Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Mar 5, 2022 – 11:27 AM EST

PDB ID	:	2JUA
Title	:	Assignment, structure, and dynamics of de novo designed protein S836
Authors	:	Go, A.; Kim, S.; Baum, J.S.; Hecht, M.H.
Deposited on	:	2007-08-16

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 (i) symbol.

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

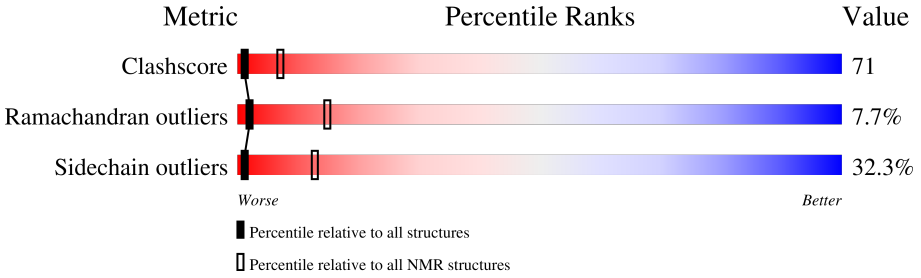
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
ShiftChecker	:	2.27
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)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

1 Overall quality at a glance (i)

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 <=5%

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	102	11% 68% 20% .

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 20 models. Model 13 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:3-A:102 (100)	0.28	13

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

3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1650 atoms, of which 812 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called de novo protein S836.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	102	1650	519	812	154	160	5	0

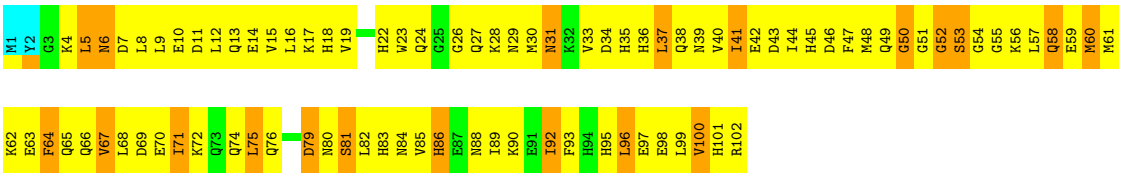
4 Residue-property plots (i)

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: de novo protein S836

Chain A: 11% 68% 20%



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

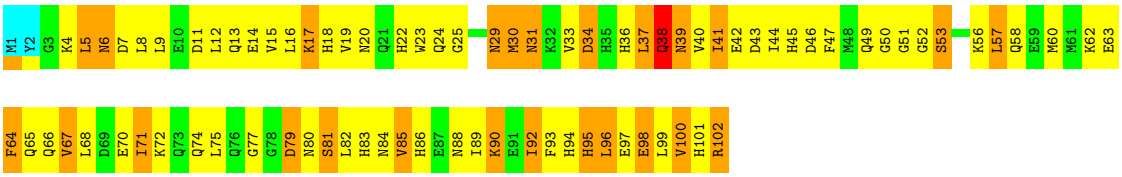
• Molecule 1: de novo protein S836

Chain A: 13% 62% 24%

4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: de novo protein S836

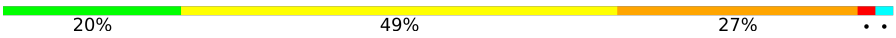
Chain A: 19% 54% 25%

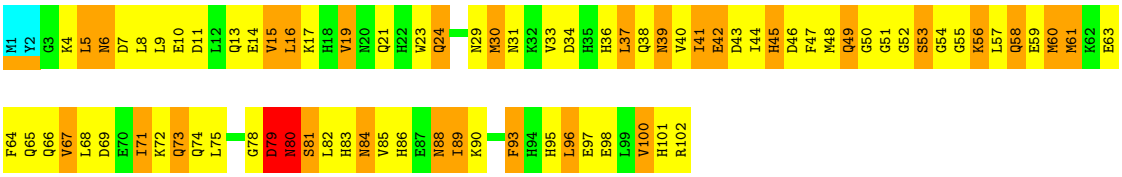


4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: de novo protein S836

Chain A:

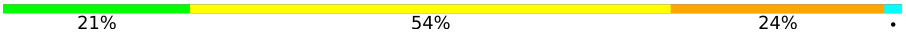


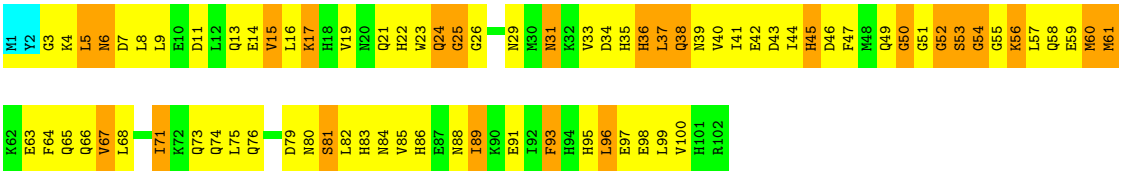


4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: de novo protein S836

Chain A:

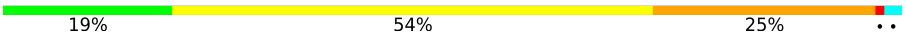




4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: de novo protein S836

Chain A:



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: de novo protein S836

Chain A: 11% 63% 25%

M1 Y2 G3 K4 L5 N6 D7 L8 L9 E10 D11 L12 Q13 E14 V15 L16 K17 H18 V19 N20 Q21 H22 W23 Q24 G25 G26 Q27 K28 N29 M30 N31 K32 V33 D34 H35 H36 L37 Q38 N39 V40 I41 E42 D43 I44 H45 D46 F47 M48 Q49 G50 G51 G52 S53 G54 G55 K56 L57 Q58 E59 M60

M61 K62 E63 F64 Q65 Q66 V67 L68 D69 E70 I71 K72 Q73 Q74 L75 Q76 G77 G78 D79 N80 S81 L82 H83 N84 V85 H86 E87 N88 I89 K90 E91 I92 F93 L96 E97 E98 L99 V100 H101 R102

4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: de novo protein S836

Chain A: 15% 58% 25%

M1 Y2 G3 K4 L5 N6 D7 L8 L9 E10 D11 L12 Q13 E14 V15 L16 K17 H18 V19 N20 Q21 H22 W23 Q24 G25 G26 Q27 K28 N29 M30 N31 K32 V33 D34 H35 H36 L37 Q38 N39 V40 I41 E42 D43 I44 H45 D46 F47 M48 Q49 G50 G51 G52 S53 G54 G55 K56 L57 Q58 E59 M60

M61 K62 E63 F64 Q65 Q66 V67 L68 D69 E70 I71 K72 Q73 Q74 L75 Q76 G77 G78 D79 N80 S81 L82 H83 N84 V85 H86 E87 N88 I89 K90 E91 I92 F93 H94 H95 L96 E97 E98 L99 V100 H101 R102

4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: de novo protein S836

Chain A: 18% 59% 21%

M1 Y2 G3 K4 L5 N6 D7 L8 L9 E10 D11 L12 Q13 E14 V15 L16 K17 H18 V19 H22 W23 Q24 K28 N29 M30 N31 K32 V33 D34 H35 H36 L37 Q38 N39 V40 I41 E42 D43 I44 H45 D46 F47 M48 Q49 G50 G51 G52 S53 G54 G55 K56 L57 Q58 E59 M60 M61 K62 E63

F64 Q65 Q66 V67 L68 D69 E70 I71 K72 Q73 Q74 L75 Q76 D79 N80 S81 L82 H83 N84 V85 H86 E87 N88 I89 K90 E91 I92 F93 H94 H95 L96 E97 E98 L99 V100 H101 R102

4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: de novo protein S836

Chain A: 20% 49% 28%

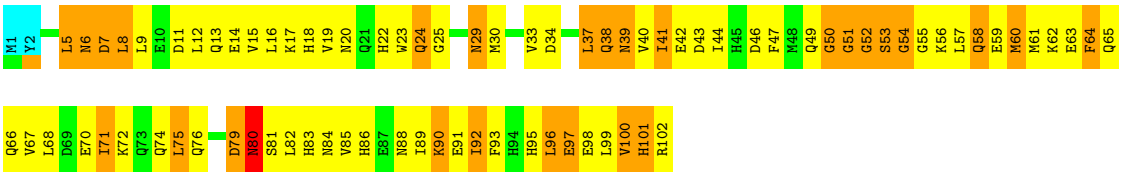
M1 Y2 G3 K4 L5 N6 D7 L8 L9 E10 D11 L12 Q13 E14 V15 L16 K17 H22 W23 Q24 N29 M30 N31 K32 V33 D34 H35 H36 L37 Q38 N39 V40 I41 E42 D43 I44 H45 D46 F47 M48 Q49 G50 G51 G52 S53 G54 G55 K56 L57 Q58 E59 M60 M61 K62 E63 F64 Q65 Q66

V67 L68 D69 E70 I71 Q74 L75 Q76 G77 G78 D79 N80 S81 L82 H83 N84 V85 H86 E87 N88 I89 K90 E91 I92 F93 H94 H95 L96 E97 E98 L99 V100 H101 R102

4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: de novo protein S836

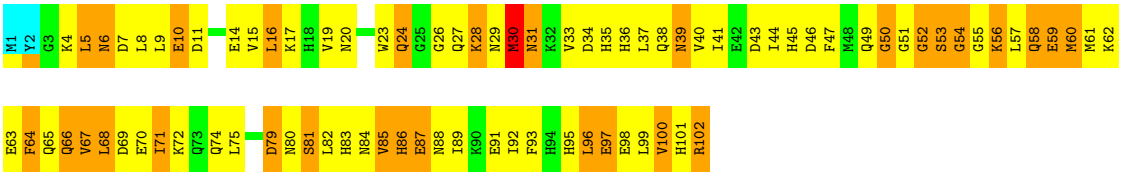
Chain A: 19% 52% 26%



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: de novo protein S836

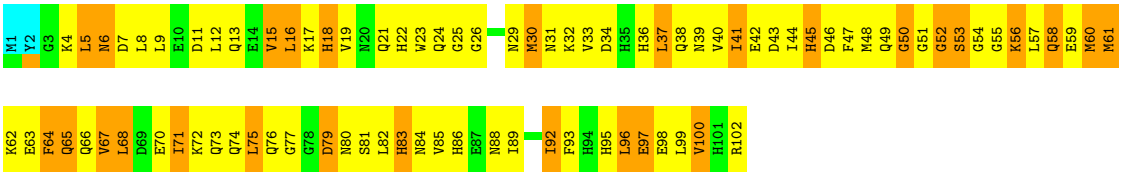
Chain A: 16% 52% 29%



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: de novo protein S836

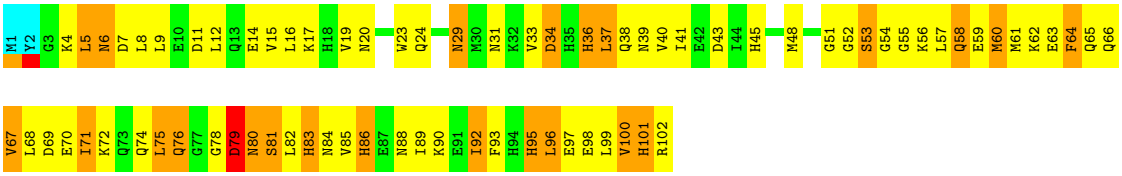
Chain A: 14% 57% 27%



4.2.13 Score per residue for model 13 (medoid)

- Molecule 1: de novo protein S836

Chain A: 24% 51% 23%



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: de novo protein S836

Chain A: 17% 59% 23%

4.2.15 Score per residue for model 15

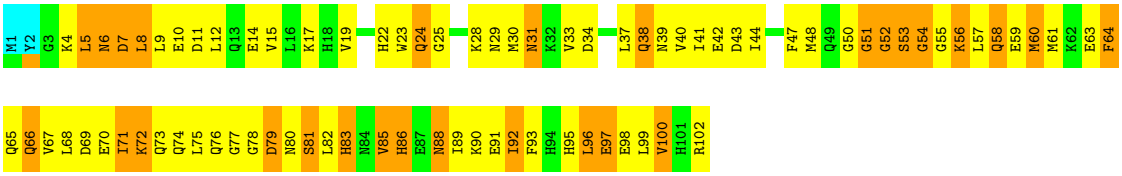
- Molecule 1: de novo protein S836

Chain A: 17% 51% 29%

4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: de novo protein S836

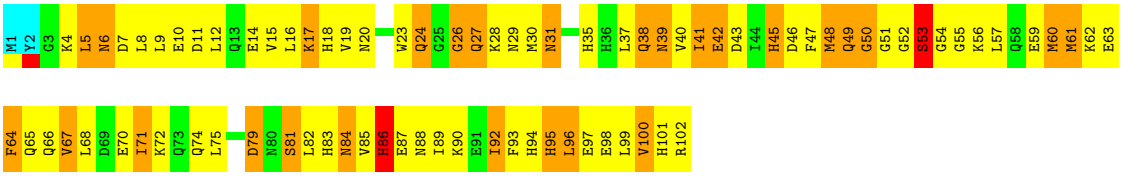
Chain A: 19% 52% 27%



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: de novo protein S836

Chain A: 18% 52% 26%



4.2.18 Score per residue for model 18

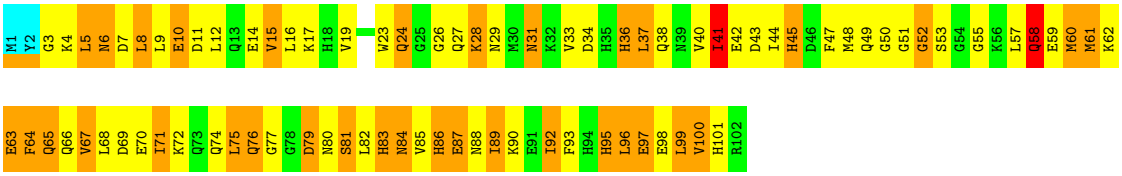
- Molecule 1: de novo protein S836

Chain A: 20% 57% 22%

4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: de novo protein S836

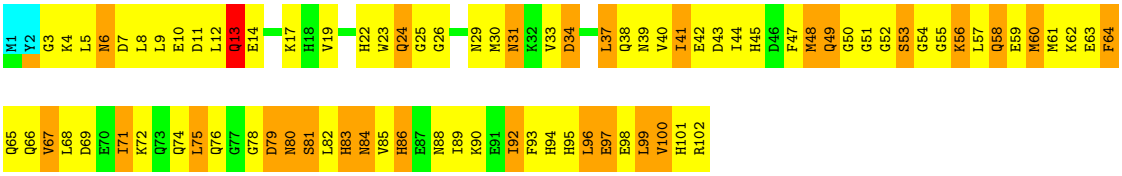
Chain A: 18% 45% 33%



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: de novo protein S836

Chain A: 16% 55% 26%



5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

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

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	
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.

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	818	792	782	114±11
All	All	16360	15840	15640	2270

