

Full wwPDB X-ray Structure Validation Report (i)

Feb 21, 2024 - 06:46 PM EST

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 A user guide is available at https://www.wwpdb.org/validation/2017/XrayValidationReportHelp with specific help available everywhere you see the (i) 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 (1)) were used in the production of this report:

MolProbity	:	4.02b-467
Mogul	:	1.8.5 (274361), CSD as541be (2020)
Xtriage (Phenix)	:	1.13
EDS	:	2.36
buster-report	:	1.1.7(2018)
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
Refmac	:	5.8.0158
CCP4	:	7.0.044 (Gargrove)
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.36

1 Overall quality at a glance (i)

The following experimental techniques were used to determine the structure: $X\text{-}RAY \, DIFFRACTION$

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.



Motria	Whole archive	Similar resolution
Metric	$(\# {\rm Entries})$	$(\# { m Entries}, { m resolution} { m range}({ m \AA}))$
R _{free}	130704	1486 (3.50-3.34)
Clashscore	141614	1572(3.50-3.34)
Ramachandran outliers	138981	1534 (3.50-3.34)
Sidechain outliers	138945	1535 (3.50-3.34)
RSRZ outliers	127900	1395 (3.50-3.34)

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 of the lower 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 <=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 cha	ain	
1	٨	9450	2%		
	А	3450	59%	27%	• 13%

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	А	4401	-	-	Х	-



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		At	oms			ZeroOcc	AltConf	Trace
1	А	3005	Total 22697	C 14414	N 3922	O 4263	S 98	0	0	0

There are 6 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
А	1089	GLY	-	linker	UNP Q8NCM8
А	1090	SER	-	linker	UNP Q8NCM8
А	1413	ARG	LYS	variant	UNP Q8NCM8
А	2871	GLN	ARG	variant	UNP Q8NCM8
А	3680	VAL	ALA	variant	UNP Q8NCM8
А	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		A	ton	ns			ZeroOcc	AltConf
2	А	1	Total 32	C 10	N 5	0 14	Р 2	V 1	0	0

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

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

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



Mol	Chain	Residues		Ate	oms			ZeroOcc	AltConf
4	Λ	1	Total	С	Ν	Ο	Р	0	0
4	A	1	31	10	5	13	3	0	0

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





Mol	Chain	Residues		Ate	oms			ZeroOcc	AltConf
Б	Δ	1	Total	С	Ν	Ο	Р	0	0
0	D A	1	27	10	5	10	2	0	0
F	Δ	1	Total	С	Ν	Ο	Р	0	0
0	A		27	10	5	10	2	0	



3 Residue-property plots (i)

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 electron 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 dot above a residue indicates a poor fit to the electron density (RSRZ > 2). 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: Green fluorescent protein/Cytoplasmic dynein 2 heavy chain 1





4RH7

S1723	F1728	V1729	G1730 L1731	V1732	W1737	G1738	C1739 F1740	D1741	E1742	F1743 N1744	R1745	L1746 F1747	E1748	S1749 V1760	L1751	S1752	I1758	V1781		N1784	I1787	F1788 T1780	T1790	M1791 N1792		G1795 K1796	G1797	61799	G1800 R1801	Q1802	K1803 L1804	P1805		Q1810	L1811 F1812	R1813 P1814	V1815 A1816	M1817 S1818
H1819	P1820 D1821	N1822	E1823 L1824	11825	V1828	I1829	S1832		F1 <mark>835</mark>	F1849	-	L1855	<mark>զ1859</mark>	Q1860 H1861	Y1862	D1863 W1864	G1865	L1866 R1867	A1868	L1869	L1879	01887	2001h	E1894 S1895	H1896	I1897	01900	A1901 L1902	T1906	M1907	X1908 K1909	F1910	C1915	17 1 1 1 1 1		V1925 F1926	11929	E1938
L1939	L1943	K1944	I 1955	P1956	A1962	L1963	E1964 L1965		M1973	11977		P1980	G1982	A1983	S1986	T1987 L1988	W1989	R1003	A1994	A1995 11996	C1997	K1998 T1000	G2000	K2001 V2002	V 2003	K2004 Q2005	Y2006	12001	K2011	L2019	W2029	S2030	TCOZI	T2035	A2038	V2041	P2045	V2048
S2049	52050 W2051	12052	D2055		E2065 S2065	L2066	N2067	L2070	D2071	D20/2 N2073	R2074	L2075	T2077	M2078	12013	E2082 R2083		F2092	E2095	A0105	00174	R2109	M2112	I2113 F2114	L2115	S2116	L2130	N2132	Q2133 P2134	A2135	E2130 Y2137	R2138	E2142		A2152 L2153	Q2154 W2155	V2156 L2157	Y2162
V2163	V2164 E2165	T2166	S2167 L2168	V2169	$\frac{62170}{T2171}$	V2172	M2173 N2174	G2175		H21/8	H2185	D2186 F2187	F2188	12189 12190	12130 N2191	L2192 T2193		L2196	N2199	L2200 N2201		R2205	F2208	T2209	V2212	F2213 H2214	W2215	01778	S2219	F223	47774	Y2230	R2235	G2236	K223/ L2238	A2239 T2240	Y2241 V2242	E2247
D2248	L.2249	D2253	F2254 S2255	N2256	G2257 L2258		P2261 V2262	I2263	02264 00001	1'2265 P2266	D2267	M2268 02269	R2270	VLCCA	F2275	K2276 P2277		K2284	F2287	12288	P2292	E2293	C2295	G2296 K2297		L2301	<mark>գ2307</mark>	S2310	T2311 02312		C2318 S2319	A2320	T2322	1000	L232/ L2328	C2335	12338	V2345
Y2346	r234/ P2348		C2351 E2352	R2353	L2354 V2355	L2356	Y2357 L2358	K2359	D2360	12361 N2362	L2363	P2364 K2365	L2366	D2367	V2375	1.0378		L2382 T7383	Y2384	D 2380	E2390	N2391 1 2302	E2393	10340F	L2397	E2398 N2399	12400	42401 12402	M2406	20411	K2411	R2414 U2415	K2416		K2420 F2421	12424	V2425 R2426	L2427 C2428
S2429	12430 D2431	Y2432	R2435		12441 Y2442	G2443	A2444 Y2445	L2446	E2447	P2448 V2449	L2450	N2453		12459 112460	G2461	S2462	K2465	1.7468	L2469	M2773		V2486	T2495	P2496	12498	W2502	V2503	7200 4	D2510 L2511	E2612	N2517	H2518 D2510	L2520	D2521	V2523	L2524	V2527 A2528	Y2529 E2530
A2531	R2533 R2533	L2534	F2535 R2536		E2544 L2545		F2548 D2549	12550	I2551	L2552 T2553	-	Q2557	W2560	TJERA	1200 1 L2565	D2566	D2570	VOE73	V2574	T2575 10576	G2577	A2578 B2570	H2580	0.05.83	ALA	ARG ALA	A2587	<mark>Q2590</mark>	P2591 L2592	P2693	P2594 H2595	G2596 V7507	16020	K2601	T.2002	D2606 L2607	V2610	L2615
	L2625 D2626	12627	L2628 L2629		E2632 V2633	L2634	E2635	R2639		K2642 V2643	L2644	S2645	<mark>\$2650</mark>	L2651 17657	L2653	ROGEG	S2657	G2658 V7659	G2660	R2661 R7667	T2663	12664 T7665		V2668	L2676	R2683	G2684 W0665	12000	Q2689 F2690			E2704	g2706	q2707	L2711	L2712	F2717 V2718	H2719 P2720
	P.5/23	L2730	Y2739		L2744 E2745	P2746	L.2749	P2750		V2/64 F2765	N2766	Y2767 F7768	T2769	Y2770	12772	02773		M2782 D2783		K2802 C2803	Q2804	V 2805 1 2806		G2810 W2811	S2812	M2816		P2820	E2821 M2822	L2823	E2826	THR	GLY	GLY	LYS	TYR ASN	ASP LYS	LYS ARG
LYS	GLU	LYS	LYS	ASN	SER V2847	D2848	P2849 D2850	F2851	L2852	L2856	L.2857	I 2858	S2861	A 7867	T2868	P2869 S2870	Q2871	F.0876		R2893	G2900	V2901	7	E2906	K2908	A2909 L2910	V2911	77877	N2915	A2918	67.67.9	S2922	D2933	A2934	A2935 L2936	Q2937	I2939 • T2940	V2941 • S2942 •
M2943	12945	42946 •	52947	12949	K2950	52952	L2953	12956		12962	V2964	V2965	72975	10010	6 6 6 7	3 3019	13025	13037		<mark>L3067</mark>	(3071	3076		K3080	<u>13087</u>	(3099	00	103	N3119 • 3120	K3121	K3122	E3124	13126	K3127	K3129	L3130 • 53131 •	E3132 •	L3134 • V3135 •
S3136	V313/ G3138	Q3139	K3140 V3141	S3142	E3143	K3145	S3153	E3154	A3155	A3156	E3159	Т3168		R3185 112186	N3187	A3188 03189		I3193	L3197	1 3000	P3201	K3202	L3206	T3010	Y3213	L3214 S3215	A3216	P3216	E3219 S3220	L3221	K32.22	T3230	L3235		13239 D3239	L3240 R3241	R3242 F3243	L3244 C3245



01 01 01 01	53248 E3249	-	13252	E3256		D3261 D3262		V3270	13271 L3272	Q3273	0400H	C3277	P3278	F3279	L3280 T3281	10201	<mark>53285</mark>		E3289	W3290	L3291	K3292	H3294	L3295	K3296	53298 S3298	R3299	L3300	Q3305	0000	N3309	F3320	G3321 K3322	T3323	L3324	13326 13326		L3336	Y3337 P3338		D3343	03347	V3352
	D335/	N3363	Joo Con	r 3367 R3367	L3368	F3369 1.3370	S3371	T3372	K3373 N3374	P3375	N3376	F3378	I3379	P3380	A 3383	A3384	<mark>S3385</mark>	I3386	T3388		N3391	63307		Q3448	T 3/ E 1	TOTOT	D3486	D3490	A3491	Y3492	L3493 P3494	L3495	A 34 99	-	M3502	T3505		S3510	K3511 I3512	N3513	N3514 M3515	Y3516	F3518
	97.92H	N3533	Do E Se		R3543	13544 03545		I3548	L3551	<mark>Q3552</mark>		00000	C3560			D3567		M3570	TICCI	F3575	V3576	R3577	M3579	H3580	P3581 53587	L3583	F3584	Q3585 F.3586	N3587	E3588	N3589 D3590	T3591	V3595	VAL	VAL	GLY ASP	MET	LEU	LYS	ALA	ASP SER	GLN	LYS
ILE	AKG D3612		E3621	K3022	L3629	A3632	L3633	P3634	53035 L3636		T3639	C3641	F3642		M3048	Y3652	N3653	N3654	C3657	E3658		P3662	K3667		S3670	F3672	q3673	Q3674 T3675	L3676	V3677	V3680	L3681	K3682	R3685	L3686	43687 \$3688	A3689	M3690	F3693		K3701	P3705	L3710
K3711	L3718	E3719	13720 E3704	T2/21	<mark>G3730</mark>	A3731 D3732	P3733		P3/30	L3740			M3755	G3756	D3760	A3760	D3761	L3762	A3771		<u>W3776</u>	<u>13780</u>	N3781		V3785	W3788	L3789	P3790 V3791	L3792	E3793	K3/94	K3802	F3805	-	T3810	H3814	P3815		P3819 13820	L3821	L3822	L3826	T3829
Y3830	F3831	L3836	K3837	L3840	M3841	R3842 T3843	Y3844		W384/	K3854	1001	13858 T3858	H3859	R3860	1 3864	-	H3871		430/3 E3876	R3877		13881 D3887	2000-1	W3885	A3000	000601	13903	D3904 R3905	L3906	F3907	03909 (3300	A3910	K3911	03914	W3915	E3916 F3917	V3918	H3919	63920 L3921	L3922	A3925		62828
D3932	V3933 Y3934	-	V3939	Y3943	L3944	V3952	I 3953	ASP	VAL PHE	ASN	GLN	ASN	LYS	LYS	NEK T306A	F3965	P3966		83970 S3970		C3975	S3976	13984		E3989	D3991		F3996	P3999	A4000	14001 14002		4 4007	04017	, , ,	64022	R4023	S4024	14025 T4026	A4027	G4028 S4029	K4030	r 4031 D4032
R4033	E4034	<mark>\$40</mark> 37	N4038	E4039 L4040	S4041	P4042 V4043		L4046	N4051	Q4052	N4053	54054 N4055	L4056	14057	14079	L4073	S4074	F4075	14070	L4078	E4079	Q4080	V4090		L4094	L4097		V4100	T4105	L4106	V4111		L4118	P4124		M41.2/	P4134	10	P413/ L4138	Q4139	Y4140	R4147	A4148 L4149
A4150	14151 04152	N4153	W4154	K4157		L4164 S4165	E4166	T4167	S4171	E4172			L4180	t t	R4184	E4186	T4187	A4188	G4192	R4193		K4199 EA200	V4201	A4202	54203 144204	1077M	L4208	04214	14215	K4216		L4220	L4221 L4222	E4223	G4224	C4.225 S4.726	F4227	D4228	G4229 N4230	Q4231	L4232	04236	L4 23 / D4 238
S4239	P4240 S4241	-	V4245	L4246 P4247	C4248	F4249	W4252	I4253	P4254 04255		E4265	C4260 I4267	S4268	L4269	V4270 VA271	TITA	V4281	T4282	N4203 14284	D4285	V4286	P4287	G4289 G4289	G4290	N4291	u=1293 D4293	Q4294	W4295 T4296	Q4297	C4298	L4302	F4303	L4304 K4305	N4306	Q4307	V4308							



4 Data and refinement statistics (i)

Property	Value	Source
Space group	C 2 2 21	Depositor
Cell constants	136.03Å 487.15Å 276.46Å	Depositor
a, b, c, α , β , γ	90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
$Resolution(\AA)$	56.60 - 3.41	Depositor
Resolution (A)	56.54 - 3.41	EDS
% Data completeness	62.2(56.60-3.41)	Depositor
(in resolution range)	62.2(56.54-3.41)	EDS
R _{merge}	(Not available)	Depositor
R_{sym}	0.10	Depositor
$< I/\sigma(I) > 1$	$1.49 (at 3.40 \text{\AA})$	Xtriage
Refinement program	REFMAC 5.8.0073	Depositor
D D .	0.237 , 0.285	Depositor
n, n_{free}	0.239 , 0.284	DCC
R_{free} test set	3915 reflections $(5.02%)$	wwPDB-VP
Wilson B-factor $(Å^2)$	108.2	Xtriage
Anisotropy	0.050	Xtriage
Bulk solvent $k_{sol}(e/A^3), B_{sol}(A^2)$	0.25 , 110.4	EDS
L-test for $twinning^2$	$ < L >=0.44, < L^2>=0.27$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.92	EDS
Total number of atoms	22816	wwPDB-VP
Average B, all atoms $(Å^2)$	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.

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



¹Intensities estimated from amplitudes.

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: ADP, MG, AOV, ATP

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).

Mal	Chain	Bo	nd lengths	Bo	ond angles
	Chain	RMSZ	# Z > 5	RMSZ	# Z > 5
1	А	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	А	0	6

All (2) bond length outliers are listed below:

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

All (5) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Ζ	$\mathbf{Observed}(^{o})$	$Ideal(^{o})$
1	А	2426	ARG	NE-CZ-NH1	-5.89	117.35	120.30
1	А	2275	PHE	CB-CA-C	-5.82	98.76	110.40
1	А	1915	CYS	CA-CB-SG	5.68	124.22	114.00
1	А	4253	ILE	CB-CA-C	-5.50	100.59	111.60
1	А	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	А	2238	LEU	Peptide
1	А	2247	GLU	Peptide
1	А	2275	PHE	Peptide
1	А	2310	SER	Peptide
1	А	2416	LYS	Peptide
1	А	2659	VAL	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	А	22697	0	21503	995	0
2	А	32	0	12	12	0
3	А	2	0	0	0	0
4	А	31	0	12	4	0
5	А	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



		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (Å)	overlap (Å)
1:A:2660:GLY:HA3	5:A:4406:ADP:O1A	1.34	1.21
1:A:2592:LEU:HD21	1:A:2707:GLN:OE1	1.37	1.19
1:A:4054:SER:HB3	1:A:4057:ILE:CD1	1.71	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:1584:PRO:HB2	1:A:1587:THR:CG2	1.98	0.92



		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (Å)	overlap (Å)
1:A:4100:VAL:CG1	1:A:4105:THR:HG21	1.98	0.92
1:A:4171:SER:CB	1:A:4308:VAL:O	2.16	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:1662:LEU:HD11	1:A:1697:GLU:HB3	1.54	0.90
1:A:2284:LYS:HE2	1:A:2401:GLN:HG3	1.51	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:1674:THR:HG22	1:A:3925:ALA:HA	1.54	0.88
1:A:3291:LEU:C	1:A:3294:HIS:CE1	2.46	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:2510:ASP:O	1:A:2522:TYR:OH	1.96	0.83
1:A:4171:SER:C	1:A:4308:VAL:O	2.16	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:2004:LYS:HG3	1:A:2006:TYR:HE1	1.41	0.82
1:A:2811:TRP:HB2	1:A:2816:MET:HE2	1.61	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



<u> </u>	A 4 9	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	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:1715:CYS:SG	1:A:1743:PHE:HA	2.22	0.79
1:A:4100:VAL:CG1	1:A:4105:THR:CG2	2.57	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:3512:ILE:HG23	1:A:4021:LEU:CD2	2.16	0.76
1:A:4171:SER:CA	1:A:4308:VAL:O	2.33	0.76
1:A:4304:LEU:HD12	1:A:4305:LYS:N	2.00	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:1583:ASP:N	1:A:1584:PRO:HD2	2.02	0.73
1:A:1696:THR:OG1	2:A:4401:AOV:O2B	2.05	0.73
1:A:2659:VAL:CB	1:A:2811:TRP:NE1	2.41	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



		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	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:1279:ILE:HD12	1:A:1293:LYS:HG3	1.71	0.71
1:A:1514:LEU:CD1	1:A:1534:PHE:CE1	2.74	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: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:3512:ILE:HD12	1:A:3513:ASN:HB2	1.72	0.70
1:A:4100:VAL:HG12	1:A:4105:THR:HG23	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:N	1:A:1900:GLN:OE1	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:2274:TYR:CE2	1:A:2428:CYS:HB3	2.28	0.68
1:A:2284:LYS:CG	1:A:2401:GLN:HG3	2.22	0.68
1:A:4057:ILE:HD11	1:A:4152:GLN:HE22	1.57	0.68
1:A:1397:ILE:HD12	1:A:1398:ARG:N	2.09	0.67
1:A:1665:THR:OG1	1:A:1666:PRO:HD2	1.94	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:4046:LEU:HD11	1:A:4138:LEU:HD13	1.77	0.67
1:A:4222:LEU:HD23	1:A:4223:GLU:N	2.09	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
1:A:3877:ARG:CZ	1:A:3943:TYR:OH	2.42	0.67



		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	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:1514:LEU:HD12	1:A:1534:PHE:CE1	2.30	0.66
1:A:2473:MET:HE1	1:A:2502:TRP:CE2	2.12	0.66
1:A:3099:TYR:O	1:A:3103:LEU:N	2.29	0.66
1:A:4154:TRP:NE1	1:A:4172:GLU:OE2	2.28	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:2242:VAL:O	1:A:2269:GLN:NE2	2.28	0.66
1:A:2284:LYS:HG3	1:A:2401:GLN:CG	2.25	0.66
1:A:2265:THR:HB	1:A:2266:PRO:CD	2.26	0.66
1:A:2518:HIS:N	1:A:2519:PRO:HA	2.10	0.66
1:A:4171:SER:O	1:A:4308:VAL:O	2.13	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:1624:TRP:CD2	1:A:3917:PHE:HB3	2.31	0.66
1:A:3847:TRP:HH2	1:A:3900:TYR:CB	2.09	0.66
1:A:4051:ASN:OD1	1:A:4051:ASN:N	2.29	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:2212:VAL:HA	1:A:2215:TRP:HE3	1.62	0.65
1:A:4030:LYS:HB2	1:A:4034:GLU:CG	2.25	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:2292:PRO:O	1:A:2295:CYS:HB2	1.96	0.65
1:A:4307:GLN:HG3	1:A:4307:GLN:O	1.97	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:2168:LEU:O	1:A:2169:VAL:C	2.34	0.65
1:A:2354:LEU:HD23	1:A:2355:VAL:N	2.12	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:1584:PRO:HB2	1:A:1587:THR:HG21	1.77	0.64
1:A:2651:LEU:HD23	1:A:2653:LEU:HD21	1.78	0.64
1:A:2135:ALA:N	1:A:2138:ARG:CG	2.38	0.64
1:A:2442:TYR:O	1:A:2446:LEU:HB2	1.97	0.64
1:A:2473:MET:CE	1:A:2502:TRP:CD2	2.63	0.64



		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:2656:ARG:NH1	1:A:2783:ASP:OD1	2.31	0.64
1:A:1938:GLU:N	1:A:1938:GLU:OE2	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:1482:GLU:OE1	1:A:1658:ASN:ND2	2.32	0.63
1:A:3871:HIS:NE2	1:A:3875:GLN:OE1	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: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:4220:LEU:HB2	1:A:4245:VAL:HG13	1.80	0.62
1:A:3080:LYS:CB	1:A:3087:ALA:HB2	2.30	0.62
1:A:3374:ASN:HB2	1:A:3820:ILE:HD11	1.82	0.62
1:A:1715:CYS:O	1:A:1716:ASP:OD1	2.18	0.62
1:A:3836:LEU:HD23	1:A:3991:ASP:CB	2.30	0.62
1:A:4052:GLN:HA	1:A:4055:ASN:OD1	1.98	0.62
1:A:2660:GLY:HA3	5:A:4406:ADP:PA	2.38	0.62
1:A:2664:ILE:HD12	1:A:2664:ILE:N	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:1472:HIS:ND1	1:A:1490:VAL:O	2.33	0.61
1:A:2239:ALA:O	1:A:2240:THR:HG23	2.00	0.61
1:A:1645:VAL:HG12	1:A:1646:ASP:H	1.66	0.61
1:A:2597:LYS:HB2	1:A:2645:SER:HB3	1.82	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:1509:LYS:NZ	1:A:1512:GLU:OE1	2.34	0.61
1:A:3238:PHE:CZ	1:A:3243:PHE:HB2	2.36	0.61
1:A:3377:PRO:HB2	1:A:3378:PHE:CB	2.29	0.61
1:A:4030:LYS:HG3	1:A:4034:GLU:CD	2.16	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:2265:THR:HB	1:A:2266:PRO:HD2	1.83	0.60
1:A:2517:ASN:HB3	1:A:2519:PRO:HB3	1.82	0.60



		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:3374:ASN:HD22	1:A:3377:PRO:HD2	1.66	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:2288:ILE:HD11	1:A:2425:VAL:CG2	2.32	0.60
1:A:3292:LYS:O	1:A:3295:LEU:HB2	2.01	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:2363:LEU:N	1:A:2364:PRO:HD2	2.17	0.59
1:A:2659:VAL:HG22	1:A:2659:VAL:O	2.01	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:1943:LEU:HA	1:A:1995:ALA:HB2	1.85	0.59
1:A:2011:LYS:NZ	1:A:2367:ASP:OD2	2.33	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:2135:ALA:CA	1:A:2138:ARG:HB2	2.30	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:1747:GLU:HB3	1:A:1750:VAL:HG23	1.84	0.59
1:A:3512:ILE:CG2	1:A:4021:LEU:CD2	2.80	0.59
1:A:3844:TYR:HA	1:A:3847:TRP:HB2	1.85	0.58
1:A:3585:GLN:O	1:A:3585:GLN:NE2	2.36	0.58
1:A:4306:ASN:O	1:A:4307:GLN:HB3	2.03	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:1973:MET:SD	1:A:2074:ARG:NH1	2.77	0.58
1:A:2162:TYR:HB2	1:A:2199:ASN:O	2.03	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



	A L O	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:2544:GLU:OE1	1:A:2544:GLU:N	2.37	0.58
1:A:2676:LEU:O	1:A:2676:LEU:HD23	2.04	0.58
1:A:3877:ARG:NH1	1:A:3943:TYR:OH	2.37	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:2625:LEU:HB3	1:A:2627:ILE:HD13	1.85	0.57
1:A:2858:ILE:O	1:A:2861:SER:OG	2.16	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:1397:ILE:HD12	1:A:1398:ARG:H	1.69	0.57
1:A:1514:LEU:CD1	1:A:1534:PHE:HE1	2.16	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:1440:ILE:HD11	1:A:1453:HIS:CG	2.40	0.56
1:A:4220:LEU:HB3	1:A:4302:LEU:HD21	1.84	0.56
1:A:3921:LEU:HD23	1:A:3922:LEU:N	2.19	0.56
1:A:4054:SER:HB3	1:A:4057:ILE:CG1	2.34	0.56
1:A:1534:PHE:HB2	1:A:1539:LEU:HD11	1.86	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:3245:CYS:SG	1:A:3249:GLU:CB	2.93	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:1908:SER:N	1:A:1964:GLU:OE2	2.39	0.56
1:A:3291:LEU:O	1:A:3294:HIS:HE1	1.74	0.56
1:A:3864:LEU:HD23	1:A:3903:ILE:HD12	1.87	0.56
1:A:4164:LEU:HD13	1:A:4214:GLN:O	2.05	0.56
1:A:4204:TRP:CZ2	1:A:4248:CYS:SG	2.99	0.56
1:A:3249:GLU:N	1:A:3249:GLU:OE1	2.39	0.56
1:A:3577:ARG:O	1:A:3584:PHE:HZ	1.89	0.56
1:A:3580:HIS:O	1:A:3584:PHE:CE2	2.55	0.56
1:A:3591:THR:CG2	1:A:3632:ALA:HB1	2.36	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:4100:VAL:CB	1:A:4105:THR:HG23	2.35	0.56
1:A:2382:LEU:HD21	1:A:2402:ILE:HD13	1.87	0.55



	AL O	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:2810:GLY:O	1:A:2811:TRP:CD1	2.58	0.55
1:A:1282:GLU:HA	1:A:1287:ARG:O	2.06	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:2402:ILE:HD12	1:A:2402:ILE:N	2.21	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:3581:PRO:HB3	1:A:3584:PHE:HE1	1.69	0.55
1:A:1260:ILE:HD12	1:A:1317:TYR:HB2	1.87	0.55
1:A:1667:LEU:HD22	1:A:1819:HIS:O	2.06	0.55
1:A:4137:PRO:O	1:A:4140:TYR:HB3	2.07	0.55
1:A:2536:ARG:HG2	1:A:2545:LEU:HD22	1.88	0.55
1:A:3239:ASP:O	1:A:3242:ARG:HG2	2.06	0.55
1:A:3570:MET:SD	1:A:4017:GLN:HB3	2.47	0.55
1:A:2767:TYR:CE2	1:A:2771:ARG:HD2	2.42	0.55
1:A:3294:HIS:CE1	1:A:3295:LEU:HG	2.42	0.55
1:A:1694:GLY:HA3	2:A:4401:AOV:H8	1.89	0.55
1:A:2592:LEU:HD22	1:A:2645:SER:O	2.05	0.55
1:A:1408:LEU:HA	1:A:1411:CYS:SG	2.46	0.55
1:A:1716:ASP:CG	1:A:1745:ARG:HH22	1.97	0.55
1:A:2348:PRO:HB3	1:A:2354:LEU:HB2	1.88	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: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: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:1996:LEU:O	1:A:2000:GLY:N	2.36	0.54
1:A:2230:TYR:OH	1:A:2266:PRO:O	2.24	0.54
1:A:3991:ASP:N	1:A:3991:ASP:OD1	2.40	0.54
1:A:4051:ASN:O	1:A:4055:ASN:N	2.40	0.54
1:A:1925:VAL:HG23	1:A:1926:PHE:HD1	1.72	0.54
1:A:2167:SER:O	1:A:2168:LEU:C	2.43	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:1711:LEU:HD12	1:A:1731:LEU:HD21	1.89	0.54
1:A:3512:ILE:CG2	1:A:4021:LEU:HD21	2.38	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:1645:VAL:HG12	1:A:1646:ASP:N	2.23	0.53



A + 1	A t and D	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:2134:PRO:O	1:A:2135:ALA:HB3	2.08	0.53
1:A:3854:LYS:O	1:A:3857:ASN:HB3	2.07	0.53
1:A:1663:VAL:CG2	1:A:1829:ILE:HD11	2.38	0.53
1:A:3296:LYS:C	1:A:3298:SER:H	2.10	0.53
1:A:3750:TYR:HA	1:A:3776:TRP:O	2.08	0.53
1:A:4057:ILE:HD12	1:A:4149:LEU:CD2	2.35	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: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:2135:ALA:CA	1:A:2138:ARG:CB	2.56	0.53
1:A:2396:GLY:C	1:A:2397:LEU:HD22	2.28	0.53
1:A:2450:LEU:O	1:A:2453:ASN:O	2.27	0.53
1:A:3740:LEU:HD12	1:A:3740:LEU:O	2.07	0.53
1:A:4147:ARG:O	1:A:4151:ILE:HG12	2.08	0.53
1:A:4265:GLU:O	1:A:4288:CYS:N	2.35	0.53
1:A:1709:GLN:O	1:A:1709:GLN:HG3	2.09	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:1376:ARG:O	1:A:1379:MET:HB3	2.08	0.53
1:A:2041:VAL:CG2	1:A:2050:SER:CB	2.87	0.53
1:A:2249:LEU:HB2	1:A:2448:PRO:HG3	1.91	0.53
1:A:1590:GLY:C	1:A:1591:ILE:HG13	2.29	0.53
1:A:2660:GLY:HA2	5:A:4406:ADP:PB	2.49	0.53
1:A:3299:ARG:HH21	1:A:3322:LYS:HD3	1.73	0.53
1:A:3577:ARG:HA	1:A:3584:PHE:HE2	1.72	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:1343:ASN:OD1	1:A:1344:HIS:N	2.42	0.52
1:A:1472:HIS:HA	1:A:1490:VAL:O	2.10	0.52
1:A:1624:TRP:CZ2	1:A:3906:LEU:HD13	2.44	0.52
1:A:3212:THR:HG23	1:A:3213:TYR:CD2	2.44	0.52
1:A:3262:ASP:OD1	1:A:3262:ASP:N	2.42	0.52
1:A:1993:ARG:HB2	1:A:2003:VAL:HG11	1.92	0.52
1:A:2004:LYS:HE2	1:A:2006:TYR:OH	2.09	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
1:A:2848:ASP:N	1:A:2849:PRO:HD2	2.24	0.52
1:A:3296:LYS:HA	1:A:3300:LEU:HD21	1.92	0.52
1:A:4052:GLN:HA	1:A:4055:ASN:CG	2.29	0.52



		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:4188:ALA:O	1:A:4192:GLY:N	2.42	0.52
1:A:2650:SER:HB2	1:A:2803:CYS:HB3	1.91	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:1691:ALA:HB1	1:A:2105:ALA:HA	1.91	0.52
1:A:1908:SER:HB2	1:A:2113:ILE:HA	1.91	0.52
1:A:3324:LEU:HG	1:A:3325:ILE:N	2.25	0.52
1:A:3675:ILE:HD11	1:A:3693:PHE:HB2	1.92	0.52
1:A:4265:GLU:O	1:A:4288:CYS:HB3	2.09	0.52
1:A:1861:HIS:HB2	1:A:2112:MET:SD	2.50	0.52
1:A:2131:ARG:HA	1:A:2138:ARG:HH22	1.64	0.52
1:A:2254:PHE:O	1:A:2595:HIS:HE1	1.92	0.52
1:A:4046:LEU:CD1	1:A:4138:LEU:HD22	2.40	0.52
1:A:1631:ARG:O	1:A:1642:VAL:HG13	2.10	0.52
1:A:1811:LEU:HD12	1:A:1811:LEU:N	2.25	0.52
1:A:1896:HIS:CD2	1:A:1929:ILE:CG2	2.88	0.52
1:A:2254:PHE:O	1:A:2595:HIS:CE1	2.63	0.52
1:A:2486:VAL:HB	1:A:4106:LEU:HD21	1.91	0.52
1:A:2774:GLN:N	1:A:2774:GLN:OE1	2.42	0.52
1:A:3218:PRO:HD2	1:A:3221:LEU:HD12	1.92	0.52
1:A:3635:SER:O	1:A:3639:THR:HG23	2.09	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: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:2823:LEU:HD13	1:A:2826:GLU:OE1	2.09	0.51
1:A:3877:ARG:HB2	1:A:3885:TRP:CD1	2.46	0.51
1:A:3965:PHE:HB3	1:A:3966:PRO:CD	2.40	0.51
1:A:1285:GLN:O	1:A:1287:ARG:HG3	2.10	0.51
1:A:2133:GLN:O	1:A:2138:ARG:HD2	2.11	0.51
1:A:3380:PRO:HD2	1:A:3383:ALA:HB3	1.92	0.51
1:A:4100:VAL:CG1	1:A:4105:THR:HG23	2.35	0.51
1:A:2263:ILE:HD11	1:A:2444:ALA:HB3	1.93	0.51
1:A:3640:LEU:CD1	1:A:3648:TRP:CZ2	2.93	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:2592:LEU:HD11	1:A:2707:GLN:OE1	2.10	0.51



		Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:3577:ARG:NH2	1:A:3577:ARG:HB3	2.26	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:3586:GLU:O	1:A:3587:ASN:HB3	2.11	0.50
1:A:3640:LEU:HD12	1:A:3648:TRP:CZ2	2.46	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:2187:GLU:HG2	1:A:2191:ASN:OD1	2.11	0.50
1:A:3577:ARG:HB3	1:A:3577:ARG:CZ	2.42	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:1728:PHE:CZ	1:A:1758:ILE:HD11	2.47	0.50
1:A:1802:GLN:N	1:A:1802:GLN:OE1	2.45	0.50
1:A:2294:GLY:O	1:A:2496:PRO:HG2	2.11	0.50
1:A:3514:ASN:O	1:A:3515:MET:HB2	2.11	0.50
1:A:3881:ILE:CG2	1:A:3882:PRO:HA	2.41	0.50
1:A:3932:ASP:OD1	1:A:3932:ASP:N	2.45	0.50
1:A:3910:ALA:O	1:A:3911:LYS:HG3	2.12	0.50
1:A:1337:GLU:O	1:A:1341:ASN:ND2	2.45	0.50
1:A:2004:LYS:CE	1:A:2006:TYR:CZ	2.95	0.50
1:A:3291:LEU:HA	1:A:3294:HIS:ND1	2.27	0.50
1:A:4227:PHE:CD2	1:A:4232:LEU:CD2	2.94	0.50
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: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:1388:VAL:HG13	1:A:1389:THR:N	2.27	0.49
1:A:2318:CYS:HB2	1:A:2360:ASP:O	2.12	0.49
1:A:2363:LEU:N	1:A:2363:LEU:HD22	2.27	0.49
1:A:2769:THR:HA	1:A:2772:ILE:HD12	1.94	0.49
1:A:1582:GLU:C	1:A:1584:PRO:HD2	2.33	0.49
1:A:3291:LEU:CA	1:A:3294:HIS:ND1	2.75	0.49
1:A:2045:PRO:O	1:A:2048:VAL:HG22	2.13	0.49
1:A:2173:MET:HB3	1:A:2426:ARG:NH1	2.27	0.49



A + 1	A t and D	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:3922:LEU:C	1:A:3922:LEU:HD13	2.32	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: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: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:1879:LEU:O	1:A:1882:GLN:N	2.43	0.49
1:A:1896:HIS:O	1:A:1900:GLN:OE1	2.30	0.49
1:A:2284:LYS:CE	1:A:2401:GLN:CA	2.91	0.49
1:A:2683:ARG:NH2	1:A:3305:GLN:O	2.46	0.49
1:A:3587:ASN:OD1	1:A:3590:ASP:CG	2.51	0.49
1:A:3674:GLN:O	1:A:3677:VAL:HB	2.13	0.49
1:A:2175:GLY:HA2	1:A:2196:LEU:HD23	1.93	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:1695:LYS:NZ	2:A:4401:AOV:O1G	2.44	0.49
1:A:2223:PHE:CE2	1:A:2224:HIS:HB2	2.47	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:2051:TRP:C	1:A:2052:ILE:HD13	2.34	0.49
1:A:2530:GLU:O	1:A:2531:ALA:C	2.51	0.49
1:A:2819:ILE:HB	1:A:2820:PRO:HD3	1.95	0.49
1:A:3300:LEU:HA	1:A:3323:THR:O	2.13	0.49
1:A:1514:LEU:HD11	1:A:1534:PHE:CE1	2.47	0.48
1:A:1696:THR:HA	1:A:1790:THR:HG21	1.95	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:3577:ARG:HA	1:A:3584:PHE:CE2	2.48	0.48
1:A:2579:ARG:C	1:A:2580:HIS:CD2	2.87	0.48
1:A:4171:SER:OG	1:A:4308:VAL:HG12	2.13	0.48
1:A:2041:VAL:HG21	1:A:2050:SER:CB	2.43	0.48
1:A:2284:LYS:HZ1	1:A:2401:GLN:N	2.11	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:1516:LYS:HD3	1:A:1638:HIS:HB3	1.94	0.48
1:A:1939:LEU:O	1:A:1939:LEU:HD23	2.14	0.48
1:A:2396:GLY:O	1:A:2397:LEU:HD22	2.13	0.48
1:A:4030:LYS:HB2	1:A:4034:GLU:CD	2.34	0.48



	A L O	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:4222:LEU:HD22	1:A:4225:CYS:O	2.13	0.48
1:A:1276:PHE:HE1	1:A:1388:VAL:HA	1.79	0.48
1:A:1280:ASP:HA	1:A:1289:MET:O	2.13	0.48
1:A:2723:LEU:N	1:A:2723:LEU:HD22	2.29	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:3291:LEU:O	1:A:3295:LEU:HG	2.14	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: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:2284:LYS:HD2	1:A:2353:ARG:HH12	1.79	0.48
1:A:3296:LYS:HD2	1:A:3296:LYS:O	2.14	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:1716:ASP:OD2	1:A:2065:SER:CA	2.57	0.47
1:A:1879:LEU:HD23	1:A:1879:LEU:N	2.29	0.47
1:A:2168:LEU:O	1:A:2171:THR:OG1	2.26	0.47
1:A:2345:VAL:HG21	1:A:2398:GLU:HB2	1.96	0.47
1:A:2625:LEU:HD22	1:A:2627:ILE:CD1	2.44	0.47
1:A:3219:GLU:N	1:A:3219:GLU:OE1	2.47	0.47
1:A:3238:PHE:N	1:A:3242:ARG:HH21	2.12	0.47
1:A:3256:GLU:OE1	1:A:3290:TRP:NE1	2.47	0.47
1:A:1987:THR:O	1:A:1988:LEU:C	2.49	0.47
1:A:2235:ARG:HB3	1:A:2237:ARG:CG	2.44	0.47
1:A:2848:ASP:N	1:A:2849:PRO:CD	2.77	0.47
1:A:3629:LEU:HD22	1:A:3680:VAL:HG21	1.95	0.47
1:A:3966:PRO:HB2	1:A:3969:VAL:CG1	2.43	0.47
1:A:4270:PRO:HA	1:A:4283:ASN:HB3	1.97	0.47
1:A:1902:LEU:HD21	1:A:1918:PHE:HZ	1.78	0.47
1:A:2208:PHE:O	1:A:2209:THR:C	2.51	0.47
1:A:2238:LEU:HD22	1:A:2238:LEU:N	2.28	0.47
1:A:2230:TYR:N	1:A:2239:ALA:HB1	2.28	0.47
1:A:2632:GLU:OE2	1:A:2812:SER:N	2.48	0.47
1:A:2643:VAL:HG11	1:A:2651:LEU:HD11	1.96	0.47



	A h o	Interatomic	Clash	
Atom-1	Atom-2	distance (Å)	overlap (Å)	
1:A:2659:VAL:CG2	1:A:2811:TRP:CD1	2.95	0.47	
1:A:2704:GLU:O	1:A:2705:ALA:HB3	2.14	0.47	
1:A:3640:LEU:CD1	1:A:3642:PHE:CE1	2.96	0.47	
1:A:3877:ARG:HH22	1:A:3996:PHE:HA	1.80	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:1643:GLN:HG3	1:A:1647:SER:O	2.14	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:4033:ARG:O	1:A:4037:SER:N	2.46	0.47	
1:A:1746:LEU:HB3	1:A:1751:LEU:HD21	1.96	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:3197:LEU:C	1:A:3197:LEU:HD12	2.35	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:2764:VAL:O	1:A:2767:TYR:HB3	2.14	0.47	
1:A:3291:LEU:CD1	1:A:3294:HIS:HE1	2.23	0.47	
1:A:1732:VAL:HB	1:A:1781:VAL:HG23	1.96	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:2639:ARG:O	1:A:2643:VAL:HG23	2.14	0.47	
1:A:3357:ASP:N	1:A:3357:ASP:OD1	2.48	0.47	
2:A:4401:AOV:O2B	2:A:4401:AOV:O4G	2.33	0.47	
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:2004:LYS:CG	1:A:2006:TYR:CZ	2.98	0.46	
1:A:2019:LEU:O	1:A:2035:THR:HG21	2.14	0.46	
1:A:2076:LEU:HD12	1:A:2077:THR:N	2.31	0.46	
1:A:2166:THR:OG1	1:A:2171:THR:HG23	2.15	0.46	
1:A:2256:ASN:OD1	1:A:2257:GLY:N	2.48	0.46	
1:A:2297:LYS:HZ3	5:A:4405:ADP:PB	2.38	0.46	
1:A:3771:ALA:HA	1:A:3805:PHE:CD1	2.50	0.46	
1:A:1444:SER:HB3	1:A:1496:VAL:HG22	1.96	0.46	
1:A:2607:LEU:O	1:A:2610:VAL:N	2.48	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:1534:PHE:CB	1:A:1539:LEU:HD11	2.45	0.46	



	A h o	Interatomic	Clash	
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)	
1:A:2502:TRP:HE1	1:A:2531:ALA:HB2	1.81	0.46	
1:A:3864:LEU:HD21	1:A:3903:ILE:HG21	1.97	0.46	
1:A:1363:LYS:O	1:A:1366:THR:OG1	2.33	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:1411:CYS:SG	1:A:1412:GLN:N	2.89	0.46	
1:A:2284:LYS:HE3	1:A:2353:ARG:NH2	2.29	0.46	
1:A:2664:ILE:N	1:A:2664:ILE:CD1	2.78	0.46	
1:A:1518:CYS:HB2	1:A:1534:PHE:CZ	2.51	0.46	
1:A:1747:GLU:O	1:A:1750:VAL:HB	2.15	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:4229:GLY:O	1:A:4230:ASN:HB2	2.16	0.46	
1:A:1446:ASN:HB3	1:A:1449:VAL:HB	1.98	0.46	
1:A:1624:TRP:HB3	1:A:3917:PHE:CB	2.46	0.46	
1:A:1719:ILE:HG22	1:A:1723:SER:HB3	1.96	0.46	
1:A:2004:LYS:HG2	1:A:2006:TYR:CE1	2.47	0.46	
1:A:2077:THR:HA	1:A:2083:ARG:HG2	1.97	0.46	
1:A:2155:TRP:CZ3	1:A:2208:PHE:HB2	2.51	0.46	
1:A:2213:PHE:HB3	1:A:2219:SER:HA	1.98	0.46	
1:A:3563:LEU:HD11	1:A:3571:PHE:CD2	2.50	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:3216:ALA:O	1:A:3391:ASN:ND2	2.48	0.46	
1:A:3621:GLU:HG3	1:A:3622:ARG:H	1.81	0.46	
1:A:4057:ILE:CG2	1:A:4152:GLN:OE1	2.63	0.46	
1:A:2307:GLN:HA	1:A:2307:GLN:OE1	2.16	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:4199:LYS:HD2	1:A:4255:GLN:HG2	1.96	0.46	
1:A:1401:LEU:HA	1:A:1404:ILE:HD12	1.96	0.46	
1:A:1499:TRP:HZ3	1:A:1503:LEU:HD11	1.80	0.46	
1:A:1982:GLY:HA3	1:A:2169:VAL:HG21	1.98	0.46	
1:A:2134:PRO:HB2	1:A:2136:GLU:HG3	1.98	0.46	
1:A:2223:PHE:CG	1:A:2224:HIS:N	2.84	0.46	
1:A:3325:ILE:HG22	1:A:3326:ILE:N	2.30	0.46	
1:A:4177:ASP:OD1	1:A:4177:ASP:N	2.49	0.46	
1:A:2805:VAL:O	1:A:2806:LEU:HD23	2.17	0.45	
1:A:3701:LYS:HE2	1:A:3989:GLU:OE1	2.16	0.45	
1:A:2130:LEU:HD13	1:A:2142:GLU:HG2	1.97	0.45	



	A L O	Interatomic	Clash	
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)	
1:A:2292:PRO:HG2	1:A:2432:TYR:HE1	1.82	0.45	
1:A:2392:LEU:N	1:A:2392:LEU:HD12	2.31	0.45	
1:A:3292:LYS:O	1:A:3296:LYS:N	2.49	0.45	
1:A:3499:ALA:HA	1:A:3502:MET:HE2	1.98	0.45	
1:A:3512:ILE:HG23	1:A:4021:LEU:HD23	1.97	0.45	
1:A:3685:ARG:O	1:A:3686:LEU:C	2.53	0.45	
1:A:3819:PRO:HA	1:A:3822:LEU:HD12	1.98	0.45	
1:A:2311:THR:OG1	1:A:2312:GLN:N	2.50	0.45	
1:A:2447:GLU:N	1:A:2448:PRO:CD	2.78	0.45	
1:A:2650:SER:O	1:A:2803:CYS:HB2	2.16	0.45	
1:A:3299:ARG:NH2	1:A:3320:PHE:O	2.48	0.45	
1:A:3970:SER:O	1:A:3970:SER:OG	2.34	0.45	
1:A:4090:VAL:HG12	1:A:4094:LEU:HD12	1.97	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:2164:VAL:O	1:A:2166:THR:HG23	2.16	0.45	
1:A:3261:ASP:OD1	1:A:3262:ASP:N	2.50	0.45	
1:A:3272:LEU:C	1:A:3272:LEU:HD23	2.37	0.45	
1:A:3721:GLU:HG3	1:A:3826:LEU:HD11	1.98	0.45	
1:A:2235:ARG:HB3	1:A:2237:ARG:HG2	1.98	0.45	
1:A:2327:LEU:O	1:A:2328:LEU:C	2.53	0.45	
1:A:2460:TRP:HE1	1:A:2519:PRO:HB2	1.80	0.45	
1:A:2593:PRO:HG2	1:A:2597:LYS:HA	1.99	0.45	
1:A:2749:LEU:HB3	1:A:2750:PRO:HD3	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:4227:PHE:HD2	1:A:4232:LEU:CD2	2.28	0.45	
1:A:1601:LEU:HD21	1:A:1832:SER:HB3	1.99	0.45	
1:A:3577:ARG:O	1:A:3584:PHE:CZ	2.69	0.45	
1:A:4025:ILE:N	1:A:4025:ILE:CD1	2.79	0.45	
1:A:4097:LEU:HD13	1:A:4111:VAL:HG12	1.98	0.45	
1:A:1741:ASP:O	1:A:1742:GLU:CB	2.64	0.45	
1:A:2495:THR:HB	1:A:2496:PRO:HD2	1.99	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:1274:ALA:HB1	1:A:1388:VAL:CG1	2.47	0.45	
1:A:1624:TRP:CE3	1:A:3917:PHE:HB3	2.51	0.45	
1:A:1663:VAL:N	2:A:4401:AOV:N1	2.64	0.45	
1:A:1708:ARG:NH1	1:A:1784:ASN:O	2.49	0.45	
1:A:2651:LEU:HD12	1:A:2651:LEU:N	2.32	0.45	
1:A:4134:PRO:HG2	1:A:4140:TYR:HA	1.99	0.45	



Atom 1	Atom 2	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:1381:ASP:O	1:A:1385:ASP:HB3	2.17	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:4201:VAL:HG12	1:A:4202:ALA:H	1.81	0.45
1:A:1560:LEU:HD23	1:A:1560:LEU:HA	1.80	0.45
1:A:1787:ILE:O	1:A:1788:PHE:CD1	2.70	0.45
1:A:1820:PRO:O	1:A:1822:ASN:OD1	2.35	0.45
1:A:3368:LEU:HD23	1:A:3369:PHE:N	2.32	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:1315:SER:O	1:A:1318:TYR:HB3	2.17	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: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:2382:LEU:CD2	1:A:2402:ILE:HD13	2.47	0.44
1:A:2411:ARG:CB	1:A:2414:ARG:CZ	2.94	0.44
1:A:3200:LEU:N	1:A:3201:PRO:CD	2.80	0.44
1:A:3640:LEU:CG	1:A:3642:PHE:CZ	2.98	0.44
1:A:3732:ASP:HA	1:A:3733:PRO:HD3	1.81	0.44
1:A:3847:TRP:HH2	1:A:3900:TYR:CG	2.35	0.44
1:A:1547:PHE:O	1:A:1551:VAL:HG23	2.17	0.44
1:A:1550:ASP:O	1:A:1554:ALA:N	2.49	0.44
1:A:2004:LYS:CE	1:A:2006:TYR:OH	2.64	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:4001:ASN:ND2	1:A:4241:SER:HA	2.33	0.44
1:A:4057:ILE:HG12	1:A:4152:GLN:OE1	2.17	0.44
1:A:4134:PRO:CG	1:A:4140:TYR:HA	2.48	0.44
1:A:1278:LEU:HD12	1:A:1278:LEU:N	2.32	0.44
1:A:1444:SER:CB	1:A:1496:VAL:HG22	2.47	0.44
1:A:1591:ILE:HB	1:A:1592:LEU:HD12	1.98	0.44
1:A:1671:CYS:O	1:A:1675:LEU:HG	2.16	0.44
1:A:1699:VAL:HG11	1:A:1788:PHE:CD2	2.52	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:2503:VAL:HG13	1:A:2504:LEU:CD1	2.48	0.44
1:A:2711:LEU:O	1:A:2712:LEU:HD23	2.17	0.44
1:A:1862:TYR:CD2	1:A:1864:TRP:HH2	2.36	0.44
1:A:2002:VAL:HG12	1:A:2003:VAL:N	2.30	0.44
1:A:1401:LEU:HB2	1:A:1402:LEU:HD23	2.00	0.44



	AL O	Interatomic	Clash	
Atom-1	Atom-2	distance (Å)	overlap (Å)	
1:A:1474:THR:O	1:A:1474:THR:HG22	2.16	0.44	
1:A:2168:LEU:O	1:A:2171:THR:N	2.50	0.44	
1:A:2821:GLU:HB2	1:A:2852:LEU:CD1	2.44	0.44	
1:A:3193:ILE:HG22	1:A:3197:LEU:HD23	1.99	0.44	
1:A:3291:LEU:CA	1:A:3294:HIS:HE1	2.25	0.44	
1:A:3577:ARG:HD2	1:A:3589:TRP:CH2	2.53	0.44	
1:A:3755:MET:N	1:A:3755:MET:CE	2.81	0.44	
1:A:4286:VAL:HG13	1:A:4287:PRO:HD2	2.00	0.44	
1:A:4288:CYS:SG	1:A:4290:GLY:CA	3.06	0.44	
1:A:2629:LEU:N	1:A:2629:LEU:HD12	2.32	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: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:3587:ASN:OD1	1:A:3590:ASP:CB	2.66	0.44	
1:A:3654:ASN:O	1:A:3682:ARG:NH1	2.50	0.44	
1:A:3965:PHE:CB	1:A:3966:PRO:CD	2.94	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:2000:GLY:O	1:A:2001:LYS:C	2.54	0.44	
1:A:2284:LYS:HE3	1:A:2401:GLN:CA	2.46	0.44	
1:A:2717:PHE:CD1	1:A:2723:LEU:HD21	2.53	0.44	
1:A:3837:LYS:HB2	1:A:3984:ILE:CG2	2.45	0.44	
1:A:4307:GLN:O	1:A:4308:VAL:HG23	2.18	0.44	
1:A:2038:ALA:HA	1:A:2041:VAL:HG12	2.00	0.43	
1:A:3217:ALA:O	1:A:3222:ARG:NE	2.51	0.43	
1:A:3244:LEU:HD22	1:A:3244:LEU:HA	1.85	0.43	
1:A:3285:SER:O	1:A:3288:THR:OG1	2.26	0.43	
1:A:3999:PRO:HG2	1:A:4002:ILE:HG12	2.00	0.43	
1:A:4227:PHE:HD2	1:A:4232:LEU:HD21	1.84	0.43	
1:A:1506:GLU:OE2	1:A:1510:THR:OG1	2.36	0.43	
1:A:2579:ARG:O	1:A:2580:HIS:CD2	2.71	0.43	
1:A:1274:ALA:HB1	1:A:1388:VAL:HG11	2.00	0.43	
1:A:1397:ILE:O	1:A:1398:ARG:C	2.56	0.43	
1:A:1500:LEU:HA	1:A:1503:LEU:HG	2.00	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:3273:GLN:OE1	1:A:3276:VAL:O	2.36	0.43	



	1 J	Interatomic	Clash
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)
1:A:3581:PRO:CA	1:A:3584:PHE:CZ	2.73	0.43
1:A:3802:LYS:O	1:A:3805:PHE:HB3	2.18	0.43
1:A:4202:ALA:HA	1:A:4249:PHE:O	2.19	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:1973:MET:HG3	1:A:2070:LEU:CD2	2.49	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: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:4124:PRO:HD2	1:A:4127:TRP:CE3	2.53	0.43
1:A:4147:ARG:HG2	1:A:4172:GLU:O	2.19	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:2004:LYS:HB3	1:A:2050:SER:HA	2.00	0.43
1:A:2114:PHE:C	1:A:2115:LEU:HD12	2.39	0.43
1:A:2284:LYS:CE	1:A:2401:GLN:CB	2.77	0.43
1:A:3654:ASN:O	1:A:3657:CYS:HB3	2.19	0.43
1:A:4201:VAL:HG23	1:A:4253:ILE:CD1	2.48	0.43
1:A:1294:ASP:O	1:A:1297:ASP:HB3	2.19	0.43
1:A:1518:CYS:HB2	1:A:1534:PHE:CE1	2.53	0.43
1:A:1855:LEU:C	1:A:1855:LEU:HD12	2.39	0.43
1:A:2805:VAL:C	1:A:2806:LEU:HD23	2.39	0.43
1:A:3281:ILE:HD12	1:A:3391:ASN:HB3	1.99	0.43
1:A:3374:ASN:ND2	1:A:3377:PRO:CD	2.78	0.43
1:A:3686:LEU:HD22	1:A:3690:MET:SD	2.59	0.43
1:A:4100:VAL:N	1:A:4105:THR:HG21	2.34	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:1475:ALA:HB1	1:A:1484:VAL:O	2.19	0.43
1:A:2590:GLN:HG3	1:A:2591:PRO:HD3	2.01	0.43
1:A:4227:PHE:CD1	1:A:4227:PHE:C	2.92	0.43
1:A:2288:ILE:HD12	1:A:2426:ARG:O	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:2357:TYR:O	1:A:2358:LEU:HD23	2.19	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:3230:THR:HG23	1:A:3235:LEU:O	2.19	0.42
1:A:3239:ASP:OD1	1:A:3239:ASP:N	2.52	0.42



	A A	Interatomic	Clash	
Atom-1	Atom-2	distance (Å)	overlap (Å)	
1:A:3493:LEU:N	1:A:3494:PRO:CD	2.82	0.42	
1:A:3577:ARG:HD2	1:A:3589:TRP:CZ3	2.54	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:3238:PHE:CZ	1:A:3243:PHE:CB	3.01	0.42	
1:A:3336:LEU:CD2	1:A:3336:LEU:N	2.82	0.42	
1:A:3512:ILE:HG23	1:A:4021:LEU:HD21	1.95	0.42	
1:A:4057:ILE:HD12	1:A:4149:LEU:HD22	1.98	0.42	
1:A:4288:CYS:SG	1:A:4290:GLY:C	2.97	0.42	
1:A:2167:SER:O	1:A:2170:GLY:N	2.52	0.42	
1:A:2200:LEU:HD12	1:A:2205:ARG:HA	2.01	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:2606:ASP:O	1:A:2610:VAL:HG23	2.19	0.42	
1:A:2664:ILE:HD12	1:A:2664:ILE:H	1.83	0.42	
1:A:1515:LEU:HD13	1:A:1538:ILE:HG23	2.01	0.42	
1:A:2029:TRP:HE1	1:A:2031:ASP:HA	1.84	0.42	
1:A:2163:VAL:HG23	1:A:2164:VAL:HG23	1.99	0.42	
1:A:2212:VAL:HA	1:A:2215:TRP:CE3	2.48	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:4227:PHE:CD2	1:A:4232:LEU:HD21	2.54	0.42	
1:A:1593:GLU:OE1	1:A:1593:GLU:N	2.47	0.42	
1:A:3321:GLY:HA2	1:A:3366:PHE:HB2	2.02	0.42	
1:A:3374:ASN:HB2	1:A:3820:ILE:CD1	2.47	0.42	
1:A:3545:GLN:HA	1:A:3548:ILE:HG22	2.01	0.42	
1:A:1684:GLY:O	1:A:1812:PHE:HA	2.19	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:1514:LEU:HD11	1:A:1534:PHE:CD1	2.54	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:2276:LYS:N	1:A:2277:PRO:HD2	2.35	0.42	
1:A:3277:CYS:SG	1:A:3368:LEU:CD2	3.07	0.42	
1:A:4134:PRO:HG2	1:A:4140:TYR:CA	2.50	0.42	
1:A:2652:LEU:C	1:A:2652:LEU:HD23	2.40	0.42	
1:A:2662:ARG:NH1	1:A:2662:ARG:HG2	2.35	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:3518:PHE:CD1	1:A:3518:PHE:N	2.87	0.42	



	AL O	Interatomic	Clash	
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)	
1:A:3583:LEU:H	1:A:3583:LEU:HG	1.68	0.42	
1:A:3788:TRP:O	1:A:3788:TRP:HD1	2.03	0.42	
1:A:3860:ARG:HB3	1:A:3907:PHE:CD2	2.55	0.42	
1:A:4271:VAL:HA	1:A:4302:LEU:O	2.19	0.42	
1:A:1866:LEU:HD12	2:A:4401:AOV:O4'	2.20	0.42	
1:A:2296:GLY:HA2	5:A:4405:ADP:O1A	2.20	0.42	
1:A:2517:ASN:HB2	1:A:2519:PRO:HB3	1.99	0.42	
1:A:4281:VAL:CG2	1:A:4304:LEU:HD23	2.48	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:3512:ILE:HD12	1:A:3513:ASN:CB	2.46	0.42	
1:A:1688:TYR:CD1	1:A:1688:TYR:C	2.93	0.41	
1:A:1906:THR:HG22	1:A:1910:PHE:CE1	2.55	0.41	
1:A:3847:TRP:CH2	1:A:3900:TYR:CG	3.08	0.41	
1:A:3919:HIS:HB2	1:A:3944:LEU:HB3	2.03	0.41	
1:A:3965:PHE:HB3	1:A:3966:PRO:HD3	2.02	0.41	
1:A:4030:LYS:O	1:A:4034:GLU:N	2.44	0.41	
1:A:1624:TRP:HZ2	1:A:3906:LEU:HD13	1.85	0.41	
1:A:1962:ALA:O	1:A:1965:LEU:HB3	2.19	0.41	
1:A:1986:SER:HB3	1:A:2095:GLU:OE2	2.19	0.41	
1:A:3309:ASN:OD1	1:A:3309:ASN:N	2.53	0.41	
1:A:3567:ASP:O	1:A:3570:MET:HB2	2.19	0.41	
1:A:3836:LEU:O	1:A:3840:LEU:HD13	2.19	0.41	
1:A:2153:LEU:HD22	1:A:2157:LEU:HD11	2.03	0.41	
1:A:2230:TYR:O	1:A:2239:ALA:HA	2.20	0.41	
1:A:2276:LYS:N	1:A:2277:PRO:CD	2.83	0.41	
1:A:2460:TRP:CH2	1:A:2523:VAL:HG11	2.55	0.41	
1:A:3836:LEU:HD23	1:A:3991:ASP:HB3	2.00	0.41	
1:A:3915:TRP:O	1:A:3918:VAL:HB	2.20	0.41	
1:A:3934:TYR:CD1	1:A:3934:TYR:C	2.93	0.41	
1:A:1496:VAL:HA	1:A:1499:TRP:HE1	1.84	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: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:1289:MET:CE	1:A:1379:MET:HG2	2.51	0.41	
1:A:1514:LEU:HD23	1:A:1538:ILE:CD1	2.50	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	



	A L O	Interatomic	Clash	
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)	
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:3270:VAL:O	1:A:3273:GLN:HB3	2.19	0.41	
1:A:1849:PHE:CE2	1:A:1869:LEU:HB2	2.56	0.41	
1:A:3238:PHE:CG	1:A:3238:PHE:O	2.72	0.41	
1:A:3249:GLU:HA	1:A:3252:ILE:HD12	2.03	0.41	
1:A:3648:TRP:CZ3	1:A:3662:PRO:HG3	2.56	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:2335:CYS:SG	1:A:2348:PRO:HA	2.60	0.41	
1:A:2534:LEU:HD12	1:A:2534:LEU:N	2.36	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:1352:LEU:O	1:A:1356:PHE:N	2.47	0.41	
1:A:1388:VAL:CG1	1:A:1389:THR:N	2.84	0.41	
1:A:1480:GLU:H	1:A:1480:GLU:CD	2.25	0.41	
1:A:1486:PHE:CD1	1:A:1506:GLU:OE1	2.74	0.41	
1:A:1591:ILE:O	1:A:1592:LEU:HB2	2.21	0.41	
1:A:1640:CYS:SG	1:A:1641:CYS:N	2.94	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:1925:VAL:HG23	1:A:1926:PHE:CD1	2.53	0.41	
1:A:2067:ASN:O	1:A:2071:ASP:HB2	2.20	0.41	
1:A:2152:ALA:O	1:A:2156:VAL:HG23	2.21	0.41	
1:A:2421:PHE:HA	1:A:2424:ILE:HD12	2.02	0.41	
1:A:2524:LEU:HD12	1:A:2564:ILE:HG21	2.03	0.41	
1:A:2573:TYR:CZ	1:A:2601:LYS:HG3	2.56	0.41	
1:A:3502:MET:HE1	1:A:3551:LEU:HD12	2.03	0.41	
1:A:3505:ILE:HD11	1:A:3578:GLY:HA3	2.03	0.41	
1:A:3759:GLN:O	1:A:3762:LEU:HG	2.21	0.41	
1:A:4072:ILE:O	1:A:4075:PHE:HB3	2.21	0.41	
1:A:4238:ASP:OD1	1:A:4239:SER:N	2.54	0.41	
1:A:4291:ASN:OD1	1:A:4294:GLN:HB2	2.21	0.41	
1:A:1906:THR:CG2	1:A:1910:PHE:CE1	3.04	0.41	
1:A:2230:TYR:OH	1:A:2270:ARG:N	2.53	0.41	
1:A:2338:ILE:HD11	1:A:2345:VAL:HG13	2.03	0.41	
1:A:2689:GLN:CG	1:A:2690:PHE:N	2.83	0.41	
1:A:3552:GLN:O	1:A:3555:VAL:HB	2.21	0.41	
1:A:1591:ILE:HG22	1:A:1592:LEU:N	2.36	0.40	
1:A:1624:TRP:CD1	1:A:3914:GLN:HB2	2.56	0.40	
1:A:1693:THR:HG21	1:A:1817:MET:CB	2.51	0.40	



	A L	Interatomic	Clash	
Atom-1	Atom-2	distance (\AA)	overlap (Å)	
1:A:1710:VAL:HA	1:A:1737:TRP:O	2.20	0.40	
1:A:1789:ILE:O	1:A:1789:ILE:HG13	2.21	0.40	
1:A:1980:PRO:O	1:A:1983:ALA:HB2	2.21	0.40	
1:A:2156:VAL:HG13	1:A:2200:LEU:HD21	2.04	0.40	
1:A:2523:VAL:O	1:A:2527:VAL:HG23	2.21	0.40	
1:A:2739:TYR:CB	1:A:2744:LEU:HD21	2.51	0.40	
1:A:3202:LYS:O	1:A:3206:LEU:HG	2.21	0.40	
1:A:3230:THR:CG2	1:A:3235:LEU:O	2.70	0.40	
1:A:3387:VAL:HG12	1:A:3388:THR:N	2.36	0.40	
1:A:3512:ILE:CG2	1:A:4021:LEU:HD23	2.52	0.40	
1:A:3640:LEU:CD1	1:A:3642:PHE:CZ	3.04	0.40	
1:A:3686:LEU:O	1:A:3689:ALA:HB3	2.21	0.40	
1:A:1539:LEU:O	1:A:1543:GLU:HG2	2.21	0.40	
1:A:2296:GLY:C	5:A:4405:ADP:O1A	2.60	0.40	
1:A:2399:ASN:C	1:A:2400:ILE:HD12	2.41	0.40	
1:A:2553:THR:HG22	1:A:2557:GLN:NE2	2.36	0.40	
1:A:3670:SER:OG	1:A:3673:GLN:HG3	2.22	0.40	
1:A:3675:ILE:HD11	1:A:3693:PHE:CB	2.49	0.40	
1:A:3687:GLN:HB3	1:A:4007:GLN:OE1	2.22	0.40	
1:A:4075:PHE:CD1	1:A:4075:PHE:C	2.94	0.40	
1:A:1741:ASP:O	1:A:1742:GLU:HB2	2.21	0.40	
1:A:1982:GLY:HA2	4:A:4403:ATP:H5'1	2.04	0.40	
1:A:2174:ASN:HA	1:A:2426:ARG:HD2	2.03	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:4288:CYS:HG	1:A:4290:GLY:C	2.24	0.40	
1:A:1986:SER:HA	1:A:1989:TRP:NE1	2.37	0.40	
1:A:2453:ASN:ND2	1:A:2512:GLU:HA	2.36	0.40	
1:A:2664:ILE:CD1	1:A:2664:ILE:H	2.34	0.40	
1:A:3858:THR:HG23	1:A:3859:HIS:N	2.36	0.40	
1:A:4200:PHE:HB2	1:A:4252:TRP:CZ3	2.57	0.40	
1:A:1567:LEU:HB3	1:A:1607:ILE:HD11	2.04	0.40	
1:A:2175:GLY:HA3	1:A:2196:LEU:CD2	2.51	0.40	
1:A:2659:VAL:O	1:A:2659:VAL:HG13	2.21	0.40	
1:A:3277:CYS:SG	1:A:3368:LEU:HD23	2.61	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:3755:MET:HB2	1:A:3780:LYS:O	2.21	0.40	
1:A:3939:VAL:HG22	1:A:4296:ILE:HG22	2.04	0.40	
1:A:4073:LEU:O	1:A:4077:ILE:HG13	2.21	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	А	2995/3450~(87%)	2834 (95%)	153~(5%)	8~(0%)	41 74

All (8) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	А	1820	PRO
1	А	3965	PHE
1	А	1589	SER
1	А	1645	VAL
1	А	3375	PRO
1	А	4027	ALA
1	А	1529	VAL
1	А	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	А	2286/3065~(75%)	2201 (96%)	85 (4%)	34 65	

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

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



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



Mol	Chain	Res	Type
1	А	3582	GLU
1	А	3583	LEU
1	А	3584	PHE
1	А	3590	ASP
1	А	3640	LEU
1	А	3641	CYS
1	А	3652	TYR
1	А	3667	LYS
1	А	3671	LEU
1	А	3688	SER
1	А	3690	MET
1	А	3718	LEU
1	А	3755	MET
1	А	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

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



Mol	Chain	Res	Type
1	А	1792	ASN
1	А	1810	GLN
1	А	2140	ASN
1	А	2178	HIS
1	А	2269	GLN
1	А	2362	ASN
1	А	2391	ASN
1	А	2580	HIS
1	А	2595	HIS
1	А	2777	HIS
1	А	3738	GLN
1	А	3742	ASN
1	А	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 monosaccharides 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	Type	Chain	D og	Link	Bond lengths			Bond angles		
	туре	Cham	nes		Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
2	AOV	А	4401	3	27,34,34	<mark>5.35</mark>	3 (11%)	$26,\!56,\!56$	1.55	3 (11%)



Mol Type	Chain	Dec	Tink	Bond lengths			Bond angles			
IVIOI	туре	Unam	nes	LIIIK	Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
5	ADP	А	4406	-	24,29,29	1.12	1 (4%)	29,45,45	1.65	7 (24%)
5	ADP	А	4405	-	24,29,29	1.07	1 (4%)	29,45,45	1.67	7 (24%)
4	ATP	А	4403	3	26,33,33	0.88	1 (3%)	31,52,52	1.99	5 (16%)

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	А	4401	3	-	0/12/39/39	0/3/3/3
5	ADP	А	4406	-	-	0/12/32/32	0/3/3/3
5	ADP	А	4405	-	-	3/12/32/32	0/3/3/3
4	ATP	А	4403	3	-	0/18/38/38	0/3/3/3

All (6) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	А	4401	AOV	O1G-VG	27.32	2.10	1.61
5	А	4406	ADP	PB-O1B	3.16	1.60	1.50
2	А	4401	AOV	C5-C4	2.50	1.47	1.40
2	А	4401	AOV	C2-N3	2.37	1.35	1.32
5	А	4405	ADP	C4-N3	-2.31	1.32	1.35
4	А	4403	ATP	C2-N3	2.07	1.35	1.32

All (22) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	$Observed(^{o})$	$Ideal(^{o})$
4	А	4403	ATP	PA-O3A-PB	-6.39	110.88	132.83
4	А	4403	ATP	PB-O3B-PG	-6.11	111.86	132.83
2	А	4401	AOV	PA-O3A-PB	-4.77	116.47	132.83
5	А	4405	ADP	C4-C5-N7	-4.16	105.06	109.40
2	А	4401	AOV	C4-C5-N7	-3.87	105.36	109.40
5	А	4406	ADP	N3-C2-N1	-3.77	122.78	128.68
4	А	4403	ATP	N3-C2-N1	-3.74	122.83	128.68
5	А	4405	ADP	C3'-C2'-C1'	3.60	106.40	100.98
5	А	4405	ADP	PA-O3A-PB	-3.59	120.50	132.83
2	А	4401	AOV	N3-C2-N1	-3.45	123.28	128.68
5	A	4406	ADP	PA-O3A-PB	-3.17	121.94	132.83
5	А	4406	ADP	O3B-PB-O2B	2.85	118.52	107.64
5	A	4406	ADP	C3'-C2'-C1'	2.67	105.00	100.98



4RH7

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	$Observed(^{o})$	$Ideal(^{o})$
4	А	4403	ATP	C4-C5-N7	-2.58	106.71	109.40
5	А	4406	ADP	C4-C5-N7	-2.54	106.75	109.40
5	А	4406	ADP	O2A-PA-O1A	2.46	124.41	112.24
5	А	4406	ADP	O4'-C4'-C3'	2.27	109.60	105.11
5	А	4405	ADP	N3-C2-N1	-2.23	125.19	128.68
5	А	4405	ADP	O2A-PA-O1A	2.20	123.10	112.24
5	А	4405	ADP	O2B-PB-O3A	2.13	111.76	104.64
4	А	4403	ATP	O4'-C4'-C3'	2.05	109.17	105.11
5	А	4405	ADP	C5-C6-N6	2.01	123.41	120.35

There are no chirality outliers.

All (3) torsion outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms
5	А	4405	ADP	C5'-O5'-PA-O2A
5	А	4405	ADP	C5'-O5'-PA-O3A
5	А	4405	ADP	O4'-C4'-C5'-O5'

There are no ring outliers.

4 monomers are involved in 26 short contacts:

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

The following is a two-dimensional graphical depiction of Mogul quality analysis of bond lengths, bond angles, torsion angles, and ring geometry for all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the validation Tables will also be included. For torsion angles, if less then 5% of the Mogul distribution of torsion angles is within 10 degrees of the torsion angle in question, then that torsion angle is considered an outlier. Any bond that is central to one or more torsion angles identified as an outlier by Mogul will be highlighted in the graph. For rings, the root-mean-square deviation (RMSD) between the ring in question and similar rings identified by Mogul is calculated over all ring torsion angles. If the average RMSD is greater than 60 degrees and the minimal RMSD between the ring in question and any Mogul-identified rings is also greater than 60 degrees, then that ring is considered an outlier. The outliers are highlighted in purple. The color gray indicates Mogul did not find sufficient equivalents in the CSD to analyse the geometry.













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 (i)

6.1 Protein, DNA and RNA chains (i)

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^{th} 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	$OWAB(Å^2)$	Q<0.9
1	А	3005/3450~(87%)	-0.31	85 (2%) 53 5	2 39, 110, 274, 477	0

All (85) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	А	3130	LEU	8.1
1	А	2975	ASP	5.9
1	А	3136	SER	5.5
1	А	2942	SER	4.7
1	А	2946	ALA	4.5
1	А	3134	LEU	4.4
1	А	2949	GLN	4.1
1	А	2945	ASP	4.0
1	А	3138	GLY	3.9
1	А	3133	LEU	3.9
1	А	2915	ASN	3.8
1	А	2953	LEU	3.7
1	А	3139	GLN	3.7
1	А	3123	THR	3.7
1	А	3135	ASN	3.7
1	А	2918	ALA	3.6
1	А	3131	GLU	3.6
1	А	2909	ALA	3.5
1	А	2964	VAL	3.5
1	А	2947	SER	3.5
1	А	2911	VAL	3.4
1	А	2907	ALA	3.3
1	А	2937	GLN	3.2
1	А	3238	PHE	3.2
1	А	3142	SER	3.2
1	А	2956	LEU	3.2
1	А	3137	VAL	3.2



4RH	7

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	А	1579	THR	3.1
1	А	3019	GLY	3.1
1	А	2938	MET	3.1
1	А	2951	THR	3.0
1	А	4030	LYS	3.0
1	А	3156	ALA	2.9
1	А	3533	ASN	2.8
1	А	4056	LEU	2.8
1	А	3128	ARG	2.8
1	А	3144	LEU	2.8
1	А	1318	TYR	2.7
1	А	3642	PHE	2.7
1	А	2935	ALA	2.7
1	А	3451	ILE	2.7
1	A	3910	ALA	2.7
1	А	4029	SER	2.6
1	А	2902	SER	2.6
1	А	2912	ASP	2.6
1	А	4031	PHE	2.6
1	А	2906	GLU	2.6
1	А	3187	ASN	2.6
1	А	3132	GLU	2.6
1	А	4026	THR	2.6
1	А	3143	GLU	2.5
1	А	3154	GLU	2.5
1	А	1321	PHE	2.5
1	А	3125	ASP	2.5
1	А	3025	GLY	2.5
1	А	1653	TYR	2.5
1	А	2944	GLN	2.5
1	A	3159	GLU	2.4
1	А	3129	LYS	2.4
1	A	3121	LYS	2.4
1	Α	3153	SER	2.4
1	А	3127	LYS	2.4
1	А	3155	ALA	2.3
1	A	3448	GLN	2.3
1	A	3141	VAL	2.3
1	А	2962	GLU	2.3
1	A	3037	PHE	2.3
1	A	3168	THR	2.2
1	А	2900	GLY	2.2



Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	А	3126	ARG	2.2
1	А	3119	ASN	2.2
1	А	2943	MET	2.2
1	А	2939	ILE	2.2
1	А	2950	LYS	2.2
1	А	2941	VAL	2.2
1	А	2952	GLU	2.1
1	А	2979	LYS	2.1
1	А	2919	GLY	2.1
1	А	2933	ASP	2.1
1	А	3076	PRO	2.1
1	А	2965	VAL	2.0
1	А	2893	ARG	2.0
1	А	4057	ILE	2.0
1	A	2922	SER	2.0
1	A	3145	LYS	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 monosaccharides 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. The B-factors column lists the minimum, median, 95^{th} 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	B-factors(Å ²)	Q<0.9
5	ADP	А	4406	27/27	0.95	0.20	66,85,103,111	0
5	ADP	А	4405	27/27	0.97	0.18	42,46,57,61	0
4	ATP	А	4403	31/31	0.97	0.18	49,80,97,108	0
2	AOV	А	4401	32/32	0.98	0.20	41,69,88,93	0
3	MG	А	4402	1/1	0.99	0.21	31,31,31,31	0
3	MG	А	4404	1/1	1.00	0.22	22,22,22,22	0



The following is a graphical depiction of the model fit to experimental electron density of all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the geometry validation Tables will also be included. Each fit is shown from different orientation to approximate a three-dimensional view.











6.5 Other polymers (i)

There are no such residues in this entry.

