



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 12, 2017 – 10:52 pm GMT

PDB ID : 2KBE
Title : solution structure of amino-terminal domain of Dbp5p
Authors : Fan, J.S.; Zhang, J.; Yang, D.
Deposited on : 2008-11-27

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

We welcome your comments at 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

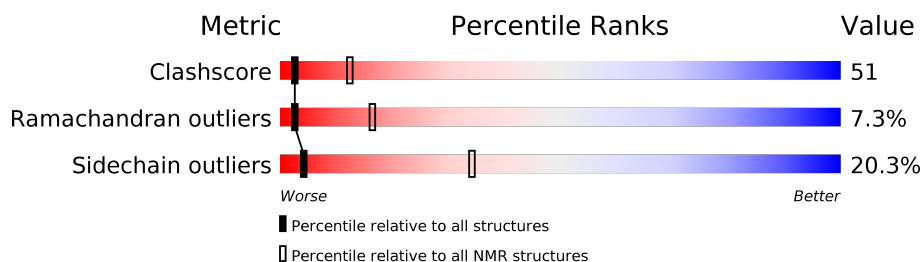
1 Overall quality at a glance

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 ≥ 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	226	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 9 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:101-A:110, A:133-A:294 (172)	0.51	9

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 2 clusters. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 3, 4, 6, 7, 8, 9, 10, 12, 16, 17, 18, 20
2	5, 11, 13, 14, 15, 19

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3616 atoms, of which 1848 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called ATP-dependent RNA helicase DBP5.

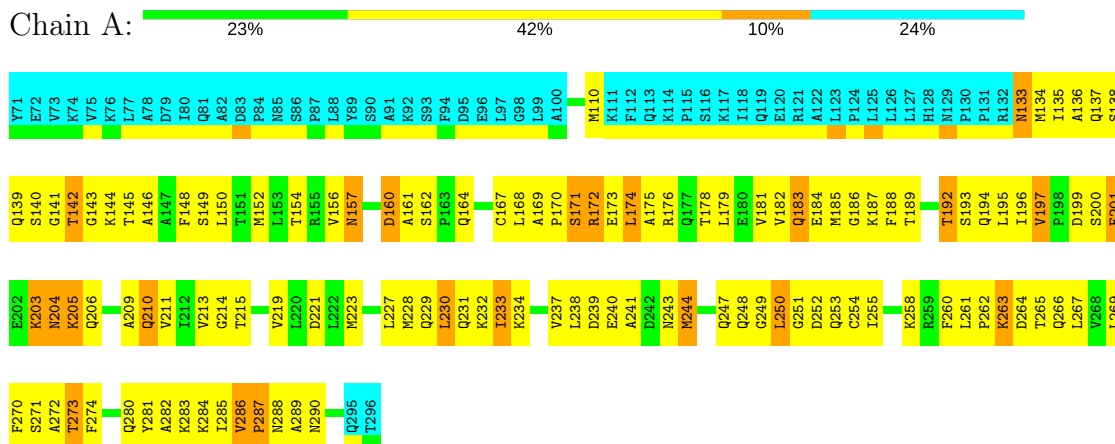
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	226	Total	C	H	N	O	S	0
			3616	1124	1848	305	330	9	

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: ATP-dependent RNA helicase DBP5

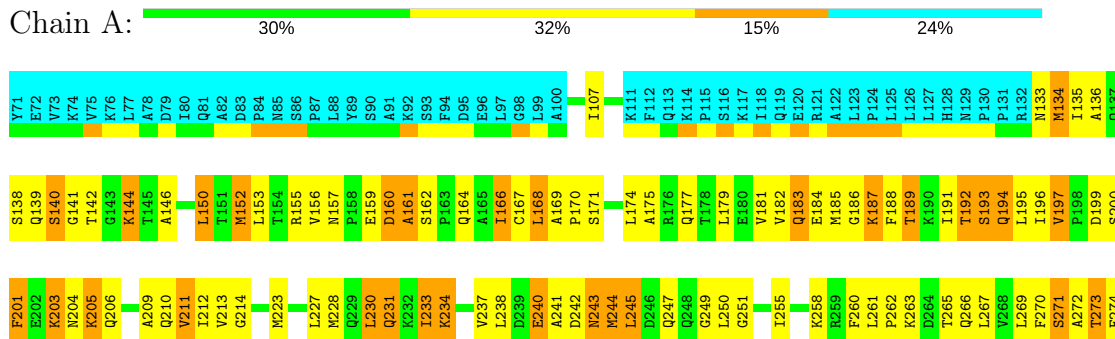


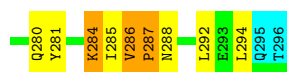
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

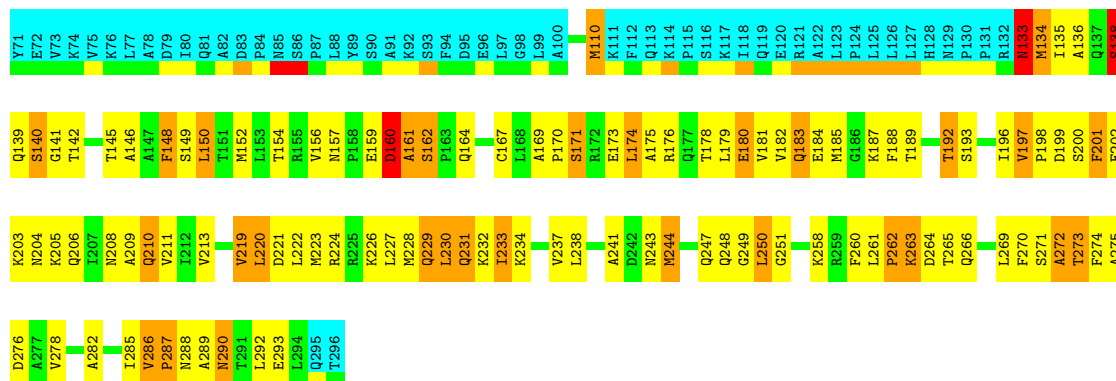
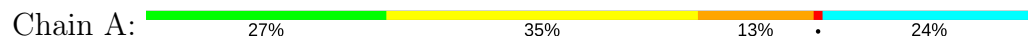
- Molecule 1: ATP-dependent RNA helicase DBP5





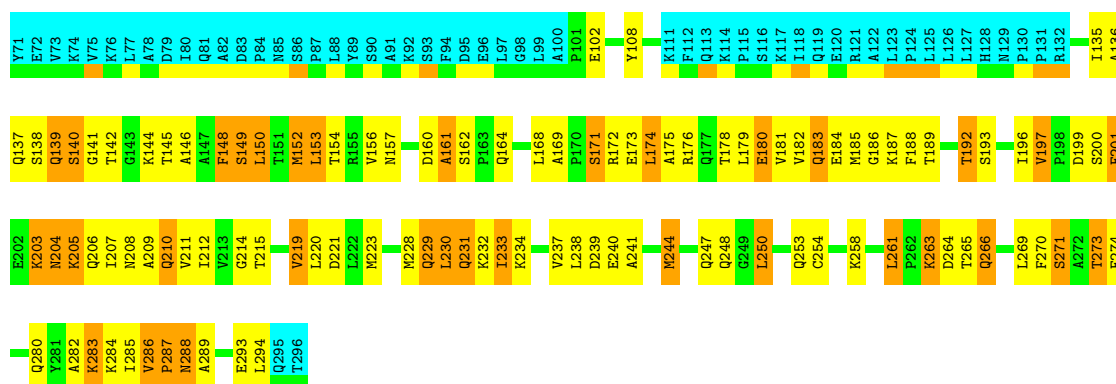
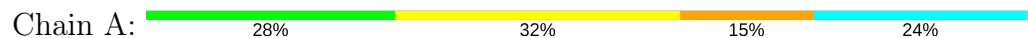
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: ATP-dependent RNA helicase DBP5



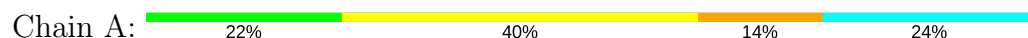
4.2.3 Score per residue for model 3

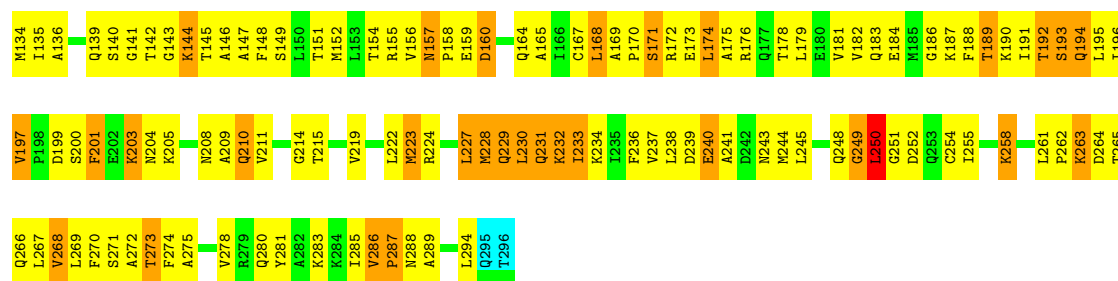
- Molecule 1: ATP-dependent RNA helicase DBP5



4.2.4 Score per residue for model 4

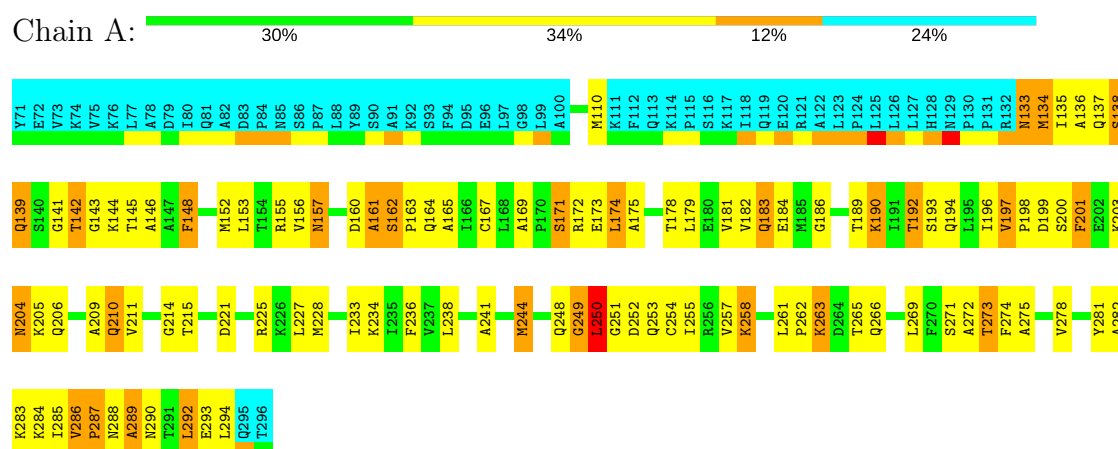
- Molecule 1: ATP-dependent RNA helicase DBP5





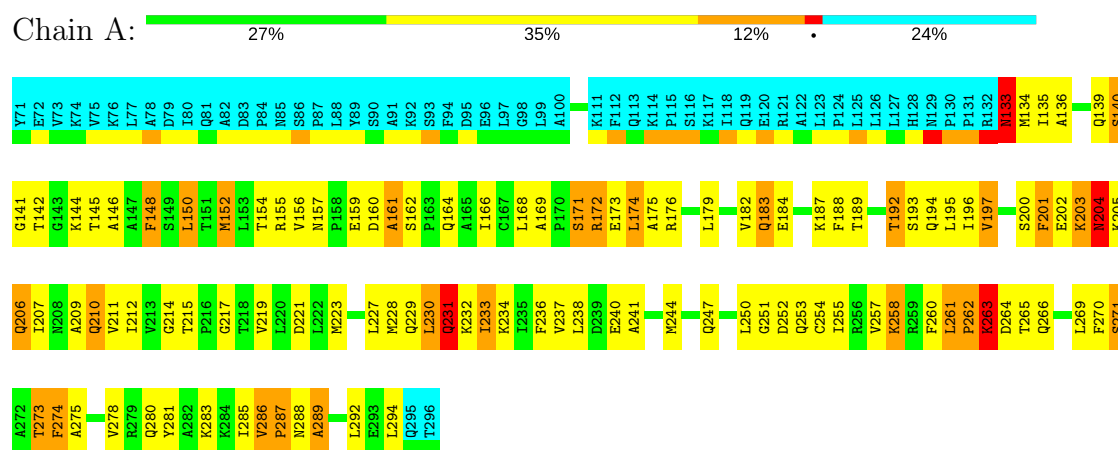
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: ATP-dependent RNA helicase DBP5



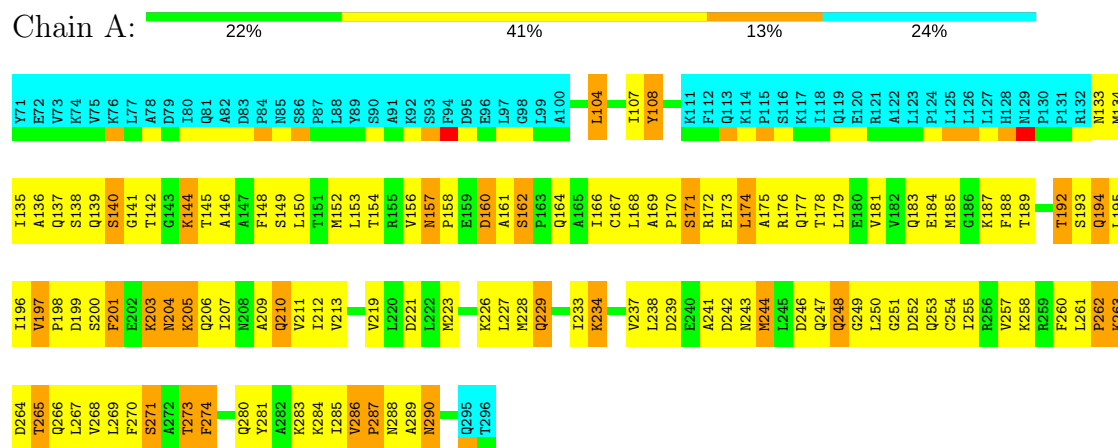
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: ATP-dependent RNA helicase DBP5



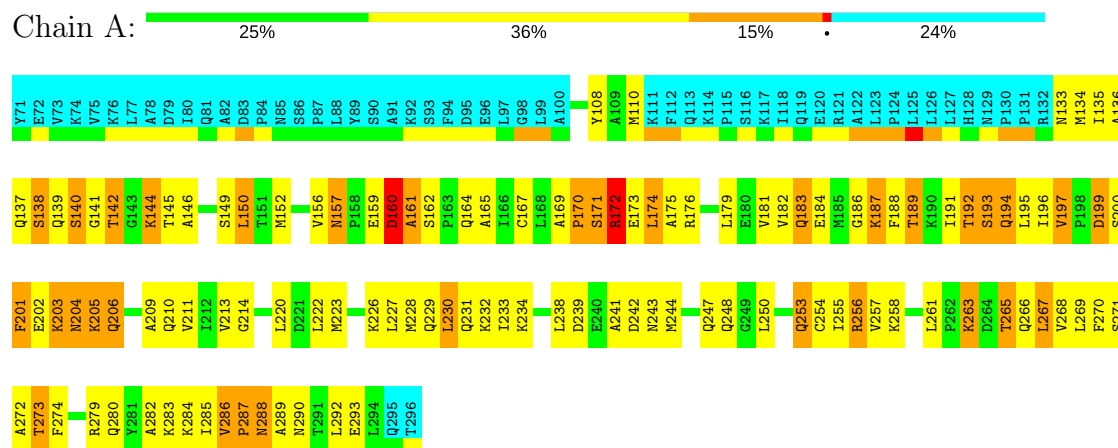
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: ATP-dependent RNA helicase DBP5



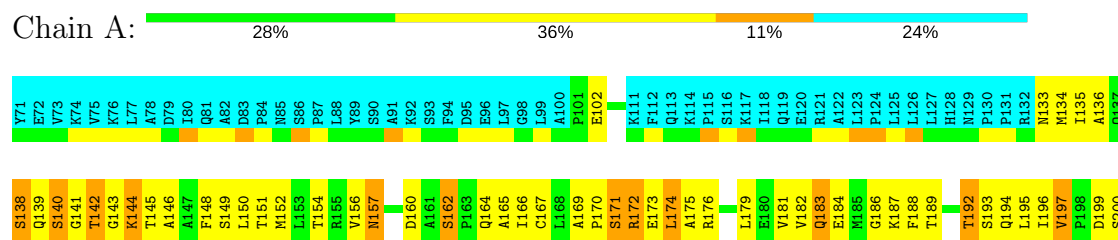
4.2.8 Score per residue for model 8

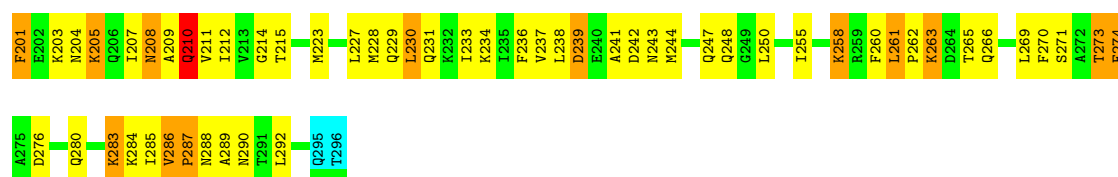
- Molecule 1: ATP-dependent RNA helicase DBP5



4.2.9 Score per residue for model 9 (medoid)

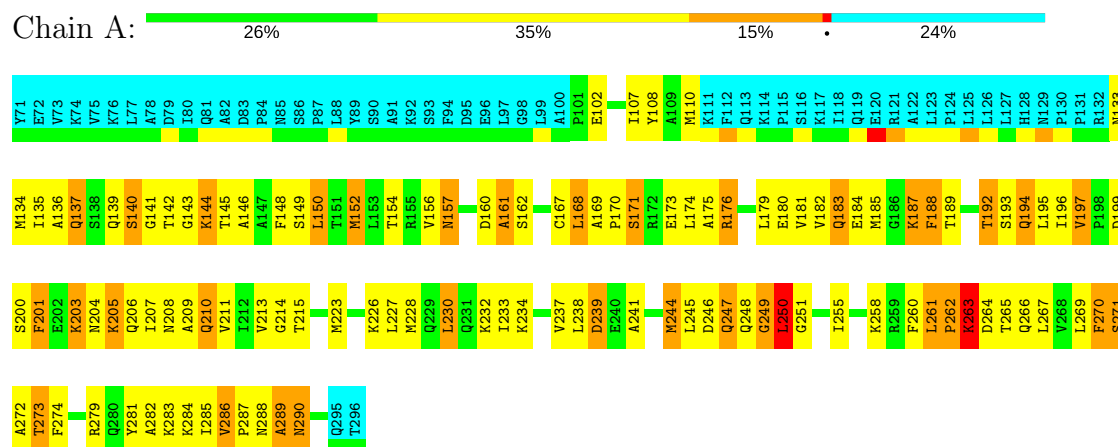
- Molecule 1: ATP-dependent RNA helicase DBP5





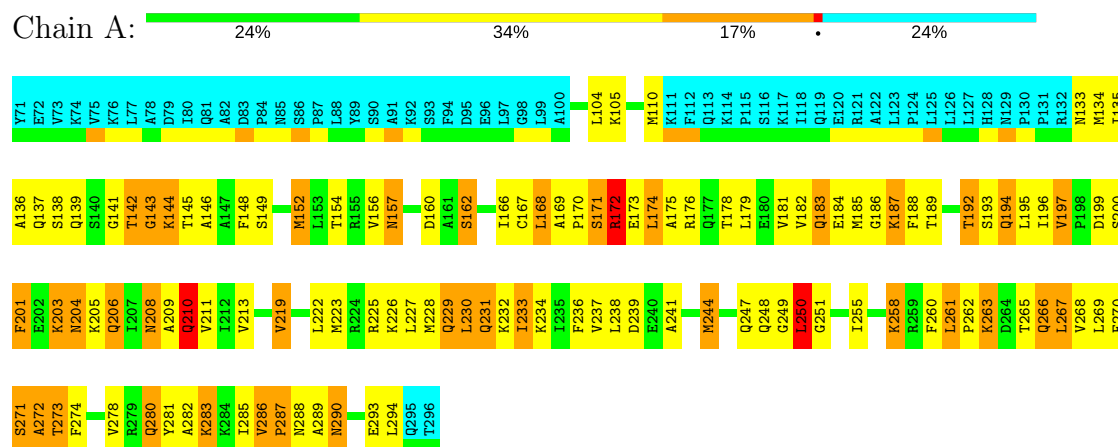
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: ATP-dependent RNA helicase DBP5



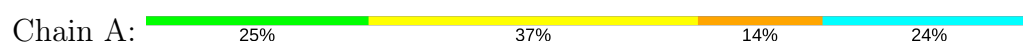
4.2.11 Score per residue for model 11

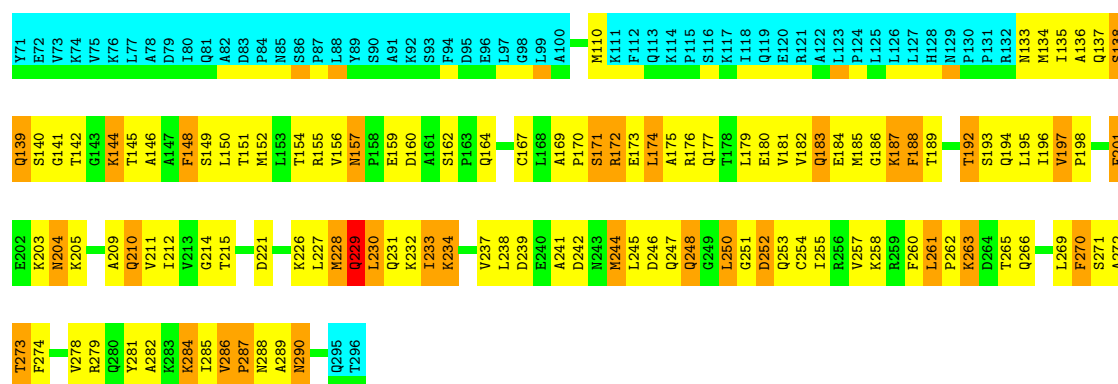
- Molecule 1: ATP-dependent RNA helicase DBP5



4.2.12 Score per residue for model 12

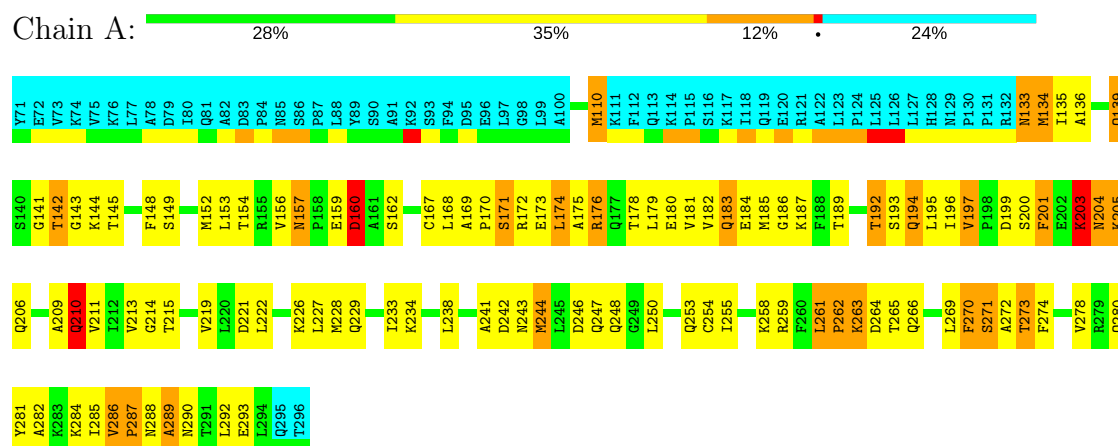
- Molecule 1: ATP-dependent RNA helicase DBP5





4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: ATP-dependent RNA helicase DBP5



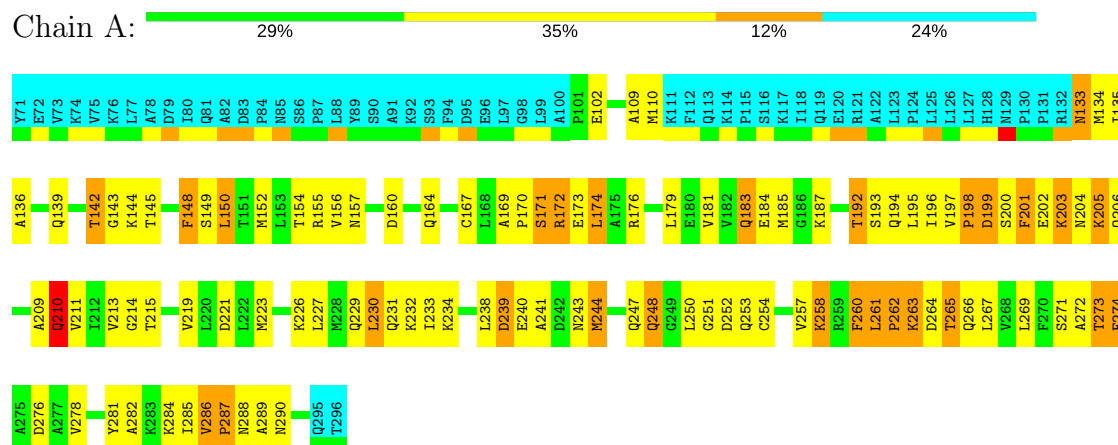
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: ATP-dependent RNA helicase DBP5



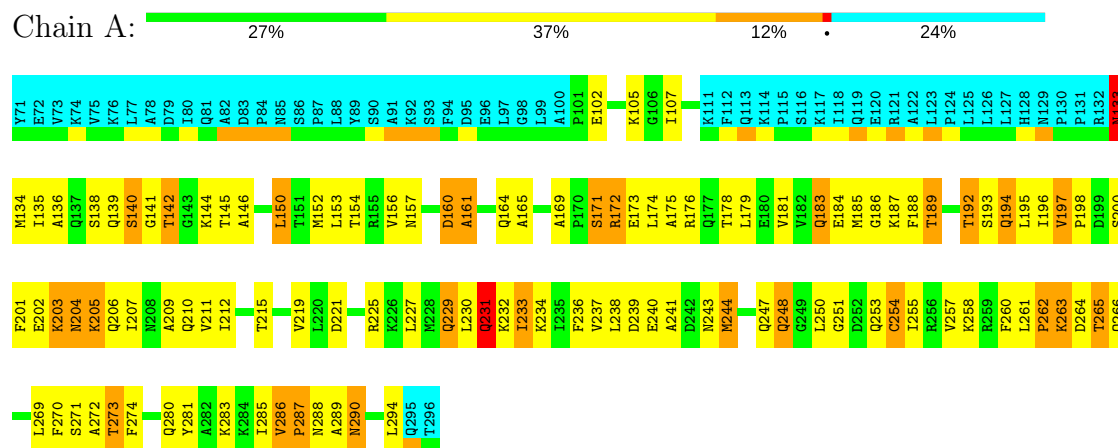
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: ATP-dependent RNA helicase DBP5



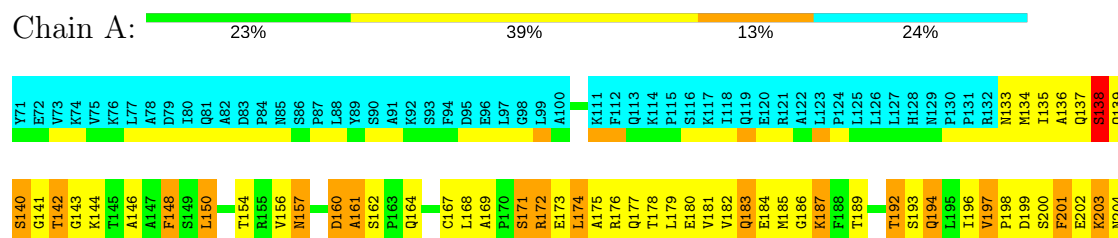
4.2.16 Score per residue for model 16

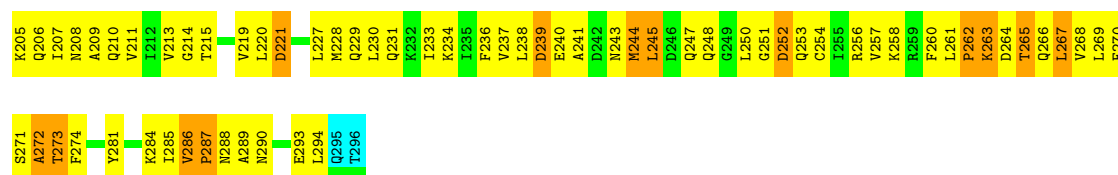
- Molecule 1: ATP-dependent RNA helicase DBP5



4.2.17 Score per residue for model 17

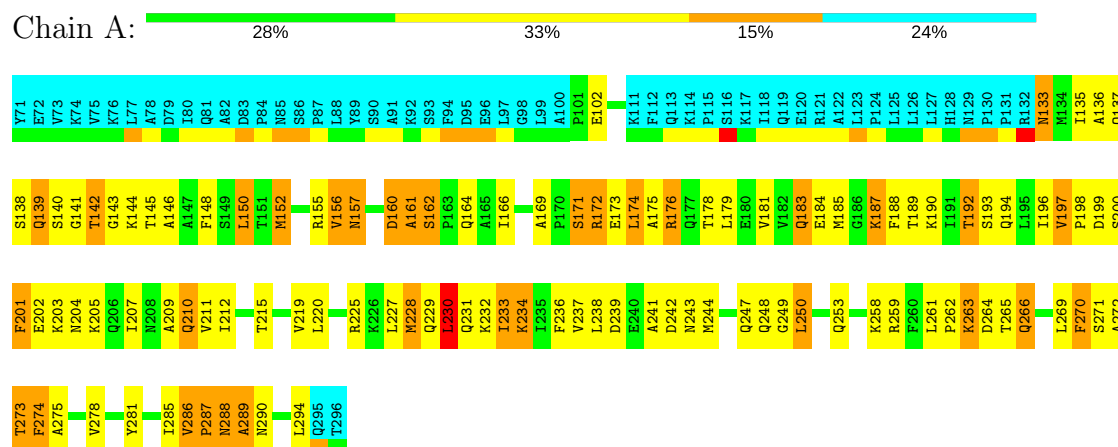
- Molecule 1: ATP-dependent RNA helicase DBP5





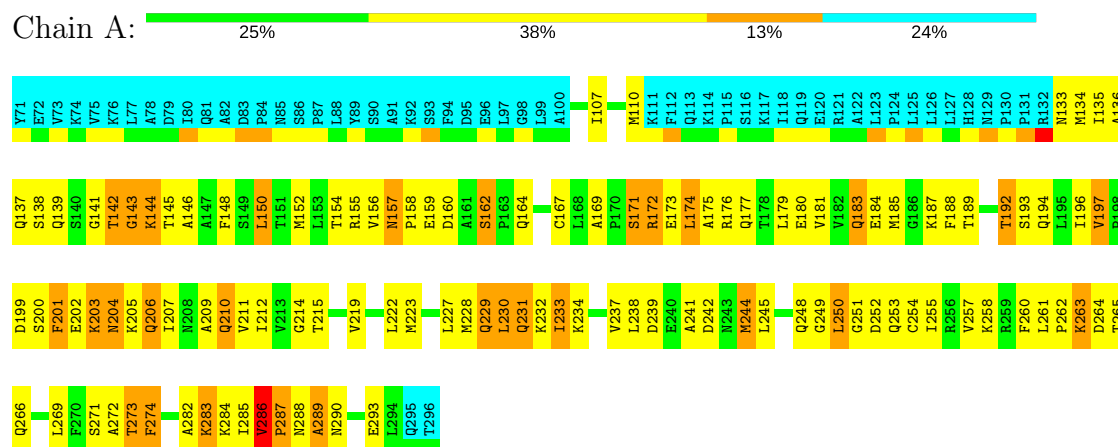
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: ATP-dependent RNA helicase DBP5



4.2.19 Score per residue for model 19

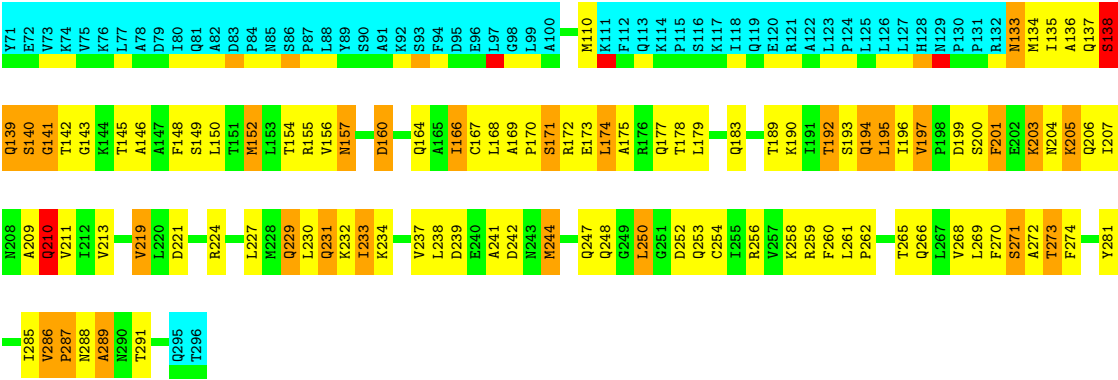
- Molecule 1: ATP-dependent RNA helicase DBP5



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: ATP-dependent RNA helicase DBP5





5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *torsion angle dynamics*.

Of the 100 calculated structures, 20 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 NIH	structure solution	2.21
X-PLOR NIH	refinement	2.21

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.

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

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	1336	1401	1401	141±12
All	All	26720	28020	28020	2811

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 51.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:174:LEU:H	1:A:174:LEU:HD22	0.99	1.18	5	11
1:A:265:THR:HG23	1:A:266:GLN:H	0.98	1.18	1	5
1:A:174:LEU:HD22	1:A:174:LEU:H	0.97	1.20	19	6
1:A:230:LEU:HD13	1:A:230:LEU:H	0.91	1.25	4	2
1:A:230:LEU:HD23	1:A:230:LEU:H	0.87	1.27	17	3
1:A:286:VAL:O	1:A:288:ASN:N	0.87	2.08	11	20
1:A:227:LEU:O	1:A:227:LEU:HD12	0.86	1.68	6	4
1:A:230:LEU:H	1:A:230:LEU:HD22	0.86	1.30	9	1
1:A:230:LEU:H	1:A:230:LEU:HD23	0.85	1.28	16	1
1:A:146:ALA:HB1	1:A:185:MET:HE1	0.84	1.50	3	7
1:A:230:LEU:HD23	1:A:230:LEU:N	0.83	1.87	1	3
1:A:241:ALA:HB2	1:A:269:LEU:HD11	0.83	1.48	17	20
1:A:238:LEU:HD21	1:A:244:MET:SD	0.82	2.15	4	17
1:A:285:ILE:HG23	1:A:287:PRO:CD	0.82	2.04	10	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:286:VAL:N	1:A:287:PRO:HD2	0.81	1.90	4	20
1:A:248:GLN:O	1:A:250:LEU:N	0.81	2.14	5	6
1:A:174:LEU:N	1:A:174:LEU:HD22	0.80	1.91	16	11
1:A:230:LEU:N	1:A:230:LEU:HD13	0.80	1.92	9	2
1:A:244:MET:SD	1:A:250:LEU:HD13	0.78	2.17	12	5
1:A:265:THR:HG23	1:A:266:GLN:N	0.78	1.93	1	5
1:A:141:GLY:O	1:A:181:VAL:HG21	0.78	1.79	4	2
1:A:174:LEU:H	1:A:174:LEU:CD2	0.77	1.92	6	8
1:A:192:THR:OG1	1:A:193:SER:N	0.77	2.18	9	18
1:A:174:LEU:CD2	1:A:174:LEU:H	0.76	1.94	8	9
1:A:196:ILE:O	1:A:197:VAL:HG23	0.75	1.81	15	1
1:A:261:LEU:N	1:A:261:LEU:HD23	0.75	1.97	16	3
1:A:135:ILE:HD11	1:A:288:ASN:C	0.74	2.03	7	20
1:A:146:ALA:HB1	1:A:185:MET:CE	0.74	2.12	18	8
1:A:205:LYS:O	1:A:227:LEU:HD22	0.73	1.82	17	14
1:A:148:PHE:CZ	1:A:237:VAL:HG21	0.73	2.18	9	5
1:A:241:ALA:CB	1:A:269:LEU:HD11	0.73	2.14	19	13
1:A:135:ILE:HD11	1:A:288:ASN:CA	0.72	2.14	8	20
1:A:182:VAL:HG11	1:A:211:VAL:HG11	0.72	1.62	5	4
1:A:269:LEU:HD22	1:A:287:PRO:CB	0.72	2.15	5	8
1:A:135:ILE:HD12	1:A:135:ILE:N	0.72	2.00	18	6
1:A:186:GLY:O	1:A:189:THR:HG23	0.71	1.84	1	3
1:A:265:THR:HG22	1:A:266:GLN:N	0.71	2.01	7	14
1:A:248:GLN:O	1:A:250:LEU:HD23	0.71	1.85	19	1
1:A:286:VAL:N	1:A:287:PRO:CD	0.71	2.53	10	20
1:A:168:LEU:O	1:A:168:LEU:HD12	0.71	1.85	11	2
1:A:230:LEU:N	1:A:230:LEU:HD23	0.71	2.01	19	3
1:A:150:LEU:HD12	1:A:150:LEU:O	0.71	1.85	6	4
1:A:285:ILE:HG23	1:A:287:PRO:HD2	0.70	1.64	12	19
1:A:285:ILE:O	1:A:286:VAL:HB	0.70	1.87	15	14
1:A:174:LEU:N	1:A:174:LEU:HD13	0.70	2.00	17	5
1:A:150:LEU:HD12	1:A:150:LEU:C	0.70	2.06	15	8
1:A:152:MET:SD	1:A:211:VAL:HG13	0.70	2.27	2	5
1:A:142:THR:HG22	1:A:143:GLY:N	0.69	2.02	13	4
1:A:230:LEU:HD12	1:A:230:LEU:H	0.69	1.47	15	1
1:A:265:THR:CG2	1:A:266:GLN:H	0.69	1.98	1	5
1:A:230:LEU:H	1:A:230:LEU:CD1	0.69	1.93	4	1
1:A:174:LEU:HD13	1:A:174:LEU:N	0.69	2.02	15	11
1:A:150:LEU:C	1:A:150:LEU:HD12	0.69	2.08	2	6
1:A:269:LEU:HD13	1:A:287:PRO:HB3	0.69	1.65	12	20
1:A:135:ILE:HD11	1:A:288:ASN:HA	0.69	1.64	8	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:136:ALA:HB3	1:A:269:LEU:O	0.69	1.88	15	19
1:A:133:ASN:CG	1:A:134:MET:N	0.69	2.46	8	3
1:A:152:MET:O	1:A:156:VAL:HG23	0.68	1.89	9	15
1:A:245:LEU:C	1:A:245:LEU:HD12	0.68	2.09	4	2
1:A:157:ASN:HD22	1:A:157:ASN:H	0.68	1.32	4	3
1:A:230:LEU:H	1:A:230:LEU:CD2	0.68	2.02	17	3
1:A:150:LEU:O	1:A:150:LEU:HD12	0.68	1.89	18	8
1:A:245:LEU:HD12	1:A:245:LEU:C	0.68	2.09	19	3
1:A:135:ILE:N	1:A:135:ILE:HD12	0.67	2.02	7	14
1:A:134:MET:SD	1:A:292:LEU:HD12	0.67	2.29	1	2
1:A:223:MET:CE	1:A:230:LEU:HD11	0.67	2.19	1	1
1:A:227:LEU:HD12	1:A:227:LEU:C	0.67	2.10	12	2
1:A:153:LEU:C	1:A:153:LEU:HD12	0.67	2.09	16	1
1:A:230:LEU:N	1:A:230:LEU:HD22	0.67	2.04	9	2
1:A:230:LEU:CD2	1:A:230:LEU:H	0.67	2.03	20	2
1:A:168:LEU:HD21	1:A:219:VAL:HG21	0.66	1.66	3	4
1:A:230:LEU:CD2	1:A:230:LEU:N	0.66	2.56	1	2
1:A:285:ILE:O	1:A:286:VAL:CB	0.66	2.42	10	9
1:A:133:ASN:ND2	1:A:134:MET:N	0.66	2.43	8	1
1:A:139:GLN:O	1:A:140:SER:C	0.66	2.33	6	12
1:A:228:MET:O	1:A:229:GLN:C	0.66	2.34	12	9
1:A:136:ALA:HB1	1:A:144:LYS:CB	0.66	2.20	12	2
1:A:194:GLN:NE2	1:A:195:LEU:O	0.66	2.29	1	11
1:A:142:THR:O	1:A:146:ALA:N	0.66	2.27	12	10
1:A:160:ASP:O	1:A:161:ALA:HB2	0.66	1.91	10	3
1:A:138:SER:H	1:A:144:LYS:HZ2	0.66	1.34	9	1
1:A:110:MET:CE	1:A:181:VAL:HG13	0.66	2.21	11	6
1:A:168:LEU:HD23	1:A:168:LEU:H	0.65	1.51	7	1
1:A:133:ASN:CG	1:A:134:MET:H	0.65	1.94	8	2
1:A:139:GLN:O	1:A:141:GLY:N	0.65	2.29	1	10
1:A:169:ALA:HB1	1:A:170:PRO:CD	0.65	2.21	10	5
1:A:174:LEU:HD22	1:A:174:LEU:N	0.65	2.03	15	6
1:A:238:LEU:HD23	1:A:238:LEU:C	0.65	2.12	6	10
1:A:133:ASN:ND2	1:A:286:VAL:O	0.64	2.29	15	3
1:A:194:GLN:OE1	1:A:195:LEU:N	0.64	2.30	15	1
1:A:104:LEU:C	1:A:104:LEU:HD12	0.64	2.12	7	1
1:A:254:CYS:SG	1:A:255:ILE:N	0.64	2.70	16	1
1:A:142:THR:N	1:A:270:PHE:CE2	0.64	2.66	18	1
1:A:290:ASN:H	1:A:290:ASN:ND2	0.64	1.90	14	1
1:A:172:ARG:H	1:A:172:ARG:NE	0.64	1.91	14	1
1:A:183:GLN:NE2	1:A:183:GLN:N	0.64	2.46	11	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:247:GLN:CG	1:A:248:GLN:N	0.64	2.61	2	3
1:A:247:GLN:HG3	1:A:248:GLN:N	0.63	2.08	11	3
1:A:168:LEU:HD23	1:A:168:LEU:N	0.63	2.09	7	1
1:A:167:CYS:O	1:A:213:VAL:HA	0.63	1.93	10	5
1:A:270:PHE:C	1:A:270:PHE:CD1	0.63	2.72	12	1
1:A:271:SER:O	1:A:273:THR:N	0.62	2.32	11	18
1:A:157:ASN:ND2	1:A:164:GLN:NE2	0.62	2.47	3	5
1:A:201:PHE:CG	1:A:202:GLU:N	0.62	2.64	16	1
1:A:230:LEU:CD1	1:A:230:LEU:H	0.62	2.06	15	2
1:A:157:ASN:H	1:A:157:ASN:HD22	0.62	1.37	12	3
1:A:265:THR:O	1:A:266:GLN:C	0.62	2.37	3	1
1:A:238:LEU:HD23	1:A:239:ASP:N	0.62	2.09	10	12
1:A:160:ASP:O	1:A:210:GLN:NE2	0.62	2.32	4	9
1:A:152:MET:SD	1:A:165:ALA:HB3	0.62	2.33	4	2
1:A:155:ARG:NH1	1:A:234:LYS:NZ	0.62	2.46	19	1
1:A:251:GLY:O	1:A:255:ILE:CG1	0.62	2.48	10	2
1:A:139:GLN:O	1:A:142:THR:N	0.62	2.33	16	3
1:A:294:LEU:N	1:A:294:LEU:HD22	0.62	2.09	11	2
1:A:105:LYS:NZ	1:A:187:LYS:NZ	0.62	2.47	4	1
1:A:261:LEU:O	1:A:263:LYS:N	0.61	2.32	5	4
1:A:144:LYS:NZ	1:A:240:GLU:N	0.61	2.48	15	1
1:A:141:GLY:N	1:A:270:PHE:CZ	0.61	2.68	12	1
1:A:181:VAL:O	1:A:184:GLU:N	0.61	2.33	13	18
1:A:157:ASN:HD21	1:A:164:GLN:NE2	0.61	1.92	2	1
1:A:169:ALA:HB3	1:A:175:ALA:HB2	0.61	1.71	2	8
1:A:105:LYS:HZ3	1:A:187:LYS:NZ	0.61	1.94	4	1
1:A:238:LEU:HD23	1:A:269:LEU:CD1	0.61	2.26	17	1
1:A:204:ASN:ND2	1:A:205:LYS:NZ	0.61	2.48	12	1
1:A:274:PHE:N	1:A:274:PHE:CD1	0.61	2.68	18	3
1:A:157:ASN:HD22	1:A:157:ASN:N	0.61	1.91	14	4
1:A:164:GLN:HE21	1:A:210:GLN:NE2	0.61	1.93	19	1
1:A:251:GLY:O	1:A:254:CYS:N	0.61	2.34	6	9
1:A:233:ILE:CG2	1:A:234:LYS:N	0.61	2.64	1	20
1:A:171:SER:N	1:A:174:LEU:HD23	0.61	2.10	2	5
1:A:209:ALA:O	1:A:211:VAL:N	0.60	2.34	12	14
1:A:192:THR:O	1:A:193:SER:CB	0.60	2.49	8	3
1:A:205:LYS:HG3	1:A:206:GLN:H	0.60	1.56	17	5
1:A:164:GLN:NE2	1:A:210:GLN:NE2	0.60	2.49	19	1
1:A:220:LEU:HD21	1:A:257:VAL:HG22	0.60	1.72	8	1
1:A:290:ASN:ND2	1:A:290:ASN:N	0.60	2.48	14	1
1:A:110:MET:SD	1:A:142:THR:HG23	0.60	2.37	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:169:ALA:HB1	1:A:170:PRO:HD2	0.60	1.72	10	8
1:A:157:ASN:H	1:A:157:ASN:ND2	0.60	1.94	4	4
1:A:237:VAL:HG13	1:A:270:PHE:CE1	0.60	2.30	1	3
1:A:157:ASN:ND2	1:A:157:ASN:N	0.60	2.49	11	4
1:A:280:GLN:HE22	1:A:283:LYS:NZ	0.60	1.95	16	1
1:A:249:GLY:O	1:A:251:GLY:N	0.59	2.35	10	6
1:A:139:GLN:O	1:A:144:LYS:NZ	0.59	2.35	7	1
1:A:227:LEU:C	1:A:227:LEU:HD12	0.59	2.17	9	2
1:A:169:ALA:HB1	1:A:174:LEU:HB2	0.59	1.75	2	11
1:A:205:LYS:CG	1:A:206:GLN:H	0.59	2.11	6	16
1:A:144:LYS:O	1:A:148:PHE:CD2	0.59	2.55	4	2
1:A:183:GLN:N	1:A:183:GLN:NE2	0.59	2.50	16	5
1:A:133:ASN:ND2	1:A:267:LEU:O	0.59	2.36	4	2
1:A:172:ARG:N	1:A:215:THR:HG21	0.59	2.13	16	12
1:A:155:ARG:NH2	1:A:266:GLN:HE22	0.59	1.95	14	2
1:A:138:SER:OG	1:A:139:GLN:N	0.59	2.34	9	3
1:A:145:THR:HB	1:A:181:VAL:HG11	0.58	1.72	13	6
1:A:136:ALA:HB1	1:A:144:LYS:HB3	0.58	1.74	12	1
1:A:254:CYS:SG	1:A:258:LYS:NZ	0.58	2.75	14	1
1:A:241:ALA:HB3	1:A:271:SER:OG	0.58	1.98	14	4
1:A:228:MET:O	1:A:228:MET:HG3	0.58	1.97	12	1
1:A:265:THR:HG22	1:A:266:GLN:H	0.58	1.58	7	1
1:A:238:LEU:C	1:A:238:LEU:HD23	0.58	2.19	5	7
1:A:197:VAL:HG23	1:A:200:SER:OG	0.58	1.98	4	4
1:A:171:SER:H	1:A:174:LEU:HD23	0.58	1.57	2	3
1:A:247:GLN:O	1:A:247:GLN:CG	0.58	2.52	15	8
1:A:157:ASN:O	1:A:157:ASN:ND2	0.58	2.36	1	10
1:A:157:ASN:ND2	1:A:157:ASN:O	0.58	2.37	3	10
1:A:284:LYS:CG	1:A:285:ILE:N	0.58	2.67	8	9
1:A:247:GLN:CG	1:A:248:GLN:H	0.58	2.12	10	3
1:A:160:ASP:O	1:A:161:ALA:CB	0.58	2.50	6	3
1:A:148:PHE:CD1	1:A:148:PHE:O	0.58	2.57	13	4
1:A:286:VAL:HG12	1:A:287:PRO:CD	0.58	2.29	19	12
1:A:133:ASN:N	1:A:133:ASN:ND2	0.58	2.52	12	2
1:A:148:PHE:CZ	1:A:152:MET:CE	0.58	2.87	12	2
1:A:261:LEU:O	1:A:261:LEU:HD12	0.58	1.98	12	1
1:A:294:LEU:N	1:A:294:LEU:CD2	0.58	2.67	11	2
1:A:162:SER:O	1:A:164:GLN:NE2	0.57	2.37	5	6
1:A:251:GLY:O	1:A:255:ILE:HG12	0.57	1.98	10	3
1:A:251:GLY:CA	1:A:281:TYR:OH	0.57	2.52	4	9
1:A:174:LEU:N	1:A:174:LEU:CD2	0.57	2.65	16	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:148:PHE:O	1:A:148:PHE:CD1	0.57	2.56	15	4
1:A:265:THR:CG2	1:A:266:GLN:N	0.57	2.66	2	7
1:A:230:LEU:HD12	1:A:230:LEU:N	0.57	2.13	15	2
1:A:145:THR:O	1:A:149:SER:N	0.57	2.38	13	11
1:A:205:LYS:O	1:A:227:LEU:HD13	0.57	2.00	9	4
1:A:189:THR:O	1:A:191:ILE:N	0.57	2.38	4	1
1:A:233:ILE:HG22	1:A:234:LYS:N	0.57	2.15	18	17
1:A:205:LYS:CG	1:A:206:GLN:N	0.57	2.67	6	6
1:A:152:MET:CG	1:A:153:LEU:N	0.57	2.68	13	2
1:A:135:ILE:HD11	1:A:289:ALA:N	0.57	2.14	3	9
1:A:135:ILE:N	1:A:135:ILE:CD1	0.56	2.68	18	9
1:A:234:LYS:O	1:A:265:THR:OG1	0.56	2.22	2	5
1:A:148:PHE:CZ	1:A:167:CYS:SG	0.56	2.97	12	1
1:A:220:LEU:HD22	1:A:256:ARG:HE	0.56	1.59	8	1
1:A:255:ILE:N	1:A:255:ILE:HD13	0.56	2.15	19	6
1:A:157:ASN:N	1:A:157:ASN:ND2	0.56	2.51	20	2
1:A:204:ASN:N	1:A:204:ASN:HD22	0.56	1.97	14	1
1:A:230:LEU:O	1:A:232:LYS:N	0.56	2.39	4	12
1:A:274:PHE:CD2	1:A:274:PHE:O	0.56	2.58	11	4
1:A:139:GLN:O	1:A:270:PHE:CZ	0.56	2.59	2	5
1:A:253:GLN:O	1:A:257:VAL:HG23	0.56	2.01	12	9
1:A:247:GLN:CG	1:A:247:GLN:O	0.56	2.52	14	5
1:A:172:ARG:CD	1:A:172:ARG:N	0.56	2.69	8	1
1:A:148:PHE:CE1	1:A:237:VAL:HG21	0.56	2.34	9	2
1:A:197:VAL:N	1:A:200:SER:OG	0.56	2.38	15	1
1:A:175:ALA:O	1:A:178:THR:N	0.56	2.38	2	11
1:A:207:ILE:HG21	1:A:212:ILE:HD12	0.56	1.77	16	4
1:A:274:PHE:O	1:A:274:PHE:CD2	0.56	2.58	5	7
1:A:228:MET:O	1:A:228:MET:HG2	0.56	2.01	1	1
1:A:187:LYS:C	1:A:189:THR:H	0.56	2.02	8	3
1:A:261:LEU:HD23	1:A:261:LEU:H	0.56	1.60	16	1
1:A:157:ASN:N	1:A:164:GLN:OE1	0.56	2.39	3	1
1:A:160:ASP:O	1:A:162:SER:N	0.56	2.39	18	7
1:A:145:THR:OG1	1:A:270:PHE:CE2	0.56	2.58	10	1
1:A:204:ASN:HD21	1:A:225:ARG:HH21	0.56	1.44	11	1
1:A:238:LEU:CD2	1:A:244:MET:SD	0.56	2.94	10	10
1:A:286:VAL:HG12	1:A:287:PRO:HD3	0.56	1.77	19	9
1:A:170:PRO:O	1:A:247:GLN:NE2	0.56	2.39	2	5
1:A:258:LYS:O	1:A:261:LEU:O	0.55	2.23	2	19
1:A:167:CYS:HB2	1:A:213:VAL:HG13	0.55	1.78	17	4
1:A:197:VAL:O	1:A:201:PHE:CD2	0.55	2.59	2	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:186:GLY:O	1:A:189:THR:N	0.55	2.39	4	3
1:A:133:ASN:ND2	1:A:267:LEU:H	0.55	1.99	10	1
1:A:261:LEU:HD23	1:A:261:LEU:N	0.55	2.16	17	2
1:A:142:THR:O	1:A:144:LYS:N	0.55	2.39	11	5
1:A:133:ASN:OD1	1:A:134:MET:N	0.55	2.39	4	1
1:A:226:LYS:CD	1:A:229:GLN:HE22	0.55	2.15	13	2
1:A:168:LEU:CD2	1:A:168:LEU:N	0.55	2.70	7	1
1:A:167:CYS:CB	1:A:213:VAL:HG13	0.55	2.31	8	1
1:A:150:LEU:HD12	1:A:151:THR:N	0.55	2.17	9	2
1:A:146:ALA:HB1	1:A:185:MET:HE2	0.55	1.77	18	3
1:A:137:GLN:NE2	1:A:273:THR:O	0.55	2.40	7	1
1:A:152:MET:O	1:A:156:VAL:N	0.54	2.39	5	4
1:A:187:LYS:C	1:A:189:THR:N	0.54	2.61	4	3
1:A:133:ASN:HD22	1:A:133:ASN:N	0.54	1.97	12	2
1:A:229:GLN:C	1:A:231:GLN:H	0.54	2.05	15	11
1:A:204:ASN:HD22	1:A:204:ASN:N	0.54	2.00	8	1
1:A:196:ILE:C	1:A:197:VAL:HG22	0.54	2.22	2	19
1:A:136:ALA:HB1	1:A:270:PHE:CE1	0.54	2.38	13	2
1:A:179:LEU:O	1:A:183:GLN:NE2	0.54	2.40	7	10
1:A:205:LYS:NZ	1:A:205:LYS:CB	0.54	2.69	9	1
1:A:286:VAL:O	1:A:289:ALA:N	0.54	2.41	5	6
1:A:263:LYS:CD	1:A:263:LYS:N	0.54	2.70	13	1
1:A:186:GLY:O	1:A:189:THR:CG2	0.54	2.56	8	3
1:A:249:GLY:C	1:A:251:GLY:H	0.54	2.04	11	4
1:A:282:ALA:O	1:A:288:ASN:N	0.54	2.40	10	7
1:A:228:MET:CG	1:A:228:MET:O	0.54	2.56	1	4
1:A:174:LEU:O	1:A:177:GLN:N	0.54	2.40	1	2
1:A:164:GLN:NE2	1:A:210:GLN:OE1	0.54	2.41	8	7
1:A:230:LEU:N	1:A:230:LEU:CD2	0.54	2.70	9	4
1:A:229:GLN:O	1:A:231:GLN:N	0.54	2.41	18	2
1:A:219:VAL:HG12	1:A:223:MET:SD	0.54	2.43	15	4
1:A:224:ARG:HH22	1:A:256:ARG:NH2	0.54	2.01	20	1
1:A:141:GLY:N	1:A:144:LYS:HZ1	0.54	2.00	7	1
1:A:171:SER:O	1:A:173:GLU:N	0.54	2.41	8	17
1:A:285:ILE:HG23	1:A:287:PRO:CG	0.54	2.33	4	17
1:A:241:ALA:N	1:A:271:SER:OG	0.54	2.41	1	2
1:A:280:GLN:CG	1:A:281:TYR:N	0.54	2.71	13	2
1:A:144:LYS:NZ	1:A:240:GLU:H	0.54	2.01	15	1
1:A:139:GLN:NE2	1:A:142:THR:OG1	0.54	2.41	14	2
1:A:183:GLN:OE1	1:A:183:GLN:N	0.53	2.41	10	5
1:A:274:PHE:O	1:A:274:PHE:CG	0.53	2.60	11	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:229:GLN:NE2	1:A:260:PHE:CD1	0.53	2.77	19	1
1:A:157:ASN:ND2	1:A:164:GLN:HE21	0.53	2.01	7	1
1:A:155:ARG:NH2	1:A:266:GLN:NE2	0.53	2.56	14	1
1:A:294:LEU:CD2	1:A:294:LEU:N	0.53	2.70	14	1
1:A:229:GLN:C	1:A:231:GLN:N	0.53	2.60	15	12
1:A:179:LEU:HD22	1:A:179:LEU:N	0.53	2.19	11	5
1:A:285:ILE:HG23	1:A:287:PRO:HD3	0.53	1.77	10	1
1:A:230:LEU:HD13	1:A:261:LEU:HD22	0.53	1.80	15	1
1:A:138:SER:H	1:A:144:LYS:NZ	0.53	2.00	12	2
1:A:231:GLN:NE2	1:A:231:GLN:C	0.53	2.62	1	2
1:A:250:LEU:C	1:A:281:TYR:OH	0.53	2.46	10	2
1:A:234:LYS:N	1:A:234:LYS:CD	0.53	2.71	12	1
1:A:164:GLN:N	1:A:164:GLN:OE1	0.53	2.41	7	1
1:A:172:ARG:O	1:A:176:ARG:CG	0.53	2.57	17	5
1:A:182:VAL:O	1:A:186:GLY:N	0.53	2.40	1	11
1:A:207:ILE:HG22	1:A:209:ALA:H	0.53	1.62	10	6
1:A:168:LEU:HD12	1:A:168:LEU:O	0.53	2.04	1	1
1:A:221:ASP:OD1	1:A:221:ASP:N	0.53	2.41	17	3
1:A:109:ALA:CB	1:A:187:LYS:NZ	0.53	2.71	14	2
1:A:180:GLU:OE1	1:A:180:GLU:N	0.53	2.42	3	2
1:A:193:SER:HA	1:A:211:VAL:O	0.53	2.04	2	19
1:A:157:ASN:N	1:A:157:ASN:HD22	0.53	2.02	10	2
1:A:263:LYS:C	1:A:265:THR:H	0.53	2.06	3	4
1:A:239:ASP:OD1	1:A:239:ASP:N	0.53	2.40	4	3
1:A:188:PHE:O	1:A:189:THR:O	0.53	2.27	4	3
1:A:239:ASP:O	1:A:240:GLU:CB	0.53	2.57	4	2
1:A:171:SER:O	1:A:174:LEU:N	0.53	2.42	1	2
1:A:192:THR:OG1	1:A:210:GLN:N	0.53	2.41	1	2
1:A:189:THR:OG1	1:A:191:ILE:CG1	0.53	2.57	8	2
1:A:189:THR:C	1:A:191:ILE:N	0.53	2.60	4	3
1:A:230:LEU:O	1:A:233:ILE:N	0.52	2.41	4	9
1:A:162:SER:N	1:A:210:GLN:HE22	0.52	2.01	17	2
1:A:221:ASP:OD2	1:A:225:ARG:NH1	0.52	2.42	5	1
1:A:229:GLN:OE1	1:A:231:GLN:NE2	0.52	2.42	11	3
1:A:139:GLN:OE1	1:A:139:GLN:N	0.52	2.42	3	2
1:A:160:ASP:O	1:A:161:ALA:C	0.52	2.47	8	8
1:A:286:VAL:H	1:A:287:PRO:HD2	0.52	1.63	11	9
1:A:183:GLN:N	1:A:183:GLN:OE1	0.52	2.42	18	4
1:A:135:ILE:HD12	1:A:135:ILE:H	0.52	1.61	12	3
1:A:150:LEU:C	1:A:150:LEU:CD1	0.52	2.76	19	7
1:A:197:VAL:O	1:A:200:SER:N	0.52	2.37	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:142:THR:CG2	1:A:143:GLY:N	0.52	2.72	13	1
1:A:133:ASN:OD1	1:A:133:ASN:N	0.52	2.43	16	2
1:A:261:LEU:N	1:A:261:LEU:CD2	0.52	2.69	16	2
1:A:149:SER:CB	1:A:185:MET:SD	0.52	2.97	12	1
1:A:227:LEU:HD12	1:A:227:LEU:O	0.52	2.04	12	1
1:A:175:ALA:HB2	1:A:214:GLY:O	0.52	2.05	1	12
1:A:276:ASP:OD1	1:A:276:ASP:N	0.52	2.42	2	1
1:A:204:ASN:ND2	1:A:225:ARG:HH21	0.52	2.02	11	1
1:A:152:MET:O	1:A:154:THR:N	0.52	2.42	3	2
1:A:150:LEU:CD1	1:A:150:LEU:C	0.52	2.75	15	6
1:A:242:ASP:N	1:A:242:ASP:OD1	0.52	2.42	9	1
1:A:174:LEU:CD1	1:A:174:LEU:N	0.52	2.70	17	6
1:A:145:THR:O	1:A:149:SER:CB	0.52	2.58	7	5
1:A:229:GLN:OE1	1:A:231:GLN:N	0.52	2.42	19	1
1:A:141:GLY:N	1:A:144:LYS:NZ	0.52	2.58	7	1
1:A:166:ILE:CD1	1:A:230:LEU:HD22	0.52	2.35	1	2
1:A:152:MET:O	1:A:156:VAL:CG2	0.52	2.57	20	5
1:A:144:LYS:NZ	1:A:145:THR:OG1	0.52	2.42	4	1
1:A:238:LEU:HD21	1:A:244:MET:HG3	0.52	1.81	6	1
1:A:171:SER:OG	1:A:174:LEU:HD21	0.52	2.05	3	1
1:A:169:ALA:CB	1:A:175:ALA:N	0.52	2.73	2	2
1:A:271:SER:C	1:A:273:THR:N	0.52	2.62	11	18
1:A:255:ILE:HD13	1:A:255:ILE:N	0.52	2.20	7	6
1:A:263:LYS:CD	1:A:263:LYS:H	0.52	2.17	15	6
1:A:294:LEU:HD12	1:A:294:LEU:N	0.52	2.19	5	1
1:A:263:LYS:H	1:A:263:LYS:CD	0.51	2.16	12	4
1:A:280:GLN:CD	1:A:281:TYR:N	0.51	2.64	1	1
1:A:152:MET:SD	1:A:211:VAL:HG22	0.51	2.46	12	2
1:A:286:VAL:C	1:A:288:ASN:N	0.51	2.63	12	20
1:A:223:MET:SD	1:A:230:LEU:HD21	0.51	2.45	9	4
1:A:137:GLN:NE2	1:A:271:SER:O	0.51	2.43	10	3
1:A:274:PHE:CD1	1:A:274:PHE:N	0.51	2.78	10	6
1:A:176:ARG:NE	1:A:180:GLU:OE2	0.51	2.42	10	1
1:A:283:LYS:C	1:A:283:LYS:CD	0.51	2.78	9	2
1:A:137:GLN:NE2	1:A:293:GLU:OE1	0.51	2.43	11	2
1:A:271:SER:C	1:A:273:THR:H	0.51	2.07	11	12
1:A:133:ASN:OD1	1:A:267:LEU:O	0.51	2.27	1	4
1:A:135:ILE:CD1	1:A:135:ILE:N	0.51	2.73	16	9
1:A:294:LEU:HD22	1:A:294:LEU:N	0.51	2.20	3	1
1:A:269:LEU:HD22	1:A:287:PRO:HB3	0.51	1.82	16	5
1:A:230:LEU:HD12	1:A:231:GLN:N	0.51	2.21	6	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:209:ALA:O	1:A:212:ILE:HD13	0.51	2.05	16	2
1:A:187:LYS:O	1:A:189:THR:N	0.51	2.44	4	3
1:A:169:ALA:HB1	1:A:174:LEU:CB	0.51	2.36	16	1
1:A:228:MET:O	1:A:228:MET:SD	0.51	2.68	14	1
1:A:262:PRO:O	1:A:264:ASP:N	0.51	2.43	10	11
1:A:229:GLN:CD	1:A:231:GLN:NE2	0.51	2.64	11	2
1:A:209:ALA:HB3	1:A:212:ILE:HD13	0.51	1.82	1	1
1:A:171:SER:C	1:A:173:GLU:N	0.51	2.62	16	19
1:A:270:PHE:N	1:A:270:PHE:CD1	0.51	2.78	6	2
1:A:223:MET:CE	1:A:230:LEU:HD21	0.51	2.35	15	3
1:A:187:LYS:C	1:A:187:LYS:CD	0.51	2.79	12	1
1:A:148:PHE:O	1:A:152:MET:SD	0.51	2.69	7	1
1:A:286:VAL:HG12	1:A:287:PRO:N	0.51	2.21	3	6
1:A:197:VAL:HG23	1:A:200:SER:CB	0.51	2.36	10	18
1:A:105:LYS:NZ	1:A:187:LYS:HZ2	0.51	2.02	4	1
1:A:135:ILE:H	1:A:135:ILE:CD1	0.51	2.19	12	2
1:A:110:MET:SD	1:A:184:GLU:OE1	0.51	2.69	10	1
1:A:133:ASN:C	1:A:289:ALA:HB3	0.51	2.26	8	9
1:A:252:ASP:N	1:A:252:ASP:OD1	0.51	2.42	12	1
1:A:274:PHE:CG	1:A:274:PHE:O	0.51	2.63	1	4
1:A:167:CYS:HB3	1:A:213:VAL:HG13	0.51	1.83	13	2
1:A:271:SER:O	1:A:273:THR:OG1	0.51	2.29	11	1
1:A:189:THR:C	1:A:191:ILE:H	0.50	2.10	4	3
1:A:174:LEU:CD2	1:A:174:LEU:N	0.50	2.69	6	7
1:A:236:PHE:CZ	1:A:258:LYS:NZ	0.50	2.72	16	1
1:A:102:GLU:CD	1:A:102:GLU:H	0.50	2.08	3	1
1:A:188:PHE:O	1:A:189:THR:C	0.50	2.50	4	3
1:A:133:ASN:O	1:A:289:ALA:HB3	0.50	2.06	8	1
1:A:238:LEU:HB3	1:A:269:LEU:HD12	0.50	1.82	2	7
1:A:228:MET:O	1:A:228:MET:CG	0.50	2.58	12	2
1:A:167:CYS:SG	1:A:239:ASP:OD1	0.50	2.70	9	1
1:A:148:PHE:CD1	1:A:148:PHE:N	0.50	2.74	4	1
1:A:187:LYS:CG	1:A:188:PHE:N	0.50	2.73	16	1
1:A:194:GLN:OE1	1:A:195:LEU:O	0.50	2.30	15	1
1:A:164:GLN:NE2	1:A:210:GLN:CG	0.50	2.75	20	1
1:A:230:LEU:N	1:A:230:LEU:CD1	0.50	2.66	4	1
1:A:244:MET:O	1:A:250:LEU:CD2	0.50	2.59	6	2
1:A:230:LEU:CD1	1:A:230:LEU:N	0.50	2.61	9	2
1:A:285:ILE:O	1:A:286:VAL:CG1	0.50	2.60	10	1
1:A:133:ASN:HD22	1:A:286:VAL:CG2	0.50	2.18	19	1
1:A:249:GLY:C	1:A:251:GLY:N	0.50	2.65	10	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:199:ASP:N	1:A:201:PHE:CE1	0.50	2.80	4	2
1:A:148:PHE:CE2	1:A:268:VAL:HG21	0.49	2.43	17	2
1:A:271:SER:OG	1:A:271:SER:O	0.49	2.28	2	2
1:A:256:ARG:CD	1:A:256:ARG:C	0.49	2.80	8	1
1:A:168:LEU:HD12	1:A:168:LEU:H	0.49	1.66	4	1
1:A:138:SER:HG	1:A:143:GLY:HA3	0.49	1.66	9	1
1:A:292:LEU:HD13	1:A:293:GLU:N	0.49	2.22	5	1
1:A:230:LEU:C	1:A:232:LYS:N	0.49	2.65	12	12
1:A:155:ARG:NH1	1:A:266:GLN:HE22	0.49	2.06	6	1
1:A:144:LYS:HG3	1:A:145:THR:N	0.49	2.22	5	1
1:A:133:ASN:N	1:A:133:ASN:OD1	0.49	2.45	2	2
1:A:142:THR:H	1:A:144:LYS:NZ	0.49	2.05	7	1
1:A:280:GLN:NE2	1:A:283:LYS:NZ	0.49	2.60	16	1
1:A:144:LYS:NZ	1:A:239:ASP:CG	0.49	2.66	11	1
1:A:153:LEU:O	1:A:156:VAL:CG1	0.49	2.61	7	1
1:A:148:PHE:CE2	1:A:237:VAL:HG21	0.49	2.43	18	3
1:A:142:THR:N	1:A:270:PHE:CZ	0.49	2.80	18	1
1:A:219:VAL:O	1:A:223:MET:SD	0.49	2.70	15	2
1:A:241:ALA:HB3	1:A:271:SER:CB	0.49	2.38	11	3
1:A:203:LYS:O	1:A:204:ASN:CB	0.49	2.60	4	1
1:A:153:LEU:O	1:A:153:LEU:HD12	0.49	2.08	16	1
1:A:179:LEU:CD1	1:A:193:SER:OG	0.49	2.60	14	1
1:A:228:MET:O	1:A:230:LEU:N	0.49	2.46	4	4
1:A:172:ARG:N	1:A:172:ARG:CD	0.49	2.75	14	1
1:A:145:THR:OG1	1:A:270:PHE:CD2	0.49	2.63	7	3
1:A:234:LYS:NZ	1:A:234:LYS:CB	0.49	2.75	18	1
1:A:242:ASP:N	1:A:271:SER:OG	0.49	2.46	14	2
1:A:232:LYS:N	1:A:232:LYS:CD	0.49	2.76	15	1
1:A:243:ASN:N	1:A:243:ASN:OD1	0.49	2.46	15	2
1:A:262:PRO:C	1:A:264:ASP:N	0.49	2.66	14	12
1:A:139:GLN:CB	1:A:142:THR:OG1	0.49	2.61	9	1
1:A:228:MET:HG2	1:A:228:MET:O	0.49	2.08	5	2
1:A:142:THR:C	1:A:144:LYS:N	0.49	2.66	11	5
1:A:139:GLN:HB2	1:A:143:GLY:N	0.49	2.23	13	5
1:A:278:VAL:O	1:A:282:ALA:CB	0.49	2.61	12	5
1:A:144:LYS:HZ2	1:A:239:ASP:CG	0.49	2.10	11	1
1:A:156:VAL:HG22	1:A:157:ASN:N	0.48	2.23	3	1
1:A:205:LYS:CD	1:A:206:GLN:H	0.48	2.21	3	3
1:A:162:SER:O	1:A:210:GLN:OE1	0.48	2.31	14	9
1:A:136:ALA:N	1:A:269:LEU:O	0.48	2.45	10	8
1:A:142:THR:HG23	1:A:181:VAL:HG22	0.48	1.84	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:223:MET:HE2	1:A:230:LEU:HD11	0.48	1.85	1	1
1:A:166:ILE:HD12	1:A:233:ILE:HD12	0.48	1.85	20	2
1:A:194:GLN:HE22	1:A:201:PHE:C	0.48	2.12	12	1
1:A:209:ALA:O	1:A:210:GLN:C	0.48	2.51	9	19
1:A:242:ASP:OD2	1:A:243:ASN:ND2	0.48	2.46	18	1
1:A:167:CYS:SG	1:A:237:VAL:CG2	0.48	3.00	10	3
1:A:142:THR:O	1:A:146:ALA:CB	0.48	2.61	20	3
1:A:148:PHE:CZ	1:A:152:MET:SD	0.48	3.06	5	1
1:A:250:LEU:C	1:A:250:LEU:HD12	0.48	2.28	16	2
1:A:250:LEU:O	1:A:250:LEU:HD12	0.48	2.08	16	2
1:A:133:ASN:HB3	1:A:286:VAL:HG22	0.48	1.85	4	2
1:A:135:ILE:HG13	1:A:287:PRO:O	0.48	2.09	3	2
1:A:136:ALA:CB	1:A:269:LEU:O	0.48	2.61	5	7
1:A:281:TYR:O	1:A:284:LYS:CG	0.48	2.62	1	1
1:A:164:GLN:NE2	1:A:210:GLN:CD	0.48	2.66	20	2
1:A:258:LYS:CE	1:A:267:LEU:HD21	0.48	2.38	7	1
1:A:144:LYS:O	1:A:148:PHE:CG	0.48	2.66	4	1
1:A:230:LEU:C	1:A:232:LYS:H	0.48	2.12	8	7
1:A:139:GLN:O	1:A:270:PHE:CE1	0.48	2.67	17	2
1:A:187:LYS:CD	1:A:188:PHE:N	0.48	2.76	12	1
1:A:139:GLN:CB	1:A:143:GLY:H	0.48	2.21	14	4
1:A:269:LEU:HD22	1:A:287:PRO:HB2	0.48	1.83	13	6
1:A:247:GLN:O	1:A:248:GLN:C	0.48	2.52	17	12
1:A:138:SER:OG	1:A:270:PHE:CZ	0.48	2.60	2	2
1:A:210:GLN:OE1	1:A:210:GLN:N	0.48	2.47	5	1
1:A:240:GLU:OE1	1:A:240:GLU:CA	0.48	2.61	14	1
1:A:286:VAL:C	1:A:288:ASN:H	0.48	2.11	11	12
1:A:293:GLU:CD	1:A:293:GLU:N	0.48	2.67	13	2
1:A:286:VAL:CG1	1:A:287:PRO:CD	0.48	2.92	12	11
1:A:242:ASP:CG	1:A:243:ASN:ND2	0.48	2.68	18	1
1:A:243:ASN:ND2	1:A:243:ASN:N	0.48	2.58	4	2
1:A:236:PHE:CE2	1:A:258:LYS:NZ	0.48	2.80	6	2
1:A:293:GLU:N	1:A:293:GLU:CD	0.48	2.67	2	1
1:A:227:LEU:C	1:A:227:LEU:CD1	0.48	2.82	12	3
1:A:167:CYS:SG	1:A:237:VAL:HG21	0.48	2.48	4	4
1:A:286:VAL:O	1:A:287:PRO:C	0.47	2.52	18	12
1:A:253:GLN:O	1:A:257:VAL:CG2	0.47	2.61	15	4
1:A:154:THR:O	1:A:156:VAL:N	0.47	2.47	9	6
1:A:279:ARG:O	1:A:283:LYS:CG	0.47	2.62	8	3
1:A:195:LEU:HD23	1:A:196:ILE:N	0.47	2.23	15	1
1:A:104:LEU:C	1:A:104:LEU:CD1	0.47	2.80	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:236:PHE:CE1	1:A:258:LYS:NZ	0.47	2.72	16	1
1:A:219:VAL:O	1:A:221:ASP:N	0.47	2.47	3	5
1:A:207:ILE:HG21	1:A:212:ILE:CD1	0.47	2.38	6	6
1:A:138:SER:HG	1:A:139:GLN:H	0.47	1.50	9	1
1:A:144:LYS:H	1:A:144:LYS:CD	0.47	2.21	9	1
1:A:166:ILE:CD1	1:A:230:LEU:HD12	0.47	2.39	9	1
1:A:258:LYS:NZ	1:A:267:LEU:HD21	0.47	2.24	1	1
1:A:169:ALA:CB	1:A:170:PRO:CD	0.47	2.90	10	4
1:A:279:ARG:O	1:A:283:LYS:CD	0.47	2.62	8	2
1:A:231:GLN:HE21	1:A:232:LYS:CA	0.47	2.22	6	1
1:A:223:MET:HE2	1:A:230:LEU:HD21	0.47	1.86	15	1
1:A:144:LYS:NZ	1:A:239:ASP:CB	0.47	2.77	11	1
1:A:242:ASP:OD1	1:A:242:ASP:N	0.47	2.47	8	1
1:A:197:VAL:O	1:A:201:PHE:CD1	0.47	2.67	4	1
1:A:199:ASP:N	1:A:201:PHE:CE2	0.47	2.82	18	13
1:A:146:ALA:O	1:A:149:SER:N	0.47	2.47	12	2
1:A:156:VAL:CG1	1:A:157:ASN:N	0.47	2.77	11	5
1:A:155:ARG:NH1	1:A:266:GLN:NE2	0.47	2.62	6	1
1:A:241:ALA:HB3	1:A:271:SER:HB3	0.47	1.85	6	1
1:A:222:LEU:CB	1:A:228:MET:SD	0.47	3.02	8	5
1:A:237:VAL:CG1	1:A:270:PHE:CE2	0.47	2.98	7	2
1:A:236:PHE:CD1	1:A:237:VAL:N	0.47	2.83	11	2
1:A:133:ASN:OD1	1:A:286:VAL:HG11	0.47	2.10	10	1
1:A:190:LYS:CB	1:A:190:LYS:NZ	0.47	2.78	5	1
1:A:294:LEU:CD1	1:A:294:LEU:N	0.47	2.77	5	2
1:A:139:GLN:O	1:A:144:LYS:CD	0.47	2.62	13	1
1:A:164:GLN:OE1	1:A:164:GLN:N	0.47	2.46	14	1
1:A:161:ALA:CA	1:A:210:GLN:HE22	0.47	2.22	18	1
1:A:249:GLY:O	1:A:250:LEU:C	0.47	2.53	19	2
1:A:177:GLN:NE2	1:A:180:GLU:OE2	0.47	2.47	19	1
1:A:229:GLN:CD	1:A:231:GLN:HE21	0.47	2.13	11	1
1:A:142:THR:O	1:A:146:ALA:HB2	0.47	2.09	8	1
1:A:288:ASN:ND2	1:A:288:ASN:O	0.47	2.45	8	1
1:A:153:LEU:O	1:A:156:VAL:HG12	0.47	2.09	3	2
1:A:265:THR:O	1:A:266:GLN:O	0.47	2.33	3	1
1:A:203:LYS:CG	1:A:204:ASN:H	0.47	2.23	13	11
1:A:230:LEU:HB3	1:A:233:ILE:HD12	0.47	1.87	9	2
1:A:230:LEU:N	1:A:230:LEU:HD12	0.47	2.24	11	1
1:A:194:GLN:OE1	1:A:196:ILE:CD1	0.47	2.62	7	1
1:A:221:ASP:O	1:A:225:ARG:NH1	0.47	2.47	16	1
1:A:141:GLY:N	1:A:270:PHE:CE1	0.47	2.83	2	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:231:GLN:HE21	1:A:231:GLN:C	0.47	2.13	6	1
1:A:145:THR:O	1:A:149:SER:OG	0.47	2.32	8	3
1:A:108:TYR:N	1:A:108:TYR:CD1	0.47	2.79	8	1
1:A:157:ASN:ND2	1:A:164:GLN:CD	0.47	2.68	8	1
1:A:155:ARG:O	1:A:164:GLN:OE1	0.47	2.33	4	2
1:A:146:ALA:O	1:A:185:MET:CE	0.47	2.62	2	1
1:A:179:LEU:CD2	1:A:179:LEU:N	0.47	2.77	13	4
1:A:231:GLN:HE21	1:A:232:LYS:N	0.47	2.07	6	1
1:A:164:GLN:HE21	1:A:210:GLN:CD	0.47	2.14	15	3
1:A:157:ASN:ND2	1:A:164:GLN:HE22	0.47	2.08	4	1
1:A:187:LYS:CD	1:A:188:PHE:CD2	0.46	2.98	18	1
1:A:250:LEU:O	1:A:281:TYR:OH	0.46	2.33	11	4
1:A:234:LYS:O	1:A:265:THR:HG22	0.46	2.10	4	7
1:A:251:GLY:O	1:A:255:ILE:N	0.46	2.41	16	3
1:A:176:ARG:CZ	1:A:180:GLU:OE2	0.46	2.62	12	1
1:A:283:LYS:NZ	1:A:283:LYS:CB	0.46	2.78	19	1
1:A:250:LEU:HD12	1:A:281:TYR:OH	0.46	2.10	11	1
1:A:133:ASN:HD22	1:A:289:ALA:CB	0.46	2.22	15	1
1:A:281:TYR:CD1	1:A:281:TYR:O	0.46	2.68	12	2
1:A:179:LEU:N	1:A:179:LEU:CD2	0.46	2.78	7	1
1:A:159:GLU:CD	1:A:159:GLU:N	0.46	2.69	14	1
1:A:152:MET:SD	1:A:165:ALA:CB	0.46	3.03	9	4
1:A:243:ASN:OD1	1:A:243:ASN:N	0.46	2.49	2	2
1:A:240:GLU:O	1:A:244:MET:SD	0.46	2.73	1	1
1:A:161:ALA:HB1	1:A:208:ASN:ND2	0.46	2.25	10	1
1:A:242:ASP:OD1	1:A:243:ASN:N	0.46	2.48	13	2
1:A:251:GLY:N	1:A:281:TYR:OH	0.46	2.49	17	2
1:A:172:ARG:CD	1:A:172:ARG:H	0.46	2.23	11	1
1:A:139:GLN:HB2	1:A:143:GLY:H	0.46	1.70	14	3
1:A:174:LEU:N	1:A:174:LEU:CD1	0.46	2.76	20	1
1:A:243:ASN:N	1:A:243:ASN:HD22	0.46	2.08	4	1
1:A:154:THR:C	1:A:156:VAL:N	0.46	2.69	9	15
1:A:258:LYS:HD2	1:A:285:ILE:HD11	0.46	1.88	1	1
1:A:244:MET:O	1:A:250:LEU:CD1	0.46	2.64	10	1
1:A:245:LEU:HD23	1:A:245:LEU:H	0.46	1.70	1	1
1:A:227:LEU:O	1:A:227:LEU:CD1	0.46	2.57	4	2
1:A:205:LYS:HG3	1:A:206:GLN:N	0.46	2.26	6	4
1:A:236:PHE:CD2	1:A:258:LYS:NZ	0.46	2.83	6	1
1:A:137:GLN:C	1:A:138:SER:OG	0.46	2.54	20	2
1:A:204:ASN:HD21	1:A:205:LYS:NZ	0.46	2.09	12	1
1:A:271:SER:O	1:A:271:SER:OG	0.46	2.33	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:174:LEU:O	1:A:175:ALA:C	0.46	2.52	1	2
1:A:102:GLU:CD	1:A:188:PHE:CD1	0.46	2.89	10	1
1:A:285:ILE:O	1:A:286:VAL:HG12	0.46	2.09	10	1
1:A:144:LYS:HZ3	1:A:240:GLU:N	0.46	2.08	15	1
1:A:110:MET:CE	1:A:142:THR:HG23	0.46	2.41	2	2
1:A:135:ILE:CD1	1:A:289:ALA:N	0.46	2.78	3	1
1:A:186:GLY:O	1:A:187:LYS:C	0.46	2.54	4	3
1:A:204:ASN:ND2	1:A:205:LYS:HZ3	0.46	2.07	12	1
1:A:160:ASP:O	1:A:210:GLN:OE1	0.46	2.34	14	4
1:A:258:LYS:NZ	1:A:263:LYS:CB	0.46	2.79	11	1
1:A:157:ASN:O	1:A:164:GLN:NE2	0.46	2.48	8	1
1:A:168:LEU:HD11	1:A:236:PHE:CZ	0.46	2.46	4	1
1:A:144:LYS:HZ3	1:A:240:GLU:H	0.45	1.53	15	1
1:A:192:THR:O	1:A:193:SER:OG	0.45	2.35	8	1
1:A:275:ALA:HB3	1:A:278:VAL:HG23	0.45	1.86	5	4
1:A:231:GLN:OE1	1:A:260:PHE:O	0.45	2.33	15	1
1:A:152:MET:SD	1:A:165:ALA:HB1	0.45	2.50	8	1
1:A:160:ASP:CG	1:A:161:ALA:N	0.45	2.68	6	1
1:A:140:SER:O	1:A:141:GLY:C	0.45	2.54	3	7
1:A:172:ARG:O	1:A:176:ARG:CB	0.45	2.64	12	4
1:A:244:MET:O	1:A:247:GLN:CG	0.45	2.65	10	1
1:A:231:GLN:NE2	1:A:232:LYS:CG	0.45	2.80	6	1
1:A:136:ALA:O	1:A:137:GLN:OE1	0.45	2.34	7	1
1:A:208:ASN:O	1:A:208:ASN:OD1	0.45	2.34	4	1
1:A:251:GLY:O	1:A:252:ASP:C	0.45	2.55	6	8
1:A:156:VAL:HG22	1:A:164:GLN:OE1	0.45	2.11	9	1
1:A:241:ALA:HB2	1:A:269:LEU:CD1	0.45	2.35	10	7
1:A:276:ASP:N	1:A:276:ASP:OD1	0.45	2.49	15	1
1:A:258:LYS:CG	1:A:259:ARG:N	0.45	2.80	20	2
1:A:204:ASN:ND2	1:A:225:ARG:NH2	0.45	2.65	11	1
1:A:172:ARG:H	1:A:172:ARG:CZ	0.45	2.23	14	1
1:A:248:GLN:NE2	1:A:249:GLY:H	0.45	2.09	7	1
1:A:166:ILE:HD12	1:A:233:ILE:CD1	0.45	2.41	9	3
1:A:162:SER:N	1:A:210:GLN:NE2	0.45	2.64	18	1
1:A:258:LYS:NZ	1:A:258:LYS:CB	0.45	2.80	19	1
1:A:196:ILE:C	1:A:197:VAL:CG2	0.45	2.85	9	17
1:A:294:LEU:C	1:A:294:LEU:HD23	0.45	2.32	17	2
1:A:234:LYS:O	1:A:265:THR:CG2	0.45	2.65	9	6
1:A:203:LYS:C	1:A:204:ASN:HD22	0.45	2.15	6	1
1:A:219:VAL:C	1:A:223:MET:SD	0.45	2.94	15	1
1:A:248:GLN:C	1:A:250:LEU:H	0.45	2.14	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:194:GLN:CD	1:A:195:LEU:H	0.45	2.15	8	2
1:A:171:SER:C	1:A:173:GLU:H	0.45	2.14	8	7
1:A:142:THR:O	1:A:143:GLY:C	0.45	2.55	13	10
1:A:252:ASP:O	1:A:256:ARG:CG	0.45	2.65	17	1
1:A:183:GLN:OE1	1:A:183:GLN:CA	0.45	2.65	1	4
1:A:144:LYS:HG3	1:A:145:THR:H	0.45	1.72	15	1
1:A:245:LEU:C	1:A:245:LEU:CD1	0.44	2.80	19	4
1:A:141:GLY:CA	1:A:145:THR:OG1	0.44	2.65	12	2
1:A:183:GLN:NE2	1:A:183:GLN:CA	0.44	2.80	11	2
1:A:219:VAL:C	1:A:221:ASP:N	0.44	2.70	3	6
1:A:183:GLN:CA	1:A:183:GLN:NE2	0.44	2.80	14	5
1:A:137:GLN:O	1:A:138:SER:CB	0.44	2.63	17	1
1:A:144:LYS:CA	1:A:144:LYS:HZ3	0.44	2.26	1	1
1:A:157:ASN:O	1:A:160:ASP:OD1	0.44	2.35	6	1
1:A:238:LEU:CD2	1:A:238:LEU:C	0.44	2.83	6	1
1:A:209:ALA:O	1:A:212:ILE:CD1	0.44	2.65	12	1
1:A:107:ILE:HD11	1:A:150:LEU:HD12	0.44	1.89	7	1
1:A:144:LYS:NZ	1:A:239:ASP:OD2	0.44	2.49	4	1
1:A:201:PHE:CD1	1:A:201:PHE:N	0.44	2.86	16	1
1:A:145:THR:HG21	1:A:178:THR:HG23	0.44	1.89	18	1
1:A:236:PHE:CD2	1:A:261:LEU:HD11	0.44	2.47	18	1
1:A:262:PRO:O	1:A:265:THR:N	0.44	2.50	18	1
1:A:159:GLU:O	1:A:160:ASP:OD1	0.44	2.36	4	2
1:A:263:LYS:CD	1:A:263:LYS:C	0.44	2.85	4	1
1:A:179:LEU:O	1:A:183:GLN:OE1	0.44	2.34	2	9
1:A:199:ASP:N	1:A:201:PHE:CZ	0.44	2.83	2	13
1:A:183:GLN:CA	1:A:183:GLN:OE1	0.44	2.66	10	2
1:A:157:ASN:OD1	1:A:164:GLN:OE1	0.44	2.35	1	1
1:A:240:GLU:OE2	1:A:243:ASN:ND2	0.44	2.50	15	1
1:A:238:LEU:HD21	1:A:244:MET:CG	0.44	2.42	14	2
1:A:292:LEU:HD13	1:A:292:LEU:C	0.44	2.33	5	1
1:A:279:ARG:CZ	1:A:288:ASN:OD1	0.44	2.65	12	1
1:A:219:VAL:HG12	1:A:223:MET:CE	0.44	2.42	11	1
1:A:203:LYS:CD	1:A:203:LYS:N	0.44	2.81	4	1
1:A:186:GLY:CA	1:A:189:THR:OG1	0.44	2.65	16	1
1:A:240:GLU:OE1	1:A:243:ASN:N	0.44	2.47	1	1
1:A:247:GLN:CD	1:A:248:GLN:H	0.44	2.16	10	1
1:A:160:ASP:OD1	1:A:210:GLN:NE2	0.44	2.48	6	1
1:A:217:GLY:O	1:A:221:ASP:OD1	0.44	2.36	6	1
1:A:250:LEU:O	1:A:254:CYS:SG	0.44	2.70	4	2
1:A:136:ALA:HB1	1:A:144:LYS:HB2	0.44	1.90	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:208:ASN:ND2	1:A:208:ASN:O	0.44	2.51	11	2
1:A:137:GLN:O	1:A:138:SER:OG	0.44	2.35	12	2
1:A:226:LYS:O	1:A:229:GLN:OE1	0.44	2.35	12	3
1:A:133:ASN:O	1:A:133:ASN:OD1	0.44	2.36	19	1
1:A:104:LEU:O	1:A:104:LEU:HD12	0.44	2.12	7	1
1:A:179:LEU:N	1:A:179:LEU:HD22	0.44	2.28	14	1
1:A:276:ASP:OD2	1:A:280:GLN:OE1	0.44	2.36	9	1
1:A:241:ALA:HB3	1:A:271:SER:HB2	0.44	1.89	10	2
1:A:238:LEU:CG	1:A:244:MET:SD	0.44	3.06	10	2
1:A:281:TYR:CD1	1:A:281:TYR:C	0.44	2.92	10	2
1:A:282:ALA:O	1:A:287:PRO:N	0.44	2.51	15	1
1:A:230:LEU:CD1	1:A:261:LEU:HD22	0.44	2.42	20	2
1:A:144:LYS:NZ	1:A:268:VAL:CG1	0.44	2.81	8	1
1:A:172:ARG:HB3	1:A:197:VAL:HG21	0.43	1.89	15	1
1:A:230:LEU:HD13	1:A:261:LEU:CD2	0.43	2.43	15	1
1:A:242:ASP:OD2	1:A:243:ASN:OD1	0.43	2.36	13	1
1:A:133:ASN:OD1	1:A:289:ALA:CB	0.43	2.66	20	1
1:A:172:ARG:HD3	1:A:172:ARG:H	0.43	1.73	11	1
1:A:194:GLN:OE1	1:A:202:GLU:OE2	0.43	2.36	18	2
1:A:289:ALA:O	1:A:290:ASN:C	0.43	2.57	2	5
1:A:148:PHE:CD1	1:A:148:PHE:C	0.43	2.92	6	1
1:A:283:LYS:CD	1:A:283:LYS:C	0.43	2.86	11	1
1:A:270:PHE:CD1	1:A:270:PHE:C	0.43	2.91	8	1
1:A:219:VAL:O	1:A:222:LEU:N	0.43	2.51	4	1
1:A:139:GLN:CB	1:A:143:GLY:N	0.43	2.81	14	1
1:A:263:LYS:C	1:A:265:THR:N	0.43	2.72	3	1
1:A:152:MET:C	1:A:154:THR:N	0.43	2.70	3	1
1:A:152:MET:O	1:A:153:LEU:C	0.43	2.55	5	4
1:A:201:PHE:O	1:A:202:GLU:OE2	0.43	2.37	6	5
1:A:153:LEU:C	1:A:153:LEU:CD1	0.43	2.79	16	1
1:A:242:ASP:O	1:A:246:ASP:OD1	0.43	2.37	14	1
1:A:135:ILE:HD13	1:A:289:ALA:O	0.43	2.13	3	2
1:A:160:ASP:C	1:A:162:SER:N	0.43	2.72	18	4
1:A:149:SER:OG	1:A:185:MET:CB	0.43	2.67	13	1
1:A:163:PRO:O	1:A:164:GLN:OE1	0.43	2.36	5	1
1:A:138:SER:CB	1:A:144:LYS:H	0.43	2.27	16	1
1:A:169:ALA:O	1:A:171:SER:N	0.43	2.52	9	1
1:A:245:LEU:HD12	1:A:246:ASP:N	0.43	2.28	12	2
1:A:148:PHE:CE2	1:A:152:MET:CE	0.43	3.01	5	1
1:A:238:LEU:C	1:A:238:LEU:CD2	0.43	2.87	20	4
1:A:204:ASN:N	1:A:204:ASN:ND2	0.43	2.67	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:151:THR:CG2	1:A:155:ARG:HE	0.43	2.27	4	1
1:A:162:SER:O	1:A:210:GLN:CD	0.43	2.57	3	1
1:A:175:ALA:O	1:A:176:ARG:C	0.43	2.56	11	11
1:A:229:GLN:NE2	1:A:231:GLN:NE2	0.43	2.66	17	1
1:A:141:GLY:C	1:A:145:THR:OG1	0.43	2.57	12	3
1:A:146:ALA:O	1:A:149:SER:CB	0.43	2.67	3	1
1:A:138:SER:HG	1:A:139:GLN:N	0.43	2.10	9	1
1:A:159:GLU:O	1:A:160:ASP:CG	0.43	2.57	2	4
1:A:286:VAL:N	1:A:287:PRO:HD3	0.43	2.27	10	1
1:A:201:PHE:O	1:A:202:GLU:OE1	0.43	2.37	2	1
1:A:232:LYS:O	1:A:233:ILE:O	0.43	2.36	4	2
1:A:138:SER:OG	1:A:144:LYS:N	0.43	2.51	9	1
1:A:138:SER:O	1:A:272:ALA:CB	0.43	2.67	11	1
1:A:144:LYS:HZ2	1:A:268:VAL:HG11	0.43	1.73	8	1
1:A:176:ARG:O	1:A:180:GLU:OE2	0.43	2.37	3	2
1:A:231:GLN:OE1	1:A:231:GLN:O	0.43	2.36	3	1
1:A:249:GLY:O	1:A:253:GLN:OE1	0.43	2.36	18	1
1:A:226:LYS:CD	1:A:229:GLN:NE2	0.43	2.82	13	1
1:A:107:ILE:HD11	1:A:150:LEU:HD22	0.43	1.89	16	1
1:A:102:GLU:H	1:A:102:GLU:CD	0.42	2.18	15	1
1:A:197:VAL:HG13	1:A:198:PRO:HD2	0.42	1.90	15	1
1:A:209:ALA:C	1:A:211:VAL:N	0.42	2.71	20	7
1:A:102:GLU:N	1:A:102:GLU:CD	0.42	2.73	18	1
1:A:184:GLU:O	1:A:187:LYS:CG	0.42	2.67	11	2
1:A:242:ASP:O	1:A:246:ASP:OD2	0.42	2.36	12	1
1:A:158:PRO:C	1:A:160:ASP:H	0.42	2.17	4	3
1:A:208:ASN:OD1	1:A:208:ASN:O	0.42	2.37	3	1
1:A:136:ALA:HB1	1:A:270:PHE:CZ	0.42	2.49	13	1
1:A:204:ASN:OD1	1:A:227:LEU:CD1	0.42	2.67	5	1
1:A:135:ILE:N	1:A:290:ASN:O	0.42	2.53	12	2
1:A:161:ALA:CB	1:A:208:ASN:HD22	0.42	2.27	2	1
1:A:140:SER:O	1:A:240:GLU:OE2	0.42	2.37	16	1
1:A:133:ASN:O	1:A:290:ASN:OD1	0.42	2.37	14	1
1:A:253:GLN:O	1:A:254:CYS:C	0.42	2.57	20	3
1:A:230:LEU:O	1:A:231:GLN:C	0.42	2.58	2	5
1:A:246:ASP:OD1	1:A:246:ASP:O	0.42	2.38	13	1
1:A:262:PRO:C	1:A:264:ASP:H	0.42	2.18	14	2
1:A:141:GLY:O	1:A:145:THR:OG1	0.42	2.37	8	1
1:A:138:SER:O	1:A:272:ALA:HB2	0.42	2.14	17	2
1:A:244:MET:C	1:A:250:LEU:CD2	0.42	2.88	12	4
1:A:258:LYS:HZ2	1:A:267:LEU:HD21	0.42	1.74	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:162:SER:O	1:A:164:GLN:CD	0.42	2.58	14	1
1:A:203:LYS:O	1:A:204:ASN:CG	0.42	2.58	17	1
1:A:209:ALA:HB3	1:A:212:ILE:CD1	0.42	2.45	1	1
1:A:146:ALA:N	1:A:181:VAL:HG11	0.42	2.30	5	1
1:A:228:MET:O	1:A:229:GLN:O	0.42	2.35	12	1
1:A:107:ILE:HD11	1:A:150:LEU:CD2	0.42	2.45	16	1
1:A:170:PRO:O	1:A:247:GLN:OE1	0.42	2.38	1	1
1:A:244:MET:O	1:A:250:LEU:HD23	0.42	2.13	12	1
1:A:237:VAL:CG1	1:A:270:PHE:CZ	0.42	3.03	9	2
1:A:135:ILE:H	1:A:135:ILE:HD12	0.42	1.74	15	4
1:A:244:MET:C	1:A:246:ASP:N	0.42	2.73	10	1
1:A:250:LEU:CD1	1:A:281:TYR:OH	0.42	2.68	11	1
1:A:148:PHE:CZ	1:A:268:VAL:HG11	0.42	2.50	4	1
1:A:139:GLN:CD	1:A:142:THR:OG1	0.42	2.57	19	2
1:A:253:GLN:O	1:A:256:ARG:N	0.42	2.52	20	1
1:A:133:ASN:OD1	1:A:286:VAL:O	0.42	2.37	11	1
1:A:137:GLN:OE1	1:A:293:GLU:OE2	0.42	2.37	8	1
1:A:105:LYS:HB2	1:A:187:LYS:HZ2	0.42	1.74	4	1
1:A:263:LYS:HD3	1:A:263:LYS:H	0.42	1.75	17	1
1:A:184:GLU:O	1:A:187:LYS:HG3	0.42	2.15	11	2
1:A:148:PHE:CE1	1:A:237:VAL:CG2	0.42	3.03	9	1
1:A:150:LEU:CD1	1:A:151:THR:N	0.42	2.83	9	1
1:A:150:LEU:N	1:A:185:MET:SD	0.42	2.93	15	2
1:A:242:ASP:CG	1:A:243:ASN:N	0.42	2.73	13	1
1:A:275:ALA:O	1:A:278:VAL:N	0.42	2.51	5	2
1:A:190:LYS:NZ	1:A:190:LYS:CB	0.42	2.83	20	1
1:A:164:GLN:NE2	1:A:210:GLN:HE22	0.42	2.12	19	1
1:A:197:VAL:O	1:A:201:PHE:CE2	0.42	2.73	2	2
1:A:219:VAL:O	1:A:220:LEU:C	0.41	2.58	18	3
1:A:138:SER:HG	1:A:143:GLY:CA	0.41	2.26	9	1
1:A:156:VAL:HG12	1:A:156:VAL:O	0.41	2.15	1	1
1:A:157:ASN:O	1:A:159:GLU:N	0.41	2.53	12	4
1:A:159:GLU:O	1:A:160:ASP:CB	0.41	2.67	2	1
1:A:258:LYS:HZ2	1:A:263:LYS:CB	0.41	2.28	11	1
1:A:280:GLN:O	1:A:283:LYS:HG3	0.41	2.15	11	1
1:A:245:LEU:CD2	1:A:245:LEU:H	0.41	2.27	1	1
1:A:166:ILE:CD1	1:A:230:LEU:HD23	0.41	2.45	6	1
1:A:144:LYS:CG	1:A:145:THR:N	0.41	2.83	5	1
1:A:204:ASN:HD22	1:A:204:ASN:C	0.41	2.18	7	1
1:A:223:MET:N	1:A:228:MET:SD	0.41	2.94	8	1
1:A:205:LYS:HD3	1:A:206:GLN:H	0.41	1.75	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:240:GLU:C	1:A:240:GLU:OE1	0.41	2.59	1	1
1:A:110:MET:SD	1:A:184:GLU:CD	0.41	2.98	10	1
1:A:199:ASP:N	1:A:199:ASP:OD1	0.41	2.49	15	1
1:A:194:GLN:CD	1:A:195:LEU:N	0.41	2.74	8	1
1:A:232:LYS:O	1:A:233:ILE:C	0.41	2.57	4	1
1:A:186:GLY:C	1:A:189:THR:OG1	0.41	2.59	16	1
1:A:134:MET:CE	1:A:144:LYS:NZ	0.41	2.83	17	1
1:A:156:VAL:HG12	1:A:157:ASN:N	0.41	2.30	6	2
1:A:250:LEU:HG	1:A:251:GLY:N	0.41	2.30	6	1
1:A:242:ASP:OD1	1:A:242:ASP:O	0.41	2.38	20	1
1:A:263:LYS:N	1:A:263:LYS:CD	0.41	2.84	12	1
1:A:244:MET:SD	1:A:250:LEU:HD22	0.41	2.55	2	2
1:A:286:VAL:CG1	1:A:287:PRO:N	0.41	2.83	19	1
1:A:242:ASP:OD1	1:A:243:ASN:ND2	0.41	2.53	8	1
1:A:253:GLN:CG	1:A:254:CYS:N	0.41	2.82	8	1
1:A:253:GLN:HG2	1:A:254:CYS:N	0.41	2.30	8	1
1:A:172:ARG:N	1:A:172:ARG:NE	0.41	2.65	14	1
1:A:149:SER:OG	1:A:153:LEU:HD11	0.41	2.16	3	1
1:A:259:ARG:CD	1:A:259:ARG:N	0.41	2.84	18	1
1:A:292:LEU:CD1	1:A:292:LEU:C	0.41	2.89	5	1
1:A:145:THR:CG2	1:A:181:VAL:HG11	0.41	2.46	12	1
1:A:137:GLN:OE1	1:A:293:GLU:OE1	0.41	2.38	19	1
1:A:160:ASP:OD1	1:A:232:LYS:NZ	0.41	2.54	19	1
1:A:203:LYS:NZ	1:A:203:LYS:CB	0.41	2.84	3	2
1:A:208:ASN:ND2	1:A:208:ASN:N	0.41	2.68	17	1
1:A:161:ALA:C	1:A:210:GLN:HE22	0.41	2.18	17	1
1:A:144:LYS:CB	1:A:270:PHE:CD1	0.41	3.03	13	1
1:A:230:LEU:HD11	1:A:261:LEU:HD22	0.41	1.92	20	1
1:A:139:GLN:O	1:A:142:THR:OG1	0.41	2.35	16	1
1:A:195:LEU:HA	1:A:213:VAL:O	0.41	2.16	1	1
1:A:171:SER:OG	1:A:174:LEU:N	0.41	2.49	1	1
1:A:133:ASN:HD21	1:A:287:PRO:CA	0.41	2.29	17	1
1:A:228:MET:O	1:A:230:LEU:HD23	0.41	2.16	18	1
1:A:280:GLN:CD	1:A:280:GLN:C	0.41	2.80	1	1
1:A:181:VAL:O	1:A:182:VAL:C	0.41	2.58	13	2
1:A:281:TYR:C	1:A:281:TYR:CD1	0.41	2.94	5	1
1:A:177:GLN:CD	1:A:177:GLN:C	0.41	2.79	12	1
1:A:241:ALA:O	1:A:242:ASP:C	0.41	2.59	19	1
1:A:160:ASP:OD2	1:A:162:SER:OG	0.41	2.38	11	1
1:A:243:ASN:HD22	1:A:243:ASN:N	0.41	2.13	14	1
1:A:293:GLU:OE2	1:A:293:GLU:N	0.41	2.54	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:157:ASN:CG	1:A:157:ASN:O	0.41	2.59	1	1
1:A:203:LYS:HB3	1:A:203:LYS:HZ3	0.41	1.75	10	1
1:A:286:VAL:HG22	1:A:286:VAL:O	0.41	2.16	10	1
1:A:194:GLN:NE2	1:A:201:PHE:C	0.41	2.74	12	1
1:A:258:LYS:O	1:A:261:LEU:N	0.40	2.52	18	1
1:A:152:MET:SD	1:A:211:VAL:CG1	0.40	3.10	15	1
1:A:188:PHE:O	1:A:188:PHE:CD2	0.40	2.74	4	1
1:A:133:ASN:ND2	1:A:286:VAL:C	0.40	2.75	17	1
1:A:244:MET:C	1:A:250:LEU:CD1	0.40	2.89	10	1
1:A:152:MET:HG3	1:A:153:LEU:N	0.40	2.31	5	1
1:A:254:CYS:SG	1:A:285:ILE:HD13	0.40	2.57	20	1
1:A:169:ALA:HB1	1:A:175:ALA:N	0.40	2.31	2	1
1:A:171:SER:N	1:A:174:LEU:CD2	0.40	2.83	2	1
1:A:263:LYS:O	1:A:265:THR:N	0.40	2.54	3	1
1:A:220:LEU:HD22	1:A:224:ARG:HH12	0.40	1.75	2	1
1:A:102:GLU:CB	1:A:188:PHE:CD1	0.40	3.04	9	1
1:A:262:PRO:O	1:A:263:LYS:C	0.40	2.59	18	1
1:A:194:GLN:CD	1:A:194:GLN:C	0.40	2.80	1	1
1:A:213:VAL:HG12	1:A:214:GLY:N	0.40	2.31	15	1
1:A:244:MET:CG	1:A:250:LEU:HD22	0.40	2.47	15	1
1:A:177:GLN:OE1	1:A:177:GLN:O	0.40	2.40	7	1
1:A:160:ASP:C	1:A:162:SER:H	0.40	2.20	14	1
1:A:240:GLU:OE2	1:A:243:ASN:CG	0.40	2.60	17	1
1:A:160:ASP:OD1	1:A:160:ASP:O	0.40	2.40	18	1
1:A:203:LYS:CB	1:A:203:LYS:NZ	0.40	2.84	10	1
1:A:157:ASN:HD22	1:A:159:GLU:N	0.40	2.15	6	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	172/226 (76%)	125±3 (72±2%)	35±3 (20±2%)	13±2 (7±1%)	2	16
All	All	3440/4520 (76%)	2494 (72%)	696 (20%)	250 (7%)	2	16

All 39 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	286	VAL	20
1	A	287	PRO	19
1	A	272	ALA	15
1	A	262	PRO	15
1	A	210	GLN	14
1	A	140	SER	13
1	A	233	ILE	12
1	A	231	GLN	11
1	A	274	PHE	11
1	A	289	ALA	10
1	A	161	ALA	10
1	A	204	ASN	10
1	A	160	ASP	9
1	A	133	ASN	9
1	A	198	PRO	9
1	A	229	GLN	8
1	A	138	SER	6
1	A	141	GLY	5
1	A	265	THR	5
1	A	250	LEU	5
1	A	143	GLY	3
1	A	248	GLN	3
1	A	249	GLY	3
1	A	193	SER	3
1	A	189	THR	3
1	A	142	THR	2
1	A	110	MET	2
1	A	172	ARG	2
1	A	170	PRO	2
1	A	263	LYS	2
1	A	153	LEU	1
1	A	266	GLN	1
1	A	220	LEU	1
1	A	240	GLU	1
1	A	230	LEU	1
1	A	264	ASP	1
1	A	203	LYS	1
1	A	190	LYS	1
1	A	228	MET	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	149/197 (76%)	119±4 (80±3%)	30±4 (20±3%)	4	34
All	All	2980/3940 (76%)	2376 (80%)	604 (20%)	4	34

All 98 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	273	THR	20
1	A	203	LYS	20
1	A	192	THR	20
1	A	201	PHE	19
1	A	197	VAL	19
1	A	263	LYS	19
1	A	171	SER	18
1	A	183	GLN	17
1	A	174	LEU	16
1	A	244	MET	15
1	A	189	THR	15
1	A	230	LEU	14
1	A	157	ASN	14
1	A	290	ASN	14
1	A	187	LYS	14
1	A	194	GLN	14
1	A	144	LYS	13
1	A	260	PHE	13
1	A	150	LEU	13
1	A	250	LEU	13
1	A	172	ARG	13
1	A	134	MET	12
1	A	205	LYS	11
1	A	162	SER	10
1	A	271	SER	9
1	A	283	LYS	9
1	A	188	PHE	9
1	A	142	THR	9
1	A	148	PHE	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	138	SER	8
1	A	261	LEU	8
1	A	210	GLN	7
1	A	258	LYS	7
1	A	139	GLN	7
1	A	152	MET	7
1	A	280	GLN	7
1	A	204	ASN	6
1	A	206	GLN	5
1	A	219	VAL	5
1	A	168	LEU	5
1	A	270	PHE	5
1	A	292	LEU	5
1	A	133	ASN	5
1	A	284	LYS	5
1	A	234	LYS	4
1	A	226	LYS	4
1	A	239	ASP	4
1	A	180	GLU	4
1	A	160	ASP	4
1	A	240	GLU	4
1	A	176	ARG	3
1	A	167	CYS	3
1	A	268	VAL	3
1	A	229	GLN	3
1	A	231	GLN	3
1	A	252	ASP	3
1	A	267	LEU	3
1	A	288	ASN	3
1	A	274	PHE	2
1	A	208	ASN	2
1	A	166	ILE	2
1	A	245	LEU	2
1	A	195	LEU	2
1	A	177	GLN	2
1	A	110	MET	2
1	A	266	GLN	2
1	A	199	ASP	2
1	A	232	LYS	2
1	A	190	LYS	2
1	A	228	MET	2
1	A	105	LYS	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	223	MET	2
1	A	294	LEU	1
1	A	264	ASP	1
1	A	102	GLU	1
1	A	149	SER	1
1	A	211	VAL	1
1	A	221	ASP	1
1	A	254	CYS	1
1	A	236	PHE	1
1	A	224	ARG	1
1	A	215	THR	1
1	A	248	GLN	1
1	A	108	TYR	1
1	A	104	LEU	1
1	A	246	ASP	1
1	A	184	GLU	1
1	A	247	GLN	1
1	A	137	GLN	1
1	A	225	ARG	1
1	A	155	ARG	1
1	A	291	THR	1
1	A	286	VAL	1
1	A	256	ARG	1
1	A	243	ASN	1
1	A	253	GLN	1
1	A	156	VAL	1
1	A	227	LEU	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided