



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Jun 16, 2024 – 07:10 AM EDT

PDB ID : 1SVQ  
Title : STRUCTURE OF SEVERIN DOMAIN 2 IN SOLUTION  
Authors : Schnuchel, A.; Holak, T.A.  
Deposited on : 1994-10-12

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

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/NMRValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

---

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

MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.37.1

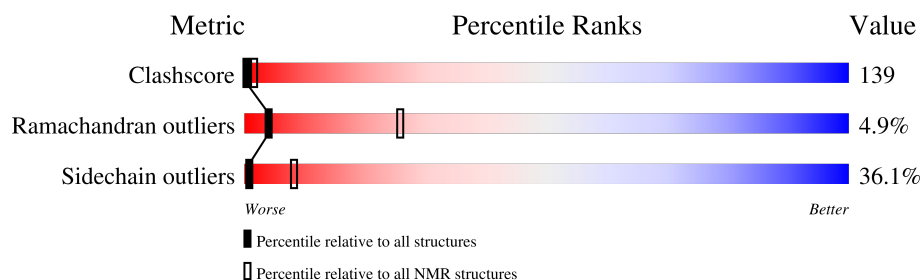
# 1 Overall quality at a glance

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	158937	12864
Ramachandran outliers	154571	11451
Sidechain outliers	154315	11428

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the experimental data. The red, orange, yellow and green segments indicate the fraction of residues that contain outliers for  $\geq 3$ , 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	114	<div> <div></div> <div>12%</div> <div>44%</div> <div>23%</div> <div>• •</div> <div>18%</div> </div>

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 12 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:161-A:251 (91)	0.64	12

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. No single-model clusters were found.

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

### 3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1430 atoms, of which 713 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called SEVERIN.

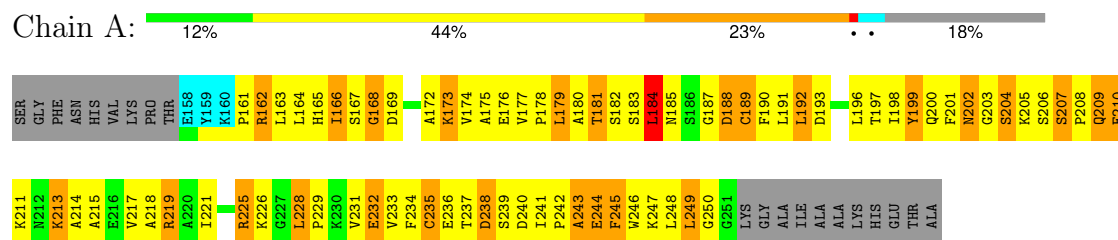
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	94	Total	C	H	N	O	S	0
			1430	453	713	121	141	2	

## 4 Residue-property plots

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

These plots are provided for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic is the same as shown in the summary in section 1 of this report. The second graphic shows the sequence where residues are colour-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. Stretches of 2 or more consecutive residues without any outliers are shown as green connectors. Residues which are classified as ill-defined in the NMR ensemble, are shown in cyan with an underline colour-coded according to the previous scheme. Residues which were present in the experimental sample, but not modelled in the final structure are shown in grey.

- Molecule 1: SEVERIN

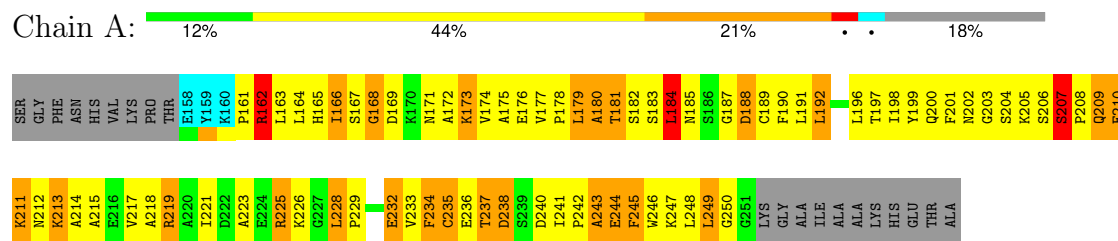


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

#### 4.2.1 Score per residue for model 1

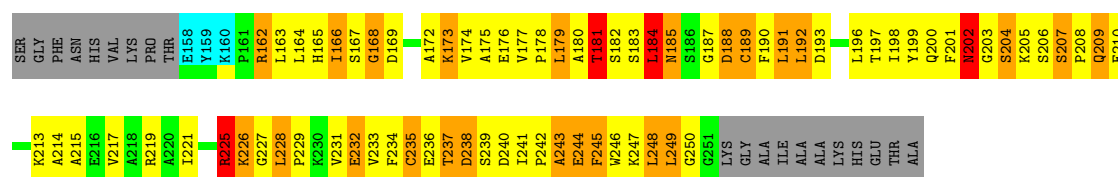
- Molecule 1: SEVERIN



#### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: SEVERIN





### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: SEVERIN



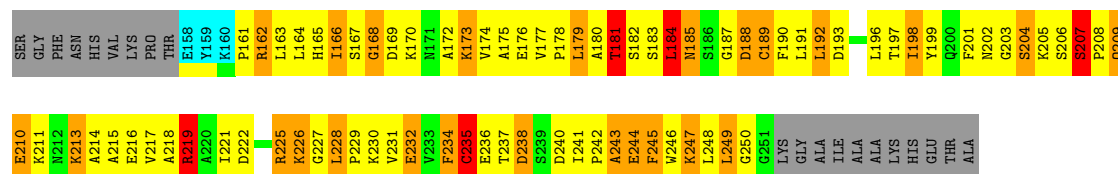
### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: SEVERIN



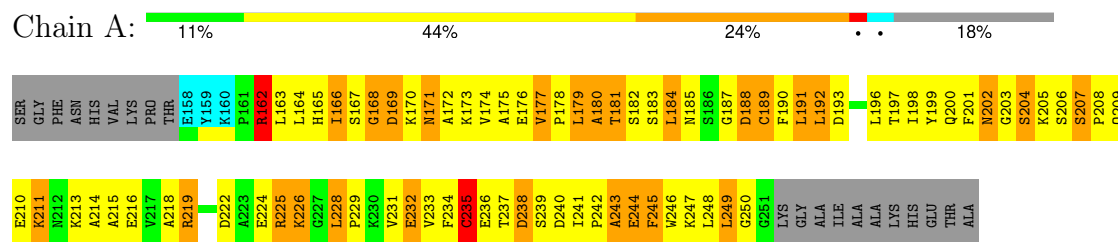
### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: SEVERIN



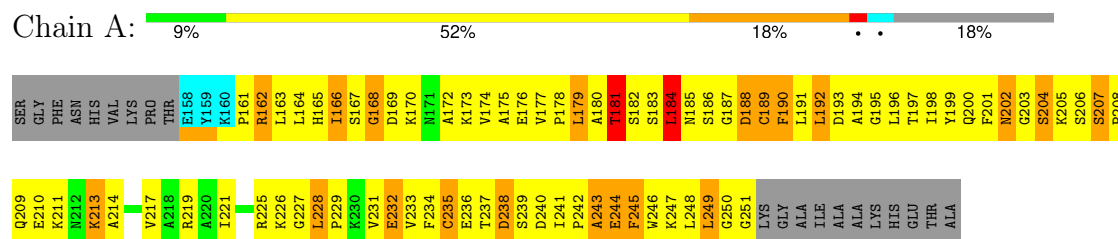
### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: SEVERIN



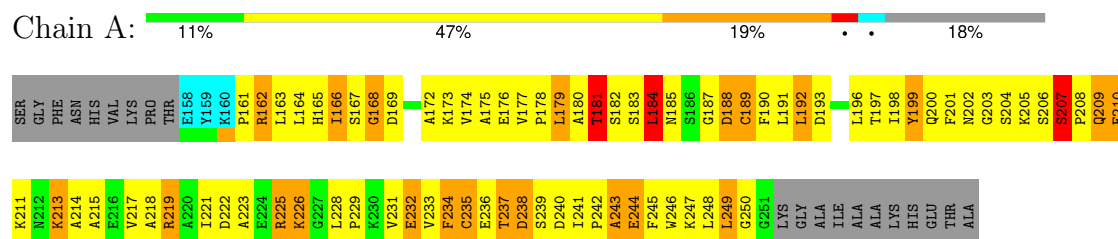
#### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: SEVERIN



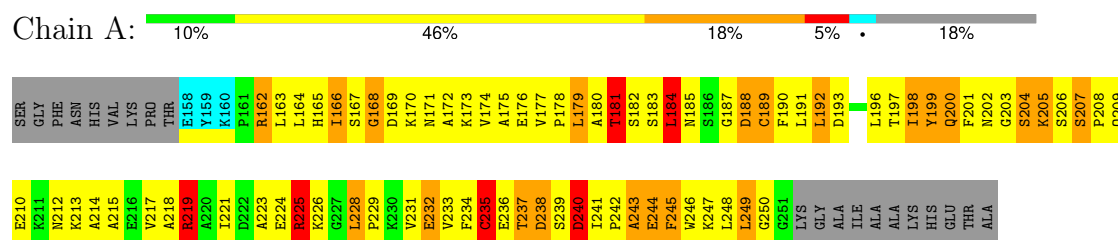
#### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: SEVERIN



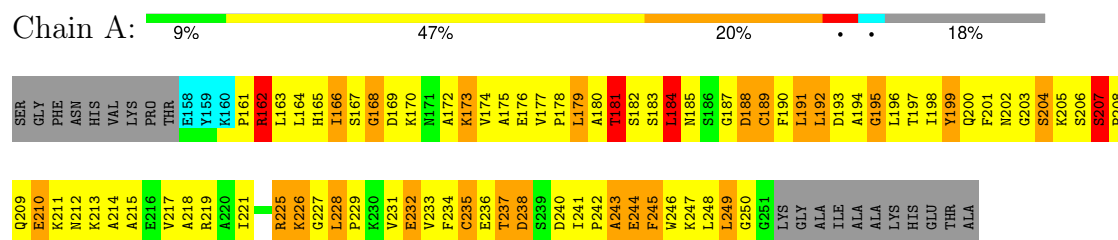
#### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: SEVERIN



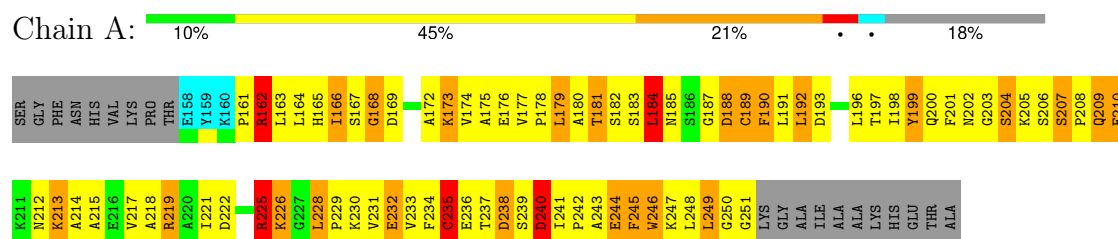
### 4.2.10 Score per residue for model 10

