



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 06:11 AM UTC

PDB ID : 1KRT / pdb_00001krt
Title : SOLUTION STRUCTURE OF THE ANTICODON BINDING DOMAIN OF
ESCHERICHIA COLI LYSYL-TRNA SYNTHETASE AND STUDIES OF
ITS INTERACTIONS WITH TRNA-LYS
Authors : Commans, S.; Dardel, F.
Deposited on : 1995-06-09

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

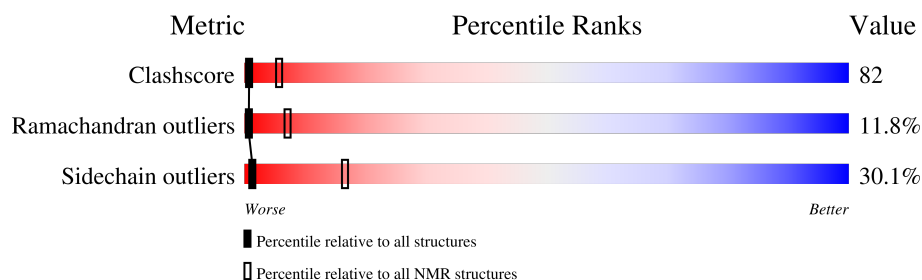
1 Overall quality at a glance

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	120	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 9 models. The atoms present in the NMR models are not consistent. Some calculations may have failed as a result. All residues are included in the validation scores. Model 2 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:40-A:129, A:135-A:149 (105)	1.85	2

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1758 atoms, of which 881 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called LYSYL-TRNA SYNTHETASE (PRODUCT OF LYSS GENE).

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	110	Total	C	H	N	O	S	0
			1758	550	881	157	166	4	

There are 3 discrepancies between the modelled and reference sequences:

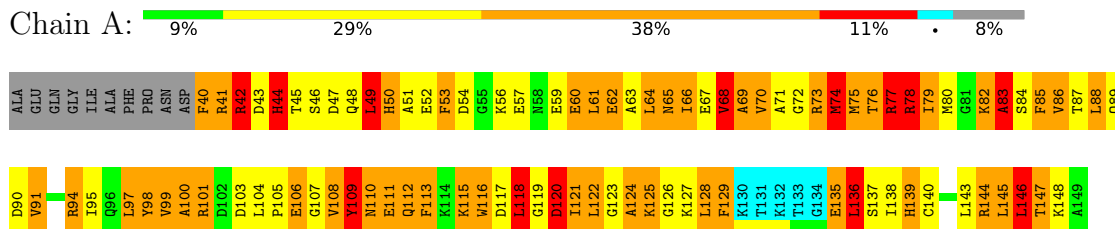
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	?	-	ASN	deletion	UNP P0A8N3
A	?	-	LEU	deletion	UNP P0A8N3
A	?	-	ARG	deletion	UNP P0A8N3

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: LYSYL-TRNA SYNTHETASE (PRODUCT OF LYSS GENE)

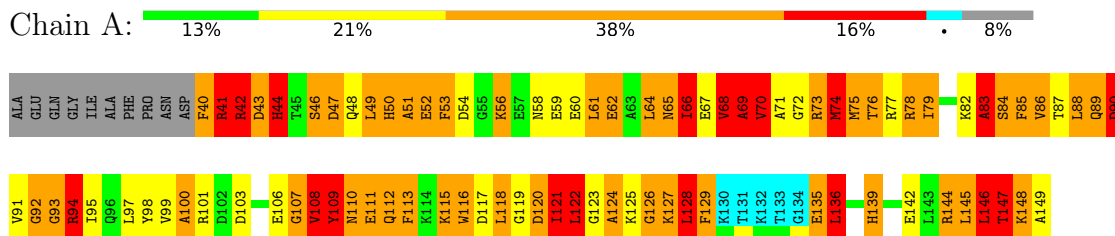


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

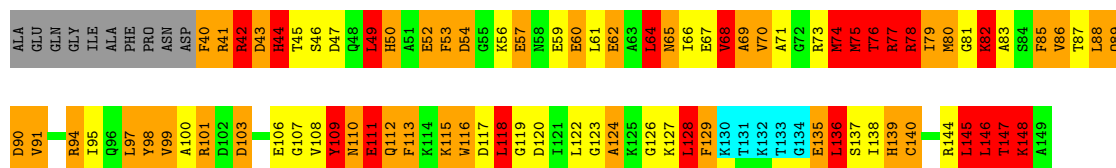
- Molecule 1: LYSYL-TRNA SYNTHETASE (PRODUCT OF LYSS GENE)



4.2.2 Score per residue for model 2 (medoid)

- Molecule 1: LYSYL-TRNA SYNTHETASE (PRODUCT OF LYSS GENE)

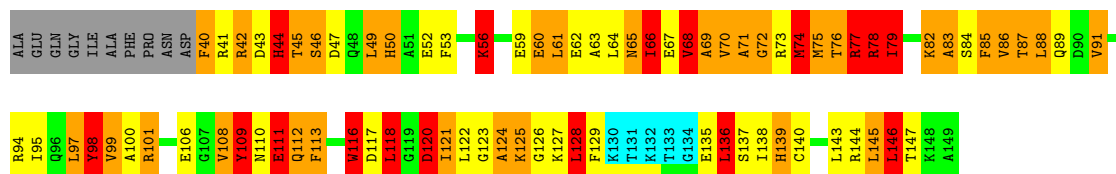




4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: LYSYL-TRNA SYNTHETASE (PRODUCT OF LYSS GENE)

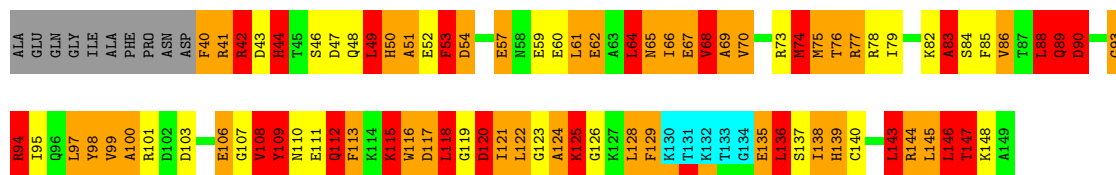
Chain A: 20% 26% 28% 14% 8%



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: LYSYL-TRNA SYNTHETASE (PRODUCT OF LYSS GENE)

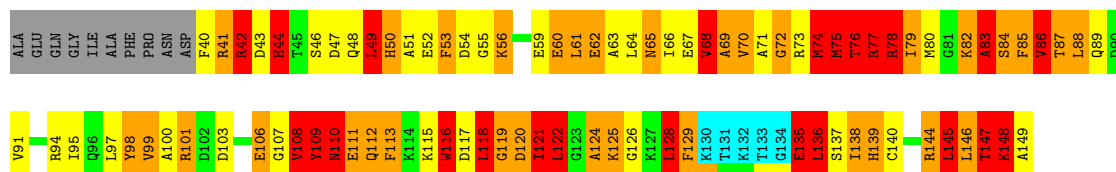
Chain A: 18% 21% 30% 19% 8%



4.2.5 Score per residue for model 5

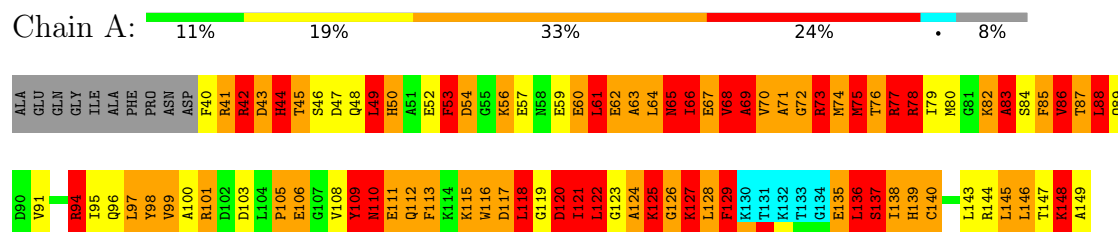
- Molecule 1: LYSYL-TRNA SYNTHETASE (PRODUCT OF LYSS GENE)

Chain A: 14% 26% 28% 20% 8%



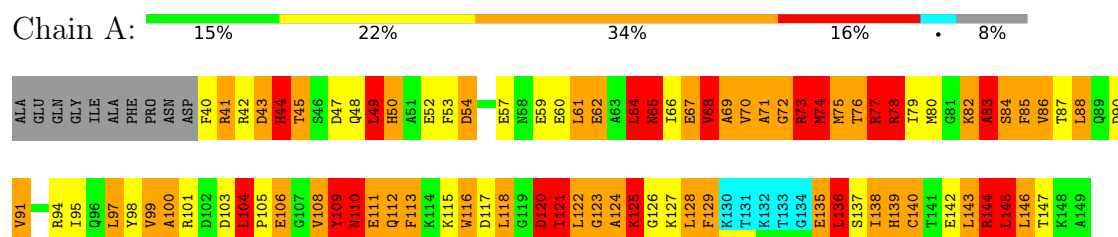
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: LYSYL-TRNA SYNTHETASE (PRODUCT OF LYSS GENE)



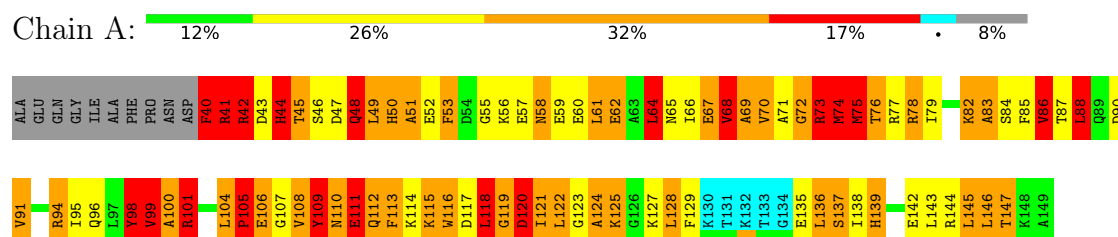
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: LYSYL-TRNA SYNTHETASE (PRODUCT OF LYSS GENE)



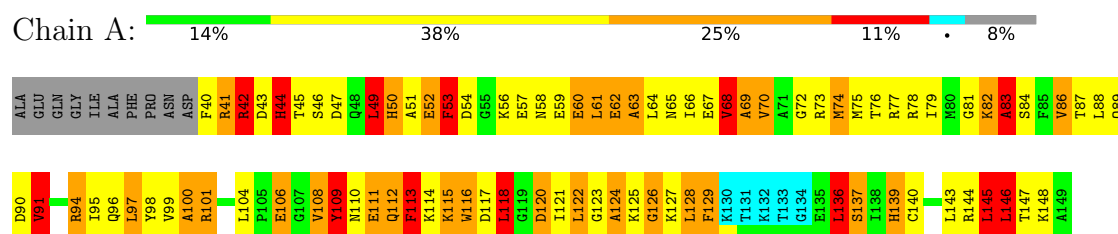
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: LYSYL-TRNA SYNTHETASE (PRODUCT OF LYSS GENE)



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: LYSYL-TRNA SYNTHETASE (PRODUCT OF LYSS GENE)



5 Refinement protocol and experimental data overview

Of the ? calculated structures, 9 were deposited, based on the following criterion: ?.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	3.1

No chemical shift data was provided.

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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	2.36±0.05	36±3/853 (4.2± 0.4%)	3.06±0.13	97±11/1142 (8.5± 1.0%)
All	All	2.37	320/7677 (4.2%)	3.06	871/10278 (8.5%)

