



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 8, 2026 – 02:11 AM UTC

PDB ID : 2KRE / pdb_00002kre
Title : Solution structure of E4B/UFD2A U-Box domain
Authors : Nomine, Y.; Wasielewski, E.; Botuyan, M.; Mer, G.
Deposited on : 2009-12-16

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

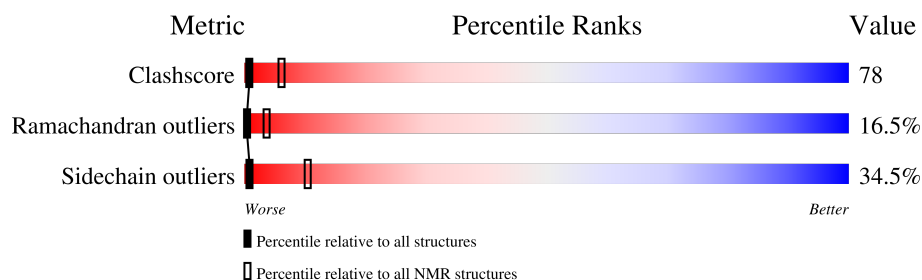
1 Overall quality at a glance

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	100	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 2 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:1228-A:1294 (67)	0.84	2

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 4 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1600 atoms, of which 792 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Ubiquitin conjugation factor E4 B.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	100	Total	C	H	N	O	S	0
			1600	501	792	141	161	5	

There are 5 discrepancies between the modelled and reference sequences:

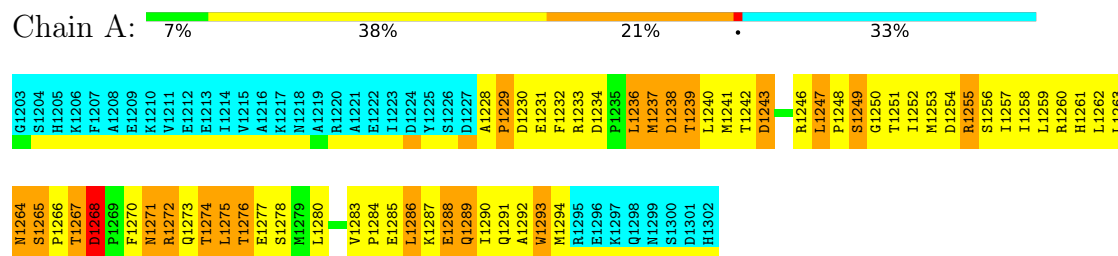
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1203	GLY	-	expression tag	UNP O95155
A	1204	SER	-	expression tag	UNP O95155
A	1205	HIS	-	expression tag	UNP O95155
A	1206	LYS	-	expression tag	UNP O95155
A	1207	PHE	-	expression tag	UNP O95155

4 Residue-property plots [i](#)

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: Ubiquitin conjugation factor E4 B

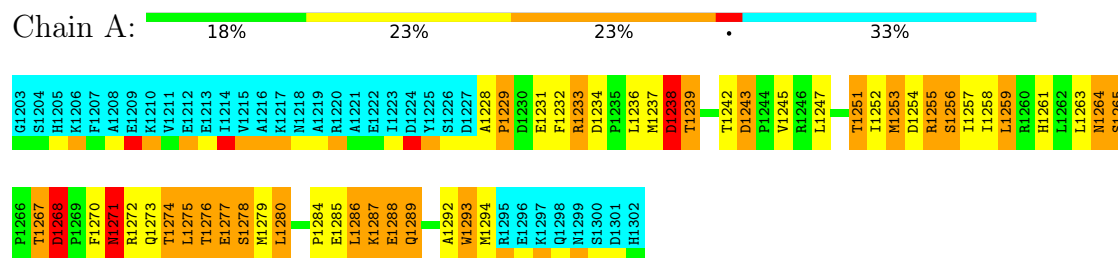


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

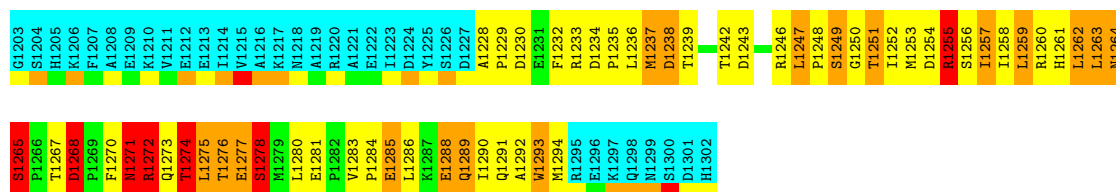
- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



4.2.2 Score per residue for model 2 (medoid)

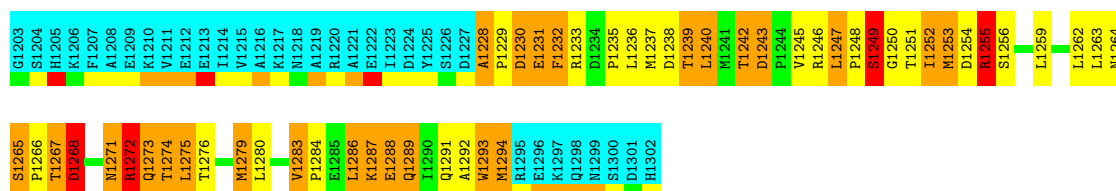
- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B





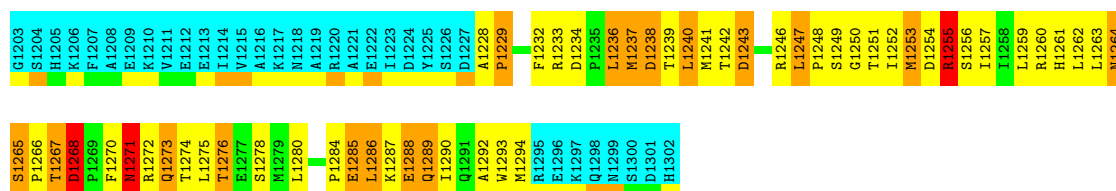
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



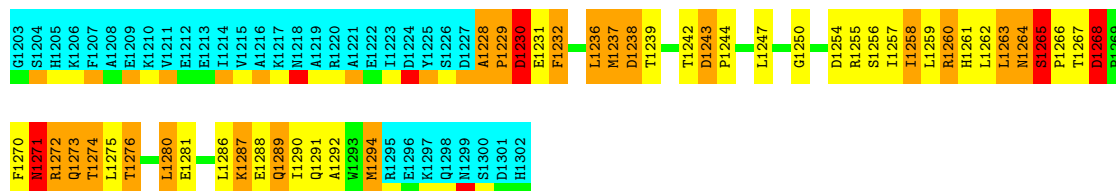
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



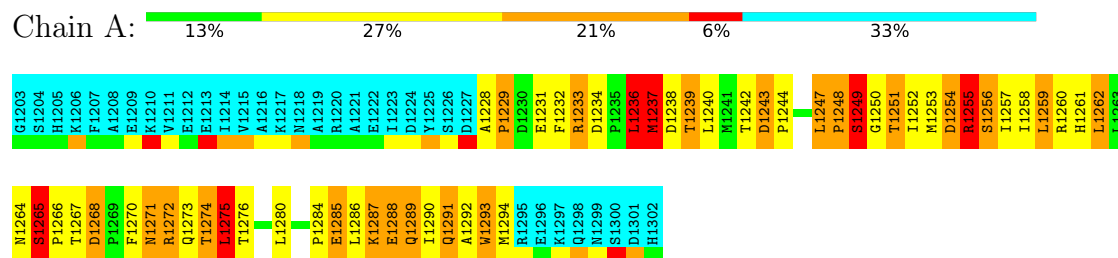
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



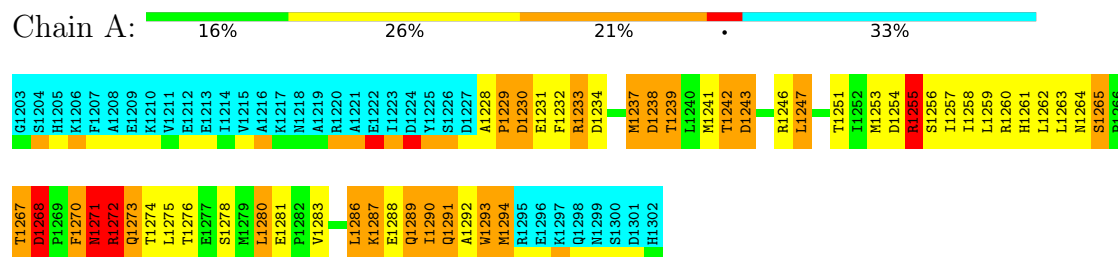
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



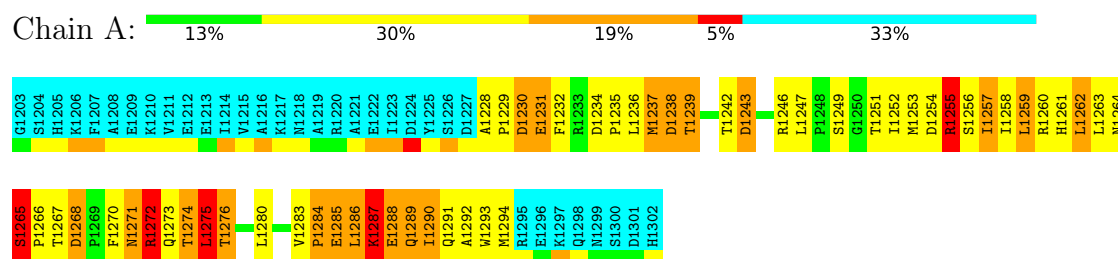
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



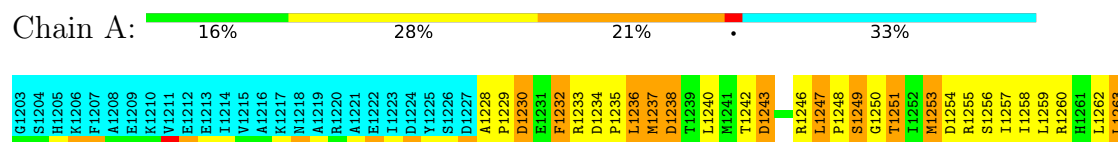
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B





4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



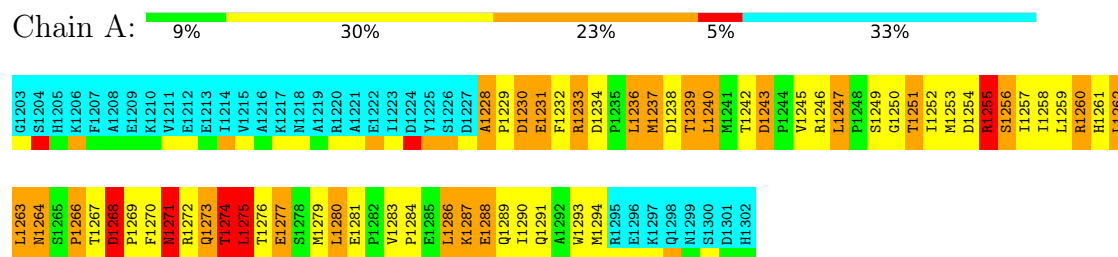
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



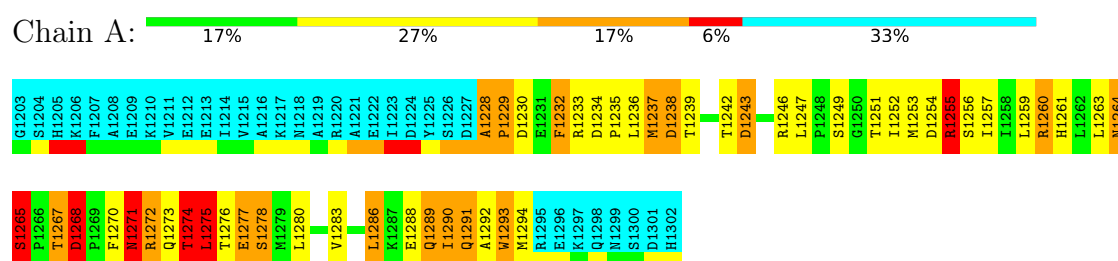
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



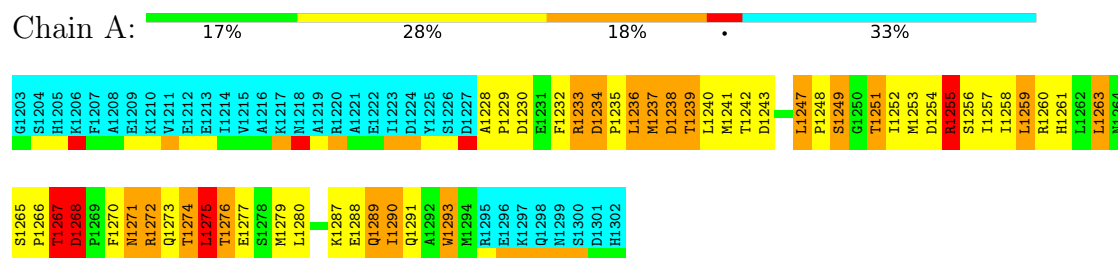
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



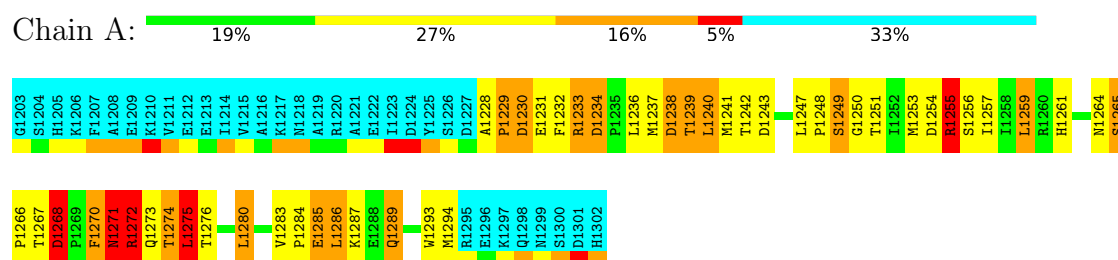
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



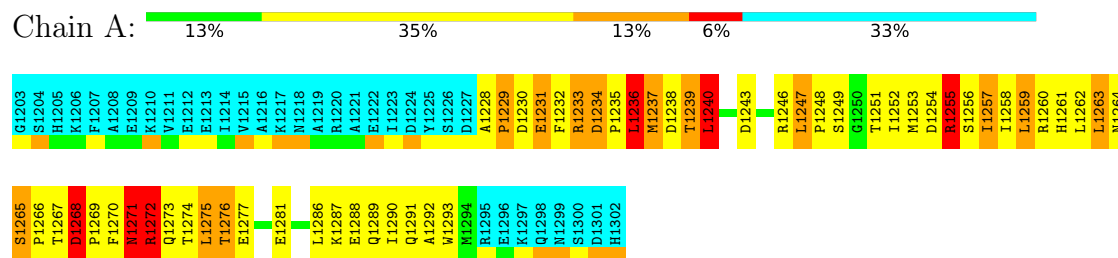
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



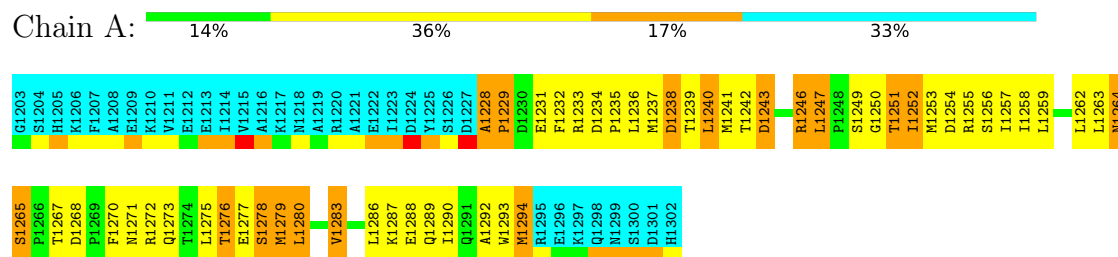
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



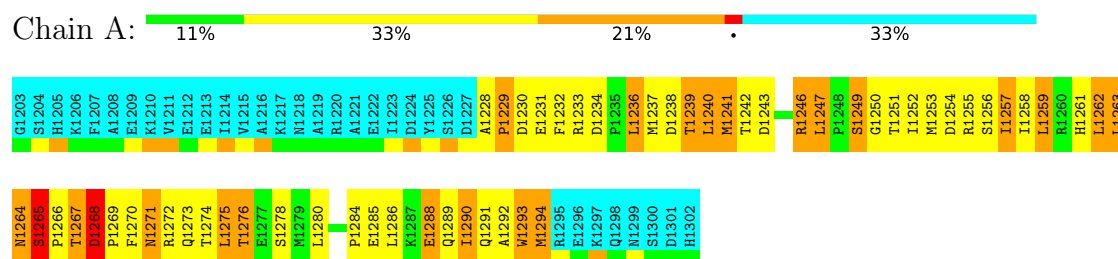
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



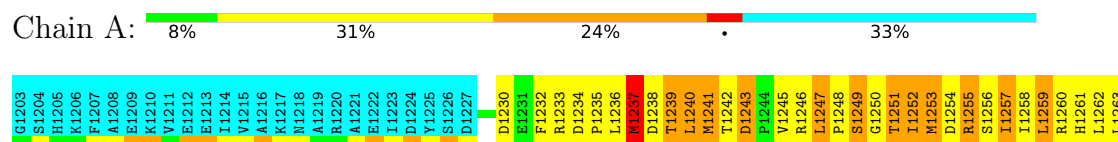
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



N1264	S1265	P1266	T1267	D1268	P1269	F1270	M1271	R1272	Q1273	T1274	L1275	T1276	E1277	S1278	M1279	L1280	E1281	P1282	V1283	P1284	E1285	L1286	K1287	E1288	Q1289	I1290	Q1291	A1292	V1293	M1294	R1295	E1296	K1297	Q1298	N1299	S1300	D1301	H1302
-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------

5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *DISTANCE GEOMETRY, SIMULATED ANNEALING*.

Of the 100 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
XPLOR-NIH	refinement	2.11.1
CYANA	structure solution	2.1

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	540	540	540	85±11
All	All	10800	10800	10800	1695

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 78.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1286:LEU:HD13	1:A:1287:LYS:N	1.03	1.66	11	1
1:A:1247:LEU:HD13	1:A:1247:LEU:N	1.00	1.71	20	7
1:A:1247:LEU:HD23	1:A:1247:LEU:O	0.94	1.63	12	3
1:A:1247:LEU:HD22	1:A:1247:LEU:H	0.93	1.17	18	8
1:A:1247:LEU:HD11	1:A:1253:MET:HE3	0.93	1.40	11	2
1:A:1286:LEU:HD22	1:A:1286:LEU:O	0.92	1.64	11	1
1:A:1247:LEU:HD22	1:A:1247:LEU:N	0.92	1.80	18	2
1:A:1247:LEU:HD11	1:A:1253:MET:SD	0.89	2.07	4	3
1:A:1280:LEU:HD13	1:A:1280:LEU:N	0.88	1.81	13	3
1:A:1280:LEU:C	1:A:1280:LEU:HD22	0.88	1.94	20	4
1:A:1280:LEU:HD13	1:A:1280:LEU:H	0.88	1.25	18	3
1:A:1228:ALA:HB2	1:A:1293:TRP:CH2	0.86	2.06	14	5
1:A:1280:LEU:HD22	1:A:1280:LEU:H	0.85	1.31	13	1
1:A:1237:MET:SD	1:A:1239:THR:N	0.84	2.51	17	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1242:THR:HG22	1:A:1254:ASP:OD2	0.83	1.73	2	3
1:A:1242:THR:HG23	1:A:1243:ASP:OD1	0.82	1.74	4	1
1:A:1236:LEU:C	1:A:1236:LEU:HD12	0.81	2.00	13	7
1:A:1286:LEU:N	1:A:1286:LEU:HD23	0.81	1.91	13	2
1:A:1286:LEU:HD23	1:A:1286:LEU:H	0.81	1.36	13	2
1:A:1246:ARG:C	1:A:1247:LEU:HD13	0.80	2.01	9	7
1:A:1232:PHE:CZ	1:A:1289:GLN:NE2	0.80	2.50	14	13
1:A:1275:LEU:C	1:A:1275:LEU:HD13	0.80	2.01	4	3
1:A:1236:LEU:HD12	1:A:1236:LEU:O	0.80	1.76	13	2
1:A:1286:LEU:HD22	1:A:1286:LEU:C	0.79	2.01	11	1
1:A:1280:LEU:C	1:A:1280:LEU:HD12	0.78	2.04	8	4
1:A:1247:LEU:N	1:A:1247:LEU:CD1	0.78	2.46	20	7
1:A:1237:MET:HE3	1:A:1257:ILE:HG21	0.77	1.55	1	1
1:A:1289:GLN:NE2	1:A:1290:ILE:N	0.77	2.32	2	2
1:A:1262:LEU:HD12	1:A:1263:LEU:N	0.77	1.94	17	6
1:A:1237:MET:SD	1:A:1239:THR:CB	0.75	2.74	17	3
1:A:1286:LEU:HD13	1:A:1286:LEU:C	0.75	2.06	11	1
1:A:1252:ILE:N	1:A:1252:ILE:HD12	0.74	1.96	1	2
1:A:1247:LEU:HD23	1:A:1247:LEU:C	0.74	2.05	12	3
1:A:1231:GLU:N	1:A:1233:ARG:HE	0.74	1.81	16	1
1:A:1273:GLN:O	1:A:1275:LEU:N	0.73	2.21	8	12
1:A:1228:ALA:HB1	1:A:1229:PRO:CD	0.73	2.13	19	10
1:A:1232:PHE:CE1	1:A:1289:GLN:NE2	0.73	2.57	19	6
1:A:1233:ARG:C	1:A:1241:MET:HE2	0.73	2.08	16	4
1:A:1249:SER:CB	1:A:1271:ASN:ND2	0.72	2.52	19	3
1:A:1238:ASP:N	1:A:1238:ASP:OD1	0.72	2.23	16	1
1:A:1237:MET:SD	1:A:1237:MET:C	0.72	2.72	12	4
1:A:1247:LEU:O	1:A:1247:LEU:HD12	0.71	1.85	7	1
1:A:1253:MET:C	1:A:1253:MET:SD	0.71	2.73	10	1
1:A:1234:ASP:OD1	1:A:1238:ASP:N	0.71	2.23	11	1
1:A:1237:MET:SD	1:A:1237:MET:O	0.71	2.48	16	1
1:A:1280:LEU:N	1:A:1280:LEU:CD1	0.71	2.52	13	5
1:A:1236:LEU:HD23	1:A:1257:ILE:CG2	0.71	2.16	12	1
1:A:1271:ASN:ND2	1:A:1271:ASN:C	0.71	2.48	17	1
1:A:1254:ASP:O	1:A:1256:SER:N	0.71	2.24	13	17
1:A:1238:ASP:C	1:A:1239:THR:HG23	0.71	2.10	19	1
1:A:1243:ASP:N	1:A:1243:ASP:OD1	0.71	2.23	3	4
1:A:1232:PHE:H	1:A:1233:ARG:NH2	0.71	1.84	13	1
1:A:1228:ALA:HB1	1:A:1229:PRO:HD2	0.70	1.61	14	11
1:A:1239:THR:O	1:A:1241:MET:N	0.70	2.24	20	4
1:A:1264:ASN:HD22	1:A:1264:ASN:H	0.70	1.28	1	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1289:GLN:O	1:A:1292:ALA:HB3	0.70	1.86	10	7
1:A:1236:LEU:HD23	1:A:1257:ILE:HG21	0.70	1.62	12	1
1:A:1258:ILE:HG23	1:A:1275:LEU:HD21	0.70	1.62	20	2
1:A:1234:ASP:OD1	1:A:1236:LEU:N	0.70	2.25	10	9
1:A:1271:ASN:N	1:A:1271:ASN:OD1	0.70	2.23	13	2
1:A:1280:LEU:N	1:A:1280:LEU:HD22	0.70	2.02	13	2
1:A:1228:ALA:O	1:A:1233:ARG:NH1	0.69	2.24	13	2
1:A:1237:MET:SD	1:A:1257:ILE:HD12	0.69	2.27	16	3
1:A:1280:LEU:H	1:A:1280:LEU:HD12	0.69	1.48	1	2
1:A:1248:PRO:O	1:A:1250:GLY:N	0.69	2.25	2	8
1:A:1290:ILE:O	1:A:1292:ALA:N	0.69	2.26	14	5
1:A:1252:ILE:C	1:A:1253:MET:SD	0.69	2.76	4	5
1:A:1255:ARG:NE	1:A:1255:ARG:O	0.69	2.26	4	1
1:A:1247:LEU:H	1:A:1247:LEU:CD2	0.69	1.99	18	6
1:A:1242:THR:O	1:A:1287:LYS:NZ	0.69	2.25	3	3
1:A:1232:PHE:CE1	1:A:1289:GLN:OE1	0.69	2.45	3	4
1:A:1234:ASP:OD1	1:A:1237:MET:N	0.69	2.26	16	2
1:A:1228:ALA:O	1:A:1230:ASP:N	0.68	2.26	10	4
1:A:1289:GLN:HE21	1:A:1289:GLN:C	0.68	1.96	14	3
1:A:1245:VAL:C	1:A:1252:ILE:HD13	0.68	2.13	3	2
1:A:1261:HIS:NE2	1:A:1267:THR:O	0.68	2.26	4	7
1:A:1233:ARG:O	1:A:1233:ARG:NE	0.68	2.25	6	1
1:A:1246:ARG:C	1:A:1247:LEU:HD23	0.68	2.14	11	1
1:A:1242:THR:N	1:A:1254:ASP:OD2	0.68	2.26	5	6
1:A:1253:MET:SD	1:A:1253:MET:N	0.68	2.66	1	6
1:A:1230:ASP:C	1:A:1233:ARG:NE	0.68	2.51	16	1
1:A:1232:PHE:H	1:A:1233:ARG:HH21	0.68	1.31	13	1
1:A:1249:SER:OG	1:A:1271:ASN:ND2	0.68	2.27	4	4
1:A:1258:ILE:HG23	1:A:1275:LEU:HD13	0.68	1.65	19	1
1:A:1275:LEU:HD13	1:A:1276:THR:N	0.68	2.03	10	8
1:A:1270:PHE:O	1:A:1271:ASN:C	0.68	2.36	7	3
1:A:1280:LEU:H	1:A:1280:LEU:CD1	0.68	2.01	11	4
1:A:1247:LEU:N	1:A:1247:LEU:HD22	0.68	2.04	13	7
1:A:1243:ASP:N	1:A:1254:ASP:OD1	0.67	2.28	7	1
1:A:1280:LEU:H	1:A:1280:LEU:CD2	0.67	1.94	13	1
1:A:1238:ASP:OD1	1:A:1239:THR:N	0.67	2.27	19	1
1:A:1237:MET:SD	1:A:1239:THR:OG1	0.67	2.50	17	3
1:A:1232:PHE:CD1	1:A:1232:PHE:N	0.67	2.62	11	13
1:A:1253:MET:SD	1:A:1258:ILE:HD11	0.67	2.30	18	4
1:A:1268:ASP:OD1	1:A:1270:PHE:N	0.67	2.27	4	13
1:A:1266:PRO:O	1:A:1268:ASP:N	0.67	2.27	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1256:SER:O	1:A:1259:LEU:N	0.67	2.28	8	12
1:A:1254:ASP:OD1	1:A:1257:ILE:N	0.67	2.27	6	1
1:A:1284:PRO:O	1:A:1286:LEU:N	0.67	2.28	4	7
1:A:1259:LEU:O	1:A:1262:LEU:HD11	0.67	1.89	17	1
1:A:1247:LEU:N	1:A:1247:LEU:CD2	0.67	2.54	18	8
1:A:1280:LEU:C	1:A:1280:LEU:CD2	0.67	2.68	11	3
1:A:1242:THR:HG23	1:A:1243:ASP:CG	0.66	2.16	4	1
1:A:1242:THR:N	1:A:1254:ASP:OD1	0.66	2.28	12	2
1:A:1229:PRO:O	1:A:1231:GLU:N	0.66	2.29	13	4
1:A:1236:LEU:O	1:A:1238:ASP:N	0.66	2.28	6	4
1:A:1247:LEU:HD11	1:A:1253:MET:CG	0.66	2.21	19	1
1:A:1251:THR:HG22	1:A:1252:ILE:H	0.66	1.51	4	2
1:A:1247:LEU:HD23	1:A:1253:MET:CE	0.66	2.21	10	1
1:A:1277:GLU:H	1:A:1277:GLU:CD	0.66	1.99	2	1
1:A:1232:PHE:CE2	1:A:1289:GLN:NE2	0.66	2.64	8	3
1:A:1247:LEU:HD12	1:A:1253:MET:HE2	0.66	1.67	1	1
1:A:1260:ARG:O	1:A:1263:LEU:N	0.66	2.27	17	5
1:A:1251:THR:HG22	1:A:1252:ILE:N	0.66	2.07	4	4
1:A:1237:MET:CE	1:A:1257:ILE:HG21	0.65	2.21	1	1
1:A:1270:PHE:O	1:A:1271:ASN:CG	0.65	2.39	10	6
1:A:1247:LEU:HD11	1:A:1253:MET:CE	0.65	2.21	15	2
1:A:1264:ASN:OD1	1:A:1265:SER:N	0.65	2.29	12	1
1:A:1289:GLN:O	1:A:1292:ALA:N	0.65	2.29	20	3
1:A:1274:THR:CG2	1:A:1275:LEU:N	0.65	2.60	13	1
1:A:1268:ASP:OD1	1:A:1272:ARG:N	0.65	2.29	6	7
1:A:1238:ASP:O	1:A:1239:THR:C	0.65	2.40	16	1
1:A:1234:ASP:CG	1:A:1238:ASP:CG	0.65	2.64	16	1
1:A:1236:LEU:C	1:A:1236:LEU:CD1	0.65	2.68	13	4
1:A:1252:ILE:N	1:A:1252:ILE:CD1	0.65	2.59	1	2
1:A:1289:GLN:NE2	1:A:1289:GLN:C	0.65	2.54	14	7
1:A:1261:HIS:CE1	1:A:1265:SER:HG	0.65	2.09	5	1
1:A:1287:LYS:O	1:A:1290:ILE:N	0.65	2.29	8	6
1:A:1271:ASN:C	1:A:1271:ASN:HD22	0.65	2.00	17	1
1:A:1294:MET:SD	1:A:1294:MET:C	0.65	2.80	18	4
1:A:1271:ASN:OD1	1:A:1271:ASN:C	0.65	2.40	18	2
1:A:1268:ASP:CB	1:A:1273:GLN:HE22	0.64	2.05	7	1
1:A:1270:PHE:C	1:A:1271:ASN:CG	0.64	2.66	8	1
1:A:1234:ASP:CG	1:A:1237:MET:SD	0.64	2.80	8	1
1:A:1234:ASP:OD1	1:A:1234:ASP:C	0.64	2.39	20	10
1:A:1271:ASN:O	1:A:1272:ARG:C	0.64	2.41	5	9
1:A:1234:ASP:CB	1:A:1238:ASP:CG	0.64	2.70	16	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1274:THR:O	1:A:1275:LEU:C	0.64	2.39	13	2
1:A:1289:GLN:NE2	1:A:1289:GLN:O	0.64	2.30	14	5
1:A:1271:ASN:O	1:A:1273:GLN:N	0.64	2.31	14	7
1:A:1237:MET:O	1:A:1237:MET:CG	0.64	2.46	16	3
1:A:1254:ASP:OD1	1:A:1256:SER:CB	0.64	2.45	6	2
1:A:1247:LEU:HD23	1:A:1253:MET:SD	0.64	2.32	14	1
1:A:1273:GLN:O	1:A:1274:THR:C	0.64	2.40	3	9
1:A:1230:ASP:OD1	1:A:1230:ASP:N	0.64	2.30	9	2
1:A:1237:MET:SD	1:A:1257:ILE:CD1	0.64	2.86	18	4
1:A:1234:ASP:OD1	1:A:1234:ASP:O	0.64	2.16	11	1
1:A:1268:ASP:C	1:A:1268:ASP:OD1	0.64	2.41	10	7
1:A:1236:LEU:HD21	1:A:1257:ILE:HG21	0.64	1.67	4	2
1:A:1247:LEU:HD23	1:A:1253:MET:HE3	0.63	1.68	8	1
1:A:1247:LEU:HD21	1:A:1249:SER:HB3	0.63	1.67	12	2
1:A:1263:LEU:C	1:A:1263:LEU:HD23	0.63	2.18	4	1
1:A:1256:SER:O	1:A:1258:ILE:N	0.63	2.31	12	9
1:A:1237:MET:C	1:A:1238:ASP:CG	0.63	2.66	4	7
1:A:1234:ASP:OD2	1:A:1253:MET:CB	0.63	2.46	19	3
1:A:1262:LEU:HD12	1:A:1262:LEU:C	0.63	2.19	20	5
1:A:1238:ASP:OD1	1:A:1238:ASP:C	0.63	2.41	20	6
1:A:1247:LEU:HD12	1:A:1275:LEU:CD2	0.63	2.24	6	2
1:A:1254:ASP:C	1:A:1256:SER:N	0.63	2.57	14	19
1:A:1249:SER:CB	1:A:1271:ASN:HD21	0.62	2.07	13	2
1:A:1264:ASN:O	1:A:1265:SER:CB	0.62	2.46	5	11
1:A:1232:PHE:CE1	1:A:1289:GLN:CD	0.62	2.76	8	3
1:A:1243:ASP:C	1:A:1243:ASP:OD1	0.62	2.42	11	5
1:A:1255:ARG:CD	1:A:1255:ARG:C	0.62	2.72	7	2
1:A:1254:ASP:C	1:A:1256:SER:H	0.62	2.02	15	16
1:A:1271:ASN:O	1:A:1272:ARG:O	0.62	2.17	17	2
1:A:1270:PHE:O	1:A:1271:ASN:CB	0.62	2.46	9	5
1:A:1247:LEU:CD1	1:A:1253:MET:HE3	0.62	2.20	11	1
1:A:1238:ASP:O	1:A:1239:THR:O	0.62	2.16	16	1
1:A:1256:SER:OG	1:A:1257:ILE:N	0.62	2.32	16	4
1:A:1271:ASN:ND2	1:A:1273:GLN:HE21	0.62	1.93	9	1
1:A:1231:GLU:CD	1:A:1232:PHE:CE1	0.62	2.78	11	1
1:A:1237:MET:SD	1:A:1257:ILE:HD11	0.62	2.34	18	2
1:A:1229:PRO:O	1:A:1230:ASP:C	0.61	2.42	10	7
1:A:1260:ARG:O	1:A:1264:ASN:ND2	0.61	2.33	8	2
1:A:1280:LEU:N	1:A:1280:LEU:HD23	0.61	2.10	14	1
1:A:1266:PRO:C	1:A:1274:THR:O	0.61	2.42	3	2
1:A:1268:ASP:CG	1:A:1270:PHE:H	0.61	2.03	1	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1280:LEU:CD1	1:A:1280:LEU:N	0.61	2.63	11	2
1:A:1242:THR:C	1:A:1243:ASP:OD1	0.61	2.43	20	5
1:A:1228:ALA:HB3	1:A:1233:ARG:NH2	0.61	2.10	7	1
1:A:1271:ASN:OD1	1:A:1273:GLN:N	0.61	2.31	15	2
1:A:1264:ASN:H	1:A:1264:ASN:ND2	0.61	1.94	1	2
1:A:1280:LEU:HD12	1:A:1280:LEU:O	0.61	1.96	19	3
1:A:1267:THR:O	1:A:1268:ASP:C	0.61	2.43	1	19
1:A:1228:ALA:O	1:A:1229:PRO:O	0.61	2.19	17	6
1:A:1289:GLN:HE21	1:A:1290:ILE:N	0.61	1.91	5	2
1:A:1234:ASP:CB	1:A:1237:MET:HE3	0.61	2.26	14	2
1:A:1231:GLU:N	1:A:1233:ARG:NE	0.61	2.49	16	1
1:A:1270:PHE:O	1:A:1272:ARG:N	0.61	2.34	1	8
1:A:1240:LEU:O	1:A:1241:MET:C	0.61	2.43	20	4
1:A:1242:THR:C	1:A:1243:ASP:CG	0.61	2.69	14	1
1:A:1232:PHE:CD1	1:A:1289:GLN:CD	0.61	2.78	2	1
1:A:1268:ASP:CG	1:A:1271:ASN:ND2	0.61	2.59	12	1
1:A:1272:ARG:O	1:A:1272:ARG:CG	0.60	2.49	17	3
1:A:1243:ASP:OD1	1:A:1254:ASP:OD1	0.60	2.19	3	7
1:A:1232:PHE:CZ	1:A:1289:GLN:CD	0.60	2.79	3	4
1:A:1237:MET:O	1:A:1238:ASP:CG	0.60	2.44	12	9
1:A:1256:SER:C	1:A:1258:ILE:N	0.60	2.57	12	10
1:A:1232:PHE:CD1	1:A:1289:GLN:NE2	0.60	2.69	2	1
1:A:1237:MET:C	1:A:1239:THR:N	0.60	2.59	1	3
1:A:1243:ASP:CG	1:A:1254:ASP:OD1	0.60	2.45	8	6
1:A:1249:SER:OG	1:A:1271:ASN:CG	0.60	2.45	6	6
1:A:1262:LEU:C	1:A:1264:ASN:H	0.60	2.05	8	2
1:A:1247:LEU:HD21	1:A:1253:MET:CE	0.60	2.27	9	1
1:A:1292:ALA:O	1:A:1294:MET:N	0.60	2.35	20	1
1:A:1290:ILE:C	1:A:1292:ALA:N	0.60	2.58	14	6
1:A:1234:ASP:HB3	1:A:1237:MET:HE3	0.60	1.74	14	1
1:A:1284:PRO:C	1:A:1286:LEU:H	0.60	2.05	6	5
1:A:1266:PRO:O	1:A:1274:THR:O	0.60	2.20	6	6
1:A:1234:ASP:CG	1:A:1238:ASP:OD1	0.60	2.44	16	1
1:A:1261:HIS:O	1:A:1265:SER:C	0.60	2.44	10	2
1:A:1261:HIS:ND1	1:A:1265:SER:OG	0.60	2.31	5	1
1:A:1232:PHE:N	1:A:1233:ARG:HH21	0.60	1.94	13	1
1:A:1234:ASP:O	1:A:1236:LEU:N	0.60	2.35	2	2
1:A:1271:ASN:OD1	1:A:1271:ASN:N	0.60	2.32	3	1
1:A:1273:GLN:C	1:A:1275:LEU:N	0.60	2.58	8	6
1:A:1289:GLN:CD	1:A:1289:GLN:C	0.60	2.68	13	2
1:A:1243:ASP:OD1	1:A:1255:ARG:N	0.60	2.35	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1263:LEU:HD12	1:A:1263:LEU:O	0.60	1.97	15	1
1:A:1266:PRO:C	1:A:1267:THR:HG22	0.60	2.22	3	1
1:A:1262:LEU:O	1:A:1264:ASN:N	0.59	2.35	8	1
1:A:1248:PRO:O	1:A:1249:SER:C	0.59	2.44	6	8
1:A:1230:ASP:OD1	1:A:1233:ARG:NH1	0.59	2.35	3	1
1:A:1232:PHE:CZ	1:A:1289:GLN:OE1	0.59	2.55	3	2
1:A:1285:GLU:CD	1:A:1285:GLU:O	0.59	2.44	4	1
1:A:1242:THR:OG1	1:A:1254:ASP:OD2	0.59	2.20	20	4
1:A:1268:ASP:HB3	1:A:1275:LEU:HD23	0.59	1.74	15	1
1:A:1264:ASN:HD22	1:A:1264:ASN:N	0.59	1.95	11	3
1:A:1237:MET:O	1:A:1238:ASP:OD1	0.59	2.20	5	6
1:A:1294:MET:SD	1:A:1294:MET:O	0.59	2.61	18	1
1:A:1243:ASP:OD2	1:A:1255:ARG:N	0.59	2.36	1	1
1:A:1264:ASN:O	1:A:1264:ASN:ND2	0.59	2.33	4	1
1:A:1264:ASN:OD1	1:A:1264:ASN:C	0.59	2.46	7	2
1:A:1247:LEU:HD21	1:A:1251:THR:HB	0.59	1.73	10	1
1:A:1231:GLU:OE2	1:A:1232:PHE:CZ	0.59	2.56	11	1
1:A:1270:PHE:C	1:A:1272:ARG:H	0.59	2.06	5	9
1:A:1287:LYS:C	1:A:1291:GLN:OE1	0.59	2.46	7	1
1:A:1246:ARG:C	1:A:1247:LEU:HD22	0.59	2.23	8	1
1:A:1256:SER:C	1:A:1258:ILE:H	0.59	2.04	12	6
1:A:1268:ASP:OD1	1:A:1271:ASN:N	0.59	2.35	20	5
1:A:1275:LEU:C	1:A:1275:LEU:CD1	0.59	2.73	4	5
1:A:1267:THR:O	1:A:1268:ASP:O	0.59	2.21	12	16
1:A:1287:LYS:O	1:A:1288:GLU:C	0.59	2.45	13	12
1:A:1274:THR:O	1:A:1275:LEU:O	0.59	2.21	6	5
1:A:1232:PHE:O	1:A:1241:MET:CE	0.59	2.51	10	2
1:A:1261:HIS:O	1:A:1264:ASN:CG	0.59	2.45	13	1
1:A:1251:THR:O	1:A:1253:MET:SD	0.58	2.61	1	2
1:A:1230:ASP:O	1:A:1231:GLU:OE1	0.58	2.21	8	1
1:A:1268:ASP:OD1	1:A:1270:PHE:O	0.58	2.20	17	3
1:A:1238:ASP:OD1	1:A:1239:THR:O	0.58	2.21	20	2
1:A:1247:LEU:HD11	1:A:1253:MET:HG2	0.58	1.75	19	1
1:A:1248:PRO:C	1:A:1250:GLY:N	0.58	2.59	2	8
1:A:1248:PRO:C	1:A:1250:GLY:H	0.58	2.06	10	4
1:A:1239:THR:O	1:A:1240:LEU:C	0.58	2.45	17	10
1:A:1243:ASP:OD1	1:A:1254:ASP:CG	0.58	2.46	5	3
1:A:1270:PHE:O	1:A:1271:ASN:O	0.58	2.21	12	3
1:A:1284:PRO:C	1:A:1286:LEU:N	0.58	2.60	4	10
1:A:1236:LEU:O	1:A:1238:ASP:OD2	0.58	2.21	5	1
1:A:1280:LEU:N	1:A:1280:LEU:HD13	0.58	2.13	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1247:LEU:CD2	1:A:1253:MET:HE1	0.58	2.28	7	1
1:A:1244:PRO:HG2	1:A:1286:LEU:HD11	0.58	1.73	11	1
1:A:1284:PRO:O	1:A:1288:GLU:OE1	0.58	2.21	13	1
1:A:1273:GLN:NE2	1:A:1275:LEU:H	0.58	1.95	20	1
1:A:1251:THR:C	1:A:1252:ILE:HD12	0.58	2.23	1	3
1:A:1277:GLU:C	1:A:1279:MET:H	0.58	2.05	9	5
1:A:1254:ASP:OD1	1:A:1256:SER:OG	0.58	2.22	17	2
1:A:1287:LYS:O	1:A:1291:GLN:OE1	0.58	2.22	7	1
1:A:1259:LEU:O	1:A:1262:LEU:CD1	0.58	2.50	17	1
1:A:1242:THR:OG1	1:A:1243:ASP:OD1	0.58	2.19	3	6
1:A:1232:PHE:CG	1:A:1289:GLN:NE2	0.58	2.72	2	1
1:A:1265:SER:O	1:A:1267:THR:N	0.58	2.37	9	5
1:A:1237:MET:C	1:A:1238:ASP:OD1	0.58	2.47	5	3
1:A:1254:ASP:OD1	1:A:1256:SER:N	0.58	2.37	6	1
1:A:1243:ASP:OD1	1:A:1256:SER:OG	0.58	2.21	7	1
1:A:1271:ASN:OD1	1:A:1273:GLN:NE2	0.58	2.37	7	1
1:A:1234:ASP:OD1	1:A:1235:PRO:N	0.58	2.36	20	6
1:A:1234:ASP:CG	1:A:1236:LEU:H	0.58	2.05	16	2
1:A:1268:ASP:OD2	1:A:1271:ASN:CG	0.58	2.47	12	1
1:A:1268:ASP:OD2	1:A:1271:ASN:OD1	0.58	2.22	12	2
1:A:1238:ASP:C	1:A:1238:ASP:OD1	0.58	2.46	19	1
1:A:1243:ASP:OD2	1:A:1254:ASP:OD1	0.58	2.20	10	8
1:A:1261:HIS:O	1:A:1265:SER:O	0.58	2.21	2	3
1:A:1262:LEU:C	1:A:1264:ASN:N	0.58	2.60	8	5
1:A:1273:GLN:C	1:A:1275:LEU:H	0.58	2.07	16	4
1:A:1237:MET:C	1:A:1239:THR:H	0.58	2.06	1	1
1:A:1236:LEU:C	1:A:1238:ASP:H	0.58	2.06	11	4
1:A:1263:LEU:HD12	1:A:1263:LEU:C	0.58	2.23	15	1
1:A:1270:PHE:O	1:A:1271:ASN:OD1	0.58	2.21	17	2
1:A:1238:ASP:OD1	1:A:1238:ASP:O	0.57	2.22	10	3
1:A:1268:ASP:OD1	1:A:1271:ASN:OD1	0.57	2.22	10	2
1:A:1264:ASN:HD22	1:A:1264:ASN:C	0.57	2.07	4	1
1:A:1233:ARG:NE	1:A:1233:ARG:N	0.57	2.53	13	1
1:A:1237:MET:HE1	1:A:1257:ILE:HG23	0.57	1.76	16	1
1:A:1238:ASP:OD2	1:A:1238:ASP:O	0.57	2.22	17	1
1:A:1265:SER:C	1:A:1267:THR:H	0.57	2.06	4	4
1:A:1261:HIS:O	1:A:1264:ASN:OD1	0.57	2.22	20	2
1:A:1238:ASP:OD2	1:A:1241:MET:CG	0.57	2.52	19	2
1:A:1273:GLN:O	1:A:1273:GLN:OE1	0.57	2.21	7	1
1:A:1283:VAL:O	1:A:1286:LEU:HD12	0.57	1.99	11	1
1:A:1260:ARG:O	1:A:1263:LEU:CB	0.57	2.52	4	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1277:GLU:O	1:A:1279:MET:N	0.57	2.38	9	1
1:A:1238:ASP:O	1:A:1238:ASP:OD1	0.57	2.22	13	2
1:A:1255:ARG:HE	1:A:1255:ARG:C	0.57	2.07	4	1
1:A:1276:THR:O	1:A:1280:LEU:HD13	0.57	2.00	4	1
1:A:1247:LEU:HD13	1:A:1247:LEU:H	0.57	1.58	13	3
1:A:1286:LEU:C	1:A:1286:LEU:CD2	0.57	2.72	11	1
1:A:1261:HIS:CE1	1:A:1265:SER:OG	0.57	2.57	5	3
1:A:1243:ASP:OD1	1:A:1243:ASP:O	0.57	2.22	15	2
1:A:1234:ASP:C	1:A:1236:LEU:H	0.56	2.08	2	1
1:A:1237:MET:O	1:A:1238:ASP:CB	0.56	2.53	18	2
1:A:1238:ASP:O	1:A:1238:ASP:CG	0.56	2.46	17	4
1:A:1251:THR:CG2	1:A:1252:ILE:N	0.56	2.68	19	3
1:A:1276:THR:O	1:A:1280:LEU:CD1	0.56	2.54	4	1
1:A:1229:PRO:C	1:A:1231:GLU:H	0.56	2.09	5	1
1:A:1254:ASP:OD2	1:A:1256:SER:OG	0.56	2.22	6	1
1:A:1237:MET:SD	1:A:1257:ILE:HG21	0.56	2.39	7	1
1:A:1271:ASN:OD1	1:A:1273:GLN:CB	0.56	2.54	15	1
1:A:1280:LEU:C	1:A:1280:LEU:CD1	0.56	2.77	8	3
1:A:1276:THR:O	1:A:1280:LEU:CD2	0.56	2.52	15	1
1:A:1283:VAL:O	1:A:1283:VAL:HG13	0.56	2.01	2	1
1:A:1275:LEU:HD13	1:A:1276:THR:H	0.56	1.59	2	1
1:A:1256:SER:O	1:A:1257:ILE:C	0.56	2.48	5	7
1:A:1243:ASP:OD1	1:A:1254:ASP:OD2	0.56	2.23	12	2
1:A:1279:MET:N	1:A:1279:MET:SD	0.56	2.79	18	1
1:A:1236:LEU:C	1:A:1238:ASP:N	0.56	2.59	6	4
1:A:1245:VAL:O	1:A:1252:ILE:HD13	0.56	2.01	3	2
1:A:1264:ASN:O	1:A:1265:SER:OG	0.56	2.23	5	8
1:A:1288:GLU:O	1:A:1289:GLN:C	0.56	2.48	12	4
1:A:1240:LEU:O	1:A:1241:MET:O	0.56	2.23	20	1
1:A:1252:ILE:HD11	1:A:1283:VAL:CG2	0.56	2.30	3	1
1:A:1237:MET:O	1:A:1238:ASP:C	0.56	2.49	11	4
1:A:1243:ASP:OD2	1:A:1255:ARG:NE	0.56	2.39	19	1
1:A:1234:ASP:O	1:A:1238:ASP:N	0.55	2.38	1	4
1:A:1228:ALA:HB2	1:A:1293:TRP:CZ3	0.55	2.36	13	4
1:A:1243:ASP:OD2	1:A:1256:SER:OG	0.55	2.25	9	2
1:A:1234:ASP:N	1:A:1238:ASP:OD1	0.55	2.28	19	1
1:A:1271:ASN:C	1:A:1272:ARG:CG	0.55	2.79	7	1
1:A:1247:LEU:HD21	1:A:1253:MET:HE2	0.55	1.78	9	2
1:A:1267:THR:O	1:A:1267:THR:OG1	0.55	2.24	19	3
1:A:1286:LEU:C	1:A:1286:LEU:CD1	0.55	2.75	11	1
1:A:1257:ILE:HG22	1:A:1257:ILE:O	0.55	2.01	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1247:LEU:HD23	1:A:1253:MET:HE1	0.55	1.78	10	1
1:A:1268:ASP:N	1:A:1273:GLN:O	0.55	2.39	18	4
1:A:1239:THR:O	1:A:1240:LEU:O	0.55	2.24	17	1
1:A:1261:HIS:CE1	1:A:1265:SER:O	0.55	2.60	6	1
1:A:1229:PRO:C	1:A:1230:ASP:CG	0.55	2.75	9	2
1:A:1228:ALA:H	1:A:1233:ARG:NH2	0.55	2.00	9	1
1:A:1247:LEU:HD22	1:A:1251:THR:O	0.55	2.02	20	5
1:A:1264:ASN:ND2	1:A:1264:ASN:C	0.55	2.65	4	1
1:A:1286:LEU:H	1:A:1286:LEU:CD2	0.55	2.06	13	2
1:A:1259:LEU:C	1:A:1259:LEU:CD1	0.55	2.79	15	1
1:A:1237:MET:HE3	1:A:1237:MET:H	0.55	1.62	12	2
1:A:1242:THR:H	1:A:1254:ASP:CG	0.55	2.08	14	1
1:A:1275:LEU:HD13	1:A:1275:LEU:C	0.54	2.27	10	2
1:A:1234:ASP:OD1	1:A:1237:MET:CE	0.54	2.55	12	1
1:A:1287:LYS:O	1:A:1289:GLN:N	0.54	2.40	4	1
1:A:1252:ILE:HG22	1:A:1253:MET:N	0.54	2.16	13	3
1:A:1230:ASP:C	1:A:1233:ARG:HE	0.54	2.09	16	1
1:A:1237:MET:O	1:A:1239:THR:N	0.54	2.40	1	2
1:A:1237:MET:SD	1:A:1239:THR:CA	0.54	2.95	17	1
1:A:1272:ARG:CG	1:A:1272:ARG:HH11	0.54	2.14	17	1
1:A:1231:GLU:C	1:A:1233:ARG:H	0.54	2.10	12	3
1:A:1280:LEU:CD2	1:A:1280:LEU:C	0.54	2.81	18	1
1:A:1228:ALA:CB	1:A:1229:PRO:CD	0.54	2.86	14	7
1:A:1245:VAL:HG21	1:A:1255:ARG:HG2	0.54	1.79	13	2
1:A:1270:PHE:C	1:A:1272:ARG:N	0.54	2.64	19	8
1:A:1229:PRO:C	1:A:1230:ASP:OD1	0.54	2.51	11	2
1:A:1247:LEU:HD12	1:A:1253:MET:CE	0.53	2.33	1	1
1:A:1230:ASP:CG	1:A:1230:ASP:O	0.53	2.48	3	2
1:A:1284:PRO:O	1:A:1285:GLU:C	0.53	2.51	8	4
1:A:1237:MET:SD	1:A:1257:ILE:CG2	0.53	2.97	7	1
1:A:1289:GLN:O	1:A:1290:ILE:C	0.53	2.49	20	3
1:A:1266:PRO:O	1:A:1274:THR:C	0.53	2.51	12	4
1:A:1264:ASN:CG	1:A:1265:SER:N	0.53	2.65	12	1
1:A:1265:SER:OG	1:A:1265:SER:O	0.53	2.23	14	1
1:A:1280:LEU:N	1:A:1280:LEU:CD2	0.53	2.72	14	1
1:A:1266:PRO:C	1:A:1267:THR:CG2	0.53	2.81	3	2
1:A:1247:LEU:N	1:A:1247:LEU:HD13	0.53	2.18	18	1
1:A:1252:ILE:CG2	1:A:1253:MET:N	0.53	2.72	13	4
1:A:1274:THR:O	1:A:1275:LEU:CB	0.53	2.57	3	1
1:A:1261:HIS:CE1	1:A:1265:SER:CB	0.53	2.91	5	1
1:A:1232:PHE:N	1:A:1232:PHE:CD1	0.53	2.70	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1283:VAL:HG12	1:A:1283:VAL:O	0.53	2.02	20	1
1:A:1245:VAL:N	1:A:1253:MET:O	0.53	2.36	3	1
1:A:1290:ILE:C	1:A:1292:ALA:H	0.53	2.12	14	4
1:A:1276:THR:HG23	1:A:1279:MET:CB	0.53	2.34	13	1
1:A:1247:LEU:C	1:A:1247:LEU:CD2	0.53	2.71	12	3
1:A:1277:GLU:HA	1:A:1280:LEU:HD21	0.53	1.80	13	1
1:A:1259:LEU:C	1:A:1259:LEU:HD13	0.53	2.28	15	1
1:A:1234:ASP:C	1:A:1236:LEU:N	0.53	2.66	2	2
1:A:1234:ASP:CB	1:A:1237:MET:SD	0.53	2.97	8	1
1:A:1246:ARG:HE	1:A:1246:ARG:C	0.53	2.11	12	1
1:A:1268:ASP:OD1	1:A:1270:PHE:C	0.53	2.52	4	8
1:A:1271:ASN:C	1:A:1273:GLN:N	0.53	2.65	14	4
1:A:1236:LEU:HD22	1:A:1269:PRO:CB	0.53	2.34	13	1
1:A:1254:ASP:O	1:A:1255:ARG:C	0.52	2.52	12	13
1:A:1247:LEU:H	1:A:1247:LEU:CD1	0.52	2.17	13	1
1:A:1266:PRO:O	1:A:1267:THR:CG2	0.52	2.56	13	1
1:A:1238:ASP:C	1:A:1239:THR:CG2	0.52	2.79	19	1
1:A:1258:ILE:O	1:A:1259:LEU:C	0.52	2.53	5	3
1:A:1264:ASN:C	1:A:1265:SER:OG	0.52	2.52	5	2
1:A:1268:ASP:OD1	1:A:1268:ASP:C	0.52	2.53	19	4
1:A:1266:PRO:O	1:A:1267:THR:HG23	0.52	2.04	13	1
1:A:1249:SER:OG	1:A:1251:THR:OG1	0.52	2.28	20	1
1:A:1280:LEU:HD12	1:A:1280:LEU:N	0.52	2.19	7	1
1:A:1232:PHE:N	1:A:1233:ARG:NH2	0.52	2.54	13	1
1:A:1233:ARG:NE	1:A:1233:ARG:CA	0.52	2.73	13	1
1:A:1272:ARG:CG	1:A:1272:ARG:NH1	0.52	2.70	17	1
1:A:1270:PHE:O	1:A:1271:ASN:ND2	0.52	2.43	15	2
1:A:1268:ASP:CA	1:A:1275:LEU:HD13	0.52	2.35	3	1
1:A:1254:ASP:O	1:A:1257:ILE:N	0.52	2.39	9	2
1:A:1237:MET:HE2	1:A:1257:ILE:HG13	0.51	1.81	12	2
1:A:1251:THR:HB	1:A:1253:MET:HE1	0.51	1.81	16	1
1:A:1244:PRO:CG	1:A:1286:LEU:HD11	0.51	2.36	11	1
1:A:1273:GLN:O	1:A:1274:THR:CB	0.51	2.58	13	1
1:A:1228:ALA:CB	1:A:1293:TRP:CH2	0.51	2.93	12	4
1:A:1284:PRO:O	1:A:1287:LYS:N	0.51	2.44	8	2
1:A:1290:ILE:HG22	1:A:1291:GLN:N	0.51	2.19	8	3
1:A:1232:PHE:C	1:A:1241:MET:CE	0.51	2.84	4	1
1:A:1247:LEU:CB	1:A:1248:PRO:CD	0.51	2.88	11	1
1:A:1233:ARG:CA	1:A:1241:MET:HE2	0.51	2.36	18	3
1:A:1238:ASP:OD2	1:A:1241:MET:HG3	0.51	2.06	20	2
1:A:1234:ASP:OD1	1:A:1237:MET:HE3	0.51	2.05	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1270:PHE:N	1:A:1270:PHE:CD1	0.51	2.72	19	1
1:A:1292:ALA:C	1:A:1294:MET:N	0.51	2.68	20	2
1:A:1268:ASP:CB	1:A:1273:GLN:NE2	0.51	2.73	7	1
1:A:1265:SER:C	1:A:1267:THR:N	0.51	2.69	5	3
1:A:1228:ALA:C	1:A:1233:ARG:HH22	0.51	2.14	7	1
1:A:1283:VAL:O	1:A:1286:LEU:CD1	0.51	2.59	11	1
1:A:1237:MET:O	1:A:1238:ASP:OD2	0.50	2.29	2	2
1:A:1252:ILE:HD11	1:A:1283:VAL:HG21	0.50	1.81	3	2
1:A:1287:LYS:NZ	1:A:1291:GLN:NE2	0.50	2.59	5	1
1:A:1254:ASP:OD1	1:A:1256:SER:CA	0.50	2.59	6	1
1:A:1255:ARG:O	1:A:1259:LEU:HD23	0.50	2.05	6	1
1:A:1247:LEU:HD21	1:A:1253:MET:HE1	0.50	1.81	7	1
1:A:1247:LEU:HD21	1:A:1249:SER:CB	0.50	2.37	12	1
1:A:1289:GLN:C	1:A:1289:GLN:CD	0.50	2.80	1	1
1:A:1275:LEU:CD1	1:A:1276:THR:O	0.50	2.59	10	1
1:A:1287:LYS:HB3	1:A:1287:LYS:HZ3	0.50	1.67	5	1
1:A:1276:THR:HG23	1:A:1279:MET:HB2	0.50	1.84	13	2
1:A:1255:ARG:HH21	1:A:1280:LEU:CD2	0.50	2.20	16	1
1:A:1231:GLU:C	1:A:1232:PHE:CD1	0.50	2.90	17	1
1:A:1242:THR:CB	1:A:1254:ASP:OD2	0.50	2.60	20	1
1:A:1280:LEU:HD22	1:A:1280:LEU:O	0.50	2.04	11	4
1:A:1271:ASN:O	1:A:1272:ARG:CB	0.50	2.59	7	2
1:A:1286:LEU:O	1:A:1287:LYS:C	0.50	2.53	12	7
1:A:1293:TRP:CE3	1:A:1294:MET:N	0.50	2.79	12	3
1:A:1264:ASN:ND2	1:A:1264:ASN:N	0.50	2.59	10	2
1:A:1284:PRO:O	1:A:1288:GLU:CD	0.50	2.55	13	1
1:A:1234:ASP:OD1	1:A:1236:LEU:C	0.49	2.55	10	2
1:A:1231:GLU:C	1:A:1233:ARG:N	0.49	2.70	1	3
1:A:1228:ALA:C	1:A:1230:ASP:H	0.49	2.14	19	1
1:A:1280:LEU:CD1	1:A:1280:LEU:H	0.49	2.19	20	2
1:A:1264:ASN:N	1:A:1264:ASN:ND2	0.49	2.60	11	1
1:A:1236:LEU:HD23	1:A:1237:MET:HE1	0.49	1.84	1	1
1:A:1275:LEU:HD23	1:A:1276:THR:N	0.49	2.22	12	2
1:A:1246:ARG:HH21	1:A:1283:VAL:HG11	0.49	1.68	7	1
1:A:1286:LEU:N	1:A:1286:LEU:CD2	0.49	2.63	13	2
1:A:1247:LEU:HD23	1:A:1275:LEU:HD21	0.49	1.84	16	1
1:A:1254:ASP:CG	1:A:1256:SER:OG	0.49	2.56	6	2
1:A:1247:LEU:HD21	1:A:1253:MET:HE3	0.49	1.84	17	2
1:A:1237:MET:HE3	1:A:1257:ILE:HG13	0.49	1.85	8	1
1:A:1266:PRO:C	1:A:1267:THR:HG23	0.49	2.33	13	1
1:A:1277:GLU:O	1:A:1277:GLU:OE1	0.49	2.31	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1236:LEU:HD22	1:A:1269:PRO:HB2	0.49	1.84	13	1
1:A:1242:THR:HG23	1:A:1254:ASP:OD2	0.49	2.08	20	1
1:A:1247:LEU:CD2	1:A:1251:THR:O	0.49	2.61	18	2
1:A:1247:LEU:CD2	1:A:1253:MET:SD	0.49	3.01	14	1
1:A:1232:PHE:CD1	1:A:1289:GLN:OE1	0.48	2.66	2	1
1:A:1280:LEU:HD22	1:A:1281:GLU:N	0.48	2.23	20	2
1:A:1247:LEU:CD2	1:A:1251:THR:H	0.48	2.21	12	3
1:A:1263:LEU:C	1:A:1263:LEU:CD1	0.48	2.86	15	1
1:A:1266:PRO:O	1:A:1275:LEU:N	0.48	2.46	17	1
1:A:1277:GLU:C	1:A:1279:MET:N	0.48	2.71	18	4
1:A:1260:ARG:O	1:A:1261:HIS:C	0.48	2.54	17	7
1:A:1230:ASP:OD1	1:A:1230:ASP:C	0.48	2.56	19	2
1:A:1236:LEU:HG	1:A:1237:MET:N	0.48	2.22	18	11
1:A:1271:ASN:OD1	1:A:1272:ARG:N	0.48	2.47	18	2
1:A:1273:GLN:O	1:A:1274:THR:O	0.48	2.32	10	1
1:A:1268:ASP:OD1	1:A:1275:LEU:CD2	0.48	2.62	8	1
1:A:1265:SER:N	1:A:1266:PRO:CD	0.48	2.76	9	1
1:A:1289:GLN:O	1:A:1292:ALA:CB	0.48	2.61	20	2
1:A:1236:LEU:HD22	1:A:1269:PRO:HG3	0.48	1.84	17	1
1:A:1237:MET:O	1:A:1237:MET:HG2	0.48	2.07	16	1
1:A:1230:ASP:O	1:A:1230:ASP:CG	0.48	2.57	19	1
1:A:1258:ILE:HD12	1:A:1275:LEU:CD1	0.48	2.38	19	1
1:A:1288:GLU:O	1:A:1292:ALA:CB	0.48	2.62	19	1
1:A:1232:PHE:O	1:A:1241:MET:HE2	0.48	2.09	10	1
1:A:1246:ARG:HA	1:A:1252:ILE:HD13	0.48	1.86	11	1
1:A:1290:ILE:O	1:A:1291:GLN:C	0.48	2.57	11	3
1:A:1233:ARG:O	1:A:1234:ASP:C	0.47	2.57	13	2
1:A:1246:ARG:N	1:A:1281:GLU:O	0.47	2.42	17	3
1:A:1254:ASP:OD1	1:A:1254:ASP:C	0.47	2.54	17	2
1:A:1249:SER:HG	1:A:1271:ASN:CG	0.47	2.14	12	1
1:A:1268:ASP:CB	1:A:1271:ASN:ND2	0.47	2.77	12	1
1:A:1234:ASP:OD2	1:A:1236:LEU:HD11	0.47	2.09	6	1
1:A:1280:LEU:CD2	1:A:1280:LEU:H	0.47	2.22	14	1
1:A:1253:MET:HG3	1:A:1254:ASP:N	0.47	2.24	18	1
1:A:1247:LEU:HD21	1:A:1253:MET:SD	0.47	2.49	3	3
1:A:1276:THR:O	1:A:1280:LEU:HD23	0.47	2.09	15	1
1:A:1247:LEU:HD12	1:A:1247:LEU:C	0.47	2.34	7	1
1:A:1232:PHE:CD2	1:A:1289:GLN:NE2	0.47	2.83	2	1
1:A:1237:MET:SD	1:A:1239:THR:HB	0.47	2.48	12	3
1:A:1254:ASP:CG	1:A:1256:SER:HG	0.47	2.17	5	1
1:A:1288:GLU:O	1:A:1292:ALA:HB2	0.47	2.10	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1270:PHE:C	1:A:1271:ASN:OD1	0.47	2.57	10	1
1:A:1277:GLU:O	1:A:1278:SER:OG	0.47	2.22	14	1
1:A:1249:SER:O	1:A:1271:ASN:ND2	0.47	2.48	3	1
1:A:1263:LEU:C	1:A:1263:LEU:CD2	0.46	2.88	4	1
1:A:1253:MET:CG	1:A:1254:ASP:N	0.46	2.76	18	2
1:A:1278:SER:OG	1:A:1279:MET:SD	0.46	2.73	18	1
1:A:1268:ASP:HA	1:A:1275:LEU:HD23	0.46	1.86	13	1
1:A:1262:LEU:C	1:A:1262:LEU:CD1	0.46	2.88	17	2
1:A:1262:LEU:O	1:A:1263:LEU:C	0.46	2.58	5	2
1:A:1266:PRO:O	1:A:1267:THR:C	0.46	2.57	15	1
1:A:1253:MET:HG2	1:A:1254:ASP:N	0.46	2.25	10	1
1:A:1257:ILE:O	1:A:1257:ILE:HG22	0.46	2.09	12	1
1:A:1243:ASP:O	1:A:1243:ASP:CG	0.46	2.58	11	4
1:A:1292:ALA:O	1:A:1293:TRP:C	0.46	2.57	8	3
1:A:1289:GLN:O	1:A:1289:GLN:NE2	0.46	2.49	13	1
1:A:1234:ASP:C	1:A:1234:ASP:OD1	0.46	2.59	2	1
1:A:1289:GLN:CD	1:A:1290:ILE:N	0.46	2.73	2	1
1:A:1264:ASN:OD1	1:A:1265:SER:OG	0.46	2.23	12	1
1:A:1236:LEU:CD2	1:A:1269:PRO:CB	0.46	2.94	13	1
1:A:1293:TRP:CD2	1:A:1293:TRP:C	0.46	2.94	13	6
1:A:1264:ASN:O	1:A:1264:ASN:CG	0.46	2.58	2	2
1:A:1247:LEU:O	1:A:1250:GLY:N	0.46	2.38	4	1
1:A:1244:PRO:CB	1:A:1286:LEU:HD11	0.46	2.41	5	1
1:A:1236:LEU:O	1:A:1237:MET:C	0.46	2.59	6	1
1:A:1234:ASP:HB3	1:A:1237:MET:HE1	0.46	1.86	12	1
1:A:1275:LEU:CD1	1:A:1276:THR:N	0.46	2.79	2	1
1:A:1247:LEU:CD2	1:A:1247:LEU:N	0.46	2.78	5	2
1:A:1255:ARG:NH1	1:A:1277:GLU:OE2	0.46	2.49	11	1
1:A:1247:LEU:HD13	1:A:1275:LEU:HD21	0.46	1.88	15	1
1:A:1268:ASP:OD2	1:A:1270:PHE:N	0.45	2.49	12	1
1:A:1271:ASN:ND2	1:A:1272:ARG:H	0.45	2.09	12	1
1:A:1233:ARG:N	1:A:1241:MET:CE	0.45	2.79	20	1
1:A:1255:ARG:C	1:A:1255:ARG:CD	0.45	2.88	2	2
1:A:1251:THR:CG2	1:A:1252:ILE:H	0.45	2.23	4	1
1:A:1230:ASP:OD1	1:A:1233:ARG:NH2	0.45	2.49	12	1
1:A:1237:MET:SD	1:A:1238:ASP:N	0.45	2.89	12	1
1:A:1237:MET:SD	1:A:1257:ILE:HG13	0.45	2.51	18	3
1:A:1228:ALA:O	1:A:1229:PRO:C	0.45	2.59	11	1
1:A:1274:THR:HG22	1:A:1275:LEU:N	0.45	2.25	13	2
1:A:1283:VAL:O	1:A:1283:VAL:HG23	0.45	2.10	16	1
1:A:1270:PHE:O	1:A:1271:ASN:HB3	0.45	2.11	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1277:GLU:HA	1:A:1280:LEU:HD23	0.45	1.88	15	1
1:A:1234:ASP:HB3	1:A:1238:ASP:CG	0.45	2.37	19	2
1:A:1230:ASP:C	1:A:1233:ARG:CZ	0.45	2.89	16	1
1:A:1271:ASN:ND2	1:A:1273:GLN:HG3	0.45	2.26	18	1
1:A:1242:THR:O	1:A:1243:ASP:OD1	0.45	2.34	20	1
1:A:1234:ASP:HB3	1:A:1237:MET:SD	0.45	2.52	8	1
1:A:1287:LYS:NZ	1:A:1291:GLN:HE22	0.45	2.10	5	1
1:A:1254:ASP:OD1	1:A:1254:ASP:O	0.45	2.35	6	1
1:A:1249:SER:O	1:A:1249:SER:OG	0.45	2.30	11	1
1:A:1247:LEU:N	1:A:1247:LEU:HD23	0.45	2.26	15	1
1:A:1231:GLU:O	1:A:1233:ARG:N	0.45	2.50	3	1
1:A:1268:ASP:HB2	1:A:1275:LEU:HD23	0.45	1.87	10	1
1:A:1277:GLU:O	1:A:1278:SER:CB	0.44	2.65	2	1
1:A:1236:LEU:CD2	1:A:1257:ILE:HG21	0.44	2.42	4	1
1:A:1287:LYS:C	1:A:1289:GLN:N	0.44	2.75	4	1
1:A:1264:ASN:C	1:A:1264:ASN:ND2	0.44	2.74	5	1
1:A:1280:LEU:HD23	1:A:1280:LEU:O	0.44	2.12	12	1
1:A:1236:LEU:O	1:A:1238:ASP:CG	0.44	2.60	5	1
1:A:1233:ARG:N	1:A:1233:ARG:HE	0.44	2.09	13	1
1:A:1253:MET:SD	1:A:1270:PHE:CE2	0.44	3.10	18	1
1:A:1276:THR:C	1:A:1278:SER:H	0.44	2.20	19	1
1:A:1277:GLU:C	1:A:1278:SER:OG	0.44	2.57	1	1
1:A:1268:ASP:N	1:A:1275:LEU:HB2	0.44	2.27	18	2
1:A:1230:ASP:O	1:A:1233:ARG:NH2	0.44	2.51	16	1
1:A:1288:GLU:C	1:A:1288:GLU:CD	0.44	2.85	4	1
1:A:1267:THR:N	1:A:1275:LEU:HB2	0.44	2.28	13	1
1:A:1261:HIS:NE2	1:A:1268:ASP:C	0.44	2.75	4	1
1:A:1273:GLN:O	1:A:1274:THR:HB	0.44	2.12	13	1
1:A:1289:GLN:CD	1:A:1289:GLN:O	0.44	2.61	13	1
1:A:1271:ASN:C	1:A:1273:GLN:H	0.44	2.21	9	1
1:A:1242:THR:CG2	1:A:1254:ASP:OD2	0.43	2.66	7	1
1:A:1273:GLN:CD	1:A:1273:GLN:C	0.43	2.83	7	1
1:A:1271:ASN:C	1:A:1271:ASN:OD1	0.43	2.61	9	1
1:A:1268:ASP:HB3	1:A:1273:GLN:H	0.43	1.73	12	1
1:A:1247:LEU:CD1	1:A:1253:MET:CE	0.43	2.96	15	1
1:A:1272:ARG:N	1:A:1272:ARG:CD	0.43	2.80	2	1
1:A:1250:GLY:C	1:A:1251:THR:OG1	0.43	2.60	10	2
1:A:1239:THR:OG1	1:A:1240:LEU:N	0.43	2.51	19	2
1:A:1278:SER:N	1:A:1280:LEU:HD12	0.43	2.28	20	1
1:A:1247:LEU:HD12	1:A:1275:LEU:HD21	0.43	1.89	2	2
1:A:1234:ASP:CB	1:A:1237:MET:HE1	0.43	2.43	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1261:HIS:CE1	1:A:1265:SER:HB2	0.43	2.47	5	1
1:A:1260:ARG:CD	1:A:1260:ARG:H	0.43	2.26	10	1
1:A:1271:ASN:ND2	1:A:1273:GLN:CG	0.43	2.82	18	1
1:A:1279:MET:O	1:A:1279:MET:CG	0.43	2.67	3	1
1:A:1255:ARG:NE	1:A:1255:ARG:C	0.43	2.74	4	1
1:A:1249:SER:CB	1:A:1271:ASN:HD22	0.43	2.26	15	2
1:A:1280:LEU:HD23	1:A:1280:LEU:C	0.43	2.38	12	1
1:A:1242:THR:OG1	1:A:1243:ASP:CG	0.43	2.61	18	1
1:A:1258:ILE:CG2	1:A:1275:LEU:HD21	0.43	2.41	20	1
1:A:1288:GLU:CG	1:A:1289:GLN:N	0.43	2.81	4	1
1:A:1233:ARG:HB2	1:A:1239:THR:N	0.43	2.29	17	1
1:A:1277:GLU:C	1:A:1278:SER:HG	0.43	2.22	1	1
1:A:1268:ASP:HB3	1:A:1273:GLN:NE2	0.43	2.28	7	1
1:A:1229:PRO:O	1:A:1230:ASP:CG	0.42	2.62	2	1
1:A:1236:LEU:O	1:A:1236:LEU:HD12	0.42	2.13	5	1
1:A:1287:LYS:CG	1:A:1288:GLU:N	0.42	2.81	10	1
1:A:1259:LEU:HD13	1:A:1259:LEU:O	0.42	2.13	15	1
1:A:1250:GLY:O	1:A:1251:THR:OG1	0.42	2.34	19	1
1:A:1249:SER:HB3	1:A:1271:ASN:ND2	0.42	2.30	10	1
1:A:1231:GLU:CD	1:A:1232:PHE:CZ	0.42	2.97	11	1
1:A:1272:ARG:O	1:A:1273:GLN:CB	0.42	2.67	13	1
1:A:1289:GLN:HG3	1:A:1290:ILE:N	0.42	2.28	14	1
1:A:1288:GLU:C	1:A:1288:GLU:OE1	0.42	2.63	4	1
1:A:1234:ASP:OD1	1:A:1236:LEU:CA	0.42	2.67	10	1
1:A:1238:ASP:O	1:A:1238:ASP:OD2	0.42	2.36	8	1
1:A:1268:ASP:HB3	1:A:1273:GLN:N	0.42	2.30	12	1
1:A:1235:PRO:CG	1:A:1252:ILE:O	0.42	2.67	3	2
1:A:1261:HIS:O	1:A:1262:LEU:C	0.42	2.61	5	1
1:A:1268:ASP:OD1	1:A:1275:LEU:HD23	0.42	2.15	8	1
1:A:1235:PRO:CD	1:A:1252:ILE:O	0.42	2.68	17	1
1:A:1233:ARG:O	1:A:1233:ARG:CG	0.42	2.68	2	1
1:A:1258:ILE:HD13	1:A:1258:ILE:N	0.42	2.29	5	1
1:A:1233:ARG:NH1	1:A:1240:LEU:HA	0.42	2.30	19	1
1:A:1268:ASP:OD1	1:A:1271:ASN:C	0.42	2.62	3	1
1:A:1288:GLU:HG3	1:A:1289:GLN:N	0.42	2.30	4	1
1:A:1277:GLU:CG	1:A:1278:SER:N	0.42	2.82	18	1
1:A:1247:LEU:CD2	1:A:1253:MET:HE3	0.42	2.42	8	1
1:A:1233:ARG:HH12	1:A:1240:LEU:CG	0.42	2.28	9	1
1:A:1233:ARG:N	1:A:1241:MET:HE2	0.42	2.30	12	1
1:A:1259:LEU:C	1:A:1259:LEU:HD23	0.42	2.40	13	1
1:A:1243:ASP:OD2	1:A:1255:ARG:CG	0.41	2.68	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1244:PRO:HG2	1:A:1287:LYS:NZ	0.41	2.30	6	1
1:A:1247:LEU:CD2	1:A:1251:THR:C	0.41	2.93	18	1
1:A:1285:GLU:O	1:A:1288:GLU:CD	0.41	2.64	2	1
1:A:1247:LEU:CD1	1:A:1253:MET:SD	0.41	2.96	4	1
1:A:1293:TRP:CZ3	1:A:1294:MET:HB3	0.41	2.49	19	2
1:A:1268:ASP:CB	1:A:1275:LEU:HD23	0.41	2.45	16	1
1:A:1257:ILE:HD13	1:A:1260:ARG:NH2	0.41	2.30	15	1
1:A:1242:THR:CG2	1:A:1256:SER:OG	0.41	2.69	19	1
1:A:1229:PRO:C	1:A:1231:GLU:N	0.41	2.74	5	1
1:A:1258:ILE:HD12	1:A:1275:LEU:HD21	0.41	1.92	18	1
1:A:1260:ARG:C	1:A:1262:LEU:N	0.41	2.78	2	1
1:A:1266:PRO:O	1:A:1267:THR:HG22	0.41	2.14	3	1
1:A:1236:LEU:HD21	1:A:1257:ILE:CG2	0.41	2.45	17	1
1:A:1259:LEU:O	1:A:1262:LEU:CG	0.41	2.69	17	1
1:A:1234:ASP:HB2	1:A:1238:ASP:CG	0.41	2.41	19	2
1:A:1261:HIS:CE1	1:A:1267:THR:O	0.41	2.73	6	1
1:A:1234:ASP:OD2	1:A:1237:MET:CE	0.41	2.68	7	1
1:A:1253:MET:SD	1:A:1258:ILE:HG13	0.41	2.55	11	1
1:A:1268:ASP:CG	1:A:1271:ASN:CG	0.41	2.89	12	1
1:A:1260:ARG:O	1:A:1264:ASN:OD1	0.41	2.38	14	1
1:A:1262:LEU:N	1:A:1262:LEU:HD23	0.41	2.31	6	1
1:A:1287:LYS:HE3	1:A:1291:GLN:NE2	0.41	2.31	7	1
1:A:1288:GLU:CD	1:A:1289:GLN:N	0.41	2.79	9	1
1:A:1228:ALA:HA	1:A:1293:TRP:CH2	0.41	2.50	13	1
1:A:1257:ILE:O	1:A:1257:ILE:CG2	0.41	2.68	13	1
1:A:1235:PRO:HB2	1:A:1270:PHE:CE2	0.41	2.50	15	1
1:A:1237:MET:SD	1:A:1257:ILE:CG1	0.41	3.08	18	1
1:A:1238:ASP:O	1:A:1239:THR:HG23	0.41	2.15	19	1
1:A:1236:LEU:HD11	1:A:1257:ILE:HG21	0.41	1.93	4	1
1:A:1261:HIS:NE2	1:A:1267:THR:C	0.41	2.79	6	1
1:A:1267:THR:C	1:A:1268:ASP:O	0.41	2.64	14	2
1:A:1273:GLN:O	1:A:1274:THR:HG22	0.41	2.15	13	1
1:A:1247:LEU:HD11	1:A:1253:MET:HE2	0.41	1.93	15	1
1:A:1238:ASP:OD2	1:A:1241:MET:HG2	0.41	2.15	19	1
1:A:1247:LEU:O	1:A:1248:PRO:C	0.41	2.64	4	1
1:A:1228:ALA:C	1:A:1233:ARG:NH2	0.41	2.79	7	1
1:A:1230:ASP:CG	1:A:1233:ARG:HH22	0.41	2.24	12	1
1:A:1249:SER:OG	1:A:1271:ASN:OD1	0.41	2.38	12	1
1:A:1247:LEU:CD1	1:A:1253:MET:HE2	0.41	2.44	1	1
1:A:1289:GLN:O	1:A:1289:GLN:CD	0.41	2.64	1	1
1:A:1246:ARG:O	1:A:1247:LEU:HD23	0.41	2.16	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1232:PHE:C	1:A:1241:MET:HE2	0.41	2.42	18	1
1:A:1236:LEU:HB2	1:A:1270:PHE:CZ	0.40	2.51	5	1
1:A:1271:ASN:O	1:A:1272:ARG:CG	0.40	2.68	7	1
1:A:1234:ASP:N	1:A:1241:MET:HE2	0.40	2.30	16	1
1:A:1269:PRO:HG2	1:A:1270:PHE:CE1	0.40	2.51	19	1
1:A:1243:ASP:CG	1:A:1256:SER:OG	0.40	2.64	6	1
1:A:1236:LEU:CD2	1:A:1269:PRO:HB3	0.40	2.46	13	1
1:A:1233:ARG:HD3	1:A:1233:ARG:N	0.40	2.32	16	1
1:A:1247:LEU:CB	1:A:1248:PRO:HD2	0.40	2.47	17	1
1:A:1253:MET:HE3	1:A:1270:PHE:CE2	0.40	2.51	20	1
1:A:1237:MET:HE2	1:A:1237:MET:H	0.40	1.77	1	1
1:A:1237:MET:HE2	1:A:1237:MET:N	0.40	2.31	1	1
1:A:1244:PRO:CG	1:A:1287:LYS:HE2	0.40	2.46	6	1
1:A:1272:ARG:NH1	1:A:1272:ARG:HG2	0.40	2.31	17	1
1:A:1239:THR:O	1:A:1239:THR:CG2	0.40	2.69	7	1
1:A:1268:ASP:HB2	1:A:1273:GLN:HE22	0.40	1.77	7	1
1:A:1273:GLN:O	1:A:1273:GLN:CD	0.40	2.65	7	1
1:A:1249:SER:HB2	1:A:1271:ASN:ND2	0.40	2.32	8	1
1:A:1261:HIS:O	1:A:1265:SER:N	0.40	2.47	15	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	67/100 (67%)	41±4 (61±5%)	15±3 (23±5%)	11±3 (16±5%)	0	4
All	All	1340/2000 (67%)	813 (61%)	306 (23%)	221 (16%)	0	4

All 38 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	1255	ARG	17
1	A	1265	SER	17
1	A	1268	ASP	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	1271	ASN	16
1	A	1274	THR	16
1	A	1272	ARG	14
1	A	1229	PRO	11
1	A	1275	LEU	9
1	A	1249	SER	8
1	A	1230	ASP	8
1	A	1290	ILE	8
1	A	1257	ILE	7
1	A	1285	GLU	7
1	A	1228	ALA	6
1	A	1288	GLU	6
1	A	1237	MET	5
1	A	1231	GLU	5
1	A	1266	PRO	5
1	A	1291	GLN	5
1	A	1240	LEU	5
1	A	1236	LEU	4
1	A	1287	LYS	3
1	A	1235	PRO	2
1	A	1278	SER	2
1	A	1232	PHE	2
1	A	1250	GLY	2
1	A	1270	PHE	2
1	A	1284	PRO	2
1	A	1241	MET	2
1	A	1238	ASP	1
1	A	1248	PRO	1
1	A	1263	LEU	1
1	A	1264	ASN	1
1	A	1273	GLN	1
1	A	1277	GLU	1
1	A	1267	THR	1
1	A	1239	THR	1
1	A	1293	TRP	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	64/92 (70%)	42±4 (66±6%)	22±4 (34±6%)	1	10
All	All	1280/1840 (70%)	839 (66%)	441 (34%)	1	10

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	1276	THR	19
1	A	1268	ASP	18
1	A	1289	GLN	15
1	A	1255	ARG	15
1	A	1239	THR	14
1	A	1243	ASP	14
1	A	1259	LEU	14
1	A	1286	LEU	14
1	A	1247	LEU	14
1	A	1251	THR	13
1	A	1275	LEU	13
1	A	1293	TRP	13
1	A	1237	MET	13
1	A	1238	ASP	12
1	A	1263	LEU	12
1	A	1271	ASN	12
1	A	1280	LEU	12
1	A	1264	ASN	11
1	A	1267	THR	10
1	A	1233	ARG	9
1	A	1287	LYS	9
1	A	1288	GLU	9
1	A	1294	MET	9
1	A	1265	SER	9
1	A	1236	LEU	9
1	A	1260	ARG	9
1	A	1274	THR	8
1	A	1272	ARG	8
1	A	1253	MET	7
1	A	1278	SER	7
1	A	1240	LEU	7
1	A	1249	SER	7
1	A	1283	VAL	7
1	A	1277	GLU	6
1	A	1262	LEU	6
1	A	1242	THR	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	1234	ASP	6
1	A	1246	ARG	6
1	A	1273	GLN	5
1	A	1230	ASP	5
1	A	1231	GLU	5
1	A	1256	SER	4
1	A	1232	PHE	4
1	A	1285	GLU	3
1	A	1252	ILE	3
1	A	1281	GLU	3
1	A	1279	MET	2
1	A	1290	ILE	2
1	A	1258	ILE	1
1	A	1254	ASP	1
1	A	1270	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