



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 27, 2016 – 12:34 AM BST

PDB ID : 2L3S
Title : Structure of the autoinhibited Crk
Authors : Kalodimos, C.G.; Sarkar, P.; Saleh, T.; Tzeng, S.R.; Birge, R.
Deposited on : 2010-09-21

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

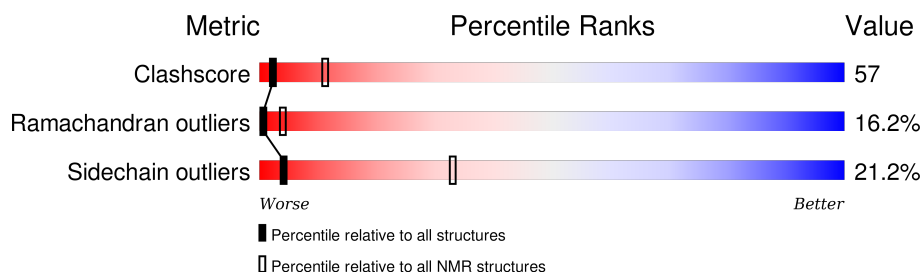
1 Overall quality at a glance

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	163	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:137-A:190, A:236-A:297 (116)	0.56	1

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

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

The models can be grouped into 2 clusters and 3 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2530 atoms, of which 1246 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Autoinhibited Crk protein.

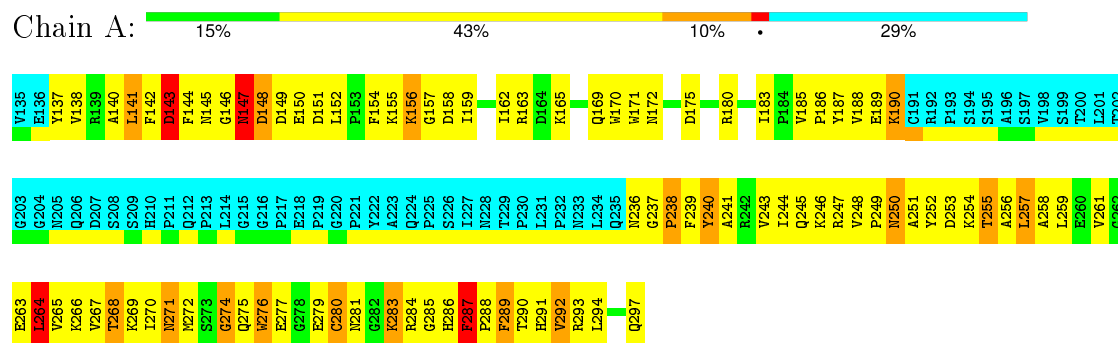
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	163	Total	C	H	N	O	S	0
			2530	809	1246	225	245	5	

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: Autoinhibited Crk protein

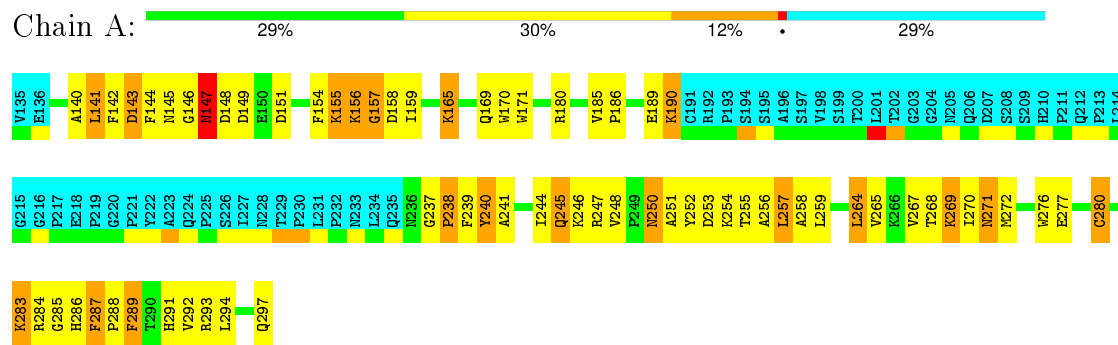


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

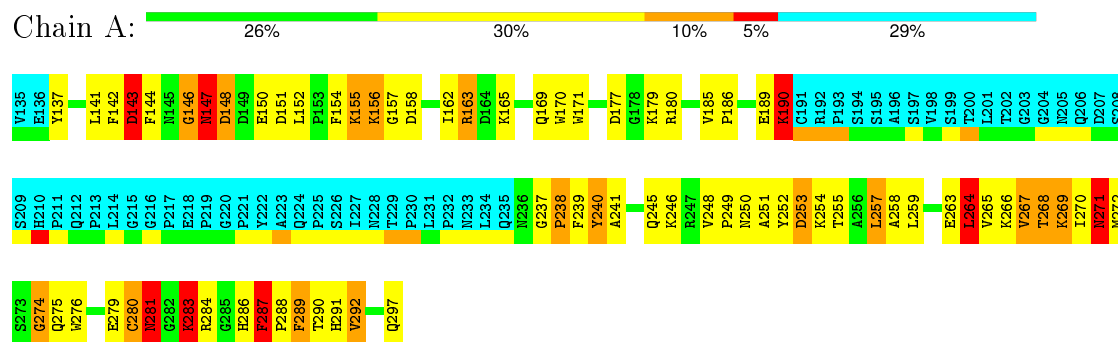
4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

- Molecule 1: Autoinhibited Crk protein



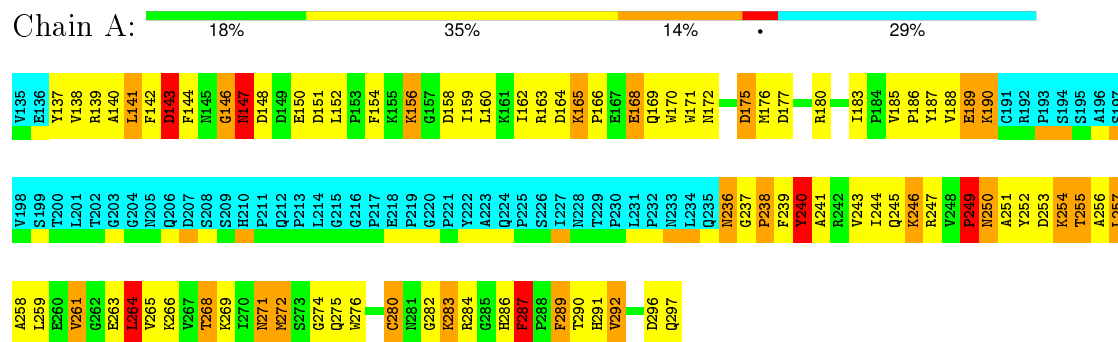
4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: Autoinhibited Crk protein



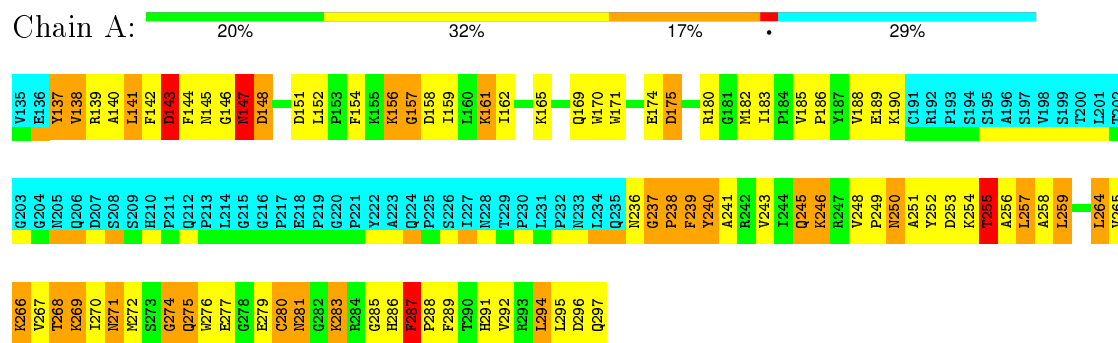
4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: Autoinhibited Crk protein



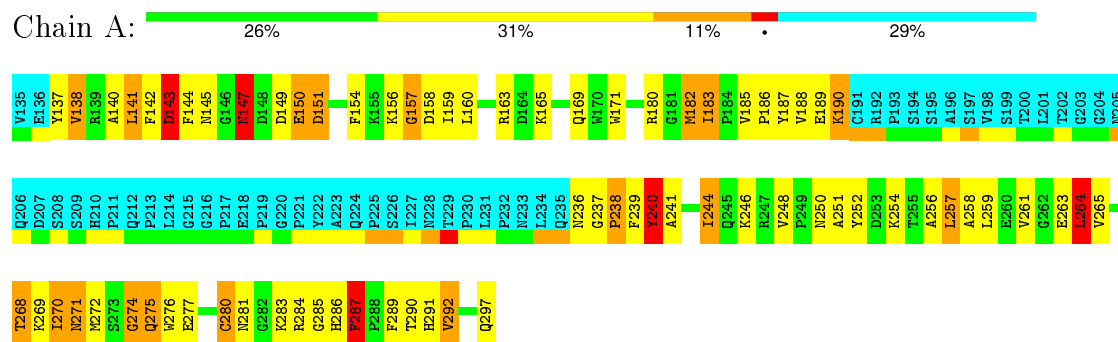
4.2.4 Score per residue for model 4

• Molecule 1: Autoinhibited Crk protein



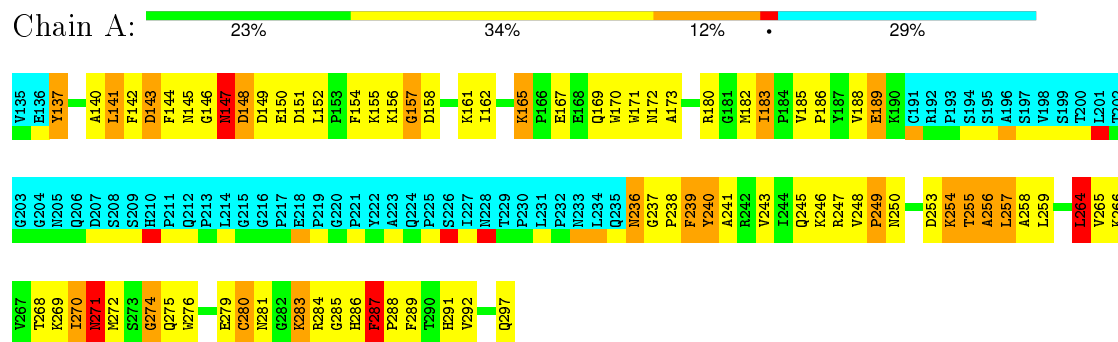
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Autoinhibited Crk protein



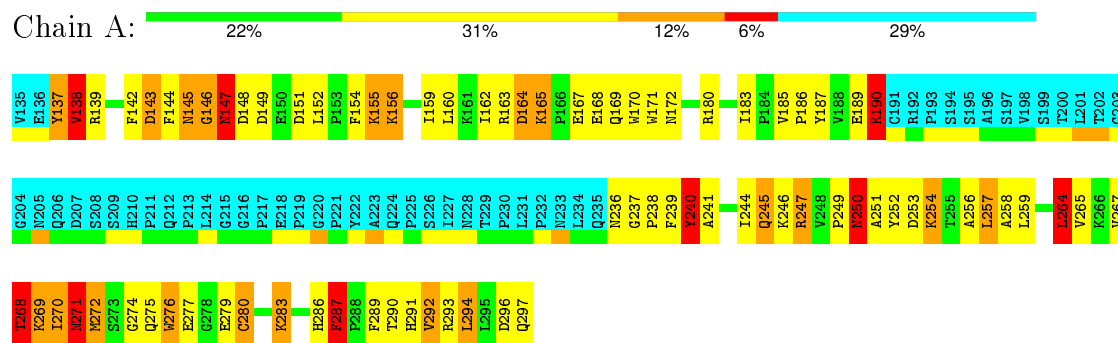
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Autoinhibited Crk protein



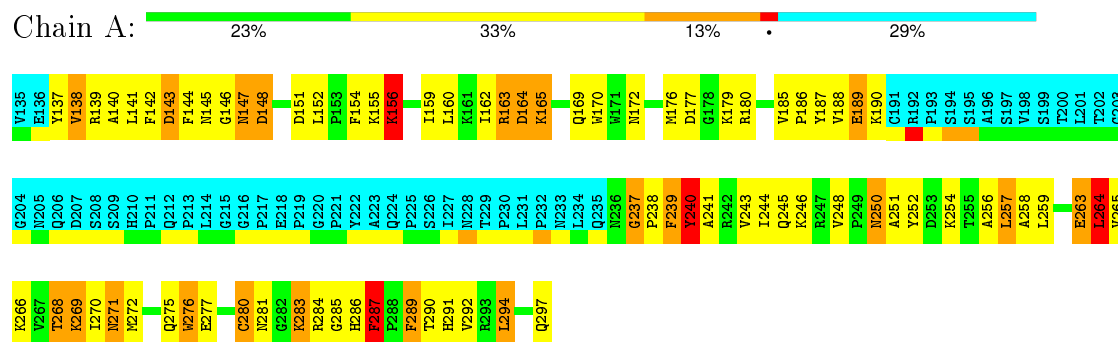
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Autoinhibited Crk protein



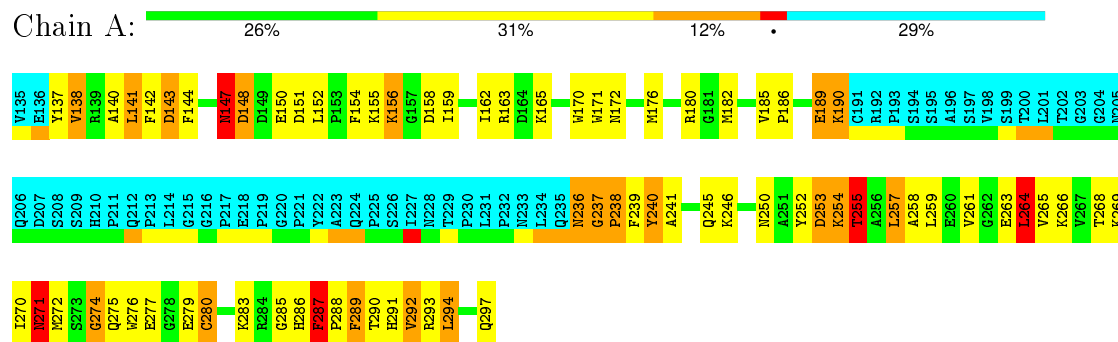
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Autoinhibited Crk protein



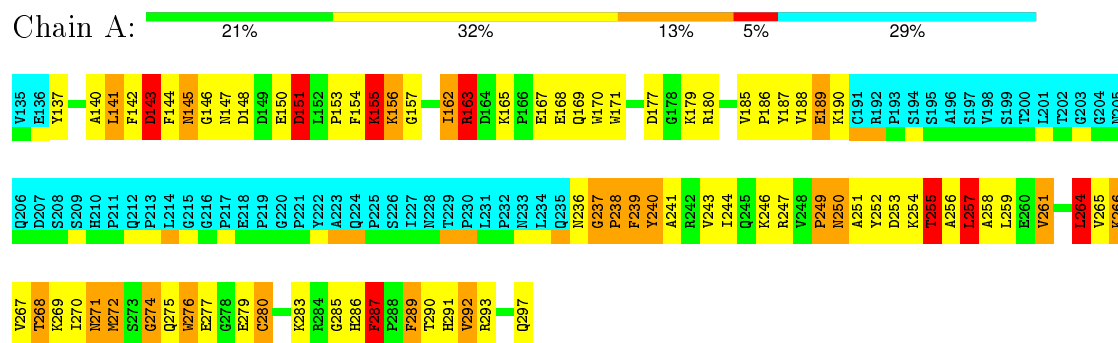
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Autoinhibited Crk protein



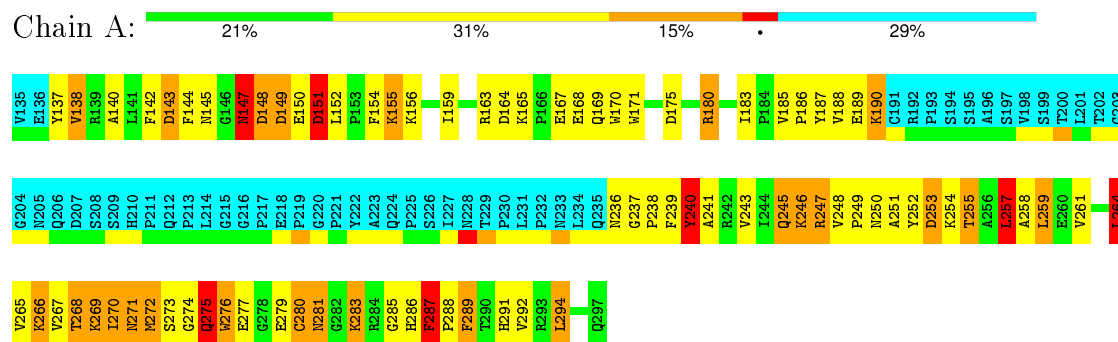
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Autoinhibited Crk protein



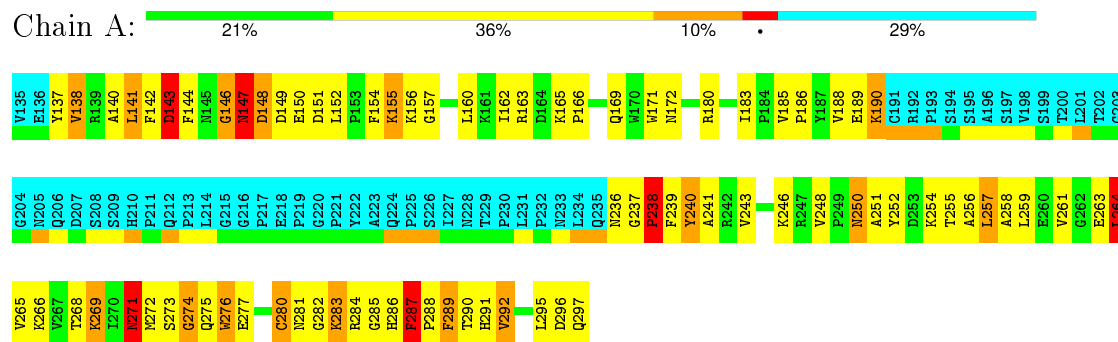
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Autoinhibited Crk protein



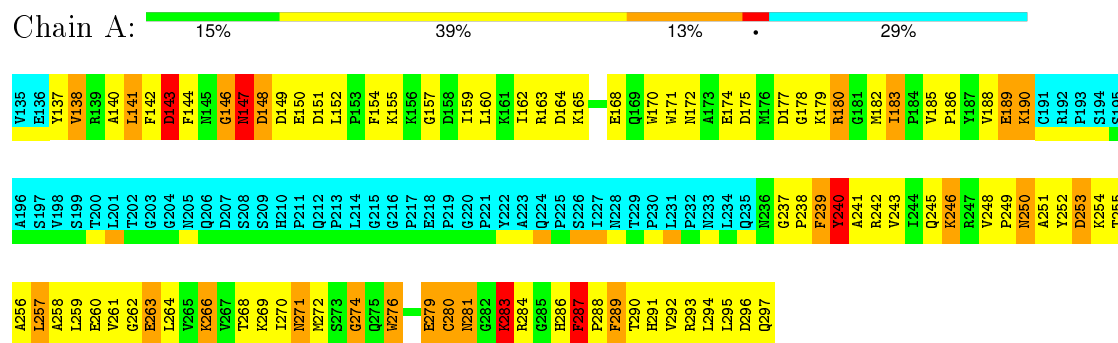
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Autoinhibited Crk protein



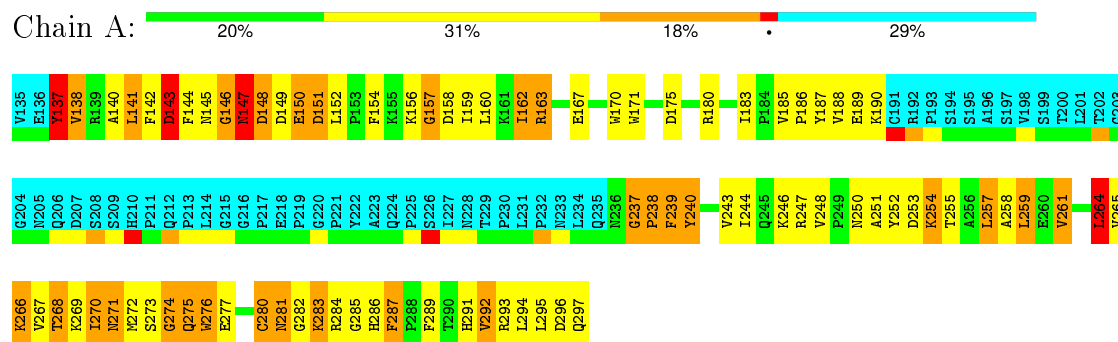
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Autoinhibited Crk protein



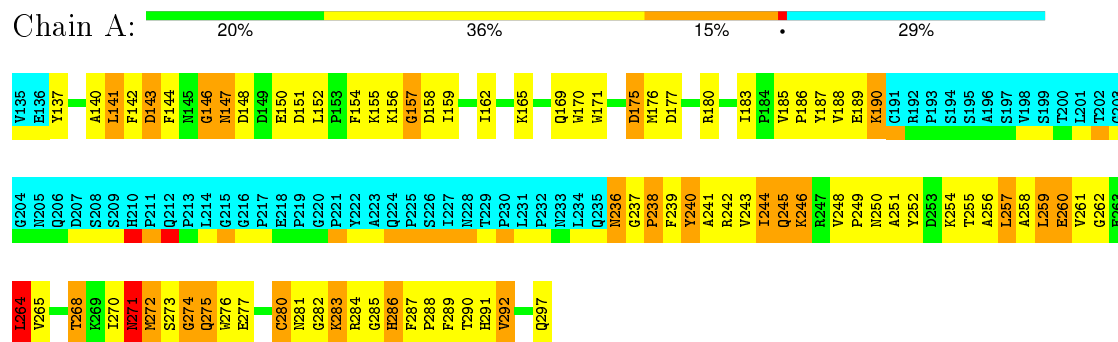
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Autoinhibited Crk protein



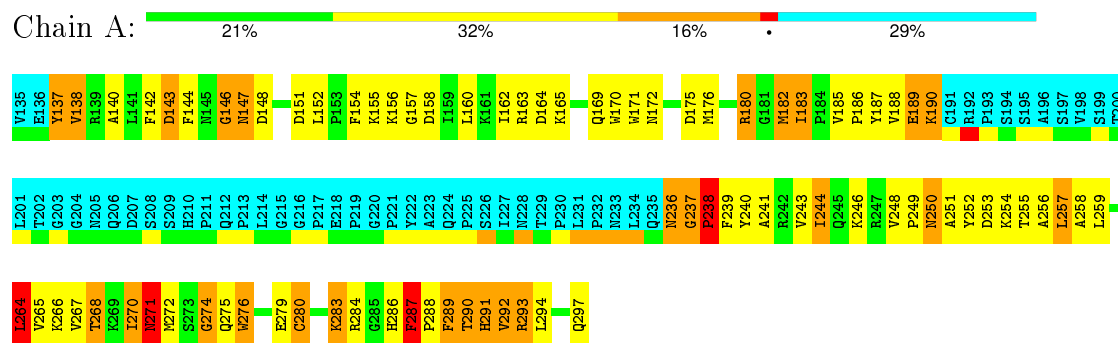
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Autoinhibited Crk protein



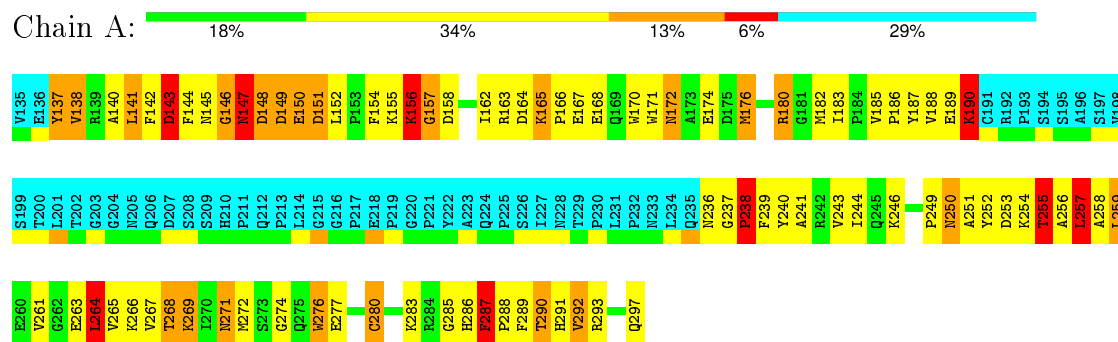
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Autoinhibited Crk protein



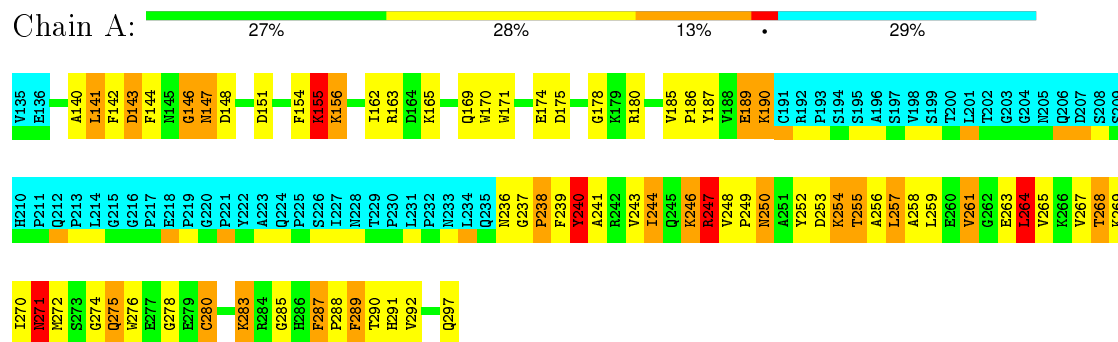
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Autoinhibited Crk protein



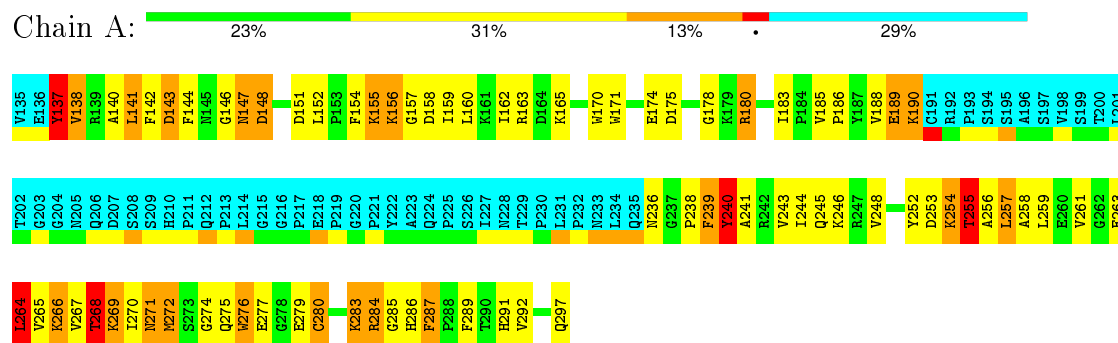
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Autoinhibited Crk protein



4.2.19 Score per residue for model 19

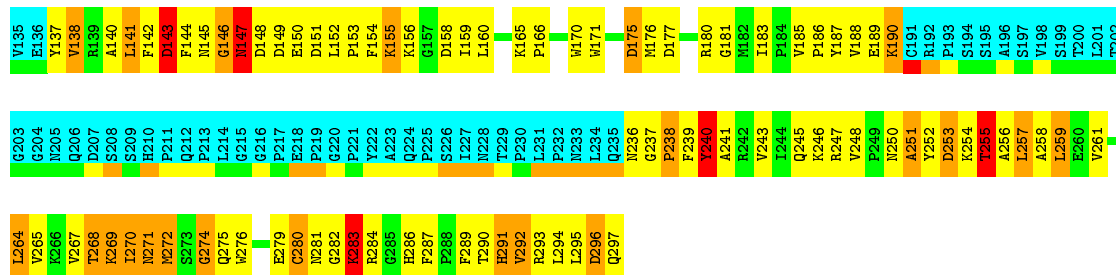
- Molecule 1: Autoinhibited Crk protein



4.2.20 Score per residue for model 20

• Molecule 1: Autoinhibited Crk protein

Chain A: 



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 20 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR NIH	refinement	2.14.4

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 [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	0.82±0.02	1±1/973 (0.1±0.1%)	0.85±0.03	1±1/1311 (0.1±0.1%)
All	All	0.82	10/19460 (0.1%)	0.85	27/26220 (0.1%)

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	238	PRO	N-CD	-6.27	1.39	1.47	11	8
1	A	237	GLY	CA-C	-5.43	1.43	1.51	14	2

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	240	TYR	CB-CG-CD2	-8.06	116.17	121.00	14	17
1	A	240	TYR	CB-CG-CD1	7.38	125.43	121.00	14	10

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	949	927	927	107±10
All	All	18980	18540	18540	2144

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 57.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:264:LEU:HD12	1:A:265:VAL:N	1.00	1.72	7	19
1:A:140:ALA:O	1:A:156:LYS:O	1.00	1.80	9	2
1:A:137:TYR:O	1:A:138:VAL:HG22	0.95	1.60	16	10
1:A:283:LYS:O	1:A:284:ARG:O	0.94	1.86	19	1
1:A:267:VAL:O	1:A:269:LYS:N	0.93	2.01	17	6
1:A:258:ALA:O	1:A:259:LEU:HD23	0.85	1.72	20	20
1:A:156:LYS:O	1:A:158:ASP:N	0.84	2.11	2	9
1:A:241:ALA:O	1:A:264:LEU:HD13	0.83	1.73	12	15
1:A:252:TYR:O	1:A:254:LYS:N	0.83	2.11	17	8
1:A:257:LEU:HD23	1:A:257:LEU:H	0.82	1.35	14	8
1:A:270:ILE:H	1:A:270:ILE:HD12	0.82	1.32	14	1
1:A:244:ILE:H	1:A:244:ILE:HD13	0.82	1.35	5	2
1:A:138:VAL:HG21	1:A:188:VAL:HG21	0.81	1.50	16	3
1:A:257:LEU:H	1:A:257:LEU:HD23	0.80	1.35	16	8
1:A:162:ILE:HG22	1:A:163:ARG:H	0.80	1.35	14	2
1:A:257:LEU:CD2	1:A:285:GLY:O	0.80	2.30	18	3
1:A:185:VAL:O	1:A:188:VAL:HG22	0.78	1.78	12	13
1:A:262:GLY:O	1:A:263:GLU:O	0.78	2.01	13	1
1:A:250:ASN:O	1:A:252:TYR:N	0.77	2.18	13	16
1:A:183:ILE:HD13	1:A:183:ILE:O	0.77	1.80	13	2
1:A:273:SER:C	1:A:276:TRP:HE1	0.76	1.82	11	1
1:A:183:ILE:O	1:A:183:ILE:HD13	0.76	1.80	5	2
1:A:271:ASN:HD22	1:A:272:MET:H	0.76	1.23	17	3
1:A:257:LEU:N	1:A:257:LEU:HD23	0.75	1.96	17	13
1:A:257:LEU:CD1	1:A:259:LEU:HD11	0.74	2.12	6	20
1:A:162:ILE:O	1:A:172:ASN:O	0.74	2.06	8	7
1:A:244:ILE:HA	1:A:261:VAL:O	0.73	1.82	15	1
1:A:246:LYS:HD2	1:A:259:LEU:HD12	0.73	1.61	20	20
1:A:248:VAL:HG13	1:A:248:VAL:O	0.73	1.84	5	2
1:A:155:LYS:O	1:A:156:LYS:O	0.73	2.05	2	1
1:A:247:ARG:O	1:A:249:PRO:HD3	0.72	1.85	6	1
1:A:249:PRO:O	1:A:250:ASN:O	0.72	2.07	17	4
1:A:271:ASN:HD22	1:A:272:MET:N	0.71	1.81	17	12
1:A:137:TYR:O	1:A:138:VAL:CG2	0.71	2.37	16	9
1:A:270:ILE:HD13	1:A:270:ILE:H	0.71	1.44	7	1
1:A:289:PHE:CD1	1:A:292:VAL:HG21	0.71	2.20	1	1
1:A:267:VAL:HG11	1:A:276:TRP:CE3	0.71	2.21	19	1
1:A:162:ILE:HG22	1:A:163:ARG:N	0.71	2.01	14	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:272:MET:SD	1:A:275:GLN:N	0.70	2.64	19	1
1:A:291:HIS:O	1:A:292:VAL:HG13	0.70	1.86	3	4
1:A:254:LYS:O	1:A:255:THR:HG23	0.70	1.87	19	4
1:A:140:ALA:HB1	1:A:154:PHE:CE1	0.70	2.22	1	15
1:A:137:TYR:O	1:A:138:VAL:O	0.70	2.10	9	3
1:A:271:ASN:ND2	1:A:271:ASN:H	0.69	1.85	19	3
1:A:150:GLU:O	1:A:151:ASP:O	0.69	2.10	11	4
1:A:147:ASN:N	1:A:151:ASP:OD2	0.69	2.25	6	12
1:A:170:TRP:CD1	1:A:239:PHE:CZ	0.69	2.80	10	6
1:A:257:LEU:HD23	1:A:257:LEU:N	0.68	2.03	14	6
1:A:246:LYS:CD	1:A:259:LEU:HD12	0.68	2.18	18	19
1:A:257:LEU:HD12	1:A:259:LEU:HD11	0.68	1.65	12	18
1:A:271:ASN:ND2	1:A:272:MET:N	0.68	2.42	9	11
1:A:138:VAL:HG12	1:A:190:LYS:O	0.67	1.89	16	3
1:A:243:VAL:O	1:A:261:VAL:O	0.67	2.12	15	1
1:A:141:LEU:HD21	1:A:189:GLU:CD	0.67	2.09	4	11
1:A:249:PRO:O	1:A:256:ALA:O	0.67	2.11	17	3
1:A:152:LEU:HD11	1:A:175:ASP:OD2	0.67	1.90	4	1
1:A:250:ASN:C	1:A:252:TYR:H	0.67	1.93	15	16
1:A:264:LEU:C	1:A:264:LEU:HD12	0.67	2.10	3	10
1:A:275:GLN:CD	1:A:276:TRP:N	0.66	2.49	11	1
1:A:271:ASN:ND2	1:A:272:MET:H	0.66	1.88	14	9
1:A:271:ASN:N	1:A:271:ASN:ND2	0.66	2.39	15	7
1:A:255:THR:O	1:A:284:ARG:O	0.66	2.14	19	6
1:A:286:HIS:O	1:A:287:PHE:CG	0.66	2.49	14	15
1:A:243:VAL:HG12	1:A:264:LEU:H	0.65	1.50	15	7
1:A:248:VAL:HG12	1:A:248:VAL:O	0.65	1.91	20	7
1:A:257:LEU:CD2	1:A:257:LEU:H	0.65	2.05	7	8
1:A:271:ASN:H	1:A:271:ASN:ND2	0.65	1.89	8	4
1:A:147:ASN:N	1:A:147:ASN:ND2	0.65	2.44	3	8
1:A:250:ASN:N	1:A:250:ASN:ND2	0.65	2.45	12	2
1:A:270:ILE:HD12	1:A:270:ILE:N	0.64	2.07	14	2
1:A:259:LEU:HD21	1:A:280:CYS:SG	0.64	2.32	3	20
1:A:244:ILE:HD13	1:A:244:ILE:N	0.64	2.07	5	1
1:A:239:PHE:CE1	1:A:297:GLN:NE2	0.64	2.65	1	6
1:A:250:ASN:N	1:A:250:ASN:HD22	0.64	1.90	12	2
1:A:141:LEU:H	1:A:141:LEU:HD12	0.64	1.51	1	2
1:A:271:ASN:ND2	1:A:272:MET:SD	0.64	2.71	15	1
1:A:142:PHE:CZ	1:A:284:ARG:NH2	0.64	2.66	6	1
1:A:148:ASP:N	1:A:151:ASP:OD2	0.64	2.30	12	11
1:A:276:TRP:CE3	1:A:289:PHE:HB2	0.64	2.28	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:137:TYR:N	1:A:137:TYR:CD1	0.64	2.66	16	2
1:A:165:LYS:NZ	1:A:171:TRP:NE1	0.63	2.46	1	1
1:A:147:ASN:HD22	1:A:147:ASN:N	0.63	1.90	3	3
1:A:286:HIS:CG	1:A:286:HIS:O	0.63	2.51	20	1
1:A:276:TRP:CD1	1:A:276:TRP:N	0.63	2.64	13	3
1:A:165:LYS:NZ	1:A:171:TRP:HE1	0.63	1.91	1	1
1:A:163:ARG:NE	1:A:180:ARG:NH2	0.63	2.47	19	2
1:A:270:ILE:H	1:A:270:ILE:HD13	0.63	1.54	6	3
1:A:142:PHE:CE2	1:A:284:ARG:NH2	0.63	2.67	2	1
1:A:162:ILE:HD12	1:A:162:ILE:N	0.63	2.08	2	3
1:A:239:PHE:O	1:A:266:LYS:HG3	0.62	1.93	11	3
1:A:271:ASN:ND2	1:A:271:ASN:N	0.62	2.47	12	8
1:A:169:GLN:NE2	1:A:240:TYR:CD1	0.62	2.67	12	5
1:A:280:CYS:O	1:A:283:LYS:CG	0.62	2.48	20	10
1:A:162:ILE:N	1:A:162:ILE:HD12	0.62	2.07	15	4
1:A:272:MET:O	1:A:276:TRP:CE3	0.62	2.52	13	3
1:A:264:LEU:HD12	1:A:264:LEU:C	0.62	2.13	4	10
1:A:239:PHE:CE2	1:A:297:GLN:NE2	0.62	2.67	13	4
1:A:170:TRP:NE1	1:A:239:PHE:CE2	0.62	2.67	13	7
1:A:171:TRP:CE3	1:A:185:VAL:HG22	0.62	2.30	17	13
1:A:286:HIS:O	1:A:287:PHE:CD2	0.62	2.53	19	17
1:A:257:LEU:CD1	1:A:265:VAL:HG21	0.62	2.25	7	3
1:A:257:LEU:H	1:A:257:LEU:CD2	0.62	2.08	1	4
1:A:268:THR:HG23	1:A:269:LYS:N	0.62	2.09	17	2
1:A:241:ALA:C	1:A:264:LEU:HD13	0.61	2.15	12	6
1:A:239:PHE:CZ	1:A:297:GLN:NE2	0.61	2.67	3	7
1:A:148:ASP:O	1:A:151:ASP:OD1	0.61	2.18	7	13
1:A:276:TRP:CH2	1:A:287:PHE:O	0.61	2.54	10	5
1:A:148:ASP:N	1:A:151:ASP:OD1	0.61	2.34	19	5
1:A:147:ASN:ND2	1:A:147:ASN:N	0.61	2.44	7	1
1:A:144:PHE:CE2	1:A:145:ASN:O	0.61	2.53	10	1
1:A:154:PHE:CD2	1:A:160:LEU:HD11	0.61	2.30	20	5
1:A:250:ASN:N	1:A:250:ASN:OD1	0.60	2.35	14	9
1:A:159:ILE:O	1:A:159:ILE:HG23	0.60	1.96	1	2
1:A:236:ASN:O	1:A:239:PHE:CD1	0.60	2.54	17	2
1:A:145:ASN:HD21	1:A:155:LYS:NZ	0.60	1.94	7	1
1:A:139:ARG:H	1:A:189:GLU:CD	0.60	2.00	8	1
1:A:140:ALA:CB	1:A:154:PHE:CE1	0.60	2.85	17	12
1:A:142:PHE:O	1:A:143:ASP:O	0.60	2.20	8	15
1:A:147:ASN:N	1:A:147:ASN:HD22	0.60	1.95	9	2
1:A:250:ASN:C	1:A:252:TYR:N	0.60	2.55	16	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:142:PHE:CE1	1:A:284:ARG:NH1	0.60	2.70	15	3
1:A:236:ASN:O	1:A:239:PHE:CZ	0.60	2.55	5	3
1:A:289:PHE:O	1:A:289:PHE:CD1	0.60	2.55	16	2
1:A:147:ASN:O	1:A:148:ASP:CG	0.59	2.40	9	7
1:A:175:ASP:O	1:A:177:ASP:N	0.59	2.35	15	3
1:A:140:ALA:HB1	1:A:154:PHE:CD1	0.59	2.31	12	1
1:A:145:ASN:HD22	1:A:145:ASN:N	0.59	1.95	7	1
1:A:269:LYS:C	1:A:270:ILE:HD12	0.59	2.18	19	1
1:A:243:VAL:O	1:A:243:VAL:HG13	0.59	1.97	19	9
1:A:170:TRP:NE1	1:A:239:PHE:CZ	0.59	2.70	8	5
1:A:289:PHE:CG	1:A:289:PHE:O	0.59	2.55	12	11
1:A:289:PHE:O	1:A:291:HIS:N	0.59	2.36	16	11
1:A:159:ILE:HD12	1:A:159:ILE:N	0.59	2.12	7	6
1:A:167:GLU:O	1:A:171:TRP:CD1	0.59	2.56	14	6
1:A:274:GLY:O	1:A:276:TRP:N	0.59	2.35	5	2
1:A:275:GLN:C	1:A:276:TRP:CG	0.59	2.75	16	4
1:A:142:PHE:O	1:A:269:LYS:NZ	0.59	2.36	11	7
1:A:145:ASN:N	1:A:145:ASN:ND2	0.59	2.48	7	1
1:A:244:ILE:HD13	1:A:244:ILE:H	0.59	1.55	18	1
1:A:272:MET:HE3	1:A:274:GLY:H	0.59	1.57	11	1
1:A:274:GLY:O	1:A:276:TRP:CD1	0.59	2.56	5	4
1:A:171:TRP:CD2	1:A:185:VAL:HG22	0.59	2.33	14	19
1:A:289:PHE:CD2	1:A:289:PHE:O	0.58	2.57	7	2
1:A:141:LEU:HD11	1:A:189:GLU:CG	0.58	2.27	12	2
1:A:244:ILE:CD1	1:A:244:ILE:H	0.58	2.12	18	1
1:A:246:LYS:HZ2	1:A:259:LEU:HD12	0.58	1.59	14	2
1:A:137:TYR:C	1:A:138:VAL:HG13	0.58	2.19	7	9
1:A:243:VAL:HG13	1:A:260:GLU:O	0.58	1.98	15	1
1:A:155:LYS:O	1:A:156:LYS:CB	0.58	2.51	17	6
1:A:169:GLN:NE2	1:A:240:TYR:CE1	0.58	2.71	12	6
1:A:250:ASN:ND2	1:A:253:ASP:N	0.58	2.51	6	1
1:A:265:VAL:HG22	1:A:266:LYS:N	0.58	2.14	11	3
1:A:250:ASN:ND2	1:A:253:ASP:H	0.58	1.97	6	1
1:A:244:ILE:N	1:A:244:ILE:HD13	0.58	2.11	16	1
1:A:185:VAL:N	1:A:186:PRO:HD2	0.58	2.14	20	20
1:A:141:LEU:HD11	1:A:189:GLU:HG3	0.57	1.76	1	2
1:A:271:ASN:HD21	1:A:276:TRP:HA	0.57	1.59	15	3
1:A:142:PHE:CE1	1:A:284:ARG:CZ	0.57	2.87	14	1
1:A:289:PHE:CD2	1:A:292:VAL:HG23	0.57	2.34	16	5
1:A:148:ASP:O	1:A:149:ASP:C	0.57	2.41	17	1
1:A:183:ILE:C	1:A:183:ILE:HD13	0.57	2.18	5	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:163:ARG:NE	1:A:164:ASP:OD1	0.57	2.37	8	1
1:A:270:ILE:N	1:A:270:ILE:HD13	0.57	2.14	16	3
1:A:189:GLU:O	1:A:190:LYS:CB	0.57	2.53	1	4
1:A:147:ASN:HD22	1:A:148:ASP:H	0.57	1.41	7	2
1:A:271:ASN:ND2	1:A:272:MET:HG3	0.57	2.14	11	3
1:A:270:ILE:CD1	1:A:270:ILE:N	0.57	2.68	7	6
1:A:140:ALA:HB2	1:A:154:PHE:CD1	0.57	2.33	11	1
1:A:271:ASN:N	1:A:271:ASN:HD22	0.57	1.96	3	1
1:A:246:LYS:NZ	1:A:259:LEU:HD12	0.57	2.15	18	1
1:A:289:PHE:O	1:A:289:PHE:CG	0.57	2.57	9	8
1:A:141:LEU:CD1	1:A:142:PHE:CE2	0.57	2.88	10	12
1:A:141:LEU:HD21	1:A:189:GLU:HG2	0.57	1.75	10	3
1:A:271:ASN:O	1:A:276:TRP:CZ3	0.57	2.57	5	2
1:A:142:PHE:CD1	1:A:284:ARG:NH2	0.57	2.73	14	1
1:A:241:ALA:O	1:A:264:LEU:HB2	0.57	2.00	4	3
1:A:239:PHE:CG	1:A:297:GLN:OE1	0.57	2.57	2	2
1:A:274:GLY:O	1:A:275:GLN:NE2	0.57	2.38	9	1
1:A:148:ASP:O	1:A:150:GLU:N	0.57	2.32	9	2
1:A:144:PHE:CD2	1:A:145:ASN:O	0.57	2.58	10	1
1:A:147:ASN:C	1:A:151:ASP:OD2	0.56	2.44	9	4
1:A:268:THR:OG1	1:A:269:LYS:N	0.56	2.38	11	2
1:A:248:VAL:O	1:A:248:VAL:HG12	0.56	1.98	16	4
1:A:147:ASN:O	1:A:148:ASP:O	0.56	2.23	17	3
1:A:257:LEU:HB3	1:A:283:LYS:O	0.56	2.00	18	2
1:A:241:ALA:N	1:A:264:LEU:HD13	0.56	2.14	19	16
1:A:288:PRO:O	1:A:291:HIS:CE1	0.56	2.58	16	10
1:A:162:ILE:N	1:A:162:ILE:CD1	0.56	2.68	2	6
1:A:163:ARG:NH2	1:A:172:ASN:ND2	0.56	2.53	9	2
1:A:250:ASN:ND2	1:A:253:ASP:CG	0.56	2.59	18	1
1:A:243:VAL:HG13	1:A:243:VAL:O	0.56	2.00	14	5
1:A:247:ARG:NH2	1:A:253:ASP:OD2	0.56	2.38	6	3
1:A:271:ASN:C	1:A:271:ASN:HD22	0.56	2.02	16	4
1:A:255:THR:O	1:A:286:HIS:ND1	0.56	2.39	20	1
1:A:270:ILE:HD13	1:A:270:ILE:N	0.56	2.15	11	2
1:A:251:ALA:N	1:A:256:ALA:O	0.56	2.39	20	1
1:A:247:ARG:O	1:A:249:PRO:CD	0.56	2.53	6	1
1:A:270:ILE:CD1	1:A:270:ILE:H	0.56	2.14	7	1
1:A:247:ARG:NH1	1:A:287:PHE:CZ	0.56	2.74	18	1
1:A:275:GLN:C	1:A:276:TRP:CD1	0.56	2.79	6	5
1:A:183:ILE:HD13	1:A:183:ILE:C	0.56	2.21	6	1
1:A:137:TYR:O	1:A:160:LEU:O	0.56	2.23	5	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:271:ASN:ND2	1:A:275:GLN:O	0.55	2.39	2	1
1:A:158:ASP:OD1	1:A:159:ILE:N	0.55	2.40	3	6
1:A:272:MET:O	1:A:276:TRP:NE1	0.55	2.39	15	1
1:A:142:PHE:CZ	1:A:284:ARG:NH1	0.55	2.75	5	1
1:A:254:LYS:C	1:A:256:ALA:H	0.55	2.03	7	7
1:A:189:GLU:OE1	1:A:189:GLU:N	0.55	2.37	8	1
1:A:137:TYR:CD2	1:A:138:VAL:N	0.55	2.74	13	2
1:A:289:PHE:CD1	1:A:292:VAL:HG23	0.55	2.36	17	5
1:A:250:ASN:OD1	1:A:250:ASN:N	0.55	2.38	4	4
1:A:241:ALA:O	1:A:264:LEU:CD1	0.55	2.55	7	4
1:A:175:ASP:C	1:A:177:ASP:H	0.55	2.04	3	3
1:A:272:MET:O	1:A:276:TRP:CZ3	0.55	2.59	14	3
1:A:275:GLN:O	1:A:276:TRP:CG	0.55	2.59	6	2
1:A:268:THR:CG2	1:A:269:LYS:N	0.55	2.70	17	1
1:A:145:ASN:O	1:A:153:PRO:CA	0.55	2.54	10	1
1:A:185:VAL:N	1:A:186:PRO:CD	0.55	2.69	20	1
1:A:142:PHE:CE2	1:A:284:ARG:CZ	0.55	2.88	16	2
1:A:241:ALA:HB2	1:A:294:LEU:HD23	0.55	1.78	4	1
1:A:140:ALA:CA	1:A:188:VAL:HG12	0.55	2.32	4	1
1:A:288:PRO:O	1:A:291:HIS:NE2	0.55	2.40	6	7
1:A:282:GLY:O	1:A:284:ARG:N	0.55	2.40	20	5
1:A:268:THR:O	1:A:270:ILE:HD12	0.55	2.01	10	2
1:A:247:ARG:HH21	1:A:254:LYS:NZ	0.55	1.99	7	2
1:A:293:ARG:O	1:A:294:LEU:CG	0.55	2.55	7	1
1:A:255:THR:O	1:A:286:HIS:N	0.55	2.40	9	1
1:A:289:PHE:O	1:A:289:PHE:CD2	0.55	2.60	17	3
1:A:137:TYR:O	1:A:137:TYR:CD2	0.55	2.60	3	1
1:A:236:ASN:O	1:A:297:GLN:NE2	0.55	2.40	6	1
1:A:177:ASP:OD2	1:A:179:LYS:NZ	0.55	2.40	13	1
1:A:243:VAL:O	1:A:245:GLN:N	0.54	2.41	15	1
1:A:243:VAL:N	1:A:263:GLU:O	0.54	2.40	13	1
1:A:175:ASP:C	1:A:177:ASP:N	0.54	2.60	15	3
1:A:137:TYR:O	1:A:162:ILE:CD1	0.54	2.55	16	1
1:A:250:ASN:O	1:A:253:ASP:N	0.54	2.40	2	5
1:A:137:TYR:O	1:A:138:VAL:HG13	0.54	2.02	16	6
1:A:152:LEU:O	1:A:154:PHE:CD2	0.54	2.61	8	11
1:A:141:LEU:HD21	1:A:189:GLU:CG	0.54	2.33	20	3
1:A:274:GLY:O	1:A:276:TRP:NE1	0.54	2.41	2	4
1:A:271:ASN:HD22	1:A:271:ASN:H	0.54	1.45	19	1
1:A:150:GLU:OE1	1:A:150:GLU:N	0.54	2.41	15	1
1:A:254:LYS:O	1:A:255:THR:CB	0.54	2.55	6	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:276:TRP:CD2	1:A:289:PHE:CB	0.54	2.91	11	1
1:A:267:VAL:HG11	1:A:276:TRP:CD2	0.54	2.38	19	1
1:A:272:MET:SD	1:A:272:MET:N	0.54	2.81	15	1
1:A:269:LYS:O	1:A:270:ILE:CG2	0.54	2.56	11	1
1:A:145:ASN:OD1	1:A:155:LYS:NZ	0.54	2.41	11	1
1:A:257:LEU:HD12	1:A:280:CYS:SG	0.54	2.43	4	2
1:A:256:ALA:HB1	1:A:287:PHE:CZ	0.53	2.37	6	3
1:A:237:GLY:HA2	1:A:238:PRO:C	0.53	2.24	14	7
1:A:271:ASN:O	1:A:272:MET:O	0.53	2.26	20	1
1:A:139:ARG:NE	1:A:189:GLU:OE2	0.53	2.40	3	1
1:A:257:LEU:HD11	1:A:259:LEU:HD11	0.53	1.80	6	6
1:A:258:ALA:C	1:A:259:LEU:HD23	0.53	2.24	20	3
1:A:271:ASN:ND2	1:A:271:ASN:O	0.53	2.40	20	1
1:A:138:VAL:HG21	1:A:188:VAL:CG2	0.53	2.29	16	1
1:A:170:TRP:O	1:A:171:TRP:CD1	0.53	2.61	7	14
1:A:187:TYR:OH	1:A:268:THR:O	0.53	2.19	17	6
1:A:254:LYS:O	1:A:255:THR:OG1	0.53	2.26	20	7
1:A:145:ASN:O	1:A:153:PRO:HA	0.53	2.03	10	1
1:A:272:MET:CE	1:A:275:GLN:N	0.53	2.71	11	1
1:A:249:PRO:HG2	1:A:257:LEU:O	0.53	2.04	13	4
1:A:276:TRP:N	1:A:276:TRP:CD1	0.53	2.75	8	1
1:A:152:LEU:HD13	1:A:181:GLY:N	0.53	2.19	20	1
1:A:142:PHE:O	1:A:143:ASP:CG	0.53	2.46	15	19
1:A:271:ASN:O	1:A:276:TRP:CE3	0.53	2.62	3	2
1:A:151:ASP:N	1:A:151:ASP:OD1	0.53	2.40	9	2
1:A:280:CYS:O	1:A:283:LYS:HG3	0.53	2.04	20	1
1:A:272:MET:HE3	1:A:275:GLN:O	0.53	2.04	18	5
1:A:254:LYS:O	1:A:255:THR:CG2	0.53	2.55	19	1
1:A:271:ASN:HD22	1:A:271:ASN:N	0.53	2.00	15	4
1:A:283:LYS:O	1:A:283:LYS:CG	0.53	2.57	11	2
1:A:280:CYS:SG	1:A:283:LYS:CG	0.53	2.97	16	2
1:A:264:LEU:HD12	1:A:265:VAL:H	0.53	1.61	8	3
1:A:165:LYS:CB	1:A:171:TRP:CD1	0.53	2.92	16	13
1:A:142:PHE:CE1	1:A:284:ARG:NH2	0.53	2.77	14	1
1:A:174:GLU:CG	1:A:178:GLY:O	0.53	2.57	18	3
1:A:257:LEU:CD2	1:A:257:LEU:N	0.53	2.70	7	4
1:A:275:GLN:HE22	1:A:276:TRP:C	0.53	2.07	11	1
1:A:275:GLN:O	1:A:276:TRP:CD2	0.53	2.62	16	2
1:A:165:LYS:CG	1:A:171:TRP:NE1	0.53	2.72	12	2
1:A:239:PHE:CD1	1:A:297:GLN:OE1	0.53	2.62	2	1
1:A:289:PHE:C	1:A:291:HIS:H	0.53	2.06	18	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:239:PHE:CD2	1:A:297:GLN:CG	0.53	2.92	13	2
1:A:293:ARG:O	1:A:294:LEU:HG	0.53	2.04	7	1
1:A:249:PRO:O	1:A:258:ALA:HB2	0.53	2.03	13	2
1:A:264:LEU:HD12	1:A:265:VAL:CA	0.52	2.34	7	7
1:A:142:PHE:O	1:A:143:ASP:OD2	0.52	2.26	7	16
1:A:269:LYS:O	1:A:277:GLU:OE1	0.52	2.27	12	1
1:A:242:ARG:CD	1:A:262:GLY:O	0.52	2.57	13	1
1:A:254:LYS:O	1:A:286:HIS:CE1	0.52	2.62	15	1
1:A:272:MET:HE3	1:A:275:GLN:N	0.52	2.19	11	1
1:A:276:TRP:CD2	1:A:289:PHE:HB2	0.52	2.39	11	1
1:A:279:GLU:OE2	1:A:281:ASN:N	0.52	2.41	20	1
1:A:147:ASN:ND2	1:A:148:ASP:H	0.52	2.01	7	1
1:A:156:LYS:C	1:A:158:ASP:N	0.52	2.62	2	3
1:A:279:GLU:OE1	1:A:281:ASN:N	0.52	2.42	13	1
1:A:189:GLU:O	1:A:190:LYS:O	0.52	2.28	5	1
1:A:236:ASN:OD1	1:A:237:GLY:N	0.52	2.42	18	2
1:A:288:PRO:HB2	1:A:290:THR:HG23	0.52	1.82	17	2
1:A:267:VAL:C	1:A:268:THR:HG23	0.52	2.23	11	1
1:A:156:LYS:O	1:A:157:GLY:C	0.52	2.48	15	8
1:A:275:GLN:O	1:A:276:TRP:CD1	0.52	2.63	14	2
1:A:275:GLN:O	1:A:287:PHE:O	0.52	2.27	14	2
1:A:161:LYS:O	1:A:173:ALA:HB1	0.52	2.05	6	1
1:A:277:GLU:N	1:A:277:GLU:OE1	0.52	2.42	12	1
1:A:163:ARG:NH2	1:A:174:GLU:OE2	0.52	2.43	18	1
1:A:289:PHE:CE1	1:A:292:VAL:HG21	0.52	2.40	1	1
1:A:146:GLY:C	1:A:147:ASN:ND2	0.52	2.64	13	9
1:A:246:LYS:CE	1:A:291:HIS:CE1	0.52	2.93	14	1
1:A:253:ASP:O	1:A:254:LYS:HG3	0.52	2.04	18	1
1:A:163:ARG:NE	1:A:180:ARG:HH21	0.52	2.02	19	2
1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:CD1	0.52	2.73	15	2
1:A:163:ARG:NH2	1:A:172:ASN:HD21	0.52	2.03	3	1
1:A:147:ASN:N	1:A:151:ASP:OD1	0.52	2.43	14	1
1:A:169:GLN:OE1	1:A:239:PHE:CD1	0.52	2.63	6	1
1:A:165:LYS:HG3	1:A:171:TRP:NE1	0.52	2.20	12	2
1:A:144:PHE:CB	1:A:154:PHE:CE1	0.52	2.93	4	9
1:A:259:LEU:CD2	1:A:280:CYS:SG	0.52	2.98	17	8
1:A:257:LEU:HD13	1:A:265:VAL:HG21	0.52	1.81	20	1
1:A:276:TRP:CZ2	1:A:287:PHE:O	0.52	2.63	7	1
1:A:267:VAL:HG22	1:A:278:GLY:HA2	0.52	1.81	18	1
1:A:272:MET:O	1:A:276:TRP:CZ2	0.51	2.63	6	1
1:A:141:LEU:CD1	1:A:142:PHE:CD2	0.51	2.93	17	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:257:LEU:N	1:A:257:LEU:CD2	0.51	2.73	4	3
1:A:239:PHE:O	1:A:240:TYR:CD1	0.51	2.64	19	12
1:A:249:PRO:O	1:A:250:ASN:C	0.51	2.49	17	3
1:A:236:ASN:O	1:A:239:PHE:CG	0.51	2.63	17	1
1:A:270:ILE:HG23	1:A:276:TRP:CE3	0.51	2.40	13	1
1:A:168:GLU:N	1:A:168:GLU:OE1	0.51	2.43	13	1
1:A:169:GLN:NE2	1:A:240:TYR:CZ	0.51	2.78	1	1
1:A:242:ARG:O	1:A:292:VAL:HA	0.51	2.05	15	1
1:A:148:ASP:OD2	1:A:149:ASP:N	0.51	2.43	14	1
1:A:162:ILE:CD1	1:A:162:ILE:N	0.51	2.73	18	2
1:A:143:ASP:OD1	1:A:155:LYS:NZ	0.51	2.43	2	1
1:A:280:CYS:O	1:A:281:ASN:CB	0.51	2.58	15	11
1:A:275:GLN:CD	1:A:275:GLN:C	0.51	2.69	11	1
1:A:275:GLN:OE1	1:A:276:TRP:O	0.51	2.28	11	1
1:A:237:GLY:HA2	1:A:239:PHE:N	0.51	2.20	7	1
1:A:189:GLU:OE1	1:A:190:LYS:N	0.51	2.44	16	1
1:A:156:LYS:C	1:A:158:ASP:H	0.51	2.08	2	1
1:A:270:ILE:HG22	1:A:271:ASN:N	0.51	2.20	15	1
1:A:272:MET:SD	1:A:276:TRP:N	0.51	2.83	15	1
1:A:159:ILE:CD1	1:A:159:ILE:N	0.51	2.73	4	5
1:A:169:GLN:OE1	1:A:297:GLN:NE2	0.51	2.44	2	2
1:A:244:ILE:N	1:A:244:ILE:CD1	0.51	2.74	5	2
1:A:243:VAL:C	1:A:245:GLN:H	0.51	2.08	15	1
1:A:168:GLU:CD	1:A:168:GLU:H	0.51	2.09	3	2
1:A:137:TYR:CG	1:A:138:VAL:N	0.51	2.79	20	1
1:A:253:ASP:O	1:A:254:LYS:CG	0.51	2.58	18	1
1:A:279:GLU:OE1	1:A:284:ARG:NH2	0.51	2.44	16	1
1:A:189:GLU:CD	1:A:190:LYS:N	0.51	2.64	11	2
1:A:146:GLY:O	1:A:147:ASN:ND2	0.51	2.43	15	6
1:A:144:PHE:CZ	1:A:146:GLY:C	0.51	2.84	10	1
1:A:257:LEU:HD22	1:A:285:GLY:O	0.50	2.06	4	3
1:A:253:ASP:O	1:A:254:LYS:CE	0.50	2.59	18	1
1:A:279:GLU:OE2	1:A:280:CYS:O	0.50	2.29	9	1
1:A:159:ILE:N	1:A:159:ILE:HD12	0.50	2.20	15	1
1:A:249:PRO:HA	1:A:253:ASP:HB3	0.50	1.84	18	1
1:A:255:THR:O	1:A:255:THR:HG22	0.50	2.06	18	1
1:A:266:LYS:O	1:A:279:GLU:O	0.50	2.29	19	1
1:A:163:ARG:CZ	1:A:180:ARG:HH21	0.50	2.18	13	1
1:A:248:VAL:CG1	1:A:248:VAL:O	0.50	2.56	5	2
1:A:143:ASP:OD2	1:A:269:LYS:NZ	0.50	2.44	12	2
1:A:243:VAL:O	1:A:262:GLY:N	0.50	2.42	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:257:LEU:HD12	1:A:259:LEU:HD21	0.50	1.82	6	11
1:A:272:MET:C	1:A:274:GLY:H	0.50	2.09	12	4
1:A:140:ALA:CB	1:A:154:PHE:CD1	0.50	2.95	20	3
1:A:241:ALA:H	1:A:264:LEU:HD13	0.50	1.66	6	3
1:A:189:GLU:O	1:A:190:LYS:C	0.50	2.50	17	3
1:A:255:THR:O	1:A:285:GLY:CA	0.50	2.60	9	6
1:A:164:ASP:O	1:A:165:LYS:CB	0.50	2.59	17	3
1:A:243:VAL:CG1	1:A:243:VAL:O	0.50	2.60	17	4
1:A:149:ASP:C	1:A:151:ASP:H	0.50	2.10	12	1
1:A:155:LYS:O	1:A:157:GLY:N	0.50	2.45	12	1
1:A:171:TRP:O	1:A:183:ILE:HG23	0.50	2.06	13	1
1:A:152:LEU:N	1:A:182:MET:O	0.50	2.45	6	3
1:A:250:ASN:OD1	1:A:253:ASP:CB	0.50	2.60	9	1
1:A:162:ILE:CG2	1:A:164:ASP:O	0.49	2.60	7	2
1:A:163:ARG:NH2	1:A:174:GLU:CD	0.49	2.65	17	2
1:A:141:LEU:HD21	1:A:189:GLU:OE2	0.49	2.07	2	1
1:A:269:LYS:O	1:A:277:GLU:O	0.49	2.29	1	3
1:A:268:THR:O	1:A:268:THR:OG1	0.49	2.25	19	1
1:A:162:ILE:O	1:A:164:ASP:N	0.49	2.42	16	2
1:A:169:GLN:NE2	1:A:240:TYR:CE2	0.49	2.80	1	2
1:A:253:ASP:O	1:A:254:LYS:CB	0.49	2.59	6	4
1:A:141:LEU:HD12	1:A:142:PHE:CD2	0.49	2.42	12	2
1:A:256:ALA:HB1	1:A:287:PHE:CE2	0.49	2.42	15	3
1:A:155:LYS:C	1:A:157:GLY:N	0.49	2.65	12	1
1:A:289:PHE:C	1:A:291:HIS:N	0.49	2.66	18	10
1:A:143:ASP:HB2	1:A:155:LYS:HZ2	0.49	1.68	16	1
1:A:236:ASN:O	1:A:239:PHE:CE1	0.49	2.66	3	5
1:A:274:GLY:N	1:A:276:TRP:HE1	0.49	2.05	11	1
1:A:275:GLN:OE1	1:A:275:GLN:C	0.49	2.51	11	1
1:A:246:LYS:HG3	1:A:287:PHE:CZ	0.49	2.43	18	1
1:A:237:GLY:HA2	1:A:239:PHE:CD1	0.48	2.43	5	7
1:A:147:ASN:H	1:A:151:ASP:CG	0.48	2.11	13	4
1:A:148:ASP:HA	1:A:151:ASP:O	0.48	2.08	14	1
1:A:167:GLU:O	1:A:171:TRP:NE1	0.48	2.46	14	2
1:A:145:ASN:ND2	1:A:155:LYS:NZ	0.48	2.61	7	1
1:A:148:ASP:C	1:A:150:GLU:N	0.48	2.67	13	5
1:A:243:VAL:O	1:A:243:VAL:CG1	0.48	2.61	19	7
1:A:280:CYS:SG	1:A:283:LYS:HG3	0.48	2.49	11	2
1:A:275:GLN:O	1:A:288:PRO:HA	0.48	2.09	11	1
1:A:255:THR:O	1:A:285:GLY:HA2	0.48	2.08	4	2
1:A:289:PHE:C	1:A:289:PHE:CD1	0.48	2.87	18	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:238:PRO:O	1:A:239:PHE:CD2	0.48	2.67	4	3
1:A:143:ASP:O	1:A:187:TYR:CE2	0.48	2.67	20	6
1:A:246:LYS:CG	1:A:287:PHE:CZ	0.48	2.95	18	1
1:A:286:HIS:O	1:A:287:PHE:CB	0.48	2.61	1	13
1:A:148:ASP:O	1:A:151:ASP:N	0.48	2.46	3	1
1:A:267:VAL:HG12	1:A:268:THR:N	0.48	2.23	11	1
1:A:289:PHE:CG	1:A:292:VAL:HG21	0.48	2.42	1	1
1:A:249:PRO:HD2	1:A:258:ALA:HA	0.48	1.83	15	4
1:A:249:PRO:HB2	1:A:256:ALA:HB3	0.48	1.86	4	2
1:A:137:TYR:CD1	1:A:137:TYR:N	0.48	2.82	20	1
1:A:271:ASN:HD21	1:A:272:MET:CE	0.48	2.20	16	2
1:A:144:PHE:CB	1:A:154:PHE:CZ	0.48	2.97	6	17
1:A:244:ILE:CA	1:A:261:VAL:O	0.48	2.59	15	1
1:A:270:ILE:HG23	1:A:276:TRP:CZ3	0.48	2.44	15	1
1:A:139:ARG:N	1:A:189:GLU:OE2	0.48	2.47	8	1
1:A:253:ASP:O	1:A:254:LYS:HB2	0.48	2.08	9	3
1:A:271:ASN:OD1	1:A:277:GLU:OE2	0.48	2.32	19	1
1:A:272:MET:SD	1:A:274:GLY:N	0.48	2.84	19	1
1:A:159:ILE:O	1:A:159:ILE:CG2	0.48	2.61	1	2
1:A:277:GLU:HA	1:A:285:GLY:O	0.48	2.09	10	9
1:A:296:ASP:O	1:A:297:GLN:CB	0.48	2.62	20	2
1:A:149:ASP:OD1	1:A:149:ASP:N	0.48	2.47	7	2
1:A:272:MET:CE	1:A:275:GLN:O	0.48	2.61	12	4
1:A:289:PHE:CD1	1:A:289:PHE:O	0.47	2.68	10	2
1:A:189:GLU:O	1:A:190:LYS:HB3	0.47	2.08	2	1
1:A:280:CYS:SG	1:A:283:LYS:CD	0.47	3.02	19	1
1:A:264:LEU:CD1	1:A:265:VAL:N	0.47	2.63	7	3
1:A:286:HIS:N	1:A:286:HIS:ND1	0.47	2.62	20	1
1:A:264:LEU:CD1	1:A:264:LEU:C	0.47	2.81	7	4
1:A:164:ASP:OD1	1:A:164:ASP:O	0.47	2.32	11	2
1:A:142:PHE:CD1	1:A:284:ARG:CZ	0.47	2.97	14	1
1:A:239:PHE:O	1:A:266:LYS:CG	0.47	2.63	10	7
1:A:267:VAL:HG13	1:A:269:LYS:O	0.47	2.09	11	1
1:A:155:LYS:O	1:A:156:LYS:HB3	0.47	2.09	8	2
1:A:246:LYS:CG	1:A:247:ARG:H	0.47	2.22	6	1
1:A:164:ASP:OD1	1:A:164:ASP:N	0.47	2.44	8	1
1:A:293:ARG:O	1:A:294:LEU:CB	0.47	2.62	7	2
1:A:143:ASP:CG	1:A:155:LYS:NZ	0.47	2.67	2	1
1:A:289:PHE:O	1:A:292:VAL:HG22	0.47	2.09	1	2
1:A:260:GLU:CG	1:A:261:VAL:N	0.47	2.76	15	1
1:A:271:ASN:ND2	1:A:271:ASN:C	0.47	2.68	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:241:ALA:H	1:A:264:LEU:CD1	0.47	2.21	8	5
1:A:239:PHE:CZ	1:A:297:GLN:CD	0.47	2.88	17	3
1:A:265:VAL:CG2	1:A:266:LYS:N	0.47	2.77	11	2
1:A:152:LEU:HD11	1:A:175:ASP:CG	0.47	2.29	19	2
1:A:170:TRP:CE3	1:A:183:ILE:C	0.47	2.88	20	2
1:A:279:GLU:OE2	1:A:282:GLY:N	0.47	2.47	20	1
1:A:244:ILE:CD1	1:A:244:ILE:N	0.47	2.78	18	1
1:A:143:ASP:CG	1:A:155:LYS:HZ1	0.47	2.13	2	1
1:A:270:ILE:HG22	1:A:276:TRP:CE3	0.47	2.45	14	1
1:A:265:VAL:HG23	1:A:280:CYS:SG	0.47	2.50	11	1
1:A:153:PRO:O	1:A:175:ASP:OD2	0.47	2.32	20	1
1:A:163:ARG:NH2	1:A:172:ASN:OD1	0.47	2.48	3	1
1:A:275:GLN:OE1	1:A:287:PHE:N	0.47	2.38	11	1
1:A:137:TYR:O	1:A:138:VAL:CB	0.47	2.62	16	1
1:A:271:ASN:ND2	1:A:272:MET:CE	0.47	2.78	5	1
1:A:263:GLU:O	1:A:264:LEU:CB	0.47	2.63	3	6
1:A:187:TYR:CE1	1:A:268:THR:OG1	0.46	2.60	16	4
1:A:144:PHE:HB3	1:A:154:PHE:CE1	0.46	2.45	4	2
1:A:147:ASN:O	1:A:148:ASP:C	0.46	2.53	13	2
1:A:286:HIS:ND1	1:A:286:HIS:C	0.46	2.68	5	1
1:A:151:ASP:C	1:A:151:ASP:OD1	0.46	2.54	7	3
1:A:148:ASP:C	1:A:150:GLU:H	0.46	2.13	13	3
1:A:182:MET:C	1:A:183:ILE:HG22	0.46	2.30	13	3
1:A:147:ASN:O	1:A:148:ASP:CB	0.46	2.62	19	2
1:A:275:GLN:O	1:A:276:TRP:CB	0.46	2.63	14	2
1:A:151:ASP:OD1	1:A:151:ASP:N	0.46	2.45	17	1
1:A:253:ASP:CG	1:A:253:ASP:O	0.46	2.54	6	2
1:A:149:ASP:C	1:A:151:ASP:N	0.46	2.69	12	1
1:A:267:VAL:CG1	1:A:268:THR:N	0.46	2.78	16	3
1:A:163:ARG:HH12	1:A:180:ARG:HH11	0.46	1.53	17	1
1:A:162:ILE:O	1:A:163:ARG:CB	0.46	2.62	12	3
1:A:137:TYR:HB3	1:A:159:ILE:HG23	0.46	1.88	9	1
1:A:162:ILE:CG2	1:A:163:ARG:N	0.46	2.78	2	3
1:A:137:TYR:CB	1:A:159:ILE:HG23	0.46	2.40	14	1
1:A:164:ASP:O	1:A:165:LYS:HB3	0.46	2.11	17	3
1:A:147:ASN:ND2	1:A:151:ASP:OD2	0.46	2.47	7	1
1:A:247:ARG:HH21	1:A:254:LYS:HZ2	0.46	1.52	18	1
1:A:177:ASP:CB	1:A:179:LYS:NZ	0.46	2.79	8	4
1:A:296:ASP:N	1:A:296:ASP:OD1	0.46	2.48	14	1
1:A:275:GLN:NE2	1:A:276:TRP:C	0.46	2.70	11	1
1:A:171:TRP:O	1:A:183:ILE:CG1	0.46	2.64	12	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:159:ILE:O	1:A:176:MET:SD	0.46	2.74	8	1
1:A:237:GLY:CA	1:A:239:PHE:N	0.46	2.79	1	3
1:A:148:ASP:C	1:A:151:ASP:OD1	0.46	2.54	8	2
1:A:140:ALA:O	1:A:157:GLY:N	0.46	2.46	13	1
1:A:254:LYS:C	1:A:255:THR:OG1	0.46	2.55	20	3
1:A:280:CYS:O	1:A:283:LYS:CD	0.46	2.65	11	1
1:A:257:LEU:HD23	1:A:285:GLY:O	0.46	2.09	18	1
1:A:237:GLY:CA	1:A:238:PRO:C	0.45	2.85	12	12
1:A:144:PHE:HB3	1:A:154:PHE:CZ	0.45	2.47	10	1
1:A:151:ASP:OD1	1:A:151:ASP:O	0.45	2.35	18	3
1:A:147:ASN:HD22	1:A:148:ASP:N	0.45	2.08	17	2
1:A:141:LEU:H	1:A:141:LEU:CD1	0.45	2.16	1	1
1:A:138:VAL:CG2	1:A:188:VAL:HG21	0.45	2.32	16	1
1:A:266:LYS:O	1:A:268:THR:HG23	0.45	2.11	11	1
1:A:268:THR:CG2	1:A:269:LYS:H	0.45	2.25	17	1
1:A:276:TRP:O	1:A:286:HIS:HA	0.45	2.12	4	2
1:A:161:LYS:O	1:A:173:ALA:CB	0.45	2.64	6	1
1:A:247:ARG:HH21	1:A:254:LYS:CE	0.45	2.23	7	2
1:A:272:MET:HE3	1:A:275:GLN:H	0.45	1.71	11	1
1:A:189:GLU:CG	1:A:190:LYS:N	0.45	2.79	16	2
1:A:168:GLU:O	1:A:185:VAL:HG21	0.45	2.12	17	1
1:A:254:LYS:C	1:A:256:ALA:N	0.45	2.68	7	1
1:A:252:TYR:C	1:A:254:LYS:H	0.45	2.14	19	2
1:A:241:ALA:O	1:A:264:LEU:CB	0.45	2.65	6	4
1:A:163:ARG:HH21	1:A:174:GLU:CD	0.45	2.14	18	1
1:A:152:LEU:CD1	1:A:175:ASP:OD2	0.45	2.62	4	1
1:A:264:LEU:C	1:A:264:LEU:CD1	0.45	2.84	6	9
1:A:246:LYS:CG	1:A:287:PHE:CE2	0.45	3.00	18	1
1:A:138:VAL:HG22	1:A:160:LEU:O	0.45	2.12	3	1
1:A:276:TRP:CE2	1:A:289:PHE:HB3	0.45	2.47	11	1
1:A:241:ALA:HA	1:A:294:LEU:HA	0.45	1.87	11	4
1:A:270:ILE:HD12	1:A:270:ILE:O	0.45	2.11	20	1
1:A:155:LYS:C	1:A:156:LYS:O	0.45	2.55	2	1
1:A:168:GLU:CD	1:A:168:GLU:N	0.45	2.70	3	2
1:A:174:GLU:OE2	1:A:178:GLY:O	0.45	2.35	13	3
1:A:243:VAL:O	1:A:262:GLY:C	0.45	2.55	13	1
1:A:146:GLY:O	1:A:147:ASN:CB	0.44	2.65	3	6
1:A:274:GLY:C	1:A:275:GLN:NE2	0.44	2.70	9	2
1:A:162:ILE:CG2	1:A:163:ARG:H	0.44	2.12	14	1
1:A:163:ARG:HE	1:A:180:ARG:NH2	0.44	2.10	16	1
1:A:248:VAL:O	1:A:248:VAL:CG1	0.44	2.56	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:144:PHE:O	1:A:145:ASN:C	0.44	2.56	6	7
1:A:243:VAL:C	1:A:261:VAL:O	0.44	2.55	15	1
1:A:272:MET:CE	1:A:276:TRP:H	0.44	2.24	15	1
1:A:275:GLN:CD	1:A:286:HIS:HB2	0.44	2.33	11	1
1:A:165:LYS:HB2	1:A:171:TRP:CD1	0.44	2.47	11	1
1:A:263:GLU:O	1:A:264:LEU:O	0.44	2.36	19	3
1:A:150:GLU:O	1:A:151:ASP:C	0.44	2.55	5	1
1:A:283:LYS:C	1:A:284:ARG:O	0.44	2.52	19	1
1:A:269:LYS:O	1:A:270:ILE:HG23	0.44	2.12	11	1
1:A:145:ASN:O	1:A:146:GLY:O	0.44	2.36	20	1
1:A:137:TYR:HA	1:A:160:LEU:O	0.44	2.12	19	1
1:A:143:ASP:CG	1:A:269:LYS:NZ	0.44	2.70	4	1
1:A:271:ASN:ND2	1:A:272:MET:HE3	0.44	2.28	5	2
1:A:151:ASP:O	1:A:151:ASP:OD1	0.44	2.35	13	2
1:A:160:LEU:HD21	1:A:175:ASP:OD1	0.44	2.12	20	1
1:A:145:ASN:HD21	1:A:155:LYS:HZ2	0.44	1.53	7	1
1:A:137:TYR:O	1:A:137:TYR:CG	0.44	2.69	3	1
1:A:158:ASP:CG	1:A:176:MET:SD	0.44	2.96	17	1
1:A:271:ASN:C	1:A:271:ASN:ND2	0.44	2.70	20	2
1:A:250:ASN:OD1	1:A:253:ASP:N	0.44	2.43	9	1
1:A:189:GLU:O	1:A:190:LYS:HB2	0.44	2.12	1	1
1:A:291:HIS:C	1:A:292:VAL:HG22	0.44	2.33	17	2
1:A:293:ARG:O	1:A:294:LEU:C	0.44	2.57	1	5
1:A:151:ASP:OD1	1:A:151:ASP:C	0.44	2.57	15	3
1:A:296:ASP:O	1:A:297:GLN:OXT	0.44	2.36	14	3
1:A:171:TRP:CD2	1:A:185:VAL:CG2	0.44	3.01	16	5
1:A:143:ASP:O	1:A:187:TYR:CD2	0.44	2.70	20	1
1:A:239:PHE:CD1	1:A:297:GLN:C	0.44	2.92	6	1
1:A:287:PHE:CD1	1:A:291:HIS:CE1	0.44	3.05	18	1
1:A:147:ASN:C	1:A:151:ASP:OD1	0.44	2.56	13	1
1:A:273:SER:CA	1:A:276:TRP:HE1	0.43	2.25	11	1
1:A:267:VAL:C	1:A:268:THR:CG2	0.43	2.86	7	2
1:A:148:ASP:CA	1:A:151:ASP:OD1	0.43	2.66	8	2
1:A:138:VAL:CG1	1:A:190:LYS:O	0.43	2.65	16	1
1:A:236:ASN:O	1:A:237:GLY:O	0.43	2.36	9	1
1:A:257:LEU:CD1	1:A:280:CYS:SG	0.43	3.05	6	3
1:A:142:PHE:O	1:A:143:ASP:CB	0.43	2.66	16	3
1:A:250:ASN:C	1:A:256:ALA:O	0.43	2.56	18	1
1:A:253:ASP:O	1:A:253:ASP:CG	0.43	2.56	9	1
1:A:190:LYS:N	1:A:190:LYS:CD	0.43	2.81	7	1
1:A:241:ALA:O	1:A:295:LEU:HD13	0.43	2.13	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:275:GLN:CD	1:A:275:GLN:N	0.43	2.72	4	1
1:A:244:ILE:HA	1:A:261:VAL:HG13	0.43	1.91	14	3
1:A:270:ILE:N	1:A:270:ILE:CD1	0.43	2.81	6	1
1:A:266:LYS:N	1:A:279:GLU:O	0.43	2.47	13	1
1:A:141:LEU:HD12	1:A:141:LEU:N	0.43	2.26	1	1
1:A:149:ASP:O	1:A:150:GLU:CB	0.43	2.65	14	2
1:A:155:LYS:O	1:A:156:LYS:NZ	0.43	2.49	8	1
1:A:190:LYS:C	1:A:190:LYS:CD	0.43	2.87	14	1
1:A:169:GLN:NE2	1:A:239:PHE:O	0.43	2.52	18	3
1:A:244:ILE:HD13	1:A:293:ARG:HE	0.43	1.72	1	2
1:A:241:ALA:O	1:A:264:LEU:HA	0.43	2.13	10	3
1:A:272:MET:CE	1:A:275:GLN:H	0.43	2.25	11	1
1:A:239:PHE:CE1	1:A:297:GLN:CG	0.43	3.02	8	2
1:A:164:ASP:CG	1:A:165:LYS:N	0.43	2.72	17	1
1:A:267:VAL:C	1:A:268:THR:HG22	0.43	2.34	19	1
1:A:140:ALA:HA	1:A:188:VAL:HG12	0.43	1.89	4	1
1:A:280:CYS:O	1:A:281:ASN:ND2	0.43	2.52	11	1
1:A:169:GLN:OE1	1:A:297:GLN:OE1	0.43	2.37	12	1
1:A:243:VAL:O	1:A:261:VAL:C	0.43	2.57	15	1
1:A:245:GLN:HA	1:A:261:VAL:HG22	0.43	1.90	3	2
1:A:140:ALA:HB2	1:A:188:VAL:HG12	0.43	1.90	6	1
1:A:270:ILE:H	1:A:270:ILE:CD1	0.43	2.25	6	1
1:A:254:LYS:O	1:A:256:ALA:N	0.43	2.52	7	1
1:A:296:ASP:OD1	1:A:296:ASP:O	0.43	2.37	4	2
1:A:274:GLY:O	1:A:276:TRP:CE2	0.43	2.71	16	2
1:A:237:GLY:HA3	1:A:239:PHE:N	0.43	2.29	5	2
1:A:137:TYR:O	1:A:138:VAL:CG1	0.43	2.67	16	1
1:A:277:GLU:HA	1:A:286:HIS:HA	0.43	1.90	4	1
1:A:271:ASN:HD22	1:A:271:ASN:C	0.42	2.18	3	2
1:A:277:GLU:CA	1:A:285:GLY:O	0.42	2.67	12	2
1:A:149:ASP:OD1	1:A:150:GLU:N	0.42	2.52	6	1
1:A:252:TYR:O	1:A:253:ASP:C	0.42	2.58	7	1
1:A:149:ASP:O	1:A:149:ASP:OD1	0.42	2.37	1	1
1:A:272:MET:O	1:A:276:TRP:CE2	0.42	2.72	15	1
1:A:257:LEU:CB	1:A:283:LYS:O	0.42	2.68	18	1
1:A:183:ILE:C	1:A:183:ILE:CD1	0.42	2.85	5	1
1:A:295:LEU:C	1:A:297:GLN:H	0.42	2.17	4	1
1:A:239:PHE:CG	1:A:297:GLN:CG	0.42	3.02	6	2
1:A:291:HIS:O	1:A:292:VAL:CG1	0.42	2.66	5	2
1:A:142:PHE:CZ	1:A:284:ARG:CZ	0.42	3.03	2	1
1:A:243:VAL:C	1:A:245:GLN:N	0.42	2.73	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:170:TRP:CD1	1:A:239:PHE:CE1	0.42	3.07	8	1
1:A:272:MET:O	1:A:274:GLY:N	0.42	2.52	12	1
1:A:260:GLU:CG	1:A:262:GLY:H	0.42	2.27	15	1
1:A:248:VAL:O	1:A:253:ASP:OD2	0.42	2.37	18	1
1:A:144:PHE:HB2	1:A:154:PHE:CZ	0.42	2.49	12	3
1:A:146:GLY:C	1:A:147:ASN:HD22	0.42	2.17	2	1
1:A:161:LYS:O	1:A:174:GLU:N	0.42	2.53	4	1
1:A:144:PHE:CE2	1:A:146:GLY:HA2	0.42	2.50	10	1
1:A:168:GLU:CG	1:A:169:GLN:N	0.42	2.82	10	2
1:A:272:MET:HE3	1:A:274:GLY:N	0.42	2.27	11	1
1:A:275:GLN:NE2	1:A:276:TRP:N	0.42	2.67	11	1
1:A:149:ASP:OD1	1:A:151:ASP:OD1	0.42	2.37	11	1
1:A:155:LYS:HG3	1:A:156:LYS:N	0.42	2.30	11	1
1:A:141:LEU:HD11	1:A:189:GLU:HB3	0.42	1.89	2	1
1:A:260:GLU:HG2	1:A:262:GLY:H	0.42	1.74	15	1
1:A:267:VAL:HG22	1:A:277:GLU:O	0.42	2.15	11	1
1:A:155:LYS:O	1:A:156:LYS:CE	0.42	2.68	18	1
1:A:140:ALA:CB	1:A:155:LYS:O	0.42	2.68	16	1
1:A:163:ARG:HE	1:A:180:ARG:HE	0.42	1.57	11	1
1:A:137:TYR:C	1:A:138:VAL:CG1	0.42	2.87	16	4
1:A:275:GLN:N	1:A:275:GLN:CD	0.42	2.72	20	1
1:A:272:MET:SD	1:A:274:GLY:C	0.42	2.98	19	1
1:A:158:ASP:C	1:A:159:ILE:HD12	0.42	2.35	5	2
1:A:183:ILE:CD1	1:A:183:ILE:C	0.42	2.88	6	1
1:A:186:PRO:C	1:A:188:VAL:H	0.42	2.18	5	1
1:A:190:LYS:CD	1:A:190:LYS:N	0.41	2.84	15	1
1:A:149:ASP:O	1:A:150:GLU:CG	0.41	2.68	14	1
1:A:267:VAL:O	1:A:268:THR:HG23	0.41	2.15	11	1
1:A:164:ASP:CG	1:A:165:LYS:H	0.41	2.17	17	1
1:A:275:GLN:N	1:A:275:GLN:NE2	0.41	2.68	14	1
1:A:154:PHE:CD2	1:A:160:LEU:CD1	0.41	3.03	13	2
1:A:177:ASP:HB3	1:A:179:LYS:NZ	0.41	2.31	2	2
1:A:255:THR:O	1:A:255:THR:CG2	0.41	2.69	18	1
1:A:137:TYR:C	1:A:138:VAL:O	0.41	2.58	9	2
1:A:258:ALA:HB3	1:A:283:LYS:CE	0.41	2.45	20	1
1:A:273:SER:HA	1:A:276:TRP:HE1	0.41	1.75	15	1
1:A:150:GLU:C	1:A:151:ASP:O	0.41	2.58	11	2
1:A:279:GLU:OE1	1:A:280:CYS:N	0.41	2.53	13	1
1:A:243:VAL:O	1:A:243:VAL:HG22	0.41	2.15	15	1
1:A:246:LYS:HZ2	1:A:259:LEU:CD1	0.41	2.27	14	1
1:A:155:LYS:C	1:A:157:GLY:H	0.41	2.18	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:266:LYS:O	1:A:268:THR:HG22	0.41	2.16	3	1
1:A:241:ALA:N	1:A:264:LEU:CD1	0.41	2.84	8	2
1:A:147:ASN:C	1:A:148:ASP:O	0.41	2.59	17	1
1:A:145:ASN:ND2	1:A:154:PHE:O	0.41	2.54	7	1
1:A:238:PRO:O	1:A:239:PHE:CG	0.41	2.73	19	1
1:A:253:ASP:C	1:A:254:LYS:CG	0.41	2.90	1	1
1:A:243:VAL:HG12	1:A:264:LEU:N	0.41	2.26	15	1
1:A:272:MET:O	1:A:276:TRP:CH2	0.41	2.74	14	1
1:A:144:PHE:CZ	1:A:146:GLY:CA	0.41	3.04	10	1
1:A:289:PHE:CD1	1:A:289:PHE:C	0.41	2.95	10	1
1:A:143:ASP:OD1	1:A:143:ASP:C	0.41	2.58	11	1
1:A:272:MET:C	1:A:274:GLY:N	0.41	2.73	12	2
1:A:271:ASN:CG	1:A:272:MET:H	0.41	2.18	13	2
1:A:157:GLY:O	1:A:159:ILE:CD1	0.41	2.69	5	1
1:A:255:THR:O	1:A:256:ALA:C	0.41	2.59	19	1
1:A:155:LYS:O	1:A:156:LYS:HB2	0.41	2.16	1	1
1:A:250:ASN:OD1	1:A:252:TYR:C	0.41	2.60	18	1
1:A:270:ILE:CG2	1:A:271:ASN:N	0.41	2.83	18	1
1:A:170:TRP:CZ2	1:A:238:PRO:HD2	0.41	2.51	4	1
1:A:242:ARG:NH1	1:A:262:GLY:O	0.40	2.54	15	1
1:A:165:LYS:O	1:A:165:LYS:HG2	0.40	2.16	3	1
1:A:268:THR:HG23	1:A:269:LYS:H	0.40	1.76	14	1
1:A:244:ILE:CD1	1:A:293:ARG:HH21	0.40	2.29	17	1
1:A:189:GLU:OE2	1:A:190:LYS:N	0.40	2.55	11	1
1:A:144:PHE:HB2	1:A:154:PHE:CE1	0.40	2.51	8	1
1:A:169:GLN:OE1	1:A:297:GLN:OXT	0.40	2.39	18	1
1:A:171:TRP:O	1:A:183:ILE:HG12	0.40	2.15	12	1
1:A:148:ASP:O	1:A:151:ASP:CG	0.40	2.59	12	1
1:A:149:ASP:O	1:A:150:GLU:HB2	0.40	2.15	5	1
1:A:272:MET:HE2	1:A:272:MET:H	0.40	1.76	19	1
1:A:143:ASP:C	1:A:143:ASP:OD1	0.40	2.60	7	1
1:A:176:MET:SD	1:A:176:MET:N	0.40	2.92	17	1
1:A:247:ARG:NH1	1:A:287:PHE:CE1	0.40	2.89	18	1
1:A:246:LYS:HE2	1:A:287:PHE:CG	0.40	2.52	19	1
1:A:239:PHE:CD2	1:A:297:GLN:NE2	0.40	2.88	19	1
1:A:170:TRP:NE1	1:A:239:PHE:HE1	0.40	2.15	1	1
1:A:152:LEU:HB3	1:A:183:ILE:CG2	0.40	2.47	7	1
1:A:288:PRO:C	1:A:290:THR:N	0.40	2.74	16	1
1:A:154:PHE:CD1	1:A:154:PHE:C	0.40	2.95	12	1
1:A:243:VAL:CG1	1:A:260:GLU:O	0.40	2.70	13	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	115/163 (71%)	67±4 (59±4%)	29±3 (25±3%)	19±4 (16±3%)	1	4
All	All	2300/3260 (71%)	1348 (59%)	580 (25%)	372 (16%)	1	4

All 56 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	147	ASN	20
1	A	143	ASP	17
1	A	190	LYS	17
1	A	287	PHE	17
1	A	264	LEU	16
1	A	251	ALA	16
1	A	274	GLY	15
1	A	146	GLY	15
1	A	138	VAL	13
1	A	290	THR	13
1	A	238	PRO	12
1	A	156	LYS	11
1	A	261	VAL	11
1	A	148	ASP	11
1	A	255	THR	10
1	A	157	GLY	9
1	A	245	GLN	9
1	A	253	ASP	9
1	A	271	ASN	8
1	A	239	PHE	7
1	A	254	LYS	7
1	A	283	LYS	6
1	A	268	THR	6
1	A	294	LEU	5
1	A	236	ASN	5
1	A	237	GLY	5
1	A	281	ASN	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	276	TRP	4
1	A	275	GLN	4
1	A	250	ASN	4
1	A	166	PRO	4
1	A	247	ARG	4
1	A	150	GLU	4
1	A	137	TYR	4
1	A	151	ASP	4
1	A	165	LYS	4
1	A	155	LYS	4
1	A	249	PRO	3
1	A	295	LEU	3
1	A	257	LEU	3
1	A	272	MET	3
1	A	176	MET	3
1	A	149	ASP	3
1	A	263	GLU	2
1	A	162	ILE	2
1	A	163	ARG	2
1	A	256	ALA	2
1	A	273	SER	2
1	A	296	ASP	2
1	A	161	LYS	1
1	A	145	ASN	1
1	A	244	ILE	1
1	A	246	LYS	1
1	A	248	VAL	1
1	A	291	HIS	1
1	A	284	ARG	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	100/140 (71%)	79±2 (79±2%)	21±2 (21±2%)	4	33
All	All	2000/2800 (71%)	1575 (79%)	425 (21%)	4	33

All 54 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	280	CYS	20
1	A	257	LEU	20
1	A	180	ARG	20
1	A	271	ASN	20
1	A	264	LEU	19
1	A	283	LYS	19
1	A	268	THR	18
1	A	292	VAL	17
1	A	287	PHE	16
1	A	141	LEU	16
1	A	269	LYS	15
1	A	147	ASN	14
1	A	143	ASP	13
1	A	155	LYS	12
1	A	240	TYR	12
1	A	270	ILE	11
1	A	289	PHE	11
1	A	266	LYS	10
1	A	189	GLU	9
1	A	175	ASP	8
1	A	250	ASN	8
1	A	183	ILE	8
1	A	255	THR	8
1	A	279	GLU	7
1	A	244	ILE	7
1	A	276	TRP	6
1	A	245	GLN	6
1	A	137	TYR	6
1	A	259	LEU	6
1	A	156	LYS	5
1	A	190	LYS	5
1	A	182	MET	5
1	A	246	LYS	5
1	A	275	GLN	4
1	A	163	ARG	4
1	A	272	MET	4
1	A	247	ARG	4
1	A	151	ASP	3
1	A	176	MET	3
1	A	291	HIS	3
1	A	236	ASN	2
1	A	164	ASP	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	165	LYS	2
1	A	293	ARG	2
1	A	249	PRO	1
1	A	138	VAL	1
1	A	145	ASN	1
1	A	169	GLN	1
1	A	172	ASN	1
1	A	286	HIS	1
1	A	260	GLU	1
1	A	168	GLU	1
1	A	267	VAL	1
1	A	281	ASN	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](#)

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