



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 26, 2026 – 10:28 AM UTC

PDB ID : 2K4T / pdb_00002k4t
Title : Solution structure of human VDAC-1 in LDAO micelles
Authors : Hiller, S.; Garces, R.G.; Malia, T.J.; Orekhov, V.Y.; Colombini, M.; Wagner, G.
Deposited on : 2008-06-17

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

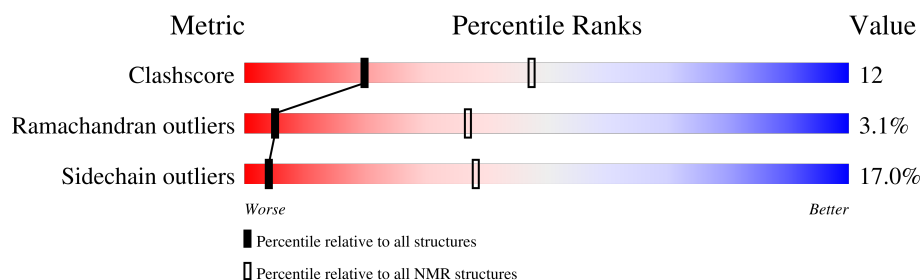
1 Overall quality at a glance

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	291	 69% 22% 7% .

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:5-A:15, A:24-A:249, A:254-A:281 (265)	3.53	1

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

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

The models can be grouped into 4 clusters and 2 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 3, 5, 6, 7, 8, 11, 16
2	9, 14, 17
3	10, 13, 19
4	12, 18, 20
Single-model clusters	4; 15

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 4347 atoms, of which 2160 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Voltage-dependent anion-selective channel protein 1.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	285	Total	C	H	N	O	S	0
			4347	1383	2160	368	431	5	

There are 8 discrepancies between the modelled and reference sequences:

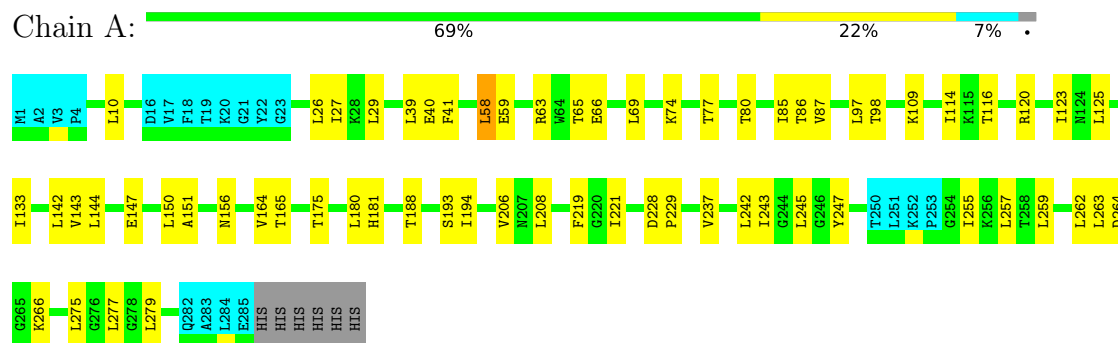
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	284	LEU	-	expression tag	UNP P21796
A	285	GLU	-	expression tag	UNP P21796
A	286	HIS	-	expression tag	UNP P21796
A	287	HIS	-	expression tag	UNP P21796
A	288	HIS	-	expression tag	UNP P21796
A	289	HIS	-	expression tag	UNP P21796
A	290	HIS	-	expression tag	UNP P21796
A	291	HIS	-	expression tag	UNP P21796

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: Voltage-dependent anion-selective channel protein 1

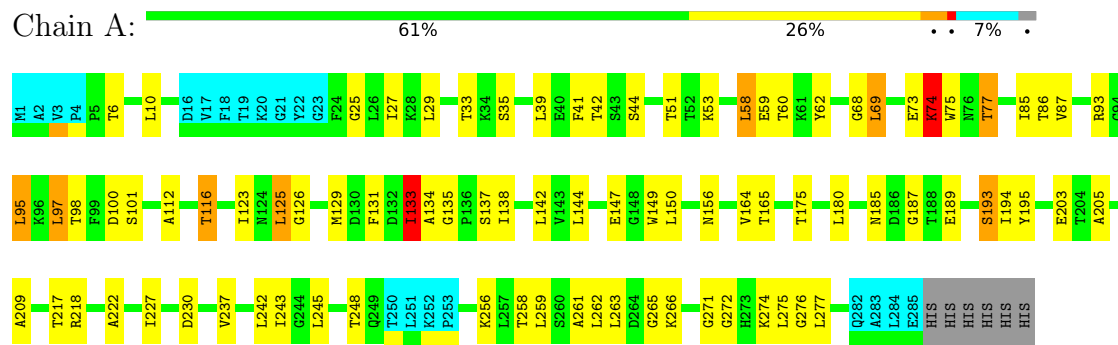


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

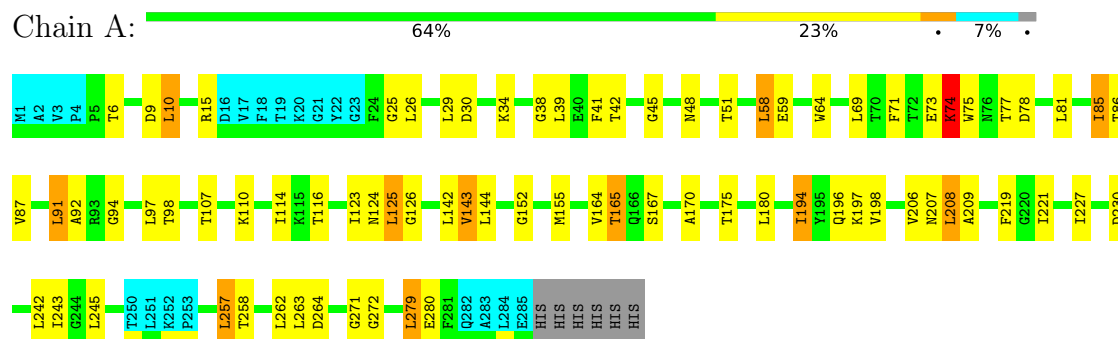
4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

- Molecule 1: Voltage-dependent anion-selective channel protein 1



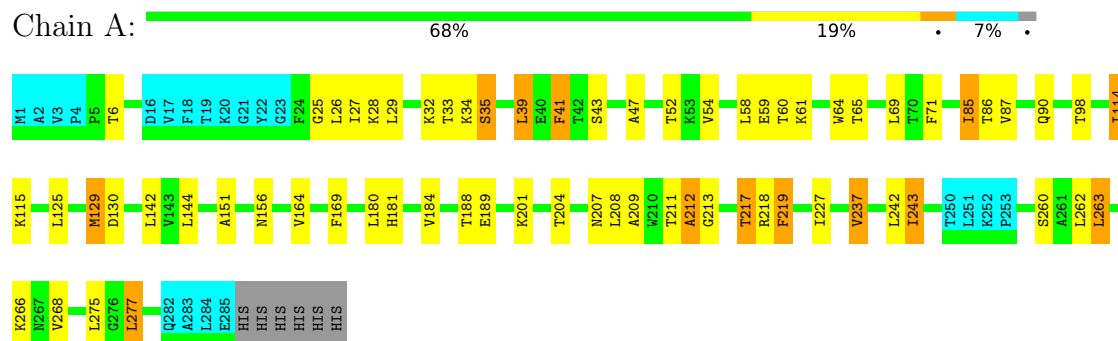
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Voltage-dependent anion-selective channel protein 1



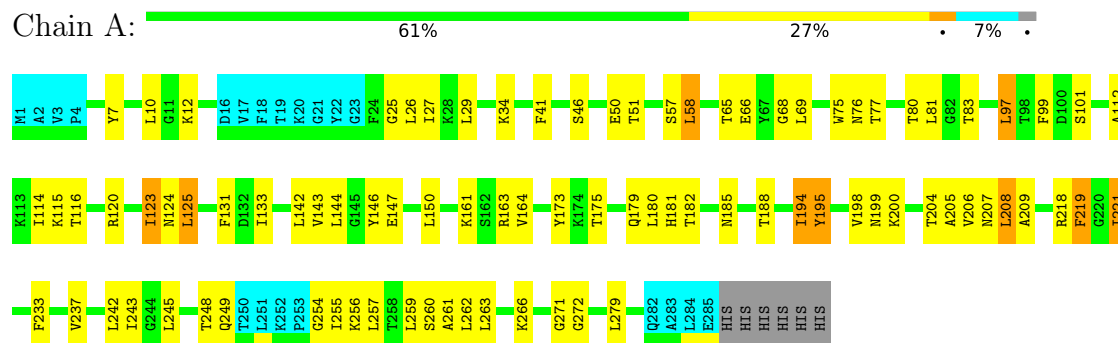
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Voltage-dependent anion-selective channel protein 1



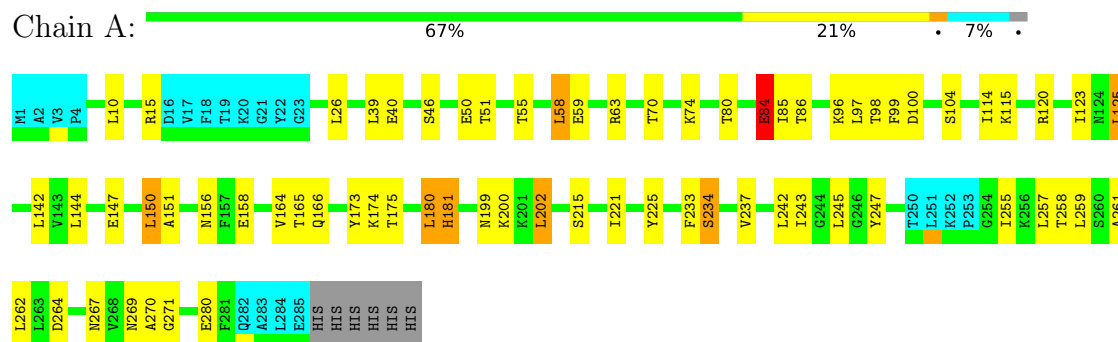
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Voltage-dependent anion-selective channel protein 1



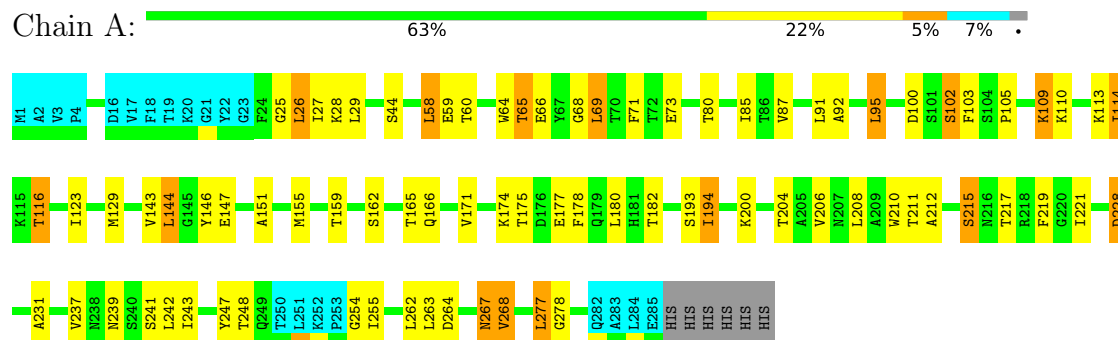
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Voltage-dependent anion-selective channel protein 1



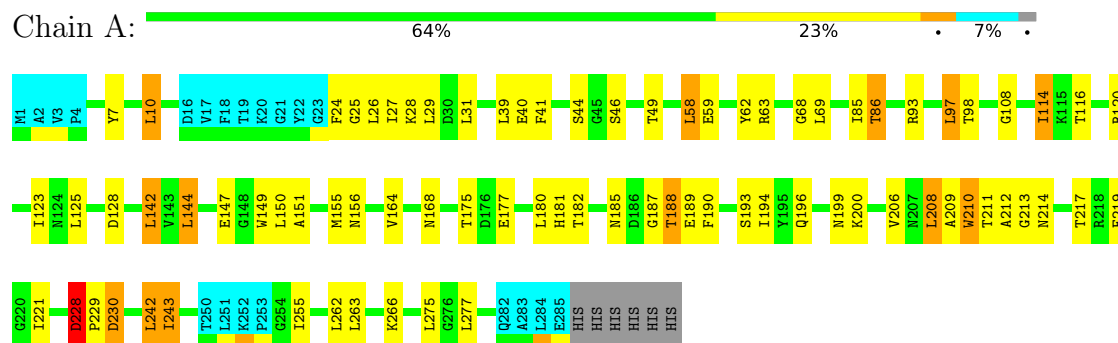
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Voltage-dependent anion-selective channel protein 1



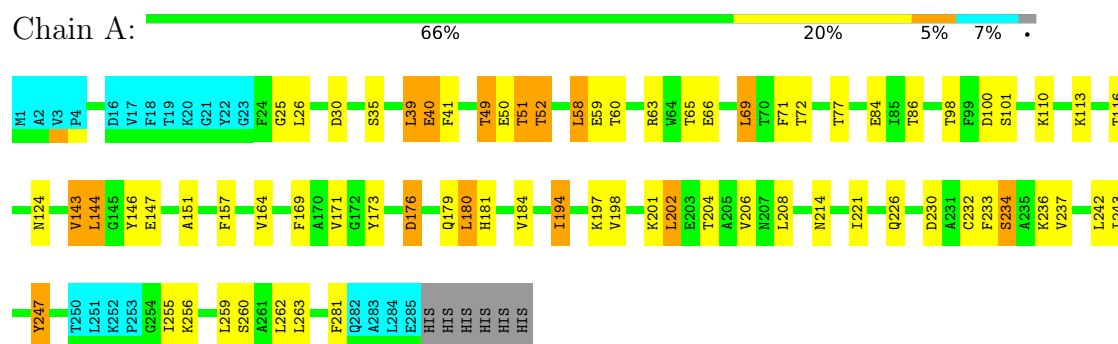
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Voltage-dependent anion-selective channel protein 1



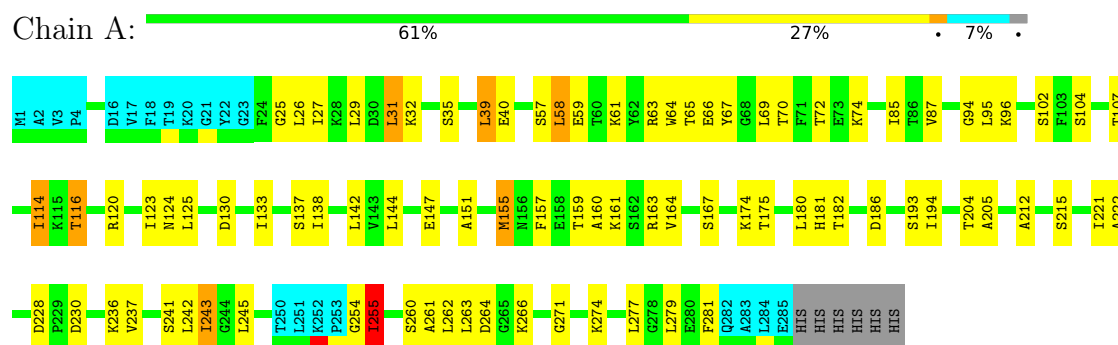
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Voltage-dependent anion-selective channel protein 1



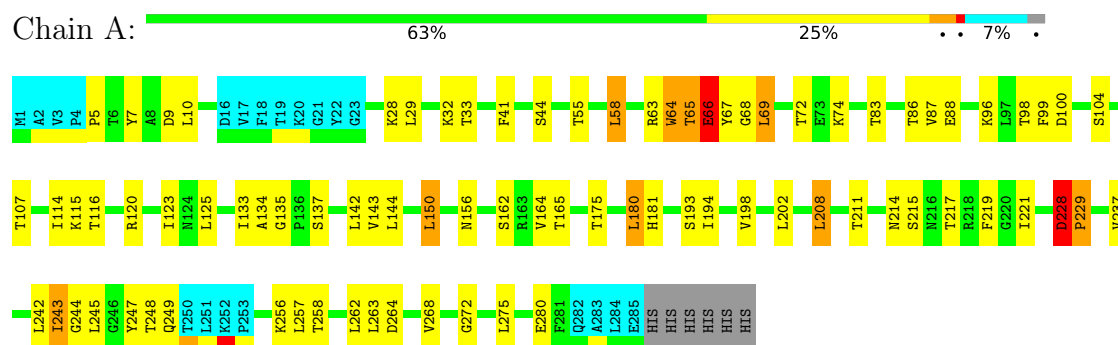
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Voltage-dependent anion-selective channel protein 1



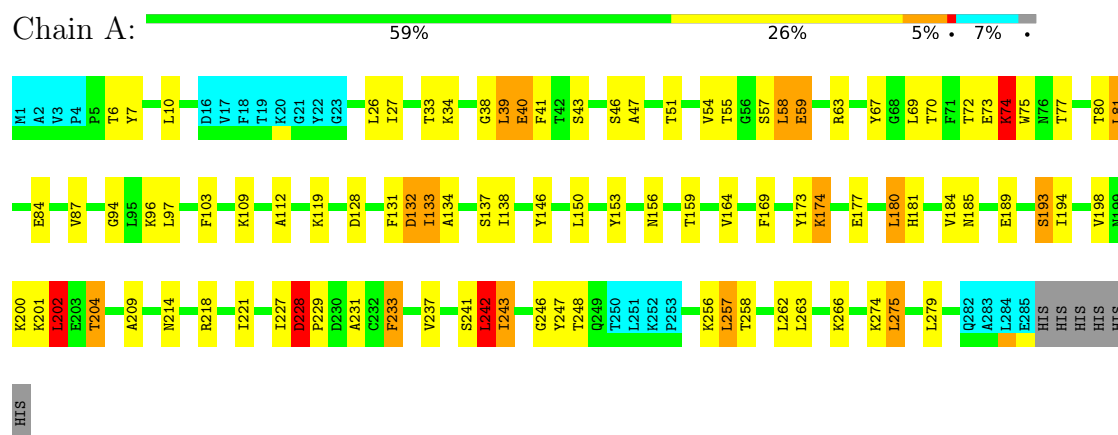
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Voltage-dependent anion-selective channel protein 1



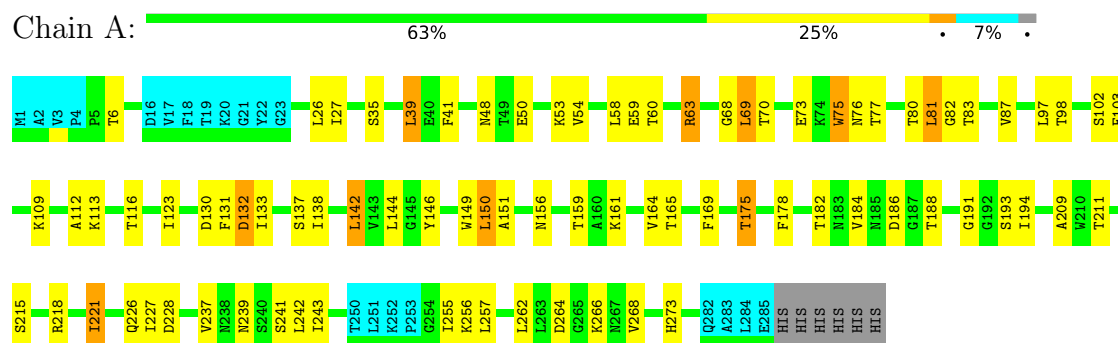
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Voltage-dependent anion-selective channel protein 1



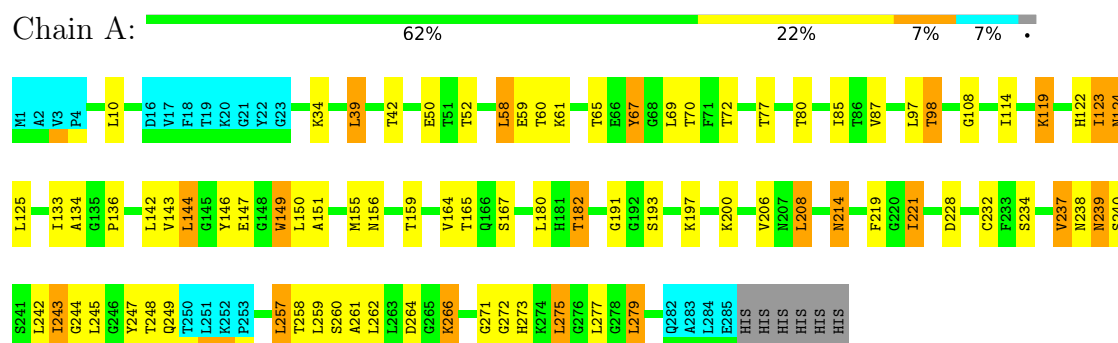
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Voltage-dependent anion-selective channel protein 1



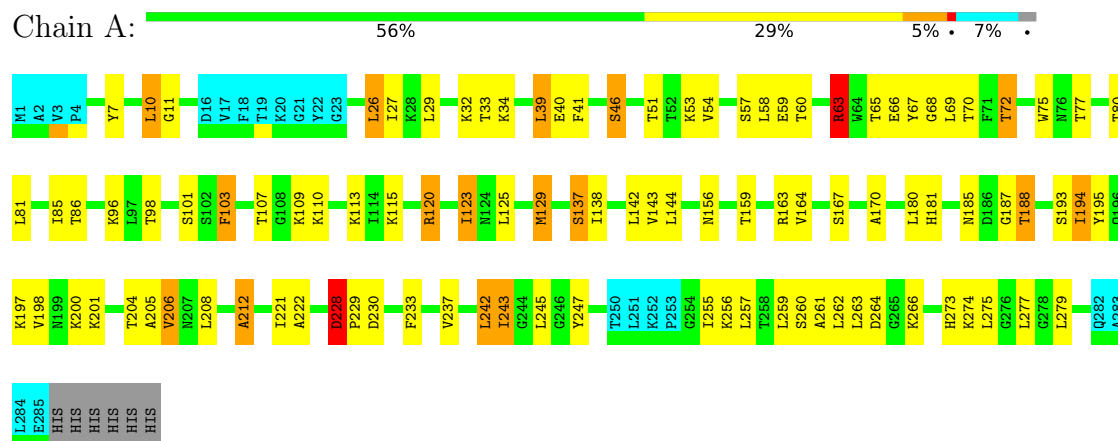
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Voltage-dependent anion-selective channel protein 1



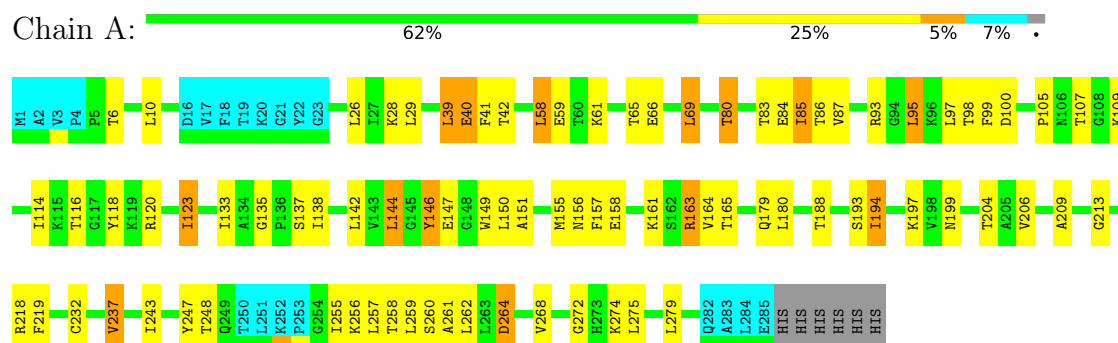
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Voltage-dependent anion-selective channel protein 1



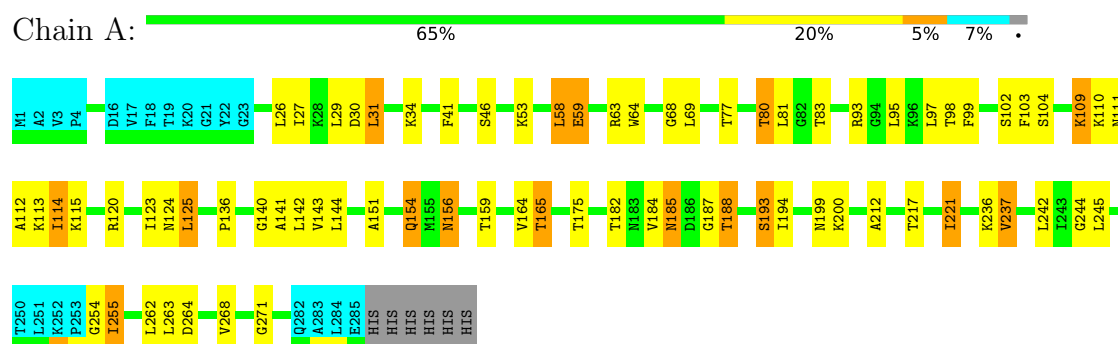
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Voltage-dependent anion-selective channel protein 1



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Voltage-dependent anion-selective channel protein 1



- Molecule 1: Voltage-dependent anion-selective channel protein 1



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 500 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *target function*.

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

Software name	Classification	Version
CYANA	structure solution	2.1
CYANA	refinement	2.1

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	2036	2005	2005	50±11
All	All	40720	40100	40100	1005

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 12.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:THR:HG23	1:A:98:THR:HG22	0.98	1.35	7	3
1:A:123:ILE:HD11	1:A:142:LEU:HD11	0.95	1.35	5	3
1:A:95:LEU:HD22	1:A:116:THR:HG22	0.94	1.37	20	1
1:A:263:LEU:HD12	1:A:268:VAL:HG21	0.91	1.40	3	2
1:A:242:LEU:HD11	1:A:262:LEU:HD21	0.89	1.45	13	3
1:A:248:THR:HG22	1:A:258:THR:HG23	0.87	1.46	18	1
1:A:237:VAL:HG22	1:A:243:ILE:HG23	0.86	1.48	13	8
1:A:81:LEU:HD13	1:A:81:LEU:N	0.83	1.87	15	2
1:A:205:ALA:HB3	1:A:222:ALA:HB3	0.83	1.49	9	3
1:A:242:LEU:HD21	1:A:262:LEU:HD21	0.82	1.49	2	9
1:A:233:PHE:HB3	1:A:246:GLY:O	0.81	1.75	13	2
1:A:69:LEU:HD11	1:A:87:VAL:HG23	0.80	1.54	2	1
1:A:206:VAL:HG23	1:A:221:ILE:HG22	0.79	1.54	4	4
1:A:190:PHE:HB2	1:A:209:ALA:HB1	0.79	1.54	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:TRP:CG	1:A:80:THR:HG1	0.79	1.94	15	1
1:A:142:LEU:C	1:A:142:LEU:HD22	0.79	2.02	11	1
1:A:95:LEU:C	1:A:95:LEU:HD22	0.78	2.03	1	1
1:A:85:ILE:O	1:A:99:PHE:HA	0.78	1.79	20	1
1:A:85:ILE:HD12	1:A:114:ILE:HG22	0.76	1.54	20	1
1:A:242:LEU:HD21	1:A:262:LEU:HD11	0.75	1.58	20	3
1:A:237:VAL:HG22	1:A:243:ILE:HG22	0.74	1.58	17	1
1:A:232:CYS:O	1:A:247:TYR:HB3	0.74	1.81	8	1
1:A:85:ILE:O	1:A:85:ILE:HD13	0.74	1.82	20	1
1:A:156:ASN:O	1:A:164:VAL:HG23	0.73	1.82	16	2
1:A:137:SER:O	1:A:138:ILE:HD13	0.73	1.83	17	2
1:A:208:LEU:HD22	1:A:208:LEU:C	0.73	2.07	7	4
1:A:247:TYR:HA	1:A:259:LEU:O	0.73	1.84	5	2
1:A:75:TRP:HB3	1:A:80:THR:O	0.73	1.82	15	1
1:A:143:VAL:C	1:A:144:LEU:HD13	0.72	2.09	20	3
1:A:69:LEU:HD23	1:A:87:VAL:HG22	0.72	1.60	18	1
1:A:237:VAL:HG13	1:A:243:ILE:HG22	0.72	1.62	12	3
1:A:69:LEU:N	1:A:69:LEU:HD13	0.72	2.00	1	2
1:A:29:LEU:HD23	1:A:279:LEU:HD11	0.72	1.61	2	1
1:A:142:LEU:HD21	1:A:144:LEU:HD21	0.71	1.60	10	1
1:A:39:LEU:HD22	1:A:39:LEU:C	0.71	2.10	13	4
1:A:245:LEU:CB	1:A:261:ALA:HB3	0.70	2.17	5	1
1:A:202:LEU:HD11	1:A:227:ILE:HD11	0.70	1.61	14	1
1:A:235:ALA:HB1	1:A:245:LEU:HD23	0.69	1.63	13	2
1:A:257:LEU:HD11	1:A:277:LEU:HD11	0.69	1.63	11	1
1:A:97:LEU:HD22	1:A:114:ILE:HD13	0.69	1.65	20	1
1:A:68:GLY:C	1:A:69:LEU:HD13	0.69	2.11	6	3
1:A:242:LEU:HD11	1:A:262:LEU:HD11	0.68	1.65	17	2
1:A:245:LEU:HD21	1:A:261:ALA:HB3	0.68	1.66	4	1
1:A:26:LEU:C	1:A:26:LEU:HD22	0.68	2.14	17	1
1:A:41:PHE:CZ	1:A:58:LEU:HD21	0.68	2.24	8	4
1:A:259:LEU:HD12	1:A:277:LEU:HD13	0.67	1.65	17	1
1:A:241:SER:O	1:A:242:LEU:C	0.67	2.37	14	1
1:A:69:LEU:HD22	1:A:69:LEU:H	0.67	1.50	6	2
1:A:234:SER:O	1:A:245:LEU:HB3	0.67	1.89	12	1
1:A:247:TYR:CA	1:A:259:LEU:O	0.67	2.43	5	2
1:A:87:VAL:HG21	1:A:97:LEU:HD12	0.67	1.65	20	1
1:A:217:THR:O	1:A:218:ARG:C	0.67	2.35	11	1
1:A:156:ASN:O	1:A:164:VAL:HG22	0.66	1.90	18	2
1:A:247:TYR:HB3	1:A:259:LEU:C	0.66	2.16	16	2
1:A:151:ALA:HB2	1:A:171:VAL:HG23	0.66	1.66	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:227:ILE:HD12	1:A:231:ALA:HB3	0.66	1.67	20	1
1:A:206:VAL:CG2	1:A:221:ILE:HG22	0.66	2.21	4	1
1:A:149:TRP:C	1:A:150:LEU:HD22	0.66	2.16	7	2
1:A:29:LEU:HD22	1:A:279:LEU:HD12	0.65	1.68	20	1
1:A:248:THR:CG2	1:A:258:THR:HG22	0.65	2.22	14	1
1:A:188:THR:HG22	1:A:212:ALA:HB3	0.65	1.66	19	2
1:A:142:LEU:N	1:A:142:LEU:HD13	0.65	2.06	20	1
1:A:69:LEU:HD23	1:A:87:VAL:CG2	0.65	2.22	18	1
1:A:69:LEU:HD12	1:A:87:VAL:HG22	0.65	1.66	15	1
1:A:85:ILE:HD13	1:A:85:ILE:C	0.65	2.15	20	1
1:A:257:LEU:HD22	1:A:279:LEU:HD13	0.65	1.67	18	1
1:A:208:LEU:N	1:A:208:LEU:HD13	0.64	2.07	2	1
1:A:208:LEU:HD22	1:A:208:LEU:O	0.64	1.92	4	2
1:A:248:THR:HG23	1:A:258:THR:HG22	0.64	1.68	14	1
1:A:194:ILE:HG12	1:A:206:VAL:HG13	0.64	1.67	17	6
1:A:35:SER:CB	1:A:39:LEU:HD11	0.63	2.24	3	1
1:A:97:LEU:HD23	1:A:116:THR:HG23	0.63	1.68	2	1
1:A:86:THR:HB	1:A:98:THR:HG23	0.63	1.69	5	2
1:A:69:LEU:HD23	1:A:86:THR:HG22	0.63	1.70	12	1
1:A:158:GLU:CD	1:A:160:ALA:HB3	0.63	2.19	20	1
1:A:26:LEU:C	1:A:27:ILE:HD12	0.63	2.19	14	6
1:A:85:ILE:O	1:A:99:PHE:CA	0.63	2.47	20	1
1:A:138:ILE:C	1:A:157:PHE:HB3	0.63	2.19	9	2
1:A:255:ILE:HD13	1:A:281:PHE:CD1	0.63	2.29	9	1
1:A:242:LEU:HD12	1:A:264:ASP:HA	0.63	1.70	2	3
1:A:210:TRP:CD1	1:A:210:TRP:O	0.63	2.52	7	1
1:A:237:VAL:CG2	1:A:243:ILE:HG23	0.62	2.24	15	7
1:A:41:PHE:CE2	1:A:58:LEU:HD21	0.62	2.28	4	3
1:A:247:TYR:CZ	1:A:259:LEU:HD22	0.62	2.30	17	2
1:A:125:LEU:HD12	1:A:142:LEU:HD12	0.62	1.71	4	1
1:A:273:HIS:CD2	1:A:275:LEU:HD12	0.62	2.30	20	1
1:A:209:ALA:HB2	1:A:219:PHE:CD2	0.62	2.29	3	2
1:A:95:LEU:HD13	1:A:118:TYR:CE1	0.62	2.30	11	1
1:A:97:LEU:CD2	1:A:116:THR:HG22	0.62	2.25	7	1
1:A:132:ASP:C	1:A:133:ILE:HD12	0.62	2.20	14	1
1:A:124:ASN:HB2	1:A:143:VAL:HG23	0.62	1.72	2	4
1:A:190:PHE:HB3	1:A:210:TRP:O	0.61	1.95	7	1
1:A:209:ALA:HB3	1:A:218:ARG:HB2	0.61	1.72	1	3
1:A:84:GLU:HA	1:A:100:ASP:CB	0.61	2.25	18	1
1:A:194:ILE:HB	1:A:206:VAL:HG13	0.61	1.71	7	1
1:A:26:LEU:HD13	1:A:26:LEU:N	0.61	2.11	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:138:ILE:O	1:A:157:PHE:CA	0.61	2.49	18	2
1:A:249:GLN:NE2	1:A:257:LEU:HD13	0.61	2.11	16	1
1:A:227:ILE:HD12	1:A:231:ALA:CB	0.61	2.24	20	1
1:A:157:PHE:CA	1:A:164:VAL:HG12	0.61	2.26	8	1
1:A:33:THR:O	1:A:41:PHE:HA	0.61	1.95	3	1
1:A:242:LEU:HD21	1:A:262:LEU:CD2	0.61	2.26	16	3
1:A:143:VAL:C	1:A:144:LEU:HD12	0.61	2.21	17	1
1:A:129:MET:HB3	1:A:137:SER:O	0.60	1.96	17	1
1:A:80:THR:HG23	1:A:103:PHE:C	0.60	2.21	14	1
1:A:231:ALA:HB3	1:A:247:TYR:CD1	0.60	2.31	14	1
1:A:140:GLY:O	1:A:154:GLN:HB3	0.60	1.95	19	1
1:A:238:ASN:O	1:A:239:ASN:C	0.60	2.43	16	1
1:A:195:TYR:CB	1:A:205:ALA:HA	0.60	2.27	4	1
1:A:202:LEU:HD11	1:A:226:GLN:CD	0.60	2.21	8	1
1:A:26:LEU:O	1:A:27:ILE:HD13	0.60	1.97	11	2
1:A:180:LEU:HD11	1:A:182:THR:HG23	0.60	1.73	7	1
1:A:138:ILE:O	1:A:156:ASN:HB3	0.59	1.96	20	2
1:A:80:THR:HG23	1:A:105:PRO:HD3	0.59	1.74	18	1
1:A:143:VAL:O	1:A:144:LEU:HD13	0.59	1.98	8	2
1:A:69:LEU:CB	1:A:86:THR:O	0.59	2.50	10	2
1:A:58:LEU:HD13	1:A:59:GLU:N	0.59	2.12	3	13
1:A:33:THR:HG21	1:A:58:LEU:HD11	0.59	1.72	3	1
1:A:47:ALA:HB2	1:A:54:VAL:HG13	0.59	1.73	13	2
1:A:208:LEU:HD13	1:A:217:THR:OG1	0.59	1.97	6	1
1:A:274:LYS:O	1:A:275:LEU:HD22	0.59	1.97	18	1
1:A:39:LEU:HD13	1:A:61:LYS:O	0.59	1.98	20	1
1:A:144:LEU:HD22	1:A:144:LEU:N	0.59	2.12	20	5
1:A:138:ILE:O	1:A:157:PHE:HA	0.59	1.97	18	2
1:A:173:TYR:CE2	1:A:180:LEU:HD12	0.59	2.32	5	1
1:A:242:LEU:HD22	1:A:243:ILE:N	0.59	2.13	7	4
1:A:103:PHE:HB3	1:A:109:LYS:O	0.59	1.96	17	1
1:A:68:GLY:C	1:A:69:LEU:HD22	0.58	2.23	17	4
1:A:195:TYR:HB3	1:A:204:THR:O	0.58	1.97	4	1
1:A:193:SER:C	1:A:194:ILE:HD13	0.58	2.22	6	5
1:A:244:GLY:O	1:A:245:LEU:HD22	0.58	1.98	10	1
1:A:262:LEU:C	1:A:263:LEU:HD23	0.58	2.23	12	1
1:A:205:ALA:CB	1:A:222:ALA:HB3	0.58	2.27	9	1
1:A:137:SER:C	1:A:138:ILE:HD13	0.58	2.23	14	3
1:A:256:LYS:CE	1:A:257:LEU:HD12	0.58	2.27	17	1
1:A:235:ALA:HB2	1:A:245:LEU:HD13	0.58	1.75	20	1
1:A:47:ALA:CB	1:A:54:VAL:HG22	0.58	2.28	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:237:VAL:HG13	1:A:243:ILE:CG2	0.58	2.28	12	1
1:A:35:SER:HB2	1:A:39:LEU:HD22	0.58	1.75	15	1
1:A:149:TRP:C	1:A:150:LEU:HD13	0.58	2.23	20	2
1:A:97:LEU:HD13	1:A:98:THR:N	0.58	2.13	2	3
1:A:81:LEU:C	1:A:103:PHE:HB3	0.58	2.24	19	1
1:A:69:LEU:HG	1:A:87:VAL:HG13	0.58	1.75	20	1
1:A:27:ILE:HG23	1:A:277:LEU:HD12	0.58	1.73	9	1
1:A:7:TYR:CD1	1:A:150:LEU:HD23	0.58	2.34	14	1
1:A:256:LYS:O	1:A:257:LEU:HD22	0.58	1.97	15	1
1:A:156:ASN:O	1:A:164:VAL:HG13	0.58	1.98	11	11
1:A:242:LEU:HD13	1:A:242:LEU:C	0.58	2.24	12	13
1:A:77:THR:O	1:A:78:ASP:C	0.58	2.47	12	2
1:A:180:LEU:HD13	1:A:181:HIS:N	0.58	2.14	9	7
1:A:80:THR:HG23	1:A:105:PRO:CD	0.58	2.29	18	1
1:A:138:ILE:HD11	1:A:161:LYS:CG	0.58	2.28	18	1
1:A:69:LEU:CD1	1:A:87:VAL:HG13	0.58	2.29	16	3
1:A:75:TRP:NE1	1:A:81:LEU:HD12	0.58	2.13	14	1
1:A:86:THR:CG2	1:A:98:THR:HG23	0.57	2.29	3	1
1:A:97:LEU:HD12	1:A:116:THR:OG1	0.57	1.99	4	1
1:A:208:LEU:HD12	1:A:208:LEU:O	0.57	1.99	6	1
1:A:81:LEU:O	1:A:103:PHE:CA	0.57	2.52	19	1
1:A:242:LEU:HD13	1:A:243:ILE:N	0.57	2.14	5	3
1:A:97:LEU:HD21	1:A:114:ILE:HD11	0.57	1.74	2	2
1:A:69:LEU:HD11	1:A:87:VAL:HG13	0.57	1.76	16	2
1:A:202:LEU:HD11	1:A:227:ILE:CD1	0.57	2.30	14	1
1:A:257:LEU:HD22	1:A:279:LEU:CD1	0.57	2.28	18	1
1:A:257:LEU:HD12	1:A:257:LEU:O	0.57	2.00	4	1
1:A:69:LEU:CD2	1:A:87:VAL:HG13	0.57	2.29	9	1
1:A:233:PHE:CE2	1:A:259:LEU:HD22	0.57	2.35	5	1
1:A:95:LEU:C	1:A:95:LEU:CD2	0.57	2.76	1	1
1:A:233:PHE:CZ	1:A:245:LEU:HD12	0.57	2.34	20	1
1:A:144:LEU:HB2	1:A:151:ALA:HB3	0.57	1.77	19	8
1:A:69:LEU:HD12	1:A:71:PHE:CZ	0.57	2.35	8	1
1:A:33:THR:CG2	1:A:58:LEU:HD11	0.56	2.30	3	1
1:A:248:THR:HG23	1:A:258:THR:OG1	0.56	2.00	11	2
1:A:64:TRP:CD1	1:A:69:LEU:HD12	0.56	2.35	9	1
1:A:180:LEU:HD12	1:A:194:ILE:HG23	0.56	1.76	2	1
1:A:233:PHE:CE2	1:A:259:LEU:HD13	0.56	2.35	5	1
1:A:125:LEU:HD12	1:A:126:GLY:N	0.56	2.15	11	1
1:A:39:LEU:HD21	1:A:41:PHE:CD2	0.56	2.35	15	1
1:A:149:TRP:O	1:A:150:LEU:HD13	0.56	2.00	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:245:LEU:CD2	1:A:261:ALA:HB3	0.56	2.29	4	1
1:A:262:LEU:HD13	1:A:263:LEU:N	0.56	2.16	7	5
1:A:10:LEU:HD11	1:A:150:LEU:HB3	0.56	1.77	1	2
1:A:81:LEU:N	1:A:81:LEU:CD1	0.56	2.61	15	1
1:A:29:LEU:HD12	1:A:279:LEU:HB3	0.56	1.77	18	1
1:A:138:ILE:HD11	1:A:161:LYS:HG2	0.56	1.76	18	1
1:A:86:THR:HG22	1:A:98:THR:HG23	0.56	1.77	10	2
1:A:233:PHE:CD2	1:A:259:LEU:HD13	0.56	2.36	5	1
1:A:189:GLU:HG2	1:A:211:THR:HG23	0.56	1.78	20	1
1:A:138:ILE:N	1:A:157:PHE:CB	0.56	2.69	18	2
1:A:275:LEU:HD12	1:A:277:LEU:HD13	0.56	1.78	3	1
1:A:69:LEU:N	1:A:87:VAL:HA	0.56	2.16	10	1
1:A:243:ILE:HD11	1:A:266:LYS:N	0.56	2.16	11	2
1:A:232:CYS:O	1:A:248:THR:O	0.56	2.24	16	1
1:A:27:ILE:HG23	1:A:277:LEU:HB3	0.56	1.76	17	2
1:A:257:LEU:HD11	1:A:277:LEU:CD1	0.56	2.31	11	1
1:A:243:ILE:HD13	1:A:266:LYS:HG2	0.56	1.78	15	1
1:A:97:LEU:HD22	1:A:114:ILE:CD1	0.56	2.30	20	1
1:A:247:TYR:CE2	1:A:259:LEU:HD13	0.55	2.37	17	1
1:A:99:PHE:CZ	1:A:112:ALA:HB1	0.55	2.36	19	1
1:A:69:LEU:HD13	1:A:88:GLU:CB	0.55	2.32	12	2
1:A:237:VAL:HB	1:A:243:ILE:HG22	0.55	1.77	16	1
1:A:124:ASN:CB	1:A:143:VAL:HG23	0.55	2.32	8	1
1:A:39:LEU:HD23	1:A:40:GLU:N	0.55	2.16	5	1
1:A:244:GLY:C	1:A:245:LEU:HD22	0.55	2.27	10	2
1:A:81:LEU:N	1:A:103:PHE:CB	0.55	2.70	19	1
1:A:75:TRP:CE2	1:A:81:LEU:HD22	0.55	2.35	2	1
1:A:97:LEU:HD23	1:A:98:THR:N	0.55	2.16	19	2
1:A:136:PRO:O	1:A:159:THR:HG22	0.55	2.01	19	1
1:A:208:LEU:HD23	1:A:217:THR:HB	0.55	1.78	7	1
1:A:41:PHE:CE2	1:A:58:LEU:HD11	0.55	2.37	8	3
1:A:61:LYS:HG2	1:A:72:THR:HG22	0.55	1.77	12	1
1:A:234:SER:C	1:A:245:LEU:HD12	0.55	2.26	12	1
1:A:241:SER:O	1:A:243:ILE:HG23	0.55	2.02	9	1
1:A:123:ILE:HB	1:A:144:LEU:HD23	0.55	1.77	18	1
1:A:71:PHE:CD1	1:A:85:ILE:HG22	0.55	2.37	2	2
1:A:245:LEU:HB2	1:A:261:ALA:HB3	0.55	1.79	5	1
1:A:10:LEU:HD23	1:A:11:GLY:N	0.55	2.17	17	1
1:A:39:LEU:HD12	1:A:40:GLU:N	0.55	2.16	8	1
1:A:26:LEU:HD12	1:A:48:ASN:OD1	0.54	2.02	2	1
1:A:125:LEU:HD12	1:A:142:LEU:CD1	0.54	2.32	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:41:PHE:CE1	1:A:58:LEU:HD21	0.54	2.36	19	3
1:A:233:PHE:CZ	1:A:245:LEU:HD11	0.54	2.37	17	1
1:A:264:ASP:O	1:A:268:VAL:HG22	0.54	2.02	19	3
1:A:242:LEU:HD22	1:A:242:LEU:C	0.54	2.27	7	1
1:A:142:LEU:HD23	1:A:144:LEU:HD21	0.54	1.79	20	1
1:A:245:LEU:HB3	1:A:261:ALA:HB3	0.54	1.78	5	1
1:A:81:LEU:O	1:A:103:PHE:HA	0.54	2.02	19	1
1:A:248:THR:OG1	1:A:258:THR:HG22	0.54	2.02	1	1
1:A:10:LEU:O	1:A:170:ALA:HB3	0.54	2.01	17	2
1:A:255:ILE:HG23	1:A:280:GLU:O	0.54	2.01	5	1
1:A:85:ILE:HD12	1:A:114:ILE:CG2	0.54	2.28	20	1
1:A:95:LEU:HD22	1:A:95:LEU:O	0.54	2.03	1	1
1:A:180:LEU:HD12	1:A:181:HIS:N	0.54	2.17	4	1
1:A:188:THR:HA	1:A:212:ALA:HB2	0.54	1.79	7	1
1:A:97:LEU:HD11	1:A:114:ILE:HD11	0.54	1.78	4	1
1:A:99:PHE:CE1	1:A:112:ALA:HB1	0.54	2.38	4	1
1:A:157:PHE:HA	1:A:164:VAL:HG12	0.54	1.79	8	1
1:A:64:TRP:CG	1:A:69:LEU:HD12	0.54	2.37	9	1
1:A:69:LEU:CD1	1:A:87:VAL:HG23	0.54	2.31	2	1
1:A:95:LEU:CD2	1:A:116:THR:HG22	0.54	2.25	20	1
1:A:123:ILE:CG2	1:A:144:LEU:HD12	0.54	2.33	6	2
1:A:97:LEU:CD1	1:A:114:ILE:HD11	0.54	2.33	4	1
1:A:259:LEU:HD23	1:A:260:SER:N	0.54	2.18	8	2
1:A:138:ILE:HG22	1:A:155:MET:SD	0.54	2.42	9	1
1:A:26:LEU:HD23	1:A:46:SER:CB	0.54	2.33	17	1
1:A:141:ALA:HA	1:A:154:GLN:CB	0.54	2.33	19	1
1:A:39:LEU:H	1:A:39:LEU:HD13	0.54	1.63	16	3
1:A:62:TYR:O	1:A:63:ARG:CB	0.54	2.55	11	1
1:A:42:THR:HG23	1:A:59:GLU:HG3	0.54	1.78	18	1
1:A:85:ILE:C	1:A:99:PHE:HB3	0.54	2.28	20	1
1:A:195:TYR:CE2	1:A:205:ALA:HB2	0.53	2.39	17	1
1:A:76:ASN:O	1:A:77:THR:C	0.53	2.50	12	1
1:A:86:THR:OG1	1:A:98:THR:HG23	0.53	2.03	1	1
1:A:125:LEU:HD23	1:A:142:LEU:HD12	0.53	1.80	1	1
1:A:195:TYR:CD1	1:A:205:ALA:HB2	0.53	2.38	1	1
1:A:190:PHE:HA	1:A:210:TRP:O	0.53	2.03	7	1
1:A:242:LEU:HD11	1:A:262:LEU:CD2	0.53	2.34	3	2
1:A:123:ILE:HD13	1:A:142:LEU:HD21	0.53	1.80	15	1
1:A:155:MET:HB3	1:A:164:VAL:HG21	0.53	1.79	18	1
1:A:112:ALA:HB3	1:A:131:PHE:O	0.53	2.04	1	2
1:A:84:GLU:HB3	1:A:99:PHE:O	0.53	2.03	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:LEU:HB2	1:A:87:VAL:HA	0.53	1.79	10	2
1:A:99:PHE:CD1	1:A:99:PHE:O	0.53	2.62	20	1
1:A:129:MET:HE2	1:A:138:ILE:HG12	0.53	1.79	1	1
1:A:264:ASP:O	1:A:268:VAL:HG13	0.53	2.03	15	2
1:A:249:GLN:HB3	1:A:257:LEU:HD11	0.53	1.80	4	1
1:A:144:LEU:HD22	1:A:144:LEU:H	0.53	1.63	20	1
1:A:10:LEU:CD1	1:A:150:LEU:HD13	0.52	2.34	4	1
1:A:237:VAL:CG2	1:A:243:ILE:HG22	0.52	2.35	3	2
1:A:210:TRP:HB3	1:A:217:THR:HG22	0.52	1.81	6	1
1:A:273:HIS:CD2	1:A:275:LEU:HD23	0.52	2.39	11	1
1:A:97:LEU:HD12	1:A:116:THR:HG23	0.52	1.81	15	1
1:A:27:ILE:CD1	1:A:277:LEU:HD12	0.52	2.34	1	2
1:A:193:SER:C	1:A:194:ILE:HD12	0.52	2.29	19	6
1:A:262:LEU:O	1:A:263:LEU:HD13	0.52	2.04	3	1
1:A:10:LEU:HG	1:A:150:LEU:HD12	0.52	1.80	5	1
1:A:228:ASP:OD1	1:A:231:ALA:HB3	0.52	2.04	6	1
1:A:39:LEU:C	1:A:39:LEU:CD2	0.52	2.83	13	5
1:A:99:PHE:CD1	1:A:99:PHE:N	0.52	2.75	20	1
1:A:233:PHE:CZ	1:A:245:LEU:HD13	0.52	2.38	4	1
1:A:87:VAL:CG2	1:A:97:LEU:HD12	0.52	2.35	20	1
1:A:189:GLU:CG	1:A:211:THR:HG23	0.52	2.33	20	1
1:A:114:ILE:HD12	1:A:115:LYS:N	0.52	2.20	3	2
1:A:180:LEU:HD12	1:A:194:ILE:CG1	0.52	2.35	11	1
1:A:6:THR:O	1:A:10:LEU:HD12	0.52	2.05	13	2
1:A:29:LEU:CD2	1:A:279:LEU:HD11	0.52	2.34	2	1
1:A:112:ALA:HB3	1:A:131:PHE:HB3	0.52	1.81	14	1
1:A:258:THR:C	1:A:259:LEU:HD22	0.52	2.30	13	1
1:A:263:LEU:CD1	1:A:268:VAL:HG21	0.52	2.34	19	1
1:A:228:ASP:CB	1:A:229:PRO:CD	0.52	2.88	14	8
1:A:85:ILE:N	1:A:99:PHE:CB	0.52	2.73	20	1
1:A:81:LEU:HD22	1:A:81:LEU:O	0.52	2.05	15	2
1:A:69:LEU:N	1:A:69:LEU:HD22	0.52	2.19	6	2
1:A:257:LEU:HD13	1:A:258:THR:N	0.52	2.19	2	1
1:A:39:LEU:HD22	1:A:40:GLU:N	0.52	2.19	14	6
1:A:165:THR:HG22	1:A:166:GLN:NE2	0.51	2.20	5	1
1:A:60:THR:HG22	1:A:73:GLU:HG2	0.51	1.82	13	1
1:A:6:THR:O	1:A:10:LEU:HD23	0.51	2.05	14	1
1:A:39:LEU:HD22	1:A:62:TYR:HA	0.51	1.80	1	1
1:A:262:LEU:C	1:A:262:LEU:HD13	0.51	2.30	14	17
1:A:189:GLU:OE1	1:A:211:THR:HG22	0.51	2.05	3	1
1:A:209:ALA:HB3	1:A:218:ARG:O	0.51	2.04	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:61:LYS:HA	1:A:72:THR:HG22	0.51	1.82	13	1
1:A:29:LEU:CD2	1:A:279:LEU:HD12	0.51	2.34	20	1
1:A:233:PHE:CE1	1:A:245:LEU:HD12	0.51	2.41	20	1
1:A:35:SER:HB3	1:A:39:LEU:HD11	0.51	1.81	3	1
1:A:6:THR:CB	1:A:150:LEU:HD12	0.51	2.36	20	1
1:A:33:THR:O	1:A:41:PHE:CA	0.51	2.58	3	1
1:A:26:LEU:HD11	1:A:48:ASN:ND2	0.51	2.20	15	1
1:A:75:TRP:CG	1:A:80:THR:OG1	0.51	2.61	15	1
1:A:256:LYS:C	1:A:257:LEU:HD22	0.51	2.31	15	1
1:A:39:LEU:HD13	1:A:39:LEU:N	0.51	2.21	16	3
1:A:208:LEU:C	1:A:208:LEU:CD2	0.51	2.82	16	4
1:A:125:LEU:HD13	1:A:126:GLY:N	0.51	2.21	2	2
1:A:43:SER:HA	1:A:58:LEU:HD22	0.51	1.83	14	1
1:A:169:PHE:CZ	1:A:184:VAL:HG11	0.51	2.41	8	3
1:A:173:TYR:CB	1:A:180:LEU:HD23	0.50	2.35	4	1
1:A:144:LEU:HG	1:A:151:ALA:HB3	0.50	1.83	7	1
1:A:190:PHE:CA	1:A:210:TRP:O	0.50	2.59	7	1
1:A:69:LEU:HB3	1:A:86:THR:O	0.50	2.06	12	1
1:A:184:VAL:HG13	1:A:190:PHE:CD1	0.50	2.41	13	1
1:A:6:THR:HG21	1:A:174:LYS:O	0.50	2.06	14	1
1:A:63:ARG:HB2	1:A:70:THR:HG23	0.50	1.82	15	1
1:A:7:TYR:HA	1:A:10:LEU:HD22	0.50	1.81	17	1
1:A:206:VAL:HG23	1:A:221:ILE:CG2	0.50	2.33	2	1
1:A:210:TRP:CB	1:A:217:THR:HG22	0.50	2.36	6	1
1:A:227:ILE:CG2	1:A:231:ALA:HB3	0.50	2.37	13	1
1:A:144:LEU:CB	1:A:151:ALA:HB3	0.50	2.37	15	1
1:A:26:LEU:HD22	1:A:27:ILE:N	0.50	2.22	17	1
1:A:188:THR:HG22	1:A:212:ALA:CB	0.50	2.36	17	2
1:A:262:LEU:C	1:A:263:LEU:HD22	0.50	2.32	17	10
1:A:180:LEU:C	1:A:180:LEU:HD13	0.50	2.31	14	6
1:A:190:PHE:HB3	1:A:210:TRP:C	0.50	2.32	7	1
1:A:234:SER:N	1:A:247:TYR:HB2	0.50	2.21	8	1
1:A:123:ILE:CD1	1:A:142:LEU:HD11	0.50	2.37	9	3
1:A:237:VAL:CG1	1:A:243:ILE:HG23	0.50	2.36	18	1
1:A:202:LEU:HD22	1:A:225:TYR:HA	0.50	1.83	13	1
1:A:209:ALA:HB3	1:A:218:ARG:HB3	0.50	1.83	18	1
1:A:70:THR:OG1	1:A:86:THR:HG23	0.50	2.07	5	1
1:A:49:THR:HG23	1:A:50:GLU:CG	0.50	2.37	8	1
1:A:279:LEU:HD13	1:A:279:LEU:N	0.50	2.21	16	1
1:A:69:LEU:N	1:A:69:LEU:CD1	0.49	2.70	1	2
1:A:73:GLU:O	1:A:74:LYS:HB2	0.49	2.08	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:63:ARG:HA	1:A:70:THR:HG22	0.49	1.85	5	1
1:A:64:TRP:CD1	1:A:65:THR:HG1	0.49	2.25	9	1
1:A:6:THR:HG22	1:A:9:ASP:HB2	0.49	1.83	12	1
1:A:150:LEU:HD21	1:A:174:LYS:HD3	0.49	1.82	13	1
1:A:58:LEU:O	1:A:74:LYS:HB3	0.49	2.07	14	3
1:A:237:VAL:HG22	1:A:243:ILE:HA	0.49	1.83	9	3
1:A:81:LEU:HD13	1:A:81:LEU:H	0.49	1.67	14	1
1:A:26:LEU:HD23	1:A:28:LYS:CE	0.49	2.37	18	1
1:A:180:LEU:HD12	1:A:194:ILE:CG2	0.49	2.37	2	1
1:A:41:PHE:CZ	1:A:58:LEU:HD11	0.49	2.42	4	1
1:A:86:THR:CB	1:A:98:THR:HG23	0.49	2.38	5	1
1:A:209:ALA:HB3	1:A:218:ARG:CB	0.49	2.37	14	1
1:A:247:TYR:CB	1:A:259:LEU:N	0.49	2.75	16	2
1:A:243:ILE:O	1:A:243:ILE:HG12	0.49	2.07	12	1
1:A:227:ILE:HG23	1:A:229:PRO:HD2	0.49	1.85	13	1
1:A:262:LEU:O	1:A:263:LEU:HD23	0.49	2.07	12	1
1:A:119:LYS:HB3	1:A:123:ILE:O	0.49	2.07	16	1
1:A:144:LEU:HD13	1:A:144:LEU:N	0.49	2.22	20	1
1:A:99:PHE:HB2	1:A:114:ILE:HD13	0.49	1.83	4	1
1:A:180:LEU:HD13	1:A:194:ILE:CG2	0.49	2.38	4	1
1:A:217:THR:O	1:A:217:THR:HG23	0.49	2.07	11	1
1:A:50:GLU:HG3	1:A:52:THR:HG23	0.48	1.83	16	1
1:A:144:LEU:HD12	1:A:151:ALA:O	0.48	2.08	18	1
1:A:248:THR:HG22	1:A:258:THR:CG2	0.48	2.32	18	1
1:A:86:THR:CG2	1:A:98:THR:HG22	0.48	2.35	18	2
1:A:69:LEU:HD22	1:A:87:VAL:HG13	0.48	1.84	13	2
1:A:198:VAL:HG12	1:A:202:LEU:O	0.48	2.08	12	1
1:A:97:LEU:C	1:A:97:LEU:HD23	0.48	2.33	18	1
1:A:39:LEU:C	1:A:39:LEU:HD13	0.48	2.33	14	2
1:A:133:ILE:HD11	1:A:135:GLY:O	0.48	2.07	1	1
1:A:256:LYS:HE3	1:A:257:LEU:HD12	0.48	1.85	17	1
1:A:195:TYR:CE1	1:A:205:ALA:HB2	0.48	2.44	1	1
1:A:49:THR:HG23	1:A:50:GLU:HG2	0.48	1.85	8	1
1:A:259:LEU:HD23	1:A:277:LEU:CB	0.48	2.39	12	1
1:A:86:THR:HG23	1:A:98:THR:CG2	0.48	2.37	8	1
1:A:95:LEU:HD13	1:A:118:TYR:CZ	0.48	2.44	11	1
1:A:139:ARG:HA	1:A:156:ASN:CB	0.48	2.39	11	2
1:A:145:GLY:HA2	1:A:150:LEU:HD23	0.48	1.85	12	1
1:A:73:GLU:O	1:A:74:LYS:CB	0.48	2.61	14	1
1:A:58:LEU:C	1:A:58:LEU:HD13	0.48	2.34	15	2
1:A:245:LEU:HD13	1:A:246:GLY:H	0.48	1.68	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:TRP:HA	1:A:75:TRP:CE3	0.48	2.44	15	1
1:A:85:ILE:HD11	1:A:87:VAL:CG2	0.48	2.38	20	1
1:A:234:SER:O	1:A:245:LEU:HA	0.48	2.09	5	1
1:A:187:GLY:C	1:A:188:THR:HG23	0.48	2.33	13	1
1:A:29:LEU:HD12	1:A:279:LEU:CB	0.48	2.39	18	1
1:A:68:GLY:O	1:A:69:LEU:HD22	0.48	2.09	19	1
1:A:24:PHE:O	1:A:49:THR:HG22	0.48	2.09	7	1
1:A:60:THR:HG22	1:A:73:GLU:HB2	0.48	1.86	15	1
1:A:55:THR:OG1	1:A:77:THR:HG21	0.48	2.08	20	1
1:A:233:PHE:HB2	1:A:247:TYR:HA	0.47	1.84	14	2
1:A:85:ILE:N	1:A:99:PHE:HB2	0.47	2.23	20	1
1:A:51:THR:O	1:A:52:THR:C	0.47	2.56	8	1
1:A:133:ILE:N	1:A:133:ILE:HD13	0.47	2.24	1	1
1:A:180:LEU:O	1:A:180:LEU:HD13	0.47	2.10	5	1
1:A:245:LEU:O	1:A:261:ALA:HB3	0.47	2.09	9	1
1:A:175:THR:HG22	1:A:178:PHE:O	0.47	2.09	11	1
1:A:151:ALA:HB1	1:A:171:VAL:HG22	0.47	1.86	6	1
1:A:75:TRP:CD1	1:A:81:LEU:C	0.47	2.92	15	1
1:A:75:TRP:HD1	1:A:81:LEU:C	0.47	2.17	15	1
1:A:6:THR:CG2	1:A:150:LEU:HD12	0.47	2.39	20	1
1:A:245:LEU:HD12	1:A:245:LEU:O	0.47	2.09	1	1
1:A:262:LEU:C	1:A:263:LEU:HD13	0.47	2.33	3	1
1:A:124:ASN:O	1:A:142:LEU:HD12	0.47	2.10	9	1
1:A:125:LEU:CD2	1:A:142:LEU:HD12	0.47	2.40	1	3
1:A:248:THR:CB	1:A:258:THR:HG22	0.47	2.39	1	1
1:A:33:THR:N	1:A:41:PHE:CB	0.47	2.78	3	1
1:A:257:LEU:HD13	1:A:259:LEU:CD1	0.47	2.40	4	1
1:A:211:THR:O	1:A:212:ALA:HB3	0.47	2.10	6	1
1:A:39:LEU:HD23	1:A:62:TYR:CE2	0.47	2.45	7	1
1:A:31:LEU:HD13	1:A:32:LYS:N	0.47	2.24	9	1
1:A:234:SER:CB	1:A:245:LEU:HD12	0.47	2.40	12	1
1:A:203:GLU:O	1:A:223:ALA:HB1	0.47	2.10	13	1
1:A:97:LEU:HD22	1:A:116:THR:CG2	0.47	2.39	1	1
1:A:69:LEU:HB2	1:A:87:VAL:CA	0.47	2.40	12	2
1:A:217:THR:HG22	1:A:241:SER:HB2	0.47	1.86	11	1
1:A:279:LEU:C	1:A:279:LEU:HD13	0.47	2.34	14	1
1:A:75:TRP:HB3	1:A:80:THR:C	0.47	2.35	15	1
1:A:237:VAL:CB	1:A:243:ILE:HG22	0.47	2.40	16	1
1:A:63:ARG:HB3	1:A:70:THR:HG23	0.47	1.85	17	1
1:A:6:THR:HB	1:A:150:LEU:HD12	0.47	1.87	20	1
1:A:187:GLY:O	1:A:188:THR:HG23	0.47	2.10	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:THR:HG23	1:A:98:THR:OG1	0.47	2.10	12	1
1:A:97:LEU:C	1:A:97:LEU:HD13	0.47	2.35	12	1
1:A:279:LEU:HD13	1:A:279:LEU:H	0.47	1.69	16	1
1:A:103:PHE:CB	1:A:110:LYS:HA	0.47	2.40	17	1
1:A:97:LEU:HD21	1:A:114:ILE:CG1	0.47	2.40	19	1
1:A:194:ILE:CG1	1:A:206:VAL:HG13	0.46	2.38	17	1
1:A:180:LEU:HD22	1:A:181:HIS:N	0.46	2.25	14	2
1:A:190:PHE:CB	1:A:210:TRP:O	0.46	2.62	7	1
1:A:237:VAL:CG1	1:A:243:ILE:HG22	0.46	2.37	12	1
1:A:75:TRP:CD1	1:A:80:THR:HB	0.46	2.45	15	1
1:A:175:THR:HG23	1:A:178:PHE:CB	0.46	2.40	15	1
1:A:142:LEU:HD22	1:A:142:LEU:O	0.46	2.10	20	1
1:A:269:ASN:O	1:A:270:ALA:HB3	0.46	2.09	5	1
1:A:198:VAL:HG13	1:A:204:THR:OG1	0.46	2.11	14	1
1:A:6:THR:HG22	1:A:150:LEU:HD12	0.46	1.86	20	1
1:A:142:LEU:N	1:A:142:LEU:CD1	0.46	2.77	20	1
1:A:97:LEU:CG	1:A:114:ILE:HD11	0.46	2.41	4	1
1:A:102:SER:O	1:A:110:LYS:HB3	0.46	2.10	6	1
1:A:123:ILE:HD11	1:A:142:LEU:HD21	0.46	1.87	7	1
1:A:123:ILE:HD13	1:A:142:LEU:HD11	0.46	1.86	10	1
1:A:97:LEU:HD22	1:A:98:THR:N	0.46	2.25	12	1
1:A:26:LEU:HD23	1:A:46:SER:HB2	0.46	1.86	17	1
1:A:86:THR:HB	1:A:98:THR:HG22	0.46	1.87	2	1
1:A:208:LEU:N	1:A:208:LEU:CD1	0.46	2.78	2	1
1:A:142:LEU:HD23	1:A:143:VAL:N	0.46	2.25	4	1
1:A:237:VAL:HG22	1:A:243:ILE:CG2	0.46	2.35	17	1
1:A:28:LYS:O	1:A:29:LEU:HD22	0.46	2.10	10	1
1:A:69:LEU:CG	1:A:87:VAL:HG13	0.46	2.40	20	2
1:A:242:LEU:CD2	1:A:262:LEU:HD21	0.46	2.33	2	1
1:A:279:LEU:C	1:A:279:LEU:CD2	0.46	2.88	16	1
1:A:142:LEU:C	1:A:142:LEU:HD13	0.46	2.36	18	1
1:A:85:ILE:HD11	1:A:87:VAL:HG23	0.46	1.87	20	1
1:A:195:TYR:HB3	1:A:205:ALA:HA	0.46	1.87	4	1
1:A:75:TRP:HB2	1:A:81:LEU:HA	0.46	1.87	15	1
1:A:256:LYS:CD	1:A:257:LEU:HD12	0.46	2.41	17	1
1:A:180:LEU:HD13	1:A:180:LEU:C	0.46	2.36	5	4
1:A:257:LEU:HD13	1:A:259:LEU:HD13	0.46	1.87	4	1
1:A:10:LEU:HD13	1:A:150:LEU:CD1	0.46	2.41	10	1
1:A:142:LEU:HD21	1:A:144:LEU:HD11	0.46	1.88	11	2
1:A:39:LEU:CD2	1:A:39:LEU:C	0.45	2.89	3	2
1:A:142:LEU:C	1:A:142:LEU:CD2	0.45	2.75	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:132:ASP:O	1:A:133:ILE:HD12	0.45	2.12	14	1
1:A:182:THR:HG22	1:A:191:GLY:O	0.45	2.11	16	1
1:A:151:ALA:HB2	1:A:171:VAL:CG2	0.45	2.39	8	1
1:A:92:ALA:HB1	1:A:95:LEU:HD21	0.45	1.88	6	1
1:A:182:THR:HG23	1:A:191:GLY:O	0.45	2.12	15	1
1:A:221:ILE:HD12	1:A:221:ILE:O	0.45	2.11	15	1
1:A:70:THR:HB	1:A:86:THR:HG23	0.45	1.87	17	1
1:A:237:VAL:HG11	1:A:243:ILE:HG23	0.45	1.88	18	1
1:A:81:LEU:H	1:A:103:PHE:CA	0.45	2.25	19	1
1:A:259:LEU:HD23	1:A:277:LEU:HB2	0.45	1.88	12	1
1:A:76:ASN:O	1:A:80:THR:OG1	0.45	2.34	15	1
1:A:273:HIS:NE2	1:A:275:LEU:HD12	0.45	2.26	17	1
1:A:60:THR:HG22	1:A:73:GLU:HB3	0.45	1.89	6	1
1:A:138:ILE:N	1:A:138:ILE:HD12	0.45	2.27	9	1
1:A:180:LEU:C	1:A:180:LEU:HD23	0.45	2.37	11	1
1:A:80:THR:C	1:A:81:LEU:HD13	0.45	2.35	15	1
1:A:29:LEU:HD13	1:A:279:LEU:CB	0.45	2.41	17	1
1:A:26:LEU:HD23	1:A:28:LYS:HE2	0.45	1.87	18	1
1:A:261:ALA:HB2	1:A:275:LEU:HD13	0.45	1.88	18	1
1:A:64:TRP:O	1:A:65:THR:C	0.45	2.59	3	1
1:A:155:MET:HE2	1:A:164:VAL:HG21	0.45	1.87	9	1
1:A:26:LEU:C	1:A:26:LEU:CD2	0.45	2.85	17	1
1:A:120:ARG:HD3	1:A:123:ILE:HD11	0.45	1.89	17	1
1:A:247:TYR:CE1	1:A:259:LEU:HD22	0.45	2.47	18	1
1:A:180:LEU:HD12	1:A:181:HIS:H	0.45	1.71	4	1
1:A:218:ARG:O	1:A:219:PHE:HB2	0.45	2.10	4	1
1:A:197:LYS:O	1:A:198:VAL:C	0.45	2.59	8	1
1:A:92:ALA:O	1:A:93:ARG:C	0.45	2.59	11	1
1:A:83:THR:O	1:A:100:ASP:HB3	0.45	2.10	18	1
1:A:277:LEU:C	1:A:277:LEU:HD13	0.45	2.36	9	1
1:A:68:GLY:O	1:A:69:LEU:HD12	0.45	2.12	10	1
1:A:257:LEU:CD2	1:A:279:LEU:HD23	0.45	2.41	14	1
1:A:91:LEU:HD13	1:A:92:ALA:N	0.45	2.27	2	1
1:A:144:LEU:HD12	1:A:151:ALA:HB3	0.45	1.88	3	1
1:A:208:LEU:HA	1:A:219:PHE:CB	0.45	2.42	4	1
1:A:218:ARG:O	1:A:219:PHE:C	0.45	2.60	11	1
1:A:75:TRP:CD1	1:A:81:LEU:N	0.45	2.85	15	1
1:A:7:TYR:HB2	1:A:143:VAL:HG21	0.45	1.88	20	1
1:A:58:LEU:HD13	1:A:59:GLU:H	0.44	1.71	20	2
1:A:231:ALA:HB1	1:A:247:TYR:OH	0.44	2.12	6	2
1:A:97:LEU:HD21	1:A:114:ILE:HG12	0.44	1.87	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:SER:HB2	1:A:39:LEU:HD11	0.44	1.89	3	1
1:A:180:LEU:HD21	1:A:182:THR:OG1	0.44	2.12	11	1
1:A:274:LYS:O	1:A:275:LEU:HD12	0.44	2.12	14	1
1:A:129:MET:CG	1:A:137:SER:C	0.44	2.90	17	1
1:A:29:LEU:HD13	1:A:279:LEU:HB3	0.44	1.88	17	1
1:A:50:GLU:O	1:A:51:THR:C	0.44	2.59	12	1
1:A:81:LEU:O	1:A:81:LEU:CD2	0.44	2.65	15	1
1:A:119:LYS:CB	1:A:124:ASN:HA	0.44	2.42	16	1
1:A:136:PRO:HD2	1:A:159:THR:HG21	0.44	1.89	16	1
1:A:124:ASN:HB3	1:A:143:VAL:HG23	0.44	1.90	4	1
1:A:180:LEU:HD23	1:A:194:ILE:HD12	0.44	1.90	6	1
1:A:7:TYR:O	1:A:10:LEU:HD23	0.44	2.11	7	1
1:A:235:ALA:HA	1:A:245:LEU:CB	0.44	2.42	12	1
1:A:67:TYR:HB2	1:A:69:LEU:HD13	0.44	1.90	14	2
1:A:208:LEU:C	1:A:208:LEU:HD13	0.44	2.36	17	1
1:A:83:THR:C	1:A:100:ASP:CG	0.44	2.85	18	1
1:A:84:GLU:CB	1:A:100:ASP:HA	0.44	2.43	11	2
1:A:63:ARG:HB3	1:A:70:THR:HG22	0.44	1.89	12	1
1:A:68:GLY:O	1:A:69:LEU:HD13	0.44	2.12	15	1
1:A:150:LEU:N	1:A:150:LEU:HD22	0.44	2.28	20	2
1:A:83:THR:O	1:A:100:ASP:CG	0.44	2.61	18	1
1:A:221:ILE:HG23	1:A:237:VAL:HG13	0.44	1.90	19	1
1:A:276:GLY:C	1:A:277:LEU:HD23	0.44	2.38	1	1
1:A:75:TRP:CZ2	1:A:81:LEU:HD22	0.44	2.47	2	1
1:A:144:LEU:CD1	1:A:151:ALA:HB3	0.44	2.42	7	1
1:A:233:PHE:CB	1:A:247:TYR:HA	0.44	2.43	13	1
1:A:175:THR:HG23	1:A:178:PHE:HB3	0.44	1.89	15	1
1:A:202:LEU:HD12	1:A:226:GLN:N	0.44	2.28	8	1
1:A:243:ILE:O	1:A:262:LEU:HD22	0.44	2.13	13	1
1:A:60:THR:O	1:A:72:THR:HG22	0.44	2.12	17	1
1:A:133:ILE:HD13	1:A:133:ILE:H	0.44	1.73	1	1
1:A:217:THR:HG22	1:A:241:SER:CB	0.44	2.43	11	1
1:A:217:THR:HG21	1:A:239:ASN:HB3	0.44	1.89	11	1
1:A:247:TYR:CB	1:A:259:LEU:C	0.44	2.90	16	1
1:A:41:PHE:CD2	1:A:58:LEU:HD11	0.44	2.48	17	1
1:A:129:MET:CB	1:A:138:ILE:HA	0.44	2.43	17	1
1:A:200:LYS:O	1:A:201:LYS:C	0.44	2.61	17	1
1:A:185:ASN:C	1:A:187:GLY:N	0.43	2.74	11	4
1:A:64:TRP:O	1:A:65:THR:HG23	0.43	2.13	10	2
1:A:103:PHE:HA	1:A:110:LYS:HB2	0.43	1.89	6	1
1:A:58:LEU:CD1	1:A:60:THR:HG23	0.43	2.43	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:184:VAL:HG13	1:A:190:PHE:CE1	0.43	2.47	13	1
1:A:277:LEU:HD13	1:A:278:GLY:N	0.43	2.27	6	1
1:A:245:LEU:HD22	1:A:245:LEU:N	0.43	2.29	16	1
1:A:114:ILE:HG23	1:A:129:MET:HG3	0.43	1.89	3	1
1:A:142:LEU:HD22	1:A:144:LEU:HD22	0.43	1.91	4	1
1:A:208:LEU:H	1:A:208:LEU:HD13	0.43	1.73	4	1
1:A:29:LEU:HD12	1:A:45:GLY:O	0.43	2.14	2	1
1:A:47:ALA:HB1	1:A:54:VAL:HG22	0.43	1.89	3	2
1:A:68:GLY:O	1:A:69:LEU:CD1	0.43	2.66	10	1
1:A:211:THR:HG21	1:A:215:SER:O	0.43	2.13	10	1
1:A:69:LEU:HD13	1:A:88:GLU:HB3	0.43	1.91	12	1
1:A:138:ILE:CD1	1:A:159:THR:HG23	0.43	2.43	15	1
1:A:60:THR:O	1:A:72:THR:HG23	0.43	2.13	16	1
1:A:85:ILE:HG22	1:A:99:PHE:O	0.43	2.12	18	1
1:A:199:ASN:O	1:A:200:LYS:C	0.43	2.62	20	1
1:A:33:THR:O	1:A:41:PHE:HB3	0.43	2.13	3	1
1:A:180:LEU:HD11	1:A:182:THR:CG2	0.43	2.41	7	1
1:A:133:ILE:HD12	1:A:134:ALA:N	0.43	2.29	16	1
1:A:103:PHE:CA	1:A:110:LYS:HB2	0.43	2.42	6	1
1:A:69:LEU:HG	1:A:87:VAL:HG22	0.43	1.90	14	1
1:A:243:ILE:N	1:A:243:ILE:HD13	0.43	2.29	16	1
1:A:245:LEU:HD23	1:A:261:ALA:HB3	0.43	1.89	16	1
1:A:47:ALA:HB2	1:A:54:VAL:HG22	0.43	1.91	3	1
1:A:228:ASP:N	1:A:229:PRO:HD2	0.43	2.28	7	6
1:A:262:LEU:HD12	1:A:264:ASP:OD1	0.43	2.13	6	1
1:A:80:THR:C	1:A:81:LEU:HD22	0.43	2.38	17	1
1:A:125:LEU:CD1	1:A:142:LEU:HD12	0.43	2.44	20	1
1:A:188:THR:O	1:A:212:ALA:HB2	0.43	2.13	3	1
1:A:173:TYR:HB3	1:A:180:LEU:HD23	0.43	1.88	4	1
1:A:10:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD12	0.43	1.90	7	1
1:A:39:LEU:HD22	1:A:39:LEU:O	0.43	2.14	17	2
1:A:59:GLU:HA	1:A:74:LYS:CB	0.42	2.43	2	1
1:A:208:LEU:CD1	1:A:208:LEU:N	0.42	2.81	4	1
1:A:242:LEU:HD23	1:A:264:ASP:CG	0.42	2.39	5	1
1:A:233:PHE:HA	1:A:247:TYR:CB	0.42	2.44	8	1
1:A:125:LEU:HD13	1:A:142:LEU:HB3	0.42	1.91	11	1
1:A:175:THR:HG23	1:A:179:GLN:NE2	0.42	2.30	13	1
1:A:227:ILE:O	1:A:228:ASP:CB	0.42	2.67	14	1
1:A:41:PHE:CE1	1:A:60:THR:HG23	0.42	2.49	1	1
1:A:7:TYR:CE1	1:A:143:VAL:HG11	0.42	2.49	10	1
1:A:233:PHE:HB3	1:A:246:GLY:C	0.42	2.37	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:95:LEU:HD23	1:A:95:LEU:H	0.42	1.75	19	1
1:A:142:LEU:HD13	1:A:142:LEU:O	0.42	2.14	11	1
1:A:75:TRP:HB2	1:A:81:LEU:CA	0.42	2.44	15	1
1:A:97:LEU:HD13	1:A:97:LEU:C	0.42	2.38	2	1
1:A:114:ILE:HD11	1:A:116:THR:HG23	0.42	1.90	9	2
1:A:80:THR:HG22	1:A:103:PHE:CD1	0.42	2.49	19	1
1:A:85:ILE:C	1:A:85:ILE:CD1	0.42	2.83	20	1
1:A:125:LEU:HD21	1:A:127:CYS:SG	0.42	2.55	20	1
1:A:69:LEU:HB2	1:A:86:THR:O	0.42	2.14	10	1
1:A:40:GLU:O	1:A:60:THR:HG23	0.42	2.13	11	1
1:A:244:GLY:C	1:A:245:LEU:HD12	0.42	2.39	19	1
1:A:208:LEU:HD12	1:A:217:THR:CG2	0.42	2.44	3	1
1:A:243:ILE:HD13	1:A:266:LYS:N	0.42	2.30	4	1
1:A:10:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HB3	0.42	1.92	7	1
1:A:75:TRP:CD1	1:A:81:LEU:HD13	0.42	2.50	17	1
1:A:146:TYR:O	1:A:149:TRP:CD1	0.42	2.73	18	1
1:A:174:LYS:HB3	1:A:178:PHE:O	0.42	2.15	6	1
1:A:180:LEU:HD12	1:A:194:ILE:HG13	0.42	1.92	11	1
1:A:155:MET:HB2	1:A:164:VAL:HG21	0.42	1.92	16	1
1:A:95:LEU:HD21	1:A:118:TYR:CE2	0.42	2.50	18	1
1:A:102:SER:O	1:A:110:LYS:CB	0.42	2.67	6	1
1:A:180:LEU:CD1	1:A:182:THR:HG23	0.42	2.43	7	1
1:A:123:ILE:HD13	1:A:142:LEU:CD1	0.42	2.45	10	1
1:A:72:THR:HG23	1:A:84:GLU:HB3	0.42	1.92	14	1
1:A:139:ARG:C	1:A:156:ASN:OD1	0.42	2.63	11	2
1:A:273:HIS:CE1	1:A:275:LEU:HD22	0.42	2.49	16	1
1:A:257:LEU:HD23	1:A:279:LEU:HD22	0.42	1.92	20	1
1:A:26:LEU:N	1:A:26:LEU:CD1	0.42	2.81	6	1
1:A:151:ALA:HB2	1:A:171:VAL:HG13	0.42	1.92	6	1
1:A:242:LEU:HD21	1:A:262:LEU:CD1	0.42	2.39	8	1
1:A:205:ALA:HB3	1:A:222:ALA:CB	0.42	2.33	9	1
1:A:156:ASN:O	1:A:164:VAL:HB	0.42	2.14	20	1
1:A:133:ILE:O	1:A:134:ALA:HB3	0.41	2.14	1	1
1:A:259:LEU:HD23	1:A:277:LEU:HA	0.41	1.92	12	1
1:A:206:VAL:HG23	1:A:219:PHE:CZ	0.41	2.50	18	1
1:A:71:PHE:HA	1:A:85:ILE:HG22	0.41	1.91	6	1
1:A:242:LEU:HD22	1:A:243:ILE:H	0.41	1.74	12	1
1:A:112:ALA:HB3	1:A:131:PHE:HB2	0.41	1.92	15	1
1:A:129:MET:CB	1:A:137:SER:O	0.41	2.68	17	1
1:A:274:LYS:C	1:A:275:LEU:HD22	0.41	2.40	18	1
1:A:259:LEU:HD22	1:A:277:LEU:HB3	0.41	1.92	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:LEU:HD23	1:A:87:VAL:HG12	0.41	1.92	3	1
1:A:25:GLY:C	1:A:26:LEU:HD13	0.41	2.40	6	1
1:A:249:GLN:CD	1:A:257:LEU:HD11	0.41	2.40	10	1
1:A:227:ILE:HG22	1:A:229:PRO:HD2	0.41	1.92	14	1
1:A:75:TRP:HB2	1:A:82:GLY:N	0.41	2.30	15	1
1:A:233:PHE:CZ	1:A:245:LEU:HD21	0.41	2.50	17	1
1:A:247:TYR:HE2	1:A:259:LEU:HD13	0.41	1.75	17	1
1:A:242:LEU:HD22	1:A:263:LEU:O	0.41	2.15	3	1
1:A:264:ASP:HB3	1:A:268:VAL:HG13	0.41	1.91	10	1
1:A:138:ILE:O	1:A:156:ASN:CB	0.41	2.68	11	2
1:A:149:TRP:O	1:A:150:LEU:HD22	0.41	2.16	16	1
1:A:10:LEU:HD13	1:A:150:LEU:HD13	0.41	1.92	18	1
1:A:7:TYR:O	1:A:143:VAL:HG21	0.41	2.15	4	1
1:A:66:GLU:O	1:A:67:TYR:C	0.41	2.62	10	1
1:A:169:PHE:HB3	1:A:184:VAL:HG22	0.41	1.93	15	1
1:A:125:LEU:C	1:A:125:LEU:HD23	0.41	2.40	16	1
1:A:261:ALA:HB2	1:A:275:LEU:HD23	0.41	1.91	17	1
1:A:133:ILE:N	1:A:133:ILE:CD1	0.41	2.84	1	1
1:A:39:LEU:HD11	1:A:41:PHE:CE2	0.41	2.50	2	1
1:A:247:TYR:HB2	1:A:259:LEU:N	0.41	2.31	5	1
1:A:138:ILE:H	1:A:157:PHE:CA	0.41	2.29	18	2
1:A:35:SER:O	1:A:36:GLU:C	0.41	2.63	11	1
1:A:242:LEU:HD23	1:A:264:ASP:OD2	0.41	2.15	20	1
1:A:75:TRP:CD2	1:A:81:LEU:HD11	0.41	2.51	4	1
1:A:143:VAL:HG23	1:A:143:VAL:O	0.41	2.16	4	1
1:A:239:ASN:C	1:A:241:SER:N	0.41	2.79	6	2
1:A:242:LEU:N	1:A:242:LEU:CD1	0.41	2.84	7	1
1:A:29:LEU:HD13	1:A:279:LEU:HD13	0.41	1.92	9	1
1:A:180:LEU:HD22	1:A:194:ILE:HG13	0.41	1.92	10	1
1:A:238:ASN:C	1:A:240:SER:N	0.41	2.77	12	1
1:A:75:TRP:CB	1:A:80:THR:O	0.41	2.63	15	1
1:A:95:LEU:HD23	1:A:117:GLY:C	0.41	2.40	20	1
1:A:221:ILE:H	1:A:221:ILE:HD13	0.41	1.75	20	1
1:A:143:VAL:HG12	1:A:152:GLY:CA	0.40	2.45	2	1
1:A:123:ILE:CG2	1:A:144:LEU:HD23	0.40	2.46	11	1
1:A:209:ALA:HB2	1:A:219:PHE:HD2	0.40	1.73	2	1
1:A:194:ILE:O	1:A:206:VAL:CG1	0.40	2.69	4	1
1:A:142:LEU:HD22	1:A:144:LEU:CD2	0.40	2.46	7	1
1:A:255:ILE:HD12	1:A:281:PHE:CD2	0.40	2.51	8	1
1:A:242:LEU:C	1:A:242:LEU:CD1	0.40	2.94	12	1
1:A:49:THR:O	1:A:50:GLU:C	0.40	2.65	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:233:PHE:CE2	1:A:245:LEU:HD11	0.40	2.50	17	1
1:A:256:LYS:C	1:A:257:LEU:HD23	0.40	2.42	18	1
1:A:188:THR:CG2	1:A:212:ALA:HB3	0.40	2.41	19	1
1:A:265:GLY:O	1:A:266:LYS:C	0.40	2.64	1	1
1:A:98:THR:HG22	1:A:100:ASP:OD1	0.40	2.17	10	1
1:A:69:LEU:HD13	1:A:88:GLU:HB2	0.40	1.92	12	1
1:A:123:ILE:HD11	1:A:142:LEU:CD1	0.40	2.37	12	1
1:A:138:ILE:HG12	1:A:159:THR:HG22	0.40	1.92	14	1
1:A:202:LEU:HD12	1:A:225:TYR:HA	0.40	1.92	5	1
1:A:103:PHE:O	1:A:105:PRO:HD3	0.40	2.17	6	1
1:A:123:ILE:HG22	1:A:144:LEU:HG	0.40	1.93	17	1
1:A:123:ILE:HG22	1:A:144:LEU:HD12	0.40	1.92	19	1
1:A:261:ALA:HB2	1:A:275:LEU:HD12	0.40	1.93	1	1
1:A:39:LEU:O	1:A:39:LEU:HD22	0.40	2.17	3	1
1:A:97:LEU:HB2	1:A:116:THR:HG23	0.40	1.93	4	1
1:A:123:ILE:HG22	1:A:144:LEU:HB2	0.40	1.92	4	1
1:A:207:ASN:O	1:A:219:PHE:HB3	0.40	2.16	4	1
1:A:159:THR:HG23	1:A:160:ALA:N	0.40	2.32	9	1
1:A:198:VAL:O	1:A:199:ASN:C	0.40	2.65	11	1
1:A:125:LEU:HG	1:A:142:LEU:HD12	0.40	1.93	19	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	265/291 (91%)	224±6 (85±2%)	33±6 (12±2%)	8±2 (3±1%)	5	37
All	All	5300/5820 (91%)	4482 (85%)	654 (12%)	164 (3%)	5	37

All 54 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	25	GLY	9
1	A	147	GLU	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	165	THR	9
1	A	271	GLY	9
1	A	66	GLU	8
1	A	228	ASP	8
1	A	77	THR	7
1	A	255	ILE	7
1	A	272	GLY	6
1	A	214	ASN	5
1	A	94	GLY	4
1	A	219	PHE	4
1	A	254	GLY	4
1	A	229	PRO	4
1	A	74	LYS	3
1	A	133	ILE	3
1	A	212	ALA	3
1	A	213	GLY	3
1	A	50	GLU	3
1	A	215	SER	3
1	A	162	SER	3
1	A	135	GLY	3
1	A	67	TYR	3
1	A	38	GLY	2
1	A	163	ARG	2
1	A	200	LYS	2
1	A	51	THR	2
1	A	84	GLU	2
1	A	267	ASN	2
1	A	109	LYS	2
1	A	177	GLU	2
1	A	108	GLY	2
1	A	176	ASP	2
1	A	134	ALA	2
1	A	63	ARG	2
1	A	132	ASP	2
1	A	280	GLU	1
1	A	199	ASN	1
1	A	49	THR	1
1	A	52	THR	1
1	A	107	THR	1
1	A	64	TRP	1
1	A	198	VAL	1
1	A	37	ASN	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	218	ARG	1
1	A	202	LEU	1
1	A	242	LEU	1
1	A	53	LYS	1
1	A	83	THR	1
1	A	122	HIS	1
1	A	239	ASN	1
1	A	240	SER	1
1	A	230	ASP	1
1	A	93	ARG	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	216/238 (91%)	179±4 (83±2%)	37±4 (17±2%)	4	38
All	All	4320/4760 (91%)	3587 (83%)	733 (17%)	4	38

All 177 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	58	LEU	17
1	A	85	ILE	13
1	A	125	LEU	13
1	A	221	ILE	13
1	A	175	THR	11
1	A	39	LEU	11
1	A	228	ASP	11
1	A	243	ILE	10
1	A	114	ILE	10
1	A	120	ARG	10
1	A	34	LYS	9
1	A	63	ARG	9
1	A	69	LEU	8
1	A	116	THR	8
1	A	144	LEU	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	204	THR	8
1	A	65	THR	8
1	A	109	LYS	8
1	A	29	LEU	7
1	A	133	ILE	7
1	A	107	THR	7
1	A	194	ILE	7
1	A	208	LEU	7
1	A	142	LEU	7
1	A	266	LYS	7
1	A	46	SER	7
1	A	80	THR	7
1	A	146	TYR	7
1	A	188	THR	7
1	A	96	LYS	7
1	A	113	LYS	7
1	A	33	THR	6
1	A	42	THR	6
1	A	51	THR	6
1	A	74	LYS	6
1	A	101	SER	6
1	A	123	ILE	6
1	A	137	SER	6
1	A	193	SER	6
1	A	165	THR	6
1	A	260	SER	6
1	A	277	LEU	6
1	A	180	LEU	6
1	A	40	GLU	6
1	A	6	THR	5
1	A	35	SER	5
1	A	44	SER	5
1	A	77	THR	5
1	A	97	LEU	5
1	A	227	ILE	5
1	A	197	LYS	5
1	A	61	LYS	5
1	A	57	SER	5
1	A	182	THR	5
1	A	185	ASN	5
1	A	26	LEU	5
1	A	104	SER	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	115	LYS	5
1	A	200	LYS	5
1	A	128	ASP	5
1	A	70	THR	5
1	A	93	ARG	4
1	A	95	LEU	4
1	A	149	TRP	4
1	A	189	GLU	4
1	A	217	THR	4
1	A	256	LYS	4
1	A	274	LYS	4
1	A	10	LEU	4
1	A	110	LYS	4
1	A	155	MET	4
1	A	167	SER	4
1	A	279	LEU	4
1	A	28	LYS	4
1	A	129	MET	4
1	A	237	VAL	4
1	A	161	LYS	4
1	A	179	GLN	4
1	A	199	ASN	4
1	A	55	THR	4
1	A	84	GLU	4
1	A	150	LEU	4
1	A	202	LEU	4
1	A	102	SER	4
1	A	159	THR	4
1	A	215	SER	4
1	A	31	LEU	4
1	A	230	ASP	4
1	A	242	LEU	4
1	A	275	LEU	4
1	A	72	THR	4
1	A	264	ASP	4
1	A	53	LYS	3
1	A	87	VAL	3
1	A	100	ASP	3
1	A	203	GLU	3
1	A	30	ASP	3
1	A	91	LEU	3
1	A	198	VAL	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	257	LEU	3
1	A	32	LYS	3
1	A	130	ASP	3
1	A	201	LYS	3
1	A	83	THR	3
1	A	248	THR	3
1	A	174	LYS	3
1	A	234	SER	3
1	A	258	THR	3
1	A	86	THR	3
1	A	236	LYS	3
1	A	163	ARG	3
1	A	186	ASP	3
1	A	255	ILE	3
1	A	132	ASP	3
1	A	156	ASN	3
1	A	98	THR	3
1	A	119	LYS	3
1	A	75	TRP	2
1	A	259	LEU	2
1	A	9	ASP	2
1	A	15	ARG	2
1	A	64	TRP	2
1	A	143	VAL	2
1	A	164	VAL	2
1	A	196	GLN	2
1	A	207	ASN	2
1	A	245	LEU	2
1	A	263	LEU	2
1	A	12	LYS	2
1	A	195	TYR	2
1	A	158	GLU	2
1	A	181	HIS	2
1	A	268	VAL	2
1	A	177	GLU	2
1	A	211	THR	2
1	A	147	GLU	2
1	A	173	TYR	2
1	A	247	TYR	2
1	A	66	GLU	2
1	A	99	PHE	2
1	A	214	ASN	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	219	PHE	2
1	A	206	VAL	2
1	A	73	GLU	2
1	A	169	PHE	2
1	A	226	GLN	2
1	A	233	PHE	2
1	A	59	GLU	2
1	A	81	LEU	2
1	A	54	VAL	2
1	A	103	PHE	2
1	A	154	GLN	2
1	A	41	PHE	1
1	A	43	SER	1
1	A	52	THR	1
1	A	60	THR	1
1	A	90	GLN	1
1	A	218	ARG	1
1	A	76	ASN	1
1	A	166	GLN	1
1	A	267	ASN	1
1	A	168	ASN	1
1	A	210	TRP	1
1	A	176	ASP	1
1	A	67	TYR	1
1	A	280	GLU	1
1	A	190	PHE	1
1	A	239	ASN	1
1	A	281	PHE	1
1	A	139	ARG	1
1	A	153	TYR	1
1	A	273	HIS	1
1	A	124	ASN	1
1	A	232	CYS	1
1	A	111	ASN	1
1	A	184	VAL	1
1	A	49	THR	1

6.3.3 RNA ⓘ

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](#)

There are no ligands in this entry.

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