



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 6, 2026 – 05:06 PM UTC

PDB ID : 2JUL / pdb_00002jul
Title : NMR Structure of DREAM
Authors : Ames, J.
Deposited on : 2007-08-30

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

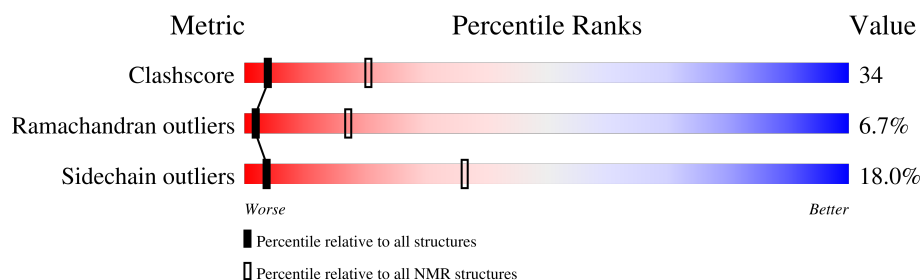
1 Overall quality at a glance

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	256	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 15 models. Model 3 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *closest to the average*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:79-A:199, A:210-A:256 (168)	1.51	3

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	3, 9, 13, 15
2	1, 12, 14
3	5, 6
4	2, 8
Single-model clusters	4; 7; 10; 11

3 Entry composition [i](#)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2905 atoms, of which 1425 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Calsenilin.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	181	Total	C	H	N	O	S	0
			2903	944	1425	241	283	10	

- Molecule 2 is CALCIUM ION (CCD ID: CA) (formula: Ca).

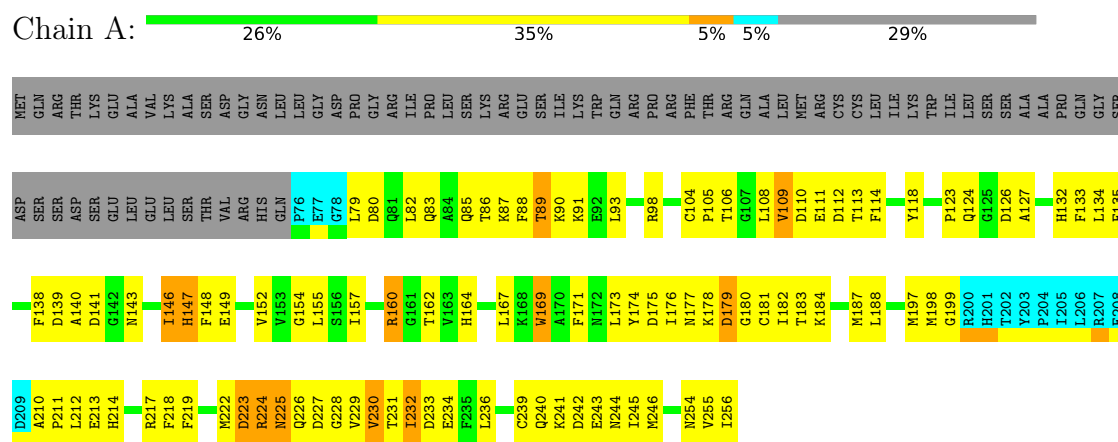
Mol	Chain	Residues	Atoms	
2	A	2	Total	Ca
			2	2

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: Calsenilin

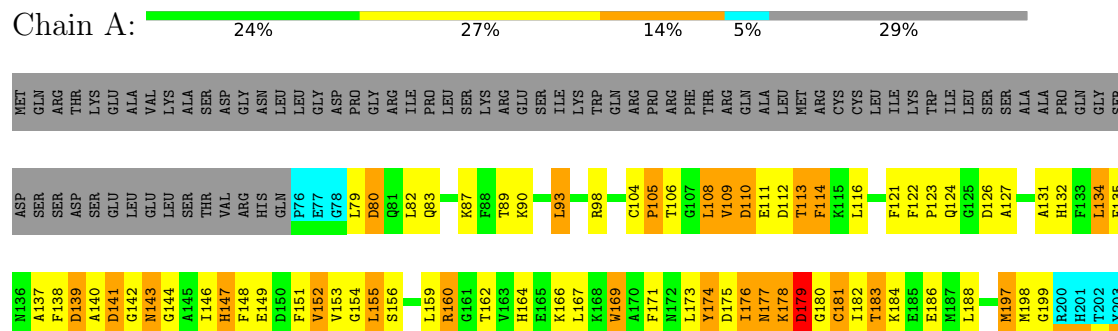


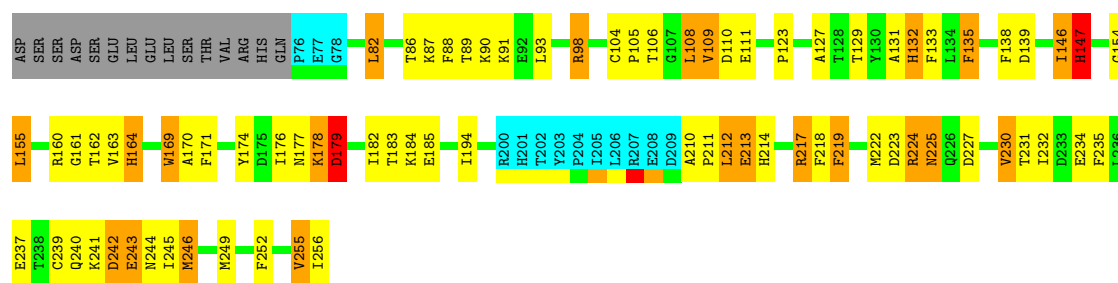
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

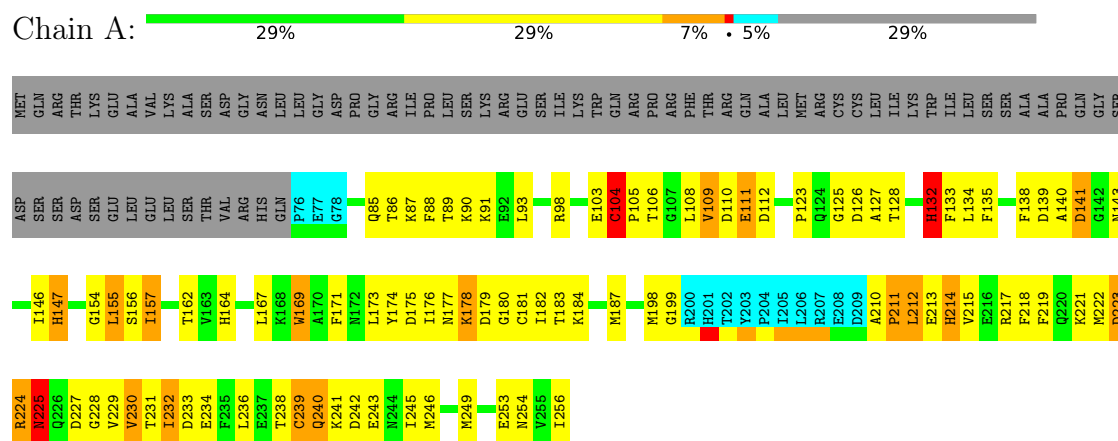
- Molecule 1: Calsenilin





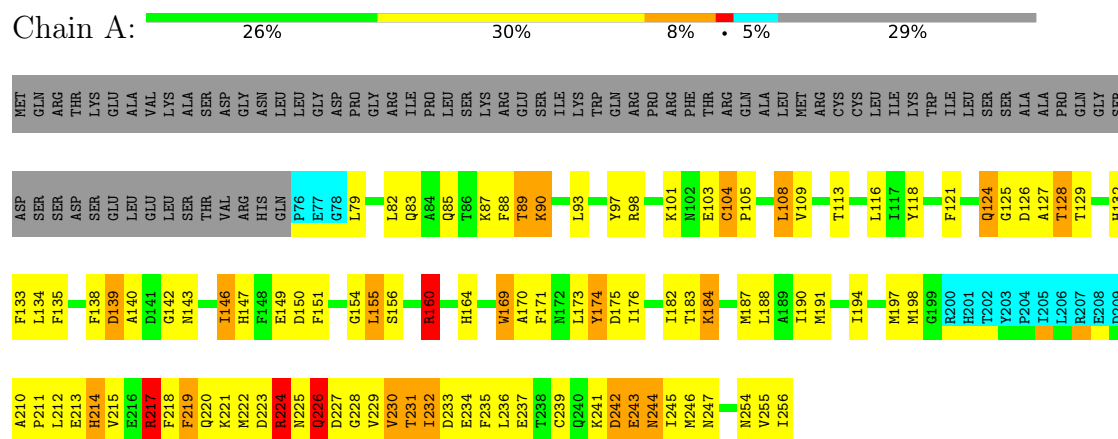
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Calsenilin



4.2.6 Score per residue for model 6

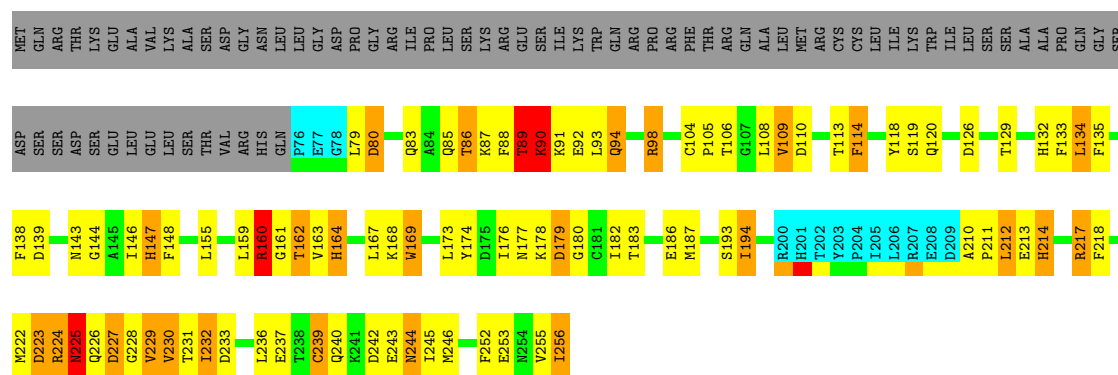
- Molecule 1: Calsenilin



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Calsenilin

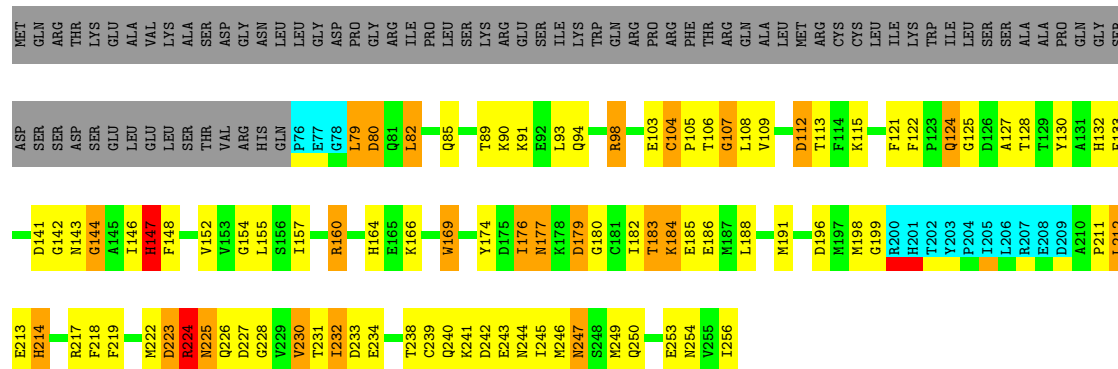
Chain A: 29% 25% 10% 5% 29%



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Calsenilin

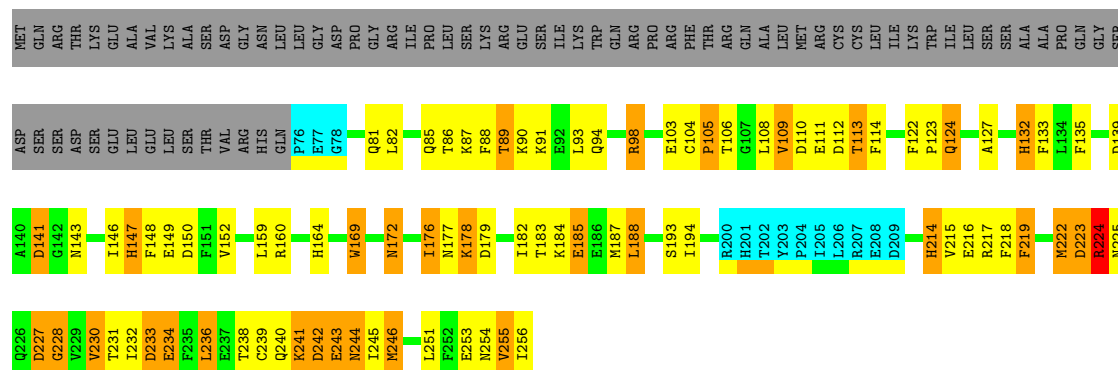
Chain A: 29% 27% 9% 5% 29%



4.2.9 Score per residue for model 9

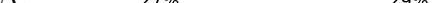
- Molecule 1: Calsenilin

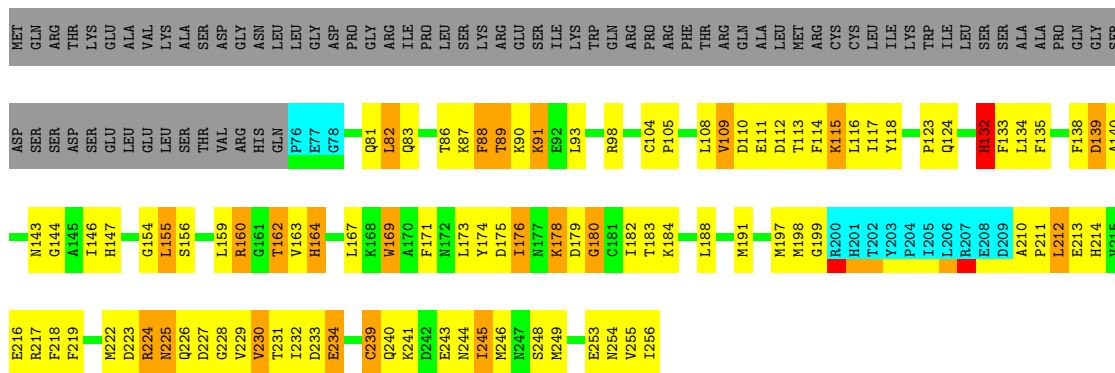
Chain A: 31% 22% 12% 5% 29%



4.2.10 Score per residue for model 10

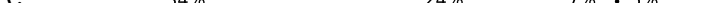
- Molecule 1: Calsenilin

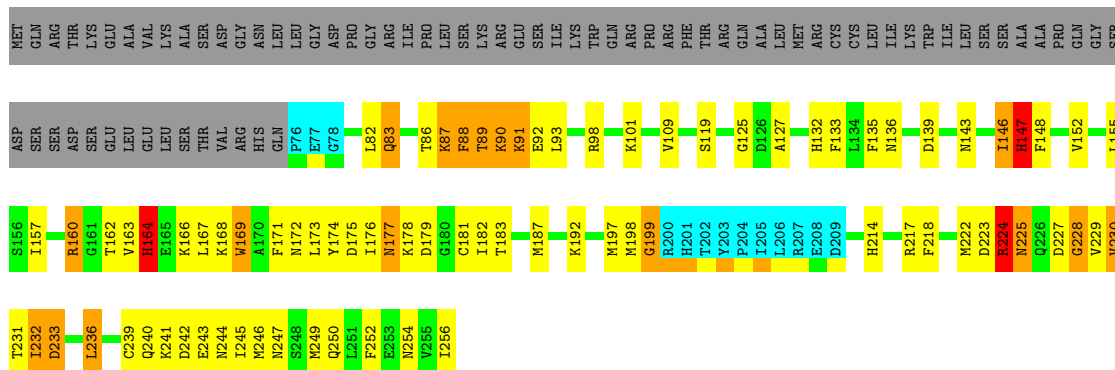
Chain A: 



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Calsenilin

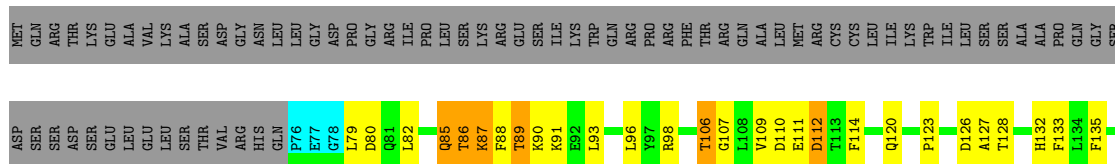
Chain A: 



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Calsenilin

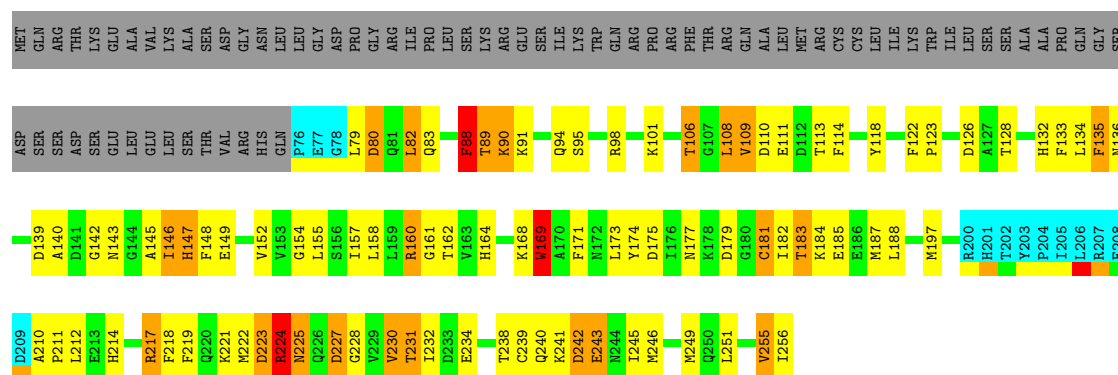
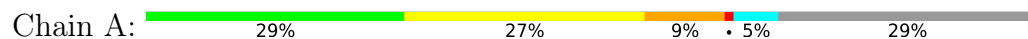
Chain A:





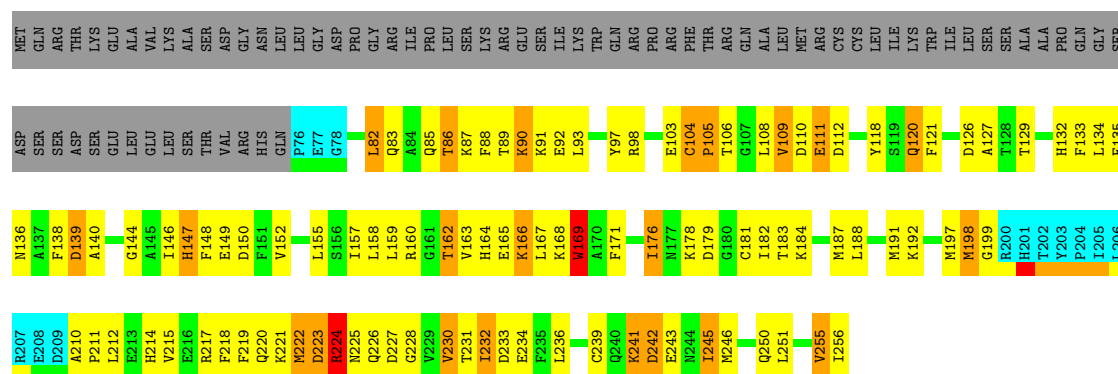
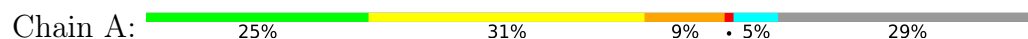
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Calsenilin



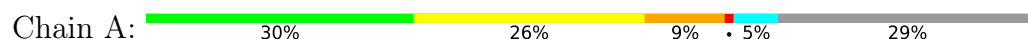
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Calsenilin



4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Calsenilin



MET	ASP	V152	D223
GLN	SER	V153	R224
ARG	SER	G154	N225
THR	ASP	L155	Q226
LYS	SER	S156	D227
GLU	GLU	I157	G228
ALA	LEU	L158	V229
VAL	GLU	L159	V230
LYS	LEU	R160	T231
ALA	SER	G161	I232
SER	THR	T162	D233
ASP	VAL	V163	E234
GLY	ARG	H164	
ASN	HIS		T238
LEU	GLN	L167	C239
LEU	P76	K168	Q240
GLY	E77	V169	K241
ASP	G78	A170	D242
PRO		F171	E243
GLY	L82	N172	N244
ARG	Q83	L173	I245
ILE	A84	Y174	M246
PRO	Q85	D175	
LEU	T86	I176	L251
SER	K87	N177	F252
LYS	F88	K178	E253
ARG	T89	D179	N254
GLU		G180	V255
SER	L93	C181	I256
ILE	Q94	I182	
LYS	S95	T183	
TRP		K184	
GLN	R98	E185	
ARG		E186	
PRO	E103	M187	
ARG	C104	L188	
PHE			
THR	V109	K192	
ARG	D110		
GLN	E111	R200	
ALA	D112	H201	
LEU		T202	
MET	Y118	Y203	
ARG	P123	P204	
CYS		I205	
CYS	D126	L206	
LEU	A127	R207	
ILE		E208	
LYS		D209	
TRP	H132	A210	
ILE	F133	F211	
LEU	L134	L212	
SER	F135	E213	
SER	N136	H214	
ALA			
ALA	I146	R217	
PRO	H147	F218	
GLN	F148	F219	
GLY	E149		
SER		M222	

5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

The models were refined using the following method: *simulated annealing*.

Of the 50 calculated structures, 15 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	3.1

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: CA

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	1.47±0.01	9±0/1395 (0.6± 0.0%)	1.40±0.01	7±1/1876 (0.4± 0.0%)
All	All	1.47	136/20925 (0.6%)	1.40	100/28140 (0.4%)

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	3.7±0.6
All	All	0	56

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	147	HIS	CG-ND1	-11.96	1.25	1.38	14	15
1	A	164	HIS	CG-ND1	-11.96	1.25	1.38	7	15
1	A	132	HIS	CG-ND1	-11.91	1.25	1.38	7	15
1	A	214	HIS	CG-ND1	-11.89	1.25	1.38	12	15
1	A	142	GLY	N-CA	7.26	1.50	1.44	1	1
1	A	169	TRP	CG-CD2	-6.49	1.32	1.43	13	15
1	A	199	GLY	N-CA	6.04	1.50	1.45	11	1
1	A	164	HIS	ND1-CE1	-5.56	1.26	1.32	14	15
1	A	147	HIS	ND1-CE1	-5.48	1.27	1.32	10	14
1	A	132	HIS	ND1-CE1	-5.40	1.27	1.32	14	15
1	A	214	HIS	ND1-CE1	-5.37	1.27	1.32	2	15

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	147	HIS	CE1-NE2-CD2	-7.59	101.41	109.00	14	15
1	A	164	HIS	CE1-NE2-CD2	-7.55	101.45	109.00	3	15
1	A	214	HIS	CE1-NE2-CD2	-7.53	101.47	109.00	15	15
1	A	132	HIS	CE1-NE2-CD2	-7.52	101.48	109.00	7	15
1	A	169	TRP	NE1-CE2-CZ2	6.43	139.75	130.10	13	15
1	A	124	GLN	CB-CA-C	-6.26	109.34	116.54	6	1
1	A	222	MET	CB-CA-C	-5.81	108.70	117.07	14	1
1	A	169	TRP	NE1-CE2-CD2	-5.63	100.08	107.40	13	15
1	A	219	PHE	CA-CB-CG	-5.41	108.39	113.80	6	5
1	A	135	PHE	CA-CB-CG	-5.16	108.64	113.80	13	3

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	224	ARG	Sidechain	15
1	A	160	ARG	Sidechain	14
1	A	217	ARG	Sidechain	14
1	A	98	ARG	Sidechain	13

6.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1367	1321	1321	91±13
All	All	20535	19815	19814	1370

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 34.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:176:ILE:HD12	1:A:176:ILE:H	0.94	1.17	10	1
1:A:176:ILE:HD12	1:A:176:ILE:N	0.88	1.83	10	4
1:A:218:PHE:CE2	1:A:246:MET:HE1	0.86	2.06	14	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:245:ILE:HG23	1:A:246:MET:H	0.82	1.34	4	3
1:A:187:MET:HE1	1:A:218:PHE:CD1	0.81	2.10	7	5
1:A:173:LEU:C	1:A:173:LEU:HD13	0.80	2.00	13	1
1:A:108:LEU:C	1:A:108:LEU:HD12	0.80	2.02	10	1
1:A:106:THR:HG22	1:A:107:GLY:H	0.79	1.35	8	1
1:A:104:CYS:N	1:A:105:PRO:CD	0.79	2.46	9	3
1:A:147:HIS:N	1:A:147:HIS:ND1	0.78	2.30	12	3
1:A:218:PHE:CE2	1:A:246:MET:SD	0.78	2.77	2	1
1:A:244:ASN:H	1:A:244:ASN:HD22	0.78	1.22	7	1
1:A:245:ILE:HG23	1:A:246:MET:N	0.77	1.93	2	12
1:A:188:LEU:C	1:A:188:LEU:HD13	0.77	2.05	6	1
1:A:218:PHE:CZ	1:A:246:MET:CE	0.76	2.68	2	1
1:A:222:MET:SD	1:A:238:THR:HG21	0.75	2.22	12	2
1:A:79:LEU:HD22	1:A:79:LEU:H	0.75	1.41	7	1
1:A:148:PHE:O	1:A:152:VAL:HG23	0.75	1.80	13	6
1:A:108:LEU:C	1:A:108:LEU:HD22	0.74	2.07	4	1
1:A:218:PHE:CZ	1:A:246:MET:SD	0.74	2.80	2	1
1:A:108:LEU:CD1	1:A:147:HIS:CE1	0.74	2.70	14	1
1:A:219:PHE:CE2	1:A:223:ASP:CG	0.73	2.66	1	2
1:A:88:PHE:CD1	1:A:88:PHE:N	0.73	2.57	11	1
1:A:218:PHE:CE1	1:A:222:MET:HE2	0.73	2.18	9	4
1:A:244:ASN:H	1:A:244:ASN:ND2	0.73	1.81	7	2
1:A:244:ASN:ND2	1:A:244:ASN:N	0.73	2.34	7	1
1:A:182:ILE:HB	1:A:230:VAL:HG13	0.72	1.59	1	15
1:A:108:LEU:HD11	1:A:147:HIS:CE1	0.72	2.19	9	2
1:A:176:ILE:H	1:A:176:ILE:HD13	0.72	1.43	14	1
1:A:103:GLU:CD	1:A:113:THR:HG21	0.72	2.10	6	1
1:A:225:ASN:ND2	1:A:227:ASP:CG	0.71	2.47	6	5
1:A:219:PHE:CZ	1:A:223:ASP:CG	0.71	2.69	10	2
1:A:79:LEU:HD22	1:A:79:LEU:N	0.71	1.99	7	1
1:A:106:THR:HG22	1:A:107:GLY:N	0.70	2.01	8	1
1:A:108:LEU:H	1:A:108:LEU:HD13	0.70	1.45	4	1
1:A:225:ASN:ND2	1:A:234:GLU:CD	0.70	2.49	12	5
1:A:108:LEU:CD1	1:A:108:LEU:N	0.70	2.54	4	1
1:A:238:THR:HG22	1:A:246:MET:SD	0.69	2.27	9	1
1:A:108:LEU:HD13	1:A:108:LEU:N	0.69	2.01	4	1
1:A:182:ILE:CB	1:A:230:VAL:HG13	0.69	2.18	1	15
1:A:176:ILE:N	1:A:176:ILE:CD1	0.69	2.55	10	3
1:A:155:LEU:O	1:A:155:LEU:HD13	0.69	1.88	13	1
1:A:116:LEU:HD23	1:A:116:LEU:O	0.68	1.88	10	1
1:A:174:TYR:CZ	1:A:249:MET:SD	0.68	2.87	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:187:MET:SD	1:A:218:PHE:CD2	0.68	2.86	9	1
1:A:223:ASP:C	1:A:225:ASN:ND2	0.68	2.51	8	1
1:A:244:ASN:HD22	1:A:244:ASN:N	0.68	1.86	7	2
1:A:176:ILE:H	1:A:176:ILE:CD1	0.68	2.00	14	2
1:A:222:MET:SD	1:A:238:THR:CG2	0.68	2.81	12	2
1:A:244:ASN:HD22	1:A:245:ILE:H	0.68	1.32	7	1
1:A:147:HIS:CD2	1:A:148:PHE:H	0.67	2.06	7	1
1:A:222:MET:SD	1:A:246:MET:HE1	0.67	2.29	12	1
1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:CD2	0.67	2.02	7	1
1:A:122:PHE:CE2	1:A:197:MET:SD	0.67	2.87	13	1
1:A:218:PHE:CE1	1:A:222:MET:CE	0.67	2.77	9	1
1:A:222:MET:SD	1:A:246:MET:CE	0.67	2.83	12	2
1:A:108:LEU:HD12	1:A:108:LEU:O	0.67	1.89	1	4
1:A:183:THR:OG1	1:A:229:VAL:HG12	0.67	1.88	5	2
1:A:239:CYS:SG	1:A:240:GLN:N	0.67	2.68	5	2
1:A:176:ILE:HD13	1:A:176:ILE:N	0.66	2.05	14	1
1:A:160:ARG:HH11	1:A:161:GLY:N	0.66	1.88	13	1
1:A:227:ASP:OD1	1:A:228:GLY:N	0.66	2.29	5	12
1:A:245:ILE:CG2	1:A:246:MET:N	0.66	2.59	10	13
1:A:174:TYR:CE2	1:A:249:MET:SD	0.66	2.88	4	1
1:A:256:ILE:H	1:A:256:ILE:HD13	0.66	1.50	7	1
1:A:179:ASP:CG	1:A:180:GLY:N	0.66	2.53	5	3
1:A:225:ASN:ND2	1:A:234:GLU:OE1	0.66	2.29	9	5
1:A:184:LYS:NZ	1:A:219:PHE:CD2	0.66	2.62	14	1
1:A:171:PHE:C	1:A:171:PHE:CD1	0.65	2.74	5	9
1:A:118:TYR:CE1	1:A:134:LEU:CD1	0.65	2.79	15	2
1:A:256:ILE:HD13	1:A:256:ILE:N	0.65	2.06	3	2
1:A:86:THR:HG21	1:A:152:VAL:HG12	0.65	1.66	3	1
1:A:244:ASN:ND2	1:A:245:ILE:H	0.65	1.90	7	1
1:A:256:ILE:CD1	1:A:256:ILE:N	0.65	2.60	7	1
1:A:147:HIS:CG	1:A:148:PHE:H	0.64	2.11	1	2
1:A:219:PHE:CE1	1:A:223:ASP:OD2	0.64	2.51	10	1
1:A:225:ASN:HD21	1:A:227:ASP:CG	0.64	2.00	6	2
1:A:222:MET:SD	1:A:246:MET:SD	0.64	2.96	12	1
1:A:255:VAL:O	1:A:255:VAL:HG13	0.64	1.93	3	2
1:A:255:VAL:O	1:A:255:VAL:HG22	0.64	1.92	14	1
1:A:159:LEU:C	1:A:159:LEU:HD23	0.64	2.17	1	2
1:A:256:ILE:N	1:A:256:ILE:CD1	0.64	2.61	3	2
1:A:198:MET:SD	1:A:199:GLY:N	0.64	2.70	14	1
1:A:232:ILE:CG2	1:A:233:ASP:N	0.64	2.61	3	2
1:A:218:PHE:CZ	1:A:246:MET:HE1	0.64	2.26	2	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:245:ILE:CG2	1:A:246:MET:H	0.64	2.05	2	4
1:A:179:ASP:OD1	1:A:180:GLY:N	0.64	2.31	1	4
1:A:133:PHE:CD1	1:A:133:PHE:N	0.64	2.63	15	12
1:A:162:THR:HG22	1:A:163:VAL:N	0.64	2.08	11	2
1:A:219:PHE:CD1	1:A:223:ASP:OD2	0.63	2.50	10	1
1:A:124:GLN:CD	1:A:125:GLY:H	0.63	2.01	6	1
1:A:225:ASN:HD21	1:A:234:GLU:CD	0.63	2.01	1	3
1:A:226:GLN:N	1:A:226:GLN:CD	0.63	2.57	3	3
1:A:223:ASP:CG	1:A:224:ARG:H	0.63	2.02	12	4
1:A:225:ASN:ND2	1:A:234:GLU:OE2	0.63	2.32	6	5
1:A:177:ASN:ND2	1:A:179:ASP:OD1	0.63	2.32	8	1
1:A:245:ILE:CG2	1:A:246:MET:HE2	0.63	2.24	14	4
1:A:225:ASN:ND2	1:A:227:ASP:OD1	0.63	2.32	9	3
1:A:147:HIS:CG	1:A:148:PHE:N	0.62	2.66	13	2
1:A:225:ASN:ND2	1:A:227:ASP:OD2	0.62	2.32	9	3
1:A:165:GLU:N	1:A:165:GLU:CD	0.62	2.57	14	1
1:A:227:ASP:N	1:A:227:ASP:OD1	0.62	2.32	4	1
1:A:224:ARG:N	1:A:234:GLU:OE1	0.62	2.32	5	1
1:A:148:PHE:CE2	1:A:152:VAL:CG2	0.62	2.83	2	2
1:A:160:ARG:C	1:A:160:ARG:HE	0.62	2.03	7	1
1:A:227:ASP:OD2	1:A:228:GLY:N	0.62	2.32	11	2
1:A:254:ASN:C	1:A:254:ASN:HD22	0.62	2.03	8	1
1:A:83:GLN:C	1:A:83:GLN:CD	0.62	2.68	15	4
1:A:187:MET:CE	1:A:218:PHE:CD1	0.62	2.83	11	5
1:A:149:GLU:OE1	1:A:150:ASP:N	0.62	2.33	6	1
1:A:222:MET:SD	1:A:238:THR:CB	0.61	2.88	8	5
1:A:118:TYR:CZ	1:A:134:LEU:CD1	0.61	2.82	10	3
1:A:174:TYR:OH	1:A:249:MET:SD	0.61	2.58	5	2
1:A:184:LYS:N	1:A:219:PHE:CE1	0.61	2.68	6	6
1:A:222:MET:SD	1:A:238:THR:OG1	0.61	2.58	8	3
1:A:173:LEU:C	1:A:173:LEU:CD1	0.61	2.73	13	1
1:A:86:THR:HG21	1:A:152:VAL:CG1	0.61	2.25	3	1
1:A:160:ARG:NH1	1:A:161:GLY:CA	0.61	2.63	13	1
1:A:256:ILE:HD12	1:A:256:ILE:N	0.61	2.10	1	1
1:A:224:ARG:C	1:A:225:ASN:CG	0.61	2.67	7	2
1:A:155:LEU:HD13	1:A:155:LEU:C	0.61	2.21	13	1
1:A:191:MET:SD	1:A:215:VAL:HG22	0.61	2.35	14	1
1:A:139:ASP:N	1:A:139:ASP:OD1	0.61	2.33	2	2
1:A:212:LEU:N	1:A:212:LEU:CD2	0.61	2.64	6	1
1:A:245:ILE:CG2	1:A:246:MET:SD	0.61	2.89	9	1
1:A:256:ILE:H	1:A:256:ILE:CD1	0.61	2.09	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:224:ARG:N	1:A:234:GLU:OE2	0.61	2.34	9	1
1:A:127:ALA:HB2	1:A:197:MET:SD	0.61	2.36	14	1
1:A:247:ASN:ND2	1:A:247:ASN:C	0.60	2.59	8	1
1:A:122:PHE:C	1:A:124:GLN:H	0.60	2.03	2	3
1:A:142:GLY:C	1:A:143:ASN:ND2	0.60	2.59	13	1
1:A:225:ASN:HD22	1:A:225:ASN:N	0.60	1.92	13	1
1:A:241:LYS:C	1:A:243:GLU:H	0.60	2.04	13	2
1:A:85:GLN:C	1:A:87:LYS:H	0.60	2.04	7	1
1:A:91:LYS:CG	1:A:92:GLU:N	0.60	2.64	11	1
1:A:149:GLU:CD	1:A:149:GLU:C	0.60	2.69	12	2
1:A:89:THR:OG1	1:A:90:LYS:N	0.60	2.34	11	2
1:A:124:GLN:CD	1:A:125:GLY:N	0.60	2.60	6	1
1:A:187:MET:HE3	1:A:218:PHE:CD1	0.59	2.32	6	3
1:A:233:ASP:OD1	1:A:234:GLU:N	0.59	2.35	3	1
1:A:163:VAL:HG13	1:A:164:HIS:N	0.59	2.11	2	1
1:A:103:GLU:C	1:A:104:CYS:SG	0.59	2.84	5	3
1:A:225:ASN:C	1:A:225:ASN:HD22	0.59	2.05	11	2
1:A:111:GLU:OE2	1:A:132:HIS:CD2	0.59	2.55	9	1
1:A:141:ASP:OD1	1:A:141:ASP:N	0.59	2.35	2	5
1:A:179:ASP:OD1	1:A:181:CYS:SG	0.59	2.61	15	1
1:A:223:ASP:CG	1:A:224:ARG:N	0.59	2.55	3	5
1:A:172:ASN:C	1:A:172:ASN:HD22	0.59	2.04	12	2
1:A:164:HIS:HD1	1:A:164:HIS:C	0.59	2.04	11	1
1:A:104:CYS:N	1:A:105:PRO:HD2	0.59	2.12	9	3
1:A:139:ASP:OD1	1:A:140:ALA:N	0.59	2.35	1	2
1:A:110:ASP:OD1	1:A:111:GLU:N	0.59	2.36	5	2
1:A:179:ASP:OD1	1:A:181:CYS:N	0.59	2.31	1	1
1:A:242:ASP:OD1	1:A:243:GLU:N	0.59	2.35	4	3
1:A:110:ASP:OD1	1:A:110:ASP:N	0.59	2.33	3	1
1:A:177:ASN:C	1:A:177:ASN:ND2	0.58	2.60	15	1
1:A:242:ASP:OD2	1:A:245:ILE:N	0.58	2.36	1	1
1:A:225:ASN:C	1:A:227:ASP:H	0.58	2.06	8	4
1:A:249:MET:C	1:A:249:MET:SD	0.58	2.86	13	1
1:A:179:ASP:CG	1:A:180:GLY:H	0.58	2.06	10	2
1:A:88:PHE:C	1:A:89:THR:HG22	0.58	2.23	7	1
1:A:232:ILE:HG23	1:A:233:ASP:N	0.58	2.13	3	2
1:A:118:TYR:OH	1:A:134:LEU:CD1	0.58	2.52	7	1
1:A:176:ILE:CG1	1:A:177:ASN:N	0.58	2.66	5	2
1:A:213:GLU:CG	1:A:214:HIS:N	0.58	2.66	7	1
1:A:177:ASN:ND2	1:A:177:ASN:N	0.58	2.48	3	1
1:A:179:ASP:CG	1:A:181:CYS:SG	0.58	2.87	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:CYS:C	1:A:106:THR:H	0.58	2.06	5	2
1:A:245:ILE:HG22	1:A:246:MET:N	0.58	2.12	1	2
1:A:210:ALA:C	1:A:212:LEU:H	0.58	2.06	13	8
1:A:111:GLU:OE2	1:A:132:HIS:ND1	0.58	2.37	10	1
1:A:149:GLU:CD	1:A:150:ASP:N	0.58	2.62	12	1
1:A:224:ARG:C	1:A:225:ASN:ND2	0.57	2.62	8	1
1:A:187:MET:HE1	1:A:218:PHE:CE1	0.57	2.34	12	1
1:A:104:CYS:O	1:A:106:THR:HG22	0.57	2.00	3	1
1:A:182:ILE:HD12	1:A:230:VAL:HG22	0.57	1.75	15	7
1:A:179:ASP:N	1:A:179:ASP:OD1	0.57	2.35	14	1
1:A:222:MET:SD	1:A:230:VAL:CG2	0.57	2.92	10	3
1:A:225:ASN:CG	1:A:227:ASP:CG	0.57	2.72	2	2
1:A:224:ARG:CD	1:A:224:ARG:C	0.57	2.78	6	1
1:A:188:LEU:C	1:A:188:LEU:CD1	0.57	2.78	6	1
1:A:241:LYS:O	1:A:243:GLU:N	0.57	2.38	13	4
1:A:242:ASP:CG	1:A:243:GLU:N	0.57	2.62	1	1
1:A:93:LEU:O	1:A:93:LEU:HD23	0.57	1.99	8	4
1:A:182:ILE:O	1:A:229:VAL:HG13	0.57	2.00	15	1
1:A:160:ARG:C	1:A:160:ARG:NE	0.57	2.62	7	1
1:A:162:THR:OG1	1:A:163:VAL:N	0.57	2.33	7	2
1:A:108:LEU:C	1:A:108:LEU:CD1	0.57	2.75	10	1
1:A:231:THR:C	1:A:233:ASP:N	0.57	2.60	8	9
1:A:223:ASP:C	1:A:234:GLU:OE2	0.57	2.48	9	1
1:A:167:LEU:HD13	1:A:239:CYS:SG	0.56	2.40	15	6
1:A:83:GLN:C	1:A:83:GLN:NE2	0.56	2.62	15	1
1:A:227:ASP:OD1	1:A:227:ASP:C	0.56	2.49	13	7
1:A:217:ARG:CZ	1:A:220:GLN:HE21	0.56	2.14	6	1
1:A:179:ASP:C	1:A:181:CYS:H	0.56	2.09	11	1
1:A:138:PHE:C	1:A:140:ALA:H	0.56	2.08	6	1
1:A:253:GLU:C	1:A:255:VAL:N	0.56	2.63	9	2
1:A:108:LEU:CD1	1:A:147:HIS:NE2	0.56	2.68	14	1
1:A:174:TYR:CD1	1:A:174:TYR:N	0.56	2.71	1	3
1:A:122:PHE:C	1:A:124:GLN:N	0.56	2.64	2	3
1:A:197:MET:C	1:A:199:GLY:H	0.56	2.08	11	1
1:A:242:ASP:OD1	1:A:242:ASP:N	0.56	2.36	2	2
1:A:139:ASP:CG	1:A:140:ALA:N	0.56	2.63	14	1
1:A:231:THR:O	1:A:233:ASP:N	0.56	2.39	8	9
1:A:138:PHE:C	1:A:140:ALA:N	0.55	2.64	6	1
1:A:243:GLU:C	1:A:245:ILE:H	0.55	2.09	15	1
1:A:226:GLN:O	1:A:228:GLY:N	0.55	2.38	15	2
1:A:177:ASN:HD21	1:A:186:GLU:CD	0.55	2.08	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:GLN:NE2	1:A:83:GLN:O	0.55	2.39	15	1
1:A:255:VAL:HG23	1:A:256:ILE:H	0.55	1.60	4	1
1:A:110:ASP:N	1:A:110:ASP:OD1	0.55	2.39	1	2
1:A:182:ILE:HG22	1:A:183:THR:N	0.55	2.17	6	15
1:A:225:ASN:CG	1:A:227:ASP:OD2	0.55	2.49	1	3
1:A:240:GLN:C	1:A:242:ASP:H	0.55	2.08	15	2
1:A:254:ASN:HD22	1:A:254:ASN:N	0.55	1.97	10	1
1:A:103:GLU:OE2	1:A:113:THR:HG21	0.55	2.00	6	1
1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CD	0.55	2.64	3	1
1:A:106:THR:CG2	1:A:107:GLY:H	0.55	2.11	8	1
1:A:121:PHE:O	1:A:122:PHE:CG	0.55	2.60	8	1
1:A:176:ILE:CG2	1:A:177:ASN:ND2	0.55	2.70	7	1
1:A:218:PHE:CD1	1:A:218:PHE:C	0.55	2.84	6	10
1:A:129:THR:HG22	1:A:133:PHE:CZ	0.55	2.36	4	2
1:A:164:HIS:C	1:A:164:HIS:ND1	0.55	2.63	11	1
1:A:139:ASP:OD1	1:A:139:ASP:C	0.54	2.50	1	4
1:A:182:ILE:CG2	1:A:183:THR:N	0.54	2.70	6	15
1:A:218:PHE:CE2	1:A:246:MET:CE	0.54	2.88	6	4
1:A:79:LEU:N	1:A:79:LEU:CD2	0.54	2.67	7	1
1:A:225:ASN:O	1:A:225:ASN:ND2	0.54	2.40	13	1
1:A:227:ASP:CG	1:A:228:GLY:H	0.54	2.07	15	4
1:A:112:ASP:CG	1:A:113:THR:N	0.54	2.64	8	1
1:A:242:ASP:OD1	1:A:242:ASP:C	0.54	2.50	1	2
1:A:225:ASN:CG	1:A:234:GLU:OE2	0.54	2.51	6	5
1:A:138:PHE:C	1:A:139:ASP:OD1	0.54	2.51	4	1
1:A:89:THR:C	1:A:91:LYS:N	0.54	2.64	7	7
1:A:173:LEU:C	1:A:175:ASP:H	0.54	2.08	3	4
1:A:182:ILE:CG2	1:A:230:VAL:HG13	0.54	2.33	1	10
1:A:126:ASP:O	1:A:127:ALA:HB3	0.54	2.01	14	4
1:A:163:VAL:CG1	1:A:164:HIS:N	0.54	2.70	2	2
1:A:244:ASN:HD22	1:A:245:ILE:N	0.54	2.01	7	2
1:A:160:ARG:NH1	1:A:161:GLY:N	0.54	2.56	13	1
1:A:219:PHE:CE2	1:A:223:ASP:OD2	0.54	2.61	1	1
1:A:106:THR:CG2	1:A:107:GLY:N	0.54	2.71	8	2
1:A:245:ILE:HG23	1:A:246:MET:HE2	0.53	1.80	14	1
1:A:222:MET:SD	1:A:230:VAL:HG21	0.53	2.43	1	4
1:A:222:MET:SD	1:A:246:MET:HE3	0.53	2.44	2	1
1:A:110:ASP:C	1:A:112:ASP:N	0.53	2.65	5	4
1:A:231:THR:HG1	1:A:233:ASP:CG	0.53	2.11	3	1
1:A:242:ASP:C	1:A:243:GLU:OE1	0.53	2.51	4	1
1:A:89:THR:O	1:A:91:LYS:N	0.53	2.41	7	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:223:ASP:O	1:A:225:ASN:ND2	0.53	2.41	13	3
1:A:216:GLU:C	1:A:216:GLU:OE1	0.53	2.51	9	1
1:A:225:ASN:C	1:A:227:ASP:N	0.53	2.64	8	6
1:A:149:GLU:CG	1:A:150:ASP:N	0.53	2.71	12	1
1:A:155:LEU:C	1:A:155:LEU:HD13	0.53	2.29	14	1
1:A:157:ILE:HG21	1:A:169:TRP:CD1	0.53	2.38	13	5
1:A:111:GLU:OE2	1:A:132:HIS:CE1	0.53	2.62	4	2
1:A:223:ASP:O	1:A:225:ASN:N	0.53	2.42	13	3
1:A:225:ASN:CG	1:A:234:GLU:CD	0.53	2.77	6	2
1:A:183:THR:C	1:A:185:GLU:N	0.53	2.66	8	1
1:A:158:LEU:HD11	1:A:169:TRP:CZ3	0.53	2.38	13	1
1:A:85:GLN:C	1:A:86:THR:OG1	0.53	2.51	15	1
1:A:122:PHE:O	1:A:124:GLN:N	0.53	2.41	2	1
1:A:133:PHE:CE1	1:A:176:ILE:HD12	0.53	2.39	4	1
1:A:179:ASP:OD2	1:A:181:CYS:SG	0.53	2.67	14	3
1:A:212:LEU:N	1:A:212:LEU:HD22	0.53	2.18	6	1
1:A:177:ASN:CG	1:A:179:ASP:OD2	0.53	2.51	8	3
1:A:197:MET:O	1:A:199:GLY:N	0.53	2.42	12	3
1:A:85:GLN:O	1:A:87:LYS:N	0.53	2.42	14	3
1:A:83:GLN:NE2	1:A:88:PHE:O	0.53	2.41	13	2
1:A:193:SER:OG	1:A:194:ILE:N	0.53	2.41	7	2
1:A:225:ASN:ND2	1:A:225:ASN:N	0.53	2.55	2	2
1:A:242:ASP:O	1:A:243:GLU:C	0.53	2.51	6	6
1:A:162:THR:HG23	1:A:163:VAL:N	0.53	2.18	7	1
1:A:147:HIS:ND1	1:A:147:HIS:N	0.53	2.56	11	1
1:A:108:LEU:HD22	1:A:108:LEU:O	0.52	2.04	4	1
1:A:139:ASP:CG	1:A:143:ASN:ND2	0.52	2.67	6	1
1:A:148:PHE:CE2	1:A:152:VAL:HG21	0.52	2.39	8	2
1:A:187:MET:HG2	1:A:215:VAL:HG22	0.52	1.79	9	1
1:A:96:LEU:HD21	1:A:155:LEU:HG	0.52	1.80	12	1
1:A:179:ASP:OD2	1:A:181:CYS:N	0.52	2.39	5	1
1:A:149:GLU:OE1	1:A:149:GLU:C	0.52	2.52	6	1
1:A:222:MET:O	1:A:224:ARG:N	0.52	2.42	7	4
1:A:242:ASP:O	1:A:244:ASN:N	0.52	2.42	12	3
1:A:243:GLU:H	1:A:243:GLU:CD	0.52	2.12	6	1
1:A:121:PHE:CG	1:A:121:PHE:O	0.52	2.61	1	1
1:A:253:GLU:O	1:A:255:VAL:N	0.52	2.43	9	1
1:A:210:ALA:O	1:A:212:LEU:N	0.52	2.42	13	2
1:A:110:ASP:O	1:A:112:ASP:N	0.52	2.42	5	2
1:A:256:ILE:O	1:A:256:ILE:HG23	0.52	2.03	8	2
1:A:198:MET:SD	1:A:198:MET:C	0.52	2.93	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:142:GLY:O	1:A:144:GLY:N	0.52	2.42	8	1
1:A:248:SER:OG	1:A:249:MET:N	0.52	2.43	10	1
1:A:143:ASN:OD1	1:A:144:GLY:N	0.52	2.42	1	1
1:A:173:LEU:O	1:A:175:ASP:N	0.52	2.42	1	6
1:A:105:PRO:C	1:A:106:THR:OG1	0.52	2.51	2	1
1:A:224:ARG:C	1:A:226:GLN:H	0.52	2.12	6	1
1:A:183:THR:HG22	1:A:186:GLU:OE1	0.52	2.05	8	1
1:A:222:MET:SD	1:A:234:GLU:O	0.52	2.68	5	4
1:A:156:SER:OG	1:A:160:ARG:NH1	0.52	2.43	6	1
1:A:162:THR:C	1:A:165:GLU:OE2	0.51	2.53	14	1
1:A:140:ALA:C	1:A:141:ASP:CG	0.51	2.78	5	1
1:A:256:ILE:HG22	1:A:256:ILE:O	0.51	2.05	5	1
1:A:177:ASN:OD1	1:A:177:ASN:N	0.51	2.42	12	2
1:A:179:ASP:OD1	1:A:179:ASP:C	0.51	2.53	1	2
1:A:94:GLN:O	1:A:94:GLN:NE2	0.51	2.44	9	1
1:A:225:ASN:N	1:A:225:ASN:ND2	0.51	2.52	13	1
1:A:135:PHE:C	1:A:135:PHE:CD1	0.51	2.88	4	8
1:A:83:GLN:O	1:A:87:LYS:N	0.51	2.42	2	1
1:A:85:GLN:O	1:A:85:GLN:NE2	0.51	2.44	2	1
1:A:82:LEU:CD1	1:A:86:THR:OG1	0.51	2.59	4	2
1:A:162:THR:CG2	1:A:163:VAL:N	0.51	2.73	11	2
1:A:224:ARG:NH2	1:A:237:GLU:OE2	0.51	2.40	7	1
1:A:177:ASN:O	1:A:177:ASN:ND2	0.51	2.43	4	1
1:A:138:PHE:O	1:A:140:ALA:N	0.51	2.43	6	1
1:A:183:THR:O	1:A:185:GLU:N	0.51	2.43	8	1
1:A:243:GLU:OE2	1:A:247:ASN:ND2	0.51	2.43	12	1
1:A:222:MET:O	1:A:223:ASP:C	0.51	2.54	13	15
1:A:87:LYS:O	1:A:88:PHE:CD2	0.51	2.64	4	2
1:A:249:MET:SD	1:A:249:MET:O	0.51	2.69	13	1
1:A:219:PHE:CZ	1:A:223:ASP:OD1	0.50	2.64	10	2
1:A:167:LEU:CD1	1:A:239:CYS:SG	0.50	3.00	10	3
1:A:213:GLU:CG	1:A:214:HIS:H	0.50	2.19	7	1
1:A:249:MET:SD	1:A:253:GLU:OE2	0.50	2.69	10	1
1:A:171:PHE:CZ	1:A:232:ILE:N	0.50	2.79	6	1
1:A:106:THR:O	1:A:108:LEU:N	0.50	2.43	8	1
1:A:158:LEU:HD12	1:A:158:LEU:N	0.50	2.21	15	1
1:A:109:VAL:CG1	1:A:146:ILE:HD12	0.50	2.36	2	4
1:A:197:MET:C	1:A:199:GLY:N	0.50	2.65	11	1
1:A:225:ASN:O	1:A:227:ASP:N	0.50	2.45	8	3
1:A:176:ILE:HG23	1:A:177:ASN:ND2	0.50	2.21	7	1
1:A:172:ASN:C	1:A:172:ASN:ND2	0.50	2.70	12	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:LEU:HD23	1:A:86:THR:OG1	0.50	2.06	15	1
1:A:104:CYS:O	1:A:106:THR:N	0.50	2.45	5	2
1:A:254:ASN:O	1:A:255:VAL:C	0.50	2.55	2	2
1:A:225:ASN:C	1:A:227:ASP:OD1	0.50	2.55	4	1
1:A:238:THR:CG2	1:A:246:MET:SD	0.50	2.99	9	1
1:A:226:GLN:C	1:A:227:ASP:CG	0.50	2.79	15	1
1:A:157:ILE:O	1:A:166:LYS:NZ	0.50	2.44	8	1
1:A:156:SER:O	1:A:160:ARG:N	0.50	2.45	10	1
1:A:143:ASN:OD1	1:A:143:ASN:N	0.50	2.45	11	1
1:A:223:ASP:CA	1:A:234:GLU:OE1	0.50	2.60	14	1
1:A:110:ASP:CG	1:A:113:THR:OG1	0.50	2.55	1	1
1:A:138:PHE:C	1:A:139:ASP:CG	0.50	2.80	2	1
1:A:85:GLN:C	1:A:87:LYS:N	0.50	2.69	7	1
1:A:242:ASP:OD1	1:A:244:ASN:ND2	0.50	2.44	11	1
1:A:178:LYS:CB	1:A:178:LYS:NZ	0.50	2.75	12	1
1:A:123:PRO:O	1:A:124:GLN:CB	0.49	2.59	2	1
1:A:249:MET:CG	1:A:253:GLU:OE2	0.49	2.60	10	1
1:A:217:ARG:CZ	1:A:220:GLN:NE2	0.49	2.75	6	1
1:A:218:PHE:CE1	1:A:222:MET:HE3	0.49	2.43	10	3
1:A:125:GLY:O	1:A:127:ALA:N	0.49	2.43	5	2
1:A:235:PHE:C	1:A:235:PHE:CD1	0.49	2.90	4	1
1:A:126:ASP:C	1:A:128:THR:H	0.49	2.15	6	2
1:A:165:GLU:N	1:A:165:GLU:OE1	0.49	2.42	14	1
1:A:167:LEU:HD22	1:A:236:LEU:HD12	0.49	1.83	1	1
1:A:127:ALA:O	1:A:131:ALA:N	0.49	2.43	3	2
1:A:168:LYS:O	1:A:172:ASN:ND2	0.49	2.46	11	1
1:A:241:LYS:C	1:A:243:GLU:N	0.49	2.71	13	2
1:A:115:LYS:NZ	1:A:128:THR:OG1	0.49	2.33	3	1
1:A:182:ILE:N	1:A:230:VAL:O	0.49	2.43	15	2
1:A:240:GLN:C	1:A:242:ASP:N	0.49	2.67	15	1
1:A:159:LEU:C	1:A:159:LEU:CD2	0.49	2.86	1	2
1:A:222:MET:C	1:A:224:ARG:N	0.49	2.69	9	1
1:A:143:ASN:C	1:A:145:ALA:N	0.49	2.70	13	1
1:A:176:ILE:CD1	1:A:176:ILE:N	0.49	2.68	14	1
1:A:236:LEU:HD12	1:A:240:GLN:HE21	0.49	1.68	7	1
1:A:91:LYS:HG3	1:A:92:GLU:N	0.49	2.23	11	1
1:A:236:LEU:O	1:A:240:GLN:CG	0.49	2.61	11	1
1:A:104:CYS:C	1:A:106:THR:N	0.49	2.71	5	2
1:A:108:LEU:C	1:A:108:LEU:CD2	0.49	2.80	4	1
1:A:247:ASN:C	1:A:247:ASN:HD22	0.49	2.15	8	1
1:A:218:PHE:CE1	1:A:246:MET:HE1	0.48	2.43	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:239:CYS:SG	1:A:246:MET:CB	0.48	3.01	4	2
1:A:170:ALA:O	1:A:174:TYR:CD2	0.48	2.66	4	2
1:A:225:ASN:HD21	1:A:228:GLY:N	0.48	2.06	11	1
1:A:157:ILE:HD13	1:A:169:TRP:CD1	0.48	2.43	2	1
1:A:225:ASN:CG	1:A:227:ASP:OD1	0.48	2.56	2	1
1:A:132:HIS:ND1	1:A:132:HIS:C	0.48	2.68	5	1
1:A:124:GLN:NE2	1:A:125:GLY:H	0.48	2.05	6	1
1:A:256:ILE:O	1:A:256:ILE:CG2	0.48	2.61	8	1
1:A:109:VAL:CG2	1:A:110:ASP:N	0.48	2.75	3	9
1:A:167:LEU:HD22	1:A:236:LEU:CD1	0.48	2.39	1	1
1:A:173:LEU:C	1:A:175:ASP:N	0.48	2.71	3	3
1:A:171:PHE:CE1	1:A:175:ASP:OD2	0.48	2.66	3	1
1:A:211:PRO:O	1:A:213:GLU:N	0.48	2.47	8	2
1:A:106:THR:C	1:A:108:LEU:H	0.48	2.16	9	1
1:A:224:ARG:HE	1:A:225:ASN:N	0.48	2.07	12	1
1:A:242:ASP:OD1	1:A:247:ASN:ND2	0.48	2.45	1	1
1:A:167:LEU:CD2	1:A:239:CYS:SG	0.48	3.01	3	1
1:A:243:GLU:N	1:A:243:GLU:OE1	0.48	2.47	4	1
1:A:210:ALA:C	1:A:212:LEU:N	0.48	2.72	13	7
1:A:253:GLU:C	1:A:255:VAL:H	0.48	2.15	9	1
1:A:225:ASN:ND2	1:A:227:ASP:H	0.48	2.06	11	1
1:A:126:ASP:O	1:A:128:THR:N	0.48	2.45	13	1
1:A:177:ASN:C	1:A:177:ASN:HD22	0.48	2.16	15	1
1:A:177:ASN:CG	1:A:178:LYS:N	0.48	2.67	15	1
1:A:177:ASN:ND2	1:A:177:ASN:H	0.48	2.06	1	2
1:A:231:THR:O	1:A:232:ILE:C	0.48	2.56	5	14
1:A:167:LEU:HD22	1:A:239:CYS:SG	0.48	2.49	5	1
1:A:227:ASP:CG	1:A:228:GLY:N	0.48	2.72	11	4
1:A:244:ASN:N	1:A:244:ASN:ND2	0.48	2.61	6	1
1:A:255:VAL:O	1:A:256:ILE:C	0.48	2.57	6	2
1:A:135:PHE:CD1	1:A:135:PHE:O	0.48	2.67	9	1
1:A:150:ASP:N	1:A:150:ASP:OD1	0.48	2.47	9	1
1:A:143:ASN:N	1:A:143:ASN:OD1	0.48	2.47	10	1
1:A:80:ASP:C	1:A:80:ASP:OD1	0.47	2.57	7	1
1:A:218:PHE:CE2	1:A:246:MET:HE2	0.47	2.44	12	2
1:A:225:ASN:HD22	1:A:234:GLU:CD	0.47	2.17	12	1
1:A:226:GLN:C	1:A:228:GLY:N	0.47	2.69	1	1
1:A:88:PHE:O	1:A:89:THR:C	0.47	2.57	9	3
1:A:125:GLY:O	1:A:126:ASP:CB	0.47	2.60	2	1
1:A:224:ARG:O	1:A:225:ASN:C	0.47	2.58	3	3
1:A:103:GLU:O	1:A:104:CYS:CB	0.47	2.61	5	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:ASP:OD1	1:A:112:ASP:C	0.47	2.56	8	1
1:A:111:GLU:OE2	1:A:132:HIS:CG	0.47	2.67	9	1
1:A:256:ILE:OXT	1:A:256:ILE:HG23	0.47	2.10	10	2
1:A:213:GLU:OE1	1:A:213:GLU:C	0.47	2.58	12	1
1:A:191:MET:SD	1:A:215:VAL:CG2	0.47	3.01	14	1
1:A:109:VAL:HG13	1:A:146:ILE:HD12	0.47	1.84	3	1
1:A:177:ASN:O	1:A:178:LYS:CB	0.47	2.62	4	1
1:A:187:MET:HG3	1:A:215:VAL:HG22	0.47	1.86	6	1
1:A:210:ALA:N	1:A:211:PRO:HD3	0.47	2.24	1	5
1:A:162:THR:C	1:A:164:HIS:N	0.47	2.72	10	2
1:A:162:THR:HG22	1:A:163:VAL:H	0.47	1.70	11	1
1:A:160:ARG:HH11	1:A:161:GLY:H	0.47	1.53	13	1
1:A:160:ARG:NH1	1:A:161:GLY:C	0.47	2.72	13	1
1:A:127:ALA:O	1:A:131:ALA:HB2	0.47	2.08	1	2
1:A:176:ILE:O	1:A:177:ASN:CG	0.47	2.58	7	1
1:A:82:LEU:CD2	1:A:86:THR:OG1	0.47	2.62	15	1
1:A:188:LEU:HD13	1:A:188:LEU:O	0.47	2.08	6	4
1:A:252:PHE:CD1	1:A:252:PHE:O	0.47	2.68	11	1
1:A:149:GLU:C	1:A:149:GLU:OE2	0.47	2.58	13	1
1:A:108:LEU:HD12	1:A:108:LEU:C	0.47	2.35	1	1
1:A:111:GLU:OE2	1:A:112:ASP:OD1	0.47	2.33	3	1
1:A:176:ILE:HG23	1:A:177:ASN:N	0.47	2.24	7	1
1:A:104:CYS:H	1:A:105:PRO:CD	0.47	2.20	9	1
1:A:254:ASN:N	1:A:254:ASN:ND2	0.47	2.63	10	1
1:A:232:ILE:HD12	1:A:232:ILE:H	0.47	1.70	4	1
1:A:91:LYS:CG	1:A:92:GLU:H	0.47	2.23	11	1
1:A:142:GLY:O	1:A:143:ASN:CB	0.47	2.62	2	1
1:A:103:GLU:O	1:A:104:CYS:SG	0.47	2.73	5	2
1:A:176:ILE:CG2	1:A:177:ASN:HD22	0.47	2.23	7	1
1:A:245:ILE:HG22	1:A:246:MET:H	0.47	1.70	10	1
1:A:224:ARG:NE	1:A:224:ARG:CA	0.47	2.76	13	2
1:A:197:MET:CE	1:A:256:ILE:CD1	0.46	2.93	2	1
1:A:101:LYS:O	1:A:104:CYS:N	0.46	2.42	6	1
1:A:126:ASP:OD1	1:A:126:ASP:N	0.46	2.48	13	1
1:A:173:LEU:C	1:A:173:LEU:HD23	0.46	2.34	7	1
1:A:140:ALA:O	1:A:142:GLY:N	0.46	2.49	13	1
1:A:127:ALA:CB	1:A:197:MET:SD	0.46	3.04	14	1
1:A:244:ASN:ND2	1:A:244:ASN:C	0.46	2.74	1	2
1:A:211:PRO:C	1:A:213:GLU:N	0.46	2.71	8	2
1:A:231:THR:C	1:A:233:ASP:H	0.46	2.16	8	2
1:A:158:LEU:HD22	1:A:158:LEU:N	0.46	2.26	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:226:GLN:O	1:A:227:ASP:CG	0.46	2.59	15	1
1:A:109:VAL:CG1	1:A:146:ILE:CD1	0.46	2.93	2	1
1:A:104:CYS:CB	1:A:105:PRO:CD	0.46	2.94	14	1
1:A:167:LEU:CD2	1:A:236:LEU:HD12	0.46	2.40	1	1
1:A:226:GLN:O	1:A:227:ASP:C	0.46	2.59	15	2
1:A:223:ASP:OD1	1:A:223:ASP:C	0.46	2.55	7	1
1:A:242:ASP:C	1:A:243:GLU:CD	0.46	2.84	7	1
1:A:130:TYR:OH	1:A:253:GLU:OE1	0.46	2.32	8	1
1:A:111:GLU:CD	1:A:111:GLU:C	0.46	2.83	15	2
1:A:143:ASN:C	1:A:145:ALA:H	0.46	2.19	13	1
1:A:245:ILE:C	1:A:245:ILE:CD1	0.46	2.88	14	1
1:A:89:THR:O	1:A:90:LYS:C	0.46	2.57	8	12
1:A:110:ASP:O	1:A:111:GLU:C	0.46	2.59	9	5
1:A:118:TYR:CE1	1:A:134:LEU:HD13	0.46	2.46	10	3
1:A:223:ASP:O	1:A:224:ARG:CB	0.46	2.64	14	2
1:A:139:ASP:OD1	1:A:143:ASN:ND2	0.46	2.48	6	1
1:A:213:GLU:HG3	1:A:214:HIS:N	0.46	2.26	7	2
1:A:86:THR:O	1:A:88:PHE:N	0.46	2.49	10	1
1:A:140:ALA:C	1:A:141:ASP:OD2	0.46	2.59	5	1
1:A:224:ARG:C	1:A:226:GLN:N	0.46	2.74	6	1
1:A:244:ASN:ND2	1:A:245:ILE:N	0.46	2.63	7	1
1:A:255:VAL:CG1	1:A:256:ILE:N	0.46	2.78	13	1
1:A:126:ASP:OD2	1:A:196:ASP:OD1	0.46	2.33	2	1
1:A:156:SER:OG	1:A:160:ARG:CZ	0.46	2.64	6	1
1:A:224:ARG:O	1:A:225:ASN:ND2	0.46	2.49	10	1
1:A:185:GLU:O	1:A:188:LEU:N	0.46	2.46	15	1
1:A:255:VAL:HG23	1:A:255:VAL:O	0.46	2.10	15	1
1:A:122:PHE:N	1:A:123:PRO:HD3	0.45	2.26	9	2
1:A:178:LYS:O	1:A:179:ASP:CG	0.45	2.58	1	1
1:A:93:LEU:HD23	1:A:93:LEU:C	0.45	2.36	8	2
1:A:139:ASP:OD1	1:A:139:ASP:N	0.45	2.48	4	1
1:A:134:LEU:C	1:A:134:LEU:HD13	0.45	2.36	6	1
1:A:160:ARG:CD	1:A:160:ARG:C	0.45	2.89	6	1
1:A:93:LEU:HD13	1:A:93:LEU:O	0.45	2.11	1	1
1:A:122:PHE:CG	1:A:123:PRO:HD2	0.45	2.46	2	1
1:A:176:ILE:HG13	1:A:177:ASN:H	0.45	1.71	7	1
1:A:255:VAL:O	1:A:255:VAL:CG2	0.45	2.64	14	1
1:A:251:LEU:N	1:A:251:LEU:CD2	0.45	2.80	2	1
1:A:225:ASN:C	1:A:225:ASN:ND2	0.45	2.74	11	2
1:A:108:LEU:HD23	1:A:147:HIS:CG	0.45	2.46	7	1
1:A:104:CYS:N	1:A:105:PRO:HD3	0.45	2.27	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:LEU:C	1:A:82:LEU:HD13	0.45	2.37	10	1
1:A:115:LYS:CD	1:A:115:LYS:C	0.45	2.89	10	1
1:A:87:LYS:HG3	1:A:88:PHE:N	0.45	2.26	11	1
1:A:177:ASN:O	1:A:177:ASN:CG	0.45	2.59	4	1
1:A:110:ASP:C	1:A:112:ASP:H	0.45	2.20	5	2
1:A:110:ASP:CG	1:A:111:GLU:N	0.45	2.75	5	1
1:A:103:GLU:O	1:A:104:CYS:C	0.45	2.58	14	2
1:A:82:LEU:HD13	1:A:82:LEU:O	0.45	2.10	10	1
1:A:154:GLY:O	1:A:157:ILE:N	0.45	2.50	5	3
1:A:176:ILE:HG23	1:A:177:ASN:HD22	0.45	1.72	7	1
1:A:178:LYS:O	1:A:179:ASP:C	0.45	2.59	10	2
1:A:183:THR:HG22	1:A:184:LYS:N	0.45	2.26	10	1
1:A:249:MET:SD	1:A:250:GLN:N	0.45	2.89	11	1
1:A:173:LEU:C	1:A:173:LEU:CD2	0.45	2.89	7	1
1:A:255:VAL:HG13	1:A:256:ILE:N	0.45	2.25	13	1
1:A:83:GLN:HG3	1:A:84:ALA:N	0.45	2.26	15	1
1:A:227:ASP:O	1:A:229:VAL:N	0.45	2.48	1	3
1:A:83:GLN:C	1:A:83:GLN:OE1	0.45	2.60	7	1
1:A:89:THR:C	1:A:91:LYS:H	0.45	2.20	7	1
1:A:121:PHE:O	1:A:122:PHE:CD2	0.45	2.70	8	1
1:A:86:THR:O	1:A:87:LYS:C	0.45	2.59	14	6
1:A:226:GLN:CD	1:A:226:GLN:H	0.45	2.19	3	1
1:A:94:GLN:O	1:A:98:ARG:N	0.45	2.42	8	1
1:A:253:GLU:C	1:A:253:GLU:CD	0.45	2.85	9	1
1:A:167:LEU:CD2	1:A:236:LEU:CD1	0.44	2.95	1	1
1:A:158:LEU:N	1:A:158:LEU:CD1	0.44	2.80	15	2
1:A:132:HIS:ND1	1:A:132:HIS:O	0.44	2.51	5	1
1:A:211:PRO:O	1:A:212:LEU:C	0.44	2.60	8	1
1:A:222:MET:SD	1:A:234:GLU:C	0.44	3.01	14	1
1:A:188:LEU:CD1	1:A:188:LEU:C	0.44	2.91	15	1
1:A:240:GLN:O	1:A:242:ASP:N	0.44	2.50	15	1
1:A:93:LEU:C	1:A:93:LEU:CD1	0.44	2.90	1	1
1:A:154:GLY:O	1:A:155:LEU:C	0.44	2.60	15	8
1:A:220:GLN:CD	1:A:220:GLN:O	0.44	2.61	3	2
1:A:243:GLU:N	1:A:243:GLU:CD	0.44	2.75	4	2
1:A:241:LYS:O	1:A:242:ASP:C	0.44	2.60	6	1
1:A:212:LEU:O	1:A:213:GLU:C	0.44	2.60	10	4
1:A:105:PRO:O	1:A:106:THR:CB	0.44	2.65	2	1
1:A:232:ILE:O	1:A:236:LEU:N	0.44	2.47	3	1
1:A:87:LYS:N	1:A:160:ARG:HH12	0.44	2.10	11	1
1:A:79:LEU:O	1:A:80:ASP:C	0.44	2.61	13	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:240:GLN:O	1:A:241:LYS:C	0.44	2.60	5	4
1:A:162:THR:HG23	1:A:164:HIS:H	0.44	1.72	7	1
1:A:88:PHE:CD2	1:A:89:THR:HG22	0.44	2.48	3	1
1:A:197:MET:O	1:A:198:MET:C	0.44	2.61	14	5
1:A:142:GLY:C	1:A:143:ASN:CG	0.44	2.85	6	1
1:A:159:LEU:O	1:A:161:GLY:N	0.44	2.49	7	1
1:A:241:LYS:O	1:A:242:ASP:CB	0.44	2.65	14	1
1:A:223:ASP:CG	1:A:228:GLY:O	0.44	2.61	5	2
1:A:239:CYS:O	1:A:242:ASP:CG	0.44	2.61	2	1
1:A:233:ASP:CG	1:A:234:GLU:N	0.44	2.76	3	1
1:A:214:HIS:ND1	1:A:214:HIS:C	0.44	2.76	9	1
1:A:116:LEU:HD23	1:A:116:LEU:C	0.44	2.37	10	1
1:A:227:ASP:C	1:A:229:VAL:H	0.44	2.21	7	2
1:A:121:PHE:CD1	1:A:121:PHE:C	0.44	2.96	6	1
1:A:233:ASP:C	1:A:235:PHE:N	0.44	2.75	6	1
1:A:176:ILE:O	1:A:177:ASN:C	0.44	2.60	7	1
1:A:255:VAL:O	1:A:255:VAL:CG1	0.44	2.65	7	1
1:A:149:GLU:O	1:A:152:VAL:N	0.44	2.51	14	1
1:A:166:LYS:NZ	1:A:250:GLN:HE22	0.44	2.11	14	1
1:A:225:ASN:OD1	1:A:225:ASN:N	0.43	2.50	1	2
1:A:148:PHE:O	1:A:149:GLU:C	0.43	2.61	2	1
1:A:109:VAL:HG22	1:A:110:ASP:N	0.43	2.27	3	2
1:A:231:THR:OG1	1:A:233:ASP:CG	0.43	2.60	3	1
1:A:179:ASP:OD1	1:A:179:ASP:N	0.43	2.50	4	1
1:A:127:ALA:O	1:A:128:THR:C	0.43	2.61	5	1
1:A:120:GLN:O	1:A:120:GLN:CD	0.43	2.61	7	1
1:A:242:ASP:C	1:A:243:GLU:CG	0.43	2.91	14	2
1:A:177:ASN:OD1	1:A:179:ASP:CG	0.43	2.60	15	1
1:A:220:GLN:CD	1:A:220:GLN:C	0.43	2.86	3	2
1:A:244:ASN:N	1:A:244:ASN:OD1	0.43	2.50	9	1
1:A:245:ILE:HG23	1:A:246:MET:SD	0.43	2.53	9	1
1:A:222:MET:HG3	1:A:223:ASP:N	0.43	2.27	13	1
1:A:225:ASN:CG	1:A:234:GLU:OE1	0.43	2.61	13	1
1:A:184:LYS:HG3	1:A:219:PHE:CE2	0.43	2.49	3	1
1:A:256:ILE:CD1	1:A:256:ILE:H	0.43	2.26	3	1
1:A:160:ARG:HE	1:A:160:ARG:CA	0.43	2.27	7	1
1:A:221:LYS:NZ	1:A:221:LYS:O	0.43	2.52	2	1
1:A:127:ALA:O	1:A:131:ALA:CB	0.43	2.66	3	1
1:A:126:ASP:C	1:A:128:THR:N	0.43	2.75	12	2
1:A:98:ARG:CD	1:A:98:ARG:C	0.43	2.91	8	1
1:A:223:ASP:CG	1:A:223:ASP:O	0.43	2.60	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:210:ALA:N	1:A:211:PRO:CD	0.43	2.81	1	3
1:A:138:PHE:O	1:A:139:ASP:CG	0.43	2.61	10	2
1:A:162:THR:O	1:A:164:HIS:N	0.43	2.52	4	2
1:A:135:PHE:CE2	1:A:146:ILE:HG12	0.43	2.49	15	3
1:A:183:THR:C	1:A:185:GLU:H	0.43	2.21	8	1
1:A:255:VAL:HG12	1:A:256:ILE:N	0.43	2.28	9	1
1:A:111:GLU:CD	1:A:111:GLU:O	0.43	2.61	13	1
1:A:82:LEU:O	1:A:82:LEU:HD13	0.43	2.14	2	2
1:A:111:GLU:CD	1:A:111:GLU:H	0.43	2.22	3	1
1:A:225:ASN:OD1	1:A:234:GLU:OE2	0.43	2.37	5	1
1:A:178:LYS:C	1:A:179:ASP:OD1	0.43	2.61	11	1
1:A:171:PHE:CD1	1:A:171:PHE:O	0.43	2.72	3	3
1:A:177:ASN:O	1:A:179:ASP:N	0.43	2.52	5	1
1:A:156:SER:O	1:A:160:ARG:NE	0.43	2.44	6	1
1:A:93:LEU:O	1:A:94:GLN:C	0.43	2.62	7	2
1:A:174:TYR:N	1:A:174:TYR:CD1	0.43	2.86	7	2
1:A:225:ASN:ND2	1:A:227:ASP:N	0.43	2.67	11	1
1:A:218:PHE:CZ	1:A:222:MET:HE2	0.43	2.48	12	2
1:A:108:LEU:HD12	1:A:147:HIS:CE1	0.43	2.48	14	1
1:A:162:THR:O	1:A:163:VAL:C	0.43	2.61	10	2
1:A:124:GLN:O	1:A:125:GLY:C	0.43	2.61	8	1
1:A:219:PHE:CG	1:A:223:ASP:OD2	0.43	2.72	10	1
1:A:93:LEU:O	1:A:97:TYR:N	0.43	2.43	14	1
1:A:87:LYS:O	1:A:88:PHE:C	0.43	2.62	7	1
1:A:112:ASP:OD1	1:A:113:THR:N	0.43	2.52	8	1
1:A:253:GLU:O	1:A:254:ASN:C	0.42	2.61	8	2
1:A:223:ASP:OD1	1:A:224:ARG:N	0.42	2.52	3	1
1:A:225:ASN:O	1:A:226:GLN:C	0.42	2.60	3	2
1:A:108:LEU:HD12	1:A:147:HIS:CD2	0.42	2.48	14	2
1:A:187:MET:CG	1:A:215:VAL:HG13	0.42	2.45	5	1
1:A:187:MET:CE	1:A:218:PHE:CE1	0.42	3.02	11	2
1:A:176:ILE:HG22	1:A:177:ASN:N	0.42	2.29	9	1
1:A:89:THR:HG23	1:A:92:GLU:HB2	0.42	1.90	11	1
1:A:152:VAL:CG1	1:A:153:VAL:N	0.42	2.82	1	1
1:A:235:PHE:CD1	1:A:235:PHE:C	0.42	2.97	2	1
1:A:239:CYS:SG	1:A:246:MET:HB3	0.42	2.54	4	2
1:A:194:ILE:HG21	1:A:252:PHE:HE2	0.42	1.75	4	1
1:A:88:PHE:O	1:A:89:THR:CB	0.42	2.67	7	1
1:A:231:THR:HG22	1:A:232:ILE:N	0.42	2.28	8	1
1:A:141:ASP:C	1:A:143:ASN:H	0.42	2.21	9	1
1:A:155:LEU:C	1:A:155:LEU:CD1	0.42	2.92	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:147:HIS:CD2	1:A:147:HIS:N	0.42	2.87	3	1
1:A:147:HIS:CD2	1:A:148:PHE:N	0.42	2.83	7	1
1:A:177:ASN:ND2	1:A:179:ASP:CG	0.42	2.78	8	1
1:A:254:ASN:C	1:A:254:ASN:ND2	0.42	2.73	8	1
1:A:216:GLU:CD	1:A:216:GLU:C	0.42	2.86	10	1
1:A:179:ASP:C	1:A:181:CYS:N	0.42	2.74	11	1
1:A:178:LYS:NZ	1:A:178:LYS:HB2	0.42	2.30	12	1
1:A:210:ALA:HB1	1:A:211:PRO:HD2	0.42	1.91	14	1
1:A:113:THR:O	1:A:114:PHE:C	0.42	2.62	1	2
1:A:134:LEU:O	1:A:137:ALA:HB3	0.42	2.14	1	1
1:A:93:LEU:C	1:A:93:LEU:CD2	0.42	2.92	8	1
1:A:123:PRO:O	1:A:124:GLN:C	0.42	2.62	10	1
1:A:183:THR:CG2	1:A:184:LYS:N	0.42	2.82	10	1
1:A:87:LYS:CG	1:A:88:PHE:N	0.42	2.82	11	1
1:A:222:MET:CG	1:A:223:ASP:H	0.42	2.28	13	1
1:A:83:GLN:CG	1:A:84:ALA:N	0.42	2.81	15	1
1:A:171:PHE:CE2	1:A:232:ILE:HA	0.42	2.50	15	1
1:A:184:LYS:HG3	1:A:185:GLU:N	0.42	2.29	4	2
1:A:244:ASN:O	1:A:245:ILE:C	0.42	2.61	6	1
1:A:149:GLU:O	1:A:150:ASP:C	0.42	2.63	14	2
1:A:83:GLN:NE2	1:A:89:THR:HA	0.42	2.29	15	1
1:A:236:LEU:O	1:A:237:GLU:C	0.42	2.61	1	1
1:A:225:ASN:OD1	1:A:234:GLU:CD	0.42	2.63	6	1
1:A:176:ILE:N	1:A:176:ILE:HD13	0.42	2.30	8	2
1:A:105:PRO:C	1:A:106:THR:CG2	0.42	2.92	9	1
1:A:82:LEU:HD21	1:A:86:THR:OG1	0.42	2.15	14	1
1:A:146:ILE:C	1:A:147:HIS:ND1	0.42	2.77	4	1
1:A:176:ILE:HG13	1:A:177:ASN:N	0.42	2.27	5	1
1:A:245:ILE:HG22	1:A:246:MET:SD	0.42	2.55	9	1
1:A:173:LEU:HD13	1:A:173:LEU:O	0.42	2.11	13	1
1:A:111:GLU:HB2	1:A:135:PHE:CD2	0.42	2.49	14	1
1:A:105:PRO:C	1:A:106:THR:HG1	0.42	2.23	2	1
1:A:244:ASN:ND2	1:A:244:ASN:O	0.42	2.53	2	1
1:A:183:THR:OG1	1:A:229:VAL:HG22	0.42	2.14	7	1
1:A:162:THR:CG2	1:A:163:VAL:H	0.42	2.28	11	1
1:A:198:MET:O	1:A:199:GLY:C	0.41	2.62	5	2
1:A:149:GLU:C	1:A:151:PHE:N	0.41	2.75	1	2
1:A:223:ASP:OD2	1:A:228:GLY:O	0.41	2.38	1	1
1:A:82:LEU:O	1:A:83:GLN:C	0.41	2.63	6	1
1:A:173:LEU:HD23	1:A:173:LEU:O	0.41	2.15	7	1
1:A:120:GLN:O	1:A:121:PHE:C	0.41	2.61	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:221:LYS:NZ	1:A:241:LYS:NZ	0.41	2.68	14	1
1:A:133:PHE:CD1	1:A:176:ILE:HD12	0.41	2.50	15	1
1:A:218:PHE:CZ	1:A:222:MET:CE	0.41	3.02	15	1
1:A:183:THR:HG23	1:A:186:GLU:H	0.41	1.75	1	1
1:A:182:ILE:HB	1:A:230:VAL:CG1	0.41	2.45	9	3
1:A:135:PHE:O	1:A:136:ASN:C	0.41	2.62	14	1
1:A:160:ARG:O	1:A:160:ARG:CD	0.41	2.68	1	1
1:A:226:GLN:N	1:A:226:GLN:OE1	0.41	2.53	2	1
1:A:254:ASN:C	1:A:255:VAL:CG2	0.41	2.93	2	1
1:A:218:PHE:CZ	1:A:246:MET:HE2	0.41	2.51	3	2
1:A:227:ASP:OD2	1:A:229:VAL:HG23	0.41	2.14	3	1
1:A:87:LYS:O	1:A:88:PHE:CG	0.41	2.74	4	1
1:A:227:ASP:OD2	1:A:229:VAL:CG2	0.41	2.68	6	1
1:A:83:GLN:O	1:A:83:GLN:CD	0.41	2.64	11	1
1:A:223:ASP:C	1:A:223:ASP:OD1	0.41	2.63	2	1
1:A:138:PHE:O	1:A:139:ASP:C	0.41	2.62	7	2
1:A:79:LEU:O	1:A:82:LEU:N	0.41	2.54	8	1
1:A:219:PHE:CZ	1:A:223:ASP:OD2	0.41	2.72	10	1
1:A:108:LEU:HG	1:A:109:VAL:N	0.41	2.30	14	1
1:A:171:PHE:CD1	1:A:171:PHE:C	0.41	2.99	2	1
1:A:105:PRO:O	1:A:106:THR:C	0.41	2.61	7	1
1:A:176:ILE:C	1:A:177:ASN:CG	0.41	2.89	7	1
1:A:172:ASN:ND2	1:A:172:ASN:O	0.41	2.54	9	1
1:A:178:LYS:CD	1:A:178:LYS:N	0.41	2.83	9	1
1:A:224:ARG:NE	1:A:224:ARG:HA	0.41	2.30	12	1
1:A:245:ILE:HG21	1:A:246:MET:HE2	0.41	1.91	13	1
1:A:177:ASN:N	1:A:177:ASN:HD22	0.41	2.14	3	1
1:A:212:LEU:O	1:A:214:HIS:N	0.41	2.54	5	1
1:A:244:ASN:O	1:A:247:ASN:N	0.41	2.49	6	1
1:A:110:ASP:O	1:A:113:THR:N	0.41	2.54	9	1
1:A:135:PHE:O	1:A:138:PHE:N	0.41	2.53	14	1
1:A:126:ASP:O	1:A:127:ALA:CB	0.41	2.69	1	2
1:A:97:TYR:O	1:A:101:LYS:N	0.41	2.49	6	1
1:A:83:GLN:CD	1:A:83:GLN:O	0.41	2.64	7	1
1:A:224:ARG:O	1:A:225:ASN:CG	0.41	2.64	7	1
1:A:222:MET:HG3	1:A:223:ASP:H	0.41	1.76	8	2
1:A:223:ASP:C	1:A:225:ASN:HD21	0.41	2.22	8	1
1:A:135:PHE:CZ	1:A:146:ILE:HG12	0.41	2.50	12	1
1:A:173:LEU:HD12	1:A:174:TYR:CD1	0.41	2.50	13	1
1:A:148:PHE:CD1	1:A:148:PHE:O	0.41	2.74	1	1
1:A:89:THR:HG23	1:A:92:GLU:H	0.41	1.74	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:185:GLU:OE1	1:A:185:GLU:C	0.41	2.64	9	1
1:A:166:LYS:HD3	1:A:250:GLN:NE2	0.41	2.30	11	1
1:A:217:ARG:HG3	1:A:217:ARG:NH1	0.41	2.31	13	1
1:A:104:CYS:SG	1:A:105:PRO:HD3	0.41	2.55	14	1
1:A:185:GLU:O	1:A:186:GLU:C	0.41	2.62	15	1
1:A:212:LEU:C	1:A:214:HIS:N	0.40	2.78	5	1
1:A:218:PHE:CD1	1:A:218:PHE:O	0.40	2.74	7	1
1:A:122:PHE:N	1:A:123:PRO:CD	0.40	2.83	9	1
1:A:118:TYR:CZ	1:A:134:LEU:HD13	0.40	2.51	13	1
1:A:138:PHE:O	1:A:139:ASP:CB	0.40	2.70	1	1
1:A:225:ASN:OD1	1:A:227:ASP:OD1	0.40	2.38	4	2
1:A:254:ASN:ND2	1:A:254:ASN:O	0.40	2.54	6	1
1:A:135:PHE:CE1	1:A:139:ASP:HB2	0.40	2.51	7	1
1:A:124:GLN:HG3	1:A:125:GLY:N	0.40	2.31	8	1
1:A:149:GLU:HG3	1:A:150:ASP:N	0.40	2.31	12	1
1:A:187:MET:HE3	1:A:218:PHE:CG	0.40	2.51	13	1
1:A:166:LYS:NZ	1:A:250:GLN:NE2	0.40	2.69	14	1
1:A:243:GLU:C	1:A:245:ILE:N	0.40	2.73	15	1
1:A:183:THR:O	1:A:184:LYS:C	0.40	2.63	2	2
1:A:231:THR:OG1	1:A:233:ASP:OD2	0.40	2.39	3	1
1:A:217:ARG:NH2	1:A:220:GLN:NE2	0.40	2.69	6	1
1:A:177:ASN:N	1:A:177:ASN:OD1	0.40	2.54	11	1
1:A:158:LEU:HD21	1:A:169:TRP:CZ2	0.40	2.52	13	1
1:A:160:ARG:HH12	1:A:161:GLY:CA	0.40	2.28	13	1
1:A:222:MET:CE	1:A:246:MET:HE3	0.40	2.47	2	1
1:A:255:VAL:C	1:A:256:ILE:O	0.40	2.64	3	1
1:A:232:ILE:H	1:A:232:ILE:CD1	0.40	2.30	4	1
1:A:129:THR:HG22	1:A:133:PHE:CE2	0.40	2.51	6	1
1:A:135:PHE:CD1	1:A:135:PHE:C	0.40	3.00	7	1
1:A:104:CYS:H	1:A:105:PRO:HD3	0.40	1.74	9	1
1:A:219:PHE:CE2	1:A:223:ASP:HB2	0.40	2.52	5	1
1:A:108:LEU:HD11	1:A:147:HIS:NE2	0.40	2.32	9	1
1:A:236:LEU:CD2	1:A:240:GLN:NE2	0.40	2.85	9	1
1:A:118:TYR:CZ	1:A:134:LEU:HD11	0.40	2.52	14	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	167/256 (65%)	130±3 (78±2%)	26±4 (16±2%)	11±3 (7±2%)	2	17
All	All	2505/3840 (65%)	1946 (78%)	390 (16%)	169 (7%)	2	17

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	223	ASP	8
1	A	243	GLU	8
1	A	232	ILE	8
1	A	105	PRO	7
1	A	224	ARG	6
1	A	123	PRO	6
1	A	88	PHE	6
1	A	255	VAL	6
1	A	179	ASP	5
1	A	244	ASN	5
1	A	242	ASP	5
1	A	174	TYR	4
1	A	178	LYS	4
1	A	225	ASN	4
1	A	85	GLN	4
1	A	87	LYS	4
1	A	226	GLN	4
1	A	144	GLY	4
1	A	241	LYS	4
1	A	143	ASN	3
1	A	198	MET	3
1	A	227	ASP	3
1	A	124	GLN	3
1	A	177	ASN	3
1	A	180	GLY	3
1	A	228	GLY	3
1	A	104	CYS	3
1	A	211	PRO	3
1	A	86	THR	3
1	A	90	LYS	3
1	A	127	ALA	3
1	A	254	ASN	3
1	A	176	ILE	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	199	GLY	2
1	A	106	THR	2
1	A	126	ASP	2
1	A	140	ALA	2
1	A	111	GLU	2
1	A	89	THR	2
1	A	162	THR	2
1	A	212	LEU	2
1	A	222	MET	2
1	A	103	GLU	1
1	A	138	PHE	1
1	A	141	ASP	1
1	A	161	GLY	1
1	A	139	ASP	1
1	A	107	GLY	1
1	A	184	LYS	1
1	A	142	GLY	1

