



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 06:51 PM BST

PDB ID : 2AGA
Title : De-ubiquitinating function of ataxin-3: insights from the solution structure of the Josephin domain
Authors : Mao, Y.; Senic-Matuglia, F.; Di Fiore, P.; Polo, S.; Hodsdon, M.E.; De Camilli, P.
Deposited on : 2005-07-26

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

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

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

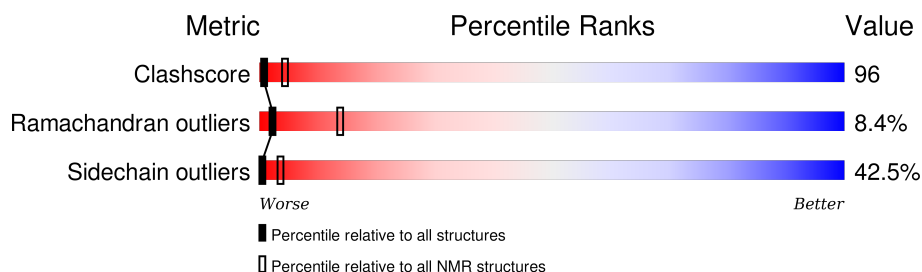
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 85%.

Percentile scores (ranging between 0-100) for global validation metrics of the entry are shown in the following graphic. The table shows the number of entries on which the scores are based.



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	114402	11133
Ramachandran outliers	111179	9975
Sidechain outliers	111093	9958

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	190	

2 Ensemble composition and analysis ⓘ

This entry contains 20 models. Model 4 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:5-A:11, A:18-A:184 (174)	0.39	4

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 2 clusters and 1 single-model cluster was found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3017 atoms, of which 1484 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Machado-Joseph disease protein 1.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	190	Total	C	H	N	O	S	0
			3017	974	1484	256	294	9	

There are 5 discrepancies between the modelled and reference sequences:

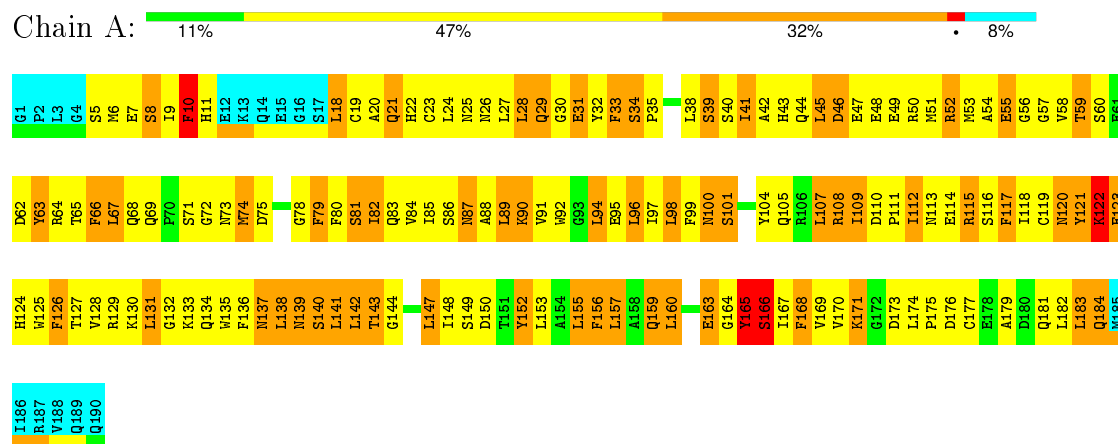
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1	GLY	-	CLONING ARTIFACT	UNP P54252
A	2	PRO	-	CLONING ARTIFACT	UNP P54252
A	3	LEU	-	CLONING ARTIFACT	UNP P54252
A	4	GLY	-	CLONING ARTIFACT	UNP P54252
A	5	SER	-	CLONING ARTIFACT	UNP P54252

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: Machado-Joseph disease protein 1

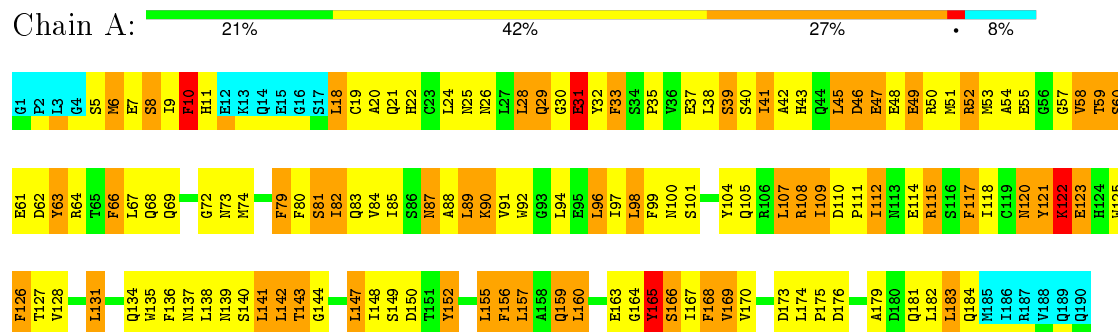


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

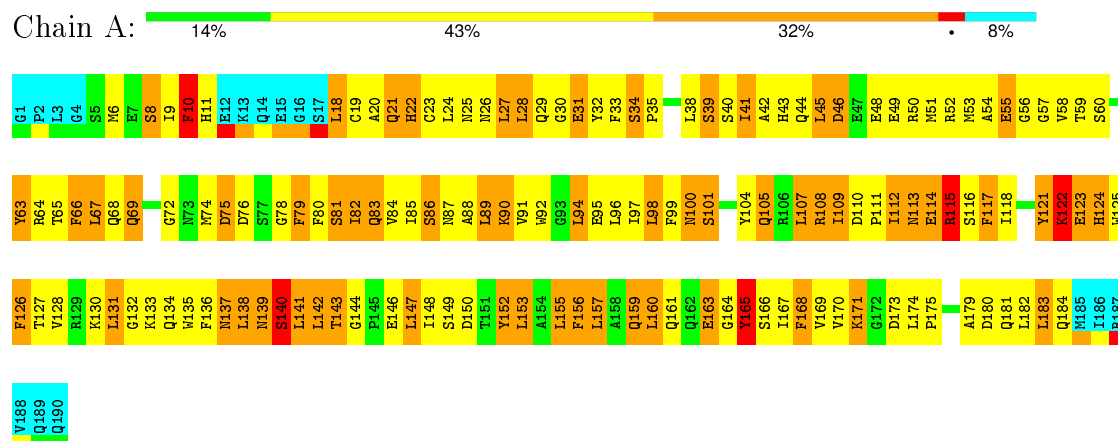
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Machado-Joseph disease protein 1



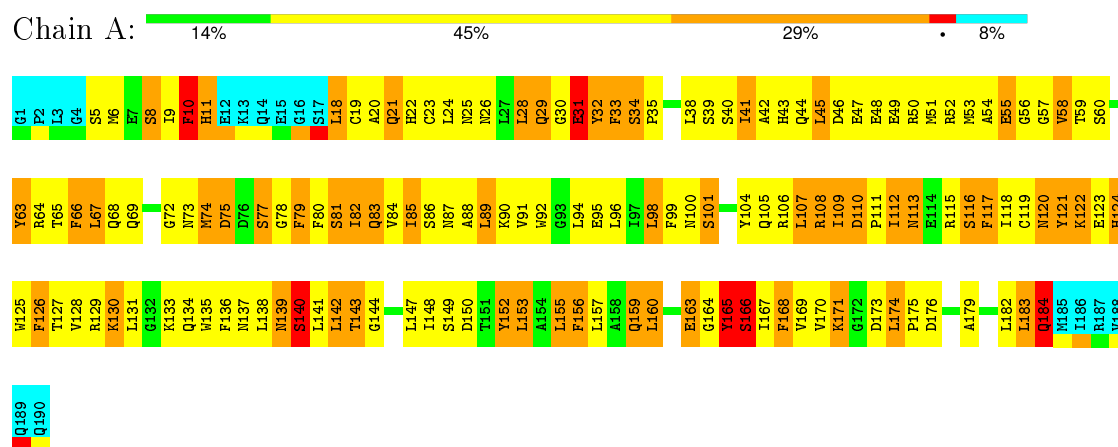
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Machado-Joseph disease protein 1



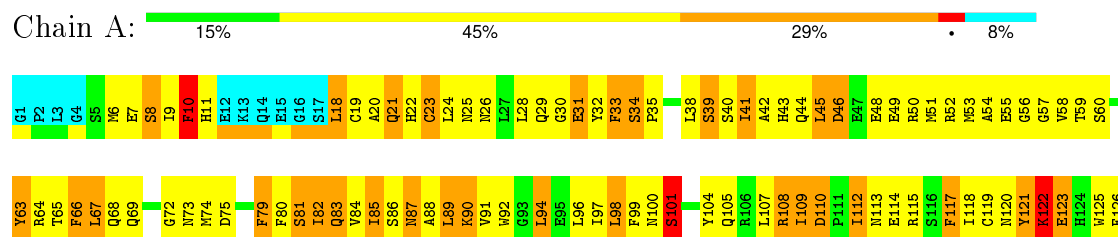
4.2.3 Score per residue for model 3

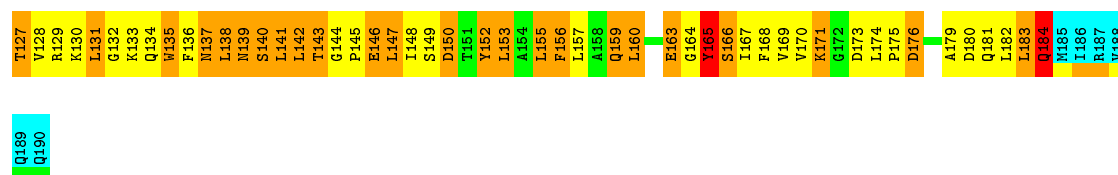
- Molecule 1: Machado-Joseph disease protein 1



4.2.4 Score per residue for model 4 (medoid)

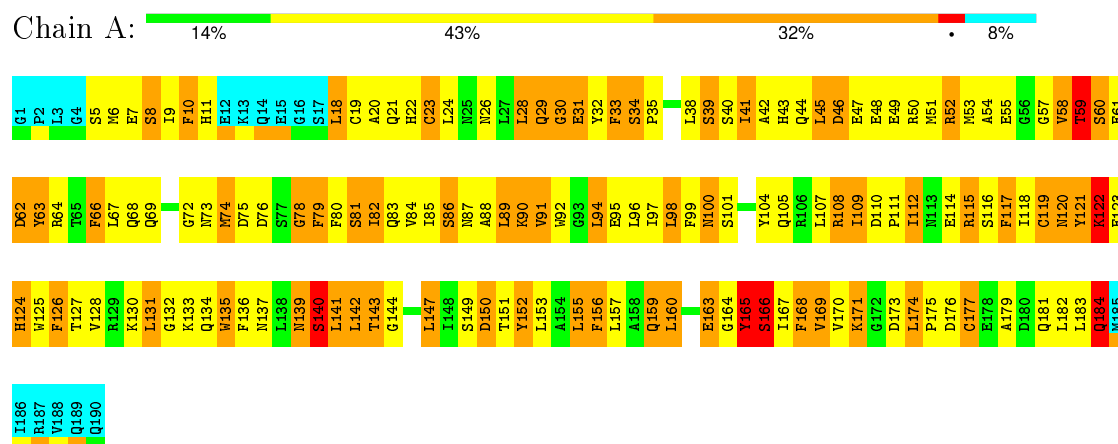
- Molecule 1: Machado-Joseph disease protein 1





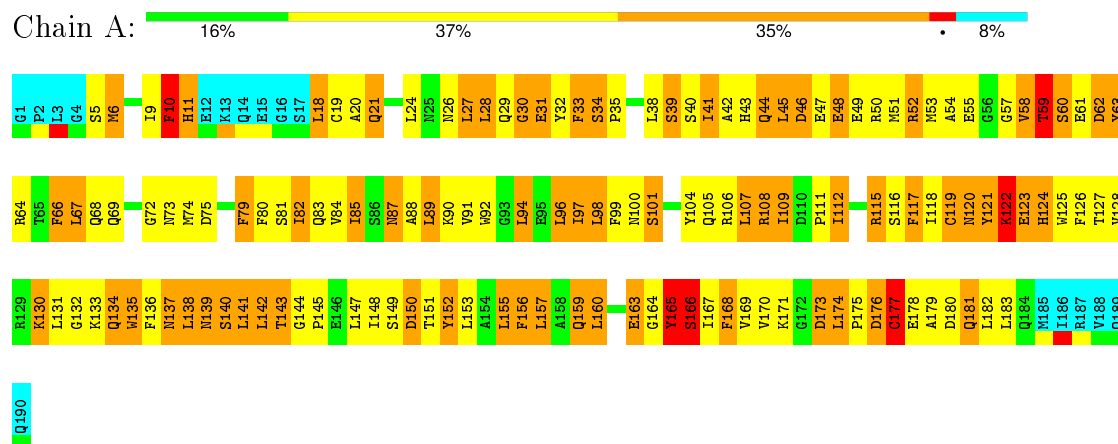
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Machado-Joseph disease protein 1



4.2.6 Score per residue for model 6

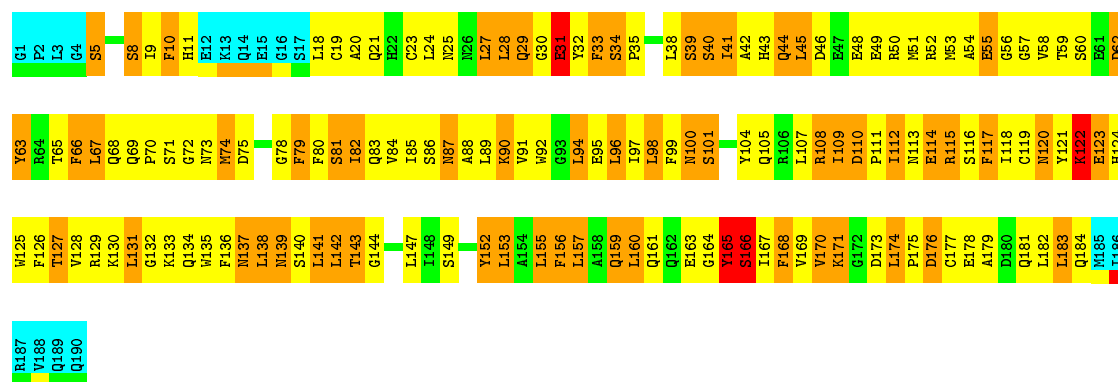
- Molecule 1: Machado-Joseph disease protein 1



4.2.7 Score per residue for model 7

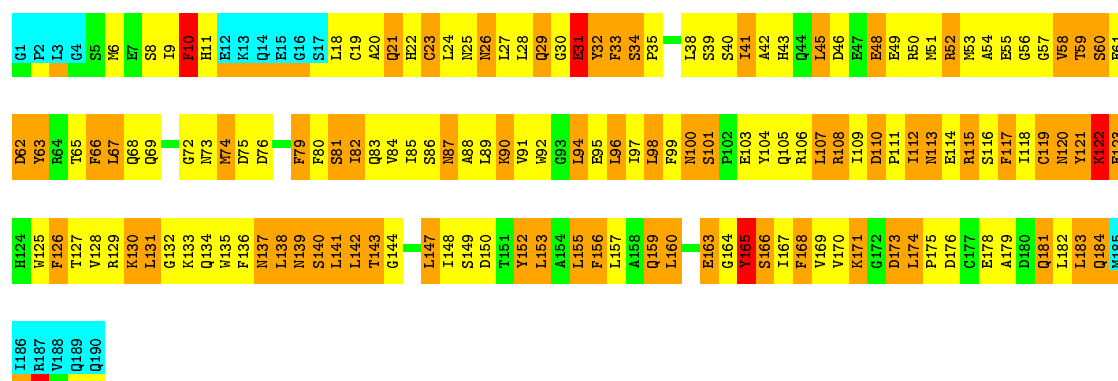
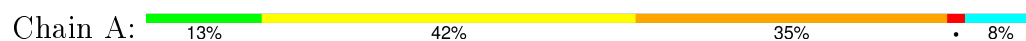
- Molecule 1: Machado-Joseph disease protein 1





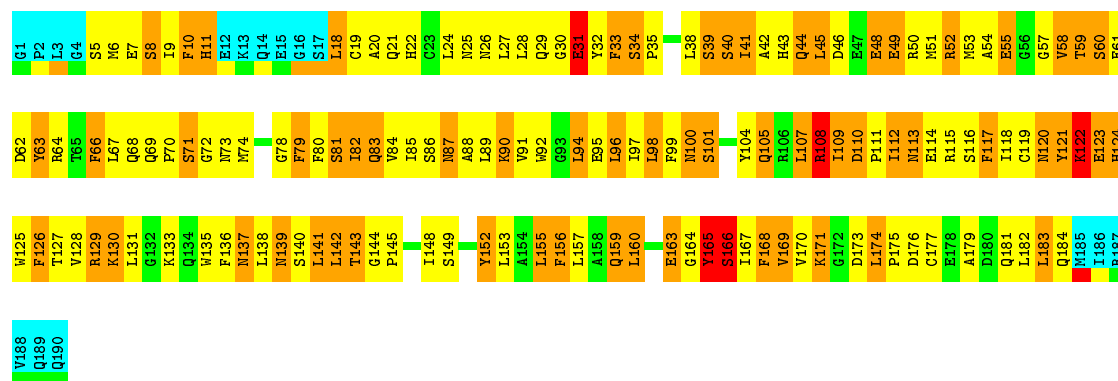
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Machado-Joseph disease protein 1



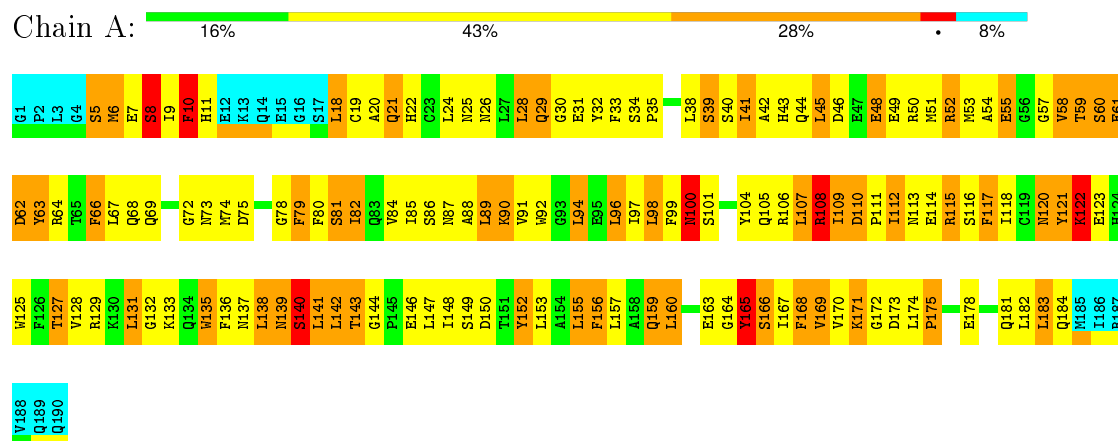
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Machado-Joseph disease protein 1



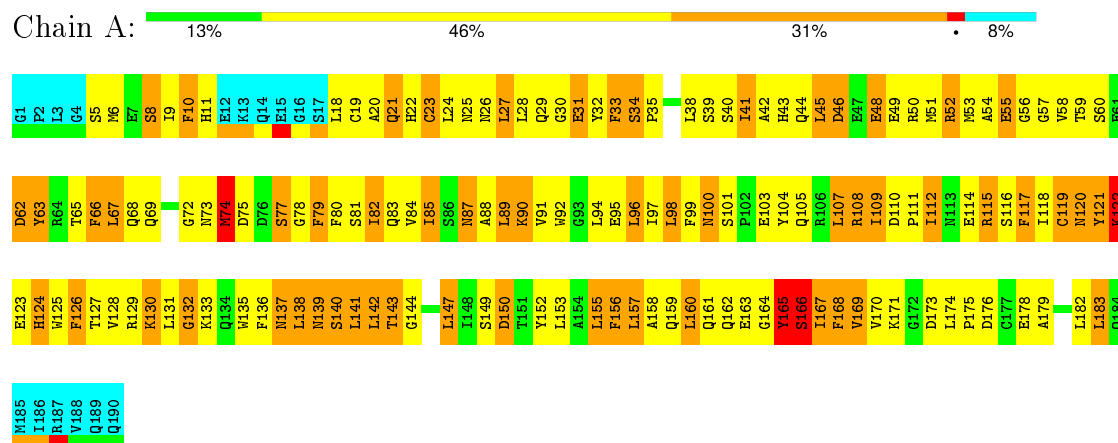
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Machado-Joseph disease protein 1



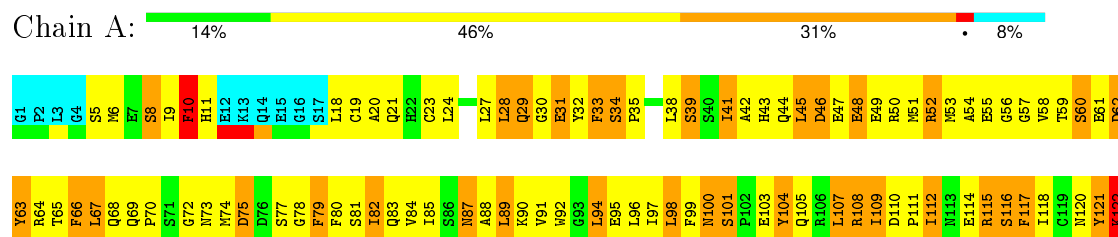
4.2.11 Score per residue for model 11

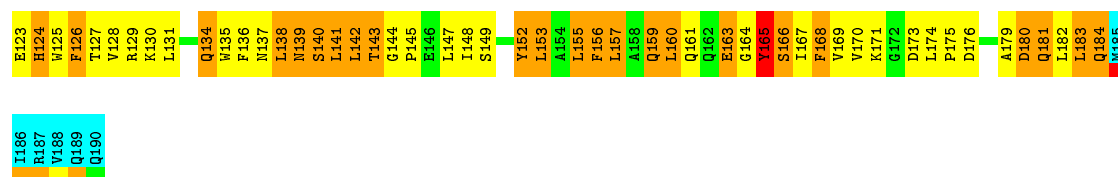
- Molecule 1: Machado-Joseph disease protein 1



4.2.12 Score per residue for model 12

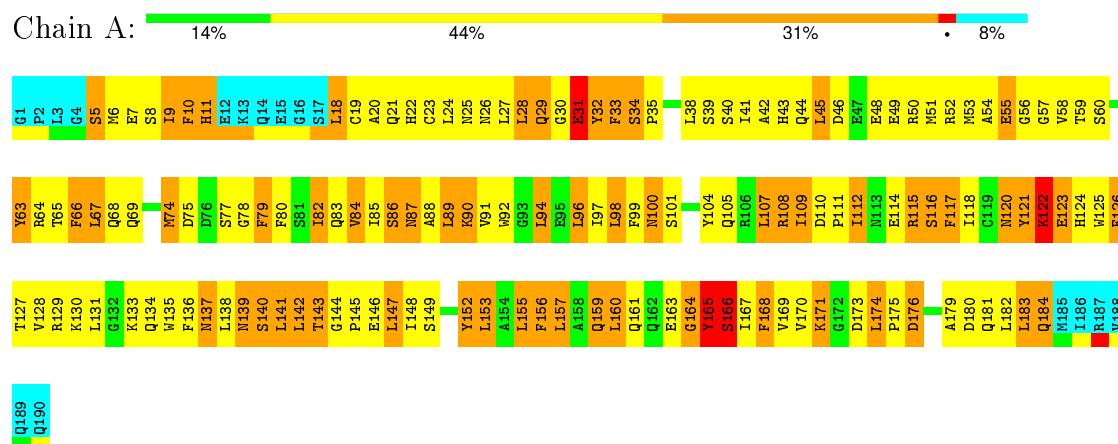
- Molecule 1: Machado-Joseph disease protein 1





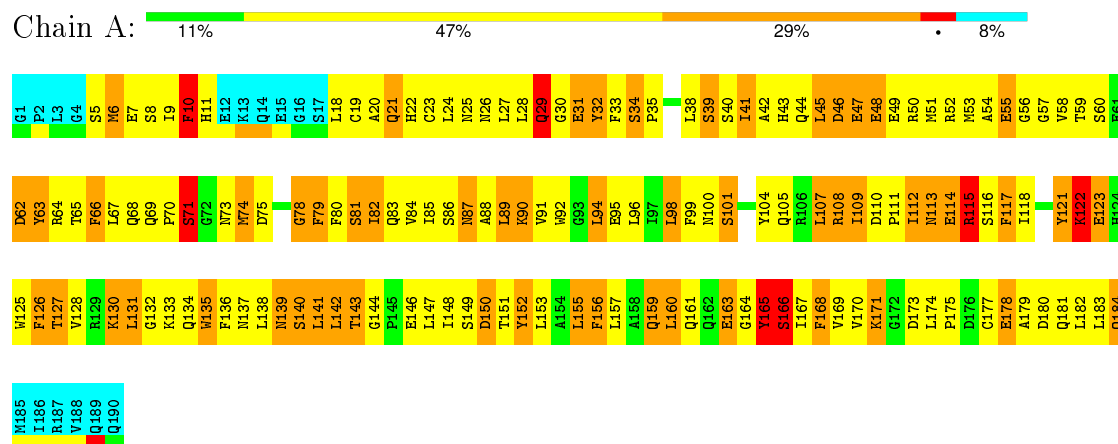
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Machado-Joseph disease protein 1



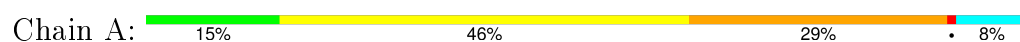
4.2.14 Score per residue for model 14

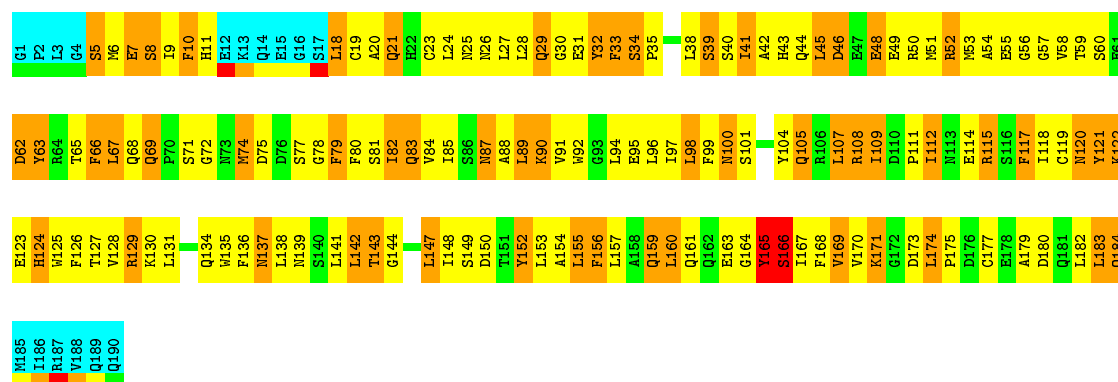
- Molecule 1: Machado-Joseph disease protein 1



4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Machado-Joseph disease protein 1

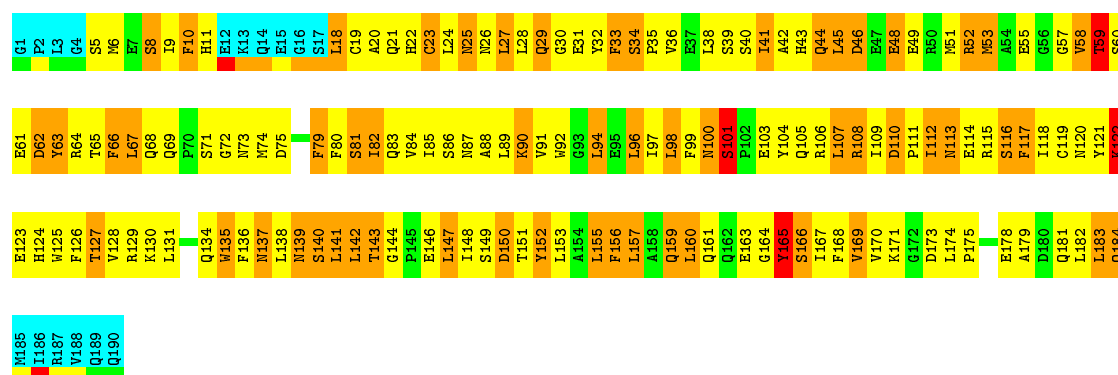




4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Machado-Joseph disease protein 1

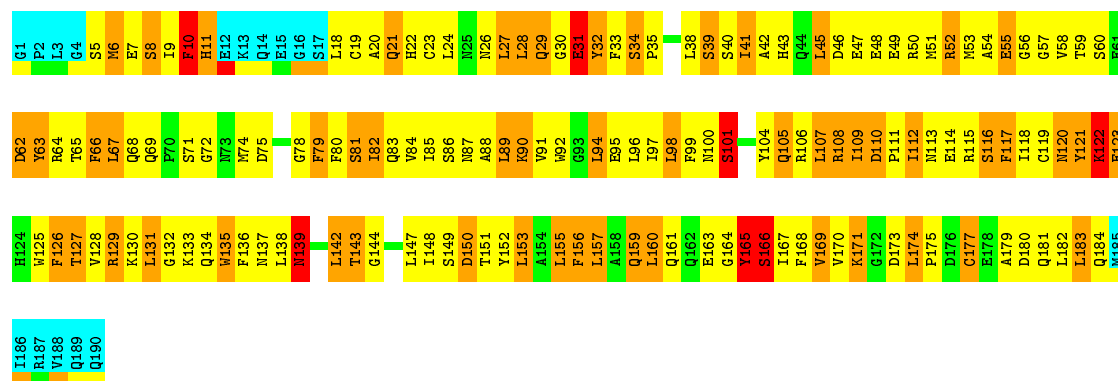
Chain A: 12% 48% 29% 8%



4.2.17 Score per residue for model 17

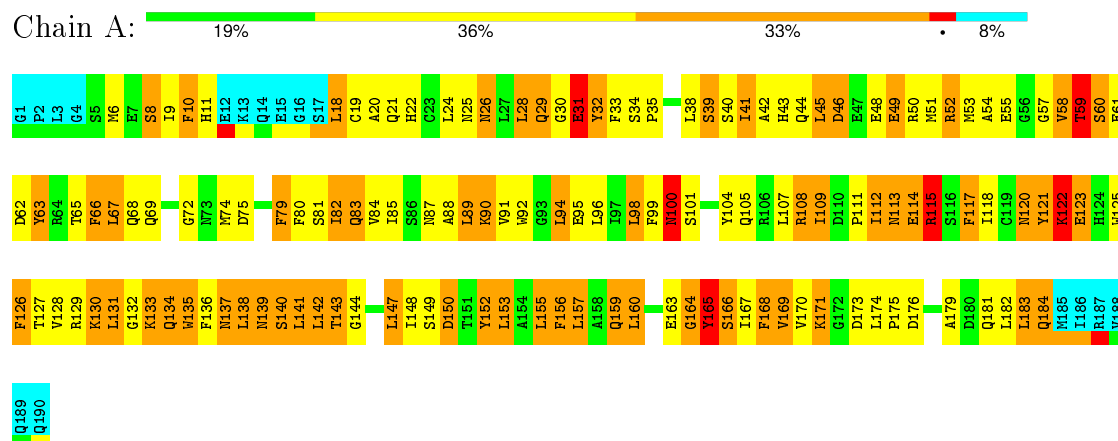
- Molecule 1: Machado-Joseph disease protein 1

Chain A: 12% 47% 29% 8%



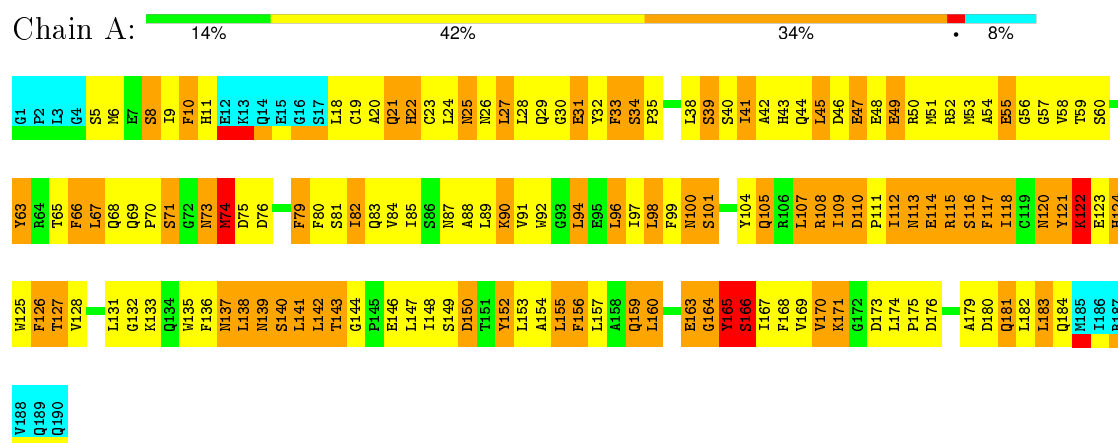
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Machado-Joseph disease protein 1



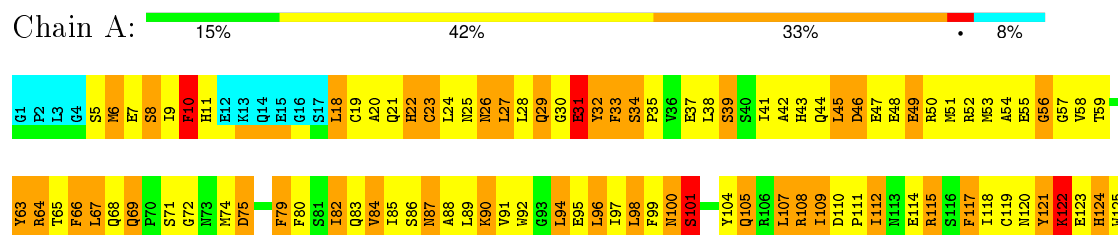
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Machado-Joseph disease protein 1



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Machado-Joseph disease protein 1



T126	T127	T128	K129	K130	L131	G132	K133	Q134	W135	F136	M137	L138	M139	S140	L141	L142	T143	L147	I148	S149	D150	T151	Y152	A153	A154	L155	F156	L157	A158	Q159	L160	E163	G164	Y165	S166	T167	F168	V169	V170	K171	G172	D173	L174	P175	D176	A179	D180	Q181	L182	L183	Q184	M185	L186	R187	V188	O189	Q190
------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------

5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 50 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
cyana	structure solution	1.0.5
cyana	refinement	1.0.5

The following table shows chemical shift validation statistics as aggregates over all chemical shift files. Detailed validation can be found in section 7 of this report.

Chemical shift file(s)	BMRB entry 6742
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	2232
Number of shifts mapped to atoms	2232
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	85%

No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.

6 Model quality ⓘ

6.1 Standard geometry ⓘ

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 ⓘ

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	1412	1361	1361	266±17
All	All	28240	27220	27220	5325

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 96.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:ILE:HG21	1:A:168:PHE:CE2	1.09	1.83	10	20
1:A:117:PHE:CE2	1:A:128:VAL:HG21	1.06	1.85	5	10
1:A:160:LEU:HD11	1:A:167:ILE:HD11	1.05	1.25	17	3
1:A:9:ILE:HD13	1:A:131:LEU:HD21	1.03	1.29	9	1
1:A:131:LEU:HD12	1:A:179:ALA:HB1	1.03	1.20	1	2
1:A:117:PHE:CE1	1:A:169:VAL:HG23	1.02	1.89	15	7
1:A:82:ILE:HG21	1:A:168:PHE:CZ	1.01	1.90	15	20
1:A:45:LEU:HD22	1:A:45:LEU:C	1.00	1.75	16	1
1:A:45:LEU:O	1:A:45:LEU:HD22	0.93	1.64	16	1
1:A:53:MET:O	1:A:58:VAL:HG13	0.93	1.62	18	1
1:A:160:LEU:HD13	1:A:161:GLN:N	0.92	1.79	11	2
1:A:160:LEU:HD11	1:A:167:ILE:CD1	0.92	1.94	11	14
1:A:131:LEU:HD11	1:A:179:ALA:HB1	0.92	1.42	7	3
1:A:94:LEU:HD22	1:A:173:ASP:O	0.92	1.65	20	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:SER:O	1:A:84:VAL:HG22	0.92	1.63	19	18
1:A:126:PHE:CZ	1:A:141:LEU:HD22	0.92	2.00	15	6
1:A:53:MET:C	1:A:58:VAL:HG13	0.91	1.86	18	1
1:A:42:ALA:HB2	1:A:84:VAL:HG12	0.91	1.39	7	17
1:A:155:LEU:HD22	1:A:155:LEU:O	0.90	1.64	5	11
1:A:42:ALA:HA	1:A:45:LEU:HD23	0.90	1.41	5	14
1:A:157:LEU:O	1:A:160:LEU:CD1	0.88	2.22	11	2
1:A:155:LEU:O	1:A:155:LEU:HD22	0.88	1.67	15	9
1:A:183:LEU:HD13	1:A:184:GLN:N	0.88	1.84	7	3
1:A:157:LEU:HA	1:A:160:LEU:HD12	0.88	1.43	17	2
1:A:136:PHE:CZ	1:A:147:LEU:HD12	0.87	2.05	15	2
1:A:115:ARG:CZ	1:A:174:LEU:HD12	0.87	2.00	1	2
1:A:87:ASN:O	1:A:91:VAL:HG13	0.87	1.69	8	19
1:A:45:LEU:HD12	1:A:49:GLU:HG3	0.86	1.46	13	3
1:A:160:LEU:HD11	1:A:167:ILE:CG1	0.86	1.99	9	18
1:A:18:LEU:HD12	1:A:19:CYS:N	0.85	1.86	9	14
1:A:9:ILE:CD1	1:A:131:LEU:HD21	0.85	2.00	9	1
1:A:45:LEU:HD22	1:A:45:LEU:O	0.85	1.72	9	1
1:A:21:GLN:HB3	1:A:38:LEU:HD22	0.85	1.46	2	1
1:A:117:PHE:CE1	1:A:169:VAL:HG12	0.85	2.06	12	1
1:A:58:VAL:HG23	1:A:62:ASP:HB3	0.85	1.49	12	7
1:A:20:ALA:CB	1:A:125:TRP:CZ2	0.84	2.60	9	20
1:A:42:ALA:HA	1:A:45:LEU:HD12	0.84	1.47	9	2
1:A:45:LEU:C	1:A:45:LEU:HD22	0.84	1.93	9	1
1:A:94:LEU:HD12	1:A:170:VAL:HG23	0.84	1.50	7	2
1:A:94:LEU:H	1:A:94:LEU:HD12	0.84	1.31	10	5
1:A:33:PHE:CZ	1:A:88:ALA:HB1	0.83	2.08	11	5
1:A:45:LEU:HD12	1:A:49:GLU:CG	0.82	2.04	13	2
1:A:89:LEU:C	1:A:94:LEU:O	0.82	2.17	10	20
1:A:63:TYR:O	1:A:67:LEU:HD23	0.82	1.74	15	1
1:A:131:LEU:HD12	1:A:179:ALA:CB	0.82	2.03	1	1
1:A:21:GLN:OE1	1:A:24:LEU:HD23	0.82	1.74	12	3
1:A:24:LEU:HD13	1:A:85:ILE:HG23	0.82	1.49	17	9
1:A:38:LEU:HD23	1:A:80:PHE:CD2	0.82	2.10	2	5
1:A:98:LEU:HD13	1:A:167:ILE:O	0.81	1.75	11	12
1:A:89:LEU:HB3	1:A:94:LEU:HD13	0.81	1.50	12	5
1:A:9:ILE:O	1:A:10:PHE:HB3	0.81	1.73	12	10
1:A:82:ILE:HD11	1:A:118:ILE:HD12	0.81	1.52	19	17
1:A:155:LEU:HD13	1:A:156:PHE:N	0.81	1.89	7	20
1:A:85:ILE:HD13	1:A:125:TRP:CH2	0.80	2.12	13	19
1:A:131:LEU:HD12	1:A:136:PHE:HB2	0.80	1.51	3	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:183:LEU:HD12	1:A:183:LEU:C	0.80	1.97	3	3
1:A:157:LEU:O	1:A:160:LEU:HD13	0.80	1.74	17	2
1:A:24:LEU:HD22	1:A:85:ILE:HG13	0.80	1.53	18	16
1:A:96:LEU:HD11	1:A:168:PHE:CB	0.80	2.05	5	7
1:A:131:LEU:HD13	1:A:131:LEU:O	0.80	1.76	17	1
1:A:24:LEU:HD22	1:A:85:ILE:HD13	0.79	1.52	17	1
1:A:89:LEU:HD13	1:A:94:LEU:HD11	0.79	1.52	15	9
1:A:137:ASN:OD1	1:A:148:ILE:HD11	0.79	1.77	18	7
1:A:45:LEU:HD13	1:A:46:ASP:N	0.79	1.93	9	2
1:A:58:VAL:O	1:A:59:THR:HG22	0.79	1.78	17	12
1:A:58:VAL:HG21	1:A:63:TYR:CD1	0.79	2.13	2	12
1:A:96:LEU:HD11	1:A:168:PHE:HB3	0.79	1.53	5	7
1:A:73:ASN:O	1:A:74:MET:CB	0.79	2.29	7	1
1:A:99:PHE:HB2	1:A:169:VAL:HG13	0.78	1.54	7	5
1:A:73:ASN:O	1:A:74:MET:HB3	0.78	1.75	7	2
1:A:118:ILE:HD13	1:A:127:THR:HG23	0.78	1.53	19	3
1:A:183:LEU:C	1:A:183:LEU:HD12	0.78	1.98	18	2
1:A:74:MET:O	1:A:79:PHE:CZ	0.78	2.37	3	1
1:A:28:LEU:HD23	1:A:92:TRP:CE2	0.78	2.14	17	12
1:A:45:LEU:CD2	1:A:45:LEU:C	0.77	2.53	16	1
1:A:136:PHE:HB3	1:A:147:LEU:HD23	0.77	1.54	10	1
1:A:21:GLN:HB2	1:A:38:LEU:HD22	0.77	1.57	14	6
1:A:33:PHE:CE2	1:A:38:LEU:HD13	0.77	2.13	14	1
1:A:42:ALA:HB2	1:A:84:VAL:CG1	0.77	2.09	9	18
1:A:183:LEU:HD13	1:A:183:LEU:C	0.77	2.00	7	2
1:A:18:LEU:HD12	1:A:18:LEU:C	0.77	2.00	10	1
1:A:24:LEU:HD11	1:A:85:ILE:HG13	0.77	1.54	15	1
1:A:174:LEU:HD13	1:A:175:PRO:HD2	0.76	1.56	6	11
1:A:21:GLN:HB2	1:A:38:LEU:HD11	0.76	1.57	10	1
1:A:89:LEU:HD13	1:A:94:LEU:CD1	0.76	2.11	9	10
1:A:11:HIS:CE1	1:A:30:GLY:N	0.76	2.54	6	3
1:A:142:LEU:HD23	1:A:144:GLY:O	0.76	1.80	10	17
1:A:107:LEU:O	1:A:108:ARG:CB	0.76	2.34	1	20
1:A:74:MET:CE	1:A:80:PHE:CD1	0.76	2.69	19	2
1:A:180:ASP:O	1:A:183:LEU:HD22	0.75	1.81	12	3
1:A:131:LEU:HD12	1:A:136:PHE:CB	0.75	2.10	3	3
1:A:5:SER:O	1:A:182:LEU:HD13	0.75	1.81	7	8
1:A:132:GLY:O	1:A:183:LEU:HD12	0.75	1.80	5	1
1:A:27:LEU:HD12	1:A:129:ARG:CD	0.75	2.11	9	1
1:A:8:SER:O	1:A:182:LEU:HD11	0.75	1.81	16	17
1:A:41:ILE:HG22	1:A:84:VAL:CG2	0.75	2.12	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:MET:HE2	1:A:58:VAL:HG21	0.75	1.57	15	2
1:A:33:PHE:CE2	1:A:88:ALA:HB1	0.74	2.17	13	14
1:A:45:LEU:HD22	1:A:87:ASN:OD1	0.74	1.82	8	3
1:A:94:LEU:HD12	1:A:170:VAL:CG2	0.74	2.11	7	2
1:A:85:ILE:HD13	1:A:125:TRP:CZ2	0.74	2.17	13	19
1:A:6:MET:HA	1:A:9:ILE:HD12	0.74	1.59	3	17
1:A:164:GLY:O	1:A:165:TYR:CD1	0.74	2.41	20	20
1:A:131:LEU:HD13	1:A:131:LEU:C	0.74	2.02	18	3
1:A:58:VAL:HG23	1:A:62:ASP:CB	0.74	2.12	7	7
1:A:107:LEU:O	1:A:108:ARG:HG2	0.74	1.83	1	1
1:A:82:ILE:CG2	1:A:168:PHE:CE2	0.73	2.71	15	20
1:A:100:ASN:HD21	1:A:166:SER:N	0.73	1.81	14	9
1:A:94:LEU:HD12	1:A:170:VAL:HG12	0.73	1.58	11	9
1:A:41:ILE:CG2	1:A:84:VAL:HG22	0.73	2.13	20	2
1:A:98:LEU:HD23	1:A:100:ASN:HB2	0.73	1.58	16	6
1:A:30:GLY:HA3	1:A:32:TYR:CZ	0.73	2.19	14	17
1:A:131:LEU:CD2	1:A:179:ALA:HB1	0.73	2.14	6	7
1:A:43:HIS:NE2	1:A:74:MET:SD	0.73	2.61	11	15
1:A:94:LEU:N	1:A:94:LEU:HD12	0.73	1.99	10	3
1:A:160:LEU:HD11	1:A:167:ILE:HG13	0.72	1.60	2	15
1:A:9:ILE:HD13	1:A:131:LEU:CD2	0.72	2.13	9	1
1:A:131:LEU:CD1	1:A:179:ALA:HB1	0.72	2.14	20	8
1:A:58:VAL:O	1:A:60:SER:N	0.72	2.23	10	8
1:A:24:LEU:HD11	1:A:89:LEU:HD21	0.72	1.61	20	9
1:A:63:TYR:CD2	1:A:67:LEU:HD11	0.72	2.20	18	10
1:A:9:ILE:O	1:A:10:PHE:CD1	0.71	2.43	18	7
1:A:117:PHE:CZ	1:A:157:LEU:HD11	0.71	2.20	6	5
1:A:31:GLU:O	1:A:32:TYR:CB	0.71	2.38	14	7
1:A:30:GLY:O	1:A:32:TYR:CE1	0.71	2.43	6	2
1:A:24:LEU:HD23	1:A:33:PHE:CZ	0.71	2.20	14	1
1:A:112:ILE:O	1:A:113:ASN:C	0.71	2.28	18	3
1:A:107:LEU:O	1:A:108:ARG:CG	0.71	2.39	1	20
1:A:111:PRO:CB	1:A:157:LEU:HD23	0.71	2.15	11	9
1:A:136:PHE:CE1	1:A:147:LEU:HD13	0.71	2.19	17	1
1:A:30:GLY:O	1:A:32:TYR:CD1	0.71	2.43	14	2
1:A:100:ASN:OD1	1:A:165:TYR:CE2	0.71	2.44	7	4
1:A:89:LEU:HD12	1:A:170:VAL:HG13	0.71	1.62	12	12
1:A:30:GLY:HA3	1:A:32:TYR:CE2	0.70	2.21	12	15
1:A:31:GLU:O	1:A:32:TYR:HB2	0.70	1.86	14	2
1:A:81:SER:O	1:A:84:VAL:HG13	0.70	1.86	7	8
1:A:111:PRO:HB3	1:A:157:LEU:HD12	0.70	1.61	10	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:VAL:HG21	1:A:63:TYR:HD1	0.70	1.47	12	12
1:A:45:LEU:HD12	1:A:49:GLU:CD	0.70	2.07	13	1
1:A:99:PHE:CD2	1:A:117:PHE:CZ	0.70	2.79	20	1
1:A:183:LEU:HD12	1:A:184:GLN:HG3	0.70	1.63	16	2
1:A:45:LEU:O	1:A:49:GLU:CB	0.70	2.40	18	17
1:A:74:MET:O	1:A:79:PHE:CE1	0.70	2.45	3	3
1:A:100:ASN:O	1:A:101:SER:C	0.69	2.30	8	20
1:A:117:PHE:CE2	1:A:128:VAL:CG2	0.69	2.73	5	10
1:A:153:LEU:HD22	1:A:153:LEU:O	0.69	1.87	18	5
1:A:131:LEU:HD11	1:A:179:ALA:CB	0.69	2.17	8	2
1:A:160:LEU:HD11	1:A:167:ILE:HG12	0.69	1.63	10	8
1:A:114:GLU:HG2	1:A:169:VAL:HG22	0.69	1.65	4	3
1:A:74:MET:HG3	1:A:75:ASP:N	0.69	2.02	3	1
1:A:35:PRO:O	1:A:80:PHE:CZ	0.69	2.45	19	19
1:A:79:PHE:C	1:A:79:PHE:CD1	0.69	2.66	14	7
1:A:45:LEU:HD13	1:A:87:ASN:HD21	0.69	1.46	15	6
1:A:174:LEU:HD22	1:A:175:PRO:HD2	0.69	1.64	12	9
1:A:142:LEU:HD22	1:A:142:LEU:H	0.69	1.47	10	10
1:A:98:LEU:CD2	1:A:168:PHE:CD2	0.69	2.75	13	11
1:A:94:LEU:CD2	1:A:174:LEU:HD23	0.69	2.17	13	2
1:A:27:LEU:HD12	1:A:129:ARG:HD2	0.68	1.64	9	1
1:A:130:LYS:CD	1:A:135:TRP:CE3	0.68	2.76	7	1
1:A:131:LEU:HB2	1:A:136:PHE:CD1	0.68	2.22	10	7
1:A:85:ILE:CG2	1:A:89:LEU:HD22	0.68	2.19	13	3
1:A:160:LEU:C	1:A:160:LEU:HD22	0.68	2.09	17	2
1:A:74:MET:CE	1:A:80:PHE:CE1	0.68	2.77	19	2
1:A:18:LEU:HD23	1:A:21:GLN:OE1	0.68	1.88	2	1
1:A:28:LEU:HG	1:A:92:TRP:CE3	0.68	2.24	13	12
1:A:85:ILE:HG22	1:A:89:LEU:HD22	0.68	1.64	13	5
1:A:21:GLN:HB2	1:A:38:LEU:HD12	0.68	1.64	3	3
1:A:28:LEU:HD13	1:A:92:TRP:CE2	0.68	2.24	15	8
1:A:44:GLN:O	1:A:48:GLU:N	0.68	2.23	2	10
1:A:73:ASN:O	1:A:74:MET:HG3	0.68	1.88	19	3
1:A:89:LEU:HD13	1:A:94:LEU:CD2	0.67	2.19	12	4
1:A:131:LEU:HD12	1:A:136:PHE:CZ	0.67	2.24	17	2
1:A:100:ASN:OD1	1:A:165:TYR:CD2	0.67	2.47	7	4
1:A:21:GLN:HE21	1:A:24:LEU:HD23	0.67	1.49	13	1
1:A:31:GLU:O	1:A:32:TYR:CD2	0.67	2.47	14	1
1:A:18:LEU:HD12	1:A:19:CYS:SG	0.67	2.30	1	3
1:A:94:LEU:HD12	1:A:94:LEU:N	0.67	2.04	12	2
1:A:89:LEU:CD1	1:A:170:VAL:HG13	0.67	2.20	20	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:157:LEU:CA	1:A:160:LEU:HD12	0.67	2.19	17	2
1:A:45:LEU:HD11	1:A:83:GLN:HB3	0.67	1.65	16	1
1:A:174:LEU:HD13	1:A:175:PRO:N	0.67	2.05	12	13
1:A:126:PHE:CD1	1:A:141:LEU:HD21	0.67	2.24	12	1
1:A:39:SER:O	1:A:43:HIS:CD2	0.67	2.48	19	16
1:A:132:GLY:O	1:A:183:LEU:HD23	0.67	1.88	6	1
1:A:21:GLN:NE2	1:A:38:LEU:HD13	0.67	2.05	7	1
1:A:96:LEU:HD22	1:A:97:ILE:N	0.66	2.04	20	10
1:A:9:ILE:O	1:A:10:PHE:CG	0.66	2.49	18	10
1:A:142:LEU:H	1:A:142:LEU:HD22	0.66	1.51	15	10
1:A:25:ASN:ND2	1:A:33:PHE:CE1	0.66	2.64	14	2
1:A:28:LEU:HD23	1:A:92:TRP:CZ2	0.66	2.25	17	5
1:A:117:PHE:CE1	1:A:157:LEU:CD1	0.66	2.79	19	1
1:A:63:TYR:O	1:A:67:LEU:CD2	0.66	2.43	15	1
1:A:10:PHE:CD1	1:A:26:ASN:ND2	0.66	2.64	6	1
1:A:155:LEU:C	1:A:155:LEU:HD22	0.66	2.10	5	9
1:A:18:LEU:HG	1:A:19:CYS:N	0.66	2.05	4	7
1:A:21:GLN:OE1	1:A:38:LEU:HD21	0.66	1.90	20	2
1:A:75:ASP:CB	1:A:79:PHE:O	0.66	2.44	11	4
1:A:100:ASN:OD1	1:A:165:TYR:CD1	0.66	2.49	5	8
1:A:155:LEU:HD21	1:A:159:GLN:NE2	0.66	2.05	5	20
1:A:112:ILE:O	1:A:135:TRP:CZ2	0.66	2.49	19	8
1:A:41:ILE:HG22	1:A:84:VAL:HG22	0.66	1.65	20	2
1:A:139:ASN:O	1:A:140:SER:CB	0.66	2.44	16	11
1:A:134:GLN:OE1	1:A:147:LEU:HD11	0.66	1.91	18	1
1:A:90:LYS:HA	1:A:94:LEU:O	0.65	1.91	5	19
1:A:111:PRO:HA	1:A:117:PHE:CZ	0.65	2.27	14	10
1:A:117:PHE:CD1	1:A:118:ILE:N	0.65	2.64	8	10
1:A:82:ILE:HD11	1:A:118:ILE:CD1	0.65	2.19	2	8
1:A:87:ASN:O	1:A:90:LYS:HG3	0.65	1.92	13	13
1:A:111:PRO:HB3	1:A:157:LEU:HD23	0.65	1.66	11	5
1:A:98:LEU:HD11	1:A:100:ASN:ND2	0.65	2.06	11	3
1:A:107:LEU:O	1:A:108:ARG:HB3	0.65	1.91	19	13
1:A:20:ALA:HB1	1:A:125:TRP:CZ2	0.65	2.27	17	18
1:A:45:LEU:HD21	1:A:83:GLN:HB3	0.65	1.66	6	3
1:A:135:TRP:CH2	1:A:150:ASP:CA	0.65	2.80	17	6
1:A:183:LEU:HD13	1:A:184:GLN:HB2	0.65	1.67	20	2
1:A:136:PHE:CE2	1:A:147:LEU:HD12	0.65	2.27	6	1
1:A:49:GLU:OE1	1:A:66:PHE:CZ	0.65	2.50	11	3
1:A:99:PHE:CE1	1:A:105:GLN:NE2	0.65	2.65	12	7
1:A:58:VAL:HG11	1:A:63:TYR:CD2	0.65	2.26	9	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:136:PHE:CZ	1:A:147:LEU:HD13	0.65	2.27	3	2
1:A:107:LEU:O	1:A:108:ARG:HB2	0.65	1.90	18	7
1:A:126:PHE:CD1	1:A:126:PHE:N	0.65	2.64	11	7
1:A:89:LEU:O	1:A:94:LEU:HD12	0.65	1.91	12	4
1:A:34:SER:CB	1:A:35:PRO:CD	0.65	2.75	14	16
1:A:42:ALA:HB2	1:A:84:VAL:HG23	0.64	1.67	20	2
1:A:126:PHE:CZ	1:A:141:LEU:CD2	0.64	2.80	7	6
1:A:31:GLU:O	1:A:32:TYR:CD1	0.64	2.50	12	3
1:A:45:LEU:O	1:A:49:GLU:N	0.64	2.28	14	18
1:A:69:GLN:CD	1:A:98:LEU:HD23	0.64	2.13	5	6
1:A:41:ILE:O	1:A:45:LEU:N	0.64	2.28	16	12
1:A:73:ASN:O	1:A:74:MET:O	0.64	2.14	5	3
1:A:131:LEU:O	1:A:131:LEU:HD13	0.64	1.90	18	1
1:A:100:ASN:OD1	1:A:165:TYR:CE1	0.64	2.51	18	7
1:A:126:PHE:CD1	1:A:141:LEU:HD22	0.64	2.27	19	5
1:A:183:LEU:HD12	1:A:184:GLN:HB2	0.64	1.68	15	2
1:A:38:LEU:HG	1:A:84:VAL:HG21	0.64	1.68	2	5
1:A:19:CYS:CB	1:A:80:PHE:CD2	0.64	2.81	3	2
1:A:58:VAL:HG21	1:A:63:TYR:CD2	0.64	2.28	17	6
1:A:33:PHE:HE2	1:A:38:LEU:HD13	0.64	1.53	14	1
1:A:49:GLU:CD	1:A:66:PHE:CE2	0.64	2.71	16	1
1:A:141:LEU:HD12	1:A:141:LEU:O	0.64	1.92	6	3
1:A:126:PHE:CE2	1:A:141:LEU:CD2	0.64	2.80	7	5
1:A:136:PHE:HE1	1:A:147:LEU:HD13	0.63	1.53	17	1
1:A:118:ILE:CG2	1:A:125:TRP:CE3	0.63	2.81	19	20
1:A:117:PHE:O	1:A:128:VAL:N	0.63	2.30	14	20
1:A:53:MET:SD	1:A:63:TYR:CE2	0.63	2.91	15	1
1:A:24:LEU:CD1	1:A:85:ILE:HG13	0.63	2.23	15	1
1:A:73:ASN:O	1:A:74:MET:CG	0.63	2.46	14	3
1:A:18:LEU:HD21	1:A:35:PRO:HB3	0.63	1.70	2	1
1:A:45:LEU:O	1:A:49:GLU:HB2	0.63	1.94	12	15
1:A:81:SER:O	1:A:84:VAL:CG2	0.63	2.45	19	18
1:A:134:GLN:OE1	1:A:135:TRP:CZ3	0.63	2.51	14	3
1:A:183:LEU:O	1:A:183:LEU:HD22	0.63	1.93	7	4
1:A:121:TYR:C	1:A:121:TYR:CD1	0.63	2.70	14	8
1:A:28:LEU:O	1:A:29:GLN:CB	0.63	2.45	7	7
1:A:58:VAL:O	1:A:59:THR:CG2	0.63	2.47	2	12
1:A:52:ARG:O	1:A:56:GLY:N	0.63	2.32	19	13
1:A:50:ARG:O	1:A:54:ALA:CB	0.63	2.46	12	19
1:A:79:PHE:CD1	1:A:79:PHE:C	0.63	2.72	11	8
1:A:160:LEU:HD13	1:A:161:GLN:H	0.63	1.53	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:ASN:ND2	1:A:165:TYR:CD1	0.63	2.66	4	1
1:A:160:LEU:CD1	1:A:167:ILE:HD11	0.63	2.18	11	2
1:A:38:LEU:CB	1:A:80:PHE:CD2	0.63	2.81	11	1
1:A:9:ILE:O	1:A:10:PHE:CD2	0.63	2.52	14	3
1:A:9:ILE:O	1:A:10:PHE:CB	0.63	2.46	14	13
1:A:121:TYR:CD1	1:A:121:TYR:C	0.63	2.71	17	10
1:A:111:PRO:CB	1:A:157:LEU:HD12	0.63	2.24	8	3
1:A:20:ALA:HB1	1:A:125:TRP:CH2	0.63	2.28	19	11
1:A:121:TYR:O	1:A:123:GLU:N	0.63	2.32	19	16
1:A:117:PHE:CD2	1:A:128:VAL:HB	0.63	2.27	2	10
1:A:33:PHE:CZ	1:A:88:ALA:CB	0.63	2.82	11	3
1:A:136:PHE:CE2	1:A:138:LEU:HD23	0.62	2.29	10	1
1:A:117:PHE:CE1	1:A:169:VAL:CG2	0.62	2.82	11	4
1:A:123:GLU:O	1:A:124:HIS:CB	0.62	2.46	12	9
1:A:10:PHE:CG	1:A:26:ASN:OD1	0.62	2.52	6	1
1:A:59:THR:O	1:A:61:GLU:N	0.62	2.30	10	8
1:A:101:SER:O	1:A:105:GLN:HG2	0.62	1.94	8	5
1:A:53:MET:O	1:A:58:VAL:N	0.62	2.32	12	16
1:A:99:PHE:N	1:A:167:ILE:O	0.62	2.32	16	10
1:A:135:TRP:CE3	1:A:135:TRP:N	0.62	2.68	4	2
1:A:99:PHE:CZ	1:A:105:GLN:OE1	0.62	2.52	12	3
1:A:21:GLN:HG3	1:A:38:LEU:HD22	0.62	1.70	13	1
1:A:11:HIS:CE1	1:A:29:GLN:O	0.62	2.53	16	1
1:A:104:TYR:O	1:A:109:ILE:HD13	0.62	1.94	16	3
1:A:10:PHE:CE2	1:A:11:HIS:O	0.62	2.53	16	4
1:A:96:LEU:HD13	1:A:170:VAL:HG22	0.62	1.70	4	6
1:A:83:GLN:O	1:A:87:ASN:ND2	0.62	2.33	15	11
1:A:168:PHE:CD1	1:A:168:PHE:N	0.62	2.67	7	9
1:A:155:LEU:HD22	1:A:155:LEU:C	0.62	2.14	19	11
1:A:21:GLN:CG	1:A:38:LEU:HD22	0.62	2.24	13	1
1:A:41:ILE:CG2	1:A:84:VAL:CG2	0.61	2.77	13	2
1:A:94:LEU:CD1	1:A:170:VAL:CG2	0.61	2.78	19	2
1:A:98:LEU:HD11	1:A:100:ASN:OD1	0.61	1.94	12	3
1:A:104:TYR:HB3	1:A:109:ILE:HD12	0.61	1.70	12	1
1:A:24:LEU:CD1	1:A:85:ILE:HG23	0.61	2.24	20	3
1:A:111:PRO:HA	1:A:117:PHE:CE2	0.61	2.30	18	3
1:A:143:THR:HG23	1:A:143:THR:O	0.61	1.95	7	11
1:A:89:LEU:O	1:A:94:LEU:O	0.61	2.18	13	20
1:A:141:LEU:HG	1:A:142:LEU:HD13	0.61	1.70	12	9
1:A:142:LEU:HD13	1:A:142:LEU:N	0.61	2.10	10	10
1:A:126:PHE:CG	1:A:141:LEU:CD2	0.61	2.83	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:ILE:O	1:A:135:TRP:CH2	0.61	2.52	15	5
1:A:131:LEU:CD2	1:A:179:ALA:CB	0.61	2.79	13	6
1:A:89:LEU:CB	1:A:94:LEU:HD13	0.61	2.24	12	5
1:A:6:MET:HE2	1:A:136:PHE:CE2	0.61	2.30	2	2
1:A:11:HIS:CE1	1:A:30:GLY:O	0.61	2.53	9	1
1:A:104:TYR:C	1:A:109:ILE:HB	0.61	2.16	7	19
1:A:143:THR:O	1:A:143:THR:HG23	0.61	1.94	9	9
1:A:6:MET:HG3	1:A:9:ILE:HD12	0.61	1.72	11	2
1:A:97:ILE:O	1:A:169:VAL:N	0.61	2.34	16	15
1:A:49:GLU:OE2	1:A:66:PHE:CE1	0.61	2.53	11	4
1:A:179:ALA:HA	1:A:182:LEU:HD12	0.61	1.73	12	7
1:A:183:LEU:HD23	1:A:184:GLN:HB2	0.61	1.70	5	1
1:A:112:ILE:HG22	1:A:153:LEU:HD23	0.61	1.73	9	1
1:A:98:LEU:HD21	1:A:100:ASN:ND2	0.61	2.10	19	3
1:A:183:LEU:C	1:A:183:LEU:HD13	0.61	2.16	19	3
1:A:10:PHE:CE1	1:A:26:ASN:CG	0.61	2.75	6	1
1:A:44:GLN:O	1:A:48:GLU:CB	0.61	2.49	16	8
1:A:117:PHE:CE1	1:A:157:LEU:HD13	0.60	2.30	19	1
1:A:35:PRO:O	1:A:80:PHE:CE1	0.60	2.54	19	2
1:A:94:LEU:HD22	1:A:170:VAL:HG12	0.60	1.71	13	1
1:A:18:LEU:HD23	1:A:19:CYS:H	0.60	1.56	3	5
1:A:164:GLY:O	1:A:165:TYR:CG	0.60	2.55	17	20
1:A:99:PHE:O	1:A:100:ASN:C	0.60	2.40	2	20
1:A:135:TRP:CH2	1:A:150:ASP:N	0.60	2.69	20	5
1:A:57:GLY:O	1:A:58:VAL:CG1	0.60	2.50	1	7
1:A:141:LEU:HD23	1:A:142:LEU:HD13	0.60	1.72	5	1
1:A:156:PHE:C	1:A:156:PHE:CD1	0.60	2.75	17	12
1:A:66:PHE:O	1:A:69:GLN:CG	0.60	2.50	15	15
1:A:43:HIS:CD2	1:A:74:MET:SD	0.60	2.95	8	10
1:A:116:SER:O	1:A:170:VAL:HG13	0.60	1.96	19	1
1:A:10:PHE:CE1	1:A:178:GLU:OE2	0.60	2.53	7	1
1:A:21:GLN:HG3	1:A:33:PHE:CE2	0.60	2.31	14	1
1:A:100:ASN:OD1	1:A:165:TYR:CG	0.60	2.54	10	4
1:A:79:PHE:CE1	1:A:80:PHE:O	0.60	2.54	15	13
1:A:49:GLU:O	1:A:53:MET:CG	0.60	2.50	18	8
1:A:6:MET:CA	1:A:9:ILE:HD12	0.60	2.27	10	13
1:A:174:LEU:HD13	1:A:175:PRO:CD	0.60	2.26	13	11
1:A:10:PHE:CD2	1:A:11:HIS:O	0.60	2.55	7	3
1:A:32:TYR:N	1:A:32:TYR:CD1	0.60	2.67	7	8
1:A:9:ILE:C	1:A:10:PHE:CG	0.60	2.72	3	2
1:A:131:LEU:CD1	1:A:179:ALA:CB	0.60	2.79	20	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:VAL:C	1:A:60:SER:N	0.60	2.55	5	19
1:A:30:GLY:O	1:A:32:TYR:CG	0.60	2.55	14	2
1:A:112:ILE:HG22	1:A:135:TRP:NE1	0.60	2.12	10	9
1:A:58:VAL:HG22	1:A:63:TYR:N	0.60	2.12	16	2
1:A:126:PHE:CE2	1:A:141:LEU:HD22	0.60	2.31	15	1
1:A:164:GLY:O	1:A:165:TYR:CB	0.59	2.49	19	20
1:A:10:PHE:CD1	1:A:26:ASN:CG	0.59	2.76	6	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:85:ILE:CG2	0.59	2.26	20	6
1:A:87:ASN:N	1:A:87:ASN:ND2	0.59	2.49	12	5
1:A:63:TYR:C	1:A:67:LEU:HD12	0.59	2.17	18	14
1:A:38:LEU:O	1:A:84:VAL:CG2	0.59	2.50	20	2
1:A:168:PHE:N	1:A:168:PHE:CD1	0.59	2.70	6	11
1:A:112:ILE:HG22	1:A:153:LEU:HD12	0.59	1.75	4	3
1:A:126:PHE:CG	1:A:141:LEU:HD22	0.59	2.32	11	2
1:A:11:HIS:CG	1:A:26:ASN:OD1	0.59	2.56	9	1
1:A:28:LEU:O	1:A:29:GLN:CG	0.59	2.51	1	7
1:A:69:GLN:CB	1:A:83:GLN:NE2	0.59	2.66	15	1
1:A:134:GLN:CB	1:A:136:PHE:CE1	0.59	2.85	14	5
1:A:20:ALA:HB3	1:A:125:TRP:CZ2	0.59	2.32	9	10
1:A:74:MET:CG	1:A:75:ASP:N	0.59	2.65	3	1
1:A:156:PHE:CD1	1:A:156:PHE:C	0.59	2.76	11	8
1:A:90:LYS:N	1:A:94:LEU:O	0.59	2.35	10	20
1:A:58:VAL:CG2	1:A:63:TYR:N	0.59	2.66	16	13
1:A:27:LEU:HD12	1:A:129:ARG:HG3	0.59	1.73	13	1
1:A:73:ASN:O	1:A:74:MET:HG2	0.59	1.98	7	3
1:A:82:ILE:HG12	1:A:125:TRP:CZ3	0.59	2.33	8	20
1:A:100:ASN:OD1	1:A:165:TYR:CZ	0.59	2.56	20	4
1:A:59:THR:O	1:A:59:THR:OG1	0.59	2.21	18	3
1:A:74:MET:HE1	1:A:80:PHE:CE1	0.59	2.33	10	7
1:A:70:PRO:O	1:A:71:SER:C	0.59	2.42	14	2
1:A:49:GLU:O	1:A:53:MET:HG3	0.59	1.98	12	2
1:A:45:LEU:HD13	1:A:87:ASN:ND2	0.58	2.12	15	6
1:A:58:VAL:O	1:A:58:VAL:HG22	0.58	1.99	10	5
1:A:99:PHE:CE1	1:A:105:GLN:CD	0.58	2.76	12	2
1:A:94:LEU:CD1	1:A:170:VAL:HG12	0.58	2.28	11	1
1:A:101:SER:O	1:A:105:GLN:HG3	0.58	1.98	19	16
1:A:99:PHE:O	1:A:105:GLN:NE2	0.58	2.35	20	10
1:A:118:ILE:CG2	1:A:125:TRP:CZ3	0.58	2.87	19	19
1:A:90:LYS:CA	1:A:94:LEU:O	0.58	2.50	5	19
1:A:28:LEU:HD13	1:A:92:TRP:CD2	0.58	2.34	8	5
1:A:46:ASP:O	1:A:50:ARG:CB	0.58	2.52	1	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:114:GLU:CD	1:A:169:VAL:HG13	0.58	2.18	17	4
1:A:57:GLY:O	1:A:58:VAL:HG13	0.58	1.98	6	6
1:A:23:CYS:O	1:A:27:LEU:N	0.58	2.34	15	7
1:A:174:LEU:HD13	1:A:174:LEU:C	0.58	2.19	12	3
1:A:9:ILE:HD11	1:A:131:LEU:HD21	0.58	1.76	14	1
1:A:53:MET:CG	1:A:54:ALA:N	0.58	2.66	18	18
1:A:38:LEU:HB3	1:A:80:PHE:CD2	0.58	2.33	11	3
1:A:57:GLY:C	1:A:59:THR:N	0.58	2.56	18	18
1:A:87:ASN:O	1:A:90:LYS:HG2	0.58	1.98	6	7
1:A:115:ARG:NH2	1:A:174:LEU:HD12	0.58	2.13	1	2
1:A:51:MET:O	1:A:55:GLU:CG	0.58	2.51	10	19
1:A:96:LEU:HD12	1:A:169:VAL:O	0.58	1.97	3	5
1:A:82:ILE:HG22	1:A:83:GLN:OE1	0.58	1.99	17	3
1:A:126:PHE:CD2	1:A:141:LEU:HD23	0.58	2.33	4	1
1:A:130:LYS:HG3	1:A:135:TRP:CE3	0.57	2.33	4	4
1:A:114:GLU:HG3	1:A:117:PHE:CD1	0.57	2.34	20	1
1:A:117:PHE:CE2	1:A:169:VAL:CG2	0.57	2.86	19	1
1:A:57:GLY:O	1:A:58:VAL:CG2	0.57	2.52	18	1
1:A:38:LEU:CB	1:A:80:PHE:CD1	0.57	2.87	19	2
1:A:11:HIS:NE2	1:A:30:GLY:N	0.57	2.52	5	3
1:A:160:LEU:HD22	1:A:160:LEU:O	0.57	1.99	17	2
1:A:30:GLY:O	1:A:31:GLU:CG	0.57	2.52	9	1
1:A:130:LYS:HD2	1:A:135:TRP:CE3	0.57	2.34	7	1
1:A:75:ASP:CB	1:A:79:PHE:CD2	0.57	2.88	17	6
1:A:112:ILE:HG22	1:A:135:TRP:CD1	0.57	2.33	18	10
1:A:6:MET:CE	1:A:136:PHE:CE2	0.57	2.87	2	3
1:A:99:PHE:CD1	1:A:105:GLN:NE2	0.57	2.72	12	2
1:A:135:TRP:CH2	1:A:150:ASP:CB	0.57	2.88	17	4
1:A:121:TYR:CE1	1:A:122:LYS:HE3	0.57	2.34	16	1
1:A:132:GLY:HA2	1:A:183:LEU:HD22	0.57	1.75	11	1
1:A:21:GLN:HG2	1:A:33:PHE:CZ	0.57	2.35	14	1
1:A:30:GLY:CA	1:A:32:TYR:CZ	0.57	2.88	5	6
1:A:11:HIS:NE2	1:A:25:ASN:CB	0.57	2.67	9	1
1:A:28:LEU:O	1:A:29:GLN:HB3	0.57	2.00	8	4
1:A:27:LEU:O	1:A:27:LEU:HD22	0.57	2.00	11	5
1:A:52:ARG:CD	1:A:53:MET:N	0.57	2.67	6	5
1:A:41:ILE:O	1:A:45:LEU:HB3	0.57	2.00	16	11
1:A:141:LEU:O	1:A:141:LEU:HD12	0.57	1.98	10	2
1:A:183:LEU:CD1	1:A:183:LEU:C	0.57	2.72	3	3
1:A:28:LEU:CD2	1:A:92:TRP:CE2	0.57	2.87	17	7
1:A:115:ARG:O	1:A:130:LYS:CG	0.57	2.52	7	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:CYS:SG	1:A:79:PHE:N	0.57	2.78	17	8
1:A:128:VAL:HG22	1:A:137:ASN:CG	0.57	2.19	9	5
1:A:44:GLN:HG3	1:A:45:LEU:N	0.57	2.13	16	4
1:A:38:LEU:HB3	1:A:80:PHE:CD1	0.57	2.35	15	9
1:A:24:LEU:HD11	1:A:89:LEU:CD1	0.57	2.30	13	1
1:A:94:LEU:HD21	1:A:174:LEU:HD23	0.57	1.75	13	1
1:A:114:GLU:O	1:A:135:TRP:CZ3	0.57	2.58	15	3
1:A:45:LEU:CD2	1:A:87:ASN:OD1	0.57	2.53	8	3
1:A:117:PHE:CZ	1:A:119:CYS:SG	0.57	2.98	5	2
1:A:115:ARG:O	1:A:130:LYS:CB	0.57	2.53	6	4
1:A:74:MET:HE3	1:A:80:PHE:CD2	0.57	2.34	13	1
1:A:121:TYR:O	1:A:121:TYR:CG	0.57	2.57	14	5
1:A:89:LEU:HD13	1:A:94:LEU:HD22	0.57	1.77	12	3
1:A:57:GLY:C	1:A:59:THR:H	0.56	2.03	1	8
1:A:131:LEU:HB3	1:A:136:PHE:CG	0.56	2.35	18	3
1:A:20:ALA:CB	1:A:125:TRP:CE2	0.56	2.88	17	1
1:A:101:SER:O	1:A:105:GLN:CG	0.56	2.53	2	17
1:A:104:TYR:O	1:A:109:ILE:CD1	0.56	2.53	16	3
1:A:82:ILE:O	1:A:82:ILE:HD13	0.56	2.00	19	5
1:A:18:LEU:CD1	1:A:19:CYS:N	0.56	2.67	9	6
1:A:24:LEU:HD12	1:A:28:LEU:HD13	0.56	1.77	17	1
1:A:125:TRP:HZ3	1:A:127:THR:HG23	0.56	1.60	14	2
1:A:28:LEU:HB3	1:A:92:TRP:CZ3	0.56	2.35	4	7
1:A:57:GLY:O	1:A:59:THR:N	0.56	2.38	18	13
1:A:45:LEU:CD1	1:A:83:GLN:HB3	0.56	2.29	16	5
1:A:118:ILE:HG23	1:A:126:PHE:O	0.56	2.01	4	7
1:A:38:LEU:HD23	1:A:80:PHE:CG	0.56	2.35	9	5
1:A:130:LYS:HD3	1:A:135:TRP:CE3	0.56	2.36	7	1
1:A:180:ASP:O	1:A:183:LEU:HD23	0.56	2.00	14	1
1:A:49:GLU:N	1:A:49:GLU:OE1	0.56	2.39	20	1
1:A:155:LEU:HD13	1:A:155:LEU:C	0.56	2.21	10	14
1:A:110:ASP:CB	1:A:113:ASN:HB3	0.56	2.30	19	4
1:A:100:ASN:O	1:A:101:SER:O	0.56	2.23	16	1
1:A:34:SER:CB	1:A:35:PRO:HD2	0.56	2.31	14	13
1:A:118:ILE:HG21	1:A:125:TRP:CZ3	0.56	2.36	4	16
1:A:89:LEU:HD12	1:A:96:LEU:HB2	0.56	1.77	7	1
1:A:138:LEU:HA	1:A:142:LEU:HD21	0.56	1.76	6	2
1:A:89:LEU:HD23	1:A:96:LEU:HB2	0.56	1.77	13	2
1:A:131:LEU:HD22	1:A:136:PHE:CE2	0.56	2.35	11	1
1:A:26:ASN:ND2	1:A:26:ASN:N	0.56	2.52	8	1
1:A:75:ASP:HB2	1:A:79:PHE:CD2	0.56	2.35	17	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:GLY:C	1:A:58:VAL:CG1	0.56	2.74	6	7
1:A:42:ALA:HB3	1:A:74:MET:SD	0.56	2.40	8	3
1:A:48:GLU:O	1:A:52:ARG:CG	0.56	2.54	9	5
1:A:139:ASN:HB3	1:A:141:LEU:HD23	0.56	1.76	18	2
1:A:6:MET:HG2	1:A:9:ILE:HD12	0.56	1.76	14	1
1:A:45:LEU:HD11	1:A:83:GLN:CB	0.56	2.30	16	1
1:A:136:PHE:CE1	1:A:147:LEU:CD2	0.56	2.89	4	2
1:A:131:LEU:HD12	1:A:136:PHE:CE2	0.56	2.35	17	1
1:A:72:GLY:O	1:A:74:MET:N	0.55	2.39	8	15
1:A:97:ILE:CD1	1:A:169:VAL:CG2	0.55	2.83	12	1
1:A:155:LEU:CD2	1:A:159:GLN:NE2	0.55	2.69	18	20
1:A:79:PHE:CD1	1:A:80:PHE:N	0.55	2.73	3	7
1:A:45:LEU:HD21	1:A:83:GLN:CB	0.55	2.31	4	3
1:A:157:LEU:N	1:A:157:LEU:HD23	0.55	2.16	14	3
1:A:45:LEU:HB2	1:A:87:ASN:CG	0.55	2.21	16	6
1:A:136:PHE:CZ	1:A:147:LEU:CD2	0.55	2.89	16	1
1:A:29:GLN:O	1:A:29:GLN:CG	0.55	2.54	11	2
1:A:18:LEU:HD12	1:A:19:CYS:CB	0.55	2.31	17	2
1:A:79:PHE:CD1	1:A:80:PHE:O	0.55	2.60	3	1
1:A:25:ASN:ND2	1:A:33:PHE:CD1	0.55	2.74	2	1
1:A:82:ILE:HD13	1:A:82:ILE:O	0.55	2.01	8	7
1:A:49:GLU:OE2	1:A:66:PHE:CE2	0.55	2.59	9	2
1:A:21:GLN:CG	1:A:33:PHE:CZ	0.55	2.90	14	1
1:A:45:LEU:CD2	1:A:83:GLN:HB3	0.55	2.31	11	8
1:A:42:ALA:CB	1:A:84:VAL:HG12	0.55	2.27	9	13
1:A:105:GLN:NE2	1:A:109:ILE:HG22	0.55	2.16	16	2
1:A:10:PHE:CG	1:A:11:HIS:N	0.55	2.74	9	2
1:A:152:TYR:O	1:A:156:PHE:N	0.55	2.37	20	18
1:A:96:LEU:CD2	1:A:97:ILE:N	0.55	2.69	20	9
1:A:132:GLY:CA	1:A:183:LEU:HD23	0.55	2.32	20	2
1:A:98:LEU:HD12	1:A:100:ASN:HB2	0.55	1.78	2	5
1:A:30:GLY:O	1:A:31:GLU:CB	0.55	2.54	9	3
1:A:27:LEU:HD12	1:A:129:ARG:HB3	0.55	1.78	17	1
1:A:27:LEU:HD21	1:A:174:LEU:HD21	0.55	1.78	19	2
1:A:183:LEU:O	1:A:184:GLN:CG	0.55	2.54	16	4
1:A:111:PRO:HA	1:A:117:PHE:CE1	0.55	2.36	10	1
1:A:19:CYS:SG	1:A:78:GLY:C	0.55	2.85	14	6
1:A:27:LEU:CD2	1:A:174:LEU:HD21	0.55	2.32	20	1
1:A:96:LEU:HD11	1:A:118:ILE:HD12	0.55	1.78	6	4
1:A:22:HIS:CE1	1:A:139:ASN:O	0.55	2.59	4	1
1:A:58:VAL:HG22	1:A:58:VAL:O	0.55	2.00	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:GLN:CD	1:A:44:GLN:C	0.55	2.65	9	1
1:A:153:LEU:O	1:A:157:LEU:HD22	0.55	2.02	11	2
1:A:28:LEU:HB3	1:A:92:TRP:CH2	0.55	2.36	19	14
1:A:45:LEU:CD2	1:A:45:LEU:O	0.55	2.50	16	1
1:A:131:LEU:HD23	1:A:179:ALA:CB	0.55	2.32	15	4
1:A:115:ARG:NH2	1:A:172:GLY:O	0.55	2.40	10	1
1:A:30:GLY:C	1:A:31:GLU:CG	0.55	2.73	9	1
1:A:10:PHE:CE1	1:A:138:LEU:HD21	0.55	2.37	18	2
1:A:24:LEU:HD13	1:A:85:ILE:CG1	0.54	2.33	2	8
1:A:117:PHE:CD2	1:A:128:VAL:CB	0.54	2.91	4	10
1:A:85:ILE:O	1:A:89:LEU:HG	0.54	2.02	8	9
1:A:137:ASN:OD1	1:A:148:ILE:CD1	0.54	2.55	12	6
1:A:136:PHE:N	1:A:136:PHE:CD1	0.54	2.75	14	2
1:A:63:TYR:O	1:A:67:LEU:CG	0.54	2.55	9	19
1:A:117:PHE:N	1:A:128:VAL:O	0.54	2.40	19	7
1:A:135:TRP:CZ3	1:A:150:ASP:N	0.54	2.75	20	3
1:A:126:PHE:CD1	1:A:141:LEU:HD23	0.54	2.38	3	3
1:A:23:CYS:SG	1:A:139:ASN:ND2	0.54	2.80	17	1
1:A:112:ILE:O	1:A:114:GLU:N	0.54	2.41	14	3
1:A:10:PHE:HE1	1:A:138:LEU:HD21	0.54	1.63	4	2
1:A:31:GLU:C	1:A:32:TYR:CG	0.54	2.77	1	10
1:A:82:ILE:HG12	1:A:125:TRP:CD2	0.54	2.37	6	11
1:A:45:LEU:O	1:A:49:GLU:CG	0.54	2.56	10	5
1:A:33:PHE:HE2	1:A:88:ALA:HB1	0.54	1.62	12	3
1:A:115:ARG:HG3	1:A:116:SER:N	0.54	2.16	7	2
1:A:174:LEU:HD13	1:A:175:PRO:O	0.54	2.03	18	6
1:A:131:LEU:HD22	1:A:136:PHE:CZ	0.54	2.37	11	1
1:A:131:LEU:HB2	1:A:136:PHE:CE1	0.54	2.37	20	1
1:A:131:LEU:HD22	1:A:179:ALA:HB1	0.54	1.78	6	1
1:A:153:LEU:O	1:A:157:LEU:HG	0.54	2.03	19	9
1:A:25:ASN:CG	1:A:33:PHE:CE1	0.54	2.81	2	1
1:A:45:LEU:CB	1:A:87:ASN:CG	0.54	2.76	9	1
1:A:135:TRP:CH2	1:A:150:ASP:HB3	0.54	2.37	14	2
1:A:53:MET:HB2	1:A:58:VAL:HG12	0.54	1.79	18	1
1:A:135:TRP:C	1:A:136:PHE:CD1	0.54	2.81	3	4
1:A:6:MET:CE	1:A:145:PRO:O	0.54	2.55	12	4
1:A:141:LEU:CD2	1:A:142:LEU:HD13	0.54	2.32	5	1
1:A:69:GLN:N	1:A:70:PRO:CD	0.54	2.71	9	1
1:A:88:ALA:HA	1:A:91:VAL:HG22	0.54	1.80	4	18
1:A:142:LEU:N	1:A:142:LEU:HD13	0.54	2.16	14	10
1:A:74:MET:SD	1:A:75:ASP:O	0.54	2.66	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:130:LYS:HG3	1:A:135:TRP:CZ3	0.54	2.38	9	4
1:A:105:GLN:CD	1:A:109:ILE:HG22	0.54	2.23	16	2
1:A:31:GLU:C	1:A:32:TYR:CD1	0.54	2.81	12	6
1:A:124:HIS:CE1	1:A:139:ASN:OD1	0.54	2.61	16	1
1:A:9:ILE:HG21	1:A:131:LEU:HD13	0.54	1.79	12	1
1:A:180:ASP:O	1:A:183:LEU:CD2	0.54	2.56	14	3
1:A:89:LEU:CD1	1:A:170:VAL:CG1	0.54	2.86	9	7
1:A:82:ILE:HD11	1:A:118:ILE:HG21	0.54	1.79	5	8
1:A:51:MET:CG	1:A:52:ARG:N	0.54	2.71	9	13
1:A:11:HIS:CE1	1:A:29:GLN:C	0.54	2.81	12	2
1:A:18:LEU:CG	1:A:19:CYS:N	0.54	2.69	3	8
1:A:27:LEU:HD22	1:A:27:LEU:O	0.54	2.02	19	2
1:A:82:ILE:HG12	1:A:125:TRP:CE3	0.54	2.38	13	20
1:A:183:LEU:HD12	1:A:184:GLN:N	0.54	2.18	15	3
1:A:11:HIS:ND1	1:A:11:HIS:C	0.53	2.60	6	1
1:A:159:GLN:O	1:A:163:GLU:CG	0.53	2.56	11	3
1:A:129:ARG:O	1:A:136:PHE:CD1	0.53	2.61	10	1
1:A:18:LEU:CD2	1:A:21:GLN:OE1	0.53	2.57	2	1
1:A:87:ASN:ND2	1:A:87:ASN:N	0.53	2.53	1	6
1:A:49:GLU:OE1	1:A:66:PHE:CE2	0.53	2.62	16	1
1:A:131:LEU:HB3	1:A:147:LEU:HD21	0.53	1.78	10	1
1:A:114:GLU:CG	1:A:169:VAL:HG22	0.53	2.33	4	2
1:A:32:TYR:CD1	1:A:32:TYR:N	0.53	2.76	15	2
1:A:51:MET:HG3	1:A:52:ARG:N	0.53	2.19	20	17
1:A:107:LEU:O	1:A:108:ARG:CD	0.53	2.57	10	18
1:A:134:GLN:HB3	1:A:147:LEU:HD21	0.53	1.81	20	1
1:A:58:VAL:HG21	1:A:63:TYR:CG	0.53	2.39	5	5
1:A:99:PHE:CZ	1:A:111:PRO:HB3	0.53	2.38	8	9
1:A:21:GLN:HB2	1:A:38:LEU:CD1	0.53	2.31	10	8
1:A:85:ILE:CG2	1:A:89:LEU:CD2	0.53	2.87	2	4
1:A:45:LEU:CB	1:A:87:ASN:OD1	0.53	2.56	9	3
1:A:136:PHE:CZ	1:A:147:LEU:CD1	0.53	2.91	6	1
1:A:155:LEU:C	1:A:155:LEU:HD13	0.53	2.23	11	6
1:A:136:PHE:HE2	1:A:138:LEU:HD23	0.53	1.63	10	1
1:A:105:GLN:HA	1:A:109:ILE:HG22	0.53	1.78	12	1
1:A:30:GLY:HA3	1:A:32:TYR:CE1	0.53	2.38	2	1
1:A:74:MET:HE1	1:A:80:PHE:CD2	0.53	2.38	20	1
1:A:125:TRP:C	1:A:126:PHE:CD1	0.53	2.81	13	9
1:A:45:LEU:HG	1:A:87:ASN:HD21	0.53	1.63	9	1
1:A:39:SER:HA	1:A:74:MET:SD	0.53	2.44	14	3
1:A:52:ARG:CG	1:A:53:MET:N	0.53	2.71	6	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:41:ILE:CG2	1:A:84:VAL:HB	0.53	2.33	17	8
1:A:39:SER:O	1:A:43:HIS:CG	0.53	2.61	19	4
1:A:98:LEU:HD22	1:A:168:PHE:CD2	0.53	2.39	13	4
1:A:69:GLN:CG	1:A:98:LEU:HD23	0.53	2.34	9	1
1:A:49:GLU:OE1	1:A:49:GLU:N	0.53	2.42	12	1
1:A:115:ARG:CZ	1:A:170:VAL:O	0.53	2.56	18	1
1:A:49:GLU:OE1	1:A:49:GLU:CA	0.53	2.57	20	1
1:A:96:LEU:HD22	1:A:96:LEU:C	0.53	2.24	20	2
1:A:85:ILE:CD1	1:A:125:TRP:CH2	0.53	2.90	18	17
1:A:44:GLN:HA	1:A:47:GLU:CG	0.53	2.34	19	1
1:A:111:PRO:O	1:A:117:PHE:CE1	0.53	2.61	10	1
1:A:18:LEU:HD11	1:A:19:CYS:SG	0.53	2.44	8	1
1:A:38:LEU:O	1:A:41:ILE:HG22	0.53	2.04	20	8
1:A:105:GLN:NE2	1:A:109:ILE:CG2	0.53	2.71	16	2
1:A:81:SER:OG	1:A:84:VAL:HG13	0.53	2.04	11	2
1:A:136:PHE:CD1	1:A:136:PHE:N	0.53	2.77	6	5
1:A:126:PHE:N	1:A:126:PHE:CD1	0.53	2.77	19	3
1:A:27:LEU:CD2	1:A:27:LEU:C	0.53	2.78	19	3
1:A:69:GLN:HG2	1:A:98:LEU:HD23	0.53	1.80	9	1
1:A:28:LEU:HD21	1:A:89:LEU:CD2	0.53	2.34	4	1
1:A:21:GLN:NE2	1:A:24:LEU:HD23	0.53	2.19	1	4
1:A:117:PHE:CD2	1:A:157:LEU:CD1	0.53	2.91	15	2
1:A:98:LEU:CD1	1:A:100:ASN:CG	0.53	2.77	11	1
1:A:142:LEU:H	1:A:142:LEU:HD13	0.53	1.64	12	6
1:A:85:ILE:CD1	1:A:125:TRP:CZ2	0.52	2.92	18	10
1:A:38:LEU:HG	1:A:84:VAL:CG2	0.52	2.34	9	7
1:A:18:LEU:CD1	1:A:19:CYS:SG	0.52	2.97	8	4
1:A:131:LEU:HD23	1:A:179:ALA:HB1	0.52	1.80	13	4
1:A:5:SER:O	1:A:182:LEU:CD2	0.52	2.57	13	2
1:A:38:LEU:HB2	1:A:80:PHE:CE2	0.52	2.40	11	1
1:A:157:LEU:HD23	1:A:157:LEU:N	0.52	2.18	5	2
1:A:115:ARG:CD	1:A:115:ARG:C	0.52	2.78	7	1
1:A:157:LEU:HA	1:A:160:LEU:HD23	0.52	1.80	18	18
1:A:112:ILE:CG2	1:A:153:LEU:HD12	0.52	2.33	16	5
1:A:53:MET:O	1:A:58:VAL:HG12	0.52	2.04	6	5
1:A:121:TYR:CG	1:A:121:TYR:O	0.52	2.62	1	6
1:A:11:HIS:CB	1:A:26:ASN:HA	0.52	2.34	3	5
1:A:66:PHE:O	1:A:68:GLN:N	0.52	2.42	20	17
1:A:35:PRO:O	1:A:80:PHE:CE2	0.52	2.62	11	2
1:A:135:TRP:O	1:A:148:ILE:N	0.52	2.38	10	1
1:A:31:GLU:O	1:A:32:TYR:CG	0.52	2.63	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:97:ILE:HD11	1:A:171:LYS:HD3	0.52	1.81	15	7
1:A:114:GLU:HG2	1:A:115:ARG:N	0.52	2.20	20	1
1:A:27:LEU:C	1:A:27:LEU:HD22	0.52	2.24	11	4
1:A:63:TYR:O	1:A:67:LEU:CB	0.52	2.58	9	8
1:A:11:HIS:CB	1:A:26:ASN:OD1	0.52	2.57	9	1
1:A:88:ALA:O	1:A:92:TRP:HB2	0.52	2.04	12	19
1:A:85:ILE:HG13	1:A:125:TRP:CH2	0.52	2.39	17	1
1:A:126:PHE:CE2	1:A:141:LEU:HD23	0.52	2.40	4	1
1:A:19:CYS:SG	1:A:21:GLN:CB	0.52	2.97	19	7
1:A:9:ILE:HD11	1:A:131:LEU:HD22	0.52	1.80	8	2
1:A:137:ASN:O	1:A:138:LEU:HD22	0.52	2.05	6	1
1:A:131:LEU:HB3	1:A:136:PHE:CD1	0.52	2.39	9	6
1:A:178:GLU:O	1:A:181:GLN:CG	0.52	2.58	6	3
1:A:96:LEU:HD23	1:A:169:VAL:C	0.52	2.25	7	2
1:A:53:MET:C	1:A:58:VAL:CG1	0.52	2.72	18	1
1:A:139:ASN:O	1:A:140:SER:OG	0.52	2.27	20	2
1:A:27:LEU:C	1:A:27:LEU:CD2	0.52	2.78	11	4
1:A:126:PHE:CE1	1:A:141:LEU:HD23	0.52	2.39	9	3
1:A:74:MET:CE	1:A:75:ASP:O	0.52	2.58	14	2
1:A:57:GLY:C	1:A:58:VAL:CG2	0.52	2.78	18	1
1:A:117:PHE:CE1	1:A:167:ILE:HG23	0.52	2.40	16	6
1:A:85:ILE:HG22	1:A:89:LEU:CD2	0.52	2.34	5	2
1:A:35:PRO:HA	1:A:80:PHE:CE2	0.52	2.39	8	1
1:A:126:PHE:CD1	1:A:141:LEU:CD2	0.52	2.92	12	2
1:A:45:LEU:HB2	1:A:87:ASN:ND2	0.51	2.19	11	7
1:A:27:LEU:O	1:A:27:LEU:CD2	0.51	2.58	20	4
1:A:131:LEU:HB3	1:A:136:PHE:CE1	0.51	2.40	14	2
1:A:6:MET:HE3	1:A:136:PHE:CZ	0.51	2.40	5	1
1:A:89:LEU:O	1:A:94:LEU:CD1	0.51	2.58	12	2
1:A:183:LEU:HD23	1:A:184:GLN:N	0.51	2.20	17	3
1:A:135:TRP:CZ2	1:A:150:ASP:HB3	0.51	2.40	14	2
1:A:82:ILE:HG12	1:A:125:TRP:CH2	0.51	2.40	3	19
1:A:141:LEU:HD12	1:A:141:LEU:C	0.51	2.25	6	2
1:A:116:SER:O	1:A:170:VAL:CG1	0.51	2.58	7	2
1:A:94:LEU:HB3	1:A:173:ASP:N	0.51	2.20	13	5
1:A:153:LEU:O	1:A:153:LEU:HD22	0.51	2.05	7	6
1:A:11:HIS:CE1	1:A:31:GLU:HB2	0.51	2.40	16	1
1:A:51:MET:O	1:A:55:GLU:CB	0.51	2.58	16	3
1:A:18:LEU:HD12	1:A:19:CYS:H	0.51	1.61	9	1
1:A:130:LYS:HB3	1:A:135:TRP:CE3	0.51	2.40	7	1
1:A:87:ASN:O	1:A:90:LYS:CG	0.51	2.57	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:LEU:HD23	1:A:94:LEU:H	0.51	1.65	1	2
1:A:74:MET:HE1	1:A:80:PHE:CE2	0.51	2.40	20	1
1:A:30:GLY:O	1:A:32:TYR:CZ	0.51	2.63	6	1
1:A:57:GLY:C	1:A:58:VAL:HG12	0.51	2.26	8	7
1:A:111:PRO:O	1:A:117:PHE:CE2	0.51	2.63	19	1
1:A:27:LEU:CD2	1:A:27:LEU:O	0.51	2.58	19	3
1:A:116:SER:O	1:A:170:VAL:HG23	0.51	2.05	2	4
1:A:11:HIS:CG	1:A:29:GLN:HA	0.51	2.40	12	1
1:A:21:GLN:HE21	1:A:38:LEU:HD13	0.51	1.62	7	1
1:A:18:LEU:HG	1:A:19:CYS:H	0.51	1.65	16	3
1:A:183:LEU:C	1:A:183:LEU:HD23	0.51	2.26	5	1
1:A:117:PHE:CZ	1:A:157:LEU:HD21	0.51	2.40	8	2
1:A:74:MET:HE2	1:A:75:ASP:O	0.51	2.05	18	2
1:A:86:SER:O	1:A:90:LYS:CG	0.51	2.59	17	10
1:A:99:PHE:CB	1:A:169:VAL:HG13	0.51	2.31	8	3
1:A:21:GLN:O	1:A:25:ASN:N	0.51	2.41	19	4
1:A:64:ARG:HD2	1:A:64:ARG:N	0.51	2.21	2	4
1:A:84:VAL:HG23	1:A:85:ILE:HD12	0.51	1.82	15	1
1:A:131:LEU:N	1:A:134:GLN:O	0.51	2.44	2	4
1:A:48:GLU:O	1:A:51:MET:HG2	0.51	2.06	4	14
1:A:9:ILE:HG12	1:A:131:LEU:HD22	0.51	1.82	13	1
1:A:66:PHE:HD1	1:A:67:LEU:HD23	0.51	1.64	15	1
1:A:89:LEU:HD23	1:A:89:LEU:N	0.51	2.19	17	1
1:A:126:PHE:CE1	1:A:141:LEU:CD2	0.51	2.94	3	2
1:A:131:LEU:HD13	1:A:179:ALA:HB1	0.51	1.83	20	1
1:A:10:PHE:CE1	1:A:138:LEU:HG	0.51	2.41	6	1
1:A:52:ARG:C	1:A:52:ARG:HD3	0.51	2.26	9	3
1:A:48:GLU:O	1:A:52:ARG:N	0.51	2.38	18	2
1:A:98:LEU:CD1	1:A:100:ASN:HB2	0.51	2.36	9	3
1:A:18:LEU:O	1:A:78:GLY:O	0.51	2.28	3	2
1:A:57:GLY:O	1:A:58:VAL:HG23	0.51	2.06	18	1
1:A:135:TRP:CH2	1:A:150:ASP:HB2	0.51	2.41	20	1
1:A:174:LEU:CD1	1:A:175:PRO:O	0.51	2.59	18	5
1:A:10:PHE:CD1	1:A:26:ASN:OD1	0.51	2.64	6	1
1:A:137:ASN:HB2	1:A:148:ILE:HD11	0.51	1.83	4	4
1:A:159:GLN:O	1:A:163:GLU:HG2	0.51	2.05	19	2
1:A:136:PHE:CE2	1:A:147:LEU:HB2	0.51	2.40	13	2
1:A:136:PHE:CZ	1:A:147:LEU:HD21	0.51	2.40	16	1
1:A:66:PHE:CD1	1:A:67:LEU:HD23	0.51	2.41	15	1
1:A:98:LEU:CD1	1:A:167:ILE:O	0.51	2.54	11	3
1:A:135:TRP:CH2	1:A:150:ASP:HA	0.51	2.40	16	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:VAL:C	1:A:60:SER:H	0.51	2.10	6	8
1:A:58:VAL:HG11	1:A:63:TYR:HD2	0.51	1.65	15	1
1:A:21:GLN:CD	1:A:24:LEU:HD23	0.51	2.27	7	3
1:A:114:GLU:HG3	1:A:169:VAL:HG22	0.51	1.83	15	2
1:A:58:VAL:O	1:A:58:VAL:CG2	0.51	2.59	9	2
1:A:111:PRO:O	1:A:114:GLU:CD	0.50	2.50	20	1
1:A:20:ALA:CB	1:A:125:TRP:CH2	0.50	2.93	19	1
1:A:74:MET:HE2	1:A:80:PHE:CD1	0.50	2.39	19	1
1:A:94:LEU:C	1:A:94:LEU:CD1	0.50	2.79	13	1
1:A:136:PHE:CE1	1:A:147:LEU:HB2	0.50	2.41	18	2
1:A:58:VAL:C	1:A:59:THR:HG22	0.50	2.26	14	11
1:A:21:GLN:O	1:A:25:ASN:CG	0.50	2.50	7	6
1:A:49:GLU:O	1:A:53:MET:HB3	0.50	2.06	6	3
1:A:27:LEU:HD22	1:A:27:LEU:C	0.50	2.26	19	3
1:A:94:LEU:N	1:A:94:LEU:CD1	0.50	2.70	10	1
1:A:136:PHE:CE1	1:A:147:LEU:HG	0.50	2.41	5	1
1:A:42:ALA:O	1:A:45:LEU:HD13	0.50	2.05	9	1
1:A:115:ARG:NH1	1:A:170:VAL:O	0.50	2.43	14	1
1:A:57:GLY:C	1:A:58:VAL:HG22	0.50	2.27	18	1
1:A:96:LEU:HD23	1:A:169:VAL:O	0.50	2.06	20	4
1:A:66:PHE:O	1:A:69:GLN:HG3	0.50	2.06	15	17
1:A:115:ARG:CG	1:A:116:SER:N	0.50	2.73	2	2
1:A:18:LEU:HG	1:A:22:HIS:CD2	0.50	2.41	17	1
1:A:18:LEU:HG	1:A:19:CYS:SG	0.50	2.46	3	2
1:A:19:CYS:HB3	1:A:80:PHE:CD2	0.50	2.40	3	2
1:A:44:GLN:O	1:A:48:GLU:CG	0.50	2.59	18	1
1:A:84:VAL:HG12	1:A:85:ILE:HD12	0.50	1.83	20	2
1:A:136:PHE:CZ	1:A:147:LEU:HG	0.50	2.41	2	3
1:A:55:GLU:O	1:A:57:GLY:N	0.50	2.45	20	7
1:A:98:LEU:HG	1:A:167:ILE:O	0.50	2.06	7	6
1:A:22:HIS:CG	1:A:23:CYS:N	0.50	2.80	14	4
1:A:95:GLU:N	1:A:171:LYS:O	0.50	2.33	12	5
1:A:117:PHE:C	1:A:117:PHE:CD1	0.50	2.84	9	5
1:A:98:LEU:CD2	1:A:168:PHE:CE2	0.50	2.95	13	2
1:A:134:GLN:NE2	1:A:135:TRP:CZ3	0.50	2.80	17	2
1:A:19:CYS:SG	1:A:79:PHE:CA	0.50	2.99	3	1
1:A:157:LEU:N	1:A:157:LEU:HD13	0.50	2.22	11	3
1:A:181:GLN:HG3	1:A:182:LEU:N	0.50	2.22	6	1
1:A:11:HIS:NE2	1:A:29:GLN:O	0.50	2.44	15	1
1:A:82:ILE:HG12	1:A:125:TRP:CE2	0.50	2.41	6	5
1:A:117:PHE:CZ	1:A:169:VAL:HG23	0.50	2.41	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:LEU:O	1:A:28:LEU:N	0.50	2.30	15	1
1:A:45:LEU:HD23	1:A:87:ASN:HD21	0.50	1.66	16	1
1:A:45:LEU:HG	1:A:46:ASP:N	0.50	2.21	12	8
1:A:94:LEU:HD12	1:A:170:VAL:CG1	0.50	2.37	17	7
1:A:135:TRP:CZ2	1:A:150:ASP:CG	0.50	2.85	5	3
1:A:115:ARG:HD3	1:A:115:ARG:C	0.50	2.27	7	1
1:A:45:LEU:HD21	1:A:83:GLN:HB2	0.50	1.84	4	2
1:A:74:MET:HE1	1:A:80:PHE:CD1	0.50	2.42	14	1
1:A:121:TYR:O	1:A:122:LYS:C	0.49	2.51	15	14
1:A:58:VAL:CG2	1:A:58:VAL:O	0.49	2.58	6	4
1:A:89:LEU:HG	1:A:94:LEU:HD11	0.49	1.84	2	4
1:A:74:MET:HE3	1:A:80:PHE:CD1	0.49	2.39	19	1
1:A:45:LEU:HG	1:A:87:ASN:ND2	0.49	2.21	9	2
1:A:129:ARG:NH2	1:A:138:LEU:CD2	0.49	2.75	8	1
1:A:30:GLY:O	1:A:31:GLU:HG2	0.49	2.06	9	1
1:A:11:HIS:CE1	1:A:30:GLY:HA2	0.49	2.42	7	2
1:A:104:TYR:C	1:A:109:ILE:HD13	0.49	2.27	20	3
1:A:155:LEU:O	1:A:159:GLN:CG	0.49	2.59	13	19
1:A:183:LEU:O	1:A:184:GLN:CB	0.49	2.60	15	1
1:A:66:PHE:CZ	1:A:83:GLN:OE1	0.49	2.65	9	2
1:A:128:VAL:HG22	1:A:137:ASN:OD1	0.49	2.07	7	1
1:A:121:TYR:CE2	1:A:124:HIS:CB	0.49	2.94	15	1
1:A:69:GLN:OE1	1:A:83:GLN:NE2	0.49	2.46	8	2
1:A:160:LEU:HD21	1:A:167:ILE:HG12	0.49	1.83	18	2
1:A:22:HIS:O	1:A:26:ASN:ND2	0.49	2.45	9	2
1:A:117:PHE:HE1	1:A:169:VAL:HG23	0.49	1.64	13	1
1:A:139:ASN:OD1	1:A:142:LEU:CD1	0.49	2.60	15	1
1:A:45:LEU:HB3	1:A:87:ASN:OD1	0.49	2.07	9	2
1:A:24:LEU:CD1	1:A:28:LEU:HD13	0.49	2.38	17	1
1:A:113:ASN:O	1:A:114:GLU:C	0.49	2.49	2	2
1:A:176:ASP:CG	1:A:177:CYS:N	0.49	2.65	6	1
1:A:99:PHE:O	1:A:101:SER:N	0.49	2.45	10	7
1:A:120:ASN:HA	1:A:125:TRP:CB	0.49	2.37	8	4
1:A:143:THR:O	1:A:143:THR:CG2	0.49	2.61	9	11
1:A:94:LEU:CD2	1:A:173:ASP:O	0.49	2.59	16	3
1:A:23:CYS:HG	1:A:138:LEU:C	0.49	2.09	7	4
1:A:48:GLU:O	1:A:52:ARG:CB	0.49	2.61	9	2
1:A:117:PHE:CE2	1:A:157:LEU:HD11	0.49	2.42	7	3
1:A:21:GLN:NE2	1:A:33:PHE:C	0.49	2.66	16	2
1:A:8:SER:HA	1:A:10:PHE:CZ	0.49	2.43	3	1
1:A:117:PHE:CD1	1:A:169:VAL:HG23	0.49	2.43	18	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:153:LEU:C	1:A:153:LEU:HD22	0.49	2.26	18	1
1:A:95:GLU:O	1:A:171:LYS:O	0.49	2.31	2	8
1:A:39:SER:OG	1:A:74:MET:CE	0.49	2.60	7	4
1:A:117:PHE:CE2	1:A:157:LEU:CD1	0.49	2.96	10	1
1:A:120:ASN:C	1:A:120:ASN:ND2	0.49	2.65	1	6
1:A:39:SER:HA	1:A:74:MET:HE1	0.49	1.83	3	1
1:A:136:PHE:CE2	1:A:147:LEU:HD13	0.49	2.43	14	1
1:A:38:LEU:HB3	1:A:80:PHE:CE2	0.49	2.43	13	2
1:A:64:ARG:CZ	1:A:64:ARG:CB	0.49	2.91	20	1
1:A:24:LEU:CD1	1:A:89:LEU:HD21	0.49	2.38	19	3
1:A:121:TYR:CE1	1:A:122:LYS:HB2	0.49	2.43	15	1
1:A:38:LEU:HB2	1:A:80:PHE:CD2	0.49	2.42	11	1
1:A:50:ARG:O	1:A:54:ALA:HB3	0.49	2.06	12	1
1:A:130:LYS:CD	1:A:135:TRP:CD2	0.49	2.96	7	1
1:A:95:GLU:O	1:A:171:LYS:N	0.49	2.45	7	1
1:A:112:ILE:C	1:A:114:GLU:OE1	0.49	2.52	20	1
1:A:134:GLN:O	1:A:136:PHE:CD1	0.49	2.65	13	3
1:A:90:LYS:CE	1:A:90:LYS:C	0.49	2.81	15	2
1:A:148:ILE:HG22	1:A:153:LEU:HB2	0.49	1.85	8	3
1:A:90:LYS:HG3	1:A:91:VAL:N	0.49	2.23	18	2
1:A:141:LEU:HD23	1:A:142:LEU:CD1	0.49	2.36	5	1
1:A:11:His:CD2	1:A:29:GLN:HA	0.49	2.43	5	1
1:A:126:PHE:HA	1:A:139:ASN:ND2	0.49	2.22	17	1
1:A:28:LEU:O	1:A:29:GLN:HG2	0.48	2.07	6	1
1:A:117:PHE:CD1	1:A:117:PHE:C	0.48	2.86	16	5
1:A:44:GLN:O	1:A:47:GLU:HG3	0.48	2.07	19	1
1:A:113:ASN:O	1:A:115:ARG:HG2	0.48	2.08	2	1
1:A:57:GLY:O	1:A:58:VAL:HG12	0.48	2.09	16	1
1:A:66:PHE:C	1:A:68:GLN:N	0.48	2.66	7	20
1:A:5:SER:HA	1:A:182:LEU:HD22	0.48	1.84	6	1
1:A:143:THR:CG2	1:A:143:THR:O	0.48	2.61	6	8
1:A:131:LEU:HB2	1:A:136:PHE:CG	0.48	2.43	5	2
1:A:157:LEU:HA	1:A:160:LEU:CD1	0.48	2.30	11	2
1:A:117:PHE:CZ	1:A:128:VAL:HG21	0.48	2.39	8	2
1:A:117:PHE:CD2	1:A:153:LEU:HD21	0.48	2.43	7	1
1:A:142:LEU:HD23	1:A:144:GLY:H	0.48	1.68	3	5
1:A:183:LEU:HD12	1:A:183:LEU:O	0.48	2.09	10	1
1:A:132:GLY:HA2	1:A:183:LEU:HD13	0.48	1.85	10	1
1:A:139:ASN:N	1:A:142:LEU:HD21	0.48	2.23	4	3
1:A:183:LEU:C	1:A:183:LEU:CD1	0.48	2.74	7	1
1:A:10:PHE:CE1	1:A:26:ASN:ND2	0.48	2.82	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:117:PHE:CD1	1:A:157:LEU:CD1	0.48	2.96	19	1
1:A:44:GLN:CG	1:A:45:LEU:N	0.48	2.76	9	1
1:A:9:ILE:HD11	1:A:131:LEU:CD2	0.48	2.38	14	1
1:A:112:ILE:CG2	1:A:135:TRP:NE1	0.48	2.77	10	6
1:A:48:GLU:OE1	1:A:48:GLU:CA	0.48	2.61	9	1
1:A:118:ILE:CG2	1:A:126:PHE:O	0.48	2.62	4	4
1:A:30:GLY:C	1:A:32:TYR:CE1	0.48	2.87	2	1
1:A:55:GLU:C	1:A:57:GLY:N	0.48	2.67	12	9
1:A:104:TYR:O	1:A:109:ILE:HB	0.48	2.08	15	12
1:A:121:TYR:CE2	1:A:124:HIS:HB2	0.48	2.43	15	1
1:A:110:ASP:CB	1:A:113:ASN:CG	0.48	2.82	10	1
1:A:20:ALA:HB2	1:A:125:TRP:CZ2	0.48	2.43	3	1
1:A:151:THR:O	1:A:155:LEU:HB3	0.48	2.09	17	6
1:A:97:ILE:HD11	1:A:169:VAL:CG2	0.48	2.37	12	1
1:A:136:PHE:CZ	1:A:147:LEU:HB2	0.48	2.43	18	2
1:A:98:LEU:CD2	1:A:100:ASN:HB2	0.48	2.39	7	3
1:A:70:PRO:O	1:A:83:GLN:NE2	0.48	2.47	12	1
1:A:131:LEU:HD12	1:A:136:PHE:CE1	0.48	2.44	18	2
1:A:30:GLY:O	1:A:31:GLU:HG3	0.48	2.08	14	1
1:A:136:PHE:HE1	1:A:147:LEU:HD12	0.48	1.69	1	1
1:A:75:ASP:HB2	1:A:79:PHE:CE2	0.47	2.44	7	3
1:A:49:GLU:HA	1:A:52:ARG:CG	0.47	2.39	11	5
1:A:99:PHE:CD2	1:A:117:PHE:CE2	0.47	3.02	13	4
1:A:141:LEU:CD2	1:A:142:LEU:CD1	0.47	2.92	5	1
1:A:131:LEU:HD22	1:A:132:GLY:N	0.47	2.24	17	1
1:A:27:LEU:HD11	1:A:116:SER:OG	0.47	2.07	12	2
1:A:99:PHE:CE2	1:A:111:PRO:HA	0.47	2.44	16	1
1:A:29:GLN:OE1	1:A:178:GLU:N	0.47	2.47	11	2
1:A:84:VAL:CG2	1:A:85:ILE:HD12	0.47	2.39	15	6
1:A:117:PHE:O	1:A:128:VAL:HB	0.47	2.09	11	9
1:A:104:TYR:CB	1:A:109:ILE:HD12	0.47	2.39	12	1
1:A:47:GLU:O	1:A:51:MET:HE2	0.47	2.10	20	1
1:A:115:ARG:HA	1:A:135:TRP:CZ3	0.47	2.44	13	1
1:A:11:HIS:CD2	1:A:11:HIS:C	0.47	2.87	7	3
1:A:29:GLN:NE2	1:A:29:GLN:O	0.47	2.47	1	1
1:A:22:HIS:NE2	1:A:139:ASN:O	0.47	2.47	4	1
1:A:99:PHE:CZ	1:A:105:GLN:NE2	0.47	2.82	19	3
1:A:21:GLN:CG	1:A:38:LEU:CD2	0.47	2.91	13	1
1:A:114:GLU:CG	1:A:114:GLU:O	0.47	2.61	2	1
1:A:66:PHE:O	1:A:67:LEU:C	0.47	2.53	3	15
1:A:5:SER:OG	1:A:9:ILE:HD11	0.47	2.09	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:142:LEU:HD13	1:A:142:LEU:H	0.47	1.69	13	7
1:A:82:ILE:CG1	1:A:125:TRP:CE3	0.47	2.97	15	2
1:A:131:LEU:HD13	1:A:136:PHE:CD2	0.47	2.45	11	1
1:A:117:PHE:CZ	1:A:169:VAL:HG12	0.47	2.43	12	1
1:A:97:ILE:HD12	1:A:169:VAL:HG22	0.47	1.86	12	1
1:A:8:SER:C	1:A:182:LEU:CD2	0.47	2.83	14	1
1:A:115:ARG:NE	1:A:170:VAL:O	0.47	2.47	18	1
1:A:85:ILE:O	1:A:89:LEU:N	0.47	2.43	17	7
1:A:94:LEU:HD23	1:A:174:LEU:HD23	0.47	1.86	10	2
1:A:94:LEU:CD1	1:A:170:VAL:CG1	0.47	2.93	17	3
1:A:128:VAL:HG22	1:A:137:ASN:ND2	0.47	2.24	11	2
1:A:136:PHE:CE2	1:A:147:LEU:HG	0.47	2.44	8	3
1:A:44:GLN:O	1:A:48:GLU:HB3	0.47	2.10	19	1
1:A:131:LEU:O	1:A:136:PHE:CE1	0.47	2.68	13	2
1:A:48:GLU:O	1:A:52:ARG:HG3	0.47	2.08	8	3
1:A:49:GLU:O	1:A:53:MET:HG2	0.47	2.08	18	2
1:A:28:LEU:HG	1:A:92:TRP:CD2	0.47	2.45	9	4
1:A:18:LEU:CD1	1:A:19:CYS:H	0.47	2.23	9	1
1:A:38:LEU:HB3	1:A:80:PHE:CG	0.47	2.45	18	3
1:A:121:TYR:CD1	1:A:122:LYS:HE3	0.47	2.45	7	1
1:A:49:GLU:OE1	1:A:66:PHE:CE1	0.47	2.67	18	1
1:A:21:GLN:HB2	1:A:33:PHE:CZ	0.47	2.44	2	1
1:A:176:ASP:OD2	1:A:180:ASP:CB	0.47	2.63	6	1
1:A:115:ARG:O	1:A:130:LYS:N	0.47	2.48	6	3
1:A:8:SER:O	1:A:182:LEU:CD1	0.47	2.62	4	2
1:A:75:ASP:CG	1:A:79:PHE:CD2	0.47	2.88	5	2
1:A:75:ASP:HA	1:A:79:PHE:O	0.47	2.10	11	3
1:A:69:GLN:HB2	1:A:70:PRO:HD3	0.47	1.85	9	1
1:A:21:GLN:NE2	1:A:38:LEU:CD1	0.47	2.78	7	1
1:A:142:LEU:HD22	1:A:142:LEU:N	0.47	2.25	16	9
1:A:38:LEU:HD13	1:A:84:VAL:HG21	0.47	1.86	6	3
1:A:21:GLN:O	1:A:25:ASN:OD1	0.47	2.33	7	7
1:A:117:PHE:CZ	1:A:157:LEU:CD2	0.47	2.98	9	1
1:A:24:LEU:HD11	1:A:89:LEU:CD2	0.47	2.36	20	3
1:A:31:GLU:C	1:A:32:TYR:CD2	0.47	2.87	9	1
1:A:25:ASN:O	1:A:29:GLN:N	0.47	2.46	14	1
1:A:21:GLN:HE22	1:A:24:LEU:HD23	0.47	1.70	1	1
1:A:74:MET:CE	1:A:80:PHE:CD2	0.46	2.98	13	2
1:A:47:GLU:O	1:A:51:MET:HG2	0.46	2.10	6	4
1:A:47:GLU:O	1:A:51:MET:CG	0.46	2.63	6	1
1:A:159:GLN:O	1:A:163:GLU:OE2	0.46	2.32	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:GLN:OE1	1:A:25:ASN:ND2	0.46	2.48	13	3
1:A:9:ILE:CD1	1:A:131:LEU:HD22	0.46	2.41	13	1
1:A:51:MET:O	1:A:55:GLU:N	0.46	2.37	8	3
1:A:111:PRO:HB2	1:A:157:LEU:HD23	0.46	1.85	17	2
1:A:98:LEU:CD1	1:A:100:ASN:OD1	0.46	2.62	8	3
1:A:45:LEU:HD12	1:A:49:GLU:HB3	0.46	1.87	8	1
1:A:11:HIS:NE2	1:A:25:ASN:HB3	0.46	2.25	9	1
1:A:181:GLN:OE1	1:A:182:LEU:HD23	0.46	2.10	17	1
1:A:96:LEU:CD2	1:A:96:LEU:C	0.46	2.84	20	3
1:A:87:ASN:HA	1:A:90:LYS:CG	0.46	2.40	10	9
1:A:131:LEU:HD12	1:A:136:PHE:CG	0.46	2.44	15	1
1:A:89:LEU:CA	1:A:94:LEU:CD1	0.46	2.93	12	1
1:A:23:CYS:O	1:A:27:LEU:CB	0.46	2.63	12	1
1:A:131:LEU:CD1	1:A:131:LEU:C	0.46	2.77	18	1
1:A:37:GLU:O	1:A:41:ILE:N	0.46	2.39	1	2
1:A:23:CYS:SG	1:A:138:LEU:O	0.46	2.73	20	2
1:A:28:LEU:O	1:A:29:GLN:C	0.46	2.54	6	1
1:A:9:ILE:O	1:A:10:PHE:HB2	0.46	2.10	10	6
1:A:174:LEU:CD1	1:A:175:PRO:HD2	0.46	2.39	13	6
1:A:114:GLU:OE2	1:A:115:ARG:CZ	0.46	2.62	19	1
1:A:142:LEU:N	1:A:142:LEU:HD22	0.46	2.25	3	5
1:A:45:LEU:O	1:A:49:GLU:HB3	0.46	2.11	18	3
1:A:39:SER:HA	1:A:74:MET:CE	0.46	2.40	3	1
1:A:53:MET:SD	1:A:63:TYR:CE1	0.46	3.08	1	1
1:A:134:GLN:NE2	1:A:148:ILE:O	0.46	2.48	1	1
1:A:104:TYR:CB	1:A:109:ILE:HD13	0.46	2.40	2	1
1:A:49:GLU:OE1	1:A:53:MET:SD	0.46	2.73	19	1
1:A:103:GLU:O	1:A:107:LEU:HG	0.46	2.10	16	4
1:A:50:ARG:O	1:A:54:ALA:HB2	0.46	2.11	11	10
1:A:9:ILE:HD13	1:A:131:LEU:HD13	0.46	1.87	13	1
1:A:19:CYS:SG	1:A:21:GLN:HB3	0.46	2.50	12	3
1:A:39:SER:N	1:A:80:PHE:CE1	0.46	2.84	18	2
1:A:11:HIS:NE2	1:A:25:ASN:HB2	0.46	2.25	9	1
1:A:11:HIS:CD2	1:A:26:ASN:CG	0.46	2.89	9	1
1:A:99:PHE:CE1	1:A:105:GLN:OE1	0.46	2.68	12	1
1:A:130:LYS:HD2	1:A:135:TRP:CD2	0.46	2.46	7	1
1:A:21:GLN:NE2	1:A:24:LEU:CD2	0.46	2.79	20	1
1:A:49:GLU:O	1:A:53:MET:CB	0.46	2.64	6	4
1:A:120:ASN:ND2	1:A:120:ASN:C	0.46	2.68	13	3
1:A:87:ASN:O	1:A:91:VAL:CG1	0.46	2.56	8	4
1:A:121:TYR:O	1:A:124:HIS:O	0.46	2.34	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:GLN:NE2	1:A:33:PHE:O	0.46	2.49	5	1
1:A:63:TYR:O	1:A:67:LEU:N	0.46	2.46	9	1
1:A:66:PHE:C	1:A:66:PHE:CD1	0.46	2.89	9	1
1:A:111:PRO:HB2	1:A:157:LEU:CD2	0.46	2.41	17	4
1:A:121:TYR:CD1	1:A:122:LYS:HB2	0.46	2.45	14	4
1:A:22:HIS:O	1:A:26:ASN:OD1	0.46	2.33	2	3
1:A:99:PHE:CD1	1:A:117:PHE:CZ	0.46	3.04	18	2
1:A:119:CYS:SG	1:A:167:ILE:HG23	0.46	2.51	11	1
1:A:9:ILE:HG13	1:A:182:LEU:HD13	0.46	1.87	18	1
1:A:66:PHE:CE1	1:A:83:GLN:OE1	0.46	2.69	2	3
1:A:95:GLU:OE1	1:A:95:GLU:N	0.46	2.49	11	1
1:A:142:LEU:N	1:A:142:LEU:CD1	0.46	2.78	10	2
1:A:88:ALA:O	1:A:92:TRP:CD1	0.46	2.69	17	7
1:A:158:ALA:O	1:A:162:GLN:NE2	0.46	2.47	11	1
1:A:117:PHE:CE2	1:A:157:LEU:HD21	0.46	2.46	9	1
1:A:99:PHE:CD2	1:A:117:PHE:HZ	0.46	2.25	20	1
1:A:30:GLY:CA	1:A:32:TYR:CE2	0.46	2.99	6	2
1:A:52:ARG:C	1:A:52:ARG:CD	0.46	2.83	10	3
1:A:41:ILE:CG2	1:A:42:ALA:N	0.46	2.79	18	9
1:A:6:MET:CG	1:A:9:ILE:HD12	0.46	2.41	5	2
1:A:45:LEU:CG	1:A:87:ASN:ND2	0.46	2.79	16	1
1:A:88:ALA:HA	1:A:91:VAL:CG2	0.46	2.41	10	6
1:A:100:ASN:HB3	1:A:165:TYR:CE2	0.46	2.45	11	1
1:A:174:LEU:CD1	1:A:174:LEU:C	0.46	2.85	12	1
1:A:21:GLN:NE2	1:A:38:LEU:HD21	0.46	2.26	1	1
1:A:21:GLN:OE1	1:A:21:GLN:HA	0.45	2.11	20	1
1:A:89:LEU:HD13	1:A:94:LEU:HD12	0.45	1.83	9	2
1:A:117:PHE:CE1	1:A:118:ILE:C	0.45	2.89	3	10
1:A:58:VAL:O	1:A:59:THR:C	0.45	2.53	16	8
1:A:112:ILE:HG21	1:A:150:ASP:O	0.45	2.11	11	6
1:A:21:GLN:OE1	1:A:25:ASN:OD1	0.45	2.34	16	3
1:A:94:LEU:H	1:A:94:LEU:HD23	0.45	1.71	15	2
1:A:129:ARG:NH2	1:A:177:CYS:SG	0.45	2.88	15	1
1:A:66:PHE:CD1	1:A:69:GLN:HG3	0.45	2.46	14	2
1:A:134:GLN:HA	1:A:134:GLN:NE2	0.45	2.26	1	1
1:A:114:GLU:OE2	1:A:170:VAL:O	0.45	2.34	19	2
1:A:96:LEU:HD21	1:A:168:PHE:CB	0.45	2.40	11	3
1:A:52:ARG:HD3	1:A:53:MET:N	0.45	2.26	8	4
1:A:70:PRO:O	1:A:72:GLY:N	0.45	2.50	7	1
1:A:120:ASN:HB3	1:A:166:SER:HB3	0.45	1.89	15	2
1:A:23:CYS:SG	1:A:138:LEU:C	0.45	2.94	2	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:ARG:HD2	1:A:67:LEU:HD12	0.45	1.88	13	3
1:A:131:LEU:CB	1:A:136:PHE:CD2	0.45	2.99	5	1
1:A:66:PHE:O	1:A:69:GLN:HG2	0.45	2.10	14	2
1:A:104:TYR:CA	1:A:109:ILE:HD13	0.45	2.42	20	2
1:A:29:GLN:NE2	1:A:175:PRO:O	0.45	2.49	6	1
1:A:28:LEU:HG	1:A:92:TRP:CZ3	0.45	2.46	3	3
1:A:117:PHE:CD2	1:A:153:LEU:HD11	0.45	2.47	9	1
1:A:38:LEU:CD2	1:A:80:PHE:CD2	0.45	2.95	2	1
1:A:21:GLN:NE2	1:A:25:ASN:OD1	0.45	2.49	4	1
1:A:111:PRO:HG2	1:A:154:ALA:CB	0.45	2.42	20	2
1:A:28:LEU:O	1:A:29:GLN:OE1	0.45	2.34	20	1
1:A:85:ILE:O	1:A:89:LEU:HD22	0.45	2.12	6	1
1:A:133:LYS:O	1:A:134:GLN:OE1	0.45	2.35	6	1
1:A:94:LEU:HD22	1:A:170:VAL:CG1	0.45	2.42	12	3
1:A:88:ALA:CA	1:A:91:VAL:HG22	0.45	2.42	10	9
1:A:19:CYS:SG	1:A:79:PHE:HA	0.45	2.52	3	1
1:A:122:LYS:O	1:A:123:GLU:HB3	0.45	2.12	4	1
1:A:138:LEU:CD2	1:A:145:PRO:HA	0.45	2.41	6	1
1:A:117:PHE:CE2	1:A:153:LEU:HD21	0.45	2.47	7	4
1:A:11:HIS:CG	1:A:26:ASN:HA	0.45	2.47	3	4
1:A:124:HIS:NE2	1:A:139:ASN:OD1	0.45	2.49	16	1
1:A:121:TYR:CZ	1:A:122:LYS:HE3	0.45	2.47	16	1
1:A:163:GLU:O	1:A:163:GLU:OE1	0.45	2.35	14	2
1:A:21:GLN:CB	1:A:38:LEU:HD12	0.45	2.38	3	1
1:A:113:ASN:O	1:A:115:ARG:N	0.45	2.50	2	1
1:A:46:ASP:O	1:A:50:ARG:HB3	0.45	2.11	19	7
1:A:5:SER:C	1:A:7:GLU:N	0.45	2.70	9	7
1:A:66:PHE:O	1:A:69:GLN:N	0.45	2.36	11	3
1:A:90:LYS:CG	1:A:91:VAL:N	0.45	2.80	19	4
1:A:26:ASN:O	1:A:129:ARG:NH2	0.45	2.50	15	1
1:A:42:ALA:O	1:A:45:LEU:CD1	0.45	2.64	9	1
1:A:21:GLN:CG	1:A:33:PHE:CE2	0.45	3.00	14	1
1:A:135:TRP:CD1	1:A:150:ASP:HA	0.45	2.47	4	1
1:A:157:LEU:HA	1:A:160:LEU:CD2	0.45	2.42	9	16
1:A:108:ARG:CG	1:A:108:ARG:O	0.45	2.64	19	1
1:A:45:LEU:CD1	1:A:49:GLU:CD	0.45	2.83	13	1
1:A:115:ARG:HD3	1:A:170:VAL:O	0.45	2.12	18	1
1:A:139:ASN:OD1	1:A:140:SER:N	0.45	2.50	2	1
1:A:139:ASN:OD1	1:A:141:LEU:HD23	0.45	2.11	2	1
1:A:98:LEU:HA	1:A:168:PHE:HA	0.45	1.89	16	4
1:A:163:GLU:HG3	1:A:164:GLY:N	0.45	2.27	3	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:LEU:C	1:A:18:LEU:CD1	0.45	2.74	10	1
1:A:21:GLN:O	1:A:21:GLN:OE1	0.45	2.35	1	1
1:A:98:LEU:CD2	1:A:100:ASN:ND2	0.45	2.80	14	2
1:A:87:ASN:N	1:A:87:ASN:HD22	0.45	2.08	15	2
1:A:73:ASN:C	1:A:74:MET:CG	0.45	2.85	8	1
1:A:130:LYS:HE3	1:A:135:TRP:CD1	0.45	2.46	17	1
1:A:135:TRP:CD2	1:A:135:TRP:N	0.45	2.85	4	2
1:A:135:TRP:CZ2	1:A:150:ASP:HB2	0.44	2.48	20	1
1:A:89:LEU:HG	1:A:94:LEU:CD1	0.44	2.42	13	3
1:A:118:ILE:O	1:A:167:ILE:HA	0.44	2.11	19	2
1:A:79:PHE:O	1:A:79:PHE:CD1	0.44	2.70	11	1
1:A:5:SER:HA	1:A:182:LEU:HD13	0.44	1.88	3	1
1:A:137:ASN:ND2	1:A:142:LEU:HB3	0.44	2.28	2	1
1:A:96:LEU:C	1:A:96:LEU:HD22	0.44	2.32	13	1
1:A:23:CYS:SG	1:A:138:LEU:HD12	0.44	2.52	7	1
1:A:18:LEU:CD2	1:A:19:CYS:H	0.44	2.25	3	1
1:A:131:LEU:O	1:A:133:LYS:N	0.44	2.50	18	1
1:A:45:LEU:CD1	1:A:49:GLU:CG	0.44	2.95	4	1
1:A:21:GLN:OE1	1:A:38:LEU:CD2	0.44	2.64	20	1
1:A:47:GLU:O	1:A:51:MET:CE	0.44	2.65	20	1
1:A:63:TYR:O	1:A:67:LEU:HG	0.44	2.12	20	3
1:A:58:VAL:O	1:A:62:ASP:HB2	0.44	2.12	9	5
1:A:82:ILE:CD1	1:A:96:LEU:HD11	0.44	2.42	10	1
1:A:131:LEU:HD23	1:A:136:PHE:CZ	0.44	2.46	10	1
1:A:165:TYR:O	1:A:166:SER:OG	0.44	2.33	5	2
1:A:38:LEU:HD23	1:A:80:PHE:HD2	0.44	1.67	2	1
1:A:160:LEU:HD21	1:A:167:ILE:CD1	0.44	2.42	19	2
1:A:120:ASN:HB3	1:A:166:SER:CB	0.44	2.43	15	6
1:A:100:ASN:HA	1:A:161:GLN:NE2	0.44	2.28	2	6
1:A:183:LEU:HG	1:A:184:GLN:N	0.44	2.27	16	1
1:A:75:ASP:HB2	1:A:79:PHE:O	0.44	2.13	3	2
1:A:82:ILE:CD1	1:A:96:LEU:HD21	0.44	2.42	18	2
1:A:21:GLN:CB	1:A:33:PHE:CZ	0.44	3.00	2	1
1:A:135:TRP:CE3	1:A:148:ILE:O	0.44	2.71	17	4
1:A:163:GLU:N	1:A:163:GLU:OE2	0.44	2.50	19	1
1:A:48:GLU:OE1	1:A:48:GLU:N	0.44	2.50	9	1
1:A:97:ILE:CD1	1:A:169:VAL:HG22	0.44	2.41	12	1
1:A:30:GLY:CA	1:A:32:TYR:CE1	0.44	3.00	2	1
1:A:48:GLU:O	1:A:52:ARG:HB3	0.44	2.12	17	4
1:A:139:ASN:H	1:A:142:LEU:HD21	0.44	1.72	7	2
1:A:104:TYR:HB3	1:A:109:ILE:CD1	0.44	2.40	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:114:GLU:OE1	1:A:114:GLU:N	0.44	2.51	20	1
1:A:58:VAL:CG2	1:A:63:TYR:HB2	0.44	2.42	2	5
1:A:11:HIS:HB2	1:A:26:ASN:CG	0.44	2.33	10	1
1:A:5:SER:CB	1:A:182:LEU:HB3	0.44	2.43	10	2
1:A:75:ASP:CG	1:A:79:PHE:CE2	0.44	2.92	5	1
1:A:110:ASP:O	1:A:113:ASN:ND2	0.44	2.48	8	1
1:A:74:MET:CG	1:A:75:ASP:H	0.44	2.26	3	1
1:A:37:GLU:O	1:A:41:ILE:HB	0.44	2.12	1	1
1:A:153:LEU:HD22	1:A:153:LEU:C	0.44	2.33	4	1
1:A:164:GLY:O	1:A:165:TYR:HB2	0.44	2.12	19	4
1:A:11:HIS:CD2	1:A:26:ASN:ND2	0.44	2.86	9	1
1:A:53:MET:HB2	1:A:58:VAL:CG1	0.44	2.42	18	1
1:A:134:GLN:HB3	1:A:136:PHE:CE1	0.44	2.47	6	1
1:A:24:LEU:HD11	1:A:89:LEU:HD13	0.44	1.89	13	1
1:A:36:VAL:O	1:A:39:SER:OG	0.44	2.33	16	1
1:A:29:GLN:CD	1:A:29:GLN:O	0.44	2.56	17	2
1:A:28:LEU:HD11	1:A:89:LEU:HD22	0.44	1.89	17	1
1:A:43:HIS:N	1:A:43:HIS:CD2	0.43	2.86	19	2
1:A:181:GLN:O	1:A:184:GLN:O	0.43	2.36	16	1
1:A:108:ARG:O	1:A:108:ARG:CG	0.43	2.65	10	3
1:A:43:HIS:CD2	1:A:43:HIS:N	0.43	2.86	10	1
1:A:160:LEU:C	1:A:160:LEU:CD2	0.43	2.81	17	1
1:A:53:MET:HG3	1:A:58:VAL:HG11	0.43	1.87	18	1
1:A:134:GLN:HB2	1:A:136:PHE:CE1	0.43	2.48	14	2
1:A:38:LEU:HD12	1:A:80:PHE:CD2	0.43	2.49	12	2
1:A:114:GLU:OE1	1:A:115:ARG:N	0.43	2.50	16	1
1:A:157:LEU:CD1	1:A:157:LEU:N	0.43	2.80	11	1
1:A:111:PRO:HB2	1:A:157:LEU:HD12	0.43	1.89	8	1
1:A:84:VAL:CG1	1:A:85:ILE:HD12	0.43	2.44	20	2
1:A:29:GLN:OE1	1:A:176:ASP:C	0.43	2.57	6	1
1:A:44:GLN:C	1:A:44:GLN:CD	0.43	2.76	6	1
1:A:155:LEU:C	1:A:155:LEU:CD2	0.43	2.82	5	2
1:A:134:GLN:O	1:A:136:PHE:CE1	0.43	2.71	13	1
1:A:114:GLU:OE2	1:A:170:VAL:N	0.43	2.51	16	1
1:A:113:ASN:OD1	1:A:113:ASN:O	0.43	2.37	3	3
1:A:100:ASN:HB3	1:A:165:TYR:CD2	0.43	2.48	11	1
1:A:127:THR:O	1:A:138:LEU:O	0.43	2.36	4	1
1:A:38:LEU:HB2	1:A:80:PHE:CE1	0.43	2.48	19	1
1:A:75:ASP:CA	1:A:79:PHE:O	0.43	2.66	11	1
1:A:127:THR:O	1:A:138:LEU:N	0.43	2.46	10	1
1:A:87:ASN:O	1:A:91:VAL:HB	0.43	2.14	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:139:ASN:HB3	1:A:142:LEU:HD11	0.43	1.89	7	1
1:A:114:GLU:OE2	1:A:169:VAL:HG13	0.43	2.13	17	1
1:A:156:PHE:CD2	1:A:157:LEU:CD1	0.43	3.01	20	1
1:A:137:ASN:O	1:A:138:LEU:CD2	0.43	2.67	6	1
1:A:58:VAL:HG22	1:A:63:TYR:H	0.43	1.74	16	2
1:A:115:ARG:CD	1:A:170:VAL:O	0.43	2.67	18	1
1:A:11:HIS:NE2	1:A:30:GLY:HA2	0.43	2.28	18	1
1:A:45:LEU:HD12	1:A:49:GLU:HG2	0.43	1.89	4	1
1:A:29:GLN:OE1	1:A:30:GLY:N	0.43	2.50	20	1
1:A:96:LEU:HD21	1:A:168:PHE:HB3	0.43	1.90	20	2
1:A:45:LEU:O	1:A:49:GLU:HG3	0.43	2.13	13	1
1:A:59:THR:CG2	1:A:62:ASP:CG	0.43	2.86	18	1
1:A:24:LEU:CG	1:A:85:ILE:HG13	0.43	2.44	15	1
1:A:126:PHE:CZ	1:A:141:LEU:HD23	0.43	2.49	9	1
1:A:169:VAL:O	1:A:169:VAL:CG1	0.43	2.66	1	1
1:A:53:MET:SD	1:A:63:TYR:CZ	0.43	3.12	1	1
1:A:94:LEU:HG	1:A:173:ASP:O	0.43	2.14	18	1
1:A:115:ARG:CZ	1:A:169:VAL:HG13	0.43	2.44	2	1
1:A:114:GLU:OE2	1:A:115:ARG:NH1	0.43	2.51	19	1
1:A:19:CYS:SG	1:A:21:GLN:HB2	0.43	2.53	4	2
1:A:105:GLN:OE1	1:A:109:ILE:O	0.43	2.36	8	2
1:A:87:ASN:O	1:A:91:VAL:HG22	0.43	2.14	17	2
1:A:139:ASN:OD1	1:A:141:LEU:HB3	0.43	2.14	15	1
1:A:134:GLN:OE1	1:A:150:ASP:OD1	0.43	2.37	3	2
1:A:35:PRO:CA	1:A:80:PHE:CZ	0.43	3.01	15	1
1:A:11:HIS:CE1	1:A:30:GLY:H	0.43	2.31	5	2
1:A:20:ALA:O	1:A:23:CYS:N	0.43	2.52	5	1
1:A:135:TRP:CH2	1:A:150:ASP:CG	0.43	2.93	5	1
1:A:132:GLY:CA	1:A:183:LEU:HB2	0.43	2.44	8	1
1:A:11:HIS:CA	1:A:26:ASN:OD1	0.43	2.66	9	1
1:A:157:LEU:N	1:A:157:LEU:CD1	0.43	2.82	20	3
1:A:134:GLN:CB	1:A:147:LEU:HD21	0.43	2.44	20	1
1:A:114:GLU:HG3	1:A:169:VAL:CG2	0.43	2.43	19	2
1:A:175:PRO:O	1:A:176:ASP:O	0.43	2.37	7	2
1:A:53:MET:CB	1:A:58:VAL:CG1	0.43	2.97	18	1
1:A:94:LEU:CD1	1:A:94:LEU:N	0.43	2.82	4	1
1:A:87:ASN:ND2	1:A:87:ASN:H	0.43	2.10	15	1
1:A:83:GLN:HA	1:A:83:GLN:NE2	0.43	2.28	11	1
1:A:138:LEU:HD13	1:A:139:ASN:N	0.43	2.29	10	1
1:A:114:GLU:HG3	1:A:169:VAL:HG12	0.43	1.89	8	1
1:A:29:GLN:O	1:A:177:CYS:SG	0.43	2.76	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:160:LEU:CG	1:A:167:ILE:HD11	0.43	2.44	18	1
1:A:72:GLY:O	1:A:73:ASN:C	0.42	2.57	5	1
1:A:45:LEU:C	1:A:45:LEU:CD2	0.42	2.68	9	1
1:A:69:GLN:HG2	1:A:98:LEU:CD2	0.42	2.44	9	1
1:A:20:ALA:C	1:A:22:HIS:N	0.42	2.72	1	1
1:A:105:GLN:HA	1:A:109:ILE:HB	0.42	1.91	3	3
1:A:10:PHE:CD2	1:A:26:ASN:OD1	0.42	2.72	6	1
1:A:11:HIS:ND1	1:A:29:GLN:HA	0.42	2.30	6	1
1:A:70:PRO:O	1:A:71:SER:O	0.42	2.37	19	1
1:A:7:GLU:CG	1:A:8:SER:N	0.42	2.82	15	1
1:A:81:SER:O	1:A:84:VAL:CG1	0.42	2.67	14	2
1:A:122:LYS:HE2	1:A:122:LYS:CA	0.42	2.44	7	1
1:A:117:PHE:CE1	1:A:118:ILE:O	0.42	2.72	2	2
1:A:8:SER:C	1:A:182:LEU:HD11	0.42	2.34	3	1
1:A:34:SER:HB3	1:A:35:PRO:CD	0.42	2.44	14	1
1:A:59:THR:O	1:A:60:SER:CB	0.42	2.66	12	6
1:A:98:LEU:CD1	1:A:100:ASN:ND2	0.42	2.80	15	2
1:A:53:MET:CE	1:A:63:TYR:CD2	0.42	3.02	15	1
1:A:44:GLN:O	1:A:48:GLU:HB2	0.42	2.15	15	3
1:A:9:ILE:HG12	1:A:131:LEU:HD21	0.42	1.91	17	1
1:A:58:VAL:C	1:A:59:THR:CG2	0.42	2.88	14	1
1:A:53:MET:O	1:A:58:VAL:CB	0.42	2.68	6	1
1:A:142:LEU:C	1:A:144:GLY:N	0.42	2.72	15	3
1:A:155:LEU:CD2	1:A:155:LEU:C	0.42	2.87	15	2
1:A:103:GLU:O	1:A:107:LEU:CG	0.42	2.67	8	2
1:A:130:LYS:HB2	1:A:135:TRP:CE3	0.42	2.50	8	1
1:A:129:ARG:NH2	1:A:138:LEU:HD23	0.42	2.28	8	1
1:A:139:ASN:ND2	1:A:140:SER:OG	0.42	2.52	8	1
1:A:132:GLY:HA2	1:A:183:LEU:HD23	0.42	1.91	7	1
1:A:80:PHE:O	1:A:125:TRP:NE1	0.42	2.48	17	1
1:A:115:ARG:O	1:A:116:SER:OG	0.42	2.31	14	1
1:A:64:ARG:HD3	1:A:64:ARG:N	0.42	2.29	4	1
1:A:155:LEU:HD22	1:A:159:GLN:CG	0.42	2.44	20	1
1:A:115:ARG:NH2	1:A:171:LYS:HB3	0.42	2.29	19	1
1:A:52:ARG:O	1:A:56:GLY:CA	0.42	2.67	17	3
1:A:49:GLU:OE2	1:A:53:MET:SD	0.42	2.78	15	1
1:A:121:TYR:CD2	1:A:124:HIS:O	0.42	2.73	15	1
1:A:98:LEU:HD11	1:A:100:ASN:CG	0.42	2.34	11	1
1:A:6:MET:CE	1:A:147:LEU:HG	0.42	2.45	10	1
1:A:183:LEU:HD13	1:A:184:GLN:CB	0.42	2.42	1	1
1:A:111:PRO:O	1:A:114:GLU:OE2	0.42	2.38	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:VAL:HG23	1:A:63:TYR:N	0.42	2.29	20	4
1:A:155:LEU:O	1:A:159:GLN:HG2	0.42	2.13	13	6
1:A:52:ARG:HG3	1:A:53:MET:H	0.42	1.75	6	1
1:A:120:ASN:OD1	1:A:120:ASN:C	0.42	2.57	6	2
1:A:18:LEU:C	1:A:18:LEU:HD12	0.42	2.35	13	1
1:A:22:HIS:O	1:A:26:ASN:CG	0.42	2.58	8	1
1:A:21:GLN:NE2	1:A:34:SER:C	0.42	2.73	3	1
1:A:112:ILE:HG22	1:A:135:TRP:CE2	0.42	2.50	14	1
1:A:131:LEU:HD21	1:A:179:ALA:HB1	0.42	1.91	2	1
1:A:84:VAL:HA	1:A:87:ASN:OD1	0.42	2.14	4	1
1:A:53:MET:O	1:A:58:VAL:CG1	0.42	2.67	6	1
1:A:134:GLN:NE2	1:A:134:GLN:HA	0.42	2.29	6	2
1:A:18:LEU:HD12	1:A:19:CYS:HB3	0.42	1.89	19	2
1:A:114:GLU:HB2	1:A:117:PHE:CE1	0.42	2.48	12	1
1:A:120:ASN:HB3	1:A:166:SER:OG	0.42	2.14	17	2
1:A:11:HIS:CD2	1:A:29:GLN:O	0.42	2.72	18	1
1:A:99:PHE:C	1:A:101:SER:N	0.42	2.72	18	1
1:A:104:TYR:HB3	1:A:109:ILE:HD13	0.42	1.92	2	1
1:A:10:PHE:O	1:A:26:ASN:OD1	0.42	2.37	19	1
1:A:94:LEU:HD13	1:A:94:LEU:C	0.42	2.35	13	1
1:A:25:ASN:ND2	1:A:31:GLU:HA	0.42	2.30	7	2
1:A:117:PHE:O	1:A:128:VAL:CB	0.42	2.68	11	1
1:A:134:GLN:HB3	1:A:147:LEU:CD1	0.42	2.45	14	2
1:A:131:LEU:HD22	1:A:136:PHE:CE1	0.42	2.49	1	1
1:A:115:ARG:O	1:A:130:LYS:HB2	0.42	2.15	4	1
1:A:11:HIS:HB2	1:A:26:ASN:CB	0.42	2.45	1	2
1:A:64:ARG:NH1	1:A:64:ARG:HB2	0.42	2.29	20	1
1:A:30:GLY:O	1:A:31:GLU:OE1	0.42	2.38	6	1
1:A:21:GLN:CB	1:A:38:LEU:HD22	0.42	2.45	13	1
1:A:33:PHE:CE2	1:A:92:TRP:NE1	0.42	2.87	11	1
1:A:114:GLU:HA	1:A:135:TRP:CZ3	0.42	2.50	2	1
1:A:132:GLY:C	1:A:183:LEU:HD23	0.42	2.35	6	1
1:A:121:TYR:HB3	1:A:126:PHE:CZ	0.42	2.50	8	2
1:A:114:GLU:OE1	1:A:115:ARG:NE	0.42	2.50	15	1
1:A:66:PHE:C	1:A:68:GLN:H	0.42	2.17	9	1
1:A:69:GLN:N	1:A:70:PRO:HD2	0.42	2.29	9	1
1:A:67:LEU:C	1:A:69:GLN:N	0.42	2.73	3	2
1:A:5:SER:CA	1:A:182:LEU:HD13	0.42	2.44	3	1
1:A:11:HIS:HB2	1:A:26:ASN:HA	0.42	1.90	2	1
1:A:100:ASN:OD1	1:A:167:ILE:N	0.42	2.53	4	1
1:A:176:ASP:C	1:A:176:ASP:OD1	0.41	2.58	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:ILE:HG12	1:A:125:TRP:CZ2	0.41	2.50	5	4
1:A:112:ILE:C	1:A:114:GLU:N	0.41	2.71	13	1
1:A:148:ILE:CG2	1:A:153:LEU:HB2	0.41	2.45	15	2
1:A:51:MET:O	1:A:55:GLU:HG3	0.41	2.15	18	3
1:A:21:GLN:HB2	1:A:38:LEU:CD2	0.41	2.44	8	1
1:A:157:LEU:HB3	1:A:167:ILE:HD13	0.41	1.91	14	1
1:A:99:PHE:HB2	1:A:169:VAL:CG1	0.41	2.40	6	1
1:A:133:LYS:O	1:A:134:GLN:CD	0.41	2.59	6	1
1:A:28:LEU:O	1:A:29:GLN:HG3	0.41	2.15	15	1
1:A:126:PHE:HB3	1:A:141:LEU:CD2	0.41	2.45	11	1
1:A:99:PHE:CD2	1:A:117:PHE:HE2	0.41	2.32	10	1
1:A:59:THR:C	1:A:61:GLU:N	0.41	2.74	10	2
1:A:110:ASP:CB	1:A:113:ASN:HB2	0.41	2.44	4	3
1:A:11:HIS:CD2	1:A:11:HIS:O	0.41	2.73	3	1
1:A:29:GLN:CB	1:A:177:CYS:HB3	0.41	2.45	14	1
1:A:53:MET:HG3	1:A:58:VAL:CG1	0.41	2.45	18	1
1:A:28:LEU:C	1:A:29:GLN:HG2	0.41	2.35	6	1
1:A:99:PHE:CZ	1:A:105:GLN:CD	0.41	2.94	19	1
1:A:136:PHE:CE2	1:A:147:LEU:HA	0.41	2.49	13	1
1:A:24:LEU:HD11	1:A:85:ILE:CG1	0.41	2.38	15	1
1:A:120:ASN:CG	1:A:166:SER:OG	0.41	2.59	17	1
1:A:30:GLY:O	1:A:31:GLU:C	0.41	2.58	14	1
1:A:34:SER:HB2	1:A:35:PRO:HD2	0.41	1.91	2	1
1:A:136:PHE:CE1	1:A:147:LEU:HD21	0.41	2.50	4	1
1:A:156:PHE:O	1:A:156:PHE:CD1	0.41	2.74	7	1
1:A:181:GLN:OE1	1:A:182:LEU:N	0.41	2.53	17	1
1:A:174:LEU:C	1:A:174:LEU:HD13	0.41	2.35	18	1
1:A:130:LYS:HA	1:A:134:GLN:O	0.41	2.16	14	2
1:A:100:ASN:OD1	1:A:167:ILE:CG1	0.41	2.68	17	2
1:A:110:ASP:HB2	1:A:113:ASN:CG	0.41	2.36	10	1
1:A:87:ASN:H	1:A:87:ASN:ND2	0.41	2.11	12	1
1:A:72:GLY:O	1:A:81:SER:CB	0.41	2.68	7	1
1:A:101:SER:HG	1:A:104:TYR:HD2	0.41	1.57	2	1
1:A:42:ALA:HB2	1:A:84:VAL:CG2	0.41	2.41	20	2
1:A:136:PHE:CE2	1:A:147:LEU:CD1	0.41	3.03	6	1
1:A:5:SER:O	1:A:182:LEU:CD1	0.41	2.67	6	1
1:A:165:TYR:C	1:A:166:SER:OG	0.41	2.58	13	2
1:A:139:ASN:O	1:A:140:SER:HB2	0.41	2.11	16	1
1:A:95:GLU:OE1	1:A:171:LYS:O	0.41	2.39	11	1
1:A:22:HIS:CD2	1:A:23:CYS:N	0.41	2.88	11	2
1:A:24:LEU:HD13	1:A:85:ILE:HG12	0.41	1.92	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:SER:O	1:A:90:LYS:HG2	0.41	2.16	5	1
1:A:19:CYS:HB2	1:A:80:PHE:CD2	0.41	2.49	3	1
1:A:112:ILE:HA	1:A:153:LEU:HD12	0.41	1.92	18	1
1:A:121:TYR:O	1:A:122:LYS:O	0.41	2.38	4	2
1:A:116:SER:HB3	1:A:170:VAL:CG1	0.41	2.45	19	1
1:A:99:PHE:CD2	1:A:117:PHE:CE1	0.41	3.09	19	1
1:A:53:MET:HB3	1:A:58:VAL:HB	0.41	1.91	16	1
1:A:183:LEU:O	1:A:184:GLN:HG3	0.41	2.16	16	1
1:A:114:GLU:HB2	1:A:117:PHE:CD1	0.41	2.51	12	1
1:A:115:ARG:HD3	1:A:116:SER:CB	0.41	2.45	7	1
1:A:10:PHE:CZ	1:A:178:GLU:OE2	0.41	2.73	7	1
1:A:99:PHE:HB2	1:A:169:VAL:HG23	0.41	1.92	17	1
1:A:53:MET:HG3	1:A:54:ALA:N	0.41	2.29	18	3
1:A:115:ARG:NH1	1:A:169:VAL:HG22	0.41	2.30	2	1
1:A:28:LEU:HD21	1:A:89:LEU:HD22	0.41	1.93	4	1
1:A:137:ASN:HD22	1:A:138:LEU:N	0.41	2.14	20	1
1:A:120:ASN:C	1:A:120:ASN:OD1	0.41	2.58	19	2
1:A:57:GLY:O	1:A:58:VAL:C	0.41	2.59	19	2
1:A:30:GLY:N	1:A:32:TYR:CE2	0.41	2.89	10	1
1:A:73:ASN:C	1:A:74:MET:HG2	0.41	2.36	8	1
1:A:28:LEU:HD23	1:A:92:TRP:NE1	0.41	2.30	9	1
1:A:40:SER:O	1:A:44:GLN:HB3	0.41	2.16	7	2
1:A:130:LYS:O	1:A:130:LYS:CG	0.41	2.69	18	1
1:A:63:TYR:O	1:A:67:LEU:HD12	0.41	2.15	18	1
1:A:55:GLU:HG3	1:A:56:GLY:N	0.41	2.31	2	1
1:A:115:ARG:O	1:A:130:LYS:HD3	0.41	2.14	4	1
1:A:84:VAL:CG1	1:A:85:ILE:N	0.41	2.83	20	1
1:A:52:ARG:HG3	1:A:53:MET:N	0.41	2.30	6	1
1:A:41:ILE:HG22	1:A:84:VAL:HG23	0.41	1.89	13	1
1:A:88:ALA:O	1:A:91:VAL:HG22	0.41	2.15	13	1
1:A:49:GLU:OE2	1:A:53:MET:CE	0.41	2.68	15	1
1:A:45:LEU:CD2	1:A:83:GLN:CB	0.41	2.99	11	1
1:A:53:MET:HG2	1:A:54:ALA:N	0.41	2.30	10	1
1:A:52:ARG:O	1:A:52:ARG:NE	0.41	2.54	10	1
1:A:119:CYS:O	1:A:125:TRP:HB2	0.41	2.15	8	1
1:A:86:SER:CB	1:A:96:LEU:HB3	0.41	2.45	8	1
1:A:38:LEU:HD23	1:A:80:PHE:CB	0.41	2.46	9	1
1:A:52:ARG:CD	1:A:52:ARG:C	0.41	2.89	9	1
1:A:29:GLN:HG3	1:A:177:CYS:CB	0.41	2.45	7	1
1:A:89:LEU:HD13	1:A:170:VAL:CG2	0.41	2.46	7	1
1:A:21:GLN:OE1	1:A:34:SER:C	0.41	2.59	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:ARG:N	1:A:64:ARG:CD	0.41	2.82	3	1
1:A:8:SER:C	1:A:182:LEU:HD21	0.41	2.36	14	1
1:A:45:LEU:HB2	1:A:87:ASN:OD1	0.41	2.15	18	1
1:A:137:ASN:HD22	1:A:142:LEU:HD12	0.41	1.76	2	1
1:A:33:PHE:CD2	1:A:34:SER:O	0.41	2.74	2	1
1:A:180:ASP:HA	1:A:183:LEU:HD23	0.41	1.91	2	1
1:A:118:ILE:HB	1:A:168:PHE:HB2	0.41	1.93	19	1
1:A:176:ASP:CB	1:A:180:ASP:CG	0.41	2.90	13	1
1:A:114:GLU:OE2	1:A:171:LYS:CD	0.41	2.69	7	1
1:A:11:HIS:C	1:A:11:HIS:CD2	0.41	2.94	17	1
1:A:130:LYS:CG	1:A:130:LYS:O	0.41	2.68	14	1
1:A:111:PRO:O	1:A:153:LEU:HD11	0.41	2.16	14	1
1:A:156:PHE:CD2	1:A:157:LEU:HD23	0.41	2.51	4	1
1:A:30:GLY:O	1:A:31:GLU:O	0.40	2.39	20	1
1:A:94:LEU:CD1	1:A:170:VAL:HG21	0.40	2.46	19	1
1:A:108:ARG:O	1:A:108:ARG:HG3	0.40	2.17	19	1
1:A:46:ASP:O	1:A:50:ARG:HB2	0.40	2.16	13	2
1:A:60:SER:O	1:A:63:TYR:CB	0.40	2.69	16	1
1:A:64:ARG:N	1:A:64:ARG:HD3	0.40	2.30	16	1
1:A:42:ALA:HB2	1:A:84:VAL:HG11	0.40	1.90	5	2
1:A:29:GLN:CG	1:A:29:GLN:O	0.40	2.67	12	1
1:A:89:LEU:CB	1:A:94:LEU:CD1	0.40	2.98	12	1
1:A:117:PHE:CD1	1:A:118:ILE:O	0.40	2.74	3	1
1:A:8:SER:O	1:A:182:LEU:CD2	0.40	2.69	14	1
1:A:49:GLU:OE1	1:A:53:MET:CE	0.40	2.69	1	1
1:A:9:ILE:CG1	1:A:131:LEU:HD22	0.40	2.45	13	1
1:A:112:ILE:CD1	1:A:154:ALA:HB2	0.40	2.46	15	1
1:A:58:VAL:HG11	1:A:63:TYR:CE2	0.40	2.52	5	1
1:A:104:TYR:CD1	1:A:109:ILE:HD12	0.40	2.51	12	1
1:A:44:GLN:O	1:A:48:GLU:OE1	0.40	2.38	12	1
1:A:147:LEU:HD12	1:A:148:ILE:N	0.40	2.31	17	1
1:A:107:LEU:O	1:A:108:ARG:HG3	0.40	2.16	16	1
1:A:119:CYS:SG	1:A:128:VAL:HG21	0.40	2.56	15	1
1:A:66:PHE:CD1	1:A:67:LEU:CD2	0.40	3.04	15	1
1:A:96:LEU:CD2	1:A:168:PHE:HB3	0.40	2.46	11	1
1:A:59:THR:OG1	1:A:59:THR:O	0.40	2.36	5	2
1:A:130:LYS:O	1:A:130:LYS:HG3	0.40	2.17	14	1
1:A:5:SER:O	1:A:182:LEU:HD23	0.40	2.17	14	1
1:A:21:GLN:OE1	1:A:34:SER:O	0.40	2.38	4	1
1:A:142:LEU:CB	1:A:146:GLU:HB2	0.40	2.47	4	1
1:A:21:GLN:OE1	1:A:34:SER:CA	0.40	2.69	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:120:ASN:CG	1:A:125:TRP:HB3	0.40	2.37	15	1
1:A:100:ASN:OD1	1:A:167:ILE:HG13	0.40	2.17	11	1
1:A:117:PHE:CD2	1:A:157:LEU:CD2	0.40	3.05	12	1
1:A:21:GLN:OE1	1:A:33:PHE:O	0.40	2.38	3	1
1:A:156:PHE:CD1	1:A:156:PHE:O	0.40	2.75	18	1
1:A:110:ASP:O	1:A:113:ASN:HB2	0.40	2.17	2	1
1:A:29:GLN:CB	1:A:176:ASP:O	0.40	2.69	13	1
1:A:99:PHE:CG	1:A:117:PHE:CE2	0.40	3.09	10	1
1:A:161:GLN:HG3	1:A:167:ILE:CD1	0.40	2.46	7	1
1:A:114:GLU:CD	1:A:169:VAL:CG1	0.40	2.87	17	1

6.3 Torsion angles

6.3.1 Protein backbone

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	174/190 (92%)	140±3 (80±2%)	20±3 (11±2%)	15±2 (8±1%)	2	14
All	All	3480/3800 (92%)	2791 (80%)	397 (11%)	292 (8%)	2	14

All 36 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	122	LYS	20
1	A	108	ARG	20
1	A	165	TYR	20
1	A	10	PHE	20
1	A	139	ASN	19
1	A	140	SER	18
1	A	166	SER	17
1	A	67	LEU	14
1	A	31	GLU	13
1	A	101	SER	11
1	A	100	ASN	10
1	A	124	HIS	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	74	MET	9
1	A	58	VAL	9
1	A	59	THR	8
1	A	184	GLN	8
1	A	73	ASN	8
1	A	18	LEU	7
1	A	132	GLY	6
1	A	29	GLN	6
1	A	78	GLY	6
1	A	71	SER	4
1	A	123	GLU	4
1	A	164	GLY	3
1	A	115	ARG	3
1	A	176	ASP	3
1	A	113	ASN	3
1	A	114	GLU	3
1	A	30	GLY	2
1	A	77	SER	2
1	A	177	CYS	2
1	A	175	PRO	1
1	A	32	TYR	1
1	A	76	ASP	1
1	A	8	SER	1
1	A	56	GLY	1

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	157/170 (92%)	90±4 (57±3%)	67±4 (43±3%)	0 3
All	All	3140/3400 (92%)	1805 (57%)	1335 (43%)	0 3

All 128 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	155	LEU	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	45	LEU	20
1	A	143	THR	20
1	A	149	SER	20
1	A	165	TYR	20
1	A	112	ILE	20
1	A	127	THR	20
1	A	98	LEU	20
1	A	79	PHE	20
1	A	66	PHE	20
1	A	142	LEU	20
1	A	156	PHE	20
1	A	166	SER	20
1	A	63	TYR	20
1	A	117	PHE	20
1	A	82	ILE	20
1	A	152	TYR	20
1	A	160	LEU	20
1	A	34	SER	19
1	A	159	GLN	19
1	A	122	LYS	18
1	A	40	SER	18
1	A	41	ILE	18
1	A	109	ILE	18
1	A	33	PHE	18
1	A	138	LEU	18
1	A	137	ASN	18
1	A	115	ARG	18
1	A	121	TYR	18
1	A	171	LYS	17
1	A	183	LEU	17
1	A	90	LYS	17
1	A	141	LEU	17
1	A	163	GLU	17
1	A	8	SER	17
1	A	94	LEU	16
1	A	107	LEU	16
1	A	110	ASP	16
1	A	120	ASN	16
1	A	39	SER	16
1	A	168	PHE	15
1	A	65	THR	15
1	A	133	LYS	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	126	PHE	14
1	A	89	LEU	14
1	A	46	ASP	13
1	A	31	GLU	13
1	A	29	GLN	12
1	A	52	ARG	12
1	A	87	ASN	12
1	A	116	SER	12
1	A	147	LEU	12
1	A	150	ASP	12
1	A	81	SER	12
1	A	157	LEU	11
1	A	130	LYS	11
1	A	62	ASP	11
1	A	119	CYS	11
1	A	10	PHE	11
1	A	176	ASP	11
1	A	21	GLN	11
1	A	28	LEU	11
1	A	96	LEU	11
1	A	123	GLU	10
1	A	129	ARG	10
1	A	131	LEU	10
1	A	55	GLU	10
1	A	174	LEU	9
1	A	135	TRP	9
1	A	169	VAL	9
1	A	153	LEU	9
1	A	48	GLU	9
1	A	64	ARG	8
1	A	60	SER	8
1	A	5	SER	8
1	A	27	LEU	8
1	A	32	TYR	7
1	A	181	GLN	7
1	A	23	CYS	7
1	A	146	GLU	7
1	A	100	ASN	6
1	A	71	SER	6
1	A	184	GLN	6
1	A	106	ARG	6
1	A	105	GLN	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	83	GLN	6
1	A	47	GLU	6
1	A	140	SER	6
1	A	101	SER	6
1	A	6	MET	6
1	A	18	LEU	6
1	A	22	HIS	5
1	A	44	GLN	5
1	A	11	HIS	5
1	A	49	GLU	5
1	A	77	SER	5
1	A	113	ASN	5
1	A	26	ASN	5
1	A	86	SER	4
1	A	75	ASP	4
1	A	177	CYS	4
1	A	134	GLN	4
1	A	85	ILE	4
1	A	59	THR	4
1	A	69	GLN	3
1	A	124	HIS	3
1	A	180	ASP	3
1	A	76	ASP	3
1	A	61	GLU	2
1	A	173	ASP	2
1	A	25	ASN	2
1	A	170	VAL	2
1	A	74	MET	2
1	A	108	ARG	2
1	A	178	GLU	2
1	A	84	VAL	2
1	A	114	GLU	2
1	A	167	ILE	1
1	A	97	ILE	1
1	A	7	GLU	1
1	A	104	TYR	1
1	A	67	LEU	1
1	A	139	ASN	1
1	A	9	ILE	1
1	A	53	MET	1
1	A	118	ILE	1
1	A	91	VAL	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	73	ASN	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 carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 85% for the well-defined parts and 84% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: BMRB entry 6742

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_1*

7.1.1 Bookkeeping

The following table shows the results of parsing the chemical shift list and reports the number of nuclei with statistically unusual chemical shifts.

Total number of shifts	2232
Number of shifts mapped to atoms	2232
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	10

7.1.2 Chemical shift referencing

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction \pm precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	185	-0.47 ± 0.17	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	158	-0.08 ± 0.08	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	180	-0.01 ± 0.13	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	175	-0.12 ± 0.28	None needed (< 0.5 ppm)

7.1.3 Completeness of resonance assignments

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 85%, i.e. 1852 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2191. 29 out of 31 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	824/858 (96%)	328/342 (96%)	335/348 (96%)	161/168 (96%)
Sidechain	906/1122 (81%)	571/659 (87%)	315/415 (76%)	20/48 (42%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Aromatic	122/211 (58%)	85/113 (75%)	34/91 (37%)	3/7 (43%)
Overall	1852/2191 (85%)	984/1114 (88%)	684/854 (80%)	184/223 (83%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 84%, i.e. 2003 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2388. 30 out of 33 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	895/936 (96%)	355/373 (95%)	365/380 (96%)	175/183 (96%)
Sidechain	986/1241 (79%)	623/730 (85%)	342/456 (75%)	21/55 (38%)
Aromatic	122/211 (58%)	85/113 (75%)	34/91 (37%)	3/7 (43%)
Overall	2003/2388 (84%)	1063/1216 (87%)	741/927 (80%)	199/245 (81%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts ⓘ

The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

Mol	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	115	ARG	NE	119.72	92.63 – 76.73	22.0
1	A	52	ARG	NE	118.64	92.63 – 76.73	21.4
1	A	50	ARG	NE	118.33	92.63 – 76.73	21.2
1	A	130	LYS	HB3	-0.58	3.10 – 0.40	-8.6
1	A	130	LYS	HG2	-0.12	2.67 – 0.07	-5.7
1	A	153	LEU	HD13	-0.69	2.16 – -0.64	-5.2
1	A	153	LEU	HD12	-0.69	2.16 – -0.64	-5.2
1	A	153	LEU	HD11	-0.69	2.16 – -0.64	-5.2
1	A	120	ASN	HB3	1.06	4.41 – 1.11	-5.2
1	A	120	ASN	HD22	4.62	9.59 – 4.69	-5.1

7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots ⓘ

The image below reports *random coil index* values for the protein chains in the structure. The height of each bar gives a probability of a given residue to be disordered, as predicted from the available chemical shifts and the amino acid sequence. A value above 0.2 is an indication of significant predicted disorder. The colour of the bar shows whether the residue is in the well-defined core (black) or in the ill-defined residue ranges (cyan), as described in section 2 on ensemble composition.

Random coil index (RCI) for chain A:

