



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 15, 2026 – 10:12 AM UTC

PDB ID : 1DEF / pdb_00001def
Title : PEPTIDE DEFORMYLASE CATALYTIC CORE (RESIDUES 1-147), NMR,
9 STRUCTURES
Authors : Meinnel, T.; Dardel, F.
Deposited on : 1996-03-19

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

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

A user guide is available at

<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	:	4-5-2 with Phenix2.0
Percentile statistics	:	20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
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)	:	2.49

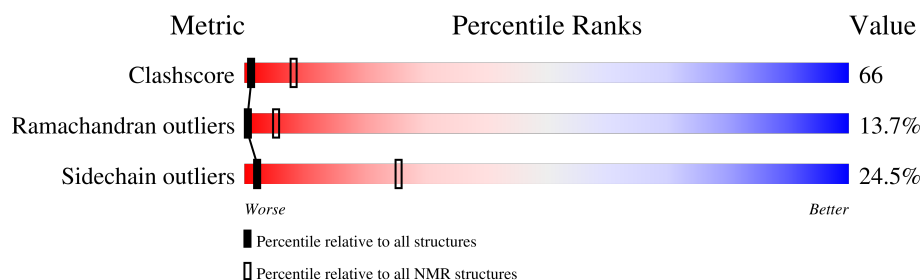
1 Overall quality at a glance

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	229148	14424
Ramachandran outliers	224038	12848
Sidechain outliers	223484	12823

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	147	15% 39% 21% 14% 11%

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 9 models. Model 8 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:3-A:7, A:12-A:62, A:68-A:142 (131)	1.66	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 3 clusters. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	3, 7, 8, 9
2	2, 4, 6
3	1, 5

3 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2352 atoms, of which 1185 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called PEPTIDE DEFORMYLASE.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	147	Total	C	H	N	O	S	0
			2351	732	1185	201	227	6	

- Molecule 2 is ZINC ION (CCD ID: ZN) (formula: Zn).

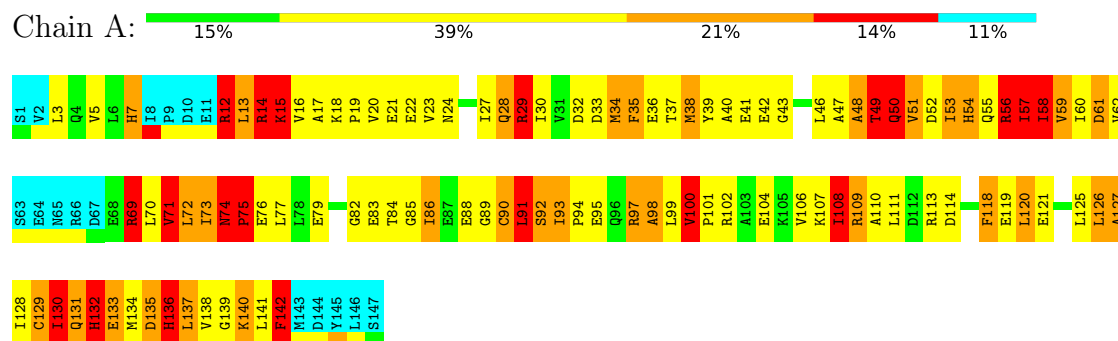
Mol	Chain	Residues	Atoms	
2	A	1	Total	Zn
			1	1

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA, 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: PEPTIDE DEFORMYLASE

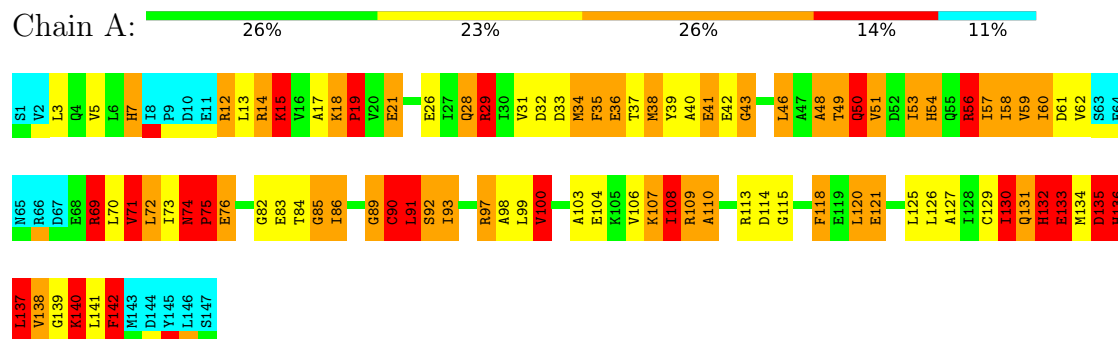


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

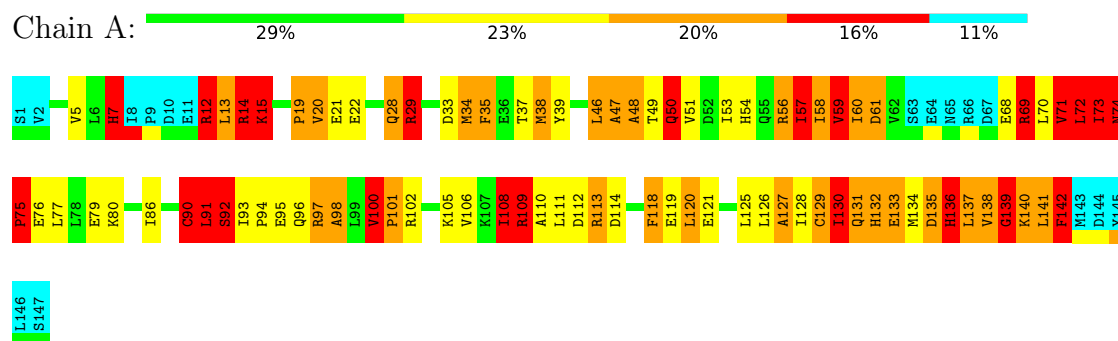
4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: PEPTIDE DEFORMYLASE



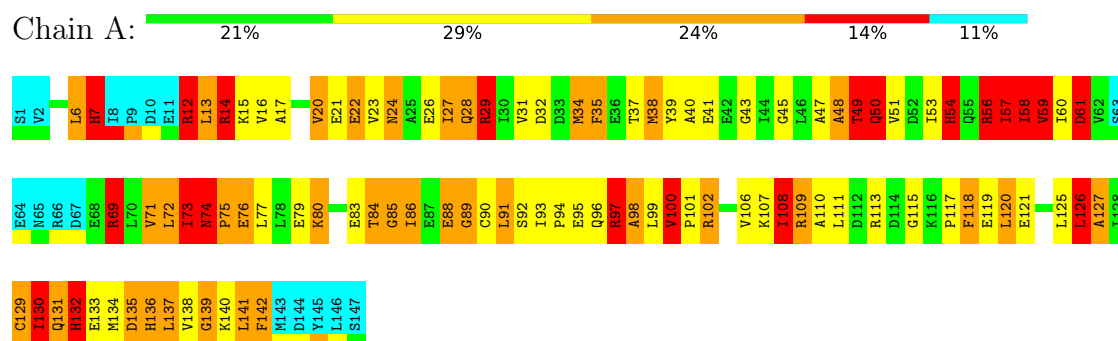
4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: PEPTIDE DEFORMYLASE



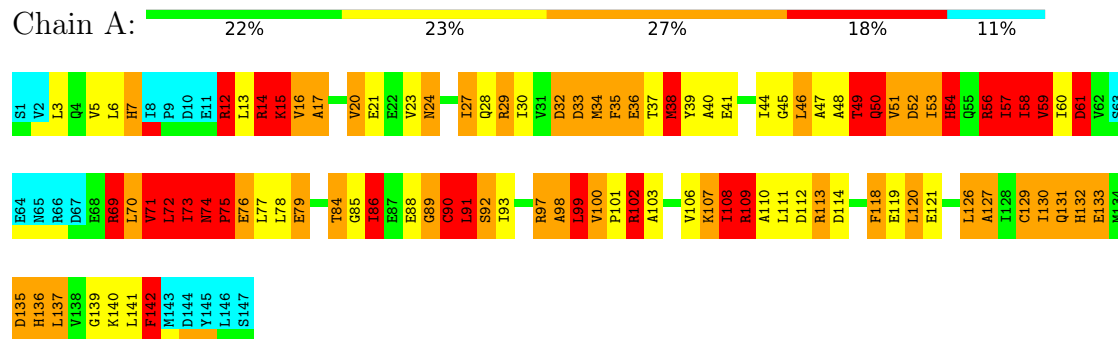
4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: PEPTIDE DEFORMYLASE



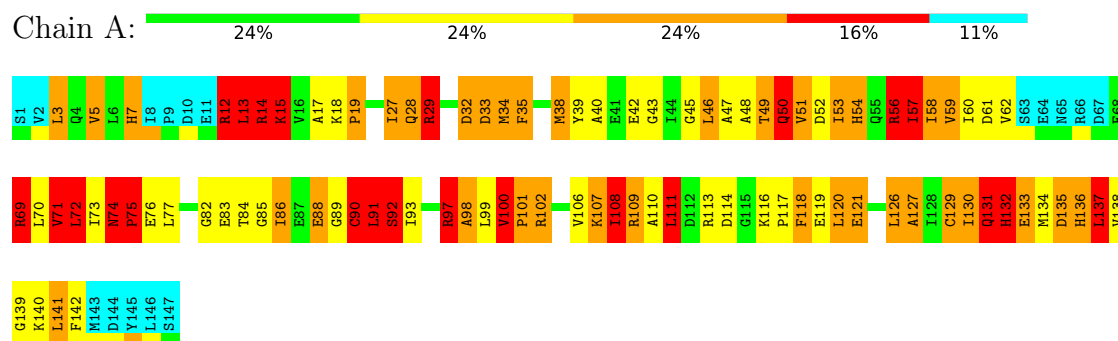
4.2.4 Score per residue for model 4

• Molecule 1: PEPTIDE DEFORMYLASE



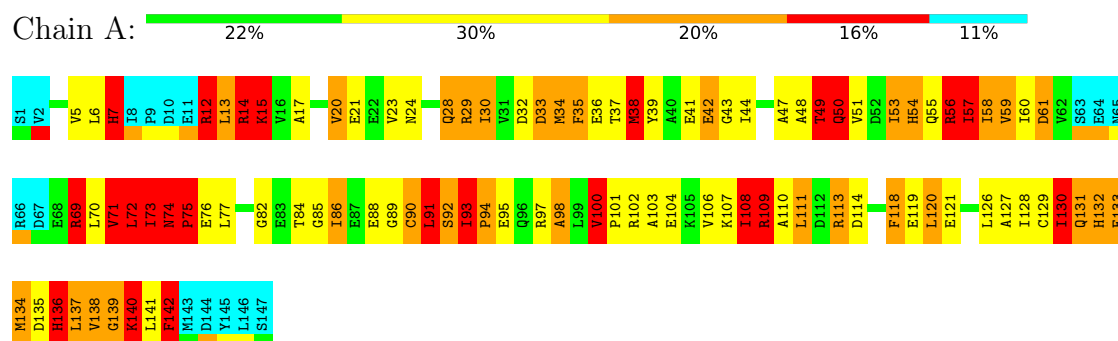
4.2.5 Score per residue for model 5

• Molecule 1: PEPTIDE DEFORMYLASE



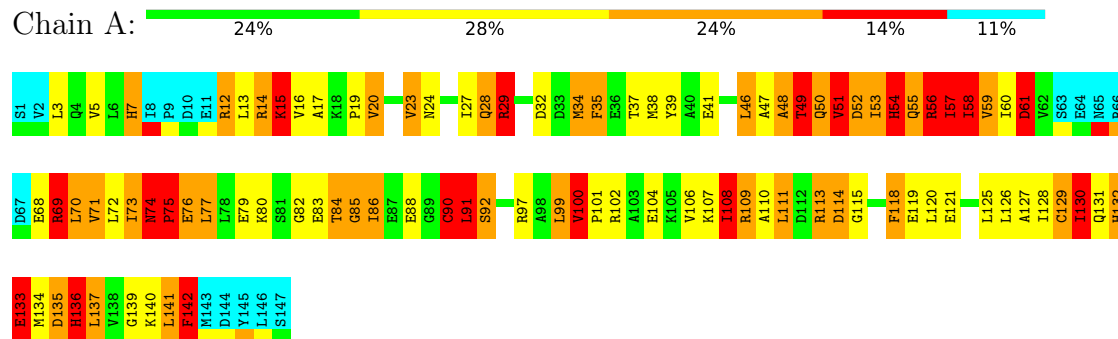
4.2.6 Score per residue for model 6

• Molecule 1: PEPTIDE DEFORMYLASE



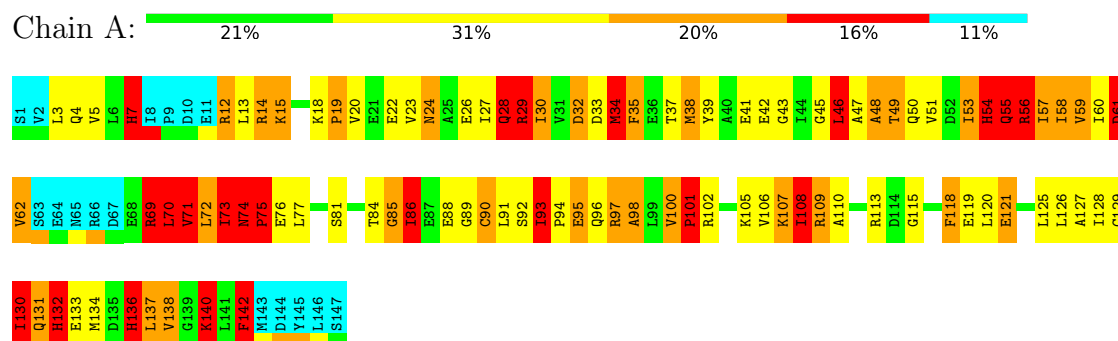
4.2.7 Score per residue for model 7

• Molecule 1: PEPTIDE DEFORMYLASE



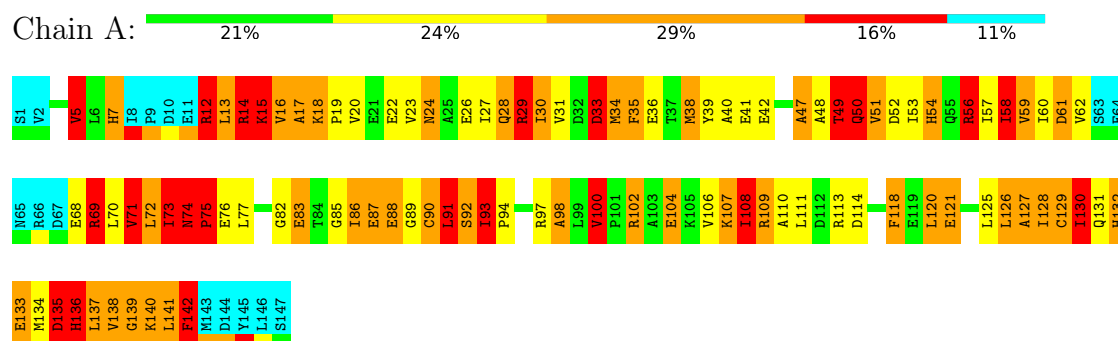
4.2.8 Score per residue for model 8 (medoid)

• Molecule 1: PEPTIDE DEFORMYLASE



4.2.9 Score per residue for model 9

• Molecule 1: PEPTIDE DEFORMYLASE



5 Refinement protocol and experimental data overview

Of the ? calculated structures, 9 were deposited, based on the following criterion: ?.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	

No chemical shift data was provided.

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.63±0.02	8±0/1049 (0.8± 0.0%)	2.70±0.08	80±7/1416 (5.7± 0.5%)
All	All	1.63	73/9441 (0.8%)	2.70	721/12744 (5.7%)

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	10.0±0.9
All	All	0	90

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	136	HIS	CG-ND1	-8.13	1.29	1.38	2	9
1	A	54	HIS	CG-ND1	-7.73	1.29	1.38	9	9
1	A	136	HIS	CD2-NE2	-7.52	1.29	1.37	9	9
1	A	132	HIS	CG-ND1	-7.40	1.30	1.38	7	9
1	A	7	HIS	CG-ND1	-7.36	1.30	1.38	2	9
1	A	7	HIS	CD2-NE2	-6.89	1.30	1.37	7	9
1	A	54	HIS	CD2-NE2	-6.39	1.30	1.37	7	9
1	A	132	HIS	CD2-NE2	-6.12	1.31	1.37	4	9
1	A	59	VAL	CA-CB	-5.09	1.47	1.55	5	1

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	136	HIS	CA-CB-CG	32.76	146.56	113.80	3	9
1	A	132	HIS	CA-CB-CG	21.49	135.29	113.80	5	7
1	A	118	PHE	CA-CB-CG	20.43	134.23	113.80	3	8
1	A	132	HIS	N-CA-C	-17.91	91.91	111.07	2	6
1	A	7	HIS	CA-CB-CG	-17.62	96.18	113.80	6	6
1	A	142	PHE	CA-CB-CG	-17.07	96.72	113.80	2	7
1	A	54	HIS	CA-CB-CG	-17.00	96.80	113.80	2	6
1	A	71	VAL	N-CA-CB	-16.77	93.23	112.34	9	9
1	A	34	MET	N-CA-C	-15.76	93.69	113.23	5	9
1	A	59	VAL	N-CA-C	15.36	130.92	108.65	3	9
1	A	136	HIS	N-CA-C	-15.26	90.07	112.04	1	7
1	A	135	ASP	N-CA-C	-14.02	94.44	111.69	4	4
1	A	131	GLN	N-CA-C	-13.25	96.80	113.23	5	6
1	A	35	PHE	N-CA-C	-13.03	97.07	111.14	7	9
1	A	140	LYS	N-CA-C	-12.94	94.85	111.02	9	4
1	A	76	GLU	N-CA-C	-12.91	81.75	107.69	5	9
1	A	141	LEU	N-CA-C	12.63	126.36	112.97	3	4
1	A	54	HIS	N-CA-C	12.50	126.49	108.86	1	6
1	A	109	ARG	N-CA-C	-12.37	86.40	107.80	8	9
1	A	15	LYS	N-CA-C	12.27	128.68	110.52	5	6
1	A	127	ALA	N-CA-C	-12.01	96.70	111.11	3	5
1	A	139	GLY	N-CA-C	-11.73	95.38	115.80	4	4
1	A	132	HIS	CB-CA-C	-11.53	93.07	110.95	6	3
1	A	95	GLU	N-CA-C	-11.50	95.03	110.55	2	2
1	A	51	VAL	CA-CB-CG2	-11.23	91.31	110.40	5	8
1	A	46	LEU	N-CA-C	-10.81	94.92	110.59	7	4
1	A	62	VAL	N-CA-C	-10.79	86.90	109.34	8	1
1	A	53	ILE	N-CA-C	-10.75	94.16	108.35	6	6
1	A	26	GLU	N-CA-C	-10.13	99.75	112.72	8	2
1	A	91	LEU	CA-C-N	10.03	140.70	121.54	2	3
1	A	91	LEU	C-N-CA	10.03	140.70	121.54	2	3
1	A	50	GLN	CB-CG-CD	9.96	129.54	112.60	1	1
1	A	74	ASN	CA-CB-CG	-9.88	102.72	112.60	8	2
1	A	70	LEU	N-CA-C	9.72	124.84	110.46	7	2
1	A	142	PHE	N-CA-CB	-9.67	94.14	110.49	8	2
1	A	114	ASP	N-CA-C	-9.64	100.77	111.28	4	4
1	A	108	ILE	N-CA-C	9.59	122.69	109.46	9	4
1	A	20	VAL	N-CA-C	9.55	123.89	108.99	6	5
1	A	132	HIS	CB-CG-CD2	-9.54	118.79	131.20	2	2
1	A	141	LEU	N-CA-CB	-9.53	95.94	110.42	9	1
1	A	100	VAL	CA-CB-CG2	9.48	126.52	110.40	3	4
1	A	137	LEU	N-CA-C	9.36	124.96	112.13	5	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	118	PHE	N-CA-C	9.34	124.62	109.40	5	2
1	A	108	ILE	O-C-N	9.29	130.76	122.12	9	8
1	A	132	HIS	O-C-N	9.28	132.05	122.03	6	6
1	A	85	GLY	N-CA-C	-9.07	102.23	111.85	3	4
1	A	98	ALA	N-CA-C	9.07	120.75	108.23	9	3
1	A	30	ILE	N-CA-C	-8.91	101.28	111.00	6	2
1	A	96	GLN	N-CA-C	8.86	123.85	109.85	2	2
1	A	84	THR	N-CA-C	8.85	129.65	110.80	7	2
1	A	136	HIS	CE1-NE2-CD2	-8.81	100.19	109.00	9	2
1	A	132	HIS	CB-CG-ND1	8.67	135.70	122.70	2	2
1	A	62	VAL	O-C-N	8.61	133.34	122.57	8	1
1	A	136	HIS	CB-CG-ND1	-8.51	109.94	122.70	8	2
1	A	106	VAL	N-CA-C	8.48	120.04	108.17	5	8
1	A	57	ILE	N-CA-C	-8.41	96.33	108.36	9	2
1	A	7	HIS	N-CA-C	8.38	124.13	107.62	6	3
1	A	16	VAL	N-CA-C	8.37	118.68	111.90	3	1
1	A	16	VAL	O-C-N	8.34	130.74	122.07	3	1
1	A	49	THR	N-CA-C	8.30	128.48	110.80	9	2
1	A	69	ARG	O-C-N	8.30	132.33	122.46	9	1
1	A	12	ARG	O-C-N	8.28	133.61	122.59	6	2
1	A	133	GLU	N-CA-C	-8.17	97.97	111.37	7	3
1	A	49	THR	CA-C-N	8.14	137.09	121.54	9	3
1	A	49	THR	C-N-CA	8.14	137.09	121.54	9	3
1	A	77	LEU	N-CA-C	8.14	122.39	110.59	2	8
1	A	88	GLU	N-CA-C	8.12	128.09	110.80	9	2
1	A	91	LEU	N-CA-C	8.06	127.97	110.80	2	6
1	A	71	VAL	CB-CA-C	8.03	122.62	111.70	9	9
1	A	136	HIS	CG-CD2-NE2	8.03	115.23	107.20	9	1
1	A	50	GLN	OE1-CD-NE2	-7.98	114.62	122.60	1	2
1	A	90	CYS	N-CA-CB	-7.95	97.05	110.49	4	6
1	A	76	GLU	N-CA-CB	-7.90	97.11	110.46	1	3
1	A	73	ILE	N-CA-CB	-7.81	98.34	111.23	6	5
1	A	58	ILE	CA-CB-CG2	7.80	123.77	110.50	5	6
1	A	90	CYS	N-CA-C	7.76	122.58	107.98	7	7
1	A	100	VAL	CG1-CB-CG2	-7.74	93.77	110.80	7	7
1	A	72	LEU	N-CA-C	-7.74	97.61	109.14	4	4
1	A	104	GLU	N-CA-C	-7.72	102.84	112.72	9	3
1	A	120	LEU	N-CA-C	7.72	121.95	108.75	2	8
1	A	62	VAL	CA-C-O	7.70	130.41	120.78	8	1
1	A	101	PRO	N-CA-C	7.64	122.26	111.33	5	2
1	A	130	ILE	CA-CB-CG2	-7.62	97.54	110.50	6	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	99	LEU	N-CA-C	-7.59	94.63	110.80	4	2
1	A	135	ASP	CA-C-N	7.55	133.80	122.17	9	2
1	A	135	ASP	C-N-CA	7.55	133.80	122.17	9	2
1	A	136	HIS	CB-CG-CD2	7.48	140.92	131.20	8	2
1	A	68	GLU	N-CA-C	-7.46	98.39	109.81	7	1
1	A	40	ALA	N-CA-C	7.42	122.33	113.28	5	1
1	A	139	GLY	CA-C-N	-7.41	107.13	121.06	7	1
1	A	139	GLY	C-N-CA	-7.41	107.13	121.06	7	1
1	A	50	GLN	N-CA-C	7.38	126.53	110.80	1	4
1	A	72	LEU	CA-C-O	-7.38	113.06	121.40	1	3
1	A	5	VAL	N-CA-C	-7.30	102.09	110.05	1	1
1	A	60	ILE	N-CA-C	-7.29	96.99	108.81	5	4
1	A	50	GLN	CG-CD-NE2	7.22	127.23	116.40	1	1
1	A	74	ASN	CA-C-N	7.20	128.84	119.84	7	9
1	A	74	ASN	C-N-CA	7.20	128.84	119.84	7	9
1	A	48	ALA	N-CA-C	-7.17	95.52	110.80	4	2
1	A	84	THR	OG1-CB-CG2	-7.15	95.00	109.30	3	1
1	A	12	ARG	CA-C-O	7.10	130.66	120.51	6	1
1	A	100	VAL	N-CA-C	7.08	124.17	108.88	7	2
1	A	57	ILE	CA-CB-CG2	-7.07	98.48	110.50	4	5
1	A	69	ARG	N-CA-CB	-7.06	100.00	110.17	5	2
1	A	35	PHE	CA-CB-CG	-7.06	106.74	113.80	3	3
1	A	15	LYS	CB-CA-C	-7.04	98.46	110.22	2	2
1	A	138	VAL	CA-C-N	-7.03	111.62	122.30	9	1
1	A	138	VAL	C-N-CA	-7.03	111.62	122.30	9	1
1	A	17	ALA	N-CA-C	-7.02	98.78	109.95	5	2
1	A	7	HIS	CB-CG-ND1	7.01	133.21	122.70	9	2
1	A	133	GLU	CA-C-N	-7.00	110.51	122.56	4	3
1	A	133	GLU	C-N-CA	-7.00	110.51	122.56	4	3
1	A	62	VAL	CB-CA-C	7.00	122.77	111.29	8	1
1	A	62	VAL	N-CA-CB	-6.99	99.69	111.23	8	1
1	A	129	CYS	N-CA-C	6.96	119.89	111.40	4	3
1	A	7	HIS	O-C-N	6.89	129.94	122.64	2	3
1	A	86	ILE	N-CA-C	6.88	119.33	108.87	4	1
1	A	89	GLY	N-CA-C	-6.86	96.92	113.18	4	2
1	A	49	THR	CA-CB-OG1	-6.82	99.37	109.60	9	2
1	A	132	HIS	N-CA-CB	6.82	119.86	109.98	6	1
1	A	100	VAL	CA-CB-CG1	-6.73	98.96	110.40	7	1
1	A	136	HIS	N-CA-CB	6.73	120.28	110.26	3	3
1	A	50	GLN	CA-C-N	-6.71	110.88	121.02	2	5
1	A	50	GLN	C-N-CA	-6.71	110.88	121.02	2	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	61	ASP	CA-CB-CG	-6.71	105.89	112.60	3	1
1	A	56	ARG	CA-C-N	-6.71	113.72	122.37	1	2
1	A	56	ARG	C-N-CA	-6.71	113.72	122.37	1	2
1	A	76	GLU	CB-CA-C	6.70	122.75	111.22	1	5
1	A	49	THR	O-C-N	6.69	131.49	122.59	4	4
1	A	108	ILE	CA-CB-CG1	-6.69	99.02	110.40	4	3
1	A	126	LEU	CA-C-O	-6.69	113.77	120.80	4	1
1	A	12	ARG	N-CA-CB	-6.69	99.18	110.49	5	1
1	A	20	VAL	N-CA-CB	-6.66	103.20	112.52	3	4
1	A	53	ILE	CA-CB-CG2	-6.64	99.21	110.50	4	3
1	A	14	ARG	N-CA-C	-6.64	102.31	110.61	4	1
1	A	69	ARG	CA-CB-CG	6.63	127.36	114.10	9	1
1	A	61	ASP	N-CA-C	-6.62	99.35	109.41	4	3
1	A	59	VAL	N-CA-CB	-6.62	100.12	112.36	9	2
1	A	55	GLN	CA-CB-CG	-6.61	100.87	114.10	8	1
1	A	132	HIS	CA-C-O	6.59	127.74	120.82	2	2
1	A	7	HIS	CE1-NE2-CD2	-6.58	102.42	109.00	9	7
1	A	18	LYS	CA-C-N	6.52	127.99	119.84	1	2
1	A	18	LYS	C-N-CA	6.52	127.99	119.84	1	2
1	A	61	ASP	CB-CA-C	-6.46	102.91	111.82	9	1
1	A	7	HIS	CG-CD2-NE2	6.43	113.63	107.20	9	2
1	A	51	VAL	N-CA-C	-6.36	96.10	109.34	6	1
1	A	3	LEU	N-CA-C	6.36	118.08	110.44	7	1
1	A	102	ARG	N-CA-C	6.36	119.69	109.83	5	2
1	A	131	GLN	CB-CG-CD	-6.35	101.80	112.60	5	3
1	A	29	ARG	CA-C-N	-6.32	111.44	120.42	9	3
1	A	29	ARG	C-N-CA	-6.32	111.44	120.42	9	3
1	A	16	VAL	CA-C-O	6.30	126.23	120.30	3	1
1	A	136	HIS	CB-CA-C	-6.27	99.09	110.56	5	1
1	A	129	CYS	CB-CA-C	-6.26	100.27	110.79	3	5
1	A	86	ILE	N-CA-CB	-6.25	104.22	112.34	8	1
1	A	15	LYS	N-CA-CB	-6.24	99.94	110.49	7	1
1	A	87	GLU	CA-C-N	6.23	133.43	121.54	9	1
1	A	87	GLU	C-N-CA	6.23	133.43	121.54	9	1
1	A	106	VAL	CA-C-N	-6.19	114.54	122.77	8	5
1	A	106	VAL	C-N-CA	-6.19	114.54	122.77	8	5
1	A	98	ALA	CB-CA-C	-6.19	99.35	110.36	4	1
1	A	111	LEU	N-CA-CB	-6.17	100.47	110.71	5	1
1	A	28	GLN	CB-CA-C	-6.16	100.96	110.81	3	2
1	A	15	LYS	O-C-N	6.15	130.57	122.33	9	1
1	A	141	LEU	CA-C-O	-6.14	113.22	122.38	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	133	GLU	N-CA-CB	-6.13	101.13	110.01	4	1
1	A	100	VAL	CB-CA-C	-6.12	107.89	113.70	1	1
1	A	50	GLN	CA-CB-CG	-6.11	101.88	114.10	3	1
1	A	92	SER	O-C-N	6.11	130.72	122.59	4	2
1	A	69	ARG	CA-C-O	6.09	129.38	122.37	9	1
1	A	93	ILE	CA-C-N	6.06	127.42	119.84	6	1
1	A	93	ILE	C-N-CA	6.06	127.42	119.84	6	1
1	A	86	ILE	CA-CB-CG2	6.05	120.79	110.50	8	1
1	A	132	HIS	CE1-NE2-CD2	-6.04	102.96	109.00	7	3
1	A	22	GLU	O-C-N	6.04	127.71	121.79	9	1
1	A	91	LEU	O-C-N	6.04	130.62	122.59	9	1
1	A	137	LEU	O-C-N	6.03	128.51	122.12	6	1
1	A	58	ILE	N-CA-C	-6.03	96.81	109.34	7	2
1	A	107	LYS	CA-C-O	5.97	126.85	120.46	7	3
1	A	47	ALA	N-CA-C	5.96	119.16	110.17	9	2
1	A	126	LEU	N-CA-C	-5.92	105.14	112.72	9	2
1	A	19	PRO	CA-C-N	-5.92	115.33	122.90	1	2
1	A	19	PRO	C-N-CA	-5.92	115.33	122.90	1	2
1	A	141	LEU	CA-C-N	5.91	132.84	121.54	9	2
1	A	141	LEU	C-N-CA	5.91	132.84	121.54	9	2
1	A	38	MET	CA-CB-CG	-5.90	102.30	114.10	4	2
1	A	98	ALA	O-C-N	5.90	131.17	122.97	4	1
1	A	130	ILE	N-CA-C	-5.88	104.39	113.16	1	2
1	A	75	PRO	N-CA-C	5.88	124.59	112.47	5	4
1	A	60	ILE	CB-CA-C	-5.82	102.83	111.80	1	2
1	A	24	ASN	N-CA-C	5.82	115.70	108.19	8	1
1	A	130	ILE	CA-CB-CG1	5.81	120.27	110.40	9	1
1	A	14	ARG	CA-C-N	-5.80	114.47	122.30	2	2
1	A	14	ARG	C-N-CA	-5.80	114.47	122.30	2	2
1	A	131	GLN	CA-C-O	-5.78	114.75	120.70	3	1
1	A	60	ILE	CA-C-N	-5.77	113.13	122.82	4	3
1	A	60	ILE	C-N-CA	-5.77	113.13	122.82	4	3
1	A	133	GLU	CA-CB-CG	5.76	125.62	114.10	1	1
1	A	59	VAL	CG1-CB-CG2	5.75	123.45	110.80	4	3
1	A	84	THR	N-CA-CB	-5.74	100.79	110.49	7	2
1	A	137	LEU	N-CA-CB	-5.74	101.19	110.14	8	1
1	A	88	GLU	CA-CB-CG	-5.72	102.66	114.10	8	1
1	A	115	GLY	N-CA-C	-5.71	99.66	113.18	7	4
1	A	32	ASP	CA-C-N	-5.67	111.52	122.06	4	3
1	A	32	ASP	C-N-CA	-5.67	111.52	122.06	4	3
1	A	130	ILE	CA-C-N	-5.65	112.75	120.44	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	130	ILE	C-N-CA	-5.65	112.75	120.44	3	1
1	A	21	GLU	N-CA-C	-5.63	105.52	112.72	1	2
1	A	114	ASP	CA-CB-CG	-5.62	106.98	112.60	2	3
1	A	46	LEU	O-C-N	5.61	130.06	122.59	2	1
1	A	69	ARG	CB-CA-C	5.60	119.85	109.54	5	1
1	A	33	ASP	CA-CB-CG	-5.58	107.02	112.60	9	1
1	A	56	ARG	N-CA-C	5.54	119.31	108.18	1	2
1	A	139	GLY	O-C-N	5.53	129.89	122.70	6	2
1	A	59	VAL	CA-C-N	-5.48	114.33	122.23	7	1
1	A	59	VAL	C-N-CA	-5.48	114.33	122.23	7	1
1	A	107	LYS	CB-CA-C	5.48	119.24	109.38	4	1
1	A	59	VAL	CB-CA-C	-5.44	101.98	110.52	3	1
1	A	55	GLN	N-CA-C	5.44	118.50	110.46	6	2
1	A	69	ARG	N-CA-C	-5.43	99.10	108.56	9	1
1	A	102	ARG	CA-C-O	-5.43	116.62	121.67	5	2
1	A	140	LYS	O-C-N	5.41	130.20	123.32	9	1
1	A	136	HIS	ND1-CE1-NE2	5.40	113.80	108.40	4	2
1	A	34	MET	CA-CB-CG	-5.40	103.30	114.10	4	1
1	A	62	VAL	CA-CB-CG2	-5.39	101.24	110.40	8	1
1	A	50	GLN	CB-CA-C	-5.37	99.73	110.42	2	2
1	A	29	ARG	O-C-N	5.37	129.73	122.59	5	3
1	A	13	LEU	N-CA-C	-5.35	106.44	113.12	6	1
1	A	86	ILE	CB-CG1-CD1	-5.34	102.58	113.80	8	1
1	A	107	LYS	N-CA-CB	-5.34	102.09	110.69	4	1
1	A	6	LEU	N-CA-C	-5.34	102.29	110.14	3	2
1	A	46	LEU	CA-C-O	5.33	128.14	120.51	2	1
1	A	32	ASP	CA-CB-CG	-5.32	107.28	112.60	1	1
1	A	131	GLN	N-CA-CB	-5.32	102.57	110.61	2	1
1	A	111	LEU	CB-CA-C	5.32	118.84	109.80	7	2
1	A	5	VAL	N-CA-CB	-5.29	106.21	112.40	5	3
1	A	88	GLU	O-C-N	5.28	128.90	122.14	5	1
1	A	74	ASN	OD1-CG-ND2	-5.28	117.32	122.60	3	1
1	A	138	VAL	CA-C-O	-5.27	115.47	120.95	9	1
1	A	136	HIS	CA-C-N	-5.26	111.32	121.58	9	2
1	A	136	HIS	C-N-CA	-5.26	111.32	121.58	9	2
1	A	142	PHE	CB-CA-C	-5.26	105.00	114.52	3	2
1	A	90	CYS	O-C-N	5.25	129.25	122.43	6	1
1	A	100	VAL	N-CA-CB	-5.24	103.88	111.21	7	2
1	A	75	PRO	O-C-N	5.19	129.65	122.64	5	2
1	A	49	THR	OG1-CB-CG2	-5.18	98.94	109.30	9	1
1	A	107	LYS	O-C-N	5.17	129.24	123.19	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	98	ALA	N-CA-CB	5.16	118.38	110.70	4	1
1	A	28	GLN	N-CA-CB	5.15	117.61	109.94	3	1
1	A	73	ILE	N-CA-C	5.13	120.02	109.34	3	1
1	A	102	ARG	CD-NE-CZ	-5.12	117.23	124.40	3	1
1	A	97	ARG	N-CA-C	5.12	117.91	109.72	4	1
1	A	83	GLU	CA-C-N	5.11	131.30	121.54	7	1
1	A	83	GLU	C-N-CA	5.11	131.30	121.54	7	1
1	A	7	HIS	CB-CG-CD2	-5.10	124.56	131.20	9	2
1	A	7	HIS	CA-C-O	5.10	126.22	120.00	8	1
1	A	28	GLN	OE1-CD-NE2	-5.07	117.53	122.60	3	1
1	A	53	ILE	CA-C-O	-5.06	116.36	121.67	5	1
1	A	34	MET	N-CA-CB	-5.06	102.52	110.46	3	1
1	A	28	GLN	O-C-N	5.06	127.93	122.11	7	1
1	A	39	TYR	N-CA-C	5.05	116.87	111.36	2	1
1	A	129	CYS	CA-C-N	-5.03	112.52	120.47	9	1
1	A	129	CYS	C-N-CA	-5.03	112.52	120.47	9	1
1	A	44	ILE	N-CA-C	-5.02	107.49	111.81	6	1
1	A	133	GLU	CB-CA-C	5.02	118.76	110.88	4	1
1	A	41	GLU	CB-CA-C	-5.01	104.44	111.65	4	1
1	A	61	ASP	N-CA-CB	-5.01	102.25	111.37	7	1
1	A	84	THR	O-C-N	5.01	129.25	122.59	7	1
1	A	110	ALA	N-CA-CB	-5.01	102.03	110.49	1	1
1	A	92	SER	N-CA-CB	-5.00	102.03	110.49	5	1
1	A	142	PHE	CB-CG-CD2	-5.00	112.20	120.70	8	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	12	ARG	Sidechain	9
1	A	14	ARG	Sidechain	9
1	A	29	ARG	Sidechain	9
1	A	56	ARG	Sidechain	9
1	A	69	ARG	Sidechain	9
1	A	97	ARG	Sidechain	9
1	A	109	ARG	Sidechain	9
1	A	113	ARG	Sidechain	9
1	A	102	ARG	Sidechain	8
1	A	74	ASN	Peptide	7
1	A	93	ILE	Peptide	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	18	LYS	Peptide	1
1	A	100	VAL	Peptide	1

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	1036	1069	1069	140±14
All	All	9333	9621	9621	1258

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 66.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:PHE:CE2	1:A:69:ARG:HB2	0.95	1.95	7	2
1:A:100:VAL:CG2	1:A:136:HIS:HB3	0.92	1.95	3	1
1:A:132:HIS:CD2	1:A:136:HIS:CE1	0.91	2.57	8	7
1:A:132:HIS:CD2	1:A:136:HIS:CD2	0.91	2.58	7	3
1:A:133:GLU:O	1:A:136:HIS:HB2	0.90	1.66	4	5
1:A:129:CYS:O	1:A:132:HIS:HB3	0.87	1.68	2	6
1:A:90:CYS:SG	1:A:136:HIS:CE1	0.87	2.66	2	1
1:A:15:LYS:CB	1:A:50:GLN:HA	0.85	2.02	9	2
1:A:7:HIS:HB2	1:A:92:SER:CB	0.84	2.02	9	1
1:A:129:CYS:C	1:A:132:HIS:HB3	0.84	1.98	5	5
1:A:7:HIS:HB2	1:A:92:SER:CA	0.83	2.03	9	1
1:A:90:CYS:CB	1:A:136:HIS:CE1	0.82	2.63	5	4
1:A:132:HIS:CD2	1:A:136:HIS:NE2	0.82	2.48	6	4
1:A:100:VAL:HG21	1:A:141:LEU:HA	0.81	1.50	4	1
1:A:90:CYS:HB2	1:A:136:HIS:CD2	0.81	2.10	2	2
1:A:90:CYS:HB2	1:A:136:HIS:CE1	0.80	2.10	3	3
1:A:100:VAL:HG23	1:A:136:HIS:HB3	0.80	1.50	3	1
1:A:7:HIS:CE1	1:A:50:GLN:HB2	0.80	2.11	4	2
1:A:7:HIS:CD2	1:A:92:SER:HB3	0.80	2.11	5	2
1:A:7:HIS:HB2	1:A:92:SER:HA	0.79	1.53	9	1
1:A:15:LYS:HB2	1:A:50:GLN:CG	0.78	2.07	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:HIS:CE1	1:A:50:GLN:NE2	0.78	2.51	2	3
1:A:100:VAL:HG11	1:A:141:LEU:HB3	0.75	1.57	9	1
1:A:73:ILE:HG13	1:A:110:ALA:HB1	0.75	1.58	1	2
1:A:35:PHE:CD1	1:A:39:TYR:CZ	0.75	2.75	8	1
1:A:35:PHE:CE2	1:A:69:ARG:CB	0.75	2.69	7	1
1:A:35:PHE:CE1	1:A:59:VAL:HB	0.74	2.18	1	9
1:A:38:MET:SD	1:A:126:LEU:HB3	0.73	2.23	9	3
1:A:7:HIS:CD2	1:A:92:SER:CB	0.73	2.71	3	3
1:A:86:ILE:CD1	1:A:132:HIS:CD2	0.73	2.72	7	3
1:A:15:LYS:HB2	1:A:50:GLN:HA	0.73	1.61	9	2
1:A:7:HIS:CD2	1:A:12:ARG:HB2	0.72	2.19	3	1
1:A:90:CYS:CB	1:A:136:HIS:CD2	0.71	2.72	4	4
1:A:86:ILE:CD1	1:A:132:HIS:CG	0.71	2.73	7	1
1:A:100:VAL:HG12	1:A:140:LYS:CB	0.71	2.16	5	2
1:A:142:PHE:CD1	1:A:142:PHE:N	0.70	2.59	4	1
1:A:90:CYS:SG	1:A:98:ALA:HB3	0.69	2.27	6	2
1:A:35:PHE:CE1	1:A:69:ARG:HB2	0.69	2.21	2	1
1:A:7:HIS:CG	1:A:92:SER:HB3	0.69	2.22	3	3
1:A:15:LYS:HB3	1:A:54:HIS:CE1	0.69	2.22	4	1
1:A:35:PHE:CE1	1:A:69:ARG:HG3	0.69	2.23	6	2
1:A:48:ALA:O	1:A:49:THR:HB	0.68	1.87	9	4
1:A:35:PHE:CD1	1:A:59:VAL:HG21	0.68	2.23	8	4
1:A:129:CYS:HA	1:A:132:HIS:HB2	0.67	1.63	2	1
1:A:12:ARG:HB3	1:A:15:LYS:CG	0.67	2.20	5	2
1:A:133:GLU:HA	1:A:136:HIS:CE1	0.67	2.25	3	3
1:A:7:HIS:CD2	1:A:51:VAL:HG12	0.67	2.25	7	1
1:A:133:GLU:HA	1:A:136:HIS:ND1	0.66	2.06	5	7
1:A:86:ILE:HD11	1:A:132:HIS:CD2	0.66	2.25	9	3
1:A:7:HIS:CE1	1:A:92:SER:OG	0.66	2.48	2	1
1:A:7:HIS:CB	1:A:92:SER:HA	0.66	2.21	9	2
1:A:7:HIS:CD2	1:A:50:GLN:NE2	0.66	2.63	2	1
1:A:15:LYS:HZ2	1:A:50:GLN:HG2	0.66	1.51	4	1
1:A:15:LYS:HE3	1:A:54:HIS:NE2	0.66	2.06	7	1
1:A:7:HIS:HB2	1:A:92:SER:HB3	0.66	1.67	9	1
1:A:133:GLU:HG3	1:A:134:MET:N	0.65	2.07	2	1
1:A:100:VAL:HG11	1:A:140:LYS:HA	0.65	1.69	7	1
1:A:15:LYS:HG2	1:A:50:GLN:H	0.65	1.50	9	1
1:A:88:GLU:CA	1:A:98:ALA:H	0.65	2.04	9	1
1:A:100:VAL:HG11	1:A:140:LYS:CA	0.65	2.22	7	1
1:A:7:HIS:CG	1:A:92:SER:CB	0.65	2.80	8	3
1:A:100:VAL:HG21	1:A:142:PHE:N	0.64	2.07	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:73:ILE:HD12	1:A:118:PHE:CZ	0.64	2.28	9	2
1:A:18:LYS:HB2	1:A:54:HIS:CD2	0.64	2.28	8	1
1:A:7:HIS:CD2	1:A:50:GLN:HE21	0.64	2.11	2	1
1:A:100:VAL:CG1	1:A:140:LYS:HB2	0.64	2.22	5	2
1:A:132:HIS:HD2	1:A:136:HIS:CE1	0.63	2.11	2	4
1:A:7:HIS:CD2	1:A:12:ARG:CB	0.63	2.82	3	1
1:A:132:HIS:O	1:A:135:ASP:N	0.63	2.31	9	3
1:A:15:LYS:HG3	1:A:54:HIS:NE2	0.63	2.07	7	1
1:A:15:LYS:HG3	1:A:54:HIS:CE1	0.63	2.29	7	1
1:A:47:ALA:HA	1:A:133:GLU:HB3	0.63	1.68	6	6
1:A:54:HIS:CD2	1:A:54:HIS:N	0.63	2.64	7	2
1:A:38:MET:SD	1:A:130:ILE:HD11	0.63	2.33	6	3
1:A:7:HIS:CE1	1:A:50:GLN:CB	0.63	2.82	1	3
1:A:86:ILE:HD13	1:A:132:HIS:CG	0.63	2.29	7	1
1:A:88:GLU:HB3	1:A:98:ALA:N	0.63	2.09	9	1
1:A:129:CYS:CA	1:A:132:HIS:HB3	0.62	2.24	5	2
1:A:7:HIS:CE1	1:A:50:GLN:HE21	0.62	2.12	1	1
1:A:12:ARG:CB	1:A:15:LYS:HG3	0.62	2.25	4	4
1:A:74:ASN:HD22	1:A:74:ASN:H	0.62	1.38	1	2
1:A:7:HIS:NE2	1:A:51:VAL:HG12	0.62	2.08	7	1
1:A:34:MET:HB3	1:A:59:VAL:HG22	0.62	1.70	3	6
1:A:38:MET:SD	1:A:126:LEU:HD13	0.62	2.35	4	2
1:A:7:HIS:CB	1:A:92:SER:CB	0.62	2.77	9	1
1:A:88:GLU:CB	1:A:98:ALA:N	0.62	2.63	9	1
1:A:57:ILE:HG23	1:A:73:ILE:CD1	0.62	2.24	1	2
1:A:58:ILE:HG23	1:A:59:VAL:N	0.62	2.10	3	1
1:A:15:LYS:HE3	1:A:50:GLN:CG	0.62	2.24	4	1
1:A:28:GLN:CD	1:A:28:GLN:C	0.62	2.68	5	8
1:A:129:CYS:O	1:A:133:GLU:HG3	0.62	1.94	8	3
1:A:58:ILE:CG2	1:A:59:VAL:H	0.61	2.07	9	3
1:A:7:HIS:CE1	1:A:50:GLN:HB3	0.61	2.31	1	1
1:A:38:MET:SD	1:A:130:ILE:CG2	0.61	2.89	5	1
1:A:129:CYS:HA	1:A:132:HIS:CB	0.60	2.26	5	2
1:A:7:HIS:ND1	1:A:50:GLN:HB2	0.60	2.12	9	1
1:A:12:ARG:HG2	1:A:13:LEU:N	0.60	2.10	1	1
1:A:132:HIS:O	1:A:136:HIS:N	0.60	2.34	7	4
1:A:90:CYS:SG	1:A:142:PHE:CE1	0.60	2.94	7	2
1:A:69:ARG:HA	1:A:69:ARG:NH2	0.60	2.12	5	1
1:A:7:HIS:NE2	1:A:50:GLN:NE2	0.60	2.50	2	1
1:A:100:VAL:HG22	1:A:142:PHE:CD2	0.60	2.32	8	2
1:A:125:LEU:O	1:A:129:CYS:SG	0.60	2.60	7	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:ILE:HD11	1:A:136:HIS:CD2	0.60	2.32	5	3
1:A:69:ARG:HA	1:A:69:ARG:HH21	0.60	1.57	5	1
1:A:86:ILE:HD11	1:A:132:HIS:NE2	0.60	2.11	9	1
1:A:100:VAL:CG2	1:A:142:PHE:N	0.60	2.65	9	1
1:A:100:VAL:CG2	1:A:142:PHE:CD2	0.60	2.85	1	2
1:A:49:THR:O	1:A:49:THR:HG22	0.60	1.97	7	1
1:A:73:ILE:HG21	1:A:110:ALA:CB	0.59	2.27	6	4
1:A:86:ILE:HB	1:A:132:HIS:CE1	0.59	2.32	4	1
1:A:101:PRO:CD	1:A:132:HIS:ND1	0.59	2.65	7	2
1:A:15:LYS:HB2	1:A:50:GLN:HG3	0.59	1.73	1	2
1:A:71:VAL:HG12	1:A:118:PHE:CZ	0.59	2.33	1	2
1:A:38:MET:SD	1:A:126:LEU:HD22	0.59	2.36	8	3
1:A:73:ILE:CG1	1:A:110:ALA:HB1	0.59	2.26	1	2
1:A:90:CYS:HB2	1:A:136:HIS:NE2	0.59	2.11	1	2
1:A:100:VAL:HG12	1:A:141:LEU:H	0.59	1.55	3	1
1:A:38:MET:SD	1:A:38:MET:C	0.59	2.85	4	2
1:A:15:LYS:HG2	1:A:50:GLN:N	0.59	2.12	9	1
1:A:72:LEU:O	1:A:73:ILE:HD13	0.59	1.98	1	2
1:A:7:HIS:CG	1:A:92:SER:HA	0.59	2.32	9	2
1:A:73:ILE:HG13	1:A:110:ALA:CB	0.59	2.27	1	2
1:A:15:LYS:CE	1:A:54:HIS:NE2	0.59	2.66	7	1
1:A:48:ALA:N	1:A:133:GLU:HG2	0.59	2.12	2	1
1:A:141:LEU:HB2	1:A:142:PHE:CZ	0.59	2.33	4	1
1:A:14:ARG:C	1:A:54:HIS:CE1	0.59	2.81	6	1
1:A:5:VAL:HB	1:A:51:VAL:HG23	0.59	1.75	7	1
1:A:61:ASP:HB3	1:A:69:ARG:HB3	0.59	1.73	7	1
1:A:5:VAL:C	1:A:51:VAL:HB	0.58	2.23	7	1
1:A:91:LEU:CD2	1:A:92:SER:H	0.58	2.11	7	1
1:A:7:HIS:CE1	1:A:50:GLN:CD	0.58	2.81	2	1
1:A:49:THR:N	1:A:137:LEU:HD23	0.58	2.14	7	1
1:A:47:ALA:CB	1:A:133:GLU:HB2	0.58	2.29	2	1
1:A:88:GLU:CB	1:A:98:ALA:H	0.58	2.10	9	1
1:A:88:GLU:N	1:A:98:ALA:O	0.58	2.36	9	1
1:A:100:VAL:HG11	1:A:141:LEU:CB	0.58	2.29	9	1
1:A:91:LEU:CD1	1:A:137:LEU:HB2	0.58	2.28	3	1
1:A:93:ILE:N	1:A:94:PRO:CD	0.58	2.67	6	2
1:A:75:PRO:HG3	1:A:108:ILE:HB	0.58	1.75	1	2
1:A:38:MET:SD	1:A:130:ILE:HG21	0.58	2.38	5	1
1:A:47:ALA:HB1	1:A:137:LEU:HD21	0.58	1.75	7	1
1:A:12:ARG:CG	1:A:15:LYS:HG3	0.58	2.29	5	1
1:A:35:PHE:CD1	1:A:39:TYR:CE1	0.58	2.92	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:VAL:CG1	1:A:141:LEU:HB3	0.58	2.27	9	1
1:A:126:LEU:O	1:A:127:ALA:C	0.58	2.47	9	9
1:A:141:LEU:HB2	1:A:142:PHE:CE1	0.58	2.34	4	1
1:A:132:HIS:CD2	1:A:136:HIS:CG	0.58	2.92	9	2
1:A:15:LYS:HB3	1:A:50:GLN:CG	0.58	2.28	6	1
1:A:133:GLU:O	1:A:137:LEU:HD13	0.57	1.99	6	1
1:A:35:PHE:CE1	1:A:69:ARG:CB	0.57	2.87	2	2
1:A:73:ILE:HG13	1:A:74:ASN:N	0.57	2.14	8	2
1:A:100:VAL:CG2	1:A:142:PHE:H	0.57	2.12	4	1
1:A:34:MET:SD	1:A:130:ILE:CD1	0.57	2.93	4	2
1:A:86:ILE:HD13	1:A:132:HIS:CD2	0.57	2.34	7	1
1:A:39:TYR:CE1	1:A:61:ASP:HB3	0.57	2.35	8	1
1:A:56:ARG:NH2	1:A:134:MET:SD	0.57	2.78	1	1
1:A:74:ASN:C	1:A:74:ASN:ND2	0.57	2.63	6	5
1:A:35:PHE:CE1	1:A:61:ASP:OD1	0.57	2.58	1	2
1:A:53:ILE:C	1:A:54:HIS:CD2	0.57	2.82	6	2
1:A:29:ARG:O	1:A:33:ASP:HB2	0.56	2.00	4	6
1:A:86:ILE:HG12	1:A:132:HIS:CG	0.56	2.35	2	2
1:A:98:ALA:HB2	1:A:142:PHE:CZ	0.56	2.35	2	1
1:A:58:ILE:HG13	1:A:59:VAL:N	0.56	2.15	6	2
1:A:12:ARG:CD	1:A:54:HIS:ND1	0.56	2.68	8	1
1:A:38:MET:HG2	1:A:130:ILE:HD11	0.56	1.76	8	1
1:A:86:ILE:HG12	1:A:87:GLU:N	0.56	2.15	9	1
1:A:100:VAL:HG12	1:A:141:LEU:N	0.56	2.15	3	2
1:A:38:MET:HE3	1:A:126:LEU:HD22	0.56	1.77	2	1
1:A:86:ILE:HG13	1:A:101:PRO:CG	0.56	2.30	2	1
1:A:69:ARG:N	1:A:69:ARG:CD	0.56	2.69	3	3
1:A:91:LEU:HA	1:A:94:PRO:HD3	0.56	1.77	6	1
1:A:15:LYS:HB2	1:A:50:GLN:HG2	0.56	1.75	1	1
1:A:39:TYR:CE2	1:A:61:ASP:CG	0.55	2.84	9	5
1:A:6:LEU:HA	1:A:92:SER:HA	0.55	1.78	3	1
1:A:88:GLU:HB3	1:A:136:HIS:NE2	0.55	2.17	6	1
1:A:55:GLN:HG2	1:A:56:ARG:N	0.55	2.17	7	1
1:A:108:ILE:HG12	1:A:120:LEU:H	0.55	1.61	1	4
1:A:137:LEU:C	1:A:139:GLY:N	0.55	2.63	6	4
1:A:90:CYS:SG	1:A:100:VAL:HG23	0.55	2.41	6	1
1:A:48:ALA:N	1:A:133:GLU:HB3	0.55	2.16	1	2
1:A:47:ALA:HA	1:A:133:GLU:HB2	0.55	1.78	2	1
1:A:51:VAL:CG2	1:A:52:ASP:N	0.55	2.70	9	2
1:A:88:GLU:CA	1:A:98:ALA:O	0.55	2.54	9	1
1:A:58:ILE:HG22	1:A:59:VAL:H	0.55	1.60	9	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:LYS:CB	1:A:54:HIS:CE1	0.55	2.89	4	1
1:A:74:ASN:N	1:A:75:PRO:HD3	0.55	2.16	6	4
1:A:27:ILE:HG22	1:A:28:GLN:N	0.55	2.16	4	1
1:A:7:HIS:HB2	1:A:92:SER:C	0.55	2.27	5	1
1:A:35:PHE:CD1	1:A:59:VAL:CG2	0.55	2.90	8	1
1:A:7:HIS:CD2	1:A:92:SER:OG	0.55	2.59	1	2
1:A:86:ILE:HD13	1:A:86:ILE:N	0.55	2.17	3	1
1:A:86:ILE:CG1	1:A:90:CYS:SG	0.55	2.95	4	1
1:A:100:VAL:CG1	1:A:140:LYS:HA	0.55	2.32	7	2
1:A:54:HIS:N	1:A:54:HIS:CD2	0.55	2.75	4	1
1:A:75:PRO:CB	1:A:108:ILE:HB	0.55	2.32	9	3
1:A:132:HIS:O	1:A:133:GLU:C	0.55	2.50	9	4
1:A:101:PRO:HG2	1:A:132:HIS:ND1	0.55	2.17	7	1
1:A:24:ASN:ND2	1:A:27:ILE:H	0.55	2.00	4	1
1:A:71:VAL:CG1	1:A:118:PHE:CZ	0.55	2.89	5	1
1:A:73:ILE:HG22	1:A:74:ASN:H	0.54	1.60	5	2
1:A:35:PHE:CZ	1:A:69:ARG:HB2	0.54	2.37	2	2
1:A:134:MET:C	1:A:136:HIS:H	0.54	2.09	6	5
1:A:61:ASP:CG	1:A:69:ARG:CB	0.54	2.80	9	1
1:A:48:ALA:O	1:A:49:THR:CB	0.54	2.56	9	5
1:A:86:ILE:N	1:A:101:PRO:HG2	0.54	2.16	6	1
1:A:15:LYS:CG	1:A:54:HIS:CE1	0.54	2.90	7	1
1:A:53:ILE:C	1:A:54:HIS:CG	0.54	2.85	6	6
1:A:88:GLU:HG2	1:A:90:CYS:SG	0.54	2.43	3	1
1:A:28:GLN:HE21	1:A:29:ARG:HA	0.54	1.62	8	2
1:A:90:CYS:HA	1:A:136:HIS:CG	0.54	2.38	9	2
1:A:100:VAL:HG11	1:A:141:LEU:H	0.54	1.62	7	1
1:A:15:LYS:HB2	1:A:137:LEU:HD11	0.54	1.79	2	1
1:A:129:CYS:HA	1:A:132:HIS:HB3	0.54	1.80	5	1
1:A:58:ILE:CG1	1:A:59:VAL:N	0.54	2.71	6	3
1:A:15:LYS:HB3	1:A:54:HIS:HE1	0.54	1.63	4	1
1:A:61:ASP:HA	1:A:69:ARG:HA	0.54	1.79	9	4
1:A:126:LEU:C	1:A:128:ILE:N	0.54	2.61	9	4
1:A:35:PHE:HE1	1:A:59:VAL:HB	0.53	1.64	7	4
1:A:75:PRO:CG	1:A:108:ILE:HB	0.53	2.33	1	2
1:A:7:HIS:ND1	1:A:91:LEU:HD12	0.53	2.17	2	1
1:A:59:VAL:HA	1:A:71:VAL:HA	0.53	1.80	4	3
1:A:12:ARG:O	1:A:14:ARG:N	0.53	2.41	8	2
1:A:7:HIS:HB3	1:A:92:SER:HA	0.53	1.78	6	1
1:A:91:LEU:HG	1:A:137:LEU:CG	0.53	2.33	7	1
1:A:131:GLN:O	1:A:135:ASP:N	0.53	2.42	1	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:ALA:CA	1:A:133:GLU:HB2	0.53	2.32	2	1
1:A:133:GLU:HA	1:A:136:HIS:HD1	0.53	1.63	2	3
1:A:73:ILE:C	1:A:75:PRO:CD	0.53	2.82	5	4
1:A:100:VAL:HG12	1:A:140:LYS:HB3	0.53	1.80	5	2
1:A:133:GLU:CG	1:A:134:MET:N	0.53	2.64	2	1
1:A:34:MET:HB3	1:A:59:VAL:CG2	0.53	2.34	3	2
1:A:90:CYS:SG	1:A:142:PHE:HE1	0.53	2.27	9	2
1:A:73:ILE:C	1:A:75:PRO:HD3	0.53	2.28	4	5
1:A:57:ILE:N	1:A:57:ILE:HD12	0.53	2.19	5	1
1:A:15:LYS:CG	1:A:50:GLN:H	0.53	2.17	7	2
1:A:7:HIS:NE2	1:A:50:GLN:HB2	0.53	2.19	7	2
1:A:15:LYS:NZ	1:A:50:GLN:HG2	0.53	2.18	4	1
1:A:12:ARG:HB2	1:A:15:LYS:HG3	0.52	1.81	6	2
1:A:84:THR:HG23	1:A:85:GLY:N	0.52	2.19	1	3
1:A:137:LEU:O	1:A:139:GLY:N	0.52	2.41	6	3
1:A:86:ILE:HG21	1:A:132:HIS:CG	0.52	2.39	4	1
1:A:15:LYS:CG	1:A:50:GLN:N	0.52	2.72	7	2
1:A:90:CYS:SG	1:A:136:HIS:CG	0.52	2.96	9	1
1:A:128:ILE:O	1:A:132:HIS:N	0.52	2.42	2	3
1:A:129:CYS:O	1:A:133:GLU:HG2	0.52	2.04	7	4
1:A:101:PRO:HD3	1:A:132:HIS:CE1	0.52	2.39	6	1
1:A:88:GLU:CG	1:A:98:ALA:O	0.52	2.57	9	1
1:A:38:MET:C	1:A:38:MET:SD	0.52	2.92	2	2
1:A:38:MET:O	1:A:38:MET:HE3	0.52	2.04	7	2
1:A:7:HIS:CE1	1:A:49:THR:C	0.52	2.86	7	1
1:A:130:ILE:O	1:A:133:GLU:HB2	0.52	2.05	1	1
1:A:127:ALA:O	1:A:131:GLN:CB	0.52	2.57	4	1
1:A:100:VAL:HG22	1:A:142:PHE:CA	0.52	2.34	9	1
1:A:46:LEU:C	1:A:133:GLU:HG3	0.52	2.29	1	1
1:A:98:ALA:CB	1:A:142:PHE:CE2	0.52	2.92	2	1
1:A:90:CYS:HA	1:A:136:HIS:CE1	0.52	2.40	4	1
1:A:47:ALA:CB	1:A:91:LEU:HD13	0.52	2.35	9	1
1:A:90:CYS:CB	1:A:136:HIS:NE2	0.52	2.72	1	1
1:A:107:LYS:HB2	1:A:121:GLU:HB3	0.52	1.79	4	2
1:A:69:ARG:H	1:A:69:ARG:CD	0.52	2.18	9	1
1:A:90:CYS:CA	1:A:136:HIS:CD2	0.52	2.93	4	2
1:A:110:ALA:O	1:A:118:PHE:N	0.52	2.43	6	9
1:A:38:MET:SD	1:A:38:MET:O	0.52	2.68	4	3
1:A:90:CYS:HA	1:A:136:HIS:CD2	0.52	2.40	4	1
1:A:15:LYS:CG	1:A:54:HIS:NE2	0.52	2.73	7	1
1:A:70:LEU:CG	1:A:71:VAL:H	0.51	2.16	8	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:LYS:CB	1:A:50:GLN:CA	0.51	2.86	9	2
1:A:18:LYS:O	1:A:55:GLN:HB3	0.51	2.06	8	1
1:A:56:ARG:HE	1:A:111:LEU:N	0.51	2.03	3	1
1:A:29:ARG:O	1:A:33:ASP:N	0.51	2.43	8	2
1:A:98:ALA:HB3	1:A:142:PHE:CD1	0.51	2.40	9	1
1:A:100:VAL:HG22	1:A:142:PHE:HA	0.51	1.80	9	1
1:A:74:ASN:N	1:A:75:PRO:CD	0.51	2.73	4	7
1:A:38:MET:O	1:A:38:MET:HE2	0.51	2.05	3	1
1:A:101:PRO:HG3	1:A:132:HIS:ND1	0.51	2.21	6	1
1:A:7:HIS:NE2	1:A:50:GLN:CA	0.51	2.74	7	1
1:A:53:ILE:C	1:A:54:HIS:ND1	0.51	2.68	8	1
1:A:15:LYS:HG2	1:A:50:GLN:CA	0.51	2.35	9	1
1:A:108:ILE:HD13	1:A:120:LEU:H	0.51	1.64	5	3
1:A:15:LYS:CE	1:A:50:GLN:HG2	0.51	2.35	4	1
1:A:86:ILE:HG12	1:A:90:CYS:SG	0.51	2.45	4	1
1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CD	0.51	2.73	6	1
1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:HIS:HE2	0.51	1.65	9	1
1:A:12:ARG:HB2	1:A:15:LYS:CG	0.51	2.36	1	2
1:A:58:ILE:HG12	1:A:72:LEU:CB	0.51	2.34	6	1
1:A:58:ILE:HB	1:A:72:LEU:HB3	0.51	1.81	2	2
1:A:12:ARG:CA	1:A:15:LYS:HG3	0.51	2.36	4	1
1:A:91:LEU:CD1	1:A:93:ILE:H	0.51	2.19	5	1
1:A:90:CYS:SG	1:A:136:HIS:CB	0.51	2.99	9	1
1:A:73:ILE:HG12	1:A:118:PHE:CZ	0.51	2.41	1	2
1:A:100:VAL:HB	1:A:101:PRO:HD3	0.51	1.83	4	1
1:A:56:ARG:HB3	1:A:74:ASN:CG	0.51	2.31	9	2
1:A:73:ILE:N	1:A:73:ILE:HD13	0.51	2.21	9	3
1:A:35:PHE:CZ	1:A:70:LEU:O	0.51	2.64	8	2
1:A:74:ASN:H	1:A:74:ASN:HD22	0.51	1.49	5	1
1:A:39:TYR:OH	1:A:61:ASP:N	0.51	2.44	9	2
1:A:37:THR:O	1:A:38:MET:C	0.51	2.53	2	5
1:A:7:HIS:NE2	1:A:12:ARG:O	0.51	2.43	8	1
1:A:47:ALA:HB3	1:A:91:LEU:HD22	0.51	1.83	9	1
1:A:58:ILE:CG2	1:A:59:VAL:N	0.51	2.74	9	3
1:A:72:LEU:C	1:A:73:ILE:HD13	0.51	2.31	4	1
1:A:7:HIS:NE2	1:A:49:THR:C	0.51	2.69	7	1
1:A:7:HIS:CD2	1:A:50:GLN:HB3	0.51	2.41	8	1
1:A:75:PRO:HB3	1:A:108:ILE:HB	0.51	1.83	9	2
1:A:34:MET:CB	1:A:59:VAL:HG22	0.50	2.34	3	3
1:A:58:ILE:HG22	1:A:59:VAL:N	0.50	2.21	9	3
1:A:108:ILE:CD1	1:A:120:LEU:O	0.50	2.60	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:134:MET:SD	1:A:134:MET:O	0.50	2.70	3	1
1:A:12:ARG:HB2	1:A:50:GLN:HB3	0.50	1.82	8	1
1:A:36:GLU:O	1:A:40:ALA:HB3	0.50	2.06	9	2
1:A:22:GLU:H	1:A:22:GLU:CD	0.50	2.15	3	1
1:A:12:ARG:NE	1:A:50:GLN:HA	0.50	2.21	8	1
1:A:83:GLU:N	1:A:83:GLU:CD	0.50	2.69	9	2
1:A:137:LEU:O	1:A:138:VAL:C	0.50	2.54	3	3
1:A:7:HIS:CE1	1:A:50:GLN:C	0.50	2.89	4	1
1:A:101:PRO:CG	1:A:132:HIS:ND1	0.50	2.74	6	2
1:A:34:MET:SD	1:A:130:ILE:HG21	0.50	2.46	2	4
1:A:61:ASP:CG	1:A:69:ARG:HB3	0.50	2.31	1	2
1:A:126:LEU:O	1:A:129:CYS:N	0.50	2.45	6	6
1:A:62:VAL:H	1:A:69:ARG:NH2	0.50	2.05	5	1
1:A:91:LEU:HB3	1:A:137:LEU:CD1	0.50	2.35	6	1
1:A:101:PRO:HG3	1:A:132:HIS:CG	0.50	2.40	6	1
1:A:20:VAL:HB	1:A:56:ARG:NE	0.50	2.21	4	2
1:A:108:ILE:O	1:A:119:GLU:HA	0.50	2.07	5	7
1:A:23:VAL:HG12	1:A:24:ASN:N	0.50	2.22	8	5
1:A:47:ALA:CA	1:A:133:GLU:HB3	0.50	2.36	9	3
1:A:7:HIS:NE2	1:A:50:GLN:N	0.50	2.59	7	1
1:A:86:ILE:HD13	1:A:132:HIS:CE1	0.50	2.42	7	1
1:A:95:GLU:H	1:A:95:GLU:CD	0.50	2.15	8	1
1:A:90:CYS:HB3	1:A:136:HIS:CE1	0.50	2.39	5	1
1:A:90:CYS:SG	1:A:136:HIS:HE1	0.50	2.16	8	1
1:A:15:LYS:O	1:A:16:VAL:C	0.50	2.55	9	1
1:A:47:ALA:HB2	1:A:91:LEU:HD13	0.50	1.84	9	1
1:A:47:ALA:HA	1:A:133:GLU:CB	0.49	2.37	4	2
1:A:98:ALA:CB	1:A:142:PHE:CE1	0.49	2.95	6	1
1:A:58:ILE:C	1:A:59:VAL:HG13	0.49	2.30	9	1
1:A:34:MET:HE3	1:A:37:THR:HB	0.49	1.84	2	1
1:A:15:LYS:HE2	1:A:16:VAL:N	0.49	2.22	4	1
1:A:52:ASP:C	1:A:54:HIS:NE2	0.49	2.70	4	1
1:A:28:GLN:HE22	1:A:32:ASP:CB	0.49	2.19	5	2
1:A:90:CYS:HB2	1:A:142:PHE:CE1	0.49	2.42	7	1
1:A:129:CYS:O	1:A:132:HIS:CB	0.49	2.57	5	1
1:A:27:ILE:C	1:A:29:ARG:N	0.49	2.68	8	1
1:A:57:ILE:CG2	1:A:73:ILE:CD1	0.49	2.90	1	1
1:A:84:THR:CG2	1:A:85:GLY:N	0.49	2.75	1	2
1:A:100:VAL:CG1	1:A:141:LEU:N	0.49	2.75	3	2
1:A:121:GLU:H	1:A:121:GLU:CD	0.49	2.16	8	2
1:A:27:ILE:O	1:A:28:GLN:C	0.49	2.56	8	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:38:MET:HE1	1:A:126:LEU:CB	0.49	2.38	9	1
1:A:58:ILE:CD1	1:A:58:ILE:N	0.49	2.75	9	1
1:A:12:ARG:CB	1:A:15:LYS:CG	0.49	2.90	4	4
1:A:73:ILE:HG21	1:A:110:ALA:HB1	0.49	1.83	9	3
1:A:24:ASN:HD21	1:A:27:ILE:H	0.49	1.51	4	1
1:A:7:HIS:CD2	1:A:12:ARG:HG2	0.49	2.41	2	1
1:A:29:ARG:O	1:A:33:ASP:CB	0.49	2.61	6	4
1:A:12:ARG:HG3	1:A:13:LEU:H	0.49	1.68	2	2
1:A:56:ARG:HB3	1:A:74:ASN:ND2	0.49	2.22	6	2
1:A:23:VAL:CG1	1:A:24:ASN:N	0.49	2.75	7	5
1:A:39:TYR:OH	1:A:69:ARG:HB2	0.49	2.08	4	2
1:A:90:CYS:HA	1:A:136:HIS:NE2	0.49	2.22	4	1
1:A:137:LEU:CD1	1:A:137:LEU:N	0.49	2.75	7	1
1:A:91:LEU:HB2	1:A:137:LEU:HD21	0.49	1.84	9	1
1:A:41:GLU:CD	1:A:43:GLY:H	0.49	2.16	3	1
1:A:58:ILE:C	1:A:59:VAL:CG1	0.49	2.86	9	2
1:A:108:ILE:H	1:A:108:ILE:HD13	0.49	1.68	6	1
1:A:35:PHE:CD1	1:A:59:VAL:HB	0.49	2.42	1	1
1:A:58:ILE:HB	1:A:72:LEU:CB	0.49	2.38	2	1
1:A:98:ALA:HB1	1:A:100:VAL:H	0.49	1.66	4	1
1:A:134:MET:O	1:A:138:VAL:N	0.49	2.45	5	2
1:A:15:LYS:CG	1:A:50:GLN:HG2	0.49	2.38	6	1
1:A:100:VAL:HB	1:A:101:PRO:CD	0.48	2.37	2	2
1:A:7:HIS:NE2	1:A:50:GLN:CG	0.48	2.76	3	1
1:A:20:VAL:CG1	1:A:22:GLU:O	0.48	2.60	3	1
1:A:47:ALA:C	1:A:49:THR:H	0.48	2.16	4	1
1:A:15:LYS:CB	1:A:50:GLN:HG2	0.48	2.38	6	1
1:A:35:PHE:CA	1:A:59:VAL:HG21	0.48	2.38	8	1
1:A:34:MET:O	1:A:38:MET:N	0.48	2.45	3	4
1:A:73:ILE:HG13	1:A:108:ILE:HG21	0.48	1.85	6	2
1:A:49:THR:HG23	1:A:49:THR:O	0.48	2.08	9	1
1:A:98:ALA:HB3	1:A:142:PHE:CE1	0.48	2.43	9	1
1:A:26:GLU:CD	1:A:26:GLU:H	0.48	2.15	1	1
1:A:20:VAL:HG12	1:A:21:GLU:N	0.48	2.22	3	3
1:A:100:VAL:HG11	1:A:141:LEU:N	0.48	2.23	7	1
1:A:128:ILE:CD1	1:A:128:ILE:N	0.48	2.76	7	1
1:A:12:ARG:NE	1:A:15:LYS:HB2	0.48	2.23	8	1
1:A:58:ILE:N	1:A:72:LEU:O	0.48	2.47	9	3
1:A:90:CYS:HB3	1:A:136:HIS:CD2	0.48	2.42	4	1
1:A:110:ALA:N	1:A:118:PHE:O	0.48	2.46	5	1
1:A:128:ILE:O	1:A:132:HIS:HB2	0.48	2.08	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:LYS:CB	1:A:50:GLN:N	0.48	2.77	7	2
1:A:28:GLN:NE2	1:A:29:ARG:HA	0.48	2.24	2	6
1:A:12:ARG:C	1:A:15:LYS:HE2	0.48	2.34	6	1
1:A:34:MET:SD	1:A:46:LEU:CD1	0.48	3.02	7	1
1:A:91:LEU:HG	1:A:137:LEU:HD12	0.48	1.84	7	1
1:A:7:HIS:CD2	1:A:50:GLN:C	0.48	2.91	9	1
1:A:15:LYS:HA	1:A:15:LYS:CE	0.48	2.39	9	1
1:A:50:GLN:NE2	1:A:91:LEU:CD2	0.48	2.77	6	1
1:A:49:THR:O	1:A:49:THR:CG2	0.48	2.61	7	1
1:A:12:ARG:CG	1:A:13:LEU:N	0.48	2.77	1	2
1:A:34:MET:SD	1:A:58:ILE:HA	0.48	2.49	1	1
1:A:15:LYS:HG2	1:A:50:GLN:O	0.48	2.09	4	1
1:A:56:ARG:HE	1:A:111:LEU:HB2	0.48	1.69	6	1
1:A:15:LYS:HB3	1:A:50:GLN:N	0.48	2.24	9	2
1:A:85:GLY:HA3	1:A:101:PRO:HD2	0.48	1.86	7	1
1:A:101:PRO:HG2	1:A:132:HIS:HA	0.48	1.85	7	1
1:A:73:ILE:HD11	1:A:118:PHE:CE1	0.48	2.44	5	2
1:A:103:ALA:CB	1:A:131:GLN:NE2	0.48	2.77	1	1
1:A:86:ILE:HD13	1:A:86:ILE:H	0.48	1.69	3	1
1:A:12:ARG:CD	1:A:15:LYS:HG3	0.48	2.39	5	1
1:A:50:GLN:NE2	1:A:137:LEU:HG	0.48	2.24	6	2
1:A:55:GLN:NE2	1:A:56:ARG:CZ	0.48	2.77	8	1
1:A:100:VAL:HG21	1:A:142:PHE:H	0.47	1.69	4	1
1:A:24:ASN:ND2	1:A:26:GLU:H	0.47	2.06	9	1
1:A:127:ALA:O	1:A:131:GLN:HB3	0.47	2.09	4	6
1:A:12:ARG:HB3	1:A:15:LYS:HG3	0.47	1.85	5	2
1:A:137:LEU:C	1:A:139:GLY:H	0.47	2.17	5	1
1:A:98:ALA:CB	1:A:142:PHE:CZ	0.47	2.97	2	1
1:A:108:ILE:HG12	1:A:109:ARG:N	0.47	2.23	2	2
1:A:108:ILE:HD13	1:A:120:LEU:O	0.47	2.09	2	3
1:A:27:ILE:CG2	1:A:28:GLN:N	0.47	2.77	4	1
1:A:69:ARG:HE	1:A:69:ARG:H	0.47	1.51	4	1
1:A:12:ARG:HD3	1:A:54:HIS:ND1	0.47	2.24	8	1
1:A:93:ILE:HG13	1:A:94:PRO:CD	0.47	2.39	8	1
1:A:75:PRO:CD	1:A:108:ILE:HB	0.47	2.39	1	1
1:A:131:GLN:O	1:A:132:HIS:C	0.47	2.57	3	2
1:A:108:ILE:HD13	1:A:110:ALA:HB3	0.47	1.85	3	1
1:A:15:LYS:HZ2	1:A:15:LYS:HB3	0.47	1.69	5	1
1:A:15:LYS:H	1:A:15:LYS:CE	0.47	2.22	6	1
1:A:39:TYR:OH	1:A:61:ASP:HB3	0.47	2.09	7	2
1:A:49:THR:CG2	1:A:137:LEU:HD11	0.47	2.40	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:ARG:HG2	1:A:33:ASP:HB2	0.47	1.86	2	1
1:A:60:ILE:C	1:A:61:ASP:CG	0.47	2.81	3	1
1:A:76:GLU:CD	1:A:76:GLU:N	0.47	2.73	3	1
1:A:75:PRO:HG3	1:A:108:ILE:CG2	0.47	2.39	9	3
1:A:141:LEU:H	1:A:141:LEU:HD23	0.47	1.70	4	1
1:A:56:ARG:NH1	1:A:56:ARG:HG3	0.47	2.24	6	1
1:A:73:ILE:CB	1:A:110:ALA:HB1	0.47	2.39	1	1
1:A:20:VAL:HG21	1:A:56:ARG:H	0.47	1.69	3	1
1:A:86:ILE:HG13	1:A:132:HIS:NE2	0.47	2.25	4	3
1:A:41:GLU:O	1:A:42:GLU:CB	0.47	2.62	6	1
1:A:15:LYS:CG	1:A:50:GLN:HA	0.47	2.40	9	1
1:A:41:GLU:C	1:A:43:GLY:N	0.47	2.72	8	2
1:A:49:THR:O	1:A:50:GLN:CB	0.47	2.62	1	1
1:A:73:ILE:CG1	1:A:110:ALA:CB	0.47	2.93	1	1
1:A:7:HIS:NE2	1:A:50:GLN:CD	0.47	2.73	3	1
1:A:7:HIS:CE1	1:A:12:ARG:O	0.47	2.68	3	2
1:A:28:GLN:NE2	1:A:32:ASP:CB	0.47	2.78	3	3
1:A:86:ILE:CD1	1:A:101:PRO:HG2	0.47	2.39	3	1
1:A:15:LYS:HE2	1:A:16:VAL:H	0.47	1.69	4	1
1:A:101:PRO:CG	1:A:132:HIS:HA	0.47	2.39	7	1
1:A:39:TYR:CD1	1:A:61:ASP:CG	0.47	2.92	8	1
1:A:98:ALA:CB	1:A:142:PHE:CD1	0.47	2.98	8	1
1:A:100:VAL:CG2	1:A:142:PHE:HA	0.47	2.40	9	1
1:A:15:LYS:CE	1:A:50:GLN:CG	0.47	2.92	4	1
1:A:35:PHE:CZ	1:A:69:ARG:HG2	0.47	2.44	4	1
1:A:58:ILE:HG23	1:A:73:ILE:HA	0.47	1.84	8	1
1:A:61:ASP:O	1:A:62:VAL:C	0.47	2.54	8	1
1:A:51:VAL:HG22	1:A:52:ASP:N	0.47	2.25	9	1
1:A:28:GLN:O	1:A:29:ARG:C	0.47	2.58	3	3
1:A:69:ARG:N	1:A:69:ARG:HD2	0.47	2.23	5	1
1:A:88:GLU:CB	1:A:136:HIS:NE2	0.47	2.77	7	1
1:A:91:LEU:CB	1:A:137:LEU:HD11	0.47	2.40	9	1
1:A:34:MET:CG	1:A:59:VAL:HG22	0.47	2.39	3	1
1:A:35:PHE:CE1	1:A:69:ARG:CG	0.47	2.98	4	2
1:A:91:LEU:HG	1:A:92:SER:N	0.47	2.25	8	1
1:A:15:LYS:HG2	1:A:51:VAL:H	0.47	1.70	9	1
1:A:49:THR:HG23	1:A:137:LEU:HB2	0.47	1.86	9	1
1:A:128:ILE:N	1:A:128:ILE:CD1	0.47	2.78	9	1
1:A:37:THR:O	1:A:39:TYR:N	0.46	2.48	1	2
1:A:86:ILE:CG1	1:A:87:GLU:N	0.46	2.77	9	1
1:A:141:LEU:N	1:A:141:LEU:HD12	0.46	2.25	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:PHE:CZ	1:A:69:ARG:CG	0.46	2.99	4	1
1:A:49:THR:C	1:A:50:GLN:NE2	0.46	2.74	5	1
1:A:39:TYR:OH	1:A:69:ARG:CG	0.46	2.63	8	1
1:A:7:HIS:CE1	1:A:49:THR:O	0.46	2.69	7	1
1:A:34:MET:SD	1:A:130:ILE:CG2	0.46	3.04	2	1
1:A:7:HIS:CG	1:A:12:ARG:HB2	0.46	2.45	3	1
1:A:89:GLY:HA2	1:A:142:PHE:CE2	0.46	2.45	3	1
1:A:34:MET:HG2	1:A:58:ILE:HG23	0.46	1.88	5	1
1:A:42:GLU:N	1:A:42:GLU:CD	0.46	2.74	5	1
1:A:62:VAL:H	1:A:69:ARG:CZ	0.46	2.22	5	1
1:A:47:ALA:HB1	1:A:137:LEU:HD11	0.46	1.88	7	1
1:A:5:VAL:CG1	1:A:50:GLN:NE2	0.46	2.79	2	1
1:A:108:ILE:HD13	1:A:110:ALA:CB	0.46	2.40	3	1
1:A:86:ILE:HG13	1:A:132:HIS:CD2	0.46	2.46	4	1
1:A:7:HIS:CG	1:A:50:GLN:NE2	0.46	2.84	2	1
1:A:20:VAL:CG1	1:A:21:GLU:N	0.46	2.78	3	3
1:A:135:ASP:O	1:A:140:LYS:CG	0.46	2.64	5	1
1:A:5:VAL:HG11	1:A:50:GLN:H	0.46	1.70	8	1
1:A:57:ILE:HD13	1:A:112:ASP:C	0.46	2.36	4	2
1:A:73:ILE:N	1:A:73:ILE:CD1	0.46	2.76	9	4
1:A:34:MET:SD	1:A:37:THR:HB	0.46	2.50	3	1
1:A:100:VAL:HG22	1:A:142:PHE:CD1	0.46	2.46	3	1
1:A:7:HIS:ND1	1:A:13:LEU:HA	0.46	2.26	5	1
1:A:39:TYR:CE1	1:A:69:ARG:HG3	0.46	2.45	5	1
1:A:101:PRO:CD	1:A:132:HIS:CE1	0.46	2.99	7	2
1:A:38:MET:HA	1:A:38:MET:HE2	0.46	1.87	8	1
1:A:69:ARG:CD	1:A:69:ARG:H	0.46	2.23	8	1
1:A:69:ARG:N	1:A:69:ARG:HD3	0.46	2.26	8	2
1:A:89:GLY:HA2	1:A:142:PHE:CZ	0.46	2.46	1	1
1:A:98:ALA:HB2	1:A:142:PHE:CE2	0.46	2.45	2	1
1:A:15:LYS:HG3	1:A:50:GLN:HA	0.46	1.87	3	1
1:A:12:ARG:HD2	1:A:54:HIS:ND1	0.46	2.25	8	1
1:A:97:ARG:O	1:A:98:ALA:CB	0.46	2.63	3	1
1:A:7:HIS:NE2	1:A:50:GLN:C	0.46	2.74	4	2
1:A:88:GLU:HB3	1:A:98:ALA:H	0.46	1.67	9	1
1:A:98:ALA:HB2	1:A:142:PHE:HE1	0.46	1.70	4	1
1:A:100:VAL:CB	1:A:140:LYS:HB2	0.46	2.41	5	1
1:A:18:LYS:HB3	1:A:54:HIS:O	0.45	2.11	1	2
1:A:53:ILE:O	1:A:54:HIS:CD2	0.45	2.69	5	1
1:A:51:VAL:CG2	1:A:52:ASP:H	0.45	2.24	7	1
1:A:128:ILE:N	1:A:128:ILE:HD12	0.45	2.26	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:5:VAL:CG1	1:A:7:HIS:NE2	0.45	2.79	9	1
1:A:90:CYS:SG	1:A:136:HIS:HA	0.45	2.51	9	1
1:A:139:GLY:O	1:A:140:LYS:C	0.45	2.57	9	1
1:A:75:PRO:HG2	1:A:76:GLU:N	0.45	2.26	1	1
1:A:79:GLU:CG	1:A:80:LYS:N	0.45	2.78	3	3
1:A:100:VAL:CG2	1:A:141:LEU:HA	0.45	2.32	4	1
1:A:86:ILE:H	1:A:101:PRO:CD	0.45	2.24	6	1
1:A:57:ILE:HA	1:A:73:ILE:HG22	0.45	1.88	7	1
1:A:75:PRO:CG	1:A:76:GLU:N	0.45	2.79	1	1
1:A:90:CYS:O	1:A:91:LEU:HB2	0.45	2.11	7	1
1:A:130:ILE:C	1:A:132:HIS:H	0.45	2.16	8	1
1:A:58:ILE:HB	1:A:72:LEU:O	0.45	2.11	1	1
1:A:79:GLU:HB3	1:A:107:LYS:HB3	0.45	1.87	4	1
1:A:14:ARG:C	1:A:54:HIS:ND1	0.45	2.75	6	1
1:A:87:GLU:HG3	1:A:88:GLU:H	0.45	1.71	9	1
1:A:107:LYS:HA	1:A:121:GLU:HA	0.45	1.87	5	3
1:A:131:GLN:O	1:A:134:MET:N	0.45	2.50	1	2
1:A:37:THR:C	1:A:39:TYR:N	0.45	2.73	1	2
1:A:126:LEU:N	1:A:126:LEU:HD22	0.45	2.27	1	2
1:A:49:THR:HG22	1:A:50:GLN:H	0.45	1.72	2	1
1:A:47:ALA:CB	1:A:91:LEU:HD23	0.45	2.42	5	1
1:A:83:GLU:C	1:A:83:GLU:CD	0.45	2.84	5	1
1:A:7:HIS:CG	1:A:50:GLN:CB	0.45	3.00	9	1
1:A:60:ILE:HG13	1:A:70:LEU:HB3	0.45	1.89	2	1
1:A:73:ILE:CG2	1:A:110:ALA:CB	0.45	2.94	6	2
1:A:28:GLN:HE22	1:A:32:ASP:HB2	0.45	1.71	5	1
1:A:133:GLU:O	1:A:137:LEU:CD1	0.45	2.64	6	1
1:A:86:ILE:HG13	1:A:132:HIS:CE1	0.45	2.47	1	1
1:A:34:MET:SD	1:A:130:ILE:HD11	0.45	2.52	4	2
1:A:101:PRO:HG3	1:A:136:HIS:HA	0.45	1.88	5	1
1:A:73:ILE:HG13	1:A:75:PRO:N	0.45	2.27	8	2
1:A:136:HIS:O	1:A:140:LYS:HB3	0.45	2.11	7	1
1:A:7:HIS:CB	1:A:92:SER:HB3	0.45	2.40	9	2
1:A:100:VAL:CG2	1:A:142:PHE:CA	0.45	2.95	9	1
1:A:111:LEU:C	1:A:118:PHE:CE1	0.45	2.95	2	3
1:A:86:ILE:HD12	1:A:132:HIS:CD2	0.45	2.46	3	1
1:A:35:PHE:C	1:A:37:THR:N	0.45	2.74	6	2
1:A:7:HIS:N	1:A:92:SER:HB3	0.45	2.27	8	1
1:A:7:HIS:CG	1:A:50:GLN:HB3	0.45	2.47	9	1
1:A:28:GLN:HG3	1:A:29:ARG:N	0.45	2.27	1	3
1:A:7:HIS:HE2	1:A:12:ARG:CB	0.45	2.25	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:73:ILE:CG2	1:A:118:PHE:CZ	0.45	3.00	6	2
1:A:100:VAL:HG12	1:A:140:LYS:HB2	0.45	1.88	3	1
1:A:98:ALA:HA	1:A:142:PHE:CE1	0.45	2.47	4	1
1:A:86:ILE:HD11	1:A:136:HIS:NE2	0.45	2.27	5	1
1:A:91:LEU:HG	1:A:137:LEU:CD1	0.45	2.42	7	1
1:A:137:LEU:HD13	1:A:138:VAL:N	0.45	2.27	8	1
1:A:38:MET:CE	1:A:126:LEU:HB3	0.45	2.41	9	1
1:A:53:ILE:O	1:A:54:HIS:CG	0.44	2.70	9	2
1:A:130:ILE:C	1:A:133:GLU:HB3	0.44	2.37	2	1
1:A:62:VAL:H	1:A:69:ARG:CA	0.44	2.25	8	1
1:A:36:GLU:O	1:A:40:ALA:CB	0.44	2.65	9	1
1:A:45:GLY:C	1:A:90:CYS:SG	0.44	3.00	8	1
1:A:93:ILE:HG13	1:A:94:PRO:HD3	0.44	1.89	8	1
1:A:100:VAL:CG2	1:A:142:PHE:HD2	0.44	2.24	8	1
1:A:7:HIS:CD2	1:A:50:GLN:O	0.44	2.71	9	1
1:A:49:THR:OG1	1:A:54:HIS:CG	0.44	2.71	1	1
1:A:7:HIS:ND1	1:A:92:SER:OG	0.44	2.50	2	1
1:A:56:ARG:CZ	1:A:111:LEU:HB3	0.44	2.42	4	1
1:A:100:VAL:CG1	1:A:141:LEU:H	0.44	2.25	7	1
1:A:91:LEU:HB3	1:A:92:SER:OG	0.44	2.13	2	1
1:A:35:PHE:O	1:A:39:TYR:CD1	0.44	2.70	3	1
1:A:50:GLN:NE2	1:A:137:LEU:CD2	0.44	2.80	6	1
1:A:91:LEU:HA	1:A:94:PRO:CD	0.44	2.42	6	1
1:A:18:LYS:CB	1:A:54:HIS:CD2	0.44	2.99	8	1
1:A:55:GLN:HG2	1:A:56:ARG:H	0.44	1.71	7	1
1:A:56:ARG:O	1:A:57:ILE:C	0.44	2.61	7	1
1:A:57:ILE:CA	1:A:73:ILE:HG22	0.44	2.42	7	1
1:A:18:LYS:O	1:A:55:GLN:CB	0.44	2.65	8	1
1:A:35:PHE:CD1	1:A:39:TYR:OH	0.44	2.66	8	1
1:A:62:VAL:HG22	1:A:68:GLU:HA	0.44	1.90	9	1
1:A:28:GLN:CG	1:A:29:ARG:N	0.44	2.81	2	3
1:A:73:ILE:HD13	1:A:73:ILE:N	0.44	2.28	4	1
1:A:86:ILE:H	1:A:101:PRO:CG	0.44	2.25	6	1
1:A:22:GLU:CD	1:A:22:GLU:C	0.44	2.86	2	1
1:A:108:ILE:CD1	1:A:120:LEU:H	0.44	2.26	6	1
1:A:98:ALA:HB3	1:A:142:PHE:CG	0.44	2.48	8	1
1:A:75:PRO:HG3	1:A:108:ILE:HG22	0.44	1.89	9	1
1:A:61:ASP:C	1:A:62:VAL:HG23	0.43	2.37	1	1
1:A:91:LEU:CG	1:A:92:SER:N	0.43	2.81	8	2
1:A:30:ILE:O	1:A:34:MET:HB2	0.43	2.12	4	2
1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:HIS:NE2	0.43	2.27	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:PHE:CZ	1:A:61:ASP:OD1	0.43	2.71	3	1
1:A:37:THR:O	1:A:40:ALA:N	0.43	2.51	3	2
1:A:132:HIS:C	1:A:134:MET:N	0.43	2.71	6	1
1:A:47:ALA:O	1:A:48:ALA:C	0.43	2.59	5	2
1:A:5:VAL:HB	1:A:51:VAL:CG2	0.43	2.43	7	1
1:A:7:HIS:NE2	1:A:51:VAL:CG1	0.43	2.81	7	1
1:A:27:ILE:O	1:A:29:ARG:N	0.43	2.52	8	1
1:A:126:LEU:O	1:A:130:ILE:N	0.43	2.51	9	1
1:A:37:THR:O	1:A:41:GLU:N	0.43	2.52	1	3
1:A:125:LEU:HD23	1:A:125:LEU:H	0.43	1.73	3	1
1:A:12:ARG:C	1:A:14:ARG:H	0.43	2.22	5	2
1:A:98:ALA:CA	1:A:142:PHE:CE1	0.43	3.02	4	1
1:A:74:ASN:ND2	1:A:74:ASN:C	0.43	2.76	3	1
1:A:47:ALA:HB2	1:A:91:LEU:CD1	0.43	2.43	4	1
1:A:141:LEU:HG	1:A:142:PHE:CE2	0.43	2.48	4	1
1:A:70:LEU:HG	1:A:71:VAL:H	0.43	1.72	1	3
1:A:73:ILE:CG1	1:A:118:PHE:CZ	0.43	3.01	1	1
1:A:108:ILE:HD13	1:A:108:ILE:H	0.43	1.72	2	1
1:A:15:LYS:HE3	1:A:50:GLN:CB	0.43	2.44	4	1
1:A:110:ALA:O	1:A:117:PRO:HA	0.43	2.14	5	1
1:A:12:ARG:HB3	1:A:50:GLN:C	0.43	2.39	9	1
1:A:56:ARG:C	1:A:57:ILE:HG13	0.43	2.38	2	1
1:A:132:HIS:CG	1:A:133:GLU:N	0.43	2.86	3	1
1:A:28:GLN:NE2	1:A:32:ASP:HB3	0.43	2.29	4	1
1:A:98:ALA:HB2	1:A:142:PHE:CE1	0.43	2.48	6	1
1:A:7:HIS:CA	1:A:92:SER:HB3	0.43	2.44	8	1
1:A:86:ILE:N	1:A:101:PRO:HD2	0.43	2.27	8	1
1:A:15:LYS:HG3	1:A:50:GLN:HG2	0.43	1.90	1	1
1:A:47:ALA:O	1:A:48:ALA:O	0.43	2.37	2	1
1:A:88:GLU:CG	1:A:89:GLY:H	0.43	2.25	4	2
1:A:16:VAL:O	1:A:17:ALA:C	0.43	2.61	4	1
1:A:46:LEU:C	1:A:133:GLU:HB3	0.43	2.38	5	1
1:A:38:MET:SD	1:A:61:ASP:OD2	0.43	2.77	2	1
1:A:47:ALA:O	1:A:49:THR:N	0.43	2.52	3	2
1:A:15:LYS:CD	1:A:15:LYS:H	0.43	2.27	6	2
1:A:34:MET:C	1:A:59:VAL:CG2	0.43	2.91	4	1
1:A:74:ASN:H	1:A:74:ASN:ND2	0.43	2.11	5	2
1:A:91:LEU:CD1	1:A:91:LEU:C	0.43	2.91	5	1
1:A:29:ARG:O	1:A:30:ILE:C	0.43	2.58	9	2
1:A:73:ILE:HD12	1:A:118:PHE:CE2	0.43	2.48	9	1
1:A:84:THR:CG2	1:A:85:GLY:H	0.43	2.27	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:LYS:O	1:A:137:LEU:HG	0.43	2.14	2	1
1:A:58:ILE:CG1	1:A:59:VAL:H	0.43	2.25	3	1
1:A:48:ALA:C	1:A:137:LEU:HD23	0.43	2.38	7	1
1:A:85:GLY:C	1:A:102:ARG:HB2	0.43	2.39	9	1
1:A:93:ILE:HD13	1:A:93:ILE:C	0.43	2.38	9	1
1:A:79:GLU:HG2	1:A:80:LYS:N	0.42	2.28	3	2
1:A:59:VAL:O	1:A:130:ILE:HD12	0.42	2.14	6	1
1:A:12:ARG:C	1:A:14:ARG:N	0.42	2.76	9	2
1:A:16:VAL:O	1:A:17:ALA:O	0.42	2.37	9	1
1:A:74:ASN:HD22	1:A:74:ASN:N	0.42	2.05	1	1
1:A:28:GLN:NE2	1:A:28:GLN:O	0.42	2.52	3	1
1:A:34:MET:HG2	1:A:58:ILE:HG22	0.42	1.90	4	1
1:A:58:ILE:HG12	1:A:72:LEU:HB3	0.42	1.91	6	1
1:A:85:GLY:HA2	1:A:101:PRO:HG2	0.42	1.91	6	1
1:A:7:HIS:NE2	1:A:50:GLN:HG2	0.42	2.29	3	1
1:A:7:HIS:NE2	1:A:50:GLN:CB	0.42	2.82	7	1
1:A:73:ILE:HG12	1:A:110:ALA:CB	0.42	2.45	7	1
1:A:101:PRO:HG2	1:A:132:HIS:CG	0.42	2.49	7	1
1:A:18:LYS:O	1:A:18:LYS:CG	0.42	2.65	8	1
1:A:39:TYR:HD1	1:A:61:ASP:CG	0.42	2.22	8	1
1:A:60:ILE:O	1:A:70:LEU:N	0.42	2.52	1	1
1:A:57:ILE:HD13	1:A:112:ASP:HA	0.42	1.90	2	1
1:A:28:GLN:C	1:A:28:GLN:NE2	0.42	2.77	7	2
1:A:91:LEU:HG	1:A:92:SER:H	0.42	1.73	3	1
1:A:100:VAL:HG22	1:A:142:PHE:CE1	0.42	2.49	3	1
1:A:98:ALA:CA	1:A:142:PHE:HE1	0.42	2.27	4	1
1:A:20:VAL:HG11	1:A:56:ARG:NH2	0.42	2.30	6	1
1:A:35:PHE:HD1	1:A:39:TYR:CE1	0.42	2.29	8	1
1:A:89:GLY:O	1:A:136:HIS:CE1	0.42	2.73	9	1
1:A:31:VAL:HG13	1:A:71:VAL:CG2	0.42	2.44	9	2
1:A:57:ILE:HG23	1:A:73:ILE:HD11	0.42	1.91	1	2
1:A:49:THR:CG2	1:A:54:HIS:CD2	0.42	3.03	5	1
1:A:38:MET:HE2	1:A:126:LEU:HD22	0.42	1.91	7	1
1:A:41:GLU:O	1:A:43:GLY:N	0.42	2.52	1	1
1:A:84:THR:OG1	1:A:85:GLY:N	0.42	2.49	3	1
1:A:86:ILE:HD13	1:A:132:HIS:NE2	0.42	2.30	2	1
1:A:28:GLN:O	1:A:31:VAL:N	0.42	2.52	3	1
1:A:88:GLU:CG	1:A:89:GLY:N	0.42	2.82	3	1
1:A:107:LYS:HZ3	1:A:109:ARG:HE	0.42	1.58	4	1
1:A:35:PHE:CD2	1:A:59:VAL:HG11	0.42	2.50	6	1
1:A:139:GLY:O	1:A:140:LYS:O	0.42	2.37	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:PHE:CD2	1:A:69:ARG:CG	0.42	3.03	7	1
1:A:141:LEU:O	1:A:142:PHE:C	0.42	2.62	7	1
1:A:15:LYS:CB	1:A:50:GLN:CG	0.42	2.97	6	1
1:A:113:ARG:O	1:A:114:ASP:C	0.42	2.62	7	2
1:A:23:VAL:HG22	1:A:56:ARG:CD	0.42	2.45	8	1
1:A:135:ASP:HA	1:A:138:VAL:HG13	0.42	1.90	9	1
1:A:28:GLN:HE21	1:A:29:ARG:CA	0.42	2.28	1	1
1:A:39:TYR:OH	1:A:69:ARG:CB	0.42	2.68	4	1
1:A:12:ARG:HB3	1:A:15:LYS:HG2	0.42	1.87	5	1
1:A:28:GLN:O	1:A:28:GLN:NE2	0.42	2.53	7	1
1:A:91:LEU:O	1:A:93:ILE:N	0.42	2.53	1	1
1:A:28:GLN:HE21	1:A:32:ASP:CB	0.42	2.27	4	1
1:A:39:TYR:OH	1:A:69:ARG:HB3	0.42	2.14	7	1
1:A:74:ASN:HD22	1:A:74:ASN:C	0.41	2.23	5	1
1:A:111:LEU:HD22	1:A:116:LYS:C	0.41	2.40	5	1
1:A:49:THR:OG1	1:A:50:GLN:N	0.41	2.53	6	1
1:A:62:VAL:H	1:A:69:ARG:N	0.41	2.13	8	1
1:A:81:SER:OG	1:A:105:LYS:HB2	0.41	2.15	8	1
1:A:84:THR:HG23	1:A:85:GLY:H	0.41	1.75	8	1
1:A:86:ILE:HG12	1:A:132:HIS:CD2	0.41	2.50	8	1
1:A:6:LEU:C	1:A:7:HIS:CD2	0.41	2.98	4	1
1:A:46:LEU:O	1:A:133:GLU:CB	0.41	2.68	4	1
1:A:12:ARG:NE	1:A:52:ASP:HA	0.41	2.30	5	1
1:A:15:LYS:N	1:A:54:HIS:CE1	0.41	2.88	6	1
1:A:85:GLY:HA2	1:A:101:PRO:CG	0.41	2.46	6	1
1:A:7:HIS:ND1	1:A:50:GLN:CB	0.41	2.83	9	1
1:A:137:LEU:HD22	1:A:137:LEU:H	0.41	1.74	9	1
1:A:134:MET:HA	1:A:137:LEU:CD2	0.41	2.44	1	1
1:A:108:ILE:HG13	1:A:120:LEU:O	0.41	2.14	3	1
1:A:90:CYS:SG	1:A:136:HIS:HD2	0.41	2.24	4	1
1:A:97:ARG:O	1:A:98:ALA:HB2	0.41	2.16	5	1
1:A:126:LEU:HA	1:A:129:CYS:HB2	0.41	1.92	7	1
1:A:35:PHE:HB3	1:A:39:TYR:CE2	0.41	2.50	8	1
1:A:38:MET:CE	1:A:130:ILE:HD11	0.41	2.45	9	1
1:A:126:LEU:HD22	1:A:126:LEU:H	0.41	1.75	1	1
1:A:73:ILE:HG22	1:A:74:ASN:ND2	0.41	2.31	5	1
1:A:15:LYS:O	1:A:54:HIS:CD2	0.41	2.73	4	1
1:A:86:ILE:HG13	1:A:90:CYS:SG	0.41	2.54	4	1
1:A:88:GLU:HG3	1:A:136:HIS:CD2	0.41	2.50	5	1
1:A:51:VAL:HG22	1:A:52:ASP:H	0.41	1.76	7	1
1:A:18:LYS:O	1:A:18:LYS:HG2	0.41	2.16	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:THR:N	1:A:102:ARG:HB2	0.41	2.31	4	1
1:A:84:THR:HG22	1:A:103:ALA:O	0.41	2.15	6	1
1:A:77:LEU:HD12	1:A:77:LEU:C	0.41	2.41	7	1
1:A:73:ILE:HG12	1:A:110:ALA:HB1	0.41	1.93	8	1
1:A:133:GLU:O	1:A:137:LEU:HD22	0.41	2.16	9	1
1:A:34:MET:O	1:A:38:MET:HB2	0.41	2.15	4	1
1:A:7:HIS:N	1:A:92:SER:HA	0.41	2.31	5	1
1:A:35:PHE:HA	1:A:59:VAL:HG21	0.41	1.92	6	2
1:A:58:ILE:O	1:A:71:VAL:HA	0.41	2.15	6	1
1:A:19:PRO:C	1:A:20:VAL:HG23	0.41	2.40	7	1
1:A:35:PHE:CG	1:A:59:VAL:HG21	0.41	2.51	8	1
1:A:111:LEU:HA	1:A:117:PRO:HA	0.41	1.93	3	1
1:A:7:HIS:CE1	1:A:51:VAL:HG23	0.41	2.51	4	1
1:A:19:PRO:C	1:A:20:VAL:CG2	0.41	2.94	7	1
1:A:48:ALA:HB3	1:A:134:MET:CB	0.41	2.45	7	1
1:A:50:GLN:NE2	1:A:91:LEU:HD22	0.41	2.31	7	1
1:A:49:THR:O	1:A:50:GLN:HB2	0.41	2.15	1	1
1:A:51:VAL:N	1:A:54:HIS:CE1	0.41	2.89	1	1
1:A:91:LEU:C	1:A:93:ILE:N	0.41	2.78	1	1
1:A:134:MET:O	1:A:138:VAL:HG22	0.41	2.15	1	1
1:A:22:GLU:CD	1:A:22:GLU:N	0.41	2.79	3	1
1:A:20:VAL:HB	1:A:56:ARG:HE	0.41	1.74	4	1
1:A:46:LEU:HD23	1:A:47:ALA:N	0.41	2.31	4	1
1:A:132:HIS:CD2	1:A:132:HIS:C	0.41	2.99	4	1
1:A:5:VAL:HG13	1:A:51:VAL:HG23	0.41	1.93	5	1
1:A:57:ILE:N	1:A:57:ILE:CD1	0.41	2.83	5	1
1:A:100:VAL:CG1	1:A:140:LYS:CB	0.41	2.88	5	1
1:A:14:ARG:CA	1:A:15:LYS:HE3	0.41	2.46	6	1
1:A:86:ILE:N	1:A:101:PRO:CG	0.41	2.83	6	1
1:A:28:GLN:NE2	1:A:32:ASP:HB2	0.41	2.31	8	2
1:A:86:ILE:C	1:A:99:LEU:HD12	0.41	2.40	7	1
1:A:137:LEU:N	1:A:137:LEU:HD13	0.41	2.31	7	1
1:A:7:HIS:CD2	1:A:12:ARG:O	0.41	2.74	8	1
1:A:70:LEU:CG	1:A:71:VAL:N	0.41	2.84	8	1
1:A:12:ARG:HD3	1:A:12:ARG:N	0.41	2.31	1	1
1:A:49:THR:O	1:A:50:GLN:CG	0.41	2.69	1	1
1:A:110:ALA:C	1:A:118:PHE:H	0.41	2.24	1	1
1:A:13:LEU:O	1:A:14:ARG:CB	0.41	2.68	2	2
1:A:57:ILE:HD13	1:A:113:ARG:N	0.41	2.31	7	2
1:A:140:LYS:HD2	1:A:142:PHE:CD2	0.41	2.51	2	1
1:A:24:ASN:ND2	1:A:27:ILE:HD13	0.41	2.31	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:113:ARG:HD3	1:A:113:ARG:C	0.41	2.41	6	1
1:A:82:GLY:HA3	1:A:104:GLU:HB3	0.41	1.91	7	1
1:A:93:ILE:CG1	1:A:94:PRO:HD3	0.41	2.46	8	1
1:A:20:VAL:HG12	1:A:111:LEU:HD22	0.41	1.93	9	1
1:A:34:MET:O	1:A:38:MET:CB	0.40	2.70	1	1
1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:CD	0.40	2.79	2	1
1:A:34:MET:C	1:A:59:VAL:HG22	0.40	2.41	4	1
1:A:55:GLN:C	1:A:56:ARG:CD	0.40	2.94	7	1
1:A:12:ARG:HB3	1:A:50:GLN:CA	0.40	2.47	9	1
1:A:38:MET:CG	1:A:39:TYR:CE1	0.40	3.05	9	1
1:A:12:ARG:CA	1:A:15:LYS:HG2	0.40	2.46	1	1
1:A:50:GLN:NE2	1:A:91:LEU:HB2	0.40	2.31	1	1
1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:HIS:ND1	0.40	2.31	4	1
1:A:44:ILE:CG1	1:A:45:GLY:N	0.40	2.84	4	1
1:A:134:MET:C	1:A:136:HIS:N	0.40	2.77	5	1
1:A:139:GLY:C	1:A:140:LYS:HG2	0.40	2.40	5	1
1:A:90:CYS:SG	1:A:100:VAL:CG2	0.40	3.10	6	1
1:A:100:VAL:HG13	1:A:141:LEU:HB2	0.40	1.92	6	1
1:A:24:ASN:CG	1:A:27:ILE:HD13	0.40	2.41	7	1
1:A:46:LEU:O	1:A:133:GLU:HG2	0.40	2.17	8	1
1:A:71:VAL:HG13	1:A:72:LEU:N	0.40	2.30	8	1
1:A:18:LYS:O	1:A:19:PRO:O	0.40	2.40	1	1
1:A:103:ALA:HB3	1:A:131:GLN:NE2	0.40	2.32	1	1
1:A:93:ILE:HB	1:A:94:PRO:CD	0.40	2.46	3	1
1:A:96:GLN:C	1:A:97:ARG:HD3	0.40	2.42	3	1
1:A:35:PHE:O	1:A:36:GLU:C	0.40	2.63	6	2
1:A:53:ILE:CG2	1:A:54:HIS:N	0.40	2.84	7	1
1:A:101:PRO:HG2	1:A:132:HIS:HD1	0.40	1.77	7	1
1:A:7:HIS:NE2	1:A:50:GLN:O	0.40	2.48	4	1
1:A:44:ILE:HG13	1:A:45:GLY:N	0.40	2.31	4	1
1:A:50:GLN:CD	1:A:137:LEU:HB3	0.40	2.42	4	1
1:A:20:VAL:HG21	1:A:55:GLN:HG2	0.40	1.93	7	1
1:A:86:ILE:C	1:A:86:ILE:HD13	0.40	2.41	9	1
1:A:100:VAL:CB	1:A:141:LEU:HB3	0.40	2.46	9	1
1:A:74:ASN:ND2	1:A:74:ASN:N	0.40	2.70	1	1
1:A:135:ASP:C	1:A:137:LEU:N	0.40	2.71	2	1
1:A:107:LYS:CG	1:A:108:ILE:N	0.40	2.84	6	1
1:A:46:LEU:CD2	1:A:133:GLU:HG3	0.40	2.47	7	1
1:A:69:ARG:H	1:A:69:ARG:HD3	0.40	1.75	9	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	131/147 (89%)	77±4 (59±3%)	36±3 (27±3%)	18±2 (14±2%)	0	5
All	All	1179/1323 (89%)	697 (59%)	320 (27%)	162 (14%)	0	5

All 50 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	75	PRO	9
1	A	49	THR	7
1	A	91	LEU	7
1	A	92	SER	7
1	A	142	PHE	7
1	A	50	GLN	6
1	A	57	ILE	6
1	A	14	ARG	5
1	A	19	PRO	5
1	A	93	ILE	5
1	A	140	LYS	5
1	A	13	LEU	5
1	A	17	ALA	5
1	A	56	ARG	5
1	A	38	MET	4
1	A	42	GLU	4
1	A	48	ALA	4
1	A	82	GLY	4
1	A	89	GLY	4
1	A	90	CYS	4
1	A	98	ALA	4
1	A	43	GLY	3
1	A	12	ARG	3
1	A	97	ARG	3
1	A	16	VAL	3
1	A	74	ASN	2
1	A	94	PRO	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	101	PRO	2
1	A	138	VAL	2
1	A	139	GLY	2
1	A	45	GLY	2
1	A	69	ARG	2
1	A	95	GLU	2
1	A	3	LEU	2
1	A	52	ASP	2
1	A	15	LYS	2
1	A	23	VAL	2
1	A	73	ILE	2
1	A	58	ILE	1
1	A	132	HIS	1
1	A	99	LEU	1
1	A	103	ALA	1
1	A	100	VAL	1
1	A	84	THR	1
1	A	85	GLY	1
1	A	28	GLN	1
1	A	29	ARG	1
1	A	30	ILE	1
1	A	72	LEU	1
1	A	5	VAL	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	113/129 (88%)	85±2 (76±2%)	28±2 (24±2%)	2	25
All	All	1017/1161 (88%)	768 (76%)	249 (24%)	2	25

All 72 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	71	VAL	9
1	A	74	ASN	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	108	ILE	9
1	A	86	ILE	8
1	A	100	VAL	8
1	A	121	GLU	8
1	A	15	LYS	7
1	A	69	ARG	7
1	A	130	ILE	7
1	A	57	ILE	7
1	A	61	ASP	7
1	A	28	GLN	6
1	A	136	HIS	6
1	A	73	ILE	6
1	A	58	ILE	6
1	A	12	ARG	5
1	A	72	LEU	5
1	A	91	LEU	5
1	A	56	ARG	4
1	A	75	PRO	4
1	A	132	HIS	4
1	A	137	LEU	4
1	A	142	PHE	4
1	A	7	HIS	4
1	A	38	MET	4
1	A	27	ILE	4
1	A	54	HIS	4
1	A	99	LEU	4
1	A	33	ASP	4
1	A	70	LEU	4
1	A	131	GLN	4
1	A	19	PRO	3
1	A	133	GLU	3
1	A	135	ASP	3
1	A	46	LEU	3
1	A	50	GLN	3
1	A	59	VAL	3
1	A	24	ASN	3
1	A	13	LEU	3
1	A	3	LEU	2
1	A	36	GLU	2
1	A	41	GLU	2
1	A	97	ARG	2
1	A	138	VAL	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	22	GLU	2
1	A	83	GLU	2
1	A	126	LEU	2
1	A	49	THR	2
1	A	76	GLU	2
1	A	32	ASP	2
1	A	111	LEU	2
1	A	51	VAL	2
1	A	60	ILE	2
1	A	93	ILE	2
1	A	21	GLU	1
1	A	92	SER	1
1	A	105	LYS	1
1	A	80	LYS	1
1	A	88	GLU	1
1	A	78	LEU	1
1	A	79	GLU	1
1	A	113	ARG	1
1	A	107	LYS	1
1	A	14	ARG	1
1	A	134	MET	1
1	A	140	LYS	1
1	A	90	CYS	1
1	A	4	GLN	1
1	A	34	MET	1
1	A	55	GLN	1
1	A	104	GLU	1
1	A	128	ILE	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 ⓘ

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

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

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided