



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 09:19 PM BST

PDB ID : 2JVN  
Title : Domain C of human PARP-1  
Authors : Hoffman, D.; Tao, Z.; Liu, H.  
Deposited on : 2007-09-24

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

We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto: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

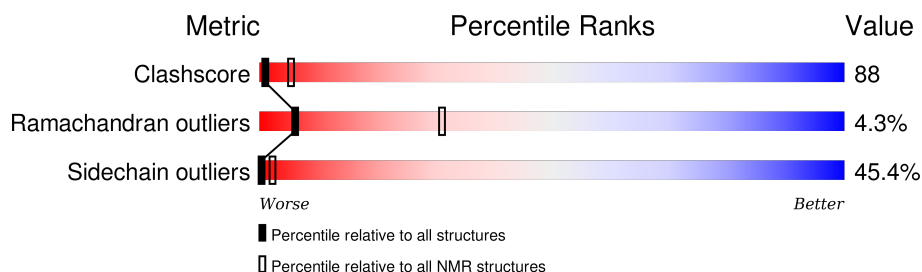
# 1 Overall quality at a glance

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  $\geq 3$ , 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	126	

## 2 Ensemble composition and analysis ⓘ

This entry contains 10 models. Model 7 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *fewest violations*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:233-A:356 (124)	0.60	7

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

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

The models can be grouped into 3 clusters and 1 single-model cluster was found.

Cluster number	Models
1	1, 5, 6, 7
2	2, 4, 10
3	8, 9
Single-model clusters	3

### 3 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2063 atoms, of which 1047 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Poly [ADP-ribose] polymerase 1.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	126	Total	C	H	N	O	S	0
			2062	650	1047	170	188	7	

- Molecule 2 is ZINC ION (three-letter code: ZN) (formula: Zn).

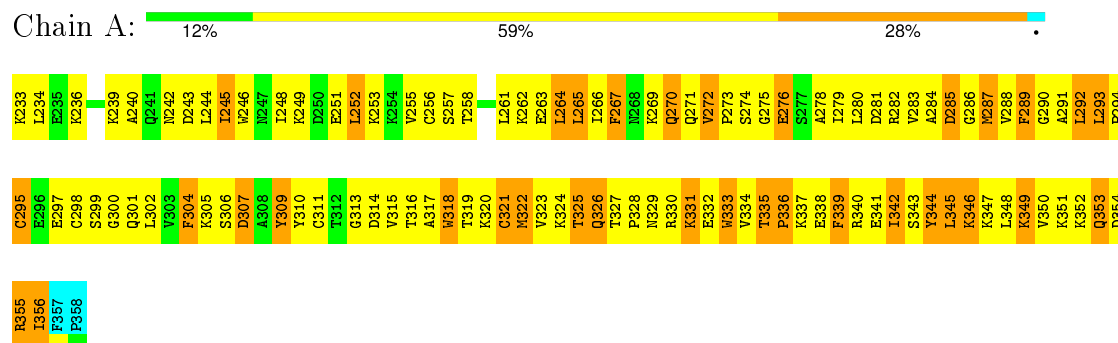
Mol	Chain	Residues	Atoms	
2	A	1	Total	Zn
			1	1

## 4 Residue-property plots

### 4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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: Poly [ADP-ribose] polymerase 1

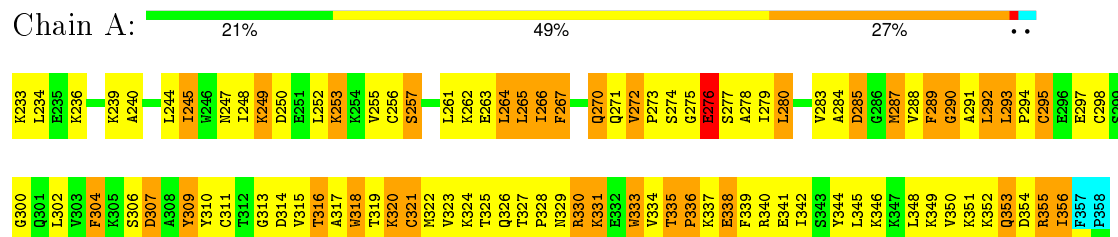


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

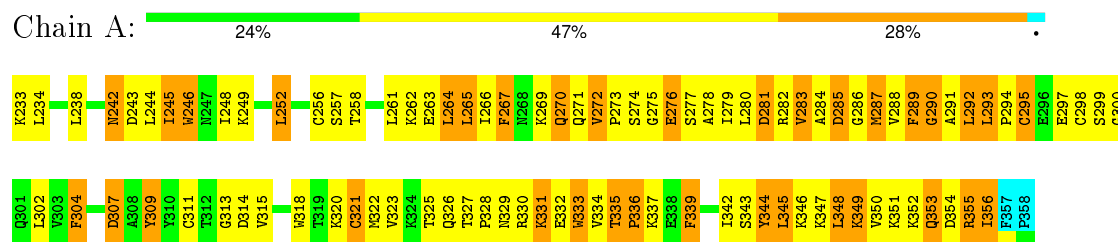
#### 4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Poly [ADP-ribose] polymerase 1



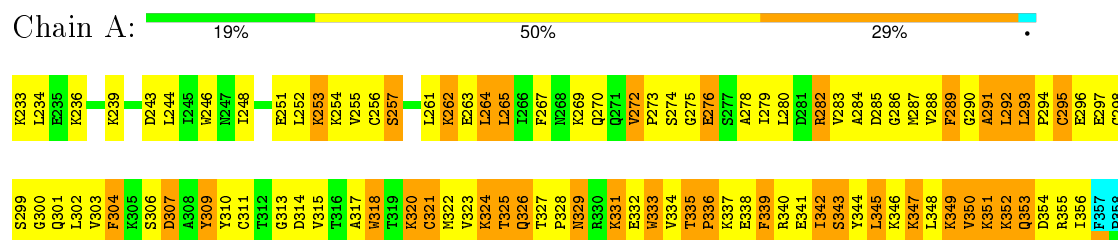
#### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Poly [ADP-ribose] polymerase 1



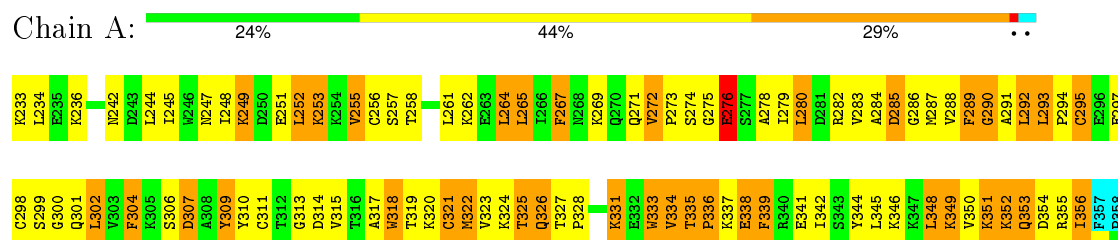
### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Poly [ADP-ribose] polymerase 1



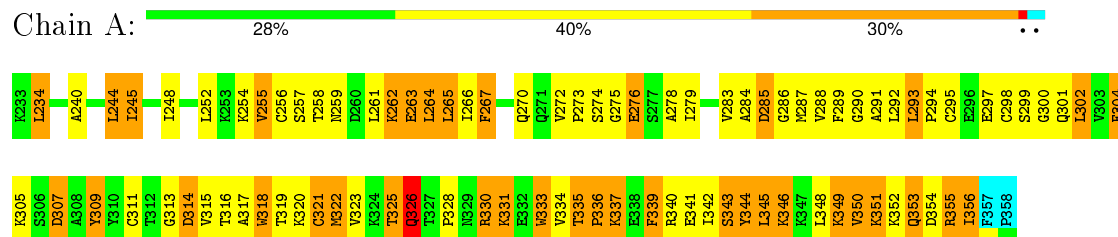
#### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Poly [ADP-ribose] polymerase 1



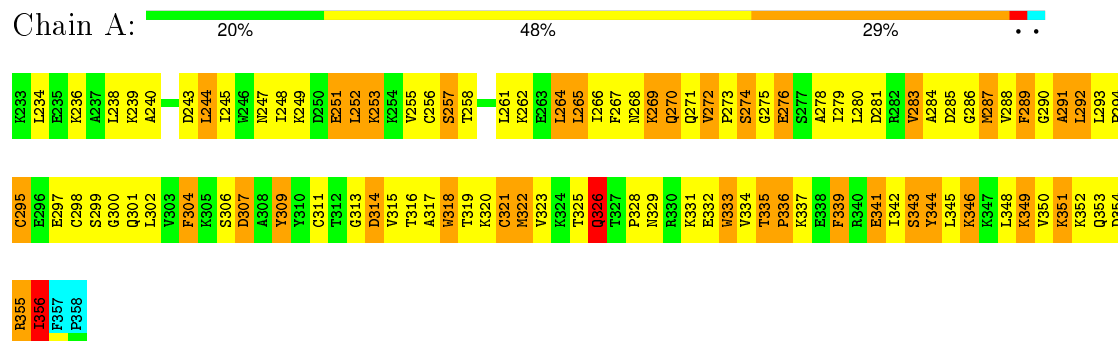
#### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Poly [ADP-ribose] polymerase 1



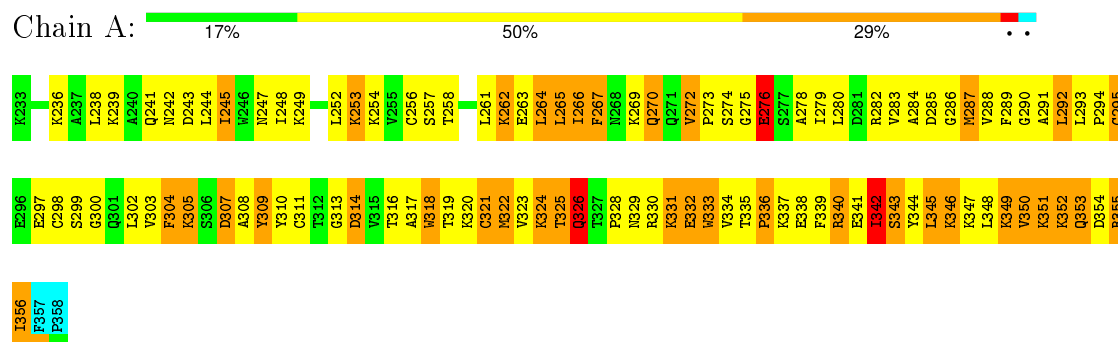
### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Poly [ADP-ribose] polymerase 1



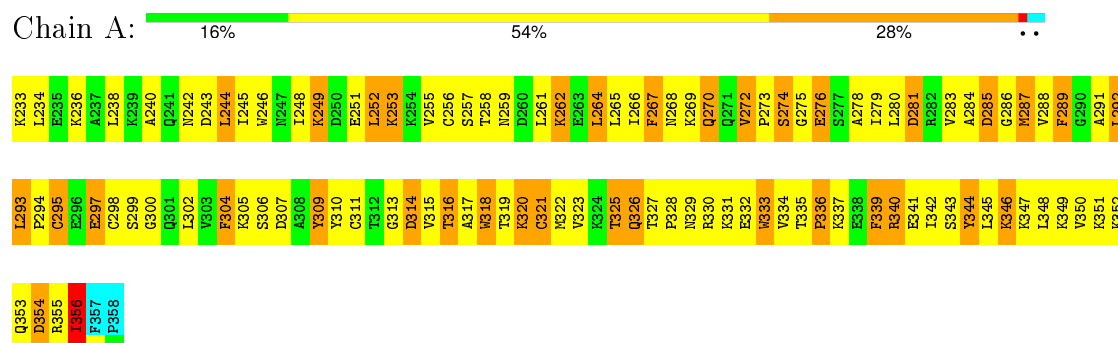
### 4.2.7 Score per residue for model 7 (medoid)

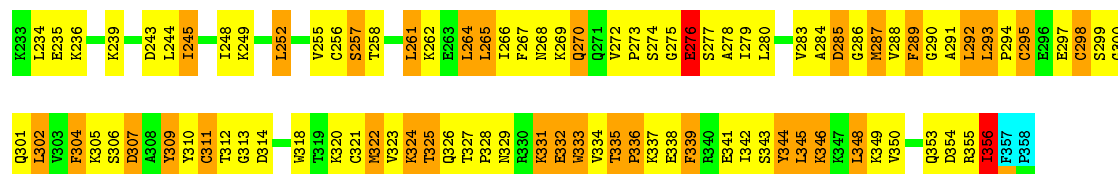
- Molecule 1: Poly [ADP-ribose] polymerase 1



### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Poly [ADP-ribose] polymerase 1







## 5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 100 calculated structures, 10 were deposited, based on the following criterion: *structures with the least restraint violations*.

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

Software name	Classification	Version
CNS	structure solution	1.1
CNS	refinement	1.1

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 ⓘ

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

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	0.57±0.01	0±0/1013 (0.0±0.0%)	0.72±0.01	0±0/1363 (0.0±0.0%)
All	All	0.57	0/10130 (0.0%)	0.72	3/13630 (0.0%)

There are no bond-length outliers.

All unique angle outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	291	ALA	N-CA-CB	-5.91	101.82	110.10	3	3

There are no chirality outliers.

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	996	1031	1028	178±9
All	All	9970	10310	10280	1784

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 88.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:291:ALA:HB1	1:A:333:TRP:CG	1.37	1.53	5	8
1:A:291:ALA:HB1	1:A:333:TRP:CB	1.27	1.59	2	10
1:A:265:LEU:HD23	1:A:279:ILE:HG23	1.12	1.15	3	10
1:A:291:ALA:CB	1:A:333:TRP:CG	1.11	2.32	5	10
1:A:248:ILE:HG22	1:A:284:ALA:HB1	1.11	1.21	10	10
1:A:291:ALA:HB1	1:A:333:TRP:HB3	1.05	1.07	2	10
1:A:298:CYS:HB3	1:A:321:CYS:HB3	0.99	1.34	8	8
1:A:279:ILE:O	1:A:283:VAL:HG23	0.98	1.58	8	8
1:A:275:GLY:O	1:A:278:ALA:N	0.97	1.97	4	10
1:A:304:PHE:HB2	1:A:309:TYR:HB2	0.94	1.39	5	10
1:A:291:ALA:HB1	1:A:333:TRP:N	0.92	1.79	10	4
1:A:291:ALA:CB	1:A:333:TRP:CB	0.92	2.48	2	10
1:A:291:ALA:HB1	1:A:333:TRP:CA	0.90	1.96	10	6
1:A:293:LEU:HD22	1:A:331:LYS:HB2	0.89	1.44	4	4
1:A:346:LYS:HA	1:A:350:VAL:HG21	0.88	1.45	10	2
1:A:291:ALA:HB3	1:A:333:TRP:CG	0.88	2.04	4	2
1:A:317:ALA:O	1:A:318:TRP:CE3	0.87	2.27	9	1
1:A:291:ALA:CB	1:A:333:TRP:HB3	0.86	2.00	4	10
1:A:288:VAL:HG13	1:A:350:VAL:HG22	0.86	1.43	10	2
1:A:248:ILE:HG22	1:A:284:ALA:CB	0.84	2.02	8	4
1:A:292:LEU:HD22	1:A:292:LEU:O	0.84	1.72	9	2
1:A:248:ILE:CG2	1:A:284:ALA:HB1	0.83	2.03	3	9
1:A:261:LEU:HD12	1:A:262:LYS:N	0.83	1.88	2	3
1:A:244:LEU:HD13	1:A:349:LYS:O	0.82	1.72	3	1
1:A:295:CYS:CB	1:A:302:LEU:HD11	0.82	2.03	8	8
1:A:261:LEU:HD11	1:A:276:GLU:HG2	0.82	1.49	2	3
1:A:264:LEU:HD23	1:A:265:LEU:HD22	0.82	1.49	4	4
1:A:291:ALA:CB	1:A:333:TRP:CD2	0.82	2.63	1	5
1:A:291:ALA:HB3	1:A:331:LYS:O	0.82	1.73	7	3
1:A:264:LEU:HD12	1:A:335:THR:HG22	0.82	1.52	10	2
1:A:279:ILE:O	1:A:283:VAL:CG2	0.81	2.28	8	10
1:A:261:LEU:HD11	1:A:276:GLU:CG	0.81	2.04	2	3
1:A:346:LYS:O	1:A:350:VAL:HG23	0.81	1.74	8	2
1:A:293:LEU:HD21	1:A:332:GLU:O	0.81	1.74	7	1
1:A:245:ILE:HD11	1:A:353:GLN:HB3	0.81	1.50	8	1
1:A:291:ALA:HB1	1:A:333:TRP:CD1	0.80	2.12	9	4
1:A:291:ALA:CB	1:A:333:TRP:N	0.80	2.45	10	6
1:A:248:ILE:HD13	1:A:345:LEU:HD12	0.80	1.53	8	1
1:A:295:CYS:HB3	1:A:302:LEU:HD11	0.80	1.51	9	6
1:A:292:LEU:HD12	1:A:304:PHE:CD1	0.80	2.11	10	3
1:A:311:CYS:HB3	1:A:323:VAL:HG12	0.79	1.52	7	1
1:A:252:LEU:HD13	1:A:339:PHE:CZ	0.79	2.11	6	2

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:291:ALA:CB	1:A:333:TRP:CD1	0.79	2.65	6	8
1:A:293:LEU:HG	1:A:294:PRO:HD2	0.79	1.52	6	2
1:A:298:CYS:HB3	1:A:321:CYS:CB	0.78	2.08	6	7
1:A:267:PHE:CE2	1:A:334:VAL:HG23	0.78	2.13	7	2
1:A:265:LEU:HD12	1:A:270:GLN:CB	0.78	2.08	6	6
1:A:244:LEU:HD12	1:A:245:ILE:N	0.78	1.94	2	2
1:A:293:LEU:O	1:A:302:LEU:HD13	0.78	1.77	8	8
1:A:295:CYS:HB2	1:A:302:LEU:HD11	0.78	1.53	1	3
1:A:272:VAL:HG13	1:A:275:GLY:HA2	0.78	1.55	8	8
1:A:309:TYR:CD2	1:A:328:PRO:HA	0.78	2.13	4	10
1:A:265:LEU:HD23	1:A:279:ILE:CG2	0.78	2.03	3	6
1:A:311:CYS:SG	1:A:323:VAL:HG13	0.77	2.19	9	2
1:A:272:VAL:HG13	1:A:275:GLY:CA	0.77	2.10	3	8
1:A:240:ALA:O	1:A:244:LEU:HD12	0.77	1.78	6	3
1:A:262:LYS:O	1:A:266:ILE:HG23	0.77	1.80	5	1
1:A:287:MET:CE	1:A:342:ILE:HG21	0.77	2.10	6	5
1:A:294:PRO:HA	1:A:301:GLN:HA	0.77	1.57	10	2
1:A:344:TYR:CE1	1:A:345:LEU:HD12	0.76	2.16	10	2
1:A:298:CYS:SG	1:A:313:GLY:HA3	0.76	2.20	7	8
1:A:346:LYS:HA	1:A:350:VAL:HG11	0.76	1.54	2	1
1:A:252:LEU:HD12	1:A:253:LYS:N	0.76	1.96	1	1
1:A:274:SER:O	1:A:278:ALA:CB	0.76	2.33	6	10
1:A:248:ILE:HG23	1:A:345:LEU:CD2	0.76	2.11	6	2
1:A:311:CYS:SG	1:A:323:VAL:HG22	0.75	2.21	9	2
1:A:244:LEU:HD13	1:A:349:LYS:CG	0.75	2.10	9	5
1:A:285:ASP:O	1:A:289:PHE:CD2	0.75	2.40	5	9
1:A:258:THR:HG23	1:A:276:GLU:CD	0.74	2.02	6	3
1:A:342:ILE:HB	1:A:345:LEU:HD23	0.74	1.58	8	1
1:A:265:LEU:CD2	1:A:279:ILE:HG23	0.74	2.05	3	4
1:A:265:LEU:HD12	1:A:270:GLN:HB2	0.74	1.56	10	7
1:A:335:THR:OG1	1:A:339:PHE:CG	0.74	2.40	7	1
1:A:264:LEU:O	1:A:267:PHE:CD2	0.73	2.41	10	8
1:A:279:ILE:O	1:A:283:VAL:HG22	0.73	1.83	3	4
1:A:298:CYS:HB2	1:A:321:CYS:CB	0.73	2.13	10	2
1:A:275:GLY:O	1:A:279:ILE:N	0.73	2.22	8	10
1:A:264:LEU:HD12	1:A:336:PRO:HD2	0.73	1.60	4	3
1:A:264:LEU:CD1	1:A:335:THR:HG22	0.73	2.14	10	4
1:A:287:MET:CE	1:A:288:VAL:HG23	0.72	2.13	3	1
1:A:292:LEU:HD22	1:A:302:LEU:O	0.72	1.84	6	3
1:A:279:ILE:O	1:A:283:VAL:HG13	0.72	1.84	3	2
1:A:293:LEU:HD13	1:A:332:GLU:O	0.72	1.84	2	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:346:LYS:O	1:A:350:VAL:HG22	0.72	1.84	5	3
1:A:288:VAL:HG23	1:A:345:LEU:HD23	0.71	1.62	2	1
1:A:295:CYS:HB2	1:A:302:LEU:HD23	0.71	1.61	5	1
1:A:326:GLN:HG3	1:A:327:THR:N	0.71	2.01	10	3
1:A:292:LEU:H	1:A:292:LEU:HD13	0.71	1.42	9	2
1:A:344:TYR:O	1:A:348:LEU:HD22	0.71	1.85	9	1
1:A:244:LEU:HD13	1:A:349:LYS:HG3	0.71	1.61	9	2
1:A:252:LEU:CD1	1:A:284:ALA:HB2	0.71	2.16	7	3
1:A:264:LEU:CD2	1:A:283:VAL:HG21	0.71	2.15	5	4
1:A:298:CYS:CB	1:A:321:CYS:HB3	0.71	2.14	6	8
1:A:293:LEU:CG	1:A:294:PRO:HD2	0.71	2.16	6	1
1:A:292:LEU:HD23	1:A:302:LEU:O	0.71	1.85	9	2
1:A:293:LEU:HD22	1:A:331:LYS:CB	0.71	2.16	4	1
1:A:293:LEU:HD13	1:A:331:LYS:CG	0.70	2.16	8	3
1:A:274:SER:O	1:A:278:ALA:HB3	0.70	1.85	6	10
1:A:287:MET:HE1	1:A:342:ILE:HG21	0.70	1.62	6	3
1:A:288:VAL:CG1	1:A:350:VAL:HA	0.70	2.16	1	4
1:A:311:CYS:O	1:A:322:MET:HA	0.69	1.87	7	10
1:A:288:VAL:HG13	1:A:350:VAL:HA	0.69	1.64	2	7
1:A:265:LEU:HD12	1:A:270:GLN:HB3	0.69	1.63	5	5
1:A:339:PHE:O	1:A:342:ILE:HG23	0.69	1.87	7	1
1:A:261:LEU:HD11	1:A:280:LEU:HD21	0.69	1.64	1	2
1:A:292:LEU:HB2	1:A:302:LEU:HD12	0.69	1.65	4	2
1:A:292:LEU:HD11	1:A:304:PHE:CD1	0.69	2.22	2	1
1:A:252:LEU:HD21	1:A:287:MET:CE	0.69	2.18	5	1
1:A:264:LEU:CD2	1:A:283:VAL:HG11	0.69	2.17	3	1
1:A:345:LEU:HD13	1:A:345:LEU:H	0.69	1.47	3	2
1:A:291:ALA:HB3	1:A:333:TRP:CB	0.68	2.18	4	2
1:A:292:LEU:C	1:A:293:LEU:HD22	0.68	2.08	7	1
1:A:292:LEU:HB3	1:A:328:PRO:CB	0.68	2.18	2	6
1:A:292:LEU:O	1:A:292:LEU:HD12	0.68	1.89	3	1
1:A:346:LYS:HA	1:A:350:VAL:CG1	0.68	2.19	2	1
1:A:293:LEU:HD13	1:A:331:LYS:HG2	0.68	1.65	8	3
1:A:288:VAL:HG22	1:A:347:LYS:CB	0.67	2.20	3	1
1:A:287:MET:HB3	1:A:342:ILE:HD13	0.67	1.67	2	5
1:A:245:ILE:HD11	1:A:285:ASP:OD1	0.67	1.89	10	5
1:A:344:TYR:O	1:A:348:LEU:HD13	0.67	1.89	7	2
1:A:252:LEU:HD23	1:A:284:ALA:HB2	0.67	1.66	2	3
1:A:288:VAL:CG1	1:A:350:VAL:HG22	0.67	2.19	10	1
1:A:258:THR:HG23	1:A:276:GLU:OE1	0.67	1.90	10	6
1:A:264:LEU:HD21	1:A:283:VAL:HG21	0.66	1.67	5	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:243:ASP:HA	1:A:246:TRP:CD1	0.66	2.26	9	2
1:A:267:PHE:CD2	1:A:336:PRO:HD3	0.66	2.25	7	2
1:A:304:PHE:C	1:A:304:PHE:CD1	0.66	2.67	8	4
1:A:264:LEU:HD23	1:A:336:PRO:HD3	0.66	1.66	9	1
1:A:249:LYS:HA	1:A:252:LEU:HD23	0.66	1.67	8	5
1:A:306:SER:HB3	1:A:356:ILE:HD13	0.66	1.68	9	3
1:A:304:PHE:HB2	1:A:309:TYR:CB	0.66	2.18	5	10
1:A:255:VAL:HG12	1:A:338:GLU:HB3	0.66	1.65	1	3
1:A:311:CYS:SG	1:A:311:CYS:O	0.66	2.54	5	4
1:A:276:GLU:HA	1:A:279:ILE:HB	0.65	1.67	8	10
1:A:311:CYS:O	1:A:311:CYS:SG	0.65	2.55	1	5
1:A:313:GLY:N	1:A:321:CYS:SG	0.65	2.69	9	2
1:A:335:THR:HB	1:A:339:PHE:HB3	0.65	1.66	10	7
1:A:248:ILE:HD11	1:A:345:LEU:HD12	0.65	1.69	9	1
1:A:309:TYR:HB3	1:A:325:THR:O	0.64	1.93	5	10
1:A:311:CYS:SG	1:A:323:VAL:HG12	0.64	2.32	8	1
1:A:292:LEU:HD13	1:A:302:LEU:O	0.64	1.92	3	1
1:A:252:LEU:HD21	1:A:287:MET:HE2	0.64	1.68	5	1
1:A:293:LEU:HG	1:A:331:LYS:CB	0.64	2.21	1	4
1:A:292:LEU:HB3	1:A:328:PRO:HB2	0.64	1.68	2	3
1:A:288:VAL:HG11	1:A:350:VAL:HG11	0.64	1.68	3	1
1:A:287:MET:HA	1:A:333:TRP:NE1	0.64	2.08	4	9
1:A:262:LYS:HA	1:A:279:ILE:HD13	0.64	1.68	7	3
1:A:252:LEU:HD11	1:A:284:ALA:HB2	0.64	1.70	5	2
1:A:283:VAL:HG12	1:A:287:MET:SD	0.64	2.33	1	1
1:A:345:LEU:O	1:A:348:LEU:HD12	0.64	1.93	3	1
1:A:288:VAL:HG13	1:A:350:VAL:HG12	0.64	1.70	2	1
1:A:284:ALA:O	1:A:287:MET:HG3	0.64	1.93	3	1
1:A:245:ILE:HG22	1:A:246:TRP:CE3	0.64	2.28	8	1
1:A:280:LEU:HD12	1:A:281:ASP:N	0.63	2.08	2	3
1:A:270:GLN:NE2	1:A:356:ILE:HD11	0.63	2.09	1	1
1:A:291:ALA:HB3	1:A:333:TRP:HB3	0.63	1.67	4	2
1:A:300:GLY:CA	1:A:313:GLY:HA3	0.63	2.22	9	3
1:A:292:LEU:HD12	1:A:302:LEU:O	0.63	1.92	5	1
1:A:291:ALA:HB2	1:A:333:TRP:CG	0.63	2.29	10	4
1:A:279:ILE:O	1:A:283:VAL:CG1	0.63	2.46	3	2
1:A:288:VAL:HG13	1:A:350:VAL:CG2	0.63	2.21	10	1
1:A:292:LEU:CD2	1:A:292:LEU:O	0.63	2.47	9	4
1:A:302:LEU:HD23	1:A:329:ASN:H	0.62	1.52	6	8
1:A:263:GLU:O	1:A:266:ILE:HG22	0.62	1.94	7	2
1:A:288:VAL:CG1	1:A:350:VAL:HG11	0.62	2.24	3	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:293:LEU:HD22	1:A:294:PRO:N	0.62	2.09	1	3
1:A:289:PHE:CD2	1:A:353:GLN:CB	0.62	2.82	7	4
1:A:267:PHE:CE2	1:A:336:PRO:HD3	0.62	2.28	10	5
1:A:288:VAL:O	1:A:350:VAL:HG13	0.62	1.95	5	2
1:A:275:GLY:O	1:A:278:ALA:CA	0.61	2.48	7	10
1:A:287:MET:HB3	1:A:333:TRP:HE1	0.61	1.54	1	5
1:A:287:MET:CB	1:A:333:TRP:HE1	0.61	2.09	4	6
1:A:342:ILE:CB	1:A:345:LEU:HD11	0.61	2.25	5	1
1:A:309:TYR:C	1:A:309:TYR:CD1	0.61	2.74	5	3
1:A:264:LEU:HD21	1:A:283:VAL:CG2	0.61	2.25	5	3
1:A:284:ALA:O	1:A:287:MET:HG2	0.61	1.96	4	2
1:A:272:VAL:HG23	1:A:273:PRO:HD2	0.61	1.73	2	6
1:A:309:TYR:CE2	1:A:328:PRO:HA	0.61	2.31	8	5
1:A:293:LEU:HD13	1:A:293:LEU:O	0.61	1.96	10	2
1:A:255:VAL:HG11	1:A:338:GLU:HB3	0.61	1.71	3	1
1:A:293:LEU:O	1:A:302:LEU:HD22	0.60	1.95	10	7
1:A:244:LEU:HD13	1:A:349:LYS:HB3	0.60	1.73	8	2
1:A:252:LEU:CD2	1:A:284:ALA:HB2	0.60	2.26	10	1
1:A:289:PHE:CZ	1:A:354:ASP:O	0.60	2.54	3	5
1:A:261:LEU:O	1:A:279:ILE:HG21	0.60	1.95	7	3
1:A:255:VAL:HG11	1:A:338:GLU:CB	0.60	2.26	3	1
1:A:288:VAL:HG22	1:A:346:LYS:HA	0.60	1.73	9	2
1:A:304:PHE:CD1	1:A:304:PHE:C	0.60	2.75	2	4
1:A:293:LEU:HB3	1:A:331:LYS:CB	0.60	2.27	10	5
1:A:291:ALA:HB1	1:A:333:TRP:CD2	0.60	2.26	5	2
1:A:293:LEU:HG	1:A:294:PRO:CD	0.60	2.27	2	3
1:A:265:LEU:HD11	1:A:356:ILE:HD12	0.59	1.74	8	1
1:A:342:ILE:HD12	1:A:342:ILE:O	0.59	1.97	2	3
1:A:295:CYS:N	1:A:302:LEU:HD11	0.59	2.13	6	2
1:A:293:LEU:O	1:A:293:LEU:HD13	0.59	1.97	3	1
1:A:244:LEU:HD22	1:A:349:LYS:HG2	0.59	1.73	9	2
1:A:295:CYS:SG	1:A:297:GLU:HB2	0.59	2.37	3	2
1:A:264:LEU:HD21	1:A:283:VAL:HG11	0.59	1.75	3	1
1:A:288:VAL:HG13	1:A:347:LYS:HA	0.59	1.75	3	1
1:A:304:PHE:CD2	1:A:328:PRO:HD3	0.59	2.33	7	2
1:A:244:LEU:HD22	1:A:349:LYS:HB3	0.59	1.72	2	1
1:A:302:LEU:N	1:A:302:LEU:HD12	0.59	2.13	6	5
1:A:344:TYR:CZ	1:A:345:LEU:HD13	0.59	2.32	7	1
1:A:311:CYS:CB	1:A:323:VAL:HG12	0.59	2.26	7	1
1:A:283:VAL:O	1:A:333:TRP:HZ2	0.58	1.81	6	5
1:A:292:LEU:CB	1:A:328:PRO:HB2	0.58	2.28	4	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:273:PRO:C	1:A:275:GLY:H	0.58	1.99	2	10
1:A:302:LEU:N	1:A:302:LEU:CD1	0.58	2.66	6	3
1:A:346:LYS:HA	1:A:350:VAL:CG2	0.58	2.25	10	2
1:A:309:TYR:CD1	1:A:309:TYR:C	0.58	2.76	4	3
1:A:289:PHE:CE1	1:A:355:ARG:HA	0.58	2.34	10	4
1:A:293:LEU:HB2	1:A:331:LYS:CB	0.58	2.28	2	2
1:A:304:PHE:CB	1:A:309:TYR:HB2	0.58	2.24	5	10
1:A:288:VAL:HG12	1:A:289:PHE:N	0.58	2.12	3	3
1:A:356:ILE:O	1:A:356:ILE:HG23	0.58	1.98	2	2
1:A:291:ALA:CB	1:A:333:TRP:H	0.58	2.10	8	5
1:A:286:GLY:O	1:A:291:ALA:N	0.58	2.37	6	4
1:A:291:ALA:CB	1:A:333:TRP:CE3	0.58	2.86	4	2
1:A:276:GLU:HA	1:A:279:ILE:HD12	0.58	1.75	7	8
1:A:326:GLN:HG3	1:A:327:THR:H	0.58	1.56	10	1
1:A:350:VAL:O	1:A:350:VAL:HG12	0.58	1.98	4	1
1:A:316:THR:O	1:A:317:ALA:C	0.58	2.42	9	1
1:A:264:LEU:HD13	1:A:339:PHE:CD2	0.57	2.34	10	5
1:A:289:PHE:CZ	1:A:355:ARG:HA	0.57	2.34	2	5
1:A:287:MET:HE2	1:A:288:VAL:HG23	0.57	1.76	3	1
1:A:252:LEU:HD21	1:A:280:LEU:O	0.57	1.98	2	3
1:A:295:CYS:SG	1:A:297:GLU:CB	0.57	2.93	4	8
1:A:287:MET:HB2	1:A:342:ILE:HD13	0.57	1.76	4	1
1:A:332:GLU:CG	1:A:342:ILE:HD12	0.57	2.29	10	1
1:A:289:PHE:CD1	1:A:353:GLN:O	0.57	2.58	3	1
1:A:264:LEU:CD2	1:A:265:LEU:HD22	0.57	2.26	4	4
1:A:293:LEU:O	1:A:302:LEU:HD11	0.57	1.99	5	2
1:A:287:MET:HE1	1:A:288:VAL:HG23	0.57	1.76	3	1
1:A:350:VAL:O	1:A:350:VAL:HG23	0.57	1.98	2	1
1:A:316:THR:HG22	1:A:318:TRP:CZ3	0.57	2.35	1	2
1:A:342:ILE:O	1:A:343:SER:CB	0.57	2.53	7	3
1:A:289:PHE:CD2	1:A:353:GLN:HB3	0.57	2.35	7	3
1:A:344:TYR:C	1:A:348:LEU:HD22	0.57	2.20	9	1
1:A:261:LEU:HD11	1:A:280:LEU:CD2	0.56	2.30	1	3
1:A:351:LYS:O	1:A:353:GLN:N	0.56	2.38	5	6
1:A:342:ILE:HB	1:A:345:LEU:HD11	0.56	1.76	5	1
1:A:302:LEU:CD1	1:A:302:LEU:N	0.56	2.68	10	5
1:A:248:ILE:HG23	1:A:345:LEU:HD21	0.56	1.77	10	2
1:A:346:LYS:O	1:A:350:VAL:HG12	0.56	1.99	1	3
1:A:248:ILE:HG23	1:A:345:LEU:HD23	0.56	1.77	7	2
1:A:285:ASP:O	1:A:289:PHE:CD1	0.56	2.59	10	1
1:A:342:ILE:HD12	1:A:342:ILE:C	0.56	2.21	5	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:287:MET:SD	1:A:342:ILE:HG21	0.56	2.41	5	1
1:A:255:VAL:HG12	1:A:338:GLU:CB	0.56	2.30	4	2
1:A:287:MET:CE	1:A:345:LEU:HD13	0.56	2.30	4	1
1:A:257:SER:O	1:A:261:LEU:N	0.56	2.31	8	9
1:A:345:LEU:HD22	1:A:345:LEU:N	0.56	2.16	5	1
1:A:294:PRO:C	1:A:302:LEU:HD13	0.56	2.20	9	3
1:A:286:GLY:HA2	1:A:289:PHE:CE1	0.56	2.36	10	2
1:A:312:THR:HA	1:A:321:CYS:O	0.56	2.01	9	2
1:A:303:VAL:O	1:A:310:TYR:O	0.56	2.24	9	3
1:A:293:LEU:HD21	1:A:332:GLU:C	0.56	2.19	7	1
1:A:293:LEU:HD13	1:A:331:LYS:HG3	0.56	1.77	5	1
1:A:304:PHE:HB2	1:A:309:TYR:HA	0.56	1.77	4	9
1:A:292:LEU:CD1	1:A:292:LEU:O	0.56	2.54	7	3
1:A:258:THR:HG23	1:A:276:GLU:OE2	0.56	2.00	6	1
1:A:309:TYR:CD2	1:A:325:THR:O	0.56	2.59	8	9
1:A:344:TYR:CD1	1:A:345:LEU:HD22	0.55	2.36	8	1
1:A:272:VAL:O	1:A:275:GLY:HA3	0.55	2.01	8	9
1:A:292:LEU:CD1	1:A:304:PHE:CD1	0.55	2.89	8	3
1:A:267:PHE:CE1	1:A:268:ASN:ND2	0.55	2.74	10	1
1:A:288:VAL:HG22	1:A:347:LYS:HB3	0.55	1.78	3	1
1:A:321:CYS:O	1:A:321:CYS:SG	0.55	2.65	9	1
1:A:344:TYR:HD1	1:A:345:LEU:HD13	0.55	1.61	5	1
1:A:252:LEU:HD13	1:A:339:PHE:HZ	0.55	1.61	2	2
1:A:248:ILE:HD11	1:A:346:LYS:HB2	0.55	1.78	3	1
1:A:244:LEU:HD13	1:A:349:LYS:HB2	0.55	1.79	1	3
1:A:289:PHE:HD1	1:A:290:GLY:N	0.55	2.00	10	3
1:A:339:PHE:O	1:A:342:ILE:HD12	0.55	2.00	7	1
1:A:334:VAL:CG2	1:A:334:VAL:O	0.54	2.55	4	6
1:A:255:VAL:HG11	1:A:341:GLU:CD	0.54	2.23	5	1
1:A:264:LEU:HG	1:A:339:PHE:CE2	0.54	2.36	7	1
1:A:298:CYS:SG	1:A:313:GLY:CA	0.54	2.95	7	1
1:A:335:THR:HG22	1:A:339:PHE:HD2	0.54	1.62	3	1
1:A:291:ALA:HB2	1:A:333:TRP:CD1	0.54	2.38	10	5
1:A:297:GLU:HB3	1:A:321:CYS:SG	0.54	2.43	2	6
1:A:267:PHE:CZ	1:A:334:VAL:O	0.54	2.60	10	5
1:A:248:ILE:HD12	1:A:345:LEU:HG	0.54	1.79	2	1
1:A:287:MET:HE3	1:A:345:LEU:HD22	0.54	1.79	1	1
1:A:274:SER:O	1:A:278:ALA:HB2	0.54	2.02	5	9
1:A:302:LEU:HD21	1:A:329:ASN:HB2	0.54	1.80	1	2
1:A:293:LEU:HD13	1:A:293:LEU:C	0.54	2.23	10	3
1:A:267:PHE:C	1:A:267:PHE:CD1	0.54	2.81	4	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:285:ASP:O	1:A:289:PHE:CG	0.54	2.61	10	4
1:A:344:TYR:CD1	1:A:345:LEU:HD13	0.54	2.37	5	1
1:A:252:LEU:O	1:A:256:CYS:N	0.54	2.41	7	8
1:A:252:LEU:HD21	1:A:280:LEU:HB2	0.54	1.80	6	1
1:A:293:LEU:CD2	1:A:331:LYS:HB3	0.54	2.33	6	1
1:A:272:VAL:HG13	1:A:273:PRO:HD2	0.54	1.79	10	2
1:A:289:PHE:CB	1:A:353:GLN:CB	0.54	2.85	4	3
1:A:285:ASP:HB3	1:A:289:PHE:CE2	0.54	2.37	6	4
1:A:306:SER:CB	1:A:356:ILE:HD13	0.54	2.33	9	2
1:A:261:LEU:CD1	1:A:280:LEU:HD21	0.54	2.33	1	2
1:A:335:THR:HG22	1:A:339:PHE:CG	0.54	2.38	6	1
1:A:234:LEU:H	1:A:234:LEU:HD13	0.54	1.62	5	1
1:A:249:LYS:HG2	1:A:280:LEU:HD12	0.54	1.79	7	1
1:A:346:LYS:O	1:A:349:LYS:N	0.54	2.39	3	1
1:A:293:LEU:HG	1:A:331:LYS:HB2	0.53	1.80	3	3
1:A:289:PHE:CD1	1:A:289:PHE:C	0.53	2.81	7	5
1:A:276:GLU:CA	1:A:279:ILE:HD12	0.53	2.34	7	2
1:A:288:VAL:HG11	1:A:350:VAL:CG1	0.53	2.33	3	1
1:A:291:ALA:CA	1:A:333:TRP:HB3	0.53	2.34	8	5
1:A:291:ALA:HB2	1:A:333:TRP:CD2	0.53	2.39	1	2
1:A:264:LEU:HD13	1:A:339:PHE:CE2	0.53	2.38	10	1
1:A:292:LEU:HD23	1:A:292:LEU:O	0.53	2.03	2	2
1:A:334:VAL:O	1:A:334:VAL:CG2	0.53	2.57	10	4
1:A:282:ARG:O	1:A:355:ARG:NH1	0.53	2.41	3	1
1:A:293:LEU:HG	1:A:294:PRO:N	0.53	2.19	5	4
1:A:293:LEU:O	1:A:302:LEU:HD21	0.53	2.04	4	2
1:A:295:CYS:N	1:A:302:LEU:CD1	0.53	2.72	9	8
1:A:302:LEU:HG	1:A:309:TYR:OH	0.53	2.03	9	2
1:A:264:LEU:HD21	1:A:283:VAL:HG13	0.53	1.80	6	1
1:A:300:GLY:HA3	1:A:313:GLY:CA	0.53	2.34	5	8
1:A:285:ASP:O	1:A:289:PHE:HD2	0.53	1.85	8	1
1:A:311:CYS:SG	1:A:323:VAL:HG23	0.53	2.44	3	6
1:A:285:ASP:HB3	1:A:289:PHE:CZ	0.53	2.39	10	3
1:A:325:THR:O	1:A:326:GLN:C	0.52	2.48	6	10
1:A:242:ASN:O	1:A:246:TRP:CE3	0.52	2.61	8	1
1:A:290:GLY:O	1:A:355:ARG:CZ	0.52	2.58	9	2
1:A:249:LYS:HA	1:A:284:ALA:HB2	0.52	1.79	8	1
1:A:287:MET:HE3	1:A:345:LEU:HD13	0.52	1.81	4	1
1:A:344:TYR:CZ	1:A:345:LEU:HD23	0.52	2.39	9	1
1:A:286:GLY:O	1:A:291:ALA:HB2	0.52	2.03	6	2
1:A:300:GLY:HA3	1:A:313:GLY:HA3	0.52	1.79	7	6

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:292:LEU:HD12	1:A:304:PHE:CG	0.52	2.39	8	1
1:A:298:CYS:O	1:A:315:VAL:HG23	0.52	2.05	9	1
1:A:302:LEU:HD12	1:A:302:LEU:N	0.52	2.20	2	3
1:A:287:MET:HE3	1:A:342:ILE:HD13	0.52	1.81	1	1
1:A:326:GLN:CG	1:A:327:THR:N	0.52	2.72	2	3
1:A:244:LEU:HD23	1:A:346:LYS:HD3	0.52	1.82	3	1
1:A:350:VAL:HG22	1:A:350:VAL:O	0.52	2.05	1	1
1:A:264:LEU:HD21	1:A:283:VAL:CG1	0.52	2.35	3	2
1:A:245:ILE:HD12	1:A:285:ASP:OD1	0.52	2.05	8	1
1:A:267:PHE:CD1	1:A:267:PHE:C	0.52	2.83	1	3
1:A:287:MET:HE2	1:A:342:ILE:HD13	0.52	1.82	9	1
1:A:304:PHE:CE2	1:A:355:ARG:NH1	0.52	2.78	9	1
1:A:335:THR:CB	1:A:339:PHE:HB3	0.51	2.35	8	2
1:A:342:ILE:O	1:A:342:ILE:HD12	0.51	2.04	5	3
1:A:293:LEU:O	1:A:302:LEU:CG	0.51	2.58	5	2
1:A:248:ILE:HG23	1:A:345:LEU:CG	0.51	2.34	6	1
1:A:309:TYR:HD2	1:A:325:THR:O	0.51	1.87	8	8
1:A:292:LEU:HD13	1:A:292:LEU:O	0.51	2.06	7	2
1:A:356:ILE:HG23	1:A:356:ILE:O	0.51	2.06	9	1
1:A:293:LEU:HB2	1:A:331:LYS:HB2	0.51	1.82	2	2
1:A:335:THR:O	1:A:336:PRO:O	0.51	2.29	8	8
1:A:255:VAL:HG11	1:A:338:GLU:O	0.51	2.06	9	1
1:A:289:PHE:CD2	1:A:353:GLN:HB2	0.51	2.41	7	3
1:A:288:VAL:CG1	1:A:350:VAL:CG1	0.51	2.88	3	1
1:A:253:LYS:NZ	1:A:280:LEU:HD22	0.51	2.21	3	1
1:A:292:LEU:HD12	1:A:328:PRO:HG2	0.51	1.81	2	1
1:A:240:ALA:O	1:A:244:LEU:HG	0.51	2.06	8	2
1:A:298:CYS:CB	1:A:321:CYS:HB2	0.51	2.36	10	2
1:A:252:LEU:HD12	1:A:261:LEU:HD11	0.51	1.83	10	1
1:A:288:VAL:HG11	1:A:350:VAL:CB	0.50	2.36	3	1
1:A:244:LEU:CD2	1:A:348:LEU:HD23	0.50	2.36	5	1
1:A:309:TYR:OH	1:A:311:CYS:HB3	0.50	2.06	2	2
1:A:293:LEU:N	1:A:293:LEU:HD22	0.50	2.20	7	1
1:A:305:LYS:HE3	1:A:308:ALA:HB3	0.50	1.84	7	1
1:A:332:GLU:HG2	1:A:342:ILE:HD12	0.50	1.81	10	1
1:A:344:TYR:O	1:A:348:LEU:HD12	0.50	2.06	2	1
1:A:258:THR:HA	1:A:261:LEU:CD2	0.50	2.36	8	3
1:A:309:TYR:OH	1:A:323:VAL:CG1	0.50	2.59	8	2
1:A:287:MET:CA	1:A:333:TRP:NE1	0.50	2.74	4	9
1:A:295:CYS:SG	1:A:297:GLU:HB3	0.50	2.47	5	6
1:A:292:LEU:CB	1:A:328:PRO:CB	0.50	2.90	4	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:293:LEU:HD23	1:A:331:LYS:HB2	0.50	1.84	7	1
1:A:345:LEU:CD1	1:A:345:LEU:H	0.50	2.18	3	1
1:A:264:LEU:HD23	1:A:265:LEU:CD2	0.50	2.36	1	1
1:A:244:LEU:HD22	1:A:349:LYS:HB2	0.50	1.82	1	2
1:A:264:LEU:HD23	1:A:336:PRO:CD	0.50	2.35	9	2
1:A:288:VAL:HG13	1:A:350:VAL:HB	0.50	1.81	9	1
1:A:264:LEU:HD12	1:A:336:PRO:HD3	0.50	1.82	3	1
1:A:350:VAL:O	1:A:350:VAL:HG22	0.50	2.06	9	1
1:A:292:LEU:HD13	1:A:292:LEU:H	0.50	1.67	2	2
1:A:293:LEU:HD22	1:A:332:GLU:O	0.50	2.06	2	2
1:A:321:CYS:SG	1:A:321:CYS:O	0.50	2.70	10	1
1:A:255:VAL:HG11	1:A:341:GLU:OE1	0.50	2.06	5	1
1:A:294:PRO:C	1:A:302:LEU:HD21	0.50	2.27	4	1
1:A:288:VAL:HG11	1:A:350:VAL:HG21	0.50	1.84	3	1
1:A:304:PHE:O	1:A:304:PHE:CD1	0.49	2.64	5	4
1:A:298:CYS:HB2	1:A:313:GLY:CA	0.49	2.37	4	7
1:A:253:LYS:O	1:A:256:CYS:O	0.49	2.30	9	2
1:A:333:TRP:N	1:A:333:TRP:CD1	0.49	2.76	10	3
1:A:346:LYS:C	1:A:350:VAL:HG23	0.49	2.28	8	1
1:A:245:ILE:CG2	1:A:246:TRP:CE3	0.49	2.95	8	1
1:A:304:PHE:CD1	1:A:304:PHE:O	0.49	2.64	3	3
1:A:309:TYR:HB3	1:A:326:GLN:O	0.49	2.07	4	4
1:A:290:GLY:O	1:A:355:ARG:NE	0.49	2.45	9	1
1:A:298:CYS:HB2	1:A:313:GLY:C	0.49	2.28	4	7
1:A:261:LEU:C	1:A:279:ILE:HG21	0.49	2.28	7	1
1:A:287:MET:HB3	1:A:333:TRP:CZ2	0.49	2.43	3	1
1:A:256:CYS:HB3	1:A:261:LEU:HD12	0.49	1.84	5	1
1:A:293:LEU:HB3	1:A:331:LYS:HB3	0.49	1.83	4	3
1:A:311:CYS:CB	1:A:323:VAL:HG22	0.49	2.37	9	1
1:A:298:CYS:O	1:A:314:ASP:N	0.49	2.46	8	7
1:A:288:VAL:HG11	1:A:349:LYS:O	0.49	2.07	1	4
1:A:293:LEU:HD11	1:A:332:GLU:O	0.49	2.08	7	1
1:A:342:ILE:C	1:A:342:ILE:HD12	0.49	2.28	6	1
1:A:311:CYS:SG	1:A:323:VAL:HB	0.49	2.48	10	1
1:A:288:VAL:HG22	1:A:350:VAL:HG22	0.49	1.84	10	1
1:A:244:LEU:HD23	1:A:348:LEU:HD23	0.49	1.84	5	1
1:A:248:ILE:HG23	1:A:345:LEU:HG	0.49	1.85	6	2
1:A:244:LEU:HD13	1:A:349:LYS:CD	0.49	2.37	1	3
1:A:264:LEU:HG	1:A:339:PHE:CZ	0.49	2.43	9	1
1:A:287:MET:HE2	1:A:346:LYS:HE3	0.49	1.83	9	1
1:A:287:MET:HA	1:A:333:TRP:CE2	0.49	2.43	3	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:261:LEU:HD12	1:A:261:LEU:C	0.49	2.28	2	3
1:A:267:PHE:CZ	1:A:334:VAL:HG22	0.49	2.43	8	1
1:A:256:CYS:SG	1:A:339:PHE:CD2	0.49	3.02	2	5
1:A:291:ALA:HB1	1:A:333:TRP:CE3	0.49	2.42	1	2
1:A:295:CYS:CA	1:A:302:LEU:HD11	0.48	2.37	9	4
1:A:292:LEU:HB3	1:A:328:PRO:CG	0.48	2.38	5	2
1:A:292:LEU:HB2	1:A:302:LEU:CD1	0.48	2.38	5	1
1:A:289:PHE:CE1	1:A:355:ARG:N	0.48	2.80	7	1
1:A:289:PHE:C	1:A:289:PHE:CD1	0.48	2.86	2	2
1:A:302:LEU:HG	1:A:309:TYR:CE1	0.48	2.43	10	4
1:A:242:ASN:O	1:A:246:TRP:HE3	0.48	1.91	8	1
1:A:310:TYR:CZ	1:A:324:LYS:CG	0.48	2.97	9	4
1:A:252:LEU:CD1	1:A:261:LEU:HD11	0.48	2.38	10	1
1:A:292:LEU:HD13	1:A:304:PHE:CD1	0.48	2.43	4	1
1:A:333:TRP:H	1:A:333:TRP:HD1	0.48	1.50	4	2
1:A:295:CYS:N	1:A:302:LEU:HD21	0.48	2.24	4	1
1:A:245:ILE:HG22	1:A:246:TRP:N	0.48	2.23	9	2
1:A:304:PHE:CD2	1:A:328:PRO:CD	0.48	2.96	7	1
1:A:261:LEU:HD11	1:A:276:GLU:HG3	0.48	1.82	6	2
1:A:345:LEU:HA	1:A:348:LEU:HD21	0.48	1.86	10	1
1:A:304:PHE:CE1	1:A:355:ARG:NH2	0.48	2.81	9	1
1:A:311:CYS:SG	1:A:323:VAL:CG1	0.48	2.97	9	1
1:A:256:CYS:SG	1:A:339:PHE:CE2	0.48	3.05	7	1
1:A:293:LEU:CG	1:A:331:LYS:HB2	0.48	2.39	10	3
1:A:288:VAL:CG1	1:A:350:VAL:HG12	0.48	2.39	2	1
1:A:244:LEU:HD12	1:A:244:LEU:C	0.48	2.28	2	1
1:A:310:TYR:CD1	1:A:310:TYR:N	0.48	2.81	4	1
1:A:284:ALA:HA	1:A:287:MET:HG3	0.48	1.85	10	1
1:A:310:TYR:N	1:A:310:TYR:CD1	0.48	2.82	8	1
1:A:346:LYS:O	1:A:350:VAL:HB	0.48	2.09	10	2
1:A:335:THR:CG2	1:A:339:PHE:HB3	0.48	2.39	7	1
1:A:344:TYR:CZ	1:A:345:LEU:CD1	0.48	2.96	7	1
1:A:265:LEU:HD11	1:A:356:ILE:CD1	0.47	2.39	8	1
1:A:317:ALA:HB3	1:A:318:TRP:CE2	0.47	2.44	8	6
1:A:249:LYS:HA	1:A:252:LEU:HD21	0.47	1.86	4	1
1:A:298:CYS:CB	1:A:321:CYS:CB	0.47	2.91	9	2
1:A:289:PHE:CE1	1:A:355:ARG:CA	0.47	2.97	7	2
1:A:348:LEU:HG	1:A:349:LYS:N	0.47	2.24	4	1
1:A:348:LEU:CD1	1:A:348:LEU:N	0.47	2.77	9	1
1:A:245:ILE:O	1:A:249:LYS:HG3	0.47	2.08	9	1
1:A:293:LEU:HD13	1:A:331:LYS:CB	0.47	2.39	5	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:263:GLU:HA	1:A:266:ILE:HD12	0.47	1.87	2	2
1:A:344:TYR:HD1	1:A:345:LEU:HD22	0.47	1.68	8	1
1:A:311:CYS:HB3	1:A:323:VAL:HG22	0.47	1.85	9	1
1:A:345:LEU:O	1:A:350:VAL:HG23	0.47	2.09	10	1
1:A:264:LEU:HD12	1:A:267:PHE:CE2	0.47	2.44	3	1
1:A:345:LEU:N	1:A:345:LEU:HD22	0.47	2.24	3	1
1:A:298:CYS:SG	1:A:313:GLY:N	0.47	2.88	4	7
1:A:289:PHE:CE2	1:A:355:ARG:N	0.47	2.83	8	1
1:A:289:PHE:CD1	1:A:290:GLY:N	0.47	2.82	2	6
1:A:341:GLU:O	1:A:344:TYR:CD1	0.47	2.68	9	1
1:A:289:PHE:HB2	1:A:353:GLN:CB	0.47	2.39	2	3
1:A:261:LEU:HD21	1:A:280:LEU:HD23	0.47	1.87	9	1
1:A:263:GLU:O	1:A:266:ILE:CG1	0.47	2.62	5	1
1:A:327:THR:HG22	1:A:355:ARG:NE	0.47	2.24	8	1
1:A:252:LEU:HD11	1:A:280:LEU:HB3	0.47	1.87	1	1
1:A:287:MET:CB	1:A:333:TRP:NE1	0.47	2.78	3	3
1:A:355:ARG:HG2	1:A:356:ILE:HG22	0.47	1.86	10	1
1:A:315:VAL:HG12	1:A:319:THR:HG1	0.47	1.70	9	1
1:A:285:ASP:CB	1:A:289:PHE:CE2	0.47	2.98	7	2
1:A:289:PHE:HB2	1:A:353:GLN:H	0.47	1.69	2	2
1:A:293:LEU:O	1:A:302:LEU:CD1	0.47	2.63	5	2
1:A:311:CYS:O	1:A:321:CYS:O	0.47	2.33	9	1
1:A:248:ILE:CD1	1:A:343:SER:O	0.47	2.63	3	1
1:A:348:LEU:HD13	1:A:348:LEU:N	0.47	2.25	9	1
1:A:285:ASP:O	1:A:289:PHE:CE2	0.47	2.68	3	3
1:A:345:LEU:HD13	1:A:345:LEU:N	0.47	2.22	3	1
1:A:334:VAL:HG22	1:A:334:VAL:O	0.46	2.10	8	3
1:A:292:LEU:CD1	1:A:302:LEU:O	0.46	2.63	4	2
1:A:265:LEU:CD2	1:A:283:VAL:CG2	0.46	2.93	10	2
1:A:252:LEU:HD12	1:A:252:LEU:C	0.46	2.31	6	3
1:A:344:TYR:CD2	1:A:348:LEU:HD11	0.46	2.45	2	1
1:A:246:TRP:HA	1:A:249:LYS:HG3	0.46	1.87	9	1
1:A:292:LEU:HD13	1:A:304:PHE:HD1	0.46	1.69	5	1
1:A:293:LEU:HB3	1:A:331:LYS:HB2	0.46	1.87	8	3
1:A:253:LYS:HA	1:A:256:CYS:O	0.46	2.10	8	3
1:A:333:TRP:CD1	1:A:333:TRP:N	0.46	2.80	7	5
1:A:293:LEU:CB	1:A:294:PRO:CD	0.46	2.92	2	1
1:A:298:CYS:HB3	1:A:321:CYS:CA	0.46	2.41	2	7
1:A:292:LEU:N	1:A:292:LEU:HD12	0.46	2.25	6	2
1:A:289:PHE:CZ	1:A:353:GLN:O	0.46	2.69	8	1
1:A:289:PHE:CG	1:A:353:GLN:O	0.46	2.68	3	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:243:ASP:HA	1:A:246:TRP:CE3	0.46	2.45	2	1
1:A:304:PHE:HB2	1:A:309:TYR:CA	0.46	2.40	4	7
1:A:287:MET:HE3	1:A:342:ILE:HG21	0.46	1.88	2	3
1:A:255:VAL:CG1	1:A:338:GLU:CB	0.46	2.93	3	1
1:A:287:MET:HG3	1:A:345:LEU:HD23	0.46	1.86	1	1
1:A:311:CYS:SG	1:A:323:VAL:CG2	0.46	3.04	10	2
1:A:248:ILE:CG2	1:A:345:LEU:HD23	0.46	2.40	6	1
1:A:288:VAL:CG1	1:A:350:VAL:CB	0.46	2.94	3	1
1:A:234:LEU:N	1:A:234:LEU:HD22	0.46	2.26	5	1
1:A:267:PHE:CE1	1:A:334:VAL:CG2	0.46	2.99	1	2
1:A:309:TYR:HB2	1:A:328:PRO:HG3	0.46	1.88	4	1
1:A:309:TYR:CD2	1:A:325:THR:HB	0.46	2.46	6	6
1:A:283:VAL:HG23	1:A:284:ALA:N	0.46	2.26	7	2
1:A:288:VAL:O	1:A:350:VAL:HG23	0.46	2.11	6	1
1:A:244:LEU:HD12	1:A:351:LYS:HG3	0.45	1.87	8	1
1:A:345:LEU:N	1:A:345:LEU:HD23	0.45	2.25	4	1
1:A:344:TYR:CE2	1:A:345:LEU:CD1	0.45	2.98	7	1
1:A:293:LEU:HD22	1:A:294:PRO:O	0.45	2.11	3	2
1:A:276:GLU:HA	1:A:279:ILE:CB	0.45	2.38	10	6
1:A:292:LEU:CD2	1:A:302:LEU:O	0.45	2.61	9	1
1:A:310:TYR:CZ	1:A:324:LYS:HG3	0.45	2.46	7	1
1:A:309:TYR:CG	1:A:328:PRO:HA	0.45	2.45	5	2
1:A:268:ASN:O	1:A:269:LYS:HB2	0.45	2.12	6	1
1:A:286:GLY:CA	1:A:355:ARG:CD	0.45	2.94	3	1
1:A:344:TYR:CE1	1:A:345:LEU:CD1	0.45	2.98	2	1
1:A:244:LEU:HD13	1:A:349:LYS:CB	0.45	2.41	8	4
1:A:287:MET:CB	1:A:342:ILE:HD13	0.45	2.40	6	2
1:A:251:GLU:HG3	1:A:252:LEU:N	0.45	2.27	6	1
1:A:248:ILE:CD1	1:A:345:LEU:HD12	0.45	2.34	8	2
1:A:334:VAL:O	1:A:334:VAL:HG22	0.45	2.10	9	4
1:A:252:LEU:HD11	1:A:284:ALA:CB	0.45	2.40	7	2
1:A:248:ILE:HD11	1:A:348:LEU:CD1	0.45	2.41	10	1
1:A:264:LEU:HD23	1:A:265:LEU:N	0.45	2.27	10	1
1:A:297:GLU:HB2	1:A:321:CYS:SG	0.45	2.52	3	1
1:A:272:VAL:HG22	1:A:274:SER:N	0.45	2.27	7	3
1:A:346:LYS:O	1:A:350:VAL:CG1	0.45	2.64	9	1
1:A:261:LEU:HD23	1:A:276:GLU:OE2	0.45	2.12	10	1
1:A:348:LEU:HD12	1:A:349:LYS:H	0.45	1.72	10	1
1:A:264:LEU:O	1:A:264:LEU:HD22	0.45	2.12	9	1
1:A:345:LEU:HA	1:A:348:LEU:HD11	0.45	1.87	10	1
1:A:288:VAL:CG1	1:A:289:PHE:N	0.45	2.80	3	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:293:LEU:CD1	1:A:332:GLU:O	0.45	2.61	2	1
1:A:335:THR:HB	1:A:339:PHE:CG	0.45	2.47	8	1
1:A:264:LEU:HA	1:A:267:PHE:CD2	0.45	2.47	1	3
1:A:252:LEU:HD12	1:A:284:ALA:HB2	0.45	1.89	3	2
1:A:293:LEU:HG	1:A:331:LYS:HB3	0.44	1.89	7	1
1:A:245:ILE:CG2	1:A:246:TRP:CZ3	0.44	2.99	8	1
1:A:252:LEU:HB2	1:A:339:PHE:CE1	0.44	2.47	1	2
1:A:317:ALA:HB3	1:A:318:TRP:CH2	0.44	2.47	4	1
1:A:341:GLU:O	1:A:344:TYR:CZ	0.44	2.71	6	1
1:A:316:THR:HG22	1:A:318:TRP:CE3	0.44	2.46	1	1
1:A:295:CYS:N	1:A:302:LEU:CD2	0.44	2.81	4	1
1:A:292:LEU:N	1:A:333:TRP:HB3	0.44	2.28	9	2
1:A:280:LEU:HA	1:A:283:VAL:HG23	0.44	1.90	2	2
1:A:311:CYS:SG	1:A:323:VAL:N	0.44	2.90	5	2
1:A:248:ILE:CD1	1:A:288:VAL:HG21	0.44	2.43	4	1
1:A:307:ASP:O	1:A:326:GLN:NE2	0.44	2.51	6	2
1:A:285:ASP:OD2	1:A:354:ASP:N	0.44	2.51	8	1
1:A:293:LEU:HB2	1:A:294:PRO:HD2	0.44	1.89	1	1
1:A:289:PHE:HB2	1:A:352:LYS:HA	0.44	1.89	3	1
1:A:293:LEU:CB	1:A:331:LYS:CB	0.44	2.96	8	3
1:A:252:LEU:CD2	1:A:280:LEU:O	0.44	2.65	8	2
1:A:288:VAL:CG1	1:A:349:LYS:O	0.44	2.66	9	1
1:A:295:CYS:C	1:A:297:GLU:N	0.44	2.69	10	2
1:A:252:LEU:HD21	1:A:287:MET:SD	0.44	2.53	7	1
1:A:289:PHE:CZ	1:A:354:ASP:C	0.44	2.91	5	4
1:A:266:ILE:HG13	1:A:267:PHE:N	0.44	2.28	5	1
1:A:289:PHE:CZ	1:A:355:ARG:N	0.44	2.86	8	1
1:A:302:LEU:CD2	1:A:329:ASN:CB	0.44	2.95	6	4
1:A:289:PHE:HZ	1:A:355:ARG:HA	0.44	1.72	6	1
1:A:288:VAL:HG22	1:A:350:VAL:HG12	0.44	1.89	2	1
1:A:287:MET:HG3	1:A:288:VAL:N	0.44	2.27	4	1
1:A:302:LEU:HA	1:A:311:CYS:HA	0.44	1.90	5	2
1:A:310:TYR:CZ	1:A:324:LYS:HG2	0.44	2.48	9	2
1:A:248:ILE:HD13	1:A:345:LEU:HB3	0.44	1.89	6	1
1:A:284:ALA:O	1:A:287:MET:CG	0.44	2.64	3	1
1:A:292:LEU:N	1:A:292:LEU:HD22	0.44	2.27	2	1
1:A:292:LEU:O	1:A:292:LEU:HD23	0.43	2.13	1	2
1:A:309:TYR:OH	1:A:323:VAL:CG2	0.43	2.66	9	2
1:A:293:LEU:O	1:A:302:LEU:CD2	0.43	2.66	4	1
1:A:290:GLY:HA2	1:A:330:ARG:CG	0.43	2.42	5	1
1:A:293:LEU:CD2	1:A:294:PRO:HD2	0.43	2.43	1	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:293:LEU:CB	1:A:331:LYS:HB3	0.43	2.43	9	1
1:A:298:CYS:O	1:A:314:ASP:O	0.43	2.37	7	3
1:A:288:VAL:O	1:A:350:VAL:HG12	0.43	2.13	7	1
1:A:272:VAL:CG1	1:A:273:PRO:HD2	0.43	2.43	10	2
1:A:298:CYS:HB2	1:A:321:CYS:HB2	0.43	1.86	10	1
1:A:356:ILE:HG12	1:A:356:ILE:O	0.43	2.12	5	2
1:A:280:LEU:HD12	1:A:280:LEU:C	0.43	2.33	2	1
1:A:302:LEU:CD2	1:A:329:ASN:H	0.43	2.26	1	1
1:A:287:MET:HB3	1:A:333:TRP:NE1	0.43	2.28	3	2
1:A:244:LEU:O	1:A:248:ILE:HG13	0.43	2.14	6	1
1:A:289:PHE:CE2	1:A:354:ASP:O	0.43	2.71	2	2
1:A:288:VAL:CG1	1:A:350:VAL:CA	0.43	2.95	9	1
1:A:288:VAL:HG11	1:A:350:VAL:HA	0.43	1.90	9	1
1:A:288:VAL:HG13	1:A:350:VAL:CG1	0.43	2.44	7	1
1:A:292:LEU:HB3	1:A:328:PRO:HG3	0.43	1.91	5	1
1:A:346:LYS:O	1:A:350:VAL:CG2	0.43	2.60	8	2
1:A:261:LEU:CD1	1:A:280:LEU:CD2	0.43	2.97	4	2
1:A:290:GLY:HA2	1:A:330:ARG:CB	0.43	2.44	1	1
1:A:316:THR:HB	1:A:319:THR:CG2	0.43	2.44	9	1
1:A:335:THR:HG23	1:A:339:PHE:HB3	0.43	1.90	7	1
1:A:267:PHE:CE2	1:A:336:PRO:CD	0.43	3.00	10	1
1:A:302:LEU:HB2	1:A:309:TYR:CE1	0.43	2.49	5	1
1:A:313:GLY:O	1:A:320:LYS:CB	0.43	2.66	8	3
1:A:291:ALA:O	1:A:331:LYS:O	0.43	2.37	3	2
1:A:244:LEU:O	1:A:248:ILE:HG12	0.43	2.14	10	2
1:A:317:ALA:HB3	1:A:318:TRP:CZ2	0.43	2.49	8	3
1:A:317:ALA:HB3	1:A:318:TRP:CZ3	0.43	2.48	4	1
1:A:344:TYR:CE2	1:A:345:LEU:CD2	0.43	3.02	9	1
1:A:289:PHE:HB2	1:A:353:GLN:C	0.43	2.34	10	1
1:A:292:LEU:HD13	1:A:304:PHE:HB3	0.42	1.90	1	1
1:A:287:MET:N	1:A:333:TRP:CZ2	0.42	2.87	4	2
1:A:304:PHE:CD2	1:A:305:LYS:O	0.42	2.72	9	2
1:A:284:ALA:HA	1:A:287:MET:CE	0.42	2.44	5	1
1:A:293:LEU:CB	1:A:294:PRO:HD2	0.42	2.44	4	2
1:A:245:ILE:HD11	1:A:353:GLN:CB	0.42	2.33	8	1
1:A:304:PHE:CD2	1:A:328:PRO:HG3	0.42	2.49	1	1
1:A:288:VAL:HA	1:A:345:LEU:HD12	0.42	1.90	4	1
1:A:261:LEU:HD12	1:A:276:GLU:OE2	0.42	2.13	7	1
1:A:261:LEU:O	1:A:279:ILE:CG2	0.42	2.66	7	1
1:A:265:LEU:HD21	1:A:283:VAL:CG1	0.42	2.43	3	1
1:A:304:PHE:O	1:A:304:PHE:CG	0.42	2.67	5	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:287:MET:CE	1:A:345:LEU:CD2	0.42	2.97	1	1
1:A:292:LEU:H	1:A:292:LEU:CD1	0.42	2.19	9	1
1:A:346:LYS:O	1:A:350:VAL:CB	0.42	2.68	9	1
1:A:246:TRP:C	1:A:246:TRP:CE3	0.42	2.93	9	2
1:A:293:LEU:HB3	1:A:294:PRO:HD2	0.42	1.91	7	1
1:A:289:PHE:CE1	1:A:355:ARG:CB	0.42	3.02	10	1
1:A:272:VAL:HG13	1:A:275:GLY:HA3	0.42	1.88	3	1
1:A:288:VAL:CG1	1:A:350:VAL:HB	0.42	2.45	3	1
1:A:304:PHE:CD1	1:A:328:PRO:HG3	0.42	2.49	5	1
1:A:289:PHE:HA	1:A:350:VAL:HG23	0.42	1.90	1	1
1:A:289:PHE:CB	1:A:353:GLN:HB3	0.42	2.44	10	2
1:A:321:CYS:SG	1:A:323:VAL:HG23	0.42	2.55	2	2
1:A:244:LEU:HD22	1:A:349:LYS:HG3	0.42	1.91	8	1
1:A:290:GLY:O	1:A:355:ARG:CD	0.42	2.66	6	1
1:A:333:TRP:HD1	1:A:333:TRP:H	0.42	1.54	10	1
1:A:310:TYR:CE1	1:A:324:LYS:HG2	0.42	2.49	3	1
1:A:309:TYR:CD1	1:A:328:PRO:HB3	0.42	2.50	2	1
1:A:242:ASN:O	1:A:246:TRP:NE1	0.42	2.53	2	1
1:A:292:LEU:HD22	1:A:303:VAL:HA	0.42	1.91	7	1
1:A:344:TYR:CD2	1:A:348:LEU:CD2	0.42	3.02	10	1
1:A:261:LEU:HD22	1:A:280:LEU:CA	0.42	2.44	3	1
1:A:289:PHE:HB2	1:A:353:GLN:N	0.42	2.29	2	1
1:A:265:LEU:HD23	1:A:279:ILE:HG12	0.42	1.91	1	1
1:A:252:LEU:CB	1:A:339:PHE:CE1	0.42	3.02	4	1
1:A:293:LEU:N	1:A:293:LEU:CD2	0.42	2.82	7	1
1:A:336:PRO:O	1:A:339:PHE:HB2	0.42	2.15	7	1
1:A:249:LYS:HG3	1:A:250:ASP:N	0.42	2.30	1	1
1:A:248:ILE:HD12	1:A:288:VAL:HG21	0.42	1.92	9	1
1:A:288:VAL:HA	1:A:346:LYS:HB3	0.42	1.92	7	2
1:A:276:GLU:HA	1:A:279:ILE:CG1	0.42	2.45	5	1
1:A:244:LEU:C	1:A:244:LEU:HD12	0.42	2.35	4	1
1:A:295:CYS:SG	1:A:297:GLU:CG	0.42	3.08	7	1
1:A:288:VAL:CB	1:A:350:VAL:HG22	0.42	2.44	10	1
1:A:293:LEU:CD1	1:A:331:LYS:HG2	0.42	2.44	4	1
1:A:339:PHE:O	1:A:342:ILE:CG1	0.42	2.68	9	1
1:A:242:ASN:O	1:A:246:TRP:CD1	0.42	2.73	2	1
1:A:258:THR:HA	1:A:261:LEU:HD21	0.41	1.91	2	2
1:A:304:PHE:CG	1:A:328:PRO:HG3	0.41	2.50	4	1
1:A:248:ILE:HD12	1:A:345:LEU:HB3	0.41	1.92	8	1
1:A:347:LYS:HG3	1:A:348:LEU:N	0.41	2.31	3	1
1:A:344:TYR:CG	1:A:345:LEU:N	0.41	2.88	9	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:252:LEU:HD11	1:A:261:LEU:HD21	0.41	1.92	9	1
1:A:261:LEU:HD22	1:A:280:LEU:CB	0.41	2.45	3	1
1:A:293:LEU:CG	1:A:294:PRO:CD	0.41	2.97	2	1
1:A:287:MET:CE	1:A:342:ILE:HD13	0.41	2.44	9	1
1:A:342:ILE:HG12	1:A:343:SER:N	0.41	2.30	7	1
1:A:283:VAL:O	1:A:287:MET:HG2	0.41	2.15	2	1
1:A:263:GLU:O	1:A:266:ILE:HG12	0.41	2.15	5	1
1:A:287:MET:HG2	1:A:333:TRP:CZ2	0.41	2.50	5	1
1:A:267:PHE:HZ	1:A:334:VAL:O	0.41	1.99	8	1
1:A:272:VAL:O	1:A:275:GLY:CA	0.41	2.68	7	1
1:A:309:TYR:HE2	1:A:325:THR:HG1	0.41	1.58	7	1
1:A:289:PHE:HB2	1:A:353:GLN:CA	0.41	2.45	4	1
1:A:355:ARG:O	1:A:356:ILE:C	0.41	2.59	10	2
1:A:311:CYS:SG	1:A:323:VAL:CB	0.41	3.09	10	1
1:A:285:ASP:OD1	1:A:353:GLN:CG	0.41	2.69	5	1
1:A:342:ILE:CB	1:A:345:LEU:HD23	0.41	2.39	8	1
1:A:289:PHE:CD2	1:A:354:ASP:O	0.41	2.73	10	1
1:A:291:ALA:HB3	1:A:333:TRP:N	0.41	2.30	2	2
1:A:340:ARG:O	1:A:344:TYR:CE1	0.41	2.74	3	1
1:A:267:PHE:CZ	1:A:268:ASN:OD1	0.41	2.74	10	1
1:A:248:ILE:HD13	1:A:345:LEU:HG	0.41	1.92	1	1
1:A:298:CYS:HB3	1:A:321:CYS:N	0.41	2.31	2	4
1:A:249:LYS:O	1:A:252:LEU:HG	0.41	2.16	1	1
1:A:310:TYR:OH	1:A:324:LYS:CD	0.41	2.69	1	1
1:A:279:ILE:O	1:A:283:VAL:HB	0.41	2.16	9	2
1:A:350:VAL:O	1:A:350:VAL:CG1	0.41	2.68	4	1
1:A:300:GLY:HA2	1:A:313:GLY:HA3	0.41	1.91	10	2
1:A:245:ILE:CD1	1:A:285:ASP:OD1	0.41	2.68	9	2
1:A:293:LEU:HD23	1:A:331:LYS:CB	0.41	2.45	7	1
1:A:293:LEU:CD2	1:A:332:GLU:O	0.41	2.59	7	1
1:A:252:LEU:HG	1:A:253:LYS:N	0.41	2.31	6	1
1:A:288:VAL:HG11	1:A:350:VAL:CG2	0.41	2.45	3	1
1:A:292:LEU:HD12	1:A:328:PRO:CG	0.41	2.46	2	1
1:A:288:VAL:CB	1:A:350:VAL:HG12	0.41	2.45	2	1
1:A:307:ASP:N	1:A:307:ASP:OD1	0.41	2.54	4	1
1:A:288:VAL:HG13	1:A:349:LYS:O	0.41	2.16	4	1
1:A:316:THR:CB	1:A:319:THR:HG21	0.41	2.45	9	1
1:A:318:TRP:HA	1:A:318:TRP:CE3	0.41	2.50	9	1
1:A:265:LEU:CD2	1:A:283:VAL:CG1	0.41	2.99	3	1
1:A:285:ASP:HB3	1:A:354:ASP:O	0.40	2.15	8	1
1:A:264:LEU:O	1:A:267:PHE:CB	0.40	2.69	9	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:341:GLU:O	1:A:344:TYR:CE1	0.40	2.74	9	1
1:A:272:VAL:HG23	1:A:273:PRO:CD	0.40	2.45	2	1
1:A:263:GLU:HA	1:A:266:ILE:HG12	0.40	1.93	5	1
1:A:292:LEU:CD2	1:A:303:VAL:HA	0.40	2.46	7	1
1:A:289:PHE:CE1	1:A:355:ARG:HB2	0.40	2.52	10	1
1:A:243:ASP:HA	1:A:246:TRP:CZ3	0.40	2.51	2	1
1:A:302:LEU:HD21	1:A:329:ASN:CB	0.40	2.46	1	1
1:A:356:ILE:CG2	1:A:356:ILE:O	0.40	2.69	4	1
1:A:264:LEU:HD12	1:A:283:VAL:HG11	0.40	1.92	9	1
1:A:289:PHE:CE1	1:A:354:ASP:C	0.40	2.95	7	1
1:A:292:LEU:H	1:A:292:LEU:HD12	0.40	1.76	7	1
1:A:244:LEU:CB	1:A:349:LYS:CB	0.40	2.98	6	1
1:A:342:ILE:CA	1:A:345:LEU:HD11	0.40	2.46	5	1
1:A:337:LYS:O	1:A:340:ARG:CG	0.40	2.69	5	1
1:A:263:GLU:O	1:A:266:ILE:CG2	0.40	2.68	1	1
1:A:302:LEU:HB3	1:A:309:TYR:HE1	0.40	1.76	4	1
1:A:344:TYR:O	1:A:348:LEU:CD1	0.40	2.66	7	1
1:A:286:GLY:HA3	1:A:333:TRP:CH2	0.40	2.51	2	1
1:A:248:ILE:HD13	1:A:345:LEU:HB2	0.40	1.92	5	1
1:A:292:LEU:HG	1:A:302:LEU:O	0.40	2.17	8	1
1:A:336:PRO:O	1:A:340:ARG:N	0.40	2.55	8	1
1:A:339:PHE:O	1:A:342:ILE:CD1	0.40	2.70	7	1
1:A:261:LEU:HD13	1:A:279:ILE:HB	0.40	1.93	6	1
1:A:335:THR:HB	1:A:339:PHE:C	0.40	2.37	5	1

## 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	123/126 (98%)	106±2 (86±2%)	12±2 (10±2%)	5±1 (4±1%)	6	31
All	All	1230/1260 (98%)	1058 (86%)	119 (10%)	53 (4%)	6	31

All 13 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	336	PRO	10
1	A	276	GLU	10
1	A	356	ILE	9
1	A	352	LYS	6
1	A	343	SER	4
1	A	326	GLN	3
1	A	290	GLY	3
1	A	342	ILE	2
1	A	348	LEU	2
1	A	341	GLU	1
1	A	340	ARG	1
1	A	350	VAL	1
1	A	317	ALA	1

### 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	112/114 (98%)	61±5 (55±4%)	51±5 (45±4%)	0	2
All	All	1120/1140 (98%)	611 (55%)	509 (45%)	0	2

All 96 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	333	TRP	10
1	A	309	TYR	10
1	A	264	LEU	10
1	A	337	LYS	10
1	A	307	ASP	10
1	A	304	PHE	10
1	A	320	LYS	10
1	A	265	LEU	9
1	A	318	TRP	9
1	A	292	LEU	9
1	A	315	VAL	8
1	A	321	CYS	8
1	A	295	CYS	8

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	245	ILE	8
1	A	299	SER	8
1	A	289	PHE	8
1	A	269	LYS	8
1	A	234	LEU	8
1	A	293	LEU	8
1	A	236	LYS	8
1	A	272	VAL	8
1	A	325	THR	7
1	A	351	LYS	7
1	A	285	ASP	7
1	A	253	LYS	7
1	A	344	TYR	7
1	A	339	PHE	7
1	A	326	GLN	7
1	A	331	LYS	7
1	A	335	THR	7
1	A	353	GLN	7
1	A	262	LYS	7
1	A	267	PHE	7
1	A	341	GLU	7
1	A	349	LYS	7
1	A	345	LEU	6
1	A	319	THR	6
1	A	257	SER	6
1	A	346	LYS	6
1	A	270	GLN	6
1	A	355	ARG	6
1	A	252	LEU	6
1	A	239	LYS	6
1	A	287	MET	6
1	A	330	ARG	6
1	A	343	SER	6
1	A	233	LYS	6
1	A	316	THR	6
1	A	324	LYS	5
1	A	251	GLU	5
1	A	276	GLU	5
1	A	322	MET	5
1	A	282	ARG	5
1	A	266	ILE	5
1	A	314	ASP	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	332	GLU	5
1	A	271	GLN	5
1	A	254	LYS	4
1	A	340	ARG	4
1	A	247	ASN	4
1	A	238	LEU	4
1	A	243	ASP	4
1	A	347	LYS	4
1	A	352	LYS	4
1	A	348	LEU	4
1	A	255	VAL	4
1	A	301	GLN	4
1	A	302	LEU	3
1	A	274	SER	3
1	A	280	LEU	3
1	A	263	GLU	3
1	A	356	ILE	3
1	A	242	ASN	3
1	A	277	SER	3
1	A	338	GLU	3
1	A	354	ASP	3
1	A	249	LYS	3
1	A	259	ASN	3
1	A	342	ILE	3
1	A	305	LYS	3
1	A	244	LEU	3
1	A	298	CYS	2
1	A	311	CYS	2
1	A	281	ASP	2
1	A	283	VAL	2
1	A	327	THR	2
1	A	350	VAL	2
1	A	261	LEU	1
1	A	235	GLU	1
1	A	241	GLN	1
1	A	334	VAL	1
1	A	297	GLU	1
1	A	268	ASN	1
1	A	296	GLU	1
1	A	329	ASN	1
1	A	246	TRP	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 carbohydrates in this entry.

## 6.6 Ligand geometry [i](#)

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

## 6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

## 6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.



## 7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided