Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Feb 27, 2022 – 04:40 PM EST

PDB ID	:	2E34
Title	:	L11 structure with RDC and RG refinement
Authors	:	Lee, D.; Walsh, J.D.; Yu, P.; Markus, M.A.; Choli-Papadopoulous, T.; Schwieters, C.D.; Krueger, S.; Draper, D.E.; Wang, Y.X.
Deposited on	:	2006-11-20

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:

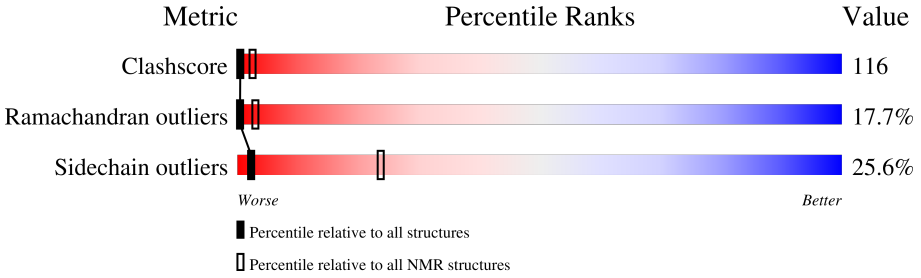
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
ShiftChecker	:	2.27
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)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

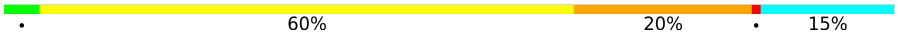
The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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	147	

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 20 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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:4-A:84, A:96-A:139 (125)	0.35	1

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 1 single-model cluster was found.

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

3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2223 atoms, of which 1136 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called 50S ribosomal protein L11.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	147	2223	692	1136	191	198	6	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: 50S ribosomal protein L11

Chain A: 60% 20% 15%

M1 K2 K3 V4 V5 A6 V7 V8 K9 L10 Q11 L12 P13 A14 G15 K16 A17 T18 P19 A20 P21 P22 V23 G24 P25 A26 L27 G28 Q29 H30 G31 A32 N33 I34 M35 E36 F37 V38 K39 A40 F41 N42 A43 A44 T45 A46 N47 M48 G49 D50 A51 I52 V53 P54 V55 E56 I57 T58 I59 Y60

A61 D62 R63 S64 F65 T66 F67 V68 T69 K70 T71 P72 P73 A74 S75 Y76 L77 I78 R79 K80 A81 A82 G83 L84 E85 K86 G87 A88 H89 K90 P91 G92 R93 E94 K95 V96 G97 R98 I99 T100 W101 E102 Q103 V104 L105 E106 I107 A108 K109 Q110 K111 M112 P113 D114 L115 N116 T117 T118 D119 L120

E121 A122 A123 A124 R125 M126 I127 A128 G129 S130 A131 R132 S133 M134 G135 V136 E137 V138 V139 G140 A141 P142 E143 V144 K145 D146 A147

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 (medoid)

• Molecule 1: 50S ribosomal protein L11

Chain A: 10% 54% 20% 15%

M1 K2 K3 V4 V5 A6 V7 V8 K9 L10 Q11 L12 P13 A14 G15 K16 A17 T18 P19 A20 P21 P22 V23 G24 P25 A26 L27 G28 Q29 H30 G31 A32 N33 I34 M35 E36 F37 V38 K39 A40 F41 N42 A43 A44 T45 A46 N47 M48 G49 D50 A51 I52 V53 P54 V55 E56 I57 T58 I59 Y60

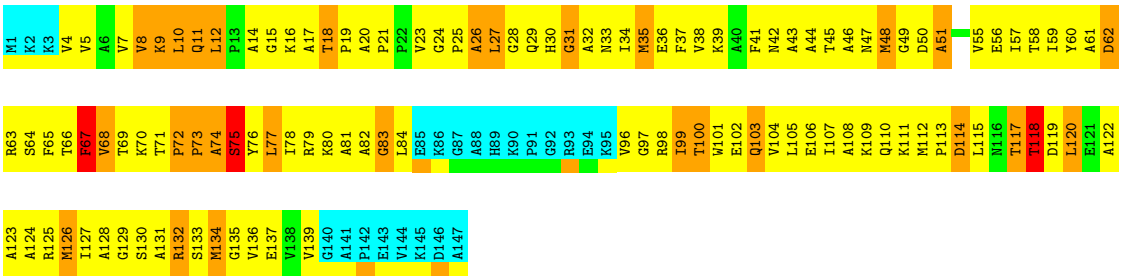
A61 D62 R63 S64 F65 T66 F67 V68 T69 K70 T71 P72 P73 A74 S75 Y76 L77 I78 R79 A82 G83 L84 E85 K86 G87 A88 H89 K90 P91 G92 R93 E94 K95 V96 G97 R98 I99 T100 W101 E102 Q103 V104 L105 E106 I107 A108 K109 Q110 K111 M112 P113 D114 L115 N116 T117 T118 D119 L120 E121

A122 A123 A124 R125 M126 I127 A128 G129 S130 A131 R132 S133 M134 G135 V136 E137 V138 V139 G140 A141 P142 E143 V144 K145 D146 A147

4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: 50S ribosomal protein L11

Chain A: 7% 57% 19% • 15%



4.2.3 Score per residue for model 3

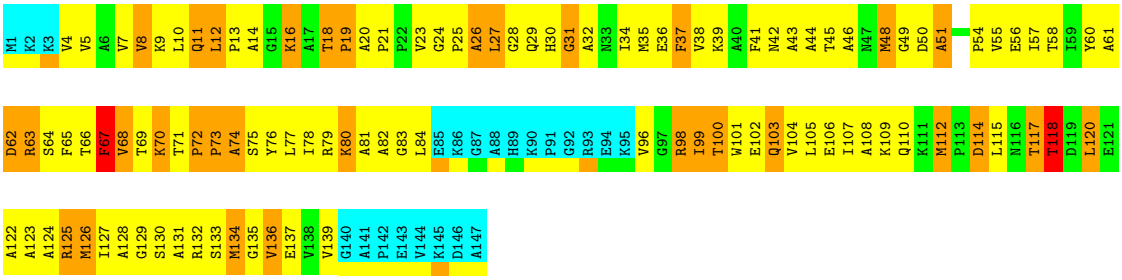
- Molecule 1: 50S ribosomal protein L11

Chain A: 10% 52% 22% • 15%

4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: 50S ribosomal protein L11

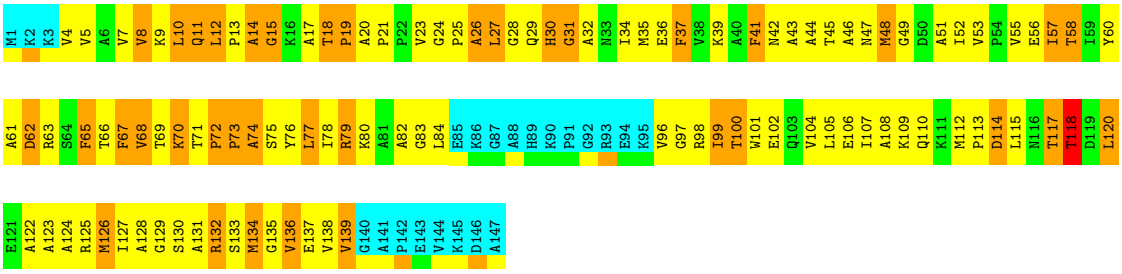
Chain A: 12% 50% 22% • 15%



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: 50S ribosomal protein L11

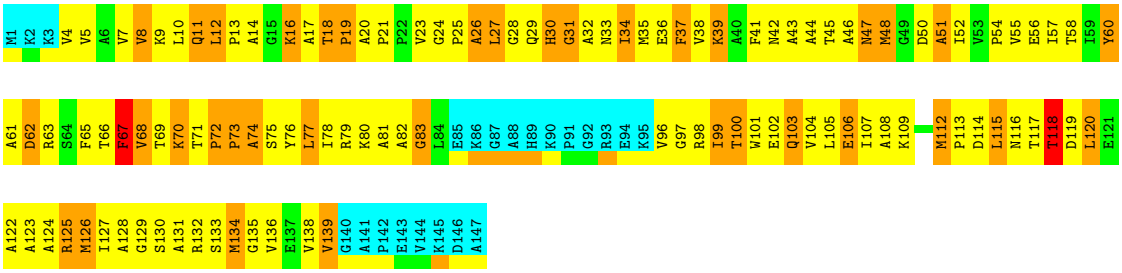
Chain A: 11% 48% 25% • 15%



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: 50S ribosomal protein L11

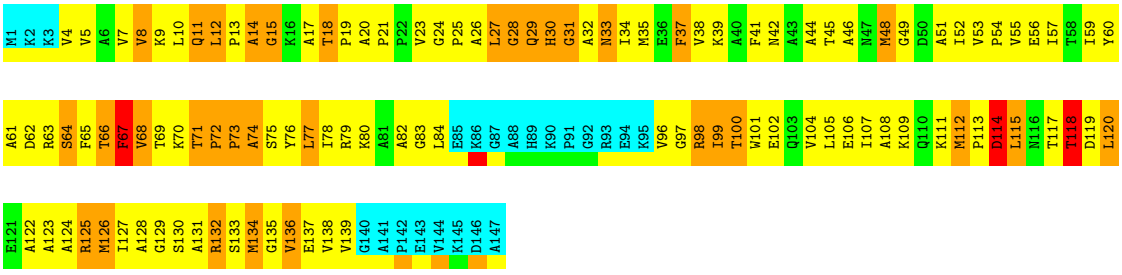
Chain A: 9% 50% 24% • 15%



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: 50S ribosomal protein L11

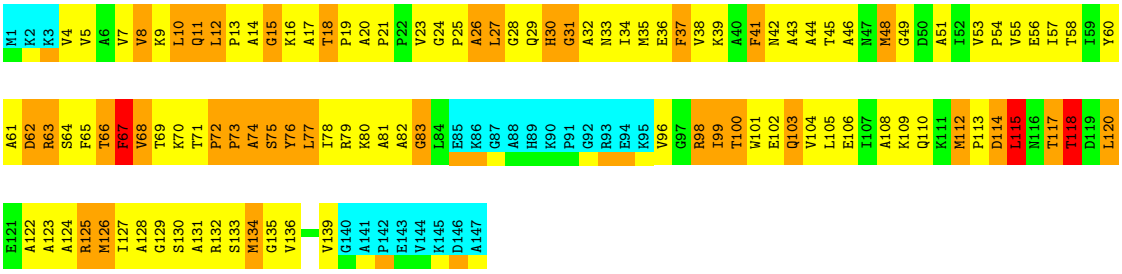
Chain A: 10% 51% 22% • 15%



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: 50S ribosomal protein L11

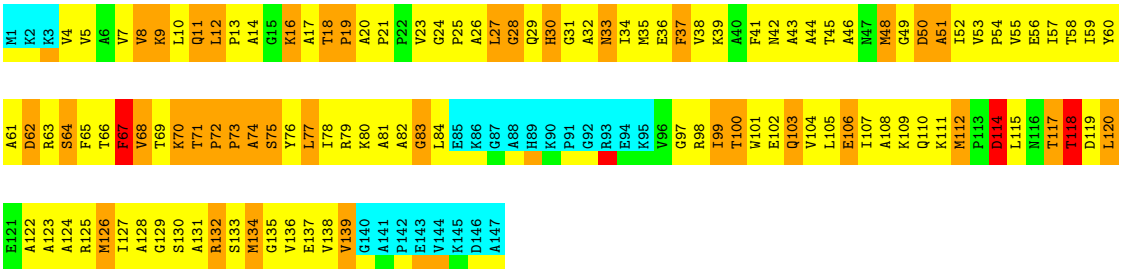
Chain A: 11% 48% 24% • 15%



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: 50S ribosomal protein L11

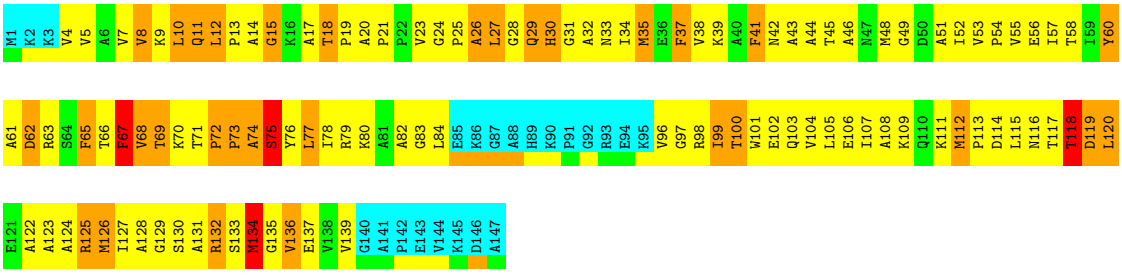
Chain A: 6% 52% 25% • 15%



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: 50S ribosomal protein L11

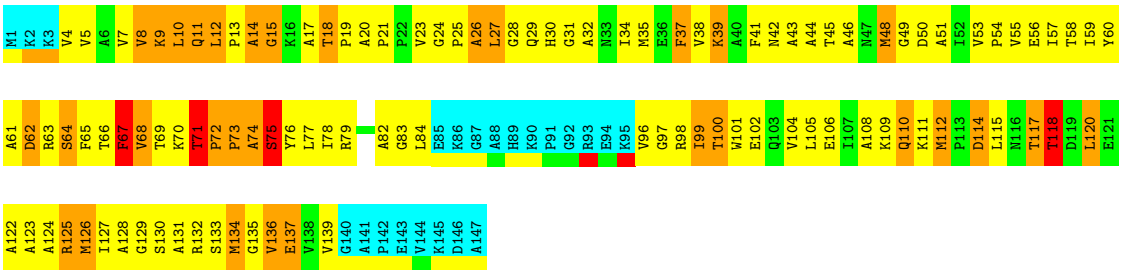
Chain A: 9% 52% 21% • 15%



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: 50S ribosomal protein L11

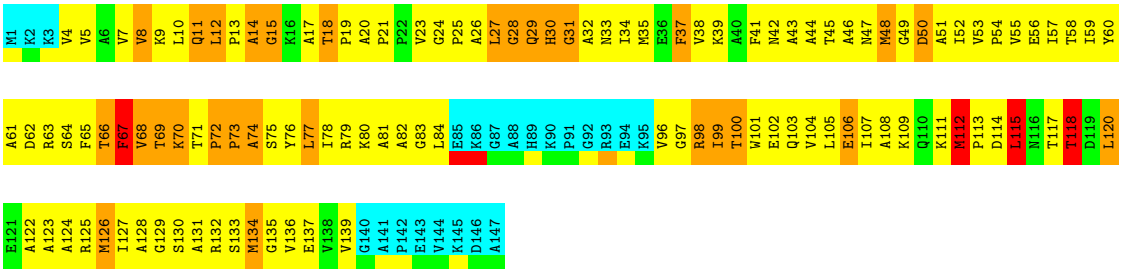
Chain A: 12% 50% 21% • 15%



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: 50S ribosomal protein L11

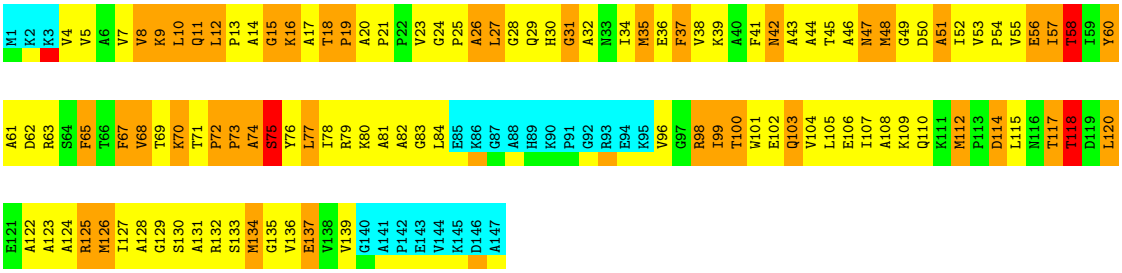
Chain A: 7% 56% 20% • 15%



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: 50S ribosomal protein L11

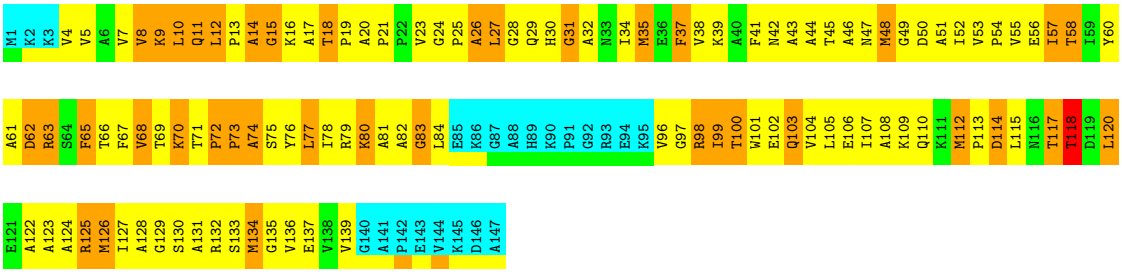
Chain A: 10% 46% 28% • 15%



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: 50S ribosomal protein L11

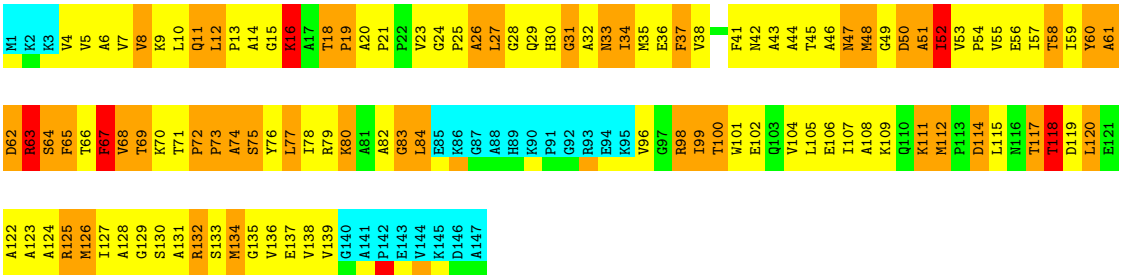
Chain A: 8% 50% 26% • 15%



4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: 50S ribosomal protein L11

Chain A: 7% 45% 29% • 15%



4.2.16 Score per residue for model 16

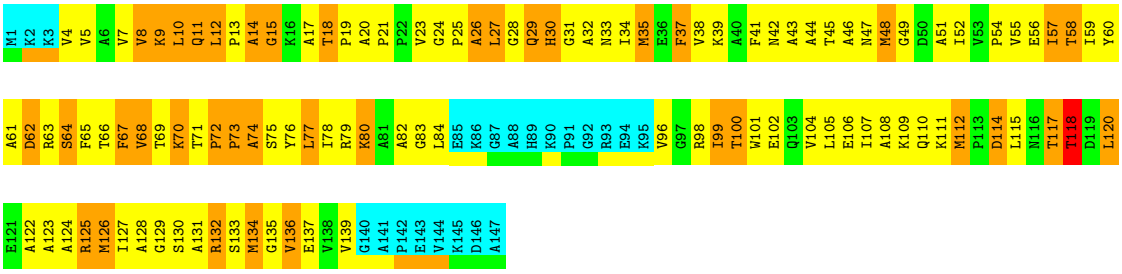
- Molecule 1: 50S ribosomal protein L11

Chain A: 10% 46% 26% • 15%

4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: 50S ribosomal protein L11

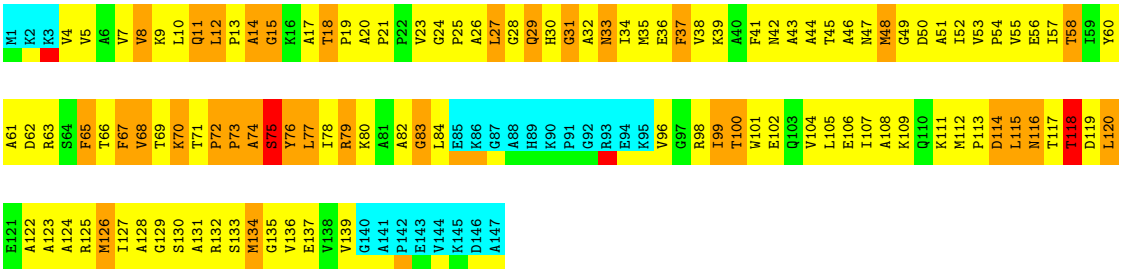
Chain A: 10% 48% 26% • 15%



4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: 50S ribosomal protein L11

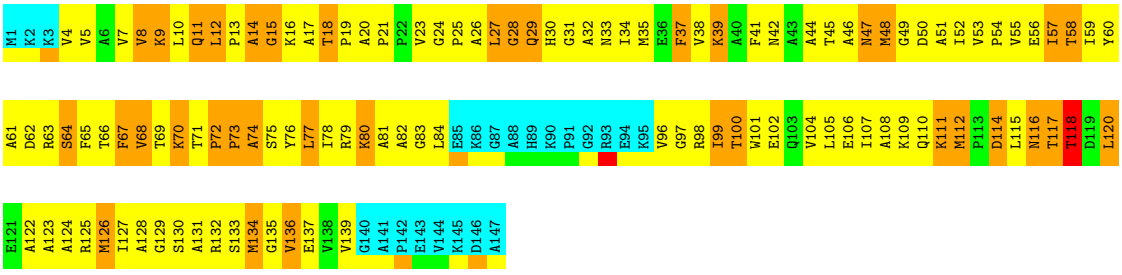
Chain A: 8% 54% 22% • 15%



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: 50S ribosomal protein L11

Chain A: 7% 53% 24% • 15%



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: 50S ribosomal protein L11

Chain A: 8% 47% 29% • 15%

M1 K2 K3 V4 V5 A6 V7 V8 K9 L10 Q11 L12 P13 A14 G15 K16 A17 T18 P19 A20 P21 P22 V23 G24 P25 A26 L27 G28 Q29 H30 G31 A32 N33 I34 M35 E36 F37 V38 K39 A40 F41 N42 A43 A44 T45 A46 N47 M48 G49 D50 A51 I52 V53 P54 V55 E56 I57 T58 I59 Y60

A61 D62 R63 S64 F65 T66 F67 V68 T69 K70 T71 P72 P73 A74 S75 Y76 L77 I78 R79 K80 A81 A82 G83 L84 E85 K86 G87 A88 H89 K90 P91 G92 R93 E94 K95 V96 G97 R98 I99 T100 W101 E102 Q103 V104 L105 E106 I107 A108 K109 Q110 K111 M112 P113 D114 L115 N116 T117 T118 D119 L120

E121 A122 A123 A124 R125 M126 I127 A128 G129 S130 A131 R132 S133 M134 G135 V136 E137 V138 V139 G140 A141 P142 E143 V144 K145 D146 A147

5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

The models were refined using the following method: *TORSION ANGLE DYNAMICS, RG refinement.*

Of the 100 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the least restraint violations.*

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

Software name	Classification	Version
CYANA	structure solution	2.1.4
X-PLOR	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	921	960	960	218±12
All	All	18420	19200	19200	4362

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 116.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:77:LEU:HD13	1:A:78:ILE:N	1.13	1.58	6	4
1:A:61:ALA:O	1:A:63:ARG:N	1.10	1.85	15	20
1:A:117:THR:HG22	1:A:118:THR:H	1.04	1.11	16	20
1:A:10:LEU:HD22	1:A:23:VAL:HG22	1.03	1.30	10	13
1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:N	1.03	1.67	12	2
1:A:11:GLN:O	1:A:12:LEU:HD12	0.99	1.55	19	10
1:A:14:ALA:HB3	1:A:51:ALA:N	0.98	1.72	1	17
1:A:77:LEU:HD21	1:A:107:ILE:CD1	0.98	1.88	12	3
1:A:76:TYR:CZ	1:A:77:LEU:HD22	0.98	1.94	3	10
1:A:11:GLN:H	1:A:11:GLN:NE2	0.97	1.57	7	2
1:A:51:ALA:C	1:A:52:ILE:HD12	0.96	1.81	9	1
1:A:76:TYR:CE1	1:A:77:LEU:HD12	0.94	1.96	6	4
1:A:68:VAL:HG12	1:A:68:VAL:O	0.94	1.63	17	12
1:A:77:LEU:O	1:A:77:LEU:HD22	0.93	1.62	12	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:THR:O	1:A:20:ALA:N	0.91	2.03	15	20
1:A:71:THR:HG21	1:A:79:ARG:NE	0.91	1.81	12	3
1:A:71:THR:HG21	1:A:79:ARG:CZ	0.91	1.95	20	2
1:A:27:LEU:HD12	1:A:37:PHE:CE2	0.90	2.01	1	20
1:A:139:VAL:HG13	1:A:139:VAL:O	0.90	1.67	20	11
1:A:10:LEU:O	1:A:55:VAL:N	0.89	2.06	7	20
1:A:73:PRO:O	1:A:75:SER:N	0.89	2.05	18	20
1:A:14:ALA:HB3	1:A:51:ALA:H	0.89	1.28	15	7
1:A:67:PHE:O	1:A:68:VAL:HG23	0.88	1.69	6	20
1:A:74:ALA:HB1	1:A:78:ILE:HD12	0.88	1.45	4	18
1:A:5:VAL:HG11	1:A:61:ALA:HB2	0.87	1.46	6	18
1:A:77:LEU:HD23	1:A:78:ILE:N	0.87	1.85	18	14
1:A:70:LYS:N	1:A:70:LYS:CD	0.85	2.40	13	7
1:A:10:LEU:CD2	1:A:23:VAL:HG22	0.84	2.01	14	13
1:A:117:THR:HG22	1:A:118:THR:N	0.84	1.87	12	20
1:A:77:LEU:HD13	1:A:77:LEU:C	0.83	1.91	12	4
1:A:105:LEU:HD13	1:A:120:LEU:HD13	0.83	1.49	7	20
1:A:59:ILE:HG23	1:A:64:SER:O	0.83	1.72	9	4
1:A:70:LYS:O	1:A:71:THR:OG1	0.82	1.97	20	20
1:A:71:THR:HG21	1:A:79:ARG:NH2	0.82	1.89	20	1
1:A:84:LEU:CD2	1:A:97:GLY:N	0.82	2.43	20	1
1:A:96:VAL:O	1:A:98:ARG:N	0.81	2.13	20	1
1:A:79:ARG:NH1	1:A:134:MET:SD	0.81	2.55	1	1
1:A:51:ALA:O	1:A:52:ILE:HD12	0.80	1.77	9	1
1:A:44:ALA:HB1	1:A:70:LYS:NZ	0.80	1.91	3	4
1:A:4:VAL:N	1:A:60:TYR:CE2	0.79	2.51	17	14
1:A:76:TYR:CE1	1:A:77:LEU:HD22	0.79	2.12	2	10
1:A:11:GLN:O	1:A:11:GLN:NE2	0.79	2.16	10	2
1:A:74:ALA:N	1:A:76:TYR:CE2	0.78	2.52	18	3
1:A:8:VAL:CG1	1:A:10:LEU:HD12	0.78	2.08	2	2
1:A:30:HIS:CD2	1:A:31:GLY:N	0.77	2.53	18	4
1:A:11:GLN:H	1:A:11:GLN:HE21	0.77	1.19	7	4
1:A:76:TYR:CZ	1:A:77:LEU:HD12	0.77	2.14	7	3
1:A:115:LEU:N	1:A:115:LEU:CD1	0.77	2.40	12	2
1:A:61:ALA:C	1:A:63:ARG:H	0.77	1.83	5	19
1:A:30:HIS:CG	1:A:30:HIS:O	0.77	2.36	9	5
1:A:77:LEU:HD12	1:A:77:LEU:C	0.77	1.99	4	2
1:A:79:ARG:NH2	1:A:134:MET:SD	0.77	2.57	17	5
1:A:65:PHE:CD1	1:A:65:PHE:N	0.77	2.50	15	15
1:A:71:THR:HG21	1:A:79:ARG:CD	0.77	2.10	14	5
1:A:105:LEU:O	1:A:109:LYS:N	0.76	2.14	3	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:116:ASN:ND2	1:A:117:THR:N	0.76	2.32	19	2
1:A:11:GLN:NE2	1:A:11:GLN:N	0.76	2.33	7	18
1:A:108:ALA:HB2	1:A:127:ILE:CG1	0.76	2.10	19	20
1:A:14:ALA:HB3	1:A:51:ALA:C	0.76	2.01	11	11
1:A:81:ALA:HB1	1:A:103:GLN:OE1	0.76	1.80	8	8
1:A:14:ALA:O	1:A:16:LYS:N	0.76	2.19	20	2
1:A:75:SER:OG	1:A:79:ARG:NH1	0.75	2.19	1	2
1:A:77:LEU:HD23	1:A:77:LEU:C	0.75	2.02	19	11
1:A:28:GLY:O	1:A:32:ALA:N	0.75	2.19	9	5
1:A:14:ALA:N	1:A:51:ALA:O	0.75	2.20	6	17
1:A:8:VAL:HG13	1:A:10:LEU:HD12	0.75	1.57	2	2
1:A:7:VAL:O	1:A:7:VAL:HG22	0.75	1.79	4	20
1:A:8:VAL:O	1:A:55:VAL:O	0.75	2.05	13	20
1:A:23:VAL:HG12	1:A:27:LEU:N	0.75	1.96	3	19
1:A:27:LEU:CD1	1:A:37:PHE:CE2	0.74	2.70	8	19
1:A:23:VAL:O	1:A:25:PRO:HD2	0.74	1.82	12	20
1:A:30:HIS:CG	1:A:31:GLY:N	0.74	2.55	18	13
1:A:27:LEU:HD12	1:A:37:PHE:CD2	0.74	2.18	10	14
1:A:4:VAL:N	1:A:60:TYR:CD2	0.74	2.56	20	11
1:A:83:GLY:O	1:A:84:LEU:HD23	0.74	1.82	9	2
1:A:99:ILE:O	1:A:139:VAL:N	0.74	2.21	20	20
1:A:71:THR:OG1	1:A:75:SER:OG	0.74	2.06	10	13
1:A:127:ILE:O	1:A:130:SER:OG	0.73	2.06	9	5
1:A:30:HIS:O	1:A:30:HIS:CD2	0.73	2.42	19	4
1:A:97:GLY:HA3	1:A:136:VAL:HG22	0.73	1.61	9	3
1:A:63:ARG:NE	1:A:63:ARG:O	0.73	2.22	14	2
1:A:11:GLN:HE21	1:A:11:GLN:N	0.72	1.81	18	4
1:A:112:MET:O	1:A:112:MET:SD	0.72	2.47	18	13
1:A:30:HIS:ND1	1:A:31:GLY:N	0.72	2.38	6	6
1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:H	0.72	1.41	8	2
1:A:68:VAL:O	1:A:68:VAL:CG1	0.72	2.37	18	7
1:A:132:ARG:HH11	1:A:132:ARG:CG	0.72	1.98	15	7
1:A:98:ARG:CG	1:A:98:ARG:HH11	0.72	1.98	13	7
1:A:125:ARG:CG	1:A:125:ARG:HH11	0.72	1.98	13	5
1:A:79:ARG:NH1	1:A:84:LEU:HD12	0.72	2.00	18	1
1:A:75:SER:HG	1:A:79:ARG:CG	0.71	1.98	14	4
1:A:115:LEU:CD1	1:A:115:LEU:H	0.71	1.97	8	2
1:A:4:VAL:N	1:A:60:TYR:CZ	0.71	2.58	15	8
1:A:82:ALA:O	1:A:98:ARG:O	0.71	2.08	12	19
1:A:126:MET:O	1:A:130:SER:N	0.71	2.23	20	20
1:A:133:SER:O	1:A:135:GLY:N	0.71	2.23	6	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:77:LEU:HD12	1:A:78:ILE:N	0.71	2.00	4	1
1:A:14:ALA:HB3	1:A:51:ALA:CA	0.71	2.16	8	16
1:A:100:THR:HG22	1:A:139:VAL:CG1	0.71	2.15	1	11
1:A:119:ASP:OD1	1:A:119:ASP:N	0.71	2.24	16	1
1:A:116:ASN:HD22	1:A:117:THR:N	0.71	1.84	3	2
1:A:68:VAL:CG1	1:A:70:LYS:NZ	0.71	2.54	6	1
1:A:79:ARG:CG	1:A:79:ARG:HH11	0.71	1.98	20	2
1:A:139:VAL:O	1:A:139:VAL:CG1	0.71	2.39	11	11
1:A:23:VAL:HG13	1:A:26:ALA:HB3	0.71	1.63	19	13
1:A:79:ARG:CZ	1:A:84:LEU:CD1	0.71	2.69	12	2
1:A:4:VAL:HB	1:A:60:TYR:CE1	0.70	2.21	20	14
1:A:99:ILE:O	1:A:139:VAL:HG12	0.70	1.85	5	15
1:A:79:ARG:NH1	1:A:84:LEU:CD1	0.70	2.53	3	2
1:A:15:GLY:O	1:A:17:ALA:N	0.70	2.24	20	2
1:A:104:VAL:HG21	1:A:128:ALA:HB2	0.70	1.63	20	20
1:A:10:LEU:CD2	1:A:23:VAL:CG2	0.70	2.69	4	12
1:A:131:ALA:HB1	1:A:136:VAL:CG1	0.70	2.16	12	20
1:A:84:LEU:HD23	1:A:84:LEU:N	0.70	2.01	15	6
1:A:30:HIS:CE1	1:A:65:PHE:CE1	0.70	2.80	20	2
1:A:65:PHE:CD2	1:A:65:PHE:O	0.70	2.45	7	8
1:A:117:THR:CG2	1:A:118:THR:H	0.70	1.96	16	20
1:A:125:ARG:O	1:A:129:GLY:N	0.70	2.25	4	20
1:A:30:HIS:O	1:A:63:ARG:CG	0.70	2.40	14	7
1:A:75:SER:HG	1:A:79:ARG:HG3	0.69	1.47	1	3
1:A:99:ILE:HD12	1:A:104:VAL:CG1	0.69	2.18	15	11
1:A:63:ARG:HH11	1:A:63:ARG:CG	0.69	1.98	15	2
1:A:30:HIS:O	1:A:63:ARG:CD	0.69	2.41	6	2
1:A:25:PRO:O	1:A:27:LEU:N	0.69	2.26	5	14
1:A:61:ALA:C	1:A:63:ARG:N	0.69	2.45	10	20
1:A:47:ASN:OD1	1:A:48:MET:N	0.69	2.26	18	2
1:A:68:VAL:HG13	1:A:70:LYS:NZ	0.69	2.02	16	3
1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:OD1	0.69	2.24	18	3
1:A:14:ALA:C	1:A:45:THR:HB	0.68	2.07	10	11
1:A:99:ILE:HD13	1:A:104:VAL:HG12	0.68	1.65	20	1
1:A:63:ARG:CG	1:A:63:ARG:NH1	0.68	2.56	15	2
1:A:125:ARG:CG	1:A:125:ARG:NH1	0.68	2.57	15	5
1:A:10:LEU:HD22	1:A:23:VAL:CG2	0.68	2.16	8	15
1:A:98:ARG:CG	1:A:98:ARG:NH1	0.68	2.56	13	8
1:A:67:PHE:O	1:A:67:PHE:CD1	0.68	2.46	16	13
1:A:132:ARG:CG	1:A:132:ARG:NH1	0.68	2.56	16	7
1:A:28:GLY:O	1:A:30:HIS:N	0.68	2.27	12	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:71:THR:CB	1:A:75:SER:OG	0.68	2.42	7	7
1:A:75:SER:OG	1:A:134:MET:SD	0.68	2.52	2	1
1:A:79:ARG:O	1:A:83:GLY:N	0.68	2.26	20	1
1:A:44:ALA:O	1:A:47:ASN:ND2	0.68	2.26	19	2
1:A:71:THR:HG21	1:A:79:ARG:NH1	0.68	2.04	20	1
1:A:20:ALA:N	1:A:21:PRO:HD3	0.68	2.03	5	20
1:A:132:ARG:O	1:A:135:GLY:N	0.68	2.27	4	15
1:A:70:LYS:O	1:A:76:TYR:HA	0.67	1.89	18	19
1:A:126:MET:O	1:A:130:SER:CB	0.67	2.43	7	16
1:A:30:HIS:O	1:A:30:HIS:CG	0.67	2.45	10	2
1:A:38:VAL:CG1	1:A:42:ASN:ND2	0.67	2.58	16	6
1:A:83:GLY:O	1:A:96:VAL:N	0.67	2.27	20	1
1:A:35:MET:O	1:A:39:LYS:N	0.67	2.24	20	17
1:A:34:ILE:O	1:A:37:PHE:HB3	0.67	1.89	9	20
1:A:48:MET:CG	1:A:49:GLY:H	0.67	2.02	20	16
1:A:27:LEU:CD1	1:A:37:PHE:CD2	0.67	2.77	8	20
1:A:75:SER:OG	1:A:79:ARG:CG	0.67	2.43	15	8
1:A:71:THR:OG1	1:A:75:SER:O	0.66	2.13	10	11
1:A:7:VAL:O	1:A:9:LYS:N	0.66	2.28	20	20
1:A:59:ILE:HA	1:A:64:SER:O	0.66	1.90	16	8
1:A:33:ASN:OD1	1:A:33:ASN:N	0.66	2.28	18	2
1:A:6:ALA:O	1:A:59:ILE:N	0.66	2.25	15	2
1:A:14:ALA:HB3	1:A:51:ALA:HB3	0.66	1.66	18	11
1:A:8:VAL:HB	1:A:57:ILE:HD12	0.66	1.64	8	20
1:A:77:LEU:HD22	1:A:77:LEU:C	0.66	2.11	12	2
1:A:98:ARG:HG3	1:A:98:ARG:HH11	0.66	1.50	12	1
1:A:67:PHE:O	1:A:68:VAL:CG2	0.66	2.44	10	20
1:A:98:ARG:HH11	1:A:98:ARG:CG	0.66	2.04	12	1
1:A:75:SER:HA	1:A:78:ILE:HB	0.66	1.66	9	8
1:A:79:ARG:CG	1:A:79:ARG:NH1	0.66	2.56	5	2
1:A:47:ASN:O	1:A:47:ASN:ND2	0.66	2.29	15	1
1:A:37:PHE:CD1	1:A:37:PHE:C	0.66	2.69	10	20
1:A:70:LYS:N	1:A:70:LYS:HD3	0.66	2.06	20	7
1:A:82:ALA:HB1	1:A:97:GLY:HA2	0.65	1.68	20	3
1:A:105:LEU:O	1:A:108:ALA:N	0.65	2.30	15	20
1:A:96:VAL:HG12	1:A:97:GLY:N	0.65	2.06	20	10
1:A:13:PRO:O	1:A:15:GLY:N	0.65	2.26	7	9
1:A:35:MET:O	1:A:39:LYS:CG	0.65	2.45	12	4
1:A:63:ARG:CG	1:A:63:ARG:O	0.65	2.44	6	3
1:A:83:GLY:O	1:A:96:VAL:CG1	0.65	2.45	18	2
1:A:38:VAL:O	1:A:42:ASN:N	0.65	2.30	13	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:120:LEU:O	1:A:124:ALA:HB2	0.65	1.91	5	20
1:A:79:ARG:CD	1:A:84:LEU:HD11	0.65	2.21	7	5
1:A:63:ARG:O	1:A:63:ARG:CZ	0.65	2.45	19	1
1:A:42:ASN:O	1:A:46:ALA:CB	0.65	2.45	10	20
1:A:77:LEU:HD21	1:A:107:ILE:HD13	0.64	1.68	19	4
1:A:79:ARG:HH11	1:A:79:ARG:HG2	0.64	1.51	18	4
1:A:76:TYR:CE2	1:A:77:LEU:CD2	0.64	2.80	4	1
1:A:119:ASP:OD2	1:A:122:ALA:HB2	0.64	1.93	18	1
1:A:16:LYS:CG	1:A:16:LYS:O	0.64	2.45	20	4
1:A:100:THR:O	1:A:104:VAL:HG13	0.64	1.92	12	20
1:A:14:ALA:CB	1:A:51:ALA:HB3	0.64	2.22	8	11
1:A:99:ILE:HD12	1:A:104:VAL:HG12	0.64	1.69	15	1
1:A:117:THR:C	1:A:118:THR:HG22	0.64	2.11	16	20
1:A:76:TYR:CE2	1:A:77:LEU:HD23	0.64	2.28	4	1
1:A:68:VAL:HG13	1:A:70:LYS:HZ3	0.64	1.53	16	3
1:A:98:ARG:CB	1:A:98:ARG:CZ	0.64	2.75	12	1
1:A:72:PRO:O	1:A:75:SER:OG	0.64	2.13	8	9
1:A:102:GLU:OE2	1:A:106:GLU:CG	0.64	2.46	13	6
1:A:128:ALA:O	1:A:131:ALA:N	0.64	2.31	15	20
1:A:32:ALA:C	1:A:33:ASN:ND2	0.64	2.51	15	2
1:A:79:ARG:HD3	1:A:84:LEU:HD11	0.64	1.69	7	3
1:A:71:THR:HG21	1:A:79:ARG:HD3	0.64	1.70	14	2
1:A:78:ILE:O	1:A:82:ALA:HB2	0.64	1.91	2	16
1:A:70:LYS:C	1:A:71:THR:OG1	0.63	2.36	20	5
1:A:72:PRO:O	1:A:73:PRO:O	0.63	2.17	4	19
1:A:134:MET:SD	1:A:136:VAL:HG23	0.63	2.33	17	6
1:A:75:SER:OG	1:A:79:ARG:NE	0.63	2.31	15	2
1:A:125:ARG:HG3	1:A:125:ARG:HH11	0.63	1.53	11	1
1:A:63:ARG:O	1:A:63:ARG:CD	0.63	2.46	4	3
1:A:13:PRO:HA	1:A:52:ILE:HA	0.63	1.69	15	1
1:A:31:GLY:O	1:A:32:ALA:HB3	0.62	1.93	15	20
1:A:71:THR:OG1	1:A:75:SER:CB	0.62	2.47	6	12
1:A:126:MET:O	1:A:130:SER:OG	0.62	2.17	10	16
1:A:12:LEU:O	1:A:53:VAL:N	0.62	2.31	15	1
1:A:12:LEU:HD23	1:A:13:PRO:HD2	0.62	1.72	10	8
1:A:100:THR:HA	1:A:139:VAL:HG12	0.62	1.71	9	5
1:A:44:ALA:O	1:A:48:MET:SD	0.62	2.58	9	8
1:A:8:VAL:O	1:A:56:GLU:HA	0.62	1.94	19	20
1:A:71:THR:OG1	1:A:75:SER:C	0.62	2.38	16	14
1:A:30:HIS:CD2	1:A:30:HIS:C	0.62	2.73	15	6
1:A:10:LEU:HD13	1:A:23:VAL:CG2	0.62	2.25	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:ALA:HB3	1:A:38:VAL:HG13	0.62	1.72	7	8
1:A:11:GLN:NE2	1:A:11:GLN:C	0.62	2.53	10	2
1:A:23:VAL:CG1	1:A:26:ALA:C	0.62	2.68	7	6
1:A:101:TRP:O	1:A:104:VAL:HG22	0.62	1.93	15	20
1:A:14:ALA:HB3	1:A:51:ALA:CB	0.62	2.25	10	11
1:A:30:HIS:ND1	1:A:30:HIS:C	0.62	2.52	8	6
1:A:18:THR:C	1:A:20:ALA:H	0.61	1.96	1	20
1:A:79:ARG:HH21	1:A:134:MET:CG	0.61	2.07	18	2
1:A:74:ALA:HB1	1:A:78:ILE:CD1	0.61	2.25	14	14
1:A:134:MET:SD	1:A:136:VAL:CG2	0.61	2.88	17	7
1:A:33:ASN:ND2	1:A:36:GLU:OE1	0.61	2.33	6	2
1:A:30:HIS:CD2	1:A:65:PHE:CE1	0.61	2.89	13	3
1:A:9:LYS:NZ	1:A:9:LYS:CB	0.61	2.62	13	2
1:A:120:LEU:O	1:A:124:ALA:CB	0.61	2.49	9	20
1:A:133:SER:C	1:A:135:GLY:H	0.61	1.98	5	20
1:A:116:ASN:ND2	1:A:116:ASN:C	0.61	2.53	3	2
1:A:79:ARG:CZ	1:A:134:MET:SD	0.61	2.88	17	2
1:A:14:ALA:O	1:A:49:GLY:O	0.61	2.18	10	2
1:A:30:HIS:NE2	1:A:65:PHE:CE1	0.61	2.68	13	1
1:A:76:TYR:CE2	1:A:77:LEU:HB3	0.61	2.31	13	16
1:A:81:ALA:CB	1:A:103:GLN:OE1	0.61	2.49	9	5
1:A:83:GLY:C	1:A:84:LEU:HD23	0.61	2.16	2	3
1:A:79:ARG:NH1	1:A:79:ARG:CG	0.60	2.63	18	2
1:A:38:VAL:CG1	1:A:42:ASN:HD22	0.60	2.09	20	2
1:A:23:VAL:CG1	1:A:26:ALA:HB3	0.60	2.26	6	20
1:A:77:LEU:HD11	1:A:107:ILE:HG12	0.60	1.73	1	9
1:A:110:GLN:CD	1:A:110:GLN:N	0.60	2.55	17	3
1:A:15:GLY:C	1:A:17:ALA:H	0.60	1.99	13	2
1:A:103:GLN:O	1:A:107:ILE:CG1	0.60	2.49	12	1
1:A:48:MET:CG	1:A:49:GLY:N	0.60	2.65	20	15
1:A:79:ARG:HH11	1:A:79:ARG:CG	0.60	2.08	18	2
1:A:112:MET:SD	1:A:123:ALA:CB	0.60	2.89	2	5
1:A:17:ALA:CB	1:A:38:VAL:HG13	0.60	2.26	17	10
1:A:44:ALA:O	1:A:47:ASN:OD1	0.60	2.19	12	3
1:A:41:PHE:CD2	1:A:45:THR:HG21	0.60	2.32	18	16
1:A:100:THR:HG22	1:A:139:VAL:HG12	0.59	1.72	20	11
1:A:77:LEU:C	1:A:77:LEU:CD2	0.59	2.69	19	4
1:A:125:ARG:O	1:A:129:GLY:CA	0.59	2.50	1	20
1:A:30:HIS:CD2	1:A:65:PHE:CD1	0.59	2.91	13	4
1:A:30:HIS:ND1	1:A:65:PHE:CD1	0.59	2.69	17	1
1:A:77:LEU:C	1:A:77:LEU:CD1	0.59	2.70	10	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:131:ALA:HB1	1:A:136:VAL:HB	0.59	1.74	9	13
1:A:77:LEU:C	1:A:77:LEU:HD22	0.59	2.18	10	2
1:A:77:LEU:HD21	1:A:107:ILE:HG12	0.59	1.73	6	3
1:A:38:VAL:HG12	1:A:42:ASN:ND2	0.59	2.13	4	5
1:A:12:LEU:O	1:A:52:ILE:HA	0.59	1.98	15	1
1:A:44:ALA:HB1	1:A:70:LYS:HZ3	0.59	1.57	4	2
1:A:71:THR:O	1:A:72:PRO:O	0.59	2.21	3	20
1:A:74:ALA:O	1:A:76:TYR:CD1	0.59	2.56	9	18
1:A:68:VAL:CG1	1:A:70:LYS:HZ1	0.59	2.10	6	1
1:A:12:LEU:HD13	1:A:55:VAL:HG11	0.59	1.74	1	8
1:A:75:SER:OG	1:A:79:ARG:CD	0.59	2.51	2	2
1:A:133:SER:C	1:A:135:GLY:N	0.58	2.56	5	20
1:A:23:VAL:O	1:A:25:PRO:CD	0.58	2.51	12	20
1:A:71:THR:C	1:A:75:SER:OG	0.58	2.41	7	3
1:A:67:PHE:CD1	1:A:67:PHE:N	0.58	2.71	19	7
1:A:33:ASN:OD1	1:A:33:ASN:O	0.58	2.21	8	1
1:A:30:HIS:NE2	1:A:33:ASN:ND2	0.58	2.51	18	2
1:A:15:GLY:H	1:A:45:THR:CB	0.58	2.12	20	2
1:A:75:SER:OG	1:A:134:MET:CE	0.58	2.51	2	1
1:A:11:GLN:O	1:A:12:LEU:CD1	0.58	2.43	19	1
1:A:47:ASN:OD1	1:A:47:ASN:C	0.58	2.42	12	2
1:A:59:ILE:CG2	1:A:64:SER:O	0.58	2.51	9	1
1:A:45:THR:O	1:A:49:GLY:O	0.58	2.22	9	12
1:A:79:ARG:O	1:A:82:ALA:HB3	0.57	2.00	11	6
1:A:66:THR:O	1:A:67:PHE:HB3	0.57	1.98	10	13
1:A:74:ALA:O	1:A:76:TYR:N	0.57	2.36	10	18
1:A:137:GLU:OE1	1:A:138:VAL:O	0.57	2.22	20	2
1:A:108:ALA:HB1	1:A:123:ALA:HB1	0.57	1.75	14	13
1:A:23:VAL:HG12	1:A:26:ALA:C	0.57	2.20	12	9
1:A:54:PRO:O	1:A:69:THR:HG21	0.57	1.98	15	2
1:A:65:PHE:CG	1:A:65:PHE:O	0.57	2.56	19	1
1:A:71:THR:CG2	1:A:79:ARG:NH2	0.57	2.67	20	1
1:A:96:VAL:CG1	1:A:97:GLY:N	0.57	2.67	20	7
1:A:97:GLY:CA	1:A:136:VAL:HG22	0.57	2.29	12	3
1:A:84:LEU:HD23	1:A:96:VAL:HG12	0.57	1.76	15	1
1:A:41:PHE:O	1:A:45:THR:HG23	0.57	1.99	4	6
1:A:4:VAL:N	1:A:60:TYR:CE1	0.57	2.72	15	4
1:A:11:GLN:NE2	1:A:11:GLN:H	0.57	1.95	10	2
1:A:27:LEU:HD13	1:A:37:PHE:CD2	0.57	2.35	8	2
1:A:137:GLU:CD	1:A:138:VAL:N	0.57	2.58	20	2
1:A:27:LEU:O	1:A:29:GLN:N	0.57	2.37	5	19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:63:ARG:NH1	1:A:63:ARG:HG3	0.57	2.15	4	2
1:A:77:LEU:HD21	1:A:107:ILE:HD11	0.57	1.72	12	1
1:A:7:VAL:O	1:A:7:VAL:CG2	0.56	2.52	4	16
1:A:8:VAL:CB	1:A:57:ILE:HD12	0.56	2.30	8	18
1:A:98:ARG:HD3	1:A:139:VAL:HG23	0.56	1.76	8	5
1:A:111:LYS:NZ	1:A:126:MET:SD	0.56	2.78	15	3
1:A:109:LYS:HE3	1:A:120:LEU:HD11	0.56	1.76	17	2
1:A:29:GLN:OE1	1:A:29:GLN:O	0.56	2.22	16	1
1:A:17:ALA:O	1:A:18:THR:HG23	0.56	1.99	10	12
1:A:108:ALA:HB2	1:A:127:ILE:HG12	0.56	1.77	14	20
1:A:127:ILE:C	1:A:130:SER:HG	0.56	2.03	9	2
1:A:102:GLU:OE2	1:A:106:GLU:OE1	0.56	2.22	9	2
1:A:84:LEU:HD21	1:A:97:GLY:N	0.56	2.13	20	1
1:A:39:LYS:O	1:A:43:ALA:CB	0.56	2.53	13	17
1:A:84:LEU:CD2	1:A:97:GLY:H	0.56	2.12	20	1
1:A:114:ASP:OD1	1:A:114:ASP:O	0.56	2.24	9	4
1:A:105:LEU:HD13	1:A:120:LEU:CD1	0.56	2.28	7	16
1:A:112:MET:SD	1:A:123:ALA:HB3	0.56	2.40	2	4
1:A:11:GLN:N	1:A:11:GLN:CD	0.56	2.59	19	8
1:A:44:ALA:HB1	1:A:70:LYS:HZ2	0.56	1.61	9	2
1:A:79:ARG:NE	1:A:84:LEU:HD11	0.56	2.16	5	1
1:A:43:ALA:O	1:A:47:ASN:OD1	0.56	2.24	2	1
1:A:80:LYS:C	1:A:80:LYS:CD	0.55	2.74	15	2
1:A:136:VAL:CG1	1:A:137:GLU:N	0.55	2.69	2	17
1:A:43:ALA:O	1:A:47:ASN:CG	0.55	2.45	5	2
1:A:10:LEU:O	1:A:54:PRO:C	0.55	2.45	12	10
1:A:98:ARG:CB	1:A:98:ARG:NH1	0.55	2.69	12	1
1:A:65:PHE:O	1:A:65:PHE:CD2	0.55	2.60	19	1
1:A:132:ARG:C	1:A:132:ARG:CD	0.55	2.75	2	11
1:A:10:LEU:HD13	1:A:23:VAL:HG22	0.55	1.77	5	1
1:A:17:ALA:O	1:A:42:ASN:ND2	0.55	2.39	10	2
1:A:41:PHE:O	1:A:44:ALA:N	0.55	2.39	15	17
1:A:63:ARG:O	1:A:63:ARG:HD3	0.55	2.02	4	1
1:A:131:ALA:HB1	1:A:136:VAL:CB	0.55	2.32	12	10
1:A:139:VAL:HG22	1:A:139:VAL:O	0.55	2.02	5	3
1:A:28:GLY:C	1:A:30:HIS:N	0.55	2.59	7	5
1:A:25:PRO:C	1:A:27:LEU:N	0.54	2.61	5	14
1:A:83:GLY:O	1:A:96:VAL:HG13	0.54	2.02	6	2
1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:C	0.54	2.23	18	1
1:A:114:ASP:CG	1:A:114:ASP:O	0.54	2.46	15	6
1:A:117:THR:CG2	1:A:118:THR:N	0.54	2.64	10	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:117:THR:CG2	1:A:122:ALA:HB3	0.54	2.32	6	12
1:A:126:MET:O	1:A:130:SER:HB3	0.54	2.02	2	4
1:A:39:LYS:O	1:A:43:ALA:HB2	0.54	2.02	11	14
1:A:30:HIS:NE2	1:A:33:ASN:O	0.54	2.40	17	1
1:A:71:THR:HG21	1:A:79:ARG:HG3	0.54	1.78	1	7
1:A:75:SER:OG	1:A:79:ARG:HG2	0.54	2.02	15	6
1:A:109:LYS:HG2	1:A:120:LEU:HD21	0.54	1.79	5	2
1:A:11:GLN:HE21	1:A:11:GLN:C	0.54	2.06	10	4
1:A:47:ASN:HD22	1:A:47:ASN:C	0.54	2.06	15	1
1:A:10:LEU:C	1:A:11:GLN:NE2	0.54	2.60	9	3
1:A:83:GLY:O	1:A:96:VAL:CA	0.54	2.56	20	1
1:A:105:LEU:HD22	1:A:120:LEU:HD22	0.54	1.79	15	19
1:A:136:VAL:HG12	1:A:137:GLU:N	0.54	2.17	2	17
1:A:137:GLU:CD	1:A:138:VAL:H	0.54	2.05	20	2
1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CD2	0.54	2.68	15	1
1:A:79:ARG:HE	1:A:134:MET:CE	0.54	2.16	18	1
1:A:34:ILE:O	1:A:37:PHE:N	0.54	2.41	7	15
1:A:112:MET:CE	1:A:119:ASP:O	0.54	2.55	18	1
1:A:114:ASP:O	1:A:114:ASP:OD1	0.54	2.26	15	2
1:A:71:THR:CB	1:A:79:ARG:HE	0.54	2.16	19	1
1:A:114:ASP:OD1	1:A:114:ASP:C	0.53	2.46	3	4
1:A:53:VAL:HG22	1:A:71:THR:C	0.53	2.24	18	6
1:A:33:ASN:ND2	1:A:33:ASN:N	0.53	2.57	7	1
1:A:81:ALA:HB1	1:A:99:ILE:HG22	0.53	1.79	20	1
1:A:79:ARG:NH1	1:A:79:ARG:HG2	0.53	2.18	1	2
1:A:30:HIS:O	1:A:63:ARG:CB	0.53	2.56	20	4
1:A:42:ASN:O	1:A:46:ALA:HB3	0.53	2.03	8	3
1:A:71:THR:HG22	1:A:72:PRO:HD2	0.53	1.79	20	1
1:A:10:LEU:N	1:A:55:VAL:O	0.53	2.42	19	20
1:A:11:GLN:HA	1:A:54:PRO:HA	0.53	1.81	3	15
1:A:28:GLY:O	1:A:29:GLN:C	0.53	2.44	9	5
1:A:132:ARG:O	1:A:133:SER:C	0.53	2.47	7	17
1:A:71:THR:OG1	1:A:79:ARG:HG3	0.53	2.03	11	6
1:A:62:ASP:OD1	1:A:62:ASP:C	0.53	2.47	6	3
1:A:44:ALA:O	1:A:48:MET:CG	0.53	2.57	15	5
1:A:71:THR:CB	1:A:75:SER:HG	0.53	2.16	17	3
1:A:75:SER:OG	1:A:79:ARG:CZ	0.53	2.57	1	1
1:A:78:ILE:O	1:A:82:ALA:CB	0.53	2.57	12	14
1:A:53:VAL:HG13	1:A:71:THR:O	0.53	2.02	20	6
1:A:76:TYR:CD1	1:A:77:LEU:N	0.53	2.77	11	3
1:A:58:THR:O	1:A:66:THR:OG1	0.53	2.26	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:4:VAL:HA	1:A:60:TYR:CE1	0.53	2.39	16	5
1:A:20:ALA:N	1:A:21:PRO:CD	0.53	2.72	1	20
1:A:44:ALA:CB	1:A:70:LYS:NZ	0.53	2.71	3	2
1:A:29:GLN:CD	1:A:29:GLN:O	0.52	2.47	17	1
1:A:13:PRO:HB2	1:A:16:LYS:HB3	0.52	1.81	1	5
1:A:4:VAL:CA	1:A:60:TYR:CE1	0.52	2.92	16	4
1:A:15:GLY:N	1:A:45:THR:HB	0.52	2.19	8	9
1:A:98:ARG:NH1	1:A:98:ARG:HG3	0.52	2.20	4	7
1:A:112:MET:N	1:A:113:PRO:HD3	0.52	2.20	16	11
1:A:16:LYS:CE	1:A:50:ASP:OD1	0.52	2.57	14	1
1:A:98:ARG:HH11	1:A:98:ARG:HG2	0.52	1.64	8	7
1:A:18:THR:C	1:A:20:ALA:N	0.52	2.61	15	15
1:A:132:ARG:NH1	1:A:132:ARG:HG3	0.52	2.20	10	7
1:A:9:LYS:HZ3	1:A:9:LYS:HB3	0.52	1.64	13	2
1:A:116:ASN:HD22	1:A:117:THR:H	0.52	1.45	19	1
1:A:65:PHE:O	1:A:65:PHE:CG	0.52	2.62	11	5
1:A:4:VAL:HA	1:A:60:TYR:CD1	0.52	2.39	7	18
1:A:70:LYS:HD3	1:A:70:LYS:H	0.52	1.65	13	7
1:A:125:ARG:HG3	1:A:125:ARG:NH1	0.52	2.20	11	1
1:A:57:ILE:HA	1:A:67:PHE:CG	0.52	2.40	3	12
1:A:131:ALA:HB1	1:A:136:VAL:HG12	0.52	1.82	3	3
1:A:125:ARG:NH1	1:A:125:ARG:CG	0.52	2.72	11	1
1:A:25:PRO:C	1:A:27:LEU:H	0.52	2.08	5	10
1:A:129:GLY:O	1:A:132:ARG:HB3	0.52	2.05	18	20
1:A:75:SER:O	1:A:79:ARG:CG	0.51	2.59	12	6
1:A:70:LYS:N	1:A:70:LYS:HD2	0.51	2.20	13	7
1:A:125:ARG:NH1	1:A:125:ARG:HG3	0.51	2.20	15	5
1:A:77:LEU:HD13	1:A:78:ILE:H	0.51	1.59	10	1
1:A:14:ALA:CB	1:A:51:ALA:C	0.51	2.77	11	10
1:A:111:LYS:CD	1:A:111:LYS:O	0.51	2.58	9	5
1:A:102:GLU:C	1:A:102:GLU:CD	0.51	2.69	11	11
1:A:50:ASP:CG	1:A:50:ASP:O	0.51	2.49	12	1
1:A:108:ALA:CB	1:A:127:ILE:CG1	0.51	2.88	16	20
1:A:34:ILE:O	1:A:35:MET:C	0.51	2.48	7	20
1:A:128:ALA:O	1:A:129:GLY:C	0.51	2.49	15	20
1:A:80:LYS:C	1:A:82:ALA:N	0.51	2.64	12	17
1:A:80:LYS:O	1:A:82:ALA:N	0.51	2.44	12	5
1:A:30:HIS:O	1:A:30:HIS:ND1	0.51	2.43	1	3
1:A:6:ALA:HB3	1:A:59:ILE:HB	0.51	1.83	15	2
1:A:50:ASP:O	1:A:51:ALA:HB2	0.51	2.06	15	9
1:A:79:ARG:HB3	1:A:84:LEU:HD12	0.51	1.83	2	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:80:LYS:C	1:A:82:ALA:H	0.51	2.09	12	9
1:A:112:MET:HE1	1:A:118:THR:O	0.51	2.05	18	1
1:A:31:GLY:O	1:A:32:ALA:CB	0.51	2.59	15	15
1:A:70:LYS:O	1:A:71:THR:CB	0.51	2.59	13	14
1:A:75:SER:OG	1:A:79:ARG:HG3	0.51	2.06	1	1
1:A:84:LEU:CD2	1:A:96:VAL:HG12	0.51	2.36	13	1
1:A:50:ASP:O	1:A:50:ASP:OD1	0.51	2.28	19	1
1:A:62:ASP:O	1:A:63:ARG:C	0.50	2.50	16	2
1:A:8:VAL:HG12	1:A:10:LEU:HB2	0.50	1.83	4	15
1:A:102:GLU:CD	1:A:102:GLU:O	0.50	2.50	2	12
1:A:35:MET:O	1:A:39:LYS:CB	0.50	2.59	12	2
1:A:35:MET:O	1:A:36:GLU:C	0.50	2.50	9	12
1:A:38:VAL:O	1:A:39:LYS:C	0.50	2.49	1	7
1:A:57:ILE:HG12	1:A:67:PHE:CZ	0.50	2.42	15	11
1:A:29:GLN:O	1:A:31:GLY:N	0.50	2.42	19	2
1:A:106:GLU:OE1	1:A:107:ILE:N	0.50	2.45	19	1
1:A:79:ARG:HD2	1:A:84:LEU:HD11	0.50	1.81	5	3
1:A:32:ALA:O	1:A:33:ASN:ND2	0.50	2.44	2	1
1:A:17:ALA:HB1	1:A:38:VAL:HG13	0.50	1.84	8	2
1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:O	0.50	2.05	18	1
1:A:112:MET:HA	1:A:115:LEU:HD11	0.50	1.83	8	2
1:A:74:ALA:C	1:A:76:TYR:N	0.50	2.65	10	11
1:A:106:GLU:CD	1:A:106:GLU:C	0.50	2.70	18	3
1:A:33:ASN:ND2	1:A:36:GLU:CB	0.50	2.75	8	1
1:A:102:GLU:OE2	1:A:106:GLU:CD	0.50	2.50	7	2
1:A:63:ARG:O	1:A:63:ARG:CG	0.50	2.60	14	1
1:A:112:MET:O	1:A:112:MET:CG	0.50	2.58	9	6
1:A:131:ALA:O	1:A:132:ARG:C	0.49	2.51	14	20
1:A:112:MET:N	1:A:113:PRO:CD	0.49	2.74	12	7
1:A:76:TYR:CG	1:A:77:LEU:N	0.49	2.80	7	14
1:A:79:ARG:NH1	1:A:79:ARG:HG3	0.49	2.21	5	2
1:A:10:LEU:CD2	1:A:23:VAL:HG23	0.49	2.37	7	4
1:A:21:PRO:O	1:A:23:VAL:N	0.49	2.45	17	5
1:A:98:ARG:CD	1:A:139:VAL:HG23	0.49	2.37	9	1
1:A:110:GLN:CD	1:A:110:GLN:H	0.49	2.11	17	2
1:A:102:GLU:CA	1:A:102:GLU:OE1	0.49	2.59	5	3
1:A:29:GLN:O	1:A:29:GLN:NE2	0.49	2.46	17	1
1:A:9:LYS:CG	1:A:9:LYS:O	0.49	2.61	13	11
1:A:23:VAL:CG1	1:A:27:LEU:N	0.49	2.74	3	5
1:A:134:MET:HG2	1:A:136:VAL:HG23	0.49	1.84	20	7
1:A:102:GLU:OE2	1:A:102:GLU:O	0.49	2.29	7	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:105:LEU:O	1:A:106:GLU:C	0.49	2.51	2	20
1:A:53:VAL:CG1	1:A:69:THR:OG1	0.49	2.61	12	3
1:A:62:ASP:O	1:A:63:ARG:O	0.49	2.30	16	2
1:A:102:GLU:CD	1:A:102:GLU:C	0.49	2.69	4	4
1:A:75:SER:O	1:A:79:ARG:HG3	0.49	2.07	12	4
1:A:70:LYS:C	1:A:71:THR:HG23	0.49	2.28	13	13
1:A:124:ALA:O	1:A:125:ARG:C	0.49	2.51	18	20
1:A:112:MET:CA	1:A:115:LEU:HD11	0.49	2.37	8	1
1:A:109:LYS:O	1:A:112:MET:CG	0.49	2.61	16	2
1:A:44:ALA:C	1:A:47:ASN:HD22	0.49	2.11	19	2
1:A:73:PRO:O	1:A:75:SER:OG	0.49	2.29	18	1
1:A:13:PRO:HA	1:A:52:ILE:HD13	0.49	1.84	20	13
1:A:102:GLU:O	1:A:102:GLU:OE2	0.49	2.30	2	2
1:A:84:LEU:HD23	1:A:96:VAL:CG1	0.49	2.38	7	2
1:A:55:VAL:C	1:A:56:GLU:OE1	0.49	2.51	13	1
1:A:12:LEU:HB3	1:A:41:PHE:CZ	0.48	2.43	6	8
1:A:32:ALA:C	1:A:33:ASN:OD1	0.48	2.51	9	2
1:A:52:ILE:HD12	1:A:52:ILE:N	0.48	2.22	9	1
1:A:41:PHE:O	1:A:43:ALA:N	0.48	2.46	15	2
1:A:15:GLY:C	1:A:17:ALA:N	0.48	2.65	13	2
1:A:57:ILE:HG22	1:A:59:ILE:HG12	0.48	1.85	19	2
1:A:8:VAL:O	1:A:56:GLU:CA	0.48	2.61	19	7
1:A:84:LEU:CD2	1:A:96:VAL:CG1	0.48	2.92	13	4
1:A:67:PHE:C	1:A:68:VAL:HG23	0.48	2.29	18	7
1:A:109:LYS:HE2	1:A:120:LEU:HD11	0.48	1.84	2	2
1:A:12:LEU:CD1	1:A:55:VAL:HG21	0.48	2.38	20	2
1:A:114:ASP:OD1	1:A:114:ASP:N	0.48	2.46	4	1
1:A:125:ARG:HH11	1:A:125:ARG:HG2	0.48	1.69	15	4
1:A:111:LYS:HD3	1:A:127:ILE:HD11	0.48	1.85	10	1
1:A:44:ALA:O	1:A:48:MET:HG2	0.48	2.09	6	3
1:A:117:THR:HG23	1:A:122:ALA:HB3	0.48	1.84	20	4
1:A:10:LEU:C	1:A:55:VAL:HG22	0.48	2.28	15	11
1:A:78:ILE:O	1:A:82:ALA:N	0.48	2.46	11	17
1:A:11:GLN:HE21	1:A:11:GLN:CA	0.48	2.21	7	3
1:A:132:ARG:HH11	1:A:132:ARG:HG2	0.47	1.68	16	7
1:A:78:ILE:HD11	1:A:127:ILE:HG23	0.47	1.86	6	3
1:A:134:MET:SD	1:A:136:VAL:HG21	0.47	2.49	18	3
1:A:21:PRO:C	1:A:23:VAL:H	0.47	2.12	17	5
1:A:71:THR:HB	1:A:75:SER:OG	0.47	2.08	10	4
1:A:125:ARG:O	1:A:129:GLY:HA3	0.47	2.09	1	19
1:A:75:SER:HB3	1:A:134:MET:SD	0.47	2.50	12	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:VAL:HG11	1:A:70:LYS:HZ1	0.47	1.66	6	1
1:A:30:HIS:CG	1:A:65:PHE:CD1	0.47	3.02	13	1
1:A:21:PRO:C	1:A:23:VAL:N	0.47	2.68	11	7
1:A:71:THR:HB	1:A:79:ARG:HE	0.47	1.69	19	1
1:A:14:ALA:HB2	1:A:53:VAL:HG23	0.47	1.86	11	1
1:A:4:VAL:HA	1:A:60:TYR:CG	0.47	2.45	9	9
1:A:122:ALA:O	1:A:123:ALA:C	0.47	2.53	9	20
1:A:18:THR:HG22	1:A:19:PRO:HD2	0.47	1.86	16	7
1:A:109:LYS:O	1:A:112:MET:HG3	0.47	2.09	18	2
1:A:31:GLY:N	1:A:63:ARG:HG3	0.47	2.24	17	1
1:A:75:SER:O	1:A:76:TYR:C	0.47	2.53	11	20
1:A:44:ALA:O	1:A:47:ASN:N	0.47	2.48	6	3
1:A:69:THR:C	1:A:70:LYS:HD2	0.47	2.29	5	7
1:A:103:GLN:O	1:A:107:ILE:HG13	0.47	2.08	12	1
1:A:99:ILE:CD1	1:A:104:VAL:CG1	0.47	2.93	20	1
1:A:67:PHE:CD1	1:A:67:PHE:C	0.47	2.87	8	9
1:A:77:LEU:HD21	1:A:107:ILE:CG1	0.47	2.40	6	1
1:A:99:ILE:HD13	1:A:104:VAL:CG1	0.47	2.38	20	1
1:A:41:PHE:O	1:A:42:ASN:C	0.46	2.54	1	20
1:A:108:ALA:HB2	1:A:127:ILE:HG13	0.46	1.87	19	13
1:A:23:VAL:HG13	1:A:26:ALA:CB	0.46	2.40	4	3
1:A:44:ALA:O	1:A:45:THR:C	0.46	2.53	6	3
1:A:68:VAL:CG1	1:A:70:LYS:HZ3	0.46	2.22	6	1
1:A:41:PHE:CZ	1:A:55:VAL:CG1	0.46	2.98	8	1
1:A:71:THR:OG1	1:A:75:SER:HB2	0.46	2.11	18	2
1:A:99:ILE:O	1:A:139:VAL:CG1	0.46	2.64	9	2
1:A:45:THR:O	1:A:49:GLY:N	0.46	2.48	9	7
1:A:58:THR:N	1:A:66:THR:O	0.46	2.49	17	6
1:A:10:LEU:HD13	1:A:23:VAL:HG21	0.46	1.88	2	1
1:A:74:ALA:HA	1:A:76:TYR:CZ	0.46	2.46	11	3
1:A:49:GLY:C	1:A:50:ASP:OD1	0.46	2.53	15	1
1:A:10:LEU:C	1:A:55:VAL:CG2	0.46	2.84	15	8
1:A:48:MET:HG2	1:A:49:GLY:H	0.46	1.70	20	3
1:A:17:ALA:HB3	1:A:42:ASN:ND2	0.46	2.24	7	2
1:A:11:GLN:N	1:A:11:GLN:HE21	0.46	2.08	9	2
1:A:76:TYR:CZ	1:A:77:LEU:CD1	0.46	2.96	6	3
1:A:111:LYS:CD	1:A:127:ILE:HD11	0.46	2.40	10	1
1:A:30:HIS:CG	1:A:65:PHE:CE1	0.46	3.04	15	1
1:A:71:THR:CB	1:A:79:ARG:NE	0.46	2.78	19	1
1:A:130:SER:OG	1:A:131:ALA:N	0.46	2.49	14	3
1:A:28:GLY:C	1:A:30:HIS:H	0.46	2.13	7	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:MET:HG3	1:A:49:GLY:H	0.46	1.70	11	4
1:A:57:ILE:HG22	1:A:59:ILE:HG13	0.46	1.88	1	3
1:A:109:LYS:O	1:A:112:MET:N	0.46	2.35	17	3
1:A:79:ARG:CZ	1:A:84:LEU:HD11	0.45	2.41	12	1
1:A:112:MET:CE	1:A:118:THR:O	0.45	2.64	18	1
1:A:109:LYS:O	1:A:110:GLN:C	0.45	2.54	3	12
1:A:114:ASP:O	1:A:114:ASP:OD2	0.45	2.34	11	3
1:A:32:ALA:O	1:A:33:ASN:CG	0.45	2.55	10	2
1:A:51:ALA:HB1	1:A:72:PRO:HD3	0.45	1.89	10	1
1:A:58:THR:OG1	1:A:66:THR:O	0.45	2.29	15	1
1:A:99:ILE:CD1	1:A:104:VAL:HG12	0.45	2.39	20	1
1:A:72:PRO:CB	1:A:73:PRO:HD2	0.45	2.42	18	20
1:A:108:ALA:CA	1:A:127:ILE:HG13	0.45	2.42	20	19
1:A:14:ALA:HB1	1:A:45:THR:HB	0.45	1.87	20	5
1:A:77:LEU:HD11	1:A:107:ILE:HD13	0.45	1.87	4	1
1:A:98:ARG:NH1	1:A:98:ARG:HB2	0.45	2.26	12	1
1:A:75:SER:OG	1:A:79:ARG:HD2	0.45	2.11	17	1
1:A:50:ASP:OD1	1:A:50:ASP:C	0.45	2.54	9	2
1:A:9:LYS:NZ	1:A:9:LYS:HB3	0.45	2.26	13	1
1:A:5:VAL:CG2	1:A:59:ILE:O	0.45	2.64	15	1
1:A:73:PRO:O	1:A:74:ALA:C	0.45	2.55	2	2
1:A:75:SER:CB	1:A:134:MET:SD	0.45	3.05	10	2
1:A:11:GLN:NE2	1:A:11:GLN:CA	0.45	2.80	10	3
1:A:4:VAL:HB	1:A:60:TYR:CE2	0.45	2.47	15	1
1:A:60:TYR:O	1:A:63:ARG:N	0.45	2.49	12	6
1:A:101:TRP:O	1:A:105:LEU:HG	0.45	2.12	1	18
1:A:9:LYS:O	1:A:9:LYS:CD	0.45	2.65	10	2
1:A:48:MET:SD	1:A:49:GLY:N	0.45	2.89	15	1
1:A:29:GLN:O	1:A:29:GLN:CD	0.45	2.54	16	1
1:A:75:SER:CB	1:A:79:ARG:CD	0.45	2.94	18	1
1:A:106:GLU:OE1	1:A:106:GLU:C	0.45	2.55	19	1
1:A:38:VAL:HG13	1:A:42:ASN:HD22	0.45	1.71	20	1
1:A:70:LYS:O	1:A:71:THR:O	0.45	2.34	3	2
1:A:13:PRO:C	1:A:15:GLY:H	0.45	2.14	7	2
1:A:119:ASP:OD1	1:A:122:ALA:CB	0.45	2.65	16	1
1:A:12:LEU:HB3	1:A:41:PHE:CE2	0.45	2.46	2	4
1:A:80:LYS:CB	1:A:80:LYS:NZ	0.45	2.80	4	1
1:A:137:GLU:CG	1:A:138:VAL:N	0.45	2.80	15	1
1:A:109:LYS:CG	1:A:120:LEU:HD21	0.45	2.42	16	1
1:A:30:HIS:O	1:A:63:ARG:HG3	0.44	2.12	4	2
1:A:41:PHE:CE1	1:A:55:VAL:CG1	0.44	3.00	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:130:SER:O	1:A:131:ALA:C	0.44	2.54	2	7
1:A:63:ARG:HH11	1:A:63:ARG:HG2	0.44	1.67	15	1
1:A:80:LYS:NZ	1:A:80:LYS:CB	0.44	2.80	17	1
1:A:102:GLU:OE1	1:A:102:GLU:HA	0.44	2.12	5	3
1:A:108:ALA:O	1:A:112:MET:CG	0.44	2.66	18	1
1:A:110:GLN:H	1:A:110:GLN:NE2	0.44	2.11	19	1
1:A:108:ALA:CB	1:A:127:ILE:HG12	0.44	2.43	16	19
1:A:14:ALA:O	1:A:50:ASP:OD1	0.44	2.35	2	1
1:A:98:ARG:NE	1:A:139:VAL:HG23	0.44	2.27	9	1
1:A:69:THR:HG23	1:A:69:THR:O	0.44	2.12	19	4
1:A:16:LYS:NZ	1:A:50:ASP:OD1	0.44	2.50	14	1
1:A:79:ARG:CG	1:A:84:LEU:HD12	0.44	2.42	18	1
1:A:10:LEU:HB3	1:A:55:VAL:CG2	0.44	2.42	4	3
1:A:66:THR:O	1:A:67:PHE:CB	0.44	2.65	11	6
1:A:75:SER:CB	1:A:79:ARG:HG2	0.44	2.43	10	1
1:A:117:THR:C	1:A:118:THR:CG2	0.44	2.86	10	1
1:A:74:ALA:N	1:A:76:TYR:CD2	0.44	2.85	11	1
1:A:79:ARG:NH2	1:A:136:VAL:CG2	0.44	2.80	2	1
1:A:102:GLU:OE2	1:A:106:GLU:HG2	0.44	2.13	13	1
1:A:102:GLU:O	1:A:105:LEU:N	0.44	2.51	15	3
1:A:42:ASN:O	1:A:46:ALA:HB2	0.43	2.12	12	8
1:A:63:ARG:O	1:A:63:ARG:HG2	0.43	2.10	6	2
1:A:30:HIS:CE1	1:A:65:PHE:CD1	0.43	3.05	5	2
1:A:9:LYS:CA	1:A:55:VAL:O	0.43	2.66	5	7
1:A:108:ALA:O	1:A:112:MET:SD	0.43	2.76	10	1
1:A:125:ARG:HH11	1:A:125:ARG:CG	0.43	2.20	11	1
1:A:62:ASP:O	1:A:63:ARG:HB3	0.43	2.13	4	5
1:A:33:ASN:ND2	1:A:36:GLU:HB2	0.43	2.27	8	1
1:A:99:ILE:O	1:A:139:VAL:CB	0.43	2.66	9	1
1:A:7:VAL:O	1:A:8:VAL:C	0.43	2.55	20	4
1:A:13:PRO:HG2	1:A:16:LYS:O	0.43	2.14	20	1
1:A:109:LYS:O	1:A:111:LYS:N	0.43	2.51	2	4
1:A:28:GLY:O	1:A:32:ALA:CA	0.43	2.66	9	1
1:A:50:ASP:C	1:A:50:ASP:OD1	0.43	2.56	11	2
1:A:110:GLN:N	1:A:110:GLN:OE1	0.43	2.52	17	1
1:A:12:LEU:CB	1:A:41:PHE:CZ	0.43	3.02	18	1
1:A:13:PRO:CG	1:A:16:LYS:O	0.43	2.67	20	1
1:A:82:ALA:C	1:A:98:ARG:H	0.43	2.16	1	1
1:A:99:ILE:HD12	1:A:104:VAL:HG11	0.43	1.90	5	5
1:A:75:SER:HB2	1:A:134:MET:CE	0.43	2.43	10	1
1:A:53:VAL:HG11	1:A:69:THR:OG1	0.43	2.12	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:PRO:HB2	1:A:16:LYS:CB	0.43	2.43	13	1
1:A:11:GLN:HA	1:A:53:VAL:O	0.43	2.13	18	1
1:A:79:ARG:NH1	1:A:84:LEU:HD13	0.43	2.28	9	1
1:A:41:PHE:C	1:A:43:ALA:N	0.43	2.71	15	1
1:A:79:ARG:HD3	1:A:84:LEU:CD1	0.43	2.43	20	1
1:A:109:LYS:HD3	1:A:120:LEU:HD21	0.43	1.91	3	1
1:A:79:ARG:NE	1:A:134:MET:SD	0.43	2.92	18	1
1:A:112:MET:SD	1:A:123:ALA:HB2	0.43	2.53	3	1
1:A:50:ASP:OD1	1:A:51:ALA:N	0.43	2.52	4	1
1:A:30:HIS:ND1	1:A:65:PHE:CE1	0.43	2.87	10	1
1:A:14:ALA:H	1:A:51:ALA:C	0.43	2.14	4	2
1:A:15:GLY:O	1:A:50:ASP:OD1	0.43	2.37	2	1
1:A:13:PRO:C	1:A:15:GLY:N	0.43	2.72	7	2
1:A:137:GLU:HG2	1:A:138:VAL:N	0.43	2.29	15	1
1:A:80:LYS:CB	1:A:80:LYS:HZ3	0.42	2.27	4	1
1:A:68:VAL:HG13	1:A:70:LYS:HZ1	0.42	1.74	2	1
1:A:109:LYS:C	1:A:111:LYS:N	0.42	2.72	20	4
1:A:47:ASN:ND2	1:A:47:ASN:C	0.42	2.72	15	1
1:A:68:VAL:O	1:A:68:VAL:HG12	0.42	2.15	12	3
1:A:130:SER:O	1:A:133:SER:N	0.42	2.52	20	3
1:A:66:THR:O	1:A:66:THR:OG1	0.42	2.36	7	4
1:A:33:ASN:HD22	1:A:36:GLU:CB	0.42	2.27	8	1
1:A:98:ARG:CZ	1:A:98:ARG:HB3	0.42	2.43	12	1
1:A:30:HIS:O	1:A:63:ARG:HG2	0.42	2.12	18	1
1:A:9:LYS:C	1:A:55:VAL:O	0.42	2.58	5	3
1:A:74:ALA:O	1:A:75:SER:C	0.42	2.58	12	7
1:A:30:HIS:O	1:A:63:ARG:HB3	0.42	2.14	8	1
1:A:31:GLY:N	1:A:63:ARG:CG	0.42	2.82	17	1
1:A:109:LYS:O	1:A:112:MET:HG2	0.42	2.15	3	3
1:A:71:THR:OG1	1:A:75:SER:HB3	0.42	2.15	2	1
1:A:9:LYS:HA	1:A:55:VAL:O	0.42	2.14	5	2
1:A:33:ASN:O	1:A:34:ILE:C	0.42	2.58	12	5
1:A:76:TYR:HD1	1:A:77:LEU:N	0.42	2.12	11	2
1:A:112:MET:CG	1:A:112:MET:O	0.42	2.66	12	2
1:A:134:MET:O	1:A:134:MET:CG	0.42	2.67	12	1
1:A:57:ILE:CG2	1:A:65:PHE:CB	0.42	2.98	15	1
1:A:30:HIS:NE2	1:A:33:ASN:OD1	0.42	2.52	18	1
1:A:84:LEU:HD23	1:A:96:VAL:HA	0.42	1.92	20	1
1:A:62:ASP:O	1:A:63:ARG:HB2	0.42	2.14	8	3
1:A:112:MET:H	1:A:113:PRO:HD3	0.42	1.72	12	2
1:A:10:LEU:C	1:A:11:GLN:HE21	0.42	2.18	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:LYS:CB	1:A:9:LYS:HZ3	0.42	2.27	2	1
1:A:76:TYR:CZ	1:A:77:LEU:HG	0.42	2.49	4	1
1:A:19:PRO:HA	1:A:34:ILE:HG21	0.42	1.92	5	1
1:A:57:ILE:HG13	1:A:67:PHE:CE2	0.42	2.49	8	2
1:A:111:LYS:O	1:A:112:MET:HB3	0.42	2.15	12	2
1:A:49:GLY:O	1:A:50:ASP:C	0.42	2.58	13	2
1:A:50:ASP:N	1:A:50:ASP:OD1	0.42	2.52	13	1
1:A:15:GLY:O	1:A:16:LYS:CG	0.42	2.68	15	1
1:A:7:VAL:CG2	1:A:56:GLU:HG3	0.42	2.44	18	1
1:A:74:ALA:CA	1:A:76:TYR:CZ	0.42	3.03	18	1
1:A:23:VAL:HG12	1:A:26:ALA:HB3	0.41	1.90	16	2
1:A:77:LEU:CD1	1:A:78:ILE:N	0.41	2.54	6	1
1:A:44:ALA:O	1:A:48:MET:HG3	0.41	2.14	15	1
1:A:117:THR:HG23	1:A:122:ALA:CB	0.41	2.45	12	1
1:A:115:LEU:HG	1:A:116:ASN:N	0.41	2.30	18	1
1:A:79:ARG:O	1:A:82:ALA:N	0.41	2.52	20	1
1:A:41:PHE:CE1	1:A:55:VAL:HG12	0.41	2.51	8	1
1:A:17:ALA:HB3	1:A:42:ASN:HD22	0.41	1.75	19	1
1:A:11:GLN:O	1:A:12:LEU:CG	0.41	2.68	10	2
1:A:37:PHE:CD1	1:A:37:PHE:O	0.41	2.72	8	2
1:A:71:THR:OG1	1:A:79:ARG:CD	0.41	2.68	9	1
1:A:128:ALA:O	1:A:131:ALA:HB3	0.41	2.16	15	1
1:A:114:ASP:O	1:A:115:LEU:C	0.41	2.59	7	4
1:A:79:ARG:NH1	1:A:84:LEU:HD11	0.41	2.28	3	1
1:A:27:LEU:C	1:A:29:GLN:N	0.41	2.74	12	1
1:A:75:SER:HB2	1:A:134:MET:SD	0.41	2.56	14	2
1:A:14:ALA:CB	1:A:51:ALA:H	0.41	2.14	15	1
1:A:79:ARG:CZ	1:A:84:LEU:HD12	0.41	2.46	3	1
1:A:56:GLU:O	1:A:58:THR:N	0.41	2.53	13	1
1:A:52:ILE:HG22	1:A:53:VAL:N	0.41	2.31	15	1
1:A:28:GLY:O	1:A:31:GLY:N	0.41	2.54	18	2
1:A:30:HIS:O	1:A:63:ARG:HA	0.41	2.15	14	1
1:A:77:LEU:CD1	1:A:107:ILE:HD13	0.41	2.46	4	1
1:A:5:VAL:N	1:A:59:ILE:O	0.41	2.49	7	1
1:A:125:ARG:CZ	1:A:125:ARG:HB3	0.41	2.44	11	1
1:A:4:VAL:CG2	1:A:5:VAL:N	0.41	2.83	13	1
1:A:79:ARG:HD2	1:A:84:LEU:CD1	0.41	2.45	13	1
1:A:12:LEU:O	1:A:52:ILE:CA	0.41	2.69	15	1
1:A:56:GLU:O	1:A:67:PHE:CB	0.41	2.69	15	1
1:A:31:GLY:N	1:A:63:ARG:HD3	0.41	2.29	19	1
1:A:84:LEU:HD22	1:A:97:GLY:H	0.41	1.76	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:102:GLU:OE1	1:A:102:GLU:CA	0.41	2.69	1	2
1:A:34:ILE:O	1:A:37:PHE:CB	0.41	2.69	2	3
1:A:27:LEU:HD23	1:A:27:LEU:HA	0.41	1.74	11	3
1:A:46:ALA:C	1:A:48:MET:N	0.41	2.74	8	1
1:A:57:ILE:CG2	1:A:65:PHE:HB2	0.41	2.46	15	1
1:A:75:SER:HB2	1:A:79:ARG:HE	0.41	1.76	19	1
1:A:106:GLU:OE1	1:A:106:GLU:CA	0.40	2.66	6	1
1:A:14:ALA:HA	1:A:45:THR:CG2	0.40	2.45	15	1
1:A:83:GLY:C	1:A:96:VAL:CG1	0.40	2.89	15	1
1:A:15:GLY:N	1:A:45:THR:CB	0.40	2.83	20	1
1:A:71:THR:HG21	1:A:79:ARG:CG	0.40	2.45	1	1
1:A:100:THR:HG22	1:A:139:VAL:HG11	0.40	1.91	1	1
1:A:123:ALA:O	1:A:126:MET:CB	0.40	2.68	3	1
1:A:70:LYS:NZ	1:A:70:LYS:CB	0.40	2.84	11	1
1:A:79:ARG:HH21	1:A:136:VAL:CG2	0.40	2.29	2	1
1:A:74:ALA:CA	1:A:76:TYR:CE2	0.40	3.04	11	1
1:A:25:PRO:O	1:A:26:ALA:C	0.40	2.60	17	1
1:A:80:LYS:HD2	1:A:81:ALA:N	0.40	2.32	19	1
1:A:96:VAL:CG1	1:A:97:GLY:H	0.40	2.29	20	1
1:A:75:SER:O	1:A:79:ARG:HG2	0.40	2.16	2	1
1:A:71:THR:OG1	1:A:79:ARG:CG	0.40	2.69	3	1
1:A:76:TYR:CZ	1:A:77:LEU:HB3	0.40	2.52	13	1
1:A:81:ALA:CB	1:A:99:ILE:HG22	0.40	2.46	20	1
1:A:57:ILE:HG12	1:A:67:PHE:CE1	0.40	2.52	9	1
1:A:61:ALA:O	1:A:62:ASP:C	0.40	2.58	10	1
1:A:99:ILE:H	1:A:99:ILE:HG13	0.40	1.53	14	1
1:A:71:THR:HB	1:A:79:ARG:NE	0.40	2.32	19	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	125/147 (85%)	65±2 (52±1%)	38±2 (30±2%)	22±1 (18±1%)	0	3
All	All	2500/2940 (85%)	1301 (52%)	756 (30%)	443 (18%)	0	3

All 39 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	8	VAL	20
1	A	19	PRO	20
1	A	24	GLY	20
1	A	62	ASP	20
1	A	68	VAL	20
1	A	72	PRO	20
1	A	73	PRO	20
1	A	74	ALA	20
1	A	118	THR	20
1	A	126	MET	20
1	A	134	MET	20
1	A	28	GLY	19
1	A	83	GLY	19
1	A	115	LEU	18
1	A	114	ASP	17
1	A	26	ALA	14
1	A	67	PHE	13
1	A	31	GLY	13
1	A	15	GLY	13
1	A	75	SER	12
1	A	117	THR	12
1	A	136	VAL	10
1	A	16	LYS	9
1	A	51	ALA	9
1	A	14	ALA	9
1	A	57	ILE	6
1	A	29	GLN	5
1	A	139	VAL	4
1	A	116	ASN	4
1	A	71	THR	3
1	A	34	ILE	2
1	A	112	MET	2
1	A	58	THR	2
1	A	61	ALA	2
1	A	63	ARG	2
1	A	30	HIS	1
1	A	81	ALA	1
1	A	52	ILE	1
1	A	97	GLY	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	95/111 (86%)	71±3 (74±3%)	24±3 (26±3%)	2 24
All	All	1900/2220 (86%)	1414 (74%)	486 (26%)	2 24

All 58 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	11	GLN	20
1	A	12	LEU	20
1	A	18	THR	20
1	A	27	LEU	20
1	A	48	MET	20
1	A	99	ILE	20
1	A	100	THR	20
1	A	118	THR	20
1	A	120	LEU	20
1	A	37	PHE	19
1	A	58	THR	19
1	A	67	PHE	19
1	A	77	LEU	18
1	A	112	MET	15
1	A	69	THR	13
1	A	70	LYS	12
1	A	125	ARG	12
1	A	10	LEU	11
1	A	132	ARG	11
1	A	9	LYS	9
1	A	103	GLN	9
1	A	64	SER	9
1	A	35	MET	8
1	A	119	ASP	8
1	A	98	ARG	8
1	A	65	PHE	8
1	A	30	HIS	7
1	A	60	TYR	6
1	A	80	LYS	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	114	ASP	6
1	A	75	SER	5
1	A	63	ARG	5
1	A	47	ASN	5
1	A	79	ARG	4
1	A	41	PHE	4
1	A	66	THR	4
1	A	33	ASN	4
1	A	39	LYS	3
1	A	106	GLU	3
1	A	16	LYS	3
1	A	115	LEU	3
1	A	50	ASP	3
1	A	71	THR	3
1	A	111	LYS	3
1	A	109	LYS	2
1	A	116	ASN	2
1	A	76	TYR	2
1	A	134	MET	2
1	A	62	ASP	2
1	A	137	GLU	2
1	A	29	GLN	2
1	A	113	PRO	1
1	A	110	GLN	1
1	A	42	ASN	1
1	A	56	GLU	1
1	A	52	ILE	1
1	A	84	LEU	1
1	A	78	ILE	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