



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 3, 2022 – 09:38 AM EST

PDB ID : 2JOK
Title : NMR structure of the catalytic domain of guanine nucleotide exchange factor BopE from Burkholderia pseudomallei
Authors : Wu, H.; Upadhyay, A.; Williams, C.; Galyov, E.E.; van den Elsen, J.M.H.; Bagby, S.
Deposited on : 2007-03-14

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

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/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:

MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
ShiftChecker	:	2.27
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.27

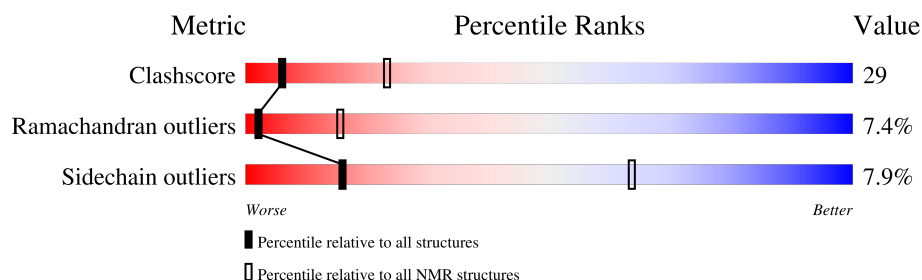
1 Overall quality at a glance

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	158937	12864
Ramachandran outliers	154571	11451
Sidechain outliers	154315	11428

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	186	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 4 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *closest to the average*.

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:80-A:161, A:167-A:169, A:173-A:248 (161)	0.65	4

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 1 clusters and 1 single-model cluster was found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2775 atoms, of which 1370 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Putative G-nucleotide exchange factor.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	184	Total	C	H	N	O	S	0
			2775	862	1370	263	276	4	

There are 2 discrepancies between the modelled and reference sequences:

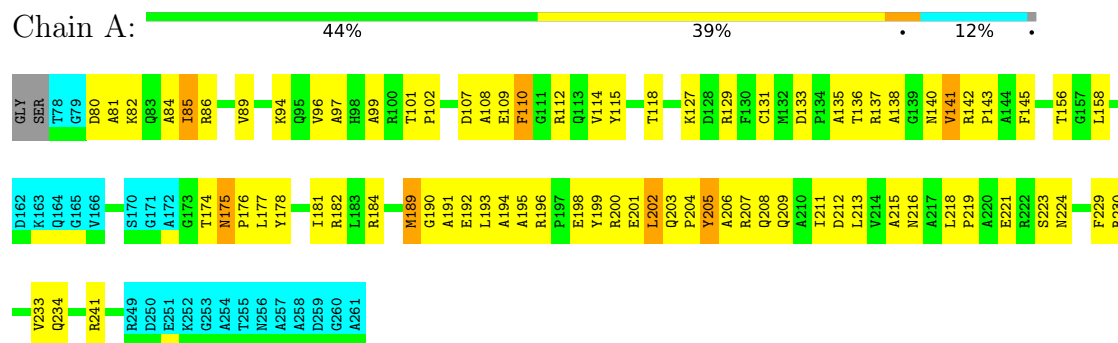
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	76	GLY	-	expression tag	UNP Q63K41
A	77	SER	-	expression tag	UNP Q63K41

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide 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: Putative G-nucleotide exchange factor

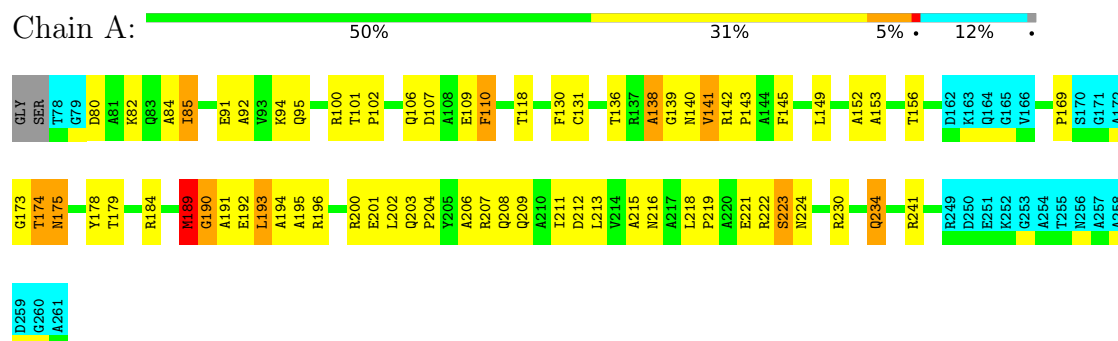


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

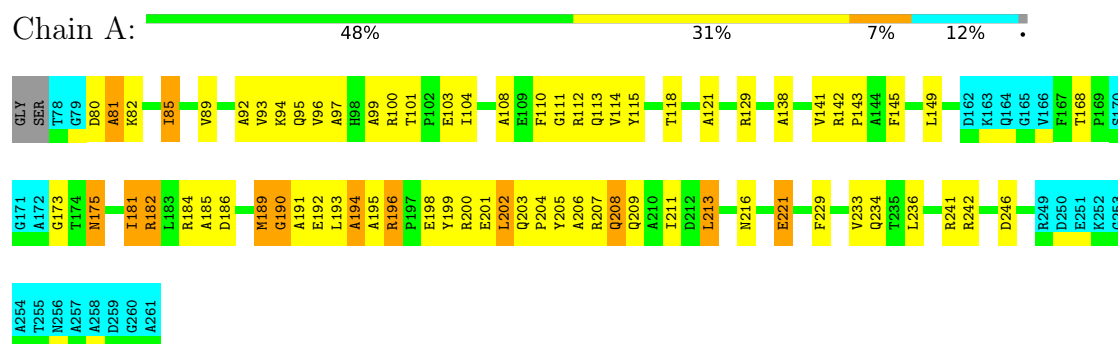
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Putative G-nucleotide exchange factor



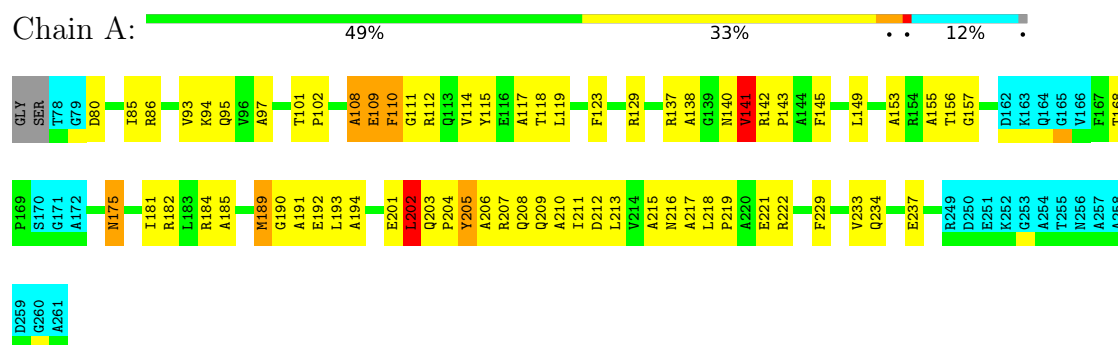
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Putative G-nucleotide exchange factor



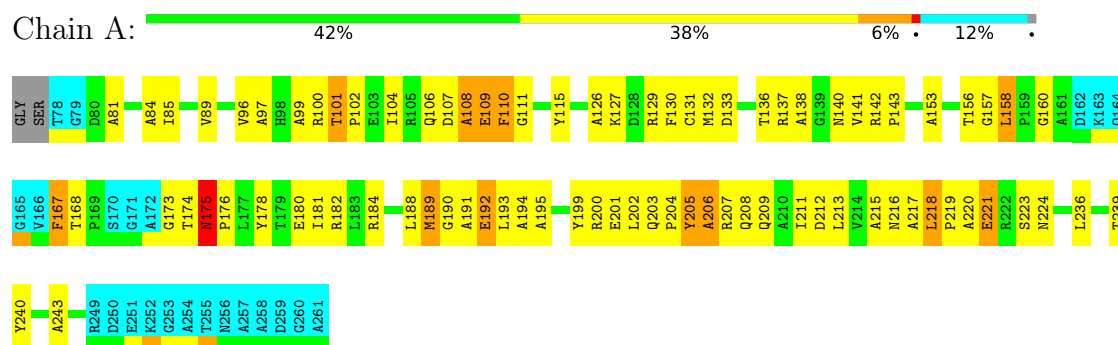
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Putative G-nucleotide exchange factor



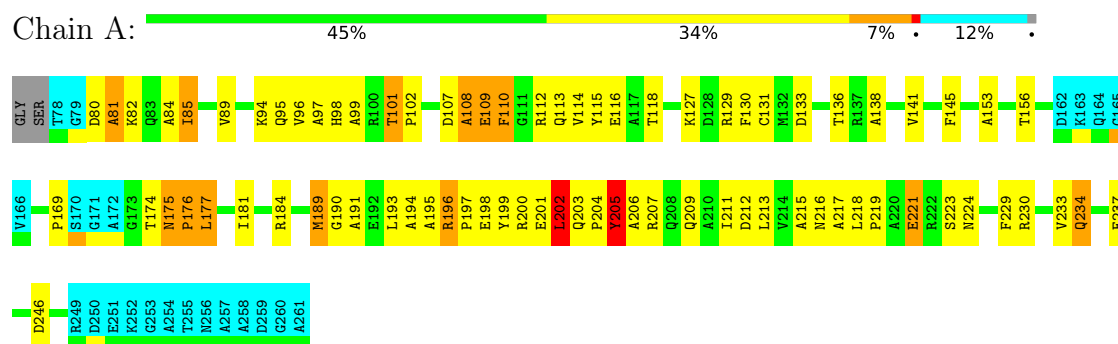
4.2.4 Score per residue for model 4 (medoid)

- Molecule 1: Putative G-nucleotide exchange factor



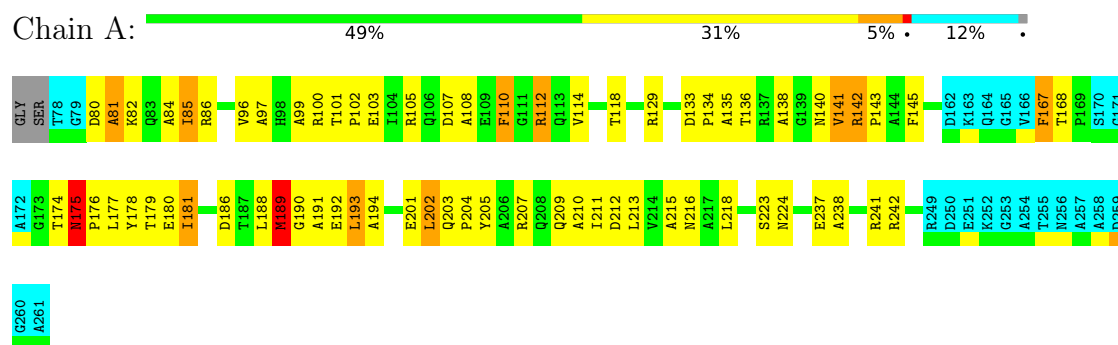
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Putative G-nucleotide exchange factor



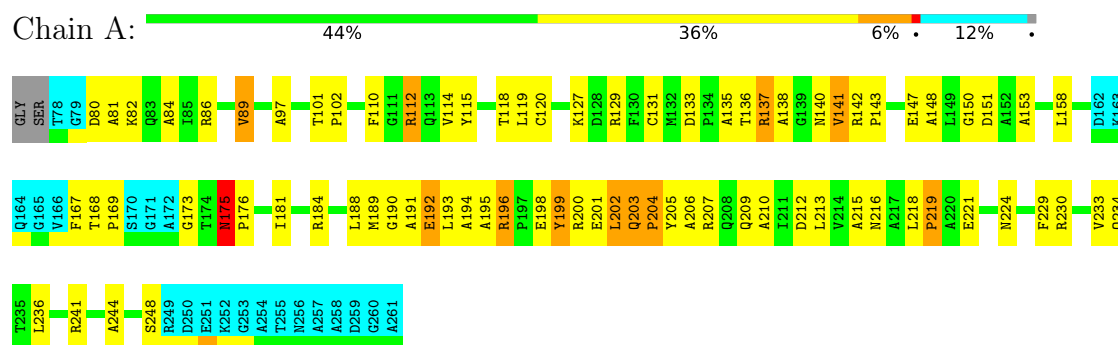
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Putative G-nucleotide exchange factor



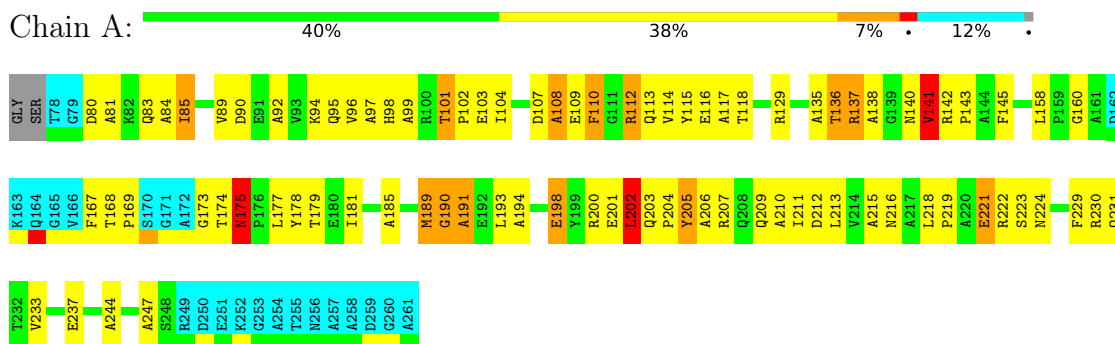
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Putative G-nucleotide exchange factor



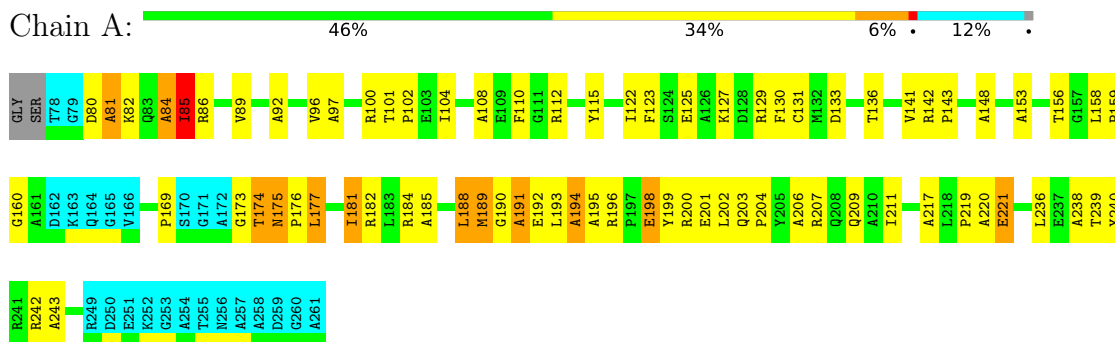
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Putative G-nucleotide exchange factor



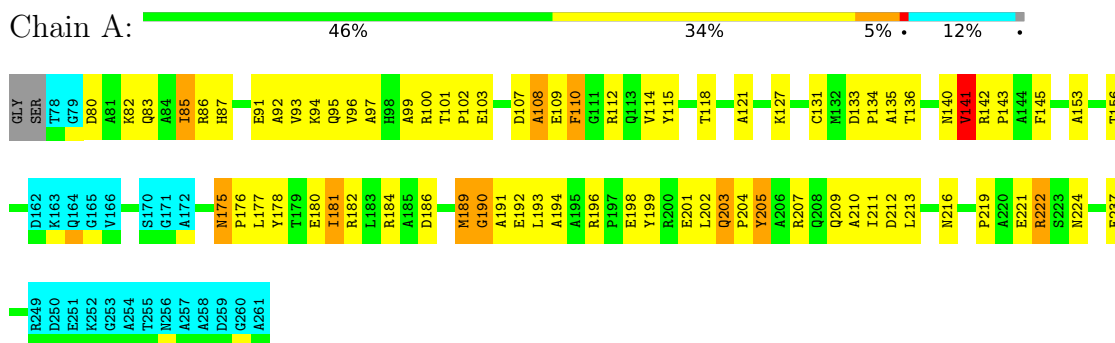
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Putative G-nucleotide exchange factor



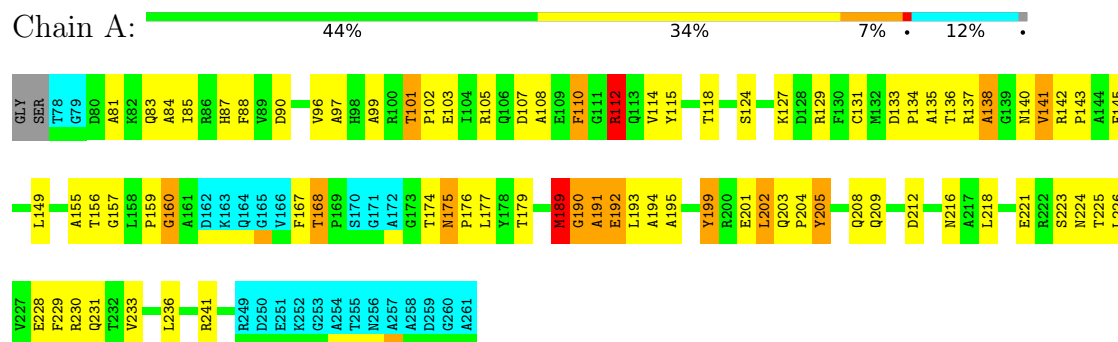
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Putative G-nucleotide exchange factor



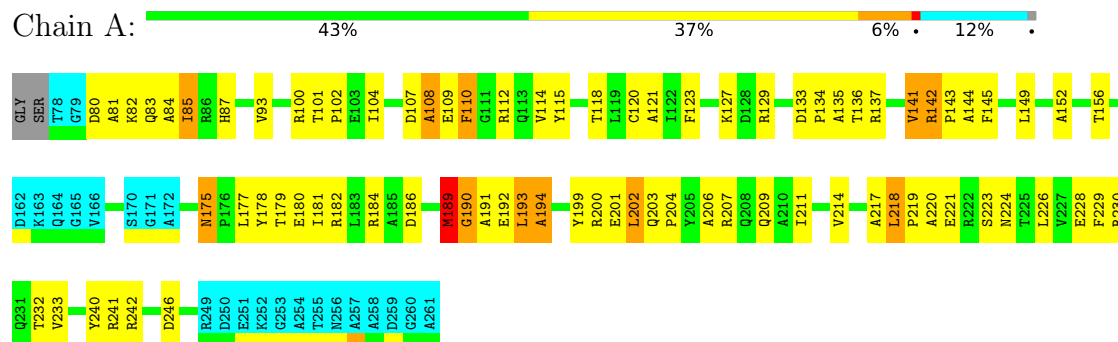
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Putative G-nucleotide exchange factor



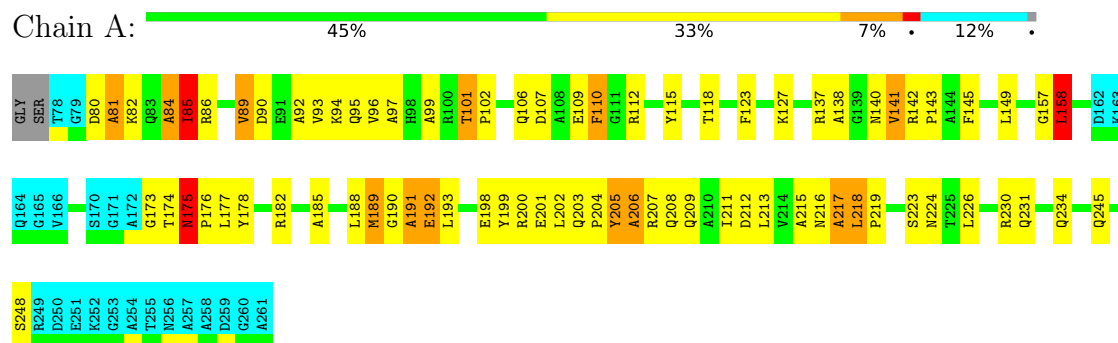
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Putative G-nucleotide exchange factor



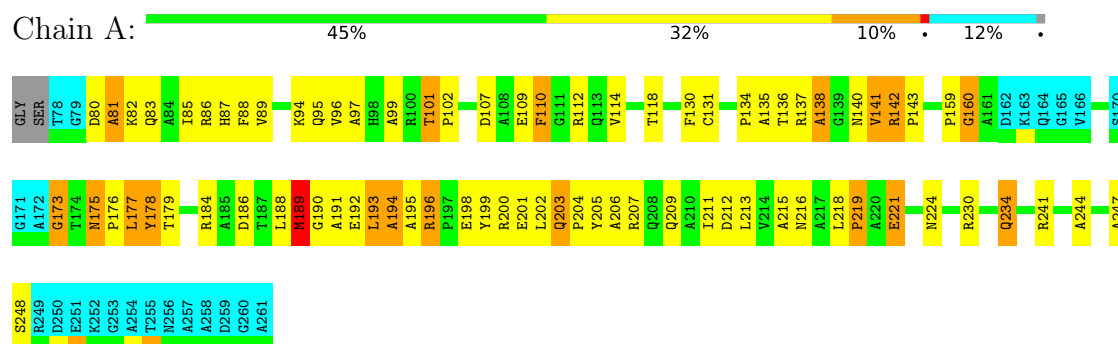
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Putative G-nucleotide exchange factor



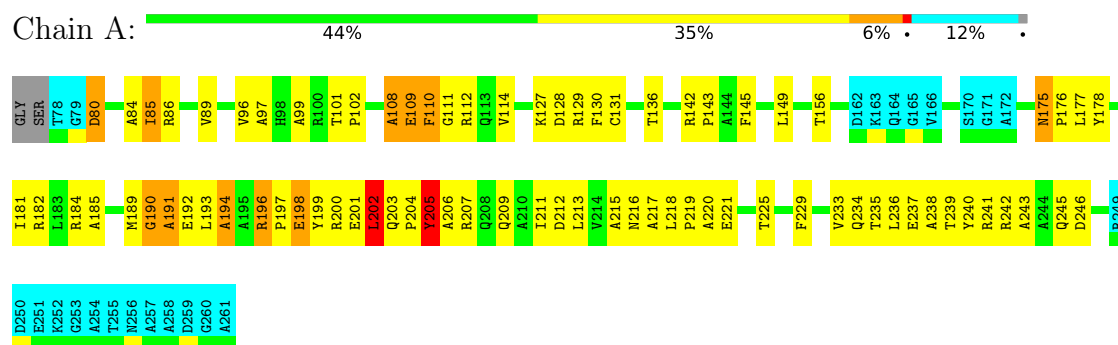
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Putative G-nucleotide exchange factor



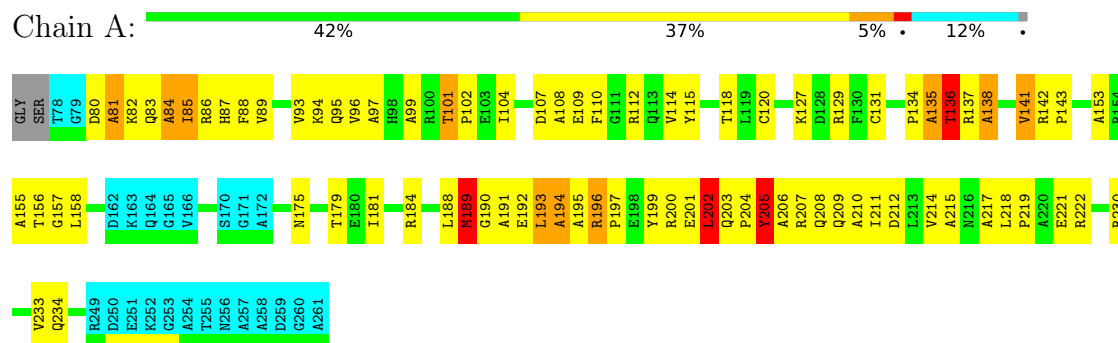
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Putative G-nucleotide exchange factor



4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Putative G-nucleotide exchange factor



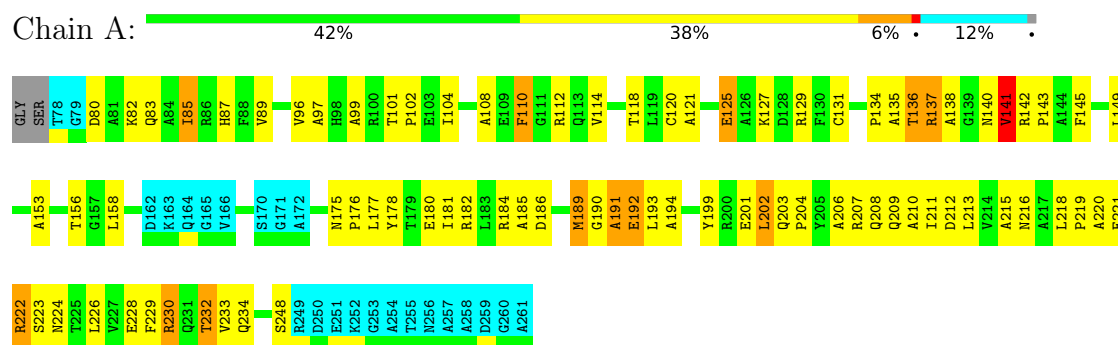
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Putative G-nucleotide exchange factor



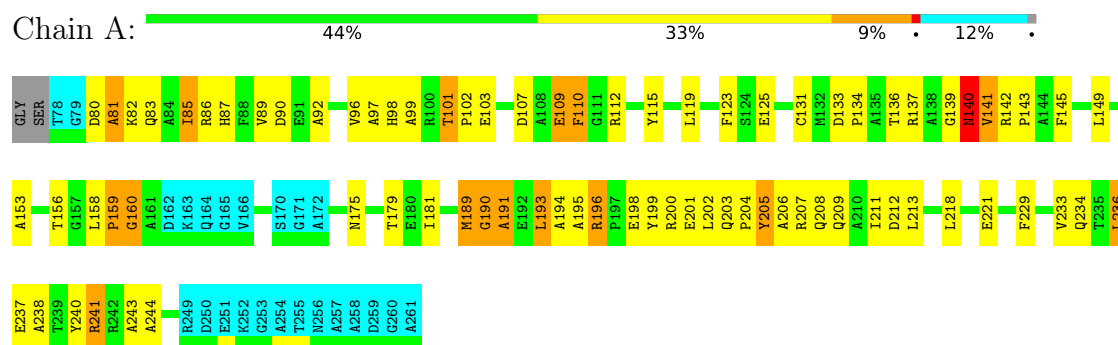
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Putative G-nucleotide exchange factor



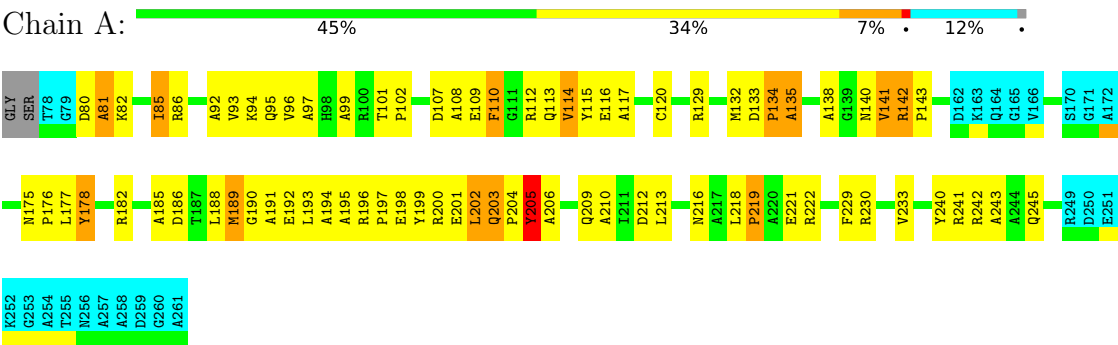
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Putative G-nucleotide exchange factor



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Putative G-nucleotide exchange factor



5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

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

Of the 40 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	
X-PLOR NIH	refinement	

No chemical shift data was provided.

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	0.1±0.2
All	All	0	1

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	112	ARG	Sidechain	1

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	1253	1231	1231	73±9
All	All	25060	24620	24620	1459

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 29.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:201:GLU:O	1:A:203:GLN:N	1.11	1.82	9	18
1:A:193:LEU:H	1:A:193:LEU:HD22	0.82	1.35	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:189:MET:SD	1:A:194:ALA:HB2	0.81	2.16	8	5
1:A:177:LEU:HD12	1:A:177:LEU:H	0.81	1.36	5	6
1:A:96:VAL:HG21	1:A:181:ILE:HG22	0.79	1.54	9	6
1:A:114:VAL:O	1:A:118:THR:HG23	0.79	1.78	8	3
1:A:189:MET:O	1:A:191:ALA:N	0.76	2.18	11	17
1:A:193:LEU:HD23	1:A:194:ALA:H	0.76	1.38	1	1
1:A:193:LEU:HD23	1:A:194:ALA:N	0.76	1.95	1	1
1:A:110:PHE:O	1:A:114:VAL:HG23	0.75	1.81	15	3
1:A:85:ILE:HD13	1:A:85:ILE:O	0.74	1.83	19	11
1:A:177:LEU:HD12	1:A:177:LEU:N	0.73	1.98	5	7
1:A:218:LEU:H	1:A:218:LEU:HD13	0.73	1.42	17	1
1:A:193:LEU:HD22	1:A:193:LEU:N	0.73	1.98	19	2
1:A:135:ALA:O	1:A:136:THR:HG23	0.72	1.83	17	2
1:A:240:TYR:O	1:A:243:ALA:N	0.72	2.23	19	3
1:A:81:ALA:O	1:A:85:ILE:HG22	0.72	1.85	14	11
1:A:175:ASN:N	1:A:176:PRO:CD	0.70	2.53	15	11
1:A:203:GLN:N	1:A:204:PRO:CD	0.69	2.55	19	12
1:A:218:LEU:HD13	1:A:218:LEU:N	0.67	2.05	17	1
1:A:101:THR:N	1:A:102:PRO:CD	0.67	2.58	9	15
1:A:136:THR:HG22	1:A:136:THR:O	0.67	1.90	8	1
1:A:207:ARG:HH11	1:A:234:GLN:NE2	0.66	1.88	7	2
1:A:229:PHE:O	1:A:233:VAL:HG23	0.66	1.90	12	6
1:A:189:MET:CG	1:A:190:GLY:H	0.66	2.04	10	5
1:A:175:ASN:ND2	1:A:175:ASN:N	0.66	2.44	8	1
1:A:123:PHE:CE2	1:A:127:LYS:NZ	0.65	2.64	13	4
1:A:175:ASN:H	1:A:176:PRO:CD	0.65	2.04	7	4
1:A:207:ARG:HH11	1:A:234:GLN:HE22	0.65	1.33	7	1
1:A:199:TYR:CG	1:A:200:ARG:N	0.64	2.66	7	1
1:A:191:ALA:O	1:A:194:ALA:N	0.64	2.29	7	4
1:A:229:PHE:O	1:A:233:VAL:HG12	0.64	1.93	8	6
1:A:209:GLN:O	1:A:212:ASP:N	0.63	2.31	1	16
1:A:213:LEU:O	1:A:216:ASN:N	0.63	2.31	3	14
1:A:192:GLU:O	1:A:195:ALA:HB3	0.63	1.92	2	5
1:A:142:ARG:N	1:A:143:PRO:CD	0.63	2.62	19	13
1:A:129:ARG:NH2	1:A:182:ARG:NH2	0.63	2.47	17	2
1:A:189:MET:C	1:A:189:MET:SD	0.63	2.77	2	1
1:A:207:ARG:NH2	1:A:234:GLN:NE2	0.63	2.46	13	2
1:A:130:PHE:O	1:A:136:THR:HG21	0.63	1.93	17	1
1:A:129:ARG:NH1	1:A:207:ARG:NH2	0.63	2.46	3	1
1:A:145:PHE:CE2	1:A:149:LEU:HD11	0.62	2.29	11	9
1:A:196:ARG:N	1:A:196:ARG:HE	0.62	1.92	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:131:CYS:SG	1:A:142:ARG:NE	0.62	2.72	16	3
1:A:200:ARG:NH2	1:A:241:ARG:NH2	0.62	2.47	1	2
1:A:138:ALA:O	1:A:140:ASN:N	0.62	2.31	17	6
1:A:206:ALA:O	1:A:209:GLN:N	0.62	2.32	8	11
1:A:108:ALA:O	1:A:111:GLY:N	0.62	2.32	17	4
1:A:215:ALA:O	1:A:218:LEU:HD23	0.62	1.95	13	1
1:A:123:PHE:CD2	1:A:127:LYS:NZ	0.62	2.68	13	1
1:A:230:ARG:NH1	1:A:231:GLN:HE21	0.62	1.92	11	1
1:A:205:TYR:CD1	1:A:205:TYR:N	0.62	2.66	5	3
1:A:108:ALA:O	1:A:110:PHE:N	0.61	2.33	17	5
1:A:97:ALA:O	1:A:101:THR:HG23	0.61	1.95	8	2
1:A:129:ARG:NH1	1:A:199:TYR:CE2	0.61	2.68	16	1
1:A:190:GLY:O	1:A:191:ALA:O	0.61	2.19	8	4
1:A:135:ALA:C	1:A:137:ARG:H	0.61	1.99	18	3
1:A:228:GLU:O	1:A:232:THR:OG1	0.61	2.18	12	2
1:A:129:ARG:NH1	1:A:207:ARG:HH22	0.60	1.93	3	1
1:A:80:ASP:O	1:A:82:LYS:N	0.60	2.34	20	13
1:A:189:MET:C	1:A:191:ALA:H	0.60	1.99	2	14
1:A:96:VAL:O	1:A:99:ALA:N	0.60	2.34	11	14
1:A:112:ARG:N	1:A:112:ARG:CD	0.60	2.64	11	4
1:A:238:ALA:N	1:A:241:ARG:HH21	0.60	1.95	15	3
1:A:207:ARG:NH2	1:A:234:GLN:HE22	0.60	1.94	14	1
1:A:208:GLN:NE2	1:A:230:ARG:NH1	0.60	2.50	16	1
1:A:200:ARG:NH1	1:A:241:ARG:NH1	0.60	2.50	19	1
1:A:229:PHE:CD1	1:A:229:PHE:O	0.59	2.55	17	2
1:A:131:CYS:SG	1:A:142:ARG:NH1	0.59	2.75	1	3
1:A:86:ARG:HE	1:A:87:HIS:CE1	0.59	2.15	17	1
1:A:203:GLN:NE2	1:A:230:ARG:HH21	0.59	1.95	20	1
1:A:158:LEU:O	1:A:160:GLY:N	0.59	2.36	9	2
1:A:134:PRO:O	1:A:135:ALA:HB2	0.59	1.97	20	1
1:A:140:ASN:C	1:A:141:VAL:HG23	0.59	2.18	1	1
1:A:134:PRO:O	1:A:135:ALA:HB3	0.59	1.97	10	4
1:A:193:LEU:H	1:A:193:LEU:HD12	0.59	1.57	2	1
1:A:208:GLN:NE2	1:A:230:ARG:CZ	0.59	2.66	16	1
1:A:200:ARG:NH1	1:A:241:ARG:HH11	0.58	1.96	19	1
1:A:207:ARG:NH1	1:A:234:GLN:NE2	0.58	2.51	7	2
1:A:83:GLN:O	1:A:87:HIS:CD2	0.58	2.56	14	8
1:A:207:ARG:NH1	1:A:234:GLN:HE22	0.58	1.97	7	1
1:A:137:ARG:O	1:A:138:ALA:HB2	0.58	1.97	14	2
1:A:201:GLU:C	1:A:203:GLN:N	0.58	2.57	9	11
1:A:204:PRO:O	1:A:208:GLN:N	0.58	2.27	19	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:203:GLN:NE2	1:A:234:GLN:NE2	0.58	2.51	16	1
1:A:193:LEU:O	1:A:196:ARG:N	0.58	2.36	20	3
1:A:203:GLN:HE22	1:A:230:ARG:HH21	0.58	1.42	20	1
1:A:203:GLN:N	1:A:204:PRO:HD2	0.58	2.13	11	8
1:A:189:MET:SD	1:A:194:ALA:CB	0.58	2.92	12	1
1:A:218:LEU:H	1:A:218:LEU:CD1	0.58	2.10	17	1
1:A:177:LEU:H	1:A:177:LEU:CD1	0.57	2.11	5	4
1:A:109:GLU:O	1:A:113:GLN:NE2	0.57	2.37	17	1
1:A:213:LEU:O	1:A:216:ASN:ND2	0.57	2.37	3	2
1:A:156:THR:HG22	1:A:225:THR:CG2	0.57	2.29	11	2
1:A:193:LEU:HD12	1:A:193:LEU:N	0.57	2.14	2	1
1:A:174:THR:OG1	1:A:175:ASN:N	0.57	2.37	9	1
1:A:129:ARG:NH2	1:A:182:ARG:HH22	0.57	1.98	18	1
1:A:193:LEU:H	1:A:193:LEU:CD2	0.57	2.11	19	1
1:A:137:ARG:O	1:A:138:ALA:HB3	0.57	2.00	13	2
1:A:129:ARG:HH11	1:A:200:ARG:NH1	0.57	1.98	9	1
1:A:200:ARG:CZ	1:A:241:ARG:NH1	0.57	2.68	19	1
1:A:105:ARG:HE	1:A:216:ASN:ND2	0.57	1.97	17	1
1:A:100:ARG:O	1:A:103:GLU:N	0.56	2.36	2	1
1:A:215:ALA:O	1:A:218:LEU:O	0.56	2.22	16	10
1:A:115:TYR:CZ	1:A:222:ARG:NE	0.56	2.73	10	1
1:A:86:ARG:O	1:A:205:TYR:CE2	0.56	2.59	10	2
1:A:177:LEU:O	1:A:180:GLU:N	0.56	2.39	12	3
1:A:176:PRO:O	1:A:180:GLU:N	0.56	2.38	17	1
1:A:145:PHE:CZ	1:A:237:GLU:OE2	0.56	2.58	19	5
1:A:192:GLU:O	1:A:195:ALA:N	0.56	2.38	20	2
1:A:152:ALA:O	1:A:156:THR:HG23	0.56	2.00	12	2
1:A:193:LEU:O	1:A:195:ALA:N	0.56	2.38	9	3
1:A:204:PRO:CB	1:A:230:ARG:NH2	0.56	2.68	11	1
1:A:217:ALA:HB3	1:A:218:LEU:HD13	0.56	1.78	17	1
1:A:207:ARG:O	1:A:211:ILE:HG23	0.56	2.01	16	11
1:A:196:ARG:O	1:A:198:GLU:N	0.56	2.38	5	1
1:A:131:CYS:SG	1:A:142:ARG:NH2	0.56	2.79	16	1
1:A:135:ALA:O	1:A:136:THR:CG2	0.56	2.53	16	2
1:A:86:ARG:NE	1:A:205:TYR:CE2	0.56	2.74	7	1
1:A:101:THR:N	1:A:102:PRO:HD2	0.56	2.16	12	11
1:A:101:THR:CG2	1:A:105:ARG:HH12	0.56	2.13	6	1
1:A:215:ALA:O	1:A:219:PRO:N	0.56	2.39	1	1
1:A:148:ALA:HB1	1:A:236:LEU:HD13	0.56	1.77	9	1
1:A:204:PRO:O	1:A:206:ALA:N	0.55	2.39	16	6
1:A:107:ASP:O	1:A:109:GLU:N	0.55	2.40	12	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:225:THR:O	1:A:228:GLU:N	0.55	2.40	11	1
1:A:200:ARG:NH1	1:A:241:ARG:NH2	0.55	2.53	14	1
1:A:115:TYR:CE2	1:A:222:ARG:NH1	0.55	2.74	17	1
1:A:189:MET:C	1:A:191:ALA:N	0.55	2.59	8	14
1:A:203:GLN:HE21	1:A:207:ARG:NH2	0.55	2.00	6	1
1:A:189:MET:CE	1:A:199:TYR:CZ	0.55	2.89	11	1
1:A:199:TYR:CG	1:A:199:TYR:O	0.55	2.58	2	6
1:A:120:CYS:SG	1:A:121:ALA:N	0.55	2.79	12	1
1:A:189:MET:SD	1:A:190:GLY:N	0.55	2.78	18	4
1:A:86:ARG:NE	1:A:205:TYR:CD1	0.55	2.75	6	2
1:A:86:ARG:NE	1:A:205:TYR:CE1	0.55	2.74	10	2
1:A:147:GLU:OE1	1:A:147:GLU:N	0.55	2.39	7	1
1:A:203:GLN:O	1:A:205:TYR:N	0.55	2.39	7	1
1:A:201:GLU:OE2	1:A:241:ARG:NH2	0.55	2.40	11	1
1:A:81:ALA:H	1:A:196:ARG:NH1	0.55	1.99	19	1
1:A:112:ARG:NH1	1:A:222:ARG:HH22	0.55	2.00	20	1
1:A:230:ARG:O	1:A:234:GLN:NE2	0.55	2.40	17	3
1:A:221:GLU:N	1:A:221:GLU:OE1	0.55	2.39	2	1
1:A:135:ALA:O	1:A:137:ARG:N	0.55	2.37	18	2
1:A:199:TYR:CD2	1:A:199:TYR:O	0.55	2.59	14	1
1:A:133:ASP:O	1:A:135:ALA:N	0.55	2.40	20	1
1:A:191:ALA:O	1:A:193:LEU:N	0.55	2.40	18	7
1:A:112:ARG:NH1	1:A:217:ALA:HB1	0.55	2.17	15	2
1:A:194:ALA:O	1:A:199:TYR:CB	0.55	2.55	16	2
1:A:142:ARG:O	1:A:145:PHE:N	0.55	2.40	2	1
1:A:195:ALA:O	1:A:196:ARG:O	0.55	2.25	19	3
1:A:113:GLN:OE1	1:A:113:GLN:N	0.55	2.40	17	1
1:A:242:ARG:NH1	1:A:246:ASP:OD1	0.54	2.40	2	2
1:A:108:ALA:O	1:A:112:ARG:NH1	0.54	2.40	11	2
1:A:97:ALA:O	1:A:101:THR:N	0.54	2.39	17	2
1:A:89:VAL:O	1:A:92:ALA:N	0.54	2.39	19	1
1:A:198:GLU:CD	1:A:198:GLU:H	0.54	2.03	9	1
1:A:93:VAL:HG21	1:A:206:ALA:HB1	0.54	1.80	20	2
1:A:203:GLN:NE2	1:A:230:ARG:NH2	0.54	2.56	20	1
1:A:185:ALA:O	1:A:189:MET:SD	0.54	2.66	15	3
1:A:105:ARG:HH22	1:A:216:ASN:ND2	0.54	2.01	11	1
1:A:221:GLU:O	1:A:224:ASN:N	0.54	2.41	1	6
1:A:110:PHE:CG	1:A:111:GLY:N	0.54	2.75	2	1
1:A:219:PRO:C	1:A:221:GLU:H	0.54	2.06	18	6
1:A:234:GLN:N	1:A:234:GLN:OE1	0.54	2.41	5	1
1:A:131:CYS:SG	1:A:142:ARG:CZ	0.54	2.95	7	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:136:THR:O	1:A:140:ASN:ND2	0.54	2.41	19	2
1:A:138:ALA:O	1:A:140:ASN:ND2	0.54	2.41	1	1
1:A:175:ASN:N	1:A:175:ASN:OD1	0.54	2.39	1	3
1:A:135:ALA:O	1:A:140:ASN:ND2	0.54	2.41	6	2
1:A:198:GLU:N	1:A:198:GLU:OE1	0.54	2.41	10	3
1:A:201:GLU:C	1:A:203:GLN:H	0.54	2.06	14	6
1:A:230:ARG:NH1	1:A:231:GLN:NE2	0.54	2.55	11	1
1:A:90:ASP:OD1	1:A:94:LYS:NZ	0.54	2.41	17	2
1:A:130:PHE:CE2	1:A:140:ASN:OD1	0.53	2.61	1	1
1:A:218:LEU:CD2	1:A:222:ARG:HE	0.53	2.15	3	1
1:A:100:ARG:NH2	1:A:180:GLU:OE1	0.53	2.41	4	3
1:A:104:ILE:O	1:A:108:ALA:N	0.53	2.41	2	5
1:A:186:ASP:O	1:A:190:GLY:N	0.53	2.41	20	2
1:A:185:ALA:O	1:A:189:MET:CG	0.53	2.56	8	6
1:A:205:TYR:CD1	1:A:206:ALA:N	0.53	2.76	3	2
1:A:125:GLU:OE1	1:A:207:ARG:NH2	0.53	2.41	19	2
1:A:175:ASN:N	1:A:179:THR:OG1	0.53	2.41	16	1
1:A:181:ILE:C	1:A:181:ILE:HD12	0.53	2.23	17	4
1:A:204:PRO:CB	1:A:230:ARG:HH21	0.53	2.16	11	1
1:A:194:ALA:O	1:A:199:TYR:CG	0.53	2.61	15	3
1:A:204:PRO:C	1:A:206:ALA:N	0.53	2.62	16	6
1:A:80:ASP:N	1:A:80:ASP:OD1	0.53	2.42	15	1
1:A:193:LEU:C	1:A:195:ALA:N	0.53	2.61	9	4
1:A:193:LEU:N	1:A:193:LEU:HD12	0.53	2.19	16	12
1:A:129:ARG:HH22	1:A:203:GLN:HE21	0.53	1.46	7	1
1:A:221:GLU:OE1	1:A:221:GLU:N	0.53	2.39	17	1
1:A:94:LYS:O	1:A:97:ALA:N	0.53	2.42	3	4
1:A:103:GLU:OE1	1:A:110:PHE:CZ	0.53	2.61	10	2
1:A:197:PRO:O	1:A:199:TYR:N	0.53	2.42	20	2
1:A:200:ARG:NH2	1:A:241:ARG:HH21	0.53	2.01	2	1
1:A:93:VAL:CG2	1:A:206:ALA:HB1	0.53	2.34	20	2
1:A:117:ALA:HB1	1:A:175:ASN:ND2	0.53	2.19	8	1
1:A:129:ARG:O	1:A:200:ARG:NH2	0.53	2.42	9	1
1:A:178:TYR:OH	1:A:182:ARG:NH2	0.53	2.42	10	2
1:A:122:ILE:HD12	1:A:207:ARG:CZ	0.53	2.34	17	1
1:A:157:GLY:O	1:A:158:LEU:C	0.53	2.47	4	2
1:A:223:SER:OG	1:A:224:ASN:N	0.53	2.42	11	6
1:A:203:GLN:HE21	1:A:207:ARG:HH22	0.53	1.46	6	1
1:A:129:ARG:CD	1:A:241:ARG:HH22	0.53	2.17	20	1
1:A:118:THR:HG23	1:A:178:TYR:OH	0.53	2.04	1	1
1:A:109:GLU:OE1	1:A:110:PHE:N	0.53	2.41	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:129:ARG:NH1	1:A:200:ARG:O	0.53	2.42	12	1
1:A:200:ARG:CG	1:A:201:GLU:H	0.53	2.17	20	1
1:A:199:TYR:CD1	1:A:199:TYR:O	0.52	2.62	19	3
1:A:208:GLN:OE1	1:A:209:GLN:NE2	0.52	2.43	17	1
1:A:216:ASN:OD1	1:A:217:ALA:N	0.52	2.43	3	1
1:A:178:TYR:OH	1:A:182:ARG:NE	0.52	2.42	4	2
1:A:137:ARG:O	1:A:142:ARG:NH2	0.52	2.42	3	1
1:A:219:PRO:O	1:A:221:GLU:N	0.52	2.42	15	5
1:A:125:GLU:N	1:A:125:GLU:OE1	0.52	2.42	18	1
1:A:195:ALA:O	1:A:196:ARG:C	0.52	2.48	5	4
1:A:133:ASP:OD1	1:A:200:ARG:NH2	0.52	2.42	9	1
1:A:188:LEU:HD13	1:A:188:LEU:O	0.52	2.05	9	1
1:A:203:GLN:OE1	1:A:207:ARG:NH2	0.52	2.42	12	1
1:A:200:ARG:CG	1:A:201:GLU:N	0.52	2.72	20	1
1:A:174:THR:O	1:A:175:ASN:CB	0.52	2.57	6	5
1:A:201:GLU:OE2	1:A:241:ARG:NH1	0.52	2.42	11	1
1:A:112:ARG:NH2	1:A:217:ALA:O	0.52	2.42	16	3
1:A:88:PHE:CD1	1:A:188:LEU:HD13	0.52	2.40	14	2
1:A:97:ALA:O	1:A:101:THR:CB	0.52	2.58	4	4
1:A:148:ALA:C	1:A:236:LEU:HD21	0.52	2.25	17	1
1:A:189:MET:CG	1:A:190:GLY:N	0.52	2.73	10	2
1:A:205:TYR:CD1	1:A:205:TYR:C	0.52	2.82	3	2
1:A:108:ALA:HB1	1:A:112:ARG:NH1	0.52	2.20	5	2
1:A:100:ARG:NH1	1:A:180:GLU:OE1	0.52	2.42	6	2
1:A:108:ALA:O	1:A:112:ARG:NH2	0.52	2.43	6	2
1:A:140:ASN:C	1:A:141:VAL:HG22	0.52	2.26	8	4
1:A:127:LYS:O	1:A:131:CYS:SG	0.52	2.68	9	9
1:A:178:TYR:CZ	1:A:182:ARG:NE	0.52	2.77	13	1
1:A:89:VAL:HG13	1:A:90:ASP:N	0.52	2.20	19	1
1:A:115:TYR:O	1:A:118:THR:OG1	0.51	2.27	13	4
1:A:177:LEU:N	1:A:177:LEU:CD1	0.51	2.73	13	4
1:A:230:ARG:HE	1:A:231:GLN:HE21	0.51	1.46	8	1
1:A:110:PHE:CD2	1:A:110:PHE:O	0.51	2.64	20	3
1:A:189:MET:CE	1:A:199:TYR:OH	0.51	2.58	15	1
1:A:80:ASP:C	1:A:82:LYS:N	0.51	2.63	13	13
1:A:210:ALA:O	1:A:213:LEU:N	0.51	2.43	3	4
1:A:100:ARG:HE	1:A:177:LEU:CD2	0.51	2.19	10	1
1:A:205:TYR:O	1:A:208:GLN:N	0.51	2.43	13	1
1:A:192:GLU:O	1:A:194:ALA:N	0.51	2.42	14	4
1:A:207:ARG:NH2	1:A:234:GLN:OE1	0.51	2.43	14	1
1:A:120:CYS:SG	1:A:158:LEU:HD12	0.51	2.46	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:VAL:CG1	1:A:206:ALA:HB2	0.51	2.35	9	1
1:A:129:ARG:NH2	1:A:201:GLU:OE2	0.51	2.44	11	1
1:A:230:ARG:CZ	1:A:231:GLN:HE21	0.51	2.18	13	1
1:A:175:ASN:N	1:A:176:PRO:HD3	0.51	2.21	15	1
1:A:112:ARG:O	1:A:115:TYR:N	0.51	2.42	2	1
1:A:138:ALA:C	1:A:140:ASN:H	0.51	2.08	17	6
1:A:201:GLU:N	1:A:201:GLU:OE1	0.51	2.39	9	1
1:A:97:ALA:O	1:A:101:THR:OG1	0.51	2.23	19	9
1:A:193:LEU:N	1:A:193:LEU:HD22	0.51	2.21	3	1
1:A:80:ASP:H	1:A:196:ARG:HH12	0.51	1.48	9	1
1:A:175:ASN:HD22	1:A:177:LEU:H	0.51	1.47	12	1
1:A:80:ASP:O	1:A:81:ALA:C	0.50	2.49	19	6
1:A:189:MET:O	1:A:189:MET:SD	0.50	2.68	5	1
1:A:108:ALA:O	1:A:112:ARG:CZ	0.50	2.60	9	1
1:A:101:THR:OG1	1:A:213:LEU:HD11	0.50	2.07	17	2
1:A:192:GLU:O	1:A:196:ARG:CG	0.50	2.59	15	1
1:A:193:LEU:H	1:A:193:LEU:CD1	0.50	2.18	2	1
1:A:193:LEU:CD1	1:A:193:LEU:N	0.50	2.74	12	3
1:A:80:ASP:C	1:A:82:LYS:H	0.50	2.10	13	4
1:A:139:GLY:O	1:A:244:ALA:HB1	0.50	2.06	19	1
1:A:217:ALA:C	1:A:218:LEU:HD12	0.50	2.26	3	1
1:A:84:ALA:O	1:A:86:ARG:N	0.50	2.44	16	4
1:A:129:ARG:HH21	1:A:182:ARG:HH21	0.50	1.49	9	1
1:A:230:ARG:O	1:A:234:GLN:OE1	0.50	2.28	18	2
1:A:186:ASP:O	1:A:189:MET:SD	0.50	2.69	18	2
1:A:136:THR:O	1:A:138:ALA:N	0.50	2.38	4	1
1:A:219:PRO:C	1:A:221:GLU:N	0.50	2.65	4	7
1:A:133:ASP:N	1:A:200:ARG:HH22	0.50	2.03	5	1
1:A:89:VAL:HG11	1:A:206:ALA:HB2	0.50	1.83	7	2
1:A:200:ARG:HH11	1:A:241:ARG:HH22	0.50	1.48	14	1
1:A:129:ARG:NH2	1:A:237:GLU:OE2	0.50	2.42	3	1
1:A:113:GLN:O	1:A:116:GLU:N	0.50	2.43	20	2
1:A:118:THR:N	1:A:175:ASN:HD21	0.50	2.05	3	1
1:A:178:TYR:CD1	1:A:178:TYR:C	0.50	2.85	18	5
1:A:80:ASP:N	1:A:196:ARG:HH12	0.50	2.05	9	1
1:A:134:PRO:O	1:A:136:THR:N	0.50	2.44	18	2
1:A:192:GLU:CD	1:A:192:GLU:H	0.50	2.10	7	1
1:A:101:THR:H	1:A:102:PRO:CD	0.49	2.20	13	5
1:A:186:ASP:OD1	1:A:189:MET:SD	0.49	2.70	6	2
1:A:200:ARG:NH1	1:A:241:ARG:HH22	0.49	2.05	14	1
1:A:89:VAL:CG1	1:A:90:ASP:N	0.49	2.74	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:213:LEU:C	1:A:215:ALA:N	0.49	2.65	3	4
1:A:86:ARG:O	1:A:89:VAL:HG12	0.49	2.07	15	4
1:A:192:GLU:CD	1:A:192:GLU:N	0.49	2.65	7	1
1:A:177:LEU:H	1:A:177:LEU:HD23	0.49	1.66	9	2
1:A:123:PHE:O	1:A:127:LYS:NZ	0.49	2.42	13	1
1:A:114:VAL:O	1:A:118:THR:OG1	0.49	2.23	14	9
1:A:201:GLU:O	1:A:202:LEU:C	0.49	2.50	16	4
1:A:190:GLY:O	1:A:192:GLU:N	0.49	2.46	9	1
1:A:218:LEU:N	1:A:218:LEU:HD22	0.49	2.22	17	1
1:A:193:LEU:CD2	1:A:194:ALA:N	0.49	2.73	1	1
1:A:237:GLU:C	1:A:241:ARG:HE	0.49	2.11	15	3
1:A:101:THR:H	1:A:102:PRO:HD2	0.49	1.66	14	2
1:A:136:THR:O	1:A:136:THR:CG2	0.49	2.59	8	1
1:A:129:ARG:NH1	1:A:203:GLN:HE22	0.49	2.04	15	1
1:A:233:VAL:HG13	1:A:234:GLN:N	0.49	2.23	16	3
1:A:191:ALA:C	1:A:193:LEU:N	0.49	2.66	6	7
1:A:193:LEU:N	1:A:193:LEU:CD2	0.49	2.75	9	2
1:A:112:ARG:CZ	1:A:217:ALA:O	0.49	2.61	9	2
1:A:198:GLU:OE1	1:A:198:GLU:N	0.49	2.42	14	2
1:A:130:PHE:O	1:A:136:THR:CG2	0.49	2.61	17	1
1:A:239:THR:O	1:A:243:ALA:HB2	0.49	2.07	4	2
1:A:133:ASP:O	1:A:136:THR:OG1	0.49	2.31	19	7
1:A:100:ARG:CZ	1:A:180:GLU:OE1	0.49	2.60	10	1
1:A:203:GLN:CD	1:A:234:GLN:NE2	0.49	2.66	16	2
1:A:89:VAL:O	1:A:93:VAL:HG23	0.49	2.07	2	1
1:A:178:TYR:CZ	1:A:207:ARG:CZ	0.49	2.96	8	1
1:A:178:TYR:OH	1:A:182:ARG:CZ	0.49	2.61	13	1
1:A:199:TYR:O	1:A:199:TYR:CD1	0.49	2.66	18	1
1:A:191:ALA:O	1:A:194:ALA:HB3	0.49	2.08	9	1
1:A:240:TYR:O	1:A:241:ARG:C	0.49	2.50	19	3
1:A:223:SER:O	1:A:226:LEU:N	0.48	2.46	12	2
1:A:228:GLU:O	1:A:232:THR:CB	0.48	2.61	12	1
1:A:238:ALA:CA	1:A:241:ARG:HH21	0.48	2.20	15	2
1:A:135:ALA:O	1:A:136:THR:OG1	0.48	2.30	16	1
1:A:204:PRO:C	1:A:206:ALA:H	0.48	2.10	20	2
1:A:158:LEU:C	1:A:160:GLY:H	0.48	2.10	19	1
1:A:204:PRO:O	1:A:230:ARG:NH2	0.48	2.40	7	1
1:A:135:ALA:O	1:A:136:THR:CB	0.48	2.61	16	2
1:A:148:ALA:CB	1:A:236:LEU:HD21	0.48	2.38	17	1
1:A:196:ARG:H	1:A:196:ARG:NE	0.48	2.06	7	1
1:A:192:GLU:OE1	1:A:192:GLU:N	0.48	2.43	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:221:GLU:O	1:A:223:SER:N	0.48	2.46	1	2
1:A:182:ARG:NH1	1:A:186:ASP:OD2	0.48	2.45	2	1
1:A:167:PHE:CD1	1:A:167:PHE:C	0.48	2.83	4	2
1:A:181:ILE:HD12	1:A:182:ARG:N	0.48	2.23	4	1
1:A:194:ALA:O	1:A:199:TYR:CD1	0.48	2.67	15	1
1:A:120:CYS:SG	1:A:158:LEU:HD11	0.48	2.49	18	2
1:A:110:PHE:CD1	1:A:110:PHE:C	0.48	2.87	12	3
1:A:134:PRO:O	1:A:137:ARG:CZ	0.48	2.61	19	1
1:A:109:GLU:CD	1:A:110:PHE:N	0.48	2.67	3	1
1:A:213:LEU:O	1:A:215:ALA:N	0.48	2.47	3	3
1:A:115:TYR:C	1:A:115:TYR:CD1	0.48	2.86	19	5
1:A:98:HIS:O	1:A:101:THR:OG1	0.48	2.32	5	2
1:A:216:ASN:O	1:A:218:LEU:N	0.48	2.47	13	1
1:A:197:PRO:C	1:A:199:TYR:N	0.48	2.67	20	2
1:A:207:ARG:O	1:A:211:ILE:CG1	0.48	2.62	8	9
1:A:167:PHE:CD1	1:A:168:THR:N	0.48	2.82	7	4
1:A:175:ASN:N	1:A:176:PRO:HD2	0.48	2.24	18	2
1:A:105:ARG:NE	1:A:216:ASN:ND2	0.48	2.62	17	1
1:A:130:PHE:O	1:A:136:THR:CB	0.48	2.62	17	1
1:A:96:VAL:HG21	1:A:181:ILE:CG2	0.48	2.35	9	1
1:A:88:PHE:CD1	1:A:88:PHE:N	0.48	2.80	11	1
1:A:86:ARG:CG	1:A:205:TYR:CG	0.48	2.97	14	1
1:A:117:ALA:O	1:A:120:CYS:SG	0.48	2.66	20	1
1:A:108:ALA:O	1:A:109:GLU:C	0.47	2.52	5	5
1:A:109:GLU:C	1:A:111:GLY:H	0.47	2.12	17	2
1:A:104:ILE:CG2	1:A:217:ALA:HB2	0.47	2.39	4	1
1:A:184:ARG:NH1	1:A:188:LEU:HD22	0.47	2.24	4	1
1:A:101:THR:CG2	1:A:105:ARG:NH1	0.47	2.77	6	1
1:A:150:GLY:O	1:A:153:ALA:HB3	0.47	2.09	7	1
1:A:107:ASP:C	1:A:109:GLU:H	0.47	2.13	20	2
1:A:92:ALA:O	1:A:96:VAL:HG23	0.47	2.09	10	2
1:A:229:PHE:O	1:A:233:VAL:CG2	0.47	2.60	12	1
1:A:203:GLN:O	1:A:206:ALA:HB3	0.47	2.09	2	1
1:A:202:LEU:CD1	1:A:202:LEU:O	0.47	2.62	16	4
1:A:142:ARG:CB	1:A:143:PRO:CD	0.47	2.92	17	5
1:A:218:LEU:O	1:A:219:PRO:O	0.47	2.32	14	3
1:A:81:ALA:O	1:A:85:ILE:CG2	0.47	2.63	13	1
1:A:148:ALA:HB1	1:A:236:LEU:HD21	0.47	1.86	17	1
1:A:110:PHE:O	1:A:110:PHE:CD1	0.47	2.67	1	5
1:A:174:THR:HG22	1:A:179:THR:HG21	0.47	1.86	6	1
1:A:129:ARG:HH22	1:A:204:PRO:CG	0.47	2.22	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:228:GLU:C	1:A:230:ARG:N	0.47	2.67	12	1
1:A:145:PHE:CE1	1:A:236:LEU:HD23	0.47	2.44	2	3
1:A:96:VAL:O	1:A:97:ALA:C	0.47	2.53	19	13
1:A:85:ILE:CG1	1:A:193:LEU:O	0.47	2.62	19	2
1:A:135:ALA:C	1:A:137:ARG:N	0.47	2.68	8	2
1:A:145:PHE:CZ	1:A:149:LEU:HD11	0.47	2.44	13	2
1:A:140:ASN:O	1:A:141:VAL:CB	0.47	2.63	1	2
1:A:104:ILE:O	1:A:108:ALA:CA	0.47	2.63	2	4
1:A:130:PHE:O	1:A:136:THR:OG1	0.47	2.31	14	4
1:A:238:ALA:HB1	1:A:242:ARG:NH1	0.47	2.25	9	1
1:A:159:PRO:O	1:A:160:GLY:O	0.47	2.33	19	3
1:A:123:PHE:C	1:A:123:PHE:CD1	0.47	2.88	19	1
1:A:188:LEU:HD12	1:A:188:LEU:N	0.47	2.24	6	3
1:A:192:GLU:C	1:A:194:ALA:H	0.47	2.13	16	4
1:A:211:ILE:HD12	1:A:212:ASP:N	0.47	2.24	10	1
1:A:135:ALA:O	1:A:140:ASN:OD1	0.47	2.33	14	1
1:A:229:PHE:O	1:A:229:PHE:CD1	0.47	2.68	11	2
1:A:118:THR:O	1:A:121:ALA:HB3	0.47	2.10	10	1
1:A:188:LEU:CD2	1:A:188:LEU:N	0.47	2.78	20	1
1:A:206:ALA:O	1:A:207:ARG:C	0.47	2.53	8	8
1:A:109:GLU:C	1:A:111:GLY:N	0.47	2.68	17	2
1:A:129:ARG:HH11	1:A:203:GLN:CD	0.47	2.13	4	1
1:A:80:ASP:OD2	1:A:83:GLN:NE2	0.47	2.40	8	1
1:A:216:ASN:C	1:A:218:LEU:N	0.47	2.68	13	1
1:A:94:LYS:O	1:A:97:ALA:HB3	0.47	2.10	17	1
1:A:229:PHE:O	1:A:233:VAL:CG1	0.47	2.63	17	1
1:A:204:PRO:O	1:A:208:GLN:CG	0.47	2.63	18	1
1:A:101:THR:CB	1:A:102:PRO:CD	0.47	2.93	19	1
1:A:175:ASN:O	1:A:179:THR:OG1	0.47	2.30	1	5
1:A:96:VAL:O	1:A:99:ALA:HB3	0.46	2.10	2	2
1:A:193:LEU:N	1:A:193:LEU:CD1	0.46	2.78	16	8
1:A:241:ARG:O	1:A:244:ALA:N	0.46	2.43	7	1
1:A:103:GLU:O	1:A:107:ASP:N	0.46	2.44	19	4
1:A:97:ALA:O	1:A:101:THR:CG2	0.46	2.64	8	2
1:A:103:GLU:CD	1:A:110:PHE:CZ	0.46	2.88	10	1
1:A:112:ARG:CG	1:A:112:ARG:HH11	0.46	2.23	11	1
1:A:153:ALA:O	1:A:156:THR:OG1	0.46	2.33	5	9
1:A:137:ARG:O	1:A:138:ALA:CB	0.46	2.62	14	4
1:A:115:TYR:CD1	1:A:116:GLU:N	0.46	2.83	8	1
1:A:101:THR:OG1	1:A:102:PRO:CD	0.46	2.64	19	1
1:A:82:LYS:N	1:A:198:GLU:OE1	0.46	2.48	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:196:ARG:C	1:A:198:GLU:N	0.46	2.68	5	1
1:A:83:GLN:O	1:A:87:HIS:CG	0.46	2.69	12	3
1:A:193:LEU:O	1:A:194:ALA:C	0.46	2.54	2	1
1:A:115:TYR:CZ	1:A:119:LEU:HD11	0.46	2.46	19	3
1:A:129:ARG:NH2	1:A:200:ARG:O	0.46	2.49	12	1
1:A:85:ILE:HD11	1:A:189:MET:CE	0.46	2.41	19	1
1:A:86:ARG:CG	1:A:205:TYR:CD2	0.46	2.99	19	1
1:A:133:ASP:CG	1:A:200:ARG:NH2	0.46	2.69	5	1
1:A:177:LEU:O	1:A:181:ILE:HG23	0.46	2.11	5	3
1:A:134:PRO:O	1:A:135:ALA:CB	0.46	2.62	20	3
1:A:197:PRO:O	1:A:200:ARG:N	0.46	2.38	16	1
1:A:174:THR:O	1:A:175:ASN:C	0.46	2.54	17	1
1:A:202:LEU:O	1:A:203:GLN:C	0.46	2.54	5	3
1:A:174:THR:O	1:A:175:ASN:O	0.46	2.34	8	1
1:A:205:TYR:O	1:A:207:ARG:N	0.46	2.49	13	1
1:A:218:LEU:HD12	1:A:219:PRO:O	0.46	2.11	18	1
1:A:148:ALA:HB1	1:A:236:LEU:HD22	0.46	1.87	7	1
1:A:196:ARG:CB	1:A:197:PRO:CD	0.46	2.94	15	1
1:A:93:VAL:CG1	1:A:94:LYS:N	0.46	2.79	16	1
1:A:137:ARG:H	1:A:140:ASN:ND2	0.45	2.08	7	1
1:A:175:ASN:N	1:A:175:ASN:ND2	0.45	2.64	7	1
1:A:84:ALA:C	1:A:86:ARG:N	0.45	2.68	16	2
1:A:132:MET:CE	1:A:200:ARG:HH12	0.45	2.24	17	1
1:A:94:LYS:O	1:A:95:GLN:C	0.45	2.55	3	10
1:A:117:ALA:C	1:A:175:ASN:HD21	0.45	2.14	3	1
1:A:203:GLN:OE1	1:A:234:GLN:OE1	0.45	2.34	3	2
1:A:90:ASP:CG	1:A:94:LYS:NZ	0.45	2.69	13	1
1:A:177:LEU:CD2	1:A:177:LEU:H	0.45	2.24	14	1
1:A:198:GLU:CD	1:A:199:TYR:N	0.45	2.69	15	1
1:A:175:ASN:ND2	1:A:175:ASN:C	0.45	2.69	6	2
1:A:133:ASP:CG	1:A:200:ARG:HH21	0.45	2.15	5	1
1:A:135:ALA:CB	1:A:248:SER:OG	0.45	2.64	7	1
1:A:220:ALA:O	1:A:223:SER:OG	0.45	2.34	4	1
1:A:236:LEU:O	1:A:240:TYR:CD1	0.45	2.69	4	2
1:A:196:ARG:HE	1:A:196:ARG:H	0.45	1.54	7	1
1:A:242:ARG:O	1:A:245:GLN:CB	0.45	2.65	15	2
1:A:100:ARG:O	1:A:101:THR:C	0.45	2.54	2	1
1:A:126:ALA:CA	1:A:129:ARG:HH21	0.45	2.24	4	1
1:A:129:ARG:HH12	1:A:207:ARG:NH1	0.45	2.09	5	1
1:A:211:ILE:O	1:A:215:ALA:HB2	0.45	2.12	5	1
1:A:138:ALA:C	1:A:140:ASN:N	0.45	2.70	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:244:ALA:O	1:A:247:ALA:N	0.45	2.49	8	1
1:A:134:PRO:O	1:A:137:ARG:NH2	0.45	2.50	19	1
1:A:106:GLN:O	1:A:107:ASP:OD1	0.45	2.34	1	1
1:A:207:ARG:O	1:A:208:GLN:C	0.45	2.55	1	1
1:A:103:GLU:O	1:A:107:ASP:OD1	0.45	2.34	10	2
1:A:107:ASP:OD1	1:A:107:ASP:O	0.45	2.35	17	1
1:A:129:ARG:CZ	1:A:203:GLN:CD	0.45	2.85	2	1
1:A:89:VAL:HG12	1:A:206:ALA:HB2	0.45	1.87	5	2
1:A:96:VAL:CG1	1:A:100:ARG:NH2	0.45	2.80	10	1
1:A:209:GLN:O	1:A:210:ALA:C	0.45	2.55	3	8
1:A:173:GLY:O	1:A:174:THR:C	0.45	2.56	9	1
1:A:204:PRO:CA	1:A:230:ARG:HH21	0.45	2.25	11	1
1:A:129:ARG:CZ	1:A:203:GLN:NE2	0.44	2.80	2	1
1:A:89:VAL:O	1:A:92:ALA:HB3	0.44	2.12	8	1
1:A:80:ASP:N	1:A:196:ARG:NH1	0.44	2.65	9	1
1:A:90:ASP:OD2	1:A:205:TYR:OH	0.44	2.35	11	1
1:A:137:ARG:O	1:A:138:ALA:C	0.44	2.55	16	1
1:A:205:TYR:O	1:A:206:ALA:C	0.44	2.56	4	2
1:A:80:ASP:H	1:A:196:ARG:NH1	0.44	2.09	9	1
1:A:175:ASN:O	1:A:179:THR:CB	0.44	2.65	16	2
1:A:197:PRO:C	1:A:199:TYR:H	0.44	2.14	20	1
1:A:189:MET:CE	1:A:199:TYR:CE2	0.44	3.00	2	1
1:A:188:LEU:N	1:A:188:LEU:CD1	0.44	2.81	13	3
1:A:84:ALA:O	1:A:85:ILE:C	0.44	2.55	13	2
1:A:103:GLU:CG	1:A:110:PHE:CE1	0.44	3.01	11	1
1:A:144:ALA:HB1	1:A:240:TYR:CZ	0.44	2.46	12	1
1:A:189:MET:SD	1:A:189:MET:O	0.44	2.75	20	1
1:A:140:ASN:O	1:A:141:VAL:HG23	0.44	2.13	1	1
1:A:137:ARG:CG	1:A:138:ALA:N	0.44	2.79	14	2
1:A:177:LEU:H	1:A:177:LEU:CD2	0.44	2.25	9	1
1:A:202:LEU:O	1:A:204:PRO:N	0.44	2.50	16	1
1:A:245:GLN:O	1:A:248:SER:OG	0.44	2.36	13	1
1:A:202:LEU:CD1	1:A:202:LEU:N	0.44	2.81	18	1
1:A:85:ILE:CG1	1:A:189:MET:SD	0.44	3.06	15	2
1:A:86:ARG:CD	1:A:205:TYR:CD1	0.44	3.00	14	1
1:A:194:ALA:O	1:A:199:TYR:CD2	0.44	2.71	5	1
1:A:113:GLN:O	1:A:115:TYR:N	0.44	2.51	20	2
1:A:190:GLY:O	1:A:191:ALA:C	0.44	2.56	9	1
1:A:123:PHE:CZ	1:A:127:LYS:NZ	0.44	2.84	13	1
1:A:236:LEU:HD11	1:A:240:TYR:CE1	0.44	2.48	19	1
1:A:110:PHE:O	1:A:111:GLY:C	0.43	2.56	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:242:ARG:NH1	1:A:246:ASP:OD2	0.43	2.50	2	1
1:A:200:ARG:O	1:A:203:GLN:OE1	0.43	2.36	19	2
1:A:129:ARG:CZ	1:A:203:GLN:OE1	0.43	2.66	6	1
1:A:221:GLU:OE1	1:A:222:ARG:N	0.43	2.51	16	1
1:A:121:ALA:O	1:A:125:GLU:OE2	0.43	2.36	18	1
1:A:212:ASP:O	1:A:215:ALA:HB3	0.43	2.12	1	1
1:A:200:ARG:CZ	1:A:241:ARG:NH2	0.43	2.81	2	1
1:A:199:TYR:CD1	1:A:199:TYR:C	0.43	2.89	11	2
1:A:133:ASP:CG	1:A:241:ARG:HH12	0.43	2.16	12	1
1:A:92:ALA:O	1:A:93:VAL:C	0.43	2.56	17	5
1:A:136:THR:O	1:A:137:ARG:O	0.43	2.35	18	2
1:A:93:VAL:HG11	1:A:209:GLN:CG	0.43	2.43	2	1
1:A:112:ARG:NH1	1:A:218:LEU:HD21	0.43	2.29	14	1
1:A:109:GLU:O	1:A:111:GLY:N	0.43	2.51	17	1
1:A:191:ALA:HB1	1:A:192:GLU:OE1	0.43	2.13	2	1
1:A:196:ARG:C	1:A:198:GLU:H	0.43	2.16	5	1
1:A:137:ARG:H	1:A:140:ASN:HD22	0.43	1.56	7	1
1:A:81:ALA:HA	1:A:84:ALA:HB3	0.43	1.90	8	1
1:A:188:LEU:N	1:A:188:LEU:HD12	0.43	2.29	13	1
1:A:189:MET:O	1:A:190:GLY:C	0.43	2.57	15	1
1:A:83:GLN:CG	1:A:84:ALA:N	0.43	2.81	16	1
1:A:221:GLU:C	1:A:223:SER:N	0.43	2.71	18	1
1:A:143:PRO:O	1:A:147:GLU:OE1	0.43	2.36	7	1
1:A:226:LEU:O	1:A:230:ARG:CB	0.43	2.66	11	1
1:A:237:GLU:C	1:A:239:THR:N	0.43	2.72	17	1
1:A:129:ARG:O	1:A:133:ASP:OD1	0.43	2.36	12	1
1:A:244:ALA:O	1:A:248:SER:CB	0.43	2.67	14	1
1:A:114:VAL:CG1	1:A:214:VAL:HG21	0.43	2.44	16	1
1:A:189:MET:HB2	1:A:194:ALA:HB2	0.43	1.89	16	1
1:A:148:ALA:HB1	1:A:236:LEU:HD11	0.43	1.91	17	1
1:A:136:THR:C	1:A:140:ASN:ND2	0.43	2.72	1	1
1:A:204:PRO:O	1:A:208:GLN:CB	0.43	2.67	2	1
1:A:182:ARG:O	1:A:186:ASP:CG	0.43	2.57	10	2
1:A:173:GLY:O	1:A:179:THR:OG1	0.43	2.36	14	1
1:A:98:HIS:HA	1:A:101:THR:OG1	0.43	2.14	19	1
1:A:86:ARG:HE	1:A:205:TYR:CB	0.42	2.27	3	1
1:A:155:ALA:C	1:A:157:GLY:H	0.42	2.17	11	3
1:A:206:ALA:O	1:A:208:GLN:N	0.42	2.51	17	2
1:A:112:ARG:O	1:A:113:GLN:C	0.42	2.56	2	1
1:A:123:PHE:CD1	1:A:123:PHE:C	0.42	2.93	3	1
1:A:112:ARG:HE	1:A:218:LEU:CD2	0.42	2.27	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:181:ILE:HD12	1:A:181:ILE:O	0.42	2.14	17	1
1:A:101:THR:O	1:A:102:PRO:C	0.42	2.57	19	1
1:A:186:ASP:O	1:A:190:GLY:CA	0.42	2.66	20	1
1:A:186:ASP:HA	1:A:189:MET:SD	0.42	2.55	2	1
1:A:129:ARG:NH2	1:A:203:GLN:CD	0.42	2.72	6	1
1:A:201:GLU:O	1:A:204:PRO:CD	0.42	2.68	10	2
1:A:175:ASN:HD22	1:A:175:ASN:C	0.42	2.18	12	1
1:A:85:ILE:O	1:A:89:VAL:HG23	0.42	2.14	14	1
1:A:128:ASP:O	1:A:128:ASP:OD1	0.42	2.38	15	1
1:A:203:GLN:NE2	1:A:207:ARG:HH22	0.42	2.13	6	1
1:A:203:GLN:O	1:A:204:PRO:C	0.42	2.57	7	1
1:A:202:LEU:N	1:A:202:LEU:CD1	0.42	2.81	12	1
1:A:140:ASN:C	1:A:141:VAL:CG2	0.42	2.86	1	2
1:A:88:PHE:CD1	1:A:188:LEU:CD1	0.42	3.02	14	1
1:A:100:ARG:O	1:A:104:ILE:CD1	0.42	2.66	9	1
1:A:198:GLU:C	1:A:200:ARG:H	0.42	2.18	13	1
1:A:207:ARG:HH22	1:A:234:GLN:NE2	0.42	2.13	14	2
1:A:178:TYR:O	1:A:181:ILE:HG13	0.42	2.14	15	1
1:A:191:ALA:O	1:A:192:GLU:C	0.42	2.57	18	4
1:A:193:LEU:C	1:A:195:ALA:H	0.42	2.18	20	2
1:A:223:SER:O	1:A:224:ASN:C	0.42	2.57	12	1
1:A:125:GLU:CD	1:A:182:ARG:HH12	0.42	2.18	17	1
1:A:137:ARG:N	1:A:140:ASN:HD22	0.42	2.12	7	1
1:A:218:LEU:H	1:A:218:LEU:HD22	0.42	1.75	17	1
1:A:109:GLU:CG	1:A:110:PHE:N	0.42	2.83	19	1
1:A:203:GLN:OE1	1:A:203:GLN:O	0.42	2.38	20	1
1:A:219:PRO:CD	1:A:222:ARG:HH21	0.42	2.28	20	1
1:A:207:ARG:O	1:A:211:ILE:CG2	0.42	2.67	3	2
1:A:132:MET:O	1:A:133:ASP:C	0.42	2.58	20	2
1:A:122:ILE:HG23	1:A:207:ARG:NH1	0.42	2.30	9	1
1:A:96:VAL:HG13	1:A:100:ARG:NH2	0.42	2.30	10	1
1:A:205:TYR:C	1:A:207:ARG:N	0.42	2.72	13	1
1:A:221:GLU:O	1:A:222:ARG:C	0.42	2.57	18	1
1:A:188:LEU:N	1:A:188:LEU:HD22	0.42	2.30	20	1
1:A:181:ILE:HG13	1:A:182:ARG:N	0.42	2.30	3	1
1:A:202:LEU:O	1:A:202:LEU:CD1	0.42	2.68	5	1
1:A:192:GLU:H	1:A:192:GLU:CD	0.42	2.16	17	1
1:A:121:ALA:CB	1:A:175:ASN:HD21	0.41	2.27	2	1
1:A:107:ASP:O	1:A:107:ASP:OD1	0.41	2.38	4	1
1:A:157:GLY:O	1:A:158:LEU:O	0.41	2.38	13	1
1:A:207:ARG:NH2	1:A:234:GLN:HE21	0.41	2.13	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:ALA:HB2	1:A:193:LEU:HB3	0.41	1.92	17	1
1:A:242:ARG:NH1	1:A:246:ASP:CG	0.41	2.74	2	1
1:A:136:THR:C	1:A:138:ALA:H	0.41	2.17	4	1
1:A:115:TYR:CD1	1:A:115:TYR:C	0.41	2.93	10	2
1:A:218:LEU:HD13	1:A:222:ARG:HG3	0.41	1.91	8	1
1:A:80:ASP:O	1:A:83:GLN:N	0.41	2.46	19	1
1:A:102:PRO:O	1:A:106:GLN:CB	0.41	2.68	13	2
1:A:107:ASP:O	1:A:108:ALA:O	0.41	2.39	5	1
1:A:216:ASN:O	1:A:216:ASN:OD1	0.41	2.37	11	1
1:A:135:ALA:C	1:A:136:THR:OG1	0.41	2.58	17	2
1:A:213:LEU:N	1:A:213:LEU:HD12	0.41	2.30	19	1
1:A:204:PRO:O	1:A:205:TYR:C	0.41	2.59	16	1
1:A:114:VAL:O	1:A:118:THR:CB	0.41	2.68	3	1
1:A:136:THR:O	1:A:137:ARG:C	0.41	2.58	8	2
1:A:235:THR:O	1:A:239:THR:HG23	0.41	2.16	15	1
1:A:177:LEU:HD23	1:A:177:LEU:C	0.41	2.36	8	1
1:A:207:ARG:NH2	1:A:234:GLN:CD	0.41	2.74	14	1
1:A:142:ARG:O	1:A:143:PRO:C	0.41	2.59	2	2
1:A:174:THR:O	1:A:179:THR:OG1	0.41	2.37	8	1
1:A:108:ALA:C	1:A:112:ARG:HH12	0.41	2.18	10	1
1:A:86:ARG:NH2	1:A:203:GLN:O	0.41	2.54	15	1
1:A:81:ALA:H	1:A:196:ARG:HH12	0.41	1.56	19	1
1:A:86:ARG:NH2	1:A:205:TYR:CD2	0.41	2.87	20	1
1:A:91:GLU:O	1:A:92:ALA:C	0.41	2.59	1	2
1:A:174:THR:O	1:A:175:ASN:CG	0.41	2.59	5	1
1:A:112:ARG:CD	1:A:218:LEU:CD2	0.41	2.99	6	1
1:A:85:ILE:HD11	1:A:189:MET:HE2	0.41	1.92	19	1
1:A:203:GLN:OE1	1:A:234:GLN:CD	0.41	2.59	19	1
1:A:236:LEU:O	1:A:237:GLU:C	0.41	2.59	19	1
1:A:90:ASP:C	1:A:92:ALA:N	0.41	2.74	8	1
1:A:177:LEU:O	1:A:178:TYR:C	0.41	2.59	12	1
1:A:86:ARG:CG	1:A:205:TYR:CD1	0.41	3.04	14	1
1:A:135:ALA:O	1:A:140:ASN:CG	0.41	2.59	18	1
1:A:90:ASP:CG	1:A:205:TYR:OH	0.41	2.60	19	1
1:A:82:LYS:O	1:A:202:LEU:CD1	0.41	2.69	2	1
1:A:130:PHE:CZ	1:A:136:THR:CG2	0.40	3.04	5	1
1:A:211:ILE:O	1:A:215:ALA:CB	0.40	2.69	6	1
1:A:177:LEU:C	1:A:179:THR:N	0.40	2.73	11	1
1:A:192:GLU:O	1:A:195:ALA:CA	0.40	2.69	20	1
1:A:113:GLN:O	1:A:114:VAL:C	0.40	2.59	8	1
1:A:212:ASP:OD1	1:A:212:ASP:O	0.40	2.39	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:129:ARG:HH22	1:A:241:ARG:CZ	0.40	2.29	11	1
1:A:81:ALA:O	1:A:82:LYS:C	0.40	2.60	17	1
1:A:174:THR:C	1:A:179:THR:OG1	0.40	2.59	17	1
1:A:110:PHE:O	1:A:110:PHE:CG	0.40	2.74	18	1
1:A:205:TYR:N	1:A:205:TYR:HD1	0.40	2.13	20	1
1:A:200:ARG:HH21	1:A:241:ARG:CZ	0.40	2.29	1	1
1:A:209:GLN:O	1:A:212:ASP:CB	0.40	2.70	6	1
1:A:173:GLY:O	1:A:174:THR:O	0.40	2.39	9	1
1:A:192:GLU:C	1:A:194:ALA:N	0.40	2.75	16	1
1:A:86:ARG:HH21	1:A:87:HIS:CE1	0.40	2.34	17	1
1:A:115:TYR:CD2	1:A:222:ARG:NH1	0.40	2.89	17	1
1:A:235:THR:O	1:A:239:THR:OG1	0.40	2.29	17	1
1:A:129:ARG:HH11	1:A:200:ARG:HH11	0.40	1.59	9	1
1:A:144:ALA:HB1	1:A:240:TYR:CE1	0.40	2.51	12	1
1:A:177:LEU:O	1:A:179:THR:N	0.40	2.54	12	1
1:A:214:VAL:O	1:A:218:LEU:CD2	0.40	2.69	12	1
1:A:197:PRO:O	1:A:200:ARG:CG	0.40	2.70	16	1
1:A:129:ARG:NH1	1:A:203:GLN:CD	0.40	2.75	4	1
1:A:115:TYR:CD2	1:A:226:LEU:HD11	0.40	2.51	13	1
1:A:129:ARG:NH1	1:A:203:GLN:NE2	0.40	2.69	15	1
1:A:136:THR:O	1:A:140:ASN:CG	0.40	2.60	19	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	161/186 (87%)	122±4 (76±2%)	27±3 (17±2%)	12±3 (7±2%)	2	15
All	All	3220/3720 (87%)	2436 (76%)	547 (17%)	237 (7%)	2	15

All 48 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	202	LEU	19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	190	GLY	17
1	A	141	VAL	15
1	A	84	ALA	11
1	A	81	ALA	11
1	A	221	GLU	11
1	A	175	ASN	10
1	A	205	TYR	10
1	A	108	ALA	8
1	A	219	PRO	8
1	A	109	GLU	7
1	A	173	GLY	7
1	A	189	MET	7
1	A	194	ALA	7
1	A	192	GLU	7
1	A	191	ALA	7
1	A	138	ALA	6
1	A	160	GLY	6
1	A	137	ARG	5
1	A	196	ARG	4
1	A	136	THR	4
1	A	220	ALA	4
1	A	169	PRO	3
1	A	222	ARG	3
1	A	85	ILE	3
1	A	193	LEU	3
1	A	139	GLY	2
1	A	174	THR	2
1	A	204	PRO	2
1	A	158	LEU	2
1	A	206	ALA	2
1	A	176	PRO	2
1	A	200	ARG	2
1	A	159	PRO	2
1	A	80	ASP	2
1	A	134	PRO	2
1	A	135	ALA	2
1	A	198	GLU	2
1	A	213	LEU	1
1	A	197	PRO	1
1	A	151	ASP	1
1	A	217	ALA	1
1	A	110	PHE	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	177	LEU	1
1	A	207	ARG	1
1	A	140	ASN	1
1	A	241	ARG	1
1	A	114	VAL	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	124/138 (90%)	114±2 (92±1%)	10±2 (8±1%)	16 63
All	All	2480/2760 (90%)	2283 (92%)	197 (8%)	16 63

All 42 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	110	PHE	18
1	A	189	MET	17
1	A	141	VAL	17
1	A	85	ILE	14
1	A	184	ARG	13
1	A	175	ASN	10
1	A	202	LEU	10
1	A	181	ILE	8
1	A	112	ARG	8
1	A	101	THR	8
1	A	218	LEU	7
1	A	205	TYR	7
1	A	168	THR	4
1	A	89	VAL	4
1	A	142	ARG	4
1	A	203	GLN	4
1	A	193	LEU	3
1	A	234	GLN	3
1	A	196	ARG	3
1	A	177	LEU	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	199	TYR	3
1	A	198	GLU	3
1	A	223	SER	2
1	A	182	ARG	2
1	A	167	PHE	2
1	A	158	LEU	2
1	A	178	TYR	2
1	A	136	THR	2
1	A	100	ARG	1
1	A	174	THR	1
1	A	208	GLN	1
1	A	242	ARG	1
1	A	137	ARG	1
1	A	188	LEU	1
1	A	115	TYR	1
1	A	93	VAL	1
1	A	113	GLN	1
1	A	125	GLU	1
1	A	230	ARG	1
1	A	232	THR	1
1	A	140	ASN	1
1	A	236	LEU	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 monosaccharides 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