Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Feb 17, 2022 – 08:52 AM EST

PDB ID	:	1P1D
Title	:	Structural Insights into the Inter-domain Chaperoning of Tandem PDZ Domains in Glutamate Receptor Interacting Proteins
Authors	:	Feng, W.; Shi, Y.; Li, M.; Zhang, M.
Deposited on	:	2003-04-12

This is a Full wwPDB NMR Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.

We welcome your comments at *validation@mail.wwpdb.org*
A user guide is available at
https://www.wwpdb.org/validation/2017/NMRValidationReportHelp
with specific help available everywhere you see the (i) symbol.

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

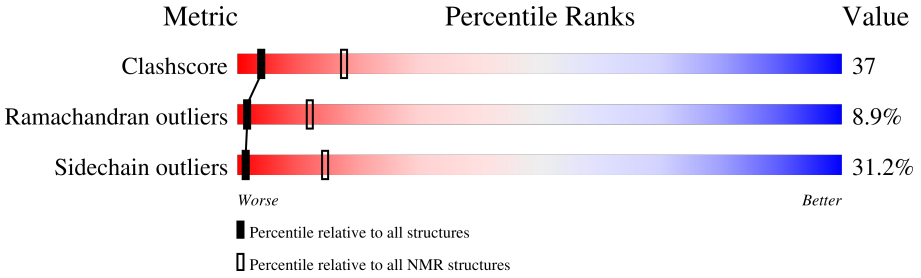
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
ShiftChecker	:	2.26
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
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	196	27% 59% 9% 5%

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 20 models. Model 12 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 11 as representative, based on the following criterion: *minimized average structure*.

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:20-A:145, A:152-A:211 (186)	0.73	12

Ill-defined regions of proteins are excluded from the global statistics.

Ligands and non-protein polymers are included in the analysis.

The models can be grouped into 4 clusters and 1 single-model cluster was found.

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

3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2989 atoms, of which 1506 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Glutamate receptor interacting protein.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	196	2989	925	1506	247	306	5	0

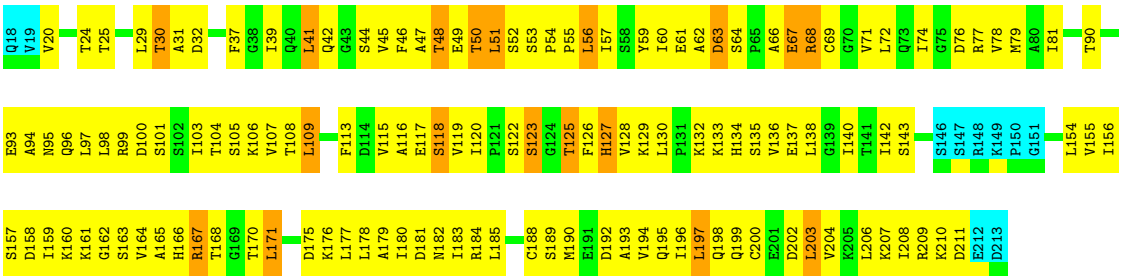
4 Residue-property plots (i)

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: Glutamate receptor interacting protein

Chain A: 27% 59% 9% 5%



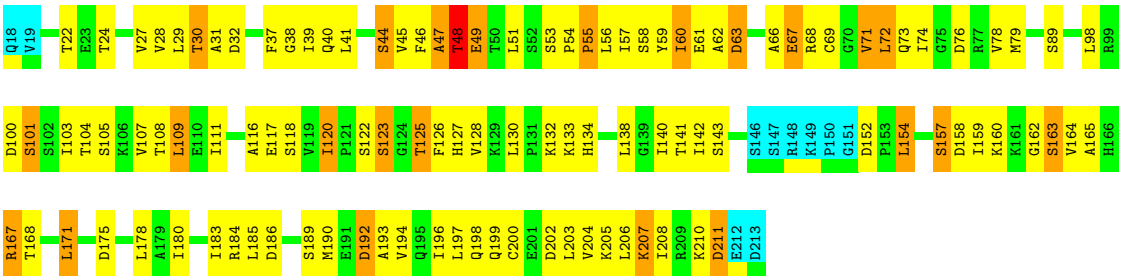
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: Glutamate receptor interacting protein

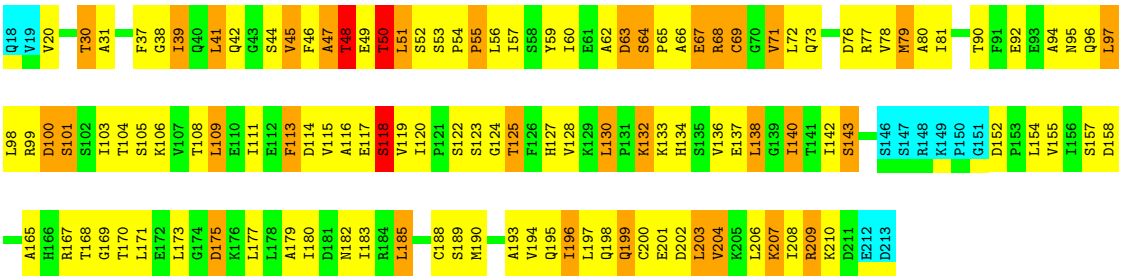
Chain A: 38% 44% 12% • 5%



4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Glutamate receptor interacting protein

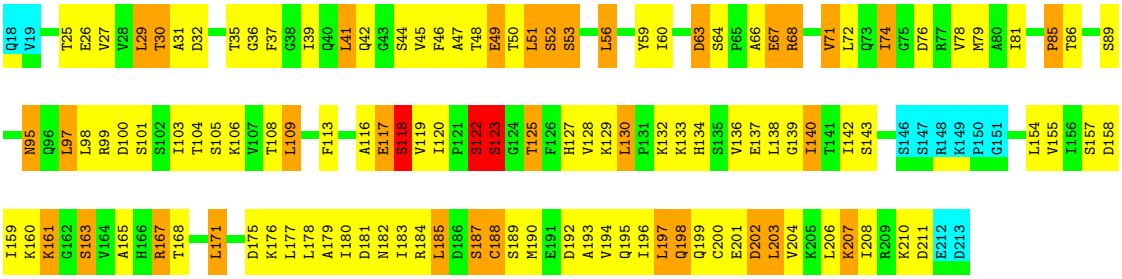
Chain A: 33% 43% 17% • 5%



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Glutamate receptor interacting protein

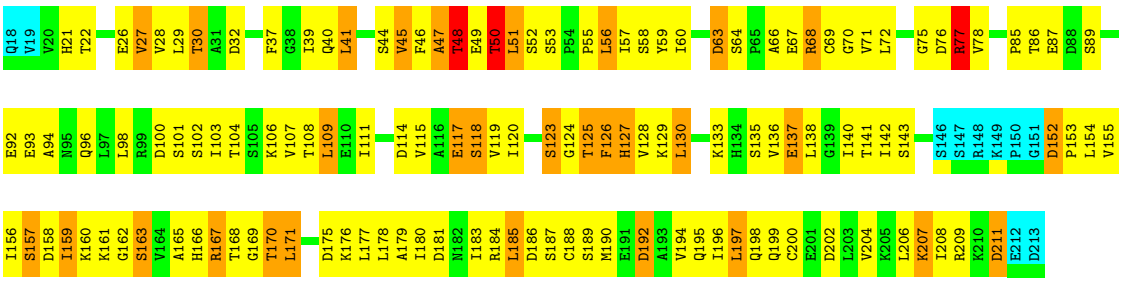
Chain A: 33% 43% 17% • 5%



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Glutamate receptor interacting protein

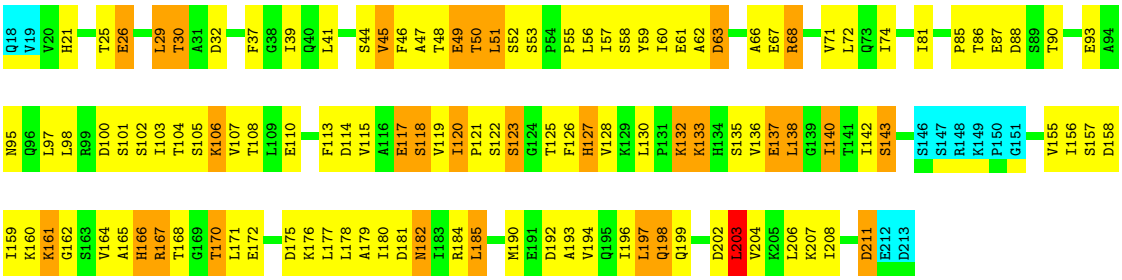
Chain A: 28% 51% 15% • 5%



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Glutamate receptor interacting protein

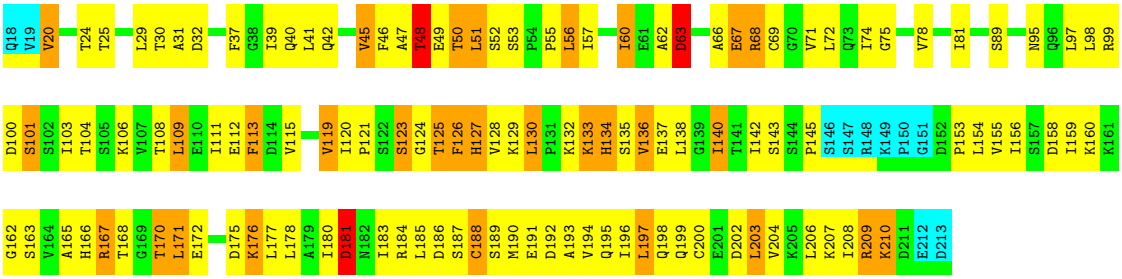
Chain A: 34% 45% 15% • 5%



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Glutamate receptor interacting protein

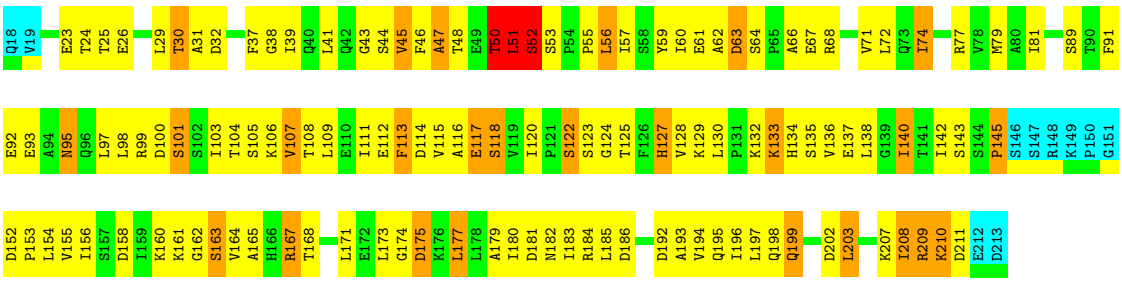
Chain A: 32% 46% 15% • 5%



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Glutamate receptor interacting protein

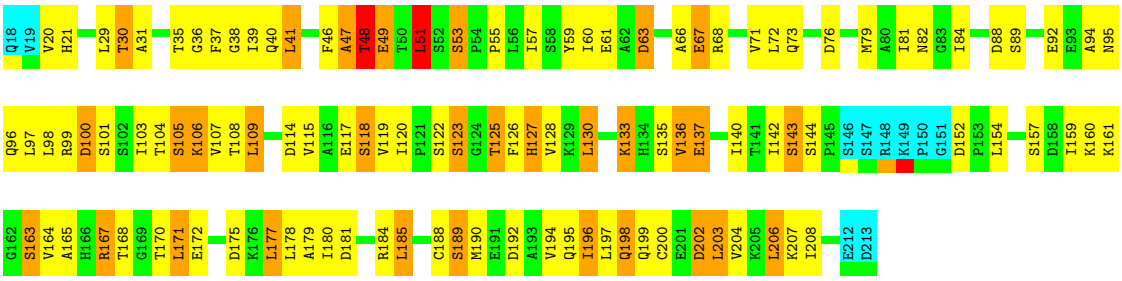
Chain A: 30% 50% 13% • 5%



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Glutamate receptor interacting protein

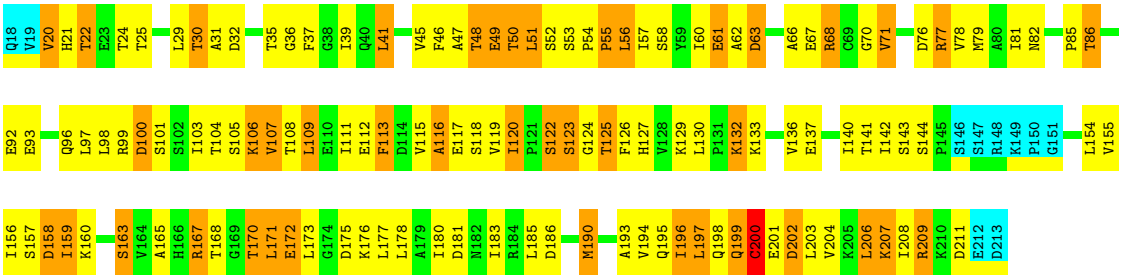
Chain A: 37% 41% 16% • 5%



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Glutamate receptor interacting protein

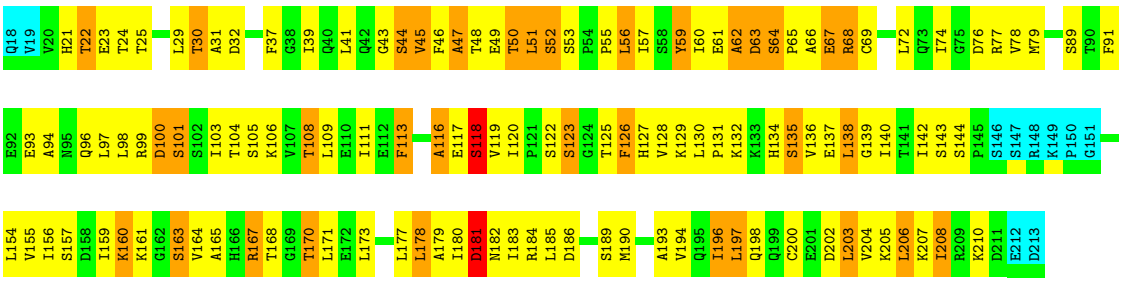
Chain A: 30% 43% 21% • 5%



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Glutamate receptor interacting protein

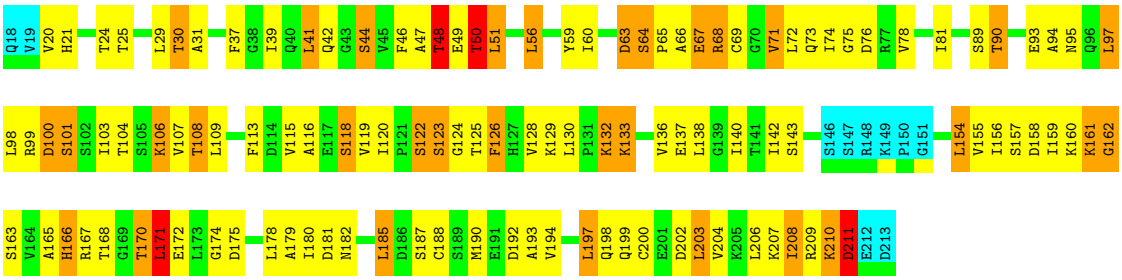
Chain A: 30% 46% 17% • 5%



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Glutamate receptor interacting protein

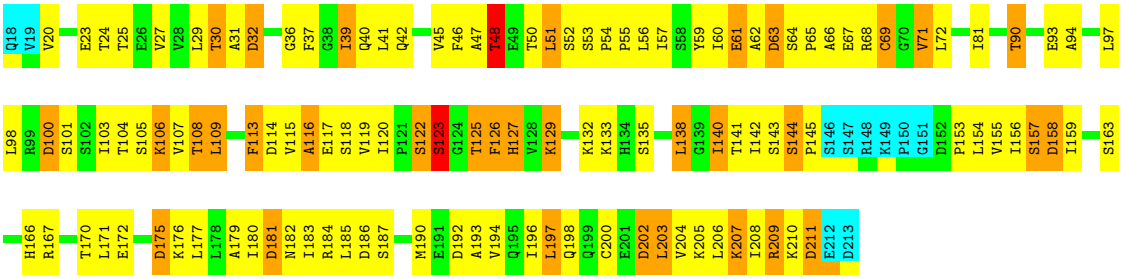
Chain A: 35% 42% 16% • 5%



4.2.12 Score per residue for model 12 (medoid)

- Molecule 1: Glutamate receptor interacting protein

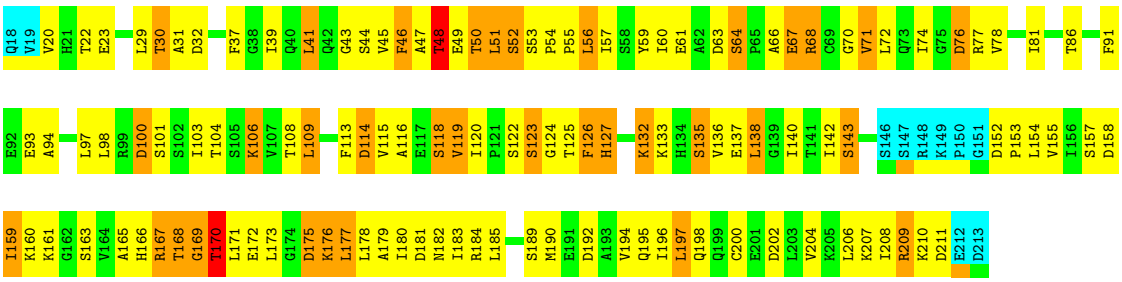
Chain A: 33% 44% 17% • 5%



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Glutamate receptor interacting protein

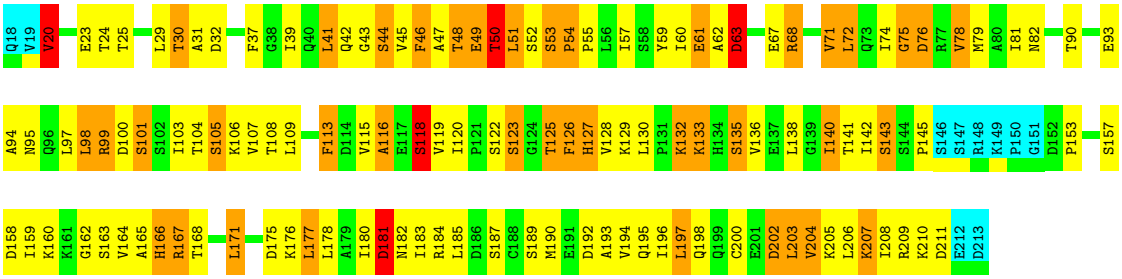
Chain A: 32% 44% 17% • 5%



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Glutamate receptor interacting protein

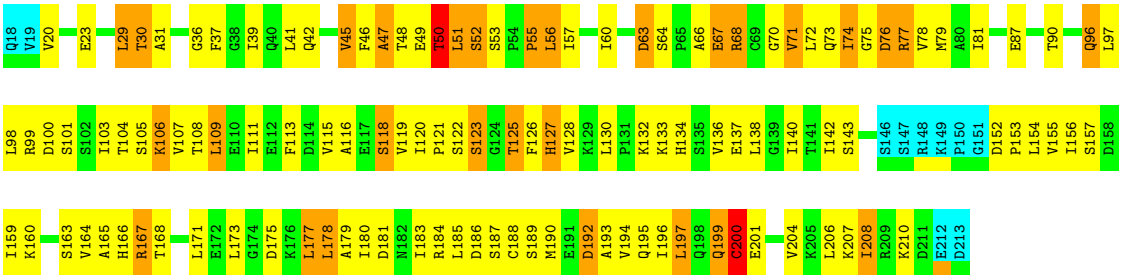
Chain A: 31% 41% 20% • 5%



4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Glutamate receptor interacting protein

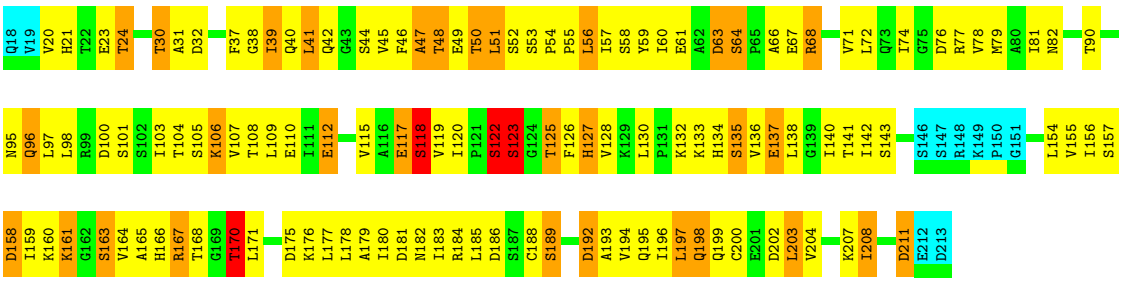
Chain A: 33% 46% 15% • 5%



4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Glutamate receptor interacting protein

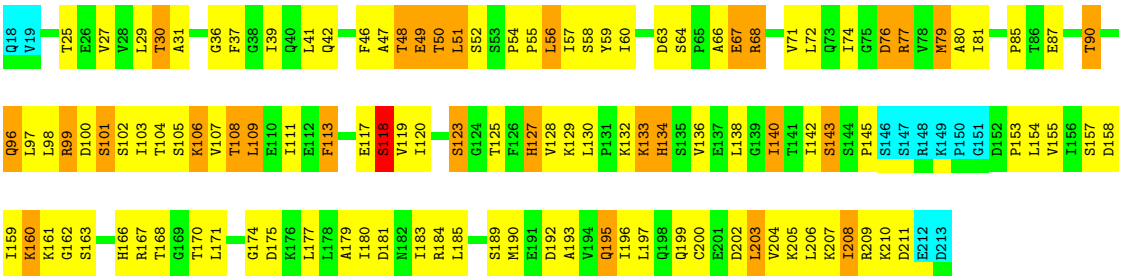
Chain A: 29% 48% 16% • 5%



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Glutamate receptor interacting protein

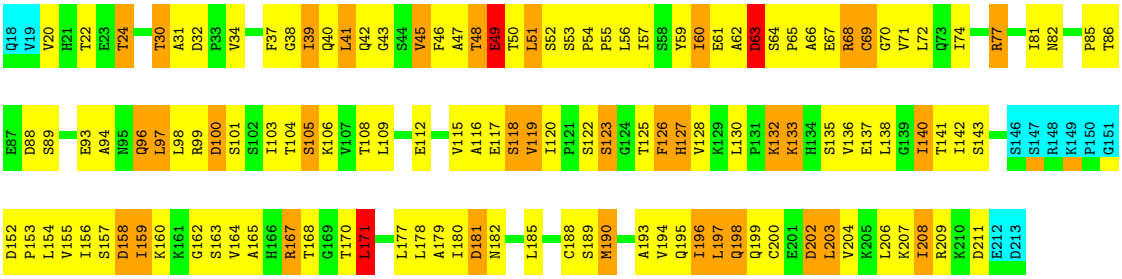
Chain A: 35% 45% 15% • 5%



4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Glutamate receptor interacting protein

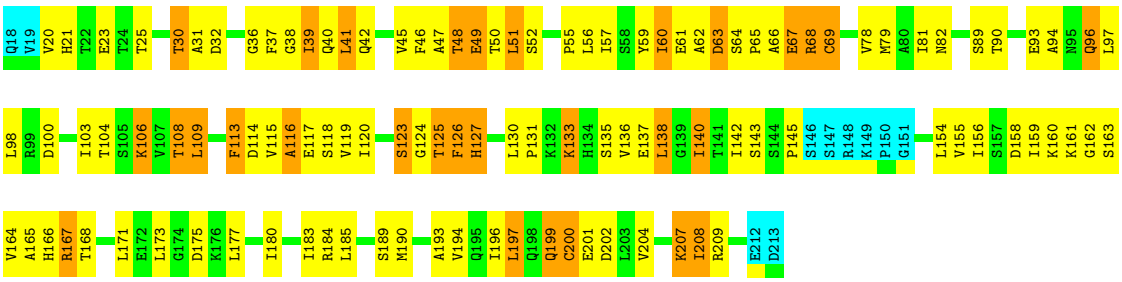
Chain A: 29% 47% 17% • 5%



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Glutamate receptor interacting protein

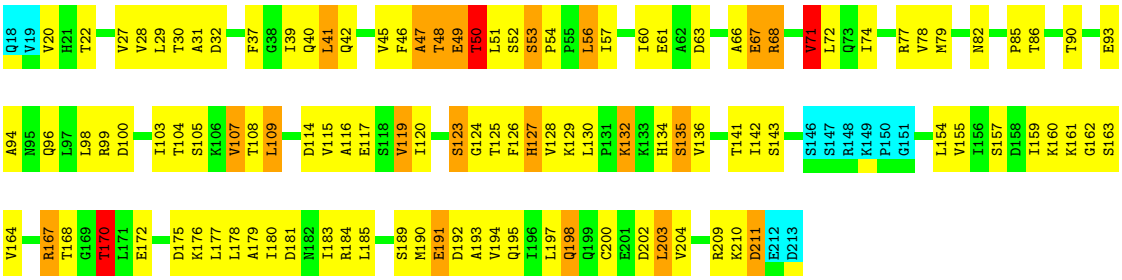
Chain A: 37% 42% 15% 5%



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Glutamate receptor interacting protein

Chain A: 37% 46% 10% • 5%



5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

The models were refined using the following method: *torsion angle dynamics*.

Of the 200 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
CNS	structure solution	1.1
CNS	refinement	1.1

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	1407	1433	1429	106±11
All	All	28140	28660	28580	2120

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 37.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:142:ILE:HD12	1:A:194:VAL:HG22	1.10	1.23	7	8
1:A:119:VAL:HG11	1:A:170:THR:HG21	1.04	1.13	13	5
1:A:39:ILE:HD11	1:A:72:LEU:HD13	1.03	1.28	8	3
1:A:29:LEU:HD21	1:A:66:ALA:HB2	1.01	1.26	5	2
1:A:41:LEU:HD13	1:A:98:LEU:HD13	1.00	1.25	19	6
1:A:39:ILE:CG2	1:A:60:ILE:HD13	0.99	1.88	3	8
1:A:142:ILE:HD11	1:A:197:LEU:HD22	0.98	1.34	5	8
1:A:41:LEU:HD21	1:A:98:LEU:HD13	0.97	1.35	10	3
1:A:185:LEU:HD11	1:A:193:ALA:HB2	0.96	1.37	19	8
1:A:142:ILE:HD13	1:A:194:VAL:HG22	0.93	1.41	15	11
1:A:138:LEU:HD23	1:A:140:ILE:HD11	0.93	1.39	17	1
1:A:39:ILE:HD13	1:A:72:LEU:HD13	0.92	1.40	15	4
1:A:29:LEU:HD11	1:A:72:LEU:HD11	0.92	1.39	12	2
1:A:39:ILE:HG21	1:A:60:ILE:HD13	0.91	1.38	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:VAL:HG22	1:A:56:LEU:HD21	0.90	1.43	20	1
1:A:29:LEU:HD21	1:A:72:LEU:HD11	0.90	1.43	15	5
1:A:156:ILE:HD13	1:A:171:LEU:HD23	0.89	1.44	6	1
1:A:180:ILE:HD12	1:A:193:ALA:HB1	0.89	1.43	19	2
1:A:177:LEU:HD22	1:A:180:ILE:HD11	0.87	1.43	18	3
1:A:120:ILE:HG23	1:A:127:HIS:HB2	0.87	1.43	9	2
1:A:39:ILE:HD11	1:A:66:ALA:HB2	0.86	1.47	9	4
1:A:165:ALA:O	1:A:168:THR:HG22	0.85	1.71	16	11
1:A:140:ILE:HG23	1:A:165:ALA:HB1	0.84	1.47	15	6
1:A:138:LEU:HD12	1:A:140:ILE:HD11	0.83	1.49	5	2
1:A:142:ILE:CG2	1:A:154:LEU:HD12	0.83	2.04	18	7
1:A:45:VAL:HG21	1:A:56:LEU:HD22	0.83	1.48	13	1
1:A:39:ILE:HG23	1:A:60:ILE:HD13	0.83	1.49	12	3
1:A:39:ILE:HG22	1:A:60:ILE:CD1	0.83	2.04	16	4
1:A:177:LEU:CD2	1:A:180:ILE:HD11	0.83	2.04	20	1
1:A:168:THR:HG21	1:A:171:LEU:HD12	0.83	1.50	11	1
1:A:200:CYS:CB	1:A:204:VAL:HG13	0.82	2.05	14	2
1:A:41:LEU:HD23	1:A:57:ILE:HD13	0.82	1.52	4	1
1:A:159:ILE:HD13	1:A:171:LEU:HD23	0.82	1.50	15	1
1:A:39:ILE:HG22	1:A:57:ILE:HG21	0.82	1.51	19	3
1:A:119:VAL:HG12	1:A:128:VAL:HG12	0.81	1.52	6	1
1:A:120:ILE:HD11	1:A:127:HIS:CG	0.81	2.10	5	11
1:A:41:LEU:HD23	1:A:57:ILE:CD1	0.81	2.05	4	1
1:A:180:ILE:CD1	1:A:193:ALA:HB1	0.81	2.04	19	5
1:A:81:ILE:HG23	1:A:109:LEU:CD2	0.81	2.06	13	7
1:A:133:LYS:O	1:A:136:VAL:HG23	0.81	1.75	8	1
1:A:31:ALA:HB2	1:A:37:PHE:CE1	0.80	2.11	1	15
1:A:66:ALA:HB1	1:A:72:LEU:CD1	0.80	2.06	11	3
1:A:78:VAL:CG1	1:A:109:LEU:HD13	0.80	2.06	3	2
1:A:39:ILE:HG21	1:A:72:LEU:HD13	0.80	1.53	16	1
1:A:45:VAL:HG22	1:A:56:LEU:HD13	0.80	1.53	7	5
1:A:81:ILE:HD13	1:A:97:LEU:HD11	0.80	1.54	2	3
1:A:45:VAL:HG22	1:A:56:LEU:HD22	0.79	1.54	12	1
1:A:81:ILE:HD13	1:A:97:LEU:CD1	0.79	2.08	2	2
1:A:119:VAL:HG11	1:A:170:THR:OG1	0.79	1.78	10	1
1:A:39:ILE:HD11	1:A:66:ALA:CB	0.79	2.07	9	4
1:A:142:ILE:HG23	1:A:154:LEU:HD11	0.79	1.55	1	1
1:A:120:ILE:HD13	1:A:120:ILE:O	0.79	1.78	1	2
1:A:39:ILE:HG22	1:A:60:ILE:HD13	0.79	1.55	16	4
1:A:81:ILE:HG23	1:A:109:LEU:CD1	0.79	2.07	19	2
1:A:30:THR:HG22	1:A:105:SER:O	0.78	1.79	17	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:ILE:CD1	1:A:72:LEU:HD13	0.78	2.09	17	3
1:A:130:LEU:HD21	1:A:168:THR:HG23	0.78	1.56	5	1
1:A:126:PHE:CE1	1:A:170:THR:HG21	0.78	2.14	11	2
1:A:41:LEU:HD21	1:A:55:PRO:HA	0.77	1.56	9	2
1:A:41:LEU:HD21	1:A:55:PRO:CB	0.77	2.09	5	2
1:A:171:LEU:HD11	1:A:206:LEU:HD12	0.77	1.55	13	1
1:A:41:LEU:HD11	1:A:98:LEU:CD1	0.77	2.09	15	2
1:A:192:ASP:O	1:A:195:GLN:NE2	0.77	2.17	17	1
1:A:177:LEU:HD21	1:A:180:ILE:HD11	0.77	1.56	20	1
1:A:39:ILE:HD11	1:A:66:ALA:HB1	0.77	1.54	13	1
1:A:130:LEU:HD11	1:A:168:THR:CG2	0.77	2.10	14	3
1:A:155:VAL:HG23	1:A:175:ASP:O	0.77	1.80	13	2
1:A:119:VAL:HG21	1:A:170:THR:HG21	0.77	1.56	5	2
1:A:145:PRO:O	1:A:155:VAL:HG21	0.76	1.80	12	1
1:A:192:ASP:O	1:A:196:ILE:HD12	0.76	1.80	16	9
1:A:130:LEU:HD11	1:A:168:THR:HG22	0.76	1.58	15	3
1:A:66:ALA:O	1:A:72:LEU:HD12	0.75	1.79	16	11
1:A:45:VAL:HG23	1:A:56:LEU:HD11	0.75	1.57	1	1
1:A:119:VAL:HG11	1:A:170:THR:CG2	0.75	2.05	13	5
1:A:41:LEU:HD13	1:A:98:LEU:HD22	0.75	1.59	3	2
1:A:179:ALA:HB3	1:A:207:LYS:CB	0.75	2.11	13	2
1:A:138:LEU:HD22	1:A:140:ILE:CD1	0.74	2.12	11	3
1:A:70:GLY:HA2	1:A:136:VAL:HG13	0.74	1.60	9	2
1:A:29:LEU:HD11	1:A:72:LEU:CD1	0.74	2.12	12	1
1:A:29:LEU:HD21	1:A:72:LEU:CD1	0.74	2.11	4	1
1:A:45:VAL:HG22	1:A:56:LEU:CD2	0.74	2.12	20	2
1:A:156:ILE:HD13	1:A:171:LEU:CD2	0.74	2.12	6	1
1:A:41:LEU:CD1	1:A:98:LEU:HD13	0.73	2.11	19	5
1:A:130:LEU:HD21	1:A:168:THR:CG2	0.73	2.13	5	3
1:A:97:LEU:HD12	1:A:98:LEU:N	0.73	1.98	17	3
1:A:45:VAL:HG22	1:A:56:LEU:CD1	0.73	2.13	7	7
1:A:119:VAL:HG12	1:A:126:PHE:CE1	0.73	2.18	4	2
1:A:81:ILE:HD12	1:A:97:LEU:HD12	0.73	1.58	7	6
1:A:179:ALA:O	1:A:180:ILE:HD13	0.73	1.83	10	7
1:A:20:VAL:HG13	1:A:115:VAL:O	0.72	1.84	13	2
1:A:200:CYS:SG	1:A:204:VAL:HG22	0.72	2.24	8	2
1:A:41:LEU:HD22	1:A:98:LEU:HD11	0.72	1.60	5	1
1:A:41:LEU:HD21	1:A:98:LEU:CD1	0.72	2.13	6	3
1:A:78:VAL:HG12	1:A:109:LEU:HD13	0.72	1.60	3	2
1:A:39:ILE:HD13	1:A:57:ILE:CD1	0.72	2.14	17	3
1:A:200:CYS:HB2	1:A:204:VAL:HG13	0.72	1.62	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:ALA:O	1:A:98:LEU:HD12	0.72	1.85	13	6
1:A:46:PHE:O	1:A:48:THR:HG22	0.72	1.85	11	6
1:A:142:ILE:CD1	1:A:194:VAL:HG22	0.72	2.14	1	16
1:A:45:VAL:CG2	1:A:56:LEU:HD11	0.72	2.15	1	1
1:A:203:LEU:O	1:A:203:LEU:HD23	0.71	1.85	18	14
1:A:138:LEU:HD22	1:A:140:ILE:HD11	0.71	1.62	6	2
1:A:200:CYS:CB	1:A:204:VAL:HG22	0.71	2.15	9	8
1:A:20:VAL:HG21	1:A:115:VAL:O	0.71	1.85	6	4
1:A:50:THR:O	1:A:51:LEU:HD23	0.71	1.85	9	3
1:A:177:LEU:HD13	1:A:180:ILE:HD11	0.71	1.60	13	1
1:A:180:ILE:CD1	1:A:185:LEU:HD21	0.71	2.16	9	4
1:A:128:VAL:HG11	1:A:168:THR:HG21	0.71	1.62	4	6
1:A:200:CYS:HB3	1:A:204:VAL:HG22	0.71	1.62	17	6
1:A:39:ILE:HD11	1:A:72:LEU:CD1	0.71	2.15	7	2
1:A:29:LEU:HD21	1:A:72:LEU:HD21	0.71	1.61	14	2
1:A:180:ILE:HG21	1:A:197:LEU:HD12	0.71	1.59	19	1
1:A:41:LEU:CD1	1:A:98:LEU:HD22	0.71	2.16	3	3
1:A:194:VAL:HG12	1:A:198:GLN:NE2	0.71	2.01	11	10
1:A:128:VAL:CG1	1:A:168:THR:HG21	0.71	2.16	4	7
1:A:185:LEU:HG	1:A:193:ALA:HB2	0.71	1.61	14	4
1:A:51:LEU:HD13	1:A:90:THR:HG23	0.71	1.63	17	3
1:A:119:VAL:CG1	1:A:128:VAL:HG13	0.70	2.16	18	5
1:A:138:LEU:HD12	1:A:140:ILE:CD1	0.70	2.16	5	4
1:A:180:ILE:HG22	1:A:181:ASP:OD2	0.70	1.86	14	3
1:A:45:VAL:CG2	1:A:56:LEU:HD21	0.70	2.16	20	1
1:A:179:ALA:HB2	1:A:184:ARG:HG2	0.70	1.63	15	7
1:A:117:GLU:HB3	1:A:168:THR:HG22	0.70	1.63	20	2
1:A:129:LYS:CD	1:A:203:LEU:HD11	0.70	2.16	12	1
1:A:132:LYS:NZ	1:A:138:LEU:HD21	0.70	2.01	12	2
1:A:76:ASP:CG	1:A:111:ILE:HD12	0.69	2.07	17	1
1:A:132:LYS:HZ1	1:A:138:LEU:HD21	0.69	1.46	12	2
1:A:154:LEU:HD11	1:A:190:MET:HA	0.69	1.64	15	10
1:A:130:LEU:HD23	1:A:164:VAL:HG23	0.69	1.64	14	3
1:A:142:ILE:HD11	1:A:197:LEU:CD2	0.69	2.17	5	1
1:A:29:LEU:HD21	1:A:66:ALA:CB	0.69	2.12	5	2
1:A:158:ASP:O	1:A:159:ILE:HD13	0.69	1.88	12	1
1:A:60:ILE:HG21	1:A:67:GLU:HB2	0.69	1.65	17	10
1:A:130:LEU:HD22	1:A:168:THR:HG21	0.69	1.65	8	2
1:A:130:LEU:HD22	1:A:164:VAL:HB	0.69	1.64	19	1
1:A:39:ILE:HG23	1:A:60:ILE:CD1	0.69	2.18	19	5
1:A:171:LEU:CD1	1:A:206:LEU:HD12	0.69	2.18	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:ASP:OD1	1:A:34:VAL:HG23	0.69	1.88	18	1
1:A:39:ILE:HD12	1:A:57:ILE:CD1	0.68	2.17	15	1
1:A:130:LEU:HD21	1:A:168:THR:HG22	0.68	1.63	7	1
1:A:129:LYS:HD2	1:A:203:LEU:HD11	0.68	1.64	12	1
1:A:119:VAL:HG13	1:A:128:VAL:HG13	0.68	1.66	18	2
1:A:101:SER:HB2	1:A:107:VAL:HG21	0.68	1.64	12	3
1:A:200:CYS:SG	1:A:204:VAL:HG23	0.68	2.28	3	2
1:A:39:ILE:CG2	1:A:57:ILE:HG21	0.68	2.18	19	3
1:A:180:ILE:HD11	1:A:193:ALA:HB1	0.68	1.63	14	4
1:A:156:ILE:HD12	1:A:174:GLY:HA3	0.68	1.66	7	1
1:A:180:ILE:HG22	1:A:181:ASP:OD1	0.68	1.88	8	2
1:A:140:ILE:HD11	1:A:165:ALA:HB3	0.68	1.64	16	2
1:A:177:LEU:HD11	1:A:206:LEU:CD2	0.68	2.18	8	2
1:A:119:VAL:HG12	1:A:128:VAL:HA	0.68	1.66	2	7
1:A:41:LEU:HD13	1:A:55:PRO:HB3	0.68	1.65	4	4
1:A:41:LEU:HD13	1:A:98:LEU:CD1	0.68	2.19	3	6
1:A:154:LEU:HD21	1:A:190:MET:HA	0.68	1.65	6	5
1:A:171:LEU:HD11	1:A:206:LEU:CD1	0.67	2.19	13	1
1:A:140:ILE:HG23	1:A:171:LEU:HD21	0.67	1.65	3	2
1:A:45:VAL:HG23	1:A:56:LEU:HD13	0.67	1.65	2	2
1:A:179:ALA:HB3	1:A:207:LYS:HB3	0.67	1.66	13	4
1:A:81:ILE:HG22	1:A:82:ASN:OD1	0.67	1.88	14	1
1:A:140:ILE:HD11	1:A:165:ALA:HB2	0.67	1.66	8	2
1:A:142:ILE:HD11	1:A:197:LEU:HG	0.67	1.65	14	1
1:A:120:ILE:HD12	1:A:120:ILE:O	0.67	1.90	17	12
1:A:179:ALA:HB3	1:A:207:LYS:HD3	0.67	1.66	2	7
1:A:66:ALA:HB1	1:A:72:LEU:HD12	0.67	1.64	11	3
1:A:154:LEU:HD22	1:A:190:MET:HA	0.67	1.65	11	1
1:A:183:ILE:HB	1:A:196:ILE:HG21	0.67	1.67	4	5
1:A:159:ILE:HD13	1:A:171:LEU:CD2	0.67	2.20	15	1
1:A:142:ILE:HG23	1:A:154:LEU:CD1	0.67	2.20	1	1
1:A:29:LEU:CD1	1:A:72:LEU:HD11	0.67	2.19	12	1
1:A:140:ILE:CD1	1:A:165:ALA:HB2	0.66	2.20	7	1
1:A:72:LEU:HD22	1:A:76:ASP:OD2	0.66	1.91	13	1
1:A:29:LEU:CD2	1:A:72:LEU:HD11	0.66	2.21	15	3
1:A:138:LEU:HD12	1:A:140:ILE:HG13	0.66	1.68	12	1
1:A:41:LEU:HD13	1:A:98:LEU:CD2	0.66	2.20	16	2
1:A:140:ILE:HD11	1:A:165:ALA:CB	0.66	2.21	10	4
1:A:41:LEU:HD22	1:A:98:LEU:HD12	0.66	1.66	1	2
1:A:138:LEU:CD1	1:A:140:ILE:HD11	0.66	2.21	2	3
1:A:196:ILE:N	1:A:196:ILE:HD13	0.66	2.06	8	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:41:LEU:HD11	1:A:98:LEU:HD13	0.66	1.68	8	5
1:A:42:GLN:O	1:A:56:LEU:HD12	0.65	1.91	20	1
1:A:196:ILE:HG23	1:A:199:GLN:OE1	0.65	1.91	15	1
1:A:178:LEU:HD23	1:A:178:LEU:O	0.65	1.91	5	2
1:A:20:VAL:HG21	1:A:115:VAL:HG13	0.65	1.67	9	1
1:A:101:SER:HB3	1:A:107:VAL:HG21	0.65	1.67	11	3
1:A:41:LEU:HD21	1:A:98:LEU:HD21	0.65	1.67	4	1
1:A:27:VAL:HG13	1:A:71:VAL:HG23	0.65	1.67	3	1
1:A:109:LEU:HD22	1:A:109:LEU:N	0.65	2.07	12	2
1:A:178:LEU:HD22	1:A:178:LEU:O	0.65	1.91	10	1
1:A:130:LEU:HD21	1:A:168:THR:HB	0.64	1.70	19	2
1:A:142:ILE:HG21	1:A:154:LEU:HD12	0.64	1.69	18	3
1:A:138:LEU:HD12	1:A:140:ILE:CG1	0.64	2.22	12	4
1:A:54:PRO:O	1:A:56:LEU:HD23	0.64	1.92	9	2
1:A:125:THR:HG22	1:A:207:LYS:HD3	0.64	1.69	14	3
1:A:42:GLN:HB3	1:A:56:LEU:HD12	0.64	1.68	3	1
1:A:43:GLY:O	1:A:45:VAL:HG23	0.64	1.93	18	1
1:A:190:MET:O	1:A:194:VAL:HG23	0.64	1.93	8	4
1:A:128:VAL:O	1:A:130:LEU:HD12	0.64	1.93	17	1
1:A:132:LYS:CG	1:A:204:VAL:HG23	0.64	2.24	9	1
1:A:70:GLY:HA3	1:A:136:VAL:HG11	0.64	1.70	15	1
1:A:120:ILE:HD11	1:A:127:HIS:CD2	0.63	2.27	2	2
1:A:24:THR:HG23	1:A:112:GLU:HG3	0.63	1.69	16	3
1:A:41:LEU:HD12	1:A:98:LEU:HD22	0.63	1.69	20	1
1:A:155:VAL:HG12	1:A:175:ASP:O	0.63	1.93	3	7
1:A:159:ILE:HG21	1:A:166:HIS:CG	0.63	2.28	11	1
1:A:159:ILE:HG12	1:A:171:LEU:HD12	0.63	1.70	18	1
1:A:60:ILE:HG21	1:A:67:GLU:CB	0.63	2.23	9	8
1:A:140:ILE:HG23	1:A:165:ALA:CB	0.63	2.24	19	1
1:A:171:LEU:HD21	1:A:206:LEU:CD2	0.63	2.24	9	2
1:A:142:ILE:CD1	1:A:197:LEU:HD13	0.63	2.22	11	1
1:A:128:VAL:O	1:A:130:LEU:HD23	0.63	1.94	8	1
1:A:119:VAL:HG22	1:A:126:PHE:CE1	0.63	2.29	12	1
1:A:130:LEU:HD22	1:A:164:VAL:HG12	0.63	1.70	7	1
1:A:20:VAL:HG12	1:A:116:ALA:HB2	0.62	1.70	11	2
1:A:41:LEU:HD22	1:A:98:LEU:CD1	0.62	2.23	3	3
1:A:138:LEU:HD13	1:A:140:ILE:HD12	0.62	1.69	1	1
1:A:39:ILE:HD13	1:A:72:LEU:CD1	0.62	2.24	11	4
1:A:132:LYS:HG3	1:A:204:VAL:HG23	0.62	1.70	13	4
1:A:31:ALA:HB2	1:A:37:PHE:CE2	0.62	2.30	13	2
1:A:159:ILE:HG22	1:A:166:HIS:HB2	0.62	1.70	14	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:ILE:HG12	1:A:109:LEU:HD23	0.62	1.69	9	1
1:A:125:THR:HG22	1:A:207:LYS:CD	0.62	2.24	12	1
1:A:77:ARG:O	1:A:111:ILE:HG22	0.62	1.94	17	5
1:A:100:ASP:O	1:A:103:ILE:HD11	0.62	1.95	2	8
1:A:81:ILE:HG21	1:A:97:LEU:CD1	0.62	2.24	18	1
1:A:180:ILE:HD13	1:A:197:LEU:CD1	0.62	2.24	19	1
1:A:72:LEU:HD23	1:A:76:ASP:OD2	0.62	1.95	3	4
1:A:78:VAL:HA	1:A:111:ILE:HG22	0.62	1.71	10	3
1:A:142:ILE:HD11	1:A:197:LEU:HD21	0.62	1.71	1	1
1:A:64:SER:O	1:A:68:ARG:NE	0.62	2.32	11	3
1:A:128:VAL:HG21	1:A:206:LEU:HD12	0.62	1.71	15	3
1:A:60:ILE:CG2	1:A:67:GLU:HB2	0.62	2.24	4	3
1:A:133:LYS:HD2	1:A:136:VAL:HG23	0.62	1.71	17	1
1:A:194:VAL:HA	1:A:197:LEU:HD22	0.61	1.72	6	1
1:A:42:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD13	0.61	1.70	20	1
1:A:185:LEU:HD13	1:A:193:ALA:CB	0.61	2.25	2	1
1:A:56:LEU:HD12	1:A:56:LEU:N	0.61	2.10	20	1
1:A:46:PHE:CD1	1:A:47:ALA:N	0.61	2.69	8	4
1:A:156:ILE:HD12	1:A:174:GLY:CA	0.61	2.24	7	1
1:A:130:LEU:HD11	1:A:168:THR:HG21	0.61	1.72	14	1
1:A:159:ILE:HG21	1:A:166:HIS:HB2	0.61	1.70	16	1
1:A:138:LEU:HD22	1:A:140:ILE:HD12	0.61	1.70	11	1
1:A:119:VAL:HG13	1:A:126:PHE:CE1	0.61	2.31	15	2
1:A:41:LEU:HD21	1:A:55:PRO:HB3	0.61	1.72	5	1
1:A:120:ILE:HD11	1:A:127:HIS:CB	0.61	2.25	5	1
1:A:39:ILE:HB	1:A:57:ILE:HD13	0.61	1.73	12	5
1:A:159:ILE:HD13	1:A:171:LEU:O	0.61	1.95	9	2
1:A:51:LEU:HD12	1:A:51:LEU:O	0.61	1.96	2	1
1:A:53:SER:HB3	1:A:56:LEU:HD11	0.61	1.73	2	1
1:A:39:ILE:HG22	1:A:60:ILE:HG23	0.61	1.73	11	3
1:A:109:LEU:HD12	1:A:109:LEU:N	0.60	2.11	10	1
1:A:141:THR:HG22	1:A:157:SER:HB2	0.60	1.72	20	3
1:A:29:LEU:HD13	1:A:39:ILE:HD13	0.60	1.74	1	1
1:A:142:ILE:HG22	1:A:154:LEU:HD12	0.60	1.74	18	6
1:A:185:LEU:HD23	1:A:185:LEU:N	0.60	2.11	2	2
1:A:153:PRO:O	1:A:154:LEU:HD22	0.60	1.96	4	4
1:A:51:LEU:O	1:A:52:SER:CB	0.60	2.49	3	2
1:A:193:ALA:HA	1:A:196:ILE:HD12	0.60	1.72	3	4
1:A:41:LEU:HD21	1:A:55:PRO:CA	0.60	2.24	9	1
1:A:130:LEU:HD13	1:A:164:VAL:HG23	0.60	1.70	16	1
1:A:138:LEU:HD12	1:A:140:ILE:HG12	0.60	1.72	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:SER:CB	1:A:56:LEU:HD11	0.60	2.26	2	1
1:A:50:THR:C	1:A:51:LEU:HG	0.60	2.17	7	1
1:A:177:LEU:HD11	1:A:206:LEU:HG	0.60	1.72	8	1
1:A:45:VAL:CG2	1:A:56:LEU:HD22	0.60	2.26	13	7
1:A:178:LEU:HD22	1:A:207:LYS:NZ	0.60	2.12	11	3
1:A:81:ILE:HB	1:A:97:LEU:HD13	0.60	1.72	8	2
1:A:125:THR:HG22	1:A:207:LYS:HG2	0.59	1.74	2	2
1:A:177:LEU:HD23	1:A:180:ILE:HD11	0.59	1.74	2	1
1:A:27:VAL:HG13	1:A:71:VAL:CG2	0.59	2.26	3	1
1:A:178:LEU:O	1:A:185:LEU:HD12	0.59	1.97	11	1
1:A:130:LEU:HD23	1:A:164:VAL:HB	0.59	1.73	5	1
1:A:60:ILE:HG21	1:A:67:GLU:CD	0.59	2.17	4	2
1:A:78:VAL:HG23	1:A:109:LEU:HB2	0.59	1.74	4	1
1:A:48:THR:O	1:A:50:THR:HG22	0.59	1.97	2	1
1:A:39:ILE:HD12	1:A:57:ILE:HD13	0.59	1.74	15	1
1:A:96:GLN:HA	1:A:99:ARG:HD3	0.59	1.72	17	1
1:A:185:LEU:CG	1:A:193:ALA:HB2	0.59	2.27	18	4
1:A:60:ILE:HG23	1:A:61:GLU:N	0.59	2.12	18	2
1:A:71:VAL:HG22	1:A:162:GLY:O	0.59	1.96	5	1
1:A:70:GLY:CA	1:A:136:VAL:HG13	0.59	2.28	9	1
1:A:45:VAL:HG13	1:A:56:LEU:HD21	0.59	1.75	20	1
1:A:120:ILE:HD11	1:A:127:HIS:HB2	0.59	1.75	5	5
1:A:130:LEU:HD11	1:A:168:THR:HB	0.59	1.74	1	1
1:A:45:VAL:HG22	1:A:56:LEU:CG	0.59	2.28	20	1
1:A:142:ILE:HD11	1:A:197:LEU:HD13	0.58	1.74	11	3
1:A:81:ILE:CD1	1:A:97:LEU:HD21	0.58	2.28	18	1
1:A:27:VAL:HG12	1:A:109:LEU:O	0.58	1.98	17	1
1:A:81:ILE:HG23	1:A:109:LEU:HD12	0.58	1.76	19	1
1:A:22:THR:HG22	1:A:114:ASP:OD1	0.58	1.97	4	1
1:A:119:VAL:CG1	1:A:170:THR:HG21	0.58	2.26	4	3
1:A:71:VAL:HG13	1:A:162:GLY:O	0.58	1.98	5	1
1:A:185:LEU:HD21	1:A:196:ILE:HD13	0.58	1.75	15	1
1:A:128:VAL:HG12	1:A:130:LEU:HD13	0.58	1.75	1	1
1:A:130:LEU:HD21	1:A:164:VAL:O	0.58	1.99	1	1
1:A:78:VAL:HG13	1:A:109:LEU:HB3	0.58	1.73	14	3
1:A:165:ALA:HB1	1:A:171:LEU:HD22	0.58	1.76	3	2
1:A:108:THR:C	1:A:109:LEU:HD13	0.58	2.19	19	2
1:A:41:LEU:HD22	1:A:55:PRO:HB2	0.58	1.75	14	2
1:A:165:ALA:O	1:A:171:LEU:HD13	0.58	1.98	16	1
1:A:39:ILE:HG23	1:A:60:ILE:HG13	0.58	1.75	19	2
1:A:39:ILE:HG23	1:A:60:ILE:CG1	0.58	2.28	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:119:VAL:HG12	1:A:128:VAL:HG13	0.58	1.74	17	3
1:A:42:GLN:CG	1:A:56:LEU:HD13	0.58	2.29	20	2
1:A:120:ILE:CG1	1:A:127:HIS:HB2	0.58	2.28	7	12
1:A:121:PRO:HA	1:A:126:PHE:HB2	0.58	1.75	5	1
1:A:154:LEU:HD11	1:A:190:MET:CB	0.58	2.29	13	4
1:A:30:THR:HG23	1:A:106:LYS:CG	0.58	2.29	11	3
1:A:39:ILE:CG2	1:A:60:ILE:CD1	0.58	2.81	14	10
1:A:67:GLU:CG	1:A:68:ARG:NH1	0.57	2.67	14	13
1:A:56:LEU:N	1:A:56:LEU:HD12	0.57	2.14	11	2
1:A:41:LEU:HD12	1:A:55:PRO:CB	0.57	2.29	15	1
1:A:126:PHE:CZ	1:A:170:THR:HG21	0.57	2.34	16	2
1:A:164:VAL:O	1:A:168:THR:HG23	0.57	1.99	8	4
1:A:55:PRO:CD	1:A:94:ALA:HB3	0.57	2.28	14	1
1:A:62:ALA:O	1:A:63:ASP:CB	0.57	2.52	7	10
1:A:204:VAL:HG13	1:A:204:VAL:O	0.57	1.99	15	3
1:A:107:VAL:CG1	1:A:109:LEU:HD11	0.57	2.29	12	1
1:A:81:ILE:HG23	1:A:109:LEU:HD21	0.57	1.75	13	1
1:A:30:THR:HG23	1:A:106:LYS:HG2	0.57	1.75	11	7
1:A:171:LEU:CD1	1:A:206:LEU:HD22	0.57	2.29	10	1
1:A:185:LEU:HD13	1:A:193:ALA:HB2	0.57	1.75	2	1
1:A:39:ILE:HD13	1:A:57:ILE:HD11	0.57	1.75	17	3
1:A:177:LEU:HD11	1:A:206:LEU:CG	0.57	2.30	8	1
1:A:140:ILE:HG22	1:A:159:ILE:HG23	0.57	1.77	9	1
1:A:81:ILE:HG12	1:A:109:LEU:HD12	0.57	1.76	19	2
1:A:81:ILE:HG12	1:A:109:LEU:HD22	0.57	1.76	15	1
1:A:181:ASP:OD2	1:A:204:VAL:HG12	0.57	1.99	18	1
1:A:120:ILE:HG13	1:A:127:HIS:HB2	0.57	1.75	2	4
1:A:138:LEU:HD13	1:A:140:ILE:HD11	0.57	1.76	3	2
1:A:27:VAL:CG1	1:A:71:VAL:HG23	0.57	2.29	4	1
1:A:133:LYS:HD3	1:A:134:HIS:N	0.57	2.15	17	1
1:A:39:ILE:CG2	1:A:57:ILE:HD13	0.57	2.29	19	7
1:A:41:LEU:HD21	1:A:98:LEU:HD22	0.57	1.77	12	1
1:A:39:ILE:CG2	1:A:60:ILE:HD12	0.57	2.29	19	2
1:A:41:LEU:HD13	1:A:98:LEU:HD11	0.56	1.75	1	1
1:A:39:ILE:CB	1:A:57:ILE:HD13	0.56	2.29	19	5
1:A:140:ILE:HG23	1:A:171:LEU:CD2	0.56	2.30	3	1
1:A:39:ILE:HG23	1:A:57:ILE:HD13	0.56	1.77	1	6
1:A:46:PHE:CZ	1:A:51:LEU:HA	0.56	2.35	6	18
1:A:171:LEU:HD21	1:A:206:LEU:HD22	0.56	1.75	9	2
1:A:39:ILE:HD13	1:A:57:ILE:HD13	0.56	1.76	8	3
1:A:31:ALA:HB3	1:A:105:SER:HA	0.56	1.77	16	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:ILE:HD12	1:A:97:LEU:CD2	0.56	2.30	8	1
1:A:154:LEU:HD11	1:A:190:MET:HB2	0.56	1.76	20	2
1:A:175:ASP:CB	1:A:208:ILE:HG21	0.56	2.30	16	2
1:A:81:ILE:HD13	1:A:97:LEU:HD21	0.56	1.75	18	1
1:A:55:PRO:HG2	1:A:81:ILE:HD11	0.56	1.76	19	1
1:A:71:VAL:O	1:A:71:VAL:HG13	0.56	2.01	1	2
1:A:46:PHE:CZ	1:A:51:LEU:O	0.56	2.58	8	2
1:A:196:ILE:HG22	1:A:200:CYS:SG	0.56	2.40	13	3
1:A:68:ARG:N	1:A:68:ARG:HD3	0.56	2.16	1	1
1:A:194:VAL:O	1:A:198:GLN:HG2	0.56	2.00	8	6
1:A:197:LEU:C	1:A:197:LEU:HD12	0.56	2.21	1	1
1:A:41:LEU:HD23	1:A:41:LEU:N	0.56	2.16	15	1
1:A:125:THR:HG22	1:A:207:LYS:HG3	0.56	1.76	1	2
1:A:180:ILE:HD13	1:A:197:LEU:HD12	0.56	1.78	19	3
1:A:46:PHE:CE1	1:A:51:LEU:HA	0.56	2.36	8	2
1:A:45:VAL:HG13	1:A:56:LEU:CD2	0.56	2.31	20	1
1:A:128:VAL:HG12	1:A:168:THR:HG21	0.55	1.77	8	1
1:A:115:VAL:O	1:A:116:ALA:HB2	0.55	2.00	14	2
1:A:175:ASP:OD2	1:A:208:ILE:HG21	0.55	2.00	3	2
1:A:141:THR:HG22	1:A:157:SER:HB3	0.55	1.79	14	3
1:A:41:LEU:C	1:A:41:LEU:HD22	0.55	2.21	20	1
1:A:60:ILE:HG21	1:A:67:GLU:HG2	0.55	1.79	1	1
1:A:64:SER:CB	1:A:65:PRO:CD	0.55	2.85	11	3
1:A:206:LEU:N	1:A:206:LEU:HD22	0.55	2.16	6	2
1:A:81:ILE:HG23	1:A:109:LEU:HD23	0.55	1.77	16	3
1:A:132:LYS:HG2	1:A:204:VAL:HG23	0.55	1.78	9	2
1:A:49:GLU:O	1:A:50:THR:HG23	0.55	2.02	10	1
1:A:45:VAL:HG21	1:A:54:PRO:HD2	0.55	1.79	12	1
1:A:57:ILE:HD12	1:A:76:ASP:HB2	0.55	1.78	14	1
1:A:175:ASP:CG	1:A:208:ILE:HG21	0.55	2.22	3	5
1:A:20:VAL:CG1	1:A:116:ALA:HB2	0.55	2.32	20	2
1:A:41:LEU:HD11	1:A:98:LEU:HD22	0.55	1.78	14	3
1:A:39:ILE:HD12	1:A:39:ILE:O	0.55	2.01	3	1
1:A:142:ILE:HD12	1:A:194:VAL:CG2	0.55	2.15	16	3
1:A:51:LEU:CD1	1:A:90:THR:HG23	0.55	2.30	17	2
1:A:154:LEU:O	1:A:155:VAL:HG13	0.55	2.02	16	2
1:A:45:VAL:CG2	1:A:56:LEU:HD13	0.55	2.31	6	1
1:A:71:VAL:HG13	1:A:162:GLY:HA2	0.55	1.77	11	2
1:A:41:LEU:HD21	1:A:55:PRO:HB2	0.55	1.78	1	1
1:A:21:HIS:CE1	1:A:115:VAL:HG11	0.55	2.37	5	1
1:A:115:VAL:O	1:A:115:VAL:HG13	0.55	2.02	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:VAL:HG23	1:A:53:SER:OG	0.55	2.01	10	1
1:A:165:ALA:HB1	1:A:171:LEU:CD2	0.55	2.32	3	1
1:A:133:LYS:CG	1:A:136:VAL:HB	0.55	2.32	6	1
1:A:163:SER:O	1:A:167:ARG:NH1	0.54	2.40	7	11
1:A:55:PRO:HB2	1:A:78:VAL:HG12	0.54	1.77	4	1
1:A:181:ASP:OD1	1:A:196:ILE:HG22	0.54	2.02	8	1
1:A:41:LEU:HD22	1:A:98:LEU:HD13	0.54	1.77	3	1
1:A:51:LEU:HD22	1:A:90:THR:HG23	0.54	1.77	5	1
1:A:175:ASP:HB3	1:A:208:ILE:HG21	0.54	1.79	14	1
1:A:71:VAL:HG13	1:A:162:GLY:CA	0.54	2.32	18	2
1:A:55:PRO:HG3	1:A:94:ALA:HB1	0.54	1.78	8	4
1:A:25:THR:HG23	1:A:161:LYS:HB3	0.54	1.79	11	2
1:A:156:ILE:N	1:A:156:ILE:HD13	0.54	2.17	15	2
1:A:115:VAL:HG23	1:A:115:VAL:O	0.54	2.02	18	4
1:A:133:LYS:HB2	1:A:136:VAL:HG23	0.54	1.78	19	5
1:A:108:THR:C	1:A:109:LEU:HD12	0.54	2.22	10	1
1:A:60:ILE:HG12	1:A:74:ILE:HD13	0.54	1.80	15	1
1:A:136:VAL:HG12	1:A:137:GLU:N	0.54	2.17	8	10
1:A:29:LEU:HD12	1:A:109:LEU:HD21	0.54	1.78	3	1
1:A:39:ILE:HG22	1:A:60:ILE:HA	0.54	1.79	3	1
1:A:60:ILE:CG1	1:A:74:ILE:HD13	0.54	2.33	3	1
1:A:46:PHE:CD2	1:A:47:ALA:N	0.54	2.76	7	14
1:A:171:LEU:HD12	1:A:171:LEU:O	0.54	2.02	4	1
1:A:71:VAL:HG12	1:A:71:VAL:O	0.54	2.03	11	6
1:A:54:PRO:CB	1:A:55:PRO:HD3	0.53	2.33	1	2
1:A:79:MET:HE2	1:A:80:ALA:HB2	0.53	1.78	17	2
1:A:128:VAL:O	1:A:128:VAL:HG23	0.53	2.02	5	3
1:A:55:PRO:HG2	1:A:78:VAL:HG23	0.53	1.79	1	1
1:A:35:THR:HG21	1:A:61:GLU:OE2	0.53	2.04	8	1
1:A:154:LEU:HD11	1:A:190:MET:CG	0.53	2.33	18	2
1:A:44:SER:O	1:A:47:ALA:HB2	0.53	2.02	2	1
1:A:180:ILE:HG12	1:A:185:LEU:HD21	0.53	1.79	4	1
1:A:180:ILE:HG22	1:A:200:CYS:SG	0.53	2.43	15	1
1:A:115:VAL:O	1:A:116:ALA:HB3	0.53	2.04	9	3
1:A:130:LEU:HD22	1:A:165:ALA:HA	0.53	1.80	4	2
1:A:180:ILE:HG13	1:A:185:LEU:HD21	0.53	1.79	5	2
1:A:39:ILE:HG21	1:A:72:LEU:HD12	0.53	1.78	14	1
1:A:208:ILE:N	1:A:208:ILE:HD13	0.53	2.19	15	8
1:A:94:ALA:HA	1:A:97:LEU:HD21	0.53	1.80	2	2
1:A:117:GLU:CB	1:A:168:THR:HG22	0.53	2.34	8	1
1:A:29:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HD13	0.53	1.81	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:VAL:CG2	1:A:115:VAL:HG13	0.53	2.33	9	1
1:A:108:THR:O	1:A:109:LEU:HD13	0.53	2.04	19	2
1:A:97:LEU:C	1:A:97:LEU:HD12	0.53	2.24	9	4
1:A:39:ILE:HG21	1:A:57:ILE:HD13	0.53	1.79	19	1
1:A:39:ILE:CD1	1:A:66:ALA:HB1	0.53	2.32	13	2
1:A:100:ASP:O	1:A:103:ILE:CD1	0.52	2.57	20	20
1:A:179:ALA:HB2	1:A:184:ARG:CG	0.52	2.32	5	3
1:A:156:ILE:HG21	1:A:172:GLU:O	0.52	2.04	12	1
1:A:71:VAL:HG22	1:A:71:VAL:O	0.52	2.05	13	1
1:A:120:ILE:CG1	1:A:120:ILE:O	0.52	2.58	14	2
1:A:41:LEU:HD12	1:A:57:ILE:HG12	0.52	1.80	1	1
1:A:84:ILE:HD12	1:A:97:LEU:HD21	0.52	1.81	8	1
1:A:194:VAL:HG12	1:A:198:GLN:HE22	0.52	1.64	12	2
1:A:82:ASN:ND2	1:A:107:VAL:HG13	0.52	2.19	9	3
1:A:200:CYS:HB2	1:A:204:VAL:HG22	0.52	1.80	9	3
1:A:128:VAL:HG13	1:A:128:VAL:O	0.52	2.03	3	1
1:A:101:SER:CB	1:A:107:VAL:HG21	0.52	2.35	4	4
1:A:55:PRO:HG3	1:A:81:ILE:HD11	0.52	1.81	9	1
1:A:160:LYS:HD3	1:A:162:GLY:N	0.52	2.20	17	1
1:A:181:ASP:N	1:A:181:ASP:OD1	0.52	2.42	18	1
1:A:40:GLN:O	1:A:57:ILE:HG23	0.52	2.03	19	1
1:A:120:ILE:HG23	1:A:127:HIS:CB	0.52	2.29	1	1
1:A:185:LEU:CD1	1:A:193:ALA:HB2	0.52	2.35	20	6
1:A:49:GLU:C	1:A:50:THR:HG23	0.52	2.24	10	1
1:A:142:ILE:HG21	1:A:154:LEU:HD21	0.52	1.82	1	1
1:A:96:GLN:HG3	1:A:97:LEU:N	0.52	2.19	16	5
1:A:39:ILE:C	1:A:39:ILE:CD1	0.52	2.77	16	1
1:A:119:VAL:HG13	1:A:126:PHE:CZ	0.52	2.39	9	1
1:A:130:LEU:HD12	1:A:130:LEU:O	0.52	2.04	10	2
1:A:192:ASP:C	1:A:196:ILE:HD12	0.52	2.25	17	2
1:A:203:LEU:HD23	1:A:203:LEU:C	0.52	2.25	10	13
1:A:107:VAL:HG12	1:A:109:LEU:CD2	0.52	2.35	4	2
1:A:178:LEU:HD21	1:A:184:ARG:NE	0.52	2.20	8	1
1:A:20:VAL:HG11	1:A:114:ASP:HB2	0.51	1.82	2	1
1:A:36:GLY:O	1:A:37:PHE:HB2	0.51	2.05	3	1
1:A:81:ILE:HG23	1:A:109:LEU:HD11	0.51	1.81	12	1
1:A:97:LEU:HD12	1:A:97:LEU:C	0.51	2.26	17	1
1:A:126:PHE:CZ	1:A:170:THR:CG2	0.51	2.94	10	2
1:A:39:ILE:HG23	1:A:60:ILE:HD12	0.51	1.83	19	1
1:A:125:THR:HG21	1:A:207:LYS:CE	0.51	2.34	19	1
1:A:124:GLY:O	1:A:209:ARG:HA	0.51	2.06	11	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:41:LEU:HD23	1:A:41:LEU:H	0.51	1.66	15	1
1:A:94:ALA:HA	1:A:97:LEU:HD23	0.51	1.81	18	1
1:A:39:ILE:HG13	1:A:66:ALA:HB1	0.51	1.80	7	3
1:A:163:SER:O	1:A:167:ARG:NE	0.51	2.44	10	4
1:A:143:SER:HB3	1:A:155:VAL:HG23	0.51	1.82	12	1
1:A:56:LEU:HG	1:A:56:LEU:O	0.51	2.06	12	3
1:A:50:THR:O	1:A:52:SER:N	0.51	2.44	7	1
1:A:41:LEU:HD12	1:A:57:ILE:CG1	0.51	2.36	18	2
1:A:171:LEU:HD13	1:A:206:LEU:HD22	0.51	1.81	10	1
1:A:46:PHE:CE1	1:A:53:SER:CB	0.51	2.94	3	1
1:A:156:ILE:HG21	1:A:173:LEU:HD23	0.51	1.82	15	1
1:A:140:ILE:CG2	1:A:171:LEU:HD21	0.50	2.35	3	1
1:A:127:HIS:NE2	1:A:207:LYS:HD2	0.50	2.20	5	3
1:A:76:ASP:HB3	1:A:111:ILE:HG21	0.50	1.83	2	1
1:A:66:ALA:C	1:A:72:LEU:HD12	0.50	2.26	12	3
1:A:200:CYS:HB3	1:A:204:VAL:HG13	0.50	1.82	14	1
1:A:57:ILE:HG21	1:A:60:ILE:HD11	0.50	1.84	15	1
1:A:95:ASN:HA	1:A:98:LEU:HD12	0.50	1.83	16	1
1:A:185:LEU:O	1:A:187:SER:N	0.50	2.44	6	3
1:A:46:PHE:CE1	1:A:50:THR:HG23	0.50	2.40	4	2
1:A:60:ILE:HG22	1:A:61:GLU:H	0.50	1.66	7	4
1:A:78:VAL:HG11	1:A:109:LEU:HD23	0.50	1.83	10	1
1:A:125:THR:HG22	1:A:207:LYS:CG	0.50	2.37	1	2
1:A:49:GLU:C	1:A:50:THR:HG22	0.50	2.27	4	3
1:A:56:LEU:HD23	1:A:56:LEU:N	0.50	2.21	4	2
1:A:175:ASP:HB2	1:A:208:ILE:HG21	0.50	1.84	16	1
1:A:29:LEU:HD21	1:A:39:ILE:HD12	0.50	1.81	17	1
1:A:132:LYS:HE2	1:A:138:LEU:HD13	0.50	1.82	17	1
1:A:49:GLU:O	1:A:50:THR:CB	0.50	2.60	16	3
1:A:20:VAL:HG11	1:A:116:ALA:CB	0.50	2.36	14	1
1:A:28:VAL:O	1:A:28:VAL:HG13	0.50	2.07	4	3
1:A:81:ILE:HG23	1:A:109:LEU:HD22	0.50	1.82	17	3
1:A:178:LEU:C	1:A:178:LEU:HD23	0.50	2.27	11	5
1:A:133:LYS:NZ	1:A:134:HIS:CE1	0.49	2.80	6	1
1:A:178:LEU:HD22	1:A:178:LEU:C	0.49	2.27	10	1
1:A:185:LEU:N	1:A:185:LEU:HD22	0.49	2.22	14	5
1:A:127:HIS:CE1	1:A:207:LYS:CG	0.49	2.95	2	1
1:A:25:THR:HG21	1:A:113:PHE:CZ	0.49	2.41	12	3
1:A:185:LEU:HD11	1:A:193:ALA:N	0.49	2.22	12	1
1:A:39:ILE:HG22	1:A:57:ILE:CG2	0.49	2.37	14	1
1:A:44:SER:CB	1:A:46:PHE:CZ	0.49	2.95	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:119:VAL:HG13	1:A:126:PHE:HE1	0.49	1.67	15	2
1:A:46:PHE:CD1	1:A:46:PHE:N	0.49	2.80	5	4
1:A:132:LYS:HE3	1:A:138:LEU:HD21	0.49	1.83	5	1
1:A:194:VAL:HG12	1:A:198:GLN:HE21	0.49	1.68	6	1
1:A:154:LEU:HD11	1:A:193:ALA:CB	0.49	2.38	11	1
1:A:180:ILE:HD12	1:A:206:LEU:CD2	0.49	2.37	13	1
1:A:177:LEU:HD12	1:A:208:ILE:HD12	0.49	1.84	14	1
1:A:24:THR:HG23	1:A:112:GLU:CG	0.49	2.37	16	2
1:A:138:LEU:HD23	1:A:140:ILE:CD1	0.49	2.26	17	1
1:A:27:VAL:HG12	1:A:71:VAL:HG23	0.49	1.84	4	1
1:A:117:GLU:CG	1:A:164:VAL:HG13	0.49	2.37	7	1
1:A:115:VAL:O	1:A:116:ALA:CB	0.49	2.60	14	4
1:A:206:LEU:O	1:A:208:ILE:HD13	0.49	2.07	17	1
1:A:142:ILE:HG22	1:A:143:SER:N	0.49	2.23	17	18
1:A:29:LEU:HD11	1:A:39:ILE:HD12	0.49	1.83	7	1
1:A:60:ILE:HG13	1:A:74:ILE:HD13	0.49	1.85	7	1
1:A:45:VAL:CG1	1:A:56:LEU:HD21	0.49	2.38	20	1
1:A:31:ALA:HB2	1:A:37:PHE:HE1	0.49	1.63	10	6
1:A:117:GLU:O	1:A:118:SER:CB	0.49	2.60	7	10
1:A:66:ALA:CB	1:A:72:LEU:HD12	0.49	2.37	5	3
1:A:115:VAL:O	1:A:115:VAL:HG23	0.49	2.07	6	2
1:A:185:LEU:HD11	1:A:196:ILE:CD1	0.49	2.37	15	1
1:A:53:SER:OG	1:A:56:LEU:HD11	0.49	2.08	2	1
1:A:120:ILE:CD1	1:A:127:HIS:HB2	0.49	2.38	3	5
1:A:39:ILE:HG23	1:A:57:ILE:HG23	0.49	1.83	7	2
1:A:108:THR:C	1:A:109:LEU:HD23	0.49	2.28	11	2
1:A:71:VAL:HG12	1:A:162:GLY:O	0.49	2.07	20	1
1:A:60:ILE:HG21	1:A:67:GLU:HB3	0.49	1.84	9	1
1:A:140:ILE:CG1	1:A:165:ALA:HB2	0.49	2.38	11	1
1:A:130:LEU:HD23	1:A:164:VAL:CG2	0.49	2.38	14	1
1:A:128:VAL:CG2	1:A:206:LEU:HD12	0.49	2.38	15	1
1:A:41:LEU:HD22	1:A:55:PRO:HB3	0.49	1.84	19	1
1:A:154:LEU:HD22	1:A:154:LEU:N	0.49	2.23	8	1
1:A:29:LEU:CD1	1:A:39:ILE:HD11	0.49	2.38	10	1
1:A:56:LEU:HD12	1:A:56:LEU:H	0.49	1.68	20	3
1:A:138:LEU:O	1:A:165:ALA:HB2	0.49	2.06	14	1
1:A:138:LEU:CD2	1:A:140:ILE:HD11	0.48	2.26	17	1
1:A:138:LEU:HD13	1:A:140:ILE:CD1	0.48	2.37	1	1
1:A:29:LEU:HD11	1:A:39:ILE:HD11	0.48	1.84	4	2
1:A:178:LEU:C	1:A:178:LEU:HD13	0.48	2.28	6	1
1:A:159:ILE:HG21	1:A:166:HIS:ND1	0.48	2.23	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:ILE:HG21	1:A:60:ILE:CD1	0.48	2.27	3	1
1:A:126:PHE:CE2	1:A:170:THR:CG2	0.48	2.96	10	1
1:A:29:LEU:HD22	1:A:29:LEU:N	0.48	2.24	13	1
1:A:64:SER:O	1:A:68:ARG:HG2	0.48	2.08	16	1
1:A:76:ASP:OD2	1:A:111:ILE:HD12	0.48	2.07	17	1
1:A:30:THR:O	1:A:37:PHE:CE2	0.48	2.66	4	2
1:A:177:LEU:HB3	1:A:208:ILE:HD13	0.48	1.84	13	1
1:A:81:ILE:HG21	1:A:97:LEU:HD11	0.48	1.84	18	1
1:A:46:PHE:CE2	1:A:51:LEU:HA	0.48	2.44	1	3
1:A:67:GLU:CG	1:A:68:ARG:CZ	0.48	2.91	19	3
1:A:31:ALA:CB	1:A:37:PHE:CE1	0.48	2.96	19	12
1:A:128:VAL:HG22	1:A:130:LEU:CD1	0.48	2.38	3	1
1:A:29:LEU:HD22	1:A:37:PHE:CD2	0.48	2.43	6	1
1:A:39:ILE:HG22	1:A:60:ILE:HD12	0.48	1.81	16	1
1:A:140:ILE:HG23	1:A:159:ILE:HG23	0.48	1.85	18	1
1:A:55:PRO:HB2	1:A:78:VAL:HG22	0.48	1.85	19	1
1:A:67:GLU:HG2	1:A:68:ARG:NH1	0.48	2.24	10	4
1:A:39:ILE:HG22	1:A:59:TYR:O	0.48	2.09	3	1
1:A:130:LEU:HD12	1:A:204:VAL:O	0.48	2.09	6	2
1:A:178:LEU:O	1:A:178:LEU:HD12	0.48	2.09	13	1
1:A:48:THR:O	1:A:49:GLU:CG	0.48	2.62	15	5
1:A:154:LEU:HD11	1:A:190:MET:CA	0.48	2.39	12	6
1:A:25:THR:HG21	1:A:113:PHE:CE2	0.48	2.44	12	3
1:A:84:ILE:CD1	1:A:97:LEU:HD21	0.48	2.39	8	1
1:A:119:VAL:CG2	1:A:126:PHE:CE1	0.48	2.97	12	1
1:A:180:ILE:HD12	1:A:193:ALA:CB	0.48	2.29	19	1
1:A:98:LEU:HA	1:A:101:SER:HB2	0.48	1.85	1	4
1:A:206:LEU:HB3	1:A:208:ILE:HD11	0.48	1.85	3	2
1:A:128:VAL:HG12	1:A:130:LEU:HD23	0.48	1.85	10	1
1:A:45:VAL:HG23	1:A:53:SER:HB2	0.48	1.85	12	2
1:A:23:GLU:OE1	1:A:115:VAL:HG11	0.48	2.09	19	1
1:A:28:VAL:C	1:A:29:LEU:HD12	0.48	2.29	20	1
1:A:132:LYS:CE	1:A:138:LEU:HD21	0.48	2.39	5	2
1:A:120:ILE:O	1:A:120:ILE:CG1	0.48	2.61	15	3
1:A:154:LEU:HD23	1:A:185:LEU:HG	0.48	1.86	9	1
1:A:76:ASP:O	1:A:78:VAL:HG23	0.48	2.08	14	1
1:A:130:LEU:HD13	1:A:164:VAL:CG2	0.48	2.39	16	1
1:A:48:THR:OG1	1:A:49:GLU:N	0.48	2.45	17	2
1:A:145:PRO:HD3	1:A:155:VAL:HG12	0.47	1.86	6	1
1:A:128:VAL:HG12	1:A:130:LEU:HD21	0.47	1.86	7	1
1:A:116:ALA:HB2	1:A:168:THR:O	0.47	2.08	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:ALA:HA	1:A:97:LEU:HD12	0.47	1.84	12	1
1:A:138:LEU:HD22	1:A:140:ILE:HG12	0.47	1.84	15	1
1:A:115:VAL:HG12	1:A:167:ARG:HA	0.47	1.86	2	1
1:A:113:PHE:CE1	1:A:167:ARG:CG	0.47	2.97	3	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:61:GLU:N	0.47	2.77	12	2
1:A:54:PRO:HB2	1:A:55:PRO:HD3	0.47	1.85	1	2
1:A:67:GLU:HB3	1:A:68:ARG:NH1	0.47	2.25	4	2
1:A:41:LEU:O	1:A:41:LEU:HD22	0.47	2.10	8	1
1:A:70:GLY:HA2	1:A:136:VAL:HG11	0.47	1.85	13	1
1:A:177:LEU:CD1	1:A:180:ILE:HD11	0.47	2.37	13	1
1:A:78:VAL:O	1:A:78:VAL:HG23	0.47	2.09	16	1
1:A:29:LEU:O	1:A:106:LYS:HA	0.47	2.09	4	2
1:A:162:GLY:N	1:A:167:ARG:NH1	0.47	2.62	7	2
1:A:113:PHE:CE1	1:A:167:ARG:NE	0.47	2.82	2	2
1:A:180:ILE:CG1	1:A:185:LEU:HD21	0.47	2.39	5	3
1:A:29:LEU:HD13	1:A:39:ILE:CD1	0.47	2.39	1	1
1:A:85:PRO:C	1:A:86:THR:HG23	0.47	2.30	18	4
1:A:78:VAL:HG12	1:A:111:ILE:CG2	0.47	2.40	6	1
1:A:180:ILE:HD12	1:A:185:LEU:HD21	0.47	1.87	7	2
1:A:31:ALA:CB	1:A:37:PHE:CE2	0.47	2.98	13	1
1:A:47:ALA:O	1:A:48:THR:HB	0.47	2.10	19	2
1:A:117:GLU:HB2	1:A:168:THR:HG22	0.47	1.87	17	1
1:A:132:LYS:HB3	1:A:202:ASP:N	0.47	2.24	18	1
1:A:41:LEU:HD23	1:A:55:PRO:HA	0.47	1.86	2	1
1:A:39:ILE:CD1	1:A:57:ILE:HD13	0.47	2.39	8	2
1:A:31:ALA:HA	1:A:37:PHE:CE1	0.47	2.44	11	2
1:A:143:SER:CB	1:A:155:VAL:HG23	0.47	2.39	12	1
1:A:39:ILE:HD13	1:A:66:ALA:HB1	0.47	1.85	20	1
1:A:66:ALA:CA	1:A:72:LEU:HD12	0.47	2.40	5	2
1:A:27:VAL:HG21	1:A:72:LEU:HD11	0.47	1.87	17	1
1:A:50:THR:OG1	1:A:51:LEU:N	0.47	2.48	13	4
1:A:159:ILE:CG2	1:A:166:HIS:CG	0.47	2.98	11	1
1:A:20:VAL:HG11	1:A:116:ALA:HB2	0.47	1.87	12	1
1:A:156:ILE:CG2	1:A:173:LEU:HD23	0.47	2.40	15	1
1:A:142:ILE:CG2	1:A:154:LEU:HD21	0.46	2.39	1	1
1:A:70:GLY:HA2	1:A:136:VAL:HG22	0.46	1.87	4	1
1:A:29:LEU:HD22	1:A:66:ALA:CB	0.46	2.40	9	1
1:A:97:LEU:O	1:A:101:SER:HB3	0.46	2.10	15	2
1:A:41:LEU:HD23	1:A:55:PRO:HB3	0.46	1.87	17	1
1:A:138:LEU:HD13	1:A:163:SER:OG	0.46	2.10	19	1
1:A:127:HIS:N	1:A:127:HIS:ND1	0.46	2.63	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:171:LEU:CD2	1:A:206:LEU:HD22	0.46	2.41	9	1
1:A:60:ILE:HG22	1:A:67:GLU:HB2	0.46	1.85	16	1
1:A:142:ILE:CG2	1:A:154:LEU:HD11	0.46	2.36	1	1
1:A:194:VAL:HA	1:A:197:LEU:CD2	0.46	2.40	1	1
1:A:46:PHE:CE1	1:A:53:SER:HB2	0.46	2.46	14	2
1:A:183:ILE:HG21	1:A:196:ILE:CD1	0.46	2.40	14	1
1:A:45:VAL:HG22	1:A:56:LEU:HD11	0.46	1.86	20	1
1:A:21:HIS:NE2	1:A:115:VAL:HG11	0.46	2.26	5	1
1:A:193:ALA:O	1:A:197:LEU:HB3	0.46	2.10	6	1
1:A:113:PHE:CE1	1:A:167:ARG:CD	0.46	2.99	5	2
1:A:25:THR:CG2	1:A:113:PHE:CE2	0.46	2.98	7	4
1:A:70:GLY:O	1:A:71:VAL:HG13	0.46	2.10	9	1
1:A:39:ILE:CG2	1:A:60:ILE:HG23	0.46	2.40	15	1
1:A:37:PHE:CD1	1:A:37:PHE:N	0.46	2.84	10	8
1:A:97:LEU:O	1:A:101:SER:N	0.46	2.49	17	3
1:A:125:THR:HG21	1:A:207:LYS:HE2	0.46	1.86	3	1
1:A:155:VAL:HG12	1:A:156:ILE:N	0.46	2.26	5	5
1:A:127:HIS:CD2	1:A:207:LYS:CG	0.46	2.98	14	2
1:A:59:TYR:CZ	1:A:60:ILE:O	0.46	2.68	4	11
1:A:177:LEU:HD23	1:A:207:LYS:O	0.46	2.10	10	1
1:A:39:ILE:HD12	1:A:57:ILE:HD11	0.46	1.85	15	1
1:A:119:VAL:CG1	1:A:126:PHE:CZ	0.46	2.99	15	1
1:A:58:SER:O	1:A:74:ILE:HG23	0.46	2.11	16	1
1:A:65:PRO:O	1:A:69:CYS:CB	0.46	2.64	2	4
1:A:41:LEU:H	1:A:41:LEU:HD13	0.46	1.70	8	1
1:A:156:ILE:CD1	1:A:171:LEU:HD12	0.46	2.41	10	1
1:A:107:VAL:HG12	1:A:109:LEU:HD21	0.46	1.88	11	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:67:GLU:CB	0.46	2.94	15	2
1:A:53:SER:N	1:A:54:PRO:HD3	0.46	2.26	1	1
1:A:24:THR:HG22	1:A:112:GLU:HG3	0.46	1.88	6	1
1:A:185:LEU:HD12	1:A:189:SER:O	0.46	2.12	16	1
1:A:177:LEU:HD22	1:A:180:ILE:CD1	0.46	2.29	18	2
1:A:39:ILE:HG22	1:A:40:GLN:N	0.45	2.26	1	1
1:A:196:ILE:HA	1:A:199:GLN:CG	0.45	2.41	2	2
1:A:39:ILE:HG23	1:A:57:ILE:CG2	0.45	2.41	9	1
1:A:131:PRO:O	1:A:164:VAL:HG21	0.45	2.11	10	1
1:A:39:ILE:CD1	1:A:66:ALA:CB	0.45	2.93	13	1
1:A:61:GLU:O	1:A:67:GLU:OE2	0.45	2.33	14	1
1:A:181:ASP:O	1:A:182:ASN:CB	0.45	2.65	16	5
1:A:71:VAL:HG11	1:A:162:GLY:HA3	0.45	1.89	4	2
1:A:25:THR:CG2	1:A:113:PHE:CZ	0.45	2.99	9	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:THR:HG22	1:A:113:PHE:CE2	0.45	2.47	6	1
1:A:67:GLU:HG3	1:A:68:ARG:CZ	0.45	2.41	10	2
1:A:106:LYS:O	1:A:107:VAL:HG23	0.45	2.11	12	1
1:A:142:ILE:HD11	1:A:197:LEU:CG	0.45	2.41	14	1
1:A:125:THR:HG21	1:A:207:LYS:HE3	0.45	1.89	1	3
1:A:152:ASP:CB	1:A:153:PRO:HD3	0.45	2.41	4	1
1:A:25:THR:CG2	1:A:111:ILE:HD11	0.45	2.41	9	1
1:A:41:LEU:HA	1:A:56:LEU:O	0.45	2.11	11	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:66:ALA:CB	0.45	2.94	1	1
1:A:138:LEU:HD23	1:A:163:SER:OG	0.45	2.11	10	1
1:A:51:LEU:HD13	1:A:90:THR:HA	0.45	1.88	14	1
1:A:119:VAL:HG13	1:A:119:VAL:O	0.45	2.11	19	1
1:A:45:VAL:CB	1:A:56:LEU:HD21	0.45	2.41	20	1
1:A:120:ILE:O	1:A:120:ILE:CD1	0.45	2.60	1	5
1:A:183:ILE:HG22	1:A:184:ARG:N	0.45	2.26	13	12
1:A:119:VAL:CG1	1:A:126:PHE:CE1	0.45	2.98	15	2
1:A:136:VAL:HG13	1:A:137:GLU:N	0.45	2.26	6	2
1:A:143:SER:N	1:A:155:VAL:O	0.45	2.50	7	2
1:A:185:LEU:H	1:A:185:LEU:HD22	0.45	1.71	5	2
1:A:20:VAL:HG22	1:A:21:HIS:N	0.45	2.26	9	2
1:A:30:THR:O	1:A:37:PHE:CD2	0.45	2.70	12	1
1:A:55:PRO:HD2	1:A:94:ALA:HB3	0.45	1.88	14	1
1:A:67:GLU:H	1:A:67:GLU:CD	0.45	2.15	14	1
1:A:46:PHE:CG	1:A:47:ALA:N	0.45	2.85	3	10
1:A:106:LYS:HG3	1:A:107:VAL:N	0.45	2.27	15	4
1:A:78:VAL:HG11	1:A:109:LEU:HD13	0.45	1.89	16	2
1:A:20:VAL:HG11	1:A:115:VAL:O	0.45	2.10	9	2
1:A:20:VAL:HG11	1:A:114:ASP:HB3	0.45	1.89	13	1
1:A:98:LEU:HA	1:A:101:SER:HB3	0.45	1.87	5	1
1:A:116:ALA:N	1:A:167:ARG:O	0.45	2.50	12	3
1:A:125:THR:HG22	1:A:207:LYS:HD2	0.45	1.89	12	1
1:A:81:ILE:HG21	1:A:97:LEU:HD13	0.45	1.88	18	1
1:A:133:LYS:CD	1:A:136:VAL:HG21	0.45	2.41	4	1
1:A:57:ILE:HG22	1:A:58:SER:N	0.45	2.27	9	2
1:A:46:PHE:CD1	1:A:53:SER:HB2	0.45	2.47	6	1
1:A:43:GLY:CA	1:A:91:PHE:CE2	0.45	3.00	13	1
1:A:120:ILE:O	1:A:120:ILE:HD12	0.45	2.12	14	2
1:A:124:GLY:N	1:A:210:LYS:O	0.45	2.50	6	3
1:A:38:GLY:O	1:A:60:ILE:HA	0.45	2.11	8	2
1:A:143:SER:OG	1:A:155:VAL:HG23	0.45	2.12	9	1
1:A:38:GLY:HA3	1:A:64:SER:CB	0.45	2.41	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:125:THR:CG2	1:A:207:LYS:CE	0.44	2.95	6	6
1:A:130:LEU:HD21	1:A:168:THR:HG21	0.44	1.89	17	1
1:A:101:SER:OG	1:A:107:VAL:HG11	0.44	2.12	1	1
1:A:57:ILE:HD12	1:A:76:ASP:OD2	0.44	2.12	2	1
1:A:45:VAL:CG2	1:A:56:LEU:CD2	0.44	2.95	15	3
1:A:39:ILE:HG21	1:A:57:ILE:CD1	0.44	2.42	9	1
1:A:45:VAL:HG21	1:A:54:PRO:CD	0.44	2.41	12	1
1:A:38:GLY:O	1:A:61:GLU:N	0.44	2.50	18	4
1:A:41:LEU:CD2	1:A:98:LEU:HD13	0.44	2.42	3	2
1:A:155:VAL:CG1	1:A:156:ILE:N	0.44	2.81	7	1
1:A:41:LEU:HB2	1:A:98:LEU:HD13	0.44	1.89	16	1
1:A:54:PRO:O	1:A:56:LEU:CD2	0.44	2.66	18	1
1:A:156:ILE:HG21	1:A:159:ILE:HD11	0.44	1.90	16	1
1:A:119:VAL:HG23	1:A:126:PHE:CE1	0.44	2.48	19	1
1:A:41:LEU:HD23	1:A:57:ILE:HD11	0.44	1.86	4	1
1:A:60:ILE:HG22	1:A:61:GLU:N	0.44	2.26	14	3
1:A:181:ASP:HA	1:A:205:LYS:HB3	0.44	1.88	10	2
1:A:20:VAL:HG22	1:A:116:ALA:HB3	0.44	1.90	13	1
1:A:168:THR:HG23	1:A:168:THR:O	0.44	2.13	13	1
1:A:132:LYS:HG2	1:A:138:LEU:HD11	0.44	1.90	14	1
1:A:48:THR:O	1:A:49:GLU:O	0.44	2.36	1	3
1:A:49:GLU:O	1:A:50:THR:HB	0.44	2.13	3	1
1:A:163:SER:O	1:A:167:ARG:HG2	0.44	2.12	12	1
1:A:39:ILE:CG2	1:A:57:ILE:CD1	0.43	2.96	9	6
1:A:180:ILE:O	1:A:182:ASN:N	0.43	2.50	2	5
1:A:153:PRO:C	1:A:154:LEU:HD22	0.43	2.33	4	1
1:A:140:ILE:HD12	1:A:165:ALA:HB2	0.43	1.90	7	1
1:A:138:LEU:HB3	1:A:140:ILE:HD12	0.43	1.90	10	1
1:A:41:LEU:CG	1:A:98:LEU:HD13	0.43	2.43	3	1
1:A:180:ILE:CG1	1:A:185:LEU:HD11	0.43	2.43	4	1
1:A:154:LEU:HD11	1:A:190:MET:HB3	0.43	1.90	6	1
1:A:168:THR:O	1:A:170:THR:N	0.43	2.51	13	1
1:A:20:VAL:HG12	1:A:115:VAL:O	0.43	2.13	20	1
1:A:95:ASN:O	1:A:99:ARG:HG3	0.43	2.14	2	4
1:A:41:LEU:HB3	1:A:57:ILE:HA	0.43	1.90	4	2
1:A:132:LYS:CG	1:A:204:VAL:CG2	0.43	2.96	5	2
1:A:41:LEU:HD13	1:A:55:PRO:CB	0.43	2.43	6	1
1:A:32:ASP:N	1:A:36:GLY:O	0.43	2.52	12	1
1:A:152:ASP:N	1:A:153:PRO:CD	0.43	2.81	15	2
1:A:132:LYS:CG	1:A:138:LEU:HD11	0.43	2.43	14	1
1:A:29:LEU:HD22	1:A:37:PHE:HD1	0.43	1.74	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:115:VAL:HG22	1:A:167:ARG:O	0.43	2.13	9	1
1:A:85:PRO:O	1:A:86:THR:HG23	0.43	2.13	3	1
1:A:132:LYS:HB2	1:A:203:LEU:N	0.43	2.27	5	2
1:A:129:LYS:HE2	1:A:203:LEU:HD11	0.43	1.90	17	1
1:A:38:GLY:H	1:A:66:ALA:HB2	0.43	1.73	2	1
1:A:120:ILE:CD1	1:A:127:HIS:CG	0.43	3.02	2	1
1:A:208:ILE:HG22	1:A:209:ARG:N	0.43	2.28	9	4
1:A:39:ILE:CG2	1:A:40:GLN:N	0.43	2.82	1	1
1:A:69:CYS:SG	1:A:72:LEU:HD23	0.43	2.53	1	1
1:A:185:LEU:N	1:A:185:LEU:CD2	0.43	2.82	20	3
1:A:121:PRO:HB3	1:A:126:PHE:CE2	0.43	2.48	6	2
1:A:39:ILE:CG2	1:A:57:ILE:HG23	0.43	2.43	9	1
1:A:156:ILE:HD11	1:A:171:LEU:HD12	0.43	1.91	10	1
1:A:30:THR:CG2	1:A:106:LYS:CG	0.43	2.96	11	1
1:A:193:ALA:O	1:A:197:LEU:HD12	0.43	2.14	11	1
1:A:70:GLY:CA	1:A:136:VAL:HG11	0.43	2.43	13	1
1:A:81:ILE:HD12	1:A:97:LEU:HD21	0.43	1.91	15	1
1:A:122:SER:O	1:A:123:SER:O	0.43	2.37	3	3
1:A:28:VAL:O	1:A:28:VAL:CG1	0.43	2.66	4	1
1:A:49:GLU:O	1:A:50:THR:HG22	0.43	2.14	4	3
1:A:196:ILE:HA	1:A:199:GLN:HG3	0.43	1.89	9	1
1:A:45:VAL:O	1:A:46:PHE:C	0.43	2.57	14	2
1:A:29:LEU:HD11	1:A:66:ALA:CB	0.43	2.44	15	1
1:A:25:THR:HG22	1:A:26:GLU:N	0.43	2.29	5	1
1:A:107:VAL:O	1:A:107:VAL:HG13	0.43	2.13	8	1
1:A:199:GLN:O	1:A:201:GLU:N	0.43	2.51	15	1
1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CD1	0.43	2.81	10	1
1:A:180:ILE:CG2	1:A:204:VAL:HG13	0.43	2.43	10	1
1:A:59:TYR:CE2	1:A:60:ILE:O	0.42	2.72	11	7
1:A:78:VAL:HG12	1:A:109:LEU:CD1	0.42	2.41	1	1
1:A:41:LEU:HD13	1:A:98:LEU:CG	0.42	2.43	3	1
1:A:178:LEU:HD23	1:A:178:LEU:C	0.42	2.34	5	1
1:A:163:SER:O	1:A:167:ARG:NH2	0.42	2.52	9	2
1:A:160:LYS:O	1:A:167:ARG:NH2	0.42	2.48	10	1
1:A:160:LYS:HG3	1:A:161:LYS:N	0.42	2.29	10	1
1:A:47:ALA:C	1:A:48:THR:HG22	0.42	2.35	12	1
1:A:67:GLU:OE2	1:A:68:ARG:NH1	0.42	2.51	14	1
1:A:127:HIS:CE1	1:A:207:LYS:HG2	0.42	2.49	2	1
1:A:119:VAL:HG13	1:A:128:VAL:HA	0.42	1.90	4	1
1:A:126:PHE:CE2	1:A:170:THR:OG1	0.42	2.72	4	1
1:A:183:ILE:CG2	1:A:184:ARG:N	0.42	2.82	13	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:119:VAL:HG23	1:A:128:VAL:HG12	0.42	1.91	5	1
1:A:174:GLY:O	1:A:208:ILE:HG21	0.42	2.15	7	1
1:A:143:SER:O	1:A:155:VAL:HG12	0.42	2.14	13	1
1:A:118:SER:O	1:A:128:VAL:HG13	0.42	2.14	14	1
1:A:204:VAL:O	1:A:204:VAL:HG13	0.42	2.14	3	1
1:A:57:ILE:HG21	1:A:60:ILE:HD13	0.42	1.89	6	1
1:A:145:PRO:CG	1:A:155:VAL:CG2	0.42	2.98	7	1
1:A:60:ILE:HD12	1:A:67:GLU:HB2	0.42	1.91	10	1
1:A:210:LYS:O	1:A:211:ASP:CB	0.42	2.67	11	1
1:A:29:LEU:CD2	1:A:72:LEU:HD21	0.42	2.40	14	1
1:A:78:VAL:HG11	1:A:109:LEU:HD22	0.42	1.90	14	1
1:A:41:LEU:HD12	1:A:55:PRO:HB3	0.42	1.90	15	1
1:A:78:VAL:HG13	1:A:109:LEU:HB2	0.42	1.91	20	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:66:ALA:HB3	0.42	2.45	1	1
1:A:49:GLU:O	1:A:50:THR:CG2	0.42	2.67	13	4
1:A:154:LEU:N	1:A:154:LEU:CD2	0.42	2.83	8	1
1:A:41:LEU:CD2	1:A:55:PRO:CB	0.42	2.98	16	1
1:A:50:THR:HG22	1:A:51:LEU:H	0.42	1.74	16	1
1:A:68:ARG:NE	1:A:68:ARG:N	0.42	2.67	11	1
1:A:159:ILE:CD1	1:A:171:LEU:HD23	0.42	2.33	15	1
1:A:40:GLN:O	1:A:57:ILE:HA	0.42	2.14	16	1
1:A:20:VAL:HG12	1:A:114:ASP:OD1	0.42	2.15	8	1
1:A:29:LEU:HD13	1:A:109:LEU:HD21	0.42	1.90	8	1
1:A:21:HIS:O	1:A:115:VAL:HG23	0.42	2.14	11	1
1:A:132:LYS:NZ	1:A:138:LEU:HD12	0.42	2.29	11	1
1:A:141:THR:O	1:A:157:SER:N	0.42	2.52	20	2
1:A:130:LEU:CD2	1:A:168:THR:CG2	0.42	2.97	17	1
1:A:154:LEU:HD13	1:A:185:LEU:HG	0.42	1.89	19	1
1:A:132:LYS:CE	1:A:138:LEU:CD2	0.42	2.97	5	1
1:A:161:LYS:O	1:A:167:ARG:NH2	0.42	2.53	5	1
1:A:57:ILE:O	1:A:75:GLY:N	0.42	2.53	14	2
1:A:133:LYS:HE2	1:A:134:HIS:CE1	0.42	2.49	6	1
1:A:141:THR:N	1:A:158:ASP:O	0.42	2.53	9	1
1:A:128:VAL:HG23	1:A:206:LEU:O	0.42	2.14	2	1
1:A:39:ILE:O	1:A:39:ILE:CD1	0.42	2.68	3	1
1:A:81:ILE:HD12	1:A:97:LEU:HD11	0.42	1.90	3	1
1:A:120:ILE:O	1:A:127:HIS:HB2	0.42	2.15	3	1
1:A:41:LEU:HD13	1:A:41:LEU:N	0.42	2.30	8	1
1:A:132:LYS:CB	1:A:202:ASP:N	0.42	2.83	12	1
1:A:132:LYS:HD3	1:A:138:LEU:HD21	0.42	1.90	13	1
1:A:71:VAL:HG21	1:A:162:GLY:C	0.42	2.35	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:132:LYS:HD3	1:A:200:CYS:O	0.42	2.15	2	1
1:A:121:PRO:HA	1:A:126:PHE:CB	0.42	2.43	5	1
1:A:133:LYS:HD2	1:A:133:LYS:N	0.42	2.30	5	2
1:A:46:PHE:CE2	1:A:50:THR:O	0.42	2.72	6	1
1:A:206:LEU:N	1:A:206:LEU:CD2	0.42	2.83	6	1
1:A:175:ASP:CB	1:A:208:ILE:CG2	0.42	2.98	4	1
1:A:194:VAL:HA	1:A:197:LEU:HB2	0.42	1.90	5	1
1:A:127:HIS:NE2	1:A:207:LYS:CE	0.42	2.83	9	1
1:A:208:ILE:H	1:A:208:ILE:HD13	0.42	1.74	11	2
1:A:118:SER:CB	1:A:129:LYS:O	0.42	2.67	14	1
1:A:177:LEU:HD23	1:A:178:LEU:H	0.42	1.74	15	1
1:A:139:GLY:O	1:A:159:ILE:HA	0.41	2.13	3	1
1:A:78:VAL:HG11	1:A:109:LEU:CD1	0.41	2.45	6	1
1:A:156:ILE:HD13	1:A:172:GLU:O	0.41	2.14	9	1
1:A:127:HIS:CD2	1:A:207:LYS:HG2	0.41	2.49	14	1
1:A:156:ILE:HG22	1:A:173:LEU:CD2	0.41	2.44	19	1
1:A:169:GLY:O	1:A:170:THR:HG22	0.41	2.15	2	1
1:A:39:ILE:O	1:A:39:ILE:HG13	0.41	2.15	4	1
1:A:45:VAL:CG2	1:A:54:PRO:O	0.41	2.68	20	1
1:A:92:GLU:O	1:A:96:GLN:HG2	0.41	2.15	8	3
1:A:21:HIS:CD2	1:A:21:HIS:O	0.41	2.74	16	3
1:A:37:PHE:CE2	1:A:101:SER:OG	0.41	2.72	5	1
1:A:180:ILE:HD12	1:A:206:LEU:CD1	0.41	2.46	6	1
1:A:43:GLY:O	1:A:91:PHE:CG	0.41	2.72	7	2
1:A:42:GLN:N	1:A:56:LEU:O	0.41	2.53	11	1
1:A:41:LEU:CD2	1:A:98:LEU:HD22	0.41	2.43	12	1
1:A:127:HIS:ND1	1:A:127:HIS:N	0.41	2.68	14	1
1:A:39:ILE:C	1:A:39:ILE:HD13	0.41	2.34	16	1
1:A:59:TYR:HA	1:A:74:ILE:HD12	0.41	1.92	1	1
1:A:51:LEU:C	1:A:53:SER:H	0.41	2.18	2	2
1:A:62:ALA:HA	1:A:68:ARG:NH2	0.41	2.30	9	2
1:A:128:VAL:CG1	1:A:168:THR:CB	0.41	2.99	8	1
1:A:29:LEU:HD12	1:A:39:ILE:HD11	0.41	1.92	13	1
1:A:59:TYR:CE1	1:A:60:ILE:O	0.41	2.72	14	2
1:A:60:ILE:CG2	1:A:67:GLU:HB3	0.41	2.46	14	1
1:A:128:VAL:CG2	1:A:206:LEU:HB2	0.41	2.46	15	1
1:A:145:PRO:HD3	1:A:155:VAL:HG22	0.41	1.90	17	1
1:A:154:LEU:CD2	1:A:193:ALA:CB	0.41	2.99	19	1
1:A:45:VAL:HG12	1:A:46:PHE:N	0.41	2.31	4	1
1:A:188:CYS:O	1:A:192:ASP:CB	0.41	2.68	8	1
1:A:132:LYS:CB	1:A:202:ASP:HA	0.41	2.45	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:195:GLN:O	1:A:199:GLN:CG	0.41	2.68	9	1
1:A:139:GLY:HA3	1:A:160:LYS:HB3	0.41	1.92	10	1
1:A:67:GLU:HB2	1:A:68:ARG:NH1	0.41	2.30	1	1
1:A:180:ILE:CD1	1:A:206:LEU:CD1	0.41	2.99	6	1
1:A:199:GLN:C	1:A:201:GLU:H	0.41	2.19	19	2
1:A:46:PHE:CD1	1:A:51:LEU:O	0.41	2.74	12	1
1:A:169:GLY:C	1:A:170:THR:HG22	0.41	2.36	13	1
1:A:78:VAL:HG12	1:A:79:MET:N	0.41	2.31	9	1
1:A:29:LEU:CD1	1:A:66:ALA:HB2	0.41	2.46	10	1
1:A:181:ASP:CG	1:A:200:CYS:HG	0.41	2.19	10	1
1:A:44:SER:HB3	1:A:46:PHE:CZ	0.41	2.51	14	1
1:A:48:THR:O	1:A:49:GLU:CB	0.41	2.69	14	1
1:A:42:GLN:CG	1:A:56:LEU:CD1	0.41	2.98	16	1
1:A:113:PHE:CE1	1:A:167:ARG:HD2	0.41	2.51	3	1
1:A:140:ILE:CD1	1:A:165:ALA:CB	0.41	2.99	4	1
1:A:176:LYS:O	1:A:209:ARG:N	0.41	2.53	6	2
1:A:46:PHE:CZ	1:A:51:LEU:CA	0.41	3.04	7	1
1:A:161:LYS:HA	1:A:167:ARG:NH1	0.41	2.30	10	2
1:A:159:ILE:CG2	1:A:166:HIS:N	0.41	2.84	13	1
1:A:57:ILE:HG21	1:A:60:ILE:CD1	0.41	2.45	15	1
1:A:180:ILE:CD1	1:A:193:ALA:CB	0.41	2.99	1	1
1:A:37:PHE:HB3	1:A:39:ILE:HD11	0.41	1.91	3	1
1:A:64:SER:O	1:A:68:ARG:CG	0.41	2.68	13	2
1:A:133:LYS:CD	1:A:136:VAL:CG2	0.41	2.98	4	1
1:A:190:MET:HG3	1:A:191:GLU:N	0.41	2.30	6	2
1:A:39:ILE:CD1	1:A:66:ALA:HB2	0.41	2.43	10	1
1:A:61:GLU:O	1:A:63:ASP:N	0.41	2.53	10	1
1:A:31:ALA:CA	1:A:37:PHE:CE1	0.41	3.03	12	1
1:A:47:ALA:O	1:A:48:THR:CB	0.41	2.69	12	1
1:A:44:SER:HB2	1:A:46:PHE:CZ	0.41	2.50	14	1
1:A:200:CYS:O	1:A:202:ASP:N	0.41	2.53	14	1
1:A:20:VAL:CG1	1:A:115:VAL:O	0.41	2.69	15	1
1:A:113:PHE:CD1	1:A:113:PHE:N	0.41	2.84	17	1
1:A:53:SER:OG	1:A:56:LEU:HD21	0.41	2.16	2	1
1:A:37:PHE:CZ	1:A:101:SER:O	0.41	2.74	6	2
1:A:57:ILE:HD12	1:A:72:LEU:HD22	0.41	1.92	15	1
1:A:117:GLU:OE2	1:A:164:VAL:HG12	0.41	2.15	18	1
1:A:196:ILE:O	1:A:200:CYS:N	0.41	2.54	19	1
1:A:51:LEU:O	1:A:53:SER:N	0.40	2.53	2	1
1:A:48:THR:O	1:A:49:GLU:HG2	0.40	2.16	3	1
1:A:47:ALA:O	1:A:48:THR:CG2	0.40	2.69	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:PHE:CG	1:A:92:GLU:N	0.40	2.89	7	1
1:A:49:GLU:O	1:A:50:THR:OG1	0.40	2.35	10	1
1:A:178:LEU:HD21	1:A:207:LYS:NZ	0.40	2.31	10	1
1:A:119:VAL:CG1	1:A:168:THR:OG1	0.40	2.69	11	1
1:A:42:GLN:O	1:A:56:LEU:HD23	0.40	2.16	12	1
1:A:93:GLU:CG	1:A:94:ALA:N	0.40	2.84	13	1
1:A:136:VAL:O	1:A:137:GLU:C	0.40	2.60	16	1
1:A:41:LEU:HD12	1:A:57:ILE:HG13	0.40	1.93	18	1
1:A:67:GLU:HG3	1:A:68:ARG:NH1	0.40	2.31	20	1
1:A:76:ASP:OD1	1:A:111:ILE:HG21	0.40	2.15	1	1
1:A:138:LEU:O	1:A:163:SER:CB	0.40	2.69	7	1
1:A:177:LEU:CD2	1:A:180:ILE:CG1	0.40	2.99	7	1
1:A:25:THR:HG22	1:A:111:ILE:HD11	0.40	1.92	9	1
1:A:78:VAL:HG21	1:A:109:LEU:HD13	0.40	1.93	11	1
1:A:144:SER:N	1:A:145:PRO:CD	0.40	2.84	12	1
1:A:144:SER:N	1:A:145:PRO:HD2	0.40	2.31	12	1
1:A:185:LEU:CD2	1:A:196:ILE:HD13	0.40	2.46	15	1
1:A:95:ASN:O	1:A:99:ARG:CG	0.40	2.69	3	1
1:A:41:LEU:CB	1:A:98:LEU:CD1	0.40	2.99	5	1
1:A:46:PHE:CE2	1:A:53:SER:HB3	0.40	2.50	8	1
1:A:43:GLY:HA2	1:A:91:PHE:CE2	0.40	2.51	13	1
1:A:54:PRO:CB	1:A:55:PRO:CD	0.40	2.99	14	1
1:A:120:ILE:O	1:A:120:ILE:HG13	0.40	2.16	14	1
1:A:152:ASP:N	1:A:153:PRO:HD3	0.40	2.31	15	1
1:A:125:THR:CG2	1:A:207:LYS:CG	0.40	2.99	1	1
1:A:81:ILE:HD12	1:A:97:LEU:CD1	0.40	2.45	3	1
1:A:136:VAL:CG1	1:A:137:GLU:N	0.40	2.84	8	2
1:A:29:LEU:O	1:A:107:VAL:N	0.40	2.55	11	1
1:A:64:SER:H	1:A:68:ARG:CZ	0.40	2.29	11	1
1:A:46:PHE:CE2	1:A:49:GLU:O	0.40	2.75	18	1
1:A:59:TYR:CG	1:A:60:ILE:N	0.40	2.90	16	1
1:A:36:GLY:C	1:A:37:PHE:CD1	0.40	2.95	17	1
1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CD2	0.40	2.83	19	1
1:A:116:ALA:O	1:A:117:GLU:CG	0.40	2.69	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	186/196 (95%)	138±4 (74±2%)	31±5 (17±3%)	16±3 (9±1%)	1 12
All	All	3720/3920 (95%)	2769 (74%)	621 (17%)	330 (9%)	1 12

All 58 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	63	ASP	20
1	A	123	SER	19
1	A	118	SER	18
1	A	48	THR	16
1	A	202	ASP	16
1	A	50	THR	15
1	A	203	LEU	14
1	A	71	VAL	13
1	A	74	ILE	12
1	A	211	ASP	11
1	A	49	GLU	10
1	A	116	ALA	10
1	A	122	SER	10
1	A	45	VAL	10
1	A	47	ALA	9
1	A	135	SER	9
1	A	170	THR	9
1	A	181	ASP	9
1	A	52	SER	7
1	A	171	LEU	6
1	A	44	SER	5
1	A	51	LEU	5
1	A	55	PRO	4
1	A	75	GLY	4
1	A	36	GLY	4
1	A	134	HIS	3
1	A	189	SER	3
1	A	85	PRO	3
1	A	77	ARG	3
1	A	137	GLU	3
1	A	20	VAL	3
1	A	153	PRO	3
1	A	145	PRO	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	200	CYS	3
1	A	54	PRO	3
1	A	188	CYS	2
1	A	169	GLY	2
1	A	117	GLU	2
1	A	175	ASP	2
1	A	186	ASP	2
1	A	136	VAL	2
1	A	152	ASP	2
1	A	22	THR	2
1	A	162	GLY	2
1	A	174	GLY	2
1	A	46	PHE	2
1	A	158	ASP	2
1	A	201	GLU	1
1	A	172	GLU	1
1	A	173	LEU	1
1	A	86	THR	1
1	A	59	TYR	1
1	A	62	ALA	1
1	A	168	THR	1
1	A	43	GLY	1
1	A	78	VAL	1
1	A	131	PRO	1
1	A	107	VAL	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	165/174 (95%)	114±5 (69±3%)	52±5 (31±3%)	1 14
All	All	3300/3480 (95%)	2270 (69%)	1030 (31%)	1 14

All 132 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	30	THR	20
1	A	104	THR	20
1	A	108	THR	20
1	A	123	SER	19
1	A	125	THR	19
1	A	197	LEU	19
1	A	160	LYS	18
1	A	133	LYS	17
1	A	167	ARG	17
1	A	68	ARG	17
1	A	158	ASP	16
1	A	106	LYS	16
1	A	132	LYS	15
1	A	199	GLN	15
1	A	51	LEU	15
1	A	32	ASP	14
1	A	109	LEU	14
1	A	127	HIS	14
1	A	67	GLU	13
1	A	157	SER	13
1	A	189	SER	13
1	A	195	GLN	13
1	A	52	SER	13
1	A	79	MET	12
1	A	101	SER	12
1	A	126	PHE	12
1	A	210	LYS	12
1	A	41	LEU	12
1	A	64	SER	12
1	A	171	LEU	12
1	A	56	LEU	12
1	A	177	LEU	12
1	A	113	PHE	11
1	A	140	ILE	11
1	A	53	SER	11
1	A	161	LYS	11
1	A	93	GLU	11
1	A	48	THR	10
1	A	89	SER	10
1	A	163	SER	10
1	A	211	ASP	10
1	A	63	ASP	10
1	A	122	SER	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	176	LYS	10
1	A	192	ASP	9
1	A	207	LYS	9
1	A	50	THR	9
1	A	77	ARG	9
1	A	118	SER	9
1	A	130	LEU	9
1	A	209	ARG	9
1	A	129	LYS	9
1	A	135	SER	9
1	A	99	ARG	9
1	A	24	THR	8
1	A	44	SER	8
1	A	159	ILE	8
1	A	69	CYS	8
1	A	90	THR	8
1	A	100	ASP	8
1	A	138	LEU	8
1	A	188	CYS	8
1	A	208	ILE	8
1	A	76	ASP	8
1	A	96	GLN	8
1	A	186	ASP	7
1	A	42	GLN	7
1	A	134	HIS	7
1	A	143	SER	7
1	A	23	GLU	7
1	A	22	THR	6
1	A	117	GLU	6
1	A	175	ASP	6
1	A	185	LEU	6
1	A	198	GLN	6
1	A	40	GLN	6
1	A	114	ASP	6
1	A	172	GLU	6
1	A	170	THR	6
1	A	73	GLN	5
1	A	178	LEU	5
1	A	39	ILE	5
1	A	196	ILE	5
1	A	95	ASN	5
1	A	187	SER	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	202	ASP	5
1	A	181	ASP	5
1	A	206	LEU	5
1	A	27	VAL	4
1	A	60	ILE	4
1	A	152	ASP	4
1	A	97	LEU	4
1	A	173	LEU	4
1	A	26	GLU	4
1	A	87	GLU	4
1	A	137	GLU	4
1	A	166	HIS	4
1	A	190	MET	4
1	A	119	VAL	4
1	A	144	SER	4
1	A	61	GLU	4
1	A	58	SER	3
1	A	72	LEU	3
1	A	120	ILE	3
1	A	205	LYS	3
1	A	29	LEU	3
1	A	102	SER	3
1	A	88	ASP	3
1	A	82	ASN	3
1	A	105	SER	3
1	A	200	CYS	3
1	A	49	GLU	3
1	A	154	LEU	2
1	A	204	VAL	2
1	A	35	THR	2
1	A	110	GLU	2
1	A	182	ASN	2
1	A	203	LEU	2
1	A	98	LEU	2
1	A	107	VAL	2
1	A	86	THR	2
1	A	112	GLU	2
1	A	201	GLU	1
1	A	136	VAL	1
1	A	115	VAL	1
1	A	92	GLU	1
1	A	21	HIS	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	20	VAL	1
1	A	184	ARG	1
1	A	57	ILE	1
1	A	71	VAL	1
1	A	191	GLU	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