



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 8, 2026 – 11:04 AM UTC

PDB ID : 1RFL / pdb_00001rfl
Title : NMR data driven structural model of G-domain of MnmE protein
Authors : Monleon, D.; Esteve, V.; Martinez-Vicente, M.; Yim, L.; Armengod, M.E.; Celda, B.
Deposited on : 2003-11-10

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

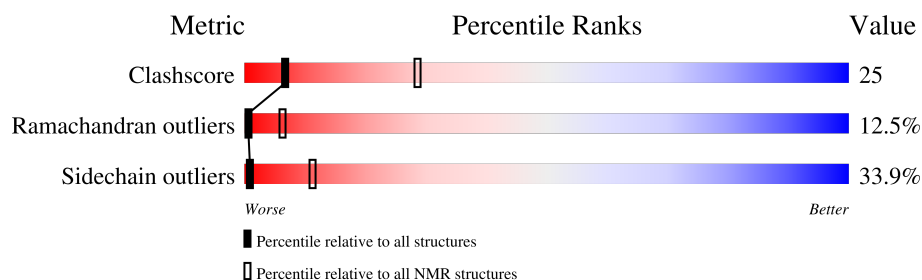
1 Overall quality at a glance

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	172	24% 69% • •

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 12 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *fewest violations*.

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:4-A:170 (167)	1.12	12

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 and 2 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2675 atoms, of which 1364 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Probable tRNA modification GTPase trmE.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	172	Total	C	H	N	O	S	0
			2675	812	1364	244	250	5	

There are 4 discrepancies between the modelled and reference sequences:

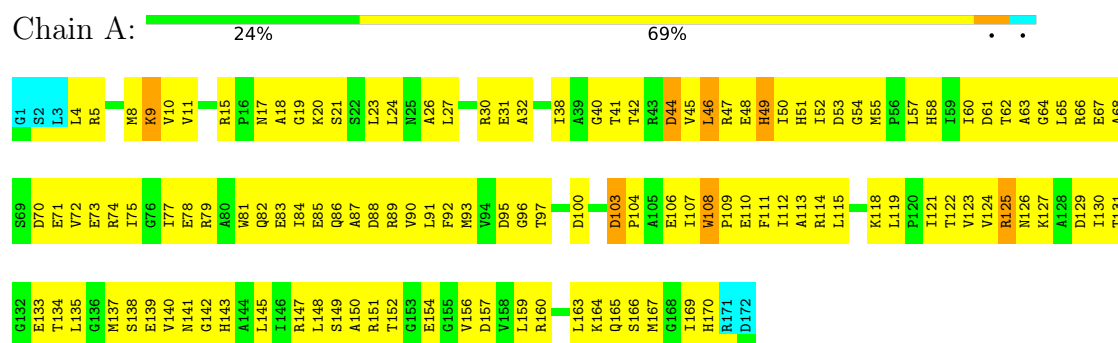
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	169	ILE	-	cloning artifact	UNP P25522
A	170	HIS	-	cloning artifact	UNP P25522
A	171	ARG	-	cloning artifact	UNP P25522
A	172	ASP	-	cloning artifact	UNP P25522

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: Probable tRNA modification GTPase trmE

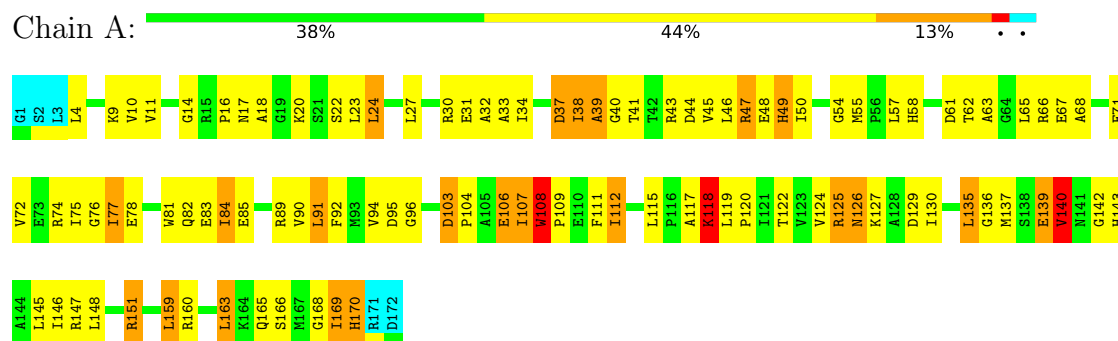


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

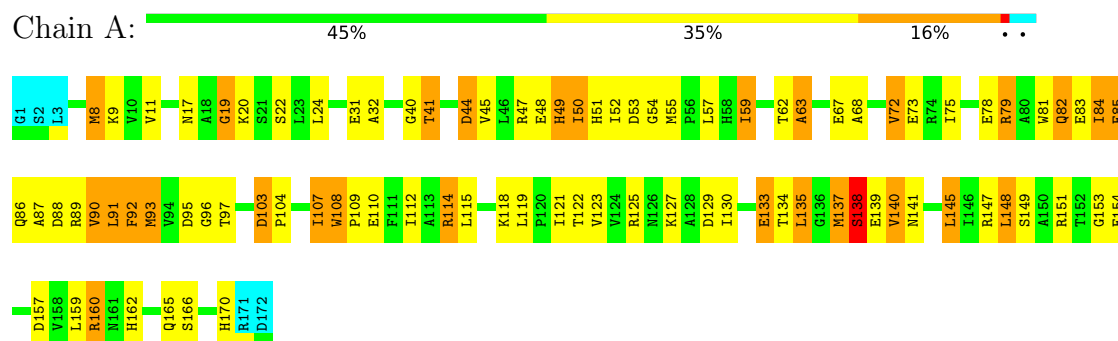
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Probable tRNA modification GTPase trmE



4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Probable tRNA modification GTPase trmE



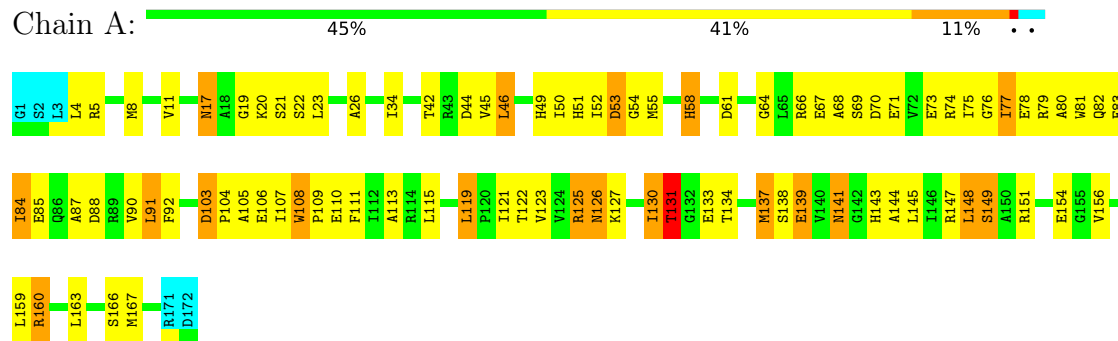
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Probable tRNA modification GTPase trmE



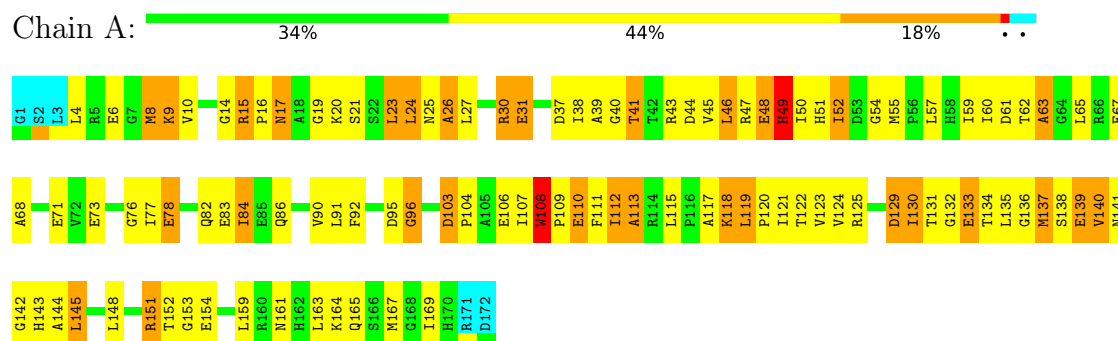
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Probable tRNA modification GTPase trmE



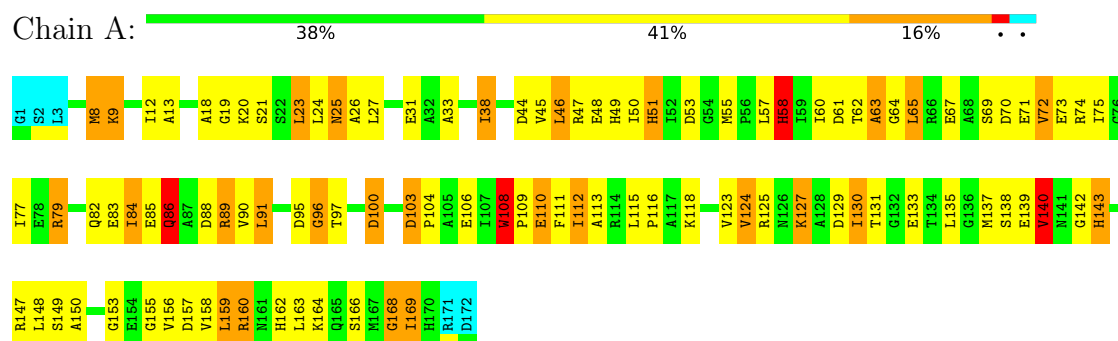
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Probable tRNA modification GTPase trmE



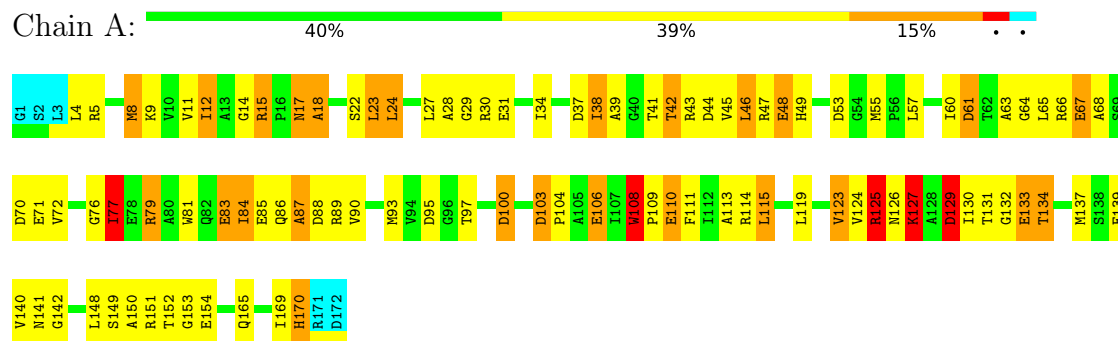
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Probable tRNA modification GTPase trmE



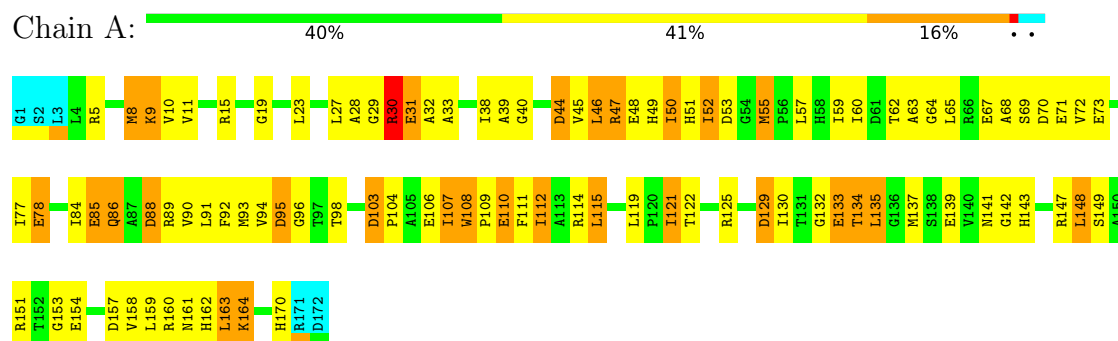
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Probable tRNA modification GTPase trmE



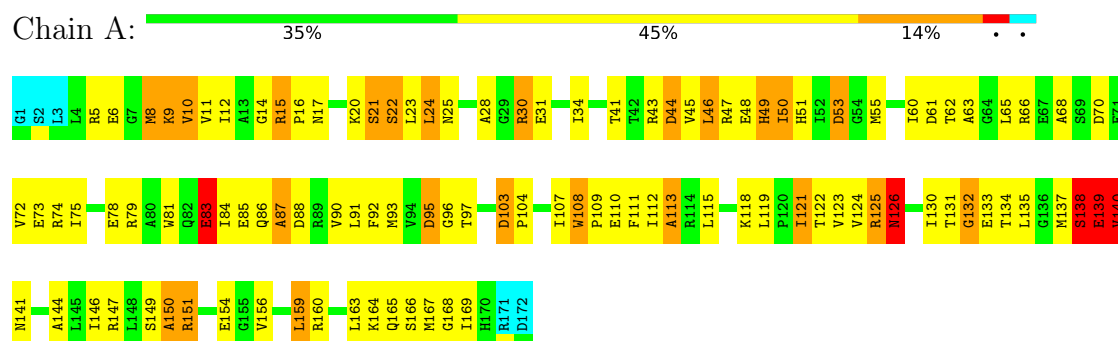
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Probable tRNA modification GTPase trmE



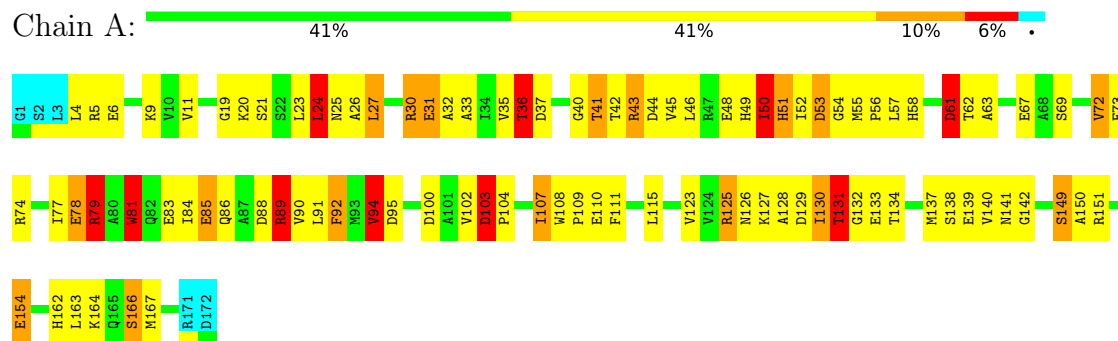
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Probable tRNA modification GTPase trmE



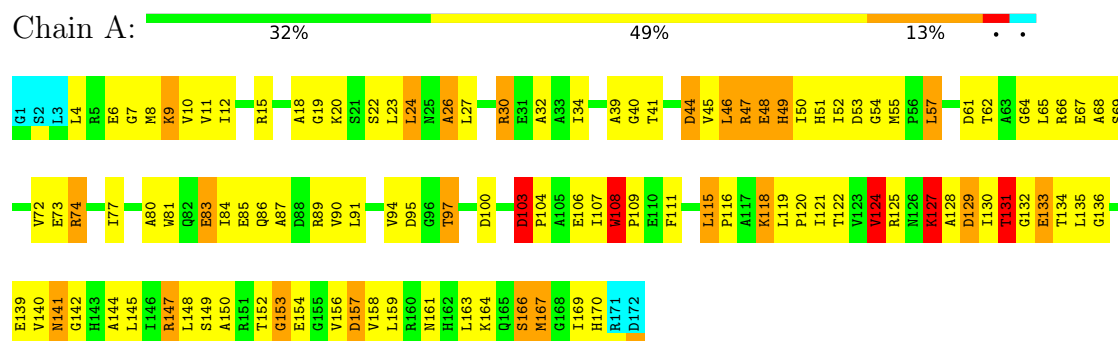
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Probable tRNA modification GTPase trmE



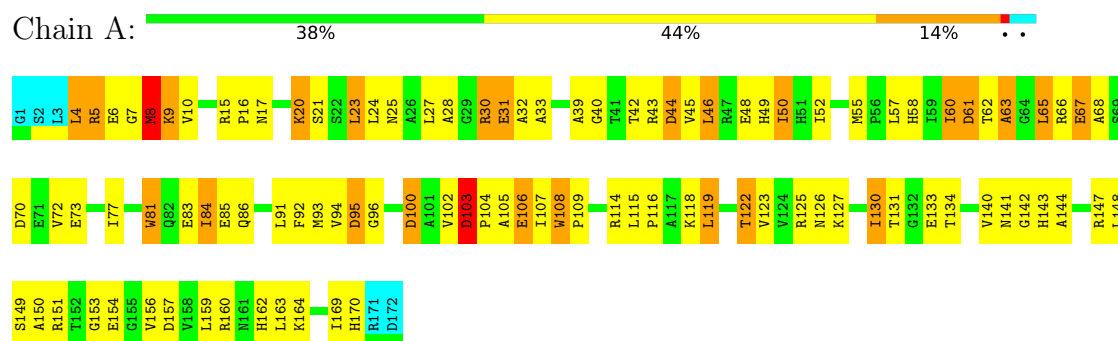
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Probable tRNA modification GTPase trmE



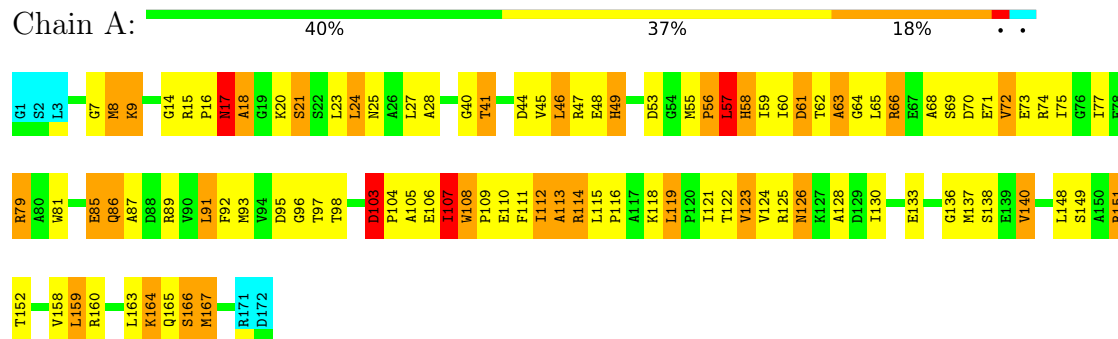
4.2.12 Score per residue for model 12 (medoid)

- Molecule 1: Probable tRNA modification GTPase trmE



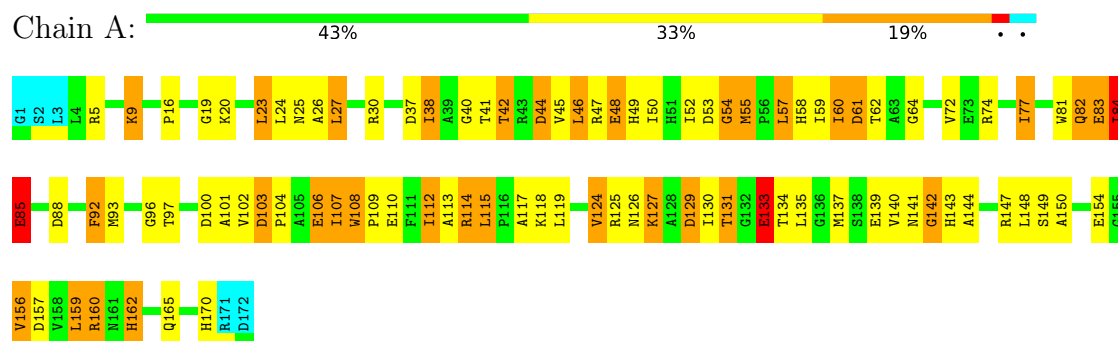
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Probable tRNA modification GTPase trmE



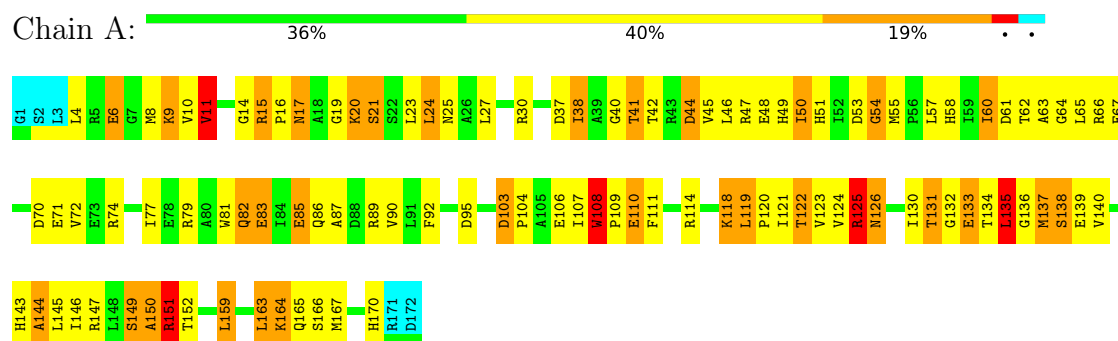
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Probable tRNA modification GTPase trmE



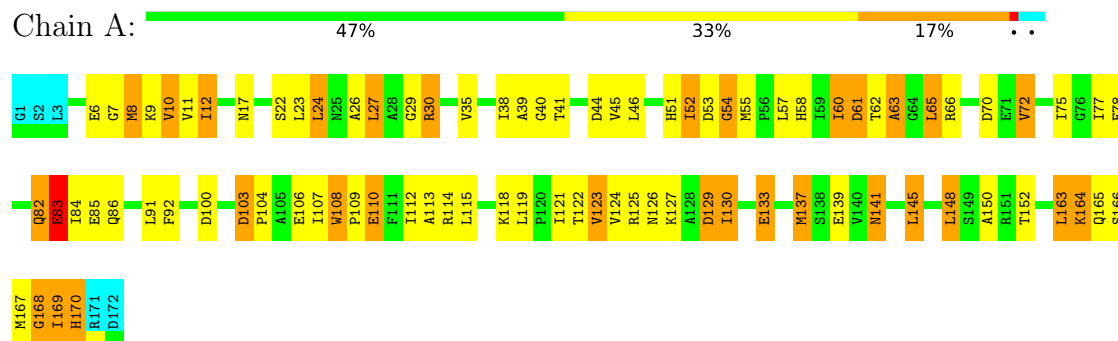
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Probable tRNA modification GTPase trmE



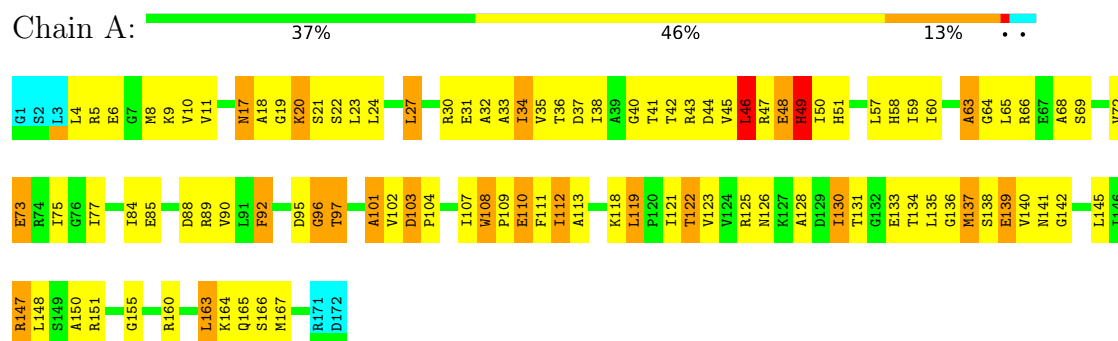
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Probable tRNA modification GTPase trmE



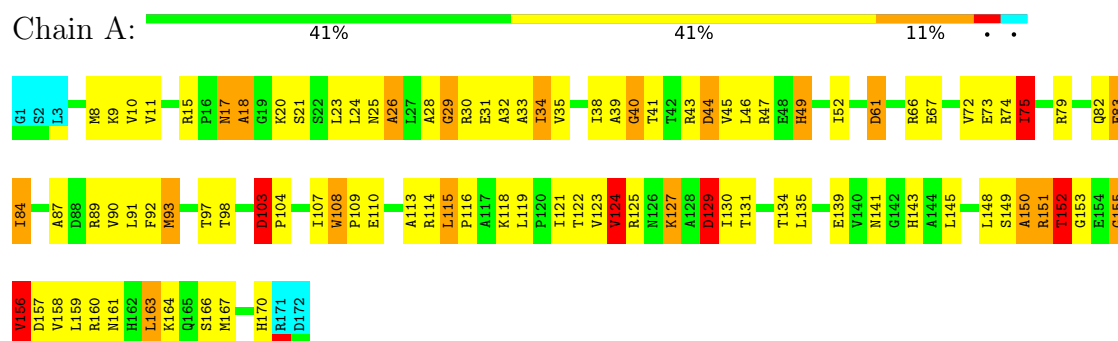
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Probable tRNA modification GTPase trmE



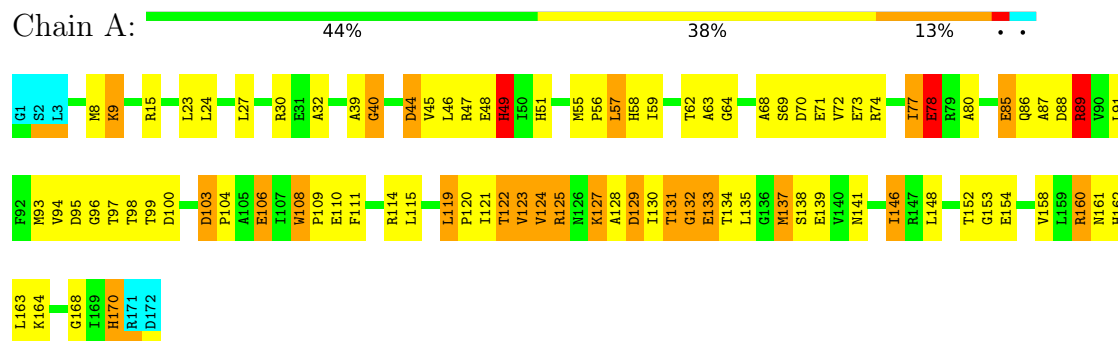
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Probable tRNA modification GTPase trmE



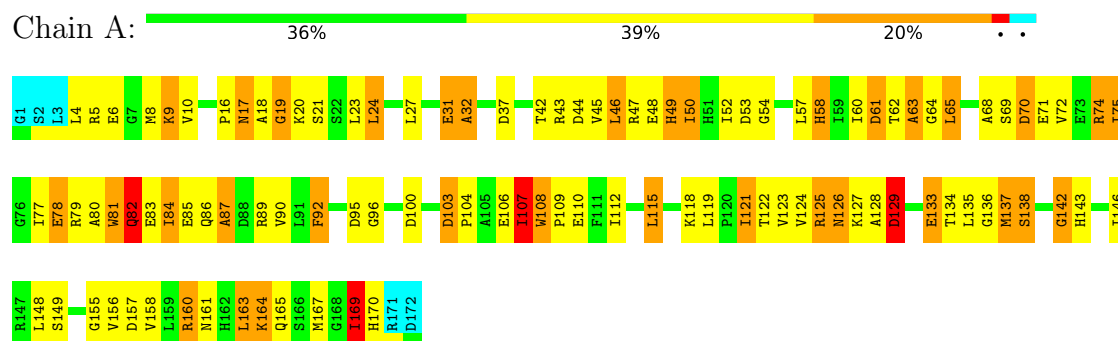
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Probable tRNA modification GTPase trmE



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Probable tRNA modification GTPase trmE



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *NMR restraints were obtained from the backbone assignment (TALOS analysis for dihedral angle constraints) and from the ^{15}N -edited 3D NOESY. Additional structural information was obtained from the homologous GTPase protein structures..*

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
DYANA	structure solution	2000
DYANA	refinement	2000

No chemical shift data was provided.

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	0.81±0.00	0±0/1292 (0.0± 0.0%)	1.09±0.02	1±1/1751 (0.0± 0.0%)
All	All	0.81	0/25840 (0.0%)	1.09	13/35020 (0.0%)

There are no bond-length outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	108	TRP	O-C-N	6.11	124.49	120.27	12	8
1	A	103	ASP	O-C-N	5.27	124.54	120.38	11	5

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	1274	1327	1296	64±9
All	All	25480	26540	25920	1272

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 25.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:ALA:HB3	1:A:93:MET:HE1	0.94	1.35	13	1
1:A:124:VAL:HG12	1:A:130:ILE:HD11	0.86	1.47	1	1
1:A:107:ILE:O	1:A:107:ILE:HD13	0.86	1.71	1	3
1:A:130:ILE:HG23	1:A:134:THR:HG21	0.86	1.45	3	1
1:A:92:PHE:CE2	1:A:119:LEU:HD23	0.86	2.06	13	1
1:A:92:PHE:CE2	1:A:107:ILE:HG22	0.84	2.07	2	2
1:A:121:ILE:CG2	1:A:134:THR:HG23	0.82	2.05	20	1
1:A:75:ILE:HD13	1:A:75:ILE:O	0.82	1.75	3	1
1:A:88:ASP:C	1:A:115:LEU:HD12	0.82	2.00	8	1
1:A:68:ALA:O	1:A:72:VAL:HG23	0.81	1.73	12	3
1:A:130:ILE:HD12	1:A:131:THR:N	0.80	1.91	15	1
1:A:46:LEU:HD22	1:A:61:ASP:HA	0.78	1.55	15	4
1:A:63:ALA:HB3	1:A:86:GLN:OE1	0.78	1.78	12	1
1:A:11:VAL:CG1	1:A:90:VAL:HG22	0.77	2.09	4	4
1:A:46:LEU:HD12	1:A:62:THR:HG23	0.76	1.56	6	1
1:A:57:LEU:C	1:A:57:LEU:HD22	0.76	2.06	19	1
1:A:30:ARG:HH21	1:A:49:HIS:CE1	0.76	1.98	1	1
1:A:4:LEU:HD21	1:A:169:ILE:HG22	0.76	1.56	20	1
1:A:121:ILE:HG21	1:A:134:THR:HG23	0.74	1.59	20	1
1:A:23:LEU:O	1:A:26:ALA:HB3	0.74	1.83	4	2
1:A:9:LYS:HB3	1:A:62:THR:HG22	0.73	1.59	9	2
1:A:84:ILE:HD13	1:A:85:GLU:N	0.73	1.97	14	1
1:A:91:LEU:O	1:A:91:LEU:HD13	0.73	1.83	1	1
1:A:124:VAL:HG22	1:A:125:ARG:N	0.73	1.98	18	2
1:A:97:THR:HG23	1:A:122:THR:HG21	0.72	1.59	9	1
1:A:144:ALA:O	1:A:145:LEU:HD23	0.71	1.84	5	2
1:A:63:ALA:HB3	1:A:86:GLN:CD	0.71	2.09	12	1
1:A:130:ILE:HD12	1:A:130:ILE:O	0.71	1.85	7	1
1:A:112:ILE:C	1:A:112:ILE:HD13	0.71	2.11	8	4
1:A:91:LEU:HD22	1:A:91:LEU:C	0.71	2.10	1	1
1:A:114:ARG:C	1:A:115:LEU:HD22	0.71	2.11	13	2
1:A:140:VAL:HG23	1:A:141:ASN:N	0.71	2.00	9	1
1:A:63:ALA:HB2	1:A:72:VAL:HG21	0.71	1.61	16	4
1:A:148:LEU:HD13	1:A:148:LEU:O	0.71	1.86	2	1
1:A:134:THR:C	1:A:135:LEU:HD23	0.70	2.11	2	1
1:A:92:PHE:CE2	1:A:119:LEU:HD13	0.70	2.21	18	1
1:A:50:ILE:HD13	1:A:50:ILE:N	0.70	2.02	9	4
1:A:130:ILE:CD1	1:A:134:THR:HG21	0.70	2.16	10	1
1:A:61:ASP:HB2	1:A:72:VAL:HG11	0.70	1.64	14	1
1:A:130:ILE:C	1:A:130:ILE:HD13	0.69	2.11	4	1
1:A:119:LEU:HD13	1:A:120:PRO:HD2	0.69	1.64	15	2
1:A:118:LYS:HG2	1:A:144:ALA:HB3	0.69	1.64	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:LEU:HD11	1:A:159:LEU:HD21	0.69	1.63	2	1
1:A:101:ALA:C	1:A:102:VAL:HG23	0.68	2.11	17	2
1:A:90:VAL:HG21	1:A:110:GLU:OE1	0.68	1.88	10	3
1:A:139:GLU:O	1:A:140:VAL:HG12	0.68	1.88	2	2
1:A:24:LEU:C	1:A:24:LEU:HD23	0.68	2.12	2	1
1:A:12:ILE:HG22	1:A:91:LEU:HB3	0.68	1.65	3	1
1:A:88:ASP:CG	1:A:167:MET:HE2	0.68	2.13	9	1
1:A:137:MET:SD	1:A:145:LEU:HD21	0.68	2.28	17	1
1:A:119:LEU:O	1:A:145:LEU:HD23	0.68	1.89	18	3
1:A:63:ALA:HB2	1:A:84:ILE:CG1	0.68	2.19	20	1
1:A:24:LEU:C	1:A:24:LEU:HD12	0.68	2.14	1	1
1:A:130:ILE:O	1:A:130:ILE:HG23	0.68	1.87	10	1
1:A:152:THR:O	1:A:152:THR:HG22	0.68	1.88	18	1
1:A:8:MET:HE1	1:A:86:GLN:O	0.67	1.90	8	2
1:A:45:VAL:HG13	1:A:45:VAL:O	0.67	1.87	14	1
1:A:92:PHE:CE1	1:A:107:ILE:HG22	0.67	2.25	14	1
1:A:112:ILE:HG23	1:A:112:ILE:O	0.67	1.88	1	2
1:A:24:LEU:HD21	1:A:48:GLU:HA	0.67	1.66	7	1
1:A:10:VAL:HG21	1:A:163:LEU:HD11	0.66	1.67	5	1
1:A:115:LEU:O	1:A:115:LEU:HD22	0.66	1.89	14	3
1:A:52:ILE:HG23	1:A:55:MET:O	0.66	1.88	8	2
1:A:123:VAL:HA	1:A:130:ILE:HG21	0.66	1.67	13	2
1:A:123:VAL:HG13	1:A:123:VAL:O	0.66	1.90	2	5
1:A:27:LEU:HD11	1:A:163:LEU:CD1	0.66	2.21	8	1
1:A:144:ALA:C	1:A:145:LEU:HD23	0.66	2.16	5	1
1:A:9:LYS:HB2	1:A:62:THR:HG22	0.66	1.66	8	3
1:A:60:ILE:C	1:A:60:ILE:HD12	0.65	2.16	20	1
1:A:123:VAL:HG23	1:A:123:VAL:O	0.65	1.91	17	1
1:A:148:LEU:C	1:A:148:LEU:HD22	0.65	2.15	2	2
1:A:87:ALA:O	1:A:115:LEU:HD11	0.65	1.90	2	2
1:A:36:THR:HG23	1:A:37:ASP:N	0.65	2.05	10	1
1:A:124:VAL:HG23	1:A:124:VAL:O	0.65	1.90	15	1
1:A:97:THR:HG22	1:A:97:THR:O	0.65	1.91	17	3
1:A:12:ILE:HD12	1:A:12:ILE:O	0.65	1.92	9	1
1:A:9:LYS:HZ2	1:A:87:ALA:CA	0.65	2.05	13	1
1:A:24:LEU:HD11	1:A:49:HIS:NE2	0.65	2.07	20	1
1:A:8:MET:HE2	1:A:88:ASP:CB	0.65	2.22	3	1
1:A:122:THR:HG23	1:A:122:THR:O	0.65	1.92	16	1
1:A:90:VAL:O	1:A:90:VAL:HG13	0.65	1.92	1	1
1:A:89:ARG:NH1	1:A:143:HIS:CE1	0.65	2.65	15	2
1:A:112:ILE:HG22	1:A:112:ILE:O	0.65	1.90	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:LEU:HD13	1:A:159:LEU:HD21	0.64	1.65	13	1
1:A:69:SER:HB2	1:A:84:ILE:HG21	0.64	1.68	4	1
1:A:77:ILE:HG22	1:A:77:ILE:O	0.64	1.92	12	3
1:A:143:HIS:O	1:A:144:ALA:HB3	0.64	1.93	14	2
1:A:118:LYS:HD3	1:A:144:ALA:HB3	0.64	1.69	5	1
1:A:9:LYS:HZ2	1:A:87:ALA:HA	0.64	1.53	13	1
1:A:120:PRO:HB3	1:A:148:LEU:HD12	0.64	1.69	11	1
1:A:92:PHE:CZ	1:A:107:ILE:HD13	0.64	2.28	17	1
1:A:21:SER:HB2	1:A:35:VAL:HG21	0.64	1.67	18	1
1:A:10:VAL:HG11	1:A:163:LEU:HD21	0.64	1.68	1	4
1:A:112:ILE:HD13	1:A:112:ILE:O	0.63	1.93	8	1
1:A:108:TRP:C	1:A:108:TRP:CD1	0.63	2.76	16	1
1:A:94:VAL:HG22	1:A:120:PRO:HG2	0.63	1.69	1	1
1:A:122:THR:HG21	1:A:130:ILE:HG13	0.63	1.67	18	1
1:A:107:ILE:O	1:A:107:ILE:HG23	0.63	1.92	20	2
1:A:45:VAL:HG11	1:A:63:ALA:O	0.63	1.93	17	4
1:A:12:ILE:H	1:A:12:ILE:HD13	0.63	1.54	7	1
1:A:11:VAL:CG1	1:A:90:VAL:HG23	0.63	2.23	1	1
1:A:93:MET:O	1:A:93:MET:HE3	0.63	1.93	13	1
1:A:96:GLY:HA2	1:A:122:THR:HG21	0.63	1.68	17	2
1:A:124:VAL:HG13	1:A:129:ASP:HA	0.63	1.69	19	1
1:A:103:ASP:N	1:A:104:PRO:CD	0.62	2.62	12	20
1:A:122:THR:O	1:A:130:ILE:HG21	0.62	1.94	2	2
1:A:59:ILE:C	1:A:59:ILE:HD13	0.62	2.20	2	1
1:A:97:THR:CG2	1:A:122:THR:HG21	0.62	2.24	9	1
1:A:151:ARG:O	1:A:152:THR:HG23	0.62	1.93	13	1
1:A:30:ARG:NH2	1:A:49:HIS:CE1	0.62	2.67	1	3
1:A:122:THR:HG23	1:A:130:ILE:HD12	0.62	1.71	13	1
1:A:92:PHE:HE1	1:A:107:ILE:HG22	0.62	1.54	14	1
1:A:62:THR:HG23	1:A:62:THR:O	0.62	1.94	16	4
1:A:122:THR:O	1:A:130:ILE:HG23	0.62	1.94	12	1
1:A:112:ILE:O	1:A:113:ALA:HB2	0.62	1.93	13	3
1:A:46:LEU:HD22	1:A:60:ILE:O	0.62	1.95	13	3
1:A:64:GLY:O	1:A:65:LEU:HD12	0.62	1.95	6	1
1:A:149:SER:O	1:A:150:ALA:HB3	0.62	1.93	11	3
1:A:10:VAL:HG21	1:A:163:LEU:HD21	0.61	1.71	17	4
1:A:35:VAL:O	1:A:36:THR:HG22	0.61	1.94	10	1
1:A:50:ILE:HD13	1:A:60:ILE:HG21	0.61	1.71	14	1
1:A:12:ILE:HG22	1:A:91:LEU:HG	0.61	1.72	9	1
1:A:113:ALA:HB1	1:A:115:LEU:HD11	0.61	1.72	14	1
1:A:97:THR:HG23	1:A:133:GLU:OE1	0.61	1.95	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:VAL:CG2	1:A:163:LEU:HD11	0.61	2.26	5	1
1:A:44:ASP:CB	1:A:72:VAL:HG23	0.61	2.26	6	1
1:A:24:LEU:HD21	1:A:48:GLU:C	0.61	2.21	14	1
1:A:27:LEU:HD13	1:A:27:LEU:N	0.61	2.11	14	1
1:A:92:PHE:O	1:A:92:PHE:CD2	0.61	2.54	13	3
1:A:89:ARG:N	1:A:115:LEU:HD12	0.60	2.11	3	2
1:A:130:ILE:HD13	1:A:130:ILE:O	0.60	1.96	4	1
1:A:96:GLY:C	1:A:122:THR:HG21	0.60	2.22	17	1
1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:N	0.60	2.12	14	3
1:A:90:VAL:HG21	1:A:110:GLU:CD	0.60	2.22	10	1
1:A:46:LEU:O	1:A:46:LEU:HD12	0.60	1.95	14	1
1:A:46:LEU:HD13	1:A:61:ASP:HA	0.60	1.72	20	2
1:A:113:ALA:HB3	1:A:115:LEU:CD2	0.60	2.27	9	1
1:A:32:ALA:O	1:A:33:ALA:HB3	0.60	1.96	3	5
1:A:130:ILE:O	1:A:131:THR:C	0.60	2.45	19	6
1:A:12:ILE:HG22	1:A:12:ILE:O	0.60	1.97	6	1
1:A:52:ILE:HD12	1:A:52:ILE:O	0.59	1.97	18	1
1:A:113:ALA:HB1	1:A:115:LEU:HD21	0.59	1.73	7	1
1:A:24:LEU:C	1:A:24:LEU:HD13	0.59	2.22	12	1
1:A:46:LEU:HD13	1:A:62:THR:H	0.59	1.57	1	1
1:A:75:ILE:O	1:A:75:ILE:HG23	0.59	1.96	18	1
1:A:96:GLY:CA	1:A:122:THR:HG21	0.59	2.28	17	1
1:A:123:VAL:O	1:A:124:VAL:C	0.59	2.45	18	3
1:A:50:ILE:HG21	1:A:60:ILE:H	0.59	1.57	20	1
1:A:113:ALA:HB3	1:A:115:LEU:HD11	0.59	1.74	18	1
1:A:112:ILE:O	1:A:112:ILE:HG23	0.58	1.96	13	1
1:A:17:ASN:O	1:A:18:ALA:HB3	0.58	1.99	7	1
1:A:118:LYS:HE2	1:A:159:LEU:HD11	0.58	1.73	15	1
1:A:50:ILE:HD13	1:A:50:ILE:H	0.58	1.57	2	2
1:A:11:VAL:HG13	1:A:90:VAL:HG22	0.58	1.76	8	4
1:A:159:LEU:HD12	1:A:160:ARG:N	0.58	2.13	4	1
1:A:67:GLU:O	1:A:68:ALA:HB3	0.58	1.97	12	1
1:A:84:ILE:HD13	1:A:84:ILE:C	0.58	2.23	14	1
1:A:86:GLN:NE2	1:A:87:ALA:HB2	0.58	2.13	20	1
1:A:51:HIS:CE1	1:A:160:ARG:HH21	0.58	2.17	2	2
1:A:23:LEU:CD2	1:A:148:LEU:HD11	0.58	2.29	4	1
1:A:92:PHE:CE2	1:A:107:ILE:CG2	0.58	2.87	18	1
1:A:25:ASN:O	1:A:26:ALA:HB2	0.57	1.99	5	1
1:A:24:LEU:O	1:A:28:ALA:HB2	0.57	2.00	3	1
1:A:92:PHE:O	1:A:92:PHE:CG	0.57	2.57	13	2
1:A:12:ILE:HD13	1:A:12:ILE:N	0.57	2.13	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:143:HIS:CE1	1:A:162:HIS:CE1	0.57	2.92	8	1
1:A:28:ALA:HB2	1:A:49:HIS:CE1	0.57	2.35	13	1
1:A:97:THR:CG2	1:A:130:ILE:HD13	0.57	2.29	13	1
1:A:104:PRO:HA	1:A:107:ILE:HG22	0.56	1.76	20	3
1:A:92:PHE:CG	1:A:92:PHE:O	0.56	2.58	9	1
1:A:108:TRP:N	1:A:109:PRO:CD	0.56	2.69	10	15
1:A:111:PHE:CD1	1:A:111:PHE:C	0.56	2.83	13	6
1:A:72:VAL:HG11	1:A:84:ILE:CD1	0.56	2.30	12	1
1:A:46:LEU:HD22	1:A:61:ASP:HB3	0.56	1.77	20	1
1:A:18:ALA:CB	1:A:93:MET:HE1	0.56	2.21	13	1
1:A:44:ASP:O	1:A:45:VAL:HG12	0.56	1.99	6	7
1:A:42:THR:HG23	1:A:45:VAL:HA	0.56	1.77	14	1
1:A:118:LYS:CE	1:A:159:LEU:HD11	0.56	2.31	15	1
1:A:130:ILE:HG22	1:A:130:ILE:O	0.56	2.01	3	1
1:A:30:ARG:CZ	1:A:49:HIS:CE1	0.56	2.89	5	2
1:A:52:ILE:HG21	1:A:58:HIS:HB2	0.56	1.77	14	1
1:A:61:ASP:HB3	1:A:72:VAL:HG13	0.56	1.78	10	2
1:A:133:GLU:O	1:A:134:THR:HG22	0.56	2.01	14	1
1:A:59:ILE:C	1:A:59:ILE:CD1	0.55	2.80	2	1
1:A:59:ILE:HG23	1:A:59:ILE:O	0.55	2.01	2	1
1:A:8:MET:HE2	1:A:88:ASP:CG	0.55	2.27	3	1
1:A:8:MET:HE2	1:A:88:ASP:HB2	0.55	1.78	3	1
1:A:131:THR:HG22	1:A:132:GLY:N	0.55	2.16	10	1
1:A:118:LYS:HB2	1:A:144:ALA:HB3	0.55	1.77	11	1
1:A:115:LEU:HD12	1:A:116:PRO:O	0.55	2.02	12	1
1:A:44:ASP:O	1:A:45:VAL:C	0.55	2.50	14	7
1:A:23:LEU:CD2	1:A:148:LEU:HD22	0.55	2.32	13	1
1:A:77:ILE:HD13	1:A:77:ILE:N	0.55	2.15	14	1
1:A:146:ILE:HD12	1:A:148:LEU:HD23	0.55	1.78	19	1
1:A:63:ALA:CB	1:A:72:VAL:HG21	0.55	2.32	15	2
1:A:8:MET:HE1	1:A:85:GLU:HG2	0.55	1.78	2	1
1:A:160:ARG:HA	1:A:163:LEU:HD12	0.55	1.77	12	1
1:A:72:VAL:HG12	1:A:73:GLU:N	0.55	2.16	13	1
1:A:24:LEU:HD22	1:A:48:GLU:HA	0.54	1.79	15	1
1:A:11:VAL:HG13	1:A:90:VAL:HG23	0.54	1.79	1	4
1:A:97:THR:HG23	1:A:122:THR:CG2	0.54	2.31	9	1
1:A:91:LEU:HD22	1:A:92:PHE:N	0.54	2.18	1	1
1:A:115:LEU:HD22	1:A:115:LEU:C	0.54	2.26	20	2
1:A:31:GLU:O	1:A:32:ALA:HB2	0.54	2.02	20	1
1:A:130:ILE:O	1:A:130:ILE:CG2	0.54	2.55	10	1
1:A:12:ILE:HD12	1:A:48:GLU:OE2	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:61:ASP:OD1	1:A:84:ILE:HD11	0.54	2.01	9	1
1:A:21:SER:CB	1:A:35:VAL:HG21	0.54	2.33	18	1
1:A:10:VAL:O	1:A:62:THR:HG21	0.54	2.03	1	1
1:A:46:LEU:O	1:A:46:LEU:CG	0.54	2.56	14	2
1:A:90:VAL:HG23	1:A:115:LEU:CD1	0.54	2.32	7	1
1:A:72:VAL:O	1:A:75:ILE:HG22	0.54	2.03	20	1
1:A:113:ALA:HB1	1:A:115:LEU:CD1	0.54	2.32	14	1
1:A:34:ILE:HD13	1:A:35:VAL:N	0.54	2.18	18	2
1:A:146:ILE:HG21	1:A:158:VAL:HG11	0.54	1.78	3	1
1:A:50:ILE:HB	1:A:60:ILE:HD12	0.54	1.80	6	1
1:A:112:ILE:C	1:A:112:ILE:CD1	0.54	2.81	14	4
1:A:88:ASP:O	1:A:115:LEU:HD12	0.54	2.02	8	1
1:A:38:ILE:HD13	1:A:38:ILE:N	0.53	2.18	1	1
1:A:124:VAL:HG12	1:A:125:ARG:N	0.53	2.18	19	1
1:A:38:ILE:H	1:A:38:ILE:HD13	0.53	1.63	6	1
1:A:140:VAL:CG2	1:A:141:ASN:N	0.53	2.70	9	1
1:A:44:ASP:HA	1:A:72:VAL:HG12	0.53	1.79	17	1
1:A:77:ILE:HG22	1:A:78:GLU:N	0.53	2.17	19	1
1:A:111:PHE:CE1	1:A:140:VAL:HG23	0.53	2.39	6	1
1:A:27:LEU:HD23	1:A:27:LEU:O	0.53	2.04	10	1
1:A:51:HIS:CG	1:A:51:HIS:O	0.53	2.62	16	2
1:A:8:MET:O	1:A:8:MET:HE2	0.53	2.04	16	3
1:A:26:ALA:HB1	1:A:156:VAL:HG21	0.53	1.81	14	1
1:A:121:ILE:HD11	1:A:145:LEU:CB	0.53	2.34	3	2
1:A:11:VAL:HG12	1:A:90:VAL:HG22	0.53	1.81	9	2
1:A:69:SER:O	1:A:72:VAL:HG12	0.53	2.03	11	1
1:A:97:THR:HG23	1:A:97:THR:O	0.53	2.03	14	1
1:A:92:PHE:CD1	1:A:107:ILE:HG22	0.53	2.39	15	1
1:A:92:PHE:CZ	1:A:119:LEU:CD2	0.52	2.91	5	1
1:A:50:ILE:CD1	1:A:50:ILE:C	0.52	2.82	10	1
1:A:166:SER:O	1:A:167:MET:C	0.52	2.51	13	4
1:A:36:THR:CG2	1:A:37:ASP:N	0.52	2.73	10	1
1:A:24:LEU:C	1:A:24:LEU:CD2	0.52	2.81	2	1
1:A:122:THR:HG21	1:A:130:ILE:CG1	0.52	2.34	18	1
1:A:108:TRP:CB	1:A:109:PRO:HD3	0.52	2.35	20	12
1:A:19:GLY:HA3	1:A:93:MET:HE2	0.52	1.81	2	1
1:A:152:THR:O	1:A:152:THR:CG2	0.52	2.58	18	1
1:A:45:VAL:O	1:A:46:LEU:C	0.52	2.52	13	8
1:A:90:VAL:HG21	1:A:110:GLU:OE2	0.52	2.04	4	2
1:A:97:THR:HG23	1:A:130:ILE:HD13	0.52	1.79	13	1
1:A:50:ILE:C	1:A:50:ILE:HD13	0.52	2.29	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:158:VAL:O	1:A:162:HIS:CD2	0.52	2.62	19	1
1:A:45:VAL:HG22	1:A:45:VAL:O	0.52	2.03	1	2
1:A:45:VAL:HG21	1:A:63:ALA:O	0.52	2.04	20	2
1:A:94:VAL:HG12	1:A:96:GLY:H	0.52	1.65	8	1
1:A:94:VAL:HG12	1:A:95:ASP:H	0.52	1.64	10	1
1:A:111:PHE:CD1	1:A:140:VAL:HG21	0.52	2.40	15	1
1:A:60:ILE:C	1:A:60:ILE:CD1	0.52	2.83	20	1
1:A:111:PHE:CD1	1:A:140:VAL:CG2	0.52	2.93	15	2
1:A:112:ILE:O	1:A:112:ILE:CG2	0.51	2.58	1	5
1:A:140:VAL:HG22	1:A:141:ASN:H	0.51	1.65	2	1
1:A:111:PHE:HB3	1:A:140:VAL:HG23	0.51	1.81	11	1
1:A:26:ALA:HB3	1:A:27:LEU:HD13	0.51	1.82	14	1
1:A:63:ALA:HB2	1:A:72:VAL:CG2	0.51	2.35	1	1
1:A:139:GLU:O	1:A:140:VAL:CG1	0.51	2.58	2	1
1:A:77:ILE:O	1:A:78:GLU:C	0.51	2.54	4	1
1:A:123:VAL:O	1:A:123:VAL:HG12	0.51	2.04	5	1
1:A:124:VAL:HG22	1:A:125:ARG:HD3	0.51	1.82	7	1
1:A:92:PHE:CD2	1:A:117:ALA:HB1	0.51	2.40	14	1
1:A:124:VAL:O	1:A:124:VAL:HG13	0.51	2.05	7	1
1:A:92:PHE:HE2	1:A:119:LEU:HD13	0.51	1.64	18	1
1:A:119:LEU:HD23	1:A:120:PRO:HD2	0.51	1.82	19	1
1:A:52:ILE:HD12	1:A:53:ASP:N	0.51	2.19	10	1
1:A:130:ILE:HD13	1:A:134:THR:HG21	0.51	1.81	10	1
1:A:45:VAL:O	1:A:45:VAL:CG1	0.51	2.58	14	1
1:A:113:ALA:CB	1:A:115:LEU:HD11	0.51	2.36	18	1
1:A:52:ILE:HG21	1:A:56:PRO:HA	0.51	1.82	10	1
1:A:153:GLY:CA	1:A:156:VAL:HG13	0.51	2.35	11	1
1:A:46:LEU:O	1:A:46:LEU:CD1	0.51	2.58	14	1
1:A:143:HIS:O	1:A:144:ALA:CB	0.51	2.59	14	1
1:A:11:VAL:O	1:A:11:VAL:HG22	0.51	2.05	15	1
1:A:150:ALA:O	1:A:152:THR:N	0.51	2.44	18	2
1:A:44:ASP:O	1:A:46:LEU:N	0.51	2.44	17	8
1:A:136:GLY:O	1:A:137:MET:C	0.51	2.53	15	5
1:A:75:ILE:C	1:A:75:ILE:HD13	0.51	2.31	18	1
1:A:80:ALA:O	1:A:81:TRP:CG	0.51	2.64	20	1
1:A:20:LYS:O	1:A:24:LEU:HD13	0.51	2.06	10	1
1:A:149:SER:O	1:A:150:ALA:CB	0.51	2.59	11	1
1:A:137:MET:O	1:A:138:SER:CB	0.50	2.59	2	1
1:A:148:LEU:HD22	1:A:149:SER:N	0.50	2.21	2	1
1:A:159:LEU:HD12	1:A:159:LEU:C	0.50	2.31	4	1
1:A:112:ILE:O	1:A:113:ALA:CB	0.50	2.59	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:ILE:HG22	1:A:52:ILE:CG1	0.50	2.35	4	1
1:A:35:VAL:O	1:A:36:THR:CB	0.50	2.59	10	1
1:A:42:THR:HG23	1:A:45:VAL:N	0.50	2.21	15	2
1:A:107:ILE:O	1:A:107:ILE:CD1	0.50	2.59	20	2
1:A:42:THR:O	1:A:44:ASP:N	0.50	2.43	3	1
1:A:119:LEU:O	1:A:145:LEU:CB	0.50	2.60	5	1
1:A:12:ILE:CD1	1:A:48:GLU:OE2	0.50	2.60	11	1
1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:O	0.50	2.07	5	2
1:A:87:ALA:O	1:A:115:LEU:HD22	0.50	2.06	11	1
1:A:38:ILE:C	1:A:40:GLY:N	0.50	2.69	1	1
1:A:103:ASP:N	1:A:104:PRO:HD2	0.50	2.21	12	15
1:A:124:VAL:HG22	1:A:125:ARG:H	0.50	1.67	16	5
1:A:107:ILE:CD1	1:A:110:GLU:CB	0.50	2.90	5	1
1:A:88:ASP:OD1	1:A:167:MET:CE	0.50	2.60	9	1
1:A:124:VAL:O	1:A:124:VAL:CG2	0.50	2.60	15	1
1:A:145:LEU:C	1:A:146:ILE:HD12	0.50	2.32	1	1
1:A:60:ILE:O	1:A:61:ASP:CB	0.50	2.59	3	2
1:A:62:THR:CG2	1:A:62:THR:O	0.50	2.60	12	1
1:A:57:LEU:HD22	1:A:57:LEU:O	0.50	2.06	19	1
1:A:169:ILE:O	1:A:170:HIS:CB	0.50	2.60	1	3
1:A:122:THR:O	1:A:130:ILE:HD13	0.50	2.07	5	1
1:A:23:LEU:HD13	1:A:148:LEU:CD2	0.50	2.37	14	1
1:A:111:PHE:CD1	1:A:140:VAL:HG23	0.50	2.42	1	1
1:A:130:ILE:C	1:A:130:ILE:CD1	0.50	2.84	4	1
1:A:88:ASP:OD1	1:A:167:MET:HE2	0.50	2.06	9	1
1:A:89:ARG:CZ	1:A:166:SER:OG	0.49	2.60	17	3
1:A:92:PHE:CE2	1:A:119:LEU:CD2	0.49	2.89	13	1
1:A:148:LEU:HD21	1:A:159:LEU:HD11	0.49	1.85	11	2
1:A:90:VAL:C	1:A:91:LEU:HD22	0.49	2.32	8	1
1:A:75:ILE:C	1:A:75:ILE:CD1	0.49	2.85	18	1
1:A:9:LYS:HG3	1:A:60:ILE:HD13	0.49	1.84	20	1
1:A:89:ARG:NH2	1:A:118:LYS:HZ2	0.49	2.05	3	1
1:A:89:ARG:NH2	1:A:118:LYS:NZ	0.49	2.60	3	1
1:A:123:VAL:HG13	1:A:124:VAL:N	0.49	2.22	6	1
1:A:119:LEU:HD11	1:A:139:GLU:OE1	0.49	2.07	4	1
1:A:49:HIS:O	1:A:50:ILE:CG1	0.49	2.60	17	1
1:A:123:VAL:O	1:A:125:ARG:N	0.49	2.46	18	2
1:A:145:LEU:O	1:A:146:ILE:HD13	0.49	2.08	3	1
1:A:90:VAL:HG11	1:A:110:GLU:HG2	0.49	1.85	7	1
1:A:124:VAL:O	1:A:125:ARG:C	0.49	2.55	7	3
1:A:30:ARG:HB3	1:A:33:ALA:HB2	0.49	1.84	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:119:LEU:N	1:A:119:LEU:HD23	0.49	2.23	12	1
1:A:136:GLY:O	1:A:138:SER:N	0.49	2.46	15	2
1:A:84:ILE:O	1:A:85:GLU:CB	0.49	2.61	16	1
1:A:45:VAL:O	1:A:47:ARG:N	0.49	2.46	5	7
1:A:90:VAL:HG23	1:A:115:LEU:HD12	0.49	1.84	4	2
1:A:123:VAL:HG22	1:A:123:VAL:O	0.49	2.08	7	2
1:A:46:LEU:CD2	1:A:60:ILE:O	0.49	2.60	14	1
1:A:129:ASP:C	1:A:131:THR:N	0.49	2.70	19	4
1:A:92:PHE:CD2	1:A:107:ILE:CG2	0.49	2.95	18	1
1:A:63:ALA:HB2	1:A:84:ILE:HD11	0.49	1.84	20	1
1:A:135:LEU:O	1:A:136:GLY:C	0.49	2.56	15	3
1:A:148:LEU:N	1:A:148:LEU:HD13	0.49	2.22	16	1
1:A:121:ILE:HD11	1:A:145:LEU:HB3	0.49	1.84	3	1
1:A:6:GLU:CD	1:A:6:GLU:C	0.49	2.81	11	1
1:A:57:LEU:C	1:A:57:LEU:CD2	0.49	2.80	19	1
1:A:122:THR:HB	1:A:130:ILE:HG21	0.49	1.85	19	1
1:A:24:LEU:HD12	1:A:24:LEU:O	0.48	2.07	1	1
1:A:62:THR:O	1:A:62:THR:CG2	0.48	2.61	2	1
1:A:121:ILE:CG1	1:A:145:LEU:HD22	0.48	2.38	2	1
1:A:75:ILE:HD13	1:A:75:ILE:C	0.48	2.32	3	1
1:A:168:GLY:O	1:A:169:ILE:C	0.48	2.56	16	3
1:A:93:MET:HE1	1:A:148:LEU:HD22	0.48	1.85	8	1
1:A:75:ILE:O	1:A:75:ILE:CG2	0.48	2.61	18	1
1:A:80:ALA:O	1:A:81:TRP:CB	0.48	2.59	20	1
1:A:50:ILE:CD1	1:A:58:HIS:O	0.48	2.60	6	2
1:A:113:ALA:HB1	1:A:115:LEU:CD2	0.48	2.37	7	2
1:A:35:VAL:O	1:A:36:THR:CG2	0.48	2.60	10	1
1:A:151:ARG:O	1:A:152:THR:CG2	0.48	2.61	13	1
1:A:92:PHE:CE1	1:A:110:GLU:HG3	0.48	2.43	20	1
1:A:8:MET:N	1:A:8:MET:SD	0.48	2.86	12	5
1:A:59:ILE:CG2	1:A:59:ILE:O	0.48	2.61	14	1
1:A:121:ILE:O	1:A:147:ARG:CB	0.48	2.61	17	1
1:A:121:ILE:HG22	1:A:134:THR:HG23	0.48	1.83	20	1
1:A:37:ASP:O	1:A:38:ILE:C	0.48	2.54	1	4
1:A:26:ALA:HB1	1:A:156:VAL:CG2	0.48	2.38	14	2
1:A:91:LEU:HD21	1:A:159:LEU:HD22	0.48	1.83	6	1
1:A:71:GLU:O	1:A:75:ILE:HG23	0.48	2.08	13	1
1:A:86:GLN:CD	1:A:87:ALA:N	0.48	2.72	20	1
1:A:16:PRO:O	1:A:17:ASN:CB	0.48	2.60	12	5
1:A:123:VAL:O	1:A:123:VAL:CG1	0.48	2.60	10	3
1:A:148:LEU:C	1:A:148:LEU:CD2	0.48	2.87	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:PHE:CZ	1:A:119:LEU:HD21	0.48	2.43	5	1
1:A:38:ILE:HD13	1:A:39:ALA:N	0.48	2.23	7	1
1:A:25:ASN:ND2	1:A:26:ALA:N	0.48	2.62	10	1
1:A:122:THR:CG2	1:A:124:VAL:HG22	0.48	2.38	5	1
1:A:50:ILE:HD13	1:A:51:HIS:N	0.48	2.23	10	1
1:A:89:ARG:NH1	1:A:143:HIS:ND1	0.48	2.61	20	1
1:A:118:LYS:HZ3	1:A:159:LEU:HD23	0.48	1.69	3	1
1:A:25:ASN:OD1	1:A:33:ALA:HB1	0.48	2.09	6	1
1:A:114:ARG:N	1:A:115:LEU:HD13	0.48	2.24	14	1
1:A:23:LEU:HA	1:A:150:ALA:HB2	0.48	1.85	15	1
1:A:122:THR:O	1:A:122:THR:CG2	0.48	2.62	16	1
1:A:72:VAL:CG1	1:A:84:ILE:HD11	0.48	2.39	6	1
1:A:52:ILE:HD12	1:A:53:ASP:C	0.48	2.34	10	1
1:A:133:GLU:O	1:A:134:THR:CG2	0.48	2.62	14	1
1:A:155:GLY:C	1:A:156:VAL:CG2	0.48	2.86	18	1
1:A:63:ALA:HB2	1:A:84:ILE:CD1	0.48	2.38	20	1
1:A:107:ILE:O	1:A:108:TRP:C	0.48	2.57	18	5
1:A:121:ILE:HG22	1:A:122:THR:N	0.48	2.24	11	4
1:A:111:PHE:HB2	1:A:140:VAL:HG11	0.47	1.84	3	1
1:A:48:GLU:O	1:A:49:HIS:C	0.47	2.57	20	6
1:A:50:ILE:N	1:A:50:ILE:CD1	0.47	2.73	9	2
1:A:9:LYS:C	1:A:10:VAL:CG1	0.47	2.87	9	1
1:A:24:LEU:O	1:A:27:LEU:CB	0.47	2.62	1	1
1:A:130:ILE:HD12	1:A:130:ILE:C	0.47	2.34	15	1
1:A:114:ARG:C	1:A:115:LEU:HD13	0.47	2.34	18	1
1:A:97:THR:O	1:A:97:THR:CG2	0.47	2.60	7	3
1:A:130:ILE:O	1:A:131:THR:CB	0.47	2.63	4	1
1:A:44:ASP:O	1:A:45:VAL:CG1	0.47	2.62	6	3
1:A:51:HIS:CE1	1:A:160:ARG:NH2	0.47	2.82	9	1
1:A:27:LEU:HD21	1:A:159:LEU:HB2	0.47	1.86	11	1
1:A:131:THR:O	1:A:132:GLY:C	0.47	2.57	9	3
1:A:50:ILE:HG23	1:A:50:ILE:O	0.47	2.08	10	1
1:A:124:VAL:O	1:A:125:ARG:CB	0.47	2.61	13	2
1:A:46:LEU:HD12	1:A:46:LEU:C	0.47	2.34	14	1
1:A:8:MET:HE3	1:A:166:SER:O	0.47	2.10	18	1
1:A:89:ARG:NH2	1:A:116:PRO:CG	0.47	2.78	11	1
1:A:38:ILE:HD11	1:A:47:ARG:HG3	0.47	1.84	15	1
1:A:9:LYS:CG	1:A:60:ILE:HD13	0.47	2.39	20	1
1:A:8:MET:HE2	1:A:88:ASP:OD1	0.47	2.09	3	1
1:A:130:ILE:C	1:A:132:GLY:N	0.47	2.72	5	2
1:A:127:LYS:O	1:A:128:ALA:C	0.47	2.57	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:VAL:CG1	1:A:63:ALA:O	0.47	2.63	2	2
1:A:72:VAL:HG11	1:A:84:ILE:HD11	0.47	1.85	6	1
1:A:45:VAL:CG1	1:A:62:THR:O	0.47	2.63	11	2
1:A:90:VAL:HG11	1:A:110:GLU:OE2	0.47	2.09	18	1
1:A:134:THR:HG23	1:A:135:LEU:N	0.47	2.25	2	3
1:A:125:ARG:O	1:A:126:ASN:C	0.47	2.58	10	4
1:A:59:ILE:O	1:A:59:ILE:HG23	0.47	2.09	14	1
1:A:84:ILE:C	1:A:84:ILE:CD1	0.47	2.87	14	1
1:A:92:PHE:CZ	1:A:110:GLU:HG2	0.47	2.45	16	1
1:A:42:THR:HG23	1:A:45:VAL:H	0.47	1.69	17	1
1:A:107:ILE:O	1:A:107:ILE:CG2	0.47	2.63	20	1
1:A:23:LEU:O	1:A:24:LEU:C	0.46	2.58	14	10
1:A:38:ILE:O	1:A:39:ALA:C	0.46	2.58	1	1
1:A:67:GLU:O	1:A:68:ALA:CB	0.46	2.63	12	1
1:A:102:VAL:O	1:A:103:ASP:C	0.46	2.58	14	1
1:A:121:ILE:CG2	1:A:122:THR:N	0.46	2.78	11	2
1:A:4:LEU:O	1:A:5:ARG:CB	0.46	2.62	12	1
1:A:148:LEU:CD2	1:A:148:LEU:C	0.46	2.88	16	1
1:A:62:THR:HG22	1:A:62:THR:O	0.46	2.09	3	1
1:A:23:LEU:HD21	1:A:148:LEU:HD11	0.46	1.86	4	1
1:A:130:ILE:O	1:A:132:GLY:N	0.46	2.48	11	2
1:A:68:ALA:O	1:A:69:SER:C	0.46	2.58	20	5
1:A:122:THR:O	1:A:130:ILE:CD1	0.46	2.63	17	1
1:A:124:VAL:CG2	1:A:125:ARG:N	0.46	2.68	18	1
1:A:60:ILE:C	1:A:61:ASP:CG	0.46	2.82	3	2
1:A:60:ILE:HG22	1:A:61:ASP:N	0.46	2.26	6	3
1:A:76:GLY:O	1:A:78:GLU:N	0.46	2.46	4	1
1:A:91:LEU:HD11	1:A:118:LYS:NZ	0.46	2.25	5	1
1:A:61:ASP:HB3	1:A:72:VAL:HG21	0.46	1.87	11	1
1:A:95:ASP:O	1:A:96:GLY:C	0.46	2.59	6	5
1:A:126:ASN:O	1:A:128:ALA:N	0.46	2.48	13	2
1:A:104:PRO:C	1:A:106:GLU:N	0.46	2.73	13	1
1:A:27:LEU:HD13	1:A:27:LEU:H	0.46	1.70	14	1
1:A:111:PHE:CG	1:A:140:VAL:HG21	0.46	2.45	15	1
1:A:17:ASN:O	1:A:18:ALA:C	0.46	2.58	17	1
1:A:69:SER:O	1:A:73:GLU:CG	0.46	2.64	3	1
1:A:137:MET:O	1:A:138:SER:C	0.46	2.59	3	1
1:A:44:ASP:C	1:A:46:LEU:N	0.46	2.72	4	5
1:A:34:ILE:HG23	1:A:34:ILE:O	0.46	2.10	9	1
1:A:129:ASP:O	1:A:130:ILE:C	0.46	2.58	6	3
1:A:138:SER:O	1:A:139:GLU:C	0.46	2.59	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:159:LEU:O	1:A:160:ARG:C	0.46	2.59	14	1
1:A:58:HIS:CD2	1:A:60:ILE:HG13	0.46	2.46	17	1
1:A:92:PHE:CD2	1:A:107:ILE:HG22	0.46	2.45	18	1
1:A:38:ILE:O	1:A:40:GLY:N	0.46	2.49	5	2
1:A:81:TRP:O	1:A:81:TRP:CE3	0.46	2.69	4	1
1:A:112:ILE:O	1:A:112:ILE:CD1	0.46	2.64	8	1
1:A:134:THR:O	1:A:136:GLY:N	0.46	2.49	15	1
1:A:24:LEU:C	1:A:24:LEU:CD1	0.46	2.89	12	2
1:A:169:ILE:HG22	1:A:170:HIS:N	0.46	2.25	1	1
1:A:102:VAL:O	1:A:106:GLU:CD	0.46	2.59	12	1
1:A:115:LEU:C	1:A:115:LEU:CD2	0.46	2.89	20	2
1:A:30:ARG:O	1:A:31:GLU:C	0.46	2.59	10	8
1:A:155:GLY:O	1:A:157:ASP:N	0.46	2.49	18	3
1:A:108:TRP:N	1:A:109:PRO:HD2	0.46	2.26	10	2
1:A:127:LYS:C	1:A:129:ASP:N	0.46	2.72	7	3
1:A:10:VAL:HG11	1:A:163:LEU:CD2	0.46	2.41	12	2
1:A:23:LEU:HD13	1:A:93:MET:SD	0.46	2.51	12	1
1:A:104:PRO:O	1:A:105:ALA:C	0.46	2.59	13	1
1:A:42:THR:OG1	1:A:44:ASP:CG	0.46	2.59	20	1
1:A:46:LEU:HD11	1:A:50:ILE:CG2	0.45	2.40	6	1
1:A:90:VAL:HG12	1:A:116:PRO:O	0.45	2.10	6	1
1:A:77:ILE:O	1:A:77:ILE:CG2	0.45	2.64	12	2
1:A:92:PHE:CE1	1:A:110:GLU:HG2	0.45	2.46	16	1
1:A:40:GLY:O	1:A:41:THR:C	0.45	2.60	3	7
1:A:100:ASP:N	1:A:103:ASP:OD1	0.45	2.50	7	1
1:A:143:HIS:O	1:A:144:ALA:HB2	0.45	2.12	15	2
1:A:143:HIS:O	1:A:143:HIS:CG	0.45	2.69	14	1
1:A:91:LEU:HB2	1:A:118:LYS:HZ2	0.45	1.71	18	1
1:A:76:GLY:O	1:A:77:ILE:C	0.45	2.59	7	2
1:A:134:THR:O	1:A:135:LEU:C	0.45	2.57	2	3
1:A:76:GLY:C	1:A:77:ILE:CG1	0.45	2.90	7	1
1:A:8:MET:HE2	1:A:85:GLU:HB3	0.45	1.87	8	1
1:A:139:GLU:O	1:A:140:VAL:C	0.45	2.57	9	2
1:A:9:LYS:CE	1:A:61:ASP:O	0.45	2.64	11	1
1:A:121:ILE:N	1:A:146:ILE:O	0.45	2.50	15	1
1:A:134:THR:O	1:A:135:LEU:HD23	0.45	2.11	2	1
1:A:111:PHE:CG	1:A:140:VAL:HG11	0.45	2.45	9	1
1:A:25:ASN:O	1:A:26:ALA:C	0.45	2.59	14	2
1:A:30:ARG:NH2	1:A:49:HIS:NE2	0.45	2.64	10	1
1:A:73:GLU:C	1:A:78:GLU:O	0.45	2.59	4	1
1:A:152:THR:O	1:A:154:GLU:N	0.45	2.49	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:148:LEU:HD13	1:A:159:LEU:HD12	0.45	1.87	8	1
1:A:83:GLU:C	1:A:84:ILE:HD12	0.45	2.37	11	1
1:A:53:ASP:O	1:A:54:GLY:C	0.45	2.60	3	6
1:A:126:ASN:O	1:A:127:LYS:C	0.45	2.59	7	1
1:A:103:ASP:O	1:A:107:ILE:CD1	0.45	2.65	9	1
1:A:101:ALA:O	1:A:102:VAL:HG23	0.45	2.11	17	1
1:A:92:PHE:CE1	1:A:107:ILE:HG12	0.45	2.47	1	2
1:A:103:ASP:CB	1:A:104:PRO:HD3	0.45	2.42	13	12
1:A:134:THR:CG2	1:A:135:LEU:N	0.45	2.80	11	2
1:A:29:GLY:O	1:A:30:ARG:C	0.45	2.60	7	4
1:A:78:GLU:O	1:A:80:ALA:N	0.45	2.49	3	1
1:A:86:GLN:O	1:A:87:ALA:C	0.45	2.60	7	2
1:A:150:ALA:O	1:A:151:ARG:C	0.45	2.59	17	3
1:A:17:ASN:O	1:A:18:ALA:HB2	0.45	2.12	18	1
1:A:155:GLY:O	1:A:156:VAL:C	0.45	2.59	18	1
1:A:78:GLU:O	1:A:79:ARG:C	0.45	2.60	20	1
1:A:17:ASN:O	1:A:18:ALA:CB	0.45	2.65	7	1
1:A:122:THR:C	1:A:124:VAL:N	0.45	2.75	11	1
1:A:58:HIS:O	1:A:58:HIS:ND1	0.45	2.50	13	1
1:A:9:LYS:HE3	1:A:60:ILE:HG22	0.45	1.89	15	1
1:A:121:ILE:HD11	1:A:145:LEU:O	0.45	2.12	16	1
1:A:104:PRO:HA	1:A:107:ILE:CG1	0.45	2.41	18	1
1:A:23:LEU:O	1:A:26:ALA:CB	0.45	2.61	4	1
1:A:14:GLY:O	1:A:15:ARG:C	0.45	2.59	15	4
1:A:46:LEU:HD23	1:A:46:LEU:O	0.45	2.11	6	1
1:A:155:GLY:O	1:A:158:VAL:HG22	0.45	2.12	6	1
1:A:24:LEU:O	1:A:25:ASN:C	0.45	2.60	15	3
1:A:127:LYS:O	1:A:129:ASP:N	0.45	2.50	20	2
1:A:141:ASN:O	1:A:142:GLY:C	0.45	2.60	17	3
1:A:65:LEU:HD23	1:A:65:LEU:H	0.45	1.72	12	1
1:A:91:LEU:HD12	1:A:91:LEU:O	0.45	2.12	13	1
1:A:130:ILE:CD1	1:A:131:THR:N	0.45	2.71	15	1
1:A:101:ALA:O	1:A:102:VAL:CB	0.45	2.64	17	1
1:A:8:MET:SD	1:A:8:MET:C	0.45	3.00	18	1
1:A:28:ALA:O	1:A:29:GLY:C	0.45	2.60	18	1
1:A:110:GLU:O	1:A:111:PHE:C	0.44	2.60	5	8
1:A:25:ASN:O	1:A:26:ALA:CB	0.44	2.65	5	1
1:A:122:THR:O	1:A:130:ILE:CG2	0.44	2.66	5	1
1:A:133:GLU:O	1:A:134:THR:C	0.44	2.60	11	5
1:A:161:ASN:O	1:A:162:HIS:C	0.44	2.60	8	2
1:A:149:SER:O	1:A:151:ARG:N	0.44	2.50	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:52:ILE:HD12	1:A:52:ILE:C	0.44	2.37	10	1
1:A:149:SER:O	1:A:150:ALA:C	0.44	2.60	14	3
1:A:164:LYS:O	1:A:165:GLN:C	0.44	2.58	15	3
1:A:88:ASP:O	1:A:89:ARG:CB	0.44	2.65	19	1
1:A:18:ALA:O	1:A:19:GLY:C	0.44	2.59	20	1
1:A:68:ALA:O	1:A:72:VAL:N	0.44	2.49	9	3
1:A:97:THR:HG21	1:A:129:ASP:CG	0.44	2.37	14	2
1:A:149:SER:O	1:A:153:GLY:N	0.44	2.51	12	2
1:A:133:GLU:C	1:A:135:LEU:N	0.44	2.75	15	1
1:A:16:PRO:O	1:A:17:ASN:CG	0.44	2.60	20	1
1:A:89:ARG:NH1	1:A:143:HIS:CG	0.44	2.85	20	1
1:A:164:LYS:O	1:A:167:MET:N	0.44	2.50	20	1
1:A:9:LYS:CG	1:A:62:THR:HB	0.44	2.43	5	1
1:A:91:LEU:CD1	1:A:118:LYS:HZ2	0.44	2.25	5	1
1:A:63:ALA:HB2	1:A:72:VAL:HG11	0.44	1.89	7	1
1:A:122:THR:HG23	1:A:130:ILE:HB	0.44	1.88	8	1
1:A:61:ASP:HB3	1:A:72:VAL:HG22	0.44	1.90	10	1
1:A:9:LYS:CE	1:A:60:ILE:HG22	0.44	2.42	15	1
1:A:103:ASP:N	1:A:103:ASP:OD1	0.44	2.50	15	1
1:A:97:THR:O	1:A:98:THR:C	0.44	2.60	18	2
1:A:115:LEU:N	1:A:115:LEU:CD1	0.44	2.81	20	2
1:A:104:PRO:O	1:A:106:GLU:N	0.44	2.50	1	1
1:A:52:ILE:O	1:A:53:ASP:C	0.44	2.61	2	2
1:A:157:ASP:O	1:A:158:VAL:C	0.44	2.60	6	3
1:A:39:ALA:O	1:A:41:THR:N	0.44	2.50	11	3
1:A:102:VAL:O	1:A:105:ALA:HB3	0.44	2.12	3	1
1:A:151:ARG:O	1:A:152:THR:C	0.44	2.60	3	1
1:A:19:GLY:O	1:A:21:SER:N	0.44	2.51	15	2
1:A:89:ARG:NH1	1:A:162:HIS:O	0.44	2.50	19	4
1:A:132:GLY:O	1:A:133:GLU:C	0.44	2.60	19	2
1:A:40:GLY:C	1:A:41:THR:OG1	0.44	2.61	10	1
1:A:120:PRO:CB	1:A:148:LEU:HD12	0.44	2.42	11	1
1:A:45:VAL:HG12	1:A:46:LEU:N	0.44	2.28	12	1
1:A:61:ASP:CB	1:A:72:VAL:HG11	0.44	2.38	14	1
1:A:160:ARG:O	1:A:163:LEU:N	0.44	2.51	20	1
1:A:32:ALA:O	1:A:33:ALA:CB	0.44	2.62	3	2
1:A:124:VAL:O	1:A:130:ILE:HD11	0.44	2.13	5	1
1:A:140:VAL:O	1:A:142:GLY:N	0.44	2.50	7	3
1:A:128:ALA:O	1:A:129:ASP:C	0.44	2.61	10	1
1:A:24:LEU:O	1:A:26:ALA:N	0.44	2.50	18	2
1:A:41:THR:O	1:A:41:THR:CG2	0.44	2.66	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:157:ASP:O	1:A:160:ARG:N	0.44	2.50	6	1
1:A:27:LEU:O	1:A:28:ALA:C	0.44	2.61	12	2
1:A:78:GLU:O	1:A:79:ARG:CG	0.44	2.65	10	1
1:A:30:ARG:NH1	1:A:49:HIS:NE2	0.44	2.66	11	1
1:A:55:MET:SD	1:A:55:MET:N	0.44	2.90	16	1
1:A:130:ILE:O	1:A:130:ILE:CD1	0.44	2.66	4	2
1:A:58:HIS:CD2	1:A:60:ILE:CG1	0.44	3.01	17	1
1:A:52:ILE:HG21	1:A:58:HIS:HB3	0.44	1.89	4	1
1:A:90:VAL:HG13	1:A:117:ALA:CB	0.44	2.43	5	1
1:A:161:ASN:O	1:A:164:LYS:N	0.44	2.50	8	2
1:A:60:ILE:HG22	1:A:61:ASP:H	0.44	1.73	9	1
1:A:61:ASP:OD1	1:A:84:ILE:CD1	0.44	2.65	9	1
1:A:96:GLY:O	1:A:97:THR:C	0.43	2.61	2	1
1:A:79:ARG:O	1:A:81:TRP:N	0.43	2.51	9	1
1:A:130:ILE:CG1	1:A:134:THR:HG21	0.43	2.43	10	1
1:A:12:ILE:HD12	1:A:48:GLU:CD	0.43	2.38	11	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:24:LEU:O	0.43	2.12	12	1
1:A:85:GLU:O	1:A:86:GLN:CD	0.43	2.60	15	1
1:A:48:GLU:N	1:A:48:GLU:CD	0.43	2.76	2	2
1:A:94:VAL:O	1:A:95:ASP:C	0.43	2.62	8	2
1:A:142:GLY:O	1:A:143:HIS:C	0.43	2.60	5	4
1:A:73:GLU:O	1:A:78:GLU:N	0.43	2.50	5	1
1:A:110:GLU:O	1:A:113:ALA:N	0.43	2.50	9	1
1:A:121:ILE:HD12	1:A:121:ILE:C	0.43	2.39	13	1
1:A:35:VAL:HG23	1:A:35:VAL:O	0.43	2.13	16	1
1:A:69:SER:O	1:A:73:GLU:CD	0.43	2.61	17	1
1:A:9:LYS:CB	1:A:62:THR:HG22	0.43	2.37	9	1
1:A:20:LYS:O	1:A:21:SER:C	0.43	2.60	12	1
1:A:4:LEU:HD21	1:A:169:ILE:CG2	0.43	2.38	20	1
1:A:31:GLU:O	1:A:33:ALA:N	0.43	2.52	1	2
1:A:139:GLU:O	1:A:140:VAL:O	0.43	2.37	2	2
1:A:61:ASP:O	1:A:63:ALA:N	0.43	2.50	3	1
1:A:67:GLU:O	1:A:68:ALA:C	0.43	2.61	5	1
1:A:92:PHE:CE1	1:A:119:LEU:CD2	0.43	3.01	5	1
1:A:117:ALA:O	1:A:143:HIS:N	0.43	2.51	5	1
1:A:129:ASP:O	1:A:133:GLU:N	0.43	2.50	6	1
1:A:52:ILE:O	1:A:53:ASP:CB	0.43	2.66	8	1
1:A:21:SER:O	1:A:24:LEU:N	0.43	2.51	13	1
1:A:46:LEU:O	1:A:46:LEU:HG	0.43	2.13	14	1
1:A:52:ILE:O	1:A:52:ILE:CG2	0.43	2.66	16	1
1:A:52:ILE:O	1:A:54:GLY:N	0.43	2.51	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:ALA:O	1:A:40:GLY:C	0.43	2.61	12	4
1:A:68:ALA:O	1:A:72:VAL:CG2	0.43	2.65	9	1
1:A:46:LEU:HD23	1:A:62:THR:HB	0.43	1.91	12	1
1:A:73:GLU:OE1	1:A:82:GLN:CG	0.43	2.67	2	1
1:A:47:ARG:O	1:A:47:ARG:CG	0.43	2.66	7	1
1:A:24:LEU:O	1:A:28:ALA:N	0.43	2.50	9	1
1:A:133:GLU:O	1:A:136:GLY:N	0.43	2.52	11	1
1:A:27:LEU:N	1:A:27:LEU:CD1	0.43	2.80	14	1
1:A:27:LEU:H	1:A:27:LEU:HD22	0.43	1.73	14	1
1:A:82:GLN:O	1:A:83:GLU:CB	0.43	2.66	16	1
1:A:139:GLU:O	1:A:139:GLU:CG	0.43	2.66	6	1
1:A:12:ILE:N	1:A:12:ILE:CD1	0.43	2.80	7	1
1:A:108:TRP:CB	1:A:109:PRO:CD	0.43	2.97	12	2
1:A:133:GLU:C	1:A:134:THR:HG22	0.43	2.38	14	1
1:A:61:ASP:HB2	1:A:72:VAL:HG13	0.43	1.90	16	1
1:A:8:MET:SD	1:A:9:LYS:N	0.43	2.91	19	1
1:A:90:VAL:HG12	1:A:91:LEU:N	0.43	2.29	4	1
1:A:131:THR:O	1:A:135:LEU:HD12	0.43	2.13	11	1
1:A:92:PHE:CZ	1:A:106:GLU:OE2	0.43	2.71	12	1
1:A:100:ASP:O	1:A:104:PRO:CD	0.43	2.66	12	1
1:A:105:ALA:O	1:A:106:GLU:CB	0.43	2.67	12	1
1:A:60:ILE:O	1:A:61:ASP:CG	0.43	2.62	3	2
1:A:88:ASP:OD1	1:A:88:ASP:N	0.43	2.52	3	1
1:A:113:ALA:HB1	1:A:115:LEU:HD23	0.43	1.91	4	1
1:A:137:MET:O	1:A:139:GLU:N	0.43	2.51	4	1
1:A:45:VAL:HG13	1:A:62:THR:HG23	0.43	1.90	10	1
1:A:59:ILE:O	1:A:59:ILE:HG22	0.43	2.14	13	1
1:A:130:ILE:CG2	1:A:131:THR:N	0.43	2.82	17	1
1:A:90:VAL:O	1:A:90:VAL:CG1	0.42	2.63	1	1
1:A:51:HIS:NE2	1:A:160:ARG:NH2	0.42	2.66	2	2
1:A:125:ARG:O	1:A:127:LYS:N	0.42	2.48	6	2
1:A:46:LEU:HD13	1:A:61:ASP:CA	0.42	2.44	4	1
1:A:52:ILE:HG21	1:A:58:HIS:CB	0.42	2.44	14	2
1:A:62:THR:O	1:A:63:ALA:C	0.42	2.62	6	1
1:A:73:GLU:OE1	1:A:81:TRP:N	0.42	2.52	10	1
1:A:56:PRO:O	1:A:57:LEU:C	0.42	2.61	13	1
1:A:127:LYS:O	1:A:130:ILE:CG1	0.42	2.66	14	1
1:A:131:THR:C	1:A:133:GLU:N	0.42	2.76	14	1
1:A:84:ILE:O	1:A:84:ILE:CG2	0.42	2.66	17	1
1:A:97:THR:HG21	1:A:127:LYS:HD2	0.42	1.90	18	1
1:A:70:ASP:O	1:A:71:GLU:C	0.42	2.62	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:ALA:O	1:A:115:LEU:CD2	0.42	2.67	19	1
1:A:63:ALA:HB1	1:A:68:ALA:CB	0.42	2.44	1	1
1:A:139:GLU:C	1:A:140:VAL:O	0.42	2.62	2	1
1:A:68:ALA:O	1:A:72:VAL:HG13	0.42	2.14	7	1
1:A:122:THR:HG23	1:A:130:ILE:HA	0.42	1.91	9	1
1:A:21:SER:C	1:A:23:LEU:N	0.42	2.76	13	1
1:A:23:LEU:O	1:A:26:ALA:N	0.42	2.51	14	2
1:A:8:MET:O	1:A:8:MET:HE3	0.42	2.14	19	1
1:A:105:ALA:O	1:A:106:GLU:C	0.42	2.63	4	1
1:A:73:GLU:OE1	1:A:78:GLU:CD	0.42	2.62	8	1
1:A:70:ASP:C	1:A:72:VAL:N	0.42	2.76	9	1
1:A:103:ASP:OD2	1:A:103:ASP:C	0.42	2.61	10	1
1:A:62:THR:O	1:A:62:THR:HG23	0.42	2.14	12	1
1:A:122:THR:O	1:A:124:VAL:N	0.42	2.50	16	1
1:A:44:ASP:C	1:A:45:VAL:HG12	0.42	2.38	1	3
1:A:118:LYS:NZ	1:A:159:LEU:HD12	0.42	2.30	1	1
1:A:72:VAL:HG23	1:A:73:GLU:N	0.42	2.29	8	1
1:A:156:VAL:O	1:A:159:LEU:N	0.42	2.51	9	1
1:A:42:THR:OG1	1:A:43:ARG:N	0.42	2.52	10	1
1:A:149:SER:O	1:A:150:ALA:O	0.42	2.37	18	1
1:A:41:THR:HG22	1:A:47:ARG:NH2	0.42	2.29	1	1
1:A:117:ALA:O	1:A:118:LYS:CB	0.42	2.66	1	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:61:ASP:N	0.42	2.83	6	1
1:A:16:PRO:O	1:A:17:ASN:C	0.42	2.62	9	1
1:A:30:ARG:NH1	1:A:49:HIS:CE1	0.42	2.87	11	1
1:A:8:MET:HG2	1:A:9:LYS:N	0.42	2.30	12	1
1:A:65:LEU:O	1:A:68:ALA:N	0.42	2.52	13	1
1:A:89:ARG:NH1	1:A:116:PRO:O	0.42	2.53	13	1
1:A:104:PRO:O	1:A:107:ILE:N	0.42	2.52	13	1
1:A:121:ILE:HD11	1:A:145:LEU:HB2	0.42	1.91	5	1
1:A:152:THR:O	1:A:153:GLY:C	0.42	2.62	11	2
1:A:92:PHE:CZ	1:A:107:ILE:HG12	0.42	2.50	8	1
1:A:8:MET:O	1:A:8:MET:CE	0.42	2.67	9	1
1:A:44:ASP:CG	1:A:61:ASP:OD1	0.42	2.63	10	1
1:A:27:LEU:HD11	1:A:163:LEU:HD13	0.42	1.90	17	1
1:A:24:LEU:HD12	1:A:48:GLU:HA	0.42	1.92	2	1
1:A:85:GLU:O	1:A:86:GLN:CB	0.42	2.67	6	1
1:A:65:LEU:O	1:A:66:ARG:C	0.42	2.63	16	2
1:A:62:THR:O	1:A:64:GLY:N	0.42	2.52	15	1
1:A:92:PHE:CE2	1:A:119:LEU:HB2	0.42	2.50	18	1
1:A:116:PRO:HB3	1:A:143:HIS:CD2	0.42	2.50	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:LYS:NZ	1:A:85:GLU:O	0.42	2.53	19	1
1:A:105:ALA:C	1:A:107:ILE:N	0.42	2.77	4	1
1:A:107:ILE:CD1	1:A:110:GLU:HB3	0.42	2.45	5	1
1:A:90:VAL:CG2	1:A:110:GLU:OE1	0.42	2.64	10	1
1:A:113:ALA:CB	1:A:115:LEU:CD1	0.42	2.97	18	1
1:A:149:SER:C	1:A:151:ARG:N	0.42	2.77	4	2
1:A:61:ASP:CG	1:A:72:VAL:HG13	0.42	2.40	13	1
1:A:61:ASP:OD2	1:A:72:VAL:HG13	0.42	2.15	20	1
1:A:159:LEU:C	1:A:159:LEU:HD13	0.42	2.40	2	1
1:A:77:ILE:O	1:A:78:GLU:CD	0.42	2.63	3	1
1:A:107:ILE:CG2	1:A:108:TRP:N	0.42	2.83	13	2
1:A:122:THR:HG22	1:A:124:VAL:HG12	0.42	1.91	3	1
1:A:26:ALA:HB1	1:A:156:VAL:HG11	0.42	1.91	6	1
1:A:11:VAL:C	1:A:12:ILE:HG23	0.42	2.39	16	1
1:A:8:MET:HB3	1:A:167:MET:CB	0.42	2.45	17	1
1:A:86:GLN:O	1:A:88:ASP:CG	0.42	2.62	19	1
1:A:121:ILE:HG21	1:A:134:THR:CG2	0.42	2.40	20	1
1:A:59:ILE:O	1:A:59:ILE:CG2	0.41	2.68	2	1
1:A:76:GLY:O	1:A:78:GLU:CD	0.41	2.63	5	1
1:A:12:ILE:CD1	1:A:48:GLU:OE1	0.41	2.68	7	1
1:A:146:ILE:CG2	1:A:147:ARG:N	0.41	2.83	9	1
1:A:89:ARG:CZ	1:A:143:HIS:CE1	0.41	3.02	15	1
1:A:20:LYS:O	1:A:21:SER:CB	0.41	2.68	17	1
1:A:38:ILE:HD13	1:A:47:ARG:HD2	0.41	1.91	5	1
1:A:24:LEU:HD21	1:A:48:GLU:CA	0.41	2.42	7	1
1:A:41:THR:O	1:A:42:THR:C	0.41	2.62	7	1
1:A:98:THR:O	1:A:98:THR:CG2	0.41	2.69	8	1
1:A:121:ILE:HD13	1:A:134:THR:HG23	0.41	1.92	9	1
1:A:10:VAL:HG11	1:A:163:LEU:HD22	0.41	1.92	12	1
1:A:60:ILE:O	1:A:61:ASP:O	0.41	2.37	12	1
1:A:156:VAL:O	1:A:157:ASP:C	0.41	2.63	12	1
1:A:113:ALA:CB	1:A:115:LEU:CD2	0.41	2.98	16	1
1:A:112:ILE:O	1:A:113:ALA:HB3	0.41	2.14	17	1
1:A:81:TRP:O	1:A:82:GLN:CB	0.41	2.67	20	1
1:A:153:GLY:O	1:A:154:GLU:C	0.41	2.63	2	1
1:A:9:LYS:HE3	1:A:87:ALA:HB2	0.41	1.90	3	1
1:A:130:ILE:O	1:A:133:GLU:N	0.41	2.53	5	1
1:A:131:THR:CG2	1:A:132:GLY:N	0.41	2.84	10	1
1:A:7:GLY:HA2	1:A:167:MET:CG	0.41	2.46	13	1
1:A:164:LYS:C	1:A:166:SER:N	0.41	2.78	16	2
1:A:94:VAL:O	1:A:96:GLY:N	0.41	2.53	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:THR:O	1:A:100:ASP:CG	0.41	2.62	19	1
1:A:61:ASP:OD2	1:A:72:VAL:CG1	0.41	2.69	20	1
1:A:111:PHE:CD1	1:A:111:PHE:O	0.41	2.74	1	1
1:A:117:ALA:O	1:A:143:HIS:CB	0.41	2.68	3	1
1:A:81:TRP:CG	1:A:82:GLN:N	0.41	2.88	14	1
1:A:128:ALA:C	1:A:130:ILE:N	0.41	2.76	17	1
1:A:64:GLY:C	1:A:65:LEU:HD22	0.41	2.40	20	1
1:A:68:ALA:C	1:A:70:ASP:N	0.41	2.76	8	1
1:A:83:GLU:OE1	1:A:83:GLU:N	0.41	2.53	9	1
1:A:130:ILE:HG12	1:A:134:THR:CG2	0.41	2.46	10	1
1:A:53:ASP:OD1	1:A:54:GLY:N	0.41	2.54	11	1
1:A:10:VAL:HG13	1:A:163:LEU:HD11	0.41	1.92	15	1
1:A:31:GLU:O	1:A:32:ALA:CB	0.41	2.68	20	1
1:A:91:LEU:HD11	1:A:118:LYS:HZ2	0.41	1.76	5	1
1:A:23:LEU:HD23	1:A:24:LEU:N	0.41	2.31	7	1
1:A:165:GLN:O	1:A:166:SER:C	0.41	2.64	16	1
1:A:100:ASP:C	1:A:101:ALA:O	0.41	2.64	3	1
1:A:48:GLU:O	1:A:49:HIS:O	0.41	2.38	9	3
1:A:30:ARG:NE	1:A:49:HIS:CE1	0.41	2.89	10	1
1:A:82:GLN:O	1:A:83:GLU:C	0.41	2.63	18	1
1:A:44:ASP:HB3	1:A:72:VAL:HG22	0.41	1.92	19	1
1:A:93:MET:SD	1:A:93:MET:N	0.41	2.93	3	1
1:A:125:ARG:CG	1:A:126:ASN:N	0.41	2.82	7	1
1:A:130:ILE:O	1:A:134:THR:CB	0.41	2.69	9	1
1:A:7:GLY:C	1:A:8:MET:SD	0.41	3.03	12	1
1:A:108:TRP:HA	1:A:108:TRP:CE3	0.41	2.50	20	1
1:A:96:GLY:HA3	1:A:122:THR:HG21	0.41	1.92	2	1
1:A:137:MET:HE2	1:A:137:MET:HB2	0.41	1.83	2	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:48:GLU:C	0.41	2.40	5	1
1:A:44:ASP:HB2	1:A:72:VAL:HG23	0.41	1.90	6	1
1:A:50:ILE:O	1:A:51:HIS:C	0.41	2.64	6	1
1:A:64:GLY:O	1:A:65:LEU:CD1	0.41	2.66	6	1
1:A:51:HIS:CD2	1:A:51:HIS:C	0.41	2.98	10	1
1:A:30:ARG:O	1:A:32:ALA:N	0.41	2.52	11	1
1:A:95:ASP:O	1:A:98:THR:CB	0.41	2.69	13	1
1:A:139:GLU:C	1:A:140:VAL:HG12	0.41	2.41	2	1
1:A:52:ILE:O	1:A:52:ILE:HG23	0.41	2.15	3	1
1:A:124:VAL:HG13	1:A:127:LYS:CB	0.41	2.46	7	1
1:A:96:GLY:O	1:A:122:THR:CB	0.41	2.69	8	1
1:A:24:LEU:HD11	1:A:48:GLU:CB	0.41	2.46	11	1
1:A:95:ASP:C	1:A:97:THR:N	0.41	2.78	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:PRO:HA	1:A:107:ILE:CG2	0.41	2.46	13	1
1:A:77:ILE:HD13	1:A:77:ILE:H	0.41	1.74	14	1
1:A:24:LEU:HD23	1:A:24:LEU:O	0.40	2.16	2	1
1:A:50:ILE:CG1	1:A:51:HIS:N	0.40	2.84	5	1
1:A:40:GLY:O	1:A:41:THR:O	0.40	2.39	10	1
1:A:97:THR:HG23	1:A:130:ILE:CD1	0.40	2.46	13	1
1:A:158:VAL:O	1:A:159:LEU:C	0.40	2.63	13	1
1:A:164:LYS:O	1:A:166:SER:N	0.40	2.51	13	1
1:A:88:ASP:OD2	1:A:166:SER:O	0.40	2.39	17	1
1:A:92:PHE:CZ	1:A:119:LEU:HD23	0.40	2.48	13	1
1:A:11:VAL:O	1:A:12:ILE:CG2	0.40	2.70	16	1
1:A:128:ALA:O	1:A:131:THR:N	0.40	2.53	17	1
1:A:107:ILE:O	1:A:110:GLU:CB	0.40	2.69	18	1
1:A:124:VAL:HG13	1:A:125:ARG:H	0.40	1.76	18	1
1:A:21:SER:O	1:A:22:SER:C	0.40	2.65	9	1
1:A:125:ARG:C	1:A:126:ASN:O	0.40	2.65	9	1
1:A:149:SER:OG	1:A:154:GLU:N	0.40	2.54	11	1
1:A:51:HIS:O	1:A:51:HIS:CD2	0.40	2.74	16	1
1:A:24:LEU:O	1:A:27:LEU:N	0.40	2.54	1	1
1:A:168:GLY:C	1:A:169:ILE:O	0.40	2.65	1	1
1:A:91:LEU:C	1:A:91:LEU:HD23	0.40	2.41	5	1
1:A:119:LEU:O	1:A:145:LEU:CA	0.40	2.69	5	1
1:A:109:PRO:O	1:A:110:GLU:CG	0.40	2.70	8	1
1:A:86:GLN:C	1:A:87:ALA:O	0.40	2.65	9	1
1:A:110:GLU:C	1:A:112:ILE:N	0.40	2.79	9	1
1:A:131:THR:O	1:A:132:GLY:O	0.40	2.39	9	1
1:A:154:GLU:CG	1:A:154:GLU:O	0.40	2.69	9	1
1:A:166:SER:OG	1:A:167:MET:N	0.40	2.53	11	1
1:A:94:VAL:O	1:A:95:ASP:O	0.40	2.38	12	1
1:A:12:ILE:O	1:A:12:ILE:CG1	0.40	2.70	16	1
1:A:44:ASP:O	1:A:45:VAL:HB	0.40	2.17	8	1
1:A:10:VAL:HG13	1:A:89:ARG:O	0.40	2.16	11	1
1:A:18:ALA:O	1:A:93:MET:SD	0.40	2.80	13	1
1:A:153:GLY:O	1:A:156:VAL:HG22	0.40	2.16	18	1

6.3 Torsion angles ⓘ

6.3.1 Protein backbone ⓘ

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	167/172 (97%)	100±6 (60±4%)	46±5 (27±3%)	21±4 (12±2%)	1	6
All	All	3340/3440 (97%)	2008 (60%)	916 (27%)	416 (12%)	1	6

All 124 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	49	HIS	17
1	A	77	ILE	12
1	A	63	ALA	12
1	A	84	ILE	11
1	A	19	GLY	10
1	A	83	GLU	9
1	A	125	ARG	9
1	A	129	ASP	9
1	A	64	GLY	9
1	A	46	LEU	8
1	A	17	ASN	8
1	A	54	GLY	7
1	A	140	VAL	7
1	A	141	ASN	7
1	A	85	GLU	7
1	A	18	ALA	6
1	A	32	ALA	6
1	A	106	GLU	6
1	A	126	ASN	6
1	A	41	THR	6
1	A	79	ARG	6
1	A	137	MET	6
1	A	87	ALA	6
1	A	123	VAL	6
1	A	139	GLU	6
1	A	96	GLY	6
1	A	138	SER	5
1	A	61	ASP	5
1	A	131	THR	5
1	A	124	VAL	5
1	A	74	ARG	4
1	A	151	ARG	4
1	A	169	ILE	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	51	HIS	4
1	A	80	ALA	4
1	A	113	ALA	4
1	A	166	SER	4
1	A	153	GLY	4
1	A	142	GLY	4
1	A	150	ALA	4
1	A	50	ILE	4
1	A	40	GLY	4
1	A	133	GLU	4
1	A	31	GLU	3
1	A	4	LEU	3
1	A	101	ALA	3
1	A	154	GLU	3
1	A	156	VAL	3
1	A	26	ALA	3
1	A	130	ILE	3
1	A	58	HIS	3
1	A	110	GLU	3
1	A	168	GLY	3
1	A	89	ARG	3
1	A	30	ARG	3
1	A	132	GLY	3
1	A	81	TRP	3
1	A	57	LEU	3
1	A	14	GLY	2
1	A	39	ALA	2
1	A	112	ILE	2
1	A	135	LEU	2
1	A	5	ARG	2
1	A	60	ILE	2
1	A	78	GLU	2
1	A	167	MET	2
1	A	42	THR	2
1	A	122	THR	2
1	A	52	ILE	2
1	A	100	ASP	2
1	A	127	LYS	2
1	A	134	THR	2
1	A	158	VAL	2
1	A	24	LEU	2
1	A	7	GLY	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	20	LYS	2
1	A	95	ASP	2
1	A	56	PRO	2
1	A	107	ILE	2
1	A	38	ILE	2
1	A	6	GLU	2
1	A	82	GLN	2
1	A	155	GLY	2
1	A	118	LYS	1
1	A	170	HIS	1
1	A	114	ARG	1
1	A	136	GLY	1
1	A	68	ALA	1
1	A	108	TRP	1
1	A	13	ALA	1
1	A	86	GLN	1
1	A	143	HIS	1
1	A	66	ARG	1
1	A	67	GLU	1
1	A	70	ASP	1
1	A	28	ALA	1
1	A	121	ILE	1
1	A	53	ASP	1
1	A	36	THR	1
1	A	92	PHE	1
1	A	94	VAL	1
1	A	97	THR	1
1	A	147	ARG	1
1	A	8	MET	1
1	A	65	LEU	1
1	A	15	ARG	1
1	A	72	VAL	1
1	A	119	LEU	1
1	A	16	PRO	1
1	A	162	HIS	1
1	A	11	VAL	1
1	A	144	ALA	1
1	A	149	SER	1
1	A	10	VAL	1
1	A	12	ILE	1
1	A	27	LEU	1
1	A	25	ASN	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	29	GLY	1
1	A	33	ALA	1
1	A	75	ILE	1
1	A	93	MET	1
1	A	152	THR	1
1	A	59	ILE	1
1	A	128	ALA	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	134/138 (97%)	89±5 (66±4%)	45±5 (34±4%)	1	11
All	All	2680/2760 (97%)	1772 (66%)	908 (34%)	1	11

All 120 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	103	ASP	20
1	A	9	LYS	19
1	A	57	LEU	17
1	A	55	MET	16
1	A	108	TRP	16
1	A	163	LEU	15
1	A	8	MET	14
1	A	119	LEU	14
1	A	133	GLU	14
1	A	164	LYS	14
1	A	20	LYS	13
1	A	118	LYS	13
1	A	127	LYS	13
1	A	137	MET	13
1	A	65	LEU	12
1	A	67	GLU	12
1	A	148	LEU	12
1	A	160	ARG	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	83	GLU	12
1	A	24	LEU	11
1	A	48	GLU	11
1	A	85	GLU	11
1	A	139	GLU	11
1	A	44	ASP	11
1	A	23	LEU	11
1	A	27	LEU	11
1	A	75	ILE	10
1	A	78	GLU	10
1	A	82	GLN	10
1	A	91	LEU	10
1	A	107	ILE	10
1	A	135	LEU	10
1	A	147	ARG	10
1	A	114	ARG	10
1	A	170	HIS	10
1	A	15	ARG	10
1	A	106	GLU	10
1	A	74	ARG	10
1	A	43	ARG	9
1	A	47	ARG	9
1	A	66	ARG	9
1	A	81	TRP	9
1	A	151	ARG	9
1	A	86	GLN	9
1	A	110	GLU	9
1	A	138	SER	9
1	A	5	ARG	9
1	A	46	LEU	9
1	A	22	SER	8
1	A	61	ASP	8
1	A	71	GLU	8
1	A	84	ILE	8
1	A	112	ILE	8
1	A	115	LEU	8
1	A	159	LEU	8
1	A	165	GLN	8
1	A	79	ARG	8
1	A	88	ASP	8
1	A	129	ASP	8
1	A	58	HIS	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	4	LEU	7
1	A	34	ILE	7
1	A	38	ILE	7
1	A	49	HIS	7
1	A	93	MET	7
1	A	21	SER	7
1	A	70	ASP	7
1	A	125	ARG	7
1	A	6	GLU	7
1	A	30	ARG	7
1	A	73	GLU	7
1	A	100	ASP	7
1	A	126	ASN	6
1	A	140	VAL	6
1	A	50	ILE	6
1	A	92	PHE	6
1	A	95	ASP	6
1	A	149	SER	6
1	A	154	GLU	6
1	A	53	ASP	6
1	A	31	GLU	6
1	A	122	THR	5
1	A	145	LEU	5
1	A	157	ASP	5
1	A	131	THR	5
1	A	141	ASN	5
1	A	167	MET	5
1	A	37	ASP	4
1	A	17	ASN	4
1	A	59	ILE	4
1	A	72	VAL	4
1	A	121	ILE	4
1	A	130	ILE	4
1	A	60	ILE	4
1	A	161	ASN	4
1	A	89	ARG	4
1	A	169	ILE	4
1	A	162	HIS	3
1	A	42	THR	3
1	A	77	ILE	3
1	A	134	THR	3
1	A	69	SER	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	51	HIS	3
1	A	52	ILE	3
1	A	12	ILE	2
1	A	94	VAL	2
1	A	25	ASN	2
1	A	166	SER	2
1	A	36	THR	2
1	A	124	VAL	2
1	A	156	VAL	2
1	A	152	THR	2
1	A	146	ILE	2
1	A	90	VAL	1
1	A	41	THR	1
1	A	143	HIS	1
1	A	10	VAL	1
1	A	102	VAL	1
1	A	11	VAL	1
1	A	97	THR	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 ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided