



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 27, 2016 – 05:14 AM BST

PDB ID : 2ROQ  
Title : Solution Structure of the thiolation-thioesterase di-domain of enterobactin synthetase component F  
Authors : Frueh, D.P.; Arthanari, H.; Koglin, A.; Vosburg, D.A.; Bennett, A.E.; Walsh, C.T.; Wagner, G.  
Deposited on : 2008-04-05

This is a Full wwPDB NMR Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.  
We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto:validation@mail.wwpdb.org)  
A user guide is available at  
<http://wwpdb.org/validation/2016/NMRValidationReportHelp>  
with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

---

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

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)  
NmrClust : Kelley et al. (1996)  
MolProbity : 4.02b-467  
Mogul : unknown  
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)  
RCI : v\_1n\_11\_5\_13\_A (Berjanski et al., 2005)  
PANAV : Wang et al. (2010)  
ShiftChecker : rb-20027457  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : rb-20027457

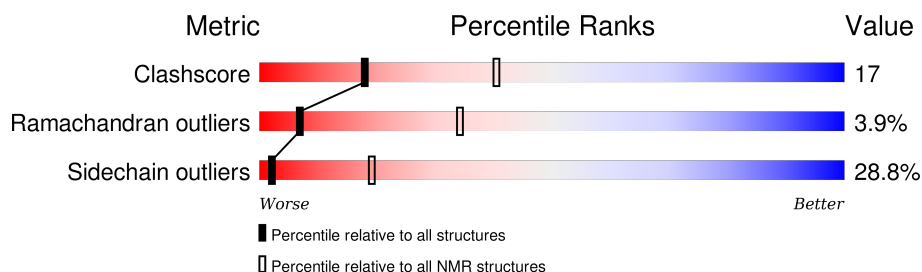
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	114402	11133
Ramachandran outliers	111179	9975
Sidechain outliers	111093	9958

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	343	

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 8 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *closest to the average*.

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:11-A:86, A:97-A:208, A:216-A:219, A:224-A:287, A:301-A:338 (294)	1.12	8

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 4 clusters and 8 single-model clusters were found.

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

### 3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 5227 atoms, of which 2585 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Enterobactin synthetase component F.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	343	Total	C	H	N	O	S	0
			5227	1670	2585	465	497	10	

There are 10 discrepancies between the modelled and reference sequences:

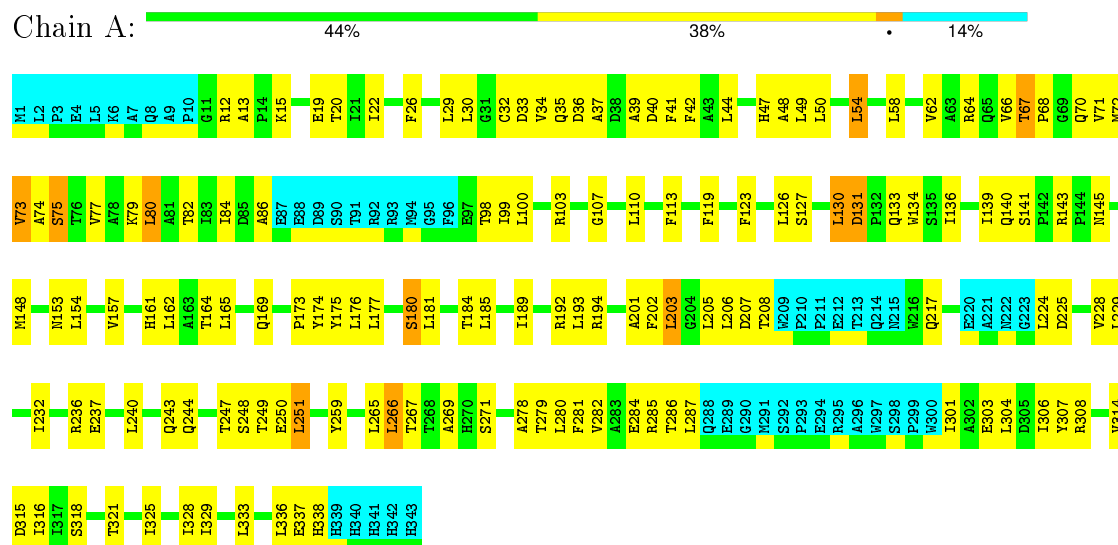
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP P11454
A	48	ALA	SER	ENGINEERED	UNP P11454
A	336	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP P11454
A	337	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP P11454
A	338	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P11454
A	339	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P11454
A	340	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P11454
A	341	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P11454
A	342	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P11454
A	343	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P11454

## 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: Enterobactin synthetase component F

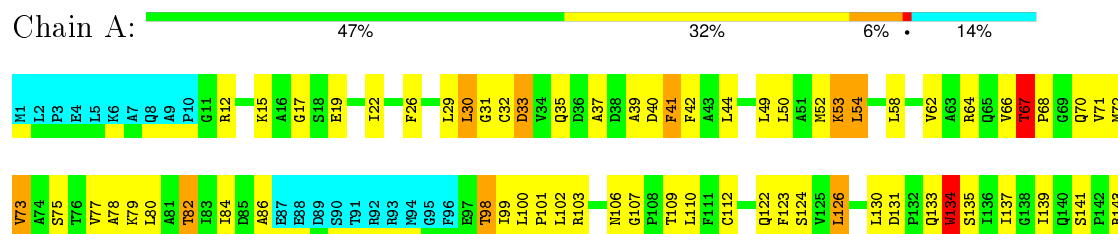


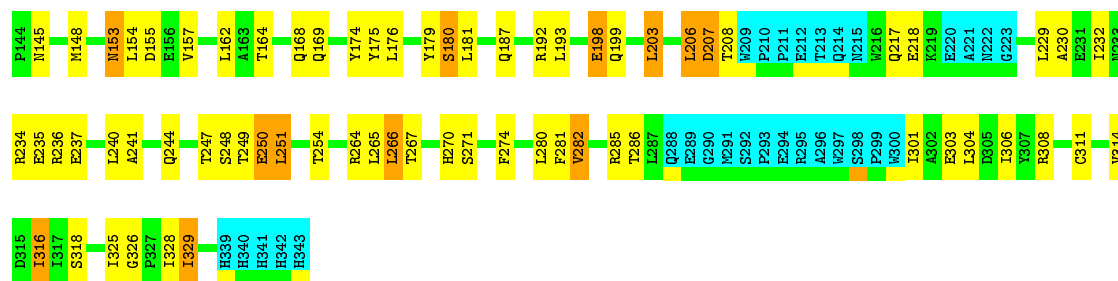
### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

#### 4.2.1 Score per residue for model 1

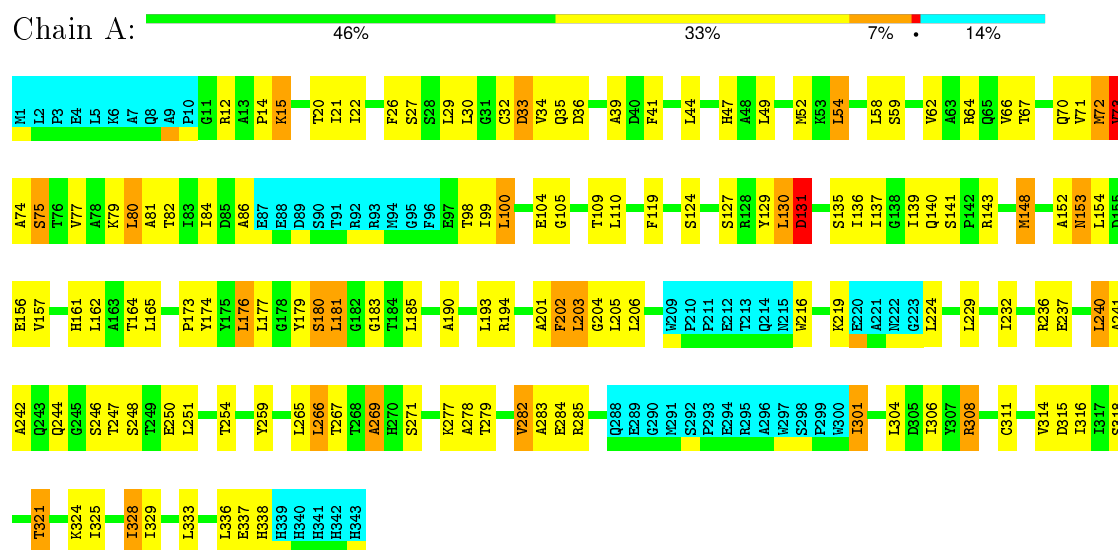
- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F





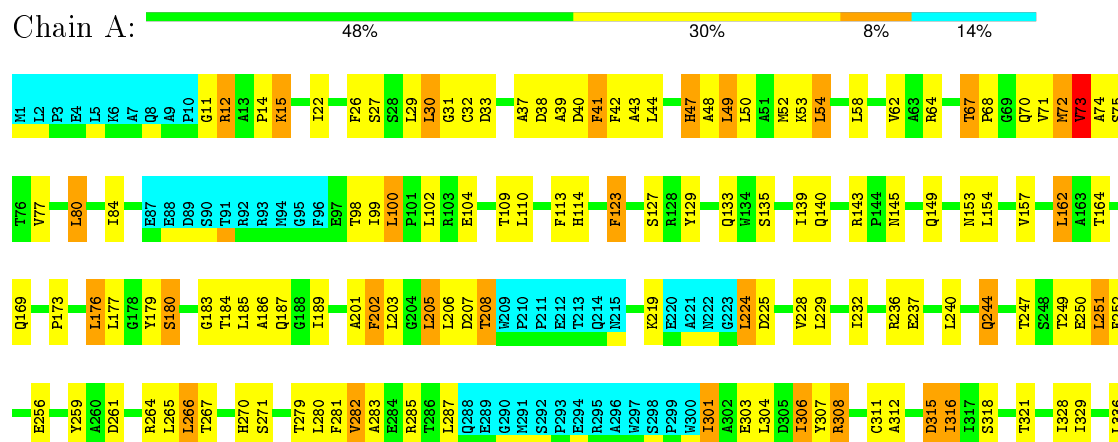
## 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F



## 4.2.3 Score per residue for model 3

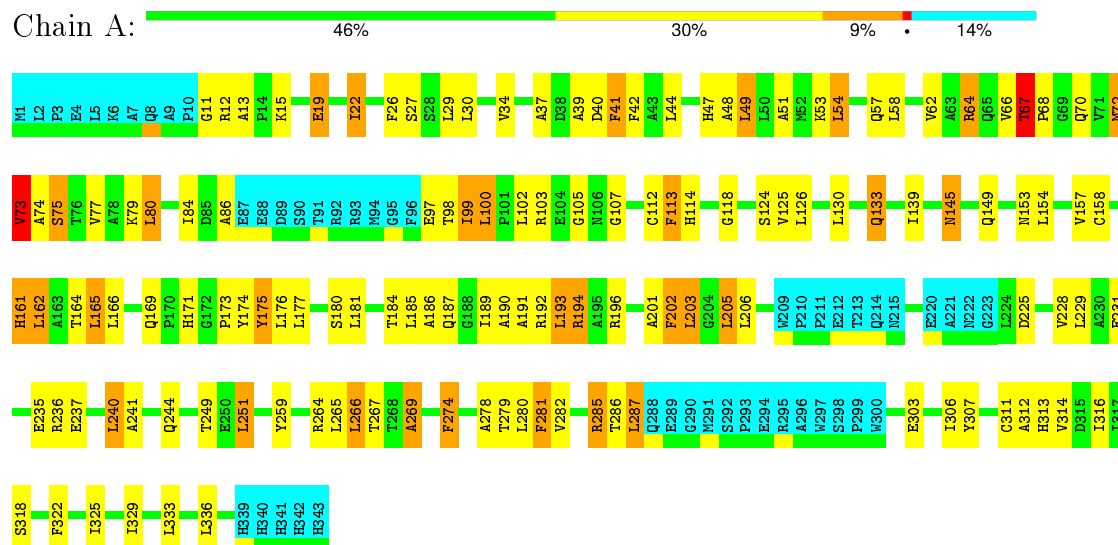
- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F



E337  
H338  
H339  
H340  
H341  
H342  
H343

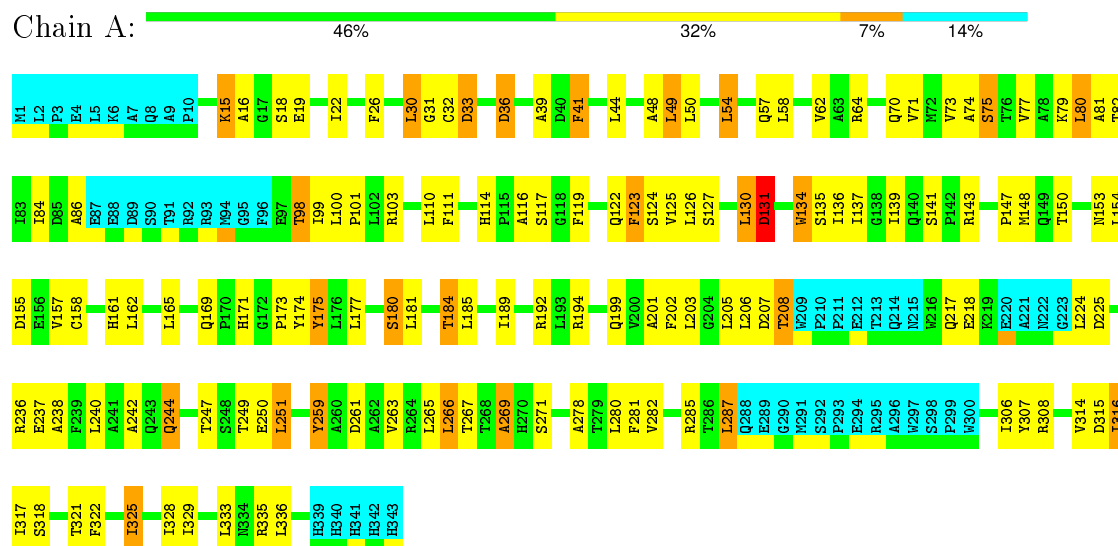
#### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F



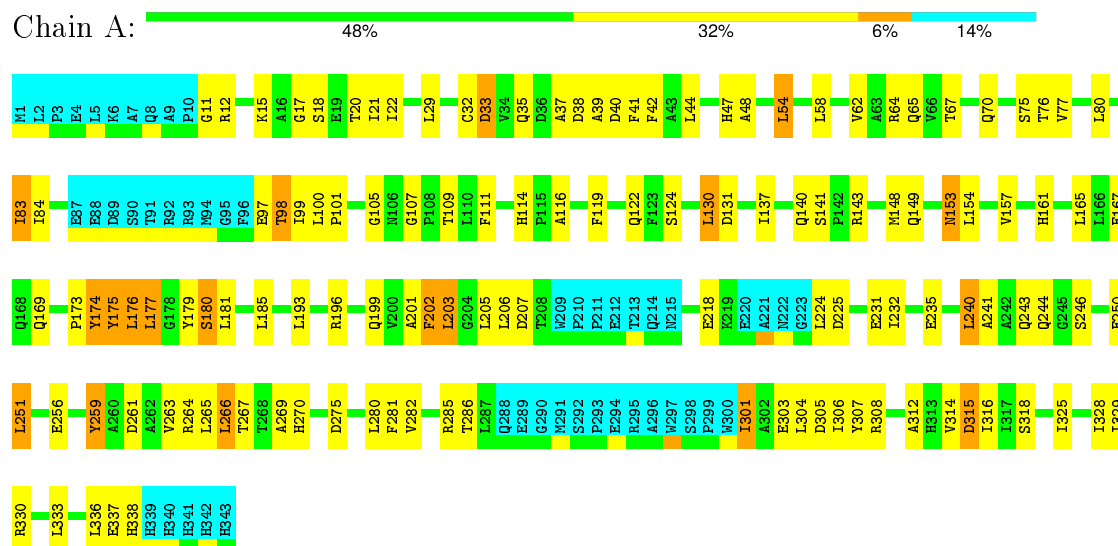
#### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F



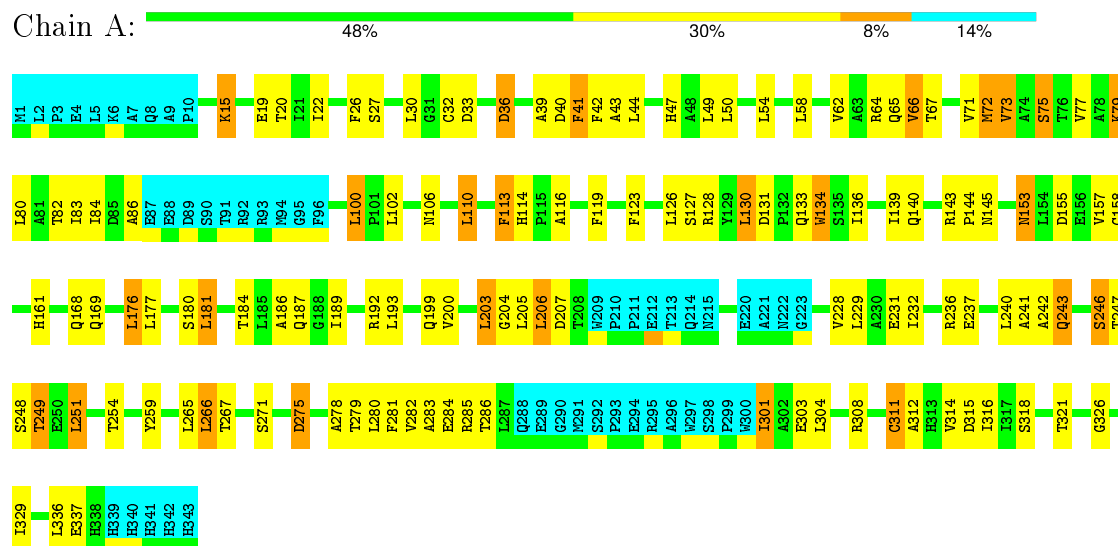
### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F



### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F

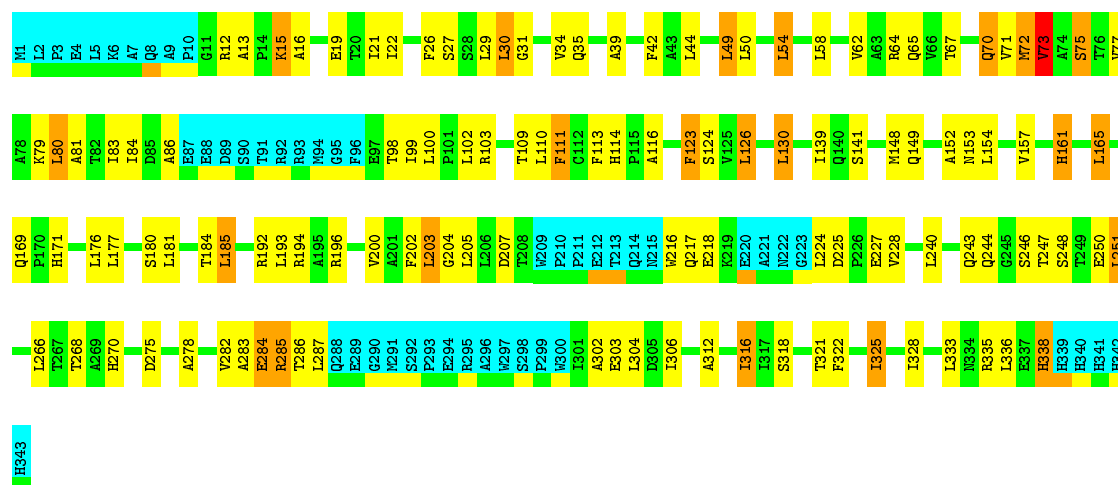


### 4.2.8 Score per residue for model 8 (medoid)

- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F

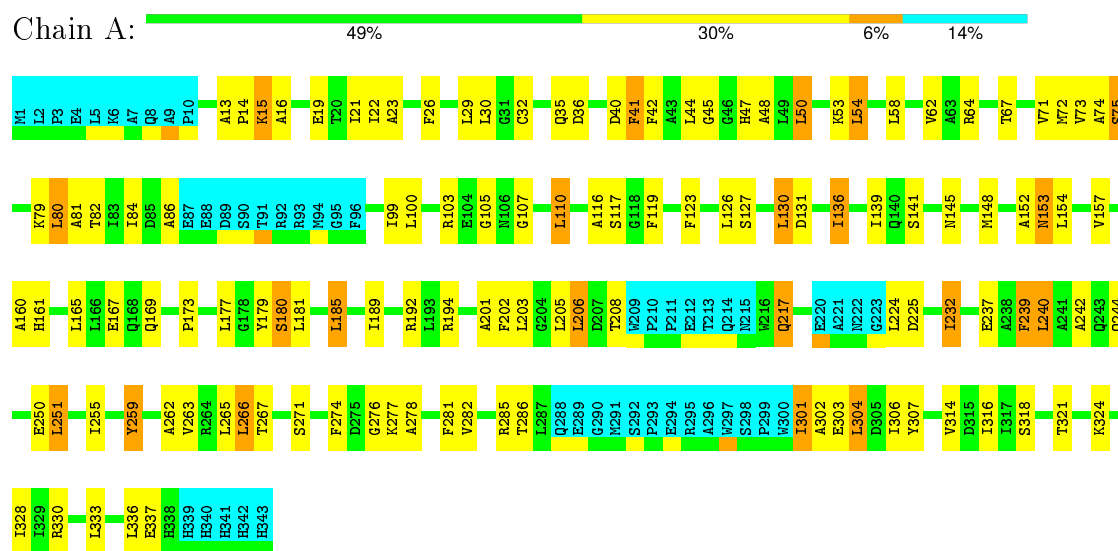






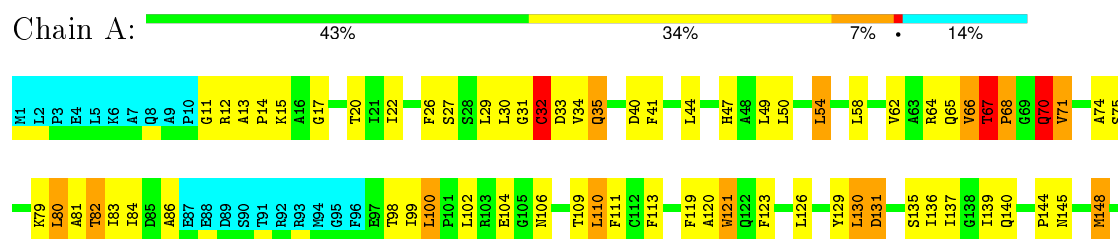
#### 4.2.9 Score per residue for model 9

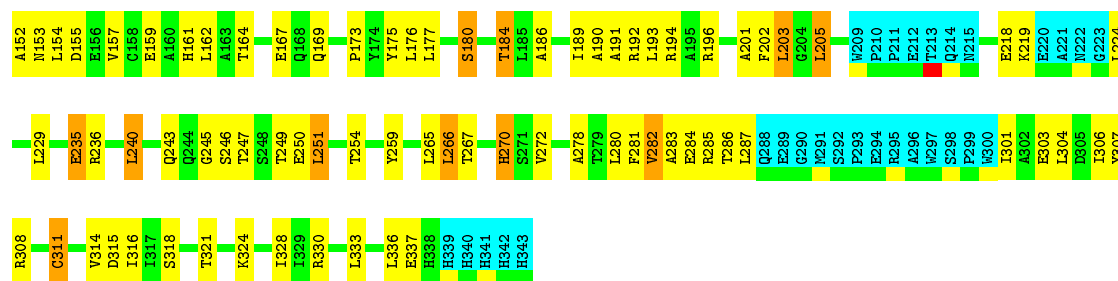
- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F



#### 4.2.10 Score per residue for model 10

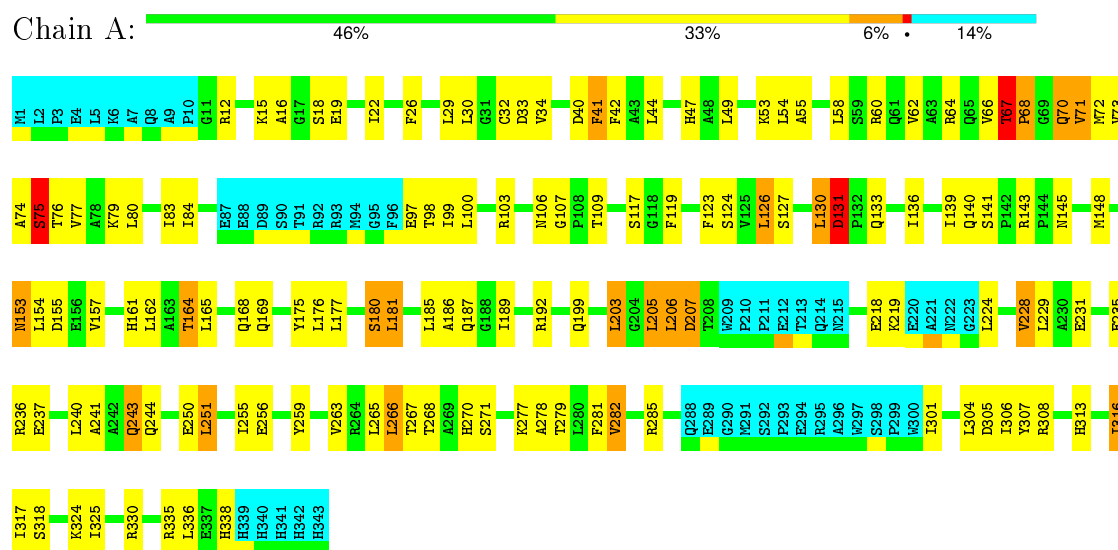
- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F





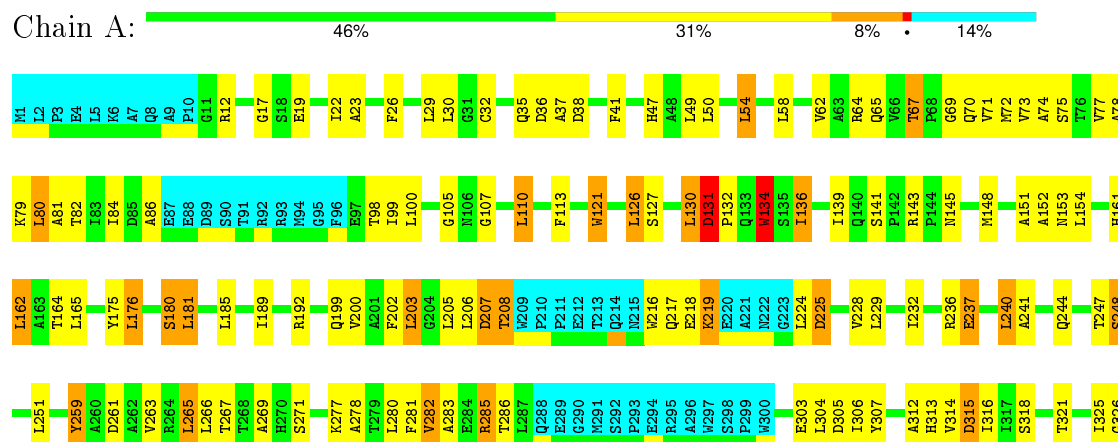
#### 4.2.11 Score per residue for model 11

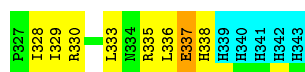
- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F



#### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F

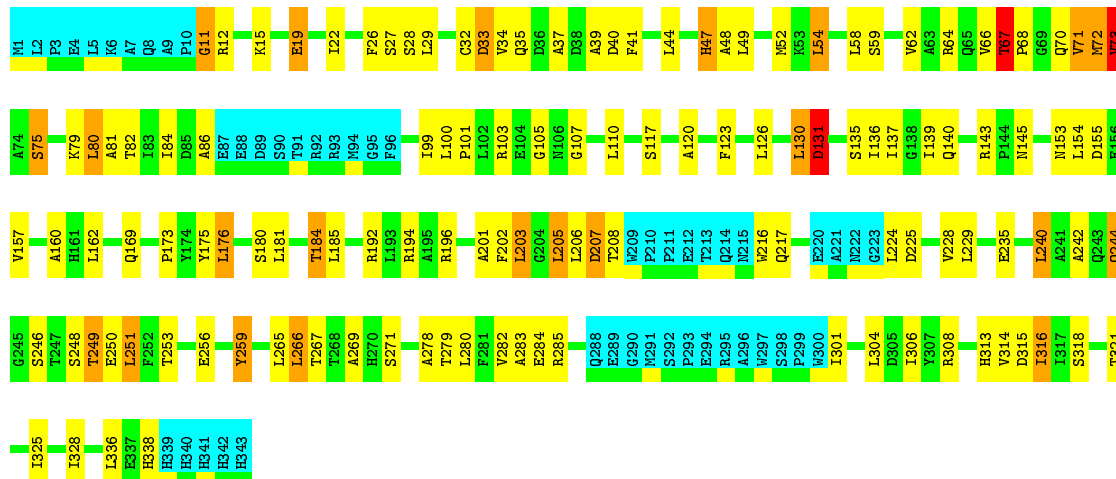




#### 4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F

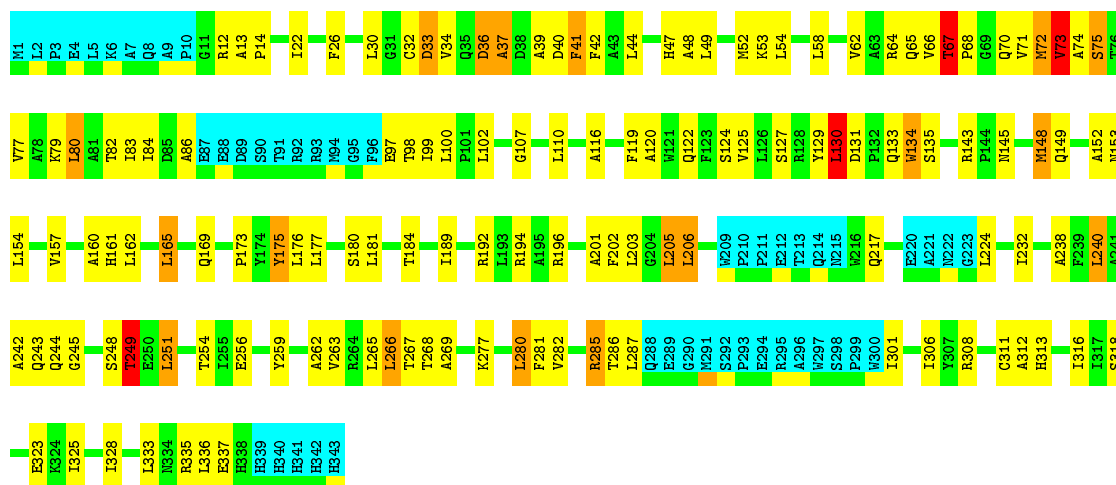
Chain A: 48% 30% 6% 14%



#### 4.2.14 Score per residue for model 14

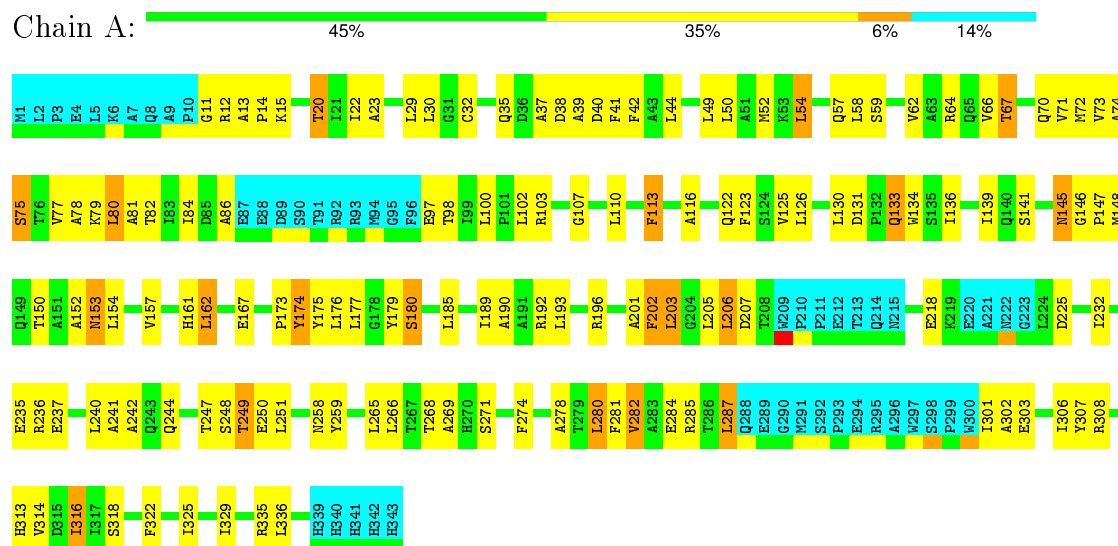
- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F

Chain A: 46% 33% 5% 14%



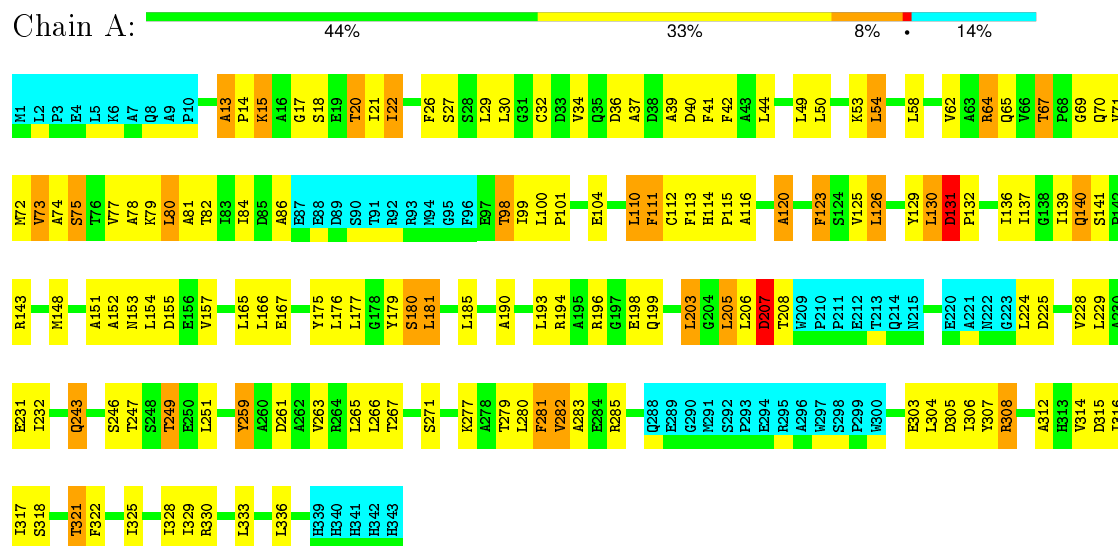
### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F



### 4.2.16 Score per residue for model 16

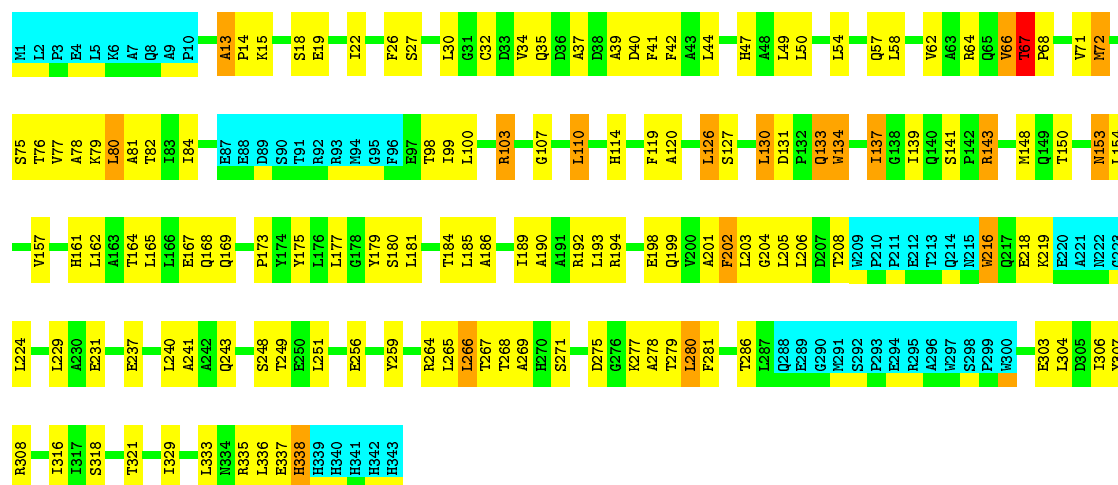
- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F



### 4.2.17 Score per residue for model 17

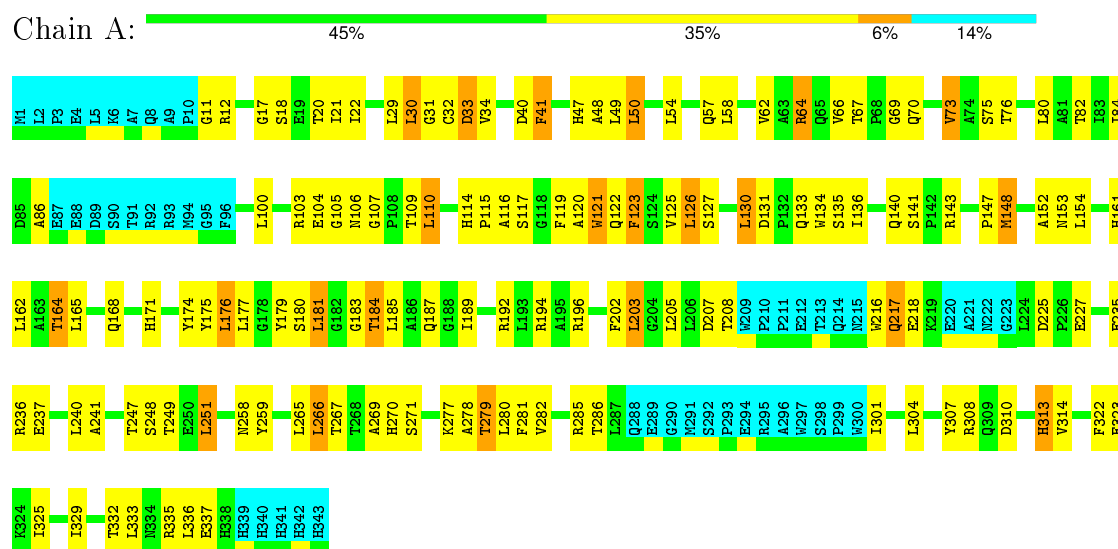
- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F





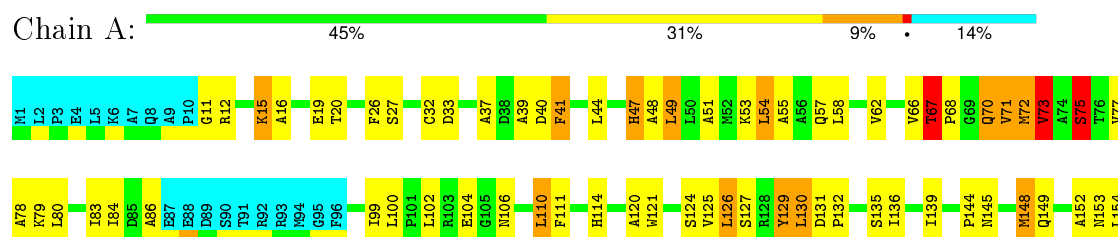
#### 4.2.18 Score per residue for model 18

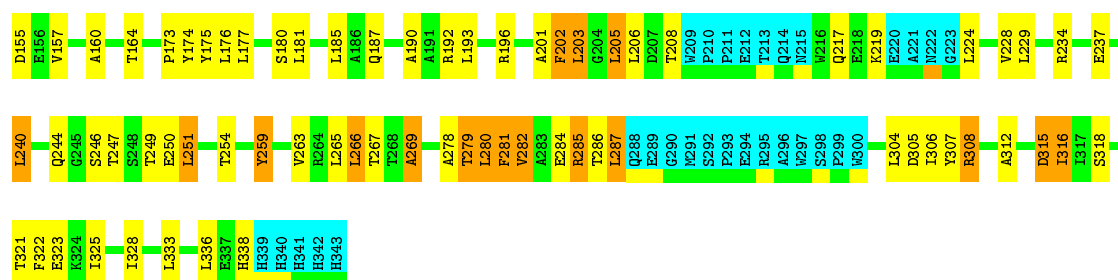
- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F



#### 4.2.19 Score per residue for model 19

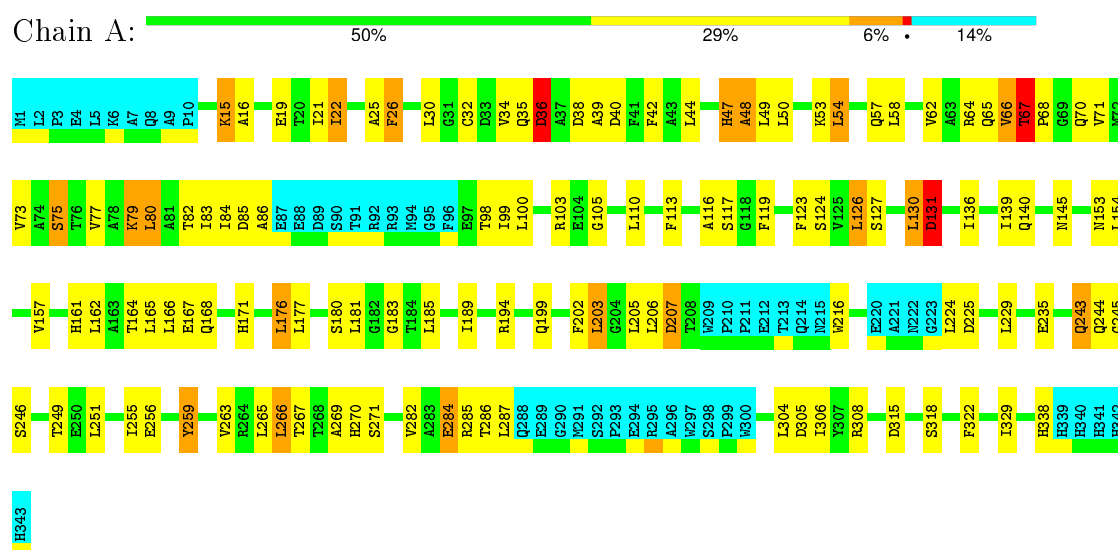
- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F





#### 4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F



## 5 Refinement protocol and experimental data overview

Of the 200 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
CYANA	structure solution	2.1
CNS	refinement	

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

## 6 Model quality ⓘ

### 6.1 Standard geometry ⓘ

There are no covalent bond-length or bond-angle outliers.

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

### 6.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	2237	2228	2228	78±9
All	All	44740	44560	44560	1556

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 17.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:VAL:HG21	1:A:84:ILE:HD12	0.99	1.29	11	1
1:A:99:ILE:HD12	1:A:139:ILE:HD12	0.99	1.30	8	4
1:A:72:MET:O	1:A:73:VAL:HG22	0.97	1.58	8	3
1:A:71:VAL:HG13	1:A:80:LEU:HD11	0.96	1.33	8	3
1:A:154:LEU:HD22	1:A:185:LEU:HD21	0.95	1.33	12	10
1:A:29:LEU:HD12	1:A:54:LEU:HD12	0.89	1.45	13	11
1:A:190:ALA:HB1	1:A:203:LEU:HD13	0.89	1.42	4	1
1:A:13:ALA:HB2	1:A:37:ALA:HB2	0.87	1.43	15	1
1:A:22:ILE:HG22	1:A:58:LEU:HD13	0.85	1.48	18	3
1:A:152:ALA:HB1	1:A:265:LEU:HD13	0.83	1.51	15	1
1:A:99:ILE:HD11	1:A:160:ALA:HB1	0.83	1.51	19	3
1:A:34:VAL:HG22	1:A:44:LEU:HD22	0.83	1.51	2	3
1:A:301:ILE:HG21	1:A:304:LEU:HD23	0.82	1.51	10	3
1:A:304:LEU:HD13	1:A:306:ILE:HG23	0.82	1.51	8	8

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:ALA:HB1	1:A:44:LEU:HD11	0.81	1.52	3	7
1:A:34:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD21	0.81	1.50	20	1
1:A:224:LEU:HD12	1:A:229:LEU:HD21	0.81	1.50	12	1
1:A:49:LEU:HD21	1:A:240:LEU:HD23	0.80	1.53	17	1
1:A:126:LEU:HD23	1:A:130:LEU:HD11	0.79	1.53	8	1
1:A:162:LEU:HD21	1:A:189:ILE:HG23	0.79	1.54	20	10
1:A:30:LEU:HD21	1:A:50:LEU:HD13	0.78	1.55	9	1
1:A:153:ASN:O	1:A:157:VAL:HG22	0.78	1.79	6	13
1:A:58:LEU:HD12	1:A:80:LEU:HD12	0.78	1.56	11	9
1:A:325:ILE:HG23	1:A:328:ILE:HD11	0.77	1.56	5	2
1:A:48:ALA:HB3	1:A:251:LEU:HD11	0.76	1.57	19	4
1:A:193:LEU:HD13	1:A:194:ARG:N	0.76	1.94	4	1
1:A:206:LEU:C	1:A:206:LEU:HD22	0.76	2.01	1	1
1:A:266:LEU:HD13	1:A:267:THR:N	0.75	1.97	9	2
1:A:39:ALA:HB1	1:A:44:LEU:HD21	0.75	1.57	16	5
1:A:193:LEU:HD22	1:A:193:LEU:O	0.74	1.82	4	1
1:A:333:LEU:HD23	1:A:336:LEU:HD21	0.73	1.59	9	8
1:A:181:LEU:HD11	1:A:266:LEU:HD23	0.73	1.61	12	3
1:A:62:VAL:HG11	1:A:84:ILE:HD12	0.73	1.61	18	14
1:A:58:LEU:O	1:A:62:VAL:HG22	0.72	1.84	4	20
1:A:266:LEU:HD22	1:A:266:LEU:O	0.72	1.84	9	1
1:A:22:ILE:HD12	1:A:58:LEU:HD13	0.72	1.59	5	6
1:A:240:LEU:C	1:A:240:LEU:HD22	0.72	2.04	9	1
1:A:123:PHE:CE2	1:A:126:LEU:HD23	0.72	2.20	13	1
1:A:206:LEU:HD13	1:A:316:ILE:HG21	0.71	1.60	2	1
1:A:26:PHE:CE2	1:A:77:VAL:HG22	0.71	2.20	19	8
1:A:325:ILE:HD12	1:A:329:ILE:HG21	0.71	1.62	6	3
1:A:66:VAL:HG23	1:A:84:ILE:HG22	0.71	1.63	17	3
1:A:82:THR:HA	1:A:86:ALA:HB3	0.71	1.63	20	1
1:A:22:ILE:HG21	1:A:77:VAL:HG13	0.70	1.63	17	4
1:A:13:ALA:HB3	1:A:14:PRO:HD3	0.70	1.64	16	2
1:A:113:PHE:CZ	1:A:189:ILE:HD12	0.70	2.21	10	1
1:A:114:HIS:CE1	1:A:120:ALA:HB3	0.70	2.22	16	1
1:A:247:THR:HG21	1:A:251:LEU:HD12	0.69	1.62	19	1
1:A:162:LEU:HD23	1:A:189:ILE:HD11	0.69	1.64	4	1
1:A:42:PHE:CZ	1:A:100:LEU:HD13	0.69	2.23	4	1
1:A:224:LEU:HD22	1:A:229:LEU:HD21	0.68	1.65	20	5
1:A:202:PHE:CG	1:A:336:LEU:HD22	0.68	2.23	19	3
1:A:301:ILE:HG21	1:A:304:LEU:HD22	0.68	1.65	9	1
1:A:176:LEU:HD12	1:A:203:LEU:HD21	0.68	1.65	13	1
1:A:126:LEU:HD12	1:A:322:PHE:CE1	0.68	2.24	20	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:70:GLN:C	1:A:74:ALA:HB2	0.68	2.10	12	8
1:A:206:LEU:HD21	1:A:316:ILE:HD13	0.68	1.65	17	2
1:A:232:ILE:HG23	1:A:314:VAL:HG12	0.67	1.65	1	1
1:A:266:LEU:O	1:A:266:LEU:HD22	0.67	1.89	19	1
1:A:99:ILE:HD13	1:A:139:ILE:HG23	0.67	1.65	2	3
1:A:263:VAL:O	1:A:266:LEU:HD22	0.67	1.90	16	2
1:A:30:LEU:HD23	1:A:50:LEU:HD12	0.67	1.64	17	2
1:A:224:LEU:N	1:A:224:LEU:HD13	0.67	2.04	3	1
1:A:202:PHE:CE2	1:A:336:LEU:HD22	0.67	2.25	13	3
1:A:206:LEU:HD23	1:A:316:ILE:HG21	0.67	1.67	12	1
1:A:266:LEU:C	1:A:266:LEU:HD22	0.67	2.08	19	1
1:A:123:PHE:CZ	1:A:126:LEU:HD22	0.67	2.25	20	2
1:A:176:LEU:HD11	1:A:203:LEU:HD23	0.67	1.64	2	2
1:A:39:ALA:HB3	1:A:77:VAL:HG23	0.66	1.66	20	4
1:A:42:PHE:CZ	1:A:100:LEU:HD11	0.66	2.25	17	7
1:A:232:ILE:HD12	1:A:259:TYR:CE1	0.66	2.25	14	1
1:A:130:LEU:HD12	1:A:134:TRP:CH2	0.66	2.26	14	2
1:A:72:MET:O	1:A:73:VAL:CG2	0.66	2.41	8	3
1:A:48:ALA:HB1	1:A:251:LEU:HD11	0.66	1.66	9	3
1:A:26:PHE:CB	1:A:34:VAL:HG11	0.66	2.21	10	1
1:A:109:THR:HG21	1:A:169:GLN:HG3	0.66	1.67	8	1
1:A:99:ILE:HD12	1:A:139:ILE:HG13	0.65	1.68	5	2
1:A:42:PHE:CE2	1:A:100:LEU:HD11	0.65	2.26	6	2
1:A:22:ILE:HD12	1:A:77:VAL:CG1	0.65	2.21	16	2
1:A:37:ALA:HB1	1:A:78:ALA:HB2	0.65	1.67	12	4
1:A:202:PHE:CG	1:A:336:LEU:HD13	0.65	2.27	3	3
1:A:206:LEU:HD11	1:A:316:ILE:HG21	0.65	1.69	14	2
1:A:130:LEU:HD21	1:A:329:ILE:HD12	0.65	1.67	4	1
1:A:126:LEU:O	1:A:130:LEU:HD22	0.65	1.92	19	1
1:A:152:ALA:CB	1:A:265:LEU:HD13	0.65	2.22	15	1
1:A:266:LEU:HD22	1:A:266:LEU:C	0.65	2.12	9	1
1:A:42:PHE:HB3	1:A:102:LEU:HD22	0.65	1.68	7	2
1:A:26:PHE:CD1	1:A:54:LEU:HD11	0.65	2.27	11	5
1:A:100:LEU:HD11	1:A:121:TRP:CE3	0.64	2.28	12	1
1:A:113:PHE:CZ	1:A:185:LEU:HD11	0.64	2.27	4	1
1:A:111:PHE:CE1	1:A:137:ILE:HD12	0.64	2.27	10	1
1:A:161:HIS:O	1:A:165:LEU:HD12	0.64	1.92	4	2
1:A:203:LEU:O	1:A:278:ALA:HB1	0.64	1.91	12	10
1:A:22:ILE:CG2	1:A:77:VAL:HG13	0.64	2.23	17	9
1:A:125:VAL:HG11	1:A:322:PHE:CE2	0.64	2.28	4	1
1:A:41:PHE:CE2	1:A:71:VAL:HG12	0.64	2.28	3	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:284:GLU:O	1:A:287:LEU:HD13	0.64	1.93	8	1
1:A:13:ALA:HB3	1:A:14:PRO:CD	0.64	2.22	16	2
1:A:22:ILE:HD12	1:A:77:VAL:HG13	0.64	1.69	4	2
1:A:110:LEU:HG	1:A:136:ILE:HG23	0.64	1.70	16	1
1:A:99:ILE:CD1	1:A:139:ILE:HG23	0.63	2.24	20	5
1:A:205:LEU:HD12	1:A:279:THR:O	0.63	1.94	19	4
1:A:30:LEU:HD23	1:A:50:LEU:HG	0.63	1.71	1	4
1:A:250:GLU:O	1:A:254:THR:HG23	0.63	1.93	1	1
1:A:143:ARG:O	1:A:254:THR:HG23	0.63	1.94	14	1
1:A:175:TYR:O	1:A:176:LEU:HD13	0.63	1.93	6	2
1:A:238:ALA:O	1:A:242:ALA:HB2	0.63	1.92	5	2
1:A:162:LEU:CD2	1:A:189:ILE:HG23	0.63	2.24	17	10
1:A:236:ARG:O	1:A:240:LEU:HD12	0.63	1.94	12	1
1:A:154:LEU:HD22	1:A:185:LEU:CD2	0.63	2.24	9	7
1:A:49:LEU:O	1:A:50:LEU:HD22	0.63	1.93	7	1
1:A:78:ALA:O	1:A:82:THR:HG23	0.63	1.93	17	2
1:A:276:GLY:O	1:A:302:ALA:HB3	0.63	1.94	9	1
1:A:126:LEU:HD12	1:A:322:PHE:CZ	0.63	2.29	8	1
1:A:217:GLN:HB2	1:A:266:LEU:HD21	0.63	1.68	5	1
1:A:326:GLY:O	1:A:329:ILE:HG22	0.62	1.92	12	3
1:A:173:PRO:HB2	1:A:201:ALA:HB2	0.62	1.71	9	9
1:A:71:VAL:HG22	1:A:80:LEU:HD11	0.62	1.72	14	3
1:A:312:ALA:HB3	1:A:315:ASP:HB2	0.62	1.68	7	6
1:A:99:ILE:HD12	1:A:139:ILE:CD1	0.62	2.24	16	3
1:A:181:LEU:HD11	1:A:266:LEU:HB3	0.62	1.70	1	4
1:A:259:TYR:OH	1:A:314:VAL:HG12	0.62	1.95	9	1
1:A:240:LEU:HD11	1:A:251:LEU:HD13	0.62	1.70	4	4
1:A:30:LEU:CD1	1:A:34:VAL:HG21	0.62	2.24	4	1
1:A:98:THR:O	1:A:99:ILE:HD13	0.62	1.95	1	8
1:A:49:LEU:HD22	1:A:244:GLN:HB2	0.62	1.72	13	1
1:A:154:LEU:HD21	1:A:181:LEU:HD13	0.62	1.69	6	1
1:A:62:VAL:HG11	1:A:84:ILE:HG21	0.62	1.70	14	3
1:A:240:LEU:HD21	1:A:251:LEU:CD1	0.61	2.25	3	8
1:A:41:PHE:HA	1:A:44:LEU:HD12	0.61	1.71	16	2
1:A:237:GLU:O	1:A:241:ALA:HB3	0.61	1.94	12	7
1:A:333:LEU:HD13	1:A:333:LEU:O	0.61	1.95	18	1
1:A:285:ARG:HD3	1:A:286:THR:HG23	0.61	1.73	14	1
1:A:224:LEU:CD1	1:A:229:LEU:HD11	0.61	2.24	16	1
1:A:22:ILE:HG13	1:A:81:ALA:HB2	0.61	1.73	2	5
1:A:39:ALA:O	1:A:77:VAL:HG23	0.61	1.96	14	1
1:A:190:ALA:HB2	1:A:203:LEU:HD13	0.61	1.72	17	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:ILE:HD12	1:A:139:ILE:CG1	0.61	2.26	1	2
1:A:49:LEU:HD11	1:A:240:LEU:HD23	0.61	1.72	11	1
1:A:237:GLU:HA	1:A:255:ILE:HG21	0.61	1.73	9	1
1:A:34:VAL:HG22	1:A:44:LEU:CD2	0.61	2.26	10	2
1:A:231:GLU:HB3	1:A:314:VAL:HG21	0.61	1.72	16	1
1:A:280:LEU:CB	1:A:306:ILE:HG22	0.61	2.26	17	1
1:A:224:LEU:CD2	1:A:263:VAL:HG13	0.61	2.26	6	1
1:A:206:LEU:HD23	1:A:316:ILE:CG2	0.61	2.26	12	1
1:A:190:ALA:HA	1:A:193:LEU:HD12	0.61	1.72	17	6
1:A:30:LEU:HD13	1:A:44:LEU:HD22	0.61	1.72	11	3
1:A:42:PHE:CB	1:A:102:LEU:HD22	0.61	2.26	7	1
1:A:99:ILE:HD12	1:A:139:ILE:HG12	0.61	1.73	17	1
1:A:22:ILE:HG22	1:A:58:LEU:CD1	0.61	2.24	18	3
1:A:275:ASP:OD2	1:A:301:ILE:HD11	0.61	1.96	7	1
1:A:123:PHE:CE1	1:A:317:ILE:HD11	0.61	2.30	5	1
1:A:280:LEU:HD23	1:A:306:ILE:HG22	0.60	1.72	16	2
1:A:30:LEU:CD2	1:A:50:LEU:HD13	0.60	2.25	9	1
1:A:113:PHE:CD1	1:A:185:LEU:HD21	0.60	2.31	4	1
1:A:49:LEU:HD11	1:A:242:ALA:HB3	0.60	1.70	2	2
1:A:66:VAL:HG12	1:A:70:GLN:OE1	0.60	1.96	11	1
1:A:205:LEU:HB2	1:A:280:LEU:HD22	0.60	1.74	15	2
1:A:176:LEU:HD23	1:A:203:LEU:HG	0.60	1.73	19	3
1:A:206:LEU:HD12	1:A:316:ILE:CD1	0.60	2.26	19	3
1:A:49:LEU:HD13	1:A:243:GLN:CB	0.60	2.27	11	2
1:A:175:TYR:OH	1:A:333:LEU:HD11	0.60	1.97	16	1
1:A:99:ILE:HD12	1:A:139:ILE:HD13	0.60	1.74	16	1
1:A:98:THR:HG23	1:A:99:ILE:HG12	0.60	1.73	4	1
1:A:29:LEU:HD21	1:A:53:LYS:HB3	0.60	1.73	1	3
1:A:193:LEU:HD22	1:A:193:LEU:C	0.60	2.16	4	1
1:A:266:LEU:HD12	1:A:267:THR:N	0.60	2.11	12	14
1:A:154:LEU:HD12	1:A:269:ALA:CB	0.60	2.27	2	8
1:A:82:THR:O	1:A:86:ALA:HB3	0.60	1.97	9	10
1:A:16:ALA:HB3	1:A:19:GLU:HB2	0.59	1.73	20	2
1:A:62:VAL:HG21	1:A:84:ILE:HB	0.59	1.74	1	3
1:A:173:PRO:CB	1:A:201:ALA:HB2	0.59	2.26	9	10
1:A:179:TYR:CE1	1:A:206:LEU:HD22	0.59	2.32	3	1
1:A:126:LEU:HG	1:A:130:LEU:HD23	0.59	1.73	1	1
1:A:206:LEU:HD12	1:A:316:ILE:HD11	0.59	1.74	19	1
1:A:126:LEU:CD2	1:A:130:LEU:HD11	0.59	2.26	8	1
1:A:240:LEU:O	1:A:240:LEU:HD22	0.59	1.97	9	8
1:A:110:LEU:HD22	1:A:134:TRP:CZ2	0.59	2.32	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:232:ILE:CG2	1:A:314:VAL:HG12	0.59	2.28	1	1
1:A:154:LEU:CD2	1:A:185:LEU:HD21	0.59	2.27	2	5
1:A:34:VAL:CG2	1:A:44:LEU:HD22	0.59	2.26	2	3
1:A:176:LEU:HD23	1:A:203:LEU:CD2	0.59	2.28	1	2
1:A:100:LEU:O	1:A:100:LEU:HD12	0.59	1.98	12	2
1:A:26:PHE:HB3	1:A:34:VAL:HG11	0.59	1.75	16	4
1:A:126:LEU:HG	1:A:130:LEU:HD21	0.58	1.73	8	1
1:A:114:HIS:N	1:A:115:PRO:CD	0.58	2.66	16	1
1:A:183:GLY:HA2	1:A:205:LEU:HD22	0.58	1.74	20	2
1:A:71:VAL:HA	1:A:80:LEU:HD21	0.58	1.74	5	8
1:A:73:VAL:HG12	1:A:100:LEU:HD22	0.58	1.72	19	1
1:A:153:ASN:ND2	1:A:265:LEU:HD22	0.58	2.13	19	1
1:A:130:LEU:HD23	1:A:131:ASP:N	0.58	2.14	2	6
1:A:240:LEU:HD21	1:A:251:LEU:HD21	0.58	1.76	9	1
1:A:208:THR:O	1:A:280:LEU:HD11	0.58	1.99	5	3
1:A:30:LEU:CD1	1:A:44:LEU:HD22	0.58	2.28	11	2
1:A:99:ILE:HG21	1:A:164:THR:HG21	0.58	1.75	11	1
1:A:72:MET:O	1:A:73:VAL:HG13	0.58	1.99	3	4
1:A:42:PHE:CE2	1:A:73:VAL:HG22	0.58	2.32	7	1
1:A:71:VAL:N	1:A:74:ALA:HB2	0.58	2.14	10	2
1:A:116:ALA:HB2	1:A:181:LEU:HB2	0.58	1.73	7	1
1:A:34:VAL:CG1	1:A:44:LEU:HD21	0.58	2.28	20	1
1:A:236:ARG:HG3	1:A:255:ILE:HG21	0.58	1.75	11	1
1:A:154:LEU:HD11	1:A:265:LEU:CD1	0.58	2.29	17	2
1:A:30:LEU:HD22	1:A:44:LEU:O	0.57	1.99	9	8
1:A:72:MET:HG3	1:A:73:VAL:HG13	0.57	1.74	15	1
1:A:66:VAL:HG22	1:A:84:ILE:CG2	0.57	2.29	19	1
1:A:71:VAL:H	1:A:74:ALA:HB2	0.57	1.58	9	1
1:A:30:LEU:HD23	1:A:50:LEU:CD1	0.57	2.29	17	4
1:A:216:TRP:CE3	1:A:266:LEU:HD22	0.57	2.34	17	1
1:A:58:LEU:CD1	1:A:80:LEU:HD12	0.57	2.28	8	10
1:A:202:PHE:CD2	1:A:336:LEU:HD13	0.57	2.34	17	4
1:A:49:LEU:HD11	1:A:240:LEU:O	0.57	2.00	13	9
1:A:17:GLY:O	1:A:20:THR:HG22	0.57	1.98	10	3
1:A:217:GLN:HG3	1:A:266:LEU:HD21	0.57	1.76	9	1
1:A:70:GLN:HG2	1:A:83:ILE:HD12	0.57	1.75	10	1
1:A:218:GLU:O	1:A:219:LYS:CB	0.57	2.52	12	1
1:A:22:ILE:HD11	1:A:81:ALA:HB2	0.57	1.77	9	2
1:A:193:LEU:HD13	1:A:200:VAL:HG12	0.57	1.75	7	2
1:A:42:PHE:CZ	1:A:100:LEU:HD21	0.57	2.34	16	1
1:A:137:ILE:O	1:A:137:ILE:HG23	0.57	1.98	2	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:102:LEU:HD13	1:A:123:PHE:CE1	0.57	2.34	8	2
1:A:280:LEU:HD13	1:A:281:PHE:N	0.57	2.15	19	1
1:A:265:LEU:C	1:A:265:LEU:HD12	0.57	2.19	6	11
1:A:116:ALA:HB3	1:A:179:TYR:CE2	0.57	2.35	15	2
1:A:26:PHE:CE1	1:A:44:LEU:HD13	0.57	2.35	20	2
1:A:66:VAL:HB	1:A:84:ILE:HD11	0.57	1.75	14	1
1:A:45:GLY:O	1:A:50:LEU:HD21	0.57	1.99	9	1
1:A:284:GLU:CG	1:A:287:LEU:HD12	0.57	2.30	20	1
1:A:313:HIS:CD2	1:A:314:VAL:HG13	0.56	2.34	13	3
1:A:39:ALA:O	1:A:76:THR:HG22	0.56	1.99	6	1
1:A:109:THR:HG22	1:A:135:SER:CB	0.56	2.29	18	2
1:A:240:LEU:HD21	1:A:251:LEU:HD13	0.56	1.75	13	6
1:A:304:LEU:CD1	1:A:306:ILE:HG23	0.56	2.29	3	7
1:A:280:LEU:HB3	1:A:306:ILE:HG22	0.56	1.77	17	2
1:A:206:LEU:O	1:A:206:LEU:HD12	0.56	2.01	2	1
1:A:116:ALA:HB1	1:A:259:TYR:CZ	0.56	2.35	20	1
1:A:301:ILE:HB	1:A:304:LEU:HD23	0.56	1.76	1	1
1:A:154:LEU:HD12	1:A:269:ALA:HB3	0.56	1.77	18	2
1:A:274:PHE:CZ	1:A:278:ALA:HB3	0.56	2.35	15	1
1:A:301:ILE:HG21	1:A:304:LEU:CD2	0.56	2.30	2	2
1:A:190:ALA:HB2	1:A:203:LEU:CD1	0.56	2.30	17	1
1:A:202:PHE:CB	1:A:336:LEU:HD13	0.56	2.31	2	3
1:A:232:ILE:HG22	1:A:314:VAL:HG21	0.56	1.75	7	1
1:A:62:VAL:HG11	1:A:84:ILE:CD1	0.56	2.30	1	10
1:A:99:ILE:HD11	1:A:160:ALA:CB	0.56	2.27	19	1
1:A:140:GLN:OE1	1:A:157:VAL:HG12	0.56	2.00	16	1
1:A:22:ILE:HD11	1:A:84:ILE:HD11	0.56	1.76	5	4
1:A:29:LEU:HD21	1:A:53:LYS:CB	0.56	2.31	1	1
1:A:205:LEU:CD1	1:A:278:ALA:HB1	0.56	2.30	9	3
1:A:216:TRP:CE3	1:A:224:LEU:HD21	0.56	2.36	2	1
1:A:176:LEU:HD23	1:A:203:LEU:HB3	0.56	1.77	6	1
1:A:224:LEU:HD11	1:A:264:ARG:HB2	0.56	1.78	6	1
1:A:206:LEU:C	1:A:206:LEU:CD2	0.56	2.74	1	1
1:A:240:LEU:HD22	1:A:240:LEU:O	0.56	2.01	7	5
1:A:72:MET:C	1:A:73:VAL:HG13	0.56	2.20	13	3
1:A:206:LEU:HD21	1:A:316:ILE:CD1	0.56	2.31	17	3
1:A:249:THR:O	1:A:249:THR:HG23	0.56	2.00	7	1
1:A:206:LEU:HD12	1:A:207:ASP:HB2	0.56	1.77	5	1
1:A:206:LEU:HD12	1:A:281:PHE:CB	0.56	2.31	17	1
1:A:16:ALA:HB3	1:A:19:GLU:HG3	0.56	1.78	9	1
1:A:39:ALA:CB	1:A:44:LEU:HD21	0.56	2.31	2	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:224:LEU:HD12	1:A:229:LEU:CD2	0.55	2.26	12	1
1:A:22:ILE:HD13	1:A:81:ALA:HB2	0.55	1.78	8	1
1:A:281:PHE:CE1	1:A:316:ILE:HD11	0.55	2.36	4	1
1:A:110:LEU:HD21	1:A:175:TYR:CD2	0.55	2.37	17	1
1:A:42:PHE:CE1	1:A:73:VAL:HG12	0.55	2.36	20	1
1:A:224:LEU:HD21	1:A:263:VAL:O	0.55	2.01	11	1
1:A:301:ILE:CG2	1:A:304:LEU:HD22	0.55	2.31	9	1
1:A:66:VAL:C	1:A:67:THR:HG22	0.55	2.21	20	2
1:A:101:PRO:HA	1:A:137:ILE:HG22	0.55	1.78	1	5
1:A:49:LEU:CD1	1:A:242:ALA:HB3	0.55	2.30	2	3
1:A:70:GLN:CG	1:A:83:ILE:HD12	0.55	2.31	10	1
1:A:26:PHE:HB3	1:A:34:VAL:HG21	0.55	1.78	2	4
1:A:333:LEU:O	1:A:333:LEU:HD13	0.55	2.01	17	1
1:A:162:LEU:HD12	1:A:166:LEU:HD21	0.55	1.78	20	1
1:A:110:LEU:HD23	1:A:175:TYR:O	0.55	2.01	12	1
1:A:206:LEU:HD12	1:A:316:ILE:HG21	0.55	1.77	15	1
1:A:181:LEU:HD22	1:A:262:ALA:HB1	0.55	1.78	9	2
1:A:67:THR:O	1:A:71:VAL:HG23	0.55	2.01	16	4
1:A:54:LEU:HD23	1:A:58:LEU:HG	0.55	1.79	7	3
1:A:39:ALA:CB	1:A:44:LEU:HD11	0.55	2.31	13	5
1:A:235:GLU:CB	1:A:314:VAL:HG21	0.55	2.31	10	1
1:A:148:MET:HA	1:A:152:ALA:HB3	0.55	1.78	14	2
1:A:259:TYR:CE1	1:A:314:VAL:HG12	0.55	2.36	13	1
1:A:130:LEU:HD11	1:A:134:TRP:CZ2	0.54	2.38	1	1
1:A:110:LEU:HB3	1:A:136:ILE:HG23	0.54	1.79	12	2
1:A:39:ALA:HB3	1:A:77:VAL:CG2	0.54	2.31	15	4
1:A:232:ILE:HG21	1:A:259:TYR:CD2	0.54	2.37	16	1
1:A:36:ASP:O	1:A:77:VAL:HG11	0.54	2.02	20	1
1:A:29:LEU:HD12	1:A:54:LEU:CD1	0.54	2.32	9	4
1:A:109:THR:HG21	1:A:169:GLN:CG	0.54	2.31	8	1
1:A:58:LEU:HD12	1:A:80:LEU:CD1	0.54	2.32	11	1
1:A:304:LEU:HD13	1:A:306:ILE:HG13	0.54	1.78	10	3
1:A:206:LEU:HD23	1:A:316:ILE:HG12	0.54	1.79	6	1
1:A:110:LEU:O	1:A:136:ILE:HG23	0.54	2.03	15	2
1:A:42:PHE:CZ	1:A:73:VAL:HG12	0.54	2.37	20	3
1:A:202:PHE:CE2	1:A:333:LEU:HD21	0.54	2.36	8	1
1:A:175:TYR:O	1:A:176:LEU:HD23	0.54	2.02	10	1
1:A:16:ALA:HB3	1:A:19:GLU:HG2	0.54	1.80	11	3
1:A:266:LEU:HD23	1:A:267:THR:N	0.54	2.18	5	2
1:A:49:LEU:HD22	1:A:243:GLN:C	0.54	2.23	16	1
1:A:49:LEU:CD2	1:A:240:LEU:HD23	0.54	2.30	17	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:175:TYR:CE1	1:A:333:LEU:HD21	0.54	2.38	19	1
1:A:240:LEU:C	1:A:240:LEU:HD13	0.54	2.23	5	8
1:A:70:GLN:O	1:A:74:ALA:HB2	0.54	2.02	15	4
1:A:110:LEU:HD11	1:A:175:TYR:CD2	0.54	2.37	17	1
1:A:102:LEU:HD13	1:A:120:ALA:HB1	0.54	1.78	19	1
1:A:70:GLN:CA	1:A:74:ALA:HB2	0.54	2.33	16	1
1:A:161:HIS:O	1:A:165:LEU:HD13	0.54	2.03	17	7
1:A:240:LEU:HD13	1:A:240:LEU:C	0.54	2.23	8	4
1:A:232:ILE:HG22	1:A:314:VAL:CG1	0.54	2.33	6	3
1:A:175:TYR:OH	1:A:333:LEU:HD21	0.54	2.02	10	1
1:A:41:PHE:CZ	1:A:54:LEU:HD13	0.54	2.38	14	8
1:A:325:ILE:O	1:A:329:ILE:HD12	0.54	2.03	16	1
1:A:30:LEU:HD12	1:A:31:GLY:N	0.53	2.18	3	5
1:A:228:VAL:HG13	1:A:229:LEU:HD23	0.53	1.79	19	5
1:A:48:ALA:CB	1:A:251:LEU:HD11	0.53	2.33	9	1
1:A:206:LEU:HD13	1:A:316:ILE:HG12	0.53	1.78	5	1
1:A:206:LEU:HD12	1:A:281:PHE:CG	0.53	2.38	17	1
1:A:135:SER:O	1:A:136:ILE:HD13	0.53	2.03	2	1
1:A:99:ILE:CD1	1:A:139:ILE:HD12	0.53	2.32	2	3
1:A:190:ALA:HB2	1:A:203:LEU:HD22	0.53	1.79	15	2
1:A:130:LEU:HD12	1:A:134:TRP:CZ2	0.53	2.39	7	1
1:A:100:LEU:HD11	1:A:121:TRP:CZ3	0.53	2.37	12	1
1:A:161:HIS:C	1:A:165:LEU:HD12	0.53	2.23	4	2
1:A:224:LEU:HD13	1:A:229:LEU:HD11	0.53	1.80	16	1
1:A:217:GLN:CB	1:A:266:LEU:HD21	0.53	2.33	5	1
1:A:325:ILE:HA	1:A:328:ILE:HD12	0.53	1.80	16	3
1:A:202:PHE:CD2	1:A:336:LEU:HD22	0.53	2.38	4	3
1:A:280:LEU:HD12	1:A:281:PHE:N	0.53	2.19	16	3
1:A:125:VAL:HG13	1:A:322:PHE:CD2	0.53	2.38	5	2
1:A:240:LEU:HD13	1:A:251:LEU:CD1	0.53	2.34	11	1
1:A:99:ILE:HG23	1:A:139:ILE:CD1	0.53	2.34	8	1
1:A:15:LYS:HB2	1:A:20:THR:HG23	0.53	1.80	16	1
1:A:113:PHE:CE2	1:A:186:ALA:HB2	0.53	2.38	3	1
1:A:206:LEU:HD21	1:A:316:ILE:HD12	0.53	1.79	14	1
1:A:224:LEU:CD2	1:A:229:LEU:HD21	0.53	2.33	20	1
1:A:23:ALA:HB1	1:A:35:GLN:HA	0.53	1.79	15	3
1:A:139:ILE:HG21	1:A:161:HIS:HB2	0.53	1.79	7	1
1:A:174:TYR:O	1:A:201:ALA:HB3	0.53	2.04	2	1
1:A:19:GLU:HG3	1:A:22:ILE:HD11	0.52	1.81	4	1
1:A:26:PHE:CD2	1:A:44:LEU:HD13	0.52	2.40	4	2
1:A:175:TYR:O	1:A:176:LEU:HD22	0.52	2.05	15	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:176:LEU:HD12	1:A:203:LEU:CD2	0.52	2.35	13	2
1:A:49:LEU:HD22	1:A:244:GLN:HG3	0.52	1.82	3	2
1:A:240:LEU:HD21	1:A:251:LEU:HD11	0.52	1.81	8	3
1:A:70:GLN:O	1:A:83:ILE:HD12	0.52	2.05	8	1
1:A:202:PHE:HB3	1:A:336:LEU:HD13	0.52	1.80	5	2
1:A:22:ILE:HG22	1:A:26:PHE:CE2	0.52	2.40	9	1
1:A:29:LEU:HD13	1:A:54:LEU:HD12	0.52	1.82	8	1
1:A:99:ILE:HG23	1:A:139:ILE:HD13	0.52	1.82	16	1
1:A:261:ASP:O	1:A:265:LEU:HD23	0.52	2.05	12	4
1:A:100:LEU:HD13	1:A:100:LEU:O	0.52	2.05	17	3
1:A:202:PHE:HB2	1:A:336:LEU:HD13	0.52	1.80	9	2
1:A:49:LEU:HD11	1:A:241:ALA:O	0.52	2.05	7	1
1:A:266:LEU:HA	1:A:269:ALA:HB3	0.52	1.82	12	1
1:A:219:LYS:HA	1:A:224:LEU:HD12	0.52	1.81	19	1
1:A:30:LEU:HD12	1:A:34:VAL:HG21	0.52	1.81	4	1
1:A:73:VAL:HG12	1:A:100:LEU:HD21	0.52	1.81	3	3
1:A:153:ASN:HB2	1:A:265:LEU:HD21	0.52	1.80	16	1
1:A:206:LEU:O	1:A:206:LEU:HD22	0.51	2.05	1	1
1:A:265:LEU:HD12	1:A:265:LEU:C	0.51	2.25	1	5
1:A:148:MET:O	1:A:152:ALA:HB3	0.51	2.05	9	4
1:A:274:PHE:O	1:A:301:ILE:HG23	0.51	2.05	1	1
1:A:21:ILE:CD1	1:A:22:ILE:HG23	0.51	2.35	8	2
1:A:47:HIS:CE1	1:A:48:ALA:HB2	0.51	2.40	20	1
1:A:131:ASP:HB2	1:A:132:PRO:HD2	0.51	1.82	19	1
1:A:49:LEU:HD13	1:A:243:GLN:HB3	0.51	1.82	11	2
1:A:127:SER:OG	1:A:136:ILE:HD11	0.51	2.05	11	1
1:A:240:LEU:HD21	1:A:251:LEU:CD2	0.51	2.35	9	1
1:A:26:PHE:O	1:A:30:LEU:HD12	0.51	2.05	7	1
1:A:98:THR:C	1:A:99:ILE:HD13	0.51	2.25	1	3
1:A:69:GLY:O	1:A:73:VAL:HG23	0.51	2.05	16	2
1:A:179:TYR:CD2	1:A:206:LEU:HD22	0.51	2.40	6	2
1:A:14:PRO:HB3	1:A:20:THR:HG23	0.51	1.81	2	1
1:A:224:LEU:HD23	1:A:263:VAL:HG13	0.51	1.82	6	1
1:A:183:GLY:HA2	1:A:205:LEU:HD23	0.51	1.82	3	2
1:A:110:LEU:HD21	1:A:177:LEU:HD12	0.51	1.83	14	1
1:A:49:LEU:HD22	1:A:245:GLY:H	0.51	1.64	14	1
1:A:72:MET:HG2	1:A:73:VAL:HG23	0.51	1.83	7	1
1:A:110:LEU:HD23	1:A:175:TYR:HB2	0.51	1.83	5	1
1:A:116:ALA:HB3	1:A:179:TYR:CE1	0.51	2.40	18	1
1:A:193:LEU:HD23	1:A:198:GLU:OE2	0.51	2.05	16	1
1:A:336:LEU:HD12	1:A:337:GLU:N	0.51	2.20	12	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:ALA:CB	1:A:37:ALA:HB2	0.51	2.26	15	1
1:A:175:TYR:CD1	1:A:333:LEU:HD21	0.51	2.40	19	1
1:A:99:ILE:HG13	1:A:164:THR:HG21	0.51	1.81	17	1
1:A:280:LEU:HD23	1:A:306:ILE:CG2	0.51	2.36	16	1
1:A:186:ALA:HB3	1:A:205:LEU:HD23	0.51	1.81	7	4
1:A:67:THR:HG23	1:A:68:PRO:CD	0.51	2.36	20	2
1:A:200:VAL:HG21	1:A:203:LEU:HD12	0.50	1.82	7	1
1:A:284:GLU:HG2	1:A:287:LEU:HD12	0.50	1.83	20	1
1:A:18:SER:HB3	1:A:81:ALA:HB1	0.50	1.82	17	1
1:A:131:ASP:CB	1:A:132:PRO:CD	0.50	2.89	12	2
1:A:110:LEU:HD23	1:A:110:LEU:O	0.50	2.07	15	1
1:A:151:ALA:HA	1:A:265:LEU:HD22	0.50	1.82	16	1
1:A:70:GLN:HA	1:A:74:ALA:HB2	0.50	1.82	16	1
1:A:207:ASP:OD2	1:A:283:ALA:HB2	0.50	2.06	13	1
1:A:283:ALA:O	1:A:286:THR:HG22	0.50	2.06	8	1
1:A:102:LEU:HD13	1:A:121:TRP:CD2	0.50	2.42	10	1
1:A:72:MET:C	1:A:73:VAL:HG23	0.50	2.27	7	1
1:A:116:ALA:HB3	1:A:259:TYR:CE1	0.50	2.41	6	1
1:A:126:LEU:HD23	1:A:127:SER:N	0.50	2.21	17	2
1:A:120:ALA:HB2	1:A:140:GLN:CB	0.50	2.36	13	1
1:A:26:PHE:CD1	1:A:44:LEU:HD13	0.50	2.41	1	3
1:A:311:CYS:HB3	1:A:316:ILE:HD12	0.50	1.82	1	2
1:A:175:TYR:C	1:A:176:LEU:HD13	0.50	2.27	6	2
1:A:285:ARG:NE	1:A:312:ALA:HB2	0.50	2.22	8	3
1:A:183:GLY:HA3	1:A:208:THR:HG21	0.50	1.84	3	1
1:A:71:VAL:HG13	1:A:80:LEU:CD1	0.50	2.24	8	1
1:A:184:THR:HG22	1:A:271:SER:CB	0.50	2.37	5	2
1:A:224:LEU:N	1:A:224:LEU:HD23	0.50	2.22	12	1
1:A:29:LEU:HD13	1:A:50:LEU:HB2	0.50	1.83	18	1
1:A:148:MET:CB	1:A:152:ALA:HB3	0.50	2.37	18	3
1:A:39:ALA:HB3	1:A:44:LEU:HD11	0.50	1.82	14	1
1:A:16:ALA:HB3	1:A:19:GLU:CG	0.49	2.37	9	1
1:A:193:LEU:C	1:A:193:LEU:HD13	0.49	2.26	4	1
1:A:19:GLU:HA	1:A:22:ILE:HD11	0.49	1.83	4	1
1:A:123:PHE:CZ	1:A:126:LEU:HD23	0.49	2.42	13	1
1:A:316:ILE:HG13	1:A:321:THR:HG21	0.49	1.85	12	3
1:A:13:ALA:CB	1:A:14:PRO:CD	0.49	2.90	16	2
1:A:22:ILE:CG1	1:A:81:ALA:HB2	0.49	2.37	13	2
1:A:176:LEU:HD23	1:A:203:LEU:HD23	0.49	1.83	1	1
1:A:67:THR:N	1:A:68:PRO:HD2	0.49	2.22	20	9
1:A:62:VAL:HG23	1:A:64:ARG:H	0.49	1.67	4	4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:GLY:C	1:A:37:ALA:HB3	0.49	2.28	6	1
1:A:102:LEU:CD1	1:A:120:ALA:HB1	0.49	2.38	19	1
1:A:336:LEU:HD12	1:A:336:LEU:C	0.49	2.26	10	5
1:A:285:ARG:CD	1:A:286:THR:HG23	0.49	2.36	14	1
1:A:99:ILE:HD12	1:A:139:ILE:HG23	0.49	1.83	17	2
1:A:133:GLN:O	1:A:134:TRP:CD2	0.49	2.65	17	1
1:A:30:LEU:HD23	1:A:50:LEU:CG	0.49	2.36	1	2
1:A:285:ARG:HD3	1:A:312:ALA:HB2	0.49	1.84	12	1
1:A:283:ALA:HB1	1:A:311:CYS:O	0.49	2.07	2	4
1:A:71:VAL:HG22	1:A:80:LEU:CD1	0.49	2.38	7	1
1:A:22:ILE:HG22	1:A:77:VAL:HG13	0.49	1.85	2	1
1:A:120:ALA:O	1:A:121:TRP:C	0.49	2.51	18	1
1:A:55:ALA:HB1	1:A:67:THR:HA	0.49	1.84	11	1
1:A:70:GLN:HB3	1:A:83:ILE:HD12	0.49	1.83	14	1
1:A:125:VAL:HG21	1:A:322:PHE:CG	0.49	2.42	4	1
1:A:30:LEU:HD12	1:A:31:GLY:H	0.49	1.68	1	5
1:A:22:ILE:HD13	1:A:58:LEU:HD22	0.49	1.83	17	2
1:A:36:ASP:O	1:A:37:ALA:HB3	0.49	2.07	16	1
1:A:149:GLN:O	1:A:153:ASN:N	0.49	2.46	6	1
1:A:133:GLN:O	1:A:134:TRP:O	0.49	2.31	17	1
1:A:114:HIS:CB	1:A:120:ALA:HB2	0.49	2.38	17	1
1:A:322:PHE:HA	1:A:325:ILE:HG22	0.48	1.85	19	1
1:A:321:THR:HG22	1:A:325:ILE:HD11	0.48	1.85	16	1
1:A:22:ILE:HG21	1:A:77:VAL:HA	0.48	1.85	6	1
1:A:49:LEU:HD11	1:A:240:LEU:HA	0.48	1.85	11	2
1:A:176:LEU:CD1	1:A:203:LEU:HD23	0.48	2.36	2	1
1:A:207:ASP:OD2	1:A:316:ILE:HD13	0.48	2.09	8	1
1:A:301:ILE:CD1	1:A:304:LEU:HD23	0.48	2.38	3	1
1:A:110:LEU:CB	1:A:136:ILE:HG23	0.48	2.38	12	2
1:A:154:LEU:HG	1:A:265:LEU:HD11	0.48	1.84	6	3
1:A:42:PHE:CE1	1:A:100:LEU:HD11	0.48	2.43	14	1
1:A:275:ASP:HB2	1:A:302:ALA:HB2	0.48	1.84	8	1
1:A:51:ALA:HB2	1:A:121:TRP:CZ3	0.48	2.44	19	1
1:A:316:ILE:HG23	1:A:321:THR:HG21	0.48	1.85	10	1
1:A:40:ASP:C	1:A:44:LEU:HD12	0.48	2.29	13	4
1:A:98:THR:HG23	1:A:99:ILE:CG1	0.48	2.37	4	1
1:A:312:ALA:HB3	1:A:315:ASP:CB	0.48	2.38	7	1
1:A:200:VAL:HG11	1:A:203:LEU:CD1	0.48	2.38	12	1
1:A:31:GLY:CA	1:A:34:VAL:HG23	0.48	2.38	18	1
1:A:139:ILE:HD13	1:A:161:HIS:CD2	0.48	2.44	15	1
1:A:66:VAL:HG23	1:A:70:GLN:CB	0.48	2.38	13	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:PHE:CE1	1:A:54:LEU:HD21	0.48	2.44	11	1
1:A:66:VAL:C	1:A:67:THR:CG2	0.48	2.82	20	2
1:A:154:LEU:HD21	1:A:265:LEU:HD11	0.48	1.86	1	1
1:A:148:MET:CA	1:A:152:ALA:HB3	0.48	2.39	12	3
1:A:73:VAL:O	1:A:74:ALA:C	0.48	2.52	14	3
1:A:11:GLY:CA	1:A:37:ALA:HB3	0.48	2.39	13	1
1:A:146:GLY:N	1:A:147:PRO:CD	0.48	2.76	15	1
1:A:22:ILE:CD1	1:A:58:LEU:HD13	0.47	2.39	1	9
1:A:80:LEU:O	1:A:84:ILE:HG23	0.47	2.09	20	1
1:A:29:LEU:HD13	1:A:50:LEU:CB	0.47	2.38	18	1
1:A:153:ASN:O	1:A:157:VAL:HG13	0.47	2.09	8	9
1:A:130:LEU:HD21	1:A:329:ILE:CD1	0.47	2.37	4	1
1:A:225:ASP:O	1:A:228:VAL:HG12	0.47	2.09	8	4
1:A:102:LEU:HD21	1:A:120:ALA:CB	0.47	2.39	14	1
1:A:113:PHE:CE1	1:A:189:ILE:HD11	0.47	2.45	20	1
1:A:174:TYR:OH	1:A:193:LEU:HD22	0.47	2.08	6	1
1:A:229:LEU:HD12	1:A:230:ALA:N	0.47	2.24	1	1
1:A:130:LEU:HD23	1:A:131:ASP:H	0.47	1.69	2	3
1:A:216:TRP:CH2	1:A:263:VAL:HG22	0.47	2.44	20	1
1:A:22:ILE:HG23	1:A:80:LEU:HD12	0.47	1.86	6	1
1:A:325:ILE:HG22	1:A:329:ILE:HB	0.47	1.86	5	1
1:A:110:LEU:HD22	1:A:111:PHE:N	0.47	2.25	5	1
1:A:133:GLN:C	1:A:134:TRP:CG	0.47	2.88	17	1
1:A:148:MET:HB3	1:A:152:ALA:HB3	0.47	1.84	19	3
1:A:130:LEU:HD12	1:A:131:ASP:OD1	0.47	2.08	18	1
1:A:144:PRO:HA	1:A:254:THR:HG23	0.47	1.87	19	3
1:A:217:GLN:HG2	1:A:224:LEU:HD21	0.47	1.86	14	1
1:A:248:SER:O	1:A:249:THR:HG22	0.47	2.10	7	1
1:A:154:LEU:HD13	1:A:269:ALA:CB	0.47	2.39	17	1
1:A:280:LEU:HD12	1:A:281:PHE:H	0.47	1.69	12	3
1:A:66:VAL:CG2	1:A:84:ILE:HG22	0.47	2.39	4	4
1:A:206:LEU:HD23	1:A:207:ASP:HB2	0.47	1.87	3	1
1:A:48:ALA:HB3	1:A:240:LEU:CD2	0.47	2.40	9	1
1:A:26:PHE:HB2	1:A:34:VAL:HG11	0.47	1.87	10	1
1:A:162:LEU:HD13	1:A:166:LEU:CD2	0.47	2.40	4	1
1:A:51:ALA:HB1	1:A:72:MET:SD	0.47	2.50	4	1
1:A:177:LEU:HD21	1:A:179:TYR:OH	0.47	2.10	16	1
1:A:13:ALA:HB2	1:A:35:GLN:O	0.47	2.10	17	1
1:A:193:LEU:HD22	1:A:198:GLU:CD	0.47	2.30	1	1
1:A:31:GLY:O	1:A:32:CYS:CB	0.47	2.62	10	1
1:A:67:THR:HG23	1:A:68:PRO:HD3	0.47	1.86	20	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:285:ARG:HD2	1:A:312:ALA:HB2	0.46	1.87	19	1
1:A:176:LEU:N	1:A:176:LEU:HD22	0.46	2.25	6	2
1:A:48:ALA:HB3	1:A:240:LEU:HD23	0.46	1.88	9	1
1:A:22:ILE:HG21	1:A:80:LEU:HB3	0.46	1.87	4	1
1:A:325:ILE:CG2	1:A:328:ILE:HD11	0.46	2.34	5	1
1:A:99:ILE:HD13	1:A:139:ILE:CD1	0.46	2.40	3	1
1:A:232:ILE:CG2	1:A:314:VAL:HG11	0.46	2.40	12	1
1:A:206:LEU:HD12	1:A:316:ILE:HG12	0.46	1.86	11	2
1:A:111:PHE:HB3	1:A:176:LEU:HD23	0.46	1.88	8	1
1:A:333:LEU:HD23	1:A:336:LEU:HD11	0.46	1.88	16	2
1:A:285:ARG:CD	1:A:312:ALA:HB2	0.46	2.40	4	1
1:A:202:PHE:CZ	1:A:336:LEU:HD22	0.46	2.45	13	2
1:A:237:GLU:O	1:A:241:ALA:HB2	0.46	2.10	17	1
1:A:202:PHE:CB	1:A:336:LEU:HD22	0.46	2.40	19	1
1:A:176:LEU:HD23	1:A:203:LEU:CG	0.46	2.41	3	2
1:A:266:LEU:HD13	1:A:266:LEU:C	0.46	2.31	9	1
1:A:110:LEU:HD11	1:A:130:LEU:HD11	0.46	1.87	13	1
1:A:232:ILE:HG22	1:A:314:VAL:HG11	0.46	1.86	6	1
1:A:126:LEU:CD1	1:A:130:LEU:HD21	0.46	2.41	10	2
1:A:98:THR:O	1:A:139:ILE:HD12	0.46	2.10	3	1
1:A:259:TYR:O	1:A:263:VAL:HG13	0.46	2.10	5	4
1:A:126:LEU:O	1:A:130:LEU:HD23	0.46	2.10	18	1
1:A:100:LEU:C	1:A:100:LEU:HD13	0.46	2.30	15	2
1:A:206:LEU:HD21	1:A:316:ILE:HG12	0.46	1.86	9	2
1:A:66:VAL:O	1:A:67:THR:HG22	0.46	2.10	20	2
1:A:71:VAL:O	1:A:72:MET:CB	0.46	2.64	17	1
1:A:33:ASP:HB3	1:A:44:LEU:HD22	0.46	1.87	14	1
1:A:154:LEU:HD22	1:A:185:LEU:HD11	0.46	1.88	16	2
1:A:126:LEU:CD2	1:A:136:ILE:HD13	0.46	2.40	12	1
1:A:217:GLN:CD	1:A:266:LEU:HD11	0.46	2.31	9	1
1:A:336:LEU:C	1:A:336:LEU:HD12	0.46	2.31	17	7
1:A:109:THR:HG22	1:A:135:SER:HB2	0.46	1.87	18	1
1:A:203:LEU:HD12	1:A:278:ALA:HB2	0.46	1.88	18	1
1:A:49:LEU:HD22	1:A:244:GLN:CG	0.46	2.41	19	1
1:A:158:CYS:SG	1:A:189:ILE:HD12	0.46	2.51	4	1
1:A:150:THR:O	1:A:265:LEU:HD22	0.46	2.11	17	1
1:A:216:TRP:HH2	1:A:263:VAL:HG22	0.46	1.71	20	1
1:A:316:ILE:CG1	1:A:321:THR:HG21	0.46	2.40	12	1
1:A:73:VAL:CG1	1:A:100:LEU:HD22	0.46	2.41	19	1
1:A:177:LEU:HD12	1:A:204:GLY:HA3	0.46	1.88	8	3
1:A:265:LEU:O	1:A:268:THR:HG22	0.46	2.11	17	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:120:ALA:HB2	1:A:140:GLN:HB2	0.46	1.87	13	1
1:A:58:LEU:HB2	1:A:66:VAL:HG11	0.46	1.87	19	1
1:A:173:PRO:CA	1:A:201:ALA:HB2	0.46	2.41	14	1
1:A:79:LYS:O	1:A:83:ILE:HG23	0.46	2.11	7	2
1:A:206:LEU:HD11	1:A:316:ILE:HD11	0.46	1.88	3	1
1:A:110:LEU:HD13	1:A:175:TYR:CE2	0.45	2.46	16	1
1:A:109:THR:HG22	1:A:169:GLN:CD	0.45	2.32	6	1
1:A:217:GLN:CD	1:A:266:LEU:HD22	0.45	2.31	1	1
1:A:164:THR:HG22	1:A:168:GLN:HB2	0.45	1.88	18	1
1:A:313:HIS:CE1	1:A:314:VAL:HG13	0.45	2.46	18	1
1:A:109:THR:HG21	1:A:168:GLN:HG3	0.45	1.86	11	1
1:A:110:LEU:HD13	1:A:134:TRP:CH2	0.45	2.46	14	3
1:A:151:ALA:HA	1:A:265:LEU:HD21	0.45	1.88	12	1
1:A:325:ILE:HG23	1:A:325:ILE:O	0.45	2.12	14	1
1:A:125:VAL:HG11	1:A:322:PHE:CD2	0.45	2.46	16	1
1:A:137:ILE:CG2	1:A:137:ILE:O	0.45	2.65	2	1
1:A:206:LEU:HD23	1:A:316:ILE:CG1	0.45	2.41	6	1
1:A:130:LEU:HD21	1:A:134:TRP:CZ2	0.45	2.45	5	1
1:A:110:LEU:HD12	1:A:175:TYR:HB2	0.45	1.88	15	2
1:A:161:HIS:CE1	1:A:165:LEU:HD11	0.45	2.47	2	1
1:A:184:THR:HG23	1:A:217:GLN:OE1	0.45	2.12	18	1
1:A:123:PHE:HZ	1:A:126:LEU:HD22	0.45	1.69	11	1
1:A:43:ALA:HB2	1:A:102:LEU:O	0.45	2.12	7	1
1:A:109:THR:HG23	1:A:135:SER:HB3	0.45	1.89	2	1
1:A:137:ILE:HD13	1:A:137:ILE:H	0.45	1.71	17	1
1:A:139:ILE:HG23	1:A:139:ILE:O	0.45	2.12	3	4
1:A:47:HIS:CE1	1:A:240:LEU:HD23	0.45	2.46	19	1
1:A:217:GLN:CG	1:A:266:LEU:HD21	0.45	2.41	9	1
1:A:22:ILE:CG2	1:A:58:LEU:HD13	0.45	2.39	8	1
1:A:266:LEU:HD23	1:A:267:THR:H	0.45	1.72	16	1
1:A:316:ILE:HA	1:A:321:THR:HG21	0.45	1.87	16	1
1:A:301:ILE:HD13	1:A:304:LEU:HD21	0.45	1.88	6	2
1:A:127:SER:OG	1:A:136:ILE:HD12	0.45	2.11	20	1
1:A:176:LEU:O	1:A:177:LEU:HD12	0.45	2.11	6	1
1:A:102:LEU:HD13	1:A:123:PHE:CZ	0.45	2.46	8	1
1:A:42:PHE:CE2	1:A:100:LEU:HD22	0.45	2.47	7	1
1:A:30:LEU:HD13	1:A:44:LEU:HB3	0.45	1.89	7	1
1:A:13:ALA:HB1	1:A:14:PRO:HD2	0.45	1.89	15	4
1:A:266:LEU:C	1:A:266:LEU:CD2	0.45	2.83	9	2
1:A:66:VAL:HG12	1:A:71:VAL:CG2	0.45	2.42	19	1
1:A:21:ILE:HD12	1:A:58:LEU:HD22	0.45	1.88	9	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:321:THR:HG22	1:A:325:ILE:CD1	0.45	2.42	16	2
1:A:111:PHE:HB2	1:A:176:LEU:HD13	0.45	1.89	16	1
1:A:22:ILE:HD12	1:A:58:LEU:CD1	0.44	2.41	1	1
1:A:259:TYR:O	1:A:263:VAL:HG22	0.44	2.12	12	2
1:A:154:LEU:HD11	1:A:269:ALA:HB2	0.44	1.89	15	2
1:A:173:PRO:HA	1:A:201:ALA:HB2	0.44	1.87	14	1
1:A:73:VAL:HG13	1:A:100:LEU:HD22	0.44	1.89	4	1
1:A:134:TRP:CD1	1:A:134:TRP:C	0.44	2.90	5	1
1:A:42:PHE:CD2	1:A:102:LEU:HD22	0.44	2.48	4	2
1:A:48:ALA:HB3	1:A:251:LEU:CD1	0.44	2.38	19	2
1:A:66:VAL:HG22	1:A:71:VAL:CG2	0.44	2.42	13	1
1:A:19:GLU:OE1	1:A:37:ALA:HB2	0.44	2.13	13	1
1:A:110:LEU:HD22	1:A:134:TRP:HZ2	0.44	1.72	1	1
1:A:247:THR:CG2	1:A:251:LEU:HD12	0.44	2.39	19	1
1:A:127:SER:CB	1:A:136:ILE:HD12	0.44	2.43	9	1
1:A:179:TYR:CD1	1:A:317:ILE:HD13	0.44	2.48	16	1
1:A:66:VAL:O	1:A:67:THR:CB	0.44	2.65	10	1
1:A:113:PHE:CE2	1:A:189:ILE:HD11	0.44	2.48	7	1
1:A:47:HIS:O	1:A:48:ALA:HB3	0.44	2.13	13	3
1:A:231:GLU:CB	1:A:314:VAL:HG21	0.44	2.41	16	1
1:A:205:LEU:CB	1:A:208:THR:HG21	0.44	2.42	16	1
1:A:49:LEU:HD13	1:A:243:GLN:HB2	0.44	1.89	10	1
1:A:240:LEU:HD12	1:A:252:PHE:CE1	0.44	2.48	3	1
1:A:34:VAL:HG21	1:A:44:LEU:HD22	0.44	1.88	8	1
1:A:131:ASP:N	1:A:132:PRO:HD2	0.44	2.28	16	1
1:A:40:ASP:O	1:A:44:LEU:HD12	0.44	2.12	7	2
1:A:82:THR:O	1:A:86:ALA:HB2	0.44	2.13	18	2
1:A:110:LEU:HD12	1:A:111:PHE:O	0.44	2.13	19	1
1:A:175:TYR:C	1:A:176:LEU:HD12	0.44	2.32	4	1
1:A:67:THR:CB	1:A:68:PRO:CD	0.44	2.95	11	6
1:A:240:LEU:CD2	1:A:240:LEU:C	0.44	2.77	9	1
1:A:67:THR:H	1:A:68:PRO:HD2	0.44	1.73	20	2
1:A:58:LEU:CD1	1:A:80:LEU:HD13	0.44	2.43	6	1
1:A:333:LEU:HD22	1:A:336:LEU:HD11	0.44	1.89	18	1
1:A:205:LEU:HD11	1:A:278:ALA:HB1	0.44	1.90	9	1
1:A:114:HIS:N	1:A:115:PRO:HD3	0.44	2.28	16	1
1:A:204:GLY:HA2	1:A:279:THR:HG22	0.44	1.90	7	1
1:A:179:TYR:HD2	1:A:206:LEU:HD22	0.44	1.73	6	1
1:A:282:VAL:HG22	1:A:287:LEU:HD23	0.44	1.89	15	1
1:A:248:SER:O	1:A:249:THR:HG23	0.44	2.12	14	1
1:A:176:LEU:HD13	1:A:203:LEU:HD23	0.44	1.89	8	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:VAL:CG1	1:A:84:ILE:HD12	0.44	2.37	16	1
1:A:162:LEU:HD23	1:A:189:ILE:CD1	0.44	2.40	4	1
1:A:265:LEU:HD12	1:A:265:LEU:O	0.43	2.12	6	3
1:A:206:LEU:CD2	1:A:316:ILE:HD13	0.43	2.40	17	1
1:A:99:ILE:HG23	1:A:139:ILE:HG13	0.43	1.90	17	1
1:A:206:LEU:HB3	1:A:316:ILE:HD13	0.43	1.89	6	1
1:A:42:PHE:HE2	1:A:100:LEU:HD22	0.43	1.73	7	1
1:A:314:VAL:HA	1:A:317:ILE:HG22	0.43	1.90	5	1
1:A:325:ILE:HG22	1:A:329:ILE:HD12	0.43	1.89	1	1
1:A:109:THR:HG22	1:A:135:SER:OG	0.43	2.13	1	1
1:A:283:ALA:CB	1:A:286:THR:HG22	0.43	2.43	12	1
1:A:49:LEU:HD11	1:A:240:LEU:HD22	0.43	1.91	3	3
1:A:166:LEU:HD11	1:A:198:GLU:OE2	0.43	2.13	16	1
1:A:207:ASP:OD1	1:A:283:ALA:HB2	0.43	2.13	16	1
1:A:127:SER:HB3	1:A:136:ILE:HD11	0.43	1.91	7	1
1:A:325:ILE:HG23	1:A:328:ILE:CD1	0.43	2.36	5	1
1:A:180:SER:O	1:A:208:THR:HG23	0.43	2.13	3	1
1:A:228:VAL:O	1:A:232:ILE:HG23	0.43	2.13	3	1
1:A:175:TYR:CZ	1:A:201:ALA:HB1	0.43	2.47	13	1
1:A:130:LEU:HD12	1:A:131:ASP:N	0.43	2.28	1	1
1:A:13:ALA:HB2	1:A:37:ALA:CB	0.43	2.30	15	1
1:A:148:MET:HB2	1:A:152:ALA:HB3	0.43	1.89	10	1
1:A:70:GLN:CD	1:A:73:VAL:HG22	0.43	2.33	20	1
1:A:263:VAL:C	1:A:266:LEU:HD12	0.43	2.34	19	2
1:A:121:TRP:CG	1:A:121:TRP:O	0.43	2.70	10	1
1:A:154:LEU:HD12	1:A:269:ALA:HB2	0.43	1.90	5	1
1:A:49:LEU:HD21	1:A:240:LEU:O	0.43	2.13	8	3
1:A:240:LEU:HD13	1:A:251:LEU:HD11	0.43	1.89	11	1
1:A:240:LEU:HD13	1:A:241:ALA:N	0.43	2.28	4	3
1:A:67:THR:HG22	1:A:68:PRO:N	0.43	2.29	4	5
1:A:62:VAL:HG11	1:A:84:ILE:CG2	0.43	2.43	11	1
1:A:153:ASN:HD21	1:A:265:LEU:HD22	0.43	1.73	4	1
1:A:137:ILE:N	1:A:137:ILE:HD13	0.43	2.29	17	1
1:A:176:LEU:HD22	1:A:203:LEU:CD2	0.43	2.44	12	1
1:A:265:LEU:O	1:A:265:LEU:HD12	0.43	2.13	18	3
1:A:332:THR:HG22	1:A:336:LEU:HD23	0.43	1.89	18	1
1:A:11:GLY:O	1:A:37:ALA:HB3	0.43	2.13	4	2
1:A:186:ALA:HB1	1:A:203:LEU:HD21	0.43	1.89	11	1
1:A:179:TYR:O	1:A:181:LEU:N	0.43	2.51	16	1
1:A:72:MET:C	1:A:73:VAL:HG22	0.43	2.33	4	1
1:A:29:LEU:CD1	1:A:54:LEU:HD12	0.43	2.41	18	3

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:LEU:CD1	1:A:130:LEU:HD11	0.43	2.44	18	2
1:A:208:THR:HG21	1:A:286:THR:HB	0.43	1.91	17	1
1:A:143:ARG:H	1:A:143:ARG:NE	0.43	2.12	17	1
1:A:206:LEU:HD23	1:A:316:ILE:CD1	0.43	2.44	6	1
1:A:31:GLY:HA3	1:A:34:VAL:HG23	0.43	1.90	18	1
1:A:174:TYR:CZ	1:A:193:LEU:HD22	0.43	2.48	15	1
1:A:55:ALA:HB1	1:A:67:THR:OG1	0.43	2.13	19	1
1:A:263:VAL:O	1:A:266:LEU:HD11	0.43	2.13	14	1
1:A:176:LEU:HD22	1:A:203:LEU:HD23	0.43	1.89	7	1
1:A:25:ALA:HB1	1:A:57:GLN:NE2	0.43	2.29	20	1
1:A:125:VAL:HG21	1:A:322:PHE:CB	0.42	2.43	15	1
1:A:66:VAL:HG22	1:A:84:ILE:HG22	0.42	1.90	4	1
1:A:202:PHE:CE1	1:A:336:LEU:HD22	0.42	2.48	3	1
1:A:123:PHE:O	1:A:123:PHE:CG	0.42	2.71	18	1
1:A:41:PHE:CE1	1:A:71:VAL:HG12	0.42	2.49	16	1
1:A:26:PHE:HE2	1:A:77:VAL:HG22	0.42	1.70	17	1
1:A:206:LEU:HD21	1:A:316:ILE:CG1	0.42	2.44	3	1
1:A:22:ILE:HG23	1:A:58:LEU:HD11	0.42	1.91	20	1
1:A:126:LEU:O	1:A:130:LEU:HD13	0.42	2.14	19	1
1:A:102:LEU:HD21	1:A:120:ALA:HB1	0.42	1.91	14	1
1:A:113:PHE:CE2	1:A:189:ILE:HD12	0.42	2.49	10	1
1:A:30:LEU:HG	1:A:50:LEU:HD12	0.42	1.92	1	1
1:A:126:LEU:HD23	1:A:130:LEU:CD2	0.42	2.44	18	1
1:A:113:PHE:CE2	1:A:185:LEU:HD12	0.42	2.48	15	1
1:A:41:PHE:HZ	1:A:54:LEU:HD22	0.42	1.75	19	1
1:A:161:HIS:CD2	1:A:189:ILE:HD11	0.42	2.49	9	1
1:A:280:LEU:CD2	1:A:306:ILE:HG22	0.42	2.42	16	1
1:A:184:THR:HG22	1:A:271:SER:HB2	0.42	1.90	5	1
1:A:40:ASP:HB2	1:A:43:ALA:HB3	0.42	1.90	3	1
1:A:174:TYR:OH	1:A:193:LEU:HD13	0.42	2.15	6	1
1:A:70:GLN:HG3	1:A:83:ILE:HD12	0.42	1.90	19	1
1:A:232:ILE:HB	1:A:314:VAL:HG11	0.42	1.91	9	1
1:A:130:LEU:HD21	1:A:134:TRP:CE2	0.42	2.50	5	1
1:A:134:TRP:N	1:A:134:TRP:CD1	0.42	2.86	12	1
1:A:282:VAL:HG23	1:A:308:ARG:HA	0.42	1.91	16	6
1:A:251:LEU:HD22	1:A:251:LEU:O	0.42	2.15	11	1
1:A:37:ALA:HA	1:A:77:VAL:HG11	0.42	1.91	14	1
1:A:21:ILE:HD11	1:A:84:ILE:HD11	0.42	1.91	16	1
1:A:13:ALA:HB2	1:A:35:GLN:C	0.42	2.35	17	1
1:A:139:ILE:HD11	1:A:160:ALA:HB3	0.42	1.90	13	1
1:A:181:LEU:CD1	1:A:266:LEU:HD23	0.42	2.40	12	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:325:ILE:HB	1:A:328:ILE:HD11	0.42	1.91	13	3
1:A:74:ALA:O	1:A:75:SER:CB	0.42	2.66	11	1
1:A:110:LEU:CG	1:A:136:ILE:HG23	0.42	2.42	16	1
1:A:15:LYS:O	1:A:20:THR:HG21	0.42	2.14	7	1
1:A:130:LEU:O	1:A:131:ASP:CB	0.42	2.67	2	1
1:A:100:LEU:CD1	1:A:102:LEU:HD23	0.42	2.45	15	1
1:A:59:SER:HB3	1:A:66:VAL:HG12	0.42	1.90	2	2
1:A:193:LEU:HD23	1:A:198:GLU:CD	0.42	2.35	16	1
1:A:249:THR:O	1:A:249:THR:CG2	0.42	2.68	7	1
1:A:173:PRO:HB3	1:A:201:ALA:HB2	0.42	1.92	17	1
1:A:67:THR:HG22	1:A:68:PRO:HD2	0.42	1.91	3	1
1:A:111:PHE:HB2	1:A:176:LEU:HD12	0.42	1.91	6	1
1:A:15:LYS:HB3	1:A:20:THR:HG23	0.42	1.92	15	1
1:A:175:TYR:CE1	1:A:333:LEU:HD22	0.42	2.50	14	1
1:A:206:LEU:CD1	1:A:316:ILE:HG21	0.42	2.44	7	1
1:A:58:LEU:HD12	1:A:80:LEU:HD13	0.42	1.91	6	1
1:A:125:VAL:HG21	1:A:322:PHE:CD2	0.41	2.50	4	1
1:A:66:VAL:HG22	1:A:71:VAL:HG23	0.41	1.90	13	1
1:A:84:ILE:HG13	1:A:85:ASP:N	0.41	2.29	20	1
1:A:282:VAL:HG12	1:A:308:ARG:HA	0.41	1.91	1	2
1:A:126:LEU:HD21	1:A:136:ILE:HD13	0.41	1.91	12	1
1:A:70:GLN:CB	1:A:83:ILE:HD12	0.41	2.45	10	1
1:A:191:ALA:HB2	1:A:274:PHE:HB3	0.41	1.91	4	1
1:A:134:TRP:CZ2	1:A:136:ILE:HD12	0.41	2.49	5	1
1:A:249:THR:HG22	1:A:253:THR:OG1	0.41	2.15	13	1
1:A:49:LEU:HD23	1:A:247:THR:CG2	0.41	2.45	19	1
1:A:217:GLN:OE1	1:A:266:LEU:HD11	0.41	2.16	9	1
1:A:176:LEU:HD12	1:A:203:LEU:HD23	0.41	1.91	10	1
1:A:193:LEU:CD2	1:A:193:LEU:C	0.41	2.86	4	1
1:A:281:PHE:CD1	1:A:316:ILE:HD11	0.41	2.50	4	1
1:A:116:ALA:HB1	1:A:259:TYR:CE2	0.41	2.50	18	1
1:A:66:VAL:HG22	1:A:84:ILE:HB	0.41	1.91	19	1
1:A:62:VAL:HG21	1:A:84:ILE:HG23	0.41	1.91	14	1
1:A:239:PHE:CD1	1:A:240:LEU:N	0.41	2.88	9	1
1:A:207:ASP:CG	1:A:316:ILE:HD13	0.41	2.35	8	1
1:A:72:MET:CG	1:A:73:VAL:HG23	0.41	2.45	7	1
1:A:246:SER:O	1:A:247:THR:C	0.41	2.59	7	1
1:A:71:VAL:O	1:A:72:MET:HB2	0.41	2.15	17	1
1:A:224:LEU:O	1:A:224:LEU:HD22	0.41	2.14	3	1
1:A:11:GLY:HA2	1:A:37:ALA:HB3	0.41	1.91	13	1
1:A:325:ILE:HA	1:A:328:ILE:CG2	0.41	2.45	2	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:325:ILE:HG23	1:A:328:ILE:CG2	0.41	2.46	2	1
1:A:80:LEU:HA	1:A:83:ILE:HG12	0.41	1.93	20	1
1:A:121:TRP:CD2	1:A:121:TRP:N	0.41	2.88	12	1
1:A:40:ASP:O	1:A:41:PHE:C	0.41	2.58	18	1
1:A:116:ALA:HB1	1:A:259:TYR:HE2	0.41	1.76	14	1
1:A:12:ARG:O	1:A:37:ALA:HB2	0.41	2.16	3	1
1:A:224:LEU:N	1:A:224:LEU:CD1	0.41	2.76	3	1
1:A:224:LEU:HD11	1:A:264:ARG:CB	0.41	2.44	6	1
1:A:247:THR:HG21	1:A:251:LEU:H	0.41	1.76	10	1
1:A:191:ALA:HB2	1:A:272:VAL:O	0.41	2.16	10	1
1:A:49:LEU:HD23	1:A:247:THR:HG22	0.41	1.91	19	1
1:A:251:LEU:HD22	1:A:251:LEU:C	0.41	2.36	11	1
1:A:41:PHE:CE2	1:A:54:LEU:HD13	0.41	2.51	14	1
1:A:153:ASN:ND2	1:A:265:LEU:HD21	0.41	2.31	10	2
1:A:123:PHE:CZ	1:A:177:LEU:HD23	0.41	2.50	10	1
1:A:113:PHE:CE1	1:A:185:LEU:HD21	0.41	2.51	4	1
1:A:22:ILE:CB	1:A:77:VAL:HG13	0.41	2.46	3	1
1:A:117:SER:O	1:A:255:ILE:HD12	0.41	2.16	20	1
1:A:301:ILE:CB	1:A:304:LEU:HD23	0.41	2.45	1	1
1:A:49:LEU:HD22	1:A:244:GLN:H	0.41	1.75	5	1
1:A:70:GLN:CG	1:A:83:ILE:HG21	0.41	2.46	6	1
1:A:71:VAL:HG12	1:A:72:MET:N	0.40	2.31	17	1
1:A:176:LEU:HD22	1:A:176:LEU:N	0.40	2.32	1	1
1:A:66:VAL:HG22	1:A:70:GLN:O	0.40	2.16	1	1
1:A:176:LEU:N	1:A:176:LEU:HD13	0.40	2.32	18	1
1:A:70:GLN:HA	1:A:83:ILE:HD12	0.40	1.93	19	1
1:A:206:LEU:HD21	1:A:316:ILE:HB	0.40	1.92	14	1
1:A:71:VAL:HG13	1:A:72:MET:N	0.40	2.30	7	1
1:A:139:ILE:O	1:A:139:ILE:HG22	0.40	2.17	5	1
1:A:26:PHE:CD2	1:A:77:VAL:HG22	0.40	2.50	19	1
1:A:125:VAL:O	1:A:129:TYR:CB	0.40	2.70	19	1
1:A:100:LEU:HD13	1:A:121:TRP:CD1	0.40	2.51	10	1
1:A:165:LEU:HD23	1:A:174:TYR:OH	0.40	2.15	5	1
1:A:110:LEU:HG	1:A:136:ILE:HG22	0.40	1.92	19	1
1:A:304:LEU:N	1:A:304:LEU:HD23	0.40	2.31	9	1
1:A:126:LEU:HD13	1:A:322:PHE:CE2	0.40	2.51	18	1
1:A:313:HIS:HD2	1:A:314:VAL:HG13	0.40	1.75	15	1
1:A:71:VAL:CG2	1:A:80:LEU:HD11	0.40	2.47	11	1
1:A:123:PHE:CE1	1:A:126:LEU:HD22	0.40	2.52	16	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	294/343 (86%)	241±5 (82±2%)	41±6 (14±2%)	11±3 (4±1%)	7	34
All	All	5880/6860 (86%)	4825 (82%)	826 (14%)	229 (4%)	7	34

All 55 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	180	SER	19
1	A	75	SER	18
1	A	107	GLY	11
1	A	145	ASN	11
1	A	73	VAL	10
1	A	15	LYS	9
1	A	67	THR	9
1	A	105	GLY	8
1	A	131	ASP	8
1	A	130	LEU	7
1	A	338	HIS	7
1	A	33	ASP	6
1	A	207	ASP	6
1	A	133	GLN	6
1	A	71	VAL	5
1	A	32	CYS	5
1	A	11	GLY	5
1	A	301	ILE	5
1	A	47	HIS	4
1	A	269	ALA	4
1	A	36	ASP	4
1	A	134	TRP	4
1	A	116	ALA	3
1	A	208	THR	3
1	A	248	SER	3
1	A	249	THR	3
1	A	153	ASN	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	86	ALA	3
1	A	17	GLY	3
1	A	121	TRP	2
1	A	245	GLY	2
1	A	48	ALA	2
1	A	68	PRO	2
1	A	35	GLN	2
1	A	13	ALA	2
1	A	120	ALA	2
1	A	247	THR	2
1	A	147	PRO	2
1	A	243	GLN	2
1	A	103	ARG	2
1	A	119	PHE	1
1	A	135	SER	1
1	A	37	ALA	1
1	A	14	PRO	1
1	A	165	LEU	1
1	A	244	GLN	1
1	A	219	LYS	1
1	A	115	PRO	1
1	A	76	THR	1
1	A	97	GLU	1
1	A	242	ALA	1
1	A	70	GLN	1
1	A	325	ILE	1
1	A	118	GLY	1
1	A	69	GLY	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	231/273 (85%)	164±5 (71±2%)	67±5 (29±2%)	2	19
All	All	4620/5460 (85%)	3289 (71%)	1331 (29%)	2	19

All 187 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	251	LEU	20
1	A	285	ARG	19
1	A	67	THR	19
1	A	318	SER	19
1	A	266	LEU	18
1	A	64	ARG	18
1	A	203	LEU	18
1	A	79	LYS	17
1	A	41	PHE	17
1	A	282	VAL	17
1	A	80	LEU	17
1	A	54	LEU	16
1	A	259	TYR	16
1	A	75	SER	15
1	A	192	ARG	15
1	A	32	CYS	14
1	A	126	LEU	14
1	A	15	LYS	14
1	A	12	ARG	14
1	A	72	MET	14
1	A	130	LEU	14
1	A	249	THR	14
1	A	131	ASP	13
1	A	307	TYR	13
1	A	244	GLN	13
1	A	281	PHE	12
1	A	110	LEU	12
1	A	303	GLU	12
1	A	250	GLU	12
1	A	194	ARG	12
1	A	33	ASP	12
1	A	143	ARG	12
1	A	271	SER	12
1	A	308	ARG	12
1	A	141	SER	12
1	A	181	LEU	11
1	A	180	SER	11
1	A	148	MET	11
1	A	47	HIS	11
1	A	169	GLN	11
1	A	205	LEU	11
1	A	177	LEU	11
1	A	164	THR	10

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	27	SER	10
1	A	124	SER	10
1	A	103	ARG	10
1	A	40	ASP	10
1	A	184	THR	10
1	A	119	PHE	10
1	A	73	VAL	10
1	A	100	LEU	10
1	A	196	ARG	10
1	A	236	ARG	9
1	A	240	LEU	9
1	A	202	PHE	9
1	A	123	PHE	9
1	A	286	THR	9
1	A	98	THR	9
1	A	235	GLU	9
1	A	199	GLN	9
1	A	140	GLN	9
1	A	225	ASP	9
1	A	207	ASP	9
1	A	246	SER	9
1	A	315	ASP	9
1	A	114	HIS	8
1	A	270	HIS	8
1	A	176	LEU	8
1	A	337	GLU	8
1	A	277	LYS	8
1	A	65	GLN	8
1	A	206	LEU	8
1	A	335	ARG	8
1	A	284	GLU	8
1	A	321	THR	8
1	A	155	ASP	8
1	A	218	GLU	8
1	A	316	ILE	8
1	A	256	GLU	7
1	A	187	GLN	7
1	A	167	GLU	7
1	A	153	ASN	7
1	A	36	ASP	7
1	A	280	LEU	7
1	A	279	THR	7

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	53	LYS	7
1	A	306	ILE	7
1	A	247	THR	7
1	A	243	GLN	7
1	A	162	LEU	7
1	A	127	SER	6
1	A	134	TRP	6
1	A	174	TYR	6
1	A	30	LEU	6
1	A	217	GLN	6
1	A	329	ILE	6
1	A	104	GLU	6
1	A	129	TYR	6
1	A	248	SER	6
1	A	122	GLN	6
1	A	52	MET	6
1	A	113	PHE	6
1	A	57	GLN	6
1	A	35	GLN	6
1	A	305	ASP	6
1	A	106	ASN	6
1	A	330	ARG	6
1	A	19	GLU	6
1	A	49	LEU	6
1	A	135	SER	5
1	A	149	GLN	5
1	A	328	ILE	5
1	A	287	LEU	5
1	A	231	GLU	5
1	A	219	LYS	5
1	A	165	LEU	5
1	A	216	TRP	5
1	A	133	GLN	5
1	A	171	HIS	5
1	A	18	SER	5
1	A	161	HIS	5
1	A	70	GLN	5
1	A	237	GLU	5
1	A	38	ASP	5
1	A	117	SER	5
1	A	208	THR	4
1	A	264	ARG	4

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	301	ILE	4
1	A	136	ILE	4
1	A	66	VAL	4
1	A	324	LYS	4
1	A	168	GLN	4
1	A	175	TYR	4
1	A	313	HIS	4
1	A	268	THR	4
1	A	185	LEU	4
1	A	338	HIS	4
1	A	50	LEU	4
1	A	97	GLU	4
1	A	145	ASN	4
1	A	323	GLU	3
1	A	22	ILE	3
1	A	21	ILE	3
1	A	275	ASP	3
1	A	112	CYS	3
1	A	20	THR	3
1	A	325	ILE	3
1	A	311	CYS	3
1	A	82	THR	2
1	A	76	THR	2
1	A	99	ILE	2
1	A	111	PHE	2
1	A	83	ILE	2
1	A	179	TYR	2
1	A	109	THR	2
1	A	234	ARG	2
1	A	198	GLU	2
1	A	158	CYS	2
1	A	150	THR	2
1	A	258	ASN	2
1	A	227	GLU	2
1	A	274	PHE	2
1	A	261	ASP	1
1	A	26	PHE	1
1	A	60	ARG	1
1	A	128	ARG	1
1	A	228	VAL	1
1	A	156	GLU	1
1	A	137	ILE	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	317	ILE	1
1	A	159	GLU	1
1	A	304	LEU	1
1	A	193	LEU	1
1	A	254	THR	1
1	A	59	SER	1
1	A	224	LEU	1
1	A	310	ASP	1
1	A	42	PHE	1
1	A	121	TRP	1
1	A	139	ILE	1
1	A	232	ILE	1
1	A	34	VAL	1
1	A	125	VAL	1
1	A	239	PHE	1
1	A	265	LEU	1
1	A	28	SER	1
1	A	229	LEU	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 ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

## 7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided