



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 19, 2026 – 07:54 PM UTC

PDB ID : 2ROQ / pdb_00002roq
Title : Solution Structure of the thiolation-thioesterase di-domain of enterobactin synthetase component F
Authors : Frueh, D.P.; Arthanari, H.; Koglin, A.; Vosburg, D.A.; Bennett, A.E.; Walsh, C.T.; Wagner, G.
Deposited on : 2008-04-05

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

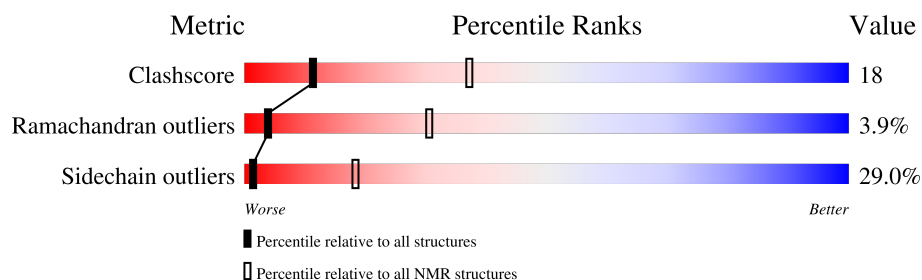
1 Overall quality at a glance

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	343	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 8 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *closest to the average*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:11-A:86, A:97-A:208, A:216-A:219, A:224-A:287, A:301-A:338 (294)	1.94	8

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 3 clusters and 8 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 5227 atoms, of which 2585 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Enterobactin synthetase component F.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	343	Total	C	H	N	O	S	0
			5227	1670	2585	465	497	10	

There are 10 discrepancies between the modelled and reference sequences:

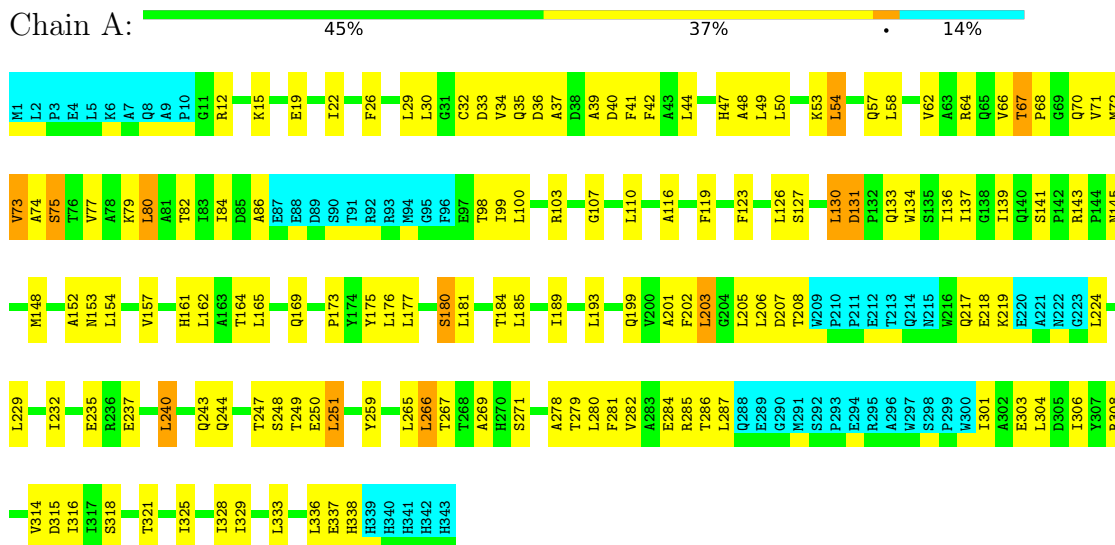
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1	MET	-	expression tag	UNP P11454
A	48	ALA	SER	engineered mutation	UNP P11454
A	336	LEU	-	expression tag	UNP P11454
A	337	GLU	-	expression tag	UNP P11454
A	338	HIS	-	expression tag	UNP P11454
A	339	HIS	-	expression tag	UNP P11454
A	340	HIS	-	expression tag	UNP P11454
A	341	HIS	-	expression tag	UNP P11454
A	342	HIS	-	expression tag	UNP P11454
A	343	HIS	-	expression tag	UNP P11454

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: Enterobactin synthetase component F

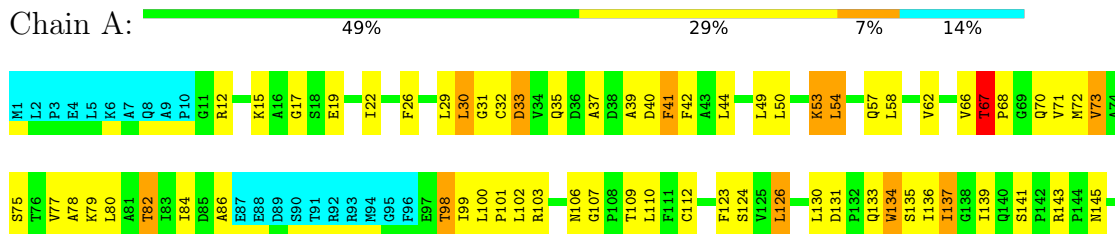


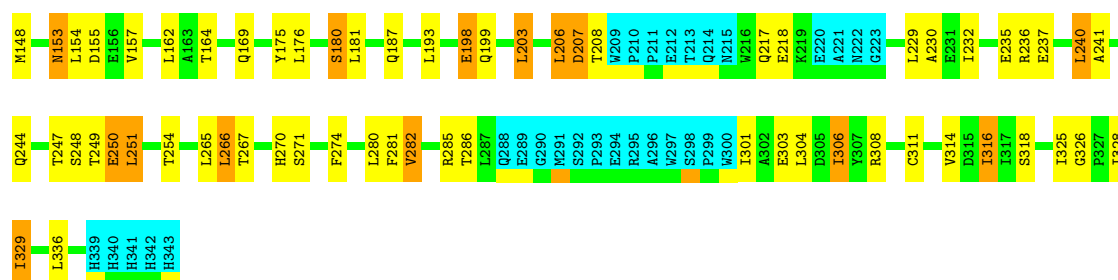
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

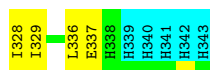
Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F



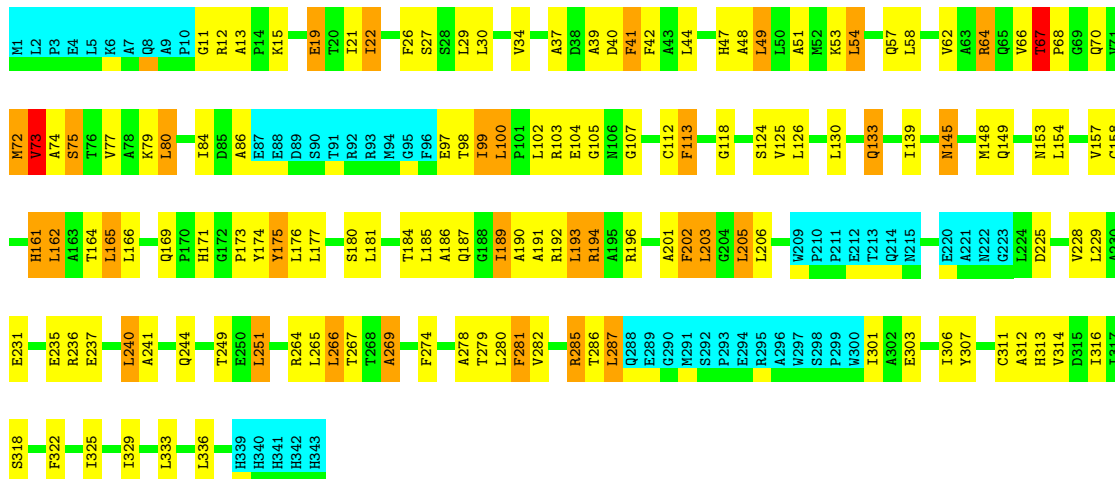




4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F

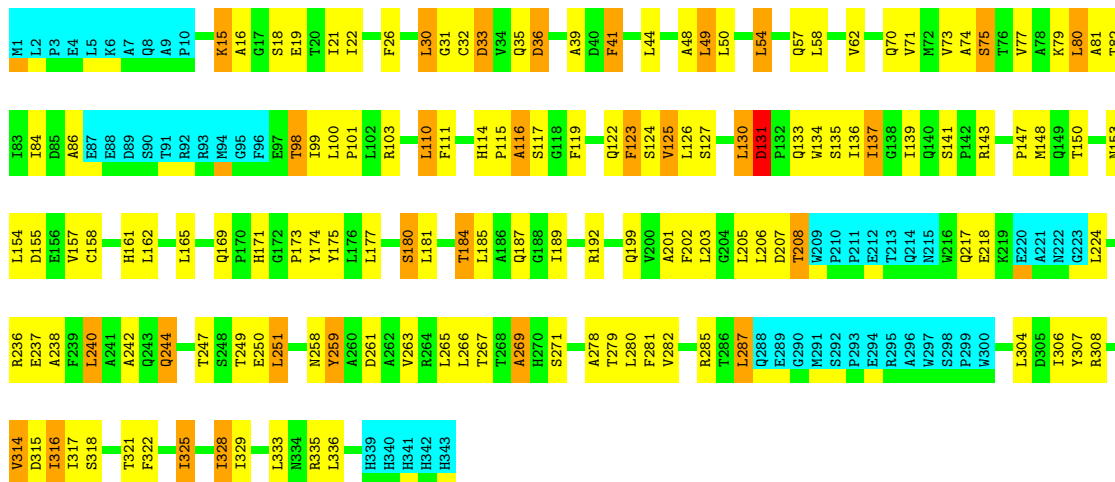
Chain A: 46% 30% 9% 14%



4.2.5 Score per residue for model 5

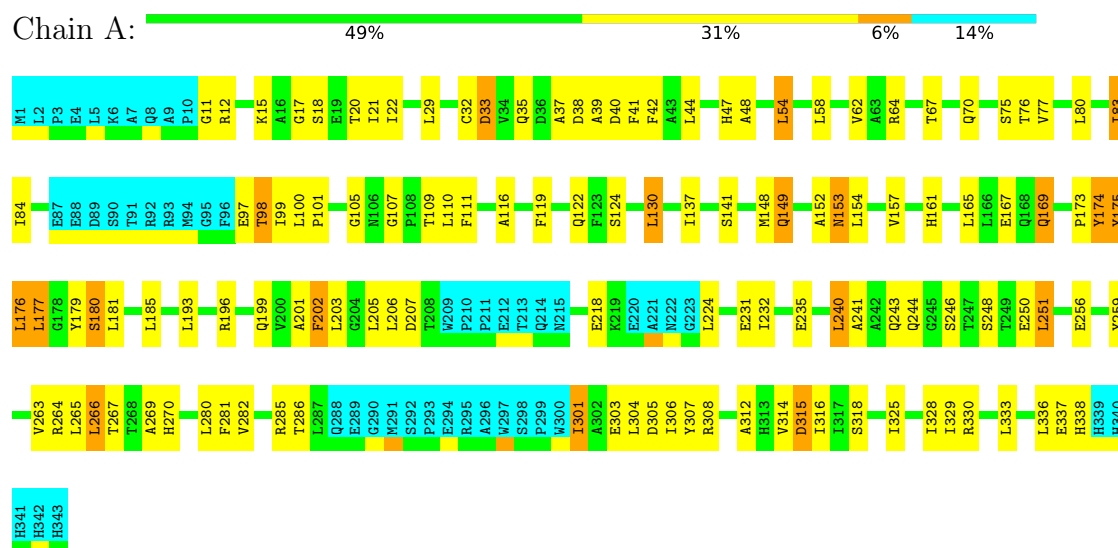
- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F

Chain A: 45% 32% 8% 14%



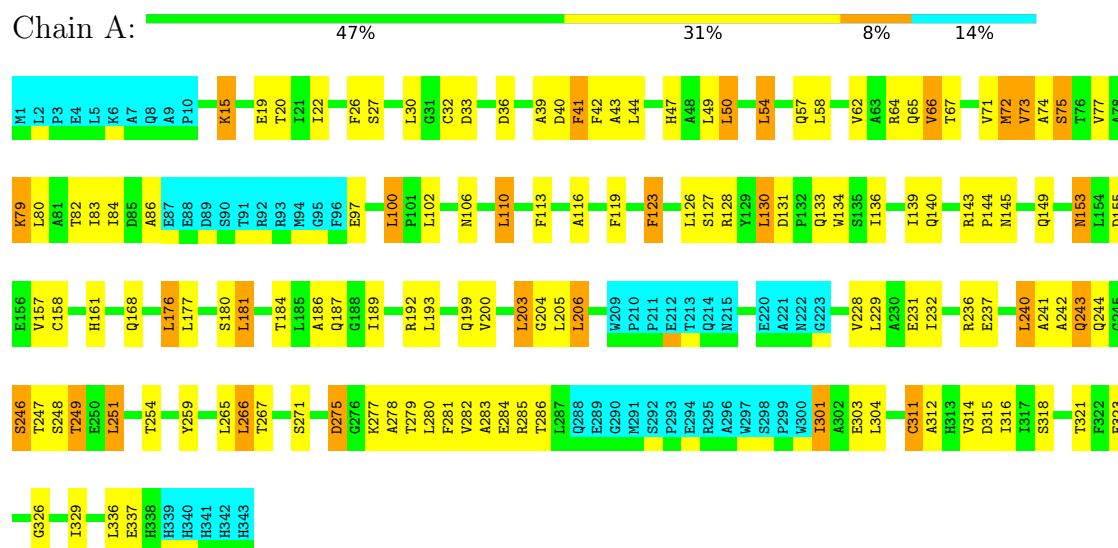
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F



4.2.7 Score per residue for model 7

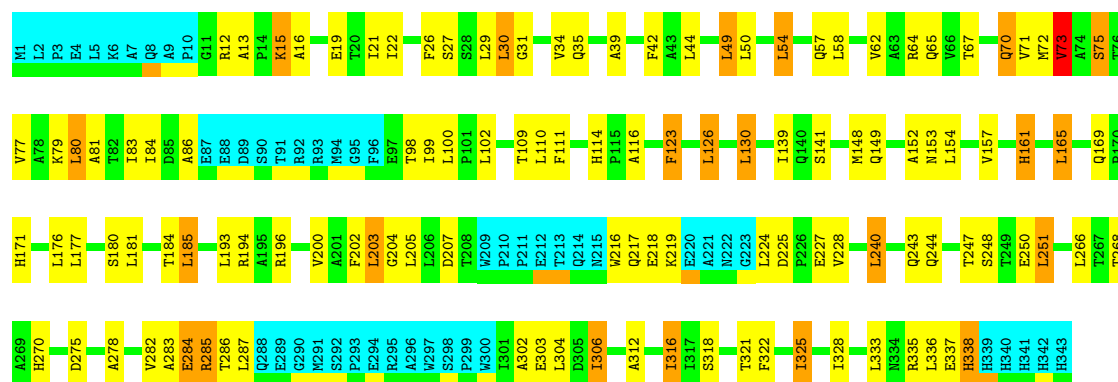
- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F



4.2.8 Score per residue for model 8 (medoid)

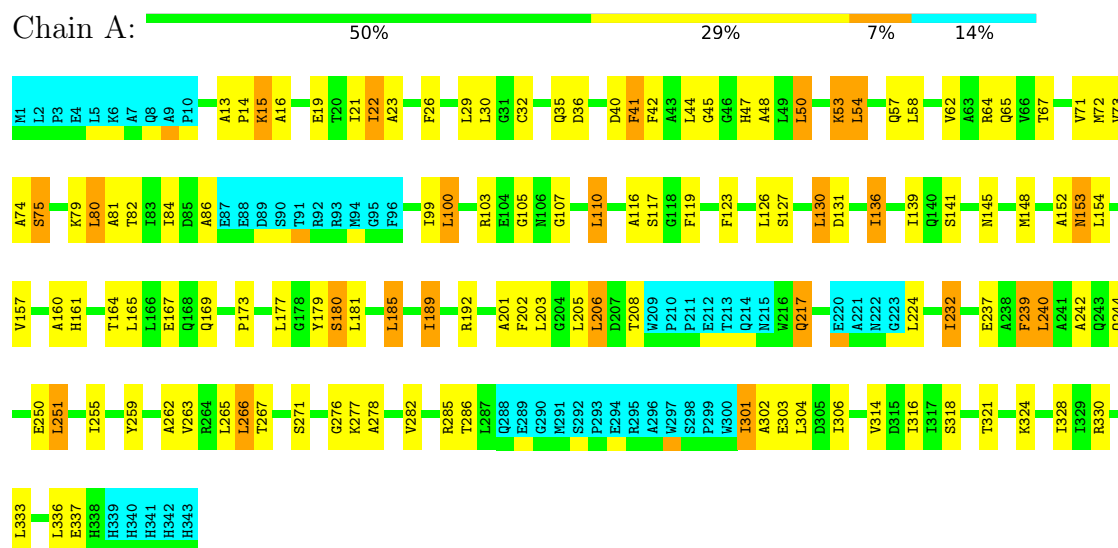
- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F





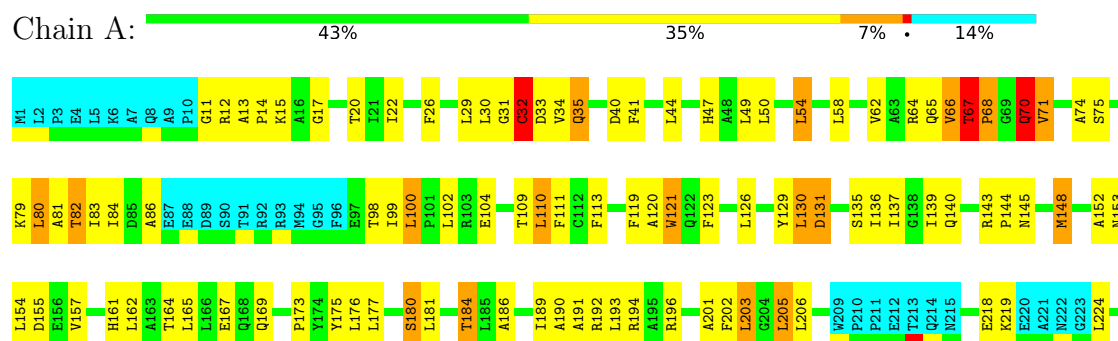
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F



4.2.10 Score per residue for model 10

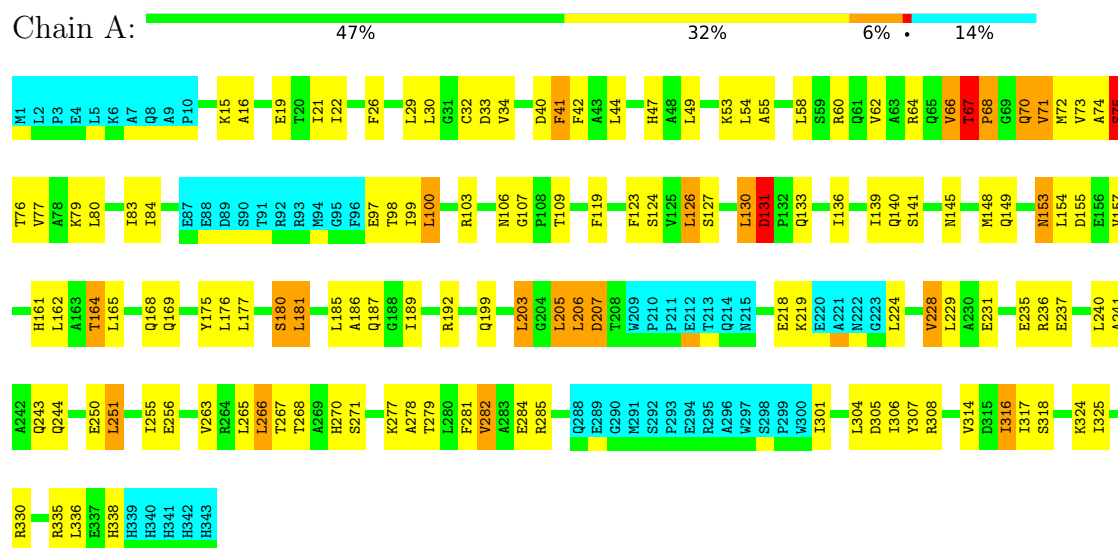
- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F





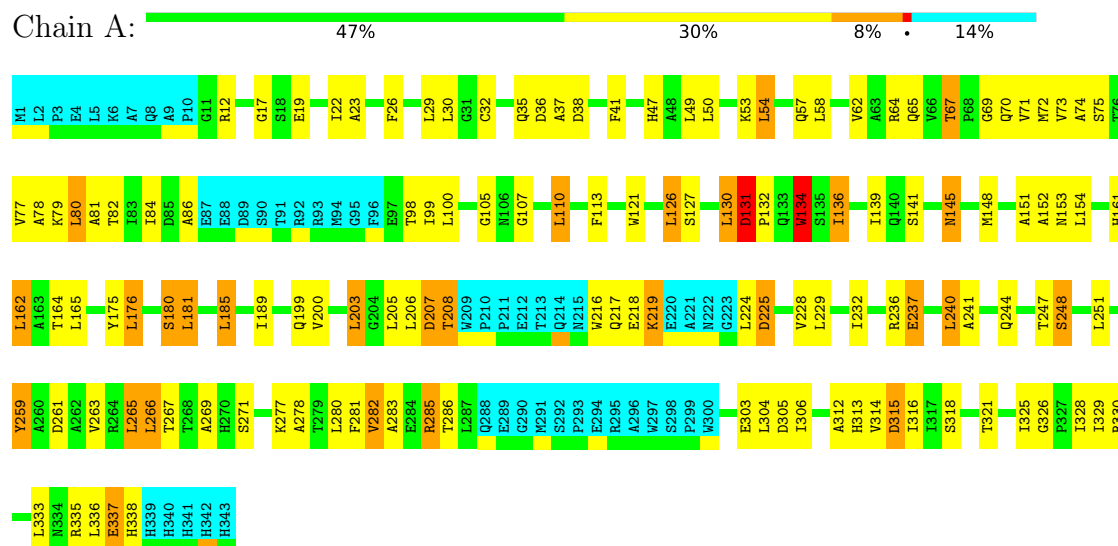
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F



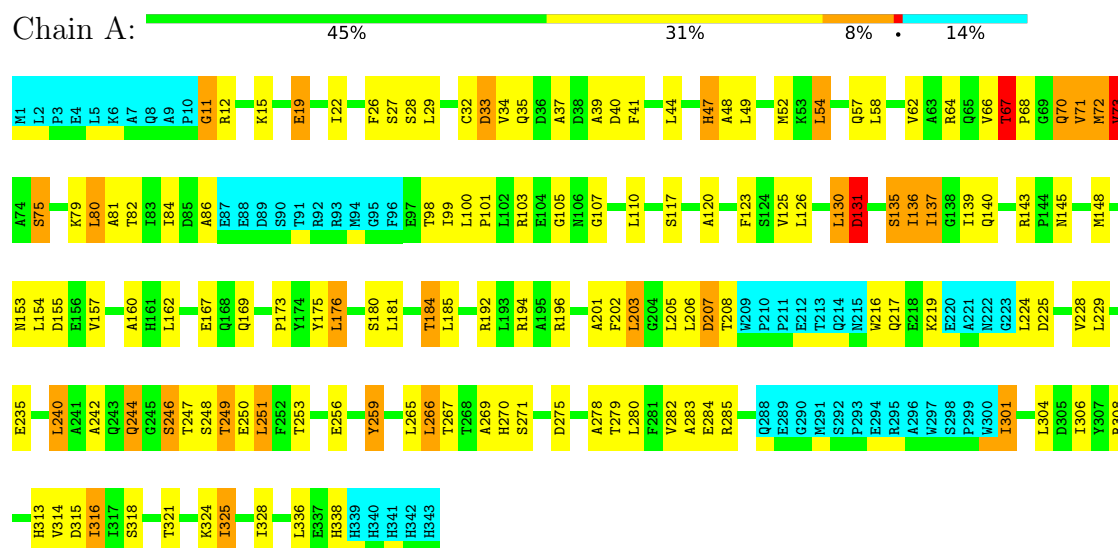
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F



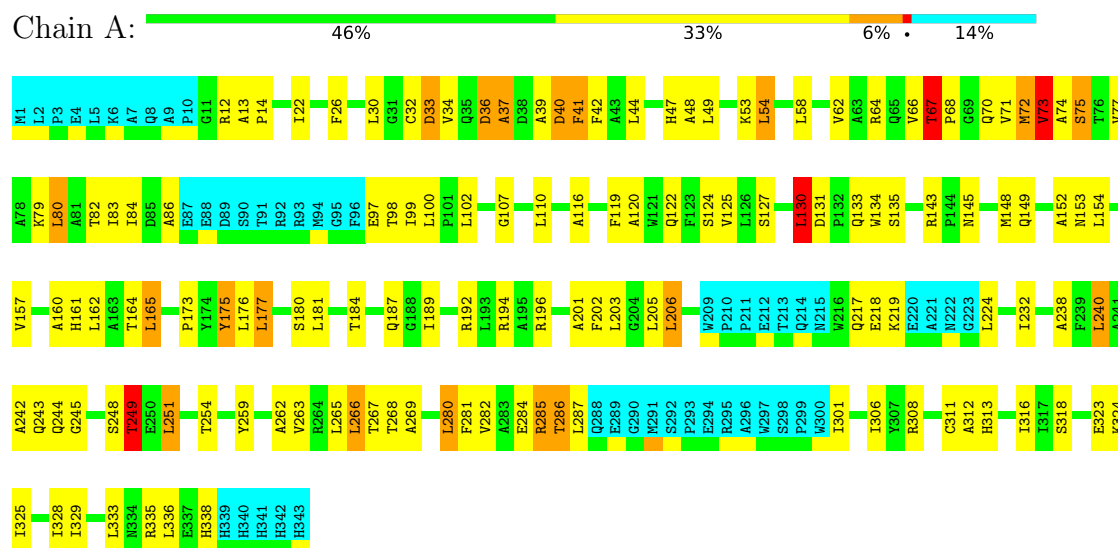
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F



4.2.14 Score per residue for model 14

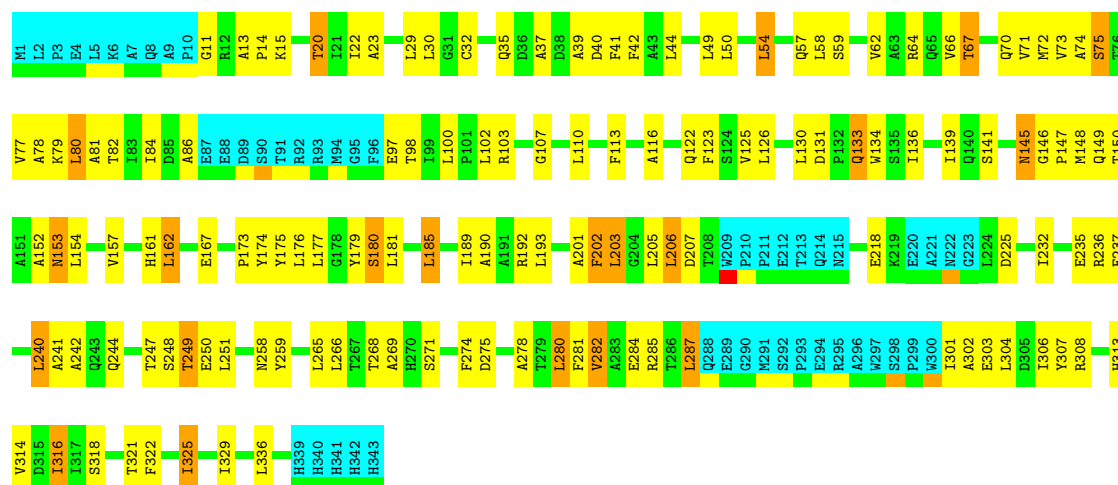
- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F



4.2.15 Score per residue for model 15

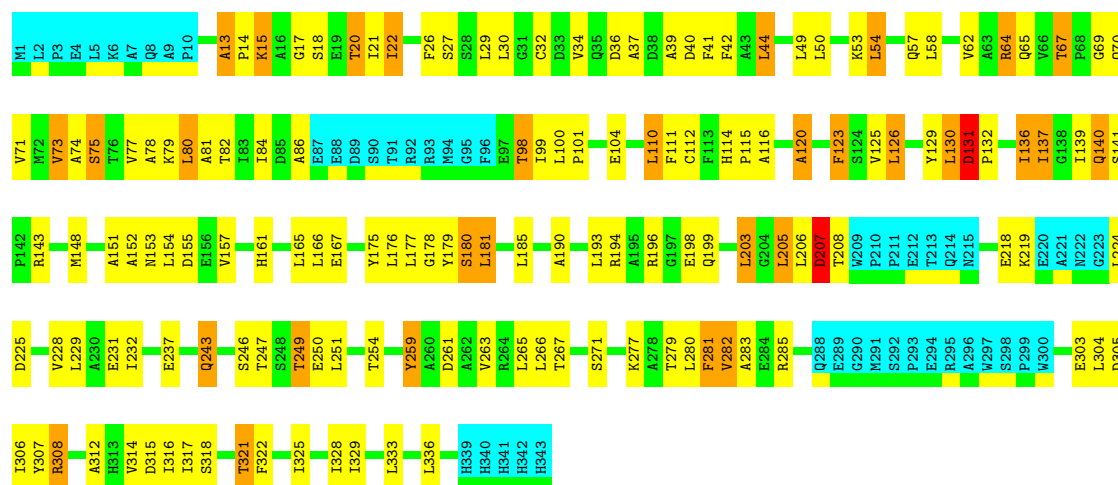
- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F





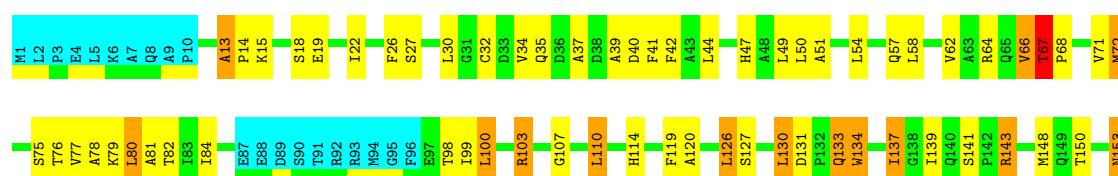
4.2.16 Score per residue for model 16

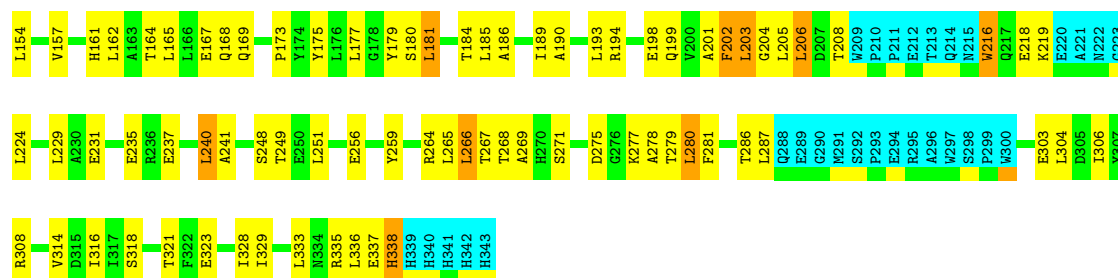
- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F



4.2.17 Score per residue for model 17

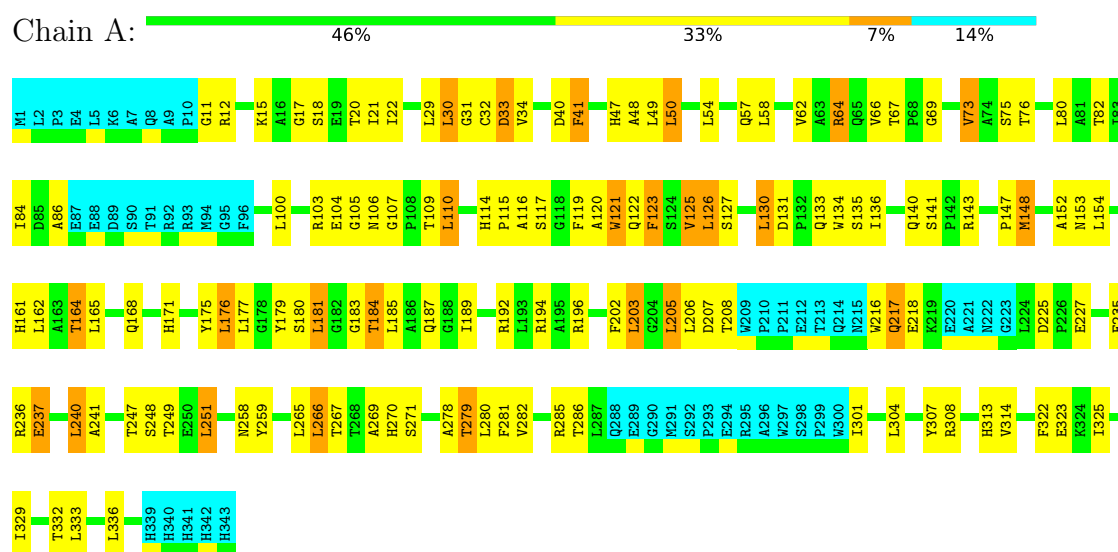
- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F





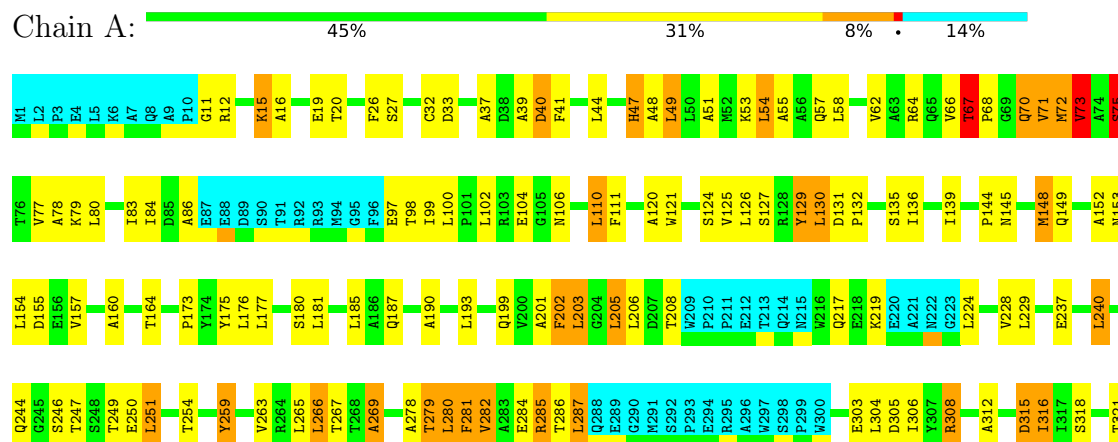
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F

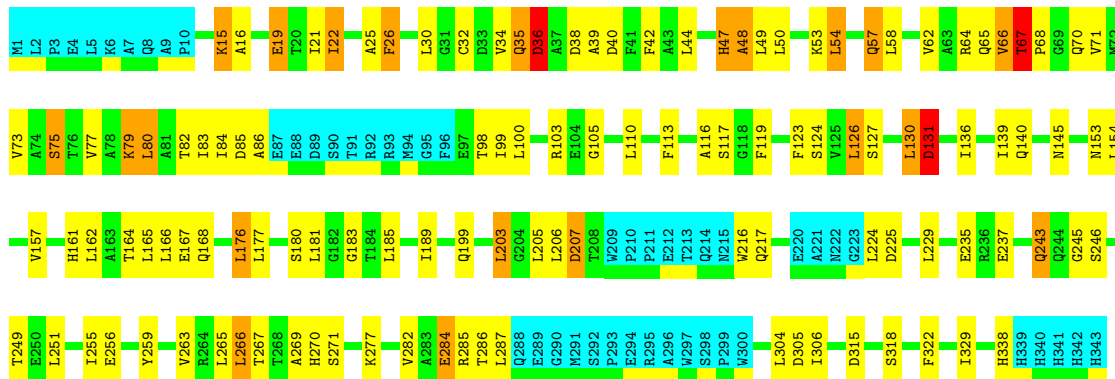




4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Enterobactin synthetase component F

Chain A: 50% 28% 6% 14%



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

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

Software name	Classification	Version
CYANA	structure solution	2.1
CNS	refinement	

No chemical shift data was provided.

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts

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	2237	2228	2228	80±10
All	All	44740	44560	44560	1610

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 18.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:VAL:HG21	1:A:84:ILE:HD12	0.99	1.29	11	1
1:A:99:ILE:HD12	1:A:139:ILE:HD12	0.99	1.30	8	4
1:A:72:MET:O	1:A:73:VAL:HG22	0.97	1.58	8	3
1:A:71:VAL:HG13	1:A:80:LEU:HD11	0.96	1.33	8	3
1:A:154:LEU:HD22	1:A:185:LEU:HD21	0.95	1.33	12	10
1:A:29:LEU:HD12	1:A:54:LEU:HD12	0.89	1.45	13	11
1:A:190:ALA:HB1	1:A:203:LEU:HD13	0.89	1.42	4	1
1:A:13:ALA:HB2	1:A:37:ALA:HB2	0.87	1.43	15	1
1:A:22:ILE:HG22	1:A:58:LEU:HD13	0.85	1.48	18	3
1:A:152:ALA:HB1	1:A:265:LEU:HD13	0.83	1.51	15	1
1:A:34:VAL:HG22	1:A:44:LEU:HD22	0.83	1.51	2	3
1:A:99:ILE:HD11	1:A:160:ALA:HB1	0.83	1.51	19	3
1:A:301:ILE:HG21	1:A:304:LEU:HD23	0.82	1.51	10	3
1:A:304:LEU:HD13	1:A:306:ILE:HG23	0.82	1.51	8	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:ALA:HB1	1:A:44:LEU:HD11	0.81	1.52	3	7
1:A:34:VAL:HG13	1:A:44:LEU:HD21	0.81	1.50	20	1
1:A:224:LEU:HD12	1:A:229:LEU:HD21	0.81	1.50	12	1
1:A:206:LEU:C	1:A:206:LEU:HD22	0.81	2.01	1	1
1:A:49:LEU:HD21	1:A:240:LEU:HD23	0.80	1.53	17	1
1:A:126:LEU:HD23	1:A:130:LEU:HD11	0.79	1.53	8	1
1:A:162:LEU:HD21	1:A:189:ILE:HG23	0.79	1.54	20	10
1:A:30:LEU:HD21	1:A:50:LEU:HD13	0.78	1.55	9	1
1:A:153:ASN:O	1:A:157:VAL:HG22	0.78	1.79	6	13
1:A:58:LEU:HD12	1:A:80:LEU:HD12	0.78	1.56	11	9
1:A:325:ILE:HG23	1:A:328:ILE:HD11	0.77	1.56	5	2
1:A:240:LEU:C	1:A:240:LEU:HD22	0.76	2.04	9	2
1:A:48:ALA:HB3	1:A:251:LEU:HD11	0.76	1.57	19	4
1:A:193:LEU:HD13	1:A:194:ARG:N	0.76	1.94	4	1
1:A:266:LEU:HD13	1:A:267:THR:N	0.75	1.97	9	2
1:A:39:ALA:HB1	1:A:44:LEU:HD21	0.75	1.57	16	5
1:A:193:LEU:O	1:A:193:LEU:HD22	0.74	1.82	4	1
1:A:333:LEU:HD23	1:A:336:LEU:HD21	0.73	1.59	9	8
1:A:181:LEU:HD11	1:A:266:LEU:HD23	0.73	1.61	12	3
1:A:62:VAL:HG11	1:A:84:ILE:HD12	0.73	1.61	18	14
1:A:70:GLN:C	1:A:74:ALA:HB2	0.72	2.10	12	8
1:A:58:LEU:O	1:A:62:VAL:HG22	0.72	1.84	4	20
1:A:266:LEU:HD22	1:A:266:LEU:O	0.72	1.84	9	2
1:A:22:ILE:HD12	1:A:58:LEU:HD13	0.72	1.59	5	6
1:A:123:PHE:CE2	1:A:126:LEU:HD23	0.72	2.20	13	1
1:A:206:LEU:HD13	1:A:316:ILE:HG21	0.71	1.60	2	1
1:A:266:LEU:HD22	1:A:266:LEU:C	0.71	2.08	19	2
1:A:26:PHE:CE2	1:A:77:VAL:HG22	0.71	2.20	19	8
1:A:66:VAL:HG23	1:A:84:ILE:HG22	0.71	1.63	17	3
1:A:325:ILE:HD12	1:A:329:ILE:HG21	0.71	1.62	6	3
1:A:82:THR:HA	1:A:86:ALA:HB3	0.71	1.63	20	1
1:A:22:ILE:HG21	1:A:77:VAL:HG13	0.70	1.63	17	4
1:A:13:ALA:HB3	1:A:14:PRO:HD3	0.70	1.64	16	2
1:A:113:PHE:CZ	1:A:189:ILE:HD12	0.70	2.21	10	1
1:A:114:HIS:CE1	1:A:120:ALA:HB3	0.70	2.22	16	1
1:A:247:THR:HG21	1:A:251:LEU:HD12	0.69	1.62	19	1
1:A:162:LEU:HD23	1:A:189:ILE:HD11	0.69	1.64	4	1
1:A:42:PHE:CZ	1:A:100:LEU:HD13	0.69	2.23	4	1
1:A:224:LEU:HD22	1:A:229:LEU:HD21	0.68	1.65	20	5
1:A:202:PHE:CG	1:A:336:LEU:HD22	0.68	2.23	19	3
1:A:301:ILE:HG21	1:A:304:LEU:HD22	0.68	1.65	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:176:LEU:HD12	1:A:203:LEU:HD21	0.68	1.65	13	1
1:A:126:LEU:HD12	1:A:322:PHE:CE1	0.68	2.24	20	1
1:A:206:LEU:HD21	1:A:316:ILE:HD13	0.68	1.65	17	2
1:A:232:ILE:HG23	1:A:314:VAL:HG12	0.67	1.65	1	1
1:A:99:ILE:HD13	1:A:139:ILE:HG23	0.67	1.65	2	3
1:A:263:VAL:O	1:A:266:LEU:HD22	0.67	1.90	16	2
1:A:224:LEU:HD13	1:A:224:LEU:N	0.67	2.04	3	1
1:A:30:LEU:HD23	1:A:50:LEU:HD12	0.67	1.64	17	2
1:A:202:PHE:CE2	1:A:336:LEU:HD22	0.67	2.25	13	3
1:A:206:LEU:HD23	1:A:316:ILE:HG21	0.67	1.67	12	1
1:A:176:LEU:HD11	1:A:203:LEU:HD23	0.67	1.64	2	2
1:A:123:PHE:CZ	1:A:126:LEU:HD22	0.67	2.25	20	2
1:A:39:ALA:HB3	1:A:77:VAL:HG23	0.66	1.66	20	4
1:A:42:PHE:CZ	1:A:100:LEU:HD11	0.66	2.25	17	7
1:A:130:LEU:HD12	1:A:134:TRP:CH2	0.66	2.26	14	2
1:A:232:ILE:HD12	1:A:259:TYR:CE1	0.66	2.25	14	1
1:A:72:MET:O	1:A:73:VAL:CG2	0.66	2.41	8	3
1:A:48:ALA:HB1	1:A:251:LEU:HD11	0.66	1.66	9	3
1:A:26:PHE:CB	1:A:34:VAL:HG11	0.66	2.21	10	1
1:A:109:THR:HG21	1:A:169:GLN:HG3	0.66	1.67	8	1
1:A:99:ILE:HD12	1:A:139:ILE:HG13	0.65	1.68	5	2
1:A:22:ILE:HD12	1:A:77:VAL:CG1	0.65	2.21	16	2
1:A:42:PHE:CE2	1:A:100:LEU:HD11	0.65	2.26	6	2
1:A:37:ALA:HB1	1:A:78:ALA:HB2	0.65	1.67	12	4
1:A:202:PHE:CG	1:A:336:LEU:HD13	0.65	2.27	3	3
1:A:130:LEU:HD21	1:A:329:ILE:HD12	0.65	1.67	4	1
1:A:206:LEU:HD11	1:A:316:ILE:HG21	0.65	1.69	14	2
1:A:193:LEU:HD22	1:A:193:LEU:C	0.65	2.16	4	1
1:A:126:LEU:O	1:A:130:LEU:HD22	0.65	1.92	19	1
1:A:152:ALA:CB	1:A:265:LEU:HD13	0.65	2.22	15	1
1:A:26:PHE:CD1	1:A:54:LEU:HD11	0.65	2.27	11	5
1:A:42:PHE:HB3	1:A:102:LEU:HD22	0.65	1.68	7	2
1:A:113:PHE:CZ	1:A:185:LEU:HD11	0.64	2.27	4	1
1:A:100:LEU:HD11	1:A:121:TRP:CE3	0.64	2.28	12	1
1:A:111:PHE:CE1	1:A:137:ILE:HD12	0.64	2.27	10	1
1:A:161:HIS:O	1:A:165:LEU:HD12	0.64	1.92	4	2
1:A:203:LEU:O	1:A:278:ALA:HB1	0.64	1.91	12	10
1:A:22:ILE:CG2	1:A:77:VAL:HG13	0.64	2.23	17	9
1:A:125:VAL:HG11	1:A:322:PHE:CE2	0.64	2.28	4	1
1:A:41:PHE:CE2	1:A:71:VAL:HG12	0.64	2.28	3	2
1:A:22:ILE:HD12	1:A:77:VAL:HG13	0.64	1.69	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:284:GLU:O	1:A:287:LEU:HD13	0.64	1.93	8	1
1:A:13:ALA:HB3	1:A:14:PRO:CD	0.64	2.22	16	2
1:A:110:LEU:HG	1:A:136:ILE:HG23	0.64	1.70	16	1
1:A:99:ILE:CD1	1:A:139:ILE:HG23	0.63	2.24	20	5
1:A:205:LEU:HD12	1:A:279:THR:O	0.63	1.94	19	4
1:A:30:LEU:HD23	1:A:50:LEU:HG	0.63	1.71	1	4
1:A:250:GLU:O	1:A:254:THR:HG23	0.63	1.93	1	1
1:A:143:ARG:O	1:A:254:THR:HG23	0.63	1.94	14	1
1:A:238:ALA:O	1:A:242:ALA:HB2	0.63	1.92	5	2
1:A:175:TYR:O	1:A:176:LEU:HD13	0.63	1.93	6	2
1:A:154:LEU:HD22	1:A:185:LEU:CD2	0.63	2.24	9	7
1:A:162:LEU:CD2	1:A:189:ILE:HG23	0.63	2.24	17	10
1:A:49:LEU:O	1:A:50:LEU:HD22	0.63	1.93	7	1
1:A:236:ARG:O	1:A:240:LEU:HD12	0.63	1.94	12	1
1:A:217:GLN:HB2	1:A:266:LEU:HD21	0.63	1.68	5	1
1:A:126:LEU:HD12	1:A:322:PHE:CZ	0.63	2.29	8	1
1:A:276:GLY:O	1:A:302:ALA:HB3	0.63	1.94	9	1
1:A:78:ALA:O	1:A:82:THR:HG23	0.63	1.93	17	2
1:A:326:GLY:O	1:A:329:ILE:HG22	0.62	1.92	12	3
1:A:173:PRO:HB2	1:A:201:ALA:HB2	0.62	1.71	9	9
1:A:71:VAL:HG22	1:A:80:LEU:HD11	0.62	1.72	14	3
1:A:312:ALA:HB3	1:A:315:ASP:HB2	0.62	1.68	7	6
1:A:99:ILE:HD12	1:A:139:ILE:CD1	0.62	2.24	16	3
1:A:181:LEU:HD11	1:A:266:LEU:HB3	0.62	1.70	1	4
1:A:259:TYR:OH	1:A:314:VAL:HG12	0.62	1.95	9	1
1:A:240:LEU:HD11	1:A:251:LEU:HD13	0.62	1.70	4	4
1:A:30:LEU:CD1	1:A:34:VAL:HG21	0.62	2.24	4	1
1:A:98:THR:O	1:A:99:ILE:HD13	0.62	1.95	1	8
1:A:154:LEU:HD21	1:A:181:LEU:HD13	0.62	1.69	6	1
1:A:49:LEU:HD22	1:A:244:GLN:HB2	0.62	1.72	13	1
1:A:62:VAL:HG11	1:A:84:ILE:HG21	0.62	1.70	14	3
1:A:265:LEU:HD12	1:A:265:LEU:C	0.61	2.19	6	17
1:A:240:LEU:HD21	1:A:251:LEU:CD1	0.61	2.25	3	8
1:A:41:PHE:HA	1:A:44:LEU:HD12	0.61	1.71	16	2
1:A:237:GLU:O	1:A:241:ALA:HB3	0.61	1.94	12	7
1:A:285:ARG:HD3	1:A:286:THR:HG23	0.61	1.73	14	1
1:A:333:LEU:HD13	1:A:333:LEU:O	0.61	1.95	18	2
1:A:224:LEU:CD1	1:A:229:LEU:HD11	0.61	2.24	16	1
1:A:22:ILE:HG13	1:A:81:ALA:HB2	0.61	1.73	2	5
1:A:39:ALA:O	1:A:77:VAL:HG23	0.61	1.96	14	1
1:A:190:ALA:HB2	1:A:203:LEU:HD13	0.61	1.72	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:ILE:HD12	1:A:139:ILE:CG1	0.61	2.26	1	2
1:A:237:GLU:HA	1:A:255:ILE:HG21	0.61	1.73	9	1
1:A:34:VAL:HG22	1:A:44:LEU:CD2	0.61	2.26	10	2
1:A:49:LEU:HD11	1:A:240:LEU:HD23	0.61	1.72	11	1
1:A:224:LEU:CD2	1:A:263:VAL:HG13	0.61	2.26	6	1
1:A:231:GLU:HB3	1:A:314:VAL:HG21	0.61	1.72	16	1
1:A:280:LEU:CB	1:A:306:ILE:HG22	0.61	2.26	17	1
1:A:190:ALA:HA	1:A:193:LEU:HD12	0.61	1.72	17	6
1:A:30:LEU:HD13	1:A:44:LEU:HD22	0.61	1.72	11	3
1:A:206:LEU:HD23	1:A:316:ILE:CG2	0.61	2.26	12	1
1:A:42:PHE:CB	1:A:102:LEU:HD22	0.61	2.26	7	1
1:A:99:ILE:HD12	1:A:139:ILE:HG12	0.61	1.73	17	1
1:A:22:ILE:HG22	1:A:58:LEU:CD1	0.61	2.24	18	3
1:A:123:PHE:CE1	1:A:317:ILE:HD11	0.61	2.30	5	1
1:A:275:ASP:OD2	1:A:301:ILE:HD11	0.61	1.96	7	1
1:A:280:LEU:HD23	1:A:306:ILE:HG22	0.60	1.72	16	2
1:A:30:LEU:CD2	1:A:50:LEU:HD13	0.60	2.25	9	1
1:A:49:LEU:HD11	1:A:242:ALA:HB3	0.60	1.70	2	2
1:A:113:PHE:CD1	1:A:185:LEU:HD21	0.60	2.31	4	1
1:A:66:VAL:HG12	1:A:70:GLN:OE1	0.60	1.96	11	1
1:A:206:LEU:C	1:A:206:LEU:CD2	0.60	2.74	1	1
1:A:205:LEU:HB2	1:A:280:LEU:HD22	0.60	1.74	15	2
1:A:66:VAL:C	1:A:67:THR:HG22	0.60	2.21	20	2
1:A:176:LEU:HD23	1:A:203:LEU:HG	0.60	1.73	19	3
1:A:49:LEU:HD13	1:A:243:GLN:CB	0.60	2.27	11	2
1:A:206:LEU:HD12	1:A:316:ILE:CD1	0.60	2.26	19	3
1:A:99:ILE:HD12	1:A:139:ILE:HD13	0.60	1.74	16	1
1:A:175:TYR:OH	1:A:333:LEU:HD11	0.60	1.97	16	1
1:A:98:THR:HG23	1:A:99:ILE:HG12	0.60	1.73	4	1
1:A:72:MET:C	1:A:73:VAL:HG13	0.60	2.20	13	3
1:A:29:LEU:HD21	1:A:53:LYS:HB3	0.60	1.73	1	3
1:A:266:LEU:HD12	1:A:267:THR:N	0.60	2.11	12	14
1:A:154:LEU:HD12	1:A:269:ALA:CB	0.60	2.27	2	8
1:A:82:THR:O	1:A:86:ALA:HB3	0.60	1.97	9	10
1:A:16:ALA:HB3	1:A:19:GLU:HB2	0.59	1.73	20	2
1:A:62:VAL:HG21	1:A:84:ILE:HB	0.59	1.74	1	3
1:A:173:PRO:CB	1:A:201:ALA:HB2	0.59	2.26	9	10
1:A:179:TYR:CE1	1:A:206:LEU:HD22	0.59	2.32	3	1
1:A:126:LEU:HG	1:A:130:LEU:HD23	0.59	1.73	1	1
1:A:126:LEU:CD2	1:A:130:LEU:HD11	0.59	2.26	8	1
1:A:206:LEU:HD12	1:A:316:ILE:HD11	0.59	1.74	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:240:LEU:HD22	1:A:240:LEU:O	0.59	1.97	9	12
1:A:110:LEU:HD22	1:A:134:TRP:CZ2	0.59	2.32	1	1
1:A:232:ILE:CG2	1:A:314:VAL:HG12	0.59	2.28	1	1
1:A:34:VAL:CG2	1:A:44:LEU:HD22	0.59	2.26	2	3
1:A:154:LEU:CD2	1:A:185:LEU:HD21	0.59	2.27	2	5
1:A:176:LEU:HD23	1:A:203:LEU:CD2	0.59	2.28	1	2
1:A:240:LEU:C	1:A:240:LEU:HD13	0.59	2.23	8	12
1:A:100:LEU:HD12	1:A:100:LEU:O	0.59	1.98	12	2
1:A:49:LEU:HD22	1:A:243:GLN:C	0.59	2.23	16	1
1:A:26:PHE:HB3	1:A:34:VAL:HG11	0.59	1.75	16	4
1:A:183:GLY:HA2	1:A:205:LEU:HD22	0.58	1.74	20	2
1:A:126:LEU:HG	1:A:130:LEU:HD21	0.58	1.73	8	1
1:A:114:HIS:N	1:A:115:PRO:CD	0.58	2.66	16	1
1:A:71:VAL:HA	1:A:80:LEU:HD21	0.58	1.74	5	8
1:A:73:VAL:HG12	1:A:100:LEU:HD22	0.58	1.72	19	1
1:A:130:LEU:HD23	1:A:131:ASP:N	0.58	2.14	2	6
1:A:240:LEU:HD21	1:A:251:LEU:HD21	0.58	1.76	9	1
1:A:153:ASN:ND2	1:A:265:LEU:HD22	0.58	2.13	19	1
1:A:72:MET:O	1:A:73:VAL:HG13	0.58	1.99	3	4
1:A:208:THR:O	1:A:280:LEU:HD11	0.58	1.99	5	3
1:A:42:PHE:CE2	1:A:73:VAL:HG22	0.58	2.32	7	1
1:A:30:LEU:CD1	1:A:44:LEU:HD22	0.58	2.28	11	2
1:A:99:ILE:HG21	1:A:164:THR:HG21	0.58	1.75	11	1
1:A:71:VAL:N	1:A:74:ALA:HB2	0.58	2.14	10	2
1:A:116:ALA:HB2	1:A:181:LEU:HB2	0.58	1.73	7	1
1:A:34:VAL:CG1	1:A:44:LEU:HD21	0.58	2.28	20	1
1:A:161:HIS:C	1:A:165:LEU:HD12	0.58	2.23	4	2
1:A:154:LEU:HD11	1:A:265:LEU:CD1	0.58	2.29	17	2
1:A:236:ARG:HG3	1:A:255:ILE:HG21	0.58	1.75	11	1
1:A:30:LEU:HD22	1:A:44:LEU:O	0.57	1.99	9	8
1:A:71:VAL:H	1:A:74:ALA:HB2	0.57	1.58	9	1
1:A:72:MET:HG3	1:A:73:VAL:HG13	0.57	1.74	15	1
1:A:66:VAL:HG22	1:A:84:ILE:CG2	0.57	2.29	19	1
1:A:30:LEU:HD23	1:A:50:LEU:CD1	0.57	2.29	17	4
1:A:216:TRP:CE3	1:A:266:LEU:HD22	0.57	2.34	17	1
1:A:202:PHE:CD2	1:A:336:LEU:HD13	0.57	2.34	17	4
1:A:58:LEU:CD1	1:A:80:LEU:HD12	0.57	2.28	8	10
1:A:49:LEU:HD11	1:A:240:LEU:O	0.57	2.00	13	9
1:A:17:GLY:O	1:A:20:THR:HG22	0.57	1.98	10	3
1:A:217:GLN:HG3	1:A:266:LEU:HD21	0.57	1.76	9	1
1:A:70:GLN:HG2	1:A:83:ILE:HD12	0.57	1.75	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:137:ILE:HG23	1:A:137:ILE:O	0.57	1.98	2	1
1:A:193:LEU:HD13	1:A:200:VAL:HG12	0.57	1.75	7	2
1:A:22:ILE:HD11	1:A:81:ALA:HB2	0.57	1.77	9	2
1:A:218:GLU:O	1:A:219:LYS:CB	0.57	2.52	12	1
1:A:42:PHE:CZ	1:A:100:LEU:HD21	0.57	2.34	16	1
1:A:102:LEU:HD13	1:A:123:PHE:CE1	0.57	2.34	8	2
1:A:280:LEU:HD13	1:A:281:PHE:N	0.57	2.15	19	1
1:A:45:GLY:O	1:A:50:LEU:HD21	0.57	1.99	9	1
1:A:116:ALA:HB3	1:A:179:TYR:CE2	0.57	2.35	15	2
1:A:66:VAL:HB	1:A:84:ILE:HD11	0.57	1.75	14	1
1:A:26:PHE:CE1	1:A:44:LEU:HD13	0.57	2.35	20	2
1:A:284:GLU:CG	1:A:287:LEU:HD12	0.57	2.30	20	1
1:A:313:HIS:CD2	1:A:314:VAL:HG13	0.56	2.34	13	3
1:A:39:ALA:O	1:A:76:THR:HG22	0.56	1.99	6	1
1:A:109:THR:HG22	1:A:135:SER:CB	0.56	2.29	18	2
1:A:240:LEU:HD21	1:A:251:LEU:HD13	0.56	1.75	13	6
1:A:206:LEU:HD12	1:A:206:LEU:O	0.56	2.01	2	1
1:A:304:LEU:CD1	1:A:306:ILE:HG23	0.56	2.29	3	7
1:A:280:LEU:HB3	1:A:306:ILE:HG22	0.56	1.77	17	2
1:A:116:ALA:HB1	1:A:259:TYR:CZ	0.56	2.35	20	1
1:A:301:ILE:HB	1:A:304:LEU:HD23	0.56	1.76	1	1
1:A:301:ILE:HG21	1:A:304:LEU:CD2	0.56	2.30	2	2
1:A:154:LEU:HD12	1:A:269:ALA:HB3	0.56	1.77	18	2
1:A:274:PHE:CZ	1:A:278:ALA:HB3	0.56	2.35	15	1
1:A:202:PHE:CB	1:A:336:LEU:HD13	0.56	2.31	2	3
1:A:190:ALA:HB2	1:A:203:LEU:CD1	0.56	2.30	17	1
1:A:232:ILE:HG22	1:A:314:VAL:HG21	0.56	1.75	7	1
1:A:62:VAL:HG11	1:A:84:ILE:CD1	0.56	2.30	1	10
1:A:140:GLN:OE1	1:A:157:VAL:HG12	0.56	2.00	16	1
1:A:99:ILE:HD11	1:A:160:ALA:CB	0.56	2.27	19	1
1:A:22:ILE:HD11	1:A:84:ILE:HD11	0.56	1.76	5	4
1:A:29:LEU:HD21	1:A:53:LYS:CB	0.56	2.31	1	1
1:A:98:THR:C	1:A:99:ILE:HD13	0.56	2.25	1	6
1:A:216:TRP:CE3	1:A:224:LEU:HD21	0.56	2.36	2	1
1:A:205:LEU:CD1	1:A:278:ALA:HB1	0.56	2.30	9	3
1:A:176:LEU:HD23	1:A:203:LEU:HB3	0.56	1.77	6	1
1:A:224:LEU:HD11	1:A:264:ARG:HB2	0.56	1.78	6	1
1:A:206:LEU:HD21	1:A:316:ILE:CD1	0.56	2.31	17	3
1:A:206:LEU:HD12	1:A:207:ASP:HB2	0.56	1.77	5	1
1:A:249:THR:O	1:A:249:THR:HG23	0.56	2.00	7	1
1:A:206:LEU:HD12	1:A:281:PHE:CB	0.56	2.31	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:ALA:CB	1:A:44:LEU:HD21	0.56	2.31	2	1
1:A:16:ALA:HB3	1:A:19:GLU:HG3	0.56	1.78	9	1
1:A:281:PHE:CE1	1:A:316:ILE:HD11	0.55	2.36	4	1
1:A:22:ILE:HD13	1:A:81:ALA:HB2	0.55	1.78	8	1
1:A:224:LEU:HD12	1:A:229:LEU:CD2	0.55	2.26	12	1
1:A:110:LEU:HD21	1:A:175:TYR:CD2	0.55	2.37	17	1
1:A:42:PHE:CE1	1:A:73:VAL:HG12	0.55	2.36	20	1
1:A:301:ILE:CG2	1:A:304:LEU:HD22	0.55	2.31	9	1
1:A:224:LEU:HD21	1:A:263:VAL:O	0.55	2.01	11	1
1:A:101:PRO:HA	1:A:137:ILE:HG22	0.55	1.78	1	5
1:A:49:LEU:CD1	1:A:242:ALA:HB3	0.55	2.30	2	3
1:A:70:GLN:CG	1:A:83:ILE:HD12	0.55	2.31	10	1
1:A:26:PHE:HB3	1:A:34:VAL:HG21	0.55	1.78	2	4
1:A:162:LEU:HD12	1:A:166:LEU:HD21	0.55	1.78	20	1
1:A:110:LEU:HD23	1:A:175:TYR:O	0.55	2.01	12	1
1:A:181:LEU:HD22	1:A:262:ALA:HB1	0.55	1.78	9	2
1:A:206:LEU:HD12	1:A:316:ILE:HG21	0.55	1.77	15	1
1:A:67:THR:O	1:A:71:VAL:HG23	0.55	2.01	16	4
1:A:39:ALA:CB	1:A:44:LEU:HD11	0.55	2.31	13	5
1:A:54:LEU:HD23	1:A:58:LEU:HG	0.55	1.79	7	3
1:A:235:GLU:CB	1:A:314:VAL:HG21	0.55	2.31	10	1
1:A:72:MET:C	1:A:73:VAL:HG23	0.55	2.27	7	1
1:A:175:TYR:C	1:A:176:LEU:HD13	0.55	2.27	6	2
1:A:148:MET:HA	1:A:152:ALA:HB3	0.55	1.78	14	2
1:A:259:TYR:CE1	1:A:314:VAL:HG12	0.55	2.36	13	1
1:A:130:LEU:HD11	1:A:134:TRP:CZ2	0.54	2.38	1	1
1:A:39:ALA:HB3	1:A:77:VAL:CG2	0.54	2.31	15	4
1:A:110:LEU:HB3	1:A:136:ILE:HG23	0.54	1.79	12	2
1:A:232:ILE:HG21	1:A:259:TYR:CD2	0.54	2.37	16	1
1:A:36:ASP:O	1:A:77:VAL:HG11	0.54	2.02	20	1
1:A:29:LEU:HD12	1:A:54:LEU:CD1	0.54	2.32	9	4
1:A:109:THR:HG21	1:A:169:GLN:CG	0.54	2.31	8	1
1:A:304:LEU:HD13	1:A:306:ILE:HG13	0.54	1.78	10	3
1:A:193:LEU:HD13	1:A:193:LEU:C	0.54	2.26	4	1
1:A:206:LEU:HD23	1:A:316:ILE:HG12	0.54	1.79	6	1
1:A:58:LEU:HD12	1:A:80:LEU:CD1	0.54	2.32	11	1
1:A:42:PHE:CZ	1:A:73:VAL:HG12	0.54	2.37	20	3
1:A:202:PHE:CE2	1:A:333:LEU:HD21	0.54	2.36	8	1
1:A:110:LEU:O	1:A:136:ILE:HG23	0.54	2.03	15	2
1:A:175:TYR:O	1:A:176:LEU:HD23	0.54	2.02	10	1
1:A:16:ALA:HB3	1:A:19:GLU:HG2	0.54	1.80	11	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:266:LEU:HD23	1:A:267:THR:N	0.54	2.18	5	2
1:A:11:GLY:C	1:A:37:ALA:HB3	0.54	2.28	6	1
1:A:49:LEU:CD2	1:A:240:LEU:HD23	0.54	2.30	17	1
1:A:175:TYR:CE1	1:A:333:LEU:HD21	0.54	2.38	19	1
1:A:70:GLN:O	1:A:74:ALA:HB2	0.54	2.02	15	4
1:A:110:LEU:HD11	1:A:175:TYR:CD2	0.54	2.37	17	1
1:A:70:GLN:CA	1:A:74:ALA:HB2	0.54	2.33	16	1
1:A:102:LEU:HD13	1:A:120:ALA:HB1	0.54	1.78	19	1
1:A:336:LEU:HD12	1:A:336:LEU:C	0.54	2.26	10	17
1:A:232:ILE:HG22	1:A:314:VAL:CG1	0.54	2.33	6	3
1:A:161:HIS:O	1:A:165:LEU:HD13	0.54	2.03	17	7
1:A:175:TYR:OH	1:A:333:LEU:HD21	0.54	2.02	10	1
1:A:120:ALA:O	1:A:121:TRP:C	0.54	2.51	18	1
1:A:41:PHE:CZ	1:A:54:LEU:HD13	0.54	2.38	14	8
1:A:325:ILE:O	1:A:329:ILE:HD12	0.54	2.03	16	1
1:A:30:LEU:HD12	1:A:31:GLY:N	0.53	2.18	3	5
1:A:228:VAL:HG13	1:A:229:LEU:HD23	0.53	1.79	19	5
1:A:206:LEU:HD13	1:A:316:ILE:HG12	0.53	1.78	5	1
1:A:48:ALA:CB	1:A:251:LEU:HD11	0.53	2.33	9	1
1:A:206:LEU:HD12	1:A:281:PHE:CG	0.53	2.38	17	1
1:A:135:SER:O	1:A:136:ILE:HD13	0.53	2.03	2	1
1:A:99:ILE:CD1	1:A:139:ILE:HD12	0.53	2.32	2	3
1:A:190:ALA:HB2	1:A:203:LEU:HD22	0.53	1.79	15	2
1:A:130:LEU:HD12	1:A:134:TRP:CZ2	0.53	2.39	7	1
1:A:217:GLN:CB	1:A:266:LEU:HD21	0.53	2.33	5	1
1:A:100:LEU:HD11	1:A:121:TRP:CZ3	0.53	2.37	12	1
1:A:224:LEU:HD13	1:A:229:LEU:HD11	0.53	1.80	16	1
1:A:51:ALA:CB	1:A:72:MET:HE3	0.53	2.34	2	1
1:A:202:PHE:CD2	1:A:336:LEU:HD22	0.53	2.38	4	3
1:A:325:ILE:HA	1:A:328:ILE:HD12	0.53	1.80	16	3
1:A:113:PHE:CE2	1:A:186:ALA:HB2	0.53	2.38	3	1
1:A:40:ASP:C	1:A:44:LEU:HD12	0.53	2.29	13	4
1:A:125:VAL:HG13	1:A:322:PHE:CD2	0.53	2.38	5	2
1:A:99:ILE:HG23	1:A:139:ILE:CD1	0.53	2.34	8	1
1:A:240:LEU:HD13	1:A:251:LEU:CD1	0.53	2.34	11	1
1:A:280:LEU:HD12	1:A:281:PHE:N	0.53	2.19	16	3
1:A:15:LYS:HB2	1:A:20:THR:HG23	0.53	1.80	16	1
1:A:206:LEU:HD21	1:A:316:ILE:HD12	0.53	1.79	14	1
1:A:224:LEU:CD2	1:A:229:LEU:HD21	0.53	2.33	20	1
1:A:174:TYR:O	1:A:201:ALA:HB3	0.53	2.04	2	1
1:A:139:ILE:HG21	1:A:161:HIS:HB2	0.53	1.79	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:ALA:HB1	1:A:35:GLN:HA	0.53	1.79	15	3
1:A:73:VAL:O	1:A:74:ALA:C	0.52	2.52	14	5
1:A:19:GLU:HG3	1:A:22:ILE:HD11	0.52	1.81	4	1
1:A:66:VAL:C	1:A:67:THR:CG2	0.52	2.82	20	2
1:A:26:PHE:CD2	1:A:44:LEU:HD13	0.52	2.40	4	2
1:A:176:LEU:HD12	1:A:203:LEU:CD2	0.52	2.35	13	2
1:A:240:LEU:O	1:A:240:LEU:HD22	0.52	2.03	13	1
1:A:175:TYR:O	1:A:176:LEU:HD22	0.52	2.05	15	1
1:A:202:PHE:HB3	1:A:336:LEU:HD13	0.52	1.80	5	2
1:A:49:LEU:HD22	1:A:244:GLN:HG3	0.52	1.82	3	2
1:A:240:LEU:HD21	1:A:251:LEU:HD11	0.52	1.81	8	3
1:A:70:GLN:O	1:A:83:ILE:HD12	0.52	2.05	8	1
1:A:29:LEU:HD13	1:A:54:LEU:HD12	0.52	1.82	8	1
1:A:22:ILE:HG22	1:A:26:PHE:CE2	0.52	2.40	9	1
1:A:99:ILE:HG23	1:A:139:ILE:HD13	0.52	1.82	16	1
1:A:261:ASP:O	1:A:265:LEU:HD23	0.52	2.05	12	4
1:A:202:PHE:HB2	1:A:336:LEU:HD13	0.52	1.80	9	2
1:A:49:LEU:HD11	1:A:241:ALA:O	0.52	2.05	7	1
1:A:100:LEU:O	1:A:100:LEU:HD13	0.52	2.05	17	3
1:A:133:GLN:C	1:A:134:TRP:CG	0.52	2.88	17	1
1:A:266:LEU:HA	1:A:269:ALA:HB3	0.52	1.82	12	1
1:A:30:LEU:HD12	1:A:34:VAL:HG21	0.52	1.81	4	1
1:A:219:LYS:HA	1:A:224:LEU:HD12	0.52	1.81	19	1
1:A:73:VAL:HG12	1:A:100:LEU:HD21	0.52	1.81	3	3
1:A:153:ASN:HB2	1:A:265:LEU:HD21	0.52	1.80	16	1
1:A:206:LEU:HD22	1:A:206:LEU:O	0.51	2.05	1	1
1:A:148:MET:O	1:A:152:ALA:HB3	0.51	2.05	9	4
1:A:274:PHE:O	1:A:301:ILE:HG23	0.51	2.05	1	1
1:A:51:ALA:HB3	1:A:72:MET:HE3	0.51	1.82	2	1
1:A:21:ILE:CD1	1:A:22:ILE:HG23	0.51	2.35	8	2
1:A:47:HIS:CE1	1:A:48:ALA:HB2	0.51	2.40	20	1
1:A:193:LEU:HD22	1:A:198:GLU:CD	0.51	2.30	1	1
1:A:49:LEU:HD13	1:A:243:GLN:HB3	0.51	1.82	11	2
1:A:127:SER:OG	1:A:136:ILE:HD11	0.51	2.05	11	1
1:A:131:ASP:HB2	1:A:132:PRO:HD2	0.51	1.82	19	1
1:A:26:PHE:O	1:A:30:LEU:HD12	0.51	2.05	7	1
1:A:240:LEU:HD21	1:A:251:LEU:CD2	0.51	2.35	9	1
1:A:14:PRO:HB3	1:A:20:THR:HG23	0.51	1.81	2	1
1:A:179:TYR:CD2	1:A:206:LEU:HD22	0.51	2.40	6	2
1:A:224:LEU:HD23	1:A:263:VAL:HG13	0.51	1.82	6	1
1:A:69:GLY:O	1:A:73:VAL:HG23	0.51	2.05	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:183:GLY:HA2	1:A:205:LEU:HD23	0.51	1.82	3	2
1:A:266:LEU:HD13	1:A:266:LEU:C	0.51	2.31	9	2
1:A:110:LEU:HD23	1:A:175:TYR:HB2	0.51	1.83	5	1
1:A:72:MET:HG2	1:A:73:VAL:HG23	0.51	1.83	7	1
1:A:49:LEU:HD22	1:A:245:GLY:H	0.51	1.64	14	1
1:A:110:LEU:HD21	1:A:177:LEU:HD12	0.51	1.83	14	1
1:A:100:LEU:C	1:A:100:LEU:HD13	0.51	2.30	15	3
1:A:193:LEU:HD23	1:A:198:GLU:OE2	0.51	2.05	16	1
1:A:116:ALA:HB3	1:A:179:TYR:CE1	0.51	2.40	18	1
1:A:336:LEU:HD12	1:A:337:GLU:N	0.51	2.20	12	3
1:A:13:ALA:CB	1:A:37:ALA:HB2	0.51	2.26	15	1
1:A:99:ILE:HG13	1:A:164:THR:HG21	0.51	1.81	17	1
1:A:175:TYR:CD1	1:A:333:LEU:HD21	0.51	2.40	19	1
1:A:186:ALA:HB3	1:A:205:LEU:HD23	0.51	1.81	7	4
1:A:217:GLN:CD	1:A:266:LEU:HD11	0.51	2.31	9	1
1:A:280:LEU:HD23	1:A:306:ILE:CG2	0.51	2.36	16	1
1:A:67:THR:HG23	1:A:68:PRO:CD	0.51	2.36	20	2
1:A:200:VAL:HG21	1:A:203:LEU:HD12	0.50	1.82	7	1
1:A:284:GLU:HG2	1:A:287:LEU:HD12	0.50	1.83	20	1
1:A:18:SER:HB3	1:A:81:ALA:HB1	0.50	1.82	17	1
1:A:131:ASP:CB	1:A:132:PRO:CD	0.50	2.89	12	2
1:A:207:ASP:OD2	1:A:283:ALA:HB2	0.50	2.06	13	1
1:A:110:LEU:O	1:A:110:LEU:HD23	0.50	2.07	15	1
1:A:70:GLN:HA	1:A:74:ALA:HB2	0.50	1.82	16	1
1:A:151:ALA:HA	1:A:265:LEU:HD22	0.50	1.82	16	1
1:A:116:ALA:HB3	1:A:259:TYR:CE1	0.50	2.41	6	1
1:A:283:ALA:O	1:A:286:THR:HG22	0.50	2.06	8	1
1:A:102:LEU:HD13	1:A:121:TRP:CD2	0.50	2.42	10	1
1:A:217:GLN:CD	1:A:266:LEU:HD22	0.50	2.31	1	2
1:A:109:THR:HG22	1:A:169:GLN:CD	0.50	2.32	6	1
1:A:126:LEU:HD23	1:A:127:SER:N	0.50	2.21	17	2
1:A:120:ALA:HB2	1:A:140:GLN:CB	0.50	2.36	13	1
1:A:26:PHE:CD1	1:A:44:LEU:HD13	0.50	2.41	1	3
1:A:311:CYS:HB3	1:A:316:ILE:HD12	0.50	1.82	1	2
1:A:183:GLY:HA3	1:A:208:THR:HG21	0.50	1.84	3	1
1:A:285:ARG:NE	1:A:312:ALA:HB2	0.50	2.22	8	3
1:A:184:THR:HG22	1:A:271:SER:CB	0.50	2.37	5	2
1:A:71:VAL:HG13	1:A:80:LEU:CD1	0.50	2.24	8	1
1:A:224:LEU:N	1:A:224:LEU:HD23	0.50	2.22	12	1
1:A:39:ALA:HB3	1:A:44:LEU:HD11	0.50	1.82	14	1
1:A:148:MET:CB	1:A:152:ALA:HB3	0.50	2.37	18	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:LEU:HD13	1:A:50:LEU:HB2	0.50	1.83	18	1
1:A:19:GLU:HA	1:A:22:ILE:HD11	0.49	1.83	4	1
1:A:16:ALA:HB3	1:A:19:GLU:CG	0.49	2.37	9	1
1:A:123:PHE:CZ	1:A:126:LEU:HD23	0.49	2.42	13	1
1:A:316:ILE:HG13	1:A:321:THR:HG21	0.49	1.85	12	3
1:A:22:ILE:CG1	1:A:81:ALA:HB2	0.49	2.37	13	2
1:A:13:ALA:CB	1:A:14:PRO:CD	0.49	2.90	16	2
1:A:67:THR:N	1:A:68:PRO:HD2	0.49	2.22	20	9
1:A:176:LEU:HD23	1:A:203:LEU:HD23	0.49	1.83	1	1
1:A:62:VAL:HG23	1:A:64:ARG:H	0.49	1.67	4	4
1:A:266:LEU:C	1:A:266:LEU:CD2	0.49	2.83	9	2
1:A:134:TRP:C	1:A:134:TRP:CD1	0.49	2.90	5	2
1:A:285:ARG:CD	1:A:286:THR:HG23	0.49	2.36	14	1
1:A:99:ILE:HD12	1:A:139:ILE:HG23	0.49	1.83	17	2
1:A:133:GLN:O	1:A:134:TRP:CD2	0.49	2.65	17	1
1:A:102:LEU:CD1	1:A:120:ALA:HB1	0.49	2.38	19	1
1:A:30:LEU:HD23	1:A:50:LEU:CG	0.49	2.36	1	2
1:A:22:ILE:HG22	1:A:77:VAL:HG13	0.49	1.85	2	1
1:A:283:ALA:HB1	1:A:311:CYS:O	0.49	2.07	2	4
1:A:71:VAL:HG22	1:A:80:LEU:CD1	0.49	2.38	7	1
1:A:285:ARG:HD3	1:A:312:ALA:HB2	0.49	1.84	12	1
1:A:125:VAL:HG21	1:A:322:PHE:CG	0.49	2.42	4	1
1:A:55:ALA:HB1	1:A:67:THR:HA	0.49	1.84	11	1
1:A:70:GLN:HB3	1:A:83:ILE:HD12	0.49	1.83	14	1
1:A:30:LEU:HD12	1:A:31:GLY:H	0.49	1.68	1	5
1:A:22:ILE:HD13	1:A:58:LEU:HD22	0.49	1.83	17	2
1:A:149:GLN:O	1:A:153:ASN:N	0.49	2.46	6	1
1:A:114:HIS:CB	1:A:120:ALA:HB2	0.49	2.38	17	1
1:A:133:GLN:O	1:A:134:TRP:O	0.49	2.31	17	1
1:A:175:TYR:C	1:A:176:LEU:HD12	0.48	2.32	4	1
1:A:22:ILE:HG21	1:A:77:VAL:HA	0.48	1.85	6	1
1:A:321:THR:HG22	1:A:325:ILE:HD11	0.48	1.85	16	1
1:A:322:PHE:HA	1:A:325:ILE:HG22	0.48	1.85	19	1
1:A:176:LEU:CD1	1:A:203:LEU:HD23	0.48	2.36	2	1
1:A:49:LEU:HD11	1:A:240:LEU:HA	0.48	1.85	11	2
1:A:36:ASP:O	1:A:37:ALA:HB3	0.48	2.07	16	1
1:A:301:ILE:CD1	1:A:304:LEU:HD23	0.48	2.38	3	1
1:A:207:ASP:OD2	1:A:316:ILE:HD13	0.48	2.09	8	1
1:A:154:LEU:HG	1:A:265:LEU:HD11	0.48	1.84	6	3
1:A:275:ASP:HB2	1:A:302:ALA:HB2	0.48	1.84	8	1
1:A:110:LEU:CB	1:A:136:ILE:HG23	0.48	2.38	12	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:42:PHE:CE1	1:A:100:LEU:HD11	0.48	2.43	14	1
1:A:98:THR:HG23	1:A:99:ILE:CG1	0.48	2.37	4	1
1:A:312:ALA:HB3	1:A:315:ASP:CB	0.48	2.38	7	1
1:A:316:ILE:HG23	1:A:321:THR:HG21	0.48	1.85	10	1
1:A:51:ALA:HB2	1:A:121:TRP:CZ3	0.48	2.44	19	1
1:A:200:VAL:HG11	1:A:203:LEU:CD1	0.48	2.38	12	1
1:A:66:VAL:HG23	1:A:70:GLN:CB	0.48	2.38	13	1
1:A:139:ILE:HD13	1:A:161:HIS:CD2	0.48	2.44	15	1
1:A:31:GLY:CA	1:A:34:VAL:HG23	0.48	2.38	18	1
1:A:26:PHE:CE1	1:A:54:LEU:HD21	0.48	2.44	11	1
1:A:70:GLN:CD	1:A:73:VAL:HG22	0.48	2.33	20	1
1:A:154:LEU:HD21	1:A:265:LEU:HD11	0.48	1.86	1	1
1:A:148:MET:CA	1:A:152:ALA:HB3	0.48	2.39	12	3
1:A:11:GLY:CA	1:A:37:ALA:HB3	0.48	2.39	13	1
1:A:146:GLY:N	1:A:147:PRO:CD	0.48	2.76	15	1
1:A:22:ILE:CD1	1:A:58:LEU:HD13	0.47	2.39	1	9
1:A:80:LEU:O	1:A:84:ILE:HG23	0.47	2.09	20	1
1:A:153:ASN:O	1:A:157:VAL:HG13	0.47	2.09	8	9
1:A:72:MET:C	1:A:73:VAL:HG22	0.47	2.33	4	1
1:A:130:LEU:HD21	1:A:329:ILE:CD1	0.47	2.37	4	1
1:A:29:LEU:HD13	1:A:50:LEU:CB	0.47	2.38	18	1
1:A:174:TYR:OH	1:A:193:LEU:HD22	0.47	2.08	6	1
1:A:225:ASP:O	1:A:228:VAL:HG12	0.47	2.09	8	4
1:A:102:LEU:HD21	1:A:120:ALA:CB	0.47	2.39	14	1
1:A:113:PHE:CE1	1:A:189:ILE:HD11	0.47	2.45	20	1
1:A:229:LEU:HD12	1:A:230:ALA:N	0.47	2.24	1	1
1:A:130:LEU:HD23	1:A:131:ASP:H	0.47	1.69	2	3
1:A:22:ILE:HG23	1:A:80:LEU:HD12	0.47	1.86	6	1
1:A:216:TRP:CH2	1:A:263:VAL:HG22	0.47	2.44	20	1
1:A:110:LEU:HD22	1:A:111:PHE:N	0.47	2.25	5	1
1:A:325:ILE:HG22	1:A:329:ILE:HB	0.47	1.86	5	1
1:A:144:PRO:HA	1:A:254:THR:HG23	0.47	1.87	19	3
1:A:248:SER:O	1:A:249:THR:HG22	0.47	2.10	7	1
1:A:148:MET:HB3	1:A:152:ALA:HB3	0.47	1.84	19	3
1:A:263:VAL:C	1:A:266:LEU:HD12	0.47	2.34	19	2
1:A:217:GLN:HG2	1:A:224:LEU:HD21	0.47	1.86	14	1
1:A:154:LEU:HD13	1:A:269:ALA:CB	0.47	2.39	17	1
1:A:130:LEU:HD12	1:A:131:ASP:OD1	0.47	2.08	18	1
1:A:206:LEU:HD23	1:A:207:ASP:HB2	0.47	1.87	3	1
1:A:280:LEU:HD12	1:A:281:PHE:H	0.47	1.69	12	3
1:A:66:VAL:CG2	1:A:84:ILE:HG22	0.47	2.39	4	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:ALA:HB1	1:A:72:MET:SD	0.47	2.50	4	1
1:A:162:LEU:HD13	1:A:166:LEU:CD2	0.47	2.40	4	1
1:A:48:ALA:HB3	1:A:240:LEU:CD2	0.47	2.40	9	1
1:A:26:PHE:HB2	1:A:34:VAL:HG11	0.47	1.87	10	1
1:A:177:LEU:HD21	1:A:179:TYR:OH	0.47	2.10	16	1
1:A:13:ALA:HB2	1:A:35:GLN:O	0.47	2.10	17	1
1:A:31:GLY:O	1:A:32:CYS:CB	0.47	2.62	10	1
1:A:67:THR:HG23	1:A:68:PRO:HD3	0.47	1.86	20	2
1:A:99:ILE:HD13	1:A:139:ILE:CD1	0.46	2.40	3	1
1:A:22:ILE:HG21	1:A:80:LEU:HB3	0.46	1.87	4	1
1:A:325:ILE:CG2	1:A:328:ILE:HD11	0.46	2.34	5	1
1:A:176:LEU:HD22	1:A:176:LEU:N	0.46	2.25	6	2
1:A:48:ALA:HB3	1:A:240:LEU:HD23	0.46	1.88	9	1
1:A:193:LEU:HD23	1:A:198:GLU:CD	0.46	2.35	16	1
1:A:13:ALA:HB2	1:A:35:GLN:C	0.46	2.35	17	1
1:A:285:ARG:HD2	1:A:312:ALA:HB2	0.46	1.87	19	1
1:A:333:LEU:HD23	1:A:336:LEU:HD11	0.46	1.88	16	2
1:A:285:ARG:CD	1:A:312:ALA:HB2	0.46	2.40	4	1
1:A:111:PHE:HB3	1:A:176:LEU:HD23	0.46	1.88	8	1
1:A:206:LEU:HD12	1:A:316:ILE:HG12	0.46	1.86	11	2
1:A:232:ILE:CG2	1:A:314:VAL:HG11	0.46	2.40	12	1
1:A:202:PHE:CZ	1:A:336:LEU:HD22	0.46	2.45	13	2
1:A:71:VAL:HB	1:A:72:MET:HE3	0.46	1.86	17	1
1:A:237:GLU:O	1:A:241:ALA:HB2	0.46	2.10	17	1
1:A:176:LEU:HD23	1:A:203:LEU:CG	0.46	2.41	3	2
1:A:232:ILE:HG22	1:A:314:VAL:HG11	0.46	1.86	6	1
1:A:110:LEU:HD11	1:A:130:LEU:HD11	0.46	1.87	13	1
1:A:202:PHE:CB	1:A:336:LEU:HD22	0.46	2.40	19	1
1:A:98:THR:O	1:A:139:ILE:HD12	0.46	2.10	3	1
1:A:193:LEU:C	1:A:193:LEU:CD2	0.46	2.86	4	1
1:A:126:LEU:CD1	1:A:130:LEU:HD21	0.46	2.41	10	2
1:A:72:MET:HE2	1:A:121:TRP:CZ3	0.46	2.45	2	1
1:A:206:LEU:HD21	1:A:316:ILE:HG12	0.46	1.86	9	2
1:A:259:TYR:O	1:A:263:VAL:HG13	0.46	2.10	5	4
1:A:66:VAL:O	1:A:67:THR:HG22	0.46	2.10	20	2
1:A:71:VAL:O	1:A:72:MET:CB	0.46	2.64	17	1
1:A:126:LEU:O	1:A:130:LEU:HD23	0.46	2.10	18	1
1:A:246:SER:O	1:A:247:THR:C	0.46	2.59	7	2
1:A:33:ASP:HB3	1:A:44:LEU:HD22	0.46	1.87	14	1
1:A:154:LEU:HD22	1:A:185:LEU:HD11	0.46	1.88	16	2
1:A:207:ASP:CG	1:A:316:ILE:HD13	0.46	2.35	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:126:LEU:CD2	1:A:136:ILE:HD13	0.46	2.40	12	1
1:A:40:ASP:O	1:A:41:PHE:C	0.46	2.58	18	4
1:A:158:CYS:SG	1:A:189:ILE:HD12	0.46	2.51	4	1
1:A:72:MET:C	1:A:73:VAL:CG1	0.46	2.89	13	1
1:A:150:THR:O	1:A:265:LEU:HD22	0.46	2.11	17	1
1:A:109:THR:HG22	1:A:135:SER:HB2	0.46	1.87	18	1
1:A:203:LEU:HD12	1:A:278:ALA:HB2	0.46	1.88	18	1
1:A:49:LEU:HD22	1:A:244:GLN:CG	0.46	2.41	19	1
1:A:216:TRP:HH2	1:A:263:VAL:HG22	0.46	1.71	20	1
1:A:177:LEU:HD12	1:A:204:GLY:HA3	0.46	1.88	8	3
1:A:316:ILE:CG1	1:A:321:THR:HG21	0.46	2.40	12	1
1:A:120:ALA:HB2	1:A:140:GLN:HB2	0.46	1.87	13	1
1:A:265:LEU:O	1:A:268:THR:HG22	0.46	2.11	17	1
1:A:73:VAL:CG1	1:A:100:LEU:HD22	0.46	2.41	19	1
1:A:206:LEU:HD11	1:A:316:ILE:HD11	0.46	1.88	3	1
1:A:79:LYS:O	1:A:83:ILE:HG23	0.46	2.11	7	2
1:A:173:PRO:CA	1:A:201:ALA:HB2	0.46	2.41	14	1
1:A:58:LEU:HB2	1:A:66:VAL:HG11	0.46	1.87	19	1
1:A:110:LEU:HD13	1:A:175:TYR:CE2	0.45	2.46	16	1
1:A:109:THR:HG21	1:A:168:GLN:HG3	0.45	1.86	11	1
1:A:164:THR:HG22	1:A:168:GLN:HB2	0.45	1.88	18	1
1:A:313:HIS:CE1	1:A:314:VAL:HG13	0.45	2.46	18	1
1:A:110:LEU:HD13	1:A:134:TRP:CH2	0.45	2.46	14	3
1:A:137:ILE:O	1:A:137:ILE:CG2	0.45	2.65	2	1
1:A:206:LEU:HD23	1:A:316:ILE:CG1	0.45	2.41	6	1
1:A:251:LEU:HD22	1:A:251:LEU:C	0.45	2.36	11	1
1:A:151:ALA:HA	1:A:265:LEU:HD21	0.45	1.88	12	1
1:A:325:ILE:HG23	1:A:325:ILE:O	0.45	2.12	14	1
1:A:125:VAL:HG11	1:A:322:PHE:CD2	0.45	2.46	16	1
1:A:130:LEU:HD21	1:A:134:TRP:CZ2	0.45	2.45	5	1
1:A:110:LEU:HD12	1:A:175:TYR:HB2	0.45	1.88	15	2
1:A:161:HIS:CE1	1:A:165:LEU:HD11	0.45	2.47	2	1
1:A:240:LEU:C	1:A:240:LEU:CD2	0.45	2.77	9	1
1:A:109:THR:HG23	1:A:135:SER:HB3	0.45	1.89	2	1
1:A:43:ALA:HB2	1:A:102:LEU:O	0.45	2.12	7	1
1:A:123:PHE:HZ	1:A:126:LEU:HD22	0.45	1.69	11	1
1:A:184:THR:HG23	1:A:217:GLN:OE1	0.45	2.12	18	1
1:A:137:ILE:H	1:A:137:ILE:HD13	0.45	1.71	17	1
1:A:301:ILE:HD13	1:A:304:LEU:HD21	0.45	1.88	6	2
1:A:139:ILE:HG23	1:A:139:ILE:O	0.45	2.12	3	4
1:A:176:LEU:O	1:A:177:LEU:HD12	0.45	2.11	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:ILE:CG2	1:A:58:LEU:HD13	0.45	2.39	8	1
1:A:217:GLN:CG	1:A:266:LEU:HD21	0.45	2.41	9	1
1:A:266:LEU:HD23	1:A:267:THR:H	0.45	1.72	16	1
1:A:316:ILE:HA	1:A:321:THR:HG21	0.45	1.87	16	1
1:A:47:HIS:CE1	1:A:240:LEU:HD23	0.45	2.46	19	1
1:A:127:SER:OG	1:A:136:ILE:HD12	0.45	2.11	20	1
1:A:30:LEU:HD13	1:A:44:LEU:HB3	0.45	1.89	7	1
1:A:42:PHE:CE2	1:A:100:LEU:HD22	0.45	2.47	7	1
1:A:102:LEU:HD13	1:A:123:PHE:CZ	0.45	2.46	8	1
1:A:321:THR:HG22	1:A:325:ILE:CD1	0.45	2.42	16	2
1:A:152:ALA:O	1:A:153:ASN:C	0.45	2.59	6	1
1:A:13:ALA:HB1	1:A:14:PRO:HD2	0.45	1.89	15	4
1:A:21:ILE:HD12	1:A:58:LEU:HD22	0.45	1.88	9	1
1:A:111:PHE:HB2	1:A:176:LEU:HD13	0.45	1.89	16	1
1:A:66:VAL:HG12	1:A:71:VAL:CG2	0.45	2.42	19	1
1:A:22:ILE:HD12	1:A:58:LEU:CD1	0.44	2.41	1	1
1:A:73:VAL:HG13	1:A:100:LEU:HD22	0.44	1.89	4	1
1:A:259:TYR:O	1:A:263:VAL:HG22	0.44	2.12	12	2
1:A:153:ASN:O	1:A:154:LEU:C	0.44	2.59	6	1
1:A:154:LEU:HD11	1:A:269:ALA:HB2	0.44	1.89	15	2
1:A:173:PRO:HA	1:A:201:ALA:HB2	0.44	1.87	14	1
1:A:42:PHE:CD2	1:A:102:LEU:HD22	0.44	2.48	4	2
1:A:48:ALA:HB3	1:A:251:LEU:CD1	0.44	2.38	19	2
1:A:19:GLU:OE1	1:A:37:ALA:HB2	0.44	2.13	13	1
1:A:66:VAL:HG22	1:A:71:VAL:CG2	0.44	2.42	13	1
1:A:224:LEU:C	1:A:224:LEU:HD12	0.44	2.37	16	1
1:A:110:LEU:HD22	1:A:134:TRP:HZ2	0.44	1.72	1	1
1:A:47:HIS:O	1:A:48:ALA:HB3	0.44	2.13	13	3
1:A:113:PHE:CE2	1:A:189:ILE:HD11	0.44	2.48	7	1
1:A:127:SER:CB	1:A:136:ILE:HD12	0.44	2.43	9	1
1:A:66:VAL:O	1:A:67:THR:CB	0.44	2.65	10	1
1:A:179:TYR:CD1	1:A:317:ILE:HD13	0.44	2.48	16	1
1:A:247:THR:CG2	1:A:251:LEU:HD12	0.44	2.39	19	1
1:A:130:LEU:HD12	1:A:131:ASP:CG	0.44	2.37	3	1
1:A:240:LEU:HD12	1:A:252:PHE:CE1	0.44	2.48	3	1
1:A:259:TYR:CD1	1:A:259:TYR:C	0.44	2.96	7	1
1:A:49:LEU:HD13	1:A:243:GLN:HB2	0.44	1.89	10	1
1:A:205:LEU:CB	1:A:208:THR:HG21	0.44	2.42	16	1
1:A:231:GLU:CB	1:A:314:VAL:HG21	0.44	2.41	16	1
1:A:40:ASP:O	1:A:44:LEU:HD12	0.44	2.12	7	2
1:A:34:VAL:HG21	1:A:44:LEU:HD22	0.44	1.88	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:131:ASP:N	1:A:132:PRO:HD2	0.44	2.28	16	1
1:A:82:THR:O	1:A:86:ALA:HB2	0.44	2.13	18	2
1:A:110:LEU:HD12	1:A:111:PHE:O	0.44	2.13	19	1
1:A:67:THR:CB	1:A:68:PRO:CD	0.44	2.95	11	6
1:A:58:LEU:CD1	1:A:80:LEU:HD13	0.44	2.43	6	1
1:A:67:THR:H	1:A:68:PRO:HD2	0.44	1.73	20	2
1:A:34:VAL:O	1:A:35:GLN:C	0.44	2.60	20	1
1:A:179:TYR:HD2	1:A:206:LEU:HD22	0.44	1.73	6	1
1:A:204:GLY:HA2	1:A:279:THR:HG22	0.44	1.90	7	1
1:A:205:LEU:HD11	1:A:278:ALA:HB1	0.44	1.90	9	1
1:A:114:HIS:N	1:A:115:PRO:HD3	0.44	2.28	16	1
1:A:333:LEU:HD22	1:A:336:LEU:HD11	0.44	1.89	18	1
1:A:162:LEU:HD23	1:A:189:ILE:CD1	0.44	2.40	4	1
1:A:176:LEU:HD13	1:A:203:LEU:HD23	0.44	1.89	8	1
1:A:248:SER:O	1:A:249:THR:HG23	0.44	2.12	14	1
1:A:282:VAL:HG22	1:A:287:LEU:HD23	0.44	1.89	15	1
1:A:62:VAL:CG1	1:A:84:ILE:HD12	0.44	2.37	16	1
1:A:265:LEU:HD12	1:A:265:LEU:O	0.43	2.12	6	6
1:A:206:LEU:HB3	1:A:316:ILE:HD13	0.43	1.89	6	1
1:A:99:ILE:HG23	1:A:139:ILE:HG13	0.43	1.90	17	1
1:A:206:LEU:CD2	1:A:316:ILE:HD13	0.43	2.40	17	1
1:A:314:VAL:HA	1:A:317:ILE:HG22	0.43	1.90	5	1
1:A:42:PHE:HE2	1:A:100:LEU:HD22	0.43	1.73	7	1
1:A:109:THR:HG22	1:A:135:SER:OG	0.43	2.13	1	1
1:A:325:ILE:HG22	1:A:329:ILE:HD12	0.43	1.89	1	1
1:A:49:LEU:HD11	1:A:240:LEU:HD22	0.43	1.91	3	3
1:A:180:SER:O	1:A:208:THR:HG23	0.43	2.13	3	1
1:A:228:VAL:O	1:A:232:ILE:HG23	0.43	2.13	3	1
1:A:325:ILE:HG23	1:A:328:ILE:CD1	0.43	2.36	5	1
1:A:127:SER:HB3	1:A:136:ILE:HD11	0.43	1.91	7	1
1:A:283:ALA:CB	1:A:286:THR:HG22	0.43	2.43	12	1
1:A:175:TYR:CZ	1:A:201:ALA:HB1	0.43	2.47	13	1
1:A:166:LEU:HD11	1:A:198:GLU:OE2	0.43	2.13	16	1
1:A:207:ASP:OD1	1:A:283:ALA:HB2	0.43	2.13	16	1
1:A:130:LEU:HD12	1:A:131:ASP:N	0.43	2.28	1	1
1:A:148:MET:HB2	1:A:152:ALA:HB3	0.43	1.89	10	1
1:A:13:ALA:HB2	1:A:37:ALA:CB	0.43	2.30	15	1
1:A:154:LEU:HD12	1:A:269:ALA:HB2	0.43	1.90	5	1
1:A:121:TRP:O	1:A:121:TRP:CG	0.43	2.70	10	1
1:A:240:LEU:HD13	1:A:241:ALA:N	0.43	2.28	4	3
1:A:49:LEU:HD21	1:A:240:LEU:O	0.43	2.13	8	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:240:LEU:HD13	1:A:251:LEU:HD11	0.43	1.89	11	1
1:A:67:THR:HG22	1:A:68:PRO:N	0.43	2.29	4	5
1:A:153:ASN:HD21	1:A:265:LEU:HD22	0.43	1.73	4	1
1:A:62:VAL:HG11	1:A:84:ILE:CG2	0.43	2.43	11	1
1:A:137:ILE:HD13	1:A:137:ILE:N	0.43	2.29	17	1
1:A:11:GLY:O	1:A:37:ALA:HB3	0.43	2.13	4	2
1:A:186:ALA:HB1	1:A:203:LEU:HD21	0.43	1.89	11	1
1:A:176:LEU:HD22	1:A:203:LEU:CD2	0.43	2.44	12	1
1:A:179:TYR:O	1:A:181:LEU:N	0.43	2.51	16	1
1:A:332:THR:HG22	1:A:336:LEU:HD23	0.43	1.89	18	1
1:A:29:LEU:CD1	1:A:54:LEU:HD12	0.43	2.41	18	3
1:A:206:LEU:HD23	1:A:316:ILE:CD1	0.43	2.44	6	1
1:A:110:LEU:CD1	1:A:130:LEU:HD11	0.43	2.44	18	2
1:A:143:ARG:H	1:A:143:ARG:NE	0.43	2.12	17	1
1:A:208:THR:HG21	1:A:286:THR:HB	0.43	1.91	17	1
1:A:176:LEU:HD22	1:A:203:LEU:HD23	0.43	1.89	7	1
1:A:263:VAL:O	1:A:266:LEU:HD11	0.43	2.13	14	1
1:A:174:TYR:CZ	1:A:193:LEU:HD22	0.43	2.48	15	1
1:A:333:LEU:HD13	1:A:333:LEU:C	0.43	2.39	17	1
1:A:31:GLY:HA3	1:A:34:VAL:HG23	0.43	1.90	18	1
1:A:55:ALA:HB1	1:A:67:THR:OG1	0.43	2.13	19	1
1:A:25:ALA:HB1	1:A:57:GLN:NE2	0.43	2.29	20	1
1:A:202:PHE:CE1	1:A:336:LEU:HD22	0.42	2.48	3	1
1:A:66:VAL:HG22	1:A:84:ILE:HG22	0.42	1.90	4	1
1:A:125:VAL:HG21	1:A:322:PHE:CB	0.42	2.43	15	1
1:A:51:ALA:HB1	1:A:72:MET:HE2	0.42	1.90	17	1
1:A:206:LEU:HD21	1:A:316:ILE:CG1	0.42	2.44	3	1
1:A:41:PHE:CE1	1:A:71:VAL:HG12	0.42	2.49	16	1
1:A:26:PHE:HE2	1:A:77:VAL:HG22	0.42	1.70	17	1
1:A:22:ILE:HG23	1:A:58:LEU:HD11	0.42	1.91	20	1
1:A:100:LEU:C	1:A:100:LEU:HD22	0.42	2.39	9	2
1:A:113:PHE:CE2	1:A:189:ILE:HD12	0.42	2.49	10	1
1:A:102:LEU:HD21	1:A:120:ALA:HB1	0.42	1.91	14	1
1:A:178:GLY:C	1:A:179:TYR:CD1	0.42	2.97	16	1
1:A:126:LEU:O	1:A:130:LEU:HD13	0.42	2.14	19	1
1:A:30:LEU:HG	1:A:50:LEU:HD12	0.42	1.92	1	1
1:A:40:ASP:HB2	1:A:43:ALA:HB3	0.42	1.90	3	1
1:A:184:THR:HG22	1:A:271:SER:HB2	0.42	1.90	5	1
1:A:174:TYR:OH	1:A:193:LEU:HD13	0.42	2.15	6	1
1:A:161:HIS:CD2	1:A:189:ILE:HD11	0.42	2.49	9	1
1:A:113:PHE:CE2	1:A:185:LEU:HD12	0.42	2.48	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:280:LEU:CD2	1:A:306:ILE:HG22	0.42	2.42	16	1
1:A:126:LEU:HD23	1:A:130:LEU:CD2	0.42	2.44	18	1
1:A:41:PHE:HZ	1:A:54:LEU:HD22	0.42	1.75	19	1
1:A:240:LEU:HD22	1:A:240:LEU:C	0.42	2.40	4	1
1:A:130:LEU:HD21	1:A:134:TRP:CE2	0.42	2.50	5	1
1:A:232:ILE:HB	1:A:314:VAL:HG11	0.42	1.91	9	1
1:A:166:LEU:HD11	1:A:198:GLU:CD	0.42	2.38	16	1
1:A:70:GLN:HG3	1:A:83:ILE:HD12	0.42	1.90	19	1
1:A:282:VAL:HG23	1:A:308:ARG:HA	0.42	1.91	16	6
1:A:251:LEU:HD22	1:A:251:LEU:O	0.42	2.15	11	1
1:A:134:TRP:N	1:A:134:TRP:CD1	0.42	2.86	12	1
1:A:139:ILE:HD11	1:A:160:ALA:HB3	0.42	1.90	13	1
1:A:37:ALA:HA	1:A:77:VAL:HG11	0.42	1.91	14	1
1:A:21:ILE:HD11	1:A:84:ILE:HD11	0.42	1.91	16	1
1:A:130:LEU:O	1:A:131:ASP:CB	0.42	2.67	2	1
1:A:15:LYS:O	1:A:20:THR:HG21	0.42	2.14	7	1
1:A:325:ILE:HB	1:A:328:ILE:HD11	0.42	1.91	13	3
1:A:74:ALA:O	1:A:75:SER:CB	0.42	2.66	11	1
1:A:181:LEU:CD1	1:A:266:LEU:HD23	0.42	2.40	12	1
1:A:110:LEU:CG	1:A:136:ILE:HG23	0.42	2.42	16	1
1:A:59:SER:HB3	1:A:66:VAL:HG12	0.42	1.90	2	2
1:A:100:LEU:CD1	1:A:102:LEU:HD23	0.42	2.45	15	1
1:A:67:THR:HG22	1:A:68:PRO:HD2	0.42	1.91	3	1
1:A:111:PHE:HB2	1:A:176:LEU:HD12	0.42	1.91	6	1
1:A:173:PRO:HB3	1:A:201:ALA:HB2	0.42	1.92	17	1
1:A:328:ILE:C	1:A:328:ILE:HD12	0.42	2.40	5	2
1:A:58:LEU:HD12	1:A:80:LEU:HD13	0.42	1.91	6	1
1:A:206:LEU:CD1	1:A:316:ILE:HG21	0.42	2.44	7	1
1:A:100:LEU:HD12	1:A:100:LEU:C	0.42	2.40	14	1
1:A:175:TYR:CE1	1:A:333:LEU:HD22	0.42	2.50	14	1
1:A:15:LYS:HB3	1:A:20:THR:HG23	0.42	1.92	15	1
1:A:240:LEU:C	1:A:240:LEU:CD1	0.41	2.93	3	1
1:A:125:VAL:HG21	1:A:322:PHE:CD2	0.41	2.50	4	1
1:A:66:VAL:HG22	1:A:71:VAL:HG23	0.41	1.90	13	1
1:A:84:ILE:HG13	1:A:85:ASP:N	0.41	2.29	20	1
1:A:282:VAL:HG12	1:A:308:ARG:HA	0.41	1.91	1	2
1:A:191:ALA:HB2	1:A:274:PHE:HB3	0.41	1.91	4	1
1:A:134:TRP:CZ2	1:A:136:ILE:HD12	0.41	2.49	5	1
1:A:70:GLN:CB	1:A:83:ILE:HD12	0.41	2.45	10	1
1:A:126:LEU:HD21	1:A:136:ILE:HD13	0.41	1.91	12	1
1:A:249:THR:HG22	1:A:253:THR:OG1	0.41	2.15	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:281:PHE:CD1	1:A:316:ILE:HD11	0.41	2.50	4	1
1:A:217:GLN:OE1	1:A:266:LEU:HD11	0.41	2.16	9	1
1:A:176:LEU:HD12	1:A:203:LEU:HD23	0.41	1.91	10	1
1:A:49:LEU:HD23	1:A:247:THR:CG2	0.41	2.45	19	1
1:A:224:LEU:HD22	1:A:224:LEU:O	0.41	2.14	3	1
1:A:72:MET:CG	1:A:73:VAL:HG23	0.41	2.45	7	1
1:A:239:PHE:CD1	1:A:240:LEU:N	0.41	2.88	9	1
1:A:11:GLY:HA2	1:A:37:ALA:HB3	0.41	1.91	13	1
1:A:62:VAL:HG21	1:A:84:ILE:HG23	0.41	1.91	14	1
1:A:71:VAL:O	1:A:72:MET:HB2	0.41	2.15	17	1
1:A:116:ALA:HB1	1:A:259:TYR:CE2	0.41	2.50	18	1
1:A:66:VAL:HG22	1:A:84:ILE:HB	0.41	1.91	19	1
1:A:325:ILE:HA	1:A:328:ILE:CG2	0.41	2.45	2	1
1:A:325:ILE:HG23	1:A:328:ILE:CG2	0.41	2.46	2	1
1:A:123:PHE:CD1	1:A:123:PHE:C	0.41	2.96	7	1
1:A:123:PHE:O	1:A:123:PHE:CG	0.41	2.71	18	1
1:A:80:LEU:HA	1:A:83:ILE:HG12	0.41	1.93	20	1
1:A:12:ARG:O	1:A:37:ALA:HB2	0.41	2.16	3	1
1:A:304:LEU:C	1:A:304:LEU:HD12	0.41	2.41	5	2
1:A:265:LEU:C	1:A:265:LEU:CD1	0.41	2.90	6	1
1:A:121:TRP:CD2	1:A:121:TRP:N	0.41	2.88	12	1
1:A:116:ALA:HB1	1:A:259:TYR:HE2	0.41	1.76	14	1
1:A:224:LEU:N	1:A:224:LEU:CD1	0.41	2.76	3	1
1:A:224:LEU:HD11	1:A:264:ARG:CB	0.41	2.44	6	1
1:A:135:SER:C	1:A:136:ILE:HD13	0.41	2.41	13	1
1:A:191:ALA:HB2	1:A:272:VAL:O	0.41	2.16	10	1
1:A:247:THR:HG21	1:A:251:LEU:H	0.41	1.76	10	1
1:A:134:TRP:CD1	1:A:134:TRP:C	0.41	2.99	14	1
1:A:22:ILE:CB	1:A:77:VAL:HG13	0.41	2.46	3	1
1:A:229:LEU:C	1:A:229:LEU:HD12	0.41	2.40	3	1
1:A:113:PHE:CE1	1:A:185:LEU:HD21	0.41	2.51	4	1
1:A:153:ASN:ND2	1:A:265:LEU:HD21	0.41	2.31	10	2
1:A:123:PHE:CZ	1:A:177:LEU:HD23	0.41	2.50	10	1
1:A:41:PHE:CE2	1:A:54:LEU:HD13	0.41	2.51	14	1
1:A:49:LEU:HD23	1:A:247:THR:HG22	0.41	1.91	19	1
1:A:117:SER:O	1:A:255:ILE:HD12	0.41	2.16	20	1
1:A:301:ILE:CB	1:A:304:LEU:HD23	0.41	2.45	1	1
1:A:49:LEU:HD22	1:A:244:GLN:H	0.41	1.75	5	1
1:A:70:GLN:CG	1:A:83:ILE:HG21	0.41	2.46	6	1
1:A:329:ILE:HD12	1:A:329:ILE:C	0.41	2.40	6	1
1:A:115:PRO:O	1:A:116:ALA:C	0.40	2.62	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:217:GLN:C	1:A:219:LYS:N	0.40	2.79	12	1
1:A:71:VAL:HG12	1:A:72:MET:N	0.40	2.31	17	1
1:A:66:VAL:HG22	1:A:70:GLN:O	0.40	2.16	1	1
1:A:176:LEU:N	1:A:176:LEU:HD22	0.40	2.32	1	1
1:A:139:ILE:O	1:A:139:ILE:HG22	0.40	2.17	5	1
1:A:206:LEU:HD21	1:A:316:ILE:HB	0.40	1.92	14	1
1:A:176:LEU:HD13	1:A:176:LEU:N	0.40	2.32	18	1
1:A:70:GLN:HA	1:A:83:ILE:HD12	0.40	1.93	19	1
1:A:165:LEU:HD23	1:A:174:TYR:OH	0.40	2.15	5	1
1:A:71:VAL:HG13	1:A:72:MET:N	0.40	2.30	7	1
1:A:100:LEU:HD13	1:A:121:TRP:CD1	0.40	2.51	10	1
1:A:69:GLY:C	1:A:73:VAL:HG23	0.40	2.42	16	1
1:A:26:PHE:CD2	1:A:77:VAL:HG22	0.40	2.50	19	1
1:A:125:VAL:O	1:A:129:TYR:CB	0.40	2.70	19	1
1:A:304:LEU:N	1:A:304:LEU:HD23	0.40	2.31	9	1
1:A:110:LEU:HG	1:A:136:ILE:HG22	0.40	1.92	19	1
1:A:71:VAL:CG2	1:A:80:LEU:HD11	0.40	2.47	11	1
1:A:217:GLN:C	1:A:219:LYS:H	0.40	2.23	12	1
1:A:313:HIS:HD2	1:A:314:VAL:HG13	0.40	1.75	15	1
1:A:123:PHE:CE1	1:A:126:LEU:HD22	0.40	2.52	16	1
1:A:218:GLU:O	1:A:219:LYS:C	0.40	2.65	16	1
1:A:126:LEU:HD13	1:A:322:PHE:CE2	0.40	2.51	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	294/343 (86%)	241±5 (82±2%)	41±6 (14±2%)	11±3 (4±1%)	4	30
All	All	5880/6860 (86%)	4825 (82%)	826 (14%)	229 (4%)	4	30

All 55 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	180	SER	19
1	A	75	SER	18
1	A	107	GLY	11
1	A	145	ASN	11
1	A	73	VAL	10
1	A	67	THR	9
1	A	15	LYS	9
1	A	105	GLY	8
1	A	131	ASP	8
1	A	338	HIS	7
1	A	130	LEU	7
1	A	33	ASP	6
1	A	133	GLN	6
1	A	207	ASP	6
1	A	71	VAL	5
1	A	32	CYS	5
1	A	301	ILE	5
1	A	11	GLY	5
1	A	134	TRP	4
1	A	47	HIS	4
1	A	269	ALA	4
1	A	36	ASP	4
1	A	17	GLY	3
1	A	208	THR	3
1	A	248	SER	3
1	A	86	ALA	3
1	A	116	ALA	3
1	A	153	ASN	3
1	A	249	THR	3
1	A	247	THR	2
1	A	48	ALA	2
1	A	147	PRO	2
1	A	243	GLN	2
1	A	103	ARG	2
1	A	35	GLN	2
1	A	68	PRO	2
1	A	120	ALA	2
1	A	121	TRP	2
1	A	245	GLY	2
1	A	13	ALA	2
1	A	119	PHE	1
1	A	14	PRO	1
1	A	118	GLY	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	325	ILE	1
1	A	242	ALA	1
1	A	70	GLN	1
1	A	76	THR	1
1	A	219	LYS	1
1	A	244	GLN	1
1	A	37	ALA	1
1	A	165	LEU	1
1	A	97	GLU	1
1	A	69	GLY	1
1	A	115	PRO	1
1	A	135	SER	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	231/273 (85%)	164±5 (71±2%)	67±5 (29±2%)	1	18
All	All	4620/5460 (85%)	3278 (71%)	1342 (29%)	1	18

All 181 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	251	LEU	20
1	A	67	THR	19
1	A	285	ARG	19
1	A	318	SER	19
1	A	54	LEU	18
1	A	79	LYS	18
1	A	203	LEU	18
1	A	266	LEU	18
1	A	80	LEU	17
1	A	240	LEU	17
1	A	282	VAL	17
1	A	64	ARG	17
1	A	41	PHE	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	57	GLN	16
1	A	15	LYS	15
1	A	32	CYS	14
1	A	249	THR	14
1	A	110	LEU	14
1	A	130	LEU	14
1	A	181	LEU	14
1	A	75	SER	14
1	A	100	LEU	13
1	A	126	LEU	13
1	A	148	MET	13
1	A	244	GLN	13
1	A	250	GLU	13
1	A	303	GLU	13
1	A	12	ARG	12
1	A	33	ASP	12
1	A	72	MET	12
1	A	141	SER	12
1	A	164	THR	12
1	A	271	SER	12
1	A	131	ASP	12
1	A	177	LEU	12
1	A	199	GLN	11
1	A	206	LEU	11
1	A	281	PHE	11
1	A	284	GLU	11
1	A	47	HIS	11
1	A	40	ASP	10
1	A	53	LYS	10
1	A	73	VAL	10
1	A	103	ARG	10
1	A	143	ARG	10
1	A	169	GLN	10
1	A	180	SER	10
1	A	187	GLN	10
1	A	235	GLU	10
1	A	286	THR	10
1	A	184	THR	10
1	A	205	LEU	10
1	A	192	ARG	10
1	A	119	PHE	10
1	A	19	GLU	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	98	THR	9
1	A	123	PHE	9
1	A	124	SER	9
1	A	218	GLU	9
1	A	270	HIS	9
1	A	306	ILE	9
1	A	27	SER	9
1	A	194	ARG	9
1	A	237	GLU	9
1	A	308	ARG	9
1	A	321	THR	9
1	A	149	GLN	9
1	A	155	ASP	8
1	A	207	ASP	8
1	A	236	ARG	8
1	A	316	ILE	8
1	A	140	GLN	8
1	A	176	LEU	8
1	A	219	LYS	8
1	A	248	SER	8
1	A	277	LYS	8
1	A	279	THR	8
1	A	315	ASP	8
1	A	196	ARG	8
1	A	307	TYR	8
1	A	167	GLU	8
1	A	337	GLU	8
1	A	35	GLN	7
1	A	153	ASN	7
1	A	162	LEU	7
1	A	247	THR	7
1	A	329	ILE	7
1	A	104	GLU	7
1	A	97	GLU	7
1	A	280	LEU	7
1	A	259	TYR	7
1	A	246	SER	7
1	A	65	GLN	7
1	A	30	LEU	6
1	A	136	ILE	6
1	A	21	ILE	6
1	A	36	ASP	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	127	SER	6
1	A	202	PHE	6
1	A	323	GLU	6
1	A	324	LYS	6
1	A	328	ILE	6
1	A	49	LEU	6
1	A	225	ASP	6
1	A	256	GLU	6
1	A	133	GLN	6
1	A	161	HIS	6
1	A	165	LEU	6
1	A	231	GLU	6
1	A	287	LEU	6
1	A	335	ARG	6
1	A	305	ASP	6
1	A	185	LEU	6
1	A	106	ASN	5
1	A	137	ILE	5
1	A	135	SER	5
1	A	301	ILE	5
1	A	145	ASN	5
1	A	122	GLN	5
1	A	243	GLN	5
1	A	330	ARG	5
1	A	50	LEU	5
1	A	66	VAL	5
1	A	70	GLN	5
1	A	216	TRP	5
1	A	217	GLN	5
1	A	325	ILE	5
1	A	338	HIS	5
1	A	22	ILE	4
1	A	171	HIS	4
1	A	18	SER	4
1	A	117	SER	4
1	A	125	VAL	4
1	A	208	THR	4
1	A	275	ASP	4
1	A	268	THR	4
1	A	112	CYS	3
1	A	52	MET	3
1	A	264	ARG	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	175	TYR	3
1	A	114	HIS	3
1	A	258	ASN	3
1	A	314	VAL	3
1	A	38	ASP	3
1	A	168	GLN	3
1	A	311	CYS	3
1	A	129	TYR	3
1	A	20	THR	3
1	A	82	THR	2
1	A	198	GLU	2
1	A	254	THR	2
1	A	109	THR	2
1	A	99	ILE	2
1	A	113	PHE	2
1	A	174	TYR	2
1	A	189	ILE	2
1	A	150	THR	2
1	A	158	CYS	2
1	A	83	ILE	2
1	A	227	GLU	2
1	A	134	TRP	2
1	A	313	HIS	2
1	A	76	THR	2
1	A	156	GLU	1
1	A	42	PHE	1
1	A	224	LEU	1
1	A	229	LEU	1
1	A	139	ILE	1
1	A	193	LEU	1
1	A	128	ARG	1
1	A	232	ILE	1
1	A	239	PHE	1
1	A	60	ARG	1
1	A	228	VAL	1
1	A	317	ILE	1
1	A	265	LEU	1
1	A	28	SER	1
1	A	34	VAL	1
1	A	304	LEU	1
1	A	44	LEU	1
1	A	26	PHE	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided