



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 03:50 AM UTC

PDB ID : 2K18 / pdb_00002k18
Title : Solution structure of bb' domains of human protein disulfide isomerase
Authors : Denisov, A.Y.; Maattanen, P.; Dabrowski, C.; Kozlov, G.; Thomas, D.Y.; Gehring, K.
Deposited on : 2008-02-22

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

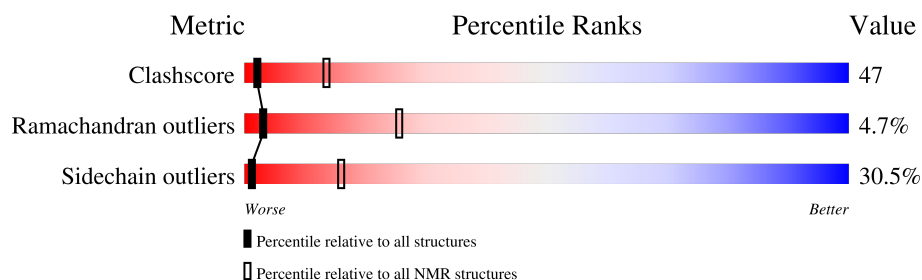
1 Overall quality at a glance

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	228	25% 51% 11% • 13%

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: *lowest energy*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:6-A:133, A:148-A:191, A:196-A:221 (198)	0.84	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 4 clusters. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 3, 7
2	2, 4, 5
3	8, 9
4	6, 10

3 Entry composition

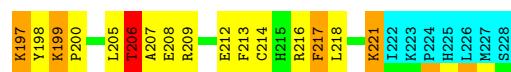
There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3588 atoms, of which 1785 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Protein disulfide-isomerase.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	228	Total	C	H	N	O	S	0
			3588	1158	1785	287	354	4	

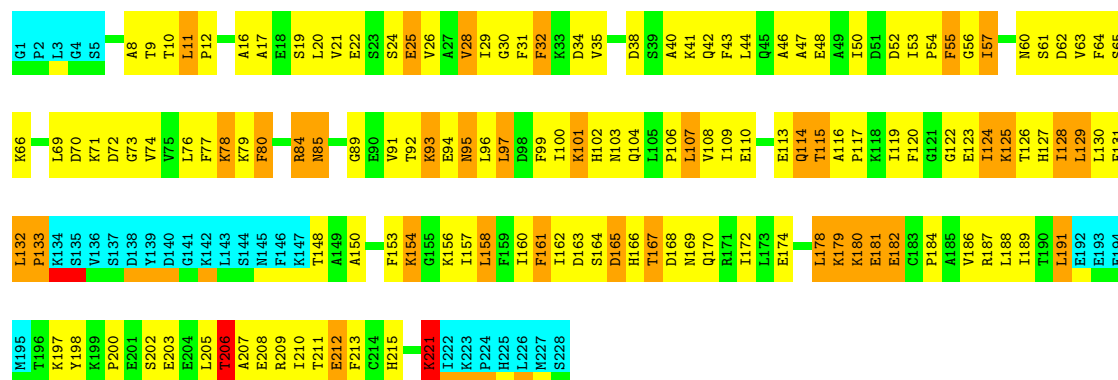
There are 5 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1	GLY	-	expression tag	UNP P07237
A	2	PRO	-	expression tag	UNP P07237
A	3	LEU	-	expression tag	UNP P07237
A	4	GLY	-	expression tag	UNP P07237
A	5	SER	-	expression tag	UNP P07237



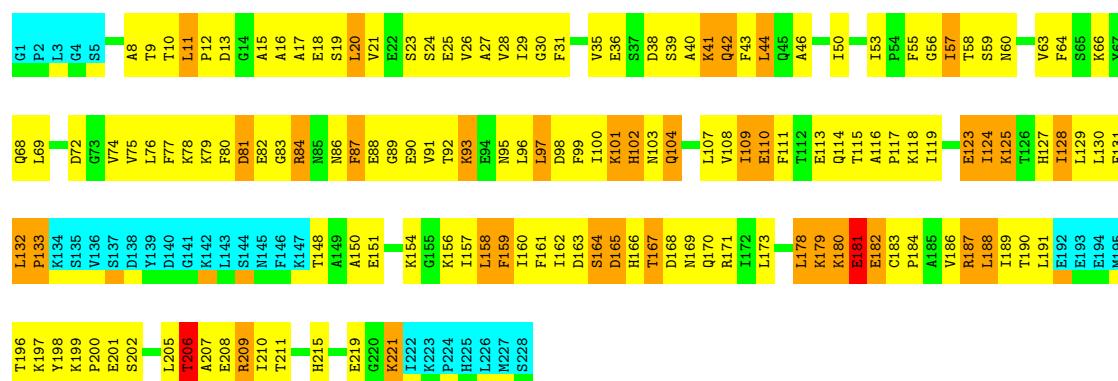
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Protein disulfide-isomerase



4.2.3 Score per residue for model 3

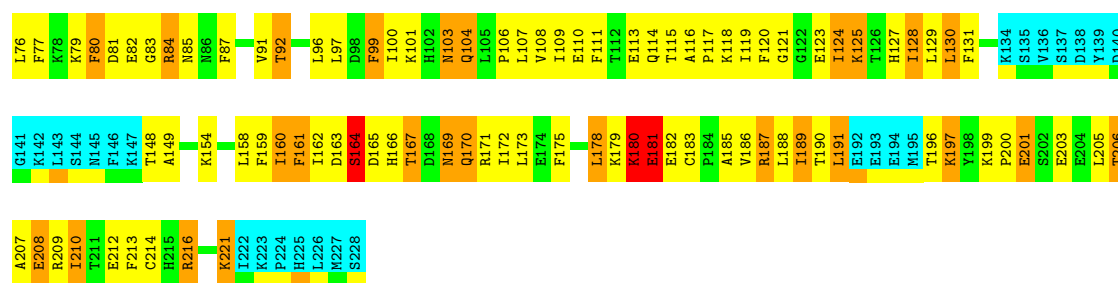
- Molecule 1: Protein disulfide-isomerase



4.2.4 Score per residue for model 4

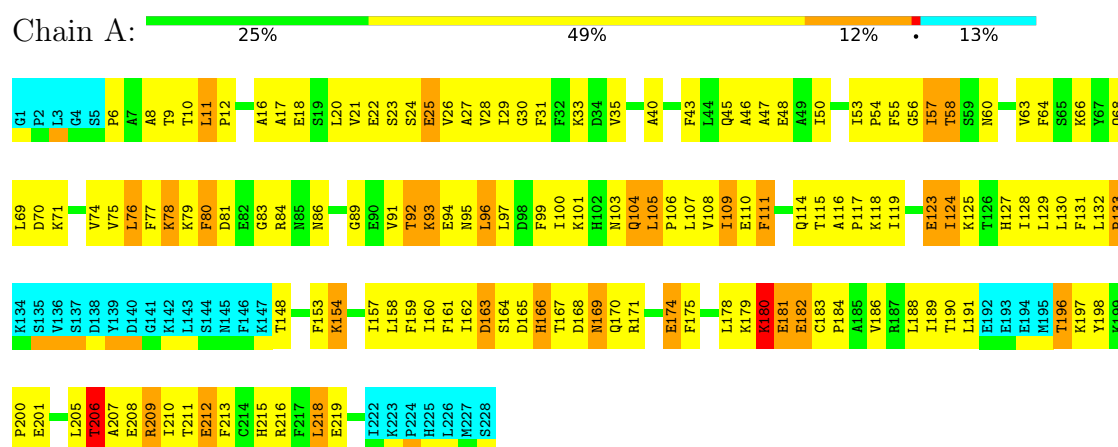
- Molecule 1: Protein disulfide-isomerase





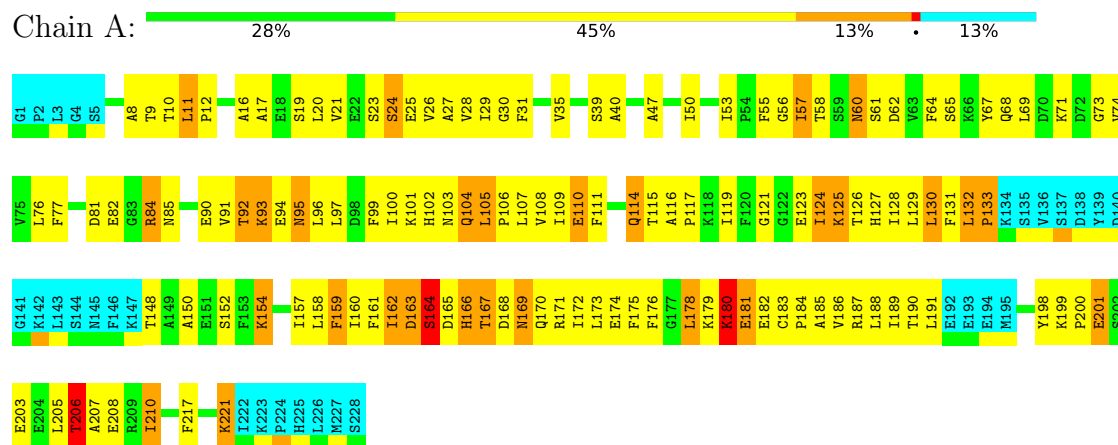
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Protein disulfide-isomerase



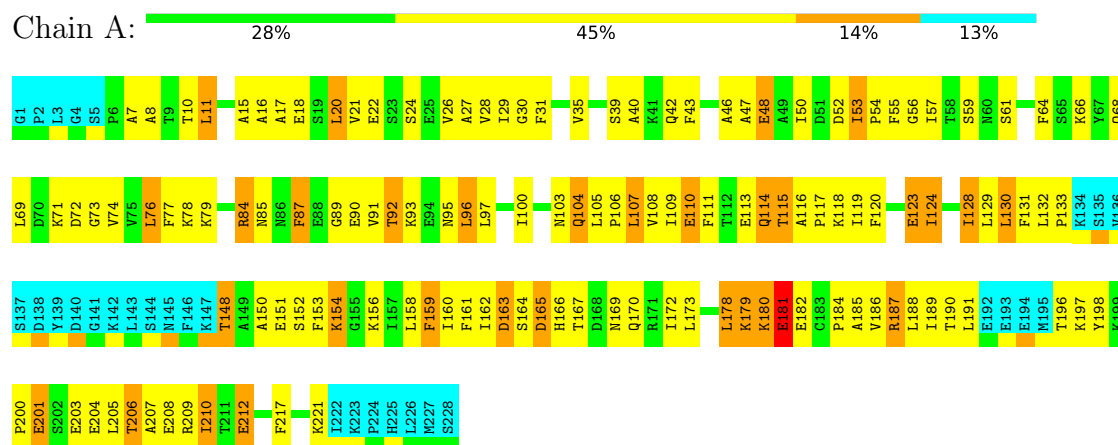
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Protein disulfide-isomerase



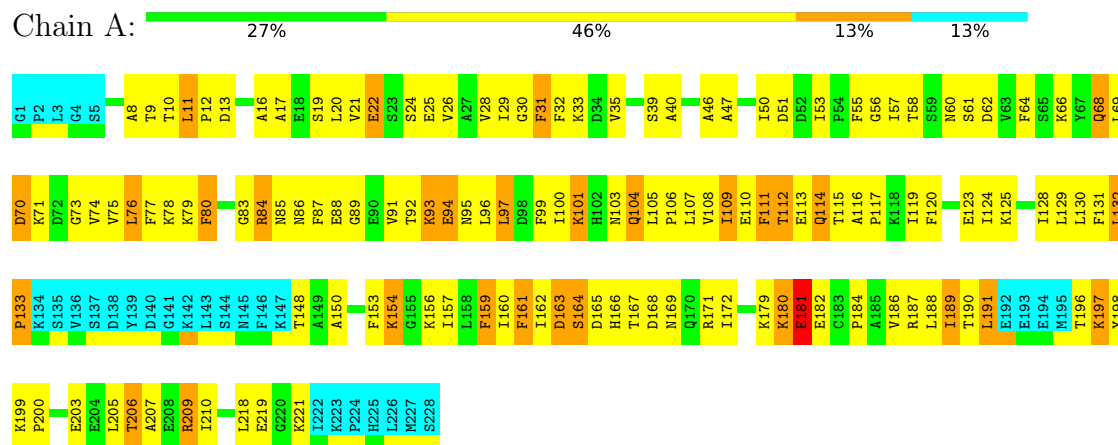
4.2.7 Score per residue for model 7 (medoid)

- Molecule 1: Protein disulfide-isomerase



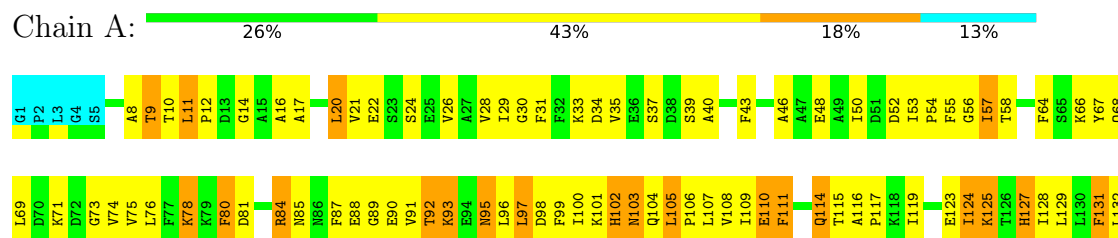
4.2.8 Score per residue for model 8

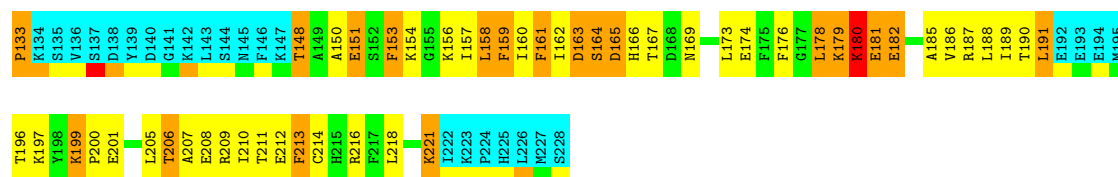
- Molecule 1: Protein disulfide-isomerase



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Protein disulfide-isomerase

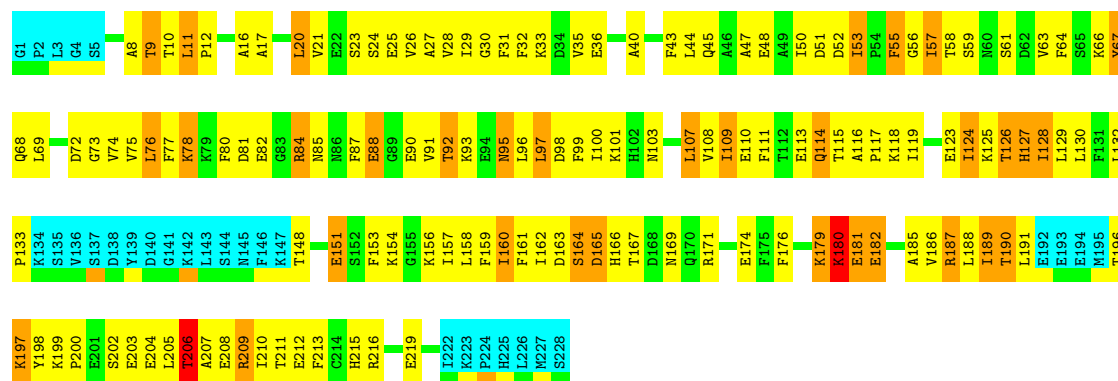




4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Protein disulfide-isomerase

Chain A: 24% 47% 14% 13%



5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

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

Of the 200 calculated structures, 10 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy and the least restraint violations*.

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

Software name	Classification	Version
CNS	refinement	1.1

No chemical shift data was provided.

6 Model quality ⓘ

6.1 Standard geometry ⓘ

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1571	1555	1555	148±12
All	All	15710	15550	15550	1482

