Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Jun 11, 2024 – 07:34 PM EDT

PDB ID	:	1PDX
Title	:	PUTIDAREDOXIN
Authors	:	Pochapsky, T.C.; Jain, N.U.; Kuti, M.; Lyons, T.A.; Heymont, J.
Deposited on	:	1999-02-15

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:

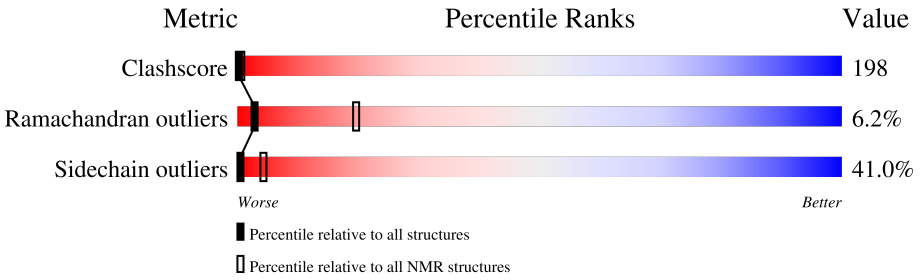
MolProbity	:	4.02b-467
Mogul	:	2022.3.0, CSD as543be (2022)
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.36.2

1 Overall quality at a glance (i)

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

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	158937	12864
Ramachandran outliers	154571	11451
Sidechain outliers	154315	11428

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the experimental data. The red, orange, yellow and green segments indicate the fraction of residues that contain outliers for >=3, 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. A cyan segment indicates the fraction of residues that are not part of the well-defined cores, and a grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions <=5%

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	106	

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 14 models. Model 3 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:2-A:32, A:47-A:106 (91)	0.32	3

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 2 clusters and 5 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	3, 6, 7, 10, 11, 12, 13
2	8, 14
Single-model clusters	1; 2; 4; 5; 9

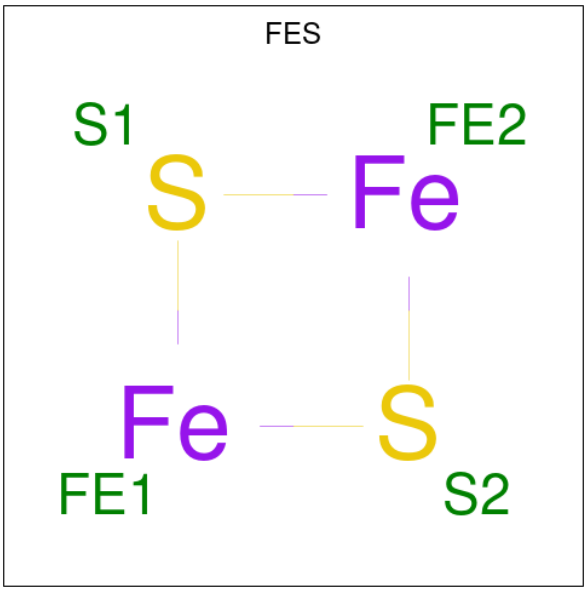
3 Entry composition (i)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 1568 atoms, of which 770 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called PROTEIN (PUTIDAREDOXIN).

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	106	1564	488	770	136	161	9	0

- Molecule 2 is FE2/S2 (INORGANIC) CLUSTER (three-letter code: FES) (formula: Fe_2S_2).



Mol	Chain	Residues	Atoms		
			Total	Fe	S
2	A	1	4	2	2

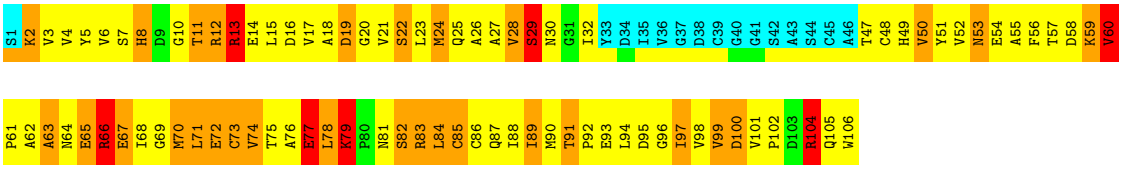
4 Residue-property plots (i)

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: PROTEIN (PUTIDAREDOXIN)

Chain A:



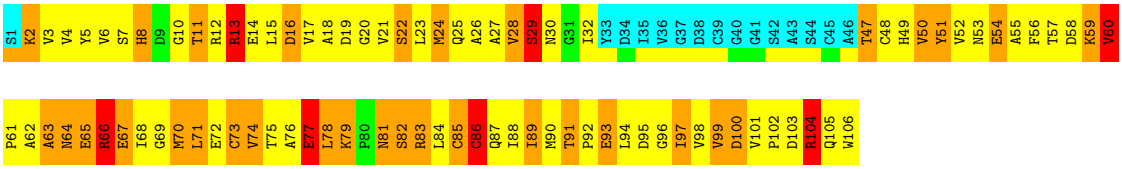
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: PROTEIN (PUTIDAREDOXIN)

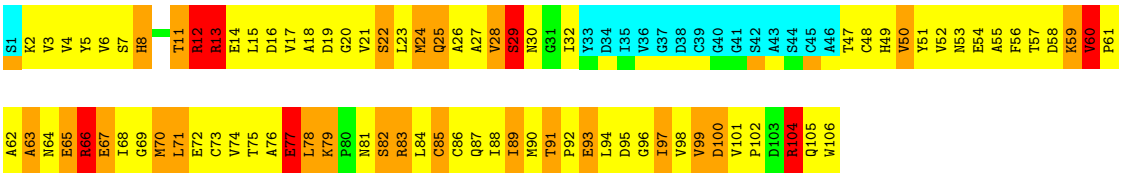
Chain A:



4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: PROTEIN (PUTIDAREDOXIN)

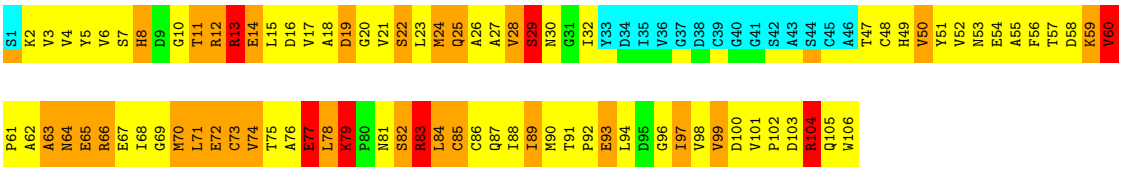
Chain A:



4.2.3 Score per residue for model 3 (medoid)

- Molecule 1: PROTEIN (PUTIDAREDOXIN)

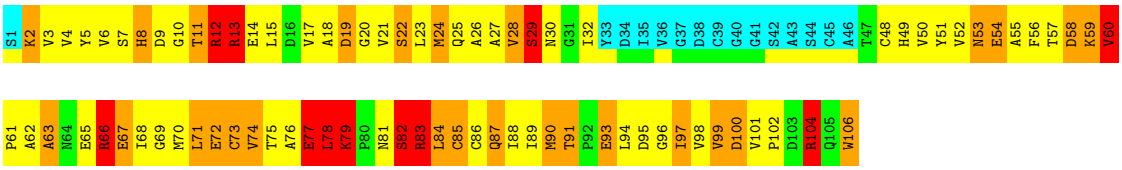
Chain A:



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: PROTEIN (PUTIDAREDOXIN)

Chain A:



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: PROTEIN (PUTIDAREDOXIN)

Chain A:

4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: PROTEIN (PUTIDAREDOXIN)

Chain A: • 47% 28% 7% 14%

S1 K2 V3 V4 Y5 V6 S7 H8 D9 G10 T11 R12 R13 E14 L15 D16 V17 A18 D19 G20 V21 S22 L23 M24 Q25 A26 A27 V28 S29 N30 G31 I32 Y33 D34 I35 V36 G37 D38 C39 G40 G41 S42 A43 S44 C45 A46 T47 C48 H49 V50 Y51 V52 N53 E54 A55 F56 T57 D58 K59 V60

P61 A62 A63 N64 E65 R66 E67 I68 G69 M70 L71 E72 C73 V74 T75 A76 E77 L78 K79 P80 N81 S82 R83 L84 C85 C86 Q87 I88 I89 M90 T91 P92 E93 L94 D95 G96 I97 V98 V99 D100 V101 P102 D103 R104 Q105 W106

4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: PROTEIN (PUTIDAREDOXIN)

Chain A: 6% 49% 25% 6% 14%

S1 K2 V3 V4 Y5 V6 S7 H8 D9 G10 T11 R12 R13 E14 L15 D16 V17 A18 D19 G20 V21 S22 L23 M24 Q25 A26 A27 V28 S29 N30 G31 I32 Y33 D34 I35 V36 G37 D38 C39 G40 G41 S42 A43 S44 C45 A46 T47 C48 H49 V50 Y51 V52 N53 E54 A55 F56 T57 D58 K59 V60

P61 A62 A63 N64 E65 R66 E67 I68 G69 M70 L71 E72 C73 V74 T75 A76 E77 L78 K79 P80 N81 S82 R83 L84 C85 C86 Q87 I88 I89 M90 T91 P92 E93 L94 D95 G96 I97 V98 V99 D100 V101 P102 D103 R104 Q105 W106

4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: PROTEIN (PUTIDAREDOXIN)

Chain A: • 46% 30% 6% 14%

S1 K2 V3 V4 Y5 V6 S7 H8 D9 G10 T11 R12 R13 E14 L15 D16 V17 A18 D19 G20 V21 S22 L23 M24 Q25 A26 A27 V28 S29 N30 G31 I32 Y33 D34 I35 V36 G37 D38 C39 G40 G41 S42 A43 S44 C45 A46 T47 C48 H49 V50 Y51 V52 N53 E54 A55 F56 T57 D58 K59 V60

P61 A62 A63 N64 E65 R66 E67 I68 G69 M70 L71 E72 C73 V74 T75 A76 E77 L78 K79 P80 N81 S82 R83 L84 C85 C86 Q87 I88 I89 M90 T91 P92 E93 L94 D95 G96 I97 V98 V99 D100 V101 P102 D103 R104 Q105 W106

4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: PROTEIN (PUTIDAREDOXIN)

Chain A: • 47% 26% 8% 14%

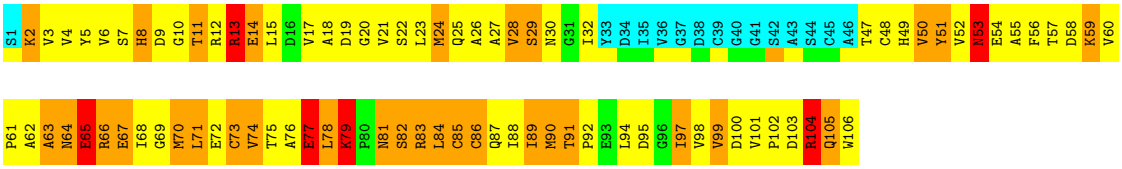
S1 K2 V3 V4 Y5 V6 S7 H8 D9 G10 T11 R12 R13 E14 L15 D16 V17 A18 D19 G20 V21 S22 L23 M24 Q25 A26 A27 V28 S29 N30 G31 I32 Y33 D34 I35 V36 G37 D38 C39 G40 G41 S42 A43 S44 C45 A46 T47 C48 H49 V50 Y51 V52 N53 E54 A55 F56 T57 D58 K59 V60

P61 A62 A63 N64 E65 R66 E67 I68 G69 M70 L71 E72 C73 V74 T75 A76 E77 L78 K79 P80 N81 S82 R83 L84 C85 C86 Q87 I88 I89 M90 T91 P92 E93 L94 D95 G96 I97 V98 V99 D100 V101 P102 D103 R104 Q105 W106

4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: PROTEIN (PUTIDAREDOXIN)

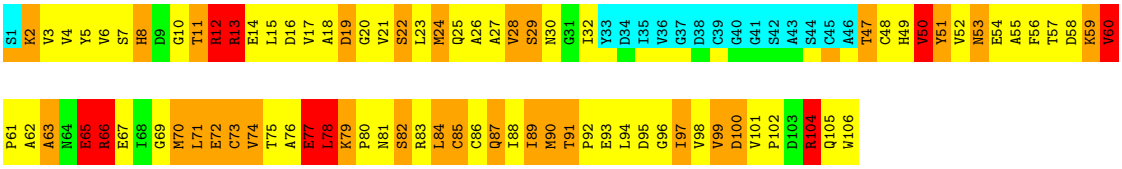
Chain A: 5% 46% 29% 6% 14%



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: PROTEIN (PUTIDAREDOXIN)

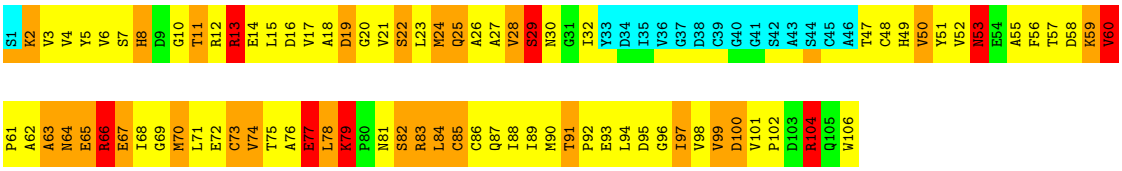
Chain A: 5% 45% 27% 8% 14%



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: PROTEIN (PUTIDAREDOXIN)

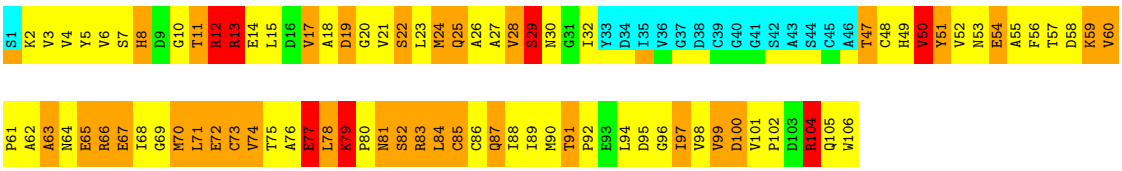
Chain A: 6% 48% 25% 8% 14%



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: PROTEIN (PUTIDAREDOXIN)

Chain A: 5% 43% 31% 7% 14%



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: PROTEIN (PUTIDAREDOXIN)

Chain A: 6% 47% 25% 8% 14%

S1 K2 V3 V4 Y5 V6 S7 H8 D9 G10 T11 R12 R13 E14 L15 D16 V17 A18 D19 G20 V21 S22 L23 M24 Q25 A26 A27 V28 S29 N30 G31 I32 Y33 D34 I35 V36 G37 D38 C39 G40 G41 S42 A43 S44 C45 A46 T47 C48 H49 V50 Y51 V52 N53 E54 A55 F56 T57 D58 K59 V60

P61 A62 A63 N64 E65 R66 E67 I68 G69 M70 L71 E72 C73 V74 T75 A76 E77 L78 K79 P80 N81 S82 R83 L84 C85 C86 Q87 I88 I89 M90 T91 P92 E93 L94 D95 G96 I97 V98 V99 D100 V101 P102 D103 R104 Q105 W106

5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

The models were refined using the following method: *DG,SA*.

Of the 80 calculated structures, 14 were deposited, based on the following criterion: *NO NOE VIOL.>0.5 A, NO DIHEDRAL VIOLATION > 5 DEG.*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	3.1
Felix	structure solution	
XPLOR	structure solution	

No chemical shift data was provided.

6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

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

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	1.09±0.01	0±0/709 (0.0± 0.0%)	1.37±0.02	4±1/963 (0.5± 0.1%)
All	All	1.09	0/9926 (0.0%)	1.37	63/13482 (0.5%)

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	4.4±0.6
All	All	0	62

There are no bond-length outliers.

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	79	LYS	N-CA-CB	-7.34	97.39	110.60	4	14
1	A	77	GLU	N-CA-CB	-5.63	100.47	110.60	13	13
1	A	51	TYR	N-CA-CB	-5.56	100.59	110.60	11	7
1	A	60	VAL	N-CA-CB	-5.38	99.67	111.50	4	13
1	A	29	SER	N-CA-CB	-5.32	102.52	110.50	3	13
1	A	82	SER	N-CA-CB	-5.16	102.76	110.50	4	1
1	A	78	LEU	CA-CB-CG	-5.02	103.75	115.30	11	2

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	66	ARG	Sidechain	14
1	A	13	ARG	Sidechain	13
1	A	104	ARG	Sidechain	13
1	A	83	ARG	Sidechain	11
1	A	12	ARG	Sidechain	11

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	699	689	689	275±19
2	A	4	0	0	1±1
All	All	9842	9646	9646	3851

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 198.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:VAL:HG13	1:A:21:VAL:HG12	1.14	1.18	8	5
1:A:60:VAL:HG11	1:A:88:ILE:HD13	1.05	1.28	9	2
1:A:49:HIS:NE2	1:A:76:ALA:HB3	1.03	1.68	14	14
1:A:97:ILE:HD12	1:A:98:VAL:N	1.03	1.67	11	12
1:A:60:VAL:HG13	1:A:61:PRO:HD2	1.01	1.32	4	14
1:A:56:PHE:CB	1:A:97:ILE:HD13	1.01	1.84	2	12
1:A:71:LEU:HD11	1:A:82:SER:CB	1.00	1.85	9	14
1:A:49:HIS:CE1	1:A:74:VAL:HG21	0.98	1.92	9	9
1:A:70:MET:SD	2:A:107:FES:S1	0.98	2.62	4	3
1:A:17:VAL:HG13	1:A:21:VAL:CG1	0.98	1.86	6	8
1:A:59:LYS:CB	1:A:94:LEU:HD21	0.98	1.89	7	14
1:A:60:VAL:HG23	1:A:94:LEU:HD13	0.96	1.34	12	14
1:A:17:VAL:HG22	1:A:26:ALA:CB	0.96	1.90	14	14
1:A:71:LEU:O	1:A:74:VAL:HG22	0.96	1.59	5	14
1:A:60:VAL:HG23	1:A:94:LEU:CD1	0.93	1.92	1	14
1:A:71:LEU:HD11	1:A:82:SER:HB3	0.93	1.38	9	14
1:A:60:VAL:HG22	1:A:89:ILE:O	0.93	1.64	7	14
1:A:60:VAL:HG11	1:A:88:ILE:HG23	0.91	1.42	7	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:LEU:HD21	1:A:32:ILE:CD1	0.91	1.96	9	9
1:A:90:MET:SD	1:A:97:ILE:HG21	0.91	2.06	13	11
1:A:52:VAL:HB	1:A:57:THR:HG22	0.91	1.42	3	14
1:A:17:VAL:HG12	1:A:21:VAL:HB	0.90	1.42	13	9
1:A:78:LEU:HD13	1:A:82:SER:OG	0.90	1.66	9	1
1:A:49:HIS:ND1	1:A:74:VAL:HG21	0.87	1.84	9	2
1:A:48:CYS:HB2	1:A:84:LEU:HD13	0.87	1.45	9	1
1:A:67:GLU:HA	1:A:70:MET:HE2	0.87	1.44	4	7
1:A:15:LEU:HD11	1:A:27:ALA:HA	0.86	1.45	12	14
1:A:15:LEU:HD21	1:A:32:ILE:HD11	0.86	1.45	4	13
1:A:71:LEU:CD2	1:A:78:LEU:HD11	0.85	2.01	12	14
1:A:15:LEU:HD11	1:A:32:ILE:HD12	0.85	1.48	14	13
1:A:53:ASN:O	1:A:57:THR:HG23	0.85	1.69	7	14
1:A:67:GLU:HG2	1:A:68:ILE:HD12	0.85	1.47	12	2
1:A:57:THR:HG21	1:A:81:ASN:HB2	0.84	1.49	4	14
1:A:3:VAL:HG22	1:A:97:ILE:CG2	0.84	2.02	10	14
1:A:59:LYS:HB3	1:A:94:LEU:HD21	0.84	1.45	4	14
1:A:2:LYS:O	1:A:97:ILE:HG22	0.84	1.73	5	14
1:A:17:VAL:HG22	1:A:26:ALA:HB3	0.83	1.50	14	6
1:A:70:MET:SD	2:A:107:FES:S2	0.83	2.75	2	4
1:A:71:LEU:HD22	1:A:78:LEU:HD11	0.83	1.51	13	14
1:A:63:ALA:HB3	1:A:67:GLU:OE1	0.83	1.71	2	1
1:A:50:VAL:HG11	1:A:85:CYS:SG	0.82	2.14	5	1
1:A:3:VAL:HG22	1:A:97:ILE:HG21	0.82	1.49	12	14
1:A:77:GLU:CG	1:A:77:GLU:O	0.81	2.27	4	14
1:A:83:ARG:NE	1:A:88:ILE:HD11	0.81	1.90	8	2
1:A:76:ALA:HB2	1:A:104:ARG:HB3	0.81	1.51	2	3
1:A:56:PHE:HB2	1:A:97:ILE:HD13	0.81	1.52	2	12
1:A:76:ALA:HB2	1:A:104:ARG:CB	0.81	2.06	2	2
1:A:67:GLU:HG3	1:A:68:ILE:HD12	0.81	1.52	6	3
1:A:60:VAL:HG13	1:A:61:PRO:CD	0.80	2.05	4	14
1:A:51:TYR:CE1	1:A:82:SER:OG	0.80	2.34	12	12
1:A:52:VAL:HG23	1:A:83:ARG:HB2	0.79	1.54	10	10
1:A:17:VAL:HG21	1:A:23:LEU:HD23	0.79	1.54	6	7
1:A:15:LEU:HD22	1:A:30:ASN:CG	0.79	1.98	14	14
1:A:84:LEU:HD23	1:A:84:LEU:N	0.78	1.93	11	6
1:A:51:TYR:OH	1:A:78:LEU:HD22	0.78	1.78	9	1
1:A:71:LEU:CD2	1:A:78:LEU:HD21	0.78	2.09	9	1
1:A:3:VAL:HA	1:A:97:ILE:HG23	0.77	1.55	14	13
1:A:75:THR:O	1:A:75:THR:HG22	0.77	1.80	11	14
1:A:52:VAL:HG23	1:A:83:ARG:CB	0.77	2.10	2	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:VAL:HG23	1:A:51:TYR:N	0.75	1.95	2	14
1:A:15:LEU:HD11	1:A:27:ALA:CA	0.75	2.11	12	13
1:A:56:PHE:HB3	1:A:97:ILE:HD12	0.74	1.57	5	2
1:A:97:ILE:HD12	1:A:98:VAL:H	0.74	1.41	14	12
1:A:48:CYS:O	1:A:50:VAL:HG13	0.74	1.83	2	12
1:A:49:HIS:CD2	1:A:102:PRO:CG	0.74	2.71	2	13
1:A:51:TYR:CD1	1:A:79:LYS:HG3	0.73	2.17	12	7
1:A:78:LEU:HG	1:A:82:SER:OG	0.73	1.83	2	13
1:A:15:LEU:HD11	1:A:32:ILE:CD1	0.73	2.13	2	5
1:A:48:CYS:CB	1:A:84:LEU:HD13	0.73	2.13	9	1
1:A:17:VAL:CG1	1:A:21:VAL:CG1	0.73	2.66	13	10
1:A:91:THR:HG23	1:A:94:LEU:HD12	0.73	1.59	10	10
1:A:63:ALA:HB3	1:A:67:GLU:HB3	0.73	1.60	12	1
1:A:48:CYS:SG	1:A:84:LEU:HD13	0.72	2.24	5	10
1:A:3:VAL:HG21	1:A:17:VAL:CG2	0.72	2.14	4	13
1:A:17:VAL:HG12	1:A:21:VAL:CB	0.72	2.13	13	9
1:A:49:HIS:CE1	1:A:51:TYR:CE2	0.72	2.78	4	11
1:A:56:PHE:CD2	1:A:97:ILE:HB	0.72	2.20	5	14
1:A:49:HIS:CE1	1:A:51:TYR:CZ	0.72	2.78	5	14
1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:HD22	0.71	2.00	7	1
1:A:76:ALA:HB2	1:A:104:ARG:HB2	0.71	1.61	9	9
1:A:74:VAL:HG21	1:A:78:LEU:HD12	0.71	1.63	5	5
1:A:17:VAL:HG21	1:A:23:LEU:CD2	0.71	2.16	12	4
1:A:51:TYR:O	1:A:100:ASP:N	0.71	2.24	13	14
1:A:60:VAL:CG1	1:A:88:ILE:HD13	0.71	2.12	9	8
1:A:17:VAL:HG21	1:A:23:LEU:HD22	0.71	1.63	12	2
1:A:59:LYS:HB2	1:A:94:LEU:HD21	0.71	1.63	7	11
1:A:60:VAL:CG1	1:A:61:PRO:HD2	0.71	2.14	8	8
1:A:97:ILE:HD12	1:A:97:ILE:C	0.70	2.05	11	10
1:A:67:GLU:HA	1:A:70:MET:HE3	0.70	1.64	9	2
1:A:14:GLU:C	1:A:15:LEU:HD23	0.69	2.07	14	8
1:A:48:CYS:SG	1:A:84:LEU:HD22	0.69	2.28	2	1
1:A:49:HIS:CE1	1:A:51:TYR:CE1	0.69	2.80	9	2
1:A:53:ASN:OD1	1:A:98:VAL:N	0.68	2.26	7	7
1:A:60:VAL:CG2	1:A:94:LEU:HD13	0.68	2.17	7	14
1:A:17:VAL:HG13	1:A:26:ALA:HB2	0.68	1.63	10	9
1:A:23:LEU:HD21	1:A:90:MET:SD	0.67	2.30	3	6
1:A:51:TYR:CE2	1:A:82:SER:OG	0.67	2.47	2	2
1:A:71:LEU:CD1	1:A:78:LEU:HD21	0.67	2.19	8	10
1:A:91:THR:OG1	1:A:93:GLU:HG3	0.67	1.88	4	6
1:A:71:LEU:HD11	1:A:82:SER:HB2	0.67	1.64	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:ARG:C	1:A:84:LEU:HD23	0.67	2.10	6	9
1:A:71:LEU:HD22	1:A:78:LEU:HD21	0.66	1.67	9	1
1:A:56:PHE:O	1:A:60:VAL:HB	0.66	1.90	7	14
1:A:15:LEU:CD2	1:A:32:ILE:HD11	0.66	2.20	7	10
1:A:49:HIS:HA	1:A:84:LEU:HD22	0.66	1.67	11	6
1:A:17:VAL:CG1	1:A:21:VAL:HG12	0.66	2.12	14	5
1:A:53:ASN:N	1:A:53:ASN:ND2	0.66	2.44	7	7
1:A:3:VAL:CG1	1:A:5:TYR:CE1	0.66	2.79	12	14
1:A:3:VAL:HG11	1:A:23:LEU:HD22	0.66	1.67	5	13
1:A:70:MET:HG3	1:A:84:LEU:HD12	0.66	1.65	1	7
1:A:3:VAL:HG21	1:A:17:VAL:HG23	0.65	1.69	13	9
1:A:3:VAL:CG1	1:A:23:LEU:HD22	0.65	2.21	2	12
1:A:49:HIS:CD2	1:A:102:PRO:HG3	0.65	2.27	12	13
1:A:71:LEU:HD22	1:A:78:LEU:CD1	0.65	2.22	13	13
1:A:63:ALA:HB3	1:A:67:GLU:CB	0.65	2.21	10	2
1:A:83:ARG:HD3	1:A:88:ILE:HD11	0.65	1.68	4	2
1:A:48:CYS:SG	1:A:84:LEU:HD12	0.64	2.32	7	2
1:A:59:LYS:C	1:A:94:LEU:HD11	0.64	2.12	4	14
1:A:51:TYR:CE2	1:A:77:GLU:O	0.64	2.50	9	2
1:A:8:HIS:N	1:A:8:HIS:ND1	0.64	2.45	4	14
1:A:49:HIS:CD2	1:A:76:ALA:HB3	0.64	2.27	5	9
1:A:50:VAL:HG22	1:A:83:ARG:O	0.64	1.91	11	9
1:A:71:LEU:CD1	1:A:82:SER:HB3	0.64	2.18	9	14
1:A:4:VAL:HG22	1:A:14:GLU:CG	0.64	2.22	3	1
1:A:49:HIS:CE1	1:A:51:TYR:OH	0.64	2.50	5	10
1:A:90:MET:HE3	1:A:90:MET:HA	0.64	1.68	8	4
1:A:49:HIS:CD2	1:A:74:VAL:HB	0.63	2.28	5	3
1:A:55:ALA:O	1:A:59:LYS:CD	0.63	2.47	11	14
1:A:5:TYR:CD1	1:A:32:ILE:CD1	0.63	2.82	2	6
1:A:15:LEU:CD1	1:A:30:ASN:OD1	0.63	2.46	6	2
1:A:18:ALA:O	1:A:90:MET:O	0.63	2.16	11	14
1:A:83:ARG:CD	1:A:88:ILE:HD11	0.63	2.22	7	2
1:A:17:VAL:HG22	1:A:26:ALA:HB2	0.63	1.66	6	4
1:A:60:VAL:HG23	1:A:94:LEU:HD12	0.63	1.71	1	9
1:A:71:LEU:HD11	1:A:78:LEU:HD21	0.63	1.69	7	9
1:A:56:PHE:CE2	1:A:97:ILE:HA	0.62	2.29	5	14
1:A:56:PHE:CE2	1:A:97:ILE:CA	0.62	2.82	7	14
1:A:106:TRP:CG	1:A:106:TRP:OXT	0.62	2.52	4	1
1:A:15:LEU:HD23	1:A:15:LEU:N	0.62	2.09	14	8
1:A:49:HIS:NE2	1:A:76:ALA:CB	0.62	2.60	9	4
1:A:71:LEU:CG	1:A:82:SER:HB3	0.62	2.24	14	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:VAL:HG13	1:A:21:VAL:HG11	0.62	1.70	12	9
1:A:51:TYR:CE1	1:A:77:GLU:O	0.62	2.52	4	11
1:A:3:VAL:HG21	1:A:17:VAL:CB	0.62	2.25	4	4
1:A:56:PHE:HB3	1:A:97:ILE:HD13	0.62	1.71	9	7
1:A:4:VAL:HG13	1:A:14:GLU:HG3	0.62	1.70	9	2
1:A:84:LEU:O	1:A:86:CYS:N	0.62	2.33	1	14
1:A:56:PHE:CZ	1:A:97:ILE:HA	0.61	2.30	5	4
1:A:53:ASN:HD21	1:A:56:PHE:HB2	0.61	1.54	10	7
1:A:3:VAL:O	1:A:14:GLU:HA	0.61	1.95	4	14
1:A:51:TYR:OH	1:A:78:LEU:HA	0.61	1.96	2	11
1:A:56:PHE:CG	1:A:97:ILE:HD13	0.61	2.30	2	11
1:A:3:VAL:HG21	1:A:17:VAL:HB	0.61	1.70	4	4
1:A:53:ASN:N	1:A:53:ASN:HD22	0.61	1.93	5	7
1:A:91:THR:CB	1:A:92:PRO:CD	0.61	2.79	10	7
1:A:23:LEU:HD21	1:A:90:MET:HG2	0.61	1.73	11	2
1:A:71:LEU:CA	1:A:84:LEU:HD23	0.61	2.25	9	1
1:A:56:PHE:CD2	1:A:94:LEU:HD22	0.61	2.31	7	12
1:A:59:LYS:CB	1:A:94:LEU:CD2	0.61	2.76	4	14
1:A:4:VAL:HG22	1:A:14:GLU:HG3	0.61	1.72	3	2
1:A:56:PHE:HB3	1:A:97:ILE:CD1	0.61	2.26	7	2
1:A:17:VAL:CG2	1:A:26:ALA:HB3	0.60	2.23	2	5
1:A:56:PHE:CD2	1:A:97:ILE:CB	0.60	2.84	7	4
1:A:15:LEU:CD1	1:A:27:ALA:N	0.60	2.64	10	13
1:A:22:SER:O	1:A:25:GLN:N	0.60	2.27	4	14
1:A:60:VAL:HG11	1:A:88:ILE:HD12	0.60	1.72	6	2
1:A:106:TRP:O	1:A:106:TRP:CD2	0.60	2.54	11	4
1:A:106:TRP:OXT	1:A:106:TRP:CD2	0.60	2.54	4	6
1:A:17:VAL:HG22	1:A:26:ALA:HB1	0.60	1.73	11	5
1:A:19:ASP:HB3	1:A:92:PRO:CD	0.60	2.26	11	4
1:A:49:HIS:HE1	1:A:51:TYR:CZ	0.60	2.14	3	12
1:A:77:GLU:O	1:A:77:GLU:HG2	0.59	1.97	4	14
1:A:71:LEU:HD22	1:A:71:LEU:C	0.59	2.17	9	2
1:A:51:TYR:CZ	1:A:77:GLU:O	0.59	2.55	14	14
1:A:67:GLU:CG	1:A:87:GLN:NE2	0.59	2.65	1	1
1:A:51:TYR:O	1:A:100:ASP:HB2	0.59	1.97	9	14
1:A:71:LEU:CD1	1:A:78:LEU:HD11	0.59	2.28	1	13
1:A:15:LEU:HD22	1:A:30:ASN:CB	0.59	2.27	11	9
1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CD2	0.59	2.65	12	9
1:A:83:ARG:NH1	1:A:88:ILE:HD11	0.59	2.12	13	3
1:A:49:HIS:CD2	1:A:102:PRO:HG2	0.59	2.32	2	7
1:A:56:PHE:CD2	1:A:97:ILE:HA	0.59	2.32	4	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:106:TRP:CD2	1:A:106:TRP:OXT	0.59	2.55	3	2
1:A:83:ARG:NH1	1:A:88:ILE:CD1	0.59	2.66	13	1
1:A:50:VAL:CG2	1:A:51:TYR:N	0.59	2.66	3	14
1:A:52:VAL:CG2	1:A:83:ARG:CB	0.59	2.81	2	4
1:A:60:VAL:N	1:A:94:LEU:HD11	0.59	2.12	5	14
1:A:71:LEU:CD2	1:A:78:LEU:CD1	0.59	2.81	4	13
1:A:83:ARG:CZ	1:A:88:ILE:CD1	0.59	2.80	10	5
1:A:65:GLU:O	1:A:69:GLY:N	0.59	2.36	11	7
1:A:2:LYS:HB2	1:A:96:GLY:N	0.58	2.12	11	13
1:A:73:CYS:O	1:A:106:TRP:NE1	0.58	2.35	4	9
1:A:24:MET:N	1:A:85:CYS:SG	0.58	2.76	3	4
1:A:71:LEU:N	1:A:84:LEU:HD11	0.58	2.12	2	1
1:A:70:MET:CE	1:A:87:GLN:CG	0.58	2.81	6	2
1:A:83:ARG:NE	1:A:88:ILE:CD1	0.58	2.66	3	2
1:A:5:TYR:CE1	1:A:32:ILE:CD1	0.58	2.86	2	3
1:A:51:TYR:CD2	1:A:79:LYS:HG3	0.58	2.34	2	1
1:A:76:ALA:HB1	1:A:102:PRO:HB2	0.58	1.75	13	3
1:A:7:SER:N	1:A:11:THR:O	0.58	2.36	11	14
1:A:53:ASN:ND2	1:A:56:PHE:HB2	0.58	2.12	5	7
1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:CD	0.58	2.66	12	3
1:A:17:VAL:HG12	1:A:90:MET:HB2	0.58	1.74	4	1
1:A:27:ALA:HA	1:A:30:ASN:OD1	0.58	1.98	7	2
1:A:4:VAL:HG13	1:A:13:ARG:O	0.58	1.99	5	13
1:A:75:THR:O	1:A:75:THR:CG2	0.57	2.51	4	14
1:A:17:VAL:CG1	1:A:21:VAL:O	0.57	2.52	2	4
1:A:88:ILE:O	1:A:88:ILE:HG22	0.57	1.99	9	5
1:A:59:LYS:HB2	1:A:94:LEU:CD2	0.57	2.29	10	14
1:A:60:VAL:CG2	1:A:89:ILE:O	0.57	2.51	11	14
1:A:58:ASP:OD1	1:A:58:ASP:N	0.57	2.36	4	1
1:A:49:HIS:CE1	1:A:74:VAL:CG2	0.57	2.81	9	1
1:A:17:VAL:CG2	1:A:26:ALA:CB	0.57	2.82	5	10
1:A:90:MET:HA	1:A:90:MET:CE	0.57	2.29	6	8
1:A:60:VAL:HG11	1:A:88:ILE:CD1	0.57	2.30	5	6
1:A:91:THR:OG1	1:A:93:GLU:CG	0.57	2.53	2	5
1:A:70:MET:O	1:A:74:VAL:HG13	0.57	1.99	12	4
1:A:53:ASN:OD1	1:A:98:VAL:CB	0.57	2.52	7	7
1:A:74:VAL:HA	1:A:106:TRP:NE1	0.57	2.15	14	14
1:A:61:PRO:O	1:A:83:ARG:NH2	0.57	2.37	12	8
1:A:74:VAL:HA	1:A:106:TRP:CD1	0.57	2.35	2	7
1:A:106:TRP:CE3	1:A:106:TRP:O	0.57	2.57	5	1
1:A:91:THR:HG22	1:A:92:PRO:HD2	0.57	1.77	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:3:VAL:CG2	1:A:90:MET:HG2	0.57	2.29	3	7
1:A:5:TYR:OH	1:A:23:LEU:CA	0.57	2.53	2	14
1:A:106:TRP:O	1:A:106:TRP:CG	0.57	2.57	6	4
1:A:76:ALA:O	1:A:78:LEU:N	0.57	2.38	4	10
1:A:57:THR:HG21	1:A:81:ASN:CB	0.57	2.29	7	6
1:A:3:VAL:CG2	1:A:90:MET:HG3	0.57	2.30	4	5
1:A:63:ALA:CB	1:A:87:GLN:CG	0.57	2.83	9	2
1:A:5:TYR:OH	1:A:23:LEU:O	0.56	2.21	7	12
1:A:67:GLU:O	1:A:71:LEU:CB	0.56	2.53	7	13
1:A:67:GLU:CA	1:A:70:MET:HE2	0.56	2.29	2	2
1:A:84:LEU:O	1:A:87:GLN:NE2	0.56	2.38	1	1
1:A:5:TYR:CE2	1:A:23:LEU:HB3	0.56	2.35	10	14
1:A:19:ASP:HA	1:A:90:MET:O	0.56	2.00	5	10
1:A:57:THR:HG21	1:A:81:ASN:CG	0.56	2.20	7	6
1:A:106:TRP:OXT	1:A:106:TRP:CG	0.56	2.58	3	8
1:A:76:ALA:CB	1:A:104:ARG:CB	0.56	2.82	2	1
1:A:67:GLU:OE2	1:A:84:LEU:N	0.56	2.39	11	2
1:A:63:ALA:CB	1:A:67:GLU:OE1	0.56	2.53	4	3
1:A:6:VAL:N	1:A:99:VAL:O	0.56	2.38	11	13
1:A:81:ASN:OD1	1:A:81:ASN:O	0.56	2.23	10	6
1:A:3:VAL:HA	1:A:97:ILE:CG2	0.56	2.30	7	3
1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:HD23	0.56	2.15	12	3
1:A:57:THR:HG21	1:A:81:ASN:HD22	0.56	1.61	5	1
1:A:90:MET:HA	1:A:90:MET:HE3	0.56	1.77	6	3
1:A:21:VAL:HG13	1:A:25:GLN:HG2	0.56	1.77	2	4
1:A:55:ALA:C	1:A:56:PHE:CD1	0.56	2.79	12	14
1:A:2:LYS:O	1:A:97:ILE:CG2	0.56	2.53	11	12
1:A:5:TYR:CZ	1:A:27:ALA:HB2	0.56	2.35	11	11
1:A:15:LEU:CD1	1:A:27:ALA:HA	0.56	2.30	2	7
1:A:15:LEU:CD2	1:A:32:ILE:CD1	0.56	2.81	12	6
1:A:106:TRP:CD2	1:A:106:TRP:C	0.55	2.80	11	13
1:A:5:TYR:CD1	1:A:32:ILE:HD13	0.55	2.36	6	5
1:A:15:LEU:CD1	1:A:27:ALA:CA	0.55	2.84	9	11
1:A:48:CYS:SG	1:A:84:LEU:CD1	0.55	2.95	9	9
1:A:5:TYR:HB2	1:A:13:ARG:CG	0.55	2.31	11	12
1:A:24:MET:CB	1:A:85:CYS:O	0.55	2.54	9	1
1:A:67:GLU:OE2	1:A:70:MET:CE	0.55	2.54	1	1
1:A:77:GLU:O	1:A:77:GLU:HG3	0.55	2.01	4	14
1:A:78:LEU:HD13	1:A:82:SER:CB	0.55	2.31	9	1
1:A:6:VAL:O	1:A:101:VAL:HG23	0.55	2.02	4	12
1:A:8:HIS:CE1	1:A:101:VAL:HG12	0.55	2.37	12	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:VAL:CG1	1:A:21:VAL:HG11	0.55	2.31	13	6
1:A:51:TYR:CE1	1:A:78:LEU:HA	0.55	2.37	11	12
1:A:62:ALA:O	1:A:63:ALA:O	0.55	2.25	1	11
1:A:70:MET:HE3	2:A:107:FES:S2	0.55	2.41	11	1
1:A:51:TYR:N	1:A:100:ASP:O	0.55	2.39	9	14
1:A:71:LEU:CD2	1:A:71:LEU:C	0.55	2.74	9	1
1:A:52:VAL:O	1:A:81:ASN:OD1	0.55	2.24	10	6
1:A:3:VAL:CG1	1:A:23:LEU:CD2	0.55	2.85	8	6
1:A:84:LEU:O	1:A:87:GLN:N	0.55	2.39	5	7
1:A:6:VAL:O	1:A:101:VAL:CG2	0.55	2.55	2	13
1:A:27:ALA:HB1	1:A:32:ILE:HB	0.55	1.79	5	3
1:A:77:GLU:O	1:A:79:LYS:CD	0.55	2.54	9	1
1:A:64:ASN:O	1:A:66:ARG:N	0.55	2.40	14	12
1:A:68:ILE:O	1:A:72:GLU:CB	0.55	2.55	3	11
1:A:67:GLU:HG3	1:A:87:GLN:NE2	0.54	2.17	1	1
1:A:51:TYR:CE2	1:A:78:LEU:HA	0.54	2.38	2	1
1:A:3:VAL:HG21	1:A:23:LEU:HD21	0.54	1.77	12	2
1:A:67:GLU:OE1	1:A:87:GLN:CB	0.54	2.54	8	1
1:A:67:GLU:HA	1:A:70:MET:CE	0.54	2.33	1	12
1:A:3:VAL:HG12	1:A:5:TYR:CE1	0.54	2.37	1	14
1:A:67:GLU:OE2	1:A:83:ARG:NE	0.54	2.41	5	1
1:A:26:ALA:O	1:A:30:ASN:ND2	0.54	2.40	6	6
1:A:51:TYR:OH	1:A:77:GLU:C	0.54	2.46	13	14
1:A:63:ALA:HB1	1:A:67:GLU:OE1	0.54	2.03	1	1
1:A:56:PHE:CG	1:A:97:ILE:HG13	0.54	2.37	7	1
1:A:67:GLU:OE1	1:A:83:ARG:CZ	0.54	2.55	12	1
1:A:71:LEU:CB	1:A:84:LEU:HD23	0.54	2.33	9	1
1:A:23:LEU:O	1:A:27:ALA:CB	0.54	2.56	13	6
1:A:17:VAL:O	1:A:90:MET:CB	0.54	2.56	6	3
1:A:67:GLU:OE1	1:A:70:MET:CE	0.54	2.55	8	1
1:A:5:TYR:CD2	1:A:99:VAL:HG21	0.54	2.38	2	11
1:A:10:GLY:O	1:A:12:ARG:CG	0.54	2.56	3	6
1:A:68:ILE:O	1:A:72:GLU:HB3	0.54	2.02	13	13
1:A:106:TRP:CE3	1:A:106:TRP:C	0.54	2.81	1	2
1:A:60:VAL:CG1	1:A:88:ILE:CD1	0.54	2.86	6	2
1:A:61:PRO:O	1:A:63:ALA:N	0.54	2.41	7	3
1:A:5:TYR:CE1	1:A:32:ILE:HD12	0.54	2.38	2	3
1:A:20:GLY:H	1:A:89:ILE:HG23	0.54	1.62	2	8
1:A:49:HIS:CE1	1:A:51:TYR:HH	0.53	2.20	5	6
1:A:67:GLU:CD	1:A:68:ILE:HD12	0.53	2.23	9	2
1:A:63:ALA:HB2	1:A:87:GLN:HG3	0.53	1.78	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:ILE:HD13	1:A:89:ILE:N	0.53	2.17	12	4
1:A:13:ARG:O	1:A:14:GLU:HG2	0.53	2.02	11	9
1:A:53:ASN:OD1	1:A:54:GLU:N	0.53	2.41	3	7
1:A:106:TRP:C	1:A:106:TRP:CE3	0.53	2.82	14	8
1:A:50:VAL:CG1	1:A:85:CYS:SG	0.53	2.95	5	1
1:A:81:ASN:O	1:A:82:SER:O	0.53	2.27	9	1
1:A:4:VAL:HA	1:A:13:ARG:O	0.53	2.04	14	14
1:A:10:GLY:O	1:A:12:ARG:CD	0.53	2.57	7	3
1:A:90:MET:HE1	1:A:94:LEU:HB3	0.53	1.81	10	4
1:A:53:ASN:OD1	1:A:56:PHE:CD1	0.53	2.62	4	7
1:A:90:MET:SD	1:A:97:ILE:HD13	0.53	2.44	5	1
1:A:13:ARG:O	1:A:14:GLU:CG	0.53	2.57	13	9
1:A:62:ALA:HA	1:A:83:ARG:NH2	0.53	2.18	1	3
1:A:61:PRO:CG	1:A:89:ILE:HB	0.53	2.34	13	9
1:A:83:ARG:NH2	1:A:88:ILE:CD1	0.53	2.72	10	4
1:A:71:LEU:O	1:A:74:VAL:CG2	0.53	2.51	9	7
1:A:90:MET:SD	1:A:91:THR:N	0.53	2.82	14	2
1:A:90:MET:HE3	1:A:90:MET:CA	0.53	2.34	6	3
1:A:67:GLU:OE1	1:A:83:ARG:NE	0.53	2.42	2	2
1:A:52:VAL:O	1:A:57:THR:CG2	0.53	2.57	3	2
1:A:7:SER:OG	1:A:11:THR:N	0.53	2.42	8	10
1:A:83:ARG:C	1:A:84:LEU:CD2	0.53	2.78	5	3
1:A:56:PHE:CG	1:A:97:ILE:HA	0.53	2.39	14	12
1:A:66:ARG:O	1:A:70:MET:CG	0.53	2.56	9	2
1:A:61:PRO:O	1:A:83:ARG:NH1	0.52	2.42	10	2
1:A:83:ARG:NH2	1:A:87:GLN:O	0.52	2.42	13	2
1:A:79:LYS:CE	1:A:81:ASN:OD1	0.52	2.57	12	1
1:A:83:ARG:O	1:A:84:LEU:HD23	0.52	2.04	1	2
1:A:17:VAL:HB	1:A:90:MET:CG	0.52	2.34	4	4
1:A:52:VAL:CG2	1:A:83:ARG:HG3	0.52	2.33	5	1
1:A:63:ALA:CB	1:A:87:GLN:HG3	0.52	2.34	9	1
1:A:67:GLU:HG2	1:A:83:ARG:CD	0.52	2.35	11	1
1:A:5:TYR:OH	1:A:23:LEU:CB	0.52	2.58	12	7
1:A:53:ASN:ND2	1:A:56:PHE:CD1	0.52	2.78	5	6
1:A:82:SER:O	1:A:83:ARG:HG2	0.52	2.05	11	4
1:A:19:ASP:N	1:A:19:ASP:OD1	0.52	2.43	1	2
1:A:22:SER:O	1:A:24:MET:N	0.52	2.43	10	7
1:A:52:VAL:O	1:A:53:ASN:C	0.52	2.48	11	13
1:A:49:HIS:O	1:A:105:GLN:NE2	0.52	2.43	2	1
1:A:50:VAL:C	1:A:51:TYR:CD1	0.52	2.84	9	2
1:A:74:VAL:CG2	1:A:78:LEU:CD1	0.52	2.88	5	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:71:LEU:CA	1:A:84:LEU:CD2	0.52	2.88	9	1
1:A:49:HIS:C	1:A:50:VAL:CG1	0.52	2.77	4	11
1:A:76:ALA:HB2	1:A:104:ARG:O	0.52	2.04	11	8
1:A:72:GLU:OE2	1:A:73:CYS:N	0.52	2.43	9	1
1:A:49:HIS:CD2	1:A:104:ARG:O	0.51	2.62	2	1
1:A:67:GLU:CD	1:A:83:ARG:CD	0.51	2.79	10	3
1:A:15:LEU:HD11	1:A:30:ASN:OD1	0.51	2.05	7	2
1:A:69:GLY:O	1:A:72:GLU:N	0.51	2.43	13	10
1:A:5:TYR:OH	1:A:23:LEU:HB3	0.51	2.05	12	6
1:A:73:CYS:HB3	1:A:106:TRP:CZ2	0.51	2.40	13	6
1:A:17:VAL:CG1	1:A:90:MET:HB2	0.51	2.36	4	1
1:A:53:ASN:OD1	1:A:98:VAL:HB	0.51	2.05	5	7
1:A:13:ARG:NH2	1:A:32:ILE:O	0.51	2.43	7	1
1:A:67:GLU:OE1	1:A:83:ARG:NH1	0.51	2.44	9	2
1:A:53:ASN:OD1	1:A:98:VAL:HG23	0.51	2.05	7	7
1:A:53:ASN:O	1:A:57:THR:CG2	0.51	2.57	14	7
1:A:5:TYR:OH	1:A:23:LEU:HA	0.51	2.05	8	5
1:A:86:CYS:O	1:A:87:GLN:NE2	0.51	2.43	2	3
1:A:48:CYS:HB3	1:A:85:CYS:SG	0.51	2.45	9	1
1:A:24:MET:CB	1:A:86:CYS:HA	0.51	2.36	8	6
1:A:48:CYS:O	1:A:50:VAL:CG1	0.51	2.56	2	2
1:A:70:MET:SD	1:A:84:LEU:HD12	0.51	2.45	4	1
1:A:61:PRO:HG3	1:A:89:ILE:HB	0.51	1.80	7	11
1:A:67:GLU:O	1:A:71:LEU:HB3	0.51	2.06	6	10
1:A:74:VAL:CA	1:A:106:TRP:NE1	0.51	2.74	14	11
1:A:90:MET:HE1	1:A:97:ILE:HB	0.51	1.82	4	1
1:A:15:LEU:CD2	1:A:30:ASN:CG	0.51	2.78	6	1
1:A:21:VAL:HG13	1:A:25:GLN:CG	0.51	2.36	8	7
1:A:52:VAL:HG21	1:A:83:ARG:HG3	0.51	1.81	5	2
1:A:57:THR:O	1:A:83:ARG:NH2	0.51	2.39	8	1
1:A:12:ARG:CD	1:A:12:ARG:N	0.51	2.74	13	1
1:A:6:VAL:HG12	1:A:7:SER:N	0.51	2.20	14	9
1:A:18:ALA:C	1:A:90:MET:O	0.51	2.50	7	13
1:A:67:GLU:CG	1:A:87:GLN:CD	0.51	2.80	1	1
1:A:68:ILE:N	1:A:68:ILE:HD12	0.51	2.20	1	2
1:A:70:MET:CG	1:A:84:LEU:CD1	0.51	2.89	2	1
1:A:71:LEU:HB2	1:A:84:LEU:HD23	0.51	1.82	9	1
1:A:71:LEU:HD21	1:A:82:SER:HB3	0.50	1.83	9	9
1:A:83:ARG:NH2	1:A:88:ILE:HD13	0.50	2.21	10	3
1:A:19:ASP:CB	1:A:92:PRO:HD3	0.50	2.36	3	4
1:A:77:GLU:HG3	1:A:79:LYS:CE	0.50	2.36	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:LEU:HD21	1:A:32:ILE:HD12	0.50	1.81	9	4
1:A:49:HIS:ND1	1:A:74:VAL:HG11	0.50	2.22	4	4
1:A:81:ASN:OD1	1:A:81:ASN:N	0.50	2.44	4	5
1:A:4:VAL:HG13	1:A:14:GLU:HG2	0.50	1.81	7	3
1:A:17:VAL:CG1	1:A:21:VAL:CB	0.50	2.90	1	9
1:A:70:MET:HG3	1:A:84:LEU:CD1	0.50	2.37	2	9
1:A:90:MET:CE	1:A:94:LEU:HB3	0.50	2.35	14	2
1:A:70:MET:CE	2:A:107:FES:S2	0.50	3.00	11	1
1:A:49:HIS:NE2	1:A:102:PRO:HG3	0.50	2.22	14	9
1:A:50:VAL:HA	1:A:102:PRO:HD3	0.50	1.82	12	8
1:A:6:VAL:HB	1:A:99:VAL:O	0.50	2.06	4	14
1:A:27:ALA:CA	1:A:32:ILE:HB	0.50	2.35	4	14
1:A:52:VAL:O	1:A:81:ASN:ND2	0.50	2.43	3	4
1:A:3:VAL:HA	1:A:97:ILE:HG22	0.50	1.84	7	1
1:A:63:ALA:CB	1:A:67:GLU:HB2	0.50	2.37	10	1
1:A:56:PHE:CD2	1:A:97:ILE:CA	0.50	2.94	7	14
1:A:53:ASN:HD21	1:A:97:ILE:CD1	0.50	2.19	4	5
1:A:74:VAL:CG2	1:A:78:LEU:HD12	0.50	2.36	5	3
1:A:77:GLU:CG	1:A:79:LYS:HE3	0.50	2.36	5	1
1:A:67:GLU:CD	1:A:87:GLN:CB	0.50	2.80	8	1
1:A:48:CYS:O	1:A:85:CYS:N	0.50	2.43	9	1
1:A:70:MET:HG3	1:A:84:LEU:CG	0.50	2.36	12	2
1:A:14:GLU:CD	1:A:14:GLU:N	0.50	2.64	14	1
1:A:74:VAL:HG21	1:A:78:LEU:CD1	0.50	2.34	5	1
1:A:23:LEU:CB	1:A:85:CYS:SG	0.49	3.00	10	2
1:A:78:LEU:CD1	1:A:82:SER:CB	0.49	2.90	9	1
1:A:97:ILE:CD1	1:A:98:VAL:N	0.49	2.65	1	3
1:A:63:ALA:CB	1:A:87:GLN:HG2	0.49	2.37	13	3
1:A:72:GLU:CD	1:A:73:CYS:N	0.49	2.66	9	1
1:A:51:TYR:OH	1:A:78:LEU:CA	0.49	2.61	2	9
1:A:84:LEU:O	1:A:85:CYS:C	0.49	2.51	10	13
1:A:69:GLY:O	1:A:73:CYS:N	0.49	2.36	9	1
1:A:22:SER:O	1:A:23:LEU:C	0.49	2.51	10	13
1:A:3:VAL:HB	1:A:15:LEU:HB2	0.49	1.84	7	3
1:A:19:ASP:OD1	1:A:19:ASP:N	0.49	2.46	9	4
1:A:54:GLU:N	1:A:54:GLU:OE2	0.49	2.46	7	1
1:A:24:MET:O	1:A:28:VAL:HB	0.49	2.07	10	3
1:A:15:LEU:CD1	1:A:32:ILE:HD12	0.49	2.32	14	4
1:A:3:VAL:HG11	1:A:5:TYR:CE1	0.49	2.43	12	8
1:A:69:GLY:O	1:A:70:MET:C	0.49	2.51	7	13
1:A:73:CYS:O	1:A:74:VAL:O	0.49	2.30	11	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:67:GLU:CD	1:A:83:ARG:NE	0.49	2.66	2	1
1:A:95:ASP:OD1	1:A:95:ASP:N	0.49	2.43	2	4
1:A:70:MET:CE	1:A:87:GLN:HG3	0.49	2.37	6	2
1:A:71:LEU:HD23	1:A:84:LEU:HD21	0.49	1.84	11	1
1:A:84:LEU:O	1:A:86:CYS:SG	0.49	2.71	1	2
1:A:27:ALA:HB1	1:A:32:ILE:CG2	0.49	2.38	5	7
1:A:19:ASP:HB3	1:A:92:PRO:HD2	0.49	1.85	11	1
1:A:6:VAL:CB	1:A:99:VAL:O	0.48	2.61	4	14
1:A:67:GLU:O	1:A:71:LEU:HB2	0.48	2.07	4	5
1:A:49:HIS:C	1:A:50:VAL:HG12	0.48	2.28	4	5
1:A:3:VAL:HG22	1:A:90:MET:SD	0.48	2.48	7	2
1:A:51:TYR:HB2	1:A:100:ASP:CB	0.48	2.38	11	12
1:A:17:VAL:HG12	1:A:21:VAL:O	0.48	2.07	2	4
1:A:83:ARG:CZ	1:A:88:ILE:HD11	0.48	2.39	12	3
1:A:90:MET:SD	1:A:97:ILE:CG2	0.48	2.94	12	6
1:A:67:GLU:OE1	1:A:83:ARG:CD	0.48	2.61	10	1
1:A:71:LEU:O	1:A:71:LEU:HD22	0.48	2.09	9	2
1:A:60:VAL:N	1:A:94:LEU:CD1	0.48	2.76	5	9
1:A:5:TYR:O	1:A:12:ARG:HA	0.48	2.09	8	14
1:A:17:VAL:O	1:A:90:MET:HB3	0.48	2.08	4	9
1:A:19:ASP:HB3	1:A:92:PRO:HD3	0.48	1.85	12	3
1:A:71:LEU:HB2	1:A:84:LEU:CD2	0.48	2.39	10	3
1:A:101:VAL:HG13	1:A:105:GLN:NE2	0.48	2.24	1	2
1:A:15:LEU:N	1:A:15:LEU:CD2	0.48	2.75	14	3
1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:HD3	0.48	2.24	11	2
1:A:51:TYR:HE1	1:A:82:SER:OG	0.48	1.92	6	5
1:A:26:ALA:O	1:A:30:ASN:OD1	0.48	2.32	7	2
1:A:63:ALA:HB1	1:A:67:GLU:HB3	0.48	1.86	6	1
1:A:24:MET:CA	1:A:85:CYS:SG	0.48	3.02	3	1
1:A:7:SER:OG	1:A:9:ASP:OD1	0.48	2.32	10	3
1:A:3:VAL:CG2	1:A:23:LEU:HD21	0.48	2.39	7	2
1:A:77:GLU:CG	1:A:79:LYS:CE	0.48	2.92	5	1
1:A:21:VAL:HG12	1:A:22:SER:N	0.48	2.24	13	6
1:A:79:LYS:HE3	1:A:81:ASN:OD1	0.48	2.09	12	1
1:A:51:TYR:CD1	1:A:79:LYS:CG	0.47	2.97	14	6
1:A:59:LYS:HB2	1:A:94:LEU:CD1	0.47	2.39	2	11
1:A:67:GLU:HB2	1:A:87:GLN:CB	0.47	2.38	9	5
1:A:67:GLU:OE2	1:A:82:SER:O	0.47	2.32	6	1
1:A:103:ASP:OD1	1:A:103:ASP:N	0.47	2.44	7	3
1:A:13:ARG:O	1:A:14:GLU:HG3	0.47	2.09	14	2
1:A:7:SER:CB	1:A:11:THR:O	0.47	2.63	1	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:67:GLU:HG3	1:A:68:ILE:N	0.47	2.24	6	3
1:A:86:CYS:SG	1:A:87:GLN:OE1	0.47	2.72	1	2
1:A:67:GLU:HG3	1:A:83:ARG:CD	0.47	2.40	2	1
1:A:23:LEU:C	1:A:85:CYS:SG	0.47	2.93	2	3
1:A:76:ALA:CB	1:A:104:ARG:HB3	0.47	2.35	2	2
1:A:54:GLU:O	1:A:58:ASP:OD1	0.47	2.32	4	1
1:A:56:PHE:CB	1:A:97:ILE:CD1	0.47	2.91	7	2
1:A:15:LEU:HD13	1:A:30:ASN:OD1	0.47	2.10	6	1
1:A:21:VAL:O	1:A:89:ILE:HA	0.47	2.08	12	8
1:A:63:ALA:O	1:A:67:GLU:OE2	0.47	2.33	12	1
1:A:76:ALA:CA	1:A:104:ARG:HB3	0.47	2.38	13	1
1:A:61:PRO:CG	1:A:89:ILE:HG12	0.47	2.39	7	2
1:A:71:LEU:HG	1:A:83:ARG:N	0.47	2.24	9	1
1:A:64:ASN:O	1:A:65:GLU:C	0.47	2.53	12	9
1:A:67:GLU:OE2	1:A:87:GLN:OE1	0.47	2.32	1	1
1:A:83:ARG:HG3	1:A:88:ILE:HD11	0.47	1.86	14	2
1:A:91:THR:CB	1:A:92:PRO:HD2	0.47	2.39	1	6
1:A:49:HIS:HB2	1:A:74:VAL:CG1	0.47	2.40	3	7
1:A:49:HIS:CG	1:A:74:VAL:HB	0.47	2.44	14	6
1:A:77:GLU:HG3	1:A:79:LYS:CD	0.47	2.40	9	1
1:A:17:VAL:CG2	1:A:23:LEU:CD2	0.47	2.91	12	2
1:A:61:PRO:O	1:A:83:ARG:CZ	0.47	2.63	10	1
1:A:90:MET:HE1	1:A:94:LEU:CB	0.47	2.40	10	1
1:A:13:ARG:C	1:A:14:GLU:CG	0.47	2.83	8	9
1:A:15:LEU:HD22	1:A:30:ASN:OD1	0.47	2.09	1	2
1:A:11:THR:HG22	1:A:13:ARG:NH2	0.47	2.25	2	1
1:A:70:MET:HB2	1:A:84:LEU:CD1	0.47	2.40	14	6
1:A:49:HIS:HB2	1:A:74:VAL:HG12	0.47	1.87	3	6
1:A:60:VAL:HG12	1:A:83:ARG:HH21	0.47	1.69	3	1
1:A:24:MET:CB	1:A:85:CYS:C	0.47	2.83	13	2
1:A:72:GLU:OE2	1:A:73:CYS:CA	0.47	2.63	9	1
1:A:63:ALA:N	1:A:67:GLU:OE1	0.47	2.47	12	1
1:A:51:TYR:HB2	1:A:100:ASP:HB3	0.47	1.86	11	13
1:A:27:ALA:HA	1:A:32:ILE:HD12	0.47	1.85	5	2
1:A:70:MET:CG	1:A:84:LEU:HD12	0.47	2.39	14	1
1:A:3:VAL:CG2	1:A:17:VAL:HG23	0.47	2.40	1	3
1:A:59:LYS:CB	1:A:94:LEU:HD11	0.47	2.40	6	12
1:A:13:ARG:CD	1:A:13:ARG:N	0.47	2.78	5	1
1:A:24:MET:SD	1:A:86:CYS:HB3	0.47	2.50	5	3
1:A:67:GLU:C	1:A:67:GLU:CD	0.47	2.74	6	1
1:A:67:GLU:OE1	1:A:68:ILE:HD12	0.47	2.10	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:ALA:CB	1:A:102:PRO:HB2	0.46	2.40	1	3
1:A:102:PRO:O	1:A:105:GLN:OE1	0.46	2.33	1	1
1:A:53:ASN:OD1	1:A:98:VAL:CG2	0.46	2.63	7	4
1:A:53:ASN:CG	1:A:56:PHE:CD1	0.46	2.89	5	3
1:A:71:LEU:HD21	1:A:82:SER:CB	0.46	2.40	7	3
1:A:77:GLU:O	1:A:79:LYS:HD2	0.46	2.10	9	4
1:A:91:THR:OG1	1:A:93:GLU:HG2	0.46	2.09	14	3
1:A:24:MET:HB2	1:A:85:CYS:O	0.46	2.10	9	1
1:A:22:SER:C	1:A:24:MET:N	0.46	2.67	10	11
1:A:53:ASN:HB2	1:A:98:VAL:HB	0.46	1.87	2	7
1:A:67:GLU:OE2	1:A:87:GLN:CD	0.46	2.53	1	1
1:A:62:ALA:O	1:A:63:ALA:C	0.46	2.53	5	13
1:A:23:LEU:HD11	1:A:97:ILE:HG12	0.46	1.87	4	1
1:A:53:ASN:CG	1:A:98:VAL:O	0.46	2.54	5	4
1:A:8:HIS:CD2	1:A:103:ASP:OD1	0.46	2.68	6	1
1:A:101:VAL:CG1	1:A:105:GLN:NE2	0.46	2.78	1	2
1:A:66:ARG:O	1:A:70:MET:HG3	0.46	2.09	9	2
1:A:67:GLU:CB	1:A:87:GLN:HG3	0.46	2.41	2	2
1:A:66:ARG:O	1:A:70:MET:HG2	0.46	2.11	4	1
1:A:83:ARG:HH11	1:A:88:ILE:HD11	0.46	1.71	14	3
1:A:67:GLU:OE1	1:A:87:GLN:HB2	0.46	2.10	8	1
1:A:55:ALA:O	1:A:59:LYS:HD3	0.46	2.10	6	9
1:A:74:VAL:HG12	1:A:106:TRP:NE1	0.46	2.24	2	1
1:A:24:MET:HB2	1:A:85:CYS:SG	0.46	2.50	9	2
1:A:69:GLY:HA2	1:A:72:GLU:OE1	0.46	2.10	9	1
1:A:97:ILE:C	1:A:97:ILE:CD1	0.46	2.79	11	3
1:A:63:ALA:HB1	1:A:87:GLN:HG2	0.46	1.86	11	1
1:A:13:ARG:CD	1:A:32:ILE:HG12	0.46	2.41	13	2
1:A:3:VAL:CG2	1:A:90:MET:CG	0.46	2.93	11	2
1:A:66:ARG:O	1:A:70:MET:SD	0.46	2.73	11	3
1:A:62:ALA:HA	1:A:83:ARG:NH1	0.46	2.25	8	2
1:A:17:VAL:CG1	1:A:21:VAL:HB	0.46	2.36	11	1
1:A:2:LYS:N	1:A:2:LYS:HD2	0.46	2.25	12	1
1:A:19:ASP:OD1	1:A:19:ASP:O	0.46	2.34	1	2
1:A:24:MET:SD	1:A:24:MET:C	0.46	2.93	1	4
1:A:51:TYR:OH	1:A:78:LEU:N	0.46	2.49	12	11
1:A:75:THR:N	1:A:106:TRP:CD1	0.46	2.84	14	9
1:A:21:VAL:HA	1:A:25:GLN:NE2	0.46	2.26	14	3
1:A:62:ALA:HA	1:A:83:ARG:CZ	0.46	2.40	7	2
1:A:63:ALA:HB3	1:A:67:GLU:HB2	0.46	1.87	10	1
1:A:63:ALA:N	1:A:83:ARG:NH2	0.46	2.64	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:MET:CE	1:A:97:ILE:HB	0.46	2.40	14	1
1:A:85:CYS:O	1:A:87:GLN:N	0.46	2.49	1	3
1:A:15:LEU:CD1	1:A:26:ALA:C	0.46	2.84	8	4
1:A:102:PRO:HG2	1:A:105:GLN:CG	0.46	2.41	2	1
1:A:17:VAL:HB	1:A:90:MET:CB	0.46	2.41	11	6
1:A:91:THR:HB	1:A:92:PRO:CD	0.46	2.41	5	1
1:A:67:GLU:CG	1:A:83:ARG:HD2	0.46	2.41	11	2
1:A:70:MET:HE1	1:A:87:GLN:OE1	0.46	2.11	13	1
1:A:59:LYS:HB2	1:A:94:LEU:HD11	0.46	1.87	8	9
1:A:89:ILE:N	1:A:89:ILE:HD13	0.46	2.26	4	2
1:A:67:GLU:HG2	1:A:68:ILE:N	0.46	2.25	5	1
1:A:91:THR:OG1	1:A:94:LEU:HD12	0.46	2.11	12	1
1:A:26:ALA:O	1:A:29:SER:N	0.46	2.43	3	9
1:A:67:GLU:HA	1:A:70:MET:CG	0.46	2.40	5	1
1:A:6:VAL:HG22	1:A:12:ARG:CD	0.45	2.41	8	6
1:A:49:HIS:HA	1:A:84:LEU:HD23	0.45	1.88	2	1
1:A:70:MET:HB2	1:A:84:LEU:HD12	0.45	1.87	14	2
1:A:63:ALA:HB1	1:A:67:GLU:HB2	0.45	1.87	8	1
1:A:64:ASN:CG	1:A:65:GLU:N	0.45	2.69	8	1
1:A:77:GLU:HG3	1:A:79:LYS:HD3	0.45	1.88	9	1
1:A:63:ALA:CB	1:A:67:GLU:CB	0.45	2.92	10	1
1:A:10:GLY:O	1:A:12:ARG:HG3	0.45	2.11	3	13
1:A:3:VAL:HG21	1:A:23:LEU:CD2	0.45	2.41	5	1
1:A:56:PHE:CE1	1:A:97:ILE:HA	0.45	2.47	5	2
1:A:71:LEU:HD21	1:A:82:SER:OG	0.45	2.11	12	3
1:A:71:LEU:HG	1:A:83:ARG:CA	0.45	2.41	9	1
1:A:24:MET:HB3	1:A:86:CYS:HA	0.45	1.87	13	6
1:A:5:TYR:HH	1:A:27:ALA:HB2	0.45	1.70	14	4
1:A:22:SER:HA	1:A:88:ILE:O	0.45	2.10	4	4
1:A:6:VAL:HG23	1:A:99:VAL:O	0.45	2.12	10	8
1:A:95:ASP:CG	1:A:95:ASP:O	0.45	2.54	4	3
1:A:6:VAL:HG22	1:A:12:ARG:NE	0.45	2.27	8	1
1:A:67:GLU:CB	1:A:87:GLN:HG2	0.45	2.41	9	2
1:A:55:ALA:O	1:A:59:LYS:HG3	0.45	2.12	5	12
1:A:70:MET:O	1:A:73:CYS:HB2	0.45	2.12	11	4
1:A:60:VAL:CG2	1:A:94:LEU:CD1	0.45	2.85	7	6
1:A:67:GLU:CD	1:A:83:ARG:HG2	0.45	2.31	4	1
1:A:49:HIS:CG	1:A:74:VAL:HG21	0.45	2.46	9	1
1:A:73:CYS:O	1:A:74:VAL:C	0.45	2.54	8	11
1:A:15:LEU:HD13	1:A:26:ALA:C	0.45	2.31	14	4
1:A:67:GLU:CG	1:A:83:ARG:CD	0.45	2.95	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:ASP:OD1	1:A:58:ASP:O	0.45	2.35	14	1
1:A:27:ALA:HA	1:A:32:ILE:CG1	0.45	2.41	1	2
1:A:57:THR:CG2	1:A:81:ASN:HB2	0.45	2.41	6	7
1:A:71:LEU:HD13	1:A:78:LEU:HD11	0.45	1.87	1	3
1:A:4:VAL:HG13	1:A:14:GLU:OE1	0.45	2.11	5	1
1:A:52:VAL:CG2	1:A:83:ARG:HB2	0.45	2.39	14	2
1:A:56:PHE:HB2	1:A:97:ILE:CD1	0.45	2.36	14	3
1:A:102:PRO:HD2	1:A:105:GLN:CG	0.45	2.42	2	1
1:A:56:PHE:CD1	1:A:56:PHE:N	0.45	2.85	7	8
1:A:72:GLU:OE2	1:A:72:GLU:O	0.45	2.34	10	1
1:A:56:PHE:CB	1:A:97:ILE:HD12	0.45	2.37	5	1
1:A:90:MET:HE3	1:A:97:ILE:HB	0.45	1.88	14	1
1:A:2:LYS:C	1:A:3:VAL:HG23	0.45	2.31	9	6
1:A:23:LEU:CD2	1:A:90:MET:HG2	0.45	2.41	11	2
1:A:71:LEU:HA	1:A:84:LEU:CD2	0.45	2.42	9	1
1:A:12:ARG:HB2	1:A:12:ARG:CZ	0.45	2.42	2	1
1:A:93:GLU:CG	1:A:94:LEU:HG	0.45	2.42	5	4
1:A:67:GLU:CG	1:A:83:ARG:HA	0.45	2.41	7	1
1:A:70:MET:CE	1:A:87:GLN:NE2	0.44	2.80	10	1
1:A:91:THR:HB	1:A:93:GLU:HG2	0.44	1.89	11	1
1:A:20:GLY:H	1:A:89:ILE:CG2	0.44	2.25	4	3
1:A:17:VAL:CG2	1:A:23:LEU:HD23	0.44	2.37	6	1
1:A:93:GLU:CG	1:A:94:LEU:N	0.44	2.80	6	3
1:A:3:VAL:HG22	1:A:90:MET:HG3	0.44	1.88	4	1
1:A:91:THR:CG2	1:A:94:LEU:HD12	0.44	2.37	10	1
1:A:79:LYS:HB3	1:A:80:PRO:HD2	0.44	1.88	11	1
1:A:17:VAL:O	1:A:90:MET:HG3	0.44	2.12	14	1
1:A:26:ALA:O	1:A:29:SER:HB3	0.44	2.13	5	8
1:A:60:VAL:CG1	1:A:61:PRO:CD	0.44	2.89	8	3
1:A:67:GLU:HG2	1:A:83:ARG:NE	0.44	2.27	11	1
1:A:7:SER:HB3	1:A:13:ARG:NH2	0.44	2.27	12	1
1:A:7:SER:OG	1:A:8:HIS:N	0.44	2.50	5	1
1:A:57:THR:O	1:A:83:ARG:NH1	0.44	2.41	6	1
1:A:65:GLU:CG	1:A:66:ARG:N	0.44	2.81	8	2
1:A:102:PRO:O	1:A:105:GLN:CD	0.44	2.56	3	3
1:A:67:GLU:CG	1:A:83:ARG:HD3	0.44	2.43	10	1
1:A:5:TYR:CZ	1:A:23:LEU:HD13	0.44	2.47	12	1
1:A:22:SER:HB3	1:A:89:ILE:CD1	0.44	2.43	8	3
1:A:95:ASP:O	1:A:95:ASP:CG	0.44	2.55	8	2
1:A:27:ALA:CA	1:A:30:ASN:OD1	0.44	2.65	7	1
1:A:67:GLU:CD	1:A:67:GLU:C	0.44	2.76	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:70:MET:CE	1:A:87:GLN:OE1	0.44	2.65	13	1
1:A:49:HIS:HA	1:A:84:LEU:CD2	0.44	2.43	14	4
1:A:6:VAL:O	1:A:101:VAL:HB	0.44	2.13	14	3
1:A:78:LEU:O	1:A:79:LYS:HE3	0.44	2.13	6	3
1:A:67:GLU:HG3	1:A:83:ARG:CG	0.44	2.42	7	1
1:A:83:ARG:HH21	1:A:88:ILE:HD13	0.44	1.71	7	1
1:A:3:VAL:CG2	1:A:97:ILE:CG2	0.44	2.89	10	1
1:A:81:ASN:O	1:A:82:SER:C	0.44	2.53	10	8
1:A:52:VAL:HG21	1:A:88:ILE:CD1	0.44	2.43	3	1
1:A:49:HIS:NE2	1:A:51:TYR:OH	0.44	2.47	5	1
1:A:70:MET:HG3	1:A:84:LEU:HG	0.44	1.89	12	4
1:A:15:LEU:HD11	1:A:27:ALA:N	0.44	2.28	7	1
1:A:51:TYR:CZ	1:A:78:LEU:HA	0.43	2.48	2	2
1:A:69:GLY:O	1:A:71:LEU:N	0.43	2.51	2	1
1:A:24:MET:HB2	1:A:85:CYS:C	0.43	2.33	6	5
1:A:24:MET:HB3	1:A:85:CYS:O	0.43	2.13	9	5
1:A:71:LEU:HB2	1:A:84:LEU:HD21	0.43	1.90	7	1
1:A:3:VAL:HG11	1:A:23:LEU:CD2	0.43	2.42	8	2
1:A:17:VAL:O	1:A:90:MET:HB2	0.43	2.11	2	2
1:A:75:THR:O	1:A:104:ARG:NH2	0.43	2.51	2	1
1:A:56:PHE:CE2	1:A:97:ILE:N	0.43	2.86	4	3
1:A:91:THR:OG1	1:A:92:PRO:HD2	0.43	2.13	14	3
1:A:23:LEU:HB2	1:A:85:CYS:SG	0.43	2.54	10	1
1:A:63:ALA:O	1:A:67:GLU:CD	0.43	2.56	12	1
1:A:8:HIS:CE1	1:A:101:VAL:CG1	0.43	3.01	12	4
1:A:19:ASP:CA	1:A:90:MET:O	0.43	2.66	5	3
1:A:9:ASP:OD1	1:A:9:ASP:C	0.43	2.56	8	2
1:A:53:ASN:CB	1:A:98:VAL:HB	0.43	2.44	1	7
1:A:7:SER:HA	1:A:101:VAL:HB	0.43	1.89	2	6
1:A:17:VAL:HG13	1:A:21:VAL:CB	0.43	2.39	2	2
1:A:67:GLU:HG3	1:A:83:ARG:HA	0.43	1.90	7	1
1:A:66:ARG:NE	1:A:66:ARG:HA	0.43	2.28	2	3
1:A:65:GLU:HG3	1:A:66:ARG:N	0.43	2.28	9	3
1:A:5:TYR:O	1:A:12:ARG:CA	0.43	2.67	8	5
1:A:24:MET:N	1:A:85:CYS:HB3	0.43	2.29	1	1
1:A:5:TYR:O	1:A:12:ARG:HB3	0.43	2.14	7	9
1:A:22:SER:O	1:A:25:GLN:HB3	0.43	2.13	4	2
1:A:27:ALA:HB1	1:A:32:ILE:CB	0.43	2.43	5	1
1:A:64:ASN:C	1:A:64:ASN:ND2	0.43	2.71	12	2
1:A:67:GLU:OE1	1:A:70:MET:HE1	0.43	2.14	8	1
1:A:52:VAL:O	1:A:53:ASN:O	0.43	2.37	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:ALA:CB	1:A:104:ARG:HB2	0.43	2.43	1	3
1:A:5:TYR:CD1	1:A:5:TYR:N	0.43	2.87	4	3
1:A:24:MET:HB2	1:A:85:CYS:HB3	0.43	1.91	4	1
1:A:27:ALA:CB	1:A:32:ILE:HB	0.43	2.44	5	1
1:A:67:GLU:OE1	1:A:83:ARG:HA	0.43	2.14	14	2
1:A:13:ARG:HG2	1:A:32:ILE:CD1	0.43	2.44	13	1
1:A:23:LEU:O	1:A:27:ALA:HB2	0.43	2.14	1	1
1:A:5:TYR:HB2	1:A:13:ARG:HG2	0.43	1.90	14	8
1:A:6:VAL:CG2	1:A:99:VAL:O	0.43	2.67	4	4
1:A:26:ALA:O	1:A:30:ASN:CG	0.43	2.57	7	2
1:A:70:MET:HG3	1:A:84:LEU:CD2	0.43	2.43	7	1
1:A:24:MET:CG	1:A:85:CYS:SG	0.43	3.07	9	1
1:A:63:ALA:O	1:A:68:ILE:CD1	0.43	2.67	9	1
1:A:67:GLU:OE2	1:A:71:LEU:HG	0.43	2.14	14	1
1:A:56:PHE:CD1	1:A:97:ILE:HA	0.43	2.48	3	2
1:A:57:THR:CB	1:A:81:ASN:HB2	0.43	2.44	5	1
1:A:5:TYR:HA	1:A:99:VAL:HB	0.43	1.91	13	4
1:A:85:CYS:O	1:A:86:CYS:C	0.43	2.56	1	1
1:A:53:ASN:HD21	1:A:97:ILE:HD13	0.43	1.73	11	1
1:A:91:THR:HB	1:A:93:GLU:CG	0.43	2.44	12	1
1:A:50:VAL:C	1:A:51:TYR:CD2	0.42	2.93	12	2
1:A:67:GLU:OE2	1:A:84:LEU:O	0.42	2.37	8	2
1:A:70:MET:HB2	1:A:84:LEU:HD11	0.42	1.90	9	1
1:A:72:GLU:CD	1:A:72:GLU:C	0.42	2.77	9	2
1:A:77:GLU:O	1:A:78:LEU:C	0.42	2.56	4	1
1:A:90:MET:SD	1:A:91:THR:O	0.42	2.77	10	1
1:A:90:MET:SD	1:A:90:MET:C	0.42	2.98	14	2
1:A:2:LYS:H	1:A:95:ASP:HA	0.42	1.74	9	5
1:A:5:TYR:HA	1:A:99:VAL:CG2	0.42	2.44	2	3
1:A:55:ALA:O	1:A:59:LYS:CG	0.42	2.67	12	6
1:A:79:LYS:CB	1:A:80:PRO:CD	0.42	2.97	13	2
1:A:79:LYS:N	1:A:82:SER:OG	0.42	2.46	8	2
1:A:105:GLN:O	1:A:105:GLN:CD	0.42	2.58	14	1
1:A:24:MET:HG3	1:A:85:CYS:SG	0.42	2.54	9	1
1:A:49:HIS:HE1	1:A:51:TYR:OH	0.42	1.96	10	1
1:A:53:ASN:O	1:A:53:ASN:ND2	0.42	2.52	11	1
1:A:51:TYR:CD2	1:A:79:LYS:CG	0.42	3.03	2	1
1:A:52:VAL:HG21	1:A:88:ILE:HG13	0.42	1.90	12	2
1:A:67:GLU:CD	1:A:83:ARG:HD3	0.42	2.33	10	3
1:A:16:ASP:OD1	1:A:16:ASP:O	0.42	2.37	5	1
1:A:21:VAL:CG1	1:A:25:GLN:HG2	0.42	2.44	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:88:ILE:C	1:A:89:ILE:HD13	0.42	2.34	4	1
1:A:67:GLU:CD	1:A:87:GLN:HB3	0.42	2.35	8	1
1:A:83:ARG:CZ	1:A:88:ILE:HD13	0.42	2.43	10	1
1:A:13:ARG:HB2	1:A:32:ILE:HD11	0.42	1.91	14	2
1:A:105:GLN:CD	1:A:105:GLN:C	0.42	2.78	14	1
1:A:89:ILE:N	1:A:89:ILE:CD1	0.42	2.81	1	1
1:A:69:GLY:C	1:A:71:LEU:N	0.42	2.71	4	2
1:A:5:TYR:CZ	1:A:23:LEU:HB3	0.42	2.49	10	2
1:A:7:SER:HB3	1:A:11:THR:O	0.42	2.14	1	7
1:A:5:TYR:HA	1:A:99:VAL:HG23	0.42	1.91	2	1
1:A:27:ALA:C	1:A:32:ILE:HB	0.42	2.35	13	2
1:A:6:VAL:HG22	1:A:12:ARG:HG2	0.42	1.91	2	1
1:A:67:GLU:C	1:A:69:GLY:N	0.42	2.74	5	1
1:A:15:LEU:HD13	1:A:26:ALA:HB1	0.42	1.91	7	1
1:A:95:ASP:OD1	1:A:95:ASP:O	0.42	2.37	12	1
1:A:51:TYR:CD1	1:A:79:LYS:HB2	0.41	2.50	5	3
1:A:67:GLU:O	1:A:69:GLY:N	0.41	2.53	5	3
1:A:63:ALA:CB	1:A:87:GLN:HB3	0.41	2.45	6	2
1:A:67:GLU:HB2	1:A:87:GLN:HG2	0.41	1.92	9	1
1:A:2:LYS:CB	1:A:96:GLY:N	0.41	2.83	13	1
1:A:5:TYR:HA	1:A:99:VAL:CB	0.41	2.45	14	3
1:A:52:VAL:HG23	1:A:83:ARG:HB3	0.41	1.90	2	1
1:A:19:ASP:O	1:A:19:ASP:CG	0.41	2.59	8	1
1:A:67:GLU:HG3	1:A:83:ARG:HD2	0.41	1.92	9	1
1:A:70:MET:HB2	1:A:84:LEU:CG	0.41	2.45	9	1
1:A:82:SER:O	1:A:83:ARG:CG	0.41	2.68	9	1
1:A:7:SER:HB3	1:A:11:THR:HG22	0.41	1.92	14	1
1:A:70:MET:CB	1:A:84:LEU:CD1	0.41	2.98	2	1
1:A:16:ASP:OD1	1:A:16:ASP:C	0.41	2.59	5	1
1:A:70:MET:HE2	1:A:87:GLN:HG3	0.41	1.92	7	1
1:A:2:LYS:N	1:A:95:ASP:HA	0.41	2.30	8	1
1:A:13:ARG:C	1:A:14:GLU:HG3	0.41	2.36	6	6
1:A:24:MET:CG	1:A:86:CYS:HA	0.41	2.45	1	1
1:A:68:ILE:N	1:A:68:ILE:CD1	0.41	2.83	1	1
1:A:84:LEU:CB	1:A:86:CYS:SG	0.41	3.08	1	1
1:A:84:LEU:HB2	1:A:86:CYS:SG	0.41	2.56	1	1
1:A:64:ASN:OD1	1:A:64:ASN:C	0.41	2.58	13	1
1:A:67:GLU:OE2	1:A:83:ARG:CD	0.41	2.68	5	1
1:A:67:GLU:OE2	1:A:68:ILE:HD12	0.41	2.15	9	1
1:A:8:HIS:HE1	1:A:101:VAL:HG12	0.41	1.76	14	1
1:A:67:GLU:HG3	1:A:83:ARG:HD3	0.41	1.93	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:PHE:CG	1:A:97:ILE:CG1	0.41	3.04	7	1
1:A:79:LYS:HB3	1:A:81:ASN:OD1	0.41	2.15	11	1
1:A:4:VAL:CG2	1:A:14:GLU:OE1	0.41	2.68	11	1
1:A:6:VAL:CG1	1:A:7:SER:N	0.41	2.84	14	1
1:A:24:MET:HB2	1:A:86:CYS:N	0.41	2.30	8	2
1:A:67:GLU:CA	1:A:87:GLN:HG3	0.41	2.45	6	1
1:A:95:ASP:OD1	1:A:95:ASP:C	0.41	2.59	8	1
1:A:48:CYS:O	1:A:84:LEU:HA	0.41	2.14	9	1
1:A:49:HIS:NE2	1:A:102:PRO:CG	0.41	2.83	2	1
1:A:67:GLU:OE1	1:A:87:GLN:HB3	0.41	2.15	2	1
1:A:17:VAL:HB	1:A:90:MET:HG2	0.41	1.93	4	1
1:A:49:HIS:O	1:A:102:PRO:CD	0.41	2.69	5	1
1:A:67:GLU:OE2	1:A:83:ARG:HD3	0.41	2.16	5	1
1:A:84:LEU:HA	1:A:84:LEU:HD22	0.41	1.70	9	1
1:A:48:CYS:SG	1:A:84:LEU:HB3	0.41	2.56	11	1
1:A:24:MET:HB3	1:A:85:CYS:C	0.41	2.37	12	1
1:A:10:GLY:O	1:A:12:ARG:HD2	0.41	2.15	13	1
1:A:67:GLU:OE2	1:A:71:LEU:CG	0.41	2.68	14	1
1:A:77:GLU:O	1:A:79:LYS:HD3	0.41	2.16	3	1
1:A:24:MET:SD	1:A:24:MET:O	0.41	2.79	7	1
1:A:61:PRO:HG3	1:A:89:ILE:HG12	0.40	1.92	4	2
1:A:70:MET:CE	1:A:87:GLN:HG2	0.40	2.46	6	1
1:A:84:LEU:HB3	1:A:86:CYS:SG	0.40	2.56	7	1
1:A:64:ASN:ND2	1:A:65:GLU:HG2	0.40	2.31	8	1
1:A:90:MET:HE3	1:A:94:LEU:O	0.40	2.15	10	2
1:A:25:GLN:O	1:A:26:ALA:C	0.40	2.59	6	2
1:A:67:GLU:CG	1:A:68:ILE:N	0.40	2.84	6	1
1:A:71:LEU:HG	1:A:83:ARG:C	0.40	2.36	9	1
1:A:3:VAL:HG22	1:A:90:MET:CG	0.40	2.46	11	1
1:A:83:ARG:NH2	1:A:88:ILE:HD11	0.40	2.32	6	1
1:A:8:HIS:ND1	1:A:101:VAL:HG12	0.40	2.31	12	1
1:A:14:GLU:O	1:A:15:LEU:HD23	0.40	2.16	13	1
1:A:9:ASP:OD1	1:A:11:THR:HB	0.40	2.16	4	1
1:A:71:LEU:CD2	1:A:82:SER:HB3	0.40	2.47	8	1
1:A:90:MET:CE	1:A:90:MET:HA	0.40	2.45	12	1
1:A:19:ASP:HB3	1:A:91:THR:HG22	0.40	1.93	13	1
1:A:52:VAL:CB	1:A:57:THR:HG22	0.40	2.31	2	1
1:A:82:SER:O	1:A:83:ARG:HG3	0.40	2.16	6	1
1:A:48:CYS:HB2	1:A:85:CYS:SG	0.40	2.56	7	1
1:A:5:TYR:HB2	1:A:13:ARG:HG3	0.40	1.92	11	1
1:A:70:MET:O	1:A:73:CYS:CB	0.40	2.68	11	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	90/106 (85%)	62±2 (68±2%)	23±2 (25±2%)	6±1 (6±1%)	3 19
All	All	1260/1484 (85%)	861 (68%)	321 (25%)	78 (6%)	3 19

All 11 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	85	CYS	14
1	A	65	GLU	13
1	A	63	ALA	12
1	A	74	VAL	12
1	A	77	GLU	11
1	A	50	VAL	7
1	A	53	ASN	3
1	A	86	CYS	2
1	A	62	ALA	2
1	A	66	ARG	1
1	A	82	SER	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	79/89 (89%)	47±2 (59±3%)	32±2 (41±3%)	0 4
All	All	1106/1246 (89%)	653 (59%)	453 (41%)	0 4

All 55 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	8	HIS	14
1	A	11	THR	14
1	A	13	ARG	14
1	A	24	MET	14
1	A	28	VAL	14
1	A	29	SER	14
1	A	58	ASP	14
1	A	73	CYS	14
1	A	77	GLU	14
1	A	78	LEU	14
1	A	99	VAL	14
1	A	104	ARG	14
1	A	71	LEU	13
1	A	82	SER	13
1	A	91	THR	13
1	A	60	VAL	12
1	A	67	GLU	12
1	A	70	MET	12
1	A	97	ILE	12
1	A	100	ASP	12
1	A	22	SER	11
1	A	59	LYS	11
1	A	50	VAL	9
1	A	19	ASP	9
1	A	79	LYS	9
1	A	84	LEU	9
1	A	2	LYS	8
1	A	54	GLU	8
1	A	66	ARG	8
1	A	89	ILE	8
1	A	12	ARG	8
1	A	72	GLU	8
1	A	53	ASN	7
1	A	47	THR	6
1	A	81	ASN	6
1	A	93	GLU	6
1	A	16	ASP	5
1	A	64	ASN	5
1	A	25	GLN	5
1	A	83	ARG	5
1	A	105	GLN	5
1	A	87	GLN	4
1	A	90	MET	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	14	GLU	3
1	A	17	VAL	3
1	A	103	ASP	2
1	A	106	TRP	2
1	A	68	ILE	2
1	A	88	ILE	2
1	A	30	ASN	2
1	A	65	GLU	2
1	A	86	CYS	1
1	A	95	ASP	1
1	A	48	CYS	1
1	A	85	CYS	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)

1 ligand is modelled in this entry.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds that are observed in the model and the number of bonds that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond length is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the average root-mean-square of all Z scores of the bond lengths.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths		
					Counts	RMSZ	#Z>2
2	FES	A	107	1	0,4,4	0.00±0.00	-

In the following table, the Counts columns list the number of angles for which Mogul statistics could be retrieved, the number of angles that are observed in the model and the number of angles that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond angle is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond angle with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the average root-mean-square of all Z scores of the bond angles.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond angles		
					Counts	RMSZ	#Z>2
2	FES	A	107	1	-	-	-

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the chemical component dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	FES	A	107	1	-	-	0±0,1,1,1

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

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