Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Feb 15, 2022 – 08:07 AM EST

PDB ID	:	1KRT
Title	:	SOLUTION STRUCTURE OF THE ANTICODON BINDING DOMAIN OF ESCHERICHIA COLI LYSYL-TRNA SYNTHETASE AND STUDIES OF ITS INTERACTIONS WITH TRNA-LYS
Authors	:	Commans, S.; Dardel, F.
Deposited on	:	1995-06-09

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:

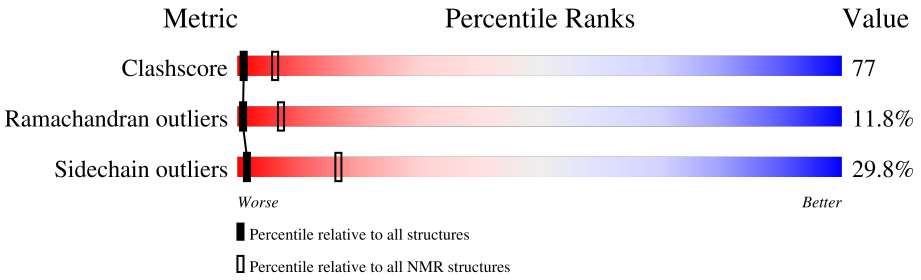
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
ShiftChecker	:	2.26
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.26

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	120	16% 32% 32% 8% • 8%

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 9 models. The atoms present in the NMR models are not consistent. Some calculations may have failed as a result. All residues are included in the validation scores. Model 2 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:40-A:129, A:135-A:149 (105)	1.07	2

Ill-defined regions of proteins are excluded from the global statistics.

Ligands and non-protein polymers are included in the analysis.

The models can be grouped into 1 clusters. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9

3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1758 atoms, of which 881 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called LYSYL-TRNA SYNTHETASE (PRODUCT OF LYSS GENE).

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	110	1758	550	881	157	166	4	0

There are 3 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	?	-	ASN	deletion	UNP P0A8N3
A	?	-	LEU	deletion	UNP P0A8N3
A	?	-	ARG	deletion	UNP P0A8N3

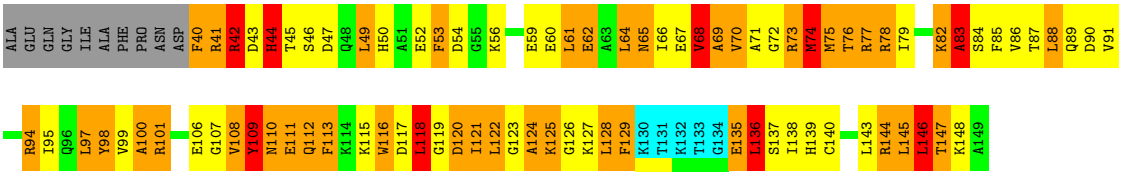
4 Residue-property plots (i)

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: LYSYL-TRNA SYNTHETASE (PRODUCT OF LYSS GENE)

Chain A: 16% 32% 32% 8% • 8%



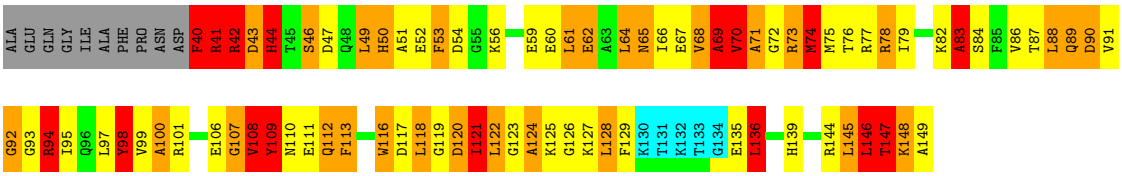
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: LYSYL-TRNA SYNTHETASE (PRODUCT OF LYSS GENE)

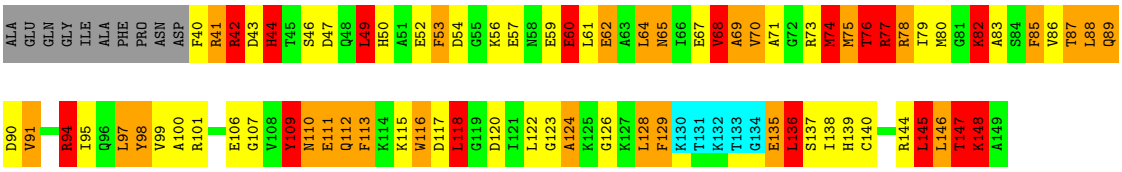
Chain A: 18% 32% 24% 13% • 8%



4.2.2 Score per residue for model 2 (medoid)

• Molecule 1: LYSYL-TRNA SYNTHETASE (PRODUCT OF LYSS GENE)

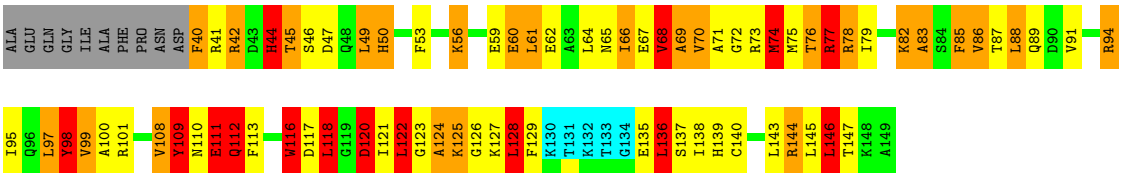
Chain A: 22% 30% 22% 13% • 8%



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: LYSYL-TRNA SYNTHETASE (PRODUCT OF LYSS GENE)

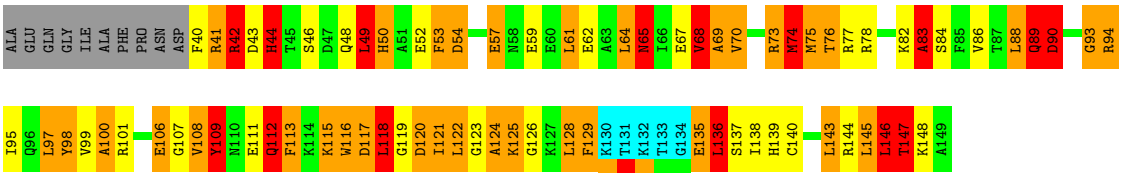
Chain A: 24% 30% 21% 12% • 8%



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: LYSYL-TRNA SYNTHETASE (PRODUCT OF LYSS GENE)

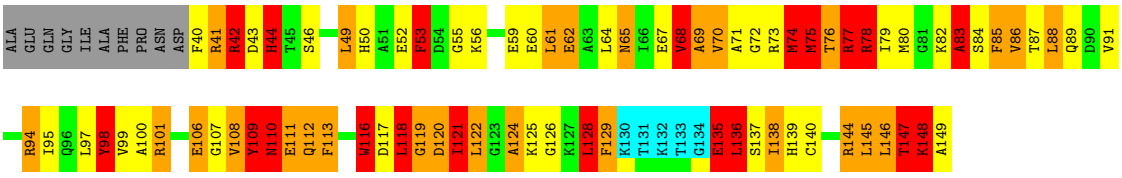
Chain A: 24% 22% 28% 12% • 8%



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: LYSYL-TRNA SYNTHETASE (PRODUCT OF LYSS GENE)

Chain A: 21% 28% 22% 17% • 8%



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: LYSYL-TRNA SYNTHETASE (PRODUCT OF LYSS GENE)

Chain A: 14% 28% 22% 23% • 8%

ALA GLU GLN GLY ILE ALA PHE PRO ASN ASP F40 R41 R42 D43 H44 T45 S46 D47 Q48 L49 E52 F53 D54 G55 K56 E59 E60 L61 E62 A63 L64 N65 I66 E67 V68 A69 V70 A71 G72 R73 M74 M75 T76 R77 R78 I79 M80 G81 K82 A83 S84 F85 V86 T87 L88 Q89 D90 V91

R94 I95 Q96 L97 Y98 V99 A100 R101 P105 E106 Y109 N110 E111 Q112 F113 K114 K115 W116 D117 L118 G119 D120 I121 L122 G123 A124 K125 G126 K127 L128 F129 K130 T131 K132 T133 G134 E135 L136 S137 I138 H139 C140 L143 R144 L145 L146 T147 K148 A149

4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: LYSYL-TRNA SYNTHETASE (PRODUCT OF LYSS GENE)

Chain A: 22% 18% 32% 14% • 8%

ALA GLU GLN GLY ILE ALA PHE PRO ASN ASP F40 R41 R42 D43 H44 T45 L49 H50 A51 E52 F53 D54 E59 E60 L61 E62 A63 L64 N65 I66 E67 V68 A69 V70 A71 G72 R73 M74 M75 T76 R77 R78 I79 K82 A83 S84 F85 V86 T87 L88 V91 R94 I95 Q96 L97

Y98 V99 A100 R101 L104 P105 E106 G107 V108 Y109 N110 E111 Q112 F113 W116 D117 L118 G119 D120 I121 L122 G123 A124 K125 G126 K127 L128 F129 K130 T131 K132 T133 G134 E135 L136 S137 I138 H139 C140 T141 E142 L143 R144 L145 L146 T147 K148 A149

4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: LYSYL-TRNA SYNTHETASE (PRODUCT OF LYSS GENE)

Chain A: 16% 38% 23% 10% • 8%

ALA GLU GLN GLY ILE ALA PHE PRO ASN ASP F40 R41 R42 D43 H44 T45 S46 D47 Q48 L49 H50 A51 E52 F53 K56 E57 N58 E59 E60 L61 E62 A63 L64 N65 I66 E67 V68 A69 V70 A71 G72 R73 M74 M75 T76 R77 R78 I79 K82 A83 S84 F85 V86 T87 L88 Q89 D90 V91

R94 I95 Q96 L97 Y98 V99 A100 R101 D102 D103 L104 P105 E106 G107 V108 Y109 N110 E111 Q112 F113 K114 K115 W116 D117 L118 G119 D120 I121 L122 G123 A124 K125 G126 K127 L128 F129 K130 T131 K132 T133 G134 E135 L136 S137 I138 H139 C140 L143 R144 L145 L146 T147 K148 A149

4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: LYSYL-TRNA SYNTHETASE (PRODUCT OF LYSS GENE)

Chain A: 26% 35% 19% 8% • 8%

ALA GLU GLN GLY ILE ALA PHE PRO ASN ASP F40 R41 R42 D43 H44 T45 S46 L49 H50 A51 E52 F53 D54 E59 E60 L61 E62 A63 L64 N65 I66 E67 V68 A69 V70 A71 G72 R73 M74 M75 T76 R77 R78 G81 K82 A83 S84 F85 V86 T87 L88 Q89 D90 V91 R94 I95

Q96 L97 Y98 V99 A100 R101 E106 G107 V108 Y109 N110 E111 Q112 F113 K114 K115 W116 D117 L118 G119 D120 I121 L122 G123 A124 K125 G126 K127 L128 F129 K130 T131 K132 T133 G134 E135 L136 S137 I138 H139 C140 L143 R144 L145 L146 T147 K148 A149

5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

Of the ? calculated structures, 9 were deposited, based on the following criterion: *?*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	3.1

No chemical shift data was provided.

