Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Feb 8, 2022 – 08:01 AM EST

PDB ID	:	1A24
Title	:	SOLUTION NMR STRUCTURE OF REDUCED DSBA FROM ESCHERICHIA COLI, FAMILY OF 20 STRUCTURES
Authors	:	Schirra, H.J.; Renner, C.; Czisch, M.; Huber-Wunderlich, M.; Holak, T.A.; Glockshuber, R.
Deposited on	:	1998-01-15

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 (i) symbol.

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

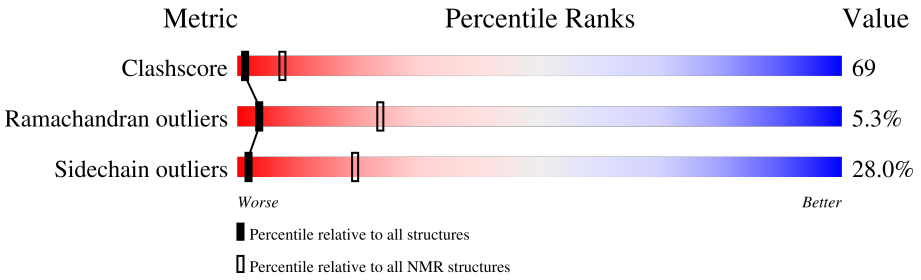
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
ShiftChecker	:	2.26
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.26

1 Overall quality at a glance (i)

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

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 <=5%

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	189	19% 63% 12% 6%

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 20 models. Model 15 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	**Residue range (total)**	**Backbone RMSD (Å)**	**Medoid model**
1	A:3-A:163, A:171-A:187 (178)	0.51	15

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 4 clusters and 3 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2952 atoms, of which 1464 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called DSBA.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	189	2952	952	1464	244	284	8	0

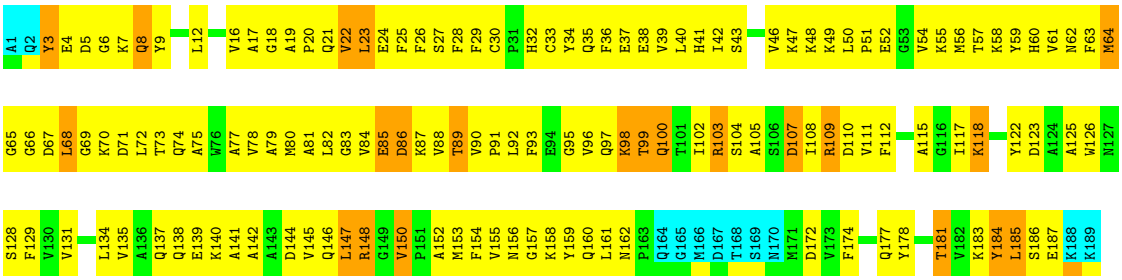
4 Residue-property plots (i)

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: DSBA

Chain A: 19% 63% 12% 6%



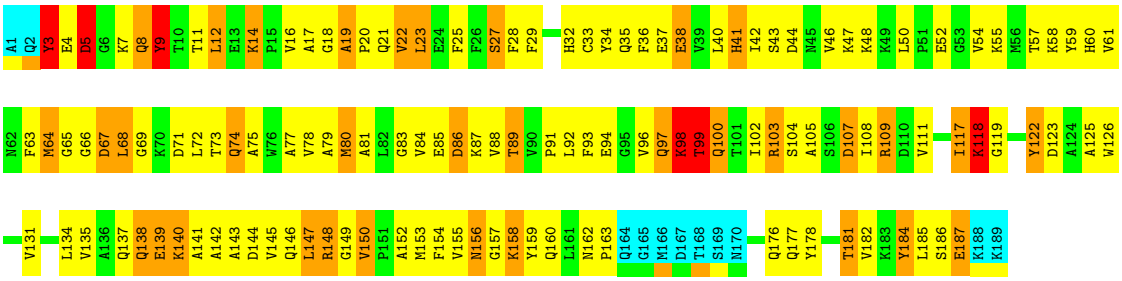
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: DSBA

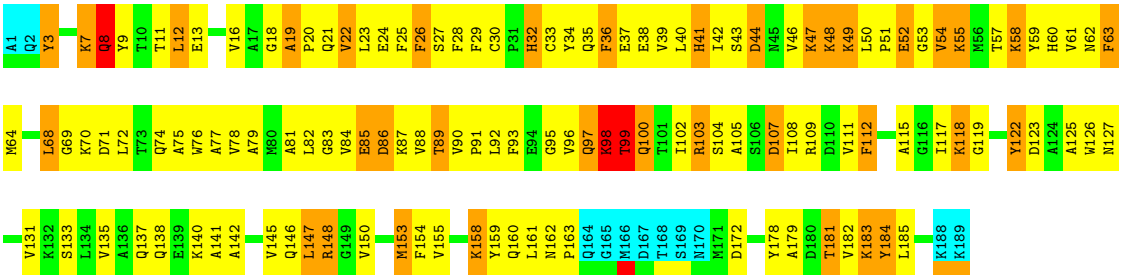
Chain A: 25% 48% 18% • 6%



4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: DSBA

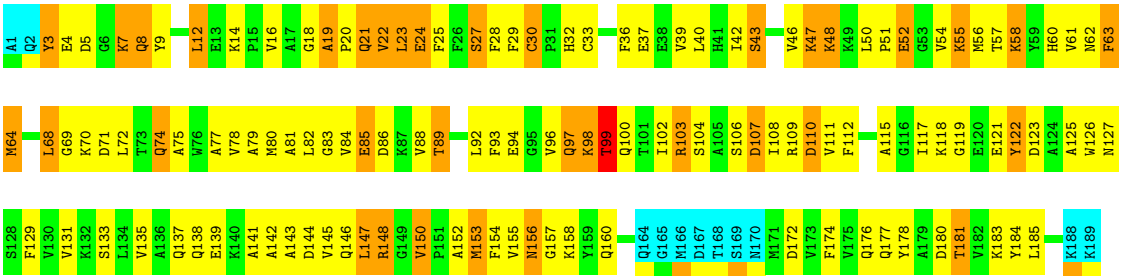
Chain A: 25% 48% 19% • 6%



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: DSBA

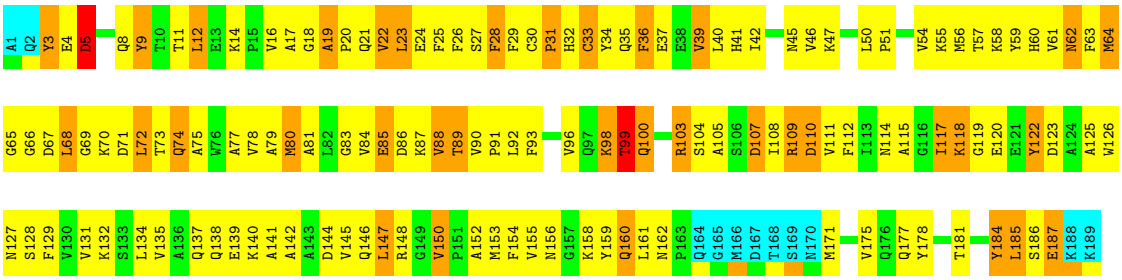
Chain A: 28% 48% 19% • 6%



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: DSBA

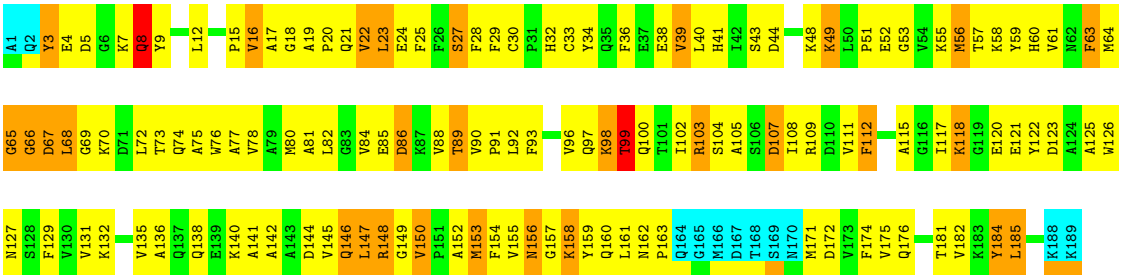
Chain A: 21% 53% 19% • 6%



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: DSBA

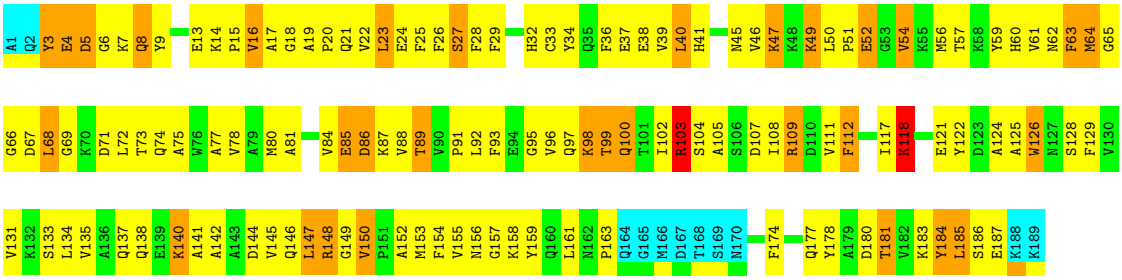
Chain A: 24% 53% 15% • 6%



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: DSBA

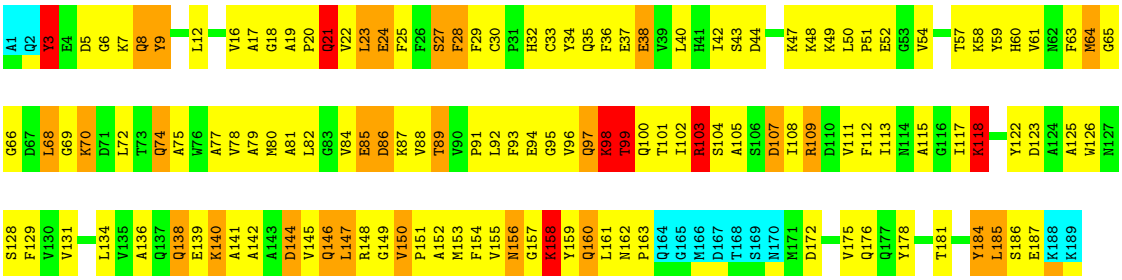
Chain A: 24% 52% 16% • 6%



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: DSBA

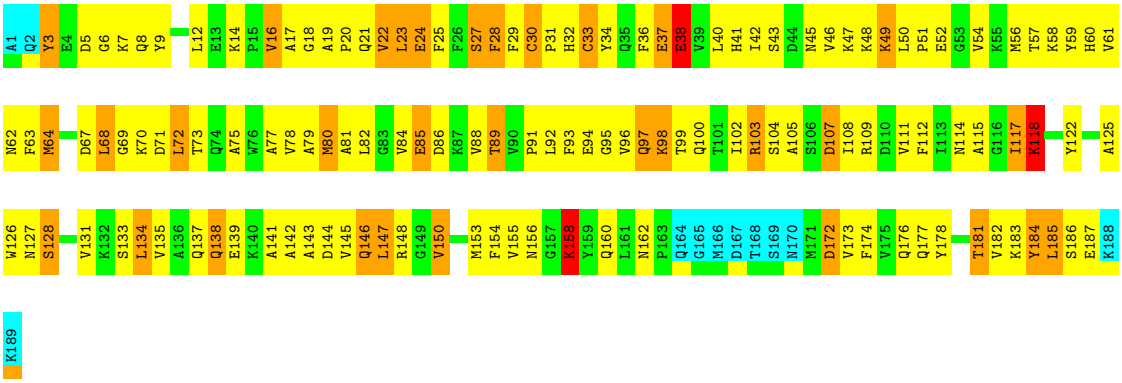
Chain A: 24% 52% 14% • 6%



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: DSBA

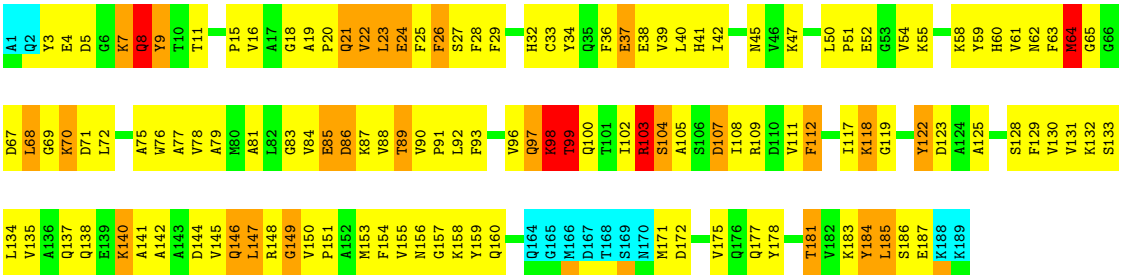
Chain A: 23% 52% 17% • 6%



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: DSBA

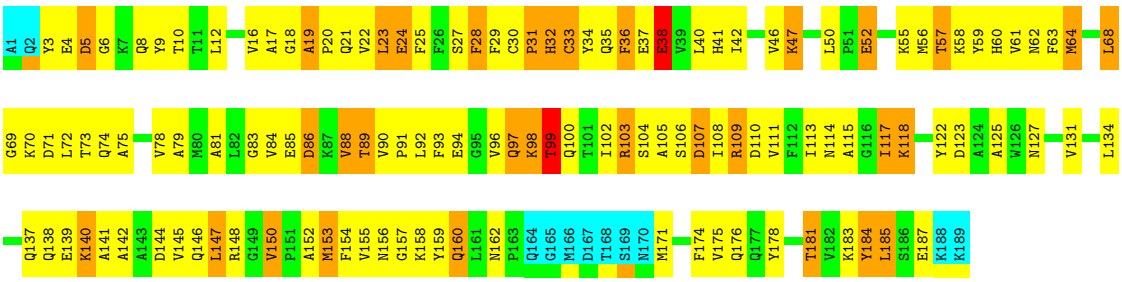
Chain A: 26% 52% 14% • 6%



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: DSBA

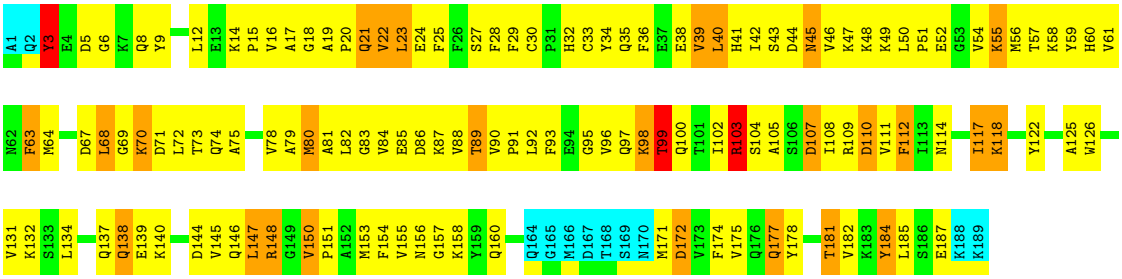
Chain A: 27% 49% 17% • 6%



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: DSBA

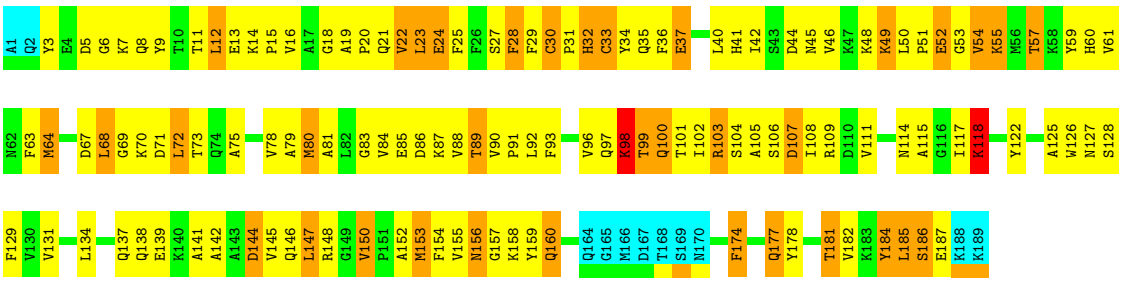
Chain A: 25% 54% 14% • 6%



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: DSBA

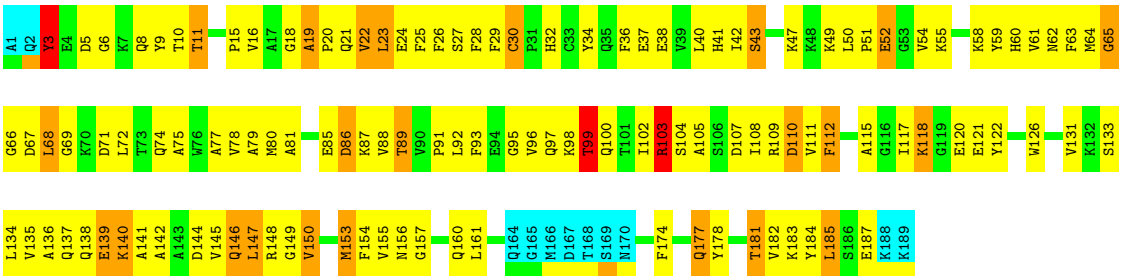
Chain A: 25% 49% 19% • 6%



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: DSBA

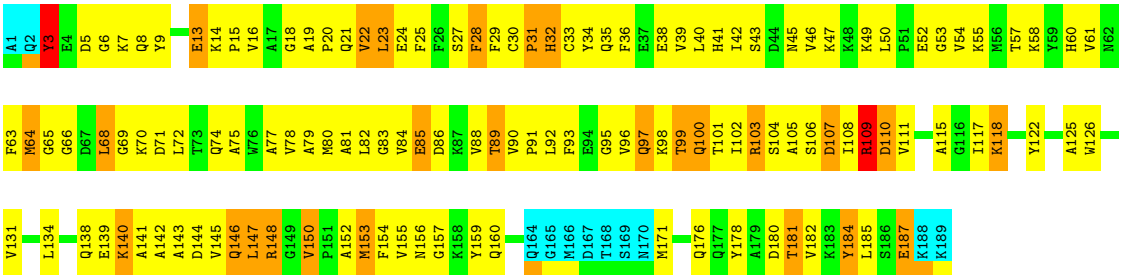
Chain A: 29% 52% 12% • 6%



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: DSBA

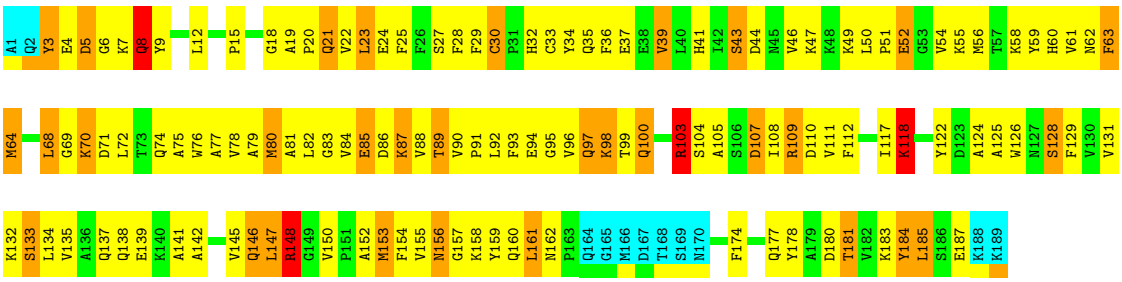
Chain A: 26% 53% 14% • 6%



4.2.15 Score per residue for model 15 (medoid)

- Molecule 1: DSBA

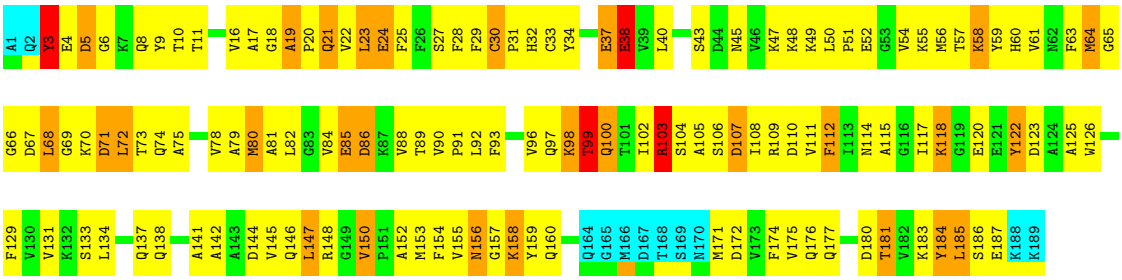
Chain A: 25% 51% 16% • 6%



4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: DSBA

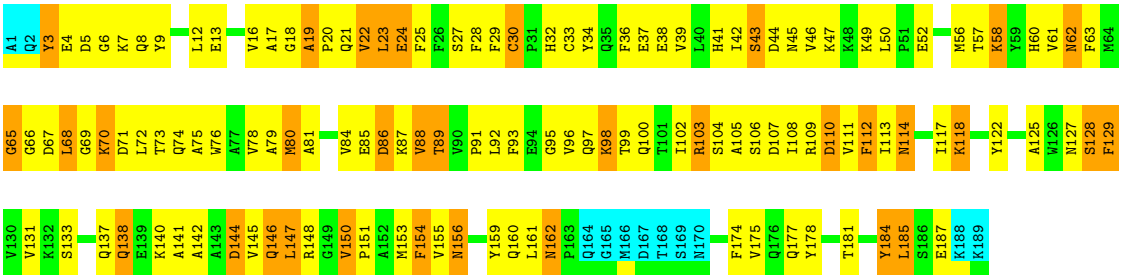
Chain A: 24% 53% 15% • 6%



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: DSBA

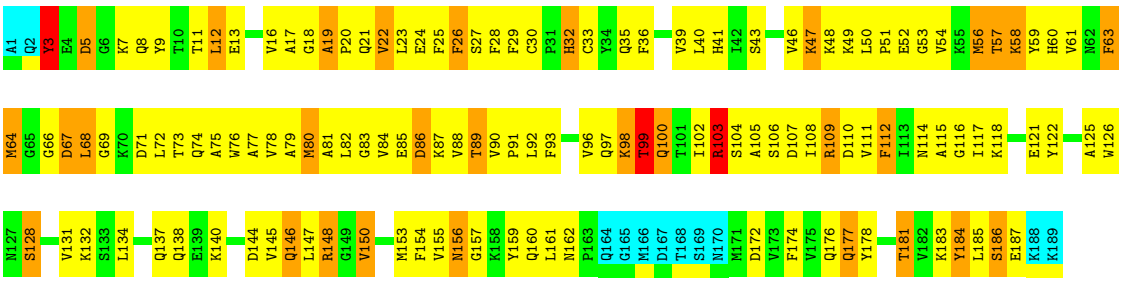
Chain A: 26% 50% 18% 6%



4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: DSBA

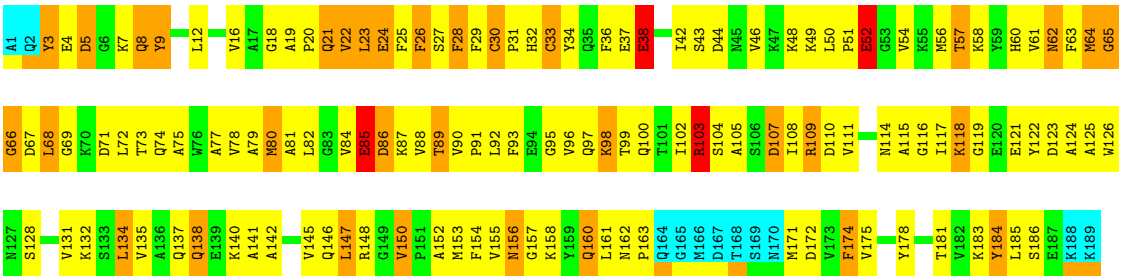
Chain A: 24% 53% 16% • 6%



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: DSBA

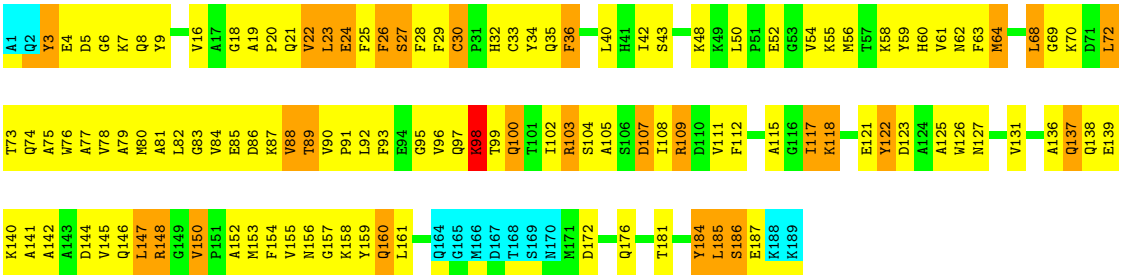
Chain A: 23% 52% 17% • 6%



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: DSBA

Chain A: 30% 49% 15% • 6%



5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

The models were refined using the following method: *simulated annealing*.

Of the 80 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *LEAST RESTRAINT VIOLATION*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	3.851
CCNMR	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.

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	3.0±0.0
All	All	0	60

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	103	ARG	Sidechain	20
1	A	109	ARG	Sidechain	20
1	A	148	ARG	Sidechain	20

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	1405	1381	1381	191±12
All	All	28100	27620	27620	3829

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 69.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:HIS:CD2	1:A:72:LEU:HD22	1.05	1.84	18	3
1:A:16:VAL:HG13	1:A:19:ALA:HB2	1.05	1.15	5	3
1:A:25:PHE:CE2	1:A:145:VAL:HG21	1.04	1.87	10	16
1:A:78:VAL:HG11	1:A:122:TYR:CD2	1.03	1.87	8	13
1:A:29:PHE:CZ	1:A:72:LEU:HD13	1.03	1.87	9	3
1:A:61:VAL:HG11	1:A:147:LEU:CD2	1.02	1.85	13	5
1:A:61:VAL:HG11	1:A:150:VAL:CG1	1.01	1.85	12	14
1:A:78:VAL:HG11	1:A:122:TYR:CE2	1.01	1.90	8	13
1:A:125:ALA:HB1	1:A:131:VAL:HG21	1.01	1.25	6	10
1:A:68:LEU:HD13	1:A:69:GLY:N	1.01	1.70	14	12
1:A:61:VAL:HG12	1:A:147:LEU:HD21	0.99	1.33	8	7
1:A:61:VAL:HG11	1:A:147:LEU:HD22	0.99	1.31	15	4
1:A:68:LEU:HD23	1:A:69:GLY:N	0.99	1.72	6	3
1:A:60:HIS:CE1	1:A:72:LEU:HD22	0.95	1.95	2	7
1:A:74:GLN:O	1:A:78:VAL:HG23	0.94	1.60	5	12
1:A:11:THR:HG23	1:A:158:LYS:O	0.94	1.62	2	3
1:A:23:LEU:HD13	1:A:25:PHE:CZ	0.93	1.98	18	1
1:A:50:LEU:HD22	1:A:54:VAL:HG11	0.93	1.41	19	3
1:A:92:LEU:O	1:A:96:VAL:HG23	0.93	1.63	15	16
1:A:60:HIS:NE2	1:A:72:LEU:HD22	0.92	1.78	9	8
1:A:68:LEU:HD11	1:A:102:ILE:HG22	0.92	1.40	11	3
1:A:29:PHE:CE1	1:A:72:LEU:HD13	0.92	1.98	9	3
1:A:144:ASP:OD1	1:A:145:VAL:HG13	0.92	1.65	10	9
1:A:161:LEU:HD12	1:A:178:TYR:CZ	0.91	2.00	2	2
1:A:50:LEU:HD11	1:A:56:MET:SD	0.91	2.06	19	2
1:A:73:THR:HG23	1:A:138:GLN:OE1	0.89	1.67	11	4
1:A:78:VAL:HG21	1:A:122:TYR:CE1	0.88	2.03	9	6
1:A:20:PRO:HG3	1:A:23:LEU:HD12	0.88	1.46	18	3
1:A:50:LEU:HD22	1:A:54:VAL:CG1	0.87	1.99	19	4
1:A:129:PHE:CE2	1:A:130:VAL:HG23	0.86	2.06	9	1
1:A:29:PHE:CE2	1:A:72:LEU:HD12	0.85	2.06	16	2
1:A:47:LYS:HA	1:A:50:LEU:HD12	0.85	1.48	4	9
1:A:99:THR:CG2	1:A:101:THR:HG23	0.85	2.02	7	1
1:A:23:LEU:HD13	1:A:25:PHE:CE2	0.85	2.05	12	15
1:A:61:VAL:HG11	1:A:147:LEU:HD21	0.85	1.47	9	2
1:A:84:VAL:HG21	1:A:112:PHE:CE1	0.84	2.07	18	4
1:A:60:HIS:NE2	1:A:72:LEU:HD21	0.84	1.86	20	3
1:A:61:VAL:HG21	1:A:150:VAL:HG11	0.84	1.47	13	3
1:A:181:THR:O	1:A:185:LEU:HD23	0.83	1.73	14	16
1:A:81:ALA:CB	1:A:131:VAL:HG22	0.83	2.04	12	16
1:A:125:ALA:CB	1:A:131:VAL:HG21	0.83	2.04	6	4
1:A:95:GLY:O	1:A:99:THR:HG23	0.83	1.73	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:VAL:HG21	1:A:144:ASP:OD1	0.83	1.74	10	6
1:A:68:LEU:HD22	1:A:68:LEU:C	0.82	1.95	5	16
1:A:40:LEU:HD21	1:A:171:MET:HB3	0.82	1.50	4	2
1:A:60:HIS:CD2	1:A:72:LEU:HD21	0.82	2.08	20	1
1:A:27:SER:HB3	1:A:61:VAL:HG22	0.82	1.47	19	6
1:A:25:PHE:CD1	1:A:147:LEU:HD22	0.82	2.10	3	5
1:A:141:ALA:O	1:A:145:VAL:HG22	0.81	1.76	10	10
1:A:27:SER:HB2	1:A:61:VAL:HG22	0.81	1.51	20	4
1:A:50:LEU:O	1:A:54:VAL:HG13	0.81	1.76	2	2
1:A:8:GLN:NE2	1:A:181:THR:HG23	0.81	1.91	17	1
1:A:50:LEU:O	1:A:54:VAL:HG22	0.81	1.76	12	2
1:A:16:VAL:CG1	1:A:19:ALA:HB2	0.80	2.06	4	3
1:A:126:TRP:HA	1:A:131:VAL:HG11	0.79	1.55	2	3
1:A:98:LYS:O	1:A:99:THR:HG23	0.79	1.78	3	10
1:A:88:VAL:HG23	1:A:92:LEU:HD12	0.79	1.53	10	19
1:A:21:GLN:O	1:A:155:VAL:HG13	0.78	1.78	9	17
1:A:68:LEU:O	1:A:108:ILE:HD11	0.78	1.79	6	4
1:A:78:VAL:HG21	1:A:122:TYR:OH	0.78	1.76	19	8
1:A:68:LEU:HD23	1:A:108:ILE:HD11	0.78	1.55	13	11
1:A:19:ALA:HB1	1:A:20:PRO:HD2	0.78	1.53	13	9
1:A:171:MET:O	1:A:175:VAL:HG23	0.78	1.78	10	3
1:A:81:ALA:HB1	1:A:131:VAL:HG22	0.78	1.52	12	16
1:A:61:VAL:HG11	1:A:150:VAL:HG11	0.78	1.55	6	13
1:A:16:VAL:HG13	1:A:19:ALA:CB	0.78	2.06	5	3
1:A:117:ILE:HD12	1:A:117:ILE:N	0.78	1.94	5	10
1:A:89:THR:HG23	1:A:93:PHE:CD1	0.78	2.13	16	20
1:A:78:VAL:HG21	1:A:122:TYR:CZ	0.78	2.13	8	13
1:A:28:PHE:CD2	1:A:72:LEU:HD21	0.77	2.14	18	4
1:A:68:LEU:HD22	1:A:68:LEU:O	0.77	1.80	14	12
1:A:87:LYS:HE2	1:A:115:ALA:HB1	0.77	1.56	7	2
1:A:71:ASP:OD2	1:A:105:ALA:HB2	0.76	1.80	2	1
1:A:46:VAL:O	1:A:50:LEU:HD13	0.76	1.80	11	1
1:A:25:PHE:HB2	1:A:152:ALA:HB3	0.76	1.54	4	10
1:A:61:VAL:HG11	1:A:150:VAL:HG13	0.76	1.55	8	8
1:A:42:ILE:O	1:A:46:VAL:HG13	0.76	1.81	19	3
1:A:115:ALA:HB3	1:A:117:ILE:HD13	0.76	1.55	16	6
1:A:53:GLY:O	1:A:54:VAL:HG23	0.76	1.80	18	1
1:A:117:ILE:HG22	1:A:117:ILE:O	0.76	1.81	15	7
1:A:117:ILE:O	1:A:117:ILE:HG22	0.75	1.79	6	4
1:A:81:ALA:HB2	1:A:131:VAL:HG22	0.75	1.56	5	4
1:A:84:VAL:HG11	1:A:117:ILE:HG12	0.75	1.59	17	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:LYS:O	1:A:50:LEU:HD23	0.75	1.81	13	2
1:A:92:LEU:HG	1:A:111:VAL:HG11	0.75	1.58	12	20
1:A:21:GLN:O	1:A:155:VAL:HG22	0.75	1.82	17	16
1:A:89:THR:HG23	1:A:93:PHE:CE1	0.75	2.17	16	20
1:A:72:LEU:O	1:A:75:ALA:HB3	0.74	1.82	4	19
1:A:68:LEU:HD22	1:A:102:ILE:HG22	0.74	1.57	18	1
1:A:61:VAL:CG1	1:A:147:LEU:HD22	0.73	2.13	15	3
1:A:21:GLN:OE1	1:A:54:VAL:HG22	0.72	1.83	4	1
1:A:54:VAL:HG22	1:A:186:SER:HB2	0.72	1.60	9	1
1:A:68:LEU:HD22	1:A:69:GLY:N	0.72	2.00	1	6
1:A:153:MET:CE	1:A:182:VAL:HG22	0.72	2.14	11	2
1:A:105:ALA:HA	1:A:108:ILE:HD12	0.72	1.61	14	13
1:A:22:VAL:HG12	1:A:22:VAL:O	0.72	1.85	16	18
1:A:36:PHE:CE2	1:A:42:ILE:HG21	0.71	2.20	14	2
1:A:23:LEU:HD23	1:A:24:GLU:N	0.71	2.01	18	3
1:A:25:PHE:HE2	1:A:145:VAL:HG21	0.71	1.46	3	14
1:A:50:LEU:CD2	1:A:54:VAL:HG11	0.71	2.15	19	4
1:A:61:VAL:CG2	1:A:150:VAL:HG11	0.70	2.15	13	1
1:A:68:LEU:HD12	1:A:107:ASP:OD2	0.70	1.86	9	2
1:A:99:THR:HG22	1:A:101:THR:H	0.70	1.46	14	3
1:A:68:LEU:HD13	1:A:69:GLY:H	0.70	1.46	17	9
1:A:19:ALA:HB3	1:A:156:ASN:C	0.70	2.07	10	13
1:A:27:SER:CB	1:A:61:VAL:HG22	0.69	2.17	17	10
1:A:72:LEU:C	1:A:72:LEU:HD23	0.69	2.06	2	1
1:A:25:PHE:CD2	1:A:147:LEU:HD13	0.69	2.22	11	10
1:A:43:SER:O	1:A:46:VAL:HG12	0.69	1.87	18	4
1:A:3:TYR:N	1:A:3:TYR:CD1	0.69	2.58	19	5
1:A:12:LEU:HD12	1:A:14:LYS:O	0.69	1.88	3	3
1:A:54:VAL:HG21	1:A:186:SER:HB2	0.69	1.65	18	2
1:A:117:ILE:N	1:A:117:ILE:HD13	0.68	2.03	13	9
1:A:28:PHE:CD1	1:A:93:PHE:CE1	0.68	2.82	10	17
1:A:88:VAL:O	1:A:92:LEU:HD12	0.68	1.87	19	2
1:A:89:THR:HG23	1:A:93:PHE:CZ	0.68	2.23	13	20
1:A:25:PHE:CZ	1:A:145:VAL:HG21	0.68	2.24	18	4
1:A:78:VAL:HG11	1:A:122:TYR:CZ	0.68	2.23	13	9
1:A:98:LYS:C	1:A:99:THR:HG22	0.68	2.09	13	1
1:A:40:LEU:HD22	1:A:175:VAL:CG2	0.68	2.18	5	2
1:A:71:ASP:OD2	1:A:105:ALA:HB1	0.67	1.89	8	5
1:A:28:PHE:CE2	1:A:72:LEU:HD21	0.67	2.24	18	1
1:A:102:ILE:HG23	1:A:107:ASP:OD1	0.67	1.90	16	7
1:A:72:LEU:O	1:A:72:LEU:HD23	0.67	1.90	17	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:LEU:HD21	1:A:154:PHE:CE2	0.67	2.25	8	3
1:A:77:ALA:CB	1:A:135:VAL:HG23	0.67	2.20	2	7
1:A:16:VAL:HG21	1:A:144:ASP:HB3	0.67	1.67	13	3
1:A:42:ILE:O	1:A:46:VAL:HG22	0.67	1.90	10	1
1:A:50:LEU:HD22	1:A:54:VAL:CB	0.67	2.19	19	1
1:A:51:PRO:HD2	1:A:54:VAL:HG21	0.66	1.66	9	4
1:A:68:LEU:HD23	1:A:68:LEU:C	0.66	2.10	6	3
1:A:22:VAL:HG13	1:A:153:MET:CE	0.66	2.20	19	1
1:A:61:VAL:CG1	1:A:147:LEU:HD21	0.66	2.16	8	10
1:A:61:VAL:HG21	1:A:63:PHE:CE1	0.65	2.25	15	4
1:A:54:VAL:HG21	1:A:186:SER:CB	0.65	2.22	4	1
1:A:63:PHE:O	1:A:63:PHE:CG	0.65	2.48	4	13
1:A:153:MET:HE1	1:A:182:VAL:HG22	0.65	1.69	11	2
1:A:89:THR:CG2	1:A:93:PHE:CE2	0.65	2.79	11	15
1:A:113:ILE:HG23	1:A:118:LYS:HA	0.65	1.67	7	3
1:A:23:LEU:CD1	1:A:25:PHE:CE1	0.65	2.80	15	1
1:A:28:PHE:CE1	1:A:93:PHE:CE1	0.65	2.85	6	16
1:A:78:VAL:HG23	1:A:112:PHE:CZ	0.65	2.26	2	1
1:A:23:LEU:CD1	1:A:25:PHE:CE2	0.65	2.79	10	15
1:A:29:PHE:CD1	1:A:96:VAL:HG11	0.65	2.27	14	8
1:A:78:VAL:CG1	1:A:122:TYR:CE2	0.65	2.80	7	13
1:A:29:PHE:CE1	1:A:72:LEU:HD22	0.64	2.28	15	6
1:A:16:VAL:HG12	1:A:16:VAL:O	0.64	1.92	17	3
1:A:40:LEU:HB2	1:A:42:ILE:HD12	0.64	1.68	3	1
1:A:25:PHE:CE1	1:A:145:VAL:HG21	0.64	2.27	11	2
1:A:27:SER:OG	1:A:61:VAL:HG22	0.64	1.92	1	2
1:A:23:LEU:HD13	1:A:25:PHE:CE1	0.64	2.28	11	3
1:A:60:HIS:CE1	1:A:72:LEU:HD13	0.64	2.27	17	1
1:A:89:THR:HG23	1:A:93:PHE:CE2	0.64	2.28	11	18
1:A:60:HIS:CE1	1:A:72:LEU:CD2	0.64	2.81	16	7
1:A:29:PHE:CG	1:A:96:VAL:HG11	0.64	2.26	20	12
1:A:25:PHE:CB	1:A:152:ALA:HB3	0.64	2.23	4	4
1:A:39:VAL:HG12	1:A:40:LEU:HG	0.64	1.69	11	1
1:A:78:VAL:HG11	1:A:122:TYR:CD1	0.64	2.28	3	6
1:A:34:TYR:CE1	1:A:38:GLU:CB	0.64	2.80	6	2
1:A:34:TYR:CG	1:A:97:GLN:NE2	0.64	2.66	9	5
1:A:82:LEU:HB2	1:A:84:VAL:HG13	0.63	1.69	15	10
1:A:78:VAL:CG2	1:A:122:TYR:CE1	0.63	2.82	9	6
1:A:161:LEU:HD12	1:A:178:TYR:CE1	0.63	2.28	2	1
1:A:25:PHE:HD2	1:A:147:LEU:HD13	0.63	1.53	15	1
1:A:47:LYS:HA	1:A:50:LEU:HD13	0.63	1.70	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:54:VAL:HG13	1:A:186:SER:HB2	0.63	1.70	6	2
1:A:28:PHE:CE1	1:A:93:PHE:CZ	0.63	2.86	6	4
1:A:29:PHE:CE1	1:A:72:LEU:HD11	0.63	2.29	8	1
1:A:68:LEU:CD1	1:A:102:ILE:HG22	0.62	2.20	11	2
1:A:54:VAL:HG13	1:A:186:SER:CB	0.62	2.24	19	2
1:A:89:THR:CG2	1:A:93:PHE:CZ	0.62	2.83	2	15
1:A:28:PHE:CD1	1:A:28:PHE:N	0.62	2.65	18	11
1:A:12:LEU:HD11	1:A:160:GLN:HB2	0.62	1.70	5	1
1:A:122:TYR:CD1	1:A:122:TYR:C	0.61	2.74	3	20
1:A:68:LEU:HD13	1:A:68:LEU:C	0.61	2.14	14	9
1:A:3:TYR:CD1	1:A:3:TYR:N	0.61	2.68	4	7
1:A:50:LEU:HD13	1:A:56:MET:HG2	0.61	1.71	18	1
1:A:68:LEU:HD23	1:A:108:ILE:CG1	0.61	2.25	2	6
1:A:81:ALA:HB2	1:A:131:VAL:HG13	0.61	1.72	1	5
1:A:27:SER:CB	1:A:60:HIS:CE1	0.61	2.84	5	7
1:A:61:VAL:CG2	1:A:63:PHE:CD1	0.61	2.84	13	3
1:A:125:ALA:C	1:A:131:VAL:HG21	0.61	2.16	2	8
1:A:78:VAL:CG2	1:A:112:PHE:CZ	0.61	2.84	2	1
1:A:154:PHE:CD1	1:A:154:PHE:N	0.61	2.68	19	12
1:A:8:GLN:NE2	1:A:9:TYR:CD1	0.61	2.67	4	1
1:A:63:PHE:CD2	1:A:63:PHE:O	0.61	2.54	14	2
1:A:59:TYR:CD1	1:A:138:GLN:CG	0.61	2.84	2	2
1:A:117:ILE:N	1:A:117:ILE:CD1	0.61	2.64	7	12
1:A:29:PHE:CE1	1:A:72:LEU:CD1	0.60	2.82	9	4
1:A:29:PHE:CD2	1:A:96:VAL:CG1	0.60	2.85	20	5
1:A:43:SER:O	1:A:46:VAL:HG22	0.60	1.97	3	3
1:A:16:VAL:HG21	1:A:145:VAL:HG12	0.60	1.71	11	1
1:A:75:ALA:HB1	1:A:112:PHE:CE2	0.60	2.31	2	1
1:A:75:ALA:CA	1:A:78:VAL:HG22	0.60	2.26	2	1
1:A:88:VAL:HG12	1:A:115:ALA:HB2	0.60	1.73	18	3
1:A:12:LEU:HD21	1:A:154:PHE:CD2	0.60	2.31	8	1
1:A:185:LEU:N	1:A:185:LEU:HD23	0.60	2.11	2	1
1:A:42:ILE:HG12	1:A:175:VAL:HG22	0.60	1.73	19	3
1:A:29:PHE:CD2	1:A:96:VAL:HG11	0.60	2.30	2	5
1:A:9:TYR:CD1	1:A:9:TYR:O	0.60	2.54	9	4
1:A:27:SER:HG	1:A:60:HIS:CD2	0.60	2.15	1	1
1:A:149:GLY:O	1:A:152:ALA:HB2	0.60	1.96	6	4
1:A:88:VAL:HG21	1:A:112:PHE:CE1	0.60	2.31	3	3
1:A:63:PHE:O	1:A:63:PHE:CD1	0.60	2.54	18	1
1:A:99:THR:HG23	1:A:101:THR:HG23	0.60	1.73	7	1
1:A:9:TYR:O	1:A:9:TYR:CD1	0.60	2.55	18	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:LYS:HE3	1:A:115:ALA:HB1	0.59	1.73	19	2
1:A:74:GLN:NE2	1:A:126:TRP:CG	0.59	2.70	13	13
1:A:92:LEU:CD2	1:A:111:VAL:HG21	0.59	2.28	16	2
1:A:99:THR:CG2	1:A:101:THR:CG2	0.59	2.79	7	1
1:A:184:TYR:CE2	1:A:185:LEU:HD22	0.59	2.33	11	5
1:A:74:GLN:O	1:A:78:VAL:HG13	0.59	1.96	2	1
1:A:30:CYS:HB3	1:A:31:PRO:HD2	0.59	1.75	14	3
1:A:40:LEU:O	1:A:41:HIS:CG	0.59	2.55	18	3
1:A:25:PHE:CZ	1:A:145:VAL:CG2	0.59	2.85	18	4
1:A:8:GLN:O	1:A:161:LEU:HD23	0.59	1.96	15	1
1:A:63:PHE:O	1:A:63:PHE:CD2	0.59	2.55	12	6
1:A:68:LEU:C	1:A:68:LEU:CD2	0.59	2.71	20	16
1:A:60:HIS:NE2	1:A:72:LEU:CD2	0.59	2.66	17	9
1:A:9:TYR:CG	1:A:9:TYR:O	0.59	2.56	2	2
1:A:68:LEU:CD2	1:A:108:ILE:HD11	0.59	2.27	15	8
1:A:78:VAL:CG1	1:A:122:TYR:CD2	0.59	2.86	5	13
1:A:27:SER:CB	1:A:60:HIS:NE2	0.59	2.66	19	5
1:A:16:VAL:O	1:A:16:VAL:HG12	0.59	1.96	3	7
1:A:72:LEU:HD23	1:A:72:LEU:O	0.59	1.98	2	2
1:A:75:ALA:HA	1:A:78:VAL:HG22	0.59	1.72	2	1
1:A:129:PHE:CZ	1:A:130:VAL:HG23	0.59	2.32	9	1
1:A:3:TYR:CD1	1:A:8:GLN:OE1	0.59	2.56	20	2
1:A:7:LYS:O	1:A:8:GLN:CG	0.59	2.51	2	5
1:A:65:GLY:O	1:A:69:GLY:N	0.59	2.36	13	7
1:A:60:HIS:CD2	1:A:72:LEU:CD2	0.59	2.86	9	2
1:A:7:LYS:O	1:A:8:GLN:CB	0.59	2.49	3	5
1:A:125:ALA:HB1	1:A:131:VAL:CG2	0.59	2.17	6	1
1:A:68:LEU:CB	1:A:105:ALA:N	0.58	2.65	8	12
1:A:9:TYR:CD1	1:A:9:TYR:C	0.58	2.76	18	3
1:A:68:LEU:HD21	1:A:104:SER:N	0.58	2.13	18	1
1:A:117:ILE:CD1	1:A:117:ILE:N	0.58	2.65	6	1
1:A:155:VAL:HG21	1:A:185:LEU:HD12	0.58	1.74	19	2
1:A:60:HIS:CE1	1:A:72:LEU:HD21	0.58	2.32	13	1
1:A:28:PHE:CG	1:A:93:PHE:CE1	0.58	2.91	19	9
1:A:54:VAL:HG12	1:A:54:VAL:O	0.58	1.97	7	1
1:A:8:GLN:HG2	1:A:9:TYR:CD2	0.58	2.32	18	1
1:A:9:TYR:O	1:A:9:TYR:CG	0.58	2.56	3	5
1:A:28:PHE:O	1:A:29:PHE:CD1	0.58	2.57	11	9
1:A:184:TYR:O	1:A:184:TYR:CD1	0.58	2.56	18	4
1:A:60:HIS:CE1	1:A:61:VAL:O	0.58	2.56	9	3
1:A:61:VAL:CG1	1:A:147:LEU:CD2	0.58	2.81	9	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:117:ILE:N	1:A:117:ILE:HD12	0.58	2.13	6	1
1:A:3:TYR:CG	1:A:8:GLN:OE1	0.58	2.56	20	1
1:A:3:TYR:CD2	1:A:3:TYR:O	0.58	2.57	2	1
1:A:19:ALA:HB3	1:A:157:GLY:N	0.58	2.13	20	7
1:A:184:TYR:CD1	1:A:184:TYR:O	0.58	2.57	16	7
1:A:16:VAL:HG21	1:A:145:VAL:CG1	0.58	2.29	11	1
1:A:153:MET:SD	1:A:161:LEU:HD12	0.58	2.39	19	1
1:A:34:TYR:CD1	1:A:34:TYR:O	0.58	2.57	1	1
1:A:64:MET:HE1	1:A:150:VAL:CG2	0.58	2.28	3	1
1:A:63:PHE:CD1	1:A:63:PHE:O	0.58	2.57	15	3
1:A:22:VAL:HG13	1:A:153:MET:HE2	0.58	1.75	3	1
1:A:8:GLN:HB3	1:A:181:THR:HG21	0.58	1.74	8	1
1:A:26:PHE:O	1:A:26:PHE:CD1	0.58	2.57	18	2
1:A:27:SER:OG	1:A:60:HIS:CD2	0.57	2.57	1	2
1:A:63:PHE:CG	1:A:63:PHE:O	0.57	2.57	7	2
1:A:129:PHE:CE2	1:A:130:VAL:CG2	0.57	2.87	9	1
1:A:9:TYR:CB	1:A:161:LEU:HD23	0.57	2.29	13	2
1:A:89:THR:HG23	1:A:93:PHE:CG	0.57	2.35	16	20
1:A:76:TRP:CH2	1:A:85:GLU:OE1	0.57	2.57	18	1
1:A:81:ALA:HB2	1:A:131:VAL:CG2	0.57	2.30	2	2
1:A:66:GLY:O	1:A:69:GLY:N	0.57	2.30	1	2
1:A:88:VAL:HG11	1:A:112:PHE:CD1	0.57	2.34	6	2
1:A:96:VAL:HG22	1:A:102:ILE:CB	0.57	2.30	17	13
1:A:126:TRP:O	1:A:126:TRP:CE3	0.57	2.58	6	1
1:A:184:TYR:CD2	1:A:185:LEU:CD2	0.57	2.88	12	5
1:A:36:PHE:CZ	1:A:42:ILE:HD13	0.57	2.34	9	1
1:A:161:LEU:HD13	1:A:178:TYR:CZ	0.57	2.35	6	1
1:A:29:PHE:CD1	1:A:64:MET:HE3	0.57	2.35	7	2
1:A:36:PHE:O	1:A:36:PHE:CD1	0.57	2.57	14	1
1:A:50:LEU:O	1:A:54:VAL:CG1	0.56	2.52	2	2
1:A:59:TYR:CD1	1:A:138:GLN:HG2	0.56	2.35	2	7
1:A:104:SER:O	1:A:107:ASP:N	0.56	2.38	16	20
1:A:8:GLN:CG	1:A:181:THR:CG2	0.56	2.84	18	1
1:A:98:LYS:O	1:A:99:THR:CG2	0.56	2.53	5	10
1:A:145:VAL:O	1:A:146:GLN:CB	0.56	2.53	11	20
1:A:50:LEU:O	1:A:54:VAL:CG2	0.56	2.53	2	2
1:A:47:LYS:CA	1:A:50:LEU:HD12	0.56	2.28	4	1
1:A:34:TYR:CE2	1:A:38:GLU:OE1	0.56	2.58	8	2
1:A:36:PHE:CD1	1:A:36:PHE:O	0.56	2.58	12	1
1:A:29:PHE:HE1	1:A:72:LEU:HD22	0.56	1.59	15	1
1:A:36:PHE:CZ	1:A:42:ILE:HG21	0.56	2.35	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:3:TYR:CG	1:A:8:GLN:CD	0.56	2.79	5	3
1:A:40:LEU:CB	1:A:42:ILE:HD12	0.56	2.29	3	1
1:A:61:VAL:HG12	1:A:147:LEU:CD2	0.56	2.29	3	1
1:A:16:VAL:CG1	1:A:19:ALA:CB	0.56	2.82	4	1
1:A:50:LEU:HG	1:A:54:VAL:HG11	0.56	1.77	6	1
1:A:34:TYR:CB	1:A:97:GLN:NE2	0.56	2.69	9	3
1:A:16:VAL:O	1:A:19:ALA:N	0.56	2.39	18	5
1:A:28:PHE:N	1:A:60:HIS:NE2	0.56	2.53	5	3
1:A:29:PHE:HD1	1:A:96:VAL:HG11	0.56	1.60	6	1
1:A:174:PHE:CD1	1:A:177:GLN:OE1	0.56	2.58	16	1
1:A:181:THR:O	1:A:185:LEU:CG	0.56	2.53	4	9
1:A:154:PHE:CE2	1:A:160:GLN:HG3	0.56	2.36	20	3
1:A:98:LYS:O	1:A:99:THR:CB	0.56	2.53	12	12
1:A:107:ASP:OD1	1:A:108:ILE:N	0.56	2.39	18	17
1:A:77:ALA:HB1	1:A:135:VAL:HG23	0.56	1.77	15	6
1:A:184:TYR:CE2	1:A:185:LEU:CD2	0.56	2.89	12	8
1:A:29:PHE:HE2	1:A:72:LEU:HD12	0.56	1.59	17	2
1:A:78:VAL:CG1	1:A:122:TYR:CD1	0.56	2.89	3	6
1:A:40:LEU:C	1:A:41:HIS:CG	0.56	2.80	6	2
1:A:142:ALA:O	1:A:146:GLN:CA	0.55	2.54	3	14
1:A:59:TYR:CD2	1:A:141:ALA:CB	0.55	2.88	2	5
1:A:76:TRP:CH2	1:A:85:GLU:OE2	0.55	2.59	9	1
1:A:25:PHE:CE2	1:A:147:LEU:HD22	0.55	2.36	11	1
1:A:38:GLU:O	1:A:41:HIS:CE1	0.55	2.59	2	1
1:A:27:SER:HB3	1:A:60:HIS:CE1	0.55	2.36	10	3
1:A:63:PHE:CD1	1:A:63:PHE:C	0.55	2.76	11	5
1:A:36:PHE:CE1	1:A:42:ILE:HG21	0.55	2.36	7	2
1:A:178:TYR:CE1	1:A:182:VAL:CG2	0.55	2.89	14	1
1:A:37:GLU:O	1:A:38:GLU:CG	0.55	2.55	8	6
1:A:181:THR:O	1:A:185:LEU:HD12	0.55	2.01	1	1
1:A:16:VAL:HG11	1:A:144:ASP:OD1	0.55	2.00	8	1
1:A:36:PHE:CD1	1:A:40:LEU:HD12	0.55	2.36	18	1
1:A:36:PHE:CE2	1:A:42:ILE:CG2	0.55	2.89	14	1
1:A:68:LEU:CD2	1:A:107:ASP:OD2	0.55	2.55	18	1
1:A:37:GLU:OE2	1:A:93:PHE:CE2	0.55	2.59	12	1
1:A:62:ASN:HD21	1:A:73:THR:HG21	0.55	1.61	17	1
1:A:81:ALA:CB	1:A:131:VAL:HG13	0.55	2.31	7	2
1:A:92:LEU:HD21	1:A:111:VAL:HG21	0.55	1.77	3	2
1:A:117:ILE:HG22	1:A:122:TYR:HB2	0.55	1.77	15	2
1:A:153:MET:C	1:A:154:PHE:CD1	0.55	2.80	17	6
1:A:58:LYS:O	1:A:76:TRP:NE1	0.55	2.40	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:154:PHE:CD1	1:A:160:GLN:CB	0.55	2.90	10	2
1:A:25:PHE:CD2	1:A:147:LEU:HD22	0.55	2.37	11	1
1:A:79:ALA:HA	1:A:84:VAL:HG22	0.55	1.79	18	8
1:A:125:ALA:O	1:A:131:VAL:CG2	0.55	2.55	1	15
1:A:26:PHE:CD1	1:A:59:TYR:O	0.55	2.60	2	1
1:A:60:HIS:NE2	1:A:72:LEU:HD13	0.55	2.16	8	4
1:A:73:THR:CG2	1:A:138:GLN:NE2	0.55	2.70	6	2
1:A:68:LEU:O	1:A:72:LEU:N	0.54	2.40	11	16
1:A:89:THR:HG23	1:A:93:PHE:CD2	0.54	2.37	11	17
1:A:68:LEU:CD1	1:A:107:ASP:OD2	0.54	2.56	11	2
1:A:64:MET:SD	1:A:68:LEU:CD2	0.54	2.96	11	1
1:A:22:VAL:HG22	1:A:155:VAL:HG22	0.54	1.79	18	2
1:A:23:LEU:HD23	1:A:24:GLU:H	0.54	1.62	18	3
1:A:117:ILE:O	1:A:117:ILE:CG2	0.54	2.55	12	9
1:A:152:ALA:HB1	1:A:154:PHE:HE1	0.54	1.61	4	1
1:A:30:CYS:CB	1:A:32:HIS:CE1	0.54	2.90	11	1
1:A:21:GLN:O	1:A:22:VAL:HG23	0.54	2.02	2	3
1:A:12:LEU:HD11	1:A:154:PHE:HD2	0.54	1.61	19	2
1:A:160:GLN:CG	1:A:160:GLN:O	0.54	2.56	17	1
1:A:50:LEU:CD2	1:A:54:VAL:CG1	0.54	2.84	3	3
1:A:61:VAL:CG2	1:A:63:PHE:CE1	0.54	2.91	5	4
1:A:73:THR:HG23	1:A:138:GLN:NE2	0.54	2.18	1	2
1:A:78:VAL:CB	1:A:122:TYR:CE2	0.54	2.91	5	7
1:A:29:PHE:CE1	1:A:64:MET:HE3	0.54	2.36	11	1
1:A:49:LYS:C	1:A:50:LEU:HD23	0.54	2.23	13	1
1:A:61:VAL:HB	1:A:63:PHE:CD1	0.54	2.38	13	2
1:A:27:SER:HA	1:A:60:HIS:CE1	0.54	2.37	8	6
1:A:47:LYS:HG2	1:A:50:LEU:HD12	0.54	1.80	17	2
1:A:26:PHE:CE1	1:A:37:GLU:OE1	0.54	2.61	4	1
1:A:77:ALA:CB	1:A:135:VAL:CG2	0.54	2.85	15	5
1:A:174:PHE:O	1:A:178:TYR:CB	0.54	2.56	19	8
1:A:34:TYR:CE2	1:A:38:GLU:CD	0.54	2.81	7	1
1:A:184:TYR:C	1:A:184:TYR:CD1	0.54	2.80	1	3
1:A:9:TYR:HB2	1:A:161:LEU:HD23	0.54	1.78	7	1
1:A:119:GLY:O	1:A:123:ASP:CB	0.54	2.56	2	4
1:A:29:PHE:CE1	1:A:72:LEU:HD12	0.54	2.38	12	2
1:A:53:GLY:O	1:A:54:VAL:CG2	0.54	2.55	18	2
1:A:32:HIS:O	1:A:36:PHE:N	0.54	2.40	5	16
1:A:142:ALA:O	1:A:146:GLN:N	0.54	2.41	9	16
1:A:64:MET:HE1	1:A:69:GLY:HA2	0.54	1.78	18	2
1:A:107:ASP:O	1:A:111:VAL:HG23	0.54	2.03	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:GLY:O	1:A:19:ALA:O	0.53	2.27	18	18
1:A:87:LYS:O	1:A:91:PRO:CD	0.53	2.56	6	9
1:A:60:HIS:C	1:A:60:HIS:CD2	0.53	2.81	2	1
1:A:178:TYR:C	1:A:178:TYR:CD1	0.53	2.81	10	3
1:A:64:MET:O	1:A:64:MET:HE1	0.53	2.02	6	1
1:A:100:GLN:O	1:A:103:ARG:CD	0.53	2.56	13	3
1:A:144:ASP:OD1	1:A:145:VAL:CG1	0.53	2.56	17	7
1:A:126:TRP:CD1	1:A:126:TRP:C	0.53	2.80	2	2
1:A:126:TRP:C	1:A:126:TRP:CD1	0.53	2.81	8	4
1:A:64:MET:HG2	1:A:65:GLY:N	0.53	2.18	7	1
1:A:3:TYR:CE1	1:A:184:TYR:CE2	0.53	2.95	9	1
1:A:19:ALA:HB1	1:A:20:PRO:CD	0.53	2.30	13	2
1:A:38:GLU:O	1:A:41:HIS:CD2	0.53	2.61	14	1
1:A:54:VAL:HG13	1:A:186:SER:HB3	0.53	1.80	19	1
1:A:73:THR:HG23	1:A:138:GLN:CD	0.53	2.23	1	2
1:A:144:ASP:OD1	1:A:145:VAL:N	0.53	2.41	10	6
1:A:27:SER:HB2	1:A:60:HIS:CE1	0.53	2.39	4	3
1:A:42:ILE:O	1:A:46:VAL:HG23	0.53	2.03	14	2
1:A:99:THR:O	1:A:100:GLN:CB	0.53	2.57	7	8
1:A:29:PHE:CE1	1:A:96:VAL:CG1	0.53	2.91	17	1
1:A:93:PHE:O	1:A:97:GLN:NE2	0.53	2.42	1	3
1:A:72:LEU:O	1:A:75:ALA:CB	0.53	2.56	3	17
1:A:27:SER:HA	1:A:60:HIS:CD2	0.53	2.39	18	11
1:A:145:VAL:HG23	1:A:147:LEU:H	0.53	1.64	5	1
1:A:178:TYR:O	1:A:182:VAL:HG23	0.53	2.03	13	3
1:A:139:GLU:O	1:A:143:ALA:CB	0.53	2.57	1	3
1:A:60:HIS:ND1	1:A:61:VAL:O	0.53	2.41	10	3
1:A:98:LYS:O	1:A:99:THR:HG22	0.53	2.03	13	1
1:A:154:PHE:CE2	1:A:160:GLN:CG	0.53	2.91	20	1
1:A:88:VAL:O	1:A:92:LEU:CG	0.53	2.57	16	13
1:A:65:GLY:O	1:A:67:ASP:N	0.53	2.42	19	3
1:A:25:PHE:CE1	1:A:147:LEU:HD22	0.53	2.39	2	1
1:A:184:TYR:CD1	1:A:184:TYR:C	0.53	2.82	18	9
1:A:91:PRO:HB2	1:A:111:VAL:HG13	0.53	1.80	4	6
1:A:110:ASP:OD1	1:A:111:VAL:N	0.53	2.42	13	6
1:A:15:PRO:CB	1:A:157:GLY:O	0.53	2.56	15	4
1:A:34:TYR:CD1	1:A:38:GLU:HB2	0.53	2.39	6	2
1:A:52:GLU:CG	1:A:52:GLU:O	0.53	2.57	5	3
1:A:174:PHE:N	1:A:174:PHE:CD1	0.53	2.75	15	1
1:A:93:PHE:O	1:A:97:GLN:CG	0.53	2.57	20	5
1:A:3:TYR:CD1	1:A:8:GLN:CD	0.53	2.83	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:153:MET:O	1:A:160:GLN:CG	0.52	2.57	18	2
1:A:64:MET:HG3	1:A:65:GLY:N	0.52	2.19	14	4
1:A:6:GLY:N	1:A:9:TYR:O	0.52	2.42	17	11
1:A:61:VAL:HG21	1:A:63:PHE:HE1	0.52	1.63	6	1
1:A:23:LEU:HD12	1:A:145:VAL:HG11	0.52	1.79	8	1
1:A:70:LYS:CE	1:A:70:LYS:O	0.52	2.57	17	1
1:A:12:LEU:CD1	1:A:14:LYS:O	0.52	2.57	1	1
1:A:3:TYR:HB3	1:A:8:GLN:HB2	0.52	1.81	9	2
1:A:61:VAL:HB	1:A:147:LEU:HD21	0.52	1.81	11	2
1:A:80:MET:HG2	1:A:134:LEU:HD13	0.52	1.80	11	1
1:A:43:SER:O	1:A:46:VAL:CG1	0.52	2.58	18	1
1:A:28:PHE:N	1:A:28:PHE:CD1	0.52	2.77	1	5
1:A:60:HIS:CE1	1:A:72:LEU:HG	0.52	2.39	10	5
1:A:96:VAL:HG22	1:A:102:ILE:HG13	0.52	1.81	9	9
1:A:27:SER:OG	1:A:28:PHE:N	0.52	2.41	20	4
1:A:77:ALA:HB2	1:A:138:GLN:NE2	0.52	2.18	14	2
1:A:35:GLN:O	1:A:40:LEU:N	0.52	2.43	20	1
1:A:34:TYR:CD1	1:A:34:TYR:C	0.52	2.82	10	9
1:A:62:ASN:OD1	1:A:62:ASN:N	0.52	2.42	2	2
1:A:65:GLY:O	1:A:66:GLY:C	0.52	2.46	19	7
1:A:25:PHE:CG	1:A:147:LEU:HD13	0.52	2.39	20	4
1:A:20:PRO:O	1:A:55:LYS:O	0.52	2.27	11	1
1:A:29:PHE:CB	1:A:64:MET:SD	0.52	2.97	15	1
1:A:138:GLN:O	1:A:141:ALA:N	0.52	2.43	13	14
1:A:20:PRO:O	1:A:156:ASN:N	0.52	2.42	18	4
1:A:181:THR:O	1:A:185:LEU:CD1	0.52	2.57	1	1
1:A:74:GLN:NE2	1:A:78:VAL:HG22	0.52	2.19	5	1
1:A:98:LYS:C	1:A:99:THR:CG2	0.52	2.78	13	1
1:A:25:PHE:CE2	1:A:145:VAL:CG2	0.52	2.80	12	6
1:A:35:GLN:O	1:A:40:LEU:HD13	0.52	2.04	1	1
1:A:23:LEU:CD1	1:A:25:PHE:CZ	0.52	2.85	18	2
1:A:153:MET:O	1:A:154:PHE:CD1	0.52	2.62	13	1
1:A:62:ASN:OD1	1:A:142:ALA:CB	0.52	2.58	19	1
1:A:64:MET:CE	1:A:72:LEU:HD22	0.52	2.34	20	1
1:A:43:SER:O	1:A:46:VAL:CG2	0.52	2.58	15	3
1:A:34:TYR:CE2	1:A:39:VAL:CG2	0.52	2.93	5	1
1:A:33:CYS:SG	1:A:34:TYR:N	0.52	2.83	9	2
1:A:181:THR:O	1:A:185:LEU:CD2	0.52	2.58	5	10
1:A:35:GLN:O	1:A:40:LEU:CG	0.52	2.58	12	3
1:A:59:TYR:CE1	1:A:138:GLN:HG3	0.52	2.40	10	3
1:A:61:VAL:CG2	1:A:64:MET:CE	0.52	2.88	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:3:TYR:CD1	1:A:8:GLN:HG2	0.51	2.40	19	2
1:A:161:LEU:HD13	1:A:178:TYR:CE1	0.51	2.40	6	1
1:A:34:TYR:CZ	1:A:38:GLU:OE2	0.51	2.63	13	1
1:A:20:PRO:O	1:A:22:VAL:N	0.51	2.44	3	11
1:A:68:LEU:HB3	1:A:105:ALA:N	0.51	2.20	8	7
1:A:155:VAL:N	1:A:159:TYR:O	0.51	2.42	2	5
1:A:72:LEU:O	1:A:75:ALA:N	0.51	2.43	20	8
1:A:73:THR:O	1:A:138:GLN:NE2	0.51	2.43	6	4
1:A:159:TYR:CD1	1:A:159:TYR:N	0.51	2.79	7	1
1:A:84:VAL:HG11	1:A:117:ILE:CD1	0.51	2.35	1	2
1:A:64:MET:O	1:A:64:MET:CE	0.51	2.58	6	1
1:A:40:LEU:O	1:A:41:HIS:ND1	0.51	2.42	10	1
1:A:136:ALA:O	1:A:140:LYS:CG	0.51	2.58	13	1
1:A:21:GLN:OE1	1:A:55:LYS:N	0.51	2.43	14	1
1:A:148:ARG:CD	1:A:148:ARG:O	0.51	2.59	14	1
1:A:9:TYR:CE2	1:A:185:LEU:HD21	0.51	2.40	18	1
1:A:16:VAL:CG1	1:A:19:ALA:HA	0.51	2.35	18	1
1:A:36:PHE:CE1	1:A:42:ILE:CD1	0.51	2.93	20	1
1:A:8:GLN:OE1	1:A:177:GLN:NE2	0.51	2.44	1	1
1:A:154:PHE:CD2	1:A:160:GLN:HB3	0.51	2.40	12	6
1:A:115:ALA:HB3	1:A:117:ILE:HG12	0.51	1.82	14	2
1:A:16:VAL:CG2	1:A:144:ASP:OD1	0.51	2.56	10	1
1:A:16:VAL:HG12	1:A:19:ALA:CB	0.51	2.36	18	1
1:A:20:PRO:CG	1:A:23:LEU:HG	0.51	2.36	3	16
1:A:74:GLN:NE2	1:A:126:TRP:CD1	0.51	2.79	11	4
1:A:39:VAL:O	1:A:41:HIS:CD2	0.51	2.63	4	2
1:A:30:CYS:SG	1:A:32:HIS:NE2	0.51	2.83	11	2
1:A:68:LEU:HD12	1:A:68:LEU:H	0.51	1.65	18	1
1:A:19:ALA:CB	1:A:157:GLY:HA3	0.51	2.36	15	11
1:A:27:SER:OG	1:A:60:HIS:NE2	0.51	2.43	1	2
1:A:154:PHE:CD2	1:A:160:GLN:HB2	0.51	2.41	18	2
1:A:29:PHE:CD2	1:A:64:MET:SD	0.51	3.04	2	1
1:A:30:CYS:O	1:A:97:GLN:NE2	0.51	2.43	20	2
1:A:24:GLU:N	1:A:57:THR:O	0.51	2.42	19	12
1:A:28:PHE:HB2	1:A:72:LEU:HD11	0.51	1.83	18	2
1:A:3:TYR:CB	1:A:8:GLN:HB2	0.51	2.36	2	1
1:A:72:LEU:C	1:A:72:LEU:CD2	0.51	2.79	2	1
1:A:39:VAL:O	1:A:41:HIS:ND1	0.51	2.43	18	2
1:A:155:VAL:O	1:A:156:ASN:ND2	0.51	2.43	8	1
1:A:25:PHE:CD2	1:A:147:LEU:CD1	0.51	2.92	11	1
1:A:77:ALA:HB2	1:A:138:GLN:HE22	0.51	1.66	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:PHE:CG	1:A:147:LEU:HD22	0.50	2.41	2	2
1:A:8:GLN:NE2	1:A:9:TYR:CG	0.50	2.79	4	1
1:A:51:PRO:O	1:A:52:GLU:O	0.50	2.29	19	6
1:A:12:LEU:HD11	1:A:160:GLN:HB3	0.50	1.83	15	1
1:A:76:TRP:CD1	1:A:138:GLN:OE1	0.50	2.65	15	1
1:A:28:PHE:O	1:A:96:VAL:HG11	0.50	2.05	16	2
1:A:50:LEU:HD11	1:A:56:MET:HE1	0.50	1.83	17	1
1:A:73:THR:HG23	1:A:138:GLN:HG2	0.50	1.84	17	1
1:A:79:ALA:O	1:A:83:GLY:N	0.50	2.44	20	12
1:A:51:PRO:O	1:A:52:GLU:C	0.50	2.50	11	5
1:A:3:TYR:CD2	1:A:8:GLN:HG2	0.50	2.42	4	1
1:A:37:GLU:O	1:A:41:HIS:N	0.50	2.44	6	1
1:A:23:LEU:HD11	1:A:25:PHE:CE2	0.50	2.40	7	1
1:A:81:ALA:CB	1:A:131:VAL:CG2	0.50	2.86	12	3
1:A:11:THR:O	1:A:160:GLN:NE2	0.50	2.44	13	1
1:A:154:PHE:CE2	1:A:160:GLN:NE2	0.50	2.79	14	1
1:A:36:PHE:CZ	1:A:42:ILE:HG22	0.50	2.42	17	1
1:A:66:GLY:O	1:A:67:ASP:C	0.50	2.49	18	3
1:A:107:ASP:CG	1:A:108:ILE:N	0.50	2.65	15	15
1:A:61:VAL:HG11	1:A:147:LEU:HD23	0.50	1.84	2	1
1:A:32:HIS:O	1:A:36:PHE:CB	0.50	2.59	8	3
1:A:45:ASN:OD1	1:A:46:VAL:N	0.50	2.44	12	2
1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:OD1	0.50	2.44	10	1
1:A:148:ARG:O	1:A:148:ARG:CD	0.50	2.59	15	1
1:A:27:SER:OG	1:A:60:HIS:CE1	0.50	2.65	17	1
1:A:34:TYR:CG	1:A:97:GLN:OE1	0.50	2.64	19	1
1:A:21:GLN:O	1:A:155:VAL:HA	0.50	2.06	17	19
1:A:56:MET:O	1:A:56:MET:CG	0.50	2.59	4	2
1:A:27:SER:HB2	1:A:29:PHE:CD2	0.50	2.41	9	1
1:A:10:THR:CG2	1:A:160:GLN:CD	0.50	2.79	10	1
1:A:59:TYR:OH	1:A:137:GLN:CG	0.50	2.59	16	1
1:A:3:TYR:HB3	1:A:8:GLN:CG	0.50	2.36	18	1
1:A:80:MET:HB3	1:A:134:LEU:HD13	0.50	1.82	19	1
1:A:61:VAL:HB	1:A:63:PHE:CE1	0.50	2.41	13	5
1:A:153:MET:SD	1:A:161:LEU:CD1	0.50	3.00	5	1
1:A:61:VAL:CG1	1:A:150:VAL:CG1	0.50	2.79	8	2
1:A:3:TYR:HB3	1:A:9:TYR:CE1	0.50	2.41	12	4
1:A:117:ILE:O	1:A:118:LYS:C	0.50	2.49	12	19
1:A:19:ALA:CB	1:A:157:GLY:CA	0.50	2.90	15	7
1:A:51:PRO:O	1:A:53:GLY:N	0.50	2.39	18	1
1:A:53:GLY:O	1:A:55:LYS:N	0.50	2.44	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:154:PHE:CE2	1:A:160:GLN:CD	0.50	2.85	2	1
1:A:27:SER:HB2	1:A:60:HIS:NE2	0.50	2.22	19	4
1:A:29:PHE:CD1	1:A:96:VAL:CG1	0.50	2.95	17	2
1:A:41:HIS:O	1:A:45:ASN:N	0.50	2.42	11	3
1:A:29:PHE:HZ	1:A:72:LEU:HD13	0.50	1.57	11	1
1:A:20:PRO:CG	1:A:23:LEU:HD12	0.50	2.37	13	1
1:A:34:TYR:HB2	1:A:97:GLN:CG	0.50	2.37	16	1
1:A:75:ALA:HA	1:A:78:VAL:HG13	0.49	1.83	2	1
1:A:155:VAL:HG12	1:A:156:ASN:OD1	0.49	2.07	5	1
1:A:115:ALA:CB	1:A:117:ILE:HD13	0.49	2.33	16	3
1:A:19:ALA:CB	1:A:157:GLY:N	0.49	2.76	19	7
1:A:5:ASP:N	1:A:5:ASP:OD1	0.49	2.44	18	1
1:A:37:GLU:O	1:A:41:HIS:CA	0.49	2.60	6	1
1:A:69:GLY:O	1:A:72:LEU:N	0.49	2.46	1	4
1:A:3:TYR:CD1	1:A:3:TYR:O	0.49	2.65	9	1
1:A:35:GLN:OE1	1:A:35:GLN:N	0.49	2.45	14	1
1:A:18:GLY:O	1:A:19:ALA:C	0.49	2.50	4	19
1:A:97:GLN:O	1:A:98:LYS:CG	0.49	2.60	1	2
1:A:84:VAL:HG11	1:A:117:ILE:CG1	0.49	2.38	16	4
1:A:61:VAL:O	1:A:64:MET:CE	0.49	2.61	12	1
1:A:78:VAL:HB	1:A:112:PHE:CZ	0.49	2.43	16	1
1:A:34:TYR:HB2	1:A:97:GLN:NE2	0.49	2.22	13	4
1:A:59:TYR:CE2	1:A:141:ALA:HB2	0.49	2.42	9	2
1:A:12:LEU:HD11	1:A:160:GLN:CB	0.49	2.38	5	1
1:A:30:CYS:SG	1:A:64:MET:CE	0.49	3.01	10	1
1:A:42:ILE:O	1:A:46:VAL:CG1	0.49	2.59	12	1
1:A:59:TYR:CE2	1:A:138:GLN:HA	0.49	2.43	12	2
1:A:162:ASN:N	1:A:163:PRO:HD3	0.49	2.22	7	2
1:A:23:LEU:HD22	1:A:25:PHE:CE1	0.49	2.41	18	1
1:A:29:PHE:CE2	1:A:96:VAL:CG1	0.49	2.96	20	3
1:A:181:THR:O	1:A:185:LEU:HG	0.49	2.08	2	4
1:A:184:TYR:CD2	1:A:185:LEU:HD22	0.49	2.43	11	2
1:A:62:ASN:O	1:A:62:ASN:ND2	0.49	2.45	13	1
1:A:16:VAL:HG21	1:A:144:ASP:CG	0.49	2.29	18	1
1:A:37:GLU:O	1:A:38:GLU:HG2	0.49	2.08	10	7
1:A:20:PRO:CG	1:A:23:LEU:HB2	0.49	2.38	18	2
1:A:22:VAL:O	1:A:22:VAL:CG1	0.49	2.61	17	6
1:A:98:LYS:O	1:A:99:THR:OG1	0.49	2.29	12	9
1:A:75:ALA:O	1:A:78:VAL:HG22	0.49	2.08	2	1
1:A:78:VAL:HG11	1:A:122:TYR:CE1	0.49	2.42	2	2
1:A:7:LYS:O	1:A:8:GLN:HB3	0.49	2.08	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:GLN:O	1:A:103:ARG:NE	0.49	2.45	11	1
1:A:9:TYR:HB3	1:A:161:LEU:CD2	0.49	2.38	18	1
1:A:174:PHE:O	1:A:174:PHE:CD1	0.48	2.66	5	2
1:A:34:TYR:CZ	1:A:38:GLU:OE1	0.48	2.66	7	2
1:A:8:GLN:NE2	1:A:177:GLN:HB3	0.48	2.23	3	1
1:A:21:GLN:NE2	1:A:53:GLY:O	0.48	2.47	5	1
1:A:54:VAL:HG21	1:A:186:SER:HB3	0.48	1.85	7	1
1:A:84:VAL:O	1:A:88:VAL:HG13	0.48	2.07	17	1
1:A:3:TYR:CB	1:A:8:GLN:HG3	0.48	2.38	18	1
1:A:12:LEU:HD12	1:A:14:LYS:C	0.48	2.29	1	1
1:A:104:SER:O	1:A:107:ASP:OD2	0.48	2.32	11	17
1:A:75:ALA:HA	1:A:78:VAL:CG2	0.48	2.38	2	1
1:A:174:PHE:CD1	1:A:174:PHE:C	0.48	2.85	5	2
1:A:140:LYS:O	1:A:144:ASP:CB	0.48	2.61	11	4
1:A:60:HIS:HB2	1:A:76:TRP:HB2	0.48	1.84	20	1
1:A:27:SER:HA	1:A:60:HIS:ND1	0.48	2.23	2	1
1:A:61:VAL:HG23	1:A:64:MET:HE1	0.48	1.83	12	1
1:A:107:ASP:O	1:A:110:ASP:OD2	0.48	2.32	4	8
1:A:50:LEU:HD23	1:A:54:VAL:HG11	0.48	1.84	8	1
1:A:50:LEU:HD23	1:A:54:VAL:CG1	0.48	2.38	8	1
1:A:162:ASN:OD1	1:A:162:ASN:N	0.48	2.47	18	2
1:A:34:TYR:CE1	1:A:38:GLU:HG3	0.48	2.44	14	1
1:A:27:SER:O	1:A:33:CYS:SG	0.48	2.71	14	15
1:A:59:TYR:CE1	1:A:138:GLN:HG2	0.48	2.43	8	2
1:A:68:LEU:N	1:A:68:LEU:HD13	0.48	2.24	1	1
1:A:155:VAL:O	1:A:156:ASN:OD1	0.48	2.31	5	1
1:A:30:CYS:HB3	1:A:32:HIS:NE2	0.48	2.24	7	2
1:A:99:THR:CG2	1:A:101:THR:HB	0.48	2.38	12	2
1:A:85:GLU:O	1:A:89:THR:N	0.48	2.43	5	4
1:A:32:HIS:HB3	1:A:36:PHE:CE1	0.48	2.43	3	1
1:A:3:TYR:HA	1:A:8:GLN:OE1	0.48	2.09	18	1
1:A:141:ALA:O	1:A:144:ASP:OD2	0.48	2.32	7	8
1:A:23:LEU:N	1:A:154:PHE:O	0.48	2.42	2	4
1:A:181:THR:O	1:A:185:LEU:CB	0.48	2.62	16	6
1:A:144:ASP:CG	1:A:145:VAL:N	0.48	2.67	16	6
1:A:68:LEU:HD23	1:A:108:ILE:CD1	0.48	2.35	15	3
1:A:68:LEU:HB2	1:A:105:ALA:N	0.48	2.23	7	10
1:A:146:GLN:O	1:A:147:LEU:HB3	0.48	2.09	18	8
1:A:75:ALA:O	1:A:76:TRP:C	0.48	2.52	2	1
1:A:60:HIS:NE2	1:A:72:LEU:HG	0.48	2.24	10	4
1:A:63:PHE:CZ	1:A:150:VAL:HG22	0.48	2.43	16	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:LEU:HD23	1:A:186:SER:HB3	0.48	1.86	12	1
1:A:16:VAL:O	1:A:16:VAL:HG22	0.48	2.07	5	2
1:A:61:VAL:HG23	1:A:64:MET:CE	0.48	2.39	8	1
1:A:30:CYS:CB	1:A:32:HIS:NE2	0.47	2.77	7	2
1:A:60:HIS:CE1	1:A:72:LEU:HB3	0.47	2.43	18	2
1:A:172:ASP:N	1:A:172:ASP:OD1	0.47	2.47	11	1
1:A:72:LEU:O	1:A:72:LEU:CD2	0.47	2.62	17	1
1:A:74:GLN:CG	1:A:122:TYR:OH	0.47	2.61	18	1
1:A:92:LEU:HG	1:A:111:VAL:CG1	0.47	2.39	2	7
1:A:62:ASN:O	1:A:62:ASN:CG	0.47	2.52	3	1
1:A:99:THR:HG22	1:A:101:THR:N	0.47	2.24	12	2
1:A:27:SER:CB	1:A:60:HIS:CD2	0.47	2.97	18	1
1:A:139:GLU:O	1:A:143:ALA:HB2	0.47	2.10	1	1
1:A:42:ILE:CG1	1:A:175:VAL:HG22	0.47	2.39	17	3
1:A:65:GLY:CA	1:A:69:GLY:HA3	0.47	2.39	14	4
1:A:8:GLN:CG	1:A:181:THR:HG21	0.47	2.39	18	1
1:A:140:LYS:O	1:A:144:ASP:OD2	0.47	2.32	10	2
1:A:95:GLY:O	1:A:99:THR:OG1	0.47	2.31	17	5
1:A:3:TYR:HB2	1:A:9:TYR:CD1	0.47	2.44	9	2
1:A:30:CYS:HB3	1:A:32:HIS:CD2	0.47	2.44	17	1
1:A:60:HIS:NE2	1:A:72:LEU:HD23	0.47	2.24	3	3
1:A:69:GLY:O	1:A:72:LEU:HB3	0.47	2.10	1	6
1:A:69:GLY:O	1:A:72:LEU:CB	0.47	2.63	12	2
1:A:78:VAL:HG11	1:A:122:TYR:HE1	0.47	1.69	2	1
1:A:117:ILE:O	1:A:118:LYS:O	0.47	2.33	5	10
1:A:8:GLN:OE1	1:A:181:THR:OG1	0.47	2.32	20	2
1:A:11:THR:HG22	1:A:12:LEU:N	0.47	2.24	18	1
1:A:163:PRO:HB3	1:A:174:PHE:CZ	0.47	2.44	6	1
1:A:64:MET:SD	1:A:64:MET:O	0.47	2.71	11	1
1:A:30:CYS:HB3	1:A:31:PRO:CD	0.47	2.38	14	1
1:A:38:GLU:O	1:A:41:HIS:NE2	0.47	2.48	14	1
1:A:20:PRO:HG2	1:A:23:LEU:CB	0.47	2.39	20	15
1:A:54:VAL:CG2	1:A:186:SER:HB2	0.47	2.40	1	2
1:A:82:LEU:CB	1:A:84:VAL:HG13	0.47	2.39	15	3
1:A:34:TYR:CB	1:A:97:GLN:CD	0.47	2.83	5	2
1:A:30:CYS:CB	1:A:31:PRO:HD2	0.47	2.40	19	3
1:A:153:MET:CE	1:A:178:TYR:OH	0.47	2.62	9	1
1:A:34:TYR:CD1	1:A:97:GLN:NE2	0.47	2.83	15	2
1:A:22:VAL:HG13	1:A:153:MET:HE3	0.47	1.84	19	1
1:A:160:GLN:OE1	1:A:161:LEU:O	0.47	2.33	20	1
1:A:32:HIS:CD2	1:A:151:PRO:HD3	0.47	2.44	17	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:178:TYR:CD1	1:A:178:TYR:C	0.47	2.88	7	3
1:A:26:PHE:CD1	1:A:26:PHE:O	0.47	2.68	20	2
1:A:62:ASN:HB3	1:A:70:LYS:N	0.47	2.25	9	1
1:A:36:PHE:HA	1:A:40:LEU:HD12	0.47	1.87	12	1
1:A:22:VAL:HG11	1:A:56:MET:HG2	0.47	1.86	19	1
1:A:161:LEU:CD1	1:A:178:TYR:CE1	0.47	2.98	2	1
1:A:80:MET:SD	1:A:134:LEU:HD22	0.47	2.50	6	1
1:A:124:ALA:O	1:A:128:SER:OG	0.47	2.33	15	3
1:A:30:CYS:CB	1:A:31:PRO:CD	0.47	2.93	14	3
1:A:172:ASP:CG	1:A:173:VAL:N	0.47	2.68	8	1
1:A:149:GLY:O	1:A:151:PRO:O	0.47	2.33	9	1
1:A:34:TYR:O	1:A:38:GLU:N	0.47	2.46	17	2
1:A:16:VAL:HG12	1:A:19:ALA:HB2	0.47	1.86	18	1
1:A:32:HIS:O	1:A:36:PHE:HB2	0.47	2.10	17	6
1:A:125:ALA:O	1:A:131:VAL:HG21	0.47	2.10	18	3
1:A:16:VAL:HG13	1:A:19:ALA:CA	0.47	2.40	4	1
1:A:40:LEU:HD22	1:A:175:VAL:HG21	0.47	1.86	5	1
1:A:15:PRO:HA	1:A:157:GLY:O	0.47	2.10	14	4
1:A:34:TYR:CE1	1:A:38:GLU:HB3	0.47	2.45	6	1
1:A:110:ASP:O	1:A:114:ASN:ND2	0.47	2.48	16	2
1:A:53:GLY:C	1:A:54:VAL:HG23	0.47	2.30	14	1
1:A:8:GLN:OE1	1:A:8:GLN:N	0.47	2.41	18	1
1:A:90:VAL:N	1:A:91:PRO:CD	0.46	2.79	14	13
1:A:27:SER:HA	1:A:60:HIS:NE2	0.46	2.25	5	4
1:A:99:THR:HG22	1:A:101:THR:HG23	0.46	1.84	7	1
1:A:42:ILE:O	1:A:46:VAL:CG2	0.46	2.63	10	2
1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:HD3	0.46	2.25	12	1
1:A:36:PHE:O	1:A:43:SER:OG	0.46	2.33	15	1
1:A:99:THR:O	1:A:100:GLN:HB2	0.46	2.09	1	20
1:A:146:GLN:O	1:A:147:LEU:O	0.46	2.34	7	7
1:A:77:ALA:HB2	1:A:138:GLN:OE1	0.46	2.10	7	1
1:A:32:HIS:HB3	1:A:36:PHE:CD1	0.46	2.45	9	1
1:A:40:LEU:HD22	1:A:175:VAL:HG23	0.46	1.85	4	1
1:A:63:PHE:CD1	1:A:63:PHE:N	0.46	2.82	6	3
1:A:23:LEU:HD11	1:A:25:PHE:CE1	0.46	2.44	15	1
1:A:153:MET:O	1:A:160:GLN:HG2	0.46	2.10	18	1
1:A:88:VAL:O	1:A:92:LEU:HG	0.46	2.11	9	11
1:A:125:ALA:O	1:A:131:VAL:HB	0.46	2.11	6	19
1:A:68:LEU:O	1:A:108:ILE:CD1	0.46	2.57	6	2
1:A:154:PHE:CD1	1:A:160:GLN:HB3	0.46	2.46	10	2
1:A:21:GLN:O	1:A:155:VAL:CG2	0.46	2.60	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:VAL:HG21	1:A:112:PHE:HE1	0.46	1.68	17	1
1:A:62:ASN:O	1:A:63:PHE:C	0.46	2.52	2	1
1:A:8:GLN:OE1	1:A:8:GLN:O	0.46	2.33	4	1
1:A:15:PRO:HB3	1:A:157:GLY:O	0.46	2.10	5	2
1:A:177:GLN:O	1:A:181:THR:OG1	0.46	2.33	12	3
1:A:39:VAL:O	1:A:41:HIS:CG	0.46	2.69	14	1
1:A:111:VAL:O	1:A:114:ASN:OD1	0.46	2.33	17	1
1:A:110:ASP:O	1:A:114:ASN:OD1	0.46	2.33	18	2
1:A:8:GLN:HG2	1:A:177:GLN:NE2	0.46	2.26	1	1
1:A:40:LEU:O	1:A:42:ILE:N	0.46	2.48	1	3
1:A:75:ALA:HB1	1:A:112:PHE:HE2	0.46	1.67	2	1
1:A:119:GLY:O	1:A:123:ASP:HB3	0.46	2.10	2	2
1:A:93:PHE:O	1:A:97:GLN:OE1	0.46	2.32	11	3
1:A:178:TYR:O	1:A:181:THR:OG1	0.46	2.31	3	1
1:A:50:LEU:HG	1:A:54:VAL:CG1	0.46	2.40	6	2
1:A:30:CYS:SG	1:A:33:CYS:SG	0.46	3.13	14	2
1:A:174:PHE:O	1:A:178:TYR:HB3	0.46	2.11	19	3
1:A:40:LEU:O	1:A:41:HIS:C	0.46	2.54	1	6
1:A:50:LEU:HA	1:A:54:VAL:HG21	0.46	1.86	6	2
1:A:24:GLU:OE1	1:A:26:PHE:CD1	0.46	2.68	9	1
1:A:34:TYR:CD2	1:A:97:GLN:NE2	0.46	2.83	10	2
1:A:59:TYR:CD2	1:A:138:GLN:HA	0.46	2.46	12	1
1:A:4:GLU:CG	1:A:4:GLU:O	0.46	2.63	15	1
1:A:29:PHE:CE1	1:A:72:LEU:CD2	0.46	2.99	15	1
1:A:34:TYR:CE1	1:A:38:GLU:HB2	0.46	2.46	6	2
1:A:78:VAL:HB	1:A:122:TYR:CE2	0.46	2.46	14	3
1:A:65:GLY:O	1:A:69:GLY:CA	0.46	2.64	7	1
1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:N	0.46	2.26	7	1
1:A:68:LEU:HG	1:A:104:SER:N	0.46	2.25	10	2
1:A:64:MET:CG	1:A:69:GLY:HA3	0.46	2.41	11	1
1:A:106:SER:O	1:A:110:ASP:OD1	0.46	2.34	14	1
1:A:64:MET:SD	1:A:72:LEU:HD22	0.46	2.51	20	1
1:A:16:VAL:O	1:A:17:ALA:C	0.46	2.54	5	11
1:A:84:VAL:O	1:A:85:GLU:C	0.46	2.54	4	14
1:A:93:PHE:CD1	1:A:93:PHE:N	0.46	2.84	2	14
1:A:16:VAL:O	1:A:16:VAL:CG1	0.46	2.64	17	3
1:A:40:LEU:C	1:A:41:HIS:ND1	0.46	2.69	6	2
1:A:125:ALA:CA	1:A:131:VAL:HG21	0.46	2.40	6	2
1:A:27:SER:HB3	1:A:60:HIS:NE2	0.46	2.26	8	1
1:A:82:LEU:HD23	1:A:82:LEU:N	0.46	2.26	8	1
1:A:68:LEU:CD1	1:A:102:ILE:C	0.46	2.85	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:174:PHE:O	1:A:178:TYR:HB2	0.46	2.11	17	3
1:A:153:MET:O	1:A:160:GLN:HA	0.46	2.11	3	10
1:A:49:LYS:C	1:A:51:PRO:HD3	0.46	2.31	2	3
1:A:24:GLU:CB	1:A:58:LYS:HA	0.46	2.41	3	4
1:A:24:GLU:CG	1:A:57:THR:O	0.46	2.64	7	1
1:A:34:TYR:CE2	1:A:38:GLU:OE2	0.46	2.69	13	2
1:A:145:VAL:O	1:A:146:GLN:HB3	0.46	2.10	19	2
1:A:3:TYR:CG	1:A:8:GLN:NE2	0.46	2.84	17	1
1:A:145:VAL:HB	1:A:154:PHE:CD2	0.46	2.46	18	1
1:A:85:GLU:O	1:A:86:ASP:C	0.45	2.55	13	12
1:A:16:VAL:HG13	1:A:16:VAL:O	0.45	2.11	4	1
1:A:61:VAL:CB	1:A:147:LEU:HD21	0.45	2.41	6	1
1:A:51:PRO:HG2	1:A:54:VAL:CG2	0.45	2.41	7	1
1:A:32:HIS:CE1	1:A:151:PRO:HD3	0.45	2.46	11	1
1:A:41:HIS:CD2	1:A:44:ASP:OD1	0.45	2.69	17	1
1:A:74:GLN:HG3	1:A:122:TYR:OH	0.45	2.12	18	1
1:A:88:VAL:O	1:A:92:LEU:HB2	0.45	2.12	8	20
1:A:26:PHE:C	1:A:26:PHE:CD1	0.45	2.89	4	1
1:A:27:SER:C	1:A:28:PHE:CD1	0.45	2.90	8	2
1:A:28:PHE:C	1:A:29:PHE:CD1	0.45	2.89	11	2
1:A:70:LYS:NZ	1:A:139:GLU:OE2	0.45	2.48	11	1
1:A:148:ARG:O	1:A:148:ARG:HD2	0.45	2.11	14	1
1:A:35:GLN:O	1:A:40:LEU:HG	0.45	2.12	12	4
1:A:71:ASP:HB3	1:A:108:ILE:CD1	0.45	2.40	17	8
1:A:145:VAL:O	1:A:146:GLN:HB2	0.45	2.10	3	7
1:A:139:GLU:OE2	1:A:143:ALA:HB2	0.45	2.10	8	1
1:A:3:TYR:HB2	1:A:9:TYR:CE1	0.45	2.46	11	1
1:A:20:PRO:HG3	1:A:23:LEU:CD1	0.45	2.40	13	1
1:A:60:HIS:HB2	1:A:76:TRP:CB	0.45	2.41	20	1
1:A:41:HIS:O	1:A:45:ASN:CB	0.45	2.64	4	3
1:A:68:LEU:CB	1:A:104:SER:C	0.45	2.85	12	5
1:A:64:MET:CG	1:A:65:GLY:N	0.45	2.79	7	3
1:A:61:VAL:CG2	1:A:64:MET:HE3	0.45	2.41	8	1
1:A:50:LEU:CD2	1:A:54:VAL:HB	0.45	2.40	16	1
1:A:66:GLY:O	1:A:68:LEU:N	0.45	2.50	18	1
1:A:68:LEU:O	1:A:108:ILE:HD12	0.45	2.11	18	1
1:A:76:TRP:CZ3	1:A:85:GLU:OE1	0.45	2.69	18	1
1:A:97:GLN:O	1:A:98:LYS:HG3	0.45	2.12	17	3
1:A:68:LEU:HB3	1:A:104:SER:CA	0.45	2.42	7	5
1:A:20:PRO:HB3	1:A:57:THR:OG1	0.45	2.12	10	5
1:A:183:LYS:O	1:A:186:SER:OG	0.45	2.33	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:8:GLN:NE2	1:A:181:THR:OG1	0.45	2.42	19	1
1:A:16:VAL:O	1:A:19:ALA:HB2	0.45	2.12	13	2
1:A:161:LEU:CD1	1:A:178:TYR:CZ	0.45	2.89	2	1
1:A:63:PHE:CZ	1:A:150:VAL:HG13	0.45	2.47	5	1
1:A:34:TYR:O	1:A:38:GLU:CG	0.45	2.65	13	1
1:A:4:GLU:O	1:A:5:ASP:C	0.45	2.55	6	6
1:A:29:PHE:CD1	1:A:64:MET:HG2	0.45	2.47	9	1
1:A:8:GLN:CD	1:A:181:THR:HG23	0.45	2.32	17	1
1:A:30:CYS:SG	1:A:32:HIS:CD2	0.45	3.10	17	1
1:A:142:ALA:O	1:A:146:GLN:HA	0.45	2.11	3	1
1:A:160:GLN:O	1:A:160:GLN:HG3	0.45	2.12	14	8
1:A:3:TYR:HA	1:A:8:GLN:CG	0.45	2.41	4	1
1:A:117:ILE:CG2	1:A:122:TYR:HB2	0.45	2.42	20	3
1:A:61:VAL:HG23	1:A:63:PHE:CD1	0.45	2.47	5	1
1:A:68:LEU:HD13	1:A:102:ILE:C	0.45	2.32	9	1
1:A:3:TYR:CB	1:A:8:GLN:CG	0.45	2.95	18	1
1:A:116:GLY:C	1:A:117:ILE:HD13	0.45	2.31	18	2
1:A:146:GLN:O	1:A:147:LEU:CB	0.45	2.65	18	2
1:A:80:MET:HB3	1:A:134:LEU:CD1	0.45	2.41	19	1
1:A:79:ALA:HA	1:A:84:VAL:CG2	0.45	2.42	18	7
1:A:4:GLU:O	1:A:5:ASP:HB3	0.45	2.11	3	1
1:A:64:MET:SD	1:A:64:MET:C	0.45	2.96	14	4
1:A:126:TRP:HA	1:A:131:VAL:CG1	0.45	2.42	13	2
1:A:68:LEU:HD13	1:A:103:ARG:CA	0.45	2.42	6	2
1:A:29:PHE:CE2	1:A:60:HIS:NE2	0.45	2.85	9	1
1:A:145:VAL:HB	1:A:154:PHE:CE2	0.45	2.47	12	1
1:A:60:HIS:CB	1:A:138:GLN:OE1	0.45	2.65	19	1
1:A:23:LEU:O	1:A:153:MET:HA	0.45	2.12	7	6
1:A:20:PRO:O	1:A:21:GLN:C	0.45	2.56	2	9
1:A:21:GLN:O	1:A:22:VAL:CG2	0.45	2.65	2	1
1:A:25:PHE:CD1	1:A:147:LEU:CD2	0.45	2.95	2	1
1:A:47:LYS:HG3	1:A:48:LYS:N	0.45	2.27	11	1
1:A:161:LEU:HD23	1:A:161:LEU:N	0.45	2.26	17	1
1:A:59:TYR:OH	1:A:137:GLN:OE1	0.45	2.36	20	1
1:A:39:VAL:O	1:A:41:HIS:N	0.44	2.50	2	1
1:A:131:VAL:O	1:A:135:VAL:HG23	0.44	2.12	3	2
1:A:71:ASP:O	1:A:71:ASP:OD1	0.44	2.35	11	2
1:A:104:SER:OG	1:A:107:ASP:CG	0.44	2.56	17	3
1:A:156:ASN:CG	1:A:156:ASN:O	0.44	2.55	14	1
1:A:59:TYR:CD1	1:A:138:GLN:HG3	0.44	2.46	15	1
1:A:74:GLN:NE2	1:A:78:VAL:CG2	0.44	2.80	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:GLN:OE1	1:A:122:TYR:OH	0.44	2.34	6	2
1:A:122:TYR:O	1:A:123:ASP:C	0.44	2.56	20	6
1:A:140:LYS:O	1:A:144:ASP:CG	0.44	2.56	11	6
1:A:47:LYS:CA	1:A:50:LEU:HD13	0.44	2.41	6	1
1:A:154:PHE:HA	1:A:159:TYR:O	0.44	2.12	17	1
1:A:67:ASP:O	1:A:68:LEU:C	0.44	2.56	18	1
1:A:8:GLN:OE1	1:A:181:THR:CG2	0.44	2.66	19	1
1:A:47:LYS:HG2	1:A:50:LEU:CD1	0.44	2.43	1	1
1:A:89:THR:O	1:A:93:PHE:N	0.44	2.33	16	6
1:A:39:VAL:O	1:A:41:HIS:NE2	0.44	2.49	15	2
1:A:27:SER:HB2	1:A:29:PHE:CE2	0.44	2.47	9	1
1:A:96:VAL:CG2	1:A:102:ILE:HG13	0.44	2.41	9	2
1:A:46:VAL:O	1:A:50:LEU:CD1	0.44	2.60	11	1
1:A:41:HIS:O	1:A:44:ASP:OD1	0.44	2.35	12	1
1:A:61:VAL:HG21	1:A:150:VAL:CG1	0.44	2.32	13	1
1:A:100:GLN:O	1:A:103:ARG:HD2	0.44	2.12	16	3
1:A:104:SER:O	1:A:107:ASP:CG	0.44	2.56	18	1
1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:HD23	0.44	2.27	2	1
1:A:63:PHE:HZ	1:A:150:VAL:HG13	0.44	1.71	5	1
1:A:181:THR:O	1:A:185:LEU:HB2	0.44	2.12	15	7
1:A:34:TYR:CD1	1:A:97:GLN:OE1	0.44	2.70	12	1
1:A:36:PHE:CE1	1:A:42:ILE:HD12	0.44	2.48	20	1
1:A:119:GLY:O	1:A:123:ASP:HB2	0.44	2.11	1	1
1:A:43:SER:O	1:A:46:VAL:N	0.44	2.50	2	1
1:A:50:LEU:HD23	1:A:51:PRO:HD2	0.44	1.89	4	1
1:A:61:VAL:HG21	1:A:147:LEU:HD21	0.44	1.88	5	1
1:A:93:PHE:HB3	1:A:97:GLN:NE2	0.44	2.28	6	1
1:A:73:THR:CG2	1:A:138:GLN:HB3	0.44	2.43	17	1
1:A:162:ASN:O	1:A:162:ASN:ND2	0.44	2.45	17	1
1:A:81:ALA:HB1	1:A:131:VAL:CG2	0.44	2.38	18	2
1:A:122:TYR:CD1	1:A:123:ASP:N	0.44	2.85	5	1
1:A:155:VAL:O	1:A:157:GLY:N	0.44	2.50	5	3
1:A:29:PHE:HB3	1:A:64:MET:SD	0.44	2.52	15	1
1:A:3:TYR:HB3	1:A:8:GLN:HG3	0.44	1.87	18	1
1:A:20:PRO:CB	1:A:23:LEU:HB2	0.44	2.42	18	1
1:A:8:GLN:O	1:A:9:TYR:HB3	0.44	2.13	1	12
1:A:47:LYS:HA	1:A:50:LEU:CD1	0.44	2.42	1	1
1:A:32:HIS:O	1:A:33:CYS:C	0.44	2.56	3	8
1:A:59:TYR:CD2	1:A:141:ALA:HB2	0.44	2.47	9	4
1:A:61:VAL:O	1:A:62:ASN:C	0.44	2.53	2	1
1:A:136:ALA:O	1:A:140:LYS:CB	0.44	2.65	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:184:TYR:CD2	1:A:185:LEU:HD23	0.44	2.48	12	1
1:A:95:GLY:O	1:A:99:THR:CG2	0.44	2.56	13	1
1:A:72:LEU:CD2	1:A:72:LEU:C	0.44	2.85	17	1
1:A:129:PHE:CD1	1:A:129:PHE:N	0.44	2.84	17	1
1:A:68:LEU:HB3	1:A:108:ILE:CD1	0.44	2.43	18	1
1:A:29:PHE:HE1	1:A:72:LEU:HD12	0.44	1.72	2	1
1:A:41:HIS:O	1:A:44:ASP:N	0.44	2.43	5	1
1:A:61:VAL:C	1:A:73:THR:OG1	0.44	2.56	5	1
1:A:91:PRO:HG2	1:A:111:VAL:CG1	0.44	2.43	19	6
1:A:65:GLY:HA3	1:A:69:GLY:HA3	0.44	1.89	13	2
1:A:4:GLU:O	1:A:5:ASP:CB	0.44	2.65	15	2
1:A:89:THR:CG2	1:A:93:PHE:CD2	0.44	3.01	11	1
1:A:65:GLY:HA3	1:A:69:GLY:CA	0.44	2.42	13	1
1:A:52:GLU:O	1:A:52:GLU:HG2	0.44	2.12	17	2
1:A:50:LEU:CD1	1:A:56:MET:HG2	0.44	2.43	18	1
1:A:35:GLN:O	1:A:40:LEU:HB2	0.44	2.13	10	3
1:A:47:LYS:O	1:A:48:LYS:C	0.44	2.57	3	2
1:A:110:ASP:CG	1:A:111:VAL:N	0.44	2.71	13	3
1:A:91:PRO:HG2	1:A:111:VAL:HG13	0.44	1.89	5	3
1:A:63:PHE:CZ	1:A:147:LEU:HD21	0.44	2.48	15	1
1:A:93:PHE:O	1:A:97:GLN:CD	0.43	2.57	14	6
1:A:21:GLN:HB3	1:A:54:VAL:HG13	0.43	1.89	4	2
1:A:112:PHE:HD2	1:A:117:ILE:HG21	0.43	1.73	4	1
1:A:20:PRO:HG2	1:A:23:LEU:HG	0.43	1.88	7	2
1:A:65:GLY:O	1:A:69:GLY:HA3	0.43	2.13	7	1
1:A:52:GLU:O	1:A:52:GLU:CG	0.43	2.66	10	1
1:A:32:HIS:NE2	1:A:151:PRO:HD3	0.43	2.28	11	1
1:A:153:MET:SD	1:A:178:TYR:OH	0.43	2.74	18	1
1:A:12:LEU:HD11	1:A:154:PHE:CD2	0.43	2.47	19	1
1:A:64:MET:O	1:A:64:MET:HG3	0.43	2.13	2	1
1:A:64:MET:HE1	1:A:150:VAL:HG21	0.43	1.88	3	1
1:A:15:PRO:CA	1:A:157:GLY:O	0.43	2.66	11	3
1:A:96:VAL:HG22	1:A:102:ILE:CG1	0.43	2.42	9	3
1:A:29:PHE:HB2	1:A:64:MET:SD	0.43	2.52	15	1
1:A:32:HIS:CE1	1:A:151:PRO:HB3	0.43	2.48	17	1
1:A:22:VAL:CG1	1:A:56:MET:HG2	0.43	2.42	19	1
1:A:98:LYS:C	1:A:99:THR:OG1	0.43	2.56	9	9
1:A:27:SER:HB2	1:A:61:VAL:CG2	0.43	2.42	6	1
1:A:44:ASP:O	1:A:48:LYS:CD	0.43	2.67	11	1
1:A:182:VAL:O	1:A:186:SER:OG	0.43	2.36	12	1
1:A:5:ASP:OD1	1:A:5:ASP:N	0.43	2.51	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:THR:CG2	1:A:12:LEU:N	0.43	2.81	18	1
1:A:104:SER:O	1:A:105:ALA:C	0.43	2.57	11	11
1:A:141:ALA:HA	1:A:144:ASP:OD2	0.43	2.13	5	2
1:A:39:VAL:O	1:A:40:LEU:C	0.43	2.57	2	3
1:A:107:ASP:O	1:A:108:ILE:C	0.43	2.57	2	4
1:A:28:PHE:HB2	1:A:72:LEU:HD21	0.43	1.89	5	2
1:A:27:SER:CA	1:A:60:HIS:CE1	0.43	3.02	8	2
1:A:60:HIS:CE1	1:A:72:LEU:CG	0.43	3.02	10	2
1:A:53:GLY:C	1:A:54:VAL:CG2	0.43	2.86	14	1
1:A:9:TYR:HB3	1:A:161:LEU:HD22	0.43	1.90	18	1
1:A:56:MET:O	1:A:56:MET:SD	0.43	2.77	18	1
1:A:88:VAL:O	1:A:92:LEU:CB	0.43	2.66	16	11
1:A:21:GLN:O	1:A:155:VAL:CG1	0.43	2.59	9	5
1:A:30:CYS:O	1:A:33:CYS:HB3	0.43	2.13	16	7
1:A:62:ASN:HB2	1:A:70:LYS:CE	0.43	2.44	4	1
1:A:4:GLU:O	1:A:5:ASP:CG	0.43	2.57	16	2
1:A:28:PHE:O	1:A:96:VAL:HB	0.43	2.14	19	5
1:A:79:ALA:O	1:A:80:MET:C	0.43	2.56	4	12
1:A:26:PHE:CD2	1:A:37:GLU:OE1	0.43	2.71	2	1
1:A:96:VAL:HG22	1:A:102:ILE:HB	0.43	1.91	6	2
1:A:158:LYS:HB3	1:A:159:TYR:CD1	0.43	2.48	7	1
1:A:27:SER:CB	1:A:64:MET:CE	0.43	2.97	8	1
1:A:125:ALA:O	1:A:128:SER:HB2	0.43	2.13	17	3
1:A:22:VAL:HG13	1:A:153:MET:SD	0.43	2.53	11	2
1:A:30:CYS:HB3	1:A:32:HIS:CE1	0.43	2.48	11	1
1:A:74:GLN:NE2	1:A:126:TRP:CD2	0.43	2.86	16	1
1:A:12:LEU:HD13	1:A:157:GLY:C	0.43	2.33	18	1
1:A:75:ALA:O	1:A:79:ALA:CB	0.43	2.67	18	1
1:A:107:ASP:OD1	1:A:107:ASP:C	0.43	2.56	2	11
1:A:118:LYS:O	1:A:119:GLY:C	0.43	2.56	3	1
1:A:45:ASN:O	1:A:46:VAL:C	0.43	2.57	6	1
1:A:155:VAL:HG12	1:A:156:ASN:HD22	0.43	1.74	8	1
1:A:20:PRO:HG2	1:A:23:LEU:HB2	0.43	1.90	13	1
1:A:10:THR:HG23	1:A:160:GLN:HG3	0.43	1.89	16	1
1:A:64:MET:O	1:A:65:GLY:C	0.43	2.56	1	2
1:A:79:ALA:HB2	1:A:112:PHE:HZ	0.43	1.74	2	1
1:A:35:GLN:CD	1:A:39:VAL:HG21	0.43	2.34	4	1
1:A:84:VAL:O	1:A:87:LYS:N	0.43	2.52	15	4
1:A:61:VAL:HB	1:A:147:LEU:CD2	0.43	2.42	11	2
1:A:162:ASN:N	1:A:163:PRO:CD	0.43	2.82	7	1
1:A:20:PRO:HB2	1:A:57:THR:OG1	0.43	2.14	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:PHE:CG	1:A:64:MET:CE	0.43	3.01	11	1
1:A:30:CYS:O	1:A:33:CYS:SG	0.43	2.73	12	1
1:A:13:GLU:HG2	1:A:14:LYS:N	0.43	2.28	14	1
1:A:129:PHE:O	1:A:133:SER:N	0.43	2.52	15	1
1:A:16:VAL:N	1:A:157:GLY:O	0.43	2.43	20	1
1:A:40:LEU:HB3	1:A:42:ILE:CD1	0.43	2.43	2	1
1:A:62:ASN:O	1:A:64:MET:N	0.43	2.52	2	1
1:A:125:ALA:C	1:A:131:VAL:CG2	0.43	2.87	2	1
1:A:119:GLY:O	1:A:120:GLU:C	0.43	2.56	4	1
1:A:49:LYS:O	1:A:51:PRO:HD3	0.43	2.14	16	5
1:A:27:SER:OG	1:A:29:PHE:CE2	0.43	2.72	6	1
1:A:88:VAL:HG23	1:A:92:LEU:CD1	0.43	2.37	8	2
1:A:154:PHE:CE1	1:A:160:GLN:HB2	0.43	2.49	10	1
1:A:61:VAL:CB	1:A:63:PHE:CD1	0.43	3.02	13	1
1:A:64:MET:CE	1:A:69:GLY:HA2	0.43	2.43	18	1
1:A:8:GLN:OE1	1:A:9:TYR:CD1	0.43	2.72	5	1
1:A:112:PHE:CE2	1:A:122:TYR:CE2	0.43	3.07	5	1
1:A:41:HIS:O	1:A:43:SER:N	0.43	2.51	13	1
1:A:92:LEU:CD2	1:A:111:VAL:HG11	0.43	2.44	14	1
1:A:9:TYR:CD1	1:A:9:TYR:N	0.43	2.87	17	2
1:A:72:LEU:HD23	1:A:72:LEU:C	0.43	2.34	17	1
1:A:75:ALA:C	1:A:77:ALA:N	0.42	2.70	2	1
1:A:79:ALA:O	1:A:82:LEU:N	0.42	2.52	11	3
1:A:68:LEU:HA	1:A:105:ALA:HA	0.42	1.90	18	1
1:A:154:PHE:CZ	1:A:160:GLN:OE1	0.42	2.72	2	1
1:A:29:PHE:HB3	1:A:64:MET:CE	0.42	2.45	4	1
1:A:155:VAL:O	1:A:156:ASN:C	0.42	2.57	9	1
1:A:155:VAL:HG21	1:A:185:LEU:HB3	0.42	1.91	11	1
1:A:30:CYS:SG	1:A:31:PRO:HD2	0.42	2.54	12	1
1:A:41:HIS:C	1:A:44:ASP:OD1	0.42	2.58	12	1
1:A:79:ALA:CB	1:A:85:GLU:HG3	0.42	2.44	18	1
1:A:160:GLN:NE2	1:A:161:LEU:O	0.42	2.52	18	1
1:A:62:ASN:OD1	1:A:70:LYS:HA	0.42	2.14	3	1
1:A:145:VAL:HG23	1:A:147:LEU:N	0.42	2.29	5	1
1:A:93:PHE:O	1:A:97:GLN:CB	0.42	2.67	6	1
1:A:45:ASN:OD1	1:A:45:ASN:C	0.42	2.57	9	1
1:A:110:ASP:OD1	1:A:110:ASP:C	0.42	2.58	13	2
1:A:36:PHE:CD1	1:A:36:PHE:C	0.42	2.93	14	2
1:A:114:ASN:C	1:A:114:ASN:ND2	0.42	2.72	17	1
1:A:61:VAL:O	1:A:73:THR:OG1	0.42	2.37	19	1
1:A:73:THR:HG22	1:A:138:GLN:NE2	0.42	2.30	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:3:TYR:CE1	1:A:181:THR:HG23	0.42	2.50	10	1
1:A:29:PHE:CG	1:A:64:MET:HE2	0.42	2.49	11	1
1:A:41:HIS:O	1:A:42:ILE:C	0.42	2.57	13	1
1:A:58:LYS:N	1:A:58:LYS:CD	0.42	2.82	18	1
1:A:88:VAL:O	1:A:92:LEU:CD1	0.42	2.64	19	2
1:A:25:PHE:CG	1:A:147:LEU:CD1	0.42	3.02	20	1
1:A:84:VAL:HG11	1:A:117:ILE:HD11	0.42	1.92	1	1
1:A:26:PHE:CD1	1:A:26:PHE:N	0.42	2.87	2	1
1:A:40:LEU:HB3	1:A:42:ILE:HD12	0.42	1.91	2	1
1:A:43:SER:O	1:A:44:ASP:C	0.42	2.57	2	1
1:A:179:ALA:O	1:A:183:LYS:NZ	0.42	2.44	2	1
1:A:147:LEU:CD1	1:A:152:ALA:CB	0.42	2.97	19	2
1:A:161:LEU:HD12	1:A:178:TYR:CE2	0.42	2.50	4	1
1:A:59:TYR:CE1	1:A:138:GLN:HB2	0.42	2.50	5	1
1:A:140:LYS:O	1:A:144:ASP:HB2	0.42	2.15	18	3
1:A:27:SER:O	1:A:33:CYS:HB2	0.42	2.13	9	2
1:A:68:LEU:HD13	1:A:103:ARG:N	0.42	2.29	9	1
1:A:73:THR:CG2	1:A:138:GLN:OE1	0.42	2.68	18	2
1:A:44:ASP:N	1:A:44:ASP:OD1	0.42	2.51	19	1
1:A:153:MET:HB2	1:A:178:TYR:OH	0.42	2.14	2	1
1:A:71:ASP:HB3	1:A:108:ILE:HD12	0.42	1.91	8	3
1:A:30:CYS:O	1:A:33:CYS:HB2	0.42	2.14	4	2
1:A:34:TYR:HB3	1:A:97:GLN:CD	0.42	2.35	5	1
1:A:154:PHE:CE1	1:A:160:GLN:HG3	0.42	2.49	5	1
1:A:145:VAL:C	1:A:146:GLN:CG	0.42	2.87	12	2
1:A:184:TYR:O	1:A:187:GLU:N	0.42	2.43	14	1
1:A:160:GLN:O	1:A:160:GLN:CG	0.42	2.68	13	3
1:A:93:PHE:O	1:A:97:GLN:HB2	0.42	2.15	6	2
1:A:20:PRO:HG2	1:A:23:LEU:CG	0.42	2.45	7	1
1:A:62:ASN:OD1	1:A:62:ASN:C	0.42	2.58	8	1
1:A:45:ASN:HA	1:A:48:LYS:HD3	0.42	1.91	11	1
1:A:34:TYR:HB2	1:A:97:GLN:CB	0.42	2.45	16	1
1:A:20:PRO:HB2	1:A:23:LEU:HB2	0.42	1.91	18	1
1:A:64:MET:CE	1:A:69:GLY:CA	0.42	2.97	18	1
1:A:8:GLN:OE1	1:A:181:THR:HG21	0.42	2.15	19	1
1:A:93:PHE:O	1:A:97:GLN:HG3	0.42	2.15	19	1
1:A:26:PHE:CE1	1:A:58:LYS:HB2	0.42	2.50	2	1
1:A:34:TYR:O	1:A:38:GLU:HB2	0.42	2.14	2	1
1:A:185:LEU:N	1:A:185:LEU:CD2	0.42	2.83	2	1
1:A:49:LYS:O	1:A:50:LEU:C	0.42	2.57	7	1
1:A:37:GLU:O	1:A:38:GLU:CD	0.42	2.58	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:PHE:CE1	1:A:60:HIS:CE1	0.42	3.08	12	1
1:A:29:PHE:CB	1:A:64:MET:HG2	0.42	2.44	16	1
1:A:68:LEU:O	1:A:69:GLY:C	0.42	2.57	17	1
1:A:68:LEU:HA	1:A:105:ALA:CB	0.42	2.44	18	1
1:A:184:TYR:O	1:A:187:GLU:HB2	0.42	2.15	1	1
1:A:47:LYS:O	1:A:49:LYS:N	0.42	2.53	2	1
1:A:71:ASP:N	1:A:71:ASP:OD1	0.42	2.51	2	1
1:A:95:GLY:C	1:A:102:ILE:HG13	0.42	2.36	17	7
1:A:16:VAL:CG2	1:A:145:VAL:HG12	0.42	2.43	11	1
1:A:6:GLY:HA2	1:A:162:ASN:ND2	0.42	2.30	15	1
1:A:52:GLU:O	1:A:52:GLU:HG3	0.42	2.14	1	1
1:A:75:ALA:HA	1:A:78:VAL:CG1	0.42	2.45	2	1
1:A:153:MET:O	1:A:160:GLN:CA	0.42	2.67	4	2
1:A:26:PHE:CZ	1:A:37:GLU:OE2	0.42	2.73	4	1
1:A:90:VAL:N	1:A:91:PRO:HD2	0.42	2.30	11	3
1:A:163:PRO:CB	1:A:174:PHE:CZ	0.42	3.03	6	1
1:A:44:ASP:O	1:A:47:LYS:N	0.42	2.53	15	1
1:A:50:LEU:HD23	1:A:50:LEU:HA	0.42	1.73	20	1
1:A:68:LEU:N	1:A:68:LEU:CD1	0.41	2.83	1	1
1:A:26:PHE:O	1:A:26:PHE:CG	0.41	2.73	2	2
1:A:7:LYS:O	1:A:7:LYS:HD2	0.41	2.15	3	1
1:A:78:VAL:HG21	1:A:122:TYR:HE1	0.41	1.67	3	1
1:A:49:LYS:C	1:A:50:LEU:HD12	0.41	2.35	6	1
1:A:35:GLN:O	1:A:40:LEU:CB	0.41	2.68	10	2
1:A:78:VAL:HG21	1:A:122:TYR:CE2	0.41	2.50	10	1
1:A:79:ALA:HB1	1:A:85:GLU:HG2	0.41	1.92	10	1
1:A:34:TYR:HB2	1:A:97:GLN:OE1	0.41	2.15	19	1
1:A:50:LEU:HD22	1:A:54:VAL:HB	0.41	1.90	19	1
1:A:54:VAL:CG1	1:A:186:SER:HB3	0.41	2.44	20	1
1:A:178:TYR:HA	1:A:181:THR:OG1	0.41	2.15	1	1
1:A:20:PRO:C	1:A:22:VAL:N	0.41	2.73	2	6
1:A:147:LEU:HD11	1:A:152:ALA:CB	0.41	2.45	3	1
1:A:34:TYR:HB3	1:A:97:GLN:NE2	0.41	2.30	9	1
1:A:148:ARG:O	1:A:148:ARG:CG	0.41	2.68	14	1
1:A:41:HIS:O	1:A:45:ASN:HB2	0.41	2.15	4	2
1:A:126:TRP:CZ3	1:A:135:VAL:HG11	0.41	2.49	6	1
1:A:12:LEU:HD12	1:A:158:LYS:N	0.41	2.30	8	1
1:A:29:PHE:CG	1:A:64:MET:HG2	0.41	2.51	9	1
1:A:64:MET:SD	1:A:72:LEU:HD13	0.41	2.55	12	1
1:A:35:GLN:NE2	1:A:39:VAL:HG11	0.41	2.31	15	1
1:A:62:ASN:CB	1:A:70:LYS:HA	0.41	2.45	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:HIS:ND1	1:A:60:HIS:C	0.41	2.73	18	1
1:A:84:VAL:HG21	1:A:112:PHE:CZ	0.41	2.48	18	1
1:A:60:HIS:CD2	1:A:61:VAL:N	0.41	2.87	2	1
1:A:68:LEU:C	1:A:68:LEU:CD1	0.41	2.86	3	1
1:A:109:ARG:HG2	1:A:110:ASP:N	0.41	2.30	4	1
1:A:60:HIS:CB	1:A:76:TRP:HB2	0.41	2.45	5	1
1:A:29:PHE:HE1	1:A:72:LEU:HD13	0.41	1.63	6	1
1:A:124:ALA:O	1:A:128:SER:N	0.41	2.53	6	1
1:A:69:GLY:O	1:A:70:LYS:C	0.41	2.59	7	1
1:A:138:GLN:O	1:A:139:GLU:C	0.41	2.57	10	4
1:A:68:LEU:O	1:A:72:LEU:HB2	0.41	2.15	9	1
1:A:29:PHE:CD2	1:A:72:LEU:HD12	0.41	2.48	17	1
1:A:4:GLU:C	1:A:5:ASP:OD1	0.41	2.59	6	1
1:A:23:LEU:O	1:A:153:MET:SD	0.41	2.79	9	1
1:A:60:HIS:CE1	1:A:72:LEU:HD23	0.41	2.50	10	1
1:A:35:GLN:HA	1:A:39:VAL:CG2	0.41	2.44	11	1
1:A:104:SER:OG	1:A:107:ASP:N	0.41	2.54	13	1
1:A:82:LEU:HB2	1:A:84:VAL:CG1	0.41	2.45	15	1
1:A:63:PHE:CD1	1:A:64:MET:HG3	0.41	2.51	5	1
1:A:27:SER:HB3	1:A:61:VAL:CG2	0.41	2.45	7	1
1:A:136:ALA:O	1:A:140:LYS:HB2	0.41	2.15	7	1
1:A:81:ALA:C	1:A:82:LEU:HD23	0.41	2.35	8	1
1:A:154:PHE:CD2	1:A:160:GLN:CB	0.41	3.03	8	1
1:A:29:PHE:CE1	1:A:96:VAL:HG11	0.41	2.50	14	1
1:A:95:GLY:O	1:A:102:ILE:HG12	0.41	2.15	14	1
1:A:68:LEU:HG	1:A:105:ALA:N	0.41	2.31	18	1
1:A:97:GLN:O	1:A:98:LYS:CB	0.41	2.68	20	1
1:A:60:HIS:ND1	1:A:72:LEU:HD22	0.41	2.26	2	1
1:A:62:ASN:O	1:A:64:MET:HG2	0.41	2.15	2	1
1:A:88:VAL:HG12	1:A:115:ALA:CB	0.41	2.46	2	1
1:A:8:GLN:NE2	1:A:177:GLN:CB	0.41	2.84	3	1
1:A:66:GLY:O	1:A:70:LYS:HG2	0.41	2.16	4	1
1:A:37:GLU:O	1:A:41:HIS:HA	0.41	2.15	6	1
1:A:51:PRO:HD2	1:A:54:VAL:CG2	0.41	2.43	9	1
1:A:8:GLN:O	1:A:162:ASN:N	0.41	2.54	5	1
1:A:74:GLN:HA	1:A:74:GLN:OE1	0.41	2.16	5	1
1:A:28:PHE:O	1:A:96:VAL:CB	0.41	2.69	7	2
1:A:82:LEU:HD21	1:A:125:ALA:HB2	0.41	1.93	7	1
1:A:8:GLN:HB3	1:A:181:THR:CG2	0.41	2.45	8	1
1:A:22:VAL:O	1:A:22:VAL:HG12	0.41	2.16	8	1
1:A:20:PRO:O	1:A:21:GLN:HB2	0.41	2.15	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:LEU:HB3	1:A:104:SER:C	0.41	2.36	12	2
1:A:10:THR:HG23	1:A:160:GLN:CG	0.41	2.46	13	1
1:A:12:LEU:HA	1:A:160:GLN:OE1	0.41	2.16	17	1
1:A:79:ALA:C	1:A:81:ALA:N	0.41	2.74	18	2
1:A:74:GLN:NE2	1:A:126:TRP:HB2	0.41	2.31	18	1
1:A:29:PHE:CE2	1:A:96:VAL:HG13	0.41	2.51	20	1
1:A:77:ALA:O	1:A:78:VAL:C	0.41	2.58	3	1
1:A:156:ASN:OD1	1:A:158:LYS:HB2	0.41	2.15	8	1
1:A:44:ASP:O	1:A:48:LYS:HD3	0.41	2.16	11	1
1:A:34:TYR:CD1	1:A:38:GLU:HG3	0.41	2.51	13	1
1:A:12:LEU:HG	1:A:160:GLN:NE2	0.41	2.31	15	1
1:A:28:PHE:O	1:A:96:VAL:HG21	0.41	2.16	15	1
1:A:29:PHE:CZ	1:A:68:LEU:HD21	0.41	2.51	16	1
1:A:105:ALA:HA	1:A:108:ILE:CD1	0.41	2.44	17	1
1:A:125:ALA:O	1:A:131:VAL:CB	0.41	2.69	18	1
1:A:36:PHE:CZ	1:A:42:ILE:CG2	0.41	3.05	20	1
1:A:22:VAL:CG2	1:A:182:VAL:HG13	0.40	2.46	1	1
1:A:54:VAL:CG2	1:A:186:SER:CB	0.40	2.99	1	1
1:A:81:ALA:HB2	1:A:131:VAL:HG23	0.40	1.94	2	1
1:A:46:VAL:O	1:A:50:LEU:HG	0.40	2.16	4	1
1:A:156:ASN:ND2	1:A:158:LYS:HB2	0.40	2.31	5	1
1:A:153:MET:O	1:A:160:GLN:CB	0.40	2.69	9	1
1:A:31:PRO:O	1:A:35:GLN:NE2	0.40	2.54	12	1
1:A:3:TYR:CA	1:A:8:GLN:OE1	0.40	2.69	18	1
1:A:23:LEU:HD23	1:A:23:LEU:HA	0.40	1.74	1	1
1:A:43:SER:OG	1:A:44:ASP:N	0.40	2.55	2	1
1:A:4:GLU:O	1:A:5:ASP:HB2	0.40	2.17	5	1
1:A:117:ILE:HD12	1:A:117:ILE:H	0.40	1.71	5	1
1:A:68:LEU:HB2	1:A:104:SER:C	0.40	2.36	6	1
1:A:64:MET:HE1	1:A:69:GLY:CA	0.40	2.45	7	1
1:A:158:LYS:HB3	1:A:159:TYR:CE1	0.40	2.51	7	1
1:A:92:LEU:CG	1:A:111:VAL:HG11	0.40	2.45	14	2
1:A:24:GLU:HB2	1:A:57:THR:O	0.40	2.16	10	2
1:A:25:PHE:CD2	1:A:147:LEU:CD2	0.40	3.04	11	1
1:A:9:TYR:HB3	1:A:161:LEU:HD23	0.40	1.93	13	1
1:A:109:ARG:O	1:A:110:ASP:C	0.40	2.58	14	1
1:A:31:PRO:HG2	1:A:32:HIS:CD2	0.40	2.51	16	1
1:A:34:TYR:CB	1:A:97:GLN:HG2	0.40	2.47	16	1
1:A:37:GLU:O	1:A:38:GLU:OE2	0.40	2.39	17	1
1:A:63:PHE:O	1:A:64:MET:HG2	0.40	2.16	19	1
1:A:136:ALA:O	1:A:140:LYS:HG3	0.40	2.15	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:LEU:HD21	1:A:111:VAL:CG2	0.40	2.45	3	1
1:A:176:GLN:O	1:A:180:ASP:HB2	0.40	2.16	3	1
1:A:29:PHE:CZ	1:A:72:LEU:HD22	0.40	2.51	6	1
1:A:9:TYR:HB2	1:A:161:LEU:CD2	0.40	2.47	7	1
1:A:40:LEU:C	1:A:42:ILE:N	0.40	2.75	8	1
1:A:30:CYS:SG	1:A:64:MET:HE3	0.40	2.56	10	1
1:A:29:PHE:CZ	1:A:64:MET:HE3	0.40	2.51	11	1
1:A:50:LEU:HD23	1:A:186:SER:CB	0.40	2.47	12	1
1:A:34:TYR:CE2	1:A:38:GLU:CB	0.40	3.04	17	1
1:A:63:PHE:CE1	1:A:150:VAL:HG22	0.40	2.51	18	1
1:A:118:LYS:O	1:A:121:GLU:N	0.40	2.54	3	1
1:A:59:TYR:CE2	1:A:138:GLN:HG2	0.40	2.51	6	1
1:A:80:MET:HB3	1:A:134:LEU:HD22	0.40	1.93	8	1
1:A:68:LEU:HD21	1:A:103:ARG:C	0.40	2.37	18	1
1:A:49:LYS:CG	1:A:183:LYS:HE3	0.40	2.46	2	1
1:A:161:LEU:HD11	1:A:182:VAL:HG23	0.40	1.91	2	1
1:A:3:TYR:HB3	1:A:9:TYR:CD1	0.40	2.52	3	1
1:A:7:LYS:O	1:A:8:GLN:HB2	0.40	2.13	3	1
1:A:30:CYS:HB2	1:A:33:CYS:SG	0.40	2.57	4	1
1:A:118:LYS:CE	1:A:120:GLU:OE2	0.40	2.69	5	1
1:A:77:ALA:HA	1:A:134:LEU:HD21	0.40	1.92	6	1
1:A:153:MET:O	1:A:160:GLN:HB2	0.40	2.16	9	1
1:A:3:TYR:HB3	1:A:8:GLN:NE2	0.40	2.31	17	1
1:A:50:LEU:HD11	1:A:56:MET:CE	0.40	2.46	17	1
1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:C	0.40	2.37	19	1

6.3 Torsion angles (i)

6.3.1 Protein backbone (i)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	178/189 (94%)	141±2 (79±1%)	28±3 (16±2%)	9±2 (5±1%)	3	23
All	All	3560/3780 (94%)	2818 (79%)	555 (16%)	187 (5%)	3	23

All 28 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	147	LEU	19
1	A	118	LYS	18
1	A	5	ASP	15
1	A	22	VAL	15
1	A	98	LYS	14
1	A	99	THR	14
1	A	158	LYS	13
1	A	19	ALA	9
1	A	52	GLU	9
1	A	3	TYR	8
1	A	38	GLU	6
1	A	117	ILE	6
1	A	39	VAL	6
1	A	8	GLN	5
1	A	21	GLN	5
1	A	65	GLY	4
1	A	31	PRO	3
1	A	156	ASN	3
1	A	85	GLU	3
1	A	54	VAL	2
1	A	66	GLY	2
1	A	149	GLY	2
1	A	9	TYR	1
1	A	41	HIS	1
1	A	63	PHE	1
1	A	55	LYS	1
1	A	64	MET	1
1	A	67	ASP	1

6.3.2 Protein sidechains (i)

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	150/159 (94%)	108±4 (72±3%)	42±4 (28±3%)	2 19
All	All	3000/3180 (94%)	2159 (72%)	841 (28%)	2 19

All 105 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	68	LEU	20
1	A	86	ASP	20
1	A	103	ARG	20
1	A	184	TYR	20
1	A	89	THR	19
1	A	150	VAL	19
1	A	23	LEU	18
1	A	3	TYR	16
1	A	64	MET	16
1	A	107	ASP	16
1	A	137	GLN	16
1	A	58	LYS	15
1	A	80	MET	14
1	A	181	THR	14
1	A	187	GLU	14
1	A	55	LYS	13
1	A	98	LYS	13
1	A	99	THR	13
1	A	134	LEU	13
1	A	70	LYS	13
1	A	112	PHE	13
1	A	185	LEU	13
1	A	7	LYS	12
1	A	24	GLU	12
1	A	30	CYS	11
1	A	172	ASP	11
1	A	43	SER	11
1	A	48	LYS	10
1	A	100	GLN	10
1	A	140	LYS	10
1	A	183	LYS	10
1	A	177	GLN	10
1	A	12	LEU	9
1	A	67	ASP	9
1	A	97	GLN	9
1	A	109	ARG	9
1	A	148	ARG	9
1	A	176	GLN	9
1	A	49	LYS	9
1	A	85	GLU	9
1	A	127	ASN	9
1	A	133	SER	9
1	A	56	MET	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	146	GLN	9
1	A	8	GLN	8
1	A	156	ASN	8
1	A	47	LYS	8
1	A	153	MET	8
1	A	129	PHE	8
1	A	128	SER	8
1	A	27	SER	7
1	A	57	THR	7
1	A	118	LYS	7
1	A	122	TYR	7
1	A	138	GLN	7
1	A	37	GLU	7
1	A	28	PHE	7
1	A	132	LYS	7
1	A	94	GLU	6
1	A	13	GLU	6
1	A	26	PHE	6
1	A	63	PHE	6
1	A	106	SER	6
1	A	110	ASP	6
1	A	160	GLN	6
1	A	121	GLU	6
1	A	9	TYR	5
1	A	14	LYS	5
1	A	139	GLU	5
1	A	32	HIS	5
1	A	158	LYS	5
1	A	162	ASN	5
1	A	33	CYS	5
1	A	62	ASN	5
1	A	72	LEU	5
1	A	114	ASN	5
1	A	71	ASP	5
1	A	74	GLN	4
1	A	36	PHE	4
1	A	88	VAL	4
1	A	40	LEU	4
1	A	180	ASP	4
1	A	38	GLU	4
1	A	11	THR	4
1	A	186	SER	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	5	ASP	3
1	A	44	ASP	3
1	A	52	GLU	3
1	A	16	VAL	3
1	A	21	GLN	3
1	A	144	ASP	3
1	A	45	ASN	3
1	A	171	MET	3
1	A	123	ASP	2
1	A	174	PHE	2
1	A	120	GLU	2
1	A	41	HIS	1
1	A	4	GLU	1
1	A	54	VAL	1
1	A	126	TRP	1
1	A	104	SER	1
1	A	87	LYS	1
1	A	161	LEU	1
1	A	154	PHE	1
1	A	35	GLN	1

6.3.3 RNA (i)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates (i)

There are no 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 (i)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation (i)

No chemical shift data were provided