THR:HG21	1:A:1734:PHE:O	2.12	0.49
1:A:1967:HIS:NE2	1:A:2204:PRO:HB3	2.28	0.49
1:A:3373:LEU:O	1:A:3373:LEU:HD23	2.13	0.48
1:A:3692:LYS:HE3	1:A:3898:GLU:O	2.12	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:1911:ASN:OD1	1:A:1912:LEU:HG	2.13	0.48
1:A:2064:GLN:NE2	1:A:2091:MET:CE	2.76	0.48
1:A:2828:LEU:HD13	1:A:2902:MET:SD	2.53	0.48
1:A:2982:VAL:HG12	1:A:2983:GLY:N	2.27	0.48
1:A:3566:LEU:HD13	1:A:3570:LEU:HD12	1.95	0.48
1:A:3671:VAL:O	1:A:3674:ILE:HG22	2.13	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:1626:CYS:SG	1:A:1639:VAL:CG1	3.01	0.48
1:A:1683:LEU:HB3	1:A:1702:LEU:HD21	1.96	0.48
1:A:1731:VAL:HG12	1:A:1732:GLN:N	2.29	0.48
1:A:2074:GLY:O	1:A:2197:ASP:HA	2.13	0.48
1:A:4065:LEU:HD12	1:A:4065:LEU:C	2.33	0.48
1:A:1664:LEU:HD23	1:A:1669:PHE:HZ	1.77	0.48
1:A:1826:PHE:CE1	1:A:1853:LEU:CD2	2.96	0.48
1:A:2002:ILE:HB	1:A:2014:PHE:HE2	1.78	0.48
1:A:2112:GLU:CB	1:A:2117:SER:HB2	2.35	0.48
1:A:3737:THR:CB	1:A:3740:THR:HB	2.44	0.48
1:A:4084:SER:O	1:A:4088:LEU:HG	2.14	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: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: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:1681:LYS:HE2	1:A:1939:PHE:CE1	2.50	0.47
1:A:2084:TRP:CZ3	1:A:2085:LYS:HG3	2.49	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:2580:LYS:HG2	1:A:2586:ARG:HH22	1.79	0.47
1:A:3612:ASP:O	1:A:3615:VAL:CG2	2.63	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:3703:PHE:HE1	1:A:3766:GLU:HG2	1.79	0.47
1:A:3877:CYS:SG	1:A:3884:LEU:HD21	2.55	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:2027:THR:HA	1:A:2028:PRO:HD3	1.47	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:2318:ILE:O	1:A:2322:LEU:HB2	2.16	0.46
1:A:3833:LYS:HZ3	1:A:3862:THR:HG21	1.81	0.46
1:A:3889:LEU:HG	1:A:3894:ARG:HD3	1.95	0.46
1:A:1554:HIS:O	1:A:1555:HIS:HB2	2.15	0.46
1:A:1683:LEU:HD22	1:A:1698:ILE:HG23	1.96	0.46
1:A:2125:TRP:CZ2	1:A:2178:LEU:CD1	2.97	0.46
1:A:2627:ARG:NH1	1:A:2630:TYR:CD2	2.84	0.46
1:A:1586:GLU:HG3	1:A:1765:ILE:H	1.81	0.46
1:A:3303:LYS:C	1:A:3306:TRP:CD1	2.74	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:1660:VAL:HG13	1:A:1728:TRP:CH2	2.51	0.46
1:A:1945:LEU:HD13	1:A:1994:VAL:HG21	1.98	0.46
1:A:1748:PHE:HD2	1:A:1755:LEU:HD22	1.77	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:3631:MET:HE1	1:A:3698:MET:HG3	1.98	0.45
1:A:1968:PHE:N	1:A:1968:PHE:CD1	2.84	0.45
1:A:3760:LEU:HD21	1:A:4078:ALA:HA	1.99	0.45
1:A:3995:GLY:HA2	1:A:3998:ILE:CD1	2.46	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: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:3809:GLU:HB3	1:A:3810:SER:H	1.53	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: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:3509:LEU:CG	1:A:3513:VAL:HG21	2.45	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:1759:LYS:HE3	1:A:1761:GLU:OE2	2.17	0.45
1:A:1953:LEU:HD11	1:A:1973:LEU:HB3	1.98	0.45
1:A:2417:CYS:O	1:A:2558:TYR:HA	2.17	0.45
1:A:3566:LEU:HD23	1:A:3587:LEU:HD11	1.99	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:2099:ASN:HA	1:A:2149:ARG:O	2.17	0.44
1:A:2447:LYS:HE3	1:A:2493:LYS:HD3	1.99	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:1951:HIS:O	1:A:1955:LEU:HB2	2.17	0.44
1:A:2262:LEU:HA	1:A:2265:ILE:HD12	1.99	0.44
1:A:3330:TYR:CD1	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:2386:MET:HB3	1:A:2627:ARG:NE	2.32	0.44
1:A:3319:GLU:HA	1:A:3359:LYS:O	2.17	0.44
1:A:3330:TYR:CE1	1:A:3334:PHE:CD2	3.05	0.44
1:A:3964:ALA:HB2	1:A:3993:VAL:HG11	1.99	0.44
1:A:1803:THR:HG21	1:A:1848:ASP:CG	2.37	0.44
1:A:2155:ASP:OD1	1:A:2195:GLU:HG3	2.17	0.44
1:A:2517:LYS:NZ	1:A:2520:GLU:OE1	2.48	0.44
1:A:2646:ARG:NH1	1:A:2687:GLY:H	2.15	0.44
1:A:2760:GLY:O	1:A:2761:ALA:HB3	2.18	0.44
1:A:1793:CYS:SG	1:A:1918:GLU:HG2	2.57	0.44
1:A:1940:GLU:CG	1:A:1941:ASP:H	2.22	0.44
1:A:2494:LEU:HB2	1:A:2499:SER:N	2.32	0.44
1:A:1559:SER:CB	1:A:1572:ILE:HG22	2.47	0.44
1:A:2037:CYS:SG	1:A:2094:PHE:HB2	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:4034:LEU:HD23	1:A:4034:LEU:C	2.38	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:3461:ILE:C	1:A:3463:SER:N	2.70	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:1826:PHE:O	1:A:1826:PHE:CG	2.70	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:2404:PHE:CZ	1:A:2428:MET:HG2	2.53	0.43
1:A:2707:VAL:HG11	1:A:2712:LEU:CD1	2.45	0.43
1:A:2738:MET:HG2	1:A:2769:LEU:HD21	2.00	0.43
1:A:2266:PHE:HD1	1:A:2326:LEU:HD21	1.83	0.43
1:A:2446:SER:N	1:A:2449:THR:HG23	2.19	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:1672:TYR:O	1:A:1676:VAL:HG23	2.19	0.43
1:A:3869:GLU:O	1:A:3870:LYS:C	2.56	0.43
1:A:4033:LEU:HD13	1:A:4035:GLN:CG	2.49	0.43
1:A:1741:LEU:O	1:A:1742:ASP:HB2	2.19	0.43
1:A:2061:TYR:O	1:A:2064:GLN:HG2	2.17	0.43
1:A:2109:LEU:CD1	1:A:2129:LEU:HD23	2.49	0.43
1:A:2503:VAL:HA	1:A:2506:LEU:HD12	2.01	0.43
1:A:2578:ILE:CG2	1:A:2630:TYR:HB2	2.49	0.43
1:A:2988:SER:CB	1:A:2989:PRO:CD	2.71	0.43
