



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 04:12 AM UTC

PDB ID : 2FEJ / pdb_00002fej
Title : Solution structure of human p53 DNA binding domain.
Authors : Perez-Canadillas, J.M.; Tidow, H.; Freund, S.M.; Rutherford, T.J.; Ang, H.C.;
Fersht, A.R.
Deposited on : 2005-12-16

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

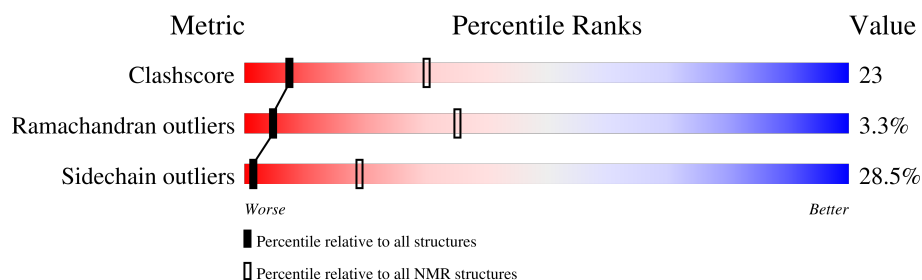
1 Overall quality at a glance

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	204	31% 50% • 14%

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 36 models. Model 11 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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:98-A:118, A:123-A:181, A:189-A:223, A:228-A:287 (175)	0.92	11

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 4 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 3, 4, 6, 7, 8, 10, 11, 13, 14, 16, 18, 20, 21, 22, 23, 24, 26, 27, 29, 31, 32, 33, 35, 36
2	9, 15
3	5, 28
4	12, 34
Single-model clusters	17; 19; 25; 30

3 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 3179 atoms, of which 1573 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Cellular tumor antigen p53.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	204	Total	C	H	N	O	S	0
			3178	987	1573	300	302	16	

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

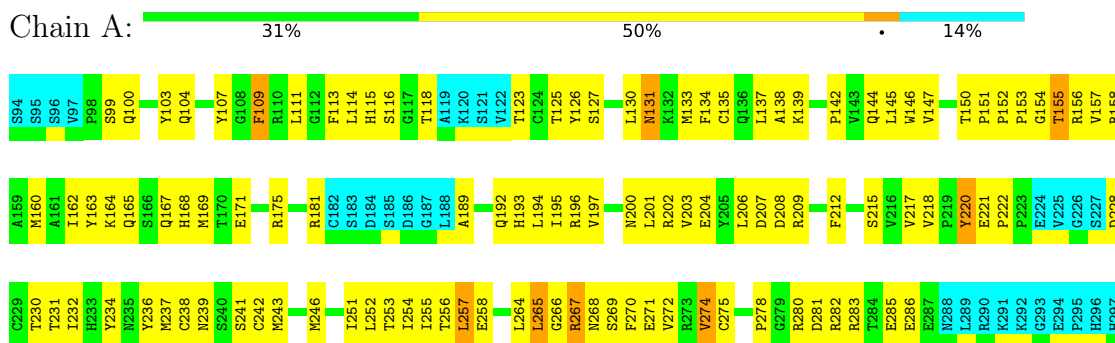
Mol	Chain	Residues	Atoms	
2	A	1	Total	Zn
			1	1

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: Cellular tumor antigen p53

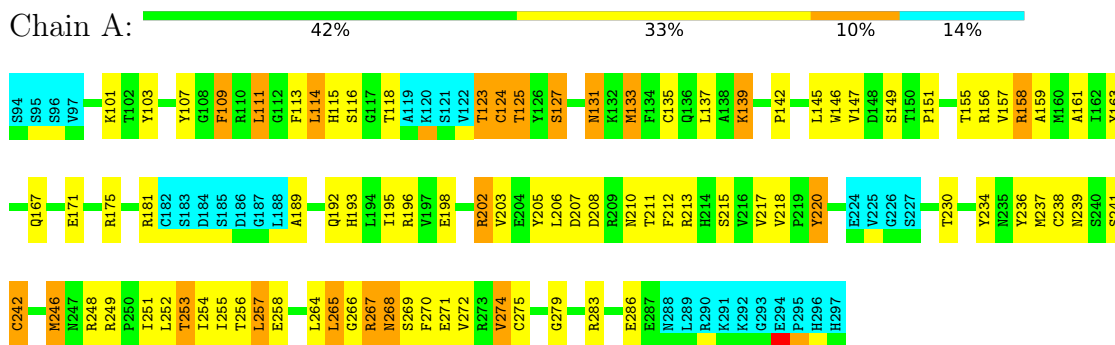


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



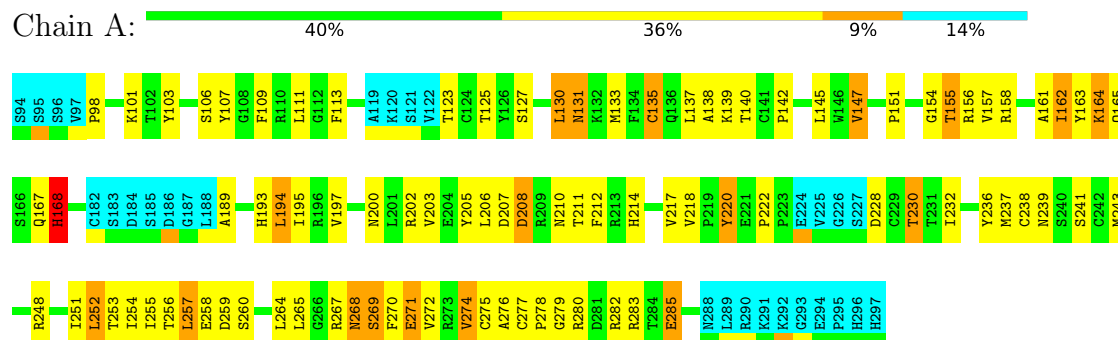
4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



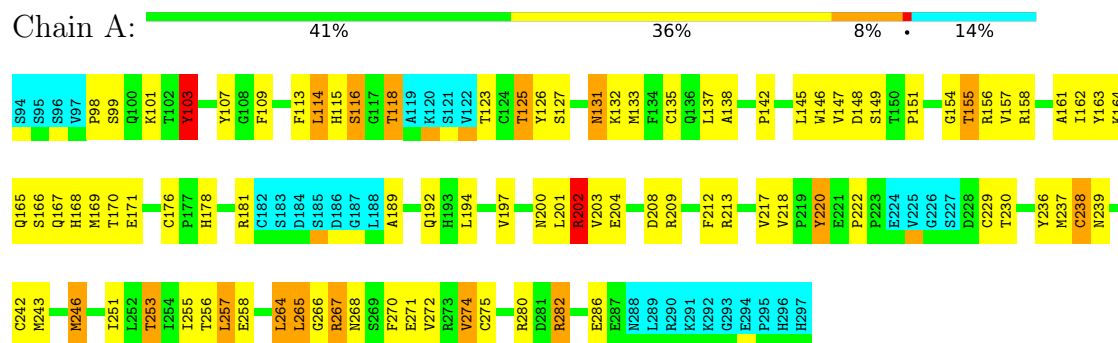
4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



4.2.4 Score per residue for model 4

• Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



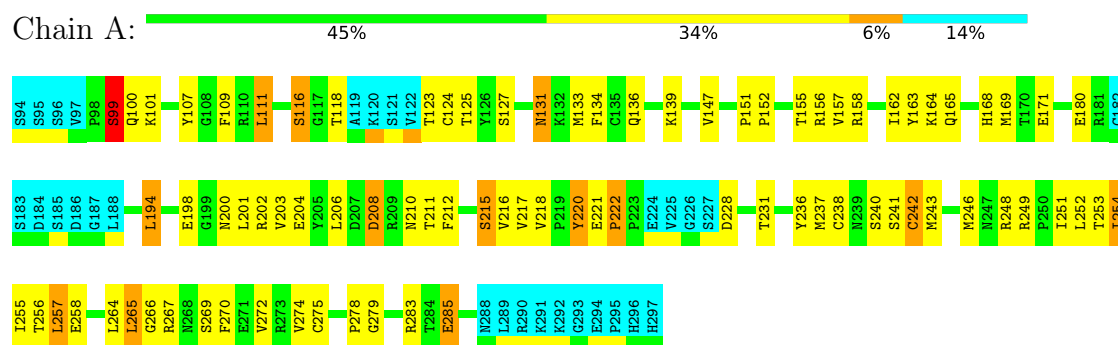
4.2.5 Score per residue for model 5

• Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



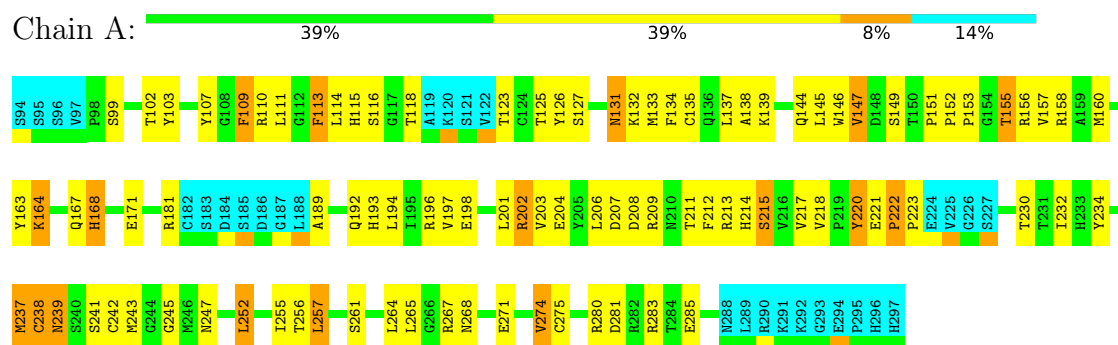
4.2.6 Score per residue for model 6

• Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



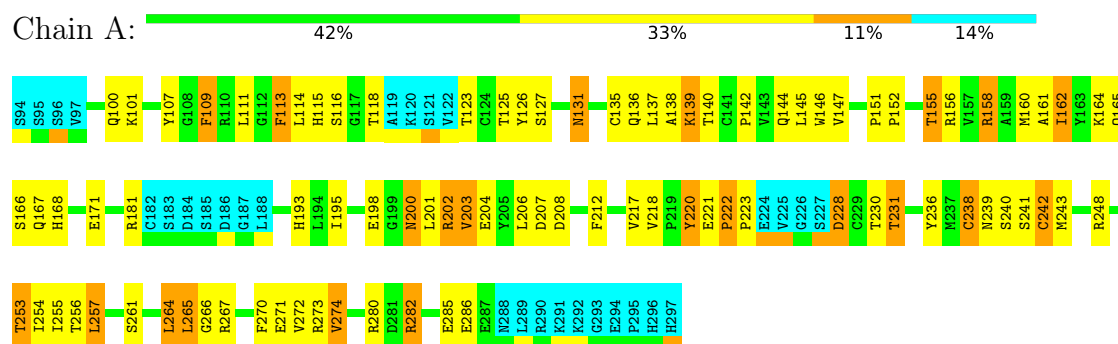
4.2.7 Score per residue for model 7

• Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



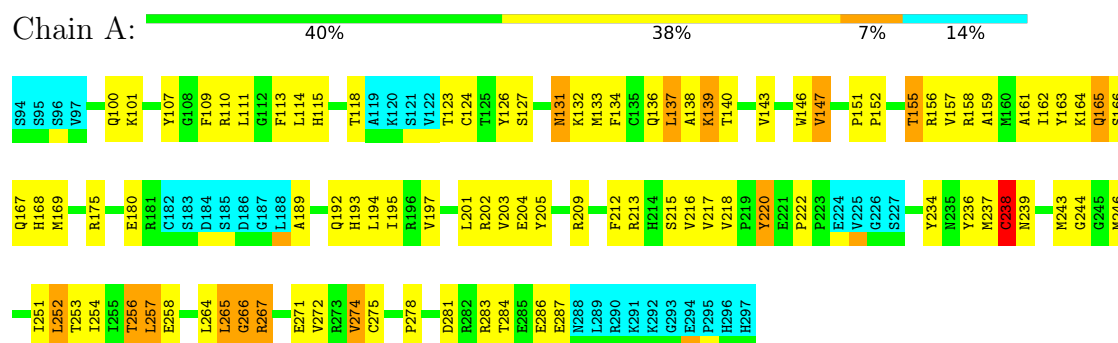
4.2.8 Score per residue for model 8

• Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



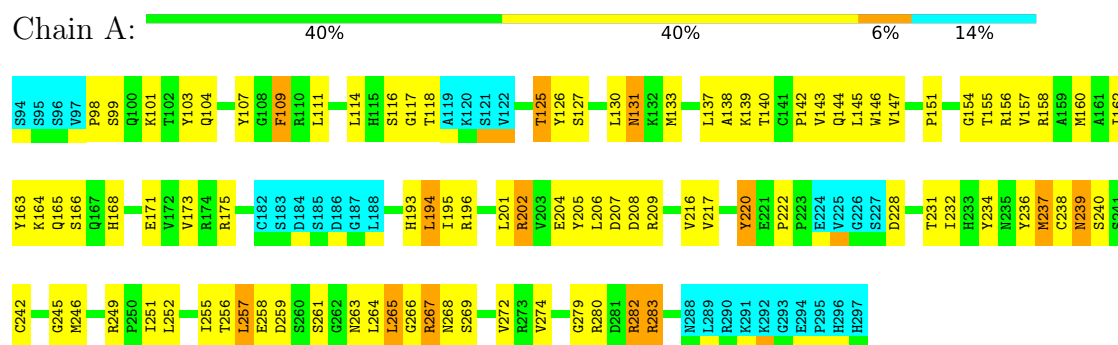
4.2.9 Score per residue for model 9

• Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



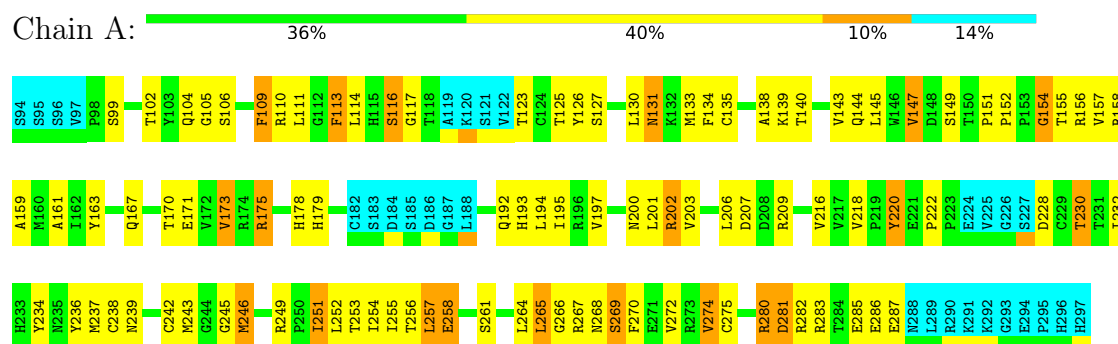
4.2.10 Score per residue for model 10

• Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



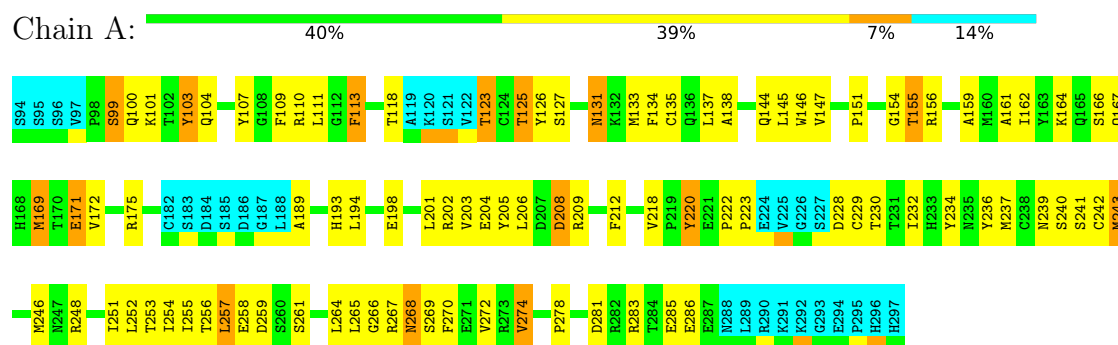
4.2.11 Score per residue for model 11 (medoid)

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



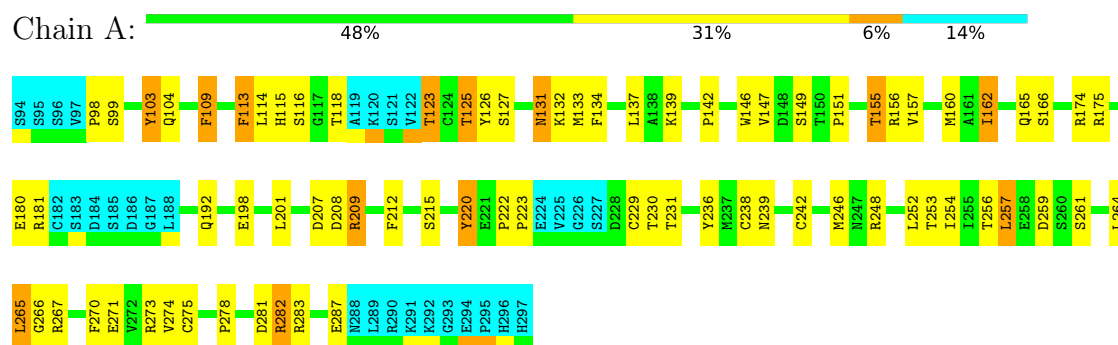
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



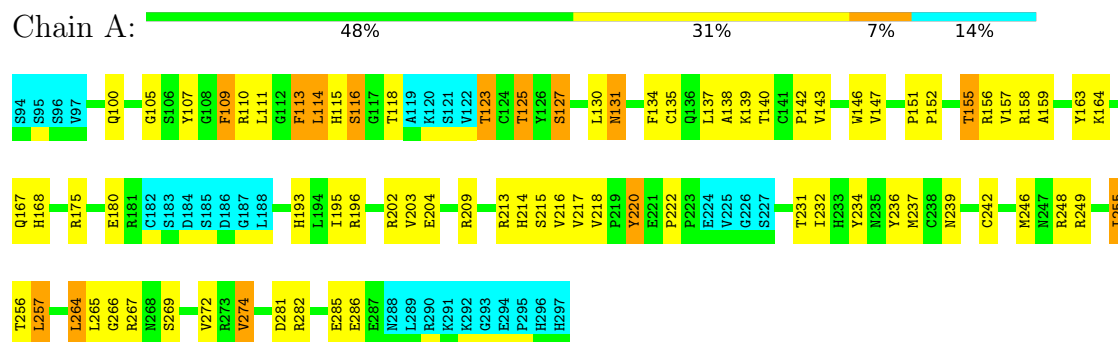
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



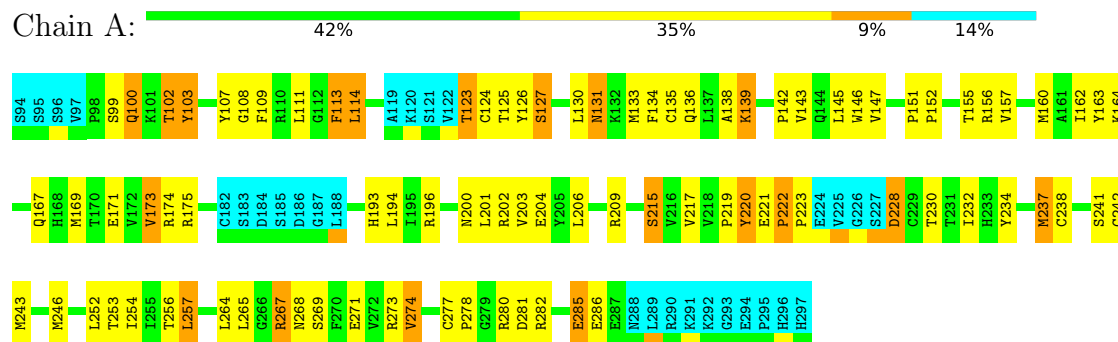
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



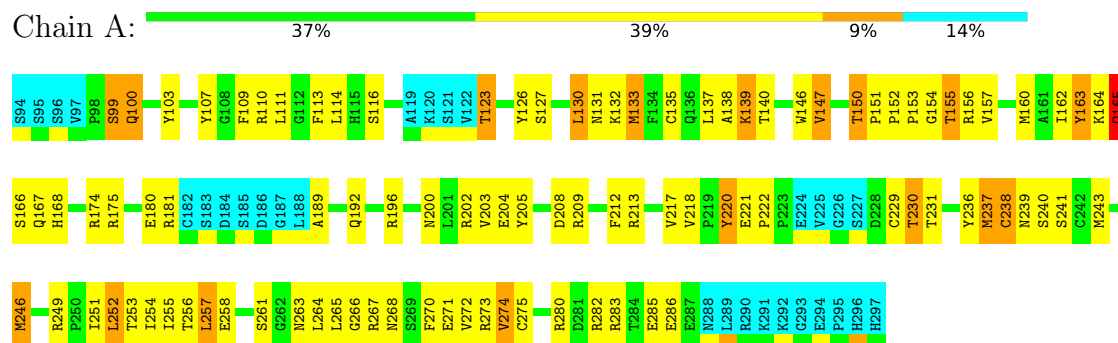
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



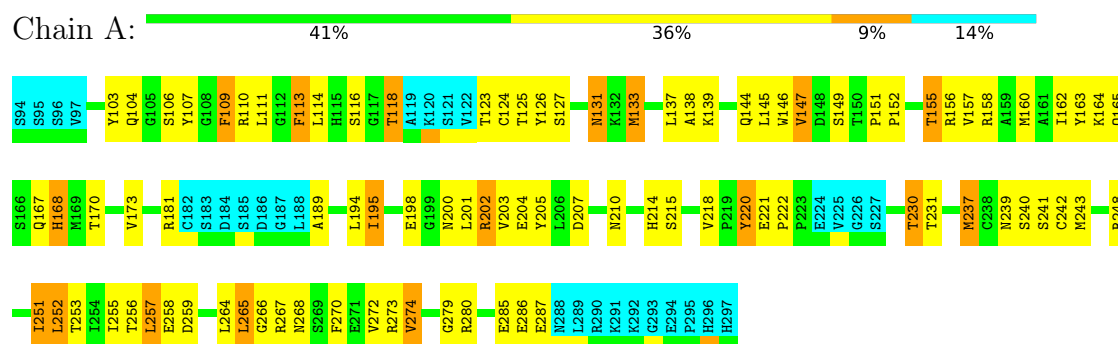
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



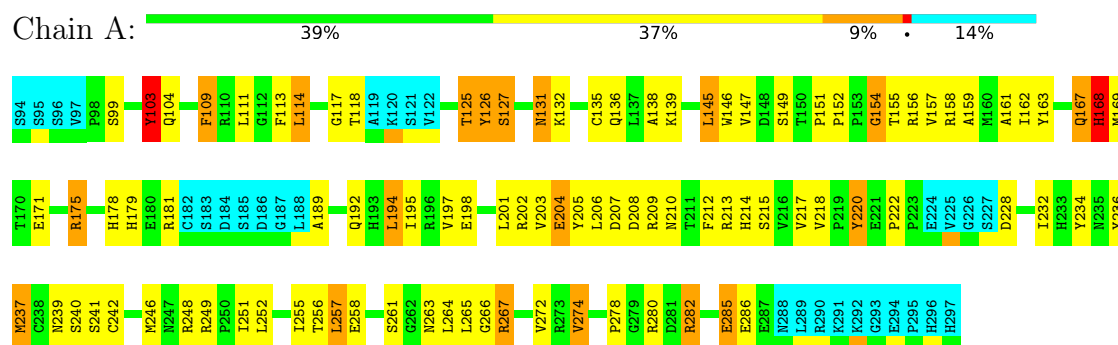
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



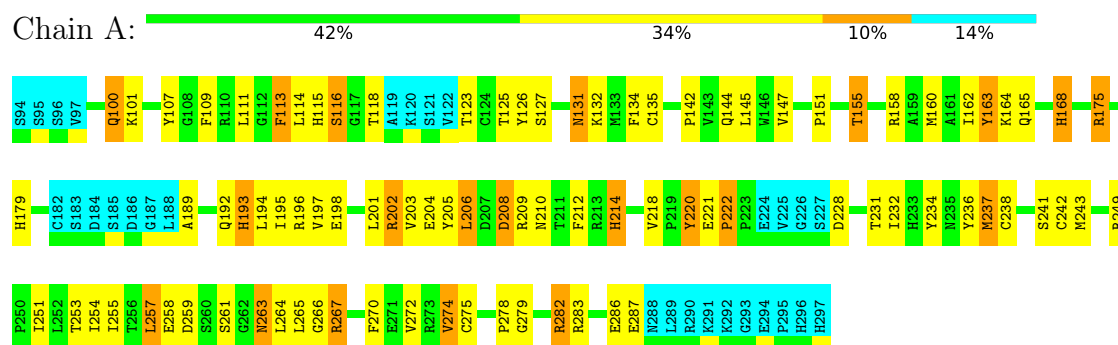
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



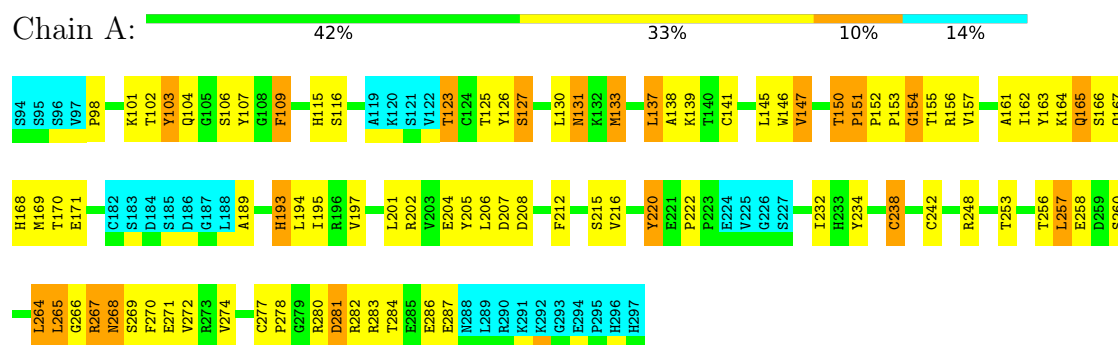
4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



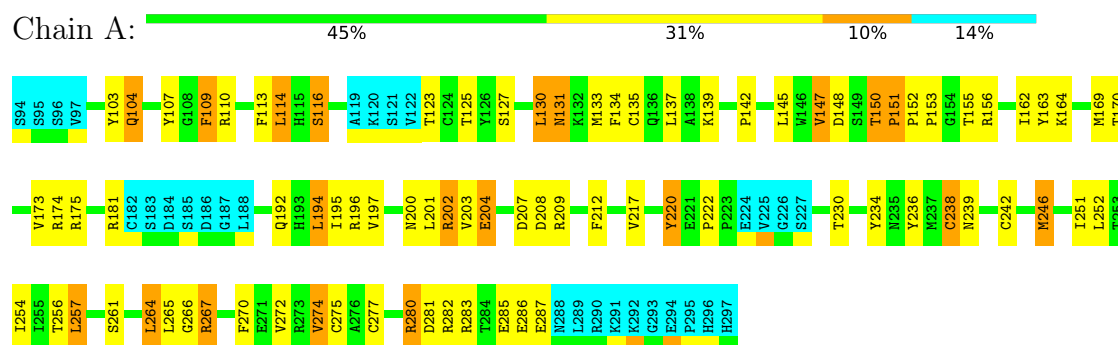
4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



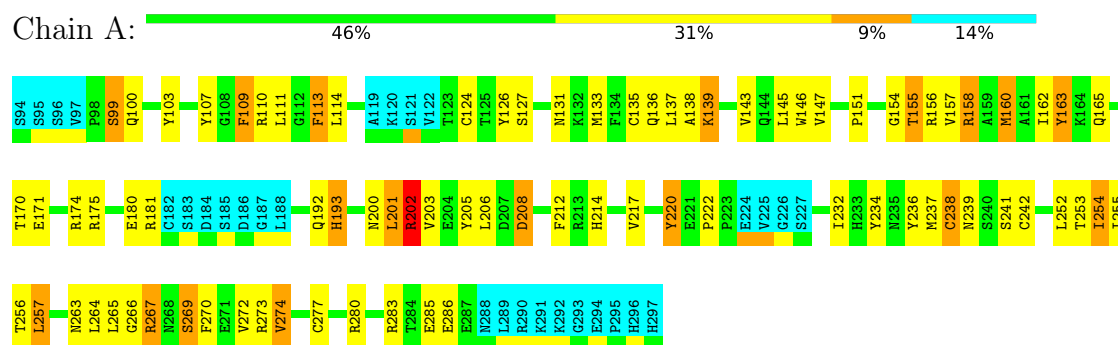
4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



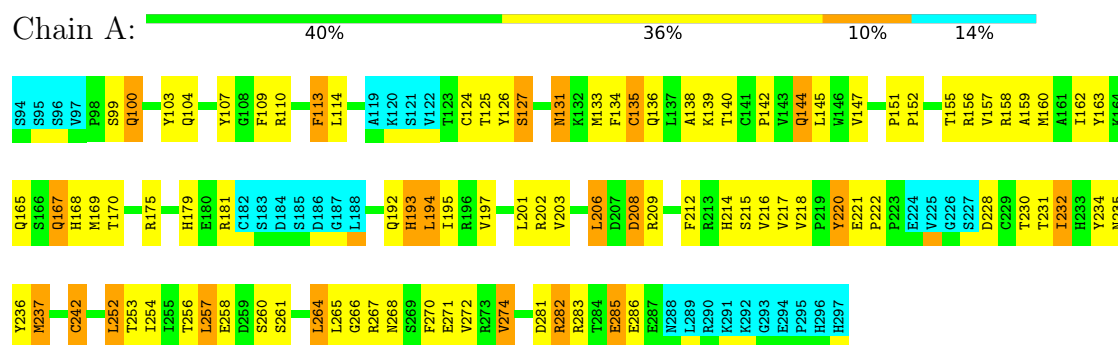
4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



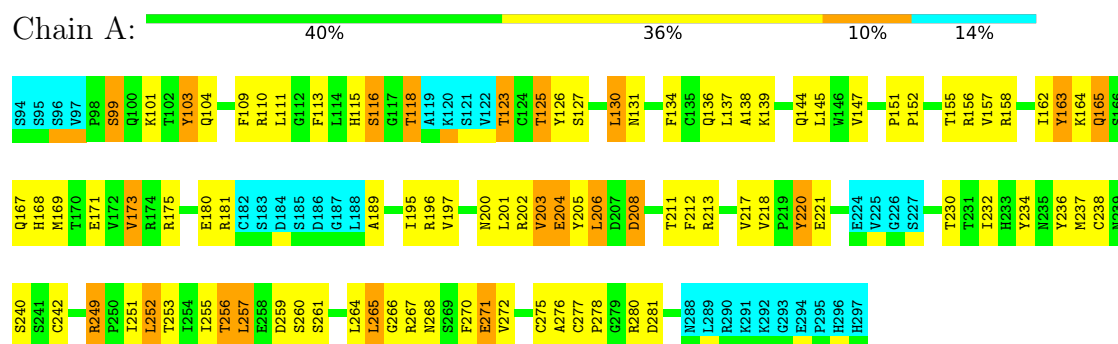
4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



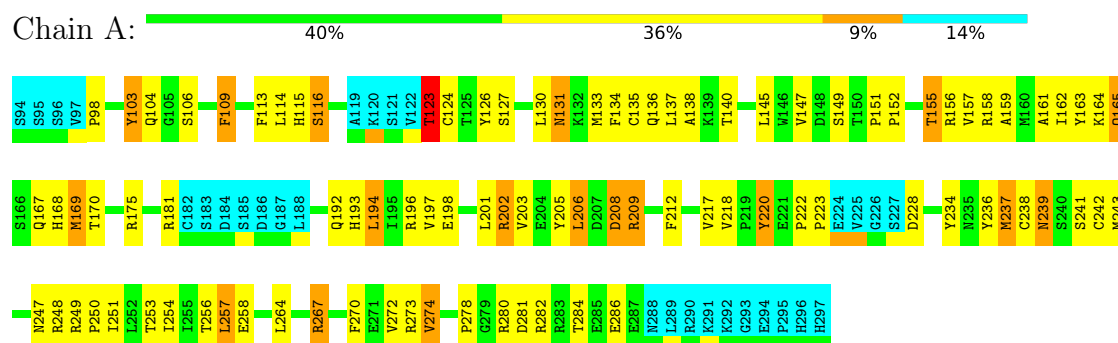
4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



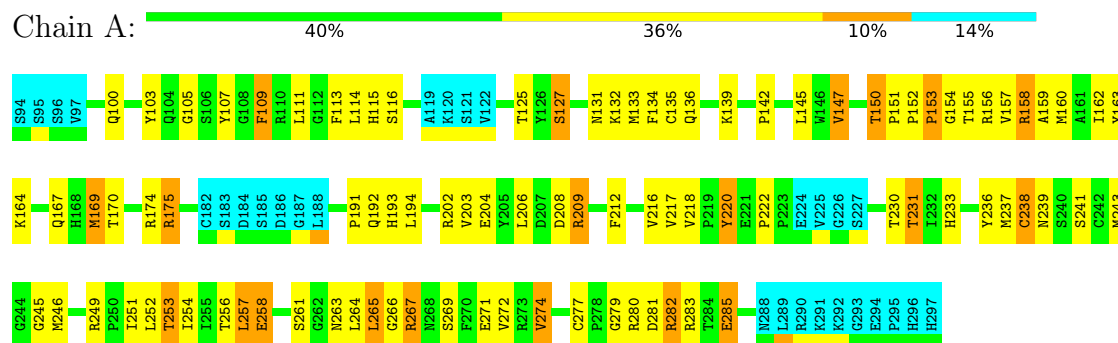
4.2.27 Score per residue for model 27

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



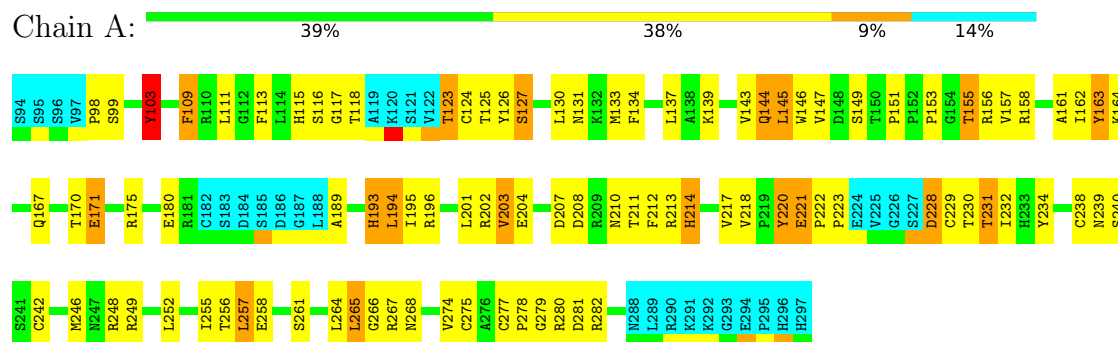
4.2.28 Score per residue for model 28

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



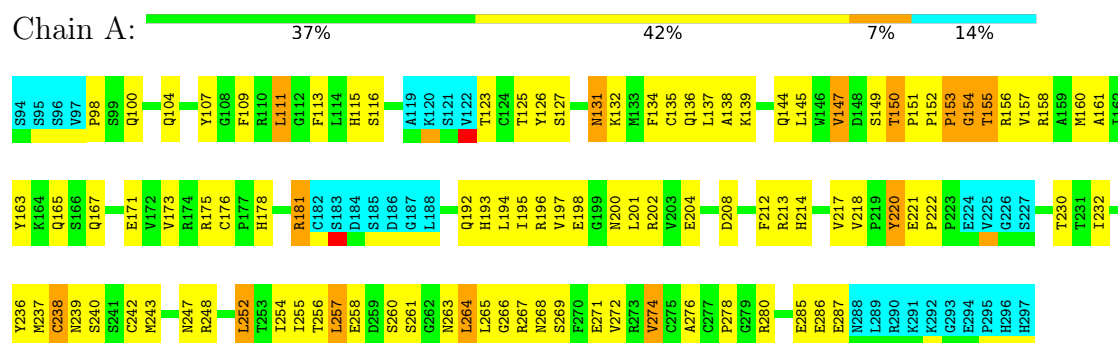
4.2.29 Score per residue for model 29

• Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



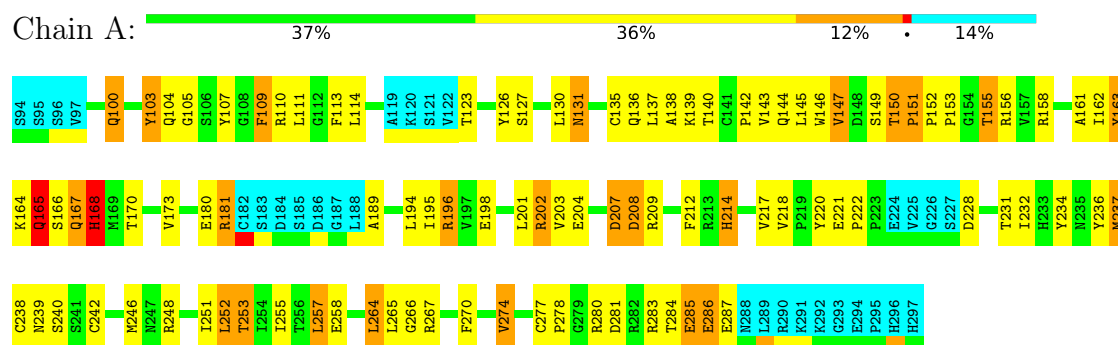
4.2.30 Score per residue for model 30

• Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



4.2.31 Score per residue for model 31

• Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



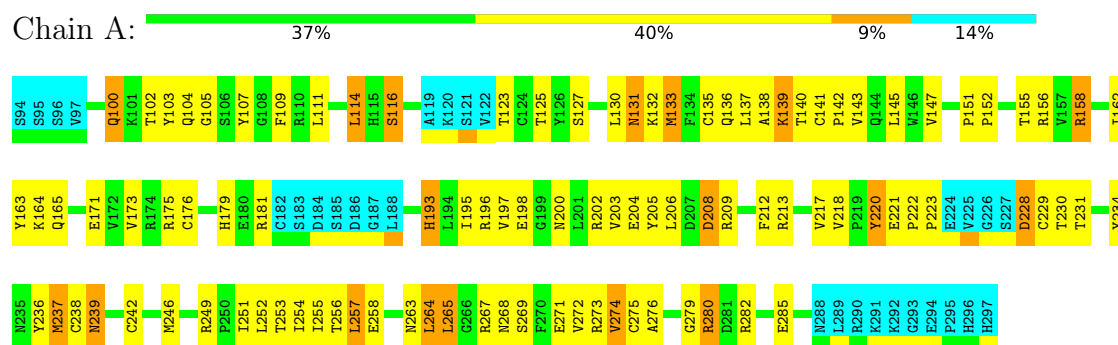
4.2.32 Score per residue for model 32

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



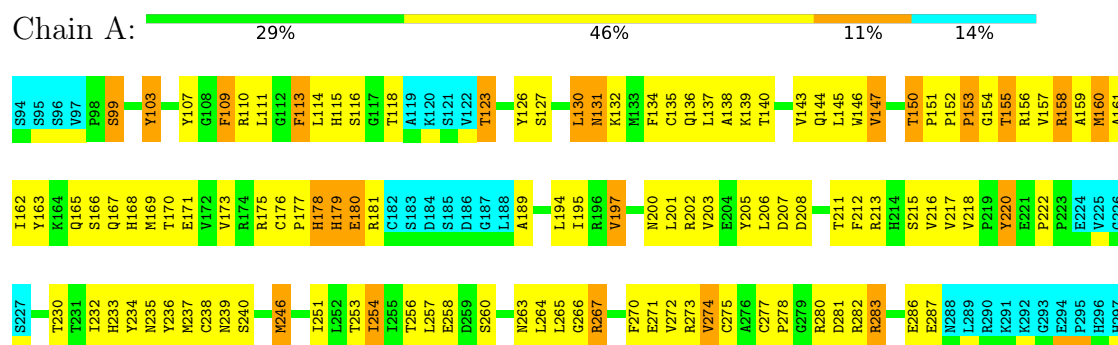
4.2.33 Score per residue for model 33

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



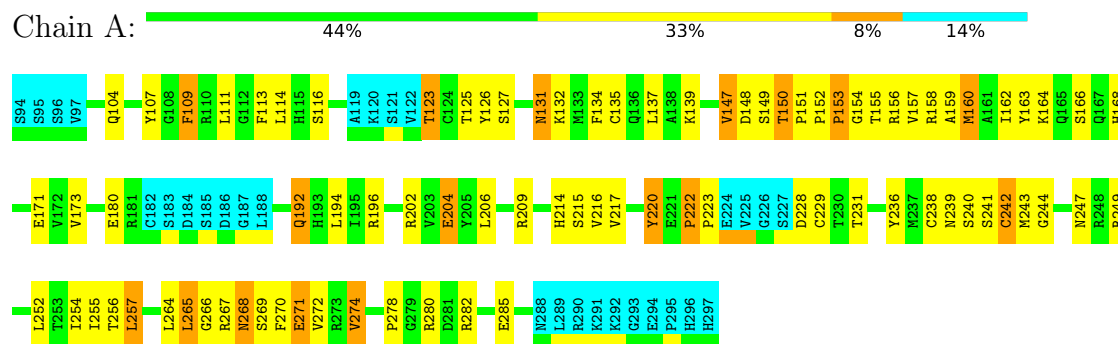
4.2.34 Score per residue for model 34

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



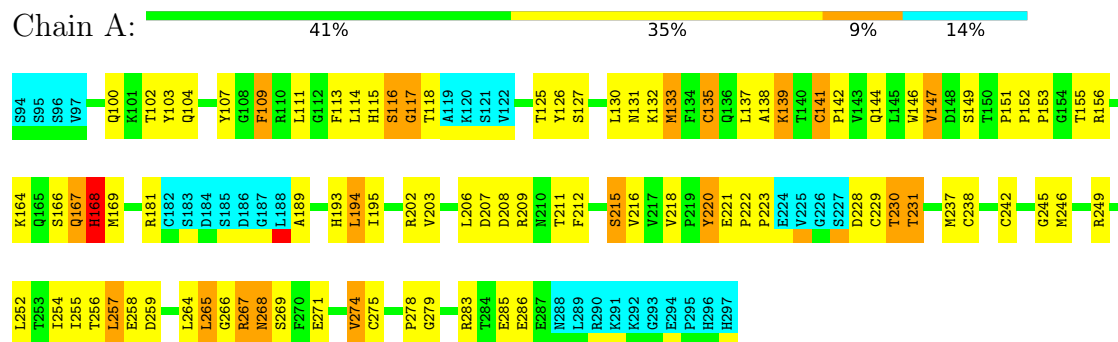
4.2.35 Score per residue for model 35

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



4.2.36 Score per residue for model 36

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

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

Of the 50 calculated structures, 36 were deposited, based on the following criterion: *structures with the least restraint violations*.

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

No chemical shift data was provided.

6 Model quality ⓘ

6.1 Standard geometry ⓘ

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

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	1395	1367	1358	64±12
All	All	50256	49212	48888	2298

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 23.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:155:THR:HG21	1:A:257:LEU:HD23	1.07	1.25	32	30
1:A:161:ALA:HB2	1:A:195:ILE:HD11	1.06	1.27	34	12
1:A:162:ILE:HD11	1:A:254:ILE:HD11	1.00	1.02	2	4
1:A:145:LEU:HD21	1:A:157:VAL:HG11	0.92	1.42	1	5
1:A:111:LEU:HD21	1:A:255:ILE:HD12	0.90	1.41	7	4
1:A:145:LEU:HD13	1:A:232:ILE:HD12	0.88	1.44	11	5
1:A:103:TYR:CE1	1:A:264:LEU:HD23	0.88	2.02	34	4
1:A:162:ILE:HD11	1:A:254:ILE:CD1	0.87	1.97	2	5
1:A:138:ALA:HB2	1:A:237:MET:HE1	0.87	1.46	3	3
1:A:155:THR:HG21	1:A:257:LEU:CD2	0.87	1.99	32	22
1:A:236:TYR:CE2	1:A:272:VAL:HG21	0.87	2.04	35	10
1:A:103:TYR:CD1	1:A:264:LEU:HD23	0.87	2.05	28	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:265:LEU:HD22	1:A:266:GLY:N	0.86	1.85	11	7
1:A:206:LEU:HD11	1:A:217:VAL:HG13	0.86	1.45	33	1
1:A:145:LEU:HD22	1:A:232:ILE:HD11	0.85	1.48	29	2
1:A:203:VAL:CG1	1:A:218:VAL:HG12	0.84	2.02	12	6
1:A:257:LEU:O	1:A:265:LEU:HD13	0.84	1.72	35	7
1:A:138:ALA:HB2	1:A:237:MET:HE3	0.83	1.49	25	7
1:A:107:TYR:CG	1:A:265:LEU:HD23	0.83	2.08	36	4
1:A:111:LEU:HD22	1:A:255:ILE:HD13	0.83	1.46	3	4
1:A:251:ILE:HG23	1:A:272:VAL:HG13	0.82	1.51	22	6
1:A:197:VAL:HG22	1:A:234:TYR:CE1	0.82	2.10	23	7
1:A:251:ILE:C	1:A:252:LEU:HD13	0.82	1.99	26	3
1:A:236:TYR:CE2	1:A:272:VAL:HG11	0.82	2.08	11	16
1:A:158:ARG:CG	1:A:217:VAL:HG12	0.82	2.04	34	6
1:A:111:LEU:HD11	1:A:255:ILE:CG2	0.81	2.05	14	1
1:A:162:ILE:HD11	1:A:252:LEU:HD22	0.81	1.52	18	3
1:A:189:ALA:HB2	1:A:205:TYR:CE2	0.80	2.11	12	3
1:A:107:TYR:CD2	1:A:265:LEU:HD23	0.80	2.12	35	1
1:A:203:VAL:HG12	1:A:218:VAL:HG12	0.80	1.53	12	6
1:A:103:TYR:CE2	1:A:264:LEU:HD23	0.79	2.12	20	2
1:A:155:THR:O	1:A:220:TYR:HB2	0.79	1.77	35	36
1:A:200:ASN:ND2	1:A:203:VAL:HG21	0.78	1.94	24	4
1:A:150:THR:HG22	1:A:152:PRO:CD	0.78	2.08	30	10
1:A:107:TYR:CE2	1:A:265:LEU:HD11	0.78	2.13	31	4
1:A:163:TYR:OH	1:A:173:VAL:HG13	0.78	1.78	26	1
1:A:116:SER:OG	1:A:125:THR:HG22	0.78	1.78	33	2
1:A:137:LEU:HD22	1:A:239:ASN:OD1	0.77	1.78	4	4
1:A:189:ALA:HB2	1:A:205:TYR:OH	0.77	1.79	5	10
1:A:256:THR:HG23	1:A:267:ARG:HG3	0.77	1.55	35	7
1:A:158:ARG:HG3	1:A:217:VAL:HG12	0.77	1.56	34	3
1:A:102:THR:HG23	1:A:268:ASN:HB3	0.77	1.57	11	2
1:A:102:THR:HG22	1:A:268:ASN:OD1	0.77	1.80	15	1
1:A:107:TYR:CD2	1:A:265:LEU:HD21	0.76	2.15	31	6
1:A:158:ARG:HB3	1:A:217:VAL:HG12	0.76	1.57	18	5
1:A:115:HIS:CE1	1:A:125:THR:HG23	0.76	2.16	28	2
1:A:145:LEU:HB2	1:A:230:THR:HG23	0.76	1.54	11	3
1:A:114:LEU:HD12	1:A:142:PRO:HB2	0.75	1.58	31	3
1:A:206:LEU:HD11	1:A:217:VAL:CG1	0.75	2.11	27	2
1:A:204:GLU:O	1:A:217:VAL:HG22	0.75	1.82	32	12
1:A:137:LEU:HD22	1:A:137:LEU:O	0.75	1.81	9	2
1:A:159:ALA:HB3	1:A:216:VAL:CG1	0.75	2.11	34	7
1:A:99:SER:CB	1:A:254:ILE:HG21	0.75	2.12	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:200:ASN:O	1:A:201:LEU:HD22	0.75	1.81	11	3
1:A:162:ILE:CG1	1:A:254:ILE:HD11	0.74	2.12	34	3
1:A:107:TYR:CG	1:A:265:LEU:HD13	0.74	2.17	21	11
1:A:107:TYR:CD1	1:A:265:LEU:HD23	0.74	2.18	36	1
1:A:162:ILE:HD12	1:A:252:LEU:HD23	0.74	1.59	3	2
1:A:256:THR:HG23	1:A:267:ARG:CB	0.74	2.12	15	8
1:A:137:LEU:HD13	1:A:239:ASN:CG	0.74	2.08	10	2
1:A:252:LEU:HD12	1:A:271:GLU:CD	0.74	2.07	3	1
1:A:252:LEU:HD12	1:A:269:SER:OG	0.74	1.83	30	1
1:A:145:LEU:HD22	1:A:232:ILE:CD1	0.74	2.12	29	2
1:A:100:GLN:CG	1:A:254:ILE:HD13	0.73	2.12	5	1
1:A:111:LEU:HD12	1:A:111:LEU:O	0.73	1.83	2	2
1:A:220:TYR:CE1	1:A:257:LEU:HD21	0.73	2.19	20	18
1:A:116:SER:HG	1:A:125:THR:HG22	0.73	1.41	33	2
1:A:114:LEU:HD12	1:A:142:PRO:HB3	0.73	1.61	36	1
1:A:231:THR:HG22	1:A:233:HIS:CE1	0.73	2.19	28	1
1:A:144:GLN:OE1	1:A:231:THR:HG23	0.73	1.83	31	1
1:A:111:LEU:HD21	1:A:255:ILE:CD1	0.73	2.13	32	5
1:A:162:ILE:CD1	1:A:254:ILE:HD11	0.72	2.14	34	6
1:A:222:PRO:HB2	1:A:223:PRO:HD3	0.72	1.61	32	6
1:A:220:TYR:CZ	1:A:257:LEU:HD21	0.72	2.19	12	27
1:A:163:TYR:CE1	1:A:173:VAL:HG22	0.72	2.19	11	2
1:A:265:LEU:HD22	1:A:265:LEU:C	0.72	2.10	36	7
1:A:221:GLU:O	1:A:230:THR:HG22	0.72	1.84	25	2
1:A:206:LEU:HD21	1:A:217:VAL:HG13	0.72	1.60	24	3
1:A:158:ARG:HG2	1:A:217:VAL:HG12	0.72	1.62	14	13
1:A:203:VAL:HG12	1:A:218:VAL:HA	0.72	1.60	28	20
1:A:220:TYR:OH	1:A:257:LEU:HD21	0.72	1.85	8	14
1:A:111:LEU:HD13	1:A:255:ILE:HD12	0.72	1.61	6	4
1:A:256:THR:HG23	1:A:267:ARG:HB3	0.72	1.61	10	7
1:A:111:LEU:HD22	1:A:143:VAL:HG12	0.71	1.62	33	2
1:A:114:LEU:HD21	1:A:142:PRO:HB2	0.71	1.62	23	6
1:A:264:LEU:HD21	1:A:267:ARG:HG2	0.71	1.62	21	8
1:A:252:LEU:HD22	1:A:252:LEU:O	0.71	1.86	23	2
1:A:135:CYS:SG	1:A:274:VAL:HG13	0.71	2.25	15	24
1:A:236:TYR:CD2	1:A:272:VAL:HG11	0.71	2.20	33	3
1:A:160:MET:O	1:A:254:ILE:HD12	0.71	1.86	24	2
1:A:111:LEU:CD1	1:A:255:ILE:HD13	0.71	2.15	33	3
1:A:264:LEU:HD23	1:A:267:ARG:CD	0.71	2.16	25	1
1:A:251:ILE:HG23	1:A:272:VAL:CG2	0.71	2.16	6	1
1:A:150:THR:C	1:A:152:PRO:HD2	0.71	2.09	30	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:162:ILE:HG13	1:A:254:ILE:HD11	0.71	1.61	24	2
1:A:155:THR:CG2	1:A:257:LEU:HD23	0.70	2.13	30	9
1:A:109:PHE:HB2	1:A:147:VAL:HG13	0.70	1.64	20	15
1:A:200:ASN:C	1:A:201:LEU:HD22	0.70	2.11	34	1
1:A:109:PHE:CD2	1:A:257:LEU:HD23	0.70	2.21	25	3
1:A:151:PRO:N	1:A:152:PRO:HD3	0.70	2.02	34	7
1:A:256:THR:HG22	1:A:267:ARG:CG	0.70	2.17	4	7
1:A:158:ARG:CD	1:A:160:MET:HE2	0.70	2.17	5	1
1:A:155:THR:HG21	1:A:257:LEU:HD12	0.70	1.62	27	2
1:A:179:HIS:CD2	1:A:237:MET:HE1	0.69	2.22	19	1
1:A:162:ILE:HG22	1:A:252:LEU:O	0.69	1.88	26	1
1:A:163:TYR:O	1:A:169:MET:HE3	0.69	1.87	27	2
1:A:194:LEU:HD21	1:A:238:CYS:CB	0.69	2.16	32	1
1:A:144:GLN:CG	1:A:231:THR:HG23	0.69	2.18	8	2
1:A:161:ALA:HB2	1:A:195:ILE:CD1	0.69	2.17	18	4
1:A:161:ALA:C	1:A:162:ILE:HD13	0.69	2.12	23	1
1:A:123:THR:HG22	1:A:139:LYS:HD2	0.68	1.63	1	1
1:A:145:LEU:HD23	1:A:157:VAL:HG21	0.68	1.64	34	1
1:A:111:LEU:HD12	1:A:143:VAL:HG12	0.68	1.65	15	1
1:A:236:TYR:OH	1:A:272:VAL:HG21	0.68	1.89	18	2
1:A:116:SER:OG	1:A:125:THR:HG23	0.68	1.87	21	1
1:A:161:ALA:HB1	1:A:251:ILE:HD11	0.68	1.64	27	4
1:A:145:LEU:HD11	1:A:232:ILE:HD12	0.68	1.62	24	5
1:A:251:ILE:HG23	1:A:272:VAL:CG1	0.68	2.18	20	5
1:A:270:PHE:CE2	1:A:272:VAL:HG22	0.67	2.24	27	6
1:A:252:LEU:N	1:A:252:LEU:HD13	0.67	2.04	23	1
1:A:264:LEU:HD21	1:A:267:ARG:HB3	0.67	1.67	23	2
1:A:137:LEU:HD13	1:A:239:ASN:HB3	0.67	1.66	17	1
1:A:200:ASN:CG	1:A:218:VAL:HG23	0.67	2.15	26	1
1:A:114:LEU:HD12	1:A:142:PRO:HG2	0.67	1.66	33	3
1:A:114:LEU:O	1:A:114:LEU:HD12	0.67	1.89	19	7
1:A:145:LEU:CD1	1:A:232:ILE:HD12	0.67	2.20	26	8
1:A:163:TYR:CE2	1:A:173:VAL:HG12	0.67	2.25	35	2
1:A:157:VAL:O	1:A:218:VAL:HG22	0.67	1.88	1	2
1:A:155:THR:O	1:A:220:TYR:CB	0.67	2.43	31	2
1:A:111:LEU:HD22	1:A:255:ILE:HD12	0.66	1.66	8	1
1:A:161:ALA:O	1:A:162:ILE:HD13	0.66	1.91	23	1
1:A:164:LYS:HB2	1:A:252:LEU:HD23	0.66	1.65	33	1
1:A:118:THR:HG21	1:A:279:GLY:HA3	0.66	1.67	1	1
1:A:151:PRO:HB2	1:A:220:TYR:CE2	0.66	2.26	9	32
1:A:256:THR:HG22	1:A:267:ARG:HG2	0.66	1.66	27	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:251:ILE:HG23	1:A:272:VAL:HG23	0.66	1.67	6	1
1:A:114:LEU:HD12	1:A:142:PRO:CB	0.66	2.19	8	2
1:A:126:TYR:CE1	1:A:133:MET:HE2	0.66	2.25	12	1
1:A:111:LEU:CD1	1:A:255:ILE:HD12	0.66	2.20	6	2
1:A:111:LEU:CD2	1:A:255:ILE:HD13	0.66	2.19	16	2
1:A:133:MET:SD	1:A:272:VAL:HG12	0.66	2.30	16	1
1:A:157:VAL:O	1:A:218:VAL:HG12	0.66	1.90	25	1
1:A:109:PHE:CE2	1:A:257:LEU:HD13	0.66	2.26	22	8
1:A:189:ALA:HB2	1:A:205:TYR:CZ	0.66	2.26	12	6
1:A:264:LEU:HD21	1:A:267:ARG:NE	0.66	2.06	34	2
1:A:254:ILE:HG23	1:A:269:SER:HB2	0.66	1.67	2	1
1:A:107:TYR:CD2	1:A:265:LEU:HD13	0.65	2.25	20	11
1:A:125:THR:HG21	1:A:282:ARG:CB	0.65	2.21	28	4
1:A:164:LYS:HB2	1:A:252:LEU:HD13	0.65	1.66	28	1
1:A:254:ILE:HD12	1:A:269:SER:CB	0.65	2.22	5	1
1:A:99:SER:HB3	1:A:254:ILE:HD13	0.65	1.67	12	2
1:A:151:PRO:HB2	1:A:220:TYR:HE2	0.65	1.51	8	3
1:A:256:THR:HB	1:A:264:LEU:HD11	0.65	1.67	26	5
1:A:114:LEU:HD21	1:A:142:PRO:CB	0.65	2.22	25	4
1:A:194:LEU:HD13	1:A:194:LEU:N	0.65	2.07	29	4
1:A:256:THR:HG23	1:A:267:ARG:CG	0.65	2.22	6	7
1:A:109:PHE:CD2	1:A:257:LEU:CD2	0.65	2.80	1	3
1:A:164:LYS:HD2	1:A:252:LEU:HD22	0.65	1.67	7	1
1:A:163:TYR:HB3	1:A:251:ILE:HG22	0.65	1.67	9	1
1:A:138:ALA:HB2	1:A:237:MET:CE	0.64	2.22	18	6
1:A:111:LEU:CD2	1:A:255:ILE:HD12	0.64	2.22	18	4
1:A:206:LEU:HD12	1:A:215:SER:OG	0.64	1.92	18	2
1:A:123:THR:HG23	1:A:139:LYS:HG2	0.64	1.67	9	1
1:A:164:LYS:CG	1:A:252:LEU:HD12	0.64	2.22	23	1
1:A:254:ILE:HD12	1:A:269:SER:HB2	0.64	1.68	5	2
1:A:107:TYR:CE2	1:A:265:LEU:HD21	0.64	2.27	8	4
1:A:114:LEU:HD21	1:A:142:PRO:CG	0.64	2.23	15	2
1:A:151:PRO:N	1:A:152:PRO:CD	0.64	2.59	35	10
1:A:264:LEU:HD21	1:A:267:ARG:HD3	0.64	1.68	31	4
1:A:194:LEU:HD23	1:A:195:ILE:HG23	0.64	1.69	10	1
1:A:137:LEU:HD22	1:A:137:LEU:C	0.64	2.17	23	2
1:A:163:TYR:CZ	1:A:173:VAL:HG13	0.64	2.28	26	1
1:A:150:THR:HG22	1:A:152:PRO:CG	0.64	2.22	35	9
1:A:264:LEU:HD21	1:A:267:ARG:CD	0.63	2.22	36	2
1:A:246:MET:HE1	1:A:251:ILE:HG12	0.63	1.68	2	2
1:A:206:LEU:HD12	1:A:215:SER:HB2	0.63	1.68	1	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:264:LEU:HD23	1:A:267:ARG:HD2	0.63	1.68	25	1
1:A:111:LEU:HD23	1:A:268:ASN:OD1	0.63	1.93	3	1
1:A:200:ASN:ND2	1:A:203:VAL:HG13	0.63	2.09	8	2
1:A:109:PHE:C	1:A:109:PHE:CD1	0.63	2.77	20	4
1:A:256:THR:HG23	1:A:267:ARG:HB2	0.63	1.70	9	8
1:A:254:ILE:HD12	1:A:268:ASN:O	0.63	1.94	30	1
1:A:256:THR:HG22	1:A:267:ARG:HB2	0.62	1.68	16	8
1:A:201:LEU:HD13	1:A:201:LEU:N	0.62	2.09	24	1
1:A:267:ARG:O	1:A:267:ARG:HG3	0.62	1.94	36	3
1:A:162:ILE:HD11	1:A:252:LEU:HD23	0.62	1.71	6	1
1:A:145:LEU:HD23	1:A:257:LEU:HD11	0.62	1.70	28	3
1:A:109:PHE:CE2	1:A:257:LEU:HD23	0.62	2.29	27	3
1:A:164:LYS:HB2	1:A:252:LEU:HD21	0.62	1.70	3	1
1:A:236:TYR:CZ	1:A:272:VAL:HG21	0.62	2.30	18	2
1:A:144:GLN:HG2	1:A:231:THR:HG23	0.62	1.72	8	2
1:A:162:ILE:CD1	1:A:252:LEU:HD23	0.62	2.24	3	1
1:A:238:CYS:HB3	1:A:246:MET:HE1	0.62	1.70	4	1
1:A:258:GLU:HG2	1:A:264:LEU:HD12	0.62	1.70	19	3
1:A:195:ILE:HG22	1:A:236:TYR:CD1	0.62	2.30	14	1
1:A:138:ALA:CB	1:A:237:MET:HE1	0.61	2.22	3	2
1:A:107:TYR:CZ	1:A:265:LEU:HD11	0.61	2.29	33	1
1:A:111:LEU:HD22	1:A:143:VAL:CG1	0.61	2.24	33	2
1:A:200:ASN:ND2	1:A:203:VAL:HG11	0.61	2.10	6	2
1:A:113:PHE:HB3	1:A:133:MET:HE3	0.61	1.72	29	2
1:A:159:ALA:HB2	1:A:234:TYR:OH	0.61	1.96	12	4
1:A:194:LEU:N	1:A:194:LEU:HD22	0.61	2.11	22	3
1:A:163:TYR:CE2	1:A:173:VAL:HG13	0.61	2.31	26	1
1:A:164:LYS:HA	1:A:169:MET:HE2	0.60	1.73	9	1
1:A:163:TYR:O	1:A:169:MET:HE2	0.60	1.96	2	1
1:A:137:LEU:HD13	1:A:239:ASN:HB2	0.60	1.72	13	3
1:A:130:LEU:HD22	1:A:132:LYS:HE3	0.60	1.72	34	1
1:A:239:ASN:HA	1:A:274:VAL:HG23	0.60	1.74	3	18
1:A:194:LEU:HD21	1:A:238:CYS:HB2	0.60	1.73	32	1
1:A:102:THR:HG22	1:A:268:ASN:HB2	0.60	1.72	7	1
1:A:158:ARG:CB	1:A:217:VAL:HG12	0.60	2.27	6	3
1:A:252:LEU:HD22	1:A:252:LEU:N	0.60	2.12	3	3
1:A:175:ARG:HB3	1:A:192:GLN:HA	0.60	1.73	13	2
1:A:252:LEU:HD12	1:A:270:PHE:O	0.60	1.96	22	1
1:A:193:HIS:CD2	1:A:195:ILE:HG22	0.60	2.32	36	2
1:A:252:LEU:HD22	1:A:252:LEU:C	0.59	2.21	25	2
1:A:151:PRO:O	1:A:220:TYR:CE2	0.59	2.55	16	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:111:LEU:HD11	1:A:255:ILE:HB	0.59	1.73	33	4
1:A:100:GLN:HG3	1:A:254:ILE:HD13	0.59	1.71	5	1
1:A:157:VAL:HA	1:A:256:THR:O	0.59	1.97	7	26
1:A:137:LEU:HD13	1:A:239:ASN:OD1	0.59	1.98	27	2
1:A:236:TYR:OH	1:A:253:THR:HG21	0.59	1.98	20	10
1:A:206:LEU:HD12	1:A:206:LEU:N	0.59	2.13	20	2
1:A:156:ARG:NH2	1:A:217:VAL:HG11	0.59	2.12	22	2
1:A:252:LEU:HD21	1:A:269:SER:HB2	0.59	1.74	11	3
1:A:137:LEU:O	1:A:138:ALA:HB3	0.58	1.97	9	19
1:A:264:LEU:HD11	1:A:267:ARG:HG2	0.58	1.75	10	2
1:A:159:ALA:HB3	1:A:216:VAL:HG12	0.58	1.74	14	2
1:A:125:THR:HG21	1:A:282:ARG:HD3	0.58	1.74	25	1
1:A:254:ILE:HG22	1:A:269:SER:CB	0.58	2.28	36	1
1:A:252:LEU:HD12	1:A:270:PHE:C	0.58	2.22	32	5
1:A:194:LEU:HD12	1:A:195:ILE:HG23	0.58	1.74	17	1
1:A:107:TYR:CZ	1:A:265:LEU:HD22	0.58	2.34	1	2
1:A:221:GLU:O	1:A:230:THR:HG23	0.58	1.97	29	6
1:A:251:ILE:CG2	1:A:272:VAL:HG13	0.58	2.28	22	4
1:A:107:TYR:CE2	1:A:265:LEU:HD23	0.58	2.33	34	1
1:A:152:PRO:N	1:A:153:PRO:CD	0.58	2.67	22	9
1:A:160:MET:O	1:A:253:THR:HG23	0.58	1.99	25	2
1:A:103:TYR:CD2	1:A:264:LEU:HD23	0.58	2.33	17	3
1:A:197:VAL:HG12	1:A:234:TYR:CE2	0.58	2.33	26	1
1:A:255:ILE:HD11	1:A:270:PHE:CE1	0.58	2.32	35	6
1:A:264:LEU:HD21	1:A:267:ARG:CZ	0.58	2.29	26	1
1:A:125:THR:HG21	1:A:282:ARG:HB3	0.58	1.73	28	1
1:A:206:LEU:HD12	1:A:215:SER:HB3	0.58	1.76	6	3
1:A:254:ILE:HG23	1:A:268:ASN:O	0.58	1.98	16	1
1:A:252:LEU:HD23	1:A:270:PHE:O	0.58	1.98	5	1
1:A:264:LEU:HD21	1:A:267:ARG:CG	0.58	2.28	21	1
1:A:99:SER:HB2	1:A:254:ILE:HG21	0.58	1.74	6	1
1:A:220:TYR:CE1	1:A:257:LEU:HD11	0.58	2.34	34	1
1:A:150:THR:HG22	1:A:152:PRO:HD3	0.57	1.76	30	9
1:A:144:GLN:HG3	1:A:231:THR:HG22	0.57	1.76	25	1
1:A:164:LYS:CB	1:A:252:LEU:HD21	0.57	2.28	3	1
1:A:201:LEU:HD12	1:A:202:ARG:HB2	0.57	1.74	10	1
1:A:194:LEU:HD12	1:A:195:ILE:N	0.57	2.13	31	1
1:A:111:LEU:HD11	1:A:255:ILE:HD13	0.57	1.75	5	2
1:A:164:LYS:HG3	1:A:252:LEU:HD12	0.57	1.75	23	1
1:A:162:ILE:HG21	1:A:254:ILE:HD11	0.57	1.76	28	1
1:A:254:ILE:HG23	1:A:269:SER:HB3	0.57	1.77	6	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:SER:HB3	1:A:254:ILE:HG21	0.57	1.75	6	1
1:A:150:THR:C	1:A:152:PRO:CD	0.57	2.77	35	9
1:A:145:LEU:CD2	1:A:157:VAL:HG21	0.57	2.29	34	2
1:A:147:VAL:HG21	1:A:151:PRO:HG3	0.57	1.76	28	5
1:A:179:HIS:C	1:A:179:HIS:CD2	0.57	2.83	34	1
1:A:251:ILE:O	1:A:252:LEU:HD13	0.57	1.99	26	2
1:A:109:PHE:HA	1:A:146:TRP:O	0.56	1.99	23	16
1:A:255:ILE:N	1:A:255:ILE:HD12	0.56	2.15	33	7
1:A:143:VAL:HG11	1:A:255:ILE:CD1	0.56	2.30	29	1
1:A:113:PHE:CE2	1:A:126:TYR:CE1	0.56	2.94	5	2
1:A:151:PRO:CD	1:A:152:PRO:HD3	0.56	2.30	34	6
1:A:153:PRO:O	1:A:154:GLY:C	0.56	2.48	30	1
1:A:125:THR:HG22	1:A:282:ARG:HD3	0.56	1.76	14	1
1:A:123:THR:HG22	1:A:139:LYS:HE3	0.56	1.77	16	1
1:A:157:VAL:HG13	1:A:256:THR:C	0.56	2.25	25	1
1:A:140:THR:HG22	1:A:235:ASN:HD21	0.56	1.61	34	1
1:A:163:TYR:CE1	1:A:173:VAL:HG21	0.56	2.35	34	1
1:A:143:VAL:HG21	1:A:234:TYR:CD2	0.56	2.35	31	7
1:A:284:THR:HG23	1:A:285:GLU:OE1	0.56	2.01	31	1
1:A:146:TRP:CE3	1:A:229:CYS:SG	0.56	2.99	16	4
1:A:164:LYS:HD3	1:A:252:LEU:HD22	0.56	1.78	28	1
1:A:125:THR:HG21	1:A:279:GLY:HA2	0.56	1.75	19	2
1:A:203:VAL:HG12	1:A:217:VAL:O	0.56	2.01	23	2
1:A:163:TYR:CD1	1:A:163:TYR:N	0.56	2.74	26	1
1:A:257:LEU:HD23	1:A:265:LEU:HD21	0.55	1.78	19	7
1:A:194:LEU:HD23	1:A:238:CYS:HB2	0.55	1.78	21	2
1:A:221:GLU:O	1:A:222:PRO:O	0.55	2.24	6	6
1:A:252:LEU:HD12	1:A:252:LEU:N	0.55	2.15	9	1
1:A:137:LEU:HD22	1:A:239:ASN:CG	0.55	2.26	34	1
1:A:246:MET:HE3	1:A:251:ILE:HG12	0.55	1.78	16	1
1:A:152:PRO:O	1:A:154:GLY:N	0.55	2.39	30	11
1:A:145:LEU:CB	1:A:230:THR:HG23	0.55	2.29	11	1
1:A:164:LYS:CB	1:A:252:LEU:HD12	0.55	2.31	23	1
1:A:127:SER:O	1:A:131:ASN:N	0.55	2.39	28	35
1:A:146:TRP:CD1	1:A:229:CYS:HG	0.55	2.19	23	1
1:A:257:LEU:HB2	1:A:266:GLY:O	0.55	2.02	35	16
1:A:125:THR:HG21	1:A:282:ARG:HG2	0.55	1.76	10	3
1:A:155:THR:HB	1:A:220:TYR:CG	0.55	2.36	33	6
1:A:152:PRO:N	1:A:153:PRO:HD2	0.55	2.17	32	8
1:A:256:THR:HG22	1:A:258:GLU:HG3	0.55	1.77	30	1
1:A:155:THR:HG21	1:A:265:LEU:HD21	0.55	1.78	16	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:158:ARG:HD3	1:A:160:MET:HE2	0.55	1.77	5	1
1:A:125:THR:HG23	1:A:282:ARG:HB2	0.55	1.77	19	1
1:A:123:THR:HG21	1:A:139:LYS:HE3	0.54	1.80	6	2
1:A:256:THR:HG23	1:A:267:ARG:CD	0.54	2.32	7	1
1:A:155:THR:HG21	1:A:257:LEU:CD1	0.54	2.32	27	3
1:A:197:VAL:HG13	1:A:232:ILE:CG2	0.54	2.32	11	1
1:A:111:LEU:HD11	1:A:255:ILE:HG22	0.54	1.77	14	1
1:A:201:LEU:HD23	1:A:201:LEU:N	0.54	2.16	15	1
1:A:162:ILE:HD11	1:A:252:LEU:CB	0.54	2.32	5	1
1:A:102:THR:HG23	1:A:268:ASN:OD1	0.54	2.02	21	1
1:A:118:THR:HG22	1:A:125:THR:HG21	0.54	1.78	7	1
1:A:163:TYR:CD1	1:A:251:ILE:HG22	0.54	2.37	10	2
1:A:158:ARG:NE	1:A:160:MET:HE3	0.54	2.16	19	1
1:A:194:LEU:N	1:A:194:LEU:HD12	0.54	2.18	21	1
1:A:118:THR:HG21	1:A:283:ARG:HB3	0.54	1.80	34	1
1:A:162:ILE:HG12	1:A:254:ILE:HD11	0.54	1.78	8	3
1:A:201:LEU:C	1:A:201:LEU:HD13	0.54	2.27	30	1
1:A:130:LEU:N	1:A:130:LEU:HD22	0.54	2.18	22	2
1:A:162:ILE:HB	1:A:252:LEU:HD21	0.54	1.79	23	1
1:A:222:PRO:HB2	1:A:223:PRO:CD	0.54	2.32	32	1
1:A:114:LEU:HD21	1:A:124:CYS:HB2	0.54	1.79	9	1
1:A:264:LEU:HD21	1:A:267:ARG:NH1	0.54	2.18	27	1
1:A:251:ILE:C	1:A:252:LEU:HD12	0.54	2.28	28	1
1:A:113:PHE:CD1	1:A:113:PHE:N	0.53	2.75	14	2
1:A:258:GLU:OE2	1:A:264:LEU:HD12	0.53	2.03	21	2
1:A:167:GLN:C	1:A:168:HIS:CG	0.53	2.86	31	15
1:A:265:LEU:HD12	1:A:265:LEU:C	0.53	2.28	16	5
1:A:143:VAL:HG11	1:A:255:ILE:HD11	0.53	1.78	29	1
1:A:145:LEU:HD13	1:A:232:ILE:CG1	0.53	2.33	12	1
1:A:201:LEU:HD21	1:A:219:PRO:HG2	0.53	1.79	15	1
1:A:280:ARG:O	1:A:284:THR:HG23	0.53	2.02	27	1
1:A:155:THR:HG22	1:A:258:GLU:O	0.53	2.04	4	7
1:A:107:TYR:CZ	1:A:265:LEU:HD21	0.53	2.38	8	1
1:A:265:LEU:C	1:A:265:LEU:HD23	0.53	2.29	31	4
1:A:111:LEU:HD21	1:A:255:ILE:HG21	0.53	1.80	14	1
1:A:111:LEU:HD12	1:A:143:VAL:CG1	0.53	2.32	15	1
1:A:206:LEU:N	1:A:206:LEU:HD22	0.53	2.18	12	6
1:A:152:PRO:O	1:A:155:THR:OG1	0.53	2.26	27	6
1:A:107:TYR:CE1	1:A:265:LEU:HD11	0.53	2.38	33	1
1:A:163:TYR:OH	1:A:173:VAL:HG21	0.53	2.04	34	1
1:A:270:PHE:CE2	1:A:272:VAL:HG12	0.53	2.38	23	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:252:LEU:HD12	1:A:252:LEU:O	0.53	2.04	24	2
1:A:111:LEU:HD13	1:A:268:ASN:OD1	0.53	2.04	7	2
1:A:197:VAL:HG11	1:A:232:ILE:HD11	0.53	1.80	21	1
1:A:252:LEU:HD22	1:A:252:LEU:H	0.53	1.63	3	1
1:A:252:LEU:HD12	1:A:271:GLU:OE1	0.52	2.03	3	2
1:A:158:ARG:NH1	1:A:256:THR:HG21	0.52	2.19	6	1
1:A:203:VAL:HG11	1:A:218:VAL:HG12	0.52	1.80	12	1
1:A:201:LEU:HD23	1:A:201:LEU:H	0.52	1.63	15	1
1:A:254:ILE:HD11	1:A:267:ARG:HD3	0.52	1.78	20	1
1:A:151:PRO:C	1:A:153:PRO:HD2	0.52	2.29	22	4
1:A:160:MET:HE2	1:A:215:SER:OG	0.52	2.04	25	1
1:A:137:LEU:O	1:A:138:ALA:CB	0.52	2.57	9	8
1:A:258:GLU:CG	1:A:264:LEU:HD12	0.52	2.35	16	1
1:A:164:LYS:O	1:A:168:HIS:CD2	0.52	2.62	17	1
1:A:162:ILE:CD1	1:A:252:LEU:HD22	0.52	2.32	18	1
1:A:201:LEU:HD22	1:A:202:ARG:N	0.52	2.20	24	1
1:A:194:LEU:HD11	1:A:238:CYS:HB2	0.52	1.82	32	1
1:A:99:SER:CB	1:A:254:ILE:HD13	0.52	2.33	12	1
1:A:151:PRO:N	1:A:152:PRO:HD2	0.52	2.19	30	1
1:A:254:ILE:HD13	1:A:269:SER:HB2	0.52	1.81	30	1
1:A:145:LEU:HD13	1:A:232:ILE:HG12	0.52	1.82	12	2
1:A:264:LEU:HG	1:A:264:LEU:O	0.52	2.03	14	1
1:A:109:PHE:CG	1:A:266:GLY:HA3	0.52	2.40	25	1
1:A:252:LEU:HD21	1:A:269:SER:CB	0.52	2.35	11	3
1:A:201:LEU:HD23	1:A:201:LEU:O	0.52	2.05	19	2
1:A:144:GLN:HG3	1:A:231:THR:HG23	0.52	1.80	29	2
1:A:236:TYR:HE2	1:A:272:VAL:HG21	0.52	1.59	16	1
1:A:163:TYR:CZ	1:A:173:VAL:HG21	0.52	2.40	34	1
1:A:135:CYS:N	1:A:278:PRO:HB3	0.52	2.20	34	7
1:A:195:ILE:O	1:A:195:ILE:HG23	0.52	2.03	19	2
1:A:264:LEU:HD21	1:A:267:ARG:CB	0.52	2.33	23	2
1:A:195:ILE:HG22	1:A:236:TYR:CE1	0.52	2.40	14	1
1:A:155:THR:HG23	1:A:258:GLU:O	0.52	2.05	21	3
1:A:222:PRO:CB	1:A:223:PRO:HD3	0.52	2.35	27	4
1:A:125:THR:HG22	1:A:282:ARG:HD2	0.51	1.82	4	1
1:A:113:PHE:CD2	1:A:126:TYR:CD1	0.51	2.98	18	2
1:A:203:VAL:HG12	1:A:218:VAL:CG1	0.51	2.31	6	1
1:A:256:THR:HG22	1:A:258:GLU:CG	0.51	2.36	30	1
1:A:135:CYS:O	1:A:274:VAL:HA	0.51	2.06	8	6
1:A:145:LEU:HD23	1:A:257:LEU:HD12	0.51	1.82	4	1
1:A:254:ILE:HG23	1:A:254:ILE:O	0.51	2.06	27	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:194:LEU:H	1:A:194:LEU:HD13	0.51	1.65	27	4
1:A:252:LEU:HD12	1:A:252:LEU:C	0.51	2.29	33	2
1:A:256:THR:CG2	1:A:264:LEU:HD11	0.51	2.35	33	1
1:A:208:ASP:O	1:A:212:PHE:HA	0.51	2.06	25	15
1:A:111:LEU:HD12	1:A:268:ASN:HB2	0.51	1.80	35	2
1:A:254:ILE:HG21	1:A:267:ARG:NH2	0.51	2.20	11	1
1:A:163:TYR:CZ	1:A:173:VAL:HG22	0.51	2.40	15	1
1:A:265:LEU:C	1:A:265:LEU:CD2	0.51	2.82	36	7
1:A:107:TYR:CG	1:A:265:LEU:HD21	0.51	2.40	12	2
1:A:195:ILE:HG23	1:A:236:TYR:HE1	0.51	1.66	20	1
1:A:254:ILE:HD11	1:A:267:ARG:CD	0.51	2.36	30	2
1:A:251:ILE:HG23	1:A:272:VAL:HB	0.51	1.83	18	2
1:A:102:THR:HG23	1:A:268:ASN:CG	0.51	2.30	21	1
1:A:222:PRO:N	1:A:223:PRO:CD	0.51	2.73	29	1
1:A:210:ASN:OD1	1:A:211:THR:HG23	0.51	2.05	1	1
1:A:159:ALA:HB3	1:A:216:VAL:HG13	0.51	1.83	34	3
1:A:111:LEU:HD21	1:A:255:ILE:CG1	0.51	2.35	12	2
1:A:155:THR:HG21	1:A:257:LEU:CG	0.51	2.35	32	2
1:A:252:LEU:HD13	1:A:252:LEU:H	0.51	1.62	23	1
1:A:126:TYR:CD1	1:A:133:MET:HB2	0.51	2.41	16	1
1:A:100:GLN:HG2	1:A:162:ILE:HD13	0.51	1.83	28	1
1:A:115:HIS:CE1	1:A:117:GLY:N	0.51	2.79	29	1
1:A:111:LEU:HD11	1:A:143:VAL:CG1	0.51	2.36	34	1
1:A:203:VAL:HG12	1:A:218:VAL:CA	0.51	2.36	33	6
1:A:107:TYR:OH	1:A:265:LEU:HD22	0.50	2.06	1	1
1:A:109:PHE:CE1	1:A:266:GLY:C	0.50	2.90	1	2
1:A:162:ILE:C	1:A:162:ILE:HD12	0.50	2.31	21	2
1:A:172:VAL:HG13	1:A:172:VAL:O	0.50	2.07	12	1
1:A:111:LEU:HD11	1:A:255:ILE:HG21	0.50	1.78	14	1
1:A:257:LEU:O	1:A:257:LEU:HG	0.50	2.06	1	2
1:A:254:ILE:HG22	1:A:269:SER:HB3	0.50	1.83	36	1
1:A:236:TYR:CZ	1:A:272:VAL:HG11	0.50	2.42	16	2
1:A:272:VAL:HG23	1:A:272:VAL:O	0.50	2.07	6	1
1:A:103:TYR:HE1	1:A:264:LEU:HD23	0.50	1.58	34	2
1:A:197:VAL:HG11	1:A:200:ASN:OD1	0.50	2.06	22	2
1:A:194:LEU:HD21	1:A:238:CYS:HB3	0.50	1.81	32	1
1:A:206:LEU:CD1	1:A:217:VAL:HG13	0.50	2.30	33	1
1:A:134:PHE:CD1	1:A:281:ASP:HB3	0.50	2.41	12	5
1:A:252:LEU:HD13	1:A:252:LEU:N	0.50	2.21	3	2
1:A:111:LEU:HD21	1:A:255:ILE:HD13	0.50	1.82	16	3
1:A:162:ILE:HG22	1:A:171:GLU:HG3	0.50	1.83	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:164:LYS:CD	1:A:168:HIS:CD2	0.50	2.95	17	1
1:A:254:ILE:HD12	1:A:254:ILE:N	0.50	2.21	34	2
1:A:137:LEU:O	1:A:137:LEU:HD13	0.49	2.06	23	2
1:A:162:ILE:CG2	1:A:163:TYR:N	0.49	2.75	15	2
1:A:150:THR:C	1:A:152:PRO:HD3	0.49	2.32	35	5
1:A:100:GLN:HE22	1:A:162:ILE:HD11	0.49	1.65	33	1
1:A:264:LEU:HD11	1:A:267:ARG:CB	0.49	2.37	13	2
1:A:236:TYR:CD2	1:A:272:VAL:HG21	0.49	2.42	20	1
1:A:252:LEU:N	1:A:252:LEU:CD1	0.49	2.75	23	1
1:A:256:THR:HG23	1:A:264:LEU:HD11	0.49	1.83	28	1
1:A:252:LEU:HD12	1:A:271:GLU:OE2	0.49	2.07	35	1
1:A:254:ILE:CD1	1:A:256:THR:HG23	0.49	2.37	36	1
1:A:114:LEU:HD21	1:A:142:PRO:HG3	0.49	1.84	13	2
1:A:197:VAL:HG22	1:A:234:TYR:HE1	0.49	1.67	34	1
1:A:263:ASN:O	1:A:265:LEU:HD13	0.49	2.07	34	1
1:A:193:HIS:CE1	1:A:205:TYR:CD1	0.49	3.00	33	4
1:A:157:VAL:HB	1:A:218:VAL:HG22	0.49	1.84	14	1
1:A:193:HIS:CE1	1:A:214:HIS:CD2	0.49	3.00	29	1
1:A:202:ARG:O	1:A:202:ARG:CG	0.49	2.61	19	10
1:A:193:HIS:CD2	1:A:205:TYR:CD1	0.49	3.01	24	1
1:A:264:LEU:HG	1:A:267:ARG:HB3	0.49	1.85	25	1
1:A:254:ILE:HG21	1:A:267:ARG:HH21	0.49	1.67	11	1
1:A:175:ARG:NE	1:A:191:PRO:O	0.49	2.45	28	1
1:A:113:PHE:CD1	1:A:133:MET:HE2	0.49	2.43	2	1
1:A:264:LEU:C	1:A:264:LEU:HD23	0.49	2.33	7	3
1:A:251:ILE:CG2	1:A:272:VAL:HG23	0.49	2.37	6	1
1:A:222:PRO:CB	1:A:223:PRO:CD	0.49	2.91	35	1
1:A:137:LEU:N	1:A:274:VAL:HG12	0.49	2.23	23	2
1:A:264:LEU:HD11	1:A:267:ARG:HD3	0.49	1.85	8	1
1:A:222:PRO:N	1:A:223:PRO:HD2	0.49	2.22	29	1
1:A:194:LEU:HD13	1:A:194:LEU:H	0.49	1.65	36	1
1:A:254:ILE:HG23	1:A:269:SER:OG	0.48	2.08	3	1
1:A:109:PHE:CE1	1:A:257:LEU:HD13	0.48	2.42	6	2
1:A:194:LEU:H	1:A:194:LEU:HD22	0.48	1.69	36	3
1:A:109:PHE:CE2	1:A:145:LEU:HD23	0.48	2.42	7	1
1:A:151:PRO:HG2	1:A:220:TYR:OH	0.48	2.08	35	6
1:A:163:TYR:CD1	1:A:171:GLU:O	0.48	2.67	23	2
1:A:109:PHE:CB	1:A:147:VAL:HG13	0.48	2.38	28	5
1:A:194:LEU:HD22	1:A:194:LEU:H	0.48	1.68	22	1
1:A:109:PHE:CE2	1:A:257:LEU:CD1	0.48	2.96	16	4
1:A:158:ARG:HD2	1:A:160:MET:HE2	0.48	1.83	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:236:TYR:HE2	1:A:272:VAL:HG11	0.48	1.68	9	3
1:A:114:LEU:HD12	1:A:114:LEU:C	0.48	2.34	11	1
1:A:264:LEU:HD11	1:A:267:ARG:HG3	0.48	1.84	35	2
1:A:162:ILE:HG22	1:A:163:TYR:N	0.48	2.23	22	3
1:A:151:PRO:CG	1:A:220:TYR:OH	0.48	2.61	34	6
1:A:257:LEU:O	1:A:265:LEU:CD1	0.48	2.61	36	1
1:A:164:LYS:N	1:A:252:LEU:HD21	0.48	2.24	3	1
1:A:145:LEU:HD22	1:A:230:THR:HB	0.48	1.85	17	2
1:A:111:LEU:HD13	1:A:255:ILE:CD1	0.48	2.39	29	2
1:A:107:TYR:CG	1:A:265:LEU:CD1	0.48	2.96	2	4
1:A:175:ARG:CG	1:A:192:GLN:HA	0.48	2.38	18	2
1:A:163:TYR:CE1	1:A:251:ILE:CG2	0.48	2.97	19	2
1:A:103:TYR:N	1:A:268:ASN:OD1	0.48	2.47	25	2
1:A:195:ILE:HG22	1:A:236:TYR:CE2	0.48	2.43	10	1
1:A:125:THR:HG21	1:A:282:ARG:HB2	0.48	1.85	21	1
1:A:125:THR:HG21	1:A:282:ARG:CG	0.47	2.38	28	1
1:A:107:TYR:CE2	1:A:265:LEU:CD2	0.47	2.97	34	1
1:A:115:HIS:ND1	1:A:116:SER:N	0.47	2.62	13	8
1:A:109:PHE:CD1	1:A:268:ASN:ND2	0.47	2.82	4	2
1:A:100:GLN:CG	1:A:162:ILE:HD13	0.47	2.38	28	1
1:A:157:VAL:HG22	1:A:257:LEU:CD1	0.47	2.39	34	1
1:A:123:THR:HG22	1:A:139:LYS:CD	0.47	2.35	1	2
1:A:275:CYS:O	1:A:276:ALA:HB3	0.47	2.09	3	2
1:A:113:PHE:CD2	1:A:126:TYR:CE1	0.47	3.02	5	1
1:A:252:LEU:HD12	1:A:252:LEU:H	0.47	1.68	9	1
1:A:107:TYR:O	1:A:108:GLY:C	0.47	2.57	15	1
1:A:152:PRO:O	1:A:220:TYR:CD2	0.47	2.67	17	5
1:A:256:THR:HG23	1:A:267:ARG:HD2	0.47	1.85	7	1
1:A:163:TYR:OH	1:A:173:VAL:HG23	0.47	2.10	10	1
1:A:146:TRP:CD2	1:A:229:CYS:SG	0.47	3.07	16	1
1:A:133:MET:HE1	1:A:141:CYS:HB3	0.47	1.84	33	2
1:A:111:LEU:HD11	1:A:268:ASN:OD1	0.47	2.09	30	1
1:A:272:VAL:HG13	1:A:272:VAL:O	0.47	2.09	9	5
1:A:117:GLY:O	1:A:125:THR:HG21	0.47	2.09	11	1
1:A:162:ILE:HG23	1:A:252:LEU:HD23	0.47	1.86	26	1
1:A:157:VAL:HG22	1:A:257:LEU:HB2	0.47	1.85	25	2
1:A:109:PHE:CE2	1:A:266:GLY:O	0.47	2.68	32	6
1:A:138:ALA:HB2	1:A:237:MET:HE2	0.47	1.85	7	1
1:A:238:CYS:O	1:A:274:VAL:HG21	0.47	2.09	9	1
1:A:137:LEU:HD22	1:A:239:ASN:ND2	0.47	2.25	35	2
1:A:126:TYR:O	1:A:126:TYR:CD1	0.47	2.68	26	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:257:LEU:HD22	1:A:265:LEU:HD22	0.47	1.86	30	1
1:A:258:GLU:HA	1:A:265:LEU:HD12	0.47	1.86	1	1
1:A:280:ARG:O	1:A:284:THR:HG22	0.47	2.10	2	1
1:A:145:LEU:HD23	1:A:257:LEU:CD1	0.47	2.40	12	5
1:A:103:TYR:HB2	1:A:267:ARG:H	0.47	1.69	31	4
1:A:109:PHE:CD1	1:A:109:PHE:C	0.47	2.93	27	4
1:A:109:PHE:CE2	1:A:257:LEU:HD12	0.47	2.45	16	2
1:A:200:ASN:OD1	1:A:203:VAL:HG11	0.47	2.09	24	2
1:A:275:CYS:O	1:A:277:CYS:N	0.47	2.47	23	1
1:A:200:ASN:CG	1:A:203:VAL:HG11	0.47	2.35	24	1
1:A:163:TYR:CE1	1:A:173:VAL:CG1	0.47	2.98	31	1
1:A:111:LEU:HD11	1:A:143:VAL:HG12	0.47	1.86	34	1
1:A:109:PHE:CE1	1:A:266:GLY:O	0.47	2.68	21	13
1:A:124:CYS:SG	1:A:133:MET:HE3	0.47	2.50	1	2
1:A:255:ILE:HD11	1:A:270:PHE:HE1	0.47	1.70	31	2
1:A:146:TRP:CG	1:A:229:CYS:HG	0.47	2.27	4	1
1:A:162:ILE:HB	1:A:252:LEU:HD11	0.47	1.86	25	1
1:A:264:LEU:HD23	1:A:267:ARG:HD3	0.47	1.85	25	1
1:A:151:PRO:HB2	1:A:220:TYR:OH	0.46	2.10	1	13
1:A:111:LEU:HD11	1:A:255:ILE:CG1	0.46	2.40	5	2
1:A:195:ILE:HG22	1:A:236:TYR:CD2	0.46	2.45	10	1
1:A:137:LEU:HD21	1:A:239:ASN:HB3	0.46	1.87	22	1
1:A:201:LEU:HD22	1:A:221:GLU:CD	0.46	2.35	31	1
1:A:200:ASN:CG	1:A:218:VAL:HG21	0.46	2.35	34	1
1:A:147:VAL:HG21	1:A:151:PRO:CG	0.46	2.41	9	1
1:A:107:TYR:CE1	1:A:265:LEU:HD22	0.46	2.45	25	1
1:A:134:PHE:C	1:A:278:PRO:HB3	0.46	2.34	15	3
1:A:111:LEU:HD11	1:A:255:ILE:CD1	0.46	2.40	5	1
1:A:107:TYR:HB3	1:A:147:VAL:HG12	0.46	1.86	20	1
1:A:206:LEU:HD21	1:A:217:VAL:CG1	0.46	2.37	24	1
1:A:143:VAL:HG21	1:A:234:TYR:HD2	0.46	1.69	31	1
1:A:252:LEU:HD11	1:A:271:GLU:HG2	0.46	1.87	7	2
1:A:134:PHE:CD1	1:A:281:ASP:CB	0.46	2.99	27	2
1:A:270:PHE:CD1	1:A:270:PHE:C	0.46	2.93	12	1
1:A:125:THR:HG1	1:A:278:PRO:C	0.46	2.18	13	1
1:A:197:VAL:CG1	1:A:234:TYR:CE2	0.46	2.98	26	1
1:A:123:THR:HG22	1:A:136:GLN:OE1	0.46	2.10	34	2
1:A:173:VAL:O	1:A:173:VAL:HG13	0.46	2.09	30	1
1:A:163:TYR:CE2	1:A:173:VAL:CG1	0.46	2.99	33	2
1:A:109:PHE:CE2	1:A:257:LEU:CD2	0.46	2.99	1	2
1:A:270:PHE:CE2	1:A:272:VAL:CG1	0.46	2.98	35	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:155:THR:HB	1:A:220:TYR:CD1	0.46	2.46	8	6
1:A:114:LEU:HD21	1:A:142:PRO:HG2	0.46	1.88	15	1
1:A:109:PHE:CG	1:A:266:GLY:CA	0.46	2.98	25	1
1:A:116:SER:HG	1:A:125:THR:HA	0.46	1.71	2	1
1:A:155:THR:OG1	1:A:220:TYR:CE2	0.46	2.67	8	6
1:A:137:LEU:HD11	1:A:238:CYS:N	0.46	2.25	8	2
1:A:162:ILE:HG22	1:A:163:TYR:H	0.46	1.70	16	4
1:A:193:HIS:NE2	1:A:205:TYR:CD1	0.46	2.84	33	2
1:A:107:TYR:CB	1:A:265:LEU:HD23	0.46	2.40	6	1
1:A:162:ILE:CG1	1:A:163:TYR:N	0.46	2.78	26	1
1:A:163:TYR:C	1:A:169:MET:HE3	0.46	2.36	27	1
1:A:252:LEU:HD11	1:A:271:GLU:CG	0.46	2.41	7	1
1:A:163:TYR:CD1	1:A:165:GLN:CG	0.46	2.98	16	1
1:A:109:PHE:CD1	1:A:266:GLY:CA	0.46	2.99	25	2
1:A:195:ILE:HG23	1:A:236:TYR:CE1	0.46	2.46	20	1
1:A:151:PRO:HD2	1:A:152:PRO:HD3	0.46	1.88	34	3
1:A:109:PHE:HB3	1:A:266:GLY:HA3	0.46	1.88	34	1
1:A:254:ILE:HD12	1:A:256:THR:HG23	0.46	1.87	36	1
1:A:208:ASP:O	1:A:212:PHE:N	0.46	2.49	33	15
1:A:168:HIS:CD2	1:A:249:ARG:NH1	0.46	2.84	5	2
1:A:265:LEU:HD13	1:A:265:LEU:H	0.46	1.71	5	1
1:A:264:LEU:HG	1:A:267:ARG:HB2	0.46	1.88	6	1
1:A:220:TYR:HE1	1:A:257:LEU:HD11	0.46	1.71	19	2
1:A:151:PRO:O	1:A:220:TYR:CD2	0.46	2.69	22	3
1:A:111:LEU:HD13	1:A:255:ILE:HD13	0.46	1.86	24	2
1:A:136:GLN:C	1:A:274:VAL:HG12	0.46	2.36	28	1
1:A:102:THR:HG23	1:A:104:GLN:OE1	0.46	2.11	36	1
1:A:155:THR:N	1:A:220:TYR:HB2	0.46	2.25	12	7
1:A:264:LEU:HD23	1:A:264:LEU:O	0.46	2.12	6	1
1:A:145:LEU:HD12	1:A:145:LEU:N	0.46	2.26	28	3
1:A:193:HIS:CE1	1:A:214:HIS:CG	0.46	3.04	19	1
1:A:109:PHE:HE2	1:A:145:LEU:HD23	0.46	1.71	27	2
1:A:254:ILE:HD12	1:A:268:ASN:C	0.46	2.36	30	1
1:A:155:THR:OG1	1:A:220:TYR:CD1	0.46	2.69	35	1
1:A:167:GLN:O	1:A:168:HIS:CG	0.45	2.69	32	7
1:A:251:ILE:HG13	1:A:272:VAL:HG23	0.45	1.87	3	1
1:A:107:TYR:CD2	1:A:265:LEU:CD2	0.45	3.00	4	2
1:A:281:ASP:HA	1:A:284:THR:HG22	0.45	1.89	21	2
1:A:193:HIS:ND1	1:A:205:TYR:CD1	0.45	2.85	10	1
1:A:194:LEU:HD23	1:A:195:ILE:HG13	0.45	1.88	22	1
1:A:200:ASN:OD1	1:A:203:VAL:HG13	0.45	2.11	26	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:103:TYR:O	1:A:103:TYR:CD2	0.45	2.69	33	1
1:A:197:VAL:HG12	1:A:200:ASN:OD1	0.45	2.11	5	1
1:A:162:ILE:HD12	1:A:252:LEU:HD11	0.45	1.89	24	1
1:A:111:LEU:HD11	1:A:255:ILE:CB	0.45	2.40	33	1
1:A:163:TYR:O	1:A:169:MET:HB3	0.45	2.11	34	1
1:A:109:PHE:CE2	1:A:268:ASN:ND2	0.45	2.85	36	1
1:A:111:LEU:CD1	1:A:113:PHE:CZ	0.45	2.99	3	1
1:A:163:TYR:CD1	1:A:173:VAL:HB	0.45	2.45	17	1
1:A:163:TYR:CD2	1:A:249:ARG:CZ	0.45	3.00	18	1
1:A:197:VAL:CG1	1:A:234:TYR:CE1	0.45	2.99	19	1
1:A:189:ALA:HB3	1:A:196:ARG:HG3	0.45	1.87	26	1
1:A:109:PHE:CZ	1:A:257:LEU:HD13	0.45	2.46	28	1
1:A:256:THR:CG2	1:A:267:ARG:CG	0.45	2.94	3	5
1:A:134:PHE:C	1:A:278:PRO:CB	0.45	2.90	19	3
1:A:162:ILE:HD12	1:A:254:ILE:HD11	0.45	1.88	22	1
1:A:270:PHE:CZ	1:A:272:VAL:CG1	0.45	3.00	23	1
1:A:162:ILE:HG12	1:A:163:TYR:N	0.45	2.26	26	1
1:A:168:HIS:CD2	1:A:168:HIS:N	0.45	2.84	18	2
1:A:197:VAL:HG23	1:A:200:ASN:HD21	0.45	1.72	3	1
1:A:195:ILE:CG2	1:A:236:TYR:CE2	0.45	3.00	10	1
1:A:196:ARG:O	1:A:234:TYR:HA	0.45	2.12	33	3
1:A:163:TYR:CD2	1:A:249:ARG:NH1	0.45	2.84	26	1
1:A:118:THR:HG21	1:A:279:GLY:CA	0.45	2.38	1	1
1:A:216:VAL:O	1:A:216:VAL:HG13	0.45	2.12	6	6
1:A:163:TYR:CD1	1:A:251:ILE:CG2	0.45	3.00	10	2
1:A:134:PHE:CD2	1:A:281:ASP:CB	0.45	3.00	26	2
1:A:176:CYS:CB	1:A:178:HIS:CE1	0.45	3.00	4	2
1:A:155:THR:OG1	1:A:220:TYR:CD2	0.45	2.70	34	2
1:A:272:VAL:O	1:A:272:VAL:HG23	0.45	2.11	23	2
1:A:252:LEU:H	1:A:252:LEU:HD13	0.45	1.71	25	1
1:A:158:ARG:CD	1:A:206:LEU:HD12	0.45	2.41	35	1
1:A:145:LEU:CD2	1:A:157:VAL:HG11	0.45	2.30	1	1
1:A:140:THR:HG22	1:A:142:PRO:HD3	0.45	1.87	3	1
1:A:168:HIS:CD2	1:A:249:ARG:NE	0.45	2.85	6	1
1:A:126:TYR:O	1:A:126:TYR:CG	0.45	2.69	21	6
1:A:194:LEU:CD2	1:A:195:ILE:HG23	0.45	2.39	10	1
1:A:145:LEU:HD21	1:A:157:VAL:HG21	0.45	1.87	18	1
1:A:152:PRO:CD	1:A:153:PRO:HD3	0.45	2.41	31	2
1:A:254:ILE:HD12	1:A:254:ILE:H	0.45	1.71	34	2
1:A:136:GLN:HB3	1:A:276:ALA:O	0.45	2.11	33	1
1:A:276:ALA:O	1:A:278:PRO:HD3	0.45	2.12	20	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:163:TYR:CE1	1:A:173:VAL:CG2	0.45	3.00	15	2
1:A:168:HIS:CG	1:A:249:ARG:NE	0.45	2.85	27	1
1:A:222:PRO:CD	1:A:223:PRO:HD3	0.45	2.42	33	2
1:A:194:LEU:N	1:A:194:LEU:CD1	0.45	2.78	29	1
1:A:107:TYR:CE2	1:A:265:LEU:CD1	0.45	2.98	30	2
1:A:207:ASP:OD1	1:A:214:HIS:CD2	0.45	2.70	31	1
1:A:107:TYR:CE1	1:A:265:LEU:CD1	0.45	3.00	33	1
1:A:168:HIS:CG	1:A:249:ARG:NH1	0.44	2.85	10	1
1:A:178:HIS:CD2	1:A:179:HIS:N	0.44	2.85	11	2
1:A:163:TYR:CG	1:A:165:GLN:NE2	0.44	2.86	21	1
1:A:193:HIS:NE2	1:A:195:ILE:HG22	0.44	2.28	36	1
1:A:136:GLN:HG3	1:A:139:LYS:HB2	0.44	1.88	2	1
1:A:163:TYR:CD2	1:A:171:GLU:O	0.44	2.71	7	3
1:A:100:GLN:HA	1:A:254:ILE:HD12	0.44	1.88	15	1
1:A:113:PHE:CE1	1:A:270:PHE:CD2	0.44	3.05	17	1
1:A:137:LEU:HD11	1:A:239:ASN:HB3	0.44	1.87	22	1
1:A:144:GLN:CG	1:A:231:THR:HG22	0.44	2.42	25	1
1:A:159:ALA:O	1:A:216:VAL:HG12	0.44	2.13	25	1
1:A:158:ARG:CG	1:A:160:MET:HE1	0.44	2.42	28	1
1:A:218:VAL:HG11	1:A:232:ILE:HD13	0.44	1.89	30	1
1:A:176:CYS:CB	1:A:178:HIS:NE2	0.44	2.81	34	1
1:A:164:LYS:HA	1:A:169:MET:HE3	0.44	1.88	12	1
1:A:232:ILE:CG2	1:A:234:TYR:CE1	0.44	3.00	14	2
1:A:200:ASN:HD21	1:A:218:VAL:HG23	0.44	1.71	23	1
1:A:254:ILE:HD11	1:A:267:ARG:NE	0.44	2.28	27	1
1:A:162:ILE:HD11	1:A:252:LEU:CD2	0.44	2.40	35	2
1:A:115:HIS:CG	1:A:116:SER:N	0.44	2.85	21	8
1:A:118:THR:CG2	1:A:125:THR:HG21	0.44	2.41	7	2
1:A:114:LEU:C	1:A:114:LEU:HD12	0.44	2.38	9	1
1:A:162:ILE:CD1	1:A:254:ILE:CD1	0.44	2.95	16	1
1:A:115:HIS:CB	1:A:126:TYR:CD1	0.44	3.00	26	1
1:A:111:LEU:HD21	1:A:268:ASN:OD1	0.44	2.11	29	1
1:A:173:VAL:O	1:A:194:LEU:HD11	0.44	2.12	30	1
1:A:168:HIS:CG	1:A:249:ARG:CZ	0.44	3.00	35	1
1:A:254:ILE:HD12	1:A:254:ILE:O	0.44	2.13	36	1
1:A:113:PHE:O	1:A:126:TYR:CE2	0.44	2.71	7	6
1:A:223:PRO:HB3	1:A:229:CYS:N	0.44	2.28	13	1
1:A:195:ILE:HD11	1:A:234:TYR:CD2	0.44	2.48	26	1
1:A:131:ASN:O	1:A:131:ASN:ND2	0.44	2.51	36	2
1:A:175:ARG:NH1	1:A:194:LEU:CB	0.44	2.80	28	1
1:A:206:LEU:N	1:A:206:LEU:CD2	0.44	2.81	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:200:ASN:ND2	1:A:203:VAL:HG22	0.44	2.28	23	1
1:A:145:LEU:HD13	1:A:232:ILE:HD11	0.44	1.90	25	1
1:A:107:TYR:CD2	1:A:149:SER:OG	0.44	2.71	35	2
1:A:118:THR:HG21	1:A:279:GLY:HA2	0.44	1.88	17	1
1:A:113:PHE:O	1:A:126:TYR:CE1	0.44	2.71	24	4
1:A:205:TYR:CE1	1:A:216:VAL:CG2	0.44	3.00	21	1
1:A:110:ARG:HA	1:A:268:ASN:ND2	0.44	2.28	25	1
1:A:267:ARG:O	1:A:267:ARG:CG	0.44	2.66	8	7
1:A:133:MET:HG3	1:A:272:VAL:HA	0.44	1.89	16	1
1:A:194:LEU:HD23	1:A:238:CYS:CB	0.44	2.43	21	1
1:A:137:LEU:HD13	1:A:239:ASN:N	0.44	2.27	30	1
1:A:100:GLN:NE2	1:A:162:ILE:HD11	0.44	2.27	33	1
1:A:254:ILE:HG23	1:A:268:ASN:C	0.43	2.38	16	1
1:A:264:LEU:HD21	1:A:267:ARG:HH11	0.43	1.73	19	1
1:A:176:CYS:HB2	1:A:179:HIS:HB2	0.43	1.89	33	1
1:A:252:LEU:N	1:A:252:LEU:CD2	0.43	2.81	3	2
1:A:103:TYR:CE1	1:A:264:LEU:HD22	0.43	2.48	7	1
1:A:103:TYR:O	1:A:104:GLN:C	0.43	2.60	12	2
1:A:113:PHE:O	1:A:126:TYR:CD2	0.43	2.71	15	5
1:A:251:ILE:HG23	1:A:272:VAL:O	0.43	2.13	17	1
1:A:109:PHE:O	1:A:268:ASN:ND2	0.43	2.52	26	1
1:A:193:HIS:CE1	1:A:195:ILE:CG2	0.43	3.01	36	1
1:A:164:LYS:HB2	1:A:252:LEU:HD11	0.43	1.90	3	1
1:A:174:ARG:HG3	1:A:175:ARG:N	0.43	2.28	22	1
1:A:103:TYR:HE2	1:A:264:LEU:HD23	0.43	1.72	27	1
1:A:158:ARG:CB	1:A:160:MET:HE1	0.43	2.43	28	1
1:A:179:HIS:CD2	1:A:180:GLU:N	0.43	2.86	34	1
1:A:253:THR:HB	1:A:270:PHE:CE1	0.43	2.48	26	2
1:A:136:GLN:HB2	1:A:139:LYS:HB2	0.43	1.89	15	1
1:A:109:PHE:CD1	1:A:266:GLY:C	0.43	2.96	18	4
1:A:136:GLN:CG	1:A:139:LYS:CG	0.43	2.97	8	1
1:A:238:CYS:O	1:A:246:MET:HE1	0.43	2.13	22	1
1:A:103:TYR:CD2	1:A:264:LEU:HD22	0.43	2.49	29	1
1:A:193:HIS:CD2	1:A:205:TYR:CG	0.43	3.06	33	1
1:A:200:ASN:ND2	1:A:218:VAL:CG2	0.43	2.81	33	4
1:A:145:LEU:CD1	1:A:145:LEU:N	0.43	2.82	17	1
1:A:179:HIS:CD2	1:A:237:MET:CE	0.43	3.00	19	1
1:A:206:LEU:HD11	1:A:217:VAL:HG11	0.43	1.86	27	1
1:A:264:LEU:HD21	1:A:267:ARG:HE	0.43	1.72	34	1
1:A:194:LEU:H	1:A:194:LEU:HD23	0.43	1.72	34	2
1:A:137:LEU:N	1:A:274:VAL:CG1	0.43	2.82	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:126:TYR:CD1	1:A:133:MET:HE2	0.43	2.48	12	1
1:A:145:LEU:N	1:A:145:LEU:HD12	0.43	2.29	17	1
1:A:158:ARG:NH1	1:A:160:MET:HE3	0.43	2.29	24	1
1:A:103:TYR:CZ	1:A:264:LEU:O	0.43	2.72	26	1
1:A:164:LYS:CB	1:A:252:LEU:HD13	0.43	2.41	28	1
1:A:160:MET:HB3	1:A:254:ILE:HD13	0.43	1.90	34	1
1:A:242:CYS:O	1:A:243:MET:CG	0.43	2.66	35	1
1:A:162:ILE:HD11	1:A:252:LEU:HB2	0.43	1.90	5	1
1:A:113:PHE:HB2	1:A:126:TYR:CD2	0.43	2.49	12	1
1:A:123:THR:O	1:A:278:PRO:CB	0.43	2.67	12	3
1:A:123:THR:HG22	1:A:139:LYS:HD3	0.43	1.91	2	1
1:A:123:THR:O	1:A:278:PRO:CG	0.43	2.67	9	2
1:A:193:HIS:NE2	1:A:214:HIS:CD2	0.43	2.87	14	1
1:A:157:VAL:CG1	1:A:255:ILE:HG23	0.43	2.43	24	3
1:A:138:ALA:CB	1:A:237:MET:HE3	0.43	2.32	25	1
1:A:246:MET:O	1:A:249:ARG:HB2	0.43	2.12	36	1
1:A:256:THR:HG22	1:A:267:ARG:HG3	0.43	1.90	4	1
1:A:257:LEU:C	1:A:257:LEU:HD12	0.43	2.39	25	1
1:A:264:LEU:HD23	1:A:267:ARG:HB2	0.42	1.91	4	1
1:A:200:ASN:ND2	1:A:203:VAL:CG1	0.42	2.80	6	1
1:A:137:LEU:N	1:A:137:LEU:CD1	0.42	2.81	9	1
1:A:114:LEU:HD12	1:A:114:LEU:N	0.42	2.29	18	1
1:A:126:TYR:CD1	1:A:126:TYR:C	0.42	2.96	30	1
1:A:145:LEU:HB2	1:A:230:THR:HB	0.42	1.90	33	1
1:A:164:LYS:HB2	1:A:252:LEU:HD12	0.42	1.91	5	1
1:A:107:TYR:CE1	1:A:265:LEU:HG	0.42	2.49	34	3
1:A:209:ARG:O	1:A:212:PHE:CE1	0.42	2.72	28	3
1:A:256:THR:CG2	1:A:267:ARG:HG3	0.42	2.44	4	2
1:A:100:GLN:HG2	1:A:254:ILE:HD13	0.42	1.89	5	1
1:A:222:PRO:HB3	1:A:223:PRO:HD2	0.42	1.91	8	1
1:A:114:LEU:O	1:A:126:TYR:CD2	0.42	2.72	16	1
1:A:239:ASN:OD1	1:A:240:SER:N	0.42	2.52	18	1
1:A:130:LEU:O	1:A:131:ASN:CG	0.42	2.62	26	1
1:A:282:ARG:HG3	1:A:283:ARG:N	0.42	2.30	28	4
1:A:113:PHE:HB2	1:A:126:TYR:CD1	0.42	2.49	9	1
1:A:109:PHE:CZ	1:A:257:LEU:HD12	0.42	2.49	16	1
1:A:202:ARG:O	1:A:202:ARG:HG3	0.42	2.13	32	1
1:A:113:PHE:CB	1:A:133:MET:HE3	0.42	2.43	12	1
1:A:257:LEU:O	1:A:265:LEU:HG	0.42	2.14	16	2
1:A:206:LEU:N	1:A:206:LEU:CD1	0.42	2.83	20	1
1:A:239:ASN:C	1:A:246:MET:HE2	0.42	2.40	34	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:125:THR:HG23	1:A:134:PHE:HB2	0.42	1.92	35	1
1:A:218:VAL:O	1:A:218:VAL:HG13	0.42	2.15	20	2
1:A:103:TYR:CD1	1:A:264:LEU:HD22	0.42	2.49	7	1
1:A:115:HIS:CD2	1:A:125:THR:HG22	0.42	2.50	13	1
1:A:163:TYR:CD2	1:A:165:GLN:CD	0.42	2.98	21	1
1:A:254:ILE:HG23	1:A:269:SER:CB	0.42	2.45	24	1
1:A:204:GLU:HB2	1:A:217:VAL:HG23	0.42	1.92	30	1
1:A:195:ILE:CD1	1:A:236:TYR:CZ	0.42	3.03	33	1
1:A:177:PRO:O	1:A:181:ARG:HG2	0.42	2.15	34	1
1:A:111:LEU:HD13	1:A:268:ASN:HB2	0.42	1.92	12	1
1:A:115:HIS:CE1	1:A:116:SER:O	0.42	2.72	26	1
1:A:158:ARG:NH1	1:A:160:MET:HE2	0.42	2.30	35	1
1:A:109:PHE:CD2	1:A:146:TRP:O	0.42	2.73	34	3
1:A:109:PHE:HB2	1:A:147:VAL:HA	0.42	1.91	7	1
1:A:216:VAL:HG13	1:A:216:VAL:O	0.42	2.13	9	1
1:A:256:THR:OG1	1:A:264:LEU:HD11	0.42	2.15	25	1
1:A:252:LEU:HD12	1:A:271:GLU:HG3	0.42	1.91	26	1
1:A:237:MET:HE3	1:A:237:MET:HB2	0.42	1.79	33	1
1:A:272:VAL:O	1:A:272:VAL:HG13	0.41	2.15	11	1
1:A:137:LEU:HD22	1:A:239:ASN:HD22	0.41	1.75	16	1
1:A:221:GLU:O	1:A:222:PRO:C	0.41	2.63	19	1
1:A:111:LEU:HA	1:A:144:GLN:O	0.41	2.15	10	2
1:A:111:LEU:HD21	1:A:255:ILE:HG12	0.41	1.91	11	1
1:A:258:GLU:HB3	1:A:264:LEU:HD12	0.41	1.92	25	1
1:A:189:ALA:HB1	1:A:196:ARG:HG2	0.41	1.91	31	1
1:A:117:GLY:O	1:A:125:THR:HG22	0.41	2.15	36	1
1:A:163:TYR:CE1	1:A:249:ARG:HB3	0.41	2.50	16	1
1:A:263:ASN:ND2	1:A:263:ASN:N	0.41	2.68	19	1
1:A:152:PRO:O	1:A:153:PRO:C	0.41	2.63	20	5
1:A:136:GLN:CG	1:A:139:LYS:HB2	0.41	2.46	24	1
1:A:163:TYR:CZ	1:A:171:GLU:O	0.41	2.72	26	1
1:A:256:THR:CG2	1:A:267:ARG:HG2	0.41	2.40	27	1
1:A:131:ASN:O	1:A:131:ASN:CG	0.41	2.63	29	1
1:A:145:LEU:HB2	1:A:230:THR:O	0.41	2.15	29	1
1:A:135:CYS:HA	1:A:278:PRO:HB3	0.41	1.91	36	1
1:A:113:PHE:O	1:A:126:TYR:CD1	0.41	2.73	11	1
1:A:134:PHE:CD1	1:A:281:ASP:OD2	0.41	2.74	11	1
1:A:194:LEU:HD13	1:A:195:ILE:HG13	0.41	1.92	18	1
1:A:255:ILE:CD1	1:A:270:PHE:CE1	0.41	3.04	19	1
1:A:194:LEU:N	1:A:194:LEU:CD2	0.41	2.82	22	1
1:A:137:LEU:O	1:A:137:LEU:CD2	0.41	2.64	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:134:PHE:CE1	1:A:281:ASP:OD2	0.41	2.74	11	1
1:A:264:LEU:CD2	1:A:267:ARG:HG2	0.41	2.45	13	1
1:A:258:GLU:CG	1:A:264:LEU:CD1	0.41	2.99	16	1
1:A:189:ALA:CB	1:A:205:TYR:CZ	0.41	3.02	19	1
1:A:192:GLN:O	1:A:214:HIS:CE1	0.41	2.73	32	1
1:A:253:THR:O	1:A:270:PHE:CD1	0.41	2.74	34	1
1:A:107:TYR:CD1	1:A:265:LEU:HD13	0.41	2.50	2	1
1:A:134:PHE:CE1	1:A:281:ASP:OD1	0.41	2.73	14	3
1:A:138:ALA:N	1:A:236:TYR:O	0.41	2.52	9	1
1:A:102:THR:HG23	1:A:268:ASN:CB	0.41	2.39	11	2
1:A:163:TYR:O	1:A:169:MET:CB	0.41	2.68	18	1
1:A:126:TYR:CD1	1:A:126:TYR:O	0.41	2.74	30	1
1:A:107:TYR:CG	1:A:149:SER:OG	0.41	2.71	35	1
1:A:155:THR:OG1	1:A:220:TYR:CZ	0.41	2.74	16	1
1:A:163:TYR:CD2	1:A:250:PRO:O	0.41	2.74	27	1
1:A:165:GLN:OE1	1:A:168:HIS:C	0.41	2.64	31	1
1:A:123:THR:O	1:A:278:PRO:HG2	0.41	2.16	35	1
1:A:134:PHE:CD1	1:A:281:ASP:CG	0.41	2.99	9	3
1:A:246:MET:HE3	1:A:251:ILE:HD13	0.41	1.92	11	1
1:A:200:ASN:OD1	1:A:203:VAL:CG1	0.41	2.69	22	1
1:A:252:LEU:C	1:A:252:LEU:CD2	0.41	2.93	25	1
1:A:155:THR:O	1:A:220:TYR:HB3	0.41	2.13	31	1
1:A:155:THR:HG23	1:A:258:GLU:N	0.41	2.31	32	1
1:A:114:LEU:O	1:A:126:TYR:CE1	0.41	2.74	36	1
1:A:193:HIS:CD2	1:A:214:HIS:CE1	0.41	3.09	3	1
1:A:125:THR:HG21	1:A:279:GLY:CA	0.41	2.46	6	1
1:A:113:PHE:CD1	1:A:126:TYR:CE1	0.41	3.08	8	1
1:A:255:ILE:N	1:A:255:ILE:CD1	0.41	2.84	33	2
1:A:113:PHE:HB3	1:A:126:TYR:CB	0.41	2.45	16	1
1:A:258:GLU:HA	1:A:263:ASN:O	0.41	2.16	16	1
1:A:265:LEU:HD12	1:A:266:GLY:N	0.41	2.30	16	1
1:A:163:TYR:CE1	1:A:171:GLU:O	0.41	2.74	20	1
1:A:165:GLN:O	1:A:165:GLN:CG	0.41	2.69	21	1
1:A:206:LEU:CD2	1:A:217:VAL:HG13	0.41	2.41	24	1
1:A:125:THR:CG2	1:A:278:PRO:O	0.41	2.69	29	1
1:A:107:TYR:CD1	1:A:107:TYR:N	0.41	2.88	33	1
1:A:136:GLN:O	1:A:139:LYS:HB2	0.41	2.16	33	1
1:A:130:LEU:HD13	1:A:285:GLU:OE2	0.41	2.16	11	1
1:A:123:THR:O	1:A:278:PRO:HG3	0.41	2.16	19	1
1:A:259:ASP:CB	1:A:263:ASN:OD1	0.41	2.69	19	1
1:A:150:THR:HG22	1:A:152:PRO:HG3	0.41	1.91	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:137:LEU:C	1:A:137:LEU:CD2	0.41	2.89	23	1
1:A:115:HIS:CE1	1:A:125:THR:HG22	0.41	2.51	26	1
1:A:276:ALA:O	1:A:278:PRO:CD	0.41	2.69	30	1
1:A:164:LYS:O	1:A:166:SER:N	0.41	2.54	31	1
1:A:139:LYS:HE2	1:A:141:CYS:SG	0.41	2.56	36	1
1:A:109:PHE:CE1	1:A:268:ASN:OD1	0.40	2.74	1	1
1:A:238:CYS:O	1:A:246:MET:HE2	0.40	2.17	2	1
1:A:264:LEU:HD23	1:A:267:ARG:CB	0.40	2.46	4	1
1:A:143:VAL:CG2	1:A:234:TYR:CD2	0.40	3.04	9	1
1:A:151:PRO:CB	1:A:220:TYR:OH	0.40	2.69	24	2
1:A:209:ARG:HA	1:A:212:PHE:CE1	0.40	2.52	13	1
1:A:125:THR:CG2	1:A:282:ARG:CB	0.40	2.98	22	1
1:A:145:LEU:CD1	1:A:232:ILE:CD1	0.40	2.99	24	1
1:A:192:GLN:NE2	1:A:214:HIS:NE2	0.40	2.69	35	1
1:A:113:PHE:CG	1:A:133:MET:SD	0.40	3.14	36	1
1:A:160:MET:O	1:A:253:THR:HA	0.40	2.16	24	2
1:A:116:SER:HB3	1:A:124:CYS:O	0.40	2.16	6	1
1:A:133:MET:SD	1:A:270:PHE:CD1	0.40	3.14	12	1
1:A:256:THR:HG21	1:A:258:GLU:OE2	0.40	2.15	17	1
1:A:175:ARG:HD3	1:A:192:GLN:HA	0.40	1.93	19	1
1:A:134:PHE:CE1	1:A:281:ASP:CG	0.40	2.99	20	1
1:A:264:LEU:CD2	1:A:267:ARG:CZ	0.40	2.98	26	1
1:A:222:PRO:CD	1:A:223:PRO:CD	0.40	2.99	29	1
1:A:209:ARG:O	1:A:212:PHE:CZ	0.40	2.74	31	1
1:A:109:PHE:CD1	1:A:266:GLY:HA3	0.40	2.51	34	1
1:A:126:TYR:CD1	1:A:127:SER:N	0.40	2.89	34	1
1:A:114:LEU:N	1:A:114:LEU:HD22	0.40	2.32	35	1
1:A:259:ASP:OD1	1:A:263:ASN:N	0.40	2.54	10	1
1:A:134:PHE:CE1	1:A:285:GLU:OE2	0.40	2.73	25	1
1:A:156:ARG:NH2	1:A:217:VAL:CG2	0.40	2.84	34	1
1:A:162:ILE:HD11	1:A:254:ILE:CG1	0.40	2.46	34	1
1:A:109:PHE:CD1	1:A:109:PHE:O	0.40	2.75	1	1
1:A:281:ASP:O	1:A:285:GLU:HB2	0.40	2.17	7	2
1:A:253:THR:N	1:A:270:PHE:O	0.40	2.54	11	1
1:A:126:TYR:CD1	1:A:126:TYR:N	0.40	2.88	16	1
1:A:165:GLN:O	1:A:165:GLN:NE2	0.40	2.54	16	1
1:A:206:LEU:HD23	1:A:206:LEU:N	0.40	2.31	19	1
1:A:124:CYS:HA	1:A:134:PHE:O	0.40	2.15	27	1
1:A:155:THR:CG2	1:A:258:GLU:O	0.40	2.69	4	1
1:A:239:ASN:ND2	1:A:242:CYS:N	0.40	2.70	12	1
1:A:164:LYS:HD2	1:A:168:HIS:CD2	0.40	2.51	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:162:ILE:HD11	1:A:252:LEU:HD11	0.40	1.94	33	1
1:A:155:THR:OG1	1:A:257:LEU:CD2	0.40	2.70	35	1
1:A:246:MET:CG	1:A:249:ARG:O	0.40	2.69	36	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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	175/204 (86%)	149±3 (85±2%)	21±3 (12±1%)	6±2 (3±1%)	5	35
All	All	6300/7344 (86%)	5349 (85%)	746 (12%)	205 (3%)	5	35

All 27 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	222	PRO	28
1	A	242	CYS	25
1	A	207	ASP	16
1	A	228	ASP	13
1	A	154	GLY	11
1	A	275	CYS	11
1	A	153	PRO	10
1	A	202	ARG	8
1	A	103	TYR	8
1	A	98	PRO	7
1	A	100	GLN	7
1	A	104	GLN	6
1	A	238	CYS	6
1	A	99	SER	6
1	A	245	GLY	6
1	A	168	HIS	5
1	A	165	GLN	5
1	A	105	GLY	5
1	A	116	SER	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	152	PRO	4
1	A	151	PRO	3
1	A	123	THR	3
1	A	244	GLY	2
1	A	243	MET	2
1	A	117	GLY	2
1	A	266	GLY	1
1	A	171	GLU	1

6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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	158/183 (86%)	113±4 (72±3%)	45±4 (28±3%)	1	19
All	All	5688/6588 (86%)	4068 (72%)	1620 (28%)	1	19

All 129 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	147	VAL	36
1	A	220	TYR	35
1	A	257	LEU	35
1	A	274	VAL	35
1	A	156	ARG	32
1	A	202	ARG	32
1	A	131	ASN	31
1	A	238	CYS	31
1	A	139	LYS	30
1	A	133	MET	25
1	A	237	MET	25
1	A	286	GLU	24
1	A	109	PHE	23
1	A	113	PHE	22
1	A	175	ARG	22
1	A	265	LEU	22
1	A	181	ARG	21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	246	MET	21
1	A	209	ARG	21
1	A	280	ARG	21
1	A	164	LYS	20
1	A	194	LEU	20
1	A	201	LEU	20
1	A	165	GLN	20
1	A	123	THR	19
1	A	253	THR	19
1	A	267	ARG	19
1	A	155	THR	19
1	A	282	ARG	19
1	A	103	TYR	18
1	A	230	THR	18
1	A	241	SER	18
1	A	271	GLU	17
1	A	261	SER	17
1	A	285	GLU	17
1	A	171	GLU	16
1	A	193	HIS	16
1	A	283	ARG	16
1	A	231	THR	16
1	A	243	MET	16
1	A	99	SER	16
1	A	110	ARG	16
1	A	149	SER	15
1	A	167	GLN	15
1	A	196	ARG	15
1	A	204	GLU	15
1	A	101	LYS	14
1	A	125	THR	14
1	A	163	TYR	14
1	A	198	GLU	14
1	A	213	ARG	14
1	A	248	ARG	14
1	A	170	THR	14
1	A	116	SER	14
1	A	180	GLU	14
1	A	114	LEU	13
1	A	100	GLN	13
1	A	208	ASP	13
1	A	277	CYS	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	252	LEU	13
1	A	132	LYS	13
1	A	192	GLN	12
1	A	264	LEU	12
1	A	144	GLN	12
1	A	166	SER	12
1	A	169	MET	12
1	A	240	SER	12
1	A	160	MET	12
1	A	215	SER	11
1	A	258	GLU	11
1	A	130	LEU	11
1	A	287	GLU	11
1	A	127	SER	10
1	A	158	ARG	10
1	A	214	HIS	10
1	A	228	ASP	10
1	A	273	ARG	10
1	A	140	THR	10
1	A	104	GLN	10
1	A	150	THR	10
1	A	242	CYS	9
1	A	268	ASN	9
1	A	269	SER	9
1	A	136	GLN	9
1	A	249	ARG	8
1	A	210	ASN	8
1	A	259	ASP	8
1	A	211	THR	8
1	A	239	ASN	8
1	A	162	ILE	7
1	A	174	ARG	7
1	A	168	HIS	7
1	A	263	ASN	7
1	A	111	LEU	6
1	A	254	ILE	6
1	A	260	SER	6
1	A	197	VAL	6
1	A	124	CYS	5
1	A	275	CYS	5
1	A	106	SER	5
1	A	206	LEU	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	135	CYS	4
1	A	200	ASN	4
1	A	247	ASN	4
1	A	203	VAL	4
1	A	173	VAL	4
1	A	281	ASP	4
1	A	102	THR	3
1	A	115	HIS	3
1	A	118	THR	3
1	A	126	TYR	3
1	A	148	ASP	3
1	A	137	LEU	3
1	A	221	GLU	3
1	A	256	THR	2
1	A	251	ILE	2
1	A	145	LEU	2
1	A	179	HIS	2
1	A	212	PHE	1
1	A	218	VAL	1
1	A	255	ILE	1
1	A	195	ILE	1
1	A	207	ASP	1
1	A	232	ILE	1
1	A	235	ASN	1
1	A	217	VAL	1
1	A	178	HIS	1
1	A	233	HIS	1
1	A	141	CYS	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