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	7.8±0.6
All	All	0	70

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	69	ALA	CA-CB	-20.66	1.22	1.53	3	8
1	A	124	ALA	CA-CB	-14.88	1.28	1.53	7	9
1	A	74	MET	CA-CB	-14.64	1.41	1.54	4	7
1	A	44	HIS	CA-CB	-13.58	1.30	1.53	6	3
1	A	108	VAL	CA-CB	-13.49	1.36	1.54	1	6
1	A	135	GLU	CA-CB	-12.19	1.34	1.53	6	3
1	A	83	ALA	CA-CB	-11.48	1.34	1.53	5	9
1	A	49	LEU	CA-CB	-11.41	1.34	1.53	4	3
1	A	44	HIS	CG-ND1	-11.21	1.25	1.38	7	9
1	A	118	LEU	CA-CB	-10.84	1.37	1.53	5	6
1	A	109	TYR	CA-CB	9.87	1.70	1.53	1	2
1	A	68	VAL	CA-C	-9.51	1.41	1.52	4	8
1	A	68	VAL	CA-CB	-9.20	1.42	1.54	6	3
1	A	120	ASP	CA-C	-9.01	1.43	1.53	5	1
1	A	116	TRP	NE1-CE2	-8.98	1.27	1.37	9	9
1	A	112	GLN	CA-CB	-8.65	1.40	1.53	7	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	70	VAL	CA-CB	-8.63	1.42	1.54	2	8
1	A	50	HIS	CG-ND1	-8.54	1.28	1.38	6	9
1	A	136	LEU	CB-CG	-8.44	1.36	1.53	6	4
1	A	69	ALA	CA-C	-8.34	1.42	1.53	9	4
1	A	116	TRP	CA-CB	-8.23	1.41	1.53	8	4
1	A	139	HIS	CG-ND1	-8.18	1.29	1.38	7	9
1	A	113	PHE	CA-CB	-8.02	1.39	1.53	4	5
1	A	94	ARG	CA-CB	-7.98	1.40	1.53	1	3
1	A	77	ARG	CB-CG	7.91	1.76	1.52	3	1
1	A	67	GLU	C-N	-7.80	1.23	1.33	6	1
1	A	148	LYS	CA-C	-7.78	1.46	1.52	5	1
1	A	136	LEU	CA-CB	-7.77	1.42	1.53	5	3
1	A	145	LEU	CA-CB	-7.72	1.41	1.53	2	2
1	A	80	MET	C-N	-7.69	1.29	1.33	2	1
1	A	66	ILE	CA-C	-7.61	1.43	1.52	7	3
1	A	120	ASP	N-CA	-7.57	1.36	1.45	9	1
1	A	124	ALA	CA-C	-7.50	1.43	1.53	8	6
1	A	91	VAL	CA-CB	-7.47	1.46	1.54	3	3
1	A	121	ILE	N-CA	7.39	1.55	1.46	6	3
1	A	145	LEU	CB-CG	-7.37	1.38	1.53	4	3
1	A	66	ILE	CA-CB	-7.16	1.45	1.54	5	5
1	A	49	LEU	C-N	-6.95	1.24	1.34	3	3
1	A	85	PHE	CA-CB	-6.93	1.42	1.53	7	2
1	A	87	THR	N-CA	6.92	1.53	1.45	5	1
1	A	84	SER	CA-CB	-6.84	1.43	1.53	7	2
1	A	146	LEU	CB-CG	6.81	1.67	1.53	6	2
1	A	44	HIS	ND1-CE1	-6.75	1.25	1.32	3	8
1	A	116	TRP	CG-CD2	-6.72	1.31	1.43	6	6
1	A	120	ASP	CA-CB	-6.71	1.42	1.53	2	4
1	A	62	GLU	CA-CB	-6.71	1.42	1.53	2	9
1	A	42	ARG	CA-CB	-6.71	1.42	1.53	1	3
1	A	59	GLU	CA-CB	-6.70	1.42	1.53	1	2
1	A	111	GLU	CA-CB	-6.70	1.43	1.53	8	9
1	A	44	HIS	CD2-NE2	-6.65	1.30	1.37	6	7
1	A	99	VAL	CA-CB	-6.53	1.46	1.53	7	2
1	A	146	LEU	N-CA	-6.48	1.37	1.46	2	3
1	A	146	LEU	C-N	-6.39	1.24	1.33	5	1
1	A	127	LYS	CA-CB	-6.38	1.39	1.53	6	1
1	A	73	ARG	CA-CB	-6.24	1.43	1.53	8	1
1	A	44	HIS	CB-CG	-6.22	1.41	1.50	9	3
1	A	105	PRO	CA-CB	-6.13	1.47	1.54	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	89	GLN	CA-CB	-6.11	1.43	1.53	1	1
1	A	126	GLY	N-CA	6.10	1.50	1.44	6	1
1	A	146	LEU	CG-CD2	6.09	1.72	1.52	6	1
1	A	70	VAL	N-CA	-6.09	1.38	1.46	1	1
1	A	49	LEU	CG-CD1	-6.07	1.32	1.52	4	1
1	A	135	GLU	C-N	-5.97	1.25	1.33	7	3
1	A	100	ALA	CA-CB	-5.92	1.44	1.53	6	2
1	A	88	LEU	CA-CB	-5.92	1.43	1.54	6	1
1	A	40	PHE	CA-CB	-5.92	1.41	1.53	8	1
1	A	41	ARG	CA-C	-5.89	1.44	1.52	8	1
1	A	127	LYS	CA-C	-5.83	1.45	1.53	3	2
1	A	128	LEU	CB-CG	-5.83	1.41	1.53	8	1
1	A	90	ASP	C-N	-5.80	1.26	1.33	4	1
1	A	106	GLU	CA-CB	-5.79	1.44	1.53	2	3
1	A	147	THR	CA-CB	-5.75	1.43	1.53	2	1
1	A	66	ILE	C-N	-5.69	1.25	1.33	6	1
1	A	53	PHE	CA-CB	-5.61	1.44	1.53	9	1
1	A	76	THR	CA-CB	-5.53	1.45	1.52	4	2
1	A	111	GLU	CA-C	-5.52	1.45	1.52	3	1
1	A	57	GLU	CA-CB	-5.50	1.44	1.53	6	2
1	A	50	HIS	CD2-NE2	-5.50	1.31	1.37	7	9
1	A	72	GLY	N-CA	5.49	1.51	1.45	5	1
1	A	129	PHE	CA-C	-5.46	1.47	1.53	4	2
1	A	58	ASN	CA-CB	-5.46	1.45	1.53	9	1
1	A	86	VAL	CA-CB	-5.45	1.47	1.54	5	4
1	A	146	LEU	CG-CD1	5.43	1.70	1.52	3	1
1	A	139	HIS	CD2-NE2	-5.38	1.31	1.37	6	9
1	A	85	PHE	C-N	-5.36	1.27	1.33	7	1
1	A	111	GLU	C-N	-5.35	1.27	1.33	9	2
1	A	103	ASP	CA-CB	-5.30	1.44	1.53	5	4
1	A	112	GLN	CB-CG	-5.27	1.36	1.52	7	1
1	A	117	ASP	CA-C	-5.24	1.45	1.53	5	1
1	A	76	THR	C-N	-5.19	1.25	1.33	5	1
1	A	138	ILE	CA-CB	-5.19	1.47	1.54	6	1
1	A	129	PHE	C-O	-5.17	1.17	1.24	6	1
1	A	49	LEU	CB-CG	-5.17	1.43	1.53	3	1
1	A	108	VAL	N-CA	5.16	1.52	1.46	1	1
1	A	118	LEU	C-N	-5.15	1.25	1.33	6	1
1	A	144	ARG	C-N	-5.15	1.26	1.33	7	1
1	A	123	GLY	CA-C	5.10	1.59	1.51	7	1
1	A	41	ARG	C-N	-5.08	1.26	1.33	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	146	LEU	CA-CB	5.08	1.60	1.53	7	1
1	A	93	GLY	N-CA	5.06	1.52	1.45	4	1
1	A	142	GLU	CA-C	-5.04	1.46	1.52	7	1

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	44	HIS	CA-CB-CG	28.28	142.08	113.80	1	7
1	A	146	LEU	N-CA-C	20.13	136.80	110.43	8	5
1	A	69	ALA	N-CA-C	20.07	153.56	110.80	6	8
1	A	136	LEU	N-CA-C	19.42	137.64	113.17	2	8
1	A	70	VAL	N-CA-C	18.14	134.24	108.12	6	3
1	A	112	GLN	N-CA-C	-17.63	91.75	110.97	6	9
1	A	43	ASP	N-CA-C	-17.14	88.61	111.74	5	8
1	A	66	ILE	N-CA-C	-17.05	80.68	106.42	6	4
1	A	47	ASP	N-CA-C	-15.58	93.92	113.55	2	5
1	A	76	THR	N-CA-C	15.51	134.68	109.40	6	6
1	A	129	PHE	N-CA-C	-15.46	80.03	109.24	4	3
1	A	145	LEU	N-CA-CB	-14.83	90.55	110.57	4	7
1	A	68	VAL	CA-CB-CG1	-14.67	85.45	110.40	7	5
1	A	66	ILE	N-CA-CB	-14.45	98.20	112.65	6	5
1	A	117	ASP	N-CA-C	13.65	130.79	110.17	4	6
1	A	41	ARG	N-CA-C	13.57	130.09	112.72	1	1
1	A	146	LEU	CA-C-O	13.57	127.51	119.77	9	5
1	A	120	ASP	N-CA-C	-13.38	92.87	110.53	6	4
1	A	121	ILE	N-CA-C	13.24	126.65	108.11	7	5
1	A	145	LEU	N-CA-C	13.23	131.58	108.56	4	6
1	A	40	PHE	CA-CB-CG	-13.13	100.67	113.80	8	4
1	A	146	LEU	O-C-N	12.96	137.92	122.75	8	7
1	A	85	PHE	N-CA-C	-12.76	90.30	109.81	6	6
1	A	77	ARG	N-CA-C	12.68	128.27	108.12	2	5
1	A	147	THR	N-CA-C	12.47	126.99	110.53	1	4
1	A	143	LEU	N-CA-C	12.39	133.08	108.18	7	2
1	A	67	GLU	CA-C-O	12.21	133.62	120.55	6	1
1	A	116	TRP	CA-CB-CG	-12.13	90.55	113.60	4	7
1	A	148	LYS	N-CA-C	-12.06	95.61	112.13	5	3
1	A	129	PHE	CA-C-N	11.94	139.15	122.07	4	2
1	A	129	PHE	C-N-CA	11.94	139.15	122.07	4	2
1	A	116	TRP	CB-CG-CD1	-11.89	109.07	126.90	9	7
1	A	136	LEU	N-CA-CB	-11.85	92.96	110.49	2	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	89	GLN	CA-CB-CG	-11.81	90.48	114.10	1	2
1	A	66	ILE	CA-C-O	11.26	133.03	121.09	6	1
1	A	45	THR	N-CA-C	11.15	127.15	110.64	3	3
1	A	67	GLU	N-CA-C	-10.99	94.22	109.71	3	4
1	A	71	ALA	N-CA-C	-10.98	92.52	109.65	7	3
1	A	111	GLU	CA-CB-CG	-10.95	92.21	114.10	8	9
1	A	126	GLY	N-CA-C	-10.82	96.15	111.20	6	2
1	A	70	VAL	CG1-CB-CG2	-10.79	87.06	110.80	1	1
1	A	112	GLN	N-CA-CB	-10.48	94.61	109.91	2	9
1	A	116	TRP	CG-CD2-CE3	10.42	144.32	133.90	9	3
1	A	79	ILE	N-CA-C	10.34	123.81	109.55	1	5
1	A	106	GLU	N-CA-C	10.27	122.92	110.19	3	4
1	A	146	LEU	N-CA-CB	-10.16	93.32	110.49	6	4
1	A	116	TRP	CD2-CE2-CZ2	10.12	132.52	122.40	9	3
1	A	109	TYR	N-CA-CB	-9.98	93.62	110.49	8	9
1	A	142	GLU	N-CA-C	-9.86	93.33	109.40	7	1
1	A	146	LEU	CA-C-N	9.83	140.22	122.92	5	4
1	A	146	LEU	C-N-CA	9.83	140.22	122.92	5	4
1	A	148	LYS	O-C-N	9.77	134.62	121.92	5	2
1	A	116	TRP	N-CA-C	9.75	125.60	110.20	7	5
1	A	86	VAL	N-CA-C	9.73	123.11	109.29	7	3
1	A	74	MET	N-CA-C	9.73	121.66	108.23	2	4
1	A	66	ILE	CB-CA-C	9.67	121.00	111.23	6	2
1	A	72	GLY	O-C-N	9.54	131.14	123.41	6	3
1	A	108	VAL	CA-C-O	9.51	132.67	120.78	1	2
1	A	119	GLY	N-CA-C	-9.44	90.82	113.18	5	4
1	A	68	VAL	O-C-N	9.43	133.75	123.00	7	9
1	A	86	VAL	N-CA-CB	-9.38	101.64	112.34	7	6
1	A	86	VAL	CA-C-N	-9.33	106.78	122.64	5	2
1	A	86	VAL	C-N-CA	-9.33	106.78	122.64	5	2
1	A	100	ALA	N-CA-CB	-9.32	96.43	110.60	8	8
1	A	120	ASP	O-C-N	9.30	133.16	122.19	5	1
1	A	49	LEU	CA-C-O	9.28	130.56	120.82	2	3
1	A	52	GLU	N-CA-C	9.16	124.57	113.12	7	4
1	A	109	TYR	CA-CB-CG	9.16	130.38	113.90	1	2
1	A	53	PHE	CA-CB-CG	-9.12	104.68	113.80	4	3
1	A	94	ARG	N-CA-C	9.10	122.26	110.53	4	2
1	A	57	GLU	N-CA-C	9.07	123.06	110.35	7	2
1	A	123	GLY	N-CA-C	-9.05	91.72	113.18	9	7
1	A	69	ALA	CB-CA-C	-8.98	92.54	110.42	6	1
1	A	121	ILE	N-CA-CB	-8.96	96.45	111.23	5	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	50	HIS	CA-CB-CG	-8.93	104.87	113.80	1	4
1	A	50	HIS	N-CA-C	-8.90	101.47	111.71	1	2
1	A	77	ARG	CB-CA-C	-8.87	98.74	112.31	6	1
1	A	77	ARG	N-CA-CB	8.85	129.61	111.21	6	1
1	A	120	ASP	N-CA-CB	-8.84	96.98	110.42	2	6
1	A	110	ASN	N-CA-C	-8.83	102.27	112.87	7	3
1	A	140	CYS	N-CA-C	8.82	123.24	110.10	7	5
1	A	106	GLU	N-CA-CB	-8.81	97.76	110.45	2	8
1	A	56	LYS	CA-CB-CG	-8.71	96.69	114.10	8	2
1	A	69	ALA	N-CA-CB	-8.68	97.20	110.49	2	5
1	A	84	SER	N-CA-C	-8.54	96.74	109.81	7	2
1	A	115	LYS	CA-C-N	-8.49	109.28	121.42	7	7
1	A	115	LYS	C-N-CA	-8.49	109.28	121.42	7	7
1	A	120	ASP	CA-C-N	-8.46	111.52	123.03	6	1
1	A	120	ASP	C-N-CA	-8.46	111.52	123.03	6	1
1	A	113	PHE	CA-CB-CG	8.39	122.19	113.80	5	3
1	A	128	LEU	N-CA-C	-8.33	95.63	109.46	5	3
1	A	128	LEU	N-CA-CB	-8.32	96.74	110.23	8	3
1	A	82	LYS	N-CA-C	-8.31	97.09	109.81	7	1
1	A	108	VAL	O-C-N	8.31	130.25	121.94	7	3
1	A	55	GLY	N-CA-C	-8.26	104.74	113.58	8	1
1	A	85	PHE	CA-CB-CG	-8.24	105.56	113.80	1	5
1	A	126	GLY	CA-C-O	-8.22	113.83	121.72	6	1
1	A	127	LYS	CA-C-N	-8.21	108.04	122.07	6	6
1	A	127	LYS	C-N-CA	-8.21	108.04	122.07	6	6
1	A	83	ALA	O-C-N	8.16	133.44	122.59	5	2
1	A	116	TRP	NE1-CE2-CZ2	-8.12	117.92	130.10	9	1
1	A	124	ALA	CA-C-O	-8.08	112.43	121.40	4	3
1	A	145	LEU	CA-C-N	8.06	135.31	121.29	7	2
1	A	145	LEU	C-N-CA	8.06	135.31	121.29	7	2
1	A	91	VAL	CA-CB-CG1	-8.03	96.75	110.40	6	1
1	A	69	ALA	CA-C-N	7.99	136.35	121.97	1	1
1	A	69	ALA	C-N-CA	7.99	136.35	121.97	1	1
1	A	135	GLU	N-CA-C	-7.98	100.23	110.53	4	2
1	A	66	ILE	O-C-N	7.95	131.25	122.98	7	3
1	A	116	TRP	CB-CG-CD2	7.94	137.91	126.80	9	6
1	A	137	SER	N-CA-C	-7.92	95.21	108.75	9	2
1	A	146	LEU	CD1-CG-CD2	7.91	128.20	110.80	6	1
1	A	135	GLU	N-CA-CB	-7.90	99.15	110.44	4	3
1	A	69	ALA	O-C-N	7.83	131.86	121.83	9	5
1	A	120	ASP	CB-CA-C	-7.78	97.11	110.88	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	75	MET	CA-C-N	-7.74	112.32	123.00	3	4
1	A	75	MET	C-N-CA	-7.74	112.32	123.00	3	4
1	A	44	HIS	N-CA-C	7.71	127.23	110.80	3	4
1	A	64	LEU	N-CA-C	7.69	122.42	112.89	6	4
1	A	129	PHE	CA-CB-CG	-7.61	106.19	113.80	1	1
1	A	108	VAL	CA-C-N	7.59	136.03	121.54	7	2
1	A	108	VAL	C-N-CA	7.59	136.03	121.54	7	2
1	A	44	HIS	CB-CG-CD2	7.58	141.05	131.20	1	4
1	A	51	ALA	N-CA-C	-7.58	103.10	111.36	1	4
1	A	144	ARG	N-CA-C	7.54	126.86	110.80	7	3
1	A	122	LEU	O-C-N	7.53	131.49	122.68	1	4
1	A	68	VAL	CA-C-O	7.53	130.72	121.54	2	4
1	A	70	VAL	CA-CB-CG1	-7.50	97.64	110.40	1	4
1	A	135	GLU	CA-C-N	7.50	135.87	121.54	4	5
1	A	135	GLU	C-N-CA	7.50	135.87	121.54	4	5
1	A	77	ARG	CA-C-N	7.49	132.99	121.53	3	2
1	A	77	ARG	C-N-CA	7.49	132.99	121.53	3	2
1	A	70	VAL	CA-CB-CG2	-7.47	97.70	110.40	1	1
1	A	65	ASN	CA-CB-CG	7.42	120.02	112.60	6	2
1	A	129	PHE	O-C-N	7.42	131.63	123.10	9	5
1	A	112	GLN	CB-CA-C	7.39	122.48	110.88	1	7
1	A	65	ASN	CA-C-N	7.37	129.96	122.96	6	2
1	A	65	ASN	C-N-CA	7.37	129.96	122.96	6	2
1	A	118	LEU	N-CA-CB	-7.30	100.10	111.05	1	3
1	A	49	LEU	N-CA-C	-7.29	103.42	111.36	6	4
1	A	112	GLN	CA-CB-CG	-7.28	99.53	114.10	1	2
1	A	109	TYR	N-CA-C	7.26	126.27	110.80	7	2
1	A	62	GLU	N-CA-CB	-7.26	98.94	110.19	8	8
1	A	44	HIS	N-CA-CB	-7.20	98.33	110.49	3	2
1	A	125	LYS	N-CA-C	7.20	120.13	108.76	4	2
1	A	68	VAL	N-CA-C	7.19	119.93	108.85	1	1
1	A	147	THR	O-C-N	7.19	132.37	123.10	5	1
1	A	75	MET	CA-CB-CG	-7.09	99.92	114.10	5	1
1	A	77	ARG	CA-CB-CG	-7.09	99.93	114.10	3	2
1	A	135	GLU	O-C-N	7.04	131.38	122.23	5	1
1	A	128	LEU	CD1-CG-CD2	7.03	126.26	110.80	8	2
1	A	47	ASP	CA-CB-CG	-7.00	105.60	112.60	9	3
1	A	98	TYR	N-CA-CB	-6.99	99.47	110.87	2	5
1	A	70	VAL	CB-CA-C	-6.98	100.14	110.33	6	2
1	A	84	SER	N-CA-CB	-6.90	98.83	110.49	9	3
1	A	77	ARG	O-C-N	6.90	128.55	121.79	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	110	ASN	CA-CB-CG	6.84	119.44	112.60	6	2
1	A	74	MET	O-C-N	6.83	131.67	122.59	6	1
1	A	129	PHE	CA-C-O	6.82	131.25	122.31	4	1
1	A	128	LEU	CB-CA-C	6.79	120.94	109.80	4	3
1	A	108	VAL	N-CA-C	-6.79	102.54	112.04	6	3
1	A	118	LEU	N-CA-C	6.74	125.15	110.80	6	3
1	A	44	HIS	CB-CG-ND1	-6.73	112.61	122.70	9	3
1	A	148	LYS	CA-C-O	6.73	130.18	120.16	5	2
1	A	59	GLU	O-C-N	6.72	129.84	122.11	1	9
1	A	78	ARG	CA-C-N	-6.72	116.04	123.16	5	2
1	A	78	ARG	C-N-CA	-6.72	116.04	123.16	5	2
1	A	113	PHE	CB-CA-C	-6.72	97.05	110.42	5	4
1	A	100	ALA	N-CA-C	6.71	119.40	108.26	3	6
1	A	140	CYS	O-C-N	6.71	131.27	122.95	7	3
1	A	70	VAL	CA-C-O	6.68	127.44	120.36	6	3
1	A	58	ASN	N-CA-C	6.64	119.12	111.02	1	2
1	A	74	MET	CA-CB-CG	-6.60	100.91	114.10	2	5
1	A	78	ARG	N-CA-C	-6.55	102.68	110.41	3	2
1	A	120	ASP	CA-C-O	6.55	130.11	120.42	5	1
1	A	105	PRO	N-CA-C	6.54	125.93	112.47	8	1
1	A	83	ALA	CA-C-N	6.52	135.33	123.27	6	2
1	A	83	ALA	C-N-CA	6.52	135.33	123.27	6	2
1	A	120	ASP	CA-CB-CG	6.50	119.10	112.60	8	2
1	A	67	GLU	O-C-N	6.50	131.68	123.23	7	2
1	A	107	GLY	N-CA-C	-6.48	97.82	113.18	1	1
1	A	64	LEU	O-C-N	6.42	131.10	122.49	7	8
1	A	117	ASP	O-C-N	6.34	130.42	122.43	4	6
1	A	122	LEU	N-CA-C	-6.34	101.14	110.52	7	4
1	A	48	GLN	N-CA-CB	-6.33	100.81	110.12	6	5
1	A	60	GLU	N-CA-CB	-6.32	100.78	110.13	6	5
1	A	69	ALA	CA-C-O	6.32	129.46	121.82	2	4
1	A	127	LYS	CA-CB-CG	-6.30	101.50	114.10	3	2
1	A	85	PHE	CA-C-N	-6.29	114.27	122.51	3	1
1	A	85	PHE	C-N-CA	-6.29	114.27	122.51	3	1
1	A	89	GLN	OE1-CD-NE2	-6.19	116.41	122.60	4	1
1	A	116	TRP	O-C-N	6.18	130.27	123.04	8	6
1	A	87	THR	O-C-N	6.14	130.46	123.27	1	3
1	A	43	ASP	CA-CB-CG	-6.14	106.46	112.60	9	3
1	A	56	LYS	N-CA-C	6.13	123.87	110.80	6	4
1	A	99	VAL	N-CA-C	-6.12	99.42	108.85	8	1
1	A	123	GLY	CA-C-N	-6.11	112.36	122.39	8	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	123	GLY	C-N-CA	-6.11	112.36	122.39	8	3
1	A	82	LYS	CA-C-O	-6.11	113.85	121.55	5	2
1	A	58	ASN	CA-C-N	6.11	128.75	120.38	8	2
1	A	58	ASN	C-N-CA	6.11	128.75	120.38	8	2
1	A	116	TRP	CG-CD1-NE1	-6.09	102.28	110.20	5	2
1	A	50	HIS	N-CA-CB	-6.04	100.92	110.22	3	3
1	A	76	THR	CA-CB-OG1	-6.00	100.59	109.60	3	3
1	A	147	THR	CA-CB-OG1	-6.00	100.59	109.60	8	1
1	A	86	VAL	CA-C-O	-6.00	114.48	120.90	5	1
1	A	122	LEU	CB-CA-C	-6.00	100.08	110.45	6	2
1	A	76	THR	CA-CB-CG2	-5.97	100.35	110.50	7	2
1	A	104	LEU	CA-C-N	5.97	127.30	119.84	8	2
1	A	104	LEU	C-N-CA	5.97	127.30	119.84	8	2
1	A	59	GLU	CA-C-N	5.97	128.75	120.63	3	5
1	A	59	GLU	C-N-CA	5.97	128.75	120.63	3	5
1	A	67	GLU	CA-C-N	5.94	132.66	121.97	6	2
1	A	67	GLU	C-N-CA	5.94	132.66	121.97	6	2
1	A	61	LEU	N-CA-CB	-5.93	99.50	110.18	6	1
1	A	63	ALA	N-CA-C	-5.93	104.72	111.07	5	4
1	A	50	HIS	CE1-NE2-CD2	-5.92	103.08	109.00	4	9
1	A	128	LEU	CA-C-N	-5.90	112.92	122.36	2	2
1	A	128	LEU	C-N-CA	-5.90	112.92	122.36	2	2
1	A	116	TRP	CA-C-O	5.90	127.42	120.69	8	2
1	A	62	GLU	N-CA-C	5.85	118.54	111.40	1	1
1	A	135	GLU	CA-C-O	5.82	128.83	120.51	3	2
1	A	145	LEU	CB-CG-CD2	5.82	128.15	110.70	7	1
1	A	44	HIS	O-C-N	5.79	130.29	122.59	6	1
1	A	44	HIS	CE1-NE2-CD2	-5.79	103.21	109.00	7	1
1	A	98	TYR	CB-CA-C	5.79	119.40	110.14	6	2
1	A	138	ILE	CA-CB-CG1	-5.79	100.56	110.40	5	1
1	A	146	LEU	CB-CA-C	-5.78	97.69	109.65	8	1
1	A	76	THR	N-CA-CB	-5.77	100.74	110.49	2	1
1	A	146	LEU	CB-CG-CD2	-5.74	93.47	110.70	1	2
1	A	46	SER	N-CA-C	5.70	122.95	110.80	3	1
1	A	98	TYR	N-CA-C	-5.69	99.01	108.34	6	2
1	A	106	GLU	CA-CB-CG	-5.65	102.79	114.10	9	2
1	A	67	GLU	N-CA-CB	-5.64	101.78	110.13	6	1
1	A	119	GLY	CA-C-N	5.63	132.60	122.64	1	1
1	A	119	GLY	C-N-CA	5.63	132.60	122.64	1	1
1	A	117	ASP	CA-C-O	5.62	126.73	120.77	2	1
1	A	53	PHE	O-C-N	5.62	130.06	122.59	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	49	LEU	CD1-CG-CD2	-5.61	98.46	110.80	5	3
1	A	72	GLY	N-CA-C	5.56	120.14	112.52	3	1
1	A	145	LEU	CD1-CG-CD2	-5.54	98.62	110.80	7	1
1	A	78	ARG	O-C-N	5.54	128.43	121.95	7	1
1	A	99	VAL	CA-C-N	-5.50	114.76	123.23	4	3
1	A	99	VAL	C-N-CA	-5.50	114.76	123.23	4	3
1	A	83	ALA	N-CA-C	-5.50	100.82	109.50	2	1
1	A	76	THR	OG1-CB-CG2	-5.49	98.32	109.30	3	2
1	A	43	ASP	O-C-N	5.46	129.32	122.55	1	1
1	A	137	SER	CA-C-N	-5.46	114.50	122.68	7	1
1	A	137	SER	C-N-CA	-5.46	114.50	122.68	7	1
1	A	125	LYS	N-CA-CB	-5.45	101.38	111.52	6	1
1	A	59	GLU	CA-C-O	5.44	128.29	120.51	6	4
1	A	101	ARG	N-CA-C	5.44	122.38	110.80	8	1
1	A	109	TYR	CB-CA-C	5.43	121.23	110.42	4	2
1	A	139	HIS	CE1-NE2-CD2	-5.43	103.57	109.00	7	7
1	A	74	MET	N-CA-CB	5.43	119.66	110.49	6	1
1	A	137	SER	CA-CB-OG	-5.40	100.31	111.10	6	1
1	A	126	GLY	CA-C-N	-5.39	111.19	122.03	9	1
1	A	126	GLY	C-N-CA	-5.39	111.19	122.03	9	1
1	A	142	GLU	CA-C-O	-5.39	114.88	120.70	7	1
1	A	148	LYS	N-CA-CB	-5.35	101.45	110.49	6	2
1	A	80	MET	N-CA-C	5.35	115.19	108.45	7	1
1	A	145	LEU	CA-C-O	-5.35	116.22	122.37	4	1
1	A	81	GLY	O-C-N	5.34	126.72	123.35	2	1
1	A	93	GLY	N-CA-C	-5.34	100.53	113.18	4	2
1	A	88	LEU	N-CA-C	5.31	117.48	109.41	8	2
1	A	108	VAL	CA-CB-CG2	-5.30	101.38	110.40	9	1
1	A	65	ASN	CA-C-O	5.30	128.09	120.51	7	2
1	A	116	TRP	CB-CA-C	-5.29	101.21	109.84	9	1
1	A	42	ARG	O-C-N	5.29	128.94	122.96	6	1
1	A	47	ASP	CA-C-N	5.29	127.89	120.28	2	1
1	A	47	ASP	C-N-CA	5.29	127.89	120.28	2	1
1	A	73	ARG	N-CA-C	5.29	122.06	110.80	6	2
1	A	84	SER	CA-CB-OG	-5.28	100.54	111.10	4	1
1	A	98	TYR	CB-CG-CD2	-5.27	112.89	120.80	8	1
1	A	75	MET	N-CA-C	5.26	122.00	110.80	6	1
1	A	136	LEU	CB-CA-C	5.25	120.87	110.42	4	1
1	A	48	GLN	N-CA-C	-5.24	105.57	111.28	5	1
1	A	144	ARG	CA-C-N	-5.23	115.79	123.00	7	1
1	A	144	ARG	C-N-CA	-5.23	115.79	123.00	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	87	THR	N-CA-C	-5.23	99.93	108.76	9	1
1	A	142	GLU	CA-C-N	-5.22	110.53	122.95	7	1
1	A	142	GLU	C-N-CA	-5.22	110.53	122.95	7	1
1	A	45	THR	CA-CB-CG2	-5.21	101.64	110.50	8	2
1	A	124	ALA	O-C-N	5.21	129.71	122.78	4	1
1	A	49	LEU	CB-CG-CD2	-5.21	95.08	110.70	8	1
1	A	52	GLU	CA-C-N	5.21	131.49	121.54	9	1
1	A	52	GLU	C-N-CA	5.21	131.49	121.54	9	1
1	A	139	HIS	CA-CB-CG	-5.20	108.60	113.80	5	1
1	A	49	LEU	CB-CG-CD1	-5.18	95.15	110.70	4	1
1	A	96	GLN	N-CA-C	-5.18	101.43	109.72	8	1
1	A	49	LEU	N-CA-CB	-5.17	102.51	110.16	5	1
1	A	118	LEU	CA-C-N	5.17	126.60	120.14	4	1
1	A	118	LEU	C-N-CA	5.17	126.60	120.14	4	1
1	A	103	ASP	N-CA-C	-5.16	106.12	112.72	2	1
1	A	118	LEU	O-C-N	5.13	129.41	122.59	3	1
1	A	117	ASP	N-CA-CB	-5.12	102.27	110.51	4	1
1	A	79	ILE	CA-CB-CG2	-5.11	101.82	110.50	3	1
1	A	121	ILE	CA-C-N	-5.08	111.86	122.07	7	1
1	A	121	ILE	C-N-CA	-5.08	111.86	122.07	7	1
1	A	76	THR	O-C-N	5.07	128.81	122.63	7	1
1	A	90	ASP	N-CA-C	-5.06	102.40	109.69	2	1
1	A	90	ASP	CA-CB-CG	5.06	117.66	112.60	1	1
1	A	121	ILE	O-C-N	-5.06	117.80	123.26	7	1
1	A	124	ALA	N-CA-C	-5.06	101.73	108.86	4	1
1	A	122	LEU	CA-C-O	-5.05	115.98	121.89	1	1
1	A	68	VAL	CA-C-N	5.05	131.57	122.02	2	1
1	A	68	VAL	C-N-CA	5.05	131.57	122.02	2	1
1	A	113	PHE	N-CA-CB	5.04	119.01	110.49	5	1
1	A	91	VAL	O-C-N	5.02	128.99	122.77	6	1
1	A	118	LEU	CD1-CG-CD2	5.01	121.81	110.80	1	1

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	42	ARG	Sidechain	9
1	A	77	ARG	Sidechain	9
1	A	78	ARG	Sidechain	9
1	A	94	ARG	Sidechain	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	101	ARG	Sidechain	9
1	A	144	ARG	Sidechain	9
1	A	41	ARG	Sidechain	8
1	A	73	ARG	Sidechain	7
1	A	104	LEU	Peptide	1

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	841	839	838	137±23
All	All	7569	7550	7542	1236

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 82.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:77:ARG:CB	1:A:77:ARG:CG	1.61	1.76	3	1
1:A:70:VAL:HA	1:A:124:ALA:H	1.03	1.04	1	1
1:A:124:ALA:HB3	1:A:143:LEU:HA	0.98	1.34	7	1
1:A:44:HIS:CD2	1:A:69:ALA:HB3	0.97	1.93	3	7
1:A:44:HIS:CB	1:A:69:ALA:HA	0.95	1.91	6	1
1:A:77:ARG:CG	1:A:77:ARG:CA	0.93	2.47	3	1
1:A:44:HIS:HD2	1:A:69:ALA:HB3	0.91	1.25	8	5
1:A:53:PHE:CE1	1:A:61:LEU:HD12	0.90	2.00	5	6
1:A:70:VAL:HG12	1:A:71:ALA:N	0.89	1.79	1	1
1:A:116:TRP:HB3	1:A:122:LEU:HD11	0.87	1.42	7	3
1:A:122:LEU:HG	1:A:145:LEU:HD13	0.86	1.45	1	1
1:A:124:ALA:CB	1:A:143:LEU:HA	0.86	2.00	7	1
1:A:146:LEU:HD23	1:A:146:LEU:N	0.85	1.85	5	1
1:A:53:PHE:CZ	1:A:61:LEU:HD11	0.85	2.07	6	1
1:A:53:PHE:CE2	1:A:61:LEU:HD12	0.84	2.07	1	1
1:A:53:PHE:CE2	1:A:128:LEU:HD11	0.83	2.07	3	1
1:A:77:ARG:CB	1:A:86:VAL:HA	0.83	2.04	5	1
1:A:40:PHE:CZ	1:A:44:HIS:CE1	0.83	2.67	7	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:116:TRP:CD2	1:A:145:LEU:HD11	0.82	2.09	1	4
1:A:70:VAL:HA	1:A:124:ALA:N	0.82	1.89	1	1
1:A:44:HIS:CD2	1:A:69:ALA:CB	0.82	2.62	7	7
1:A:122:LEU:CG	1:A:145:LEU:HD13	0.81	2.05	1	1
1:A:40:PHE:CE1	1:A:44:HIS:CE1	0.81	2.68	4	5
1:A:124:ALA:HB3	1:A:144:ARG:N	0.81	1.90	7	1
1:A:146:LEU:HD23	1:A:146:LEU:H	0.81	1.34	5	1
1:A:116:TRP:CZ2	1:A:145:LEU:HG	0.80	2.11	1	3
1:A:44:HIS:HB2	1:A:69:ALA:HA	0.79	1.55	6	1
1:A:116:TRP:CG	1:A:145:LEU:HB3	0.79	2.12	5	1
1:A:124:ALA:HB3	1:A:144:ARG:H	0.79	1.38	7	1
1:A:116:TRP:CG	1:A:145:LEU:HD11	0.78	2.13	3	4
1:A:146:LEU:C	1:A:146:LEU:CD1	0.78	2.57	1	3
1:A:53:PHE:CD1	1:A:61:LEU:HD12	0.78	2.13	4	3
1:A:77:ARG:HG3	1:A:78:ARG:N	0.77	1.95	3	1
1:A:129:PHE:O	1:A:136:LEU:HB3	0.77	1.80	6	3
1:A:44:HIS:CD2	1:A:69:ALA:HB2	0.76	2.15	7	4
1:A:89:GLN:HB2	1:A:94:ARG:CG	0.76	2.11	1	1
1:A:116:TRP:CD2	1:A:145:LEU:HB3	0.76	2.16	5	2
1:A:121:ILE:O	1:A:146:LEU:HG	0.75	1.81	3	2
1:A:146:LEU:CG	1:A:147:THR:H	0.75	1.91	6	3
1:A:116:TRP:H	1:A:116:TRP:CD1	0.74	2.00	9	3
1:A:44:HIS:CG	1:A:68:VAL:HB	0.74	2.18	1	2
1:A:67:GLU:C	1:A:126:GLY:O	0.74	2.30	6	4
1:A:44:HIS:CE1	1:A:68:VAL:HA	0.74	2.17	4	4
1:A:53:PHE:CE2	1:A:128:LEU:CD1	0.74	2.70	8	2
1:A:69:ALA:CB	1:A:124:ALA:O	0.74	2.35	4	6
1:A:69:ALA:HB2	1:A:125:LYS:HA	0.73	1.58	4	1
1:A:144:ARG:C	1:A:145:LEU:HD22	0.73	2.08	7	1
1:A:44:HIS:HB2	1:A:68:VAL:HB	0.73	1.57	1	1
1:A:89:GLN:HG2	1:A:94:ARG:CG	0.73	2.13	4	2
1:A:121:ILE:N	1:A:146:LEU:HD21	0.73	1.99	6	1
1:A:74:MET:CB	1:A:88:LEU:HA	0.73	2.14	3	8
1:A:146:LEU:N	1:A:146:LEU:CD2	0.73	2.51	5	1
1:A:116:TRP:CD1	1:A:116:TRP:N	0.72	2.57	5	6
1:A:116:TRP:CB	1:A:122:LEU:HD11	0.71	2.15	6	3
1:A:44:HIS:ND1	1:A:68:VAL:HB	0.71	1.99	1	1
1:A:146:LEU:CG	1:A:147:THR:N	0.71	2.53	6	2
1:A:40:PHE:CE1	1:A:69:ALA:HB2	0.71	2.20	8	1
1:A:44:HIS:HB3	1:A:68:VAL:HG12	0.71	1.60	3	1
1:A:53:PHE:CE2	1:A:61:LEU:CD1	0.70	2.74	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:PHE:CD2	1:A:128:LEU:HD21	0.70	2.21	1	5
1:A:77:ARG:CG	1:A:78:ARG:N	0.70	2.54	3	2
1:A:116:TRP:CE2	1:A:145:LEU:CD1	0.70	2.73	7	2
1:A:121:ILE:N	1:A:146:LEU:HD11	0.70	2.01	3	2
1:A:77:ARG:CA	1:A:86:VAL:HA	0.70	2.16	5	1
1:A:53:PHE:CD2	1:A:128:LEU:HD11	0.70	2.21	3	2
1:A:145:LEU:HD12	1:A:145:LEU:C	0.70	2.11	1	2
1:A:40:PHE:CD1	1:A:44:HIS:NE2	0.69	2.60	1	1
1:A:122:LEU:HD13	1:A:145:LEU:HD13	0.69	1.64	4	1
1:A:69:ALA:HA	1:A:125:LYS:CG	0.69	2.16	7	1
1:A:40:PHE:HA	1:A:44:HIS:HB3	0.69	1.64	7	4
1:A:140:CYS:SG	1:A:143:LEU:HD21	0.69	2.27	9	1
1:A:122:LEU:HD12	1:A:122:LEU:N	0.69	2.02	9	2
1:A:74:MET:HE2	1:A:75:MET:CG	0.69	2.18	2	1
1:A:116:TRP:CZ2	1:A:145:LEU:CD1	0.69	2.76	7	2
1:A:72:GLY:O	1:A:122:LEU:HD13	0.69	1.86	7	5
1:A:128:LEU:CD2	1:A:128:LEU:C	0.69	2.66	3	1
1:A:85:PHE:CE1	1:A:98:TYR:CD1	0.69	2.81	2	2
1:A:124:ALA:CB	1:A:144:ARG:H	0.69	2.00	7	1
1:A:122:LEU:HG	1:A:145:LEU:HB2	0.68	1.65	2	1
1:A:53:PHE:CZ	1:A:128:LEU:HG	0.68	2.22	5	2
1:A:116:TRP:HB3	1:A:122:LEU:CD1	0.68	2.18	7	1
1:A:98:TYR:CE1	1:A:100:ALA:HB2	0.68	2.23	4	4
1:A:69:ALA:HB1	1:A:124:ALA:O	0.68	1.88	8	3
1:A:53:PHE:CE2	1:A:128:LEU:CD2	0.68	2.77	1	4
1:A:53:PHE:CE2	1:A:128:LEU:HG	0.68	2.23	5	6
1:A:120:ASP:HA	1:A:147:THR:O	0.68	1.88	9	1
1:A:113:PHE:HA	1:A:116:TRP:CD1	0.68	2.24	1	7
1:A:109:TYR:CG	1:A:110:ASN:N	0.67	2.61	2	8
1:A:121:ILE:N	1:A:146:LEU:O	0.67	2.28	4	2
1:A:76:THR:HA	1:A:87:THR:H	0.67	1.49	2	1
1:A:99:VAL:HG12	1:A:109:TYR:CD2	0.67	2.24	8	8
1:A:40:PHE:CE2	1:A:44:HIS:NE2	0.67	2.63	7	5
1:A:109:TYR:CD1	1:A:110:ASN:N	0.67	2.63	8	7
1:A:44:HIS:HB3	1:A:69:ALA:HA	0.67	1.66	6	1
1:A:77:ARG:N	1:A:86:VAL:HG22	0.67	2.05	5	1
1:A:120:ASP:HA	1:A:148:LYS:CB	0.66	2.20	5	1
1:A:40:PHE:CD2	1:A:44:HIS:CE1	0.66	2.83	1	3
1:A:49:LEU:HB3	1:A:50:HIS:CD2	0.66	2.25	2	3
1:A:53:PHE:CG	1:A:128:LEU:HD21	0.66	2.25	4	2
1:A:44:HIS:NE2	1:A:69:ALA:HB2	0.66	2.06	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:PHE:CD2	1:A:61:LEU:CD1	0.66	2.78	8	2
1:A:71:ALA:HB1	1:A:122:LEU:O	0.66	1.90	7	4
1:A:77:ARG:NE	1:A:85:PHE:H	0.66	1.89	7	1
1:A:116:TRP:CD1	1:A:116:TRP:H	0.66	2.06	1	2
1:A:107:GLY:C	1:A:109:TYR:N	0.66	2.50	1	5
1:A:136:LEU:C	1:A:136:LEU:CD1	0.65	2.69	5	4
1:A:77:ARG:CG	1:A:78:ARG:H	0.65	2.04	3	1
1:A:53:PHE:CE1	1:A:61:LEU:CD1	0.65	2.80	2	5
1:A:53:PHE:CE2	1:A:128:LEU:HD21	0.65	2.27	7	5
1:A:76:THR:HA	1:A:87:THR:N	0.65	2.07	2	1
1:A:67:GLU:CA	1:A:127:LYS:HA	0.65	2.21	6	1
1:A:74:MET:HE2	1:A:75:MET:HG2	0.65	1.67	2	1
1:A:116:TRP:CE2	1:A:145:LEU:HG	0.65	2.27	6	3
1:A:136:LEU:C	1:A:136:LEU:HD12	0.65	2.16	2	3
1:A:146:LEU:HD22	1:A:147:THR:H	0.65	1.51	3	1
1:A:77:ARG:NH1	1:A:78:ARG:N	0.64	2.45	7	1
1:A:53:PHE:CD1	1:A:61:LEU:CD1	0.64	2.80	2	5
1:A:74:MET:SD	1:A:88:LEU:C	0.64	2.81	2	2
1:A:128:LEU:C	1:A:128:LEU:HD23	0.64	2.16	8	2
1:A:128:LEU:HD12	1:A:135:GLU:O	0.64	1.92	7	2
1:A:44:HIS:CE1	1:A:67:GLU:O	0.64	2.50	4	5
1:A:112:GLN:C	1:A:116:TRP:NE1	0.64	2.56	8	9
1:A:42:ARG:HB2	1:A:71:ALA:HB2	0.64	1.70	8	1
1:A:69:ALA:HB2	1:A:124:ALA:O	0.64	1.93	2	4
1:A:60:GLU:O	1:A:64:LEU:HD23	0.64	1.92	8	3
1:A:44:HIS:CG	1:A:69:ALA:H	0.64	2.11	8	2
1:A:44:HIS:ND1	1:A:68:VAL:HA	0.64	2.08	7	1
1:A:121:ILE:C	1:A:146:LEU:HG	0.63	2.18	3	1
1:A:146:LEU:CD1	1:A:146:LEU:H	0.63	2.06	3	1
1:A:42:ARG:CB	1:A:71:ALA:HB2	0.63	2.23	8	1
1:A:121:ILE:H	1:A:146:LEU:HD21	0.63	1.53	6	3
1:A:129:PHE:O	1:A:129:PHE:CG	0.63	2.49	6	2
1:A:89:GLN:CD	1:A:90:ASP:H	0.63	2.00	4	2
1:A:121:ILE:H	1:A:146:LEU:CD2	0.63	2.06	9	3
1:A:146:LEU:C	1:A:146:LEU:HD13	0.63	2.18	1	3
1:A:121:ILE:O	1:A:146:LEU:HB3	0.63	1.93	7	1
1:A:116:TRP:CH2	1:A:145:LEU:HB2	0.63	2.29	9	1
1:A:71:ALA:CB	1:A:122:LEU:O	0.63	2.47	1	5
1:A:74:MET:SD	1:A:88:LEU:CA	0.63	2.87	2	2
1:A:53:PHE:CD2	1:A:61:LEU:HD11	0.63	2.29	8	1
1:A:89:GLN:CG	1:A:90:ASP:H	0.62	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:112:GLN:O	1:A:116:TRP:NE1	0.62	2.32	4	9
1:A:121:ILE:C	1:A:122:LEU:HD12	0.62	2.18	9	1
1:A:70:VAL:CG2	1:A:124:ALA:HB3	0.62	2.24	5	5
1:A:53:PHE:CD1	1:A:128:LEU:HD21	0.62	2.29	5	2
1:A:129:PHE:O	1:A:136:LEU:CB	0.62	2.48	6	1
1:A:121:ILE:N	1:A:146:LEU:HG	0.62	2.10	8	1
1:A:40:PHE:HA	1:A:44:HIS:NE2	0.62	2.10	6	2
1:A:53:PHE:CG	1:A:61:LEU:HD21	0.62	2.30	6	1
1:A:109:TYR:O	1:A:112:GLN:HB3	0.61	1.94	2	2
1:A:53:PHE:CD1	1:A:128:LEU:HD11	0.61	2.30	6	1
1:A:122:LEU:N	1:A:122:LEU:CD1	0.61	2.63	9	2
1:A:49:LEU:O	1:A:52:GLU:N	0.61	2.34	8	5
1:A:44:HIS:CE1	1:A:68:VAL:CA	0.61	2.84	7	1
1:A:40:PHE:CZ	1:A:44:HIS:NE2	0.61	2.69	2	4
1:A:146:LEU:HD22	1:A:146:LEU:C	0.61	2.20	2	1
1:A:69:ALA:HA	1:A:125:LYS:HG3	0.61	1.71	7	1
1:A:64:LEU:HD12	1:A:65:ASN:N	0.61	2.10	4	2
1:A:109:TYR:C	1:A:111:GLU:N	0.61	2.55	8	7
1:A:89:GLN:HG2	1:A:94:ARG:CA	0.61	2.25	4	1
1:A:98:TYR:CE1	1:A:100:ALA:CB	0.61	2.84	4	2
1:A:146:LEU:HG	1:A:147:THR:N	0.60	2.10	6	1
1:A:116:TRP:CD1	1:A:145:LEU:HD11	0.60	2.31	3	2
1:A:73:ARG:HG2	1:A:74:MET:N	0.60	2.11	6	2
1:A:77:ARG:NH1	1:A:85:PHE:O	0.60	2.34	7	1
1:A:40:PHE:HE1	1:A:69:ALA:HB2	0.60	1.52	8	1
1:A:40:PHE:CG	1:A:44:HIS:NE2	0.60	2.69	3	3
1:A:107:GLY:O	1:A:109:TYR:N	0.60	2.34	1	4
1:A:77:ARG:CG	1:A:85:PHE:O	0.60	2.49	3	1
1:A:42:ARG:CG	1:A:71:ALA:HB2	0.60	2.26	8	1
1:A:44:HIS:ND1	1:A:68:VAL:HG12	0.60	2.11	3	2
1:A:112:GLN:C	1:A:116:TRP:HE1	0.60	2.05	4	6
1:A:77:ARG:HB2	1:A:86:VAL:HG23	0.60	1.73	3	1
1:A:79:ILE:HG23	1:A:80:MET:N	0.60	2.11	6	2
1:A:41:ARG:C	1:A:70:VAL:HB	0.60	2.21	1	1
1:A:53:PHE:CE2	1:A:128:LEU:CG	0.60	2.84	1	6
1:A:120:ASP:HB2	1:A:147:THR:O	0.59	1.97	5	1
1:A:120:ASP:N	1:A:147:THR:HA	0.59	2.12	5	1
1:A:53:PHE:CD2	1:A:135:GLU:HG2	0.59	2.33	6	1
1:A:68:VAL:O	1:A:125:LYS:CB	0.59	2.50	7	1
1:A:44:HIS:CB	1:A:68:VAL:HB	0.59	2.27	1	1
1:A:107:GLY:C	1:A:109:TYR:H	0.59	2.05	5	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:77:ARG:HG3	1:A:78:ARG:H	0.59	1.58	3	1
1:A:77:ARG:CZ	1:A:78:ARG:H	0.59	2.11	7	1
1:A:143:LEU:O	1:A:144:ARG:CB	0.59	2.51	7	1
1:A:49:LEU:HD23	1:A:50:HIS:N	0.59	2.13	4	1
1:A:44:HIS:CD2	1:A:70:VAL:HG23	0.58	2.33	1	1
1:A:70:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB3	0.58	1.74	5	2
1:A:109:TYR:CE1	1:A:110:ASN:HB3	0.58	2.32	8	3
1:A:122:LEU:HB3	1:A:145:LEU:CD1	0.58	2.28	4	1
1:A:42:ARG:C	1:A:44:HIS:N	0.58	2.50	1	6
1:A:74:MET:SD	1:A:75:MET:N	0.58	2.76	7	2
1:A:89:GLN:HB2	1:A:94:ARG:HG3	0.58	1.74	1	1
1:A:85:PHE:O	1:A:86:VAL:HG23	0.58	1.99	2	3
1:A:49:LEU:HD22	1:A:49:LEU:C	0.58	2.24	6	3
1:A:116:TRP:CE2	1:A:145:LEU:HD13	0.58	2.34	2	1
1:A:66:ILE:HG22	1:A:68:VAL:HG13	0.58	1.76	3	1
1:A:71:ALA:HA	1:A:122:LEU:C	0.58	2.24	2	4
1:A:121:ILE:H	1:A:146:LEU:HD11	0.58	1.57	3	2
1:A:79:ILE:HG22	1:A:84:SER:HA	0.58	1.74	6	2
1:A:53:PHE:CD1	1:A:61:LEU:HD21	0.58	2.33	6	1
1:A:116:TRP:CZ2	1:A:145:LEU:HD11	0.58	2.34	7	1
1:A:116:TRP:CZ2	1:A:145:LEU:HB2	0.58	2.34	9	1
1:A:49:LEU:O	1:A:50:HIS:C	0.58	2.44	1	4
1:A:69:ALA:C	1:A:70:VAL:HG13	0.58	2.23	3	7
1:A:89:GLN:CG	1:A:90:ASP:N	0.58	2.62	1	1
1:A:146:LEU:CD2	1:A:147:THR:H	0.58	2.12	3	2
1:A:122:LEU:CD1	1:A:122:LEU:N	0.57	2.66	1	3
1:A:41:ARG:O	1:A:69:ALA:HB3	0.57	1.99	5	4
1:A:49:LEU:HD11	1:A:128:LEU:HD21	0.57	1.75	2	2
1:A:53:PHE:CD2	1:A:61:LEU:HD21	0.57	2.34	6	1
1:A:74:MET:SD	1:A:87:THR:C	0.57	2.87	2	1
1:A:143:LEU:O	1:A:144:ARG:HB2	0.57	1.99	7	1
1:A:73:ARG:NE	1:A:116:TRP:HB2	0.57	2.15	1	1
1:A:110:ASN:HA	1:A:113:PHE:CD2	0.57	2.34	7	3
1:A:85:PHE:CE2	1:A:98:TYR:CD2	0.57	2.93	3	1
1:A:52:GLU:C	1:A:54:ASP:H	0.57	2.06	9	1
1:A:76:THR:OG1	1:A:86:VAL:HG22	0.57	2.00	2	1
1:A:148:LYS:HG3	1:A:149:ALA:N	0.57	2.15	5	1
1:A:144:ARG:C	1:A:145:LEU:CD2	0.57	2.77	7	1
1:A:44:HIS:HD2	1:A:70:VAL:HG23	0.57	1.59	1	1
1:A:118:LEU:C	1:A:120:ASP:H	0.57	2.06	7	2
1:A:44:HIS:CE1	1:A:68:VAL:N	0.57	2.73	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:ALA:HB2	1:A:101:ARG:CG	0.57	2.30	8	1
1:A:77:ARG:H	1:A:86:VAL:HG22	0.57	1.59	5	1
1:A:146:LEU:H	1:A:146:LEU:HD12	0.57	1.59	3	1
1:A:100:ALA:O	1:A:109:TYR:CD2	0.57	2.58	8	1
1:A:61:LEU:O	1:A:61:LEU:HD13	0.56	2.00	6	1
1:A:122:LEU:CD1	1:A:145:LEU:HD13	0.56	2.30	4	2
1:A:49:LEU:O	1:A:53:PHE:HB2	0.56	2.00	2	1
1:A:116:TRP:CG	1:A:145:LEU:CB	0.56	2.87	5	1
1:A:67:GLU:O	1:A:127:LYS:C	0.56	2.48	6	1
1:A:44:HIS:CE1	1:A:67:GLU:C	0.56	2.83	7	1
1:A:77:ARG:CZ	1:A:78:ARG:HB2	0.56	2.30	7	1
1:A:44:HIS:HB2	1:A:68:VAL:CG2	0.56	2.30	1	1
1:A:44:HIS:HB3	1:A:68:VAL:CG1	0.56	2.29	3	1
1:A:53:PHE:CE1	1:A:128:LEU:HD11	0.56	2.35	6	1
1:A:73:ARG:HA	1:A:88:LEU:CD2	0.56	2.30	6	1
1:A:146:LEU:HG	1:A:147:THR:H	0.56	1.61	6	1
1:A:77:ARG:NE	1:A:78:ARG:H	0.56	1.98	7	1
1:A:49:LEU:HD13	1:A:53:PHE:CD1	0.56	2.35	8	1
1:A:49:LEU:O	1:A:53:PHE:N	0.56	2.38	1	5
1:A:109:TYR:C	1:A:111:GLU:H	0.56	2.09	8	3
1:A:146:LEU:HD23	1:A:147:THR:O	0.56	1.99	9	1
1:A:108:VAL:HA	1:A:112:GLN:CG	0.56	2.31	1	1
1:A:44:HIS:HB2	1:A:69:ALA:O	0.56	2.00	8	2
1:A:124:ALA:HB3	1:A:143:LEU:CA	0.56	2.22	7	1
1:A:108:VAL:C	1:A:112:GLN:HB2	0.56	2.25	3	4
1:A:77:ARG:CZ	1:A:85:PHE:H	0.56	2.13	7	1
1:A:116:TRP:NE1	1:A:145:LEU:HD21	0.56	2.16	3	1
1:A:116:TRP:CE2	1:A:145:LEU:HD11	0.56	2.36	8	4
1:A:121:ILE:H	1:A:147:THR:C	0.56	2.09	1	2
1:A:82:LYS:O	1:A:83:ALA:C	0.56	2.49	5	6
1:A:119:GLY:HA3	1:A:147:THR:HA	0.56	1.77	5	1
1:A:120:ASP:HB2	1:A:147:THR:C	0.56	2.26	5	1
1:A:53:PHE:CD2	1:A:135:GLU:CG	0.56	2.89	6	1
1:A:61:LEU:HD13	1:A:61:LEU:C	0.56	2.24	6	1
1:A:122:LEU:CG	1:A:144:ARG:HB3	0.56	2.31	7	1
1:A:146:LEU:H	1:A:146:LEU:CD2	0.56	2.06	5	1
1:A:41:ARG:C	1:A:44:HIS:CD2	0.56	2.84	8	1
1:A:72:GLY:N	1:A:122:LEU:HD23	0.55	2.16	5	1
1:A:41:ARG:N	1:A:44:HIS:NE2	0.55	2.53	8	1
1:A:74:MET:SD	1:A:116:TRP:O	0.55	2.64	9	1
1:A:122:LEU:HG	1:A:145:LEU:CB	0.55	2.31	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:GLN:NE2	1:A:94:ARG:HA	0.55	2.17	4	1
1:A:40:PHE:CD1	1:A:44:HIS:CE1	0.55	2.94	9	2
1:A:98:TYR:CD2	1:A:139:HIS:CD2	0.55	2.95	7	4
1:A:120:ASP:CG	1:A:146:LEU:HD11	0.55	2.26	3	1
1:A:44:HIS:HB2	1:A:68:VAL:CB	0.55	2.32	1	1
1:A:109:TYR:O	1:A:111:GLU:N	0.55	2.39	8	4
1:A:129:PHE:O	1:A:129:PHE:CD1	0.55	2.60	6	1
1:A:89:GLN:HG3	1:A:94:ARG:HA	0.55	1.78	1	1
1:A:49:LEU:HG	1:A:50:HIS:N	0.55	2.15	1	2
1:A:128:LEU:HD11	1:A:135:GLU:O	0.55	2.01	2	1
1:A:120:ASP:HB2	1:A:148:LYS:CA	0.55	2.32	5	1
1:A:120:ASP:HA	1:A:148:LYS:N	0.55	2.16	1	1
1:A:145:LEU:CD2	1:A:145:LEU:N	0.55	2.70	7	1
1:A:85:PHE:CE2	1:A:98:TYR:CE2	0.54	2.95	3	1
1:A:49:LEU:HD22	1:A:49:LEU:O	0.54	2.02	6	3
1:A:42:ARG:O	1:A:43:ASP:C	0.54	2.47	1	1
1:A:67:GLU:HA	1:A:127:LYS:HA	0.54	1.78	8	3
1:A:122:LEU:CG	1:A:145:LEU:HB2	0.54	2.33	2	1
1:A:40:PHE:CE2	1:A:44:HIS:CE1	0.54	2.95	1	3
1:A:53:PHE:CE1	1:A:128:LEU:CD2	0.54	2.91	5	2
1:A:49:LEU:HD12	1:A:66:ILE:HG21	0.54	1.80	6	1
1:A:123:GLY:H	1:A:144:ARG:HA	0.54	1.61	7	1
1:A:116:TRP:CD2	1:A:145:LEU:CD1	0.54	2.90	6	4
1:A:49:LEU:HD21	1:A:66:ILE:HG13	0.54	1.80	3	1
1:A:122:LEU:CB	1:A:145:LEU:HD13	0.54	2.32	4	1
1:A:120:ASP:N	1:A:147:THR:C	0.54	2.65	5	1
1:A:129:PHE:CD1	1:A:129:PHE:O	0.54	2.61	4	1
1:A:108:VAL:O	1:A:112:GLN:HB2	0.54	2.03	7	2
1:A:128:LEU:HD12	1:A:129:PHE:N	0.54	2.17	2	1
1:A:119:GLY:CA	1:A:147:THR:HA	0.54	2.33	5	1
1:A:82:LYS:O	1:A:109:TYR:CZ	0.54	2.60	8	1
1:A:128:LEU:CD1	1:A:136:LEU:N	0.54	2.70	9	1
1:A:64:LEU:CD1	1:A:65:ASN:N	0.53	2.71	2	2
1:A:79:ILE:CG2	1:A:80:MET:N	0.53	2.72	6	3
1:A:107:GLY:O	1:A:109:TYR:CB	0.53	2.57	1	1
1:A:116:TRP:CH2	1:A:145:LEU:HG	0.53	2.38	6	2
1:A:120:ASP:CG	1:A:146:LEU:HD12	0.53	2.29	4	1
1:A:126:GLY:CA	1:A:140:CYS:HA	0.53	2.33	6	1
1:A:68:VAL:N	1:A:126:GLY:O	0.53	2.41	2	7
1:A:121:ILE:O	1:A:146:LEU:HD22	0.53	2.03	6	1
1:A:42:ARG:NH2	1:A:42:ARG:HB2	0.53	2.18	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:PHE:CD1	1:A:61:LEU:HD11	0.53	2.39	7	2
1:A:112:GLN:O	1:A:116:TRP:CD1	0.53	2.61	3	2
1:A:89:GLN:CD	1:A:93:GLY:C	0.53	2.76	4	1
1:A:42:ARG:O	1:A:43:ASP:CB	0.53	2.56	6	1
1:A:70:VAL:O	1:A:124:ALA:N	0.53	2.41	1	3
1:A:53:PHE:CZ	1:A:128:LEU:CD1	0.53	2.92	6	1
1:A:69:ALA:N	1:A:125:LYS:HA	0.53	2.19	6	1
1:A:121:ILE:N	1:A:146:LEU:CD2	0.53	2.69	6	1
1:A:77:ARG:CZ	1:A:85:PHE:O	0.53	2.56	7	1
1:A:77:ARG:HB2	1:A:86:VAL:HA	0.53	1.81	2	2
1:A:77:ARG:HG2	1:A:85:PHE:H	0.53	1.63	3	1
1:A:101:ARG:H	1:A:105:PRO:HG3	0.53	1.63	6	1
1:A:116:TRP:N	1:A:116:TRP:CD2	0.53	2.72	7	1
1:A:42:ARG:HB3	1:A:71:ALA:HB3	0.53	1.80	3	1
1:A:40:PHE:CE2	1:A:67:GLU:O	0.53	2.62	8	1
1:A:53:PHE:O	1:A:61:LEU:HD11	0.53	2.04	9	1
1:A:42:ARG:HB3	1:A:71:ALA:CB	0.52	2.33	3	1
1:A:120:ASP:HA	1:A:148:LYS:HB3	0.52	1.81	5	1
1:A:53:PHE:CZ	1:A:61:LEU:HD21	0.52	2.39	6	1
1:A:53:PHE:CE1	1:A:61:LEU:HD21	0.52	2.39	6	1
1:A:107:GLY:O	1:A:109:TYR:HB2	0.52	2.04	1	1
1:A:123:GLY:H	1:A:144:ARG:C	0.52	2.12	7	1
1:A:40:PHE:HA	1:A:44:HIS:CG	0.52	2.39	9	4
1:A:74:MET:CG	1:A:88:LEU:HA	0.52	2.34	1	4
1:A:74:MET:HB2	1:A:88:LEU:HA	0.52	1.81	2	5
1:A:121:ILE:N	1:A:147:THR:C	0.52	2.67	1	1
1:A:146:LEU:C	1:A:146:LEU:HD12	0.52	2.29	7	3
1:A:41:ARG:H	1:A:44:HIS:HB3	0.52	1.64	9	3
1:A:143:LEU:C	1:A:144:ARG:HG2	0.52	2.30	7	1
1:A:146:LEU:HD23	1:A:147:THR:H	0.52	1.63	9	1
1:A:67:GLU:CB	1:A:127:LYS:HA	0.52	2.35	6	1
1:A:53:PHE:CE2	1:A:128:LEU:HD13	0.52	2.38	8	1
1:A:64:LEU:HG	1:A:65:ASN:N	0.52	2.20	1	2
1:A:124:ALA:HB3	1:A:143:LEU:C	0.52	2.30	7	1
1:A:69:ALA:C	1:A:70:VAL:CG1	0.52	2.83	8	7
1:A:53:PHE:CE2	1:A:61:LEU:HD21	0.52	2.40	6	1
1:A:83:ALA:HA	1:A:109:TYR:CE2	0.52	2.39	3	2
1:A:41:ARG:N	1:A:44:HIS:HB3	0.52	2.19	4	2
1:A:67:GLU:HB3	1:A:126:GLY:O	0.52	2.05	6	2
1:A:49:LEU:HD21	1:A:128:LEU:CD2	0.52	2.34	2	1
1:A:64:LEU:O	1:A:65:ASN:C	0.52	2.52	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:GLN:CD	1:A:90:ASP:N	0.51	2.68	4	1
1:A:86:VAL:HG11	1:A:113:PHE:CE2	0.51	2.40	2	5
1:A:116:TRP:CE2	1:A:145:LEU:CG	0.51	2.93	4	3
1:A:121:ILE:N	1:A:146:LEU:CD1	0.51	2.73	3	2
1:A:43:ASP:H	1:A:69:ALA:C	0.51	2.13	7	1
1:A:46:SER:O	1:A:50:HIS:CD2	0.51	2.64	5	2
1:A:70:VAL:HG23	1:A:144:ARG:CZ	0.51	2.35	7	1
1:A:77:ARG:HH21	1:A:79:ILE:HG22	0.51	1.65	7	1
1:A:53:PHE:CE2	1:A:61:LEU:HD13	0.51	2.41	8	1
1:A:136:LEU:N	1:A:136:LEU:CD2	0.51	2.74	1	1
1:A:77:ARG:CG	1:A:77:ARG:C	0.51	2.84	3	1
1:A:44:HIS:CG	1:A:68:VAL:HG12	0.51	2.41	2	4
1:A:128:LEU:CD1	1:A:135:GLU:O	0.51	2.58	2	2
1:A:118:LEU:CD2	1:A:119:GLY:H	0.51	2.19	6	1
1:A:53:PHE:CZ	1:A:128:LEU:CD2	0.51	2.93	4	2
1:A:136:LEU:HD12	1:A:137:SER:N	0.51	2.20	5	2
1:A:122:LEU:HG	1:A:145:LEU:CD1	0.51	2.36	8	2
1:A:77:ARG:NH1	1:A:78:ARG:H	0.51	2.03	7	1
1:A:40:PHE:CE1	1:A:44:HIS:NE2	0.51	2.75	1	1
1:A:42:ARG:HB2	1:A:42:ARG:CZ	0.51	2.35	1	1
1:A:122:LEU:HG	1:A:145:LEU:CD2	0.51	2.36	9	1
1:A:113:PHE:CD1	1:A:143:LEU:HD21	0.50	2.41	6	1
1:A:44:HIS:CD2	1:A:69:ALA:O	0.50	2.64	1	1
1:A:49:LEU:HD13	1:A:53:PHE:CB	0.50	2.36	2	1
1:A:64:LEU:CD1	1:A:64:LEU:C	0.50	2.83	2	2
1:A:121:ILE:H	1:A:146:LEU:CD1	0.50	2.19	3	2
1:A:117:ASP:HB2	1:A:118:LEU:HG	0.50	1.83	4	1
1:A:118:LEU:CD1	1:A:119:GLY:H	0.50	2.19	4	1
1:A:121:ILE:O	1:A:146:LEU:C	0.50	2.54	4	1
1:A:116:TRP:CG	1:A:122:LEU:HD11	0.50	2.41	8	2
1:A:82:LYS:O	1:A:109:TYR:CE2	0.50	2.65	2	2
1:A:129:PHE:CD1	1:A:139:HIS:HB2	0.50	2.40	1	7
1:A:77:ARG:HB2	1:A:85:PHE:O	0.50	2.05	2	2
1:A:49:LEU:HD11	1:A:128:LEU:CD2	0.50	2.36	7	1
1:A:49:LEU:HD13	1:A:53:PHE:HB2	0.50	1.83	2	1
1:A:121:ILE:O	1:A:146:LEU:HD12	0.50	2.06	3	2
1:A:79:ILE:CG2	1:A:84:SER:HA	0.50	2.37	7	1
1:A:121:ILE:O	1:A:146:LEU:CD1	0.50	2.59	3	2
1:A:74:MET:HB3	1:A:88:LEU:HA	0.50	1.83	5	2
1:A:120:ASP:HB2	1:A:148:LYS:HA	0.50	1.84	5	1
1:A:122:LEU:HG	1:A:145:LEU:HD11	0.50	1.82	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:GLN:HB2	1:A:94:ARG:CB	0.50	2.36	1	1
1:A:89:GLN:CD	1:A:93:GLY:O	0.50	2.55	4	2
1:A:76:THR:HG22	1:A:87:THR:CB	0.50	2.37	5	1
1:A:123:GLY:N	1:A:144:ARG:HA	0.50	2.22	7	1
1:A:146:LEU:HD23	1:A:147:THR:N	0.50	2.22	9	1
1:A:74:MET:CG	1:A:75:MET:H	0.49	2.17	8	2
1:A:129:PHE:CE1	1:A:139:HIS:HB2	0.49	2.42	6	2
1:A:61:LEU:O	1:A:64:LEU:HG	0.49	2.07	6	1
1:A:60:GLU:C	1:A:62:GLU:N	0.49	2.69	2	8
1:A:116:TRP:CE2	1:A:145:LEU:HD21	0.49	2.42	3	1
1:A:121:ILE:CG2	1:A:122:LEU:N	0.49	2.75	3	2
1:A:62:GLU:HA	1:A:65:ASN:HB3	0.49	1.83	1	2
1:A:112:GLN:O	1:A:116:TRP:CE2	0.49	2.65	2	4
1:A:44:HIS:CG	1:A:69:ALA:HB3	0.49	2.38	3	1
1:A:77:ARG:HA	1:A:77:ARG:HE	0.49	1.67	3	1
1:A:77:ARG:N	1:A:87:THR:H	0.49	2.05	5	1
1:A:109:TYR:CE1	1:A:110:ASN:CG	0.49	2.90	6	2
1:A:122:LEU:HA	1:A:145:LEU:CB	0.49	2.37	2	1
1:A:42:ARG:CB	1:A:71:ALA:HB3	0.49	2.38	3	1
1:A:50:HIS:N	1:A:50:HIS:CD2	0.49	2.80	3	1
1:A:70:VAL:O	1:A:144:ARG:CD	0.49	2.61	7	1
1:A:146:LEU:CD2	1:A:147:THR:N	0.49	2.74	9	1
1:A:122:LEU:N	1:A:122:LEU:HD12	0.49	2.23	7	3
1:A:116:TRP:CD2	1:A:116:TRP:N	0.49	2.68	8	2
1:A:78:ARG:HA	1:A:84:SER:HB3	0.49	1.83	5	1
1:A:44:HIS:CB	1:A:69:ALA:H	0.49	2.20	8	1
1:A:116:TRP:NE1	1:A:145:LEU:HD13	0.49	2.23	9	1
1:A:70:VAL:CA	1:A:124:ALA:H	0.49	1.97	1	1
1:A:89:GLN:HB2	1:A:94:ARG:CA	0.49	2.37	1	1
1:A:77:ARG:HB3	1:A:85:PHE:O	0.49	2.07	6	1
1:A:128:LEU:C	1:A:128:LEU:CD2	0.49	2.86	8	1
1:A:74:MET:SD	1:A:75:MET:HG2	0.49	2.48	1	1
1:A:76:THR:CG2	1:A:87:THR:HB	0.49	2.38	5	1
1:A:97:LEU:HD23	1:A:97:LEU:N	0.49	2.23	6	4
1:A:53:PHE:CE1	1:A:128:LEU:CD1	0.49	2.95	6	1
1:A:118:LEU:C	1:A:120:ASP:N	0.49	2.67	8	1
1:A:44:HIS:CD2	1:A:69:ALA:H	0.49	2.26	4	2
1:A:71:ALA:HA	1:A:122:LEU:O	0.49	2.08	6	3
1:A:73:ARG:CG	1:A:74:MET:N	0.49	2.75	6	1
1:A:86:VAL:HB	1:A:99:VAL:CG2	0.49	2.37	6	1
1:A:50:HIS:CD2	1:A:50:HIS:N	0.48	2.81	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:GLN:HG3	1:A:93:GLY:H	0.48	1.68	4	1
1:A:129:PHE:CD1	1:A:129:PHE:C	0.48	2.90	6	3
1:A:120:ASP:CB	1:A:147:THR:O	0.48	2.60	5	1
1:A:53:PHE:CZ	1:A:61:LEU:CD1	0.48	2.92	6	1
1:A:53:PHE:CE1	1:A:61:LEU:CD2	0.48	2.95	6	1
1:A:62:GLU:O	1:A:63:ALA:C	0.48	2.56	6	1
1:A:43:ASP:N	1:A:69:ALA:O	0.48	2.46	7	1
1:A:121:ILE:O	1:A:146:LEU:CA	0.48	2.61	7	1
1:A:121:ILE:O	1:A:146:LEU:CB	0.48	2.60	7	1
1:A:99:VAL:CG1	1:A:109:TYR:CD2	0.48	2.96	9	6
1:A:53:PHE:CD1	1:A:128:LEU:CD2	0.48	2.96	5	2
1:A:118:LEU:C	1:A:118:LEU:HD12	0.48	2.33	1	1
1:A:120:ASP:HB2	1:A:147:THR:HA	0.48	1.84	1	1
1:A:86:VAL:CG1	1:A:87:THR:N	0.48	2.76	8	2
1:A:77:ARG:HA	1:A:77:ARG:NE	0.48	2.23	3	1
1:A:40:PHE:HA	1:A:44:HIS:CE1	0.48	2.42	6	1
1:A:73:ARG:HA	1:A:88:LEU:HD23	0.48	1.85	6	1
1:A:122:LEU:CD1	1:A:145:LEU:CD1	0.48	2.91	1	1
1:A:69:ALA:HB1	1:A:70:VAL:HG13	0.48	1.84	6	1
1:A:40:PHE:CE1	1:A:125:LYS:HB2	0.48	2.44	3	1
1:A:117:ASP:HB2	1:A:118:LEU:HD22	0.48	1.85	6	1
1:A:68:VAL:O	1:A:125:LYS:HB2	0.48	2.09	7	1
1:A:107:GLY:O	1:A:108:VAL:C	0.48	2.56	1	1
1:A:50:HIS:CD2	1:A:50:HIS:H	0.48	2.27	3	1
1:A:125:LYS:CD	1:A:125:LYS:C	0.48	2.86	3	1
1:A:146:LEU:CD2	1:A:146:LEU:H	0.48	2.22	6	1
1:A:44:HIS:ND1	1:A:68:VAL:CA	0.48	2.77	7	1
1:A:46:SER:O	1:A:48:GLN:N	0.48	2.47	8	1
1:A:146:LEU:CD1	1:A:147:THR:O	0.48	2.61	3	1
1:A:53:PHE:CD1	1:A:61:LEU:CD2	0.48	2.96	6	1
1:A:122:LEU:HB3	1:A:145:LEU:HD12	0.48	1.86	4	1
1:A:120:ASP:N	1:A:147:THR:CA	0.48	2.76	5	1
1:A:122:LEU:CA	1:A:146:LEU:HD21	0.48	2.39	5	1
1:A:112:GLN:O	1:A:115:LYS:N	0.48	2.46	6	5
1:A:125:LYS:HG2	1:A:126:GLY:N	0.48	2.24	3	3
1:A:116:TRP:CE3	1:A:116:TRP:HA	0.48	2.43	4	2
1:A:74:MET:SD	1:A:87:THR:O	0.48	2.72	5	1
1:A:89:GLN:CB	1:A:94:ARG:HG3	0.47	2.39	2	1
1:A:77:ARG:O	1:A:86:VAL:CG2	0.47	2.62	5	1
1:A:119:GLY:C	1:A:149:ALA:HB3	0.47	2.34	6	1
1:A:40:PHE:CE2	1:A:44:HIS:HE1	0.47	2.27	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:97:LEU:HB2	1:A:140:CYS:SG	0.47	2.49	7	1
1:A:75:MET:SD	1:A:89:GLN:NE2	0.47	2.86	9	1
1:A:40:PHE:CG	1:A:44:HIS:CE1	0.47	3.02	1	1
1:A:140:CYS:SG	1:A:143:LEU:HD11	0.47	2.49	3	1
1:A:116:TRP:CD1	1:A:145:LEU:HB3	0.47	2.42	5	1
1:A:82:LYS:C	1:A:109:TYR:CZ	0.47	2.93	2	1
1:A:98:TYR:CD1	1:A:100:ALA:HB2	0.47	2.44	4	2
1:A:112:GLN:CG	1:A:145:LEU:HD11	0.47	2.39	2	1
1:A:146:LEU:HD22	1:A:146:LEU:O	0.47	2.10	2	1
1:A:77:ARG:CB	1:A:86:VAL:CA	0.47	2.86	5	1
1:A:40:PHE:CZ	1:A:68:VAL:HG12	0.47	2.44	6	1
1:A:89:GLN:NE2	1:A:93:GLY:O	0.47	2.48	1	2
1:A:128:LEU:CD1	1:A:135:GLU:C	0.47	2.88	1	1
1:A:121:ILE:O	1:A:146:LEU:CD2	0.47	2.63	6	2
1:A:53:PHE:O	1:A:54:ASP:C	0.47	2.58	7	3
1:A:46:SER:HA	1:A:49:LEU:HD23	0.47	1.86	3	1
1:A:53:PHE:HE2	1:A:128:LEU:CD2	0.47	2.23	8	2
1:A:53:PHE:CE1	1:A:128:LEU:HD23	0.47	2.44	4	2
1:A:143:LEU:HD12	1:A:143:LEU:N	0.47	2.24	8	2
1:A:146:LEU:CD1	1:A:146:LEU:N	0.47	2.77	3	1
1:A:136:LEU:C	1:A:136:LEU:HD13	0.46	2.35	6	2
1:A:77:ARG:NH1	1:A:78:ARG:CG	0.46	2.78	7	1
1:A:123:GLY:O	1:A:124:ALA:HB2	0.46	2.10	7	1
1:A:140:CYS:SG	1:A:143:LEU:CD2	0.46	3.02	9	1
1:A:108:VAL:HA	1:A:112:GLN:HG2	0.46	1.86	1	1
1:A:75:MET:O	1:A:76:THR:O	0.46	2.33	2	1
1:A:77:ARG:CB	1:A:85:PHE:O	0.46	2.64	6	2
1:A:44:HIS:CD2	1:A:69:ALA:N	0.46	2.84	4	1
1:A:40:PHE:CE2	1:A:68:VAL:HG11	0.46	2.44	6	1
1:A:112:GLN:HG3	1:A:116:TRP:HZ2	0.46	1.71	1	1
1:A:61:LEU:O	1:A:64:LEU:HD12	0.46	2.11	4	1
1:A:42:ARG:CB	1:A:71:ALA:H	0.46	2.23	6	1
1:A:116:TRP:CE2	1:A:145:LEU:CB	0.46	2.99	9	1
1:A:53:PHE:CZ	1:A:128:LEU:CG	0.46	2.99	4	1
1:A:122:LEU:HB3	1:A:144:ARG:HB3	0.46	1.86	7	1
1:A:98:TYR:O	1:A:140:CYS:N	0.46	2.48	6	2
1:A:137:SER:OG	1:A:138:ILE:N	0.46	2.48	3	3
1:A:49:LEU:C	1:A:51:ALA:N	0.46	2.67	8	3
1:A:77:ARG:HB2	1:A:85:PHE:C	0.46	2.36	2	1
1:A:40:PHE:CZ	1:A:68:VAL:CG1	0.46	2.99	6	1
1:A:121:ILE:CA	1:A:146:LEU:HD11	0.46	2.41	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:116:TRP:CE2	1:A:145:LEU:HB3	0.46	2.46	5	1
1:A:53:PHE:CE1	1:A:128:LEU:CG	0.46	2.99	6	1
1:A:67:GLU:HB3	1:A:126:GLY:C	0.46	2.36	7	1
1:A:90:ASP:O	1:A:91:VAL:C	0.45	2.59	2	3
1:A:77:ARG:NH1	1:A:78:ARG:CB	0.45	2.79	7	1
1:A:74:MET:SD	1:A:88:LEU:N	0.45	2.90	2	1
1:A:44:HIS:CB	1:A:68:VAL:HG12	0.45	2.35	3	1
1:A:119:GLY:C	1:A:147:THR:HA	0.45	2.36	5	1
1:A:120:ASP:CB	1:A:147:THR:C	0.45	2.89	5	1
1:A:129:PHE:C	1:A:135:GLU:O	0.45	2.59	8	1
1:A:41:ARG:C	1:A:70:VAL:CB	0.45	2.90	1	1
1:A:112:GLN:O	1:A:113:PHE:C	0.45	2.59	5	2
1:A:77:ARG:N	1:A:86:VAL:HA	0.45	2.27	2	2
1:A:42:ARG:HA	1:A:69:ALA:O	0.45	2.11	6	1
1:A:112:GLN:HG2	1:A:145:LEU:HD11	0.45	1.88	7	1
1:A:138:ILE:CG2	1:A:139:HIS:N	0.45	2.77	7	1
1:A:46:SER:O	1:A:47:ASP:C	0.45	2.58	1	1
1:A:118:LEU:HD22	1:A:118:LEU:H	0.45	1.72	3	2
1:A:46:SER:HB3	1:A:49:LEU:HD12	0.45	1.89	5	1
1:A:44:HIS:HB2	1:A:69:ALA:CA	0.45	2.36	6	1
1:A:67:GLU:HA	1:A:126:GLY:O	0.45	2.11	7	1
1:A:73:ARG:HG3	1:A:116:TRP:O	0.45	2.11	7	1
1:A:121:ILE:H	1:A:146:LEU:HG	0.45	1.71	8	1
1:A:104:LEU:C	1:A:106:GLU:H	0.45	2.20	9	1
1:A:53:PHE:CD1	1:A:61:LEU:HD13	0.45	2.44	2	1
1:A:44:HIS:CG	1:A:68:VAL:HA	0.45	2.47	7	1
1:A:122:LEU:HD23	1:A:144:ARG:NE	0.45	2.26	7	1
1:A:42:ARG:CD	1:A:71:ALA:HB2	0.45	2.42	8	1
1:A:122:LEU:HD12	1:A:124:ALA:HB2	0.45	1.88	3	1
1:A:40:PHE:CE2	1:A:125:LYS:HB2	0.45	2.46	5	2
1:A:71:ALA:C	1:A:122:LEU:CD2	0.45	2.90	5	1
1:A:90:ASP:O	1:A:92:GLY:N	0.45	2.50	1	1
1:A:57:GLU:O	1:A:60:GLU:HB2	0.45	2.11	2	1
1:A:86:VAL:HG11	1:A:113:PHE:CD2	0.45	2.47	4	1
1:A:67:GLU:HB3	1:A:127:LYS:HA	0.45	1.87	6	1
1:A:121:ILE:CB	1:A:146:LEU:HD11	0.45	2.42	6	1
1:A:129:PHE:C	1:A:136:LEU:H	0.45	2.20	6	1
1:A:73:ARG:HH12	1:A:75:MET:HE3	0.45	1.72	7	1
1:A:86:VAL:HG12	1:A:97:LEU:HG	0.45	1.89	9	1
1:A:72:GLY:O	1:A:73:ARG:HB3	0.45	2.11	6	1
1:A:84:SER:OG	1:A:99:VAL:HB	0.45	2.11	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:PHE:C	1:A:86:VAL:HG23	0.44	2.36	2	1
1:A:121:ILE:O	1:A:146:LEU:CG	0.44	2.60	3	2
1:A:89:GLN:HG2	1:A:94:ARG:HA	0.44	1.88	4	1
1:A:44:HIS:N	1:A:68:VAL:HG12	0.44	2.27	7	1
1:A:61:LEU:HA	1:A:64:LEU:HD21	0.44	1.89	7	1
1:A:101:ARG:C	1:A:105:PRO:O	0.44	2.60	8	1
1:A:43:ASP:O	1:A:44:HIS:C	0.44	2.60	7	2
1:A:122:LEU:HD22	1:A:145:LEU:CD1	0.44	2.41	4	1
1:A:74:MET:HB3	1:A:87:THR:O	0.44	2.13	6	1
1:A:111:GLU:C	1:A:114:LYS:H	0.44	2.21	8	2
1:A:89:GLN:HG2	1:A:94:ARG:HG2	0.44	1.88	4	1
1:A:52:GLU:O	1:A:54:ASP:N	0.44	2.50	6	1
1:A:85:PHE:CE1	1:A:98:TYR:CD2	0.44	3.04	6	1
1:A:120:ASP:HB2	1:A:148:LYS:O	0.44	2.13	6	1
1:A:142:GLU:CD	1:A:142:GLU:C	0.44	2.85	1	1
1:A:148:LYS:CG	1:A:149:ALA:N	0.44	2.79	1	2
1:A:56:LYS:NZ	1:A:60:GLU:HB3	0.44	2.27	3	1
1:A:111:GLU:O	1:A:112:GLN:C	0.44	2.60	3	3
1:A:122:LEU:N	1:A:122:LEU:HD23	0.44	2.27	4	2
1:A:70:VAL:HG11	1:A:97:LEU:HD22	0.44	1.90	4	1
1:A:126:GLY:HA2	1:A:140:CYS:HA	0.44	1.88	6	1
1:A:66:ILE:HG12	1:A:68:VAL:HG12	0.44	1.89	1	1
1:A:40:PHE:CD2	1:A:44:HIS:NE2	0.44	2.86	3	2
1:A:120:ASP:HA	1:A:148:LYS:C	0.44	2.37	6	1
1:A:146:LEU:H	1:A:146:LEU:HD22	0.44	1.73	9	1
1:A:70:VAL:HG23	1:A:144:ARG:NH1	0.44	2.27	7	1
1:A:79:ILE:CG2	1:A:110:ASN:ND2	0.44	2.81	1	1
1:A:79:ILE:CG2	1:A:83:ALA:O	0.44	2.65	5	2
1:A:77:ARG:NH2	1:A:85:PHE:HB2	0.44	2.28	7	1
1:A:84:SER:C	1:A:85:PHE:CG	0.44	2.95	7	1
1:A:121:ILE:C	1:A:146:LEU:HB3	0.44	2.38	7	1
1:A:49:LEU:CB	1:A:50:HIS:CD2	0.43	3.01	2	2
1:A:122:LEU:HD13	1:A:145:LEU:CD1	0.43	2.38	4	1
1:A:49:LEU:CD1	1:A:66:ILE:HG21	0.43	2.43	6	1
1:A:146:LEU:HB3	1:A:147:THR:O	0.43	2.13	8	1
1:A:41:ARG:NE	1:A:41:ARG:HA	0.43	2.27	9	1
1:A:41:ARG:O	1:A:70:VAL:CB	0.43	2.66	1	1
1:A:120:ASP:CG	1:A:146:LEU:CD1	0.43	2.92	3	1
1:A:66:ILE:HG23	1:A:128:LEU:HD23	0.43	1.89	6	1
1:A:83:ALA:HA	1:A:99:VAL:O	0.43	2.13	6	1
1:A:98:TYR:N	1:A:138:ILE:O	0.43	2.51	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:77:ARG:CZ	1:A:79:ILE:H	0.43	2.26	7	1
1:A:120:ASP:HB3	1:A:146:LEU:HD22	0.43	1.90	7	1
1:A:46:SER:CB	1:A:49:LEU:HD21	0.43	2.43	1	1
1:A:49:LEU:CG	1:A:50:HIS:N	0.43	2.81	1	1
1:A:70:VAL:HG12	1:A:71:ALA:H	0.43	1.62	1	1
1:A:118:LEU:N	1:A:118:LEU:HD13	0.43	2.27	2	3
1:A:118:LEU:N	1:A:118:LEU:HD22	0.43	2.28	2	1
1:A:75:MET:SD	1:A:75:MET:O	0.43	2.76	5	1
1:A:118:LEU:HD22	1:A:118:LEU:N	0.43	2.27	5	1
1:A:121:ILE:HG22	1:A:146:LEU:HD13	0.43	1.90	6	1
1:A:65:ASN:O	1:A:65:ASN:CG	0.43	2.61	7	1
1:A:79:ILE:O	1:A:84:SER:HB2	0.43	2.13	7	1
1:A:83:ALA:HB2	1:A:101:ARG:HG3	0.43	1.89	8	1
1:A:50:HIS:C	1:A:52:GLU:N	0.43	2.73	9	1
1:A:122:LEU:CG	1:A:145:LEU:CB	0.43	2.97	2	1
1:A:61:LEU:HD13	1:A:61:LEU:HA	0.43	1.60	5	2
1:A:121:ILE:H	1:A:146:LEU:CG	0.43	2.26	6	2
1:A:122:LEU:CB	1:A:145:LEU:CD1	0.43	2.95	4	1
1:A:42:ARG:O	1:A:42:ARG:HD3	0.43	2.14	6	1
1:A:42:ARG:CZ	1:A:42:ARG:CB	0.43	2.96	1	1
1:A:49:LEU:C	1:A:52:GLU:H	0.43	2.22	1	1
1:A:44:HIS:HD2	1:A:70:VAL:CG2	0.43	2.26	1	1
1:A:84:SER:C	1:A:85:PHE:CD1	0.43	2.97	1	1
1:A:112:GLN:HG3	1:A:116:TRP:CZ2	0.43	2.48	1	1
1:A:44:HIS:HD2	1:A:69:ALA:CB	0.43	2.17	3	2
1:A:83:ALA:CA	1:A:109:TYR:CE2	0.43	3.01	3	1
1:A:52:GLU:C	1:A:54:ASP:N	0.43	2.76	5	2
1:A:121:ILE:HB	1:A:146:LEU:HD11	0.43	1.91	6	1
1:A:74:MET:CB	1:A:88:LEU:HD23	0.43	2.44	7	1
1:A:77:ARG:HH11	1:A:78:ARG:N	0.43	2.08	7	1
1:A:74:MET:HG3	1:A:88:LEU:HA	0.43	1.91	4	2
1:A:101:ARG:HB2	1:A:105:PRO:CB	0.43	2.44	6	1
1:A:100:ALA:O	1:A:109:TYR:CE2	0.43	2.72	8	1
1:A:62:GLU:C	1:A:64:LEU:N	0.43	2.73	6	2
1:A:108:VAL:HA	1:A:112:GLN:CB	0.43	2.44	1	1
1:A:120:ASP:HA	1:A:148:LYS:H	0.43	1.72	1	1
1:A:77:ARG:HG2	1:A:85:PHE:O	0.43	2.14	3	1
1:A:122:LEU:HA	1:A:145:LEU:HD13	0.43	1.91	6	1
1:A:111:GLU:O	1:A:114:LYS:HB3	0.43	2.14	9	1
1:A:42:ARG:HA	1:A:70:VAL:HA	0.42	1.91	6	1
1:A:40:PHE:HA	1:A:44:HIS:CD2	0.42	2.49	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:142:GLU:C	1:A:143:LEU:HD12	0.42	2.39	8	1
1:A:77:ARG:CA	1:A:77:ARG:CD	0.42	2.97	3	1
1:A:49:LEU:HD21	1:A:53:PHE:CD1	0.42	2.49	4	1
1:A:122:LEU:HA	1:A:146:LEU:HD21	0.42	1.90	5	1
1:A:53:PHE:CE1	1:A:128:LEU:HG	0.42	2.48	6	1
1:A:74:MET:SD	1:A:94:ARG:HD3	0.42	2.54	1	1
1:A:128:LEU:HA	1:A:137:SER:O	0.42	2.14	3	1
1:A:49:LEU:CD2	1:A:53:PHE:HB2	0.42	2.44	4	1
1:A:49:LEU:C	1:A:49:LEU:CD2	0.42	2.92	6	1
1:A:118:LEU:H	1:A:118:LEU:HD13	0.42	1.73	6	1
1:A:41:ARG:O	1:A:69:ALA:CB	0.42	2.68	9	1
1:A:86:VAL:HG21	1:A:99:VAL:HG21	0.42	1.92	2	1
1:A:112:GLN:O	1:A:115:LYS:CB	0.42	2.68	6	2
1:A:89:GLN:HE21	1:A:94:ARG:HA	0.42	1.73	4	1
1:A:43:ASP:O	1:A:45:THR:HG23	0.42	2.13	6	1
1:A:103:ASP:C	1:A:105:PRO:HD3	0.42	2.40	6	1
1:A:129:PHE:CD1	1:A:137:SER:O	0.42	2.72	6	1
1:A:69:ALA:CA	1:A:125:LYS:HB2	0.42	2.45	7	1
1:A:98:TYR:HB3	1:A:139:HIS:HA	0.42	1.91	5	3
1:A:121:ILE:HG23	1:A:122:LEU:N	0.42	2.30	1	2
1:A:116:TRP:CZ3	1:A:144:ARG:O	0.42	2.72	5	1
1:A:122:LEU:CD1	1:A:145:LEU:HD11	0.42	2.45	6	1
1:A:139:HIS:CD2	1:A:139:HIS:C	0.42	2.97	6	2
1:A:79:ILE:O	1:A:84:SER:CB	0.42	2.68	7	1
1:A:121:ILE:CA	1:A:146:LEU:CD1	0.42	2.97	6	1
1:A:82:LYS:N	1:A:82:LYS:HD2	0.42	2.29	7	1
1:A:100:ALA:HB2	1:A:139:HIS:NE2	0.42	2.30	9	1
1:A:129:PHE:O	1:A:135:GLU:O	0.42	2.38	1	1
1:A:72:GLY:O	1:A:122:LEU:HD23	0.42	2.14	3	1
1:A:53:PHE:CG	1:A:128:LEU:HD11	0.42	2.49	6	1
1:A:49:LEU:HA	1:A:49:LEU:HD22	0.42	1.70	7	1
1:A:77:ARG:NH1	1:A:78:ARG:HG2	0.42	2.30	7	1
1:A:135:GLU:HG3	1:A:136:LEU:H	0.42	1.75	8	1
1:A:50:HIS:O	1:A:51:ALA:C	0.42	2.63	9	1
1:A:70:VAL:C	1:A:124:ALA:N	0.42	2.78	1	1
1:A:74:MET:CB	1:A:88:LEU:HD13	0.42	2.45	5	1
1:A:146:LEU:O	1:A:147:THR:C	0.42	2.63	2	1
1:A:49:LEU:HD23	1:A:49:LEU:C	0.42	2.40	4	1
1:A:89:GLN:HG3	1:A:93:GLY:N	0.42	2.29	4	1
1:A:44:HIS:HB2	1:A:69:ALA:C	0.42	2.39	6	1
1:A:41:ARG:O	1:A:70:VAL:HG11	0.41	2.15	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:67:GLU:CB	1:A:126:GLY:O	0.41	2.66	6	1
1:A:52:GLU:O	1:A:55:GLY:N	0.41	2.53	5	1
1:A:71:ALA:C	1:A:122:LEU:HD21	0.41	2.41	5	1
1:A:122:LEU:CG	1:A:145:LEU:HD11	0.41	2.45	6	1
1:A:69:ALA:HA	1:A:125:LYS:CB	0.41	2.44	7	1
1:A:74:MET:N	1:A:88:LEU:HD23	0.41	2.30	7	1
1:A:122:LEU:CB	1:A:144:ARG:HB3	0.41	2.45	7	1
1:A:40:PHE:CZ	1:A:125:LYS:HG3	0.41	2.50	8	1
1:A:58:ASN:O	1:A:61:LEU:HB2	0.41	2.16	8	1
1:A:60:GLU:O	1:A:63:ALA:N	0.41	2.53	9	1
1:A:122:LEU:CA	1:A:145:LEU:HB3	0.41	2.46	2	1
1:A:77:ARG:HA	1:A:77:ARG:CD	0.41	2.45	3	1
1:A:69:ALA:O	1:A:138:ILE:CD1	0.41	2.69	5	1
1:A:86:VAL:HG22	1:A:87:THR:N	0.41	2.30	7	1
1:A:76:THR:O	1:A:76:THR:HG23	0.41	2.15	5	1
1:A:104:LEU:O	1:A:106:GLU:N	0.41	2.54	7	1
1:A:120:ASP:CA	1:A:147:THR:O	0.41	2.65	9	1
1:A:77:ARG:HB2	1:A:87:THR:N	0.41	2.31	5	1
1:A:110:ASN:C	1:A:110:ASN:OD1	0.41	2.63	5	1
1:A:112:GLN:HG2	1:A:116:TRP:HE1	0.41	1.76	5	1
1:A:72:GLY:O	1:A:73:ARG:CB	0.41	2.69	6	1
1:A:82:LYS:NZ	1:A:101:ARG:NH1	0.41	2.68	8	1
1:A:120:ASP:CG	1:A:146:LEU:HD21	0.41	2.40	8	1
1:A:94:ARG:H	1:A:94:ARG:NE	0.41	2.12	1	1
1:A:70:VAL:O	1:A:70:VAL:HG23	0.41	2.16	4	2
1:A:108:VAL:O	1:A:112:GLN:NE2	0.41	2.54	3	1
1:A:146:LEU:HD22	1:A:147:THR:N	0.41	2.25	3	1
1:A:77:ARG:O	1:A:86:VAL:HG23	0.41	2.16	5	1
1:A:88:LEU:HD22	1:A:144:ARG:NH1	0.41	2.30	7	1
1:A:97:LEU:HD13	1:A:140:CYS:SG	0.41	2.56	7	1
1:A:122:LEU:HD12	1:A:145:LEU:CD1	0.41	2.46	1	1
1:A:89:GLN:HG2	1:A:94:ARG:CB	0.41	2.46	4	1
1:A:109:TYR:CZ	1:A:110:ASN:ND2	0.41	2.88	5	1
1:A:41:ARG:O	1:A:44:HIS:CD2	0.41	2.74	6	1
1:A:74:MET:CG	1:A:75:MET:N	0.41	2.83	8	1
1:A:89:GLN:CG	1:A:94:ARG:CG	0.41	2.95	4	1
1:A:119:GLY:HA3	1:A:149:ALA:HB3	0.41	1.92	6	1
1:A:83:ALA:HB2	1:A:101:ARG:HG2	0.41	1.92	8	1
1:A:118:LEU:O	1:A:119:GLY:C	0.41	2.64	8	1
1:A:116:TRP:CZ3	1:A:145:LEU:C	0.41	2.99	9	1
1:A:99:VAL:HG12	1:A:109:TYR:HD2	0.40	1.77	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:148:LYS:HB3	1:A:148:LYS:NZ	0.40	2.31	2	1
1:A:121:ILE:N	1:A:147:THR:O	0.40	2.53	4	1
1:A:77:ARG:NH2	1:A:78:ARG:HB2	0.40	2.31	7	1
1:A:122:LEU:HG	1:A:145:LEU:HD22	0.40	1.92	2	1
1:A:42:ARG:HB2	1:A:71:ALA:CB	0.40	2.43	8	1
1:A:86:VAL:CG1	1:A:97:LEU:HG	0.40	2.47	9	1
1:A:122:LEU:HG	1:A:145:LEU:HD23	0.40	1.92	9	1
1:A:101:ARG:C	1:A:103:ASP:H	0.40	2.24	2	1
1:A:44:HIS:CE1	1:A:68:VAL:C	0.40	2.99	7	1
1:A:50:HIS:CE1	1:A:136:LEU:HD21	0.40	2.51	8	1
1:A:74:MET:HG2	1:A:88:LEU:HA	0.40	1.92	8	1
1:A:109:TYR:CE1	1:A:110:ASN:CB	0.40	3.02	8	1
1:A:113:PHE:CA	1:A:116:TRP:CD1	0.40	2.99	1	1
1:A:135:GLU:HG2	1:A:136:LEU:H	0.40	1.75	1	1
1:A:88:LEU:CD1	1:A:97:LEU:HD11	0.40	2.47	3	1
1:A:116:TRP:CE2	1:A:145:LEU:CD2	0.40	3.05	3	1
1:A:120:ASP:HB3	1:A:149:ALA:C	0.40	2.41	6	1
1:A:41:ARG:O	1:A:70:VAL:CG1	0.40	2.69	1	1
1:A:53:PHE:HE2	1:A:128:LEU:HD21	0.40	1.77	3	1
1:A:82:LYS:HD3	1:A:82:LYS:N	0.40	2.31	6	1
1:A:88:LEU:HD22	1:A:144:ARG:CZ	0.40	2.47	7	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	103/120 (86%)	69±5 (67±5%)	22±3 (22±2%)	12±3 (12±3%)	1	7
All	All	927/1080 (86%)	618 (67%)	200 (22%)	109 (12%)	1	7

All 40 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	65	ASN	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	44	HIS	8
1	A	83	ALA	6
1	A	75	MET	6
1	A	54	ASP	5
1	A	91	VAL	5
1	A	106	GLU	5
1	A	109	TYR	5
1	A	56	LYS	4
1	A	136	LEU	4
1	A	110	ASN	4
1	A	46	SER	3
1	A	108	VAL	3
1	A	148	LYS	3
1	A	53	PHE	3
1	A	69	ALA	2
1	A	121	ILE	2
1	A	78	ARG	2
1	A	82	LYS	2
1	A	147	THR	2
1	A	79	ILE	2
1	A	120	ASP	2
1	A	118	LEU	2
1	A	47	ASP	2
1	A	73	ARG	2
1	A	105	PRO	2
1	A	70	VAL	1
1	A	92	GLY	1
1	A	146	LEU	1
1	A	76	THR	1
1	A	57	GLU	1
1	A	74	MET	1
1	A	43	ASP	1
1	A	68	VAL	1
1	A	129	PHE	1
1	A	125	LYS	1
1	A	144	ARG	1
1	A	45	THR	1
1	A	101	ARG	1
1	A	81	GLY	1

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	88/99 (89%)	62±2 (70±2%)	26±2 (30±2%)	1	16
All	All	792/891 (89%)	554 (70%)	238 (30%)	1	16

All 63 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	88	LEU	9
1	A	95	ILE	9
1	A	109	TYR	9
1	A	61	LEU	8
1	A	68	VAL	8
1	A	74	MET	8
1	A	97	LEU	8
1	A	44	HIS	8
1	A	42	ARG	7
1	A	76	THR	7
1	A	128	LEU	7
1	A	136	LEU	7
1	A	125	LYS	6
1	A	49	LEU	6
1	A	64	LEU	5
1	A	121	ILE	5
1	A	146	LEU	5
1	A	147	THR	5
1	A	118	LEU	5
1	A	120	ASP	5
1	A	66	ILE	4
1	A	78	ARG	4
1	A	111	GLU	4
1	A	122	LEU	4
1	A	89	GLN	4
1	A	145	LEU	4
1	A	86	VAL	4
1	A	53	PHE	3
1	A	73	ARG	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	90	ASP	3
1	A	94	ARG	3
1	A	115	LYS	3
1	A	45	THR	3
1	A	77	ARG	3
1	A	82	LYS	3
1	A	91	VAL	3
1	A	99	VAL	3
1	A	101	ARG	3
1	A	110	ASN	3
1	A	137	SER	3
1	A	40	PHE	2
1	A	56	LYS	2
1	A	75	MET	2
1	A	148	LYS	2
1	A	98	TYR	2
1	A	116	TRP	2
1	A	48	GLN	2
1	A	57	GLU	2
1	A	138	ILE	2
1	A	96	GLN	2
1	A	41	ARG	2
1	A	52	GLU	1
1	A	79	ILE	1
1	A	112	GLN	1
1	A	143	LEU	1
1	A	135	GLU	1
1	A	46	SER	1
1	A	65	ASN	1
1	A	127	LYS	1
1	A	129	PHE	1
1	A	104	LEU	1
1	A	84	SER	1
1	A	113	PHE	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 [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