



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 27, 2016 – 04:21 AM BST

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

This is a Full wwPDB NMR Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.
We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org
A user guide is available at
<http://wwpdb.org/validation/2016/NMRValidationReportHelp>
with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The following versions of software and data (see [references ⓘ](#)) were used in the production of this report:

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)
NmrClust : Kelley et al. (1996)
MolProbity : 4.02b-467
Mogul : unknown
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)
RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
ShiftChecker : rb-20027457
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : rb-20027457

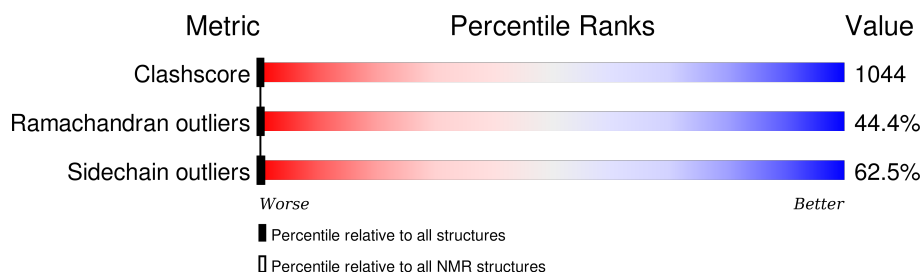
1 Overall quality at a glance

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	114402	11133
Ramachandran outliers	111179	9975
Sidechain outliers	111093	9958

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the experimental data. The red, orange, yellow and green segments indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. A cyan segment indicates the fraction of residues that are not part of the well-defined cores, and a grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions $\leq 5\%$

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	43	

2 Ensemble composition and analysis ⓘ

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

3 Entry composition [i](#)

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

- Molecule 1 is a protein called DIHYDROLIPOAMIDE ACETYLTRANSFERASE.

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

4 Residue-property plots

These plots are provided for all protein, RNA and DNA chains in the entry. The first graphic is the same as shown in the summary in section 1 of this report. The second graphic shows the sequence where residues are colour-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. Stretches of 2 or more consecutive residues without any outliers are shown as green connectors. Residues which are classified as ill-defined in the NMR ensemble, are shown in cyan with an underline colour-coded according to the previous scheme. Residues which were present in the experimental sample, but not modelled in the final structure are shown in grey.

- Molecule 1: DIHYDROLIPOAMIDE ACETYLTRANSFERASE

Chain A: 



5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

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

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

No chemical shift data was provided. No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.

6 Model quality ⓘ

6.1 Standard geometry ⓘ

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	103.30	229/307 (74.6%)	28.42	256/383 (66.8%)
All	All	103.30	229/307 (74.6%)	28.42	256/383 (66.8%)

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	19	34
All	All	19	34

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	34	ASP	CA-CB	553.95	13.72	1.53
1	A	23	GLY	CA-C	445.95	8.65	1.51
1	A	34	ASP	CA-C	390.29	11.67	1.52
1	A	18	ILE	CA-C	380.90	11.43	1.52
1	A	19	ARG	CA-C	345.30	10.50	1.52
1	A	3	ALA	N-CA	334.67	8.15	1.46
1	A	29	ARG	CA-C	330.56	10.12	1.52
1	A	14	LYS	CA-C	309.38	9.57	1.52
1	A	6	SER	CA-CB	288.73	5.86	1.52
1	A	12	ARG	CA-C	288.44	9.02	1.52
1	A	10	TYR	N-CA	286.12	7.18	1.46
1	A	8	ARG	CA-C	271.13	8.57	1.52
1	A	15	GLY	C-O	260.50	5.40	1.23
1	A	9	LYS	N-CA	255.97	6.58	1.46
1	A	26	LYS	CA-C	224.34	7.36	1.52
1	A	20	LEU	CA-C	216.20	7.15	1.52
1	A	6	SER	CA-C	214.21	7.09	1.52
1	A	11	ALA	CA-C	213.47	7.08	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	8	ARG	CG-CD	211.14	6.79	1.51
1	A	10	TYR	CA-C	209.53	6.97	1.52
1	A	34	ASP	N-CA	204.81	5.55	1.46
1	A	21	VAL	CB-CG1	203.99	5.81	1.52
1	A	29	ARG	CZ-NH1	200.79	3.94	1.33
1	A	33	GLU	CD-OE1	198.75	3.44	1.25
1	A	29	ARG	CB-CG	198.15	6.87	1.52
1	A	9	LYS	CA-C	185.16	6.34	1.52
1	A	11	ALA	CA-CB	178.00	5.26	1.52
1	A	12	ARG	CZ-NH2	173.35	3.58	1.33
1	A	14	LYS	CG-CD	169.31	7.28	1.52
1	A	18	ILE	CA-CB	157.89	5.18	1.54
1	A	7	VAL	CA-C	155.64	5.57	1.52
1	A	16	VAL	C-O	154.24	4.16	1.23
1	A	5	PRO	CA-C	151.79	4.56	1.52
1	A	21	VAL	CB-CG2	151.15	4.70	1.52
1	A	2	ILE	CA-C	143.21	5.25	1.52
1	A	29	ARG	NE-CZ	142.77	3.18	1.33
1	A	21	VAL	CA-C	141.94	5.22	1.52
1	A	5	PRO	N-CD	140.02	3.43	1.47
1	A	24	THR	C-O	139.79	3.88	1.23
1	A	4	MET	CA-C	139.03	5.14	1.52
1	A	13	GLU	CA-C	137.84	5.11	1.52
1	A	27	ASN	CA-C	136.81	5.08	1.52
1	A	23	GLY	N-CA	136.29	3.50	1.46
1	A	22	GLN	CA-C	128.60	4.87	1.52
1	A	12	ARG	CB-CG	128.00	4.98	1.52
1	A	33	GLU	CA-C	127.03	4.83	1.52
1	A	31	LEU	CA-C	126.76	4.82	1.52
1	A	3	ALA	CA-C	126.42	4.81	1.52
1	A	26	LYS	CD-CE	125.93	4.66	1.51
1	A	10	TYR	CG-CD2	124.98	3.01	1.39
1	A	17	ASP	CA-C	120.86	4.67	1.52
1	A	20	LEU	CG-CD2	119.79	5.95	1.51
1	A	10	TYR	C-O	115.91	3.43	1.23
1	A	8	ARG	NE-CZ	115.70	2.83	1.33
1	A	31	LEU	C-O	115.33	3.42	1.23
1	A	30	VAL	CB-CG2	112.80	3.89	1.52
1	A	25	GLY	N-CA	110.69	3.12	1.46
1	A	30	VAL	CA-C	108.64	4.35	1.52
1	A	19	ARG	CB-CG	107.96	4.44	1.52
1	A	32	LYS	CA-C	105.97	4.28	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	8	ARG	CZ-NH2	103.24	2.67	1.33
1	A	31	LEU	CG-CD1	103.20	5.33	1.51
1	A	16	VAL	CB-CG1	102.87	3.68	1.52
1	A	13	GLU	CG-CD	101.17	3.03	1.51
1	A	6	SER	CB-OG	100.00	2.72	1.42
1	A	12	ARG	CZ-NH1	98.96	2.61	1.33
1	A	28	GLY	CA-C	97.06	3.07	1.51
1	A	7	VAL	N-CA	96.74	3.39	1.46
1	A	28	GLY	N-CA	96.34	2.90	1.46
1	A	14	LYS	CB-CG	91.82	4.00	1.52
1	A	30	VAL	CA-CB	89.97	3.43	1.54
1	A	10	TYR	CE1-CZ	88.36	2.53	1.38
1	A	19	ARG	CZ-NH2	87.04	2.46	1.33
1	A	32	LYS	N-CA	82.19	3.10	1.46
1	A	13	GLU	CD-OE2	81.88	2.15	1.25
1	A	17	ASP	N-CA	81.80	3.10	1.46
1	A	16	VAL	N-CA	80.54	3.07	1.46
1	A	21	VAL	N-CA	80.38	3.07	1.46
1	A	18	ILE	N-CA	80.11	3.06	1.46
1	A	26	LYS	N-CA	79.14	3.04	1.46
1	A	8	ARG	N-CA	77.62	3.01	1.46
1	A	15	GLY	N-CA	77.40	2.62	1.46
1	A	31	LEU	CG-CD2	77.17	4.37	1.51
1	A	25	GLY	CA-C	77.00	2.75	1.51
1	A	22	GLN	N-CA	76.53	2.99	1.46
1	A	5	PRO	CA-CB	75.19	3.04	1.53
1	A	32	LYS	CE-NZ	75.11	3.36	1.49
1	A	3	ALA	CA-CB	74.80	3.09	1.52
1	A	29	ARG	CD-NE	73.97	2.72	1.46
1	A	24	THR	N-CA	72.88	2.92	1.46
1	A	16	VAL	CB-CG2	72.19	3.04	1.52
1	A	21	VAL	CA-CB	72.11	3.06	1.54
1	A	12	ARG	CD-NE	72.04	2.69	1.46
1	A	33	GLU	N-CA	71.75	2.89	1.46
1	A	10	TYR	CD2-CE2	71.44	2.46	1.39
1	A	9	LYS	CA-CB	70.84	3.09	1.53
1	A	26	LYS	CB-CG	70.65	3.43	1.52
1	A	10	TYR	CA-CB	70.65	3.09	1.53
1	A	10	TYR	CD1-CE1	69.39	2.43	1.39
1	A	33	GLU	CA-CB	69.10	3.06	1.53
1	A	8	ARG	CA-CB	69.05	3.05	1.53
1	A	29	ARG	CZ-NH2	66.54	2.19	1.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	17	ASP	CA-CB	66.18	2.99	1.53
1	A	22	GLN	CG-CD	65.60	3.02	1.51
1	A	8	ARG	CZ-NH1	65.37	2.18	1.33
1	A	1	VAL	CB-CG1	61.39	2.81	1.52
1	A	23	GLY	C-O	61.05	2.21	1.23
1	A	16	VAL	CA-CB	60.84	2.82	1.54
1	A	24	THR	CB-OG1	58.90	2.61	1.43
1	A	10	TYR	CG-CD1	58.41	2.15	1.39
1	A	24	THR	CA-CB	58.16	3.04	1.53
1	A	28	GLY	C-O	57.39	2.15	1.23
1	A	10	TYR	CB-CG	57.34	2.37	1.51
1	A	33	GLU	CG-CD	57.15	2.37	1.51
1	A	17	ASP	CB-CG	57.14	2.71	1.51
1	A	18	ILE	CB-CG2	56.73	3.28	1.52
1	A	5	PRO	CG-CD	56.02	3.35	1.50
1	A	32	LYS	CA-CB	55.69	2.76	1.53
1	A	33	GLU	CB-CG	54.78	2.56	1.52
1	A	7	VAL	CB-CG1	54.28	2.66	1.52
1	A	2	ILE	CB-CG2	54.02	3.20	1.52
1	A	21	VAL	C-O	52.65	2.23	1.23
1	A	1	VAL	CA-C	52.57	2.89	1.52
1	A	27	ASN	C-O	52.28	2.22	1.23
1	A	32	LYS	C-O	52.01	2.22	1.23
1	A	16	VAL	CA-C	51.97	2.88	1.52
1	A	17	ASP	CG-OD2	51.44	2.43	1.25
1	A	11	ALA	C-O	49.98	2.18	1.23
1	A	1	VAL	N-CA	49.59	2.45	1.46
1	A	27	ASN	N-CA	49.44	2.45	1.46
1	A	29	ARG	C-O	49.20	2.16	1.23
1	A	14	LYS	CD-CE	48.67	2.73	1.51
1	A	19	ARG	CG-CD	48.57	2.73	1.51
1	A	17	ASP	C-O	48.22	2.15	1.23
1	A	4	MET	CA-CB	46.53	2.56	1.53
1	A	13	GLU	CD-OE1	46.33	1.76	1.25
1	A	26	LYS	CA-CB	45.64	2.54	1.53
1	A	33	GLU	CD-OE2	45.41	1.75	1.25
1	A	30	VAL	N-CA	45.35	2.37	1.46
1	A	20	LEU	N-CA	45.24	2.36	1.46
1	A	19	ARG	N-CA	43.87	2.34	1.46
1	A	31	LEU	CB-CG	41.22	2.72	1.52
1	A	9	LYS	CB-CG	40.75	2.62	1.52
1	A	22	GLN	CA-CB	39.92	2.41	1.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	17	ASP	CG-OD1	39.25	2.15	1.25
1	A	32	LYS	CB-CG	37.54	2.54	1.52
1	A	29	ARG	N-CA	34.42	2.15	1.46
1	A	12	ARG	N-CA	34.36	2.15	1.46
1	A	2	ILE	CG1-CD1	34.14	3.85	1.50
1	A	13	GLU	CB-CG	33.83	2.16	1.52
1	A	22	GLN	CB-CG	33.77	2.43	1.52
1	A	2	ILE	CB-CG1	33.48	2.47	1.54
1	A	22	GLN	CD-NE2	31.95	2.12	1.32
1	A	24	THR	CA-C	31.43	2.34	1.52
1	A	8	ARG	CD-NE	31.07	1.99	1.46
1	A	32	LYS	CG-CD	29.02	2.51	1.52
1	A	4	MET	CB-CG	28.62	2.42	1.51
1	A	8	ARG	CB-CG	28.17	2.28	1.52
1	A	18	ILE	CG1-CD1	28.11	3.44	1.50
1	A	13	GLU	C-O	28.00	1.76	1.23
1	A	3	ALA	C-O	28.00	1.76	1.23
1	A	33	GLU	C-O	27.78	1.76	1.23
1	A	12	ARG	C-O	27.76	1.76	1.23
1	A	15	GLY	CA-C	-26.94	1.08	1.51
1	A	14	LYS	CE-NZ	26.89	2.16	1.49
1	A	20	LEU	CA-CB	26.85	2.15	1.53
1	A	19	ARG	CZ-NH1	-26.61	0.98	1.33
1	A	24	THR	CB-CG2	26.22	2.38	1.52
1	A	26	LYS	CE-NZ	24.83	2.11	1.49
1	A	32	LYS	CD-CE	24.77	2.13	1.51
1	A	27	ASN	CA-CB	24.73	2.17	1.53
1	A	9	LYS	C-O	24.71	1.70	1.23
1	A	22	GLN	CD-OE1	24.13	1.77	1.24
1	A	12	ARG	CG-CD	23.72	2.11	1.51
1	A	29	ARG	CG-CD	23.35	2.10	1.51
1	A	5	PRO	CB-CG	22.98	2.64	1.50
1	A	5	PRO	N-CA	-22.86	1.08	1.47
1	A	6	SER	N-CA	22.47	1.91	1.46
1	A	30	VAL	CB-CG1	-21.27	1.08	1.52
1	A	14	LYS	CA-CB	21.20	2.00	1.53
1	A	1	VAL	CB-CG2	-21.13	1.08	1.52
1	A	19	ARG	CA-CB	-20.64	1.08	1.53
1	A	2	ILE	CA-CB	-20.22	1.08	1.54
1	A	31	LEU	CA-CB	-19.71	1.08	1.53
1	A	12	ARG	NE-CZ	-18.98	1.08	1.33
1	A	4	MET	N-CA	-18.81	1.08	1.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	33	GLU	C-N	18.45	1.76	1.34
1	A	22	GLN	C-N	-18.13	1.00	1.33
1	A	10	TYR	CZ-OH	-17.38	1.08	1.37
1	A	9	LYS	C-N	15.77	1.70	1.34
1	A	11	ALA	N-CA	15.04	1.76	1.46
1	A	4	MET	CG-SD	14.72	2.19	1.81
1	A	2	ILE	C-N	-14.60	1.00	1.34
1	A	12	ARG	CA-CB	-14.32	1.22	1.53
1	A	29	ARG	CA-CB	-14.31	1.22	1.53
1	A	14	LYS	C-N	-13.55	1.08	1.33
1	A	30	VAL	C-O	-13.13	0.98	1.23
1	A	4	MET	C-O	-13.12	0.98	1.23
1	A	1	VAL	C-O	-13.05	0.98	1.23
1	A	26	LYS	CG-CD	-12.92	1.08	1.52
1	A	20	LEU	CG-CD1	-12.81	1.04	1.51
1	A	10	TYR	CE2-CZ	12.12	1.54	1.38
1	A	7	VAL	CA-CB	-12.06	1.29	1.54
1	A	22	GLN	C-O	-12.04	1.00	1.23
1	A	2	ILE	C-O	-12.04	1.00	1.23
1	A	27	ASN	CG-ND2	-11.38	1.04	1.32
1	A	6	SER	C-N	-11.24	1.08	1.34
1	A	20	LEU	C-N	-11.17	1.08	1.34
1	A	26	LYS	C-N	-11.12	1.08	1.34
1	A	25	GLY	C-N	-11.11	1.08	1.34
1	A	19	ARG	C-N	-11.11	1.08	1.34
1	A	7	VAL	C-N	-10.92	1.08	1.34
1	A	25	GLY	C-O	-9.22	1.08	1.23
1	A	27	ASN	CG-OD1	-8.83	1.04	1.24
1	A	13	GLU	N-CA	-8.37	1.29	1.46
1	A	18	ILE	CB-CG1	-8.01	1.31	1.54
1	A	14	LYS	C-O	-7.86	1.08	1.23
1	A	7	VAL	C-O	-7.84	1.08	1.23
1	A	20	LEU	C-O	-7.84	1.08	1.23
1	A	26	LYS	C-O	-7.84	1.08	1.23
1	A	19	ARG	C-O	-7.75	1.08	1.23
1	A	18	ILE	C-O	-7.73	1.08	1.23
1	A	6	SER	C-O	-7.66	1.08	1.23
1	A	5	PRO	C-O	-7.45	1.08	1.23
1	A	4	MET	C-N	7.11	1.47	1.34
1	A	14	LYS	N-CA	-6.90	1.32	1.46
1	A	30	VAL	C-N	6.50	1.49	1.34
1	A	1	VAL	C-N	6.42	1.48	1.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	8	ARG	C-N	-5.04	1.22	1.34

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	29	ARG	NE-CZ-NH2	-143.60	48.50	120.30
1	A	8	ARG	NE-CZ-NH1	-121.94	59.33	120.30
1	A	8	ARG	NE-CZ-NH2	-119.24	60.68	120.30
1	A	29	ARG	NE-CZ-NH1	-117.18	61.71	120.30
1	A	12	ARG	NH1-CZ-NH2	-100.42	8.94	119.40
1	A	12	ARG	NE-CZ-NH1	-93.81	73.39	120.30
1	A	12	ARG	NE-CZ-NH2	-91.69	74.46	120.30
1	A	10	TYR	CB-CG-CD2	-88.20	68.08	121.00
1	A	10	TYR	CD1-CG-CD2	-86.87	22.34	117.90
1	A	8	ARG	NH1-CZ-NH2	-76.72	35.00	119.40
1	A	17	ASP	CB-CG-OD2	-67.39	57.65	118.30
1	A	10	TYR	CG-CD2-CE2	65.19	173.46	121.30
1	A	19	ARG	NE-CZ-NH2	65.05	152.83	120.30
1	A	11	ALA	CB-CA-C	-63.51	14.84	110.10
1	A	33	GLU	OE1-CD-OE2	-62.83	47.90	123.30
1	A	15	GLY	CA-C-O	-62.52	8.07	120.60
1	A	17	ASP	CB-CG-OD1	-61.80	62.68	118.30
1	A	5	PRO	N-CA-CB	-61.56	29.42	103.30
1	A	10	TYR	CB-CG-CD1	-57.97	86.22	121.00
1	A	21	VAL	CG1-CB-CG2	-54.59	23.56	110.90
1	A	21	VAL	CA-C-O	-54.50	5.65	120.10
1	A	10	TYR	CE1-CZ-CE2	-52.93	35.12	119.80
1	A	34	ASP	CB-CA-C	-51.85	6.71	110.40
1	A	17	ASP	OD1-CG-OD2	-50.99	26.41	123.30
1	A	10	TYR	CD1-CE1-CZ	50.13	164.92	119.80
1	A	14	LYS	CA-CB-CG	-49.93	3.55	113.40
1	A	7	VAL	CB-CA-C	-49.69	16.98	111.40
1	A	21	VAL	CA-CB-CG2	-49.16	37.16	110.90
1	A	12	ARG	CA-CB-CG	-49.15	5.27	113.40
1	A	30	VAL	CA-CB-CG2	-49.11	37.23	110.90
1	A	29	ARG	CD-NE-CZ	-48.52	55.68	123.60
1	A	13	GLU	OE1-CD-OE2	-47.81	65.93	123.30
1	A	6	SER	N-CA-CB	-47.53	39.20	110.50
1	A	2	ILE	C-N-CA	-47.03	4.13	121.70
1	A	18	ILE	CB-CA-C	-46.92	17.76	111.60
1	A	10	TYR	CA-C-O	-44.65	26.34	120.10
1	A	16	VAL	CG1-CB-CG2	-44.06	40.41	110.90

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	24	THR	CA-C-O	-43.57	28.59	120.10
1	A	3	ALA	CB-CA-C	-41.32	48.12	110.10
1	A	1	VAL	CA-CB-CG1	-41.16	49.16	110.90
1	A	8	ARG	CD-NE-CZ	-41.03	66.16	123.60
1	A	18	ILE	CG1-CB-CG2	-40.98	21.24	111.40
1	A	21	VAL	CA-CB-CG1	-40.22	50.57	110.90
1	A	33	GLU	CG-CD-OE1	-39.97	38.36	118.30
1	A	20	LEU	N-CA-C	-39.81	3.50	111.00
1	A	29	ARG	CA-CB-CG	-39.52	26.45	113.40
1	A	17	ASP	CB-CA-C	-39.37	31.66	110.40
1	A	9	LYS	O-C-N	-39.20	59.98	122.70
1	A	33	GLU	O-C-N	-39.18	60.01	122.70
1	A	6	SER	CB-CA-C	-38.87	36.24	110.10
1	A	32	LYS	CB-CA-C	-38.25	33.91	110.40
1	A	8	ARG	C-N-CA	-37.97	26.77	121.70
1	A	6	SER	C-N-CA	-37.85	27.08	121.70
1	A	34	ASP	CA-C-O	-37.40	41.57	120.10
1	A	16	VAL	CA-CB-CG2	-37.30	54.95	110.90
1	A	25	GLY	C-N-CA	-36.89	29.47	121.70
1	A	17	ASP	N-CA-CB	-36.18	45.48	110.60
1	A	7	VAL	C-N-CA	-35.90	31.95	121.70
1	A	7	VAL	CG1-CB-CG2	-35.73	53.74	110.90
1	A	27	ASN	N-CA-C	-35.72	14.57	111.00
1	A	24	THR	N-CA-CB	-35.34	43.14	110.30
1	A	12	ARG	CA-C-O	-34.64	47.35	120.10
1	A	26	LYS	CA-CB-CG	-33.98	38.65	113.40
1	A	28	GLY	CA-C-O	-33.87	59.63	120.60
1	A	20	LEU	CA-C-O	-33.80	49.13	120.10
1	A	14	LYS	N-CA-C	-33.71	19.98	111.00
1	A	8	ARG	N-CA-CB	-33.32	50.63	110.60
1	A	22	GLN	CA-C-O	-33.25	50.27	120.10
1	A	13	GLU	CG-CD-OE1	-33.17	51.96	118.30
1	A	7	VAL	CA-CB-CG1	33.15	160.63	110.90
1	A	16	VAL	CA-C-O	-32.91	50.99	120.10
1	A	18	ILE	C-N-CA	-32.86	39.56	121.70
1	A	33	GLU	N-CA-CB	-32.83	51.51	110.60
1	A	30	VAL	N-CA-CB	-32.82	39.29	111.50
1	A	11	ALA	N-CA-CB	-32.60	64.45	110.10
1	A	13	GLU	CB-CA-C	-32.48	45.44	110.40
1	A	5	PRO	CA-N-CD	-32.20	66.42	111.50
1	A	30	VAL	CA-C-O	-32.03	52.83	120.10
1	A	20	LEU	C-N-CA	-31.44	43.10	121.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	4	MET	CA-CB-CG	-31.37	59.97	113.30
1	A	19	ARG	NH1-CZ-NH2	-31.08	85.22	119.40
1	A	33	GLU	CB-CA-C	-30.48	49.45	110.40
1	A	22	GLN	CG-CD-OE1	-30.41	60.78	121.60
1	A	18	ILE	CA-CB-CG2	30.32	171.54	110.90
1	A	4	MET	N-CA-CB	-30.17	56.30	110.60
1	A	16	VAL	CB-CA-C	-30.04	54.32	111.40
1	A	5	PRO	N-CD-CG	-30.00	58.19	103.20
1	A	24	THR	OG1-CB-CG2	-30.00	41.00	110.00
1	A	2	ILE	CA-C-O	-29.83	57.46	120.10
1	A	32	LYS	CA-C-O	-29.68	57.77	120.10
1	A	19	ARG	CA-C-N	-29.00	53.40	117.20
1	A	22	GLN	CB-CA-C	-28.78	52.83	110.40
1	A	26	LYS	N-CA-CB	-28.47	59.35	110.60
1	A	10	TYR	CG-CD1-CE1	28.18	143.84	121.30
1	A	22	GLN	C-N-CA	-28.05	63.39	122.30
1	A	20	LEU	CD1-CG-CD2	-27.83	27.02	110.50
1	A	30	VAL	N-CA-C	-27.78	35.99	111.00
1	A	32	LYS	N-CA-CB	-27.61	60.90	110.60
1	A	10	TYR	CZ-CE2-CD2	27.34	144.40	119.80
1	A	31	LEU	CD1-CG-CD2	-27.21	28.86	110.50
1	A	25	GLY	CA-C-N	-27.19	57.38	117.20
1	A	21	VAL	N-CA-CB	-27.15	51.76	111.50
1	A	32	LYS	CA-CB-CG	-27.11	53.75	113.40
1	A	13	GLU	CG-CD-OE2	-27.04	64.22	118.30
1	A	2	ILE	CA-CB-CG1	-26.85	59.98	111.00
1	A	30	VAL	CB-CA-C	-26.81	60.47	111.40
1	A	8	ARG	CA-CB-CG	-26.44	55.23	113.40
1	A	28	GLY	N-CA-C	-26.24	47.50	113.10
1	A	32	LYS	N-CA-C	-26.14	40.42	111.00
1	A	16	VAL	N-CA-CB	-25.69	54.98	111.50
1	A	2	ILE	CA-CB-CG2	-25.51	59.89	110.90
1	A	22	GLN	CG-CD-NE2	-25.24	56.12	116.70
1	A	17	ASP	CA-CB-CG	-25.01	58.37	113.40
1	A	1	VAL	CA-C-O	-25.00	67.60	120.10
1	A	29	ARG	CG-CD-NE	-24.74	59.85	111.80
1	A	19	ARG	N-CA-C	-24.67	44.39	111.00
1	A	31	LEU	CA-CB-CG	-24.59	58.73	115.30
1	A	31	LEU	CB-CG-CD2	-24.44	69.45	111.00
1	A	14	LYS	CD-CE-NZ	24.39	167.80	111.70
1	A	22	GLN	OE1-CD-NE2	-24.32	65.96	121.90
1	A	33	GLU	CA-CB-CG	-24.26	60.03	113.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	3	ALA	CA-C-O	-24.10	69.49	120.10
1	A	26	LYS	C-N-CA	-24.06	61.55	121.70
1	A	14	LYS	C-N-CA	-23.74	72.45	122.30
1	A	9	LYS	C-N-CA	-23.64	62.59	121.70
1	A	18	ILE	CA-CB-CG1	23.31	155.28	111.00
1	A	9	LYS	CA-C-N	-23.25	66.04	117.20
1	A	23	GLY	N-CA-C	-23.08	55.41	113.10
1	A	26	LYS	CD-CE-NZ	22.99	164.59	111.70
1	A	19	ARG	C-N-CA	-22.35	65.83	121.70
1	A	33	GLU	CA-C-N	-22.34	68.06	117.20
1	A	13	GLU	CA-C-O	-22.29	73.29	120.10
1	A	2	ILE	CG1-CB-CG2	-21.91	63.19	111.40
1	A	14	LYS	CA-C-O	-21.77	74.39	120.10
1	A	33	GLU	CA-C-O	-21.68	74.57	120.10
1	A	4	MET	N-CA-C	-21.58	52.74	111.00
1	A	30	VAL	CA-C-N	21.32	164.11	117.20
1	A	13	GLU	CB-CG-CD	-20.79	58.06	114.20
1	A	34	ASP	N-CA-CB	-20.70	73.34	110.60
1	A	29	ARG	N-CA-C	-20.49	55.69	111.00
1	A	33	GLU	CG-CD-OE2	-20.14	78.02	118.30
1	A	1	VAL	CG1-CB-CG2	20.07	143.02	110.90
1	A	10	TYR	CB-CA-C	-19.93	70.53	110.40
1	A	24	THR	CA-CB-CG2	-19.93	84.50	112.40
1	A	27	ASN	N-CA-CB	-19.88	74.82	110.60
1	A	18	ILE	N-CA-C	-19.77	57.61	111.00
1	A	27	ASN	CA-C-O	-19.58	78.99	120.10
1	A	19	ARG	N-CA-CB	19.30	145.34	110.60
1	A	12	ARG	CB-CA-C	19.27	148.93	110.40
1	A	13	GLU	N-CA-C	19.25	162.96	111.00
1	A	31	LEU	CA-C-O	-19.11	79.97	120.10
1	A	32	LYS	CB-CG-CD	-18.94	62.35	111.60
1	A	30	VAL	CG1-CB-CG2	-18.93	80.62	110.90
1	A	2	ILE	CA-C-N	18.91	158.81	117.20
1	A	29	ARG	CB-CA-C	18.84	148.09	110.40
1	A	19	ARG	CG-CD-NE	18.75	151.17	111.80
1	A	9	LYS	N-CA-CB	-18.74	76.87	110.60
1	A	3	ALA	N-CA-CB	-18.38	84.37	110.10
1	A	31	LEU	CB-CG-CD1	-18.24	80.00	111.00
1	A	20	LEU	CA-C-N	18.18	157.20	117.20
1	A	33	GLU	C-N-CA	-17.95	76.83	121.70
1	A	29	ARG	CA-C-O	-17.85	82.62	120.10
1	A	6	SER	CA-C-O	17.62	157.10	120.10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	20	LEU	CB-CA-C	-17.47	77.00	110.20
1	A	6	SER	N-CA-C	-17.35	64.15	111.00
1	A	5	PRO	CB-CA-C	-17.18	69.06	112.00
1	A	23	GLY	CA-C-O	-17.11	89.81	120.60
1	A	18	ILE	N-CA-CB	-16.94	71.85	110.80
1	A	1	VAL	CA-C-N	16.90	154.37	117.20
1	A	1	VAL	N-CA-C	-16.59	66.22	111.00
1	A	24	THR	CB-CA-C	-16.45	67.18	111.60
1	A	4	MET	CA-C-O	-16.36	85.75	120.10
1	A	6	SER	CA-C-N	-15.93	82.16	117.20
1	A	34	ASP	CA-C-N	-15.47	83.17	117.20
1	A	2	ILE	N-CA-C	14.98	151.44	111.00
1	A	20	LEU	N-CA-CB	-14.95	80.50	110.40
1	A	1	VAL	N-CA-CB	14.88	144.25	111.50
1	A	10	TYR	CA-CB-CG	-14.87	85.15	113.40
1	A	14	LYS	CB-CG-CD	-14.86	72.96	111.60
1	A	15	GLY	N-CA-C	-14.75	76.22	113.10
1	A	34	ASP	N-CA-C	-14.48	71.91	111.00
1	A	11	ALA	N-CA-C	-14.31	72.36	111.00
1	A	17	ASP	N-CA-C	-14.11	72.91	111.00
1	A	27	ASN	CA-CB-CG	-14.03	82.53	113.40
1	A	16	VAL	CA-CB-CG1	-13.78	90.23	110.90
1	A	4	MET	CB-CA-C	-13.73	82.94	110.40
1	A	9	LYS	CB-CA-C	-13.71	82.97	110.40
1	A	22	GLN	N-CA-CB	-13.62	86.09	110.60
1	A	22	GLN	CB-CG-CD	-13.18	77.32	111.60
1	A	12	ARG	CB-CG-CD	13.17	145.83	111.60
1	A	18	ILE	CA-C-N	-12.87	88.88	117.20
1	A	19	ARG	CA-CB-CG	-12.30	86.35	113.40
1	A	26	LYS	N-CA-C	-12.09	78.37	111.00
1	A	17	ASP	CA-C-O	-12.04	94.81	120.10
1	A	31	LEU	N-CA-C	-12.02	78.55	111.00
1	A	22	GLN	CA-C-N	11.90	140.00	116.20
1	A	31	LEU	CB-CA-C	11.69	132.41	110.20
1	A	34	ASP	CA-CB-CG	-11.53	88.04	113.40
1	A	11	ALA	CA-C-O	-11.32	96.33	120.10
1	A	27	ASN	CB-CA-C	-11.29	87.83	110.40
1	A	5	PRO	N-CA-C	-11.24	82.87	112.10
1	A	21	VAL	N-CA-C	-11.14	80.93	111.00
1	A	30	VAL	CA-CB-CG1	-11.05	94.33	110.90
1	A	2	ILE	CB-CA-C	-10.96	89.69	111.60
1	A	5	PRO	C-N-CA	10.95	149.09	121.70

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	25	GLY	N-CA-C	-10.90	85.85	113.10
1	A	4	MET	CA-C-N	10.61	146.79	117.10
1	A	24	THR	CA-CB-OG1	-10.56	86.82	109.00
1	A	20	LEU	CB-CG-CD2	-10.55	93.06	111.00
1	A	12	ARG	CD-NE-CZ	-10.42	109.01	123.60
1	A	6	SER	CA-CB-OG	-10.41	83.09	111.20
1	A	8	ARG	CA-C-N	-10.21	94.74	117.20
1	A	9	LYS	CA-CB-CG	-10.09	91.21	113.40
1	A	19	ARG	CA-C-O	10.02	141.15	120.10
1	A	14	LYS	N-CA-CB	-9.84	92.89	110.60
1	A	10	TYR	N-CA-CB	-9.40	93.67	110.60
1	A	26	LYS	CB-CG-CD	9.06	135.17	111.60
1	A	9	LYS	CB-CG-CD	-9.01	88.18	111.60
1	A	29	ARG	NH1-CZ-NH2	-8.91	109.60	119.40
1	A	8	ARG	CB-CA-C	8.91	128.21	110.40
1	A	25	GLY	O-C-N	-8.70	108.78	122.70
1	A	10	TYR	CE1-CZ-OH	8.68	143.53	120.10
1	A	6	SER	O-C-N	-8.61	108.93	122.70
1	A	19	ARG	O-C-N	-8.59	108.96	122.70
1	A	5	PRO	CA-CB-CG	-8.54	87.77	104.00
1	A	26	LYS	O-C-N	-8.54	109.04	122.70
1	A	7	VAL	O-C-N	-8.41	109.24	122.70
1	A	20	LEU	O-C-N	-8.38	109.29	122.70
1	A	5	PRO	CB-CG-CD	-8.30	74.11	106.50
1	A	14	LYS	O-C-N	-8.26	109.16	123.20
1	A	1	VAL	CB-CA-C	-8.10	96.01	111.40
1	A	7	VAL	CA-C-O	-8.04	103.21	120.10
1	A	8	ARG	CA-C-O	8.03	136.96	120.10
1	A	4	MET	C-N-CD	7.87	144.92	128.40
1	A	8	ARG	N-CA-C	-7.73	90.14	111.00
1	A	29	ARG	N-CA-CB	-7.63	96.86	110.60
1	A	18	ILE	O-C-N	-7.48	110.74	122.70
1	A	20	LEU	CA-CB-CG	-7.35	98.39	115.30
1	A	26	LYS	CA-C-O	-7.18	105.03	120.10
1	A	25	GLY	CA-C-O	6.97	133.14	120.60
1	A	13	GLU	CA-CB-CG	-6.90	98.22	113.40
1	A	4	MET	CG-SD-CE	-6.13	90.39	100.20
1	A	7	VAL	N-CA-C	-6.08	94.58	111.00
1	A	27	ASN	CB-CG-OD1	-6.08	109.45	121.60
1	A	7	VAL	CA-CB-CG2	5.98	119.86	110.90
1	A	32	LYS	CD-CE-NZ	5.77	124.97	111.70
1	A	14	LYS	CA-C-N	5.75	127.71	116.20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	8	ARG	CB-CG-CD	-5.66	96.89	111.60
1	A	12	ARG	N-CA-C	-5.61	95.85	111.00
1	A	13	GLU	N-CA-CB	5.42	120.35	110.60
1	A	27	ASN	OD1-CG-ND2	-5.39	109.50	121.90
1	A	7	VAL	N-CA-CB	-5.37	99.70	111.50
1	A	1	VAL	C-N-CA	-5.24	108.59	121.70
1	A	30	VAL	C-N-CA	-5.22	108.65	121.70
1	A	33	GLU	N-CA-C	-5.21	96.93	111.00
1	A	19	ARG	CD-NE-CZ	-5.04	116.55	123.60

All chiral outliers are listed below.

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

All planar outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	4	MET	Mainchain
1	A	10	TYR	Sidechain
1	A	27	ASN	Sidechain
1	A	33	GLU	Sidechain
1	A	5	PRO	Mainchain
1	A	22	GLN	Sidechain,Mainchain,Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	17	ASP	Sidechain
1	A	6	SER	Mainchain,Peptide
1	A	12	ARG	Sidechain
1	A	29	ARG	Sidechain
1	A	18	ILE	Mainchain,Peptide
1	A	1	VAL	Mainchain,Peptide
1	A	7	VAL	Mainchain,Peptide
1	A	13	GLU	Sidechain
1	A	2	ILE	Mainchain,Peptide
1	A	30	VAL	Mainchain,Peptide
1	A	19	ARG	Mainchain,Peptide
1	A	8	ARG	Sidechain,Peptide
1	A	25	GLY	Mainchain,Peptide
1	A	14	LYS	Mainchain
1	A	20	LEU	Mainchain
1	A	26	LYS	Mainchain,Peptide

6.2 Too-close contacts ⓘ

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in each chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen atoms added and optimized by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes averaged over the ensemble.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	321	344	311	660
All	All	321	344	311	660

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 1044.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:1:VAL:CG1	1:A:1:VAL:HA	1.61	1.19
1:A:29:ARG:NE	1:A:34:ASP:CB	1.53	1.68
1:A:7:VAL:HG21	1:A:7:VAL:CG1	1.50	1.36
1:A:29:ARG:NH1	1:A:35:ILE:CA	1.50	1.74
1:A:32:LYS:CG	1:A:38:PHE:CD1	1.50	1.94
1:A:25:GLY:CA	1:A:34:ASP:CB	1.50	1.84
1:A:6:SER:CB	1:A:9:LYS:HB2	1.48	1.34
1:A:16:VAL:CB	1:A:32:LYS:HD3	1.47	1.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:25:GLY:HA3	1:A:34:ASP:CG	1.45	1.32
1:A:9:LYS:C	1:A:10:TYR:N	1.45	1.70
1:A:25:GLY:HA3	1:A:34:ASP:CB	1.43	0.92
1:A:29:ARG:NH1	1:A:35:ILE:HA	1.42	1.15
1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:HA	1.42	1.40
1:A:24:THR:CA	1:A:34:ASP:OD2	1.41	1.66
1:A:31:LEU:N	1:A:39:LEU:N	1.40	1.68
1:A:14:LYS:CG	1:A:14:LYS:CA	1.39	2.01
1:A:13:GLU:HB2	1:A:14:LYS:CD	1.39	1.46
1:A:14:LYS:CB	1:A:14:LYS:CA	1.37	2.00
1:A:9:LYS:O	1:A:39:LEU:CD2	1.36	1.73
1:A:25:GLY:CA	1:A:34:ASP:CG	1.35	1.90
1:A:30:VAL:C	1:A:38:PHE:CB	1.35	1.93
1:A:25:GLY:CA	1:A:34:ASP:HB2	1.35	1.45
1:A:25:GLY:CA	1:A:29:ARG:NE	1.34	1.89
1:A:33:GLU:CA	1:A:38:PHE:CE2	1.34	2.10
1:A:6:SER:HB3	1:A:9:LYS:CB	1.34	1.50
1:A:31:LEU:CD1	1:A:38:PHE:O	1.34	1.76
1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CD1	1.33	1.89
1:A:31:LEU:H	1:A:39:LEU:N	1.33	0.83
1:A:21:VAL:HG12	1:A:21:VAL:C	1.33	1.42
1:A:25:GLY:HA3	1:A:29:ARG:NE	1.32	1.36
1:A:10:TYR:CG	1:A:10:TYR:CD1	1.32	2.15
1:A:6:SER:CA	1:A:6:SER:N	1.32	1.91
1:A:13:GLU:O	1:A:14:LYS:CG	1.31	1.76
1:A:24:THR:OG1	1:A:24:THR:CG2	1.31	1.76
1:A:18:ILE:HG23	1:A:29:ARG:CZ	1.30	1.51
1:A:29:ARG:NH1	1:A:34:ASP:O	1.30	1.62
1:A:4:MET:SD	1:A:4:MET:CG	1.30	2.19
1:A:30:VAL:C	1:A:38:PHE:N	1.30	1.75
1:A:9:LYS:C	1:A:9:LYS:HZ1	1.29	1.28
1:A:18:ILE:CD1	1:A:18:ILE:HG21	1.29	1.56
1:A:29:ARG:CD	1:A:29:ARG:CG	1.29	2.10
1:A:5:PRO:CA	1:A:6:SER:HB2	1.29	1.57
1:A:18:ILE:CG1	1:A:18:ILE:CG2	1.28	2.11
1:A:9:LYS:C	1:A:9:LYS:O	1.28	1.70
1:A:12:ARG:CD	1:A:12:ARG:CG	1.26	2.11
1:A:32:LYS:CD	1:A:32:LYS:CE	1.26	2.13
1:A:8:ARG:NE	1:A:8:ARG:CD	1.26	1.99
1:A:29:ARG:NE	1:A:34:ASP:CG	1.26	1.89
1:A:25:GLY:HA2	1:A:34:ASP:OD2	1.26	1.26
1:A:26:LYS:CG	1:A:26:LYS:CA	1.25	2.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:2:ILE:CG1	1:A:2:ILE:CA	1.24	2.15
1:A:20:LEU:CB	1:A:20:LEU:CA	1.24	2.15
1:A:31:LEU:N	1:A:38:PHE:CA	1.24	1.91
1:A:25:GLY:CA	1:A:34:ASP:OD2	1.24	1.85
1:A:3:ALA:O	1:A:3:ALA:C	1.24	1.76
1:A:7:VAL:CG1	1:A:7:VAL:CG2	1.24	2.15
1:A:17:ASP:CB	1:A:18:ILE:CB	1.24	2.15
1:A:9:LYS:O	1:A:10:TYR:N	1.24	1.70
1:A:29:ARG:C	1:A:32:LYS:HG2	1.23	1.54
1:A:12:ARG:O	1:A:12:ARG:C	1.23	1.76
1:A:1:VAL:CG1	1:A:1:VAL:CA	1.23	2.15
1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CG	1.23	2.16
1:A:27:ASN:CB	1:A:27:ASN:CA	1.22	2.17
1:A:9:LYS:O	1:A:39:LEU:HD21	1.22	1.08
1:A:33:GLU:CD	1:A:33:GLU:OE2	1.22	1.75
1:A:24:THR:CG2	1:A:34:ASP:HB3	1.22	1.64
1:A:13:GLU:OE1	1:A:13:GLU:CD	1.21	1.76
1:A:22:GLN:CD	1:A:22:GLN:OE1	1.21	1.77
1:A:17:ASP:OD1	1:A:17:ASP:O	1.21	1.53
1:A:7:VAL:N	1:A:35:ILE:HD12	1.21	1.46
1:A:29:ARG:NH1	1:A:34:ASP:C	1.20	1.92
1:A:22:GLN:C	1:A:22:GLN:HE22	1.20	1.39
1:A:16:VAL:CB	1:A:17:ASP:CA	1.20	2.18
1:A:8:ARG:HD2	1:A:10:TYR:CB	1.19	1.66
1:A:2:ILE:O	1:A:2:ILE:HG21	1.19	1.36
1:A:30:VAL:C	1:A:38:PHE:H	1.19	1.34
1:A:17:ASP:CG	1:A:18:ILE:CA	1.18	2.12
1:A:21:VAL:CG2	1:A:22:GLN:N	1.18	2.07
1:A:7:VAL:N	1:A:35:ILE:CD1	1.18	2.05
1:A:31:LEU:N	1:A:38:PHE:C	1.18	1.96
1:A:9:LYS:HB3	1:A:10:TYR:CB	1.18	1.67
1:A:31:LEU:H	1:A:38:PHE:C	1.17	1.43
1:A:29:ARG:HH12	1:A:29:ARG:C	1.17	1.42
1:A:20:LEU:HD21	1:A:21:VAL:CA	1.17	1.68
1:A:24:THR:HG23	1:A:24:THR:OG1	1.16	1.28
1:A:28:GLY:C	1:A:37:ALA:HB2	1.16	1.60
1:A:5:PRO:CD	1:A:5:PRO:C	1.15	2.14
1:A:9:LYS:CB	1:A:10:TYR:CB	1.15	2.23
1:A:31:LEU:O	1:A:31:LEU:HD13	1.15	1.41
1:A:26:LYS:C	1:A:27:ASN:CA	1.15	2.15
1:A:9:LYS:NZ	1:A:39:LEU:CD2	1.15	2.10
1:A:19:ARG:C	1:A:20:LEU:CA	1.14	2.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:26:LYS:NZ	1:A:26:LYS:CE	1.14	2.11
1:A:19:ARG:HH12	1:A:20:LEU:N	1.13	1.37
1:A:25:GLY:C	1:A:26:LYS:CA	1.12	2.17
1:A:29:ARG:HH11	1:A:35:ILE:CA	1.12	1.41
1:A:7:VAL:C	1:A:8:ARG:CA	1.12	2.17
1:A:5:PRO:N	1:A:6:SER:HB2	1.12	1.58
1:A:8:ARG:CG	1:A:8:ARG:CB	1.12	2.28
1:A:15:GLY:O	1:A:16:VAL:CA	1.11	1.97
1:A:24:THR:HG23	1:A:34:ASP:CB	1.11	1.76
1:A:21:VAL:HG22	1:A:22:GLN:N	1.11	1.59
1:A:20:LEU:HD12	1:A:20:LEU:N	1.10	1.55
1:A:16:VAL:O	1:A:17:ASP:CA	1.10	2.00
1:A:29:ARG:HH11	1:A:34:ASP:C	1.10	1.44
1:A:24:THR:CA	1:A:25:GLY:CA	1.10	2.30
1:A:29:ARG:HH11	1:A:35:ILE:N	1.10	1.45
1:A:17:ASP:O	1:A:18:ILE:CA	1.09	1.99
1:A:10:TYR:C	1:A:30:VAL:HG11	1.09	1.67
1:A:17:ASP:OD2	1:A:20:LEU:HA	1.09	1.45
1:A:25:GLY:CA	1:A:29:ARG:HE	1.09	1.52
1:A:6:SER:HA	1:A:39:LEU:CB	1.09	1.76
1:A:29:ARG:NH1	1:A:35:ILE:N	1.09	1.98
1:A:12:ARG:CD	1:A:13:GLU:N	1.09	2.15
1:A:5:PRO:CB	1:A:5:PRO:N	1.09	2.16
1:A:14:LYS:NZ	1:A:14:LYS:CE	1.08	2.16
1:A:29:ARG:NE	1:A:34:ASP:HB2	1.08	1.52
1:A:4:MET:CB	1:A:4:MET:N	1.08	2.16
1:A:27:ASN:CA	1:A:36:ASP:CG	1.08	2.22
1:A:31:LEU:O	1:A:32:LYS:CA	1.08	2.00
1:A:16:VAL:CB	1:A:32:LYS:CD	1.07	2.31
1:A:31:LEU:O	1:A:38:PHE:CD1	1.07	2.06
1:A:31:LEU:HD12	1:A:31:LEU:C	1.07	1.69
1:A:2:ILE:O	1:A:2:ILE:CG2	1.07	2.01
1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:HD13	1.06	1.57
1:A:8:ARG:NH1	1:A:8:ARG:CZ	1.06	2.18
1:A:19:ARG:NH1	1:A:20:LEU:N	1.06	2.02
1:A:24:THR:O	1:A:25:GLY:CA	1.06	2.02
1:A:29:ARG:NH1	1:A:29:ARG:C	1.06	2.09
1:A:5:PRO:CG	1:A:6:SER:H	1.06	1.61
1:A:10:TYR:CG	1:A:10:TYR:CB	1.06	2.37
1:A:30:VAL:C	1:A:38:PHE:HB3	1.06	1.61
1:A:16:VAL:HG21	1:A:16:VAL:CG1	1.06	1.79
1:A:30:VAL:C	1:A:38:PHE:CA	1.05	2.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CA	1.05	2.35
1:A:33:GLU:CA	1:A:38:PHE:HE2	1.05	1.49
1:A:24:THR:N	1:A:24:THR:CB	1.05	2.19
1:A:10:TYR:CE1	1:A:11:ALA:CB	1.05	2.39
1:A:27:ASN:CA	1:A:36:ASP:OD2	1.05	2.04
1:A:18:ILE:CG2	1:A:29:ARG:CZ	1.04	2.34
1:A:9:LYS:NZ	1:A:9:LYS:C	1.04	2.08
1:A:10:TYR:OH	1:A:30:VAL:HG11	1.03	1.52
1:A:21:VAL:CA	1:A:22:GLN:N	1.03	2.20
1:A:33:GLU:CA	1:A:38:PHE:CZ	1.03	2.40
1:A:22:GLN:NE2	1:A:22:GLN:CD	1.03	2.12
1:A:20:LEU:CD2	1:A:21:VAL:HG23	1.03	1.83
1:A:12:ARG:HE	1:A:12:ARG:C	1.02	1.56
1:A:16:VAL:HG13	1:A:16:VAL:HG21	1.02	1.27
1:A:24:THR:C	1:A:34:ASP:OD2	1.02	1.97
1:A:3:ALA:HA	1:A:6:SER:O	1.02	1.53
1:A:9:LYS:NZ	1:A:10:TYR:N	1.02	2.08
1:A:16:VAL:CG1	1:A:29:ARG:CZ	1.02	2.37
1:A:14:LYS:CG	1:A:14:LYS:HA	1.01	1.82
1:A:6:SER:CB	1:A:9:LYS:CB	1.01	2.23
1:A:10:TYR:CZ	1:A:30:VAL:HG11	1.01	1.90
1:A:24:THR:CB	1:A:24:THR:CG2	1.00	2.38
1:A:29:ARG:HE	1:A:34:ASP:HB2	1.00	0.95
1:A:9:LYS:HB3	1:A:10:TYR:HB2	1.00	1.14
1:A:29:ARG:C	1:A:30:VAL:HG12	1.00	1.76
1:A:8:ARG:HD2	1:A:10:TYR:HB3	1.00	1.33
1:A:33:GLU:CD	1:A:33:GLU:CA	1.00	2.30
1:A:18:ILE:HD11	1:A:19:ARG:N	0.99	1.71
1:A:21:VAL:CG1	1:A:21:VAL:CG2	0.99	2.40
1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:CG	0.99	2.40
1:A:13:GLU:CB	1:A:14:LYS:CD	0.99	2.39
1:A:9:LYS:C	1:A:39:LEU:CD2	0.99	2.31
1:A:2:ILE:H	1:A:3:ALA:CA	0.99	1.69
1:A:27:ASN:O	1:A:28:GLY:CA	0.99	2.11
1:A:32:LYS:CG	1:A:38:PHE:CG	0.99	2.45
1:A:23:GLY:O	1:A:24:THR:CA	0.98	2.11
1:A:25:GLY:HA2	1:A:29:ARG:NH2	0.98	1.71
1:A:12:ARG:NE	1:A:12:ARG:C	0.98	2.15
1:A:22:GLN:CB	1:A:22:GLN:CA	0.98	2.41
1:A:24:THR:CA	1:A:25:GLY:HA2	0.98	1.85
1:A:16:VAL:CG2	1:A:16:VAL:CG1	0.98	2.40
1:A:20:LEU:C	1:A:20:LEU:HD21	0.97	1.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:31:LEU:HD13	1:A:38:PHE:O	0.97	1.58
1:A:21:VAL:O	1:A:22:GLN:CA	0.97	2.12
1:A:16:VAL:HB	1:A:32:LYS:HD3	0.97	1.27
1:A:32:LYS:CG	1:A:38:PHE:CE1	0.97	2.48
1:A:3:ALA:C	1:A:4:MET:CA	0.97	2.33
1:A:4:MET:CB	1:A:4:MET:CG	0.97	2.43
1:A:19:ARG:C	1:A:20:LEU:CD1	0.96	2.32
1:A:19:ARG:C	1:A:20:LEU:HD13	0.96	1.80
1:A:18:ILE:CG2	1:A:18:ILE:HG12	0.96	1.87
1:A:17:ASP:HB2	1:A:18:ILE:CB	0.96	1.86
1:A:19:ARG:O	1:A:20:LEU:HD13	0.96	1.61
1:A:29:ARG:NE	1:A:29:ARG:HG2	0.96	1.75
1:A:3:ALA:C	1:A:4:MET:N	0.96	2.18
1:A:16:VAL:CB	1:A:16:VAL:O	0.96	2.13
1:A:26:LYS:CD	1:A:26:LYS:CA	0.96	2.44
1:A:29:ARG:C	1:A:32:LYS:CG	0.96	2.34
1:A:31:LEU:CD2	1:A:31:LEU:H	0.96	1.70
1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:C	0.96	2.34
1:A:31:LEU:CD1	1:A:31:LEU:O	0.96	2.14
1:A:29:ARG:NE	1:A:34:ASP:C	0.95	2.19
1:A:20:LEU:HD23	1:A:21:VAL:HG23	0.95	1.33
1:A:22:GLN:CG	1:A:22:GLN:CB	0.95	2.43
1:A:6:SER:CA	1:A:39:LEU:CB	0.95	2.42
1:A:8:ARG:CD	1:A:10:TYR:HB3	0.95	1.90
1:A:24:THR:CA	1:A:24:THR:O	0.94	2.14
1:A:16:VAL:HG12	1:A:29:ARG:C	0.94	1.83
1:A:21:VAL:C	1:A:22:GLN:CA	0.94	2.36
1:A:9:LYS:NZ	1:A:39:LEU:HD22	0.94	1.76
1:A:24:THR:HA	1:A:25:GLY:HA2	0.93	1.37
1:A:33:GLU:OE1	1:A:33:GLU:CG	0.93	2.16
1:A:9:LYS:HZ1	1:A:39:LEU:CD2	0.93	1.69
1:A:12:ARG:NH2	1:A:13:GLU:HA	0.93	1.77
1:A:9:LYS:C	1:A:39:LEU:HD21	0.93	1.82
1:A:2:ILE:CB	1:A:2:ILE:CG1	0.92	2.47
1:A:33:GLU:CD	1:A:33:GLU:CG	0.92	2.37
1:A:21:VAL:HG22	1:A:21:VAL:CG1	0.92	1.94
1:A:7:VAL:HG21	1:A:7:VAL:HG13	0.92	1.38
1:A:13:GLU:HB2	1:A:14:LYS:HD2	0.91	1.42
1:A:20:LEU:CD2	1:A:21:VAL:CG2	0.91	2.48
1:A:29:ARG:C	1:A:35:ILE:HA	0.90	1.87
1:A:4:MET:CA	1:A:4:MET:CG	0.90	2.49
1:A:18:ILE:CG2	1:A:18:ILE:CD1	0.90	2.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:31:LEU:HD13	1:A:32:LYS:N	0.90	1.81
1:A:25:GLY:CA	1:A:26:LYS:N	0.90	2.35
1:A:22:GLN:C	1:A:22:GLN:NE2	0.90	2.25
1:A:31:LEU:N	1:A:39:LEU:H	0.90	1.35
1:A:6:SER:CA	1:A:39:LEU:HB2	0.90	1.96
1:A:16:VAL:HG13	1:A:29:ARG:CZ	0.89	1.97
1:A:25:GLY:CA	1:A:29:ARG:NH2	0.89	2.35
1:A:20:LEU:C	1:A:21:VAL:CA	0.89	2.40
1:A:33:GLU:HG2	1:A:33:GLU:C	0.89	1.87
1:A:6:SER:CB	1:A:8:ARG:NE	0.89	2.35
1:A:20:LEU:HD12	1:A:20:LEU:CA	0.89	1.96
1:A:17:ASP:N	1:A:17:ASP:CB	0.89	2.35
1:A:11:ALA:CB	1:A:11:ALA:C	0.89	2.40
1:A:14:LYS:CE	1:A:16:VAL:CA	0.89	2.51
1:A:12:ARG:CG	1:A:13:GLU:HA	0.89	1.97
1:A:26:LYS:CE	1:A:28:GLY:N	0.89	2.35
1:A:9:LYS:HZ3	1:A:39:LEU:CD2	0.89	1.79
1:A:1:VAL:C	1:A:3:ALA:HB3	0.88	1.88
1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	0.88	2.36
1:A:29:ARG:C	1:A:38:PHE:HB2	0.88	1.89
1:A:32:LYS:CD	1:A:32:LYS:CG	0.88	2.51
1:A:6:SER:HA	1:A:39:LEU:HB2	0.88	1.42
1:A:7:VAL:O	1:A:7:VAL:HG11	0.88	1.69
1:A:8:ARG:HD2	1:A:9:LYS:HB3	0.88	1.42
1:A:10:TYR:C	1:A:30:VAL:CG1	0.87	2.43
1:A:9:LYS:HZ1	1:A:10:TYR:N	0.87	1.65
1:A:8:ARG:CD	1:A:10:TYR:CB	0.87	2.52
1:A:9:LYS:CB	1:A:10:TYR:HB3	0.87	1.99
1:A:28:GLY:C	1:A:37:ALA:CB	0.87	2.43
1:A:18:ILE:CD1	1:A:18:ILE:C	0.87	2.43
1:A:6:SER:HB3	1:A:8:ARG:NE	0.86	1.84
1:A:9:LYS:NZ	1:A:9:LYS:O	0.86	2.08
1:A:24:THR:OG1	1:A:34:ASP:HB3	0.86	1.71
1:A:17:ASP:O	1:A:17:ASP:C	0.86	2.15
1:A:24:THR:HA	1:A:34:ASP:OD2	0.86	1.69
1:A:20:LEU:CD2	1:A:21:VAL:CA	0.85	2.53
1:A:5:PRO:CG	1:A:6:SER:N	0.85	2.39
1:A:32:LYS:CB	1:A:32:LYS:CG	0.85	2.53
1:A:28:GLY:O	1:A:28:GLY:C	0.85	2.15
1:A:8:ARG:CZ	1:A:9:LYS:CA	0.85	2.55
1:A:26:LYS:CA	1:A:26:LYS:CB	0.85	2.54
1:A:33:GLU:CA	1:A:34:ASP:CA	0.85	2.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:5:PRO:N	1:A:6:SER:CB	0.85	2.39
1:A:2:ILE:N	1:A:3:ALA:CA	0.85	2.39
1:A:13:GLU:OE2	1:A:13:GLU:CD	0.85	2.15
1:A:9:LYS:CB	1:A:10:TYR:HB2	0.84	1.93
1:A:31:LEU:N	1:A:38:PHE:CB	0.84	2.34
1:A:8:ARG:HD3	1:A:8:ARG:CZ	0.84	2.02
1:A:17:ASP:CG	1:A:17:ASP:OD1	0.84	2.15
1:A:20:LEU:CD2	1:A:20:LEU:C	0.83	2.46
1:A:27:ASN:CG	1:A:27:ASN:CA	0.83	2.47
1:A:33:GLU:CB	1:A:33:GLU:CG	0.83	2.56
1:A:2:ILE:C	1:A:2:ILE:HG21	0.83	1.93
1:A:29:ARG:O	1:A:29:ARG:C	0.83	2.16
1:A:8:ARG:CA	1:A:8:ARG:CG	0.83	2.57
1:A:11:ALA:C	1:A:12:ARG:CG	0.83	2.47
1:A:1:VAL:C	1:A:3:ALA:CB	0.83	2.47
1:A:21:VAL:CG1	1:A:21:VAL:C	0.83	2.39
1:A:4:MET:O	1:A:5:PRO:CB	0.83	2.27
1:A:4:MET:CA	1:A:4:MET:CB	0.82	2.56
1:A:16:VAL:C	1:A:32:LYS:CG	0.82	2.47
1:A:25:GLY:CA	1:A:26:LYS:HB3	0.82	2.04
1:A:12:ARG:HD2	1:A:13:GLU:N	0.82	1.88
1:A:1:VAL:HG21	1:A:24:THR:HG21	0.82	1.50
1:A:22:GLN:CD	1:A:22:GLN:CA	0.82	2.47
1:A:25:GLY:HA3	1:A:34:ASP:HB2	0.82	0.90
1:A:16:VAL:HG11	1:A:29:ARG:CZ	0.82	2.03
1:A:5:PRO:CA	1:A:6:SER:CB	0.82	2.52
1:A:9:LYS:NZ	1:A:39:LEU:HD23	0.82	1.90
1:A:12:ARG:CZ	1:A:12:ARG:C	0.81	2.48
1:A:20:LEU:C	1:A:21:VAL:CG2	0.81	2.49
1:A:11:ALA:C	1:A:11:ALA:O	0.81	2.18
1:A:3:ALA:O	1:A:3:ALA:HB1	0.81	1.75
1:A:16:VAL:CB	1:A:17:ASP:HA	0.81	2.04
1:A:22:GLN:NE2	1:A:22:GLN:OE1	0.81	2.14
1:A:23:GLY:C	1:A:26:LYS:HB2	0.81	1.97
1:A:31:LEU:CD1	1:A:38:PHE:C	0.81	2.48
1:A:31:LEU:CD1	1:A:31:LEU:HD22	0.80	2.06
1:A:7:VAL:C	1:A:7:VAL:HG11	0.80	1.97
1:A:25:GLY:C	1:A:26:LYS:CG	0.80	2.50
1:A:30:VAL:HG13	1:A:35:ILE:HD13	0.80	1.51
1:A:19:ARG:NH2	1:A:19:ARG:CZ	0.79	2.46
1:A:14:LYS:CB	1:A:14:LYS:N	0.79	2.45
1:A:33:GLU:HG2	1:A:33:GLU:OE1	0.79	1.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:12:ARG:O	1:A:12:ARG:NE	0.79	2.15
1:A:18:ILE:CD1	1:A:19:ARG:N	0.79	2.45
1:A:14:LYS:C	1:A:15:GLY:CA	0.79	2.51
1:A:16:VAL:C	1:A:32:LYS:CD	0.79	2.52
1:A:1:VAL:CA	1:A:1:VAL:N	0.79	2.45
1:A:27:ASN:N	1:A:27:ASN:CA	0.79	2.45
1:A:25:GLY:HA2	1:A:34:ASP:CG	0.79	1.77
1:A:17:ASP:N	1:A:17:ASP:HB3	0.78	1.93
1:A:8:ARG:HD2	1:A:10:TYR:HB2	0.78	1.55
1:A:23:GLY:C	1:A:24:THR:CA	0.78	2.51
1:A:24:THR:HB	1:A:24:THR:N	0.78	1.92
1:A:31:LEU:CD1	1:A:31:LEU:CD2	0.78	2.59
1:A:14:LYS:HE3	1:A:16:VAL:CA	0.78	2.06
1:A:31:LEU:CG	1:A:36:ASP:O	0.78	2.31
1:A:20:LEU:HD21	1:A:21:VAL:CG2	0.78	2.07
1:A:23:GLY:O	1:A:23:GLY:C	0.78	2.21
1:A:30:VAL:C	1:A:38:PHE:HB2	0.78	1.97
1:A:22:GLN:NE2	1:A:23:GLY:CA	0.78	2.46
1:A:19:ARG:C	1:A:20:LEU:CB	0.78	2.52
1:A:29:ARG:NE	1:A:34:ASP:OD1	0.78	2.16
1:A:29:ARG:NE	1:A:29:ARG:CG	0.78	2.46
1:A:12:ARG:NH2	1:A:13:GLU:CA	0.78	2.46
1:A:29:ARG:CD	1:A:34:ASP:O	0.78	2.31
1:A:21:VAL:O	1:A:21:VAL:C	0.77	2.23
1:A:33:GLU:O	1:A:39:LEU:HD13	0.77	1.79
1:A:27:ASN:C	1:A:27:ASN:O	0.77	2.22
1:A:7:VAL:CG1	1:A:8:ARG:NE	0.77	2.47
1:A:28:GLY:N	1:A:29:ARG:N	0.77	2.32
1:A:32:LYS:CD	1:A:32:LYS:CB	0.77	2.61
1:A:21:VAL:HG13	1:A:21:VAL:CG2	0.77	2.09
1:A:11:ALA:C	1:A:11:ALA:HB3	0.77	2.00
1:A:6:SER:CA	1:A:39:LEU:HB3	0.77	2.09
1:A:4:MET:C	1:A:5:PRO:CB	0.77	2.52
1:A:9:LYS:CG	1:A:9:LYS:CB	0.77	2.62
1:A:31:LEU:CG	1:A:40:ALA:O	0.77	2.30
1:A:34:ASP:CB	1:A:34:ASP:C	0.76	2.53
1:A:3:ALA:O	1:A:4:MET:N	0.76	2.19
1:A:31:LEU:CD1	1:A:38:PHE:HA	0.76	2.10
1:A:12:ARG:HG3	1:A:12:ARG:NH2	0.76	1.96
1:A:14:LYS:CG	1:A:14:LYS:N	0.76	2.48
1:A:1:VAL:CG2	1:A:24:THR:HG21	0.75	2.12
1:A:33:GLU:CB	1:A:38:PHE:CD2	0.75	2.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:29:ARG:NH1	1:A:30:VAL:CA	0.75	2.49
1:A:11:ALA:HB1	1:A:12:ARG:HG2	0.75	1.58
1:A:19:ARG:CZ	1:A:20:LEU:N	0.75	2.49
1:A:7:VAL:CB	1:A:8:ARG:NE	0.75	2.49
1:A:24:THR:CG2	1:A:34:ASP:CB	0.75	2.52
1:A:5:PRO:CB	1:A:5:PRO:CG	0.75	2.64
1:A:29:ARG:C	1:A:30:VAL:CG1	0.75	2.55
1:A:32:LYS:C	1:A:33:GLU:CA	0.75	2.55
1:A:26:LYS:HZ2	1:A:27:ASN:C	0.74	1.85
1:A:24:THR:HG23	1:A:34:ASP:HB3	0.74	0.81
1:A:12:ARG:CG	1:A:13:GLU:N	0.74	2.49
1:A:11:ALA:HB1	1:A:11:ALA:C	0.74	2.02
1:A:28:GLY:N	1:A:28:GLY:C	0.74	2.41
1:A:16:VAL:CG1	1:A:29:ARG:C	0.74	2.55
1:A:12:ARG:HD2	1:A:16:VAL:HG22	0.74	1.57
1:A:33:GLU:CB	1:A:38:PHE:CE2	0.74	2.71
1:A:10:TYR:HE1	1:A:11:ALA:CB	0.73	1.89
1:A:26:LYS:C	1:A:27:ASN:CB	0.73	2.54
1:A:7:VAL:CG1	1:A:7:VAL:CB	0.73	2.66
1:A:24:THR:O	1:A:26:LYS:HB3	0.73	1.84
1:A:8:ARG:CD	1:A:9:LYS:HB3	0.73	2.13
1:A:29:ARG:HH12	1:A:35:ILE:HA	0.73	0.92
1:A:22:GLN:CA	1:A:22:GLN:OE1	0.73	2.37
1:A:20:LEU:C	1:A:21:VAL:CB	0.72	2.58
1:A:3:ALA:CB	1:A:3:ALA:O	0.72	2.37
1:A:33:GLU:OE2	1:A:33:GLU:C	0.72	2.28
1:A:7:VAL:CA	1:A:9:LYS:HB3	0.72	2.14
1:A:20:LEU:CD1	1:A:20:LEU:CA	0.72	2.67
1:A:31:LEU:CD1	1:A:38:PHE:CA	0.72	2.67
1:A:22:GLN:O	1:A:22:GLN:CG	0.72	2.38
1:A:9:LYS:C	1:A:9:LYS:CE	0.72	2.58
1:A:32:LYS:HD2	1:A:32:LYS:CB	0.72	2.13
1:A:7:VAL:CG2	1:A:8:ARG:NE	0.71	2.52
1:A:13:GLU:OE2	1:A:14:LYS:CG	0.71	2.37
1:A:13:GLU:CD	1:A:13:GLU:HB3	0.71	2.05
1:A:9:LYS:C	1:A:39:LEU:HD22	0.71	2.05
1:A:29:ARG:NH2	1:A:29:ARG:NE	0.71	2.38
1:A:31:LEU:CD1	1:A:31:LEU:C	0.71	2.57
1:A:28:GLY:C	1:A:29:ARG:N	0.71	2.44
1:A:31:LEU:CD1	1:A:32:LYS:N	0.70	2.54
1:A:21:VAL:CG1	1:A:22:GLN:N	0.70	2.54
1:A:22:GLN:CG	1:A:22:GLN:NE2	0.70	2.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:2:ILE:N	1:A:3:ALA:CB	0.70	2.53
1:A:16:VAL:HB	1:A:17:ASP:CA	0.70	2.12
1:A:31:LEU:O	1:A:38:PHE:CG	0.70	2.43
1:A:21:VAL:CG1	1:A:21:VAL:HG21	0.70	2.15
1:A:33:GLU:O	1:A:33:GLU:CG	0.70	2.40
1:A:9:LYS:O	1:A:39:LEU:HD23	0.70	1.83
1:A:21:VAL:C	1:A:22:GLN:HA	0.70	2.06
1:A:26:LYS:HZ2	1:A:36:ASP:CB	0.70	1.99
1:A:31:LEU:H	1:A:39:LEU:H	0.70	0.72
1:A:29:ARG:CG	1:A:37:ALA:HB3	0.70	2.16
1:A:16:VAL:C	1:A:16:VAL:CB	0.69	2.60
1:A:9:LYS:HZ3	1:A:39:LEU:HD23	0.69	1.44
1:A:21:VAL:HG22	1:A:21:VAL:O	0.69	1.87
1:A:13:GLU:OE1	1:A:13:GLU:CG	0.69	2.39
1:A:10:TYR:OH	1:A:11:ALA:CA	0.69	2.41
1:A:23:GLY:C	1:A:26:LYS:CB	0.69	2.62
1:A:16:VAL:CG2	1:A:16:VAL:CA	0.68	2.71
1:A:31:LEU:HD22	1:A:31:LEU:HD13	0.68	1.60
1:A:6:SER:CB	1:A:7:VAL:CA	0.68	2.70
1:A:30:VAL:HG13	1:A:35:ILE:CD1	0.68	2.18
1:A:8:ARG:CD	1:A:9:LYS:CB	0.68	2.71
1:A:24:THR:C	1:A:34:ASP:CG	0.68	2.53
1:A:29:ARG:C	1:A:30:VAL:CB	0.67	2.62
1:A:1:VAL:O	1:A:3:ALA:HB3	0.67	1.87
1:A:31:LEU:N	1:A:38:PHE:HB3	0.67	1.98
1:A:7:VAL:CG1	1:A:8:ARG:CD	0.67	2.72
1:A:8:ARG:CD	1:A:8:ARG:CZ	0.67	2.72
1:A:21:VAL:CG1	1:A:21:VAL:O	0.67	2.42
1:A:6:SER:HA	1:A:39:LEU:H	0.67	1.48
1:A:13:GLU:CB	1:A:13:GLU:CD	0.67	2.63
1:A:31:LEU:CD2	1:A:31:LEU:HD13	0.67	2.19
1:A:33:GLU:HG3	1:A:34:ASP:CA	0.67	2.20
1:A:14:LYS:CD	1:A:14:LYS:CE	0.67	2.72
1:A:22:GLN:O	1:A:22:GLN:HG3	0.67	1.89
1:A:3:ALA:HA	1:A:6:SER:C	0.66	2.09
1:A:33:GLU:O	1:A:33:GLU:HG2	0.66	1.91
1:A:19:ARG:CD	1:A:19:ARG:CG	0.66	2.73
1:A:12:ARG:C	1:A:24:THR:OG1	0.66	2.34
1:A:31:LEU:CG	1:A:31:LEU:CB	0.66	2.72
1:A:13:GLU:N	1:A:16:VAL:HA	0.66	2.06
1:A:13:GLU:CG	1:A:13:GLU:C	0.66	2.64
1:A:16:VAL:HB	1:A:32:LYS:CD	0.66	2.10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:25:GLY:O	1:A:26:LYS:CD	0.66	2.44
1:A:17:ASP:CB	1:A:17:ASP:C	0.65	2.64
1:A:8:ARG:CB	1:A:8:ARG:N	0.65	2.59
1:A:12:ARG:NH1	1:A:13:GLU:HA	0.65	2.06
1:A:17:ASP:CB	1:A:18:ILE:CG1	0.65	2.73
1:A:2:ILE:CD1	1:A:2:ILE:CG2	0.65	2.74
1:A:6:SER:HA	1:A:39:LEU:N	0.65	2.06
1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:HG2	0.65	2.21
1:A:11:ALA:C	1:A:12:ARG:HG2	0.65	2.12
1:A:17:ASP:CA	1:A:18:ILE:CB	0.65	2.74
1:A:17:ASP:OD2	1:A:17:ASP:O	0.64	2.15
1:A:11:ALA:C	1:A:12:ARG:CA	0.64	2.66
1:A:19:ARG:CZ	1:A:20:LEU:CD2	0.64	2.75
1:A:18:ILE:CG1	1:A:29:ARG:CZ	0.64	2.75
1:A:30:VAL:O	1:A:38:PHE:N	0.64	2.05
1:A:33:GLU:CB	1:A:33:GLU:N	0.64	2.59
1:A:12:ARG:CZ	1:A:12:ARG:NH1	0.64	2.61
1:A:3:ALA:HB2	1:A:4:MET:N	0.64	2.07
1:A:8:ARG:HD2	1:A:9:LYS:CB	0.64	2.21
1:A:10:TYR:CD2	1:A:11:ALA:N	0.63	2.66
1:A:13:GLU:OE2	1:A:13:GLU:OE1	0.63	2.15
1:A:20:LEU:HD23	1:A:21:VAL:CG2	0.63	2.13
1:A:10:TYR:CD2	1:A:11:ALA:CB	0.63	2.81
1:A:14:LYS:HE2	1:A:15:GLY:HA3	0.63	1.70
1:A:18:ILE:HG23	1:A:29:ARG:NH2	0.63	2.09
1:A:22:GLN:CB	1:A:22:GLN:OE1	0.63	2.47
1:A:15:GLY:CA	1:A:15:GLY:N	0.62	2.62
1:A:6:SER:CB	1:A:8:ARG:HE	0.62	2.04
1:A:7:VAL:HA	1:A:10:TYR:HB2	0.62	1.69
1:A:12:ARG:O	1:A:12:ARG:CZ	0.62	2.47
1:A:14:LYS:C	1:A:15:GLY:C	0.62	2.57
1:A:5:PRO:CD	1:A:5:PRO:O	0.62	2.46
1:A:18:ILE:HD11	1:A:18:ILE:HG21	0.62	1.63
1:A:24:THR:HA	1:A:25:GLY:CA	0.62	2.06
1:A:33:GLU:CG	1:A:33:GLU:C	0.62	2.59
1:A:7:VAL:CA	1:A:10:TYR:HB2	0.62	2.25
1:A:12:ARG:NH2	1:A:12:ARG:CG	0.62	2.62
1:A:17:ASP:C	1:A:18:ILE:N	0.62	2.52
1:A:25:GLY:C	1:A:26:LYS:CB	0.62	2.68
1:A:17:ASP:OD2	1:A:20:LEU:CA	0.61	2.36
1:A:18:ILE:CG2	1:A:29:ARG:CD	0.61	2.77
1:A:30:VAL:O	1:A:31:LEU:CB	0.61	2.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:4:MET:CG	1:A:4:MET:CE	0.61	2.78
1:A:22:GLN:HB2	1:A:23:GLY:C	0.61	2.16
1:A:12:ARG:HG3	1:A:12:ARG:HH21	0.61	1.54
1:A:7:VAL:HA	1:A:9:LYS:HB3	0.61	1.70
1:A:21:VAL:N	1:A:21:VAL:CG2	0.61	2.63
1:A:2:ILE:HA	1:A:3:ALA:CB	0.61	2.26
1:A:26:LYS:NZ	1:A:26:LYS:O	0.60	2.34
1:A:26:LYS:NZ	1:A:27:ASN:C	0.60	2.54
1:A:3:ALA:CA	1:A:6:SER:O	0.60	2.42
1:A:17:ASP:CB	1:A:18:ILE:HB	0.60	2.19
1:A:13:GLU:CA	1:A:13:GLU:CG	0.60	2.80
1:A:29:ARG:CD	1:A:29:ARG:CZ	0.60	2.79
1:A:17:ASP:OD2	1:A:17:ASP:CB	0.60	2.49
1:A:26:LYS:N	1:A:29:ARG:NE	0.60	2.49
1:A:5:PRO:HG2	1:A:6:SER:H	0.60	1.50
1:A:12:ARG:CG	1:A:13:GLU:CA	0.60	2.78
1:A:26:LYS:HZ2	1:A:36:ASP:N	0.60	1.94
1:A:14:LYS:HZ3	1:A:15:GLY:CA	0.60	2.10
1:A:20:LEU:CG	1:A:20:LEU:CA	0.60	2.79
1:A:32:LYS:HG3	1:A:38:PHE:CG	0.60	2.32
1:A:5:PRO:C	1:A:5:PRO:HD3	0.59	2.13
1:A:19:ARG:CZ	1:A:20:LEU:HD22	0.59	2.26
1:A:7:VAL:N	1:A:35:ILE:HD13	0.59	2.06
1:A:22:GLN:CB	1:A:23:GLY:C	0.59	2.71
1:A:26:LYS:HZ2	1:A:36:ASP:HB2	0.58	1.58
1:A:14:LYS:HE2	1:A:15:GLY:CA	0.58	2.28
1:A:21:VAL:HG13	1:A:21:VAL:HG21	0.58	1.71
1:A:8:ARG:CZ	1:A:8:ARG:NH2	0.58	2.67
1:A:9:LYS:HZ2	1:A:10:TYR:N	0.58	1.91
1:A:17:ASP:CG	1:A:17:ASP:CB	0.58	2.71
1:A:22:GLN:O	1:A:22:GLN:OE1	0.57	2.22
1:A:12:ARG:NE	1:A:12:ARG:NH1	0.57	2.53
1:A:23:GLY:O	1:A:24:THR:CB	0.57	2.50
1:A:13:GLU:C	1:A:14:LYS:CG	0.57	2.72
1:A:2:ILE:CD1	1:A:2:ILE:HG21	0.57	2.28
1:A:31:LEU:CB	1:A:35:ILE:O	0.57	2.44
1:A:16:VAL:CB	1:A:16:VAL:CA	0.57	2.82
1:A:2:ILE:CG2	1:A:2:ILE:CA	0.57	2.82
1:A:3:ALA:O	1:A:4:MET:CB	0.57	2.53
1:A:21:VAL:CB	1:A:21:VAL:N	0.56	2.67
1:A:30:VAL:O	1:A:37:ALA:N	0.56	2.39
1:A:1:VAL:CG1	1:A:1:VAL:CB	0.56	2.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:12:ARG:NE	1:A:12:ARG:CD	0.56	2.68
1:A:31:LEU:O	1:A:38:PHE:HA	0.56	2.00
1:A:21:VAL:O	1:A:24:THR:N	0.56	2.38
1:A:29:ARG:C	1:A:38:PHE:CB	0.56	2.73
1:A:16:VAL:O	1:A:17:ASP:CB	0.56	2.54
1:A:25:GLY:C	1:A:25:GLY:CA	0.56	2.75
1:A:17:ASP:CG	1:A:17:ASP:OD2	0.56	2.43
1:A:15:GLY:N	1:A:15:GLY:C	0.56	2.58
1:A:33:GLU:CA	1:A:33:GLU:CG	0.56	2.84
1:A:31:LEU:HB2	1:A:35:ILE:O	0.56	1.99
1:A:6:SER:O	1:A:7:VAL:HB	0.56	1.82
1:A:12:ARG:CA	1:A:13:GLU:HG2	0.55	2.31
1:A:18:ILE:HD12	1:A:18:ILE:C	0.55	2.19
1:A:5:PRO:C	1:A:5:PRO:CG	0.55	2.74
1:A:1:VAL:O	1:A:2:ILE:CB	0.55	2.41
1:A:29:ARG:HH11	1:A:35:ILE:C	0.55	2.02
1:A:32:LYS:N	1:A:38:PHE:CE1	0.55	2.74
1:A:33:GLU:CB	1:A:33:GLU:O	0.55	2.55
1:A:8:ARG:NH1	1:A:8:ARG:NE	0.55	2.54
1:A:33:GLU:CG	1:A:34:ASP:CA	0.54	2.84
1:A:33:GLU:CB	1:A:34:ASP:N	0.54	2.70
1:A:21:VAL:HG12	1:A:21:VAL:O	0.54	2.02
1:A:19:ARG:NE	1:A:20:LEU:HD22	0.54	2.17
1:A:32:LYS:N	1:A:38:PHE:CD1	0.54	2.74
1:A:22:GLN:HE21	1:A:23:GLY:CA	0.54	2.15
1:A:28:GLY:O	1:A:37:ALA:HB2	0.54	2.03
1:A:1:VAL:CB	1:A:24:THR:HG21	0.54	2.33
1:A:6:SER:HB3	1:A:9:LYS:HB2	0.54	0.60
1:A:13:GLU:O	1:A:13:GLU:CD	0.53	2.46
1:A:29:ARG:CD	1:A:29:ARG:NE	0.53	2.72
1:A:7:VAL:HA	1:A:9:LYS:CB	0.53	2.34
1:A:10:TYR:OH	1:A:30:VAL:CG1	0.53	2.43
1:A:27:ASN:O	1:A:29:ARG:CG	0.53	2.57
1:A:2:ILE:N	1:A:2:ILE:CG1	0.53	2.71
1:A:7:VAL:CA	1:A:9:LYS:CB	0.53	2.87
1:A:28:GLY:C	1:A:29:ARG:CA	0.52	2.77
1:A:4:MET:O	1:A:5:PRO:HB3	0.52	2.01
1:A:8:ARG:NE	1:A:9:LYS:CB	0.52	2.73
1:A:3:ALA:HA	1:A:7:VAL:HB	0.52	1.82
1:A:17:ASP:C	1:A:18:ILE:HB	0.52	2.25
1:A:4:MET:SD	1:A:4:MET:CA	0.52	2.98
1:A:8:ARG:HD3	1:A:10:TYR:HB3	0.51	1.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:9:LYS:HB3	1:A:10:TYR:HB3	0.51	1.59
1:A:32:LYS:HD2	1:A:32:LYS:HB3	0.51	1.81
1:A:16:VAL:N	1:A:16:VAL:CB	0.51	2.73
1:A:29:ARG:NH1	1:A:30:VAL:O	0.51	2.43
1:A:9:LYS:HG3	1:A:10:TYR:CA	0.51	2.36
1:A:12:ARG:HD3	1:A:30:VAL:HG13	0.51	1.82
1:A:14:LYS:NZ	1:A:15:GLY:CA	0.51	2.73
1:A:12:ARG:CD	1:A:16:VAL:HG22	0.51	2.35
1:A:17:ASP:CA	1:A:17:ASP:CG	0.51	2.79
1:A:17:ASP:OD1	1:A:18:ILE:CA	0.51	2.59
1:A:25:GLY:O	1:A:28:GLY:N	0.51	2.43
1:A:17:ASP:OD1	1:A:17:ASP:CB	0.51	2.58
1:A:17:ASP:CB	1:A:18:ILE:HG13	0.51	2.34
1:A:12:ARG:NH1	1:A:13:GLU:CA	0.51	2.71
1:A:3:ALA:HA	1:A:7:VAL:N	0.51	2.21
1:A:25:GLY:C	1:A:26:LYS:CD	0.50	2.77
1:A:19:ARG:HH12	1:A:19:ARG:C	0.50	1.96
1:A:33:GLU:CA	1:A:38:PHE:HZ	0.50	2.13
1:A:17:ASP:C	1:A:17:ASP:HB2	0.50	2.27
1:A:24:THR:O	1:A:26:LYS:CB	0.50	2.59
1:A:26:LYS:NZ	1:A:36:ASP:N	0.50	2.59
1:A:18:ILE:HG23	1:A:29:ARG:CD	0.50	2.35
1:A:19:ARG:O	1:A:20:LEU:CB	0.49	2.59
1:A:33:GLU:HB2	1:A:34:ASP:N	0.49	2.22
1:A:7:VAL:N	1:A:30:VAL:HG21	0.49	2.19
1:A:20:LEU:O	1:A:21:VAL:CB	0.49	2.60
1:A:33:GLU:HB3	1:A:39:LEU:HA	0.49	1.83
1:A:19:ARG:NH2	1:A:19:ARG:NH1	0.49	2.57
1:A:7:VAL:HG13	1:A:8:ARG:CD	0.49	2.37
1:A:10:TYR:HE1	1:A:11:ALA:HB3	0.49	1.65
1:A:13:GLU:OE1	1:A:13:GLU:C	0.49	2.50
1:A:6:SER:HA	1:A:39:LEU:CA	0.49	2.35
1:A:9:LYS:HZ3	1:A:39:LEU:HD22	0.49	1.51
1:A:18:ILE:HG13	1:A:29:ARG:CZ	0.48	2.37
1:A:18:ILE:HG22	1:A:29:ARG:CD	0.48	2.38
1:A:25:GLY:O	1:A:26:LYS:CE	0.48	2.60
1:A:5:PRO:HD3	1:A:5:PRO:O	0.48	2.08
1:A:33:GLU:CB	1:A:33:GLU:OE1	0.48	2.62
1:A:8:ARG:NE	1:A:8:ARG:HH11	0.48	2.05
1:A:21:VAL:CA	1:A:21:VAL:CG2	0.48	2.92
1:A:24:THR:OG1	1:A:24:THR:CB	0.48	2.61
1:A:25:GLY:O	1:A:26:LYS:CA	0.48	2.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:29:ARG:NH1	1:A:35:ILE:C	0.48	2.60
1:A:19:ARG:O	1:A:20:LEU:HB2	0.47	2.09
1:A:7:VAL:HG13	1:A:7:VAL:CG2	0.47	2.16
1:A:2:ILE:CD1	1:A:2:ILE:HG23	0.47	2.40
1:A:26:LYS:C	1:A:26:LYS:NZ	0.47	2.68
1:A:1:VAL:HG23	1:A:1:VAL:C	0.47	2.30
1:A:33:GLU:CB	1:A:38:PHE:HD2	0.47	2.17
1:A:24:THR:HG22	1:A:24:THR:O	0.47	2.10
1:A:16:VAL:O	1:A:16:VAL:CG2	0.46	2.63
1:A:18:ILE:HG22	1:A:29:ARG:HD3	0.46	1.86
1:A:33:GLU:CB	1:A:38:PHE:HE2	0.46	2.21
1:A:33:GLU:CG	1:A:33:GLU:OE2	0.46	2.64
1:A:26:LYS:C	1:A:27:ASN:HB2	0.46	2.31
1:A:30:VAL:CG1	1:A:35:ILE:CG1	0.46	2.91
1:A:8:ARG:HB2	1:A:8:ARG:N	0.46	2.25
1:A:31:LEU:O	1:A:38:PHE:CA	0.45	2.64
1:A:16:VAL:C	1:A:32:LYS:HD3	0.45	2.30
1:A:19:ARG:NH2	1:A:19:ARG:HH12	0.45	2.10
1:A:21:VAL:C	1:A:22:GLN:CD	0.45	2.74
1:A:26:LYS:N	1:A:26:LYS:CB	0.45	2.80
1:A:22:GLN:CG	1:A:22:GLN:OE1	0.45	2.65
1:A:7:VAL:HG12	1:A:8:ARG:NE	0.45	2.25
1:A:30:VAL:HG13	1:A:35:ILE:CG1	0.44	2.42
1:A:24:THR:HG22	1:A:25:GLY:N	0.44	2.27
1:A:9:LYS:HZ1	1:A:39:LEU:HD22	0.44	1.49
1:A:22:GLN:C	1:A:22:GLN:OE1	0.44	2.56
1:A:32:LYS:C	1:A:33:GLU:HA	0.44	2.31
1:A:26:LYS:C	1:A:26:LYS:HZ2	0.44	2.16
1:A:12:ARG:CB	1:A:13:GLU:HG2	0.44	2.43
1:A:14:LYS:O	1:A:15:GLY:C	0.44	2.55
1:A:3:ALA:C	1:A:4:MET:CB	0.43	2.86
1:A:23:GLY:C	1:A:24:THR:HA	0.43	2.32
1:A:1:VAL:O	1:A:2:ILE:HB	0.43	2.12
1:A:1:VAL:HG21	1:A:30:VAL:HG23	0.43	1.88
1:A:7:VAL:C	1:A:8:ARG:CB	0.43	2.86
1:A:1:VAL:CG2	1:A:30:VAL:HG23	0.43	2.44
1:A:1:VAL:HB	1:A:24:THR:HG21	0.43	1.91
1:A:14:LYS:NZ	1:A:15:GLY:N	0.43	2.67
1:A:24:THR:CA	1:A:26:LYS:HB3	0.42	2.44
1:A:30:VAL:O	1:A:36:ASP:C	0.42	2.56
1:A:1:VAL:CA	1:A:1:VAL:O	0.42	2.68
1:A:19:ARG:NE	1:A:21:VAL:HA	0.42	2.29

Continued on next page...





Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)
1:A:31:LEU:HD23	1:A:38:PHE:CD2	0.42	2.48
1:A:16:VAL:HB	1:A:17:ASP:HA	0.42	1.81
1:A:7:VAL:O	1:A:8:ARG:CA	0.42	2.58
1:A:16:VAL:C	1:A:16:VAL:CA	0.42	2.88
1:A:6:SER:CA	1:A:39:LEU:H	0.42	2.25
1:A:8:ARG:NE	1:A:8:ARG:CZ	0.42	2.83
1:A:13:GLU:CD	1:A:14:LYS:N	0.42	2.73
1:A:4:MET:CG	1:A:4:MET:N	0.42	2.79
1:A:19:ARG:HH22	1:A:20:LEU:CA	0.42	2.21
1:A:8:ARG:NE	1:A:9:LYS:HB2	0.42	2.26
1:A:21:VAL:O	1:A:22:GLN:CD	0.41	2.58
1:A:24:THR:CG2	1:A:24:THR:O	0.41	2.68
1:A:31:LEU:CD2	1:A:38:PHE:CG	0.41	3.01
1:A:1:VAL:CA	1:A:1:VAL:C	0.41	2.89
1:A:18:ILE:CG2	1:A:29:ARG:HD3	0.41	2.44
1:A:33:GLU:HB3	1:A:39:LEU:CA	0.41	2.44
1:A:31:LEU:CA	1:A:39:LEU:N	0.41	2.73
1:A:9:LYS:CE	1:A:10:TYR:N	0.41	2.82
1:A:14:LYS:NZ	1:A:14:LYS:C	0.40	2.74
1:A:16:VAL:CG2	1:A:17:ASP:N	0.40	2.85
1:A:6:SER:HB2	1:A:8:ARG:HE	0.40	1.75
1:A:19:ARG:O	1:A:20:LEU:CD1	0.40	2.45

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

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

Mol	Chain	Res	Type
1	A	34	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

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

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	32/32 (100%)	12 (38%)	20 (62%)	0	0
All	All	32/32 (100%)	12 (38%)	20 (62%)	0	0

All 20 residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type
1	A	12	ARG
1	A	6	SER
1	A	20	LEU
1	A	13	GLU
1	A	27	ASN
1	A	26	LYS
1	A	29	ARG
1	A	19	ARG
1	A	31	LEU
1	A	34	ASP
1	A	17	ASP
1	A	18	ILE
1	A	5	PRO
1	A	14	LYS
1	A	32	LYS
1	A	8	ARG
1	A	9	LYS
1	A	2	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	21	VAL
1	A	7	VAL

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 carbohydrates 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