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 47.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:LEU:HD13	1:A:17:ALA:HB2	1.07	1.25	2	8
1:A:8:ALA:HB1	1:A:57:ILE:HD11	1.05	1.21	2	10
1:A:50:ILE:HG21	1:A:97:LEU:HD11	1.01	1.31	2	1
1:A:10:THR:HG22	1:A:57:ILE:HB	0.97	1.32	7	6
1:A:107:LEU:HD22	1:A:150:ALA:HB1	0.94	1.38	1	3
1:A:53:ILE:HD12	1:A:104:GLN:HG3	0.88	1.44	2	6
1:A:28:VAL:HB	1:A:76:LEU:HG	0.88	1.45	8	3
1:A:169:ASN:HA	1:A:172:ILE:HD12	0.86	1.47	8	2
1:A:132:LEU:HD13	1:A:133:PRO:HD2	0.86	1.48	2	2
1:A:128:ILE:HG23	1:A:157:ILE:HD11	0.86	1.47	5	7
1:A:107:LEU:HD11	1:A:150:ALA:HB1	0.85	1.45	6	2
1:A:46:ALA:CB	1:A:96:LEU:HD21	0.84	2.03	5	7
1:A:20:LEU:HD11	1:A:29:ILE:HD11	0.84	1.48	6	2
1:A:10:THR:C	1:A:11:LEU:HD13	0.83	1.99	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:132:LEU:HD23	1:A:133:PRO:HD2	0.83	1.47	8	2
1:A:43:PHE:CD1	1:A:96:LEU:HD22	0.82	2.08	3	5
1:A:186:VAL:O	1:A:200:PRO:HD3	0.81	1.76	8	7
1:A:199:LYS:HG3	1:A:200:PRO:HD2	0.80	1.52	9	4
1:A:81:ASP:OD1	1:A:107:LEU:HD13	0.80	1.77	3	2
1:A:165:ASP:HB3	1:A:169:ASN:HB2	0.80	1.52	10	7
1:A:60:ASN:HB2	1:A:63:VAL:HG23	0.80	1.52	5	1
1:A:76:LEU:HD12	1:A:85:ASN:O	0.80	1.75	10	1
1:A:111:PHE:HB2	1:A:162:ILE:HG22	0.80	1.52	9	3
1:A:93:LYS:HA	1:A:96:LEU:HD23	0.79	1.55	7	4
1:A:170:GLN:O	1:A:173:LEU:HG	0.78	1.78	6	3
1:A:129:LEU:HD21	1:A:162:ILE:HD13	0.77	1.57	1	1
1:A:11:LEU:HD21	1:A:20:LEU:CD2	0.77	2.10	7	2
1:A:108:VAL:HG13	1:A:159:PHE:O	0.77	1.80	7	1
1:A:28:VAL:HG22	1:A:76:LEU:HG	0.76	1.57	2	3
1:A:56:GLY:C	1:A:57:ILE:HD13	0.75	2.05	2	4
1:A:111:PHE:CB	1:A:162:ILE:HG22	0.75	2.11	6	2
1:A:60:ASN:HB3	1:A:63:VAL:HG23	0.74	1.56	2	3
1:A:46:ALA:HB3	1:A:96:LEU:HD21	0.74	1.58	7	3
1:A:109:ILE:O	1:A:160:ILE:HG12	0.74	1.81	4	1
1:A:11:LEU:HD21	1:A:20:LEU:HD23	0.74	1.58	7	2
1:A:131:PHE:CD2	1:A:184:PRO:HA	0.74	2.18	2	4
1:A:131:PHE:CD1	1:A:184:PRO:HA	0.74	2.18	7	2
1:A:109:ILE:HG22	1:A:160:ILE:HG22	0.74	1.59	7	2
1:A:26:VAL:HB	1:A:78:LYS:HE3	0.74	1.58	5	1
1:A:9:THR:HG23	1:A:20:LEU:HD22	0.73	1.60	1	1
1:A:76:LEU:O	1:A:84:ARG:HA	0.73	1.83	5	10
1:A:107:LEU:HD23	1:A:108:VAL:HG13	0.73	1.61	8	1
1:A:179:LYS:O	1:A:182:GLU:N	0.72	2.21	2	10
1:A:30:GLY:O	1:A:57:ILE:HG22	0.72	1.83	3	2
1:A:170:GLN:HA	1:A:173:LEU:HD12	0.72	1.60	1	1
1:A:8:ALA:HA	1:A:55:PHE:O	0.72	1.84	5	10
1:A:115:THR:O	1:A:119:ILE:HG12	0.72	1.84	1	4
1:A:43:PHE:CZ	1:A:74:VAL:HG11	0.72	2.19	2	4
1:A:8:ALA:HB1	1:A:57:ILE:CD1	0.72	2.12	2	6
1:A:165:ASP:CB	1:A:169:ASN:HB2	0.72	2.15	7	7
1:A:125:LYS:H	1:A:191:LEU:HB3	0.72	1.43	4	4
1:A:11:LEU:HG	1:A:17:ALA:HA	0.71	1.60	7	2
1:A:185:ALA:HB1	1:A:200:PRO:HG3	0.71	1.62	7	5
1:A:76:LEU:HD22	1:A:103:ASN:CB	0.71	2.16	10	1
1:A:115:THR:O	1:A:119:ILE:HG13	0.71	1.85	6	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:THR:HG22	1:A:57:ILE:O	0.70	1.85	2	1
1:A:8:ALA:CB	1:A:57:ILE:HD11	0.70	2.12	10	3
1:A:188:LEU:HD21	1:A:213:PHE:HB3	0.70	1.62	2	1
1:A:129:LEU:HD21	1:A:162:ILE:HG12	0.70	1.62	6	1
1:A:50:ILE:HD11	1:A:55:PHE:CE1	0.70	2.22	7	1
1:A:55:PHE:HE2	1:A:100:ILE:HG21	0.70	1.46	4	3
1:A:128:ILE:HG22	1:A:188:LEU:HG	0.69	1.64	3	2
1:A:128:ILE:CG2	1:A:188:LEU:HD12	0.69	2.18	5	3
1:A:9:THR:HG21	1:A:20:LEU:HB2	0.69	1.62	1	3
1:A:11:LEU:HB3	1:A:16:ALA:HB3	0.69	1.63	1	2
1:A:30:GLY:HA3	1:A:74:VAL:HG22	0.69	1.61	5	8
1:A:169:ASN:CG	1:A:172:ILE:HD12	0.69	2.12	1	1
1:A:129:LEU:HD21	1:A:162:ILE:CG2	0.69	2.16	9	5
1:A:128:ILE:CG2	1:A:157:ILE:HD11	0.69	2.18	3	3
1:A:186:VAL:HG13	1:A:213:PHE:CE2	0.69	2.23	5	2
1:A:127:HIS:HB2	1:A:160:ILE:HD11	0.69	1.65	5	1
1:A:43:PHE:HD1	1:A:96:LEU:HD22	0.68	1.44	5	4
1:A:77:PHE:HA	1:A:83:GLY:O	0.68	1.88	1	4
1:A:109:ILE:HD12	1:A:115:THR:HG23	0.68	1.65	4	2
1:A:30:GLY:CA	1:A:74:VAL:HG22	0.68	2.18	2	9
1:A:111:PHE:CG	1:A:162:ILE:HD12	0.68	2.23	3	2
1:A:29:ILE:HG23	1:A:56:GLY:C	0.68	2.14	8	7
1:A:107:LEU:HD21	1:A:154:LYS:HG3	0.67	1.63	7	1
1:A:129:LEU:HA	1:A:160:ILE:HG13	0.67	1.65	1	5
1:A:50:ILE:HD13	1:A:97:LEU:CD1	0.67	2.18	2	1
1:A:131:PHE:HA	1:A:162:ILE:CG2	0.67	2.20	3	6
1:A:46:ALA:HB1	1:A:97:LEU:HD13	0.67	1.66	1	1
1:A:46:ALA:HB1	1:A:96:LEU:HD11	0.67	1.65	2	3
1:A:131:PHE:HA	1:A:162:ILE:HG13	0.67	1.65	9	2
1:A:50:ILE:O	1:A:50:ILE:HG13	0.67	1.90	7	9
1:A:127:HIS:HB3	1:A:158:LEU:HG	0.66	1.67	2	2
1:A:29:ILE:HA	1:A:56:GLY:O	0.66	1.90	3	5
1:A:76:LEU:HD13	1:A:103:ASN:HB3	0.66	1.67	4	2
1:A:173:LEU:HD13	1:A:178:LEU:O	0.66	1.89	4	3
1:A:39:SER:OG	1:A:91:VAL:HG21	0.66	1.89	6	3
1:A:127:HIS:HB2	1:A:160:ILE:CD1	0.66	2.21	10	2
1:A:101:LYS:HA	1:A:104:GLN:HG2	0.66	1.68	3	1
1:A:129:LEU:HD21	1:A:162:ILE:HG21	0.66	1.67	9	2
1:A:110:GLU:HB3	1:A:161:PHE:CE2	0.66	2.25	10	5
1:A:64:PHE:HB3	1:A:69:LEU:O	0.66	1.91	2	9
1:A:162:ILE:HD11	1:A:169:ASN:HD21	0.66	1.51	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:VAL:HG22	1:A:76:LEU:HD13	0.66	1.67	7	1
1:A:10:THR:CG2	1:A:57:ILE:HB	0.65	2.21	6	6
1:A:187:ARG:HG3	1:A:198:TYR:O	0.65	1.91	1	1
1:A:133:PRO:HA	1:A:164:SER:HB3	0.65	1.67	5	3
1:A:123:GLU:O	1:A:124:ILE:HG13	0.65	1.90	10	4
1:A:127:HIS:HB2	1:A:160:ILE:HD12	0.65	1.69	10	1
1:A:110:GLU:HA	1:A:161:PHE:O	0.65	1.92	7	4
1:A:87:PHE:CE2	1:A:96:LEU:HA	0.65	2.27	8	3
1:A:131:PHE:HB2	1:A:162:ILE:HD11	0.65	1.66	1	1
1:A:208:GLU:O	1:A:212:GLU:HB2	0.65	1.91	7	6
1:A:87:PHE:HE2	1:A:96:LEU:HA	0.65	1.52	9	2
1:A:128:ILE:HD11	1:A:186:VAL:HG23	0.65	1.69	10	1
1:A:50:ILE:HG13	1:A:55:PHE:HZ	0.65	1.52	10	2
1:A:30:GLY:CA	1:A:74:VAL:HG13	0.65	2.21	3	10
1:A:96:LEU:O	1:A:100:ILE:HG12	0.65	1.91	5	5
1:A:131:PHE:HA	1:A:162:ILE:CG1	0.65	2.22	1	3
1:A:17:ALA:O	1:A:21:VAL:HG23	0.65	1.92	6	8
1:A:43:PHE:CE1	1:A:96:LEU:HD22	0.65	2.26	3	1
1:A:129:LEU:HD11	1:A:162:ILE:HB	0.65	1.69	10	1
1:A:112:THR:HG23	1:A:114:GLN:HG3	0.64	1.69	8	1
1:A:110:GLU:HB3	1:A:161:PHE:CZ	0.64	2.28	7	1
1:A:207:ALA:HA	1:A:210:ILE:HG12	0.64	1.68	10	4
1:A:28:VAL:HG21	1:A:100:ILE:HG23	0.64	1.70	3	1
1:A:93:LYS:O	1:A:97:LEU:HG	0.64	1.92	7	1
1:A:165:ASP:HB2	1:A:169:ASN:HB2	0.64	1.69	7	1
1:A:205:LEU:HB3	1:A:208:GLU:HB2	0.64	1.70	5	3
1:A:186:VAL:HB	1:A:209:ARG:NH1	0.64	2.08	5	1
1:A:188:LEU:HD23	1:A:198:TYR:CD1	0.64	2.28	1	1
1:A:209:ARG:HG2	1:A:213:PHE:CZ	0.64	2.28	2	1
1:A:170:GLN:NE2	1:A:173:LEU:HD21	0.64	2.08	4	1
1:A:28:VAL:HG21	1:A:76:LEU:HD23	0.64	1.70	10	1
1:A:35:VAL:HG13	1:A:40:ALA:HB1	0.63	1.70	5	3
1:A:57:ILE:N	1:A:57:ILE:HD12	0.63	2.08	6	2
1:A:185:ALA:HB1	1:A:200:PRO:CG	0.63	2.23	7	4
1:A:28:VAL:HG13	1:A:76:LEU:HA	0.63	1.70	10	6
1:A:129:LEU:HA	1:A:160:ILE:HG23	0.63	1.69	4	1
1:A:188:LEU:HB3	1:A:198:TYR:HB3	0.63	1.69	5	2
1:A:76:LEU:HD22	1:A:103:ASN:HB3	0.63	1.71	10	1
1:A:186:VAL:HG11	1:A:213:PHE:CE2	0.63	2.29	10	1
1:A:108:VAL:HG12	1:A:159:PHE:O	0.62	1.94	5	7
1:A:132:LEU:HD12	1:A:133:PRO:HD2	0.62	1.71	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:THR:HG23	1:A:57:ILE:HG12	0.62	1.69	2	1
1:A:188:LEU:HD21	1:A:213:PHE:CD2	0.62	2.29	1	1
1:A:99:PHE:O	1:A:103:ASN:HB2	0.62	1.94	4	5
1:A:56:GLY:C	1:A:57:ILE:HD12	0.62	2.20	1	3
1:A:207:ALA:O	1:A:210:ILE:HG13	0.62	1.94	6	8
1:A:133:PRO:HA	1:A:164:SER:OG	0.62	1.94	2	1
1:A:128:ILE:HD13	1:A:129:LEU:N	0.62	2.08	7	2
1:A:11:LEU:HD13	1:A:11:LEU:N	0.62	2.08	1	2
1:A:11:LEU:HB3	1:A:16:ALA:CB	0.62	2.24	7	2
1:A:93:LYS:HA	1:A:96:LEU:CD2	0.62	2.24	5	6
1:A:109:ILE:O	1:A:160:ILE:HG23	0.62	1.95	9	3
1:A:28:VAL:HG22	1:A:76:LEU:CD1	0.62	2.25	7	1
1:A:108:VAL:HG12	1:A:161:PHE:HD1	0.62	1.55	7	1
1:A:165:ASP:O	1:A:169:ASN:HB2	0.61	1.94	3	5
1:A:151:GLU:O	1:A:154:LYS:HG2	0.61	1.95	1	3
1:A:126:THR:C	1:A:127:HIS:HD1	0.61	2.01	6	1
1:A:111:PHE:HD2	1:A:129:LEU:HD11	0.61	1.53	7	1
1:A:28:VAL:HG23	1:A:76:LEU:HA	0.61	1.72	8	4
1:A:31:PHE:CE2	1:A:69:LEU:HD12	0.61	2.29	7	1
1:A:189:ILE:HD13	1:A:197:LYS:HE3	0.61	1.72	3	1
1:A:216:ARG:HG2	1:A:221:LYS:HD2	0.61	1.72	4	1
1:A:124:ILE:O	1:A:124:ILE:HG13	0.61	1.95	6	7
1:A:178:LEU:CD2	1:A:182:GLU:HA	0.61	2.25	2	1
1:A:128:ILE:HG22	1:A:188:LEU:HD12	0.61	1.72	5	1
1:A:92:THR:O	1:A:96:LEU:HB3	0.61	1.96	7	5
1:A:26:VAL:HG11	1:A:104:GLN:HG2	0.61	1.70	8	3
1:A:178:LEU:HD23	1:A:182:GLU:HA	0.61	1.73	7	3
1:A:127:HIS:ND1	1:A:158:LEU:HB3	0.61	2.10	4	1
1:A:20:LEU:CD1	1:A:29:ILE:HD11	0.61	2.22	6	1
1:A:52:ASP:OD1	1:A:53:ILE:HG22	0.61	1.95	9	1
1:A:17:ALA:O	1:A:20:LEU:HG	0.61	1.96	8	6
1:A:199:LYS:CG	1:A:200:PRO:HD2	0.61	2.26	3	2
1:A:130:LEU:O	1:A:162:ILE:HG22	0.60	1.95	4	1
1:A:111:PHE:HB3	1:A:162:ILE:HG22	0.60	1.70	6	1
1:A:26:VAL:HG11	1:A:104:GLN:CG	0.60	2.27	6	2
1:A:105:LEU:HG	1:A:106:PRO:HD2	0.60	1.71	5	2
1:A:128:ILE:HB	1:A:188:LEU:HD12	0.60	1.72	7	2
1:A:107:LEU:HD11	1:A:150:ALA:CB	0.60	2.24	6	1
1:A:46:ALA:HB1	1:A:97:LEU:CD1	0.60	2.26	1	2
1:A:30:GLY:HA2	1:A:74:VAL:HA	0.60	1.74	5	9
1:A:106:PRO:O	1:A:158:LEU:HD11	0.60	1.97	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:ILE:HD12	1:A:52:ASP:OD1	0.60	1.97	2	1
1:A:10:THR:HG22	1:A:57:ILE:HG12	0.60	1.74	5	2
1:A:128:ILE:HD13	1:A:128:ILE:C	0.60	2.21	4	3
1:A:107:LEU:HD21	1:A:154:LYS:HA	0.59	1.74	10	1
1:A:153:PHE:HB3	1:A:157:ILE:HG22	0.59	1.74	10	1
1:A:55:PHE:CZ	1:A:100:ILE:HG21	0.59	2.32	3	2
1:A:19:SER:O	1:A:22:GLU:HG3	0.59	1.96	8	1
1:A:111:PHE:CD2	1:A:162:ILE:HD12	0.59	2.31	5	2
1:A:12:PRO:HD2	1:A:16:ALA:CB	0.59	2.27	5	8
1:A:165:ASP:HB3	1:A:169:ASN:CB	0.59	2.28	6	2
1:A:47:ALA:HB1	1:A:55:PHE:HB2	0.59	1.73	7	1
1:A:35:VAL:HA	1:A:40:ALA:CB	0.59	2.28	7	10
1:A:119:ILE:O	1:A:121:GLY:N	0.59	2.36	4	1
1:A:111:PHE:HB3	1:A:162:ILE:HG13	0.59	1.73	10	3
1:A:121:GLY:O	1:A:191:LEU:HD21	0.59	1.97	6	1
1:A:26:VAL:O	1:A:53:ILE:HG13	0.59	1.98	1	5
1:A:80:PHE:CE1	1:A:106:PRO:HB3	0.59	2.33	9	5
1:A:28:VAL:HG22	1:A:76:LEU:CG	0.59	2.28	6	4
1:A:26:VAL:CB	1:A:78:LYS:HE3	0.58	2.28	5	1
1:A:131:PHE:HA	1:A:162:ILE:HG12	0.58	1.73	1	1
1:A:131:PHE:HD2	1:A:184:PRO:HA	0.58	1.53	5	4
1:A:76:LEU:HD23	1:A:77:PHE:N	0.58	2.13	3	2
1:A:78:LYS:HD2	1:A:103:ASN:O	0.58	1.98	3	1
1:A:129:LEU:HD11	1:A:162:ILE:HG21	0.58	1.74	6	2
1:A:28:VAL:CB	1:A:76:LEU:HG	0.58	2.27	8	2
1:A:26:VAL:HG13	1:A:77:PHE:O	0.58	1.99	4	3
1:A:53:ILE:O	1:A:55:PHE:CE1	0.58	2.56	5	8
1:A:24:SER:OG	1:A:54:PRO:HG2	0.58	1.97	5	3
1:A:26:VAL:HG23	1:A:78:LYS:HG2	0.58	1.74	9	1
1:A:10:THR:CG2	1:A:57:ILE:HG12	0.58	2.28	3	3
1:A:87:PHE:HZ	1:A:100:ILE:HG23	0.58	1.58	9	1
1:A:109:ILE:HG12	1:A:115:THR:HG23	0.58	1.76	2	1
1:A:15:ALA:O	1:A:18:GLU:HG2	0.58	1.99	1	2
1:A:28:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD12	0.58	1.74	3	2
1:A:126:THR:O	1:A:157:ILE:HG13	0.58	1.99	2	4
1:A:28:VAL:HG13	1:A:76:LEU:CA	0.58	2.29	6	5
1:A:169:ASN:ND2	1:A:172:ILE:HG13	0.58	2.13	2	2
1:A:133:PRO:O	1:A:164:SER:HB2	0.57	1.99	1	1
1:A:7:ALA:HB3	1:A:48:GLU:HA	0.57	1.76	7	1
1:A:205:LEU:HG	1:A:206:THR:N	0.57	2.14	4	8
1:A:179:LYS:O	1:A:180:LYS:C	0.57	2.47	2	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:200:PRO:O	1:A:201:GLU:HG3	0.57	1.99	7	1
1:A:178:LEU:HD22	1:A:182:GLU:HA	0.57	1.77	2	1
1:A:28:VAL:HG22	1:A:76:LEU:HB3	0.57	1.74	10	1
1:A:26:VAL:HG12	1:A:53:ILE:HD11	0.57	1.74	4	4
1:A:125:LYS:HB3	1:A:127:HIS:CE1	0.57	2.35	3	1
1:A:76:LEU:HD12	1:A:77:PHE:N	0.57	2.14	7	1
1:A:53:ILE:HD13	1:A:54:PRO:O	0.57	2.00	7	1
1:A:179:LYS:O	1:A:181:GLU:N	0.56	2.38	6	10
1:A:189:ILE:HD12	1:A:196:THR:O	0.56	2.00	3	1
1:A:11:LEU:HD22	1:A:17:ALA:HA	0.56	1.74	6	3
1:A:50:ILE:HD13	1:A:97:LEU:HD11	0.56	1.76	2	1
1:A:87:PHE:CZ	1:A:96:LEU:HA	0.56	2.35	3	1
1:A:26:VAL:HG23	1:A:77:PHE:O	0.56	2.00	6	1
1:A:109:ILE:HD12	1:A:115:THR:CG2	0.56	2.29	3	2
1:A:128:ILE:HB	1:A:188:LEU:HD13	0.56	1.76	4	1
1:A:171:ARG:NH2	1:A:174:GLU:HB3	0.56	2.15	6	1
1:A:162:ILE:HD11	1:A:169:ASN:ND2	0.56	2.15	2	1
1:A:108:VAL:HB	1:A:161:PHE:HE1	0.56	1.60	5	2
1:A:29:ILE:HD12	1:A:29:ILE:N	0.56	2.16	2	1
1:A:31:PHE:HB2	1:A:73:GLY:O	0.56	2.00	4	7
1:A:50:ILE:HG21	1:A:97:LEU:HG	0.56	1.75	6	1
1:A:39:SER:HB3	1:A:91:VAL:HG21	0.56	1.77	3	1
1:A:132:LEU:HD21	1:A:161:PHE:HB2	0.56	1.77	7	2
1:A:76:LEU:CD1	1:A:85:ASN:HB3	0.56	2.29	10	1
1:A:205:LEU:H	1:A:208:GLU:HB2	0.56	1.59	2	1
1:A:95:ASN:O	1:A:99:PHE:HB2	0.56	2.00	10	2
1:A:50:ILE:HB	1:A:52:ASP:OD1	0.56	2.01	2	1
1:A:129:LEU:HB2	1:A:160:ILE:HD11	0.56	1.76	6	4
1:A:170:GLN:HA	1:A:173:LEU:HD23	0.56	1.77	4	3
1:A:108:VAL:HB	1:A:161:PHE:CE1	0.56	2.36	5	1
1:A:171:ARG:O	1:A:174:GLU:HG3	0.56	2.00	5	1
1:A:47:ALA:HB1	1:A:55:PHE:CB	0.56	2.31	7	1
1:A:92:THR:HB	1:A:95:ASN:HB2	0.55	1.77	2	3
1:A:206:THR:HG23	1:A:207:ALA:H	0.55	1.60	6	5
1:A:107:LEU:CD1	1:A:150:ALA:HB1	0.55	2.26	6	1
1:A:30:GLY:HA2	1:A:74:VAL:HG13	0.55	1.78	3	7
1:A:205:LEU:O	1:A:209:ARG:N	0.55	2.39	7	7
1:A:148:THR:O	1:A:151:GLU:HG3	0.55	2.01	9	1
1:A:127:HIS:CD2	1:A:158:LEU:HB3	0.55	2.36	6	2
1:A:92:THR:O	1:A:96:LEU:HG	0.55	2.01	10	3
1:A:50:ILE:HG21	1:A:97:LEU:CD1	0.55	2.21	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:186:VAL:HG11	1:A:213:PHE:CZ	0.55	2.37	2	1
1:A:28:VAL:CG2	1:A:76:LEU:HD13	0.55	2.31	7	1
1:A:35:VAL:O	1:A:40:ALA:HB3	0.55	2.02	5	7
1:A:131:PHE:CE2	1:A:185:ALA:HB3	0.55	2.37	6	3
1:A:166:HIS:CD2	1:A:167:THR:HG23	0.55	2.37	5	1
1:A:55:PHE:CE2	1:A:100:ILE:HD13	0.55	2.37	6	1
1:A:27:ALA:HA	1:A:53:ILE:HD11	0.55	1.77	7	1
1:A:108:VAL:HG12	1:A:161:PHE:CD1	0.55	2.38	7	1
1:A:111:PHE:CD2	1:A:129:LEU:HD11	0.54	2.37	3	1
1:A:87:PHE:CZ	1:A:100:ILE:HG23	0.54	2.37	9	1
1:A:67:TYR:HB3	1:A:69:LEU:CD1	0.54	2.32	10	1
1:A:29:ILE:HD12	1:A:77:PHE:CD1	0.54	2.37	8	2
1:A:109:ILE:CG2	1:A:160:ILE:HG22	0.54	2.30	7	1
1:A:173:LEU:CD1	1:A:178:LEU:HB3	0.54	2.31	3	1
1:A:130:LEU:HD11	1:A:210:ILE:HG22	0.54	1.80	4	1
1:A:107:LEU:HD21	1:A:150:ALA:CB	0.54	2.33	6	1
1:A:204:GLU:N	1:A:209:ARG:HG3	0.54	2.17	10	1
1:A:131:PHE:HB2	1:A:184:PRO:HA	0.54	1.79	6	1
1:A:29:ILE:HD12	1:A:77:PHE:CE1	0.54	2.37	3	3
1:A:160:ILE:HD13	1:A:161:PHE:N	0.54	2.17	4	1
1:A:132:LEU:CD2	1:A:133:PRO:HD2	0.54	2.27	8	1
1:A:206:THR:O	1:A:209:ARG:HG3	0.54	2.02	5	1
1:A:111:PHE:HE1	1:A:119:ILE:CD1	0.54	2.16	8	1
1:A:50:ILE:HG13	1:A:50:ILE:O	0.54	2.01	10	1
1:A:93:LYS:O	1:A:96:LEU:HG	0.54	2.01	5	6
1:A:188:LEU:HD12	1:A:188:LEU:N	0.54	2.17	2	2
1:A:29:ILE:O	1:A:74:VAL:HG13	0.54	2.03	6	8
1:A:47:ALA:HB1	1:A:55:PHE:CD1	0.54	2.37	5	6
1:A:109:ILE:CD1	1:A:160:ILE:HG22	0.54	2.32	1	1
1:A:128:ILE:CB	1:A:188:LEU:HD12	0.54	2.33	1	2
1:A:117:PRO:HA	1:A:120:PHE:CD2	0.54	2.38	2	1
1:A:130:LEU:HD23	1:A:132:LEU:HD23	0.54	1.78	2	1
1:A:92:THR:OG1	1:A:95:ASN:HB2	0.54	2.01	5	1
1:A:169:ASN:OD1	1:A:172:ILE:HB	0.54	2.03	7	1
1:A:50:ILE:HD13	1:A:97:LEU:HG	0.54	1.80	9	2
1:A:50:ILE:CG2	1:A:97:LEU:HD21	0.53	2.33	3	2
1:A:128:ILE:CG2	1:A:188:LEU:HG	0.53	2.33	9	1
1:A:110:GLU:HB2	1:A:161:PHE:CE2	0.53	2.38	1	4
1:A:125:LYS:H	1:A:191:LEU:HB2	0.53	1.62	3	1
1:A:11:LEU:HG	1:A:17:ALA:CA	0.53	2.32	7	2
1:A:128:ILE:CG2	1:A:188:LEU:HD23	0.53	2.34	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:LEU:HD12	1:A:96:LEU:C	0.53	2.29	3	7
1:A:161:PHE:CD1	1:A:161:PHE:N	0.53	2.76	8	6
1:A:207:ALA:HA	1:A:210:ILE:CG1	0.53	2.34	4	3
1:A:132:LEU:HD13	1:A:133:PRO:CD	0.53	2.31	6	1
1:A:205:LEU:O	1:A:206:THR:C	0.53	2.52	2	8
1:A:75:VAL:HG22	1:A:86:ASN:CG	0.53	2.28	5	2
1:A:199:LYS:HG3	1:A:200:PRO:CD	0.53	2.30	9	2
1:A:50:ILE:HD13	1:A:97:LEU:HD23	0.53	1.81	5	1
1:A:161:PHE:N	1:A:161:PHE:CD1	0.53	2.77	4	1
1:A:129:LEU:HD11	1:A:162:ILE:CG2	0.53	2.33	1	3
1:A:188:LEU:HD21	1:A:213:PHE:CB	0.53	2.32	2	1
1:A:132:LEU:CD2	1:A:161:PHE:HB2	0.53	2.34	7	2
1:A:153:PHE:HB3	1:A:157:ILE:CG2	0.53	2.33	10	1
1:A:163:ASP:O	1:A:164:SER:C	0.53	2.52	1	10
1:A:11:LEU:CD1	1:A:17:ALA:HB2	0.53	2.30	6	2
1:A:125:LYS:O	1:A:191:LEU:HB2	0.53	2.03	9	1
1:A:9:THR:CG2	1:A:20:LEU:HD22	0.52	2.33	1	1
1:A:210:ILE:HG13	1:A:211:THR:N	0.52	2.18	10	5
1:A:57:ILE:HD12	1:A:57:ILE:N	0.52	2.20	1	2
1:A:180:LYS:C	1:A:182:GLU:H	0.52	2.12	7	10
1:A:108:VAL:HG23	1:A:159:PHE:O	0.52	2.04	10	1
1:A:26:VAL:CG1	1:A:78:LYS:HG3	0.52	2.34	1	1
1:A:131:PHE:HA	1:A:162:ILE:HG22	0.52	1.81	5	3
1:A:107:LEU:HD21	1:A:150:ALA:HB2	0.52	1.79	6	1
1:A:55:PHE:CD1	1:A:55:PHE:N	0.52	2.78	10	7
1:A:131:PHE:CE1	1:A:164:SER:HA	0.52	2.40	2	1
1:A:28:VAL:HG23	1:A:76:LEU:CA	0.52	2.34	8	4
1:A:28:VAL:HG21	1:A:100:ILE:CG2	0.52	2.35	3	1
1:A:11:LEU:HD22	1:A:11:LEU:N	0.52	2.19	7	1
1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:HD13	0.52	2.20	1	1
1:A:165:ASP:C	1:A:167:THR:H	0.52	2.12	6	10
1:A:128:ILE:CG1	1:A:188:LEU:HD13	0.52	2.35	4	1
1:A:75:VAL:HG13	1:A:85:ASN:C	0.52	2.30	8	3
1:A:173:LEU:HD22	1:A:182:GLU:OE2	0.52	2.03	4	1
1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:PHE:CE1	0.52	2.39	6	1
1:A:107:LEU:O	1:A:108:VAL:HG13	0.52	2.03	5	1
1:A:178:LEU:HB3	1:A:182:GLU:OE2	0.52	2.05	6	1
1:A:131:PHE:CE1	1:A:184:PRO:HA	0.51	2.39	7	2
1:A:162:ILE:HD11	1:A:169:ASN:OD1	0.51	2.05	8	1
1:A:32:PHE:O	1:A:59:SER:HB2	0.51	2.04	10	1
1:A:129:LEU:O	1:A:187:ARG:HG3	0.51	2.05	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:186:VAL:O	1:A:200:PRO:CD	0.51	2.55	8	5
1:A:169:ASN:CG	1:A:172:ILE:HG21	0.51	2.31	4	1
1:A:53:ILE:HD13	1:A:53:ILE:C	0.51	2.30	7	1
1:A:129:LEU:HD21	1:A:162:ILE:CD1	0.51	2.34	1	1
1:A:53:ILE:O	1:A:55:PHE:CZ	0.51	2.64	4	4
1:A:107:LEU:HG	1:A:150:ALA:HB1	0.51	1.81	2	1
1:A:129:LEU:C	1:A:129:LEU:HD13	0.51	2.30	5	1
1:A:96:LEU:O	1:A:100:ILE:HG13	0.51	2.05	6	2
1:A:60:ASN:HB2	1:A:63:VAL:CG2	0.51	2.33	5	1
1:A:105:LEU:HG	1:A:106:PRO:CD	0.51	2.36	5	1
1:A:167:THR:HG23	1:A:168:ASP:H	0.51	1.66	2	2
1:A:131:PHE:CD2	1:A:185:ALA:HB3	0.51	2.40	4	2
1:A:221:LYS:HA	1:A:221:LYS:HE2	0.51	1.82	4	1
1:A:169:ASN:CG	1:A:172:ILE:HD13	0.51	2.31	6	1
1:A:87:PHE:CZ	1:A:99:PHE:HB3	0.51	2.41	9	2
1:A:129:LEU:HD22	1:A:187:ARG:HH12	0.51	1.65	7	1
1:A:111:PHE:CD2	1:A:162:ILE:HG22	0.51	2.40	1	1
1:A:206:THR:OG1	1:A:207:ALA:N	0.51	2.43	9	4
1:A:169:ASN:OD1	1:A:172:ILE:HD13	0.51	2.05	8	1
1:A:165:ASP:C	1:A:167:THR:N	0.50	2.70	6	10
1:A:11:LEU:HD22	1:A:11:LEU:H	0.50	1.67	7	2
1:A:132:LEU:O	1:A:132:LEU:HG	0.50	2.06	9	1
1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:HD22	0.50	2.22	1	1
1:A:101:LYS:HD2	1:A:102:HIS:ND1	0.50	2.22	3	1
1:A:91:VAL:O	1:A:91:VAL:HG23	0.50	2.06	1	9
1:A:50:ILE:HG13	1:A:55:PHE:CZ	0.50	2.37	10	3
1:A:128:ILE:CB	1:A:188:LEU:HD13	0.50	2.37	4	1
1:A:165:ASP:O	1:A:167:THR:N	0.50	2.44	3	10
1:A:60:ASN:HB3	1:A:63:VAL:CG2	0.50	2.33	2	1
1:A:189:ILE:HD13	1:A:189:ILE:N	0.50	2.22	4	1
1:A:76:LEU:C	1:A:76:LEU:HD23	0.50	2.32	6	1
1:A:187:ARG:NH2	1:A:189:ILE:HB	0.50	2.22	2	2
1:A:31:PHE:CD1	1:A:58:THR:HG23	0.50	2.42	6	1
1:A:9:THR:O	1:A:56:GLY:HA2	0.50	2.06	6	7
1:A:107:LEU:O	1:A:158:LEU:HG	0.50	2.06	3	1
1:A:53:ILE:HB	1:A:104:GLN:NE2	0.50	2.22	7	1
1:A:164:SER:O	1:A:165:ASP:C	0.50	2.55	9	10
1:A:74:VAL:HG12	1:A:87:PHE:CE1	0.50	2.42	4	1
1:A:26:VAL:HG22	1:A:53:ILE:HD11	0.50	1.82	6	1
1:A:28:VAL:CG1	1:A:55:PHE:CD2	0.49	2.95	1	3
1:A:26:VAL:HG13	1:A:78:LYS:HG2	0.49	1.81	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:125:LYS:HD2	1:A:158:LEU:HD21	0.49	1.83	1	1
1:A:58:THR:CG2	1:A:63:VAL:HG11	0.49	2.37	5	1
1:A:198:TYR:HE1	1:A:213:PHE:CD2	0.49	2.24	5	1
1:A:169:ASN:O	1:A:173:LEU:HG	0.49	2.07	9	1
1:A:107:LEU:CD2	1:A:150:ALA:HB1	0.49	2.36	3	2
1:A:131:PHE:CZ	1:A:187:ARG:HG2	0.49	2.42	4	1
1:A:186:VAL:HG13	1:A:200:PRO:CG	0.49	2.38	2	1
1:A:186:VAL:CG1	1:A:213:PHE:CE2	0.49	2.95	5	1
1:A:124:ILE:HA	1:A:191:LEU:O	0.49	2.07	6	1
1:A:129:LEU:HD23	1:A:129:LEU:C	0.49	2.32	6	3
1:A:58:THR:HG23	1:A:64:PHE:HE1	0.49	1.67	8	1
1:A:87:PHE:CZ	1:A:99:PHE:CB	0.49	2.95	3	1
1:A:109:ILE:HD11	1:A:119:ILE:HD11	0.49	1.85	4	1
1:A:128:ILE:O	1:A:160:ILE:HG22	0.49	2.07	4	1
1:A:131:PHE:CE2	1:A:184:PRO:HA	0.49	2.43	2	1
1:A:15:ALA:O	1:A:18:GLU:HG3	0.49	2.07	7	1
1:A:42:GLN:O	1:A:93:LYS:HD3	0.49	2.07	7	1
1:A:85:ASN:HB3	1:A:103:ASN:HD22	0.49	1.67	8	1
1:A:46:ALA:CB	1:A:96:LEU:HD11	0.49	2.36	2	1
1:A:153:PHE:CZ	1:A:218:LEU:HD13	0.49	2.42	5	1
1:A:31:PHE:HB3	1:A:64:PHE:HE1	0.49	1.68	6	1
1:A:165:ASP:OD2	1:A:168:ASP:HB2	0.49	2.08	6	1
1:A:76:LEU:HD13	1:A:85:ASN:HB3	0.49	1.83	10	1
1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:PHE:HE1	0.49	1.68	6	1
1:A:9:THR:CG2	1:A:20:LEU:HB2	0.49	2.38	8	1
1:A:186:VAL:HG13	1:A:200:PRO:HG3	0.48	1.82	2	1
1:A:133:PRO:HD3	1:A:184:PRO:HG3	0.48	1.84	6	1
1:A:191:LEU:O	1:A:191:LEU:HG	0.48	2.07	6	1
1:A:127:HIS:O	1:A:189:ILE:HD12	0.48	2.08	10	1
1:A:125:LYS:CD	1:A:158:LEU:HD21	0.48	2.37	1	1
1:A:80:PHE:CZ	1:A:106:PRO:HB3	0.48	2.44	9	2
1:A:125:LYS:O	1:A:191:LEU:HD12	0.48	2.08	3	1
1:A:12:PRO:HD2	1:A:16:ALA:HB1	0.48	1.85	5	2
1:A:62:ASP:HB3	1:A:66:LYS:NZ	0.48	2.22	1	1
1:A:12:PRO:HA	1:A:60:ASN:OD1	0.48	2.08	5	1
1:A:127:HIS:ND1	1:A:189:ILE:HB	0.48	2.23	10	1
1:A:107:LEU:HG	1:A:150:ALA:CB	0.48	2.39	2	1
1:A:114:GLN:O	1:A:117:PRO:HG2	0.48	2.08	6	7
1:A:9:THR:HG21	1:A:20:LEU:CB	0.48	2.36	1	1
1:A:97:LEU:HA	1:A:100:ILE:HD11	0.48	1.84	2	1
1:A:128:ILE:HG21	1:A:188:LEU:HD23	0.48	1.86	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:VAL:O	1:A:24:SER:O	0.48	2.32	1	9
1:A:41:LYS:NZ	1:A:44:LEU:HD12	0.48	2.23	3	1
1:A:106:PRO:HG2	1:A:109:ILE:CG2	0.48	2.38	4	1
1:A:204:GLU:HB2	1:A:209:ARG:HG3	0.48	1.84	7	1
1:A:125:LYS:H	1:A:191:LEU:HD12	0.48	1.68	10	1
1:A:188:LEU:HD22	1:A:188:LEU:N	0.48	2.23	1	1
1:A:31:PHE:CE2	1:A:69:LEU:CD1	0.48	2.97	4	1
1:A:68:GLN:O	1:A:69:LEU:HD23	0.48	2.09	8	1
1:A:55:PHE:CZ	1:A:100:ILE:HG13	0.48	2.44	7	1
1:A:109:ILE:CG1	1:A:115:THR:HG23	0.47	2.38	2	1
1:A:76:LEU:HD13	1:A:103:ASN:OD1	0.47	2.09	10	1
1:A:11:LEU:CD2	1:A:20:LEU:HD23	0.47	2.34	7	2
1:A:102:HIS:HE1	1:A:122:GLY:O	0.47	1.92	2	1
1:A:187:ARG:HG2	1:A:198:TYR:O	0.47	2.08	2	2
1:A:29:ILE:HD12	1:A:77:PHE:CZ	0.47	2.43	3	1
1:A:187:ARG:N	1:A:187:ARG:HD3	0.47	2.24	3	1
1:A:35:VAL:HG23	1:A:40:ALA:HB1	0.47	1.86	10	1
1:A:107:LEU:HG	1:A:158:LEU:HD22	0.47	1.86	10	1
1:A:190:THR:HB	1:A:196:THR:HB	0.47	1.84	10	1
1:A:169:ASN:OD1	1:A:172:ILE:HD12	0.47	2.10	1	1
1:A:31:PHE:HB3	1:A:64:PHE:CZ	0.47	2.45	10	3
1:A:76:LEU:HD12	1:A:100:ILE:HA	0.47	1.87	8	1
1:A:129:LEU:HB3	1:A:187:ARG:HD2	0.47	1.86	4	1
1:A:28:VAL:N	1:A:53:ILE:HD11	0.47	2.25	7	1
1:A:100:ILE:HD12	1:A:101:LYS:N	0.47	2.25	9	1
1:A:125:LYS:HG2	1:A:158:LEU:HD21	0.47	1.86	2	1
1:A:26:VAL:CG2	1:A:78:LYS:HE3	0.47	2.40	5	1
1:A:129:LEU:HD23	1:A:130:LEU:N	0.47	2.24	7	2
1:A:53:ILE:O	1:A:53:ILE:HG23	0.47	2.09	10	8
1:A:170:GLN:HG3	1:A:171:ARG:N	0.47	2.25	1	1
1:A:10:THR:HG22	1:A:57:ILE:C	0.47	2.35	2	1
1:A:38:ASP:O	1:A:42:GLN:HG3	0.47	2.09	2	1
1:A:30:GLY:O	1:A:57:ILE:HA	0.47	2.09	7	2
1:A:110:GLU:HG2	1:A:161:PHE:CD2	0.47	2.45	6	1
1:A:50:ILE:HG21	1:A:97:LEU:HD21	0.47	1.85	9	1
1:A:179:LYS:HB3	1:A:180:LYS:HD3	0.47	1.86	10	1
1:A:198:TYR:CE1	1:A:199:LYS:O	0.47	2.68	1	1
1:A:109:ILE:CD1	1:A:115:THR:HG23	0.47	2.39	3	1
1:A:188:LEU:HD21	1:A:213:PHE:CG	0.47	2.45	1	1
1:A:43:PHE:HZ	1:A:74:VAL:HG11	0.47	1.64	2	1
1:A:28:VAL:HG13	1:A:76:LEU:CB	0.47	2.40	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:187:ARG:HH11	1:A:189:ILE:HD12	0.47	1.69	4	1
1:A:20:LEU:C	1:A:20:LEU:HD12	0.47	2.35	7	1
1:A:160:ILE:N	1:A:160:ILE:HD13	0.47	2.25	10	1
1:A:173:LEU:HD13	1:A:178:LEU:HB3	0.46	1.87	3	1
1:A:105:LEU:HD13	1:A:106:PRO:HD2	0.46	1.85	9	2
1:A:26:VAL:HG12	1:A:53:ILE:CD1	0.46	2.40	4	2
1:A:116:ALA:N	1:A:117:PRO:HD2	0.46	2.25	2	10
1:A:127:HIS:HB3	1:A:158:LEU:CG	0.46	2.38	1	1
1:A:27:ALA:O	1:A:77:PHE:HB2	0.46	2.10	6	4
1:A:157:ILE:HG23	1:A:159:PHE:CE1	0.46	2.45	8	1
1:A:28:VAL:O	1:A:55:PHE:HA	0.46	2.10	10	3
1:A:165:ASP:O	1:A:169:ASN:HB3	0.46	2.11	8	2
1:A:28:VAL:CG2	1:A:76:LEU:HD12	0.46	2.41	4	2
1:A:210:ILE:HG13	1:A:211:THR:H	0.46	1.70	10	2
1:A:114:GLN:C	1:A:117:PRO:HD2	0.46	2.36	5	10
1:A:107:LEU:HD23	1:A:150:ALA:HB1	0.46	1.87	3	1
1:A:129:LEU:HD12	1:A:160:ILE:HD12	0.46	1.87	4	1
1:A:209:ARG:O	1:A:213:PHE:CD1	0.46	2.68	5	1
1:A:39:SER:CB	1:A:91:VAL:HG21	0.46	2.40	9	2
1:A:129:LEU:HA	1:A:160:ILE:O	0.46	2.09	10	1
1:A:70:ASP:C	1:A:71:LYS:HG2	0.46	2.35	8	2
1:A:165:ASP:HB2	1:A:169:ASN:CG	0.46	2.36	1	1
1:A:200:PRO:CB	1:A:213:PHE:CE1	0.46	2.99	2	1
1:A:50:ILE:HD11	1:A:55:PHE:CZ	0.46	2.45	3	2
1:A:81:ASP:OD2	1:A:106:PRO:HA	0.46	2.11	9	1
1:A:100:ILE:HG13	1:A:101:LYS:N	0.46	2.26	2	1
1:A:129:LEU:HA	1:A:160:ILE:CG1	0.46	2.39	6	1
1:A:50:ILE:HG21	1:A:97:LEU:HD22	0.46	1.87	7	1
1:A:18:GLU:O	1:A:22:GLU:HG3	0.46	2.11	5	1
1:A:205:LEU:O	1:A:209:ARG:HB2	0.46	2.11	3	3
1:A:26:VAL:HG13	1:A:53:ILE:HG13	0.46	1.87	6	1
1:A:93:LYS:HA	1:A:96:LEU:HD12	0.46	1.88	6	1
1:A:124:ILE:HG13	1:A:124:ILE:O	0.46	2.10	9	2
1:A:26:VAL:HG13	1:A:78:LYS:HA	0.46	1.87	10	1
1:A:26:VAL:HG13	1:A:78:LYS:HG3	0.46	1.86	1	1
1:A:131:PHE:HA	1:A:162:ILE:HG23	0.46	1.87	3	1
1:A:110:GLU:N	1:A:161:PHE:CE1	0.46	2.84	7	1
1:A:39:SER:HB2	1:A:91:VAL:HG21	0.46	1.88	9	1
1:A:10:THR:HA	1:A:57:ILE:O	0.46	2.11	10	2
1:A:28:VAL:HG22	1:A:76:LEU:HD12	0.46	1.86	4	1
1:A:154:LYS:HD2	1:A:154:LYS:C	0.46	2.36	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:163:ASP:HB3	1:A:165:ASP:OD1	0.46	2.11	7	1
1:A:53:ILE:CD1	1:A:104:GLN:HG3	0.45	2.31	8	2
1:A:123:GLU:O	1:A:124:ILE:CG1	0.45	2.64	6	5
1:A:76:LEU:HD23	1:A:103:ASN:HB3	0.45	1.86	7	1
1:A:11:LEU:HB3	1:A:20:LEU:CD2	0.45	2.42	10	1
1:A:76:LEU:HD13	1:A:103:ASN:CB	0.45	2.37	6	1
1:A:131:PHE:HB3	1:A:162:ILE:HD11	0.45	1.88	6	1
1:A:159:PHE:CD1	1:A:159:PHE:N	0.45	2.85	10	4
1:A:55:PHE:CE2	1:A:100:ILE:HG21	0.45	2.41	6	1
1:A:87:PHE:CD2	1:A:99:PHE:CD2	0.45	3.04	10	1
1:A:209:ARG:O	1:A:213:PHE:CD2	0.45	2.69	2	1
1:A:189:ILE:HD13	1:A:197:LYS:HG2	0.45	1.88	3	1
1:A:60:ASN:HD22	1:A:61:SER:N	0.45	2.10	6	1
1:A:77:PHE:N	1:A:77:PHE:CD1	0.45	2.85	3	1
1:A:115:THR:HG22	1:A:119:ILE:HD11	0.45	1.88	5	1
1:A:46:ALA:HB2	1:A:96:LEU:HD21	0.45	1.87	2	1
1:A:43:PHE:CD1	1:A:96:LEU:CD2	0.45	2.93	3	1
1:A:212:GLU:O	1:A:216:ARG:HG2	0.45	2.11	10	1
1:A:11:LEU:CG	1:A:17:ALA:HA	0.45	2.35	7	2
1:A:20:LEU:HD21	1:A:29:ILE:HD11	0.45	1.88	1	1
1:A:186:VAL:HG21	1:A:213:PHE:CE2	0.45	2.47	2	1
1:A:127:HIS:HE2	1:A:160:ILE:HB	0.45	1.72	4	1
1:A:104:GLN:O	1:A:104:GLN:HG2	0.45	2.11	5	2
1:A:10:THR:HG22	1:A:57:ILE:CB	0.45	2.35	6	2
1:A:128:ILE:HD11	1:A:186:VAL:CG2	0.45	2.41	10	1
1:A:129:LEU:HB3	1:A:187:ARG:HD3	0.45	1.88	6	1
1:A:186:VAL:O	1:A:200:PRO:HB3	0.45	2.12	6	1
1:A:10:THR:HG23	1:A:57:ILE:HD13	0.45	1.89	9	1
1:A:209:ARG:CD	1:A:213:PHE:HE2	0.45	2.25	10	1
1:A:169:ASN:O	1:A:172:ILE:HG22	0.45	2.12	4	1
1:A:76:LEU:CD2	1:A:103:ASN:HB3	0.45	2.42	7	1
1:A:205:LEU:HB3	1:A:208:GLU:CB	0.45	2.42	7	2
1:A:31:PHE:CD1	1:A:31:PHE:N	0.45	2.85	8	2
1:A:42:GLN:HA	1:A:42:GLN:OE1	0.44	2.12	1	1
1:A:176:PHE:CE1	1:A:187:ARG:HD2	0.44	2.47	1	1
1:A:128:ILE:C	1:A:128:ILE:CD1	0.44	2.90	4	1
1:A:173:LEU:C	1:A:173:LEU:HD12	0.44	2.36	4	2
1:A:129:LEU:HD13	1:A:130:LEU:N	0.44	2.26	5	1
1:A:187:ARG:C	1:A:188:LEU:HD12	0.44	2.37	9	1
1:A:50:ILE:CG2	1:A:97:LEU:HD22	0.44	2.42	7	1
1:A:97:LEU:O	1:A:101:LYS:HB2	0.44	2.11	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:VAL:HG11	1:A:100:ILE:CD1	0.44	2.43	3	1
1:A:58:THR:HG21	1:A:63:VAL:HG11	0.44	1.88	3	2
1:A:101:LYS:HD2	1:A:101:LYS:C	0.44	2.38	8	1
1:A:76:LEU:HB3	1:A:85:ASN:HB2	0.44	1.89	6	2
1:A:99:PHE:CE2	1:A:103:ASN:OD1	0.44	2.71	9	1
1:A:124:ILE:HA	1:A:191:LEU:HD22	0.44	1.89	1	1
1:A:128:ILE:HG12	1:A:187:ARG:O	0.44	2.12	4	2
1:A:216:ARG:HE	1:A:221:LYS:HD3	0.44	1.72	4	1
1:A:11:LEU:HD22	1:A:17:ALA:CA	0.44	2.42	6	2
1:A:93:LYS:HG2	1:A:94:GLU:OE1	0.44	2.12	6	1
1:A:96:LEU:HG	1:A:97:LEU:N	0.44	2.27	7	1
1:A:205:LEU:HB3	1:A:208:GLU:HB3	0.44	1.89	10	2
1:A:200:PRO:HB3	1:A:213:PHE:CE2	0.44	2.47	5	1
1:A:87:PHE:CE2	1:A:99:PHE:HB3	0.44	2.48	9	1
1:A:75:VAL:HG13	1:A:77:PHE:CE1	0.43	2.48	10	1
1:A:92:THR:HB	1:A:95:ASN:HB3	0.43	1.90	3	1
1:A:125:LYS:HB3	1:A:127:HIS:HE1	0.43	1.70	3	1
1:A:153:PHE:HZ	1:A:218:LEU:HD22	0.43	1.73	9	1
1:A:188:LEU:HD11	1:A:213:PHE:CD2	0.43	2.48	9	1
1:A:31:PHE:HA	1:A:58:THR:OG1	0.43	2.12	9	1
1:A:176:PHE:CD2	1:A:178:LEU:HD12	0.43	2.48	9	1
1:A:166:HIS:CE1	1:A:167:THR:HG23	0.43	2.48	1	1
1:A:116:ALA:O	1:A:120:PHE:CE1	0.43	2.72	2	1
1:A:163:ASP:O	1:A:165:ASP:N	0.43	2.52	3	1
1:A:116:ALA:O	1:A:120:PHE:CD1	0.43	2.72	8	2
1:A:129:LEU:HB2	1:A:189:ILE:HD11	0.43	1.89	8	1
1:A:198:TYR:CD1	1:A:198:TYR:C	0.43	2.96	1	1
1:A:50:ILE:HD13	1:A:97:LEU:HD13	0.43	1.87	2	1
1:A:130:LEU:HD12	1:A:186:VAL:HG22	0.43	1.90	3	1
1:A:9:THR:O	1:A:56:GLY:CA	0.43	2.66	6	1
1:A:11:LEU:HD22	1:A:17:ALA:CB	0.43	2.43	8	3
1:A:128:ILE:O	1:A:160:ILE:HG12	0.43	2.13	6	1
1:A:173:LEU:HB2	1:A:182:GLU:OE2	0.43	2.13	6	1
1:A:50:ILE:HD12	1:A:52:ASP:OD2	0.43	2.13	9	1
1:A:109:ILE:HG12	1:A:160:ILE:HG22	0.43	1.91	1	1
1:A:100:ILE:O	1:A:104:GLN:N	0.43	2.51	3	1
1:A:128:ILE:HD11	1:A:159:PHE:CD2	0.43	2.48	5	1
1:A:28:VAL:HG22	1:A:76:LEU:HB2	0.43	1.90	7	1
1:A:189:ILE:N	1:A:189:ILE:HD12	0.43	2.28	7	1
1:A:188:LEU:CD2	1:A:198:TYR:CD1	0.43	3.01	1	1
1:A:97:LEU:HA	1:A:100:ILE:CD1	0.43	2.44	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:VAL:HG23	1:A:85:ASN:C	0.43	2.39	10	1
1:A:17:ALA:HA	1:A:20:LEU:HD23	0.43	1.91	9	2
1:A:31:PHE:HE2	1:A:63:VAL:HG12	0.43	1.73	3	1
1:A:109:ILE:N	1:A:161:PHE:CE1	0.43	2.87	5	4
1:A:127:HIS:CE1	1:A:189:ILE:HB	0.43	2.48	5	2
1:A:158:LEU:C	1:A:158:LEU:HD13	0.43	2.38	5	1
1:A:105:LEU:HD23	1:A:106:PRO:O	0.43	2.12	8	1
1:A:111:PHE:HE1	1:A:119:ILE:HD11	0.43	1.73	8	1
1:A:109:ILE:HG13	1:A:110:GLU:N	0.43	2.29	10	1
1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CD1	0.43	2.76	1	1
1:A:127:HIS:CB	1:A:158:LEU:HG	0.43	2.42	1	1
1:A:24:SER:O	1:A:25:GLU:C	0.43	2.61	8	4
1:A:129:LEU:HB3	1:A:187:ARG:NH1	0.43	2.28	7	1
1:A:154:LYS:O	1:A:154:LYS:HG3	0.43	2.14	9	1
1:A:28:VAL:CG2	1:A:76:LEU:HD23	0.43	2.41	10	1
1:A:96:LEU:HD12	1:A:97:LEU:N	0.43	2.29	3	1
1:A:170:GLN:HA	1:A:173:LEU:CD2	0.43	2.44	4	1
1:A:11:LEU:CD2	1:A:20:LEU:HD21	0.43	2.42	10	1
1:A:129:LEU:CA	1:A:160:ILE:HG23	0.42	2.40	4	1
1:A:43:PHE:HE1	1:A:96:LEU:HD13	0.42	1.73	7	1
1:A:132:LEU:CD1	1:A:133:PRO:HD2	0.42	2.42	5	1
1:A:93:LYS:HG2	1:A:94:GLU:N	0.42	2.28	8	1
1:A:111:PHE:CB	1:A:162:ILE:HG13	0.42	2.44	10	1
1:A:57:ILE:HD13	1:A:57:ILE:N	0.42	2.29	2	2
1:A:122:GLY:O	1:A:123:GLU:HB3	0.42	2.14	2	1
1:A:50:ILE:HD11	1:A:55:PHE:HZ	0.42	1.74	9	1
1:A:77:PHE:C	1:A:78:LYS:HD2	0.42	2.39	10	1
1:A:20:LEU:HD21	1:A:29:ILE:CD1	0.42	2.44	1	1
1:A:75:VAL:HG11	1:A:84:ARG:HB3	0.42	1.91	3	1
1:A:28:VAL:HG22	1:A:76:LEU:CB	0.42	2.44	7	1
1:A:60:ASN:OD1	1:A:62:ASP:HB2	0.42	2.13	8	1
1:A:190:THR:C	1:A:191:LEU:HD12	0.42	2.39	7	1
1:A:50:ILE:HB	1:A:52:ASP:OD2	0.42	2.15	9	1
1:A:171:ARG:HG3	1:A:172:ILE:N	0.42	2.29	4	1
1:A:75:VAL:HG13	1:A:86:ASN:N	0.42	2.30	5	1
1:A:88:GLU:HA	1:A:88:GLU:OE1	0.42	2.15	10	1
1:A:128:ILE:HG22	1:A:188:LEU:HB3	0.42	1.91	1	1
1:A:31:PHE:CD2	1:A:64:PHE:CE1	0.42	3.07	5	1
1:A:53:ILE:HG21	1:A:100:ILE:CG2	0.42	2.45	1	2
1:A:50:ILE:HG23	1:A:97:LEU:HD22	0.42	1.92	4	1
1:A:180:LYS:C	1:A:182:GLU:N	0.42	2.78	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:205:LEU:HG	1:A:206:THR:HG22	0.42	1.92	2	1
1:A:58:THR:OG1	1:A:63:VAL:HG21	0.42	2.14	3	1
1:A:165:ASP:O	1:A:169:ASN:CB	0.42	2.68	10	2
1:A:107:LEU:O	1:A:158:LEU:HD13	0.42	2.14	9	1
1:A:176:PHE:HE1	1:A:199:LYS:HE2	0.42	1.74	10	1
1:A:99:PHE:CD2	1:A:103:ASN:OD1	0.42	2.73	2	1
1:A:114:GLN:O	1:A:117:PRO:HD2	0.42	2.15	5	1
1:A:87:PHE:HA	1:A:99:PHE:CE2	0.42	2.50	8	1
1:A:127:HIS:CD2	1:A:189:ILE:HB	0.42	2.49	9	1
1:A:85:ASN:ND2	1:A:103:ASN:ND2	0.41	2.68	2	1
1:A:129:LEU:HD22	1:A:187:ARG:NE	0.41	2.30	4	1
1:A:98:ASP:O	1:A:102:HIS:HB2	0.41	2.14	9	1
1:A:111:PHE:HD2	1:A:129:LEU:CD1	0.41	2.27	7	1
1:A:203:GLU:O	1:A:203:GLU:HG2	0.41	2.14	7	1
1:A:108:VAL:HA	1:A:159:PHE:O	0.41	2.15	10	1
1:A:32:PHE:O	1:A:59:SER:HB3	0.41	2.15	1	1
1:A:190:THR:HG21	1:A:217:PHE:CZ	0.41	2.50	1	1
1:A:158:LEU:N	1:A:158:LEU:HD23	0.41	2.30	2	1
1:A:175:PHE:CZ	1:A:197:LYS:HE3	0.41	2.50	4	1
1:A:11:LEU:HG	1:A:16:ALA:C	0.41	2.40	7	1
1:A:216:ARG:O	1:A:221:LYS:HB2	0.41	2.15	9	2
1:A:109:ILE:C	1:A:161:PHE:CE1	0.41	2.99	3	1
1:A:157:ILE:HG23	1:A:159:PHE:HE1	0.41	1.73	8	1
1:A:80:PHE:CD1	1:A:80:PHE:C	0.41	2.98	9	1
1:A:208:GLU:O	1:A:212:GLU:HG2	0.41	2.15	9	1
1:A:32:PHE:HA	1:A:72:ASP:OD1	0.41	2.15	2	1
1:A:78:LYS:HG3	1:A:80:PHE:O	0.41	2.16	2	1
1:A:189:ILE:HD13	1:A:197:LYS:CE	0.41	2.43	3	1
1:A:149:ALA:CB	1:A:210:ILE:CD1	0.41	2.98	4	1
1:A:105:LEU:HD23	1:A:158:LEU:CD1	0.41	2.45	7	1
1:A:179:LYS:N	1:A:179:LYS:HD3	0.41	2.29	7	1
1:A:160:ILE:HD12	1:A:160:ILE:N	0.41	2.31	9	1
1:A:160:ILE:HD13	1:A:160:ILE:H	0.41	1.75	10	1
1:A:128:ILE:HG13	1:A:159:PHE:HA	0.41	1.90	8	2
1:A:50:ILE:CD1	1:A:97:LEU:HD23	0.41	2.46	5	1
1:A:205:LEU:O	1:A:209:ARG:CB	0.41	2.69	10	1
1:A:127:HIS:O	1:A:189:ILE:HG22	0.41	2.16	3	1
1:A:28:VAL:HB	1:A:76:LEU:HD12	0.41	1.91	9	1
1:A:30:GLY:N	1:A:56:GLY:O	0.41	2.52	8	2
1:A:83:GLY:C	1:A:84:ARG:HG2	0.41	2.41	3	1
1:A:28:VAL:O	1:A:56:GLY:N	0.41	2.51	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:187:ARG:C	1:A:188:LEU:HD13	0.41	2.40	1	1
1:A:150:ALA:O	1:A:154:LYS:N	0.41	2.54	8	3
1:A:98:ASP:O	1:A:101:LYS:HG3	0.41	2.16	3	1
1:A:50:ILE:CD1	1:A:101:LYS:HE3	0.41	2.46	5	1
1:A:61:SER:HA	1:A:64:PHE:HD2	0.41	1.76	6	1
1:A:110:GLU:CB	1:A:161:PHE:CE2	0.41	3.04	6	1
1:A:29:ILE:HG23	1:A:57:ILE:N	0.41	2.31	8	1
1:A:119:ILE:O	1:A:120:PHE:C	0.41	2.64	8	1
1:A:53:ILE:O	1:A:55:PHE:CD1	0.41	2.74	9	1
1:A:87:PHE:CD1	1:A:88:GLU:N	0.41	2.88	10	1
1:A:70:ASP:O	1:A:71:LYS:HG2	0.41	2.17	1	1
1:A:76:LEU:HD23	1:A:77:PHE:H	0.41	1.73	3	1
1:A:188:LEU:O	1:A:198:TYR:N	0.41	2.53	3	2
1:A:200:PRO:HA	1:A:213:PHE:HE2	0.41	1.75	4	1
1:A:29:ILE:C	1:A:74:VAL:HG13	0.40	2.41	2	1
1:A:81:ASP:OD1	1:A:107:LEU:HG	0.40	2.15	5	1
1:A:131:PHE:CD1	1:A:131:PHE:C	0.40	2.99	7	1
1:A:187:ARG:NH1	1:A:187:ARG:HB3	0.40	2.32	7	1
1:A:132:LEU:CD1	1:A:161:PHE:HB2	0.40	2.45	1	1
1:A:175:PHE:CD1	1:A:175:PHE:C	0.40	2.99	5	2
1:A:176:PHE:CE1	1:A:199:LYS:HE2	0.40	2.51	10	1
1:A:197:LYS:NZ	1:A:197:LYS:HB3	0.40	2.31	1	1
1:A:50:ILE:O	1:A:50:ILE:CG1	0.40	2.68	5	1
1:A:196:THR:C	1:A:197:LYS:HG3	0.40	2.42	5	1
1:A:165:ASP:HB3	1:A:169:ASN:CG	0.40	2.42	6	1
1:A:90:GLU:HG2	1:A:90:GLU:O	0.40	2.15	9	1
1:A:107:LEU:CD2	1:A:150:ALA:HB3	0.40	2.47	2	1
1:A:42:GLN:HA	1:A:42:GLN:HE21	0.40	1.76	3	1
1:A:125:LYS:O	1:A:191:LEU:HB3	0.40	2.16	6	1
1:A:131:PHE:CB	1:A:162:ILE:HD11	0.40	2.46	6	1
1:A:203:GLU:O	1:A:203:GLU:HG3	0.40	2.15	8	1
1:A:14:GLY:O	1:A:17:ALA:HB3	0.40	2.16	9	1
1:A:76:LEU:HD23	1:A:76:LEU:C	0.40	2.41	4	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	198/228 (87%)	171±2 (86±1%)	18±3 (9±1%)	9±1 (5±1%)	3	25
All	All	1980/2280 (87%)	1707 (86%)	179 (9%)	94 (5%)	3	25

All 17 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	124	ILE	10
1	A	166	HIS	10
1	A	180	LYS	10
1	A	181	GLU	10
1	A	206	THR	10
1	A	133	PRO	9
1	A	89	GLY	7
1	A	164	SER	6
1	A	72	ASP	4
1	A	221	LYS	4
1	A	70	ASP	3
1	A	81	ASP	3
1	A	201	GLU	3
1	A	165	ASP	2
1	A	120	PHE	1
1	A	6	PRO	1
1	A	88	GLU	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	172/199 (86%)	120±4 (69±3%)	52±4 (31±3%)	1	16
All	All	1720/1990 (86%)	1195 (69%)	525 (31%)	1	16

All 134 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	11	LEU	10
1	A	68	GLN	9
1	A	84	ARG	9
1	A	148	THR	9
1	A	80	PHE	8
1	A	93	LYS	8
1	A	125	LYS	8
1	A	66	LYS	8
1	A	71	LYS	7
1	A	79	LYS	7
1	A	104	GLN	7
1	A	190	THR	7
1	A	197	LYS	7
1	A	221	LYS	7
1	A	57	ILE	7
1	A	154	LYS	7
1	A	178	LEU	7
1	A	48	GLU	6
1	A	78	LYS	6
1	A	97	LEU	6
1	A	101	LYS	6
1	A	163	ASP	6
1	A	180	LYS	6
1	A	182	GLU	6
1	A	191	LEU	6
1	A	206	THR	6
1	A	113	GLU	6
1	A	114	GLN	6
1	A	156	LYS	6
1	A	92	THR	6
1	A	20	LEU	5
1	A	44	LEU	5
1	A	61	SER	5
1	A	82	GLU	5
1	A	109	ILE	5
1	A	161	PHE	5
1	A	25	GLU	5
1	A	95	ASN	5
1	A	128	ILE	5
1	A	179	LYS	5
1	A	118	LYS	5
1	A	123	GLU	5
1	A	159	PHE	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	187	ARG	5
1	A	201	GLU	5
1	A	130	LEU	5
1	A	94	GLU	4
1	A	107	LEU	4
1	A	158	LEU	4
1	A	164	SER	4
1	A	171	ARG	4
1	A	19	SER	4
1	A	22	GLU	4
1	A	132	LEU	4
1	A	153	PHE	4
1	A	167	THR	4
1	A	170	GLN	4
1	A	174	GLU	4
1	A	203	GLU	4
1	A	215	HIS	4
1	A	23	SER	4
1	A	90	GLU	4
1	A	110	GLU	4
1	A	151	GLU	4
1	A	181	GLU	4
1	A	183	CYS	4
1	A	209	ARG	4
1	A	219	GLU	4
1	A	33	LYS	4
1	A	76	LEU	4
1	A	34	ASP	3
1	A	45	GLN	3
1	A	85	ASN	3
1	A	115	THR	3
1	A	127	HIS	3
1	A	168	ASP	3
1	A	199	LYS	3
1	A	214	CYS	3
1	A	218	LEU	3
1	A	55	PHE	3
1	A	165	ASP	3
1	A	202	SER	3
1	A	212	GLU	3
1	A	13	ASP	3
1	A	24	SER	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	88	GLU	3
1	A	102	HIS	3
1	A	208	GLU	3
1	A	52	ASP	3
1	A	169	ASN	3
1	A	189	ILE	3
1	A	210	ILE	3
1	A	9	THR	3
1	A	105	LEU	3
1	A	111	PHE	3
1	A	196	THR	3
1	A	67	TYR	3
1	A	31	PHE	2
1	A	37	SER	2
1	A	86	ASN	2
1	A	112	THR	2
1	A	166	HIS	2
1	A	188	LEU	2
1	A	217	PHE	2
1	A	32	PHE	2
1	A	41	LYS	2
1	A	62	ASP	2
1	A	65	SER	2
1	A	36	GLU	2
1	A	59	SER	2
1	A	87	PHE	2
1	A	103	ASN	2
1	A	160	ILE	2
1	A	216	ARG	2
1	A	96	LEU	2
1	A	152	SER	2
1	A	53	ILE	2
1	A	51	ASP	2
1	A	70	ASP	1
1	A	28	VAL	1
1	A	129	LEU	1
1	A	38	ASP	1
1	A	42	GLN	1
1	A	18	GLU	1
1	A	39	SER	1
1	A	99	PHE	1
1	A	58	THR	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	60	ASN	1
1	A	162	ILE	1
1	A	176	PHE	1
1	A	131	PHE	1
1	A	213	PHE	1
1	A	98	ASP	1
1	A	126	THR	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 ⓘ

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers ⓘ

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided