

Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Dec 10, 2022 – 10:03 PM EST

PDB ID : 1KTM Title : SOLUTION STRUCTURE OF FAT DOMAIN OF FOCAL ADHESION KI-NASE Authors : Liu, G.; Guibao, C.; Zheng, J. Deposited on : 2002-01-16

This is a Full wwPDB NMR Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.

We welcome your comments at *validation@mail.wwpdb.org* A user guide is available at https://www.wwpdb.org/validation/2017/NMRValidationReportHelp with specific help available everywhere you see the (i) symbol.

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

The following versions of software and data (see references (1)) 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	:	2.31.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.31.2

1 Overall quality at a glance (i)

The following experimental techniques were used to determine the structure: $SOLUTION\ NMR$

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

Percentile scores (ranging between 0-100) for global validation metrics of the entry are shown in the following graphic. The table shows the number of entries on which the scores are based.



Metric	$egin{array}{c} { m Whole \ archive} \ (\#{ m Entries}) \end{array}$	${f NMR} \ { m archive} \ (\#{ m Entries})$
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	Δ	120					
	A	139	17%	59%	14%	9%	



2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 25 models. Model 9 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *fewest violations*.

The following residues are included in the computation of the global validation metrics.

Well-defined (core) protein residues					
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model		
1	A:922-A:1047 (126)	0.38	9		

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 7 clusters and 2 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 11, 14
2	8, 9, 13, 17
3	19, 20, 21, 23
4	10, 15, 24
5	3, 16, 18
6	12, 22, 25
7	6, 7
Single-model clusters	4; 5



3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2215 atoms, of which 1132 are hydrogens and 0 are deuteriums.

• Molecule 1 is a protein called FOCAL ADHESION KINASE 1.

Mol	Chain	Residues	Atoms					Trace	
1	٨	120	Total	С	Η	Ν	0	S	0
1 A	139	2215	682	1132	186	207	8	0	

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference	
А	915	MET	-	initiating methionine	UNP Q00944	



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: FOCAL ADHESION KINASE 1



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





4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



4.2.3 Score per residue for model 3

\bullet Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



4.2.4 Score per residue for model 4





4.2.5 Score per residue for model 5

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



4.2.6 Score per residue for model 6

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



4.2.7 Score per residue for model 7

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



4.2.8 Score per residue for model 8





- 4.2.9 Score per residue for model 9 (medoid)
- \bullet Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



4.2.10 Score per residue for model 10



- 4.2.11 Score per residue for model 11
- \bullet Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1





- 4.2.12 Score per residue for model 12
- \bullet Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



4.2.13 Score per residue for model 13

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



4.2.14 Score per residue for model 14





- 4.2.15 Score per residue for model 15
- \bullet Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



4.2.16 Score per residue for model 16



- 4.2.17 Score per residue for model 17
- \bullet Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1





- 4.2.18 Score per residue for model 18
- \bullet Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



4.2.19 Score per residue for model 19



- 4.2.20 Score per residue for model 20
- \bullet Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1





- Score per residue for model 21 4.2.21
- Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



- Score per residue for model 22 4.2.22
- Chain A: • 9% 23% 44% 22%
- Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1

- Score per residue for model 23 4.2.23
- Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1





- 4.2.24 Score per residue for model 24
- \bullet Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



4.2.25 Score per residue for model 25



 \bullet Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

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

Of the 270 calculated structures, 25 were deposited, based on the following criterion: structures with the least restraint violations.

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

Software name	Classification	Version
DYANA	structure solution	1.5
DYANA	refinement	

No chemical shift data was provided.



6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

There are no covalent bond-length or bond-angle outliers.

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts (i)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	А	980	1035	1035	106 ± 8
All	All	24500	25875	25875	2639

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 52.

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:926:TYR:CD1	1:A:1036:LEU:HD11	1.10	1.81	23	21
1:A:962:LEU:HD11	1:A:995:LEU:HD13	1.07	1.23	9	1
1:A:943:ILE:HD11	1:A:951:TYR:CE1	1.01	1.91	15	18
1:A:962:LEU:HD13	1:A:995:LEU:HD22	1.00	1.28	2	6
1:A:926:TYR:CZ	1:A:1036:LEU:HD21	0.99	1.93	13	22
1:A:984:ILE:HD11	1:A:1039:ILE:CG1	0.96	1.89	2	17
1:A:965:LEU:O	1:A:969:VAL:HG23	0.95	1.62	16	23
1:A:1005:ALA:O	1:A:1009:VAL:HG23	0.93	1.62	6	2
1:A:994:ASP:CB	1:A:1028:LEU:HD11	0.92	1.95	23	3
1:A:943:ILE:HD11	1:A:951:TYR:CZ	0.91	2.01	3	11
1:A:962:LEU:HD22	1:A:962:LEU:O	0.91	1.64	21	3
1:A:1008:TYR:O	1:A:1011:THR:HG22	0.90	1.66	7	2
1:A:962:LEU:HD22	1:A:995:LEU:CD2	0.90	1.97	14	1
1:A:972:SER:O	1:A:976:LEU:HD22	0.90	1.67	21	18



	A h		\mathbf{D}	Mo	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:929:VAL:O	1:A:933:VAL:HG22	0.89	1.66	14	1
1:A:984:ILE:HG23	1:A:1035:LEU:HD11	0.89	1.41	22	1
1:A:925:VAL:HG21	1:A:972:SER:OG	0.87	1.68	8	2
1:A:1013:LEU:HD12	1:A:1017:TYR:CE2	0.87	2.05	12	1
1:A:962:LEU:HD22	1:A:995:LEU:HD22	0.87	1.45	14	1
1:A:962:LEU:CD1	1:A:995:LEU:HD13	0.86	1.99	9	6
1:A:998:LEU:HD13	1:A:1028:LEU:CD1	0.86	2.01	18	8
1:A:929:VAL:HG22	1:A:965:LEU:HD21	0.86	1.48	23	2
1:A:960:LEU:HD12	1:A:960:LEU:O	0.85	1.70	1	1
1:A:980:THR:OG1	1:A:1038:VAL:HG12	0.85	1.69	24	6
1:A:1010:MET:CE	1:A:1011:THR:HG23	0.85	2.01	1	4
1:A:994:ASP:HB2	1:A:1028:LEU:HD11	0.85	1.49	21	3
1:A:929:VAL:HG21	1:A:1036:LEU:HD13	0.84	1.46	22	1
1:A:942:LYS:O	1:A:946:ALA:HB2	0.84	1.72	8	25
1:A:1035:LEU:O	1:A:1038:VAL:HG12	0.84	1.73	21	7
1:A:1044:LEU:HD13	1:A:1045:LYS:N	0.83	1.88	18	1
1:A:926:TYR:CD1	1:A:1036:LEU:HD21	0.83	2.08	22	13
1:A:926:TYR:CE1	1:A:1036:LEU:HD21	0.83	2.08	9	21
1:A:983:GLU:HB3	1:A:1038:VAL:HG11	0.81	1.51	22	9
1:A:980:THR:HG22	1:A:1042:ALA:CB	0.81	2.04	4	10
1:A:998:LEU:HD13	1:A:1028:LEU:HD12	0.81	1.52	18	6
1:A:962:LEU:HD13	1:A:995:LEU:HD13	0.81	1.53	18	6
1:A:980:THR:HB	1:A:1042:ALA:HB2	0.81	1.53	11	9
1:A:1008:TYR:CE2	1:A:1017:TYR:CE1	0.80	2.69	4	3
1:A:955:VAL:HG21	1:A:1002:MET:HB2	0.80	1.52	15	9
1:A:964:THR:O	1:A:968:THR:HG23	0.80	1.74	14	8
1:A:925:VAL:O	1:A:929:VAL:HG23	0.79	1.77	18	12
1:A:1008:TYR:CD2	1:A:1017:TYR:CE2	0.79	2.70	15	6
1:A:984:ILE:HD11	1:A:1039:ILE:HG12	0.79	1.55	5	12
1:A:932:LEU:C	1:A:932:LEU:HD22	0.79	1.98	5	3
1:A:962:LEU:HD13	1:A:963:ARG:N	0.79	1.92	11	3
1:A:925:VAL:HG22	1:A:968:THR:HG22	0.79	1.54	7	6
1:A:983:GLU:CB	1:A:1038:VAL:HG11	0.78	2.09	22	10
1:A:976:LEU:HD12	1:A:1042:ALA:HB3	0.78	1.54	13	4
1:A:984:ILE:HD11	1:A:1039:ILE:HG13	0.78	1.55	2	12
1:A:926:TYR:CE1	1:A:1036:LEU:HD11	0.78	2.14	23	9
1:A:926:TYR:CE2	1:A:1036:LEU:HD21	0.78	2.13	3	18
1:A:1008:TYR:CD1	1:A:1017:TYR:CE1	0.78	2.72	20	8
1:A:932:LEU:HD13	1:A:933:VAL:H	0.78	1.38	4	3
1:A:984:ILE:HG23	1:A:1035:LEU:CD1	0.78	2.09	22	1
1:A:940:SER:CB	1:A:1022:LEU:HD23	0.77	2.09	14	5



		(1,1,(3))	\mathbf{D}	Mod	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:962:LEU:O	1:A:966:LEU:HD12	0.77	1.79	6	11
1:A:1009:VAL:HG22	1:A:1014:GLN:NE2	0.77	1.95	6	1
1:A:980:THR:HG22	1:A:1042:ALA:HB1	0.77	1.56	4	3
1:A:1008:TYR:CD2	1:A:1017:TYR:CE1	0.77	2.73	11	5
1:A:925:VAL:HG21	1:A:972:SER:HB2	0.77	1.55	17	5
1:A:952:VAL:HG23	1:A:1006:GLN:OE1	0.77	1.80	10	1
1:A:971:GLU:O	1:A:975:VAL:HG23	0.77	1.79	19	20
1:A:1008:TYR:CD1	1:A:1017:TYR:CZ	0.77	2.73	22	7
1:A:925:VAL:HG21	1:A:972:SER:HG	0.77	1.37	8	1
1:A:932:LEU:C	1:A:932:LEU:HD12	0.76	1.99	12	19
1:A:1008:TYR:CG	1:A:1017:TYR:CE2	0.76	2.73	18	5
1:A:962:LEU:HD11	1:A:995:LEU:CD1	0.76	2.10	9	1
1:A:1044:LEU:HD12	1:A:1045:LYS:N	0.76	1.96	3	17
1:A:1008:TYR:CE2	1:A:1017:TYR:CZ	0.76	2.74	4	5
1:A:1013:LEU:HD12	1:A:1017:TYR:CD2	0.76	2.15	12	1
1:A:932:LEU:HD13	1:A:933:VAL:N	0.75	1.97	4	3
1:A:976:LEU:HD13	1:A:976:LEU:N	0.75	1.97	5	2
1:A:976:LEU:HG	1:A:1039:ILE:HG23	0.74	1.58	5	20
1:A:925:VAL:CG2	1:A:968:THR:HG22	0.74	2.12	7	3
1:A:970:ASP:HA	1:A:973:LEU:HD12	0.74	1.58	4	3
1:A:980:THR:CB	1:A:1042:ALA:HB2	0.74	2.11	6	7
1:A:925:VAL:HG23	1:A:968:THR:HG22	0.74	1.58	11	2
1:A:962:LEU:HD13	1:A:995:LEU:HG	0.74	1.59	23	3
1:A:980:THR:HG23	1:A:984:ILE:HD12	0.74	1.59	5	8
1:A:962:LEU:HD22	1:A:962:LEU:C	0.74	2.03	21	3
1:A:1013:LEU:HD12	1:A:1013:LEU:O	0.73	1.84	1	2
1:A:925:VAL:HG11	1:A:972:SER:OG	0.73	1.83	25	2
1:A:995:LEU:C	1:A:995:LEU:HD12	0.73	2.04	25	8
1:A:952:VAL:HG23	1:A:1006:GLN:NE2	0.73	1.98	17	2
1:A:1006:GLN:O	1:A:1009:VAL:HG12	0.72	1.84	20	4
1:A:1044:LEU:C	1:A:1044:LEU:HD22	0.72	2.05	10	2
1:A:1009:VAL:HG22	1:A:1014:GLN:CD	0.72	2.05	6	1
1:A:932:LEU:O	1:A:936:VAL:HG23	0.72	1.82	11	2
1:A:973:LEU:HD22	1:A:981:HIS:CD2	0.72	2.19	14	2
1:A:1009:VAL:HG23	1:A:1014:GLN:HG3	0.72	1.60	1	5
1:A:1044:LEU:HD13	1:A:1045:LYS:H	0.72	1.42	18	1
1:A:1034:ASN:O	1:A:1038:VAL:HG23	0.71	1.85	10	9
1:A:962:LEU:HD13	1:A:995:LEU:CD2	0.71	2.10	2	2
1:A:926:TYR:CE1	1:A:1036:LEU:CD2	0.71	2.73	17	7
1:A:983:GLU:HB2	1:A:1038:VAL:HG21	0.71	1.59	11	1
1:A:932:LEU:HD23	1:A:933:VAL:HG13	0.71	1.62	25	2



	A h		\mathbf{D}	Mo	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:998:LEU:O	1:A:998:LEU:HD22	0.71	1.85	15	1
1:A:1008:TYR:CG	1:A:1017:TYR:CZ	0.70	2.79	17	9
1:A:1008:TYR:CZ	1:A:1017:TYR:CE1	0.70	2.79	6	1
1:A:1044:LEU:HD22	1:A:1045:LYS:N	0.70	2.00	14	2
1:A:1008:TYR:CE1	1:A:1017:TYR:CZ	0.70	2.79	6	3
1:A:960:LEU:HD12	1:A:960:LEU:C	0.70	2.07	1	1
1:A:987:ALA:HB1	1:A:1035:LEU:HD22	0.70	1.64	1	1
1:A:955:VAL:HG21	1:A:1002:MET:CB	0.69	2.17	18	7
1:A:962:LEU:CD1	1:A:991:LEU:HD11	0.69	2.17	13	1
1:A:933:VAL:HG11	1:A:1032:ALA:HB3	0.69	1.64	20	1
1:A:1008:TYR:CG	1:A:1017:TYR:CE1	0.69	2.81	21	8
1:A:1010:MET:HE2	1:A:1011:THR:HG23	0.69	1.63	1	2
1:A:926:TYR:O	1:A:930:THR:HG22	0.69	1.87	25	1
1:A:983:GLU:CB	1:A:1038:VAL:HG21	0.69	2.18	11	1
1:A:975:VAL:C	1:A:976:LEU:HD13	0.68	2.07	5	2
1:A:925:VAL:HG22	1:A:968:THR:HG23	0.68	1.63	24	1
1:A:943:ILE:HD11	1:A:951:TYR:CE2	0.68	2.23	3	2
1:A:962:LEU:HG	1:A:995:LEU:HD22	0.68	1.65	20	1
1:A:955:VAL:CG1	1:A:999:ILE:HD13	0.68	2.18	19	11
1:A:1022:LEU:C	1:A:1022:LEU:HD13	0.68	2.09	18	13
1:A:955:VAL:HG11	1:A:1002:MET:HG2	0.68	1.65	10	4
1:A:929:VAL:O	1:A:932:LEU:HD13	0.68	1.87	11	3
1:A:1044:LEU:HD22	1:A:1044:LEU:C	0.68	2.08	14	1
1:A:1013:LEU:HD13	1:A:1016:GLU:HB3	0.68	1.65	21	4
1:A:980:THR:CG2	1:A:1042:ALA:CB	0.67	2.72	18	24
1:A:962:LEU:CG	1:A:995:LEU:HD22	0.67	2.20	20	1
1:A:973:LEU:HD21	1:A:981:HIS:HB3	0.67	1.66	19	2
1:A:937:ILE:HD11	1:A:1029:ALA:HB2	0.67	1.64	9	4
1:A:962:LEU:CD2	1:A:995:LEU:HD22	0.67	2.20	14	1
1:A:976:LEU:CG	1:A:1039:ILE:HG23	0.66	2.20	24	16
1:A:980:THR:OG1	1:A:1038:VAL:HG22	0.66	1.91	6	2
1:A:962:LEU:HD12	1:A:991:LEU:HD11	0.66	1.67	13	1
1:A:962:LEU:CD1	1:A:995:LEU:HD22	0.66	2.16	2	2
1:A:994:ASP:CB	1:A:1028:LEU:HD21	0.66	2.21	9	13
1:A:977:PRO:HD2	1:A:1042:ALA:HB1	0.66	1.68	7	4
1:A:975:VAL:HG12	1:A:976:LEU:HD22	0.66	1.68	6	1
1:A:1011:THR:O	1:A:1012:SER:CB	0.65	2.44	24	9
1:A:1013:LEU:HD23	1:A:1013:LEU:N	0.65	2.06	22	3
1:A:933:VAL:O	1:A:937:ILE:HD12	0.65	1.91	2	2
1:A:932:LEU:HD22	1:A:933:VAL:N	0.65	2.07	11	3
1:A:1008:TYR:CZ	1:A:1017:TYR:CZ	0.65	2.85	6	3



		(1,1)	\mathbf{D}^{*}	Mo	lels	
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:980:THR:HG23	1:A:1042:ALA:CB	0.65	2.21	15	1	
1:A:976:LEU:HB3	1:A:980:THR:HG21	0.64	1.67	19	5	
1:A:933:VAL:CG1	1:A:1032:ALA:HB3	0.64	2.22	20	5	
1:A:976:LEU:CD1	1:A:1039:ILE:HG23	0.64	2.23	24	9	
1:A:925:VAL:HG21	1:A:972:SER:CB	0.64	2.23	17	4	
1:A:932:LEU:HD22	1:A:962:LEU:HD22	0.64	1.69	15	1	
1:A:962:LEU:HD21	1:A:991:LEU:HD11	0.64	1.70	10	2	
1:A:940:SER:HB2	1:A:1022:LEU:HD23	0.64	1.68	16	3	
1:A:952:VAL:HG23	1:A:1006:GLN:CD	0.64	2.12	8	3	
1:A:962:LEU:HD11	1:A:991:LEU:HD23	0.64	1.69	15	1	
1:A:933:VAL:HG22	1:A:1029:ALA:HA	0.64	1.70	9	7	
1:A:980:THR:HG23	1:A:1042:ALA:HB2	0.64	1.68	15	1	
1:A:1041:GLN:HA	1:A:1044:LEU:HD21	0.63	1.69	7	16	
1:A:994:ASP:CG	1:A:1028:LEU:HD21	0.63	2.13	23	4	
1:A:929:VAL:CG2	1:A:965:LEU:HD11	0.63	2.24	10	1	
1:A:932:LEU:HD22	1:A:962:LEU:HD13	0.63	1.70	13	1	
1:A:980:THR:HG21	1:A:1042:ALA:CB	0.63	2.24	1	12	
1:A:962:LEU:HD23	1:A:991:LEU:HD21	0.63	1.69	2	6	
1:A:980:THR:CG2	1:A:1042:ALA:HB1	0.62	2.24	19	6	
1:A:994:ASP:HB3	1:A:1028:LEU:HD21	0.62	1.71	19	18	
1:A:994:ASP:HB3	1:A:1028:LEU:HD11	0.62	1.67	23	3	
1:A:926:TYR:CD1	1:A:1036:LEU:CD1	0.62	2.77	9	5	
1:A:952:VAL:HG23	1:A:1006:GLN:HG3	0.62	1.71	1	2	
1:A:998:LEU:HD13	1:A:1028:LEU:HD11	0.62	1.70	1	3	
1:A:925:VAL:HG22	1:A:968:THR:CG2	0.62	2.23	1	2	
1:A:1008:TYR:CE1	1:A:1017:TYR:OH	0.62	2.53	14	7	
1:A:929:VAL:HG22	1:A:965:LEU:CD2	0.62	2.23	23	1	
1:A:980:THR:HG23	1:A:984:ILE:CD1	0.61	2.24	7	7	
1:A:981:HIS:O	1:A:985:GLU:N	0.61	2.25	19	3	
1:A:952:VAL:N	1:A:953:PRO:CD	0.61	2.63	11	25	
1:A:955:VAL:CG1	1:A:999:ILE:CD1	0.61	2.78	3	5	
1:A:1008:TYR:CD2	1:A:1017:TYR:CZ	0.61	2.89	4	7	
1:A:962:LEU:CB	1:A:995:LEU:HD22	0.61	2.26	20	5	
1:A:943:ILE:CD1	1:A:951:TYR:CE2	0.61	2.84	23	2	
1:A:980:THR:HG23	1:A:1042:ALA:HB1	0.61	1.71	12	1	
1:A:937:ILE:N	1:A:937:ILE:HD13	0.61	2.10	9	1	
1:A:926:TYR:CZ	1:A:1036:LEU:CD2	0.61	2.83	14	10	
1:A:965:LEU:CD2	1:A:991:LEU:CD2	0.61	2.79	22	1	
1:A:980:THR:OG1	1:A:984:ILE:HD12	0.60	1.95	22	1	
1:A:933:VAL:HG12	1:A:1029:ALA:HA	0.60	1.73	21	3	
1:A:991:LEU:HD12	1:A:1028:LEU:HD22	0.60	1.73	20	3	



			\mathbf{D}	Mo	odels	
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:1011:THR:HG23	1:A:1013:LEU:HB2	0.60	1.73	3	2	
1:A:922:ASN:O	1:A:926:TYR:CD1	0.60	2.55	11	9	
1:A:980:THR:CG2	1:A:1042:ALA:HB2	0.60	2.27	5	13	
1:A:929:VAL:HG22	1:A:965:LEU:HD12	0.60	1.74	20	3	
1:A:926:TYR:CD1	1:A:1036:LEU:CD2	0.60	2.85	17	1	
1:A:955:VAL:HG21	1:A:1002:MET:HG3	0.60	1.73	25	1	
1:A:937:ILE:HD11	1:A:1029:ALA:CB	0.59	2.27	11	2	
1:A:987:ALA:HB3	1:A:1035:LEU:HD13	0.59	1.74	14	1	
1:A:1041:GLN:O	1:A:1044:LEU:CD1	0.59	2.51	18	6	
1:A:1008:TYR:CB	1:A:1017:TYR:CE2	0.59	2.86	22	1	
1:A:962:LEU:HD13	1:A:995:LEU:CG	0.59	2.28	7	1	
1:A:942:LYS:O	1:A:946:ALA:CB	0.59	2.51	1	24	
1:A:958:VAL:HG12	1:A:995:LEU:HD21	0.59	1.73	9	1	
1:A:998:LEU:CD1	1:A:1028:LEU:HD12	0.59	2.27	18	4	
1:A:955:VAL:HG11	1:A:999:ILE:HA	0.58	1.74	20	1	
1:A:962:LEU:HD12	1:A:991:LEU:CD1	0.58	2.28	13	1	
1:A:930:THR:O	1:A:934:LYS:N	0.58	2.33	13	9	
1:A:1010:MET:C	1:A:1011:THR:HG22	0.58	2.16	13	1	
1:A:991:LEU:HD11	1:A:995:LEU:HD12	0.58	1.74	9	1	
1:A:932:LEU:HD23	1:A:965:LEU:HD13	0.58	1.76	2	2	
1:A:932:LEU:C	1:A:932:LEU:CD2	0.58	2.72	11	3	
1:A:939:MET:O	1:A:943:ILE:N	0.58	2.37	9	22	
1:A:925:VAL:HG22	1:A:968:THR:O	0.58	1.99	4	3	
1:A:958:VAL:HG12	1:A:962:LEU:CD1	0.57	2.29	7	1	
1:A:962:LEU:HD12	1:A:991:LEU:CG	0.57	2.28	13	1	
1:A:943:ILE:HD13	1:A:1021:MET:SD	0.57	2.39	4	1	
1:A:962:LEU:HD11	1:A:991:LEU:CD2	0.57	2.28	15	1	
1:A:955:VAL:HG13	1:A:999:ILE:HD13	0.57	1.76	3	6	
1:A:1009:VAL:HG13	1:A:1010:MET:H	0.57	1.58	15	1	
1:A:980:THR:O	1:A:984:ILE:HD12	0.57	1.99	24	4	
1:A:943:ILE:HD11	1:A:951:TYR:CD1	0.57	2.34	9	3	
1:A:990:LEU:HD22	1:A:1031:ASP:OD2	0.57	1.99	25	2	
1:A:1008:TYR:CE2	1:A:1017:TYR:CE2	0.57	2.93	24	4	
1:A:1008:TYR:CD1	1:A:1017:TYR:OH	0.57	2.58	22	2	
1:A:951:TYR:CD1	1:A:1002:MET:SD	0.57	2.97	3	1	
1:A:976:LEU:HD12	1:A:1042:ALA:CB	0.57	2.29	13	1	
1:A:1011:THR:HG23	1:A:1012:SER:H	0.57	1.60	25	3	
1:A:998:LEU:HD23	1:A:999:ILE:N	0.57	2.14	25	1	
1:A:955:VAL:HG21	1:A:1002:MET:CG	0.56	2.29	3	5	
1:A:983:GLU:HB2	1:A:1038:VAL:HG11	0.56	1.76	14	4	
1:A:944:GLN:N	1:A:945:PRO:CD	0.56	2.69	4	25	



	h a c		D1 (8)	Mo	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:976:LEU:HD22	1:A:976:LEU:N	0.56	2.15	25	16
1:A:955:VAL:HG21	1:A:1002:MET:HG2	0.56	1.78	3	1
1:A:940:SER:HA	1:A:943:ILE:HD12	0.56	1.76	4	1
1:A:933:VAL:CG1	1:A:1032:ALA:CB	0.56	2.83	20	1
1:A:929:VAL:O	1:A:932:LEU:CD1	0.56	2.53	11	3
1:A:1043:ARG:O	1:A:1047:ILE:HD12	0.56	2.00	8	3
1:A:962:LEU:HD13	1:A:992:ASN:OD1	0.56	2.01	9	1
1:A:943:ILE:HG22	1:A:944:GLN:N	0.56	2.15	1	5
1:A:1007:GLN:O	1:A:1009:VAL:N	0.56	2.38	6	2
1:A:922:ASN:ND2	1:A:1043:ARG:HH22	0.56	1.99	21	1
1:A:1008:TYR:HD1	1:A:1013:LEU:HD23	0.56	1.61	25	1
1:A:932:LEU:HD23	1:A:965:LEU:CD1	0.55	2.30	23	2
1:A:995:LEU:HD12	1:A:995:LEU:O	0.55	2.01	18	6
1:A:976:LEU:CD1	1:A:1043:ARG:N	0.55	2.68	13	3
1:A:969:VAL:HG21	1:A:988:GLN:CD	0.55	2.22	2	1
1:A:1008:TYR:CD1	1:A:1013:LEU:HD11	0.55	2.36	2	1
1:A:1010:MET:HE3	1:A:1011:THR:HG23	0.55	1.78	4	1
1:A:1008:TYR:CZ	1:A:1017:TYR:OH	0.55	2.60	24	9
1:A:995:LEU:HD12	1:A:999:ILE:HG12	0.55	1.77	15	2
1:A:926:TYR:CG	1:A:1036:LEU:HD21	0.55	2.37	22	2
1:A:962:LEU:HD13	1:A:995:LEU:CD1	0.55	2.32	3	5
1:A:1022:LEU:HD13	1:A:1022:LEU:O	0.54	2.01	1	5
1:A:1011:THR:HG23	1:A:1013:LEU:H	0.54	1.60	12	4
1:A:998:LEU:HD22	1:A:998:LEU:C	0.54	2.23	15	1
1:A:998:LEU:HD23	1:A:998:LEU:C	0.54	2.22	25	1
1:A:955:VAL:HG11	1:A:1002:MET:CB	0.54	2.32	5	1
1:A:1040:ASP:O	1:A:1044:LEU:CD2	0.54	2.56	5	1
1:A:962:LEU:CD2	1:A:991:LEU:HD21	0.54	2.32	9	1
1:A:962:LEU:HD23	1:A:991:LEU:HD11	0.54	1.80	12	1
1:A:980:THR:O	1:A:984:ILE:CG1	0.54	2.56	24	7
1:A:955:VAL:HG13	1:A:999:ILE:CD1	0.54	2.33	3	2
1:A:976:LEU:CB	1:A:980:THR:HG21	0.54	2.31	12	3
1:A:973:LEU:HD21	1:A:984:ILE:HG21	0.54	1.79	3	1
1:A:958:VAL:HG12	1:A:995:LEU:HD11	0.54	1.78	17	2
1:A:977:PRO:O	1:A:981:HIS:CD2	0.54	2.61	10	1
1:A:1011:THR:OG1	1:A:1012:SER:N	0.54	2.40	9	4
1:A:1013:LEU:HD12	1:A:1017:TYR:CD1	0.54	2.38	16	1
1:A:1012:SER:O	1:A:1014:GLN:N	0.54	2.41	17	7
1:A:962:LEU:HB2	1:A:995:LEU:HD11	0.54	1.79	7	1
1:A:939:MET:O	1:A:943:ILE:CG1	0.54	2.56	1	2
1:A:962:LEU:C	1:A:962:LEU:CD2	0.54	2.76	21	3



		Clash(Å)	\mathbf{D}	Models		
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:981:HIS:N	1:A:981:HIS:CD2	0.54	2.75	15	1	
1:A:973:LEU:N	1:A:974:PRO:CD	0.54	2.70	4	25	
1:A:1010:MET:O	1:A:1010:MET:CE	0.54	2.55	24	2	
1:A:1014:GLN:O	1:A:1018:LYS:N	0.54	2.40	10	7	
1:A:1000:ASN:O	1:A:1004:LEU:HD23	0.54	2.01	18	1	
1:A:1010:MET:O	1:A:1010:MET:HE3	0.54	2.03	24	1	
1:A:978:ALA:O	1:A:979:SER:CB	0.53	2.56	6	7	
1:A:926:TYR:CE1	1:A:1036:LEU:CD1	0.53	2.89	13	4	
1:A:962:LEU:CD1	1:A:991:LEU:CD2	0.53	2.86	6	1	
1:A:1005:ALA:O	1:A:1009:VAL:HG12	0.53	2.03	13	5	
1:A:962:LEU:CD1	1:A:991:LEU:HD21	0.53	2.32	6	2	
1:A:958:VAL:HG13	1:A:995:LEU:HD11	0.53	1.79	19	1	
1:A:937:ILE:O	1:A:938:GLU:C	0.53	2.47	24	24	
1:A:929:VAL:HG21	1:A:1036:LEU:CD1	0.53	2.30	22	1	
1:A:951:TYR:CE1	1:A:1002:MET:SD	0.53	3.02	3	1	
1:A:998:LEU:C	1:A:998:LEU:HD13	0.53	2.24	19	2	
1:A:994:ASP:CB	1:A:1028:LEU:CD2	0.53	2.86	17	7	
1:A:1011:THR:HG23	1:A:1012:SER:N	0.53	2.17	6	3	
1:A:994:ASP:CB	1:A:1028:LEU:CD1	0.53	2.87	24	2	
1:A:922:ASN:O	1:A:926:TYR:CG	0.53	2.61	1	8	
1:A:1013:LEU:HD13	1:A:1016:GLU:CB	0.53	2.34	3	3	
1:A:1008:TYR:HD1	1:A:1013:LEU:HD11	0.53	1.63	2	1	
1:A:1010:MET:CE	1:A:1010:MET:C	0.53	2.77	17	1	
1:A:975:VAL:HG12	1:A:976:LEU:CD1	0.52	2.34	5	1	
1:A:1010:MET:O	1:A:1011:THR:CB	0.52	2.57	13	2	
1:A:943:ILE:CG2	1:A:1018:LYS:CD	0.52	2.87	10	1	
1:A:1007:GLN:O	1:A:1010:MET:CG	0.52	2.57	6	2	
1:A:999:ILE:O	1:A:1002:MET:CG	0.52	2.58	23	2	
1:A:962:LEU:HD21	1:A:991:LEU:HG	0.52	1.80	14	1	
1:A:926:TYR:CG	1:A:1036:LEU:HD11	0.52	2.38	25	1	
1:A:947:PRO:O	1:A:951:TYR:CB	0.52	2.58	5	3	
1:A:943:ILE:CG2	1:A:944:GLN:N	0.52	2.73	2	23	
1:A:945:PRO:O	1:A:946:ALA:C	0.52	2.47	16	24	
1:A:939:MET:O	1:A:942:LYS:N	0.52	2.43	9	17	
1:A:1042:ALA:O	1:A:1045:LYS:CB	0.52	2.57	20	4	
1:A:1035:LEU:HD23	1:A:1036:LEU:N	0.52	2.20	21	1	
1:A:1044:LEU:C	1:A:1044:LEU:CD2	0.52	2.78	10	3	
1:A:962:LEU:CD2	1:A:966:LEU:HD13	0.52	2.35	11	1	
1:A:951:TYR:CE1	1:A:955:VAL:HG23	0.52	2.39	21	2	
1:A:972:SER:O	1:A:976:LEU:CD2	0.52	2.58	14	16	
1:A:1000:ASN:O	1:A:1004:LEU:CD2	0.52	2.58	18	1	



		(1,1,(3))) Distance($^{\lambda}$)	Mod	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:951:TYR:HE2	1:A:1005:ALA:HB3	0.52	1.64	9	11
1:A:1009:VAL:HG13	1:A:1014:GLN:HG3	0.52	1.81	3	1
1:A:955:VAL:HG11	1:A:1002:MET:HB2	0.52	1.81	5	1
1:A:1008:TYR:CE2	1:A:1017:TYR:OH	0.52	2.63	7	5
1:A:980:THR:OG1	1:A:984:ILE:CD1	0.52	2.58	22	2
1:A:1009:VAL:O	1:A:1010:MET:C	0.51	2.49	25	5
1:A:930:THR:O	1:A:934:LYS:CG	0.51	2.58	12	8
1:A:1005:ALA:O	1:A:1009:VAL:CG2	0.51	2.58	3	1
1:A:1035:LEU:O	1:A:1038:VAL:CG1	0.51	2.59	11	3
1:A:940:SER:HA	1:A:943:ILE:CG2	0.51	2.35	25	17
1:A:942:LYS:CE	1:A:954:MET:SD	0.51	2.99	19	10
1:A:1005:ALA:O	1:A:1009:VAL:CG1	0.51	2.58	11	3
1:A:922:ASN:OD1	1:A:926:TYR:CZ	0.51	2.63	13	1
1:A:926:TYR:HD1	1:A:1036:LEU:HD11	0.51	1.57	1	2
1:A:953:PRO:O	1:A:954:MET:C	0.51	2.49	23	24
1:A:965:LEU:C	1:A:965:LEU:HD23	0.51	2.26	2	1
1:A:976:LEU:N	1:A:976:LEU:CD1	0.51	2.69	5	1
1:A:965:LEU:HD22	1:A:969:VAL:HG23	0.51	1.83	8	1
1:A:965:LEU:O	1:A:969:VAL:CG2	0.51	2.59	6	5
1:A:1010:MET:CE	1:A:1011:THR:OG1	0.51	2.59	2	1
1:A:975:VAL:C	1:A:976:LEU:HD22	0.51	2.26	6	1
1:A:1029:ALA:O	1:A:1033:LYS:CG	0.51	2.59	7	1
1:A:1009:VAL:HG23	1:A:1014:GLN:CG	0.51	2.35	23	1
1:A:932:LEU:HD12	1:A:936:VAL:HG23	0.50	1.83	7	5
1:A:1034:ASN:OD1	1:A:1034:ASN:C	0.50	2.50	21	2
1:A:948:PRO:CB	1:A:1006:GLN:OE1	0.50	2.60	18	3
1:A:1022:LEU:C	1:A:1022:LEU:CD1	0.50	2.79	2	6
1:A:962:LEU:HD13	1:A:965:LEU:HD22	0.50	1.83	15	1
1:A:1012:SER:C	1:A:1014:GLN:N	0.50	2.63	17	8
1:A:1013:LEU:O	1:A:1016:GLU:CB	0.50	2.60	19	6
1:A:1036:LEU:O	1:A:1039:ILE:N	0.50	2.45	14	20
1:A:923:ASP:O	1:A:927:GLU:CG	0.50	2.60	2	5
1:A:962:LEU:O	1:A:966:LEU:CD1	0.50	2.59	23	7
1:A:976:LEU:N	1:A:976:LEU:CD2	0.50	2.75	6	2
1:A:933:VAL:CG2	1:A:1032:ALA:CB	0.50	2.89	11	2
1:A:995:LEU:O	1:A:998:LEU:N	0.50	2.45	13	12
1:A:926:TYR:CD2	1:A:1036:LEU:HD21	0.50	2.41	20	8
1:A:1009:VAL:O	1:A:1011:THR:N	0.50	2.44	13	7
1:A:1007:GLN:O	1:A:1008:TYR:C	0.50	2.49	6	2
1:A:1004:LEU:HD12	1:A:1005:ALA:N	0.50	2.21	15	1
1:A:932:LEU:HD12	1:A:932:LEU:O	0.50	2.05	17	6



	has page	~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~ ~		Mo	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	$\operatorname{Distance}(\mathbf{A})$	Worst	Total
1:A:1044:LEU:O	1:A:1047:ILE:N	0.50	2.45	13	4
1:A:987:ALA:HB1	1:A:1035:LEU:CD2	0.49	2.37	1	1
1:A:951:TYR:CE1	1:A:1002:MET:HG3	0.49	2.41	24	2
1:A:973:LEU:HD22	1:A:981:HIS:CE1	0.49	2.41	5	1
1:A:932:LEU:HD12	1:A:933:VAL:N	0.49	2.22	18	2
1:A:932:LEU:C	1:A:932:LEU:CD1	0.49	2.73	12	18
1:A:980:THR:HB	1:A:984:ILE:HD12	0.49	1.84	16	1
1:A:1013:LEU:N	1:A:1013:LEU:CD2	0.49	2.76	22	2
1:A:984:ILE:CD1	1:A:1039:ILE:CG1	0.49	2.86	9	3
1:A:995:LEU:C	1:A:995:LEU:CD1	0.49	2.77	25	4
1:A:994:ASP:HB2	1:A:1028:LEU:HD21	0.49	1.83	9	5
1:A:932:LEU:HD22	1:A:962:LEU:HG	0.49	1.84	7	1
1:A:952:VAL:CG2	1:A:1006:GLN:OE1	0.49	2.60	22	2
1:A:929:VAL:HG13	1:A:1032:ALA:HB1	0.49	1.84	13	1
1:A:952:VAL:N	1:A:953:PRO:HD2	0.49	2.23	13	25
1:A:951:TYR:CE2	1:A:1002:MET:CG	0.49	2.96	14	2
1:A:1013:LEU:O	1:A:1014:GLN:C	0.49	2.50	17	13
1:A:955:VAL:CG1	1:A:956:LYS:N	0.49	2.75	4	1
1:A:922:ASN:OD1	1:A:975:VAL:HG11	0.49	2.07	10	1
1:A:939:MET:O	1:A:943:ILE:CB	0.49	2.61	1	2
1:A:1034:ASN:O	1:A:1038:VAL:CG2	0.49	2.61	12	1
1:A:1009:VAL:HG13	1:A:1010:MET:N	0.49	2.23	22	4
1:A:1010:MET:CE	1:A:1011:THR:CG2	0.49	2.89	4	1
1:A:962:LEU:CG	1:A:995:LEU:HD13	0.49	2.37	9	1
1:A:933:VAL:CG2	1:A:1032:ALA:HB3	0.49	2.38	11	5
1:A:928:ASN:O	1:A:932:LEU:HD12	0.49	2.07	4	1
1:A:976:LEU:CD1	1:A:1039:ILE:O	0.49	2.61	19	2
1:A:962:LEU:HB3	1:A:995:LEU:HD22	0.49	1.85	5	1
1:A:929:VAL:HG22	1:A:965:LEU:CD1	0.49	2.36	20	2
1:A:998:LEU:HD11	1:A:1021:MET:SD	0.49	2.48	24	1
1:A:980:THR:HG21	1:A:1042:ALA:HB2	0.48	1.82	7	2
1:A:922:ASN:OD1	1:A:923:ASP:N	0.48	2.46	11	1
1:A:1030:VAL:O	1:A:1033:LYS:N	0.48	2.46	7	15
1:A:980:THR:O	1:A:984:ILE:CD1	0.48	2.61	24	2
1:A:935:ALA:O	1:A:936:VAL:C	0.48	2.52	23	22
1:A:994:ASP:HB3	1:A:1028:LEU:CD2	0.48	2.38	4	15
1:A:962:LEU:HD22	1:A:995:LEU:HD23	0.48	1.78	14	1
1:A:1038:VAL:CG1	1:A:1039:ILE:N	0.48	2.76	1	1
1:A:955:VAL:HG22	1:A:999:ILE:HD13	0.48	1.85	4	1
1:A:984:ILE:O	1:A:988:GLN:CG	0.48	2.61	21	2
1:A:975:VAL:HG12	1:A:976:LEU:CD2	0.48	2.37	6	1



		$O_{1} = 1 \left(\begin{pmatrix} \lambda \\ \lambda \end{pmatrix} \right)$	Å) Distance(Å)	Mo	lels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:998:LEU:CD1	1:A:1028:LEU:CD1	0.48	2.92	10	1
1:A:994:ASP:CG	1:A:1028:LEU:CD2	0.48	2.82	2	4
1:A:952:VAL:CG2	1:A:1006:GLN:CD	0.48	2.82	21	1
1:A:978:ALA:O	1:A:981:HIS:N	0.48	2.47	12	3
1:A:981:HIS:O	1:A:985:GLU:HB2	0.48	2.09	20	3
1:A:981:HIS:O	1:A:982:ARG:C	0.48	2.52	19	7
1:A:984:ILE:HD11	1:A:1039:ILE:CD1	0.48	2.38	13	1
1:A:976:LEU:HD11	1:A:1039:ILE:O	0.48	2.09	4	1
1:A:1013:LEU:O	1:A:1016:GLU:N	0.48	2.47	17	11
1:A:962:LEU:HD11	1:A:995:LEU:HD22	0.48	1.85	21	1
1:A:929:VAL:CG2	1:A:965:LEU:HD21	0.48	2.31	23	1
1:A:928:ASN:OD1	1:A:968:THR:HG21	0.48	2.08	5	5
1:A:958:VAL:O	1:A:961:ALA:N	0.48	2.47	13	1
1:A:976:LEU:CD2	1:A:976:LEU:N	0.47	2.77	11	1
1:A:930:THR:O	1:A:934:LYS:CB	0.47	2.62	12	3
1:A:969:VAL:O	1:A:973:LEU:N	0.47	2.47	7	9
1:A:962:LEU:HD12	1:A:991:LEU:HD21	0.47	1.87	13	1
1:A:994:ASP:OD1	1:A:1028:LEU:HD21	0.47	2.09	23	1
1:A:962:LEU:HD23	1:A:991:LEU:CD2	0.47	2.39	11	3
1:A:1004:LEU:O	1:A:1008:TYR:N	0.47	2.47	5	3
1:A:979:SER:N	1:A:981:HIS:NE2	0.47	2.61	1	1
1:A:975:VAL:HG12	1:A:976:LEU:HD13	0.47	1.85	5	3
1:A:965:LEU:HD12	1:A:991:LEU:HD23	0.47	1.86	19	1
1:A:951:TYR:CE2	1:A:1002:MET:HG2	0.47	2.44	21	1
1:A:1014:GLN:O	1:A:1016:GLU:N	0.47	2.47	25	10
1:A:1012:SER:O	1:A:1012:SER:OG	0.47	2.32	10	1
1:A:925:VAL:HG22	1:A:968:THR:C	0.47	2.29	17	1
1:A:1004:LEU:O	1:A:1007:GLN:N	0.47	2.47	1	6
1:A:1014:GLN:O	1:A:1015:GLN:C	0.47	2.53	25	13
1:A:976:LEU:HD11	1:A:1039:ILE:HG23	0.47	1.87	15	4
1:A:1042:ALA:O	1:A:1045:LYS:N	0.47	2.48	8	10
1:A:952:VAL:O	1:A:1002:MET:CE	0.47	2.63	6	1
1:A:958:VAL:O	1:A:962:LEU:HD12	0.47	2.10	7	1
1:A:1010:MET:O	1:A:1011:THR:HG23	0.47	2.09	17	1
1:A:994:ASP:HB3	1:A:1028:LEU:CD1	0.47	2.40	11	5
1:A:978:ALA:HA	1:A:981:HIS:CD2	0.47	2.45	14	3
1:A:937:ILE:O	1:A:940:SER:N	0.47	2.48	1	1
1:A:951:TYR:CZ	1:A:1002:MET:HG3	0.47	2.45	14	4
1:A:998:LEU:C	1:A:998:LEU:HD23	0.47	2.30	2	1
1:A:998:LEU:HD13	1:A:999:ILE:N	0.47	2.25	3	2
1:A:953:PRO:O	1:A:956:LYS:N	0.47	2.48	17	11



	as page		\mathbf{D}	Mo	dels	
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total	
1:A:938:GLU:O	1:A:941:SER:CB	0.47	2.63	25	2	
1:A:977:PRO:C	1:A:979:SER:N	0.47	2.68	12	2	
1:A:929:VAL:HG22	1:A:965:LEU:HD11	0.47	1.86	10	1	
1:A:950:GLU:C	1:A:953:PRO:HD2	0.47	2.30	23	2	
1:A:992:ASN:O	1:A:995:LEU:N	0.46	2.48	25	4	
1:A:940:SER:CA	1:A:943:ILE:HD12	0.46	2.40	4	1	
1:A:939:MET:CE	1:A:1021:MET:SD	0.46	3.03	6	1	
1:A:960:LEU:C	1:A:960:LEU:CD1	0.46	2.79	1	1	
1:A:1011:THR:HG22	1:A:1012:SER:N	0.46	2.25	2	1	
1:A:1034:ASN:OD1	1:A:1035:LEU:N	0.46	2.47	21	2	
1:A:922:ASN:CG	1:A:975:VAL:HG11	0.46	2.30	10	1	
1:A:977:PRO:O	1:A:979:SER:N	0.46	2.48	12	2	
1:A:926:TYR:CZ	1:A:1036:LEU:HD23	0.46	2.45	17	1	
1:A:943:ILE:HD12	1:A:1018:LYS:CE	0.46	2.40	18	1	
1:A:925:VAL:CG2	1:A:968:THR:O	0.46	2.63	4	1	
1:A:983:GLU:O	1:A:987:ALA:N	0.46	2.49	14	4	
1:A:1010:MET:CE	1:A:1011:THR:N	0.46	2.78	15	1	
1:A:932:LEU:HD11	1:A:962:LEU:HG	0.46	1.86	25	1	
1:A:923:ASP:O	1:A:927:GLU:N	0.46	2.49	22	4	
1:A:927:GLU:O	1:A:931:GLY:N	0.46	2.48	18	7	
1:A:982:ARG:O	1:A:985:GLU:N	0.46	2.49	2	5	
1:A:998:LEU:CD1	1:A:1028:LEU:HD11	0.46	2.41	10	1	
1:A:1002:MET:O	1:A:1005:ALA:N	0.46	2.49	4	1	
1:A:932:LEU:HB3	1:A:961:ALA:HB1	0.46	1.87	5	1	
1:A:991:LEU:CD1	1:A:995:LEU:HD12	0.46	2.40	9	1	
1:A:977:PRO:O	1:A:978:ALA:C	0.46	2.54	14	2	
1:A:955:VAL:HG21	1:A:1002:MET:HB3	0.46	1.88	23	1	
1:A:994:ASP:O	1:A:998:LEU:N	0.46	2.49	1	1	
1:A:928:ASN:HB3	1:A:965:LEU:HD12	0.46	1.86	4	1	
1:A:991:LEU:O	1:A:995:LEU:N	0.46	2.48	25	3	
1:A:1008:TYR:O	1:A:1009:VAL:C	0.46	2.54	6	2	
1:A:1000:ASN:O	1:A:1003:LYS:N	0.46	2.49	9	4	
1:A:929:VAL:HG23	1:A:965:LEU:CD1	0.46	2.41	12	1	
1:A:930:THR:O	1:A:933:VAL:N	0.46	2.49	13	3	
1:A:926:TYR:O	1:A:930:THR:HG23	0.46	2.10	4	4	
1:A:1028:LEU:O	1:A:1031:ASP:N	0.46	2.49	4	9	
1:A:948:PRO:O	1:A:1006:GLN:NE2	0.46	2.49	17	3	
1:A:1033:LYS:C	1:A:1035:LEU:N	0.46	2.69	12	5	
1:A:1012:SER:O	1:A:1015:GLN:CG	0.46	2.64	6	2	
1:A:1041:GLN:O	1:A:1044:LEU:HD13	0.46	2.11	10	1	
1:A:1033:LYS:O	1:A:1035:LEU:N	0.46	2.49	12	2	



	A h		\mathbf{D}	\ Models	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:1008:TYR:O	1:A:1013:LEU:CD1	0.46	2.64	18	1
1:A:1022:LEU:O	1:A:1026:HIS:N	0.46	2.48	20	3
1:A:969:VAL:O	1:A:972:SER:N	0.46	2.49	5	21
1:A:977:PRO:CG	1:A:1042:ALA:O	0.46	2.64	17	3
1:A:940:SER:CB	1:A:1018:LYS:NZ	0.46	2.79	8	1
1:A:1011:THR:CG2	1:A:1012:SER:N	0.46	2.79	10	1
1:A:991:LEU:CD1	1:A:1028:LEU:HD22	0.46	2.41	20	2
1:A:1038:VAL:O	1:A:1042:ALA:HB2	0.46	2.11	19	2
1:A:1044:LEU:C	1:A:1046:MET:N	0.45	2.69	19	12
1:A:1039:ILE:O	1:A:1042:ALA:N	0.45	2.48	25	12
1:A:937:ILE:O	1:A:939:MET:N	0.45	2.49	6	3
1:A:980:THR:HG21	1:A:1042:ALA:HB3	0.45	1.88	18	1
1:A:1017:TYR:O	1:A:1020:GLN:N	0.45	2.49	5	1
1:A:950:GLU:O	1:A:954:MET:SD	0.45	2.75	23	5
1:A:922:ASN:OD1	1:A:922:ASN:N	0.45	2.50	25	1
1:A:1001:LYS:HA	1:A:1004:LEU:HD12	0.45	1.88	3	2
1:A:951:TYR:C	1:A:951:TYR:CD1	0.45	2.89	7	1
1:A:959:GLY:HA2	1:A:962:LEU:HD12	0.45	1.88	11	2
1:A:962:LEU:O	1:A:965:LEU:N	0.45	2.49	14	1
1:A:973:LEU:CD2	1:A:981:HIS:CD2	0.45	2.96	22	2
1:A:987:ALA:CB	1:A:1035:LEU:HD13	0.45	2.42	14	1
1:A:948:PRO:CA	1:A:1006:GLN:OE1	0.45	2.64	18	2
1:A:962:LEU:HD22	1:A:995:LEU:HB2	0.45	1.88	18	1
1:A:957:GLU:O	1:A:960:LEU:N	0.45	2.49	16	4
1:A:951:TYR:CE1	1:A:955:VAL:CG2	0.45	3.00	21	2
1:A:958:VAL:CG1	1:A:959:GLY:N	0.45	2.80	25	4
1:A:980:THR:HB	1:A:984:ILE:CD1	0.45	2.41	12	1
1:A:981:HIS:CD2	1:A:981:HIS:H	0.45	2.30	15	1
1:A:1004:LEU:HB3	1:A:1008:TYR:CE1	0.45	2.47	10	1
1:A:978:ALA:O	1:A:1045:LYS:NZ	0.45	2.50	16	1
1:A:932:LEU:HD23	1:A:933:VAL:N	0.45	2.27	25	2
1:A:1011:THR:HG23	1:A:1013:LEU:N	0.45	2.26	6	3
1:A:928:ASN:O	1:A:932:LEU:N	0.45	2.47	14	1
1:A:1011:THR:O	1:A:1013:LEU:CD2	0.45	2.65	17	1
1:A:942:LYS:NZ	1:A:954:MET:SD	0.45	2.89	19	1
1:A:930:THR:O	1:A:931:GLY:C	0.45	2.55	1	10
1:A:1008:TYR:HB3	1:A:1017:TYR:CD1	0.45	2.47	3	2
1:A:944:GLN:NE2	1:A:1014:GLN:OE1	0.45	2.49	4	1
1:A:951:TYR:CZ	1:A:1002:MET:HG2	0.45	2.47	4	1
1:A:966:LEU:HD13	1:A:988:GLN:OE1	0.45	2.12	4	1
1:A:922:ASN:OD1	1:A:926:TYR:CE1	0.45	2.70	13	1



	t i c			Models	
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:935:ALA:O	1:A:939:MET:CG	0.45	2.65	1	1
1:A:972:SER:O	1:A:973:LEU:C	0.45	2.56	8	7
1:A:1044:LEU:O	1:A:1046:MET:N	0.45	2.50	8	9
1:A:980:THR:CA	1:A:984:ILE:HD13	0.45	2.42	3	1
1:A:944:GLN:N	1:A:945:PRO:HD2	0.45	2.27	4	5
1:A:958:VAL:CG1	1:A:958:VAL:CG1 1:A:962:LEU:CD1		2.95	10	1
1:A:999:ILE:O	1:A:999:ILE:O 1:A:1003:LYS:N		2.48	10	1
1:A:922:ASN:OD1	:922:ASN:OD1 1:A:926:TYR:CE2		2.70	13	1
1:A:1018:LYS:O	1:A:1018:LYS:NZ	0.45	2.49	13	1
1:A:1011:THR:CG2	1:A:1013:LEU:HG	0.45	2.41	24	1
1:A:1038:VAL:O	1:A:1042:ALA:N	0.44	2.50	12	1
1:A:923:ASP:OD1	1:A:924:LYS:N	0.44	2.50	18	1
1:A:1002:MET:SD 1:A:1003:LYS:N		0.44	2.89	20	1
1:A:933:VAL:HG12	1:A:934:LYS:N	0.44	2.26	1	2
1:A:1002:MET:C	1:A:1004:LEU:N	0.44	2.71	20	3
1:A:1042:ALA:O	1:A:1043:ARG:C	0.44	2.55	5	7
1:A:973:LEU:CD2	1:A:984:ILE:HG21	0.44	2.42	3	1
1:A:962:LEU:HD13 1:A:962:LEU		0.44	2.33	11	1
1:A:977:PRO:O 1:A:980:THR:OG1		0.44	2.31	12	2
1:A:980:THR:O 1:A:984:ILE:N		0.44	2.41	22	2
1:A:952:VAL:CG2	1:A:1006:GLN:NE2	0.44	2.80	21	1
1:A:1022:LEU:O	1:A:1025:ALA:HB3	0.44	2.11	16	3
1:A:939:MET:O	1:A:943:ILE:HB	0.44	2.13	22	6
1:A:1008:TYR:O	1:A:1014:GLN:N	0.44	2.51	20	2
1:A:967:ALA:O	1:A:970:ASP:N	0.44	2.51	19	2
1:A:936:VAL:HG21	1:A:1028:LEU:CD1	0.44	2.42	16	1
1:A:1008:TYR:CB	1:A:1017:TYR:CD2	0.44	3.00	18	2
1:A:933:VAL:O	1:A:936:VAL:N	0.44	2.50	1	2
1:A:980:THR:C	1:A:982:ARG:N	0.44	2.69	20	3
1:A:962:LEU:O	1:A:966:LEU:HD13	0.44	2.13	7	2
1:A:1001:LYS:O	1:A:1004:LEU:N	0.44	2.49	19	1
1:A:1010:MET:O	1:A:1011:THR:OG1	0.44	2.31	24	1
1:A:1013:LEU:HD11	1:A:1016:GLU:OE1	0.44	2.12	25	1
1:A:1008:TYR:CG	1:A:1017:TYR:OH	0.44	2.68	17	1
1:A:935:ALA:O	1:A:939:MET:N	0.44	2.45	1	1
1:A:1021:MET:SD	1:A:1022:LEU:N	0.44	2.91	2	2
1:A:1007:GLN:O	1:A:1010:MET:HG2	0.44	2.12	6	1
1:A:1007:GLN:C	1:A:1009:VAL:N	0.44	2.71	7	2
1:A:1027:ALA:O	1:A:1031:ASP:N	0.44	2.46	7	1
1:A:1024:ALA:C	1:A:1026:HIS:N	0.44	2.70	21	1
1:A:959:GLY:HA2	1:A:995:LEU:HD12	0.44	1.90	1	1



1KTM
TTTT

	t i c			Mod	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:932:LEU:CD2	1:A:965:LEU:HD13	0.44	2.42	2	2
1:A:940:SER:CB	1:A:1022:LEU:CD2	0.44	2.95	5	1
1:A:925:VAL:O	1:A:929:VAL:CG2	0.44	2.59	4	2
1:A:980:THR:CB	1:A:1038:VAL:HG12	0.44	2.42	10	1
1:A:926:TYR:CE1	1:A:1036:LEU:CG	0.44	3.01	13	1
1:A:931:GLY:O	1:A:932:LEU:C	0.44	2.56	17	1
1:A:955:VAL:HG21	1:A:1002:MET:SD	0.44	2.53	19	1
1:A:943:ILE:O	1:A:944:GLN:C	0.44	2.56	1	1
1:A:929:VAL:HA	1:A:965:LEU:HD11	0.44	1.89	4	1
1:A:952:VAL:CG2	1:A:1006:GLN:CG	0.44	2.95	7	1
1:A:1018:LYS:O	1:A:1021:MET:CG	0.44	2.66	18	3
1:A:962:LEU:HD22	1:A:966:LEU:HD13	0.44	1.90	11	1
1:A:932:LEU:O 1:A:935:ALA:N		0.44	2.51	21	1
1:A:980:THR:O 1:A:984:ILE:HB		0.43	2.12	3	9
1:A:1008:TYR:HB3 1:A:1017:TYR:C		0.43	2.48	3	1
1:A:990:LEU:HD22 1:A:1031:ASP		0.43	2.13	22	2
1:A:972:SER:OG 1:A:976:LEU:HD23		0.43	2.13	16	1
1:A:951:TYR:CE2 1:A:1002:MET:HG3		0.43	2.48	17	1
1:A:1039:ILE:O	1:A:1039:ILE:O 1:A:1042:ALA:HB3		2.13	24	2
1:A:951:TYR:CZ 1:A:1002:MET:HB2		0.43	2.48	22	2
1:A:1031:ASP:O	1:A:1034:ASN:CG	0.43	2.57	21	1
1:A:955:VAL:C	1:A:957:GLU:N	0.43	2.70	22	4
1:A:962:LEU:HD22	1:A:991:LEU:HG	0.43	1.89	2	1
1:A:1004:LEU:O	1:A:1005:ALA:C	0.43	2.57	22	2
1:A:962:LEU:HD12	1:A:991:LEU:CD2	0.43	2.43	24	2
1:A:995:LEU:O	1:A:996:ALA:C	0.43	2.56	23	3
1:A:1006:GLN:O	1:A:1009:VAL:CG1	0.43	2.61	20	3
1:A:994:ASP:HB2	1:A:1028:LEU:CD2	0.43	2.43	17	2
1:A:971:GLU:C	1:A:974:PRO:HD2	0.43	2.34	3	2
1:A:940:SER:HB2	1:A:1022:LEU:CD2	0.43	2.44	5	1
1:A:932:LEU:CD2	1:A:962:LEU:HD13	0.43	2.39	13	1
1:A:962:LEU:HD11	1:A:991:LEU:HG	0.43	1.91	16	2
1:A:1028:LEU:O	1:A:1029:ALA:C	0.43	2.57	17	19
1:A:1036:LEU:O	1:A:1037:ASP:C	0.43	2.56	1	3
1:A:995:LEU:O	1:A:999:ILE:HD12	0.43	2.13	10	1
1:A:1013:LEU:HD12	1:A:1017:TYR:HD1	0.43	1.74	21	1
1:A:932:LEU:CD1	1:A:936:VAL:HG23	0.43	2.43	7	2
1:A:973:LEU:HD21	1:A:984:ILE:CG2	0.43	2.44	3	1
1:A:987:ALA:HB3	1:A:1035:LEU:CD2	0.43	2.43	12	1
1:A:1010:MET:O	1:A:1010:MET:HE1	0.43	2.13	17	1
1:A:955:VAL:O	1:A:955:VAL:O 1:A:958:VAL:N		2.51	22	2



				Mo	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:973:LEU:N	1:A:974:PRO:HD2	0.43	2.29	4	11
1:A:952:VAL:HG23	1:A:1006:GLN:CG	0.43	2.44	24	1
1:A:1002:MET:SD	1:A:1002:MET:C	0.43	2.97	19	4
1:A:1014:GLN:C	1:A:1016:GLU:N	0.43	2.72	20	6
1:A:943:ILE:CD1	1:A:951:TYR:CE1	0.43	2.88	9	1
1:A:962:LEU:CD2	1:A:991:LEU:HD11	0.43	2.42	10	1
1:A:1010:MET:CE	1:A:1010:MET:O	0.43	2.66	17	1
1:A:998:LEU:O	1:A:1002:MET:N	0.43	2.47	19	1
1:A:980:THR:CB	1:A:1038:VAL:HG22	0.42	2.44	2	1
1:A:1012:SER:O	1:A:1013:LEU:C	0.42	2.58	6	4
1:A:1010:MET:O	1:A:1011:THR:HB	0.42	2.14	8	2
1:A:933:VAL:HG21	1:A:1032:ALA:HB3	0.42	1.91	9	1
1:A:980:THR:O 1:A:980:THR:OG1		0.42	2.35	9	1
1:A:929:VAL:HG23 1:A:965:LEU:HD11		0.42	1.90	10	1
1:A:1039:ILE:O 1:A:1043:ARG:N		0.42	2.48	10	1
1:A:1010:MET:O 1:A:1011:THR:C		0.42	2.57	15	1
1:A:940:SER:OG 1:A:1022:LEU:HD23		0.42	2.14	4	1
1:A:952:VAL:CG2 1:A:1006:GLN:HG3		0.42	2.44	7	1
1:A:978:ALA:O	LA:O 1:A:979:SER:C		2.58	8	1
1:A:955:VAL:O	1:A:955:VAL:O 1:A:958:VAL:HG12		2.14	21	1
1:A:962:LEU:CD2	1:A:991:LEU:CG	0.42	2.97	2	1
1:A:958:VAL:O	1:A:961:ALA:HB3	0.42	2.15	24	1
1:A:998:LEU:O	1:A:998:LEU:HD13	0.42	2.14	5	1
1:A:955:VAL:O	1:A:957:GLU:N	0.42	2.52	2	3
1:A:1009:VAL:C	1:A:1011:THR:N	0.42	2.72	5	5
1:A:939:MET:O	1:A:940:SER:C	0.42	2.58	24	7
1:A:943:ILE:HG12	1:A:954:MET:CE	0.42	2.45	8	2
1:A:1033:LYS:O	1:A:1034:ASN:C	0.42	2.57	12	1
1:A:1024:ALA:O	1:A:1028:LEU:N	0.42	2.46	19	1
1:A:989:LYS:O	1:A:993:SER:N	0.42	2.51	20	1
1:A:927:GLU:C	1:A:929:VAL:N	0.42	2.72	25	1
1:A:927:GLU:O	1:A:928:ASN:C	0.42	2.58	12	5
1:A:926:TYR:CE2	1:A:1036:LEU:CD2	0.42	2.98	3	2
1:A:1002:MET:C	1:A:1002:MET:SD	0.42	2.98	16	4
1:A:1000:ASN:O	1:A:1001:LYS:C	0.42	2.58	16	6
1:A:1009:VAL:HG23	1:A:1014:GLN:NE2	0.42	2.30	14	1
1:A:983:GLU:HG2	1:A:1038:VAL:HG21	0.42	1.92	20	1
1:A:994:ASP:HB2	1:A:1028:LEU:CD1	0.42	2.43	24	1
1:A:964:THR:HG22	1:A:968:THR:CG2	0.42	2.43	8	1
1:A:1044:LEU:O	1:A:1045:LYS:C	0.42	2.57	17	6
1:A:929:VAL:HG12	1:A:930:THR:N	0.42	2.30	11	2



		Cl_{2}	$\mathbf{D}^{\mathbf{i}}_{\mathbf{i}}$	Mo	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:965:LEU:HD12	1:A:991:LEU:CD2	0.42	2.45	11	1
1:A:933:VAL:HG23	1:A:934:LYS:N	0.42	2.30	12	1
1:A:973:LEU:HD23	1:A:973:LEU:HA	0.42	1.72	14	4
1:A:1005:ALA:O	1:A:1009:VAL:N	0.42	2.53	18	1
1:A:1002:MET:HG3	1:A:1003:LYS:N	0.42	2.30	19	2
1:A:933:VAL:C	1:A:935:ALA:N	0.42	2.71	1	1
1:A:964:THR:O	1:A:965:LEU:C	0.42	2.58	8	2
1:A:1022:LEU:O	1:A:1023:THR:C	0.42	2.58	24	2
1:A:969:VAL:HG21	1:A:988:GLN:NE2	0.41	2.29	2	2
1:A:1000:ASN:C	1:A:1002:MET:N	0.41	2.72	3	3
1:A:927:GLU:O	1:A:930:THR:OG1	0.41	2.39	8	4
1:A:990:LEU:O	1:A:994:ASP:OD1	0.41	2.38	11	1
1:A:973:LEU:HD22	1:A:981:HIS:NE2	0.41	2.29	14	1
1:A:992:ASN:O 1:A:993:SER:C		0.41	2.59	21	2
1:A:955:VAL:O 1:A:956:LYS:C		0.41	2.58	2	9
1:A:982:ARG:O 1:A:983:GLU:C		0.41	2.57	8	1
1:A:950:GLU:O 1:A:954:MET:CB		0.41	2.68	10	1
1:A:928:ASN:OD1 1:A:961:ALA:O		0.41	2.38	11	1
1:A:924:LYS:O 1:A:928:ASN:OD1		0.41	2.38	16	2
1:A:926:TYR:CZ 1:A:1036:LEU:HD11		0.41	2.49	25	1
1:A:984:ILE:CD1	1:A:1039:ILE:HG13	0.41	2.44	24	2
1:A:965:LEU:HD23	1:A:969:VAL:CG2	0.41	2.45	14	1
1:A:962:LEU:CD2	1:A:991:LEU:HG	0.41	2.44	2	1
1:A:981:HIS:O	1:A:984:ILE:N	0.41	2.53	4	1
1:A:1031:ASP:O	1:A:1034:ASN:ND2	0.41	2.54	5	1
1:A:967:ALA:O	1:A:970:ASP:CB	0.41	2.68	12	1
1:A:1033:LYS:O	1:A:1037:ASP:N	0.41	2.45	12	1
1:A:928:ASN:ND2	1:A:968:THR:HG21	0.41	2.30	15	1
1:A:926:TYR:CE1	1:A:1036:LEU:HD23	0.41	2.49	17	1
1:A:995:LEU:CD1	1:A:999:ILE:CG1	0.41	2.98	25	1
1:A:928:ASN:O	1:A:929:VAL:C	0.41	2.59	17	1
1:A:959:GLY:O	1:A:963:ARG:CG	0.41	2.68	19	1
1:A:969:VAL:HG11	1:A:988:GLN:OE1	0.41	2.14	21	1
1:A:1038:VAL:O	1:A:1041:GLN:CG	0.41	2.68	23	1
1:A:952:VAL:CG2	1:A:1006:GLN:HG2	0.41	2.46	24	1
1:A:951:TYR:CE2	1:A:1005:ALA:HB3	0.41	2.50	25	1
1:A:955:VAL:HG12	1:A:956:LYS:N	0.41	2.31	4	1
1:A:943:ILE:HG21	1:A:1018:LYS:NZ	0.41	2.30	8	1
1:A:933:VAL:O	1:A:934:LYS:C	0.41	2.59	22	2
1:A:951:TYR:CZ	1:A:1002:MET:CG	0.41	3.03	2	1
1:A:1041:GLN:OE1	1:A:1041:GLN:OE1 1:A:1041:GLN:O		2.39	5	1



	h h o		D1 (8)	Mod	dels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:980:THR:OG1	1:A:980:THR:O	0.41	2.37	21	1
1:A:969:VAL:HG11	1:A:988:GLN:CD	0.41	2.36	8	1
1:A:1002:MET:SD	1:A:1002:MET:O	0.41	2.79	18	2
1:A:1021:MET:HG3	1:A:1022:LEU:N	0.41	2.30	20	1
1:A:1019:LYS:O	1:A:1023:THR:OG1	0.41	2.39	21	1
1:A:943:ILE:CD1	1:A:951:TYR:CZ	0.41	3.04	23	1
1:A:977:PRO:O 1:A:978:ALA:O		0.41	2.38	3	1
1:A:1004:LEU:C	EU:C 1:A:1006:GLN:N		2.73	20	2
1:A:952:VAL:O 1:A:1002:MET:HE2		0.41	2.15	6	1
1:A:1027:ALA:O	1:A:1031:ASP:OD2	0.41	2.39	7	1
1:A:1028:LEU:O	1:A:1031:ASP:OD1	0.41	2.38	7	1
1:A:936:VAL:HG12 1:A:1025:ALA:H		0.41	1.93	9	1
1:A:939:MET:SD	1:A:954:MET:SD	0.41	3.19	12	1
1:A:980:THR:O	1:A:984:ILE:CB	0.41	2.69	16	1
1:A:1010:MET:SD	1:A:1010:MET:O	0.41	2.79	16	2
1:A:971:GLU:O	1:A:975:VAL:CG2	0.41	2.61	19	1
1:A:1000:ASN:O	1:A:1002:MET:N	0.41	2.54	25	1
1:A:933:VAL:O	1:A:935:ALA:N	0.41	2.54	1	1
1:A:1030:VAL:O 1:A:1031:ASP:C		0.41	2.60	2	1
1:A:1004:LEU:HB3 1:A:1008:TYR:CD2		0.41	2.51	3	1
1:A:957:GLU:O	1:A:958:VAL:C	0.41	2.59	5	1
1:A:952:VAL:HA	1:A:1002:MET:CE	0.41	2.46	6	1
1:A:978:ALA:C	1:A:980:THR:N	0.41	2.74	12	2
1:A:955:VAL:CG1	1:A:999:ILE:HD12	0.41	2.46	13	1
1:A:1008:TYR:CD1	1:A:1013:LEU:HD12	0.41	2.51	20	1
1:A:932:LEU:HG	1:A:933:VAL:N	0.40	2.31	6	3
1:A:923:ASP:C	1:A:925:VAL:N	0.40	2.74	13	1
1:A:1044:LEU:HA	1:A:1047:ILE:CG1	0.40	2.46	13	1
1:A:982:ARG:O	1:A:986:MET:N	0.40	2.50	25	1
1:A:1041:GLN:HA	1:A:1044:LEU:CD2	0.40	2.46	2	1
1:A:948:PRO:O	1:A:1006:GLN:OE1	0.40	2.39	8	1
1:A:978:ALA:HB1	1:A:981:HIS:CE1	0.40	2.52	21	1
1:A:1011:THR:O	1:A:1012:SER:HB3	0.40	2.16	24	1
1:A:943:ILE:O	1:A:946:ALA:N	0.40	2.55	4	1
1:A:948:PRO:HA	1:A:1006:GLN:OE1	0.40	2.16	8	1
1:A:932:LEU:CD2	1:A:965:LEU:HD22	0.40	2.46	10	1
1:A:1011:THR:O	1:A:1012:SER:HB2	0.40	2.16	10	1
1:A:1014:GLN:OE1	1:A:1015:GLN:N	0.40	2.54	2	1
1:A:962:LEU:HD13	1:A:995:LEU:HD11	0.40	1.92	7	1
1:A:980:THR:O	1:A:981:HIS:O	0.40	2.40	9	1
1:A:1009:VAL:O	1:A:1011:THR:O	0.40	2.38	19	1



Atom 1	Atom 2	$Clack(\lambda)$	Distance(Å)	Moo	lels
Atom-1	Atom-2	Clash(A)	Distance(A)	Worst	Total
1:A:951:TYR:CE1	1:A:1002:MET:HB2	0.40	2.52	23	1
1:A:1021:MET:SD	1:A:1021:MET:C	0.40	3.00	2	1
1:A:932:LEU:CD1	1:A:936:VAL:CG2	0.40	2.99	7	1
1:A:978:ALA:O	1:A:980:THR:N	0.40	2.54	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	Perc	entiles	
1	А	126/139~(91%)	$93 \pm 4 \ (74 \pm 3\%)$	$30\pm4~(23\pm3\%)$	4 ± 1 ($3\pm1\%$)	7	40
All	All	3150/3475~(91%)	2317~(74%)	738 (23%)	95~(3%)	7	40

All 23 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	\mathbf{Res}	Type	Models (Total)
1	А	1012	SER	14
1	А	1011	THR	8
1	А	978	ALA	7
1	А	953	PRO	7
1	А	1010	MET	7
1	А	1014	GLN	7
1	А	979	SER	6
1	А	1047	ILE	6
1	А	982	ARG	5
1	А	1015	GLN	5
1	А	981	HIS	4
1	А	993	SER	3
1	А	939	MET	3
1	А	945	PRO	2
1	А	1008	TYR	2
1	А	1013	LEU	2
1	А	938	GLU	1
1	А	1045	LYS	1



Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	А	931	GLY	1
1	А	1034	ASN	1
1	А	954	MET	1
1	А	1009	VAL	1
1	А	936	VAL	1

6.3.2 Protein sidechains (i)

In the following table, the Percentiles column shows the percent side chain 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 side chain conformation was analysed and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Perce	entiles
1	А	110/122~(90%)	$71 \pm 4 (65 \pm 4\%)$	$39 \pm 4 (35 \pm 4\%)$	1	9
All	All	2750/3050 (90%)	1785~(65%)	965~(35%)	1	9

All 86 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	А	932	LEU	25
1	А	938	GLU	25
1	А	942	LYS	25
1	А	960	LEU	25
1	А	973	LEU	25
1	А	990	LEU	25
1	А	943	ILE	24
1	А	995	LEU	24
1	А	1010	MET	24
1	А	1036	LEU	24
1	А	950	GLU	23
1	А	957	GLU	21
1	А	972	SER	21
1	А	944	GLN	20
1	А	963	ARG	19
1	А	985	GLU	19
1	А	993	SER	19
1	А	1019	LYS	19
1	А	1018	LYS	18
1	А	954	MET	18



Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	А	1013	LEU	18
1	А	956	LYS	17
1	А	952	VAL	16
1	А	976	LEU	16
1	А	1002	MET	16
1	А	965	LEU	14
1	А	989	LYS	14
1	А	1040	ASP	14
1	А	934	LYS	14
1	А	1045	LYS	14
1	А	923	ASP	13
1	А	958	VAL	13
1	А	979	SER	13
1	А	1001	LYS	12
1	А	941	SER	12
1	А	998	LEU	12
1	А	1033	LYS	12
1	А	1012	SER	11
1	А	1015	GLN	11
1	А	1021	MET	11
1	А	1014	GLN	11
1	А	924	LYS	11
1	А	982	ARG	10
1	А	986	MET	10
1	А	1007	GLN	10
1	А	1046	MET	10
1	А	962	LEU	9
1	А	994	ASP	9
1	А	1006	GLN	9
1	А	1011	THR	9
1	А	949	GLU	9
1	А	1016	GLU	8
1	А	1026	HIS	8
1	A	980	THR	8
1	A	1003	LYS	7
1	A	1028	LEU	7
1	А	1043	ARG	7
1	А	$10\overline{41}$	GLN	7
1	A	1022	LEU	7
1	A	933	VAL	6
1	A	928	ASN	5
1	А	992	ASN	5



Mol	Chain	\mathbf{Res}	Type	Models (Total)
1	А	936	VAL	5
1	А	997	GLU	5
1	А	922	ASN	4
1	А	981	HIS	4
1	А	1035	LEU	4
1	А	966	LEU	4
1	А	983	GLU	4
1	А	988	GLN	4
1	А	1044	LEU	4
1	А	951	TYR	3
1	А	927	GLU	3
1	А	1038	VAL	2
1	А	984	ILE	2
1	А	939	MET	2
1	А	940	SER	2
1	А	955	VAL	2
1	А	1031	ASP	2
1	А	991	LEU	2
1	А	1017	TYR	2
1	A	1004	LEU	2
1	A	968	THR	2
1	A	1008	TYR	1
1	A	926	TYR	1
1	A	930	THR	1

Continued from previous page...

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

