



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 12, 2017 – 06:07 pm GMT

PDB ID : 1FR0  
Title : SOLUTION STRUCTURE OF THE HISTIDINE-CONTAINING PHOSPHOTRANSFER DOMAIN OF ANAEROBIC SENSOR KINASE ARCB FROM ESCHERICHIA COLI.  
Authors : Ikegami, T.; Okada, T.; Ohki, I.; Hirayama, J.; Mizuno, T.; Shirakawa, M.  
Deposited on : 2000-09-07

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

We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto:validation@mail.wwpdb.org)

A user guide is available at

<http://wwpdb.org/validation/2016/NMRValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

---

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

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)  
NmrClust : Kelley et al. (1996)  
MolProbity : 4.02b-467  
Percentile statistics : 20161228.v01 (using entries in the PDB archive December 28th 2016)  
RCI : v\_1n\_11\_5\_13\_A (Berjanski et al., 2005)  
PANAV : Wang et al. (2010)  
ShiftChecker : trunk28760  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : recalc28949

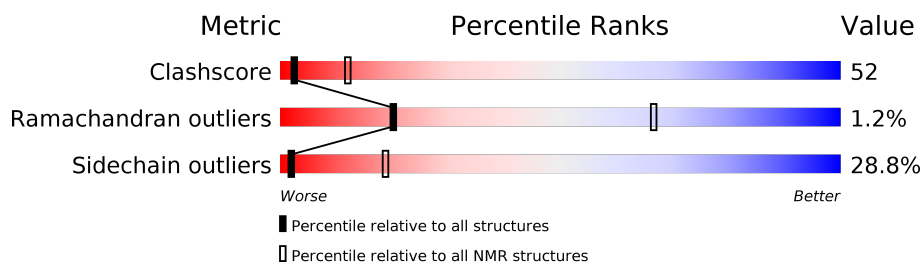
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	125131	11601
Ramachandran outliers	121729	10391
Sidechain outliers	121581	10367

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the experimental data. The red, orange, yellow and green segments indicate the fraction of residues that contain outliers for  $\geq 3$ , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. A cyan segment indicates the fraction of residues that are not part of the well-defined cores, and 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	125	<div> <div>23%</div> <div>59%</div> <div>8%</div> <div>• 9%</div> </div>

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 30 models. Model 28 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

The following residues are included in the computation of the global validation metrics.

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:662-A:775 (114)	0.33	28

Ill-defined regions of proteins are excluded from the global statistics.

Ligands and non-protein polymers are included in the analysis.

The models can be grouped into 4 clusters and 1 single-model cluster was found.

Cluster number	Models
1	3, 4, 5, 6, 7, 8, 12, 15, 16, 17, 20, 21, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 30
2	1, 10, 11, 19, 29
3	9, 18, 22
4	13, 14
Single-model clusters	2

### 3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1966 atoms, of which 984 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called ARCB.

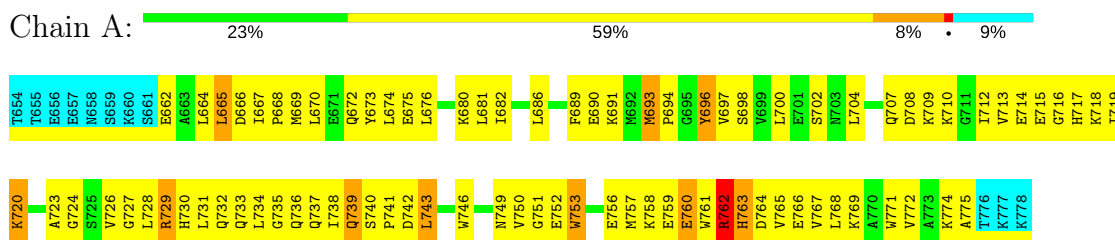
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	125	Total	C	H	N	O	S	0
			1966	624	984	163	191	4	

## 4 Residue-property plots

### 4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA and DNA chains in the entry. The first graphic is the same as shown in the summary in section 1 of this report. The second graphic shows the sequence where residues are colour-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 outliers are shown as green connectors. Residues which are classified as ill-defined in the NMR ensemble, are shown in cyan with an underline colour-coded according to the previous scheme. Residues which were present in the experimental sample, but not modelled in the final structure are shown in grey.

- Molecule 1: ARCB

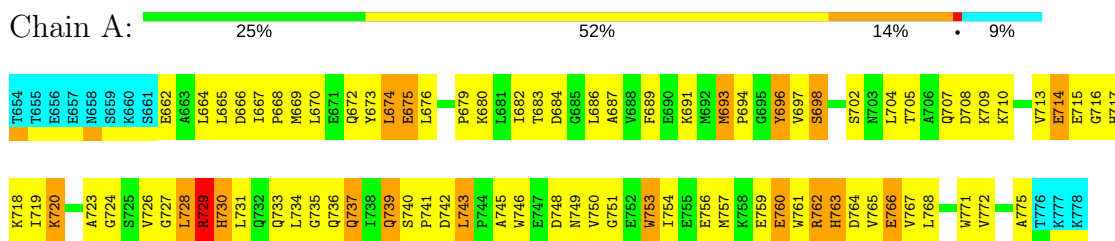


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

#### 4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: ARCB

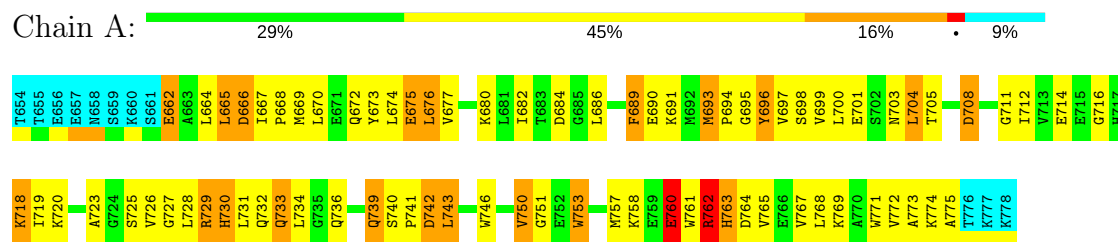


#### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: ARCB

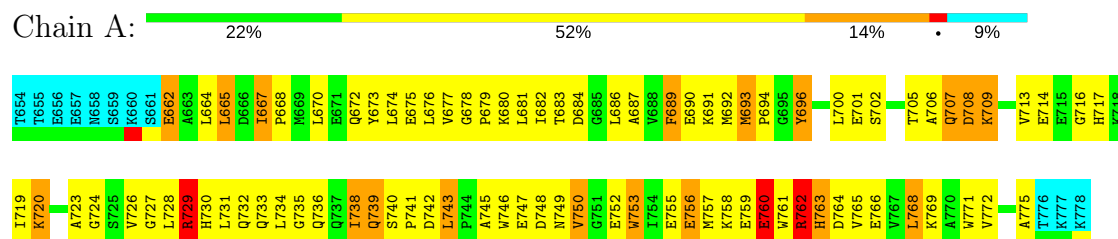






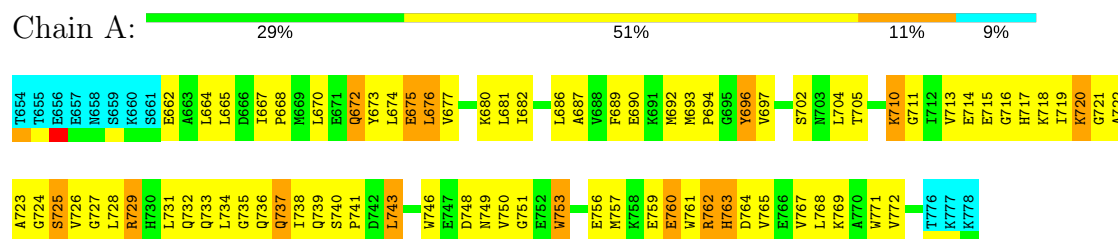
#### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: ARCB



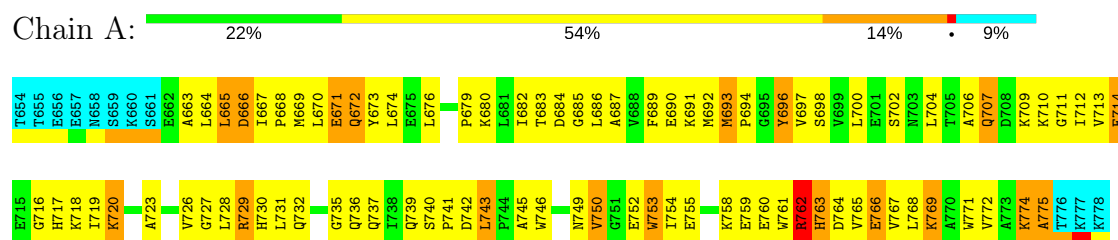
#### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: ARCB



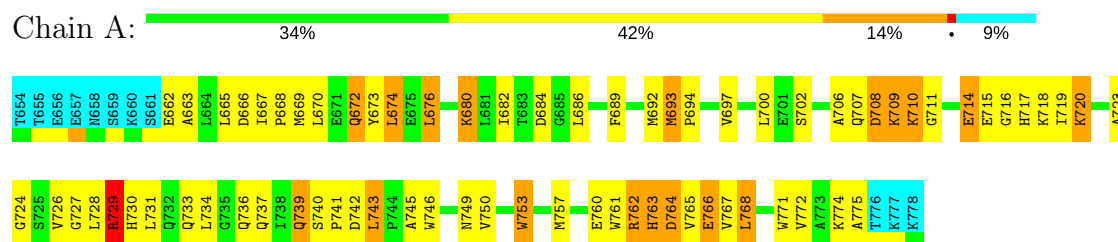
#### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: ARCB



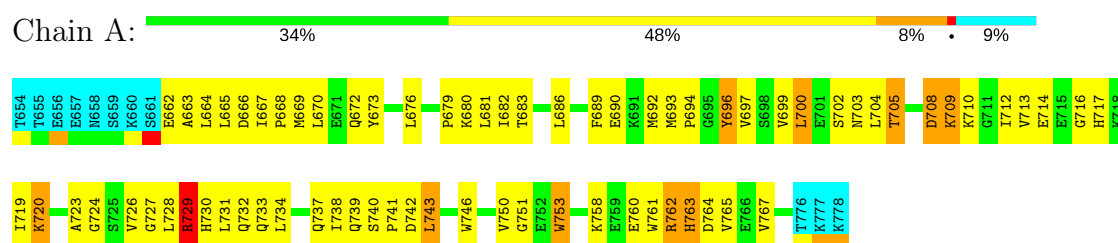
### 4.2.10 Score per residue for model 10

#### • Molecule 1: ARCB



### 4.2.11 Score per residue for model 11

#### • Molecule 1: ARCB



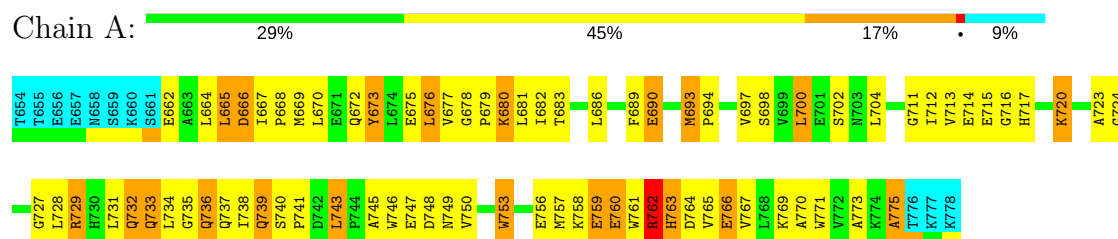
### 4.2.12 Score per residue for model 12

#### • Molecule 1: ARCB



### 4.2.13 Score per residue for model 13

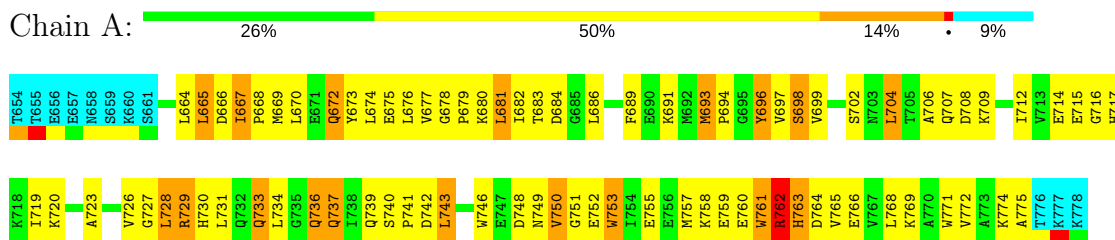
#### • Molecule 1: ARCB





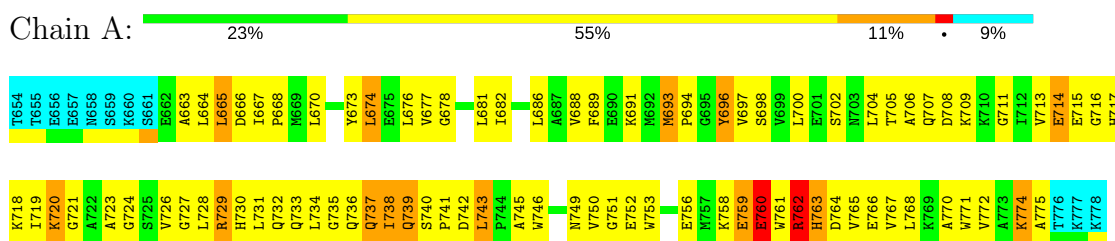
## 4.2.14 Score per residue for model 14

## • Molecule 1: ARCB



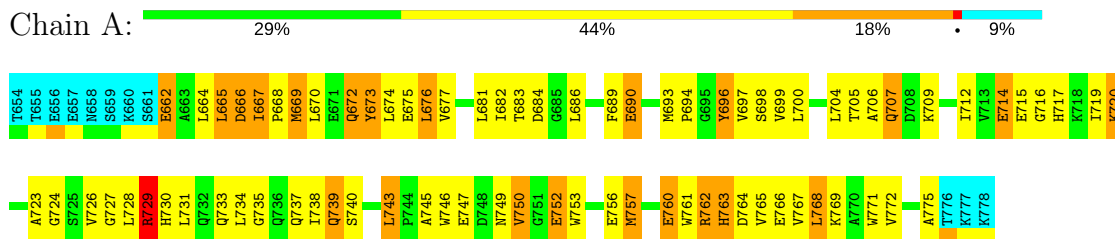
## 4.2.15 Score per residue for model 15

## • Molecule 1: ARCB



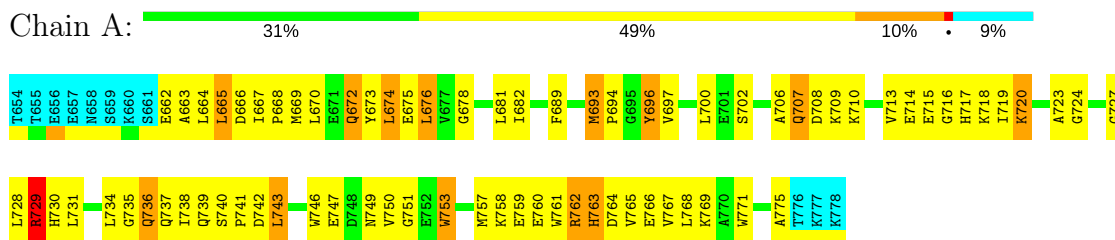
## 4.2.16 Score per residue for model 16

## • Molecule 1: ARCB



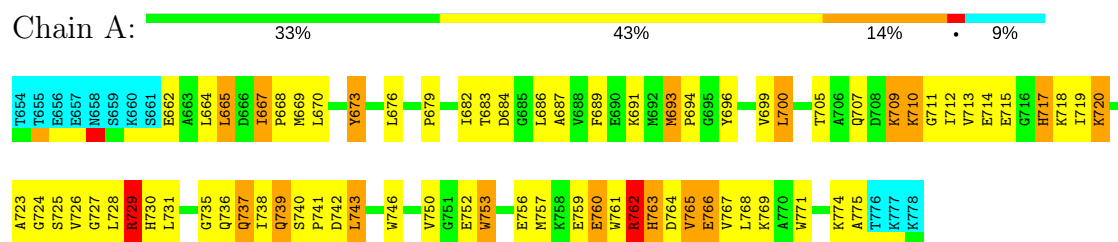
## 4.2.17 Score per residue for model 17

## • Molecule 1: ARCB



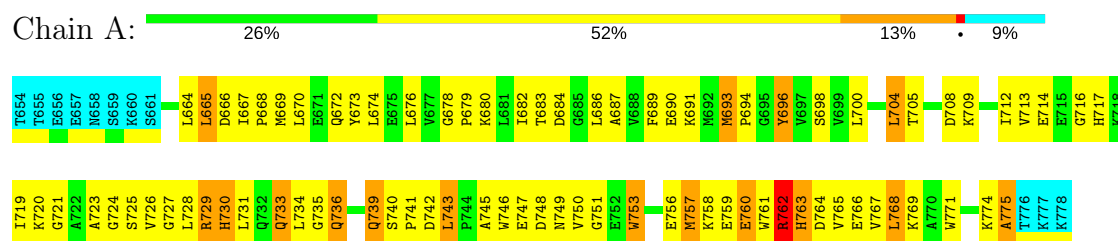
## 4.2.18 Score per residue for model 18

## • Molecule 1: ARCB



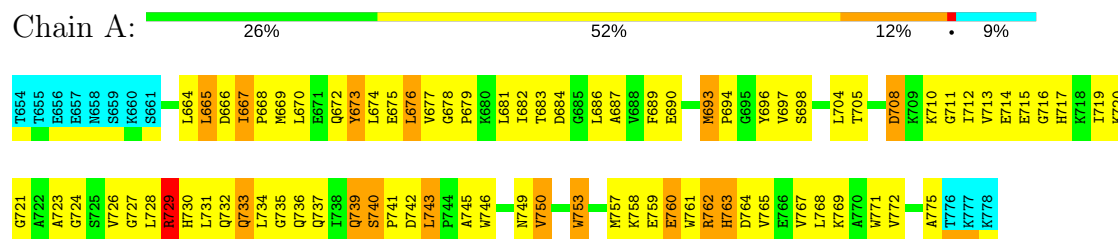
## 4.2.19 Score per residue for model 19

## • Molecule 1: ARCB



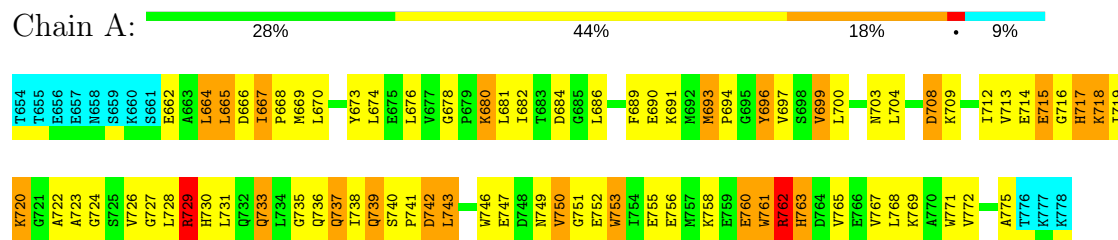
## 4.2.20 Score per residue for model 20

## • Molecule 1: ARCB



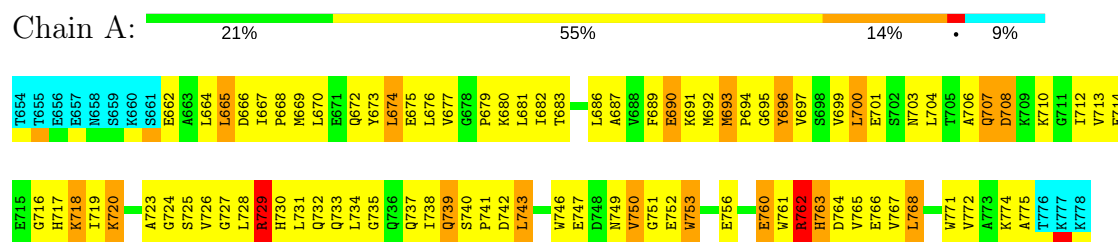
## 4.2.21 Score per residue for model 21

## • Molecule 1: ARCB



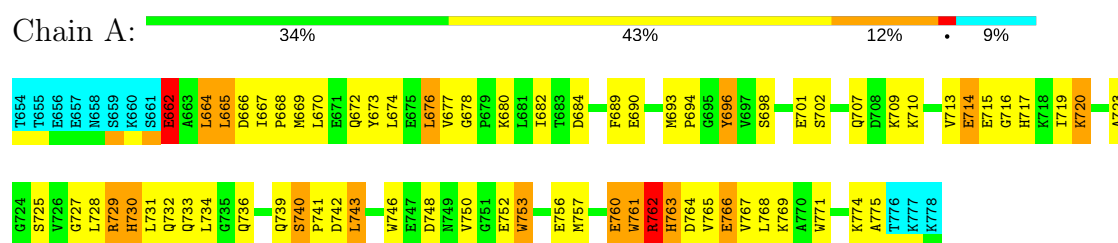
## 4.2.22 Score per residue for model 22

## • Molecule 1: ARCB



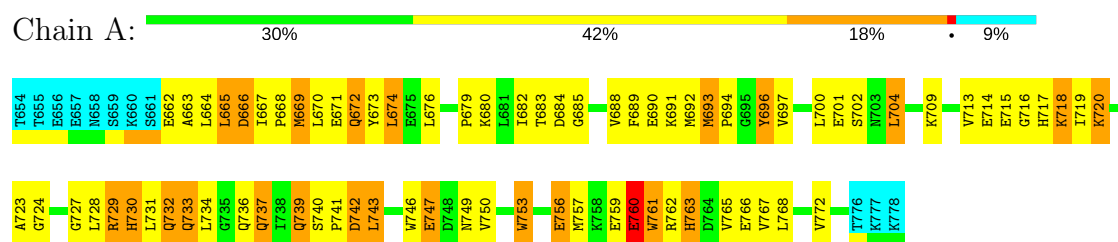
## 4.2.23 Score per residue for model 23

## • Molecule 1: ARCB



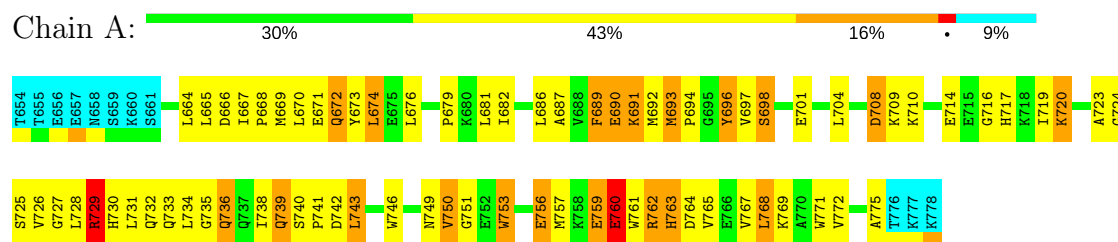
## 4.2.24 Score per residue for model 24

## • Molecule 1: ARCB



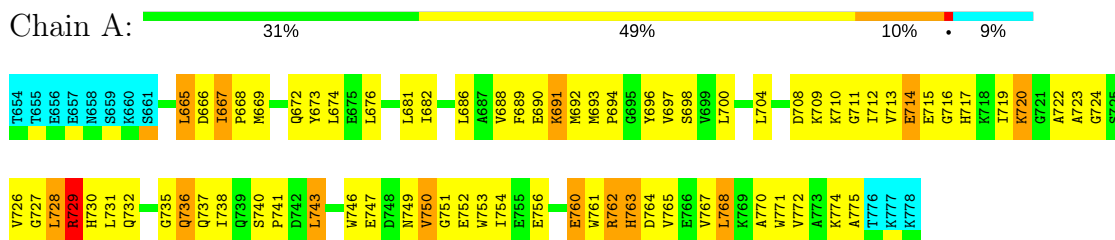
## 4.2.25 Score per residue for model 25

## • Molecule 1: ARCB



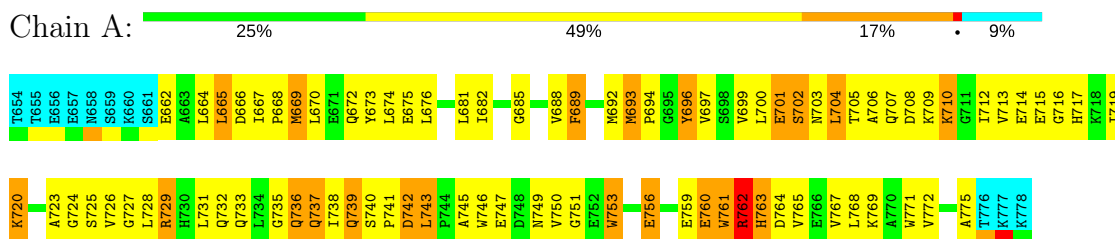
#### 4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: ARCB



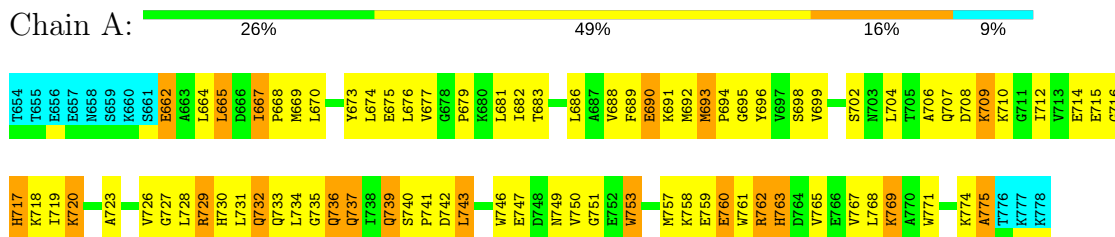
#### 4.2.27 Score per residue for model 27

- Molecule 1: ARCB



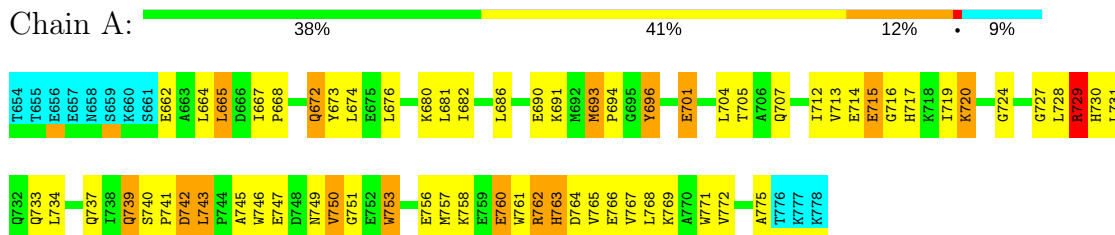
#### 4.2.28 Score per residue for model 28 (medoid)

- Molecule 1: ARCB



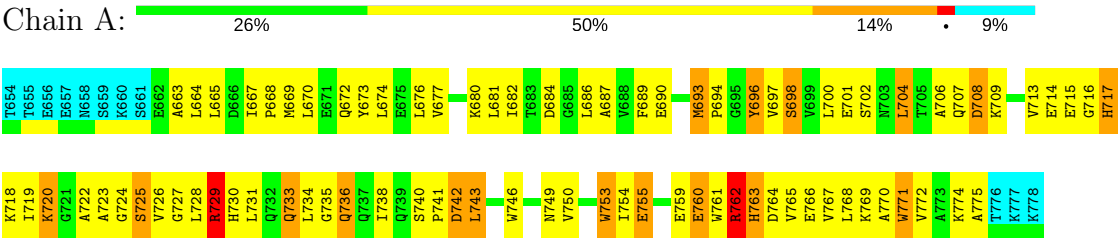
#### 4.2.29 Score per residue for model 29

- Molecule 1: ARCB



4.2.30 Score per residue for model 30

● Molecule 1: ARCB



## 5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *simulated annealing*.

Of the 100 calculated structures, 30 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

The following table shows the software used for structure solution, optimisation and refinement.

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	3.851
DYANA	structure solution	1.5

No chemical shift data was provided. No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.

## 6 Model quality [i](#)

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

There are no covalent bond-length or bond-angle outliers.

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	Planarity
1	A	0.0±0.0	1.9±0.2
All	All	0	58

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	729	ARG	Sidechain	29
1	A	762	ARG	Sidechain	29

### 6.2 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 each 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 averaged over the ensemble.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	897	897	897	94±9
All	All	26910	26910	26910	2823

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 52.

All unique clashes are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:676:LEU:HD12	1:A:677:VAL:HG13	1.07	1.25	12	6
1:A:674:LEU:HD11	1:A:772:VAL:HG22	1.03	1.17	1	5
1:A:689:PHE:CZ	1:A:723:ALA:HB2	1.03	1.88	30	19
1:A:676:LEU:HD12	1:A:677:VAL:HG23	1.01	1.29	20	3
1:A:686:LEU:HD21	1:A:765:VAL:HG13	0.97	1.33	2	4
1:A:677:VAL:HG11	1:A:681:LEU:HD23	0.95	1.36	20	3
1:A:689:PHE:CE2	1:A:723:ALA:HB2	0.94	1.98	7	13
1:A:728:LEU:HD11	1:A:765:VAL:CG2	0.93	1.93	7	22
1:A:670:LEU:HD11	1:A:768:LEU:HD13	0.93	1.36	17	13
1:A:728:LEU:HD11	1:A:765:VAL:HG22	0.92	1.40	1	17
1:A:715:GLU:O	1:A:719:ILE:HD12	0.89	1.68	30	10
1:A:730:HIS:CE1	1:A:734:LEU:HD11	0.88	2.02	11	3
1:A:728:LEU:HD22	1:A:731:LEU:HD23	0.88	1.41	17	3
1:A:673:TYR:HA	1:A:676:LEU:HD12	0.87	1.46	7	18
1:A:686:LEU:HD11	1:A:765:VAL:HG23	0.87	1.42	21	2
1:A:678:GLY:O	1:A:682:ILE:HD12	0.87	1.69	2	7
1:A:670:LEU:HD11	1:A:768:LEU:CD1	0.86	1.98	17	5
1:A:677:VAL:HG21	1:A:681:LEU:HD23	0.86	1.47	22	4
1:A:763:HIS:O	1:A:767:VAL:HG23	0.85	1.71	1	12
1:A:673:TYR:O	1:A:677:VAL:HG22	0.85	1.71	16	6
1:A:664:LEU:HD13	1:A:763:HIS:NE2	0.84	1.86	27	21
1:A:673:TYR:HB3	1:A:682:ILE:HD11	0.83	1.46	26	25
1:A:730:HIS:O	1:A:734:LEU:HD13	0.83	1.72	12	4
1:A:672:GLN:NE2	1:A:676:LEU:HD11	0.83	1.87	29	1
1:A:674:LEU:HD21	1:A:772:VAL:HG13	0.83	1.49	1	13
1:A:746:TRP:O	1:A:750:VAL:HG23	0.83	1.74	30	11
1:A:665:LEU:HD11	1:A:767:VAL:HB	0.82	1.51	5	2
1:A:670:LEU:HD11	1:A:768:LEU:CD2	0.81	2.05	10	1
1:A:670:LEU:CD1	1:A:768:LEU:HD13	0.80	2.06	20	6
1:A:686:LEU:HD11	1:A:765:VAL:HG13	0.80	1.52	7	3
1:A:676:LEU:HD12	1:A:677:VAL:N	0.80	1.91	15	2
1:A:761:TRP:CZ3	1:A:765:VAL:HG21	0.79	2.11	1	14
1:A:713:VAL:HG21	1:A:741:PRO:HG3	0.79	1.55	21	9
1:A:665:LEU:HD22	1:A:767:VAL:HG13	0.77	1.55	20	1
1:A:771:TRP:O	1:A:775:ALA:HB2	0.77	1.80	23	5
1:A:720:LYS:HG2	1:A:731:LEU:HD22	0.76	1.58	6	1
1:A:672:GLN:OE1	1:A:676:LEU:HD11	0.76	1.81	24	1
1:A:670:LEU:HD21	1:A:727:GLY:HA3	0.76	1.56	16	5
1:A:728:LEU:HD11	1:A:765:VAL:HG23	0.75	1.57	8	8
1:A:693:MET:O	1:A:697:VAL:HG22	0.75	1.81	8	1
1:A:731:LEU:HD21	1:A:761:TRP:HB2	0.74	1.59	21	6
1:A:676:LEU:HD12	1:A:677:VAL:CG2	0.74	2.12	20	2

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:731:LEU:HA	1:A:734:LEU:HD12	0.74	1.59	2	3
1:A:686:LEU:HD11	1:A:765:VAL:CG2	0.74	2.11	21	4
1:A:674:LEU:HD11	1:A:772:VAL:HG13	0.74	1.58	27	4
1:A:731:LEU:HD11	1:A:761:TRP:HB2	0.73	1.56	24	13
1:A:670:LEU:HD21	1:A:726:VAL:O	0.73	1.82	22	11
1:A:689:PHE:CE1	1:A:723:ALA:HB2	0.73	2.18	18	6
1:A:696:TYR:CD1	1:A:719:ILE:HD11	0.73	2.19	5	8
1:A:746:TRP:CH2	1:A:750:VAL:HG21	0.72	2.20	16	15
1:A:726:VAL:O	1:A:768:LEU:HD21	0.72	1.85	7	4
1:A:735:GLY:O	1:A:738:ILE:HG22	0.72	1.85	18	5
1:A:762:ARG:O	1:A:765:VAL:HG12	0.72	1.85	21	3
1:A:713:VAL:HG13	1:A:739:GLN:HA	0.72	1.61	27	8
1:A:672:GLN:HG2	1:A:676:LEU:HD11	0.71	1.62	27	2
1:A:673:TYR:CB	1:A:682:ILE:HD11	0.71	2.15	24	11
1:A:763:HIS:CE1	1:A:767:VAL:HG21	0.71	2.20	29	18
1:A:686:LEU:HB2	1:A:726:VAL:HG11	0.71	1.61	1	5
1:A:664:LEU:HD22	1:A:764:ASP:OD1	0.71	1.85	13	7
1:A:728:LEU:HD23	1:A:764:ASP:CG	0.71	2.06	22	3
1:A:693:MET:O	1:A:697:VAL:HG23	0.70	1.87	24	10
1:A:670:LEU:HD11	1:A:768:LEU:HD22	0.70	1.61	10	1
1:A:696:TYR:CZ	1:A:719:ILE:HD12	0.70	2.22	27	1
1:A:761:TRP:CZ3	1:A:765:VAL:HG11	0.69	2.22	21	2
1:A:670:LEU:O	1:A:674:LEU:HD12	0.69	1.87	16	2
1:A:693:MET:HE2	1:A:761:TRP:CE3	0.69	2.22	26	2
1:A:713:VAL:HG22	1:A:739:GLN:HA	0.69	1.64	17	3
1:A:686:LEU:HD21	1:A:765:VAL:CG1	0.69	2.17	2	2
1:A:665:LEU:HD22	1:A:767:VAL:CG1	0.69	2.18	20	1
1:A:672:GLN:CG	1:A:676:LEU:HD11	0.69	2.18	27	1
1:A:676:LEU:CD1	1:A:677:VAL:HG13	0.69	2.05	16	1
1:A:746:TRP:CD1	1:A:753:TRP:CZ3	0.69	2.81	19	15
1:A:731:LEU:HD21	1:A:761:TRP:CB	0.69	2.17	29	10
1:A:761:TRP:CD2	1:A:762:ARG:N	0.68	2.62	18	30
1:A:728:LEU:CD1	1:A:765:VAL:HG22	0.68	2.19	1	1
1:A:708:ASP:O	1:A:712:ILE:HD12	0.67	1.89	26	3
1:A:765:VAL:HA	1:A:768:LEU:HD23	0.67	1.66	4	3
1:A:746:TRP:CZ3	1:A:750:VAL:HG21	0.67	2.25	25	11
1:A:720:LYS:CG	1:A:731:LEU:HD22	0.67	2.20	6	1
1:A:681:LEU:C	1:A:681:LEU:HD12	0.66	2.10	20	6
1:A:674:LEU:HD12	1:A:682:ILE:HD12	0.66	1.68	27	1
1:A:768:LEU:HD12	1:A:768:LEU:C	0.66	2.11	26	4
1:A:677:VAL:HG12	1:A:680:LYS:HB2	0.66	1.68	2	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:681:LEU:HD12	1:A:681:LEU:O	0.66	1.90	22	5
1:A:713:VAL:HG22	1:A:738:ILE:O	0.65	1.91	21	3
1:A:731:LEU:HD22	1:A:731:LEU:N	0.65	2.06	12	3
1:A:670:LEU:HD21	1:A:768:LEU:CD1	0.65	2.21	28	2
1:A:734:LEU:HD23	1:A:757:MET:HG3	0.65	1.67	29	2
1:A:682:ILE:N	1:A:682:ILE:HD12	0.65	2.06	16	1
1:A:664:LEU:HD23	1:A:764:ASP:OD2	0.65	1.92	6	1
1:A:665:LEU:HD21	1:A:764:ASP:O	0.65	1.92	10	4
1:A:686:LEU:HD11	1:A:765:VAL:CG1	0.65	2.20	7	1
1:A:761:TRP:HZ3	1:A:765:VAL:HG21	0.65	1.53	12	25
1:A:771:TRP:CZ3	1:A:775:ALA:CB	0.64	2.80	3	18
1:A:665:LEU:HD21	1:A:767:VAL:CG1	0.64	2.21	16	6
1:A:700:LEU:HD13	1:A:715:GLU:OE2	0.64	1.91	17	1
1:A:681:LEU:HD12	1:A:681:LEU:C	0.64	2.12	3	2
1:A:686:LEU:HD13	1:A:726:VAL:HG11	0.63	1.69	25	12
1:A:665:LEU:HD11	1:A:767:VAL:CB	0.63	2.24	5	1
1:A:740:SER:O	1:A:743:LEU:HD12	0.63	1.94	8	30
1:A:722:ALA:O	1:A:726:VAL:HG23	0.63	1.93	21	1
1:A:672:GLN:HE21	1:A:676:LEU:HD11	0.63	1.54	29	1
1:A:704:LEU:HA	1:A:712:ILE:HD11	0.63	1.69	28	5
1:A:717:HIS:CD2	1:A:718:LYS:N	0.63	2.67	21	3
1:A:677:VAL:HG11	1:A:681:LEU:CD2	0.63	2.20	20	1
1:A:768:LEU:C	1:A:768:LEU:HD12	0.62	2.14	1	7
1:A:728:LEU:HD23	1:A:764:ASP:OD2	0.62	1.94	1	3
1:A:696:TYR:CZ	1:A:719:ILE:CG1	0.62	2.83	29	3
1:A:677:VAL:HB	1:A:681:LEU:HD23	0.62	1.71	30	1
1:A:761:TRP:CG	1:A:762:ARG:N	0.61	2.68	10	30
1:A:673:TYR:CA	1:A:676:LEU:HD12	0.61	2.25	9	11
1:A:696:TYR:CD1	1:A:719:ILE:CD1	0.61	2.83	5	8
1:A:672:GLN:O	1:A:676:LEU:HD12	0.61	1.95	10	3
1:A:768:LEU:HD12	1:A:768:LEU:O	0.61	1.95	7	1
1:A:665:LEU:CD2	1:A:767:VAL:HG12	0.61	2.26	29	4
1:A:734:LEU:HD23	1:A:757:MET:CE	0.61	2.25	14	1
1:A:731:LEU:HD21	1:A:761:TRP:HA	0.61	1.73	29	5
1:A:714:GLU:O	1:A:717:HIS:CD2	0.61	2.53	4	26
1:A:731:LEU:HD22	1:A:757:MET:SD	0.61	2.35	16	1
1:A:696:TYR:O	1:A:699:VAL:HG12	0.61	1.95	11	3
1:A:689:PHE:HE2	1:A:723:ALA:HB2	0.61	1.52	9	4
1:A:704:LEU:CA	1:A:712:ILE:HD11	0.61	2.25	9	4
1:A:746:TRP:CE2	1:A:750:VAL:CG2	0.61	2.84	17	7
1:A:686:LEU:CD2	1:A:765:VAL:HG13	0.61	2.19	2	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:700:LEU:HD11	1:A:712:ILE:HG23	0.61	1.71	12	3
1:A:771:TRP:O	1:A:775:ALA:HB3	0.60	1.96	30	3
1:A:689:PHE:CZ	1:A:723:ALA:CB	0.60	2.80	4	4
1:A:677:VAL:CG1	1:A:681:LEU:HD23	0.60	2.25	14	2
1:A:746:TRP:CZ2	1:A:750:VAL:CG2	0.60	2.85	8	9
1:A:673:TYR:HB2	1:A:682:ILE:HD11	0.60	1.73	2	2
1:A:731:LEU:N	1:A:731:LEU:HD22	0.60	2.12	18	5
1:A:667:ILE:N	1:A:668:PRO:CD	0.59	2.65	10	30
1:A:763:HIS:CE1	1:A:767:VAL:CG2	0.59	2.85	25	12
1:A:719:ILE:N	1:A:719:ILE:CD1	0.59	2.65	22	4
1:A:667:ILE:N	1:A:668:PRO:HD2	0.59	2.13	8	30
1:A:726:VAL:HG12	1:A:768:LEU:CD2	0.59	2.27	5	1
1:A:693:MET:CE	1:A:761:TRP:CD2	0.59	2.85	26	1
1:A:746:TRP:CH2	1:A:750:VAL:CG2	0.59	2.86	25	6
1:A:731:LEU:HD21	1:A:761:TRP:CA	0.59	2.28	29	4
1:A:730:HIS:CG	1:A:764:ASP:OD2	0.59	2.56	26	3
1:A:723:ALA:HB1	1:A:728:LEU:HD12	0.59	1.73	6	10
1:A:676:LEU:HD12	1:A:677:VAL:CG1	0.59	2.18	23	2
1:A:719:ILE:CD1	1:A:719:ILE:N	0.58	2.66	8	2
1:A:664:LEU:CD1	1:A:763:HIS:NE2	0.58	2.67	24	12
1:A:731:LEU:N	1:A:731:LEU:CD2	0.58	2.66	10	7
1:A:693:MET:CE	1:A:761:TRP:CE3	0.58	2.86	26	2
1:A:771:TRP:CE3	1:A:775:ALA:CB	0.58	2.86	30	9
1:A:740:SER:O	1:A:743:LEU:CD1	0.58	2.52	22	30
1:A:665:LEU:CD1	1:A:767:VAL:CG1	0.58	2.82	5	2
1:A:665:LEU:HD21	1:A:767:VAL:HG12	0.58	1.76	1	6
1:A:740:SER:N	1:A:741:PRO:CD	0.57	2.67	13	25
1:A:704:LEU:HD22	1:A:712:ILE:HD13	0.57	1.74	4	3
1:A:679:PRO:O	1:A:683:THR:HG22	0.57	1.98	20	1
1:A:681:LEU:HG	1:A:682:ILE:HD12	0.57	1.75	30	1
1:A:693:MET:N	1:A:694:PRO:HD2	0.57	2.15	5	30
1:A:664:LEU:HD13	1:A:763:HIS:CD2	0.57	2.34	23	1
1:A:731:LEU:CD2	1:A:731:LEU:N	0.57	2.67	12	7
1:A:664:LEU:HB2	1:A:665:LEU:HD23	0.57	1.76	17	2
1:A:670:LEU:CD1	1:A:768:LEU:CD1	0.57	2.80	17	5
1:A:723:ALA:HB1	1:A:728:LEU:HD13	0.57	1.77	1	2
1:A:734:LEU:HD23	1:A:757:MET:HB2	0.57	1.75	1	4
1:A:693:MET:SD	1:A:761:TRP:CE2	0.57	2.97	25	10
1:A:670:LEU:CD2	1:A:768:LEU:CD1	0.57	2.83	28	2
1:A:693:MET:SD	1:A:761:TRP:CD2	0.57	2.98	6	7
1:A:700:LEU:HD22	1:A:715:GLU:OE2	0.57	2.00	17	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:681:LEU:O	1:A:681:LEU:HD12	0.57	1.99	21	1
1:A:693:MET:N	1:A:694:PRO:CD	0.57	2.67	11	28
1:A:771:TRP:CE3	1:A:775:ALA:HB3	0.56	2.35	30	2
1:A:674:LEU:HD22	1:A:771:TRP:HZ3	0.56	1.60	27	1
1:A:734:LEU:HD23	1:A:757:MET:HB3	0.56	1.76	6	1
1:A:716:GLY:O	1:A:720:LYS:CE	0.56	2.53	30	25
1:A:730:HIS:CE1	1:A:760:GLU:OE1	0.56	2.58	23	4
1:A:693:MET:SD	1:A:761:TRP:CZ2	0.56	2.98	17	4
1:A:696:TYR:CE1	1:A:719:ILE:HD11	0.56	2.35	1	8
1:A:686:LEU:HD11	1:A:765:VAL:HG22	0.56	1.77	2	1
1:A:720:LYS:NZ	1:A:738:ILE:HD13	0.56	2.15	3	1
1:A:763:HIS:HE1	1:A:767:VAL:HG21	0.56	1.61	13	14
1:A:693:MET:SD	1:A:761:TRP:CH2	0.56	2.99	17	3
1:A:695:GLY:O	1:A:699:VAL:HG23	0.56	2.00	22	3
1:A:726:VAL:HG12	1:A:768:LEU:HD21	0.56	1.77	3	5
1:A:696:TYR:CD1	1:A:719:ILE:HG12	0.56	2.36	22	8
1:A:730:HIS:CD2	1:A:731:LEU:CD2	0.55	2.89	23	2
1:A:704:LEU:HD11	1:A:750:VAL:HG11	0.55	1.77	30	1
1:A:696:TYR:CZ	1:A:719:ILE:HG12	0.55	2.37	14	4
1:A:665:LEU:CD2	1:A:767:VAL:CG1	0.55	2.83	20	4
1:A:767:VAL:CG1	1:A:768:LEU:N	0.55	2.70	20	1
1:A:730:HIS:CD2	1:A:764:ASP:OD2	0.55	2.59	19	1
1:A:674:LEU:CD1	1:A:772:VAL:HG22	0.55	2.11	1	2
1:A:686:LEU:HD13	1:A:726:VAL:CG1	0.55	2.32	25	2
1:A:761:TRP:O	1:A:765:VAL:HG23	0.55	2.01	1	1
1:A:713:VAL:HG13	1:A:739:GLN:CB	0.55	2.32	7	2
1:A:674:LEU:HD23	1:A:678:GLY:C	0.55	2.21	21	3
1:A:696:TYR:CE1	1:A:719:ILE:HG12	0.55	2.37	19	3
1:A:715:GLU:O	1:A:719:ILE:HD13	0.55	2.02	1	3
1:A:714:GLU:HA	1:A:717:HIS:CD2	0.55	2.37	4	3
1:A:765:VAL:CG1	1:A:766:GLU:N	0.55	2.69	18	1
1:A:673:TYR:O	1:A:677:VAL:CG2	0.55	2.55	8	5
1:A:728:LEU:HD22	1:A:731:LEU:HD12	0.55	1.78	14	1
1:A:670:LEU:HD21	1:A:768:LEU:HD11	0.54	1.79	28	3
1:A:670:LEU:HD11	1:A:768:LEU:HD21	0.54	1.76	10	1
1:A:761:TRP:CE3	1:A:761:TRP:C	0.54	2.81	13	7
1:A:681:LEU:C	1:A:681:LEU:HD13	0.54	2.23	11	1
1:A:771:TRP:O	1:A:775:ALA:CB	0.54	2.56	6	14
1:A:728:LEU:CD1	1:A:765:VAL:HG23	0.54	2.33	5	3
1:A:767:VAL:HG13	1:A:768:LEU:N	0.54	2.17	20	1
1:A:677:VAL:HG12	1:A:678:GLY:N	0.54	2.16	15	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:761:TRP:C	1:A:761:TRP:CE3	0.54	2.81	27	11
1:A:673:TYR:HA	1:A:676:LEU:HD11	0.54	1.79	28	2
1:A:693:MET:HG2	1:A:761:TRP:CZ2	0.54	2.37	8	4
1:A:670:LEU:HD13	1:A:768:LEU:CD1	0.54	2.33	20	1
1:A:730:HIS:CG	1:A:731:LEU:N	0.54	2.75	6	1
1:A:672:GLN:O	1:A:676:LEU:CD1	0.54	2.56	17	2
1:A:726:VAL:O	1:A:768:LEU:HD22	0.54	2.02	5	2
1:A:684:ASP:O	1:A:687:ALA:HB3	0.53	2.03	2	4
1:A:761:TRP:CZ3	1:A:765:VAL:CG1	0.53	2.91	21	2
1:A:665:LEU:HD12	1:A:667:ILE:HD13	0.53	1.79	29	2
1:A:683:THR:HG23	1:A:684:ASP:N	0.53	2.18	16	1
1:A:689:PHE:CE2	1:A:723:ALA:CB	0.53	2.86	7	4
1:A:746:TRP:O	1:A:750:VAL:CG2	0.53	2.57	22	4
1:A:717:HIS:C	1:A:717:HIS:CD2	0.53	2.81	30	2
1:A:715:GLU:O	1:A:719:ILE:CD1	0.53	2.57	24	2
1:A:728:LEU:HD21	1:A:765:VAL:HG23	0.53	1.80	22	2
1:A:666:ASP:O	1:A:670:LEU:HD12	0.53	2.02	4	3
1:A:693:MET:SD	1:A:761:TRP:CZ3	0.53	3.02	21	4
1:A:719:ILE:N	1:A:719:ILE:HD12	0.53	2.19	22	3
1:A:726:VAL:O	1:A:768:LEU:CD2	0.53	2.57	7	4
1:A:679:PRO:O	1:A:683:THR:CG2	0.53	2.57	20	2
1:A:704:LEU:HD13	1:A:704:LEU:C	0.53	2.23	24	3
1:A:672:GLN:O	1:A:676:LEU:CD2	0.53	2.56	2	6
1:A:768:LEU:O	1:A:768:LEU:HD12	0.53	2.03	20	4
1:A:720:LYS:CG	1:A:731:LEU:O	0.53	2.57	11	8
1:A:674:LEU:HD23	1:A:679:PRO:HD3	0.53	1.81	3	1
1:A:719:ILE:HD12	1:A:719:ILE:N	0.53	2.18	26	3
1:A:683:THR:CG2	1:A:684:ASP:N	0.53	2.72	7	2
1:A:682:ILE:O	1:A:686:LEU:CB	0.53	2.57	21	13
1:A:730:HIS:CB	1:A:764:ASP:OD2	0.53	2.56	16	4
1:A:706:ALA:O	1:A:707:GLN:CB	0.53	2.57	10	7
1:A:674:LEU:HD11	1:A:772:VAL:CG2	0.53	2.11	1	1
1:A:762:ARG:O	1:A:765:VAL:CG1	0.53	2.56	21	2
1:A:690:GLU:OE2	1:A:761:TRP:CH2	0.53	2.62	22	1
1:A:674:LEU:HD22	1:A:678:GLY:HA2	0.52	1.79	2	1
1:A:688:VAL:HG13	1:A:689:PHE:N	0.52	2.19	15	3
1:A:739:GLN:O	1:A:739:GLN:CG	0.52	2.57	1	4
1:A:739:GLN:CG	1:A:739:GLN:O	0.52	2.57	10	9
1:A:743:LEU:HD13	1:A:746:TRP:HB2	0.52	1.81	7	27
1:A:743:LEU:CD1	1:A:746:TRP:HB2	0.52	2.34	23	27
1:A:761:TRP:CE3	1:A:765:VAL:HG21	0.52	2.39	1	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:685:GLY:O	1:A:688:VAL:CG2	0.52	2.57	3	1
1:A:682:ILE:CD1	1:A:682:ILE:N	0.52	2.72	16	1
1:A:771:TRP:O	1:A:775:ALA:N	0.52	2.43	21	7
1:A:715:GLU:O	1:A:719:ILE:CG1	0.52	2.57	20	3
1:A:674:LEU:HD21	1:A:772:VAL:CG1	0.52	2.31	12	3
1:A:731:LEU:HD21	1:A:761:TRP:HB3	0.52	1.81	16	1
1:A:739:GLN:NE2	1:A:740:SER:OG	0.52	2.42	16	5
1:A:699:VAL:HG13	1:A:700:LEU:N	0.52	2.20	27	1
1:A:734:LEU:CD2	1:A:757:MET:SD	0.52	2.98	5	1
1:A:713:VAL:O	1:A:716:GLY:N	0.52	2.43	26	6
1:A:717:HIS:CD2	1:A:717:HIS:C	0.52	2.82	28	1
1:A:737:GLN:HB3	1:A:753:TRP:CZ2	0.52	2.40	1	10
1:A:745:ALA:O	1:A:749:ASN:ND2	0.52	2.43	13	7
1:A:735:GLY:O	1:A:739:GLN:NE2	0.52	2.43	8	7
1:A:664:LEU:HD23	1:A:764:ASP:OD1	0.52	2.04	14	1
1:A:728:LEU:HD21	1:A:764:ASP:HB3	0.52	1.81	4	1
1:A:696:TYR:CE1	1:A:719:ILE:CG1	0.52	2.93	14	4
1:A:672:GLN:O	1:A:676:LEU:HD21	0.52	2.04	2	1
1:A:690:GLU:OE2	1:A:765:VAL:HG11	0.52	2.04	11	4
1:A:720:LYS:CD	1:A:731:LEU:HD22	0.52	2.35	6	1
1:A:667:ILE:CD1	1:A:667:ILE:N	0.52	2.73	30	4
1:A:749:ASN:OD1	1:A:750:VAL:N	0.52	2.43	22	9
1:A:764:ASP:N	1:A:764:ASP:OD1	0.52	2.43	26	5
1:A:696:TYR:CD2	1:A:719:ILE:HD12	0.52	2.40	17	1
1:A:715:GLU:HB3	1:A:719:ILE:HD11	0.52	1.81	20	1
1:A:703:ASN:OD1	1:A:704:LEU:N	0.51	2.43	11	1
1:A:764:ASP:OD1	1:A:764:ASP:N	0.51	2.43	16	5
1:A:734:LEU:HD23	1:A:757:MET:CB	0.51	2.35	6	2
1:A:685:GLY:O	1:A:688:VAL:HG22	0.51	2.04	3	2
1:A:703:ASN:OD1	1:A:708:ASP:CB	0.51	2.59	6	2
1:A:679:PRO:O	1:A:683:THR:CB	0.51	2.59	19	7
1:A:665:LEU:CB	1:A:727:GLY:O	0.51	2.58	29	9
1:A:730:HIS:ND1	1:A:764:ASP:OD2	0.51	2.44	16	6
1:A:734:LEU:HD23	1:A:757:MET:SD	0.51	2.45	5	1
1:A:771:TRP:CE3	1:A:775:ALA:HB2	0.51	2.41	5	2
1:A:663:ALA:O	1:A:729:ARG:NE	0.51	2.43	10	3
1:A:736:GLN:O	1:A:739:GLN:NE2	0.51	2.42	9	3
1:A:750:VAL:HG12	1:A:751:GLY:N	0.51	2.21	25	5
1:A:682:ILE:HG21	1:A:772:VAL:HG21	0.51	1.83	26	4
1:A:731:LEU:HD11	1:A:761:TRP:CB	0.51	2.35	18	1
1:A:741:PRO:HA	1:A:746:TRP:CE3	0.51	2.40	1	26

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:728:LEU:CD2	1:A:764:ASP:OD2	0.51	2.58	1	1
1:A:689:PHE:CZ	1:A:723:ALA:N	0.51	2.79	10	2
1:A:696:TYR:CE2	1:A:719:ILE:HG12	0.51	2.40	14	3
1:A:746:TRP:CD2	1:A:750:VAL:CG2	0.51	2.94	17	2
1:A:750:VAL:O	1:A:753:TRP:N	0.51	2.43	2	2
1:A:771:TRP:CZ3	1:A:775:ALA:HB3	0.51	2.41	10	3
1:A:663:ALA:O	1:A:729:ARG:CZ	0.50	2.60	24	1
1:A:664:LEU:HD23	1:A:730:HIS:HB2	0.50	1.82	2	2
1:A:673:TYR:HA	1:A:676:LEU:HD21	0.50	1.83	28	1
1:A:770:ALA:O	1:A:774:LYS:N	0.50	2.43	26	2
1:A:713:VAL:HG13	1:A:739:GLN:HG3	0.50	1.84	11	1
1:A:748:ASP:N	1:A:748:ASP:OD1	0.50	2.44	3	1
1:A:665:LEU:HD22	1:A:768:LEU:N	0.50	2.21	25	1
1:A:728:LEU:HD22	1:A:731:LEU:HB2	0.50	1.81	1	1
1:A:674:LEU:HD22	1:A:682:ILE:HD13	0.50	1.84	5	1
1:A:716:GLY:HA3	1:A:738:ILE:HG21	0.50	1.81	7	1
1:A:737:GLN:HB3	1:A:753:TRP:CH2	0.50	2.42	26	1
1:A:670:LEU:HD13	1:A:768:LEU:HD13	0.50	1.80	20	1
1:A:757:MET:HG3	1:A:758:LYS:N	0.50	2.22	6	2
1:A:739:GLN:C	1:A:741:PRO:CD	0.50	2.80	18	14
1:A:693:MET:SD	1:A:761:TRP:CE3	0.50	3.05	17	6
1:A:761:TRP:C	1:A:761:TRP:CD2	0.50	2.85	3	15
1:A:761:TRP:CD2	1:A:761:TRP:C	0.50	2.85	24	9
1:A:682:ILE:H	1:A:682:ILE:HD12	0.50	1.66	11	1
1:A:753:TRP:O	1:A:757:MET:CB	0.50	2.60	28	2
1:A:763:HIS:C	1:A:763:HIS:ND1	0.50	2.65	3	16
1:A:750:VAL:HG13	1:A:754:ILE:HD11	0.50	1.83	1	1
1:A:693:MET:CB	1:A:694:PRO:CD	0.50	2.89	7	5
1:A:714:GLU:O	1:A:718:LYS:CB	0.50	2.59	18	3
1:A:667:ILE:N	1:A:667:ILE:CD1	0.50	2.74	26	10
1:A:735:GLY:O	1:A:738:ILE:N	0.50	2.45	17	11
1:A:676:LEU:HD12	1:A:677:VAL:CB	0.50	2.36	15	2
1:A:694:PRO:HA	1:A:697:VAL:CG2	0.50	2.36	10	3
1:A:674:LEU:HD13	1:A:678:GLY:HA2	0.50	1.83	15	1
1:A:696:TYR:CD1	1:A:719:ILE:CG1	0.50	2.95	30	4
1:A:696:TYR:CG	1:A:719:ILE:HG12	0.50	2.42	24	8
1:A:733:GLN:OE1	1:A:733:GLN:N	0.50	2.45	21	1
1:A:740:SER:O	1:A:742:ASP:N	0.49	2.43	7	23
1:A:689:PHE:CE2	1:A:693:MET:SD	0.49	3.05	8	1
1:A:754:ILE:HG13	1:A:755:GLU:N	0.49	2.22	30	1
1:A:686:LEU:HD23	1:A:769:LYS:HD2	0.49	1.84	20	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:739:GLN:NE2	1:A:739:GLN:C	0.49	2.66	1	5
1:A:730:HIS:CE1	1:A:760:GLU:CG	0.49	2.94	21	1
1:A:666:ASP:CG	1:A:669:MET:CB	0.49	2.81	27	5
1:A:693:MET:HG3	1:A:761:TRP:CH2	0.49	2.42	20	8
1:A:689:PHE:O	1:A:693:MET:CG	0.49	2.60	21	2
1:A:763:HIS:ND1	1:A:763:HIS:C	0.49	2.66	25	13
1:A:686:LEU:HD22	1:A:768:LEU:HD11	0.49	1.83	29	2
1:A:709:LYS:HA	1:A:712:ILE:HD12	0.49	1.85	16	1
1:A:704:LEU:N	1:A:712:ILE:HD11	0.49	2.22	9	2
1:A:736:GLN:HA	1:A:739:GLN:NE2	0.49	2.23	13	1
1:A:739:GLN:C	1:A:739:GLN:NE2	0.49	2.66	12	8
1:A:700:LEU:HD21	1:A:754:ILE:CD1	0.49	2.38	26	1
1:A:737:GLN:O	1:A:740:SER:OG	0.49	2.31	10	9
1:A:717:HIS:O	1:A:721:GLY:N	0.49	2.46	15	2
1:A:672:GLN:O	1:A:675:GLU:N	0.49	2.44	16	10
1:A:728:LEU:CD2	1:A:764:ASP:HB3	0.49	2.38	19	2
1:A:693:MET:HE2	1:A:761:TRP:CD2	0.49	2.42	15	1
1:A:676:LEU:CD1	1:A:677:VAL:HG23	0.49	2.21	20	2
1:A:750:VAL:CG1	1:A:751:GLY:N	0.49	2.76	25	3
1:A:664:LEU:CD2	1:A:764:ASP:OD2	0.48	2.60	6	1
1:A:716:GLY:HA2	1:A:720:LYS:CE	0.48	2.38	19	20
1:A:765:VAL:O	1:A:768:LEU:N	0.48	2.46	16	1
1:A:729:ARG:HG3	1:A:730:HIS:N	0.48	2.23	6	15
1:A:704:LEU:C	1:A:704:LEU:CD1	0.48	2.81	24	2
1:A:665:LEU:HD23	1:A:727:GLY:O	0.48	2.08	10	1
1:A:696:TYR:CD2	1:A:719:ILE:HG13	0.48	2.43	8	1
1:A:665:LEU:HA	1:A:727:GLY:O	0.48	2.09	21	30
1:A:737:GLN:CB	1:A:753:TRP:CZ2	0.48	2.96	24	5
1:A:665:LEU:HD12	1:A:667:ILE:CD1	0.48	2.37	13	2
1:A:759:GLU:O	1:A:760:GLU:CG	0.48	2.61	3	1
1:A:768:LEU:CD1	1:A:768:LEU:C	0.48	2.80	26	3
1:A:693:MET:HB3	1:A:761:TRP:CZ2	0.48	2.43	13	1
1:A:693:MET:HG3	1:A:761:TRP:CZ3	0.48	2.43	6	5
1:A:689:PHE:CE2	1:A:693:MET:HG2	0.48	2.43	1	2
1:A:708:ASP:OD1	1:A:711:GLY:N	0.48	2.46	26	2
1:A:694:PRO:O	1:A:697:VAL:CG2	0.48	2.61	11	3
1:A:693:MET:HG2	1:A:761:TRP:CH2	0.48	2.42	16	3
1:A:693:MET:HE3	1:A:761:TRP:CE2	0.48	2.43	26	1
1:A:730:HIS:C	1:A:730:HIS:ND1	0.48	2.65	24	1
1:A:698:SER:OG	1:A:699:VAL:N	0.48	2.47	16	3
1:A:704:LEU:HD11	1:A:750:VAL:CG1	0.48	2.37	30	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:685:GLY:O	1:A:688:VAL:CG1	0.48	2.61	27	1
1:A:670:LEU:HB3	1:A:771:TRP:CZ3	0.48	2.43	7	1
1:A:713:VAL:HG13	1:A:739:GLN:CA	0.48	2.36	27	1
1:A:707:GLN:N	1:A:707:GLN:OE1	0.48	2.47	29	1
1:A:697:VAL:O	1:A:700:LEU:CB	0.48	2.61	15	1
1:A:735:GLY:HA2	1:A:738:ILE:HD12	0.48	1.84	16	2
1:A:697:VAL:HG23	1:A:698:SER:N	0.48	2.24	1	6
1:A:665:LEU:CD2	1:A:767:VAL:HB	0.48	2.39	16	1
1:A:689:PHE:CZ	1:A:719:ILE:O	0.47	2.66	6	1
1:A:762:ARG:HG3	1:A:763:HIS:N	0.47	2.24	27	1
1:A:716:GLY:O	1:A:720:LYS:HE3	0.47	2.09	8	14
1:A:736:GLN:C	1:A:736:GLN:NE2	0.47	2.67	13	1
1:A:665:LEU:CA	1:A:729:ARG:HG2	0.47	2.39	1	10
1:A:696:TYR:CZ	1:A:719:ILE:CD1	0.47	2.96	27	1
1:A:696:TYR:CD1	1:A:719:ILE:HG13	0.47	2.43	18	1
1:A:709:LYS:O	1:A:713:VAL:HG23	0.47	2.08	4	1
1:A:666:ASP:O	1:A:670:LEU:CG	0.47	2.63	14	2
1:A:696:TYR:CE2	1:A:719:ILE:HG13	0.47	2.44	9	2
1:A:686:LEU:HD23	1:A:769:LYS:HG3	0.47	1.85	9	1
1:A:679:PRO:O	1:A:683:THR:OG1	0.47	2.32	19	4
1:A:729:ARG:O	1:A:732:GLN:CG	0.47	2.62	27	1
1:A:743:LEU:HB2	1:A:746:TRP:CB	0.47	2.39	22	9
1:A:693:MET:CG	1:A:761:TRP:CH2	0.47	2.97	13	1
1:A:734:LEU:CD2	1:A:757:MET:HB3	0.47	2.39	6	1
1:A:730:HIS:CD2	1:A:731:LEU:HG	0.47	2.45	19	1
1:A:671:GLU:HG3	1:A:672:GLN:N	0.47	2.24	2	1
1:A:669:MET:HG3	1:A:673:TYR:CZ	0.47	2.45	2	1
1:A:686:LEU:CD1	1:A:765:VAL:HG23	0.47	2.30	21	1
1:A:664:LEU:O	1:A:764:ASP:OD2	0.47	2.33	12	3
1:A:746:TRP:O	1:A:749:ASN:OD1	0.47	2.33	30	2
1:A:669:MET:HE3	1:A:724:GLY:O	0.47	2.10	30	1
1:A:729:ARG:O	1:A:733:GLN:NE2	0.47	2.48	13	1
1:A:768:LEU:C	1:A:768:LEU:CD1	0.47	2.82	1	2
1:A:664:LEU:O	1:A:764:ASP:OD1	0.47	2.33	23	4
1:A:708:ASP:O	1:A:712:ILE:CD1	0.47	2.63	20	2
1:A:674:LEU:HD23	1:A:679:PRO:N	0.47	2.24	7	1
1:A:734:LEU:HG	1:A:753:TRP:CD1	0.47	2.44	8	4
1:A:771:TRP:CZ3	1:A:775:ALA:HB1	0.47	2.45	6	3
1:A:761:TRP:CZ2	1:A:762:ARG:HG3	0.47	2.45	24	1
1:A:762:ARG:CG	1:A:763:HIS:N	0.47	2.78	27	1
1:A:696:TYR:CD2	1:A:719:ILE:HG12	0.47	2.44	14	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:746:TRP:CZ3	1:A:750:VAL:CG2	0.47	2.98	2	2
1:A:714:GLU:HA	1:A:717:HIS:NE2	0.47	2.25	2	8
1:A:693:MET:CE	1:A:761:TRP:CE2	0.47	2.97	15	1
1:A:728:LEU:CD1	1:A:765:VAL:CG2	0.47	2.92	13	1
1:A:716:GLY:O	1:A:720:LYS:HE2	0.46	2.10	26	12
1:A:674:LEU:HA	1:A:678:GLY:CA	0.46	2.41	7	3
1:A:689:PHE:O	1:A:693:MET:CB	0.46	2.63	21	2
1:A:665:LEU:HD21	1:A:768:LEU:N	0.46	2.24	30	1
1:A:686:LEU:O	1:A:686:LEU:HD12	0.46	2.09	13	1
1:A:759:GLU:O	1:A:760:GLU:OE1	0.46	2.33	1	2
1:A:686:LEU:CD1	1:A:726:VAL:HG11	0.46	2.41	25	2
1:A:665:LEU:CD2	1:A:728:LEU:HD23	0.46	2.40	8	1
1:A:690:GLU:CG	1:A:691:LYS:N	0.46	2.79	4	1
1:A:680:LYS:O	1:A:684:ASP:OD2	0.46	2.34	14	1
1:A:704:LEU:HD22	1:A:712:ILE:CD1	0.46	2.41	27	5
1:A:716:GLY:CA	1:A:720:LYS:CE	0.46	2.94	21	1
1:A:717:HIS:CG	1:A:718:LYS:N	0.46	2.83	4	3
1:A:728:LEU:CD2	1:A:764:ASP:CB	0.46	2.94	6	2
1:A:686:LEU:CB	1:A:726:VAL:HG11	0.46	2.37	1	2
1:A:702:SER:O	1:A:705:THR:OG1	0.46	2.34	1	2
1:A:728:LEU:HD22	1:A:731:LEU:CD1	0.46	2.41	14	1
1:A:760:GLU:O	1:A:764:ASP:OD1	0.46	2.32	6	1
1:A:664:LEU:O	1:A:729:ARG:CG	0.46	2.63	2	1
1:A:749:ASN:HB3	1:A:753:TRP:CZ3	0.46	2.45	2	2
1:A:667:ILE:O	1:A:671:GLU:CG	0.46	2.63	3	1
1:A:728:LEU:HD22	1:A:731:LEU:CD2	0.46	2.40	25	1
1:A:665:LEU:HD23	1:A:728:LEU:HD23	0.46	1.87	8	1
1:A:708:ASP:O	1:A:712:ILE:CG1	0.46	2.64	20	1
1:A:692:MET:O	1:A:695:GLY:N	0.46	2.48	22	1
1:A:729:ARG:CG	1:A:730:HIS:N	0.46	2.79	6	1
1:A:759:GLU:O	1:A:760:GLU:CB	0.46	2.64	24	2
1:A:720:LYS:N	1:A:720:LYS:HD3	0.46	2.24	28	6
1:A:763:HIS:ND1	1:A:763:HIS:O	0.46	2.48	5	3
1:A:665:LEU:HD12	1:A:667:ILE:HD12	0.46	1.87	27	1
1:A:674:LEU:CD2	1:A:772:VAL:HG13	0.46	2.32	1	3
1:A:689:PHE:CE2	1:A:693:MET:CG	0.46	2.98	21	1
1:A:730:HIS:CE1	1:A:760:GLU:HG3	0.46	2.45	21	1
1:A:729:ARG:O	1:A:730:HIS:C	0.46	2.54	25	4
1:A:665:LEU:HD22	1:A:768:LEU:HB2	0.46	1.88	8	1
1:A:690:GLU:CG	1:A:765:VAL:HG11	0.46	2.41	22	1
1:A:719:ILE:CG1	1:A:720:LYS:N	0.46	2.79	6	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:720:LYS:HD3	1:A:720:LYS:N	0.46	2.26	16	9
1:A:728:LEU:CD2	1:A:764:ASP:HB2	0.46	2.41	15	1
1:A:738:ILE:HA	1:A:746:TRP:CZ2	0.46	2.46	25	2
1:A:750:VAL:O	1:A:753:TRP:CB	0.46	2.64	26	1
1:A:693:MET:HE3	1:A:761:TRP:CZ2	0.46	2.46	26	1
1:A:723:ALA:O	1:A:726:VAL:N	0.46	2.48	9	2
1:A:665:LEU:CD2	1:A:768:LEU:CA	0.46	2.94	30	1
1:A:730:HIS:NE2	1:A:734:LEU:HD11	0.46	2.26	5	1
1:A:770:ALA:O	1:A:773:ALA:HB3	0.46	2.11	13	1
1:A:739:GLN:HG2	1:A:739:GLN:O	0.45	2.11	5	9
1:A:682:ILE:O	1:A:686:LEU:HB2	0.45	2.11	11	8
1:A:746:TRP:CE3	1:A:750:VAL:CG2	0.45	2.98	2	1
1:A:731:LEU:CD1	1:A:757:MET:HG3	0.45	2.41	4	1
1:A:724:GLY:HA2	1:A:728:LEU:O	0.45	2.12	27	22
1:A:746:TRP:HA	1:A:749:ASN:OD1	0.45	2.11	30	4
1:A:664:LEU:HD21	1:A:760:GLU:OE2	0.45	2.11	21	1
1:A:728:LEU:CD2	1:A:731:LEU:HG	0.45	2.41	14	1
1:A:678:GLY:O	1:A:682:ILE:CD1	0.45	2.64	15	3
1:A:673:TYR:CG	1:A:682:ILE:HD11	0.45	2.47	29	1
1:A:727:GLY:HA3	1:A:768:LEU:HD21	0.45	1.87	10	1
1:A:731:LEU:CD1	1:A:761:TRP:HB2	0.45	2.41	6	2
1:A:666:ASP:HB3	1:A:669:MET:CB	0.45	2.42	12	4
1:A:685:GLY:O	1:A:688:VAL:HG12	0.45	2.10	27	1
1:A:713:VAL:CG2	1:A:741:PRO:HG3	0.45	2.42	17	8
1:A:729:ARG:O	1:A:732:GLN:HG3	0.45	2.11	27	1
1:A:709:LYS:O	1:A:710:LYS:C	0.45	2.55	18	5
1:A:694:PRO:O	1:A:697:VAL:HG22	0.45	2.12	25	2
1:A:677:VAL:CG1	1:A:680:LYS:HB2	0.45	2.40	2	1
1:A:728:LEU:CD2	1:A:764:ASP:CG	0.45	2.82	22	3
1:A:714:GLU:O	1:A:718:LYS:HB3	0.45	2.11	18	1
1:A:665:LEU:CD2	1:A:768:LEU:HB2	0.45	2.41	30	1
1:A:704:LEU:HD13	1:A:704:LEU:O	0.45	2.12	20	3
1:A:739:GLN:O	1:A:739:GLN:HG2	0.45	2.12	27	5
1:A:716:GLY:CA	1:A:720:LYS:HE2	0.45	2.42	22	3
1:A:734:LEU:HD23	1:A:757:MET:HE2	0.45	1.88	14	1
1:A:686:LEU:O	1:A:690:GLU:CG	0.45	2.65	30	1
1:A:669:MET:CE	1:A:724:GLY:O	0.45	2.65	30	1
1:A:691:LYS:HG3	1:A:692:MET:N	0.45	2.26	24	1
1:A:677:VAL:HG12	1:A:680:LYS:CB	0.45	2.40	2	1
1:A:756:GLU:O	1:A:760:GLU:HB3	0.45	2.11	5	3
1:A:701:GLU:OE1	1:A:701:GLU:O	0.45	2.34	29	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:768:LEU:HG	1:A:769:LYS:N	0.45	2.27	25	6
1:A:756:GLU:O	1:A:760:GLU:CB	0.45	2.65	5	3
1:A:714:GLU:O	1:A:715:GLU:C	0.45	2.55	21	3
1:A:714:GLU:O	1:A:716:GLY:N	0.45	2.50	21	3
1:A:761:TRP:O	1:A:764:ASP:CB	0.45	2.65	5	1
1:A:713:VAL:HG13	1:A:739:GLN:HB2	0.45	1.88	7	1
1:A:690:GLU:O	1:A:694:PRO:HD3	0.45	2.12	8	1
1:A:673:TYR:HB3	1:A:682:ILE:CD1	0.45	2.40	11	8
1:A:729:ARG:CZ	1:A:729:ARG:HB2	0.45	2.41	21	1
1:A:665:LEU:CD1	1:A:767:VAL:HG12	0.45	2.42	11	1
1:A:746:TRP:CZ2	1:A:750:VAL:HG21	0.45	2.47	18	1
1:A:665:LEU:CD2	1:A:767:VAL:HG11	0.45	2.42	20	1
1:A:730:HIS:CD2	1:A:761:TRP:HA	0.44	2.46	6	2
1:A:699:VAL:O	1:A:703:ASN:OD1	0.44	2.35	27	1
1:A:763:HIS:O	1:A:767:VAL:CG2	0.44	2.57	1	1
1:A:670:LEU:HD21	1:A:727:GLY:CA	0.44	2.37	16	2
1:A:681:LEU:C	1:A:681:LEU:CD1	0.44	2.85	30	4
1:A:759:GLU:CA	1:A:759:GLU:OE1	0.44	2.65	25	1
1:A:686:LEU:O	1:A:687:ALA:C	0.44	2.55	22	2
1:A:693:MET:HG2	1:A:761:TRP:CE2	0.44	2.47	24	2
1:A:674:LEU:CD1	1:A:682:ILE:HD12	0.44	2.40	27	1
1:A:715:GLU:O	1:A:719:ILE:HG12	0.44	2.12	27	4
1:A:735:GLY:O	1:A:736:GLN:C	0.44	2.56	26	19
1:A:687:ALA:O	1:A:690:GLU:HG3	0.44	2.12	25	1
1:A:717:HIS:HB3	1:A:739:GLN:NE2	0.44	2.28	19	4
1:A:716:GLY:C	1:A:720:LYS:CE	0.44	2.85	21	1
1:A:687:ALA:O	1:A:690:GLU:CG	0.44	2.65	3	1
1:A:683:THR:O	1:A:687:ALA:HB2	0.44	2.12	20	1
1:A:715:GLU:HB3	1:A:719:ILE:CD1	0.44	2.42	20	1
1:A:709:LYS:CG	1:A:710:LYS:N	0.44	2.79	4	1
1:A:754:ILE:CG1	1:A:755:GLU:N	0.44	2.81	30	1
1:A:687:ALA:O	1:A:690:GLU:HG2	0.44	2.13	19	4
1:A:728:LEU:HD21	1:A:764:ASP:HB2	0.44	1.89	17	1
1:A:739:GLN:CD	1:A:739:GLN:C	0.44	2.76	9	2
1:A:771:TRP:CH2	1:A:775:ALA:HB1	0.44	2.47	7	1
1:A:665:LEU:CA	1:A:727:GLY:O	0.44	2.66	29	7
1:A:693:MET:HE2	1:A:761:TRP:CE2	0.44	2.47	15	1
1:A:734:LEU:CD2	1:A:757:MET:HB2	0.44	2.43	20	2
1:A:670:LEU:CD2	1:A:768:LEU:HD11	0.44	2.41	28	1
1:A:733:GLN:O	1:A:734:LEU:C	0.44	2.56	22	16
1:A:765:VAL:O	1:A:766:GLU:C	0.44	2.56	5	15

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:665:LEU:HD13	1:A:670:LEU:CD1	0.44	2.43	1	1
1:A:677:VAL:CG1	1:A:680:LYS:CB	0.44	2.96	2	1
1:A:761:TRP:CZ2	1:A:762:ARG:HD2	0.44	2.48	8	1
1:A:676:LEU:HD12	1:A:677:VAL:HB	0.44	1.88	15	1
1:A:689:PHE:CD1	1:A:689:PHE:C	0.44	2.90	5	2
1:A:674:LEU:HD23	1:A:678:GLY:HA2	0.44	1.89	20	1
1:A:714:GLU:O	1:A:718:LYS:HB2	0.44	2.12	10	5
1:A:664:LEU:O	1:A:764:ASP:CG	0.44	2.56	1	2
1:A:670:LEU:HD11	1:A:768:LEU:HB2	0.44	1.88	1	2
1:A:665:LEU:HD13	1:A:767:VAL:HG12	0.44	1.89	11	1
1:A:730:HIS:O	1:A:734:LEU:HD12	0.44	2.12	11	1
1:A:679:PRO:O	1:A:683:THR:HB	0.44	2.13	13	10
1:A:759:GLU:HA	1:A:759:GLU:OE1	0.44	2.13	25	1
1:A:680:LYS:O	1:A:683:THR:HG22	0.44	2.13	7	1
1:A:717:HIS:O	1:A:721:GLY:HA3	0.44	2.13	4	1
1:A:745:ALA:O	1:A:749:ASN:CG	0.43	2.56	27	10
1:A:767:VAL:O	1:A:768:LEU:C	0.43	2.56	17	9
1:A:681:LEU:HG	1:A:682:ILE:N	0.43	2.27	2	1
1:A:750:VAL:O	1:A:751:GLY:C	0.43	2.57	22	13
1:A:741:PRO:HB3	1:A:746:TRP:CH2	0.43	2.48	1	2
1:A:729:ARG:C	1:A:729:ARG:CD	0.43	2.86	7	2
1:A:664:LEU:CD2	1:A:764:ASP:OD1	0.43	2.66	14	1
1:A:763:HIS:O	1:A:764:ASP:C	0.43	2.57	27	3
1:A:763:HIS:O	1:A:763:HIS:ND1	0.43	2.50	21	1
1:A:690:GLU:HG3	1:A:691:LYS:N	0.43	2.28	25	4
1:A:716:GLY:O	1:A:720:LYS:HG2	0.43	2.13	4	1
1:A:690:GLU:OE2	1:A:761:TRP:CZ3	0.43	2.72	22	1
1:A:730:HIS:CE1	1:A:734:LEU:HD22	0.43	2.48	24	1
1:A:762:ARG:O	1:A:763:HIS:C	0.43	2.56	11	9
1:A:672:GLN:O	1:A:673:TYR:C	0.43	2.57	27	4
1:A:749:ASN:OD1	1:A:749:ASN:C	0.43	2.57	19	2
1:A:668:PRO:O	1:A:671:GLU:OE2	0.43	2.35	3	1
1:A:730:HIS:ND1	1:A:731:LEU:HD23	0.43	2.28	3	1
1:A:700:LEU:HD21	1:A:754:ILE:HD12	0.43	1.90	26	1
1:A:731:LEU:CD2	1:A:761:TRP:HB2	0.43	2.43	9	1
1:A:679:PRO:HB2	1:A:683:THR:OG1	0.43	2.13	13	1
1:A:731:LEU:O	1:A:732:GLN:C	0.43	2.56	6	5
1:A:771:TRP:CH2	1:A:775:ALA:CB	0.43	3.01	22	2
1:A:761:TRP:O	1:A:762:ARG:C	0.43	2.57	20	4
1:A:729:ARG:CD	1:A:730:HIS:N	0.43	2.82	7	1
1:A:756:GLU:O	1:A:760:GLU:HB2	0.43	2.13	27	6

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:667:ILE:HD13	1:A:667:ILE:N	0.43	2.27	10	1
1:A:671:GLU:OE1	1:A:672:GLN:N	0.43	2.52	9	1
1:A:708:ASP:O	1:A:709:LYS:C	0.43	2.56	30	6
1:A:763:HIS:ND1	1:A:767:VAL:CG2	0.43	2.82	1	1
1:A:752:GLU:O	1:A:756:GLU:CB	0.43	2.67	2	1
1:A:736:GLN:O	1:A:739:GLN:HG3	0.43	2.14	14	2
1:A:730:HIS:O	1:A:734:LEU:CD1	0.43	2.66	11	1
1:A:771:TRP:C	1:A:771:TRP:CE3	0.43	2.91	29	3
1:A:707:GLN:CA	1:A:707:GLN:NE2	0.43	2.80	7	1
1:A:730:HIS:HB3	1:A:764:ASP:OD2	0.43	2.14	9	4
1:A:756:GLU:O	1:A:757:MET:C	0.43	2.55	24	6
1:A:664:LEU:O	1:A:729:ARG:HG2	0.43	2.13	23	3
1:A:680:LYS:O	1:A:684:ASP:HB2	0.43	2.14	21	1
1:A:747:GLU:O	1:A:747:GLU:CG	0.43	2.67	21	1
1:A:682:ILE:O	1:A:686:LEU:HB3	0.43	2.14	22	4
1:A:756:GLU:HG2	1:A:760:GLU:OE1	0.43	2.14	29	1
1:A:672:GLN:O	1:A:675:GLU:HG3	0.43	2.14	22	1
1:A:722:ALA:O	1:A:725:SER:N	0.43	2.49	30	1
1:A:760:GLU:O	1:A:761:TRP:C	0.43	2.58	18	5
1:A:750:VAL:HA	1:A:753:TRP:HB2	0.43	1.91	27	3
1:A:728:LEU:HD22	1:A:764:ASP:CB	0.43	2.44	7	3
1:A:721:GLY:O	1:A:725:SER:OG	0.43	2.34	8	1
1:A:739:GLN:C	1:A:739:GLN:CD	0.43	2.78	14	2
1:A:693:MET:HE2	1:A:761:TRP:CG	0.43	2.49	16	1
1:A:703:ASN:CG	1:A:708:ASP:CB	0.42	2.87	6	1
1:A:739:GLN:O	1:A:739:GLN:CD	0.42	2.58	1	1
1:A:743:LEU:CD1	1:A:746:TRP:CB	0.42	2.97	7	4
1:A:711:GLY:O	1:A:715:GLU:HG3	0.42	2.14	15	1
1:A:726:VAL:O	1:A:768:LEU:HD13	0.42	2.14	26	2
1:A:709:LYS:O	1:A:711:GLY:N	0.42	2.52	9	1
1:A:728:LEU:HD22	1:A:731:LEU:CG	0.42	2.44	14	1
1:A:732:GLN:O	1:A:736:GLN:OE1	0.42	2.36	28	1
1:A:711:GLY:O	1:A:712:ILE:C	0.42	2.57	20	3
1:A:706:ALA:O	1:A:707:GLN:HB2	0.42	2.14	2	9
1:A:759:GLU:CD	1:A:759:GLU:O	0.42	2.58	2	1
1:A:696:TYR:CG	1:A:719:ILE:HG13	0.42	2.48	8	1
1:A:702:SER:O	1:A:705:THR:HG22	0.42	2.14	4	1
1:A:768:LEU:O	1:A:771:TRP:CB	0.42	2.67	14	1
1:A:688:VAL:O	1:A:691:LYS:HG2	0.42	2.15	28	1
1:A:749:ASN:O	1:A:750:VAL:C	0.42	2.58	2	10
1:A:703:ASN:HB3	1:A:708:ASP:CB	0.42	2.44	21	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:671:GLU:CD	1:A:672:GLN:N	0.42	2.72	3	1
1:A:734:LEU:HD23	1:A:757:MET:HE3	0.42	1.90	14	1
1:A:761:TRP:CE3	1:A:762:ARG:N	0.42	2.87	27	3
1:A:688:VAL:HG23	1:A:689:PHE:N	0.42	2.29	2	1
1:A:665:LEU:HD21	1:A:764:ASP:CA	0.42	2.45	3	1
1:A:722:ALA:O	1:A:725:SER:OG	0.42	2.34	4	2
1:A:747:GLU:CG	1:A:747:GLU:O	0.42	2.68	4	1
1:A:757:MET:CG	1:A:758:LYS:N	0.42	2.82	6	1
1:A:666:ASP:CG	1:A:669:MET:HB3	0.42	2.34	27	2
1:A:765:VAL:O	1:A:767:VAL:N	0.42	2.52	29	4
1:A:749:ASN:C	1:A:749:ASN:OD1	0.42	2.57	16	3
1:A:713:VAL:O	1:A:714:GLU:C	0.42	2.57	26	4
1:A:689:PHE:CZ	1:A:723:ALA:CA	0.42	3.02	10	1
1:A:710:LYS:O	1:A:711:GLY:C	0.42	2.57	18	3
1:A:674:LEU:CD2	1:A:679:PRO:HD3	0.42	2.43	3	1
1:A:689:PHE:O	1:A:693:MET:HB2	0.42	2.15	16	1
1:A:741:PRO:HB3	1:A:746:TRP:CZ3	0.42	2.49	23	1
1:A:728:LEU:HD23	1:A:728:LEU:N	0.42	2.28	24	1
1:A:687:ALA:HA	1:A:690:GLU:HG2	0.42	1.92	19	1
1:A:720:LYS:O	1:A:721:GLY:C	0.42	2.58	20	2
1:A:765:VAL:HA	1:A:768:LEU:CD2	0.42	2.41	4	2
1:A:689:PHE:CE1	1:A:693:MET:HG2	0.42	2.50	30	1
1:A:699:VAL:CG1	1:A:700:LEU:N	0.42	2.83	27	1
1:A:667:ILE:O	1:A:771:TRP:CZ2	0.42	2.73	19	1
1:A:721:GLY:O	1:A:722:ALA:C	0.42	2.57	12	1
1:A:759:GLU:O	1:A:760:GLU:HB2	0.42	2.15	28	5
1:A:711:GLY:C	1:A:715:GLU:OE2	0.42	2.58	26	2
1:A:761:TRP:CE3	1:A:762:ARG:HA	0.42	2.49	13	1
1:A:739:GLN:NE2	1:A:740:SER:HB2	0.42	2.30	17	1
1:A:742:ASP:OD1	1:A:742:ASP:N	0.42	2.53	10	1
1:A:681:LEU:HD12	1:A:682:ILE:N	0.42	2.30	20	1
1:A:746:TRP:CZ2	1:A:750:VAL:HG22	0.42	2.50	2	1
1:A:697:VAL:O	1:A:698:SER:C	0.42	2.57	15	1
1:A:697:VAL:O	1:A:700:LEU:HB2	0.42	2.15	11	1
1:A:668:PRO:O	1:A:671:GLU:HG3	0.42	2.15	3	1
1:A:710:LYS:CG	1:A:711:GLY:N	0.42	2.83	8	1
1:A:720:LYS:HG3	1:A:731:LEU:O	0.42	2.13	30	1
1:A:700:LEU:CD1	1:A:715:GLU:HG3	0.42	2.45	13	1
1:A:708:ASP:C	1:A:712:ILE:HD12	0.42	2.36	21	2
1:A:734:LEU:HD23	1:A:757:MET:CG	0.42	2.42	29	1
1:A:739:GLN:CD	1:A:739:GLN:O	0.42	2.59	12	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:717:HIS:CG	1:A:739:GLN:OE1	0.42	2.73	20	1
1:A:686:LEU:O	1:A:690:GLU:HG2	0.42	2.15	30	1
1:A:670:LEU:CD2	1:A:727:GLY:HA3	0.42	2.39	16	1
1:A:684:ASP:O	1:A:685:GLY:C	0.41	2.58	24	2
1:A:666:ASP:CG	1:A:669:MET:HB2	0.41	2.35	21	4
1:A:708:ASP:O	1:A:710:LYS:N	0.41	2.52	5	1
1:A:703:ASN:OD1	1:A:712:ILE:HG13	0.41	2.15	11	1
1:A:665:LEU:HD22	1:A:768:LEU:CD2	0.41	2.45	10	1
1:A:732:GLN:OE1	1:A:732:GLN:C	0.41	2.58	20	1
1:A:716:GLY:O	1:A:720:LYS:HD3	0.41	2.15	4	1
1:A:692:MET:O	1:A:693:MET:C	0.41	2.58	22	1
1:A:740:SER:OG	1:A:743:LEU:HD11	0.41	2.16	15	2
1:A:729:ARG:HB2	1:A:729:ARG:CZ	0.41	2.45	5	1
1:A:703:ASN:OD1	1:A:703:ASN:C	0.41	2.58	11	1
1:A:696:TYR:CZ	1:A:719:ILE:HG13	0.41	2.50	9	1
1:A:696:TYR:O	1:A:697:VAL:C	0.41	2.56	6	2
1:A:739:GLN:C	1:A:741:PRO:HD3	0.41	2.34	2	7
1:A:696:TYR:CE1	1:A:719:ILE:CD1	0.41	3.04	19	2
1:A:703:ASN:HB2	1:A:708:ASP:CB	0.41	2.45	11	1
1:A:707:GLN:O	1:A:707:GLN:OE1	0.41	2.38	10	1
1:A:728:LEU:HA	1:A:764:ASP:OD2	0.41	2.16	12	1
1:A:674:LEU:HA	1:A:678:GLY:HA2	0.41	1.92	7	1
1:A:756:GLU:HG3	1:A:757:MET:N	0.41	2.29	7	1
1:A:663:ALA:HA	1:A:729:ARG:CZ	0.41	2.46	9	1
1:A:712:ILE:HA	1:A:715:GLU:OE2	0.41	2.15	13	1
1:A:748:ASP:O	1:A:748:ASP:OD1	0.41	2.38	1	1
1:A:665:LEU:HD11	1:A:767:VAL:CG1	0.41	2.44	11	1
1:A:734:LEU:HA	1:A:737:GLN:OE1	0.41	2.15	10	1
1:A:680:LYS:O	1:A:681:LEU:C	0.41	2.58	4	1
1:A:700:LEU:HD23	1:A:754:ILE:HD12	0.41	1.92	9	1
1:A:665:LEU:CD1	1:A:667:ILE:HD12	0.41	2.46	25	1
1:A:689:PHE:CE1	1:A:722:ALA:HB3	0.41	2.50	26	1
1:A:720:LYS:HE3	1:A:735:GLY:CA	0.41	2.46	22	1
1:A:730:HIS:ND1	1:A:734:LEU:HD11	0.41	2.29	28	1
1:A:677:VAL:CG2	1:A:681:LEU:HD23	0.41	2.41	16	1
1:A:752:GLU:N	1:A:752:GLU:OE1	0.41	2.53	23	1
1:A:670:LEU:CD1	1:A:768:LEU:HB2	0.41	2.46	1	1
1:A:675:GLU:OE1	1:A:675:GLU:CA	0.41	2.67	2	1
1:A:731:LEU:HA	1:A:731:LEU:HD13	0.41	1.75	21	1
1:A:688:VAL:CG1	1:A:689:PHE:N	0.41	2.83	15	1
1:A:729:ARG:O	1:A:733:GLN:HG3	0.41	2.15	11	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:733:GLN:OE1	1:A:736:GLN:OE1	0.41	2.39	10	1
1:A:667:ILE:O	1:A:671:GLU:HG3	0.41	2.15	3	1
1:A:671:GLU:HB2	1:A:771:TRP:CH2	0.41	2.51	25	1
1:A:756:GLU:CG	1:A:760:GLU:OE1	0.41	2.68	18	1
1:A:703:ASN:O	1:A:706:ALA:N	0.41	2.50	22	1
1:A:716:GLY:O	1:A:720:LYS:HB2	0.41	2.16	16	1
1:A:696:TYR:OH	1:A:718:LYS:CE	0.41	2.69	2	1
1:A:728:LEU:HD21	1:A:768:LEU:CD2	0.41	2.46	21	1
1:A:768:LEU:O	1:A:771:TRP:HB3	0.41	2.15	3	1
1:A:735:GLY:O	1:A:737:GLN:N	0.41	2.53	9	1
1:A:714:GLU:C	1:A:716:GLY:N	0.41	2.74	28	2
1:A:746:TRP:C	1:A:746:TRP:CE3	0.41	2.94	16	1
1:A:761:TRP:CZ3	1:A:762:ARG:HA	0.41	2.51	13	1
1:A:690:GLU:OE2	1:A:765:VAL:CG1	0.41	2.69	13	1
1:A:709:LYS:HG3	1:A:710:LYS:N	0.41	2.31	27	1
1:A:715:GLU:O	1:A:719:ILE:HB	0.41	2.16	20	2
1:A:749:ASN:HB3	1:A:753:TRP:CE3	0.41	2.50	2	1
1:A:708:ASP:O	1:A:712:ILE:HG12	0.41	2.15	5	1
1:A:757:MET:O	1:A:758:LYS:C	0.41	2.58	29	3
1:A:666:ASP:OD2	1:A:669:MET:HB2	0.41	2.15	3	1
1:A:665:LEU:HD22	1:A:768:LEU:CA	0.41	2.46	25	1
1:A:686:LEU:HB2	1:A:726:VAL:CG1	0.41	2.45	7	1
1:A:774:LYS:O	1:A:775:ALA:C	0.41	2.59	9	1
1:A:771:TRP:CE3	1:A:771:TRP:C	0.41	2.94	9	1
1:A:666:ASP:O	1:A:670:LEU:HB2	0.41	2.16	14	2
1:A:752:GLU:O	1:A:753:TRP:C	0.41	2.59	22	1
1:A:662:GLU:HG2	1:A:667:ILE:HD13	0.41	1.93	6	1
1:A:670:LEU:CD2	1:A:768:LEU:HD13	0.41	2.46	24	1
1:A:747:GLU:O	1:A:747:GLU:OE2	0.41	2.39	24	1
1:A:696:TYR:CG	1:A:719:ILE:HD12	0.41	2.51	17	1
1:A:717:HIS:O	1:A:721:GLY:CA	0.41	2.68	4	1
1:A:722:ALA:O	1:A:723:ALA:C	0.41	2.59	30	1
1:A:770:ALA:O	1:A:771:TRP:C	0.41	2.59	30	1
1:A:666:ASP:OD1	1:A:669:MET:HB2	0.41	2.16	13	1
1:A:720:LYS:HD3	1:A:731:LEU:CD2	0.40	2.47	6	1
1:A:732:GLN:OE1	1:A:733:GLN:NE2	0.40	2.54	7	1
1:A:719:ILE:HG13	1:A:720:LYS:HG3	0.40	1.93	6	1
1:A:701:GLU:O	1:A:702:SER:C	0.40	2.60	27	1
1:A:732:GLN:HG3	1:A:733:GLN:N	0.40	2.31	27	1
1:A:674:LEU:CD2	1:A:678:GLY:C	0.40	2.90	21	1
1:A:674:LEU:CD2	1:A:682:ILE:HD13	0.40	2.45	5	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:679:PRO:HB3	1:A:772:VAL:CG1	0.40	2.46	25	1
1:A:730:HIS:ND1	1:A:731:LEU:CD2	0.40	2.84	20	1
1:A:675:GLU:O	1:A:676:LEU:C	0.40	2.59	28	1
1:A:663:ALA:O	1:A:729:ARG:NH1	0.40	2.53	24	1
1:A:739:GLN:O	1:A:741:PRO:HD2	0.40	2.16	24	1
1:A:713:VAL:HA	1:A:739:GLN:OE1	0.40	2.15	8	1
1:A:734:LEU:HD22	1:A:757:MET:HG3	0.40	1.91	14	1
1:A:689:PHE:HZ	1:A:723:ALA:HB2	0.40	1.61	30	1
1:A:720:LYS:HB3	1:A:731:LEU:O	0.40	2.17	16	1
1:A:693:MET:CE	1:A:761:TRP:CG	0.40	3.05	1	1
1:A:668:PRO:O	1:A:671:GLU:HG2	0.40	2.15	2	1
1:A:739:GLN:C	1:A:739:GLN:OE1	0.40	2.60	14	1
1:A:752:GLU:CA	1:A:752:GLU:OE1	0.40	2.70	16	1
1:A:733:GLN:O	1:A:736:GLN:HB3	0.40	2.17	13	1
1:A:716:GLY:O	1:A:717:HIS:C	0.40	2.59	21	1
1:A:670:LEU:O	1:A:671:GLU:C	0.40	2.60	3	1
1:A:708:ASP:O	1:A:712:ILE:HG13	0.40	2.16	3	1
1:A:768:LEU:O	1:A:769:LYS:C	0.40	2.58	18	1
1:A:740:SER:N	1:A:741:PRO:HD3	0.40	2.30	13	1

## 6.3 Torsion angles ⓘ

### 6.3.1 Protein backbone ⓘ

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 NMR 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	114/125 (91%)	99±3 (87±2%)	14±3 (12±2%)	1±1 (1±0%)	20	66
All	All	3420/3750 (91%)	2967 (87%)	411 (12%)	42 (1%)	20	66

All 5 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	760	GLU	30
1	A	775	ALA	5
1	A	662	GLU	3

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	680	LYS	3
1	A	709	LYS	1

### 6.3.2 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 NMR 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	95/106 (90%)	68±4 (71±5%)	27±4 (29±5%)	2	19
All	All	2850/3180 (90%)	2029 (71%)	821 (29%)	2	19

All 73 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	743	LEU	30
1	A	763	HIS	30
1	A	753	TRP	29
1	A	696	TYR	27
1	A	720	LYS	25
1	A	693	MET	24
1	A	665	LEU	21
1	A	739	GLN	20
1	A	708	ASP	19
1	A	702	SER	17
1	A	680	LYS	17
1	A	691	LYS	16
1	A	666	ASP	16
1	A	704	LEU	16
1	A	769	LYS	16
1	A	733	GLN	16
1	A	700	LEU	16
1	A	762	ARG	16
1	A	729	ARG	16
1	A	672	GLN	15
1	A	709	LYS	15
1	A	759	GLU	14
1	A	669	MET	14

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	774	LYS	14
1	A	674	LEU	14
1	A	662	GLU	13
1	A	690	GLU	13
1	A	710	LYS	13
1	A	737	GLN	13
1	A	736	GLN	13
1	A	758	LYS	13
1	A	752	GLU	12
1	A	766	GLU	12
1	A	698	SER	12
1	A	705	THR	12
1	A	747	GLU	12
1	A	718	LYS	11
1	A	750	VAL	11
1	A	732	GLN	11
1	A	725	SER	11
1	A	701	GLU	10
1	A	692	MET	10
1	A	676	LEU	10
1	A	667	ILE	9
1	A	707	GLN	9
1	A	760	GLU	9
1	A	742	ASP	9
1	A	768	LEU	8
1	A	761	TRP	7
1	A	675	GLU	7
1	A	714	GLU	7
1	A	756	GLU	7
1	A	748	ASP	7
1	A	689	PHE	7
1	A	684	ASP	6
1	A	755	GLU	6
1	A	730	HIS	5
1	A	717	HIS	4
1	A	673	TYR	4
1	A	681	LEU	3
1	A	757	MET	3
1	A	728	LEU	3
1	A	715	GLU	2
1	A	740	SER	2
1	A	671	GLU	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	664	LEU	2
1	A	738	ILE	2
1	A	703	ASN	1
1	A	699	VAL	1
1	A	765	VAL	1
1	A	734	LEU	1
1	A	771	TRP	1
1	A	764	ASP	1

### 6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

### 6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

### 6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

### 6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

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

There are no chain breaks in this entry.

## 7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided