



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

May 7, 2024 – 03:53 pm BST

PDB ID : 2CJK
Title : Structure of the RNA binding domain of Hrp1 in complex with RNA
Authors : Perez-Canadillas, J.M.
Deposited on : 2006-04-04

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	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
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)	:	2.36.2

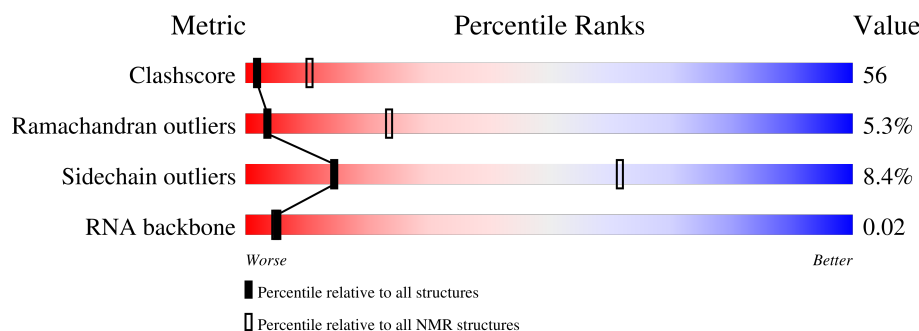
1 Overall quality at a glance

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	158937	12864
Ramachandran outliers	154571	11451
Sidechain outliers	154315	11428
RNA backbone	4643	676

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	167	
2	B	8	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 25 models. Model 5 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative.

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:159-A:319 (161)	1.16	5

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 1 single-model cluster was found.

Cluster number	Models
1	2, 4, 5, 6, 7, 8, 10, 11, 13, 14, 16, 18, 19, 21
2	17, 20, 23, 24, 25
3	1, 3, 9, 12, 22
Single-model clusters	15

3 Entry composition [i](#)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2915 atoms, of which 1408 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called NUCLEAR POLYADENYLATED RNA-BINDING PROTEIN 4.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	167	Total	C	H	N	O	S	0
			2665	849	1323	232	256	5	

- Molecule 2 is a RNA chain called 5'-R(*UP*AP*UP*AP*UP*AP*UP*AP)-3'.

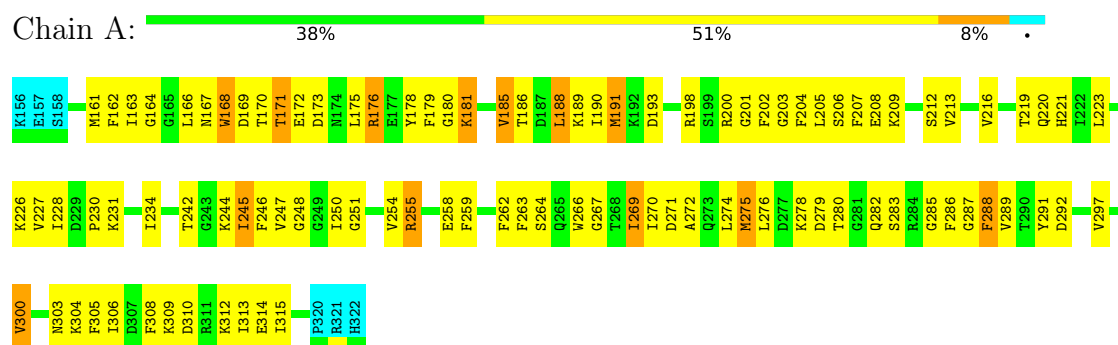
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
2	B	8	Total	C	H	N	O	P	0
			250	76	85	28	54	7	

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: NUCLEAR POLYADENYLATED RNA-BINDING PROTEIN 4



- Molecule 2: 5'-R(*UP*AP*UP*AP*UP*AP*UP*AP)-3'

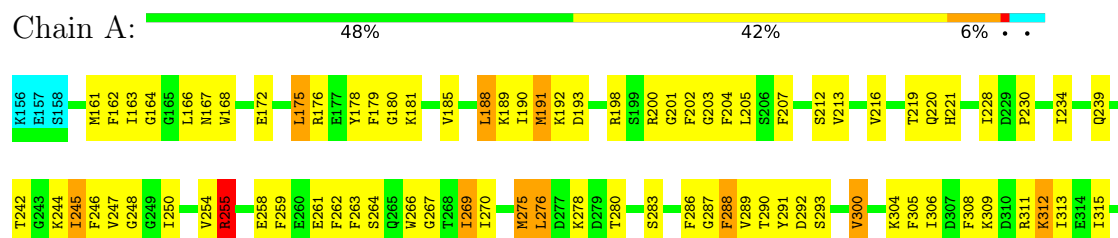


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

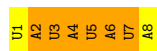
- Molecule 1: NUCLEAR POLYADENYLATED RNA-BINDING PROTEIN 4





- Molecule 2: 5'-R(*UP*AP*UP*AP*UP*AP*UP*AP)-3'

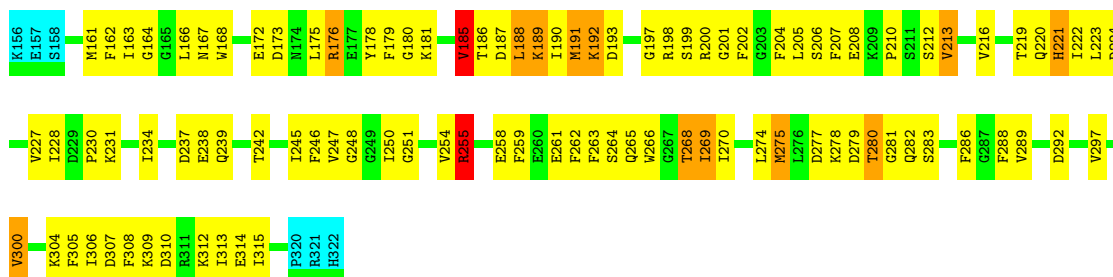
Chain B:



4.2.2 Score per residue for model 2

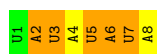
- Molecule 1: NUCLEAR POLYADENYLATED RNA-BINDING PROTEIN 4

Chain A:



- Molecule 2: 5'-R(*UP*AP*UP*AP*UP*AP*UP*AP)-3'

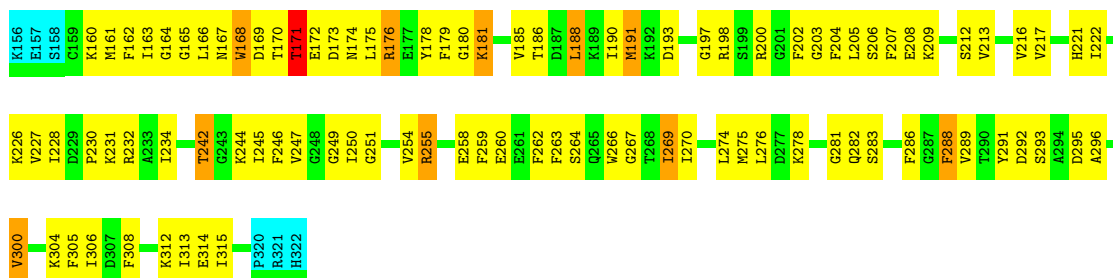
Chain B:



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: NUCLEAR POLYADENYLATED RNA-BINDING PROTEIN 4

Chain A:



- Molecule 2: 5'-R(*UP*AP*UP*AP*UP*AP*UP*AP)-3'

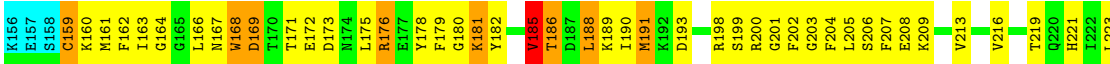
Chain B: 



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: NUCLEAR POLYADENYLATED RNA-BINDING PROTEIN 4

Chain A: 








- Molecule 2: 5'-R(*UP*AP*UP*AP*UP*AP*UP*AP)-3'

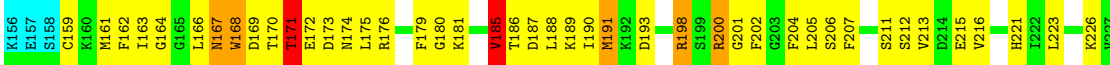
Chain B: 



4.2.5 Score per residue for model 5 (medoid)

- Molecule 1: NUCLEAR POLYADENYLATED RNA-BINDING PROTEIN 4

Chain A: 







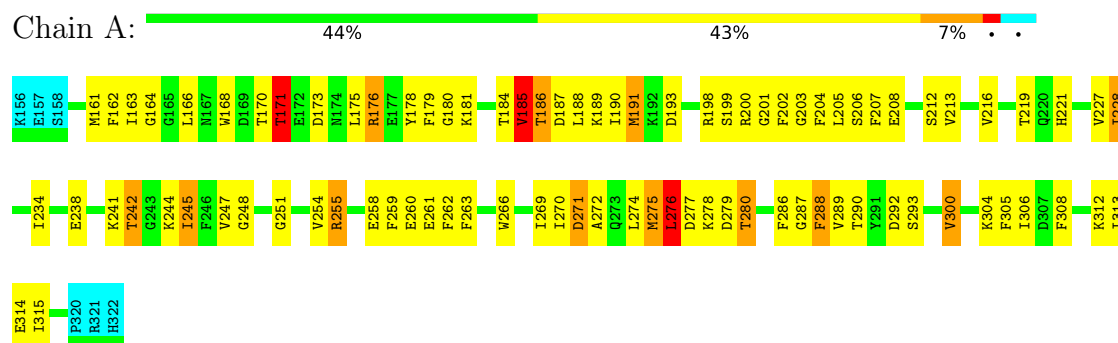
- Molecule 2: 5'-R(*UP*AP*UP*AP*UP*AP*UP*AP)-3'

Chain B: 



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: NUCLEAR POLYADENYLATED RNA-BINDING PROTEIN 4

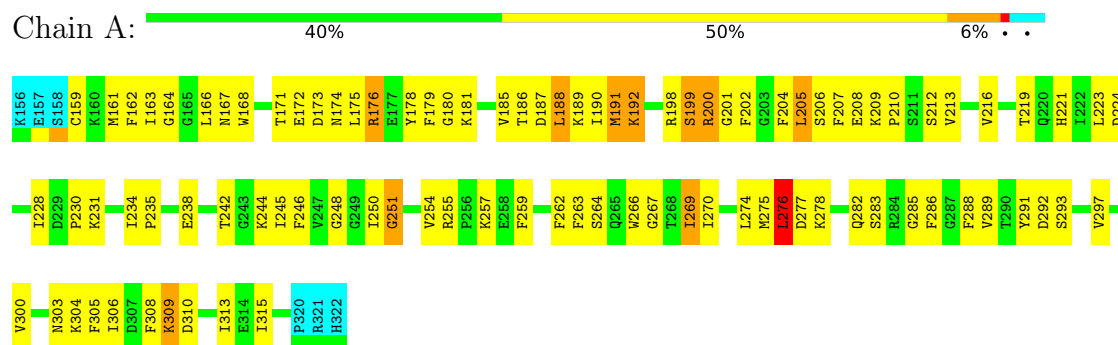


- Molecule 2: 5'-R(*UP*AP*UP*AP*UP*AP*UP*AP)-3'



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: NUCLEAR POLYADENYLATED RNA-BINDING PROTEIN 4



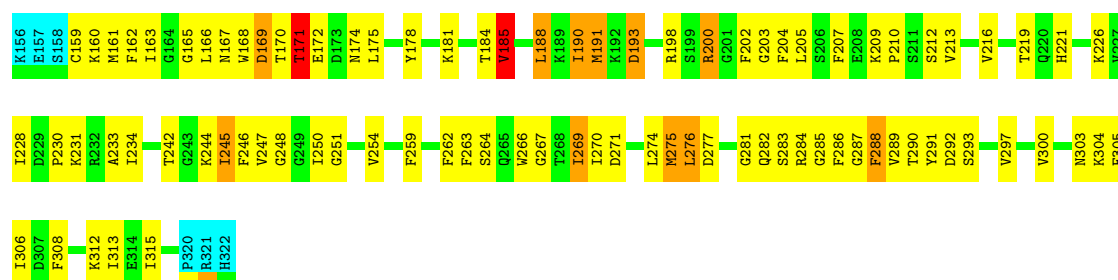
- Molecule 2: 5'-R(*UP*AP*UP*AP*UP*AP*UP*AP)-3'



4.2.8 Score per residue for model 8

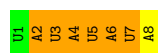
- Molecule 1: NUCLEAR POLYADENYLATED RNA-BINDING PROTEIN 4





- Molecule 2: 5'-R(*UP*AP*UP*AP*UP*AP*UP*AP)-3'

Chain B: 12% 12% 75%



4.2.9 Score per residue for model 9

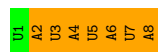
- Molecule 1: NUCLEAR POLYADENYLATED RNA-BINDING PROTEIN 4

Chain A: 43% 47% 5% . .



- Molecule 2: 5'-R(*UP*AP*UP*AP*UP*AP*UP*AP)-3'

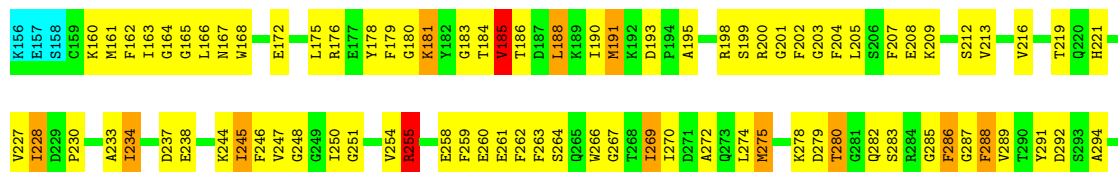
Chain B: 12% 88%

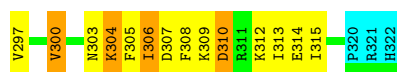


4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: NUCLEAR POLYADENYLATED RNA-BINDING PROTEIN 4

Chain A: 38% 49% 9% . .





- Molecule 2: 5'-R(*UP*AP*UP*AP*UP*AP*UP*AP)-3'

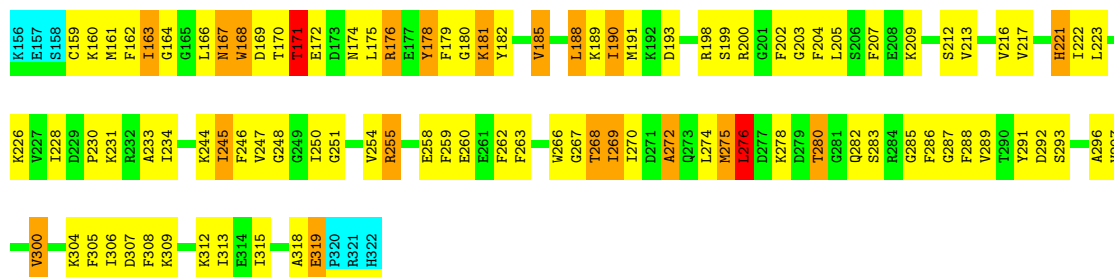
Chain B: 12% 88%



4.2.11 Score per residue for model 11

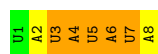
- Molecule 1: NUCLEAR POLYADENYLATED RNA-BINDING PROTEIN 4

Chain A: 38% 46% 11% . .



- Molecule 2: 5'-R(*UP*AP*UP*AP*UP*AP*UP*AP)-3'

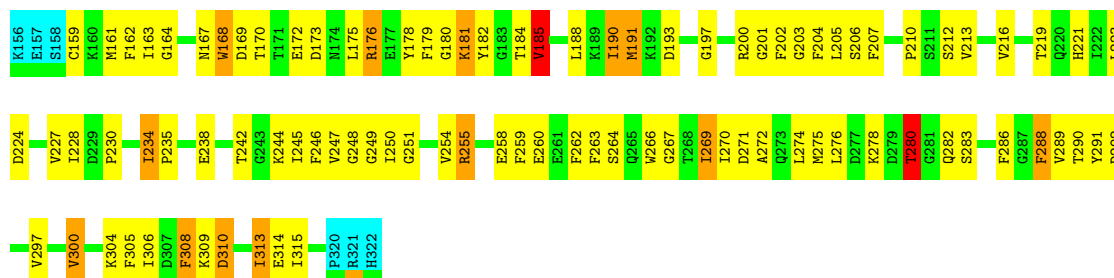
Chain B: 12% 25% 62%



4.2.12 Score per residue for model 12


- Molecule 1: NUCLEAR POLYADENYLATED RNA-BINDING PROTEIN 4

Chain A: 40% 47% 8% . .



- Molecule 2: 5'-R(*UP*AP*UP*AP*UP*AP*UP*AP)-3'

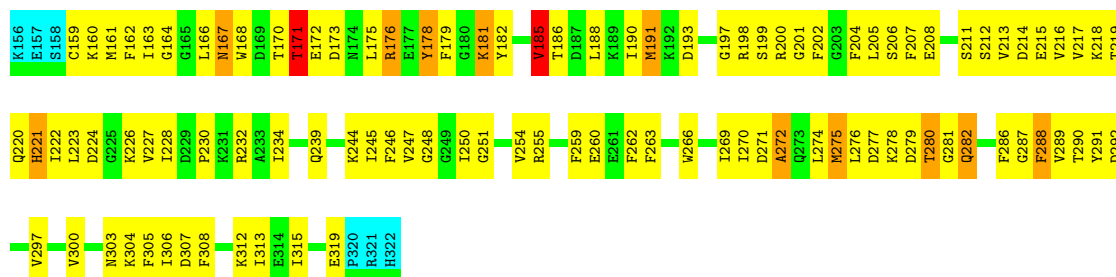
Chain B:  12% 88%



4.2.13 Score per residue for model 13


- Molecule 1: NUCLEAR POLYADENYLATED RNA-BINDING PROTEIN 4

Chain A:  35% 54% 7% . .



