



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 12, 2026 – 12:57 PM UTC

PDB ID : 1SVQ / pdb_00001svq
Title : STRUCTURE OF SEVERIN DOMAIN 2 IN SOLUTION
Authors : Schnuchel, A.; Holak, T.A.
Deposited on : 1994-10-12

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

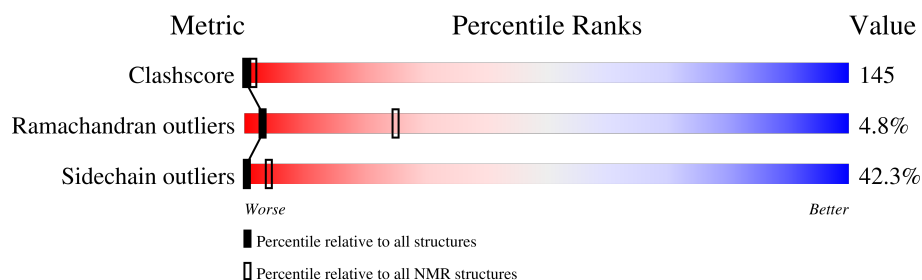
1 Overall quality at a glance

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	114	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 12 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:161-A:251 (91)	0.64	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. No single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1430 atoms, of which 713 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called SEVERIN.

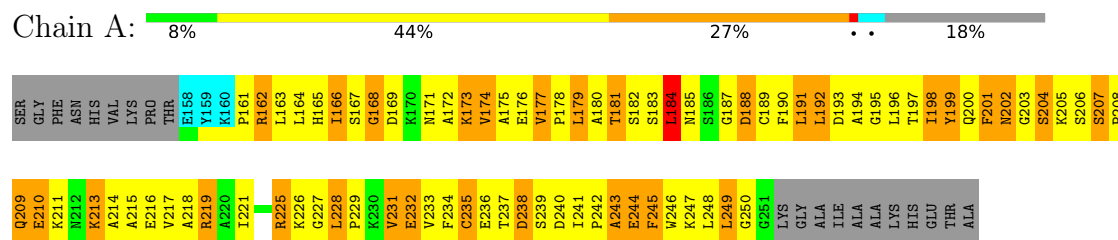
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	94	Total	C	H	N	O	S	0
			1430	453	713	121	141	2	

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: SEVERIN

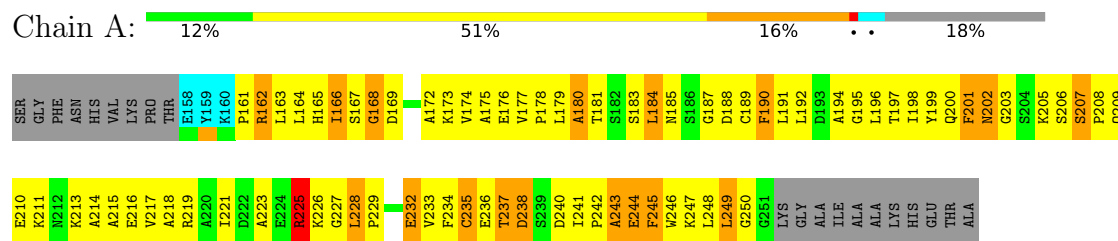


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

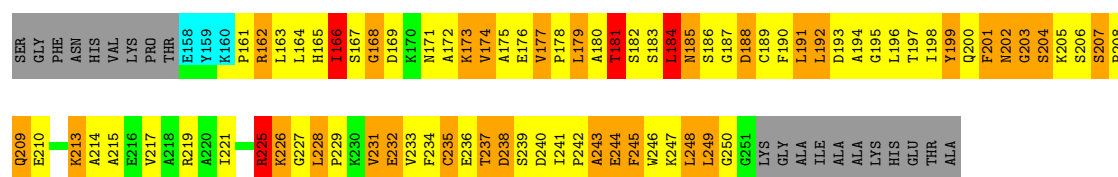
- Molecule 1: SEVERIN



4.2.2 Score per residue for model 2

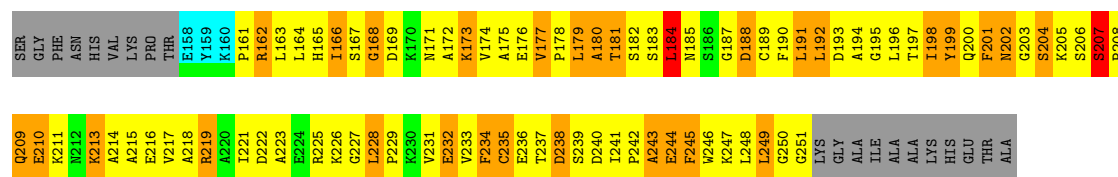
- Molecule 1: SEVERIN





4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: SEVERIN



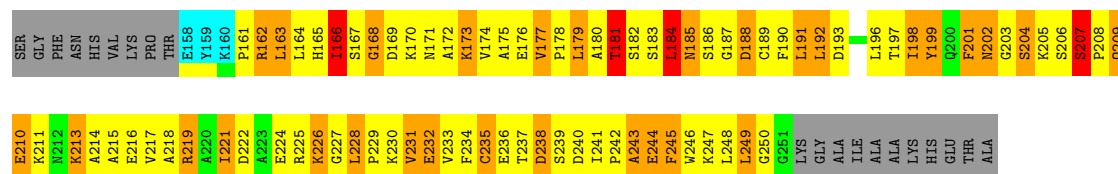
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: SEVERIN



4.2.5 Score per residue for model 5

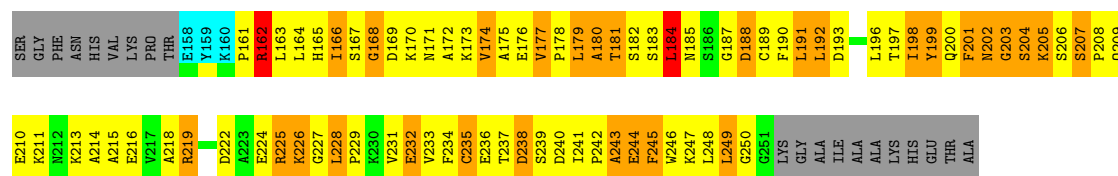
- Molecule 1: SEVERIN



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: SEVERIN

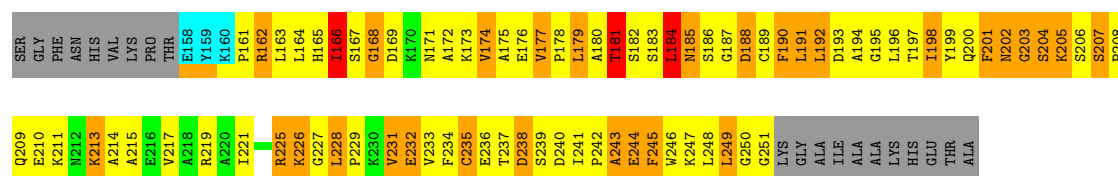
Chain A: 9% 44% 25% • • 18%



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: SEVERIN

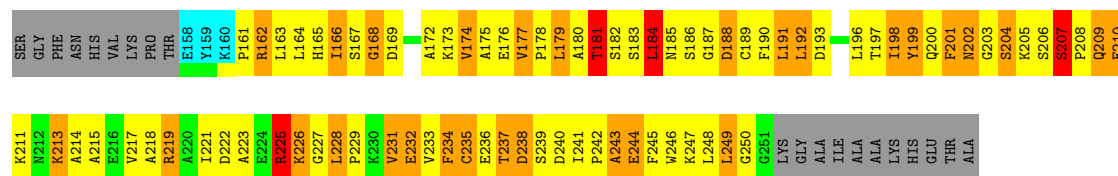
Chain A: 8% 44% 25% • • 18%



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: SEVERIN

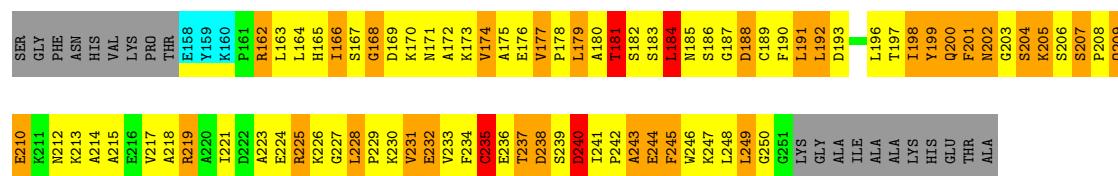
Chain A: 9% 42% 25% • • 18%



4.2.9 Score per residue for model 9

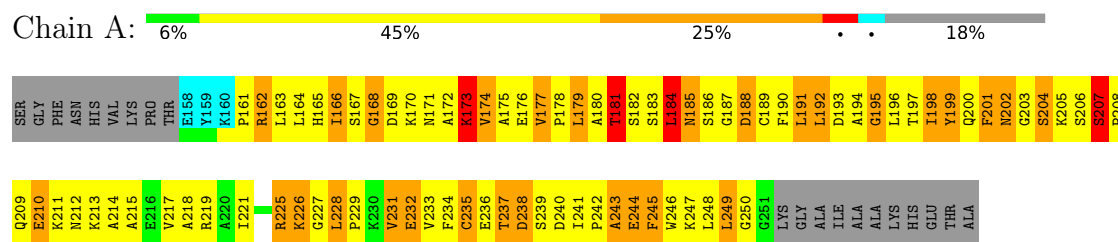
- Molecule 1: SEVERIN

Chain A: 7% 43% 26% • • 18%



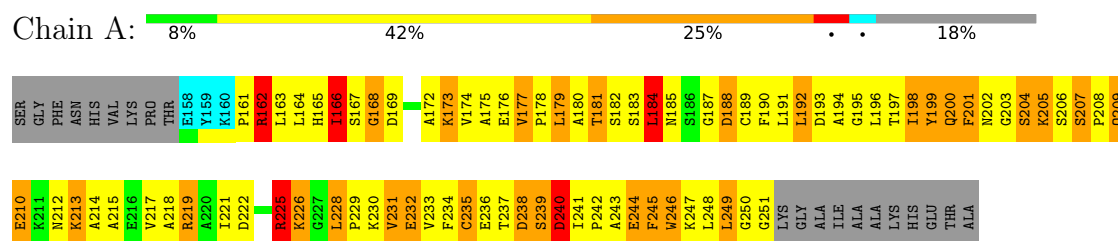
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: SEVERIN



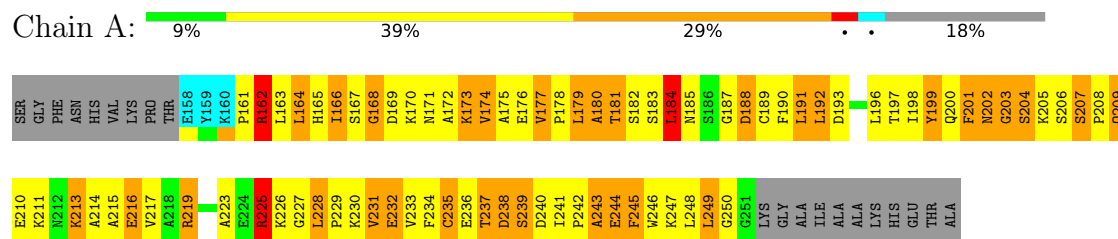
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: SEVERIN



4.2.12 Score per residue for model 12 (medoid)

- Molecule 1: SEVERIN



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: SEVERIN



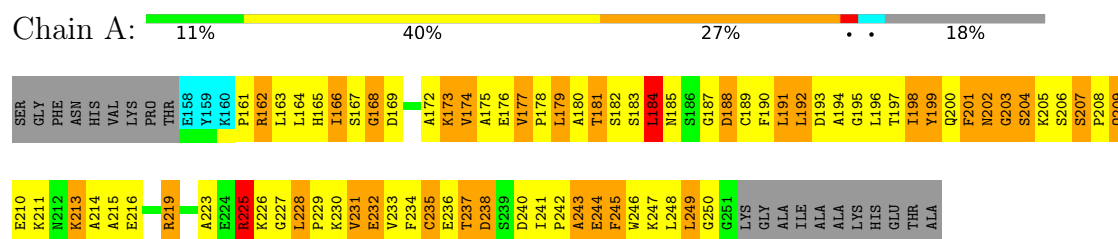
4.2.14 Score per residue for model 14

● Molecule 1: SEVERIN



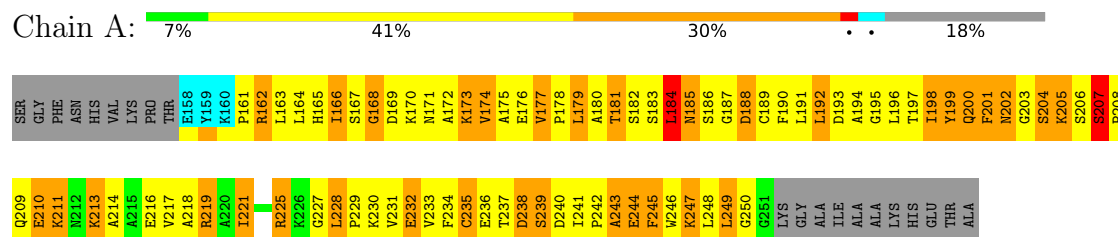
4.2.15 Score per residue for model 15

● Molecule 1: SEVERIN



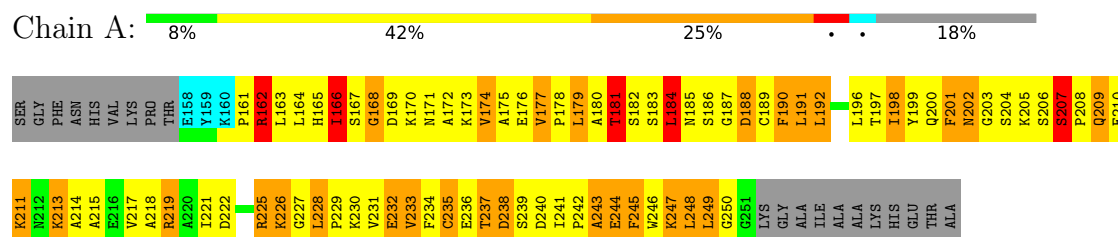
4.2.16 Score per residue for model 16

● Molecule 1: SEVERIN



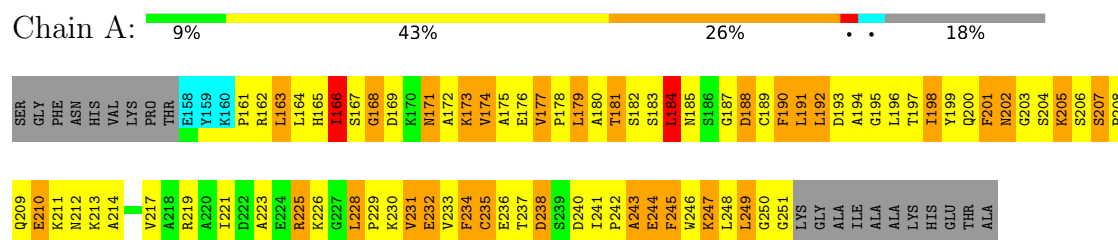
4.2.17 Score per residue for model 17

● Molecule 1: SEVERIN



4.2.18 Score per residue for model 18

• Molecule 1: SEVERIN



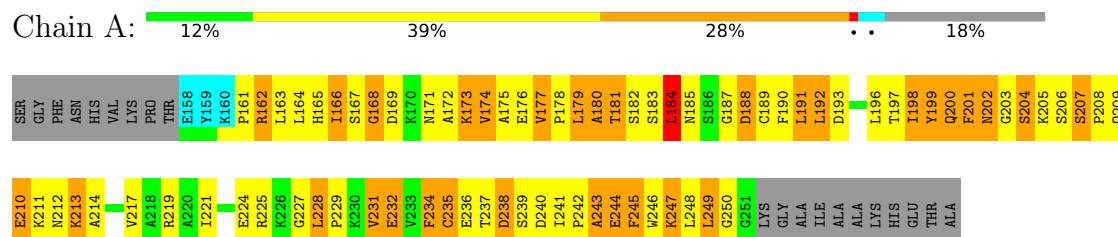
4.2.19 Score per residue for model 19

• Molecule 1: SEVERIN



4.2.20 Score per residue for model 20

• Molecule 1: SEVERIN



5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

Of the ? calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: ?.

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

No chemical shift data was provided.

6 Model quality [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	1.52±0.01	2±1/699 (0.3± 0.1%)	1.41±0.02	3±1/943 (0.4± 0.1%)
All	All	1.52	36/13980 (0.3%)	1.41	68/18860 (0.4%)

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	2.9±0.3
All	All	0	58

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	201	PHE	C-N	-6.36	1.25	1.33	18	20
1	A	203	GLY	CA-C	6.17	1.56	1.51	7	7
1	A	190	PHE	N-CA	6.08	1.53	1.45	18	6
1	A	235	CYS	CA-CB	5.26	1.59	1.53	9	1
1	A	173	LYS	C-N	-5.16	1.26	1.33	10	2

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	201	PHE	CA-CB-CG	-8.62	105.17	113.80	13	20
1	A	166	ILE	CB-CA-C	-7.10	103.36	111.59	5	9
1	A	202	ASN	N-CA-CB	-6.47	100.85	110.17	16	18
1	A	202	ASN	CB-CA-C	5.76	121.08	109.68	18	15
1	A	201	PHE	N-CA-C	-5.76	102.93	110.53	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	247	LYS	N-CA-C	-5.71	105.19	111.82	19	1
1	A	239	SER	N-CA-C	-5.56	106.87	113.38	11	1
1	A	246	TRP	CA-CB-CG	-5.35	103.43	113.60	19	1
1	A	205	LYS	N-CA-C	-5.24	107.18	113.21	7	1

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	219	ARG	Sidechain	20
1	A	162	ARG	Sidechain	19
1	A	225	ARG	Sidechain	19

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	687	685	685	200±10
All	All	13740	13700	13700	3992

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 145.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:241:ILE:HG23	1:A:245:PHE:CD2	1.09	1.81	11	2
1:A:163:LEU:HD11	1:A:249:LEU:HD22	1.05	1.24	12	13
1:A:179:LEU:HD12	1:A:180:ALA:N	1.04	1.66	19	20
1:A:163:LEU:HD12	1:A:180:ALA:HB3	1.04	1.12	2	3
1:A:180:ALA:O	1:A:249:LEU:HD11	1.03	1.53	9	9
1:A:241:ILE:HG21	1:A:246:TRP:CD2	1.01	1.91	11	2
1:A:164:LEU:HD13	1:A:165:HIS:N	0.99	1.72	13	18
1:A:202:ASN:HB2	1:A:234:PHE:C	0.99	1.82	4	20
1:A:202:ASN:C	1:A:235:CYS:HA	0.98	1.82	3	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:241:ILE:HG23	1:A:246:TRP:CD2	0.98	1.93	9	18
1:A:249:LEU:HD12	1:A:249:LEU:C	0.98	1.84	4	14
1:A:163:LEU:HD11	1:A:249:LEU:CD2	0.98	1.87	16	8
1:A:192:LEU:C	1:A:192:LEU:HD12	0.95	1.85	16	11
1:A:192:LEU:HD12	1:A:192:LEU:C	0.95	1.84	2	9
1:A:249:LEU:HD12	1:A:249:LEU:O	0.95	1.62	14	18
1:A:249:LEU:C	1:A:249:LEU:HD12	0.94	1.87	6	3
1:A:163:LEU:O	1:A:177:VAL:HG13	0.93	1.63	15	16
1:A:205:LYS:CG	1:A:237:THR:HG21	0.93	1.94	20	7
1:A:165:HIS:C	1:A:166:ILE:HD13	0.91	1.90	12	19
1:A:200:GLN:OE1	1:A:233:VAL:HG13	0.91	1.64	15	1
1:A:162:ARG:C	1:A:163:LEU:HD22	0.90	1.91	10	13
1:A:179:LEU:HD12	1:A:179:LEU:C	0.90	1.91	8	20
1:A:240:ASP:C	1:A:241:ILE:HD12	0.90	1.90	4	2
1:A:166:ILE:HG21	1:A:214:ALA:HB2	0.89	1.42	12	17
1:A:192:LEU:O	1:A:192:LEU:HD12	0.89	1.68	1	2
1:A:197:THR:C	1:A:198:ILE:HD12	0.88	1.94	1	13
1:A:239:SER:O	1:A:241:ILE:HD12	0.87	1.67	13	2
1:A:200:GLN:HB2	1:A:233:VAL:HG22	0.87	1.47	3	6
1:A:163:LEU:HD12	1:A:180:ALA:CB	0.86	2.00	2	2
1:A:164:LEU:HD23	1:A:165:HIS:N	0.85	1.86	16	2
1:A:166:ILE:HD12	1:A:174:VAL:HG23	0.85	1.49	16	19
1:A:181:THR:HG21	1:A:250:GLY:HA3	0.85	1.49	1	16
1:A:163:LEU:CD1	1:A:180:ALA:HB3	0.84	2.00	2	3
1:A:200:GLN:CB	1:A:233:VAL:HG22	0.83	2.03	15	6
1:A:202:ASN:HB3	1:A:235:CYS:CA	0.83	2.02	18	19
1:A:200:GLN:HB2	1:A:233:VAL:HG12	0.83	1.50	12	8
1:A:165:HIS:O	1:A:174:VAL:HG23	0.82	1.74	11	20
1:A:202:ASN:HB3	1:A:235:CYS:CB	0.82	2.05	18	20
1:A:184:LEU:HD11	1:A:190:PHE:CD2	0.82	2.10	16	2
1:A:181:THR:HG21	1:A:250:GLY:CA	0.82	2.05	20	9
1:A:245:PHE:CE1	1:A:249:LEU:HD23	0.81	2.10	8	5
1:A:163:LEU:CD1	1:A:249:LEU:HD22	0.81	2.03	12	12
1:A:163:LEU:HB3	1:A:177:VAL:HG12	0.81	1.50	17	4
1:A:164:LEU:HD12	1:A:166:ILE:CD1	0.81	2.06	1	18
1:A:243:ALA:HB1	1:A:247:LYS:HE2	0.81	1.51	3	1
1:A:166:ILE:HD13	1:A:166:ILE:N	0.81	1.91	1	18
1:A:181:THR:HG23	1:A:249:LEU:HD11	0.81	1.53	11	1
1:A:197:THR:O	1:A:198:ILE:HD13	0.81	1.76	12	2
1:A:172:ALA:HB2	1:A:209:GLN:HB3	0.80	1.52	6	20
1:A:205:LYS:HG3	1:A:237:THR:HG21	0.80	1.53	3	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:180:ALA:HB1	1:A:183:SER:HB3	0.80	1.53	3	6
1:A:163:LEU:O	1:A:177:VAL:HG22	0.80	1.76	16	13
1:A:213:LYS:O	1:A:217:VAL:HG23	0.79	1.76	12	6
1:A:163:LEU:HD12	1:A:249:LEU:HD22	0.79	1.53	5	1
1:A:241:ILE:HA	1:A:246:TRP:NE1	0.79	1.93	17	18
1:A:204:SER:CB	1:A:237:THR:HG23	0.79	2.08	9	4
1:A:184:LEU:HD22	1:A:246:TRP:CH2	0.79	2.12	12	8
1:A:192:LEU:HD12	1:A:192:LEU:O	0.78	1.79	17	18
1:A:203:GLY:N	1:A:235:CYS:SG	0.78	2.56	11	20
1:A:163:LEU:CB	1:A:177:VAL:HG12	0.78	2.08	6	4
1:A:163:LEU:HB3	1:A:177:VAL:HG22	0.78	1.55	2	12
1:A:164:LEU:HD12	1:A:166:ILE:HD11	0.78	1.52	1	18
1:A:204:SER:HB3	1:A:237:THR:HG23	0.78	1.55	9	1
1:A:200:GLN:OE1	1:A:214:ALA:HB1	0.77	1.79	20	2
1:A:202:ASN:HB3	1:A:235:CYS:SG	0.76	2.19	9	20
1:A:181:THR:HG23	1:A:249:LEU:CB	0.76	2.09	19	1
1:A:205:LYS:HG2	1:A:237:THR:HG21	0.76	1.57	17	8
1:A:166:ILE:HD12	1:A:174:VAL:CG2	0.75	2.11	8	18
1:A:249:LEU:HD12	1:A:250:GLY:N	0.75	1.95	11	2
1:A:179:LEU:HD13	1:A:249:LEU:HD22	0.75	1.59	19	1
1:A:204:SER:N	1:A:237:THR:HG23	0.75	1.97	19	11
1:A:179:LEU:HD21	1:A:249:LEU:CD2	0.75	2.12	18	2
1:A:205:LYS:N	1:A:237:THR:CG2	0.75	2.50	13	6
1:A:192:LEU:C	1:A:192:LEU:CD1	0.74	2.59	2	20
1:A:163:LEU:HD22	1:A:163:LEU:N	0.74	1.97	11	7
1:A:217:VAL:HG12	1:A:221:ILE:HD11	0.74	1.59	8	12
1:A:200:GLN:CB	1:A:233:VAL:HG12	0.74	2.12	9	7
1:A:180:ALA:O	1:A:249:LEU:HD21	0.74	1.83	17	2
1:A:239:SER:O	1:A:241:ILE:N	0.73	2.22	13	4
1:A:180:ALA:O	1:A:249:LEU:CD1	0.73	2.35	9	9
1:A:241:ILE:HG23	1:A:246:TRP:CE2	0.73	2.18	19	18
1:A:163:LEU:HD11	1:A:249:LEU:HD21	0.72	1.59	16	3
1:A:163:LEU:CB	1:A:177:VAL:HG22	0.72	2.13	5	12
1:A:162:ARG:O	1:A:163:LEU:HD13	0.72	1.84	5	2
1:A:175:ALA:O	1:A:177:VAL:HG12	0.71	1.86	15	3
1:A:166:ILE:HG21	1:A:214:ALA:CB	0.71	2.16	12	12
1:A:249:LEU:C	1:A:249:LEU:CD1	0.70	2.63	6	15
1:A:245:PHE:HE1	1:A:249:LEU:HD23	0.70	1.44	9	5
1:A:180:ALA:O	1:A:181:THR:HG23	0.70	1.86	11	1
1:A:179:LEU:CD2	1:A:249:LEU:HD22	0.70	2.17	18	2
1:A:184:LEU:HD13	1:A:246:TRP:CH2	0.70	2.21	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:189:CYS:HA	1:A:202:ASN:HA	0.70	1.62	3	20
1:A:163:LEU:HD13	1:A:178:PRO:HA	0.70	1.64	15	2
1:A:181:THR:HG23	1:A:249:LEU:CD1	0.69	2.17	11	1
1:A:187:GLY:O	1:A:206:SER:HA	0.69	1.88	14	7
1:A:187:GLY:O	1:A:206:SER:CB	0.69	2.40	9	6
1:A:191:LEU:HD11	1:A:198:ILE:HG23	0.69	1.64	1	7
1:A:207:SER:O	1:A:211:LYS:CB	0.68	2.42	16	7
1:A:202:ASN:HB2	1:A:235:CYS:N	0.68	2.03	4	7
1:A:245:PHE:CD1	1:A:245:PHE:C	0.68	2.70	4	8
1:A:163:LEU:O	1:A:177:VAL:HG12	0.68	1.88	6	4
1:A:166:ILE:CG1	1:A:214:ALA:HB2	0.68	2.19	8	3
1:A:164:LEU:HD13	1:A:165:HIS:H	0.68	1.48	12	18
1:A:241:ILE:HG23	1:A:246:TRP:CG	0.68	2.23	9	18
1:A:187:GLY:CA	1:A:205:LYS:HB2	0.68	2.19	3	20
1:A:192:LEU:HD22	1:A:249:LEU:HB2	0.68	1.64	8	1
1:A:200:GLN:OE1	1:A:218:ALA:HB2	0.67	1.89	9	2
1:A:234:PHE:CD1	1:A:234:PHE:N	0.67	2.63	3	5
1:A:165:HIS:CE1	1:A:167:SER:HG	0.67	2.08	8	6
1:A:180:ALA:O	1:A:181:THR:HB	0.67	1.90	10	9
1:A:241:ILE:HG21	1:A:246:TRP:CE2	0.67	2.24	11	2
1:A:179:LEU:C	1:A:179:LEU:CD1	0.66	2.67	13	20
1:A:201:PHE:O	1:A:202:ASN:OD1	0.66	2.12	11	2
1:A:163:LEU:HD23	1:A:178:PRO:C	0.66	2.16	5	1
1:A:176:GLU:O	1:A:177:VAL:HG12	0.66	1.91	14	8
1:A:162:ARG:O	1:A:163:LEU:HD23	0.66	1.91	3	2
1:A:187:GLY:O	1:A:203:GLY:O	0.66	2.14	9	9
1:A:163:LEU:N	1:A:163:LEU:HD22	0.66	2.06	5	1
1:A:184:LEU:HD22	1:A:246:TRP:HH2	0.66	1.50	4	3
1:A:163:LEU:HB2	1:A:178:PRO:O	0.65	1.91	10	17
1:A:162:ARG:O	1:A:163:LEU:HD22	0.65	1.91	16	8
1:A:202:ASN:O	1:A:235:CYS:HA	0.65	1.90	15	20
1:A:177:VAL:HG11	1:A:190:PHE:HZ	0.65	1.50	17	3
1:A:241:ILE:CG2	1:A:245:PHE:CD2	0.65	2.77	4	2
1:A:189:CYS:SG	1:A:202:ASN:ND2	0.65	2.70	18	13
1:A:207:SER:HB2	1:A:208:PRO:HD2	0.65	1.68	15	13
1:A:245:PHE:C	1:A:245:PHE:CD1	0.65	2.74	3	9
1:A:167:SER:CB	1:A:188:ASP:CB	0.65	2.75	19	20
1:A:181:THR:HB	1:A:249:LEU:HD11	0.65	1.69	16	6
1:A:187:GLY:HA2	1:A:205:LYS:HB2	0.65	1.67	20	18
1:A:201:PHE:CG	1:A:202:ASN:N	0.65	2.65	18	2
1:A:163:LEU:CD2	1:A:249:LEU:HD22	0.65	2.22	13	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:191:LEU:HD11	1:A:198:ILE:CG2	0.65	2.22	1	9
1:A:164:LEU:HD23	1:A:165:HIS:H	0.64	1.49	3	2
1:A:199:TYR:CD2	1:A:232:GLU:CG	0.64	2.80	20	18
1:A:199:TYR:CD2	1:A:232:GLU:HG3	0.64	2.26	20	18
1:A:180:ALA:HB3	1:A:183:SER:CB	0.64	2.22	19	1
1:A:189:CYS:SG	1:A:202:ASN:CG	0.64	2.80	11	18
1:A:197:THR:O	1:A:198:ILE:HD12	0.64	1.92	1	10
1:A:202:ASN:CB	1:A:235:CYS:CA	0.64	2.76	4	20
1:A:177:VAL:HG11	1:A:190:PHE:CZ	0.64	2.27	17	2
1:A:164:LEU:HD22	1:A:175:ALA:C	0.64	2.17	15	10
1:A:181:THR:OG1	1:A:245:PHE:CE1	0.64	2.50	14	4
1:A:228:LEU:HD12	1:A:228:LEU:O	0.64	1.93	9	8
1:A:164:LEU:O	1:A:190:PHE:CE1	0.64	2.51	15	5
1:A:241:ILE:HG21	1:A:246:TRP:CG	0.64	2.27	11	2
1:A:180:ALA:HB3	1:A:183:SER:HB3	0.64	1.70	19	1
1:A:166:ILE:CD1	1:A:166:ILE:N	0.63	2.61	11	4
1:A:165:HIS:CD2	1:A:190:PHE:CD2	0.63	2.87	15	2
1:A:167:SER:HB2	1:A:188:ASP:CB	0.63	2.24	8	20
1:A:245:PHE:CD2	1:A:246:TRP:NE1	0.63	2.66	2	9
1:A:200:GLN:NE2	1:A:202:ASN:OD1	0.63	2.32	4	5
1:A:201:PHE:CE1	1:A:202:ASN:O	0.63	2.51	4	14
1:A:164:LEU:CD1	1:A:166:ILE:CD1	0.63	2.76	13	18
1:A:199:TYR:CD1	1:A:199:TYR:N	0.63	2.66	8	11
1:A:163:LEU:HD21	1:A:249:LEU:HD22	0.62	1.70	4	4
1:A:202:ASN:HB2	1:A:234:PHE:O	0.62	1.94	18	20
1:A:199:TYR:N	1:A:199:TYR:CD1	0.62	2.67	4	7
1:A:181:THR:HG23	1:A:249:LEU:HB3	0.62	1.71	19	1
1:A:237:THR:O	1:A:238:ASP:C	0.62	2.42	13	1
1:A:232:GLU:HG3	1:A:234:PHE:CE2	0.62	2.29	1	1
1:A:218:ALA:HA	1:A:221:ILE:HG12	0.62	1.72	16	5
1:A:201:PHE:CZ	1:A:240:ASP:HB2	0.62	2.30	4	12
1:A:232:GLU:CG	1:A:232:GLU:O	0.62	2.48	14	2
1:A:201:PHE:CZ	1:A:202:ASN:O	0.62	2.53	11	2
1:A:188:ASP:O	1:A:203:GLY:N	0.62	2.33	3	13
1:A:207:SER:O	1:A:211:LYS:HB2	0.62	1.95	17	9
1:A:165:HIS:CE1	1:A:167:SER:OG	0.62	2.53	14	17
1:A:189:CYS:SG	1:A:202:ASN:OD1	0.61	2.58	9	2
1:A:204:SER:H	1:A:237:THR:HG23	0.61	1.54	19	1
1:A:191:LEU:CD1	1:A:198:ILE:CG2	0.61	2.78	1	16
1:A:228:LEU:N	1:A:229:PRO:CD	0.61	2.64	10	20
1:A:165:HIS:HB2	1:A:177:VAL:HG11	0.61	1.71	19	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:165:HIS:CE1	1:A:185:ASN:CG	0.61	2.79	1	3
1:A:238:ASP:CG	1:A:239:SER:N	0.61	2.59	13	1
1:A:187:GLY:HA2	1:A:205:LYS:CB	0.61	2.26	15	12
1:A:192:LEU:HD22	1:A:249:LEU:CB	0.61	2.26	8	1
1:A:167:SER:O	1:A:173:LYS:O	0.61	2.18	10	20
1:A:181:THR:OG1	1:A:245:PHE:CZ	0.61	2.54	16	4
1:A:205:LYS:CG	1:A:237:THR:CG2	0.61	2.79	11	4
1:A:166:ILE:HB	1:A:189:CYS:O	0.60	1.96	11	19
1:A:176:GLU:C	1:A:177:VAL:CG1	0.60	2.74	1	12
1:A:200:GLN:CD	1:A:214:ALA:HB1	0.60	2.21	16	1
1:A:162:ARG:C	1:A:163:LEU:HD13	0.60	2.21	5	1
1:A:192:LEU:HD22	1:A:249:LEU:HB3	0.60	1.72	5	3
1:A:241:ILE:HB	1:A:246:TRP:NE1	0.60	2.11	4	2
1:A:185:ASN:OD1	1:A:190:PHE:CE1	0.60	2.54	3	4
1:A:207:SER:N	1:A:208:PRO:CD	0.60	2.64	16	7
1:A:166:ILE:N	1:A:166:ILE:CD1	0.60	2.65	9	15
1:A:166:ILE:N	1:A:166:ILE:HD13	0.60	2.12	11	2
1:A:181:THR:CG2	1:A:250:GLY:CA	0.60	2.79	20	8
1:A:191:LEU:CD1	1:A:198:ILE:HG23	0.60	2.25	5	16
1:A:189:CYS:HB3	1:A:202:ASN:OD1	0.60	1.96	7	7
1:A:176:GLU:C	1:A:177:VAL:HG12	0.60	2.22	1	13
1:A:241:ILE:HD13	1:A:246:TRP:CZ2	0.60	2.32	4	2
1:A:200:GLN:HB3	1:A:233:VAL:HG22	0.60	1.74	15	1
1:A:218:ALA:HA	1:A:221:ILE:HD12	0.60	1.72	1	1
1:A:200:GLN:NE2	1:A:214:ALA:HB1	0.60	2.12	8	11
1:A:163:LEU:N	1:A:163:LEU:CD2	0.60	2.65	14	5
1:A:179:LEU:CD2	1:A:190:PHE:CE1	0.60	2.85	15	1
1:A:165:HIS:CD2	1:A:185:ASN:CG	0.59	2.80	3	2
1:A:190:PHE:O	1:A:201:PHE:O	0.59	2.19	18	2
1:A:204:SER:CA	1:A:235:CYS:O	0.59	2.49	7	7
1:A:184:LEU:CD2	1:A:246:TRP:CH2	0.59	2.85	12	1
1:A:179:LEU:O	1:A:249:LEU:HD13	0.59	1.97	15	2
1:A:166:ILE:HG13	1:A:214:ALA:HB2	0.59	1.73	8	3
1:A:202:ASN:C	1:A:235:CYS:SG	0.59	2.86	18	11
1:A:187:GLY:O	1:A:206:SER:N	0.59	2.35	20	13
1:A:164:LEU:HD22	1:A:175:ALA:O	0.59	1.98	10	13
1:A:207:SER:CB	1:A:208:PRO:HD2	0.59	2.27	18	13
1:A:163:LEU:HD22	1:A:179:LEU:HA	0.59	1.74	13	2
1:A:240:ASP:O	1:A:241:ILE:HG13	0.59	1.97	9	2
1:A:184:LEU:CD1	1:A:190:PHE:CD2	0.59	2.85	16	1
1:A:166:ILE:HG22	1:A:210:GLU:HA	0.59	1.74	3	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:164:LEU:O	1:A:190:PHE:CE2	0.59	2.56	18	4
1:A:192:LEU:HD12	1:A:193:ASP:N	0.59	2.11	16	12
1:A:180:ALA:O	1:A:181:THR:CB	0.59	2.50	8	10
1:A:165:HIS:NE2	1:A:185:ASN:ND2	0.59	2.51	8	12
1:A:165:HIS:CE1	1:A:185:ASN:OD1	0.59	2.56	12	1
1:A:199:TYR:CE2	1:A:244:GLU:CD	0.58	2.81	3	1
1:A:189:CYS:HB2	1:A:210:GLU:HB2	0.58	1.73	17	7
1:A:174:VAL:HG11	1:A:213:LYS:HG3	0.58	1.75	16	11
1:A:201:PHE:CD1	1:A:201:PHE:C	0.58	2.78	15	7
1:A:184:LEU:HD13	1:A:246:TRP:CZ3	0.58	2.34	11	2
1:A:192:LEU:HD23	1:A:249:LEU:HD23	0.58	1.72	7	1
1:A:180:ALA:O	1:A:181:THR:CG2	0.58	2.50	11	1
1:A:163:LEU:O	1:A:177:VAL:CB	0.58	2.51	6	4
1:A:200:GLN:HE21	1:A:214:ALA:HB1	0.58	1.58	7	7
1:A:163:LEU:CB	1:A:178:PRO:O	0.58	2.51	14	10
1:A:179:LEU:HD12	1:A:180:ALA:CA	0.58	2.27	19	14
1:A:245:PHE:CE2	1:A:246:TRP:CE2	0.58	2.92	20	8
1:A:249:LEU:CD1	1:A:249:LEU:C	0.58	2.77	9	1
1:A:164:LEU:HD22	1:A:176:GLU:HA	0.58	1.75	12	17
1:A:232:GLU:N	1:A:232:GLU:CD	0.58	2.61	2	9
1:A:189:CYS:SG	1:A:202:ASN:HB3	0.58	2.39	4	8
1:A:163:LEU:HB2	1:A:177:VAL:HG22	0.58	1.74	5	1
1:A:179:LEU:O	1:A:249:LEU:CD1	0.58	2.52	15	2
1:A:187:GLY:HA2	1:A:205:LYS:C	0.58	2.24	7	7
1:A:228:LEU:HD12	1:A:228:LEU:C	0.58	2.24	17	3
1:A:180:ALA:H	1:A:249:LEU:HD13	0.58	1.57	11	2
1:A:202:ASN:HB3	1:A:235:CYS:HA	0.58	1.76	18	2
1:A:163:LEU:CD2	1:A:249:LEU:HD13	0.58	2.28	15	2
1:A:165:HIS:C	1:A:166:ILE:CD1	0.57	2.77	11	18
1:A:231:VAL:C	1:A:232:GLU:CD	0.57	2.72	11	18
1:A:201:PHE:C	1:A:201:PHE:CD1	0.57	2.80	19	7
1:A:204:SER:CB	1:A:235:CYS:O	0.57	2.52	13	8
1:A:164:LEU:HD13	1:A:164:LEU:C	0.57	2.22	13	18
1:A:187:GLY:O	1:A:206:SER:CA	0.57	2.52	12	7
1:A:165:HIS:CG	1:A:190:PHE:CE2	0.57	2.92	15	2
1:A:201:PHE:CE1	1:A:240:ASP:HB2	0.57	2.35	11	5
1:A:163:LEU:O	1:A:177:VAL:CG1	0.57	2.53	6	12
1:A:174:VAL:HG21	1:A:217:VAL:HG21	0.57	1.74	12	2
1:A:164:LEU:CD2	1:A:176:GLU:HA	0.57	2.29	13	17
1:A:165:HIS:NE2	1:A:167:SER:OG	0.57	2.37	13	19
1:A:201:PHE:CZ	1:A:240:ASP:OD2	0.57	2.58	6	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:165:HIS:CD2	1:A:185:ASN:OD1	0.57	2.57	13	3
1:A:228:LEU:N	1:A:229:PRO:HD2	0.57	2.15	1	20
1:A:179:LEU:HD11	1:A:184:LEU:HD12	0.57	1.76	15	2
1:A:185:ASN:OD1	1:A:190:PHE:CD1	0.56	2.58	13	4
1:A:201:PHE:CE2	1:A:241:ILE:HD11	0.56	2.35	4	1
1:A:232:GLU:CD	1:A:232:GLU:N	0.56	2.63	9	9
1:A:187:GLY:O	1:A:206:SER:OG	0.56	2.21	16	11
1:A:210:GLU:O	1:A:214:ALA:CB	0.56	2.54	1	3
1:A:243:ALA:O	1:A:247:LYS:CB	0.56	2.54	20	15
1:A:179:LEU:CD2	1:A:249:LEU:CD2	0.56	2.80	18	2
1:A:163:LEU:HB3	1:A:177:VAL:CG2	0.56	2.30	9	6
1:A:181:THR:OG1	1:A:249:LEU:HG	0.56	2.01	8	3
1:A:163:LEU:HD13	1:A:249:LEU:HD22	0.56	1.78	3	2
1:A:163:LEU:O	1:A:177:VAL:CG2	0.56	2.54	16	2
1:A:163:LEU:CD2	1:A:163:LEU:N	0.56	2.69	1	8
1:A:202:ASN:CB	1:A:235:CYS:HA	0.56	2.31	11	20
1:A:180:ALA:O	1:A:181:THR:OG1	0.56	2.21	11	1
1:A:166:ILE:HG23	1:A:213:LYS:HB3	0.56	1.78	16	1
1:A:165:HIS:CB	1:A:177:VAL:HG11	0.56	2.30	19	5
1:A:202:ASN:CB	1:A:234:PHE:C	0.56	2.79	14	18
1:A:166:ILE:HG21	1:A:214:ALA:N	0.56	2.16	17	6
1:A:168:GLY:O	1:A:169:ASP:C	0.56	2.49	1	20
1:A:237:THR:O	1:A:240:ASP:CG	0.56	2.49	19	19
1:A:196:LEU:O	1:A:229:PRO:CB	0.55	2.54	1	19
1:A:167:SER:HA	1:A:210:GLU:HB3	0.55	1.78	20	6
1:A:241:ILE:CG1	1:A:246:TRP:CZ2	0.55	2.90	4	2
1:A:201:PHE:HA	1:A:234:PHE:CE1	0.55	2.36	18	6
1:A:174:VAL:HG12	1:A:213:LYS:HG2	0.55	1.77	1	1
1:A:189:CYS:SG	1:A:202:ASN:CB	0.55	2.95	4	12
1:A:217:VAL:CG1	1:A:221:ILE:HD11	0.55	2.31	2	3
1:A:225:ARG:C	1:A:226:LYS:CD	0.55	2.80	5	8
1:A:187:GLY:CA	1:A:205:LYS:CD	0.55	2.85	3	1
1:A:197:THR:O	1:A:198:ILE:CD1	0.55	2.55	17	11
1:A:165:HIS:NE2	1:A:185:ASN:OD1	0.55	2.40	5	6
1:A:241:ILE:CB	1:A:246:TRP:CE2	0.55	2.90	4	2
1:A:217:VAL:O	1:A:221:ILE:HD12	0.55	2.02	8	2
1:A:164:LEU:CD2	1:A:175:ALA:C	0.55	2.80	15	10
1:A:209:GLN:CD	1:A:209:GLN:N	0.55	2.65	2	4
1:A:165:HIS:NE2	1:A:185:ASN:CG	0.55	2.65	11	11
1:A:164:LEU:O	1:A:190:PHE:CD1	0.54	2.60	19	5
1:A:163:LEU:CG	1:A:178:PRO:O	0.54	2.55	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:167:SER:HB2	1:A:188:ASP:CG	0.54	2.28	11	20
1:A:226:LYS:CD	1:A:226:LYS:N	0.54	2.70	4	8
1:A:166:ILE:HG22	1:A:210:GLU:CA	0.54	2.33	3	1
1:A:166:ILE:CG2	1:A:214:ALA:HB2	0.54	2.30	17	6
1:A:199:TYR:CG	1:A:232:GLU:OE2	0.54	2.60	14	2
1:A:180:ALA:C	1:A:249:LEU:HD11	0.54	2.25	14	6
1:A:179:LEU:HD23	1:A:190:PHE:CE2	0.54	2.37	18	1
1:A:162:ARG:C	1:A:163:LEU:CD2	0.54	2.79	17	8
1:A:189:CYS:HB3	1:A:202:ASN:ND2	0.54	2.18	2	2
1:A:165:HIS:CD2	1:A:185:ASN:ND2	0.54	2.76	3	1
1:A:188:ASP:N	1:A:188:ASP:OD1	0.54	2.41	6	3
1:A:163:LEU:HG	1:A:179:LEU:HA	0.54	1.77	19	7
1:A:164:LEU:O	1:A:190:PHE:CD2	0.54	2.60	11	4
1:A:174:VAL:HG11	1:A:213:LYS:CG	0.54	2.32	16	4
1:A:174:VAL:CG1	1:A:213:LYS:HD2	0.54	2.33	5	2
1:A:239:SER:O	1:A:241:ILE:CD1	0.54	2.53	9	2
1:A:179:LEU:CD1	1:A:180:ALA:O	0.54	2.56	11	1
1:A:166:ILE:HG21	1:A:214:ALA:CA	0.54	2.33	17	3
1:A:206:SER:OG	1:A:210:GLU:OE1	0.54	2.26	3	6
1:A:240:ASP:OD1	1:A:241:ILE:CD1	0.54	2.56	17	12
1:A:241:ILE:HG12	1:A:246:TRP:CZ2	0.54	2.37	4	2
1:A:180:ALA:O	1:A:249:LEU:CD2	0.54	2.54	17	2
1:A:200:GLN:CD	1:A:202:ASN:OD1	0.54	2.51	20	2
1:A:221:ILE:N	1:A:221:ILE:HD13	0.54	2.18	16	2
1:A:242:PRO:HD2	1:A:246:TRP:HE1	0.54	1.63	18	18
1:A:193:ASP:OD1	1:A:198:ILE:CD1	0.54	2.56	2	1
1:A:199:TYR:CZ	1:A:244:GLU:OE2	0.54	2.61	2	2
1:A:167:SER:HB3	1:A:188:ASP:HB2	0.54	1.79	3	18
1:A:201:PHE:O	1:A:201:PHE:CG	0.54	2.61	4	10
1:A:223:ALA:O	1:A:226:LYS:CE	0.54	2.56	3	1
1:A:241:ILE:CG1	1:A:245:PHE:CE2	0.54	2.91	4	2
1:A:166:ILE:HG13	1:A:214:ALA:CB	0.54	2.33	8	5
1:A:197:THR:HG22	1:A:198:ILE:N	0.54	2.18	15	16
1:A:206:SER:CB	1:A:210:GLU:OE2	0.54	2.56	17	2
1:A:192:LEU:HD23	1:A:245:PHE:CD1	0.53	2.37	5	5
1:A:202:ASN:CB	1:A:235:CYS:SG	0.53	2.96	18	9
1:A:165:HIS:HB2	1:A:190:PHE:CE2	0.53	2.38	4	2
1:A:201:PHE:CG	1:A:201:PHE:O	0.53	2.60	1	1
1:A:246:TRP:O	1:A:250:GLY:CA	0.53	2.56	7	6
1:A:163:LEU:HB2	1:A:177:VAL:HG12	0.53	1.79	3	2
1:A:188:ASP:OD1	1:A:188:ASP:N	0.53	2.42	19	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:164:LEU:HD22	1:A:166:ILE:CD1	0.53	2.33	16	2
1:A:181:THR:HG22	1:A:246:TRP:CE3	0.53	2.39	15	5
1:A:184:LEU:HD11	1:A:190:PHE:CG	0.53	2.38	16	2
1:A:179:LEU:HD23	1:A:190:PHE:CE1	0.53	2.38	15	1
1:A:165:HIS:CD2	1:A:190:PHE:CE2	0.53	2.97	15	2
1:A:181:THR:OG1	1:A:250:GLY:CA	0.53	2.57	18	1
1:A:183:SER:O	1:A:184:LEU:O	0.53	2.27	13	20
1:A:205:LYS:HG3	1:A:237:THR:CG2	0.53	2.33	11	3
1:A:201:PHE:CD2	1:A:201:PHE:O	0.53	2.61	9	2
1:A:238:ASP:O	1:A:240:ASP:N	0.53	2.42	16	9
1:A:193:ASP:OD1	1:A:198:ILE:CG1	0.53	2.56	15	3
1:A:206:SER:O	1:A:210:GLU:OE2	0.53	2.26	17	1
1:A:202:ASN:CB	1:A:234:PHE:O	0.53	2.56	18	9
1:A:217:VAL:O	1:A:221:ILE:CD1	0.53	2.57	8	2
1:A:165:HIS:CB	1:A:190:PHE:CE1	0.53	2.92	11	3
1:A:247:LYS:CG	1:A:248:LEU:N	0.53	2.72	2	1
1:A:163:LEU:HB2	1:A:177:VAL:O	0.53	2.04	15	6
1:A:218:ALA:CA	1:A:221:ILE:HG12	0.53	2.34	16	5
1:A:167:SER:HB3	1:A:188:ASP:CB	0.52	2.32	19	9
1:A:167:SER:CB	1:A:188:ASP:HB3	0.52	2.33	19	7
1:A:244:GLU:HG3	1:A:245:PHE:N	0.52	2.19	7	4
1:A:163:LEU:CD1	1:A:249:LEU:CD2	0.52	2.86	2	1
1:A:187:GLY:HA3	1:A:205:LYS:CD	0.52	2.34	3	1
1:A:165:HIS:CD2	1:A:190:PHE:CE1	0.52	2.97	11	3
1:A:200:GLN:HB3	1:A:233:VAL:HG12	0.52	1.81	18	2
1:A:215:ALA:O	1:A:219:ARG:CD	0.52	2.57	9	1
1:A:240:ASP:OD1	1:A:241:ILE:HD12	0.52	2.04	11	1
1:A:179:LEU:CG	1:A:249:LEU:HD22	0.52	2.34	15	2
1:A:188:ASP:HA	1:A:206:SER:OG	0.52	2.04	20	9
1:A:242:PRO:O	1:A:244:GLU:N	0.52	2.43	17	19
1:A:206:SER:OG	1:A:210:GLU:CD	0.52	2.52	20	7
1:A:163:LEU:CB	1:A:177:VAL:CG2	0.52	2.87	5	2
1:A:167:SER:HB2	1:A:188:ASP:HB3	0.52	1.79	12	9
1:A:187:GLY:O	1:A:206:SER:HB3	0.52	2.05	9	6
1:A:241:ILE:HG12	1:A:245:PHE:CE2	0.52	2.40	4	1
1:A:241:ILE:CD1	1:A:246:TRP:CZ2	0.52	2.92	4	2
1:A:180:ALA:O	1:A:181:THR:C	0.52	2.51	15	3
1:A:207:SER:O	1:A:211:LYS:HG3	0.52	2.04	17	1
1:A:207:SER:O	1:A:211:LYS:HB3	0.52	2.04	8	5
1:A:214:ALA:O	1:A:215:ALA:C	0.52	2.53	3	13
1:A:162:ARG:C	1:A:163:LEU:HD23	0.52	2.30	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:218:ALA:HA	1:A:221:ILE:CG1	0.52	2.34	5	5
1:A:239:SER:O	1:A:240:ASP:C	0.52	2.52	9	3
1:A:165:HIS:HA	1:A:190:PHE:CD1	0.52	2.40	3	3
1:A:181:THR:N	1:A:249:LEU:HD11	0.52	2.20	12	7
1:A:165:HIS:CB	1:A:190:PHE:CE2	0.52	2.93	4	2
1:A:238:ASP:C	1:A:240:ASP:N	0.52	2.66	16	19
1:A:187:GLY:CA	1:A:205:LYS:HD2	0.52	2.34	3	1
1:A:240:ASP:CB	1:A:241:ILE:HD12	0.52	2.35	4	1
1:A:176:GLU:OE1	1:A:177:VAL:N	0.52	2.42	14	1
1:A:165:HIS:CD2	1:A:166:ILE:N	0.52	2.77	18	9
1:A:241:ILE:CG2	1:A:246:TRP:CD2	0.52	2.84	4	5
1:A:163:LEU:HB3	1:A:177:VAL:CG1	0.52	2.28	17	3
1:A:192:LEU:CD2	1:A:249:LEU:CB	0.51	2.88	8	1
1:A:163:LEU:O	1:A:177:VAL:N	0.51	2.43	5	13
1:A:206:SER:O	1:A:210:GLU:CD	0.51	2.53	5	6
1:A:191:LEU:HA	1:A:200:GLN:HA	0.51	1.82	15	10
1:A:161:PRO:C	1:A:162:ARG:CG	0.51	2.82	11	8
1:A:243:ALA:O	1:A:247:LYS:CG	0.51	2.59	2	2
1:A:163:LEU:HD13	1:A:179:LEU:HA	0.51	1.80	13	2
1:A:202:ASN:CB	1:A:235:CYS:N	0.51	2.73	4	8
1:A:178:PRO:O	1:A:179:LEU:C	0.51	2.52	10	9
1:A:209:GLN:OE1	1:A:209:GLN:N	0.51	2.44	11	3
1:A:179:LEU:HD13	1:A:249:LEU:CD2	0.51	2.34	19	1
1:A:206:SER:C	1:A:210:GLU:OE2	0.51	2.54	3	6
1:A:217:VAL:HG12	1:A:221:ILE:CD1	0.51	2.36	9	2
1:A:174:VAL:CG1	1:A:213:LYS:CG	0.51	2.89	1	4
1:A:207:SER:H	1:A:208:PRO:CD	0.51	2.17	16	7
1:A:207:SER:CB	1:A:208:PRO:CD	0.51	2.89	18	13
1:A:241:ILE:HD12	1:A:241:ILE:N	0.51	2.21	19	2
1:A:165:HIS:HB2	1:A:190:PHE:CE1	0.51	2.41	11	6
1:A:188:ASP:HA	1:A:210:GLU:OE1	0.51	2.06	5	5
1:A:203:GLY:HA2	1:A:236:GLU:O	0.51	2.06	6	13
1:A:179:LEU:CD1	1:A:180:ALA:N	0.51	2.59	19	5
1:A:238:ASP:C	1:A:240:ASP:H	0.51	2.14	9	1
1:A:242:PRO:O	1:A:243:ALA:C	0.50	2.54	11	19
1:A:181:THR:CG2	1:A:250:GLY:HA3	0.50	2.35	16	10
1:A:210:GLU:O	1:A:211:LYS:C	0.50	2.54	17	1
1:A:238:ASP:O	1:A:239:SER:C	0.50	2.54	16	14
1:A:163:LEU:HD12	1:A:190:PHE:HE2	0.50	1.66	20	1
1:A:174:VAL:CG1	1:A:213:LYS:CD	0.50	2.89	5	2
1:A:236:GLU:OE2	1:A:238:ASP:O	0.50	2.30	20	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:162:ARG:CG	1:A:193:ASP:HB3	0.50	2.36	7	1
1:A:181:THR:HG23	1:A:249:LEU:HB2	0.50	1.82	19	1
1:A:240:ASP:N	1:A:240:ASP:OD1	0.50	2.45	1	3
1:A:163:LEU:CD1	1:A:179:LEU:HA	0.50	2.37	6	4
1:A:247:LYS:O	1:A:251:GLY:C	0.50	2.55	3	4
1:A:200:GLN:HE21	1:A:233:VAL:HG13	0.50	1.66	16	1
1:A:174:VAL:CG1	1:A:213:LYS:HG3	0.50	2.37	2	1
1:A:165:HIS:HB2	1:A:190:PHE:CZ	0.50	2.41	11	2
1:A:200:GLN:OE1	1:A:233:VAL:CG1	0.50	2.59	7	2
1:A:236:GLU:HG3	1:A:237:THR:N	0.50	2.21	4	17
1:A:200:GLN:HG2	1:A:202:ASN:OD1	0.50	2.07	7	1
1:A:242:PRO:HD2	1:A:246:TRP:NE1	0.50	2.22	1	13
1:A:240:ASP:OD1	1:A:241:ILE:HD11	0.50	2.06	2	5
1:A:163:LEU:O	1:A:177:VAL:O	0.50	2.30	3	6
1:A:212:ASN:O	1:A:213:LYS:C	0.50	2.55	13	5
1:A:240:ASP:CG	1:A:241:ILE:HD12	0.50	2.31	11	1
1:A:165:HIS:CG	1:A:190:PHE:CE1	0.50	2.99	11	2
1:A:241:ILE:CG2	1:A:246:TRP:CG	0.49	2.94	11	20
1:A:164:LEU:CD1	1:A:165:HIS:N	0.49	2.65	15	9
1:A:185:ASN:O	1:A:186:SER:C	0.49	2.55	16	9
1:A:179:LEU:HG	1:A:249:LEU:HD13	0.49	1.84	18	2
1:A:164:LEU:CB	1:A:191:LEU:HD23	0.49	2.37	2	1
1:A:185:ASN:N	1:A:185:ASN:ND2	0.49	2.60	2	1
1:A:231:VAL:C	1:A:232:GLU:OE1	0.49	2.55	19	10
1:A:192:LEU:CD2	1:A:249:LEU:HB3	0.49	2.38	8	5
1:A:179:LEU:HD21	1:A:249:LEU:HD22	0.49	1.73	18	1
1:A:241:ILE:CG2	1:A:246:TRP:CE2	0.49	2.95	4	2
1:A:198:ILE:C	1:A:199:TYR:CD1	0.49	2.91	15	9
1:A:163:LEU:HB2	1:A:177:VAL:CG2	0.49	2.36	5	1
1:A:236:GLU:OE2	1:A:238:ASP:OD1	0.49	2.29	11	1
1:A:205:LYS:N	1:A:237:THR:HG21	0.49	2.18	13	1
1:A:179:LEU:CD2	1:A:190:PHE:CE2	0.49	2.95	18	1
1:A:192:LEU:CD2	1:A:249:LEU:HD23	0.49	2.37	7	1
1:A:245:PHE:CD1	1:A:245:PHE:O	0.49	2.66	1	5
1:A:189:CYS:HB3	1:A:202:ASN:CG	0.49	2.32	18	5
1:A:204:SER:OG	1:A:236:GLU:C	0.49	2.56	6	2
1:A:240:ASP:C	1:A:240:ASP:OD1	0.49	2.56	15	1
1:A:181:THR:HG23	1:A:249:LEU:HG	0.49	1.82	1	2
1:A:202:ASN:O	1:A:234:PHE:O	0.49	2.30	1	8
1:A:196:LEU:O	1:A:229:PRO:HB2	0.49	2.08	9	16
1:A:179:LEU:HD12	1:A:180:ALA:H	0.49	1.61	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:243:ALA:O	1:A:247:LYS:HB2	0.49	2.07	17	9
1:A:187:GLY:C	1:A:203:GLY:O	0.49	2.56	9	1
1:A:174:VAL:CG1	1:A:213:LYS:HG2	0.49	2.38	16	3
1:A:187:GLY:HA3	1:A:205:LYS:HB2	0.49	1.84	17	6
1:A:199:TYR:CD2	1:A:232:GLU:HG2	0.49	2.42	2	13
1:A:227:GLY:O	1:A:228:LEU:C	0.49	2.56	2	16
1:A:197:THR:HG23	1:A:230:LYS:HB3	0.49	1.83	4	1
1:A:205:LYS:N	1:A:237:THR:HG22	0.49	2.22	4	2
1:A:209:GLN:NE2	1:A:209:GLN:HA	0.48	2.23	4	3
1:A:165:HIS:C	1:A:165:HIS:CD2	0.48	2.91	18	3
1:A:198:ILE:O	1:A:232:GLU:OE2	0.48	2.31	3	18
1:A:226:LYS:N	1:A:226:LYS:HD2	0.48	2.22	10	5
1:A:165:HIS:HA	1:A:190:PHE:CE1	0.48	2.43	3	2
1:A:223:ALA:O	1:A:226:LYS:NZ	0.48	2.45	3	1
1:A:217:VAL:O	1:A:221:ILE:HG12	0.48	2.08	16	5
1:A:240:ASP:OD1	1:A:240:ASP:C	0.48	2.54	19	5
1:A:219:ARG:NH2	1:A:222:ASP:OD2	0.48	2.46	17	1
1:A:210:GLU:O	1:A:214:ALA:HB3	0.48	2.08	17	2
1:A:246:TRP:HA	1:A:246:TRP:CE3	0.48	2.43	11	2
1:A:190:PHE:O	1:A:201:PHE:N	0.48	2.47	15	17
1:A:197:THR:O	1:A:198:ILE:CG1	0.48	2.61	17	11
1:A:179:LEU:CG	1:A:249:LEU:CD2	0.48	2.92	15	2
1:A:172:ALA:HB2	1:A:209:GLN:CB	0.48	2.34	18	1
1:A:188:ASP:HA	1:A:210:GLU:CD	0.48	2.33	7	6
1:A:228:LEU:C	1:A:228:LEU:CD1	0.48	2.86	17	1
1:A:166:ILE:O	1:A:210:GLU:HB2	0.48	2.09	13	11
1:A:163:LEU:CD2	1:A:179:LEU:HA	0.48	2.37	13	3
1:A:181:THR:OG1	1:A:250:GLY:HA2	0.48	2.08	18	3
1:A:246:TRP:N	1:A:246:TRP:CD1	0.48	2.82	15	2
1:A:202:ASN:N	1:A:234:PHE:O	0.48	2.47	1	8
1:A:202:ASN:CA	1:A:235:CYS:HA	0.48	2.39	20	15
1:A:163:LEU:C	1:A:177:VAL:HG12	0.48	2.34	6	3
1:A:241:ILE:HA	1:A:246:TRP:CD1	0.48	2.43	17	3
1:A:164:LEU:HD22	1:A:166:ILE:HD11	0.48	1.86	16	1
1:A:214:ALA:O	1:A:217:VAL:N	0.48	2.47	5	3
1:A:172:ALA:CB	1:A:209:GLN:HB3	0.48	2.37	17	5
1:A:179:LEU:CD1	1:A:249:LEU:HD22	0.48	2.37	19	1
1:A:164:LEU:HD11	1:A:174:VAL:HG23	0.48	1.85	20	1
1:A:168:GLY:O	1:A:171:ASN:C	0.48	2.57	12	8
1:A:164:LEU:HD11	1:A:174:VAL:CG2	0.48	2.38	20	1
1:A:209:GLN:N	1:A:209:GLN:CD	0.47	2.72	14	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:225:ARG:C	1:A:226:LYS:HD3	0.47	2.34	6	6
1:A:243:ALA:O	1:A:247:LYS:HB3	0.47	2.09	10	4
1:A:241:ILE:HG22	1:A:241:ILE:O	0.47	2.09	9	1
1:A:226:LYS:N	1:A:226:LYS:HD3	0.47	2.23	14	1
1:A:179:LEU:HG	1:A:249:LEU:HD22	0.47	1.84	15	1
1:A:189:CYS:CB	1:A:210:GLU:HG3	0.47	2.39	17	1
1:A:194:ALA:O	1:A:195:GLY:C	0.47	2.58	16	11
1:A:185:ASN:OD1	1:A:188:ASP:OD2	0.47	2.32	14	2
1:A:166:ILE:O	1:A:210:GLU:CB	0.47	2.62	18	3
1:A:204:SER:HA	1:A:235:CYS:O	0.47	2.10	19	3
1:A:205:LYS:CG	1:A:237:THR:HG22	0.47	2.40	4	1
1:A:241:ILE:HB	1:A:246:TRP:CE2	0.47	2.44	4	1
1:A:161:PRO:HA	1:A:193:ASP:O	0.47	2.10	20	4
1:A:163:LEU:CD1	1:A:178:PRO:HA	0.47	2.38	18	2
1:A:174:VAL:O	1:A:175:ALA:HB2	0.47	2.10	8	19
1:A:163:LEU:HG	1:A:180:ALA:N	0.47	2.25	2	6
1:A:161:PRO:C	1:A:162:ARG:HG3	0.47	2.35	11	2
1:A:240:ASP:OD1	1:A:240:ASP:N	0.47	2.46	11	1
1:A:202:ASN:CA	1:A:235:CYS:SG	0.47	3.02	18	1
1:A:181:THR:CG2	1:A:249:LEU:HB2	0.47	2.39	19	1
1:A:223:ALA:O	1:A:226:LYS:HD3	0.47	2.09	8	5
1:A:232:GLU:O	1:A:232:GLU:HG2	0.47	2.10	14	2
1:A:240:ASP:HB2	1:A:241:ILE:HD12	0.47	1.86	4	1
1:A:211:LYS:O	1:A:215:ALA:CB	0.47	2.63	17	3
1:A:204:SER:HB3	1:A:237:THR:CG2	0.47	2.36	9	1
1:A:163:LEU:HD12	1:A:180:ALA:N	0.47	2.25	3	2
1:A:207:SER:H	1:A:208:PRO:HD2	0.47	1.70	17	6
1:A:163:LEU:HD11	1:A:249:LEU:CD1	0.47	2.40	8	1
1:A:240:ASP:O	1:A:241:ILE:CG1	0.47	2.63	9	1
1:A:174:VAL:HG11	1:A:213:LYS:HG2	0.47	1.87	11	1
1:A:246:TRP:CD1	1:A:246:TRP:N	0.46	2.83	1	11
1:A:166:ILE:HG22	1:A:210:GLU:CB	0.46	2.40	5	2
1:A:179:LEU:HG	1:A:249:LEU:CD1	0.46	2.40	18	1
1:A:227:GLY:C	1:A:229:PRO:HD2	0.46	2.35	10	17
1:A:184:LEU:HD22	1:A:246:TRP:CZ2	0.46	2.45	13	1
1:A:209:GLN:OE1	1:A:209:GLN:HA	0.46	2.11	18	1
1:A:236:GLU:CG	1:A:237:THR:N	0.46	2.79	4	13
1:A:204:SER:OG	1:A:235:CYS:O	0.46	2.32	12	4
1:A:165:HIS:CE1	1:A:185:ASN:ND2	0.46	2.83	10	1
1:A:191:LEU:HB2	1:A:200:GLN:HG2	0.46	1.88	20	1
1:A:205:LYS:CB	1:A:237:THR:HG21	0.46	2.40	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:225:ARG:CD	1:A:229:PRO:HG3	0.46	2.41	9	5
1:A:204:SER:OG	1:A:237:THR:N	0.46	2.49	6	2
1:A:198:ILE:O	1:A:232:GLU:HG2	0.46	2.10	9	1
1:A:240:ASP:C	1:A:241:ILE:HG13	0.46	2.36	13	2
1:A:200:GLN:OE1	1:A:202:ASN:OD1	0.46	2.34	20	1
1:A:166:ILE:CD1	1:A:174:VAL:HG23	0.46	2.33	16	2
1:A:181:THR:HG22	1:A:246:TRP:HE3	0.46	1.71	18	1
1:A:191:LEU:O	1:A:191:LEU:HG	0.46	2.11	5	16
1:A:228:LEU:C	1:A:228:LEU:HD12	0.46	2.36	13	2
1:A:186:SER:OG	1:A:240:ASP:OD2	0.46	2.34	13	1
1:A:232:GLU:CG	1:A:234:PHE:CE2	0.46	2.99	1	1
1:A:204:SER:C	1:A:206:SER:H	0.46	2.18	2	3
1:A:215:ALA:O	1:A:219:ARG:HD2	0.46	2.09	9	1
1:A:206:SER:OG	1:A:210:GLU:OE2	0.46	2.34	18	3
1:A:166:ILE:HG21	1:A:210:GLU:O	0.45	2.11	5	3
1:A:244:GLU:CD	1:A:244:GLU:C	0.45	2.83	7	1
1:A:244:GLU:C	1:A:244:GLU:OE2	0.45	2.59	7	1
1:A:161:PRO:O	1:A:162:ARG:CG	0.45	2.64	15	1
1:A:222:ASP:OD1	1:A:222:ASP:C	0.45	2.57	6	1
1:A:206:SER:C	1:A:210:GLU:CD	0.45	2.84	10	1
1:A:206:SER:OG	1:A:210:GLU:CG	0.45	2.65	20	3
1:A:234:PHE:O	1:A:234:PHE:CD1	0.45	2.69	12	7
1:A:181:THR:HG23	1:A:246:TRP:CE3	0.45	2.46	17	3
1:A:204:SER:HB2	1:A:235:CYS:O	0.45	2.11	20	3
1:A:218:ALA:O	1:A:219:ARG:C	0.45	2.58	19	2
1:A:177:VAL:HG23	1:A:178:PRO:O	0.45	2.11	19	1
1:A:164:LEU:CD1	1:A:164:LEU:C	0.45	2.89	2	12
1:A:193:ASP:OD1	1:A:198:ILE:HG13	0.45	2.11	3	3
1:A:218:ALA:O	1:A:222:ASP:HB2	0.45	2.10	8	6
1:A:165:HIS:C	1:A:166:ILE:HD12	0.45	2.36	11	2
1:A:207:SER:O	1:A:211:LYS:CG	0.45	2.64	17	1
1:A:188:ASP:HA	1:A:210:GLU:HG3	0.45	1.89	9	6
1:A:222:ASP:OD1	1:A:222:ASP:O	0.45	2.35	6	1
1:A:166:ILE:O	1:A:210:GLU:HB3	0.45	2.11	1	1
1:A:191:LEU:CD1	1:A:198:ILE:HG22	0.45	2.41	12	2
1:A:162:ARG:HG3	1:A:193:ASP:HB3	0.45	1.88	7	1
1:A:200:GLN:OE1	1:A:214:ALA:O	0.45	2.34	16	1
1:A:207:SER:HB2	1:A:208:PRO:CD	0.45	2.40	7	5
1:A:245:PHE:CZ	1:A:246:TRP:CZ3	0.45	3.04	11	2
1:A:199:TYR:OH	1:A:244:GLU:OE2	0.45	2.34	15	1
1:A:164:LEU:HG	1:A:175:ALA:C	0.45	2.37	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:197:THR:C	1:A:198:ILE:HG12	0.45	2.37	2	2
1:A:181:THR:CG2	1:A:249:LEU:CB	0.45	2.91	19	1
1:A:242:PRO:HD2	1:A:246:TRP:CD1	0.45	2.47	17	2
1:A:197:THR:CG2	1:A:232:GLU:OE2	0.45	2.65	3	2
1:A:242:PRO:C	1:A:244:GLU:N	0.45	2.74	17	11
1:A:161:PRO:C	1:A:162:ARG:HG2	0.45	2.36	1	1
1:A:214:ALA:C	1:A:216:GLU:N	0.45	2.75	19	3
1:A:189:CYS:N	1:A:210:GLU:HG3	0.45	2.27	15	3
1:A:187:GLY:O	1:A:210:GLU:OE2	0.45	2.34	6	1
1:A:162:ARG:HG2	1:A:162:ARG:NH1	0.45	2.27	12	1
1:A:216:GLU:C	1:A:216:GLU:OE1	0.45	2.59	14	1
1:A:163:LEU:HD12	1:A:190:PHE:CE1	0.45	2.47	19	1
1:A:210:GLU:HG2	1:A:211:LYS:N	0.44	2.27	1	5
1:A:165:HIS:O	1:A:166:ILE:HD13	0.44	2.12	6	3
1:A:241:ILE:CG2	1:A:246:TRP:CD1	0.44	3.00	4	2
1:A:236:GLU:HG3	1:A:240:ASP:HB3	0.44	1.89	7	5
1:A:187:GLY:HA2	1:A:205:LYS:N	0.44	2.26	16	1
1:A:164:LEU:CG	1:A:191:LEU:HD23	0.44	2.41	2	1
1:A:179:LEU:HD13	1:A:249:LEU:O	0.44	2.12	4	1
1:A:184:LEU:HD13	1:A:246:TRP:HZ3	0.44	1.72	4	1
1:A:200:GLN:HB3	1:A:233:VAL:HG13	0.44	1.89	4	1
1:A:187:GLY:HA2	1:A:205:LYS:H	0.44	1.72	5	3
1:A:165:HIS:NE2	1:A:167:SER:CB	0.44	2.81	9	4
1:A:179:LEU:HD22	1:A:190:PHE:CE1	0.44	2.47	15	1
1:A:184:LEU:HD11	1:A:245:PHE:CZ	0.44	2.47	15	2
1:A:225:ARG:HB3	1:A:229:PRO:HD3	0.44	1.89	19	1
1:A:185:ASN:OD1	1:A:188:ASP:OD1	0.44	2.35	2	1
1:A:215:ALA:O	1:A:219:ARG:HB2	0.44	2.12	5	3
1:A:164:LEU:C	1:A:164:LEU:CD1	0.44	2.90	5	3
1:A:165:HIS:CD2	1:A:190:PHE:CD1	0.44	3.06	8	1
1:A:164:LEU:CD2	1:A:176:GLU:N	0.44	2.80	18	2
1:A:163:LEU:HD13	1:A:178:PRO:CA	0.44	2.41	18	2
1:A:207:SER:N	1:A:208:PRO:HD2	0.44	2.26	8	6
1:A:226:LYS:N	1:A:226:LYS:CD	0.44	2.80	14	2
1:A:184:LEU:CD2	1:A:201:PHE:CD2	0.44	3.01	14	1
1:A:161:PRO:O	1:A:162:ARG:HG2	0.44	2.12	14	6
1:A:225:ARG:C	1:A:226:LYS:HG2	0.44	2.38	8	9
1:A:228:LEU:O	1:A:228:LEU:HD23	0.44	2.12	3	1
1:A:206:SER:CB	1:A:210:GLU:OE1	0.44	2.66	10	1
1:A:223:ALA:O	1:A:226:LYS:CD	0.44	2.66	12	1
1:A:244:GLU:O	1:A:248:LEU:HB2	0.44	2.12	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:189:CYS:SG	1:A:211:LYS:HA	0.44	2.52	20	1
1:A:180:ALA:O	1:A:249:LEU:CG	0.44	2.65	17	1
1:A:179:LEU:HB2	1:A:249:LEU:HD22	0.44	1.90	19	1
1:A:164:LEU:HG	1:A:191:LEU:HD23	0.44	1.89	2	1
1:A:186:SER:OG	1:A:237:THR:HG22	0.44	2.12	7	1
1:A:241:ILE:N	1:A:241:ILE:HD12	0.44	2.28	10	1
1:A:197:THR:C	1:A:198:ILE:CD1	0.43	2.87	7	2
1:A:163:LEU:O	1:A:177:VAL:CA	0.43	2.66	17	4
1:A:164:LEU:HG	1:A:176:GLU:HA	0.43	1.89	3	2
1:A:240:ASP:CG	1:A:240:ASP:O	0.43	2.61	6	1
1:A:181:THR:HB	1:A:249:LEU:CD1	0.43	2.41	14	2
1:A:200:GLN:O	1:A:233:VAL:HA	0.43	2.13	11	1
1:A:163:LEU:HD13	1:A:179:LEU:H	0.43	1.72	15	2
1:A:179:LEU:HG	1:A:249:LEU:CD2	0.43	2.43	15	1
1:A:218:ALA:O	1:A:222:ASP:CB	0.43	2.65	13	1
1:A:236:GLU:HG2	1:A:240:ASP:HB3	0.43	1.90	19	1
1:A:245:PHE:CE1	1:A:249:LEU:HG	0.43	2.48	19	1
1:A:180:ALA:O	1:A:184:LEU:HD12	0.43	2.12	1	1
1:A:164:LEU:HB3	1:A:191:LEU:HD23	0.43	1.90	2	1
1:A:237:THR:O	1:A:240:ASP:OD1	0.43	2.35	10	4
1:A:200:GLN:NE2	1:A:202:ASN:HD21	0.43	2.11	7	1
1:A:193:ASP:CG	1:A:198:ILE:HD12	0.43	2.38	2	1
1:A:163:LEU:CD2	1:A:192:LEU:HB2	0.43	2.43	3	1
1:A:197:THR:O	1:A:198:ILE:HG13	0.43	2.13	3	12
1:A:163:LEU:O	1:A:177:VAL:HB	0.43	2.13	10	2
1:A:243:ALA:O	1:A:247:LYS:HG2	0.43	2.13	2	1
1:A:233:VAL:O	1:A:233:VAL:HG23	0.43	2.13	6	1
1:A:163:LEU:HD11	1:A:249:LEU:HD13	0.43	1.91	8	1
1:A:184:LEU:HD13	1:A:246:TRP:HH2	0.43	1.65	11	1
1:A:183:SER:O	1:A:184:LEU:C	0.43	2.61	19	2
1:A:204:SER:C	1:A:237:THR:CG2	0.43	2.91	13	1
1:A:166:ILE:CB	1:A:189:CYS:O	0.43	2.67	1	1
1:A:172:ALA:C	1:A:173:LYS:HG3	0.43	2.38	6	5
1:A:176:GLU:CG	1:A:177:VAL:N	0.43	2.82	3	3
1:A:189:CYS:CB	1:A:214:ALA:CB	0.43	2.96	4	1
1:A:202:ASN:HB2	1:A:235:CYS:CA	0.43	2.42	9	1
1:A:237:THR:O	1:A:240:ASP:CB	0.43	2.67	1	4
1:A:169:ASP:OD1	1:A:169:ASP:N	0.43	2.51	15	3
1:A:224:GLU:O	1:A:226:LYS:HD2	0.43	2.13	6	1
1:A:225:ARG:HD3	1:A:229:PRO:HG3	0.43	1.90	10	1
1:A:243:ALA:O	1:A:247:LYS:HG3	0.43	2.14	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:192:LEU:HD23	1:A:245:PHE:CE1	0.43	2.49	11	3
1:A:209:GLN:N	1:A:209:GLN:OE1	0.43	2.52	14	1
1:A:172:ALA:O	1:A:173:LYS:HG2	0.43	2.14	17	1
1:A:191:LEU:HB2	1:A:200:GLN:CG	0.43	2.43	20	1
1:A:200:GLN:HG2	1:A:202:ASN:ND2	0.43	2.28	2	1
1:A:228:LEU:CB	1:A:229:PRO:HD3	0.43	2.44	13	5
1:A:188:ASP:CA	1:A:210:GLU:HG3	0.43	2.44	4	1
1:A:164:LEU:CD2	1:A:176:GLU:CA	0.43	2.96	13	1
1:A:198:ILE:CG2	1:A:231:VAL:HG13	0.43	2.44	17	1
1:A:185:ASN:O	1:A:188:ASP:OD1	0.42	2.36	2	1
1:A:236:GLU:HG3	1:A:240:ASP:CB	0.42	2.44	6	1
1:A:211:LYS:O	1:A:215:ALA:HB2	0.42	2.14	8	1
1:A:207:SER:OG	1:A:208:PRO:HD3	0.42	2.14	17	3
1:A:231:VAL:O	1:A:232:GLU:OE1	0.42	2.37	3	8
1:A:174:VAL:HG11	1:A:213:LYS:CD	0.42	2.43	5	2
1:A:199:TYR:CE2	1:A:232:GLU:HG3	0.42	2.49	13	1
1:A:204:SER:HB2	1:A:236:GLU:HA	0.42	1.91	20	1
1:A:216:GLU:C	1:A:216:GLU:CD	0.42	2.88	14	1
1:A:222:ASP:O	1:A:226:LYS:HA	0.42	2.14	5	1
1:A:240:ASP:C	1:A:242:PRO:HD3	0.42	2.39	17	2
1:A:180:ALA:CB	1:A:183:SER:HB2	0.42	2.44	19	1
1:A:228:LEU:HB3	1:A:229:PRO:HD3	0.42	1.92	10	5
1:A:200:GLN:OE1	1:A:233:VAL:HB	0.42	2.14	7	1
1:A:210:GLU:O	1:A:214:ALA:N	0.42	2.52	17	1
1:A:246:TRP:O	1:A:251:GLY:N	0.42	2.53	7	1
1:A:238:ASP:CG	1:A:239:SER:H	0.42	2.21	13	1
1:A:208:PRO:O	1:A:212:ASN:HB2	0.42	2.14	19	1
1:A:247:LYS:HG3	1:A:248:LEU:N	0.42	2.30	2	1
1:A:167:SER:CB	1:A:188:ASP:OD2	0.42	2.68	12	1
1:A:197:THR:HG22	1:A:198:ILE:H	0.42	1.75	16	3
1:A:184:LEU:HD11	1:A:245:PHE:HZ	0.42	1.74	15	1
1:A:189:CYS:HB2	1:A:210:GLU:CB	0.42	2.44	17	1
1:A:169:ASP:N	1:A:169:ASP:OD1	0.42	2.53	1	1
1:A:176:GLU:HG3	1:A:177:VAL:N	0.42	2.30	3	2
1:A:184:LEU:CD1	1:A:249:LEU:HD21	0.42	2.45	4	1
1:A:224:GLU:C	1:A:226:LYS:HD2	0.42	2.39	4	1
1:A:233:VAL:C	1:A:234:PHE:CD2	0.42	2.98	11	2
1:A:245:PHE:CD1	1:A:246:TRP:N	0.42	2.88	17	1
1:A:181:THR:CG2	1:A:250:GLY:HA2	0.42	2.43	20	1
1:A:240:ASP:O	1:A:241:ILE:HD12	0.42	2.14	4	1
1:A:204:SER:N	1:A:235:CYS:O	0.42	2.53	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:164:LEU:CD1	1:A:166:ILE:HD12	0.42	2.45	11	1
1:A:206:SER:HB2	1:A:210:GLU:OE2	0.41	2.15	10	3
1:A:244:GLU:CG	1:A:245:PHE:N	0.41	2.83	7	1
1:A:167:SER:CB	1:A:188:ASP:HB2	0.41	2.45	10	3
1:A:202:ASN:CB	1:A:235:CYS:CB	0.41	2.91	9	1
1:A:245:PHE:HD1	1:A:246:TRP:CD1	0.41	2.33	10	2
1:A:184:LEU:HD22	1:A:201:PHE:CD2	0.41	2.50	14	1
1:A:180:ALA:CB	1:A:183:SER:CB	0.41	2.97	19	1
1:A:225:ARG:CB	1:A:229:PRO:HD3	0.41	2.46	19	1
1:A:181:THR:CA	1:A:249:LEU:HD11	0.41	2.45	13	2
1:A:179:LEU:HD11	1:A:249:LEU:HD21	0.41	1.92	15	1
1:A:166:ILE:O	1:A:167:SER:HB3	0.41	2.15	16	1
1:A:179:LEU:HD13	1:A:249:LEU:CB	0.41	2.45	19	1
1:A:188:ASP:HB3	1:A:210:GLU:OE1	0.41	2.15	3	3
1:A:163:LEU:HG	1:A:179:LEU:CA	0.41	2.46	9	1
1:A:172:ALA:C	1:A:173:LYS:CG	0.41	2.94	14	1
1:A:247:LYS:O	1:A:251:GLY:HA3	0.41	2.15	19	1
1:A:180:ALA:H	1:A:249:LEU:HD11	0.41	1.76	8	1
1:A:196:LEU:HD23	1:A:196:LEU:HA	0.41	1.74	4	1
1:A:193:ASP:HA	1:A:198:ILE:HG13	0.41	1.93	14	2
1:A:180:ALA:O	1:A:183:SER:N	0.41	2.53	15	1
1:A:171:ASN:O	1:A:173:LYS:HE2	0.41	2.16	18	1
1:A:163:LEU:CB	1:A:177:VAL:CG1	0.41	2.92	6	1
1:A:185:ASN:HB2	1:A:188:ASP:OD2	0.41	2.16	6	2
1:A:166:ILE:HG13	1:A:214:ALA:CA	0.41	2.46	8	1
1:A:187:GLY:HA2	1:A:205:LYS:CA	0.41	2.46	9	2
1:A:187:GLY:C	1:A:206:SER:HB3	0.41	2.41	9	1
1:A:236:GLU:CG	1:A:240:ASP:HA	0.41	2.46	9	2
1:A:238:ASP:O	1:A:239:SER:HB3	0.41	2.16	9	1
1:A:163:LEU:HB3	1:A:179:LEU:HB3	0.41	1.93	18	1
1:A:200:GLN:HB3	1:A:233:VAL:HA	0.41	1.92	2	2
1:A:245:PHE:CE2	1:A:246:TRP:NE1	0.41	2.88	2	1
1:A:213:LYS:O	1:A:216:GLU:HB3	0.41	2.16	3	1
1:A:199:TYR:CG	1:A:232:GLU:HG2	0.41	2.51	4	1
1:A:183:SER:C	1:A:184:LEU:O	0.41	2.64	6	1
1:A:188:ASP:HA	1:A:206:SER:HG	0.41	1.76	10	1
1:A:163:LEU:HD13	1:A:179:LEU:N	0.41	2.31	15	2
1:A:163:LEU:CG	1:A:179:LEU:HA	0.41	2.46	17	1
1:A:244:GLU:OE2	1:A:244:GLU:C	0.41	2.64	3	1
1:A:174:VAL:HG12	1:A:213:LYS:HD2	0.41	1.91	5	1
1:A:204:SER:N	1:A:236:GLU:O	0.41	2.53	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:197:THR:C	1:A:198:ILE:CG1	0.41	2.94	12	1
1:A:179:LEU:CD1	1:A:184:LEU:HD12	0.41	2.43	15	1
1:A:168:GLY:HA3	1:A:172:ALA:HA	0.40	1.93	12	1
1:A:163:LEU:CD2	1:A:249:LEU:HB2	0.40	2.45	15	1
1:A:215:ALA:O	1:A:219:ARG:CG	0.40	2.70	15	1
1:A:247:LYS:O	1:A:251:GLY:N	0.40	2.54	19	1
1:A:209:GLN:NE2	1:A:209:GLN:CA	0.40	2.83	4	1
1:A:225:ARG:HB3	1:A:229:PRO:HG3	0.40	1.93	10	1
1:A:215:ALA:O	1:A:219:ARG:HG3	0.40	2.15	15	1
1:A:221:ILE:N	1:A:221:ILE:CD1	0.40	2.82	16	1
1:A:245:PHE:CD2	1:A:246:TRP:CD1	0.40	3.09	9	1
1:A:239:SER:C	1:A:241:ILE:N	0.40	2.79	11	1
1:A:217:VAL:O	1:A:221:ILE:HG13	0.40	2.16	18	1
1:A:246:TRP:O	1:A:250:GLY:HA3	0.40	2.16	20	1
1:A:202:ASN:CA	1:A:234:PHE:O	0.40	2.70	1	1
1:A:163:LEU:C	1:A:177:VAL:HG22	0.40	2.41	5	1
1:A:237:THR:C	1:A:240:ASP:HB3	0.40	2.41	10	1
1:A:240:ASP:OD1	1:A:241:ILE:HG13	0.40	2.16	17	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	90/114 (79%)	69±5 (76±6%)	15±2 (17±3%)	4±1 (5±1%)	3	25
All	All	1769/2280 (78%)	1375 (78%)	309 (17%)	85 (5%)	3	25

All 10 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	168	GLY	19
1	A	184	LEU	19
1	A	243	ALA	18
1	A	181	THR	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	207	SER	7
1	A	180	ALA	5
1	A	240	ASP	4
1	A	239	SER	2
1	A	195	GLY	1
1	A	238	ASP	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	74/91 (81%)	41±6 (56±8%)	30±5 (41±7%)	0	5
All	All	1427/1820 (78%)	824 (58%)	603 (42%)	0	4

All 51 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	232	GLU	20
1	A	235	CYS	20
1	A	238	ASP	20
1	A	244	GLU	20
1	A	248	LEU	20
1	A	249	LEU	20
1	A	228	LEU	19
1	A	177	VAL	19
1	A	179	LEU	19
1	A	182	SER	19
1	A	184	LEU	19
1	A	188	ASP	19
1	A	191	LEU	19
1	A	192	LEU	19
1	A	204	SER	19
1	A	207	SER	19
1	A	245	PHE	18
1	A	166	ILE	18
1	A	181	THR	18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	198	ILE	17
1	A	174	VAL	16
1	A	213	LYS	15
1	A	231	VAL	15
1	A	199	TYR	14
1	A	209	GLN	13
1	A	173	LYS	11
1	A	226	LYS	11
1	A	210	GLU	11
1	A	230	LYS	9
1	A	225	ARG	8
1	A	237	THR	8
1	A	205	LYS	8
1	A	211	LYS	8
1	A	170	LYS	8
1	A	162	ARG	7
1	A	247	LYS	7
1	A	185	ASN	6
1	A	216	GLU	6
1	A	171	ASN	5
1	A	234	PHE	5
1	A	200	GLN	5
1	A	224	GLU	4
1	A	219	ARG	4
1	A	212	ASN	3
1	A	221	ILE	3
1	A	233	VAL	3
1	A	240	ASP	3
1	A	246	TRP	2
1	A	163	LEU	2
1	A	164	LEU	1
1	A	176	GLU	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided