

Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Mar 5, 2022 – 08:15 AM EST

PDB ID	:	2JXY
Title	:	Solution structure of the hemopexin-like domain of MMP12
Authors	:	Bertini, I.; Calderone, V.; Fragai, M.; Jaiswal, R.; Luchinat, C.; Melikian, M.
Deposited on	:	2007-12-01

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
Ideal geometry (proteins) Ideal geometry (DNA, RNA) Validation Pipeline (wwPDB-VP)	::	Engh & Huber (2001) Parkinson et al. (1996) 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	$egin{array}{c} { m Whole \ archive} \ (\#{ m Entries}) \end{array}$	${f NMR} {f archive} \ (\# { m Entries})$
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	А	194	36%	57%	5% •



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	Well-defined core Residue range (total) Backbone RMSD (Å) Medoid model						
1	A:281-A:470 (190)	0.70	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 3 clusters and 4 single-model clusters were found.

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



3 Entry composition (i)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 3243 atoms, of which 1595 are hydrogens and 0 are deuteriums.

• Molecule 1 is a protein called Macrophage metalloelastase.

Mol	Chain	Residues	Atoms					Trace	
1	٨	104	Total	С	Η	Ν	0	S	0
	194	3242	1089	1595	267	286	5	U	

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
А	277	MET	-	expression tag	UNP P39900

• Molecule 2 is CALCIUM ION (three-letter code: CA) (formula: Ca).

Mol	Chain	Residues	Atoms
2	А	1	Total Ca 1 1



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: Macrophage metalloelastase



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)





4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: Macrophage metalloelastase



4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: Macrophage metalloelastase



4.2.4 Score per residue for model 4





4.2.5 Score per residue for model 5

• Molecule 1: Macrophage metalloelastase



4.2.6 Score per residue for model 6

• Molecule 1: Macrophage metalloelastase



4.2.7 Score per residue for model 7





4.2.8 Score per residue for model 8

• Molecule 1: Macrophage metalloelastase



4.2.9 Score per residue for model 9

• Molecule 1: Macrophage metalloelastase



4.2.10 Score per residue for model 10





4.2.11 Score per residue for model 11

• Molecule 1: Macrophage metalloelastase



4.2.12 Score per residue for model 12

• Molecule 1: Macrophage metalloelastase



4.2.13 Score per residue for model 13





4.2.14 Score per residue for model 14

• Molecule 1: Macrophage metalloelastase



4.2.15 Score per residue for model 15

• Molecule 1: Macrophage metalloelastase



4.2.16 Score per residue for model 16





4.2.17 Score per residue for model 17

• Molecule 1: Macrophage metalloelastase



4.2.18 Score per residue for model 18

• Molecule 1: Macrophage metalloelastase



4.2.19 Score per residue for model 19





4.2.20 Score per residue for model 20





5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

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

Of the 1600 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: lowest target function.

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

Software name	Classification	Version
DYANA	refinement	

No chemical shift data was provided.



6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: CA

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	А	1618	1568	1565	$80{\pm}15$
All	All	32380	31360	31324	1602

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 25.

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

Atom 1	Atom 2	$Clash(\lambda)$	Distance(Å)	Mo	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:281:LEU:HD11	1:A:307:TRP:CZ3	1.00	1.91	17	1
1:A:328:LEU:HD21	1:A:355:ILE:HD11	0.94	1.40	10	3
1:A:346:LEU:HD23	1:A:355:ILE:HD13	0.92	1.37	2	2
1:A:291:VAL:HG21	1:A:442:PHE:CZ	0.91	2.01	15	1
1:A:298:ILE:HD13	1:A:300:PHE:CZ	0.90	2.01	13	1
1:A:432:VAL:HG21	1:A:442:PHE:CE1	0.88	2.02	8	3
1:A:368:ILE:HD12	1:A:377:VAL:HG13	0.88	1.45	2	1
1:A:286:LEU:HD11	1:A:307:TRP:CZ2	0.88	2.04	16	2
1:A:336:TYR:OH	1:A:338:ILE:HD11	0.87	1.69	10	1
1:A:327:THR:O	1:A:328:LEU:HD22	0.87	1.70	6	13
1:A:334:ALA:HB1	1:A:383:ALA:HB2	0.86	1.46	15	1
1:A:281:LEU:HD11	1:A:316:THR:OG1	0.85	1.71	18	1



Continued from prev	ious page				
Atom_1	Atom_2	$Clash(\lambda)$	$lash(\hat{\lambda})$ Distance($\hat{\lambda}$)		lels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:450:GLU:O	1:A:458:ILE:HG23	0.84	1.72	1	3
1:A:382:ALA:HB1	1:A:432:VAL:HG12	0.84	1.50	1	5
1:A:354:LEU:HD23	1:A:364:TYR:CE2	0.83	2.08	18	3
1:A:350:ASP:O	1:A:368:ILE:HG23	0.82	1.74	13	1
1:A:338:ILE:HD12	1:A:345:PHE:CE1	0.82	2.10	10	2
1:A:291:VAL:HG22	1:A:431:ALA:HB1	0.81	1.50	4	5
1:A:291:VAL:HG21	1:A:442:PHE:CE1	0.81	2.11	15	1
1:A:291:VAL:HG21	1:A:300:PHE:CE2	0.80	2.11	16	1
1:A:424:GLY:CA	1:A:458:ILE:HD11	0.80	2.06	12	2
1:A:337:GLU:OE1	1:A:344:VAL:HG22	0.80	1.75	19	1
1:A:462:LEU:HD11	1:A:466:SER:CB	0.79	2.07	15	3
1:A:364:TYR:N	1:A:365:PRO:CD	0.79	2.46	12	3
1:A:328:LEU:HD13	1:A:329:PRO:HD2	0.79	1.54	10	6
1:A:290:ALA:HB2	1:A:333:GLU:O	0.78	1.77	15	2
1:A:429:ILE:HD11	1:A:440:TYR:OH	0.78	1.77	15	1
1:A:336:TYR:CZ	1:A:338:ILE:HD11	0.77	2.14	10	1
1:A:347:PHE:CZ	1:A:380:ILE:HD12	0.77	2.15	5	1
1:A:288:PHE:CE2	1:A:300:PHE:CD1	0.77	2.72	4	2
1:A:281:LEU:HD13	1:A:316:THR:OG1	0.77	1.80	17	1
1:A:396:VAL:HG22	1:A:397:ASP:OD1	0.76	1.79	19	1
1:A:298:ILE:HD12	1:A:310:VAL:HG23	0.76	1.58	20	1
1:A:462:LEU:HD12	1:A:466:SER:CB	0.74	2.10	13	7
1:A:449:PHE:CE1	1:A:461:THR:HG22	0.74	2.16	14	1
1:A:462:LEU:HD12	1:A:466:SER:HB3	0.74	1.57	1	7
1:A:347:PHE:CE1	1:A:380:ILE:HD12	0.74	2.18	5	1
1:A:299:PHE:CD1	1:A:308:LEU:HD23	0.73	2.18	9	1
1:A:432:VAL:HG23	1:A:441:TYR:O	0.73	1.82	16	2
1:A:425:ILE:HD13	1:A:425:ILE:N	0.72	2.00	10	4
1:A:281:LEU:HD21	1:A:307:TRP:CD1	0.72	2.20	5	1
1:A:425:ILE:HG21	1:A:442:PHE:CD2	0.72	2.20	16	2
1:A:354:LEU:HD12	1:A:355:ILE:N	0.72	1.98	8	5
1:A:346:LEU:HD23	1:A:355:ILE:CD1	0.71	2.16	2	1
1:A:334:ALA:HB1	1:A:383:ALA:CB	0.71	2.15	15	2
1:A:297:LYS:HA	1:A:310:VAL:HG11	0.71	1.62	5	3
1:A:354:LEU:C	1:A:354:LEU:HD12	0.71	2.05	18	3
1:A:345:PHE:C	1:A:346:LEU:HD23	0.71	2.05	10	1
1:A:345:PHE:C	1:A:346:LEU:HD22	0.70	2.06	2	8
1:A:384:VAL:HG11	1:A:432:VAL:HG12	0.70	1.62	18	1
1:A:425:ILE:CG2	1:A:429:ILE:HD13	0.70	2.17	5	1
1:A:428:LYS:C	1:A:429:ILE:HD12	0.70	2.07	1	1

1:A:353:TRP:NE1

Continued on next page...

12

1

2.60



0.69

1:A:364:TYR:CE1

$2J\Lambda I$	2JXY
---------------	------

	ious page			Mode	
Atom-1	Atom-2	$\operatorname{Clash}(A)$	Distance(A)	Worst	Total
1:A:298:ILE:O	1:A:298:ILE:HD12	0.69	1.86	13	1
1:A:396:VAL:HG12	1:A:397:ASP:OD2	0.69	1.88	6	1
1:A:281:LEU:HD13	1:A:468:PHE:CE2	0.69	2.23	1	1
1:A:418:ILE:HG22	1:A:425:ILE:HD11	0.69	1.63	14	2
1:A:346:LEU:HD23	1:A:346:LEU:N	0.69	2.03	10	1
1:A:297:LYS:HA	1:A:310:VAL:HG21	0.68	1.65	20	4
1:A:382:ALA:HB1	1:A:432:VAL:HG22	0.68	1.64	14	3
1:A:304:ARG:O	1:A:320:LEU:HD12	0.68	1.89	20	1
1:A:424:GLY:HA3	1:A:458:ILE:HD11	0.68	1.64	12	3
1:A:429:ILE:HD11	1:A:442:PHE:HB3	0.68	1.66	3	3
1:A:281:LEU:HD22	1:A:468:PHE:HB3	0.67	1.65	15	1
1:A:432:VAL:CG2	1:A:442:PHE:CE1	0.67	2.77	1	2
1:A:461:THR:HG22	1:A:461:THR:O	0.67	1.89	6	2
1:A:364:TYR:C	1:A:364:TYR:CD1	0.67	2.67	12	1
1:A:354:LEU:C	1:A:354:LEU:HD13	0.67	2.09	17	3
1:A:432:VAL:HG21	1:A:442:PHE:CZ	0.67	2.24	8	2
1:A:346:LEU:CD2	1:A:355:ILE:HD13	0.67	2.18	2	1
1:A:357:ASN:O	1:A:358:LEU:HD23	0.67	1.88	4	5
1:A:418:ILE:HD13	1:A:427:PRO:O	0.67	1.90	18	2
1:A:281:LEU:HD23	1:A:307:TRP:CH2	0.66	2.25	19	2
1:A:327:THR:C	1:A:328:LEU:HD22	0.66	2.09	9	6
1:A:328:LEU:HD11	1:A:346:LEU:HD11	0.66	1.66	10	1
1:A:354:LEU:HD23	1:A:354:LEU:O	0.66	1.90	13	2
1:A:462:LEU:HD11	1:A:466:SER:HB3	0.66	1.67	15	1
1:A:399:GLN:O	1:A:418:ILE:HD11	0.65	1.91	20	5
1:A:338:ILE:HD11	1:A:385:PHE:HB3	0.65	1.66	20	1
1:A:281:LEU:HD13	1:A:468:PHE:CD2	0.65	2.26	1	1
1:A:421:ASN:ND2	1:A:422:PHE:CZ	0.65	2.65	15	1
1:A:281:LEU:CD2	1:A:468:PHE:CD1	0.65	2.79	11	1
1:A:299:PHE:CE2	1:A:308:LEU:HD23	0.65	2.26	8	2
1:A:433:PHE:CE1	1:A:443:PHE:CZ	0.65	2.85	7	1
1:A:443:PHE:CE2	1:A:448:GLN:NE2	0.64	2.65	2	3
1:A:373:PHE:O	1:A:373:PHE:CD2	0.64	2.50	20	3
1:A:328:LEU:HD11	1:A:355:ILE:HD11	0.64	1.66	14	2
1:A:299:PHE:CD2	1:A:308:LEU:HD21	0.64	2.27	3	1
1:A:291:VAL:HG23	1:A:299:PHE:O	0.64	1.93	7	1
1:A:382:ALA:HB2	1:A:431:ALA:HA	0.64	1.69	16	5
1:A:432:VAL:HG13	1:A:441:TYR:O	0.64	1.93	12	1
1:A:327:THR:O	1:A:327:THR:HG23	0.64	1.93	2	8
1:A:310:VAL:HG13	1:A:311:SER:N	0.64	2.08	16	1
1:A:384:VAL:CG2	1:A:432:VAL:HG13	0.63	2.23	10	2



2JX	Y

	ous page			Model	
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:449:PHE:CE2	1:A:461:THR:CG2	0.63	2.81	20	1
1:A:336:TYR:CE2	1:A:338:ILE:HD11	0.63	2.28	2	1
1:A:355:ILE:N	1:A:355:ILE:HD12	0.63	2.09	11	5
1:A:443:PHE:CE1	1:A:448:GLN:CG	0.63	2.81	15	2
1:A:281:LEU:CD2	1:A:468:PHE:CE1	0.63	2.82	11	1
1:A:336:TYR:CZ	1:A:345:PHE:CB	0.63	2.81	9	2
1:A:336:TYR:CE1	1:A:345:PHE:CB	0.63	2.81	2	3
1:A:369:HIS:CE1	1:A:373:PHE:CD2	0.63	2.87	16	1
1:A:369:HIS:NE2	1:A:373:PHE:CD1	0.63	2.66	16	1
1:A:384:VAL:O	1:A:392:THR:HG23	0.63	1.93	20	6
1:A:338:ILE:HD12	1:A:345:PHE:CD1	0.63	2.28	10	1
1:A:443:PHE:CD2	1:A:448:GLN:NE2	0.62	2.67	2	1
1:A:369:HIS:CE1	1:A:373:PHE:CG	0.62	2.87	16	1
1:A:307:TRP:CD1	1:A:317:SER:O	0.62	2.52	18	1
1:A:291:VAL:HG22	1:A:431:ALA:CB	0.62	2.23	20	1
1:A:328:LEU:HD21	1:A:360:PRO:HG3	0.62	1.71	9	1
1:A:298:ILE:H	1:A:310:VAL:HG11	0.62	1.55	15	4
1:A:364:TYR:N	1:A:365:PRO:HD2	0.62	2.10	12	1
1:A:332:ILE:HG23	1:A:347:PHE:O	0.62	1.94	5	1
1:A:425:ILE:HG21	1:A:442:PHE:CG	0.62	2.30	17	1
1:A:316:THR:CG2	1:A:468:PHE:CD1	0.62	2.82	6	1
1:A:281:LEU:HD22	1:A:468:PHE:CD1	0.62	2.29	11	1
1:A:425:ILE:HG22	1:A:429:ILE:HD13	0.61	1.71	5	1
1:A:400:TYR:CD1	1:A:400:TYR:O	0.61	2.53	20	1
1:A:338:ILE:HG23	1:A:338:ILE:O	0.61	1.95	4	7
1:A:422:PHE:O	1:A:425:ILE:HD11	0.61	1.95	6	2
1:A:448:GLN:NE2	1:A:462:LEU:HD21	0.61	2.09	13	1
1:A:434:TYR:O	1:A:434:TYR:CD2	0.61	2.53	6	3
1:A:298:ILE:HD13	1:A:300:PHE:CE2	0.61	2.31	13	1
1:A:325:TRP:HB3	1:A:328:LEU:HD23	0.61	1.72	9	8
1:A:282:CYS:SG	1:A:470:CYS:CB	0.61	2.89	5	1
1:A:329:PRO:O	1:A:332:ILE:HD11	0.61	1.94	12	1
1:A:467:TRP:O	1:A:468:PHE:CD1	0.61	2.54	18	1
1:A:395:PHE:CE2	1:A:432:VAL:HG21	0.61	2.30	14	1
1:A:462:LEU:HD11	1:A:466:SER:OG	0.61	1.95	2	2
1:A:291:VAL:HG11	1:A:443:PHE:CE1	0.61	2.31	6	1
1:A:316:THR:HG22	1:A:468:PHE:CD1	0.61	2.31	6	1
1:A:294:VAL:HG23	1:A:297:LYS:HB2	0.61	1.72	14	1
1:A:308:LEU:HD23	1:A:309:LYS:N	0.61	2.10	20	1
1:A:299:PHE:CE1	1:A:308:LEU:HD23	0.61	2.30	9	1
1:A:429:ILE:HD11	1:A:442:PHE:CD1	0.60	2.31	16	2



1:A:377:VAL:HG22

1:A:425:ILE:HG22

A 4 1	A 4 - 0	O[1 - 1]	D . (8)	\ Models	
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:361:GLU:OE2	1:A:364:TYR:CE1	0.60	2.54	3	1
1:A:332:ILE:HG13	1:A:346:LEU:HD12	0.60	1.74	14	1
1:A:368:ILE:HD12	1:A:377:VAL:CG1	0.60	2.25	2	1
1:A:337:GLU:HG2	1:A:344:VAL:HG22	0.60	1.74	6	1
1:A:297:LYS:HA	1:A:310:VAL:HG23	0.60	1.73	19	3
1:A:294:VAL:HG22	1:A:337:GLU:CD	0.60	2.16	17	1
1:A:332:ILE:HD13	1:A:346:LEU:HD12	0.60	1.72	5	2
1:A:361:GLU:OE1	1:A:364:TYR:CE1	0.60	2.54	10	1
1:A:336:TYR:CZ	1:A:345:PHE:CG	0.60	2.90	2	1
1:A:403:TYR:CE1	1:A:404:ASP:O	0.60	2.55	12	3
1:A:286:LEU:CD1	1:A:307:TRP:CZ2	0.60	2.83	16	1
1:A:298:ILE:CD1	1:A:310:VAL:HG23	0.60	2.27	20	1
1:A:336:TYR:C	1:A:336:TYR:CD1	0.59	2.75	18	3
1:A:305:PHE:CE1	1:A:320:LEU:HD12	0.59	2.31	4	3
1:A:347:PHE:N	1:A:347:PHE:CD1	0.59	2.70	10	1
1:A:400:TYR:CE1	1:A:401:TRP:O	0.59	2.55	5	2
1:A:443:PHE:CZ	1:A:448:GLN:OE1	0.59	2.55	6	2
1:A:466:SER:O	1:A:467:TRP:CD1	0.59	2.55	19	2
1:A:372:GLY:O	1:A:373:PHE:C	0.59	2.40	11	10
1:A:389:PHE:C	1:A:390:TYR:CG	0.59	2.75	14	4
1:A:293:THR:HG21	1:A:434:TYR:O	0.59	1.97	5	1
1:A:358:LEU:HD23	1:A:359:ARG:HG2	0.59	1.73	17	1
1:A:281:LEU:O	1:A:468:PHE:CZ	0.59	2.55	5	1
1:A:361:GLU:OE1	1:A:364:TYR:CD1	0.59	2.55	10	1
1:A:441:TYR:CD1	1:A:441:TYR:N	0.59	2.68	15	1
1:A:354:LEU:C	1:A:355:ILE:HD12	0.59	2.18	15	3
1:A:438:LYS:O	1:A:439:TYR:CD1	0.59	2.55	14	3
1:A:296:ASN:O	1:A:310:VAL:HG21	0.59	1.98	8	2
1:A:421:ASN:O	1:A:422:PHE:CD1	0.59	2.56	2	2
1:A:432:VAL:HG22	1:A:442:PHE:HB3	0.59	1.75	6	1
1:A:306:PHE:O	1:A:306:PHE:CD1	0.59	2.56	7	1
1:A:395:PHE:CD2	1:A:429:ILE:HG21	0.59	2.33	2	3
1:A:368:ILE:CD1	1:A:377:VAL:HG21	0.59	2.28	9	1
1:A:462:LEU:HD22	1:A:466:SER:HB2	0.58	1.73	10	1
1:A:336:TYR:CG	1:A:336:TYR:O	0.58	2.56	18	11
1:A:443:PHE:CD1	1:A:443:PHE:C	0.58	2.75	1	5
1:A:281:LEU:HD21	1:A:468:PHE:CE1	0.58	2.33	11	1
1:A:346:LEU:HD22	1:A:346:LEU:N	0.58	2.13	2	2
1:A:299:PHE:CZ	1:A:308:LEU:HD23	0.58	2.34	13	1

Continued on next page...

13

20

1

1

1.76

2.33



0.58

0.58

1:A:396:VAL:HG11

1:A:442:PHE:CZ

2JXY

	to us page			Models	
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:382:ALA:HB3	1:A:432:VAL:HG12	0.58	1.75	4	1
1:A:290:ALA:HB2	1:A:332:ILE:O	0.58	1.97	10	1
1:A:290:ALA:HB2	1:A:333:GLU:C	0.58	2.19	15	1
1:A:286:LEU:CD2	1:A:288:PHE:CZ	0.58	2.86	10	1
1:A:298:ILE:HD11	1:A:309:LYS:O	0.58	1.98	13	1
1:A:396:VAL:HG21	1:A:401:TRP:CZ3	0.58	2.33	20	1
1:A:421:ASN:OD1	1:A:422:PHE:CE2	0.58	2.57	7	4
1:A:372:GLY:O	1:A:373:PHE:CD2	0.58	2.57	6	1
1:A:352:TYR:CD1	1:A:352:TYR:C	0.58	2.77	12	4
1:A:294:VAL:HG23	1:A:294:VAL:O	0.58	1.98	18	2
1:A:454:LEU:HD23	1:A:455:LEU:CD2	0.58	2.29	16	1
1:A:357:ASN:C	1:A:358:LEU:HD23	0.57	2.19	2	2
1:A:334:ALA:HB1	1:A:383:ALA:HB3	0.57	1.74	10	2
1:A:364:TYR:CD2	1:A:365:PRO:HD3	0.57	2.34	12	1
1:A:288:PHE:CD2	1:A:300:PHE:CE1	0.57	2.92	18	1
1:A:434:TYR:O	1:A:434:TYR:CG	0.57	2.57	6	3
1:A:380:ILE:HG23	1:A:395:PHE:O	0.57	1.98	5	1
1:A:373:PHE:CZ	1:A:375:ASN:O	0.57	2.57	17	1
1:A:352:TYR:CD1	1:A:368:ILE:HG23	0.57	2.34	19	2
1:A:281:LEU:O	1:A:468:PHE:CE1	0.57	2.57	5	1
1:A:425:ILE:HD13	1:A:425:ILE:H	0.57	1.58	19	3
1:A:300:PHE:CD1	1:A:300:PHE:N	0.57	2.73	8	3
1:A:307:TRP:CZ3	1:A:468:PHE:CE1	0.57	2.92	7	1
1:A:401:TRP:CH2	1:A:411:ASP:O	0.57	2.57	9	1
1:A:432:VAL:HG21	1:A:442:PHE:CE2	0.57	2.35	5	2
1:A:328:LEU:HD12	1:A:346:LEU:HD12	0.57	1.76	4	1
1:A:343:GLN:NE2	1:A:354:LEU:HD21	0.57	2.15	3	2
1:A:425:ILE:CG2	1:A:442:PHE:CZ	0.57	2.87	6	1
1:A:362:PRO:O	1:A:363:ASN:CB	0.57	2.53	6	9
1:A:309:LYS:HB2	1:A:316:THR:HG22	0.57	1.76	16	1
1:A:292:THR:HG21	1:A:337:GLU:CD	0.57	2.20	3	1
1:A:400:TYR:C	1:A:400:TYR:CD1	0.57	2.78	10	6
1:A:468:PHE:C	1:A:468:PHE:CD1	0.57	2.79	3	2
1:A:281:LEU:HD22	1:A:468:PHE:CB	0.57	2.30	15	1
1:A:332:ILE:HD12	1:A:346:LEU:HB3	0.57	1.75	16	1
1:A:316:THR:HG21	1:A:468:PHE:CE2	0.57	2.35	18	1
1:A:433:PHE:CZ	1:A:441:TYR:CB	0.57	2.88	9	3
1:A:337:GLU:CB	1:A:344:VAL:HA	0.57	2.29	18	1
1:A:332:ILE:CG2	1:A:335:ALA:HB2	0.56	2.30	2	1
1:A:330:SER:O	1:A:331:GLY:C	0.56	2.42	8	2
1:A:281:LEU:HD22	1:A:468:PHE:CE2	0.56	2.34	14	1



A + amo 1	A + ama 9	$C = c \left(\begin{pmatrix} \lambda \\ \lambda \end{pmatrix} \right)$	\mathbf{D} : \mathbf{D} : \mathbf{D} : \mathbf{D}	Mod	dels
Atom-1	Atom-2	$\operatorname{Clash}(\mathbf{A})$	Distance(A)	Worst	Total
1:A:309:LYS:HG2	1:A:316:THR:HG22	0.56	1.77	18	1
1:A:306:PHE:CD2	1:A:319:ASN:O	0.56	2.58	12	2
1:A:467:TRP:O	1:A:468:PHE:CG	0.56	2.58	7	2
1:A:384:VAL:HB	1:A:432:VAL:HG23	0.56	1.76	19	2
1:A:327:THR:HG22	1:A:327:THR:O	0.56	2.00	1	1
1:A:441:TYR:CE1	1:A:450:GLU:CG	0.56	2.88	10	2
1:A:301:PHE:CD1	1:A:332:ILE:HD13	0.56	2.35	11	2
1:A:298:ILE:HG21	1:A:300:PHE:CZ	0.56	2.35	9	1
1:A:373:PHE:O	1:A:373:PHE:CG	0.56	2.56	20	1
1:A:292:THR:HG21	1:A:337:GLU:OE1	0.56	2.00	3	1
1:A:281:LEU:CD2	1:A:307:TRP:CH2	0.56	2.88	19	1
1:A:328:LEU:HD13	1:A:329:PRO:CD	0.56	2.29	16	3
1:A:370:SER:O	1:A:371:PHE:CG	0.56	2.59	1	3
1:A:443:PHE:CZ	1:A:448:GLN:CD	0.56	2.78	10	2
1:A:382:ALA:CB	1:A:432:VAL:HG12	0.56	2.31	20	7
1:A:353:TRP:CH2	1:A:365:PRO:HA	0.56	2.35	5	1
1:A:425:ILE:N	1:A:425:ILE:CD1	0.56	2.68	10	3
1:A:434:TYR:CG	1:A:434:TYR:O	0.56	2.58	15	1
1:A:433:PHE:CD1	1:A:433:PHE:O	0.56	2.59	15	2
1:A:371:PHE:CG	1:A:371:PHE:O	0.56	2.58	15	2
1:A:281:LEU:HD11	1:A:307:TRP:CE3	0.56	2.33	17	1
1:A:332:ILE:HG21	1:A:346:LEU:HD12	0.56	1.78	11	3
1:A:294:VAL:HG22	1:A:337:GLU:OE1	0.56	2.00	15	1
1:A:369:HIS:CE1	1:A:373:PHE:CD1	0.56	2.94	16	1
1:A:364:TYR:CD1	1:A:366:LYS:CE	0.56	2.88	4	3
1:A:336:TYR:OH	1:A:345:PHE:CD2	0.56	2.59	9	1
1:A:453:PHE:CD1	1:A:453:PHE:O	0.55	2.60	4	4
1:A:369:HIS:CD2	1:A:369:HIS:C	0.55	2.79	20	5
1:A:288:PHE:CE1	1:A:443:PHE:CZ	0.55	2.93	18	1
1:A:443:PHE:CE2	1:A:448:GLN:CG	0.55	2.89	20	1
1:A:299:PHE:CE2	1:A:308:LEU:HD21	0.55	2.36	11	2
1:A:325:TRP:CH2	1:A:346:LEU:HD21	0.55	2.36	19	1
1:A:293:THR:HG22	1:A:298:ILE:HG22	0.55	1.78	5	1
1:A:307:TRP:CZ3	1:A:468:PHE:CE2	0.55	2.95	6	1
1:A:369:HIS:CE1	1:A:373:PHE:CE2	0.55	2.94	16	1
1:A:432:VAL:CG2	1:A:442:PHE:CZ	0.55	2.90	1	1
1:A:299:PHE:CE2	1:A:308:LEU:CD2	0.55	2.90	11	2
1:A:462:LEU:HD21	1:A:466:SER:OG	0.55	2.00	2	1
1:A:372:GLY:O	1:A:373:PHE:CG	0.55	2.59	6	1
1:A:347:PHE:CD2	1:A:352:TYR:CB	0.55	2.90	10	1
1:A:288:PHE:CD2	1:A:300:PHE:CD1	0.55	2.95	18	2



2JXY

					dels	
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:301:PHE:CD2	1:A:332:ILE:CG1	0.55	2.90	7	1	
1:A:364:TYR:CG	1:A:365:PRO:HD3	0.55	2.37	12	1	
1:A:306:PHE:C	1:A:306:PHE:CD1	0.55	2.79	18	5	
1:A:286:LEU:HD22	1:A:307:TRP:CZ2	0.55	2.37	2	1	
1:A:344:VAL:CG1	1:A:346:LEU:CD2	0.55	2.85	14	1	
1:A:384:VAL:HG13	1:A:432:VAL:HG13	0.54	1.78	16	2	
1:A:286:LEU:HD11	1:A:307:TRP:CH2	0.54	2.37	7	1	
1:A:369:HIS:CD2	1:A:369:HIS:O	0.54	2.60	20	1	
1:A:344:VAL:HG12	1:A:346:LEU:CD2	0.54	2.32	14	3	
1:A:395:PHE:CD1	1:A:418:ILE:HG23	0.54	2.37	6	1	
1:A:288:PHE:CE2	1:A:443:PHE:CE2	0.54	2.95	9	2	
1:A:389:PHE:O	1:A:390:TYR:CD2	0.54	2.60	1	4	
1:A:466:SER:O	1:A:467:TRP:CG	0.54	2.61	6	1	
1:A:371:PHE:CD1	1:A:371:PHE:C	0.54	2.81	12	1	
1:A:354:LEU:HD12	1:A:355:ILE:H	0.54	1.60	7	2	
1:A:292:THR:HB	1:A:335:ALA:HB3	0.54	1.78	18	1	
1:A:368:ILE:N	1:A:368:ILE:HD13	0.54	2.18	18	1	
1:A:301:PHE:CE2	1:A:332:ILE:HD13	0.54	2.38	1	1	
1:A:355:ILE:N	1:A:355:ILE:CD1	0.54	2.70	1	3	
1:A:439:TYR:CD1	1:A:450:GLU:OE2	0.54	2.60	2	3	
1:A:293:THR:HG21	1:A:435:SER:CB	0.54	2.32	9	3	
1:A:441:TYR:CE1	1:A:450:GLU:OE1	0.54	2.61	3	1	
1:A:281:LEU:CD2	1:A:307:TRP:CZ2	0.54	2.91	6	1	
1:A:289:ASP:O	1:A:431:ALA:HB2	0.54	2.02	6	1	
1:A:312:GLU:O	1:A:313:ARG:C	0.54	2.46	9	2	
1:A:291:VAL:CG2	1:A:431:ALA:HB1	0.54	2.32	8	1	
1:A:301:PHE:CE1	1:A:332:ILE:HD13	0.54	2.38	8	1	
1:A:306:PHE:CD2	1:A:319:ASN:ND2	0.54	2.76	9	1	
1:A:444:GLN:CG	1:A:444:GLN:O	0.54	2.56	4	1	
1:A:414:TYR:N	1:A:415:PRO:HD3	0.54	2.18	19	3	
1:A:288:PHE:CE2	1:A:300:PHE:CG	0.54	2.96	18	1	
1:A:336:TYR:CZ	1:A:345:PHE:CD2	0.54	2.96	2	1	
1:A:370:SER:O	1:A:371:PHE:CD2	0.53	2.61	6	2	
1:A:352:TYR:N	1:A:352:TYR:CD1	0.53	2.76	13	3	
1:A:374:PRO:O	1:A:375:ASN:CB	0.53	2.57	10	2	
1:A:412:PRO:O	1:A:413:GLY:C	0.53	2.46	16	1	
1:A:288:PHE:CG	1:A:443:PHE:CD2	0.53	2.96	18	1	
1:A:336:TYR:CE1	1:A:345:PHE:HB3	0.53	2.39	9	1	
1:A:455:LEU:HD23	1:A:455:LEU:N	0.53	2.18	14	1	
1:A:433:PHE:CD1	1:A:433:PHE:C	0.53	2.81	17	2	
1:A:429:ILE:CD1	1:A:442:PHE:CD1	0.53	2.91	16	1	



2JXY

				Models	
Atom-1	Atom-2	$\operatorname{Clash}(\mathbf{A})$	Distance(A)	Worst	Total
1:A:337:GLU:HG3	1:A:344:VAL:HG22	0.53	1.80	12	1
1:A:306:PHE:C	1:A:307:TRP:CE3	0.53	2.82	18	1
1:A:298:ILE:HD12	1:A:298:ILE:C	0.53	2.23	13	1
1:A:443:PHE:CD1	1:A:448:GLN:HG2	0.53	2.38	15	1
1:A:463:LYS:N	1:A:463:LYS:CD	0.53	2.72	18	1
1:A:364:TYR:CD2	1:A:366:LYS:HD2	0.53	2.38	17	6
1:A:400:TYR:CE2	1:A:416:LYS:HB2	0.53	2.39	20	1
1:A:323:SER:HB3	1:A:324:LEU:HD12	0.53	1.80	16	1
1:A:371:PHE:O	1:A:371:PHE:CD2	0.53	2.62	20	3
1:A:308:LEU:HD23	1:A:308:LEU:C	0.53	2.24	20	1
1:A:308:LEU:C	1:A:308:LEU:HD13	0.52	2.25	9	1
1:A:286:LEU:CD2	1:A:307:TRP:CZ2	0.52	2.92	2	1
1:A:336:TYR:CD2	1:A:338:ILE:HD11	0.52	2.39	2	1
1:A:310:VAL:HG13	1:A:311:SER:H	0.52	1.62	18	2
1:A:298:ILE:HD12	1:A:300:PHE:CZ	0.52	2.39	6	3
1:A:439:TYR:CG	1:A:450:GLU:OE2	0.52	2.63	2	1
1:A:431:ALA:HB3	1:A:442:PHE:CE2	0.52	2.40	15	1
1:A:433:PHE:CE2	1:A:441:TYR:HB2	0.52	2.40	17	1
1:A:447:ASN:OD1	1:A:449:PHE:CD2	0.52	2.63	2	1
1:A:288:PHE:CD1	1:A:443:PHE:CD2	0.52	2.98	6	1
1:A:364:TYR:CE2	1:A:366:LYS:HD3	0.52	2.40	17	5
1:A:299:PHE:CZ	1:A:308:LEU:CD2	0.52	2.92	13	1
1:A:332:ILE:HD12	1:A:332:ILE:N	0.52	2.19	2	1
1:A:305:PHE:CD2	1:A:319:ASN:O	0.52	2.62	8	1
1:A:310:VAL:O	1:A:311:SER:C	0.52	2.47	18	5
1:A:418:ILE:HD12	1:A:427:PRO:O	0.52	2.05	17	1
1:A:390:TYR:O	1:A:405:GLU:CB	0.52	2.58	20	1
1:A:328:LEU:CD1	1:A:346:LEU:HD11	0.52	2.33	10	1
1:A:393:TYR:CD1	1:A:393:TYR:N	0.52	2.76	6	2
1:A:310:VAL:HG22	1:A:311:SER:H	0.52	1.65	17	5
1:A:318:VAL:HG12	1:A:318:VAL:O	0.52	2.03	10	3
1:A:336:TYR:HB2	1:A:383:ALA:HB3	0.52	1.82	4	1
1:A:449:PHE:CE2	1:A:461:THR:HG23	0.52	2.40	20	1
1:A:462:LEU:CD2	1:A:467:TRP:CZ2	0.52	2.92	2	1
1:A:338:ILE:HD12	1:A:340:ALA:HB3	0.52	1.82	3	1
1:A:433:PHE:CE2	1:A:441:TYR:HB3	0.52	2.40	3	1
1:A:353:TRP:CZ3	1:A:361:GLU:O	0.52	2.63	20	2
1:A:336:TYR:CE1	1:A:347:PHE:CE2	0.52	2.98	9	1
1:A:449:PHE:CD1	1:A:449:PHE:N	0.52	2.78	15	1
1:A:291:VAL:CG2	1:A:300:PHE:CD2	0.52	2.94	16	1
1:A:421:ASN:ND2	1:A:422:PHE:CE2	0.52	2.78	17	1



$ZJ\Lambda I$	2JXY
---------------	------

				Models	
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:462:LEU:CD1	1:A:466:SER:CB	0.51	2.88	2	1
1:A:400:TYR:O	1:A:400:TYR:CG	0.51	2.63	10	5
1:A:325:TRP:CE3	1:A:328:LEU:HD12	0.51	2.41	10	1
1:A:364:TYR:CD1	1:A:366:LYS:HE3	0.51	2.40	3	10
1:A:281:LEU:HD23	1:A:307:TRP:CZ2	0.51	2.40	6	1
1:A:309:LYS:C	1:A:310:VAL:HG12	0.51	2.24	8	1
1:A:433:PHE:CZ	1:A:441:TYR:HB2	0.51	2.39	9	1
1:A:433:PHE:CZ	1:A:441:TYR:CG	0.51	2.98	3	1
1:A:337:GLU:CG	1:A:344:VAL:HG22	0.51	2.36	12	2
1:A:384:VAL:HG11	1:A:432:VAL:CG1	0.51	2.35	12	1
1:A:281:LEU:HD23	1:A:307:TRP:CZ3	0.51	2.40	19	1
1:A:310:VAL:HG13	1:A:312:GLU:H	0.51	1.66	11	1
1:A:328:LEU:HD11	1:A:346:LEU:CD1	0.51	2.36	16	1
1:A:364:TYR:CD1	1:A:366:LYS:HE2	0.51	2.40	4	3
1:A:281:LEU:O	1:A:282:CYS:CB	0.51	2.59	14	2
1:A:307:TRP:CZ3	1:A:318:VAL:N	0.51	2.78	15	1
1:A:443:PHE:CE1	1:A:448:GLN:HG3	0.51	2.40	15	1
1:A:364:TYR:CG	1:A:366:LYS:CE	0.51	2.94	1	1
1:A:395:PHE:CE1	1:A:418:ILE:HG23	0.51	2.41	6	1
1:A:462:LEU:CG	1:A:466:SER:OG	0.51	2.59	2	1
1:A:310:VAL:O	1:A:313:ARG:CD	0.51	2.59	13	1
1:A:348:LYS:O	1:A:349:ASP:C	0.51	2.49	13	1
1:A:443:PHE:CZ	1:A:448:GLN:HG3	0.51	2.40	16	2
1:A:468:PHE:CD1	1:A:468:PHE:N	0.51	2.74	17	1
1:A:400:TYR:CE2	1:A:416:LYS:CB	0.51	2.94	20	1
1:A:422:PHE:O	1:A:425:ILE:CD1	0.51	2.59	2	6
1:A:286:LEU:CD1	1:A:307:TRP:CH2	0.51	2.93	7	1
1:A:301:PHE:CE2	1:A:332:ILE:HG13	0.51	2.41	7	1
1:A:374:PRO:HG2	1:A:377:VAL:HG13	0.51	1.82	8	1
1:A:354:LEU:HD11	1:A:356:SER:OG	0.51	2.06	10	1
1:A:364:TYR:CE2	1:A:366:LYS:HG3	0.51	2.41	18	1
1:A:364:TYR:N	1:A:365:PRO:HD3	0.51	2.21	20	12
1:A:357:ASN:O	1:A:358:LEU:CD2	0.51	2.59	16	5
1:A:364:TYR:CE1	1:A:366:LYS:HE3	0.51	2.41	3	1
1:A:338:ILE:O	1:A:338:ILE:CG2	0.51	2.59	5	3
1:A:347:PHE:CG	1:A:380:ILE:HD12	0.51	2.41	8	1
1:A:347:PHE:CZ	1:A:380:ILE:CD1	0.50	2.94	5	1
1:A:461:THR:C	1:A:462:LEU:HD13	0.50	2.27	19	1
1:A:337:GLU:CD	1:A:344:VAL:HG22	0.50	2.26	19	1
1:A:449:PHE:CZ	1:A:461:THR:HG23	0.50	2.41	20	1
1:A:389:PHE:O	1:A:390:TYR:CB	0.50	2.59	14	4



Atom-1	Atom-2	$Clash(\Delta)$	Distance(Å)	Mo	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:364:TYR:CD2	1:A:366:LYS:CD	0.50	2.94	9	4
1:A:367:SER:O	1:A:370:SER:CB	0.50	2.59	20	1
1:A:391:ARG:CG	1:A:392:THR:N	0.50	2.74	20	1
1:A:442:PHE:CZ	1:A:449:PHE:CB	0.50	2.94	20	1
1:A:394:PHE:CD1	1:A:403:TYR:CD1	0.50	2.99	4	1
1:A:387:PRO:HG3	1:A:434:TYR:CE2	0.50	2.41	7	1
1:A:399:GLN:OE1	1:A:415:PRO:CB	0.50	2.60	20	1
1:A:443:PHE:CE1	1:A:448:GLN:HG2	0.50	2.41	2	2
1:A:291:VAL:HG12	1:A:300:PHE:HA	0.50	1.82	15	2
1:A:328:LEU:HD11	1:A:355:ILE:HG12	0.50	1.83	12	1
1:A:453:PHE:C	1:A:453:PHE:CD1	0.50	2.84	13	1
1:A:350:ASP:O	1:A:351:LYS:CG	0.50	2.60	15	10
1:A:370:SER:O	1:A:371:PHE:CB	0.50	2.58	6	2
1:A:438:LYS:CG	1:A:438:LYS:O	0.50	2.60	15	3
1:A:422:PHE:HB2	1:A:425:ILE:HD11	0.50	1.82	18	1
1:A:338:ILE:HG13	1:A:385:PHE:CD2	0.50	2.42	20	1
1:A:352:TYR:HD2	1:A:368:ILE:HG23	0.50	1.66	4	2
1:A:288:PHE:CE2	1:A:443:PHE:CZ	0.50	3.00	9	1
1:A:329:PRO:O	1:A:332:ILE:CD1	0.50	2.60	12	1
1:A:384:VAL:CG1	1:A:432:VAL:HG13	0.50	2.36	16	1
1:A:281:LEU:HD11	1:A:307:TRP:HZ3	0.50	1.58	17	1
1:A:443:PHE:CE2	1:A:448:GLN:HG2	0.50	2.42	20	1
1:A:292:THR:HG21	1:A:337:GLU:OE2	0.50	2.07	3	1
1:A:433:PHE:CE2	1:A:441:TYR:CB	0.50	2.94	3	2
1:A:432:VAL:CG2	1:A:433:PHE:N	0.50	2.75	13	1
1:A:443:PHE:CD1	1:A:464:SER:HA	0.50	2.42	15	1
1:A:298:ILE:HD12	1:A:310:VAL:HB	0.50	1.84	18	1
1:A:377:VAL:CG1	1:A:378:LYS:N	0.49	2.74	6	2
1:A:429:ILE:CD1	1:A:431:ALA:O	0.49	2.60	7	1
1:A:285:ASN:ND2	1:A:285:ASN:N	0.49	2.58	9	1
1:A:374:PRO:HB3	1:A:401:TRP:CZ2	0.49	2.42	13	1
1:A:288:PHE:CE1	1:A:443:PHE:CE2	0.49	3.00	18	1
1:A:338:ILE:CG2	1:A:338:ILE:O	0.49	2.60	3	1
1:A:304:ARG:HG2	1:A:305:PHE:CD2	0.49	2.42	11	1
1:A:422:PHE:CE2	1:A:456:GLN:HG2	0.49	2.43	13	1
1:A:352:TYR:CZ	1:A:366:LYS:HB2	0.49	2.42	5	2
1:A:298:ILE:CG2	1:A:300:PHE:CZ	0.49	2.95	9	1
1:A:336:TYR:CZ	1:A:345:PHE:HB2	0.49	2.42	9	2
1:A:443:PHE:CD1	1:A:448:GLN:CG	0.49	2.95	15	1
1:A:350:ASP:OD1	1:A:368:ILE:HD11	0.49	2.08	1	1
1:A:309:LYS:CB	1:A:316:THR:HG22	0.49	2.37	10	1
	1	1	1	1	1

Con

2.37101Continued on next page...



2JXY
20111

				Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:281:LEU:HD11	1:A:307:TRP:CH2	0.49	2.42	11	1	
1:A:310:VAL:HG22	1:A:311:SER:N	0.49	2.23	15	8	
1:A:302:LYS:O	1:A:305:PHE:O	0.49	2.30	20	2	
1:A:425:ILE:HG22	1:A:442:PHE:CE1	0.49	2.43	20	2	
1:A:395:PHE:CD1	1:A:418:ILE:HG12	0.49	2.43	9	1	
1:A:431:ALA:O	1:A:432:VAL:HG13	0.49	2.08	14	1	
1:A:310:VAL:HG13	1:A:311:SER:OG	0.49	2.07	16	1	
1:A:286:LEU:C	1:A:286:LEU:HD23	0.49	2.27	1	1	
1:A:294:VAL:HG12	1:A:294:VAL:O	0.49	2.07	9	2	
1:A:425:ILE:CG2	1:A:442:PHE:CG	0.49	2.96	17	1	
1:A:374:PRO:CB	1:A:401:TRP:CZ2	0.49	2.96	20	1	
1:A:374:PRO:HB2	1:A:401:TRP:CZ2	0.49	2.42	20	1	
1:A:458:ILE:HG22	1:A:458:ILE:O	0.49	2.07	11	1	
1:A:429:ILE:HG12	1:A:442:PHE:CD1	0.49	2.42	13	2	
1:A:355:ILE:HG22	1:A:355:ILE:O	0.49	2.07	7	1	
1:A:421:ASN:OD1	1:A:422:PHE:CD2	0.49	2.66	7	2	
1:A:345:PHE:CE2	1:A:352:TYR:CE1	0.49	3.01	11	1	
1:A:436:LYS:HG2	1:A:441:TYR:CE1	0.49	2.43	13	1	
1:A:462:LEU:CD1	1:A:466:SER:OG	0.49	2.61	2	1	
1:A:288:PHE:CE2	1:A:300:PHE:CE1	0.49	3.01	4	2	
1:A:398:ASN:O	1:A:417:LEU:CD1	0.49	2.61	14	2	
1:A:422:PHE:CE2	1:A:451:TYR:CD1	0.49	3.01	1	1	
1:A:432:VAL:HG23	1:A:442:PHE:CD1	0.49	2.43	1	1	
1:A:462:LEU:HD11	1:A:466:SER:HB2	0.49	1.83	2	1	
1:A:441:TYR:CZ	1:A:450:GLU:CG	0.49	2.96	5	2	
1:A:286:LEU:HD13	1:A:287:SER:N	0.49	2.22	9	1	
1:A:393:TYR:CE2	1:A:400:TYR:OH	0.49	2.58	15	1	
1:A:441:TYR:CE1	1:A:450:GLU:HG3	0.48	2.43	14	7	
1:A:428:LYS:O	1:A:444:GLN:CG	0.48	2.61	9	1	
1:A:387:PRO:O	1:A:390:TYR:CE1	0.48	2.66	11	1	
1:A:449:PHE:HB2	1:A:451:TYR:CE1	0.48	2.43	13	1	
1:A:373:PHE:CZ	1:A:377:VAL:O	0.48	2.66	14	1	
1:A:373:PHE:HA	1:A:377:VAL:HG12	0.48	1.85	1	1	
1:A:441:TYR:CZ	1:A:450:GLU:HG2	0.48	2.43	13	1	
1:A:431:ALA:O	1:A:432:VAL:CG1	0.48	2.61	14	1	
1:A:443:PHE:CZ	1:A:448:GLN:CG	0.48	2.96	16	2	
1:A:288:PHE:CZ	1:A:443:PHE:CE2	0.48	3.01	18	1	
1:A:291:VAL:HG23	1:A:433:PHE:HB3	0.48	1.86	19	1	
1:A:367:SER:HB3	1:A:369:HIS:CE1	0.48	2.43	19	1	
1:A:374:PRO:HD2	1:A:377:VAL:HG21	0.48	1.85	12	1	
1:A:306:PHE:HB3	1:A:321:ILE:HD11	0.48	1.84	19	1	



		(1,1,(3))	\mathbf{D}	Models	
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:373:PHE:CZ	1:A:375:ASN:HA	0.48	2.44	10	2
1:A:338:ILE:HD11	1:A:385:PHE:CB	0.48	2.38	20	1
1:A:315:LYS:O	1:A:316:THR:CG2	0.48	2.62	3	1
1:A:364:TYR:CE1	1:A:366:LYS:CE	0.48	2.97	4	3
1:A:433:PHE:CZ	1:A:441:TYR:HB3	0.48	2.43	5	1
1:A:441:TYR:CZ	1:A:450:GLU:OE1	0.48	2.66	17	1
1:A:443:PHE:CE1	1:A:464:SER:HB2	0.48	2.44	18	1
1:A:374:PRO:HG2	1:A:401:TRP:CH2	0.48	2.42	1	1
1:A:336:TYR:O	1:A:336:TYR:CD2	0.48	2.67	5	2
1:A:307:TRP:CZ3	1:A:468:PHE:CZ	0.48	3.02	6	2
1:A:467:TRP:C	1:A:468:PHE:CD2	0.48	2.87	7	2
1:A:303:ASP:O	1:A:305:PHE:N	0.48	2.44	16	2
1:A:421:ASN:OD1	1:A:422:PHE:CZ	0.48	2.67	4	1
1:A:440:TYR:C	1:A:440:TYR:CD1	0.48	2.84	15	1
1:A:369:HIS:CE1	1:A:373:PHE:CE1	0.48	3.01	16	1
1:A:412:PRO:O	1:A:414:TYR:N	0.48	2.46	19	1
1:A:449:PHE:CE2	1:A:461:THR:HG21	0.48	2.43	20	1
1:A:425:ILE:HG21	1:A:442:PHE:CE2	0.48	2.44	6	2
1:A:291:VAL:CG2	1:A:300:PHE:CE2	0.48	2.94	16	1
1:A:429:ILE:HD12	1:A:444:GLN:OE1	0.48	2.08	16	1
1:A:462:LEU:HD13	1:A:462:LEU:N	0.48	2.24	19	1
1:A:449:PHE:CZ	1:A:461:THR:CG2	0.48	2.96	20	1
1:A:297:LYS:CA	1:A:310:VAL:HG11	0.48	2.36	5	1
1:A:298:ILE:O	1:A:308:LEU:CD2	0.48	2.61	9	1
1:A:344:VAL:HG12	1:A:346:LEU:HD22	0.48	1.86	10	1
1:A:281:LEU:HB3	1:A:468:PHE:CZ	0.48	2.44	2	1
1:A:301:PHE:CD1	1:A:301:PHE:N	0.48	2.82	9	2
1:A:336:TYR:CG	1:A:337:GLU:N	0.48	2.81	19	2
1:A:374:PRO:O	1:A:376:PHE:N	0.48	2.47	13	1
1:A:354:LEU:HD22	1:A:354:LEU:O	0.48	2.09	15	1
1:A:327:THR:O	1:A:327:THR:CG2	0.47	2.62	2	4
1:A:422:PHE:HB2	1:A:425:ILE:HD12	0.47	1.86	2	1
1:A:455:LEU:O	1:A:456:GLN:CB	0.47	2.62	5	2
1:A:295:GLY:O	1:A:296:ASN:CB	0.47	2.62	9	2
1:A:419:THR:O	1:A:423:GLN:N	0.47	2.47	19	2
1:A:285:ASN:N	1:A:285:ASN:HD22	0.47	2.07	14	1
1:A:310:VAL:HG13	1:A:312:GLU:N	0.47	2.24	11	1
1:A:354:LEU:HD23	1:A:361:GLU:CG	0.47	2.38	16	1
1:A:374:PRO:HD2	1:A:377:VAL:HG12	0.47	1.85	16	1
1:A:281:LEU:CD1	1:A:307:TRP:CZ3	0.47	2.83	17	1
1:A:354:LEU:C	1:A:354:LEU:CD1	0.47	2.81	17	3



Structure Validation Report					
$Clash(\lambda)$	Distance(Å)	Mod	dels		
Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total		
0.47	2.39	4	1		
0.47	2.43	5	1		
0.47	2.47	6	2		
0.47	3.01	18	1		
0.47	1.86	18	1		
0.47	2.77	18	1		
0.47	2.39	14	2		
0.47	2.67	2	1		
0.47	2.44	5	1		
0.47	2.51	17	4		
0.47	2.47	10	1		
0.47	2.45	12	1		
0.47	2.83	12	1		
0.47	3.03	18	1		
0.47	2.62	12	9		
0.47	2.30	2	1		
0.47	1.69	3	1		
0.47	2.45	8	1		
0.47	2.68	9	1		

Continued from previous page...

Atom-2

1:A:346:LEU:HD12

1:A:442:PHE:CE1

1:A:372:GLY:N

Atom-1

1:A:328:LEU:CD1

1:A:440:TYR:HB3

1:A:368:ILE:O

1:A:288:PHE:CD1	1:A:443:PHE:CE2	0.47	3.01	18	1
1:A:291:VAL:HG12	1:A:431:ALA:HB1	0.47	1.86	18	1
1:A:338:ILE:CG2	1:A:339:GLU:N	0.47	2.77	18	1
1:A:418:ILE:CG2	1:A:425:ILE:HD11	0.47	2.39	14	2
1:A:434:TYR:CD1	1:A:439:TYR:O	0.47	2.67	2	1
1:A:307:TRP:CE2	1:A:318:VAL:HG12	0.47	2.44	5	1
1:A:311:SER:O	1:A:312:GLU:C	0.47	2.51	17	4
1:A:348:LYS:O	1:A:350:ASP:N	0.47	2.47	10	1
1:A:352:TYR:CE2	1:A:366:LYS:HB2	0.47	2.45	12	1
1:A:364:TYR:CD1	1:A:365:PRO:N	0.47	2.83	12	1
1:A:288:PHE:CD2	1:A:443:PHE:CE2	0.47	3.03	18	1
1:A:407:ARG:O	1:A:408:GLN:CB	0.47	2.62	12	9
1:A:368:ILE:CD1	1:A:377:VAL:HG13	0.47	2.30	2	1
1:A:298:ILE:HD12	1:A:300:PHE:HZ	0.47	1.69	3	1
1:A:307:TRP:CH2	1:A:318:VAL:HG13	0.47	2.45	8	1
1:A:344:VAL:O	1:A:345:PHE:CD1	0.47	2.68	9	1
1:A:346:LEU:N	1:A:346:LEU:CD2	0.47	2.74	10	1
1:A:352:TYR:CD2	1:A:366:LYS:HB3	0.47	2.44	11	1
1:A:307:TRP:NE1	1:A:318:VAL:HG22	0.47	2.24	18	1
1:A:414:TYR:CE2	1:A:416:LYS:HG3	0.47	2.45	4	11
1:A:315:LYS:HG2	1:A:468:PHE:CE2	0.47	2.45	3	1
1:A:305:PHE:CD2	1:A:318:VAL:CG1	0.47	2.98	6	1
1:A:316:THR:HG21	1:A:468:PHE:CD1	0.47	2.43	11	3
1:A:301:PHE:CD2	1:A:332:ILE:HB	0.47	2.45	8	1
1:A:352:TYR:CZ	1:A:366:LYS:HB3	0.47	2.45	18	8
1:A:372:GLY:O	1:A:374:PRO:N	0.47	2.47	11	6
1:A:306:PHE:CZ	1:A:319:ASN:HB2	0.47	2.44	10	4
1:A:293:THR:HG21	1:A:435:SER:HB2	0.47	1.86	3	2
1:A:418:ILE:HD12	1:A:418:ILE:H	0.47	1.68	8	2
1:A:347:PHE:CE2	1:A:380:ILE:HB	0.47	2.45	5	1
1:A:448:GLN:O	1:A:462:LEU:CD2	0.47	2.63	5	1
1:A:347:PHE:CE2	1:A:352:TYR:CE1	0.47	3.02	6	1
1:A:461:THR:O	1:A:461:THR:CG2	0.47	2.60	6	1
1:A:459:THR:OG1	1:A:460:LYS:N	0.47	2.47	7	1
1:A:293:THR:HG21	1:A:435:SER:OG	0.47	2.09	9	1
1:A:286:LEU:HD23	1:A:287:SER:H	0.47	1.69	11	1
1:A:343:GLN:NE2	1:A:354:LEU:HD11	0.47	2.25	14	1
1:A:369:HIS:CE1	1:A:373:PHE:CZ	0.47	3.02	16	1
			$\overline{\alpha}$	1	



		. 0 .	. 0 .	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:300:PHE:CD1	1:A:300:PHE:C	0.47	2.87	18	1	
1:A:352:TYR:O	1:A:352:TYR:CG	0.47	2.67	11	1	
1:A:418:ILE:HG22	1:A:425:ILE:CD1	0.47	2.39	14	1	
1:A:339:GLU:O	1:A:342:ASN:N	0.47	2.48	18	1	
1:A:460:LYS:HE2	1:A:462:LEU:HD22	0.47	1.86	18	1	
1:A:364:TYR:CD2	1:A:366:LYS:HD3	0.47	2.44	6	2	
1:A:434:TYR:CE1	1:A:439:TYR:O	0.47	2.68	2	1	
1:A:341:ARG:O	1:A:342:ASN:CB	0.47	2.63	19	2	
1:A:400:TYR:CE1	1:A:402:ARG:HG3	0.47	2.45	7	1	
1:A:375:ASN:O	1:A:376:PHE:C	0.47	2.54	13	1	
1:A:448:GLN:CB	1:A:462:LEU:CD2	0.47	2.92	16	1	
1:A:300:PHE:O	1:A:307:TRP:CE3	0.47	2.68	8	1	
1:A:395:PHE:HE2	1:A:432:VAL:HG21	0.47	1.69	9	2	
1:A:439:TYR:CE1	1:A:452:ASP:HB2	0.47	2.44	10	1	
1:A:354:LEU:C	1:A:354:LEU:HD22	0.47	2.30	15	1	
1:A:433:PHE:CD1	1:A:433:PHE:N	0.46	2.83	5	5	
1:A:301:PHE:CE1	1:A:321:ILE:HG12	0.46	2.45	2	1	
1:A:403:TYR:CE2	1:A:405:GLU:OE2	0.46	2.67	6	1	
1:A:292:THR:HB	1:A:335:ALA:HB1	0.46	1.86	7	2	
1:A:301:PHE:CD2	1:A:332:ILE:HG12	0.46	2.45	7	1	
1:A:298:ILE:CG2	1:A:300:PHE:CE1	0.46	2.98	9	1	
1:A:307:TRP:CE2	1:A:316:THR:CB	0.46	2.98	14	1	
1:A:418:ILE:CD1	1:A:427:PRO:O	0.46	2.63	17	3	
1:A:301:PHE:CZ	1:A:332:ILE:HD13	0.46	2.45	1	1	
1:A:418:ILE:O	1:A:420:LYS:N	0.46	2.48	1	4	
1:A:460:LYS:O	1:A:461:THR:HG23	0.46	2.10	3	1	
1:A:451:TYR:CE1	1:A:456:GLN:HA	0.46	2.45	6	1	
1:A:306:PHE:CE2	1:A:319:ASN:HB3	0.46	2.45	14	1	
1:A:429:ILE:CD1	1:A:444:GLN:OE1	0.46	2.64	16	1	
1:A:430:ASP:CB	1:A:443:PHE:O	0.46	2.64	2	5	
1:A:364:TYR:CD2	1:A:366:LYS:HE3	0.46	2.45	8	3	
1:A:433:PHE:CE1	1:A:441:TYR:O	0.46	2.69	9	1	
1:A:391:ARG:CZ	1:A:404:ASP:OD1	0.46	2.63	9	1	
1:A:436:LYS:HD3	1:A:441:TYR:CE1	0.46	2.46	10	2	
1:A:448:GLN:CB	1:A:462:LEU:HD21	0.46	2.40	14	1	
1:A:432:VAL:HG23	1:A:440:TYR:CD1	0.46	2.44	15	1	
1:A:307:TRP:CE3	1:A:318:VAL:HB	0.46	2.46	17	1	
1:A:288:PHE:CG	1:A:443:PHE:CE2	0.46	3.03	18	1	
1:A:308:LEU:C	1:A:308:LEU:CD2	0.46	2.84	20	1	
1:A:299:PHE:HB3	1:A:301:PHE:CE1	0.46	2.45	3	1	
1:A:356:SER:O	1:A:358:LEU:N	0.46	2.49	6	3	

d fr . . α ntinau



			D1 (8)	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:422:PHE:HB3	1:A:451:TYR:CE2	0.46	2.46	8	2	
1:A:311:SER:OG	1:A:312:GLU:N	0.46	2.49	9	1	
1:A:388:ARG:O	1:A:390:TYR:CE2	0.46	2.68	11	1	
1:A:460:LYS:C	1:A:461:THR:CG2	0.46	2.84	13	1	
1:A:352:TYR:CZ	1:A:366:LYS:CB	0.46	2.99	18	2	
1:A:329:PRO:HG3	1:A:353:TRP:CZ3	0.46	2.46	1	1	
1:A:380:ILE:HG22	1:A:381:ASP:N	0.46	2.26	12	3	
1:A:334:ALA:HB1	1:A:382:ALA:HA	0.46	1.88	4	1	
1:A:430:ASP:N	1:A:430:ASP:OD1	0.46	2.49	6	2	
1:A:432:VAL:HB	1:A:442:PHE:CD1	0.46	2.45	13	3	
1:A:377:VAL:HG12	1:A:378:LYS:N	0.46	2.24	10	1	
1:A:382:ALA:HB3	1:A:395:PHE:HD2	0.46	1.70	12	1	
1:A:455:LEU:N	1:A:455:LEU:CD2	0.46	2.78	14	1	
1:A:302:LYS:O	1:A:304:ARG:N	0.46	2.49	6	3	
1:A:393:TYR:C	1:A:394:PHE:CD1	0.46	2.89	1	1	
1:A:299:PHE:HB3	1:A:301:PHE:CZ	0.46	2.46	3	2	
1:A:364:TYR:CG	1:A:366:LYS:HE3	0.46	2.46	7	4	
1:A:352:TYR:CD2	1:A:368:ILE:HG23	0.46	2.45	4	1	
1:A:445:GLY:O	1:A:447:ASN:ND2	0.46	2.49	16	3	
1:A:325:TRP:CG	1:A:328:LEU:CB	0.46	2.99	10	1	
1:A:371:PHE:O	1:A:371:PHE:CG	0.46	2.69	20	1	
1:A:429:ILE:CD1	1:A:442:PHE:CD2	0.46	2.98	20	1	
1:A:385:PHE:C	1:A:385:PHE:CD1	0.46	2.89	1	1	
1:A:336:TYR:CE1	1:A:345:PHE:CG	0.46	3.04	2	1	
1:A:441:TYR:CD1	1:A:450:GLU:HG3	0.46	2.46	6	1	
1:A:437:ASN:O	1:A:439:TYR:CD2	0.46	2.69	17	2	
1:A:293:THR:O	1:A:337:GLU:CG	0.46	2.63	13	1	
1:A:293:THR:HG21	1:A:435:SER:HA	0.46	1.86	14	1	
1:A:386:ASN:ND2	1:A:393:TYR:CE1	0.46	2.83	17	2	
1:A:449:PHE:CD1	1:A:461:THR:HG23	0.46	2.46	17	1	
1:A:419:THR:HG23	1:A:420:LYS:N	0.46	2.26	18	2	
1:A:293:THR:HG21	1:A:435:SER:HB3	0.46	1.87	20	1	
1:A:447:ASN:OD1	1:A:449:PHE:CE2	0.46	2.69	2	1	
1:A:431:ALA:HB3	1:A:443:PHE:HB2	0.46	1.87	3	1	
1:A:321:ILE:O	1:A:324:LEU:N	0.46	2.47	10	5	
1:A:352:TYR:CE1	1:A:366:LYS:HB3	0.46	2.47	9	2	
1:A:318:VAL:O	1:A:318:VAL:HG13	0.46	2.11	15	1	
1:A:463:LYS:O	1:A:466:SER:N	0.46	2.49	17	1	
1:A:392:THR:HG22	1:A:393:TYR:H	0.46	1.70	19	1	
1:A:397:ASP:OD1	1:A:397:ASP:N	0.46	2.49	19	1	
1:A:372:GLY:C	1:A:373:PHE:CD1	0.46	2.89	20	1	



	1.5	CI 1 (8)	D1 (8)	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:299:PHE:CD1	1:A:308:LEU:HD21	0.45	2.47	2	1	
1:A:345:PHE:O	1:A:346:LEU:HD22	0.45	2.11	5	2	
1:A:441:TYR:CE2	1:A:450:GLU:HG3	0.45	2.47	5	1	
1:A:432:VAL:HG12	1:A:442:PHE:HD1	0.45	1.71	9	1	
1:A:298:ILE:CD1	1:A:300:PHE:CZ	0.45	2.90	13	1	
1:A:433:PHE:CE2	1:A:435:SER:HB3	0.45	2.46	19	1	
1:A:338:ILE:CD1	1:A:340:ALA:HB3	0.45	2.40	3	1	
1:A:403:TYR:CD2	1:A:410:MET:HB3	0.45	2.46	4	1	
1:A:321:ILE:HG22	1:A:322:SER:N	0.45	2.27	20	3	
1:A:387:PRO:HG2	1:A:434:TYR:CZ	0.45	2.47	7	1	
1:A:354:LEU:HD13	1:A:354:LEU:O	0.45	2.11	11	1	
1:A:391:ARG:NH1	1:A:404:ASP:OD2	0.45	2.50	14	1	
1:A:403:TYR:CE2	1:A:410:MET:HB3	0.45	2.45	10	2	
1:A:293:THR:HG22	1:A:433:PHE:CE2	0.45	2.46	6	1	
1:A:467:TRP:O	1:A:468:PHE:C	0.45	2.55	10	2	
1:A:355:ILE:HD12	1:A:355:ILE:N	0.45	2.27	15	1	
1:A:281:LEU:HD21	1:A:307:TRP:CE3	0.45	2.46	17	1	
1:A:395:PHE:CE2	1:A:432:VAL:HG11	0.45	2.46	17	1	
1:A:307:TRP:CZ3	1:A:318:VAL:HB	0.45	2.47	11	2	
1:A:468:PHE:CD1	1:A:470:CYS:HB2	0.45	2.47	20	2	
1:A:291:VAL:HG11	1:A:442:PHE:HZ	0.45	1.71	15	1	
1:A:281:LEU:HA	1:A:286:LEU:HD12	0.45	1.89	17	1	
1:A:307:TRP:HE1	1:A:318:VAL:HG22	0.45	1.72	18	1	
1:A:297:LYS:HG2	1:A:299:PHE:CZ	0.45	2.47	19	1	
1:A:302:LYS:N	1:A:305:PHE:O	0.45	2.49	1	4	
1:A:373:PHE:CD1	1:A:377:VAL:HG21	0.45	2.46	6	1	
1:A:436:LYS:HE3	1:A:441:TYR:CE2	0.45	2.46	8	1	
1:A:336:TYR:OH	1:A:345:PHE:CG	0.45	2.64	9	1	
1:A:448:GLN:HB3	1:A:462:LEU:HD21	0.45	1.87	11	1	
1:A:433:PHE:CE2	1:A:443:PHE:CE1	0.45	3.05	12	1	
1:A:400:TYR:CE2	1:A:418:ILE:HA	0.45	2.46	13	1	
1:A:360:PRO:O	1:A:361:GLU:C	0.45	2.54	16	4	
1:A:288:PHE:CD2	1:A:443:PHE:CD1	0.45	3.04	7	1	
1:A:301:PHE:O	1:A:302:LYS:C	0.45	2.54	7	1	
1:A:299:PHE:C	1:A:300:PHE:CG	0.45	2.90	11	1	
1:A:308:LEU:HD21	1:A:313:ARG:CZ	0.45	2.41	16	1	
1:A:463:LYS:O	1:A:466:SER:CB	0.45	2.65	16	1	
1:A:414:TYR:N	1:A:415:PRO:CD	0.45	2.79	19	1	
1:A:418:ILE:O	1:A:419:THR:C	0.45	2.53	14	5	
1:A:462:LEU:CD2	1:A:466:SER:OG	0.45	2.65	2	1	
1:A:296:ASN:O	1:A:296:ASN:ND2	0.45	2.50	20	2	



			\mathbf{D}^{*}	Mo	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:315:LYS:C	1:A:316:THR:HG23	0.45	2.32	3	1
1:A:344:VAL:N	1:A:355:ILE:O	0.45	2.49	3	1
1:A:393:TYR:CD2	1:A:400:TYR:CE1	0.45	3.05	4	2
1:A:294:VAL:O	1:A:296:ASN:N	0.45	2.49	12	2
1:A:298:ILE:C	1:A:299:PHE:CD1	0.45	2.90	11	2
1:A:307:TRP:CE3	1:A:317:SER:O	0.45	2.69	11	1
1:A:441:TYR:CD2	1:A:448:GLN:OE1	0.45	2.69	16	1
1:A:463:LYS:O	1:A:464:SER:C	0.45	2.55	17	2
1:A:433:PHE:O	1:A:441:TYR:N	0.45	2.49	6	1
1:A:418:ILE:O	1:A:421:ASN:N	0.45	2.50	16	1
1:A:447:ASN:N	1:A:447:ASN:ND2	0.45	2.64	20	1
1:A:338:ILE:CD1	1:A:385:PHE:CD2	0.45	3.00	6	1
1:A:286:LEU:HD23	1:A:287:SER:N	0.45	2.27	20	1
1:A:432:VAL:HG21	1:A:442:PHE:CD2	0.44	2.47	5	1
1:A:443:PHE:CZ	1:A:448:GLN:NE2	0.44	2.84	9	1
1:A:328:LEU:HD23	1:A:360:PRO:HB3	0.44	1.90	10	1
1:A:336:TYR:CE2	1:A:338:ILE:CG1	0.44	3.00	10	1
1:A:364:TYR:CZ	1:A:366:LYS:HD3	0.44	2.47	15	2
1:A:345:PHE:CE2	1:A:354:LEU:HD13	0.44	2.48	12	1
1:A:425:ILE:O	1:A:444:GLN:NE2	0.44	2.49	12	1
1:A:354:LEU:N	1:A:354:LEU:CD1	0.44	2.80	15	1
1:A:380:ILE:CG2	1:A:381:ASP:N	0.44	2.81	1	1
1:A:448:GLN:HG2	1:A:462:LEU:HD23	0.44	1.88	3	1
1:A:428:LYS:O	1:A:444:GLN:NE2	0.44	2.50	4	1
1:A:281:LEU:HB2	1:A:468:PHE:CE2	0.44	2.47	5	1
1:A:440:TYR:CD1	1:A:440:TYR:N	0.44	2.84	7	2
1:A:344:VAL:C	1:A:345:PHE:CD1	0.44	2.91	9	1
1:A:425:ILE:HD13	1:A:426:GLY:H	0.44	1.73	12	1
1:A:305:PHE:HB3	1:A:307:TRP:CH2	0.44	2.47	18	1
1:A:286:LEU:HD11	1:A:307:TRP:CZ3	0.44	2.47	1	1
1:A:373:PHE:CZ	1:A:376:PHE:HA	0.44	2.47	1	1
1:A:306:PHE:CE2	1:A:319:ASN:C	0.44	2.91	2	2
1:A:384:VAL:HG11	1:A:432:VAL:HG22	0.44	1.88	4	1
1:A:291:VAL:HG13	1:A:300:PHE:CE1	0.44	2.47	9	1
1:A:292:THR:OG1	1:A:335:ALA:CB	0.44	2.66	4	1
1:A:356:SER:O	1:A:357:ASN:CB	0.44	2.65	17	2
1:A:285:ASN:N	1:A:285:ASN:ND2	0.44	2.65	6	1
1:A:467:TRP:C	1:A:468:PHE:CG	0.44	2.90	7	2
1:A:303:ASP:O	1:A:331:GLY:N	0.44	2.49	11	2
1:A:320:LEU:HD23	1:A:320:LEU:H	0.44	1.71	19	1
1:A:368:ILE:O	1:A:371:PHE:CD1	0.44	2.69	20	1



2JXY

Continued from previous page					
Atom 1	Atom 2	$Clash(\lambda)$	Distance(Å)	Mod	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:444:GLN:O	1:A:447:ASN:ND2	0.44	2.50	3	3
1:A:379:LYS:O	1:A:396:VAL:HG23	0.44	2.13	5	1
1:A:447:ASN:HB3	1:A:449:PHE:CD1	0.44	2.47	6	1
1:A:325:TRP:CZ3	1:A:328:LEU:HD12	0.44	2.48	10	1
1:A:384:VAL:HG23	1:A:432:VAL:HG13	0.44	1.88	10	1
1:A:448:GLN:O	1:A:462:LEU:HD23	0.44	2.12	11	2
1:A:462:LEU:HD12	1:A:466:SER:OG	0.44	2.12	11	1
1:A:449:PHE:CD1	1:A:461:THR:HG22	0.44	2.47	14	1
1:A:338:ILE:HD12	1:A:385:PHE:CE2	0.44	2.47	6	1
1:A:447:ASN:HB3	1:A:449:PHE:CE1	0.44	2.47	6	1
1:A:286:LEU:HD22	1:A:307:TRP:CZ3	0.44	2.48	19	1
1:A:391:ARG:NH1	1:A:411:ASP:OD2	0.44	2.51	3	1
1:A:306:PHE:CB	1:A:319:ASN:O	0.44	2.66	6	1
1:A:312:GLU:O	1:A:314:PRO:N	0.44	2.51	7	1
1:A:394:PHE:CD2	1:A:403:TYR:CD1	0.44	3.05	10	1
1:A:453:PHE:C	1:A:455:LEU:N	0.44	2.70	13	2
1:A:281:LEU:CB	1:A:468:PHE:CD2	0.44	3.01	5	1
1:A:283:ASP:O	1:A:285:ASN:ND2	0.44	2.50	9	2
1:A:350:ASP:O	1:A:350:ASP:CG	0.44	2.54	9	4
1:A:440:TYR:HB3	1:A:442:PHE:CE2	0.44	2.48	10	1
1:A:395:PHE:HE2	1:A:432:VAL:HG11	0.44	1.73	17	1
1:A:425:ILE:CG1	1:A:426:GLY:N	0.44	2.81	1	1
1:A:301:PHE:CD1	1:A:321:ILE:HD11	0.44	2.47	2	1
1:A:306:PHE:CD1	1:A:306:PHE:C	0.44	2.91	7	1
1:A:352:TYR:O	1:A:352:TYR:CD2	0.44	2.71	9	1
1:A:449:PHE:CD2	1:A:461:THR:CG2	0.44	3.01	13	1
1:A:448:GLN:HB3	1:A:462:LEU:CD2	0.44	2.43	16	1
1:A:306:PHE:CD1	1:A:319:ASN:O	0.44	2.70	19	1
1:A:329:PRO:O	1:A:330:SER:CB	0.43	2.66	19	2
1:A:425:ILE:CG2	1:A:442:PHE:CE1	0.43	3.01	6	1
1:A:442:PHE:CD1	1:A:442:PHE:N	0.43	2.86	6	1
1:A:300:PHE:C	1:A:301:PHE:CD1	0.43	2.91	9	1
1:A:350:ASP:OD1	1:A:369:HIS:ND1	0.43	2.50	11	1
1:A:455:LEU:O	1:A:456:GLN:C	0.43	2.56	15	4
1:A:353:TRP:CD1	1:A:364:TYR:CD1	0.43	3.06	12	1
1:A:393:TYR:CB	1:A:401:TRP:O	0.43	2.66	1	1
1:A:348:LYS:O	1:A:351:LYS:O	0.43	2.37	16	11
1:A:305:PHE:CD2	1:A:318:VAL:HG12	0.43	2.48	8	1
1:A:313:ARG:CG	1:A:315:LYS:O	0.43	2.66	12	1
1:A:310:VAL:CG2	1:A:311:SER:N	0.43	2.81	1	2
1:A:358:LEU:O	1:A:358:LEU:CG	0.43	2.66	12	1



2JXY

			D . (8)	Models	
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:429:ILE:CG1	1:A:442:PHE:CD1	0.43	3.01	16	1
1:A:465:ASN:O	1:A:468:PHE:N	0.43	2.51	18	1
1:A:299:PHE:CD2	1:A:308:LEU:CD2	0.43	3.01	1	2
1:A:403:TYR:C	1:A:403:TYR:CD1	0.43	2.91	1	1
1:A:418:ILE:C	1:A:420:LYS:N	0.43	2.70	1	5
1:A:438:LYS:O	1:A:438:LYS:CG	0.43	2.67	4	2
1:A:303:ASP:O	1:A:304:ARG:CB	0.43	2.64	8	1
1:A:299:PHE:CD1	1:A:299:PHE:N	0.43	2.86	11	1
1:A:419:THR:O	1:A:423:GLN:CA	0.43	2.67	11	1
1:A:283:ASP:O	1:A:465:ASN:ND2	0.43	2.52	12	1
1:A:291:VAL:CG2	1:A:442:PHE:CZ	0.43	2.90	15	1
1:A:425:ILE:HG21	1:A:442:PHE:CD1	0.43	2.48	17	1
1:A:292:THR:OG1	1:A:335:ALA:HB1	0.43	2.13	4	1
1:A:435:SER:O	1:A:436:LYS:CB	0.43	2.66	20	2
1:A:291:VAL:HG21	1:A:300:PHE:CZ	0.43	2.46	16	1
1:A:295:GLY:CA	1:A:339:GLU:OE1	0.43	2.66	18	1
1:A:464:SER:O	1:A:465:ASN:C	0.43	2.57	18	1
1:A:390:TYR:O	1:A:405:GLU:N	0.43	2.50	20	1
1:A:310:VAL:O	1:A:311:SER:O	0.43	2.36	18	2
1:A:424:GLY:C	1:A:425:ILE:CG2	0.43	2.86	12	1
1:A:425:ILE:HD11	1:A:451:TYR:CD1	0.43	2.49	15	1
1:A:300:PHE:O	1:A:306:PHE:CB	0.43	2.67	16	1
1:A:384:VAL:CG1	1:A:432:VAL:HG12	0.43	2.41	18	1
1:A:332:ILE:CG2	1:A:334:ALA:O	0.43	2.66	4	1
1:A:438:LYS:HA	1:A:438:LYS:CE	0.43	2.43	5	2
1:A:304:ARG:N	1:A:304:ARG:CD	0.43	2.81	10	1
1:A:294:VAL:O	1:A:294:VAL:HG13	0.43	2.14	13	1
1:A:346:LEU:CD2	1:A:346:LEU:N	0.43	2.81	2	1
1:A:309:LYS:CD	1:A:315:LYS:O	0.43	2.67	3	1
1:A:293:THR:CG2	1:A:435:SER:OG	0.43	2.67	9	1
1:A:425:ILE:H	1:A:425:ILE:HD13	0.43	1.72	16	2
1:A:364:TYR:CG	1:A:365:PRO:CD	0.43	3.02	12	1
1:A:329:PRO:HG3	1:A:353:TRP:CE3	0.43	2.49	13	1
1:A:295:GLY:O	1:A:296:ASN:OD1	0.43	2.37	14	1
1:A:425:ILE:HD12	1:A:442:PHE:CE2	0.43	2.48	14	1
1:A:393:TYR:N	1:A:393:TYR:CD1	0.43	2.86	16	1
1:A:433:PHE:CE1	1:A:441:TYR:CB	0.43	3.02	18	1
1:A:403:TYR:O	1:A:403:TYR:CG	0.43	2.70	20	1
1:A:325:TRP:CE3	1:A:328:LEU:HG	0.43	2.48	15	1
1:A:442:PHE:CZ	1:A:449:PHE:HB2	0.43	2.49	20	1
1:A:374:PRO:CG	1:A:401:TRP:CH2	0.43	3.01	1	1

J fa α ntin



2JXY

		(1, 1, (3))	\mathbf{D} : $(\hat{\mathbf{x}})$	Models	
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:321:ILE:O	1:A:322:SER:C	0.43	2.56	5	5
1:A:373:PHE:CZ	1:A:380:ILE:HG12	0.43	2.49	6	1
1:A:352:TYR:CE1	1:A:366:LYS:HB2	0.43	2.48	10	1
1:A:362:PRO:O	1:A:363:ASN:CG	0.42	2.58	8	2
1:A:414:TYR:CZ	1:A:416:LYS:HG3	0.42	2.49	5	1
1:A:430:ASP:N	1:A:443:PHE:O	0.42	2.51	10	1
1:A:292:THR:CG2	1:A:293:THR:N	0.42	2.81	17	1
1:A:306:PHE:CD1	1:A:321:ILE:HG13	0.42	2.49	19	1
1:A:412:PRO:O	1:A:413:GLY:O	0.42	2.37	16	4
1:A:373:PHE:N	1:A:374:PRO:HD3	0.42	2.28	20	3
1:A:467:TRP:O	1:A:469:GLY:N	0.42	2.52	11	1
1:A:442:PHE:HB2	1:A:449:PHE:CZ	0.42	2.49	5	1
1:A:401:TRP:CZ2	1:A:412:PRO:HA	0.42	2.49	18	1
1:A:338:ILE:O	1:A:341:ARG:N	0.42	2.52	20	1
1:A:344:VAL:O	1:A:355:ILE:HG22	0.42	2.13	4	1
1:A:336:TYR:CE1	1:A:345:PHE:HB2	0.42	2.49	6	2
1:A:325:TRP:HB3	1:A:328:LEU:CB	0.42	2.44	10	1
1:A:336:TYR:O	1:A:336:TYR:CG	0.42	2.71	10	1
1:A:306:PHE:CZ	1:A:319:ASN:CB	0.42	3.03	12	1
1:A:384:VAL:CG1	1:A:385:PHE:N	0.42	2.82	13	1
1:A:440:TYR:CD1	1:A:441:TYR:N	0.42	2.87	15	1
1:A:322:SER:O	1:A:324:LEU:N	0.42	2.53	19	1
1:A:380:ILE:HA	1:A:396:VAL:HG22	0.42	1.90	20	1
1:A:298:ILE:C	1:A:298:ILE:HD12	0.42	2.35	4	1
1:A:322:SER:O	1:A:323:SER:C	0.42	2.57	9	2
1:A:463:LYS:C	1:A:465:ASN:N	0.42	2.72	7	1
1:A:383:ALA:HB1	1:A:394:PHE:CE1	0.42	2.48	13	1
1:A:389:PHE:O	1:A:390:TYR:CG	0.42	2.72	14	2
1:A:431:ALA:CB	1:A:442:PHE:CE2	0.42	3.03	15	1
1:A:451:TYR:CD2	1:A:458:ILE:HG13	0.42	2.50	17	1
1:A:399:GLN:CB	1:A:416:LYS:O	0.42	2.67	20	1
1:A:344:VAL:CG1	1:A:346:LEU:HD21	0.42	2.45	3	2
1:A:354:LEU:HD13	1:A:355:ILE:N	0.42	2.30	3	1
1:A:338:ILE:O	1:A:340:ALA:N	0.42	2.53	8	4
1:A:373:PHE:CE1	1:A:375:ASN:HA	0.42	2.50	4	1
1:A:281:LEU:O	1:A:468:PHE:CE2	0.42	2.72	5	1
1:A:354:LEU:O	1:A:360:PRO:CB	0.42	2.67	6	1
1:A:373:PHE:CE2	1:A:380:ILE:HG12	0.42	2.50	6	1
1:A:396:VAL:O	1:A:398:ASN:N	0.42	2.53	13	3
1:A:424:GLY:HA3	1:A:458:ILE:HD12	0.42	1.91	9	1
1:A:367:SER:O	1:A:370:SER:N	0.42	2.51	14	1



			D: ((8)	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:337:GLU:CD	1:A:338:ILE:N	0.42	2.72	16	1	
1:A:307:TRP:CD2	1:A:318:VAL:HB	0.42	2.50	17	1	
1:A:437:ASN:O	1:A:438:LYS:C	0.42	2.58	17	1	
1:A:337:GLU:HB3	1:A:344:VAL:HG12	0.42	1.92	20	1	
1:A:343:GLN:CG	1:A:355:ILE:O	0.42	2.67	1	1	
1:A:389:PHE:O	1:A:391:ARG:CG	0.42	2.67	11	1	
1:A:455:LEU:O	1:A:456:GLN:NE2	0.42	2.53	11	1	
1:A:307:TRP:CE2	1:A:316:THR:OG1	0.42	2.72	14	1	
1:A:329:PRO:CB	1:A:348:LYS:HD3	0.42	2.44	16	1	
1:A:442:PHE:CZ	1:A:449:PHE:HB3	0.42	2.49	20	1	
1:A:396:VAL:O	1:A:397:ASP:CB	0.42	2.68	1	1	
1:A:296:ASN:O	1:A:296:ASN:CG	0.42	2.58	3	1	
1:A:443:PHE:CE1	1:A:448:GLN:HB3	0.42	2.50	3	1	
1:A:400:TYR:CD1	1:A:401:TRP:N	0.42	2.87	5	1	
1:A:443:PHE:CD1	1:A:444:GLN:N	0.42	2.87	5	1	
1:A:467:TRP:C	1:A:469:GLY:N	0.42	2.73	11	1	
1:A:354:LEU:HD12	1:A:354:LEU:O	0.42	2.12	18	1	
1:A:425:ILE:CG2	1:A:442:PHE:CD1	0.42	3.03	18	1	
1:A:443:PHE:CZ	1:A:464:SER:HB2	0.42	2.49	18	1	
1:A:322:SER:C	1:A:324:LEU:N	0.42	2.70	19	1	
1:A:368:ILE:O	1:A:370:SER:N	0.42	2.53	1	1	
1:A:362:PRO:O	1:A:363:ASN:HB2	0.42	2.14	5	2	
1:A:436:LYS:HD3	1:A:439:TYR:CD1	0.42	2.50	5	1	
1:A:301:PHE:CZ	1:A:306:PHE:CE1	0.42	3.08	9	1	
1:A:448:GLN:HG3	1:A:462:LEU:HD23	0.42	1.91	12	1	
1:A:348:LYS:N	1:A:351:LYS:O	0.42	2.49	13	1	
1:A:376:PHE:O	1:A:377:VAL:O	0.42	2.38	14	1	
1:A:354:LEU:HD23	1:A:361:GLU:HG2	0.42	1.90	16	1	
1:A:332:ILE:HG12	1:A:346:LEU:HD12	0.42	1.90	2	1	
1:A:455:LEU:HD11	1:A:457:ARG:HB2	0.42	1.91	5	1	
1:A:469:GLY:O	1:A:470:CYS:SG	0.42	2.78	8	1	
1:A:286:LEU:HD22	1:A:288:PHE:CZ	0.42	2.50	10	1	
1:A:307:TRP:CD1	1:A:318:VAL:HG22	0.42	2.50	12	1	
1:A:380:ILE:HG22	1:A:381:ASP:H	0.42	1.75	15	1	
1:A:385:PHE:CG	1:A:386:ASN:N	0.41	2.87	2	1	
1:A:352:TYR:CD1	1:A:352:TYR:O	0.41	2.73	3	2	
1:A:399:GLN:O	1:A:418:ILE:CD1	0.41	2.68	10	1	
1:A:422:PHE:CB	1:A:425:ILE:HD11	0.41	2.45	11	1	
1:A:369:HIS:HB2	1:A:373:PHE:CG	0.41	2.50	12	1	
1:A:468:PHE:CE1	1:A:470:CYS:HB2	0.41	2.50	20	2	
1:A:285:ASN:O	1:A:285:ASN:CG	0.41	2.58	14	1	



A + 1	A + 2	$C_{1} = c_{1} \left(\frac{3}{2} \right)$	Distance(Å)	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)		Worst	Total	
1:A:431:ALA:C	1:A:432:VAL:HG13	0.41	2.35	14	1	
1:A:444:GLN:CD	1:A:444:GLN:O	0.41	2.59	15	1	
1:A:381:ASP:O	1:A:430:ASP:O	0.41	2.38	17	1	
1:A:300:PHE:CD1	1:A:301:PHE:N	0.41	2.88	18	1	
1:A:422:PHE:CE1	1:A:451:TYR:CE2	0.41	3.08	18	1	
1:A:433:PHE:CE1	1:A:441:TYR:HB3	0.41	2.50	18	1	
1:A:338:ILE:O	1:A:338:ILE:HG23	0.41	2.15	3	1	
1:A:377:VAL:O	1:A:378:LYS:CB	0.41	2.68	3	1	
1:A:424:GLY:H	1:A:425:ILE:HD13	0.41	1.75	10	2	
1:A:343:GLN:OE1	1:A:345:PHE:CE1	0.41	2.72	8	1	
1:A:356:SER:N	1:A:359:ARG:O	0.41	2.52	10	1	
1:A:281:LEU:HB3	1:A:468:PHE:CE2	0.41	2.50	16	1	
1:A:357:ASN:O	1:A:358:LEU:CG	0.41	2.68	16	1	
1:A:374:PRO:O	1:A:375:ASN:CG	0.41	2.58	16	1	
1:A:321:ILE:C	1:A:323:SER:N	0.41	2.74	2	2	
1:A:436:LYS:HG3	1:A:441:TYR:CE1	0.41	2.50	2	1	
1:A:373:PHE:CD1	1:A:373:PHE:C	0.41	2.92	3	1	
1:A:425:ILE:HG12	1:A:442:PHE:CD2	0.41	2.50	9	1	
1:A:296:ASN:OD1	1:A:296:ASN:C	0.41	2.56	14	1	
1:A:322:SER:O	1:A:325:TRP:O	0.41	2.38	15	1	
1:A:296:ASN:OD1	1:A:296:ASN:N	0.41	2.53	16	1	
1:A:391:ARG:HG2	1:A:392:THR:N	0.41	2.30	20	1	
1:A:462:LEU:CB	1:A:466:SER:HB3	0.41	2.45	7	1	
1:A:349:ASP:O	1:A:378:LYS:O	0.41	2.39	10	1	
1:A:358:LEU:O	1:A:358:LEU:HD12	0.41	2.16	12	1	
1:A:351:LYS:CB	1:A:366:LYS:O	0.41	2.69	13	1	
1:A:307:TRP:CE3	1:A:307:TRP:HA	0.41	2.51	15	1	
1:A:354:LEU:N	1:A:354:LEU:HD13	0.41	2.31	15	1	
1:A:393:TYR:CE1	1:A:402:ARG:NE	0.41	2.88	16	1	
1:A:368:ILE:C	1:A:370:SER:N	0.41	2.73	18	2	
1:A:362:PRO:C	1:A:363:ASN:CG	0.41	2.79	8	2	
1:A:381:ASP:CG	1:A:429:ILE:O	0.41	2.59	4	3	
1:A:432:VAL:CG2	1:A:442:PHE:CD2	0.41	3.04	5	1	
1:A:352:TYR:CE2	1:A:366:LYS:HB3	0.41	2.50	11	1	
1:A:372:GLY:O	1:A:373:PHE:CD1	0.41	2.73	20	1	
1:A:432:VAL:HG23	1:A:442:PHE:CE1	0.41	2.48	1	1	
1:A:364:TYR:CZ	1:A:366:LYS:HE3	0.41	2.49	3	1	
1:A:442:PHE:HB2	1:A:451:TYR:CE1	0.41	2.50	13	1	
1:A:433:PHE:O	1:A:433:PHE:CG	0.41	2.73	18	1	
1:A:389:PHE:CD2	1:A:402:ARG:NH1	0.41	2.88	19	1	
1:A:330:SER:O	1:A:332:ILE:N	0.41	2.54	20	1	



		(1,1)	Distant (8)	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:430:ASP:OD1	1:A:430:ASP:N	0.41	2.54	7	1	
1:A:321:ILE:HD12	1:A:330:SER:HB3	0.41	1.93	10	1	
1:A:354:LEU:CD2	1:A:361:GLU:CG	0.41	2.99	16	1	
1:A:445:GLY:O	1:A:447:ASN:CG	0.41	2.59	16	1	
1:A:305:PHE:CD2	1:A:318:VAL:HB	0.41	2.50	19	1	
1:A:321:ILE:O	1:A:323:SER:N	0.41	2.53	2	1	
1:A:396:VAL:CG1	1:A:401:TRP:CZ3	0.41	3.03	5	1	
1:A:287:SER:O	1:A:302:LYS:CE	0.41	2.68	6	1	
1:A:352:TYR:CE2	1:A:368:ILE:HG22	0.41	2.51	6	1	
1:A:368:ILE:O	1:A:373:PHE:N	0.41	2.54	6	1	
1:A:436:LYS:HD3	1:A:441:TYR:CD1	0.41	2.50	7	1	
1:A:332:ILE:CG2	1:A:346:LEU:HD12	0.41	2.45	11	1	
1:A:419:THR:O	1:A:423:GLN:CG	0.41	2.69	11	1	
1:A:400:TYR:CD1	1:A:400:TYR:C	0.41	2.94	15	1	
1:A:398:ASN:O	1:A:398:ASN:OD1	0.41	2.38	17	1	
1:A:305:PHE:CB	1:A:307:TRP:CH2	0.41	3.04	18	1	
1:A:398:ASN:CG	1:A:398:ASN:O	0.41	2.59	19	1	
1:A:302:LYS:O	1:A:305:PHE:N	0.41	2.54	1	1	
1:A:286:LEU:CD2	1:A:307:TRP:CH2	0.41	3.04	2	1	
1:A:467:TRP:CE3	1:A:467:TRP:HA	0.41	2.50	4	1	
1:A:281:LEU:HB3	1:A:468:PHE:CD2	0.41	2.50	5	1	
1:A:424:GLY:HA3	1:A:458:ILE:CD1	0.41	2.46	8	1	
1:A:306:PHE:O	1:A:319:ASN:O	0.41	2.38	9	1	
1:A:436:LYS:HE2	1:A:441:TYR:CE1	0.41	2.51	9	1	
1:A:306:PHE:CE1	1:A:319:ASN:HB2	0.41	2.51	10	1	
1:A:329:PRO:HG3	1:A:353:TRP:CH2	0.41	2.51	10	1	
1:A:453:PHE:O	1:A:454:LEU:C	0.41	2.59	19	2	
1:A:464:SER:O	1:A:465:ASN:CG	0.41	2.59	10	1	
1:A:328:LEU:CD1	1:A:329:PRO:HD2	0.41	2.46	11	1	
1:A:282:CYS:CA	1:A:470:CYS:SG	0.41	3.08	13	1	
1:A:349:ASP:O	1:A:350:ASP:CB	0.41	2.68	13	1	
1:A:374:PRO:HD2	1:A:377:VAL:CG1	0.41	2.45	16	1	
1:A:393:TYR:CE1	1:A:402:ARG:NH1	0.41	2.89	19	1	
1:A:350:ASP:O	1:A:350:ASP:OD2	0.41	2.39	20	1	
1:A:399:GLN:CG	1:A:416:LYS:O	0.41	2.69	20	1	
1:A:395:PHE:CE1	1:A:432:VAL:HG11	0.41	2.50	2	1	
1:A:290:ALA:O	1:A:291:VAL:HG13	0.41	2.15	10	1	
1:A:304:ARG:O	1:A:320:LEU:CD1	0.41	2.66	20	1	
1:A:455:LEU:C	1:A:456:GLN:OE1	0.40	2.60	2	1	
1:A:450:GLU:OE1	1:A:451:TYR:O	0.40	2.40	14	1	
1:A:420:LYS:O	1:A:421:ASN:C	0.40	2.59	15	1	



A + a 1	A.t. a.m. D	$C = a \cdot (\hat{\lambda})$	\mathbf{D} : \mathbf{D}	Mo	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:324:LEU:O	1:A:325:TRP:C	0.40	2.60	16	1
1:A:464:SER:C	1:A:466:SER:N	0.40	2.74	18	1
1:A:455:LEU:O	1:A:456:GLN:CD	0.40	2.59	6	1
1:A:368:ILE:HD11	1:A:377:VAL:HG21	0.40	1.93	9	1
1:A:286:LEU:CD2	1:A:288:PHE:CE2	0.40	3.05	10	1
1:A:465:ASN:O	1:A:470:CYS:C	0.40	2.59	10	2
1:A:334:ALA:HB3	1:A:347:PHE:HB2	0.40	1.91	11	1
1:A:402:ARG:HB3	A:402:ARG:HB3 1:A:402:ARG:CZ		2.46	11	1
1:A:344:VAL:HG12	1:A:346:LEU:HD23	0.40	1.93	14	1
1:A:462:LEU:HG	1:A:463:LYS:N	0.40	2.32	15	1
1:A:308:LEU:HD23	1:A:317:SER:CB	0.40	2.46	16	1
1:A:376:PHE:O	1:A:377:VAL:C	0.40	2.59	16	1
1:A:299:PHE:CZ	1:A:308:LEU:HD11	0.40	2.51	20	1
1:A:400:TYR:CZ	1:A:416:LYS:HB2	0.40	2.51	20	1
1:A:433:PHE:CG	1:A:434:TYR:N	0.40	2.89	6	1
1:A:383:ALA:CB	1:A:394:PHE:CE1	0.40	3.05	13	1
1:A:419:THR:O	1:A:422:PHE:C	0.40	2.60	13	1
1:A:432:VAL:HA	1:A:442:PHE:CG	0.40	2.51	15	1
1:A:452:ASP:OD1	1:A:454:LEU:CB	0.40	2.69	18	1
1:A:345:PHE:CE1	1:A:354:LEU:HD13	0.40	2.50	20	1
1:A:296:ASN:ND2	1:A:296:ASN:O	0.40	2.55	4	1
1:A:291:VAL:O	1:A:335:ALA:O	0.40	2.40	15	1
1:A:445:GLY:O	1:A:446:SER:CB	0.40	2.68	15	1
1:A:303:ASP:O	1:A:304:ARG:HB2	0.40	2.17	16	2
1:A:429:ILE:HD11	1:A:442:PHE:CG	0.40	2.51	16	1
1:A:455:LEU:C	1:A:456:GLN:CD	0.40	2.80	16	1
1:A:462:LEU:HD12	1:A:466:SER:HB2	0.40	1.92	16	1
1:A:290:ALA:HA	1:A:431:ALA:HB2	0.40	1.93	17	1
1:A:298:ILE:O	1:A:308:LEU:HD12	0.40	2.15	18	1
1:A:439:TYR:CD2	1:A:452:ASP:OD1	0.40	2.74	20	1
1:A:369:HIS:C	1:A:371:PHE:N	0.40	2.74	1	1
1:A:298:ILE:HD12	1:A:300:PHE:CE2	0.40	2.52	10	1
1:A:294:VAL:HG23	1:A:297:LYS:CB	0.40	2.45	14	1
1:A:364:TYR:CD2	1:A:366:LYS:HG2	0.40	2.51	14	1

1:A:432:VAL:HG23

1:A:300:PHE:CE1



0.40

0.40

1:A:440:TYR:CE1

1:A:301:PHE:O

2.51

2.75

15

18

1

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	А	189/194~(97%)	$138\pm5~(73\pm3\%)$	$38\pm5~(20\pm3\%)$	$13\pm3~(7\pm1\%)$	2 17		
All	All	3780/3880~(97%)	2753~(73%)	767 (20%)	260~(7%)	2 17		

All 48 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	А	326	PRO	20
1	А	378	LYS	16
1	А	413	GLY	15
1	А	455	LEU	14
1	А	303	ASP	13
1	А	311	SER	12
1	А	372	GLY	12
1	А	436	LYS	11
1	А	373	PHE	10
1	А	282	CYS	10
1	А	285	ASN	9
1	А	310	VAL	9
1	А	376	PHE	9
1	А	371	PHE	8
1	А	374	PRO	8
1	А	425	ILE	7
1	А	438	LYS	6
1	А	363	ASN	6
1	А	467	TRP	6
1	А	377	VAL	5
1	А	295	GLY	4
1	А	332	ILE	4
1	А	419	THR	3
1	А	446	SER	3
1	А	321	ILE	3
1	А	412	PRO	3
1	А	375	ASN	3



Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	А	358	LEU	3
1	А	418	ILE	2
1	А	342	ASN	2
1	А	408	GLN	2
1	А	397	ASP	2
1	А	468	PHE	2
1	А	331	GLY	2
1	А	389	PHE	2
1	А	465	ASN	2
1	А	430	ASP	1
1	А	314	PRO	1
1	А	456	GLN	1
1	А	302	LYS	1
1	А	432	VAL	1
1	А	349	ASP	1
1	А	330	SER	1
1	А	350	ASP	1
1	А	294	VAL	1
1	А	340	ALA	1
1	А	312	GLU	1
1	А	359	ARG	1

Continued from previous page...

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	Per	cen	tile	s
1	А	175/178~(98%)	$128\pm5~(73\pm3\%)$	$47\pm5~(27\pm3\%)$	2		21	
All	All	3500/3560~(98%)	2556 (73%)	944 (27%)	2		21	

All 139 unique residues with a non-rotameric side chain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	А	304	ARG	18
1	А	410	MET	18
1	А	364	TYR	17
1	А	285	ASN	16



Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	А	378	LYS	16
1	А	407	ARG	16
1	А	438	LYS	16
1	А	325	TRP	15
1	А	348	LYS	15
1	А	358	LEU	15
1	А	404	ASP	15
1	А	320	LEU	14
1	А	366	LYS	14
1	А	371	PHE	14
1	А	417	LEU	14
1	A	428	LYS	14
1	А	460	LYS	14
1	А	302	LYS	13
1	А	359	ARG	13
1	A	381	ASP	13
1	А	463	LYS	13
1	А	470	CYS	13
1	А	317	SER	13
1	А	354	LEU	12
1	А	397	ASP	12
1	А	411	ASP	12
1	А	289	ASP	11
1	А	308	LEU	11
1	А	430	ASP	11
1	А	443	PHE	11
1	А	457	ARG	11
1	А	313	ARG	11
1	А	376	PHE	11
1	А	369	HIS	11
1	A	323	SER	10
1	А	408	GLN	10
1	А	447	ASN	10
1	А	379	LYS	10
1	А	283	ASP	10
1	A	337	GLU	10
1	A	286	LEU	9
1	A	315	LYS	9
1	A	389	PHE	9
1	A	436	LYS	9
1	A	448	GLN	9
1	А	455	LEU	9



Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	А	339	GLU	9
1	А	388	ARG	9
1	А	425	ILE	9
1	А	282	CYS	9
1	А	370	SER	9
1	А	324	LEU	8
1	А	386	ASN	8
1	А	406	ARG	8
1	А	444	GLN	8
1	А	467	TRP	8
1	А	309	LYS	7
1	А	367	SER	7
1	А	399	GLN	7
1	А	409	MET	7
1	А	435	SER	7
1	А	303	ASP	7
1	А	400	TYR	7
1	А	281	LEU	7
1	А	405	GLU	7
1	А	450	GLU	7
1	А	401	TRP	7
1	А	333	GLU	6
1	А	464	SER	6
1	А	466	SER	6
1	А	341	ARG	6
1	А	357	ASN	6
1	А	310	VAL	6
1	А	328	LEU	5
1	А	330	SER	5
1	А	462	LEU	5
1	А	312	GLU	5
1	А	345	PHE	5
1	A	429	ILE	5
1	A	322	SER	5
1	A	338	ILE	4
1	A	343	GLN	4
1	A	377	VAL	4
1	A	394	PHE	4
1	А	361	GLU	4
1	A	452	ASP	4
1	A	336	TYR	4
1	А	419	THR	4

Continued from previous page...



Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	А	297	LYS	4
1	А	363	ASN	4
1	А	352	TYR	4
1	А	327	THR	4
1	А	423	GLN	4
1	А	311	SER	4
1	А	319	ASN	4
1	А	307	TRP	3
1	А	402	ARG	3
1	А	446	SER	3
1	А	292	THR	3
1	А	300	PHE	3
1	А	356	SER	3
1	А	349	ASP	3
1	А	451	TYR	3
1	А	375	ASN	2
1	А	421	ASN	2
1	А	468	PHE	2
1	А	353	TRP	2
1	А	306	PHE	2
1	А	346	LEU	2
1	А	418	ILE	2
1	А	441	TYR	2
1	А	368	ILE	2
1	А	391	ARG	2
1	А	440	TYR	2
1	А	296	ASN	2
1	А	342	ASN	2
1	А	414	TYR	2
1	А	393	TYR	1
1	A	434	TYR	1
1	А	437	ASN	1
1	A	396	VAL	1
1	A	373	PHE	1
1	A	355	ILE	1
1	A	442	PHE	1
1	A	287	SER	1
1	A	305	PHE	1
1	A	347	PHE	1
1	A	456	GLN	1
1	A	350	ASP	1
1	А	432	VAL	1

Continued from previous page...



		-	1 0	
Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	А	459	THR	1
1	А	298	ILE	1
1	А	293	THR	1
1	А	433	PHE	1
1	А	301	PHE	1
1	А	384	VAL	1
1	А	318	VAL	1
1	А	321	ILE	1
1	А	385	PHE	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)

Of 1 ligands modelled in this entry, 1 is monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

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