#### • Molecule 1: SEVERIN



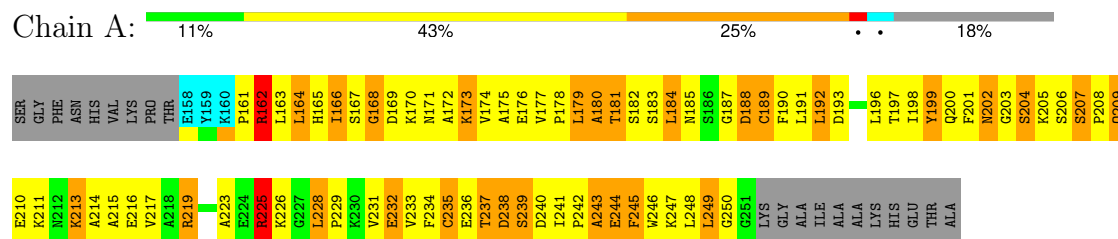
### 4.2.11 Score per residue for model 11

#### • Molecule 1: SEVERIN



### 4.2.12 Score per residue for model 12 (medoid)

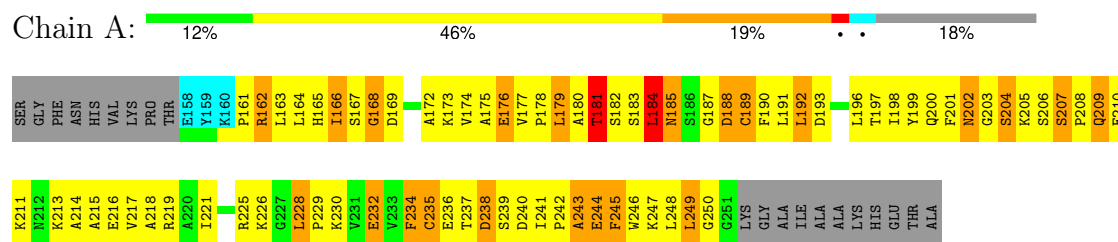
#### • Molecule 1: SEVERIN





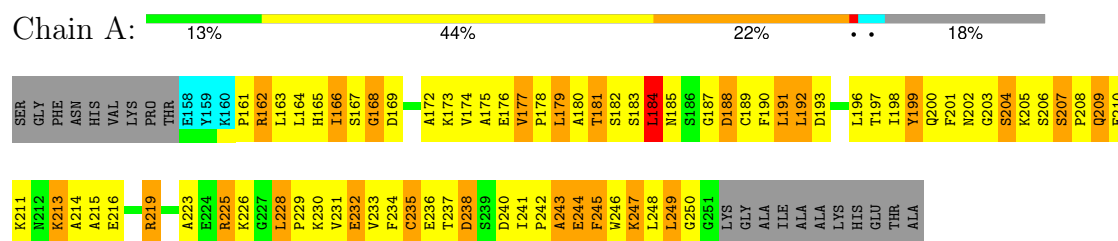
## 4.2.14 Score per residue for model 14

## • Molecule 1: SEVERIN



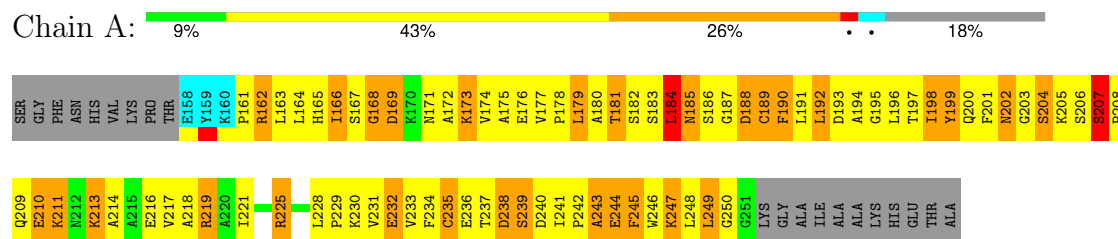
## 4.2.15 Score per residue for model 15

## • Molecule 1: SEVERIN



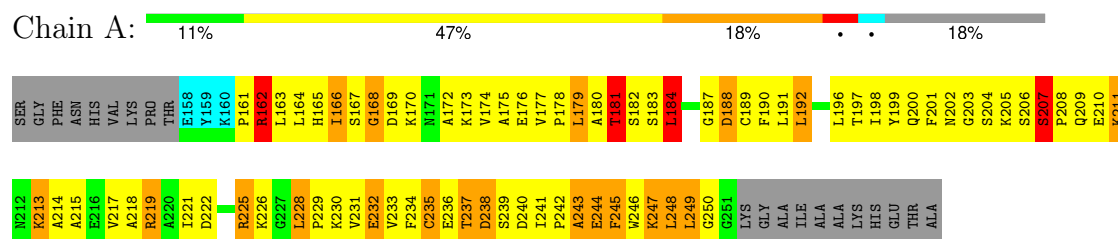
## 4.2.16 Score per residue for model 16

## • Molecule 1: SEVERIN



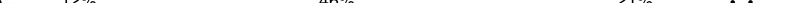
## 4.2.17 Score per residue for model 17

## • Molecule 1: SEVERIN



#### 4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: SEVERIN

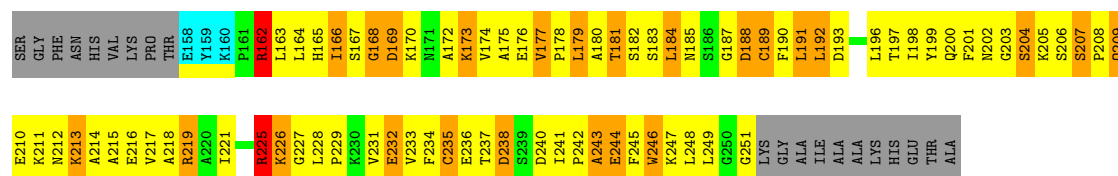
Chain A: 



#### 4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: SEVERIN

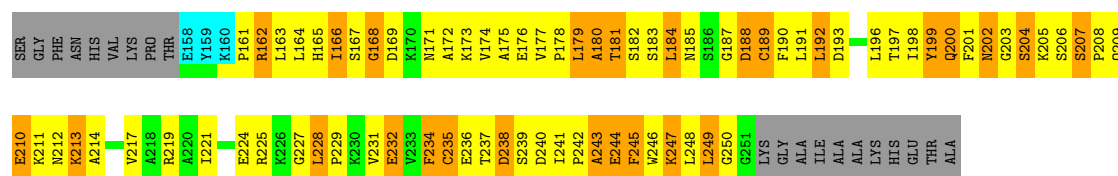
Chain A: 



#### 4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: SEVERIN

Chain A: 



## 5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

Of the ? calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: ?.

The authors did not provide any information on software used for structure solution, optimization or refinement.

No chemical shift data was provided.

## 6 Model quality

### 6.1 Standard geometry

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.12±0.01	1±1/699 ( 0.1± 0.1%)	1.02±0.01	1±0/943 ( 0.1± 0.1%)
All	All	1.12	20/13980 ( 0.1%)	1.02	11/18860 ( 0.1%)

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	2.9±0.3
All	All	0	58

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	189	CYS	CB-SG	7.03	1.94	1.82	9	16
1	A	235	CYS	CB-SG	6.18	1.92	1.82	9	4

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	202	ASN	N-CA-CB	-5.50	100.69	110.60	2	8
1	A	246	TRP	CA-CB-CG	-5.41	103.43	113.70	19	2
1	A	202	ASN	CB-CA-C	5.34	121.08	110.40	18	1

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	219	ARG	Sidechain	20
1	A	162	ARG	Sidechain	19
1	A	225	ARG	Sidechain	19

## 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	687	685	685	190±10
All	All	13740	13700	13700	3803

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 139.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:241:ILE:HG23	1:A:245:PHE:CD2	1.09	1.81	11	2
1:A:163:LEU:HD11	1:A:249:LEU:HD22	1.05	1.24	12	13
1:A:179:LEU:HD12	1:A:180:ALA:N	1.04	1.66	19	20
1:A:163:LEU:HD12	1:A:180:ALA:HB3	1.04	1.12	2	3
1:A:180:ALA:O	1:A:249:LEU:HD11	1.03	1.53	9	9
1:A:241:ILE:HG21	1:A:246:TRP:CD2	1.01	1.91	11	2
1:A:164:LEU:HD13	1:A:165:HIS:N	0.99	1.72	13	18
1:A:241:ILE:HG23	1:A:246:TRP:CD2	0.98	1.93	9	18
1:A:163:LEU:HD11	1:A:249:LEU:CD2	0.98	1.87	16	8
1:A:249:LEU:HD12	1:A:249:LEU:O	0.95	1.62	14	18
1:A:202:ASN:HB2	1:A:234:PHE:C	0.95	1.82	4	20
1:A:202:ASN:C	1:A:235:CYS:HA	0.94	1.82	3	20
1:A:249:LEU:HD12	1:A:249:LEU:C	0.93	1.84	4	14
1:A:163:LEU:O	1:A:177:VAL:HG13	0.93	1.63	15	16
1:A:205:LYS:CG	1:A:237:THR:HG21	0.93	1.94	20	7
1:A:200:GLN:OE1	1:A:233:VAL:HG13	0.91	1.64	15	1
1:A:192:LEU:C	1:A:192:LEU:HD12	0.91	1.85	16	17
1:A:166:ILE:HG21	1:A:214:ALA:HB2	0.89	1.42	12	17
1:A:192:LEU:HD12	1:A:192:LEU:C	0.89	1.87	4	3
1:A:249:LEU:C	1:A:249:LEU:HD12	0.89	1.87	6	3
1:A:192:LEU:O	1:A:192:LEU:HD12	0.89	1.68	1	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:239:SER:O	1:A:241:ILE:HD12	0.87	1.67	13	2
1:A:165:HIS:C	1:A:166:ILE:HD13	0.87	1.90	12	19
1:A:200:GLN:HB2	1:A:233:VAL:HG22	0.87	1.47	3	6
1:A:240:ASP:C	1:A:241:ILE:HD12	0.86	1.90	4	2
1:A:163:LEU:HD12	1:A:180:ALA:CB	0.86	2.00	2	2
1:A:162:ARG:C	1:A:163:LEU:HD22	0.85	1.91	10	12
1:A:164:LEU:HD23	1:A:165:HIS:N	0.85	1.86	16	2
1:A:166:ILE:HD12	1:A:174:VAL:HG23	0.85	1.49	16	19
1:A:181:THR:HG21	1:A:250:GLY:HA3	0.85	1.49	1	16
1:A:179:LEU:HD12	1:A:179:LEU:C	0.85	1.91	8	20
1:A:197:THR:C	1:A:198:ILE:HD12	0.84	1.94	1	12
1:A:163:LEU:CD1	1:A:180:ALA:HB3	0.84	2.00	2	3
1:A:200:GLN:CB	1:A:233:VAL:HG22	0.83	2.03	15	6
1:A:202:ASN:HB3	1:A:235:CYS:CA	0.83	2.02	18	19
1:A:200:GLN:HB2	1:A:233:VAL:HG12	0.83	1.50	12	8
1:A:165:HIS:O	1:A:174:VAL:HG23	0.82	1.74	11	20
1:A:202:ASN:HB3	1:A:235:CYS:CB	0.82	2.05	18	20
1:A:165:HIS:CE1	1:A:167:SER:HG	0.82	1.92	15	9
1:A:184:LEU:HD11	1:A:190:PHE:CD2	0.82	2.10	16	2
1:A:181:THR:HG21	1:A:250:GLY:CA	0.82	2.05	20	9
1:A:245:PHE:CE1	1:A:249:LEU:HD23	0.81	2.10	8	5
1:A:163:LEU:CD1	1:A:249:LEU:HD22	0.81	2.03	12	12
1:A:163:LEU:HB3	1:A:177:VAL:HG12	0.81	1.50	17	4
1:A:164:LEU:HD12	1:A:166:ILE:CD1	0.81	2.06	1	18
1:A:243:ALA:HB1	1:A:247:LYS:HE2	0.81	1.51	3	1
1:A:166:ILE:HD13	1:A:166:ILE:N	0.81	1.91	1	17
1:A:181:THR:HG23	1:A:249:LEU:HD11	0.81	1.53	11	1
1:A:197:THR:O	1:A:198:ILE:HD13	0.81	1.76	12	2
1:A:172:ALA:HB2	1:A:209:GLN:HB3	0.80	1.52	6	20
1:A:205:LYS:HG3	1:A:237:THR:HG21	0.80	1.53	3	5
1:A:180:ALA:HB1	1:A:183:SER:HB3	0.80	1.53	3	6
1:A:163:LEU:O	1:A:177:VAL:HG22	0.80	1.76	16	13
1:A:213:LYS:O	1:A:217:VAL:HG23	0.79	1.76	12	6
1:A:163:LEU:HD12	1:A:249:LEU:HD22	0.79	1.53	5	1
1:A:241:ILE:HA	1:A:246:TRP:NE1	0.79	1.93	17	18
1:A:204:SER:CB	1:A:237:THR:HG23	0.79	2.08	9	4
1:A:184:LEU:HD22	1:A:246:TRP:CH2	0.79	2.12	12	8
1:A:192:LEU:HD12	1:A:192:LEU:O	0.78	1.79	17	18
1:A:203:GLY:N	1:A:235:CYS:SG	0.78	2.56	11	20
1:A:163:LEU:CB	1:A:177:VAL:HG12	0.78	2.08	6	4
1:A:163:LEU:HB3	1:A:177:VAL:HG22	0.78	1.55	2	12

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:164:LEU:HD12	1:A:166:ILE:HD11	0.78	1.52	1	18
1:A:204:SER:HB3	1:A:237:THR:HG23	0.78	1.55	9	1
1:A:200:GLN:OE1	1:A:214:ALA:HB1	0.77	1.79	20	2
1:A:202:ASN:HB3	1:A:235:CYS:SG	0.76	2.19	9	20
1:A:181:THR:HG23	1:A:249:LEU:CB	0.76	2.09	19	1
1:A:205:LYS:HG2	1:A:237:THR:HG21	0.76	1.57	17	8
1:A:166:ILE:HD12	1:A:174:VAL:CG2	0.75	2.11	8	18
1:A:249:LEU:HD12	1:A:250:GLY:N	0.75	1.95	11	2
1:A:179:LEU:HD13	1:A:249:LEU:HD22	0.75	1.59	19	1
1:A:204:SER:N	1:A:237:THR:HG23	0.75	1.97	19	11
1:A:179:LEU:HD21	1:A:249:LEU:CD2	0.75	2.12	18	2
1:A:205:LYS:N	1:A:237:THR:CG2	0.75	2.50	13	6
1:A:166:ILE:N	1:A:166:ILE:HD13	0.74	1.97	9	3
1:A:163:LEU:HD22	1:A:163:LEU:N	0.74	1.97	11	8
1:A:217:VAL:HG12	1:A:221:ILE:HD11	0.74	1.59	8	12
1:A:200:GLN:CB	1:A:233:VAL:HG12	0.74	2.12	9	7
1:A:180:ALA:O	1:A:249:LEU:HD21	0.74	1.83	17	2
1:A:239:SER:O	1:A:241:ILE:N	0.73	2.22	13	4
1:A:180:ALA:O	1:A:249:LEU:CD1	0.73	2.35	9	9
1:A:241:ILE:HG23	1:A:246:TRP:CE2	0.73	2.18	19	18
1:A:163:LEU:HD11	1:A:249:LEU:HD21	0.72	1.59	16	3
1:A:163:LEU:CB	1:A:177:VAL:HG22	0.72	2.13	5	12
1:A:162:ARG:O	1:A:163:LEU:HD13	0.72	1.84	5	2
1:A:175:ALA:O	1:A:177:VAL:HG12	0.71	1.86	15	3
1:A:166:ILE:HG21	1:A:214:ALA:CB	0.71	2.16	12	12
1:A:245:PHE:HE1	1:A:249:LEU:HD23	0.70	1.44	9	5
1:A:180:ALA:O	1:A:181:THR:HG23	0.70	1.86	11	1
1:A:179:LEU:CD2	1:A:249:LEU:HD22	0.70	2.17	18	2
1:A:184:LEU:HD13	1:A:246:TRP:CH2	0.70	2.21	11	1
1:A:189:CYS:HA	1:A:202:ASN:HA	0.70	1.62	3	20
1:A:163:LEU:HD13	1:A:178:PRO:HA	0.70	1.64	15	2
1:A:249:LEU:C	1:A:249:LEU:CD1	0.69	2.61	4	14
1:A:181:THR:HG23	1:A:249:LEU:CD1	0.69	2.17	11	1
1:A:187:GLY:O	1:A:206:SER:HA	0.69	1.88	14	7
1:A:192:LEU:C	1:A:192:LEU:CD1	0.69	2.59	2	20
1:A:187:GLY:O	1:A:206:SER:CB	0.69	2.40	9	6
1:A:191:LEU:HD11	1:A:198:ILE:HG23	0.69	1.64	1	7
1:A:207:SER:O	1:A:211:LYS:CB	0.68	2.42	16	7
1:A:202:ASN:HB2	1:A:235:CYS:N	0.68	2.03	4	7
1:A:163:LEU:O	1:A:177:VAL:HG12	0.68	1.88	6	4
1:A:166:ILE:CG1	1:A:214:ALA:HB2	0.68	2.19	8	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:164:LEU:HD13	1:A:165:HIS:H	0.68	1.48	12	18
1:A:241:ILE:HG23	1:A:246:TRP:CG	0.68	2.23	9	18
1:A:187:GLY:CA	1:A:205:LYS:HB2	0.68	2.19	3	20
1:A:192:LEU:HD22	1:A:249:LEU:HB2	0.68	1.64	8	1
1:A:200:GLN:OE1	1:A:218:ALA:HB2	0.67	1.89	9	2
1:A:234:PHE:CD1	1:A:234:PHE:N	0.67	2.63	3	5
1:A:180:ALA:O	1:A:181:THR:HB	0.67	1.90	10	9
1:A:241:ILE:HG21	1:A:246:TRP:CE2	0.67	2.24	11	2
1:A:201:PHE:O	1:A:202:ASN:OD1	0.66	2.12	11	2
1:A:176:GLU:O	1:A:177:VAL:HG12	0.66	1.91	14	8
1:A:162:ARG:O	1:A:163:LEU:HD23	0.66	1.91	3	2
1:A:187:GLY:O	1:A:203:GLY:O	0.66	2.14	9	9
1:A:184:LEU:HD22	1:A:246:TRP:HH2	0.66	1.50	4	3
1:A:163:LEU:HB2	1:A:178:PRO:O	0.65	1.91	10	17
1:A:162:ARG:O	1:A:163:LEU:HD22	0.65	1.91	16	8
1:A:202:ASN:O	1:A:235:CYS:HA	0.65	1.90	15	20
1:A:177:VAL:HG11	1:A:190:PHE:HZ	0.65	1.50	17	3
1:A:241:ILE:CG2	1:A:245:PHE:CD2	0.65	2.77	4	2
1:A:189:CYS:SG	1:A:202:ASN:ND2	0.65	2.70	18	13
1:A:207:SER:HB2	1:A:208:PRO:HD2	0.65	1.68	15	13
1:A:167:SER:CB	1:A:188:ASP:CB	0.65	2.75	19	20
1:A:181:THR:HB	1:A:249:LEU:HD11	0.65	1.69	16	6
1:A:187:GLY:HA2	1:A:205:LYS:HB2	0.65	1.67	20	18
1:A:201:PHE:CG	1:A:202:ASN:N	0.65	2.65	18	2
1:A:163:LEU:CD2	1:A:249:LEU:HD22	0.65	2.22	13	3
1:A:191:LEU:HD11	1:A:198:ILE:CG2	0.65	2.22	1	9
1:A:164:LEU:HD23	1:A:165:HIS:H	0.64	1.49	3	2
1:A:199:TYR:CD2	1:A:232:GLU:CG	0.64	2.80	20	18
1:A:199:TYR:CD2	1:A:232:GLU:HG3	0.64	2.26	20	18
1:A:180:ALA:HB3	1:A:183:SER:CB	0.64	2.22	19	1
1:A:197:THR:O	1:A:198:ILE:HD12	0.64	1.92	1	10
1:A:202:ASN:CB	1:A:235:CYS:CA	0.64	2.76	4	20
1:A:177:VAL:HG11	1:A:190:PHE:CZ	0.64	2.27	17	2
1:A:179:LEU:C	1:A:179:LEU:CD1	0.64	2.64	8	19
1:A:181:THR:OG1	1:A:245:PHE:CE1	0.64	2.50	14	4
1:A:228:LEU:HD12	1:A:228:LEU:O	0.64	1.93	9	8
1:A:164:LEU:O	1:A:190:PHE:CE1	0.64	2.51	15	5
1:A:241:ILE:HG21	1:A:246:TRP:CG	0.64	2.27	11	2
1:A:180:ALA:HB3	1:A:183:SER:HB3	0.64	1.70	19	1
1:A:166:ILE:CD1	1:A:166:ILE:N	0.63	2.61	11	3
1:A:165:HIS:CD2	1:A:190:PHE:CD2	0.63	2.87	15	2

Continued on next page...



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:245:PHE:CD1	1:A:245:PHE:C	0.63	2.70	4	2
1:A:167:SER:HB2	1:A:188:ASP:CB	0.63	2.24	8	20
1:A:245:PHE:CD2	1:A:246:TRP:NE1	0.63	2.66	2	9
1:A:200:GLN:NE2	1:A:202:ASN:OD1	0.63	2.32	4	5
1:A:201:PHE:CE1	1:A:202:ASN:O	0.63	2.51	4	14
1:A:164:LEU:CD1	1:A:166:ILE:CD1	0.63	2.76	13	18
1:A:199:TYR:CD1	1:A:199:TYR:N	0.63	2.66	8	17
1:A:163:LEU:HD21	1:A:249:LEU:HD22	0.62	1.70	4	4
1:A:202:ASN:HB2	1:A:234:PHE:O	0.62	1.94	18	20
1:A:245:PHE:C	1:A:245:PHE:CD1	0.62	2.71	11	15
1:A:199:TYR:N	1:A:199:TYR:CD1	0.62	2.67	4	1
1:A:181:THR:HG23	1:A:249:LEU:HB3	0.62	1.71	19	1
1:A:232:GLU:HG3	1:A:234:PHE:CE2	0.62	2.29	1	1
1:A:218:ALA:HA	1:A:221:ILE:HG12	0.62	1.72	16	5
1:A:201:PHE:CZ	1:A:240:ASP:HB2	0.62	2.30	4	12
1:A:232:GLU:CG	1:A:232:GLU:O	0.62	2.48	14	2
1:A:201:PHE:CZ	1:A:202:ASN:O	0.62	2.53	11	2
1:A:188:ASP:O	1:A:203:GLY:N	0.62	2.33	3	13
1:A:207:SER:O	1:A:211:LYS:HB2	0.62	1.95	17	9
1:A:165:HIS:CE1	1:A:167:SER:OG	0.62	2.53	14	17
1:A:189:CYS:SG	1:A:202:ASN:OD1	0.61	2.58	9	2
1:A:163:LEU:HD23	1:A:178:PRO:C	0.61	2.16	5	1
1:A:204:SER:H	1:A:237:THR:HG23	0.61	1.54	19	1
1:A:191:LEU:CD1	1:A:198:ILE:CG2	0.61	2.78	1	16
1:A:228:LEU:N	1:A:229:PRO:CD	0.61	2.64	10	20
1:A:165:HIS:HB2	1:A:177:VAL:HG11	0.61	1.71	19	7
1:A:187:GLY:HA2	1:A:205:LYS:CB	0.61	2.26	15	12
1:A:192:LEU:HD22	1:A:249:LEU:CB	0.61	2.26	8	1
1:A:167:SER:O	1:A:173:LYS:O	0.61	2.18	10	20
1:A:181:THR:OG1	1:A:245:PHE:CZ	0.61	2.54	16	4
1:A:205:LYS:CG	1:A:237:THR:CG2	0.61	2.79	11	4
1:A:166:ILE:HB	1:A:189:CYS:O	0.60	1.96	11	19
1:A:192:LEU:HD22	1:A:249:LEU:HB3	0.60	1.72	5	3
1:A:241:ILE:HB	1:A:246:TRP:NE1	0.60	2.11	4	2
1:A:185:ASN:OD1	1:A:190:PHE:CE1	0.60	2.54	3	4
1:A:207:SER:N	1:A:208:PRO:CD	0.60	2.64	16	7
1:A:166:ILE:N	1:A:166:ILE:CD1	0.60	2.65	9	16
1:A:181:THR:CG2	1:A:250:GLY:CA	0.60	2.79	20	8
1:A:191:LEU:CD1	1:A:198:ILE:HG23	0.60	2.25	5	16
1:A:189:CYS:HB3	1:A:202:ASN:OD1	0.60	1.96	7	7
1:A:189:CYS:SG	1:A:202:ASN:CG	0.60	2.80	11	17

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:241:ILE:HD13	1:A:246:TRP:CZ2	0.60	2.32	4	2
1:A:200:GLN:HB3	1:A:233:VAL:HG22	0.60	1.74	15	1
1:A:218:ALA:HA	1:A:221:ILE:HD12	0.60	1.72	1	1
1:A:200:GLN:NE2	1:A:214:ALA:HB1	0.60	2.12	8	11
1:A:163:LEU:N	1:A:163:LEU:CD2	0.60	2.65	14	6
1:A:179:LEU:CD2	1:A:190:PHE:CE1	0.60	2.85	15	1
1:A:190:PHE:O	1:A:201:PHE:O	0.59	2.19	18	2
1:A:204:SER:CA	1:A:235:CYS:O	0.59	2.49	7	7
1:A:184:LEU:CD2	1:A:246:TRP:CH2	0.59	2.85	12	1
1:A:179:LEU:O	1:A:249:LEU:HD13	0.59	1.97	15	2
1:A:166:ILE:HG13	1:A:214:ALA:HB2	0.59	1.73	8	3
1:A:187:GLY:O	1:A:206:SER:N	0.59	2.35	20	13
1:A:164:LEU:HD22	1:A:175:ALA:O	0.59	1.98	10	13
1:A:164:LEU:HD22	1:A:175:ALA:C	0.59	2.17	15	9
1:A:207:SER:CB	1:A:208:PRO:HD2	0.59	2.27	18	13
1:A:163:LEU:HD22	1:A:179:LEU:HA	0.59	1.74	13	2
1:A:240:ASP:O	1:A:241:ILE:HG13	0.59	1.97	9	2
1:A:184:LEU:CD1	1:A:190:PHE:CD2	0.59	2.85	16	1
1:A:166:ILE:HG22	1:A:210:GLU:HA	0.59	1.74	3	3
1:A:164:LEU:O	1:A:190:PHE:CE2	0.59	2.56	18	4
1:A:192:LEU:HD12	1:A:193:ASP:N	0.59	2.11	16	12
1:A:180:ALA:O	1:A:181:THR:CB	0.59	2.50	8	10
1:A:165:HIS:NE2	1:A:185:ASN:ND2	0.59	2.51	8	12
1:A:165:HIS:CE1	1:A:185:ASN:OD1	0.59	2.56	12	1
1:A:189:CYS:HB2	1:A:210:GLU:HB2	0.58	1.73	17	7
1:A:174:VAL:HG11	1:A:213:LYS:HG3	0.58	1.75	16	11
1:A:184:LEU:HD13	1:A:246:TRP:CZ3	0.58	2.34	11	2
1:A:192:LEU:HD23	1:A:249:LEU:HD23	0.58	1.72	7	1
1:A:180:ALA:O	1:A:181:THR:CG2	0.58	2.50	11	1
1:A:163:LEU:O	1:A:177:VAL:CB	0.58	2.51	6	4
1:A:200:GLN:HE21	1:A:214:ALA:HB1	0.58	1.58	7	7
1:A:163:LEU:CB	1:A:178:PRO:O	0.58	2.51	14	10
1:A:179:LEU:HD12	1:A:180:ALA:CA	0.58	2.27	19	14
1:A:245:PHE:CE2	1:A:246:TRP:CE2	0.58	2.92	20	8
1:A:164:LEU:HD22	1:A:176:GLU:HA	0.58	1.75	12	17
1:A:189:CYS:SG	1:A:202:ASN:HB3	0.58	2.39	4	8
1:A:163:LEU:HB2	1:A:177:VAL:HG22	0.58	1.74	5	1
1:A:179:LEU:O	1:A:249:LEU:CD1	0.58	2.52	15	2
1:A:180:ALA:H	1:A:249:LEU:HD13	0.58	1.57	11	2
1:A:202:ASN:HB3	1:A:235:CYS:HA	0.58	1.76	18	2
1:A:163:LEU:CD2	1:A:249:LEU:HD13	0.58	2.28	15	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:204:SER:CB	1:A:235:CYS:O	0.57	2.52	13	8
1:A:237:THR:O	1:A:238:ASP:C	0.57	2.42	13	1
1:A:187:GLY:O	1:A:206:SER:CA	0.57	2.52	12	7
1:A:165:HIS:CG	1:A:190:PHE:CE2	0.57	2.92	15	2
1:A:201:PHE:CE1	1:A:240:ASP:HB2	0.57	2.35	11	5
1:A:163:LEU:O	1:A:177:VAL:CG1	0.57	2.53	6	12
1:A:174:VAL:HG21	1:A:217:VAL:HG21	0.57	1.74	12	2
1:A:164:LEU:CD2	1:A:176:GLU:HA	0.57	2.29	13	17
1:A:165:HIS:NE2	1:A:167:SER:OG	0.57	2.37	13	19
1:A:201:PHE:CZ	1:A:240:ASP:OD2	0.57	2.58	6	5
1:A:165:HIS:CD2	1:A:185:ASN:OD1	0.57	2.57	13	3
1:A:228:LEU:N	1:A:229:PRO:HD2	0.57	2.15	1	20
1:A:179:LEU:HD11	1:A:184:LEU:HD12	0.57	1.76	15	2
1:A:185:ASN:OD1	1:A:190:PHE:CD1	0.56	2.58	13	4
1:A:201:PHE:CE2	1:A:241:ILE:HD11	0.56	2.35	4	1
1:A:210:GLU:O	1:A:214:ALA:CB	0.56	2.54	1	3
1:A:243:ALA:O	1:A:247:LYS:CB	0.56	2.54	20	15
1:A:238:ASP:CG	1:A:239:SER:N	0.56	2.59	13	1
1:A:179:LEU:CD2	1:A:249:LEU:CD2	0.56	2.80	18	2
1:A:163:LEU:HB3	1:A:177:VAL:CG2	0.56	2.30	9	6
1:A:181:THR:OG1	1:A:249:LEU:HG	0.56	2.01	8	3
1:A:187:GLY:O	1:A:206:SER:OG	0.56	2.20	10	11
1:A:163:LEU:HD13	1:A:249:LEU:HD22	0.56	1.78	3	2
1:A:163:LEU:O	1:A:177:VAL:CG2	0.56	2.54	16	2
1:A:163:LEU:CD2	1:A:163:LEU:N	0.56	2.69	1	7
1:A:176:GLU:C	1:A:177:VAL:CG1	0.56	2.74	1	9
1:A:202:ASN:CB	1:A:235:CYS:HA	0.56	2.31	11	20
1:A:180:ALA:O	1:A:181:THR:OG1	0.56	2.21	11	1
1:A:166:ILE:HG23	1:A:213:LYS:HB3	0.56	1.78	16	1
1:A:165:HIS:CE1	1:A:185:ASN:CG	0.56	2.79	1	2
1:A:200:GLN:CD	1:A:214:ALA:HB1	0.56	2.21	16	1
1:A:165:HIS:CB	1:A:177:VAL:HG11	0.56	2.30	19	5
1:A:162:ARG:C	1:A:163:LEU:HD13	0.56	2.21	5	1
1:A:166:ILE:HG21	1:A:214:ALA:N	0.56	2.16	17	6
1:A:196:LEU:O	1:A:229:PRO:CB	0.55	2.54	1	19
1:A:167:SER:HA	1:A:210:GLU:HB3	0.55	1.78	20	6
1:A:241:ILE:CG1	1:A:246:TRP:CZ2	0.55	2.90	4	2
1:A:201:PHE:HA	1:A:234:PHE:CE1	0.55	2.36	18	6
1:A:174:VAL:HG12	1:A:213:LYS:HG2	0.55	1.77	1	1
1:A:176:GLU:C	1:A:177:VAL:HG12	0.55	2.22	1	11
1:A:189:CYS:SG	1:A:202:ASN:CB	0.55	2.95	4	12

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:217:VAL:CG1	1:A:221:ILE:HD11	0.55	2.31	2	3
1:A:187:GLY:CA	1:A:205:LYS:CD	0.55	2.85	3	1
1:A:197:THR:O	1:A:198:ILE:CD1	0.55	2.55	17	11
1:A:165:HIS:NE2	1:A:185:ASN:OD1	0.55	2.40	5	6
1:A:241:ILE:CB	1:A:246:TRP:CE2	0.55	2.90	4	2
1:A:217:VAL:O	1:A:221:ILE:HD12	0.55	2.02	8	2
1:A:164:LEU:O	1:A:190:PHE:CD1	0.54	2.60	19	5
1:A:163:LEU:CG	1:A:178:PRO:O	0.54	2.55	5	1
1:A:202:ASN:C	1:A:235:CYS:SG	0.54	2.86	18	10
1:A:166:ILE:HG22	1:A:210:GLU:CA	0.54	2.33	3	1
1:A:166:ILE:CG2	1:A:214:ALA:HB2	0.54	2.30	17	6
1:A:226:LYS:CD	1:A:226:LYS:N	0.54	2.70	4	2
1:A:199:TYR:CG	1:A:232:GLU:OE2	0.54	2.60	14	2
1:A:165:HIS:CD2	1:A:185:ASN:CG	0.54	2.80	3	2
1:A:179:LEU:HD23	1:A:190:PHE:CE2	0.54	2.37	18	1
1:A:189:CYS:HB3	1:A:202:ASN:ND2	0.54	2.18	2	2
1:A:165:HIS:CD2	1:A:185:ASN:ND2	0.54	2.76	3	1
1:A:188:ASP:N	1:A:188:ASP:OD1	0.54	2.41	6	5
1:A:163:LEU:HG	1:A:179:LEU:HA	0.54	1.77	19	7
1:A:164:LEU:O	1:A:190:PHE:CD2	0.54	2.60	11	4
1:A:174:VAL:HG11	1:A:213:LYS:CG	0.54	2.32	16	4
1:A:174:VAL:CG1	1:A:213:LYS:HD2	0.54	2.33	5	2
1:A:239:SER:O	1:A:241:ILE:CD1	0.54	2.53	9	2
1:A:179:LEU:CD1	1:A:180:ALA:O	0.54	2.56	11	1
1:A:166:ILE:HG21	1:A:214:ALA:CA	0.54	2.33	17	3
1:A:240:ASP:OD1	1:A:241:ILE:CD1	0.54	2.56	17	12
1:A:241:ILE:HG12	1:A:246:TRP:CZ2	0.54	2.37	4	2
1:A:180:ALA:O	1:A:249:LEU:CD2	0.54	2.54	17	2
1:A:221:ILE:N	1:A:221:ILE:HD13	0.54	2.18	16	2
1:A:226:LYS:N	1:A:226:LYS:CD	0.54	2.70	2	8
1:A:242:PRO:HD2	1:A:246:TRP:HE1	0.54	1.63	18	18
1:A:193:ASP:OD1	1:A:198:ILE:CD1	0.54	2.56	2	1
1:A:199:TYR:CZ	1:A:244:GLU:OE2	0.54	2.61	2	2
1:A:167:SER:HB3	1:A:188:ASP:HB2	0.54	1.79	3	18
1:A:201:PHE:C	1:A:201:PHE:CD1	0.54	2.78	15	7
1:A:201:PHE:O	1:A:201:PHE:CG	0.54	2.61	4	12
1:A:223:ALA:O	1:A:226:LYS:CE	0.54	2.56	3	1
1:A:241:ILE:CG1	1:A:245:PHE:CE2	0.54	2.91	4	2
1:A:166:ILE:HG13	1:A:214:ALA:CB	0.54	2.33	8	5
1:A:197:THR:HG22	1:A:198:ILE:N	0.54	2.18	15	16
1:A:206:SER:CB	1:A:210:GLU:OE2	0.54	2.56	17	2

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:244:GLU:HG3	1:A:245:PHE:N	0.53	2.19	7	4
1:A:192:LEU:HD23	1:A:245:PHE:CD1	0.53	2.37	5	5
1:A:202:ASN:CB	1:A:235:CYS:SG	0.53	2.96	18	9
1:A:165:HIS:HB2	1:A:190:PHE:CE2	0.53	2.38	4	2
1:A:201:PHE:CG	1:A:201:PHE:O	0.53	2.60	1	2
1:A:246:TRP:O	1:A:250:GLY:CA	0.53	2.56	7	6
1:A:163:LEU:HB2	1:A:177:VAL:HG12	0.53	1.79	3	2
1:A:199:TYR:CE2	1:A:244:GLU:CD	0.53	2.81	3	1
1:A:164:LEU:HD22	1:A:166:ILE:CD1	0.53	2.33	16	2
1:A:181:THR:HG22	1:A:246:TRP:CE3	0.53	2.39	15	5
1:A:249:LEU:CD1	1:A:249:LEU:C	0.53	2.77	9	1
1:A:184:LEU:HD11	1:A:190:PHE:CG	0.53	2.38	16	2
1:A:179:LEU:HD23	1:A:190:PHE:CE1	0.53	2.38	15	1
1:A:232:GLU:N	1:A:232:GLU:CD	0.53	2.61	2	18
1:A:165:HIS:CD2	1:A:190:PHE:CE2	0.53	2.97	15	2
1:A:187:GLY:HA2	1:A:205:LYS:C	0.53	2.24	7	5
1:A:228:LEU:HD12	1:A:228:LEU:C	0.53	2.24	17	4
1:A:181:THR:OG1	1:A:250:GLY:CA	0.53	2.57	18	1
1:A:183:SER:O	1:A:184:LEU:O	0.53	2.27	13	20
1:A:205:LYS:HG3	1:A:237:THR:CG2	0.53	2.33	11	3
1:A:201:PHE:CD2	1:A:201:PHE:O	0.53	2.61	9	1
1:A:165:HIS:C	1:A:166:ILE:CD1	0.53	2.77	11	14
1:A:238:ASP:O	1:A:240:ASP:N	0.53	2.42	16	9
1:A:193:ASP:OD1	1:A:198:ILE:CG1	0.53	2.56	15	3
1:A:206:SER:O	1:A:210:GLU:OE2	0.53	2.26	17	1
1:A:202:ASN:CB	1:A:234:PHE:O	0.53	2.56	18	9
1:A:217:VAL:O	1:A:221:ILE:CD1	0.53	2.57	8	2
1:A:165:HIS:CB	1:A:190:PHE:CE1	0.53	2.92	11	3
1:A:164:LEU:HD13	1:A:164:LEU:C	0.53	2.22	13	15
1:A:247:LYS:CG	1:A:248:LEU:N	0.53	2.72	2	1
1:A:163:LEU:HB2	1:A:177:VAL:O	0.53	2.04	15	6
1:A:218:ALA:CA	1:A:221:ILE:HG12	0.53	2.34	16	5
1:A:167:SER:HB3	1:A:188:ASP:CB	0.52	2.32	19	9
1:A:167:SER:CB	1:A:188:ASP:HB3	0.52	2.33	19	7
1:A:163:LEU:CD1	1:A:249:LEU:CD2	0.52	2.86	2	1
1:A:187:GLY:HA3	1:A:205:LYS:CD	0.52	2.34	3	1
1:A:165:HIS:CD2	1:A:190:PHE:CE1	0.52	2.97	11	3
1:A:200:GLN:HB3	1:A:233:VAL:HG12	0.52	1.81	18	2
1:A:215:ALA:O	1:A:219:ARG:CD	0.52	2.57	9	1
1:A:240:ASP:OD1	1:A:241:ILE:HD12	0.52	2.04	11	1
1:A:179:LEU:CG	1:A:249:LEU:HD22	0.52	2.34	15	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:188:ASP:HA	1:A:206:SER:OG	0.52	2.04	20	9
1:A:242:PRO:O	1:A:244:GLU:N	0.52	2.43	17	19
1:A:163:LEU:CB	1:A:177:VAL:CG2	0.52	2.87	5	2
1:A:167:SER:HB2	1:A:188:ASP:HB3	0.52	1.79	12	9
1:A:187:GLY:O	1:A:206:SER:HB3	0.52	2.05	9	6
1:A:241:ILE:HG12	1:A:245:PHE:CE2	0.52	2.40	4	1
1:A:241:ILE:CD1	1:A:246:TRP:CZ2	0.52	2.92	4	2
1:A:207:SER:O	1:A:211:LYS:HG3	0.52	2.04	17	1
1:A:207:SER:O	1:A:211:LYS:HB3	0.52	2.04	8	5
1:A:218:ALA:HA	1:A:221:ILE:CG1	0.52	2.34	5	5
1:A:165:HIS:HA	1:A:190:PHE:CD1	0.52	2.40	3	3
1:A:181:THR:N	1:A:249:LEU:HD11	0.52	2.20	12	7
1:A:165:HIS:CB	1:A:190:PHE:CE2	0.52	2.93	4	2
1:A:187:GLY:CA	1:A:205:LYS:HD2	0.52	2.34	3	1
1:A:240:ASP:CB	1:A:241:ILE:HD12	0.52	2.35	4	1
1:A:176:GLU:OE1	1:A:177:VAL:N	0.52	2.42	14	1
1:A:165:HIS:CD2	1:A:166:ILE:N	0.52	2.77	18	9
1:A:241:ILE:CG2	1:A:246:TRP:CD2	0.52	2.84	4	5
1:A:163:LEU:HB3	1:A:177:VAL:CG1	0.52	2.28	17	3
1:A:192:LEU:CD2	1:A:249:LEU:CB	0.51	2.88	8	1
1:A:163:LEU:O	1:A:177:VAL:N	0.51	2.43	5	13
1:A:191:LEU:HA	1:A:200:GLN:HA	0.51	1.82	15	10
1:A:206:SER:OG	1:A:210:GLU:OE1	0.51	2.29	10	6
1:A:243:ALA:O	1:A:247:LYS:CG	0.51	2.59	2	2
1:A:163:LEU:HD13	1:A:179:LEU:HA	0.51	1.80	13	2
1:A:202:ASN:CB	1:A:235:CYS:N	0.51	2.73	4	8
1:A:209:GLN:OE1	1:A:209:GLN:N	0.51	2.44	11	3
1:A:179:LEU:HD13	1:A:249:LEU:CD2	0.51	2.34	19	1
1:A:202:ASN:CB	1:A:234:PHE:C	0.51	2.79	14	16
1:A:217:VAL:HG12	1:A:221:ILE:CD1	0.51	2.36	9	2
1:A:168:GLY:O	1:A:169:ASP:C	0.51	2.49	1	20
1:A:174:VAL:CG1	1:A:213:LYS:CG	0.51	2.89	1	4
1:A:237:THR:O	1:A:240:ASP:CG	0.51	2.49	19	19
1:A:207:SER:H	1:A:208:PRO:CD	0.51	2.17	16	7
1:A:207:SER:CB	1:A:208:PRO:CD	0.51	2.89	18	13
1:A:241:ILE:HD12	1:A:241:ILE:N	0.51	2.21	19	3
1:A:165:HIS:HB2	1:A:190:PHE:CE1	0.51	2.41	11	6
1:A:188:ASP:HA	1:A:210:GLU:OE1	0.51	2.06	5	5
1:A:203:GLY:HA2	1:A:236:GLU:O	0.51	2.06	6	13
1:A:179:LEU:CD1	1:A:180:ALA:N	0.51	2.59	19	6
1:A:181:THR:CG2	1:A:250:GLY:HA3	0.50	2.35	16	10

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:163:LEU:HD12	1:A:190:PHE:HE2	0.50	1.66	20	1
1:A:225:ARG:C	1:A:226:LYS:CD	0.50	2.80	5	6
1:A:174:VAL:CG1	1:A:213:LYS:CD	0.50	2.89	5	2
1:A:236:GLU:OE2	1:A:238:ASP:O	0.50	2.30	20	13
1:A:162:ARG:CG	1:A:193:ASP:HB3	0.50	2.36	7	1
1:A:181:THR:HG23	1:A:249:LEU:HB2	0.50	1.82	19	1
1:A:240:ASP:N	1:A:240:ASP:OD1	0.50	2.45	1	2
1:A:163:LEU:CD1	1:A:179:LEU:HA	0.50	2.37	6	4
1:A:200:GLN:HE21	1:A:233:VAL:HG13	0.50	1.66	16	1
1:A:174:VAL:CG1	1:A:213:LYS:HG3	0.50	2.37	2	1
1:A:165:HIS:HB2	1:A:190:PHE:CZ	0.50	2.41	11	2
1:A:200:GLN:OE1	1:A:233:VAL:CG1	0.50	2.59	7	2
1:A:236:GLU:HG3	1:A:237:THR:N	0.50	2.21	4	17
1:A:209:GLN:N	1:A:209:GLN:CD	0.50	2.65	2	4
1:A:165:HIS:NE2	1:A:185:ASN:CG	0.50	2.65	11	8
1:A:200:GLN:HG2	1:A:202:ASN:OD1	0.50	2.07	7	1
1:A:242:PRO:HD2	1:A:246:TRP:NE1	0.50	2.22	1	13
1:A:240:ASP:OD1	1:A:241:ILE:HD11	0.50	2.06	2	5
1:A:163:LEU:O	1:A:177:VAL:O	0.50	2.30	3	6
1:A:164:LEU:CD2	1:A:175:ALA:C	0.50	2.80	15	8
1:A:167:SER:HB2	1:A:188:ASP:CG	0.50	2.28	11	18
1:A:165:HIS:CG	1:A:190:PHE:CE1	0.50	2.99	11	2
1:A:241:ILE:CG2	1:A:246:TRP:CG	0.49	2.94	11	20
1:A:164:LEU:CD1	1:A:165:HIS:N	0.49	2.65	15	9
1:A:180:ALA:C	1:A:249:LEU:HD11	0.49	2.25	14	5
1:A:179:LEU:HG	1:A:249:LEU:HD13	0.49	1.84	18	2
1:A:164:LEU:CB	1:A:191:LEU:HD23	0.49	2.37	2	1
1:A:185:ASN:ND2	1:A:185:ASN:N	0.49	2.60	2	1
1:A:192:LEU:CD2	1:A:249:LEU:HB3	0.49	2.38	8	5
1:A:179:LEU:HD21	1:A:249:LEU:HD22	0.49	1.73	18	1
1:A:241:ILE:CG2	1:A:246:TRP:CE2	0.49	2.95	4	2
1:A:163:LEU:HB2	1:A:177:VAL:CG2	0.49	2.36	5	1
1:A:236:GLU:OE2	1:A:238:ASP:OD1	0.49	2.29	11	1
1:A:205:LYS:N	1:A:237:THR:HG21	0.49	2.18	13	1
1:A:179:LEU:CD2	1:A:190:PHE:CE2	0.49	2.95	18	1
1:A:192:LEU:CD2	1:A:249:LEU:HD23	0.49	2.37	7	1
1:A:200:GLN:CD	1:A:202:ASN:OD1	0.49	2.51	20	2
1:A:245:PHE:CD1	1:A:245:PHE:O	0.49	2.66	1	5
1:A:181:THR:HG23	1:A:249:LEU:HG	0.49	1.82	1	2
1:A:202:ASN:O	1:A:234:PHE:O	0.49	2.30	1	8
1:A:196:LEU:O	1:A:229:PRO:HB2	0.49	2.08	9	16

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:179:LEU:HD12	1:A:180:ALA:H	0.49	1.61	15	1
1:A:243:ALA:O	1:A:247:LYS:HB2	0.49	2.07	17	9
1:A:174:VAL:CG1	1:A:213:LYS:HG2	0.49	2.38	16	3
1:A:187:GLY:HA3	1:A:205:LYS:HB2	0.49	1.84	17	6
1:A:199:TYR:CD2	1:A:232:GLU:HG2	0.49	2.42	2	13
1:A:197:THR:HG23	1:A:230:LYS:HB3	0.49	1.83	4	1
1:A:205:LYS:N	1:A:237:THR:HG22	0.49	2.22	4	2
1:A:209:GLN:NE2	1:A:209:GLN:HA	0.48	2.23	4	3
1:A:238:ASP:C	1:A:240:ASP:N	0.48	2.64	4	18
1:A:198:ILE:O	1:A:232:GLU:OE2	0.48	2.31	3	18
1:A:226:LYS:N	1:A:226:LYS:HD2	0.48	2.22	10	5
1:A:165:HIS:HA	1:A:190:PHE:CE1	0.48	2.43	3	2
1:A:223:ALA:O	1:A:226:LYS:NZ	0.48	2.45	3	1
1:A:217:VAL:O	1:A:221:ILE:HG12	0.48	2.08	16	5
1:A:219:ARG:NH2	1:A:222:ASP:OD2	0.48	2.46	17	1
1:A:210:GLU:O	1:A:214:ALA:HB3	0.48	2.08	17	2
1:A:246:TRP:CE3	1:A:246:TRP:HA	0.48	2.43	11	1
1:A:190:PHE:O	1:A:201:PHE:N	0.48	2.47	15	17
1:A:197:THR:O	1:A:198:ILE:CG1	0.48	2.61	17	11
1:A:179:LEU:CG	1:A:249:LEU:CD2	0.48	2.92	15	2
1:A:172:ALA:HB2	1:A:209:GLN:CB	0.48	2.34	18	1
1:A:166:ILE:O	1:A:210:GLU:HB2	0.48	2.09	13	11
1:A:231:VAL:C	1:A:232:GLU:CD	0.48	2.72	11	18
1:A:163:LEU:CD2	1:A:179:LEU:HA	0.48	2.37	13	3
1:A:181:THR:OG1	1:A:250:GLY:HA2	0.48	2.08	18	3
1:A:246:TRP:CD1	1:A:246:TRP:N	0.48	2.82	15	13
1:A:202:ASN:N	1:A:234:PHE:O	0.48	2.47	1	8
1:A:202:ASN:CA	1:A:235:CYS:HA	0.48	2.39	20	16
1:A:241:ILE:HA	1:A:246:TRP:CD1	0.48	2.43	17	3
1:A:164:LEU:HD22	1:A:166:ILE:HD11	0.48	1.86	16	1
1:A:214:ALA:O	1:A:217:VAL:N	0.48	2.47	5	3
1:A:172:ALA:CB	1:A:209:GLN:HB3	0.48	2.37	17	5
1:A:240:ASP:OD1	1:A:240:ASP:N	0.48	2.47	9	2
1:A:179:LEU:CD1	1:A:249:LEU:HD22	0.48	2.37	19	1
1:A:164:LEU:HD11	1:A:174:VAL:HG23	0.48	1.85	20	1
1:A:206:SER:OG	1:A:210:GLU:CD	0.48	2.52	20	7
1:A:164:LEU:HD11	1:A:174:VAL:CG2	0.48	2.38	20	1
1:A:162:ARG:C	1:A:163:LEU:CD2	0.47	2.81	8	5
1:A:243:ALA:O	1:A:247:LYS:HB3	0.47	2.09	10	4
1:A:209:GLN:CD	1:A:209:GLN:N	0.47	2.68	4	1
1:A:241:ILE:HG22	1:A:241:ILE:O	0.47	2.09	9	1

Continued on next page...



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:226:LYS:N	1:A:226:LYS:HD3	0.47	2.23	14	1
1:A:179:LEU:HG	1:A:249:LEU:HD22	0.47	1.84	15	1
1:A:180:ALA:O	1:A:181:THR:C	0.47	2.51	15	3
1:A:189:CYS:CB	1:A:210:GLU:HG3	0.47	2.39	17	1
1:A:174:VAL:O	1:A:175:ALA:HB2	0.47	2.10	12	19
1:A:214:ALA:O	1:A:215:ALA:C	0.47	2.53	3	11
1:A:162:ARG:C	1:A:163:LEU:HD23	0.47	2.30	3	1
1:A:185:ASN:OD1	1:A:188:ASP:OD2	0.47	2.32	14	2
1:A:239:SER:O	1:A:240:ASP:C	0.47	2.52	9	3
1:A:166:ILE:O	1:A:210:GLU:CB	0.47	2.62	18	3
1:A:204:SER:HA	1:A:235:CYS:O	0.47	2.10	19	3
1:A:205:LYS:CG	1:A:237:THR:HG22	0.47	2.40	4	1
1:A:241:ILE:HB	1:A:246:TRP:CE2	0.47	2.44	4	1
1:A:161:PRO:HA	1:A:193:ASP:O	0.47	2.10	20	4
1:A:163:LEU:CD1	1:A:178:PRO:HA	0.47	2.38	18	2
1:A:163:LEU:HG	1:A:180:ALA:N	0.47	2.25	2	6
1:A:202:ASN:CA	1:A:235:CYS:SG	0.47	3.02	18	1
1:A:181:THR:CG2	1:A:249:LEU:HB2	0.47	2.39	19	1
1:A:223:ALA:O	1:A:226:LYS:HD3	0.47	2.09	8	5
1:A:232:GLU:O	1:A:232:GLU:HG2	0.47	2.10	14	2
1:A:240:ASP:HB2	1:A:241:ILE:HD12	0.47	1.86	4	1
1:A:211:LYS:O	1:A:215:ALA:CB	0.47	2.63	17	3
1:A:204:SER:HB3	1:A:237:THR:CG2	0.47	2.36	9	1
1:A:206:SER:O	1:A:210:GLU:CD	0.47	2.53	5	6
1:A:163:LEU:HD12	1:A:180:ALA:N	0.47	2.25	3	2
1:A:207:SER:H	1:A:208:PRO:HD2	0.47	1.70	17	6
1:A:163:LEU:HD11	1:A:249:LEU:CD1	0.47	2.40	8	1
1:A:188:ASP:OD1	1:A:188:ASP:N	0.47	2.48	15	3
1:A:240:ASP:O	1:A:241:ILE:CG1	0.47	2.63	9	1
1:A:174:VAL:HG11	1:A:213:LYS:HG2	0.47	1.87	11	1
1:A:166:ILE:HG22	1:A:210:GLU:CB	0.46	2.40	5	2
1:A:179:LEU:HG	1:A:249:LEU:CD1	0.46	2.40	18	1
1:A:178:PRO:O	1:A:179:LEU:C	0.46	2.52	10	8
1:A:206:SER:C	1:A:210:GLU:OE2	0.46	2.54	3	6
1:A:161:PRO:C	1:A:162:ARG:CG	0.46	2.82	11	3
1:A:204:SER:OG	1:A:235:CYS:O	0.46	2.30	16	2
1:A:184:LEU:HD22	1:A:246:TRP:CZ2	0.46	2.45	13	1
1:A:209:GLN:OE1	1:A:209:GLN:HA	0.46	2.11	18	1
1:A:236:GLU:CG	1:A:237:THR:N	0.46	2.79	4	14
1:A:165:HIS:CE1	1:A:185:ASN:ND2	0.46	2.83	10	1
1:A:191:LEU:HB2	1:A:200:GLN:HG2	0.46	1.88	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:205:LYS:CB	1:A:237:THR:HG21	0.46	2.40	20	1
1:A:240:ASP:CG	1:A:241:ILE:HD12	0.46	2.31	11	1
1:A:225:ARG:CD	1:A:229:PRO:HG3	0.46	2.41	9	5
1:A:204:SER:OG	1:A:237:THR:N	0.46	2.49	6	2
1:A:198:ILE:O	1:A:232:GLU:HG2	0.46	2.10	9	1
1:A:238:ASP:C	1:A:240:ASP:H	0.46	2.14	9	1
1:A:200:GLN:OE1	1:A:202:ASN:OD1	0.46	2.34	20	1
1:A:242:PRO:O	1:A:243:ALA:C	0.46	2.54	11	8
1:A:166:ILE:CD1	1:A:174:VAL:HG23	0.46	2.33	16	2
1:A:181:THR:HG22	1:A:246:TRP:HE3	0.46	1.71	18	1
1:A:191:LEU:O	1:A:191:LEU:HG	0.46	2.11	5	20
1:A:238:ASP:O	1:A:239:SER:C	0.46	2.54	16	9
1:A:186:SER:OG	1:A:240:ASP:OD2	0.46	2.34	13	1
1:A:210:GLU:O	1:A:211:LYS:C	0.46	2.54	17	1
1:A:232:GLU:CG	1:A:234:PHE:CE2	0.46	2.99	1	1
1:A:215:ALA:O	1:A:219:ARG:HD2	0.46	2.09	9	1
1:A:206:SER:OG	1:A:210:GLU:OE2	0.46	2.34	18	3
1:A:166:ILE:HG21	1:A:210:GLU:O	0.45	2.11	5	3
1:A:161:PRO:O	1:A:162:ARG:CG	0.45	2.64	15	1
1:A:247:LYS:O	1:A:251:GLY:C	0.45	2.55	3	4
1:A:206:SER:OG	1:A:210:GLU:CG	0.45	2.65	20	3
1:A:234:PHE:O	1:A:234:PHE:CD1	0.45	2.69	12	7
1:A:181:THR:HG23	1:A:246:TRP:CE3	0.45	2.46	17	3
1:A:204:SER:HB2	1:A:235:CYS:O	0.45	2.11	20	3
1:A:177:VAL:HG23	1:A:178:PRO:O	0.45	2.11	19	1
1:A:193:ASP:OD1	1:A:198:ILE:HG13	0.45	2.11	3	3
1:A:218:ALA:O	1:A:222:ASP:HB2	0.45	2.10	8	6
1:A:207:SER:O	1:A:211:LYS:CG	0.45	2.64	17	1
1:A:188:ASP:HA	1:A:210:GLU:HG3	0.45	1.89	9	6
1:A:212:ASN:O	1:A:213:LYS:C	0.45	2.55	13	5
1:A:222:ASP:OD1	1:A:222:ASP:O	0.45	2.35	6	1
1:A:166:ILE:O	1:A:210:GLU:HB3	0.45	2.11	1	1
1:A:191:LEU:CD1	1:A:198:ILE:HG22	0.45	2.41	12	2
1:A:246:TRP:HA	1:A:246:TRP:CE3	0.45	2.46	4	1
1:A:162:ARG:HG3	1:A:193:ASP:HB3	0.45	1.88	7	1
1:A:200:GLN:OE1	1:A:214:ALA:O	0.45	2.34	16	1
1:A:207:SER:HB2	1:A:208:PRO:CD	0.45	2.40	7	5
1:A:245:PHE:CZ	1:A:246:TRP:CZ3	0.45	3.04	11	2
1:A:199:TYR:OH	1:A:244:GLU:OE2	0.45	2.34	15	1
1:A:185:ASN:O	1:A:186:SER:C	0.45	2.55	16	2
1:A:198:ILE:C	1:A:199:TYR:CD1	0.45	2.91	15	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:181:THR:CG2	1:A:249:LEU:CB	0.45	2.91	19	1
1:A:242:PRO:HD2	1:A:246:TRP:CD1	0.45	2.47	17	2
1:A:197:THR:CG2	1:A:232:GLU:OE2	0.45	2.65	3	2
1:A:189:CYS:N	1:A:210:GLU:HG3	0.45	2.27	15	3
1:A:187:GLY:O	1:A:210:GLU:OE2	0.45	2.34	6	1
1:A:162:ARG:HG2	1:A:162:ARG:NH1	0.45	2.27	12	1
1:A:163:LEU:HD12	1:A:190:PHE:CE1	0.45	2.47	19	1
1:A:210:GLU:HG2	1:A:211:LYS:N	0.44	2.27	1	5
1:A:165:HIS:O	1:A:166:ILE:HD13	0.44	2.12	6	3
1:A:241:ILE:CG2	1:A:246:TRP:CD1	0.44	3.00	4	2
1:A:236:GLU:HG3	1:A:240:ASP:HB3	0.44	1.89	7	5
1:A:187:GLY:HA2	1:A:205:LYS:N	0.44	2.26	16	1
1:A:164:LEU:CG	1:A:191:LEU:HD23	0.44	2.41	2	1
1:A:179:LEU:HD13	1:A:249:LEU:O	0.44	2.12	4	1
1:A:184:LEU:HD13	1:A:246:TRP:HZ3	0.44	1.72	4	1
1:A:200:GLN:HB3	1:A:233:VAL:HG13	0.44	1.89	4	1
1:A:187:GLY:HA2	1:A:205:LYS:H	0.44	1.72	5	3
1:A:204:SER:OG	1:A:236:GLU:C	0.44	2.56	6	2
1:A:165:HIS:NE2	1:A:167:SER:CB	0.44	2.81	9	4
1:A:240:ASP:OD1	1:A:240:ASP:C	0.44	2.56	15	4
1:A:179:LEU:HD22	1:A:190:PHE:CE1	0.44	2.47	15	1
1:A:184:LEU:HD11	1:A:245:PHE:CZ	0.44	2.47	15	2
1:A:225:ARG:HB3	1:A:229:PRO:HD3	0.44	1.89	19	1
1:A:185:ASN:OD1	1:A:188:ASP:OD1	0.44	2.35	2	1
1:A:215:ALA:O	1:A:219:ARG:HB2	0.44	2.12	5	3
1:A:231:VAL:C	1:A:232:GLU:OE1	0.44	2.55	19	9
1:A:165:HIS:CD2	1:A:190:PHE:CD1	0.44	3.06	8	1
1:A:164:LEU:CD2	1:A:176:GLU:N	0.44	2.80	18	2
1:A:163:LEU:HD13	1:A:178:PRO:CA	0.44	2.41	18	2
1:A:207:SER:N	1:A:208:PRO:HD2	0.44	2.26	8	6
1:A:184:LEU:CD2	1:A:201:PHE:CD2	0.44	3.01	14	1
1:A:227:GLY:O	1:A:228:LEU:C	0.44	2.56	2	8
1:A:161:PRO:O	1:A:162:ARG:HG2	0.44	2.12	14	6
1:A:228:LEU:O	1:A:228:LEU:HD23	0.44	2.12	3	1
1:A:206:SER:CB	1:A:210:GLU:OE1	0.44	2.66	10	1
1:A:223:ALA:O	1:A:226:LYS:CD	0.44	2.66	12	1
1:A:244:GLU:O	1:A:248:LEU:HB2	0.44	2.12	17	1
1:A:189:CYS:SG	1:A:211:LYS:HA	0.44	2.52	20	1
1:A:165:HIS:C	1:A:165:HIS:CD2	0.44	2.91	18	3
1:A:180:ALA:O	1:A:249:LEU:CG	0.44	2.65	17	1
1:A:179:LEU:HB2	1:A:249:LEU:HD22	0.44	1.90	19	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:164:LEU:HG	1:A:191:LEU:HD23	0.44	1.89	2	1
1:A:186:SER:OG	1:A:237:THR:HG22	0.44	2.12	7	1
1:A:163:LEU:O	1:A:177:VAL:CA	0.43	2.66	17	4
1:A:164:LEU:HG	1:A:176:GLU:HA	0.43	1.89	3	2
1:A:181:THR:HB	1:A:249:LEU:CD1	0.43	2.41	14	2
1:A:200:GLN:O	1:A:233:VAL:HA	0.43	2.13	11	1
1:A:163:LEU:HD13	1:A:179:LEU:H	0.43	1.72	15	2
1:A:179:LEU:HG	1:A:249:LEU:CD2	0.43	2.43	15	1
1:A:218:ALA:O	1:A:222:ASP:CB	0.43	2.65	13	1
1:A:228:LEU:C	1:A:228:LEU:CD1	0.43	2.86	17	1
1:A:236:GLU:HG2	1:A:240:ASP:HB3	0.43	1.90	19	1
1:A:245:PHE:CE1	1:A:249:LEU:HG	0.43	2.48	19	1
1:A:180:ALA:O	1:A:184:LEU:HD12	0.43	2.12	1	1
1:A:201:PHE:CD1	1:A:201:PHE:C	0.43	2.87	1	3
1:A:164:LEU:HB3	1:A:191:LEU:HD23	0.43	1.90	2	1
1:A:188:ASP:HA	1:A:210:GLU:CD	0.43	2.33	7	4
1:A:237:THR:O	1:A:240:ASP:OD1	0.43	2.35	10	4
1:A:200:GLN:NE2	1:A:202:ASN:HD21	0.43	2.11	7	1
1:A:163:LEU:CD2	1:A:192:LEU:HB2	0.43	2.43	3	1
1:A:197:THR:O	1:A:198:ILE:HG13	0.43	2.13	3	12
1:A:163:LEU:O	1:A:177:VAL:HB	0.43	2.13	10	2
1:A:189:CYS:HB3	1:A:202:ASN:CG	0.43	2.32	18	4
1:A:243:ALA:O	1:A:247:LYS:HG2	0.43	2.13	2	1
1:A:233:VAL:O	1:A:233:VAL:HG23	0.43	2.13	6	1
1:A:163:LEU:HD11	1:A:249:LEU:HD13	0.43	1.91	8	1
1:A:184:LEU:HD13	1:A:246:TRP:HH2	0.43	1.65	11	1
1:A:166:ILE:CB	1:A:189:CYS:O	0.43	2.67	1	1
1:A:163:LEU:C	1:A:177:VAL:HG12	0.43	2.34	6	1
1:A:176:GLU:CG	1:A:177:VAL:N	0.43	2.82	3	3
1:A:189:CYS:CB	1:A:214:ALA:CB	0.43	2.96	4	1
1:A:202:ASN:HB2	1:A:235:CYS:CA	0.43	2.42	9	1
1:A:169:ASP:N	1:A:169:ASP:OD1	0.43	2.51	15	2
1:A:237:THR:O	1:A:240:ASP:CB	0.43	2.67	1	4
1:A:168:GLY:O	1:A:171:ASN:C	0.43	2.57	12	2
1:A:224:GLU:O	1:A:226:LYS:HD2	0.43	2.13	6	1
1:A:225:ARG:HD3	1:A:229:PRO:HG3	0.43	1.90	10	1
1:A:243:ALA:O	1:A:247:LYS:HG3	0.43	2.14	3	2
1:A:192:LEU:HD23	1:A:245:PHE:CE1	0.43	2.49	11	3
1:A:209:GLN:N	1:A:209:GLN:OE1	0.43	2.52	14	1
1:A:172:ALA:O	1:A:173:LYS:HG2	0.43	2.14	17	1
1:A:191:LEU:HB2	1:A:200:GLN:CG	0.43	2.43	20	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:200:GLN:HG2	1:A:202:ASN:ND2	0.43	2.28	2	1
1:A:228:LEU:CB	1:A:229:PRO:HD3	0.43	2.44	13	5
1:A:188:ASP:CA	1:A:210:GLU:HG3	0.43	2.44	4	1
1:A:164:LEU:CD2	1:A:176:GLU:CA	0.43	2.96	13	1
1:A:198:ILE:CG2	1:A:231:VAL:HG13	0.43	2.44	17	1
1:A:185:ASN:O	1:A:188:ASP:OD1	0.42	2.36	2	1
1:A:194:ALA:O	1:A:195:GLY:C	0.42	2.58	16	5
1:A:236:GLU:HG3	1:A:240:ASP:CB	0.42	2.44	6	1
1:A:211:LYS:O	1:A:215:ALA:HB2	0.42	2.14	8	1
1:A:207:SER:OG	1:A:208:PRO:HD3	0.42	2.14	17	3
1:A:231:VAL:O	1:A:232:GLU:OE1	0.42	2.37	3	8
1:A:174:VAL:HG11	1:A:213:LYS:CD	0.42	2.43	5	2
1:A:201:PHE:O	1:A:201:PHE:CD2	0.42	2.72	8	1
1:A:199:TYR:CE2	1:A:232:GLU:HG3	0.42	2.49	13	1
1:A:204:SER:HB2	1:A:236:GLU:HA	0.42	1.91	20	1
1:A:225:ARG:C	1:A:226:LYS:HD3	0.42	2.34	6	4
1:A:187:GLY:C	1:A:203:GLY:O	0.42	2.56	9	1
1:A:222:ASP:O	1:A:226:LYS:HA	0.42	2.14	5	1
1:A:180:ALA:CB	1:A:183:SER:HB2	0.42	2.44	19	1
1:A:228:LEU:HB3	1:A:229:PRO:HD3	0.42	1.92	10	5
1:A:200:GLN:OE1	1:A:233:VAL:HB	0.42	2.14	7	1
1:A:210:GLU:O	1:A:214:ALA:N	0.42	2.52	17	1
1:A:246:TRP:O	1:A:251:GLY:N	0.42	2.53	7	1
1:A:208:PRO:O	1:A:212:ASN:HB2	0.42	2.14	19	1
1:A:247:LYS:HG3	1:A:248:LEU:N	0.42	2.30	2	1
1:A:167:SER:CB	1:A:188:ASP:OD2	0.42	2.68	12	1
1:A:197:THR:HG22	1:A:198:ILE:H	0.42	1.75	16	3
1:A:227:GLY:C	1:A:229:PRO:HD2	0.42	2.35	10	2
1:A:184:LEU:HD11	1:A:245:PHE:HZ	0.42	1.74	15	1
1:A:189:CYS:HB2	1:A:210:GLU:CB	0.42	2.44	17	1
1:A:176:GLU:HG3	1:A:177:VAL:N	0.42	2.30	3	2
1:A:184:LEU:CD1	1:A:249:LEU:HD21	0.42	2.45	4	1
1:A:161:PRO:C	1:A:162:ARG:HG3	0.42	2.35	11	1
1:A:245:PHE:CD1	1:A:246:TRP:N	0.42	2.88	17	1
1:A:181:THR:CG2	1:A:250:GLY:HA2	0.42	2.43	20	1
1:A:240:ASP:O	1:A:241:ILE:HD12	0.42	2.14	4	1
1:A:204:SER:N	1:A:235:CYS:O	0.42	2.53	6	1
1:A:164:LEU:CD1	1:A:166:ILE:HD12	0.42	2.45	11	1
1:A:206:SER:HB2	1:A:210:GLU:OE2	0.41	2.15	10	3
1:A:244:GLU:CG	1:A:245:PHE:N	0.41	2.83	7	1
1:A:167:SER:CB	1:A:188:ASP:HB2	0.41	2.45	10	3

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:202:ASN:CB	1:A:235:CYS:CB	0.41	2.91	9	1
1:A:245:PHE:HD1	1:A:246:TRP:CD1	0.41	2.33	10	2
1:A:184:LEU:HD22	1:A:201:PHE:CD2	0.41	2.50	14	1
1:A:180:ALA:CB	1:A:183:SER:CB	0.41	2.97	19	1
1:A:225:ARG:CB	1:A:229:PRO:HD3	0.41	2.46	19	1
1:A:204:SER:C	1:A:206:SER:H	0.41	2.18	2	1
1:A:181:THR:CA	1:A:249:LEU:HD11	0.41	2.45	13	2
1:A:179:LEU:HD11	1:A:249:LEU:HD21	0.41	1.92	15	1
1:A:166:ILE:O	1:A:167:SER:HB3	0.41	2.15	16	1
1:A:179:LEU:HD13	1:A:249:LEU:CB	0.41	2.45	19	1
1:A:188:ASP:HB3	1:A:210:GLU:OE1	0.41	2.15	3	3
1:A:163:LEU:HG	1:A:179:LEU:CA	0.41	2.46	9	1
1:A:240:ASP:C	1:A:241:ILE:HG13	0.41	2.36	13	1
1:A:247:LYS:O	1:A:251:GLY:HA3	0.41	2.15	19	1
1:A:244:GLU:OE2	1:A:244:GLU:C	0.41	2.59	7	1
1:A:180:ALA:H	1:A:249:LEU:HD11	0.41	1.76	8	1
1:A:196:LEU:HD23	1:A:196:LEU:HA	0.41	1.74	4	1
1:A:193:ASP:HA	1:A:198:ILE:HG13	0.41	1.93	14	2
1:A:180:ALA:O	1:A:183:SER:N	0.41	2.53	15	1
1:A:171:ASN:O	1:A:173:LYS:HE2	0.41	2.16	18	1
1:A:161:PRO:C	1:A:162:ARG:HG2	0.41	2.36	1	1
1:A:164:LEU:CD1	1:A:164:LEU:C	0.41	2.88	13	2
1:A:163:LEU:CB	1:A:177:VAL:CG1	0.41	2.92	6	1
1:A:185:ASN:HB2	1:A:188:ASP:OD2	0.41	2.16	6	2
1:A:166:ILE:HG13	1:A:214:ALA:CA	0.41	2.46	8	1
1:A:187:GLY:HA2	1:A:205:LYS:CA	0.41	2.46	9	2
1:A:236:GLU:CG	1:A:240:ASP:HA	0.41	2.46	9	2
1:A:238:ASP:O	1:A:239:SER:HB3	0.41	2.16	9	1
1:A:163:LEU:HB3	1:A:179:LEU:HB3	0.41	1.93	18	1
1:A:200:GLN:HB3	1:A:233:VAL:HA	0.41	1.92	2	2
1:A:245:PHE:CE2	1:A:246:TRP:NE1	0.41	2.88	2	1
1:A:213:LYS:O	1:A:216:GLU:HB3	0.41	2.16	3	1
1:A:199:TYR:CG	1:A:232:GLU:HG2	0.41	2.51	4	1
1:A:169:ASP:OD1	1:A:169:ASP:N	0.41	2.53	19	2
1:A:222:ASP:OD1	1:A:222:ASP:C	0.41	2.57	6	1
1:A:163:LEU:HD13	1:A:179:LEU:N	0.41	2.31	15	2
1:A:163:LEU:CG	1:A:179:LEU:HA	0.41	2.46	17	1
1:A:174:VAL:HG12	1:A:213:LYS:HD2	0.41	1.91	5	1
1:A:204:SER:N	1:A:236:GLU:O	0.41	2.53	9	1
1:A:179:LEU:CD1	1:A:184:LEU:HD12	0.41	2.43	15	1
1:A:218:ALA:O	1:A:219:ARG:C	0.41	2.58	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:165:HIS:C	1:A:166:ILE:HD12	0.40	2.36	11	1
1:A:168:GLY:HA3	1:A:172:ALA:HA	0.40	1.93	12	1
1:A:163:LEU:CD2	1:A:249:LEU:HB2	0.40	2.45	15	1
1:A:215:ALA:O	1:A:219:ARG:CG	0.40	2.70	15	1
1:A:247:LYS:O	1:A:251:GLY:N	0.40	2.54	19	1
1:A:209:GLN:NE2	1:A:209:GLN:CA	0.40	2.83	4	1
1:A:225:ARG:HB3	1:A:229:PRO:HG3	0.40	1.93	10	1
1:A:215:ALA:O	1:A:219:ARG:HG3	0.40	2.15	15	1
1:A:221:ILE:N	1:A:221:ILE:CD1	0.40	2.82	16	1
1:A:245:PHE:CD2	1:A:246:TRP:CD1	0.40	3.09	9	1
1:A:217:VAL:O	1:A:221:ILE:HG13	0.40	2.16	18	1
1:A:246:TRP:O	1:A:250:GLY:HA3	0.40	2.16	20	1
1:A:202:ASN:CA	1:A:234:PHE:O	0.40	2.70	1	1
1:A:216:GLU:C	1:A:216:GLU:OE1	0.40	2.59	14	1
1:A:164:LEU:HG	1:A:175:ALA:C	0.40	2.37	16	1
1:A:240:ASP:OD1	1:A:241:ILE:HG13	0.40	2.16	17	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	90/114 (79%)	70±2 (78±2%)	16±2 (18±2%)	4±1 (5±1%)	4	26
All	All	1800/2280 (79%)	1395 (78%)	317 (18%)	88 (5%)	4	26

All 10 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	168	GLY	20
1	A	184	LEU	20
1	A	243	ALA	18
1	A	181	THR	9
1	A	207	SER	7
1	A	180	ALA	6

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	240	ASP	4
1	A	239	SER	2
1	A	195	GLY	1
1	A	238	ASP	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	74/91 (81%)	47±3 (64±4%)	27±3 (36±4%)	1	8
All	All	1480/1820 (81%)	946 (64%)	534 (36%)	1	8

All 51 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	166	ILE	20
1	A	179	LEU	20
1	A	182	SER	20
1	A	188	ASP	20
1	A	192	LEU	20
1	A	204	SER	20
1	A	207	SER	20
1	A	232	GLU	20
1	A	235	CYS	20
1	A	238	ASP	20
1	A	244	GLU	20
1	A	248	LEU	20
1	A	181	THR	19
1	A	249	LEU	19
1	A	245	PHE	18
1	A	184	LEU	16
1	A	228	LEU	16
1	A	213	LYS	14
1	A	225	ARG	13
1	A	226	LYS	12
1	A	173	LYS	11

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	209	GLN	11
1	A	210	GLU	11
1	A	199	TYR	10
1	A	162	ARG	8
1	A	211	LYS	8
1	A	170	LYS	8
1	A	171	ASN	7
1	A	219	ARG	7
1	A	234	PHE	7
1	A	237	THR	7
1	A	216	GLU	7
1	A	247	LYS	7
1	A	230	LYS	7
1	A	191	LEU	6
1	A	177	VAL	6
1	A	198	ILE	5
1	A	212	ASN	4
1	A	185	ASN	4
1	A	240	ASP	4
1	A	205	LYS	3
1	A	224	GLU	3
1	A	169	ASP	3
1	A	190	PHE	3
1	A	202	ASN	2
1	A	246	TRP	2
1	A	200	GLN	2
1	A	231	VAL	1
1	A	164	LEU	1
1	A	176	GLU	1
1	A	163	LEU	1

### 6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

## 6.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains ⓘ

There are no non-standard protein/DNA/RNA residues in this entry.

## 6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

## 6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

## 6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

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

There are no chain breaks in this entry.

## 7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided