



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 12, 2026 – 09:00 PM UTC

PDB ID : 2KHC / pdb_00002khc
Title : Bruno RRM3+
Authors : Lyon, A.M.; Reveal, B.S.; Macdonald, P.M.; Hoffman, D.W.
Deposited on : 2009-04-01

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

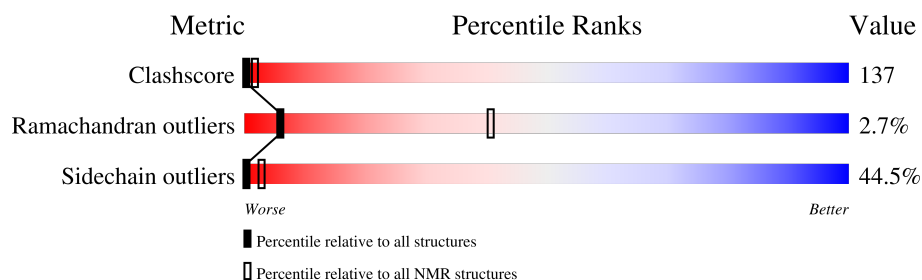
1 Overall quality at a glance

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	118	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 10 models. Model 5 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *closest to the average*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:487-A:497 (11)	1.29	9
2	A:517-A:552, A:561-A:597 (73)	0.50	5

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 1 clusters. No single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1737 atoms, of which 873 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Testis-specific RNP-type RNA binding protein.

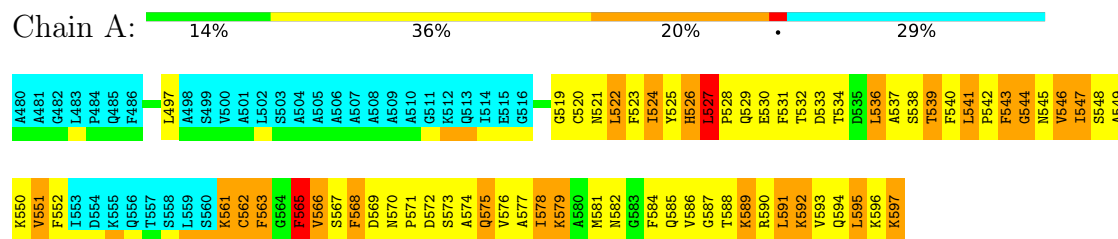
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	118	Total	C	H	N	O	S	0
			1737	555	873	143	163	3	

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: Testis-specific RNP-type RNA binding protein

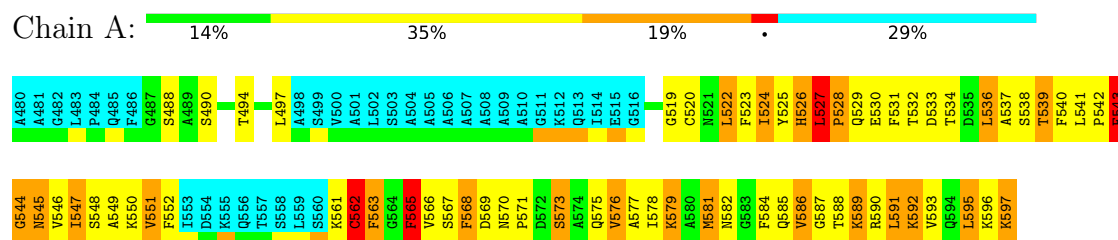


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

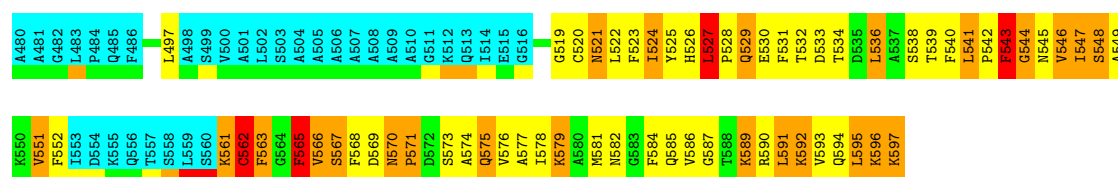
- Molecule 1: Testis-specific RNP-type RNA binding protein



4.2.2 Score per residue for model 2

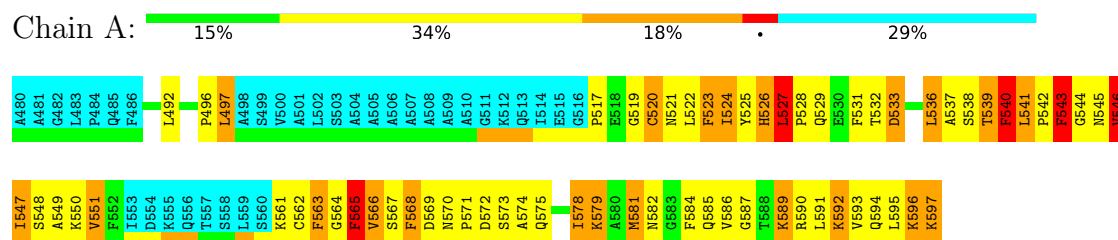
- Molecule 1: Testis-specific RNP-type RNA binding protein





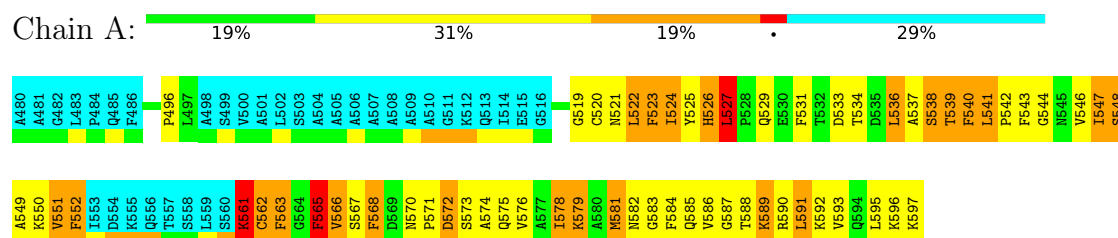
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Testis-specific RNP-type RNA binding protein



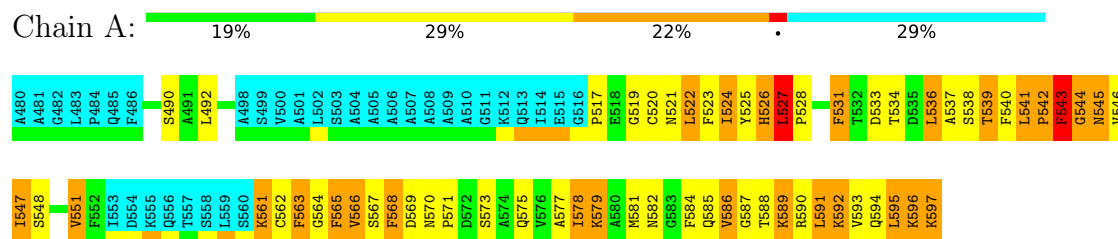
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Testis-specific RNP-type RNA binding protein



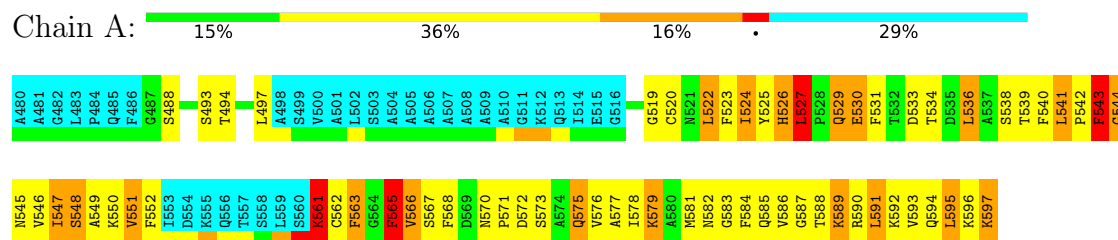
4.2.5 Score per residue for model 5 (medoid)

- Molecule 1: Testis-specific RNP-type RNA binding protein



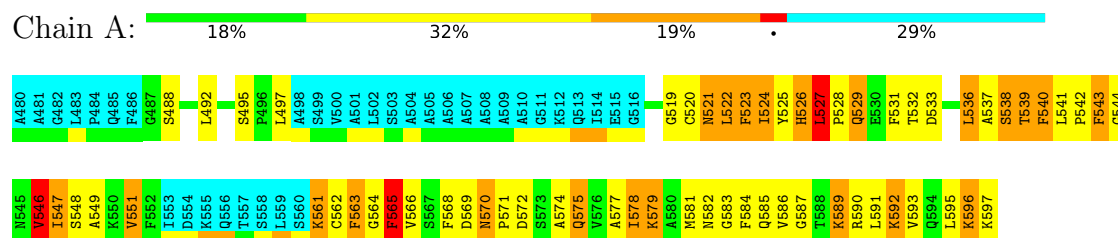
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Testis-specific RNP-type RNA binding protein



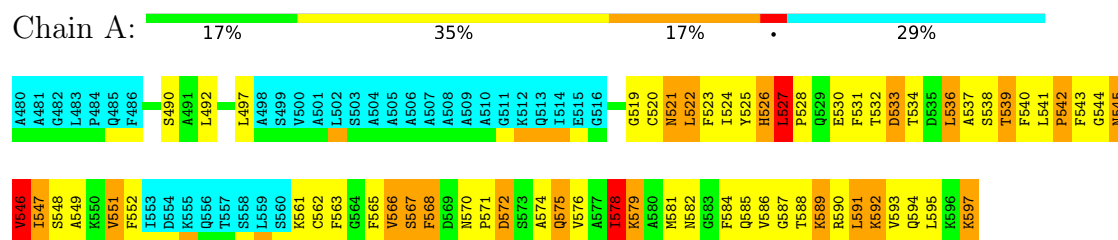
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Testis-specific RNP-type RNA binding protein



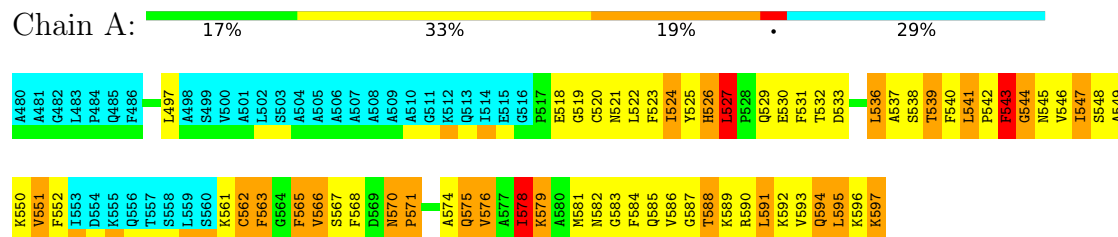
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Testis-specific RNP-type RNA binding protein



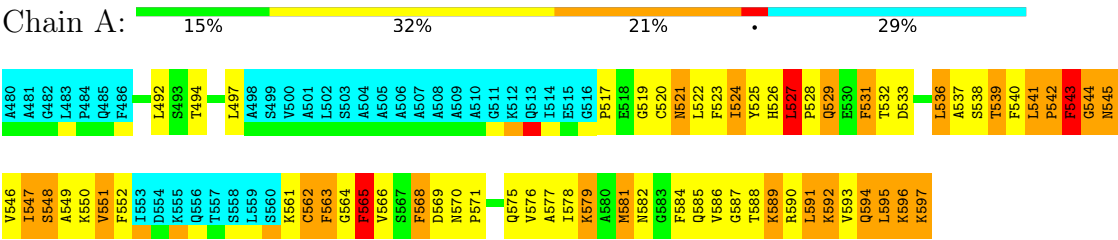
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Testis-specific RNP-type RNA binding protein



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Testis-specific RNP-type RNA binding protein



5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

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

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

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

No chemical shift data was provided.

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	0.65±0.02	0±0/654 (0.0± 0.0%)	1.14±0.04	4±2/883 (0.4± 0.2%)
All	All	0.65	0/6540 (0.0%)	1.14	39/8830 (0.4%)

There are no bond-length outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	527	LEU	N-CA-C	8.73	121.07	110.07	5	10
1	A	543	PHE	N-CA-C	7.93	119.61	110.97	7	2
1	A	562	CYS	N-CA-C	7.10	117.24	107.73	2	2
1	A	545	ASN	N-CA-C	-6.11	99.31	109.46	3	2
1	A	565	PHE	CA-CB-CG	5.99	119.79	113.80	10	8
1	A	540	PHE	CA-CB-CG	5.92	119.72	113.80	3	1
1	A	578	ILE	N-CA-C	5.58	115.81	110.74	7	5
1	A	543	PHE	N-CA-CB	-5.55	101.81	109.91	7	1
1	A	546	VAL	N-CA-C	5.54	116.08	107.99	3	4
1	A	568	PHE	CA-CB-CG	-5.45	108.35	113.80	3	1
1	A	581	MET	N-CA-C	5.43	117.25	108.34	4	3

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	639	643	642	176±16
All	All	6390	6430	6420	1760

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 137.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:522:LEU:HD21	1:A:524:ILE:HG23	1.12	1.13	1	3
1:A:522:LEU:HD12	1:A:578:ILE:HG23	1.12	1.22	4	2
1:A:543:PHE:CD1	1:A:544:GLY:N	1.07	2.22	4	3
1:A:526:HIS:HB2	1:A:591:LEU:HA	1.04	1.27	2	10
1:A:522:LEU:HD12	1:A:524:ILE:HG23	1.04	1.30	8	1
1:A:543:PHE:CD1	1:A:568:PHE:HB3	1.02	1.89	8	6
1:A:527:LEU:O	1:A:562:CYS:HB2	1.01	1.55	3	4
1:A:527:LEU:O	1:A:562:CYS:CB	0.97	2.12	8	10
1:A:551:VAL:HG11	1:A:563:PHE:CZ	0.97	1.94	3	6
1:A:551:VAL:HG22	1:A:565:PHE:CE1	0.96	1.95	6	4
1:A:551:VAL:HG21	1:A:563:PHE:CZ	0.95	1.95	10	5
1:A:527:LEU:O	1:A:562:CYS:N	0.95	1.99	10	7
1:A:543:PHE:CD2	1:A:544:GLY:N	0.95	2.35	7	1
1:A:540:PHE:CD2	1:A:568:PHE:CE2	0.95	2.55	7	1
1:A:541:LEU:HA	1:A:543:PHE:CE1	0.94	1.97	3	2
1:A:547:ILE:HD13	1:A:547:ILE:N	0.94	1.78	1	2
1:A:527:LEU:O	1:A:562:CYS:CA	0.93	2.16	10	10
1:A:584:PHE:HB3	1:A:591:LEU:HD13	0.93	1.36	1	1
1:A:540:PHE:O	1:A:543:PHE:CD2	0.93	2.22	4	3
1:A:524:ILE:HG22	1:A:593:VAL:HA	0.92	1.42	6	10
1:A:524:ILE:HB	1:A:591:LEU:HD11	0.91	1.42	3	6
1:A:522:LEU:HD21	1:A:593:VAL:HG23	0.91	1.42	2	3
1:A:522:LEU:HD22	1:A:578:ILE:HG23	0.91	1.39	3	5
1:A:526:HIS:CB	1:A:591:LEU:HA	0.90	1.96	8	10
1:A:527:LEU:HD11	1:A:584:PHE:CE1	0.90	2.01	10	2
1:A:551:VAL:HG21	1:A:563:PHE:CE1	0.89	2.02	5	5
1:A:527:LEU:HD22	1:A:531:PHE:CD2	0.89	2.01	6	2
1:A:526:HIS:N	1:A:591:LEU:HD12	0.89	1.83	6	3
1:A:522:LEU:HD22	1:A:524:ILE:HG23	0.88	1.42	7	1
1:A:527:LEU:O	1:A:562:CYS:C	0.88	2.17	7	10
1:A:543:PHE:CD1	1:A:568:PHE:CD2	0.87	2.63	7	1
1:A:522:LEU:HD13	1:A:578:ILE:CG2	0.87	2.00	2	3
1:A:543:PHE:CD1	1:A:543:PHE:O	0.86	2.28	2	3
1:A:527:LEU:HD12	1:A:584:PHE:CE2	0.86	2.06	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:551:VAL:HG13	1:A:563:PHE:O	0.86	1.70	9	5
1:A:537:ALA:HB1	1:A:546:VAL:HG11	0.85	1.46	7	1
1:A:543:PHE:HB2	1:A:574:ALA:HB2	0.84	1.49	4	3
1:A:519:GLY:O	1:A:597:LYS:HA	0.84	1.72	10	9
1:A:551:VAL:HG11	1:A:563:PHE:CE2	0.83	2.08	9	6
1:A:591:LEU:HD12	1:A:592:LYS:N	0.83	1.89	7	3
1:A:527:LEU:O	1:A:562:CYS:SG	0.82	2.37	6	5
1:A:544:GLY:CA	1:A:570:ASN:HB3	0.82	2.04	7	2
1:A:526:HIS:CB	1:A:591:LEU:HD12	0.82	2.05	1	1
1:A:540:PHE:CE1	1:A:568:PHE:CZ	0.82	2.67	10	4
1:A:543:PHE:CG	1:A:543:PHE:O	0.82	2.32	9	3
1:A:536:LEU:O	1:A:540:PHE:HB2	0.82	1.75	9	3
1:A:541:LEU:HG	1:A:546:VAL:HG11	0.82	1.50	8	2
1:A:551:VAL:HG22	1:A:565:PHE:CD1	0.82	2.09	5	4
1:A:525:TYR:CD1	1:A:525:TYR:O	0.82	2.33	2	1
1:A:566:VAL:HB	1:A:568:PHE:CE1	0.81	2.09	8	4
1:A:527:LEU:HD22	1:A:531:PHE:CD1	0.81	2.10	4	1
1:A:526:HIS:HB2	1:A:591:LEU:CA	0.81	2.05	6	10
1:A:540:PHE:CE1	1:A:568:PHE:CE1	0.81	2.68	1	3
1:A:522:LEU:HD21	1:A:524:ILE:CG2	0.81	2.01	1	4
1:A:543:PHE:CZ	1:A:546:VAL:HG12	0.81	2.10	9	8
1:A:547:ILE:C	1:A:547:ILE:HD13	0.81	2.00	2	1
1:A:537:ALA:HB1	1:A:546:VAL:HG21	0.81	1.52	3	1
1:A:579:LYS:HG3	1:A:595:LEU:HD13	0.81	1.51	5	2
1:A:522:LEU:HD13	1:A:540:PHE:CE2	0.81	2.10	4	1
1:A:543:PHE:HB2	1:A:574:ALA:CB	0.81	2.06	8	4
1:A:551:VAL:HG21	1:A:563:PHE:CE2	0.81	2.09	10	7
1:A:543:PHE:O	1:A:543:PHE:CD1	0.80	2.34	9	3
1:A:522:LEU:CD2	1:A:524:ILE:HG23	0.80	2.02	1	4
1:A:540:PHE:CB	1:A:577:ALA:HB1	0.80	2.06	1	4
1:A:566:VAL:HB	1:A:568:PHE:CZ	0.80	2.12	8	5
1:A:523:PHE:O	1:A:594:GLN:HG2	0.80	1.77	8	1
1:A:522:LEU:HD11	1:A:593:VAL:CG2	0.80	2.06	7	5
1:A:541:LEU:HA	1:A:543:PHE:CE2	0.80	2.11	8	1
1:A:586:VAL:HB	1:A:589:LYS:CG	0.79	2.07	8	2
1:A:543:PHE:O	1:A:543:PHE:CG	0.79	2.33	6	3
1:A:543:PHE:CE2	1:A:568:PHE:CD2	0.79	2.70	3	1
1:A:527:LEU:HD12	1:A:584:PHE:CD2	0.79	2.12	1	1
1:A:526:HIS:N	1:A:591:LEU:HD13	0.79	1.93	7	3
1:A:584:PHE:CB	1:A:591:LEU:HD13	0.78	2.08	1	1
1:A:522:LEU:HD11	1:A:593:VAL:HG23	0.78	1.55	4	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:546:VAL:C	1:A:547:ILE:HD13	0.78	2.02	1	1
1:A:522:LEU:HD23	1:A:578:ILE:HG21	0.78	1.56	8	1
1:A:551:VAL:HG22	1:A:565:PHE:CD2	0.78	2.13	8	1
1:A:522:LEU:HD22	1:A:578:ILE:CG2	0.77	2.08	3	2
1:A:551:VAL:HG13	1:A:565:PHE:CZ	0.77	2.15	5	4
1:A:581:MET:HG3	1:A:582:ASN:O	0.77	1.79	10	8
1:A:522:LEU:HD12	1:A:594:GLN:O	0.77	1.78	3	6
1:A:543:PHE:CD2	1:A:568:PHE:HB3	0.77	2.14	7	2
1:A:525:TYR:HA	1:A:563:PHE:HB2	0.77	1.56	5	10
1:A:551:VAL:HG12	1:A:565:PHE:CE1	0.77	2.14	7	5
1:A:579:LYS:CG	1:A:595:LEU:HD22	0.77	2.10	6	4
1:A:537:ALA:HB2	1:A:548:SER:HB3	0.76	1.57	4	3
1:A:520:CYS:O	1:A:568:PHE:CD2	0.75	2.40	8	6
1:A:522:LEU:C	1:A:522:LEU:HD23	0.75	2.05	1	2
1:A:540:PHE:CE2	1:A:568:PHE:CZ	0.75	2.75	8	4
1:A:547:ILE:N	1:A:547:ILE:HD12	0.75	1.96	6	7
1:A:543:PHE:CE2	1:A:546:VAL:HG12	0.75	2.16	2	6
1:A:543:PHE:O	1:A:570:ASN:CB	0.74	2.34	8	4
1:A:574:ALA:O	1:A:578:ILE:HD12	0.74	1.82	3	1
1:A:533:ASP:HA	1:A:536:LEU:HD21	0.74	1.57	5	3
1:A:526:HIS:H	1:A:591:LEU:HD12	0.74	1.38	4	3
1:A:527:LEU:HD11	1:A:584:PHE:CD1	0.74	2.17	10	2
1:A:544:GLY:CA	1:A:570:ASN:HB2	0.73	2.12	3	2
1:A:524:ILE:CD1	1:A:536:LEU:HD22	0.73	2.14	4	2
1:A:533:ASP:OD2	1:A:566:VAL:HG13	0.73	1.84	8	1
1:A:544:GLY:O	1:A:546:VAL:HG13	0.73	1.83	10	5
1:A:543:PHE:CG	1:A:544:GLY:N	0.73	2.48	7	2
1:A:520:CYS:O	1:A:568:PHE:HB2	0.72	1.83	1	9
1:A:533:ASP:O	1:A:536:LEU:HG	0.72	1.85	10	3
1:A:543:PHE:HD1	1:A:544:GLY:H	0.72	1.25	3	1
1:A:533:ASP:OD1	1:A:536:LEU:HD11	0.72	1.84	5	2
1:A:527:LEU:HD22	1:A:531:PHE:CE2	0.72	2.19	7	2
1:A:551:VAL:HG11	1:A:563:PHE:CE1	0.72	2.19	1	5
1:A:540:PHE:HB3	1:A:577:ALA:HB1	0.72	1.59	1	3
1:A:525:TYR:CG	1:A:525:TYR:O	0.72	2.43	8	1
1:A:520:CYS:HB2	1:A:568:PHE:O	0.72	1.85	8	10
1:A:526:HIS:CG	1:A:591:LEU:HA	0.72	2.20	4	10
1:A:570:ASN:HB2	1:A:571:PRO:CD	0.72	2.14	4	2
1:A:524:ILE:HD12	1:A:536:LEU:HD22	0.72	1.62	8	1
1:A:526:HIS:CG	1:A:590:ARG:O	0.71	2.43	1	10
1:A:586:VAL:HG21	1:A:589:LYS:HD3	0.71	1.61	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:543:PHE:CD1	1:A:568:PHE:CE2	0.71	2.79	7	1
1:A:536:LEU:HD13	1:A:566:VAL:HG13	0.71	1.62	3	1
1:A:524:ILE:HB	1:A:591:LEU:HD21	0.71	1.61	7	6
1:A:544:GLY:HA3	1:A:570:ASN:HB3	0.71	1.62	7	2
1:A:584:PHE:H	1:A:591:LEU:HB3	0.70	1.47	7	6
1:A:522:LEU:HD23	1:A:566:VAL:HG21	0.70	1.61	3	1
1:A:533:ASP:O	1:A:536:LEU:HD12	0.70	1.86	3	2
1:A:547:ILE:N	1:A:547:ILE:CD1	0.70	2.52	1	6
1:A:526:HIS:HB3	1:A:591:LEU:HD12	0.70	1.63	1	1
1:A:540:PHE:C	1:A:542:PRO:HD2	0.70	2.12	1	10
1:A:540:PHE:HD1	1:A:543:PHE:CD2	0.70	2.04	1	3
1:A:543:PHE:CE1	1:A:568:PHE:HA	0.69	2.22	2	4
1:A:525:TYR:O	1:A:525:TYR:CG	0.69	2.44	5	7
1:A:540:PHE:CD1	1:A:568:PHE:CZ	0.69	2.80	1	4
1:A:522:LEU:HD12	1:A:578:ILE:HG12	0.69	1.62	7	1
1:A:525:TYR:CA	1:A:563:PHE:HB2	0.69	2.16	5	8
1:A:524:ILE:CB	1:A:591:LEU:HD21	0.69	2.16	7	5
1:A:522:LEU:HD22	1:A:595:LEU:HA	0.69	1.64	8	1
1:A:522:LEU:CD2	1:A:595:LEU:HA	0.69	2.18	8	1
1:A:543:PHE:HB2	1:A:574:ALA:HB1	0.68	1.64	8	1
1:A:524:ILE:HB	1:A:591:LEU:CD1	0.68	2.17	3	5
1:A:540:PHE:CD2	1:A:543:PHE:CE2	0.68	2.81	8	2
1:A:566:VAL:HB	1:A:568:PHE:CE2	0.68	2.23	3	1
1:A:522:LEU:HD13	1:A:523:PHE:N	0.68	2.03	8	1
1:A:543:PHE:CE1	1:A:546:VAL:HA	0.68	2.23	2	6
1:A:543:PHE:HD1	1:A:544:GLY:N	0.68	1.85	4	2
1:A:543:PHE:CZ	1:A:568:PHE:CD1	0.68	2.81	7	2
1:A:540:PHE:CZ	1:A:568:PHE:CZ	0.68	2.82	8	5
1:A:551:VAL:O	1:A:563:PHE:O	0.68	2.12	8	10
1:A:540:PHE:CE2	1:A:568:PHE:CE2	0.68	2.81	9	5
1:A:527:LEU:CD1	1:A:591:LEU:HD13	0.67	2.19	9	1
1:A:543:PHE:O	1:A:544:GLY:O	0.67	2.12	9	6
1:A:566:VAL:HG12	1:A:568:PHE:CZ	0.67	2.25	3	1
1:A:543:PHE:CG	1:A:568:PHE:HB3	0.67	2.25	4	1
1:A:584:PHE:N	1:A:591:LEU:HB3	0.67	2.05	7	6
1:A:551:VAL:HG23	1:A:563:PHE:O	0.67	1.89	10	4
1:A:525:TYR:CD1	1:A:563:PHE:HB3	0.67	2.25	3	2
1:A:568:PHE:CD1	1:A:568:PHE:N	0.66	2.62	8	3
1:A:541:LEU:O	1:A:542:PRO:C	0.66	2.36	5	8
1:A:520:CYS:SG	1:A:574:ALA:HB3	0.66	2.30	7	4
1:A:525:TYR:CB	1:A:563:PHE:HB2	0.66	2.21	2	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:541:LEU:O	1:A:543:PHE:N	0.66	2.28	5	6
1:A:522:LEU:HB2	1:A:578:ILE:HG21	0.66	1.68	5	4
1:A:566:VAL:HG12	1:A:568:PHE:CE1	0.66	2.24	7	1
1:A:543:PHE:CE1	1:A:546:VAL:HG12	0.66	2.25	8	1
1:A:496:PRO:O	1:A:497:LEU:HD12	0.66	1.91	3	1
1:A:537:ALA:HB1	1:A:546:VAL:CG2	0.66	2.20	3	1
1:A:533:ASP:CG	1:A:536:LEU:HD11	0.66	2.15	10	2
1:A:526:HIS:C	1:A:527:LEU:HD23	0.66	2.16	1	1
1:A:527:LEU:H	1:A:527:LEU:HD13	0.66	1.51	2	1
1:A:540:PHE:CE2	1:A:568:PHE:HE2	0.66	2.08	3	1
1:A:540:PHE:CE1	1:A:581:MET:HE1	0.66	2.26	3	1
1:A:527:LEU:HG	1:A:531:PHE:CD1	0.66	2.25	8	3
1:A:578:ILE:HD12	1:A:595:LEU:CD1	0.65	2.22	4	1
1:A:524:ILE:HG13	1:A:591:LEU:HD21	0.65	1.66	7	2
1:A:524:ILE:CD1	1:A:566:VAL:HG23	0.65	2.21	6	4
1:A:540:PHE:CZ	1:A:568:PHE:CE2	0.65	2.83	6	3
1:A:575:GLN:O	1:A:579:LYS:HG3	0.65	1.91	7	2
1:A:541:LEU:C	1:A:543:PHE:N	0.65	2.51	5	7
1:A:544:GLY:HA2	1:A:570:ASN:CG	0.65	2.15	8	2
1:A:540:PHE:O	1:A:543:PHE:HD2	0.65	1.70	4	2
1:A:522:LEU:HD12	1:A:524:ILE:CG2	0.65	2.17	8	1
1:A:527:LEU:CD1	1:A:591:LEU:HD22	0.65	2.22	8	2
1:A:520:CYS:HB2	1:A:568:PHE:HB2	0.64	1.69	10	2
1:A:543:PHE:CE1	1:A:568:PHE:HB3	0.64	2.28	4	2
1:A:543:PHE:CD1	1:A:568:PHE:CG	0.64	2.86	1	3
1:A:584:PHE:HB3	1:A:591:LEU:HB2	0.64	1.67	4	4
1:A:584:PHE:N	1:A:591:LEU:HB2	0.64	2.07	2	3
1:A:551:VAL:HG21	1:A:563:PHE:CD2	0.64	2.26	7	4
1:A:528:PRO:C	1:A:562:CYS:HB2	0.64	2.18	8	2
1:A:527:LEU:O	1:A:527:LEU:HD22	0.64	1.93	2	1
1:A:527:LEU:H	1:A:527:LEU:HD22	0.64	1.53	9	2
1:A:541:LEU:O	1:A:541:LEU:HD23	0.64	1.92	7	3
1:A:543:PHE:CE2	1:A:568:PHE:CG	0.63	2.86	3	2
1:A:566:VAL:HG13	1:A:568:PHE:CE1	0.63	2.28	5	3
1:A:522:LEU:HD21	1:A:593:VAL:CG2	0.63	2.19	2	2
1:A:570:ASN:HD21	1:A:574:ALA:HB2	0.63	1.53	7	2
1:A:536:LEU:HD13	1:A:566:VAL:HG22	0.63	1.70	9	6
1:A:586:VAL:HB	1:A:589:LYS:HB2	0.63	1.70	3	9
1:A:570:ASN:OD1	1:A:574:ALA:HB2	0.63	1.94	7	3
1:A:538:SER:HA	1:A:541:LEU:HD12	0.63	1.70	7	1
1:A:566:VAL:CG1	1:A:568:PHE:CE1	0.63	2.82	5	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:527:LEU:HD22	1:A:527:LEU:N	0.63	2.09	9	1
1:A:543:PHE:CZ	1:A:546:VAL:HA	0.63	2.29	6	3
1:A:527:LEU:HD13	1:A:527:LEU:H	0.63	1.53	8	2
1:A:540:PHE:CE2	1:A:568:PHE:CD2	0.62	2.86	2	3
1:A:543:PHE:HB3	1:A:574:ALA:HA	0.62	1.68	3	1
1:A:540:PHE:HB2	1:A:543:PHE:CE2	0.62	2.28	4	1
1:A:547:ILE:C	1:A:547:ILE:CD1	0.62	2.72	2	1
1:A:536:LEU:O	1:A:540:PHE:CD1	0.62	2.52	4	4
1:A:586:VAL:HG11	1:A:589:LYS:HD2	0.62	1.72	9	1
1:A:570:ASN:HB3	1:A:574:ALA:HB2	0.62	1.71	9	1
1:A:525:TYR:O	1:A:525:TYR:CD2	0.62	2.53	1	7
1:A:527:LEU:HB3	1:A:531:PHE:HB3	0.62	1.71	5	2
1:A:570:ASN:ND2	1:A:574:ALA:HB2	0.62	2.08	7	2
1:A:586:VAL:CB	1:A:589:LYS:CG	0.62	2.78	8	1
1:A:537:ALA:HA	1:A:540:PHE:CE1	0.61	2.30	1	3
1:A:540:PHE:O	1:A:543:PHE:HB3	0.61	1.94	9	6
1:A:524:ILE:CG1	1:A:591:LEU:HD21	0.61	2.24	7	2
1:A:522:LEU:HD13	1:A:540:PHE:CZ	0.61	2.30	4	1
1:A:584:PHE:HB2	1:A:591:LEU:HD12	0.61	1.72	5	2
1:A:527:LEU:HD21	1:A:584:PHE:CG	0.61	2.31	10	1
1:A:568:PHE:CE2	1:A:578:ILE:CG1	0.61	2.83	1	2
1:A:543:PHE:CE1	1:A:568:PHE:HD1	0.61	2.13	9	3
1:A:545:ASN:ND2	1:A:547:ILE:HD11	0.61	2.10	8	1
1:A:536:LEU:HD13	1:A:566:VAL:CG2	0.61	2.26	7	2
1:A:541:LEU:HD23	1:A:546:VAL:HG11	0.61	1.72	1	1
1:A:551:VAL:HG12	1:A:565:PHE:CD1	0.61	2.31	7	4
1:A:540:PHE:CD1	1:A:568:PHE:CE1	0.61	2.89	4	1
1:A:583:GLY:H	1:A:591:LEU:HD23	0.60	1.56	9	3
1:A:539:THR:HG22	1:A:581:MET:HE1	0.60	1.70	9	1
1:A:575:GLN:HA	1:A:578:ILE:HD12	0.60	1.73	10	4
1:A:543:PHE:O	1:A:570:ASN:ND2	0.60	2.34	3	2
1:A:541:LEU:HA	1:A:543:PHE:CD1	0.60	2.31	7	1
1:A:584:PHE:CB	1:A:591:LEU:HB2	0.60	2.26	2	9
1:A:537:ALA:HB2	1:A:548:SER:CB	0.60	2.26	4	2
1:A:541:LEU:HA	1:A:543:PHE:HE1	0.60	1.54	7	1
1:A:543:PHE:CG	1:A:568:PHE:CD2	0.60	2.88	7	1
1:A:522:LEU:CD1	1:A:593:VAL:HG23	0.60	2.25	1	5
1:A:579:LYS:CG	1:A:595:LEU:HD13	0.60	2.26	1	2
1:A:540:PHE:CD2	1:A:568:PHE:CE1	0.60	2.90	6	3
1:A:540:PHE:HD2	1:A:543:PHE:CD2	0.60	2.14	2	3
1:A:579:LYS:CB	1:A:595:LEU:HD22	0.60	2.26	9	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:524:ILE:CG2	1:A:591:LEU:HD21	0.60	2.27	4	3
1:A:543:PHE:CE1	1:A:568:PHE:CE2	0.60	2.90	7	1
1:A:570:ASN:CB	1:A:571:PRO:HD2	0.60	2.26	3	2
1:A:525:TYR:N	1:A:591:LEU:HD21	0.59	2.11	2	2
1:A:523:PHE:CZ	1:A:563:PHE:CZ	0.59	2.90	3	3
1:A:526:HIS:HB2	1:A:591:LEU:CB	0.59	2.27	4	6
1:A:578:ILE:HD12	1:A:595:LEU:HD12	0.59	1.73	5	1
1:A:522:LEU:CD1	1:A:524:ILE:HG23	0.59	2.18	8	1
1:A:546:VAL:HG23	1:A:546:VAL:O	0.59	1.98	2	6
1:A:551:VAL:HG22	1:A:565:PHE:CZ	0.59	2.32	10	3
1:A:527:LEU:HD11	1:A:591:LEU:HD22	0.59	1.74	3	2
1:A:544:GLY:HA2	1:A:570:ASN:ND2	0.59	2.11	8	2
1:A:526:HIS:CB	1:A:591:LEU:CA	0.59	2.76	6	7
1:A:543:PHE:HB2	1:A:570:ASN:CG	0.59	2.22	4	2
1:A:522:LEU:CD2	1:A:578:ILE:HG21	0.59	2.24	8	1
1:A:540:PHE:HB2	1:A:577:ALA:HB1	0.59	1.73	10	2
1:A:526:HIS:CD2	1:A:590:ARG:O	0.59	2.56	1	10
1:A:540:PHE:HB3	1:A:543:PHE:CD2	0.59	2.33	9	3
1:A:591:LEU:HD12	1:A:592:LYS:H	0.59	1.56	7	3
1:A:527:LEU:HD22	1:A:531:PHE:CG	0.59	2.32	4	1
1:A:570:ASN:CG	1:A:571:PRO:HD2	0.58	2.22	6	4
1:A:536:LEU:HD13	1:A:566:VAL:CG1	0.58	2.28	3	1
1:A:536:LEU:CB	1:A:566:VAL:HG21	0.58	2.29	4	3
1:A:537:ALA:HB1	1:A:546:VAL:CG1	0.58	2.23	7	1
1:A:579:LYS:HG3	1:A:595:LEU:HD22	0.58	1.75	10	3
1:A:543:PHE:HD2	1:A:570:ASN:ND2	0.58	1.96	7	1
1:A:522:LEU:CD2	1:A:524:ILE:HD12	0.58	2.28	1	2
1:A:524:ILE:HB	1:A:591:LEU:HD23	0.58	1.75	1	1
1:A:577:ALA:O	1:A:581:MET:HB3	0.58	1.98	2	2
1:A:531:PHE:CZ	1:A:536:LEU:HD23	0.58	2.34	1	1
1:A:593:VAL:HG13	1:A:593:VAL:O	0.58	1.97	6	8
1:A:524:ILE:HB	1:A:591:LEU:HD22	0.58	1.75	10	3
1:A:584:PHE:CE2	1:A:586:VAL:CG2	0.58	2.87	8	7
1:A:523:PHE:CE2	1:A:563:PHE:CZ	0.58	2.92	5	6
1:A:543:PHE:O	1:A:544:GLY:C	0.58	2.47	9	6
1:A:543:PHE:CB	1:A:574:ALA:HA	0.58	2.28	8	2
1:A:544:GLY:HA2	1:A:570:ASN:HB2	0.58	1.73	3	2
1:A:524:ILE:HD11	1:A:536:LEU:HD13	0.58	1.74	8	1
1:A:570:ASN:HD21	1:A:574:ALA:CB	0.57	2.12	7	2
1:A:524:ILE:HB	1:A:591:LEU:CD2	0.57	2.29	2	8
1:A:523:PHE:CE1	1:A:563:PHE:CD1	0.57	2.92	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:526:HIS:CE1	1:A:590:ARG:N	0.57	2.72	7	6
1:A:543:PHE:O	1:A:570:ASN:HB3	0.57	1.98	8	2
1:A:533:ASP:HB2	1:A:548:SER:HB2	0.57	1.76	1	3
1:A:568:PHE:CE2	1:A:578:ILE:HG12	0.57	2.33	10	3
1:A:527:LEU:HD13	1:A:527:LEU:N	0.57	2.14	3	2
1:A:531:PHE:CD1	1:A:584:PHE:CD2	0.57	2.92	1	1
1:A:533:ASP:HB3	1:A:549:ALA:O	0.57	1.99	6	6
1:A:529:GLN:HA	1:A:552:PHE:HB2	0.57	1.76	2	1
1:A:543:PHE:CZ	1:A:546:VAL:CG1	0.57	2.86	9	7
1:A:527:LEU:HD13	1:A:531:PHE:HB3	0.57	1.76	4	2
1:A:527:LEU:CD1	1:A:584:PHE:CE1	0.57	2.87	5	2
1:A:543:PHE:CD2	1:A:568:PHE:CB	0.57	2.87	7	1
1:A:524:ILE:HD12	1:A:591:LEU:HD21	0.57	1.75	8	1
1:A:520:CYS:O	1:A:568:PHE:CB	0.57	2.52	1	6
1:A:524:ILE:HG13	1:A:591:LEU:CD2	0.56	2.30	1	1
1:A:546:VAL:HB	1:A:568:PHE:CE1	0.56	2.35	3	1
1:A:527:LEU:HD21	1:A:584:PHE:HB3	0.56	1.77	10	2
1:A:527:LEU:HD21	1:A:563:PHE:C	0.56	2.25	2	1
1:A:551:VAL:CG1	1:A:565:PHE:CZ	0.56	2.88	5	7
1:A:547:ILE:HG12	1:A:567:SER:O	0.56	2.01	3	1
1:A:536:LEU:HB2	1:A:540:PHE:CZ	0.56	2.35	1	3
1:A:540:PHE:HB2	1:A:543:PHE:CD2	0.56	2.34	4	2
1:A:520:CYS:O	1:A:578:ILE:HD11	0.56	2.00	1	1
1:A:544:GLY:HA3	1:A:570:ASN:CG	0.56	2.24	10	4
1:A:531:PHE:CE1	1:A:532:THR:O	0.56	2.58	8	4
1:A:578:ILE:HD12	1:A:595:LEU:HD13	0.56	1.78	4	1
1:A:524:ILE:CB	1:A:591:LEU:HD11	0.56	2.27	3	4
1:A:527:LEU:HD13	1:A:591:LEU:HD13	0.56	1.77	9	1
1:A:540:PHE:CD1	1:A:543:PHE:CD2	0.56	2.93	10	3
1:A:543:PHE:CE1	1:A:568:PHE:CD1	0.56	2.93	5	5
1:A:541:LEU:O	1:A:543:PHE:CD1	0.56	2.59	7	2
1:A:536:LEU:HB2	1:A:566:VAL:HG21	0.56	1.77	7	2
1:A:522:LEU:HD21	1:A:524:ILE:HD12	0.55	1.78	4	2
1:A:522:LEU:CD2	1:A:522:LEU:C	0.55	2.78	1	2
1:A:543:PHE:CE1	1:A:568:PHE:CD2	0.55	2.93	7	1
1:A:544:GLY:HA2	1:A:570:ASN:CB	0.55	2.30	8	2
1:A:543:PHE:CD1	1:A:570:ASN:ND2	0.55	2.74	4	1
1:A:570:ASN:CG	1:A:574:ALA:HB2	0.55	2.26	7	1
1:A:522:LEU:HD12	1:A:594:GLN:C	0.55	2.25	3	6
1:A:543:PHE:CZ	1:A:568:PHE:CG	0.55	2.94	7	2
1:A:528:PRO:CA	1:A:562:CYS:HB2	0.55	2.31	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:527:LEU:CD1	1:A:584:PHE:CD2	0.55	2.87	1	1
1:A:540:PHE:O	1:A:543:PHE:CG	0.55	2.60	3	1
1:A:568:PHE:N	1:A:568:PHE:CD1	0.55	2.72	4	2
1:A:527:LEU:HD21	1:A:584:PHE:CB	0.55	2.30	10	1
1:A:570:ASN:CB	1:A:571:PRO:CD	0.55	2.84	4	8
1:A:578:ILE:CD1	1:A:595:LEU:HD12	0.55	2.32	5	1
1:A:527:LEU:HD11	1:A:563:PHE:C	0.55	2.27	7	1
1:A:551:VAL:CG2	1:A:565:PHE:CD2	0.55	2.89	8	1
1:A:524:ILE:HD11	1:A:536:LEU:HD22	0.55	1.79	4	2
1:A:581:MET:HG2	1:A:582:ASN:O	0.55	2.01	3	1
1:A:563:PHE:CZ	1:A:565:PHE:CE1	0.55	2.95	8	1
1:A:551:VAL:CG1	1:A:565:PHE:CE1	0.54	2.90	4	5
1:A:584:PHE:HB3	1:A:591:LEU:CD1	0.54	2.23	1	1
1:A:529:GLN:HA	1:A:552:PHE:CB	0.54	2.32	2	3
1:A:592:LYS:N	1:A:592:LYS:CE	0.54	2.70	2	1
1:A:584:PHE:CZ	1:A:586:VAL:CG2	0.54	2.90	9	2
1:A:551:VAL:HG22	1:A:551:VAL:O	0.54	2.02	7	3
1:A:522:LEU:HB2	1:A:578:ILE:CG2	0.54	2.32	6	2
1:A:586:VAL:HB	1:A:589:LYS:CB	0.54	2.32	8	8
1:A:540:PHE:CD2	1:A:543:PHE:HE2	0.54	2.19	3	1
1:A:541:LEU:HA	1:A:543:PHE:CZ	0.54	2.37	3	1
1:A:522:LEU:HD13	1:A:578:ILE:HG23	0.54	1.78	2	1
1:A:540:PHE:CD2	1:A:543:PHE:CD2	0.54	2.95	8	2
1:A:570:ASN:O	1:A:571:PRO:O	0.54	2.25	9	2
1:A:525:TYR:HA	1:A:563:PHE:CB	0.54	2.32	5	6
1:A:526:HIS:CE1	1:A:590:ARG:O	0.54	2.61	10	10
1:A:578:ILE:HB	1:A:595:LEU:HD12	0.54	1.78	1	1
1:A:531:PHE:CE2	1:A:591:LEU:HD21	0.54	2.38	1	1
1:A:525:TYR:CE1	1:A:563:PHE:HB3	0.54	2.38	3	2
1:A:523:PHE:CZ	1:A:563:PHE:CE2	0.54	2.96	3	2
1:A:543:PHE:CE2	1:A:568:PHE:CD1	0.54	2.96	4	1
1:A:527:LEU:HB2	1:A:531:PHE:CB	0.53	2.34	2	6
1:A:525:TYR:N	1:A:591:LEU:CD1	0.53	2.71	8	3
1:A:523:PHE:O	1:A:594:GLN:CG	0.53	2.54	8	1
1:A:536:LEU:HB2	1:A:540:PHE:CE2	0.53	2.38	10	3
1:A:540:PHE:C	1:A:542:PRO:CD	0.53	2.80	4	5
1:A:525:TYR:CD1	1:A:563:PHE:CB	0.53	2.91	3	2
1:A:528:PRO:HA	1:A:562:CYS:SG	0.53	2.43	5	3
1:A:586:VAL:CB	1:A:589:LYS:HG3	0.53	2.33	8	1
1:A:540:PHE:CD2	1:A:578:ILE:CG1	0.53	2.92	3	1
1:A:523:PHE:CE2	1:A:563:PHE:CE1	0.53	2.96	1	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:575:GLN:O	1:A:579:LYS:CD	0.53	2.56	8	4
1:A:539:THR:HG22	1:A:540:PHE:HD1	0.53	1.63	3	2
1:A:540:PHE:CE2	1:A:568:PHE:CE1	0.53	2.97	8	2
1:A:570:ASN:HB3	1:A:571:PRO:HD2	0.53	1.80	3	1
1:A:575:GLN:O	1:A:578:ILE:HG13	0.53	2.04	5	1
1:A:543:PHE:CE1	1:A:568:PHE:CZ	0.53	2.97	7	1
1:A:527:LEU:HG	1:A:531:PHE:CG	0.53	2.39	9	3
1:A:572:ASP:O	1:A:575:GLN:N	0.53	2.42	4	3
1:A:543:PHE:CE2	1:A:568:PHE:HA	0.53	2.38	7	1
1:A:568:PHE:CE2	1:A:578:ILE:HG13	0.53	2.39	1	1
1:A:520:CYS:CB	1:A:568:PHE:HB2	0.53	2.33	5	5
1:A:586:VAL:O	1:A:587:GLY:C	0.52	2.52	8	10
1:A:524:ILE:O	1:A:563:PHE:HB2	0.52	2.04	5	8
1:A:542:PRO:O	1:A:544:GLY:N	0.52	2.42	10	5
1:A:543:PHE:CZ	1:A:546:VAL:CB	0.52	2.93	2	5
1:A:547:ILE:HG23	1:A:567:SER:CB	0.52	2.34	2	1
1:A:520:CYS:O	1:A:568:PHE:CG	0.52	2.63	5	5
1:A:578:ILE:HG21	1:A:595:LEU:HB2	0.52	1.82	10	1
1:A:543:PHE:CZ	1:A:568:PHE:HD1	0.52	2.22	2	1
1:A:543:PHE:HB2	1:A:570:ASN:OD1	0.52	2.04	4	2
1:A:527:LEU:HD21	1:A:564:GLY:N	0.52	2.19	3	1
1:A:588:THR:C	1:A:589:LYS:HG2	0.52	2.30	8	1
1:A:536:LEU:HD13	1:A:566:VAL:HB	0.52	1.82	1	1
1:A:543:PHE:CE2	1:A:546:VAL:CG1	0.52	2.93	1	5
1:A:540:PHE:CE1	1:A:581:MET:CE	0.52	2.93	3	1
1:A:541:LEU:N	1:A:542:PRO:HD2	0.52	2.20	7	1
1:A:531:PHE:CD1	1:A:584:PHE:CE1	0.52	2.98	6	2
1:A:520:CYS:O	1:A:568:PHE:HD2	0.52	1.88	9	3
1:A:547:ILE:HD13	1:A:548:SER:N	0.52	2.20	2	1
1:A:547:ILE:HD13	1:A:547:ILE:H	0.52	1.64	3	1
1:A:551:VAL:HB	1:A:565:PHE:CZ	0.51	2.39	1	5
1:A:563:PHE:CZ	1:A:565:PHE:CE2	0.51	2.99	7	7
1:A:523:PHE:CE1	1:A:525:TYR:CD2	0.51	2.98	7	2
1:A:545:ASN:OD1	1:A:547:ILE:HD11	0.51	2.05	10	1
1:A:584:PHE:CE2	1:A:586:VAL:HG21	0.51	2.40	8	2
1:A:523:PHE:CE1	1:A:525:TYR:CE2	0.51	2.98	3	2
1:A:540:PHE:CZ	1:A:566:VAL:HG21	0.51	2.41	5	3
1:A:522:LEU:HB3	1:A:568:PHE:CE2	0.51	2.41	9	4
1:A:541:LEU:CA	1:A:543:PHE:CE1	0.51	2.85	3	1
1:A:576:VAL:HA	1:A:579:LYS:HD2	0.51	1.82	4	3
1:A:541:LEU:C	1:A:541:LEU:HD12	0.51	2.31	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:522:LEU:HD22	1:A:594:GLN:O	0.51	2.05	8	1
1:A:522:LEU:CD1	1:A:593:VAL:CG2	0.51	2.88	1	3
1:A:526:HIS:CD2	1:A:590:ARG:C	0.51	2.88	2	2
1:A:522:LEU:CD2	1:A:593:VAL:HG23	0.51	2.36	9	3
1:A:523:PHE:CE1	1:A:563:PHE:CE1	0.51	2.98	7	2
1:A:524:ILE:HG21	1:A:591:LEU:HD21	0.51	1.81	4	3
1:A:531:PHE:CE1	1:A:584:PHE:CE1	0.51	2.99	6	1
1:A:522:LEU:HD23	1:A:523:PHE:N	0.51	2.21	7	2
1:A:543:PHE:CD1	1:A:568:PHE:CB	0.51	2.93	10	5
1:A:525:TYR:N	1:A:591:LEU:HD11	0.51	2.20	7	3
1:A:526:HIS:CE1	1:A:589:LYS:CG	0.51	2.94	7	4
1:A:539:THR:HG22	1:A:581:MET:CE	0.51	2.36	9	1
1:A:543:PHE:CD1	1:A:568:PHE:CD1	0.51	2.98	1	5
1:A:570:ASN:CG	1:A:571:PRO:CD	0.51	2.84	10	5
1:A:543:PHE:O	1:A:570:ASN:HB2	0.51	2.06	4	3
1:A:541:LEU:HG	1:A:546:VAL:HG21	0.51	1.83	7	1
1:A:523:PHE:CD1	1:A:523:PHE:C	0.50	2.89	7	8
1:A:525:TYR:CB	1:A:563:PHE:CB	0.50	2.89	2	8
1:A:562:CYS:SG	1:A:563:PHE:N	0.50	2.84	1	2
1:A:522:LEU:CB	1:A:578:ILE:HG21	0.50	2.36	5	1
1:A:583:GLY:CA	1:A:591:LEU:HD23	0.50	2.36	7	1
1:A:566:VAL:CB	1:A:568:PHE:CE1	0.50	2.90	8	1
1:A:581:MET:HE3	1:A:582:ASN:H	0.50	1.66	1	1
1:A:527:LEU:HD22	1:A:531:PHE:CE1	0.50	2.41	4	1
1:A:581:MET:HE3	1:A:582:ASN:N	0.50	2.21	1	1
1:A:543:PHE:CE2	1:A:568:PHE:CB	0.50	2.93	7	1
1:A:527:LEU:HG	1:A:584:PHE:CG	0.50	2.42	5	1
1:A:551:VAL:HG11	1:A:565:PHE:CZ	0.50	2.41	8	1
1:A:527:LEU:CD2	1:A:563:PHE:HA	0.50	2.37	3	1
1:A:541:LEU:HA	1:A:543:PHE:CD2	0.50	2.42	10	2
1:A:543:PHE:CD1	1:A:544:GLY:CA	0.50	2.95	4	1
1:A:596:LYS:HG2	1:A:596:LYS:O	0.50	2.07	2	4
1:A:543:PHE:CD1	1:A:543:PHE:N	0.50	2.79	3	1
1:A:540:PHE:C	1:A:543:PHE:CD2	0.50	2.89	4	1
1:A:547:ILE:HD11	1:A:569:ASP:OD2	0.50	2.06	5	1
1:A:527:LEU:HB2	1:A:531:PHE:HB3	0.50	1.84	7	1
1:A:595:LEU:C	1:A:595:LEU:HD23	0.50	2.32	7	1
1:A:527:LEU:HD12	1:A:584:PHE:HB2	0.50	1.84	8	1
1:A:551:VAL:HG13	1:A:565:PHE:CE2	0.50	2.41	8	1
1:A:551:VAL:HG13	1:A:563:PHE:C	0.50	2.31	4	4
1:A:543:PHE:CD2	1:A:570:ASN:ND2	0.49	2.79	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:539:THR:HG22	1:A:540:PHE:N	0.49	2.22	8	4
1:A:527:LEU:N	1:A:562:CYS:O	0.49	2.45	5	1
1:A:533:ASP:OD1	1:A:565:PHE:N	0.49	2.45	8	1
1:A:578:ILE:HG22	1:A:595:LEU:HB2	0.49	1.83	1	1
1:A:522:LEU:HD23	1:A:566:VAL:HG11	0.49	1.83	5	1
1:A:578:ILE:CG1	1:A:595:LEU:HD12	0.49	2.38	5	1
1:A:531:PHE:C	1:A:531:PHE:CD1	0.49	2.90	10	1
1:A:543:PHE:HD1	1:A:568:PHE:HB3	0.49	1.68	5	3
1:A:544:GLY:O	1:A:545:ASN:C	0.49	2.55	10	6
1:A:540:PHE:HD2	1:A:543:PHE:CG	0.49	2.26	9	3
1:A:568:PHE:CD2	1:A:578:ILE:HG12	0.49	2.43	6	3
1:A:492:LEU:N	1:A:492:LEU:HD12	0.49	2.23	7	1
1:A:522:LEU:HB2	1:A:578:ILE:HD13	0.49	1.83	4	2
1:A:533:ASP:CG	1:A:549:ALA:O	0.49	2.55	8	2
1:A:543:PHE:CE1	1:A:568:PHE:CA	0.49	2.95	4	1
1:A:522:LEU:HB2	1:A:568:PHE:CE2	0.49	2.43	8	1
1:A:537:ALA:N	1:A:566:VAL:HG11	0.48	2.23	4	1
1:A:584:PHE:H	1:A:591:LEU:CB	0.48	2.22	1	1
1:A:521:ASN:O	1:A:596:LYS:HG2	0.48	2.09	3	6
1:A:551:VAL:CG2	1:A:563:PHE:CD2	0.48	2.96	3	2
1:A:522:LEU:HD13	1:A:593:VAL:HG23	0.48	1.86	5	1
1:A:527:LEU:HD13	1:A:589:LYS:NZ	0.48	2.23	10	1
1:A:524:ILE:CB	1:A:591:LEU:HD23	0.48	2.38	1	1
1:A:543:PHE:HD1	1:A:568:PHE:CB	0.48	2.22	1	2
1:A:591:LEU:HD23	1:A:592:LYS:N	0.48	2.24	10	3
1:A:519:GLY:O	1:A:597:LYS:CA	0.48	2.59	3	2
1:A:543:PHE:CB	1:A:574:ALA:HB2	0.48	2.34	4	1
1:A:536:LEU:CD1	1:A:566:VAL:CG2	0.48	2.91	1	1
1:A:551:VAL:CG1	1:A:563:PHE:CE1	0.48	2.96	9	4
1:A:543:PHE:C	1:A:570:ASN:CB	0.48	2.87	4	2
1:A:533:ASP:HB3	1:A:548:SER:HB2	0.48	1.85	5	2
1:A:551:VAL:HG13	1:A:565:PHE:HZ	0.48	1.69	10	2
1:A:527:LEU:HD22	1:A:562:CYS:O	0.48	2.09	9	2
1:A:543:PHE:C	1:A:570:ASN:CG	0.48	2.81	7	2
1:A:524:ILE:HD11	1:A:566:VAL:HG23	0.48	1.84	6	2
1:A:526:HIS:N	1:A:591:LEU:CD2	0.48	2.77	2	2
1:A:570:ASN:N	1:A:570:ASN:HD22	0.48	2.07	7	2
1:A:566:VAL:CG2	1:A:568:PHE:HE1	0.48	2.21	5	2
1:A:531:PHE:CZ	1:A:536:LEU:CD2	0.47	2.97	1	1
1:A:541:LEU:HG	1:A:546:VAL:CG1	0.47	2.33	8	1
1:A:586:VAL:HB	1:A:589:LYS:HG2	0.47	1.83	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:527:LEU:HD22	1:A:589:LYS:CE	0.47	2.38	1	1
1:A:586:VAL:HG11	1:A:589:LYS:HD3	0.47	1.84	1	1
1:A:566:VAL:CG1	1:A:568:PHE:CE2	0.47	2.97	3	1
1:A:541:LEU:N	1:A:542:PRO:CD	0.47	2.77	4	2
1:A:533:ASP:HB3	1:A:549:ALA:C	0.47	2.34	4	1
1:A:541:LEU:HD21	1:A:546:VAL:CG2	0.47	2.39	7	1
1:A:526:HIS:CB	1:A:591:LEU:HG	0.47	2.39	2	3
1:A:543:PHE:CZ	1:A:546:VAL:CA	0.47	2.96	2	2
1:A:543:PHE:CB	1:A:574:ALA:CB	0.47	2.92	3	1
1:A:533:ASP:HB2	1:A:549:ALA:C	0.47	2.35	8	1
1:A:523:PHE:HE1	1:A:525:TYR:CD2	0.47	2.27	3	2
1:A:578:ILE:CG2	1:A:595:LEU:HD12	0.47	2.39	7	1
1:A:524:ILE:O	1:A:563:PHE:HD1	0.47	1.92	6	3
1:A:522:LEU:HD11	1:A:593:VAL:HG22	0.47	1.85	2	1
1:A:527:LEU:N	1:A:527:LEU:HD22	0.47	2.25	3	1
1:A:531:PHE:CE2	1:A:584:PHE:CD1	0.47	3.02	4	1
1:A:536:LEU:HD12	1:A:566:VAL:CG2	0.47	2.40	5	1
1:A:540:PHE:CD2	1:A:568:PHE:CZ	0.47	3.00	7	1
1:A:541:LEU:CG	1:A:546:VAL:HG21	0.47	2.39	7	1
1:A:533:ASP:OD2	1:A:565:PHE:O	0.47	2.33	8	1
1:A:551:VAL:CG1	1:A:565:PHE:CE2	0.47	2.98	8	1
1:A:539:THR:CG2	1:A:540:PHE:N	0.47	2.78	4	5
1:A:527:LEU:CB	1:A:531:PHE:CB	0.47	2.92	10	2
1:A:543:PHE:CE2	1:A:568:PHE:CA	0.47	2.98	7	1
1:A:522:LEU:CD2	1:A:593:VAL:CG2	0.47	2.91	2	1
1:A:570:ASN:OD1	1:A:574:ALA:N	0.47	2.48	2	1
1:A:520:CYS:HB3	1:A:574:ALA:CB	0.47	2.39	4	1
1:A:551:VAL:HG22	1:A:565:PHE:CE2	0.47	2.44	8	1
1:A:522:LEU:HD13	1:A:578:ILE:HG22	0.47	1.84	2	1
1:A:526:HIS:CD2	1:A:592:LYS:NZ	0.47	2.83	7	3
1:A:540:PHE:HB2	1:A:577:ALA:CB	0.46	2.40	10	2
1:A:570:ASN:ND2	1:A:570:ASN:N	0.46	2.64	7	2
1:A:527:LEU:HB3	1:A:528:PRO:HD2	0.46	1.87	1	1
1:A:521:ASN:O	1:A:596:LYS:CG	0.46	2.64	9	2
1:A:533:ASP:HA	1:A:536:LEU:HD12	0.46	1.87	6	2
1:A:581:MET:CG	1:A:582:ASN:O	0.46	2.63	9	1
1:A:524:ILE:H	1:A:524:ILE:HD13	0.46	1.70	1	1
1:A:522:LEU:HG	1:A:524:ILE:HG23	0.46	1.86	2	1
1:A:584:PHE:CB	1:A:591:LEU:CB	0.46	2.94	8	1
1:A:527:LEU:HD23	1:A:562:CYS:SG	0.46	2.50	9	1
1:A:526:HIS:CD2	1:A:592:LYS:HE2	0.46	2.45	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:526:HIS:O	1:A:561:LYS:HB2	0.46	2.11	4	2
1:A:538:SER:O	1:A:541:LEU:HD23	0.46	2.10	4	1
1:A:561:LYS:O	1:A:562:CYS:SG	0.46	2.73	5	1
1:A:531:PHE:CE1	1:A:584:PHE:CD1	0.46	3.04	6	1
1:A:524:ILE:HD11	1:A:536:LEU:CD1	0.46	2.41	8	1
1:A:528:PRO:C	1:A:562:CYS:CB	0.46	2.89	8	1
1:A:522:LEU:CD2	1:A:524:ILE:CD1	0.46	2.93	1	2
1:A:566:VAL:CB	1:A:568:PHE:CE2	0.46	2.97	3	1
1:A:526:HIS:CD2	1:A:589:LYS:HG2	0.46	2.45	2	1
1:A:566:VAL:CG1	1:A:568:PHE:CZ	0.46	2.98	3	1
1:A:570:ASN:CB	1:A:574:ALA:HB2	0.46	2.40	9	1
1:A:525:TYR:N	1:A:591:LEU:CD2	0.46	2.78	2	2
1:A:527:LEU:O	1:A:527:LEU:CD2	0.46	2.63	2	1
1:A:593:VAL:O	1:A:593:VAL:CG1	0.46	2.64	6	4
1:A:524:ILE:CD1	1:A:566:VAL:CG2	0.46	2.94	9	1
1:A:584:PHE:H	1:A:591:LEU:HB2	0.46	1.71	1	2
1:A:526:HIS:CD2	1:A:592:LYS:HE3	0.46	2.46	7	2
1:A:551:VAL:O	1:A:551:VAL:HG22	0.46	2.11	4	1
1:A:527:LEU:CD1	1:A:584:PHE:CD1	0.46	2.98	5	1
1:A:586:VAL:CG2	1:A:589:LYS:HD3	0.46	2.38	9	1
1:A:526:HIS:CE1	1:A:589:LYS:HG2	0.46	2.46	3	3
1:A:540:PHE:CD2	1:A:578:ILE:HG12	0.46	2.46	3	1
1:A:537:ALA:O	1:A:541:LEU:HB2	0.46	2.10	7	1
1:A:540:PHE:CE2	1:A:543:PHE:CE2	0.46	3.04	8	1
1:A:563:PHE:HZ	1:A:565:PHE:CE1	0.46	2.29	8	1
1:A:581:MET:HE2	1:A:581:MET:O	0.46	2.11	3	1
1:A:543:PHE:CE1	1:A:568:PHE:CG	0.46	3.03	7	1
1:A:527:LEU:HB3	1:A:531:PHE:CB	0.46	2.41	10	1
1:A:523:PHE:C	1:A:523:PHE:HD1	0.45	2.19	7	2
1:A:575:GLN:O	1:A:579:LYS:HD2	0.45	2.11	4	1
1:A:568:PHE:CE2	1:A:578:ILE:HD13	0.45	2.45	5	1
1:A:595:LEU:HD23	1:A:596:LYS:N	0.45	2.25	7	1
1:A:545:ASN:HB3	1:A:569:ASP:HB2	0.45	1.88	10	1
1:A:523:PHE:CZ	1:A:525:TYR:CE2	0.45	3.04	7	2
1:A:540:PHE:HE2	1:A:568:PHE:CE1	0.45	2.29	8	1
1:A:541:LEU:CG	1:A:546:VAL:HG11	0.45	2.33	8	1
1:A:529:GLN:HB3	1:A:552:PHE:HB2	0.45	1.89	1	1
1:A:533:ASP:HA	1:A:536:LEU:CD1	0.45	2.41	6	1
1:A:524:ILE:C	1:A:591:LEU:HD11	0.45	2.36	7	1
1:A:540:PHE:CG	1:A:568:PHE:CE2	0.45	3.02	7	1
1:A:531:PHE:CZ	1:A:564:GLY:HA3	0.45	2.46	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:526:HIS:CD2	1:A:592:LYS:CE	0.45	3.00	1	1
1:A:551:VAL:HG23	1:A:564:GLY:HA2	0.45	1.87	5	1
1:A:540:PHE:CE2	1:A:568:PHE:CG	0.45	3.05	6	2
1:A:525:TYR:CE2	1:A:592:LYS:HG3	0.45	2.46	2	1
1:A:563:PHE:CD1	1:A:563:PHE:C	0.45	2.95	3	2
1:A:527:LEU:HD21	1:A:584:PHE:CD1	0.45	2.47	10	2
1:A:541:LEU:C	1:A:543:PHE:CD1	0.45	2.95	7	1
1:A:588:THR:O	1:A:589:LYS:CG	0.45	2.64	9	1
1:A:525:TYR:HB2	1:A:563:PHE:CB	0.45	2.42	5	4
1:A:527:LEU:HD22	1:A:589:LYS:HE3	0.45	1.88	1	1
1:A:578:ILE:CG2	1:A:595:LEU:CB	0.45	2.95	10	2
1:A:524:ILE:HB	1:A:591:LEU:CG	0.45	2.41	7	3
1:A:533:ASP:OD2	1:A:549:ALA:HA	0.45	2.11	3	1
1:A:543:PHE:CE2	1:A:568:PHE:CE2	0.45	3.05	3	1
1:A:543:PHE:HB2	1:A:570:ASN:ND2	0.45	2.26	4	2
1:A:570:ASN:HB2	1:A:571:PRO:HD3	0.45	1.89	7	2
1:A:572:ASP:O	1:A:575:GLN:HB2	0.45	2.12	8	2
1:A:551:VAL:HB	1:A:563:PHE:CE2	0.45	2.47	8	1
1:A:563:PHE:CD1	1:A:564:GLY:N	0.45	2.84	3	2
1:A:524:ILE:HD13	1:A:524:ILE:N	0.45	2.27	1	3
1:A:540:PHE:HZ	1:A:578:ILE:CG1	0.45	2.25	2	1
1:A:536:LEU:HB2	1:A:566:VAL:CG2	0.45	2.40	4	1
1:A:529:GLN:OE1	1:A:530:GLU:N	0.45	2.49	6	1
1:A:520:CYS:CB	1:A:568:PHE:O	0.44	2.65	3	1
1:A:526:HIS:HB3	1:A:527:LEU:HD23	0.44	1.89	10	2
1:A:540:PHE:CD2	1:A:578:ILE:HG13	0.44	2.48	3	1
1:A:563:PHE:CD1	1:A:564:GLY:O	0.44	2.70	3	1
1:A:522:LEU:CD1	1:A:540:PHE:CE2	0.44	2.94	4	1
1:A:527:LEU:N	1:A:527:LEU:CD2	0.44	2.80	9	3
1:A:572:ASP:O	1:A:576:VAL:HG23	0.44	2.12	6	1
1:A:537:ALA:O	1:A:541:LEU:CB	0.44	2.65	7	1
1:A:540:PHE:HE2	1:A:568:PHE:CZ	0.44	2.24	8	1
1:A:527:LEU:HD11	1:A:591:LEU:HD13	0.44	1.87	9	1
1:A:563:PHE:HZ	1:A:565:PHE:CE2	0.44	2.30	9	3
1:A:578:ILE:HB	1:A:595:LEU:HD22	0.44	1.88	3	1
1:A:522:LEU:HD13	1:A:593:VAL:CG2	0.44	2.41	5	1
1:A:543:PHE:CE1	1:A:568:PHE:CB	0.44	2.98	4	2
1:A:524:ILE:HD12	1:A:536:LEU:CD2	0.44	2.38	8	1
1:A:586:VAL:CG2	1:A:589:LYS:CB	0.44	2.96	5	1
1:A:541:LEU:CA	1:A:543:PHE:CE2	0.44	2.95	8	1
1:A:526:HIS:CB	1:A:591:LEU:CD1	0.44	2.89	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:529:GLN:HA	1:A:552:PHE:HB3	0.44	1.89	4	1
1:A:540:PHE:CB	1:A:543:PHE:CD2	0.44	3.01	4	1
1:A:533:ASP:CG	1:A:565:PHE:O	0.44	2.60	5	2
1:A:546:VAL:O	1:A:546:VAL:CG2	0.44	2.65	8	2
1:A:536:LEU:O	1:A:540:PHE:CE1	0.44	2.71	4	4
1:A:544:GLY:H	1:A:570:ASN:ND2	0.44	2.11	6	1
1:A:522:LEU:CD2	1:A:578:ILE:CG2	0.44	2.95	8	1
1:A:531:PHE:CE1	1:A:536:LEU:HD23	0.44	2.47	1	1
1:A:573:SER:O	1:A:576:VAL:HG12	0.44	2.13	1	1
1:A:584:PHE:N	1:A:591:LEU:CB	0.44	2.80	2	2
1:A:540:PHE:CD2	1:A:568:PHE:CD1	0.44	3.06	6	1
1:A:520:CYS:SG	1:A:570:ASN:O	0.44	2.74	7	2
1:A:524:ILE:CD1	1:A:536:LEU:CD2	0.44	2.94	8	1
1:A:536:LEU:HB2	1:A:566:VAL:HG11	0.43	1.90	3	1
1:A:541:LEU:CD2	1:A:546:VAL:CG2	0.43	2.96	7	1
1:A:543:PHE:CE1	1:A:568:PHE:CE1	0.43	3.06	7	1
1:A:522:LEU:HG	1:A:593:VAL:CG2	0.43	2.43	8	1
1:A:579:LYS:CG	1:A:595:LEU:CD2	0.43	2.96	10	1
1:A:576:VAL:HA	1:A:579:LYS:CD	0.43	2.43	6	2
1:A:547:ILE:CD1	1:A:569:ASP:OD2	0.43	2.66	7	2
1:A:591:LEU:HD23	1:A:592:LYS:H	0.43	1.73	10	2
1:A:529:GLN:CD	1:A:529:GLN:N	0.43	2.76	9	1
1:A:570:ASN:CG	1:A:571:PRO:HD3	0.43	2.38	5	3
1:A:588:THR:C	1:A:589:LYS:HG3	0.43	2.39	9	1
1:A:536:LEU:CD1	1:A:566:VAL:HB	0.43	2.43	10	1
1:A:543:PHE:CZ	1:A:568:PHE:CE1	0.43	3.07	3	1
1:A:522:LEU:CD1	1:A:594:GLN:N	0.43	2.82	6	2
1:A:547:ILE:HD12	1:A:547:ILE:H	0.43	1.71	10	2
1:A:578:ILE:HG21	1:A:595:LEU:CB	0.43	2.42	10	1
1:A:524:ILE:CG1	1:A:591:LEU:CD2	0.43	2.96	1	1
1:A:522:LEU:HG	1:A:578:ILE:CG2	0.43	2.44	7	1
1:A:576:VAL:HA	1:A:579:LYS:HD3	0.43	1.90	8	1
1:A:531:PHE:CE1	1:A:564:GLY:HA3	0.43	2.48	10	1
1:A:519:GLY:O	1:A:597:LYS:HB3	0.43	2.12	5	2
1:A:566:VAL:HG12	1:A:568:PHE:HZ	0.43	1.70	3	1
1:A:578:ILE:CD1	1:A:595:LEU:HD13	0.43	2.44	4	1
1:A:551:VAL:CG1	1:A:563:PHE:CE2	0.43	2.94	5	1
1:A:543:PHE:CD1	1:A:568:PHE:HD1	0.43	2.32	6	1
1:A:551:VAL:CG2	1:A:565:PHE:CZ	0.43	3.00	10	3
1:A:524:ILE:O	1:A:563:PHE:CD1	0.43	2.72	6	1
1:A:583:GLY:HA3	1:A:591:LEU:HD23	0.43	1.88	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:526:HIS:ND1	1:A:590:ARG:O	0.43	2.51	1	1
1:A:547:ILE:CG2	1:A:567:SER:HB3	0.43	2.43	2	1
1:A:517:PRO:O	1:A:569:ASP:CB	0.43	2.67	3	1
1:A:522:LEU:HD23	1:A:566:VAL:CG1	0.43	2.44	5	1
1:A:541:LEU:CD2	1:A:546:VAL:HG11	0.43	2.43	1	1
1:A:522:LEU:CD1	1:A:593:VAL:HG22	0.43	2.44	2	1
1:A:531:PHE:CD1	1:A:531:PHE:O	0.43	2.71	10	2
1:A:541:LEU:CA	1:A:543:PHE:CD1	0.43	3.02	7	1
1:A:523:PHE:CZ	1:A:563:PHE:CE1	0.43	3.07	5	1
1:A:527:LEU:CD2	1:A:584:PHE:CG	0.43	3.01	10	1
1:A:519:GLY:O	1:A:597:LYS:CB	0.42	2.67	8	2
1:A:529:GLN:CB	1:A:552:PHE:CB	0.42	2.97	1	1
1:A:526:HIS:HB2	1:A:591:LEU:CG	0.42	2.43	2	3
1:A:583:GLY:N	1:A:591:LEU:HD23	0.42	2.29	9	2
1:A:551:VAL:CG2	1:A:565:PHE:CE2	0.42	3.01	8	1
1:A:543:PHE:CE1	1:A:545:ASN:O	0.42	2.72	9	1
1:A:522:LEU:HG	1:A:578:ILE:HG23	0.42	1.90	7	1
1:A:583:GLY:C	1:A:591:LEU:HD23	0.42	2.39	7	1
1:A:594:GLN:O	1:A:594:GLN:HG3	0.42	2.13	8	1
1:A:539:THR:CG2	1:A:581:MET:CE	0.42	2.97	9	1
1:A:524:ILE:N	1:A:524:ILE:HD13	0.42	2.30	10	1
1:A:526:HIS:HB2	1:A:591:LEU:HD23	0.42	1.90	10	1
1:A:533:ASP:OD2	1:A:548:SER:C	0.42	2.62	7	1
1:A:527:LEU:HB3	1:A:528:PRO:CD	0.42	2.44	10	1
1:A:520:CYS:SG	1:A:570:ASN:ND2	0.42	2.93	7	1
1:A:544:GLY:N	1:A:570:ASN:ND2	0.42	2.68	6	1
1:A:525:TYR:C	1:A:591:LEU:HD13	0.42	2.39	7	1
1:A:533:ASP:OD1	1:A:534:THR:N	0.42	2.53	1	2
1:A:526:HIS:CB	1:A:591:LEU:HB2	0.42	2.45	3	2
1:A:527:LEU:HD22	1:A:563:PHE:HA	0.42	1.91	3	1
1:A:540:PHE:CD1	1:A:540:PHE:N	0.42	2.88	3	1
1:A:586:VAL:CG2	1:A:589:LYS:HB3	0.42	2.45	7	3
1:A:540:PHE:CZ	1:A:578:ILE:HG12	0.42	2.49	6	2
1:A:527:LEU:CD1	1:A:586:VAL:CG2	0.42	2.98	1	1
1:A:540:PHE:CE1	1:A:566:VAL:HG21	0.42	2.49	1	1
1:A:551:VAL:O	1:A:562:CYS:SG	0.42	2.78	1	1
1:A:527:LEU:N	1:A:527:LEU:CD1	0.42	2.83	3	1
1:A:527:LEU:CD2	1:A:563:PHE:CA	0.42	2.97	3	1
1:A:546:VAL:C	1:A:547:ILE:HD12	0.42	2.39	6	1
1:A:529:GLN:CB	1:A:552:PHE:HB2	0.42	2.44	1	1
1:A:570:ASN:OD1	1:A:571:PRO:O	0.42	2.38	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:527:LEU:CD2	1:A:563:PHE:C	0.42	2.93	3	1
1:A:537:ALA:HB2	1:A:548:SER:OG	0.42	2.14	3	1
1:A:543:PHE:CZ	1:A:568:PHE:HA	0.42	2.50	4	1
1:A:525:TYR:HB2	1:A:563:PHE:HB3	0.42	1.91	5	1
1:A:536:LEU:C	1:A:540:PHE:CZ	0.41	2.98	1	2
1:A:520:CYS:HB3	1:A:568:PHE:HB2	0.41	1.92	4	1
1:A:526:HIS:CB	1:A:591:LEU:CB	0.41	2.97	4	2
1:A:543:PHE:CB	1:A:574:ALA:CA	0.41	2.97	8	1
1:A:541:LEU:O	1:A:541:LEU:HD12	0.41	2.15	10	1
1:A:528:PRO:HD3	1:A:584:PHE:CE2	0.41	2.50	7	2
1:A:543:PHE:CD2	1:A:544:GLY:CA	0.41	3.04	7	1
1:A:578:ILE:CG2	1:A:595:LEU:HB2	0.41	2.46	10	1
1:A:522:LEU:CG	1:A:524:ILE:HG23	0.41	2.46	5	1
1:A:578:ILE:HG22	1:A:593:VAL:CG2	0.41	2.46	5	1
1:A:522:LEU:CD1	1:A:578:ILE:HG23	0.41	2.45	7	1
1:A:527:LEU:HD11	1:A:564:GLY:N	0.41	2.30	7	1
1:A:527:LEU:HG	1:A:584:PHE:CD2	0.41	2.50	10	1
1:A:540:PHE:HD2	1:A:568:PHE:CE2	0.41	2.25	7	1
1:A:522:LEU:HD23	1:A:522:LEU:O	0.41	2.15	4	1
1:A:566:VAL:CB	1:A:568:PHE:HE1	0.41	2.26	8	1
1:A:531:PHE:CD1	1:A:531:PHE:C	0.41	2.98	8	1
1:A:539:THR:CG2	1:A:581:MET:HE1	0.41	2.41	9	1
1:A:591:LEU:CD2	1:A:592:LYS:N	0.41	2.83	2	1
1:A:540:PHE:CD1	1:A:581:MET:CE	0.41	3.04	3	1
1:A:517:PRO:O	1:A:569:ASP:OD1	0.41	2.38	10	2
1:A:563:PHE:C	1:A:563:PHE:CD1	0.41	2.98	7	1
1:A:566:VAL:C	1:A:568:PHE:CE1	0.41	2.99	8	1
1:A:568:PHE:CE2	1:A:578:ILE:CD1	0.41	3.03	5	1
1:A:541:LEU:C	1:A:541:LEU:CD1	0.41	2.94	10	1
1:A:546:VAL:HB	1:A:568:PHE:CD1	0.40	2.50	3	1
1:A:540:PHE:O	1:A:541:LEU:C	0.40	2.64	4	1
1:A:525:TYR:C	1:A:591:LEU:CD1	0.40	2.94	7	1
1:A:528:PRO:HA	1:A:562:CYS:HB3	0.40	1.93	1	1
1:A:551:VAL:HG23	1:A:564:GLY:CA	0.40	2.46	5	1
1:A:584:PHE:CD1	1:A:586:VAL:HG22	0.40	2.51	5	1
1:A:526:HIS:H	1:A:591:LEU:CD1	0.40	2.23	6	1
1:A:551:VAL:HG11	1:A:563:PHE:CD2	0.40	2.50	7	1
1:A:567:SER:C	1:A:568:PHE:CD1	0.40	2.99	8	1
1:A:586:VAL:HG21	1:A:589:LYS:NZ	0.40	2.31	10	1
1:A:526:HIS:CE1	1:A:592:LYS:NZ	0.40	2.89	2	1
1:A:526:HIS:NE2	1:A:590:ARG:N	0.40	2.69	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:526:HIS:O	1:A:589:LYS:NZ	0.40	2.54	5	2
1:A:521:ASN:ND2	1:A:567:SER:OG	0.40	2.53	8	1
1:A:570:ASN:C	1:A:571:PRO:O	0.40	2.64	9	1
1:A:527:LEU:HD21	1:A:589:LYS:HB3	0.40	1.93	1	1
1:A:570:ASN:HB2	1:A:571:PRO:HD2	0.40	1.93	7	1
1:A:545:ASN:HD22	1:A:547:ILE:HD11	0.40	1.75	8	1
1:A:527:LEU:CB	1:A:528:PRO:CD	0.40	2.99	10	1
1:A:566:VAL:HG11	1:A:568:PHE:CZ	0.40	2.51	5	1
1:A:566:VAL:CG1	1:A:568:PHE:HE1	0.40	2.29	10	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	83/118 (70%)	70±2 (85±2%)	10±1 (12±2%)	2±1 (3±2%)	6	41
All	All	830/1180 (70%)	705 (85%)	103 (12%)	22 (3%)	6	41

All 8 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	543	PHE	6
1	A	544	GLY	6
1	A	542	PRO	3
1	A	571	PRO	2
1	A	561	LYS	2
1	A	528	PRO	1
1	A	496	PRO	1
1	A	545	ASN	1

6.3.2 Protein sidechains [i](#)

In the following table, the Percentiles column shows the percent sidechain outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all NMR

entries. The Analysed column shows the number of residues for which the sidechain conformation was analysed and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	71/91 (78%)	39±3 (55±4%)	32±3 (45±4%)	0	3
All	All	710/910 (78%)	394 (55%)	316 (45%)	0	3

All 59 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	527	LEU	10
1	A	536	LEU	10
1	A	538	SER	10
1	A	539	THR	10
1	A	547	ILE	10
1	A	551	VAL	10
1	A	579	LYS	10
1	A	585	GLN	10
1	A	592	LYS	10
1	A	524	ILE	9
1	A	563	PHE	9
1	A	589	LYS	9
1	A	497	LEU	8
1	A	526	HIS	8
1	A	565	PHE	8
1	A	591	LEU	8
1	A	597	LYS	8
1	A	543	PHE	7
1	A	561	LYS	7
1	A	567	SER	7
1	A	596	LYS	7
1	A	541	LEU	7
1	A	566	VAL	7
1	A	522	LEU	6
1	A	550	LYS	6
1	A	573	SER	6
1	A	575	GLN	6
1	A	588	THR	6
1	A	595	LEU	6
1	A	530	GLU	5
1	A	562	CYS	5
1	A	568	PHE	5
1	A	521	ASN	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	529	GLN	4
1	A	548	SER	4
1	A	492	LEU	4
1	A	488	SER	3
1	A	490	SER	3
1	A	494	THR	3
1	A	532	THR	3
1	A	570	ASN	3
1	A	523	PHE	3
1	A	540	PHE	3
1	A	546	VAL	3
1	A	552	PHE	3
1	A	578	ILE	3
1	A	545	ASN	2
1	A	576	VAL	2
1	A	586	VAL	2
1	A	533	ASP	2
1	A	572	ASP	2
1	A	531	PHE	2
1	A	594	GLN	2
1	A	520	CYS	1
1	A	581	MET	1
1	A	534	THR	1
1	A	493	SER	1
1	A	495	SER	1
1	A	518	GLU	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