Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Apr 21, 2024 – 04:48 PM EDT

PDB ID	:	1WLO
Title	:	Solution structure of the hypothetical protein from thermus thermophilus HB8
Authors	:	Hayashi, F.; Yokoyama, S.; RIKEN Structural Genomics/Proteomics Initiative (RSGI)
Deposited on	:	2004-06-28

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 types of validation reports are described at
http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types.

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

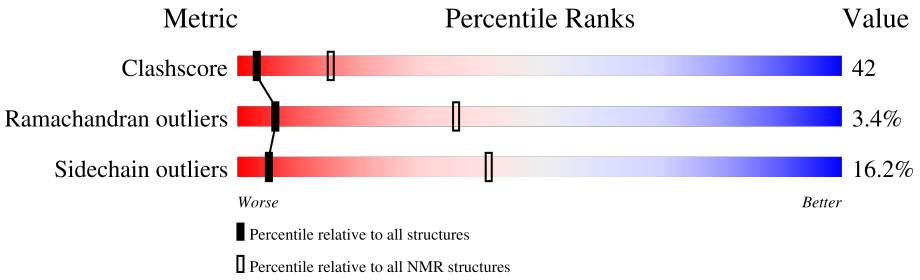
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.36.2

1 Overall quality at a glance (i)

The following experimental techniques were used to determine the structure:
SOLUTION NMR

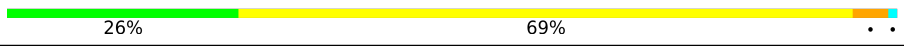
The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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	136	

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 20 models. Model 5 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	**Residue range (total)**	**Backbone RMSD (Å)**	**Medoid model**
1	A:2-A:136 (135)	0.63	5

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

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

The models can be grouped into 4 clusters and 3 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2171 atoms, of which 1099 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called sufE protein.

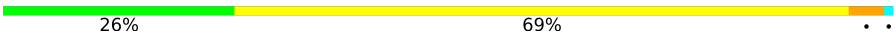
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	136	2171	699	1099	182	189	2	0

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: sufE protein

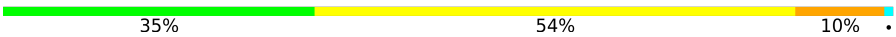
Chain A: 

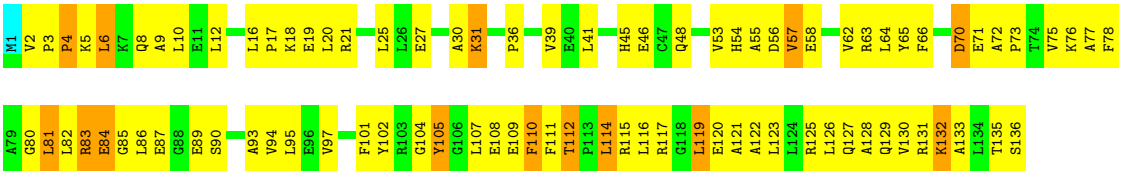
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: sufE protein

Chain A: 



4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: sufE protein

Chain A: 31% 57% 10% ••

M1 V2 P3 P4 K5 L6 K7 Q8 A9 L10 E11 L12 F13 K14 S15 L16 P17 K18 E19 L20 R21 S22 Q23 V24 L25 L26 E27 Y28 A29 A30 K31 P36 V39 E40 L41 V44 H45 E46 C47 Q48 F51 F52 V53 H54 A55 E58 V62 R63 L64 Y65 F66 H67 V68 P69

D70 E71 A72 P73 T74 V75 K76 A77 F78 A79 G80 L81 L82 R83 E84 G85 L86 E87 G88 E89 S90 P91 E92 A93 V94 L95 E96 V97 F101 Y102 R103 G104 Y105 G106 L107 E108 E109 F110 F111 T112 G118 L119 E120 A121 A122 R125 L126 Q127 A128 Q129 V130 R131 K132 A133 L134 T135 S136

4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: sufE protein

Chain A: 36% 53% 10% •

M1 V2 P3 P4 K5 L6 K7 Q8 L12 F13 K14 S15 L16 P17 K18 E19 L20 R21 S22 Q23 V24 L25 L26 E27 Y28 A29 P36 V39 E40 L41 V44 H45 E46 C47 Q48 V53 H54 A55 D56 V57 E58 V62 R63 L64 Y65 F66 H67 V68 P69 D70 E71 A72 P73

K76 A77 F78 A79 G80 L81 L82 R83 E84 G85 L86 E89 S90 P91 E92 A93 V94 L95 E96 V97 F101 Y102 R103 G104 Y105 G106 L107 E108 F111 T112 L116 L119 E120 A121 A122 L123 L124 R125 L126 Q127 V130 R131 K132 A133 L134 T135 S136

4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: sufE protein

Chain A: 40% 50% 10% •

M1 V2 P3 P4 K5 L6 K7 Q8 A9 L10 E11 L12 L16 P17 K18 E19 L20 R21 S22 Q23 V24 L25 L26 E27 Y28 A29 A30 K31 V32 E40 V44 H45 E46 C47 Q48 F51 F52 V53 H54 E58 V62 R63 L64 Y65 F66 H67 V68 P69 D70 E71 A72 P73 T74 V75

K76 A77 F78 L81 L82 R83 E84 G85 L86 E87 G88 E89 S90 P91 V94 L95 E96 V97 P98 F101 Y102 R103 G104 Y105 E109 F110 R115 L116 L119 A122 L123 L124 R125 L126 Q127 A128 Q129 V130 R131 K132 A133 L134 T135 S136

4.2.5 Score per residue for model 5 (medoid)

- Molecule 1: sufE protein

Chain A: 43% 48% 9% •

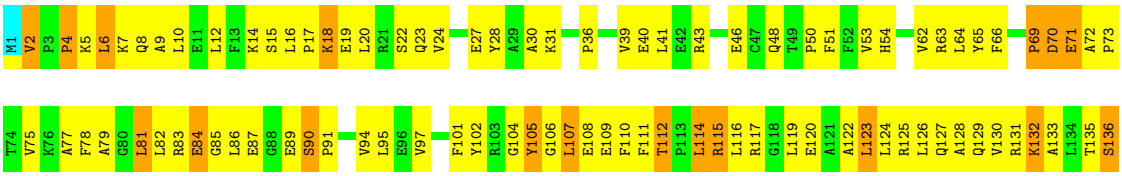
M1 V2 P3 P4 K5 L6 K7 Q8 A9 L10 E11 L12 F13 L16 P17 K18 E19 L20 R21 S22 Q23 V24 L25 A29 A30 K31 V32 G38 P50 F51 F52 V53 H54 A55 D56 V57 E58 V62 R63 L64 Y65 V68 P69 D70 P73 T74 V75 K76 A77 F78 L81 L82

R83 E84 G85 L86 E89 S90 P91 V94 L95 E96 V97 P98 F101 Y102 R103 G104 Y105 G106 L107 F110 F111 R115 L116 R117 G118 L119 E120 A121 A122 L123 L124 R125 L126 Q127 A128 Q129 V130 R131 K132 A133 L134 T135 S136

4.2.6 Score per residue for model 6

• Molecule 1: sufE protein

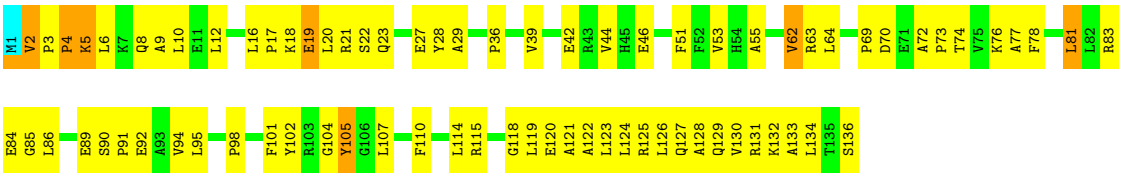
Chain A: 32% 54% 13% •



4.2.7 Score per residue for model 7

• Molecule 1: sufE protein

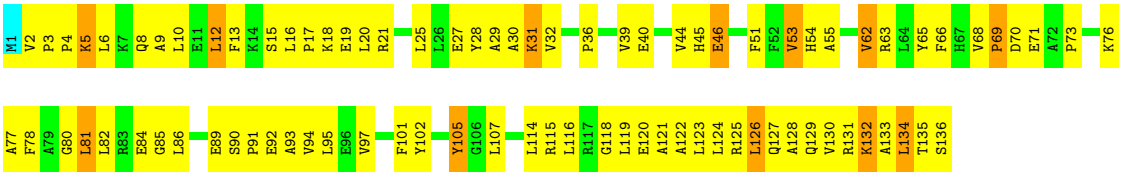
Chain A: 43% 51% 5% •



4.2.8 Score per residue for model 8

• Molecule 1: sufE protein

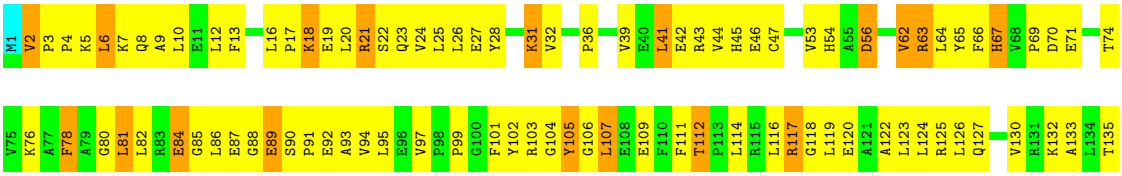
Chain A: 36% 54% 9% •



4.2.9 Score per residue for model 9

• Molecule 1: sufE protein

Chain A: 30% 56% 13% •



S136

4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: sufE protein

Chain A: 31% 59% 10%

M1 V2 P3 P4 K5 L6 K7 Q8 A9 L10 E11 L12 S15 L16 P17 K18 E19 L20 R21 S22 Q23 V24 L25 L26 E27 Y28 A29 A30 K31 V32 P33 P36 P37 G38 V39 E40 L41 E42 R43 V44 H45 E46 P50 F51 F52 V53 H54 A55 V62 R63 L64 Y65 F66 P69 D70

E71 A72 P73 K76 A77 F78 L81 L82 R83 E84 G85 L86 E87 G88 E89 S90 P91 E92 A93 V94 L95 E96 V97 P98 F101 Y102 R103 G104 Y105 G106 L107 F111 L114 R115 G118 L119 E120 A121 A122 L123 L124 R125 L126 Q127 A128 Q129 V130 R131 K132 A133 L134 T135 S136

4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: sufE protein

Chain A: 36% 52% 11%

M1 V2 P3 P4 K5 L6 K7 Q8 A9 L10 E11 L12 F13 L16 P17 K18 E19 L20 R21 S22 Q23 V24 L25 L26 E27 Y28 A29 A30 K31 V32 P36 V39 E40 L41 E42 R43 V44 H45 E46 C47 V53 H54 A55 D56 V57 E58 V62 R63 L64 Y65 F66 P69 D70 E71

A72 P73 A77 F78 A79 G80 L81 L82 R83 E84 G85 L86 E87 G88 E89 S90 P91 E92 A93 V94 L95 E96 V97 F101 Y102 R103 G104 Y105 G106 L107 F110 F111 L116 R117 G118 L119 E120 A121 A122 L123 L124 R125 L126 Q127 A128 Q129 V130 R131 K132 A133 S136

4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: sufE protein

Chain A: 36% 54% 9%

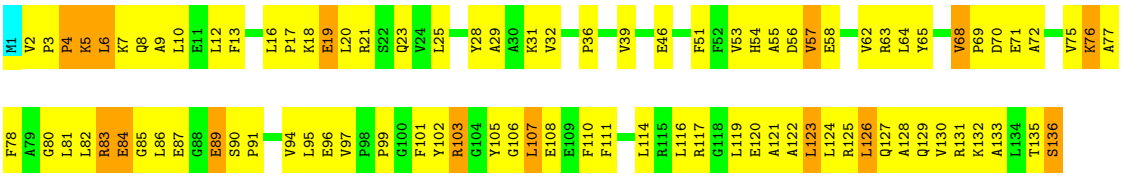
M1 V2 P3 P4 K5 L6 K7 Q8 A9 L10 E11 L12 F13 L16 P17 K18 E19 L20 R21 S22 Q23 V24 L25 L26 E27 Y28 A29 A30 K31 G38 E42 H45 E46 C47 Q48 V53 H54 A55 D56 V57 E58 V62 R63 L64 Y65 F66 H67 V68 P69 D70 E71 A72 P73

K76 A77 F78 A79 G80 L81 L82 R83 E84 G85 L86 E87 G88 E89 S90 P91 V94 L95 E96 V97 F101 Y102 R103 G104 Y105 G106 L107 E108 F111 L114 R115 L116 R117 G118 L119 E120 A121 R125 L126 Q127 A128 Q129 V130 R131 K132 A133 L134 T135 S136

4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: sufE protein

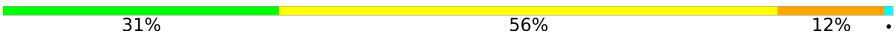
Chain A: 32% 56% 11%

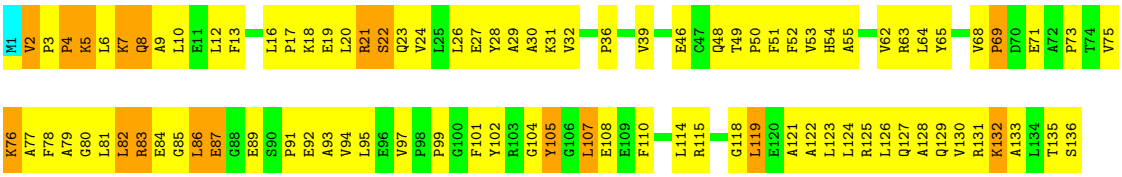


4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: sufE protein

Chain A:

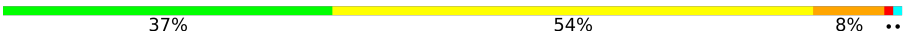


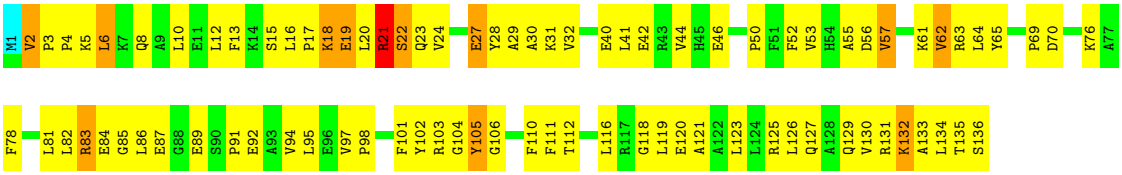


4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: sufE protein

Chain A:

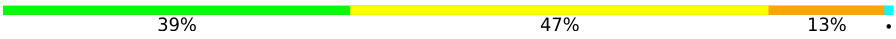


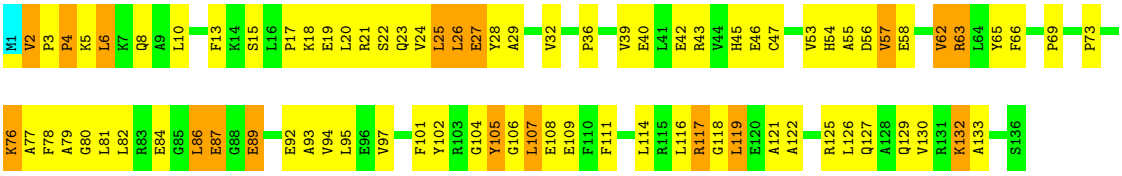


4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: sufE protein

Chain A:

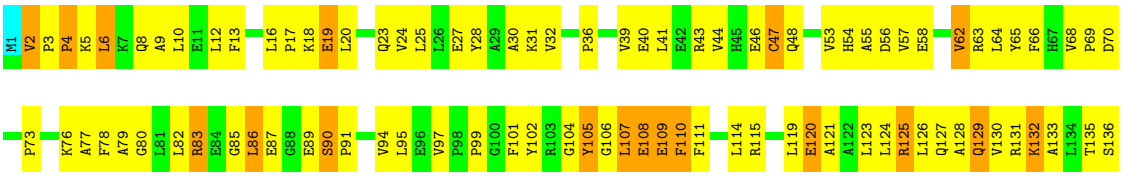




4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: sufE protein

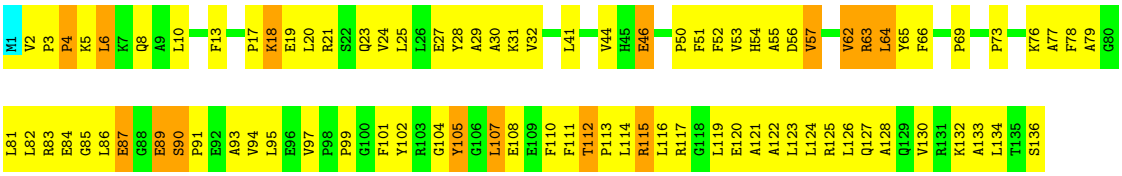
Chain A: 32% 54% 13%



4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: sufE protein

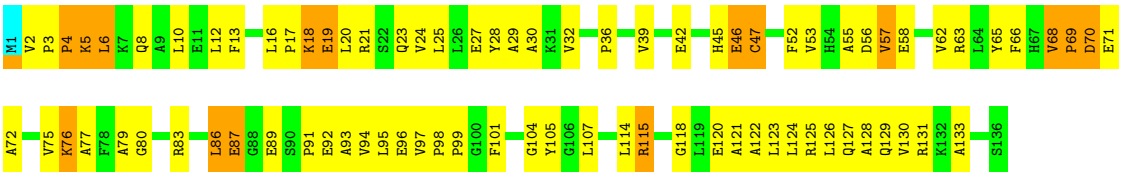
Chain A: 35% 54% 11%



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: sufE protein

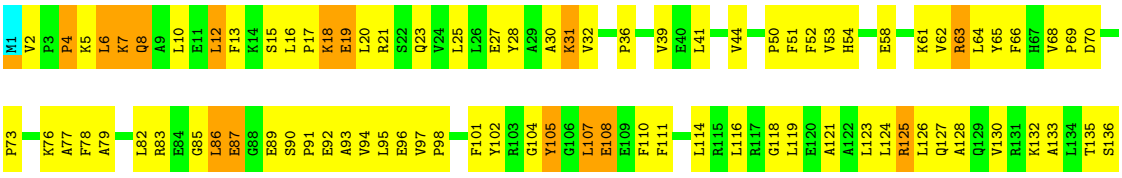
Chain A: 39% 49% 11%



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: sufE protein

Chain A: 36% 52% 11%



5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

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

Of the 100 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy, target function*.

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

Software name	Classification	Version
CYANA	structure solution	1.0.7
CYANA	refinement	1.0.7

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	1064	1090	1090	91±10
All	All	21280	21800	21800	1814

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 42.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:LEU:HD12	1:A:94:VAL:HG12	1.09	1.24	20	1
1:A:53:VAL:HG22	1:A:126:LEU:HD21	1.06	1.22	5	3
1:A:86:LEU:HD12	1:A:94:VAL:HG22	1.03	1.27	14	4
1:A:53:VAL:CG2	1:A:126:LEU:HD21	1.00	1.85	5	4
1:A:89:GLU:OE1	1:A:93:ALA:HB3	0.98	1.57	18	1
1:A:81:LEU:HD22	1:A:81:LEU:O	0.94	1.63	8	2
1:A:91:PRO:O	1:A:95:LEU:HD23	0.94	1.63	10	11
1:A:90:SER:O	1:A:94:VAL:HG13	0.90	1.65	4	4
1:A:89:GLU:CG	1:A:94:VAL:HG23	0.90	1.97	18	1
1:A:72:ALA:HB3	1:A:75:VAL:HG22	0.90	1.42	2	3
1:A:57:VAL:CG1	1:A:133:ALA:HB1	0.89	1.97	1	9
1:A:62:VAL:HG23	1:A:89:GLU:O	0.87	1.68	13	7
1:A:93:ALA:O	1:A:97:VAL:HG23	0.86	1.70	16	8
1:A:126:LEU:O	1:A:130:VAL:HG23	0.86	1.70	5	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:122:ALA:O	1:A:126:LEU:HD22	0.85	1.71	10	2
1:A:39:VAL:HG13	1:A:54:HIS:CD2	0.84	2.05	16	2
1:A:89:GLU:CD	1:A:94:VAL:HG23	0.84	1.91	18	1
1:A:78:PHE:CD1	1:A:119:LEU:HD13	0.84	2.07	18	3
1:A:108:GLU:HA	1:A:116:LEU:HD11	0.84	1.47	1	4
1:A:12:LEU:HD13	1:A:13:PHE:N	0.83	1.88	8	2
1:A:57:VAL:HG12	1:A:133:ALA:HB1	0.83	1.49	3	3
1:A:78:PHE:CG	1:A:119:LEU:HD13	0.83	2.09	6	3
1:A:12:LEU:HD23	1:A:13:PHE:N	0.83	1.89	3	1
1:A:132:LYS:O	1:A:135:THR:HG22	0.81	1.74	4	8
1:A:102:TYR:CZ	1:A:116:LEU:HD12	0.81	2.11	9	1
1:A:72:ALA:HB3	1:A:75:VAL:CG2	0.80	2.05	19	3
1:A:62:VAL:HG13	1:A:89:GLU:O	0.80	1.75	20	12
1:A:10:LEU:HD13	1:A:105:TYR:CE2	0.80	2.11	1	6
1:A:53:VAL:HG23	1:A:66:PHE:CD2	0.80	2.11	8	1
1:A:86:LEU:HD12	1:A:94:VAL:CG2	0.80	2.06	16	2
1:A:102:TYR:CE1	1:A:116:LEU:HD22	0.79	2.12	8	3
1:A:66:PHE:CD2	1:A:79:ALA:HB1	0.79	2.12	18	3
1:A:62:VAL:HG23	1:A:64:LEU:HD11	0.78	1.53	18	2
1:A:78:PHE:O	1:A:82:LEU:HD22	0.78	1.78	16	4
1:A:91:PRO:O	1:A:95:LEU:HD12	0.78	1.78	9	3
1:A:111:PHE:HB2	1:A:116:LEU:HD21	0.78	1.54	9	2
1:A:112:THR:O	1:A:116:LEU:HD23	0.78	1.79	15	2
1:A:95:LEU:HD21	1:A:127:GLN:O	0.78	1.79	3	5
1:A:102:TYR:HB2	1:A:107:LEU:HD23	0.76	1.56	14	7
1:A:134:LEU:C	1:A:134:LEU:HD12	0.76	2.01	8	3
1:A:102:TYR:HB2	1:A:107:LEU:HD13	0.76	1.56	13	4
1:A:20:LEU:O	1:A:24:VAL:HG12	0.75	1.80	11	1
1:A:53:VAL:HB	1:A:126:LEU:HD21	0.75	1.57	19	8
1:A:131:ARG:O	1:A:135:THR:HG22	0.75	1.80	8	2
1:A:36:PRO:HD2	1:A:39:VAL:HG11	0.75	1.57	9	7
1:A:28:TYR:O	1:A:32:VAL:HG23	0.75	1.82	20	9
1:A:70:ASP:OD2	1:A:72:ALA:HB2	0.75	1.81	7	1
1:A:86:LEU:CD1	1:A:94:VAL:HG22	0.74	2.10	14	2
1:A:68:VAL:HG21	1:A:76:LYS:HD2	0.74	1.58	14	2
1:A:2:VAL:HG12	1:A:97:VAL:HA	0.74	1.58	11	3
1:A:64:LEU:HD13	1:A:87:GLU:HA	0.73	1.59	10	6
1:A:73:PRO:O	1:A:77:ALA:HB2	0.73	1.83	18	13
1:A:72:ALA:HB3	1:A:75:VAL:HB	0.73	1.59	1	3
1:A:62:VAL:HG21	1:A:94:VAL:HG21	0.73	1.60	15	10
1:A:22:SER:O	1:A:26:LEU:HD23	0.73	1.84	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:ALA:HB1	1:A:130:VAL:CG2	0.73	2.13	2	7
1:A:41:LEU:HD23	1:A:41:LEU:N	0.72	2.00	9	1
1:A:85:GLY:O	1:A:86:LEU:HD23	0.72	1.85	15	15
1:A:121:ALA:HA	1:A:124:LEU:HD12	0.72	1.60	10	3
1:A:86:LEU:CD1	1:A:94:VAL:HG12	0.71	2.10	20	1
1:A:2:VAL:HG13	1:A:6:LEU:HD23	0.71	1.61	4	3
1:A:99:PRO:HB3	1:A:124:LEU:HD11	0.70	1.64	17	5
1:A:64:LEU:HD12	1:A:64:LEU:N	0.70	2.02	18	6
1:A:78:PHE:CD2	1:A:119:LEU:HD22	0.70	2.21	4	3
1:A:86:LEU:HD12	1:A:94:VAL:CG1	0.70	2.10	20	1
1:A:111:PHE:CB	1:A:116:LEU:HD21	0.70	2.15	9	2
1:A:13:PHE:CE2	1:A:107:LEU:CD1	0.69	2.75	14	6
1:A:134:LEU:HD12	1:A:135:THR:N	0.69	2.03	12	3
1:A:79:ALA:HA	1:A:82:LEU:HD12	0.69	1.65	14	2
1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CD2	0.69	2.55	16	5
1:A:86:LEU:O	1:A:87:GLU:C	0.69	2.31	20	4
1:A:2:VAL:CG1	1:A:6:LEU:HD23	0.68	2.18	14	4
1:A:81:LEU:HD13	1:A:82:LEU:N	0.68	2.04	1	2
1:A:66:PHE:CG	1:A:79:ALA:HB1	0.68	2.24	16	4
1:A:12:LEU:HD11	1:A:16:LEU:CD1	0.68	2.18	20	2
1:A:89:GLU:OE1	1:A:90:SER:O	0.68	2.12	18	1
1:A:90:SER:O	1:A:94:VAL:HG23	0.68	1.88	2	3
1:A:9:ALA:HB2	1:A:84:GLU:CD	0.67	2.09	5	5
1:A:95:LEU:HD11	1:A:131:ARG:HG3	0.67	1.66	5	9
1:A:82:LEU:O	1:A:86:LEU:HD12	0.67	1.89	15	8
1:A:81:LEU:HD23	1:A:81:LEU:O	0.67	1.90	3	2
1:A:55:ALA:HB3	1:A:129:GLN:HB2	0.67	1.67	16	7
1:A:32:VAL:HG22	1:A:83:ARG:HD2	0.67	1.65	18	1
1:A:25:LEU:CD1	1:A:110:PHE:CE1	0.66	2.78	4	1
1:A:78:PHE:CD1	1:A:81:LEU:HD23	0.66	2.25	2	2
1:A:102:TYR:CE2	1:A:116:LEU:HD12	0.66	2.26	9	1
1:A:78:PHE:CB	1:A:119:LEU:HD22	0.66	2.20	13	2
1:A:123:LEU:C	1:A:123:LEU:HD23	0.66	2.11	4	1
1:A:16:LEU:HD13	1:A:24:VAL:HG21	0.66	1.64	14	2
1:A:57:VAL:HG21	1:A:91:PRO:HG3	0.66	1.68	3	1
1:A:53:VAL:HG22	1:A:126:LEU:CD2	0.66	2.13	5	1
1:A:101:PHE:CD1	1:A:102:TYR:N	0.65	2.64	7	5
1:A:25:LEU:HD13	1:A:111:PHE:CZ	0.65	2.26	9	7
1:A:102:TYR:CZ	1:A:116:LEU:HD22	0.65	2.27	1	6
1:A:53:VAL:HG13	1:A:126:LEU:CD1	0.65	2.22	8	2
1:A:64:LEU:CD2	1:A:126:LEU:HD13	0.64	2.23	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:LEU:HD12	1:A:81:LEU:O	0.64	1.92	7	5
1:A:12:LEU:HD23	1:A:12:LEU:C	0.64	2.13	3	1
1:A:107:LEU:N	1:A:107:LEU:HD13	0.64	2.06	20	5
1:A:97:VAL:O	1:A:123:LEU:HD21	0.64	1.93	10	3
1:A:55:ALA:HB2	1:A:126:LEU:CD2	0.64	2.21	16	2
1:A:53:VAL:HG13	1:A:126:LEU:HD11	0.64	1.70	8	1
1:A:57:VAL:CG1	1:A:133:ALA:CB	0.64	2.76	19	8
1:A:99:PRO:HB3	1:A:124:LEU:HD21	0.64	1.69	9	2
1:A:36:PRO:O	1:A:39:VAL:HG12	0.63	1.93	1	7
1:A:41:LEU:HD23	1:A:53:VAL:CA	0.63	2.22	3	1
1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:HD22	0.63	2.08	20	5
1:A:119:LEU:O	1:A:122:ALA:HB3	0.63	1.94	1	8
1:A:53:VAL:CG2	1:A:66:PHE:CE2	0.63	2.81	8	1
1:A:24:VAL:HG12	1:A:28:TYR:CE2	0.63	2.28	17	2
1:A:81:LEU:HD22	1:A:81:LEU:C	0.63	2.14	1	2
1:A:53:VAL:HG12	1:A:66:PHE:CD1	0.63	2.29	2	8
1:A:57:VAL:HG12	1:A:133:ALA:CB	0.63	2.23	3	9
1:A:41:LEU:N	1:A:41:LEU:CD2	0.63	2.60	9	1
1:A:86:LEU:HD11	1:A:97:VAL:HG21	0.63	1.69	19	2
1:A:25:LEU:HD22	1:A:111:PHE:CZ	0.63	2.29	11	2
1:A:44:VAL:HG22	1:A:125:ARG:CD	0.62	2.24	8	4
1:A:94:VAL:O	1:A:97:VAL:HG23	0.62	1.94	4	1
1:A:27:GLU:O	1:A:30:ALA:HB3	0.62	1.93	10	8
1:A:13:PHE:CZ	1:A:25:LEU:HD21	0.62	2.28	12	4
1:A:68:VAL:HG11	1:A:75:VAL:CG2	0.62	2.24	4	1
1:A:12:LEU:HD13	1:A:12:LEU:C	0.61	2.15	8	2
1:A:25:LEU:HD11	1:A:110:PHE:CD2	0.61	2.31	11	1
1:A:62:VAL:HG23	1:A:64:LEU:CD1	0.61	2.24	18	3
1:A:50:PRO:O	1:A:52:PHE:CE2	0.61	2.53	5	2
1:A:9:ALA:HB1	1:A:28:TYR:OH	0.61	1.94	12	2
1:A:51:PHE:CD1	1:A:75:VAL:CG1	0.61	2.84	14	1
1:A:118:GLY:O	1:A:121:ALA:HB3	0.61	1.96	2	5
1:A:81:LEU:C	1:A:81:LEU:HD13	0.61	2.16	10	1
1:A:53:VAL:CG1	1:A:126:LEU:HD11	0.61	2.26	10	2
1:A:41:LEU:HD23	1:A:53:VAL:HA	0.61	1.71	3	1
1:A:53:VAL:HG12	1:A:66:PHE:CD2	0.61	2.30	6	1
1:A:53:VAL:HG23	1:A:66:PHE:CD1	0.60	2.31	3	3
1:A:82:LEU:CD2	1:A:101:PHE:CZ	0.60	2.84	9	1
1:A:29:ALA:HB1	1:A:76:LYS:HB3	0.60	1.73	2	12
1:A:19:GLU:HG2	1:A:20:LEU:HD12	0.60	1.73	14	1
1:A:12:LEU:CD1	1:A:13:PHE:N	0.60	2.65	20	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:VAL:HG22	1:A:125:ARG:HD3	0.59	1.72	9	4
1:A:64:LEU:N	1:A:64:LEU:CD1	0.59	2.65	18	4
1:A:62:VAL:HG23	1:A:64:LEU:HD12	0.59	1.75	2	1
1:A:44:VAL:HG23	1:A:51:PHE:O	0.59	1.98	18	3
1:A:17:PRO:HG2	1:A:20:LEU:HD22	0.59	1.74	15	1
1:A:62:VAL:CG2	1:A:64:LEU:HD11	0.59	2.25	18	2
1:A:78:PHE:CZ	1:A:82:LEU:HD21	0.59	2.32	1	1
1:A:104:GLY:O	1:A:105:TYR:CG	0.59	2.56	19	14
1:A:91:PRO:HA	1:A:94:VAL:HG22	0.59	1.73	4	4
1:A:82:LEU:HD21	1:A:101:PHE:CZ	0.59	2.33	9	2
1:A:19:GLU:HG3	1:A:20:LEU:HD12	0.58	1.73	2	1
1:A:78:PHE:CG	1:A:119:LEU:HD22	0.58	2.34	13	2
1:A:86:LEU:HD22	1:A:94:VAL:HG22	0.58	1.75	1	2
1:A:86:LEU:HD21	1:A:97:VAL:HG21	0.58	1.74	18	4
1:A:102:TYR:CE2	1:A:116:LEU:CD1	0.58	2.87	9	1
1:A:123:LEU:HD21	1:A:127:GLN:CD	0.58	2.19	4	1
1:A:95:LEU:HD21	1:A:130:VAL:HB	0.58	1.76	18	5
1:A:57:VAL:HG13	1:A:133:ALA:HB1	0.58	1.74	12	6
1:A:95:LEU:HD11	1:A:131:ARG:CG	0.57	2.28	7	5
1:A:81:LEU:HD23	1:A:81:LEU:C	0.57	2.20	3	2
1:A:51:PHE:CD1	1:A:75:VAL:HG11	0.57	2.33	14	1
1:A:17:PRO:CG	1:A:20:LEU:HD12	0.57	2.29	5	10
1:A:63:ARG:C	1:A:64:LEU:HD12	0.57	2.20	18	1
1:A:78:PHE:CE2	1:A:82:LEU:HD11	0.56	2.35	11	2
1:A:108:GLU:CA	1:A:116:LEU:HD11	0.56	2.28	1	1
1:A:12:LEU:CD2	1:A:13:PHE:N	0.56	2.67	3	1
1:A:53:VAL:HG23	1:A:66:PHE:CE2	0.56	2.33	8	1
1:A:64:LEU:HD12	1:A:83:ARG:HA	0.56	1.77	7	2
1:A:102:TYR:CE2	1:A:116:LEU:HD22	0.56	2.35	12	2
1:A:12:LEU:HD11	1:A:16:LEU:HD12	0.56	1.78	20	1
1:A:9:ALA:HB2	1:A:84:GLU:OE1	0.56	2.01	9	4
1:A:102:TYR:CE1	1:A:116:LEU:HD13	0.56	2.36	6	1
1:A:10:LEU:HD11	1:A:101:PHE:CD2	0.56	2.36	10	4
1:A:6:LEU:HD11	1:A:101:PHE:CE2	0.55	2.36	10	1
1:A:64:LEU:HD21	1:A:126:LEU:HD13	0.55	1.77	6	1
1:A:99:PRO:O	1:A:102:TYR:CE2	0.55	2.59	18	1
1:A:55:ALA:HB2	1:A:126:LEU:HB3	0.55	1.77	1	4
1:A:2:VAL:CG1	1:A:6:LEU:HD12	0.55	2.32	2	4
1:A:41:LEU:HD23	1:A:53:VAL:C	0.55	2.22	3	3
1:A:13:PHE:CE1	1:A:25:LEU:CD2	0.55	2.88	12	1
1:A:78:PHE:CD2	1:A:82:LEU:HD11	0.55	2.37	11	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:LYS:O	1:A:79:ALA:HB3	0.55	2.02	3	3
1:A:10:LEU:HD11	1:A:101:PHE:HD2	0.55	1.61	12	3
1:A:36:PRO:HG2	1:A:39:VAL:HG21	0.55	1.78	17	8
1:A:25:LEU:HD11	1:A:110:PHE:CD1	0.55	2.36	17	1
1:A:70:ASP:O	1:A:71:GLU:CG	0.54	2.55	13	2
1:A:111:PHE:CB	1:A:116:LEU:CD2	0.54	2.85	9	2
1:A:62:VAL:CG1	1:A:90:SER:C	0.54	2.76	3	6
1:A:10:LEU:CD1	1:A:105:TYR:CE2	0.54	2.88	1	1
1:A:62:VAL:O	1:A:64:LEU:HD12	0.54	2.03	10	1
1:A:32:VAL:HG22	1:A:83:ARG:HD3	0.54	1.80	15	2
1:A:81:LEU:HD13	1:A:81:LEU:C	0.54	2.22	8	2
1:A:101:PHE:C	1:A:101:PHE:CD1	0.54	2.81	11	5
1:A:81:LEU:O	1:A:84:GLU:CG	0.54	2.56	13	3
1:A:86:LEU:O	1:A:87:GLU:O	0.54	2.26	16	3
1:A:78:PHE:O	1:A:81:LEU:N	0.54	2.41	12	11
1:A:85:GLY:O	1:A:86:LEU:CD2	0.53	2.55	18	12
1:A:25:LEU:HD12	1:A:110:PHE:CE1	0.53	2.38	4	1
1:A:82:LEU:HD22	1:A:82:LEU:H	0.53	1.63	16	2
1:A:83:ARG:O	1:A:87:GLU:CB	0.53	2.56	14	3
1:A:95:LEU:HD13	1:A:127:GLN:HB3	0.53	1.80	6	7
1:A:64:LEU:HD22	1:A:126:LEU:CD1	0.53	2.33	13	1
1:A:10:LEU:HD13	1:A:101:PHE:O	0.53	2.03	16	3
1:A:91:PRO:HA	1:A:94:VAL:CG2	0.53	2.34	4	4
1:A:95:LEU:HD23	1:A:127:GLN:HB3	0.53	1.78	9	3
1:A:51:PHE:CE1	1:A:75:VAL:HG12	0.53	2.38	14	1
1:A:89:GLU:CG	1:A:94:VAL:CG2	0.53	2.82	18	1
1:A:25:LEU:HD13	1:A:111:PHE:CE2	0.53	2.38	2	2
1:A:122:ALA:O	1:A:126:LEU:HD12	0.53	2.04	4	2
1:A:17:PRO:CG	1:A:20:LEU:HD22	0.53	2.34	15	1
1:A:17:PRO:HG2	1:A:20:LEU:HD12	0.53	1.79	3	7
1:A:78:PHE:CE2	1:A:82:LEU:HD21	0.53	2.39	1	2
1:A:135:THR:O	1:A:135:THR:HG23	0.53	2.03	1	1
1:A:98:PRO:O	1:A:123:LEU:CD2	0.53	2.57	7	6
1:A:102:TYR:CG	1:A:103:ARG:N	0.53	2.76	11	4
1:A:82:LEU:CA	1:A:86:LEU:HD12	0.53	2.34	12	3
1:A:10:LEU:HB3	1:A:105:TYR:CE2	0.53	2.39	1	10
1:A:79:ALA:HA	1:A:82:LEU:HD23	0.53	1.79	16	1
1:A:23:GLN:CG	1:A:24:VAL:N	0.53	2.71	4	2
1:A:120:GLU:O	1:A:124:LEU:HD22	0.52	2.02	9	2
1:A:56:ASP:O	1:A:63:ARG:N	0.52	2.42	15	10
1:A:6:LEU:HD11	1:A:101:PHE:CD2	0.52	2.39	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:LEU:CD1	1:A:110:PHE:CD1	0.52	2.92	17	2
1:A:86:LEU:O	1:A:89:GLU:N	0.52	2.43	19	6
1:A:125:ARG:O	1:A:128:ALA:HB3	0.52	2.05	19	3
1:A:68:VAL:HG21	1:A:76:LYS:CD	0.52	2.32	14	1
1:A:97:VAL:O	1:A:127:GLN:NE2	0.52	2.42	18	15
1:A:53:VAL:CG1	1:A:126:LEU:HD21	0.52	2.35	3	1
1:A:98:PRO:O	1:A:123:LEU:CD1	0.52	2.58	4	1
1:A:24:VAL:CG1	1:A:28:TYR:CE1	0.52	2.92	15	3
1:A:62:VAL:CG2	1:A:90:SER:C	0.52	2.78	1	4
1:A:10:LEU:HD11	1:A:101:PHE:CD1	0.52	2.39	13	7
1:A:94:VAL:HG23	1:A:95:LEU:HD22	0.52	1.82	7	1
1:A:12:LEU:HD21	1:A:16:LEU:HD11	0.52	1.82	3	1
1:A:78:PHE:O	1:A:82:LEU:CD2	0.52	2.58	10	8
1:A:82:LEU:O	1:A:86:LEU:CD1	0.52	2.57	15	3
1:A:82:LEU:O	1:A:86:LEU:CG	0.51	2.57	9	6
1:A:64:LEU:HD21	1:A:86:LEU:HB2	0.51	1.82	15	3
1:A:130:VAL:O	1:A:133:ALA:N	0.51	2.43	11	18
1:A:55:ALA:CB	1:A:130:VAL:HG23	0.51	2.35	2	1
1:A:94:VAL:O	1:A:97:VAL:CG2	0.51	2.58	4	1
1:A:10:LEU:HB3	1:A:105:TYR:CE1	0.51	2.41	19	2
1:A:32:VAL:CG2	1:A:80:GLY:CA	0.51	2.88	11	8
1:A:83:ARG:O	1:A:87:GLU:HB3	0.51	2.05	17	4
1:A:12:LEU:HD21	1:A:16:LEU:CD1	0.51	2.36	3	1
1:A:64:LEU:HD21	1:A:86:LEU:CB	0.51	2.36	10	2
1:A:13:PHE:CE1	1:A:21:ARG:HB3	0.51	2.40	3	4
1:A:21:ARG:HA	1:A:24:VAL:CG1	0.51	2.35	11	3
1:A:97:VAL:HG12	1:A:123:LEU:HD11	0.51	1.82	4	1
1:A:132:LYS:CD	1:A:133:ALA:N	0.51	2.73	4	1
1:A:113:PRO:O	1:A:117:ARG:CD	0.51	2.58	18	1
1:A:53:VAL:CG1	1:A:126:LEU:CD1	0.51	2.88	10	2
1:A:39:VAL:HG23	1:A:54:HIS:CD2	0.51	2.41	11	2
1:A:82:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HD12	0.51	1.81	10	1
1:A:25:LEU:HD22	1:A:111:PHE:CE2	0.51	2.41	11	1
1:A:51:PHE:CE1	1:A:75:VAL:CG1	0.51	2.94	14	1
1:A:55:ALA:HB1	1:A:130:VAL:HG22	0.51	1.83	10	5
1:A:94:VAL:O	1:A:127:GLN:NE2	0.51	2.44	18	12
1:A:13:PHE:CE2	1:A:107:LEU:HD13	0.51	2.40	3	4
1:A:101:PHE:CD1	1:A:101:PHE:C	0.51	2.83	3	6
1:A:123:LEU:C	1:A:123:LEU:CD2	0.51	2.79	4	1
1:A:78:PHE:CD2	1:A:119:LEU:HG	0.51	2.41	1	7
1:A:10:LEU:CD2	1:A:107:LEU:HD11	0.51	2.36	19	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:GLU:O	1:A:30:ALA:N	0.51	2.44	8	10
1:A:55:ALA:HB1	1:A:130:VAL:HG23	0.51	1.80	2	2
1:A:132:LYS:CD	1:A:132:LYS:C	0.51	2.79	16	1
1:A:17:PRO:O	1:A:20:LEU:N	0.50	2.44	3	8
1:A:120:GLU:O	1:A:121:ALA:C	0.50	2.48	18	7
1:A:81:LEU:O	1:A:84:GLU:HG3	0.50	2.05	13	3
1:A:36:PRO:O	1:A:39:VAL:CG1	0.50	2.57	9	1
1:A:64:LEU:CD1	1:A:86:LEU:CB	0.50	2.89	11	1
1:A:102:TYR:CE2	1:A:103:ARG:HG2	0.50	2.42	13	1
1:A:86:LEU:CD2	1:A:97:VAL:HG21	0.50	2.36	18	1
1:A:2:VAL:HG13	1:A:6:LEU:HD12	0.50	1.83	18	3
1:A:20:LEU:HD22	1:A:23:GLN:OE1	0.50	2.07	4	1
1:A:89:GLU:OE2	1:A:93:ALA:CB	0.50	2.59	16	1
1:A:41:LEU:CD2	1:A:65:TYR:O	0.50	2.59	17	1
1:A:17:PRO:O	1:A:18:LYS:C	0.50	2.48	3	20
1:A:63:ARG:HB3	1:A:65:TYR:CE2	0.50	2.42	12	15
1:A:64:LEU:HD11	1:A:86:LEU:HB2	0.50	1.82	14	1
1:A:107:LEU:HD13	1:A:107:LEU:N	0.50	2.22	17	1
1:A:78:PHE:CE2	1:A:119:LEU:HB3	0.50	2.41	6	18
1:A:126:LEU:O	1:A:129:GLN:N	0.50	2.45	8	9
1:A:31:LYS:O	1:A:83:ARG:CZ	0.50	2.59	2	2
1:A:46:GLU:HG2	1:A:121:ALA:HB2	0.50	1.83	13	2
1:A:13:PHE:CZ	1:A:25:LEU:HG	0.50	2.42	8	4
1:A:27:GLU:O	1:A:31:LYS:NZ	0.50	2.44	10	1
1:A:13:PHE:CE1	1:A:21:ARG:O	0.50	2.65	15	2
1:A:20:LEU:HD23	1:A:23:GLN:NE2	0.50	2.22	5	1
1:A:107:LEU:HD22	1:A:107:LEU:H	0.50	1.67	17	2
1:A:62:VAL:CG2	1:A:89:GLU:O	0.50	2.59	12	1
1:A:10:LEU:CD2	1:A:107:LEU:CD1	0.49	2.90	1	2
1:A:111:PHE:O	1:A:115:ARG:CB	0.49	2.60	1	3
1:A:13:PHE:CZ	1:A:21:ARG:O	0.49	2.65	15	2
1:A:20:LEU:CD2	1:A:23:GLN:NE2	0.49	2.75	5	1
1:A:41:LEU:HD23	1:A:54:HIS:CB	0.49	2.37	6	1
1:A:24:VAL:CG2	1:A:28:TYR:CZ	0.49	2.95	11	1
1:A:18:LYS:O	1:A:21:ARG:N	0.49	2.45	11	9
1:A:72:ALA:CB	1:A:75:VAL:HG22	0.49	2.28	19	2
1:A:55:ALA:HB2	1:A:126:LEU:HD23	0.49	1.83	16	1
1:A:13:PHE:CZ	1:A:110:PHE:CE2	0.49	3.00	17	1
1:A:123:LEU:HD22	1:A:127:GLN:HG3	0.49	1.84	8	5
1:A:46:GLU:CB	1:A:121:ALA:CB	0.49	2.90	13	4
1:A:55:ALA:HB2	1:A:126:LEU:HD22	0.49	1.84	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:LEU:CD1	1:A:107:LEU:HD22	0.49	2.37	18	1
1:A:102:TYR:CE1	1:A:120:GLU:CD	0.49	2.86	12	2
1:A:122:ALA:C	1:A:126:LEU:HD12	0.49	2.28	7	1
1:A:32:VAL:O	1:A:76:LYS:CE	0.49	2.61	9	1
1:A:120:GLU:O	1:A:123:LEU:N	0.49	2.45	7	7
1:A:125:ARG:O	1:A:128:ALA:N	0.49	2.46	17	12
1:A:19:GLU:HG3	1:A:20:LEU:HD13	0.49	1.84	15	1
1:A:19:GLU:CG	1:A:20:LEU:N	0.49	2.75	3	6
1:A:69:PRO:O	1:A:71:GLU:N	0.49	2.46	12	5
1:A:64:LEU:HD22	1:A:83:ARG:HA	0.48	1.85	15	1
1:A:6:LEU:HD11	1:A:101:PHE:CE1	0.48	2.43	1	2
1:A:98:PRO:O	1:A:123:LEU:HD13	0.48	2.08	4	1
1:A:13:PHE:CE2	1:A:107:LEU:HD11	0.48	2.43	9	1
1:A:12:LEU:O	1:A:16:LEU:N	0.48	2.46	15	16
1:A:20:LEU:O	1:A:23:GLN:N	0.48	2.47	14	17
1:A:78:PHE:CD2	1:A:119:LEU:HB3	0.48	2.43	20	5
1:A:107:LEU:N	1:A:107:LEU:CD1	0.48	2.77	20	2
1:A:28:TYR:CE2	1:A:84:GLU:HG3	0.48	2.44	15	7
1:A:53:VAL:HG12	1:A:66:PHE:HD1	0.48	1.67	9	6
1:A:12:LEU:O	1:A:15:SER:N	0.48	2.46	8	4
1:A:24:VAL:CG1	1:A:28:TYR:CE2	0.48	2.97	17	1
1:A:91:PRO:HB2	1:A:134:LEU:HD11	0.48	1.84	5	1
1:A:68:VAL:HG21	1:A:76:LYS:HG3	0.48	1.85	8	3
1:A:32:VAL:HG22	1:A:80:GLY:HA2	0.48	1.84	14	7
1:A:6:LEU:HD21	1:A:81:LEU:CD2	0.48	2.39	1	1
1:A:18:LYS:O	1:A:19:GLU:C	0.48	2.52	19	20
1:A:62:VAL:O	1:A:64:LEU:CD1	0.48	2.61	10	1
1:A:83:ARG:O	1:A:83:ARG:CG	0.48	2.62	20	2
1:A:66:PHE:CD1	1:A:79:ALA:HB1	0.48	2.44	19	1
1:A:43:ARG:NH2	1:A:47:CYS:O	0.48	2.47	16	3
1:A:13:PHE:CE1	1:A:25:LEU:HD21	0.48	2.44	12	1
1:A:132:LYS:O	1:A:136:SER:N	0.47	2.47	13	7
1:A:74:THR:O	1:A:77:ALA:HB3	0.47	2.09	2	1
1:A:91:PRO:CB	1:A:130:VAL:CG1	0.47	2.92	4	3
1:A:105:TYR:O	1:A:106:GLY:C	0.47	2.52	12	1
1:A:124:LEU:HD22	1:A:124:LEU:H	0.47	1.68	9	1
1:A:39:VAL:CG1	1:A:54:HIS:CD2	0.47	2.91	16	1
1:A:57:VAL:CG2	1:A:133:ALA:HB1	0.47	2.39	5	2
1:A:127:GLN:O	1:A:131:ARG:CD	0.47	2.62	5	1
1:A:102:TYR:HE1	1:A:116:LEU:HD13	0.47	1.69	6	1
1:A:53:VAL:CG2	1:A:126:LEU:CD2	0.47	2.92	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:TYR:CE1	1:A:84:GLU:HG3	0.47	2.45	11	2
1:A:24:VAL:O	1:A:26:LEU:N	0.47	2.47	16	1
1:A:20:LEU:O	1:A:22:SER:N	0.47	2.47	15	5
1:A:24:VAL:HG13	1:A:28:TYR:CE1	0.47	2.44	16	2
1:A:44:VAL:N	1:A:51:PHE:O	0.47	2.48	10	3
1:A:28:TYR:CD2	1:A:81:LEU:HB2	0.47	2.45	11	1
1:A:69:PRO:C	1:A:71:GLU:N	0.47	2.68	13	10
1:A:41:LEU:HD12	1:A:67:HIS:N	0.47	2.25	9	1
1:A:122:ALA:O	1:A:125:ARG:N	0.47	2.47	10	1
1:A:122:ALA:C	1:A:126:LEU:HD22	0.47	2.29	10	1
1:A:13:PHE:CE1	1:A:25:LEU:HG	0.47	2.44	16	1
1:A:6:LEU:O	1:A:9:ALA:N	0.47	2.48	10	10
1:A:130:VAL:O	1:A:132:LYS:N	0.47	2.47	5	2
1:A:132:LYS:O	1:A:135:THR:CG2	0.47	2.60	6	2
1:A:111:PHE:HB3	1:A:116:LEU:CD2	0.47	2.40	9	1
1:A:95:LEU:O	1:A:127:GLN:NE2	0.47	2.48	10	2
1:A:83:ARG:HA	1:A:87:GLU:CB	0.47	2.39	17	1
1:A:92:GLU:O	1:A:96:GLU:CG	0.47	2.63	2	1
1:A:73:PRO:O	1:A:76:LYS:N	0.47	2.48	14	2
1:A:134:LEU:C	1:A:134:LEU:CD1	0.47	2.76	8	2
1:A:32:VAL:HG22	1:A:83:ARG:CD	0.47	2.38	18	1
1:A:80:GLY:O	1:A:84:GLU:N	0.46	2.47	3	4
1:A:19:GLU:CA	1:A:19:GLU:OE1	0.46	2.63	2	1
1:A:10:LEU:HD11	1:A:101:PHE:HD1	0.46	1.70	4	6
1:A:6:LEU:HD11	1:A:81:LEU:CD2	0.46	2.39	8	1
1:A:54:HIS:N	1:A:65:TYR:O	0.46	2.48	9	1
1:A:134:LEU:CD1	1:A:135:THR:N	0.46	2.78	12	1
1:A:49:THR:HG21	1:A:115:ARG:NH2	0.46	2.25	14	1
1:A:89:GLU:CD	1:A:93:ALA:HB3	0.46	2.29	18	1
1:A:124:LEU:H	1:A:124:LEU:HD22	0.46	1.69	19	1
1:A:78:PHE:CG	1:A:119:LEU:HD23	0.46	2.46	9	1
1:A:6:LEU:C	1:A:8:GLN:N	0.46	2.69	19	9
1:A:4:PRO:O	1:A:8:GLN:N	0.46	2.46	9	5
1:A:54:HIS:ND1	1:A:129:GLN:OE1	0.46	2.49	6	1
1:A:10:LEU:HB3	1:A:105:TYR:CZ	0.46	2.45	13	7
1:A:62:VAL:N	1:A:89:GLU:O	0.46	2.47	11	4
1:A:13:PHE:CZ	1:A:21:ARG:HB3	0.46	2.45	8	2
1:A:24:VAL:HG22	1:A:28:TYR:CE2	0.46	2.45	11	1
1:A:25:LEU:HD12	1:A:110:PHE:CD1	0.46	2.46	1	1
1:A:4:PRO:O	1:A:6:LEU:N	0.46	2.49	2	7
1:A:70:ASP:N	1:A:70:ASP:OD1	0.46	2.48	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:LEU:HD22	1:A:82:LEU:N	0.46	2.25	6	4
1:A:132:LYS:CG	1:A:133:ALA:N	0.46	2.78	7	2
1:A:18:LYS:O	1:A:20:LEU:N	0.46	2.48	15	1
1:A:10:LEU:HB3	1:A:105:TYR:CD2	0.46	2.45	1	2
1:A:10:LEU:CB	1:A:105:TYR:CZ	0.46	2.98	1	1
1:A:119:LEU:O	1:A:122:ALA:N	0.46	2.49	2	2
1:A:36:PRO:HD3	1:A:65:TYR:CD1	0.46	2.45	3	1
1:A:57:VAL:CG2	1:A:133:ALA:CB	0.46	2.93	5	1
1:A:10:LEU:O	1:A:13:PHE:N	0.46	2.48	11	3
1:A:85:GLY:C	1:A:86:LEU:HD22	0.46	2.31	17	3
1:A:24:VAL:C	1:A:26:LEU:N	0.46	2.67	16	1
1:A:130:VAL:HG12	1:A:134:LEU:HD21	0.46	1.86	3	1
1:A:116:LEU:O	1:A:119:LEU:N	0.46	2.49	18	2
1:A:50:PRO:HB2	1:A:52:PHE:CZ	0.46	2.46	20	4
1:A:81:LEU:O	1:A:84:GLU:N	0.46	2.48	16	1
1:A:126:LEU:HD22	1:A:126:LEU:H	0.46	1.71	8	2
1:A:67:HIS:ND1	1:A:67:HIS:C	0.46	2.68	9	1
1:A:102:TYR:CZ	1:A:103:ARG:HG3	0.46	2.46	12	1
1:A:89:GLU:OE2	1:A:94:VAL:N	0.46	2.48	18	1
1:A:40:GLU:O	1:A:54:HIS:ND1	0.46	2.49	6	5
1:A:102:TYR:OH	1:A:120:GLU:CG	0.46	2.64	1	2
1:A:10:LEU:CD1	1:A:101:PHE:O	0.46	2.64	18	1
1:A:2:VAL:CG2	1:A:7:LYS:HD2	0.45	2.41	11	3
1:A:89:GLU:OE1	1:A:90:SER:N	0.45	2.49	18	1
1:A:45:HIS:O	1:A:47:CYS:N	0.45	2.49	19	1
1:A:4:PRO:O	1:A:5:LYS:C	0.45	2.54	20	15
1:A:123:LEU:CD2	1:A:127:GLN:CD	0.45	2.85	4	1
1:A:46:GLU:CD	1:A:121:ALA:HB2	0.45	2.32	8	1
1:A:73:PRO:O	1:A:77:ALA:CB	0.45	2.64	10	2
1:A:6:LEU:O	1:A:8:GLN:N	0.45	2.50	19	5
1:A:5:LYS:O	1:A:84:GLU:OE2	0.45	2.34	6	5
1:A:64:LEU:CD1	1:A:86:LEU:HB2	0.45	2.41	11	3
1:A:104:GLY:O	1:A:105:TYR:CD1	0.45	2.69	1	2
1:A:6:LEU:HD11	1:A:81:LEU:HD21	0.45	1.89	8	1
1:A:107:LEU:HD23	1:A:111:PHE:HE2	0.45	1.71	10	1
1:A:39:VAL:CG2	1:A:54:HIS:CD2	0.45	3.00	20	2
1:A:75:VAL:CG2	1:A:76:LYS:N	0.45	2.80	2	2
1:A:53:VAL:CG2	1:A:65:TYR:O	0.45	2.65	3	1
1:A:95:LEU:HD23	1:A:127:GLN:CB	0.45	2.42	9	1
1:A:4:PRO:C	1:A:6:LEU:N	0.45	2.69	2	8
1:A:68:VAL:HG13	1:A:76:LYS:HD2	0.45	1.87	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:TYR:O	1:A:31:LYS:N	0.45	2.47	9	4
1:A:51:PHE:HE2	1:A:122:ALA:HB2	0.45	1.72	13	1
1:A:78:PHE:CG	1:A:119:LEU:HG	0.45	2.46	14	5
1:A:90:SER:O	1:A:94:VAL:CG2	0.45	2.63	2	1
1:A:106:GLY:C	1:A:108:GLU:N	0.45	2.70	17	2
1:A:13:PHE:CZ	1:A:25:LEU:CG	0.45	2.99	8	1
1:A:32:VAL:CG2	1:A:80:GLY:HA2	0.45	2.42	9	4
1:A:76:LYS:O	1:A:77:ALA:C	0.45	2.55	2	11
1:A:84:GLU:CD	1:A:84:GLU:C	0.45	2.76	13	5
1:A:114:LEU:O	1:A:117:ARG:N	0.45	2.49	1	1
1:A:121:ALA:O	1:A:122:ALA:C	0.45	2.54	19	2
1:A:20:LEU:C	1:A:22:SER:N	0.45	2.70	15	7
1:A:111:PHE:O	1:A:115:ARG:HB3	0.45	2.11	6	1
1:A:89:GLU:OE1	1:A:93:ALA:CB	0.45	2.48	18	1
1:A:54:HIS:NE2	1:A:56:ASP:OD2	0.44	2.50	1	5
1:A:116:LEU:O	1:A:117:ARG:C	0.44	2.56	1	6
1:A:102:TYR:O	1:A:103:ARG:C	0.44	2.55	11	2
1:A:16:LEU:O	1:A:21:ARG:NE	0.44	2.50	5	4
1:A:115:ARG:O	1:A:118:GLY:N	0.44	2.50	7	3
1:A:123:LEU:HD11	1:A:127:GLN:CD	0.44	2.33	8	1
1:A:91:PRO:HB3	1:A:130:VAL:HG13	0.44	1.88	12	1
1:A:64:LEU:HD12	1:A:87:GLU:N	0.44	2.27	17	1
1:A:111:PHE:O	1:A:112:THR:O	0.44	2.36	1	5
1:A:130:VAL:O	1:A:131:ARG:C	0.44	2.56	5	4
1:A:69:PRO:O	1:A:70:ASP:C	0.44	2.56	12	5
1:A:64:LEU:HD11	1:A:86:LEU:HB3	0.44	1.90	11	1
1:A:13:PHE:CD2	1:A:107:LEU:HD11	0.44	2.47	14	1
1:A:14:LYS:O	1:A:21:ARG:NH2	0.44	2.51	2	1
1:A:116:LEU:O	1:A:118:GLY:N	0.44	2.50	9	2
1:A:106:GLY:O	1:A:108:GLU:N	0.44	2.51	17	2
1:A:21:ARG:HG3	1:A:110:PHE:CZ	0.44	2.47	15	1
1:A:89:GLU:HG2	1:A:94:VAL:CG2	0.44	2.42	18	1
1:A:20:LEU:O	1:A:21:ARG:C	0.44	2.55	7	9
1:A:5:LYS:HA	1:A:5:LYS:CE	0.44	2.42	5	1
1:A:82:LEU:O	1:A:86:LEU:HB2	0.44	2.13	13	2
1:A:24:VAL:CG2	1:A:28:TYR:CE2	0.44	3.00	11	1
1:A:64:LEU:O	1:A:65:TYR:CD1	0.44	2.71	14	1
1:A:20:LEU:HD12	1:A:23:GLN:OE1	0.44	2.12	15	1
1:A:53:VAL:CG2	1:A:66:PHE:CD1	0.44	3.00	3	2
1:A:91:PRO:CB	1:A:134:LEU:HD21	0.44	2.42	7	1
1:A:54:HIS:CD2	1:A:54:HIS:C	0.44	2.91	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:GLU:HG3	1:A:28:TYR:N	0.44	2.28	16	1
1:A:83:ARG:NH1	1:A:87:GLU:OE1	0.44	2.51	19	1
1:A:81:LEU:C	1:A:81:LEU:CD2	0.44	2.85	3	2
1:A:42:GLU:OE2	1:A:125:ARG:NH1	0.44	2.50	9	1
1:A:106:GLY:O	1:A:109:GLU:N	0.44	2.50	9	2
1:A:8:GLN:O	1:A:12:LEU:CB	0.44	2.65	17	1
1:A:104:GLY:C	1:A:105:TYR:CG	0.44	2.91	19	1
1:A:46:GLU:OE1	1:A:121:ALA:HB2	0.44	2.13	3	1
1:A:4:PRO:CA	1:A:8:GLN:OE1	0.44	2.65	4	1
1:A:10:LEU:HD13	1:A:105:TYR:HE2	0.44	1.66	1	1
1:A:80:GLY:O	1:A:84:GLU:CG	0.44	2.66	2	1
1:A:130:VAL:O	1:A:134:LEU:N	0.44	2.49	8	1
1:A:130:VAL:O	1:A:133:ALA:HB3	0.44	2.13	10	1
1:A:123:LEU:C	1:A:125:ARG:N	0.44	2.70	14	1
1:A:62:VAL:HG21	1:A:90:SER:O	0.44	2.13	6	2
1:A:46:GLU:HB2	1:A:121:ALA:CB	0.44	2.43	19	2
1:A:46:GLU:CB	1:A:121:ALA:HB2	0.44	2.42	19	1
1:A:47:CYS:C	1:A:48:GLN:CG	0.43	2.87	12	2
1:A:83:ARG:O	1:A:84:GLU:C	0.43	2.56	5	3
1:A:126:LEU:O	1:A:130:VAL:N	0.43	2.49	10	3
1:A:31:LYS:O	1:A:83:ARG:NE	0.43	2.51	20	1
1:A:2:VAL:CG1	1:A:3:PRO:HD2	0.43	2.43	17	17
1:A:36:PRO:CD	1:A:65:TYR:CE1	0.43	3.01	3	1
1:A:91:PRO:HB3	1:A:130:VAL:CG1	0.43	2.43	14	4
1:A:116:LEU:C	1:A:118:GLY:N	0.43	2.71	9	2
1:A:121:ALA:CA	1:A:124:LEU:HD12	0.43	2.39	10	1
1:A:102:TYR:CE2	1:A:120:GLU:CD	0.43	2.92	10	1
1:A:83:ARG:CG	1:A:87:GLU:HB2	0.43	2.43	13	1
1:A:2:VAL:HG12	1:A:97:VAL:HG22	0.43	1.89	20	1
1:A:75:VAL:HG23	1:A:76:LYS:N	0.43	2.29	2	1
1:A:32:VAL:HG11	1:A:76:LYS:CE	0.43	2.43	5	1
1:A:55:ALA:CB	1:A:130:VAL:HG22	0.43	2.44	5	1
1:A:118:GLY:O	1:A:121:ALA:N	0.43	2.52	5	2
1:A:95:LEU:HD11	1:A:131:ARG:CD	0.43	2.42	7	2
1:A:124:LEU:HD22	1:A:124:LEU:N	0.43	2.28	7	2
1:A:53:VAL:HG11	1:A:126:LEU:HD11	0.43	1.89	10	1
1:A:29:ALA:HB1	1:A:76:LYS:CG	0.43	2.44	14	1
1:A:6:LEU:HD22	1:A:10:LEU:HG	0.43	1.90	17	1
1:A:45:HIS:C	1:A:47:CYS:N	0.43	2.70	19	1
1:A:36:PRO:CD	1:A:65:TYR:CD1	0.43	3.02	3	1
1:A:130:VAL:C	1:A:132:LYS:N	0.43	2.71	5	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:131:ARG:O	1:A:134:LEU:N	0.43	2.51	10	1
1:A:106:GLY:O	1:A:110:PHE:N	0.43	2.49	17	1
1:A:83:ARG:HB2	1:A:87:GLU:CB	0.43	2.43	18	1
1:A:132:LYS:O	1:A:135:THR:N	0.43	2.50	5	1
1:A:132:LYS:O	1:A:136:SER:C	0.43	2.57	8	1
1:A:88:GLY:O	1:A:89:GLU:O	0.43	2.36	9	1
1:A:129:GLN:O	1:A:130:VAL:C	0.43	2.57	10	1
1:A:19:GLU:HG3	1:A:20:LEU:CD1	0.43	2.42	15	1
1:A:43:ARG:NH1	1:A:45:HIS:CE1	0.43	2.87	9	2
1:A:95:LEU:HD11	1:A:131:ARG:HD2	0.43	1.90	15	1
1:A:123:LEU:CD2	1:A:127:GLN:HG3	0.43	2.43	17	4
1:A:78:PHE:CD2	1:A:82:LEU:HD21	0.43	2.49	5	1
1:A:43:ARG:NH2	1:A:48:GLN:O	0.43	2.51	6	1
1:A:53:VAL:HG12	1:A:66:PHE:HD2	0.43	1.70	6	1
1:A:27:GLU:O	1:A:28:TYR:C	0.43	2.56	8	3
1:A:44:VAL:HG13	1:A:125:ARG:HD2	0.43	1.91	9	1
1:A:125:ARG:O	1:A:126:LEU:C	0.43	2.57	8	3
1:A:81:LEU:O	1:A:84:GLU:CB	0.43	2.66	13	1
1:A:25:LEU:HD22	1:A:111:PHE:HZ	0.43	1.74	17	1
1:A:6:LEU:O	1:A:7:LYS:C	0.43	2.58	14	3
1:A:40:GLU:O	1:A:54:HIS:CE1	0.42	2.72	17	1
1:A:99:PRO:HB3	1:A:124:LEU:CD1	0.42	2.40	17	2
1:A:12:LEU:CD1	1:A:16:LEU:CD1	0.42	2.94	20	1
1:A:51:PHE:CE2	1:A:53:VAL:CG1	0.42	3.02	7	1
1:A:6:LEU:HG	1:A:86:LEU:CD2	0.42	2.44	17	1
1:A:19:GLU:HG3	1:A:20:LEU:N	0.42	2.29	3	1
1:A:55:ALA:O	1:A:56:ASP:OD1	0.42	2.37	12	3
1:A:114:LEU:C	1:A:116:LEU:N	0.42	2.73	6	1
1:A:27:GLU:O	1:A:30:ALA:CB	0.42	2.66	10	1
1:A:78:PHE:O	1:A:82:LEU:N	0.42	2.51	11	1
1:A:104:GLY:O	1:A:105:TYR:C	0.42	2.57	15	2
1:A:123:LEU:O	1:A:125:ARG:N	0.42	2.53	14	1
1:A:12:LEU:CD1	1:A:16:LEU:HD12	0.42	2.42	20	1
1:A:47:CYS:O	1:A:48:GLN:C	0.42	2.58	2	1
1:A:18:LYS:CA	1:A:21:ARG:NH1	0.42	2.83	3	1
1:A:22:SER:OG	1:A:23:GLN:N	0.42	2.53	7	1
1:A:13:PHE:O	1:A:16:LEU:N	0.42	2.52	8	1
1:A:31:LYS:O	1:A:33:PRO:N	0.42	2.52	10	1
1:A:95:LEU:HD11	1:A:127:GLN:O	0.42	2.14	18	1
1:A:10:LEU:CB	1:A:105:TYR:CE2	0.42	3.02	1	1
1:A:12:LEU:C	1:A:12:LEU:CD2	0.42	2.86	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:VAL:HG23	1:A:133:ALA:CB	0.42	2.43	5	1
1:A:57:VAL:HG23	1:A:133:ALA:HB1	0.42	1.91	17	1
1:A:89:GLU:CG	1:A:90:SER:N	0.42	2.80	18	1
1:A:106:GLY:O	1:A:107:LEU:C	0.42	2.58	17	4
1:A:21:ARG:O	1:A:24:VAL:N	0.42	2.53	18	1
1:A:108:GLU:C	1:A:110:PHE:N	0.42	2.72	13	2
1:A:13:PHE:O	1:A:21:ARG:CD	0.42	2.68	3	1
1:A:62:VAL:O	1:A:62:VAL:CG2	0.42	2.67	8	1
1:A:27:GLU:O	1:A:31:LYS:CD	0.42	2.67	9	1
1:A:68:VAL:HG11	1:A:76:LYS:HG3	0.42	1.90	13	1
1:A:126:LEU:HD23	1:A:126:LEU:N	0.42	2.30	13	1
1:A:2:VAL:CB	1:A:97:VAL:HG22	0.42	2.44	20	1
1:A:78:PHE:CE1	1:A:81:LEU:HD23	0.42	2.49	2	1
1:A:4:PRO:C	1:A:8:GLN:OE1	0.42	2.58	4	1
1:A:95:LEU:CD2	1:A:130:VAL:CG1	0.42	2.97	17	1
1:A:102:TYR:OH	1:A:120:GLU:CD	0.41	2.59	1	2
1:A:123:LEU:O	1:A:124:LEU:C	0.41	2.58	6	2
1:A:62:VAL:HG23	1:A:89:GLU:C	0.41	2.31	6	1
1:A:103:ARG:NH2	1:A:108:GLU:OE2	0.41	2.53	12	1
1:A:5:LYS:CE	1:A:5:LYS:HA	0.41	2.45	14	1
1:A:134:LEU:N	1:A:134:LEU:HD12	0.41	2.31	18	2
1:A:6:LEU:HD21	1:A:81:LEU:HD21	0.41	1.90	1	1
1:A:10:LEU:CD2	1:A:107:LEU:HD12	0.41	2.45	1	1
1:A:36:PRO:HD3	1:A:65:TYR:CE1	0.41	2.50	3	1
1:A:63:ARG:HB3	1:A:65:TYR:CZ	0.41	2.51	11	3
1:A:68:VAL:CG1	1:A:76:LYS:HD2	0.41	2.46	19	2
1:A:78:PHE:CD1	1:A:81:LEU:HD12	0.41	2.49	8	1
1:A:120:GLU:C	1:A:122:ALA:N	0.41	2.73	1	1
1:A:81:LEU:CD1	1:A:107:LEU:HD21	0.41	2.45	13	1
1:A:52:PHE:O	1:A:53:VAL:HG13	0.41	2.15	19	1
1:A:46:GLU:HB3	1:A:121:ALA:CB	0.41	2.45	3	2
1:A:53:VAL:CG1	1:A:126:LEU:CD2	0.41	2.98	3	1
1:A:129:GLN:O	1:A:132:LYS:NZ	0.41	2.51	4	1
1:A:13:PHE:CZ	1:A:25:LEU:CD2	0.41	3.01	12	1
1:A:82:LEU:HA	1:A:86:LEU:HD12	0.41	1.91	12	3
1:A:10:LEU:O	1:A:13:PHE:CB	0.41	2.69	13	1
1:A:120:GLU:O	1:A:122:ALA:N	0.41	2.53	13	1
1:A:24:VAL:O	1:A:27:GLU:HG3	0.41	2.16	16	1
1:A:111:PHE:CD1	1:A:119:LEU:HD11	0.41	2.51	18	1
1:A:108:GLU:O	1:A:112:THR:CA	0.41	2.68	6	1
1:A:119:LEU:O	1:A:120:GLU:C	0.41	2.59	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:ALA:N	1:A:129:GLN:OE1	0.41	2.49	7	1
1:A:122:ALA:O	1:A:126:LEU:CD2	0.41	2.64	8	1
1:A:68:VAL:HG22	1:A:68:VAL:O	0.41	2.15	13	1
1:A:21:ARG:HG3	1:A:110:PHE:CE2	0.41	2.50	15	1
1:A:24:VAL:O	1:A:25:LEU:C	0.41	2.58	16	2
1:A:12:LEU:HD11	1:A:16:LEU:HD11	0.41	1.92	20	1
1:A:19:GLU:O	1:A:23:GLN:CG	0.41	2.69	2	1
1:A:82:LEU:HD23	1:A:101:PHE:CZ	0.41	2.51	9	1
1:A:118:GLY:O	1:A:119:LEU:C	0.41	2.58	9	2
1:A:31:LYS:O	1:A:32:VAL:C	0.41	2.59	10	1
1:A:2:VAL:HG13	1:A:3:PRO:HD2	0.41	1.92	17	1
1:A:121:ALA:O	1:A:125:ARG:N	0.41	2.51	2	1
1:A:43:ARG:CZ	1:A:50:PRO:HA	0.41	2.45	6	1
1:A:102:TYR:CD2	1:A:103:ARG:N	0.41	2.88	12	2
1:A:108:GLU:O	1:A:110:PHE:N	0.41	2.54	13	1
1:A:78:PHE:O	1:A:79:ALA:C	0.41	2.59	12	3
1:A:51:PHE:CZ	1:A:79:ALA:HB2	0.41	2.51	6	1
1:A:97:VAL:CG1	1:A:101:PHE:CD2	0.41	3.03	8	2
1:A:38:GLY:O	1:A:39:VAL:C	0.41	2.58	10	1
1:A:2:VAL:HG12	1:A:3:PRO:HD2	0.41	1.93	16	1
1:A:116:LEU:C	1:A:120:GLU:OE2	0.41	2.59	1	1
1:A:47:CYS:O	1:A:48:GLN:CB	0.41	2.69	3	1
1:A:102:TYR:CD1	1:A:103:ARG:N	0.41	2.89	3	1
1:A:82:LEU:O	1:A:86:LEU:HG	0.41	2.15	5	1
1:A:107:LEU:O	1:A:116:LEU:HD11	0.41	2.16	6	1
1:A:28:TYR:HA	1:A:31:LYS:HZ3	0.41	1.76	8	1
1:A:124:LEU:N	1:A:124:LEU:CD2	0.41	2.84	11	1
1:A:131:ARG:HA	1:A:134:LEU:HD23	0.41	1.91	12	1
1:A:83:ARG:HG2	1:A:87:GLU:CB	0.41	2.45	13	1
1:A:16:LEU:CD1	1:A:24:VAL:HG21	0.41	2.42	14	1
1:A:18:LYS:O	1:A:21:ARG:HG2	0.41	2.16	15	1
1:A:55:ALA:O	1:A:129:GLN:OE1	0.41	2.39	17	1
1:A:83:ARG:CB	1:A:87:GLU:HB2	0.41	2.46	18	1
1:A:6:LEU:HD22	1:A:10:LEU:CD1	0.41	2.46	19	1
1:A:12:LEU:O	1:A:13:PHE:C	0.41	2.60	20	1
1:A:51:PHE:CZ	1:A:53:VAL:CG1	0.41	3.04	4	1
1:A:10:LEU:HD22	1:A:102:TYR:HA	0.41	1.93	6	1
1:A:102:TYR:CB	1:A:107:LEU:HD23	0.41	2.43	9	1
1:A:56:ASP:O	1:A:62:VAL:HA	0.41	2.16	15	3
1:A:94:VAL:CG2	1:A:95:LEU:N	0.41	2.84	20	1
1:A:80:GLY:O	1:A:84:GLU:CB	0.40	2.69	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:VAL:HG11	1:A:90:SER:C	0.40	2.37	9	1
1:A:81:LEU:C	1:A:81:LEU:CD1	0.40	2.89	10	1
1:A:108:GLU:HG3	1:A:116:LEU:CD1	0.40	2.46	12	1
1:A:68:VAL:CG2	1:A:76:LYS:CD	0.40	2.99	14	1
1:A:83:ARG:O	1:A:87:GLU:HB2	0.40	2.15	20	1
1:A:94:VAL:HG23	1:A:95:LEU:N	0.40	2.31	12	2
1:A:84:GLU:HG3	1:A:85:GLY:N	0.40	2.31	5	1
1:A:24:VAL:HG13	1:A:25:LEU:N	0.40	2.31	10	1
1:A:53:VAL:HG23	1:A:65:TYR:O	0.40	2.16	11	1
1:A:102:TYR:O	1:A:105:TYR:CD2	0.40	2.74	11	1
1:A:57:VAL:HA	1:A:61:LYS:O	0.40	2.16	15	1
1:A:43:ARG:HG3	1:A:44:VAL:N	0.40	2.31	17	1
1:A:71:GLU:O	1:A:72:ALA:C	0.40	2.59	19	1
1:A:108:GLU:CG	1:A:116:LEU:CD1	0.40	2.99	1	1
1:A:55:ALA:CB	1:A:130:VAL:CG2	0.40	2.93	2	1
1:A:12:LEU:HD23	1:A:13:PHE:CA	0.40	2.45	3	1
1:A:54:HIS:N	1:A:126:LEU:HD21	0.40	2.32	9	1
1:A:54:HIS:HB3	1:A:65:TYR:CB	0.40	2.46	9	1
1:A:121:ALA:O	1:A:125:ARG:CG	0.40	2.70	14	1
1:A:78:PHE:O	1:A:82:LEU:HD23	0.40	2.17	15	1
1:A:53:VAL:HG21	1:A:66:PHE:CE1	0.40	2.52	3	1
1:A:73:PRO:C	1:A:75:VAL:N	0.40	2.75	5	1
1:A:95:LEU:HA	1:A:127:GLN:NE2	0.40	2.32	5	1
1:A:64:LEU:CD2	1:A:86:LEU:HB2	0.40	2.45	10	1
1:A:135:THR:O	1:A:136:SER:C	0.40	2.59	14	1
1:A:107:LEU:HD13	1:A:107:LEU:H	0.40	1.73	20	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	134/136 (99%)	102±4 (76±3%)	27±4 (20±3%)	5±1 (3±1%)	6	36
All	All	2680/2720 (99%)	2043 (76%)	545 (20%)	92 (3%)	6	36

All 19 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	4	PRO	17
1	A	69	PRO	17
1	A	105	TYR	16
1	A	2	VAL	10
1	A	106	GLY	5
1	A	70	ASP	4
1	A	87	GLU	4
1	A	112	THR	3
1	A	21	ARG	3
1	A	38	GLY	2
1	A	117	ARG	2
1	A	89	GLU	2
1	A	104	GLY	1
1	A	131	ARG	1
1	A	103	ARG	1
1	A	7	LYS	1
1	A	19	GLU	1
1	A	25	LEU	1
1	A	46	GLU	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	113/114 (99%)	95±3 (84±3%)	18±3 (16±3%)	5 41
All	All	2260/2280 (99%)	1894 (84%)	366 (16%)	5 41

All 67 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	6	LEU	15
1	A	46	GLU	15
1	A	114	LEU	14
1	A	8	GLN	13
1	A	31	LYS	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	58	GLU	12
1	A	132	LYS	12
1	A	107	LEU	12
1	A	70	ASP	11
1	A	83	ARG	11
1	A	5	LYS	11
1	A	22	SER	11
1	A	62	VAL	11
1	A	92	GLU	10
1	A	110	PHE	9
1	A	57	VAL	8
1	A	81	LEU	8
1	A	136	SER	8
1	A	63	ARG	8
1	A	19	GLU	8
1	A	115	ARG	7
1	A	18	LYS	7
1	A	41	LEU	6
1	A	45	HIS	6
1	A	84	GLU	6
1	A	87	GLU	5
1	A	109	GLU	5
1	A	119	LEU	5
1	A	68	VAL	5
1	A	76	LYS	5
1	A	42	GLU	5
1	A	47	CYS	5
1	A	108	GLU	5
1	A	86	LEU	5
1	A	48	GLN	4
1	A	90	SER	4
1	A	74	THR	3
1	A	12	LEU	3
1	A	53	VAL	3
1	A	123	LEU	3
1	A	27	GLU	3
1	A	126	LEU	3
1	A	134	LEU	3
1	A	7	LYS	3
1	A	26	LEU	3
1	A	15	SER	3
1	A	117	ARG	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	125	ARG	3
1	A	78	PHE	2
1	A	71	GLU	2
1	A	40	GLU	2
1	A	120	GLU	2
1	A	103	ARG	2
1	A	89	GLU	2
1	A	23	GLN	1
1	A	14	LYS	1
1	A	56	ASP	1
1	A	67	HIS	1
1	A	112	THR	1
1	A	51	PHE	1
1	A	24	VAL	1
1	A	82	LEU	1
1	A	21	ARG	1
1	A	129	GLN	1
1	A	131	ARG	1
1	A	64	LEU	1
1	A	61	LYS	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