Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Apr 21, 2024 – 02:37 PM EDT

PDB ID	:	2KQU
Title	:	F98N apoflavodoxin from Anabaena PCC 7119
Authors	:	Ayuso-Tejedor, S.; Sancho, J.; Jimenez, M.A.; Bernado, P.
Deposited on	:	2009-11-19

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 types of validation reports are described at
http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types.

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

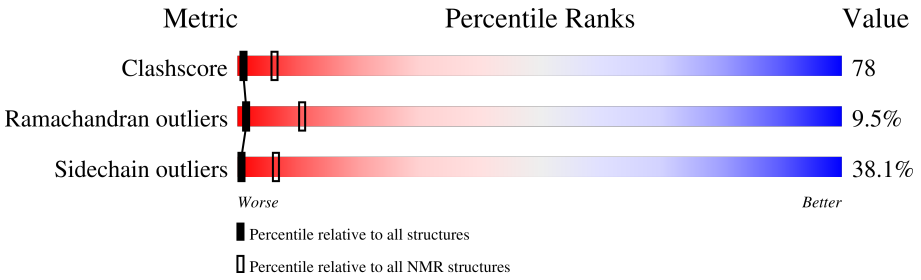
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.36.2

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	169	8% 30% 11% • 50%

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 20 models. Model 7 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *fewest violations*.

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:2-A:9, A:17-A:52, A:72-A:86, A:109-A:118, A:154-A:168 (84)	0.87	7

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 5 clusters and 7 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2605 atoms, of which 1278 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Flavodoxin.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	169	2605	834	1278	215	277	1	0

There are 2 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1	ALA	SER	cloning artifact	UNP P0A3E0
A	98	ASN	PHE	engineered mutation	UNP P0A3E0

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: Flavodoxin

Chain A: 8% 30% 11% • 50%

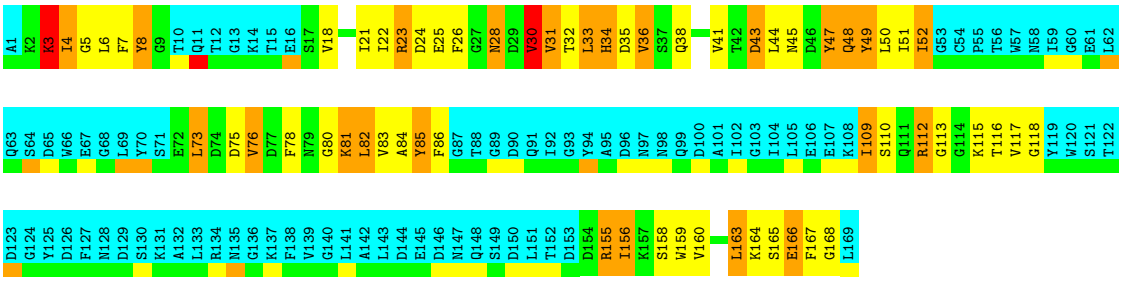
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: Flavodoxin

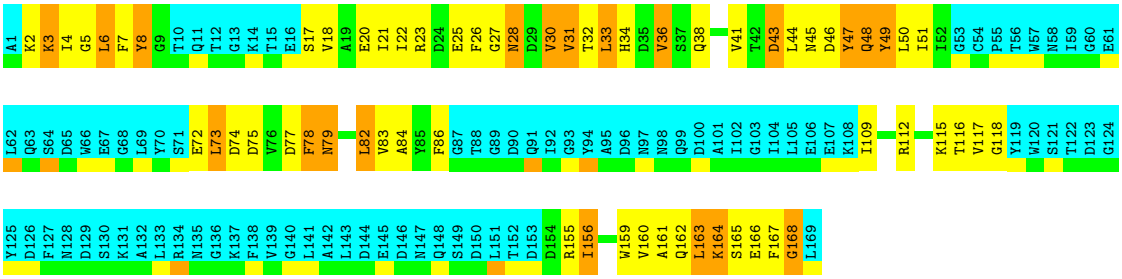
Chain A: 13% 21% 14% • 50%



4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Flavodoxin

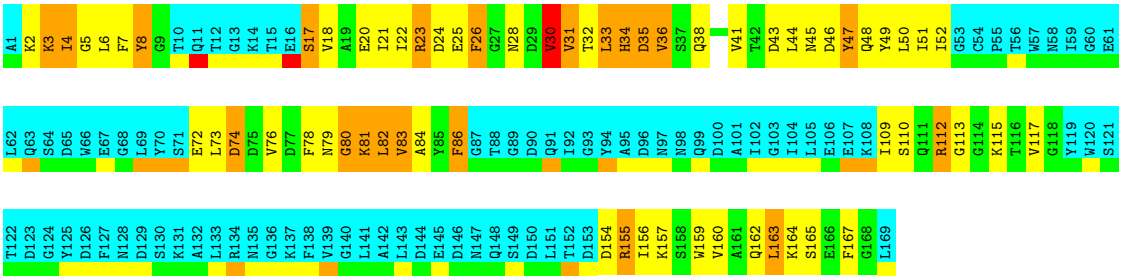
Chain A: 12% 25% 12% 50%



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Flavodoxin

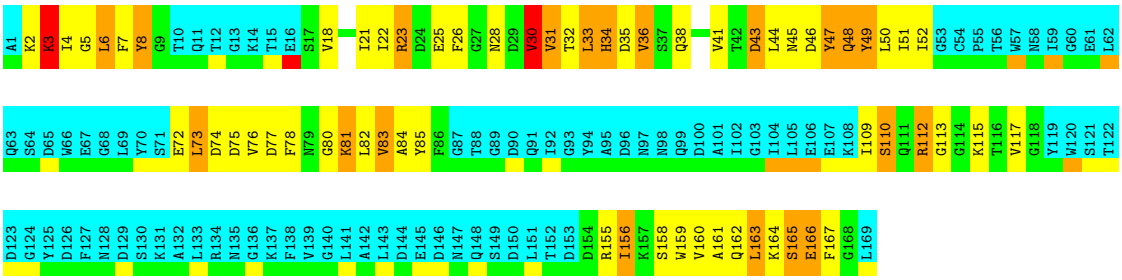
Chain A: 11% 25% 12% • 50%



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Flavodoxin

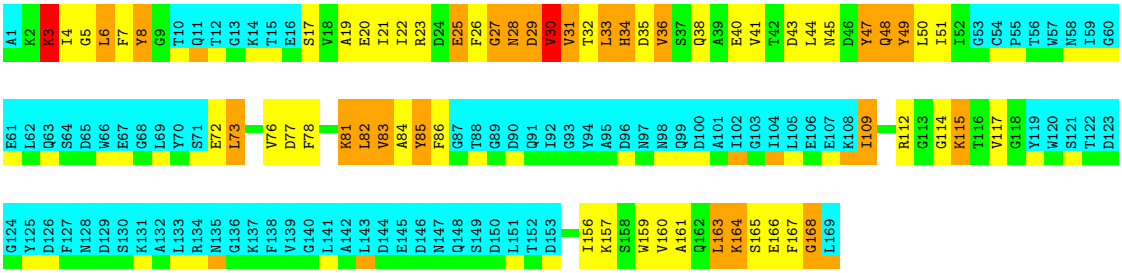
Chain A: 12% 25% 12% • 50%



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Flavodoxin

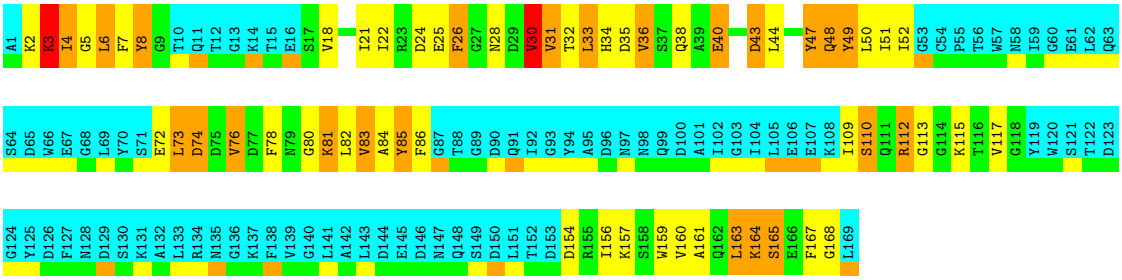
Chain A: 13% 22% 14% • 50%



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Flavodoxin

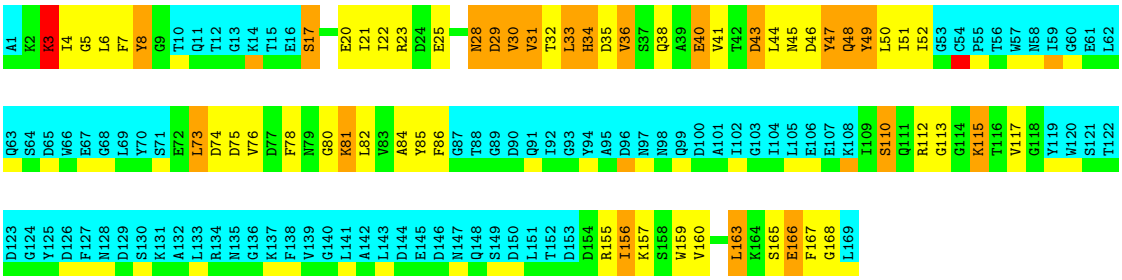
Chain A: 14% 21% 14% • 50%



4.2.7 Score per residue for model 7 (medoid)

- Molecule 1: Flavodoxin

Chain A: 14% 22% 12% • 50%



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Flavodoxin

Chain A: 13% 24% 11% • 50%

A1 K2 K3 I4 G5 L6 F7 Y8 G9 T10 Q11 T12 G13 K14 T15 E16 S17 V18 A19 E20 I21 I22 R23 D24 E25 F26 G27 N28 D29 V30 V31 T32 L33 H34 D35 V36 S37 Q38 V41 T42 D43 L44 N45 D46 Y47 Q48 Y49 L50 I51 I52 G53 C54 P55 T56 W57 N58 I59 G60 E61

L62 Q63 S64 D65 W66 E67 G68 L69 Y70 S71 E72 L73 D74 D75 V76 D77 F78 N79 G80 K81 L82 V83 A84 Y85 F86 G87 T88 G89 D90 Q91 I92 G93 Y94 A95 D96 N97 N98 Q99 D100 A101 I102 G103 I104 L105 E106 E107 K108 I109 R112 K115 T116 V117 G118 Y119 W120 S121 T122 D123

G124 Y125 D126 F127 N128 D129 S130 K131 A132 L133 R134 N135 G136 K137 F138 V139 G140 L141 A142 L143 D144 E145 D146 N147 Q148 S149 D150 L151 T152 D153 D154 R155 I156 K157 S158 W159 V160 A161 Q162 L163 K164 S165 E166 F167 G168 L169

4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Flavodoxin

Chain A: 12% 25% 11% • 50%

A1 K2 K3 I4 G5 L6 F7 Y8 G9 T10 Q11 T12 G13 K14 T15 E16 S17 V18 A19 E20 I21 I22 R23 D24 E25 F26 G27 N28 D29 V30 V31 T32 L33 H34 D35 V36 S37 Q38 V41 T42 D43 L44 N45 D46 Y47 Q48 Y49 L50 I51 I52 G53 C54 P55 T56 W57 N58 I59 G60 E61

L62 Q63 S64 D65 W66 E67 G68 L69 Y70 S71 E72 L73 D74 D75 V76 D77 F78 N79 G80 K81 L82 V83 A84 Y85 F86 G87 T88 G89 D90 Q91 I92 G93 Y94 A95 D96 N97 N98 Q99 D100 A101 I102 G103 I104 L105 E106 E107 K108 I109 S110 Q111 R112 G113 G114 K115 T116 V117 G118 Y119 W120 S121

T122 D123 G124 Y125 D126 F127 N128 D129 S130 K131 A132 L133 R134 N135 G136 K137 F138 V139 G140 L141 A142 L143 D144 E145 D146 N147 Q148 S149 D150 L151 T152 D153 I156 K157 S158 W159 V160 A161 Q162 L163 K164 S165 E166 F167 G168 L169

4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Flavodoxin

Chain A: 9% 24% 15% • 50%

A1 K2 K3 I4 G5 L6 F7 Y8 G9 T10 Q11 T12 G13 K14 T15 E16 S17 V18 I21 I22 R23 D24 E25 F26 G27 N28 D29 V30 V31 T32 L33 H34 D35 V36 S37 Q38 A39 E40 V41 T42 D43 L44 N45 D46 Y47 Q48 Y49 L50 I51 I52 G53 C54 P55 T56 W57 N58 I59 G60 E61

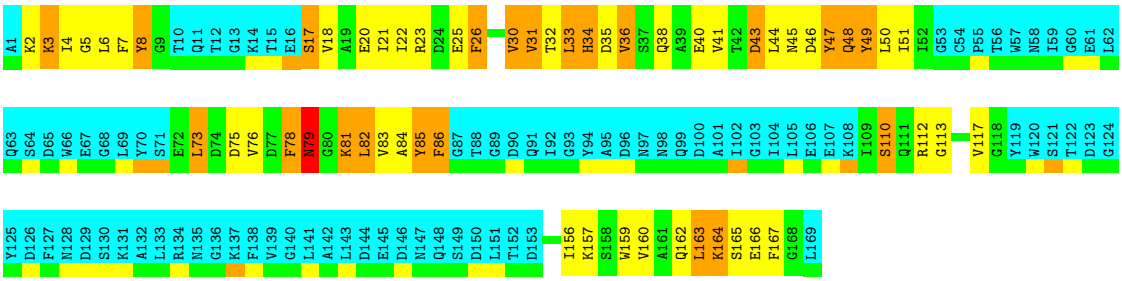
L62 Q63 S64 D65 W66 E67 G68 L69 Y70 S71 E72 L73 D74 D75 V76 D77 F78 N79 G80 K81 L82 V83 A84 Y85 F86 G87 T88 G89 D90 Q91 I92 G93 Y94 A95 D96 N97 N98 Q99 D100 A101 I102 G103 I104 L105 E106 E107 K108 I109 S110 Q111 R112 G113 G114 K115 T116 V117 G118 Y119 W120 S121

T122 D123 G124 Y125 D126 F127 N128 D129 S130 K131 A132 L133 R134 N135 G136 K137 F138 V139 G140 L141 A142 L143 D144 E145 D146 N147 Q148 S149 D150 L151 T152 D153 D154 R155 I156 K157 S158 W159 V160 A161 Q162 L163 K164 S165 E166 F167 G168 L169

4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Flavodoxin

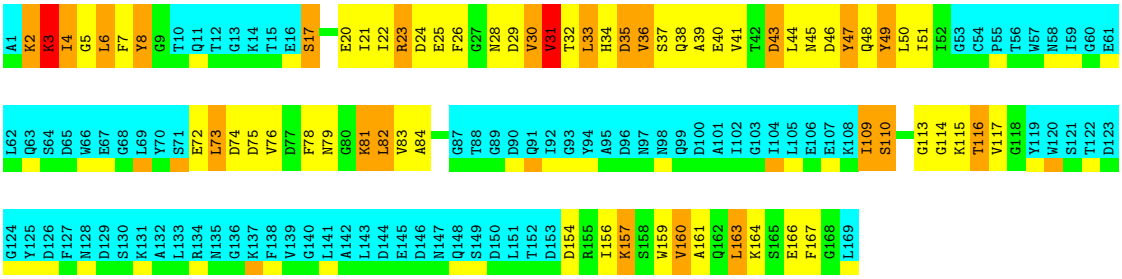
Chain A: 15% 21% 13% • 50%



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Flavodoxin

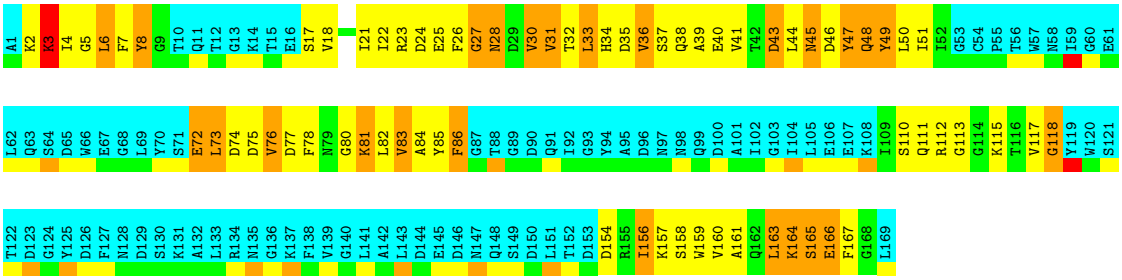
Chain A: 11% 25% 13% • 50%



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Flavodoxin

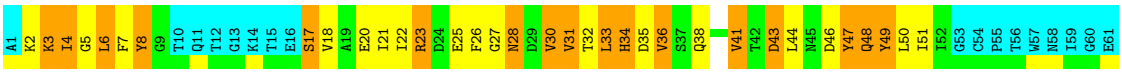
Chain A: 8% 27% 15% • 50%

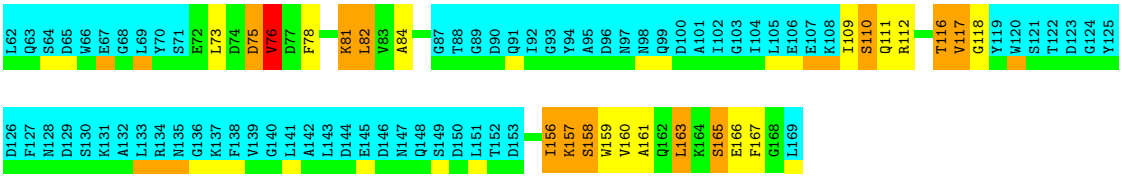


4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Flavodoxin

Chain A: 15% 17% 17% • 50%

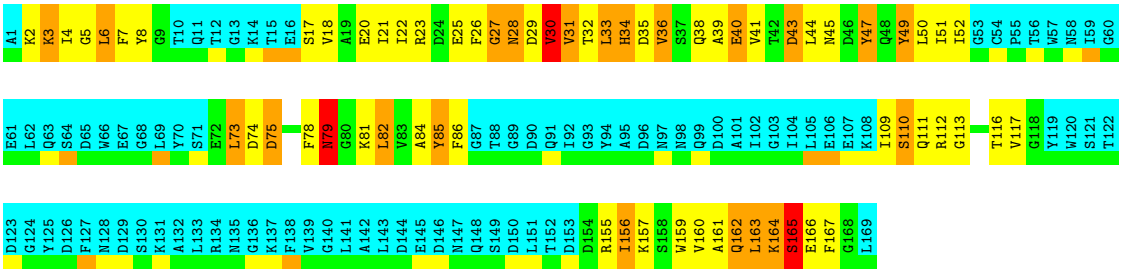




4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Flavodoxin

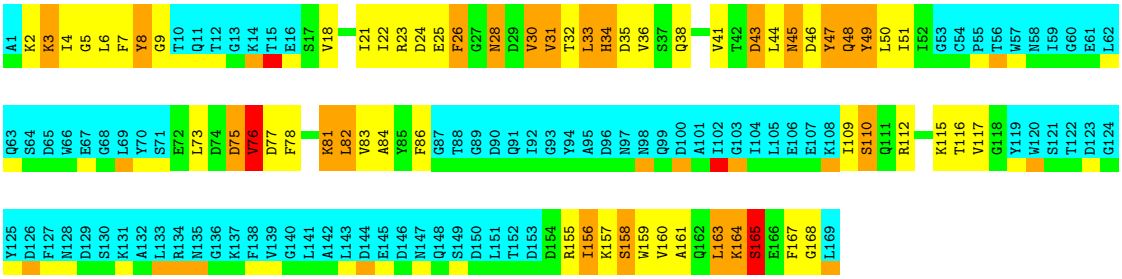
Chain A: 11% 25% 12% • 50%



4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Flavodoxin

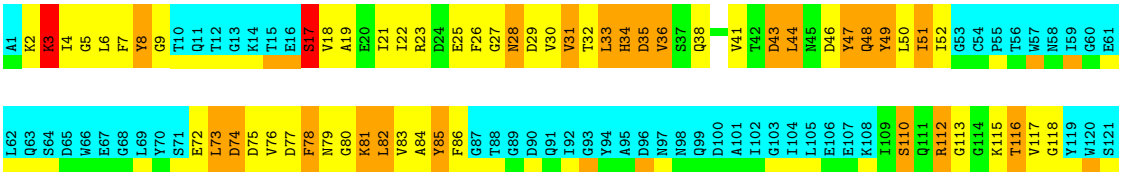
Chain A: 13% 23% 12% • 50%



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Flavodoxin

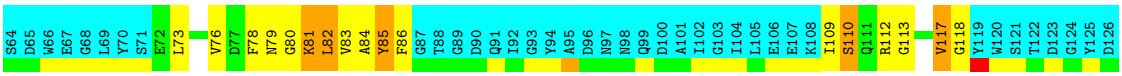
Chain A: 8% 26% 14% • 50%

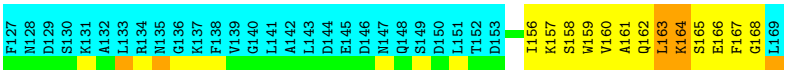


4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Flavodoxin

Chain A: 11% 26% 12% • 50%

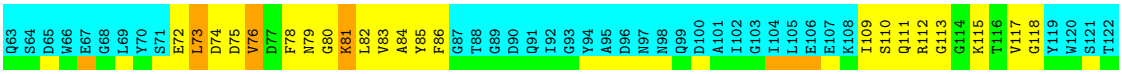


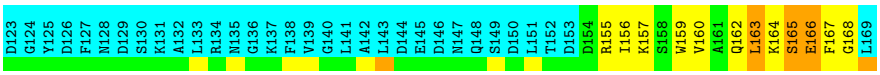


4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Flavodoxin

Chain A: 8% 28% 13% • 50%

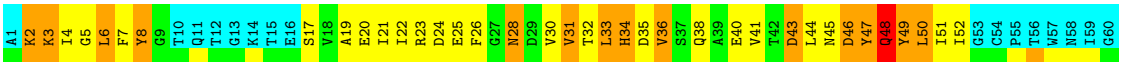


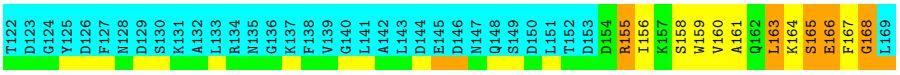


4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Flavodoxin

Chain A: 9% 26% 14% • 50%





5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

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

Of the 100 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *target function*.

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

Software name	Classification	Version
CYANA	refinement	2.1

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	669	671	656	103±14
All	All	13380	13420	13120	2055

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 78.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:LEU:HD13	1:A:167:PHE:CE1	1.26	1.64	17	19
1:A:22:ILE:CD1	1:A:160:VAL:HG22	1.22	1.62	10	15
1:A:22:ILE:CD1	1:A:160:VAL:CG2	1.16	2.23	17	11
1:A:86:PHE:CD2	1:A:159:TRP:CD1	1.15	2.35	17	1
1:A:7:PHE:CE2	1:A:44:LEU:HD23	1.10	1.82	4	19
1:A:21:ILE:CG2	1:A:156:ILE:HD13	1.10	1.75	6	6
1:A:25:GLU:CG	1:A:156:ILE:HD12	1.09	1.77	6	7
1:A:26:PHE:CD1	1:A:164:LYS:HD3	1.08	1.83	17	5
1:A:51:ILE:HG23	1:A:84:ALA:HB3	1.08	1.21	17	5
1:A:73:LEU:HD11	1:A:109:ILE:HG21	1.07	1.25	5	1
1:A:22:ILE:HD12	1:A:160:VAL:CG2	1.07	1.79	10	12
1:A:4:ILE:HD12	1:A:30:VAL:HG11	1.05	1.18	11	2
1:A:22:ILE:HD11	1:A:160:VAL:HG22	1.04	1.26	17	2
1:A:86:PHE:CD2	1:A:159:TRP:CG	1.04	2.46	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:ILE:HG21	1:A:163:LEU:HD13	1.03	1.28	17	1
1:A:25:GLU:HB3	1:A:160:VAL:HG11	1.02	1.09	10	5
1:A:51:ILE:HG21	1:A:159:TRP:CH2	1.02	1.89	7	14
1:A:73:LEU:HD23	1:A:109:ILE:HG12	1.02	1.20	10	3
1:A:84:ALA:HB2	1:A:167:PHE:CZ	0.99	1.90	17	20
1:A:22:ILE:HD12	1:A:160:VAL:HG22	0.99	1.03	10	8
1:A:7:PHE:CD2	1:A:44:LEU:HD23	0.98	1.93	1	19
1:A:84:ALA:HA	1:A:117:VAL:HG12	0.98	1.29	15	3
1:A:25:GLU:CB	1:A:160:VAL:HG11	0.95	1.90	10	2
1:A:25:GLU:HB3	1:A:160:VAL:HG21	0.94	1.38	19	15
1:A:44:LEU:HD12	1:A:45:ASN:N	0.93	1.79	16	17
1:A:7:PHE:CE1	1:A:50:LEU:HD22	0.92	1.99	8	6
1:A:50:LEU:C	1:A:51:ILE:HD13	0.92	1.85	18	2
1:A:21:ILE:HG23	1:A:156:ILE:HD13	0.92	1.42	6	6
1:A:82:LEU:HD13	1:A:167:PHE:CE2	0.91	1.99	6	5
1:A:25:GLU:HG2	1:A:156:ILE:HD12	0.91	1.39	6	5
1:A:84:ALA:HA	1:A:117:VAL:HG22	0.91	1.37	10	9
1:A:82:LEU:CD1	1:A:167:PHE:CE1	0.91	2.54	17	6
1:A:73:LEU:HD23	1:A:109:ILE:CG1	0.90	1.96	10	3
1:A:5:GLY:C	1:A:6:LEU:HD13	0.89	1.88	2	2
1:A:86:PHE:HB2	1:A:159:TRP:NE1	0.89	1.82	17	1
1:A:73:LEU:HD12	1:A:109:ILE:HD13	0.89	1.41	19	1
1:A:73:LEU:HD13	1:A:78:PHE:CD2	0.89	2.03	5	2
1:A:33:LEU:HD13	1:A:35:ASP:CB	0.89	1.98	16	12
1:A:82:LEU:HD12	1:A:82:LEU:O	0.88	1.68	4	20
1:A:51:ILE:CG2	1:A:163:LEU:HD13	0.88	1.99	17	1
1:A:5:GLY:O	1:A:51:ILE:HD12	0.88	1.68	3	11
1:A:6:LEU:O	1:A:6:LEU:HD22	0.88	1.69	19	1
1:A:49:TYR:C	1:A:50:LEU:HD22	0.88	1.88	6	6
1:A:7:PHE:CD1	1:A:50:LEU:HD22	0.88	2.03	8	9
1:A:22:ILE:HD12	1:A:160:VAL:HG21	0.88	1.42	17	2
1:A:18:VAL:O	1:A:22:ILE:HG22	0.87	1.68	4	13
1:A:73:LEU:HD13	1:A:78:PHE:CE2	0.86	2.05	1	2
1:A:25:GLU:OE2	1:A:157:LYS:CE	0.86	2.22	11	2
1:A:6:LEU:HD12	1:A:32:THR:O	0.86	1.71	14	1
1:A:86:PHE:HD2	1:A:159:TRP:CG	0.86	1.84	17	1
1:A:25:GLU:HG3	1:A:156:ILE:HD12	0.85	1.48	7	3
1:A:26:PHE:CE1	1:A:164:LYS:HD3	0.85	2.07	15	3
1:A:44:LEU:HD12	1:A:78:PHE:CE1	0.85	2.06	17	1
1:A:4:ILE:HD13	1:A:26:PHE:CE2	0.84	2.08	4	1
1:A:82:LEU:HD13	1:A:167:PHE:CZ	0.84	2.06	4	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:4:ILE:HD13	1:A:26:PHE:CE1	0.84	2.07	18	9
1:A:25:GLU:CB	1:A:160:VAL:HG21	0.84	2.02	1	11
1:A:33:LEU:HD13	1:A:35:ASP:HB2	0.84	1.48	7	14
1:A:159:TRP:CZ3	1:A:163:LEU:HD11	0.83	2.09	9	15
1:A:23:ARG:CG	1:A:31:VAL:HG21	0.83	2.03	9	6
1:A:21:ILE:HG21	1:A:156:ILE:HG21	0.83	1.50	1	4
1:A:81:LYS:NZ	1:A:83:VAL:HG13	0.83	1.88	13	4
1:A:25:GLU:HB3	1:A:160:VAL:CG1	0.83	2.00	10	1
1:A:73:LEU:CD1	1:A:109:ILE:HG21	0.83	2.02	18	3
1:A:28:ASN:HB3	1:A:30:VAL:HG22	0.81	1.53	20	11
1:A:25:GLU:OE2	1:A:157:LYS:HE2	0.81	1.73	11	3
1:A:81:LYS:HZ2	1:A:83:VAL:HG13	0.80	1.36	13	1
1:A:29:ASP:O	1:A:31:VAL:HG12	0.80	1.76	12	3
1:A:41:VAL:HG11	1:A:75:ASP:HB3	0.80	1.54	14	1
1:A:156:ILE:O	1:A:160:VAL:HG23	0.80	1.75	20	14
1:A:82:LEU:C	1:A:82:LEU:HD12	0.80	1.98	17	9
1:A:4:ILE:CD1	1:A:30:VAL:HG11	0.80	2.06	11	1
1:A:36:VAL:HG21	1:A:43:ASP:OD2	0.79	1.77	2	2
1:A:73:LEU:HD21	1:A:109:ILE:HD13	0.79	1.53	4	1
1:A:84:ALA:HB2	1:A:167:PHE:CE1	0.79	2.12	10	2
1:A:84:ALA:HB2	1:A:167:PHE:CE2	0.79	2.11	17	2
1:A:22:ILE:HD11	1:A:160:VAL:HG23	0.78	1.54	12	1
1:A:33:LEU:O	1:A:36:VAL:HG22	0.78	1.77	13	9
1:A:51:ILE:HG21	1:A:159:TRP:CZ2	0.78	2.13	7	6
1:A:84:ALA:HA	1:A:117:VAL:CG1	0.77	2.09	17	2
1:A:7:PHE:CD1	1:A:50:LEU:HD13	0.77	2.15	12	3
1:A:51:ILE:CG2	1:A:84:ALA:HB3	0.77	2.06	17	1
1:A:26:PHE:CE2	1:A:164:LYS:CE	0.77	2.68	20	1
1:A:51:ILE:HG23	1:A:84:ALA:O	0.77	1.78	6	5
1:A:21:ILE:HG22	1:A:25:GLU:OE1	0.76	1.81	14	1
1:A:52:ILE:HD11	1:A:85:TYR:CE1	0.76	2.14	15	2
1:A:32:THR:C	1:A:33:LEU:HD23	0.76	2.00	2	1
1:A:51:ILE:HG21	1:A:159:TRP:HH2	0.76	1.39	7	9
1:A:84:ALA:CA	1:A:117:VAL:HG22	0.76	2.09	10	1
1:A:81:LYS:CD	1:A:83:VAL:HG23	0.75	2.12	1	2
1:A:86:PHE:CD2	1:A:159:TRP:CH2	0.75	2.75	10	2
1:A:41:VAL:HG11	1:A:75:ASP:CB	0.75	2.12	14	2
1:A:8:TYR:CE2	1:A:34:HIS:CE1	0.75	2.74	8	10
1:A:26:PHE:CE2	1:A:164:LYS:NZ	0.75	2.55	20	1
1:A:49:TYR:O	1:A:50:LEU:HD22	0.74	1.82	2	6
1:A:8:TYR:CZ	1:A:34:HIS:CE1	0.74	2.75	16	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:LEU:HD13	1:A:6:LEU:N	0.74	1.97	2	3
1:A:117:VAL:HG21	1:A:166:GLU:HB3	0.74	1.59	17	1
1:A:81:LYS:O	1:A:114:GLY:HA3	0.74	1.82	10	1
1:A:86:PHE:CB	1:A:159:TRP:NE1	0.74	2.50	17	1
1:A:73:LEU:HD23	1:A:109:ILE:HG13	0.74	1.59	8	1
1:A:21:ILE:HG22	1:A:156:ILE:HG21	0.74	1.58	11	2
1:A:73:LEU:HD13	1:A:74:ASP:N	0.74	1.97	15	7
1:A:21:ILE:CG2	1:A:156:ILE:HG21	0.73	2.14	1	5
1:A:73:LEU:C	1:A:73:LEU:HD22	0.73	2.03	6	7
1:A:73:LEU:CD2	1:A:109:ILE:HD13	0.73	2.13	12	2
1:A:51:ILE:HG21	1:A:163:LEU:CD1	0.73	2.11	17	1
1:A:86:PHE:CD1	1:A:159:TRP:CD1	0.73	2.77	18	1
1:A:44:LEU:HB2	1:A:50:LEU:HD11	0.73	1.59	18	6
1:A:23:ARG:HG3	1:A:31:VAL:HG11	0.73	1.60	12	1
1:A:23:ARG:HG3	1:A:31:VAL:HG21	0.72	1.60	9	3
1:A:82:LEU:HD13	1:A:167:PHE:CD1	0.72	2.20	7	9
1:A:82:LEU:HD12	1:A:82:LEU:C	0.72	2.05	8	11
1:A:117:VAL:HG11	1:A:167:PHE:CZ	0.72	2.20	4	5
1:A:28:ASN:CB	1:A:30:VAL:HG22	0.72	2.15	14	13
1:A:160:VAL:HG13	1:A:164:LYS:HZ1	0.72	1.45	13	1
1:A:160:VAL:HG13	1:A:164:LYS:NZ	0.72	2.00	13	1
1:A:52:ILE:HD12	1:A:85:TYR:CD1	0.72	2.19	18	1
1:A:156:ILE:N	1:A:156:ILE:HD13	0.71	2.00	11	5
1:A:21:ILE:HG22	1:A:156:ILE:HD13	0.71	1.62	6	2
1:A:23:ARG:HH21	1:A:33:LEU:HD21	0.71	1.46	17	2
1:A:84:ALA:HB1	1:A:163:LEU:HB3	0.71	1.62	17	1
1:A:3:LYS:HA	1:A:30:VAL:HG12	0.71	1.63	9	14
1:A:82:LEU:CD1	1:A:167:PHE:CZ	0.71	2.73	17	9
1:A:2:LYS:O	1:A:3:LYS:C	0.71	2.29	19	2
1:A:44:LEU:HD11	1:A:76:VAL:HG21	0.70	1.64	1	6
1:A:52:ILE:HD12	1:A:85:TYR:CZ	0.70	2.21	1	1
1:A:84:ALA:HA	1:A:117:VAL:CG2	0.70	2.17	10	5
1:A:73:LEU:HD22	1:A:74:ASP:N	0.70	2.02	17	4
1:A:76:VAL:HG11	1:A:78:PHE:CE1	0.69	2.21	10	3
1:A:86:PHE:CG	1:A:159:TRP:CD1	0.69	2.79	17	1
1:A:117:VAL:HG11	1:A:167:PHE:CE1	0.69	2.21	4	7
1:A:4:ILE:HD13	1:A:26:PHE:CD2	0.69	2.23	4	1
1:A:84:ALA:CA	1:A:117:VAL:HG12	0.69	2.14	15	2
1:A:29:ASP:O	1:A:31:VAL:HG22	0.69	1.88	7	3
1:A:73:LEU:HD22	1:A:73:LEU:C	0.69	2.08	17	4
1:A:86:PHE:CE2	1:A:159:TRP:HB2	0.68	2.22	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:4:ILE:HD13	1:A:26:PHE:CD1	0.68	2.23	10	2
1:A:84:ALA:CB	1:A:117:VAL:CG2	0.68	2.71	10	1
1:A:117:VAL:HG11	1:A:166:GLU:CB	0.68	2.19	1	6
1:A:51:ILE:CG1	1:A:84:ALA:HB3	0.68	2.18	20	10
1:A:73:LEU:HD13	1:A:109:ILE:HG21	0.68	1.63	18	1
1:A:74:ASP:HA	1:A:109:ILE:HD13	0.68	1.64	3	1
1:A:85:TYR:CD2	1:A:117:VAL:O	0.68	2.46	13	1
1:A:81:LYS:CD	1:A:83:VAL:HG13	0.68	2.18	20	1
1:A:51:ILE:HD13	1:A:51:ILE:N	0.68	2.04	17	2
1:A:4:ILE:CG2	1:A:51:ILE:HD11	0.68	2.18	15	6
1:A:51:ILE:CG2	1:A:159:TRP:CZ2	0.67	2.78	11	4
1:A:159:TRP:CH2	1:A:163:LEU:HD11	0.67	2.24	12	15
1:A:163:LEU:HD23	1:A:163:LEU:N	0.67	2.04	10	14
1:A:25:GLU:CG	1:A:156:ILE:CD1	0.67	2.67	7	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:83:VAL:HG22	0.67	2.04	19	1
1:A:159:TRP:CE3	1:A:163:LEU:HD11	0.67	2.23	9	14
1:A:47:TYR:CD1	1:A:47:TYR:N	0.67	2.62	1	20
1:A:8:TYR:N	1:A:8:TYR:CD1	0.67	2.63	5	20
1:A:23:ARG:HH21	1:A:33:LEU:CD2	0.66	2.02	5	2
1:A:6:LEU:N	1:A:6:LEU:HD22	0.66	2.05	5	1
1:A:7:PHE:CE1	1:A:50:LEU:CD2	0.66	2.77	8	2
1:A:84:ALA:CB	1:A:167:PHE:CZ	0.66	2.76	17	2
1:A:51:ILE:CG2	1:A:159:TRP:CH2	0.66	2.76	11	1
1:A:41:VAL:CG2	1:A:44:LEU:HD11	0.66	2.19	20	1
1:A:26:PHE:CZ	1:A:164:LYS:HE3	0.66	2.26	20	1
1:A:43:ASP:O	1:A:47:TYR:CD2	0.66	2.48	20	7
1:A:23:ARG:HH21	1:A:33:LEU:CG	0.66	2.03	5	2
1:A:31:VAL:O	1:A:31:VAL:HG22	0.66	1.90	19	2
1:A:25:GLU:HG2	1:A:156:ILE:CD1	0.66	2.21	7	2
1:A:31:VAL:HG12	1:A:31:VAL:O	0.66	1.90	3	6
1:A:117:VAL:CG1	1:A:167:PHE:CZ	0.66	2.78	12	5
1:A:117:VAL:CG1	1:A:167:PHE:CE1	0.66	2.79	4	8
1:A:4:ILE:HG22	1:A:51:ILE:HD11	0.66	1.68	10	5
1:A:162:GLN:HG2	1:A:163:LEU:HD23	0.65	1.65	9	1
1:A:26:PHE:CZ	1:A:51:ILE:HD11	0.65	2.26	16	1
1:A:23:ARG:CD	1:A:31:VAL:HG11	0.65	2.22	2	1
1:A:83:VAL:O	1:A:116:THR:HA	0.65	1.91	10	1
1:A:23:ARG:NH2	1:A:33:LEU:HD21	0.65	2.07	17	2
1:A:44:LEU:HD11	1:A:76:VAL:HB	0.65	1.67	14	2
1:A:117:VAL:HG21	1:A:163:LEU:HA	0.65	1.67	15	1
1:A:73:LEU:HD11	1:A:109:ILE:CG2	0.65	2.16	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:117:VAL:HG21	1:A:163:LEU:HB3	0.65	1.69	5	1
1:A:51:ILE:HG12	1:A:84:ALA:HB3	0.65	1.67	16	9
1:A:52:ILE:HD12	1:A:85:TYR:CE1	0.64	2.27	18	1
1:A:5:GLY:O	1:A:6:LEU:HD23	0.64	1.93	13	2
1:A:7:PHE:CD2	1:A:44:LEU:CD2	0.64	2.80	15	18
1:A:3:LYS:HG3	1:A:32:THR:HG21	0.63	1.70	12	1
1:A:7:PHE:O	1:A:52:ILE:HG22	0.63	1.94	3	6
1:A:73:LEU:HD12	1:A:109:ILE:HG21	0.63	1.68	3	3
1:A:21:ILE:HG23	1:A:156:ILE:CD1	0.63	2.20	15	2
1:A:73:LEU:CD2	1:A:109:ILE:CD1	0.63	2.76	10	4
1:A:76:VAL:HG21	1:A:78:PHE:CE1	0.63	2.29	9	8
1:A:26:PHE:CD1	1:A:160:VAL:CG2	0.63	2.82	12	1
1:A:7:PHE:CD1	1:A:50:LEU:CD2	0.63	2.81	7	1
1:A:26:PHE:CE1	1:A:164:LYS:CD	0.62	2.83	17	3
1:A:48:GLN:HE21	1:A:48:GLN:N	0.62	1.93	17	2
1:A:7:PHE:CD1	1:A:50:LEU:HD12	0.62	2.29	6	7
1:A:158:SER:O	1:A:161:ALA:HB3	0.62	1.94	9	1
1:A:33:LEU:HD13	1:A:35:ASP:CG	0.62	2.14	1	3
1:A:157:LYS:O	1:A:161:ALA:HB2	0.62	1.95	18	6
1:A:117:VAL:HG23	1:A:166:GLU:HG3	0.62	1.70	15	1
1:A:110:SER:O	1:A:116:THR:HG23	0.61	1.94	15	2
1:A:43:ASP:O	1:A:47:TYR:CE2	0.61	2.54	12	19
1:A:22:ILE:HD11	1:A:26:PHE:CE1	0.61	2.30	4	1
1:A:25:GLU:OE2	1:A:157:LYS:HE3	0.61	1.94	11	3
1:A:4:ILE:HG21	1:A:26:PHE:CZ	0.61	2.31	10	1
1:A:5:GLY:CA	1:A:50:LEU:HD23	0.61	2.26	11	6
1:A:23:ARG:HH21	1:A:33:LEU:HG	0.61	1.55	7	2
1:A:81:LYS:HZ3	1:A:83:VAL:HG22	0.61	1.55	19	1
1:A:21:ILE:CG2	1:A:156:ILE:CD1	0.61	2.72	15	2
1:A:110:SER:CB	1:A:116:THR:HG21	0.61	2.26	1	2
1:A:8:TYR:OH	1:A:34:HIS:CE1	0.61	2.54	18	7
1:A:41:VAL:HG11	1:A:75:ASP:HB2	0.61	1.72	17	1
1:A:81:LYS:HZ3	1:A:83:VAL:N	0.60	1.93	1	2
1:A:110:SER:HB2	1:A:116:THR:HG21	0.60	1.71	1	1
1:A:5:GLY:CA	1:A:32:THR:O	0.60	2.49	15	16
1:A:162:GLN:CG	1:A:163:LEU:HD23	0.60	2.27	9	1
1:A:85:TYR:CD1	1:A:85:TYR:O	0.60	2.55	13	1
1:A:33:LEU:HD23	1:A:33:LEU:N	0.60	2.11	2	3
1:A:41:VAL:CG2	1:A:76:VAL:CG1	0.60	2.80	9	3
1:A:4:ILE:HD12	1:A:30:VAL:CG1	0.60	2.12	11	2
1:A:52:ILE:O	1:A:86:PHE:CD2	0.60	2.55	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:ILE:HD11	1:A:160:VAL:CG2	0.59	2.27	12	1
1:A:25:GLU:HG3	1:A:160:VAL:HG11	0.59	1.74	18	1
1:A:44:LEU:CD1	1:A:76:VAL:HG21	0.59	2.26	17	4
1:A:86:PHE:CD2	1:A:86:PHE:O	0.59	2.55	2	1
1:A:26:PHE:CE2	1:A:164:LYS:HE3	0.59	2.31	20	1
1:A:85:TYR:N	1:A:117:VAL:O	0.59	2.35	10	1
1:A:7:PHE:CG	1:A:50:LEU:HD13	0.59	2.32	20	3
1:A:44:LEU:HD12	1:A:78:PHE:CZ	0.59	2.33	17	1
1:A:48:GLN:HG2	1:A:49:TYR:CE2	0.59	2.32	12	4
1:A:3:LYS:CE	1:A:47:TYR:CZ	0.58	2.86	2	1
1:A:5:GLY:O	1:A:6:LEU:HD13	0.58	1.96	5	1
1:A:36:VAL:HG23	1:A:36:VAL:O	0.58	1.98	11	4
1:A:23:ARG:HB2	1:A:31:VAL:HG21	0.58	1.74	3	1
1:A:49:TYR:O	1:A:50:LEU:HD23	0.58	1.97	20	4
1:A:85:TYR:HB2	1:A:117:VAL:O	0.58	1.98	10	2
1:A:21:ILE:HD12	1:A:21:ILE:N	0.58	2.14	14	10
1:A:73:LEU:HD12	1:A:109:ILE:CG2	0.58	2.29	3	1
1:A:82:LEU:HD13	1:A:167:PHE:CD2	0.58	2.34	15	1
1:A:26:PHE:CZ	1:A:164:LYS:NZ	0.58	2.72	20	1
1:A:5:GLY:C	1:A:6:LEU:HD23	0.58	2.19	18	4
1:A:76:VAL:HG11	1:A:78:PHE:CD1	0.58	2.34	10	3
1:A:52:ILE:HD11	1:A:85:TYR:CZ	0.58	2.34	15	1
1:A:6:LEU:HD12	1:A:6:LEU:N	0.57	2.14	20	2
1:A:50:LEU:O	1:A:51:ILE:HD13	0.57	1.99	18	1
1:A:3:LYS:N	1:A:30:VAL:HG12	0.57	2.14	2	1
1:A:26:PHE:CD1	1:A:164:LYS:CD	0.57	2.76	17	2
1:A:7:PHE:CZ	1:A:44:LEU:HB3	0.57	2.35	16	19
1:A:163:LEU:O	1:A:167:PHE:CG	0.57	2.58	14	15
1:A:6:LEU:N	1:A:6:LEU:CD1	0.57	2.67	19	2
1:A:23:ARG:CB	1:A:31:VAL:HG21	0.57	2.29	3	2
1:A:7:PHE:CE2	1:A:44:LEU:HD22	0.57	2.34	17	1
1:A:6:LEU:HD12	1:A:33:LEU:HD23	0.57	1.76	18	1
1:A:81:LYS:HD3	1:A:83:VAL:HG23	0.56	1.77	1	2
1:A:43:ASP:O	1:A:47:TYR:CZ	0.56	2.58	2	11
1:A:33:LEU:HD13	1:A:35:ASP:HB3	0.56	1.72	16	5
1:A:2:LYS:O	1:A:49:TYR:CD1	0.56	2.59	19	2
1:A:26:PHE:CZ	1:A:163:LEU:CD1	0.56	2.88	17	2
1:A:33:LEU:HD12	1:A:35:ASP:OD1	0.56	2.00	3	1
1:A:26:PHE:CZ	1:A:164:LYS:CE	0.56	2.88	20	1
1:A:86:PHE:O	1:A:86:PHE:CD1	0.56	2.58	20	1
1:A:117:VAL:HG11	1:A:167:PHE:CD1	0.56	2.35	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:117:VAL:HG23	1:A:166:GLU:HB2	0.56	1.77	4	1
1:A:73:LEU:CD2	1:A:109:ILE:HG12	0.56	2.13	10	1
1:A:82:LEU:HD13	1:A:167:PHE:CG	0.56	2.35	15	1
1:A:44:LEU:HD11	1:A:76:VAL:CG2	0.56	2.29	17	3
1:A:81:LYS:HZ3	1:A:83:VAL:HG23	0.56	1.60	1	2
1:A:85:TYR:CD1	1:A:85:TYR:C	0.56	2.80	13	1
1:A:73:LEU:HD13	1:A:74:ASP:H	0.56	1.61	15	6
1:A:76:VAL:CG1	1:A:78:PHE:CD1	0.56	2.89	14	3
1:A:28:ASN:HB3	1:A:30:VAL:HG12	0.56	1.78	15	1
1:A:86:PHE:O	1:A:86:PHE:CG	0.55	2.60	2	2
1:A:78:PHE:HB2	1:A:109:ILE:HD12	0.55	1.78	8	2
1:A:84:ALA:HB2	1:A:167:PHE:HZ	0.55	1.61	3	8
1:A:82:LEU:C	1:A:82:LEU:CD1	0.55	2.75	16	17
1:A:73:LEU:HD23	1:A:109:ILE:CD1	0.55	2.32	10	1
1:A:51:ILE:N	1:A:51:ILE:CD1	0.55	2.68	17	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:83:VAL:CG1	0.55	2.70	4	2
1:A:73:LEU:HD22	1:A:109:ILE:HD13	0.55	1.77	12	1
1:A:48:GLN:C	1:A:49:TYR:CG	0.55	2.79	20	12
1:A:86:PHE:HB2	1:A:159:TRP:CZ2	0.55	2.36	13	2
1:A:33:LEU:HD12	1:A:35:ASP:CB	0.55	2.30	17	2
1:A:74:ASP:HA	1:A:109:ILE:HD11	0.55	1.77	20	1
1:A:78:PHE:CD2	1:A:81:LYS:HG2	0.55	2.36	16	10
1:A:81:LYS:N	1:A:81:LYS:CD	0.55	2.69	8	1
1:A:23:ARG:CG	1:A:31:VAL:HG11	0.55	2.30	12	2
1:A:52:ILE:HD12	1:A:85:TYR:CE2	0.55	2.36	1	1
1:A:86:PHE:HD2	1:A:159:TRP:CD2	0.55	2.18	17	1
1:A:159:TRP:CE2	1:A:163:LEU:HD21	0.55	2.37	9	1
1:A:84:ALA:CB	1:A:117:VAL:HG22	0.55	2.31	10	1
1:A:84:ALA:CA	1:A:117:VAL:CG1	0.55	2.85	17	1
1:A:73:LEU:CD2	1:A:109:ILE:CG1	0.54	2.84	12	2
1:A:86:PHE:CB	1:A:159:TRP:CD1	0.54	2.89	17	1
1:A:52:ILE:HD11	1:A:83:VAL:CG1	0.54	2.32	1	1
1:A:73:LEU:HD21	1:A:109:ILE:CD1	0.54	2.32	4	1
1:A:117:VAL:HG21	1:A:166:GLU:HB2	0.54	1.76	12	1
1:A:23:ARG:HG3	1:A:33:LEU:HD21	0.54	1.77	20	1
1:A:159:TRP:O	1:A:163:LEU:HD23	0.54	2.02	5	4
1:A:33:LEU:HD12	1:A:35:ASP:HB2	0.54	1.79	17	1
1:A:81:LYS:HD3	1:A:83:VAL:HG13	0.54	1.77	20	1
1:A:26:PHE:CZ	1:A:163:LEU:HD12	0.54	2.38	17	1
1:A:163:LEU:O	1:A:167:PHE:CD2	0.54	2.60	13	3
1:A:117:VAL:CG1	1:A:166:GLU:CB	0.54	2.85	7	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:4:ILE:HG23	1:A:49:TYR:HB2	0.54	1.78	12	1
1:A:109:ILE:O	1:A:113:GLY:CA	0.54	2.56	20	2
1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:CD1	0.54	2.71	1	2
1:A:31:VAL:CG1	1:A:33:LEU:HD21	0.54	2.33	13	1
1:A:6:LEU:HD13	1:A:33:LEU:HB3	0.54	1.79	8	1
1:A:84:ALA:CB	1:A:167:PHE:HZ	0.54	2.14	10	1
1:A:41:VAL:CG2	1:A:76:VAL:CG2	0.53	2.87	1	3
1:A:7:PHE:CD1	1:A:50:LEU:CD1	0.53	2.91	15	3
1:A:51:ILE:HD12	1:A:84:ALA:HB3	0.53	1.80	18	1
1:A:81:LYS:CE	1:A:83:VAL:HG23	0.53	2.33	1	1
1:A:82:LEU:HD22	1:A:167:PHE:CG	0.53	2.37	6	6
1:A:5:GLY:HA3	1:A:32:THR:O	0.53	2.03	20	7
1:A:48:GLN:O	1:A:49:TYR:CD1	0.53	2.61	20	1
1:A:78:PHE:HB2	1:A:109:ILE:HG23	0.53	1.79	10	1
1:A:47:TYR:O	1:A:49:TYR:N	0.53	2.40	20	1
1:A:22:ILE:HD11	1:A:26:PHE:CE2	0.53	2.39	1	4
1:A:46:ASP:HB3	1:A:47:TYR:CE1	0.53	2.39	20	5
1:A:81:LYS:CE	1:A:81:LYS:O	0.53	2.56	20	4
1:A:161:ALA:O	1:A:165:SER:CB	0.53	2.56	13	13
1:A:44:LEU:O	1:A:47:TYR:O	0.53	2.27	16	16
1:A:5:GLY:CA	1:A:32:THR:OG1	0.53	2.56	14	5
1:A:48:GLN:HG2	1:A:49:TYR:CE1	0.53	2.39	5	3
1:A:76:VAL:CG2	1:A:78:PHE:CD1	0.53	2.92	19	8
1:A:112:ARG:O	1:A:113:GLY:C	0.53	2.47	20	4
1:A:41:VAL:HG22	1:A:76:VAL:CG2	0.53	2.34	1	1
1:A:76:VAL:HG13	1:A:77:ASP:N	0.53	2.19	10	1
1:A:82:LEU:CD1	1:A:82:LEU:C	0.53	2.73	17	1
1:A:26:PHE:CE1	1:A:164:LYS:HD2	0.53	2.38	13	1
1:A:6:LEU:CD1	1:A:33:LEU:HD23	0.53	2.34	18	2
1:A:41:VAL:HG23	1:A:44:LEU:HD21	0.53	1.80	20	1
1:A:6:LEU:HD13	1:A:33:LEU:HD23	0.52	1.80	20	2
1:A:157:LYS:O	1:A:161:ALA:CB	0.52	2.58	17	5
1:A:17:SER:O	1:A:21:ILE:HD12	0.52	2.04	19	3
1:A:2:LYS:HB3	1:A:49:TYR:CE1	0.52	2.40	19	2
1:A:3:LYS:HD3	1:A:47:TYR:CE1	0.52	2.40	2	1
1:A:85:TYR:CZ	1:A:118:GLY:HA3	0.52	2.38	13	1
1:A:25:GLU:OE2	1:A:160:VAL:CG2	0.52	2.57	14	1
1:A:30:VAL:O	1:A:31:VAL:HG23	0.52	2.04	15	12
1:A:48:GLN:HG2	1:A:49:TYR:CZ	0.52	2.40	16	7
1:A:30:VAL:O	1:A:31:VAL:HG13	0.52	2.05	20	2
1:A:23:ARG:HD2	1:A:31:VAL:HG11	0.52	1.79	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:165:SER:O	1:A:168:GLY:N	0.52	2.43	20	3
1:A:52:ILE:O	1:A:86:PHE:CE2	0.52	2.62	6	1
1:A:3:LYS:CE	1:A:32:THR:CG2	0.52	2.88	14	1
1:A:22:ILE:HD11	1:A:26:PHE:HE1	0.52	1.64	4	1
1:A:117:VAL:HG21	1:A:166:GLU:CB	0.52	2.34	12	2
1:A:44:LEU:CG	1:A:76:VAL:HG21	0.52	2.35	17	1
1:A:156:ILE:N	1:A:156:ILE:CD1	0.51	2.70	11	1
1:A:48:GLN:N	1:A:48:GLN:NE2	0.51	2.57	17	2
1:A:7:PHE:CD2	1:A:34:HIS:CB	0.51	2.93	19	1
1:A:4:ILE:CG2	1:A:51:ILE:CD1	0.51	2.89	15	1
1:A:78:PHE:CE2	1:A:81:LYS:HE3	0.51	2.39	4	3
1:A:81:LYS:NZ	1:A:83:VAL:HG23	0.51	2.20	1	1
1:A:3:LYS:CD	1:A:47:TYR:CE1	0.51	2.94	2	1
1:A:156:ILE:O	1:A:160:VAL:CG2	0.51	2.58	16	10
1:A:25:GLU:CD	1:A:157:LYS:HG2	0.51	2.25	11	1
1:A:23:ARG:CD	1:A:24:ASP:N	0.51	2.73	18	2
1:A:6:LEU:HD22	1:A:32:THR:O	0.51	2.05	2	1
1:A:26:PHE:CD2	1:A:164:LYS:HD2	0.51	2.40	20	1
1:A:30:VAL:O	1:A:31:VAL:CG2	0.51	2.58	15	6
1:A:78:PHE:CD2	1:A:81:LYS:HG3	0.51	2.41	17	2
1:A:78:PHE:CD1	1:A:81:LYS:HE3	0.51	2.41	17	1
1:A:82:LEU:CD1	1:A:167:PHE:CE2	0.51	2.93	15	1
1:A:159:TRP:O	1:A:163:LEU:CD2	0.51	2.59	17	5
1:A:23:ARG:CD	1:A:23:ARG:C	0.51	2.80	18	3
1:A:117:VAL:HG23	1:A:166:GLU:CG	0.51	2.35	15	1
1:A:41:VAL:HG22	1:A:44:LEU:HD11	0.51	1.82	20	2
1:A:44:LEU:HD22	1:A:73:LEU:HB3	0.51	1.81	15	1
1:A:4:ILE:HD12	1:A:30:VAL:HG21	0.50	1.83	2	2
1:A:73:LEU:C	1:A:73:LEU:CD2	0.50	2.80	17	9
1:A:27:GLY:O	1:A:28:ASN:CB	0.50	2.59	15	2
1:A:117:VAL:CG2	1:A:166:GLU:CD	0.50	2.80	17	1
1:A:7:PHE:CE2	1:A:44:LEU:HB3	0.50	2.41	14	9
1:A:25:GLU:OE1	1:A:157:LYS:HE3	0.50	2.06	17	1
1:A:86:PHE:HD2	1:A:159:TRP:CD1	0.50	1.94	17	1
1:A:36:VAL:O	1:A:36:VAL:HG12	0.50	2.06	7	1
1:A:6:LEU:HG	1:A:51:ILE:HD12	0.50	1.81	20	1
1:A:19:ALA:O	1:A:23:ARG:CB	0.50	2.60	18	1
1:A:82:LEU:HB2	1:A:167:PHE:CD1	0.50	2.42	4	3
1:A:6:LEU:HD22	1:A:6:LEU:H	0.50	1.65	5	1
1:A:44:LEU:HD12	1:A:44:LEU:C	0.50	2.28	1	10
1:A:4:ILE:HG21	1:A:26:PHE:CE1	0.50	2.41	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:80:GLY:N	1:A:113:GLY:O	0.49	2.45	1	8
1:A:163:LEU:N	1:A:163:LEU:CD2	0.49	2.74	10	2
1:A:39:ALA:CB	1:A:43:ASP:OD1	0.49	2.60	15	1
1:A:45:ASN:OD1	1:A:76:VAL:CG1	0.49	2.60	1	2
1:A:41:VAL:HG22	1:A:76:VAL:HG21	0.49	1.84	1	1
1:A:81:LYS:HE2	1:A:109:ILE:HG22	0.49	1.84	16	1
1:A:117:VAL:HG11	1:A:166:GLU:HB2	0.49	1.83	19	5
1:A:17:SER:O	1:A:21:ILE:CD1	0.49	2.60	18	11
1:A:41:VAL:CG2	1:A:76:VAL:HG13	0.49	2.37	4	2
1:A:31:VAL:HG23	1:A:31:VAL:O	0.49	2.07	7	3
1:A:39:ALA:HB1	1:A:43:ASP:OD2	0.49	2.07	12	2
1:A:39:ALA:HB1	1:A:43:ASP:CG	0.49	2.28	13	1
1:A:36:VAL:O	1:A:36:VAL:HG13	0.49	2.07	15	1
1:A:21:ILE:O	1:A:25:GLU:N	0.49	2.45	18	1
1:A:44:LEU:HD13	1:A:78:PHE:CZ	0.49	2.43	4	7
1:A:2:LYS:CB	1:A:49:TYR:CE1	0.49	2.95	19	2
1:A:51:ILE:HG23	1:A:84:ALA:CB	0.49	2.15	17	2
1:A:52:ILE:HD11	1:A:73:LEU:HD21	0.49	1.83	19	1
1:A:25:GLU:HB2	1:A:160:VAL:HG21	0.49	1.85	11	3
1:A:33:LEU:HD12	1:A:35:ASP:HB3	0.49	1.84	20	1
1:A:4:ILE:HD12	1:A:30:VAL:CB	0.49	2.37	2	1
1:A:46:ASP:HB2	1:A:47:TYR:CE1	0.49	2.42	16	4
1:A:25:GLU:OE2	1:A:157:LYS:HG2	0.49	2.08	6	1
1:A:6:LEU:HD13	1:A:6:LEU:H	0.49	1.66	19	1
1:A:6:LEU:CD1	1:A:8:TYR:OH	0.49	2.61	12	1
1:A:110:SER:O	1:A:116:THR:CG2	0.49	2.61	17	2
1:A:86:PHE:CE2	1:A:159:TRP:CB	0.49	2.95	17	1
1:A:79:ASN:O	1:A:81:LYS:N	0.49	2.45	15	4
1:A:84:ALA:CA	1:A:117:VAL:CG2	0.49	2.85	10	1
1:A:39:ALA:CB	1:A:43:ASP:OD2	0.49	2.60	12	1
1:A:2:LYS:O	1:A:4:ILE:N	0.49	2.45	19	2
1:A:82:LEU:HB2	1:A:167:PHE:CE1	0.48	2.43	6	2
1:A:25:GLU:HG3	1:A:156:ILE:CD1	0.48	2.32	7	1
1:A:165:SER:O	1:A:166:GLU:C	0.48	2.51	20	1
1:A:34:HIS:O	1:A:35:ASP:C	0.48	2.50	20	16
1:A:44:LEU:HB2	1:A:50:LEU:CD1	0.48	2.39	14	7
1:A:52:ILE:CD1	1:A:85:TYR:CE2	0.48	2.96	1	1
1:A:4:ILE:HG23	1:A:49:TYR:CB	0.48	2.38	12	1
1:A:86:PHE:HA	1:A:159:TRP:CZ2	0.48	2.44	10	2
1:A:78:PHE:CD1	1:A:81:LYS:HD2	0.48	2.44	12	2
1:A:25:GLU:CD	1:A:157:LYS:HE3	0.48	2.29	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:ASP:O	1:A:31:VAL:CG1	0.48	2.61	18	2
1:A:7:PHE:CD2	1:A:34:HIS:HB2	0.48	2.44	19	1
1:A:4:ILE:HG22	1:A:51:ILE:CD1	0.48	2.38	3	3
1:A:76:VAL:HG23	1:A:78:PHE:CD1	0.48	2.43	3	6
1:A:25:GLU:CG	1:A:160:VAL:HG21	0.48	2.38	18	1
1:A:31:VAL:O	1:A:31:VAL:CG2	0.48	2.60	19	1
1:A:73:LEU:C	1:A:73:LEU:HD12	0.48	2.29	5	3
1:A:23:ARG:NH2	1:A:33:LEU:CG	0.48	2.75	5	1
1:A:41:VAL:CG2	1:A:76:VAL:HG22	0.48	2.38	5	1
1:A:52:ILE:CD1	1:A:85:TYR:CD2	0.48	2.96	7	1
1:A:86:PHE:CE2	1:A:159:TRP:CH2	0.48	3.02	10	1
1:A:7:PHE:O	1:A:52:ILE:CG2	0.48	2.61	17	2
1:A:86:PHE:CE2	1:A:159:TRP:CZ3	0.47	3.02	10	2
1:A:85:TYR:O	1:A:159:TRP:NE1	0.47	2.28	11	1
1:A:85:TYR:CE2	1:A:118:GLY:HA3	0.47	2.44	13	1
1:A:82:LEU:HD22	1:A:167:PHE:CD1	0.47	2.44	1	3
1:A:159:TRP:CZ3	1:A:163:LEU:CD1	0.47	2.92	14	8
1:A:86:PHE:HA	1:A:159:TRP:NE1	0.47	2.23	11	1
1:A:160:VAL:CG1	1:A:161:ALA:N	0.47	2.77	12	1
1:A:157:LYS:NZ	1:A:161:ALA:HB2	0.47	2.24	14	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:81:LYS:O	0.47	2.48	19	3
1:A:32:THR:C	1:A:33:LEU:CD2	0.47	2.79	2	1
1:A:81:LYS:O	1:A:114:GLY:CA	0.47	2.62	5	2
1:A:109:ILE:O	1:A:113:GLY:HA3	0.47	2.08	20	2
1:A:21:ILE:O	1:A:25:GLU:CB	0.47	2.63	18	1
1:A:3:LYS:HG2	1:A:47:TYR:CD1	0.47	2.43	12	2
1:A:73:LEU:O	1:A:109:ILE:HD11	0.47	2.09	19	1
1:A:31:VAL:O	1:A:31:VAL:CG1	0.47	2.63	11	4
1:A:3:LYS:CG	1:A:32:THR:HG21	0.47	2.38	12	1
1:A:86:PHE:CD1	1:A:159:TRP:NE1	0.47	2.83	18	1
1:A:117:VAL:HG11	1:A:166:GLU:HB3	0.47	1.87	11	3
1:A:159:TRP:CD1	1:A:162:GLN:NE2	0.47	2.83	9	1
1:A:4:ILE:HG21	1:A:51:ILE:HD11	0.47	1.86	15	1
1:A:86:PHE:CA	1:A:159:TRP:HE1	0.47	2.23	17	1
1:A:25:GLU:HG3	1:A:156:ILE:HB	0.47	1.84	19	1
1:A:19:ALA:O	1:A:22:ILE:CG2	0.47	2.63	5	2
1:A:81:LYS:NZ	1:A:115:LYS:O	0.47	2.48	7	1
1:A:5:GLY:HA3	1:A:50:LEU:HD23	0.47	1.85	13	4
1:A:78:PHE:CB	1:A:109:ILE:HG23	0.47	2.38	10	1
1:A:3:LYS:HE3	1:A:47:TYR:CZ	0.47	2.43	2	1
1:A:73:LEU:CD2	1:A:73:LEU:C	0.47	2.79	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:2:LYS:HE3	1:A:164:LYS:NZ	0.47	2.24	4	1
1:A:33:LEU:O	1:A:35:ASP:N	0.47	2.48	20	4
1:A:81:LYS:NZ	1:A:83:VAL:N	0.46	2.62	1	1
1:A:6:LEU:N	1:A:6:LEU:CD2	0.46	2.74	5	1
1:A:72:GLU:OE1	1:A:73:LEU:CD1	0.46	2.63	13	1
1:A:81:LYS:HZ2	1:A:109:ILE:CG2	0.46	2.23	9	1
1:A:2:LYS:HB2	1:A:49:TYR:CZ	0.46	2.45	14	2
1:A:78:PHE:CD2	1:A:81:LYS:CE	0.46	2.98	6	2
1:A:73:LEU:HD12	1:A:73:LEU:O	0.46	2.11	5	1
1:A:41:VAL:HG23	1:A:76:VAL:CG1	0.46	2.41	9	2
1:A:110:SER:CB	1:A:116:THR:OG1	0.46	2.63	12	1
1:A:78:PHE:CG	1:A:81:LYS:HD2	0.46	2.46	14	1
1:A:81:LYS:O	1:A:81:LYS:NZ	0.46	2.47	16	1
1:A:86:PHE:HB2	1:A:159:TRP:HE1	0.46	1.65	17	1
1:A:23:ARG:CD	1:A:31:VAL:CG1	0.46	2.94	2	1
1:A:33:LEU:HD12	1:A:33:LEU:H	0.46	1.71	6	2
1:A:81:LYS:O	1:A:81:LYS:CE	0.46	2.64	16	1
1:A:50:LEU:HD12	1:A:78:PHE:CZ	0.46	2.46	10	3
1:A:44:LEU:O	1:A:78:PHE:CZ	0.46	2.68	13	1
1:A:117:VAL:HG22	1:A:118:GLY:H	0.46	1.70	17	1
1:A:5:GLY:C	1:A:6:LEU:HD12	0.46	2.31	20	1
1:A:26:PHE:CZ	1:A:164:LYS:HE2	0.46	2.44	13	1
1:A:3:LYS:CE	1:A:47:TYR:CE1	0.46	2.99	2	1
1:A:163:LEU:HB2	1:A:167:PHE:CE2	0.46	2.45	5	2
1:A:84:ALA:HB1	1:A:163:LEU:HD22	0.46	1.86	11	1
1:A:46:ASP:CB	1:A:47:TYR:CE1	0.46	2.99	20	1
1:A:78:PHE:CG	1:A:81:LYS:HG2	0.46	2.46	20	1
1:A:30:VAL:O	1:A:31:VAL:CG1	0.46	2.64	20	4
1:A:117:VAL:HG12	1:A:167:PHE:CE1	0.46	2.46	8	2
1:A:25:GLU:OE2	1:A:157:LYS:CG	0.46	2.64	9	1
1:A:117:VAL:CG2	1:A:166:GLU:CG	0.46	2.94	12	2
1:A:7:PHE:CE1	1:A:50:LEU:HD12	0.46	2.46	6	1
1:A:78:PHE:CG	1:A:81:LYS:HG3	0.45	2.46	17	3
1:A:86:PHE:CA	1:A:159:TRP:NE1	0.45	2.78	17	1
1:A:34:HIS:O	1:A:36:VAL:N	0.45	2.49	19	20
1:A:34:HIS:ND1	1:A:34:HIS:C	0.45	2.70	11	3
1:A:154:ASP:O	1:A:158:SER:CB	0.45	2.64	13	1
1:A:110:SER:CA	1:A:116:THR:OG1	0.45	2.65	14	1
1:A:5:GLY:HA3	1:A:50:LEU:CD2	0.45	2.42	10	5
1:A:34:HIS:C	1:A:36:VAL:N	0.45	2.70	11	20
1:A:49:TYR:HB3	1:A:82:LEU:HD11	0.45	1.89	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:ILE:N	1:A:21:ILE:CD1	0.45	2.79	16	3
1:A:81:LYS:CE	1:A:81:LYS:C	0.45	2.84	20	1
1:A:86:PHE:CD1	1:A:86:PHE:C	0.45	2.90	20	1
1:A:73:LEU:HB2	1:A:78:PHE:CZ	0.45	2.47	1	1
1:A:156:ILE:HD13	1:A:156:ILE:H	0.45	1.71	17	4
1:A:81:LYS:HZ3	1:A:82:LEU:C	0.45	2.15	1	1
1:A:3:LYS:HG2	1:A:47:TYR:CE1	0.45	2.47	12	1
1:A:109:ILE:HD12	1:A:109:ILE:N	0.45	2.26	18	1
1:A:81:LYS:CD	1:A:81:LYS:C	0.45	2.86	1	4
1:A:81:LYS:CE	1:A:83:VAL:HG13	0.45	2.41	3	2
1:A:33:LEU:CD1	1:A:35:ASP:CB	0.45	2.94	6	1
1:A:110:SER:O	1:A:114:GLY:N	0.45	2.50	12	1
1:A:52:ILE:HD11	1:A:85:TYR:CD2	0.45	2.46	7	1
1:A:46:ASP:HB3	1:A:47:TYR:CD1	0.45	2.47	20	2
1:A:21:ILE:HG21	1:A:156:ILE:HG13	0.45	1.89	11	1
1:A:28:ASN:HB2	1:A:30:VAL:HG22	0.45	1.89	19	1
1:A:23:ARG:CG	1:A:33:LEU:HD21	0.45	2.42	20	1
1:A:52:ILE:HG13	1:A:85:TYR:CD1	0.44	2.48	1	1
1:A:8:TYR:CZ	1:A:34:HIS:ND1	0.44	2.85	2	1
1:A:33:LEU:C	1:A:35:ASP:N	0.44	2.69	13	5
1:A:109:ILE:O	1:A:110:SER:C	0.44	2.54	15	2
1:A:117:VAL:CG1	1:A:166:GLU:HB3	0.44	2.43	10	2
1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:HD13	0.44	2.27	8	1
1:A:28:ASN:CB	1:A:30:VAL:HG12	0.44	2.41	15	1
1:A:154:ASP:OD1	1:A:157:LYS:CD	0.44	2.65	3	1
1:A:6:LEU:HD12	1:A:33:LEU:HB3	0.44	1.89	4	2
1:A:51:ILE:HG22	1:A:86:PHE:CE2	0.44	2.48	6	1
1:A:79:ASN:O	1:A:113:GLY:O	0.44	2.36	11	1
1:A:6:LEU:O	1:A:33:LEU:HA	0.44	2.13	12	2
1:A:7:PHE:CG	1:A:34:HIS:HB3	0.44	2.48	19	1
1:A:49:TYR:C	1:A:50:LEU:HG	0.44	2.32	20	1
1:A:52:ILE:CD1	1:A:83:VAL:CG1	0.44	2.95	1	1
1:A:25:GLU:OE1	1:A:25:GLU:N	0.44	2.50	9	1
1:A:48:GLN:CG	1:A:49:TYR:CE2	0.44	3.00	12	1
1:A:6:LEU:HD12	1:A:6:LEU:H	0.44	1.72	15	1
1:A:26:PHE:HZ	1:A:163:LEU:CD1	0.44	2.25	17	1
1:A:81:LYS:HD3	1:A:83:VAL:CG1	0.44	2.43	20	1
1:A:81:LYS:HZ3	1:A:83:VAL:CG2	0.44	2.25	1	1
1:A:25:GLU:OE1	1:A:157:LYS:HA	0.44	2.12	6	1
1:A:45:ASN:OD1	1:A:46:ASP:N	0.44	2.50	16	3
1:A:25:GLU:HB3	1:A:160:VAL:CG2	0.44	2.39	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:GLU:OE2	1:A:156:ILE:HD12	0.44	2.13	4	1
1:A:73:LEU:HD22	1:A:73:LEU:O	0.44	2.13	15	3
1:A:84:ALA:CB	1:A:167:PHE:CE2	0.44	2.94	17	1
1:A:33:LEU:CD1	1:A:35:ASP:OD1	0.44	2.65	3	1
1:A:38:GLN:O	1:A:38:GLN:CG	0.44	2.65	9	2
1:A:44:LEU:CB	1:A:50:LEU:HD11	0.44	2.42	12	1
1:A:41:VAL:HG22	1:A:76:VAL:HG13	0.44	1.89	4	1
1:A:158:SER:O	1:A:161:ALA:N	0.44	2.50	9	2
1:A:159:TRP:O	1:A:162:GLN:N	0.44	2.50	9	3
1:A:34:HIS:C	1:A:34:HIS:ND1	0.44	2.71	16	3
1:A:30:VAL:O	1:A:30:VAL:HG12	0.44	2.12	11	1
1:A:85:TYR:O	1:A:85:TYR:CG	0.43	2.71	13	1
1:A:84:ALA:CB	1:A:163:LEU:HB3	0.43	2.38	17	1
1:A:52:ILE:HD11	1:A:73:LEU:CD2	0.43	2.43	19	1
1:A:2:LYS:CB	1:A:30:VAL:CG1	0.43	2.97	2	1
1:A:73:LEU:C	1:A:75:ASP:N	0.43	2.71	16	6
1:A:78:PHE:CD2	1:A:81:LYS:HD3	0.43	2.48	11	1
1:A:78:PHE:O	1:A:113:GLY:HA2	0.43	2.12	17	1
1:A:85:TYR:O	1:A:118:GLY:HA3	0.43	2.13	17	1
1:A:117:VAL:CG1	1:A:167:PHE:CD1	0.43	3.01	20	1
1:A:33:LEU:H	1:A:33:LEU:HD23	0.43	1.74	3	1
1:A:21:ILE:CG2	1:A:25:GLU:OE1	0.43	2.62	14	1
1:A:86:PHE:CD2	1:A:159:TRP:CZ2	0.43	3.06	10	1
1:A:81:LYS:CE	1:A:113:GLY:C	0.43	2.87	19	1
1:A:5:GLY:O	1:A:50:LEU:HD13	0.43	2.13	2	1
1:A:36:VAL:CG2	1:A:43:ASP:OD2	0.43	2.60	2	1
1:A:33:LEU:CD1	1:A:35:ASP:HB3	0.43	2.43	16	3
1:A:81:LYS:NZ	1:A:109:ILE:CG2	0.43	2.82	9	1
1:A:30:VAL:C	1:A:31:VAL:HG23	0.43	2.34	15	2
1:A:19:ALA:O	1:A:22:ILE:HG22	0.43	2.13	5	2
1:A:166:GLU:O	1:A:167:PHE:C	0.43	2.57	9	4
1:A:110:SER:HB3	1:A:116:THR:HG21	0.43	1.90	9	1
1:A:79:ASN:HA	1:A:113:GLY:HA2	0.43	1.91	17	1
1:A:2:LYS:C	1:A:30:VAL:HG12	0.43	2.34	20	1
1:A:49:TYR:O	1:A:50:LEU:CD2	0.43	2.67	12	1
1:A:52:ILE:HD11	1:A:83:VAL:HG11	0.43	1.90	1	1
1:A:44:LEU:O	1:A:47:TYR:N	0.43	2.52	4	3
1:A:159:TRP:CD2	1:A:163:LEU:HD11	0.43	2.49	16	3
1:A:27:GLY:O	1:A:28:ASN:C	0.43	2.57	2	2
1:A:2:LYS:CB	1:A:30:VAL:HG11	0.43	2.44	12	1
1:A:44:LEU:CD1	1:A:78:PHE:CE1	0.43	2.94	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:52:ILE:CD1	1:A:85:TYR:CD1	0.43	2.98	18	1
1:A:21:ILE:HD12	1:A:21:ILE:H	0.43	1.74	19	1
1:A:164:LYS:O	1:A:168:GLY:C	0.42	2.57	6	4
1:A:7:PHE:CZ	1:A:44:LEU:HD23	0.42	2.39	4	1
1:A:17:SER:O	1:A:21:ILE:HD13	0.42	2.14	17	3
1:A:33:LEU:O	1:A:34:HIS:C	0.42	2.57	20	3
1:A:50:LEU:HD22	1:A:50:LEU:N	0.42	2.29	6	1
1:A:26:PHE:CE1	1:A:164:LYS:CE	0.42	3.02	13	1
1:A:117:VAL:HG21	1:A:162:GLN:O	0.42	2.14	3	1
1:A:117:VAL:HG13	1:A:167:PHE:CE1	0.42	2.49	20	1
1:A:50:LEU:HD23	1:A:78:PHE:CE2	0.42	2.50	3	1
1:A:86:PHE:HA	1:A:159:TRP:CE2	0.42	2.48	10	1
1:A:86:PHE:HD2	1:A:159:TRP:CE2	0.42	2.33	15	1
1:A:84:ALA:N	1:A:167:PHE:HZ	0.42	2.11	17	1
1:A:72:GLU:C	1:A:74:ASP:N	0.42	2.73	12	4
1:A:26:PHE:CG	1:A:164:LYS:NZ	0.42	2.84	13	1
1:A:44:LEU:HD12	1:A:45:ASN:H	0.42	1.66	16	1
1:A:109:ILE:O	1:A:113:GLY:N	0.42	2.52	20	1
1:A:26:PHE:CZ	1:A:51:ILE:CD1	0.42	3.00	16	1
1:A:21:ILE:O	1:A:25:GLU:OE1	0.42	2.38	9	1
1:A:4:ILE:HD13	1:A:26:PHE:HE1	0.42	1.75	11	1
1:A:117:VAL:CG2	1:A:166:GLU:HG3	0.42	2.45	12	1
1:A:81:LYS:HE2	1:A:109:ILE:CG2	0.42	2.44	16	1
1:A:162:GLN:O	1:A:166:GLU:CG	0.42	2.68	18	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:83:VAL:CG2	0.42	2.83	1	1
1:A:117:VAL:HG12	1:A:167:PHE:CZ	0.42	2.49	2	1
1:A:163:LEU:HB3	1:A:167:PHE:CZ	0.42	2.50	10	1
1:A:3:LYS:HA	1:A:3:LYS:CE	0.42	2.45	12	1
1:A:5:GLY:O	1:A:50:LEU:HA	0.42	2.15	17	1
1:A:8:TYR:O	1:A:34:HIS:NE2	0.42	2.53	19	1
1:A:77:ASP:O	1:A:78:PHE:C	0.42	2.58	20	1
1:A:77:ASP:O	1:A:79:ASN:N	0.42	2.53	2	1
1:A:50:LEU:HD23	1:A:78:PHE:HE2	0.42	1.75	3	1
1:A:4:ILE:N	1:A:30:VAL:HG23	0.42	2.30	15	1
1:A:39:ALA:HB3	1:A:43:ASP:CG	0.42	2.35	15	1
1:A:6:LEU:HD12	1:A:51:ILE:HB	0.41	1.92	2	1
1:A:79:ASN:C	1:A:81:LYS:N	0.41	2.73	18	2
1:A:117:VAL:CG2	1:A:166:GLU:HB2	0.41	2.45	4	1
1:A:26:PHE:CD2	1:A:164:LYS:HD3	0.41	2.50	8	1
1:A:7:PHE:CE2	1:A:44:LEU:CD2	0.41	3.02	17	1
1:A:25:GLU:OE1	1:A:156:ILE:HD12	0.41	2.15	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:159:TRP:CH2	1:A:163:LEU:CD1	0.41	3.03	11	2
1:A:50:LEU:HD12	1:A:78:PHE:CE2	0.41	2.50	10	1
1:A:22:ILE:HG23	1:A:23:ARG:N	0.41	2.30	19	1
1:A:2:LYS:HB3	1:A:30:VAL:CG1	0.41	2.45	2	1
1:A:49:TYR:HB3	1:A:82:LEU:CG	0.41	2.45	6	1
1:A:4:ILE:HB	1:A:30:VAL:CG1	0.41	2.45	11	1
1:A:84:ALA:HA	1:A:117:VAL:HG13	0.41	1.87	17	1
1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:HD12	0.41	2.30	1	1
1:A:159:TRP:CE2	1:A:163:LEU:HD22	0.41	2.51	5	1
1:A:4:ILE:HD12	1:A:30:VAL:CG2	0.41	2.44	2	1
1:A:30:VAL:O	1:A:30:VAL:HG22	0.41	2.15	15	1
1:A:82:LEU:HD22	1:A:167:PHE:HB3	0.41	1.92	15	1
1:A:48:GLN:CB	1:A:81:LYS:HB3	0.41	2.46	10	1
1:A:75:ASP:O	1:A:76:VAL:O	0.41	2.39	14	4
1:A:5:GLY:N	1:A:50:LEU:HD23	0.41	2.31	11	1
1:A:25:GLU:OE1	1:A:157:LYS:CB	0.41	2.68	12	1
1:A:4:ILE:O	1:A:32:THR:OG1	0.41	2.39	2	3
1:A:117:VAL:CG1	1:A:166:GLU:HG2	0.41	2.46	11	1
1:A:27:GLY:O	1:A:28:ASN:O	0.41	2.39	13	2
1:A:34:HIS:O	1:A:37:SER:N	0.41	2.54	19	2
1:A:83:VAL:HG23	1:A:115:LYS:O	0.41	2.16	5	1
1:A:82:LEU:HD22	1:A:167:PHE:CD2	0.41	2.51	6	1
1:A:3:LYS:HD2	1:A:32:THR:CG2	0.41	2.46	10	1
1:A:166:GLU:CA	1:A:166:GLU:OE1	0.41	2.68	13	1
1:A:73:LEU:HA	1:A:76:VAL:HG12	0.41	1.92	14	1
1:A:78:PHE:CE1	1:A:81:LYS:HE3	0.41	2.51	17	1
1:A:3:LYS:HG2	1:A:47:TYR:CG	0.41	2.51	18	1
1:A:19:ALA:HB1	1:A:33:LEU:HD22	0.41	1.92	20	1
1:A:163:LEU:HD12	1:A:164:LYS:CE	0.41	2.45	20	1
1:A:48:GLN:CB	1:A:81:LYS:HD3	0.41	2.46	12	1
1:A:33:LEU:N	1:A:33:LEU:CD2	0.40	2.81	2	1
1:A:81:LYS:HE3	1:A:83:VAL:CG1	0.40	2.45	3	2
1:A:73:LEU:HD13	1:A:73:LEU:N	0.40	2.31	9	1
1:A:84:ALA:HB2	1:A:167:PHE:HE2	0.40	1.70	13	1
1:A:166:GLU:OE1	1:A:166:GLU:N	0.40	2.53	13	1
1:A:29:ASP:O	1:A:31:VAL:N	0.40	2.54	15	1
1:A:52:ILE:HG13	1:A:85:TYR:CG	0.40	2.51	1	1
1:A:73:LEU:CD1	1:A:78:PHE:CD2	0.40	2.97	1	1
1:A:33:LEU:HD22	1:A:35:ASP:OD1	0.40	2.16	11	1
1:A:158:SER:O	1:A:159:TRP:C	0.40	2.60	14	2
1:A:86:PHE:CE2	1:A:159:TRP:CG	0.40	3.06	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:73:LEU:O	1:A:109:ILE:CD1	0.40	2.69	19	1
1:A:6:LEU:HD12	1:A:8:TYR:OH	0.40	2.16	12	1
1:A:72:GLU:OE1	1:A:73:LEU:HD12	0.40	2.17	13	1
1:A:3:LYS:CA	1:A:30:VAL:HG12	0.40	2.41	17	1
1:A:81:LYS:HE2	1:A:83:VAL:CG2	0.40	2.46	18	1
1:A:79:ASN:O	1:A:80:GLY:C	0.40	2.59	19	1
1:A:81:LYS:HE3	1:A:113:GLY:C	0.40	2.37	19	1
1:A:78:PHE:CD2	1:A:81:LYS:HE3	0.40	2.52	4	1
1:A:8:TYR:O	1:A:72:GLU:OE2	0.40	2.40	5	1
1:A:36:VAL:O	1:A:36:VAL:CG2	0.40	2.69	11	1
1:A:50:LEU:O	1:A:83:VAL:HA	0.40	2.17	12	1
1:A:43:ASP:CG	1:A:47:TYR:OH	0.40	2.59	13	1
1:A:73:LEU:HD23	1:A:78:PHE:CD2	0.40	2.51	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	84/169 (50%)	63±3 (76±4%)	13±3 (15±3%)	8±2 (9±2%)	1	11
All	All	1680/3380 (50%)	1269 (76%)	252 (15%)	159 (9%)	1	11

All 23 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	3	LYS	20
1	A	31	VAL	20
1	A	36	VAL	19
1	A	30	VAL	16
1	A	28	ASN	13
1	A	110	SER	11
1	A	76	VAL	8
1	A	168	GLY	7
1	A	40	GLU	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	165	SER	6
1	A	17	SER	6
1	A	118	GLY	5
1	A	80	GLY	4
1	A	78	PHE	3
1	A	27	GLY	3
1	A	86	PHE	2
1	A	2	LYS	2
1	A	79	ASN	2
1	A	113	GLY	2
1	A	9	GLY	1
1	A	166	GLU	1
1	A	34	HIS	1
1	A	48	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	72/141 (51%)	45±2 (62±3%)	27±2 (38±3%)	1 6
All	All	1440/2820 (51%)	892 (62%)	548 (38%)	1 6

All 63 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	6	LEU	20
1	A	33	LEU	20
1	A	38	GLN	20
1	A	47	TYR	20
1	A	49	TYR	20
1	A	8	TYR	19
1	A	43	ASP	19
1	A	163	LEU	19
1	A	81	LYS	18
1	A	115	LYS	16
1	A	34	HIS	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	48	GLN	15
1	A	73	LEU	15
1	A	82	LEU	15
1	A	164	LYS	15
1	A	3	LYS	14
1	A	4	ILE	12
1	A	23	ARG	12
1	A	156	ILE	12
1	A	2	LYS	12
1	A	165	SER	11
1	A	20	GLU	11
1	A	83	VAL	11
1	A	75	ASP	10
1	A	85	TYR	10
1	A	166	GLU	10
1	A	30	VAL	9
1	A	112	ARG	9
1	A	155	ARG	9
1	A	158	SER	8
1	A	72	GLU	8
1	A	86	PHE	7
1	A	17	SER	7
1	A	110	SER	7
1	A	24	ASP	6
1	A	46	ASP	6
1	A	79	ASN	6
1	A	26	PHE	6
1	A	40	GLU	6
1	A	157	LYS	6
1	A	116	THR	5
1	A	162	GLN	5
1	A	74	ASP	5
1	A	77	ASP	5
1	A	111	GLN	4
1	A	109	ILE	3
1	A	35	ASP	3
1	A	76	VAL	3
1	A	31	VAL	3
1	A	45	ASN	3
1	A	52	ILE	2
1	A	25	GLU	2
1	A	29	ASP	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	154	ASP	2
1	A	117	VAL	2
1	A	160	VAL	1
1	A	41	VAL	1
1	A	18	VAL	1
1	A	44	LEU	1
1	A	51	ILE	1
1	A	78	PHE	1
1	A	28	ASN	1
1	A	50	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 (i)

No chemical shift data were provided