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

In the following table, the Percentiles column shows the percent sidechain outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all NMR entries. The Analysed column shows the number of residues for which the sidechain conformation was analysed and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	149/227 (66%)	122±4 (82±3%)	27±4 (18±3%)	4	36
All	All	2235/3405 (66%)	1833 (82%)	402 (18%)	4	36

All 112 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	146	ILE	15
1	A	169	TRP	15
1	A	230	VAL	15
1	A	82	LEU	12
1	A	109	VAL	12
1	A	155	LEU	10
1	A	188	LEU	10
1	A	225	ASN	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	93	LEU	8
1	A	177	ASN	8
1	A	112	ASP	7
1	A	114	PHE	7
1	A	239	CYS	7
1	A	89	THR	7
1	A	106	THR	6
1	A	178	LYS	6
1	A	104	CYS	6
1	A	236	LEU	6
1	A	108	LEU	5
1	A	139	ASP	5
1	A	162	THR	5
1	A	176	ILE	5
1	A	179	ASP	5
1	A	212	LEU	5
1	A	147	HIS	5
1	A	251	LEU	5
1	A	80	ASP	4
1	A	87	LYS	4
1	A	113	THR	4
1	A	141	ASP	4
1	A	183	THR	4
1	A	191	MET	4
1	A	192	LYS	4
1	A	221	LYS	4
1	A	231	THR	4
1	A	241	LYS	4
1	A	246	MET	4
1	A	256	ILE	4
1	A	136	ASN	4
1	A	160	ARG	4
1	A	91	LYS	4
1	A	98	ARG	4
1	A	217	ARG	4
1	A	224	ARG	4
1	A	159	LEU	4
1	A	88	PHE	4
1	A	134	LEU	3
1	A	226	GLN	3
1	A	237	GLU	3
1	A	245	ILE	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	213	GLU	3
1	A	227	ASP	3
1	A	90	LYS	3
1	A	168	LYS	3
1	A	86	THR	3
1	A	116	LEU	2
1	A	156	SER	2
1	A	166	LYS	2
1	A	181	CYS	2
1	A	240	GLN	2
1	A	242	ASP	2
1	A	253	GLU	2
1	A	143	ASN	2
1	A	164	HIS	2
1	A	190	ILE	2
1	A	219	PHE	2
1	A	126	ASP	2
1	A	132	HIS	2
1	A	157	ILE	2
1	A	128	THR	2
1	A	194	ILE	2
1	A	244	ASN	2
1	A	94	GLN	2
1	A	119	SER	2
1	A	129	THR	2
1	A	229	VAL	2
1	A	252	PHE	2
1	A	115	LYS	2
1	A	198	MET	2
1	A	214	HIS	2
1	A	247	ASN	2
1	A	233	ASP	2
1	A	234	GLU	2
1	A	83	GLN	2
1	A	101	LYS	2
1	A	120	GLN	2
1	A	95	SER	2
1	A	110	ASP	1
1	A	124	GLN	1
1	A	152	VAL	1
1	A	197	MET	1
1	A	232	ILE	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	121	PHE	1
1	A	85	GLN	1
1	A	118	TYR	1
1	A	184	LYS	1
1	A	79	LEU	1
1	A	196	ASP	1
1	A	250	GLN	1
1	A	103	GLU	1
1	A	172	ASN	1
1	A	185	GLU	1
1	A	81	GLN	1
1	A	117	ILE	1
1	A	150	ASP	1
1	A	248	SER	1
1	A	254	ASN	1
1	A	92	GLU	1
1	A	158	LEU	1
1	A	149	GLU	1
1	A	173	LEU	1
1	A	175	ASP	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 ⓘ

Of 2 ligands modelled in this entry, 2 are 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