



Full wwPDB EM Validation Report ⓘ

Mar 15, 2025 – 09:07 pm GMT

PDB ID : 8QJU
EMDB ID : EMD-18449
Title : Structure of the human 1-phosphatidylinositol 4,5-bisphosphate phosphodiesterase gamma-2 (PLCG2) protein
Authors : Faille, A.; Warren, A.J.
Deposited on : 2023-09-13
Resolution : 3.50 Å(reported)

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 : **FAILED**
MolProbity : 4.02b-467
Percentile statistics : 20231227.v01 (using entries in the PDB archive December 27th 2023)
MapQ : **FAILED**
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.41

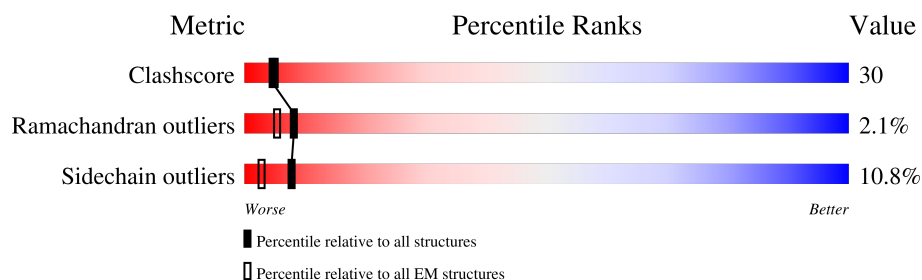
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

ELECTRON MICROSCOPY

The reported resolution of this entry is 3.50 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	210492	15764
Ramachandran outliers	207382	16835
Sidechain outliers	206894	16415

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 $\leq 5\%$.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	1265	

2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 8578 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.

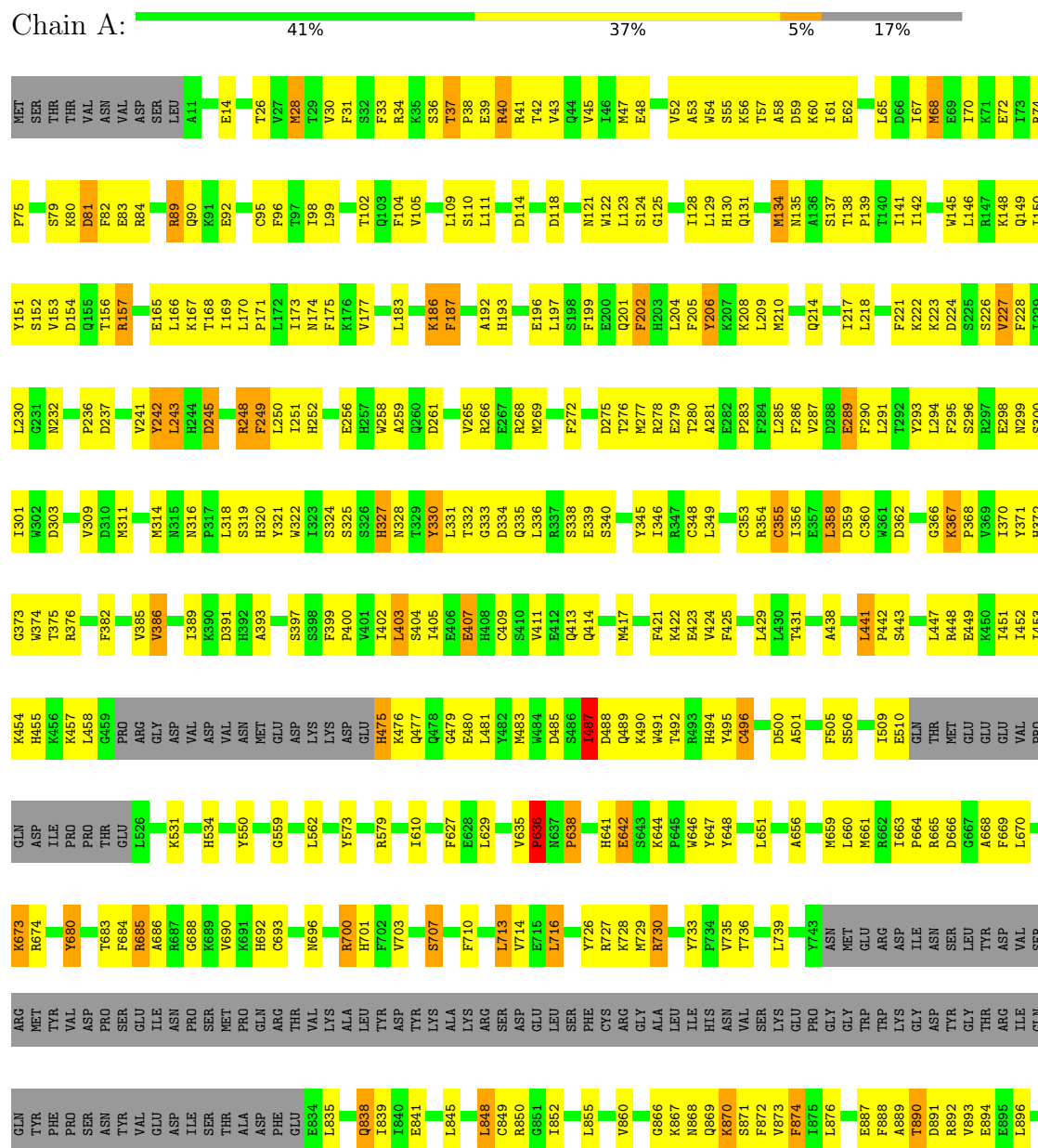
- Molecule 1 is a protein called 1-phosphatidylinositol 4,5-bisphosphate phosphodiesterase gamma-2.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S		
1	A	1045	8578	5470	1470	1595	43	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. Residues are color-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. Stretches of 2 or more consecutive residues without any outlier are shown as a green connector. Residues present in the sample, but not in the model, are shown in grey.

- Molecule 1: 1-phosphatidylinositol 4,5-bisphosphate phosphodiesterase gamma-2



TYR	V1182	G1108	Q1039	K970	W899
GLN	F1183	L1109	P1040	I974	S902
GLU		S1110		L975	I903
LYS	M1186	P1111	M1043	K976	I906
CYS		I1112	R1044	Y977	T907
ASN	L1190	W1113	T1045	N978	W908
LYS		A1114		Q979	LYS
ARG		P1115	Y1048	K980	ILE
ARG		T1116	D1049	G981	ASP
LEU		Q1117	P1050	L982	THR
GLU		E1118	M1051		LYS
GLU		K1119	P1052	Y985	GLU
LEU		W1120	P1053	P986	ASN
TYR		T1121	E1054	P987	S925
SER		F1122		K988	I926
SER			R1057	G989	L930
SER			K1058	Q990	L933
CYS		Y1125	I1059	R991	V934
ASN			L1060	V992	V935
LYS		L1129	M1061	D993	P936
LYS			T1062	S994	K937
PHE		L1132	L1063	S995	P939
TYR		R1133	T1064	N996	T940
SER		F1134	V1065	Y997	T943
TYR		V1135		S998	K944
SER		Y1137	A1070	P999	D945
SER		E1138	R1071	F1000	N946
			H1072	F1001	L947
			L1073	L1002	E948
		M1141	P1074	W1003	N949
		F1142	K1075	L1004	P950
			L1076	Cl005	E954
		M1146		Q1008	R955
		F1147	S1079		S957
		L1148	I1080		P958
		A1149	A1081		A963
		H1150	C1082		D964
			P1083		S965
		I1155	F1084		I966
		K1156	V1085		I967
		A1157	E1086		Q969
		V1158	V1087		
		K1159	E1088		
			I1089		
		R1163	C1090		
		S1164	G1091		
		V1165	A1092		
		P1166	E1093		
		L1167	Y1094		
		K1168	D1095		
			M1096		
		Y1171			
		S1172	F1099		
		E1173			
			L1030		
		E1176	T1102		
		L1177	W1103		
		A1178	V1104		
		S1179	M1105		
		L1180	D1106		
		L1181	N1107		

4 Experimental information

Property	Value	Source
EM reconstruction method	SINGLE PARTICLE	Depositor
Imposed symmetry	POINT, Not provided	
Number of particles used	130911	Depositor
Resolution determination method	FSC 0.143 CUT-OFF	Depositor
CTF correction method	PHASE FLIPPING AND AMPLITUDE CORRECTION	Depositor
Microscope	TFS KRIOS	Depositor
Voltage (kV)	300	Depositor
Electron dose ($e^-/\text{\AA}^2$)	50	Depositor
Minimum defocus (nm)	1000	Depositor
Maximum defocus (nm)	2400	Depositor
Magnification	Not provided	
Image detector	GATAN K3 BIOQUANTUM (6k x 4k)	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	0.31	0/8779	0.65	0/11849

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

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	8578	0	8475	511	0
All	All	8578	0	8475	511	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 30.

All (511) 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:138:THR:CG2	1:A:139:PRO:HD3	1.69	1.21
1:A:138:THR:HG22	1:A:139:PRO:HD3	1.31	1.11
1:A:138:THR:CG2	1:A:272:PHE:HE1	1.68	1.07
1:A:170:LEU:HD12	1:A:173:ILE:HD11	1.38	1.05
1:A:138:THR:CG2	1:A:272:PHE:CE1	2.41	1.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:441:LEU:HD23	1:A:442:PRO:HD2	1.45	0.97
1:A:138:THR:HG21	1:A:272:PHE:HE1	1.29	0.97
1:A:138:THR:HG23	1:A:139:PRO:HD3	1.48	0.95
1:A:442:PRO:HB2	1:A:447:LEU:HD11	1.50	0.94
1:A:531:LYS:HB3	1:A:636:PRO:HB3	1.48	0.93
1:A:175:PHE:HB2	1:A:1109:LEU:HD13	1.51	0.93
1:A:940:THR:HG22	1:A:954:GLU:HB3	1.54	0.90
1:A:173:ILE:HG13	1:A:1109:LEU:HD11	1.57	0.87
1:A:259:ALA:HB1	1:A:265:VAL:HG22	1.57	0.87
1:A:1043:MET:HG2	1:A:1048:TYR:CE2	2.11	0.86
1:A:138:THR:HG22	1:A:272:PHE:CE1	2.10	0.85
1:A:214:GLN:HG2	1:A:1112:ILE:HD11	1.58	0.85
1:A:1044:ARG:O	1:A:1045:THR:HG23	1.77	0.85
1:A:985:VAL:HG21	1:A:1002:LEU:HD22	1.57	0.85
1:A:170:LEU:HD23	1:A:177:VAL:HG22	1.57	0.85
1:A:138:THR:CG2	1:A:139:PRO:CD	2.55	0.85
1:A:644:LYS:HE3	1:A:646:TRP:HE1	1.39	0.84
1:A:1099:PHE:CG	1:A:1120:VAL:HB	2.13	0.84
1:A:389:ILE:O	1:A:393:ALA:HB2	1.78	0.81
1:A:74:ARG:NH2	1:A:79:SER:HB2	1.96	0.81
1:A:138:THR:HG23	1:A:139:PRO:CD	2.10	0.80
1:A:1076:LEU:HG	1:A:1148:LEU:HD23	1.62	0.80
1:A:151:TYR:CZ	1:A:157:ARG:HB3	2.17	0.79
1:A:96:PHE:HB2	1:A:123:LEU:HD21	1.66	0.77
1:A:458:LEU:HD21	1:A:926:ILE:HB	1.65	0.77
1:A:335:GLN:HE21	1:A:1013:ASN:HD21	1.31	0.77
1:A:151:TYR:CE2	1:A:157:ARG:HB3	2.18	0.76
1:A:866:GLY:HA3	1:A:871:SER:HA	1.66	0.76
1:A:251:ILE:HG23	1:A:252:HIS:CD2	2.21	0.76
1:A:700:ARG:HH11	1:A:700:ARG:HG2	1.51	0.75
1:A:431:THR:O	1:A:935:VAL:HG21	1.88	0.74
1:A:1065:VAL:HG11	1:A:1134:PHE:HE1	1.53	0.73
1:A:243:LEU:HD21	1:A:266:ARG:HA	1.70	0.73
1:A:400:PRO:HG2	1:A:1036:TYR:OH	1.89	0.72
1:A:1136:VAL:CG2	1:A:1180:LEU:HD11	2.20	0.72
1:A:217:ILE:HD11	1:A:1112:ILE:HD12	1.70	0.72
1:A:349:LEU:HD11	1:A:356:ILE:HG21	1.71	0.72
1:A:664:PRO:HA	1:A:685:ARG:NH1	2.05	0.72
1:A:333:GLY:H	1:A:1015:GLN:HG3	1.55	0.71
1:A:226:SER:O	1:A:227:VAL:HG22	1.91	0.71
1:A:647:TYR:OH	1:A:673:LYS:NZ	2.24	0.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:487:ILE:HD13	1:A:487:ILE:H	1.55	0.70
1:A:700:ARG:HH11	1:A:700:ARG:CG	2.05	0.69
1:A:506:SER:HA	1:A:849:CYS:HA	1.74	0.69
1:A:1080:ILE:HD12	1:A:1080:ILE:H	1.56	0.69
1:A:700:ARG:O	1:A:701:HIS:ND1	2.26	0.69
1:A:259:ALA:HB1	1:A:265:VAL:CG2	2.23	0.68
1:A:442:PRO:CB	1:A:447:LEU:HD11	2.23	0.68
1:A:221:PHE:HZ	1:A:294:LEU:HD11	1.58	0.67
1:A:573:TYR:CE1	1:A:610:ILE:HD11	2.29	0.67
1:A:940:THR:CG2	1:A:954:GLU:HB3	2.22	0.67
1:A:299:ASN:ND2	1:A:1163:ARG:HA	2.10	0.67
1:A:967:ILE:HD11	1:A:1002:LEU:HD23	1.76	0.67
1:A:258:TRP:HH2	1:A:268:ARG:HB2	1.60	0.66
1:A:173:ILE:CG1	1:A:1109:LEU:HD11	2.24	0.66
1:A:59:ASP:OD1	1:A:156:THR:HG21	1.95	0.66
1:A:138:THR:HB	1:A:296:SER:OG	1.95	0.66
1:A:327:HIS:CG	1:A:328:ASN:H	2.13	0.66
1:A:481:LEU:HB2	1:A:496:CYS:SG	2.36	0.66
1:A:550:TYR:HA	1:A:700:ARG:HH12	1.61	0.66
1:A:665:ARG:HH22	1:A:739:LEU:HD21	1.62	0.65
1:A:664:PRO:HA	1:A:685:ARG:HH12	1.59	0.65
1:A:173:ILE:HD12	1:A:1109:LEU:HD21	1.78	0.65
1:A:943:THR:HB	1:A:945:ASP:OD2	1.96	0.65
1:A:54:TRP:HZ3	1:A:65:LEU:HD12	1.61	0.65
1:A:454:LYS:HE3	1:A:955:ILE:HD13	1.78	0.65
1:A:641:HIS:HB3	1:A:713:LEU:HB2	1.79	0.64
1:A:385:VAL:O	1:A:389:ILE:HG13	1.96	0.64
1:A:142:ILE:HG12	1:A:1177:LEU:HD22	1.77	0.64
1:A:660:LEU:CD1	1:A:735:VAL:HG21	2.28	0.64
1:A:366:GLY:HA2	1:A:413:GLN:HE22	1.62	0.64
1:A:31:PHE:CE1	1:A:38:PRO:HB3	2.33	0.63
1:A:295:PHE:CE1	1:A:1181:LEU:HB2	2.34	0.63
1:A:999:PRO:HB3	1:A:1012:LEU:HD21	1.81	0.63
1:A:505:PHE:O	1:A:849:CYS:HB2	1.98	0.63
1:A:1177:LEU:HD12	1:A:1177:LEU:H	1.64	0.62
1:A:487:ILE:HG12	1:A:488:ASP:H	1.65	0.62
1:A:303:ASP:HA	1:A:1159:LYS:HD2	1.81	0.62
1:A:873:VAL:HG23	1:A:889:ALA:HB2	1.82	0.62
1:A:1089:ILE:HG13	1:A:1122:PHE:HB3	1.82	0.61
1:A:386:VAL:HG22	1:A:425:PHE:CE1	2.36	0.61
1:A:320:HIS:HE2	1:A:979:GLN:HG3	1.65	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1147:PHE:HZ	1:A:1150:HIS:HB3	1.65	0.61
1:A:1043:MET:HG2	1:A:1048:TYR:CZ	2.36	0.61
1:A:256:GLU:HG2	1:A:258:TRP:CD1	2.36	0.60
1:A:974:LEU:HD23	1:A:1005:CYS:SG	2.41	0.60
1:A:41:ARG:NH1	1:A:56:LYS:HG2	2.16	0.60
1:A:228:PHE:CD1	1:A:249:PHE:HB2	2.36	0.60
1:A:258:TRP:CH2	1:A:268:ARG:HB2	2.35	0.60
1:A:1039:GLN:HB3	1:A:1043:MET:CE	2.31	0.60
1:A:228:PHE:CE2	1:A:230:LEU:HB2	2.36	0.60
1:A:534:HIS:CD2	1:A:562:LEU:HB2	2.36	0.60
1:A:422:LYS:CE	1:A:933:LEU:HD21	2.31	0.60
1:A:987:PRO:HG3	1:A:997:TYR:HE1	1.66	0.60
1:A:1000:PHE:CZ	1:A:1129:LEU:HG	2.37	0.59
1:A:647:TYR:HH	1:A:673:LYS:NZ	2.00	0.59
1:A:644:LYS:HE3	1:A:646:TRP:NE1	2.14	0.59
1:A:422:LYS:HE3	1:A:933:LEU:HD21	1.84	0.59
1:A:866:GLY:CA	1:A:871:SER:HA	2.33	0.59
1:A:53:ALA:HB1	1:A:61:ILE:HG23	1.85	0.59
1:A:1168:LYS:HB3	1:A:1173:GLU:O	2.02	0.59
1:A:1004:LEU:HD23	1:A:1004:LEU:O	2.03	0.59
1:A:1114:ALA:O	1:A:1116:THR:N	2.36	0.59
1:A:1065:VAL:HG11	1:A:1134:PHE:CE1	2.38	0.58
1:A:1176:GLU:O	1:A:1178:ALA:N	2.35	0.58
1:A:214:GLN:HA	1:A:1112:ILE:HG13	1.83	0.58
1:A:1085:VAL:HG22	1:A:1136:VAL:HG22	1.84	0.58
1:A:358:LEU:HD11	1:A:385:VAL:HG11	1.84	0.58
1:A:372:HIS:HB3	1:A:375:THR:OG1	2.03	0.58
1:A:487:ILE:HG13	1:A:665:ARG:HH11	1.67	0.58
1:A:559:GLY:HA2	1:A:629:LEU:HD21	1.85	0.58
1:A:187:PHE:CZ	1:A:197:LEU:HG	2.39	0.58
1:A:397:SER:OG	1:A:1034:THR:HA	2.03	0.58
1:A:98:ILE:HD12	1:A:109:LEU:HD23	1.86	0.58
1:A:165:GLU:O	1:A:168:THR:HG22	2.03	0.58
1:A:174:ASN:O	1:A:1108:GLY:N	2.37	0.58
1:A:138:THR:HG22	1:A:272:PHE:CD1	2.38	0.58
1:A:65:LEU:HD11	1:A:109:LEU:HD22	1.85	0.57
1:A:327:HIS:CG	1:A:328:ASN:N	2.70	0.57
1:A:30:VAL:HG22	1:A:111:LEU:CD2	2.34	0.57
1:A:275:ASP:HB2	1:A:278:ARG:HB3	1.86	0.57
1:A:1059:ILE:HG13	1:A:1125:TYR:HE1	1.69	0.57
1:A:210:MET:HE3	1:A:1110:SER:HB3	1.86	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1059:ILE:N	1:A:1059:ILE:HD12	2.19	0.56
1:A:277:MET:O	1:A:278:ARG:CB	2.54	0.56
1:A:943:THR:O	1:A:945:ASP:N	2.38	0.56
1:A:336:LEU:HG	1:A:992:VAL:HB	1.87	0.56
1:A:279:GLU:HG3	1:A:280:THR:HG23	1.87	0.56
1:A:48:GLU:N	1:A:48:GLU:OE2	2.35	0.56
1:A:268:ARG:NH2	1:A:298:GLU:O	2.39	0.56
1:A:174:ASN:HD22	1:A:1075:LYS:HB2	1.71	0.56
1:A:1114:ALA:O	1:A:1115:PRO:C	2.45	0.56
1:A:487:ILE:H	1:A:487:ILE:CD1	2.18	0.55
1:A:250:LEU:HD13	1:A:258:TRP:HE1	1.70	0.55
1:A:80:LYS:O	1:A:81:ASP:C	2.44	0.55
1:A:335:GLN:NE2	1:A:1013:ASN:HD21	2.03	0.55
1:A:550:TYR:CD2	1:A:635:VAL:HB	2.41	0.55
1:A:39:GLU:OE1	1:A:41:ARG:NE	2.40	0.55
1:A:874:PHE:CZ	1:A:888:PHE:HB2	2.42	0.55
1:A:336:LEU:CD1	1:A:845:LEU:HD22	2.36	0.55
1:A:429:LEU:HD11	1:A:453:ILE:HD11	1.88	0.55
1:A:1030:LEU:HD11	1:A:1156:LYS:HE3	1.89	0.55
1:A:372:HIS:CD2	1:A:373:GLY:H	2.25	0.55
1:A:894:GLU:CD	1:A:894:GLU:H	2.10	0.55
1:A:1071:ARG:HA	1:A:1109:LEU:O	2.07	0.54
1:A:1146:ASN:HD22	1:A:1147:PHE:H	1.56	0.54
1:A:45:VAL:HG22	1:A:52:VAL:HG22	1.88	0.54
1:A:241:VAL:HG23	1:A:285:LEU:HB2	1.88	0.54
1:A:137:SER:OG	1:A:272:PHE:HA	2.07	0.54
1:A:400:PRO:O	1:A:1036:TYR:OH	2.24	0.54
1:A:376:ARG:HE	1:A:479:GLY:HA2	1.73	0.54
1:A:730:ARG:H	1:A:730:ARG:HD2	1.73	0.54
1:A:700:ARG:O	1:A:700:ARG:HD2	2.07	0.54
1:A:1044:ARG:O	1:A:1045:THR:CG2	2.52	0.54
1:A:425:PHE:CD2	1:A:451:ILE:HD12	2.43	0.54
1:A:668:ALA:HA	1:A:733:TYR:O	2.08	0.54
1:A:1057:ARG:CZ	1:A:1094:TYR:HB3	2.37	0.54
1:A:1084:PHE:CE1	1:A:1137:TYR:HB2	2.42	0.54
1:A:186:LYS:HA	1:A:186:LYS:HE3	1.89	0.54
1:A:651:LEU:HD23	1:A:656:ALA:HB2	1.89	0.54
1:A:336:LEU:HD13	1:A:495:TYR:CE2	2.42	0.53
1:A:376:ARG:HE	1:A:480:GLU:H	1.56	0.53
1:A:1080:ILE:CG2	1:A:1106:ASP:HB3	2.38	0.53
1:A:324:SER:HA	1:A:1028:PHE:CE2	2.44	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:991:ARG:HD3	1:A:995:SER:O	2.08	0.53
1:A:491:TRP:HE1	1:A:868:ASN:HB2	1.74	0.53
1:A:943:THR:C	1:A:945:ASP:N	2.62	0.53
1:A:988:LYS:HD2	1:A:990:GLN:HB2	1.90	0.53
1:A:277:MET:O	1:A:278:ARG:HB3	2.09	0.53
1:A:950:PRO:HB3	1:A:977:TYR:CD1	2.44	0.53
1:A:1178:ALA:O	1:A:1179:SER:HB3	2.09	0.53
1:A:407:GLU:HB2	1:A:455:HIS:NE2	2.24	0.53
1:A:993:ASP:O	1:A:994:SER:HB2	2.09	0.53
1:A:221:PHE:O	1:A:223:LYS:N	2.38	0.53
1:A:243:LEU:HD22	1:A:269:MET:SD	2.49	0.53
1:A:334:ASP:O	1:A:338:SER:HB2	2.09	0.53
1:A:849:CYS:O	1:A:849:CYS:SG	2.67	0.52
1:A:72:GLU:OE2	1:A:99:LEU:HD22	2.09	0.52
1:A:74:ARG:HH21	1:A:79:SER:HB2	1.73	0.52
1:A:210:MET:CE	1:A:1110:SER:HB3	2.40	0.52
1:A:259:ALA:CB	1:A:265:VAL:HG22	2.34	0.52
1:A:150:ILE:HD11	1:A:202:PHE:HD2	1.74	0.52
1:A:166:LEU:HD21	1:A:205:PHE:HE2	1.75	0.52
1:A:1072:HIS:HB2	1:A:1177:LEU:O	2.10	0.52
1:A:248:ARG:HA	1:A:251:ILE:HG22	1.89	0.52
1:A:33:PHE:HB3	1:A:84:ARG:HG3	1.91	0.52
1:A:243:LEU:HD23	1:A:283:PRO:HD2	1.92	0.52
1:A:1004:LEU:HD12	1:A:1092:ALA:HB2	1.91	0.52
1:A:668:ALA:O	1:A:684:PHE:HA	2.09	0.52
1:A:454:LYS:HE2	1:A:955:ILE:HG21	1.91	0.52
1:A:891:ASP:OD1	1:A:891:ASP:N	2.40	0.52
1:A:1014:PHE:CD1	1:A:1021:MET:SD	3.03	0.52
1:A:1070:ALA:HB3	1:A:1111:PRO:HD2	1.91	0.52
1:A:204:LEU:O	1:A:208:LYS:HG2	2.10	0.52
1:A:938:LYS:HB3	1:A:954:GLU:HA	1.90	0.52
1:A:324:SER:HA	1:A:1028:PHE:CZ	2.44	0.52
1:A:167:LYS:HD3	1:A:183:LEU:HD12	1.91	0.51
1:A:301:ILE:HD11	1:A:1158:VAL:HG13	1.92	0.51
1:A:314:MET:HG3	1:A:399:PHE:CE2	2.45	0.51
1:A:481:LEU:HD21	1:A:899:TRP:NE1	2.25	0.51
1:A:331:LEU:HD23	1:A:340:SER:HB2	1.93	0.51
1:A:368:PRO:HG2	1:A:417:MET:HG3	1.92	0.51
1:A:902:SER:O	1:A:906:ILE:HG12	2.11	0.51
1:A:1023:MET:SD	1:A:1090:CYS:HB3	2.51	0.51
1:A:43:VAL:HG12	1:A:122:TRP:CH2	2.46	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:947:LEU:O	1:A:948:GLU:HB2	2.11	0.51
1:A:947:LEU:O	1:A:948:GLU:CB	2.58	0.51
1:A:1099:PHE:HE2	1:A:1118:GLU:HA	1.75	0.51
1:A:1165:VAL:HG23	1:A:1165:VAL:O	2.10	0.51
1:A:336:LEU:HD13	1:A:845:LEU:HD22	1.93	0.51
1:A:999:PRO:HD2	1:A:1020:TYR:CD1	2.46	0.51
1:A:124:SER:O	1:A:128:ILE:HG12	2.10	0.50
1:A:1039:GLN:HB3	1:A:1043:MET:HE2	1.93	0.50
1:A:174:ASN:OD1	1:A:1108:GLY:HA3	2.12	0.50
1:A:1013:ASN:HB3	1:A:1015:GLN:OE1	2.10	0.50
1:A:407:GLU:OE2	1:A:414:GLN:NE2	2.44	0.50
1:A:663:ILE:HD12	1:A:735:VAL:HG13	1.92	0.50
1:A:893:VAL:O	1:A:896:LEU:HB3	2.11	0.50
1:A:1073:LEU:HD13	1:A:1136:VAL:HG11	1.93	0.50
1:A:242:TYR:N	1:A:245:ASP:OD2	2.44	0.50
1:A:333:GLY:H	1:A:1015:GLN:CG	2.25	0.50
1:A:642:GLU:HA	1:A:647:TYR:HD2	1.75	0.50
1:A:669:PHE:HA	1:A:684:PHE:HA	1.94	0.50
1:A:330:TYR:HB2	1:A:340:SER:OG	2.12	0.50
1:A:335:GLN:HE21	1:A:1013:ASN:ND2	2.03	0.50
1:A:660:LEU:HD11	1:A:735:VAL:HG21	1.92	0.50
1:A:665:ARG:HH22	1:A:739:LEU:CD2	2.24	0.50
1:A:201:GLN:O	1:A:204:LEU:N	2.45	0.50
1:A:869:GLN:O	1:A:870:LYS:C	2.49	0.49
1:A:204:LEU:HD11	1:A:208:LYS:HE3	1.94	0.49
1:A:506:SER:HB2	1:A:848:LEU:HD22	1.93	0.49
1:A:665:ARG:HH21	1:A:733:TYR:HB3	1.76	0.49
1:A:1080:ILE:HG21	1:A:1106:ASP:HB3	1.95	0.49
1:A:80:LYS:O	1:A:83:GLU:N	2.44	0.49
1:A:320:HIS:O	1:A:1039:GLN:HG3	2.13	0.49
1:A:331:LEU:HD11	1:A:372:HIS:HB2	1.95	0.49
1:A:943:THR:C	1:A:945:ASP:H	2.15	0.49
1:A:40:ARG:H	1:A:40:ARG:HD2	1.78	0.49
1:A:168:THR:O	1:A:171:PRO:HD2	2.12	0.49
1:A:336:LEU:HD13	1:A:495:TYR:HE2	1.77	0.49
1:A:138:THR:HG21	1:A:272:PHE:CE1	2.20	0.49
1:A:332:THR:OG1	1:A:339:GLU:O	2.30	0.49
1:A:407:GLU:CD	1:A:409:CYS:HB2	2.34	0.49
1:A:173:ILE:HG13	1:A:1109:LEU:CD1	2.36	0.48
1:A:442:PRO:HB2	1:A:447:LEU:CD1	2.33	0.48
1:A:1080:ILE:HD12	1:A:1080:ILE:N	2.26	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1137:TYR:CE1	1:A:1147:PHE:HD1	2.31	0.48
1:A:1016:THR:HG22	1:A:1018:ASP:H	1.77	0.48
1:A:1064:THR:HG22	1:A:1121:THR:HG22	1.94	0.48
1:A:80:LYS:O	1:A:82:PHE:N	2.46	0.48
1:A:489:GLN:HE21	1:A:489:GLN:HA	1.77	0.48
1:A:673:LYS:HG3	1:A:674:ARG:O	2.13	0.48
1:A:680:TYR:HD1	1:A:680:TYR:H	1.61	0.48
1:A:1147:PHE:CZ	1:A:1150:HIS:HB3	2.47	0.48
1:A:330:TYR:HD1	1:A:330:TYR:H	1.62	0.48
1:A:1087:VAL:HG12	1:A:1122:PHE:HE2	1.77	0.48
1:A:166:LEU:HD21	1:A:205:PHE:CE2	2.48	0.48
1:A:295:PHE:CE1	1:A:1181:LEU:CB	2.96	0.48
1:A:402:ILE:HG22	1:A:402:ILE:O	2.12	0.48
1:A:475:HIS:O	1:A:476:LYS:HB2	2.13	0.48
1:A:710:PHE:CD2	1:A:716:LEU:HD12	2.48	0.48
1:A:55:SER:HA	1:A:62:GLU:OE2	2.14	0.48
1:A:72:GLU:HG3	1:A:99:LEU:HD13	1.96	0.48
1:A:487:ILE:CG1	1:A:665:ARG:HH11	2.27	0.48
1:A:1176:GLU:O	1:A:1177:LEU:C	2.52	0.48
1:A:947:LEU:HD11	1:A:966:ILE:HG21	1.96	0.48
1:A:996:ASN:OD1	1:A:1013:ASN:N	2.47	0.48
1:A:1113:TRP:O	1:A:1114:ALA:C	2.52	0.48
1:A:481:LEU:HD22	1:A:890:THR:HB	1.96	0.47
1:A:845:LEU:HB2	1:A:849:CYS:HB3	1.95	0.47
1:A:214:GLN:HG2	1:A:1112:ILE:CD1	2.39	0.47
1:A:336:LEU:HD11	1:A:992:VAL:HG11	1.96	0.47
1:A:489:GLN:HA	1:A:489:GLN:NE2	2.30	0.47
1:A:170:LEU:CD2	1:A:177:VAL:HG22	2.37	0.47
1:A:228:PHE:CE2	1:A:230:LEU:HD13	2.48	0.47
1:A:345:TYR:CE2	1:A:385:VAL:HG13	2.49	0.47
1:A:1054:GLU:HA	1:A:1057:ARG:NH1	2.30	0.47
1:A:1059:ILE:HG13	1:A:1125:TYR:CE1	2.49	0.47
1:A:1183:PHE:CG	1:A:1183:PHE:O	2.67	0.47
1:A:166:LEU:HD23	1:A:183:LEU:HD13	1.96	0.47
1:A:358:LEU:HD11	1:A:385:VAL:CG1	2.44	0.47
1:A:925:SER:O	1:A:926:ILE:HB	2.14	0.47
1:A:175:PHE:HB2	1:A:1109:LEU:CD1	2.34	0.47
1:A:947:LEU:O	1:A:948:GLU:HG2	2.15	0.47
1:A:947:LEU:HD21	1:A:958:PHE:CZ	2.48	0.47
1:A:146:LEU:HD21	1:A:206:TYR:CD2	2.50	0.47
1:A:192:ALA:HB2	1:A:201:GLN:HE22	1.79	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:648:TYR:HB3	1:A:651:LEU:HD13	1.97	0.47
1:A:41:ARG:HD2	1:A:54:TRP:HD1	1.79	0.47
1:A:399:PHE:CD1	1:A:399:PHE:N	2.83	0.46
1:A:138:THR:CB	1:A:296:SER:OG	2.62	0.46
1:A:333:GLY:N	1:A:1015:GLN:HG3	2.26	0.46
1:A:707:SER:HB2	1:A:1079:SER:HA	1.96	0.46
1:A:491:TRP:HZ2	1:A:867:LYS:O	1.98	0.46
1:A:1019:LYS:HD2	1:A:1090:CYS:SG	2.55	0.46
1:A:45:VAL:HG11	1:A:129:LEU:CD1	2.45	0.46
1:A:425:PHE:CD2	1:A:451:ILE:CD1	2.99	0.46
1:A:1005:CYS:HB3	1:A:1050:PRO:CB	2.46	0.46
1:A:1108:GLY:O	1:A:1111:PRO:HD3	2.15	0.46
1:A:457:LYS:HG2	1:A:938:LYS:NZ	2.31	0.46
1:A:1052:PRO:O	1:A:1057:ARG:NH2	2.49	0.46
1:A:170:LEU:O	1:A:173:ILE:HG12	2.16	0.46
1:A:730:ARG:H	1:A:730:ARG:CD	2.28	0.46
1:A:845:LEU:O	1:A:992:VAL:HG21	2.16	0.46
1:A:109:LEU:HD21	1:A:111:LEU:HD11	1.97	0.46
1:A:218:LEU:HD21	1:A:291:LEU:HB2	1.97	0.46
1:A:700:ARG:HG2	1:A:700:ARG:NH1	2.27	0.46
1:A:870:LYS:N	1:A:870:LYS:HD2	2.31	0.46
1:A:947:LEU:HA	1:A:956:ARG:HH22	1.80	0.46
1:A:236:PRO:O	1:A:237:ASP:HB3	2.16	0.46
1:A:295:PHE:CD1	1:A:1181:LEU:HB2	2.51	0.45
1:A:693:CYS:HB2	1:A:1142:PHE:HE2	1.80	0.45
1:A:210:MET:HE3	1:A:210:MET:HA	1.97	0.45
1:A:221:PHE:HZ	1:A:294:LEU:CD1	2.28	0.45
1:A:241:VAL:HG22	1:A:285:LEU:O	2.16	0.45
1:A:447:LEU:N	1:A:447:LEU:HD12	2.31	0.45
1:A:104:PHE:O	1:A:105:VAL:C	2.53	0.45
1:A:332:THR:O	1:A:338:SER:OG	2.25	0.45
1:A:421:PHE:HB3	1:A:429:LEU:HD21	1.99	0.45
1:A:644:LYS:HD3	1:A:714:VAL:HG12	1.97	0.45
1:A:145:TRP:O	1:A:148:LYS:N	2.50	0.45
1:A:367:LYS:H	1:A:367:LYS:HG2	1.48	0.45
1:A:139:PRO:HD3	1:A:272:PHE:CE1	2.51	0.45
1:A:173:ILE:O	1:A:174:ASN:HB3	2.17	0.45
1:A:355:CYS:SG	1:A:355:CYS:O	2.75	0.45
1:A:867:LYS:HD2	1:A:887:GLU:OE2	2.17	0.45
1:A:208:LYS:HD3	1:A:236:PRO:HG2	1.98	0.45
1:A:376:ARG:HD2	1:A:480:GLU:HG3	1.97	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:680:TYR:N	1:A:680:TYR:CD1	2.84	0.45
1:A:33:PHE:CB	1:A:84:ARG:HG3	2.46	0.45
1:A:153:VAL:HG23	1:A:154:ASP:N	2.32	0.45
1:A:641:HIS:O	1:A:641:HIS:CD2	2.70	0.45
1:A:245:ASP:O	1:A:248:ARG:HG2	2.17	0.44
1:A:425:PHE:HD2	1:A:429:LEU:HD13	1.82	0.44
1:A:130:HIS:CE1	1:A:134:MET:SD	3.11	0.44
1:A:481:LEU:CD2	1:A:890:THR:HB	2.47	0.44
1:A:669:PHE:O	1:A:735:VAL:HG23	2.17	0.44
1:A:934:VAL:O	1:A:934:VAL:HG12	2.18	0.44
1:A:218:LEU:HD13	1:A:287:VAL:CG1	2.47	0.44
1:A:491:TRP:CZ3	1:A:889:ALA:HB3	2.52	0.44
1:A:930:LEU:HD13	1:A:930:LEU:O	2.18	0.44
1:A:979:GLN:HG2	1:A:980:LYS:HG3	1.98	0.44
1:A:36:SER:OG	1:A:37:THR:N	2.51	0.44
1:A:89:ARG:HA	1:A:89:ARG:NH2	2.33	0.44
1:A:223:LYS:HD3	1:A:224:ASP:N	2.32	0.44
1:A:485:ASP:HB3	1:A:487:ILE:HD13	2.00	0.44
1:A:534:HIS:CB	1:A:638:PRO:HB3	2.48	0.44
1:A:696:ASN:HB2	1:A:703:VAL:HG23	1.98	0.44
1:A:54:TRP:HZ3	1:A:65:LEU:CD1	2.30	0.44
1:A:668:ALA:HB1	1:A:735:VAL:HG22	2.00	0.44
1:A:835:LEU:O	1:A:839:ILE:N	2.45	0.44
1:A:1106:ASP:O	1:A:1107:ASN:HB3	2.18	0.44
1:A:151:TYR:O	1:A:154:ASP:O	2.36	0.44
1:A:245:ASP:HA	1:A:248:ARG:HG2	2.00	0.44
1:A:982:LEU:HD22	1:A:1008:GLN:HG2	2.00	0.44
1:A:170:LEU:HA	1:A:173:ILE:HG12	2.00	0.43
1:A:199:PHE:CD1	1:A:199:PHE:C	2.91	0.43
1:A:214:GLN:CG	1:A:1112:ILE:HD11	2.40	0.43
1:A:1087:VAL:HG12	1:A:1122:PHE:CE2	2.53	0.43
1:A:286:PHE:O	1:A:289:GLU:N	2.50	0.43
1:A:988:LYS:CD	1:A:990:GLN:HB2	2.48	0.43
1:A:58:ALA:O	1:A:59:ASP:HB3	2.18	0.43
1:A:298:GLU:OE2	1:A:298:GLU:N	2.42	0.43
1:A:345:TYR:CD2	1:A:385:VAL:HG13	2.53	0.43
1:A:685:ARG:HE	1:A:688:GLY:HA2	1.82	0.43
1:A:855:LEU:HD23	1:A:855:LEU:HA	1.80	0.43
1:A:1099:PHE:CD1	1:A:1120:VAL:HB	2.53	0.43
1:A:1105:ASN:OD1	1:A:1106:ASP:N	2.46	0.43
1:A:648:TYR:CD2	1:A:651:LEU:HD22	2.53	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1082:CYS:O	1:A:1138:GLU:HA	2.17	0.43
1:A:1116:THR:O	1:A:1118:GLU:N	2.52	0.43
1:A:256:GLU:C	1:A:258:TRP:H	2.22	0.43
1:A:447:LEU:HD22	1:A:452:ILE:HD11	1.99	0.43
1:A:481:LEU:HD21	1:A:899:TRP:CD1	2.53	0.43
1:A:1089:ILE:HG12	1:A:1122:PHE:CD2	2.53	0.43
1:A:429:LEU:HD12	1:A:429:LEU:HA	1.83	0.43
1:A:660:LEU:HD13	1:A:735:VAL:HG21	1.99	0.43
1:A:873:VAL:HG22	1:A:874:PHE:N	2.34	0.43
1:A:1015:GLN:OE1	1:A:1015:GLN:N	2.34	0.43
1:A:173:ILE:HD12	1:A:1109:LEU:CD2	2.48	0.43
1:A:325:SER:HA	1:A:355:CYS:HB3	2.00	0.43
1:A:534:HIS:NE2	1:A:635:VAL:O	2.52	0.43
1:A:322:TRP:CH2	1:A:1040:PRO:HD3	2.53	0.43
1:A:358:LEU:HD23	1:A:370:ILE:HD11	2.01	0.43
1:A:1040:PRO:HD2	1:A:1043:MET:HE2	2.01	0.43
1:A:1001:ARG:HH12	1:A:1093:GLU:HB2	1.83	0.43
1:A:165:GLU:O	1:A:168:THR:N	2.51	0.42
1:A:354:ARG:O	1:A:355:CYS:HB2	2.19	0.42
1:A:579:ARG:CZ	1:A:627:PHE:HB3	2.49	0.42
1:A:327:HIS:CG	1:A:987:PRO:HD2	2.54	0.42
1:A:345:TYR:O	1:A:346:ILE:C	2.58	0.42
1:A:1004:LEU:HD22	1:A:1050:PRO:HA	2.00	0.42
1:A:1039:GLN:HB3	1:A:1043:MET:HE1	2.00	0.42
1:A:1180:LEU:O	1:A:1182:VAL:HG13	2.19	0.42
1:A:149:GLN:O	1:A:152:SER:HB3	2.19	0.42
1:A:227:VAL:HG21	1:A:252:HIS:ND1	2.33	0.42
1:A:860:VAL:HB	1:A:903:ILE:CG2	2.49	0.42
1:A:1089:ILE:O	1:A:1089:ILE:HG22	2.18	0.42
1:A:56:LYS:N	1:A:62:GLU:OE2	2.51	0.42
1:A:67:ILE:O	1:A:68:MET:C	2.57	0.42
1:A:256:GLU:O	1:A:258:TRP:HD1	2.02	0.42
1:A:280:THR:OG1	1:A:281:ALA:N	2.53	0.42
1:A:294:LEU:O	1:A:1164:SER:HB2	2.20	0.42
1:A:455:HIS:C	1:A:939:PRO:HG2	2.40	0.42
1:A:948:GLU:O	1:A:949:ASN:C	2.58	0.42
1:A:1049:ASP:HB2	1:A:1052:PRO:HB3	2.02	0.42
1:A:404:SER:HA	1:A:454:LYS:HG3	2.01	0.42
1:A:1136:VAL:HG22	1:A:1180:LEU:HD11	1.96	0.42
1:A:31:PHE:O	1:A:110:SER:OG	2.38	0.42
1:A:175:PHE:CD2	1:A:209:LEU:HD21	2.54	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:221:PHE:CZ	1:A:294:LEU:HD11	2.46	0.42
1:A:693:CYS:HB2	1:A:1142:PHE:CE2	2.55	0.42
1:A:382:PHE:CZ	1:A:417:MET:HG2	2.55	0.42
1:A:492:THR:O	1:A:494:HIS:CD2	2.73	0.42
1:A:648:TYR:HB3	1:A:651:LEU:HB2	2.02	0.42
1:A:958:PHE:O	1:A:985:VAL:HA	2.20	0.42
1:A:201:GLN:O	1:A:202:PHE:C	2.58	0.42
1:A:327:HIS:HB2	1:A:987:PRO:HG2	2.02	0.42
1:A:386:VAL:HG13	1:A:424:VAL:HG11	2.01	0.42
1:A:399:PHE:HB3	1:A:400:PRO:HD2	2.02	0.42
1:A:455:HIS:CE1	1:A:926:ILE:HD12	2.55	0.42
1:A:492:THR:O	1:A:494:HIS:HD2	2.03	0.42
1:A:1015:GLN:H	1:A:1015:GLN:CD	2.21	0.42
1:A:1057:ARG:O	1:A:1058:LYS:HB3	2.20	0.42
1:A:1058:LYS:C	1:A:1059:ILE:HD12	2.40	0.42
1:A:1150:HIS:O	1:A:1150:HIS:CG	2.73	0.42
1:A:70:ILE:HD13	1:A:98:ILE:HG21	2.01	0.41
1:A:122:TRP:O	1:A:125:GLY:N	2.53	0.41
1:A:177:VAL:CG1	1:A:183:LEU:HG	2.50	0.41
1:A:316:ASN:O	1:A:321:TYR:HE2	2.02	0.41
1:A:405:ILE:HD11	1:A:421:PHE:HZ	1.85	0.41
1:A:943:THR:O	1:A:946:ASN:N	2.47	0.41
1:A:955:ILE:HG13	1:A:982:LEU:O	2.20	0.41
1:A:1012:LEU:HD12	1:A:1012:LEU:N	2.34	0.41
1:A:1092:ALA:HB3	1:A:1094:TYR:CE1	2.55	0.41
1:A:1167:LEU:HD11	1:A:1180:LEU:HG	2.02	0.41
1:A:121:ASN:O	1:A:125:GLY:N	2.42	0.41
1:A:138:THR:HG23	1:A:139:PRO:N	2.36	0.41
1:A:153:VAL:HG23	1:A:154:ASP:H	1.85	0.41
1:A:309:VAL:HG22	1:A:1034:THR:HG23	2.02	0.41
1:A:670:LEU:N	1:A:683:THR:O	2.43	0.41
1:A:285:LEU:HD23	1:A:285:LEU:HA	1.88	0.41
1:A:373:GLY:O	1:A:374:TRP:HB2	2.20	0.41
1:A:726:TYR:CD1	1:A:727:ARG:HG2	2.55	0.41
1:A:1070:ALA:HA	1:A:1179:SER:O	2.21	0.41
1:A:54:TRP:CZ3	1:A:65:LEU:HD12	2.50	0.41
1:A:177:VAL:HG11	1:A:183:LEU:HG	2.02	0.41
1:A:214:GLN:HB2	1:A:291:LEU:HD21	2.03	0.41
1:A:358:LEU:HB2	1:A:403:LEU:HD21	2.02	0.41
1:A:892:ARG:HB3	1:A:894:GLU:OE2	2.20	0.41
1:A:1030:LEU:HD11	1:A:1156:LYS:CE	2.49	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:506:SER:HA	1:A:850:ARG:H	1.85	0.41
1:A:963:ALA:O	1:A:964:ASP:C	2.59	0.41
1:A:985:VAL:CG2	1:A:1002:LEU:HD22	2.41	0.41
1:A:249:PHE:CD2	1:A:290:PHE:HZ	2.38	0.41
1:A:509:ILE:O	1:A:510:GLU:C	2.59	0.41
1:A:1071:ARG:O	1:A:1178:ALA:HA	2.20	0.41
1:A:256:GLU:C	1:A:258:TRP:N	2.74	0.41
1:A:666:ASP:OD2	1:A:686:ALA:HA	2.19	0.41
1:A:1004:LEU:HD11	1:A:1094:TYR:OH	2.21	0.41
1:A:57:THR:HG22	1:A:60:LYS:HE2	2.03	0.41
1:A:205:PHE:O	1:A:206:TYR:C	2.59	0.41
1:A:1017:ALA:HB2	1:A:1171:TYR:CE1	2.55	0.41
1:A:1063:LEU:HD21	1:A:1132:LEU:HD22	2.01	0.41
1:A:1159:LYS:HB2	1:A:1163:ARG:CD	2.50	0.41
1:A:30:VAL:HG22	1:A:111:LEU:HD22	2.01	0.41
1:A:217:ILE:CD1	1:A:295:PHE:HZ	2.34	0.41
1:A:293:TYR:O	1:A:294:LEU:C	2.59	0.41
1:A:448:ARG:HG2	1:A:449:GLU:HG2	2.02	0.41
1:A:501:ALA:O	1:A:855:LEU:HB2	2.21	0.41
1:A:573:TYR:CZ	1:A:610:ILE:HD11	2.55	0.41
1:A:726:TYR:O	1:A:727:ARG:C	2.58	0.41
1:A:965:SER:HA	1:A:968:ARG:HG2	2.02	0.41
1:A:993:ASP:OD1	1:A:995:SER:N	2.44	0.41
1:A:75:PRO:O	1:A:95:CYS:O	2.39	0.41
1:A:835:LEU:O	1:A:838:GLN:HB3	2.21	0.41
1:A:979:GLN:O	1:A:980:LYS:HB2	2.21	0.41
1:A:42:THR:O	1:A:54:TRP:HA	2.21	0.40
1:A:348:CYS:C	1:A:353:CYS:SG	3.00	0.40
1:A:700:ARG:O	1:A:700:ARG:CD	2.69	0.40
1:A:871:SER:O	1:A:872:PHE:C	2.58	0.40
1:A:974:LEU:HD23	1:A:1005:CYS:HG	1.86	0.40
1:A:993:ASP:O	1:A:994:SER:CB	2.69	0.40
1:A:999:PRO:HD3	1:A:1020:TYR:HB3	2.03	0.40
1:A:669:PHE:HA	1:A:683:THR:O	2.21	0.40
1:A:860:VAL:HA	1:A:876:LEU:HD23	2.03	0.40
1:A:1072:HIS:O	1:A:1073:LEU:C	2.60	0.40
1:A:123:LEU:HD23	1:A:123:LEU:HA	1.89	0.40
1:A:228:PHE:CD2	1:A:230:LEU:HB2	2.56	0.40
1:A:276:THR:O	1:A:279:GLU:HB3	2.21	0.40
1:A:300:SER:HA	1:A:1164:SER:O	2.21	0.40
1:A:349:LEU:CD1	1:A:356:ILE:HG21	2.45	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:359:ASP:O	1:A:370:ILE:HG23	2.20	0.40
1:A:1163:ARG:HG2	1:A:1163:ARG:NH1	2.37	0.40
1:A:28:MET:HE3	1:A:122:TRP:NE1	2.36	0.40
1:A:404:SER:HA	1:A:454:LYS:CG	2.52	0.40
1:A:448:ARG:O	1:A:449:GLU:HB2	2.22	0.40
1:A:641:HIS:CD2	1:A:680:TYR:CE2	3.09	0.40
1:A:685:ARG:NH1	1:A:685:ARG:HG3	2.36	0.40
1:A:947:LEU:HA	1:A:956:ARG:NH2	2.36	0.40
1:A:208:LYS:CD	1:A:236:PRO:HG2	2.51	0.40
1:A:285:LEU:HD22	1:A:289:GLU:HB3	2.03	0.40
1:A:483:MET:HE3	1:A:494:HIS:CD2	2.57	0.40
1:A:641:HIS:HB3	1:A:713:LEU:CB	2.49	0.40
1:A:945:ASP:OD1	1:A:946:ASN:N	2.55	0.40
1:A:1111:PRO:O	1:A:1112:ILE:HD13	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 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	1035/1265 (82%)	922 (89%)	91 (9%)	22 (2%)	5	32

All (22) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	81	ASP
1	A	227	VAL
1	A	327	HIS
1	A	355	CYS
1	A	948	GLU
1	A	1045	THR
1	A	1107	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1115	PRO
1	A	1177	LEU
1	A	222	LYS
1	A	438	ALA
1	A	487	ILE
1	A	638	PRO
1	A	944	LYS
1	A	642	GLU
1	A	926	ILE
1	A	937	CYS
1	A	1083	PRO
1	A	1117	GLN
1	A	68	MET
1	A	636	PRO
1	A	1105	ASN

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	950/1158 (82%)	847 (89%)	103 (11%)	5	24

All (103) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	14	GLU
1	A	26	THR
1	A	28	MET
1	A	34	ARG
1	A	37	THR
1	A	40	ARG
1	A	47	MET
1	A	89	ARG
1	A	90	GLN
1	A	92	GLU
1	A	102	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	114	ASP
1	A	118	ASP
1	A	131	GLN
1	A	134	MET
1	A	135	ASN
1	A	141	ILE
1	A	157	ARG
1	A	169	ILE
1	A	186	LYS
1	A	187	PHE
1	A	193	HIS
1	A	196	GLU
1	A	202	PHE
1	A	206	TYR
1	A	232	ASN
1	A	242	TYR
1	A	243	LEU
1	A	245	ASP
1	A	248	ARG
1	A	249	PHE
1	A	261	ASP
1	A	289	GLU
1	A	311	MET
1	A	318	LEU
1	A	319	SER
1	A	330	TYR
1	A	358	LEU
1	A	360	CYS
1	A	362	ASP
1	A	367	LYS
1	A	371	TYR
1	A	386	VAL
1	A	391	ASP
1	A	403	LEU
1	A	407	GLU
1	A	411	VAL
1	A	423	GLU
1	A	441	LEU
1	A	443	SER
1	A	475	HIS
1	A	477	GLN
1	A	487	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	490	LYS
1	A	496	CYS
1	A	500	ASP
1	A	636	PRO
1	A	659	MET
1	A	661	MET
1	A	673	LYS
1	A	680	TYR
1	A	685	ARG
1	A	690	VAL
1	A	692	HIS
1	A	700	ARG
1	A	707	SER
1	A	713	LEU
1	A	716	LEU
1	A	728	LYS
1	A	729	MET
1	A	730	ARG
1	A	736	THR
1	A	838	GLN
1	A	841	GLU
1	A	848	LEU
1	A	852	ILE
1	A	870	LYS
1	A	874	PHE
1	A	890	THR
1	A	930	LEU
1	A	968	ARG
1	A	970	LYS
1	A	976	LYS
1	A	997	TYR
1	A	1014	PHE
1	A	1021	MET
1	A	1025	HIS
1	A	1037	VAL
1	A	1049	ASP
1	A	1051	MET
1	A	1061	MET
1	A	1090	CYS
1	A	1094	TYR
1	A	1096	ASN
1	A	1102	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1104	VAL
1	A	1115	PRO
1	A	1120	VAL
1	A	1141	MET
1	A	1142	PHE
1	A	1146	ASN
1	A	1155	ILE
1	A	1186	MET

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (18) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	51	GLN
1	A	90	GLN
1	A	232	ASN
1	A	254	GLN
1	A	316	ASN
1	A	328	ASN
1	A	335	GLN
1	A	372	HIS
1	A	413	GLN
1	A	446	GLN
1	A	477	GLN
1	A	489	GLN
1	A	637	ASN
1	A	856	ASN
1	A	868	ASN
1	A	979	GLN
1	A	1031	ASN
1	A	1146	ASN

5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides 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.