- Molecule 2: 5'-R(*UP*AP*UP*AP*UP*AP*UP*AP)-3'

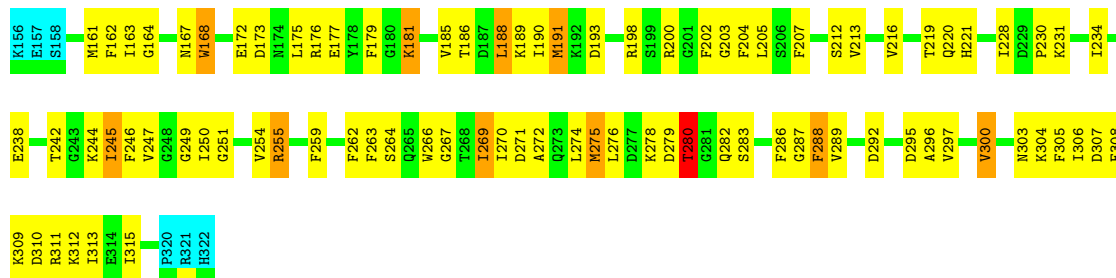
Chain B:  12% 88%



4.2.14 Score per residue for model 14


- Molecule 1: NUCLEAR POLYADENYLATED RNA-BINDING PROTEIN 4

Chain A:  44% 46% 6% . .



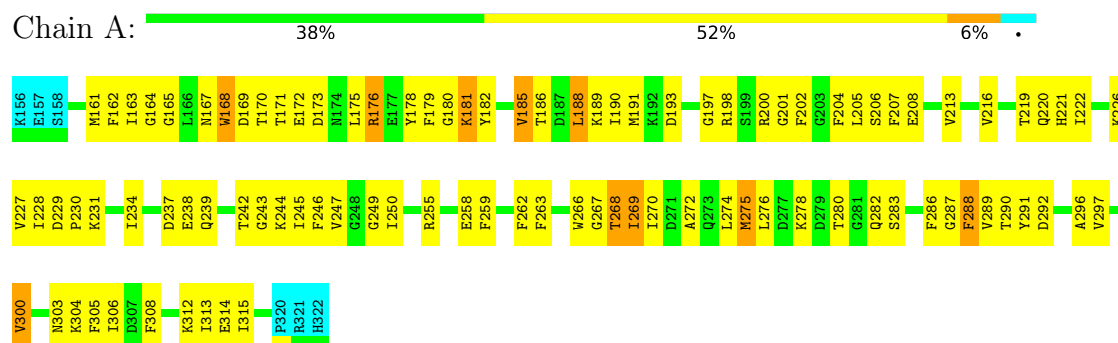
- Molecule 2: 5'-R(*UP*AP*UP*AP*UP*AP*UP*AP)-3'

Chain B:  12% 12% 75%



4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: NUCLEAR POLYADENYLATED RNA-BINDING PROTEIN 4

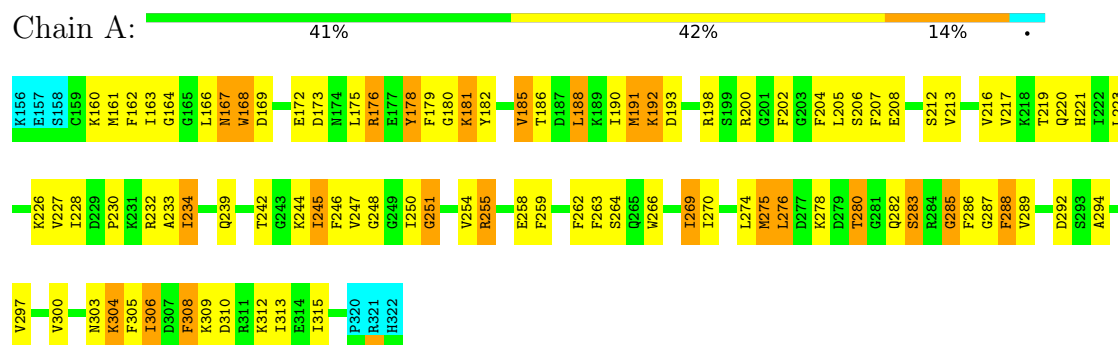


- Molecule 2: 5'-R(*UP*AP*UP*AP*UP*AP*UP*AP)-3'



4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: NUCLEAR POLYADENYLATED RNA-BINDING PROTEIN 4



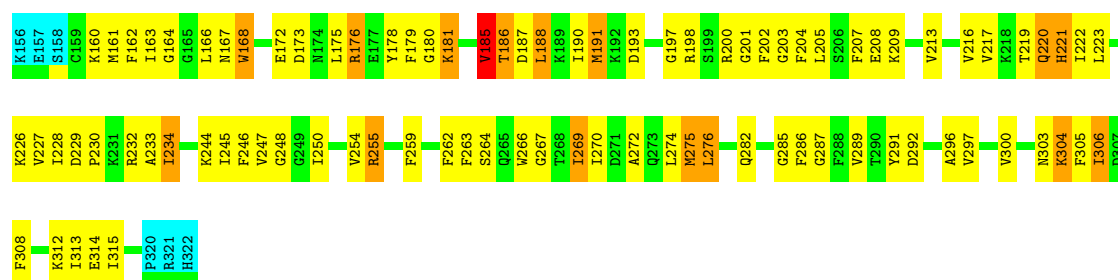
- Molecule 2: 5'-R(*UP*AP*UP*AP*UP*AP*UP*AP)-3'



4.2.17 Score per residue for model 17

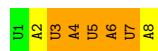
- Molecule 1: NUCLEAR POLYADENYLATED RNA-BINDING PROTEIN 4





- Molecule 2: 5'-R(*UP*AP*UP*AP*UP*AP*UP*AP)-3'

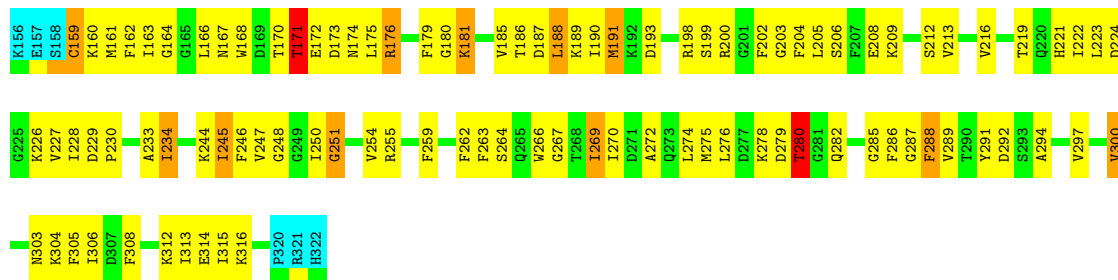
Chain B: 12% 25% 62%



4.2.18 Score per residue for model 18

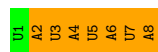
- Molecule 1: NUCLEAR POLYADENYLATED RNA-BINDING PROTEIN 4

Chain A: 38% 50% 7%



- Molecule 2: 5'-R(*UP*AP*UP*AP*UP*AP*UP*AP)-3'

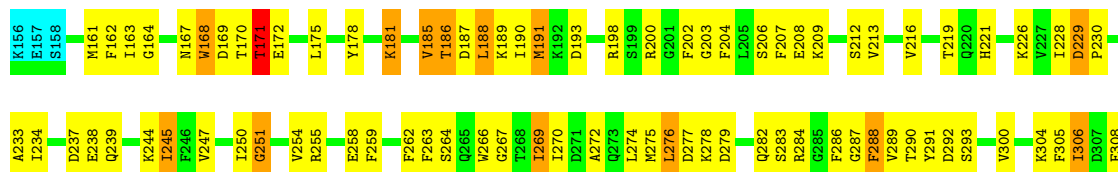
Chain B: 12% 88%

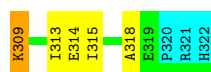


4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: NUCLEAR POLYADENYLATED RNA-BINDING PROTEIN 4

Chain A: 44% 44% 8%



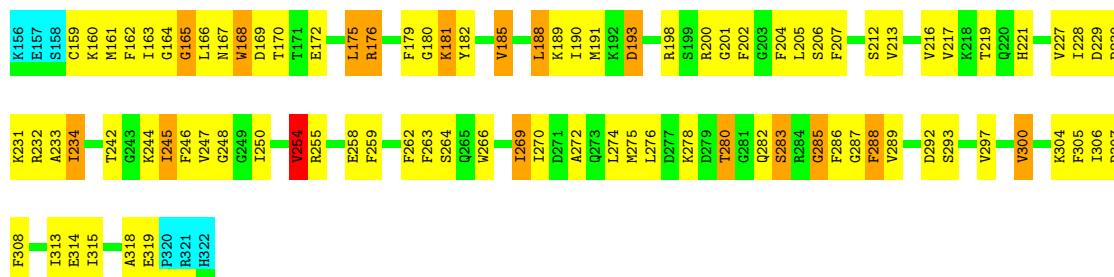


- Molecule 2: 5'-R(*UP*AP*UP*AP*UP*AP*UP*AP)-3'

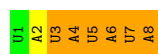


4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: NUCLEAR POLYADENYLATED RNA-BINDING PROTEIN 4

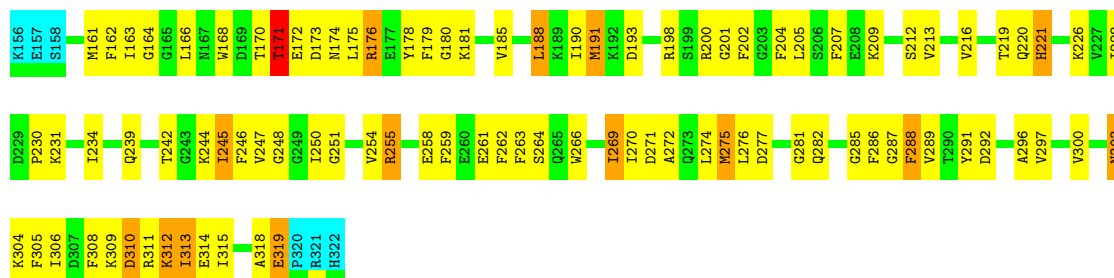


- Molecule 2: 5'-R(*UP*AP*UP*AP*UP*AP*UP*AP)-3'




4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: NUCLEAR POLYADENYLATED RNA-BINDING PROTEIN 4



- Molecule 2: 5'-R(*UP*AP*UP*AP*UP*AP*UP*AP)-3'

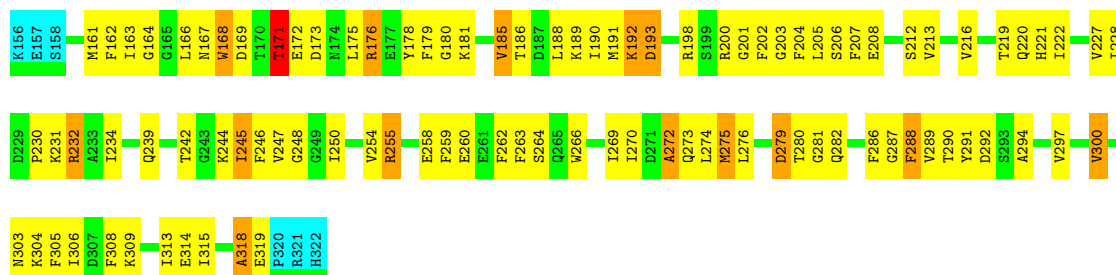
Chain B:  12% 88%



4.2.22 Score per residue for model 22


- Molecule 1: NUCLEAR POLYADENYLATED RNA-BINDING PROTEIN 4

Chain A:  38% 49% 8% . .



- Molecule 2: 5'-R(*UP*AP*UP*AP*UP*AP*UP*AP)-3'

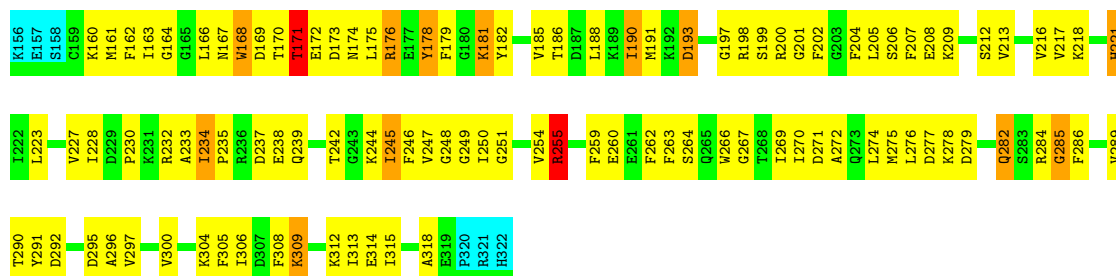
Chain B:  12% 88%



4.2.23 Score per residue for model 23


- Molecule 1: NUCLEAR POLYADENYLATED RNA-BINDING PROTEIN 4

Chain A:  34% 54% 7% . .



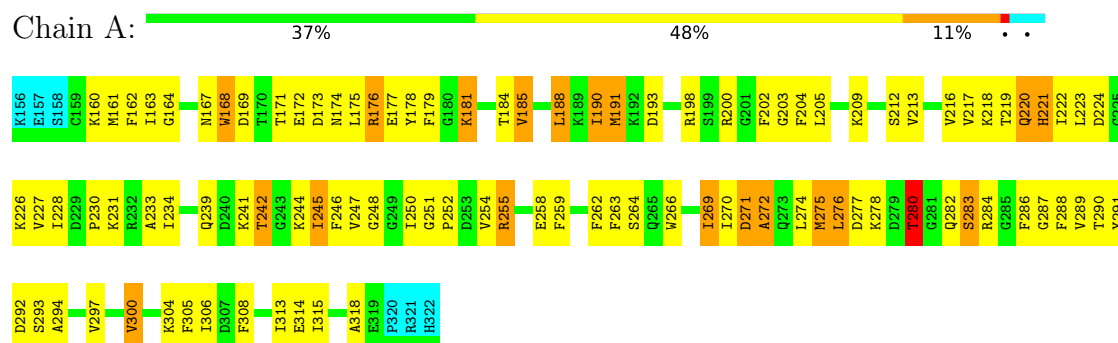
- Molecule 2: 5'-R(*UP*AP*UP*AP*UP*AP*UP*AP)-3'

Chain B:  12% 12% 75%



4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: NUCLEAR POLYADENYLATED RNA-BINDING PROTEIN 4

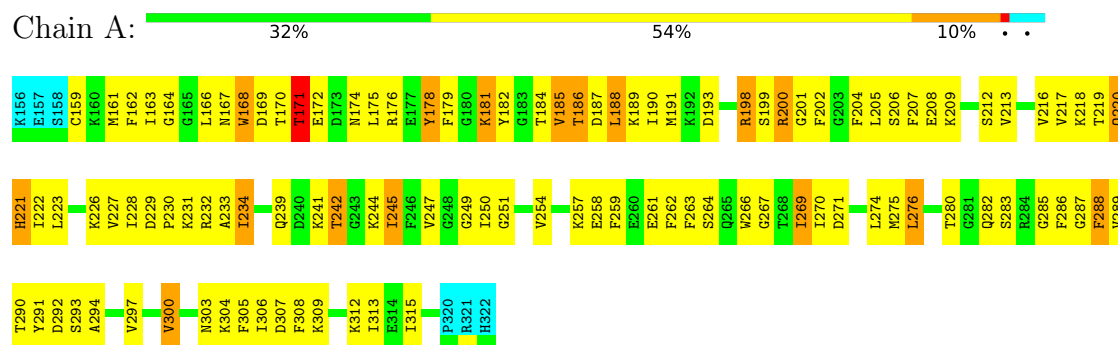


- Molecule 2: 5'-R(*UP*AP*UP*AP*UP*AP*UP*AP)-3'



4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: NUCLEAR POLYADENYLATED RNA-BINDING PROTEIN 4



- Molecule 2: 5'-R(*UP*AP*UP*AP*UP*AP*UP*AP)-3'



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *XPLOR-NIH*, *CNS*.

Of the 50 calculated structures, 25 were deposited, based on the following criterion: *COMPARISON BETWEEN ENERGY- ORDERED RMSD PROFILES AND TOTAL ENERGY*.

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

Software name	Classification	Version
Xplor-NIH	refinement	
NMRPipe	structure solution	
ANSIG	structure solution	
XwinNMR	structure solution	

No chemical shift data was provided.

6 Model quality i

6.1 Standard geometry i

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 i

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1289	1269	1268	151±13
2	B	165	85	86	39±5
All	All	36350	33850	33850	3940

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 56.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:300:VAL:HG22	1:A:315:ILE:HD13	1.06	1.22	23	1
1:A:274:LEU:HD23	1:A:276:LEU:HD11	1.00	1.26	17	3
1:A:245:ILE:HD12	1:A:315:ILE:HG21	0.99	1.34	17	7
1:A:216:VAL:O	1:A:221:HIS:NE2	0.94	1.99	12	25
1:A:170:THR:HG21	1:A:223:LEU:HD21	0.94	1.37	13	1
1:A:282:GLN:OE1	2:B:2:A:H4'	0.92	1.64	10	11
1:A:234:ILE:HG22	2:B:6:A:C2	0.91	2.00	6	2
1:A:251:GLY:O	1:A:254:VAL:HG12	0.90	1.66	18	3
1:A:163:ILE:HG22	1:A:166:LEU:HD11	0.90	1.40	13	1
1:A:166:LEU:HD23	1:A:228:ILE:HG21	0.90	1.44	2	7
1:A:207:PHE:CE2	1:A:216:VAL:HG21	0.89	2.02	11	8
2:B:5:U:O2'	2:B:6:A:H5''	0.89	1.68	4	17
1:A:263:PHE:CB	1:A:269:ILE:HD11	0.89	1.98	15	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:210:PRO:O	1:A:213:VAL:HG12	0.88	1.66	8	4
1:A:247:VAL:HG21	1:A:263:PHE:CZ	0.88	2.03	12	8
1:A:167:ASN:O	1:A:169:ASP:N	0.88	2.07	20	11
1:A:251:GLY:O	1:A:254:VAL:HG22	0.88	1.69	14	11
1:A:294:ALA:O	1:A:297:VAL:HG12	0.88	1.68	25	7
1:A:263:PHE:HB2	1:A:269:ILE:HD11	0.88	1.43	11	5
1:A:188:LEU:HD13	1:A:188:LEU:O	0.87	1.69	19	1
1:A:250:ILE:HG23	1:A:254:VAL:HG21	0.87	1.44	1	3
1:A:178:TYR:OH	1:A:221:HIS:HB2	0.87	1.70	17	2
1:A:245:ILE:HD12	1:A:315:ILE:CG2	0.86	2.00	17	6
1:A:222:ILE:HD12	1:A:227:VAL:HG12	0.86	1.43	22	4
1:A:184:THR:O	1:A:185:VAL:HG12	0.86	1.69	10	3
1:A:300:VAL:HG23	1:A:306:ILE:HD11	0.85	1.49	3	19
1:A:204:PHE:CE2	2:B:7:U:C6	0.85	2.65	1	15
1:A:204:PHE:CE1	2:B:7:U:C6	0.85	2.65	16	10
1:A:185:VAL:HG12	1:A:207:PHE:CE1	0.85	2.07	7	3
1:A:205:LEU:HD21	1:A:207:PHE:CZ	0.84	2.07	7	10
1:A:172:GLU:N	1:A:190:ILE:HD12	0.83	1.89	25	19
1:A:200:ARG:HB3	1:A:202:PHE:CE2	0.83	2.08	18	8
1:A:212:SER:O	1:A:216:VAL:HG23	0.83	1.73	14	21
1:A:262:PHE:CE2	1:A:313:ILE:HD11	0.83	2.06	21	13
1:A:259:PHE:CZ	1:A:289:VAL:HG23	0.82	2.09	20	16
1:A:251:GLY:O	1:A:254:VAL:HG13	0.82	1.75	3	1
1:A:275:MET:O	1:A:276:LEU:HD12	0.82	1.74	16	3
1:A:163:ILE:HG23	1:A:228:ILE:HD12	0.81	1.52	12	11
1:A:227:VAL:O	1:A:228:ILE:O	0.81	1.99	6	2
1:A:185:VAL:HG23	1:A:207:PHE:CE1	0.81	2.10	16	8
1:A:185:VAL:HG21	1:A:188:LEU:HD23	0.81	1.52	9	4
1:A:161:MET:SD	1:A:213:VAL:HG13	0.81	2.15	18	20
1:A:175:LEU:HD22	1:A:205:LEU:HD21	0.81	1.52	17	7
1:A:185:VAL:HG21	1:A:188:LEU:CD2	0.80	2.07	14	4
1:A:250:ILE:HG22	1:A:254:VAL:HG21	0.80	1.51	7	4
2:B:5:U:O2'	2:B:6:A:P	0.80	2.39	15	5
1:A:227:VAL:HG21	1:A:279:ASP:OD2	0.79	1.76	13	1
1:A:250:ILE:HD11	1:A:287:GLY:HA3	0.79	1.53	14	6
1:A:200:ARG:HG3	1:A:202:PHE:CE1	0.79	2.12	19	3
1:A:163:ILE:CG2	1:A:228:ILE:HD12	0.79	2.06	12	8
1:A:219:THR:O	1:A:221:HIS:CD2	0.78	2.37	12	16
1:A:266:TRP:CZ2	1:A:300:VAL:HG21	0.78	2.13	17	22
1:A:269:ILE:HG21	1:A:272:ALA:HB2	0.78	1.54	15	3
1:A:166:LEU:HD13	1:A:202:PHE:HA	0.78	1.53	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:222:ILE:CD1	1:A:227:VAL:HG13	0.78	2.09	25	1
1:A:165:GLY:O	1:A:228:ILE:HG22	0.78	1.79	20	5
1:A:238:GLU:O	1:A:242:THR:HG23	0.77	1.78	12	6
1:A:247:VAL:HG21	1:A:263:PHE:CE2	0.77	2.14	3	3
1:A:188:LEU:HD22	1:A:189:LYS:N	0.76	1.96	19	1
1:A:175:LEU:HD12	1:A:190:ILE:HD11	0.76	1.57	22	5
1:A:222:ILE:HG23	1:A:226:LYS:O	0.76	1.80	13	5
1:A:191:MET:HE3	1:A:202:PHE:O	0.76	1.80	19	3
1:A:318:ALA:O	2:B:2:A:H2	0.76	1.64	9	1
1:A:263:PHE:CD2	1:A:289:VAL:HG21	0.75	2.15	9	16
1:A:222:ILE:CD1	1:A:227:VAL:HG12	0.75	2.11	15	4
1:A:269:ILE:HG22	1:A:269:ILE:O	0.75	1.82	3	4
1:A:247:VAL:HG11	1:A:259:PHE:CE1	0.74	2.16	20	16
1:A:187:ASP:C	1:A:188:LEU:HD13	0.74	2.02	7	1
1:A:181:LYS:HG3	1:A:182:TYR:CD1	0.74	2.18	4	8
1:A:250:ILE:HD11	1:A:287:GLY:CA	0.74	2.13	8	2
1:A:185:VAL:HG11	1:A:188:LEU:HD22	0.74	1.60	16	1
1:A:278:LYS:O	1:A:280:THR:HG22	0.74	1.82	10	8
1:A:163:ILE:HD13	1:A:179:PHE:CZ	0.74	2.17	16	2
1:A:262:PHE:CD1	1:A:308:PHE:CD1	0.73	2.76	5	15
1:A:234:ILE:HD11	1:A:271:ASP:OD2	0.73	1.82	12	1
1:A:263:PHE:CD2	1:A:266:TRP:CZ2	0.73	2.76	13	23
1:A:269:ILE:HG23	1:A:290:THR:O	0.73	1.84	23	3
1:A:300:VAL:HG22	1:A:315:ILE:CD1	0.73	2.09	23	1
1:A:260:GLU:O	1:A:269:ILE:HD12	0.73	1.84	11	7
1:A:250:ILE:HD11	1:A:287:GLY:N	0.73	1.99	8	2
1:A:186:THR:HG23	1:A:208:GLU:N	0.72	1.98	7	8
1:A:176:ARG:HG3	1:A:185:VAL:HG11	0.72	1.59	10	1
1:A:263:PHE:HB3	1:A:269:ILE:HD11	0.72	1.62	15	1
1:A:163:ILE:HB	1:A:166:LEU:HD21	0.72	1.59	11	1
2:B:3:U:O2	2:B:5:U:H3'	0.72	1.85	15	3
1:A:274:LEU:HD21	1:A:283:SER:OG	0.72	1.84	14	2
1:A:172:GLU:HB3	1:A:188:LEU:HD21	0.71	1.62	2	2
1:A:247:VAL:HG12	1:A:287:GLY:O	0.71	1.85	6	16
1:A:175:LEU:HD22	1:A:190:ILE:HD11	0.71	1.61	14	1
1:A:162:PHE:CE1	1:A:204:PHE:CZ	0.71	2.78	23	19
1:A:160:LYS:HB3	1:A:233:ALA:HB3	0.71	1.62	17	8
1:A:190:ILE:HG23	1:A:200:ARG:CZ	0.71	2.15	7	1
1:A:178:TYR:CD2	1:A:223:LEU:HD12	0.71	2.20	25	2
1:A:185:VAL:O	1:A:185:VAL:HG13	0.71	1.85	10	3
1:A:279:ASP:O	1:A:280:THR:HG23	0.71	1.85	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:275:MET:HE1	2:B:3:U:O3'	0.71	1.86	22	1
1:A:179:PHE:CZ	1:A:228:ILE:HD11	0.71	2.21	12	1
1:A:222:ILE:HG23	1:A:226:LYS:C	0.70	2.06	17	3
1:A:166:LEU:CD2	1:A:228:ILE:HG21	0.70	2.16	2	6
1:A:250:ILE:CG2	1:A:254:VAL:HG11	0.70	2.16	10	3
1:A:274:LEU:CD2	1:A:276:LEU:HD11	0.70	2.15	22	2
1:A:163:ILE:O	1:A:202:PHE:HB2	0.70	1.85	18	21
1:A:300:VAL:CG2	1:A:306:ILE:HD11	0.70	2.16	5	11
1:A:250:ILE:HG21	1:A:274:LEU:CD1	0.70	2.17	7	4
1:A:234:ILE:HD12	1:A:239:GLN:HG2	0.70	1.62	23	2
2:B:8:A:H3'	2:B:8:A:N3	0.70	2.01	22	1
1:A:274:LEU:HD21	1:A:283:SER:O	0.70	1.87	2	5
1:A:205:LEU:HD23	1:A:206:SER:N	0.70	2.01	15	6
1:A:214:ASP:OD1	1:A:215:GLU:N	0.69	2.25	13	1
1:A:250:ILE:CG2	1:A:254:VAL:HG21	0.69	2.18	7	7
1:A:250:ILE:HD12	1:A:287:GLY:N	0.69	2.02	13	3
1:A:179:PHE:HZ	1:A:228:ILE:HD11	0.69	1.48	12	2
1:A:167:ASN:HA	2:B:4:A:N7	0.69	2.02	25	17
1:A:178:TYR:CG	1:A:223:LEU:HD12	0.69	2.22	17	1
1:A:266:TRP:NE1	1:A:300:VAL:HB	0.69	2.03	17	23
1:A:185:VAL:HG12	1:A:185:VAL:O	0.69	1.88	19	4
1:A:269:ILE:HG21	1:A:272:ALA:CB	0.69	2.18	15	2
1:A:163:ILE:CG2	1:A:166:LEU:HD21	0.68	2.18	21	12
1:A:162:PHE:CE2	2:B:6:A:C8	0.68	2.81	25	24
1:A:217:VAL:HG23	1:A:230:PRO:O	0.68	1.89	13	4
1:A:205:LEU:HD12	1:A:206:SER:N	0.68	2.04	7	1
1:A:221:HIS:HB3	1:A:228:ILE:HD11	0.68	1.65	19	1
1:A:266:TRP:CZ2	1:A:300:VAL:CG2	0.68	2.76	15	23
1:A:234:ILE:HG22	2:B:6:A:N1	0.68	2.03	11	2
1:A:264:SER:N	1:A:269:ILE:HD11	0.68	2.04	22	19
1:A:242:THR:HG21	1:A:270:ILE:HD11	0.68	1.66	23	2
1:A:242:THR:HG21	1:A:270:ILE:CD1	0.67	2.19	23	4
1:A:186:THR:OG1	1:A:208:GLU:N	0.67	2.27	10	8
1:A:247:VAL:HG11	1:A:313:ILE:HD12	0.67	1.67	23	1
2:B:8:A:H2'	2:B:8:A:N3	0.67	2.02	6	6
1:A:318:ALA:O	2:B:2:A:C2	0.67	2.45	9	2
1:A:250:ILE:HG21	1:A:274:LEU:HD11	0.67	1.66	7	4
1:A:259:PHE:CZ	1:A:289:VAL:CG2	0.67	2.78	4	25
1:A:276:LEU:HD22	1:A:276:LEU:O	0.67	1.89	6	1
1:A:245:ILE:HG22	1:A:297:VAL:HG13	0.66	1.67	17	3
1:A:266:TRP:O	1:A:266:TRP:CD1	0.66	2.49	15	23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:263:PHE:CD2	1:A:266:TRP:CH2	0.66	2.84	15	12
1:A:178:TYR:OH	1:A:221:HIS:CD2	0.66	2.48	13	3
1:A:170:THR:CG2	1:A:223:LEU:HD13	0.66	2.20	23	1
1:A:182:TYR:OH	1:A:219:THR:HG21	0.66	1.90	25	1
1:A:245:ILE:HD12	1:A:315:ILE:HG23	0.66	1.66	7	1
1:A:221:HIS:CD2	1:A:230:PRO:HG3	0.66	2.25	2	3
1:A:274:LEU:HD23	1:A:276:LEU:HG	0.66	1.68	6	1
1:A:164:GLY:HA3	2:B:5:U:C6	0.66	2.25	21	22
1:A:217:VAL:HG12	1:A:230:PRO:O	0.66	1.91	16	2
1:A:275:MET:O	1:A:276:LEU:HD22	0.66	1.91	11	1
1:A:249:GLY:O	1:A:313:ILE:HG22	0.66	1.91	12	4
1:A:303:ASN:ND2	1:A:306:ILE:HD12	0.66	2.06	16	1
1:A:247:VAL:HG23	1:A:315:ILE:HG12	0.66	1.68	8	15
1:A:168:TRP:CE3	2:B:4:A:C5	0.66	2.84	22	24
1:A:247:VAL:CG2	1:A:263:PHE:CZ	0.65	2.79	13	6
1:A:300:VAL:HG22	1:A:315:ILE:HG13	0.65	1.67	7	1
1:A:185:VAL:CG2	1:A:185:VAL:O	0.65	2.44	6	3
1:A:222:ILE:HG12	1:A:227:VAL:HG12	0.65	1.68	17	1
1:A:201:GLY:HA3	2:B:4:A:O2'	0.65	1.92	10	14
1:A:162:PHE:CD1	1:A:204:PHE:CE1	0.65	2.85	8	15
1:A:292:ASP:OD1	1:A:293:SER:N	0.65	2.30	11	11
1:A:303:ASN:O	1:A:305:PHE:N	0.65	2.29	10	12
1:A:193:ASP:CB	1:A:198:ARG:O	0.65	2.45	3	19
2:B:5:U:O2'	2:B:6:A:OP2	0.65	2.15	20	11
1:A:178:TYR:CE2	1:A:179:PHE:CE2	0.65	2.85	25	5
1:A:274:LEU:O	1:A:275:MET:HB2	0.65	1.91	17	22
2:B:6:A:H1'	2:B:7:U:O2	0.65	1.92	23	1
1:A:175:LEU:HD23	1:A:188:LEU:CD1	0.65	2.22	9	3
1:A:263:PHE:CG	1:A:289:VAL:HG21	0.64	2.27	22	18
1:A:173:ASP:HA	1:A:176:ARG:HD3	0.64	1.67	17	14
1:A:272:ALA:HB2	1:A:289:VAL:HG13	0.64	1.67	24	6
1:A:245:ILE:CG2	1:A:297:VAL:HG23	0.64	2.21	25	7
1:A:185:VAL:CG1	1:A:185:VAL:O	0.64	2.45	17	4
1:A:245:ILE:CG2	1:A:297:VAL:HG13	0.64	2.22	7	7
1:A:178:TYR:OH	1:A:221:HIS:CG	0.64	2.50	11	5
1:A:166:LEU:HG	1:A:223:LEU:HD22	0.64	1.68	13	1
1:A:168:TRP:CZ3	2:B:4:A:C2	0.64	2.86	5	23
1:A:191:MET:CE	1:A:203:GLY:HA2	0.64	2.23	19	11
1:A:185:VAL:HG22	1:A:205:LEU:HD11	0.64	1.70	22	1
1:A:170:THR:HG22	1:A:190:ILE:HD11	0.64	1.69	9	1
1:A:262:PHE:HE2	1:A:313:ILE:HD11	0.64	1.49	12	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:303:ASN:HB3	1:A:306:ILE:HD11	0.64	1.70	7	1
1:A:275:MET:C	1:A:276:LEU:HD12	0.64	2.14	23	1
1:A:162:PHE:CD1	1:A:204:PHE:CE2	0.64	2.86	4	10
1:A:188:LEU:HD13	1:A:188:LEU:N	0.64	2.08	7	1
1:A:262:PHE:CZ	1:A:306:ILE:HG21	0.64	2.28	8	4
1:A:185:VAL:HG23	1:A:206:SER:O	0.63	1.93	18	4
1:A:163:ILE:CG2	1:A:166:LEU:HD11	0.63	2.20	13	2
1:A:173:ASP:OD1	1:A:174:ASN:N	0.63	2.31	7	2
1:A:313:ILE:HG13	1:A:313:ILE:O	0.63	1.93	21	2
1:A:188:LEU:HD13	1:A:188:LEU:C	0.63	2.13	19	1
1:A:262:PHE:HB2	1:A:308:PHE:CE1	0.63	2.28	25	17
1:A:213:VAL:HG11	1:A:232:ARG:CD	0.63	2.23	5	4
1:A:242:THR:HG22	1:A:270:ILE:HD12	0.63	1.68	8	1
1:A:170:THR:O	1:A:174:ASN:ND2	0.63	2.30	5	5
1:A:191:MET:HG2	2:B:7:U:H1'	0.63	1.69	15	3
1:A:175:LEU:CB	1:A:188:LEU:HD11	0.63	2.24	3	8
1:A:172:GLU:HG2	1:A:190:ILE:HB	0.63	1.69	1	4
1:A:254:VAL:O	1:A:258:GLU:HB3	0.63	1.93	9	2
1:A:162:PHE:CE2	2:B:6:A:N9	0.63	2.67	4	25
1:A:166:LEU:O	1:A:167:ASN:CB	0.63	2.46	11	3
1:A:248:GLY:O	1:A:313:ILE:HB	0.62	1.93	12	18
1:A:191:MET:SD	1:A:202:PHE:CE2	0.62	2.92	17	9
1:A:234:ILE:HG22	1:A:238:GLU:HB2	0.62	1.72	7	3
1:A:282:GLN:OE1	2:B:2:A:H5''	0.62	1.95	3	1
1:A:193:ASP:HB2	1:A:198:ARG:O	0.62	1.95	22	12
1:A:245:ILE:CD1	1:A:289:VAL:HB	0.62	2.25	19	15
1:A:304:LYS:HG3	1:A:305:PHE:CD1	0.62	2.29	21	25
1:A:279:ASP:OD1	1:A:280:THR:HG23	0.62	1.95	22	1
1:A:282:GLN:HB2	1:A:286:PHE:CZ	0.62	2.29	22	1
1:A:170:THR:O	1:A:171:THR:O	0.62	2.16	8	11
1:A:217:VAL:HG21	1:A:232:ARG:NH2	0.62	2.10	20	1
1:A:175:LEU:HD23	1:A:179:PHE:CE2	0.62	2.30	11	17
1:A:175:LEU:HB2	1:A:188:LEU:HD11	0.62	1.72	3	5
1:A:300:VAL:HG23	1:A:306:ILE:CD1	0.62	2.25	17	11
1:A:162:PHE:CE2	2:B:5:U:C2	0.62	2.88	23	9
1:A:221:HIS:CD2	1:A:230:PRO:HD2	0.61	2.29	12	7
1:A:254:VAL:O	1:A:255:ARG:O	0.61	2.18	22	11
1:A:277:ASP:OD1	1:A:278:LYS:N	0.61	2.33	7	1
1:A:309:LYS:N	1:A:309:LYS:HD2	0.61	2.09	23	1
1:A:166:LEU:O	2:B:4:A:C8	0.61	2.52	9	10
1:A:270:ILE:HD11	1:A:292:ASP:HB3	0.61	1.70	11	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:237:ASP:OD1	1:A:238:GLU:N	0.61	2.33	19	6
1:A:202:PHE:CD1	2:B:5:U:H4'	0.61	2.30	10	14
1:A:185:VAL:O	1:A:185:VAL:CG1	0.61	2.49	15	5
1:A:175:LEU:HB2	1:A:188:LEU:HD21	0.61	1.71	18	1
1:A:227:VAL:HG21	1:A:276:LEU:O	0.61	1.94	24	1
1:A:162:PHE:CD2	2:B:6:A:C4	0.61	2.89	11	19
1:A:276:LEU:HD23	1:A:283:SER:CB	0.61	2.26	1	1
1:A:161:MET:O	1:A:204:PHE:HA	0.61	1.96	24	7
1:A:167:ASN:CA	2:B:4:A:N7	0.61	2.64	25	14
1:A:190:ILE:HG23	1:A:200:ARG:NE	0.61	2.11	7	1
1:A:178:TYR:OH	1:A:221:HIS:CB	0.61	2.49	24	2
1:A:185:VAL:HG21	1:A:188:LEU:HB3	0.61	1.72	20	1
1:A:263:PHE:CE2	1:A:315:ILE:HD13	0.60	2.31	13	9
2:B:3:U:O2'	2:B:5:U:H3'	0.60	1.96	20	2
1:A:275:MET:HE1	1:A:288:PHE:CD1	0.60	2.31	5	1
2:B:5:U:O2'	2:B:6:A:O5'	0.60	2.20	21	2
1:A:163:ILE:CB	1:A:166:LEU:HD21	0.60	2.26	11	1
1:A:247:VAL:HG22	1:A:315:ILE:HG23	0.60	1.72	12	2
1:A:159:CYS:SG	1:A:213:VAL:HG21	0.60	2.37	18	2
1:A:166:LEU:HD23	1:A:228:ILE:CG2	0.60	2.24	4	4
1:A:200:ARG:HB3	1:A:202:PHE:CE1	0.60	2.32	20	10
1:A:178:TYR:HD2	1:A:223:LEU:HD12	0.60	1.53	25	2
1:A:245:ILE:HD12	1:A:300:VAL:HG11	0.60	1.72	23	1
1:A:270:ILE:HG22	1:A:290:THR:HB	0.60	1.73	6	2
1:A:162:PHE:CD2	2:B:6:A:C5	0.60	2.90	3	24
1:A:170:THR:HG22	1:A:175:LEU:HB2	0.60	1.73	19	2
1:A:300:VAL:O	1:A:303:ASN:OD1	0.59	2.20	16	1
1:A:275:MET:O	1:A:276:LEU:HD23	0.59	1.97	13	4
1:A:170:THR:HG23	1:A:223:LEU:HD13	0.59	1.74	23	1
1:A:161:MET:CG	1:A:213:VAL:HG23	0.59	2.27	2	1
1:A:191:MET:HB2	1:A:200:ARG:HB3	0.59	1.74	23	1
1:A:191:MET:SD	1:A:191:MET:N	0.59	2.75	24	5
1:A:250:ILE:HB	1:A:254:VAL:HG21	0.59	1.74	25	1
1:A:250:ILE:HB	1:A:254:VAL:HG11	0.59	1.74	8	1
1:A:172:GLU:O	1:A:176:ARG:HD3	0.59	1.97	11	2
1:A:170:THR:CG2	1:A:223:LEU:HD21	0.59	2.21	13	1
1:A:245:ILE:HD13	1:A:245:ILE:O	0.59	1.97	9	14
1:A:263:PHE:C	1:A:269:ILE:HD11	0.59	2.18	25	20
1:A:166:LEU:HD11	1:A:202:PHE:C	0.59	2.18	22	2
1:A:254:VAL:O	1:A:258:GLU:HB2	0.59	1.98	16	8
1:A:202:PHE:CD2	2:B:5:U:H4'	0.59	2.33	18	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:178:TYR:C	1:A:178:TYR:CD1	0.59	2.75	16	5
1:A:189:LYS:O	1:A:203:GLY:CA	0.59	2.50	1	2
1:A:191:MET:O	1:A:192:LYS:O	0.59	2.20	16	4
1:A:275:MET:O	1:A:282:GLN:HB3	0.59	1.97	18	1
1:A:234:ILE:HD12	2:B:6:A:C6	0.59	2.33	8	9
1:A:205:LEU:HD22	1:A:207:PHE:CE2	0.59	2.32	5	7
1:A:221:HIS:CD2	1:A:221:HIS:N	0.59	2.71	13	6
2:B:7:U:O2'	2:B:8:A:H4'	0.59	1.98	14	1
1:A:162:PHE:CE2	2:B:6:A:C4	0.58	2.92	4	22
1:A:200:ARG:HG3	1:A:202:PHE:CZ	0.58	2.32	19	3
1:A:221:HIS:CD2	1:A:230:PRO:HG2	0.58	2.33	14	17
2:B:4:A:H3'	2:B:5:U:H5''	0.58	1.75	25	3
1:A:178:TYR:O	1:A:181:LYS:HD3	0.58	1.98	25	2
1:A:164:GLY:O	1:A:228:ILE:HG22	0.58	1.97	14	9
1:A:305:PHE:CE2	1:A:314:GLU:HG2	0.58	2.33	21	1
1:A:274:LEU:HB2	1:A:276:LEU:HD11	0.58	1.75	24	1
1:A:246:PHE:CE1	2:B:2:A:C5	0.58	2.92	10	20
1:A:166:LEU:HD12	1:A:200:ARG:HH21	0.58	1.59	8	1
1:A:303:ASN:O	1:A:304:LYS:C	0.58	2.41	16	1
1:A:217:VAL:HG21	1:A:232:ARG:CZ	0.58	2.28	20	1
1:A:270:ILE:CD1	1:A:292:ASP:HA	0.58	2.28	22	11
1:A:245:ILE:HD11	1:A:263:PHE:CE2	0.58	2.33	10	8
1:A:231:LYS:HE3	2:B:5:U:O4	0.58	1.97	7	1
1:A:234:ILE:CG1	2:B:6:A:C6	0.58	2.87	4	5
1:A:275:MET:HB2	1:A:282:GLN:HB3	0.58	1.75	11	2
1:A:282:GLN:O	1:A:283:SER:CB	0.58	2.51	20	2
1:A:170:THR:O	1:A:190:ILE:HD13	0.58	1.99	9	1
1:A:229:ASP:O	2:B:5:U:O4	0.58	2.22	15	3
1:A:172:GLU:CA	1:A:190:ILE:HD12	0.58	2.28	20	6
1:A:266:TRP:O	1:A:296:ALA:HB1	0.57	1.99	11	7
1:A:295:ASP:OD1	1:A:296:ALA:N	0.57	2.37	23	3
1:A:178:TYR:OH	1:A:179:PHE:CZ	0.57	2.57	11	4
1:A:278:LYS:O	1:A:280:THR:N	0.57	2.37	14	1
1:A:263:PHE:HB3	1:A:291:TYR:OH	0.57	1.99	21	2
1:A:250:ILE:CD1	1:A:259:PHE:CE1	0.57	2.87	23	5
1:A:318:ALA:O	1:A:319:GLU:CB	0.57	2.52	11	1
1:A:250:ILE:HD13	1:A:259:PHE:CE1	0.57	2.33	15	4
1:A:276:LEU:HD23	1:A:279:ASP:O	0.57	1.98	14	2
1:A:185:VAL:HG11	1:A:188:LEU:CD2	0.57	2.28	16	1
1:A:189:LYS:N	1:A:204:PHE:O	0.57	2.37	11	5
1:A:193:ASP:HB3	1:A:198:ARG:O	0.57	2.00	3	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:262:PHE:HD2	1:A:263:PHE:CD1	0.57	2.17	21	6
1:A:178:TYR:CZ	1:A:179:PHE:CZ	0.57	2.92	11	5
2:B:7:U:O2'	2:B:8:A:P	0.57	2.61	13	3
1:A:162:PHE:CE2	2:B:5:U:C6	0.57	2.92	6	9
1:A:160:LYS:CB	1:A:233:ALA:HB3	0.57	2.29	17	1
1:A:318:ALA:O	2:B:2:A:N1	0.57	2.38	22	1
1:A:162:PHE:CE2	2:B:5:U:N1	0.57	2.72	4	20
1:A:276:LEU:HD22	1:A:283:SER:HB2	0.57	1.75	3	1
1:A:200:ARG:NE	1:A:202:PHE:O	0.57	2.38	25	1
1:A:250:ILE:HG22	1:A:254:VAL:HG11	0.57	1.77	10	2
1:A:162:PHE:HB3	1:A:231:LYS:HG2	0.57	1.77	9	1
1:A:247:VAL:O	1:A:286:PHE:HB2	0.57	2.00	14	1
1:A:268:THR:O	1:A:269:ILE:O	0.57	2.23	15	1
1:A:250:ILE:O	1:A:254:VAL:HB	0.57	2.00	17	1
1:A:266:TRP:CH2	1:A:306:ILE:HD12	0.57	2.34	4	9
1:A:250:ILE:HD11	1:A:286:PHE:C	0.57	2.21	2	2
1:A:211:SER:O	1:A:215:GLU:OE1	0.57	2.23	5	1
1:A:188:LEU:HD22	1:A:188:LEU:H	0.57	1.60	7	1
1:A:262:PHE:CZ	1:A:308:PHE:HB2	0.57	2.34	22	5
1:A:250:ILE:HD13	1:A:259:PHE:CD1	0.57	2.35	15	5
1:A:213:VAL:HG11	1:A:232:ARG:NE	0.57	2.14	17	1
1:A:179:PHE:CB	1:A:205:LEU:HD11	0.56	2.30	4	3
1:A:178:TYR:CE2	1:A:179:PHE:CZ	0.56	2.92	13	1
1:A:303:ASN:O	1:A:306:ILE:HD13	0.56	1.99	16	1
1:A:262:PHE:CE1	1:A:306:ILE:HG21	0.56	2.34	9	3
1:A:239:GLN:NE2	2:B:6:A:O2'	0.56	2.39	19	8
1:A:245:ILE:HG21	1:A:297:VAL:HG23	0.56	1.76	16	7
1:A:200:ARG:HG2	1:A:202:PHE:H	0.56	1.60	7	2
1:A:276:LEU:N	1:A:276:LEU:HD22	0.56	2.16	20	1
1:A:286:PHE:CE1	2:B:2:A:C4'	0.56	2.88	9	15
2:B:7:U:O2	2:B:7:U:O4'	0.56	2.22	23	1
1:A:179:PHE:CG	1:A:205:LEU:CD1	0.56	2.89	4	6
1:A:171:THR:C	1:A:190:ILE:HD12	0.56	2.21	22	8
1:A:259:PHE:CZ	1:A:289:VAL:HG22	0.56	2.36	11	5
1:A:242:THR:HG22	1:A:292:ASP:HA	0.56	1.78	1	1
1:A:306:ILE:O	1:A:313:ILE:HG12	0.56	2.00	7	1
1:A:285:GLY:O	1:A:286:PHE:O	0.56	2.23	10	1
1:A:247:VAL:HG11	1:A:263:PHE:HZ	0.56	1.61	23	1
1:A:166:LEU:HB3	1:A:170:THR:OG1	0.56	2.00	11	4
1:A:269:ILE:O	1:A:269:ILE:CG2	0.56	2.54	3	1
1:A:304:LYS:HG3	1:A:305:PHE:CE1	0.56	2.36	7	25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:172:GLU:HB3	1:A:188:LEU:HD22	0.56	1.78	18	1
1:A:246:PHE:CD1	2:B:2:A:C5	0.56	2.94	11	6
1:A:246:PHE:CE1	2:B:2:A:C4	0.56	2.94	23	8
1:A:228:ILE:HG13	1:A:230:PRO:HD3	0.56	1.76	23	1
1:A:234:ILE:HD11	2:B:6:A:N6	0.55	2.16	18	8
1:A:223:LEU:HD23	1:A:224:ASP:OD1	0.55	2.01	24	1
1:A:178:TYR:OH	1:A:221:HIS:HA	0.55	2.01	15	11
1:A:309:LYS:O	1:A:310:ASP:CB	0.55	2.54	12	2
1:A:190:ILE:HG23	1:A:200:ARG:NH2	0.55	2.17	25	1
1:A:168:TRP:N	2:B:4:A:N7	0.55	2.55	23	21
1:A:175:LEU:HB3	1:A:188:LEU:HD11	0.55	1.78	10	3
1:A:283:SER:O	1:A:284:ARG:HG2	0.55	2.01	8	1
1:A:244:LYS:C	1:A:318:ALA:HB2	0.55	2.22	9	1
1:A:246:PHE:CZ	2:B:2:A:N7	0.55	2.74	15	11
2:B:7:U:O2'	2:B:8:A:H5'	0.55	2.01	14	1
2:B:2:A:N3	2:B:3:U:C5	0.55	2.74	24	2
1:A:181:LYS:HD3	1:A:181:LYS:H	0.55	1.61	25	1
1:A:246:PHE:CG	2:B:2:A:C6	0.55	2.94	8	12
1:A:303:ASN:OD1	1:A:305:PHE:C	0.55	2.45	21	1
1:A:191:MET:SD	1:A:202:PHE:CE1	0.55	2.99	13	5
1:A:285:GLY:O	1:A:286:PHE:CD1	0.55	2.60	10	1
1:A:275:MET:HE3	2:B:3:U:O4'	0.55	2.01	18	2
1:A:190:ILE:O	1:A:191:MET:O	0.55	2.25	19	1
1:A:282:GLN:HB2	1:A:286:PHE:CE2	0.55	2.36	22	1
1:A:172:GLU:HG2	1:A:190:ILE:HD12	0.55	1.79	24	1
1:A:262:PHE:CD2	1:A:263:PHE:CD1	0.55	2.94	15	5
1:A:161:MET:N	1:A:205:LEU:O	0.55	2.37	9	12
1:A:176:ARG:O	1:A:180:GLY:N	0.55	2.39	2	16
1:A:168:TRP:CD1	1:A:199:SER:O	0.55	2.60	13	6
1:A:166:LEU:HD22	1:A:175:LEU:HD11	0.55	1.79	22	2
1:A:213:VAL:HG11	1:A:232:ARG:HE	0.55	1.61	17	1
1:A:282:GLN:HG3	1:A:286:PHE:CD2	0.55	2.36	22	1
1:A:250:ILE:HD12	1:A:286:PHE:C	0.55	2.22	13	2
1:A:270:ILE:O	1:A:271:ASP:OD1	0.55	2.25	12	3
1:A:275:MET:CE	1:A:286:PHE:CE2	0.55	2.89	5	1
1:A:250:ILE:O	1:A:254:VAL:HG21	0.55	2.02	9	1
1:A:204:PHE:CZ	2:B:7:U:C4	0.55	2.95	23	1
1:A:307:ASP:O	1:A:307:ASP:OD1	0.54	2.24	4	4
1:A:244:LYS:O	1:A:318:ALA:HB2	0.54	2.02	20	4
1:A:188:LEU:HD22	1:A:188:LEU:C	0.54	2.23	19	1
1:A:184:THR:O	1:A:185:VAL:CG1	0.54	2.55	25	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:274:LEU:O	1:A:275:MET:CB	0.54	2.56	24	14
1:A:164:GLY:O	1:A:228:ILE:HA	0.54	2.02	12	2
1:A:185:VAL:CG2	1:A:207:PHE:CE1	0.54	2.89	16	4
1:A:270:ILE:CD1	1:A:292:ASP:HB3	0.54	2.32	11	5
1:A:221:HIS:CG	1:A:230:PRO:HG2	0.54	2.37	19	2
1:A:163:ILE:HG21	1:A:175:LEU:HD21	0.54	1.78	22	1
1:A:244:LYS:CE	1:A:288:PHE:CD2	0.54	2.91	13	7
1:A:305:PHE:HA	1:A:313:ILE:O	0.54	2.02	23	10
1:A:234:ILE:CD1	2:B:6:A:C6	0.54	2.90	2	17
1:A:179:PHE:CD2	1:A:205:LEU:HD11	0.54	2.38	18	3
1:A:247:VAL:HG11	1:A:259:PHE:HE1	0.54	1.62	21	6
1:A:188:LEU:N	1:A:188:LEU:HD22	0.54	2.17	7	1
1:A:168:TRP:CG	2:B:4:A:C8	0.54	2.96	9	1
1:A:161:MET:HE2	1:A:216:VAL:HB	0.54	1.80	13	1
1:A:175:LEU:CD2	1:A:190:ILE:HD11	0.54	2.30	14	1
1:A:185:VAL:O	1:A:185:VAL:HG23	0.54	2.01	6	4
1:A:262:PHE:CG	1:A:308:PHE:CE1	0.54	2.96	23	4
1:A:258:GLU:HA	1:A:261:GLU:HB3	0.54	1.79	6	3
1:A:254:VAL:HG12	1:A:309:LYS:HG2	0.54	1.78	23	1
1:A:159:CYS:HA	1:A:213:VAL:HG21	0.54	1.80	11	1
1:A:162:PHE:N	1:A:231:LYS:O	0.54	2.37	25	4
1:A:300:VAL:HG22	1:A:306:ILE:HD11	0.54	1.79	15	1
2:B:3:U:O2	2:B:6:A:P	0.54	2.66	1	4
1:A:234:ILE:HG13	2:B:6:A:N6	0.54	2.18	25	8
1:A:191:MET:HB2	1:A:200:ARG:HD2	0.54	1.79	8	1
1:A:191:MET:HB2	1:A:200:ARG:HB2	0.54	1.80	21	3
1:A:262:PHE:CZ	1:A:313:ILE:HD11	0.54	2.37	21	2
1:A:275:MET:HE1	2:B:3:U:O4'	0.53	2.03	1	1
1:A:275:MET:CE	2:B:3:U:O4'	0.53	2.56	20	3
1:A:163:ILE:O	1:A:202:PHE:CB	0.53	2.56	14	15
1:A:297:VAL:O	1:A:300:VAL:HG12	0.53	2.02	16	8
1:A:276:LEU:HD13	1:A:282:GLN:NE2	0.53	2.17	20	1
1:A:221:HIS:O	1:A:228:ILE:HG12	0.53	2.02	24	1
1:A:168:TRP:CZ3	2:B:4:A:C4	0.53	2.96	25	13
1:A:172:GLU:HB3	1:A:188:LEU:HD11	0.53	1.78	1	1
1:A:216:VAL:HG12	1:A:230:PRO:HB2	0.53	1.80	17	4
1:A:244:LYS:HE3	1:A:288:PHE:CD2	0.53	2.37	22	3
1:A:200:ARG:HB2	1:A:202:PHE:CE2	0.53	2.38	25	1
1:A:222:ILE:HD12	1:A:227:VAL:HA	0.53	1.79	25	1
1:A:247:VAL:HG11	1:A:259:PHE:CZ	0.53	2.38	8	14
1:A:245:ILE:HG21	1:A:297:VAL:HG13	0.53	1.80	2	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:263:PHE:CZ	1:A:315:ILE:CD1	0.53	2.92	3	14
1:A:175:LEU:HD12	1:A:190:ILE:CD1	0.53	2.33	4	4
1:A:247:VAL:CG2	1:A:263:PHE:CE2	0.53	2.91	3	1
1:A:263:PHE:CZ	1:A:315:ILE:HD13	0.53	2.38	10	11
1:A:266:TRP:CZ3	1:A:306:ILE:CD1	0.53	2.91	4	6
2:B:5:U:O2'	2:B:5:U:O2	0.53	2.27	15	18
1:A:279:ASP:OD1	1:A:280:THR:N	0.53	2.42	22	2
1:A:163:ILE:HG22	1:A:166:LEU:HD21	0.53	1.79	8	7
1:A:234:ILE:CD1	2:B:6:A:N6	0.53	2.72	3	13
1:A:274:LEU:HD23	1:A:276:LEU:CD1	0.53	2.29	14	2
1:A:204:PHE:CZ	2:B:7:U:C5	0.53	2.96	23	1
1:A:191:MET:HE2	1:A:202:PHE:O	0.53	2.04	25	3
1:A:168:TRP:CH2	2:B:4:A:C4	0.53	2.97	7	7
1:A:263:PHE:HA	1:A:266:TRP:CZ3	0.53	2.39	7	5
1:A:200:ARG:CG	1:A:202:PHE:CZ	0.53	2.92	21	4
1:A:163:ILE:HG22	1:A:166:LEU:CD1	0.53	2.26	13	1
1:A:254:VAL:CG1	1:A:308:PHE:CE2	0.53	2.92	19	1
1:A:168:TRP:CH2	2:B:4:A:N3	0.53	2.77	18	15
1:A:286:PHE:CZ	2:B:2:A:C4'	0.53	2.92	3	13
1:A:168:TRP:CE3	2:B:4:A:C6	0.53	2.97	23	8
1:A:271:ASP:O	1:A:272:ALA:HB3	0.53	2.04	9	1
1:A:262:PHE:CE2	1:A:313:ILE:CD1	0.53	2.92	16	3
1:A:250:ILE:O	1:A:251:GLY:O	0.53	2.27	19	2
1:A:181:LYS:CD	1:A:181:LYS:C	0.52	2.78	18	5
1:A:242:THR:HA	1:A:291:TYR:O	0.52	2.02	24	3
1:A:250:ILE:O	1:A:254:VAL:CG1	0.52	2.57	19	2
1:A:172:GLU:CG	1:A:190:ILE:HD12	0.52	2.35	24	1
1:A:226:LYS:NZ	2:B:4:A:C6	0.52	2.77	5	4
1:A:247:VAL:HG11	1:A:263:PHE:CZ	0.52	2.39	3	3
1:A:227:VAL:HG12	1:A:229:ASP:OD2	0.52	2.04	20	1
1:A:275:MET:HB2	1:A:282:GLN:HG3	0.52	1.81	23	1
1:A:254:VAL:HG23	1:A:254:VAL:O	0.52	2.03	24	1
1:A:244:LYS:CD	1:A:290:THR:OG1	0.52	2.58	6	8
1:A:270:ILE:HD11	1:A:292:ASP:HA	0.52	1.81	20	9
1:A:227:VAL:HG22	1:A:277:ASP:O	0.52	2.04	24	2
1:A:169:ASP:OD1	1:A:170:THR:N	0.52	2.42	12	1
1:A:227:VAL:HG21	1:A:279:ASP:CG	0.52	2.25	13	1
1:A:233:ALA:HA	2:B:6:A:N1	0.52	2.18	17	5
1:A:263:PHE:CE2	1:A:266:TRP:CZ2	0.52	2.97	13	19
1:A:231:LYS:HE2	2:B:6:A:H62	0.52	1.65	15	5
1:A:189:LYS:HG3	1:A:191:MET:SD	0.52	2.45	25	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:191:MET:SD	2:B:7:U:H1'	0.52	2.44	19	5
1:A:191:MET:SD	1:A:200:ARG:HG3	0.52	2.44	7	1
1:A:260:GLU:HG2	1:A:272:ALA:HB3	0.52	1.81	10	1
1:A:172:GLU:O	1:A:188:LEU:HD11	0.52	2.04	20	1
1:A:266:TRP:CH2	1:A:306:ILE:CD1	0.52	2.93	24	7
1:A:247:VAL:HG13	1:A:315:ILE:HG12	0.52	1.80	12	2
1:A:179:PHE:CG	1:A:205:LEU:HD11	0.52	2.40	4	2
1:A:175:LEU:CB	1:A:188:LEU:HD21	0.52	2.35	18	1
1:A:170:THR:O	1:A:174:ASN:HB2	0.52	2.05	11	6
1:A:191:MET:HB2	1:A:200:ARG:CG	0.52	2.34	10	7
1:A:242:THR:CG2	1:A:270:ILE:HD11	0.52	2.34	23	2
1:A:163:ILE:HG21	1:A:166:LEU:HD21	0.52	1.82	21	1
1:A:190:ILE:O	1:A:190:ILE:HG23	0.52	2.05	2	1
2:B:4:A:H3'	2:B:5:U:C5'	0.52	2.35	3	8
1:A:276:LEU:C	1:A:276:LEU:HD13	0.52	2.25	6	1
1:A:163:ILE:O	1:A:202:PHE:CA	0.52	2.58	14	6
1:A:246:PHE:CZ	2:B:2:A:C5	0.52	2.98	10	4
1:A:185:VAL:HG22	1:A:205:LEU:HD21	0.52	1.80	5	2
1:A:267:GLY:O	1:A:268:THR:HG22	0.52	2.05	11	2
1:A:276:LEU:O	1:A:276:LEU:HD23	0.52	2.04	19	1
1:A:161:MET:SD	1:A:213:VAL:HG23	0.51	2.45	2	1
1:A:191:MET:HG2	2:B:7:U:O2'	0.51	2.05	7	1
1:A:306:ILE:CG1	1:A:315:ILE:HD11	0.51	2.35	23	1
1:A:246:PHE:CD2	2:B:2:A:N6	0.51	2.78	2	3
1:A:286:PHE:CZ	2:B:2:A:O4'	0.51	2.62	19	19
1:A:231:LYS:HD2	2:B:5:U:C4	0.51	2.40	9	1
1:A:166:LEU:HD22	1:A:170:THR:HG21	0.51	1.82	23	1
1:A:163:ILE:O	1:A:202:PHE:HA	0.51	2.06	14	3
1:A:275:MET:O	1:A:282:GLN:HB2	0.51	2.05	25	1
1:A:190:ILE:O	1:A:202:PHE:O	0.51	2.28	6	2
1:A:305:PHE:HB3	1:A:312:LYS:HB3	0.51	1.83	17	6
1:A:226:LYS:HZ2	2:B:4:A:N6	0.51	2.03	8	2
1:A:244:LYS:HE2	1:A:288:PHE:CD2	0.51	2.41	14	10
1:A:241:LYS:O	1:A:242:THR:O	0.51	2.29	6	2
1:A:258:GLU:O	1:A:262:PHE:N	0.51	2.43	10	5
1:A:309:LYS:O	1:A:310:ASP:HB2	0.51	2.04	21	2
1:A:191:MET:SD	2:B:7:U:O2'	0.51	2.65	23	1
1:A:245:ILE:C	1:A:245:ILE:CD1	0.51	2.79	25	2
1:A:262:PHE:CD1	1:A:308:PHE:CE1	0.51	2.99	23	2
1:A:275:MET:SD	1:A:286:PHE:CE2	0.51	3.04	5	2
1:A:234:ILE:HD11	1:A:238:GLU:CB	0.51	2.36	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:6:A:O2'	2:B:7:U:H5''	0.51	2.06	20	1
1:A:175:LEU:CD1	1:A:188:LEU:HD11	0.51	2.35	3	1
1:A:179:PHE:CE1	1:A:216:VAL:HG13	0.51	2.41	24	3
1:A:311:ARG:O	1:A:312:LYS:CB	0.51	2.59	21	1
1:A:266:TRP:CZ3	1:A:306:ILE:HD12	0.51	2.41	6	5
1:A:270:ILE:HD11	1:A:292:ASP:HB2	0.51	1.81	13	5
1:A:205:LEU:HD21	1:A:207:PHE:HZ	0.51	1.58	7	5
1:A:166:LEU:HD12	1:A:166:LEU:N	0.51	2.21	13	1
1:A:181:LYS:CD	1:A:181:LYS:H	0.51	2.18	3	3
1:A:246:PHE:CZ	2:B:2:A:C8	0.51	2.98	23	4
2:B:3:U:O2	2:B:6:A:OP2	0.51	2.29	20	7
1:A:191:MET:CB	1:A:200:ARG:CG	0.51	2.88	10	7
1:A:247:VAL:HG13	1:A:250:ILE:HD11	0.51	1.83	17	1
2:B:8:A:N3	2:B:8:A:C3'	0.51	2.74	22	1
1:A:191:MET:CE	1:A:204:PHE:CE2	0.50	2.94	1	2
1:A:305:PHE:CE1	1:A:314:GLU:HG2	0.50	2.41	17	13
1:A:166:LEU:O	1:A:170:THR:OG1	0.50	2.27	3	2
1:A:309:LYS:O	1:A:310:ASP:HB3	0.50	2.06	12	1
1:A:179:PHE:CE2	1:A:205:LEU:HD11	0.50	2.42	17	4
1:A:185:VAL:HG21	1:A:205:LEU:HD11	0.50	1.83	16	1
1:A:282:GLN:NE2	1:A:286:PHE:O	0.50	2.42	17	2
1:A:300:VAL:HG13	1:A:315:ILE:HG21	0.50	1.81	23	1
1:A:178:TYR:OH	1:A:221:HIS:HB3	0.50	2.07	16	5
1:A:262:PHE:CE1	1:A:308:PHE:CD1	0.50	3.00	23	1
1:A:186:THR:O	1:A:187:ASP:OD1	0.50	2.28	18	5
1:A:232:ARG:HD3	1:A:233:ALA:N	0.50	2.21	16	1
1:A:274:LEU:O	1:A:282:GLN:NE2	0.50	2.41	16	2
1:A:193:ASP:N	1:A:198:ARG:O	0.50	2.45	14	7
2:B:5:U:H4'	2:B:5:U:OP1	0.50	2.06	18	9
1:A:263:PHE:CZ	1:A:313:ILE:HD12	0.50	2.41	7	1
1:A:274:LEU:HD21	1:A:283:SER:CB	0.50	2.37	14	2
1:A:175:LEU:CD1	1:A:190:ILE:HD11	0.50	2.36	4	4
1:A:245:ILE:HD11	1:A:263:PHE:HE2	0.50	1.66	16	4
1:A:164:GLY:O	1:A:228:ILE:CG2	0.50	2.60	25	3
1:A:221:HIS:CD2	1:A:230:PRO:CD	0.50	2.95	21	10
1:A:192:LYS:HA	1:A:199:SER:HA	0.50	1.83	2	1
1:A:242:THR:HG22	1:A:292:ASP:O	0.50	2.07	2	3
1:A:161:MET:HB3	1:A:231:LYS:O	0.50	2.07	14	1
1:A:191:MET:CB	1:A:200:ARG:CB	0.50	2.90	23	2
1:A:264:SER:N	1:A:269:ILE:CD1	0.50	2.74	21	18
1:A:270:ILE:HG13	1:A:292:ASP:CA	0.50	2.37	16	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:286:PHE:CE1	2:B:2:A:C5'	0.50	2.94	3	1
1:A:235:PRO:HB2	1:A:238:GLU:OE1	0.50	2.06	12	2
1:A:199:SER:O	1:A:200:ARG:HB3	0.50	2.06	7	1
1:A:246:PHE:HB3	1:A:317:ARG:O	0.50	2.07	9	1
1:A:275:MET:SD	1:A:288:PHE:CD2	0.50	3.05	18	1
1:A:189:LYS:O	1:A:203:GLY:HA2	0.49	2.06	6	3
1:A:242:THR:O	1:A:291:TYR:O	0.49	2.30	3	3
1:A:246:PHE:CE1	2:B:2:A:C8	0.49	3.00	13	4
2:B:5:U:O2	2:B:6:A:C8	0.49	2.65	11	1
1:A:258:GLU:O	1:A:262:PHE:CB	0.49	2.59	22	3
1:A:185:VAL:HG22	1:A:206:SER:O	0.49	2.07	16	1
1:A:191:MET:CB	1:A:200:ARG:HG3	0.49	2.37	9	5
1:A:175:LEU:HD23	1:A:188:LEU:HD11	0.49	1.84	9	1
1:A:307:ASP:OD1	1:A:312:LYS:CD	0.49	2.61	25	2
1:A:283:SER:O	1:A:284:ARG:HB3	0.49	2.07	19	1
1:A:168:TRP:CE2	1:A:198:ARG:HD2	0.49	2.43	18	1
2:B:3:U:O2'	2:B:3:U:O2	0.49	2.30	20	2
1:A:200:ARG:HD2	1:A:200:ARG:N	0.49	2.21	3	1
1:A:262:PHE:CE2	1:A:263:PHE:CE1	0.49	3.00	15	3
1:A:303:ASN:CG	1:A:306:ILE:HD12	0.49	2.28	16	1
1:A:274:LEU:HB3	1:A:282:GLN:CD	0.49	2.28	18	1
1:A:191:MET:HE3	1:A:204:PHE:HE1	0.49	1.67	23	1
1:A:204:PHE:HE2	2:B:6:A:C2	0.49	2.25	23	1
1:A:217:VAL:HG11	1:A:232:ARG:NE	0.49	2.22	23	1
1:A:247:VAL:CG1	1:A:313:ILE:HD12	0.49	2.36	23	1
1:A:231:LYS:HE2	2:B:6:A:N6	0.49	2.22	3	2
1:A:266:TRP:CZ2	1:A:300:VAL:HG23	0.49	2.41	7	1
1:A:271:ASP:O	1:A:272:ALA:O	0.49	2.29	24	2
1:A:282:GLN:NE2	2:B:2:A:O3'	0.49	2.44	13	1
1:A:282:GLN:OE1	1:A:286:PHE:CE1	0.49	2.65	16	3
1:A:171:THR:O	1:A:172:GLU:HB2	0.49	2.07	24	1
1:A:164:GLY:O	1:A:228:ILE:CA	0.49	2.61	12	1
2:B:5:U:O2'	2:B:6:A:OP1	0.49	2.31	15	1
1:A:179:PHE:CD1	1:A:205:LEU:CD1	0.49	2.96	13	1
1:A:275:MET:HG3	1:A:282:GLN:OE1	0.49	2.08	22	1
1:A:162:PHE:CE2	2:B:5:U:H1'	0.49	2.43	24	8
1:A:286:PHE:CE1	2:B:2:A:H4'	0.49	2.43	10	12
1:A:221:HIS:O	1:A:227:VAL:O	0.49	2.30	6	1
1:A:242:THR:HG22	1:A:270:ILE:CD1	0.49	2.37	22	1
1:A:172:GLU:CG	1:A:190:ILE:HB	0.48	2.37	24	3
1:A:245:ILE:CG2	1:A:297:VAL:HG22	0.48	2.38	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:179:PHE:CD1	1:A:205:LEU:CD2	0.48	2.96	10	1
1:A:267:GLY:HA3	1:A:291:TYR:CE1	0.48	2.43	4	10
1:A:191:MET:CE	1:A:204:PHE:CD1	0.48	2.95	12	2
1:A:221:HIS:CD2	1:A:230:PRO:CG	0.48	2.94	2	3
1:A:269:ILE:HG21	1:A:272:ALA:HB3	0.48	1.85	11	1
1:A:160:LYS:O	1:A:233:ALA:HB3	0.48	2.08	10	1
1:A:251:GLY:O	1:A:254:VAL:CG2	0.48	2.59	13	2
1:A:175:LEU:HD23	1:A:179:PHE:CD2	0.48	2.43	1	4
1:A:202:PHE:CE1	2:B:5:U:OP1	0.48	2.66	2	1
1:A:282:GLN:HB3	1:A:286:PHE:CZ	0.48	2.44	4	5
1:A:185:VAL:HG21	1:A:188:LEU:HD12	0.48	1.84	7	2
1:A:162:PHE:CE1	1:A:202:PHE:CD2	0.48	3.01	20	1
1:A:191:MET:O	1:A:199:SER:O	0.48	2.31	23	1
1:A:221:HIS:O	1:A:227:VAL:HG23	0.48	2.07	12	2
1:A:164:GLY:CA	2:B:5:U:C6	0.48	2.96	13	5
1:A:168:TRP:CZ3	1:A:198:ARG:NH2	0.48	2.82	5	3
1:A:234:ILE:HD12	2:B:6:A:C5	0.48	2.44	8	4
1:A:161:MET:CE	1:A:216:VAL:HG11	0.48	2.38	15	2
1:A:200:ARG:HB2	1:A:202:PHE:CE1	0.48	2.43	8	1
1:A:191:MET:HE3	1:A:204:PHE:CE1	0.48	2.43	23	1
1:A:275:MET:HE1	2:B:3:U:C4'	0.48	2.38	1	1
1:A:305:PHE:HB3	1:A:312:LYS:CG	0.48	2.38	25	2
1:A:191:MET:HB2	1:A:200:ARG:HD3	0.48	1.86	7	1
1:A:263:PHE:HE2	1:A:315:ILE:HD13	0.48	1.69	15	1
2:B:6:A:O3'	2:B:7:U:H4'	0.48	2.09	15	2
1:A:185:VAL:CG2	1:A:206:SER:O	0.48	2.62	18	2
1:A:185:VAL:HG12	1:A:207:PHE:CD1	0.48	2.42	7	3
1:A:191:MET:HE1	1:A:203:GLY:HA2	0.48	1.86	1	1
1:A:162:PHE:CE1	1:A:202:PHE:CD1	0.48	3.01	18	3
1:A:305:PHE:CB	1:A:312:LYS:CE	0.48	2.92	5	2
2:B:3:U:O2'	2:B:5:U:O5'	0.48	2.31	22	7
1:A:205:LEU:HD22	1:A:207:PHE:CZ	0.48	2.44	14	1
1:A:202:PHE:CD2	2:B:5:U:C4'	0.48	2.96	18	1
1:A:246:PHE:CD1	2:B:2:A:C6	0.48	3.02	2	4
1:A:266:TRP:CE2	1:A:291:TYR:OH	0.48	2.62	24	2
1:A:288:PHE:CZ	2:B:3:U:C5	0.48	3.01	13	1
1:A:191:MET:HB3	1:A:200:ARG:CB	0.48	2.39	19	1
1:A:200:ARG:N	1:A:200:ARG:HD3	0.48	2.24	25	2
1:A:254:VAL:HG12	1:A:309:LYS:HD2	0.48	1.85	14	1
1:A:216:VAL:O	1:A:221:HIS:CE1	0.48	2.67	19	1
1:A:282:GLN:CB	1:A:286:PHE:CE2	0.48	2.97	22	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:191:MET:HE1	1:A:204:PHE:CD2	0.48	2.44	24	1
1:A:193:ASP:O	1:A:197:GLY:N	0.47	2.47	23	7
1:A:223:LEU:HD23	1:A:224:ASP:CG	0.47	2.29	7	5
1:A:189:LYS:O	1:A:204:PHE:N	0.47	2.47	4	6
1:A:276:LEU:CB	1:A:280:THR:HA	0.47	2.39	5	1
1:A:166:LEU:CA	1:A:170:THR:OG1	0.47	2.62	3	2
1:A:205:LEU:CD2	1:A:207:PHE:CE2	0.47	2.97	5	2
1:A:262:PHE:CZ	1:A:306:ILE:CG2	0.47	2.97	22	10
1:A:263:PHE:HA	1:A:266:TRP:CE3	0.47	2.43	7	2
2:B:3:U:H2'	2:B:5:U:OP2	0.47	2.08	2	7
1:A:213:VAL:HG11	1:A:232:ARG:HD3	0.47	1.85	5	1
1:A:161:MET:HB2	1:A:205:LEU:HB2	0.47	1.86	17	1
1:A:263:PHE:CD2	1:A:289:VAL:HG11	0.47	2.44	16	2
1:A:267:GLY:HA3	1:A:291:TYR:CD1	0.47	2.45	11	2
1:A:160:LYS:CG	1:A:233:ALA:CB	0.47	2.93	17	2
1:A:232:ARG:N	1:A:232:ARG:HD2	0.47	2.24	22	1
1:A:250:ILE:O	1:A:254:VAL:HG11	0.47	2.09	7	1
1:A:303:ASN:ND2	1:A:306:ILE:CD1	0.47	2.77	7	1
1:A:250:ILE:C	1:A:254:VAL:HG21	0.47	2.29	9	1
1:A:254:VAL:HG13	1:A:255:ARG:N	0.47	2.25	17	2
1:A:182:TYR:OH	1:A:221:HIS:CE1	0.47	2.67	23	2
1:A:162:PHE:CZ	2:B:6:A:C1'	0.47	2.98	22	4
1:A:262:PHE:CE1	1:A:308:PHE:HD1	0.47	2.28	23	1
1:A:251:GLY:O	1:A:254:VAL:CG1	0.47	2.60	2	3
1:A:275:MET:O	1:A:283:SER:N	0.47	2.47	2	5
1:A:255:ARG:CB	1:A:258:GLU:OE1	0.47	2.62	22	4
1:A:166:LEU:HD12	1:A:200:ARG:NH2	0.47	2.24	8	1
1:A:178:TYR:CD2	1:A:223:LEU:CD1	0.47	2.98	17	1
1:A:185:VAL:CG2	1:A:205:LEU:HD11	0.47	2.40	22	1
1:A:274:LEU:O	1:A:282:GLN:HG3	0.47	2.10	23	1
1:A:250:ILE:CD1	1:A:287:GLY:HA3	0.47	2.38	8	3
1:A:160:LYS:CE	1:A:204:PHE:HB3	0.47	2.40	24	3
1:A:234:ILE:HG13	2:B:6:A:N1	0.47	2.25	23	5
1:A:275:MET:CE	1:A:288:PHE:CD1	0.47	2.97	5	1
1:A:304:LYS:CG	1:A:305:PHE:CD1	0.47	2.98	13	7
1:A:185:VAL:CG2	1:A:188:LEU:HD12	0.47	2.40	7	1
1:A:276:LEU:HA	1:A:281:GLY:O	0.47	2.09	13	1
1:A:306:ILE:HD11	1:A:315:ILE:HD12	0.47	1.87	16	1
1:A:185:VAL:HG12	1:A:207:PHE:HE1	0.47	1.67	9	3
1:A:191:MET:CG	2:B:7:U:H1'	0.47	2.39	24	5
1:A:168:TRP:CZ3	2:B:4:A:C5	0.47	3.02	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:262:PHE:CD2	1:A:263:PHE:CE1	0.47	3.03	12	1
1:A:173:ASP:O	1:A:176:ARG:HG2	0.47	2.10	14	2
1:A:163:ILE:CD1	1:A:179:PHE:CZ	0.47	2.96	16	1
1:A:246:PHE:CD1	2:B:2:A:C4	0.47	3.03	22	1
1:A:275:MET:CG	1:A:282:GLN:OE1	0.47	2.63	22	1
1:A:191:MET:HB2	1:A:200:ARG:CB	0.47	2.39	23	1
1:A:162:PHE:CZ	2:B:6:A:O4'	0.47	2.68	24	1
1:A:221:HIS:NE2	1:A:230:PRO:HG3	0.47	2.25	2	1
1:A:234:ILE:HG12	2:B:6:A:N6	0.47	2.25	15	4
1:A:242:THR:CG2	1:A:270:ILE:HD12	0.47	2.40	22	2
1:A:259:PHE:CE1	1:A:263:PHE:CE1	0.47	3.03	15	1
1:A:162:PHE:O	1:A:230:PRO:HA	0.47	2.09	22	3
1:A:175:LEU:HD13	1:A:188:LEU:CD1	0.47	2.40	3	1
1:A:264:SER:O	1:A:267:GLY:O	0.47	2.33	7	2
1:A:271:ASP:O	1:A:290:THR:N	0.47	2.48	25	2
1:A:205:LEU:CD2	1:A:207:PHE:CZ	0.46	2.98	21	8
1:A:262:PHE:CG	1:A:308:PHE:CD1	0.46	3.03	17	6
1:A:186:THR:N	1:A:206:SER:O	0.46	2.48	7	4
1:A:263:PHE:HZ	1:A:313:ILE:HD12	0.46	1.68	7	1
1:A:266:TRP:O	1:A:266:TRP:CG	0.46	2.68	11	6
1:A:182:TYR:HH	1:A:221:HIS:CE1	0.46	2.28	13	1
1:A:235:PRO:HD2	1:A:238:GLU:OE1	0.46	2.10	23	1
1:A:163:ILE:N	1:A:203:GLY:O	0.46	2.48	19	7
2:B:6:A:O2'	2:B:7:U:P	0.46	2.73	6	2
1:A:168:TRP:CZ2	2:B:4:A:H1'	0.46	2.45	18	8
1:A:269:ILE:CG1	1:A:291:TYR:CE1	0.46	2.99	7	1
2:B:4:A:OP2	2:B:4:A:C4'	0.46	2.63	9	2
1:A:161:MET:HE2	1:A:216:VAL:HG11	0.46	1.86	12	1
1:A:162:PHE:CE2	2:B:6:A:C1'	0.46	2.99	11	3
1:A:308:PHE:CE1	1:A:309:LYS:HE3	0.46	2.45	9	2
1:A:269:ILE:HG12	1:A:291:TYR:CE1	0.46	2.45	7	2
1:A:178:TYR:CZ	1:A:179:PHE:CE1	0.46	3.03	13	1
1:A:266:TRP:CZ3	1:A:306:ILE:HD13	0.46	2.45	24	2
2:B:3:U:O2'	2:B:5:U:OP2	0.46	2.33	17	2
1:A:245:ILE:HD13	1:A:245:ILE:C	0.46	2.31	9	6
1:A:184:THR:C	1:A:185:VAL:HG13	0.46	2.31	12	3
2:B:1:U:O2'	2:B:2:A:N7	0.46	2.48	7	1
1:A:223:LEU:HD12	1:A:228:ILE:HD13	0.46	1.86	11	1
1:A:185:VAL:CG1	1:A:188:LEU:HD23	0.46	2.40	15	1
1:A:244:LYS:NZ	1:A:288:PHE:CE2	0.46	2.84	4	3
1:A:191:MET:O	1:A:200:ARG:HB2	0.46	2.11	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:303:ASN:OD1	1:A:306:ILE:CG1	0.46	2.64	21	1
1:A:200:ARG:O	2:B:4:A:O2'	0.46	2.34	11	2
1:A:161:MET:HB2	1:A:205:LEU:O	0.46	2.11	11	2
1:A:300:VAL:HA	1:A:303:ASN:OD1	0.46	2.10	16	1
1:A:160:LYS:CG	1:A:233:ALA:HB3	0.46	2.41	17	1
1:A:168:TRP:CD2	2:B:4:A:C5	0.46	3.03	23	2
1:A:162:PHE:CD2	2:B:5:U:C2	0.46	3.04	23	1
1:A:282:GLN:OE1	2:B:2:A:C5'	0.46	2.64	3	1
1:A:274:LEU:CD2	1:A:283:SER:HB2	0.46	2.40	5	1
1:A:191:MET:CE	1:A:202:PHE:O	0.46	2.64	6	3
2:B:8:A:N3	2:B:8:A:C2'	0.46	2.77	14	3
1:A:185:VAL:CG2	1:A:188:LEU:HD23	0.46	2.34	9	1
1:A:160:LYS:HE2	1:A:204:PHE:HB3	0.46	1.88	10	2
1:A:254:VAL:HG23	1:A:308:PHE:CZ	0.46	2.46	18	1
1:A:255:ARG:HB3	1:A:258:GLU:OE1	0.46	2.11	21	1
1:A:277:ASP:O	1:A:281:GLY:HA3	0.46	2.10	21	1
1:A:270:ILE:CG2	1:A:290:THR:HB	0.46	2.40	24	1
1:A:249:GLY:O	1:A:313:ILE:CG2	0.46	2.64	3	2
1:A:234:ILE:HG13	2:B:6:A:C6	0.46	2.46	23	5
1:A:266:TRP:HH2	1:A:306:ILE:HG21	0.46	1.71	7	2
1:A:204:PHE:CZ	2:B:7:U:C6	0.46	3.03	23	2
1:A:282:GLN:CB	1:A:286:PHE:CZ	0.46	2.98	22	1
1:A:220:GLN:O	1:A:228:ILE:O	0.46	2.34	2	3
1:A:168:TRP:HD1	1:A:199:SER:HG	0.46	1.53	4	1
1:A:198:ARG:O	1:A:199:SER:HB2	0.46	2.10	7	1
2:B:2:A:O2'	2:B:3:U:C6	0.46	2.69	23	1
1:A:239:GLN:O	1:A:242:THR:HG23	0.46	2.11	25	1
1:A:277:ASP:HB3	1:A:281:GLY:HA3	0.45	1.86	2	2
2:B:3:U:O2'	2:B:4:A:OP1	0.45	2.30	6	1
1:A:250:ILE:CD1	1:A:259:PHE:CD1	0.45	2.98	20	3
1:A:166:LEU:HG	1:A:201:GLY:O	0.45	2.10	23	2
2:B:5:U:O2'	2:B:6:A:C5'	0.45	2.64	24	1
1:A:167:ASN:OD1	2:B:4:A:N6	0.45	2.49	23	16
1:A:269:ILE:HG23	1:A:272:ALA:HB2	0.45	1.88	17	3
1:A:164:GLY:HA3	2:B:5:U:C5	0.45	2.45	10	4
1:A:254:VAL:HG23	1:A:255:ARG:N	0.45	2.27	12	3
1:A:231:LYS:HD2	2:B:5:U:O4	0.45	2.11	9	1
1:A:201:GLY:HA3	2:B:4:A:H2'	0.45	1.87	25	1
1:A:263:PHE:CE2	1:A:266:TRP:CH2	0.45	3.05	13	2
1:A:178:TYR:CZ	1:A:221:HIS:HB2	0.45	2.46	11	2
2:B:3:U:C2	2:B:5:U:OP2	0.45	2.69	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:162:PHE:CZ	1:A:202:PHE:CD2	0.45	3.04	20	1
1:A:303:ASN:OD1	1:A:306:ILE:HG12	0.45	2.11	21	1
1:A:223:LEU:CD2	1:A:224:ASP:OD1	0.45	2.64	24	1
1:A:179:PHE:CD2	1:A:205:LEU:CD1	0.45	3.00	18	2
1:A:175:LEU:HD13	1:A:188:LEU:HD11	0.45	1.87	3	1
1:A:175:LEU:HD13	1:A:223:LEU:CD1	0.45	2.41	5	1
1:A:275:MET:CE	2:B:3:U:C1'	0.45	2.94	13	1
1:A:231:LYS:CE	1:A:271:ASP:OD2	0.45	2.65	14	1
1:A:250:ILE:O	1:A:285:GLY:C	0.45	2.55	25	3
1:A:276:LEU:HD23	1:A:283:SER:OG	0.45	2.10	24	1
1:A:254:VAL:HG23	1:A:308:PHE:CE2	0.45	2.46	2	3
1:A:189:LYS:CD	2:B:7:U:C4	0.45	2.99	2	1
1:A:170:THR:HG22	1:A:175:LEU:CD2	0.45	2.41	15	2
1:A:217:VAL:HG13	1:A:218:LYS:N	0.45	2.27	25	4
2:B:3:U:O2	2:B:6:A:OP1	0.45	2.35	15	1
1:A:244:LYS:CE	1:A:288:PHE:CE2	0.45	3.00	20	1
1:A:280:THR:HG23	1:A:280:THR:O	0.45	2.11	25	1
1:A:222:ILE:HD13	1:A:227:VAL:HG23	0.45	1.87	3	1
1:A:235:PRO:CB	1:A:238:GLU:OE1	0.45	2.65	7	2
2:B:3:U:O2'	2:B:5:U:P	0.45	2.74	17	1
1:A:168:TRP:CE2	1:A:198:ARG:CD	0.45	3.00	18	1
1:A:306:ILE:HG13	1:A:315:ILE:HD11	0.45	1.88	23	1
1:A:217:VAL:HG11	1:A:232:ARG:CZ	0.45	2.42	23	1
2:B:3:U:H3'	2:B:4:A:H4'	0.45	1.88	9	4
1:A:200:ARG:HB3	1:A:202:PHE:CZ	0.45	2.47	13	3
1:A:247:VAL:HG12	1:A:287:GLY:C	0.45	2.32	22	2
1:A:270:ILE:HG12	1:A:292:ASP:CA	0.45	2.42	17	6
1:A:278:LYS:O	1:A:279:ASP:OD1	0.45	2.35	5	2
1:A:202:PHE:CD1	2:B:5:U:C4'	0.45	3.00	10	1
1:A:185:VAL:HG21	1:A:188:LEU:CG	0.45	2.41	11	1
1:A:286:PHE:CE1	2:B:2:A:O4'	0.45	2.70	22	4
2:B:3:U:O2	2:B:5:U:C3'	0.45	2.60	15	1
1:A:200:ARG:CG	1:A:202:PHE:CE1	0.45	2.97	21	1
1:A:245:ILE:CG2	1:A:297:VAL:CG2	0.45	2.93	25	2
1:A:179:PHE:CG	1:A:205:LEU:CD2	0.45	3.00	10	3
1:A:245:ILE:HD11	1:A:289:VAL:HB	0.45	1.89	1	3
1:A:246:PHE:CB	1:A:317:ARG:O	0.45	2.65	9	1
1:A:275:MET:O	1:A:282:GLN:CG	0.45	2.65	16	3
1:A:282:GLN:O	1:A:283:SER:HB3	0.45	2.12	16	2
1:A:246:PHE:CZ	1:A:286:PHE:CB	0.45	2.99	22	1
1:A:175:LEU:HD13	1:A:188:LEU:HD12	0.44	1.88	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:220:GLN:O	1:A:221:HIS:HB2	0.44	2.12	21	4
2:B:5:U:O2	2:B:5:U:C2'	0.44	2.64	20	6
1:A:270:ILE:HD11	1:A:292:ASP:CB	0.44	2.41	3	5
1:A:168:TRP:CD1	2:B:4:A:C8	0.44	3.05	9	1
1:A:226:LYS:NZ	2:B:4:A:N6	0.44	2.65	18	2
1:A:199:SER:OG	1:A:200:ARG:NH1	0.44	2.50	25	1
1:A:275:MET:HE2	1:A:288:PHE:HB2	0.44	1.88	5	1
1:A:168:TRP:CD2	2:B:4:A:C8	0.44	3.05	9	1
1:A:282:GLN:HA	1:A:286:PHE:CE1	0.44	2.47	22	2
1:A:191:MET:CE	1:A:204:PHE:CE1	0.44	3.00	12	2
1:A:303:ASN:OD1	1:A:305:PHE:O	0.44	2.36	21	1
1:A:175:LEU:HD23	1:A:179:PHE:HE2	0.44	1.72	24	3
1:A:181:LYS:HG3	1:A:182:TYR:CE1	0.44	2.47	4	3
1:A:178:TYR:CE2	1:A:223:LEU:HG	0.44	2.47	11	1
1:A:275:MET:SD	1:A:288:PHE:CG	0.44	3.11	13	1
1:A:245:ILE:HG12	1:A:289:VAL:HB	0.44	1.89	17	1
1:A:257:LYS:O	1:A:261:GLU:CB	0.44	2.65	25	1
1:A:162:PHE:CD1	1:A:204:PHE:CZ	0.44	3.05	23	2
1:A:234:ILE:HG12	2:B:6:A:C6	0.44	2.48	15	3
1:A:244:LYS:HG3	1:A:289:VAL:O	0.44	2.12	17	5
1:A:282:GLN:OE1	1:A:286:PHE:O	0.44	2.35	23	1
1:A:241:LYS:O	1:A:242:THR:C	0.44	2.56	24	1
1:A:258:GLU:O	1:A:261:GLU:HG2	0.44	2.13	2	3
1:A:213:VAL:HG11	1:A:232:ARG:HD2	0.44	1.88	3	2
2:B:7:U:O2'	2:B:8:A:H5''	0.44	2.12	12	1
1:A:178:TYR:CD2	1:A:223:LEU:HG	0.44	2.48	17	1
1:A:168:TRP:CZ2	1:A:198:ARG:HD2	0.44	2.48	23	1
2:B:6:A:C1'	2:B:7:U:O2	0.44	2.65	23	1
1:A:258:GLU:OE1	1:A:309:LYS:HE2	0.44	2.13	19	2
1:A:250:ILE:HG23	1:A:254:VAL:CG2	0.44	2.30	1	1
1:A:275:MET:CE	2:B:3:U:C4'	0.44	2.95	20	2
1:A:186:THR:CG2	1:A:208:GLU:CA	0.44	2.96	9	6
1:A:282:GLN:NE2	2:B:3:U:C4'	0.44	2.81	12	2
1:A:178:TYR:OH	1:A:221:HIS:CA	0.44	2.66	9	4
1:A:270:ILE:HG12	1:A:292:ASP:N	0.44	2.28	13	1
1:A:220:GLN:NE2	1:A:227:VAL:CG2	0.44	2.81	16	1
1:A:201:GLY:HA3	2:B:4:A:C2'	0.44	2.43	20	2
1:A:173:ASP:HA	1:A:176:ARG:CD	0.44	2.43	3	1
1:A:274:LEU:HD11	1:A:283:SER:O	0.44	2.13	3	1
1:A:170:THR:HG22	1:A:175:LEU:HD22	0.44	1.88	5	1
1:A:170:THR:C	1:A:171:THR:HG23	0.44	2.34	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:184:THR:O	1:A:185:VAL:HG22	0.44	2.13	6	3
1:A:245:ILE:HD13	1:A:300:VAL:HG11	0.44	1.90	7	1
2:B:7:U:O2'	2:B:8:A:C5'	0.44	2.65	14	1
1:A:246:PHE:CZ	1:A:286:PHE:HB2	0.44	2.47	22	1
1:A:252:PRO:O	1:A:254:VAL:HG13	0.44	2.13	24	1
1:A:234:ILE:CG1	2:B:6:A:N6	0.44	2.80	25	1
1:A:205:LEU:CD1	1:A:207:PHE:CZ	0.44	3.00	6	2
1:A:168:TRP:CD1	1:A:199:SER:N	0.44	2.86	7	1
1:A:263:PHE:O	1:A:291:TYR:OH	0.44	2.35	22	2
1:A:167:ASN:OD1	1:A:226:LYS:CG	0.44	2.66	16	1
1:A:246:PHE:HB3	1:A:316:LYS:O	0.44	2.12	18	1
1:A:191:MET:HB3	1:A:200:ARG:CG	0.44	2.43	19	1
1:A:200:ARG:HG2	1:A:202:PHE:CZ	0.44	2.48	21	1
1:A:190:ILE:O	1:A:190:ILE:CG2	0.44	2.66	22	1
2:B:2:A:O2'	2:B:3:U:H6	0.44	1.96	23	1
1:A:186:THR:CG2	1:A:208:GLU:HA	0.43	2.43	9	2
1:A:164:GLY:O	1:A:228:ILE:HB	0.43	2.13	18	4
1:A:308:PHE:CE1	1:A:309:LYS:HD3	0.43	2.48	19	2
1:A:247:VAL:HG21	1:A:263:PHE:HZ	0.43	1.71	17	1
1:A:239:GLN:NE2	2:B:6:A:C2'	0.43	2.81	19	1
1:A:244:LYS:HE2	1:A:288:PHE:CE2	0.43	2.48	21	1
1:A:282:GLN:NE2	1:A:288:PHE:N	0.43	2.66	22	1
1:A:254:VAL:HG12	1:A:309:LYS:CG	0.43	2.43	25	1
1:A:275:MET:O	1:A:283:SER:CA	0.43	2.67	5	1
1:A:260:GLU:O	1:A:269:ILE:CD1	0.43	2.66	9	2
1:A:166:LEU:CB	1:A:170:THR:OG1	0.43	2.66	11	1
1:A:275:MET:O	1:A:282:GLN:HG2	0.43	2.13	16	1
1:A:161:MET:HE1	1:A:217:VAL:HG22	0.43	1.90	17	1
1:A:162:PHE:CE1	1:A:204:PHE:CE1	0.43	3.06	25	1
2:B:1:U:O2	2:B:1:U:O4'	0.43	2.35	1	1
1:A:166:LEU:HB2	1:A:201:GLY:O	0.43	2.13	13	2
1:A:303:ASN:CG	1:A:306:ILE:CD1	0.43	2.87	16	1
1:A:263:PHE:CD1	1:A:289:VAL:HG21	0.43	2.48	21	1
1:A:231:LYS:HD3	2:B:5:U:O4	0.43	2.13	22	1
1:A:205:LEU:HD12	1:A:205:LEU:C	0.43	2.34	7	1
1:A:200:ARG:NE	2:B:8:A:OP1	0.43	2.51	9	1
1:A:239:GLN:OE1	2:B:6:A:H2'	0.43	2.13	13	1
1:A:174:ASN:O	1:A:178:TYR:CB	0.43	2.66	24	1
1:A:246:PHE:CE1	1:A:286:PHE:CD2	0.43	3.06	13	5
2:B:7:U:O2'	2:B:8:A:OP2	0.43	2.36	13	1
1:A:200:ARG:NH2	1:A:202:PHE:O	0.43	2.52	25	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:305:PHE:HB3	1:A:312:LYS:CE	0.43	2.43	13	2
1:A:282:GLN:CD	1:A:283:SER:N	0.43	2.72	11	1
1:A:161:MET:HE3	1:A:216:VAL:HG12	0.43	1.91	13	1
1:A:178:TYR:OH	1:A:179:PHE:CE1	0.43	2.69	13	1
1:A:254:VAL:HB	1:A:308:PHE:CE2	0.43	2.49	19	1
1:A:319:GLU:O	2:B:2:A:C2	0.43	2.71	21	1
1:A:275:MET:CE	2:B:3:U:H1'	0.43	2.43	25	1
1:A:187:ASP:O	1:A:206:SER:N	0.43	2.52	2	2
1:A:219:THR:O	1:A:221:HIS:NE2	0.43	2.51	4	4
1:A:262:PHE:O	1:A:265:GLN:HG2	0.43	2.14	2	1
1:A:264:SER:HA	1:A:267:GLY:O	0.43	2.14	3	2
1:A:191:MET:HE2	1:A:203:GLY:HA2	0.43	1.89	4	2
1:A:271:ASP:O	1:A:271:ASP:OD1	0.43	2.37	6	1
1:A:169:ASP:O	1:A:171:THR:N	0.43	2.47	8	1
1:A:191:MET:O	1:A:200:ARG:NH1	0.43	2.51	8	1
1:A:276:LEU:HA	1:A:282:GLN:HB3	0.43	1.90	17	1
1:A:239:GLN:NE2	2:B:6:A:N3	0.43	2.66	21	2
1:A:176:ARG:HG2	1:A:177:GLU:N	0.43	2.28	24	1
1:A:200:ARG:CZ	1:A:202:PHE:O	0.43	2.66	25	1
1:A:222:ILE:HD12	1:A:227:VAL:HG22	0.43	1.91	25	1
1:A:179:PHE:CG	1:A:205:LEU:HD22	0.43	2.49	10	1
1:A:308:PHE:CD2	1:A:313:ILE:HD13	0.43	2.48	12	1
1:A:282:GLN:CG	1:A:286:PHE:CE2	0.43	3.02	22	1
1:A:300:VAL:CG2	1:A:315:ILE:HD12	0.43	2.44	22	1
1:A:162:PHE:HE2	2:B:6:A:C8	0.43	2.29	23	1
1:A:227:VAL:O	1:A:227:VAL:HG23	0.43	2.14	23	1
1:A:175:LEU:CB	1:A:188:LEU:CD1	0.43	2.97	2	1
1:A:286:PHE:CZ	2:B:2:A:H4'	0.43	2.48	3	5
1:A:278:LYS:O	1:A:281:GLY:N	0.43	2.49	5	1
1:A:275:MET:O	1:A:277:ASP:N	0.43	2.47	6	1
1:A:200:ARG:HD2	1:A:202:PHE:O	0.43	2.14	7	1
1:A:251:GLY:H	1:A:254:VAL:HG12	0.43	1.74	8	1
1:A:220:GLN:O	1:A:221:HIS:CB	0.43	2.67	15	2
1:A:262:PHE:CE1	1:A:308:PHE:HA	0.43	2.49	19	1
1:A:244:LYS:HB2	1:A:289:VAL:O	0.43	2.13	21	1
1:A:190:ILE:O	1:A:191:MET:HB2	0.43	2.14	22	1
1:A:250:ILE:O	1:A:284:ARG:O	0.43	2.37	24	1
1:A:161:MET:SD	1:A:213:VAL:HG22	0.43	2.54	3	1
2:B:6:A:HO2'	2:B:7:U:P	0.43	2.36	3	1
1:A:262:PHE:HZ	1:A:306:ILE:CG2	0.43	2.27	15	2
1:A:263:PHE:CG	1:A:266:TRP:CH2	0.43	3.07	14	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:310:ASP:OD1	1:A:311:ARG:N	0.43	2.52	14	1
1:A:175:LEU:HD12	1:A:179:PHE:CE2	0.43	2.48	15	1
1:A:308:PHE:CG	1:A:309:LYS:N	0.43	2.85	16	1
1:A:307:ASP:OD1	1:A:312:LYS:CE	0.42	2.67	11	3
2:B:3:U:O2	2:B:3:U:O2'	0.42	2.37	6	4
1:A:279:ASP:O	1:A:280:THR:CG2	0.42	2.63	18	1
1:A:308:PHE:CD2	1:A:309:LYS:HG2	0.42	2.49	22	1
1:A:185:VAL:HG23	1:A:207:PHE:CD1	0.42	2.49	2	3
1:A:212:SER:HA	1:A:215:GLU:OE1	0.42	2.13	5	1
1:A:269:ILE:HA	1:A:290:THR:O	0.42	2.14	12	1
1:A:277:ASP:O	1:A:278:LYS:CG	0.42	2.67	13	1
1:A:262:PHE:HZ	1:A:306:ILE:HG21	0.42	1.71	15	1
1:A:254:VAL:HG12	1:A:309:LYS:HG3	0.42	1.91	21	1
1:A:282:GLN:O	1:A:286:PHE:CD1	0.42	2.72	25	1
1:A:191:MET:SD	1:A:204:PHE:CD2	0.42	3.12	1	1
1:A:270:ILE:CD1	1:A:292:ASP:HB2	0.42	2.43	10	3
1:A:219:THR:O	1:A:220:GLN:O	0.42	2.36	17	3
1:A:247:VAL:HG21	1:A:313:ILE:HD12	0.42	1.91	21	1
1:A:248:GLY:O	1:A:313:ILE:HA	0.42	2.15	21	1
1:A:311:ARG:O	1:A:312:LYS:O	0.42	2.37	1	1
2:B:3:U:C2'	2:B:5:U:OP2	0.42	2.67	2	2
1:A:185:VAL:O	1:A:185:VAL:HG12	0.42	2.14	17	4
1:A:282:GLN:OE1	2:B:2:A:C4'	0.42	2.67	3	1
1:A:189:LYS:O	1:A:203:GLY:HA3	0.42	2.15	11	1
1:A:248:GLY:O	1:A:313:ILE:CB	0.42	2.67	12	1
1:A:173:ASP:O	1:A:177:GLU:HG2	0.42	2.15	14	1
1:A:204:PHE:CZ	2:B:7:U:C2	0.42	3.08	23	1
1:A:274:LEU:HD23	1:A:276:LEU:HD22	0.42	1.90	25	1
1:A:168:TRP:CZ3	2:B:4:A:N3	0.42	2.87	2	3
1:A:247:VAL:CG1	1:A:287:GLY:O	0.42	2.68	1	3
1:A:160:LYS:HG2	1:A:233:ALA:HB2	0.42	1.90	8	1
1:A:171:THR:O	1:A:175:LEU:CD2	0.42	2.67	15	1
1:A:282:GLN:OE1	1:A:286:PHE:CD1	0.42	2.73	16	1
1:A:163:ILE:HG12	1:A:203:GLY:O	0.42	2.15	19	1
1:A:275:MET:CB	1:A:282:GLN:CB	0.42	2.98	21	1
1:A:305:PHE:HB3	1:A:312:LYS:HG3	0.42	1.92	21	1
2:B:7:U:C4'	2:B:7:U:OP1	0.42	2.67	21	1
1:A:189:LYS:CD	2:B:7:U:O4	0.42	2.68	2	1
1:A:199:SER:O	1:A:200:ARG:HB2	0.42	2.15	2	1
1:A:263:PHE:CE2	1:A:266:TRP:HZ2	0.42	2.33	6	1
1:A:267:GLY:O	1:A:268:THR:CB	0.42	2.66	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:263:PHE:CD2	1:A:289:VAL:CG2	0.42	3.00	14	1
1:A:200:ARG:CZ	2:B:8:A:OP2	0.42	2.68	15	1
1:A:231:LYS:NZ	1:A:271:ASP:OD2	0.42	2.52	21	1
1:A:268:THR:HG23	1:A:292:ASP:HB3	0.42	1.92	2	1
1:A:308:PHE:CZ	1:A:309:LYS:NZ	0.42	2.87	2	1
1:A:166:LEU:HD11	1:A:203:GLY:N	0.42	2.29	3	1
1:A:305:PHE:HB3	1:A:312:LYS:HG2	0.42	1.91	5	1
2:B:3:U:C6	2:B:3:U:OP2	0.42	2.73	7	1
1:A:276:LEU:HD12	1:A:276:LEU:N	0.42	2.30	12	2
1:A:282:GLN:CD	1:A:282:GLN:C	0.42	2.78	23	2
1:A:273:GLN:O	1:A:282:GLN:NE2	0.42	2.50	22	1
1:A:276:LEU:CA	1:A:281:GLY:O	0.42	2.67	22	1
1:A:276:LEU:N	1:A:281:GLY:O	0.42	2.52	22	1
1:A:188:LEU:HD12	1:A:205:LEU:CD2	0.42	2.45	2	1
1:A:231:LYS:CE	2:B:6:A:H62	0.42	2.27	3	4
1:A:178:TYR:CZ	1:A:179:PHE:CE2	0.42	3.08	11	2
1:A:249:GLY:C	1:A:313:ILE:HG22	0.42	2.34	12	1
1:A:211:SER:O	1:A:214:ASP:OD1	0.42	2.37	13	1
1:A:185:VAL:CG2	1:A:205:LEU:HD21	0.42	2.44	15	1
1:A:249:GLY:HA3	1:A:313:ILE:CB	0.42	2.45	25	1
1:A:172:GLU:CB	1:A:188:LEU:HD11	0.42	2.45	1	1
1:A:275:MET:O	1:A:283:SER:HB3	0.42	2.15	5	1
1:A:234:ILE:CG2	1:A:238:GLU:HB2	0.42	2.41	7	1
1:A:276:LEU:HB3	1:A:283:SER:OG	0.42	2.15	8	1
1:A:172:GLU:HA	1:A:190:ILE:HD12	0.42	1.90	11	1
1:A:271:ASP:OD2	2:B:6:A:N6	0.42	2.52	12	1
1:A:246:PHE:CE1	2:B:2:A:N7	0.42	2.88	13	1
1:A:275:MET:HB2	1:A:282:GLN:HG2	0.42	1.91	16	1
1:A:274:LEU:HD21	1:A:283:SER:HB2	0.42	1.91	19	1
2:B:6:A:H1'	2:B:7:U:C2	0.42	2.49	23	1
1:A:166:LEU:CD1	1:A:200:ARG:NH2	0.42	2.83	25	1
1:A:175:LEU:HB3	1:A:188:LEU:CD1	0.42	2.44	1	1
1:A:254:VAL:HG23	1:A:308:PHE:HE2	0.42	1.75	1	2
1:A:244:LYS:O	1:A:318:ALA:CB	0.42	2.68	24	2
1:A:159:CYS:CA	1:A:213:VAL:HG21	0.42	2.44	11	1
1:A:175:LEU:O	1:A:179:PHE:HB2	0.42	2.15	11	2
1:A:282:GLN:HG3	1:A:286:PHE:O	0.42	2.15	22	1
1:A:172:GLU:N	1:A:190:ILE:CD1	0.42	2.82	23	1
1:A:254:VAL:O	1:A:255:ARG:C	0.42	2.58	24	1
1:A:279:ASP:O	1:A:280:THR:HB	0.41	2.15	2	2
1:A:263:PHE:HB2	1:A:269:ILE:CD1	0.41	2.44	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:185:VAL:CG2	1:A:188:LEU:CD2	0.41	2.98	10	1
1:A:275:MET:CE	2:B:3:U:O3'	0.41	2.68	11	1
2:B:7:U:H2'	2:B:8:A:N7	0.41	2.30	15	1
1:A:262:PHE:CZ	1:A:313:ILE:CD1	0.41	3.03	16	1
1:A:306:ILE:O	1:A:308:PHE:N	0.41	2.53	16	1
1:A:200:ARG:NE	2:B:8:A:OP2	0.41	2.53	18	1
1:A:276:LEU:HD23	1:A:282:GLN:HG2	0.41	1.92	18	1
1:A:308:PHE:CE2	1:A:309:LYS:HD3	0.41	2.50	1	1
1:A:213:VAL:CG1	1:A:232:ARG:CD	0.41	2.99	3	2
1:A:255:ARG:HB2	1:A:258:GLU:OE1	0.41	2.15	6	1
1:A:200:ARG:HD3	1:A:200:ARG:H	0.41	1.74	8	1
1:A:246:PHE:HE1	1:A:286:PHE:CD2	0.41	2.33	8	1
1:A:234:ILE:CG1	2:B:6:A:N1	0.41	2.83	15	1
1:A:305:PHE:CD1	1:A:305:PHE:N	0.41	2.88	17	1
1:A:250:ILE:O	1:A:254:VAL:HG13	0.41	2.14	19	1
1:A:249:GLY:N	1:A:285:GLY:O	0.41	2.53	23	1
1:A:274:LEU:HG	1:A:282:GLN:NE2	0.41	2.30	23	1
1:A:259:PHE:CD2	1:A:274:LEU:HD23	0.41	2.50	24	1
1:A:161:MET:CE	1:A:216:VAL:CG1	0.41	2.98	15	3
1:A:305:PHE:HB3	1:A:312:LYS:HE2	0.41	1.91	6	1
1:A:277:ASP:O	1:A:279:ASP:N	0.41	2.53	19	1
1:A:164:GLY:O	1:A:165:GLY:C	0.41	2.58	20	1
1:A:269:ILE:CG2	1:A:272:ALA:HB2	0.41	2.44	23	1
1:A:245:ILE:CD1	1:A:245:ILE:O	0.41	2.68	24	2
1:A:246:PHE:CG	2:B:2:A:N6	0.41	2.88	2	1
1:A:286:PHE:CE2	2:B:2:A:O4'	0.41	2.73	5	1
1:A:282:GLN:OE1	1:A:286:PHE:CZ	0.41	2.74	10	3
1:A:160:LYS:C	1:A:233:ALA:HB3	0.41	2.36	10	1
1:A:180:GLY:O	1:A:183:GLY:O	0.41	2.39	10	1
1:A:200:ARG:NH2	2:B:8:A:OP1	0.41	2.52	21	1
1:A:191:MET:HB3	1:A:200:ARG:CD	0.41	2.45	24	1
1:A:222:ILE:CG2	1:A:226:LYS:O	0.41	2.68	25	1
1:A:191:MET:O	1:A:200:ARG:HD3	0.41	2.16	1	1
1:A:189:LYS:CG	1:A:204:PHE:HB2	0.41	2.45	2	1
1:A:250:ILE:O	1:A:251:GLY:C	0.41	2.59	7	1
1:A:223:LEU:HB2	1:A:228:ILE:HD13	0.41	1.91	13	1
1:A:175:LEU:HD22	1:A:205:LEU:HD11	0.41	1.92	24	1
1:A:305:PHE:N	1:A:305:PHE:CD1	0.41	2.89	10	2
1:A:305:PHE:CB	1:A:312:LYS:CG	0.41	2.98	4	1
1:A:279:ASP:C	1:A:280:THR:HG23	0.41	2.35	5	1
1:A:278:LYS:O	1:A:279:ASP:HB3	0.41	2.16	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:245:ILE:CD1	1:A:300:VAL:HG11	0.41	2.45	7	1
1:A:161:MET:CE	1:A:216:VAL:HB	0.41	2.43	13	1
1:A:280:THR:O	1:A:280:THR:OG1	0.41	2.38	14	1
1:A:300:VAL:CG2	1:A:306:ILE:CD1	0.41	2.97	17	1
1:A:221:HIS:HB2	1:A:228:ILE:CG1	0.41	2.46	19	1
1:A:282:GLN:OE1	1:A:288:PHE:HB2	0.41	2.16	22	1
1:A:168:TRP:O	1:A:169:ASP:OD1	0.41	2.39	23	1
1:A:160:LYS:CE	1:A:204:PHE:CB	0.41	2.99	24	1
1:A:245:ILE:O	1:A:245:ILE:HD12	0.41	2.15	25	2
1:A:246:PHE:O	1:A:315:ILE:HA	0.41	2.15	2	1
1:A:305:PHE:CE1	1:A:314:GLU:HG3	0.41	2.51	6	1
1:A:172:GLU:HG3	1:A:190:ILE:HB	0.41	1.92	7	2
1:A:164:GLY:O	1:A:228:ILE:CB	0.41	2.69	9	1
1:A:186:THR:CG2	1:A:208:GLU:N	0.41	2.83	23	1
1:A:284:ARG:NH2	2:B:2:A:OP1	0.41	2.54	23	1
1:A:305:PHE:HD2	1:A:312:LYS:HD3	0.41	1.76	23	1
1:A:242:THR:CG2	1:A:270:ILE:CD1	0.41	2.99	22	4
1:A:275:MET:SD	1:A:286:PHE:HE2	0.41	2.38	5	1
1:A:186:THR:OG1	1:A:206:SER:CB	0.41	2.68	7	1
1:A:205:LEU:HD23	1:A:205:LEU:C	0.41	2.36	15	1
1:A:178:TYR:CG	1:A:223:LEU:CD1	0.41	2.99	17	1
1:A:278:LYS:O	1:A:280:THR:HG23	0.41	2.16	1	1
1:A:191:MET:SD	1:A:202:PHE:CD2	0.41	3.14	2	1
1:A:186:THR:HG23	1:A:207:PHE:C	0.41	2.37	3	2
1:A:179:PHE:HB2	1:A:205:LEU:HD11	0.41	1.93	5	1
1:A:227:VAL:CG2	1:A:277:ASP:O	0.41	2.69	6	1
1:A:303:ASN:HB3	1:A:306:ILE:CD1	0.41	2.42	7	1
1:A:305:PHE:O	1:A:306:ILE:HD13	0.41	2.15	7	1
2:B:3:U:O2	2:B:5:U:OP2	0.41	2.39	8	1
1:A:309:LYS:O	1:A:310:ASP:CG	0.41	2.59	10	1
1:A:250:ILE:HD11	1:A:259:PHE:CE1	0.41	2.51	11	1
1:A:200:ARG:NH2	2:B:8:A:OP2	0.41	2.54	15	1
1:A:245:ILE:HD12	1:A:289:VAL:HB	0.41	1.93	19	1
1:A:308:PHE:HB3	1:A:313:ILE:HG23	0.41	1.92	21	1
1:A:169:ASP:O	1:A:171:THR:CG2	0.41	2.69	22	1
1:A:275:MET:O	1:A:282:GLN:CB	0.41	2.69	23	1
1:A:193:ASP:OD1	1:A:200:ARG:NE	0.41	2.54	24	1
1:A:272:ALA:CB	1:A:289:VAL:HG13	0.41	2.43	24	1
2:B:6:A:C4'	2:B:7:U:OP1	0.41	2.69	24	1
1:A:271:ASP:O	1:A:290:THR:HB	0.41	2.16	25	1
2:B:4:A:OP2	2:B:4:A:H4'	0.41	2.16	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:189:LYS:HD2	2:B:7:U:C4	0.41	2.51	2	1
1:A:176:ARG:O	1:A:180:GLY:CA	0.41	2.69	4	1
1:A:266:TRP:CD1	1:A:296:ALA:O	0.41	2.74	5	2
1:A:304:LYS:CG	1:A:305:PHE:CE1	0.41	3.04	6	1
1:A:168:TRP:HD1	1:A:199:SER:O	0.41	1.99	7	1
1:A:175:LEU:HD12	1:A:179:PHE:HE2	0.41	1.76	15	1
1:A:300:VAL:CG2	1:A:303:ASN:OD1	0.41	2.69	16	1
1:A:187:ASP:O	1:A:206:SER:HB3	0.41	2.15	19	1
1:A:189:LYS:HB3	1:A:204:PHE:HB2	0.40	1.94	7	1
1:A:259:PHE:CE1	1:A:263:PHE:CE2	0.40	3.09	7	1
1:A:263:PHE:CZ	1:A:313:ILE:CD1	0.40	3.04	7	1
1:A:200:ARG:HB3	1:A:202:PHE:CD2	0.40	2.47	18	1
1:A:244:LYS:HD2	1:A:288:PHE:CE2	0.40	2.51	18	1
1:A:250:ILE:HG23	1:A:254:VAL:HG11	0.40	1.93	18	1
1:A:283:SER:O	1:A:284:ARG:CB	0.40	2.69	19	1
1:A:167:ASN:O	1:A:168:TRP:C	0.40	2.59	9	1
1:A:245:ILE:CD1	1:A:315:ILE:HG21	0.40	2.40	2	1
1:A:276:LEU:HB2	1:A:280:THR:HA	0.40	1.91	5	1
1:A:262:PHE:HE1	1:A:307:ASP:O	0.40	2.00	10	1
1:A:185:VAL:HG21	1:A:205:LEU:CD1	0.40	2.46	16	1
1:A:318:ALA:O	1:A:319:GLU:CG	0.40	2.69	21	1
1:A:247:VAL:HA	1:A:314:GLU:O	0.40	2.15	23	1
1:A:270:ILE:O	1:A:271:ASP:HB3	0.40	2.15	6	1
1:A:187:ASP:OD1	1:A:188:LEU:N	0.40	2.55	7	1
1:A:250:ILE:HB	1:A:254:VAL:CG1	0.40	2.45	8	1
1:A:168:TRP:NE1	1:A:199:SER:O	0.40	2.53	10	1
1:A:191:MET:HE1	1:A:204:PHE:CD1	0.40	2.51	12	1
1:A:308:PHE:CZ	1:A:309:LYS:CD	0.40	3.04	16	1
1:A:221:HIS:NE2	1:A:230:PRO:HG2	0.40	2.32	17	2
1:A:276:LEU:HD23	1:A:282:GLN:CG	0.40	2.47	18	1
1:A:244:LYS:HD2	1:A:289:VAL:O	0.40	2.17	19	1
1:A:274:LEU:O	1:A:282:GLN:CG	0.40	2.70	22	1
1:A:308:PHE:CZ	1:A:309:LYS:HD3	0.40	2.51	22	1
1:A:250:ILE:HD12	1:A:287:GLY:CA	0.40	2.47	1	1
1:A:191:MET:HB3	1:A:200:ARG:HD3	0.40	1.93	4	1
1:A:193:ASP:CA	1:A:198:ARG:O	0.40	2.69	4	1
1:A:236:ARG:NH2	2:B:7:U:H5''	0.40	2.32	4	1
1:A:270:ILE:HD11	1:A:292:ASP:CG	0.40	2.37	4	1
1:A:215:GLU:O	1:A:219:THR:OG1	0.40	2.33	13	1
1:A:275:MET:HE3	2:B:3:U:C1'	0.40	2.47	13	1
1:A:277:ASP:O	1:A:278:LYS:HG3	0.40	2.16	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:266:TRP:CE2	1:A:300:VAL:HB	0.40	2.51	15	1
1:A:166:LEU:O	1:A:170:THR:HB	0.40	2.17	20	1
2:B:7:U:C3'	2:B:7:U:OP1	0.40	2.70	20	1
1:A:204:PHE:CE1	2:B:7:U:C5	0.40	3.09	23	1
1:A:306:ILE:HB	1:A:313:ILE:CG1	0.40	2.46	23	1

6.3 Torsion angles

6.3.1 Protein backbone

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	161/167 (96%)	141±3 (88±2%)	11±3 (7±2%)	9±2 (5±1%)	3	23
All	All	4025/4175 (96%)	3530 (88%)	282 (7%)	213 (5%)	3	23

All 42 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	269	ILE	21
1	A	255	ARG	17
1	A	275	MET	16
1	A	168	TRP	16
1	A	185	VAL	14
1	A	280	THR	12
1	A	171	THR	12
1	A	285	GLY	9
1	A	310	ASP	8
1	A	272	ALA	6
1	A	169	ASP	5
1	A	276	LEU	5
1	A	251	GLY	5
1	A	312	LYS	4
1	A	192	LYS	4
1	A	242	THR	4
1	A	278	LYS	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	281	GLY	4
1	A	304	LYS	4
1	A	159	CYS	4
1	A	220	GLN	4
1	A	167	ASN	3
1	A	319	GLU	3
1	A	283	SER	3
1	A	221	HIS	2
1	A	279	ASP	2
1	A	191	MET	2
1	A	228	ILE	2
1	A	271	ASP	2
1	A	277	ASP	2
1	A	308	PHE	2
1	A	313	ILE	2
1	A	199	SER	1
1	A	200	ARG	1
1	A	195	ALA	1
1	A	286	PHE	1
1	A	224	ASP	1
1	A	282	GLN	1
1	A	243	GLY	1
1	A	165	GLY	1
1	A	254	VAL	1
1	A	318	ALA	1

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	139/145 (96%)	127±2 (92±2%)	12±2 (8±2%)	14	61
All	All	3475/3625 (96%)	3182 (92%)	293 (8%)	14	61

All 43 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	188	LEU	25
1	A	181	LYS	24
1	A	288	PHE	23
1	A	245	ILE	18
1	A	176	ARG	18
1	A	191	MET	16
1	A	300	VAL	16
1	A	209	LYS	14
1	A	255	ARG	12
1	A	185	VAL	12
1	A	171	THR	12
1	A	276	LEU	10
1	A	234	ILE	10
1	A	190	ILE	7
1	A	186	THR	6
1	A	221	HIS	6
1	A	159	CYS	5
1	A	280	THR	5
1	A	178	TYR	5
1	A	309	LYS	4
1	A	193	ASP	4
1	A	306	ILE	4
1	A	229	ASP	4
1	A	175	LEU	3
1	A	268	THR	3
1	A	226	LYS	3
1	A	200	ARG	3
1	A	319	GLU	3
1	A	189	LYS	2
1	A	198	ARG	2
1	A	232	ARG	2
1	A	192	LYS	1
1	A	213	VAL	1
1	A	205	LEU	1
1	A	257	LYS	1
1	A	231	LYS	1
1	A	163	ILE	1
1	A	167	ASN	1
1	A	223	LEU	1
1	A	199	SER	1
1	A	254	VAL	1
1	A	303	ASN	1
1	A	282	GLN	1

6.3.3 RNA [i](#)

Mol	Chain	Analysed	Backbone Outliers	Pucker Outliers	Suiteness
2	B	7/8 (88%)	7±0 (97±6%)	0±0 (1±4%)	0.02±0.05
All	All	175/200 (88%)	169 (97%)	2 (1%)	0.02

The overall RNA backbone suiteness is 0.02.

All unique RNA backbone outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
2	B	3	U	25
2	B	5	U	25
2	B	6	A	25
2	B	7	U	25
2	B	8	A	25
2	B	4	A	24
2	B	2	A	20

All unique RNA pucker outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
2	B	5	U	1
2	B	6	A	1

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 monosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided