



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 01:54 PM BST

PDB ID : 1BVH  
Title : SOLUTION STRUCTURE OF A LOW MOLECULAR WEIGHT PROTEIN  
TYROSINE PHOSPHATASE  
Authors : Logan, T.M.; Zhou, M.-M.; Nettlesheim, D.G.; Meadows, R.P.; Van Etten,  
R.L.; Fesik, S.W.  
Deposited on : 1994-05-03

This is a Full wwPDB NMR Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.  
We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto: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

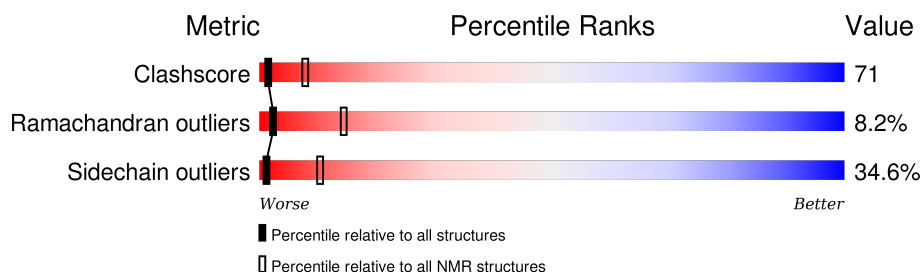
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

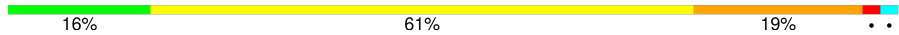
The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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	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  $\geq 3$ , 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	157	

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 15 models. Model 12 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:4-A:157 (154)	0.79	12

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

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

The models can be grouped into 3 clusters and 1 single-model cluster was found.

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

### 3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2493 atoms, of which 1237 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called ACID PHOSPHATASE.

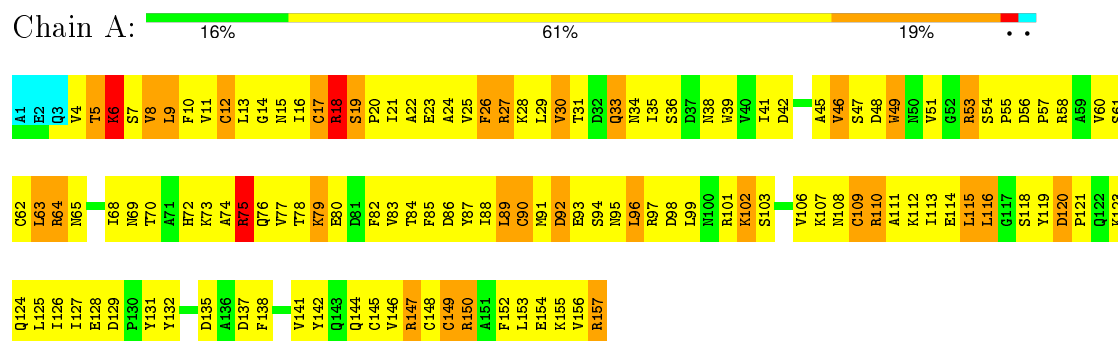
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	157	Total	C	H	N	O	S	0
			2493	780	1237	227	240	9	

## 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: ACID PHOSPHATASE

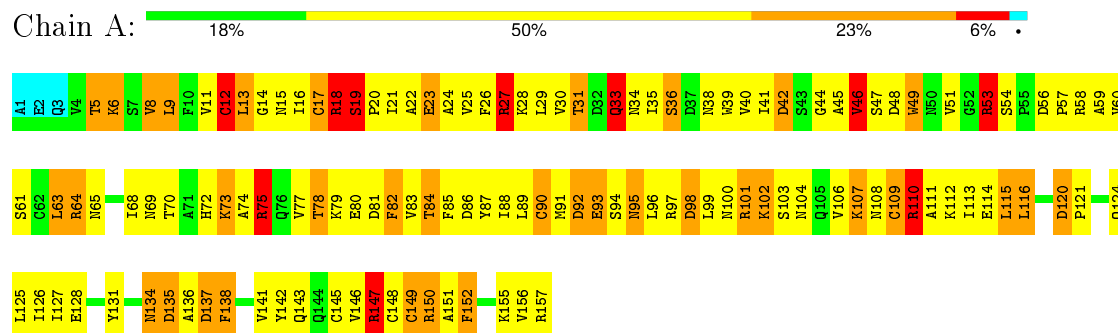


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

#### 4.2.1 Score per residue for model 1

#### • Molecule 1: ACID PHOSPHATASE



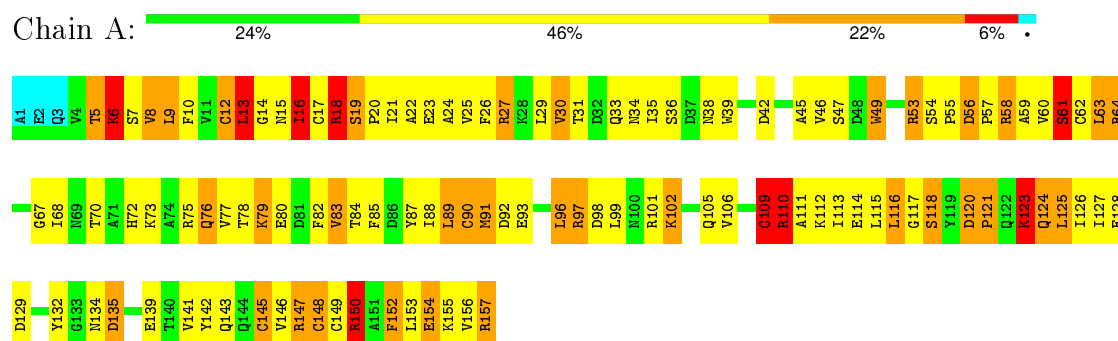
### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: ACID PHOSPHATASE



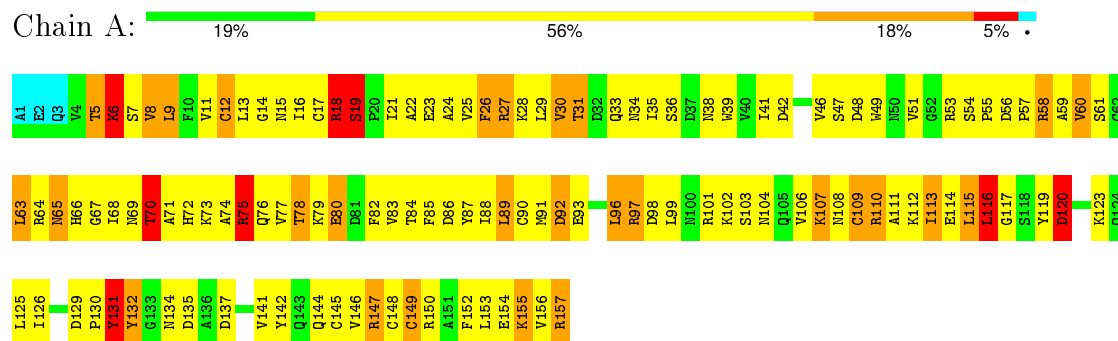
### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: ACID PHOSPHATASE



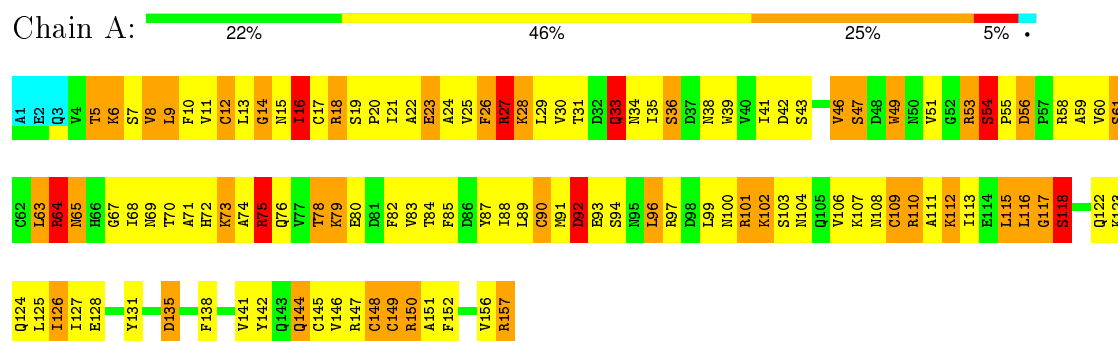
### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: ACID PHOSPHATASE



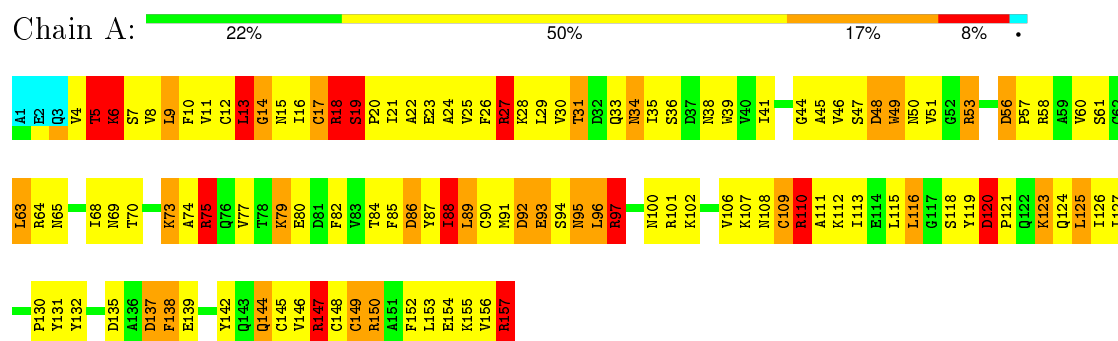
### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: ACID PHOSPHATASE



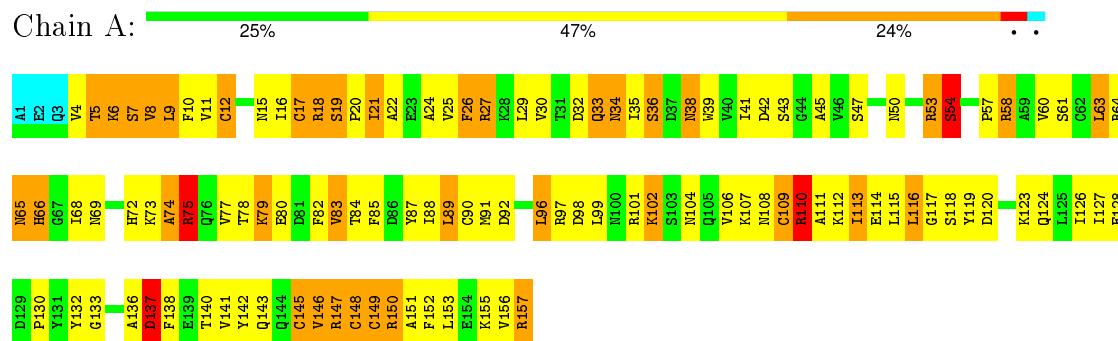
### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: ACID PHOSPHATASE



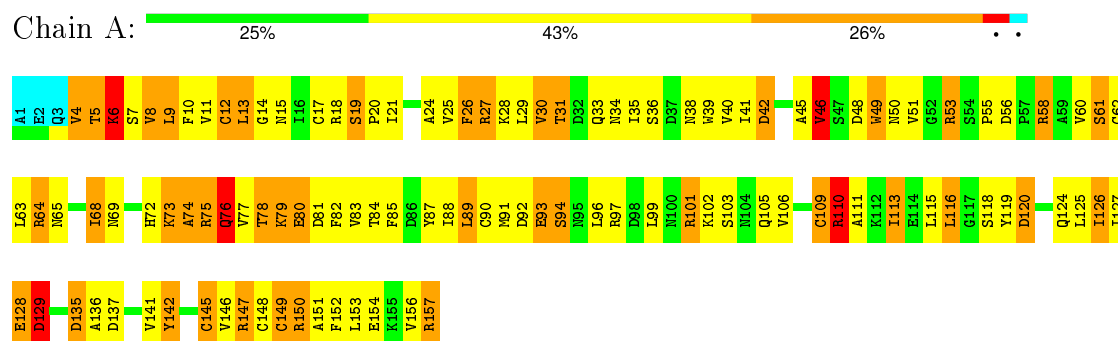
### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: ACID PHOSPHATASE



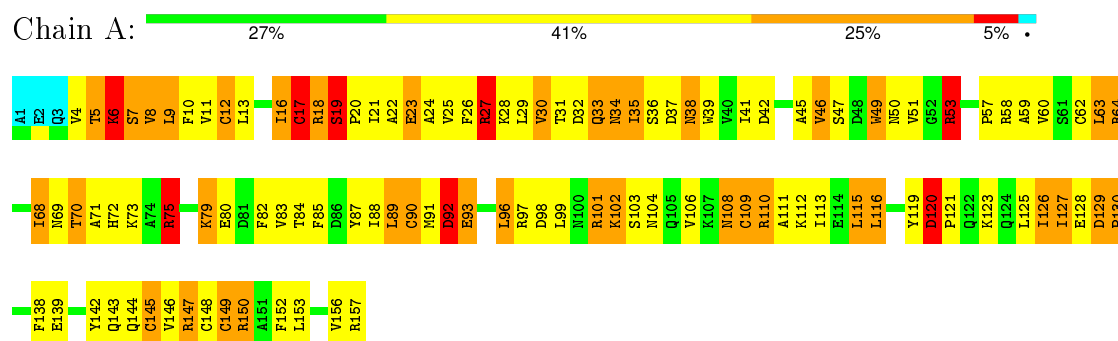
### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: ACID PHOSPHATASE



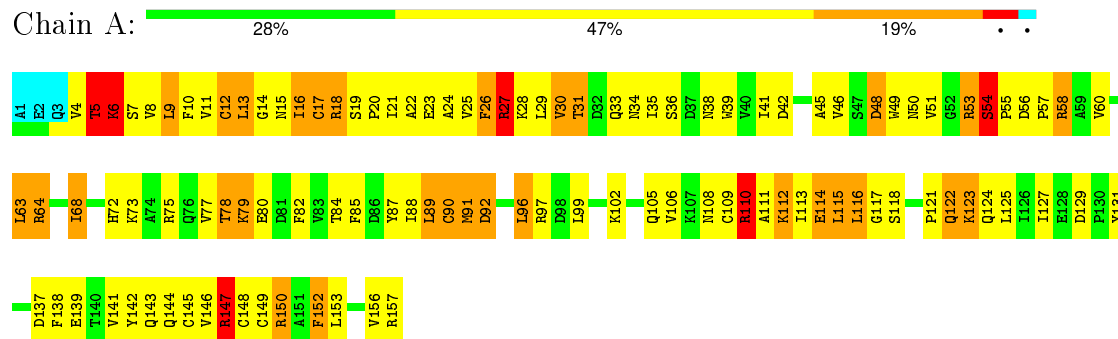
### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: ACID PHOSPHATASE



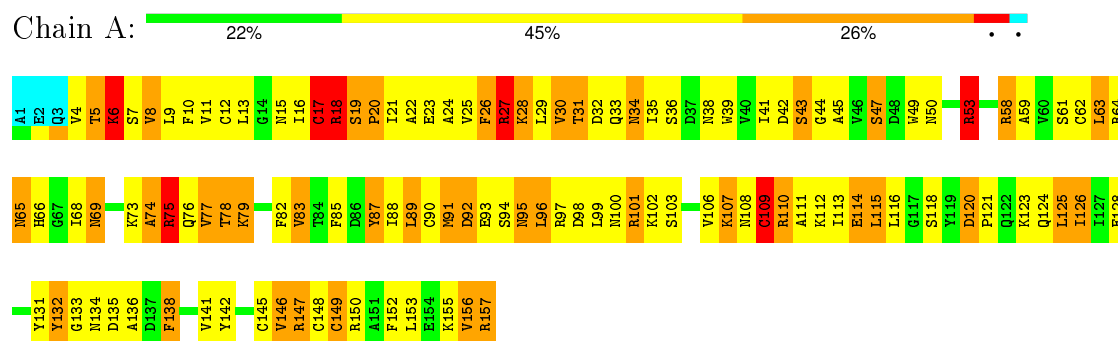
### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: ACID PHOSPHATASE



### 4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: ACID PHOSPHATASE



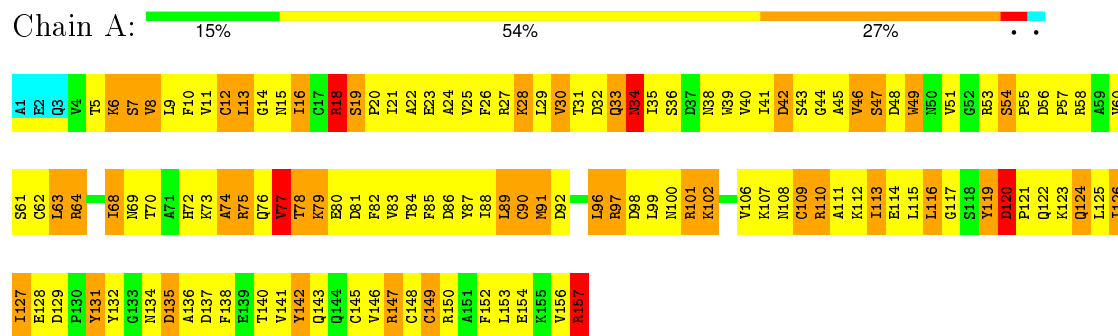
### 4.2.12 Score per residue for model 12 (medoid)

- Molecule 1: ACID PHOSPHATASE



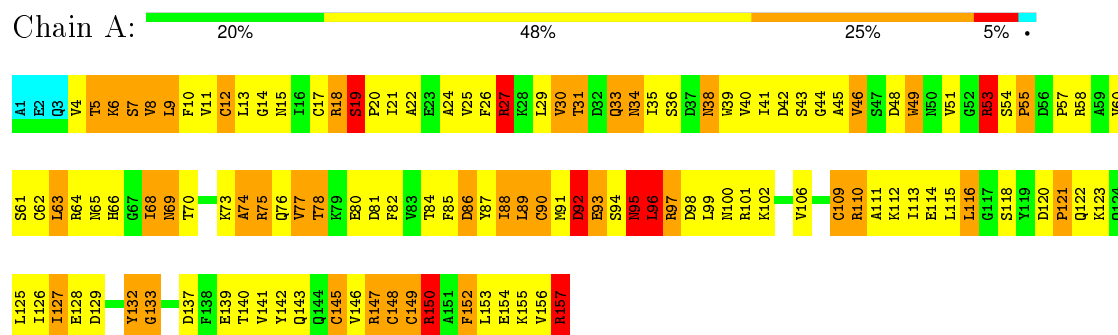
### 4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: ACID PHOSPHATASE



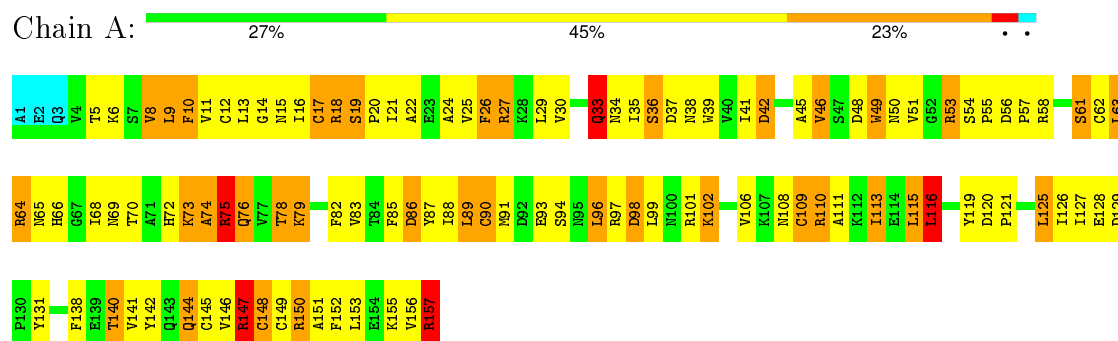
### 4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: ACID PHOSPHATASE



#### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: ACID PHOSPHATASE



## 5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

Of the ? calculated structures, 15 were deposited, based on the following criterion: ?.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	

No chemical shift data was provided. No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.

## 6 Model quality [i](#)

### 6.1 Standard geometry [i](#)

There are no covalent bond-length or bond-angle outliers.

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	11.3±0.6
All	All	0	170

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	75	ARG	Sidechain	15
1	A	58	ARG	Sidechain	15
1	A	27	ARG	Sidechain	15
1	A	18	ARG	Sidechain	14
1	A	53	ARG	Sidechain	14
1	A	97	ARG	Sidechain	14
1	A	157	ARG	Sidechain	14
1	A	110	ARG	Sidechain	14
1	A	147	ARG	Sidechain	14
1	A	150	ARG	Sidechain	14
1	A	64	ARG	Sidechain	14
1	A	101	ARG	Sidechain	13

### 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	1233	1216	1216	174±14
All	All	18495	18240	18240	2611

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 71.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:ALA:HB1	1:A:148:CYS:SG	1.14	1.81	14	4
1:A:22:ALA:HB2	1:A:145:CYS:SG	1.10	1.87	12	6
1:A:152:PHE:CZ	1:A:156:VAL:HG21	1.03	1.88	13	13
1:A:116:LEU:HD21	1:A:148:CYS:SG	1.01	1.96	9	3
1:A:96:LEU:HD21	1:A:113:ILE:CG2	0.96	1.90	14	8
1:A:59:ALA:O	1:A:63:LEU:HD12	0.93	1.62	5	1
1:A:11:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD11	0.93	1.38	8	7
1:A:82:PHE:O	1:A:111:ALA:HB2	0.92	1.64	11	13
1:A:106:VAL:HG11	1:A:109:CYS:SG	0.91	2.05	12	2
1:A:21:ILE:O	1:A:25:VAL:HG23	0.91	1.64	7	14
1:A:115:LEU:HD12	1:A:126:ILE:HD11	0.91	1.43	15	1
1:A:25:VAL:HG12	1:A:149:CYS:SG	0.91	2.06	1	5
1:A:9:LEU:HD13	1:A:85:PHE:CD1	0.90	2.01	11	3
1:A:92:ASP:OD2	1:A:126:ILE:HD12	0.90	1.67	11	1
1:A:152:PHE:O	1:A:156:VAL:HG22	0.89	1.67	14	13
1:A:21:ILE:HG21	1:A:142:TYR:HA	0.89	1.44	8	9
1:A:8:VAL:HG12	1:A:39:TRP:CZ3	0.89	2.02	2	15
1:A:5:THR:HG22	1:A:38:ASN:HA	0.88	1.43	13	15
1:A:102:LYS:O	1:A:106:VAL:HG23	0.87	1.70	7	13
1:A:25:VAL:HG11	1:A:146:VAL:HA	0.87	1.46	8	15
1:A:8:VAL:HG11	1:A:26:PHE:CE2	0.87	2.05	6	11
1:A:96:LEU:HD13	1:A:100:ASN:OD1	0.86	1.71	1	1
1:A:31:THR:HG23	1:A:36:SER:CB	0.86	2.01	6	1
1:A:63:LEU:CD2	1:A:68:ILE:HG21	0.86	2.00	5	1
1:A:138:PHE:O	1:A:141:VAL:HG12	0.86	1.70	10	3
1:A:25:VAL:HG12	1:A:29:LEU:CD1	0.86	2.01	8	7
1:A:116:LEU:HD22	1:A:148:CYS:SG	0.86	2.10	3	4
1:A:88:ILE:CG1	1:A:111:ALA:HB1	0.85	2.02	11	15
1:A:8:VAL:O	1:A:41:ILE:HG23	0.85	1.71	14	1
1:A:96:LEU:HD21	1:A:113:ILE:HG21	0.85	1.46	6	4
1:A:106:VAL:CB	1:A:109:CYS:SG	0.84	2.66	12	2
1:A:126:ILE:HG21	1:A:128:GLU:OE2	0.84	1.73	7	1
1:A:26:PHE:CE1	1:A:30:VAL:HG12	0.84	2.07	13	4
1:A:22:ALA:CA	1:A:148:CYS:SG	0.83	2.66	15	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:116:LEU:O	1:A:126:ILE:HD11	0.83	1.74	3	1
1:A:89:LEU:HD11	1:A:152:PHE:CE2	0.82	2.09	14	5
1:A:91:MET:CE	1:A:148:CYS:SG	0.82	2.67	10	3
1:A:25:VAL:CG1	1:A:149:CYS:SG	0.82	2.67	1	4
1:A:25:VAL:HG12	1:A:29:LEU:HD11	0.82	1.52	9	5
1:A:106:VAL:CG1	1:A:109:CYS:SG	0.81	2.67	12	2
1:A:25:VAL:HA	1:A:68:ILE:HD11	0.81	1.52	13	4
1:A:96:LEU:HD22	1:A:100:ASN:HB2	0.81	1.50	2	5
1:A:30:VAL:HG23	1:A:35:ILE:CG1	0.81	2.05	4	8
1:A:24:ALA:HB1	1:A:68:ILE:HG12	0.81	1.52	15	4
1:A:10:PHE:CE1	1:A:89:LEU:HD13	0.81	2.11	7	3
1:A:29:LEU:HD21	1:A:150:ARG:HB2	0.81	1.50	6	2
1:A:22:ALA:N	1:A:145:CYS:SG	0.81	2.54	11	8
1:A:88:ILE:HG13	1:A:111:ALA:HB1	0.80	1.54	12	15
1:A:96:LEU:HD11	1:A:114:GLU:O	0.80	1.76	4	1
1:A:116:LEU:CD2	1:A:148:CYS:SG	0.80	2.70	9	5
1:A:19:SER:O	1:A:21:ILE:HD12	0.80	1.74	11	1
1:A:30:VAL:HG22	1:A:36:SER:HA	0.80	1.53	5	6
1:A:116:LEU:HD13	1:A:148:CYS:SG	0.79	2.17	11	2
1:A:16:ILE:HD12	1:A:17:CYS:N	0.79	1.91	15	5
1:A:116:LEU:HD11	1:A:148:CYS:O	0.79	1.78	13	4
1:A:22:ALA:CB	1:A:148:CYS:SG	0.79	2.71	15	4
1:A:96:LEU:HD21	1:A:113:ILE:HG22	0.78	1.53	15	5
1:A:116:LEU:HD11	1:A:148:CYS:HA	0.78	1.55	9	8
1:A:57:PRO:O	1:A:60:VAL:HG12	0.78	1.77	9	6
1:A:92:ASP:OD1	1:A:116:LEU:HD23	0.78	1.77	4	1
1:A:17:CYS:SG	1:A:138:PHE:CZ	0.78	2.76	1	1
1:A:17:CYS:SG	1:A:138:PHE:CE1	0.78	2.77	1	1
1:A:31:THR:HG23	1:A:36:SER:OG	0.77	1.79	6	1
1:A:51:VAL:HG13	1:A:75:ARG:HA	0.77	1.54	8	4
1:A:63:LEU:HD22	1:A:68:ILE:HG21	0.77	1.54	5	1
1:A:15:ASN:O	1:A:16:ILE:HG23	0.77	1.78	5	4
1:A:29:LEU:HD11	1:A:150:ARG:HG3	0.77	1.53	15	2
1:A:18:ARG:O	1:A:145:CYS:SG	0.77	2.43	8	1
1:A:29:LEU:HD21	1:A:150:ARG:HA	0.77	1.57	15	1
1:A:10:PHE:CZ	1:A:148:CYS:SG	0.76	2.77	9	1
1:A:30:VAL:HA	1:A:35:ILE:HD11	0.76	1.56	9	1
1:A:141:VAL:O	1:A:145:CYS:SG	0.76	2.44	5	2
1:A:111:ALA:O	1:A:113:ILE:HD13	0.76	1.80	14	12
1:A:11:VAL:O	1:A:12:CYS:SG	0.76	2.44	6	1
1:A:79:LYS:HG2	1:A:106:VAL:HG13	0.76	1.56	9	8

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:ALA:HB1	1:A:68:ILE:CG2	0.76	2.11	14	8
1:A:144:GLN:O	1:A:148:CYS:SG	0.76	2.43	4	2
1:A:57:PRO:HA	1:A:60:VAL:HG23	0.75	1.59	4	1
1:A:79:LYS:HB2	1:A:106:VAL:HG22	0.75	1.55	6	1
1:A:152:PHE:CE1	1:A:156:VAL:HG21	0.75	2.16	14	6
1:A:58:ARG:O	1:A:62:CYS:SG	0.75	2.45	8	1
1:A:26:PHE:CE1	1:A:41:ILE:HD11	0.74	2.17	9	3
1:A:96:LEU:O	1:A:96:LEU:HD23	0.74	1.82	8	3
1:A:63:LEU:N	1:A:63:LEU:HD23	0.74	1.98	15	3
1:A:63:LEU:HD23	1:A:63:LEU:N	0.74	1.98	12	5
1:A:19:SER:OG	1:A:141:VAL:HG21	0.74	1.82	10	1
1:A:79:LYS:CB	1:A:106:VAL:HG22	0.74	2.12	6	1
1:A:29:LEU:HD22	1:A:149:CYS:SG	0.74	2.22	14	2
1:A:30:VAL:HG23	1:A:35:ILE:HG12	0.74	1.59	2	13
1:A:90:CYS:SG	1:A:91:MET:N	0.74	2.60	12	3
1:A:29:LEU:HD21	1:A:150:ARG:CA	0.73	2.13	15	4
1:A:96:LEU:HD23	1:A:99:LEU:HB2	0.73	1.61	4	4
1:A:106:VAL:HB	1:A:109:CYS:SG	0.73	2.23	12	2
1:A:29:LEU:HD21	1:A:150:ARG:HG3	0.73	1.58	7	1
1:A:24:ALA:HB1	1:A:68:ILE:HG21	0.73	1.59	5	3
1:A:82:PHE:HA	1:A:111:ALA:HB2	0.73	1.60	6	5
1:A:116:LEU:HD21	1:A:148:CYS:HA	0.73	1.60	15	3
1:A:82:PHE:CA	1:A:111:ALA:HB2	0.73	2.13	6	1
1:A:45:ALA:HB1	1:A:50:ASN:ND2	0.73	1.99	6	1
1:A:92:ASP:CG	1:A:126:ILE:HG21	0.73	2.03	3	1
1:A:88:ILE:CD1	1:A:111:ALA:HB1	0.72	2.14	12	14
1:A:21:ILE:N	1:A:21:ILE:HD13	0.72	1.97	7	3
1:A:11:VAL:HG13	1:A:44:GLY:O	0.72	1.85	11	2
1:A:9:LEU:HD13	1:A:85:PHE:CE2	0.72	2.19	1	2
1:A:16:ILE:HG22	1:A:54:SER:O	0.72	1.84	5	1
1:A:127:ILE:O	1:A:127:ILE:HG22	0.72	1.85	7	1
1:A:89:LEU:HD21	1:A:152:PHE:CE2	0.72	2.20	3	1
1:A:12:CYS:SG	1:A:15:ASN:HA	0.72	2.25	15	1
1:A:29:LEU:HD21	1:A:150:ARG:CB	0.71	2.15	11	4
1:A:26:PHE:O	1:A:30:VAL:HG13	0.71	1.85	13	2
1:A:126:ILE:O	1:A:126:ILE:HG23	0.71	1.82	2	1
1:A:11:VAL:C	1:A:12:CYS:SG	0.71	2.69	6	1
1:A:22:ALA:CB	1:A:145:CYS:SG	0.70	2.74	12	2
1:A:116:LEU:CD1	1:A:148:CYS:SG	0.70	2.79	11	2
1:A:91:MET:HE1	1:A:148:CYS:SG	0.70	2.26	10	2
1:A:92:ASP:CG	1:A:126:ILE:HG23	0.70	2.07	11	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:LEU:HD21	1:A:150:ARG:CG	0.70	2.17	7	1
1:A:25:VAL:HG21	1:A:145:CYS:SG	0.70	2.26	3	3
1:A:22:ALA:HA	1:A:145:CYS:SG	0.70	2.25	3	1
1:A:24:ALA:HB1	1:A:68:ILE:HG22	0.70	1.64	14	1
1:A:9:LEU:HD13	1:A:85:PHE:CD2	0.70	2.22	1	4
1:A:45:ALA:HB2	1:A:50:ASN:OD1	0.69	1.87	10	1
1:A:70:THR:O	1:A:70:THR:HG23	0.69	1.86	3	2
1:A:21:ILE:HG21	1:A:142:TYR:CA	0.69	2.15	13	9
1:A:17:CYS:O	1:A:17:CYS:SG	0.69	2.50	2	2
1:A:12:CYS:SG	1:A:19:SER:HB2	0.69	2.27	2	3
1:A:21:ILE:HG22	1:A:142:TYR:CD1	0.69	2.23	7	1
1:A:45:ALA:O	1:A:46:VAL:HG12	0.69	1.88	8	2
1:A:82:PHE:CD2	1:A:106:VAL:HG21	0.69	2.22	5	4
1:A:95:ASN:HB2	1:A:115:LEU:HD22	0.69	1.64	6	1
1:A:29:LEU:HD22	1:A:150:ARG:HG3	0.68	1.64	1	4
1:A:116:LEU:HG	1:A:148:CYS:SG	0.68	2.28	2	1
1:A:88:ILE:HD12	1:A:111:ALA:CB	0.68	2.18	5	15
1:A:26:PHE:CD1	1:A:30:VAL:HG12	0.68	2.23	6	8
1:A:26:PHE:N	1:A:149:CYS:SG	0.68	2.66	1	5
1:A:59:ALA:O	1:A:63:LEU:HD22	0.68	1.88	2	2
1:A:22:ALA:HA	1:A:148:CYS:SG	0.68	2.27	15	1
1:A:8:VAL:HG12	1:A:39:TRP:CE3	0.68	2.24	11	14
1:A:82:PHE:HB3	1:A:109:CYS:SG	0.68	2.27	12	2
1:A:8:VAL:HG11	1:A:26:PHE:HE2	0.68	1.49	10	3
1:A:103:SER:HB2	1:A:109:CYS:SG	0.68	2.28	4	5
1:A:62:CYS:SG	1:A:139:GLU:OE2	0.68	2.51	3	1
1:A:21:ILE:HG22	1:A:145:CYS:SG	0.67	2.29	14	3
1:A:16:ILE:HD12	1:A:17:CYS:H	0.67	1.47	7	2
1:A:142:TYR:O	1:A:146:VAL:HG23	0.67	1.89	10	1
1:A:51:VAL:HG13	1:A:75:ARG:HD3	0.67	1.65	6	1
1:A:12:CYS:SG	1:A:91:MET:HG2	0.67	2.30	6	1
1:A:152:PHE:CE2	1:A:156:VAL:HG21	0.67	2.24	12	3
1:A:25:VAL:CG1	1:A:29:LEU:HD11	0.66	2.20	8	3
1:A:145:CYS:HA	1:A:148:CYS:SG	0.66	2.29	13	4
1:A:6:LYS:CB	1:A:39:TRP:CH2	0.66	2.78	13	3
1:A:16:ILE:HD12	1:A:16:ILE:C	0.66	2.11	4	1
1:A:12:CYS:SG	1:A:14:GLY:O	0.66	2.54	4	2
1:A:12:CYS:SG	1:A:15:ASN:CA	0.66	2.83	15	1
1:A:91:MET:N	1:A:91:MET:SD	0.66	2.68	12	3
1:A:21:ILE:HB	1:A:145:CYS:SG	0.65	2.30	13	6
1:A:6:LYS:CB	1:A:39:TRP:CZ3	0.65	2.78	15	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:SER:N	1:A:20:PRO:CD	0.65	2.59	7	12
1:A:35:ILE:CD1	1:A:153:LEU:HD21	0.65	2.22	6	6
1:A:25:VAL:HG12	1:A:29:LEU:HD12	0.65	1.68	4	5
1:A:125:LEU:O	1:A:125:LEU:HD23	0.65	1.91	8	1
1:A:99:LEU:HB3	1:A:113:ILE:HG21	0.65	1.69	4	3
1:A:109:CYS:SG	1:A:110:ARG:N	0.65	2.69	11	6
1:A:6:LYS:CG	1:A:87:TYR:CE1	0.65	2.80	14	1
1:A:79:LYS:CG	1:A:106:VAL:HG13	0.65	2.22	9	5
1:A:57:PRO:CA	1:A:60:VAL:HG23	0.65	2.22	4	1
1:A:115:LEU:HD12	1:A:126:ILE:CD1	0.65	2.18	15	1
1:A:30:VAL:CA	1:A:35:ILE:HD11	0.64	2.23	9	1
1:A:35:ILE:HD12	1:A:153:LEU:HD21	0.64	1.68	11	1
1:A:25:VAL:HG22	1:A:68:ILE:HD11	0.64	1.70	1	1
1:A:46:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HG	0.64	1.70	12	1
1:A:6:LYS:CG	1:A:87:TYR:CZ	0.64	2.81	14	1
1:A:26:PHE:CE1	1:A:30:VAL:CG1	0.64	2.81	6	5
1:A:35:ILE:HD13	1:A:153:LEU:HD21	0.64	1.69	14	3
1:A:30:VAL:HG23	1:A:36:SER:N	0.63	2.08	9	9
1:A:12:CYS:SG	1:A:15:ASN:N	0.63	2.71	15	4
1:A:21:ILE:CG2	1:A:142:TYR:CD2	0.63	2.82	3	4
1:A:29:LEU:CD1	1:A:149:CYS:SG	0.63	2.87	3	6
1:A:63:LEU:HD22	1:A:68:ILE:CG2	0.63	2.24	5	1
1:A:9:LEU:CD1	1:A:85:PHE:CD1	0.63	2.81	11	3
1:A:30:VAL:HG23	1:A:35:ILE:C	0.63	2.14	11	4
1:A:8:VAL:HG21	1:A:26:PHE:HE2	0.63	1.54	15	1
1:A:49:TRP:CD1	1:A:49:TRP:N	0.63	2.66	13	7
1:A:35:ILE:H	1:A:35:ILE:HD13	0.63	1.53	9	1
1:A:35:ILE:N	1:A:35:ILE:HD13	0.63	2.08	9	1
1:A:9:LEU:HD22	1:A:88:ILE:HG12	0.63	1.71	3	9
1:A:127:ILE:HG22	1:A:128:GLU:N	0.63	2.09	14	1
1:A:18:ARG:HA	1:A:141:VAL:HG11	0.63	1.69	3	2
1:A:22:ALA:O	1:A:149:CYS:SG	0.62	2.52	9	5
1:A:90:CYS:SG	1:A:96:LEU:HG	0.62	2.33	15	4
1:A:9:LEU:CD1	1:A:85:PHE:CE1	0.62	2.82	11	3
1:A:8:VAL:HG11	1:A:26:PHE:CZ	0.62	2.29	14	4
1:A:26:PHE:CE1	1:A:41:ILE:CD1	0.62	2.81	9	4
1:A:95:ASN:CB	1:A:115:LEU:HD22	0.62	2.23	6	1
1:A:96:LEU:HD22	1:A:100:ASN:CB	0.62	2.24	2	2
1:A:106:VAL:HG21	1:A:109:CYS:SG	0.62	2.35	1	2
1:A:21:ILE:HD13	1:A:21:ILE:N	0.62	2.10	9	3
1:A:96:LEU:HD11	1:A:113:ILE:HB	0.62	1.69	2	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:73:LYS:O	1:A:74:ALA:HB3	0.62	1.95	14	2
1:A:103:SER:OG	1:A:109:CYS:SG	0.61	2.45	9	1
1:A:6:LYS:HB3	1:A:39:TRP:CZ3	0.61	2.30	15	15
1:A:46:VAL:O	1:A:46:VAL:HG12	0.61	1.95	5	1
1:A:82:PHE:CG	1:A:106:VAL:HG21	0.61	2.30	15	7
1:A:40:VAL:HG12	1:A:85:PHE:CE1	0.61	2.30	8	2
1:A:59:ALA:O	1:A:63:LEU:HD23	0.61	1.94	9	1
1:A:147:ARG:HB3	1:A:151:ALA:HB2	0.61	1.72	15	3
1:A:113:ILE:HD13	1:A:113:ILE:N	0.60	2.11	7	4
1:A:7:SER:O	1:A:87:TYR:CD2	0.60	2.54	11	11
1:A:30:VAL:CG2	1:A:36:SER:CA	0.60	2.79	9	9
1:A:135:ASP:O	1:A:136:ALA:HB3	0.60	1.96	11	4
1:A:94:SER:O	1:A:96:LEU:N	0.60	2.34	14	5
1:A:11:VAL:HB	1:A:90:CYS:SG	0.60	2.36	5	2
1:A:127:ILE:HG23	1:A:127:ILE:O	0.60	1.96	5	4
1:A:45:ALA:HB1	1:A:50:ASN:HD21	0.60	1.55	6	1
1:A:63:LEU:HD23	1:A:64:ARG:N	0.60	2.11	1	2
1:A:11:VAL:CG1	1:A:46:VAL:HG23	0.60	2.26	5	5
1:A:93:GLU:HB2	1:A:115:LEU:HD11	0.60	1.73	8	1
1:A:89:LEU:HD23	1:A:114:GLU:HB3	0.60	1.73	10	1
1:A:22:ALA:HB1	1:A:148:CYS:HB3	0.60	1.74	5	2
1:A:9:LEU:CD1	1:A:85:PHE:CE2	0.60	2.83	1	2
1:A:91:MET:HE2	1:A:91:MET:HA	0.60	1.73	15	1
1:A:30:VAL:CG2	1:A:36:SER:HA	0.60	2.27	13	9
1:A:9:LEU:HD22	1:A:88:ILE:CD1	0.60	2.27	6	8
1:A:138:PHE:CD1	1:A:141:VAL:HG11	0.60	2.31	7	1
1:A:120:ASP:CB	1:A:121:PRO:CD	0.60	2.80	15	5
1:A:17:CYS:SG	1:A:131:TYR:OH	0.60	2.60	5	1
1:A:88:ILE:CD1	1:A:111:ALA:CB	0.60	2.79	12	14
1:A:11:VAL:HG13	1:A:44:GLY:C	0.59	2.18	11	2
1:A:115:LEU:HD23	1:A:115:LEU:N	0.59	2.12	1	2
1:A:6:LYS:HB3	1:A:39:TRP:CH2	0.59	2.33	6	14
1:A:8:VAL:CG1	1:A:39:TRP:CZ3	0.59	2.84	2	8
1:A:6:LYS:CB	1:A:39:TRP:CZ2	0.59	2.86	6	8
1:A:30:VAL:CG2	1:A:36:SER:N	0.59	2.66	3	8
1:A:120:ASP:N	1:A:121:PRO:CD	0.59	2.66	3	5
1:A:84:THR:HG22	1:A:85:PHE:N	0.59	2.12	10	4
1:A:77:VAL:HG12	1:A:82:PHE:CE1	0.59	2.32	7	1
1:A:90:CYS:SG	1:A:99:LEU:HD12	0.59	2.37	9	4
1:A:26:PHE:CD1	1:A:41:ILE:CD1	0.59	2.86	9	4
1:A:11:VAL:CG1	1:A:46:VAL:CG2	0.59	2.81	2	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:PHE:CZ	1:A:89:LEU:HD13	0.58	2.32	7	3
1:A:30:VAL:O	1:A:36:SER:N	0.58	2.35	15	6
1:A:22:ALA:O	1:A:148:CYS:SG	0.58	2.61	15	1
1:A:26:PHE:O	1:A:30:VAL:HG12	0.58	1.97	15	7
1:A:89:LEU:HD11	1:A:152:PHE:CD2	0.58	2.32	14	2
1:A:26:PHE:CD2	1:A:149:CYS:CB	0.58	2.85	5	4
1:A:8:VAL:HG21	1:A:26:PHE:CE2	0.58	2.33	15	1
1:A:72:HIS:CD2	1:A:73:LYS:N	0.58	2.72	1	4
1:A:116:LEU:HD23	1:A:116:LEU:O	0.58	1.97	8	1
1:A:29:LEU:HD12	1:A:149:CYS:SG	0.58	2.39	9	6
1:A:21:ILE:N	1:A:21:ILE:HD12	0.58	2.13	12	1
1:A:30:VAL:HG23	1:A:35:ILE:HG13	0.58	1.71	4	4
1:A:31:THR:HG23	1:A:36:SER:HB3	0.58	1.72	6	1
1:A:91:MET:O	1:A:127:ILE:HG23	0.58	1.98	5	2
1:A:82:PHE:CZ	1:A:99:LEU:HD23	0.58	2.34	11	3
1:A:6:LYS:CD	1:A:39:TRP:CZ2	0.58	2.86	12	2
1:A:6:LYS:O	1:A:39:TRP:CE3	0.58	2.56	14	1
1:A:49:TRP:N	1:A:49:TRP:CD1	0.58	2.72	14	3
1:A:72:HIS:CD2	1:A:73:LYS:O	0.58	2.57	1	5
1:A:17:CYS:SG	1:A:18:ARG:HG3	0.58	2.39	12	1
1:A:21:ILE:C	1:A:145:CYS:SG	0.58	2.82	3	3
1:A:18:ARG:CD	1:A:19:SER:N	0.58	2.67	3	1
1:A:54:SER:CB	1:A:55:PRO:CD	0.57	2.81	5	3
1:A:42:ASP:OD1	1:A:72:HIS:CE1	0.57	2.57	12	1
1:A:127:ILE:CG1	1:A:144:GLN:CB	0.57	2.82	9	1
1:A:19:SER:CB	1:A:20:PRO:CD	0.57	2.81	1	2
1:A:89:LEU:HD21	1:A:152:PHE:CE1	0.57	2.35	8	3
1:A:17:CYS:O	1:A:18:ARG:CB	0.57	2.52	8	4
1:A:6:LYS:CD	1:A:39:TRP:CH2	0.57	2.87	15	4
1:A:21:ILE:HG22	1:A:25:VAL:HG23	0.57	1.75	10	1
1:A:82:PHE:C	1:A:111:ALA:HB2	0.57	2.18	6	1
1:A:24:ALA:CB	1:A:68:ILE:CG2	0.57	2.82	14	3
1:A:30:VAL:CG2	1:A:35:ILE:CG1	0.57	2.81	4	7
1:A:30:VAL:HG21	1:A:39:TRP:HB2	0.57	1.75	1	5
1:A:116:LEU:HD11	1:A:148:CYS:CA	0.57	2.29	4	4
1:A:63:LEU:CD2	1:A:68:ILE:CG2	0.57	2.80	5	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:41:ILE:CG1	0.57	2.83	8	6
1:A:110:ARG:CZ	1:A:110:ARG:CB	0.57	2.83	6	1
1:A:142:TYR:CD1	1:A:142:TYR:C	0.57	2.79	3	5
1:A:81:ASP:O	1:A:85:PHE:CD2	0.57	2.57	14	2
1:A:118:SER:O	1:A:119:TYR:CD1	0.56	2.58	12	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:VAL:HG13	1:A:84:THR:N	0.56	2.15	1	2
1:A:63:LEU:HD23	1:A:64:ARG:H	0.56	1.59	1	2
1:A:131:TYR:CE2	1:A:132:TYR:CE2	0.56	2.93	2	1
1:A:29:LEU:HD22	1:A:150:ARG:CG	0.56	2.30	9	2
1:A:72:HIS:CD2	1:A:72:HIS:C	0.56	2.79	3	3
1:A:153:LEU:O	1:A:157:ARG:N	0.56	2.38	2	2
1:A:21:ILE:CG2	1:A:142:TYR:CD1	0.56	2.88	7	1
1:A:30:VAL:HG11	1:A:41:ILE:HD11	0.56	1.75	11	3
1:A:72:HIS:C	1:A:72:HIS:CD2	0.56	2.79	2	4
1:A:137:ASP:O	1:A:138:PHE:CB	0.56	2.53	10	1
1:A:35:ILE:HD11	1:A:153:LEU:HD21	0.56	1.77	13	2
1:A:60:VAL:HG13	1:A:61:SER:N	0.56	2.16	5	7
1:A:96:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	0.56	1.78	9	3
1:A:25:VAL:HB	1:A:149:CYS:SG	0.56	2.41	5	4
1:A:131:TYR:O	1:A:131:TYR:CD1	0.56	2.58	11	2
1:A:11:VAL:HG11	1:A:46:VAL:CG2	0.56	2.31	15	5
1:A:96:LEU:HD11	1:A:114:GLU:C	0.56	2.19	4	1
1:A:6:LYS:HG2	1:A:87:TYR:CE1	0.56	2.36	14	1
1:A:44:GLY:CA	1:A:77:VAL:CG2	0.56	2.83	1	1
1:A:83:VAL:HG23	1:A:110:ARG:HG2	0.56	1.75	13	1
1:A:96:LEU:CD2	1:A:113:ILE:HG21	0.56	2.28	6	1
1:A:22:ALA:CA	1:A:145:CYS:SG	0.56	2.92	3	1
1:A:83:VAL:CG2	1:A:110:ARG:CB	0.56	2.84	11	1
1:A:24:ALA:CB	1:A:63:LEU:CD2	0.56	2.84	5	1
1:A:6:LYS:HG3	1:A:87:TYR:CE1	0.56	2.36	14	1
1:A:26:PHE:CD2	1:A:149:CYS:HB2	0.56	2.36	5	6
1:A:8:VAL:HG13	1:A:41:ILE:CG1	0.56	2.31	14	7
1:A:56:ASP:O	1:A:60:VAL:CG2	0.56	2.54	4	1
1:A:25:VAL:HG11	1:A:146:VAL:HG13	0.56	1.78	7	2
1:A:141:VAL:CG1	1:A:142:TYR:N	0.56	2.69	13	1
1:A:6:LYS:HB3	1:A:39:TRP:CZ2	0.55	2.36	10	8
1:A:16:ILE:HD12	1:A:17:CYS:SG	0.55	2.41	9	2
1:A:5:THR:HG22	1:A:38:ASN:CA	0.55	2.25	3	9
1:A:126:ILE:HG22	1:A:128:GLU:HG3	0.55	1.79	5	2
1:A:82:PHE:CZ	1:A:102:LYS:HG2	0.55	2.36	1	1
1:A:11:VAL:HB	1:A:99:LEU:HD11	0.55	1.78	1	1
1:A:26:PHE:CG	1:A:149:CYS:HB2	0.55	2.37	6	12
1:A:48:ASP:HA	1:A:51:VAL:HG23	0.55	1.78	6	6
1:A:6:LYS:HG2	1:A:87:TYR:CZ	0.55	2.37	14	1
1:A:126:ILE:O	1:A:127:ILE:HG22	0.55	2.00	15	1
1:A:106:VAL:CG2	1:A:109:CYS:SG	0.55	2.95	12	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:LYS:HD2	1:A:39:TRP:CH2	0.55	2.37	5	3
1:A:25:VAL:CG2	1:A:145:CYS:SG	0.55	2.94	3	1
1:A:142:TYR:CD1	1:A:142:TYR:O	0.55	2.60	11	2
1:A:12:CYS:SG	1:A:14:GLY:C	0.55	2.84	4	2
1:A:13:LEU:HD21	1:A:49:TRP:CZ3	0.55	2.36	3	1
1:A:33:GLN:O	1:A:34:ASN:CB	0.55	2.55	13	8
1:A:87:TYR:CD1	1:A:87:TYR:N	0.55	2.73	14	4
1:A:19:SER:N	1:A:20:PRO:HD2	0.55	2.16	7	10
1:A:35:ILE:CD1	1:A:153:LEU:HD11	0.55	2.32	10	4
1:A:12:CYS:SG	1:A:19:SER:CB	0.55	2.95	2	2
1:A:30:VAL:CB	1:A:35:ILE:HD11	0.55	2.31	9	1
1:A:39:TRP:CZ2	1:A:153:LEU:HD12	0.55	2.37	9	3
1:A:12:CYS:SG	1:A:12:CYS:O	0.55	2.65	8	1
1:A:145:CYS:SG	1:A:146:VAL:N	0.55	2.80	9	2
1:A:12:CYS:SG	1:A:13:LEU:O	0.55	2.65	3	1
1:A:11:VAL:HG22	1:A:44:GLY:HA3	0.55	1.76	14	1
1:A:22:ALA:C	1:A:148:CYS:SG	0.55	2.85	15	1
1:A:25:VAL:CG1	1:A:146:VAL:HG13	0.54	2.32	3	2
1:A:111:ALA:O	1:A:113:ILE:CD1	0.54	2.56	8	12
1:A:152:PHE:C	1:A:152:PHE:CD1	0.54	2.80	2	4
1:A:86:ASP:C	1:A:87:TYR:CD1	0.54	2.81	14	3
1:A:126:ILE:CD1	1:A:126:ILE:O	0.54	2.55	2	1
1:A:142:TYR:C	1:A:142:TYR:CD1	0.54	2.80	1	8
1:A:77:VAL:HG12	1:A:78:THR:N	0.54	2.17	10	4
1:A:22:ALA:HB2	1:A:148:CYS:SG	0.54	2.41	10	1
1:A:29:LEU:HD13	1:A:150:ARG:CA	0.54	2.33	2	3
1:A:6:LYS:HG2	1:A:87:TYR:CE2	0.54	2.37	2	7
1:A:30:VAL:HG21	1:A:36:SER:HA	0.54	1.80	9	7
1:A:15:ASN:ND2	1:A:45:ALA:HB2	0.54	2.16	7	1
1:A:63:LEU:N	1:A:63:LEU:CD2	0.54	2.67	13	4
1:A:16:ILE:HG22	1:A:53:ARG:O	0.54	2.02	12	5
1:A:127:ILE:HD11	1:A:144:GLN:CB	0.54	2.32	9	1
1:A:82:PHE:CZ	1:A:102:LYS:HB3	0.54	2.38	3	3
1:A:26:PHE:O	1:A:30:VAL:CG1	0.54	2.56	13	7
1:A:9:LEU:HB2	1:A:85:PHE:CD2	0.54	2.38	1	4
1:A:24:ALA:HB1	1:A:68:ILE:HG23	0.54	1.80	3	1
1:A:146:VAL:O	1:A:149:CYS:SG	0.54	2.65	7	1
1:A:21:ILE:HG22	1:A:25:VAL:CG2	0.54	2.33	10	2
1:A:26:PHE:CD1	1:A:41:ILE:HG12	0.54	2.38	14	4
1:A:21:ILE:O	1:A:25:VAL:CG2	0.54	2.56	13	10
1:A:6:LYS:CG	1:A:87:TYR:OH	0.54	2.56	3	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:ASP:OD2	1:A:126:ILE:HD13	0.54	2.03	3	1
1:A:6:LYS:CD	1:A:156:VAL:O	0.54	2.56	12	2
1:A:153:LEU:O	1:A:157:ARG:CA	0.54	2.56	13	4
1:A:21:ILE:HG23	1:A:142:TYR:CD2	0.54	2.38	13	3
1:A:26:PHE:CZ	1:A:153:LEU:HD13	0.54	2.37	9	3
1:A:49:TRP:C	1:A:49:TRP:CD1	0.54	2.80	15	2
1:A:83:VAL:O	1:A:110:ARG:CD	0.54	2.56	15	6
1:A:29:LEU:CD2	1:A:150:ARG:N	0.54	2.71	15	2
1:A:6:LYS:CB	1:A:39:TRP:CE2	0.53	2.91	6	4
1:A:45:ALA:O	1:A:46:VAL:CG1	0.53	2.55	8	2
1:A:91:MET:HA	1:A:91:MET:HE2	0.53	1.79	4	1
1:A:126:ILE:O	1:A:127:ILE:CG2	0.53	2.56	15	1
1:A:119:TYR:O	1:A:120:ASP:CB	0.53	2.56	2	6
1:A:33:GLN:HB3	1:A:35:ILE:CG2	0.53	2.34	5	6
1:A:6:LYS:HD2	1:A:39:TRP:CZ2	0.53	2.39	15	6
1:A:56:ASP:O	1:A:60:VAL:HG22	0.53	2.03	4	1
1:A:19:SER:OG	1:A:91:MET:SD	0.53	2.66	3	1
1:A:116:LEU:CD1	1:A:148:CYS:O	0.53	2.57	8	3
1:A:22:ALA:HB2	1:A:145:CYS:HA	0.53	1.79	7	1
1:A:30:VAL:O	1:A:36:SER:CB	0.53	2.56	2	4
1:A:93:GLU:CB	1:A:115:LEU:HD11	0.53	2.33	8	1
1:A:117:GLY:O	1:A:118:SER:CB	0.53	2.56	10	3
1:A:83:VAL:CG2	1:A:110:ARG:HB3	0.53	2.34	11	1
1:A:121:PRO:CB	1:A:147:ARG:NH2	0.53	2.72	10	1
1:A:6:LYS:HB2	1:A:39:TRP:CH2	0.53	2.38	15	3
1:A:21:ILE:CG2	1:A:145:CYS:SG	0.53	2.97	9	1
1:A:90:CYS:SG	1:A:99:LEU:CD1	0.53	2.97	9	1
1:A:83:VAL:HG23	1:A:108:ASN:O	0.53	2.04	15	2
1:A:25:VAL:HG21	1:A:146:VAL:HA	0.53	1.79	7	1
1:A:9:LEU:HB2	1:A:85:PHE:CG	0.53	2.39	5	10
1:A:30:VAL:CG2	1:A:35:ILE:HG13	0.53	2.33	11	7
1:A:92:ASP:OD1	1:A:128:GLU:CG	0.53	2.57	11	2
1:A:29:LEU:CD1	1:A:146:VAL:O	0.53	2.57	13	1
1:A:14:GLY:O	1:A:15:ASN:CB	0.53	2.57	5	2
1:A:25:VAL:CB	1:A:149:CYS:SG	0.53	2.97	5	3
1:A:57:PRO:HA	1:A:60:VAL:CG2	0.53	2.33	4	1
1:A:21:ILE:HD12	1:A:141:VAL:HG12	0.53	1.81	3	1
1:A:96:LEU:HD23	1:A:96:LEU:O	0.53	2.03	7	1
1:A:96:LEU:CD2	1:A:113:ILE:CG2	0.53	2.81	6	2
1:A:141:VAL:HG13	1:A:142:TYR:N	0.53	2.18	13	1
1:A:35:ILE:CG1	1:A:39:TRP:CD1	0.53	2.92	9	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:LEU:CD2	1:A:85:PHE:CD2	0.53	2.92	14	1
1:A:66:HIS:CE1	1:A:142:TYR:OH	0.53	2.62	15	1
1:A:29:LEU:HD22	1:A:150:ARG:HB2	0.53	1.79	3	1
1:A:91:MET:SD	1:A:148:CYS:SG	0.52	3.07	7	1
1:A:120:ASP:CB	1:A:121:PRO:HD3	0.52	2.34	15	9
1:A:29:LEU:HD11	1:A:146:VAL:HG13	0.52	1.79	13	1
1:A:126:ILE:O	1:A:126:ILE:CG2	0.52	2.54	2	2
1:A:63:LEU:O	1:A:68:ILE:CG2	0.52	2.57	9	1
1:A:87:TYR:CE2	1:A:156:VAL:HG11	0.52	2.38	1	1
1:A:5:THR:O	1:A:6:LYS:O	0.52	2.27	3	10
1:A:16:ILE:CG2	1:A:53:ARG:O	0.52	2.57	5	3
1:A:57:PRO:O	1:A:61:SER:CB	0.52	2.57	4	1
1:A:107:LYS:O	1:A:107:LYS:CD	0.52	2.57	11	1
1:A:91:MET:HE2	1:A:148:CYS:SG	0.52	2.44	11	2
1:A:19:SER:OG	1:A:63:LEU:HD11	0.52	2.05	11	1
1:A:96:LEU:O	1:A:96:LEU:CD2	0.52	2.57	10	2
1:A:152:PHE:CD1	1:A:152:PHE:C	0.52	2.83	14	3
1:A:18:ARG:O	1:A:19:SER:CB	0.52	2.56	9	7
1:A:19:SER:O	1:A:21:ILE:N	0.52	2.42	11	1
1:A:152:PHE:O	1:A:156:VAL:CG2	0.52	2.58	12	2
1:A:87:TYR:CE2	1:A:156:VAL:HB	0.52	2.39	14	3
1:A:82:PHE:CE2	1:A:102:LYS:HB3	0.52	2.39	13	1
1:A:83:VAL:CG1	1:A:84:THR:N	0.52	2.72	1	2
1:A:96:LEU:HD22	1:A:100:ASN:CA	0.52	2.34	1	2
1:A:6:LYS:HB2	1:A:39:TRP:CZ3	0.52	2.39	15	2
1:A:30:VAL:HB	1:A:35:ILE:HD11	0.52	1.81	9	1
1:A:92:ASP:O	1:A:94:SER:N	0.52	2.42	1	2
1:A:107:LYS:O	1:A:107:LYS:CG	0.52	2.57	11	1
1:A:87:TYR:CD2	1:A:156:VAL:HG11	0.52	2.38	1	1
1:A:11:VAL:O	1:A:90:CYS:CB	0.52	2.57	7	1
1:A:127:ILE:O	1:A:129:ASP:N	0.52	2.43	8	1
1:A:42:ASP:OD1	1:A:72:HIS:NE2	0.52	2.43	5	1
1:A:19:SER:HB2	1:A:141:VAL:HG11	0.52	1.81	4	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:41:ILE:HG13	0.52	2.35	8	5
1:A:63:LEU:CD2	1:A:63:LEU:N	0.52	2.66	11	3
1:A:60:VAL:CG1	1:A:61:SER:N	0.52	2.73	12	7
1:A:103:SER:HA	1:A:109:CYS:SG	0.52	2.45	1	2
1:A:4:VAL:HG22	1:A:5:THR:H	0.52	1.65	8	1
1:A:80:GLU:O	1:A:84:THR:CB	0.52	2.57	2	7
1:A:13:LEU:HD11	1:A:49:TRP:CH2	0.52	2.40	5	2
1:A:27:ARG:O	1:A:30:VAL:HG12	0.52	2.04	2	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:VAL:O	1:A:63:LEU:CD2	0.52	2.57	2	2
1:A:42:ASP:HB2	1:A:85:PHE:CZ	0.52	2.40	2	7
1:A:49:TRP:CD1	1:A:49:TRP:C	0.52	2.81	8	1
1:A:19:SER:N	1:A:20:PRO:HD3	0.52	2.19	15	2
1:A:70:THR:O	1:A:70:THR:CG2	0.52	2.58	3	1
1:A:77:VAL:CG1	1:A:82:PHE:CE1	0.52	2.92	7	1
1:A:4:VAL:O	1:A:6:LYS:N	0.52	2.43	12	2
1:A:29:LEU:HD13	1:A:150:ARG:HB2	0.52	1.82	9	3
1:A:74:ALA:O	1:A:75:ARG:CB	0.52	2.58	5	3
1:A:152:PHE:CE1	1:A:156:VAL:CG2	0.52	2.90	13	3
1:A:26:PHE:CE1	1:A:41:ILE:HG12	0.52	2.40	1	2
1:A:120:ASP:N	1:A:121:PRO:HD2	0.51	2.21	12	9
1:A:23:GLU:OE1	1:A:43:SER:CB	0.51	2.59	13	1
1:A:59:ALA:O	1:A:63:LEU:CD2	0.51	2.57	9	1
1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD11	0.51	1.80	4	1
1:A:45:ALA:O	1:A:46:VAL:CB	0.51	2.57	8	4
1:A:12:CYS:O	1:A:14:GLY:N	0.51	2.43	6	2
1:A:68:ILE:O	1:A:69:ASN:CB	0.51	2.58	15	2
1:A:8:VAL:CG2	1:A:152:PHE:CE2	0.51	2.93	9	1
1:A:82:PHE:O	1:A:111:ALA:CB	0.51	2.57	9	6
1:A:14:GLY:O	1:A:18:ARG:CG	0.51	2.59	10	1
1:A:13:LEU:HD11	1:A:49:TRP:HH2	0.51	1.66	13	1
1:A:23:GLU:CA	1:A:23:GLU:OE1	0.51	2.58	2	1
1:A:54:SER:CB	1:A:55:PRO:HD2	0.51	2.35	5	1
1:A:25:VAL:HG11	1:A:146:VAL:CA	0.51	2.33	7	4
1:A:19:SER:HB2	1:A:141:VAL:CG1	0.51	2.36	15	1
1:A:87:TYR:CE2	1:A:156:VAL:CG1	0.51	2.93	1	1
1:A:11:VAL:CB	1:A:99:LEU:HD11	0.51	2.36	1	4
1:A:30:VAL:O	1:A:36:SER:CA	0.51	2.59	2	3
1:A:64:ARG:HG3	1:A:142:TYR:CE1	0.51	2.41	5	1
1:A:10:PHE:CE1	1:A:89:LEU:CD1	0.51	2.92	3	1
1:A:77:VAL:CG1	1:A:78:THR:N	0.51	2.73	10	2
1:A:92:ASP:CB	1:A:126:ILE:HG23	0.51	2.36	11	1
1:A:48:ASP:CG	1:A:51:VAL:HG21	0.51	2.25	10	2
1:A:24:ALA:HB2	1:A:70:THR:HB	0.51	1.83	9	1
1:A:115:LEU:HD12	1:A:116:LEU:O	0.51	2.06	6	1
1:A:110:ARG:CZ	1:A:110:ARG:HB2	0.51	2.36	6	1
1:A:64:ARG:HD3	1:A:142:TYR:CE2	0.51	2.41	5	1
1:A:21:ILE:HD12	1:A:21:ILE:N	0.51	2.20	4	1
1:A:62:CYS:SG	1:A:142:TYR:CD2	0.51	3.01	15	1
1:A:22:ALA:HB2	1:A:145:CYS:CA	0.51	2.36	7	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:ASN:N	1:A:69:ASN:ND2	0.51	2.59	11	2
1:A:27:ARG:O	1:A:31:THR:OG1	0.51	2.28	8	8
1:A:6:LYS:HD3	1:A:39:TRP:CH2	0.51	2.41	12	1
1:A:19:SER:CB	1:A:20:PRO:HD3	0.51	2.35	1	9
1:A:35:ILE:HD11	1:A:153:LEU:CD2	0.51	2.35	13	2
1:A:39:TRP:CH2	1:A:87:TYR:CE2	0.51	2.99	6	1
1:A:15:ASN:ND2	1:A:74:ALA:HB2	0.51	2.21	4	1
1:A:132:TYR:CD1	1:A:132:TYR:N	0.51	2.74	14	1
1:A:30:VAL:O	1:A:35:ILE:HG23	0.50	2.06	5	4
1:A:6:LYS:HB3	1:A:39:TRP:CE2	0.50	2.41	10	6
1:A:22:ALA:HB1	1:A:148:CYS:CB	0.50	2.36	14	3
1:A:8:VAL:HG12	1:A:39:TRP:HZ3	0.50	1.62	2	2
1:A:11:VAL:CG1	1:A:99:LEU:HD11	0.50	2.36	9	5
1:A:29:LEU:HD13	1:A:150:ARG:N	0.50	2.21	9	3
1:A:110:ARG:O	1:A:110:ARG:CG	0.50	2.60	3	2
1:A:30:VAL:HG22	1:A:36:SER:CA	0.50	2.34	15	6
1:A:11:VAL:CG1	1:A:44:GLY:O	0.50	2.57	11	1
1:A:95:ASN:O	1:A:96:LEU:C	0.50	2.49	1	5
1:A:89:LEU:HA	1:A:114:GLU:O	0.50	2.07	13	4
1:A:15:ASN:O	1:A:20:PRO:CG	0.50	2.60	11	1
1:A:10:PHE:CE1	1:A:116:LEU:CD2	0.50	2.95	9	1
1:A:8:VAL:HG21	1:A:152:PHE:CE2	0.50	2.41	9	1
1:A:64:ARG:O	1:A:65:ASN:O	0.50	2.30	5	1
1:A:29:LEU:HD13	1:A:149:CYS:SG	0.50	2.45	3	1
1:A:21:ILE:N	1:A:21:ILE:CD1	0.50	2.67	7	1
1:A:65:ASN:OD1	1:A:66:HIS:CD2	0.50	2.65	7	1
1:A:66:HIS:CD2	1:A:68:ILE:HG12	0.50	2.42	11	1
1:A:116:LEU:CG	1:A:116:LEU:O	0.50	2.59	8	1
1:A:63:LEU:O	1:A:66:HIS:CD2	0.50	2.65	4	1
1:A:92:ASP:CG	1:A:126:ILE:CG2	0.50	2.80	1	3
1:A:157:ARG:NE	1:A:157:ARG:O	0.50	2.45	14	1
1:A:98:ASP:O	1:A:102:LYS:CG	0.50	2.60	15	1
1:A:92:ASP:HB3	1:A:126:ILE:HG23	0.50	1.82	7	3
1:A:16:ILE:HD12	1:A:56:ASP:OD1	0.50	2.07	5	1
1:A:47:SER:HB3	1:A:49:TRP:CE2	0.50	2.42	5	2
1:A:57:PRO:HA	1:A:60:VAL:CG1	0.50	2.37	12	3
1:A:24:ALA:CB	1:A:63:LEU:HD21	0.50	2.37	5	1
1:A:64:ARG:CB	1:A:68:ILE:HG12	0.50	2.37	5	1
1:A:40:VAL:HG12	1:A:85:PHE:HE1	0.50	1.66	8	1
1:A:64:ARG:CG	1:A:142:TYR:CZ	0.50	2.95	5	1
1:A:64:ARG:HB2	1:A:68:ILE:CG1	0.50	2.37	5	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:PHE:CD2	1:A:106:VAL:CG2	0.50	2.94	5	1
1:A:96:LEU:HD12	1:A:115:LEU:CD2	0.49	2.36	3	2
1:A:88:ILE:HG22	1:A:88:ILE:O	0.49	2.07	12	5
1:A:95:ASN:O	1:A:97:ARG:N	0.49	2.45	14	2
1:A:131:TYR:CG	1:A:131:TYR:O	0.49	2.63	6	1
1:A:19:SER:CB	1:A:141:VAL:CG1	0.49	2.90	15	1
1:A:140:THR:HG23	1:A:141:VAL:N	0.49	2.22	7	1
1:A:92:ASP:O	1:A:93:GLU:CB	0.49	2.57	9	2
1:A:60:VAL:O	1:A:63:LEU:HD23	0.49	2.07	8	2
1:A:82:PHE:CE2	1:A:99:LEU:HD23	0.49	2.42	11	1
1:A:77:VAL:HG22	1:A:78:THR:N	0.49	2.21	8	1
1:A:15:ASN:O	1:A:16:ILE:CG2	0.49	2.57	5	3
1:A:77:VAL:O	1:A:78:THR:HG23	0.49	2.06	13	1
1:A:82:PHE:CZ	1:A:102:LYS:CB	0.49	2.95	3	3
1:A:124:GLN:O	1:A:125:LEU:C	0.49	2.51	6	2
1:A:73:LYS:O	1:A:74:ALA:CB	0.49	2.60	14	1
1:A:63:LEU:O	1:A:68:ILE:CG1	0.49	2.60	3	1
1:A:9:LEU:HB2	1:A:85:PHE:CD1	0.49	2.42	7	1
1:A:22:ALA:HB2	1:A:145:CYS:HG	0.49	1.62	12	1
1:A:12:CYS:SG	1:A:19:SER:OG	0.49	2.70	8	1
1:A:24:ALA:CB	1:A:68:ILE:HG21	0.49	2.37	5	1
1:A:124:GLN:O	1:A:125:LEU:CB	0.49	2.61	3	1
1:A:48:ASP:OD1	1:A:51:VAL:HG21	0.49	2.08	8	2
1:A:25:VAL:O	1:A:29:LEU:CB	0.49	2.61	15	1
1:A:42:ASP:HB2	1:A:85:PHE:CE2	0.49	2.43	3	4
1:A:92:ASP:OD2	1:A:128:GLU:CG	0.49	2.61	9	1
1:A:43:SER:OG	1:A:44:GLY:N	0.49	2.44	11	1
1:A:30:VAL:CG2	1:A:35:ILE:C	0.49	2.81	11	1
1:A:132:TYR:O	1:A:134:ASN:N	0.49	2.45	11	1
1:A:129:ASP:N	1:A:129:ASP:OD1	0.49	2.46	4	1
1:A:110:ARG:CD	1:A:110:ARG:O	0.49	2.61	3	1
1:A:107:LYS:O	1:A:108:ASN:CB	0.49	2.60	1	1
1:A:6:LYS:HB3	1:A:39:TRP:CE3	0.49	2.43	7	10
1:A:136:ALA:O	1:A:137:ASP:CB	0.49	2.59	7	1
1:A:18:ARG:O	1:A:19:SER:O	0.49	2.31	11	1
1:A:151:ALA:O	1:A:154:GLU:CG	0.49	2.61	8	1
1:A:99:LEU:CB	1:A:113:ILE:HG21	0.49	2.38	13	1
1:A:18:ARG:HB2	1:A:141:VAL:CG2	0.49	2.38	13	1
1:A:98:ASP:OD1	1:A:99:LEU:N	0.48	2.46	13	1
1:A:50:ASN:OD1	1:A:53:ARG:CD	0.48	2.61	9	1
1:A:64:ARG:HG3	1:A:142:TYR:CZ	0.48	2.42	5	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:THR:O	1:A:82:PHE:CD2	0.48	2.66	14	1
1:A:120:ASP:HB3	1:A:121:PRO:CD	0.48	2.38	13	1
1:A:17:CYS:N	1:A:56:ASP:OD1	0.48	2.46	5	1
1:A:130:PRO:O	1:A:132:TYR:N	0.48	2.46	4	1
1:A:37:ASP:OD1	1:A:37:ASP:N	0.48	2.45	15	2
1:A:138:PHE:CD2	1:A:138:PHE:O	0.48	2.66	7	1
1:A:83:VAL:HA	1:A:110:ARG:CG	0.48	2.38	7	2
1:A:87:TYR:CZ	1:A:156:VAL:CG1	0.48	2.96	12	1
1:A:88:ILE:HD12	1:A:111:ALA:HB1	0.48	1.82	13	4
1:A:83:VAL:HG22	1:A:110:ARG:HB3	0.48	1.85	11	1
1:A:79:LYS:HD2	1:A:106:VAL:HG13	0.48	1.85	6	1
1:A:10:PHE:CZ	1:A:148:CYS:O	0.48	2.67	7	2
1:A:113:ILE:N	1:A:113:ILE:HD13	0.48	2.23	4	2
1:A:86:ASP:HB3	1:A:87:TYR:CE1	0.48	2.44	15	1
1:A:96:LEU:CD2	1:A:96:LEU:O	0.48	2.62	7	1
1:A:53:ARG:O	1:A:54:SER:O	0.48	2.32	7	3
1:A:82:PHE:CE2	1:A:102:LYS:HE2	0.48	2.43	2	1
1:A:13:LEU:HD21	1:A:49:TRP:HZ3	0.48	1.69	3	1
1:A:60:VAL:O	1:A:64:ARG:CB	0.48	2.61	10	2
1:A:8:VAL:HB	1:A:152:PHE:CE1	0.48	2.44	13	1
1:A:9:LEU:O	1:A:9:LEU:HD23	0.48	2.09	5	1
1:A:68:ILE:O	1:A:69:ASN:O	0.48	2.32	14	1
1:A:82:PHE:CE2	1:A:102:LYS:CB	0.48	2.97	11	1
1:A:4:VAL:HG22	1:A:5:THR:N	0.48	2.24	11	1
1:A:47:SER:HB3	1:A:49:TRP:CZ2	0.48	2.43	5	2
1:A:87:TYR:CE2	1:A:156:VAL:CB	0.48	2.96	2	1
1:A:65:ASN:CG	1:A:65:ASN:O	0.48	2.52	5	1
1:A:16:ILE:CD1	1:A:16:ILE:C	0.48	2.81	4	1
1:A:148:CYS:SG	1:A:149:CYS:N	0.48	2.86	15	1
1:A:63:LEU:CB	1:A:68:ILE:HB	0.47	2.39	6	2
1:A:11:VAL:O	1:A:90:CYS:SG	0.47	2.72	5	1
1:A:26:PHE:CG	1:A:149:CYS:CB	0.47	2.97	11	4
1:A:25:VAL:O	1:A:29:LEU:N	0.47	2.47	14	2
1:A:70:THR:OG1	1:A:71:ALA:N	0.47	2.46	12	2
1:A:128:GLU:O	1:A:129:ASP:O	0.47	2.32	12	1
1:A:88:ILE:HG13	1:A:111:ALA:CB	0.47	2.38	13	1
1:A:106:VAL:CG1	1:A:109:CYS:HB2	0.47	2.39	5	8
1:A:68:ILE:CG2	1:A:69:ASN:N	0.47	2.77	7	3
1:A:26:PHE:CD2	1:A:41:ILE:HG12	0.47	2.44	10	3
1:A:115:LEU:HD12	1:A:117:GLY:N	0.47	2.24	13	1
1:A:28:LYS:HA	1:A:31:THR:CG2	0.47	2.39	13	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:72:HIS:O	1:A:72:HIS:CD2	0.47	2.66	13	2
1:A:8:VAL:HG13	1:A:41:ILE:HG13	0.47	1.85	14	2
1:A:135:ASP:N	1:A:135:ASP:OD1	0.47	2.46	1	1
1:A:39:TRP:CZ2	1:A:153:LEU:CD1	0.47	2.98	7	1
1:A:88:ILE:O	1:A:112:LYS:O	0.47	2.32	4	2
1:A:92:ASP:OD2	1:A:115:LEU:CD1	0.47	2.63	11	1
1:A:26:PHE:HB2	1:A:149:CYS:CB	0.47	2.39	13	9
1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:CD1	0.47	2.39	12	1
1:A:17:CYS:C	1:A:18:ARG:CG	0.47	2.80	12	1
1:A:10:PHE:CZ	1:A:116:LEU:HD21	0.47	2.44	9	1
1:A:6:LYS:HB2	1:A:39:TRP:CZ2	0.47	2.44	5	1
1:A:88:ILE:O	1:A:88:ILE:HG22	0.47	2.09	11	6
1:A:62:CYS:O	1:A:66:HIS:CE1	0.47	2.67	11	1
1:A:45:ALA:O	1:A:76:GLN:OE1	0.47	2.33	11	1
1:A:91:MET:O	1:A:92:ASP:O	0.47	2.33	9	2
1:A:68:ILE:C	1:A:69:ASN:ND2	0.47	2.68	4	1
1:A:85:PHE:CD1	1:A:85:PHE:N	0.47	2.82	7	1
1:A:33:GLN:O	1:A:34:ASN:C	0.47	2.53	7	6
1:A:21:ILE:HG21	1:A:142:TYR:CD1	0.47	2.45	11	1
1:A:30:VAL:HG22	1:A:36:SER:HB3	0.47	1.86	11	1
1:A:16:ILE:O	1:A:17:CYS:O	0.47	2.33	11	1
1:A:135:ASP:O	1:A:136:ALA:CB	0.47	2.61	11	2
1:A:21:ILE:HB	1:A:145:CYS:CB	0.47	2.40	2	4
1:A:116:LEU:O	1:A:116:LEU:CD2	0.47	2.62	8	1
1:A:18:ARG:CB	1:A:141:VAL:HG21	0.47	2.39	13	1
1:A:63:LEU:HA	1:A:142:TYR:CE2	0.47	2.45	2	1
1:A:77:VAL:HG12	1:A:82:PHE:CE2	0.47	2.45	4	1
1:A:35:ILE:CD1	1:A:153:LEU:CD2	0.47	2.93	14	2
1:A:5:THR:O	1:A:39:TRP:HA	0.47	2.09	3	1
1:A:5:THR:CG2	1:A:38:ASN:HA	0.47	2.40	10	3
1:A:19:SER:HB2	1:A:59:ALA:CB	0.47	2.39	11	1
1:A:26:PHE:HZ	1:A:153:LEU:HD13	0.47	1.70	3	2
1:A:22:ALA:CB	1:A:91:MET:SD	0.47	3.03	4	1
1:A:30:VAL:HG13	1:A:36:SER:OG	0.47	2.10	15	1
1:A:89:LEU:HD21	1:A:152:PHE:CD1	0.47	2.44	7	1
1:A:21:ILE:HG13	1:A:63:LEU:HD22	0.47	1.87	11	1
1:A:11:VAL:HG12	1:A:12:CYS:N	0.47	2.25	13	1
1:A:26:PHE:CD1	1:A:30:VAL:CG1	0.47	2.95	6	3
1:A:10:PHE:CE1	1:A:89:LEU:HB2	0.47	2.45	14	3
1:A:6:LYS:HG3	1:A:87:TYR:OH	0.47	2.10	4	7
1:A:11:VAL:HG11	1:A:99:LEU:CD1	0.47	2.28	8	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:LEU:HD11	1:A:146:VAL:CG1	0.47	2.40	13	1
1:A:120:ASP:HB3	1:A:121:PRO:HD3	0.47	1.87	13	1
1:A:72:HIS:CD2	1:A:72:HIS:O	0.47	2.68	3	2
1:A:55:PRO:HB2	1:A:60:VAL:CG1	0.47	2.40	4	1
1:A:29:LEU:HD21	1:A:150:ARG:N	0.47	2.25	14	1
1:A:44:GLY:CA	1:A:77:VAL:HG22	0.47	2.40	1	1
1:A:26:PHE:CZ	1:A:153:LEU:HB2	0.46	2.46	7	3
1:A:18:ARG:C	1:A:59:ALA:CB	0.46	2.83	11	1
1:A:45:ALA:CB	1:A:50:ASN:OD1	0.46	2.63	15	2
1:A:49:TRP:O	1:A:50:ASN:OD1	0.46	2.34	8	1
1:A:129:ASP:O	1:A:130:PRO:O	0.46	2.33	9	1
1:A:55:PRO:O	1:A:56:ASP:O	0.46	2.34	3	2
1:A:42:ASP:CB	1:A:85:PHE:CZ	0.46	2.99	2	4
1:A:92:ASP:OD2	1:A:127:ILE:CG2	0.46	2.63	12	1
1:A:121:PRO:O	1:A:122:GLN:CB	0.46	2.61	10	1
1:A:17:CYS:HB3	1:A:131:TYR:CE1	0.46	2.45	10	1
1:A:92:ASP:N	1:A:92:ASP:OD1	0.46	2.48	5	1
1:A:69:ASN:O	1:A:70:THR:CG2	0.46	2.63	14	1
1:A:45:ALA:HB1	1:A:50:ASN:OD1	0.46	2.10	15	1
1:A:18:ARG:HD3	1:A:19:SER:N	0.46	2.25	3	1
1:A:83:VAL:HG22	1:A:110:ARG:CB	0.46	2.40	11	1
1:A:153:LEU:O	1:A:157:ARG:CB	0.46	2.64	6	4
1:A:22:ALA:N	1:A:145:CYS:HB3	0.46	2.26	7	3
1:A:6:LYS:HD3	1:A:156:VAL:O	0.46	2.11	7	8
1:A:9:LEU:CD2	1:A:88:ILE:HG12	0.46	2.41	9	10
1:A:73:LYS:O	1:A:74:ALA:O	0.46	2.34	7	3
1:A:106:VAL:HB	1:A:109:CYS:CB	0.46	2.41	5	2
1:A:90:CYS:SG	1:A:92:ASP:O	0.46	2.74	12	1
1:A:13:LEU:H	1:A:46:VAL:HG23	0.46	1.71	6	1
1:A:106:VAL:CB	1:A:109:CYS:HB2	0.46	2.40	5	1
1:A:89:LEU:HD22	1:A:116:LEU:O	0.46	2.09	4	1
1:A:149:CYS:SG	1:A:150:ARG:N	0.46	2.89	3	1
1:A:73:LYS:O	1:A:75:ARG:N	0.46	2.48	11	1
1:A:142:TYR:O	1:A:145:CYS:SG	0.46	2.73	9	1
1:A:6:LYS:HD3	1:A:87:TYR:CE2	0.46	2.45	5	1
1:A:47:SER:HB2	1:A:49:TRP:CD2	0.46	2.46	5	1
1:A:25:VAL:CG2	1:A:68:ILE:HD11	0.46	2.39	1	1
1:A:6:LYS:HB3	1:A:39:TRP:CD2	0.46	2.46	10	4
1:A:70:THR:O	1:A:71:ALA:HB3	0.46	2.10	12	1
1:A:90:CYS:SG	1:A:91:MET:O	0.46	2.73	13	1
1:A:35:ILE:CD1	1:A:35:ILE:N	0.46	2.78	9	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:ASP:CB	1:A:127:ILE:O	0.46	2.64	9	1
1:A:85:PHE:N	1:A:85:PHE:CD1	0.46	2.83	3	1
1:A:80:GLU:O	1:A:84:THR:OG1	0.46	2.32	7	13
1:A:47:SER:O	1:A:76:GLN:OE1	0.46	2.33	11	1
1:A:63:LEU:HD12	1:A:68:ILE:HG21	0.46	1.87	8	2
1:A:76:GLN:O	1:A:77:VAL:O	0.46	2.33	14	2
1:A:40:VAL:O	1:A:40:VAL:HG12	0.46	2.11	13	2
1:A:16:ILE:HD12	1:A:17:CYS:CB	0.46	2.41	15	1
1:A:25:VAL:CA	1:A:68:ILE:HD11	0.46	2.36	10	1
1:A:29:LEU:HD13	1:A:150:ARG:CB	0.46	2.41	9	3
1:A:96:LEU:O	1:A:100:ASN:HB2	0.46	2.10	14	3
1:A:46:VAL:HA	1:A:77:VAL:HG12	0.46	1.87	2	1
1:A:6:LYS:HG2	1:A:87:TYR:OH	0.46	2.11	6	1
1:A:89:LEU:CD1	1:A:152:PHE:CD2	0.46	2.99	14	1
1:A:83:VAL:O	1:A:110:ARG:HG2	0.46	2.11	3	4
1:A:60:VAL:HA	1:A:63:LEU:CD2	0.46	2.40	8	1
1:A:30:VAL:CB	1:A:35:ILE:CD1	0.46	2.94	9	1
1:A:92:ASP:HB2	1:A:127:ILE:O	0.46	2.11	9	1
1:A:41:ILE:O	1:A:42:ASP:OD1	0.46	2.34	1	2
1:A:17:CYS:O	1:A:18:ARG:CG	0.46	2.64	12	1
1:A:132:TYR:O	1:A:133:GLY:O	0.46	2.33	14	2
1:A:151:ALA:O	1:A:154:GLU:HG2	0.46	2.11	8	1
1:A:21:ILE:HD12	1:A:63:LEU:HG	0.46	1.86	5	1
1:A:29:LEU:CD2	1:A:150:ARG:CA	0.46	2.92	15	1
1:A:30:VAL:HG21	1:A:39:TRP:CB	0.45	2.41	1	5
1:A:8:VAL:CG1	1:A:39:TRP:CE3	0.45	2.99	11	1
1:A:22:ALA:N	1:A:145:CYS:HB2	0.45	2.26	3	3
1:A:33:GLN:HB3	1:A:35:ILE:HG22	0.45	1.87	5	4
1:A:140:THR:CG2	1:A:141:VAL:N	0.45	2.79	7	1
1:A:19:SER:O	1:A:21:ILE:CD1	0.45	2.57	11	1
1:A:15:ASN:O	1:A:20:PRO:HG2	0.45	2.10	11	1
1:A:138:PHE:C	1:A:138:PHE:CD1	0.45	2.90	15	2
1:A:68:ILE:HG22	1:A:69:ASN:N	0.45	2.27	7	4
1:A:31:THR:CA	1:A:36:SER:HB3	0.45	2.41	13	1
1:A:126:ILE:HD13	1:A:127:ILE:N	0.45	2.26	9	2
1:A:61:SER:O	1:A:65:ASN:N	0.45	2.48	15	1
1:A:63:LEU:CB	1:A:68:ILE:O	0.45	2.64	7	1
1:A:17:CYS:SG	1:A:17:CYS:O	0.45	2.74	12	1
1:A:126:ILE:O	1:A:126:ILE:HD12	0.45	2.11	2	1
1:A:64:ARG:NE	1:A:67:GLY:HA3	0.45	2.26	5	1
1:A:30:VAL:HG22	1:A:31:THR:N	0.45	2.26	3	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:PHE:CE2	1:A:102:LYS:HB2	0.45	2.47	11	1
1:A:68:ILE:O	1:A:69:ASN:CG	0.45	2.55	14	2
1:A:5:THR:O	1:A:6:LYS:C	0.45	2.55	8	10
1:A:10:PHE:CD1	1:A:89:LEU:O	0.45	2.70	10	1
1:A:12:CYS:O	1:A:12:CYS:SG	0.45	2.74	10	2
1:A:123:LYS:O	1:A:124:GLN:CB	0.45	2.64	13	1
1:A:10:PHE:CZ	1:A:116:LEU:HD12	0.45	2.47	5	1
1:A:59:ALA:O	1:A:61:SER:N	0.45	2.50	4	2
1:A:88:ILE:O	1:A:113:ILE:HA	0.45	2.12	13	14
1:A:26:PHE:CB	1:A:149:CYS:CB	0.45	2.94	12	2
1:A:83:VAL:HG23	1:A:110:ARG:HB3	0.45	1.88	1	2
1:A:49:TRP:CD1	1:A:50:ASN:N	0.45	2.85	6	1
1:A:45:ALA:CB	1:A:50:ASN:ND2	0.45	2.76	6	1
1:A:19:SER:CB	1:A:141:VAL:HG11	0.45	2.41	15	1
1:A:63:LEU:HG	1:A:68:ILE:HG21	0.45	1.89	3	1
1:A:91:MET:O	1:A:92:ASP:C	0.45	2.55	14	4
1:A:9:LEU:HD13	1:A:85:PHE:CG	0.45	2.45	11	1
1:A:74:ALA:O	1:A:75:ARG:O	0.45	2.34	11	1
1:A:92:ASP:O	1:A:115:LEU:CD2	0.45	2.65	8	1
1:A:82:PHE:HA	1:A:111:ALA:CB	0.45	2.38	6	2
1:A:21:ILE:HG21	1:A:142:TYR:CD2	0.45	2.45	3	2
1:A:17:CYS:O	1:A:18:ARG:HB2	0.45	2.11	3	1
1:A:94:SER:O	1:A:95:ASN:C	0.45	2.54	1	1
1:A:92:ASP:OD1	1:A:117:GLY:N	0.45	2.49	7	1
1:A:127:ILE:CG2	1:A:127:ILE:O	0.45	2.57	7	1
1:A:85:PHE:O	1:A:110:ARG:O	0.45	2.34	11	1
1:A:25:VAL:O	1:A:26:PHE:C	0.45	2.55	5	10
1:A:110:ARG:HG3	1:A:110:ARG:O	0.45	2.11	5	5
1:A:154:GLU:HA	1:A:157:ARG:CB	0.45	2.41	2	2
1:A:64:ARG:NH2	1:A:142:TYR:OH	0.45	2.50	5	1
1:A:29:LEU:CD2	1:A:149:CYS:SG	0.45	3.01	14	2
1:A:66:HIS:CE1	1:A:68:ILE:CG1	0.45	3.00	14	1
1:A:63:LEU:O	1:A:68:ILE:HG13	0.45	2.12	3	1
1:A:123:LYS:O	1:A:124:GLN:O	0.45	2.35	3	1
1:A:75:ARG:O	1:A:76:GLN:O	0.45	2.35	8	1
1:A:44:GLY:HA2	1:A:77:VAL:HG22	0.45	1.89	1	1
1:A:30:VAL:CB	1:A:35:ILE:CG1	0.44	2.95	11	1
1:A:30:VAL:CG2	1:A:35:ILE:HG12	0.44	2.42	9	4
1:A:17:CYS:SG	1:A:56:ASP:HB2	0.44	2.52	6	1
1:A:92:ASP:OD1	1:A:116:LEU:CB	0.44	2.65	5	1
1:A:6:LYS:HD2	1:A:156:VAL:O	0.44	2.12	2	4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:LEU:CD2	1:A:99:LEU:HB2	0.44	2.42	13	1
1:A:63:LEU:HB3	1:A:68:ILE:HG21	0.44	1.89	6	1
1:A:82:PHE:CZ	1:A:102:LYS:CG	0.44	3.00	1	1
1:A:11:VAL:HB	1:A:99:LEU:CD1	0.44	2.42	1	1
1:A:90:CYS:HB3	1:A:99:LEU:CD1	0.44	2.43	11	1
1:A:83:VAL:HA	1:A:110:ARG:HB3	0.44	1.89	11	1
1:A:115:LEU:O	1:A:116:LEU:C	0.44	2.55	13	8
1:A:48:ASP:HA	1:A:51:VAL:CG2	0.44	2.43	6	5
1:A:10:PHE:O	1:A:44:GLY:N	0.44	2.51	13	1
1:A:77:VAL:HG11	1:A:82:PHE:CZ	0.44	2.48	4	1
1:A:70:THR:HG23	1:A:71:ALA:H	0.44	1.70	4	1
1:A:92:ASP:O	1:A:127:ILE:O	0.44	2.36	3	1
1:A:15:ASN:O	1:A:15:ASN:OD1	0.44	2.36	1	1
1:A:91:MET:HA	1:A:91:MET:CE	0.44	2.42	10	3
1:A:26:PHE:HB2	1:A:149:CYS:SG	0.44	2.52	11	1
1:A:92:ASP:O	1:A:93:GLU:C	0.44	2.55	6	4
1:A:99:LEU:HB3	1:A:113:ILE:CG2	0.44	2.41	4	2
1:A:21:ILE:HG21	1:A:142:TYR:CB	0.44	2.43	9	2
1:A:30:VAL:HA	1:A:35:ILE:CD1	0.44	2.37	9	1
1:A:47:SER:CB	1:A:49:TRP:CE2	0.44	3.01	5	1
1:A:68:ILE:O	1:A:69:ASN:ND2	0.44	2.51	14	1
1:A:46:VAL:HG12	1:A:46:VAL:O	0.44	2.12	12	3
1:A:126:ILE:O	1:A:127:ILE:CB	0.44	2.65	2	1
1:A:92:ASP:OD1	1:A:126:ILE:HD12	0.44	2.12	6	1
1:A:69:ASN:C	1:A:70:THR:CG2	0.44	2.85	14	1
1:A:9:LEU:CD1	1:A:85:PHE:CD2	0.44	2.99	1	1
1:A:92:ASP:OD2	1:A:128:GLU:CA	0.44	2.66	1	1
1:A:77:VAL:HG11	1:A:82:PHE:CE1	0.44	2.47	11	1
1:A:126:ILE:O	1:A:127:ILE:C	0.44	2.56	15	3
1:A:29:LEU:CD1	1:A:150:ARG:HB2	0.44	2.43	1	4
1:A:90:CYS:O	1:A:91:MET:C	0.44	2.56	6	1
1:A:135:ASP:OD1	1:A:137:ASP:CB	0.44	2.66	6	1
1:A:64:ARG:O	1:A:65:ASN:C	0.44	2.56	5	1
1:A:140:THR:O	1:A:144:GLN:OE1	0.44	2.36	15	1
1:A:110:ARG:O	1:A:110:ARG:HG3	0.44	2.13	15	5
1:A:30:VAL:HB	1:A:35:ILE:CG1	0.44	2.42	11	1
1:A:72:HIS:NE2	1:A:73:LYS:O	0.44	2.50	8	1
1:A:89:LEU:HB3	1:A:114:GLU:O	0.44	2.13	2	2
1:A:60:VAL:CG2	1:A:64:ARG:HD2	0.44	2.43	9	1
1:A:64:ARG:CD	1:A:142:TYR:CZ	0.44	3.01	5	1
1:A:24:ALA:CB	1:A:68:ILE:HG12	0.44	2.41	4	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:GLU:HG2	1:A:94:SER:N	0.44	2.27	1	1
1:A:108:ASN:O	1:A:109:CYS:C	0.44	2.56	7	2
1:A:9:LEU:HD12	1:A:85:PHE:CZ	0.44	2.48	11	1
1:A:63:LEU:O	1:A:68:ILE:HG22	0.44	2.12	1	2
1:A:17:CYS:O	1:A:18:ARG:C	0.44	2.56	4	2
1:A:147:ARG:O	1:A:148:CYS:C	0.44	2.56	7	6
1:A:111:ALA:O	1:A:112:LYS:C	0.44	2.53	11	6
1:A:66:HIS:NE2	1:A:68:ILE:CG1	0.44	2.81	11	1
1:A:12:CYS:O	1:A:13:LEU:C	0.44	2.56	10	8
1:A:18:ARG:NH1	1:A:18:ARG:HG2	0.43	2.28	7	1
1:A:107:LYS:O	1:A:108:ASN:C	0.43	2.56	11	2
1:A:4:VAL:O	1:A:5:THR:HG23	0.43	2.12	10	1
1:A:22:ALA:CB	1:A:148:CYS:HB3	0.43	2.43	9	1
1:A:63:LEU:HD13	1:A:70:THR:HG21	0.43	1.89	5	1
1:A:51:VAL:HG22	1:A:76:GLN:H	0.43	1.73	5	1
1:A:26:PHE:CA	1:A:149:CYS:SG	0.43	3.05	3	1
1:A:82:PHE:HA	1:A:88:ILE:CD1	0.43	2.43	1	3
1:A:119:TYR:O	1:A:120:ASP:OD1	0.43	2.36	8	1
1:A:24:ALA:CB	1:A:70:THR:HB	0.43	2.43	9	1
1:A:121:PRO:O	1:A:123:LYS:N	0.43	2.51	14	1
1:A:25:VAL:CG1	1:A:146:VAL:HA	0.43	2.40	7	1
1:A:84:THR:CG2	1:A:85:PHE:CE1	0.43	3.02	7	1
1:A:9:LEU:HD13	1:A:85:PHE:CE1	0.43	2.40	11	1
1:A:53:ARG:O	1:A:74:ALA:HB2	0.43	2.13	11	1
1:A:30:VAL:O	1:A:36:SER:HB2	0.43	2.13	2	3
1:A:28:LYS:C	1:A:31:THR:HG22	0.43	2.34	13	1
1:A:92:ASP:OD2	1:A:128:GLU:HG2	0.43	2.13	9	2
1:A:80:GLU:O	1:A:84:THR:HB	0.43	2.12	6	3
1:A:83:VAL:O	1:A:110:ARG:HD3	0.43	2.13	9	4
1:A:106:VAL:HG11	1:A:109:CYS:HB2	0.43	1.89	5	2
1:A:46:VAL:O	1:A:46:VAL:CG1	0.43	2.66	5	1
1:A:56:ASP:OD1	1:A:56:ASP:O	0.43	2.36	4	1
1:A:57:PRO:O	1:A:61:SER:HB2	0.43	2.13	4	1
1:A:20:PRO:O	1:A:21:ILE:C	0.43	2.57	15	1
1:A:58:ARG:O	1:A:61:SER:OG	0.43	2.35	3	1
1:A:55:PRO:O	1:A:56:ASP:C	0.43	2.57	15	5
1:A:21:ILE:O	1:A:25:VAL:HB	0.43	2.13	13	2
1:A:88:ILE:CG1	1:A:111:ALA:CB	0.43	2.90	13	1
1:A:145:CYS:O	1:A:148:CYS:HB2	0.43	2.14	7	1
1:A:21:ILE:CD1	1:A:21:ILE:N	0.43	2.77	9	2
1:A:92:ASP:O	1:A:93:GLU:O	0.43	2.37	6	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:MET:CE	1:A:116:LEU:HD13	0.43	2.43	1	2
1:A:23:GLU:OE1	1:A:24:ALA:N	0.43	2.52	3	1
1:A:138:PHE:CE1	1:A:141:VAL:HG11	0.43	2.48	7	1
1:A:34:ASN:CG	1:A:34:ASN:O	0.43	2.57	11	1
1:A:35:ILE:CG1	1:A:35:ILE:O	0.43	2.65	12	1
1:A:106:VAL:HB	1:A:109:CYS:HB2	0.43	1.90	5	3
1:A:96:LEU:O	1:A:100:ASN:CB	0.43	2.67	2	1
1:A:47:SER:HB2	1:A:49:TRP:CE2	0.43	2.47	2	1
1:A:26:PHE:C	1:A:26:PHE:CD1	0.43	2.92	9	1
1:A:79:LYS:HB2	1:A:106:VAL:CG2	0.43	2.36	6	1
1:A:92:ASP:OD1	1:A:128:GLU:HG3	0.43	2.13	3	1
1:A:113:ILE:N	1:A:113:ILE:CD1	0.43	2.77	7	2
1:A:126:ILE:CG2	1:A:128:GLU:HG3	0.43	2.44	7	5
1:A:125:LEU:O	1:A:126:ILE:O	0.43	2.36	8	2
1:A:23:GLU:O	1:A:24:ALA:C	0.43	2.56	4	11
1:A:33:GLN:O	1:A:34:ASN:HB2	0.43	2.14	11	1
1:A:18:ARG:HD2	1:A:19:SER:N	0.43	2.28	13	1
1:A:79:LYS:HG3	1:A:80:GLU:N	0.43	2.27	6	1
1:A:92:ASP:OD1	1:A:116:LEU:HB2	0.43	2.13	5	1
1:A:69:ASN:C	1:A:70:THR:HG23	0.43	2.34	14	1
1:A:19:SER:HB3	1:A:141:VAL:HG11	0.43	1.91	15	1
1:A:26:PHE:HA	1:A:149:CYS:SG	0.43	2.54	3	1
1:A:95:ASN:N	1:A:95:ASN:OD1	0.43	2.51	1	1
1:A:78:THR:O	1:A:79:LYS:C	0.43	2.57	12	5
1:A:45:ALA:O	1:A:46:VAL:HB	0.43	2.12	14	3
1:A:53:ARG:O	1:A:54:SER:C	0.43	2.57	14	4
1:A:127:ILE:CD1	1:A:144:GLN:CB	0.43	2.97	9	1
1:A:68:ILE:O	1:A:69:ASN:C	0.43	2.56	4	1
1:A:63:LEU:O	1:A:64:ARG:C	0.43	2.57	4	1
1:A:98:ASP:O	1:A:102:LYS:HG2	0.43	2.13	15	1
1:A:51:VAL:CG2	1:A:76:GLN:HB2	0.43	2.44	15	1
1:A:9:LEU:HD12	1:A:85:PHE:CE1	0.43	2.49	3	1
1:A:134:ASN:O	1:A:135:ASP:CB	0.43	2.66	11	1
1:A:9:LEU:HD22	1:A:88:ILE:CG1	0.43	2.42	13	3
1:A:59:ALA:O	1:A:60:VAL:C	0.43	2.56	4	2
1:A:30:VAL:HG22	1:A:36:SER:CB	0.43	2.43	11	1
1:A:26:PHE:HA	1:A:29:LEU:HD12	0.43	1.90	8	1
1:A:4:VAL:O	1:A:38:ASN:CG	0.43	2.57	9	1
1:A:79:LYS:CA	1:A:106:VAL:HG22	0.43	2.44	6	1
1:A:6:LYS:CG	1:A:39:TRP:CZ2	0.43	3.02	6	1
1:A:106:VAL:O	1:A:108:ASN:N	0.43	2.51	4	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:ALA:C	1:A:46:VAL:HG23	0.43	2.34	14	1
1:A:63:LEU:HB3	1:A:68:ILE:CG2	0.43	2.43	14	1
1:A:63:LEU:CG	1:A:68:ILE:HG21	0.43	2.44	1	1
1:A:73:LYS:O	1:A:74:ALA:C	0.42	2.57	12	3
1:A:29:LEU:O	1:A:30:VAL:C	0.42	2.57	10	2
1:A:126:ILE:O	1:A:128:GLU:N	0.42	2.52	13	2
1:A:107:LYS:O	1:A:108:ASN:HB3	0.42	2.14	5	1
1:A:9:LEU:HD23	1:A:85:PHE:CD2	0.42	2.49	14	1
1:A:66:HIS:CE1	1:A:68:ILE:HG12	0.42	2.49	14	1
1:A:75:ARG:HG3	1:A:76:GLN:N	0.42	2.28	15	1
1:A:92:ASP:OD2	1:A:127:ILE:C	0.42	2.57	1	1
1:A:26:PHE:CD1	1:A:26:PHE:O	0.42	2.72	13	1
1:A:95:ASN:CA	1:A:115:LEU:HD22	0.42	2.44	6	1
1:A:130:PRO:O	1:A:131:TYR:C	0.42	2.57	4	1
1:A:127:ILE:CG2	1:A:128:GLU:N	0.42	2.77	14	1
1:A:140:THR:O	1:A:141:VAL:C	0.42	2.57	14	1
1:A:147:ARG:HA	1:A:150:ARG:CB	0.42	2.44	7	1
1:A:11:VAL:O	1:A:90:CYS:HA	0.42	2.14	7	5
1:A:127:ILE:O	1:A:127:ILE:HG23	0.42	2.13	12	1
1:A:123:LYS:C	1:A:124:GLN:CG	0.42	2.88	13	1
1:A:64:ARG:CG	1:A:142:TYR:CE2	0.42	3.02	5	1
1:A:154:GLU:HG3	1:A:155:LYS:N	0.42	2.29	4	2
1:A:92:ASP:O	1:A:93:GLU:HB2	0.42	2.14	12	2
1:A:7:SER:CB	1:A:85:PHE:HA	0.42	2.44	8	1
1:A:26:PHE:CB	1:A:149:CYS:HB2	0.42	2.45	2	2
1:A:27:ARG:HD3	1:A:69:ASN:O	0.42	2.14	9	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:152:PHE:CE1	0.42	3.02	6	1
1:A:15:ASN:CG	1:A:15:ASN:O	0.42	2.57	6	1
1:A:75:ARG:O	1:A:76:GLN:C	0.42	2.57	5	1
1:A:15:ASN:O	1:A:15:ASN:CG	0.42	2.57	4	1
1:A:92:ASP:OD2	1:A:128:GLU:HA	0.42	2.14	1	2
1:A:22:ALA:HA	1:A:145:CYS:O	0.42	2.13	7	1
1:A:127:ILE:HG12	1:A:127:ILE:O	0.42	2.15	15	3
1:A:92:ASP:OD1	1:A:92:ASP:C	0.42	2.57	10	1
1:A:44:GLY:HA3	1:A:77:VAL:CG2	0.42	2.44	6	2
1:A:48:ASP:O	1:A:48:ASP:CG	0.42	2.58	1	1
1:A:57:PRO:C	1:A:60:VAL:HG12	0.42	2.34	7	1
1:A:21:ILE:H	1:A:21:ILE:HD12	0.42	1.73	12	1
1:A:13:LEU:HD13	1:A:95:ASN:ND2	0.42	2.30	12	1
1:A:17:CYS:O	1:A:18:ARG:HB3	0.42	2.14	8	1
1:A:115:LEU:H	1:A:115:LEU:HD23	0.42	1.73	2	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:126:ILE:C	1:A:127:ILE:HG22	0.42	2.35	15	1
1:A:67:GLY:O	1:A:68:ILE:C	0.42	2.57	12	1
1:A:93:GLU:O	1:A:94:SER:C	0.42	2.58	8	1
1:A:19:SER:OG	1:A:19:SER:O	0.42	2.34	10	1
1:A:27:ARG:HD3	1:A:69:ASN:CB	0.42	2.44	9	1
1:A:16:ILE:CG2	1:A:54:SER:O	0.42	2.63	5	1
1:A:122:GLN:O	1:A:122:GLN:CG	0.42	2.67	5	1
1:A:104:ASN:N	1:A:104:ASN:OD1	0.42	2.53	5	1
1:A:126:ILE:HG23	1:A:128:GLU:HG3	0.42	1.91	15	1
1:A:51:VAL:HG13	1:A:75:ARG:CA	0.42	2.35	8	1
1:A:83:VAL:O	1:A:110:ARG:HD2	0.42	2.15	8	1
1:A:116:LEU:CD1	1:A:148:CYS:HA	0.42	2.44	10	1
1:A:33:GLN:O	1:A:34:ASN:CG	0.42	2.57	9	1
1:A:92:ASP:CG	1:A:116:LEU:O	0.42	2.58	6	1
1:A:56:ASP:C	1:A:60:VAL:CG2	0.42	2.88	4	1
1:A:10:PHE:CZ	1:A:116:LEU:CD1	0.42	3.02	15	1
1:A:15:ASN:CB	1:A:45:ALA:HB2	0.42	2.44	3	1
1:A:83:VAL:HA	1:A:110:ARG:HG3	0.42	1.91	3	2
1:A:107:LYS:O	1:A:107:LYS:HG3	0.42	2.14	11	1
1:A:30:VAL:O	1:A:31:THR:C	0.42	2.57	3	2
1:A:62:CYS:O	1:A:63:LEU:C	0.42	2.57	2	1
1:A:91:MET:C	1:A:92:ASP:CG	0.42	2.79	14	1
1:A:16:ILE:O	1:A:17:CYS:HB3	0.42	2.15	1	1
1:A:18:ARG:HA	1:A:141:VAL:CG1	0.42	2.44	8	2
1:A:82:PHE:O	1:A:111:ALA:N	0.42	2.53	9	2
1:A:89:LEU:HD21	1:A:152:PHE:CD2	0.42	2.49	13	1
1:A:42:ASP:HB2	1:A:85:PHE:CE1	0.42	2.49	2	1
1:A:126:ILE:O	1:A:127:ILE:HB	0.42	2.15	14	2
1:A:26:PHE:CE1	1:A:30:VAL:HG11	0.42	2.50	9	2
1:A:24:ALA:HB1	1:A:68:ILE:CG1	0.42	2.45	4	1
1:A:26:PHE:CD1	1:A:41:ILE:CG1	0.42	3.03	14	1
1:A:54:SER:O	1:A:55:PRO:O	0.42	2.38	14	1
1:A:26:PHE:CD1	1:A:41:ILE:HD13	0.42	2.50	1	1
1:A:4:VAL:C	1:A:38:ASN:OD1	0.41	2.57	7	1
1:A:106:VAL:O	1:A:107:LYS:C	0.41	2.59	4	2
1:A:76:GLN:HA	1:A:76:GLN:OE1	0.41	2.15	11	1
1:A:35:ILE:HD11	1:A:153:LEU:CD1	0.41	2.44	10	1
1:A:30:VAL:CG2	1:A:31:THR:N	0.41	2.83	13	1
1:A:21:ILE:O	1:A:25:VAL:CB	0.41	2.68	6	2
1:A:68:ILE:O	1:A:69:ASN:HB2	0.41	2.15	15	2
1:A:132:TYR:O	1:A:133:GLY:C	0.41	2.57	2	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:135:ASP:O	1:A:136:ALA:C	0.41	2.58	2	1
1:A:92:ASP:OD2	1:A:128:GLU:CD	0.41	2.58	9	1
1:A:18:ARG:N	1:A:138:PHE:CZ	0.41	2.88	6	1
1:A:28:LYS:O	1:A:29:LEU:C	0.41	2.59	5	1
1:A:144:GLN:HG3	1:A:145:CYS:N	0.41	2.29	5	1
1:A:122:GLN:O	1:A:122:GLN:HG3	0.41	2.14	5	1
1:A:46:VAL:CG2	1:A:99:LEU:HD11	0.41	2.44	3	1
1:A:92:ASP:O	1:A:115:LEU:HB2	0.41	2.15	10	1
1:A:30:VAL:O	1:A:32:ASP:N	0.41	2.53	13	1
1:A:154:GLU:HA	1:A:157:ARG:HB3	0.41	1.91	6	1
1:A:92:ASP:OD2	1:A:126:ILE:CG2	0.41	2.68	1	1
1:A:26:PHE:O	1:A:27:ARG:C	0.41	2.58	8	1
1:A:58:ARG:NH2	1:A:138:PHE:CD2	0.41	2.87	2	1
1:A:50:ASN:OD1	1:A:53:ARG:CB	0.41	2.68	9	1
1:A:4:VAL:HG12	1:A:5:THR:N	0.41	2.30	14	1
1:A:8:VAL:O	1:A:41:ILE:HA	0.41	2.16	1	2
1:A:22:ALA:HA	1:A:148:CYS:HG	0.41	1.76	15	1
1:A:56:ASP:CB	1:A:57:PRO:HD2	0.41	2.45	15	1
1:A:61:SER:O	1:A:65:ASN:HB2	0.41	2.15	1	2
1:A:114:GLU:HG3	1:A:115:LEU:N	0.41	2.30	3	1
1:A:125:LEU:O	1:A:126:ILE:HB	0.41	2.15	11	2
1:A:120:ASP:HB2	1:A:121:PRO:HD3	0.41	1.92	11	1
1:A:28:LYS:O	1:A:32:ASP:HB2	0.41	2.15	11	1
1:A:92:ASP:C	1:A:92:ASP:OD1	0.41	2.57	13	1
1:A:12:CYS:HB3	1:A:19:SER:OG	0.41	2.15	9	1
1:A:50:ASN:OD1	1:A:53:ARG:HD3	0.41	2.16	9	1
1:A:131:TYR:C	1:A:131:TYR:CD1	0.41	2.90	15	1
1:A:137:ASP:OD1	1:A:137:ASP:O	0.41	2.38	1	1
1:A:8:VAL:O	1:A:85:PHE:CD2	0.41	2.74	7	1
1:A:29:LEU:HD11	1:A:149:CYS:SG	0.41	2.53	2	1
1:A:13:LEU:O	1:A:50:ASN:ND2	0.41	2.54	6	1
1:A:15:ASN:OD1	1:A:43:SER:OG	0.41	2.39	5	1
1:A:115:LEU:O	1:A:117:GLY:N	0.41	2.53	4	2
1:A:35:ILE:HD12	1:A:153:LEU:HD11	0.41	1.92	4	2
1:A:51:VAL:CG1	1:A:75:ARG:HD2	0.41	2.46	4	1
1:A:9:LEU:HD21	1:A:88:ILE:HD11	0.41	1.92	14	1
1:A:7:SER:HA	1:A:40:VAL:O	0.41	2.15	14	1
1:A:14:GLY:O	1:A:15:ASN:HB3	0.41	2.14	15	1
1:A:119:TYR:CD1	1:A:119:TYR:N	0.41	2.88	8	1
1:A:98:ASP:O	1:A:102:LYS:HG3	0.41	2.14	9	1
1:A:24:ALA:HB3	1:A:63:LEU:HD21	0.41	1.91	5	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:ILE:HG13	1:A:39:TRP:CD1	0.41	2.50	14	1
1:A:8:VAL:O	1:A:41:ILE:CG2	0.41	2.57	14	1
1:A:120:ASP:N	1:A:121:PRO:HD3	0.41	2.30	14	1
1:A:83:VAL:HG23	1:A:110:ARG:CB	0.41	2.46	11	1
1:A:83:VAL:HG23	1:A:110:ARG:N	0.41	2.30	11	1
1:A:8:VAL:HB	1:A:152:PHE:CZ	0.41	2.51	13	1
1:A:119:TYR:N	1:A:119:TYR:CD1	0.41	2.88	9	1
1:A:16:ILE:C	1:A:17:CYS:SG	0.41	2.98	9	1
1:A:86:ASP:O	1:A:112:LYS:HB3	0.41	2.16	6	1
1:A:54:SER:OG	1:A:55:PRO:HD2	0.41	2.15	5	1
1:A:26:PHE:CE2	1:A:41:ILE:HG12	0.41	2.50	11	1
1:A:69:ASN:ND2	1:A:69:ASN:N	0.41	2.69	12	1
1:A:15:ASN:ND2	1:A:20:PRO:HG3	0.41	2.30	12	1
1:A:123:LYS:CG	1:A:123:LYS:O	0.41	2.68	10	1
1:A:153:LEU:O	1:A:157:ARG:HB2	0.41	2.15	14	2
1:A:12:CYS:O	1:A:13:LEU:HB3	0.41	2.16	15	1
1:A:142:TYR:O	1:A:145:CYS:HB2	0.41	2.16	7	1
1:A:152:PHE:CZ	1:A:156:VAL:CG2	0.41	2.92	8	1
1:A:91:MET:O	1:A:92:ASP:CB	0.41	2.68	8	1
1:A:46:VAL:CG2	1:A:99:LEU:HG	0.41	2.46	10	1
1:A:25:VAL:O	1:A:27:ARG:N	0.41	2.54	2	1
1:A:127:ILE:CG1	1:A:144:GLN:HB3	0.41	2.46	9	1
1:A:63:LEU:O	1:A:65:ASN:N	0.41	2.53	4	1
1:A:59:ALA:O	1:A:63:LEU:HB3	0.41	2.15	3	1
1:A:19:SER:HB3	1:A:20:PRO:HD3	0.41	1.92	1	1
1:A:98:ASP:O	1:A:99:LEU:C	0.41	2.58	1	1
1:A:8:VAL:HB	1:A:152:PHE:CE2	0.41	2.50	9	1
1:A:13:LEU:O	1:A:14:GLY:C	0.41	2.57	3	1
1:A:82:PHE:CB	1:A:109:CYS:SG	0.41	3.08	1	1
1:A:87:TYR:CE2	1:A:156:VAL:HG21	0.40	2.51	2	1
1:A:13:LEU:O	1:A:15:ASN:N	0.40	2.54	6	1
1:A:16:ILE:CD1	1:A:17:CYS:N	0.40	2.75	15	1
1:A:91:MET:HE3	1:A:91:MET:HA	0.40	1.91	10	1
1:A:9:LEU:HD22	1:A:85:PHE:CD2	0.40	2.52	14	1
1:A:150:ARG:O	1:A:151:ALA:C	0.40	2.59	7	1
1:A:96:LEU:CD2	1:A:100:ASN:N	0.40	2.84	2	1
1:A:119:TYR:O	1:A:120:ASP:HB2	0.40	2.16	2	1
1:A:33:GLN:C	1:A:35:ILE:N	0.40	2.74	1	1
1:A:82:PHE:HA	1:A:88:ILE:HD11	0.40	1.92	1	1
1:A:65:ASN:OD1	1:A:66:HIS:N	0.40	2.55	7	1
1:A:6:LYS:CG	1:A:39:TRP:CH2	0.40	3.04	12	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:LEU:HB2	1:A:95:ASN:ND2	0.40	2.32	12	1
1:A:121:PRO:HG3	1:A:147:ARG:CG	0.40	2.47	10	1
1:A:153:LEU:O	1:A:154:GLU:C	0.40	2.56	2	1
1:A:30:VAL:CA	1:A:35:ILE:CD1	0.40	2.98	9	1
1:A:87:TYR:CE1	1:A:156:VAL:HG11	0.40	2.51	6	1
1:A:25:VAL:O	1:A:29:LEU:HB2	0.40	2.17	6	1
1:A:28:LYS:HA	1:A:31:THR:OG1	0.40	2.17	6	1
1:A:76:GLN:O	1:A:77:VAL:C	0.40	2.60	14	1
1:A:50:ASN:HA	1:A:53:ARG:CD	0.40	2.46	15	1
1:A:76:GLN:OE1	1:A:77:VAL:O	0.40	2.39	3	1
1:A:18:ARG:C	1:A:59:ALA:HB1	0.40	2.36	11	1
1:A:47:SER:O	1:A:51:VAL:CG2	0.40	2.69	13	1
1:A:147:ARG:C	1:A:149:CYS:N	0.40	2.75	6	1
1:A:63:LEU:HD23	1:A:68:ILE:HG21	0.40	1.87	5	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	153/157 (97%)	108±4 (70±3%)	33±5 (21±3%)	13±3 (8±2%)	2	14
All	All	2295/2355 (97%)	1617 (70%)	489 (21%)	189 (8%)	2	14

All 65 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	6	LYS	12
1	A	46	VAL	8
1	A	19	SER	8
1	A	92	ASP	7
1	A	74	ALA	6
1	A	33	GLN	6
1	A	120	ASP	6
1	A	95	ASN	5

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	16	ILE	5
1	A	18	ARG	5
1	A	17	CYS	4
1	A	68	ILE	4
1	A	13	LEU	4
1	A	69	ASN	4
1	A	133	GLY	4
1	A	127	ILE	4
1	A	14	GLY	4
1	A	65	ASN	4
1	A	135	ASP	4
1	A	93	GLU	4
1	A	75	ARG	4
1	A	116	LEU	4
1	A	126	ILE	3
1	A	34	ASN	3
1	A	128	GLU	3
1	A	134	ASN	3
1	A	130	PRO	3
1	A	54	SER	3
1	A	5	THR	3
1	A	77	VAL	3
1	A	131	TYR	3
1	A	123	LYS	2
1	A	109	CYS	2
1	A	125	LEU	2
1	A	70	THR	2
1	A	121	PRO	2
1	A	138	PHE	2
1	A	107	LYS	2
1	A	12	CYS	2
1	A	88	ILE	2
1	A	67	GLY	2
1	A	129	ASP	2
1	A	146	VAL	2
1	A	117	GLY	1
1	A	137	ASP	1
1	A	118	SER	1
1	A	53	ARG	1
1	A	156	VAL	1
1	A	124	GLN	1
1	A	51	VAL	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	20	PRO	1
1	A	119	TYR	1
1	A	38	ASN	1
1	A	84	THR	1
1	A	61	SER	1
1	A	96	LEU	1
1	A	114	GLU	1
1	A	55	PRO	1
1	A	122	GLN	1
1	A	76	GLN	1
1	A	82	PHE	1
1	A	71	ALA	1
1	A	4	VAL	1
1	A	56	ASP	1
1	A	112	LYS	1

### 6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	139/141 (99%)	91±5 (65±4%)	48±5 (35±4%)	1	10
All	All	2085/2115 (99%)	1363 (65%)	722 (35%)	1	10

All 114 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	109	CYS	15
1	A	89	LEU	15
1	A	12	CYS	13
1	A	63	LEU	13
1	A	9	LEU	13
1	A	8	VAL	13
1	A	157	ARG	12
1	A	96	LEU	12
1	A	79	LYS	12
1	A	5	THR	12

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	27	ARG	12
1	A	49	TRP	12
1	A	149	CYS	11
1	A	73	LYS	11
1	A	120	ASP	11
1	A	78	THR	11
1	A	75	ARG	11
1	A	125	LEU	11
1	A	19	SER	11
1	A	116	LEU	11
1	A	147	ARG	11
1	A	6	LYS	11
1	A	123	LYS	10
1	A	28	LYS	10
1	A	115	LEU	10
1	A	102	LYS	10
1	A	47	SER	10
1	A	137	ASP	9
1	A	31	THR	9
1	A	90	CYS	9
1	A	98	ASP	8
1	A	61	SER	8
1	A	33	GLN	8
1	A	42	ASP	8
1	A	26	PHE	8
1	A	101	ARG	8
1	A	145	CYS	8
1	A	54	SER	8
1	A	124	GLN	8
1	A	30	VAL	8
1	A	118	SER	7
1	A	86	ASP	7
1	A	143	GLN	7
1	A	132	TYR	7
1	A	70	THR	7
1	A	13	LEU	7
1	A	135	ASP	7
1	A	18	ARG	7
1	A	110	ARG	7
1	A	17	CYS	7
1	A	113	ILE	7
1	A	155	LYS	7

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	53	ARG	7
1	A	129	ASP	7
1	A	93	GLU	6
1	A	112	LYS	6
1	A	64	ARG	6
1	A	91	MET	6
1	A	114	GLU	5
1	A	65	ASN	5
1	A	152	PHE	5
1	A	92	ASP	5
1	A	56	ASP	5
1	A	144	GLN	5
1	A	36	SER	5
1	A	148	CYS	5
1	A	105	GLN	5
1	A	7	SER	5
1	A	97	ARG	5
1	A	139	GLU	4
1	A	43	SER	4
1	A	138	PHE	4
1	A	48	ASP	4
1	A	16	ILE	4
1	A	23	GLU	4
1	A	107	LYS	4
1	A	58	ARG	4
1	A	94	SER	4
1	A	76	GLN	4
1	A	34	ASN	4
1	A	80	GLU	4
1	A	104	ASN	4
1	A	62	CYS	4
1	A	131	TYR	4
1	A	154	GLU	3
1	A	83	VAL	3
1	A	88	ILE	3
1	A	142	TYR	3
1	A	122	GLN	3
1	A	126	ILE	3
1	A	68	ILE	3
1	A	108	ASN	3
1	A	134	ASN	3
1	A	38	ASN	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	103	SER	3
1	A	150	ARG	3
1	A	10	PHE	3
1	A	100	ASN	2
1	A	81	ASP	2
1	A	140	THR	2
1	A	32	ASP	2
1	A	95	ASN	2
1	A	119	TYR	2
1	A	69	ASN	2
1	A	46	VAL	2
1	A	87	TYR	1
1	A	50	ASN	1
1	A	66	HIS	1
1	A	37	ASP	1
1	A	60	VAL	1
1	A	35	ILE	1
1	A	77	VAL	1
1	A	21	ILE	1
1	A	15	ASN	1

### 6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

### 6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no carbohydrates in this entry.

### 6.6 Ligand geometry ⓘ

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

No chemical shift data were provided