



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 25, 2026 – 11:03 AM UTC

PDB ID : 2JVN / pdb_00002jvn
Title : Domain C of human PARP-1
Authors : Hoffman, D.; Tao, Z.; Liu, H.
Deposited on : 2007-09-24

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

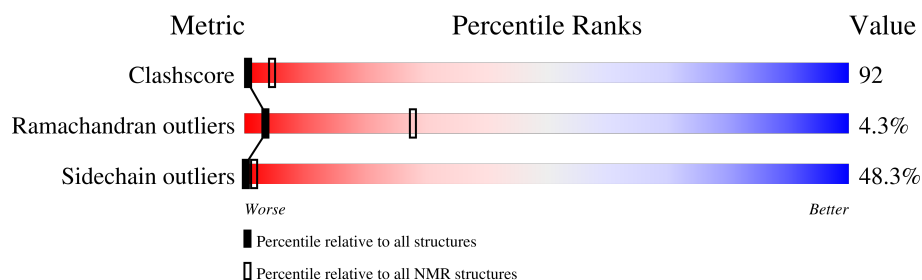
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

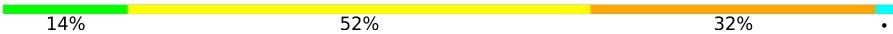
The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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	126	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 10 models. Model 7 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *fewest violations*.

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:233-A:356 (124)	1.04	7

Ill-defined regions of proteins are excluded from the global statistics.

Ligands and non-protein polymers are included in the analysis.

The models can be grouped into 3 clusters and 1 single-model cluster was found.

Cluster number	Models
1	1, 5, 6, 7
2	2, 4, 10
3	8, 9
Single-model clusters	3

3 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2063 atoms, of which 1047 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Poly [ADP-ribose] polymerase 1.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	126	Total	C	H	N	O	S	0
			2062	650	1047	170	188	7	

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

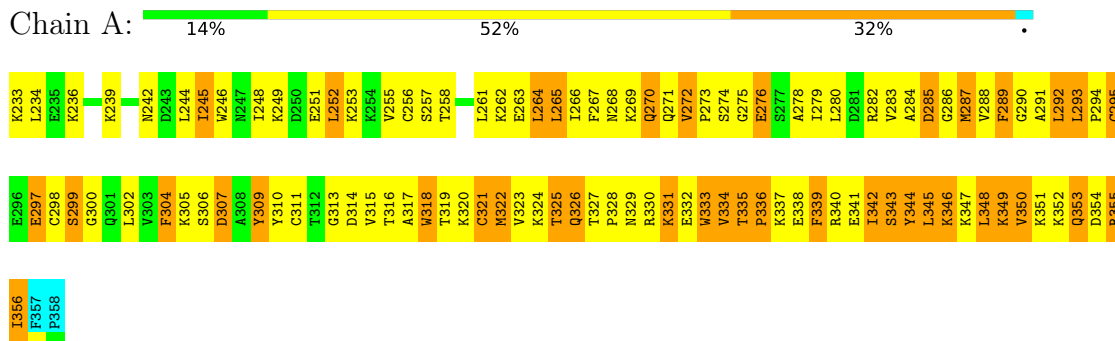
Mol	Chain	Residues	Atoms	
2	A	1	Total	Zn
			1	1

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: Poly [ADP-ribose] polymerase 1

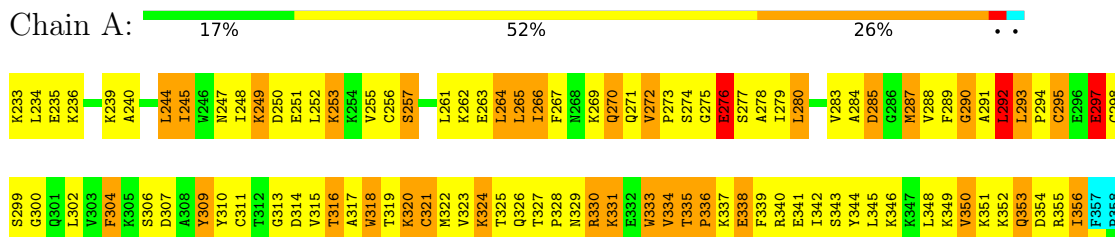


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

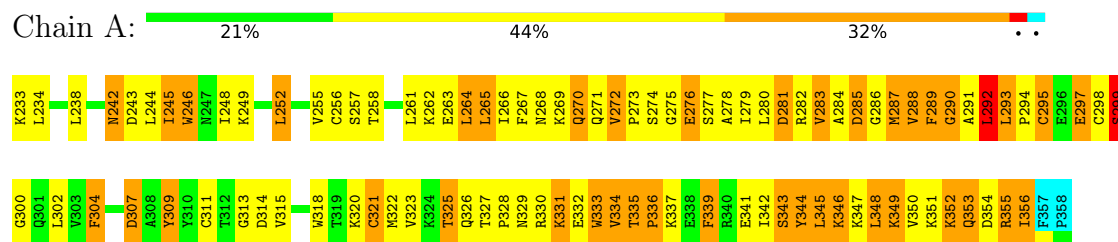
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Poly [ADP-ribose] polymerase 1



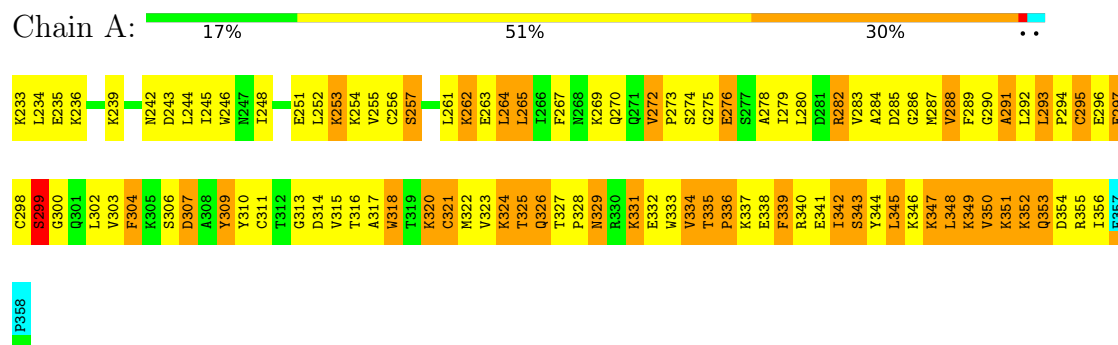
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Poly [ADP-ribose] polymerase 1



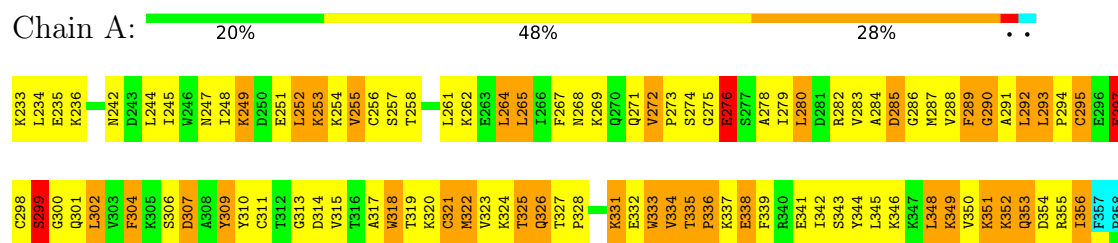
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Poly [ADP-ribose] polymerase 1



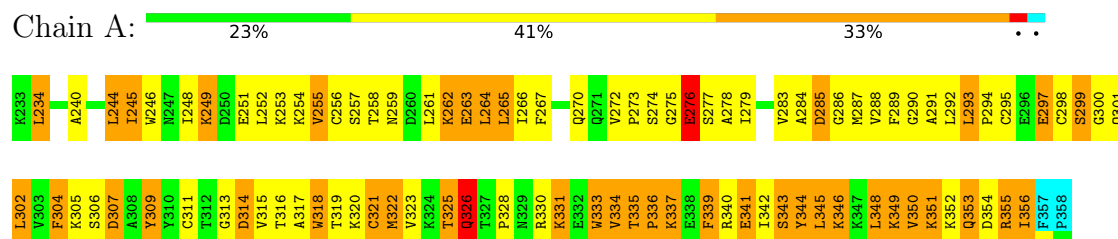
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Poly [ADP-ribose] polymerase 1



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Poly [ADP-ribose] polymerase 1



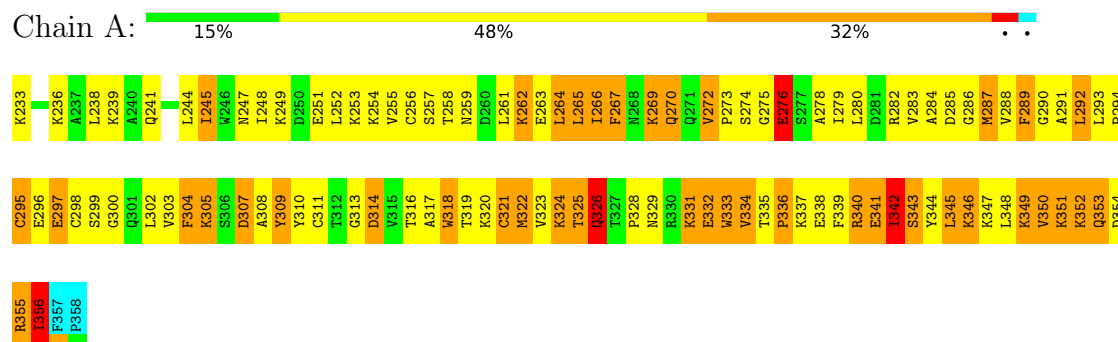
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Poly [ADP-ribose] polymerase 1



4.2.7 Score per residue for model 7 (medoid)

- Molecule 1: Poly [ADP-ribose] polymerase 1



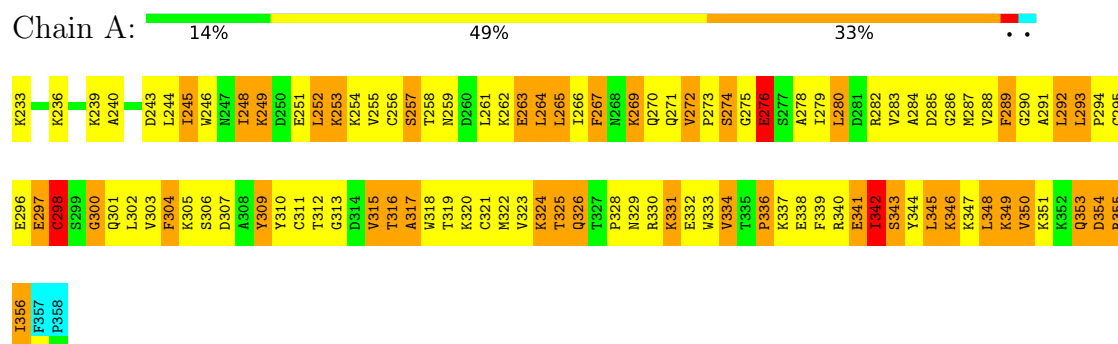
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Poly [ADP-ribose] polymerase 1



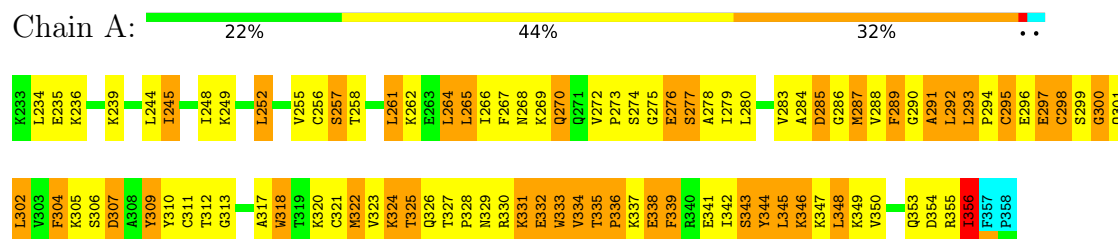
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Poly [ADP-ribose] polymerase 1



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Poly [ADP-ribose] polymerase 1



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 100 calculated structures, 10 were deposited, based on the following criterion: *structures with the least restraint violations*.

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

Software name	Classification	Version
CNS	structure solution	1.1
CNS	refinement	1.1

No chemical shift data was provided.

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	0.82±0.01	0±1/1013 (0.0± 0.1%)	1.05±0.02	3±1/1363 (0.2± 0.1%)
All	All	0.82	4/10130 (0.0%)	1.05	33/13630 (0.2%)

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	300	GLY	N-CA	-5.64	1.39	1.44	9	2
1	A	298	CYS	N-CA	-5.13	1.40	1.46	9	1
1	A	291	ALA	N-CA	-5.02	1.40	1.45	10	1

All unique angle outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	297	GLU	N-CA-C	-7.90	101.97	111.69	1	10
1	A	296	GLU	N-CA-C	-6.14	105.37	112.86	10	2
1	A	292	LEU	N-CA-C	6.04	119.36	109.76	1	3
1	A	343	SER	N-CA-C	-5.76	108.05	114.62	4	5
1	A	299	SER	N-CA-C	-5.49	103.81	111.39	2	7
1	A	291	ALA	N-CA-CB	-5.27	101.82	110.41	3	1
1	A	289	PHE	N-CA-C	5.08	118.63	112.23	9	2
1	A	277	SER	N-CA-C	-5.06	105.95	111.82	10	2
1	A	283	VAL	CB-CA-C	-5.06	105.35	111.87	8	1

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	996	1031	1028	186±11
All	All	9970	10310	10280	1860

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 92.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:291:ALA:HB1	1:A:333:TRP:CG	1.37	1.53	5	8
1:A:291:ALA:HB1	1:A:333:TRP:CB	1.27	1.59	2	10
1:A:265:LEU:HD23	1:A:279:ILE:HG23	1.12	1.15	3	10
1:A:291:ALA:CB	1:A:333:TRP:CG	1.11	2.32	5	10
1:A:248:ILE:HG22	1:A:284:ALA:HB1	1.11	1.21	10	10
1:A:287:MET:HE2	1:A:288:VAL:HG23	1.06	1.25	3	1
1:A:291:ALA:HB1	1:A:333:TRP:HB3	1.05	1.07	2	10
1:A:298:CYS:HB3	1:A:321:CYS:HB3	0.99	1.34	8	8
1:A:279:ILE:O	1:A:283:VAL:HG23	0.98	1.58	8	8
1:A:275:GLY:O	1:A:278:ALA:N	0.97	1.97	4	10
1:A:304:PHE:HB2	1:A:309:TYR:HB2	0.94	1.39	5	10
1:A:291:ALA:HB1	1:A:333:TRP:N	0.92	1.79	10	4
1:A:291:ALA:CB	1:A:333:TRP:CB	0.92	2.48	2	10
1:A:287:MET:HE1	1:A:342:ILE:HG21	0.90	1.43	10	5
1:A:291:ALA:HB1	1:A:333:TRP:CA	0.90	1.96	10	6
1:A:293:LEU:HD22	1:A:331:LYS:HB2	0.89	1.44	4	4
1:A:252:LEU:HD21	1:A:287:MET:HE1	0.89	1.41	5	1
1:A:346:LYS:HA	1:A:350:VAL:HG21	0.88	1.45	10	2
1:A:291:ALA:HB3	1:A:333:TRP:CG	0.88	2.04	4	2
1:A:317:ALA:O	1:A:318:TRP:CE3	0.87	2.27	9	1
1:A:291:ALA:CB	1:A:333:TRP:HB3	0.86	2.00	4	10
1:A:288:VAL:HG13	1:A:350:VAL:HG22	0.86	1.43	10	2
1:A:248:ILE:HG22	1:A:284:ALA:CB	0.84	2.02	8	4
1:A:287:MET:HE3	1:A:345:LEU:HD13	0.84	1.45	4	1
1:A:292:LEU:HD22	1:A:292:LEU:O	0.84	1.72	9	1
1:A:248:ILE:CG2	1:A:284:ALA:HB1	0.83	2.03	3	9
1:A:261:LEU:HD12	1:A:262:LYS:N	0.83	1.88	2	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:244:LEU:HD13	1:A:349:LYS:O	0.82	1.72	3	1
1:A:295:CYS:CB	1:A:302:LEU:HD11	0.82	2.03	8	8
1:A:264:LEU:HD23	1:A:265:LEU:HD22	0.82	1.49	4	4
1:A:261:LEU:HD11	1:A:276:GLU:HG2	0.82	1.49	2	3
1:A:291:ALA:CB	1:A:333:TRP:CD2	0.82	2.63	1	5
1:A:264:LEU:HD12	1:A:335:THR:HG22	0.82	1.52	10	2
1:A:291:ALA:HB3	1:A:331:LYS:O	0.82	1.73	7	3
1:A:279:ILE:O	1:A:283:VAL:CG2	0.81	2.28	8	10
1:A:261:LEU:HD11	1:A:276:GLU:CG	0.81	2.04	2	3
1:A:346:LYS:O	1:A:350:VAL:HG23	0.81	1.74	8	2
1:A:293:LEU:HD21	1:A:332:GLU:O	0.81	1.74	7	1
1:A:245:ILE:HD11	1:A:353:GLN:HB3	0.81	1.50	8	1
1:A:291:ALA:HB1	1:A:333:TRP:CD1	0.80	2.12	9	4
1:A:291:ALA:CB	1:A:333:TRP:N	0.80	2.45	10	6
1:A:248:ILE:HD13	1:A:345:LEU:HD12	0.80	1.53	8	1
1:A:295:CYS:HB3	1:A:302:LEU:HD11	0.80	1.51	9	6
1:A:292:LEU:HD12	1:A:304:PHE:CD1	0.80	2.11	10	3
1:A:252:LEU:HD13	1:A:339:PHE:CZ	0.79	2.11	6	2
1:A:258:THR:HG23	1:A:276:GLU:CD	0.79	2.02	6	3
1:A:311:CYS:HB3	1:A:323:VAL:HG12	0.79	1.52	7	1
1:A:291:ALA:CB	1:A:333:TRP:CD1	0.79	2.65	6	8
1:A:293:LEU:HG	1:A:294:PRO:HD2	0.79	1.52	6	2
1:A:298:CYS:HB3	1:A:321:CYS:CB	0.78	2.08	6	7
1:A:267:PHE:CE2	1:A:334:VAL:HG23	0.78	2.13	7	2
1:A:265:LEU:HD12	1:A:270:GLN:CB	0.78	2.08	6	6
1:A:244:LEU:HD12	1:A:245:ILE:N	0.78	1.94	2	2
1:A:293:LEU:O	1:A:302:LEU:HD13	0.78	1.77	8	8
1:A:295:CYS:HB2	1:A:302:LEU:HD11	0.78	1.53	1	3
1:A:272:VAL:HG13	1:A:275:GLY:HA2	0.78	1.55	8	8
1:A:309:TYR:CD2	1:A:328:PRO:HA	0.78	2.13	4	10
1:A:265:LEU:HD23	1:A:279:ILE:CG2	0.78	2.03	3	6
1:A:311:CYS:SG	1:A:323:VAL:HG13	0.77	2.19	9	2
1:A:272:VAL:HG13	1:A:275:GLY:CA	0.77	2.10	3	8
1:A:240:ALA:O	1:A:244:LEU:HD12	0.77	1.78	6	3
1:A:262:LYS:O	1:A:266:ILE:HG23	0.77	1.80	5	1
1:A:287:MET:CE	1:A:342:ILE:HG21	0.77	2.10	6	4
1:A:294:PRO:HA	1:A:301:GLN:HA	0.77	1.57	10	2
1:A:344:TYR:CE1	1:A:345:LEU:HD12	0.76	2.16	10	2
1:A:298:CYS:SG	1:A:313:GLY:HA3	0.76	2.20	7	8
1:A:346:LYS:HA	1:A:350:VAL:HG11	0.76	1.54	2	1
1:A:252:LEU:HD12	1:A:253:LYS:N	0.76	1.96	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:274:SER:O	1:A:278:ALA:CB	0.76	2.33	6	10
1:A:248:ILE:HG23	1:A:345:LEU:CD2	0.76	2.11	6	2
1:A:311:CYS:SG	1:A:323:VAL:HG22	0.75	2.21	9	2
1:A:244:LEU:HD13	1:A:349:LYS:CG	0.75	2.10	9	5
1:A:285:ASP:O	1:A:289:PHE:CD2	0.75	2.40	5	9
1:A:342:ILE:HB	1:A:345:LEU:HD23	0.74	1.58	8	1
1:A:265:LEU:CD2	1:A:279:ILE:HG23	0.74	2.05	3	4
1:A:265:LEU:HD12	1:A:270:GLN:HB2	0.74	1.56	10	7
1:A:335:THR:OG1	1:A:339:PHE:CG	0.74	2.40	7	1
1:A:264:LEU:O	1:A:267:PHE:CD2	0.73	2.41	10	8
1:A:279:ILE:O	1:A:283:VAL:HG22	0.73	1.83	3	4
1:A:298:CYS:HB2	1:A:321:CYS:CB	0.73	2.13	10	2
1:A:275:GLY:O	1:A:279:ILE:N	0.73	2.22	8	10
1:A:287:MET:HE3	1:A:345:LEU:HG	0.73	1.60	5	1
1:A:292:LEU:C	1:A:293:LEU:HD22	0.73	2.08	7	1
1:A:264:LEU:HD12	1:A:336:PRO:HD2	0.73	1.60	4	3
1:A:264:LEU:CD1	1:A:335:THR:HG22	0.73	2.14	10	4
1:A:279:ILE:O	1:A:283:VAL:HG13	0.72	1.84	3	2
1:A:292:LEU:HD22	1:A:302:LEU:O	0.72	1.84	6	3
1:A:293:LEU:HD13	1:A:332:GLU:O	0.72	1.84	2	2
1:A:287:MET:HE3	1:A:345:LEU:HD22	0.72	1.60	2	2
1:A:346:LYS:O	1:A:350:VAL:HG22	0.72	1.84	5	3
1:A:288:VAL:HG23	1:A:345:LEU:HD23	0.71	1.62	2	1
1:A:295:CYS:HB2	1:A:302:LEU:HD23	0.71	1.61	5	1
1:A:326:GLN:HG3	1:A:327:THR:N	0.71	2.01	10	3
1:A:292:LEU:HD13	1:A:292:LEU:H	0.71	1.42	9	4
1:A:344:TYR:O	1:A:348:LEU:HD22	0.71	1.85	9	1
1:A:252:LEU:CD1	1:A:284:ALA:HB2	0.71	2.16	7	3
1:A:287:MET:CE	1:A:288:VAL:HG23	0.71	2.13	3	1
1:A:244:LEU:HD13	1:A:349:LYS:HG3	0.71	1.61	9	2
1:A:264:LEU:CD2	1:A:283:VAL:HG21	0.71	2.15	5	4
1:A:298:CYS:CB	1:A:321:CYS:HB3	0.71	2.14	6	8
1:A:293:LEU:CG	1:A:294:PRO:HD2	0.71	2.16	6	1
1:A:292:LEU:HD23	1:A:302:LEU:O	0.71	1.85	9	2
1:A:304:PHE:C	1:A:304:PHE:CD1	0.71	2.67	8	4
1:A:293:LEU:HD22	1:A:331:LYS:CB	0.71	2.16	4	1
1:A:274:SER:O	1:A:278:ALA:HB3	0.70	1.85	6	10
1:A:293:LEU:HD13	1:A:331:LYS:CG	0.70	2.16	8	3
1:A:288:VAL:CG1	1:A:350:VAL:HA	0.70	2.16	1	4
1:A:311:CYS:O	1:A:322:MET:HA	0.69	1.87	7	10
1:A:287:MET:HE2	1:A:345:LEU:CD2	0.69	2.16	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:288:VAL:HG13	1:A:350:VAL:HA	0.69	1.64	2	7
1:A:265:LEU:HD12	1:A:270:GLN:HB3	0.69	1.63	5	5
1:A:339:PHE:O	1:A:342:ILE:HG23	0.69	1.87	7	1
1:A:261:LEU:HD11	1:A:280:LEU:HD21	0.69	1.64	1	2
1:A:292:LEU:HB2	1:A:302:LEU:HD12	0.69	1.65	4	2
1:A:287:MET:HE3	1:A:342:ILE:HD13	0.69	1.63	1	2
1:A:287:MET:HE3	1:A:345:LEU:CD2	0.69	2.18	2	2
1:A:292:LEU:HD11	1:A:304:PHE:CD1	0.69	2.22	2	1
1:A:264:LEU:CD2	1:A:283:VAL:HG11	0.69	2.17	3	1
1:A:345:LEU:HD13	1:A:345:LEU:H	0.69	1.47	3	2
1:A:304:PHE:CD1	1:A:304:PHE:C	0.68	2.70	10	5
1:A:284:ALA:HA	1:A:287:MET:HE2	0.68	1.64	5	1
1:A:291:ALA:HB3	1:A:333:TRP:CB	0.68	2.18	4	2
1:A:292:LEU:HB3	1:A:328:PRO:CB	0.68	2.18	2	6
1:A:333:TRP:H	1:A:333:TRP:CD1	0.68	2.07	4	5
1:A:346:LYS:HA	1:A:350:VAL:CG1	0.68	2.19	2	1
1:A:292:LEU:HD12	1:A:292:LEU:O	0.68	1.89	3	1
1:A:293:LEU:HD13	1:A:331:LYS:HG2	0.68	1.65	8	3
1:A:288:VAL:HG22	1:A:347:LYS:CB	0.67	2.20	3	1
1:A:245:ILE:HD11	1:A:285:ASP:OD1	0.67	1.89	10	5
1:A:287:MET:HB3	1:A:342:ILE:HD13	0.67	1.67	2	5
1:A:344:TYR:O	1:A:348:LEU:HD13	0.67	1.89	7	2
1:A:252:LEU:HD23	1:A:284:ALA:HB2	0.67	1.66	2	3
1:A:288:VAL:CG1	1:A:350:VAL:HG22	0.67	2.19	10	1
1:A:258:THR:HG23	1:A:276:GLU:OE1	0.67	1.90	10	6
1:A:264:LEU:HD21	1:A:283:VAL:HG21	0.66	1.67	5	3
1:A:243:ASP:HA	1:A:246:TRP:CD1	0.66	2.26	9	2
1:A:267:PHE:CD2	1:A:336:PRO:HD3	0.66	2.25	7	2
1:A:264:LEU:HD23	1:A:336:PRO:HD3	0.66	1.66	9	1
1:A:249:LYS:HA	1:A:252:LEU:HD23	0.66	1.67	8	5
1:A:309:TYR:CD1	1:A:309:TYR:C	0.66	2.74	5	8
1:A:306:SER:HB3	1:A:356:ILE:HD13	0.66	1.68	9	3
1:A:255:VAL:HG12	1:A:338:GLU:HB3	0.66	1.65	1	3
1:A:304:PHE:HB2	1:A:309:TYR:CB	0.66	2.18	5	10
1:A:311:CYS:SG	1:A:311:CYS:O	0.66	2.54	5	3
1:A:276:GLU:HA	1:A:279:ILE:HB	0.65	1.67	8	10
1:A:287:MET:HE2	1:A:346:LYS:HE3	0.65	1.67	9	1
1:A:252:LEU:HD21	1:A:287:MET:CE	0.65	2.18	5	1
1:A:313:GLY:N	1:A:321:CYS:SG	0.65	2.69	9	2
1:A:335:THR:HB	1:A:339:PHE:HB3	0.65	1.66	10	7
1:A:248:ILE:HD11	1:A:345:LEU:HD12	0.65	1.69	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:309:TYR:HB3	1:A:325:THR:O	0.64	1.93	5	10
1:A:311:CYS:SG	1:A:323:VAL:HG12	0.64	2.32	8	1
1:A:292:LEU:HD13	1:A:302:LEU:O	0.64	1.92	3	1
1:A:292:LEU:HB3	1:A:328:PRO:HB2	0.64	1.68	2	3
1:A:293:LEU:HG	1:A:331:LYS:CB	0.64	2.21	1	4
1:A:288:VAL:HG11	1:A:350:VAL:HG11	0.64	1.68	3	1
1:A:287:MET:HA	1:A:333:TRP:NE1	0.64	2.08	4	9
1:A:262:LYS:HA	1:A:279:ILE:HD13	0.64	1.68	7	3
1:A:252:LEU:HD11	1:A:284:ALA:HB2	0.64	1.70	5	2
1:A:283:VAL:HG12	1:A:287:MET:SD	0.64	2.33	1	1
1:A:288:VAL:HG13	1:A:350:VAL:HG12	0.64	1.70	2	1
1:A:345:LEU:O	1:A:348:LEU:HD12	0.64	1.93	3	1
1:A:284:ALA:O	1:A:287:MET:HG3	0.64	1.93	3	1
1:A:245:ILE:HG22	1:A:246:TRP:CE3	0.64	2.28	8	1
1:A:270:GLN:NE2	1:A:356:ILE:HD11	0.63	2.09	1	1
1:A:291:ALA:HB3	1:A:333:TRP:HB3	0.63	1.67	4	2
1:A:280:LEU:HD12	1:A:281:ASP:N	0.63	2.08	2	3
1:A:300:GLY:CA	1:A:313:GLY:HA3	0.63	2.22	9	3
1:A:311:CYS:O	1:A:311:CYS:SG	0.63	2.57	8	6
1:A:292:LEU:HD12	1:A:302:LEU:O	0.63	1.92	5	1
1:A:291:ALA:HB2	1:A:333:TRP:CG	0.63	2.29	10	4
1:A:279:ILE:O	1:A:283:VAL:CG1	0.63	2.46	3	2
1:A:288:VAL:HG13	1:A:350:VAL:CG2	0.63	2.21	10	1
1:A:273:PRO:C	1:A:275:GLY:H	0.63	1.99	2	10
1:A:292:LEU:O	1:A:292:LEU:CD2	0.63	2.47	9	3
1:A:263:GLU:O	1:A:266:ILE:HG22	0.62	1.94	7	2
1:A:302:LEU:HD23	1:A:329:ASN:H	0.62	1.52	6	8
1:A:288:VAL:CG1	1:A:350:VAL:HG11	0.62	2.24	3	1
1:A:287:MET:HE3	1:A:342:ILE:HG21	0.62	1.71	6	1
1:A:316:THR:O	1:A:317:ALA:C	0.62	2.42	9	1
1:A:293:LEU:HD22	1:A:294:PRO:N	0.62	2.09	1	3
1:A:289:PHE:CD2	1:A:353:GLN:CB	0.62	2.82	7	4
1:A:267:PHE:CE2	1:A:336:PRO:HD3	0.62	2.28	10	5
1:A:288:VAL:O	1:A:350:VAL:HG13	0.62	1.95	5	2
1:A:275:GLY:O	1:A:278:ALA:CA	0.61	2.48	7	10
1:A:287:MET:HB3	1:A:333:TRP:HE1	0.61	1.54	1	5
1:A:344:TYR:C	1:A:348:LEU:HD22	0.61	2.20	9	1
1:A:287:MET:CB	1:A:333:TRP:HE1	0.61	2.09	4	6
1:A:342:ILE:CB	1:A:345:LEU:HD11	0.61	2.25	5	1
1:A:264:LEU:HD21	1:A:283:VAL:CG2	0.61	2.25	5	3
1:A:284:ALA:O	1:A:287:MET:HG2	0.61	1.96	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:272:VAL:HG23	1:A:273:PRO:HD2	0.61	1.73	2	6
1:A:342:ILE:C	1:A:342:ILE:HD12	0.61	2.21	5	2
1:A:309:TYR:CE2	1:A:328:PRO:HA	0.61	2.31	8	5
1:A:293:LEU:O	1:A:293:LEU:HD13	0.61	1.96	10	3
1:A:255:VAL:HG11	1:A:338:GLU:HB3	0.61	1.71	3	1
1:A:287:MET:HE3	1:A:345:LEU:CD1	0.61	2.24	4	1
1:A:293:LEU:O	1:A:302:LEU:HD22	0.60	1.95	10	7
1:A:244:LEU:HD13	1:A:349:LYS:HB3	0.60	1.73	8	2
1:A:293:LEU:HD21	1:A:332:GLU:C	0.60	2.19	7	1
1:A:252:LEU:CD2	1:A:284:ALA:HB2	0.60	2.26	10	1
1:A:289:PHE:CZ	1:A:354:ASP:O	0.60	2.54	3	5
1:A:294:PRO:C	1:A:302:LEU:HD13	0.60	2.20	9	3
1:A:255:VAL:HG11	1:A:338:GLU:CB	0.60	2.26	3	1
1:A:261:LEU:O	1:A:279:ILE:HG21	0.60	1.95	7	3
1:A:288:VAL:HG22	1:A:346:LYS:HA	0.60	1.73	9	2
1:A:291:ALA:HB1	1:A:333:TRP:CD2	0.60	2.26	5	2
1:A:293:LEU:HG	1:A:294:PRO:CD	0.60	2.27	2	3
1:A:293:LEU:HB3	1:A:331:LYS:CB	0.60	2.27	10	5
1:A:287:MET:HE3	1:A:342:ILE:CD1	0.59	2.27	1	1
1:A:342:ILE:O	1:A:342:ILE:HD12	0.59	1.97	2	1
1:A:265:LEU:HD11	1:A:356:ILE:HD12	0.59	1.74	8	1
1:A:295:CYS:N	1:A:302:LEU:HD11	0.59	2.13	6	2
1:A:293:LEU:HD13	1:A:293:LEU:C	0.59	2.23	10	2
1:A:244:LEU:HD22	1:A:349:LYS:HG2	0.59	1.73	9	2
1:A:295:CYS:SG	1:A:297:GLU:HB2	0.59	2.37	3	2
1:A:255:VAL:HG11	1:A:341:GLU:CD	0.59	2.23	5	2
1:A:264:LEU:HD21	1:A:283:VAL:HG11	0.59	1.75	3	1
1:A:288:VAL:HG13	1:A:347:LYS:HA	0.59	1.75	3	1
1:A:244:LEU:HD22	1:A:349:LYS:HB3	0.59	1.72	2	1
1:A:304:PHE:CD2	1:A:328:PRO:HD3	0.59	2.33	7	2
1:A:302:LEU:HD12	1:A:302:LEU:N	0.59	2.13	6	3
1:A:344:TYR:CZ	1:A:345:LEU:HD13	0.59	2.32	7	1
1:A:267:PHE:CD1	1:A:267:PHE:C	0.59	2.81	4	8
1:A:311:CYS:CB	1:A:323:VAL:HG12	0.59	2.26	7	1
1:A:283:VAL:O	1:A:333:TRP:HZ2	0.58	1.81	6	5
1:A:292:LEU:CB	1:A:328:PRO:HB2	0.58	2.28	4	2
1:A:302:LEU:N	1:A:302:LEU:CD1	0.58	2.66	6	5
1:A:287:MET:HE1	1:A:343:SER:O	0.58	1.97	3	1
1:A:346:LYS:HA	1:A:350:VAL:CG2	0.58	2.25	10	2
1:A:289:PHE:CE1	1:A:355:ARG:HA	0.58	2.34	10	4
1:A:293:LEU:HB2	1:A:331:LYS:CB	0.58	2.28	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:288:VAL:HG12	1:A:289:PHE:N	0.58	2.12	3	3
1:A:304:PHE:CB	1:A:309:TYR:HB2	0.58	2.24	5	10
1:A:289:PHE:C	1:A:289:PHE:CD1	0.58	2.81	7	4
1:A:291:ALA:CB	1:A:333:TRP:H	0.58	2.10	8	5
1:A:291:ALA:CB	1:A:333:TRP:CE3	0.58	2.86	4	2
1:A:286:GLY:O	1:A:291:ALA:N	0.58	2.37	6	4
1:A:276:GLU:HA	1:A:279:ILE:HD12	0.58	1.75	7	8
1:A:326:GLN:HG3	1:A:327:THR:H	0.58	1.56	10	1
1:A:350:VAL:HG12	1:A:350:VAL:O	0.58	1.98	4	1
1:A:264:LEU:HD13	1:A:339:PHE:CD2	0.57	2.34	10	5
1:A:289:PHE:CZ	1:A:355:ARG:HA	0.57	2.34	2	5
1:A:252:LEU:HD21	1:A:280:LEU:O	0.57	1.98	2	3
1:A:287:MET:HE3	1:A:342:ILE:CG1	0.57	2.30	1	1
1:A:295:CYS:SG	1:A:297:GLU:CB	0.57	2.93	4	8
1:A:289:PHE:CD1	1:A:353:GLN:O	0.57	2.58	3	1
1:A:287:MET:HB2	1:A:342:ILE:HD13	0.57	1.76	4	1
1:A:332:GLU:CG	1:A:342:ILE:HD12	0.57	2.29	10	1
1:A:325:THR:O	1:A:326:GLN:C	0.57	2.48	6	10
1:A:264:LEU:CD2	1:A:265:LEU:HD22	0.57	2.26	4	4
1:A:293:LEU:O	1:A:302:LEU:HD11	0.57	1.99	5	2
1:A:350:VAL:O	1:A:350:VAL:HG23	0.57	1.98	2	1
1:A:356:ILE:HG23	1:A:356:ILE:O	0.57	1.98	2	1
1:A:316:THR:HG22	1:A:318:TRP:CZ3	0.57	2.35	1	2
1:A:342:ILE:O	1:A:343:SER:CB	0.57	2.53	7	3
1:A:289:PHE:CD2	1:A:353:GLN:HB3	0.57	2.35	7	3
1:A:261:LEU:HD11	1:A:280:LEU:CD2	0.56	2.30	1	3
1:A:351:LYS:O	1:A:353:GLN:N	0.56	2.38	5	6
1:A:342:ILE:HB	1:A:345:LEU:HD11	0.56	1.76	5	1
1:A:248:ILE:HG23	1:A:345:LEU:HD21	0.56	1.77	10	2
1:A:356:ILE:O	1:A:356:ILE:HG23	0.56	2.00	4	2
1:A:346:LYS:O	1:A:350:VAL:HG12	0.56	1.99	1	3
1:A:246:TRP:CD1	1:A:249:LYS:HZ1	0.56	2.18	5	1
1:A:287:MET:SD	1:A:342:ILE:HG21	0.56	2.41	5	1
1:A:248:ILE:HG23	1:A:345:LEU:HD23	0.56	1.77	7	2
1:A:285:ASP:O	1:A:289:PHE:CD1	0.56	2.59	10	1
1:A:255:VAL:HG12	1:A:338:GLU:CB	0.56	2.30	4	2
1:A:257:SER:O	1:A:261:LEU:N	0.56	2.31	8	9
1:A:345:LEU:HD22	1:A:345:LEU:N	0.56	2.16	5	1
1:A:286:GLY:HA2	1:A:289:PHE:CE1	0.56	2.36	10	2
1:A:303:VAL:O	1:A:310:TYR:O	0.56	2.24	9	3
1:A:293:LEU:HD13	1:A:331:LYS:HG3	0.56	1.77	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:312:THR:HA	1:A:321:CYS:O	0.56	2.01	9	2
1:A:304:PHE:HB2	1:A:309:TYR:HA	0.56	1.77	4	9
1:A:292:LEU:O	1:A:292:LEU:CD1	0.56	2.54	7	3
1:A:258:THR:HG23	1:A:276:GLU:OE2	0.56	2.00	6	1
1:A:309:TYR:CD2	1:A:325:THR:O	0.56	2.59	8	9
1:A:344:TYR:CD1	1:A:345:LEU:HD22	0.55	2.36	8	1
1:A:272:VAL:O	1:A:275:GLY:HA3	0.55	2.01	8	9
1:A:292:LEU:CD1	1:A:304:PHE:CD1	0.55	2.88	2	3
1:A:267:PHE:CE1	1:A:268:ASN:ND2	0.55	2.74	10	1
1:A:288:VAL:HG22	1:A:347:LYS:HB3	0.55	1.78	3	1
1:A:344:TYR:HD1	1:A:345:LEU:HD13	0.55	1.61	5	1
1:A:321:CYS:SG	1:A:321:CYS:O	0.55	2.65	9	2
1:A:252:LEU:HD13	1:A:339:PHE:HZ	0.55	1.61	2	2
1:A:333:TRP:CD1	1:A:333:TRP:H	0.55	2.19	5	5
1:A:248:ILE:HD11	1:A:346:LYS:HB2	0.55	1.78	3	1
1:A:244:LEU:HD13	1:A:349:LYS:HB2	0.55	1.79	1	3
1:A:289:PHE:HD1	1:A:290:GLY:N	0.55	2.00	10	3
1:A:339:PHE:O	1:A:342:ILE:HD12	0.55	2.00	7	1
1:A:334:VAL:CG2	1:A:334:VAL:O	0.54	2.55	4	3
1:A:335:THR:HG22	1:A:339:PHE:HD2	0.54	1.62	3	1
1:A:264:LEU:HG	1:A:339:PHE:CE2	0.54	2.36	7	1
1:A:298:CYS:SG	1:A:313:GLY:CA	0.54	2.95	7	1
1:A:287:MET:HE2	1:A:346:LYS:CE	0.54	2.32	9	1
1:A:297:GLU:HB3	1:A:321:CYS:SG	0.54	2.43	2	6
1:A:248:ILE:HD12	1:A:345:LEU:HG	0.54	1.79	2	1
1:A:267:PHE:CZ	1:A:334:VAL:O	0.54	2.60	10	5
1:A:291:ALA:HB2	1:A:333:TRP:CD1	0.54	2.38	10	5
1:A:274:SER:O	1:A:278:ALA:HB2	0.54	2.02	5	9
1:A:298:CYS:HB2	1:A:313:GLY:C	0.54	2.28	4	7
1:A:346:LYS:C	1:A:350:VAL:HG23	0.54	2.28	8	1
1:A:302:LEU:HD21	1:A:329:ASN:HB2	0.54	1.80	1	2
1:A:261:LEU:C	1:A:279:ILE:HG21	0.54	2.28	7	1
1:A:285:ASP:O	1:A:289:PHE:CG	0.54	2.61	10	4
1:A:344:TYR:CD1	1:A:345:LEU:HD13	0.54	2.37	5	1
1:A:252:LEU:O	1:A:256:CYS:N	0.54	2.41	7	8
1:A:294:PRO:C	1:A:302:LEU:HD21	0.54	2.27	4	1
1:A:272:VAL:HG13	1:A:273:PRO:HD2	0.54	1.79	10	2
1:A:252:LEU:HD21	1:A:280:LEU:HB2	0.54	1.80	6	1
1:A:293:LEU:CD2	1:A:331:LYS:HB3	0.54	2.33	6	1
1:A:285:ASP:HB3	1:A:289:PHE:CE2	0.54	2.37	6	4
1:A:289:PHE:CB	1:A:353:GLN:CB	0.54	2.85	4	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:306:SER:CB	1:A:356:ILE:HD13	0.54	2.33	9	2
1:A:261:LEU:CD1	1:A:280:LEU:HD21	0.54	2.33	1	2
1:A:234:LEU:HD13	1:A:234:LEU:H	0.54	1.62	5	1
1:A:335:THR:HG22	1:A:339:PHE:CG	0.54	2.38	6	1
1:A:346:LYS:O	1:A:349:LYS:N	0.54	2.39	3	1
1:A:249:LYS:HG2	1:A:280:LEU:HD12	0.54	1.79	7	1
1:A:293:LEU:HG	1:A:331:LYS:HB2	0.53	1.80	3	3
1:A:342:ILE:HD12	1:A:342:ILE:O	0.53	2.03	10	5
1:A:261:LEU:HD12	1:A:261:LEU:C	0.53	2.28	2	3
1:A:276:GLU:CA	1:A:279:ILE:HD12	0.53	2.34	7	2
1:A:288:VAL:HG11	1:A:350:VAL:CG1	0.53	2.33	3	1
1:A:292:LEU:CD2	1:A:292:LEU:O	0.53	2.57	8	1
1:A:289:PHE:CD1	1:A:289:PHE:C	0.53	2.86	2	5
1:A:291:ALA:CA	1:A:333:TRP:HB3	0.53	2.34	8	5
1:A:291:ALA:HB2	1:A:333:TRP:CD2	0.53	2.39	1	2
1:A:264:LEU:HD13	1:A:339:PHE:CE2	0.53	2.38	10	1
1:A:292:LEU:O	1:A:292:LEU:HD23	0.53	2.03	2	2
1:A:334:VAL:O	1:A:334:VAL:CG2	0.53	2.56	5	7
1:A:282:ARG:O	1:A:355:ARG:NH1	0.53	2.41	3	1
1:A:293:LEU:O	1:A:302:LEU:HD21	0.53	2.04	4	2
1:A:293:LEU:HG	1:A:294:PRO:N	0.53	2.19	5	4
1:A:295:CYS:N	1:A:302:LEU:CD1	0.53	2.72	9	8
1:A:264:LEU:HD21	1:A:283:VAL:HG13	0.53	1.80	6	1
1:A:302:LEU:HG	1:A:309:TYR:OH	0.53	2.03	9	2
1:A:300:GLY:HA3	1:A:313:GLY:CA	0.53	2.34	5	8
1:A:244:LEU:HD12	1:A:244:LEU:C	0.53	2.28	2	1
1:A:311:CYS:SG	1:A:323:VAL:HG23	0.53	2.44	3	6
1:A:285:ASP:HB3	1:A:289:PHE:CZ	0.53	2.39	10	3
1:A:285:ASP:O	1:A:289:PHE:HD2	0.53	1.85	8	1
1:A:290:GLY:O	1:A:355:ARG:CZ	0.52	2.58	9	2
1:A:242:ASN:O	1:A:246:TRP:CE3	0.52	2.61	8	1
1:A:286:GLY:O	1:A:291:ALA:HB2	0.52	2.03	6	2
1:A:249:LYS:HA	1:A:284:ALA:HB2	0.52	1.79	8	1
1:A:344:TYR:CZ	1:A:345:LEU:HD23	0.52	2.39	9	1
1:A:300:GLY:HA3	1:A:313:GLY:HA3	0.52	1.79	7	6
1:A:292:LEU:HD12	1:A:304:PHE:CG	0.52	2.39	8	1
1:A:298:CYS:O	1:A:315:VAL:HG23	0.52	2.05	9	1
1:A:326:GLN:CG	1:A:327:THR:N	0.52	2.72	2	3
1:A:302:LEU:N	1:A:302:LEU:HD12	0.52	2.20	2	5
1:A:244:LEU:HD23	1:A:346:LYS:HD3	0.52	1.82	3	1
1:A:350:VAL:O	1:A:350:VAL:HG22	0.52	2.05	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:264:LEU:HD21	1:A:283:VAL:CG1	0.52	2.35	3	2
1:A:293:LEU:C	1:A:293:LEU:HD13	0.52	2.30	1	1
1:A:245:ILE:HD12	1:A:285:ASP:OD1	0.52	2.05	8	1
1:A:304:PHE:CE2	1:A:355:ARG:NH1	0.52	2.78	9	1
1:A:293:LEU:O	1:A:302:LEU:CG	0.51	2.58	5	2
1:A:248:ILE:HG23	1:A:345:LEU:CG	0.51	2.34	6	1
1:A:335:THR:CB	1:A:339:PHE:HB3	0.51	2.35	8	2
1:A:309:TYR:HD2	1:A:325:THR:O	0.51	1.87	8	8
1:A:287:MET:HE3	1:A:342:ILE:CG2	0.51	2.34	6	1
1:A:252:LEU:C	1:A:252:LEU:HD12	0.51	2.31	6	2
1:A:292:LEU:O	1:A:292:LEU:HD13	0.51	2.06	7	2
1:A:293:LEU:HB2	1:A:331:LYS:HB2	0.51	1.82	2	2
1:A:335:THR:O	1:A:336:PRO:O	0.51	2.29	8	8
1:A:255:VAL:HG11	1:A:338:GLU:O	0.51	2.06	9	1
1:A:288:VAL:CG1	1:A:350:VAL:CG1	0.51	2.88	3	1
1:A:289:PHE:CD2	1:A:353:GLN:HB2	0.51	2.41	7	3
1:A:292:LEU:HD12	1:A:328:PRO:HG2	0.51	1.81	2	1
1:A:253:LYS:NZ	1:A:280:LEU:HD22	0.51	2.21	3	1
1:A:240:ALA:O	1:A:244:LEU:HG	0.51	2.06	8	2
1:A:298:CYS:CB	1:A:321:CYS:HB2	0.51	2.36	10	2
1:A:252:LEU:HD12	1:A:261:LEU:HD11	0.51	1.83	10	1
1:A:288:VAL:HG11	1:A:350:VAL:CB	0.50	2.36	3	1
1:A:287:MET:CE	1:A:345:LEU:HD13	0.50	2.30	4	1
1:A:244:LEU:CD2	1:A:348:LEU:HD23	0.50	2.36	5	1
1:A:309:TYR:OH	1:A:311:CYS:HB3	0.50	2.06	2	2
1:A:344:TYR:O	1:A:348:LEU:HD12	0.50	2.06	2	1
1:A:293:LEU:HD22	1:A:293:LEU:N	0.50	2.20	7	1
1:A:305:LYS:HE3	1:A:308:ALA:HB3	0.50	1.84	7	1
1:A:332:GLU:HG2	1:A:342:ILE:HD12	0.50	1.81	10	1
1:A:287:MET:CA	1:A:333:TRP:NE1	0.50	2.74	4	9
1:A:292:LEU:CB	1:A:328:PRO:CB	0.50	2.90	4	2
1:A:295:CYS:SG	1:A:297:GLU:HB3	0.50	2.47	5	6
1:A:258:THR:HA	1:A:261:LEU:CD2	0.50	2.36	8	3
1:A:345:LEU:H	1:A:345:LEU:CD1	0.50	2.18	3	1
1:A:293:LEU:HD23	1:A:331:LYS:HB2	0.50	1.84	7	1
1:A:309:TYR:OH	1:A:323:VAL:CG1	0.50	2.59	8	2
1:A:244:LEU:HD22	1:A:349:LYS:HB2	0.50	1.82	1	2
1:A:264:LEU:HD23	1:A:265:LEU:CD2	0.50	2.36	1	1
1:A:264:LEU:HD12	1:A:336:PRO:HD3	0.50	1.82	3	1
1:A:264:LEU:HD23	1:A:336:PRO:CD	0.50	2.35	9	2
1:A:288:VAL:HG13	1:A:350:VAL:HB	0.50	1.81	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:293:LEU:HD22	1:A:332:GLU:O	0.50	2.06	2	2
1:A:255:VAL:HG11	1:A:341:GLU:OE1	0.50	2.06	5	1
1:A:288:VAL:HG11	1:A:350:VAL:HG21	0.50	1.84	3	1
1:A:298:CYS:HB2	1:A:313:GLY:CA	0.49	2.37	4	7
1:A:304:PHE:CD1	1:A:304:PHE:O	0.49	2.64	5	7
1:A:253:LYS:O	1:A:256:CYS:O	0.49	2.30	9	2
1:A:333:TRP:N	1:A:333:TRP:CD1	0.49	2.76	10	2
1:A:287:MET:HE1	1:A:342:ILE:CG2	0.49	2.36	9	1
1:A:309:TYR:HB3	1:A:326:GLN:O	0.49	2.07	4	4
1:A:245:ILE:CG2	1:A:246:TRP:CE3	0.49	2.95	8	1
1:A:290:GLY:O	1:A:355:ARG:NE	0.49	2.45	9	1
1:A:292:LEU:O	1:A:292:LEU:HD22	0.49	2.06	10	1
1:A:287:MET:HE1	1:A:343:SER:HB3	0.49	1.84	3	1
1:A:287:MET:HB3	1:A:333:TRP:CZ2	0.49	2.43	3	1
1:A:256:CYS:HB3	1:A:261:LEU:HD12	0.49	1.84	5	1
1:A:293:LEU:HB3	1:A:331:LYS:HB3	0.49	1.83	4	3
1:A:311:CYS:CB	1:A:323:VAL:HG22	0.49	2.37	9	1
1:A:298:CYS:O	1:A:314:ASP:N	0.49	2.46	8	7
1:A:287:MET:HE1	1:A:343:SER:CB	0.49	2.37	3	1
1:A:288:VAL:HG11	1:A:349:LYS:O	0.49	2.07	1	4
1:A:293:LEU:HD11	1:A:332:GLU:O	0.49	2.08	7	1
1:A:302:LEU:CD1	1:A:302:LEU:N	0.49	2.76	7	3
1:A:311:CYS:SG	1:A:323:VAL:HB	0.49	2.48	10	1
1:A:244:LEU:HD23	1:A:348:LEU:HD23	0.49	1.84	5	1
1:A:288:VAL:HG22	1:A:350:VAL:HG22	0.49	1.84	10	1
1:A:244:LEU:HD13	1:A:349:LYS:CD	0.49	2.37	1	3
1:A:248:ILE:HG23	1:A:345:LEU:HG	0.49	1.85	6	2
1:A:287:MET:HA	1:A:333:TRP:CE2	0.49	2.43	3	2
1:A:264:LEU:HG	1:A:339:PHE:CZ	0.49	2.43	9	1
1:A:267:PHE:CZ	1:A:334:VAL:HG22	0.49	2.43	8	1
1:A:291:ALA:HB1	1:A:333:TRP:CE3	0.49	2.42	1	2
1:A:256:CYS:SG	1:A:339:PHE:CD2	0.49	3.02	2	6
1:A:289:PHE:CZ	1:A:354:ASP:C	0.49	2.91	5	4
1:A:295:CYS:CA	1:A:302:LEU:HD11	0.48	2.37	9	4
1:A:292:LEU:HB2	1:A:302:LEU:CD1	0.48	2.38	5	1
1:A:292:LEU:HB3	1:A:328:PRO:CG	0.48	2.38	5	2
1:A:295:CYS:C	1:A:297:GLU:N	0.48	2.69	10	2
1:A:289:PHE:CE1	1:A:355:ARG:N	0.48	2.80	7	1
1:A:302:LEU:HG	1:A:309:TYR:CE1	0.48	2.43	10	4
1:A:310:TYR:CZ	1:A:324:LYS:CG	0.48	2.97	9	4
1:A:242:ASN:O	1:A:246:TRP:HE3	0.48	1.91	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:252:LEU:CD1	1:A:261:LEU:HD11	0.48	2.38	10	1
1:A:333:TRP:H	1:A:333:TRP:HD1	0.48	1.50	4	3
1:A:292:LEU:HD13	1:A:304:PHE:CD1	0.48	2.43	4	1
1:A:245:ILE:HG22	1:A:246:TRP:N	0.48	2.23	9	2
1:A:261:LEU:HD11	1:A:276:GLU:HG3	0.48	1.82	6	2
1:A:280:LEU:HD12	1:A:280:LEU:C	0.48	2.33	2	4
1:A:295:CYS:N	1:A:302:LEU:HD21	0.48	2.24	4	1
1:A:304:PHE:CD2	1:A:328:PRO:CD	0.48	2.96	7	1
1:A:345:LEU:HA	1:A:348:LEU:HD21	0.48	1.86	10	1
1:A:288:VAL:CG1	1:A:350:VAL:HG12	0.48	2.39	2	1
1:A:293:LEU:CG	1:A:331:LYS:HB2	0.48	2.39	10	3
1:A:256:CYS:SG	1:A:339:PHE:CE2	0.48	3.05	7	1
1:A:304:PHE:CE1	1:A:355:ARG:NH2	0.48	2.81	9	1
1:A:311:CYS:SG	1:A:323:VAL:CG1	0.48	2.97	9	1
1:A:310:TYR:CD1	1:A:310:TYR:N	0.48	2.81	4	2
1:A:284:ALA:HA	1:A:287:MET:HG3	0.48	1.85	10	1
1:A:289:PHE:HB2	1:A:353:GLN:C	0.48	2.34	10	1
1:A:335:THR:CG2	1:A:339:PHE:HB3	0.48	2.39	7	1
1:A:344:TYR:CZ	1:A:345:LEU:CD1	0.48	2.96	7	1
1:A:346:LYS:O	1:A:350:VAL:HB	0.48	2.09	10	2
1:A:273:PRO:C	1:A:275:GLY:N	0.47	2.72	2	6
1:A:317:ALA:HB3	1:A:318:TRP:CE2	0.47	2.44	8	6
1:A:249:LYS:HA	1:A:252:LEU:HD21	0.47	1.86	4	1
1:A:289:PHE:CE1	1:A:355:ARG:CA	0.47	2.97	7	2
1:A:265:LEU:HD11	1:A:356:ILE:CD1	0.47	2.39	8	1
1:A:298:CYS:CB	1:A:321:CYS:CB	0.47	2.91	9	2
1:A:348:LEU:HG	1:A:349:LYS:N	0.47	2.24	4	1
1:A:293:LEU:HD13	1:A:331:LYS:CB	0.47	2.39	5	1
1:A:245:ILE:O	1:A:249:LYS:HG3	0.47	2.08	9	1
1:A:348:LEU:CD1	1:A:348:LEU:N	0.47	2.77	9	1
1:A:263:GLU:HA	1:A:266:ILE:HD12	0.47	1.87	2	2
1:A:264:LEU:HD12	1:A:267:PHE:CE2	0.47	2.44	3	1
1:A:345:LEU:N	1:A:345:LEU:HD22	0.47	2.24	3	1
1:A:344:TYR:HD1	1:A:345:LEU:HD22	0.47	1.68	8	1
1:A:311:CYS:HB3	1:A:323:VAL:HG22	0.47	1.85	9	1
1:A:345:LEU:O	1:A:350:VAL:HG23	0.47	2.09	10	1
1:A:287:MET:HE2	1:A:345:LEU:HD22	0.47	1.87	1	1
1:A:298:CYS:SG	1:A:313:GLY:N	0.47	2.87	3	7
1:A:289:PHE:CD1	1:A:290:GLY:N	0.47	2.82	2	6
1:A:289:PHE:CE2	1:A:355:ARG:N	0.47	2.83	8	1
1:A:341:GLU:O	1:A:344:TYR:CD1	0.47	2.68	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:289:PHE:HB2	1:A:353:GLN:CB	0.47	2.39	2	3
1:A:246:TRP:CE3	1:A:246:TRP:C	0.47	2.93	9	2
1:A:263:GLU:O	1:A:266:ILE:CG1	0.47	2.62	5	1
1:A:261:LEU:HD21	1:A:280:LEU:HD23	0.47	1.87	9	1
1:A:252:LEU:HD11	1:A:280:LEU:HB3	0.47	1.87	1	1
1:A:287:MET:CB	1:A:333:TRP:NE1	0.47	2.78	3	3
1:A:327:THR:HG22	1:A:355:ARG:NE	0.47	2.24	8	1
1:A:355:ARG:HG2	1:A:356:ILE:HG22	0.47	1.86	10	1
1:A:289:PHE:HB2	1:A:353:GLN:H	0.47	1.69	2	2
1:A:285:ASP:CB	1:A:289:PHE:CE2	0.47	2.98	7	2
1:A:315:VAL:HG12	1:A:319:THR:HG1	0.47	1.70	9	1
1:A:248:ILE:CD1	1:A:343:SER:O	0.47	2.63	3	1
1:A:293:LEU:O	1:A:302:LEU:CD1	0.47	2.63	5	2
1:A:311:CYS:O	1:A:321:CYS:O	0.47	2.33	9	1
1:A:285:ASP:O	1:A:289:PHE:CE2	0.47	2.68	3	3
1:A:345:LEU:HD13	1:A:345:LEU:N	0.47	2.22	3	1
1:A:244:LEU:C	1:A:244:LEU:HD12	0.47	2.35	4	1
1:A:348:LEU:N	1:A:348:LEU:HD13	0.47	2.25	9	1
1:A:292:LEU:CD1	1:A:302:LEU:O	0.46	2.63	4	2
1:A:265:LEU:CD2	1:A:283:VAL:CG2	0.46	2.93	10	2
1:A:344:TYR:CD2	1:A:348:LEU:HD11	0.46	2.45	2	1
1:A:292:LEU:HD13	1:A:304:PHE:HD1	0.46	1.69	5	1
1:A:246:TRP:HA	1:A:249:LYS:HG3	0.46	1.87	9	1
1:A:293:LEU:CB	1:A:294:PRO:CD	0.46	2.92	2	1
1:A:253:LYS:HA	1:A:256:CYS:O	0.46	2.10	8	3
1:A:293:LEU:HB3	1:A:331:LYS:HB2	0.46	1.87	8	3
1:A:298:CYS:HB3	1:A:321:CYS:CA	0.46	2.41	2	7
1:A:292:LEU:HD12	1:A:292:LEU:N	0.46	2.25	6	2
1:A:243:ASP:HA	1:A:246:TRP:CE3	0.46	2.45	2	1
1:A:289:PHE:CG	1:A:353:GLN:O	0.46	2.68	3	1
1:A:289:PHE:CZ	1:A:353:GLN:O	0.46	2.69	8	1
1:A:304:PHE:HB2	1:A:309:TYR:CA	0.46	2.40	4	7
1:A:255:VAL:CG1	1:A:338:GLU:CB	0.46	2.93	3	1
1:A:355:ARG:O	1:A:356:ILE:C	0.46	2.59	10	2
1:A:287:MET:HG3	1:A:345:LEU:HD23	0.46	1.86	1	1
1:A:288:VAL:CG1	1:A:350:VAL:CB	0.46	2.94	3	1
1:A:234:LEU:HD22	1:A:234:LEU:N	0.46	2.26	5	1
1:A:248:ILE:CG2	1:A:345:LEU:HD23	0.46	2.40	6	1
1:A:311:CYS:SG	1:A:323:VAL:CG2	0.46	3.04	10	2
1:A:267:PHE:CE1	1:A:334:VAL:CG2	0.46	2.99	1	2
1:A:283:VAL:HG23	1:A:284:ALA:N	0.46	2.26	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:309:TYR:CD2	1:A:325:THR:HB	0.46	2.46	6	6
1:A:309:TYR:HB2	1:A:328:PRO:HG3	0.46	1.88	4	1
1:A:288:VAL:O	1:A:350:VAL:HG23	0.46	2.11	6	1
1:A:293:LEU:HD22	1:A:294:PRO:O	0.45	2.11	3	2
1:A:345:LEU:HD23	1:A:345:LEU:N	0.45	2.25	4	1
1:A:344:TYR:CE2	1:A:345:LEU:CD1	0.45	2.98	7	1
1:A:244:LEU:HD12	1:A:351:LYS:HG3	0.45	1.87	8	1
1:A:276:GLU:HA	1:A:279:ILE:CB	0.45	2.38	10	6
1:A:344:TYR:CE1	1:A:345:LEU:CD1	0.45	2.98	2	1
1:A:286:GLY:CA	1:A:355:ARG:CD	0.45	2.94	3	1
1:A:309:TYR:CG	1:A:328:PRO:HA	0.45	2.45	5	2
1:A:310:TYR:CZ	1:A:324:LYS:HG3	0.45	2.46	7	1
1:A:334:VAL:HG22	1:A:334:VAL:O	0.45	2.10	8	1
1:A:292:LEU:CD2	1:A:302:LEU:O	0.45	2.61	9	1
1:A:244:LEU:HD13	1:A:349:LYS:CB	0.45	2.41	8	4
1:A:287:MET:CB	1:A:342:ILE:HD13	0.45	2.40	6	2
1:A:251:GLU:HG3	1:A:252:LEU:N	0.45	2.27	6	1
1:A:333:TRP:CD1	1:A:333:TRP:N	0.45	2.84	9	6
1:A:334:VAL:O	1:A:334:VAL:HG22	0.45	2.10	9	6
1:A:252:LEU:HD11	1:A:284:ALA:CB	0.45	2.40	7	2
1:A:248:ILE:CD1	1:A:345:LEU:HD12	0.45	2.34	8	2
1:A:248:ILE:HD11	1:A:348:LEU:CD1	0.45	2.41	10	1
1:A:252:LEU:HD12	1:A:252:LEU:C	0.45	2.36	1	1
1:A:268:ASN:O	1:A:269:LYS:HB2	0.45	2.12	6	1
1:A:289:PHE:CE1	1:A:354:ASP:C	0.45	2.95	7	1
1:A:297:GLU:HB2	1:A:321:CYS:SG	0.45	2.52	3	1
1:A:264:LEU:HD23	1:A:265:LEU:N	0.45	2.27	10	1
1:A:272:VAL:HG22	1:A:274:SER:N	0.45	2.27	7	3
1:A:335:THR:HB	1:A:339:PHE:C	0.45	2.37	5	3
1:A:287:MET:HE1	1:A:343:SER:C	0.45	2.36	3	1
1:A:346:LYS:O	1:A:350:VAL:CG1	0.45	2.64	9	1
1:A:261:LEU:HD23	1:A:276:GLU:OE2	0.45	2.12	10	1
1:A:348:LEU:HD12	1:A:349:LYS:H	0.45	1.72	10	1
1:A:293:LEU:CD1	1:A:332:GLU:O	0.45	2.61	2	1
1:A:288:VAL:CG1	1:A:289:PHE:N	0.45	2.80	3	1
1:A:264:LEU:O	1:A:264:LEU:HD22	0.45	2.12	9	1
1:A:345:LEU:HA	1:A:348:LEU:HD11	0.45	1.87	10	1
1:A:264:LEU:HA	1:A:267:PHE:CD2	0.45	2.47	1	3
1:A:252:LEU:HD12	1:A:284:ALA:HB2	0.45	1.89	3	2
1:A:335:THR:HB	1:A:339:PHE:CG	0.45	2.47	8	1
1:A:293:LEU:HG	1:A:331:LYS:HB3	0.44	1.89	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:252:LEU:HB2	1:A:339:PHE:CE1	0.44	2.47	1	2
1:A:317:ALA:HB3	1:A:318:TRP:CH2	0.44	2.47	4	1
1:A:341:GLU:O	1:A:344:TYR:CZ	0.44	2.71	6	1
1:A:245:ILE:CG2	1:A:246:TRP:CZ3	0.44	2.99	8	1
1:A:316:THR:HG22	1:A:318:TRP:CE3	0.44	2.46	1	1
1:A:280:LEU:HA	1:A:283:VAL:HG23	0.44	1.90	2	2
1:A:298:CYS:O	1:A:299:SER:C	0.44	2.59	2	5
1:A:292:LEU:N	1:A:333:TRP:HB3	0.44	2.28	9	2
1:A:311:CYS:SG	1:A:323:VAL:N	0.44	2.90	5	2
1:A:295:CYS:N	1:A:302:LEU:CD2	0.44	2.81	4	1
1:A:248:ILE:CD1	1:A:288:VAL:HG21	0.44	2.43	4	1
1:A:307:ASP:O	1:A:326:GLN:NE2	0.44	2.51	6	2
1:A:293:LEU:HB2	1:A:294:PRO:HD2	0.44	1.89	1	1
1:A:289:PHE:HB2	1:A:352:LYS:HA	0.44	1.89	3	1
1:A:285:ASP:OD2	1:A:354:ASP:N	0.44	2.51	8	1
1:A:266:ILE:HG13	1:A:267:PHE:N	0.44	2.28	5	1
1:A:293:LEU:CB	1:A:331:LYS:CB	0.44	2.96	8	3
1:A:252:LEU:HD21	1:A:287:MET:SD	0.44	2.53	7	1
1:A:252:LEU:CD2	1:A:280:LEU:O	0.44	2.65	8	2
1:A:288:VAL:CG1	1:A:349:LYS:O	0.44	2.66	9	1
1:A:302:LEU:CD2	1:A:329:ASN:CB	0.44	2.95	6	4
1:A:288:VAL:HG22	1:A:350:VAL:HG12	0.44	1.89	2	1
1:A:285:ASP:C	1:A:289:PHE:CE2	0.44	2.96	5	3
1:A:289:PHE:HZ	1:A:355:ARG:HA	0.44	1.72	6	1
1:A:289:PHE:CZ	1:A:355:ARG:N	0.44	2.86	8	1
1:A:289:PHE:C	1:A:289:PHE:HD1	0.44	2.20	2	1
1:A:292:LEU:N	1:A:292:LEU:HD22	0.44	2.27	2	1
1:A:284:ALA:O	1:A:287:MET:CG	0.44	2.64	3	1
1:A:287:MET:HG3	1:A:288:VAL:N	0.44	2.27	4	1
1:A:302:LEU:HA	1:A:311:CYS:HA	0.44	1.90	5	2
1:A:248:ILE:HD13	1:A:345:LEU:HB3	0.44	1.89	6	1
1:A:310:TYR:CZ	1:A:324:LYS:HG2	0.44	2.48	9	2
1:A:292:LEU:HD23	1:A:292:LEU:O	0.43	2.13	1	2
1:A:309:TYR:OH	1:A:323:VAL:CG2	0.43	2.66	9	2
1:A:293:LEU:O	1:A:302:LEU:CD2	0.43	2.66	4	1
1:A:290:GLY:HA2	1:A:330:ARG:CG	0.43	2.42	5	1
1:A:346:LYS:C	1:A:350:VAL:CG2	0.43	2.91	8	1
1:A:293:LEU:CD2	1:A:294:PRO:HD2	0.43	2.43	1	1
1:A:293:LEU:CB	1:A:331:LYS:HB3	0.43	2.43	9	1
1:A:298:CYS:O	1:A:314:ASP:O	0.43	2.37	7	3
1:A:272:VAL:CG1	1:A:273:PRO:HD2	0.43	2.43	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:288:VAL:O	1:A:350:VAL:HG12	0.43	2.13	7	1
1:A:298:CYS:HB2	1:A:321:CYS:HB2	0.43	1.86	10	1
1:A:356:ILE:HG12	1:A:356:ILE:O	0.43	2.12	5	2
1:A:302:LEU:CD2	1:A:329:ASN:H	0.43	2.26	1	1
1:A:289:PHE:CE2	1:A:354:ASP:O	0.43	2.71	2	2
1:A:287:MET:HB3	1:A:333:TRP:NE1	0.43	2.28	3	2
1:A:317:ALA:C	1:A:318:TRP:CG	0.43	2.95	7	7
1:A:346:LYS:O	1:A:349:LYS:C	0.43	2.62	3	1
1:A:244:LEU:O	1:A:248:ILE:HG13	0.43	2.14	6	1
1:A:333:TRP:CD1	1:A:333:TRP:C	0.43	2.95	3	1
1:A:288:VAL:CG1	1:A:350:VAL:CA	0.43	2.95	9	1
1:A:292:LEU:HB3	1:A:328:PRO:HG3	0.43	1.91	5	1
1:A:288:VAL:HG13	1:A:350:VAL:CG1	0.43	2.44	7	1
1:A:288:VAL:HG11	1:A:350:VAL:HA	0.43	1.90	9	1
1:A:261:LEU:CD1	1:A:280:LEU:CD2	0.43	2.97	4	2
1:A:290:GLY:HA2	1:A:330:ARG:CB	0.43	2.44	1	1
1:A:346:LYS:O	1:A:350:VAL:CG2	0.43	2.60	8	2
1:A:302:LEU:HB2	1:A:309:TYR:CE1	0.43	2.49	5	1
1:A:335:THR:HG23	1:A:339:PHE:HB3	0.43	1.90	7	1
1:A:316:THR:HB	1:A:319:THR:CG2	0.43	2.44	9	1
1:A:256:CYS:C	1:A:261:LEU:HD13	0.43	2.39	10	1
1:A:267:PHE:CE2	1:A:336:PRO:CD	0.43	3.00	10	1
1:A:313:GLY:O	1:A:320:LYS:CB	0.43	2.66	8	3
1:A:286:GLY:O	1:A:290:GLY:C	0.43	2.61	3	2
1:A:291:ALA:O	1:A:331:LYS:O	0.43	2.37	3	2
1:A:298:CYS:C	1:A:315:VAL:HG23	0.43	2.39	9	1
1:A:317:ALA:HB3	1:A:318:TRP:CZ2	0.43	2.49	8	3
1:A:317:ALA:HB3	1:A:318:TRP:CZ3	0.43	2.48	4	1
1:A:244:LEU:O	1:A:248:ILE:HG12	0.43	2.14	10	2
1:A:344:TYR:CE2	1:A:345:LEU:CD2	0.43	3.02	9	1
1:A:285:ASP:CG	1:A:289:PHE:CE2	0.43	2.97	10	1
1:A:292:LEU:HD13	1:A:304:PHE:HB3	0.42	1.90	1	1
1:A:287:MET:N	1:A:333:TRP:CZ2	0.42	2.87	4	2
1:A:304:PHE:CD2	1:A:305:LYS:O	0.42	2.72	9	2
1:A:304:PHE:CD2	1:A:328:PRO:HG3	0.42	2.49	1	1
1:A:265:LEU:HD21	1:A:283:VAL:CG1	0.42	2.43	3	1
1:A:288:VAL:HA	1:A:345:LEU:HD12	0.42	1.90	4	1
1:A:293:LEU:CB	1:A:294:PRO:HD2	0.42	2.44	4	2
1:A:304:PHE:O	1:A:304:PHE:CG	0.42	2.67	5	1
1:A:261:LEU:O	1:A:279:ILE:CG2	0.42	2.66	7	1
1:A:261:LEU:HD12	1:A:276:GLU:OE2	0.42	2.13	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:245:ILE:HD11	1:A:353:GLN:CB	0.42	2.33	8	1
1:A:272:VAL:HG13	1:A:275:GLY:HA3	0.42	1.88	3	1
1:A:288:VAL:CG1	1:A:350:VAL:HB	0.42	2.45	3	1
1:A:304:PHE:CD1	1:A:328:PRO:HG3	0.42	2.49	5	1
1:A:266:ILE:C	1:A:269:LYS:H	0.42	2.22	9	2
1:A:293:LEU:HB3	1:A:294:PRO:HD2	0.42	1.91	7	1
1:A:292:LEU:H	1:A:292:LEU:CD1	0.42	2.19	9	1
1:A:346:LYS:O	1:A:350:VAL:CB	0.42	2.68	9	1
1:A:289:PHE:CE1	1:A:355:ARG:CB	0.42	3.02	10	1
1:A:289:PHE:HA	1:A:350:VAL:HG23	0.42	1.90	1	1
1:A:321:CYS:SG	1:A:323:VAL:HG23	0.42	2.55	2	2
1:A:289:PHE:CB	1:A:353:GLN:HB3	0.42	2.44	10	2
1:A:306:SER:O	1:A:307:ASP:CG	0.42	2.63	9	2
1:A:242:ASN:O	1:A:246:TRP:NE1	0.42	2.53	2	1
1:A:309:TYR:CD1	1:A:328:PRO:HB3	0.42	2.50	2	1
1:A:310:TYR:CE1	1:A:324:LYS:HG2	0.42	2.49	3	1
1:A:290:GLY:O	1:A:355:ARG:CD	0.42	2.66	6	1
1:A:244:LEU:HD22	1:A:349:LYS:HG3	0.42	1.91	8	1
1:A:289:PHE:HB2	1:A:353:GLN:N	0.42	2.29	2	1
1:A:261:LEU:HD22	1:A:280:LEU:CA	0.42	2.44	3	1
1:A:292:LEU:HD22	1:A:303:VAL:HA	0.42	1.91	7	1
1:A:344:TYR:CD2	1:A:348:LEU:CD2	0.42	3.02	10	1
1:A:265:LEU:HD23	1:A:279:ILE:HG12	0.42	1.91	1	1
1:A:252:LEU:CB	1:A:339:PHE:CE1	0.42	3.02	4	1
1:A:293:LEU:N	1:A:293:LEU:CD2	0.42	2.82	7	1
1:A:336:PRO:O	1:A:339:PHE:HB2	0.42	2.15	7	1
1:A:249:LYS:HG3	1:A:250:ASP:N	0.42	2.30	1	1
1:A:276:GLU:HA	1:A:279:ILE:CG1	0.42	2.45	5	1
1:A:288:VAL:HA	1:A:346:LYS:HB3	0.42	1.92	7	2
1:A:248:ILE:HD12	1:A:288:VAL:HG21	0.42	1.92	9	1
1:A:287:MET:CE	1:A:345:LEU:HD22	0.42	2.45	1	1
1:A:295:CYS:SG	1:A:297:GLU:CG	0.42	3.08	7	1
1:A:288:VAL:CB	1:A:350:VAL:HG22	0.42	2.44	10	1
1:A:242:ASN:O	1:A:246:TRP:CD1	0.42	2.73	2	1
1:A:293:LEU:CD1	1:A:331:LYS:HG2	0.42	2.44	4	1
1:A:339:PHE:O	1:A:342:ILE:CG1	0.42	2.68	9	1
1:A:258:THR:HA	1:A:261:LEU:HD21	0.41	1.91	2	2
1:A:304:PHE:CG	1:A:328:PRO:HG3	0.41	2.50	4	1
1:A:289:PHE:CE2	1:A:353:GLN:C	0.41	2.98	9	1
1:A:347:LYS:HG3	1:A:348:LEU:N	0.41	2.31	3	1
1:A:248:ILE:HD12	1:A:345:LEU:HB3	0.41	1.92	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:295:CYS:C	1:A:297:GLU:H	0.41	2.23	9	2
1:A:293:LEU:CG	1:A:294:PRO:CD	0.41	2.97	2	1
1:A:261:LEU:HD22	1:A:280:LEU:CB	0.41	2.45	3	1
1:A:252:LEU:HD11	1:A:261:LEU:HD21	0.41	1.92	9	1
1:A:344:TYR:CG	1:A:345:LEU:N	0.41	2.88	9	1
1:A:283:VAL:O	1:A:287:MET:HG2	0.41	2.15	2	1
1:A:263:GLU:O	1:A:266:ILE:HG12	0.41	2.15	5	1
1:A:287:MET:HG2	1:A:333:TRP:CZ2	0.41	2.50	5	1
1:A:342:ILE:HG12	1:A:343:SER:N	0.41	2.30	7	1
1:A:289:PHE:CE2	1:A:354:ASP:C	0.41	2.98	9	1
1:A:272:VAL:O	1:A:275:GLY:CA	0.41	2.68	7	1
1:A:267:PHE:HZ	1:A:334:VAL:O	0.41	1.99	8	1
1:A:289:PHE:HB2	1:A:353:GLN:CA	0.41	2.45	4	1
1:A:285:ASP:OD1	1:A:353:GLN:CG	0.41	2.69	5	1
1:A:311:CYS:SG	1:A:323:VAL:CB	0.41	3.09	10	1
1:A:291:ALA:HB3	1:A:333:TRP:N	0.41	2.30	2	2
1:A:340:ARG:O	1:A:344:TYR:CE1	0.41	2.74	3	1
1:A:342:ILE:CB	1:A:345:LEU:HD23	0.41	2.39	8	1
1:A:289:PHE:CD2	1:A:354:ASP:O	0.41	2.73	10	1
1:A:267:PHE:CZ	1:A:268:ASN:OD1	0.41	2.74	10	1
1:A:248:ILE:HD13	1:A:345:LEU:HG	0.41	1.92	1	1
1:A:249:LYS:O	1:A:252:LEU:HG	0.41	2.16	1	1
1:A:298:CYS:HB3	1:A:321:CYS:N	0.41	2.31	2	4
1:A:310:TYR:OH	1:A:324:LYS:CD	0.41	2.69	1	1
1:A:288:VAL:CB	1:A:350:VAL:HG12	0.41	2.45	2	1
1:A:292:LEU:HD12	1:A:328:PRO:CG	0.41	2.46	2	1
1:A:288:VAL:HG11	1:A:350:VAL:CG2	0.41	2.45	3	1
1:A:279:ILE:O	1:A:283:VAL:HB	0.41	2.16	9	2
1:A:350:VAL:O	1:A:350:VAL:CG1	0.41	2.68	4	1
1:A:252:LEU:HG	1:A:253:LYS:N	0.41	2.31	6	1
1:A:245:ILE:CD1	1:A:285:ASP:OD1	0.41	2.68	9	2
1:A:293:LEU:HD23	1:A:331:LYS:CB	0.41	2.45	7	1
1:A:293:LEU:CD2	1:A:332:GLU:O	0.41	2.59	7	1
1:A:300:GLY:HA2	1:A:313:GLY:HA3	0.41	1.91	10	2
1:A:289:PHE:HD1	1:A:289:PHE:C	0.41	2.24	10	1
1:A:265:LEU:CD2	1:A:283:VAL:CG1	0.41	2.99	3	1
1:A:288:VAL:HG13	1:A:349:LYS:O	0.41	2.16	4	1
1:A:307:ASP:N	1:A:307:ASP:OD1	0.41	2.54	4	1
1:A:316:THR:CB	1:A:319:THR:HG21	0.41	2.45	9	1
1:A:318:TRP:CE3	1:A:318:TRP:HA	0.41	2.50	9	1
1:A:272:VAL:HG23	1:A:273:PRO:CD	0.40	2.45	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:263:GLU:HA	1:A:266:ILE:HG12	0.40	1.93	5	1
1:A:342:ILE:C	1:A:342:ILE:CD1	0.40	2.91	5	1
1:A:285:ASP:HB3	1:A:354:ASP:O	0.40	2.15	8	1
1:A:264:LEU:O	1:A:267:PHE:CB	0.40	2.69	9	1
1:A:341:GLU:O	1:A:344:TYR:CE1	0.40	2.74	9	1
1:A:243:ASP:HA	1:A:246:TRP:CZ3	0.40	2.51	2	1
1:A:292:LEU:CD2	1:A:303:VAL:HA	0.40	2.46	7	1
1:A:289:PHE:CE1	1:A:355:ARG:HB2	0.40	2.52	10	1
1:A:302:LEU:HD21	1:A:329:ASN:CB	0.40	2.46	1	1
1:A:356:ILE:O	1:A:356:ILE:CG2	0.40	2.69	4	1
1:A:337:LYS:O	1:A:340:ARG:CG	0.40	2.69	5	1
1:A:342:ILE:CA	1:A:345:LEU:HD11	0.40	2.46	5	1
1:A:244:LEU:CB	1:A:349:LYS:CB	0.40	2.98	6	1
1:A:292:LEU:HD12	1:A:292:LEU:H	0.40	1.76	7	1
1:A:264:LEU:HD12	1:A:283:VAL:HG11	0.40	1.92	9	1
1:A:263:GLU:O	1:A:266:ILE:CG2	0.40	2.68	1	1
1:A:286:GLY:HA3	1:A:333:TRP:CH2	0.40	2.51	2	1
1:A:302:LEU:HB3	1:A:309:TYR:HE1	0.40	1.76	4	1
1:A:248:ILE:HD13	1:A:345:LEU:HB2	0.40	1.92	5	1
1:A:344:TYR:O	1:A:348:LEU:CD1	0.40	2.66	7	1
1:A:287:MET:CE	1:A:345:LEU:CD2	0.40	2.97	1	1
1:A:261:LEU:HD13	1:A:279:ILE:HB	0.40	1.93	6	1
1:A:339:PHE:O	1:A:342:ILE:CD1	0.40	2.70	7	1
1:A:292:LEU:HG	1:A:302:LEU:O	0.40	2.17	8	1
1:A:336:PRO:O	1:A:340:ARG:N	0.40	2.55	8	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	123/126 (98%)	106±2 (86±2%)	12±2 (10±2%)	5±1 (4±1%)	3	28
All	All	1230/1260 (98%)	1058 (86%)	119 (10%)	53 (4%)	3	28

All 13 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	276	GLU	10
1	A	336	PRO	10
1	A	356	ILE	9
1	A	352	LYS	6
1	A	343	SER	4
1	A	290	GLY	3
1	A	326	GLN	3
1	A	348	LEU	2
1	A	342	ILE	2
1	A	341	GLU	1
1	A	350	VAL	1
1	A	340	ARG	1
1	A	317	ALA	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	112/114 (98%)	58±4 (52±4%)	54±4 (48±4%)	0	1
All	All	1120/1140 (98%)	579 (52%)	541 (48%)	0	1

All 97 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	264	LEU	10
1	A	265	LEU	10
1	A	304	PHE	10
1	A	309	TYR	10
1	A	320	LYS	10
1	A	334	VAL	10
1	A	337	LYS	10
1	A	245	ILE	9
1	A	269	LYS	9
1	A	293	LEU	9
1	A	318	TRP	9
1	A	341	GLU	9
1	A	234	LEU	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	236	LYS	8
1	A	251	GLU	8
1	A	272	VAL	8
1	A	295	CYS	8
1	A	315	VAL	8
1	A	321	CYS	8
1	A	331	LYS	8
1	A	333	TRP	8
1	A	299	SER	8
1	A	325	THR	8
1	A	233	LYS	7
1	A	239	LYS	7
1	A	253	LYS	7
1	A	262	LYS	7
1	A	292	LEU	7
1	A	316	THR	7
1	A	335	THR	7
1	A	344	TYR	7
1	A	351	LYS	7
1	A	353	GLN	7
1	A	307	ASP	7
1	A	346	LYS	7
1	A	326	GLN	7
1	A	257	SER	6
1	A	270	GLN	6
1	A	271	GLN	6
1	A	285	ASP	6
1	A	319	THR	6
1	A	324	LYS	6
1	A	348	LEU	6
1	A	352	LYS	6
1	A	252	LEU	6
1	A	339	PHE	6
1	A	343	SER	6
1	A	345	LEU	6
1	A	347	LYS	6
1	A	349	LYS	6
1	A	355	ARG	6
1	A	332	GLU	6
1	A	247	ASN	5
1	A	249	LYS	5
1	A	266	ILE	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	276	GLU	5
1	A	287	MET	5
1	A	330	ARG	5
1	A	338	GLU	5
1	A	255	VAL	5
1	A	282	ARG	5
1	A	289	PHE	5
1	A	254	LYS	5
1	A	322	MET	5
1	A	235	GLU	4
1	A	244	LEU	4
1	A	340	ARG	4
1	A	350	VAL	4
1	A	238	LEU	4
1	A	242	ASN	4
1	A	268	ASN	4
1	A	302	LEU	4
1	A	259	ASN	4
1	A	356	ILE	4
1	A	277	SER	3
1	A	280	LEU	3
1	A	297	GLU	3
1	A	354	ASP	3
1	A	263	GLU	3
1	A	342	ILE	3
1	A	301	GLN	3
1	A	314	ASP	3
1	A	274	SER	3
1	A	267	PHE	3
1	A	305	LYS	3
1	A	283	VAL	2
1	A	288	VAL	2
1	A	296	GLU	2
1	A	327	THR	2
1	A	243	ASP	2
1	A	298	CYS	2
1	A	246	TRP	1
1	A	281	ASP	1
1	A	329	ASN	1
1	A	241	GLN	1
1	A	248	ILE	1
1	A	261	LEU	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

6.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains [i](#)

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no 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