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 71.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:LEU:O	1:A:16:LEU:HD12	0.92	1.63	3	9
1:A:57:LEU:HD12	1:A:100:VAL:HG11	0.90	1.44	2	4
1:A:29:ASN:O	1:A:33:VAL:HG22	0.87	1.69	13	14
1:A:23:TRP:CH2	1:A:33:VAL:HG21	0.86	2.04	14	7
1:A:5:LEU:H	1:A:5:LEU:HD22	0.83	1.32	20	8
1:A:12:LEU:HD11	1:A:37:LEU:HD21	0.82	1.50	5	9
1:A:68:LEU:C	1:A:68:LEU:HD13	0.81	1.96	18	14
1:A:64:PHE:CD1	1:A:93:PHE:CD2	0.80	2.69	3	3
1:A:68:LEU:C	1:A:68:LEU:HD12	0.78	1.99	11	2
1:A:57:LEU:HD12	1:A:96:LEU:HD22	0.77	1.56	19	3
1:A:23:TRP:NE1	1:A:74:GLN:NE2	0.77	2.32	1	18
1:A:57:LEU:C	1:A:57:LEU:HD23	0.77	1.99	6	18
1:A:49:GLN:NE2	1:A:50:GLY:N	0.77	2.32	11	4
1:A:88:ASN:ND2	1:A:89:ILE:N	0.75	2.34	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:61:MET:SD	1:A:62:LYS:N	0.75	2.60	5	4
1:A:37:LEU:CD1	1:A:67:VAL:HG11	0.75	2.11	3	3
1:A:16:LEU:HD12	1:A:16:LEU:C	0.75	2.02	3	5
1:A:71:ILE:HG22	1:A:82:LEU:HD23	0.74	1.55	2	15
1:A:37:LEU:HD12	1:A:37:LEU:H	0.74	1.42	11	3
1:A:23:TRP:HE1	1:A:74:GLN:NE2	0.74	1.80	20	17
1:A:23:TRP:CH2	1:A:33:VAL:HG11	0.74	2.18	6	6
1:A:40:VAL:HG11	1:A:64:PHE:CD2	0.74	2.18	5	7
1:A:36:HIS:O	1:A:40:VAL:HG23	0.74	1.83	7	8
1:A:11:ASP:CG	1:A:92:ILE:HD11	0.74	2.03	8	3
1:A:30:MET:SD	1:A:31:ASN:ND2	0.73	2.61	11	5
1:A:64:PHE:CD2	1:A:93:PHE:CD1	0.73	2.76	6	12
1:A:49:GLN:H	1:A:49:GLN:HE21	0.72	1.27	14	2
1:A:29:ASN:O	1:A:33:VAL:HG13	0.72	1.85	4	6
1:A:31:ASN:HD22	1:A:31:ASN:N	0.72	1.83	15	13
1:A:57:LEU:CD1	1:A:96:LEU:HD22	0.72	2.15	19	9
1:A:65:GLN:HE22	1:A:66:GLN:NE2	0.72	1.81	9	1
1:A:75:LEU:HD22	1:A:75:LEU:N	0.71	2.01	12	12
1:A:49:GLN:HE21	1:A:50:GLY:N	0.70	1.84	19	2
1:A:68:LEU:HD12	1:A:68:LEU:O	0.70	1.86	11	2
1:A:49:GLN:HE21	1:A:49:GLN:N	0.70	1.84	14	3
1:A:84:ASN:ND2	1:A:84:ASN:N	0.70	2.38	18	2
1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:ND2	0.70	2.38	2	12
1:A:24:GLN:O	1:A:74:GLN:NE2	0.70	2.25	8	14
1:A:84:ASN:OD1	1:A:85:VAL:N	0.70	2.25	7	1
1:A:6:ASN:OD1	1:A:7:ASP:N	0.70	2.25	8	1
1:A:45:HIS:O	1:A:49:GLN:NE2	0.70	2.25	8	6
1:A:12:LEU:HD11	1:A:37:LEU:CD2	0.69	2.18	12	11
1:A:3:GLY:O	1:A:6:ASN:ND2	0.69	2.26	18	3
1:A:5:LEU:O	1:A:8:LEU:N	0.69	2.25	18	20
1:A:33:VAL:HG23	1:A:34:ASP:N	0.69	2.01	11	11
1:A:24:GLN:OE1	1:A:25:GLY:N	0.69	2.25	4	2
1:A:25:GLY:O	1:A:74:GLN:NE2	0.69	2.26	14	1
1:A:40:VAL:O	1:A:42:GLU:N	0.69	2.26	10	12
1:A:65:GLN:NE2	1:A:66:GLN:NE2	0.69	2.41	9	1
1:A:9:LEU:C	1:A:9:LEU:HD23	0.68	2.08	9	13
1:A:36:HIS:CG	1:A:63:GLU:OE1	0.68	2.46	8	1
1:A:57:LEU:O	1:A:59:GLU:N	0.68	2.26	13	19
1:A:86:HIS:CD2	1:A:86:HIS:O	0.68	2.46	17	5
1:A:49:GLN:O	1:A:51:GLY:N	0.68	2.26	20	17
1:A:4:LYS:O	1:A:7:ASP:N	0.68	2.26	5	19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:37:LEU:O	1:A:40:VAL:N	0.68	2.27	1	19
1:A:53:SER:O	1:A:55:GLY:N	0.68	2.27	10	17
1:A:18:HIS:O	1:A:22:HIS:CD2	0.68	2.46	12	1
1:A:49:GLN:NE2	1:A:49:GLN:H	0.68	1.86	9	2
1:A:26:GLY:H	1:A:74:GLN:NE2	0.68	1.87	5	3
1:A:14:GLU:O	1:A:17:LYS:N	0.68	2.27	8	19
1:A:57:LEU:HD12	1:A:100:VAL:CG1	0.68	2.19	2	1
1:A:74:GLN:O	1:A:76:GLN:N	0.68	2.27	19	10
1:A:22:HIS:ND1	1:A:81:SER:CB	0.68	2.56	5	4
1:A:33:VAL:HG12	1:A:70:GLU:CD	0.68	2.09	8	2
1:A:47:PHE:CZ	1:A:100:VAL:HG12	0.68	2.24	16	8
1:A:79:ASP:OD1	1:A:79:ASP:N	0.67	2.27	15	13
1:A:40:VAL:O	1:A:43:ASP:N	0.67	2.27	3	20
1:A:46:ASP:OD1	1:A:49:GLN:NE2	0.67	2.27	11	1
1:A:82:LEU:O	1:A:86:HIS:N	0.67	2.27	4	20
1:A:37:LEU:O	1:A:39:ASN:N	0.67	2.28	10	11
1:A:33:VAL:O	1:A:36:HIS:N	0.67	2.27	9	7
1:A:8:LEU:HD11	1:A:95:HIS:HB3	0.67	1.65	9	13
1:A:29:ASN:O	1:A:31:ASN:N	0.67	2.28	3	7
1:A:46:ASP:OD2	1:A:49:GLN:NE2	0.67	2.26	15	1
1:A:19:VAL:HG23	1:A:85:VAL:HG11	0.66	1.65	18	10
1:A:101:HIS:O	1:A:101:HIS:ND1	0.66	2.29	8	2
1:A:6:ASN:ND2	1:A:7:ASP:OD1	0.66	2.28	13	1
1:A:24:GLN:OE1	1:A:78:GLY:N	0.66	2.29	1	2
1:A:6:ASN:HD22	1:A:7:ASP:N	0.66	1.88	3	1
1:A:60:MET:SD	1:A:61:MET:N	0.66	2.68	20	12
1:A:40:VAL:HG13	1:A:60:MET:SD	0.66	2.31	14	9
1:A:65:GLN:NE2	1:A:93:PHE:CE2	0.66	2.64	17	2
1:A:6:ASN:ND2	1:A:7:ASP:N	0.65	2.43	3	5
1:A:9:LEU:HD21	1:A:41:ILE:CG2	0.65	2.21	5	2
1:A:68:LEU:HD12	1:A:69:ASP:N	0.65	2.06	15	2
1:A:8:LEU:HD11	1:A:95:HIS:CB	0.65	2.22	9	9
1:A:57:LEU:HD11	1:A:96:LEU:HD22	0.65	1.68	4	2
1:A:26:GLY:H	1:A:74:GLN:HE21	0.65	1.35	7	2
1:A:9:LEU:HD23	1:A:10:GLU:N	0.65	2.07	19	5
1:A:9:LEU:HD23	1:A:9:LEU:C	0.64	2.12	19	2
1:A:37:LEU:HD12	1:A:37:LEU:N	0.64	2.08	11	3
1:A:60:MET:C	1:A:60:MET:SD	0.64	2.76	6	11
1:A:62:LYS:O	1:A:66:GLN:NE2	0.64	2.31	11	1
1:A:23:TRP:HE1	1:A:74:GLN:HE21	0.64	1.31	13	2
1:A:61:MET:C	1:A:61:MET:SD	0.64	2.76	12	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:GLY:O	1:A:52:GLY:N	0.64	2.31	16	8
1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:HD22	0.64	1.90	2	3
1:A:60:MET:SD	1:A:60:MET:C	0.63	2.77	12	6
1:A:11:ASP:OD1	1:A:92:ILE:HD11	0.63	1.92	8	1
1:A:20:ASN:CG	1:A:30:MET:SD	0.63	2.77	10	1
1:A:63:GLU:O	1:A:67:VAL:HG23	0.63	1.93	2	9
1:A:19:VAL:O	1:A:23:TRP:N	0.63	2.30	7	2
1:A:57:LEU:HD13	1:A:100:VAL:HG11	0.63	1.70	4	3
1:A:96:LEU:O	1:A:98:GLU:N	0.63	2.31	6	20
1:A:12:LEU:HD22	1:A:64:PHE:CZ	0.63	2.29	17	7
1:A:65:GLN:C	1:A:65:GLN:NE2	0.62	2.52	12	4
1:A:30:MET:SD	1:A:30:MET:C	0.62	2.78	12	2
1:A:81:SER:O	1:A:84:ASN:ND2	0.62	2.31	9	2
1:A:26:GLY:O	1:A:29:ASN:ND2	0.62	2.33	15	1
1:A:100:VAL:O	1:A:102:ARG:N	0.61	2.32	6	8
1:A:26:GLY:O	1:A:28:LYS:N	0.61	2.33	17	5
1:A:76:GLN:NE2	1:A:76:GLN:N	0.61	2.47	7	1
1:A:83:HIS:ND1	1:A:87:GLU:OE2	0.61	2.31	19	1
1:A:97:GLU:O	1:A:101:HIS:CG	0.61	2.53	11	2
1:A:22:HIS:CG	1:A:81:SER:CB	0.61	2.83	1	1
1:A:23:TRP:CD1	1:A:24:GLN:N	0.61	2.68	2	10
1:A:6:ASN:ND2	1:A:6:ASN:C	0.61	2.54	6	3
1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:OD1	0.61	2.32	17	2
1:A:5:LEU:H	1:A:5:LEU:CD2	0.61	2.08	20	1
1:A:89:ILE:O	1:A:93:PHE:N	0.61	2.32	20	13
1:A:33:VAL:CG2	1:A:34:ASP:N	0.61	2.64	6	10
1:A:88:ASN:CG	1:A:89:ILE:N	0.61	2.54	7	2
1:A:22:HIS:CE1	1:A:81:SER:HG	0.61	2.14	20	3
1:A:5:LEU:HD22	1:A:5:LEU:N	0.61	2.08	20	1
1:A:88:ASN:OD1	1:A:88:ASN:N	0.60	2.33	16	4
1:A:24:GLN:CB	1:A:79:ASP:OD2	0.60	2.49	3	8
1:A:57:LEU:HD23	1:A:57:LEU:O	0.60	1.96	17	5
1:A:75:LEU:HD22	1:A:75:LEU:H	0.60	1.56	12	1
1:A:92:ILE:HG22	1:A:93:PHE:N	0.60	2.12	7	15
1:A:94:HIS:O	1:A:94:HIS:CD2	0.60	2.54	2	2
1:A:18:HIS:CG	1:A:18:HIS:O	0.60	2.55	6	1
1:A:57:LEU:HD23	1:A:57:LEU:C	0.60	2.17	17	1
1:A:24:GLN:O	1:A:26:GLY:N	0.60	2.35	4	3
1:A:12:LEU:O	1:A:14:GLU:N	0.60	2.34	20	1
1:A:53:SER:O	1:A:56:LYS:N	0.60	2.35	1	10
1:A:57:LEU:C	1:A:59:GLU:N	0.60	2.55	13	19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:LEU:HD21	1:A:41:ILE:HG23	0.60	1.72	5	1
1:A:23:TRP:NE1	1:A:74:GLN:CD	0.59	2.55	5	6
1:A:68:LEU:HD13	1:A:68:LEU:O	0.59	1.96	7	13
1:A:57:LEU:C	1:A:57:LEU:CD2	0.59	2.71	6	19
1:A:85:VAL:O	1:A:88:ASN:N	0.59	2.35	17	2
1:A:64:PHE:CE1	1:A:93:PHE:CD2	0.59	2.90	9	3
1:A:49:GLN:CD	1:A:50:GLY:N	0.59	2.56	4	2
1:A:44:ILE:HG23	1:A:96:LEU:HD11	0.59	1.74	19	3
1:A:60:MET:O	1:A:64:PHE:N	0.59	2.34	15	1
1:A:41:ILE:HA	1:A:44:ILE:HD12	0.59	1.73	2	3
1:A:40:VAL:HG13	1:A:60:MET:HB2	0.59	1.75	2	4
1:A:33:VAL:HG12	1:A:70:GLU:OE2	0.59	1.97	1	1
1:A:96:LEU:C	1:A:98:GLU:H	0.59	2.02	6	19
1:A:65:GLN:NE2	1:A:65:GLN:C	0.59	2.55	9	1
1:A:11:ASP:O	1:A:15:VAL:CG1	0.58	2.51	18	14
1:A:88:ASN:ND2	1:A:88:ASN:C	0.58	2.55	3	1
1:A:31:ASN:O	1:A:35:HIS:CE1	0.58	2.56	18	1
1:A:69:ASP:O	1:A:69:ASP:OD1	0.58	2.21	9	3
1:A:36:HIS:ND1	1:A:66:GLN:NE2	0.58	2.52	15	1
1:A:23:TRP:CD1	1:A:74:GLN:NE2	0.58	2.71	6	3
1:A:85:VAL:O	1:A:88:ASN:OD1	0.58	2.21	3	2
1:A:74:GLN:O	1:A:79:ASP:OD2	0.58	2.21	6	8
1:A:22:HIS:O	1:A:79:ASP:OD1	0.58	2.22	1	2
1:A:23:TRP:HE1	1:A:74:GLN:CD	0.58	2.02	5	4
1:A:71:ILE:O	1:A:74:GLN:N	0.58	2.37	15	11
1:A:64:PHE:CE1	1:A:93:PHE:CG	0.58	2.91	9	3
1:A:24:GLN:O	1:A:74:GLN:OE1	0.58	2.22	4	2
1:A:79:ASP:O	1:A:81:SER:N	0.58	2.36	10	17
1:A:12:LEU:HD12	1:A:12:LEU:O	0.58	1.98	10	3
1:A:96:LEU:C	1:A:98:GLU:N	0.58	2.57	6	20
1:A:49:GLN:C	1:A:51:GLY:N	0.58	2.57	8	17
1:A:81:SER:O	1:A:84:ASN:OD1	0.58	2.22	7	1
1:A:68:LEU:C	1:A:68:LEU:CD1	0.58	2.72	13	16
1:A:36:HIS:O	1:A:63:GLU:OE1	0.58	2.21	2	1
1:A:22:HIS:ND1	1:A:81:SER:OG	0.58	2.36	5	4
1:A:61:MET:SD	1:A:61:MET:C	0.58	2.82	5	3
1:A:35:HIS:CE1	1:A:39:ASN:ND2	0.58	2.72	15	1
1:A:47:PHE:O	1:A:47:PHE:CD1	0.57	2.57	6	6
1:A:37:LEU:HD11	1:A:67:VAL:HG11	0.57	1.76	11	4
1:A:66:GLN:O	1:A:69:ASP:OD1	0.57	2.22	3	1
1:A:53:SER:C	1:A:55:GLY:N	0.57	2.57	13	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:LEU:CD2	1:A:41:ILE:HG23	0.57	2.28	5	2
1:A:23:TRP:O	1:A:24:GLN:OE1	0.57	2.22	14	1
1:A:49:GLN:H	1:A:49:GLN:NE2	0.57	1.94	14	1
1:A:88:ASN:O	1:A:91:GLU:N	0.57	2.37	14	3
1:A:5:LEU:O	1:A:6:ASN:C	0.57	2.43	4	20
1:A:5:LEU:CD1	1:A:99:LEU:HD13	0.57	2.30	9	4
1:A:6:ASN:OD1	1:A:6:ASN:N	0.57	2.34	19	2
1:A:49:GLN:C	1:A:51:GLY:H	0.57	2.03	7	17
1:A:49:GLN:NE2	1:A:50:GLY:CA	0.57	2.68	10	3
1:A:7:ASP:O	1:A:11:ASP:OD1	0.57	2.23	5	4
1:A:3:GLY:O	1:A:6:ASN:OD1	0.56	2.23	8	1
1:A:16:LEU:HD13	1:A:37:LEU:HD13	0.56	1.76	1	2
1:A:97:GLU:O	1:A:101:HIS:CD2	0.56	2.58	1	2
1:A:64:PHE:CD1	1:A:93:PHE:CE2	0.56	2.93	9	3
1:A:37:LEU:O	1:A:38:GLN:C	0.56	2.43	2	20
1:A:43:ASP:OD2	1:A:56:LYS:O	0.56	2.22	1	3
1:A:57:LEU:O	1:A:57:LEU:HD23	0.56	2.01	11	13
1:A:81:SER:O	1:A:85:VAL:HG23	0.56	2.00	12	7
1:A:20:ASN:OD1	1:A:30:MET:SD	0.56	2.64	10	1
1:A:67:VAL:O	1:A:70:GLU:N	0.56	2.39	19	6
1:A:64:PHE:CG	1:A:93:PHE:CD1	0.56	2.94	19	7
1:A:16:LEU:C	1:A:16:LEU:CD1	0.56	2.69	3	3
1:A:31:ASN:ND2	1:A:31:ASN:N	0.56	2.53	11	2
1:A:11:ASP:CB	1:A:92:ILE:HD11	0.56	2.30	16	8
1:A:10:GLU:O	1:A:14:GLU:OE1	0.56	2.23	11	1
1:A:57:LEU:C	1:A:59:GLU:H	0.56	2.04	4	19
1:A:91:GLU:O	1:A:95:HIS:CD2	0.56	2.58	14	2
1:A:6:ASN:OD1	1:A:10:GLU:OE2	0.56	2.24	17	1
1:A:29:ASN:O	1:A:30:MET:C	0.56	2.45	11	11
1:A:40:VAL:O	1:A:41:ILE:C	0.55	2.43	9	19
1:A:88:ASN:O	1:A:89:ILE:C	0.55	2.43	10	17
1:A:34:ASP:OD2	1:A:38:GLN:OE1	0.55	2.25	4	1
1:A:44:ILE:HG12	1:A:96:LEU:HD11	0.55	1.77	4	3
1:A:9:LEU:HD11	1:A:45:HIS:CD2	0.55	2.36	4	1
1:A:40:VAL:O	1:A:44:ILE:HD12	0.55	2.00	16	2
1:A:4:LYS:O	1:A:5:LEU:C	0.55	2.45	20	18
1:A:22:HIS:O	1:A:82:LEU:HD13	0.55	2.01	5	7
1:A:23:TRP:CH2	1:A:71:ILE:HG23	0.55	2.36	12	11
1:A:93:PHE:CD1	1:A:93:PHE:O	0.55	2.59	20	5
1:A:10:GLU:O	1:A:14:GLU:OE2	0.55	2.24	17	2
1:A:79:ASP:C	1:A:81:SER:N	0.55	2.60	10	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:HIS:O	1:A:35:HIS:ND1	0.55	2.40	1	1
1:A:35:HIS:ND1	1:A:35:HIS:C	0.55	2.60	1	1
1:A:57:LEU:HD13	1:A:100:VAL:CG1	0.55	2.32	4	1
1:A:24:GLN:C	1:A:74:GLN:NE2	0.55	2.60	19	3
1:A:85:VAL:O	1:A:87:GLU:N	0.55	2.40	17	2
1:A:75:LEU:HD11	1:A:83:HIS:N	0.55	2.16	9	12
1:A:3:GLY:O	1:A:6:ASN:CG	0.55	2.45	1	1
1:A:53:SER:C	1:A:55:GLY:H	0.55	2.05	6	16
1:A:6:ASN:O	1:A:10:GLU:CB	0.55	2.55	9	3
1:A:78:GLY:O	1:A:80:ASN:N	0.55	2.39	7	5
1:A:15:VAL:O	1:A:19:VAL:CG2	0.54	2.55	7	5
1:A:24:GLN:O	1:A:79:ASP:OD2	0.54	2.26	11	3
1:A:101:HIS:CD2	1:A:101:HIS:O	0.54	2.61	20	2
1:A:7:ASP:O	1:A:11:ASP:CG	0.54	2.45	1	6
1:A:12:LEU:C	1:A:14:GLU:N	0.54	2.61	20	2
1:A:65:GLN:CD	1:A:65:GLN:O	0.54	2.46	5	2
1:A:76:GLN:N	1:A:76:GLN:HE21	0.54	2.00	7	1
1:A:52:GLY:O	1:A:53:SER:C	0.54	2.46	17	2
1:A:62:LYS:O	1:A:66:GLN:CG	0.54	2.55	12	11
1:A:58:GLN:NE2	1:A:97:GLU:OE1	0.54	2.41	10	2
1:A:29:ASN:C	1:A:31:ASN:N	0.54	2.59	3	6
1:A:71:ILE:O	1:A:73:GLN:N	0.54	2.40	16	3
1:A:24:GLN:NE2	1:A:25:GLY:H	0.54	1.99	20	1
1:A:11:ASP:HB3	1:A:92:ILE:HD11	0.54	1.79	5	5
1:A:82:LEU:CD1	1:A:82:LEU:N	0.54	2.70	6	6
1:A:94:HIS:O	1:A:94:HIS:CG	0.54	2.60	2	2
1:A:97:GLU:O	1:A:101:HIS:CB	0.54	2.55	18	1
1:A:7:ASP:OD1	1:A:11:ASP:OD2	0.54	2.26	20	1
1:A:65:GLN:C	1:A:65:GLN:HE21	0.54	2.06	9	3
1:A:61:MET:CG	1:A:62:LYS:N	0.54	2.71	10	2
1:A:79:ASP:C	1:A:81:SER:H	0.53	2.07	7	15
1:A:5:LEU:O	1:A:9:LEU:N	0.53	2.40	9	6
1:A:34:ASP:O	1:A:34:ASP:OD1	0.53	2.26	3	3
1:A:50:GLY:C	1:A:52:GLY:H	0.53	2.06	14	9
1:A:18:HIS:O	1:A:22:HIS:ND1	0.53	2.41	14	1
1:A:60:MET:O	1:A:61:MET:C	0.53	2.46	4	9
1:A:60:MET:O	1:A:63:GLU:N	0.53	2.41	13	7
1:A:63:GLU:O	1:A:66:GLN:N	0.53	2.37	16	2
1:A:26:GLY:C	1:A:28:LYS:H	0.53	2.06	17	8
1:A:74:GLN:O	1:A:79:ASP:CG	0.53	2.47	10	5
1:A:39:ASN:OD1	1:A:39:ASN:O	0.53	2.26	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:GLN:NE2	1:A:50:GLY:H	0.53	2.01	11	1
1:A:57:LEU:CD2	1:A:58:GLN:NE2	0.53	2.71	19	1
1:A:29:ASN:OD1	1:A:74:GLN:NE2	0.53	2.41	4	1
1:A:11:ASP:O	1:A:11:ASP:OD1	0.53	2.26	13	2
1:A:95:HIS:O	1:A:98:GLU:CB	0.53	2.57	15	2
1:A:3:GLY:O	1:A:4:LYS:C	0.53	2.45	20	4
1:A:40:VAL:C	1:A:42:GLU:N	0.53	2.61	10	7
1:A:74:GLN:O	1:A:75:LEU:C	0.53	2.46	16	3
1:A:16:LEU:O	1:A:16:LEU:CD1	0.53	2.50	15	1
1:A:74:GLN:C	1:A:76:GLN:H	0.53	2.08	20	11
1:A:23:TRP:HE1	1:A:29:ASN:ND2	0.53	2.02	15	1
1:A:23:TRP:CZ2	1:A:33:VAL:HG11	0.53	2.39	6	1
1:A:29:ASN:N	1:A:29:ASN:OD1	0.52	2.41	10	4
1:A:96:LEU:O	1:A:99:LEU:N	0.52	2.40	4	1
1:A:15:VAL:O	1:A:19:VAL:HG23	0.52	2.04	19	2
1:A:36:HIS:CE1	1:A:66:GLN:OE1	0.52	2.63	15	1
1:A:15:VAL:HG11	1:A:88:ASN:OD1	0.52	2.04	7	1
1:A:37:LEU:HD12	1:A:67:VAL:HG11	0.52	1.80	12	2
1:A:74:GLN:C	1:A:76:GLN:N	0.52	2.61	19	9
1:A:5:LEU:O	1:A:7:ASP:N	0.52	2.42	6	7
1:A:100:VAL:C	1:A:102:ARG:H	0.52	2.08	1	5
1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CD2	0.52	2.71	12	11
1:A:11:ASP:OD1	1:A:92:ILE:CD1	0.52	2.57	8	1
1:A:29:ASN:ND2	1:A:74:GLN:OE1	0.52	2.41	20	1
1:A:16:LEU:HD13	1:A:37:LEU:CD1	0.52	2.35	1	1
1:A:87:GLU:O	1:A:87:GLU:OE1	0.52	2.28	1	1
1:A:12:LEU:HD12	1:A:12:LEU:C	0.52	2.25	10	3
1:A:12:LEU:HD22	1:A:64:PHE:CE2	0.52	2.39	17	1
1:A:63:GLU:O	1:A:64:PHE:C	0.52	2.47	16	2
1:A:19:VAL:HG12	1:A:19:VAL:O	0.52	2.05	8	1
1:A:100:VAL:C	1:A:102:ARG:N	0.52	2.62	6	9
1:A:71:ILE:O	1:A:72:LYS:C	0.52	2.47	12	13
1:A:44:ILE:CG1	1:A:96:LEU:HD11	0.52	2.34	4	3
1:A:39:ASN:OD1	1:A:39:ASN:C	0.52	2.48	4	1
1:A:26:GLY:C	1:A:28:LYS:N	0.51	2.60	17	7
1:A:93:PHE:CD1	1:A:93:PHE:C	0.51	2.83	7	11
1:A:74:GLN:C	1:A:79:ASP:OD2	0.51	2.48	2	3
1:A:67:VAL:O	1:A:68:LEU:C	0.51	2.48	5	9
1:A:85:VAL:C	1:A:87:GLU:N	0.51	2.63	17	2
1:A:36:HIS:CG	1:A:63:GLU:OE2	0.51	2.63	4	2
1:A:50:GLY:C	1:A:52:GLY:N	0.51	2.62	16	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:HIS:O	1:A:49:GLN:CD	0.51	2.49	6	1
1:A:7:ASP:O	1:A:11:ASP:CB	0.51	2.59	17	3
1:A:10:GLU:OE1	1:A:10:GLU:C	0.51	2.49	5	1
1:A:52:GLY:O	1:A:54:GLY:N	0.51	2.44	17	1
1:A:33:VAL:O	1:A:34:ASP:C	0.51	2.49	14	8
1:A:19:VAL:O	1:A:19:VAL:CG1	0.51	2.59	8	3
1:A:85:VAL:O	1:A:88:ASN:CG	0.51	2.49	16	1
1:A:33:VAL:HG23	1:A:34:ASP:H	0.51	1.63	11	2
1:A:19:VAL:HG22	1:A:82:LEU:HG	0.51	1.81	4	2
1:A:29:ASN:C	1:A:31:ASN:H	0.50	2.09	3	1
1:A:47:PHE:C	1:A:47:PHE:CD1	0.50	2.84	8	1
1:A:49:GLN:N	1:A:49:GLN:NE2	0.50	2.58	14	1
1:A:34:ASP:OD1	1:A:34:ASP:C	0.50	2.50	20	4
1:A:23:TRP:HE1	1:A:29:ASN:HD22	0.50	1.47	15	1
1:A:22:HIS:CE1	1:A:81:SER:OG	0.50	2.64	20	4
1:A:82:LEU:O	1:A:85:VAL:N	0.50	2.43	7	5
1:A:57:LEU:HD22	1:A:58:GLN:NE2	0.50	2.21	6	1
1:A:10:GLU:C	1:A:14:GLU:OE2	0.50	2.50	19	1
1:A:50:GLY:O	1:A:51:GLY:C	0.50	2.48	1	2
1:A:24:GLN:CD	1:A:25:GLY:H	0.50	2.10	20	1
1:A:43:ASP:O	1:A:46:ASP:N	0.50	2.44	12	1
1:A:33:VAL:CG2	1:A:34:ASP:H	0.50	2.20	11	2
1:A:78:GLY:C	1:A:80:ASN:H	0.50	2.10	13	3
1:A:82:LEU:HD12	1:A:82:LEU:N	0.50	2.21	16	2
1:A:37:LEU:HD11	1:A:67:VAL:CG1	0.50	2.37	6	1
1:A:27:GLN:CD	1:A:27:GLN:O	0.50	2.49	11	1
1:A:48:MET:SD	1:A:49:GLN:NE2	0.50	2.85	20	1
1:A:43:ASP:OD2	1:A:60:MET:CG	0.49	2.60	20	1
1:A:63:GLU:O	1:A:67:VAL:CG2	0.49	2.60	12	2
1:A:65:GLN:O	1:A:65:GLN:CG	0.49	2.60	5	4
1:A:9:LEU:HD12	1:A:41:ILE:O	0.49	2.07	15	2
1:A:10:GLU:O	1:A:14:GLU:CG	0.49	2.60	20	3
1:A:33:VAL:O	1:A:35:HIS:N	0.49	2.46	7	3
1:A:47:PHE:CD1	1:A:47:PHE:O	0.49	2.65	8	1