1:A:1646:GLN:OE1	1:A:1763:ILE:HG12	2.18	0.43
1:A:1967:HIS:C	1:A:1968:PHE:CD1	2.85	0.43
1:A:3696:MET:SD	1:A:3760:LEU:HD23	2.59	0.43
1:A:1611:LEU:O	1:A:1615:ILE:HG12	2.19	0.43
1:A:1681:LYS:HE2	1:A:1939:PHE:CZ	2.53	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:2375:ILE:HG22	1:A:2376:PRO:O	2.18	0.43
1:A:2982:VAL:CG1	1:A:2983:GLY:N	2.82	0.43
1:A:3544:LYS:O	1:A:3548:LEU:HB2	2.19	0.43
1:A:3784:ASN:ND2	1:A:3865:ALA:O	2.52	0.43
1:A:1650:LEU:O	1:A:1654:VAL:HG23	2.19	0.43
1:A:3407:LEU:HD23	1:A:3518:PHE:CE2	2.53	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:1822:CYS:SG	1:A:1850:PHE:CA	3.04	0.42
1:A:3628:ILE:HG13	1:A:3705:LEU:HD23	2.00	0.42
1:A:3785:TYR:CD1	1:A:3785:TYR:N	2.87	0.42
1:A:4033:LEU:HD12	1:A:4033:LEU:C	2.39	0.42
1:A:4074:GLU:HA	1:A:4077:GLN:HE21	1.84	0.42
1:A:1568:SER:HB2	1:A:1816:VAL:HG21	2.01	0.42
1:A:1781:THR:HG21	1:A:1919:PHE:CE1	2.55	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2111:LYS:HZ3	1:A:2161:GLU:HG2	1.76	0.42
1:A:2178:LEU:HB2	1:A:2182:GLU:H	1.83	0.42
1:A:2707:VAL:HG11	1:A:2712:LEU:HD12	2.00	0.42
1:A:2786:ILE:HD12	1:A:3460:PRO:CG	2.49	0.42
1:A:1715:LEU:HG	1:A:1727:LEU:HD22	2.02	0.42
1:A:1822:CYS:HB2	1:A:1853:LEU:CD2	2.31	0.42
1:A:2306:ASP:HB2	1:A:2309:SER:HB3	2.02	0.42
1:A:2640:THR:O	1:A:2643:SER:HB3	2.20	0.42
1:A:3414:MET:O	1:A:3418:ILE:HG12	2.19	0.42
1:A:1965:HIS:HD2	1:A:2212:LEU:HD23	1.85	0.42
1:A:2510:MET:O	1:A:2513:GLN:NE2	2.53	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:3464:ARG:O	1:A:3467:SER:O	2.38	0.42
1:A:3810:SER:HB3	1:A:3837:GLY:HA2	2.01	0.42
1:A:2138:ASN:ND2	1:A:2185:PRO:O	2.52	0.42
1:A:3777:VAL:HG12	1:A:3895:PHE:CE1	2.53	0.42
1:A:1939:PHE:CD1	1:A:1939:PHE:N	2.87	0.42
1:A:2225:LYS:HD2	1:A:2281:PHE:CZ	2.55	0.42
1:A:2411:LYS:HG2	1:A:2530:HIS:CE1	2.41	0.42
1:A:2609:THR:HA	1:A:2612:GLN:O	2.20	0.42
1:A:3505:ILE:O	1:A:3510:ARG:NH1	2.53	0.42
1:A:3728:GLU:CG	1:A:4079:LYS:HE2	2.49	0.42
1:A:3785:TYR:CE2	1:A:3859:VAL:HG13	2.54	0.42
1:A:1998:LEU:CD1	1:A:2022:PHE:HZ	2.32	0.42
1:A:2088:ILE:HG12	1:A:2151:TRP:CZ2	2.55	0.42
1:A:2141:ILE:CG2	1:A:2145:PHE:HB2	2.49	0.42
1:A:2385:VAL:HG23	1:A:2574:TYR:CD1	2.53	0.42
1:A:2755:HIS:HB3	1:A:2912:CYS:SG	2.60	0.42
1:A:2905:SER:HA	1:A:2906:PRO:HD2	1.85	0.42
1:A:3848:LEU:O	1:A:3849:SER:C	2.59	0.42
1:A:1575:LEU:O	1:A:1576:GLU:HB3	2.20	0.42
1:A:1727:LEU:O	1:A:1731:VAL:HG23	2.20	0.42
1:A:1830:VAL:O	1:A:1834:LEU:HG	2.19	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:2489:ILE:HD11	1:A:2506:LEU:HD13	2.02	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:4045:LEU:O	1:A:4048:ILE:HG22	2.20	0.42
1:A:2053:PHE:HB2	1:A:2219:VAL:HB	2.02	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3534:LEU:HD12	1:A:3618:TYR:CZ	2.52	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: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:1898:LEU:HD11	1:A:1908:LEU:CD2	2.50	0.41
1:A:3612:ASP:C	1:A:3615:VAL:HG22	2.41	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:2786:ILE:HD12	1:A:3460:PRO:HG2	2.02	0.41
1:A:3365:ARG:HD2	1:A:3368:ASP:OD2	2.19	0.41
1:A:1965:HIS:HD2	1:A:2212:LEU:HD21	1.85	0.41
1:A:2034:ILE:HD12	1:A:2061:TYR:CE2	2.55	0.41
1:A:3808:LYS:HA	1:A:3808:LYS:HD3	1.89	0.41
1:A:2109:LEU:HB3	1:A:2113:SER:HB2	2.03	0.41
1:A:2420:PRO:HD3	1:A:2536:ASN:HD21	1.85	0.41
1:A:2512:LYS:O	1:A:2513:GLN:CB	2.66	0.41
1:A:3544:LYS:HE3	1:A:3607:PHE:CD1	2.55	0.41
1:A:3799:LYS:HG3	1:A:3803:LEU:HD11	2.03	0.41
1:A:2276:LEU:HD21	1:A:2415:ILE:HG21	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:4020:ASN:ND2	1:A:4028:ARG:HD3	2.35	0.41
1:A:1702:LEU:HA	1:A:1702:LEU:HD23	1.86	0.41
1:A:2225:LYS:HG2	1:A:2229:LEU:HD12	2.02	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:2766:LYS:CE	1:A:2890:THR:HB	2.39	0.41
1:A:2852:LEU:HG	1:A:2856:LEU:HD13	2.03	0.41
1:A:2891:ILE:HD11	1:A:2903:ILE:HD11	2.03	0.41
1:A:2985:ASN:N	1:A:2986:PRO:CD	2.84	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:3413:HIS:O	1:A:3417:VAL:HG23	2.21	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:4033:LEU:CD1	1:A:4035:GLN:H	2.34	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:2977:TYR:HD1	1:A:2981:LYS:HG3	1.86	0.40
1:A:3590:LEU:HD12	1:A:3593:GLU:HB2	2.02	0.40
1:A:2175:ILE:HG13	1:A:2184:LEU:C	2.42	0.40
1:A:2229:LEU:HD11	1:A:2285:GLU:HG3	2.02	0.40
1:A:2488:GLU:HB3	1:A:2491:LEU:CG	2.51	0.40
1:A:3330:TYR:CZ	1:A:3346:LEU:HD13	2.55	0.40
1:A:1794:PHE:CD1	1:A:1802:LYS:HB3	2.56	0.40
1:A:2332:GLY:HA2	1:A:2335:GLN:CG	2.52	0.40
1:A:2336:ARG:HG2	1:A:2355:ASP:CG	2.41	0.40
1:A:2761:ALA:O	1:A:2892:CYS:CB	2.69	0.40
1:A:2819:GLU:HB3	1:A:2891:ILE:HG22	2.03	0.40
1:A:3570:LEU:HD23	1:A:3580:ASN:CG	2.41	0.40
1:A:3813:ILE:HG22	1:A:3840:LEU:HD23	2.04	0.40
1:A:3951:SER:HB3	1:A:4003:ASP:OD2	2.22	0.40
1:A:2039:LYS:HG2	1:A:2049:MET:HG3	2.03	0.40
1:A:2581:LEU:HD13	1:A:2633:ILE:HG22	2.03	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:3832:SER:O	1:A:3836:GLY:N	2.45	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%)	41 77

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%)	36 59

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

Sometimes 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 [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 monosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

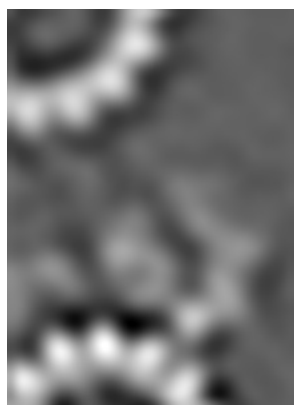
5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

6 Tomogram visualisation [i](#)

This section contains visualisations of the EMDB entry EMD-5757. These allow visual inspection of the internal detail of the tomogram and identification of artifacts.

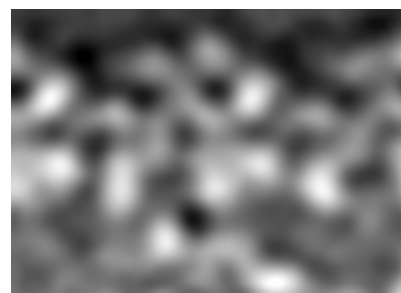
6.1 Orthogonal projections [i](#)



X



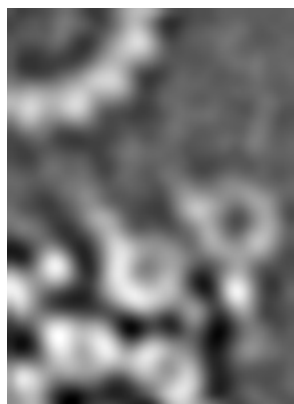
Y



Z

The images above show the tomogram projected in three orthogonal directions.

6.2 Central slices [i](#)



X Index: 25



Y Index: 18



Z Index: 25

The images above show central slices of the tomogram in three orthogonal directions.

6.3 Largest variance slices [i](#)



X Index: 29



Y Index: 16



Z Index: 7

The images above show the largest variance slices of the tomogram in three orthogonal directions.

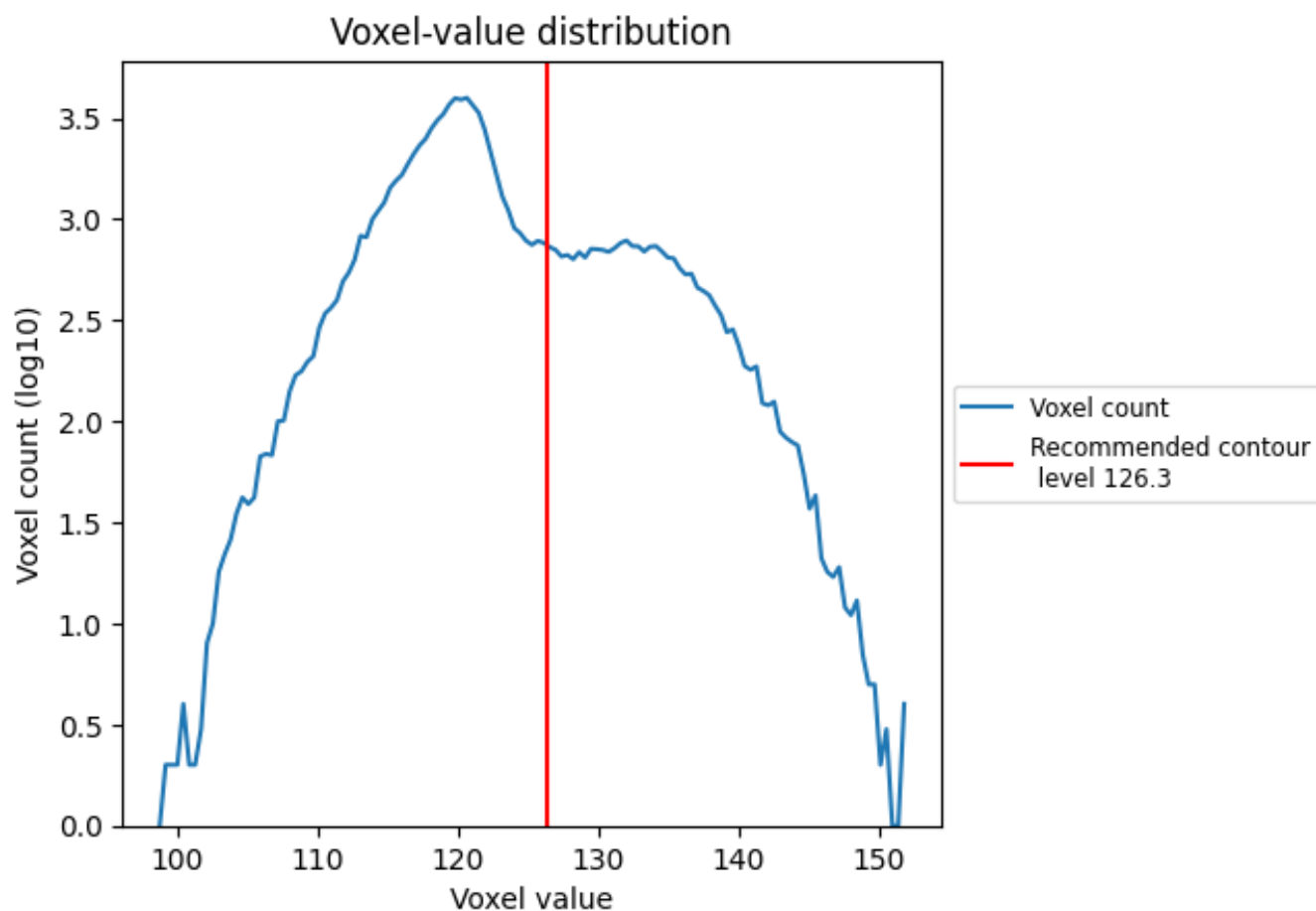
6.4 Mask visualisation [i](#)

This section was not generated. No masks/segmentation were deposited.

7 Tomogram analysis [i](#)

This section contains the results of statistical analysis of the tomogram.

7.1 Voxel-value distribution [i](#)



The voxel-value distribution is plotted in 128 intervals along the x-axis. The y-axis is logarithmic.

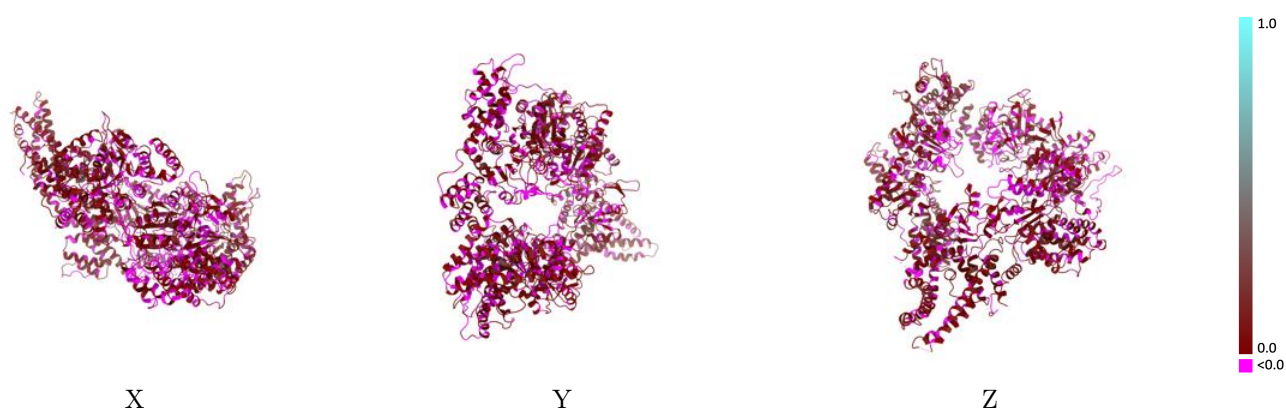
8 Map-model fit [i](#)

This section contains information regarding the fit between EMDB map EMD-5757 and PDB model 3J67. Per-residue inclusion information can be found in section 3 on page 4.

8.1 Map-model overlay [i](#)

This section was not generated.

8.2 Q-score mapped to coordinate model [i](#)

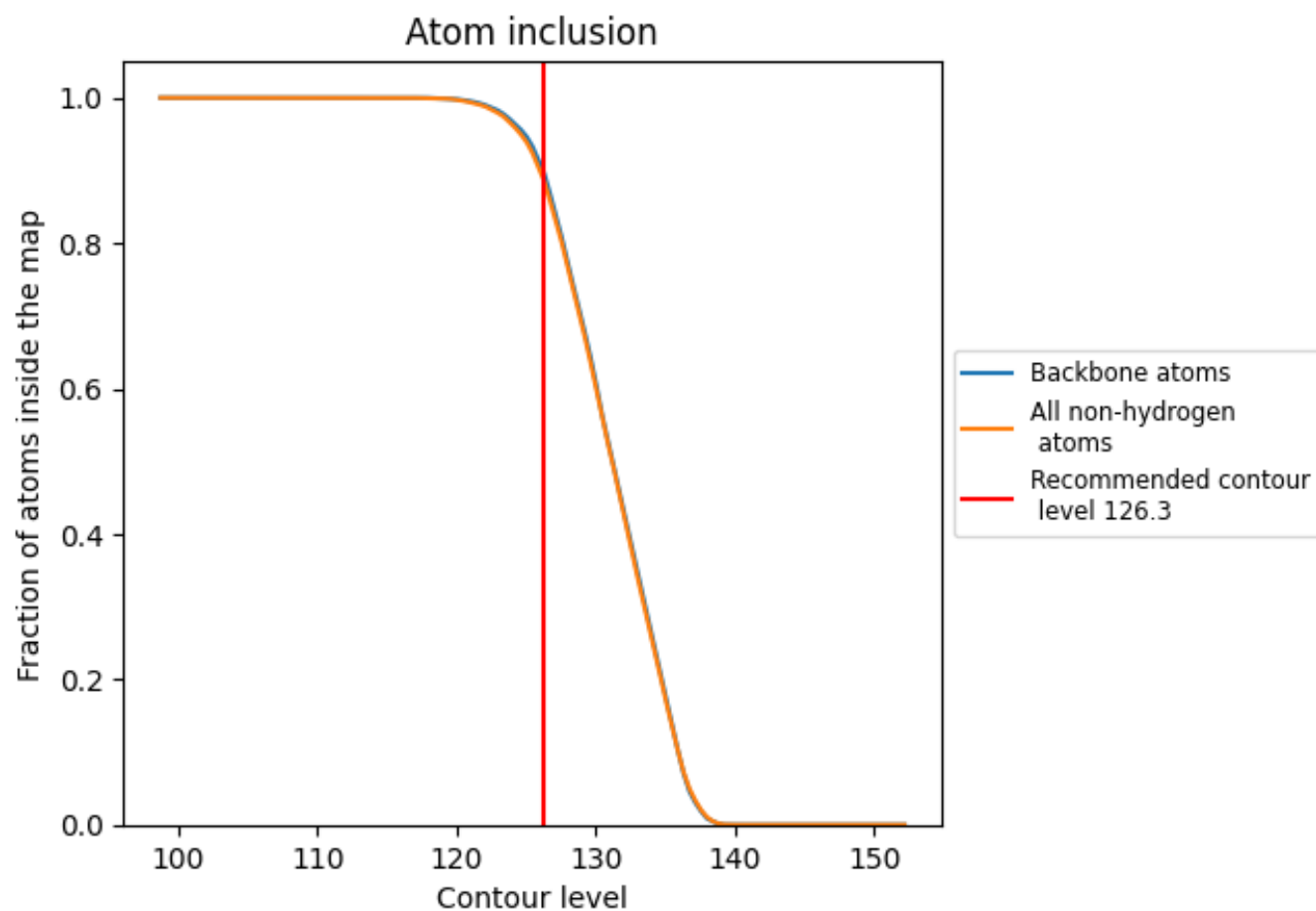


The images above show the model with each residue coloured according to its Q-score. This shows their resolvability in the map with higher Q-score values reflecting better resolvability. Please note: Q-score is calculating the resolvability of atoms, and thus high values are only expected at resolutions at which atoms can be resolved. Low Q-score values may therefore be expected for many entries.

8.3 Atom inclusion mapped to coordinate model [i](#)

This section was not generated.

8.4 Atom inclusion [i](#)



At the recommended contour level, 90% of all backbone atoms, 89% of all non-hydrogen atoms, are inside the map.

8.5 Map-model fit summary ⓘ

The table lists the average atom inclusion at the recommended contour level (126.3) and Q-score for the entire model and for each chain.

Chain	Atom inclusion	Q-score
All	<div><div></div></div> 0.8854	<div><div></div></div> 0.0350
A	<div><div></div></div> 0.8854	<div><div></div></div> 0.0350

