



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 8, 2026 – 12:20 PM UTC

PDB ID : 2KTY / pdb_00002kty
BMRB ID : 16715
Title : Solution Structure of human Vaccinia Related Kinase-1
Authors : Shin, J.; Yoon, H.
Deposited on : 2010-02-10

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

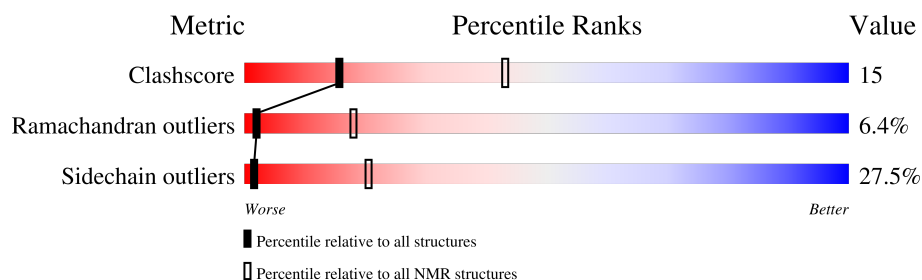
1 Overall quality at a glance

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	368	45% 38% • 12% •

2 Ensemble composition and analysis ⓘ

This entry contains 20 models. Model 4 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:25-A:56, A:66-A:335, A:339-A:345, A:350-A:356 (316)	1.45	4

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 2 clusters. No single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 5833 atoms, of which 2932 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Serine/threonine-protein kinase VRK1.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	360	Total	C	H	N	O	S	0
			5833	1848	2932	508	531	14	

There are 8 discrepancies between the modelled and reference sequences:

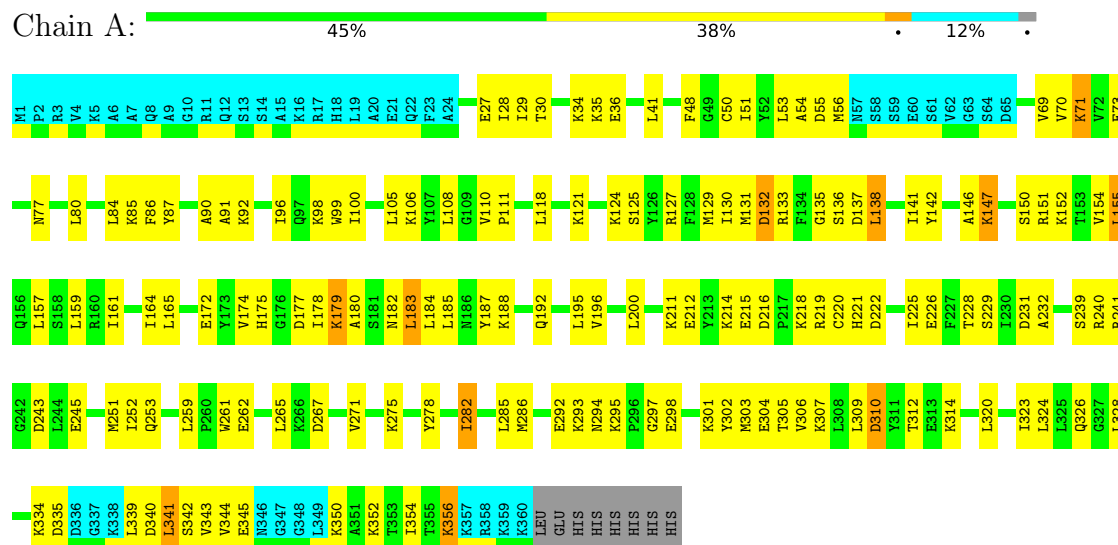
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	361	LEU	-	expression tag	UNP Q99986
A	362	GLU	-	expression tag	UNP Q99986
A	363	HIS	-	expression tag	UNP Q99986
A	364	HIS	-	expression tag	UNP Q99986
A	365	HIS	-	expression tag	UNP Q99986
A	366	HIS	-	expression tag	UNP Q99986
A	367	HIS	-	expression tag	UNP Q99986
A	368	HIS	-	expression tag	UNP Q99986

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: Serine/threonine-protein kinase VRK1

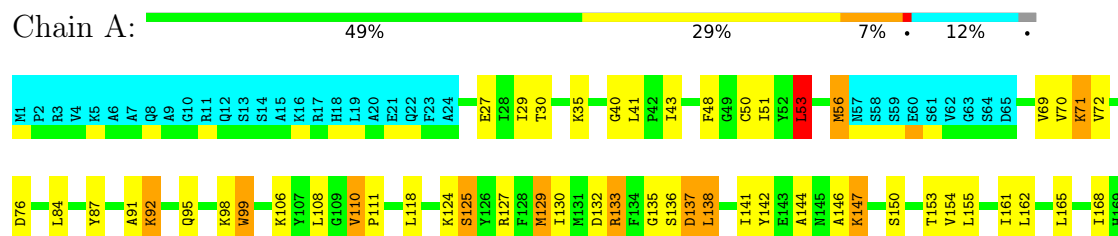


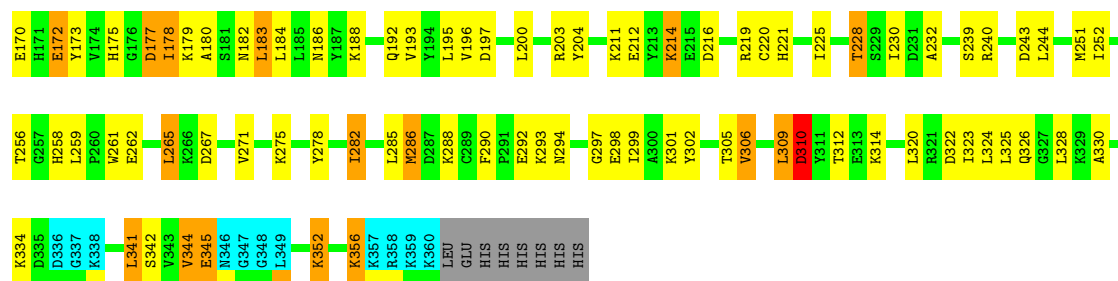
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

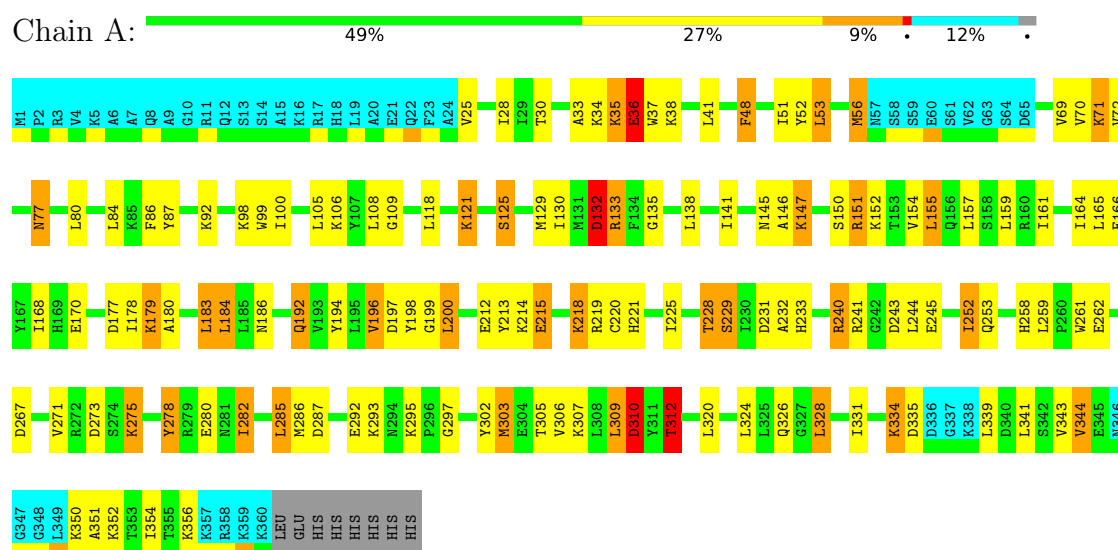
- Molecule 1: Serine/threonine-protein kinase VRK1





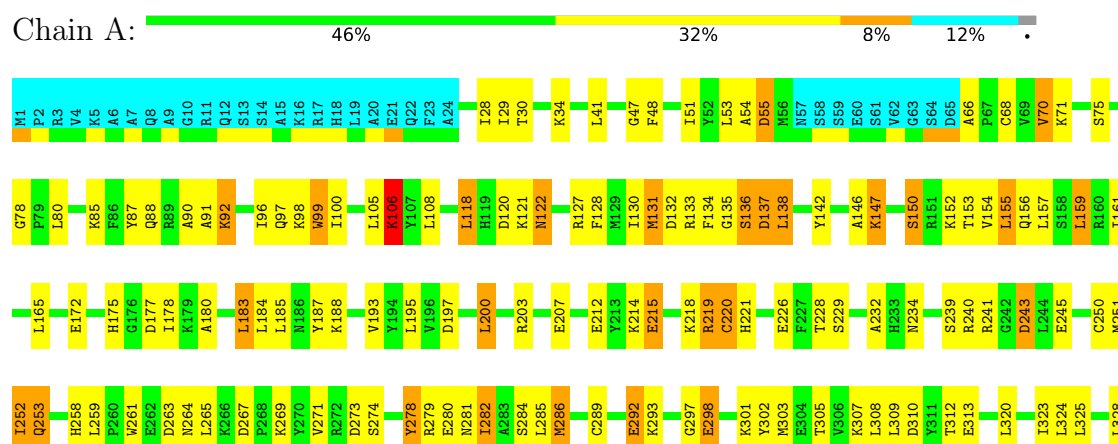
4.2.2 Score per residue for model 2

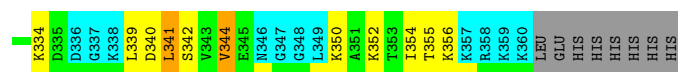
- Molecule 1: Serine/threonine-protein kinase VRK1



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Serine/threonine-protein kinase VRK1

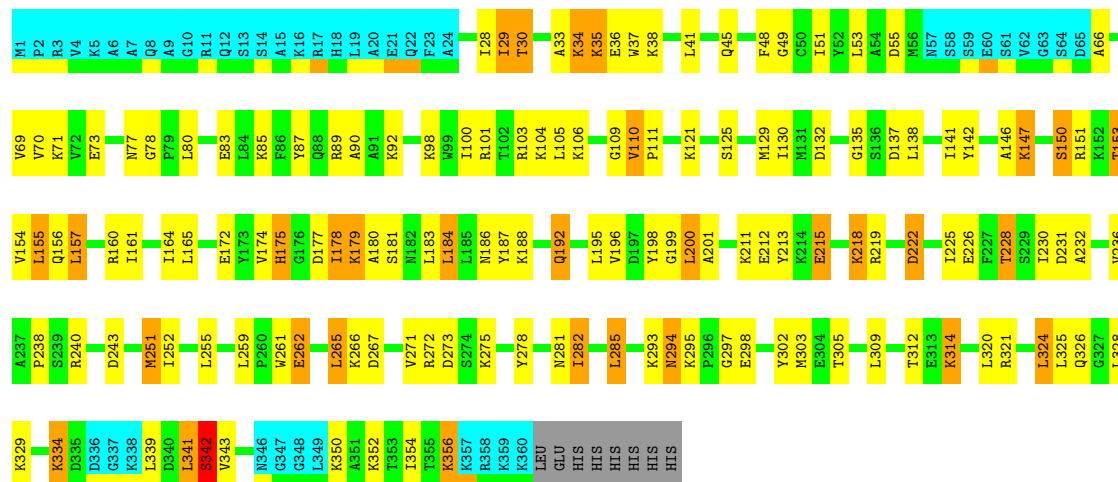




4.2.4 Score per residue for model 4 (medoid)

- Molecule 1: Serine/threonine-protein kinase VRK1

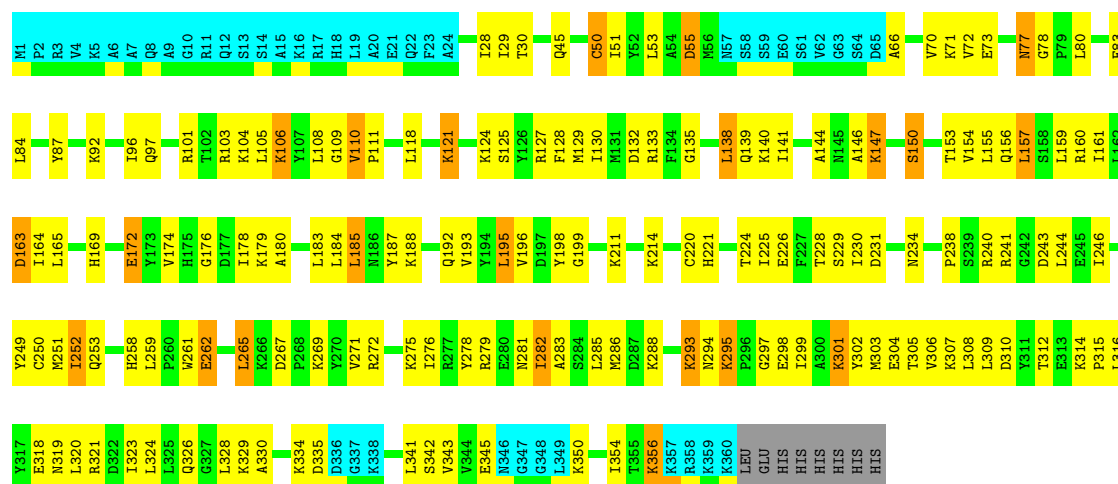
Chain A: 47% 30% 8% 12% .



4.2.5 Score per residue for model 5

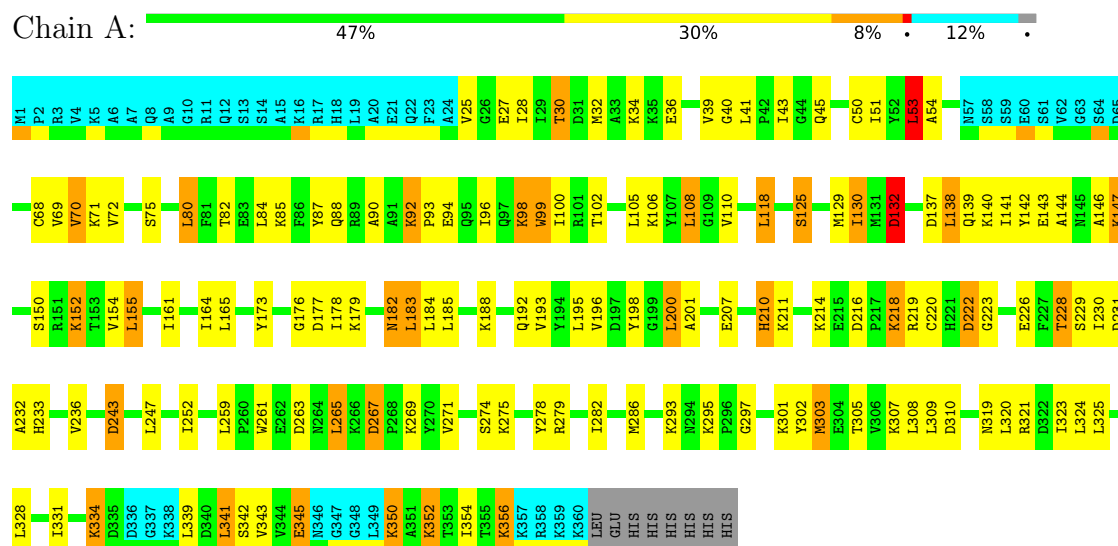
- Molecule 1: Serine/threonine-protein kinase VRK1

Chain A: 42% 38% 6% 12% .



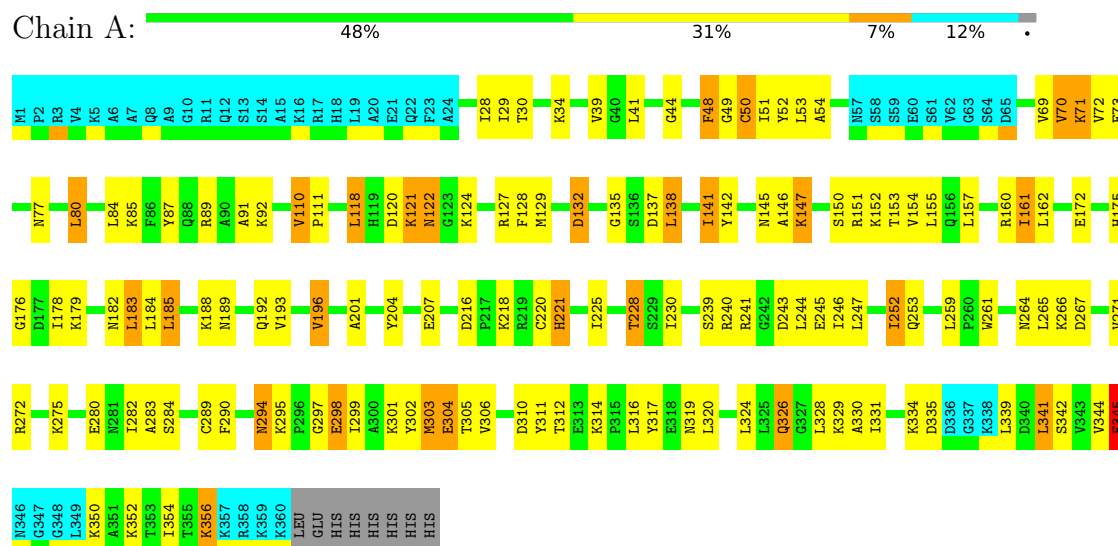
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Serine/threonine-protein kinase VRK1



4.2.7 Score per residue for model 7

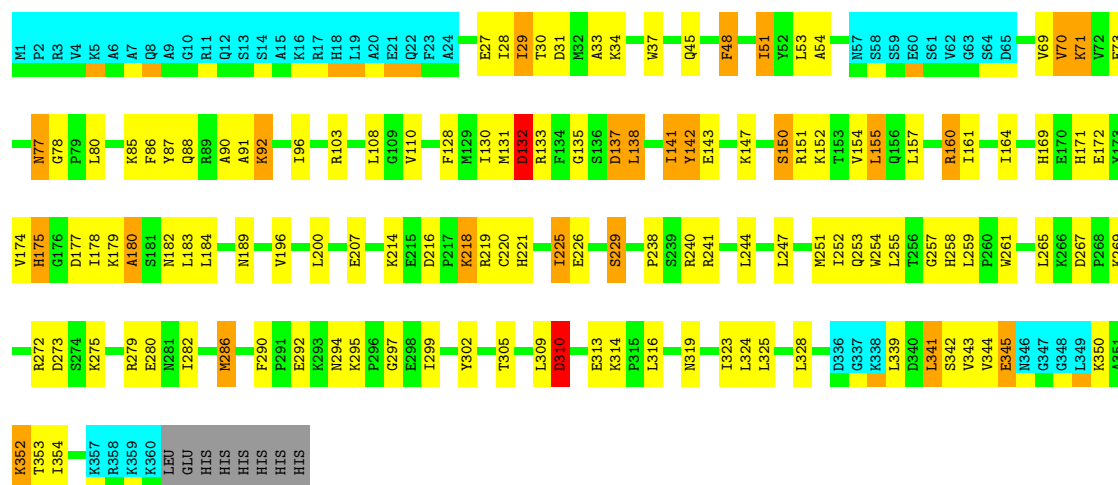
- Molecule 1: Serine/threonine-protein kinase VRK1



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Serine/threonine-protein kinase VRK1

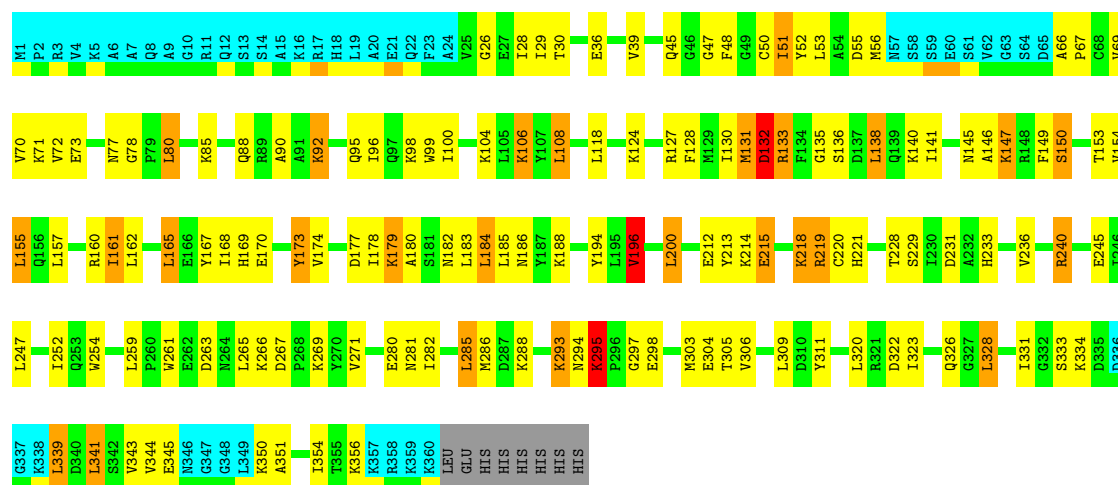




4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Serine/threonine-protein kinase VRK1

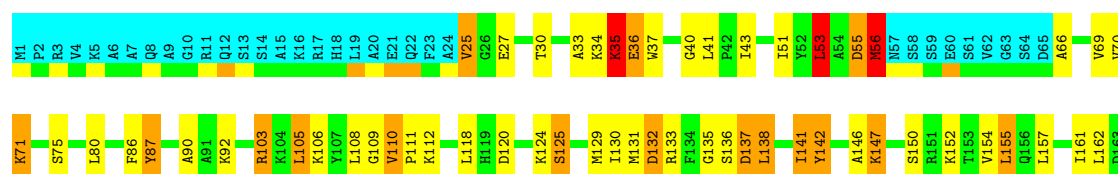
Chain A: 47% 31% 7% 12%

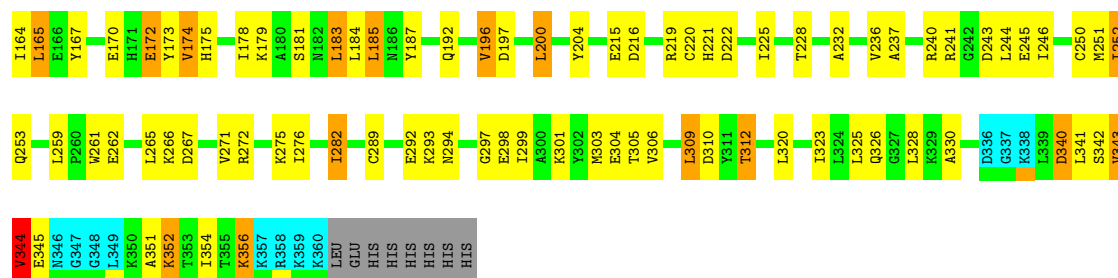


4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Serine/threonine-protein kinase VRK1

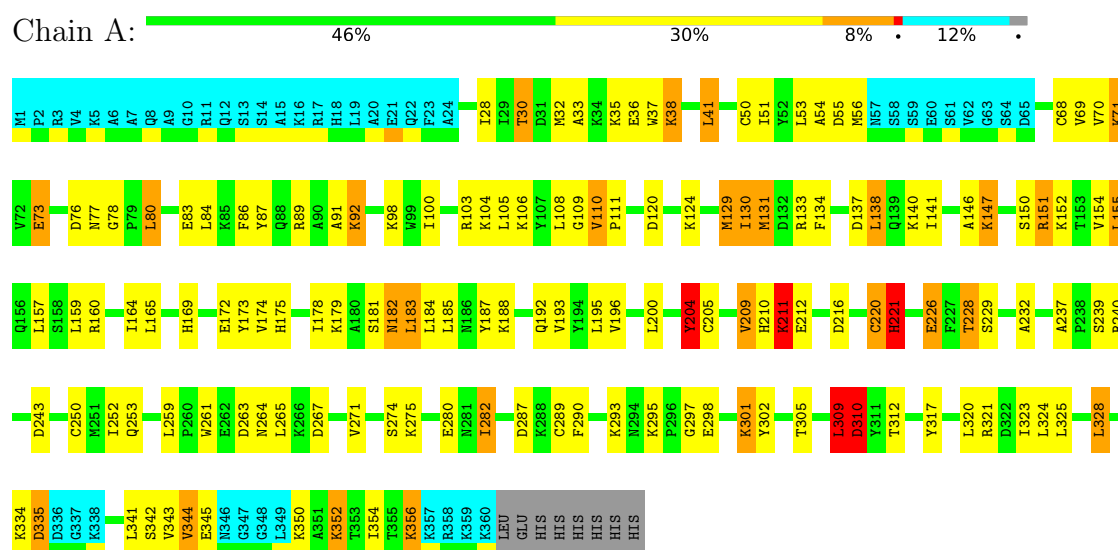
Chain A: 48% 29% 8% 12%





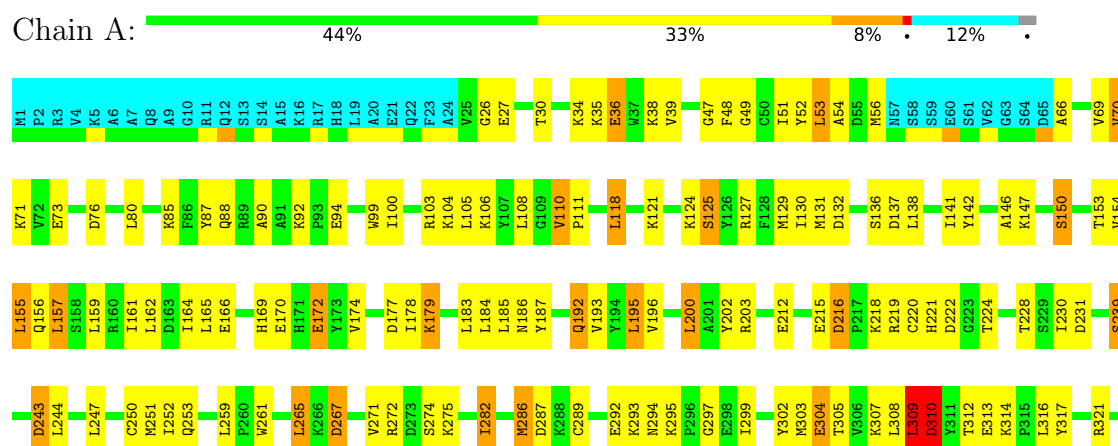
4.2.11 Score per residue for model 11

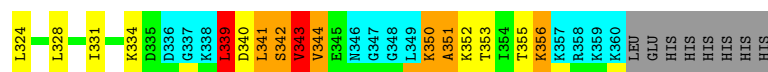
- Molecule 1: Serine/threonine-protein kinase VRK1



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Serine/threonine-protein kinase VRK1

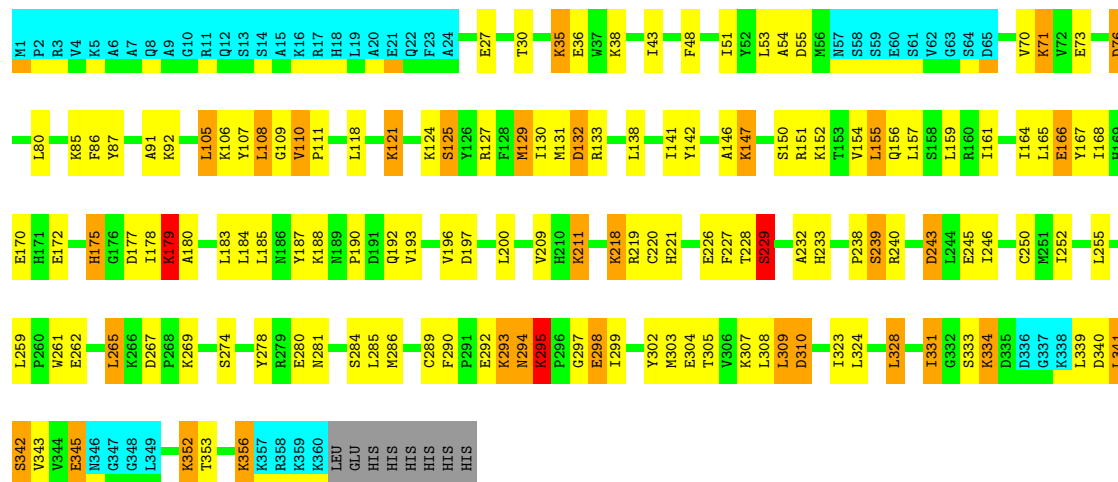




4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Serine/threonine-protein kinase VRK1

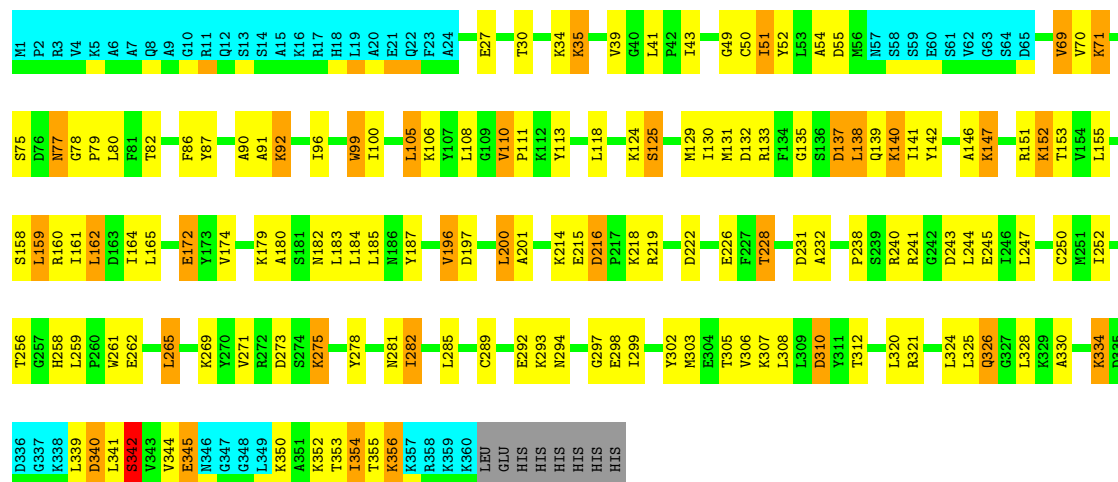
Chain A: 48% 29% 9% 12%



4.2.14 Score per residue for model 14

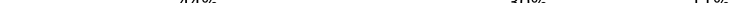
- Molecule 1: Serine/threonine-protein kinase VRK1

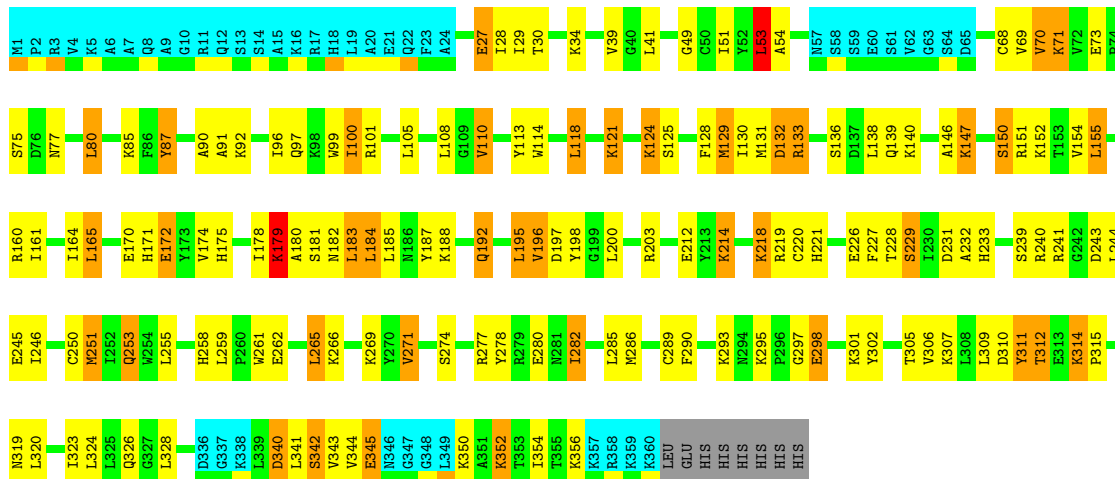
Chain A: 46% 30% 9% 12%



4.2.15 Score per residue for model 15

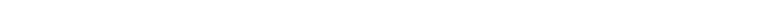
- Molecule 1: Serine/threonine-protein kinase VRK1

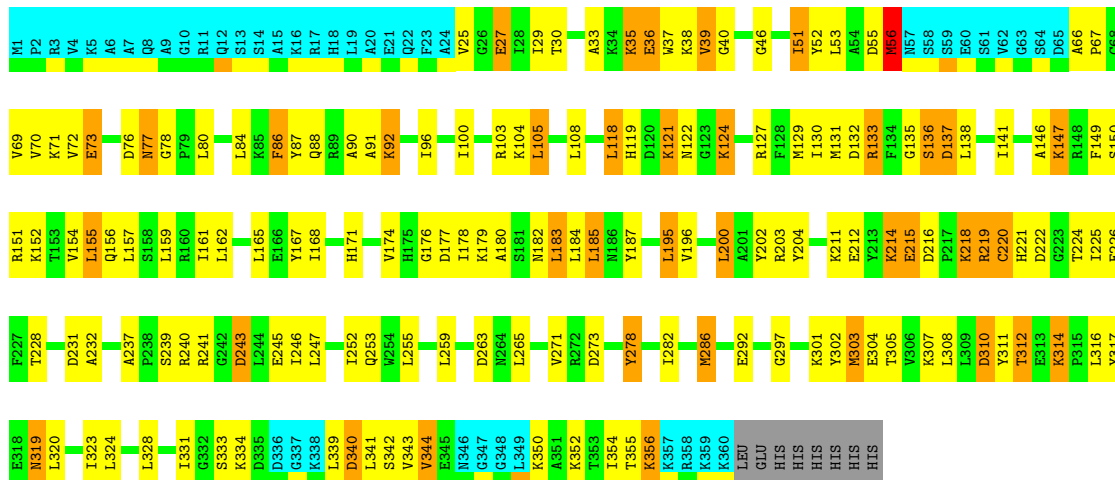
Chain A:  44% 30% 11% 12% 3%



4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Serine/threonine-protein kinase VRK1

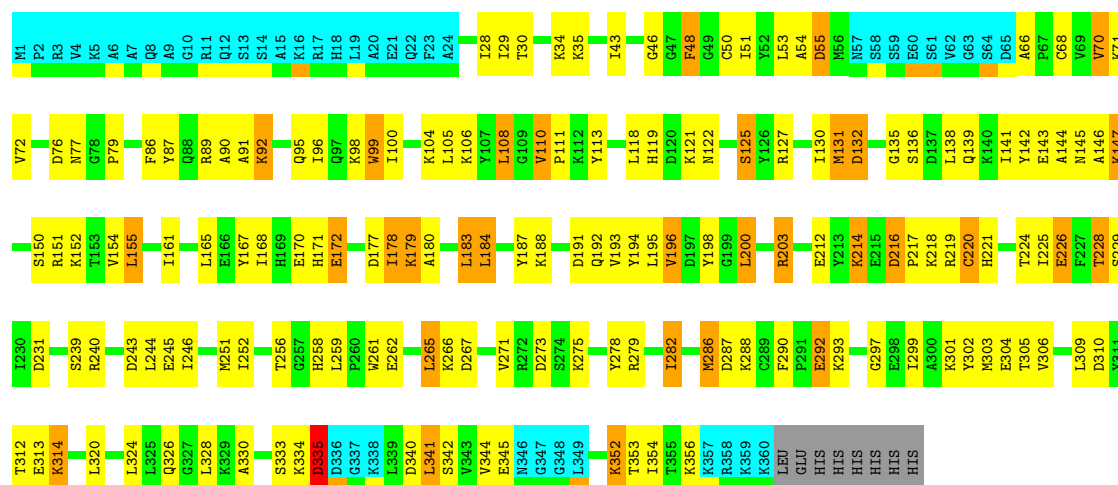
Chain A:  42% 33% 10% 12% .



4.2.17 Score per residue for model 17

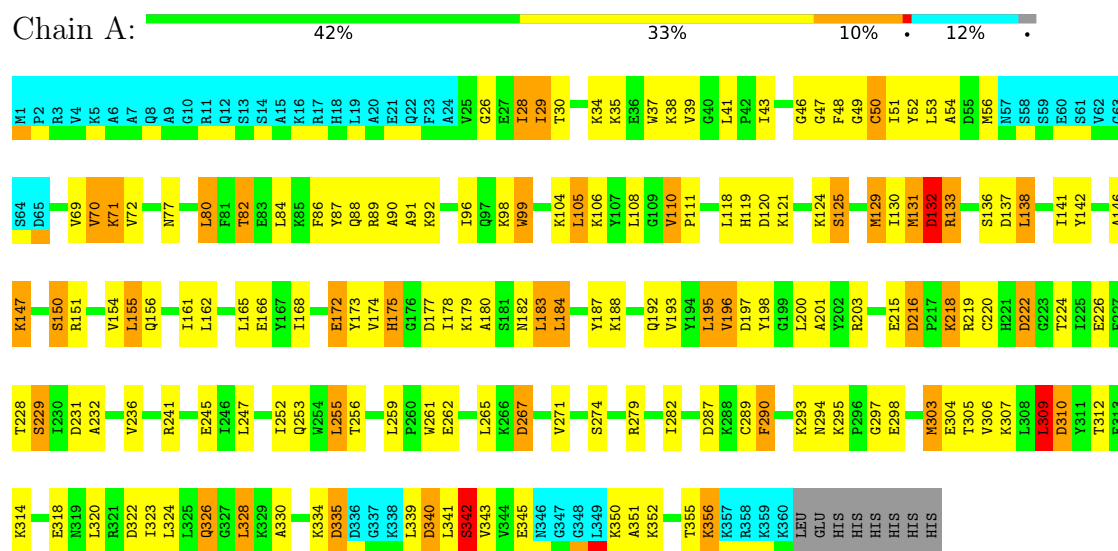
- Molecule 1: Serine/threonine-protein kinase VRK1

Chain A: 42% 35% 9% 12%



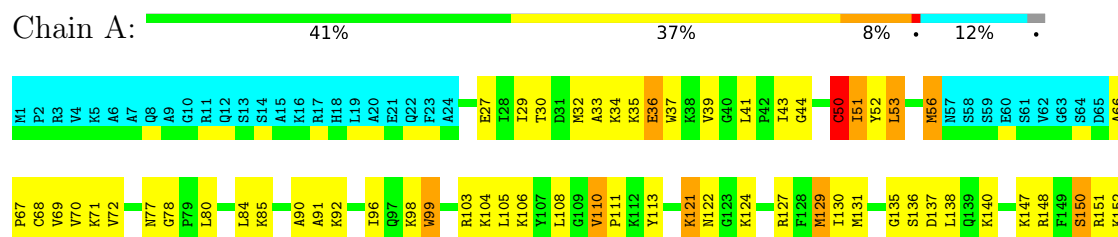
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Serine/threonine-protein kinase VRK1



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Serine/threonine-protein kinase VRK1



5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

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

Of the 200 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
CYANA	refinement	

No chemical shift data was provided.

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts [i](#)

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	2574	2599	2599	76±10
All	All	51480	51980	51980	1512

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 15.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:185:LEU:HD11	1:A:341:LEU:HD22	0.95	1.36	6	2
1:A:252:ILE:HD12	1:A:286:MET:HE3	0.91	1.41	17	1
1:A:252:ILE:HD12	1:A:286:MET:HE2	0.87	1.46	16	1
1:A:138:LEU:HD22	1:A:183:LEU:HD22	0.85	1.46	5	4
1:A:184:LEU:HD23	1:A:196:VAL:HG22	0.84	1.49	16	5
1:A:141:ILE:HD13	1:A:341:LEU:HD23	0.83	1.50	11	4
1:A:141:ILE:HG21	1:A:341:LEU:HD23	0.83	1.50	6	3
1:A:110:VAL:HG23	1:A:164:ILE:HD11	0.83	1.46	12	3
1:A:200:LEU:HD22	1:A:200:LEU:O	0.82	1.74	4	1
1:A:161:ILE:HG21	1:A:178:ILE:HD11	0.81	1.51	4	5
1:A:43:ILE:HD11	1:A:53:LEU:HD12	0.80	1.50	10	2
1:A:252:ILE:HD13	1:A:286:MET:HE3	0.78	1.52	3	1
1:A:96:ILE:HG23	1:A:108:LEU:HD12	0.78	1.54	8	3
1:A:157:LEU:HD23	1:A:193:VAL:HG11	0.77	1.55	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:118:LEU:C	1:A:118:LEU:HD22	0.77	2.05	6	3
1:A:161:ILE:HG23	1:A:195:LEU:HD11	0.76	1.57	20	2
1:A:155:LEU:HD23	1:A:328:LEU:HD13	0.75	1.58	11	2
1:A:278:TYR:CG	1:A:285:LEU:HD22	0.74	2.17	2	3
1:A:96:ILE:HG23	1:A:108:LEU:HD22	0.73	1.61	3	7
1:A:30:THR:HG23	1:A:35:LYS:HG3	0.73	1.61	13	3
1:A:141:ILE:HD11	1:A:344:VAL:HG22	0.73	1.60	12	2
1:A:225:ILE:HG21	1:A:271:VAL:HG21	0.73	1.58	17	1
1:A:141:ILE:HG21	1:A:341:LEU:HD22	0.72	1.62	2	2
1:A:251:MET:HE1	1:A:324:LEU:HD11	0.71	1.60	5	3
1:A:184:LEU:HD21	1:A:196:VAL:HG12	0.71	1.61	17	4
1:A:183:LEU:C	1:A:184:LEU:HD13	0.71	2.11	15	2
1:A:51:ILE:HD12	1:A:71:LYS:CB	0.71	2.15	18	12
1:A:138:LEU:HB3	1:A:180:ALA:HB1	0.71	1.61	15	11
1:A:138:LEU:HD22	1:A:183:LEU:HD13	0.71	1.60	14	7
1:A:184:LEU:HD23	1:A:196:VAL:HG13	0.71	1.61	19	1
1:A:225:ILE:HG23	1:A:265:LEU:HD21	0.70	1.63	10	2
1:A:141:ILE:HG23	1:A:343:VAL:HG21	0.70	1.61	2	2
1:A:184:LEU:HD21	1:A:196:VAL:CG1	0.70	2.15	15	5
1:A:184:LEU:HD21	1:A:196:VAL:HG13	0.70	1.62	15	2
1:A:99:TRP:CD1	1:A:99:TRP:C	0.69	2.70	1	9
1:A:29:ILE:HD11	1:A:37:TRP:CH2	0.69	2.22	8	1
1:A:259:LEU:HD13	1:A:261:TRP:CZ2	0.69	2.23	15	17
1:A:99:TRP:CZ3	1:A:108:LEU:HD13	0.69	2.23	2	3
1:A:200:LEU:HD12	1:A:352:LYS:HG2	0.69	1.64	10	1
1:A:224:THR:HG23	1:A:351:ALA:HB2	0.69	1.65	12	1
1:A:90:ALA:HB1	1:A:110:VAL:HG21	0.67	1.66	12	3
1:A:118:LEU:HD21	1:A:125:SER:HB3	0.67	1.67	14	4
1:A:161:ILE:HG21	1:A:178:ILE:CD1	0.67	2.20	17	4
1:A:155:LEU:HG	1:A:328:LEU:HD22	0.67	1.66	11	7
1:A:48:PHE:CE2	1:A:351:ALA:HB1	0.66	2.24	2	2
1:A:265:LEU:HA	1:A:271:VAL:HG23	0.66	1.67	15	1
1:A:56:MET:HG2	1:A:66:ALA:HB2	0.66	1.66	16	1
1:A:183:LEU:C	1:A:184:LEU:HD22	0.66	2.14	16	13
1:A:177:ASP:CG	1:A:200:LEU:HD13	0.66	2.16	12	4
1:A:78:GLY:N	1:A:79:PRO:HD2	0.66	2.06	14	1
1:A:168:ILE:HG22	1:A:173:TYR:O	0.66	1.91	18	1
1:A:177:ASP:CB	1:A:200:LEU:HD23	0.65	2.22	1	1
1:A:302:TYR:CE2	1:A:320:LEU:HD22	0.65	2.26	11	8
1:A:155:LEU:HB2	1:A:328:LEU:HD13	0.65	1.68	4	5
1:A:298:GLU:HG2	1:A:324:LEU:HD23	0.65	1.69	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:259:LEU:HD22	1:A:261:TRP:CZ3	0.65	2.27	12	6
1:A:161:ILE:HG21	1:A:247:LEU:HD13	0.65	1.67	9	7
1:A:182:ASN:ND2	1:A:195:LEU:HD22	0.65	2.07	6	1
1:A:182:ASN:OD1	1:A:183:LEU:HD12	0.65	1.91	1	2
1:A:220:CYS:O	1:A:221:HIS:C	0.65	2.38	11	13
1:A:183:LEU:O	1:A:184:LEU:HD23	0.65	1.92	20	1
1:A:118:LEU:HD11	1:A:125:SER:HB2	0.64	1.66	1	7
1:A:185:LEU:HD11	1:A:341:LEU:HD13	0.64	1.68	12	1
1:A:66:ALA:HB3	1:A:67:PRO:HD3	0.64	1.67	9	3
1:A:204:TYR:CB	1:A:209:VAL:HG23	0.64	2.22	11	1
1:A:222:ASP:CB	1:A:232:ALA:HB1	0.64	2.22	4	2
1:A:204:TYR:O	1:A:237:ALA:HB1	0.64	1.93	16	1
1:A:141:ILE:HD13	1:A:341:LEU:HD22	0.64	1.69	20	1
1:A:278:TYR:OH	1:A:303:MET:HE1	0.64	1.93	19	2
1:A:228:THR:HG23	1:A:232:ALA:HB3	0.64	1.70	14	5
1:A:165:LEU:HD21	1:A:243:ASP:OD2	0.64	1.93	2	2
1:A:54:ALA:HB2	1:A:70:VAL:CG1	0.64	2.23	6	1
1:A:244:LEU:HD22	1:A:320:LEU:HD13	0.63	1.70	1	1
1:A:157:LEU:CD2	1:A:193:VAL:HG11	0.63	2.23	5	3
1:A:141:ILE:CD1	1:A:344:VAL:HG22	0.63	2.22	12	2
1:A:157:LEU:O	1:A:161:ILE:HD12	0.63	1.94	20	8
1:A:184:LEU:HD11	1:A:196:VAL:HG22	0.63	1.68	4	1
1:A:302:TYR:CD2	1:A:320:LEU:HD22	0.63	2.28	4	8
1:A:282:ILE:HG21	1:A:303:MET:HB3	0.63	1.71	18	2
1:A:252:ILE:HD13	1:A:286:MET:CE	0.63	2.22	3	1
1:A:165:LEU:HD13	1:A:243:ASP:OD2	0.63	1.93	6	1
1:A:184:LEU:O	1:A:185:LEU:HD23	0.63	1.94	10	3
1:A:225:ILE:HD13	1:A:268:PRO:HA	0.62	1.71	20	1
1:A:183:LEU:HD23	1:A:193:VAL:HG21	0.62	1.71	6	2
1:A:278:TYR:CD2	1:A:285:LEU:HD22	0.62	2.29	2	1
1:A:155:LEU:HD22	1:A:328:LEU:HD22	0.62	1.71	17	1
1:A:265:LEU:O	1:A:265:LEU:HD13	0.62	1.93	10	6
1:A:253:GLN:OE1	1:A:259:LEU:HD11	0.62	1.94	8	1
1:A:28:ILE:HD12	1:A:38:LYS:HG3	0.62	1.71	18	1
1:A:278:TYR:CZ	1:A:285:LEU:HD12	0.62	2.29	3	1
1:A:174:VAL:HG21	1:A:238:PRO:HG2	0.62	1.70	8	2
1:A:69:VAL:HG22	1:A:132:ASP:O	0.62	1.93	8	9
1:A:90:ALA:O	1:A:96:ILE:HD11	0.62	1.94	6	7
1:A:50:CYS:O	1:A:72:VAL:HG12	0.62	1.95	5	7
1:A:157:LEU:HD23	1:A:254:TRP:CH2	0.62	2.30	8	2
1:A:309:LEU:HD13	1:A:309:LEU:O	0.62	1.95	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:138:LEU:HD22	1:A:183:LEU:CB	0.62	2.23	4	11
1:A:141:ILE:HG21	1:A:341:LEU:HG	0.62	1.72	11	2
1:A:298:GLU:CG	1:A:324:LEU:HD23	0.62	2.25	3	2
1:A:230:ILE:HD11	1:A:275:LYS:CB	0.62	2.25	6	2
1:A:137:ASP:O	1:A:141:ILE:HD12	0.61	1.94	6	7
1:A:73:GLU:CG	1:A:80:LEU:HD13	0.61	2.25	4	1
1:A:184:LEU:HD23	1:A:196:VAL:CG2	0.61	2.25	12	3
1:A:225:ILE:HA	1:A:228:THR:HG22	0.61	1.71	7	2
1:A:160:ARG:O	1:A:164:ILE:HG22	0.61	1.95	8	3
1:A:253:GLN:HB2	1:A:259:LEU:HD21	0.61	1.72	11	7
1:A:200:LEU:HD12	1:A:352:LYS:CG	0.61	2.25	10	1
1:A:118:LEU:HD11	1:A:125:SER:CB	0.61	2.26	12	5
1:A:55:ASP:HB2	1:A:66:ALA:HB3	0.61	1.70	3	3
1:A:150:SER:O	1:A:154:VAL:HG23	0.61	1.94	11	19
1:A:73:GLU:HG3	1:A:80:LEU:HD23	0.61	1.72	11	2
1:A:141:ILE:HG21	1:A:341:LEU:CD2	0.61	2.25	18	5
1:A:278:TYR:CE2	1:A:285:LEU:HD12	0.61	2.31	3	3
1:A:155:LEU:HG	1:A:324:LEU:HD22	0.61	1.73	2	1
1:A:53:LEU:HD13	1:A:68:CYS:O	0.61	1.95	11	1
1:A:82:THR:HG21	1:A:201:ALA:HB3	0.61	1.71	14	1
1:A:73:GLU:CD	1:A:80:LEU:HD23	0.61	2.20	9	1
1:A:328:LEU:O	1:A:331:ILE:HG22	0.61	1.96	6	4
1:A:185:LEU:HD11	1:A:341:LEU:HD23	0.61	1.73	9	2
1:A:51:ILE:HG23	1:A:71:LYS:HA	0.61	1.72	3	13
1:A:220:CYS:O	1:A:355:THR:HG21	0.61	1.96	3	1
1:A:136:SER:OG	1:A:344:VAL:HG11	0.61	1.96	12	1
1:A:154:VAL:HG21	1:A:255:LEU:CD1	0.61	2.26	16	1
1:A:136:SER:CB	1:A:344:VAL:HG21	0.61	2.25	20	1
1:A:281:ASN:O	1:A:285:LEU:HD12	0.60	1.95	14	3
1:A:176:GLY:O	1:A:246:ILE:HG21	0.60	1.96	5	2
1:A:53:LEU:HD23	1:A:68:CYS:O	0.60	1.96	6	2
1:A:228:THR:CG2	1:A:232:ALA:HB3	0.60	2.27	3	3
1:A:184:LEU:HD21	1:A:196:VAL:HG23	0.60	1.71	4	1
1:A:222:ASP:HB2	1:A:232:ALA:HB1	0.60	1.73	14	2
1:A:185:LEU:HD11	1:A:341:LEU:CD2	0.60	2.26	7	2
1:A:228:THR:O	1:A:232:ALA:HB3	0.60	1.96	15	7
1:A:177:ASP:HB2	1:A:200:LEU:HD22	0.60	1.72	3	4
1:A:264:ASN:O	1:A:271:VAL:HG13	0.60	1.96	3	2
1:A:184:LEU:HD23	1:A:196:VAL:HG12	0.60	1.70	7	4
1:A:141:ILE:HG23	1:A:342:SER:HB2	0.60	1.72	4	3
1:A:66:ALA:HB3	1:A:67:PRO:CD	0.60	2.27	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:THR:HG23	1:A:35:LYS:CG	0.60	2.26	14	3
1:A:200:LEU:HD21	1:A:222:ASP:O	0.60	1.97	10	1
1:A:225:ILE:CG2	1:A:271:VAL:HG21	0.60	2.26	17	3
1:A:255:LEU:HD11	1:A:294:ASN:CG	0.60	2.22	4	1
1:A:55:ASP:C	1:A:56:MET:HG3	0.60	2.21	10	1
1:A:103:ARG:HB3	1:A:105:LEU:HD23	0.60	1.74	10	1
1:A:200:LEU:HD11	1:A:352:LYS:HD3	0.60	1.72	6	1
1:A:225:ILE:HG23	1:A:265:LEU:CD2	0.60	2.27	8	2
1:A:151:ARG:HG3	1:A:328:LEU:HD11	0.60	1.73	11	2
1:A:141:ILE:CG1	1:A:344:VAL:HG22	0.60	2.26	20	1
1:A:155:LEU:CB	1:A:328:LEU:HD13	0.59	2.27	12	4
1:A:244:LEU:HD21	1:A:317:TYR:CE1	0.59	2.32	7	1
1:A:155:LEU:HD22	1:A:328:LEU:CD2	0.59	2.27	17	1
1:A:240:ARG:NH2	1:A:312:THR:HG22	0.59	2.12	2	1
1:A:252:ILE:HG22	1:A:299:ILE:HG21	0.59	1.72	14	1
1:A:262:GLU:O	1:A:265:LEU:HD22	0.59	1.97	15	1
1:A:213:TYR:HB2	1:A:236:VAL:HG21	0.59	1.74	19	1
1:A:96:ILE:HG22	1:A:100:ILE:HD12	0.59	1.73	6	6
1:A:131:MET:HE1	1:A:134:PHE:CE2	0.59	2.32	3	2
1:A:165:LEU:HD13	1:A:243:ASP:OD1	0.59	1.98	20	2
1:A:136:SER:HB3	1:A:344:VAL:HG11	0.59	1.73	16	1
1:A:190:PRO:HB3	1:A:344:VAL:HG21	0.59	1.74	19	1
1:A:342:SER:O	1:A:344:VAL:HG23	0.59	1.97	3	2
1:A:184:LEU:HD12	1:A:194:TYR:O	0.59	1.98	9	3
1:A:118:LEU:HD21	1:A:125:SER:CB	0.59	2.28	14	1
1:A:309:LEU:HD12	1:A:310:ASP:O	0.59	1.98	8	2
1:A:86:PHE:CE1	1:A:168:ILE:HG22	0.59	2.32	13	2
1:A:51:ILE:HD12	1:A:71:LYS:HB3	0.59	1.73	14	6
1:A:259:LEU:HD22	1:A:261:TRP:CH2	0.59	2.32	9	10
1:A:155:LEU:HD11	1:A:325:LEU:HD22	0.59	1.74	10	1
1:A:165:LEU:HD11	1:A:243:ASP:CG	0.59	2.23	4	4
1:A:306:VAL:HG23	1:A:320:LEU:HD21	0.59	1.74	1	1
1:A:200:LEU:C	1:A:200:LEU:HD13	0.59	2.23	4	1
1:A:252:ILE:CD1	1:A:286:MET:HE2	0.59	2.26	16	1
1:A:54:ALA:HB2	1:A:70:VAL:HG12	0.59	1.73	15	9
1:A:118:LEU:HD11	1:A:125:SER:HB3	0.58	1.74	5	1
1:A:155:LEU:CD2	1:A:328:LEU:HD13	0.58	2.28	11	3
1:A:182:ASN:O	1:A:195:LEU:HD23	0.58	1.97	15	3
1:A:137:ASP:OD1	1:A:184:LEU:HD22	0.58	1.98	20	1
1:A:43:ILE:CD1	1:A:53:LEU:HD12	0.58	2.27	10	2
1:A:252:ILE:CB	1:A:286:MET:HE1	0.58	2.28	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:265:LEU:HD23	1:A:266:LYS:N	0.58	2.13	15	1
1:A:175:HIS:CE1	1:A:195:LEU:HD13	0.58	2.33	4	1
1:A:138:LEU:HD12	1:A:341:LEU:HD21	0.58	1.76	10	3
1:A:185:LEU:HD12	1:A:193:VAL:HG23	0.58	1.74	13	1
1:A:30:THR:HG23	1:A:35:LYS:HB2	0.58	1.75	2	2
1:A:298:GLU:HB3	1:A:324:LEU:HD23	0.58	1.74	7	3
1:A:142:TYR:CD1	1:A:142:TYR:C	0.58	2.81	8	2
1:A:28:ILE:HD12	1:A:35:LYS:HG3	0.58	1.76	20	1
1:A:29:ILE:HD12	1:A:128:PHE:CD2	0.58	2.34	5	1
1:A:184:LEU:HD22	1:A:184:LEU:N	0.58	2.13	15	15
1:A:105:LEU:HD11	1:A:166:GLU:OE2	0.58	1.98	13	1
1:A:39:VAL:HG23	1:A:52:TYR:CD1	0.58	2.34	7	1
1:A:141:ILE:HG23	1:A:343:VAL:CG2	0.58	2.29	2	1
1:A:221:HIS:CG	1:A:221:HIS:O	0.58	2.56	10	3
1:A:225:ILE:HG12	1:A:271:VAL:HG11	0.58	1.75	1	2
1:A:178:ILE:O	1:A:178:ILE:HG22	0.58	1.99	13	10
1:A:316:LEU:HD23	1:A:319:ASN:CG	0.58	2.24	16	2
1:A:69:VAL:HG13	1:A:132:ASP:O	0.58	1.99	9	1
1:A:144:ALA:HB1	1:A:345:GLU:OE2	0.58	1.99	17	1
1:A:90:ALA:CB	1:A:110:VAL:HG21	0.58	2.29	6	2
1:A:174:VAL:HG21	1:A:238:PRO:CG	0.57	2.29	14	1
1:A:100:ILE:HD11	1:A:108:LEU:HD13	0.57	1.75	6	1
1:A:251:MET:HE1	1:A:324:LEU:HD21	0.57	1.76	15	2
1:A:244:LEU:CD2	1:A:320:LEU:HD21	0.57	2.28	17	1
1:A:255:LEU:HD21	1:A:294:ASN:OD1	0.57	1.99	4	2
1:A:185:LEU:HD23	1:A:193:VAL:HG23	0.57	1.76	5	3
1:A:151:ARG:CG	1:A:328:LEU:HD11	0.57	2.29	13	2
1:A:136:SER:CB	1:A:344:VAL:HG11	0.57	2.29	12	1
1:A:141:ILE:HG23	1:A:342:SER:CB	0.57	2.30	18	2
1:A:197:ASP:O	1:A:198:TYR:C	0.57	2.47	15	1
1:A:99:TRP:CH2	1:A:108:LEU:HD13	0.57	2.35	12	2
1:A:138:LEU:HD22	1:A:183:LEU:HB2	0.57	1.76	2	4
1:A:152:LYS:HA	1:A:328:LEU:HD11	0.57	1.77	19	2
1:A:165:LEU:HD13	1:A:243:ASP:CG	0.57	2.24	6	1
1:A:252:ILE:HD11	1:A:290:PHE:CE1	0.57	2.35	7	1
1:A:204:TYR:HB3	1:A:209:VAL:HG23	0.57	1.75	11	1
1:A:25:VAL:HG22	1:A:40:GLY:C	0.57	2.25	16	1
1:A:178:ILE:O	1:A:179:LYS:C	0.57	2.45	13	16
1:A:138:LEU:CD2	1:A:183:LEU:HD22	0.57	2.27	5	1
1:A:226:GLU:N	1:A:265:LEU:HD21	0.57	2.15	6	1
1:A:196:VAL:HG13	1:A:197:ASP:CG	0.57	2.25	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:VAL:HG23	1:A:52:TYR:CD2	0.57	2.35	14	4
1:A:262:GLU:O	1:A:265:LEU:HD23	0.57	1.99	4	4
1:A:184:LEU:C	1:A:185:LEU:HD23	0.57	2.25	16	2
1:A:138:LEU:HD22	1:A:183:LEU:HB3	0.57	1.77	17	1
1:A:118:LEU:O	1:A:118:LEU:HD23	0.56	2.00	7	2
1:A:309:LEU:HD22	1:A:314:LYS:O	0.56	2.00	15	2
1:A:247:LEU:HD23	1:A:302:TYR:OH	0.56	2.00	12	2
1:A:301:LYS:HB3	1:A:323:ILE:HD13	0.56	1.76	10	3
1:A:118:LEU:C	1:A:118:LEU:CD2	0.56	2.78	16	3
1:A:52:TYR:CE2	1:A:72:VAL:HG21	0.56	2.35	16	2
1:A:28:ILE:HG23	1:A:38:LYS:CE	0.56	2.31	4	1
1:A:73:GLU:HB2	1:A:80:LEU:HD22	0.56	1.77	20	3
1:A:309:LEU:HD13	1:A:315:PRO:HA	0.56	1.76	15	2
1:A:198:TYR:O	1:A:200:LEU:HD12	0.56	1.99	6	1
1:A:175:HIS:NE2	1:A:201:ALA:HB2	0.56	2.15	7	1
1:A:265:LEU:HD12	1:A:265:LEU:O	0.56	2.00	17	5
1:A:153:THR:O	1:A:157:LEU:HD12	0.56	2.01	5	2
1:A:43:ILE:HD12	1:A:69:VAL:HG11	0.56	1.77	19	2
1:A:53:LEU:HD11	1:A:133:ARG:NE	0.56	2.16	18	1
1:A:53:LEU:HD21	1:A:133:ARG:NE	0.56	2.15	1	3
1:A:151:ARG:NH2	1:A:331:ILE:HG21	0.56	2.16	16	2
1:A:109:GLY:O	1:A:164:ILE:HD12	0.56	2.01	4	4
1:A:80:LEU:O	1:A:80:LEU:HD13	0.56	2.01	13	7
1:A:43:ILE:HD11	1:A:53:LEU:HB2	0.56	1.75	13	2
1:A:165:LEU:HD11	1:A:243:ASP:OD1	0.56	2.01	4	1
1:A:283:ALA:HB2	1:A:304:GLU:HB2	0.56	1.75	5	2
1:A:256:THR:HG22	1:A:290:PHE:CD2	0.56	2.36	18	1
1:A:153:THR:HG22	1:A:339:LEU:HD13	0.56	1.77	20	1
1:A:131:MET:HE3	1:A:132:ASP:HB3	0.56	1.77	9	1
1:A:309:LEU:HD13	1:A:314:LYS:O	0.56	2.01	17	1
1:A:177:ASP:HB2	1:A:200:LEU:HD23	0.56	1.76	1	1
1:A:29:ILE:HD12	1:A:128:PHE:CE2	0.56	2.35	5	3
1:A:55:ASP:CB	1:A:66:ALA:HB3	0.56	2.31	5	2
1:A:90:ALA:HB2	1:A:167:TYR:OH	0.56	1.99	9	3
1:A:240:ARG:CD	1:A:312:THR:HG22	0.56	2.31	19	1
1:A:271:VAL:HG12	1:A:275:LYS:CD	0.56	2.30	2	1
1:A:165:LEU:HD22	1:A:243:ASP:OD2	0.56	2.01	13	2
1:A:161:ILE:HD11	1:A:183:LEU:HD21	0.56	1.78	12	4
1:A:78:GLY:N	1:A:79:PRO:CD	0.56	2.69	14	1
1:A:182:ASN:ND2	1:A:195:LEU:HD11	0.55	2.16	1	3
1:A:244:LEU:HD22	1:A:320:LEU:HD21	0.55	1.77	17	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:306:VAL:HG12	1:A:320:LEU:HD21	0.55	1.78	18	3
1:A:185:LEU:CD1	1:A:341:LEU:HD22	0.55	2.22	6	1
1:A:161:ILE:CG2	1:A:178:ILE:HD11	0.55	2.32	15	1
1:A:182:ASN:ND2	1:A:195:LEU:HD21	0.55	2.17	16	1
1:A:302:TYR:CD1	1:A:320:LEU:HD22	0.55	2.37	6	1
1:A:165:LEU:HD21	1:A:243:ASP:HB3	0.55	1.78	11	1
1:A:252:ILE:CG2	1:A:299:ILE:HG21	0.55	2.32	14	1
1:A:138:LEU:CD2	1:A:183:LEU:HD13	0.55	2.32	10	7
1:A:259:LEU:HD13	1:A:261:TRP:CH2	0.55	2.36	12	3
1:A:342:SER:O	1:A:343:VAL:HG13	0.55	2.02	12	1
1:A:108:LEU:HD21	1:A:167:TYR:CD2	0.55	2.36	13	1
1:A:161:ILE:HG12	1:A:183:LEU:HD21	0.55	1.79	4	1
1:A:298:GLU:HB3	1:A:324:LEU:HD12	0.55	1.78	13	2
1:A:43:ILE:HD11	1:A:53:LEU:HD22	0.55	1.77	18	1
1:A:317:TYR:HA	1:A:320:LEU:HD12	0.55	1.79	11	2
1:A:141:ILE:CG1	1:A:344:VAL:HG13	0.55	2.32	16	1
1:A:252:ILE:HB	1:A:299:ILE:HG21	0.55	1.79	1	5
1:A:93:PRO:HA	1:A:96:ILE:HD12	0.55	1.78	6	1
1:A:278:TYR:CD2	1:A:285:LEU:HD13	0.55	2.36	2	1
1:A:176:GLY:HA2	1:A:246:ILE:HD13	0.55	1.77	16	2
1:A:138:LEU:HD21	1:A:157:LEU:HD21	0.55	1.79	8	1
1:A:343:VAL:HG22	1:A:344:VAL:HG22	0.55	1.79	10	1
1:A:138:LEU:CB	1:A:180:ALA:HB1	0.55	2.30	15	1
1:A:252:ILE:CG2	1:A:286:MET:HE1	0.54	2.32	2	1
1:A:282:ILE:HG21	1:A:303:MET:CG	0.54	2.32	9	1
1:A:161:ILE:HG23	1:A:195:LEU:CD1	0.54	2.31	20	2
1:A:252:ILE:HB	1:A:286:MET:HE1	0.54	1.78	2	1
1:A:184:LEU:HD11	1:A:196:VAL:CG2	0.54	2.33	4	1
1:A:66:ALA:N	1:A:67:PRO:HD2	0.54	2.15	19	3
1:A:146:ALA:O	1:A:147:LYS:C	0.54	2.48	14	18
1:A:149:PHE:CE1	1:A:341:LEU:HD11	0.54	2.38	9	1
1:A:175:HIS:ND1	1:A:201:ALA:HB2	0.54	2.18	18	1
1:A:56:MET:CG	1:A:66:ALA:HB2	0.54	2.31	16	1
1:A:28:ILE:HG22	1:A:35:LYS:HG2	0.54	1.79	2	1
1:A:82:THR:HG22	1:A:198:TYR:O	0.54	2.03	20	1
1:A:174:VAL:HG11	1:A:238:PRO:CG	0.54	2.32	4	2
1:A:51:ILE:HG23	1:A:71:LYS:CA	0.54	2.32	17	6
1:A:184:LEU:HD11	1:A:196:VAL:HG12	0.54	1.79	2	2
1:A:29:ILE:HD12	1:A:128:PHE:CE1	0.54	2.37	20	3
1:A:244:LEU:HD22	1:A:320:LEU:CD2	0.54	2.32	7	2
1:A:41:LEU:O	1:A:53:LEU:HD23	0.54	2.03	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:256:THR:HG22	1:A:290:PHE:CE2	0.54	2.38	1	2
1:A:73:GLU:HG3	1:A:80:LEU:HD13	0.54	1.78	4	1
1:A:222:ASP:HB3	1:A:232:ALA:HB1	0.54	1.78	4	1
1:A:183:LEU:O	1:A:184:LEU:HD13	0.54	2.03	5	3
1:A:173:TYR:CD1	1:A:201:ALA:HB1	0.54	2.37	6	1
1:A:251:MET:CE	1:A:324:LEU:HD21	0.54	2.32	8	1
1:A:168:ILE:HG22	1:A:173:TYR:C	0.54	2.28	18	1
1:A:53:LEU:HD13	1:A:56:MET:CE	0.54	2.32	19	1
1:A:298:GLU:HG3	1:A:324:LEU:HD23	0.54	1.79	3	1
1:A:137:ASP:C	1:A:141:ILE:HD12	0.54	2.28	18	3
1:A:53:LEU:HD12	1:A:69:VAL:HG12	0.54	1.79	4	2
1:A:168:ILE:HG13	1:A:174:VAL:HG12	0.54	1.80	9	1
1:A:100:ILE:HG23	1:A:105:LEU:HB2	0.53	1.79	4	2
1:A:226:GLU:HG3	1:A:265:LEU:HD22	0.53	1.78	4	3
1:A:328:LEU:O	1:A:328:LEU:HD13	0.53	2.03	8	1
1:A:39:VAL:HG23	1:A:52:TYR:CB	0.53	2.32	9	1
1:A:177:ASP:OD1	1:A:200:LEU:HD22	0.53	2.03	2	1
1:A:70:VAL:HG12	1:A:130:ILE:HD11	0.53	1.79	6	1
1:A:267:ASP:O	1:A:271:VAL:HG23	0.53	2.03	11	7
1:A:155:LEU:HD22	1:A:324:LEU:HD22	0.53	1.80	12	1
1:A:43:ILE:CD1	1:A:69:VAL:HG11	0.53	2.33	19	1
1:A:99:TRP:CZ2	1:A:108:LEU:HD13	0.53	2.38	19	2
1:A:271:VAL:HG12	1:A:275:LYS:HD2	0.53	1.78	19	3
1:A:153:THR:HG22	1:A:339:LEU:HG	0.53	1.77	12	1
1:A:151:ARG:NE	1:A:331:ILE:HD13	0.53	2.17	16	1
1:A:225:ILE:HD13	1:A:268:PRO:CA	0.53	2.33	20	1
1:A:182:ASN:O	1:A:196:VAL:HG22	0.53	2.03	19	1
1:A:109:GLY:CA	1:A:164:ILE:HD11	0.53	2.34	2	1
1:A:157:LEU:HD23	1:A:254:TRP:CZ3	0.53	2.39	9	1
1:A:174:VAL:HG22	1:A:202:TYR:O	0.53	2.04	20	3
1:A:175:HIS:NE2	1:A:200:LEU:HD12	0.53	2.19	13	1
1:A:91:ALA:HB1	1:A:113:TYR:CD1	0.53	2.39	14	1
1:A:157:LEU:HD22	1:A:183:LEU:HD22	0.53	1.81	16	1
1:A:286:MET:HE2	1:A:299:ILE:CG2	0.53	2.34	17	1
1:A:176:GLY:O	1:A:200:LEU:HD22	0.53	2.04	6	1
1:A:84:LEU:HA	1:A:129:MET:HE2	0.53	1.81	19	2
1:A:87:TYR:C	1:A:87:TYR:CD1	0.53	2.86	15	1
1:A:91:ALA:HB1	1:A:113:TYR:CB	0.53	2.34	19	1
1:A:161:ILE:HD12	1:A:195:LEU:HD11	0.53	1.79	19	1
1:A:51:ILE:HD12	1:A:71:LYS:HB2	0.53	1.80	18	4
1:A:138:LEU:HD22	1:A:183:LEU:CD2	0.53	2.30	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:178:ILE:CG2	1:A:246:ILE:HG22	0.53	2.34	15	3
1:A:209:VAL:HG12	1:A:211:LYS:HG2	0.53	1.80	13	1
1:A:162:LEU:HD22	1:A:317:TYR:CE2	0.53	2.37	16	1
1:A:109:GLY:HA3	1:A:164:ILE:HD11	0.52	1.81	2	1
1:A:343:VAL:HG22	1:A:343:VAL:O	0.52	2.04	18	3
1:A:213:TYR:OH	1:A:312:THR:HG21	0.52	2.04	2	1
1:A:177:ASP:CB	1:A:200:LEU:HD13	0.52	2.34	13	4
1:A:161:ILE:CD1	1:A:195:LEU:HD13	0.52	2.34	5	1
1:A:301:LYS:HG2	1:A:323:ILE:HG21	0.52	1.81	15	1
1:A:252:ILE:HD12	1:A:286:MET:HG3	0.52	1.80	1	2
1:A:155:LEU:HD11	1:A:324:LEU:HB3	0.52	1.80	3	4
1:A:230:ILE:HD11	1:A:275:LYS:HD2	0.52	1.81	5	2
1:A:226:GLU:HG2	1:A:265:LEU:HD21	0.52	1.82	16	1
1:A:251:MET:HE3	1:A:324:LEU:HD21	0.52	1.80	8	1
1:A:252:ILE:HD12	1:A:286:MET:SD	0.52	2.44	20	3
1:A:304:GLU:CD	1:A:308:LEU:HD12	0.52	2.30	12	1
1:A:229:SER:HB2	1:A:246:ILE:HD11	0.52	1.82	13	1
1:A:353:THR:HG22	1:A:354:ILE:HD13	0.52	1.81	20	2
1:A:240:ARG:NH1	1:A:309:LEU:HD12	0.52	2.20	20	1
1:A:138:LEU:CD1	1:A:341:LEU:HD21	0.52	2.35	6	2
1:A:84:LEU:HA	1:A:129:MET:HE1	0.52	1.82	16	1
1:A:33:ALA:HB3	1:A:37:TRP:HE1	0.52	1.65	11	5
1:A:177:ASP:CB	1:A:200:LEU:HD22	0.52	2.34	13	1
1:A:55:ASP:O	1:A:56:MET:C	0.51	2.53	10	1
1:A:152:LYS:HD2	1:A:153:THR:HG23	0.51	1.81	14	1
1:A:265:LEU:HD12	1:A:271:VAL:CG2	0.51	2.35	16	1
1:A:302:TYR:CE2	1:A:320:LEU:HD23	0.51	2.40	14	3
1:A:226:GLU:CA	1:A:265:LEU:HD21	0.51	2.35	6	2
1:A:278:TYR:OH	1:A:286:MET:HE2	0.51	2.06	6	1
1:A:265:LEU:HD22	1:A:271:VAL:HG11	0.51	1.82	10	1
1:A:161:ILE:HG22	1:A:165:LEU:CD1	0.51	2.35	17	2
1:A:71:LYS:HD3	1:A:129:MET:HE3	0.51	1.81	14	1
1:A:27:GLU:O	1:A:39:VAL:HG23	0.51	2.05	6	2
1:A:302:TYR:HB2	1:A:323:ILE:HD11	0.51	1.82	13	2
1:A:110:VAL:HG23	1:A:164:ILE:CD1	0.51	2.28	12	3
1:A:184:LEU:HD23	1:A:196:VAL:CG1	0.51	2.35	19	2
1:A:311:TYR:O	1:A:312:THR:HG23	0.51	2.06	19	3
1:A:306:VAL:CG1	1:A:320:LEU:HD21	0.51	2.35	18	1
1:A:118:LEU:HD22	1:A:118:LEU:O	0.51	2.05	15	3
1:A:111:PRO:HG3	1:A:196:VAL:HG12	0.51	1.81	12	1
1:A:198:TYR:HB2	1:A:200:LEU:HD12	0.51	1.82	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:103:ARG:CB	1:A:105:LEU:HD13	0.51	2.36	5	1
1:A:161:ILE:HG21	1:A:178:ILE:HD12	0.51	1.82	13	3
1:A:110:VAL:HG22	1:A:111:PRO:HD2	0.51	1.83	13	12
1:A:196:VAL:HG23	1:A:197:ASP:CG	0.51	2.31	1	1
1:A:86:PHE:CE1	1:A:90:ALA:HB2	0.51	2.41	10	1
1:A:253:GLN:CB	1:A:259:LEU:HD21	0.51	2.36	11	1
1:A:165:LEU:HD11	1:A:243:ASP:HB3	0.51	1.82	15	1
1:A:225:ILE:HG22	1:A:271:VAL:HG21	0.51	1.83	2	1
1:A:204:TYR:CZ	1:A:237:ALA:HB3	0.51	2.41	11	1
1:A:159:LEU:HD23	1:A:160:ARG:N	0.51	2.21	14	1
1:A:138:LEU:C	1:A:180:ALA:HB1	0.50	2.31	16	5
1:A:161:ILE:CG1	1:A:183:LEU:HD21	0.50	2.37	4	1
1:A:136:SER:OG	1:A:344:VAL:HG22	0.50	2.06	3	1
1:A:141:ILE:CD1	1:A:185:LEU:HD11	0.50	2.36	16	1
1:A:100:ILE:HG23	1:A:105:LEU:CB	0.50	2.37	12	4
1:A:121:LYS:O	1:A:122:ASN:C	0.50	2.55	20	3
1:A:141:ILE:HG21	1:A:341:LEU:HD21	0.50	1.82	9	1
1:A:154:VAL:HG21	1:A:255:LEU:HD13	0.50	1.81	16	1
1:A:91:ALA:HB1	1:A:113:TYR:CD2	0.50	2.41	17	1
1:A:278:TYR:OH	1:A:286:MET:HE1	0.50	2.06	17	1
1:A:343:VAL:O	1:A:344:VAL:C	0.50	2.55	11	3
1:A:43:ILE:HG22	1:A:45:GLN:CG	0.50	2.36	6	1
1:A:308:LEU:HD12	1:A:308:LEU:O	0.50	2.06	16	1
1:A:29:ILE:HG22	1:A:37:TRP:O	0.50	2.06	18	1
1:A:84:LEU:HD13	1:A:129:MET:CG	0.50	2.37	2	1
1:A:141:ILE:HG12	1:A:343:VAL:HG22	0.50	1.84	11	1
1:A:261:TRP:CD1	1:A:271:VAL:HG13	0.50	2.41	11	1
1:A:87:TYR:CD2	1:A:129:MET:HE1	0.50	2.42	13	1
1:A:200:LEU:HD21	1:A:352:LYS:HB3	0.50	1.84	11	1
1:A:53:LEU:HD12	1:A:54:ALA:N	0.50	2.21	13	1
1:A:341:LEU:O	1:A:342:SER:CB	0.50	2.60	6	1
1:A:52:TYR:CD1	1:A:70:VAL:HG13	0.50	2.41	7	1
1:A:161:ILE:HD12	1:A:178:ILE:HD12	0.50	1.84	8	1
1:A:153:THR:HA	1:A:339:LEU:HD22	0.50	1.82	9	1
1:A:282:ILE:HG21	1:A:303:MET:HG2	0.50	1.83	9	1
1:A:100:ILE:HD11	1:A:108:LEU:HB2	0.50	1.84	11	1
1:A:159:LEU:HD12	1:A:325:LEU:HD21	0.50	1.83	14	1
1:A:226:GLU:HA	1:A:265:LEU:HD11	0.50	1.84	19	3
1:A:272:ARG:O	1:A:276:ILE:HD12	0.50	2.06	5	2
1:A:196:VAL:HG13	1:A:197:ASP:N	0.49	2.21	10	2
1:A:165:LEU:HD23	1:A:168:ILE:HD11	0.49	1.83	16	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:183:LEU:HD23	1:A:193:VAL:CG2	0.49	2.37	3	5
1:A:96:ILE:CG2	1:A:108:LEU:HD22	0.49	2.35	3	5
1:A:198:TYR:O	1:A:198:TYR:CG	0.49	2.65	17	1
1:A:53:LEU:HD13	1:A:69:VAL:HG12	0.49	1.84	18	1
1:A:239:SER:HB3	1:A:312:THR:HG23	0.49	1.84	1	1
1:A:239:SER:O	1:A:240:ARG:HB3	0.49	2.07	20	2
1:A:184:LEU:HD21	1:A:196:VAL:CG2	0.49	2.36	4	1
1:A:278:TYR:OH	1:A:303:MET:HE2	0.49	2.08	17	1
1:A:328:LEU:HD11	1:A:335:ASP:HA	0.49	1.83	17	1
1:A:138:LEU:HD21	1:A:157:LEU:CD2	0.49	2.38	4	1
1:A:200:LEU:HD22	1:A:200:LEU:C	0.49	2.32	4	1
1:A:282:ILE:HD11	1:A:304:GLU:OE2	0.49	2.08	19	1
1:A:200:LEU:HD13	1:A:201:ALA:N	0.49	2.23	4	1
1:A:226:GLU:HA	1:A:265:LEU:HD21	0.49	1.84	6	2
1:A:304:GLU:OE2	1:A:308:LEU:HD11	0.49	2.08	13	1
1:A:182:ASN:CG	1:A:195:LEU:HD11	0.49	2.32	1	1
1:A:103:ARG:HB2	1:A:105:LEU:HD13	0.49	1.85	5	1
1:A:141:ILE:CG2	1:A:341:LEU:HD23	0.49	2.33	6	1
1:A:141:ILE:CD1	1:A:341:LEU:HD23	0.49	2.33	11	1
1:A:90:ALA:O	1:A:110:VAL:HG21	0.49	2.07	15	1
1:A:149:PHE:CE1	1:A:341:LEU:HD12	0.49	2.42	16	1
1:A:220:CYS:SG	1:A:355:THR:HG21	0.49	2.47	16	1
1:A:35:LYS:O	1:A:36:GLU:CB	0.49	2.60	10	7
1:A:185:LEU:HD23	1:A:193:VAL:HA	0.49	1.83	6	1
1:A:90:ALA:HB3	1:A:110:VAL:HG11	0.49	1.85	8	1
1:A:138:LEU:HD11	1:A:341:LEU:HD21	0.49	1.84	12	1
1:A:80:LEU:HD12	1:A:127:ARG:CD	0.49	2.38	13	1
1:A:226:GLU:CG	1:A:265:LEU:HD22	0.49	2.38	14	1
1:A:161:ILE:CG2	1:A:247:LEU:HD13	0.49	2.38	16	1
1:A:136:SER:HB3	1:A:344:VAL:HG21	0.49	1.83	20	1
1:A:141:ILE:HD13	1:A:341:LEU:CD2	0.49	2.36	1	2
1:A:155:LEU:HD13	1:A:328:LEU:HD23	0.49	1.84	2	1
1:A:53:LEU:HD11	1:A:55:ASP:OD2	0.49	2.08	17	1
1:A:295:LYS:HG2	1:A:331:ILE:HG21	0.48	1.85	9	1
1:A:255:LEU:HD12	1:A:255:LEU:O	0.48	2.07	13	1
1:A:30:THR:HG23	1:A:35:LYS:HB3	0.48	1.84	10	4
1:A:165:LEU:HD21	1:A:243:ASP:CB	0.48	2.37	12	2
1:A:230:ILE:HD11	1:A:275:LYS:CD	0.48	2.38	7	1
1:A:252:ILE:HG21	1:A:286:MET:HE1	0.48	1.85	2	1
1:A:73:GLU:CG	1:A:80:LEU:HD23	0.48	2.38	7	3
1:A:52:TYR:CD2	1:A:70:VAL:HG13	0.48	2.43	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:165:LEU:HD12	1:A:165:LEU:O	0.48	2.09	19	1
1:A:73:GLU:CB	1:A:80:LEU:HD22	0.48	2.38	20	1
1:A:87:TYR:O	1:A:91:ALA:HB2	0.48	2.09	17	10
1:A:153:THR:HA	1:A:339:LEU:HD23	0.48	1.84	7	1
1:A:220:CYS:HB3	1:A:355:THR:HG21	0.48	1.83	12	1
1:A:298:GLU:OE1	1:A:328:LEU:HD12	0.48	2.09	13	1
1:A:309:LEU:HD12	1:A:310:ASP:N	0.48	2.23	17	2
1:A:282:ILE:N	1:A:282:ILE:HD13	0.48	2.23	5	12
1:A:244:LEU:HB3	1:A:306:VAL:HG11	0.48	1.86	7	3
1:A:343:VAL:O	1:A:344:VAL:HG13	0.48	2.08	10	1
1:A:174:VAL:O	1:A:174:VAL:HG23	0.48	2.08	11	1
1:A:96:ILE:HG12	1:A:108:LEU:HD23	0.48	1.85	15	1
1:A:155:LEU:HD21	1:A:324:LEU:HB3	0.48	1.84	15	1
1:A:310:ASP:HB2	1:A:312:THR:HG22	0.48	1.84	17	1
1:A:35:LYS:O	1:A:36:GLU:HB2	0.48	2.09	4	4
1:A:25:VAL:HG13	1:A:40:GLY:O	0.48	2.09	6	1
1:A:241:ARG:HA	1:A:244:LEU:HD12	0.48	1.85	7	3
1:A:198:TYR:O	1:A:199:GLY:C	0.48	2.56	5	3
1:A:99:TRP:CD1	1:A:100:ILE:N	0.48	2.82	9	2
1:A:96:ILE:CG2	1:A:108:LEU:HD12	0.48	2.38	17	1
1:A:165:LEU:HD13	1:A:175:HIS:CE1	0.48	2.44	19	1
1:A:106:LYS:HD3	1:A:159:LEU:HD23	0.47	1.86	3	1
1:A:53:LEU:HD21	1:A:55:ASP:OD2	0.47	2.10	5	1
1:A:177:ASP:HB2	1:A:200:LEU:HD13	0.47	1.86	13	3
1:A:265:LEU:HD23	1:A:271:VAL:HG21	0.47	1.86	9	1
1:A:158:SER:O	1:A:162:LEU:HD12	0.47	2.08	14	1
1:A:165:LEU:HD12	1:A:175:HIS:NE2	0.47	2.24	15	1
1:A:29:ILE:HD12	1:A:128:PHE:CZ	0.47	2.43	7	1
1:A:53:LEU:HD22	1:A:69:VAL:HG12	0.47	1.86	11	1
1:A:53:LEU:HD21	1:A:133:ARG:HE	0.47	1.69	11	2
1:A:100:ILE:HG23	1:A:105:LEU:HB3	0.47	1.86	14	2
1:A:216:ASP:N	1:A:217:PRO:HD2	0.47	2.24	17	1
1:A:70:VAL:HG12	1:A:130:ILE:CG1	0.47	2.39	6	1
1:A:316:LEU:HD23	1:A:319:ASN:HB2	0.47	1.85	20	2
1:A:55:ASP:O	1:A:56:MET:HE3	0.47	2.09	10	2
1:A:141:ILE:HG23	1:A:342:SER:HB3	0.47	1.84	12	3
1:A:155:LEU:CD2	1:A:324:LEU:HD22	0.47	2.39	15	1
1:A:175:HIS:CE1	1:A:178:ILE:HD13	0.47	2.45	15	1
1:A:153:THR:HG22	1:A:339:LEU:HD22	0.47	1.86	4	1
1:A:28:ILE:HD13	1:A:38:LYS:HG3	0.47	1.87	2	1
1:A:53:LEU:HA	1:A:69:VAL:HG12	0.47	1.86	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:178:ILE:HG21	1:A:250:CYS:SG	0.47	2.49	3	3
1:A:29:ILE:HD13	1:A:37:TRP:O	0.47	2.10	4	1
1:A:87:TYR:OH	1:A:196:VAL:HG23	0.47	2.09	10	1
1:A:175:HIS:O	1:A:175:HIS:CG	0.47	2.67	10	1
1:A:109:GLY:C	1:A:164:ILE:HD12	0.47	2.35	11	1
1:A:165:LEU:HD11	1:A:178:ILE:HD11	0.47	1.85	13	1
1:A:96:ILE:O	1:A:100:ILE:HG12	0.47	2.10	15	1
1:A:155:LEU:CB	1:A:328:LEU:HD12	0.47	2.40	19	1
1:A:106:LYS:CD	1:A:159:LEU:HD23	0.47	2.40	3	1
1:A:204:TYR:CD1	1:A:237:ALA:HB1	0.47	2.45	10	1
1:A:227:PHE:O	1:A:246:ILE:HD12	0.47	2.10	13	1
1:A:226:GLU:HA	1:A:265:LEU:HD12	0.47	1.87	15	1
1:A:80:LEU:HD11	1:A:129:MET:CE	0.47	2.40	15	1
1:A:244:LEU:HD23	1:A:306:VAL:HG12	0.47	1.87	15	1
1:A:84:LEU:HD13	1:A:129:MET:HG2	0.47	1.85	2	2
1:A:137:ASP:OD1	1:A:184:LEU:HD12	0.47	2.09	3	2
1:A:165:LEU:C	1:A:165:LEU:HD13	0.47	2.35	5	1
1:A:33:ALA:HB1	1:A:36:GLU:OE2	0.46	2.10	2	1
1:A:96:ILE:HG12	1:A:108:LEU:HD12	0.46	1.85	5	1
1:A:244:LEU:HD21	1:A:317:TYR:CZ	0.46	2.45	7	1
1:A:265:LEU:HD13	1:A:265:LEU:C	0.46	2.35	7	4
1:A:211:LYS:HG2	1:A:312:THR:HG21	0.46	1.86	11	1
1:A:190:PRO:HB3	1:A:343:VAL:HG22	0.46	1.85	13	1
1:A:161:ILE:CG2	1:A:195:LEU:HD11	0.46	2.37	20	1
1:A:230:ILE:HG23	1:A:275:LYS:HD2	0.46	1.86	1	1
1:A:328:LEU:HD13	1:A:328:LEU:C	0.46	2.35	10	4
1:A:224:THR:O	1:A:228:THR:N	0.46	2.48	5	1
1:A:141:ILE:HG21	1:A:341:LEU:CG	0.46	2.40	4	3
1:A:118:LEU:HD23	1:A:125:SER:HB3	0.46	1.86	6	1
1:A:53:LEU:HD13	1:A:133:ARG:HD2	0.46	1.86	13	1
1:A:218:LYS:O	1:A:219:ARG:C	0.46	2.59	17	1
1:A:35:LYS:O	1:A:36:GLU:CG	0.46	2.63	20	1
1:A:69:VAL:HG13	1:A:133:ARG:HA	0.46	1.86	9	2
1:A:161:ILE:HD11	1:A:195:LEU:HD13	0.46	1.87	5	1
1:A:108:LEU:HD11	1:A:167:TYR:CD2	0.46	2.46	10	1
1:A:46:GLY:O	1:A:51:ILE:HG21	0.46	2.11	17	1
1:A:66:ALA:N	1:A:67:PRO:CD	0.46	2.79	19	1
1:A:138:LEU:HD22	1:A:183:LEU:CD1	0.46	2.40	20	1
1:A:153:THR:HG22	1:A:339:LEU:HA	0.46	1.87	3	1
1:A:28:ILE:HG23	1:A:38:LYS:HE3	0.46	1.88	4	1
1:A:226:GLU:HA	1:A:265:LEU:HD22	0.46	1.88	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:185:LEU:CD2	1:A:193:VAL:HG23	0.46	2.41	12	1
1:A:331:ILE:HD11	1:A:333:SER:CB	0.46	2.39	13	1
1:A:222:ASP:OD1	1:A:232:ALA:HB1	0.46	2.11	16	2
1:A:328:LEU:HD13	1:A:334:LYS:HA	0.46	1.87	19	1
1:A:80:LEU:C	1:A:80:LEU:HD13	0.46	2.35	10	3
1:A:140:LYS:CE	1:A:144:ALA:HB2	0.46	2.41	6	1
1:A:298:GLU:CD	1:A:328:LEU:HD12	0.46	2.35	11	1
1:A:157:LEU:C	1:A:161:ILE:HD12	0.46	2.35	20	2
1:A:278:TYR:CZ	1:A:286:MET:HE3	0.46	2.46	13	1
1:A:155:LEU:CD2	1:A:325:LEU:HD22	0.46	2.40	19	1
1:A:55:ASP:HB3	1:A:66:ALA:HB3	0.46	1.86	5	1
1:A:196:VAL:HG22	1:A:197:ASP:H	0.46	1.70	10	1
1:A:43:ILE:HG22	1:A:45:GLN:HG2	0.45	1.88	6	1
1:A:155:LEU:CG	1:A:328:LEU:HD13	0.45	2.41	12	2
1:A:165:LEU:HD22	1:A:243:ASP:HB2	0.45	1.88	20	2
1:A:118:LEU:HD12	1:A:127:ARG:HG3	0.45	1.88	17	1
1:A:301:LYS:HB2	1:A:323:ILE:HD11	0.45	1.87	19	1
1:A:165:LEU:HD21	1:A:243:ASP:CG	0.45	2.36	5	3
1:A:176:GLY:C	1:A:246:ILE:HD13	0.45	2.36	19	1
1:A:177:ASP:HB3	1:A:200:LEU:HD13	0.45	1.88	20	1
1:A:151:ARG:HG2	1:A:328:LEU:HD12	0.45	1.87	4	1
1:A:175:HIS:CD2	1:A:201:ALA:HB2	0.45	2.46	7	1
1:A:137:ASP:OD2	1:A:184:LEU:HD12	0.45	2.11	11	1
1:A:27:GLU:N	1:A:39:VAL:HG12	0.45	2.27	15	1
1:A:175:HIS:NE2	1:A:195:LEU:HD22	0.45	2.25	20	1
1:A:53:LEU:HD21	1:A:133:ARG:CZ	0.45	2.42	1	1
1:A:66:ALA:CB	1:A:67:PRO:CD	0.45	2.94	9	1
1:A:161:ILE:HG12	1:A:178:ILE:HD12	0.45	1.87	9	1
1:A:155:LEU:CG	1:A:328:LEU:HD22	0.45	2.40	11	2
1:A:226:GLU:CG	1:A:265:LEU:HD21	0.45	2.42	16	1
1:A:321:ARG:O	1:A:325:LEU:HD23	0.45	2.11	14	3
1:A:169:HIS:ND1	1:A:174:VAL:HG22	0.45	2.27	5	1
1:A:136:SER:CB	1:A:185:LEU:HD12	0.45	2.42	10	1
1:A:86:PHE:CZ	1:A:168:ILE:HD11	0.45	2.46	18	1
1:A:82:THR:HG21	1:A:198:TYR:OH	0.45	2.11	18	1
1:A:178:ILE:O	1:A:178:ILE:CG2	0.45	2.64	13	3
1:A:343:VAL:C	1:A:344:VAL:HG22	0.45	2.37	10	1
1:A:151:ARG:NH1	1:A:255:LEU:HD21	0.45	2.27	15	1
1:A:262:GLU:HG2	1:A:265:LEU:HD23	0.45	1.87	1	1
1:A:70:VAL:HG12	1:A:130:ILE:CD1	0.45	2.42	6	1
1:A:316:LEU:HD23	1:A:319:ASN:CB	0.45	2.41	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:157:LEU:HD21	1:A:193:VAL:HG21	0.45	1.87	12	1
1:A:204:TYR:C	1:A:204:TYR:CD1	0.45	2.94	1	1
1:A:341:LEU:O	1:A:344:VAL:HG23	0.45	2.11	8	1
1:A:344:VAL:HG22	1:A:344:VAL:O	0.45	2.11	2	1
1:A:131:MET:HE1	1:A:134:PHE:CZ	0.45	2.47	3	1
1:A:157:LEU:HD21	1:A:193:VAL:HG11	0.45	1.89	5	1
1:A:98:LYS:O	1:A:102:THR:HG23	0.45	2.12	6	1
1:A:343:VAL:C	1:A:344:VAL:HG23	0.45	2.37	12	1
1:A:255:LEU:HD21	1:A:294:ASN:HD21	0.45	1.72	13	1
1:A:196:VAL:HG23	1:A:198:TYR:H	0.45	1.71	15	2
1:A:48:PHE:CZ	1:A:351:ALA:HB1	0.44	2.47	18	1
1:A:108:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG23	0.44	1.89	8	1
1:A:174:VAL:HG21	1:A:204:TYR:HB2	0.44	1.88	10	1
1:A:155:LEU:HD23	1:A:328:LEU:HD23	0.44	1.90	18	1
1:A:155:LEU:HD21	1:A:324:LEU:C	0.44	2.38	19	1
1:A:49:GLY:H	1:A:51:ILE:HD11	0.44	1.71	4	1
1:A:138:LEU:HD12	1:A:341:LEU:HD22	0.44	1.89	11	1
1:A:309:LEU:HD23	1:A:310:ASP:N	0.44	2.27	11	2
1:A:344:VAL:O	1:A:344:VAL:HG22	0.44	2.12	11	1
1:A:156:GLN:CB	1:A:339:LEU:HD11	0.44	2.43	13	1
1:A:229:SER:HB2	1:A:246:ILE:HD13	0.44	1.89	17	1
1:A:215:GLU:O	1:A:216:ASP:C	0.44	2.61	16	1
1:A:225:ILE:HD13	1:A:271:VAL:HG21	0.44	1.88	10	1
1:A:162:LEU:C	1:A:162:LEU:HD13	0.44	2.37	12	1
1:A:137:ASP:HA	1:A:184:LEU:HD13	0.44	1.89	16	1
1:A:342:SER:O	1:A:343:VAL:C	0.44	2.60	6	3
1:A:214:LYS:HA	1:A:236:VAL:HG22	0.44	1.90	6	1
1:A:155:LEU:CD1	1:A:325:LEU:HD22	0.44	2.41	10	1
1:A:204:TYR:CE1	1:A:237:ALA:HB3	0.44	2.46	11	1
1:A:278:TYR:OH	1:A:286:MET:HE3	0.44	2.12	13	1
1:A:244:LEU:HD22	1:A:320:LEU:CD1	0.44	2.41	1	1
1:A:281:ASN:O	1:A:285:LEU:HD23	0.44	2.13	13	2
1:A:179:LYS:HZ1	1:A:200:LEU:HD11	0.44	1.73	14	1
1:A:40:GLY:HA3	1:A:56:MET:HE3	0.44	1.90	1	1
1:A:80:LEU:HD13	1:A:80:LEU:O	0.44	2.13	10	1
1:A:331:ILE:HD11	1:A:333:SER:HB3	0.44	1.89	13	1
1:A:105:LEU:HD21	1:A:166:GLU:OE1	0.44	2.12	18	1
1:A:161:ILE:O	1:A:165:LEU:HD13	0.44	2.13	10	2
1:A:200:LEU:HD11	1:A:352:LYS:CB	0.43	2.43	1	1
1:A:155:LEU:C	1:A:155:LEU:HD13	0.43	2.38	14	1
1:A:174:VAL:HG21	1:A:238:PRO:HG3	0.43	1.87	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:GLY:C	1:A:131:MET:HE3	0.43	2.37	17	1
1:A:244:LEU:HB3	1:A:306:VAL:HG21	0.43	1.90	1	1
1:A:271:VAL:HG12	1:A:275:LYS:HD3	0.43	1.88	2	1
1:A:286:MET:SD	1:A:299:ILE:HG22	0.43	2.53	12	1
1:A:155:LEU:HD22	1:A:328:LEU:HD12	0.43	1.90	19	1
1:A:84:LEU:HD23	1:A:129:MET:HE2	0.43	1.88	6	1
1:A:161:ILE:CD1	1:A:183:LEU:HD21	0.43	2.43	12	1
1:A:225:ILE:HD11	1:A:268:PRO:HB3	0.43	1.88	19	1
1:A:168:ILE:HD11	1:A:175:HIS:CE1	0.43	2.47	1	1
1:A:34:LYS:O	1:A:35:LYS:CG	0.43	2.66	4	3
1:A:251:MET:HE2	1:A:299:ILE:HD12	0.43	1.89	12	1
1:A:152:LYS:CD	1:A:153:THR:HG23	0.43	2.43	14	1
1:A:100:ILE:HD13	1:A:100:ILE:N	0.43	2.29	15	1
1:A:114:TRP:CD1	1:A:114:TRP:N	0.43	2.87	15	1
1:A:177:ASP:OD2	1:A:200:LEU:HD13	0.43	2.12	12	1
1:A:140:LYS:CE	1:A:344:VAL:HG11	0.43	2.43	14	1
1:A:151:ARG:HH12	1:A:255:LEU:HD21	0.43	1.72	15	1
1:A:227:PHE:HB3	1:A:246:ILE:HG23	0.43	1.91	15	1
1:A:79:PRO:HB3	1:A:353:THR:HG23	0.43	1.89	17	1
1:A:84:LEU:HD22	1:A:129:MET:SD	0.43	2.53	2	2
1:A:220:CYS:C	1:A:222:ASP:H	0.43	2.22	18	2
1:A:54:ALA:HB1	1:A:130:ILE:HD11	0.43	1.89	11	1
1:A:141:ILE:HG12	1:A:344:VAL:HG13	0.43	1.90	16	1
1:A:174:VAL:HG13	1:A:243:ASP:OD2	0.43	2.13	4	3
1:A:253:GLN:HB2	1:A:259:LEU:HD11	0.43	1.89	10	2
1:A:309:LEU:O	1:A:310:ASP:CB	0.43	2.65	13	2
1:A:240:ARG:O	1:A:241:ARG:C	0.43	2.62	20	2
1:A:323:ILE:HD12	1:A:324:LEU:N	0.43	2.29	8	2
1:A:241:ARG:NH2	1:A:309:LEU:HD13	0.43	2.28	18	1
1:A:240:ARG:HD3	1:A:312:THR:HG22	0.43	1.91	19	1
1:A:326:GLN:O	1:A:330:ALA:HB2	0.43	2.14	18	8
1:A:141:ILE:HD12	1:A:345:GLU:HB3	0.43	1.90	7	1
1:A:301:LYS:HG2	1:A:323:ILE:HD13	0.43	1.91	11	1
1:A:157:LEU:CD2	1:A:193:VAL:HG21	0.43	2.44	12	1
1:A:87:TYR:O	1:A:91:ALA:N	0.43	2.51	15	1
1:A:141:ILE:HG12	1:A:344:VAL:HG22	0.43	1.91	16	1
1:A:184:LEU:CD2	1:A:196:VAL:HG22	0.42	2.34	1	1
1:A:84:LEU:HD12	1:A:129:MET:SD	0.42	2.54	7	1
1:A:49:GLY:O	1:A:50:CYS:CB	0.42	2.66	18	2
1:A:184:LEU:HD13	1:A:184:LEU:N	0.42	2.29	15	1
1:A:304:GLU:O	1:A:308:LEU:HD23	0.42	2.13	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:GLY:HA2	1:A:56:MET:HE3	0.42	1.92	18	1
1:A:144:ALA:HB3	1:A:345:GLU:CD	0.42	2.38	1	1
1:A:175:HIS:CD2	1:A:195:LEU:HD23	0.42	2.49	3	1
1:A:197:ASP:OD2	1:A:200:LEU:HD12	0.42	2.14	3	1
1:A:243:ASP:HA	1:A:246:ILE:HD12	0.42	1.90	16	2
1:A:255:LEU:HD23	1:A:299:ILE:CD1	0.42	2.44	8	1
1:A:71:LYS:O	1:A:128:PHE:HA	0.42	2.15	9	1
1:A:131:MET:O	1:A:132:ASP:O	0.42	2.38	9	1
1:A:146:ALA:C	1:A:147:LYS:CG	0.42	2.92	12	3
1:A:249:TYR:CD1	1:A:249:TYR:C	0.42	2.97	5	1
1:A:50:CYS:O	1:A:72:VAL:HG22	0.42	2.14	9	1
1:A:80:LEU:HD22	1:A:83:GLU:CD	0.42	2.39	11	1
1:A:26:GLY:N	1:A:39:VAL:HG13	0.42	2.29	12	1
1:A:53:LEU:HD22	1:A:56:MET:HE2	0.42	1.91	19	1
1:A:84:LEU:HD12	1:A:127:ARG:HD3	0.42	1.89	20	1
1:A:264:ASN:C	1:A:271:VAL:HG13	0.42	2.39	3	1
1:A:176:GLY:CA	1:A:246:ILE:HD13	0.42	2.44	7	1
1:A:253:GLN:O	1:A:257:GLY:HA2	0.42	2.15	8	1
1:A:316:LEU:HD22	1:A:318:GLU:CD	0.42	2.39	5	1
1:A:25:VAL:HG22	1:A:40:GLY:O	0.42	2.14	16	1
1:A:176:GLY:O	1:A:246:ILE:HD13	0.42	2.15	19	1
1:A:140:LYS:HE3	1:A:144:ALA:HB2	0.42	1.91	6	1
1:A:99:TRP:CZ3	1:A:108:LEU:HD22	0.42	2.50	12	1
1:A:302:TYR:O	1:A:306:VAL:HG13	0.42	2.15	14	2
1:A:328:LEU:HD12	1:A:333:SER:HB3	0.42	1.91	16	1
1:A:29:ILE:HD12	1:A:128:PHE:CD1	0.42	2.49	20	1
1:A:80:LEU:HD23	1:A:127:ARG:HB2	0.42	1.91	16	1
1:A:91:ALA:O	1:A:92:LYS:CB	0.42	2.68	1	1
1:A:153:THR:HG21	1:A:341:LEU:HD12	0.42	1.91	4	1
1:A:204:TYR:CD1	1:A:204:TYR:C	0.42	2.96	7	1
1:A:26:GLY:H	1:A:39:VAL:HG13	0.42	1.75	12	2
1:A:172:GLU:O	1:A:173:TYR:CG	0.42	2.73	11	1
1:A:48:PHE:O	1:A:51:ILE:HD11	0.42	2.15	18	1
1:A:151:ARG:CD	1:A:255:LEU:HD11	0.42	2.45	18	1
1:A:238:PRO:O	1:A:239:SER:CB	0.41	2.68	13	1
1:A:295:LYS:NZ	1:A:331:ILE:HD13	0.41	2.29	13	1
1:A:55:ASP:O	1:A:56:MET:CB	0.41	2.66	16	1
1:A:80:LEU:HD21	1:A:127:ARG:HG2	0.41	1.91	3	1
1:A:231:ASP:CG	1:A:246:ILE:HD11	0.41	2.40	5	1
1:A:31:ASP:OD2	1:A:33:ALA:HB3	0.41	2.15	8	1
1:A:281:ASN:C	1:A:285:LEU:HD12	0.41	2.40	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:138:LEU:HD13	1:A:183:LEU:HB3	0.41	1.92	20	1
1:A:69:VAL:HG13	1:A:133:ARG:HG2	0.41	1.92	2	1
1:A:96:ILE:HG23	1:A:108:LEU:CD1	0.41	2.37	8	1
1:A:196:VAL:O	1:A:197:ASP:CB	0.41	2.69	14	1
1:A:80:LEU:HD13	1:A:80:LEU:C	0.41	2.40	14	1
1:A:252:ILE:O	1:A:256:THR:HG23	0.41	2.16	14	1
1:A:216:ASP:CB	1:A:217:PRO:CD	0.41	2.98	17	1
1:A:224:THR:C	1:A:226:GLU:N	0.41	2.77	17	1
1:A:244:LEU:HD13	1:A:306:VAL:HB	0.41	1.92	2	1
1:A:213:TYR:HB2	1:A:236:VAL:HG23	0.41	1.91	4	2
1:A:144:ALA:CB	1:A:343:VAL:HG12	0.41	2.45	5	1
1:A:261:TRP:CD1	1:A:261:TRP:C	0.41	2.98	5	1
1:A:155:LEU:HD23	1:A:328:LEU:CD1	0.41	2.36	11	1
1:A:342:SER:C	1:A:343:VAL:HG22	0.41	2.40	12	1
1:A:77:ASN:HB3	1:A:80:LEU:CB	0.41	2.44	14	1
1:A:87:TYR:O	1:A:91:ALA:HB3	0.41	2.16	7	1
1:A:282:ILE:HG21	1:A:303:MET:SD	0.41	2.55	7	1
1:A:200:LEU:HD23	1:A:352:LYS:CB	0.41	2.46	15	1
1:A:286:MET:N	1:A:286:MET:HE3	0.41	2.31	16	1
1:A:131:MET:HE2	1:A:197:ASP:OD1	0.41	2.15	18	1
1:A:220:CYS:O	1:A:221:HIS:CD2	0.41	2.73	1	1
1:A:303:MET:O	1:A:306:VAL:HG22	0.41	2.15	2	1
1:A:53:LEU:HD12	1:A:68:CYS:O	0.41	2.16	3	1
1:A:80:LEU:HD21	1:A:129:MET:HE1	0.41	1.92	2	1
1:A:174:VAL:HG11	1:A:238:PRO:HG3	0.41	1.93	4	1
1:A:265:LEU:HA	1:A:271:VAL:HG11	0.41	1.93	7	1
1:A:239:SER:HB2	1:A:312:THR:HG23	0.41	1.91	12	1
1:A:230:ILE:HG23	1:A:275:LYS:HG3	0.41	1.91	4	1
1:A:231:ASP:O	1:A:236:VAL:HG12	0.41	2.15	9	1
1:A:25:VAL:HG23	1:A:40:GLY:C	0.41	2.41	10	1
1:A:53:LEU:HD21	1:A:133:ARG:CD	0.41	2.46	15	1
1:A:184:LEU:O	1:A:193:VAL:HG23	0.41	2.16	17	1
1:A:341:LEU:C	1:A:341:LEU:HD23	0.41	2.41	3	1
1:A:177:ASP:HB2	1:A:200:LEU:HD21	0.41	1.92	4	1
1:A:30:THR:HG23	1:A:36:GLU:HG2	0.41	1.93	6	1
1:A:160:ARG:NE	1:A:193:VAL:HG13	0.41	2.31	7	1
1:A:185:LEU:HD11	1:A:341:LEU:CD1	0.41	2.41	12	1
1:A:165:LEU:HD21	1:A:175:HIS:HB3	0.41	1.93	20	1
1:A:255:LEU:HD11	1:A:294:ASN:ND2	0.40	2.30	4	1
1:A:105:LEU:HD23	1:A:163:ASP:CG	0.40	2.41	5	1
1:A:86:PHE:CE2	1:A:168:ILE:HG21	0.40	2.51	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:THR:CG2	1:A:201:ALA:HB3	0.40	2.46	6	1
1:A:302:TYR:CD1	1:A:302:TYR:C	0.40	2.99	17	1
1:A:84:LEU:HD13	1:A:129:MET:SD	0.40	2.56	18	1
1:A:251:MET:HE2	1:A:298:GLU:OE2	0.40	2.17	3	1
1:A:179:LYS:O	1:A:180:ALA:HB2	0.40	2.16	8	1
1:A:28:ILE:HD13	1:A:38:LYS:HB3	0.40	1.93	11	1
1:A:155:LEU:HG	1:A:328:LEU:HD13	0.40	1.93	16	1
1:A:47:GLY:HA3	1:A:351:ALA:HB3	0.40	1.92	18	1
1:A:282:ILE:HA	1:A:285:LEU:HD21	0.40	1.91	2	1
1:A:161:ILE:HG22	1:A:165:LEU:HD12	0.40	1.94	17	1
1:A:173:TYR:O	1:A:174:VAL:HG13	0.40	2.16	18	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	316/368 (86%)	250±4 (79±1%)	46±4 (14±1%)	20±4 (6±1%)	2	18
All	All	6320/7360 (86%)	5002 (79%)	913 (14%)	405 (6%)	2	18

All 71 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	297	GLY	20
1	A	356	LYS	17
1	A	219	ARG	15
1	A	135	GLY	14
1	A	172	GLU	14
1	A	218	LYS	14
1	A	92	LYS	13
1	A	310	ASP	12
1	A	344	VAL	12
1	A	77	ASN	11
1	A	334	LYS	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	340	ASP	11
1	A	132	ASP	10
1	A	342	SER	10
1	A	192	GLN	8
1	A	229	SER	8
1	A	312	THR	8
1	A	339	LEU	8
1	A	78	GLY	8
1	A	294	ASN	8
1	A	345	GLU	8
1	A	214	LYS	7
1	A	121	LYS	7
1	A	55	ASP	7
1	A	215	GLU	6
1	A	179	LYS	6
1	A	295	LYS	6
1	A	292	GLU	5
1	A	48	PHE	5
1	A	293	LYS	5
1	A	239	SER	5
1	A	352	LYS	5
1	A	196	VAL	5
1	A	309	LEU	5
1	A	343	VAL	5
1	A	53	LEU	4
1	A	35	LYS	4
1	A	106	LYS	4
1	A	221	HIS	4
1	A	335	ASP	4
1	A	56	MET	3
1	A	240	ARG	3
1	A	47	GLY	3
1	A	120	ASP	3
1	A	122	ASN	3
1	A	211	LYS	3
1	A	124	LYS	3
1	A	175	HIS	3
1	A	353	THR	3
1	A	351	ALA	3
1	A	50	CYS	3
1	A	49	GLY	3
1	A	76	ASP	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	216	ASP	3
1	A	36	GLU	2
1	A	105	LEU	2
1	A	313	GLU	2
1	A	44	GLY	2
1	A	314	LYS	2
1	A	341	LEU	2
1	A	46	GLY	2
1	A	210	HIS	1
1	A	223	GLY	1
1	A	350	LYS	1
1	A	180	ALA	1
1	A	173	TYR	1
1	A	66	ALA	1
1	A	204	TYR	1
1	A	212	GLU	1
1	A	222	ASP	1
1	A	203	ARG	1

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	278/319 (87%)	202±7 (73±2%)	76±7 (27±2%)	1	20
All	All	5560/6380 (87%)	4033 (73%)	1527 (27%)	1	20

All 228 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	305	THR	20
1	A	70	VAL	19
1	A	130	ILE	19
1	A	147	LYS	19
1	A	155	LEU	19
1	A	293	LYS	16
1	A	352	LYS	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	350	LYS	16
1	A	354	ILE	16
1	A	106	LYS	15
1	A	267	ASP	15
1	A	92	LYS	15
1	A	282	ILE	14
1	A	132	ASP	14
1	A	303	MET	14
1	A	131	MET	14
1	A	30	THR	13
1	A	41	LEU	13
1	A	71	LYS	13
1	A	110	VAL	13
1	A	124	LYS	13
1	A	183	LEU	13
1	A	188	LYS	13
1	A	356	LYS	13
1	A	187	TYR	13
1	A	133	ARG	12
1	A	142	TYR	12
1	A	240	ARG	12
1	A	310	ASP	12
1	A	334	LYS	12
1	A	341	LEU	12
1	A	152	LYS	12
1	A	200	LEU	12
1	A	218	LYS	12
1	A	245	GLU	12
1	A	295	LYS	12
1	A	307	LYS	12
1	A	53	LEU	11
1	A	125	SER	11
1	A	138	LEU	11
1	A	192	GLN	11
1	A	216	ASP	11
1	A	34	LYS	11
1	A	121	LYS	11
1	A	231	ASP	11
1	A	252	ILE	11
1	A	85	LYS	11
1	A	98	LYS	10
1	A	129	MET	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	170	GLU	10
1	A	172	GLU	10
1	A	212	GLU	10
1	A	214	LYS	10
1	A	228	THR	10
1	A	345	GLU	10
1	A	229	SER	10
1	A	28	ILE	10
1	A	289	CYS	10
1	A	342	SER	10
1	A	105	LEU	10
1	A	27	GLU	9
1	A	56	MET	9
1	A	265	LEU	9
1	A	298	GLU	9
1	A	301	LYS	9
1	A	314	LYS	9
1	A	159	LEU	9
1	A	262	GLU	9
1	A	280	GLU	9
1	A	150	SER	9
1	A	269	LYS	9
1	A	274	SER	9
1	A	104	LYS	9
1	A	35	LYS	8
1	A	48	PHE	8
1	A	99	TRP	8
1	A	136	SER	8
1	A	137	ASP	8
1	A	203	ARG	8
1	A	258	HIS	8
1	A	286	MET	8
1	A	309	LEU	8
1	A	77	ASN	8
1	A	196	VAL	8
1	A	215	GLU	8
1	A	273	ASP	8
1	A	328	LEU	8
1	A	88	GLN	8
1	A	118	LEU	8
1	A	156	GLN	8
1	A	243	ASP	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	292	GLU	8
1	A	103	ARG	8
1	A	73	GLU	8
1	A	29	ILE	7
1	A	36	GLU	7
1	A	87	TYR	7
1	A	151	ARG	7
1	A	179	LYS	7
1	A	326	GLN	7
1	A	335	ASP	7
1	A	220	CYS	7
1	A	279	ARG	7
1	A	266	LYS	7
1	A	185	LEU	7
1	A	51	ILE	7
1	A	80	LEU	7
1	A	127	ARG	6
1	A	162	LEU	6
1	A	186	ASN	6
1	A	211	LYS	6
1	A	184	LEU	6
1	A	275	LYS	6
1	A	287	ASP	6
1	A	312	THR	6
1	A	89	ARG	6
1	A	140	LYS	6
1	A	195	LEU	6
1	A	250	CYS	6
1	A	182	ASN	6
1	A	304	GLU	6
1	A	86	PHE	6
1	A	171	HIS	6
1	A	340	ASP	6
1	A	288	LYS	5
1	A	294	ASN	5
1	A	323	ILE	5
1	A	233	HIS	5
1	A	241	ARG	5
1	A	278	TYR	5
1	A	75	SER	5
1	A	207	GLU	5
1	A	219	ARG	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	263	ASP	5
1	A	157	LEU	5
1	A	251	MET	5
1	A	139	GLN	5
1	A	290	PHE	5
1	A	165	LEU	5
1	A	38	LYS	5
1	A	76	ASP	4
1	A	178	ILE	4
1	A	322	ASP	4
1	A	325	LEU	4
1	A	145	ASN	4
1	A	253	GLN	4
1	A	308	LEU	4
1	A	45	GLN	4
1	A	101	ARG	4
1	A	160	ARG	4
1	A	181	SER	4
1	A	272	ARG	4
1	A	329	LYS	4
1	A	50	CYS	4
1	A	319	ASN	4
1	A	108	LEU	4
1	A	141	ILE	4
1	A	169	HIS	4
1	A	226	GLU	4
1	A	313	GLU	4
1	A	239	SER	4
1	A	95	GLN	3
1	A	173	TYR	3
1	A	166	GLU	3
1	A	285	LEU	3
1	A	97	GLN	3
1	A	284	SER	3
1	A	175	HIS	3
1	A	222	ASP	3
1	A	321	ARG	3
1	A	143	GLU	3
1	A	311	TYR	3
1	A	120	ASP	3
1	A	236	VAL	3
1	A	119	HIS	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	122	ASN	3
1	A	224	THR	3
1	A	153	THR	2
1	A	177	ASP	2
1	A	37	TRP	2
1	A	197	ASP	2
1	A	234	ASN	2
1	A	83	GLU	2
1	A	324	LEU	2
1	A	84	LEU	2
1	A	32	MET	2
1	A	94	GLU	2
1	A	210	HIS	2
1	A	161	ILE	2
1	A	189	ASN	2
1	A	225	ILE	2
1	A	244	LEU	2
1	A	343	VAL	2
1	A	333	SER	2
1	A	55	ASP	2
1	A	204	TYR	2
1	A	331	ILE	2
1	A	339	LEU	2
1	A	355	THR	2
1	A	68	CYS	2
1	A	255	LEU	2
1	A	306	VAL	1
1	A	281	ASN	1
1	A	163	ASP	1
1	A	164	ILE	1
1	A	25	VAL	1
1	A	112	LYS	1
1	A	174	VAL	1
1	A	344	VAL	1
1	A	205	CYS	1
1	A	209	VAL	1
1	A	221	HIS	1
1	A	264	ASN	1
1	A	316	LEU	1
1	A	317	TYR	1
1	A	107	TYR	1
1	A	69	VAL	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	100	ILE	1
1	A	113	TYR	1
1	A	271	VAL	1
1	A	277	ARG	1
1	A	39	VAL	1
1	A	191	ASP	1
1	A	82	THR	1
1	A	318	GLU	1
1	A	148	ARG	1
1	A	158	SER	1
1	A	246	ILE	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

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