



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 02:50 PM BST

PDB ID : 1IMO
Title : NMR STRUCTURE OF HUMAN DNA LIGASE IIIALPHA BRCT DOMAIN
Authors : Krishnan, V.V.; Thornton, K.H.; Thelen, M.P.; Cosman, M.
Deposited on : 2001-05-11

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

<http://wwpdb.org/validation/2016/NMRValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The following versions of software and data (see [references ⓘ](#)) were used in the production of this report:

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)
NmrClust : Kelley et al. (1996)
MolProbity : 4.02b-467
Mogul : unknown
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)
RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
ShiftChecker : rb-20027457
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : rb-20027457

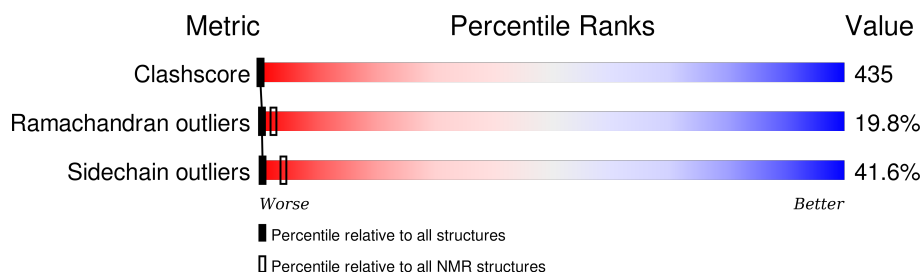
1 Overall quality at a glance

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	114402	11133
Ramachandran outliers	111179	9975
Sidechain outliers	111093	9958

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 $\leq 5\%$

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	88	

2 Ensemble composition and analysis ⓘ

This entry contains 1 models. Identification of well-defined residues and clustering analysis are not possible.

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1398 atoms, of which 697 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called DNA LIGASE III.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	88	Total	C	H	N	O	S	0
			1398	446	697	124	127	4	

There are 2 discrepancies between the modelled and reference sequences:

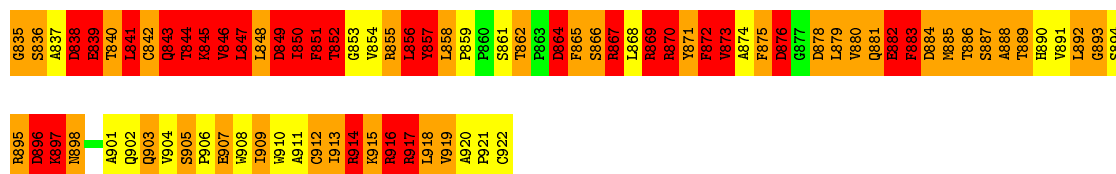
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	835	GLY	LYS	CLONING ARTIFACT	UNP P49916
A	836	SER	ALA	CLONING ARTIFACT	UNP P49916

4 Residue-property plots

These plots are provided for all protein, RNA and DNA 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: DNA LIGASE III

Chain A: 



5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

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

Of the 299 calculated structures, 1 were deposited, based on the following criterion: *structure with the least restraint violations, structure with the lowest energy, target function*.

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

Software name	Classification	Version
DYANA	structure solution	1.5
DYANA	refinement	1.5

No chemical shift data was provided. No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.

6 Model quality ⓘ

6.1 Standard geometry ⓘ

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	15.59	145/718 (20.2%)	15.90	174/976 (17.8%)
All	All	15.59	145/718 (20.2%)	15.90	174/976 (17.8%)

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	1	0
All	All	1	0

All bond outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	867	ARG	CZ-NH1	-85.55	0.21	1.33
1	A	907	GLU	CD-OE1	-85.14	0.32	1.25
1	A	914	ARG	CZ-NH1	-74.16	0.36	1.33
1	A	907	GLU	CD-OE2	-67.83	0.51	1.25
1	A	839	GLU	CD-OE2	-65.45	0.53	1.25
1	A	839	GLU	CD-OE1	-64.91	0.54	1.25
1	A	836	SER	CB-OG	-62.51	0.60	1.42
1	A	870	ARG	CZ-NH1	-60.43	0.54	1.33
1	A	882	GLU	CD-OE2	-60.37	0.59	1.25
1	A	835	GLY	N-CA	-59.42	0.56	1.46
1	A	905	SER	CB-OG	-59.42	0.65	1.42
1	A	855	ARG	CZ-NH1	-58.47	0.57	1.33
1	A	870	ARG	CZ-NH2	-58.34	0.57	1.33
1	A	882	GLU	CD-OE1	-56.95	0.63	1.25
1	A	916	ARG	CG-CD	-53.64	0.17	1.51
1	A	871	TYR	CG-CD2	-51.11	0.72	1.39
1	A	871	TYR	CE1-CZ	-50.65	0.72	1.38
1	A	857	TYR	CG-CD2	-50.23	0.73	1.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	857	TYR	CE1-CZ	-49.74	0.73	1.38
1	A	857	TYR	CG-CD1	-49.59	0.74	1.39
1	A	857	TYR	CE2-CZ	-49.06	0.74	1.38
1	A	916	ARG	NE-CZ	-48.87	0.69	1.33
1	A	870	ARG	CD-NE	-48.48	0.64	1.46
1	A	883	PHE	CG-CD2	-47.02	0.68	1.38
1	A	871	TYR	CG-CD1	-45.38	0.80	1.39
1	A	872	PHE	CG-CD1	-45.16	0.71	1.38
1	A	871	TYR	CE2-CZ	-44.92	0.80	1.38
1	A	916	ARG	CZ-NH1	-44.71	0.74	1.33
1	A	875	PHE	CG-CD2	-44.49	0.72	1.38
1	A	875	PHE	CG-CD1	-43.60	0.73	1.38
1	A	922	CYS	CB-SG	-43.55	1.08	1.82
1	A	869	ARG	CZ-NH1	-42.99	0.77	1.33
1	A	883	PHE	CG-CD1	-42.94	0.74	1.38
1	A	895	ARG	CZ-NH1	-42.83	0.77	1.33
1	A	870	ARG	NE-CZ	-42.52	0.77	1.33
1	A	838	ASP	CB-CG	-41.92	0.63	1.51
1	A	847	LEU	C-O	-41.84	0.43	1.23
1	A	849	ASP	CG-OD1	-41.29	0.30	1.25
1	A	872	PHE	CG-CD2	-40.64	0.77	1.38
1	A	838	ASP	CG-OD1	-40.21	0.32	1.25
1	A	838	ASP	CG-OD2	-39.67	0.34	1.25
1	A	917	ARG	CG-CD	-38.02	0.56	1.51
1	A	865	PHE	CG-CD2	-37.44	0.82	1.38
1	A	835	GLY	C-O	-37.08	0.64	1.23
1	A	846	VAL	C-O	-36.66	0.53	1.23
1	A	883	PHE	CE1-CZ	-36.41	0.68	1.37
1	A	851	PHE	CG-CD2	-36.14	0.84	1.38
1	A	851	PHE	CG-CD1	-36.05	0.84	1.38
1	A	865	PHE	CG-CD1	-36.03	0.84	1.38
1	A	914	ARG	NE-CZ	-35.69	0.86	1.33
1	A	872	PHE	CE2-CZ	-34.95	0.70	1.37
1	A	875	PHE	CE1-CZ	-34.34	0.72	1.37
1	A	849	ASP	CG-OD2	-33.90	0.47	1.25
1	A	875	PHE	CE2-CZ	-33.69	0.73	1.37
1	A	896	ASP	CG-OD1	-33.69	0.47	1.25
1	A	883	PHE	CE2-CZ	-33.13	0.74	1.37
1	A	917	ARG	NE-CZ	-32.97	0.90	1.33
1	A	881	GLN	CD-NE2	-31.63	0.53	1.32
1	A	896	ASP	CG-OD2	-31.54	0.52	1.25
1	A	878	ASP	CG-OD2	-31.43	0.53	1.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	872	PHE	CE1-CZ	-31.33	0.77	1.37
1	A	867	ARG	NE-CZ	-30.77	0.93	1.33
1	A	922	CYS	CA-CB	-30.64	0.86	1.53
1	A	864	ASP	CG-OD1	-30.34	0.55	1.25
1	A	893	GLY	C-O	-29.54	0.76	1.23
1	A	849	ASP	CB-CG	-29.43	0.90	1.51
1	A	907	GLU	CG-CD	-29.09	1.08	1.51
1	A	865	PHE	CE1-CZ	-28.79	0.82	1.37
1	A	844	THR	C-O	-27.86	0.70	1.23
1	A	851	PHE	CE1-CZ	-27.79	0.84	1.37
1	A	865	PHE	CE2-CZ	-27.70	0.84	1.37
1	A	866	SER	CB-OG	-27.69	1.06	1.42
1	A	851	PHE	CE2-CZ	-27.67	0.84	1.37
1	A	842	CYS	CB-SG	-27.09	1.36	1.82
1	A	876	ASP	CG-OD1	-26.73	0.63	1.25
1	A	914	ARG	CZ-NH2	-26.45	0.98	1.33
1	A	878	ASP	CG-OD1	-26.34	0.64	1.25
1	A	864	ASP	CG-OD2	-26.28	0.64	1.25
1	A	884	ASP	CG-OD2	-26.01	0.65	1.25
1	A	876	ASP	CG-OD2	-25.87	0.65	1.25
1	A	884	ASP	CG-OD1	-25.41	0.66	1.25
1	A	922	CYS	CA-C	-24.78	0.88	1.52
1	A	917	ARG	CZ-NH1	-24.61	1.01	1.33
1	A	867	ARG	CZ-NH2	-24.36	1.01	1.33
1	A	914	ARG	CG-CD	-24.16	0.91	1.51
1	A	847	LEU	C-N	-23.75	0.79	1.34
1	A	895	ARG	CZ-NH2	-23.42	1.02	1.33
1	A	869	ARG	NE-CZ	-22.60	1.03	1.33
1	A	881	GLN	CD-OE1	-22.33	0.74	1.24
1	A	846	VAL	C-N	-22.17	0.83	1.34
1	A	846	VAL	CB-CG2	-22.17	1.06	1.52
1	A	855	ARG	NE-CZ	-22.10	1.04	1.33
1	A	914	ARG	CD-NE	-21.68	1.09	1.46
1	A	855	ARG	CZ-NH2	-20.45	1.06	1.33
1	A	835	GLY	C-N	-20.17	0.87	1.34
1	A	922	CYS	C-O	-20.15	0.85	1.23
1	A	840	THR	CB-OG1	-19.71	1.03	1.43
1	A	867	ARG	CD-NE	-19.63	1.13	1.46
1	A	867	ARG	CG-CD	-19.42	1.03	1.51
1	A	913	ILE	CB-CG1	-19.18	1.00	1.54
1	A	895	ARG	CD-NE	-19.15	1.13	1.46
1	A	870	ARG	CG-CD	-19.04	1.04	1.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	916	ARG	CZ-NH2	-17.42	1.10	1.33
1	A	912	CYS	CB-SG	-16.82	1.53	1.82
1	A	879	LEU	CG-CD2	-16.65	0.90	1.51
1	A	855	ARG	CD-NE	-16.57	1.18	1.46
1	A	879	LEU	CG-CD1	-16.57	0.90	1.51
1	A	843	GLN	CD-OE1	-16.43	0.87	1.24
1	A	846	VAL	CB-CG1	-16.25	1.18	1.52
1	A	915	LYS	CE-NZ	-16.15	1.08	1.49
1	A	895	ARG	NE-CZ	-15.66	1.12	1.33
1	A	916	ARG	CD-NE	-15.49	1.20	1.46
1	A	841	LEU	CG-CD1	-15.21	0.95	1.51
1	A	913	ILE	CB-CG2	-14.87	1.06	1.52
1	A	836	SER	CA-CB	-14.54	1.31	1.52
1	A	917	ARG	CZ-NH2	-14.47	1.14	1.33
1	A	843	GLN	CD-NE2	-14.32	0.97	1.32
1	A	869	ARG	CZ-NH2	-14.23	1.14	1.33
1	A	835	GLY	CA-C	-14.15	1.29	1.51
1	A	855	ARG	CB-CG	-13.86	1.15	1.52
1	A	841	LEU	CG-CD2	-13.74	1.00	1.51
1	A	845	LYS	CG-CD	-13.43	1.06	1.52
1	A	917	ARG	CD-NE	-13.15	1.24	1.46
1	A	869	ARG	CD-NE	-11.88	1.26	1.46
1	A	839	GLU	CG-CD	-11.54	1.34	1.51
1	A	836	SER	N-CA	-10.97	1.24	1.46
1	A	845	LYS	CE-NZ	-10.74	1.22	1.49
1	A	844	THR	C-N	-10.69	1.09	1.34
1	A	840	THR	CB-CG2	-10.42	1.18	1.52
1	A	841	LEU	CB-CG	-10.05	1.23	1.52
1	A	896	ASP	CB-CG	-9.88	1.30	1.51
1	A	869	ARG	CG-CD	-9.79	1.27	1.51
1	A	856	LEU	CG-CD2	-9.47	1.16	1.51
1	A	893	GLY	C-N	-8.20	1.15	1.34
1	A	907	GLU	CB-CG	-8.15	1.36	1.52
1	A	898	ASN	CG-OD1	-8.11	1.06	1.24
1	A	903	GLN	CD-NE2	-7.80	1.13	1.32
1	A	852	THR	CB-OG1	-7.46	1.28	1.43
1	A	917	ARG	CB-CG	-7.18	1.33	1.52
1	A	853	GLY	C-O	-6.99	1.12	1.23
1	A	855	ARG	CG-CD	-6.59	1.35	1.51
1	A	845	LYS	CD-CE	-6.47	1.35	1.51
1	A	870	ARG	CB-CG	-5.66	1.37	1.52
1	A	856	LEU	CG-CD1	-5.53	1.31	1.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	844	THR	CB-OG1	-5.46	1.32	1.43

All angle outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	867	ARG	NE-CZ-NH2	96.11	168.36	120.30
1	A	867	ARG	NE-CZ-NH1	-94.31	73.15	120.30
1	A	907	GLU	OE1-CD-OE2	-82.90	23.82	123.30
1	A	916	ARG	NE-CZ-NH1	-80.94	79.83	120.30
1	A	914	ARG	NE-CZ-NH1	-77.28	81.66	120.30
1	A	914	ARG	NE-CZ-NH2	76.59	158.60	120.30
1	A	883	PHE	CD1-CG-CD2	-75.56	20.07	118.30
1	A	847	LEU	O-C-N	-73.63	4.89	122.70
1	A	857	TYR	CD1-CG-CD2	-72.62	38.02	117.90
1	A	883	PHE	CB-CG-CD1	71.00	170.50	120.80
1	A	883	PHE	CB-CG-CD2	69.47	169.43	120.80
1	A	875	PHE	CD1-CG-CD2	-68.71	28.98	118.30
1	A	839	GLU	OE1-CD-OE2	-68.44	41.17	123.30
1	A	857	TYR	CB-CG-CD1	66.90	161.14	121.00
1	A	857	TYR	CB-CG-CD2	66.40	160.84	121.00
1	A	882	GLU	OE1-CD-OE2	-65.81	44.33	123.30
1	A	875	PHE	CB-CG-CD1	64.06	165.64	120.80
1	A	871	TYR	CD1-CG-CD2	-63.91	47.59	117.90
1	A	875	PHE	CB-CG-CD2	63.69	165.38	120.80
1	A	872	PHE	CD1-CG-CD2	-61.09	38.89	118.30
1	A	871	TYR	CB-CG-CD1	60.75	157.45	121.00
1	A	872	PHE	CB-CG-CD2	58.16	161.51	120.80
1	A	855	ARG	NE-CZ-NH2	56.75	148.67	120.30
1	A	871	TYR	CB-CG-CD2	56.59	154.95	121.00
1	A	883	PHE	CE1-CZ-CE2	-55.51	20.08	120.00
1	A	872	PHE	CB-CG-CD1	55.42	159.60	120.80
1	A	896	ASP	CB-CG-OD2	55.27	168.04	118.30
1	A	896	ASP	CB-CG-OD1	53.89	166.80	118.30
1	A	896	ASP	OD1-CG-OD2	-51.65	25.16	123.30
1	A	857	TYR	CE1-CZ-CE2	-51.13	37.98	119.80
1	A	875	PHE	CE1-CZ-CE2	-50.55	29.01	120.00
1	A	857	TYR	CG-CD1-CE1	49.79	161.13	121.30
1	A	857	TYR	CG-CD2-CE2	49.44	160.85	121.30
1	A	864	ASP	CB-CG-OD2	47.51	161.05	118.30
1	A	857	TYR	CZ-CE2-CD2	45.88	161.10	119.80
1	A	857	TYR	CD1-CE1-CZ	45.69	160.92	119.80
1	A	883	PHE	CG-CD1-CE1	45.18	170.50	120.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	871	TYR	CG-CD1-CE1	45.14	157.41	121.30
1	A	871	TYR	CE1-CZ-CE2	-45.13	47.59	119.80
1	A	872	PHE	CE1-CZ-CE2	-45.01	38.99	120.00
1	A	883	PHE	CG-CD2-CE2	44.21	169.44	120.80
1	A	864	ASP	CB-CG-OD1	43.55	157.50	118.30
1	A	846	VAL	O-C-N	-43.21	53.56	122.70
1	A	864	ASP	OD1-CG-OD2	-43.08	41.45	123.30
1	A	849	ASP	CB-CG-OD2	42.88	156.89	118.30
1	A	878	ASP	CB-CG-OD1	42.60	156.64	118.30
1	A	871	TYR	CG-CD2-CE2	42.12	154.99	121.30
1	A	883	PHE	CZ-CE2-CD2	41.95	170.44	120.10
1	A	871	TYR	CZ-CE2-CD2	41.79	157.41	119.80
1	A	883	PHE	CD1-CE1-CZ	41.15	169.48	120.10
1	A	875	PHE	CG-CD1-CE1	40.75	165.62	120.80
1	A	875	PHE	CG-CD2-CE2	40.56	165.42	120.80
1	A	865	PHE	CD1-CG-CD2	-40.33	65.87	118.30
1	A	871	TYR	CD1-CE1-CZ	39.10	154.99	119.80
1	A	851	PHE	CD1-CG-CD2	-38.95	67.66	118.30
1	A	865	PHE	CB-CG-CD1	38.25	147.57	120.80
1	A	875	PHE	CZ-CE2-CD2	37.92	165.60	120.10
1	A	875	PHE	CD1-CE1-CZ	37.72	165.37	120.10
1	A	869	ARG	NE-CZ-NH2	37.57	139.09	120.30
1	A	878	ASP	OD1-CG-OD2	-37.35	52.34	123.30
1	A	876	ASP	CB-CG-OD2	37.26	151.84	118.30
1	A	872	PHE	CG-CD2-CE2	37.03	161.53	120.80
1	A	865	PHE	CB-CG-CD2	36.80	146.56	120.80
1	A	851	PHE	CB-CG-CD1	36.44	146.31	120.80
1	A	878	ASP	CB-CG-OD2	36.36	151.02	118.30
1	A	876	ASP	CB-CG-OD1	36.21	150.89	118.30
1	A	851	PHE	CB-CG-CD2	36.05	146.03	120.80
1	A	895	ARG	NE-CZ-NH2	36.00	138.30	120.30
1	A	916	ARG	NE-CZ-NH2	35.89	138.25	120.30
1	A	872	PHE	CG-CD1-CE1	35.29	159.62	120.80
1	A	869	ARG	NE-CZ-NH1	-35.15	102.72	120.30
1	A	884	ASP	CB-CG-OD1	34.98	149.78	118.30
1	A	876	ASP	OD1-CG-OD2	-34.75	57.27	123.30
1	A	872	PHE	CD1-CE1-CZ	34.44	161.43	120.10
1	A	884	ASP	CB-CG-OD2	34.13	149.01	118.30
1	A	855	ARG	NE-CZ-NH1	-33.30	103.65	120.30
1	A	872	PHE	CZ-CE2-CD2	32.87	159.54	120.10
1	A	884	ASP	OD1-CG-OD2	-32.68	61.20	123.30
1	A	849	ASP	OD1-CG-OD2	-32.64	61.29	123.30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	867	ARG	CD-NE-CZ	32.36	168.90	123.60
1	A	870	ARG	NE-CZ-NH2	31.03	135.81	120.30
1	A	865	PHE	CE1-CZ-CE2	-30.08	65.86	120.00
1	A	881	GLN	OE1-CD-NE2	-29.67	53.66	121.90
1	A	851	PHE	CE1-CZ-CE2	-29.05	67.71	120.00
1	A	847	LEU	CA-C-N	27.70	178.13	117.20
1	A	847	LEU	CA-C-O	27.08	176.98	120.10
1	A	917	ARG	NE-CZ-NH1	-27.02	106.79	120.30
1	A	907	GLU	CG-CD-OE2	26.31	170.93	118.30
1	A	849	ASP	CB-CG-OD1	26.14	141.82	118.30
1	A	914	ARG	CD-NE-CZ	25.74	159.64	123.60
1	A	870	ARG	NH1-CZ-NH2	-25.49	91.36	119.40
1	A	870	ARG	NE-CZ-NH1	25.05	132.82	120.30
1	A	865	PHE	CG-CD1-CE1	24.34	147.58	120.80
1	A	907	GLU	CG-CD-OE1	23.48	165.25	118.30
1	A	865	PHE	CG-CD2-CE2	23.42	146.56	120.80
1	A	851	PHE	CG-CD1-CE1	23.22	146.34	120.80
1	A	851	PHE	CG-CD2-CE2	22.95	146.04	120.80
1	A	865	PHE	CZ-CE2-CD2	22.89	147.57	120.10
1	A	847	LEU	C-N-CA	22.61	178.23	121.70
1	A	916	ARG	CG-CD-NE	-22.19	65.19	111.80
1	A	865	PHE	CD1-CE1-CZ	22.05	146.56	120.10
1	A	851	PHE	CZ-CE2-CD2	21.80	146.25	120.10
1	A	851	PHE	CD1-CE1-CZ	21.58	146.00	120.10
1	A	916	ARG	CB-CG-CD	21.16	166.63	111.60
1	A	839	GLU	CG-CD-OE1	20.66	159.61	118.30
1	A	916	ARG	NH1-CZ-NH2	20.48	141.92	119.40
1	A	838	ASP	CB-CG-OD2	20.47	136.72	118.30
1	A	839	GLU	CG-CD-OE2	20.46	159.22	118.30
1	A	882	GLU	CG-CD-OE1	20.14	158.58	118.30
1	A	882	GLU	CG-CD-OE2	19.40	157.09	118.30
1	A	855	ARG	CD-NE-CZ	19.04	150.26	123.60
1	A	881	GLN	CG-CD-OE1	18.99	159.58	121.60
1	A	835	GLY	O-C-N	-18.57	92.98	122.70
1	A	846	VAL	CA-C-N	18.44	157.77	117.20
1	A	879	LEU	CB-CG-CD2	18.36	142.21	111.00
1	A	879	LEU	CB-CG-CD1	18.32	142.14	111.00
1	A	838	ASP	OD1-CG-OD2	-18.27	88.58	123.30
1	A	838	ASP	CB-CG-OD1	18.22	134.69	118.30
1	A	838	ASP	CA-CB-CG	16.31	149.28	113.40
1	A	917	ARG	CB-CG-CD	-16.03	69.92	111.60
1	A	879	LEU	CD1-CG-CD2	-15.85	62.95	110.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	857	TYR	OH-CZ-CE2	15.18	161.09	120.10
1	A	914	ARG	CG-CD-NE	15.14	143.59	111.80
1	A	857	TYR	CE1-CZ-OH	15.12	160.93	120.10
1	A	846	VAL	C-N-CA	14.98	159.16	121.70
1	A	895	ARG	NH1-CZ-NH2	-14.24	103.73	119.40
1	A	871	TYR	OH-CZ-CE2	13.81	157.40	120.10
1	A	844	THR	O-C-N	-13.67	100.82	122.70
1	A	846	VAL	CA-C-O	13.60	148.67	120.10
1	A	871	TYR	CE1-CZ-OH	12.93	155.01	120.10
1	A	881	GLN	CG-CD-NE2	12.52	146.76	116.70
1	A	869	ARG	CD-NE-CZ	12.41	140.97	123.60
1	A	895	ARG	CD-NE-CZ	12.16	140.63	123.60
1	A	922	CYS	CA-C-O	11.86	145.00	120.10
1	A	916	ARG	CD-NE-CZ	11.43	139.60	123.60
1	A	845	LYS	CG-CD-CE	11.41	146.12	111.90
1	A	870	ARG	CD-NE-CZ	10.83	138.76	123.60
1	A	835	GLY	N-CA-C	10.69	139.82	113.10
1	A	855	ARG	NH1-CZ-NH2	-10.66	107.68	119.40
1	A	844	THR	CA-C-N	10.65	140.63	117.20
1	A	913	ILE	CG1-CB-CG2	-10.52	88.26	111.40
1	A	893	GLY	O-C-N	-10.51	105.89	122.70
1	A	917	ARG	NH1-CZ-NH2	10.45	130.90	119.40
1	A	917	ARG	CG-CD-NE	-10.40	89.95	111.80
1	A	843	GLN	OE1-CD-NE2	-10.38	98.02	121.90
1	A	835	GLY	CA-C-N	10.00	139.21	117.20
1	A	867	ARG	CG-CD-NE	9.82	132.42	111.80
1	A	922	CYS	CA-CB-SG	9.47	131.04	114.00
1	A	922	CYS	CB-CA-C	-9.44	91.52	110.40
1	A	893	GLY	CA-C-N	9.42	137.93	117.20
1	A	845	LYS	CB-CG-CD	9.41	136.08	111.60
1	A	841	LEU	CB-CG-CD2	-9.24	95.28	111.00
1	A	846	VAL	CA-CB-CG1	9.07	124.50	110.90
1	A	867	ARG	CB-CG-CD	8.98	134.95	111.60
1	A	905	SER	CA-CB-OG	8.97	135.42	111.20
1	A	844	THR	C-N-CA	8.83	143.77	121.70
1	A	913	ILE	CA-CB-CG2	8.70	128.30	110.90
1	A	835	GLY	C-N-CA	8.18	142.15	121.70
1	A	893	GLY	C-N-CA	7.87	141.36	121.70
1	A	846	VAL	CG1-CB-CG2	-7.69	98.60	110.90
1	A	836	SER	CA-CB-OG	7.57	131.63	111.20
1	A	922	CYS	N-CA-CB	7.37	123.87	110.60
1	A	913	ILE	CA-CB-CG1	6.85	124.02	111.00

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	856	LEU	CB-CG-CD1	6.67	122.34	111.00
1	A	855	ARG	CA-CB-CG	6.62	127.97	113.40
1	A	849	ASP	CA-CB-CG	6.47	127.64	113.40
1	A	869	ARG	CG-CD-NE	6.43	125.30	111.80
1	A	841	LEU	CB-CG-CD1	6.37	121.83	111.00
1	A	840	THR	CA-CB-CG2	6.25	121.16	112.40
1	A	885	MET	CG-SD-CE	6.21	110.14	100.20
1	A	843	GLN	CG-CD-NE2	5.72	130.43	116.70
1	A	869	ARG	CB-CG-CD	5.64	126.26	111.60
1	A	922	CYS	N-CA-C	5.51	125.87	111.00
1	A	870	ARG	CG-CD-NE	5.34	123.02	111.80

All chiral outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms
1	A	922	CYS	CA

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts ⓘ

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	701	697	688	604
All	All	701	697	688	604

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 435.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:885:MET:SD	1:A:897:LYS:HB2	1.63	1.26
1:A:916:ARG:CG	1:A:916:ARG:CZ	1.55	1.76
1:A:846:VAL:C	1:A:847:LEU:HD22	1.54	1.15
1:A:916:ARG:CD	1:A:916:ARG:CZ	1.51	1.78
1:A:850:ILE:CD1	1:A:913:ILE:HA	1.49	1.35
1:A:850:ILE:HD12	1:A:913:ILE:CA	1.43	1.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:871:TYR:CE2	1:A:871:TYR:CG	1.43	2.07
1:A:872:PHE:CG	1:A:872:PHE:CE1	1.42	2.07
1:A:871:TYR:CD1	1:A:871:TYR:CZ	1.42	2.07
1:A:872:PHE:CD2	1:A:872:PHE:CZ	1.42	2.07
1:A:883:PHE:CG	1:A:883:PHE:CE2	1.42	2.06
1:A:883:PHE:CZ	1:A:883:PHE:CD1	1.39	2.07
1:A:857:TYR:CG	1:A:857:TYR:CE1	1.38	2.11
1:A:857:TYR:CD2	1:A:857:TYR:CZ	1.37	2.11
1:A:857:TYR:CG	1:A:857:TYR:CE2	1.37	2.10
1:A:857:TYR:CD1	1:A:857:TYR:CZ	1.36	2.10
1:A:875:PHE:CZ	1:A:875:PHE:CD2	1.36	2.11
1:A:875:PHE:CG	1:A:875:PHE:CE2	1.36	2.10
1:A:875:PHE:CZ	1:A:875:PHE:CD1	1.36	2.10
1:A:916:ARG:NH2	1:A:916:ARG:NE	1.36	1.68
1:A:835:GLY:N	1:A:835:GLY:C	1.35	1.76
1:A:875:PHE:CG	1:A:875:PHE:CE1	1.35	2.11
1:A:851:PHE:CG	1:A:851:PHE:CE1	1.35	2.15
1:A:851:PHE:CZ	1:A:851:PHE:CD2	1.35	2.15
1:A:846:VAL:O	1:A:847:LEU:CD2	1.34	1.74
1:A:851:PHE:CG	1:A:851:PHE:CE2	1.34	2.15
1:A:865:PHE:CZ	1:A:865:PHE:CD1	1.34	2.13
1:A:851:PHE:CA	1:A:918:LEU:HD11	1.34	1.51
1:A:865:PHE:CZ	1:A:865:PHE:CD2	1.34	2.16
1:A:872:PHE:CG	1:A:872:PHE:CE2	1.33	2.14
1:A:871:TYR:CG	1:A:871:TYR:CE1	1.33	2.15
1:A:871:TYR:CD2	1:A:871:TYR:CZ	1.33	2.15
1:A:872:PHE:CD1	1:A:872:PHE:CZ	1.33	2.14
1:A:865:PHE:CG	1:A:865:PHE:CE2	1.33	2.13
1:A:883:PHE:CG	1:A:883:PHE:CE1	1.33	2.13
1:A:851:PHE:CZ	1:A:851:PHE:CD1	1.32	2.15
1:A:871:TYR:OH	1:A:913:ILE:HD11	1.32	1.14
1:A:854:VAL:HG11	1:A:908:TRP:CH2	1.32	1.58
1:A:865:PHE:CE1	1:A:865:PHE:CG	1.31	2.16
1:A:896:ASP:CB	1:A:896:ASP:OD1	1.31	1.77
1:A:854:VAL:CG2	1:A:918:LEU:HG	1.31	1.56
1:A:914:ARG:NE	1:A:914:ARG:CG	1.31	1.90
1:A:883:PHE:CZ	1:A:883:PHE:CD2	1.31	2.13
1:A:881:GLN:CG	1:A:881:GLN:NE2	1.30	1.91
1:A:847:LEU:O	1:A:848:LEU:CA	1.30	1.80
1:A:836:SER:CA	1:A:836:SER:OG	1.30	1.77
1:A:885:MET:SD	1:A:897:LYS:CB	1.29	2.20
1:A:916:ARG:NH2	1:A:916:ARG:NH1	1.29	1.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:871:TYR:CB	1:A:871:TYR:CD2	1.27	2.18
1:A:914:ARG:CD	1:A:914:ARG:CB	1.27	2.12
1:A:872:PHE:CD1	1:A:872:PHE:CB	1.26	2.18
1:A:871:TYR:CE2	1:A:875:PHE:CZ	1.25	2.23
1:A:896:ASP:CB	1:A:896:ASP:OD2	1.25	1.82
1:A:883:PHE:CB	1:A:883:PHE:CD2	1.24	2.17
1:A:846:VAL:C	1:A:847:LEU:CD2	1.23	2.05
1:A:846:VAL:O	1:A:847:LEU:CA	1.23	1.86
1:A:839:GLU:CG	1:A:839:GLU:OE2	1.22	1.85
1:A:850:ILE:HD12	1:A:913:ILE:C	1.22	1.54
1:A:857:TYR:CD1	1:A:857:TYR:CB	1.22	2.22
1:A:857:TYR:CD2	1:A:857:TYR:CB	1.22	2.21
1:A:839:GLU:OE1	1:A:839:GLU:CG	1.21	1.86
1:A:838:ASP:CA	1:A:838:ASP:CG	1.21	2.08
1:A:871:TYR:CE2	1:A:875:PHE:HZ	1.20	1.51
1:A:875:PHE:CD2	1:A:875:PHE:CB	1.20	2.21
1:A:875:PHE:CB	1:A:875:PHE:CD1	1.20	2.22
1:A:879:LEU:CB	1:A:879:LEU:CD2	1.20	2.19
1:A:878:ASP:CB	1:A:878:ASP:OD2	1.19	1.89
1:A:851:PHE:CD1	1:A:851:PHE:CB	1.19	2.26
1:A:879:LEU:CD1	1:A:879:LEU:CB	1.19	2.19
1:A:865:PHE:CB	1:A:865:PHE:CD2	1.19	2.24
1:A:851:PHE:HA	1:A:918:LEU:CD1	1.18	1.66
1:A:865:PHE:CB	1:A:865:PHE:CD1	1.18	2.26
1:A:885:MET:O	1:A:888:ALA:N	1.17	1.77
1:A:851:PHE:CD2	1:A:851:PHE:CB	1.17	2.26
1:A:851:PHE:CZ	1:A:909:ILE:CG1	1.16	2.29
1:A:850:ILE:CG1	1:A:913:ILE:HA	1.16	1.43
1:A:847:LEU:CA	1:A:847:LEU:O	1.15	1.93
1:A:846:VAL:HG23	1:A:871:TYR:OH	1.15	1.41
1:A:846:VAL:O	1:A:846:VAL:CA	1.13	1.97
1:A:850:ILE:CD1	1:A:913:ILE:CA	1.12	2.12
1:A:871:TYR:CD2	1:A:875:PHE:CZ	1.12	2.37
1:A:849:ASP:CA	1:A:849:ASP:CG	1.11	2.18
1:A:846:VAL:O	1:A:847:LEU:HD22	1.11	0.97
1:A:871:TYR:OH	1:A:871:TYR:CE1	1.11	2.03
1:A:871:TYR:CB	1:A:871:TYR:CD1	1.11	2.26
1:A:856:LEU:HD12	1:A:856:LEU:O	1.10	1.44
1:A:856:LEU:HD12	1:A:856:LEU:C	1.09	1.62
1:A:879:LEU:HG	1:A:879:LEU:CD2	1.09	1.76
1:A:854:VAL:HG21	1:A:918:LEU:CG	1.09	1.76
1:A:856:LEU:N	1:A:890:HIS:HB2	1.09	1.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:847:LEU:HD22	1:A:847:LEU:N	1.09	1.56
1:A:858:LEU:CD2	1:A:868:LEU:HB3	1.09	1.75
1:A:847:LEU:HD13	1:A:871:TYR:CE1	1.09	1.81
1:A:878:ASP:CB	1:A:878:ASP:OD1	1.08	2.02
1:A:879:LEU:HG	1:A:879:LEU:CD1	1.08	1.76
1:A:856:LEU:CD2	1:A:892:LEU:HD12	1.07	1.78
1:A:871:TYR:OH	1:A:913:ILE:CD1	1.07	2.00
1:A:846:VAL:C	1:A:847:LEU:CA	1.06	2.23
1:A:872:PHE:CD2	1:A:872:PHE:CB	1.06	2.25
1:A:850:ILE:CG1	1:A:913:ILE:CA	1.05	2.32
1:A:857:TYR:OH	1:A:857:TYR:CE1	1.05	2.07
1:A:916:ARG:HG3	1:A:916:ARG:CZ	1.05	1.78
1:A:856:LEU:HA	1:A:890:HIS:CB	1.05	1.80
1:A:864:ASP:CB	1:A:864:ASP:OD1	1.05	2.02
1:A:847:LEU:C	1:A:848:LEU:CA	1.05	2.23
1:A:905:SER:CA	1:A:905:SER:OG	1.04	2.03
1:A:849:ASP:HB3	1:A:849:ASP:CG	1.03	1.48
1:A:882:GLU:OE2	1:A:882:GLU:CG	1.03	2.06
1:A:856:LEU:CA	1:A:890:HIS:CB	1.01	2.38
1:A:850:ILE:HD12	1:A:913:ILE:O	1.01	1.52
1:A:848:LEU:HD22	1:A:916:ARG:HD2	1.01	1.25
1:A:880:VAL:HG21	1:A:888:ALA:CB	1.01	1.85
1:A:905:SER:OG	1:A:905:SER:HB3	1.00	1.28
1:A:849:ASP:HB2	1:A:849:ASP:CG	1.00	1.48
1:A:855:ARG:C	1:A:890:HIS:HB2	1.00	1.61
1:A:858:LEU:HD21	1:A:868:LEU:CB	0.99	1.87
1:A:905:SER:OG	1:A:905:SER:HB2	0.99	1.28
1:A:857:TYR:OH	1:A:857:TYR:CE2	0.99	2.08
1:A:882:GLU:OE1	1:A:882:GLU:CG	0.99	2.10
1:A:884:ASP:OD2	1:A:884:ASP:CB	0.99	2.10
1:A:836:SER:HB2	1:A:836:SER:OG	0.99	1.26
1:A:879:LEU:HD23	1:A:879:LEU:CG	0.99	1.53
1:A:849:ASP:CB	1:A:849:ASP:CG	0.99	0.90
1:A:876:ASP:CB	1:A:876:ASP:OD1	0.98	2.09
1:A:876:ASP:CB	1:A:876:ASP:OD2	0.98	2.12
1:A:884:ASP:CB	1:A:884:ASP:OD1	0.98	2.12
1:A:836:SER:HB3	1:A:836:SER:OG	0.98	1.26
1:A:856:LEU:CA	1:A:890:HIS:HB2	0.98	1.89
1:A:905:SER:OG	1:A:906:PRO:HD2	0.98	1.59
1:A:914:ARG:HG3	1:A:914:ARG:CD	0.98	1.51
1:A:879:LEU:CG	1:A:879:LEU:HD11	0.97	1.53
1:A:856:LEU:HD21	1:A:892:LEU:HD12	0.97	0.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:879:LEU:HD22	1:A:879:LEU:CG	0.97	1.53
1:A:864:ASP:CB	1:A:864:ASP:OD2	0.97	2.12
1:A:879:LEU:HD23	1:A:879:LEU:CD1	0.97	1.87
1:A:848:LEU:HD22	1:A:916:ARG:CD	0.96	1.90
1:A:847:LEU:CA	1:A:848:LEU:N	0.96	2.29
1:A:879:LEU:CG	1:A:879:LEU:HD12	0.96	1.53
1:A:846:VAL:CA	1:A:847:LEU:N	0.96	2.28
1:A:916:ARG:CB	1:A:916:ARG:CZ	0.96	2.42
1:A:879:LEU:CG	1:A:879:LEU:HD13	0.96	1.53
1:A:855:ARG:HD2	1:A:889:THR:N	0.96	1.75
1:A:879:LEU:CD2	1:A:879:LEU:HD12	0.96	1.87
1:A:854:VAL:HG11	1:A:908:TRP:HH2	0.96	0.89
1:A:914:ARG:HG2	1:A:914:ARG:CD	0.95	1.51
1:A:905:SER:CB	1:A:905:SER:OG	0.94	0.65
1:A:881:GLN:CD	1:A:881:GLN:OE1	0.94	0.74
1:A:881:GLN:CG	1:A:881:GLN:OE1	0.94	2.15
1:A:879:LEU:HD21	1:A:879:LEU:CG	0.94	1.53
1:A:851:PHE:HZ	1:A:851:PHE:CE1	0.94	1.69
1:A:885:MET:O	1:A:887:SER:N	0.94	2.01
1:A:879:LEU:CD1	1:A:879:LEU:CD2	0.94	0.94
1:A:855:ARG:HG3	1:A:889:THR:N	0.93	1.78
1:A:858:LEU:HD21	1:A:868:LEU:HB3	0.93	0.94
1:A:883:PHE:CB	1:A:883:PHE:CD1	0.93	2.24
1:A:856:LEU:HD21	1:A:892:LEU:CD1	0.93	1.91
1:A:871:TYR:CE2	1:A:871:TYR:OH	0.93	2.11
1:A:854:VAL:CG1	1:A:908:TRP:HH2	0.92	1.76
1:A:847:LEU:HD13	1:A:871:TYR:CD1	0.92	2.00
1:A:855:ARG:NE	1:A:889:THR:CB	0.92	2.01
1:A:845:LYS:O	1:A:871:TYR:HE1	0.91	1.47
1:A:854:VAL:CG2	1:A:918:LEU:CG	0.91	2.42
1:A:881:GLN:O	1:A:884:ASP:N	0.91	2.03
1:A:847:LEU:HD13	1:A:871:TYR:HE1	0.91	1.24
1:A:871:TYR:CE1	1:A:875:PHE:CZ	0.91	2.51
1:A:914:ARG:CG	1:A:914:ARG:CD	0.91	0.91
1:A:847:LEU:CD2	1:A:847:LEU:N	0.91	2.31
1:A:914:ARG:CG	1:A:914:ARG:HD3	0.91	1.45
1:A:836:SER:CB	1:A:836:SER:OG	0.90	0.61
1:A:856:LEU:CD1	1:A:856:LEU:C	0.90	2.28
1:A:914:ARG:CG	1:A:914:ARG:HD2	0.90	1.45
1:A:879:LEU:CD1	1:A:879:LEU:CG	0.90	0.90
1:A:879:LEU:CG	1:A:879:LEU:CD2	0.90	0.90
1:A:854:VAL:HG12	1:A:872:PHE:HZ	0.90	1.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:855:ARG:CD	1:A:889:THR:N	0.90	2.35
1:A:850:ILE:CD1	1:A:913:ILE:O	0.90	2.20
1:A:854:VAL:CG1	1:A:908:TRP:CH2	0.89	2.52
1:A:855:ARG:H	1:A:889:THR:CG2	0.89	1.78
1:A:871:TYR:CZ	1:A:875:PHE:CZ	0.89	2.59
1:A:856:LEU:HA	1:A:890:HIS:C	0.89	1.88
1:A:885:MET:HB2	1:A:898:ASN:CB	0.89	1.96
1:A:871:TYR:CD1	1:A:875:PHE:CZ	0.89	2.59
1:A:871:TYR:CZ	1:A:913:ILE:CD1	0.88	2.56
1:A:846:VAL:CA	1:A:847:LEU:HD22	0.88	1.99
1:A:889:THR:HG23	1:A:890:HIS:ND1	0.88	1.82
1:A:871:TYR:CD2	1:A:875:PHE:HZ	0.88	1.78
1:A:851:PHE:CZ	1:A:909:ILE:HA	0.88	2.03
1:A:845:LYS:O	1:A:871:TYR:CE1	0.88	2.26
1:A:851:PHE:CZ	1:A:909:ILE:HG12	0.88	2.03
1:A:885:MET:CG	1:A:898:ASN:HB2	0.87	1.98
1:A:846:VAL:C	1:A:847:LEU:N	0.87	0.83
1:A:847:LEU:CD1	1:A:871:TYR:CD1	0.87	2.57
1:A:841:LEU:HD11	1:A:845:LYS:CE	0.86	2.01
1:A:884:ASP:CG	1:A:884:ASP:OD1	0.86	0.66
1:A:895:ARG:O	1:A:898:ASN:N	0.86	2.09
1:A:855:ARG:H	1:A:889:THR:HG21	0.85	1.26
1:A:876:ASP:OD2	1:A:876:ASP:CG	0.85	0.65
1:A:851:PHE:CZ	1:A:909:ILE:HG13	0.85	2.03
1:A:884:ASP:CG	1:A:884:ASP:OD2	0.85	0.65
1:A:841:LEU:HD11	1:A:845:LYS:HE2	0.85	1.49
1:A:879:LEU:CD2	1:A:879:LEU:HD13	0.84	1.39
1:A:851:PHE:HZ	1:A:851:PHE:CE2	0.84	1.70
1:A:878:ASP:CG	1:A:878:ASP:OD1	0.84	0.64
1:A:864:ASP:CG	1:A:864:ASP:OD2	0.84	0.64
1:A:851:PHE:CE1	1:A:909:ILE:HG13	0.84	2.08
1:A:851:PHE:CZ	1:A:851:PHE:CE2	0.84	0.84
1:A:871:TYR:CZ	1:A:913:ILE:HD11	0.84	2.06
1:A:838:ASP:O	1:A:842:CYS:HB2	0.83	1.71
1:A:851:PHE:CD1	1:A:851:PHE:CG	0.83	0.84
1:A:876:ASP:OD1	1:A:876:ASP:CG	0.83	0.63
1:A:894:SER:O	1:A:897:LYS:NZ	0.83	2.11
1:A:879:LEU:HD22	1:A:879:LEU:CD1	0.83	1.39
1:A:870:ARG:O	1:A:874:ALA:HB2	0.83	1.73
1:A:865:PHE:CG	1:A:865:PHE:CD1	0.83	0.84
1:A:851:PHE:CZ	1:A:851:PHE:CE1	0.83	0.84
1:A:865:PHE:CZ	1:A:865:PHE:CE2	0.83	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:851:PHE:C	1:A:918:LEU:HD21	0.83	1.93
1:A:835:GLY:N	1:A:835:GLY:HA2	0.83	1.22
1:A:851:PHE:CD2	1:A:851:PHE:CG	0.82	0.84
1:A:855:ARG:N	1:A:889:THR:CG2	0.82	2.41
1:A:885:MET:CB	1:A:898:ASN:HB2	0.82	2.04
1:A:835:GLY:N	1:A:835:GLY:HA3	0.82	1.22
1:A:857:TYR:HB3	1:A:891:VAL:HG12	0.82	1.51
1:A:905:SER:CB	1:A:906:PRO:HD2	0.82	2.03
1:A:855:ARG:HG3	1:A:889:THR:H	0.82	1.29
1:A:851:PHE:HZ	1:A:909:ILE:CB	0.82	1.88
1:A:882:GLU:OE1	1:A:882:GLU:CD	0.82	0.63
1:A:865:PHE:CE1	1:A:865:PHE:CZ	0.82	0.82
1:A:846:VAL:O	1:A:847:LEU:N	0.81	0.67
1:A:857:TYR:H	1:A:891:VAL:HA	0.81	1.34
1:A:852:THR:N	1:A:918:LEU:HD21	0.81	1.91
1:A:872:PHE:HZ	1:A:872:PHE:CE2	0.81	1.61
1:A:838:ASP:CG	1:A:838:ASP:HB2	0.81	1.24
1:A:865:PHE:CG	1:A:865:PHE:CD2	0.80	0.82
1:A:838:ASP:CG	1:A:838:ASP:HB3	0.80	1.24
1:A:885:MET:CE	1:A:897:LYS:HB2	0.80	2.06
1:A:883:PHE:HZ	1:A:883:PHE:CE1	0.80	1.60
1:A:858:LEU:CD1	1:A:859:PRO:HD2	0.80	2.07
1:A:851:PHE:HZ	1:A:909:ILE:CG2	0.80	1.90
1:A:847:LEU:CD1	1:A:871:TYR:HD1	0.80	1.87
1:A:851:PHE:CE1	1:A:909:ILE:CG1	0.79	2.65
1:A:854:VAL:HG21	1:A:918:LEU:HG	0.79	0.85
1:A:855:ARG:CZ	1:A:889:THR:CB	0.79	2.53
1:A:848:LEU:HB2	1:A:850:ILE:HD11	0.79	1.51
1:A:854:VAL:HG12	1:A:872:PHE:CZ	0.79	2.12
1:A:851:PHE:CE1	1:A:909:ILE:HA	0.79	2.11
1:A:850:ILE:HG13	1:A:913:ILE:HG13	0.79	1.53
1:A:875:PHE:HZ	1:A:875:PHE:CE2	0.79	1.65
1:A:855:ARG:CG	1:A:889:THR:N	0.79	2.39
1:A:851:PHE:CZ	1:A:909:ILE:CB	0.79	2.66
1:A:850:ILE:HG13	1:A:913:ILE:CB	0.79	2.08
1:A:847:LEU:C	1:A:848:LEU:N	0.78	0.79
1:A:848:LEU:CB	1:A:850:ILE:HD11	0.78	2.09
1:A:851:PHE:CZ	1:A:909:ILE:CA	0.77	2.67
1:A:914:ARG:CG	1:A:914:ARG:HH11	0.77	1.88
1:A:919:VAL:HG23	1:A:920:ALA:N	0.77	1.94
1:A:851:PHE:HZ	1:A:909:ILE:CG1	0.77	1.93
1:A:851:PHE:HZ	1:A:909:ILE:HG23	0.77	1.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:858:LEU:HD12	1:A:859:PRO:CD	0.77	2.10
1:A:882:GLU:OE2	1:A:882:GLU:CD	0.77	0.59
1:A:885:MET:HB2	1:A:898:ASN:CG	0.77	2.00
1:A:865:PHE:HZ	1:A:865:PHE:CE2	0.77	1.70
1:A:865:PHE:CE1	1:A:865:PHE:HZ	0.76	1.68
1:A:871:TYR:CG	1:A:871:TYR:CD1	0.76	0.80
1:A:871:TYR:CE2	1:A:871:TYR:CZ	0.76	0.80
1:A:885:MET:HB2	1:A:898:ASN:HB2	0.76	1.56
1:A:885:MET:SD	1:A:897:LYS:C	0.76	2.65
1:A:881:GLN:OE1	1:A:881:GLN:NE2	0.75	0.61
1:A:875:PHE:HZ	1:A:875:PHE:CE1	0.75	1.63
1:A:879:LEU:CD2	1:A:879:LEU:HD11	0.75	0.99
1:A:850:ILE:HG22	1:A:912:CYS:CB	0.75	2.11
1:A:879:LEU:HD22	1:A:879:LEU:HD13	0.75	1.06
1:A:879:LEU:HD21	1:A:879:LEU:CD1	0.74	0.99
1:A:851:PHE:N	1:A:918:LEU:HD11	0.74	1.98
1:A:851:PHE:HA	1:A:918:LEU:HD11	0.74	0.77
1:A:864:ASP:CG	1:A:864:ASP:OD1	0.74	0.55
1:A:871:TYR:CZ	1:A:875:PHE:HZ	0.73	2.01
1:A:850:ILE:HG22	1:A:912:CYS:HB3	0.73	1.61
1:A:838:ASP:CG	1:A:838:ASP:CB	0.72	0.63
1:A:855:ARG:HD2	1:A:889:THR:CA	0.72	1.94
1:A:890:HIS:HA	1:A:902:GLN:H	0.72	1.44
1:A:856:LEU:CA	1:A:890:HIS:HB3	0.72	2.14
1:A:895:ARG:C	1:A:897:LYS:HE3	0.72	2.05
1:A:885:MET:SD	1:A:898:ASN:HB2	0.72	2.25
1:A:889:THR:O	1:A:901:ALA:HA	0.72	1.83
1:A:846:VAL:C	1:A:846:VAL:O	0.72	0.53
1:A:851:PHE:CZ	1:A:909:ILE:HG23	0.72	2.19
1:A:882:GLU:HA	1:A:885:MET:CE	0.72	2.15
1:A:885:MET:HA	1:A:888:ALA:HB2	0.72	1.59
1:A:854:VAL:HG13	1:A:890:HIS:CD2	0.72	2.20
1:A:858:LEU:HD12	1:A:859:PRO:N	0.71	2.00
1:A:871:TYR:CE2	1:A:875:PHE:CE1	0.71	2.78
1:A:885:MET:O	1:A:886:THR:C	0.71	2.28
1:A:850:ILE:HG13	1:A:913:ILE:CA	0.71	2.15
1:A:871:TYR:O	1:A:874:ALA:HB3	0.71	1.86
1:A:880:VAL:HG21	1:A:888:ALA:HB2	0.71	1.62
1:A:835:GLY:N	1:A:835:GLY:CA	0.71	0.56
1:A:857:TYR:HB3	1:A:891:VAL:HA	0.71	1.61
1:A:870:ARG:O	1:A:874:ALA:CB	0.71	2.38
1:A:872:PHE:CE1	1:A:872:PHE:CZ	0.71	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:871:TYR:CG	1:A:875:PHE:CZ	0.71	2.79
1:A:858:LEU:HD12	1:A:859:PRO:HD2	0.71	1.60
1:A:855:ARG:C	1:A:890:HIS:CB	0.70	2.50
1:A:859:PRO:CD	1:A:892:LEU:HB3	0.70	2.16
1:A:895:ARG:CA	1:A:897:LYS:HE3	0.70	2.16
1:A:878:ASP:CG	1:A:878:ASP:OD2	0.70	0.53
1:A:894:SER:C	1:A:897:LYS:NZ	0.70	2.45
1:A:855:ARG:O	1:A:889:THR:HG22	0.69	1.87
1:A:882:GLU:HA	1:A:885:MET:HE1	0.69	1.63
1:A:908:TRP:O	1:A:912:CYS:SG	0.69	2.51
1:A:880:VAL:HG21	1:A:888:ALA:HB1	0.69	1.62
1:A:862:THR:CG2	1:A:868:LEU:HD12	0.69	2.18
1:A:895:ARG:HB3	1:A:903:GLN:NE2	0.69	2.02
1:A:872:PHE:CD2	1:A:872:PHE:CG	0.69	0.77
1:A:871:TYR:HH	1:A:913:ILE:HD11	0.69	1.45
1:A:850:ILE:O	1:A:918:LEU:HD22	0.69	1.87
1:A:905:SER:CB	1:A:906:PRO:CD	0.69	2.70
1:A:839:GLU:OE1	1:A:839:GLU:CD	0.68	0.54
1:A:850:ILE:HG13	1:A:913:ILE:CG1	0.68	2.19
1:A:856:LEU:HA	1:A:890:HIS:HB3	0.68	1.61
1:A:846:VAL:O	1:A:847:LEU:CG	0.68	2.41
1:A:852:THR:O	1:A:852:THR:CG2	0.68	2.41
1:A:856:LEU:HA	1:A:890:HIS:CA	0.68	2.17
1:A:875:PHE:O	1:A:876:ASP:CB	0.68	2.41
1:A:857:TYR:CE2	1:A:857:TYR:CZ	0.68	0.74
1:A:854:VAL:HG23	1:A:918:LEU:CD2	0.67	2.19
1:A:856:LEU:CB	1:A:890:HIS:HB3	0.67	2.19
1:A:839:GLU:CD	1:A:839:GLU:OE2	0.67	0.53
1:A:895:ARG:O	1:A:896:ASP:C	0.67	2.33
1:A:851:PHE:HE1	1:A:909:ILE:HA	0.67	1.48
1:A:871:TYR:CE1	1:A:871:TYR:CZ	0.67	0.72
1:A:905:SER:OG	1:A:906:PRO:CD	0.67	2.41
1:A:850:ILE:CG1	1:A:913:ILE:HG13	0.67	2.20
1:A:871:TYR:CG	1:A:871:TYR:CD2	0.67	0.72
1:A:875:PHE:CZ	1:A:875:PHE:CE2	0.67	0.73
1:A:845:LYS:C	1:A:847:LEU:CD2	0.66	2.63
1:A:851:PHE:CA	1:A:918:LEU:CD1	0.66	2.46
1:A:884:ASP:OD2	1:A:884:ASP:OD1	0.66	0.67
1:A:846:VAL:O	1:A:847:LEU:CB	0.66	2.41
1:A:875:PHE:CZ	1:A:875:PHE:CE1	0.66	0.72
1:A:916:ARG:HH12	1:A:916:ARG:CZ	0.66	1.39
1:A:850:ILE:O	1:A:918:LEU:CD2	0.66	2.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:883:PHE:CZ	1:A:883:PHE:CE1	0.66	0.68
1:A:850:ILE:O	1:A:918:LEU:HD13	0.66	1.89
1:A:883:PHE:CZ	1:A:883:PHE:CE2	0.66	0.74
1:A:851:PHE:HD1	1:A:851:PHE:CG	0.66	1.42
1:A:851:PHE:CZ	1:A:851:PHE:HE2	0.66	1.43
1:A:872:PHE:CE2	1:A:872:PHE:CZ	0.66	0.70
1:A:857:TYR:CD1	1:A:857:TYR:CG	0.66	0.74
1:A:857:TYR:N	1:A:891:VAL:HA	0.66	2.06
1:A:851:PHE:CZ	1:A:851:PHE:HE1	0.66	1.42
1:A:865:PHE:HE2	1:A:865:PHE:CZ	0.65	1.42
1:A:850:ILE:O	1:A:852:THR:N	0.65	2.28
1:A:865:PHE:HD1	1:A:865:PHE:CG	0.65	1.42
1:A:851:PHE:CG	1:A:851:PHE:HD2	0.65	1.42
1:A:855:ARG:HD2	1:A:888:ALA:C	0.65	2.12
1:A:865:PHE:HD2	1:A:865:PHE:CG	0.65	1.41
1:A:865:PHE:CZ	1:A:865:PHE:HE1	0.65	1.41
1:A:885:MET:SD	1:A:897:LYS:CD	0.65	2.85
1:A:850:ILE:O	1:A:918:LEU:CD1	0.65	2.45
1:A:857:TYR:CE1	1:A:857:TYR:CZ	0.64	0.73
1:A:855:ARG:CZ	1:A:889:THR:OG1	0.64	2.46
1:A:857:TYR:CD2	1:A:857:TYR:CG	0.64	0.73
1:A:871:TYR:CD2	1:A:875:PHE:CE1	0.64	2.86
1:A:845:LYS:O	1:A:871:TYR:CZ	0.64	2.51
1:A:841:LEU:CD1	1:A:845:LYS:CE	0.64	2.76
1:A:858:LEU:HD11	1:A:862:THR:HG21	0.63	1.70
1:A:872:PHE:CD1	1:A:872:PHE:CG	0.63	0.71
1:A:896:ASP:OD2	1:A:896:ASP:CG	0.63	0.52
1:A:850:ILE:C	1:A:852:THR:H	0.63	1.97
1:A:850:ILE:HG13	1:A:913:ILE:HB	0.62	1.70
1:A:875:PHE:CG	1:A:875:PHE:CD2	0.62	0.72
1:A:895:ARG:N	1:A:897:LYS:HE3	0.62	2.09
1:A:858:LEU:C	1:A:858:LEU:HD12	0.62	2.15
1:A:855:ARG:NH1	1:A:889:THR:CB	0.62	2.52
1:A:859:PRO:HD3	1:A:892:LEU:HB3	0.62	1.72
1:A:855:ARG:N	1:A:889:THR:HG21	0.61	1.99
1:A:883:PHE:CG	1:A:883:PHE:CD1	0.61	0.74
1:A:846:VAL:CG2	1:A:871:TYR:OH	0.61	2.34
1:A:857:TYR:N	1:A:890:HIS:O	0.61	2.33
1:A:876:ASP:OD1	1:A:876:ASP:OD2	0.61	0.62
1:A:854:VAL:O	1:A:872:PHE:CZ	0.61	2.53
1:A:911:ALA:O	1:A:915:LYS:CG	0.61	2.49
1:A:857:TYR:H	1:A:891:VAL:CA	0.61	2.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:882:GLU:O	1:A:885:MET:CE	0.61	2.48
1:A:836:SER:N	1:A:836:SER:OG	0.61	2.32
1:A:881:GLN:CD	1:A:881:GLN:HE22	0.60	1.22
1:A:846:VAL:HG23	1:A:871:TYR:CZ	0.60	2.29
1:A:847:LEU:HD13	1:A:871:TYR:CZ	0.60	2.31
1:A:885:MET:C	1:A:898:ASN:ND2	0.60	2.54
1:A:895:ARG:HD3	1:A:903:GLN:NE2	0.60	2.12
1:A:916:ARG:NE	1:A:916:ARG:CZ	0.60	0.69
1:A:850:ILE:C	1:A:918:LEU:CD1	0.60	2.70
1:A:881:GLN:CD	1:A:881:GLN:HE21	0.60	1.22
1:A:891:VAL:HG13	1:A:901:ALA:CB	0.60	2.27
1:A:841:LEU:CD1	1:A:845:LYS:HE3	0.59	2.27
1:A:875:PHE:CG	1:A:875:PHE:CD1	0.59	0.73
1:A:896:ASP:O	1:A:898:ASN:N	0.59	2.35
1:A:850:ILE:CD1	1:A:913:ILE:HG13	0.59	2.27
1:A:916:ARG:NH1	1:A:916:ARG:CZ	0.59	0.74
1:A:850:ILE:C	1:A:918:LEU:HD13	0.59	2.18
1:A:857:TYR:HB3	1:A:891:VAL:CG1	0.59	2.27
1:A:857:TYR:CB	1:A:891:VAL:HG12	0.58	2.27
1:A:855:ARG:NH1	1:A:889:THR:OG1	0.58	2.35
1:A:871:TYR:HE2	1:A:871:TYR:CZ	0.58	1.34
1:A:896:ASP:OD1	1:A:896:ASP:CG	0.58	0.47
1:A:848:LEU:CB	1:A:850:ILE:CD1	0.58	2.81
1:A:871:TYR:CG	1:A:871:TYR:HD1	0.58	1.34
1:A:891:VAL:HB	1:A:897:LYS:NZ	0.58	2.13
1:A:843:GLN:HB2	1:A:846:VAL:HG12	0.57	1.75
1:A:846:VAL:N	1:A:847:LEU:HD22	0.57	2.15
1:A:856:LEU:HB2	1:A:890:HIS:HB3	0.57	1.76
1:A:865:PHE:HA	1:A:868:LEU:HB2	0.57	1.76
1:A:851:PHE:HB3	1:A:854:VAL:HB	0.57	1.77
1:A:840:THR:O	1:A:846:VAL:HG11	0.57	1.99
1:A:881:GLN:CD	1:A:881:GLN:NE2	0.57	0.53
1:A:844:THR:HG22	1:A:845:LYS:N	0.56	2.15
1:A:856:LEU:CD1	1:A:856:LEU:O	0.56	2.37
1:A:871:TYR:CZ	1:A:913:ILE:HD12	0.56	2.33
1:A:875:PHE:O	1:A:876:ASP:HB2	0.56	1.99
1:A:836:SER:N	1:A:836:SER:HG	0.56	1.98
1:A:845:LYS:C	1:A:847:LEU:HD22	0.56	2.21
1:A:885:MET:O	1:A:898:ASN:ND2	0.56	2.38
1:A:919:VAL:CG2	1:A:920:ALA:N	0.56	2.67
1:A:851:PHE:O	1:A:854:VAL:HB	0.56	2.00
1:A:847:LEU:N	1:A:871:TYR:HH	0.56	1.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:881:GLN:O	1:A:882:GLU:C	0.56	2.43
1:A:844:THR:CG2	1:A:845:LYS:N	0.55	2.64
1:A:852:THR:N	1:A:918:LEU:CD2	0.55	2.69
1:A:871:TYR:CE2	1:A:913:ILE:CD1	0.55	2.90
1:A:872:PHE:O	1:A:874:ALA:N	0.55	2.39
1:A:885:MET:SD	1:A:897:LYS:CA	0.55	2.93
1:A:854:VAL:HG23	1:A:918:LEU:CG	0.55	2.30
1:A:906:PRO:O	1:A:910:TRP:CD1	0.55	2.60
1:A:908:TRP:CD1	1:A:921:PRO:HA	0.55	2.37
1:A:851:PHE:HD1	1:A:908:TRP:CZ3	0.55	2.20
1:A:846:VAL:N	1:A:847:LEU:CD2	0.55	2.70
1:A:894:SER:C	1:A:897:LYS:HZ1	0.55	2.05
1:A:895:ARG:O	1:A:897:LYS:HD2	0.54	2.03
1:A:880:VAL:HB	1:A:884:ASP:O	0.54	2.02
1:A:858:LEU:HD13	1:A:892:LEU:HD13	0.54	1.80
1:A:854:VAL:CG2	1:A:918:LEU:CD2	0.54	2.83
1:A:865:PHE:O	1:A:866:SER:C	0.54	2.45
1:A:872:PHE:HE1	1:A:872:PHE:CZ	0.54	1.30
1:A:895:ARG:HD3	1:A:903:GLN:HE22	0.54	1.61
1:A:872:PHE:HD2	1:A:872:PHE:CG	0.54	1.30
1:A:904:VAL:HG23	1:A:905:SER:N	0.54	2.15
1:A:880:VAL:CG2	1:A:888:ALA:CB	0.54	2.76
1:A:871:TYR:CG	1:A:871:TYR:HD2	0.54	1.30
1:A:845:LYS:C	1:A:847:LEU:HD21	0.53	2.24
1:A:870:ARG:CZ	1:A:870:ARG:HH21	0.53	1.24
1:A:871:TYR:HE1	1:A:871:TYR:CZ	0.53	1.30
1:A:862:THR:HG21	1:A:868:LEU:HD12	0.53	1.78
1:A:857:TYR:CG	1:A:857:TYR:O	0.53	2.61
1:A:851:PHE:O	1:A:854:VAL:N	0.53	2.29
1:A:857:TYR:HE2	1:A:857:TYR:CZ	0.53	1.28
1:A:885:MET:HB2	1:A:898:ASN:ND2	0.53	2.18
1:A:887:SER:O	1:A:888:ALA:O	0.53	2.25
1:A:879:LEU:CA	1:A:879:LEU:CD2	0.53	2.86
1:A:857:TYR:HD2	1:A:857:TYR:CG	0.53	1.28
1:A:857:TYR:HE1	1:A:857:TYR:CZ	0.53	1.28
1:A:914:ARG:HD2	1:A:914:ARG:CB	0.53	2.02
1:A:880:VAL:CG1	1:A:884:ASP:O	0.53	2.56
1:A:895:ARG:CA	1:A:897:LYS:CE	0.53	2.87
1:A:878:ASP:OD2	1:A:878:ASP:OD1	0.53	0.53
1:A:847:LEU:C	1:A:847:LEU:O	0.52	0.43
1:A:856:LEU:CB	1:A:890:HIS:CB	0.52	2.84
1:A:857:TYR:HD1	1:A:857:TYR:CG	0.52	1.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:895:ARG:CB	1:A:903:GLN:NE2	0.52	2.72
1:A:840:THR:O	1:A:846:VAL:CG1	0.52	2.58
1:A:849:ASP:N	1:A:849:ASP:CG	0.52	2.63
1:A:885:MET:CE	1:A:897:LYS:HD3	0.52	2.34
1:A:889:THR:CG2	1:A:890:HIS:N	0.52	2.72
1:A:857:TYR:CB	1:A:891:VAL:HA	0.52	2.35
1:A:849:ASP:O	1:A:916:ARG:O	0.52	2.28
1:A:837:ALA:O	1:A:841:LEU:N	0.52	2.43
1:A:872:PHE:O	1:A:873:VAL:C	0.52	2.49
1:A:871:TYR:HE2	1:A:875:PHE:HZ	0.52	1.27
1:A:911:ALA:O	1:A:915:LYS:HG2	0.52	2.05
1:A:896:ASP:O	1:A:897:LYS:C	0.51	2.48
1:A:891:VAL:N	1:A:902:GLN:O	0.51	2.40
1:A:851:PHE:N	1:A:918:LEU:CD1	0.51	2.70
1:A:883:PHE:CG	1:A:883:PHE:CD2	0.51	0.68
1:A:845:LYS:O	1:A:846:VAL:C	0.51	2.48
1:A:850:ILE:C	1:A:852:THR:N	0.51	2.63
1:A:895:ARG:HB3	1:A:903:GLN:CG	0.51	2.36
1:A:905:SER:CB	1:A:905:SER:HG	0.51	1.22
1:A:895:ARG:HA	1:A:897:LYS:HZ2	0.51	1.64
1:A:854:VAL:HG11	1:A:908:TRP:CZ3	0.51	2.30
1:A:872:PHE:CZ	1:A:872:PHE:HE2	0.51	1.26
1:A:916:ARG:HE	1:A:916:ARG:CZ	0.51	1.28
1:A:855:ARG:C	1:A:889:THR:HG22	0.51	2.04
1:A:872:PHE:HD1	1:A:872:PHE:CG	0.51	1.26
1:A:885:MET:CB	1:A:898:ASN:CB	0.51	2.72
1:A:882:GLU:C	1:A:884:ASP:H	0.50	2.09
1:A:851:PHE:CD1	1:A:908:TRP:CZ3	0.50	3.00
1:A:891:VAL:O	1:A:902:GLN:O	0.50	2.30
1:A:872:PHE:O	1:A:875:PHE:N	0.50	2.45
1:A:875:PHE:CG	1:A:875:PHE:HD1	0.50	1.25
1:A:850:ILE:CD1	1:A:913:ILE:CG1	0.50	2.90
1:A:875:PHE:CZ	1:A:875:PHE:HE2	0.50	1.25
1:A:881:GLN:O	1:A:884:ASP:CA	0.50	2.59
1:A:836:SER:O	1:A:839:GLU:N	0.50	2.44
1:A:851:PHE:HA	1:A:918:LEU:CG	0.50	2.34
1:A:871:TYR:CE2	1:A:913:ILE:HD12	0.49	2.41
1:A:867:ARG:O	1:A:868:LEU:C	0.49	2.49
1:A:895:ARG:HB3	1:A:903:GLN:HG3	0.49	1.82
1:A:875:PHE:O	1:A:876:ASP:CG	0.49	2.50
1:A:908:TRP:CE2	1:A:912:CYS:SG	0.49	3.05
1:A:848:LEU:HB3	1:A:850:ILE:CD1	0.49	2.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:850:ILE:CD1	1:A:913:ILE:CB	0.49	2.87
1:A:845:LYS:O	1:A:847:LEU:HD13	0.49	2.07
1:A:852:THR:O	1:A:852:THR:HG23	0.49	2.06
1:A:836:SER:O	1:A:837:ALA:C	0.49	2.49
1:A:836:SER:HG	1:A:836:SER:CB	0.48	1.19
1:A:845:LYS:O	1:A:847:LEU:CD1	0.48	2.60
1:A:883:PHE:HE2	1:A:883:PHE:CZ	0.48	1.24
1:A:836:SER:CA	1:A:836:SER:HG	0.48	1.92
1:A:851:PHE:CB	1:A:854:VAL:HB	0.48	2.39
1:A:845:LYS:HB3	1:A:847:LEU:HD11	0.48	1.83
1:A:880:VAL:CB	1:A:884:ASP:O	0.48	2.61
1:A:882:GLU:O	1:A:885:MET:HE3	0.48	2.09
1:A:841:LEU:C	1:A:843:GLN:N	0.48	2.67
1:A:859:PRO:HD3	1:A:892:LEU:CB	0.48	2.38
1:A:875:PHE:CZ	1:A:875:PHE:HE1	0.48	1.24
1:A:883:PHE:CG	1:A:883:PHE:HD1	0.47	1.23
1:A:845:LYS:O	1:A:847:LEU:CD2	0.47	2.62
1:A:875:PHE:HD2	1:A:875:PHE:CG	0.47	1.24
1:A:885:MET:HA	1:A:888:ALA:CB	0.47	2.37
1:A:880:VAL:HG12	1:A:884:ASP:O	0.47	2.10
1:A:843:GLN:HB2	1:A:846:VAL:CG1	0.47	2.39
1:A:874:ALA:O	1:A:875:PHE:C	0.47	2.52
1:A:882:GLU:O	1:A:885:MET:SD	0.47	2.72
1:A:885:MET:C	1:A:887:SER:N	0.46	2.66
1:A:871:TYR:CD1	1:A:875:PHE:CE1	0.46	2.99
1:A:896:ASP:C	1:A:898:ASN:N	0.46	2.68
1:A:859:PRO:CD	1:A:892:LEU:CB	0.46	2.92
1:A:912:CYS:HA	1:A:919:VAL:HG13	0.46	1.86
1:A:882:GLU:OE1	1:A:882:GLU:OE2	0.46	0.46
1:A:855:ARG:HG3	1:A:855:ARG:O	0.46	2.11
1:A:856:LEU:CD1	1:A:857:TYR:N	0.46	2.77
1:A:867:ARG:O	1:A:871:TYR:N	0.46	2.44
1:A:858:LEU:HD13	1:A:859:PRO:HD2	0.46	1.84
1:A:845:LYS:O	1:A:847:LEU:HD22	0.46	2.10
1:A:851:PHE:CA	1:A:854:VAL:HB	0.46	2.40
1:A:871:TYR:CE1	1:A:875:PHE:CE1	0.46	2.95
1:A:885:MET:SD	1:A:897:LYS:CG	0.45	2.99
1:A:846:VAL:CA	1:A:847:LEU:CD2	0.45	2.81
1:A:890:HIS:CD2	1:A:902:GLN:HB2	0.45	2.47
1:A:890:HIS:CG	1:A:902:GLN:HB2	0.45	2.47
1:A:851:PHE:CE2	1:A:909:ILE:HG12	0.45	2.47
1:A:851:PHE:O	1:A:852:THR:C	0.45	2.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:891:VAL:HB	1:A:897:LYS:HZ3	0.45	1.71
1:A:885:MET:SD	1:A:898:ASN:N	0.45	2.89
1:A:869:ARG:O	1:A:873:VAL:HG12	0.44	2.12
1:A:914:ARG:HB3	1:A:914:ARG:HD2	0.44	1.83
1:A:889:THR:O	1:A:901:ALA:CA	0.44	2.59
1:A:883:PHE:CG	1:A:883:PHE:HD2	0.44	1.20
1:A:847:LEU:HA	1:A:875:PHE:CE1	0.44	2.47
1:A:867:ARG:O	1:A:871:TYR:CB	0.44	2.66
1:A:883:PHE:HE1	1:A:883:PHE:CZ	0.44	1.20
1:A:840:THR:C	1:A:842:CYS:N	0.44	2.71
1:A:858:LEU:HD11	1:A:862:THR:CG2	0.44	2.41
1:A:850:ILE:CG2	1:A:912:CYS:CB	0.44	2.90
1:A:885:MET:HG3	1:A:897:LYS:O	0.44	2.13
1:A:858:LEU:CD2	1:A:868:LEU:CB	0.43	2.70
1:A:881:GLN:HB2	1:A:884:ASP:HB2	0.43	1.90
1:A:845:LYS:C	1:A:846:VAL:HG22	0.43	2.32
1:A:851:PHE:HB3	1:A:872:PHE:CZ	0.43	2.47
1:A:880:VAL:CG2	1:A:888:ALA:HB2	0.43	2.39
1:A:895:ARG:HB3	1:A:903:GLN:CD	0.43	2.32
1:A:880:VAL:CG2	1:A:888:ALA:HB1	0.43	2.40
1:A:892:LEU:HD11	1:A:909:ILE:CD1	0.43	2.43
1:A:864:ASP:OD1	1:A:864:ASP:OD2	0.43	0.43
1:A:855:ARG:O	1:A:855:ARG:CG	0.43	2.65
1:A:909:ILE:O	1:A:913:ILE:HG22	0.43	2.14
1:A:871:TYR:HE2	1:A:913:ILE:HD12	0.43	1.71
1:A:869:ARG:O	1:A:873:VAL:CG1	0.43	2.67
1:A:895:ARG:N	1:A:897:LYS:CE	0.43	2.80
1:A:885:MET:CB	1:A:898:ASN:CG	0.43	2.83
1:A:872:PHE:C	1:A:874:ALA:N	0.42	2.71
1:A:882:GLU:C	1:A:884:ASP:N	0.42	2.73
1:A:869:ARG:O	1:A:870:ARG:C	0.42	2.57
1:A:841:LEU:C	1:A:843:GLN:H	0.42	2.18
1:A:847:LEU:CD1	1:A:871:TYR:CG	0.42	3.02
1:A:908:TRP:CD2	1:A:912:CYS:SG	0.42	3.13
1:A:870:ARG:NH2	1:A:870:ARG:CZ	0.42	0.57
1:A:851:PHE:CE2	1:A:909:ILE:CG1	0.42	2.91
1:A:854:VAL:HG13	1:A:890:HIS:CG	0.41	2.50
1:A:917:ARG:O	1:A:918:LEU:C	0.41	2.57
1:A:851:PHE:CE1	1:A:909:ILE:CA	0.41	2.95
1:A:859:PRO:HG2	1:A:862:THR:CB	0.41	2.45
1:A:890:HIS:HA	1:A:902:GLN:N	0.41	2.22
1:A:851:PHE:CZ	1:A:909:ILE:CG2	0.41	2.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:857:TYR:H	1:A:890:HIS:C	0.41	2.19
1:A:912:CYS:SG	1:A:919:VAL:HG13	0.41	2.56
1:A:840:THR:C	1:A:842:CYS:H	0.41	2.19
1:A:882:GLU:CA	1:A:885:MET:CE	0.41	2.95
1:A:891:VAL:CG2	1:A:902:GLN:O	0.41	2.68
1:A:852:THR:HG22	1:A:918:LEU:CD2	0.40	2.47
1:A:841:LEU:HD21	1:A:845:LYS:HA	0.40	1.93
1:A:852:THR:O	1:A:852:THR:HG22	0.40	2.15
1:A:868:LEU:HA	1:A:868:LEU:HD23	0.40	1.67
1:A:885:MET:CA	1:A:888:ALA:CB	0.40	2.99

6.3 Torsion angles

6.3.1 Protein backbone

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	86/88 (98%)	43 (50%)	26 (30%)	17 (20%)	0	2
All	All	86/88 (98%)	43 (50%)	26 (30%)	17 (20%)	0	2

All 17 Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type
1	A	886	THR
1	A	845	LYS
1	A	876	ASP
1	A	851	PHE
1	A	882	GLU
1	A	873	VAL
1	A	872	PHE
1	A	883	PHE
1	A	869	ARG
1	A	896	ASP
1	A	888	ALA
1	A	893	GLY
1	A	897	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	850	ILE
1	A	846	VAL
1	A	848	LEU
1	A	847	LEU

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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	77/77 (100%)	45 (58%)	32 (42%)	0	4
All	All	77/77 (100%)	45 (58%)	32 (42%)	0	4

All 32 residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type
1	A	845	LYS
1	A	914	ARG
1	A	919	VAL
1	A	880	VAL
1	A	839	GLU
1	A	918	LEU
1	A	847	LEU
1	A	896	ASP
1	A	889	THR
1	A	841	LEU
1	A	917	ARG
1	A	907	GLU
1	A	852	THR
1	A	861	SER
1	A	897	LYS
1	A	858	LEU
1	A	870	ARG
1	A	909	ILE
1	A	862	THR
1	A	887	SER
1	A	856	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	873	VAL
1	A	838	ASP
1	A	850	ILE
1	A	843	GLN
1	A	892	LEU
1	A	916	ARG
1	A	857	TYR
1	A	844	THR
1	A	849	ASP
1	A	864	ASP
1	A	867	ARG

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 carbohydrates 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

No chemical shift data were provided