6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 5$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the (average) root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.73±0.05	12±3/853 (1.5± 0.3%)	2.53±0.09	60±9/1142 (5.2± 0.8%)
All	All	1.74	112/7677 (1.5%)	2.53	538/10278 (5.2%)

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	7.8±0.6
All	All	0	70

All unique bond outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	69	ALA	CA-CB	-14.46	1.22	1.52	3	8
1	A	124	ALA	CA-CB	-11.49	1.28	1.52	7	7
1	A	44	HIS	CA-CB	-10.65	1.30	1.53	6	2
1	A	135	GLU	CA-CB	-8.96	1.34	1.53	6	3
1	A	108	VAL	CA-CB	-8.88	1.36	1.54	1	2
1	A	77	ARG	CB-CG	8.75	1.76	1.52	3	1
1	A	83	ALA	CA-CB	-8.75	1.34	1.52	5	9
1	A	49	LEU	CA-CB	-8.23	1.34	1.53	4	1
1	A	116	TRP	NE1-CE2	-7.68	1.27	1.37	9	7
1	A	118	LEU	CA-CB	-7.48	1.36	1.53	7	3
1	A	70	VAL	CB-CG1	-7.39	1.37	1.52	1	1
1	A	109	TYR	CA-CB	7.36	1.70	1.53	1	1
1	A	116	TRP	CG-CD2	-7.06	1.31	1.43	6	7
1	A	127	LYS	CA-CB	-6.79	1.39	1.53	6	1
1	A	74	MET	CA-CB	-6.69	1.39	1.53	3	5
1	A	84	SER	CA-CB	-6.66	1.43	1.52	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	68	VAL	CB-CG1	-6.65	1.38	1.52	6	1
1	A	116	TRP	CD2-CE2	-6.42	1.33	1.41	7	3
1	A	113	PHE	CA-CB	-6.41	1.39	1.53	4	2
1	A	112	GLN	CA-CB	-6.37	1.40	1.53	7	7
1	A	106	GLU	CB-CG	-6.26	1.40	1.52	9	1
1	A	94	ARG	CA-CB	-6.16	1.40	1.53	1	1
1	A	68	VAL	CA-CB	-6.10	1.42	1.54	6	2
1	A	116	TRP	CE2-CZ2	-6.06	1.29	1.39	1	2
1	A	116	TRP	CG-CD1	-5.93	1.28	1.36	2	5
1	A	116	TRP	CD1-NE1	-5.92	1.27	1.38	9	3
1	A	112	GLN	CB-CG	-5.89	1.36	1.52	7	2
1	A	116	TRP	CA-CB	-5.87	1.41	1.53	8	1
1	A	44	HIS	CG-ND1	-5.83	1.25	1.38	7	5
1	A	70	VAL	CA-CB	-5.73	1.42	1.54	2	2
1	A	146	LEU	CG-CD2	5.62	1.72	1.51	6	1
1	A	40	PHE	CA-CB	-5.61	1.41	1.53	8	1
1	A	136	LEU	CB-CG	-5.51	1.36	1.52	6	1
1	A	145	LEU	CA-CB	-5.42	1.41	1.53	2	1
1	A	42	ARG	CA-CB	-5.37	1.42	1.53	1	2
1	A	120	ASP	CA-CB	-5.31	1.42	1.53	2	1
1	A	49	LEU	CG-CD1	-5.22	1.32	1.51	4	1
1	A	99	VAL	CB-CG1	-5.22	1.41	1.52	8	1
1	A	136	LEU	CA-CB	-5.11	1.42	1.53	5	1
1	A	85	PHE	CA-CB	-5.11	1.42	1.53	7	1
1	A	62	GLU	CA-CB	-5.09	1.42	1.53	2	1
1	A	59	GLU	CA-CB	-5.04	1.42	1.53	1	1
1	A	68	VAL	CB-CG2	-5.03	1.42	1.52	1	1
1	A	146	LEU	CG-CD1	5.03	1.70	1.51	3	1
1	A	146	LEU	CB-CG	5.00	1.67	1.52	6	1

All unique angle outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
1	A	68	VAL	CA-CB-CG1	-16.96	85.45	110.90	7	7
1	A	44	HIS	CA-CB-CG	16.75	142.08	113.60	1	7
1	A	69	ALA	N-CA-C	15.76	153.56	111.00	6	7
1	A	70	VAL	CG1-CB-CG2	-14.90	87.06	110.90	1	1
1	A	116	TRP	CB-CG-CD1	-13.79	109.07	127.00	9	7
1	A	146	LEU	CA-C-N	-13.75	86.95	117.20	8	6
1	A	98	TYR	CB-CG-CD2	-13.52	112.89	121.00	8	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	116	TRP	CA-CB-CG	-12.18	90.55	113.70	4	7
1	A	98	TYR	CB-CG-CD1	12.09	128.25	121.00	8	5
1	A	53	PHE	CB-CG-CD2	-11.91	112.46	120.80	9	1
1	A	69	ALA	CB-CA-C	-11.71	92.54	110.10	6	1
1	A	116	TRP	CG-CD2-CE3	11.58	144.32	133.90	9	3
1	A	129	PHE	N-CA-C	-11.47	80.03	111.00	4	2
1	A	129	PHE	CA-C-N	-11.39	92.14	117.20	4	3
1	A	40	PHE	CB-CG-CD2	-11.37	112.84	120.80	1	4
1	A	116	TRP	NE1-CE2-CZ2	-11.35	117.92	130.40	9	2
1	A	66	ILE	N-CA-C	-11.23	80.68	111.00	6	1
1	A	53	PHE	CB-CG-CD1	10.62	128.24	120.80	9	1
1	A	77	ARG	N-CA-CB	10.56	129.61	110.60	6	1
1	A	109	TYR	CB-CG-CD2	-10.48	114.71	121.00	5	4
1	A	89	GLN	CA-CB-CG	-10.42	90.48	113.40	1	2
1	A	146	LEU	CB-CG-CD2	-10.31	93.47	111.00	1	5
1	A	108	VAL	CA-C-N	-10.11	94.96	117.20	1	1
1	A	145	LEU	CB-CG-CD2	10.09	128.15	111.00	7	2
1	A	148	LYS	CA-C-N	-10.00	95.20	117.20	5	2
1	A	145	LEU	N-CA-CB	-9.92	90.55	110.40	4	4
1	A	136	LEU	N-CA-C	9.87	137.64	111.00	2	6
1	A	100	ALA	N-CA-CB	-9.76	96.43	110.10	8	8
1	A	111	GLU	CA-CB-CG	-9.63	92.21	113.40	8	9
1	A	146	LEU	N-CA-C	9.55	136.80	111.00	8	2
1	A	146	LEU	O-C-N	9.51	137.92	122.70	8	5
1	A	109	TYR	N-CA-CB	-9.43	93.62	110.60	8	9
1	A	91	VAL	CA-CB-CG1	-9.43	96.75	110.90	6	1
1	A	49	LEU	CB-CG-CD2	-9.37	95.08	111.00	8	5
1	A	68	VAL	CA-C-N	-9.36	96.62	117.20	2	9
1	A	129	PHE	CB-CG-CD2	-9.34	114.26	120.80	2	2
1	A	49	LEU	CB-CG-CD1	-9.32	95.15	111.00	4	4
1	A	120	ASP	CA-C-N	-9.31	96.72	117.20	5	1
1	A	69	ALA	N-CA-CB	-9.21	97.20	110.10	2	5
1	A	109	TYR	CA-CB-CG	8.94	130.38	113.40	1	2
1	A	119	GLY	N-CA-C	-8.91	90.82	113.10	5	2
1	A	112	GLN	N-CA-CB	-8.88	94.61	110.60	2	9
1	A	67	GLU	CA-C-N	-8.85	97.72	117.20	6	1
1	A	70	VAL	CA-CB-CG1	-8.84	97.64	110.90	1	7
1	A	70	VAL	CA-CB-CG2	-8.80	97.70	110.90	1	1
1	A	76	THR	N-CA-C	8.77	134.68	111.00	6	2
1	A	136	LEU	N-CA-CB	-8.72	92.96	110.40	2	9
1	A	116	TRP	CB-CG-CD2	8.70	137.91	126.60	9	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	129	PHE	O-C-N	8.67	136.57	122.70	4	4
1	A	76	THR	CA-CB-CG2	-8.61	100.35	112.40	7	3
1	A	70	VAL	N-CA-C	8.61	134.24	111.00	6	1
1	A	123	GLY	N-CA-C	-8.55	91.72	113.10	9	7
1	A	146	LEU	N-CA-CB	-8.54	93.32	110.40	6	2
1	A	116	TRP	CD2-CE2-CZ2	8.52	132.52	122.30	9	3
1	A	69	ALA	CA-C-N	-8.32	98.90	117.20	2	5
1	A	43	ASP	N-CA-C	-8.29	88.61	111.00	5	6
1	A	143	LEU	N-CA-C	8.18	133.08	111.00	7	1
1	A	40	PHE	CB-CG-CD1	8.12	126.49	120.80	1	2
1	A	116	TRP	CD1-NE1-CE2	8.04	116.24	109.00	5	6
1	A	75	MET	CA-CB-CG	-7.87	99.92	113.30	5	1
1	A	116	TRP	CG-CD1-NE1	-7.82	102.28	110.10	5	8
1	A	109	TYR	CB-CG-CD1	7.81	125.69	121.00	5	3
1	A	84	SER	N-CA-CB	-7.78	98.83	110.50	9	3
1	A	113	PHE	CB-CG-CD2	-7.76	115.37	120.80	2	3
1	A	116	TRP	CD1-CG-CD2	7.69	112.45	106.30	9	6
1	A	45	THR	CA-CB-CG2	-7.69	101.64	112.40	8	2
1	A	66	ILE	CA-C-N	-7.68	100.31	117.20	6	3
1	A	85	PHE	N-CA-C	-7.67	90.30	111.00	6	5
1	A	145	LEU	N-CA-C	7.62	131.58	111.00	4	2
1	A	56	LYS	CA-CB-CG	-7.60	96.69	113.40	8	1
1	A	120	ASP	N-CA-CB	-7.57	96.98	110.60	2	5
1	A	116	TRP	CE2-CD2-CG	-7.50	101.30	107.30	9	1
1	A	148	LYS	O-C-N	7.45	134.62	122.70	5	2
1	A	146	LEU	C-N-CA	7.41	140.22	121.70	5	3
1	A	128	LEU	CB-CG-CD2	7.35	123.49	111.00	3	1
1	A	59	GLU	CA-C-N	-7.34	101.04	117.20	6	9
1	A	117	ASP	N-CA-C	7.33	130.79	111.00	4	1
1	A	61	LEU	CB-CG-CD1	-7.31	98.57	111.00	6	2
1	A	74	MET	CA-CB-CG	-7.29	100.91	113.30	2	5
1	A	113	PHE	CB-CG-CD1	7.26	125.88	120.80	2	3
1	A	83	ALA	CA-C-N	-7.26	101.24	117.20	5	5
1	A	106	GLU	N-CA-CB	-7.24	97.57	110.60	5	6
1	A	117	ASP	CA-C-N	-7.23	101.28	117.20	4	8
1	A	100	ALA	CB-CA-C	7.22	120.94	110.10	8	1
1	A	146	LEU	CA-C-O	7.16	135.13	120.10	8	3
1	A	112	GLN	N-CA-C	-7.13	91.75	111.00	6	7
1	A	147	THR	N-CA-C	7.12	130.22	111.00	4	2
1	A	41	ARG	N-CA-C	7.07	130.09	111.00	1	1
1	A	146	LEU	CA-CB-CG	-7.01	99.18	115.30	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	146	LEU	CB-CG-CD1	-6.99	99.12	111.00	2	3
1	A	129	PHE	C-N-CA	6.98	139.15	121.70	4	1
1	A	135	GLU	CA-C-N	-6.93	101.95	117.20	3	3
1	A	128	LEU	CB-CG-CD1	6.92	122.77	111.00	6	1
1	A	68	VAL	O-C-N	6.91	133.75	122.70	7	5
1	A	71	ALA	N-CA-C	-6.84	92.52	111.00	7	1
1	A	128	LEU	N-CA-CB	-6.83	96.74	110.40	8	3
1	A	44	HIS	N-CA-CB	-6.82	98.33	110.60	3	2
1	A	147	THR	CA-CB-CG2	-6.82	102.86	112.40	7	3
1	A	44	HIS	CA-C-N	-6.81	102.21	117.20	6	1
1	A	98	TYR	N-CA-CB	-6.79	98.38	110.60	9	5
1	A	126	GLY	N-CA-C	-6.78	96.15	113.10	6	1
1	A	116	TRP	CA-C-N	-6.76	102.32	117.20	8	7
1	A	120	ASP	N-CA-C	-6.71	92.87	111.00	6	2
1	A	83	ALA	O-C-N	6.71	133.44	122.70	5	2
1	A	113	PHE	CB-CA-C	-6.67	97.05	110.40	5	4
1	A	64	LEU	CB-CG-CD2	-6.67	99.66	111.00	5	4
1	A	88	LEU	CB-CG-CD2	-6.65	99.70	111.00	6	1
1	A	120	ASP	CB-CA-C	-6.64	97.11	110.40	5	1
1	A	146	LEU	CB-CA-C	-6.58	97.69	110.20	8	1
1	A	40	PHE	CA-C-N	-6.58	102.72	117.20	8	1
1	A	142	GLU	N-CA-C	-6.54	93.33	111.00	7	1
1	A	120	ASP	O-C-N	6.54	133.16	122.70	5	1
1	A	62	GLU	N-CA-CB	-6.48	98.94	110.60	8	8
1	A	67	GLU	CA-C-O	6.44	133.62	120.10	6	1
1	A	77	ARG	N-CA-C	6.40	128.27	111.00	2	2
1	A	135	GLU	N-CA-CB	-6.36	99.15	110.60	4	2
1	A	108	VAL	CA-CB-CG2	-6.34	101.38	110.90	9	3
1	A	47	ASP	N-CA-C	-6.33	93.92	111.00	2	2
1	A	112	GLN	CA-CB-CG	-6.30	99.53	113.40	1	2
1	A	129	PHE	CB-CG-CD1	-6.29	116.40	120.80	4	2
1	A	74	MET	N-CA-C	-6.28	94.05	111.00	6	1
1	A	121	ILE	N-CA-CB	-6.24	96.45	110.80	5	1
1	A	67	GLU	N-CA-C	-6.21	94.22	111.00	3	1
1	A	118	LEU	CA-C-N	-6.17	103.86	116.20	3	1
1	A	66	ILE	CA-C-O	6.16	133.03	120.10	6	1
1	A	77	ARG	CA-CB-CG	-6.12	99.93	113.40	3	1
1	A	107	GLY	N-CA-C	-6.11	97.82	113.10	1	1
1	A	87	THR	CA-CB-CG2	-6.07	103.90	112.40	1	3
1	A	108	VAL	O-C-N	6.05	132.37	122.70	1	1
1	A	147	THR	O-C-N	6.05	132.37	122.70	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	112	GLN	CB-CA-C	6.04	122.48	110.40	1	3
1	A	44	HIS	N-CA-C	6.01	127.23	111.00	3	2
1	A	69	ALA	O-C-N	6.00	132.30	122.70	3	4
1	A	108	VAL	CA-C-O	5.98	132.67	120.10	1	1
1	A	45	THR	N-CA-C	5.98	127.15	111.00	3	1
1	A	86	VAL	C-N-CA	-5.97	106.78	121.70	5	1
1	A	74	MET	CA-C-N	-5.95	104.12	117.20	6	1
1	A	70	VAL	CB-CA-C	-5.93	100.14	111.40	6	1
1	A	65	ASN	CA-C-N	-5.91	104.19	117.20	5	4
1	A	146	LEU	CD1-CG-CD2	5.90	128.20	110.50	6	1
1	A	99	VAL	CA-CB-CG1	-5.89	102.07	110.90	8	1
1	A	144	ARG	N-CA-C	5.88	126.86	111.00	7	1
1	A	69	ALA	C-N-CA	5.86	136.35	121.70	1	1
1	A	137	SER	N-CA-C	-5.85	95.21	111.00	9	1
1	A	77	ARG	CB-CA-C	-5.83	98.74	110.40	6	1
1	A	121	ILE	N-CA-C	5.80	126.65	111.00	7	2
1	A	72	GLY	O-C-N	5.76	131.91	122.70	7	2
1	A	108	VAL	C-N-CA	5.73	136.03	121.70	7	2
1	A	91	VAL	CA-C-N	-5.71	104.78	116.20	6	1
1	A	148	LYS	N-CA-C	-5.70	95.61	111.00	5	1
1	A	56	LYS	CA-C-N	-5.70	104.67	117.20	8	1
1	A	128	LEU	N-CA-C	-5.69	95.63	111.00	5	1
1	A	122	LEU	CA-CB-CG	-5.68	102.22	115.30	3	1
1	A	135	GLU	C-N-CA	5.67	135.87	121.70	4	1
1	A	109	TYR	N-CA-C	5.66	126.27	111.00	7	1
1	A	86	VAL	CA-CB-CG2	-5.65	102.42	110.90	5	1
1	A	128	LEU	CB-CA-C	5.65	120.94	110.20	4	2
1	A	145	LEU	CB-CG-CD1	-5.64	101.41	111.00	8	2
1	A	53	PHE	CA-C-N	-5.63	104.81	117.20	6	1
1	A	71	ALA	CA-C-N	-5.62	104.97	116.20	1	1
1	A	136	LEU	CB-CA-C	5.61	120.87	110.20	4	1
1	A	67	GLU	O-C-N	5.61	131.68	122.70	7	1
1	A	74	MET	O-C-N	5.61	131.67	122.70	6	1
1	A	76	THR	CA-C-N	-5.56	104.96	117.20	7	2
1	A	40	PHE	CA-CB-CG	-5.51	100.67	113.90	8	1
1	A	49	LEU	CA-C-N	-5.50	105.09	117.20	7	3
1	A	118	LEU	N-CA-CB	-5.50	99.39	110.40	4	3
1	A	138	ILE	CA-CB-CG1	-5.49	100.56	111.00	5	1
1	A	90	ASP	CA-C-N	-5.49	105.12	117.20	4	1
1	A	66	ILE	N-CA-CB	-5.48	98.20	110.80	6	1
1	A	140	CYS	CA-C-N	-5.47	105.16	117.20	8	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
1	A	127	LYS	C-N-CA	-5.46	108.04	121.70	6	1
1	A	60	GLU	N-CA-CB	-5.45	100.78	110.60	6	3
1	A	83	ALA	C-N-CA	5.45	135.33	121.70	6	1
1	A	61	LEU	N-CA-CB	-5.45	99.50	110.40	6	1
1	A	122	LEU	CB-CG-CD2	-5.45	101.74	111.00	8	1
1	A	145	LEU	C-N-CA	5.45	135.31	121.70	7	1
1	A	48	GLN	N-CA-CB	-5.44	100.81	110.60	6	2
1	A	135	GLU	O-C-N	5.42	131.38	122.70	5	1
1	A	109	TYR	CB-CA-C	5.42	121.23	110.40	4	2
1	A	122	LEU	CB-CA-C	-5.41	99.91	110.20	7	2
1	A	127	LYS	CA-CB-CG	-5.41	101.50	113.40	3	1
1	A	61	LEU	CB-CA-C	5.41	120.47	110.20	6	1
1	A	116	TRP	N-CA-C	5.41	125.60	111.00	7	1
1	A	50	HIS	N-CA-CB	-5.38	100.92	110.60	3	1
1	A	140	CYS	O-C-N	5.36	131.27	122.70	7	1
1	A	66	ILE	O-C-N	5.34	131.25	122.70	7	1
1	A	105	PRO	N-CA-C	5.32	125.93	112.10	8	1
1	A	129	PHE	CA-C-O	5.31	131.25	120.10	4	1
1	A	64	LEU	CA-C-N	-5.30	105.53	117.20	5	2
1	A	84	SER	N-CA-C	-5.28	96.74	111.00	7	1
1	A	70	VAL	CA-C-N	-5.25	105.65	117.20	2	2
1	A	128	LEU	CD1-CG-CD2	5.25	126.26	110.50	8	1
1	A	64	LEU	O-C-N	5.25	131.10	122.70	7	1
1	A	118	LEU	N-CA-C	5.24	125.15	111.00	6	1
1	A	49	LEU	CA-C-O	5.22	131.06	120.10	3	2
1	A	136	LEU	CB-CG-CD2	-5.16	102.22	111.00	8	1
1	A	82	LYS	N-CA-C	-5.15	97.09	111.00	7	1
1	A	50	HIS	CA-CB-CG	-5.13	104.87	113.60	1	2
1	A	125	LYS	N-CA-CB	-5.12	101.38	110.60	6	1
1	A	97	LEU	CA-C-N	-5.11	105.96	117.20	7	1
1	A	148	LYS	N-CA-CB	-5.09	101.45	110.60	6	1
1	A	76	THR	OG1-CB-CG2	-5.08	98.32	110.00	3	1
1	A	68	VAL	CA-C-O	5.06	130.72	120.10	2	1
1	A	76	THR	N-CA-CB	-5.03	100.74	110.30	2	1
1	A	74	MET	N-CA-CB	5.03	119.66	110.60	6	1
1	A	93	GLY	N-CA-C	-5.03	100.53	113.10	4	1
1	A	52	GLU	N-CA-C	5.03	124.57	111.00	7	1

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	42	ARG	Sidechain	9
1	A	77	ARG	Sidechain	9
1	A	78	ARG	Sidechain	9
1	A	94	ARG	Sidechain	9
1	A	101	ARG	Sidechain	9
1	A	144	ARG	Sidechain	9
1	A	41	ARG	Sidechain	8
1	A	73	ARG	Sidechain	7
1	A	104	LEU	Peptide	1

6.2 Too-close contacts (i)

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in each chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen atoms added and optimized by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes averaged over the ensemble.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	841	839	838	129±21
All	All	7569	7550	7538	1162

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 77.

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:ARG:CB	1:A:77:ARG:CG	1.61	1.76	3	1
1:A:70:VAL:HA	1:A:124:ALA:H	1.03	1.04	1	1
1:A:124:ALA:HB3	1:A:143:LEU:HA	0.98	1.34	7	1
1:A:44:HIS:CD2	1:A:69:ALA:HB3	0.97	1.93	3	7
1:A:44:HIS:CB	1:A:69:ALA:HA	0.95	1.91	6	1
1:A:77:ARG:CG	1:A:77:ARG:CA	0.93	2.47	3	1
1:A:44:HIS:HD2	1:A:69:ALA:HB3	0.91	1.25	8	5
1:A:53:PHE:CE1	1:A:61:LEU:HD12	0.90	2.00	5	6
1:A:70:VAL:HG12	1:A:71:ALA:N	0.89	1.79	1	1
1:A:116:TRP:HB3	1:A:122:LEU:HD11	0.87	1.42	7	3
1:A:122:LEU:HG	1:A:145:LEU:HD13	0.86	1.45	1	1
1:A:124:ALA:CB	1:A:143:LEU:HA	0.86	2.00	7	1
1:A:146:LEU:HD23	1:A:146:LEU:N	0.85	1.85	5	1
1:A:53:PHE:CZ	1:A:61:LEU:HD11	0.85	2.07	6	1
1:A:53:PHE:CE2	1:A:61:LEU:HD12	0.84	2.07	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:PHE:CE2	1:A:128:LEU:HD11	0.83	2.07	3	1
1:A:77:ARG:CB	1:A:86:VAL:HA	0.83	2.04	5	1
1:A:40:PHE:CZ	1:A:44:HIS:CE1	0.83	2.67	7	5
1:A:116:TRP:CD2	1:A:145:LEU:HD11	0.82	2.09	1	4
1:A:70:VAL:HA	1:A:124:ALA:N	0.82	1.89	1	1
1:A:44:HIS:CD2	1:A:69:ALA:CB	0.82	2.62	7	7
1:A:122:LEU:CG	1:A:145:LEU:HD13	0.81	2.05	1	1
1:A:40:PHE:CE1	1:A:44:HIS:CE1	0.81	2.68	4	5
1:A:124:ALA:HB3	1:A:144:ARG:N	0.81	1.90	7	1
1:A:146:LEU:HD23	1:A:146:LEU:H	0.81	1.34	5	1
1:A:116:TRP:CZ2	1:A:145:LEU:HG	0.80	2.11	1	3
1:A:44:HIS:HB2	1:A:69:ALA:HA	0.79	1.55	6	1
1:A:116:TRP:CG	1:A:145:LEU:HB3	0.79	2.12	5	1
1:A:124:ALA:HB3	1:A:144:ARG:H	0.79	1.38	7	1
1:A:116:TRP:CG	1:A:145:LEU:HD11	0.78	2.13	3	4
1:A:53:PHE:CD1	1:A:61:LEU:HD12	0.78	2.13	4	3
1:A:77:ARG:HG3	1:A:78:ARG:N	0.77	1.95	3	1
1:A:129:PHE:O	1:A:136:LEU:HB3	0.77	1.80	6	3
1:A:44:HIS:CD2	1:A:69:ALA:HB2	0.76	2.15	7	4
1:A:89:GLN:HB2	1:A:94:ARG:CG	0.76	2.11	1	1
1:A:116:TRP:CD2	1:A:145:LEU:HB3	0.76	2.16	5	2
1:A:121:ILE:O	1:A:146:LEU:HG	0.75	1.81	3	2
1:A:146:LEU:CG	1:A:147:THR:H	0.75	1.91	6	3
1:A:44:HIS:CG	1:A:68:VAL:HB	0.74	2.18	1	2
1:A:44:HIS:CE1	1:A:68:VAL:HA	0.74	2.17	4	4
1:A:53:PHE:CE2	1:A:128:LEU:CD1	0.74	2.70	8	2
1:A:69:ALA:CB	1:A:124:ALA:O	0.74	2.35	4	6
1:A:69:ALA:HB2	1:A:125:LYS:HA	0.73	1.58	4	1
1:A:146:LEU:C	1:A:146:LEU:CD1	0.73	2.57	1	2
1:A:44:HIS:HB2	1:A:68:VAL:HB	0.73	1.57	1	1
1:A:89:GLN:HG2	1:A:94:ARG:CG	0.73	2.13	4	2
1:A:121:ILE:N	1:A:146:LEU:HD21	0.73	1.99	6	1
1:A:74:MET:CB	1:A:88:LEU:HA	0.73	2.14	3	8
1:A:146:LEU:N	1:A:146:LEU:CD2	0.73	2.51	5	1
1:A:116:TRP:CD1	1:A:116:TRP:N	0.72	2.57	5	6
1:A:116:TRP:CB	1:A:122:LEU:HD11	0.71	2.15	6	3
1:A:44:HIS:ND1	1:A:68:VAL:HB	0.71	1.99	1	1
1:A:146:LEU:CG	1:A:147:THR:N	0.71	2.53	6	2
1:A:40:PHE:CE1	1:A:69:ALA:HB2	0.71	2.20	8	1
1:A:44:HIS:HB3	1:A:68:VAL:HG12	0.71	1.60	3	1
1:A:53:PHE:CE2	1:A:61:LEU:CD1	0.70	2.74	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:PHE:CD2	1:A:128:LEU:HD21	0.70	2.21	1	5
1:A:77:ARG:CG	1:A:78:ARG:N	0.70	2.54	3	2
1:A:116:TRP:CE2	1:A:145:LEU:CD1	0.70	2.73	7	2
1:A:121:ILE:N	1:A:146:LEU:HD11	0.70	2.01	3	2
1:A:77:ARG:CA	1:A:86:VAL:HA	0.70	2.16	5	1
1:A:53:PHE:CD2	1:A:128:LEU:HD11	0.70	2.21	3	2
1:A:67:GLU:C	1:A:126:GLY:O	0.70	2.30	6	3
1:A:40:PHE:CD1	1:A:44:HIS:NE2	0.69	2.60	1	1
1:A:122:LEU:HD13	1:A:145:LEU:HD13	0.69	1.64	4	1
1:A:69:ALA:HA	1:A:125:LYS:CG	0.69	2.16	7	1
1:A:40:PHE:HA	1:A:44:HIS:HB3	0.69	1.64	7	4
1:A:140:CYS:SG	1:A:143:LEU:HD21	0.69	2.27	9	1
1:A:122:LEU:HD12	1:A:122:LEU:N	0.69	2.02	9	2
1:A:116:TRP:CZ2	1:A:145:LEU:CD1	0.69	2.76	7	2
1:A:144:ARG:C	1:A:145:LEU:HD22	0.69	2.08	7	1
1:A:72:GLY:O	1:A:122:LEU:HD13	0.69	1.86	7	5
1:A:85:PHE:CE1	1:A:98:TYR:CD1	0.69	2.81	2	2
1:A:124:ALA:CB	1:A:144:ARG:H	0.69	2.00	7	1
1:A:122:LEU:HG	1:A:145:LEU:HB2	0.68	1.65	2	1
1:A:53:PHE:CZ	1:A:128:LEU:HG	0.68	2.22	5	2
1:A:116:TRP:HB3	1:A:122:LEU:CD1	0.68	2.18	7	1
1:A:98:TYR:CE1	1:A:100:ALA:HB2	0.68	2.23	4	4
1:A:69:ALA:HB1	1:A:124:ALA:O	0.68	1.88	8	3
1:A:53:PHE:CE2	1:A:128:LEU:CD2	0.68	2.77	1	4
1:A:53:PHE:CE2	1:A:128:LEU:HG	0.68	2.23	5	6
1:A:120:ASP:HA	1:A:147:THR:O	0.68	1.88	9	1
1:A:113:PHE:HA	1:A:116:TRP:CD1	0.68	2.24	1	7
1:A:109:TYR:CG	1:A:110:ASN:N	0.67	2.61	2	8
1:A:121:ILE:N	1:A:146:LEU:O	0.67	2.28	4	2
1:A:76:THR:HA	1:A:87:THR:H	0.67	1.49	2	1
1:A:99:VAL:HG12	1:A:109:TYR:CD2	0.67	2.24	8	8
1:A:40:PHE:CE2	1:A:44:HIS:NE2	0.67	2.63	7	5
1:A:109:TYR:CD1	1:A:110:ASN:N	0.67	2.63	8	7
1:A:44:HIS:HB3	1:A:69:ALA:HA	0.67	1.66	6	1
1:A:77:ARG:N	1:A:86:VAL:HG22	0.67	2.05	5	1
1:A:120:ASP:HA	1:A:148:LYS:CB	0.66	2.20	5	1
1:A:40:PHE:CD2	1:A:44:HIS:CE1	0.66	2.83	1	3
1:A:49:LEU:HB3	1:A:50:HIS:CD2	0.66	2.25	2	3
1:A:53:PHE:CG	1:A:128:LEU:HD21	0.66	2.25	4	2
1:A:44:HIS:NE2	1:A:69:ALA:HB2	0.66	2.06	7	2
1:A:53:PHE:CD2	1:A:61:LEU:CD1	0.66	2.78	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:71:ALA:HB1	1:A:122:LEU:O	0.66	1.90	7	4
1:A:77:ARG:NE	1:A:85:PHE:H	0.66	1.89	7	1
1:A:77:ARG:CG	1:A:78:ARG:H	0.65	2.04	3	1
1:A:53:PHE:CE1	1:A:61:LEU:CD1	0.65	2.80	2	5
1:A:53:PHE:CE2	1:A:128:LEU:HD21	0.65	2.27	7	5
1:A:145:LEU:HD12	1:A:145:LEU:C	0.65	2.11	1	2
1:A:76:THR:HA	1:A:87:THR:N	0.65	2.07	2	1
1:A:67:GLU:CA	1:A:127:LYS:HA	0.65	2.21	6	1
1:A:116:TRP:CE2	1:A:145:LEU:HG	0.65	2.27	6	3
1:A:146:LEU:HD22	1:A:147:THR:H	0.65	1.51	3	1
1:A:77:ARG:NH1	1:A:78:ARG:N	0.64	2.45	7	1
1:A:53:PHE:CD1	1:A:61:LEU:CD1	0.64	2.80	2	5
1:A:128:LEU:HD12	1:A:135:GLU:O	0.64	1.92	7	2
1:A:44:HIS:CE1	1:A:67:GLU:O	0.64	2.50	4	5
1:A:128:LEU:CD2	1:A:128:LEU:C	0.64	2.66	3	1
1:A:42:ARG:HB2	1:A:71:ALA:HB2	0.64	1.70	8	1
1:A:69:ALA:HB2	1:A:124:ALA:O	0.64	1.93	2	4
1:A:60:GLU:O	1:A:64:LEU:HD23	0.64	1.92	8	3
1:A:44:HIS:CG	1:A:69:ALA:H	0.64	2.11	8	2
1:A:44:HIS:ND1	1:A:68:VAL:HA	0.64	2.08	7	1
1:A:146:LEU:CD1	1:A:146:LEU:H	0.63	2.06	3	1
1:A:42:ARG:CB	1:A:71:ALA:HB2	0.63	2.23	8	1
1:A:121:ILE:H	1:A:146:LEU:HD21	0.63	1.53	6	3
1:A:129:PHE:O	1:A:129:PHE:CG	0.63	2.49	6	2
1:A:121:ILE:H	1:A:146:LEU:CD2	0.63	2.06	9	3
1:A:121:ILE:O	1:A:146:LEU:HB3	0.63	1.93	7	1
1:A:116:TRP:CH2	1:A:145:LEU:HB2	0.63	2.29	9	1
1:A:71:ALA:CB	1:A:122:LEU:O	0.63	2.47	1	5
1:A:74:MET:SD	1:A:88:LEU:CA	0.63	2.87	2	2
1:A:53:PHE:CD2	1:A:61:LEU:HD11	0.63	2.29	8	1
1:A:89:GLN:CG	1:A:90:ASP:H	0.62	2.06	1	1
1:A:112:GLN:O	1:A:116:TRP:NE1	0.62	2.32	4	9
1:A:89:GLN:CG	1:A:90:ASP:N	0.62	2.62	1	1
1:A:70:VAL:CG2	1:A:124:ALA:HB3	0.62	2.24	5	5
1:A:53:PHE:CD1	1:A:128:LEU:HD21	0.62	2.29	5	2
1:A:129:PHE:O	1:A:136:LEU:CB	0.62	2.48	6	1
1:A:121:ILE:N	1:A:146:LEU:HG	0.62	2.10	8	1
1:A:40:PHE:HA	1:A:44:HIS:NE2	0.62	2.10	6	2
1:A:53:PHE:CG	1:A:61:LEU:HD21	0.62	2.30	6	1
1:A:109:TYR:O	1:A:112:GLN:HB3	0.61	1.94	2	2
1:A:53:PHE:CD1	1:A:128:LEU:HD11	0.61	2.30	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:122:LEU:N	1:A:122:LEU:CD1	0.61	2.63	9	2
1:A:107:GLY:C	1:A:109:TYR:N	0.61	2.50	1	5
1:A:49:LEU:O	1:A:52:GLU:N	0.61	2.34	8	5
1:A:44:HIS:CE1	1:A:68:VAL:CA	0.61	2.84	7	1
1:A:40:PHE:CZ	1:A:44:HIS:NE2	0.61	2.69	2	4
1:A:69:ALA:HA	1:A:125:LYS:HG3	0.61	1.71	7	1
1:A:136:LEU:C	1:A:136:LEU:CD1	0.61	2.69	5	4
1:A:64:LEU:HD12	1:A:65:ASN:N	0.61	2.10	4	2
1:A:136:LEU:C	1:A:136:LEU:HD12	0.61	2.16	2	3
1:A:89:GLN:HG2	1:A:94:ARG:CA	0.61	2.25	4	1
1:A:98:TYR:CE1	1:A:100:ALA:CB	0.61	2.84	4	2
1:A:146:LEU:HG	1:A:147:THR:N	0.60	2.10	6	1
1:A:116:TRP:CD1	1:A:145:LEU:HD11	0.60	2.31	3	2
1:A:73:ARG:HG2	1:A:74:MET:N	0.60	2.11	6	2
1:A:77:ARG:NH1	1:A:85:PHE:O	0.60	2.34	7	1
1:A:40:PHE:HE1	1:A:69:ALA:HB2	0.60	1.52	8	1
1:A:40:PHE:CG	1:A:44:HIS:NE2	0.60	2.69	3	3
1:A:107:GLY:O	1:A:109:TYR:N	0.60	2.34	1	4
1:A:77:ARG:CG	1:A:85:PHE:O	0.60	2.49	3	1
1:A:42:ARG:CG	1:A:71:ALA:HB2	0.60	2.26	8	1
1:A:44:HIS:ND1	1:A:68:VAL:HG12	0.60	2.11	3	2
1:A:77:ARG:HB2	1:A:86:VAL:HG23	0.60	1.73	3	1
1:A:79:ILE:HG23	1:A:80:MET:N	0.60	2.11	6	2
1:A:53:PHE:CE2	1:A:128:LEU:CG	0.60	2.84	1	6
1:A:120:ASP:HB2	1:A:147:THR:O	0.59	1.97	5	1
1:A:128:LEU:C	1:A:128:LEU:HD23	0.59	2.16	8	2
1:A:74:MET:SD	1:A:88:LEU:C	0.59	2.81	2	2
1:A:120:ASP:N	1:A:147:THR:HA	0.59	2.12	5	1
1:A:53:PHE:CD2	1:A:135:GLU:HG2	0.59	2.33	6	1
1:A:68:VAL:O	1:A:125:LYS:CB	0.59	2.50	7	1
1:A:112:GLN:C	1:A:116:TRP:NE1	0.59	2.56	8	6
1:A:44:HIS:CB	1:A:68:VAL:HB	0.59	2.27	1	1
1:A:77:ARG:HG3	1:A:78:ARG:H	0.59	1.58	3	1
1:A:121:ILE:C	1:A:146:LEU:HG	0.59	2.18	3	1
1:A:77:ARG:CZ	1:A:78:ARG:H	0.59	2.11	7	1
1:A:143:LEU:O	1:A:144:ARG:CB	0.59	2.51	7	1
1:A:49:LEU:HD23	1:A:50:HIS:N	0.59	2.13	4	1
1:A:44:HIS:CD2	1:A:70:VAL:HG23	0.58	2.33	1	1
1:A:70:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB3	0.58	1.74	5	2
1:A:109:TYR:CE1	1:A:110:ASN:HB3	0.58	2.32	8	3
1:A:89:GLN:CD	1:A:90:ASP:H	0.58	2.00	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:122:LEU:HB3	1:A:145:LEU:CD1	0.58	2.28	4	1
1:A:74:MET:SD	1:A:75:MET:N	0.58	2.76	7	2
1:A:89:GLN:HB2	1:A:94:ARG:HG3	0.58	1.74	1	1
1:A:85:PHE:O	1:A:86:VAL:HG23	0.58	1.99	2	3
1:A:116:TRP:CE2	1:A:145:LEU:HD13	0.58	2.34	2	1
1:A:66:ILE:HG22	1:A:68:VAL:HG13	0.58	1.76	3	1
1:A:121:ILE:H	1:A:146:LEU:HD11	0.58	1.57	3	2
1:A:79:ILE:HG22	1:A:84:SER:HA	0.58	1.74	6	2
1:A:53:PHE:CD1	1:A:61:LEU:HD21	0.58	2.33	6	1
1:A:116:TRP:CZ2	1:A:145:LEU:HD11	0.58	2.34	7	1
1:A:116:TRP:CZ2	1:A:145:LEU:HB2	0.58	2.34	9	1
1:A:146:LEU:CD2	1:A:147:THR:H	0.58	2.12	3	2
1:A:121:ILE:C	1:A:122:LEU:HD12	0.58	2.18	9	1
1:A:122:LEU:CD1	1:A:122:LEU:N	0.57	2.66	1	3
1:A:41:ARG:O	1:A:69:ALA:HB3	0.57	1.99	5	4
1:A:49:LEU:HD11	1:A:128:LEU:HD21	0.57	1.75	2	2
1:A:53:PHE:CD2	1:A:61:LEU:HD21	0.57	2.34	6	1
1:A:143:LEU:O	1:A:144:ARG:HB2	0.57	1.99	7	1
1:A:73:ARG:NE	1:A:116:TRP:HB2	0.57	2.15	1	1
1:A:110:ASN:HA	1:A:113:PHE:CD2	0.57	2.34	7	3
1:A:85:PHE:CE2	1:A:98:TYR:CD2	0.57	2.93	3	1
1:A:109:TYR:C	1:A:111:GLU:N	0.57	2.55	8	6
1:A:146:LEU:C	1:A:146:LEU:HD13	0.57	2.18	1	2
1:A:76:THR:OG1	1:A:86:VAL:HG22	0.57	2.00	2	1
1:A:148:LYS:HG3	1:A:149:ALA:N	0.57	2.15	5	1
1:A:44:HIS:HD2	1:A:70:VAL:HG23	0.57	1.59	1	1
1:A:44:HIS:CE1	1:A:68:VAL:N	0.57	2.73	7	1
1:A:83:ALA:HB2	1:A:101:ARG:CG	0.57	2.30	8	1
1:A:49:LEU:HG	1:A:50:HIS:N	0.57	2.15	1	2
1:A:146:LEU:HD22	1:A:146:LEU:C	0.57	2.20	2	1
1:A:77:ARG:H	1:A:86:VAL:HG22	0.57	1.59	5	1
1:A:146:LEU:H	1:A:146:LEU:HD12	0.57	1.59	3	1
1:A:100:ALA:O	1:A:109:TYR:CD2	0.57	2.58	8	1
1:A:61:LEU:O	1:A:61:LEU:HD13	0.56	2.00	6	1
1:A:122:LEU:CD1	1:A:145:LEU:HD13	0.56	2.30	4	2
1:A:49:LEU:O	1:A:53:PHE:HB2	0.56	2.00	2	1
1:A:116:TRP:CG	1:A:145:LEU:CB	0.56	2.87	5	1
1:A:77:ARG:CZ	1:A:78:ARG:HB2	0.56	2.30	7	1
1:A:44:HIS:HB2	1:A:68:VAL:CG2	0.56	2.30	1	1
1:A:44:HIS:HB3	1:A:68:VAL:CG1	0.56	2.29	3	1
1:A:53:PHE:CE1	1:A:128:LEU:HD11	0.56	2.35	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:73:ARG:HA	1:A:88:LEU:CD2	0.56	2.30	6	1
1:A:146:LEU:HG	1:A:147:THR:H	0.56	1.61	6	1
1:A:77:ARG:NE	1:A:78:ARG:H	0.56	1.98	7	1
1:A:49:LEU:HD13	1:A:53:PHE:CD1	0.56	2.35	8	1
1:A:49:LEU:O	1:A:53:PHE:N	0.56	2.38	1	5
1:A:146:LEU:HD23	1:A:147:THR:O	0.56	1.99	9	1
1:A:108:VAL:HA	1:A:112:GLN:CG	0.56	2.31	1	1
1:A:44:HIS:HB2	1:A:69:ALA:O	0.56	2.00	8	2
1:A:124:ALA:HB3	1:A:143:LEU:CA	0.56	2.22	7	1
1:A:77:ARG:CZ	1:A:85:PHE:H	0.56	2.13	7	1
1:A:116:TRP:NE1	1:A:145:LEU:HD21	0.56	2.16	3	1
1:A:116:TRP:CE2	1:A:145:LEU:HD11	0.56	2.36	8	4
1:A:119:GLY:HA3	1:A:147:THR:HA	0.56	1.77	5	1
1:A:53:PHE:CD2	1:A:135:GLU:CG	0.56	2.89	6	1
1:A:122:LEU:CG	1:A:144:ARG:HB3	0.56	2.31	7	1
1:A:146:LEU:H	1:A:146:LEU:CD2	0.56	2.06	5	1
1:A:72:GLY:N	1:A:122:LEU:HD23	0.55	2.16	5	1
1:A:41:ARG:N	1:A:44:HIS:NE2	0.55	2.53	8	1
1:A:74:MET:SD	1:A:116:TRP:O	0.55	2.64	9	1
1:A:122:LEU:HG	1:A:145:LEU:CB	0.55	2.31	2	1
1:A:89:GLN:NE2	1:A:94:ARG:HA	0.55	2.17	4	1
1:A:40:PHE:CD1	1:A:44:HIS:CE1	0.55	2.94	9	2
1:A:98:TYR:CD2	1:A:139:HIS:CD2	0.55	2.95	7	4
1:A:42:ARG:C	1:A:44:HIS:N	0.55	2.50	1	6
1:A:44:HIS:HB2	1:A:68:VAL:CB	0.55	2.32	1	1
1:A:112:GLN:C	1:A:116:TRP:HE1	0.55	2.05	4	6
1:A:41:ARG:C	1:A:70:VAL:HB	0.55	2.21	1	1
1:A:109:TYR:O	1:A:111:GLU:N	0.55	2.39	8	4
1:A:129:PHE:O	1:A:129:PHE:CD1	0.55	2.60	6	1
1:A:89:GLN:HG3	1:A:94:ARG:HA	0.55	1.78	1	1
1:A:128:LEU:HD11	1:A:135:GLU:O	0.55	2.01	2	1
1:A:120:ASP:HB2	1:A:148:LYS:CA	0.55	2.32	5	1
1:A:120:ASP:HA	1:A:148:LYS:N	0.55	2.16	1	1
1:A:145:LEU:N	1:A:145:LEU:CD2	0.55	2.70	7	1
1:A:85:PHE:CE2	1:A:98:TYR:CE2	0.54	2.95	3	1
1:A:49:LEU:HD22	1:A:49:LEU:O	0.54	2.02	6	1
1:A:67:GLU:HA	1:A:127:LYS:HA	0.54	1.78	8	3
1:A:122:LEU:CG	1:A:145:LEU:HB2	0.54	2.33	2	1
1:A:40:PHE:CE2	1:A:44:HIS:CE1	0.54	2.95	1	3
1:A:107:GLY:C	1:A:109:TYR:H	0.54	2.05	5	3
1:A:53:PHE:CE1	1:A:128:LEU:CD2	0.54	2.91	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:LEU:HD12	1:A:66:ILE:HG21	0.54	1.80	6	1
1:A:123:GLY:H	1:A:144:ARG:HA	0.54	1.61	7	1
1:A:116:TRP:CD2	1:A:145:LEU:CD1	0.54	2.90	6	4
1:A:49:LEU:HD21	1:A:66:ILE:HG13	0.54	1.80	3	1
1:A:122:LEU:CB	1:A:145:LEU:HD13	0.54	2.32	4	1
1:A:129:PHE:CD1	1:A:129:PHE:O	0.54	2.61	4	1
1:A:108:VAL:O	1:A:112:GLN:HB2	0.54	2.03	7	2
1:A:128:LEU:HD12	1:A:129:PHE:N	0.54	2.17	2	1
1:A:119:GLY:CA	1:A:147:THR:HA	0.54	2.33	5	1
1:A:82:LYS:O	1:A:109:TYR:CZ	0.54	2.60	8	1
1:A:128:LEU:CD1	1:A:136:LEU:N	0.54	2.70	9	1
1:A:64:LEU:CD1	1:A:65:ASN:N	0.53	2.71	2	2
1:A:79:ILE:CG2	1:A:80:MET:N	0.53	2.72	6	3
1:A:49:LEU:HD22	1:A:49:LEU:C	0.53	2.24	6	3
1:A:107:GLY:O	1:A:109:TYR:CB	0.53	2.57	1	1
1:A:116:TRP:CH2	1:A:145:LEU:HG	0.53	2.38	6	2
1:A:148:LYS:CG	1:A:149:ALA:N	0.53	2.70	5	2
1:A:71:ALA:HA	1:A:122:LEU:C	0.53	2.24	2	3
1:A:126:GLY:CA	1:A:140:CYS:HA	0.53	2.33	6	1
1:A:49:LEU:O	1:A:50:HIS:C	0.53	2.44	1	3
1:A:68:VAL:N	1:A:126:GLY:O	0.53	2.41	2	7
1:A:69:ALA:C	1:A:70:VAL:HG13	0.53	2.23	3	7
1:A:121:ILE:O	1:A:146:LEU:HD22	0.53	2.03	6	1
1:A:42:ARG:NH2	1:A:42:ARG:HB2	0.53	2.18	1	1
1:A:53:PHE:CD1	1:A:61:LEU:HD11	0.53	2.39	7	2
1:A:112:GLN:O	1:A:116:TRP:CD1	0.53	2.61	3	2
1:A:42:ARG:O	1:A:43:ASP:CB	0.53	2.56	6	1
1:A:70:VAL:O	1:A:124:ALA:N	0.53	2.41	1	3
1:A:53:PHE:CZ	1:A:128:LEU:CD1	0.53	2.92	6	1
1:A:69:ALA:N	1:A:125:LYS:HA	0.53	2.19	6	1
1:A:121:ILE:N	1:A:146:LEU:CD2	0.53	2.69	6	1
1:A:77:ARG:CZ	1:A:85:PHE:O	0.53	2.56	7	1
1:A:74:MET:SD	1:A:87:THR:C	0.53	2.87	2	1
1:A:77:ARG:HB2	1:A:86:VAL:HA	0.53	1.81	2	2
1:A:77:ARG:HG2	1:A:85:PHE:H	0.53	1.63	3	1
1:A:101:ARG:H	1:A:105:PRO:HG3	0.53	1.63	6	1
1:A:116:TRP:N	1:A:116:TRP:CD2	0.53	2.72	7	1
1:A:52:GLU:C	1:A:54:ASP:H	0.53	2.06	9	1
1:A:42:ARG:HB3	1:A:71:ALA:HB3	0.53	1.80	3	1
1:A:40:PHE:CE2	1:A:67:GLU:O	0.53	2.62	8	1
1:A:53:PHE:O	1:A:61:LEU:HD11	0.53	2.04	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:42:ARG:HB3	1:A:71:ALA:CB	0.52	2.33	3	1
1:A:120:ASP:HA	1:A:148:LYS:HB3	0.52	1.81	5	1
1:A:53:PHE:CZ	1:A:61:LEU:HD21	0.52	2.39	6	1
1:A:118:LEU:C	1:A:120:ASP:H	0.52	2.06	7	1
1:A:53:PHE:CE1	1:A:61:LEU:HD21	0.52	2.39	6	1
1:A:107:GLY:O	1:A:109:TYR:HB2	0.52	2.04	1	1
1:A:40:PHE:HA	1:A:44:HIS:CG	0.52	2.39	9	4
1:A:74:MET:CG	1:A:88:LEU:HA	0.52	2.34	1	4
1:A:74:MET:HB2	1:A:88:LEU:HA	0.52	1.81	2	5
1:A:41:ARG:H	1:A:44:HIS:HB3	0.52	1.64	9	3
1:A:146:LEU:HD23	1:A:147:THR:H	0.52	1.63	9	1
1:A:67:GLU:CB	1:A:127:LYS:HA	0.52	2.35	6	1
1:A:53:PHE:CE2	1:A:128:LEU:HD13	0.52	2.38	8	1
1:A:64:LEU:HG	1:A:65:ASN:N	0.52	2.20	1	2
1:A:44:HIS:CE1	1:A:67:GLU:C	0.52	2.83	7	1
1:A:53:PHE:CE2	1:A:61:LEU:HD21	0.52	2.40	6	1
1:A:67:GLU:O	1:A:127:LYS:C	0.52	2.48	6	1
1:A:83:ALA:HA	1:A:109:TYR:CE2	0.52	2.39	3	2
1:A:41:ARG:N	1:A:44:HIS:HB3	0.52	2.19	4	2
1:A:67:GLU:HB3	1:A:126:GLY:O	0.52	2.05	6	2
1:A:49:LEU:HD21	1:A:128:LEU:CD2	0.52	2.34	2	1
1:A:144:ARG:C	1:A:145:LEU:CD2	0.51	2.77	7	1
1:A:86:VAL:HG11	1:A:113:PHE:CE2	0.51	2.40	2	5
1:A:116:TRP:CE2	1:A:145:LEU:CG	0.51	2.93	4	3
1:A:108:VAL:C	1:A:112:GLN:HB2	0.51	2.25	3	4
1:A:121:ILE:N	1:A:146:LEU:CD1	0.51	2.73	3	2
1:A:61:LEU:HD13	1:A:61:LEU:C	0.51	2.24	6	1
1:A:121:ILE:H	1:A:147:THR:C	0.51	2.09	1	1
1:A:46:SER:O	1:A:50:HIS:CD2	0.51	2.64	5	2
1:A:120:ASP:HB2	1:A:147:THR:C	0.51	2.26	5	1
1:A:70:VAL:HG23	1:A:144:ARG:CZ	0.51	2.35	7	1
1:A:77:ARG:HH21	1:A:79:ILE:HG22	0.51	1.65	7	1
1:A:53:PHE:CE2	1:A:61:LEU:HD13	0.51	2.41	8	1
1:A:82:LYS:O	1:A:83:ALA:C	0.51	2.49	5	6
1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CD2	0.51	2.74	1	1
1:A:44:HIS:CG	1:A:68:VAL:HG12	0.51	2.41	2	4
1:A:128:LEU:CD1	1:A:135:GLU:O	0.51	2.58	2	2
1:A:118:LEU:CD2	1:A:119:GLY:H	0.51	2.19	6	1
1:A:41:ARG:C	1:A:44:HIS:CD2	0.51	2.84	8	1
1:A:53:PHE:CZ	1:A:128:LEU:CD2	0.51	2.93	4	2
1:A:136:LEU:HD12	1:A:137:SER:N	0.51	2.20	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:122:LEU:HG	1:A:145:LEU:CD1	0.51	2.36	8	2
1:A:77:ARG:NH1	1:A:78:ARG:H	0.51	2.03	7	1
1:A:40:PHE:CE1	1:A:44:HIS:NE2	0.51	2.75	1	1
1:A:42:ARG:HB2	1:A:42:ARG:CZ	0.51	2.35	1	1
1:A:120:ASP:CG	1:A:146:LEU:HD11	0.51	2.26	3	1
1:A:122:LEU:HG	1:A:145:LEU:CD2	0.51	2.36	9	1
1:A:113:PHE:CD1	1:A:143:LEU:HD21	0.50	2.41	6	1
1:A:44:HIS:CD2	1:A:69:ALA:O	0.50	2.64	1	1
1:A:49:LEU:HD13	1:A:53:PHE:CB	0.50	2.36	2	1
1:A:121:ILE:H	1:A:146:LEU:CD1	0.50	2.19	3	2
1:A:117:ASP:HB2	1:A:118:LEU:HG	0.50	1.83	4	1
1:A:118:LEU:CD1	1:A:119:GLY:H	0.50	2.19	4	1
1:A:116:TRP:CG	1:A:122:LEU:HD11	0.50	2.41	8	2
1:A:82:LYS:O	1:A:109:TYR:CE2	0.50	2.65	2	2
1:A:129:PHE:CD1	1:A:139:HIS:HB2	0.50	2.40	1	7
1:A:77:ARG:HB2	1:A:85:PHE:O	0.50	2.05	2	2
1:A:49:LEU:HD11	1:A:128:LEU:CD2	0.50	2.36	7	1
1:A:49:LEU:HD13	1:A:53:PHE:HB2	0.50	1.83	2	1
1:A:121:ILE:O	1:A:146:LEU:HD12	0.50	2.06	3	2
1:A:79:ILE:CG2	1:A:84:SER:HA	0.50	2.37	7	1
1:A:121:ILE:O	1:A:146:LEU:CD1	0.50	2.59	3	2
1:A:109:TYR:C	1:A:111:GLU:H	0.50	2.09	8	2
1:A:74:MET:HB3	1:A:88:LEU:HA	0.50	1.83	5	2
1:A:120:ASP:HB2	1:A:148:LYS:HA	0.50	1.84	5	1
1:A:122:LEU:HG	1:A:145:LEU:HD11	0.50	1.82	6	1
1:A:89:GLN:HB2	1:A:94:ARG:CB	0.50	2.36	1	1
1:A:42:ARG:O	1:A:43:ASP:C	0.50	2.47	1	1
1:A:76:THR:HG22	1:A:87:THR:CB	0.50	2.37	5	1
1:A:123:GLY:N	1:A:144:ARG:HA	0.50	2.22	7	1
1:A:146:LEU:HD23	1:A:147:THR:N	0.50	2.22	9	1
1:A:74:MET:CG	1:A:75:MET:H	0.49	2.17	8	2
1:A:129:PHE:CE1	1:A:139:HIS:HB2	0.49	2.42	6	2
1:A:61:LEU:O	1:A:64:LEU:HG	0.49	2.07	6	1
1:A:116:TRP:CE2	1:A:145:LEU:HD21	0.49	2.42	3	1
1:A:121:ILE:CG2	1:A:122:LEU:N	0.49	2.75	3	2
1:A:62:GLU:HA	1:A:65:ASN:HB3	0.49	1.83	1	2
1:A:112:GLN:O	1:A:116:TRP:CE2	0.49	2.65	2	4
1:A:44:HIS:CG	1:A:69:ALA:HB3	0.49	2.38	3	1
1:A:77:ARG:HA	1:A:77:ARG:HE	0.49	1.67	3	1
1:A:77:ARG:N	1:A:87:THR:H	0.49	2.05	5	1
1:A:122:LEU:HA	1:A:145:LEU:CB	0.49	2.37	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:42:ARG:CB	1:A:71:ALA:HB3	0.49	2.38	3	1
1:A:50:HIS:N	1:A:50:HIS:CD2	0.49	2.80	3	1
1:A:70:VAL:O	1:A:144:ARG:CD	0.49	2.61	7	1
1:A:146:LEU:CD2	1:A:147:THR:N	0.49	2.74	9	1
1:A:122:LEU:N	1:A:122:LEU:HD12	0.49	2.23	7	3
1:A:116:TRP:CD2	1:A:116:TRP:N	0.49	2.68	8	2
1:A:78:ARG:HA	1:A:84:SER:HB3	0.49	1.83	5	1
1:A:120:ASP:N	1:A:147:THR:C	0.49	2.65	5	1
1:A:44:HIS:CB	1:A:69:ALA:H	0.49	2.20	8	1
1:A:116:TRP:NE1	1:A:145:LEU:HD13	0.49	2.23	9	1
1:A:70:VAL:CA	1:A:124:ALA:H	0.49	1.97	1	1
1:A:89:GLN:HB2	1:A:94:ARG:CA	0.49	2.37	1	1
1:A:77:ARG:HB3	1:A:85:PHE:O	0.49	2.07	6	1
1:A:74:MET:SD	1:A:75:MET:HG2	0.49	2.48	1	1
1:A:76:THR:CG2	1:A:87:THR:HB	0.49	2.38	5	1
1:A:97:LEU:HD23	1:A:97:LEU:N	0.49	2.23	6	4
1:A:53:PHE:CE1	1:A:128:LEU:CD1	0.49	2.95	6	1
1:A:44:HIS:CD2	1:A:69:ALA:H	0.49	2.26	4	2
1:A:71:ALA:HA	1:A:122:LEU:O	0.49	2.08	6	3
1:A:73:ARG:CG	1:A:74:MET:N	0.49	2.75	6	1
1:A:86:VAL:HB	1:A:99:VAL:CG2	0.49	2.37	6	1
1:A:50:HIS:CD2	1:A:50:HIS:N	0.48	2.81	2	1
1:A:89:GLN:HG3	1:A:93:GLY:H	0.48	1.68	4	1
1:A:120:ASP:CG	1:A:146:LEU:HD12	0.48	2.29	4	1
1:A:120:ASP:CB	1:A:147:THR:O	0.48	2.60	5	1
1:A:53:PHE:CZ	1:A:61:LEU:CD1	0.48	2.92	6	1
1:A:53:PHE:CE1	1:A:61:LEU:CD2	0.48	2.95	6	1
1:A:43:ASP:N	1:A:69:ALA:O	0.48	2.46	7	1
1:A:121:ILE:O	1:A:146:LEU:CA	0.48	2.61	7	1
1:A:121:ILE:O	1:A:146:LEU:CB	0.48	2.60	7	1
1:A:99:VAL:CG1	1:A:109:TYR:CD2	0.48	2.96	9	6
1:A:53:PHE:CD1	1:A:128:LEU:CD2	0.48	2.96	5	2
1:A:120:ASP:HB2	1:A:147:THR:HA	0.48	1.84	1	1
1:A:86:VAL:CG1	1:A:87:THR:N	0.48	2.76	8	2
1:A:77:ARG:HA	1:A:77:ARG:NE	0.48	2.23	3	1
1:A:40:PHE:HA	1:A:44:HIS:CE1	0.48	2.42	6	1
1:A:73:ARG:HA	1:A:88:LEU:HD23	0.48	1.85	6	1
1:A:122:LEU:CD1	1:A:145:LEU:CD1	0.48	2.91	1	1
1:A:69:ALA:HB1	1:A:70:VAL:HG13	0.48	1.84	6	1
1:A:40:PHE:CE1	1:A:125:LYS:HB2	0.48	2.44	3	1
1:A:117:ASP:HB2	1:A:118:LEU:HD22	0.48	1.85	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:VAL:O	1:A:125:LYS:HB2	0.48	2.09	7	1
1:A:50:HIS:CD2	1:A:50:HIS:H	0.48	2.27	3	1
1:A:146:LEU:CD2	1:A:146:LEU:H	0.48	2.22	6	1
1:A:44:HIS:ND1	1:A:68:VAL:CA	0.48	2.77	7	1
1:A:46:SER:O	1:A:48:GLN:N	0.48	2.47	8	1
1:A:146:LEU:CD1	1:A:147:THR:O	0.48	2.61	3	1
1:A:53:PHE:CD1	1:A:61:LEU:CD2	0.48	2.96	6	1
1:A:146:LEU:C	1:A:146:LEU:HD12	0.48	2.29	7	2
1:A:122:LEU:HB3	1:A:145:LEU:HD12	0.48	1.86	4	1
1:A:120:ASP:N	1:A:147:THR:CA	0.48	2.76	5	1
1:A:122:LEU:CA	1:A:146:LEU:HD21	0.48	2.39	5	1
1:A:112:GLN:O	1:A:115:LYS:N	0.48	2.46	6	5
1:A:125:LYS:HG2	1:A:126:GLY:N	0.48	2.24	3	3
1:A:116:TRP:CE3	1:A:116:TRP:HA	0.48	2.43	4	2
1:A:74:MET:SD	1:A:87:THR:O	0.48	2.72	5	1
1:A:89:GLN:CB	1:A:94:ARG:HG3	0.47	2.39	2	1
1:A:77:ARG:O	1:A:86:VAL:CG2	0.47	2.62	5	1
1:A:40:PHE:CE2	1:A:44:HIS:HE1	0.47	2.27	1	1
1:A:97:LEU:HB2	1:A:140:CYS:SG	0.47	2.49	7	1
1:A:123:GLY:H	1:A:144:ARG:C	0.47	2.12	7	1
1:A:143:LEU:C	1:A:144:ARG:HG2	0.47	2.30	7	1
1:A:75:MET:SD	1:A:89:GLN:NE2	0.47	2.86	9	1
1:A:40:PHE:CG	1:A:44:HIS:CE1	0.47	3.02	1	1
1:A:121:ILE:N	1:A:147:THR:C	0.47	2.67	1	1
1:A:140:CYS:SG	1:A:143:LEU:HD11	0.47	2.49	3	1
1:A:138:ILE:CG2	1:A:139:HIS:N	0.47	2.77	7	1
1:A:118:LEU:C	1:A:120:ASP:N	0.47	2.67	8	1
1:A:116:TRP:CD1	1:A:145:LEU:HB3	0.47	2.42	5	1
1:A:69:ALA:C	1:A:70:VAL:CG1	0.47	2.83	8	4
1:A:124:ALA:HB3	1:A:143:LEU:C	0.47	2.30	7	1
1:A:98:TYR:CD1	1:A:100:ALA:HB2	0.47	2.44	4	2
1:A:112:GLN:CG	1:A:145:LEU:HD11	0.47	2.39	2	1
1:A:146:LEU:HD22	1:A:146:LEU:O	0.47	2.10	2	1
1:A:77:ARG:CB	1:A:86:VAL:CA	0.47	2.86	5	1
1:A:40:PHE:CZ	1:A:68:VAL:HG12	0.47	2.44	6	1
1:A:89:GLN:NE2	1:A:93:GLY:O	0.47	2.48	1	2
1:A:89:GLN:CD	1:A:90:ASP:N	0.47	2.68	4	1
1:A:64:LEU:O	1:A:65:ASN:C	0.47	2.52	7	2
1:A:121:ILE:O	1:A:146:LEU:CD2	0.47	2.63	6	2
1:A:46:SER:HA	1:A:49:LEU:HD23	0.47	1.86	3	1
1:A:53:PHE:HE2	1:A:128:LEU:CD2	0.47	2.23	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:PHE:CE1	1:A:128:LEU:HD23	0.47	2.44	4	2
1:A:143:LEU:HD12	1:A:143:LEU:N	0.47	2.24	8	2
1:A:146:LEU:CD1	1:A:146:LEU:N	0.47	2.77	3	1
1:A:43:ASP:H	1:A:69:ALA:C	0.46	2.13	7	1
1:A:77:ARG:NH1	1:A:78:ARG:CG	0.46	2.78	7	1
1:A:123:GLY:O	1:A:124:ALA:HB2	0.46	2.10	7	1
1:A:140:CYS:SG	1:A:143:LEU:CD2	0.46	3.02	9	1
1:A:108:VAL:HA	1:A:112:GLN:HG2	0.46	1.86	1	1
1:A:75:MET:O	1:A:76:THR:O	0.46	2.33	2	1
1:A:77:ARG:CB	1:A:85:PHE:O	0.46	2.64	6	2
1:A:77:ARG:CG	1:A:77:ARG:C	0.46	2.84	3	1
1:A:44:HIS:CD2	1:A:69:ALA:N	0.46	2.84	4	1
1:A:40:PHE:CE2	1:A:68:VAL:HG11	0.46	2.44	6	1
1:A:112:GLN:HG3	1:A:116:TRP:HZ2	0.46	1.71	1	1
1:A:64:LEU:CD1	1:A:64:LEU:C	0.46	2.83	2	2
1:A:61:LEU:O	1:A:64:LEU:HD12	0.46	2.11	4	1
1:A:42:ARG:CB	1:A:71:ALA:H	0.46	2.23	6	1
1:A:116:TRP:CE2	1:A:145:LEU:CB	0.46	2.99	9	1
1:A:53:PHE:CZ	1:A:128:LEU:CG	0.46	2.99	4	1
1:A:122:LEU:HB3	1:A:144:ARG:HB3	0.46	1.86	7	1
1:A:98:TYR:O	1:A:140:CYS:N	0.46	2.48	6	2
1:A:137:SER:OG	1:A:138:ILE:N	0.46	2.48	3	3
1:A:49:LEU:O	1:A:49:LEU:HD22	0.46	2.11	5	2
1:A:40:PHE:CZ	1:A:68:VAL:CG1	0.46	2.99	6	1
1:A:121:ILE:CA	1:A:146:LEU:HD11	0.46	2.41	6	1
1:A:121:ILE:O	1:A:146:LEU:C	0.46	2.54	4	1
1:A:116:TRP:CE2	1:A:145:LEU:HB3	0.46	2.46	5	1
1:A:53:PHE:CE1	1:A:128:LEU:CG	0.46	2.99	6	1
1:A:77:ARG:NH1	1:A:78:ARG:CB	0.45	2.79	7	1
1:A:74:MET:SD	1:A:88:LEU:N	0.45	2.90	2	1
1:A:44:HIS:CB	1:A:68:VAL:HG12	0.45	2.35	3	1
1:A:77:ARG:N	1:A:86:VAL:HA	0.45	2.27	2	2
1:A:42:ARG:HA	1:A:69:ALA:O	0.45	2.11	6	1
1:A:112:GLN:HG2	1:A:145:LEU:HD11	0.45	1.88	7	1
1:A:118:LEU:HD22	1:A:118:LEU:H	0.45	1.72	3	2
1:A:89:GLN:CD	1:A:93:GLY:O	0.45	2.55	4	1
1:A:46:SER:HB3	1:A:49:LEU:HD12	0.45	1.89	5	1
1:A:44:HIS:HB2	1:A:69:ALA:CA	0.45	2.36	6	1
1:A:67:GLU:HA	1:A:126:GLY:O	0.45	2.11	7	1
1:A:73:ARG:HG3	1:A:116:TRP:O	0.45	2.11	7	1
1:A:121:ILE:H	1:A:146:LEU:HG	0.45	1.71	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:GLU:C	1:A:62:GLU:N	0.45	2.69	2	4
1:A:53:PHE:CD1	1:A:61:LEU:HD13	0.45	2.44	2	1
1:A:44:HIS:CG	1:A:68:VAL:HA	0.45	2.47	7	1
1:A:122:LEU:HD23	1:A:144:ARG:NE	0.45	2.26	7	1
1:A:42:ARG:CD	1:A:71:ALA:HB2	0.45	2.42	8	1
1:A:122:LEU:HD12	1:A:124:ALA:HB2	0.45	1.88	3	1
1:A:40:PHE:CE2	1:A:125:LYS:HB2	0.45	2.46	5	2
1:A:90:ASP:O	1:A:92:GLY:N	0.45	2.50	1	1
1:A:57:GLU:O	1:A:60:GLU:HB2	0.45	2.11	2	1
1:A:86:VAL:HG11	1:A:113:PHE:CD2	0.45	2.47	4	1
1:A:67:GLU:HB3	1:A:127:LYS:HA	0.45	1.87	6	1
1:A:121:ILE:CB	1:A:146:LEU:HD11	0.45	2.42	6	1
1:A:86:VAL:HG12	1:A:97:LEU:HG	0.45	1.89	9	1
1:A:109:TYR:CE1	1:A:110:ASN:CG	0.45	2.90	6	2
1:A:72:GLY:O	1:A:73:ARG:HB3	0.45	2.11	6	1
1:A:84:SER:OG	1:A:99:VAL:HB	0.45	2.11	7	1
1:A:121:ILE:O	1:A:146:LEU:CG	0.44	2.60	3	2
1:A:89:GLN:HG2	1:A:94:ARG:HA	0.44	1.88	4	1
1:A:44:HIS:N	1:A:68:VAL:HG12	0.44	2.27	7	1
1:A:61:LEU:HA	1:A:64:LEU:HD21	0.44	1.89	7	1
1:A:122:LEU:HD22	1:A:145:LEU:CD1	0.44	2.41	4	1
1:A:74:MET:HB3	1:A:87:THR:O	0.44	2.13	6	1
1:A:128:LEU:C	1:A:128:LEU:CD2	0.44	2.86	8	1
1:A:89:GLN:HG2	1:A:94:ARG:HG2	0.44	1.88	4	1
1:A:52:GLU:O	1:A:54:ASP:N	0.44	2.50	6	1
1:A:85:PHE:CE1	1:A:98:TYR:CD2	0.44	3.04	6	1
1:A:120:ASP:HB2	1:A:148:LYS:O	0.44	2.13	6	1
1:A:56:LYS:NZ	1:A:60:GLU:HB3	0.44	2.27	3	1
1:A:122:LEU:N	1:A:122:LEU:HD23	0.44	2.27	4	2
1:A:70:VAL:HG11	1:A:97:LEU:HD22	0.44	1.90	4	1
1:A:126:GLY:HA2	1:A:140:CYS:HA	0.44	1.88	6	1
1:A:66:ILE:HG12	1:A:68:VAL:HG12	0.44	1.89	1	1
1:A:40:PHE:CD2	1:A:44:HIS:NE2	0.44	2.86	3	2
1:A:146:LEU:H	1:A:146:LEU:HD22	0.44	1.73	9	1
1:A:49:LEU:C	1:A:51:ALA:N	0.44	2.67	8	2
1:A:129:PHE:CD1	1:A:129:PHE:C	0.44	2.90	6	3
1:A:62:GLU:O	1:A:63:ALA:C	0.44	2.56	6	1
1:A:70:VAL:HG23	1:A:144:ARG:NH1	0.44	2.27	7	1
1:A:79:ILE:CG2	1:A:110:ASN:ND2	0.44	2.81	1	1
1:A:89:GLN:CD	1:A:93:GLY:C	0.44	2.76	4	1
1:A:118:LEU:C	1:A:118:LEU:HD12	0.44	2.33	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:79:ILE:CG2	1:A:83:ALA:O	0.44	2.65	5	2
1:A:52:GLU:C	1:A:54:ASP:N	0.44	2.71	6	1
1:A:77:ARG:NH2	1:A:85:PHE:HB2	0.44	2.28	7	1
1:A:49:LEU:CB	1:A:50:HIS:CD2	0.43	3.01	2	2
1:A:122:LEU:HD13	1:A:145:LEU:CD1	0.43	2.38	4	1
1:A:49:LEU:CD1	1:A:66:ILE:HG21	0.43	2.43	6	1
1:A:146:LEU:HB3	1:A:147:THR:O	0.43	2.13	8	1
1:A:41:ARG:NE	1:A:41:ARG:HA	0.43	2.27	9	1
1:A:41:ARG:O	1:A:70:VAL:CB	0.43	2.66	1	1
1:A:66:ILE:HG23	1:A:128:LEU:HD23	0.43	1.89	6	1
1:A:83:ALA:HA	1:A:99:VAL:O	0.43	2.13	6	1
1:A:98:TYR:N	1:A:138:ILE:O	0.43	2.51	8	2
1:A:77:ARG:CZ	1:A:79:ILE:H	0.43	2.26	7	1
1:A:120:ASP:HB3	1:A:146:LEU:HD22	0.43	1.90	7	1
1:A:46:SER:CB	1:A:49:LEU:HD21	0.43	2.43	1	1
1:A:49:LEU:CG	1:A:50:HIS:N	0.43	2.81	1	1
1:A:70:VAL:HG12	1:A:71:ALA:H	0.43	1.62	1	1
1:A:107:GLY:O	1:A:108:VAL:C	0.43	2.56	1	1
1:A:118:LEU:HD22	1:A:118:LEU:N	0.43	2.28	2	2
1:A:118:LEU:N	1:A:118:LEU:HD13	0.43	2.27	2	3
1:A:125:LYS:CD	1:A:125:LYS:C	0.43	2.86	3	1
1:A:75:MET:SD	1:A:75:MET:O	0.43	2.76	5	1
1:A:121:ILE:HG22	1:A:146:LEU:HD13	0.43	1.90	6	1
1:A:79:ILE:O	1:A:84:SER:HB2	0.43	2.13	7	1
1:A:83:ALA:HB2	1:A:101:ARG:HG3	0.43	1.89	8	1
1:A:122:LEU:CG	1:A:145:LEU:CB	0.43	2.97	2	1
1:A:61:LEU:HD13	1:A:61:LEU:HA	0.43	1.60	5	2
1:A:121:ILE:H	1:A:146:LEU:CG	0.43	2.26	6	2
1:A:122:LEU:CB	1:A:145:LEU:CD1	0.43	2.95	4	1
1:A:42:ARG:O	1:A:42:ARG:HD3	0.43	2.14	6	1
1:A:42:ARG:CZ	1:A:42:ARG:CB	0.43	2.96	1	1
1:A:44:HIS:HD2	1:A:70:VAL:CG2	0.43	2.26	1	1
1:A:112:GLN:HG3	1:A:116:TRP:CZ2	0.43	2.48	1	1
1:A:44:HIS:HD2	1:A:69:ALA:CB	0.43	2.17	3	2
1:A:83:ALA:CA	1:A:109:TYR:CE2	0.43	3.01	3	1
1:A:119:GLY:C	1:A:149:ALA:HB3	0.43	2.34	6	1
1:A:121:ILE:HB	1:A:146:LEU:HD11	0.43	1.91	6	1
1:A:74:MET:CB	1:A:88:LEU:HD23	0.43	2.44	7	1
1:A:77:ARG:HH11	1:A:78:ARG:N	0.43	2.08	7	1
1:A:74:MET:HG3	1:A:88:LEU:HA	0.43	1.91	4	2
1:A:101:ARG:HB2	1:A:105:PRO:CB	0.43	2.44	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:ALA:O	1:A:109:TYR:CE2	0.43	2.72	8	1
1:A:108:VAL:HA	1:A:112:GLN:CB	0.43	2.44	1	1
1:A:120:ASP:HA	1:A:148:LYS:H	0.43	1.72	1	1
1:A:82:LYS:C	1:A:109:TYR:CZ	0.43	2.93	2	1
1:A:77:ARG:HG2	1:A:85:PHE:O	0.43	2.14	3	1
1:A:122:LEU:HA	1:A:145:LEU:HD13	0.43	1.91	6	1
1:A:111:GLU:O	1:A:114:LYS:HB3	0.43	2.14	9	1
1:A:128:LEU:CD1	1:A:135:GLU:C	0.42	2.88	1	1
1:A:136:LEU:C	1:A:136:LEU:HD13	0.42	2.35	6	2
1:A:42:ARG:HA	1:A:70:VAL:HA	0.42	1.91	6	1
1:A:40:PHE:HA	1:A:44:HIS:CD2	0.42	2.49	1	1
1:A:77:ARG:CA	1:A:77:ARG:CD	0.42	2.97	3	1
1:A:49:LEU:HD21	1:A:53:PHE:CD1	0.42	2.49	4	1
1:A:122:LEU:HA	1:A:146:LEU:HD21	0.42	1.90	5	1
1:A:53:PHE:CE1	1:A:128:LEU:HG	0.42	2.48	6	1
1:A:74:MET:SD	1:A:94:ARG:HD3	0.42	2.54	1	1
1:A:128:LEU:HA	1:A:137:SER:O	0.42	2.14	3	1
1:A:49:LEU:CD2	1:A:53:PHE:HB2	0.42	2.44	4	1
1:A:118:LEU:H	1:A:118:LEU:HD13	0.42	1.73	6	1
1:A:41:ARG:O	1:A:69:ALA:CB	0.42	2.68	9	1
1:A:86:VAL:HG21	1:A:99:VAL:HG21	0.42	1.92	2	1
1:A:112:GLN:O	1:A:115:LYS:CB	0.42	2.68	6	2
1:A:89:GLN:HE21	1:A:94:ARG:HA	0.42	1.73	4	1
1:A:43:ASP:O	1:A:45:THR:HG23	0.42	2.13	6	1
1:A:129:PHE:CD1	1:A:137:SER:O	0.42	2.72	6	1
1:A:69:ALA:CA	1:A:125:LYS:HB2	0.42	2.45	7	1
1:A:98:TYR:HB3	1:A:139:HIS:HA	0.42	1.91	5	3
1:A:121:ILE:HG23	1:A:122:LEU:N	0.42	2.30	1	2
1:A:116:TRP:CZ3	1:A:144:ARG:O	0.42	2.72	5	1
1:A:122:LEU:CD1	1:A:145:LEU:HD11	0.42	2.45	6	1
1:A:79:ILE:O	1:A:84:SER:CB	0.42	2.68	7	1
1:A:53:PHE:O	1:A:54:ASP:C	0.42	2.58	7	2
1:A:121:ILE:CA	1:A:146:LEU:CD1	0.42	2.97	6	1
1:A:82:LYS:N	1:A:82:LYS:HD2	0.42	2.29	7	1
1:A:100:ALA:HB2	1:A:139:HIS:NE2	0.42	2.30	9	1
1:A:129:PHE:O	1:A:135:GLU:O	0.42	2.38	1	1
1:A:72:GLY:O	1:A:122:LEU:HD23	0.42	2.14	3	1
1:A:53:PHE:CG	1:A:128:LEU:HD11	0.42	2.49	6	1
1:A:49:LEU:HA	1:A:49:LEU:HD22	0.42	1.70	7	1
1:A:77:ARG:NH1	1:A:78:ARG:HG2	0.42	2.30	7	1
1:A:135:GLU:HG3	1:A:136:LEU:H	0.42	1.75	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:MET:CB	1:A:88:LEU:HD13	0.42	2.45	5	1
1:A:89:GLN:HG3	1:A:93:GLY:N	0.42	2.29	4	1
1:A:41:ARG:O	1:A:70:VAL:HG11	0.41	2.15	1	1
1:A:67:GLU:CB	1:A:126:GLY:O	0.41	2.66	6	1
1:A:52:GLU:O	1:A:55:GLY:N	0.41	2.53	5	1
1:A:122:LEU:CG	1:A:145:LEU:HD11	0.41	2.45	6	1
1:A:69:ALA:HA	1:A:125:LYS:CB	0.41	2.44	7	1
1:A:125:LYS:CG	1:A:126:GLY:N	0.41	2.84	3	1
1:A:74:MET:N	1:A:88:LEU:HD23	0.41	2.30	7	1
1:A:122:LEU:CB	1:A:144:ARG:HB3	0.41	2.45	7	1
1:A:40:PHE:CZ	1:A:125:LYS:HG3	0.41	2.50	8	1
1:A:58:ASN:O	1:A:61:LEU:HB2	0.41	2.16	8	1
1:A:60:GLU:O	1:A:63:ALA:N	0.41	2.53	9	1
1:A:122:LEU:CA	1:A:145:LEU:HB3	0.41	2.46	2	1
1:A:77:ARG:HA	1:A:77:ARG:CD	0.41	2.45	3	1
1:A:69:ALA:O	1:A:138:ILE:CD1	0.41	2.69	5	1
1:A:86:VAL:HG22	1:A:87:THR:N	0.41	2.30	7	1
1:A:77:ARG:HB2	1:A:85:PHE:C	0.41	2.36	2	1
1:A:76:THR:O	1:A:76:THR:HG23	0.41	2.15	5	1
1:A:104:LEU:O	1:A:106:GLU:N	0.41	2.54	7	1
1:A:120:ASP:CA	1:A:147:THR:O	0.41	2.65	9	1
1:A:77:ARG:HB2	1:A:87:THR:N	0.41	2.31	5	1
1:A:112:GLN:HG2	1:A:116:TRP:HE1	0.41	1.76	5	1
1:A:72:GLY:O	1:A:73:ARG:CB	0.41	2.69	6	1
1:A:82:LYS:NZ	1:A:101:ARG:NH1	0.41	2.68	8	1
1:A:94:ARG:H	1:A:94:ARG:NE	0.41	2.12	1	1
1:A:70:VAL:O	1:A:70:VAL:HG23	0.41	2.16	4	2
1:A:108:VAL:O	1:A:112:GLN:NE2	0.41	2.54	3	1
1:A:146:LEU:HD22	1:A:147:THR:N	0.41	2.25	3	1
1:A:77:ARG:O	1:A:86:VAL:HG23	0.41	2.16	5	1
1:A:67:GLU:HB3	1:A:126:GLY:C	0.41	2.36	7	1
1:A:88:LEU:HD22	1:A:144:ARG:NH1	0.41	2.30	7	1
1:A:97:LEU:HD13	1:A:140:CYS:SG	0.41	2.56	7	1
1:A:122:LEU:HD12	1:A:145:LEU:CD1	0.41	2.46	1	1
1:A:90:ASP:O	1:A:91:VAL:C	0.41	2.59	2	1
1:A:89:GLN:HG2	1:A:94:ARG:CB	0.41	2.46	4	1
1:A:109:TYR:CZ	1:A:110:ASN:ND2	0.41	2.88	5	1
1:A:120:ASP:CB	1:A:147:THR:C	0.41	2.89	5	1
1:A:41:ARG:O	1:A:44:HIS:CD2	0.41	2.74	6	1
1:A:74:MET:CG	1:A:75:MET:N	0.41	2.83	8	1
1:A:129:PHE:C	1:A:135:GLU:O	0.41	2.59	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:GLN:CG	1:A:94:ARG:CG	0.41	2.95	4	1
1:A:112:GLN:O	1:A:113:PHE:C	0.41	2.59	5	1
1:A:119:GLY:C	1:A:147:THR:HA	0.41	2.36	5	1
1:A:119:GLY:HA3	1:A:149:ALA:HB3	0.41	1.92	6	1
1:A:83:ALA:HB2	1:A:101:ARG:HG2	0.41	1.92	8	1
1:A:99:VAL:HG12	1:A:109:TYR:HD2	0.40	1.77	2	1
1:A:148:LYS:HB3	1:A:148:LYS:NZ	0.40	2.31	2	1
1:A:121:ILE:N	1:A:147:THR:O	0.40	2.53	4	1
1:A:77:ARG:NH2	1:A:78:ARG:HB2	0.40	2.31	7	1
1:A:46:SER:O	1:A:47:ASP:C	0.40	2.58	1	1
1:A:122:LEU:HG	1:A:145:LEU:HD22	0.40	1.92	2	1
1:A:42:ARG:HB2	1:A:71:ALA:CB	0.40	2.43	8	1
1:A:86:VAL:CG1	1:A:97:LEU:HG	0.40	2.47	9	1
1:A:122:LEU:HG	1:A:145:LEU:HD23	0.40	1.92	9	1
1:A:50:HIS:CE1	1:A:136:LEU:HD21	0.40	2.51	8	1
1:A:74:MET:HG2	1:A:88:LEU:HA	0.40	1.92	8	1
1:A:109:TYR:CE1	1:A:110:ASN:CB	0.40	3.02	8	1
1:A:113:PHE:CA	1:A:116:TRP:CD1	0.40	2.99	1	1
1:A:135:GLU:HG2	1:A:136:LEU:H	0.40	1.75	1	1
1:A:88:LEU:CD1	1:A:97:LEU:HD11	0.40	2.47	3	1
1:A:116:TRP:CE2	1:A:145:LEU:CD2	0.40	3.05	3	1
1:A:41:ARG:O	1:A:70:VAL:CG1	0.40	2.69	1	1
1:A:53:PHE:HE2	1:A:128:LEU:HD21	0.40	1.77	3	1
1:A:71:ALA:C	1:A:122:LEU:CD2	0.40	2.90	5	1
1:A:82:LYS:HD3	1:A:82:LYS:N	0.40	2.31	6	1
1:A:88:LEU:HD22	1:A:144:ARG:CZ	0.40	2.47	7	1
1:A:44:HIS:O	1:A:45:THR:OG1	0.40	2.39	8	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	103/120 (86%)	69±5 (67±5%)	22±3 (22±2%)	12±3 (12±3%)	1 7
All	All	927/1080 (86%)	618 (67%)	200 (22%)	109 (12%)	1 7

All 40 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	65	ASN	9
1	A	44	HIS	8
1	A	83	ALA	6
1	A	75	MET	6
1	A	54	ASP	5
1	A	91	VAL	5
1	A	106	GLU	5
1	A	109	TYR	5
1	A	56	LYS	4
1	A	136	LEU	4
1	A	110	ASN	4
1	A	46	SER	3
1	A	108	VAL	3
1	A	148	LYS	3
1	A	53	PHE	3
1	A	69	ALA	2
1	A	121	ILE	2
1	A	78	ARG	2
1	A	82	LYS	2
1	A	147	THR	2
1	A	79	ILE	2
1	A	120	ASP	2
1	A	118	LEU	2
1	A	47	ASP	2
1	A	73	ARG	2
1	A	105	PRO	2
1	A	70	VAL	1
1	A	92	GLY	1
1	A	146	LEU	1
1	A	76	THR	1
1	A	57	GLU	1
1	A	74	MET	1
1	A	43	ASP	1
1	A	68	VAL	1
1	A	129	PHE	1
1	A	125	LYS	1
1	A	144	ARG	1
1	A	45	THR	1
1	A	101	ARG	1
1	A	81	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	88/99 (89%)	62±3 (70±3%)	26±3 (30±3%)	1 17
All	All	792/891 (89%)	556 (70%)	236 (30%)	1 17

All 65 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	88	LEU	9
1	A	95	ILE	9
1	A	97	LEU	9
1	A	109	TYR	9
1	A	61	LEU	8
1	A	44	HIS	8
1	A	42	ARG	7
1	A	74	MET	7
1	A	76	THR	7
1	A	94	ARG	7
1	A	128	LEU	7
1	A	136	LEU	7
1	A	68	VAL	7
1	A	98	TYR	6
1	A	49	LEU	6
1	A	120	ASP	6
1	A	64	LEU	5
1	A	122	LEU	5
1	A	125	LYS	5
1	A	147	THR	5
1	A	118	LEU	5
1	A	53	PHE	4
1	A	73	ARG	4
1	A	78	ARG	4
1	A	121	ILE	4
1	A	146	LEU	4
1	A	77	ARG	4
1	A	89	GLN	4
1	A	90	ASP	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	82	LYS	3
1	A	145	LEU	3
1	A	110	ASN	3
1	A	137	SER	3
1	A	40	PHE	2
1	A	113	PHE	2
1	A	52	GLU	2
1	A	75	MET	2
1	A	148	LYS	2
1	A	45	THR	2
1	A	66	ILE	2
1	A	86	VAL	2
1	A	91	VAL	2
1	A	112	GLN	2
1	A	116	TRP	2
1	A	144	ARG	2
1	A	57	GLU	2
1	A	101	ARG	2
1	A	41	ARG	2
1	A	96	GLN	2
1	A	129	PHE	2
1	A	56	LYS	1
1	A	60	GLU	1
1	A	99	VAL	1
1	A	111	GLU	1
1	A	48	GLN	1
1	A	115	LYS	1
1	A	143	LEU	1
1	A	135	GLU	1
1	A	46	SER	1
1	A	65	ASN	1
1	A	127	LYS	1
1	A	104	LEU	1
1	A	138	ILE	1
1	A	84	SER	1
1	A	102	ASP	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