1:A:75:LEU:H	1:A:75:LEU:CD2	0.49	2.19	12	2
1:A:14:GLU:O	1:A:15:VAL:C	0.49	2.50	7	18
1:A:82:LEU:O	1:A:84:ASN:N	0.49	2.46	20	14
1:A:12:LEU:HD23	1:A:44:ILE:CD1	0.49	2.37	8	6
1:A:63:GLU:N	1:A:63:GLU:CD	0.49	2.65	12	1
1:A:9:LEU:CD1	1:A:45:HIS:CG	0.49	2.96	4	1
1:A:9:LEU:C	1:A:9:LEU:CD2	0.49	2.80	9	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:ASN:O	1:A:30:MET:SD	0.49	2.70	10	3
1:A:82:LEU:C	1:A:84:ASN:N	0.49	2.66	20	15
1:A:37:LEU:C	1:A:39:ASN:N	0.49	2.66	9	6
1:A:11:ASP:O	1:A:15:VAL:HG13	0.49	2.07	19	5
1:A:36:HIS:ND1	1:A:63:GLU:OE2	0.49	2.46	3	1
1:A:40:VAL:CG1	1:A:60:MET:SD	0.49	3.00	14	3
1:A:7:ASP:O	1:A:11:ASP:OD2	0.49	2.31	9	3
1:A:100:VAL:CG2	1:A:101:HIS:N	0.49	2.74	13	4
1:A:37:LEU:O	1:A:41:ILE:N	0.49	2.46	6	4
1:A:75:LEU:CD1	1:A:79:ASP:O	0.49	2.61	12	1
1:A:22:HIS:CG	1:A:81:SER:OG	0.49	2.66	7	1
1:A:66:GLN:CD	1:A:66:GLN:C	0.49	2.71	15	1
1:A:22:HIS:O	1:A:82:LEU:CD1	0.48	2.61	4	5
1:A:36:HIS:ND1	1:A:66:GLN:CD	0.48	2.67	15	1
1:A:61:MET:SD	1:A:62:LYS:CG	0.48	3.01	15	1
1:A:66:GLN:NE2	1:A:66:GLN:O	0.48	2.45	15	1
1:A:19:VAL:O	1:A:20:ASN:C	0.48	2.51	7	2
1:A:22:HIS:CD2	1:A:22:HIS:N	0.48	2.81	2	3
1:A:75:LEU:C	1:A:77:GLY:H	0.48	2.11	19	3
1:A:75:LEU:O	1:A:77:GLY:N	0.48	2.46	19	3
1:A:61:MET:SD	1:A:97:GLU:OE2	0.48	2.72	6	1
1:A:37:LEU:HD22	1:A:41:ILE:HD11	0.48	1.84	15	1
1:A:56:LYS:O	1:A:59:GLU:CB	0.48	2.62	3	1
1:A:47:PHE:CD1	1:A:57:LEU:HD12	0.48	2.43	4	1
1:A:80:ASN:ND2	1:A:80:ASN:H	0.48	2.06	8	2
1:A:24:GLN:O	1:A:25:GLY:C	0.48	2.49	10	2
1:A:49:GLN:CG	1:A:50:GLY:N	0.48	2.76	2	1
1:A:84:ASN:O	1:A:88:ASN:OD1	0.48	2.32	9	2
1:A:58:GLN:N	1:A:58:GLN:OE1	0.48	2.47	1	2
1:A:77:GLY:C	1:A:79:ASP:H	0.48	2.11	1	1
1:A:58:GLN:N	1:A:58:GLN:CD	0.48	2.66	3	3
1:A:15:VAL:O	1:A:19:VAL:N	0.48	2.46	3	1
1:A:80:ASN:ND2	1:A:80:ASN:C	0.48	2.67	10	1
1:A:49:GLN:HE21	1:A:49:GLN:H	0.48	1.49	3	1
1:A:65:GLN:HA	1:A:68:LEU:HD21	0.48	1.85	19	2
1:A:17:LYS:HZ2	1:A:17:LYS:CB	0.48	2.21	4	1
1:A:57:LEU:CD1	1:A:100:VAL:HG11	0.48	2.39	9	3
1:A:16:LEU:HB2	1:A:37:LEU:HD13	0.48	1.85	15	1
1:A:8:LEU:HD11	1:A:95:HIS:HB2	0.48	1.86	3	3
1:A:6:ASN:O	1:A:10:GLU:N	0.47	2.47	15	2
1:A:11:ASP:O	1:A:15:VAL:HG12	0.47	2.09	3	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:HIS:ND1	1:A:83:HIS:C	0.47	2.67	2	1
1:A:29:ASN:HD22	1:A:74:GLN:HE22	0.47	1.51	5	1
1:A:62:LYS:CG	1:A:63:GLU:N	0.47	2.77	7	2
1:A:89:ILE:O	1:A:90:LYS:C	0.47	2.53	20	13
1:A:41:ILE:N	1:A:41:ILE:HD12	0.47	2.24	15	3
1:A:49:GLN:HG2	1:A:50:GLY:N	0.47	2.24	2	3
1:A:42:GLU:O	1:A:46:ASP:CG	0.47	2.53	1	1
1:A:10:GLU:C	1:A:14:GLU:OE1	0.47	2.52	11	1
1:A:82:LEU:N	1:A:82:LEU:HD12	0.47	2.22	6	4
1:A:85:VAL:O	1:A:88:ASN:ND2	0.47	2.42	7	1
1:A:46:ASP:O	1:A:50:GLY:N	0.47	2.47	17	2
1:A:80:ASN:C	1:A:80:ASN:HD22	0.47	2.12	10	1
1:A:6:ASN:O	1:A:10:GLU:CG	0.46	2.63	5	1
1:A:19:VAL:HG13	1:A:82:LEU:HD11	0.46	1.87	7	1
1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:HD22	0.46	2.08	18	1
1:A:4:LYS:HB2	1:A:99:LEU:HD21	0.46	1.86	20	1
1:A:22:HIS:CG	1:A:81:SER:HB3	0.46	2.44	1	2
1:A:12:LEU:HD13	1:A:64:PHE:CZ	0.46	2.45	12	2
1:A:11:ASP:HB2	1:A:92:ILE:HD11	0.46	1.88	14	2
1:A:82:LEU:O	1:A:83:HIS:C	0.46	2.54	17	20
1:A:84:ASN:O	1:A:88:ASN:CG	0.46	2.54	12	1
1:A:47:PHE:CD1	1:A:47:PHE:C	0.46	2.89	6	3
1:A:80:ASN:OD1	1:A:80:ASN:C	0.46	2.49	14	1
1:A:19:VAL:HG23	1:A:85:VAL:CG1	0.46	2.40	20	4
1:A:19:VAL:O	1:A:22:HIS:N	0.46	2.44	5	2
1:A:22:HIS:CG	1:A:81:SER:HG	0.46	2.28	7	1
1:A:49:GLN:C	1:A:49:GLN:OE1	0.46	2.54	15	1
1:A:68:LEU:O	1:A:72:LYS:CB	0.46	2.64	15	1
1:A:9:LEU:HD11	1:A:45:HIS:CG	0.46	2.46	4	1
1:A:17:LYS:C	1:A:19:VAL:H	0.46	2.13	6	5
1:A:23:TRP:NE1	1:A:29:ASN:OD1	0.46	2.49	13	1
1:A:14:GLU:O	1:A:16:LEU:N	0.46	2.48	13	4
1:A:42:GLU:O	1:A:42:GLU:CD	0.46	2.54	3	1
1:A:24:GLN:NE2	1:A:78:GLY:H	0.46	2.09	16	1
1:A:14:GLU:C	1:A:16:LEU:N	0.46	2.68	13	5
1:A:66:GLN:O	1:A:70:GLU:CG	0.46	2.64	16	2
1:A:20:ASN:HD22	1:A:20:ASN:N	0.45	2.09	1	1
1:A:19:VAL:CG1	1:A:82:LEU:HD11	0.45	2.41	7	1
1:A:67:VAL:O	1:A:69:ASP:N	0.45	2.49	11	1
1:A:66:GLN:NE2	1:A:66:GLN:C	0.45	2.70	15	1
1:A:18:HIS:O	1:A:18:HIS:CG	0.45	2.69	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:MET:CG	1:A:49:GLN:N	0.45	2.78	8	1
1:A:97:GLU:CG	1:A:97:GLU:O	0.45	2.63	19	1
1:A:8:LEU:O	1:A:12:LEU:N	0.45	2.46	8	1
1:A:23:TRP:CE3	1:A:30:MET:SD	0.45	3.10	9	1
1:A:9:LEU:HD23	1:A:9:LEU:O	0.45	2.12	2	4
1:A:15:VAL:HG22	1:A:16:LEU:N	0.45	2.25	3	2
1:A:65:GLN:NE2	1:A:65:GLN:O	0.45	2.50	12	2
1:A:77:GLY:O	1:A:79:ASP:N	0.45	2.49	1	1
1:A:24:GLN:OE1	1:A:78:GLY:CA	0.45	2.65	13	1
1:A:37:LEU:H	1:A:37:LEU:CD1	0.45	2.18	11	1
1:A:53:SER:O	1:A:54:GLY:C	0.45	2.54	1	6
1:A:84:ASN:OD1	1:A:84:ASN:C	0.45	2.52	7	1
1:A:49:GLN:HE21	1:A:50:GLY:H	0.45	1.54	19	2
1:A:68:LEU:HD13	1:A:69:ASP:N	0.45	2.26	14	1
1:A:3:GLY:O	1:A:5:LEU:N	0.45	2.49	1	1
1:A:17:LYS:C	1:A:19:VAL:N	0.45	2.70	10	2
1:A:23:TRP:CZ3	1:A:71:ILE:HG23	0.45	2.47	12	1
1:A:92:ILE:O	1:A:95:HIS:N	0.45	2.46	18	2
1:A:5:LEU:HD13	1:A:5:LEU:N	0.45	2.27	2	4
1:A:12:LEU:C	1:A:14:GLU:H	0.45	2.14	20	1
1:A:57:LEU:O	1:A:58:GLN:C	0.44	2.55	19	12
1:A:71:ILE:C	1:A:73:GLN:N	0.44	2.70	16	3
1:A:74:GLN:O	1:A:79:ASP:OD1	0.44	2.35	11	2
1:A:34:ASP:CG	1:A:38:GLN:OE1	0.44	2.56	4	1
1:A:100:VAL:O	1:A:101:HIS:C	0.44	2.56	6	2
1:A:5:LEU:C	1:A:7:ASP:N	0.44	2.69	6	4
1:A:46:ASP:O	1:A:49:GLN:NE2	0.44	2.50	5	1
1:A:29:ASN:OD1	1:A:29:ASN:N	0.44	2.49	12	1
1:A:77:GLY:O	1:A:79:ASP:OD1	0.44	2.35	15	1
1:A:57:LEU:HD11	1:A:96:LEU:HB3	0.44	1.88	19	1
1:A:82:LEU:N	1:A:82:LEU:CD1	0.44	2.80	3	2
1:A:75:LEU:O	1:A:76:GLN:C	0.44	2.54	18	1
1:A:101:HIS:CG	1:A:101:HIS:O	0.44	2.71	7	1
1:A:73:GLN:O	1:A:74:GLN:C	0.44	2.55	12	1
1:A:25:GLY:CA	1:A:74:GLN:HE22	0.44	2.25	15	1
1:A:57:LEU:CD2	1:A:58:GLN:HE22	0.44	2.24	19	1
1:A:27:GLN:O	1:A:27:GLN:CG	0.44	2.65	17	4
1:A:33:VAL:C	1:A:35:HIS:N	0.44	2.70	7	3
1:A:75:LEU:HD21	1:A:82:LEU:HB3	0.44	1.90	9	1
1:A:83:HIS:ND1	1:A:83:HIS:O	0.44	2.51	2	1
1:A:23:TRP:CZ3	1:A:33:VAL:HG21	0.44	2.48	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:LEU:C	1:A:77:GLY:N	0.44	2.70	6	3
1:A:88:ASN:ND2	1:A:89:ILE:H	0.44	2.10	7	1
1:A:43:ASP:O	1:A:44:ILE:C	0.44	2.57	12	1
1:A:15:VAL:O	1:A:85:VAL:HG11	0.44	2.12	19	1
1:A:24:GLN:OE1	1:A:24:GLN:C	0.43	2.56	4	1
1:A:91:GLU:O	1:A:95:HIS:CG	0.43	2.71	10	2
1:A:80:ASN:ND2	1:A:80:ASN:N	0.43	2.66	15	1
1:A:78:GLY:C	1:A:80:ASN:N	0.43	2.72	7	2
1:A:48:MET:HG3	1:A:49:GLN:N	0.43	2.28	8	1
1:A:5:LEU:HD23	1:A:48:MET:HB3	0.43	1.90	20	2
1:A:31:ASN:O	1:A:32:LYS:C	0.43	2.56	1	1
1:A:65:GLN:O	1:A:65:GLN:CD	0.43	2.57	14	2
1:A:19:VAL:C	1:A:21:GLN:N	0.43	2.72	12	1
1:A:73:GLN:N	1:A:73:GLN:NE2	0.43	2.67	3	1
1:A:24:GLN:OE1	1:A:24:GLN:CA	0.43	2.67	4	1
1:A:57:LEU:HD22	1:A:58:GLN:HE22	0.43	1.74	6	1
1:A:11:ASP:O	1:A:15:VAL:N	0.43	2.40	12	1
1:A:9:LEU:HD21	1:A:41:ILE:HG22	0.43	1.90	3	1
1:A:97:GLU:O	1:A:97:GLU:CG	0.43	2.67	16	2
1:A:5:LEU:N	1:A:5:LEU:HD13	0.43	2.29	3	9
1:A:45:HIS:O	1:A:48:MET:CG	0.43	2.67	19	2
1:A:15:VAL:HB	1:A:85:VAL:HG12	0.43	1.90	11	1
1:A:46:ASP:CG	1:A:49:GLN:NE2	0.43	2.72	11	1
1:A:16:LEU:CD1	1:A:16:LEU:C	0.43	2.87	15	1
1:A:12:LEU:HD23	1:A:44:ILE:HD11	0.43	1.90	16	1
1:A:98:GLU:C	1:A:100:VAL:N	0.43	2.73	8	4
1:A:33:VAL:HG12	1:A:70:GLU:OE1	0.43	2.13	8	1
1:A:46:ASP:O	1:A:46:ASP:OD1	0.43	2.36	8	1
1:A:64:PHE:CE1	1:A:89:ILE:HG23	0.43	2.49	9	1
1:A:64:PHE:CD1	1:A:93:PHE:CG	0.42	3.07	9	1
1:A:34:ASP:O	1:A:38:GLN:CB	0.42	2.67	14	1
1:A:93:PHE:C	1:A:95:HIS:H	0.42	2.17	3	1
1:A:12:LEU:C	1:A:12:LEU:CD1	0.42	2.87	10	1
1:A:39:ASN:ND2	1:A:39:ASN:N	0.42	2.67	13	1
1:A:35:HIS:ND1	1:A:35:HIS:N	0.42	2.64	18	1
1:A:96:LEU:O	1:A:100:VAL:HG13	0.42	2.13	3	2
1:A:21:GLN:C	1:A:23:TRP:H	0.42	2.18	4	1
1:A:9:LEU:CD2	1:A:41:ILE:CG2	0.42	2.97	6	1
1:A:49:GLN:OE1	1:A:50:GLY:N	0.42	2.52	15	1
1:A:34:ASP:C	1:A:34:ASP:OD1	0.42	2.57	13	1
1:A:93:PHE:C	1:A:95:HIS:N	0.42	2.73	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:TRP:CZ2	1:A:74:GLN:HG3	0.42	2.50	18	3
1:A:19:VAL:O	1:A:21:GLN:N	0.42	2.53	12	1
1:A:65:GLN:NE2	1:A:65:GLN:HA	0.42	2.30	8	1
1:A:98:GLU:C	1:A:100:VAL:H	0.42	2.17	15	1
1:A:64:PHE:HB3	1:A:93:PHE:CZ	0.42	2.49	16	3
1:A:37:LEU:N	1:A:37:LEU:CD1	0.42	2.80	11	1
1:A:26:GLY:N	1:A:74:GLN:NE2	0.42	2.66	12	1
1:A:71:ILE:HG22	1:A:82:LEU:CD2	0.42	2.36	2	1
1:A:40:VAL:C	1:A:42:GLU:H	0.42	2.18	2	1
1:A:54:GLY:O	1:A:58:GLN:OE1	0.42	2.38	3	1
1:A:8:LEU:O	1:A:12:LEU:CB	0.42	2.67	12	1
1:A:61:MET:SD	1:A:62:LYS:HG2	0.42	2.55	15	1
1:A:93:PHE:C	1:A:93:PHE:CD1	0.42	2.91	16	1
1:A:73:GLN:O	1:A:75:LEU:N	0.41	2.53	3	1
1:A:12:LEU:HD22	1:A:64:PHE:HZ	0.41	1.74	19	1
1:A:23:TRP:CZ2	1:A:29:ASN:HB2	0.41	2.50	10	1
1:A:85:VAL:O	1:A:86:HIS:C	0.41	2.57	17	1
1:A:31:ASN:O	1:A:34:ASP:N	0.41	2.54	1	1
1:A:5:LEU:HD23	1:A:48:MET:CG	0.41	2.45	9	1
1:A:91:GLU:C	1:A:93:PHE:N	0.41	2.74	9	2
1:A:70:GLU:O	1:A:71:ILE:C	0.41	2.57	9	1
1:A:30:MET:O	1:A:30:MET:CG	0.41	2.68	3	1
1:A:44:ILE:O	1:A:47:PHE:N	0.41	2.44	4	2
1:A:84:ASN:ND2	1:A:84:ASN:C	0.41	2.74	8	1
1:A:65:GLN:HE22	1:A:66:GLN:HE21	0.41	1.53	9	1
1:A:25:GLY:O	1:A:74:GLN:OE1	0.41	2.39	16	1
1:A:75:LEU:O	1:A:79:ASP:OD1	0.41	2.39	16	1
1:A:18:HIS:O	1:A:19:VAL:C	0.41	2.58	7	1
1:A:64:PHE:C	1:A:66:GLN:N	0.41	2.73	11	1
1:A:61:MET:HG3	1:A:62:LYS:N	0.41	2.31	12	1
1:A:26:GLY:O	1:A:29:ASN:CG	0.41	2.59	15	1
1:A:12:LEU:O	1:A:13:GLN:C	0.41	2.59	20	1
1:A:57:LEU:HD11	1:A:96:LEU:CD2	0.41	2.46	7	1
1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:HD22	0.41	2.30	11	2
1:A:20:ASN:N	1:A:20:ASN:ND2	0.41	2.69	1	1
1:A:17:LYS:CB	1:A:17:LYS:NZ	0.41	2.83	4	1
1:A:64:PHE:C	1:A:66:GLN:H	0.41	2.18	11	1
1:A:7:ASP:OD1	1:A:11:ASP:OD1	0.41	2.39	12	1
1:A:29:ASN:O	1:A:32:LYS:N	0.41	2.54	14	1
1:A:23:TRP:NE1	1:A:74:GLN:HG2	0.41	2.31	5	1
1:A:25:GLY:C	1:A:74:GLN:HE22	0.41	2.19	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:MET:O	1:A:34:ASP:CB	0.41	2.69	20	1
1:A:101:HIS:O	1:A:101:HIS:CG	0.41	2.74	20	1
1:A:24:GLN:NE2	1:A:78:GLY:HA3	0.40	2.31	9	1
1:A:67:VAL:C	1:A:69:ASP:N	0.40	2.74	11	1
1:A:92:ILE:O	1:A:95:HIS:CB	0.40	2.68	18	1
1:A:39:ASN:O	1:A:39:ASN:ND2	0.40	2.53	20	1
1:A:62:LYS:O	1:A:66:GLN:OE1	0.40	2.39	9	1
1:A:23:TRP:NE1	1:A:74:GLN:CG	0.40	2.84	5	1
1:A:8:LEU:HD13	1:A:8:LEU:HA	0.40	1.79	9	1
1:A:16:LEU:CD1	1:A:20:ASN:ND2	0.40	2.84	11	1
1:A:84:ASN:O	1:A:87:GLU:CG	0.40	2.69	11	1
1:A:85:VAL:C	1:A:87:GLU:H	0.40	2.20	17	1
1:A:10:GLU:CD	1:A:11:ASP:OD1	0.40	2.60	5	1
1:A:62:LYS:HG2	1:A:63:GLU:N	0.40	2.30	6	1
1:A:41:ILE:H	1:A:41:ILE:CD1	0.40	2.29	15	1

6.3 Torsion angles (i)

6.3.1 Protein backbone (i)

In the following table, the Percentiles column shows the percent Ramachandran outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all 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	99/102 (97%)	72±2 (73±2%)	19±3 (19±3%)	8±1 (8±1%)	2	15
All	All	1980/2040 (97%)	1442 (73%)	385 (19%)	153 (8%)	2	15

All 24 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	52	GLY	18
1	A	97	GLU	18
1	A	58	GLN	17
1	A	50	GLY	15
1	A	54	GLY	11
1	A	80	ASN	11
1	A	75	LEU	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	41	ILE	7
1	A	38	GLN	7
1	A	30	MET	6
1	A	101	HIS	5
1	A	27	GLN	5
1	A	79	ASP	4
1	A	26	GLY	3
1	A	25	GLY	3
1	A	51	GLY	3
1	A	77	GLY	2
1	A	89	ILE	1
1	A	72	LYS	1
1	A	53	SER	1
1	A	86	HIS	1
1	A	78	GLY	1
1	A	76	GLN	1
1	A	13	GLN	1

6.3.2 Protein sidechains (i)

In the following table, the Percentiles column shows the percent sidechain outliers of the chain as a percentile score with respect to all 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	90/92 (98%)	61±3 (68±3%)	29±3 (32±3%)	1 13
All	All	1800/1840 (98%)	1218 (68%)	582 (32%)	1 13

All 76 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	71	ILE	20
1	A	96	LEU	20
1	A	5	LEU	19
1	A	6	ASN	19
1	A	60	MET	19
1	A	67	VAL	19
1	A	79	ASP	18
1	A	64	PHE	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	65	GLN	17
1	A	81	SER	17
1	A	92	ILE	17
1	A	100	VAL	17
1	A	53	SER	16
1	A	31	ASN	14
1	A	99	LEU	13
1	A	86	HIS	12
1	A	45	HIS	11
1	A	48	MET	11
1	A	95	HIS	10
1	A	37	LEU	10
1	A	13	GLN	9
1	A	102	ARG	9
1	A	24	GLN	9
1	A	49	GLN	9
1	A	39	ASN	8
1	A	56	LYS	8
1	A	80	ASN	8
1	A	61	MET	8
1	A	83	HIS	8
1	A	36	HIS	7
1	A	85	VAL	7
1	A	46	ASP	7
1	A	84	ASN	7
1	A	35	HIS	7
1	A	18	HIS	6
1	A	66	GLN	6
1	A	70	GLU	6
1	A	42	GLU	6
1	A	28	LYS	6
1	A	63	GLU	5
1	A	90	LYS	5
1	A	94	HIS	5
1	A	17	LYS	5
1	A	34	ASP	5
1	A	16	LEU	5
1	A	41	ILE	5
1	A	8	LEU	5
1	A	69	ASP	5
1	A	21	GLN	4
1	A	87	GLU	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	88	ASN	4
1	A	29	ASN	4
1	A	15	VAL	4
1	A	73	GLN	4
1	A	89	ILE	4
1	A	10	GLU	4
1	A	30	MET	4
1	A	20	ASN	4
1	A	76	GLN	4
1	A	7	ASP	4
1	A	101	HIS	3
1	A	19	VAL	3
1	A	68	LEU	3
1	A	93	PHE	3
1	A	27	GLN	3
1	A	97	GLU	3
1	A	38	GLN	2
1	A	59	GLU	2
1	A	11	ASP	2
1	A	32	LYS	2
1	A	57	LEU	1
1	A	98	GLU	1
1	A	4	LYS	1
1	A	9	LEU	1
1	A	72	LYS	1
1	A	58	GLN	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 (i)

No chemical shift data were provided