



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 1, 2026 – 03:59 AM UTC

PDB ID : 2PDE / pdb_00002pde
Title : THE HIGH RESOLUTION STRUCTURE OF THE PERIPHERAL SUBUNIT-BINDING DOMAIN OF DIHYDROLIPOAMIDE ACETYLTRANSFERASE FROM THE PYRUVATE DEHYDROGENASE MULTIENZYME COMPLEX OF BACILLUS STEAROTHERMOPHILUS
Authors : Kalia, Y.N.; Brocklehurst, S.M.; Hipps, D.S.; Appella, E.; Sakaguchi, K.; Perham, R.N.
Deposited on : 1992-11-25

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

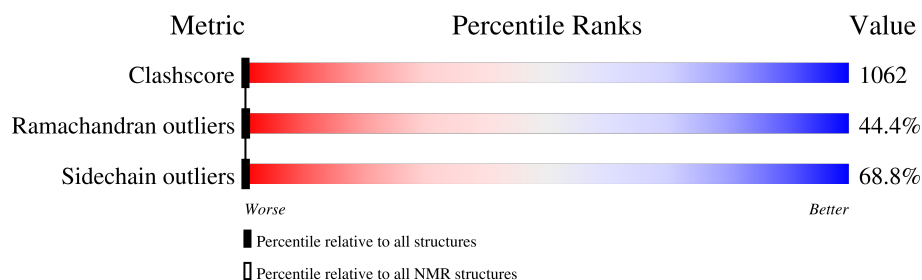
1 Overall quality at a glance

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	43	7% 9% 19% 65%

2 Ensemble composition and analysis ⓘ

This entry contains 1 models. Identification of well-defined residues and clustering analysis are not possible.

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 665 atoms, of which 344 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called DIHYDROLIPOAMIDE ACETYLTRANSFERASE.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	43	Total	C	H	N	O	S	0
			665	202	344	61	57	1	

4 Residue-property plots

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: DIHYDROLIPOAMIDE ACETYLTRANSFERASE

Chain A: 



5 Refinement protocol and experimental data overview

Of the ? calculated structures, 1 were deposited, based on the following criterion: ?.

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

No chemical shift data was provided.

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	132.63	231/307 (75.2%)	26.71	261/383 (68.1%)
All	All	132.63	231/307 (75.2%)	26.71	261/383 (68.1%)

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	19	34
All	All	19	34

All bond outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	19	ARG	CA-C	670.12	10.50	1.52
1	A	34	ASP	CA-CB	609.60	13.72	1.53
1	A	14	LYS	CA-C	600.42	9.57	1.52
1	A	3	ALA	N-CA	587.21	8.15	1.46
1	A	8	ARG	CA-C	526.20	8.57	1.52
1	A	34	ASP	CA-C	483.21	11.67	1.52
1	A	18	ILE	CA-C	471.59	11.43	1.52
1	A	26	LYS	CA-C	435.42	7.36	1.52
1	A	6	SER	CA-C	415.77	7.09	1.52
1	A	29	ARG	CA-C	409.26	10.12	1.52
1	A	20	LEU	CA-C	401.24	7.15	1.53
1	A	9	LYS	N-CA	396.99	6.58	1.46
1	A	23	GLY	CA-C	396.29	8.65	1.52
1	A	9	LYS	CA-C	359.41	6.34	1.52
1	A	12	ARG	CA-C	357.11	9.02	1.52
1	A	7	VAL	CA-C	318.79	5.57	1.52
1	A	10	TYR	N-CA	301.23	7.18	1.46
1	A	2	ILE	CA-C	293.35	5.25	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	4	MET	CA-C	286.98	5.14	1.52
1	A	11	ALA	CA-C	264.30	7.08	1.52
1	A	10	TYR	CA-C	259.42	6.97	1.52
1	A	6	SER	CA-CB	255.96	5.86	1.53
1	A	3	ALA	CA-C	254.84	4.81	1.52
1	A	34	ASP	N-CA	215.64	5.55	1.46
1	A	15	GLY	C-O	208.45	5.40	1.23
1	A	14	LYS	CG-CD	191.89	7.28	1.52
1	A	29	ARG	CZ-NH1	186.66	3.94	1.32
1	A	29	ARG	CB-CG	178.37	6.87	1.52
1	A	8	ARG	CG-CD	175.78	6.79	1.52
1	A	21	VAL	CA-C	175.74	5.22	1.52
1	A	12	ARG	CZ-NH2	173.04	3.58	1.33
1	A	13	GLU	CA-C	170.65	5.11	1.52
1	A	27	ASN	CA-C	169.38	5.08	1.52
1	A	29	ARG	NE-CZ	168.73	3.18	1.33
1	A	22	GLN	CA-C	159.22	4.87	1.52
1	A	33	GLU	CA-C	157.27	4.83	1.52
1	A	31	LEU	CA-C	156.94	4.82	1.52
1	A	7	VAL	N-CA	154.78	3.39	1.46
1	A	5	PRO	CA-C	151.79	4.56	1.52
1	A	17	ASP	CA-C	149.64	4.67	1.52
1	A	16	VAL	C-O	146.42	4.16	1.23
1	A	5	PRO	N-CD	140.02	3.43	1.47
1	A	8	ARG	NE-CZ	136.74	2.83	1.33
1	A	18	ILE	CA-CB	134.65	5.18	1.54
1	A	30	VAL	CA-C	134.51	4.35	1.52
1	A	20	LEU	CG-CD2	134.10	5.95	1.52
1	A	24	THR	C-O	132.70	3.88	1.23
1	A	32	LYS	CA-C	131.20	4.28	1.52
1	A	21	VAL	CB-CG1	129.91	5.81	1.52
1	A	23	GLY	N-CA	128.08	3.50	1.45
1	A	26	LYS	N-CA	122.82	3.04	1.46
1	A	8	ARG	N-CA	120.47	3.01	1.46
1	A	31	LEU	CG-CD1	115.50	5.33	1.52
1	A	12	ARG	CB-CG	115.23	4.98	1.52
1	A	33	GLU	CD-OE1	115.22	3.44	1.25
1	A	11	ALA	CA-CB	113.24	5.26	1.52
1	A	3	ALA	CA-CB	112.31	3.09	1.53
1	A	10	TYR	C-O	110.01	3.43	1.23
1	A	31	LEU	C-O	109.47	3.42	1.23
1	A	26	LYS	CD-CE	104.54	4.66	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	25	GLY	N-CA	104.08	3.12	1.45
1	A	8	ARG	CZ-NH2	102.93	2.67	1.33
1	A	19	ARG	CB-CG	97.20	4.44	1.52
1	A	21	VAL	CB-CG2	96.28	4.70	1.52
1	A	9	LYS	CA-CB	92.50	3.09	1.53
1	A	12	ARG	CZ-NH1	92.11	2.61	1.32
1	A	28	GLY	N-CA	90.63	2.90	1.45
1	A	8	ARG	CA-CB	90.17	3.05	1.53
1	A	29	ARG	CD-NE	89.96	2.72	1.46
1	A	12	ARG	CD-NE	87.62	2.69	1.46
1	A	19	ARG	CZ-NH2	86.73	2.46	1.33
1	A	32	LYS	N-CA	86.57	3.10	1.46
1	A	31	LEU	CG-CD2	86.31	4.37	1.52
1	A	28	GLY	CA-C	86.16	3.07	1.52
1	A	17	ASP	N-CA	86.15	3.10	1.46
1	A	16	VAL	N-CA	84.83	3.07	1.46
1	A	21	VAL	N-CA	84.67	3.07	1.46
1	A	18	ILE	N-CA	84.38	3.06	1.46
1	A	5	PRO	CA-CB	83.43	3.04	1.53
1	A	14	LYS	CB-CG	82.67	4.00	1.52
1	A	22	GLN	N-CA	80.61	2.99	1.46
1	A	10	TYR	CA-CB	77.96	3.09	1.53
1	A	10	TYR	CG-CD2	77.27	3.01	1.39
1	A	24	THR	N-CA	76.77	2.92	1.46
1	A	33	GLU	CA-CB	76.26	3.06	1.53
1	A	20	LEU	N-CA	75.62	2.36	1.46
1	A	33	GLU	N-CA	75.58	2.89	1.46
1	A	24	THR	CB-OG1	73.31	2.61	1.43
1	A	17	ASP	CA-CB	73.05	2.99	1.53
1	A	15	GLY	N-CA	72.88	2.62	1.45
1	A	30	VAL	CB-CG2	71.87	3.89	1.52
1	A	30	VAL	CA-CB	70.09	3.43	1.54
1	A	25	GLY	CA-C	68.34	2.75	1.52
1	A	19	ARG	N-CA	68.14	2.34	1.46
1	A	5	PRO	CG-CD	68.10	3.35	1.51
1	A	29	ARG	CZ-NH2	66.23	2.19	1.33
1	A	16	VAL	CB-CG1	65.56	3.68	1.52
1	A	4	MET	CA-CB	65.11	2.56	1.53
1	A	1	VAL	CA-C	65.09	2.89	1.52
1	A	6	SER	CB-OG	65.05	2.72	1.42
1	A	16	VAL	CA-C	64.35	2.88	1.52
1	A	26	LYS	CB-CG	63.62	3.43	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	32	LYS	CE-NZ	62.49	3.36	1.49
1	A	17	ASP	CG-OD2	62.27	2.43	1.25
1	A	32	LYS	CA-CB	61.50	2.76	1.53
1	A	8	ARG	CZ-NH1	60.91	2.18	1.32
1	A	13	GLU	CG-CD	60.66	3.03	1.52
1	A	2	ILE	CG1-CD1	60.06	3.85	1.51
1	A	22	GLN	CG-CD	59.95	3.02	1.52
1	A	26	LYS	CA-CB	59.70	2.54	1.53
1	A	31	LEU	CB-CG	59.31	2.72	1.53
1	A	21	VAL	CA-CB	56.19	3.06	1.54
1	A	24	THR	CA-CB	55.60	3.04	1.54
1	A	18	ILE	CB-CG2	53.38	3.28	1.52
1	A	1	VAL	N-CA	52.25	2.45	1.46
1	A	27	ASN	N-CA	52.10	2.45	1.46
1	A	2	ILE	CB-CG2	50.84	3.20	1.52
1	A	21	VAL	C-O	49.92	2.23	1.23
1	A	27	ASN	C-O	49.57	2.22	1.23
1	A	18	ILE	CG1-CD1	49.40	3.44	1.51
1	A	32	LYS	C-O	49.31	2.22	1.23
1	A	23	GLY	C-O	48.89	2.21	1.23
1	A	10	TYR	CE1-CZ	47.98	2.53	1.38
1	A	17	ASP	CB-CG	47.88	2.71	1.52
1	A	30	VAL	N-CA	47.79	2.37	1.46
1	A	13	GLU	CD-OE2	47.56	2.15	1.25
1	A	17	ASP	CG-OD1	47.51	2.15	1.25
1	A	16	VAL	CA-CB	47.43	2.82	1.54
1	A	11	ALA	C-O	47.38	2.18	1.23
1	A	2	ILE	CB-CG1	47.17	2.47	1.53
1	A	29	ARG	C-O	46.64	2.16	1.23
1	A	16	VAL	CB-CG2	46.03	3.04	1.52
1	A	28	GLY	C-O	45.96	2.15	1.23
1	A	17	ASP	C-O	45.71	2.15	1.23
1	A	20	LEU	CA-CB	44.98	2.15	1.53
1	A	22	GLN	CA-CB	44.17	2.41	1.53
1	A	19	ARG	CG-CD	40.30	2.73	1.52
1	A	14	LYS	CD-CE	40.16	2.73	1.52
1	A	1	VAL	CB-CG1	39.16	2.81	1.52
1	A	10	TYR	CB-CG	39.09	2.37	1.51
1	A	24	THR	CA-C	38.92	2.34	1.52
1	A	8	ARG	CD-NE	37.86	1.99	1.46
1	A	22	GLN	CD-NE2	37.85	2.12	1.33
1	A	3	ALA	C-O	37.56	1.76	1.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	9	LYS	C-O	36.76	1.70	1.24
1	A	9	LYS	CB-CG	36.71	2.62	1.52
1	A	29	ARG	N-CA	36.29	2.15	1.46
1	A	12	ARG	N-CA	36.22	2.15	1.46
1	A	10	TYR	CG-CD1	36.06	2.15	1.39
1	A	10	TYR	CD2-CE2	35.96	2.46	1.38
1	A	6	SER	N-CA	34.95	1.91	1.46
1	A	10	TYR	CD1-CE1	34.93	2.43	1.38
1	A	7	VAL	CB-CG1	34.63	2.66	1.52
1	A	33	GLU	CB-CG	34.59	2.56	1.52
1	A	33	GLU	CG-CD	34.25	2.37	1.52
1	A	2	ILE	CA-CB	-33.91	1.08	1.54
1	A	32	LYS	CB-CG	33.82	2.54	1.52
1	A	32	LYS	CG-CD	32.89	2.51	1.52
1	A	27	ASN	CA-CB	31.99	2.17	1.53
1	A	33	GLU	C-N	30.81	1.76	1.33
1	A	22	GLN	CB-CG	30.43	2.43	1.52
1	A	4	MET	CB-CG	30.17	2.42	1.52
1	A	5	PRO	CB-CG	29.19	2.64	1.51
1	A	22	GLN	CD-OE1	28.15	1.77	1.23
1	A	14	LYS	CA-CB	27.88	2.00	1.53
1	A	13	GLU	CD-OE1	26.98	1.76	1.25
1	A	19	ARG	CA-CB	-26.59	1.08	1.53
1	A	4	MET	N-CA	-26.53	1.08	1.46
1	A	13	GLU	C-O	26.50	1.76	1.23
1	A	33	GLU	CD-OE2	26.45	1.75	1.25
1	A	9	LYS	C-N	26.41	1.70	1.33
1	A	33	GLU	C-O	26.29	1.76	1.23
1	A	12	ARG	C-O	26.27	1.76	1.23
1	A	24	THR	CB-CG2	26.16	2.38	1.52
1	A	8	ARG	CB-CG	25.38	2.28	1.52
1	A	19	ARG	CZ-NH1	-24.50	0.98	1.32
1	A	15	GLY	CA-C	-24.06	1.08	1.52
1	A	2	ILE	C-N	-24.04	1.00	1.33
1	A	22	GLN	C-N	-23.52	1.00	1.33
1	A	5	PRO	N-CA	-22.86	1.08	1.47
1	A	31	LEU	CA-CB	-22.52	1.08	1.53
1	A	12	ARG	NE-CZ	-22.43	1.08	1.33
1	A	14	LYS	CE-NZ	22.31	2.16	1.49
1	A	13	GLU	CB-CG	21.32	2.16	1.52
1	A	26	LYS	CE-NZ	20.59	2.11	1.49
1	A	32	LYS	CD-CE	20.24	2.13	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	4	MET	C-O	-20.17	0.98	1.24
1	A	2	ILE	C-O	-19.82	1.00	1.24
1	A	19	ARG	C-N	-19.65	1.08	1.33
1	A	12	ARG	CG-CD	19.60	2.11	1.52
1	A	29	ARG	CG-CD	19.29	2.10	1.52
1	A	6	SER	C-N	-18.71	1.08	1.33
1	A	7	VAL	CA-CB	-18.40	1.29	1.54
1	A	25	GLY	C-N	-17.99	1.08	1.33
1	A	20	LEU	C-N	-17.84	1.08	1.33
1	A	26	LYS	C-N	-17.77	1.08	1.33
1	A	7	VAL	C-N	-17.68	1.08	1.33
1	A	14	LYS	C-N	-17.64	1.08	1.33
1	A	11	ALA	N-CA	15.88	1.76	1.46
1	A	12	ARG	CA-CB	-15.50	1.22	1.53
1	A	29	ARG	CA-CB	-15.49	1.22	1.53
1	A	4	MET	CG-SD	15.47	2.19	1.80
1	A	26	LYS	CG-CD	-14.65	1.08	1.52
1	A	20	LEU	CG-CD1	-14.57	1.04	1.52
1	A	10	TYR	CZ-OH	-14.16	1.08	1.38
1	A	27	ASN	CG-ND2	-13.74	1.04	1.33
1	A	20	LEU	C-O	-13.52	1.08	1.23
1	A	30	VAL	CB-CG1	-13.44	1.08	1.52
1	A	1	VAL	CB-CG2	-13.36	1.08	1.52
1	A	7	VAL	C-O	-13.13	1.08	1.24
1	A	30	VAL	C-O	-12.58	0.98	1.23
1	A	1	VAL	C-O	-12.50	0.98	1.23
1	A	14	LYS	C-O	-12.36	1.08	1.24
1	A	26	LYS	C-O	-12.32	1.08	1.24
1	A	19	ARG	C-O	-12.18	1.08	1.24
1	A	6	SER	C-O	-12.04	1.08	1.24
1	A	22	GLN	C-O	-11.54	1.00	1.23
1	A	30	VAL	C-N	11.18	1.49	1.33
1	A	1	VAL	C-N	11.16	1.48	1.33
1	A	18	ILE	CB-CG1	-10.92	1.31	1.53
1	A	14	LYS	N-CA	-10.58	1.32	1.46
1	A	27	ASN	CG-OD1	-10.02	1.04	1.23
1	A	13	GLU	N-CA	-8.76	1.29	1.46
1	A	8	ARG	C-N	-8.02	1.22	1.33
1	A	5	PRO	C-O	-7.45	1.08	1.23
1	A	18	ILE	C-O	-7.44	1.08	1.23
1	A	25	GLY	C-O	-7.33	1.08	1.23
1	A	4	MET	C-N	7.11	1.47	1.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	10	TYR	CE2-CZ	6.69	1.54	1.38
1	A	2	ILE	N-CA	5.98	1.53	1.46
1	A	18	ILE	C-N	5.57	1.41	1.33

All angle outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	12	ARG	NH1-CZ-NH2	-84.89	8.94	119.30
1	A	29	ARG	NE-CZ-NH2	-78.55	48.50	119.20
1	A	2	ILE	CA-C-N	-75.39	4.13	122.49
1	A	2	ILE	C-N-CA	-75.39	4.13	122.49
1	A	20	LEU	N-CA-C	-69.34	3.50	109.60
1	A	21	VAL	CA-C-O	-67.74	5.65	120.80
1	A	5	PRO	N-CA-CB	-66.53	29.42	102.60
1	A	8	ARG	NE-CZ-NH2	-65.02	60.68	119.20
1	A	8	ARG	NH1-CZ-NH2	-64.84	35.00	119.30
1	A	20	LEU	CA-C-O	-64.47	49.13	121.98
1	A	10	TYR	CD1-CG-CD2	-63.84	22.34	118.10
1	A	11	ALA	CB-CA-C	-63.77	14.84	110.50
1	A	8	ARG	NE-CZ-NH1	-62.17	59.33	121.50
1	A	29	ARG	NE-CZ-NH1	-59.79	61.71	121.50
1	A	7	VAL	CB-CA-C	-57.50	16.98	111.29
1	A	22	GLN	OE1-CD-NE2	-56.64	65.96	122.60
1	A	10	TYR	CA-C-O	-55.57	26.34	120.80
1	A	14	LYS	CA-CB-CG	-55.28	3.55	114.10
1	A	34	ASP	CB-CA-C	-54.42	6.71	110.10
1	A	12	ARG	CA-CB-CG	-54.41	5.27	114.10
1	A	24	THR	CA-C-O	-54.24	28.59	120.80
1	A	17	ASP	CA-CB-CG	-54.23	58.37	112.60
1	A	15	GLY	CA-C-O	-53.68	8.07	120.80
1	A	6	SER	CA-C-N	-52.72	27.08	121.97
1	A	6	SER	C-N-CA	-52.72	27.08	121.97
1	A	2	ILE	CA-C-O	-50.66	57.46	120.78
1	A	12	ARG	NE-CZ-NH2	-49.71	74.46	119.20
1	A	8	ARG	CA-C-N	-49.62	26.77	121.54
1	A	8	ARG	C-N-CA	-49.62	26.77	121.54
1	A	29	ARG	CD-NE-CZ	-49.09	55.68	124.40
1	A	25	GLY	CA-C-N	-48.20	29.47	121.54
1	A	25	GLY	C-N-CA	-48.20	29.47	121.54
1	A	12	ARG	NE-CZ-NH1	-48.11	73.39	121.50
1	A	9	LYS	O-C-N	-47.07	59.98	122.59
1	A	18	ILE	CB-CA-C	-46.92	17.76	111.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	7	VAL	CA-C-N	-46.91	31.95	121.54
1	A	7	VAL	C-N-CA	-46.91	31.95	121.54
1	A	34	ASP	CA-C-O	-46.61	41.57	120.80
1	A	29	ARG	CA-CB-CG	-43.83	26.45	114.10
1	A	20	LEU	CA-C-N	-43.66	43.10	121.70
1	A	20	LEU	C-N-CA	-43.66	43.10	121.70
1	A	12	ARG	CA-C-O	-43.20	47.35	120.80
1	A	21	VAL	CA-CB-CG2	-43.08	37.16	110.40
1	A	30	VAL	CA-CB-CG2	-43.04	37.23	110.40
1	A	18	ILE	CA-C-N	-42.92	39.56	121.54
1	A	18	ILE	C-N-CA	-42.92	39.56	121.54
1	A	14	LYS	N-CA-C	-42.64	19.98	110.80
1	A	10	TYR	CE1-CZ-CE2	-42.59	35.12	120.30
1	A	30	VAL	N-CA-CB	-42.48	39.29	111.50
1	A	6	SER	N-CA-CB	-42.18	39.20	110.49
1	A	3	ALA	CA-C-O	-41.70	69.49	119.95
1	A	8	ARG	CD-NE-CZ	-41.60	66.16	124.40
1	A	22	GLN	CA-C-O	-41.49	50.27	120.80
1	A	17	ASP	CB-CA-C	-41.29	31.66	110.10
1	A	16	VAL	CA-C-O	-41.06	50.99	120.80
1	A	24	THR	N-CA-CB	-40.21	43.14	111.50
1	A	17	ASP	OD1-CG-OD2	-40.20	26.41	122.90
1	A	22	GLN	CG-CD-NE2	-40.19	56.12	116.40
1	A	32	LYS	CB-CA-C	-40.10	33.91	110.10
1	A	30	VAL	CA-C-O	-39.98	52.83	120.80
1	A	21	VAL	CG1-CB-CG2	-39.65	23.56	110.80
1	A	33	GLU	O-C-N	-39.37	60.01	123.00
1	A	3	ALA	CB-CA-C	-38.83	48.12	111.02
1	A	17	ASP	N-CA-CB	-38.24	45.48	110.50
1	A	20	LEU	CD1-CG-CD2	-38.08	27.02	110.80
1	A	5	PRO	N-CD-CG	-38.01	58.19	103.80
1	A	26	LYS	CA-CB-CG	-37.73	38.65	114.10
1	A	19	ARG	NE-CZ-NH2	37.36	152.83	119.20
1	A	6	SER	CB-CA-C	-37.27	36.24	110.42
1	A	31	LEU	CD1-CG-CD2	-37.25	28.86	110.80
1	A	32	LYS	CA-C-O	-37.08	57.77	120.80
1	A	1	VAL	CA-CB-CG1	-36.02	49.16	110.40
1	A	18	ILE	CA-CB-CG2	35.91	171.54	110.50
1	A	8	ARG	N-CA-CB	-35.42	50.63	110.49
1	A	19	ARG	CA-C-N	-35.39	65.83	121.74
1	A	19	ARG	C-N-CA	-35.39	65.83	121.74
1	A	21	VAL	CA-CB-CG1	-35.20	50.57	110.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	10	TYR	CB-CG-CD2	-35.15	68.08	120.80
1	A	21	VAL	N-CA-CB	-35.14	51.76	111.50
1	A	10	TYR	CG-CD2-CE2	34.84	173.46	121.20
1	A	33	GLU	CG-CD-OE1	-34.80	38.36	118.40
1	A	33	GLU	N-CA-CB	-34.70	51.51	110.50
1	A	27	ASN	N-CA-C	-34.44	14.57	111.00
1	A	24	THR	OG1-CB-CG2	-34.15	41.00	109.30
1	A	13	GLU	CB-CA-C	-34.03	45.44	110.10
1	A	26	LYS	CA-C-N	-33.41	61.55	121.70
1	A	26	LYS	C-N-CA	-33.41	61.55	121.70
1	A	16	VAL	N-CA-CB	-33.25	54.98	111.50
1	A	9	LYS	CA-C-N	-32.84	62.59	121.70
1	A	9	LYS	C-N-CA	-32.84	62.59	121.70
1	A	16	VAL	CA-CB-CG2	-32.62	54.95	110.40
1	A	22	GLN	CA-C-N	-32.40	63.39	121.70
1	A	22	GLN	C-N-CA	-32.40	63.39	121.70
1	A	14	LYS	CA-C-O	-32.25	74.39	120.51
1	A	5	PRO	CA-N-CD	-32.20	66.42	111.50
1	A	13	GLU	CB-CG-CD	-32.08	58.06	112.60
1	A	16	VAL	CG1-CB-CG2	-32.00	40.41	110.80
1	A	33	GLU	CB-CA-C	-31.92	49.45	110.10
1	A	1	VAL	CA-C-O	-31.29	67.60	120.80
1	A	33	GLU	OE1-CD-OE2	-31.25	47.90	122.90
1	A	19	ARG	N-CA-C	-31.18	44.39	110.80
1	A	11	ALA	N-CA-CB	-30.63	64.45	110.40
1	A	4	MET	N-CA-CB	-30.38	56.30	110.37
1	A	26	LYS	N-CA-CB	-30.26	59.35	110.49
1	A	32	LYS	CA-CB-CG	-30.17	53.75	114.10
1	A	22	GLN	CB-CA-C	-30.14	52.83	110.10
1	A	27	ASN	CA-CB-CG	-30.07	82.53	112.60
1	A	16	VAL	CB-CA-C	-30.04	54.32	111.40
1	A	22	GLN	CG-CD-OE1	-30.01	60.78	120.80
1	A	18	ILE	CG1-CB-CG2	-29.82	21.24	110.70
1	A	2	ILE	CA-CB-CG2	-29.77	59.89	110.50
1	A	2	ILE	CA-CB-CG1	-29.66	59.98	110.40
1	A	7	VAL	CA-CB-CG1	29.55	160.63	110.40
1	A	8	ARG	CA-CB-CG	-29.44	55.23	114.10
1	A	32	LYS	N-CA-CB	-29.18	60.90	110.50
1	A	28	GLY	CA-C-O	-29.13	59.63	120.80
1	A	13	GLU	CG-CD-OE1	-28.89	51.96	118.40
1	A	13	GLU	CA-C-O	-27.95	73.29	120.80
1	A	14	LYS	CA-C-N	-27.36	72.45	121.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	14	LYS	C-N-CA	-27.36	72.45	121.70
1	A	33	GLU	CA-C-O	-27.19	74.57	120.80
1	A	4	MET	CA-CB-CG	-27.06	59.97	114.10
1	A	33	GLU	CA-CB-CG	-27.04	60.03	114.10
1	A	30	VAL	CB-CA-C	-26.81	60.47	111.40
1	A	30	VAL	N-CA-C	-26.79	35.99	111.00
1	A	17	ASP	CB-CG-OD2	-26.41	57.65	118.40
1	A	18	ILE	CA-CB-CG1	26.40	155.28	110.40
1	A	19	ARG	NH1-CZ-NH2	-26.22	85.22	119.30
1	A	7	VAL	CG1-CB-CG2	-25.94	53.74	110.80
1	A	4	MET	N-CA-C	-25.82	52.74	109.81
1	A	6	SER	CA-C-O	25.59	157.10	120.51
1	A	32	LYS	N-CA-C	-25.21	40.42	111.00
1	A	10	TYR	CD1-CE1-CZ	25.18	164.92	119.60
1	A	4	MET	CA-C-O	-25.12	85.75	120.16
1	A	33	GLU	CA-C-N	-24.93	76.83	121.70
1	A	33	GLU	C-N-CA	-24.93	76.83	121.70
1	A	27	ASN	CA-C-O	-24.59	78.99	120.80
1	A	34	ASP	CA-CB-CG	-24.56	88.04	112.60
1	A	17	ASP	CB-CG-OD1	-24.23	62.68	118.40
1	A	31	LEU	CA-C-O	-24.02	79.97	120.80
1	A	13	GLU	OE1-CD-OE2	-23.74	65.93	122.90
1	A	29	ARG	CG-CD-NE	-23.70	59.85	112.00
1	A	13	GLU	CG-CD-OE2	-23.55	64.22	118.40
1	A	18	ILE	N-CA-CB	-23.33	71.85	111.50
1	A	10	TYR	CB-CG-CD1	-23.05	86.22	120.80
1	A	28	GLY	N-CA-C	-22.69	47.50	113.30
1	A	29	ARG	CA-C-O	-22.46	82.62	120.80
1	A	6	SER	N-CA-C	-21.90	64.15	110.80
1	A	34	ASP	N-CA-CB	-21.86	73.34	110.50
1	A	32	LYS	CB-CG-CD	-21.28	62.35	111.30
1	A	27	ASN	N-CA-CB	-20.99	74.82	110.50
1	A	10	TYR	CB-CA-C	-20.82	70.53	110.10
1	A	22	GLN	CB-CG-CD	-20.75	77.32	112.60
1	A	19	ARG	N-CA-CB	20.62	145.34	110.49
1	A	12	ARG	CB-CA-C	20.44	148.93	110.10
1	A	2	ILE	N-CA-C	20.24	151.44	109.34
1	A	29	ARG	CB-CA-C	19.99	148.09	110.10
1	A	23	GLY	N-CA-C	-19.96	55.41	113.30
1	A	9	LYS	N-CA-CB	-19.90	76.87	110.49
1	A	20	LEU	N-CA-CB	-19.79	80.50	110.39
1	A	29	ARG	N-CA-C	-19.75	55.69	111.00

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1	VAL	N-CA-CB	19.26	144.25	111.50
1	A	18	ILE	N-CA-C	-19.07	57.61	111.00
1	A	24	THR	CB-CA-C	-19.06	67.18	109.10
1	A	13	GLU	N-CA-C	18.56	162.96	111.00
1	A	19	ARG	CG-CD-NE	17.80	151.17	112.00
1	A	33	GLU	CG-CD-OE2	-17.56	78.02	118.40
1	A	14	LYS	CD-CE-NZ	17.47	167.80	111.90
1	A	5	PRO	CB-CA-C	-17.18	69.06	112.00
1	A	20	LEU	CB-CA-C	-17.14	77.00	112.99
1	A	14	LYS	CB-CG-CD	-16.67	72.96	111.30
1	A	26	LYS	CD-CE-NZ	16.46	164.59	111.90
1	A	31	LEU	CA-CB-CG	-16.45	58.73	116.30
1	A	3	ALA	N-CA-CB	-16.26	84.37	111.20
1	A	1	VAL	N-CA-C	-15.99	66.22	111.00
1	A	10	TYR	CA-CB-CG	-15.97	85.15	113.90
1	A	2	ILE	CG1-CB-CG2	-15.84	63.19	110.70
1	A	24	THR	CA-CB-CG2	-15.29	84.50	110.50
1	A	17	ASP	CA-C-O	-15.29	94.81	120.80
1	A	26	LYS	N-CA-C	-15.23	78.37	110.80
1	A	24	THR	CA-CB-OG1	-15.19	86.82	109.60
1	A	10	TYR	CG-CD1-CE1	15.10	143.84	121.20
1	A	12	ARG	CB-CG-CD	15.01	145.83	111.30
1	A	23	GLY	CA-C-O	-14.76	89.81	120.80
1	A	1	VAL	CG1-CB-CG2	14.64	143.02	110.80
1	A	19	ARG	CA-C-O	14.43	141.15	120.51
1	A	5	PRO	CA-C-N	14.42	149.09	121.54
1	A	5	PRO	C-N-CA	14.42	149.09	121.54
1	A	11	ALA	CA-C-O	-14.39	96.33	120.80
1	A	22	GLN	N-CA-CB	-14.36	86.09	110.50
1	A	7	VAL	CA-C-O	-14.06	103.21	120.78
1	A	6	SER	CA-CB-OG	-14.00	83.09	111.10
1	A	34	ASP	N-CA-C	-13.96	71.91	111.00
1	A	19	ARG	CA-CB-CG	-13.88	86.35	114.10
1	A	4	MET	CB-CA-C	-13.82	82.94	110.17
1	A	11	ALA	N-CA-C	-13.80	72.36	111.00
1	A	9	LYS	CB-CA-C	-13.79	82.97	110.42
1	A	10	TYR	CZ-CE2-CD2	13.78	144.40	119.60
1	A	31	LEU	CB-CG-CD2	-13.75	69.45	110.70
1	A	30	VAL	CG1-CB-CG2	-13.72	80.62	110.80
1	A	17	ASP	N-CA-C	-13.61	72.91	111.00
1	A	5	PRO	CB-CG-CD	-13.60	74.11	105.40
1	A	2	ILE	CB-CA-C	-13.17	89.69	111.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	27	ASN	OD1-CG-ND2	-13.10	109.50	122.60
1	A	15	GLY	N-CA-C	-12.79	76.22	113.30
1	A	16	VAL	CA-CB-CG1	-11.86	90.23	110.40
1	A	31	LEU	CB-CA-C	11.74	132.41	110.10
1	A	27	ASN	CB-CA-C	-11.72	87.83	110.10
1	A	31	LEU	N-CA-C	-11.59	78.55	111.00
1	A	8	ARG	CA-C-O	11.51	136.96	120.51
1	A	9	LYS	CA-CB-CG	-11.45	91.21	114.10
1	A	5	PRO	N-CA-C	-11.24	82.87	112.10
1	A	4	MET	C-N-CD	11.05	144.92	120.60
1	A	12	ARG	CD-NE-CZ	-10.99	109.01	124.40
1	A	26	LYS	CA-C-O	-10.83	105.03	120.51
1	A	21	VAL	N-CA-C	-10.74	80.93	111.00
1	A	7	VAL	O-C-N	-10.66	109.24	122.57
1	A	14	LYS	N-CA-CB	-10.41	92.89	110.49
1	A	26	LYS	CB-CG-CD	10.38	135.17	111.30
1	A	6	SER	O-C-N	-10.27	108.93	122.59
1	A	19	ARG	O-C-N	-10.24	108.96	122.59
1	A	31	LEU	CB-CG-CD1	-10.23	80.00	110.70
1	A	26	LYS	O-C-N	-10.19	109.04	122.59
1	A	14	LYS	O-C-N	-10.10	109.16	122.59
1	A	20	LEU	O-C-N	-10.08	109.29	121.79
1	A	9	LYS	CB-CG-CD	-10.05	88.18	111.30
1	A	10	TYR	N-CA-CB	-9.90	93.67	110.50
1	A	8	ARG	N-CA-C	-9.70	90.14	110.80
1	A	25	GLY	N-CA-C	-9.47	85.85	113.30
1	A	30	VAL	CA-CB-CG1	-9.45	94.33	110.40
1	A	8	ARG	CB-CA-C	8.94	128.21	110.42
1	A	25	GLY	O-C-N	-8.89	108.78	123.00
1	A	5	PRO	CA-CB-CG	-8.54	87.77	104.00
1	A	1	VAL	CB-CA-C	-8.10	96.01	111.40
1	A	29	ARG	N-CA-CB	-8.02	96.86	110.50
1	A	13	GLU	CA-CB-CG	-7.94	98.22	114.10
1	A	10	TYR	CE1-CZ-OH	7.88	143.53	119.90
1	A	18	ILE	O-C-N	-7.67	110.74	123.00
1	A	29	ARG	NH1-CZ-NH2	-7.46	109.60	119.30
1	A	1	VAL	CA-C-N	-7.43	108.59	121.97
1	A	1	VAL	C-N-CA	-7.43	108.59	121.97
1	A	4	MET	CA-C-N	-7.34	109.39	127.00
1	A	4	MET	C-N-CA	-7.34	109.39	127.00
1	A	30	VAL	CA-C-N	-7.25	108.65	121.70
1	A	30	VAL	C-N-CA	-7.25	108.65	121.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	7	VAL	N-CA-C	-7.09	94.58	109.34
1	A	7	VAL	N-CA-CB	-6.99	99.70	111.23
1	A	8	ARG	CB-CG-CD	-6.27	96.89	111.30
1	A	2	ILE	CB-CG1-CD1	-5.95	101.31	113.80
1	A	20	LEU	CB-CG-CD2	-5.88	93.06	110.70
1	A	25	GLY	CA-C-O	5.88	133.14	120.80
1	A	13	GLU	N-CA-CB	5.79	120.35	110.50
1	A	27	ASN	CB-CG-OD1	-5.68	109.45	120.80
1	A	38	PHE	CA-CB-CG	-5.64	108.16	113.80
1	A	19	ARG	CD-NE-CZ	-5.61	116.55	124.40
1	A	7	VAL	CA-CB-CG2	5.57	119.86	110.40
1	A	12	ARG	N-CA-C	-5.41	95.85	111.00
1	A	9	LYS	N-CA-C	-5.40	99.31	110.80
1	A	22	GLN	CA-CB-CG	-5.32	103.46	114.10
1	A	20	LEU	CA-CB-CG	-5.12	98.39	116.30
1	A	33	GLU	N-CA-C	-5.02	96.93	111.00

All chiral outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms
1	A	1	VAL	CA
1	A	2	ILE	CA
1	A	3	ALA	CA
1	A	6	SER	CA
1	A	7	VAL	CA
1	A	9	LYS	CA
1	A	10	TYR	CA
1	A	13	GLU	CA
1	A	14	LYS	CA
1	A	18	ILE	CA
1	A	20	LEU	CA
1	A	21	VAL	CA
1	A	22	GLN	CA
1	A	24	THR	CA
1	A	26	LYS	CA
1	A	29	ARG	CA
1	A	32	LYS	CA
1	A	33	GLU	CA
1	A	34	ASP	CA

All planar outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	1	VAL	Mainchain,Peptide
1	A	2	ILE	Mainchain,Peptide
1	A	4	MET	Mainchain
1	A	5	PRO	Mainchain
1	A	6	SER	Mainchain,Peptide
1	A	7	VAL	Mainchain,Peptide
1	A	8	ARG	Sidechain,Peptide
1	A	10	TYR	Sidechain
1	A	12	ARG	Sidechain
1	A	13	GLU	Sidechain
1	A	14	LYS	Mainchain
1	A	17	ASP	Sidechain
1	A	18	ILE	Mainchain,Peptide
1	A	19	ARG	Mainchain,Peptide
1	A	20	LEU	Mainchain
1	A	22	GLN	Sidechain,Mainchain,Peptide
1	A	25	GLY	Mainchain,Peptide
1	A	26	LYS	Mainchain,Peptide
1	A	27	ASN	Sidechain
1	A	29	ARG	Sidechain
1	A	30	VAL	Mainchain,Peptide
1	A	33	GLU	Sidechain

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	321	344	311	671
All	All	321	344	311	671

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 1062.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:1:VAL:HA	1:A:1:VAL:CG1	1.61	1.19
1:A:29:ARG:NE	1:A:34:ASP:CB	1.53	1.68
1:A:7:VAL:CG1	1:A:7:VAL:HG21	1.50	1.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:29:ARG:NH1	1:A:35:ILE:CA	1.50	1.74
1:A:32:LYS:CG	1:A:38:PHE:CD1	1.50	1.94
1:A:25:GLY:CA	1:A:34:ASP:CB	1.50	1.84
1:A:25:GLY:HA3	1:A:34:ASP:CG	1.50	1.32
1:A:9:LYS:C	1:A:10:TYR:N	1.48	1.70
1:A:6:SER:CB	1:A:9:LYS:HB2	1.48	1.34
1:A:16:VAL:CB	1:A:32:LYS:HD3	1.47	1.34
1:A:25:GLY:CA	1:A:34:ASP:CG	1.44	1.90
1:A:25:GLY:HA3	1:A:34:ASP:CB	1.43	0.92
1:A:29:ARG:NH1	1:A:35:ILE:HA	1.42	1.15
1:A:31:LEU:HA	1:A:31:LEU:CG	1.42	1.40
1:A:24:THR:CA	1:A:34:ASP:OD2	1.41	1.66
1:A:31:LEU:N	1:A:39:LEU:N	1.40	1.68
1:A:30:VAL:C	1:A:38:PHE:CB	1.39	1.93
1:A:13:GLU:HB2	1:A:14:LYS:CD	1.39	1.46
1:A:14:LYS:CA	1:A:14:LYS:CG	1.39	2.01
1:A:21:VAL:HG12	1:A:21:VAL:C	1.37	1.42
1:A:14:LYS:CA	1:A:14:LYS:CB	1.37	2.00
1:A:9:LYS:O	1:A:39:LEU:CD2	1.36	1.73
1:A:25:GLY:CA	1:A:34:ASP:HB2	1.35	1.45
1:A:30:VAL:C	1:A:38:PHE:N	1.35	1.75
1:A:25:GLY:CA	1:A:29:ARG:NE	1.34	1.89
1:A:6:SER:HB3	1:A:9:LYS:CB	1.34	1.50
1:A:33:GLU:CA	1:A:38:PHE:CE2	1.34	2.10
1:A:31:LEU:CD1	1:A:38:PHE:O	1.34	1.76
1:A:20:LEU:CD1	1:A:20:LEU:N	1.33	1.89
1:A:31:LEU:H	1:A:39:LEU:N	1.33	0.83
1:A:9:LYS:C	1:A:9:LYS:O	1.32	1.70
1:A:25:GLY:HA3	1:A:29:ARG:NE	1.32	1.36
1:A:6:SER:CA	1:A:6:SER:N	1.32	1.91
1:A:10:TYR:CG	1:A:10:TYR:CD1	1.32	2.15
1:A:13:GLU:O	1:A:14:LYS:CG	1.31	1.76
1:A:24:THR:OG1	1:A:24:THR:CG2	1.31	1.76
1:A:29:ARG:NE	1:A:34:ASP:CG	1.30	1.89
1:A:18:ILE:HG23	1:A:29:ARG:CZ	1.30	1.51
1:A:4:MET:CG	1:A:4:MET:SD	1.30	2.19
1:A:29:ARG:NH1	1:A:34:ASP:O	1.30	1.62
1:A:18:ILE:HG21	1:A:18:ILE:CD1	1.29	1.56
1:A:29:ARG:CG	1:A:29:ARG:CD	1.29	2.10
1:A:5:PRO:CA	1:A:6:SER:HB2	1.29	1.57
1:A:3:ALA:O	1:A:3:ALA:C	1.28	1.76
1:A:29:ARG:C	1:A:32:LYS:HG2	1.28	1.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:12:ARG:C	1:A:12:ARG:O	1.28	1.76
1:A:18:ILE:CG1	1:A:18:ILE:CG2	1.28	2.11
1:A:33:GLU:CD	1:A:33:GLU:OE2	1.27	1.75
1:A:12:ARG:CG	1:A:12:ARG:CD	1.26	2.11
1:A:9:LYS:C	1:A:9:LYS:HZ1	1.26	1.36
1:A:13:GLU:OE1	1:A:13:GLU:CD	1.26	1.76
1:A:8:ARG:CD	1:A:8:ARG:NE	1.26	1.99
1:A:22:GLN:OE1	1:A:22:GLN:CD	1.26	1.77
1:A:25:GLY:HA2	1:A:34:ASP:OD2	1.26	1.26
1:A:32:LYS:CE	1:A:32:LYS:CD	1.26	2.13
1:A:26:LYS:CA	1:A:26:LYS:CG	1.25	2.15
1:A:29:ARG:NH1	1:A:34:ASP:C	1.25	1.92
1:A:22:GLN:HE22	1:A:22:GLN:C	1.25	1.39
1:A:2:ILE:CG1	1:A:2:ILE:CA	1.24	2.15
1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CA	1.24	2.15
1:A:31:LEU:N	1:A:38:PHE:CA	1.24	1.91
1:A:7:VAL:CG1	1:A:7:VAL:CG2	1.24	2.15
1:A:9:LYS:O	1:A:10:TYR:N	1.24	1.70
1:A:17:ASP:CB	1:A:18:ILE:CB	1.24	2.15
1:A:17:ASP:CG	1:A:18:ILE:CA	1.23	2.12
1:A:30:VAL:C	1:A:38:PHE:H	1.23	1.34
1:A:1:VAL:CG1	1:A:1:VAL:CA	1.23	2.15
1:A:13:GLU:CG	1:A:13:GLU:CB	1.23	2.16
1:A:31:LEU:N	1:A:38:PHE:C	1.22	1.96
1:A:9:LYS:O	1:A:39:LEU:HD21	1.22	1.08
1:A:27:ASN:CB	1:A:27:ASN:CA	1.22	2.17
1:A:31:LEU:H	1:A:38:PHE:C	1.22	1.43
1:A:24:THR:CG2	1:A:34:ASP:HB3	1.22	1.64
1:A:29:ARG:C	1:A:29:ARG:HH12	1.22	1.42
1:A:7:VAL:N	1:A:35:ILE:HD12	1.21	1.46
1:A:17:ASP:OD1	1:A:17:ASP:O	1.21	1.53
1:A:28:GLY:C	1:A:37:ALA:HB2	1.20	1.60
1:A:16:VAL:CB	1:A:17:ASP:CA	1.20	2.18
1:A:26:LYS:C	1:A:27:ASN:CA	1.19	2.15
1:A:2:ILE:HG21	1:A:2:ILE:O	1.19	1.36
1:A:5:PRO:C	1:A:5:PRO:CD	1.19	2.14
1:A:8:ARG:HD2	1:A:10:TYR:CB	1.19	1.66
1:A:19:ARG:C	1:A:20:LEU:CA	1.19	2.16
1:A:7:VAL:N	1:A:35:ILE:CD1	1.18	2.05
1:A:21:VAL:CG2	1:A:22:GLN:N	1.18	2.07
1:A:9:LYS:HB3	1:A:10:TYR:CB	1.18	1.67
1:A:25:GLY:C	1:A:26:LYS:CA	1.17	2.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:7:VAL:C	1:A:8:ARG:CA	1.17	2.17
1:A:20:LEU:HD21	1:A:21:VAL:CA	1.17	1.68
1:A:9:LYS:HZ1	1:A:39:LEU:CD2	1.16	1.52
1:A:24:THR:OG1	1:A:24:THR:HG23	1.16	1.28
1:A:9:LYS:CB	1:A:10:TYR:CB	1.15	2.23
1:A:29:ARG:HH11	1:A:34:ASP:C	1.15	1.44
1:A:31:LEU:HD13	1:A:31:LEU:O	1.15	1.41
1:A:9:LYS:NZ	1:A:39:LEU:CD2	1.15	2.10
1:A:10:TYR:C	1:A:30:VAL:HG11	1.14	1.67
1:A:30:VAL:C	1:A:38:PHE:CA	1.14	2.19
1:A:26:LYS:CE	1:A:26:LYS:NZ	1.14	2.11
1:A:19:ARG:HH12	1:A:20:LEU:N	1.13	1.37
1:A:27:ASN:CA	1:A:36:ASP:CG	1.12	2.22
1:A:25:GLY:CA	1:A:34:ASP:OD2	1.12	1.85
1:A:5:PRO:N	1:A:6:SER:HB2	1.12	1.58
1:A:29:ARG:HH11	1:A:35:ILE:CA	1.12	1.41
1:A:8:ARG:CG	1:A:8:ARG:CB	1.12	2.28
1:A:15:GLY:O	1:A:16:VAL:CA	1.11	1.97
1:A:31:LEU:HD12	1:A:31:LEU:C	1.11	1.69
1:A:24:THR:HG23	1:A:34:ASP:CB	1.11	1.76
1:A:21:VAL:HG22	1:A:22:GLN:N	1.11	1.59
1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:HD12	1.10	1.55
1:A:16:VAL:O	1:A:17:ASP:CA	1.10	2.00
1:A:24:THR:CA	1:A:25:GLY:CA	1.10	2.30
1:A:29:ARG:NH1	1:A:29:ARG:C	1.10	2.09
1:A:29:ARG:HH11	1:A:35:ILE:N	1.10	1.45
1:A:17:ASP:O	1:A:18:ILE:CA	1.09	1.99
1:A:17:ASP:OD2	1:A:20:LEU:HA	1.09	1.45
1:A:6:SER:HA	1:A:39:LEU:CB	1.09	1.76
1:A:25:GLY:CA	1:A:29:ARG:HE	1.09	1.52
1:A:5:PRO:N	1:A:5:PRO:CB	1.09	2.16
1:A:12:ARG:CD	1:A:13:GLU:N	1.09	2.15
1:A:29:ARG:NH1	1:A:35:ILE:N	1.09	1.98
1:A:9:LYS:C	1:A:9:LYS:NZ	1.08	2.08
1:A:14:LYS:NZ	1:A:14:LYS:CE	1.08	2.16
1:A:29:ARG:NE	1:A:34:ASP:HB2	1.08	1.52
1:A:4:MET:N	1:A:4:MET:CB	1.08	2.16
1:A:22:GLN:CD	1:A:22:GLN:NE2	1.08	2.12
1:A:31:LEU:O	1:A:32:LYS:CA	1.08	2.00
1:A:16:VAL:CB	1:A:32:LYS:CD	1.07	2.31
1:A:12:ARG:C	1:A:12:ARG:HE	1.07	1.56
1:A:31:LEU:O	1:A:38:PHE:CD1	1.07	2.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:2:ILE:O	1:A:2:ILE:CG2	1.07	2.01
1:A:8:ARG:CZ	1:A:8:ARG:NH1	1.06	2.18
1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:HD13	1.06	1.57
1:A:19:ARG:NH1	1:A:20:LEU:N	1.06	2.02
1:A:5:PRO:CG	1:A:6:SER:H	1.06	1.61
1:A:10:TYR:CG	1:A:10:TYR:CB	1.06	2.37
1:A:24:THR:O	1:A:25:GLY:CA	1.06	2.02
1:A:24:THR:C	1:A:34:ASP:OD2	1.06	1.97
1:A:16:VAL:CG1	1:A:16:VAL:HG21	1.06	1.79
1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:N	1.05	2.19
1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CA	1.05	2.35
1:A:33:GLU:CA	1:A:38:PHE:HE2	1.05	1.49
1:A:10:TYR:CE1	1:A:11:ALA:CB	1.05	2.39
1:A:27:ASN:CA	1:A:36:ASP:OD2	1.05	2.04
1:A:30:VAL:C	1:A:38:PHE:HB3	1.05	1.61
1:A:29:ARG:C	1:A:30:VAL:HG12	1.05	1.76
1:A:18:ILE:CG2	1:A:29:ARG:CZ	1.04	2.34
1:A:33:GLU:CA	1:A:33:GLU:CD	1.04	2.30
1:A:10:TYR:OH	1:A:30:VAL:HG11	1.03	1.52
1:A:9:LYS:C	1:A:39:LEU:CD2	1.03	2.31
1:A:21:VAL:CA	1:A:22:GLN:N	1.03	2.20
1:A:12:ARG:C	1:A:12:ARG:NE	1.03	2.15
1:A:33:GLU:CA	1:A:38:PHE:CZ	1.03	2.40
1:A:20:LEU:CD2	1:A:21:VAL:HG23	1.03	1.83
1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:HG13	1.02	1.27
1:A:3:ALA:HA	1:A:6:SER:O	1.02	1.53
1:A:20:LEU:HD21	1:A:20:LEU:C	1.02	1.79
1:A:9:LYS:NZ	1:A:10:TYR:N	1.02	2.08
1:A:16:VAL:CG1	1:A:29:ARG:CZ	1.02	2.37
1:A:3:ALA:C	1:A:4:MET:CA	1.01	2.33
1:A:14:LYS:CG	1:A:14:LYS:HA	1.01	1.82
1:A:19:ARG:C	1:A:20:LEU:CD1	1.01	2.32
1:A:19:ARG:C	1:A:20:LEU:HD13	1.01	1.80
1:A:3:ALA:C	1:A:4:MET:N	1.01	2.18
1:A:6:SER:CB	1:A:9:LYS:CB	1.01	2.23
1:A:10:TYR:CZ	1:A:30:VAL:HG11	1.01	1.90
1:A:29:ARG:C	1:A:32:LYS:CG	1.01	2.34
1:A:24:THR:CG2	1:A:24:THR:CB	1.00	2.38
1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	1.00	2.34
1:A:29:ARG:NE	1:A:34:ASP:C	1.00	2.19
1:A:9:LYS:HB3	1:A:10:TYR:HB2	1.00	1.14
1:A:29:ARG:HE	1:A:34:ASP:HB2	1.00	0.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:8:ARG:HD2	1:A:10:TYR:HB3	1.00	1.33
1:A:18:ILE:HD11	1:A:19:ARG:N	0.99	1.71
1:A:21:VAL:CG2	1:A:21:VAL:CG1	0.99	2.40
1:A:32:LYS:CG	1:A:32:LYS:CA	0.99	2.40
1:A:13:GLU:CB	1:A:14:LYS:CD	0.99	2.39
1:A:16:VAL:HG12	1:A:29:ARG:C	0.99	1.83
1:A:2:ILE:H	1:A:3:ALA:CA	0.99	1.69
1:A:9:LYS:C	1:A:39:LEU:HD21	0.99	1.82
1:A:21:VAL:C	1:A:22:GLN:CA	0.99	2.36
1:A:27:ASN:O	1:A:28:GLY:CA	0.99	2.11
1:A:32:LYS:CG	1:A:38:PHE:CG	0.99	2.45
1:A:23:GLY:O	1:A:24:THR:CA	0.98	2.11
1:A:25:GLY:HA2	1:A:29:ARG:NH2	0.98	1.71
1:A:22:GLN:CA	1:A:22:GLN:CB	0.98	2.41
1:A:24:THR:CA	1:A:25:GLY:HA2	0.98	1.85
1:A:16:VAL:CG1	1:A:16:VAL:CG2	0.98	2.40
1:A:31:LEU:HD13	1:A:38:PHE:O	0.97	1.58
1:A:21:VAL:O	1:A:22:GLN:CA	0.97	2.12
1:A:4:MET:CG	1:A:4:MET:CB	0.97	2.43
1:A:16:VAL:HB	1:A:32:LYS:HD3	0.97	1.27
1:A:32:LYS:CG	1:A:38:PHE:CE1	0.97	2.48
1:A:33:GLU:CD	1:A:33:GLU:CG	0.96	2.37
1:A:18:ILE:CG2	1:A:18:ILE:HG12	0.96	1.87
1:A:17:ASP:HB2	1:A:18:ILE:CB	0.96	1.86
1:A:19:ARG:O	1:A:20:LEU:HD13	0.96	1.61
1:A:29:ARG:NE	1:A:29:ARG:HG2	0.96	1.75
1:A:16:VAL:CB	1:A:16:VAL:O	0.96	2.13
1:A:26:LYS:CA	1:A:26:LYS:CD	0.96	2.44
1:A:31:LEU:H	1:A:31:LEU:CD2	0.96	1.70
1:A:31:LEU:CD1	1:A:31:LEU:O	0.96	2.14
1:A:20:LEU:HD23	1:A:21:VAL:HG23	0.95	1.33
1:A:22:GLN:CB	1:A:22:GLN:CG	0.95	2.43
1:A:6:SER:CA	1:A:39:LEU:CB	0.95	2.42
1:A:29:ARG:C	1:A:35:ILE:HA	0.95	1.87
1:A:8:ARG:CD	1:A:10:TYR:HB3	0.95	1.90
1:A:21:VAL:C	1:A:21:VAL:CG1	0.95	2.39
1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:O	0.94	2.14
1:A:22:GLN:C	1:A:22:GLN:NE2	0.94	2.25
1:A:9:LYS:NZ	1:A:39:LEU:HD22	0.94	1.76
1:A:33:GLU:HG2	1:A:33:GLU:C	0.94	1.87
1:A:20:LEU:C	1:A:21:VAL:CA	0.94	2.40
1:A:26:LYS:HZ3	1:A:27:ASN:C	0.94	1.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:11:ALA:CB	1:A:11:ALA:C	0.93	2.40
1:A:24:THR:HA	1:A:25:GLY:HA2	0.93	1.37
1:A:33:GLU:CG	1:A:33:GLU:OE1	0.93	2.16
1:A:1:VAL:C	1:A:3:ALA:HB3	0.93	1.88
1:A:12:ARG:NH2	1:A:13:GLU:HA	0.93	1.77
1:A:29:ARG:C	1:A:38:PHE:HB2	0.93	1.89
1:A:2:ILE:CG1	1:A:2:ILE:CB	0.92	2.47
1:A:21:VAL:HG22	1:A:21:VAL:CG1	0.92	1.94
1:A:7:VAL:HG21	1:A:7:VAL:HG13	0.92	1.38
1:A:28:GLY:C	1:A:37:ALA:CB	0.92	2.43
1:A:18:ILE:CD1	1:A:18:ILE:C	0.91	2.43
1:A:9:LYS:HZ1	1:A:39:LEU:HD22	0.91	1.26
1:A:10:TYR:C	1:A:30:VAL:CG1	0.91	2.43
1:A:13:GLU:HB2	1:A:14:LYS:HD2	0.91	1.42
1:A:20:LEU:CD2	1:A:21:VAL:CG2	0.91	2.48
1:A:17:ASP:O	1:A:17:ASP:C	0.91	2.15
1:A:4:MET:CG	1:A:4:MET:CA	0.90	2.49
1:A:18:ILE:CD1	1:A:18:ILE:CG2	0.90	2.47
1:A:31:LEU:HD13	1:A:32:LYS:N	0.90	1.81
1:A:25:GLY:CA	1:A:26:LYS:N	0.90	2.35
1:A:6:SER:CA	1:A:39:LEU:HB2	0.90	1.96
1:A:31:LEU:N	1:A:39:LEU:H	0.90	1.35
1:A:16:VAL:HG13	1:A:29:ARG:CZ	0.89	1.97
1:A:13:GLU:CD	1:A:13:GLU:OE2	0.89	2.15
1:A:25:GLY:CA	1:A:29:ARG:NH2	0.89	2.35
1:A:6:SER:CB	1:A:8:ARG:NE	0.89	2.35
1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:HD12	0.89	1.96
1:A:17:ASP:CB	1:A:17:ASP:N	0.89	2.35
1:A:14:LYS:CE	1:A:16:VAL:CA	0.89	2.51
1:A:28:GLY:C	1:A:28:GLY:O	0.89	2.15
1:A:17:ASP:CG	1:A:17:ASP:OD1	0.89	2.15
1:A:12:ARG:CG	1:A:13:GLU:HA	0.89	1.97
1:A:26:LYS:CE	1:A:28:GLY:N	0.89	2.35
1:A:2:ILE:HG21	1:A:2:ILE:C	0.88	1.93
1:A:20:LEU:CD2	1:A:20:LEU:C	0.88	2.46
1:A:27:ASN:CA	1:A:27:ASN:CG	0.88	2.47
1:A:29:ARG:C	1:A:29:ARG:O	0.88	2.16
1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	0.88	2.36
1:A:6:SER:HA	1:A:39:LEU:HB2	0.88	1.42
1:A:32:LYS:CG	1:A:32:LYS:CD	0.88	2.51
1:A:7:VAL:HG11	1:A:7:VAL:O	0.88	1.69
1:A:8:ARG:HD2	1:A:9:LYS:HB3	0.88	1.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:11:ALA:C	1:A:12:ARG:CG	0.88	2.47
1:A:1:VAL:C	1:A:3:ALA:CB	0.88	2.47
1:A:16:VAL:C	1:A:32:LYS:CG	0.87	2.47
1:A:8:ARG:CD	1:A:10:TYR:CB	0.87	2.52
1:A:9:LYS:CB	1:A:10:TYR:HB3	0.87	1.99
1:A:22:GLN:CD	1:A:22:GLN:CA	0.87	2.47
1:A:6:SER:HB3	1:A:8:ARG:NE	0.86	1.84
1:A:20:LEU:C	1:A:21:VAL:CG2	0.86	2.49
1:A:9:LYS:O	1:A:9:LYS:NZ	0.86	2.08
1:A:11:ALA:C	1:A:11:ALA:O	0.86	2.18
1:A:24:THR:OG1	1:A:34:ASP:HB3	0.86	1.71
1:A:9:LYS:HZ2	1:A:10:TYR:N	0.86	1.68
1:A:12:ARG:C	1:A:12:ARG:CZ	0.86	2.48
1:A:24:THR:HA	1:A:34:ASP:OD2	0.86	1.69
1:A:20:LEU:CD2	1:A:21:VAL:CA	0.85	2.53
1:A:5:PRO:CG	1:A:6:SER:N	0.85	2.39
1:A:23:GLY:C	1:A:26:LYS:HB2	0.85	1.97
1:A:31:LEU:CD1	1:A:38:PHE:C	0.85	2.48
1:A:32:LYS:CG	1:A:32:LYS:CB	0.85	2.53
1:A:8:ARG:CZ	1:A:9:LYS:CA	0.85	2.55
1:A:5:PRO:N	1:A:6:SER:CB	0.85	2.39
1:A:26:LYS:CA	1:A:26:LYS:CB	0.85	2.54
1:A:33:GLU:CA	1:A:34:ASP:CA	0.85	2.54
1:A:2:ILE:N	1:A:3:ALA:CA	0.85	2.39
1:A:7:VAL:C	1:A:7:VAL:HG11	0.84	1.97
1:A:8:ARG:CZ	1:A:8:ARG:HD3	0.84	2.02
1:A:9:LYS:CB	1:A:10:TYR:HB2	0.84	1.93
1:A:25:GLY:C	1:A:26:LYS:CG	0.84	2.50
1:A:33:GLU:CG	1:A:33:GLU:CB	0.83	2.56
1:A:31:LEU:N	1:A:38:PHE:CB	0.83	2.34
1:A:8:ARG:CA	1:A:8:ARG:CG	0.83	2.57
1:A:25:GLY:HA2	1:A:34:ASP:CG	0.83	1.77
1:A:16:VAL:C	1:A:32:LYS:CD	0.83	2.52
1:A:23:GLY:C	1:A:24:THR:CA	0.83	2.51
1:A:4:MET:O	1:A:5:PRO:CB	0.83	2.27
1:A:14:LYS:C	1:A:15:GLY:CA	0.83	2.51
1:A:23:GLY:O	1:A:23:GLY:C	0.83	2.21
1:A:4:MET:CB	1:A:4:MET:CA	0.82	2.56
1:A:19:ARG:C	1:A:20:LEU:CB	0.82	2.52
1:A:25:GLY:CA	1:A:26:LYS:HB3	0.82	2.04
1:A:1:VAL:HG21	1:A:24:THR:HG21	0.82	1.50
1:A:12:ARG:HD2	1:A:13:GLU:N	0.82	1.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:21:VAL:C	1:A:21:VAL:O	0.82	2.23
1:A:25:GLY:HA3	1:A:34:ASP:HB2	0.82	0.90
1:A:30:VAL:C	1:A:38:PHE:HB2	0.82	1.97
1:A:16:VAL:HG11	1:A:29:ARG:CZ	0.82	2.03
1:A:27:ASN:O	1:A:27:ASN:C	0.82	2.22
1:A:4:MET:C	1:A:5:PRO:CB	0.82	2.52
1:A:5:PRO:CA	1:A:6:SER:CB	0.82	2.52
1:A:9:LYS:NZ	1:A:39:LEU:HD23	0.82	1.90
1:A:11:ALA:C	1:A:11:ALA:HB3	0.81	2.00
1:A:3:ALA:O	1:A:3:ALA:HB1	0.81	1.75
1:A:34:ASP:CB	1:A:34:ASP:C	0.81	2.53
1:A:16:VAL:CB	1:A:17:ASP:HA	0.81	2.04
1:A:22:GLN:OE1	1:A:22:GLN:NE2	0.81	2.14
1:A:31:LEU:CD1	1:A:31:LEU:HD22	0.80	2.06
1:A:29:ARG:C	1:A:30:VAL:CG1	0.80	2.55
1:A:30:VAL:HG13	1:A:35:ILE:HD13	0.80	1.51
1:A:32:LYS:C	1:A:33:GLU:CA	0.79	2.55
1:A:19:ARG:CZ	1:A:19:ARG:NH2	0.79	2.46
1:A:14:LYS:CB	1:A:14:LYS:N	0.79	2.45
1:A:33:GLU:HG2	1:A:33:GLU:OE1	0.79	1.74
1:A:12:ARG:O	1:A:12:ARG:NE	0.79	2.15
1:A:28:GLY:C	1:A:28:GLY:N	0.79	2.41
1:A:18:ILE:CD1	1:A:19:ARG:N	0.79	2.45
1:A:1:VAL:CA	1:A:1:VAL:N	0.79	2.45
1:A:11:ALA:C	1:A:11:ALA:HB1	0.79	2.02
1:A:16:VAL:CG1	1:A:29:ARG:C	0.79	2.55
1:A:27:ASN:CA	1:A:27:ASN:N	0.79	2.45
1:A:8:ARG:HD2	1:A:10:TYR:HB2	0.78	1.55
1:A:17:ASP:N	1:A:17:ASP:HB3	0.78	1.93
1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:HB	0.78	1.92
1:A:26:LYS:C	1:A:27:ASN:CB	0.78	2.54
1:A:31:LEU:CD1	1:A:31:LEU:CD2	0.78	2.59
1:A:14:LYS:HE3	1:A:16:VAL:CA	0.78	2.06
1:A:31:LEU:CG	1:A:36:ASP:O	0.78	2.31
1:A:20:LEU:HD21	1:A:21:VAL:CG2	0.78	2.07
1:A:22:GLN:NE2	1:A:23:GLY:CA	0.78	2.46
1:A:29:ARG:NE	1:A:34:ASP:OD1	0.78	2.16
1:A:29:ARG:NE	1:A:29:ARG:CG	0.78	2.46
1:A:12:ARG:NH2	1:A:13:GLU:CA	0.78	2.46
1:A:29:ARG:CD	1:A:34:ASP:O	0.78	2.31
1:A:33:GLU:O	1:A:39:LEU:HD13	0.77	1.79
1:A:7:VAL:CG1	1:A:8:ARG:NE	0.77	2.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:28:GLY:N	1:A:29:ARG:N	0.77	2.32
1:A:24:THR:C	1:A:34:ASP:CG	0.77	2.53
1:A:32:LYS:CD	1:A:32:LYS:CB	0.77	2.61
1:A:21:VAL:CG2	1:A:21:VAL:HG13	0.77	2.09
1:A:13:GLU:CD	1:A:13:GLU:HB3	0.77	2.05
1:A:20:LEU:C	1:A:21:VAL:CB	0.77	2.58
1:A:33:GLU:OE2	1:A:33:GLU:C	0.77	2.28
1:A:6:SER:CA	1:A:39:LEU:HB3	0.77	2.09
1:A:9:LYS:CB	1:A:9:LYS:CG	0.77	2.62
1:A:31:LEU:CG	1:A:40:ALA:O	0.77	2.30
1:A:3:ALA:O	1:A:4:MET:N	0.76	2.19
1:A:9:LYS:C	1:A:9:LYS:CE	0.76	2.58
1:A:31:LEU:CD1	1:A:38:PHE:HA	0.76	2.10
1:A:26:LYS:HZ3	1:A:36:ASP:N	0.76	1.78
1:A:31:LEU:CD1	1:A:31:LEU:C	0.76	2.57
1:A:12:ARG:NH2	1:A:12:ARG:HG3	0.76	1.96
1:A:9:LYS:C	1:A:39:LEU:HD22	0.76	2.05
1:A:14:LYS:CG	1:A:14:LYS:N	0.76	2.48
1:A:28:GLY:C	1:A:29:ARG:N	0.76	2.44
1:A:1:VAL:CG2	1:A:24:THR:HG21	0.75	2.12
1:A:33:GLU:CB	1:A:38:PHE:CD2	0.75	2.69
1:A:29:ARG:NH1	1:A:30:VAL:CA	0.75	2.49
1:A:7:VAL:CB	1:A:8:ARG:NE	0.75	2.49
1:A:11:ALA:HB1	1:A:12:ARG:HG2	0.75	1.58
1:A:19:ARG:CZ	1:A:20:LEU:N	0.75	2.49
1:A:21:VAL:C	1:A:22:GLN:HA	0.75	2.06
1:A:24:THR:CG2	1:A:34:ASP:CB	0.75	2.52
1:A:5:PRO:CB	1:A:5:PRO:CG	0.75	2.64
1:A:16:VAL:CB	1:A:16:VAL:C	0.74	2.60
1:A:24:THR:HG23	1:A:34:ASP:HB3	0.74	0.81
1:A:12:ARG:CG	1:A:13:GLU:N	0.74	2.49
1:A:12:ARG:HD2	1:A:16:VAL:HG22	0.74	1.57
1:A:33:GLU:CB	1:A:38:PHE:CE2	0.74	2.71
1:A:10:TYR:HE1	1:A:11:ALA:CB	0.73	1.89
1:A:7:VAL:CG1	1:A:7:VAL:CB	0.73	2.66
1:A:23:GLY:C	1:A:26:LYS:CB	0.73	2.62
1:A:8:ARG:CD	1:A:9:LYS:HB3	0.73	2.13
1:A:24:THR:O	1:A:26:LYS:HB3	0.73	1.84
1:A:29:ARG:HH12	1:A:35:ILE:HA	0.73	0.92
1:A:29:ARG:C	1:A:30:VAL:CB	0.73	2.62
1:A:33:GLU:CG	1:A:33:GLU:C	0.73	2.59
1:A:22:GLN:OE1	1:A:22:GLN:CA	0.73	2.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:3:ALA:O	1:A:3:ALA:CB	0.72	2.37
1:A:7:VAL:CA	1:A:9:LYS:HB3	0.72	2.14
1:A:14:LYS:C	1:A:15:GLY:C	0.72	2.57
1:A:20:LEU:CD1	1:A:20:LEU:CA	0.72	2.67
1:A:31:LEU:CD1	1:A:38:PHE:CA	0.72	2.67
1:A:22:GLN:CG	1:A:22:GLN:O	0.72	2.38
1:A:32:LYS:CB	1:A:32:LYS:HD2	0.72	2.13
1:A:7:VAL:CG2	1:A:8:ARG:NE	0.71	2.52
1:A:13:GLU:CD	1:A:13:GLU:CB	0.71	2.63
1:A:13:GLU:OE2	1:A:14:LYS:CG	0.71	2.37
1:A:29:ARG:NE	1:A:29:ARG:NH2	0.71	2.38
1:A:3:ALA:HA	1:A:6:SER:C	0.71	2.09
1:A:9:LYS:HZ3	1:A:39:LEU:CD2	0.71	1.99
1:A:31:LEU:CD1	1:A:32:LYS:N	0.70	2.54
1:A:13:GLU:CG	1:A:13:GLU:C	0.70	2.64
1:A:21:VAL:CG1	1:A:22:GLN:N	0.70	2.54
1:A:22:GLN:NE2	1:A:22:GLN:CG	0.70	2.54
1:A:2:ILE:N	1:A:3:ALA:CB	0.70	2.53
1:A:12:ARG:C	1:A:24:THR:OG1	0.70	2.34
1:A:17:ASP:CB	1:A:17:ASP:C	0.70	2.64
1:A:16:VAL:HB	1:A:17:ASP:CA	0.70	2.12
1:A:31:LEU:O	1:A:38:PHE:CG	0.70	2.43
1:A:9:LYS:O	1:A:39:LEU:HD23	0.70	1.83
1:A:21:VAL:CG1	1:A:21:VAL:HG21	0.70	2.15
1:A:33:GLU:CG	1:A:33:GLU:O	0.70	2.40
1:A:29:ARG:CG	1:A:37:ALA:HB3	0.70	2.16
1:A:31:LEU:H	1:A:39:LEU:H	0.70	0.72
1:A:21:VAL:HG22	1:A:21:VAL:O	0.69	1.87
1:A:13:GLU:OE1	1:A:13:GLU:CG	0.69	2.39
1:A:10:TYR:OH	1:A:11:ALA:CA	0.69	2.41
1:A:11:ALA:C	1:A:12:ARG:CA	0.69	2.66
1:A:16:VAL:CA	1:A:16:VAL:CG2	0.68	2.71
1:A:31:LEU:HD13	1:A:31:LEU:HD22	0.68	1.60
1:A:6:SER:CB	1:A:7:VAL:CA	0.68	2.70
1:A:11:ALA:C	1:A:12:ARG:HG2	0.68	2.12
1:A:30:VAL:HG13	1:A:35:ILE:CD1	0.68	2.18
1:A:8:ARG:CD	1:A:9:LYS:CB	0.68	2.71
1:A:1:VAL:O	1:A:3:ALA:HB3	0.67	1.87
1:A:7:VAL:CG1	1:A:8:ARG:CD	0.67	2.72
1:A:8:ARG:CD	1:A:8:ARG:CZ	0.67	2.72
1:A:31:LEU:N	1:A:38:PHE:HB3	0.67	1.98
1:A:6:SER:HA	1:A:39:LEU:H	0.67	1.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:21:VAL:CG1	1:A:21:VAL:O	0.67	2.42
1:A:17:ASP:C	1:A:18:ILE:N	0.67	2.52
1:A:31:LEU:HD13	1:A:31:LEU:CD2	0.67	2.19
1:A:33:GLU:HG3	1:A:34:ASP:CA	0.67	2.20
1:A:14:LYS:CD	1:A:14:LYS:CE	0.67	2.72
1:A:22:GLN:O	1:A:22:GLN:HG3	0.67	1.89
1:A:25:GLY:C	1:A:26:LYS:CB	0.66	2.68
1:A:9:LYS:HZ1	1:A:10:TYR:N	0.66	1.88
1:A:33:GLU:HG2	1:A:33:GLU:O	0.66	1.91
1:A:19:ARG:CD	1:A:19:ARG:CG	0.66	2.73
1:A:22:GLN:HB2	1:A:23:GLY:C	0.66	2.16
1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CB	0.66	2.72
1:A:13:GLU:N	1:A:16:VAL:HA	0.66	2.06
1:A:16:VAL:HB	1:A:32:LYS:CD	0.66	2.10
1:A:25:GLY:O	1:A:26:LYS:CD	0.66	2.44
1:A:8:ARG:CB	1:A:8:ARG:N	0.65	2.59
1:A:12:ARG:NH1	1:A:13:GLU:HA	0.65	2.06
1:A:2:ILE:CG2	1:A:2:ILE:CD1	0.65	2.74
1:A:6:SER:HA	1:A:39:LEU:N	0.65	2.06
1:A:17:ASP:CB	1:A:18:ILE:CG1	0.65	2.73
1:A:32:LYS:HG2	1:A:32:LYS:CA	0.65	2.21
1:A:17:ASP:CA	1:A:18:ILE:CB	0.65	2.74
1:A:17:ASP:O	1:A:17:ASP:OD2	0.64	2.15
1:A:19:ARG:CZ	1:A:20:LEU:CD2	0.64	2.75
1:A:18:ILE:CG1	1:A:29:ARG:CZ	0.64	2.75
1:A:30:VAL:O	1:A:38:PHE:N	0.64	2.05
1:A:26:LYS:NZ	1:A:27:ASN:C	0.64	2.54
1:A:33:GLU:CB	1:A:33:GLU:N	0.64	2.59
1:A:3:ALA:HB2	1:A:4:MET:N	0.64	2.07
1:A:12:ARG:CZ	1:A:12:ARG:NH1	0.64	2.61
1:A:8:ARG:HD2	1:A:9:LYS:CB	0.64	2.21
1:A:10:TYR:CD2	1:A:11:ALA:N	0.63	2.66
1:A:22:GLN:CB	1:A:23:GLY:C	0.63	2.71
1:A:13:GLU:OE1	1:A:13:GLU:OE2	0.63	2.15
1:A:5:PRO:C	1:A:5:PRO:HD3	0.63	2.13
1:A:20:LEU:HD23	1:A:21:VAL:CG2	0.63	2.13
1:A:10:TYR:CD2	1:A:11:ALA:CB	0.63	2.81
1:A:14:LYS:HE2	1:A:15:GLY:HA3	0.63	1.70
1:A:18:ILE:HG23	1:A:29:ARG:NH2	0.63	2.09
1:A:22:GLN:OE1	1:A:22:GLN:CB	0.63	2.47
1:A:15:GLY:CA	1:A:15:GLY:N	0.62	2.62
1:A:17:ASP:CB	1:A:17:ASP:CG	0.62	2.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:6:SER:CB	1:A:8:ARG:HE	0.62	2.04
1:A:7:VAL:HA	1:A:10:TYR:HB2	0.62	1.69
1:A:12:ARG:O	1:A:12:ARG:CZ	0.62	2.47
1:A:14:LYS:HZ3	1:A:15:GLY:CA	0.62	2.08
1:A:18:ILE:HG21	1:A:18:ILE:HD11	0.62	1.63
1:A:24:THR:HA	1:A:25:GLY:CA	0.62	2.06
1:A:13:GLU:C	1:A:14:LYS:CG	0.62	2.72
1:A:7:VAL:CA	1:A:10:TYR:HB2	0.62	2.25
1:A:12:ARG:CG	1:A:12:ARG:NH2	0.62	2.62
1:A:4:MET:CG	1:A:4:MET:CE	0.61	2.78
1:A:17:ASP:OD2	1:A:20:LEU:CA	0.61	2.36
1:A:18:ILE:CG2	1:A:29:ARG:CD	0.61	2.77
1:A:30:VAL:O	1:A:31:LEU:CB	0.61	2.35
1:A:7:VAL:HA	1:A:9:LYS:HB3	0.61	1.70
1:A:12:ARG:HG3	1:A:12:ARG:HH21	0.61	1.54
1:A:21:VAL:CG2	1:A:21:VAL:N	0.61	2.63
1:A:2:ILE:HA	1:A:3:ALA:CB	0.61	2.26
1:A:9:LYS:HZ3	1:A:39:LEU:HD23	0.61	1.54
1:A:3:ALA:CA	1:A:6:SER:O	0.60	2.42
1:A:26:LYS:NZ	1:A:26:LYS:O	0.60	2.34
1:A:15:GLY:C	1:A:15:GLY:N	0.60	2.58
1:A:17:ASP:CB	1:A:18:ILE:HB	0.60	2.19
1:A:25:GLY:CA	1:A:25:GLY:C	0.60	2.75
1:A:13:GLU:CG	1:A:13:GLU:CA	0.60	2.80
1:A:29:ARG:CZ	1:A:29:ARG:CD	0.60	2.79
1:A:29:ARG:C	1:A:38:PHE:CB	0.60	2.73
1:A:17:ASP:CB	1:A:17:ASP:OD2	0.60	2.49
1:A:17:ASP:CG	1:A:17:ASP:OD2	0.60	2.43
1:A:5:PRO:HG2	1:A:6:SER:H	0.60	1.50
1:A:26:LYS:N	1:A:29:ARG:NE	0.60	2.49
1:A:12:ARG:CG	1:A:13:GLU:CA	0.60	2.78
1:A:18:ILE:C	1:A:18:ILE:HD12	0.60	2.19
1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:CG	0.60	2.79
1:A:32:LYS:HG3	1:A:38:PHE:CG	0.60	2.32
1:A:5:PRO:C	1:A:5:PRO:CG	0.59	2.74
1:A:29:ARG:HH11	1:A:35:ILE:C	0.59	2.02
1:A:7:VAL:N	1:A:35:ILE:HD13	0.59	2.06
1:A:19:ARG:CZ	1:A:20:LEU:HD22	0.59	2.26
1:A:2:ILE:CG2	1:A:2:ILE:C	0.58	2.65
1:A:8:ARG:CZ	1:A:8:ARG:NH2	0.58	2.67
1:A:14:LYS:HE2	1:A:15:GLY:CA	0.58	2.28
1:A:21:VAL:HG13	1:A:21:VAL:HG21	0.58	1.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:13:GLU:O	1:A:13:GLU:CD	0.58	2.46
1:A:25:GLY:C	1:A:26:LYS:CD	0.58	2.77
1:A:22:GLN:OE1	1:A:22:GLN:O	0.57	2.22
1:A:12:ARG:NE	1:A:12:ARG:NH1	0.57	2.53
1:A:23:GLY:O	1:A:24:THR:CB	0.57	2.50
1:A:2:ILE:HG21	1:A:2:ILE:CD1	0.57	2.28
1:A:28:GLY:C	1:A:29:ARG:CA	0.57	2.77
1:A:31:LEU:CB	1:A:35:ILE:O	0.57	2.44
1:A:2:ILE:CA	1:A:2:ILE:CG2	0.57	2.82
1:A:3:ALA:O	1:A:4:MET:CB	0.57	2.53
1:A:16:VAL:CB	1:A:16:VAL:CA	0.57	2.82
1:A:17:ASP:C	1:A:18:ILE:HB	0.57	2.25
1:A:5:PRO:CD	1:A:5:PRO:O	0.56	2.46
1:A:21:VAL:CB	1:A:21:VAL:N	0.56	2.67
1:A:30:VAL:O	1:A:37:ALA:N	0.56	2.39
1:A:1:VAL:CG1	1:A:1:VAL:CB	0.56	2.81
1:A:12:ARG:CD	1:A:12:ARG:NE	0.56	2.68
1:A:31:LEU:O	1:A:38:PHE:HA	0.56	2.00
1:A:21:VAL:O	1:A:24:THR:N	0.56	2.38
1:A:16:VAL:O	1:A:17:ASP:CB	0.56	2.54
1:A:17:ASP:CG	1:A:17:ASP:CA	0.56	2.79
1:A:31:LEU:HB2	1:A:35:ILE:O	0.56	1.99
1:A:33:GLU:CA	1:A:33:GLU:CG	0.56	2.84
1:A:12:ARG:CA	1:A:13:GLU:HG2	0.55	2.31
1:A:17:ASP:HB2	1:A:17:ASP:C	0.55	2.27
1:A:1:VAL:O	1:A:2:ILE:CB	0.55	2.41
1:A:32:LYS:N	1:A:38:PHE:CE1	0.55	2.74
1:A:19:ARG:C	1:A:19:ARG:HH12	0.55	1.96
1:A:8:ARG:NE	1:A:8:ARG:NH1	0.55	2.54
1:A:33:GLU:CB	1:A:33:GLU:O	0.55	2.55
1:A:33:GLU:CG	1:A:34:ASP:CA	0.54	2.84
1:A:33:GLU:CB	1:A:34:ASP:N	0.54	2.70
1:A:21:VAL:HG12	1:A:21:VAL:O	0.54	2.02
1:A:19:ARG:NE	1:A:20:LEU:HD22	0.54	2.17
1:A:21:VAL:C	1:A:22:GLN:CD	0.54	2.74
1:A:32:LYS:N	1:A:38:PHE:CD1	0.54	2.74
1:A:22:GLN:HE21	1:A:23:GLY:CA	0.54	2.15
1:A:28:GLY:O	1:A:37:ALA:HB2	0.54	2.03
1:A:6:SER:O	1:A:7:VAL:HB	0.54	1.82
1:A:1:VAL:CB	1:A:24:THR:HG21	0.54	2.33
1:A:6:SER:HB3	1:A:9:LYS:HB2	0.54	0.60
1:A:13:GLU:OE1	1:A:13:GLU:C	0.54	2.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:29:ARG:NE	1:A:29:ARG:CD	0.53	2.72
1:A:7:VAL:HA	1:A:9:LYS:CB	0.53	2.34
1:A:10:TYR:OH	1:A:30:VAL:CG1	0.53	2.43
1:A:29:ARG:NH1	1:A:35:ILE:C	0.53	2.60
1:A:2:ILE:CG1	1:A:2:ILE:N	0.53	2.71
1:A:7:VAL:CA	1:A:9:LYS:CB	0.53	2.87
1:A:27:ASN:O	1:A:29:ARG:CG	0.53	2.57
1:A:4:MET:O	1:A:5:PRO:HB3	0.52	2.01
1:A:8:ARG:NE	1:A:9:LYS:CB	0.52	2.73
1:A:26:LYS:HZ3	1:A:36:ASP:CB	0.52	2.17
1:A:3:ALA:HA	1:A:7:VAL:HB	0.52	1.82
1:A:26:LYS:C	1:A:26:LYS:NZ	0.52	2.68
1:A:1:VAL:C	1:A:1:VAL:HG23	0.52	2.30
1:A:4:MET:SD	1:A:4:MET:CA	0.52	2.98
1:A:8:ARG:HD3	1:A:10:TYR:HB3	0.51	1.77
1:A:9:LYS:HB3	1:A:10:TYR:HB3	0.51	1.59
1:A:32:LYS:HD2	1:A:32:LYS:HB3	0.51	1.81
1:A:16:VAL:CB	1:A:16:VAL:N	0.51	2.73
1:A:29:ARG:NH1	1:A:30:VAL:O	0.51	2.43
1:A:9:LYS:HG3	1:A:10:TYR:CA	0.51	2.36
1:A:12:ARG:CD	1:A:16:VAL:HG22	0.51	2.35
1:A:12:ARG:HD3	1:A:30:VAL:HG13	0.51	1.82
1:A:14:LYS:NZ	1:A:15:GLY:CA	0.51	2.73
1:A:17:ASP:OD1	1:A:18:ILE:CA	0.51	2.59
1:A:25:GLY:O	1:A:28:GLY:N	0.51	2.43
1:A:17:ASP:CB	1:A:17:ASP:OD1	0.51	2.58
1:A:17:ASP:CB	1:A:18:ILE:HG13	0.51	2.34
1:A:3:ALA:HA	1:A:7:VAL:N	0.51	2.21
1:A:12:ARG:NH1	1:A:13:GLU:CA	0.51	2.71
1:A:33:GLU:CA	1:A:38:PHE:HZ	0.50	2.13
1:A:24:THR:O	1:A:26:LYS:CB	0.50	2.59
1:A:26:LYS:C	1:A:27:ASN:HB2	0.50	2.31
1:A:16:VAL:C	1:A:32:LYS:HD3	0.50	2.30
1:A:18:ILE:HG23	1:A:29:ARG:CD	0.50	2.35
1:A:19:ARG:O	1:A:20:LEU:CB	0.49	2.59
1:A:7:VAL:N	1:A:30:VAL:HG21	0.49	2.19
1:A:33:GLU:HB2	1:A:34:ASP:N	0.49	2.22
1:A:20:LEU:O	1:A:21:VAL:CB	0.49	2.60
1:A:33:GLU:HB3	1:A:39:LEU:HA	0.49	1.83
1:A:7:VAL:HG13	1:A:8:ARG:CD	0.49	2.37
1:A:19:ARG:NH1	1:A:19:ARG:NH2	0.49	2.57
1:A:10:TYR:HE1	1:A:11:ALA:HB3	0.49	1.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:22:GLN:OE1	1:A:22:GLN:C	0.49	2.56
1:A:6:SER:HA	1:A:39:LEU:CA	0.49	2.35
1:A:18:ILE:HG13	1:A:29:ARG:CZ	0.48	2.37
1:A:18:ILE:HG22	1:A:29:ARG:CD	0.48	2.38
1:A:25:GLY:O	1:A:26:LYS:CE	0.48	2.60
1:A:3:ALA:C	1:A:4:MET:CB	0.48	2.86
1:A:8:ARG:NE	1:A:8:ARG:HH11	0.48	2.05
1:A:14:LYS:O	1:A:15:GLY:C	0.48	2.55
1:A:32:LYS:C	1:A:33:GLU:HA	0.48	2.31
1:A:33:GLU:OE1	1:A:33:GLU:CB	0.48	2.62
1:A:21:VAL:CG2	1:A:21:VAL:CA	0.48	2.92
1:A:23:GLY:C	1:A:24:THR:HA	0.48	2.32
1:A:24:THR:OG1	1:A:24:THR:CB	0.48	2.61
1:A:7:VAL:C	1:A:8:ARG:CB	0.48	2.86
1:A:7:VAL:CG2	1:A:7:VAL:HG13	0.47	2.16
1:A:19:ARG:O	1:A:20:LEU:HB2	0.47	2.09
1:A:2:ILE:CD1	1:A:2:ILE:HG23	0.47	2.40
1:A:19:ARG:C	1:A:20:LEU:HD12	0.47	2.11
1:A:30:VAL:O	1:A:36:ASP:C	0.47	2.56
1:A:33:GLU:CB	1:A:38:PHE:HD2	0.47	2.17
1:A:16:VAL:CA	1:A:16:VAL:C	0.47	2.88
1:A:13:GLU:CD	1:A:14:LYS:N	0.47	2.73
1:A:24:THR:O	1:A:24:THR:HG22	0.47	2.10
1:A:5:PRO:HD3	1:A:5:PRO:O	0.46	2.08
1:A:16:VAL:O	1:A:16:VAL:CG2	0.46	2.63
1:A:21:VAL:O	1:A:22:GLN:CD	0.46	2.58
1:A:26:LYS:NZ	1:A:36:ASP:N	0.46	2.59
1:A:18:ILE:HG22	1:A:29:ARG:HD3	0.46	1.86
1:A:33:GLU:CB	1:A:38:PHE:HE2	0.46	2.21
1:A:33:GLU:OE2	1:A:33:GLU:CG	0.46	2.64
1:A:30:VAL:CG1	1:A:35:ILE:CG1	0.46	2.91
1:A:8:ARG:N	1:A:8:ARG:HB2	0.46	2.25
1:A:14:LYS:NZ	1:A:14:LYS:C	0.46	2.74
1:A:1:VAL:CA	1:A:1:VAL:C	0.45	2.89
1:A:31:LEU:O	1:A:38:PHE:CA	0.45	2.64
1:A:31:LEU:CA	1:A:38:PHE:C	0.45	2.88
1:A:19:ARG:HH12	1:A:19:ARG:NH2	0.45	2.10
1:A:26:LYS:N	1:A:26:LYS:CB	0.45	2.80
1:A:7:VAL:HG12	1:A:8:ARG:NE	0.45	2.25
1:A:22:GLN:OE1	1:A:22:GLN:CG	0.45	2.65
1:A:26:LYS:NZ	1:A:36:ASP:HB2	0.45	2.27
1:A:30:VAL:HG13	1:A:35:ILE:CG1	0.44	2.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:24:THR:HG22	1:A:25:GLY:N	0.44	2.27
1:A:1:VAL:C	1:A:1:VAL:CG2	0.44	2.90
1:A:12:ARG:CB	1:A:13:GLU:HG2	0.44	2.43
1:A:22:GLN:CA	1:A:23:GLY:C	0.43	2.91
1:A:1:VAL:O	1:A:2:ILE:HB	0.43	2.12
1:A:12:ARG:C	1:A:24:THR:CB	0.43	2.91
1:A:1:VAL:HG21	1:A:30:VAL:HG23	0.43	1.88
1:A:26:LYS:C	1:A:26:LYS:HZ2	0.43	2.21
1:A:1:VAL:CG2	1:A:30:VAL:HG23	0.43	2.44
1:A:1:VAL:HB	1:A:24:THR:HG21	0.43	1.91
1:A:14:LYS:NZ	1:A:15:GLY:N	0.43	2.67
1:A:29:ARG:NH1	1:A:30:VAL:C	0.43	2.76
1:A:29:ARG:C	1:A:32:LYS:HA	0.43	2.39
1:A:24:THR:CA	1:A:26:LYS:HB3	0.42	2.44
1:A:1:VAL:CA	1:A:1:VAL:O	0.42	2.68
1:A:14:LYS:HZ3	1:A:15:GLY:N	0.42	2.12
1:A:19:ARG:NE	1:A:21:VAL:HA	0.42	2.29
1:A:31:LEU:HD23	1:A:38:PHE:CD2	0.42	2.48
1:A:7:VAL:O	1:A:8:ARG:CA	0.42	2.58
1:A:16:VAL:HB	1:A:17:ASP:HA	0.42	1.81
1:A:6:SER:CA	1:A:39:LEU:H	0.42	2.25
1:A:8:ARG:NE	1:A:8:ARG:CZ	0.42	2.83
1:A:26:LYS:NZ	1:A:36:ASP:CB	0.42	2.82
1:A:4:MET:CG	1:A:4:MET:N	0.42	2.79
1:A:8:ARG:NE	1:A:9:LYS:HB2	0.42	2.26
1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:C	0.42	2.78
1:A:24:THR:CG2	1:A:24:THR:O	0.41	2.68
1:A:31:LEU:CD2	1:A:38:PHE:CG	0.41	3.01
1:A:21:VAL:C	1:A:24:THR:N	0.41	2.79
1:A:18:ILE:CG2	1:A:29:ARG:HD3	0.41	2.44
1:A:33:GLU:HB3	1:A:39:LEU:CA	0.41	2.44
1:A:31:LEU:CA	1:A:39:LEU:N	0.41	2.73
1:A:9:LYS:CE	1:A:10:TYR:N	0.41	2.82
1:A:27:ASN:O	1:A:28:GLY:C	0.41	2.63
1:A:29:ARG:C	1:A:32:LYS:CA	0.40	2.95
1:A:16:VAL:CG2	1:A:17:ASP:N	0.40	2.85
1:A:6:SER:HB2	1:A:8:ARG:HE	0.40	1.75
1:A:39:LEU:O	1:A:40:ALA:C	0.40	2.65

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	18/43 (42%)	6 (33%)	4 (22%)	8 (44%)	0	0
All	All	18/43 (42%)	6 (33%)	4 (22%)	8 (44%)	0	0

All 8 Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type
1	A	2	ILE
1	A	5	PRO
1	A	7	VAL
1	A	8	ARG
1	A	9	LYS
1	A	26	LYS
1	A	34	ASP
1	A	40	ALA

6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	32/32 (100%)	10 (31%)	22 (69%)	0	0
All	All	32/32 (100%)	10 (31%)	22 (69%)	0	0

All 22 residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1	VAL
1	A	2	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	5	PRO
1	A	6	SER
1	A	7	VAL
1	A	8	ARG
1	A	9	LYS
1	A	12	ARG
1	A	13	GLU
1	A	14	LYS
1	A	16	VAL
1	A	17	ASP
1	A	18	ILE
1	A	19	ARG
1	A	20	LEU
1	A	21	VAL
1	A	26	LYS
1	A	27	ASN
1	A	29	ARG
1	A	31	LEU
1	A	32	LYS
1	A	34	ASP

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

6.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains ⓘ

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

6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry ⓘ

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

The following chains have linkage breaks:

Mol	Chain	Number of breaks
1	A	27

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
1	A	15:GLY	C	16:VAL	N	5.73
1	A	12:ARG	C	13:GLU	N	5.21
1	A	16:VAL	C	17:ASP	N	4.96
1	A	24:THR	C	25:GLY	N	4.92
1	A	10:TYR	C	11:ALA	N	4.27
1	A	31:LEU	C	32:LYS	N	4.21
1	A	21:VAL	C	22:GLN	N	3.10
1	A	27:ASN	C	28:GLY	N	3.09
1	A	32:LYS	C	33:GLU	N	3.09
1	A	23:GLY	C	24:THR	N	3.08
1	A	11:ALA	C	12:ARG	N	3.06
1	A	29:ARG	C	30:VAL	N	3.04
1	A	17:ASP	C	18:ILE	N	2.52
1	A	28:GLY	C	29:ARG	N	2.44
1	A	3:ALA	C	4:MET	N	2.18
1	A	13:GLU	C	14:LYS	N	2.12
1	A	33:GLU	C	34:ASP	N	1.76
1	A	9:LYS	C	10:TYR	N	1.70
1	A	6:SER	C	7:VAL	N	1.08
1	A	7:VAL	C	8:ARG	N	1.08
1	A	14:LYS	C	15:GLY	N	1.08
1	A	19:ARG	C	20:LEU	N	1.08
1	A	20:LEU	C	21:VAL	N	1.08
1	A	25:GLY	C	26:LYS	N	1.08
1	A	26:LYS	C	27:ASN	N	1.08
1	A	2:ILE	C	3:ALA	N	1.00
1	A	22:GLN	C	23:GLY	N	1.00

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided