



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 03:40 PM BST

PDB ID : 1J5I
Title : Solution Structure of a Novel Chromoprotein Derived from Apo-Neocarzinostatin and a Synthetic Chromophore
Authors : Urbaniak, M.D.; Muskett, F.W.; Finucane, M.D.; Caddick, S.; Woolfson, D.N.
Deposited on : 2002-05-02

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 : 1.7.1 (RC1), CSD as537be (2016)
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

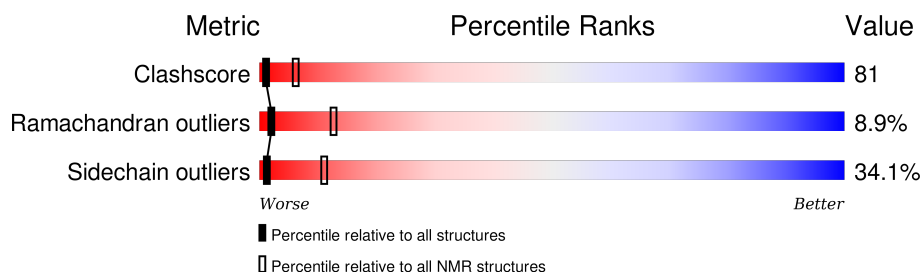
1 Overall quality at a glance

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 ≥ 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	122	

2 Ensemble composition and analysis ⓘ

This entry contains 44 models. Model 11 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:3-A:111 (109)	0.55	11

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 5 clusters and 4 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 10, 11, 12, 13, 14, 16, 17, 23, 25, 28, 33, 37, 40, 42
2	4, 5, 6, 7, 8, 18, 21, 30, 32, 39
3	2, 3, 9, 19, 20, 22, 34
4	26, 27, 35, 36, 38, 44
5	24, 43
Single-model clusters	15; 29; 31; 41

3 Entry composition [i](#)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 1557 atoms, of which 756 are hydrogens and 0 are deuteriums.

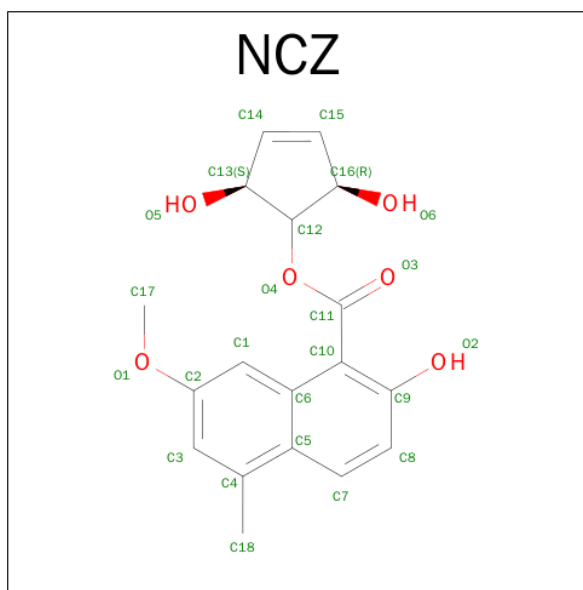
- Molecule 1 is a protein called PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin).

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	113	Total	C	H	N	O	S	0
			1515	476	738	132	165	4	

There are 9 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	-8	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P0A3R9
A	-7	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P0A3R9
A	-6	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P0A3R9
A	-5	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P0A3R9
A	-4	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P0A3R9
A	-3	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P0A3R9
A	-2	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP P0A3R9
A	-1	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP P0A3R9
A	0	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP P0A3R9

- Molecule 2 is 2-HYDROXY-7-METHOXY-5-METHYL-NAPHTHALENE-1-CARBOXYLIC ACID MESO-2,5-DIHYDROXY-CYCLOPENT-3-ENYL ESTER (three-letter code: NCZ) (formula: C₁₈H₁₈O₆).



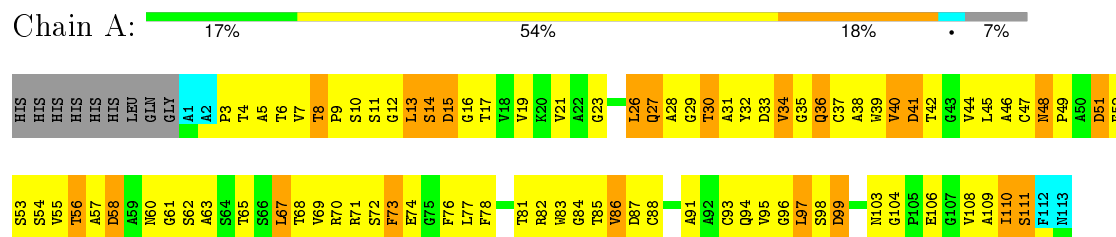
Mol	Chain	Residues	Atoms			
			Total	C	H	O
2	A	1	42	18	18	6

4 Residue-property plots [i](#)

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: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)

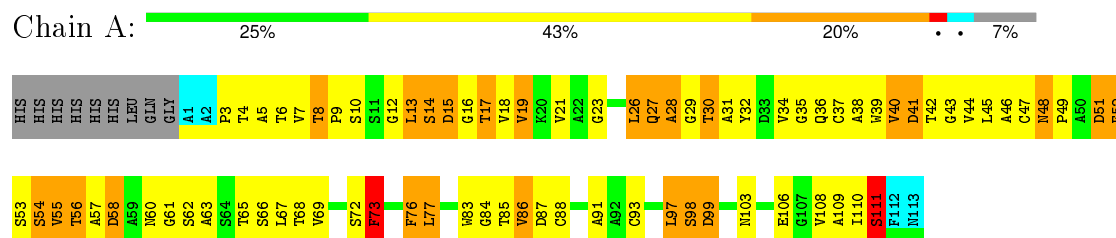


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

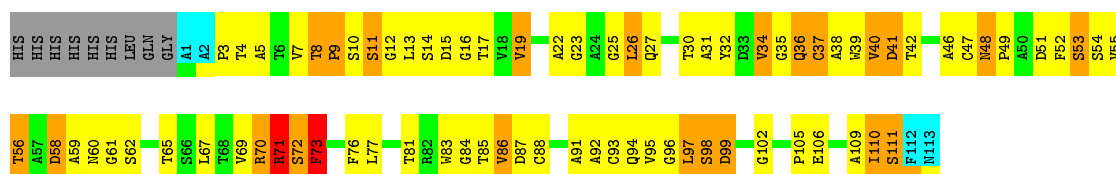
- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



4.2.2 Score per residue for model 2

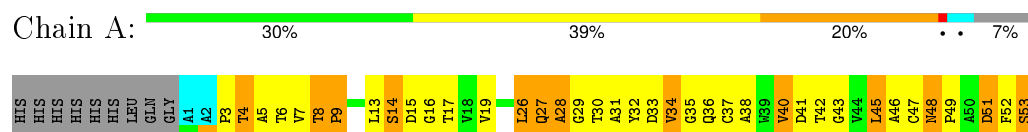
- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)





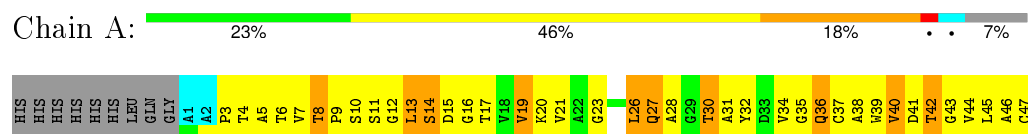
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



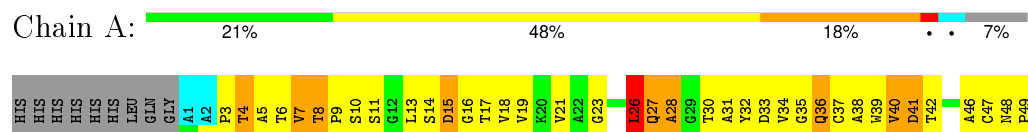
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



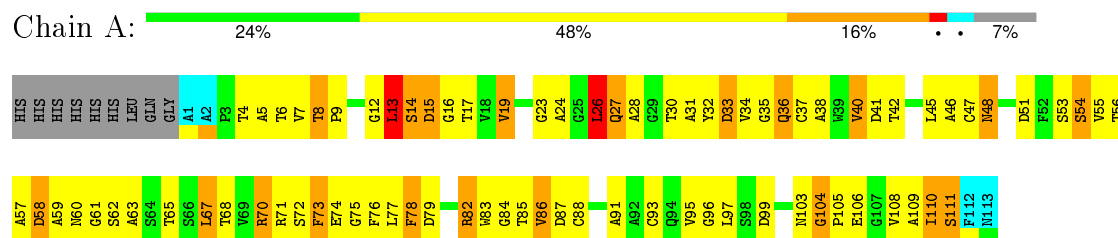
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



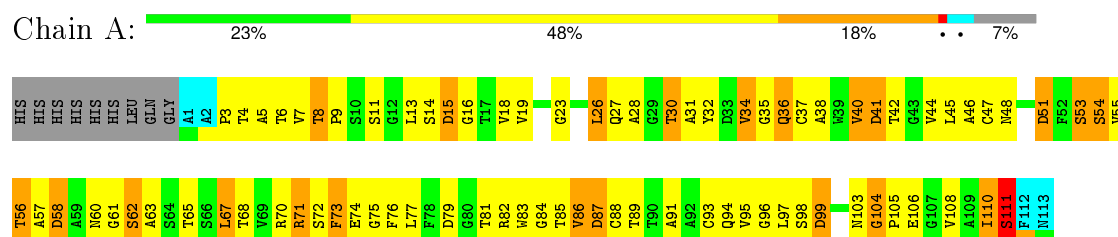
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



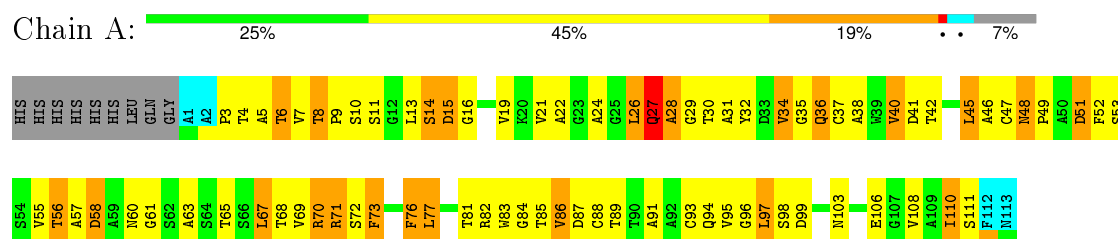
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



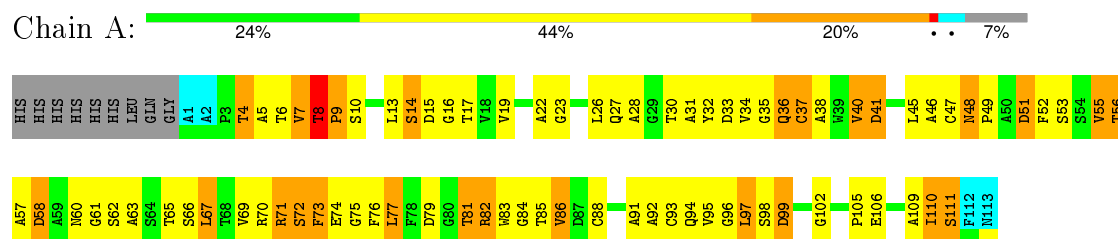
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



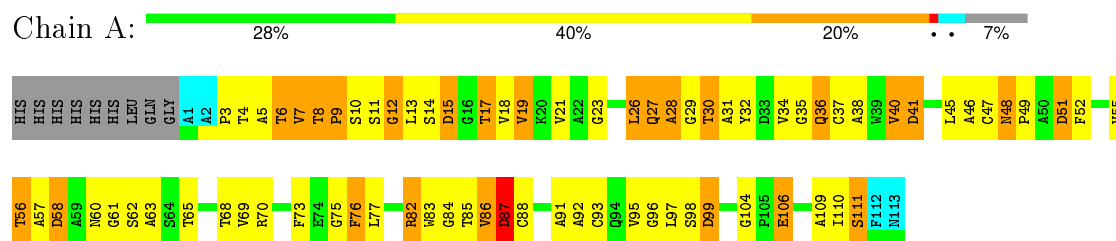
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



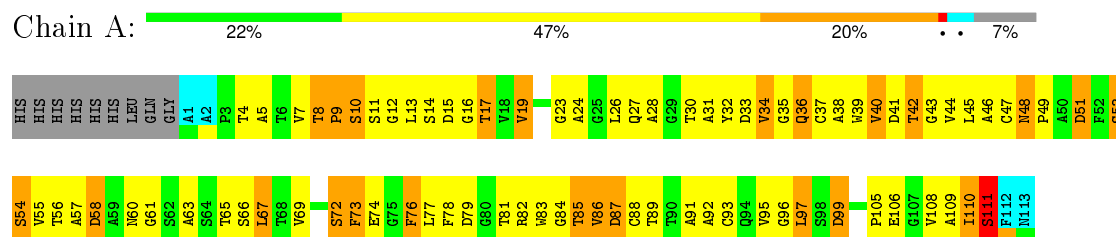
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



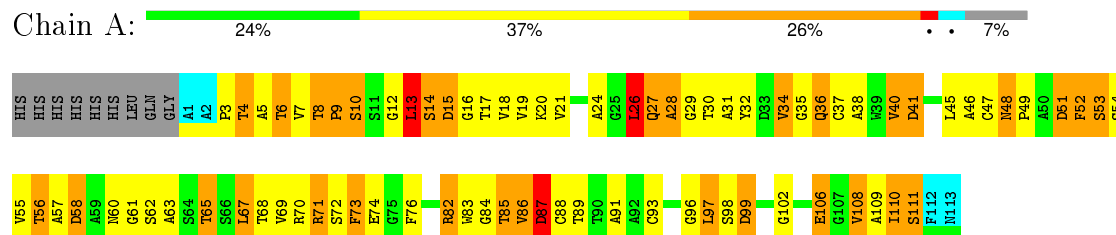
4.2.11 Score per residue for model 11 (medoid)

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



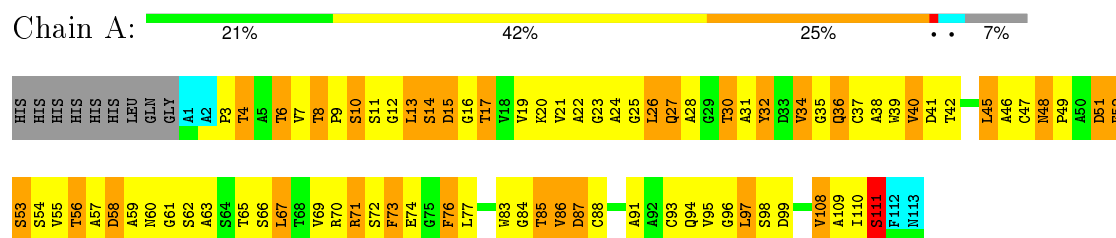
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



4.2.13 Score per residue for model 13

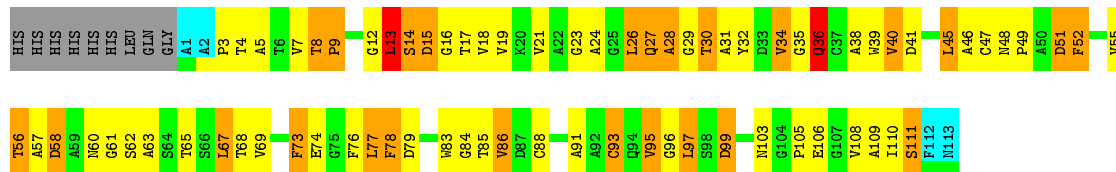
- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)

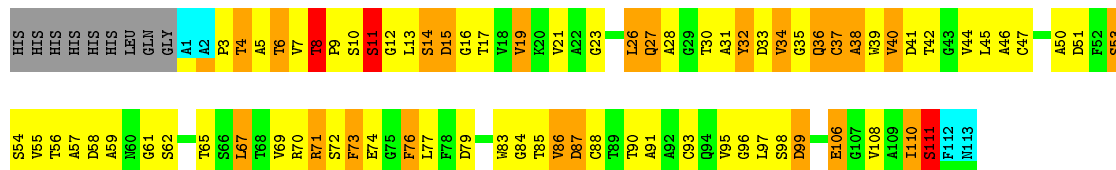
Chain A:  29% 39% 20% • • 7%



4.2.15 Score per residue for model 15


- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)

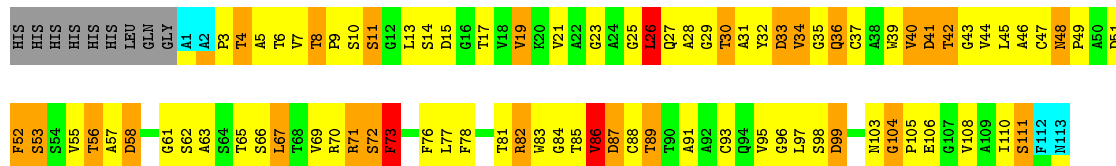
Chain A:  25% 43% 19% • • 7%



4.2.16 Score per residue for model 16

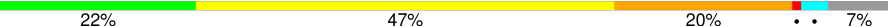
- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)

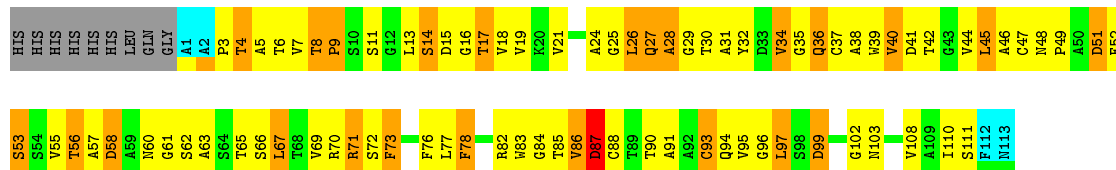
Chain A:  20% 46% 20% • • 7%



4.2.17 Score per residue for model 17

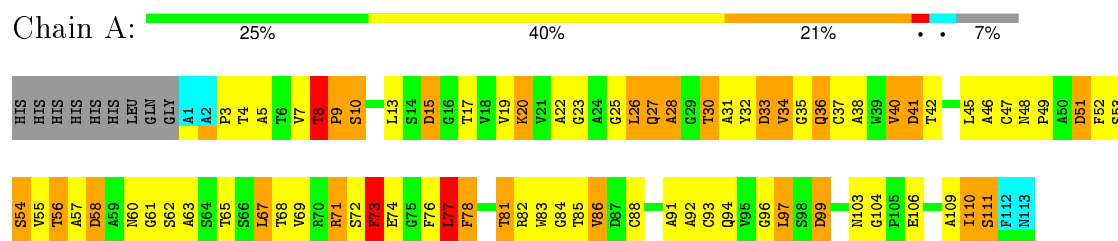
- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)

Chain A:  22% 47% 20% • • 7%



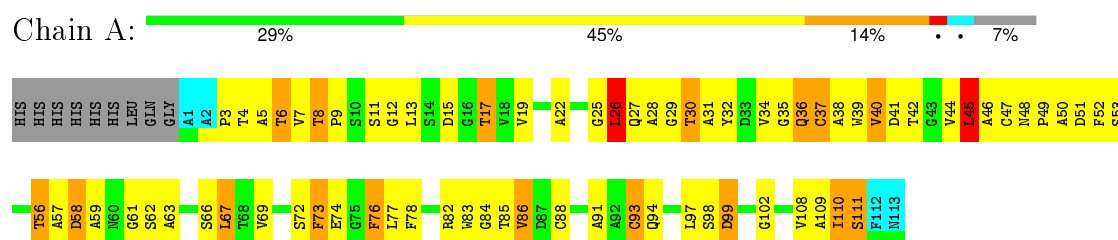
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



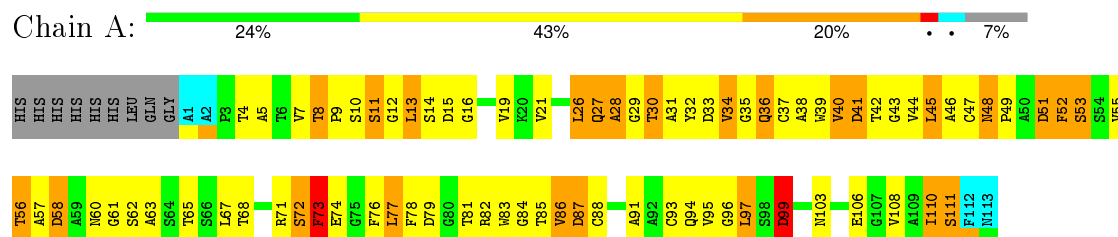
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



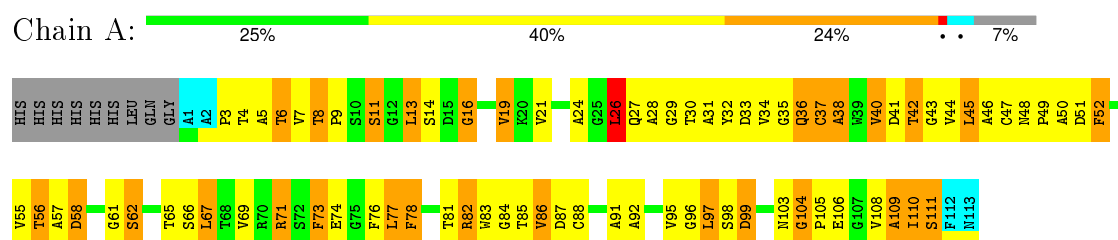
4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



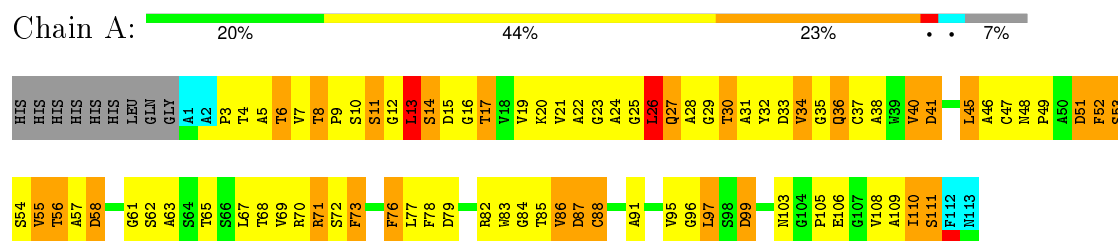
4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



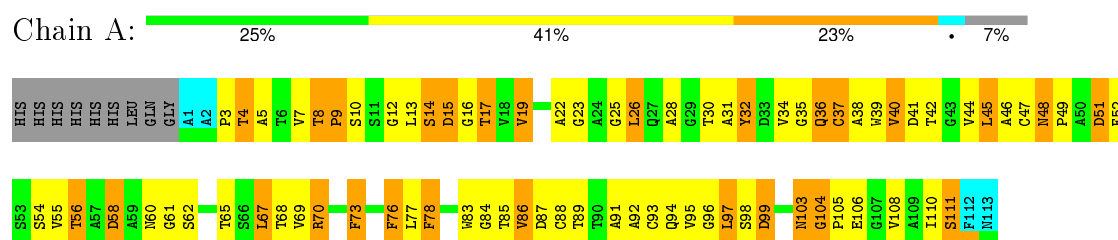
4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



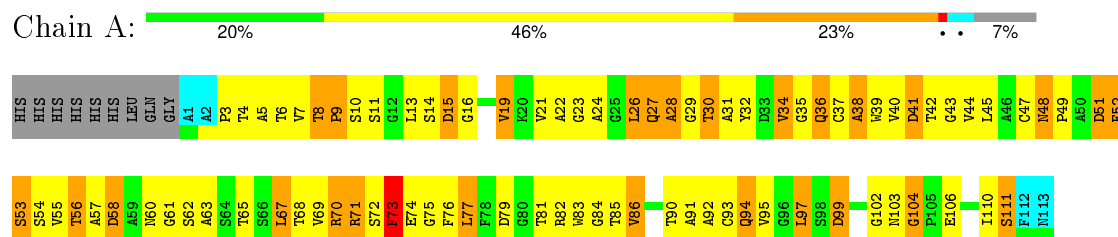
4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



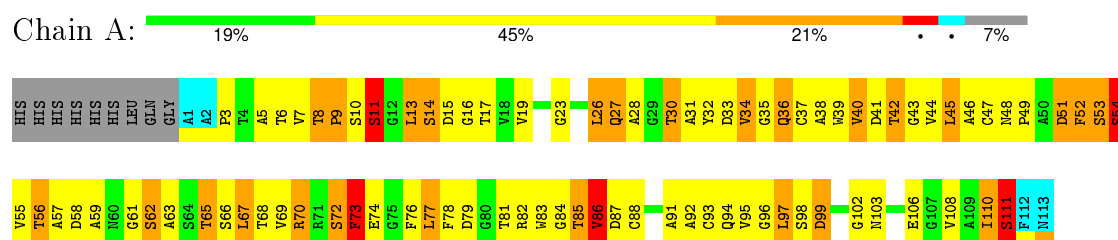
4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



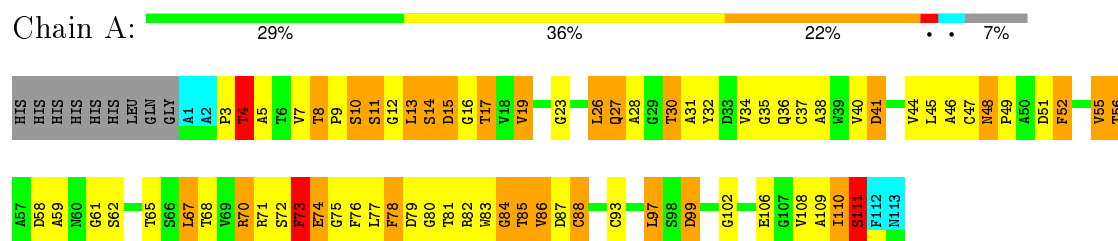
4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



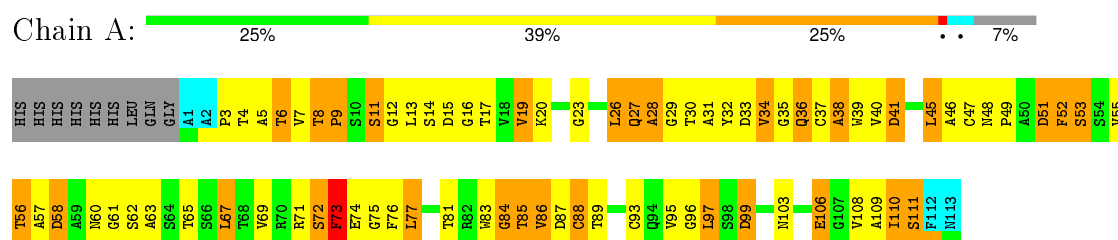
4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



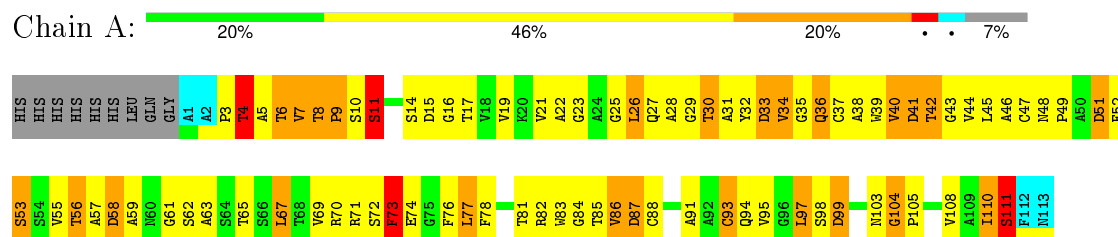
4.2.27 Score per residue for model 27

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



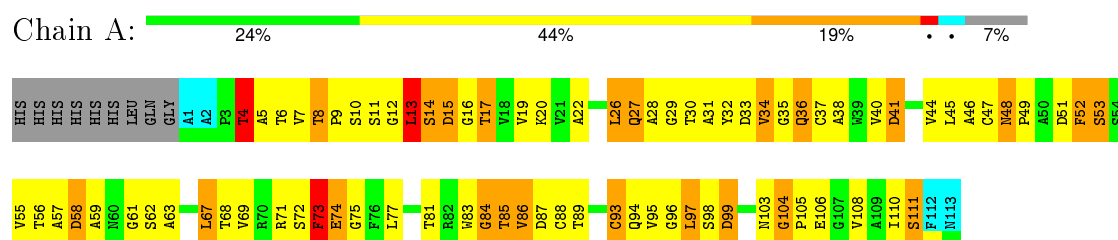
4.2.28 Score per residue for model 28

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



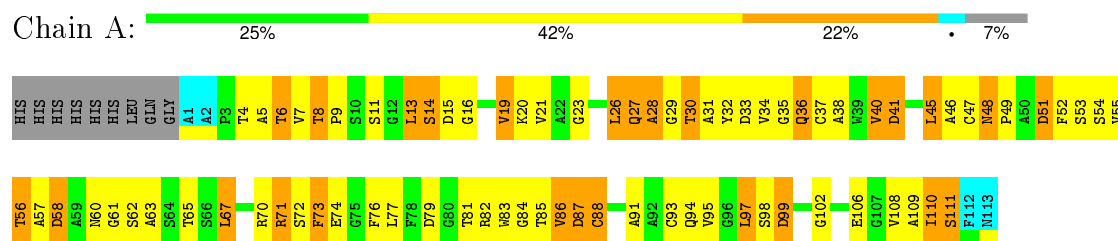
4.2.29 Score per residue for model 29

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



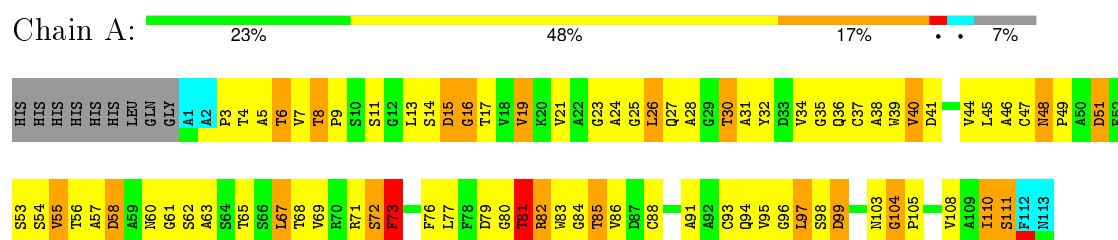
4.2.30 Score per residue for model 30

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



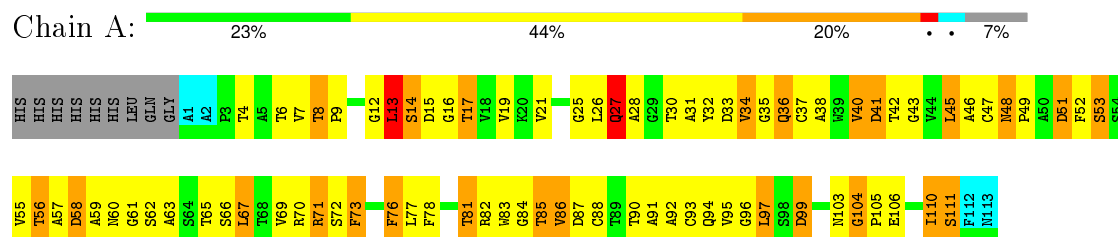
4.2.31 Score per residue for model 31

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



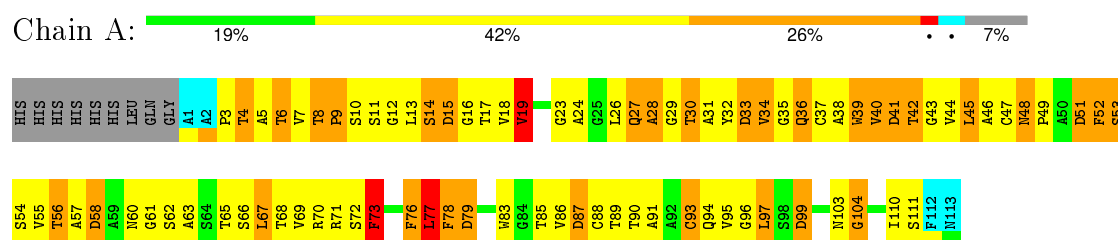
4.2.32 Score per residue for model 32

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



4.2.33 Score per residue for model 33

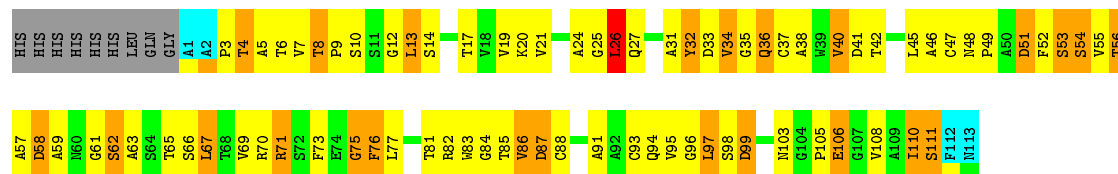
- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



4.2.34 Score per residue for model 34

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)

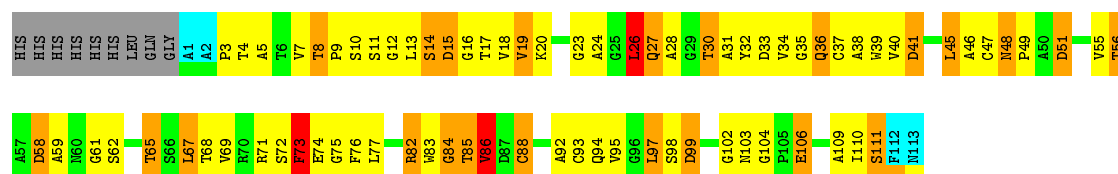
Chain A: 25% 44% 20% 7%



4.2.35 Score per residue for model 35

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)

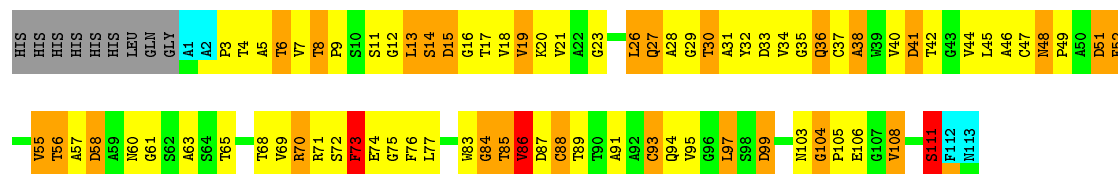
Chain A: 26% 42% 19% 7%



4.2.36 Score per residue for model 36

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)

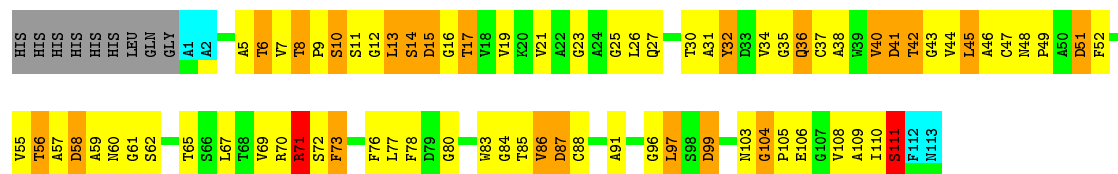
Chain A: 24% 41% 22% 7%



4.2.37 Score per residue for model 37

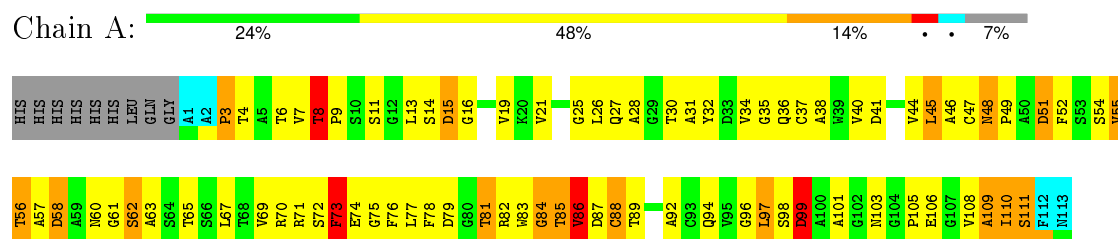
- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)

Chain A: 27% 43% 18% 7%



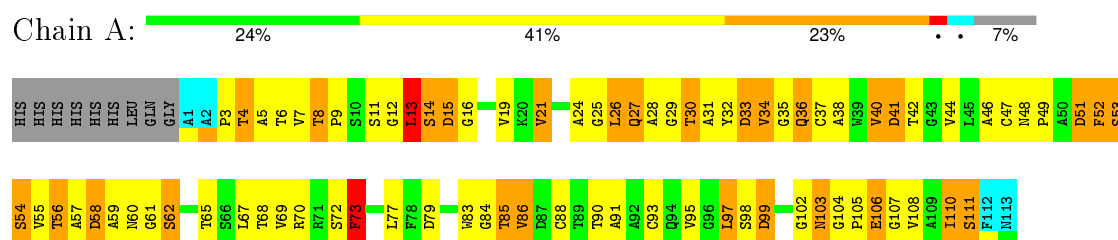
4.2.38 Score per residue for model 38

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



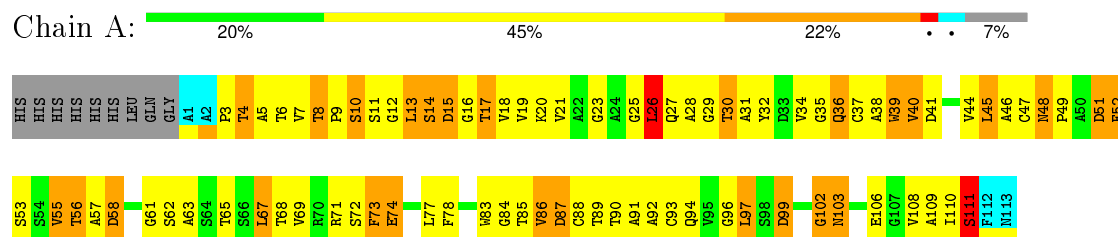
4.2.39 Score per residue for model 39

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



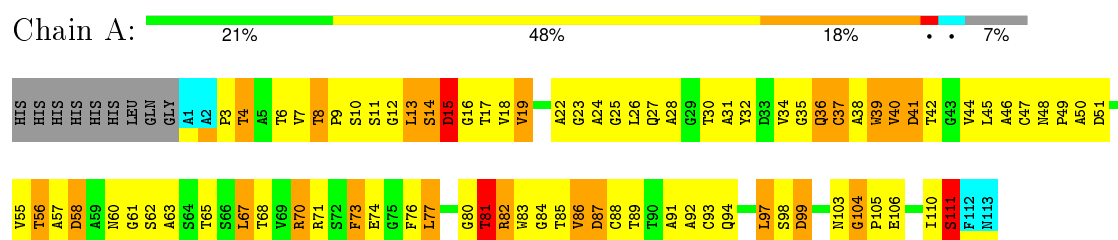
4.2.40 Score per residue for model 40

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



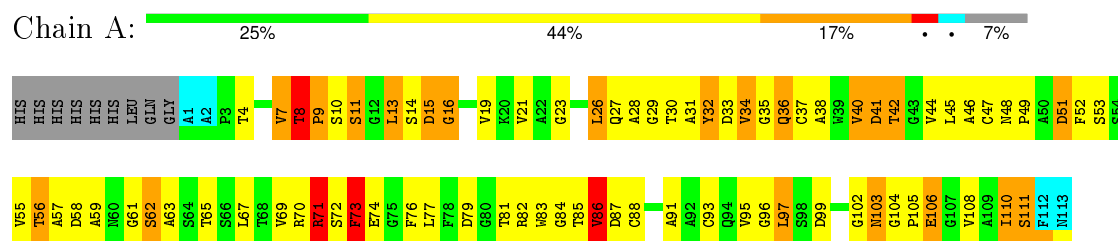
4.2.41 Score per residue for model 41

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



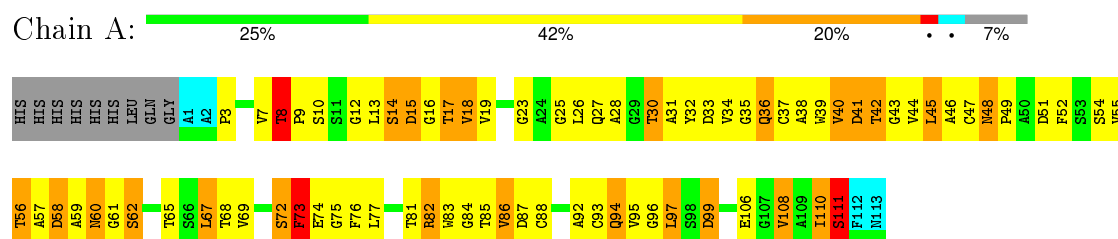
4.2.42 Score per residue for model 42

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



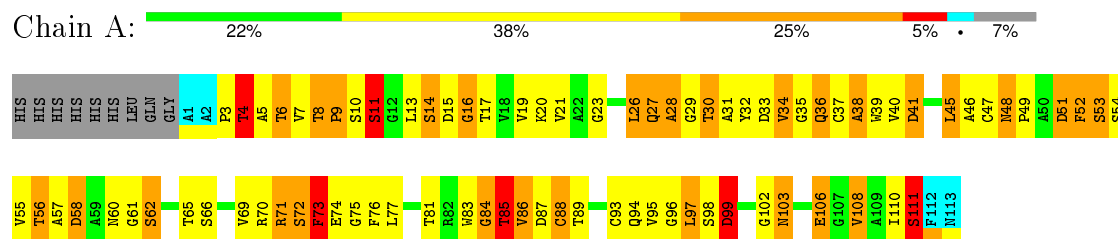
4.2.43 Score per residue for model 43

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



4.2.44 Score per residue for model 44

- Molecule 1: PROTEIN (Apo-Neocarzinostatin)



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 100 calculated structures, 44 were deposited, based on the following criterion: *structures with favorable non-bond energy*.

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

Software name	Classification	Version
Dyana	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 ⓘ

6.1 Standard geometry ⓘ

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: NCZ

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	748	713	703	120±12
2	A	24	18	18	12±3
All	All	33968	32164	31724	5337

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 81.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:TYR:CE1	1:A:97:LEU:HD22	1.13	1.78	37	1
1:A:44:VAL:HG11	1:A:77:LEU:HD23	1.04	1.17	24	6
1:A:9:PRO:CD	1:A:19:VAL:HG21	1.03	1.82	30	7
1:A:34:VAL:HG21	1:A:65:THR:HG21	1.02	1.28	37	19
1:A:40:VAL:HG22	1:A:85:THR:HG21	1.01	1.04	41	4
1:A:55:VAL:HG13	1:A:65:THR:HG21	0.99	1.34	33	3
1:A:95:VAL:HG21	1:A:110:ILE:HD12	0.98	1.31	8	1
1:A:26:LEU:HD11	1:A:97:LEU:HD21	0.97	1.01	19	7
1:A:34:VAL:CG2	1:A:97:LEU:HD22	0.96	1.90	27	1
1:A:50:ALA:HB2	1:A:73:PHE:CD2	0.96	1.96	19	2
1:A:26:LEU:CD1	1:A:97:LEU:HD21	0.95	1.91	19	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:VAL:HG22	1:A:85:THR:OG1	0.94	1.62	23	10
1:A:40:VAL:HG11	1:A:83:TRP:CG	0.94	1.97	24	2
1:A:95:VAL:O	1:A:108:VAL:HG12	0.94	1.63	20	13
1:A:26:LEU:HD11	1:A:97:LEU:CD2	0.94	1.92	19	5
1:A:40:VAL:HG21	1:A:83:TRP:CZ2	0.94	1.98	43	2
1:A:77:LEU:HD12	1:A:81:THR:HG23	0.94	1.34	42	3
1:A:46:ALA:HB2	1:A:77:LEU:CD2	0.94	1.93	31	2
1:A:40:VAL:HG22	1:A:85:THR:CG2	0.93	1.93	41	1
1:A:13:LEU:HD23	1:A:111:SER:O	0.93	1.62	12	8
1:A:57:ALA:HB2	1:A:63:ALA:HB2	0.93	1.41	7	31
1:A:85:THR:O	1:A:86:VAL:HG22	0.91	1.65	16	4
1:A:40:VAL:HG21	1:A:83:TRP:CE2	0.91	2.00	24	2
1:A:77:LEU:HD13	1:A:81:THR:HG23	0.89	1.42	30	2
1:A:27:GLN:O	1:A:57:ALA:HB3	0.89	1.68	1	24
1:A:5:ALA:HB2	1:A:26:LEU:HD22	0.89	1.42	7	3
1:A:77:LEU:HD23	1:A:81:THR:HG23	0.89	1.43	25	5
1:A:34:VAL:HG22	1:A:97:LEU:HD22	0.89	1.42	27	3
1:A:55:VAL:HG22	1:A:65:THR:HG21	0.88	1.46	27	5
1:A:7:VAL:HG12	1:A:19:VAL:CG2	0.87	1.99	21	3
1:A:26:LEU:HD21	1:A:97:LEU:HD11	0.87	1.44	42	2
1:A:31:ALA:HB2	1:A:56:THR:OG1	0.87	1.69	25	40
1:A:4:THR:O	1:A:6:THR:HG23	0.87	1.69	40	1
1:A:93:CYS:O	1:A:110:ILE:HG22	0.87	1.70	29	3
1:A:13:LEU:HD12	1:A:110:ILE:HG23	0.86	1.45	5	4
1:A:66:SER:O	1:A:67:LEU:HD22	0.86	1.69	33	9
1:A:7:VAL:HG12	1:A:9:PRO:HD2	0.85	1.45	7	15
1:A:26:LEU:HD23	1:A:32:TYR:OH	0.85	1.71	42	1
1:A:69:VAL:HG13	1:A:71:ARG:NH2	0.85	1.86	18	2
1:A:9:PRO:HG3	1:A:19:VAL:HG11	0.85	1.49	41	19
1:A:77:LEU:HD12	1:A:81:THR:HB	0.85	1.48	43	6
1:A:34:VAL:HG12	1:A:67:LEU:CD1	0.85	2.02	37	2
1:A:40:VAL:HG11	1:A:83:TRP:CD2	0.85	2.07	24	2
1:A:55:VAL:HB	1:A:97:LEU:HD21	0.85	1.48	32	1
1:A:44:VAL:CG1	1:A:77:LEU:HD23	0.85	2.00	24	4
1:A:13:LEU:O	1:A:13:LEU:HD12	0.84	1.72	35	5
1:A:34:VAL:HG23	1:A:55:VAL:HG21	0.84	1.46	10	2
1:A:13:LEU:HD12	1:A:13:LEU:O	0.84	1.72	10	3
1:A:34:VAL:HG23	1:A:97:LEU:HB3	0.84	1.48	14	18
1:A:13:LEU:HD21	1:A:110:ILE:HG23	0.84	1.46	34	1
1:A:9:PRO:CG	1:A:19:VAL:HG11	0.83	2.03	13	19
1:A:7:VAL:HG13	1:A:19:VAL:HB	0.83	1.48	39	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:97:LEU:HD12	1:A:97:LEU:O	0.83	1.72	16	2
1:A:7:VAL:HG13	1:A:19:VAL:HG21	0.83	1.50	3	12
1:A:95:VAL:HG21	1:A:110:ILE:CD1	0.83	2.03	8	1
1:A:13:LEU:HD12	1:A:69:VAL:HG11	0.83	1.50	27	3
1:A:27:GLN:OE1	1:A:97:LEU:HD11	0.83	1.73	7	1
1:A:7:VAL:HG23	1:A:21:VAL:HG22	0.83	1.48	15	5
1:A:95:VAL:CG2	1:A:110:ILE:HD12	0.83	2.03	8	2
1:A:97:LEU:HD13	1:A:97:LEU:N	0.83	1.89	20	8
1:A:40:VAL:HB	1:A:46:ALA:HB3	0.82	1.47	8	21
1:A:7:VAL:HG22	1:A:19:VAL:CG2	0.82	2.04	30	9
1:A:34:VAL:HG12	1:A:51:ASP:OD1	0.82	1.72	19	1
1:A:11:SER:HB3	1:A:69:VAL:HG21	0.82	1.51	44	1
1:A:32:TYR:HB2	1:A:97:LEU:HD12	0.82	1.52	10	11
1:A:55:VAL:CG2	1:A:65:THR:HG21	0.82	2.05	39	7
1:A:13:LEU:HD12	1:A:14:SER:N	0.82	1.88	4	5
1:A:13:LEU:HD13	1:A:110:ILE:HG23	0.81	1.53	20	1
1:A:9:PRO:HD3	1:A:19:VAL:HG21	0.81	1.53	31	3
1:A:69:VAL:HG13	1:A:110:ILE:HD11	0.81	1.49	16	1
1:A:40:VAL:HG22	1:A:85:THR:CB	0.81	2.04	23	8
1:A:106:GLU:O	2:A:130:NCZ:H181	0.80	1.77	27	11
1:A:13:LEU:HD22	1:A:69:VAL:HG11	0.80	1.53	34	2
1:A:7:VAL:HG22	1:A:19:VAL:HG21	0.80	1.53	16	4
1:A:7:VAL:HB	1:A:110:ILE:HD11	0.80	1.54	34	6
1:A:9:PRO:CG	1:A:19:VAL:HG21	0.80	2.06	10	4
1:A:55:VAL:HG21	1:A:65:THR:CB	0.80	2.07	36	14
1:A:5:ALA:HB1	1:A:21:VAL:CG1	0.80	2.07	12	4
1:A:97:LEU:N	1:A:97:LEU:HD13	0.79	1.93	23	4
1:A:77:LEU:HD12	1:A:81:THR:CG2	0.79	2.07	42	3
1:A:97:LEU:HD23	1:A:97:LEU:N	0.79	1.92	5	6
1:A:97:LEU:N	1:A:97:LEU:HD23	0.79	1.92	38	10
1:A:97:LEU:O	1:A:97:LEU:HD22	0.79	1.77	43	4
1:A:46:ALA:HB2	1:A:77:LEU:HD23	0.79	1.51	31	7
1:A:44:VAL:CG1	1:A:77:LEU:HD12	0.79	2.08	40	2
1:A:55:VAL:HG21	1:A:65:THR:HB	0.79	1.54	44	12
1:A:26:LEU:HG	1:A:97:LEU:HD11	0.78	1.56	12	10
1:A:55:VAL:CG1	1:A:65:THR:HG21	0.78	2.08	33	2
1:A:50:ALA:HB2	1:A:73:PHE:CG	0.77	2.14	19	1
1:A:26:LEU:HD13	1:A:63:ALA:HB3	0.77	1.54	40	2
1:A:55:VAL:HG21	1:A:65:THR:OG1	0.77	1.79	37	5
1:A:34:VAL:HG23	1:A:97:LEU:HD12	0.77	1.52	20	3
1:A:5:ALA:HB2	1:A:26:LEU:CD1	0.77	2.10	27	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:THR:C	1:A:86:VAL:HG13	0.77	2.00	42	4
1:A:77:LEU:HD21	1:A:83:TRP:HB2	0.77	1.54	19	10
1:A:11:SER:OG	1:A:69:VAL:HG21	0.77	1.79	15	2
1:A:92:ALA:HB1	1:A:109:ALA:HB1	0.77	1.57	18	6
1:A:32:TYR:O	1:A:55:VAL:HG12	0.77	1.80	4	1
1:A:55:VAL:HG13	1:A:65:THR:CG2	0.76	2.09	33	1
1:A:9:PRO:HG2	1:A:19:VAL:HG12	0.76	1.57	8	8
1:A:13:LEU:C	1:A:13:LEU:HD12	0.76	2.01	22	3
1:A:34:VAL:CG2	1:A:97:LEU:HD23	0.76	2.10	37	1
1:A:34:VAL:HG22	1:A:97:LEU:HD23	0.76	1.55	37	1
1:A:7:VAL:CG2	1:A:21:VAL:HG22	0.76	2.10	15	3
1:A:9:PRO:HD2	1:A:19:VAL:HG21	0.76	1.58	30	3
1:A:74:GLU:HA	1:A:86:VAL:HG23	0.76	1.56	26	4
1:A:70:ARG:O	1:A:73:PHE:CD2	0.76	2.38	37	17
1:A:12:GLY:HA2	1:A:69:VAL:HG11	0.75	1.56	37	1
1:A:5:ALA:HB1	1:A:21:VAL:HG12	0.75	1.58	39	5
1:A:53:SER:CB	1:A:67:LEU:HD11	0.75	2.12	40	3
1:A:8:THR:CB	1:A:9:PRO:HD3	0.75	2.12	18	40
1:A:40:VAL:CG2	1:A:85:THR:HG23	0.75	2.12	3	1
1:A:69:VAL:CG1	1:A:110:ILE:HD11	0.75	2.11	16	2
1:A:40:VAL:CG2	1:A:85:THR:HG21	0.74	2.00	41	1
1:A:7:VAL:HG13	1:A:19:VAL:CG2	0.74	2.12	3	2
1:A:50:ALA:HB2	1:A:73:PHE:CE2	0.74	2.18	19	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:19:VAL:HG21	0.74	2.13	11	11
1:A:13:LEU:CD1	1:A:69:VAL:HG11	0.74	2.11	27	2
1:A:32:TYR:OH	1:A:57:ALA:HB2	0.74	1.81	15	2
1:A:7:VAL:HB	1:A:110:ILE:HD13	0.74	1.60	9	2
1:A:55:VAL:HG23	1:A:65:THR:HB	0.73	1.60	4	6
1:A:3:PRO:HG2	1:A:6:THR:HG21	0.73	1.58	36	3
1:A:40:VAL:HG21	1:A:85:THR:OG1	0.73	1.83	3	2
1:A:27:GLN:HB2	1:A:57:ALA:HB3	0.73	1.59	6	6
1:A:26:LEU:HD21	1:A:97:LEU:HD21	0.73	1.59	29	9
1:A:18:VAL:HG13	1:A:68:THR:OG1	0.73	1.82	1	3
1:A:34:VAL:HG23	1:A:55:VAL:HG11	0.73	1.60	6	8
1:A:8:THR:HB	1:A:9:PRO:HD3	0.73	1.59	18	32
1:A:7:VAL:HG13	1:A:9:PRO:HD2	0.73	1.60	9	11
1:A:69:VAL:HG11	1:A:110:ILE:HD12	0.73	1.61	32	1
1:A:84:GLY:O	1:A:86:VAL:N	0.73	2.22	44	24
1:A:4:THR:HB	1:A:26:LEU:HD13	0.73	1.58	33	3
1:A:7:VAL:HG21	1:A:110:ILE:HG21	0.72	1.60	3	3
1:A:27:GLN:C	1:A:57:ALA:HB3	0.72	2.04	31	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:THR:O	1:A:69:VAL:HG12	0.72	1.83	33	2
1:A:6:THR:C	1:A:21:VAL:HG13	0.72	2.05	31	3
1:A:45:LEU:HD22	2:A:130:NCZ:H173	0.72	1.60	3	12
1:A:108:VAL:HG13	1:A:110:ILE:HD13	0.72	1.61	15	5
1:A:75:GLY:N	1:A:83:TRP:O	0.71	2.24	29	7
1:A:5:ALA:HB1	1:A:97:LEU:HD11	0.71	1.61	23	1
1:A:26:LEU:CD2	1:A:97:LEU:HD21	0.71	2.16	25	2
1:A:5:ALA:HB2	1:A:26:LEU:HD21	0.71	1.63	4	1
1:A:45:LEU:HD21	2:A:130:NCZ:H173	0.71	1.61	24	2
1:A:5:ALA:HB2	1:A:26:LEU:HD12	0.71	1.63	18	9
1:A:77:LEU:HD22	1:A:81:THR:HB	0.71	1.61	24	1
1:A:85:THR:C	1:A:86:VAL:HG23	0.71	2.06	27	10
1:A:34:VAL:CG2	1:A:97:LEU:HD12	0.71	2.16	20	2
1:A:73:PHE:CD1	1:A:73:PHE:N	0.71	2.56	44	7
1:A:3:PRO:HD2	1:A:6:THR:HG21	0.71	1.61	19	1
1:A:32:TYR:CD1	1:A:97:LEU:CB	0.71	2.73	15	1
1:A:13:LEU:HD12	1:A:13:LEU:C	0.71	2.05	4	4
1:A:27:GLN:NE2	1:A:32:TYR:CE2	0.70	2.59	5	9
1:A:44:VAL:CG1	1:A:77:LEU:HD22	0.70	2.16	29	5
1:A:77:LEU:HD12	1:A:81:THR:O	0.70	1.86	7	3
1:A:34:VAL:CG1	1:A:67:LEU:HD12	0.70	2.17	27	5
1:A:7:VAL:CB	1:A:110:ILE:HD11	0.70	2.16	39	7
1:A:18:VAL:HG22	1:A:68:THR:OG1	0.70	1.86	33	4
1:A:13:LEU:HD22	1:A:17:THR:HG21	0.70	1.64	5	4
1:A:36:GLN:HB3	1:A:95:VAL:HG22	0.69	1.63	20	8
1:A:77:LEU:HD12	1:A:77:LEU:N	0.69	2.02	24	1
1:A:36:GLN:HG2	1:A:95:VAL:HG22	0.69	1.63	15	10
1:A:46:ALA:CB	1:A:77:LEU:HD23	0.69	2.17	44	2
1:A:34:VAL:HG12	1:A:67:LEU:HD12	0.69	1.63	37	1
1:A:6:THR:O	1:A:21:VAL:HG13	0.69	1.88	10	2
1:A:42:THR:O	1:A:42:THR:HG23	0.69	1.88	34	5
1:A:40:VAL:HG21	1:A:75:GLY:HA3	0.69	1.64	7	5
1:A:32:TYR:CD1	1:A:55:VAL:O	0.69	2.46	42	1
1:A:44:VAL:HG11	1:A:77:LEU:HD22	0.69	1.64	20	7
1:A:26:LEU:HD12	1:A:97:LEU:HD21	0.69	1.65	28	1
1:A:23:GLY:HA3	1:A:63:ALA:HB3	0.69	1.64	5	2
1:A:58:ASP:O	1:A:61:GLY:N	0.68	2.26	4	44
1:A:50:ALA:HB2	1:A:73:PHE:CE1	0.68	2.23	15	1
1:A:27:GLN:OE1	1:A:97:LEU:HD12	0.68	1.88	38	1
1:A:85:THR:HG22	1:A:87:ASP:H	0.68	1.48	43	7
1:A:45:LEU:HD13	2:A:130:NCZ:H14	0.68	1.62	40	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:GLN:O	1:A:36:GLN:HG2	0.68	1.89	34	9
1:A:69:VAL:HG11	1:A:110:ILE:HG12	0.68	1.66	31	4
1:A:95:VAL:HB	1:A:110:ILE:HD13	0.68	1.65	34	2
1:A:95:VAL:CG2	1:A:110:ILE:HD13	0.68	2.19	34	3
1:A:37:CYS:SG	1:A:45:LEU:HD11	0.68	2.29	12	3
1:A:11:SER:OG	1:A:19:VAL:HG11	0.68	1.88	25	1
1:A:42:THR:HG23	1:A:42:THR:O	0.67	1.89	8	5
1:A:108:VAL:HG13	1:A:110:ILE:HD12	0.67	1.64	44	3
1:A:7:VAL:HG11	1:A:110:ILE:HD12	0.67	1.66	29	1
1:A:40:VAL:CB	1:A:46:ALA:HB3	0.67	2.17	8	19
1:A:39:TRP:O	1:A:91:ALA:HB1	0.67	1.89	20	7
1:A:69:VAL:O	1:A:69:VAL:HG13	0.67	1.88	44	4
1:A:36:GLN:HG2	1:A:36:GLN:O	0.67	1.87	7	10
1:A:12:GLY:O	1:A:14:SER:N	0.67	2.27	14	9
1:A:48:ASN:OD1	1:A:73:PHE:CE2	0.67	2.48	3	15
1:A:85:THR:O	1:A:86:VAL:CG2	0.67	2.41	16	12
1:A:32:TYR:CD2	1:A:99:ASP:N	0.67	2.63	38	1
1:A:72:SER:O	1:A:73:PHE:CD1	0.67	2.48	26	3
1:A:34:VAL:CG2	1:A:55:VAL:HG21	0.67	2.19	23	3
1:A:26:LEU:HD22	1:A:57:ALA:HB2	0.67	1.65	40	2
1:A:40:VAL:HG13	1:A:83:TRP:CD1	0.67	2.24	28	28
1:A:14:SER:O	1:A:15:ASP:C	0.67	2.33	40	14
1:A:5:ALA:HB1	1:A:21:VAL:HG13	0.67	1.65	12	2
1:A:5:ALA:HB2	1:A:26:LEU:CD2	0.66	2.17	7	7
1:A:77:LEU:N	1:A:77:LEU:HD12	0.66	2.05	41	2
1:A:26:LEU:HG	1:A:97:LEU:HD21	0.66	1.66	10	2
1:A:76:PHE:CD2	1:A:82:ARG:CB	0.66	2.78	30	2
1:A:5:ALA:CB	1:A:97:LEU:HD11	0.66	2.20	23	5
1:A:110:ILE:O	1:A:111:SER:CB	0.66	2.43	4	32
1:A:84:GLY:O	1:A:85:THR:C	0.66	2.34	35	5
1:A:37:CYS:CB	2:A:130:NCZ:C6	0.66	2.73	5	37
1:A:67:LEU:HD13	1:A:68:THR:H	0.66	1.49	43	10
1:A:3:PRO:C	1:A:4:THR:HG23	0.66	2.11	23	13
1:A:32:TYR:N	1:A:32:TYR:CD1	0.66	2.64	13	3
1:A:29:GLY:HA2	1:A:57:ALA:HB3	0.66	1.67	22	6
1:A:27:GLN:OE1	1:A:32:TYR:CD2	0.66	2.49	25	4
1:A:70:ARG:O	1:A:73:PHE:CE2	0.66	2.49	36	9
1:A:69:VAL:HG13	1:A:110:ILE:CD1	0.66	2.20	16	2
1:A:7:VAL:CG2	1:A:19:VAL:HG21	0.66	2.21	16	3
1:A:12:GLY:CA	1:A:110:ILE:HD12	0.65	2.21	26	1
1:A:27:GLN:CD	1:A:32:TYR:CE2	0.65	2.70	1	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:97:LEU:HD23	1:A:97:LEU:H	0.65	1.51	21	3
1:A:17:THR:HG22	1:A:69:VAL:HG12	0.65	1.69	1	1
1:A:47:CYS:SG	2:A:130:NCZ:C10	0.65	2.84	2	44
1:A:50:ALA:HB1	1:A:73:PHE:CE2	0.65	2.26	21	1
1:A:27:GLN:NE2	1:A:32:TYR:CZ	0.65	2.64	5	11
1:A:85:THR:O	1:A:86:VAL:HG13	0.65	1.92	16	4
1:A:34:VAL:HG23	1:A:55:VAL:CG2	0.65	2.21	23	2
1:A:26:LEU:HD21	1:A:97:LEU:CD1	0.65	2.22	42	2
1:A:51:ASP:CG	1:A:51:ASP:O	0.65	2.33	14	16
1:A:26:LEU:CD1	1:A:97:LEU:HD11	0.65	2.22	16	6
1:A:36:GLN:CG	1:A:95:VAL:HG13	0.65	2.22	44	5
1:A:40:VAL:CG2	1:A:83:TRP:CZ2	0.65	2.78	43	1
1:A:36:GLN:HG2	1:A:95:VAL:HG13	0.65	1.69	17	3
1:A:26:LEU:HD12	1:A:27:GLN:N	0.65	2.07	22	10
1:A:7:VAL:HG11	1:A:110:ILE:HD11	0.64	1.69	10	2
1:A:27:GLN:CG	1:A:32:TYR:CZ	0.64	2.80	21	3
1:A:77:LEU:HD11	1:A:83:TRP:HB2	0.64	1.68	4	5
1:A:69:VAL:HG13	1:A:71:ARG:HH21	0.64	1.51	37	1
1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:HD23	0.64	2.07	3	1
1:A:37:CYS:O	1:A:38:ALA:HB2	0.64	1.91	27	16
1:A:69:VAL:HG11	1:A:110:ILE:HG21	0.64	1.68	39	3
1:A:28:ALA:HB2	1:A:61:GLY:CA	0.64	2.23	5	4
1:A:27:GLN:CG	1:A:32:TYR:CD2	0.64	2.81	8	6
1:A:27:GLN:NE2	1:A:32:TYR:CE1	0.64	2.66	12	3
1:A:68:THR:HG23	1:A:70:ARG:HG2	0.64	1.70	26	1
1:A:8:THR:CB	1:A:9:PRO:CD	0.64	2.76	42	30
1:A:53:SER:CB	1:A:67:LEU:HD21	0.64	2.22	29	1
1:A:47:CYS:SG	2:A:130:NCZ:C9	0.64	2.86	9	44
1:A:26:LEU:HD13	1:A:97:LEU:HD11	0.64	1.69	27	3
1:A:27:GLN:NE2	1:A:32:TYR:CD2	0.63	2.67	6	6
1:A:34:VAL:HG23	1:A:55:VAL:HB	0.63	1.70	5	2
1:A:48:ASN:OD1	1:A:73:PHE:CZ	0.63	2.51	44	6
1:A:38:ALA:HB2	1:A:93:CYS:HA	0.63	1.70	30	6
1:A:5:ALA:CB	1:A:21:VAL:HG12	0.63	2.23	39	1
1:A:26:LEU:HD21	1:A:106:GLU:HG2	0.63	1.70	10	2
1:A:32:TYR:CE1	1:A:99:ASP:HA	0.63	2.27	35	15
1:A:34:VAL:HG12	1:A:53:SER:HB3	0.63	1.70	32	11
1:A:83:TRP:O	1:A:84:GLY:O	0.63	2.16	29	5
1:A:34:VAL:HG12	1:A:53:SER:CB	0.63	2.24	15	14
1:A:35:GLY:O	2:A:130:NCZ:H182	0.63	1.94	35	19
1:A:57:ALA:CB	1:A:63:ALA:HB2	0.63	2.22	11	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:ALA:CB	1:A:73:PHE:CD2	0.63	2.81	21	2
1:A:27:GLN:CG	1:A:32:TYR:CD1	0.63	2.81	41	2
1:A:84:GLY:O	1:A:85:THR:HB	0.63	1.93	43	28
1:A:26:LEU:HD11	1:A:97:LEU:HD11	0.62	1.70	1	4
1:A:13:LEU:CD2	1:A:110:ILE:HG23	0.62	2.24	34	2
1:A:8:THR:HG22	1:A:11:SER:CB	0.62	2.24	15	1
1:A:34:VAL:HG21	1:A:65:THR:OG1	0.62	1.95	44	1
1:A:51:ASP:O	1:A:51:ASP:CG	0.62	2.36	28	23
1:A:69:VAL:CG1	1:A:110:ILE:HG21	0.62	2.24	39	4
1:A:97:LEU:H	1:A:97:LEU:HD13	0.62	1.52	43	6
1:A:55:VAL:HG11	1:A:65:THR:OG1	0.62	1.95	20	2
1:A:74:GLU:CB	1:A:86:VAL:HG23	0.62	2.24	36	3
1:A:18:VAL:HG22	1:A:68:THR:HG23	0.62	1.69	12	4
1:A:84:GLY:O	1:A:85:THR:CB	0.62	2.48	11	15
1:A:48:ASN:HD22	1:A:48:ASN:N	0.62	1.92	23	5
1:A:76:PHE:CE1	1:A:77:LEU:O	0.62	2.53	2	2
1:A:7:VAL:HG22	1:A:9:PRO:HD2	0.62	1.71	4	2
1:A:13:LEU:HD23	1:A:110:ILE:HG23	0.62	1.69	30	1
1:A:26:LEU:CD2	1:A:97:LEU:HD11	0.62	2.25	29	1
1:A:45:LEU:HD22	2:A:130:NCZ:C13	0.62	2.25	35	2
1:A:27:GLN:OE1	1:A:32:TYR:CD1	0.62	2.52	34	5
1:A:40:VAL:CG1	1:A:46:ALA:HB3	0.62	2.24	19	25
1:A:54:SER:O	1:A:55:VAL:HG13	0.62	1.94	23	1
1:A:85:THR:O	1:A:86:VAL:HG23	0.62	1.95	44	9
1:A:31:ALA:O	1:A:32:TYR:CD1	0.62	2.52	43	11
1:A:41:ASP:OD1	1:A:83:TRP:CZ3	0.61	2.53	31	8
1:A:27:GLN:OE1	1:A:32:TYR:CE1	0.61	2.53	17	8
1:A:55:VAL:HG11	1:A:65:THR:CB	0.61	2.26	17	2
1:A:41:ASP:OD2	1:A:83:TRP:CE3	0.61	2.53	42	11
1:A:97:LEU:N	1:A:97:LEU:CD1	0.61	2.61	9	3
1:A:26:LEU:HD21	1:A:97:LEU:CD2	0.61	2.25	40	3
1:A:45:LEU:HD11	2:A:130:NCZ:H173	0.61	1.71	1	3
1:A:49:PRO:O	1:A:52:PHE:CE2	0.61	2.54	14	16
1:A:37:CYS:CB	2:A:130:NCZ:C5	0.61	2.79	37	22
1:A:74:GLU:O	1:A:76:PHE:CE2	0.61	2.53	42	1
1:A:27:GLN:CD	1:A:32:TYR:CG	0.61	2.73	41	4
1:A:42:THR:O	1:A:44:VAL:HG23	0.61	1.96	17	8
1:A:74:GLU:O	1:A:76:PHE:CE1	0.61	2.53	12	6
1:A:40:VAL:HG23	1:A:85:THR:HG23	0.61	1.72	3	1
1:A:41:ASP:OD2	1:A:83:TRP:CZ2	0.61	2.53	20	4
1:A:5:ALA:HB2	1:A:97:LEU:HD11	0.61	1.70	37	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:4:THR:HG22	1:A:25:GLY:C	0.61	2.16	39	1
1:A:27:GLN:NE2	1:A:32:TYR:CG	0.61	2.69	38	5
1:A:5:ALA:H	1:A:26:LEU:HD23	0.61	1.56	15	3
1:A:27:GLN:HE22	1:A:55:VAL:HG13	0.61	1.55	8	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:19:VAL:CG2	0.61	2.79	21	14
1:A:14:SER:O	1:A:16:GLY:N	0.61	2.33	9	37
1:A:7:VAL:HG13	1:A:19:VAL:CB	0.61	2.26	34	7
1:A:41:ASP:CG	1:A:83:TRP:CE3	0.61	2.74	19	8
1:A:71:ARG:O	1:A:73:PHE:CE1	0.61	2.54	22	4
1:A:41:ASP:OD1	1:A:83:TRP:CH2	0.61	2.54	3	5
1:A:34:VAL:HG23	1:A:97:LEU:HG	0.61	1.72	32	1
1:A:41:ASP:OD1	1:A:83:TRP:CE3	0.61	2.54	19	13
1:A:44:VAL:HG11	1:A:77:LEU:CD2	0.61	2.26	21	5
1:A:46:ALA:HB2	1:A:77:LEU:CD1	0.61	2.26	1	5
1:A:42:THR:O	1:A:42:THR:CG2	0.61	2.48	17	5
1:A:34:VAL:HG23	1:A:97:LEU:HD23	0.61	1.72	40	2
1:A:7:VAL:HG11	1:A:110:ILE:CD1	0.61	2.26	10	2
1:A:51:ASP:OD2	2:A:130:NCZ:C8	0.61	2.49	11	15
1:A:27:GLN:O	1:A:29:GLY:N	0.61	2.33	8	15
1:A:32:TYR:CE2	1:A:99:ASP:OD2	0.60	2.54	14	4
1:A:41:ASP:OD2	1:A:83:TRP:CZ3	0.60	2.54	1	9
1:A:45:LEU:C	1:A:45:LEU:HD13	0.60	2.16	7	2
1:A:27:GLN:NE2	1:A:97:LEU:HD13	0.60	2.11	32	1
1:A:42:THR:O	1:A:42:THR:HG22	0.60	1.95	19	2
1:A:41:ASP:OD2	1:A:83:TRP:CH2	0.60	2.53	14	5
1:A:55:VAL:HG21	1:A:65:THR:HG21	0.60	1.74	34	4
1:A:48:ASN:N	1:A:48:ASN:ND2	0.60	2.47	2	9
1:A:77:LEU:N	1:A:77:LEU:CD1	0.60	2.64	41	1
1:A:7:VAL:HG11	1:A:110:ILE:HG13	0.60	1.73	22	1
1:A:26:LEU:HD12	1:A:27:GLN:OE1	0.60	1.97	12	2
1:A:108:VAL:CG1	1:A:110:ILE:HD12	0.60	2.26	44	1
1:A:68:THR:HG22	1:A:70:ARG:HG2	0.60	1.73	8	2
1:A:41:ASP:OD1	1:A:83:TRP:CZ2	0.60	2.54	18	3
1:A:9:PRO:HG2	1:A:13:LEU:HD21	0.60	1.74	7	2
1:A:48:ASN:ND2	1:A:73:PHE:CE1	0.60	2.69	10	2
1:A:7:VAL:HG13	1:A:9:PRO:O	0.60	1.97	30	1
1:A:69:VAL:HG13	1:A:69:VAL:O	0.60	1.97	1	2
1:A:27:GLN:CD	1:A:32:TYR:CD1	0.60	2.75	41	4
1:A:78:PHE:CD2	2:A:130:NCZ:O5	0.59	2.55	38	2
1:A:83:TRP:CD1	1:A:85:THR:OG1	0.59	2.55	16	10
1:A:48:ASN:CG	1:A:73:PHE:CE2	0.59	2.76	3	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:THR:O	1:A:86:VAL:HG12	0.59	1.97	36	3
1:A:81:THR:O	1:A:83:TRP:N	0.59	2.35	31	2
1:A:27:GLN:CD	1:A:32:TYR:CD2	0.59	2.76	6	10
1:A:50:ALA:CB	1:A:73:PHE:CG	0.59	2.85	21	2
1:A:27:GLN:HB2	1:A:32:TYR:CE2	0.59	2.32	13	1
1:A:31:ALA:CB	1:A:56:THR:OG1	0.59	2.51	44	37
1:A:76:PHE:CE2	1:A:82:ARG:CB	0.59	2.86	30	2
1:A:13:LEU:HD23	1:A:110:ILE:HD12	0.59	1.73	30	1
1:A:4:THR:HB	1:A:26:LEU:HD22	0.59	1.74	12	7
1:A:97:LEU:CD2	1:A:97:LEU:N	0.59	2.63	38	2
1:A:48:ASN:OD1	1:A:73:PHE:CD2	0.59	2.55	7	4
1:A:95:VAL:CB	1:A:110:ILE:HD13	0.59	2.27	34	1
1:A:51:ASP:OD1	2:A:130:NCZ:C8	0.59	2.50	14	10
1:A:8:THR:OG1	1:A:19:VAL:HG11	0.59	1.96	15	1
1:A:26:LEU:HD13	1:A:97:LEU:HD21	0.59	1.73	11	3
1:A:108:VAL:CG1	1:A:110:ILE:CD1	0.59	2.80	44	1
1:A:32:TYR:CD1	1:A:32:TYR:N	0.59	2.70	37	1
1:A:6:THR:O	1:A:21:VAL:HG22	0.59	1.97	10	1
1:A:83:TRP:O	1:A:86:VAL:HG22	0.59	1.98	44	2
1:A:74:GLU:O	1:A:76:PHE:CD1	0.59	2.55	12	2
1:A:46:ALA:HB2	1:A:77:LEU:HD12	0.59	1.75	1	2
1:A:55:VAL:HG13	1:A:97:LEU:HD13	0.59	1.74	44	1
1:A:49:PRO:O	1:A:52:PHE:CD2	0.59	2.56	17	13
1:A:32:TYR:CD1	1:A:97:LEU:HB3	0.59	2.31	15	1
1:A:108:VAL:O	1:A:108:VAL:HG13	0.59	1.97	11	2
1:A:48:ASN:O	1:A:52:PHE:CE1	0.59	2.55	20	2
1:A:26:LEU:HD13	1:A:27:GLN:N	0.59	2.12	9	2
1:A:8:THR:CB	1:A:19:VAL:HG11	0.59	2.27	15	1
1:A:6:THR:O	1:A:21:VAL:HA	0.59	1.98	10	5
1:A:4:THR:HB	1:A:26:LEU:HD23	0.59	1.75	30	2
1:A:13:LEU:CD2	1:A:17:THR:HG21	0.59	2.28	2	2
1:A:5:ALA:HB2	1:A:97:LEU:CD2	0.58	2.28	3	7
1:A:76:PHE:O	1:A:76:PHE:CD1	0.58	2.56	11	5
1:A:27:GLN:OE1	1:A:32:TYR:CE2	0.58	2.56	30	5
1:A:27:GLN:CD	1:A:32:TYR:CZ	0.58	2.76	36	10
1:A:41:ASP:CG	1:A:83:TRP:CZ3	0.58	2.77	23	2
1:A:32:TYR:CE2	1:A:99:ASP:OD1	0.58	2.56	34	4
1:A:85:THR:C	1:A:86:VAL:CG1	0.58	2.71	42	4
1:A:34:VAL:HG21	1:A:65:THR:CG2	0.58	2.27	35	9
1:A:74:GLU:HB2	1:A:86:VAL:HG23	0.58	1.75	36	2
1:A:13:LEU:HD21	1:A:111:SER:N	0.58	2.13	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:GLN:CG	1:A:48:ASN:OD1	0.58	2.52	32	9
1:A:36:GLN:NE2	1:A:51:ASP:HB2	0.58	2.14	21	2
1:A:8:THR:CG2	1:A:9:PRO:HD3	0.58	2.28	42	23
1:A:13:LEU:O	1:A:13:LEU:CD1	0.58	2.52	1	3
1:A:27:GLN:OE1	1:A:32:TYR:CZ	0.58	2.57	28	3
1:A:69:VAL:O	1:A:69:VAL:CG1	0.58	2.52	44	3
1:A:45:LEU:HD21	2:A:130:NCZ:H1	0.58	1.75	35	1
1:A:40:VAL:HG21	1:A:83:TRP:CD1	0.58	2.34	36	2
1:A:7:VAL:CG2	1:A:19:VAL:CG2	0.58	2.81	30	3
1:A:17:THR:HG22	1:A:19:VAL:CG1	0.58	2.29	32	2
1:A:26:LEU:HD23	1:A:32:TYR:CZ	0.58	2.34	42	1
1:A:105:PRO:HG2	2:A:130:NCZ:C1	0.58	2.29	5	8
1:A:76:PHE:CE1	1:A:80:GLY:O	0.58	2.57	37	1
1:A:35:GLY:CA	1:A:51:ASP:HA	0.57	2.29	36	39
1:A:5:ALA:N	1:A:26:LEU:HD23	0.57	2.14	10	3
1:A:34:VAL:CG1	1:A:67:LEU:CD1	0.57	2.82	8	3
1:A:45:LEU:HD23	1:A:45:LEU:O	0.57	1.98	15	1
1:A:76:PHE:CZ	1:A:80:GLY:O	0.57	2.57	37	1
1:A:48:ASN:CG	1:A:73:PHE:CZ	0.57	2.77	24	6
1:A:42:THR:CG2	1:A:42:THR:O	0.57	2.50	25	3
1:A:55:VAL:CB	1:A:97:LEU:HD21	0.57	2.27	32	1
1:A:17:THR:O	1:A:69:VAL:HG23	0.57	1.99	4	4
1:A:7:VAL:O	1:A:8:THR:O	0.57	2.23	15	1
1:A:34:VAL:HG12	1:A:53:SER:O	0.57	1.98	20	1
1:A:13:LEU:HD12	1:A:111:SER:O	0.57	1.99	11	5
1:A:44:VAL:HG11	1:A:77:LEU:HD12	0.57	1.73	40	2
1:A:27:GLN:HG3	1:A:32:TYR:CD1	0.57	2.34	41	8
1:A:40:VAL:CG1	1:A:46:ALA:CB	0.57	2.82	39	13
1:A:49:PRO:HA	1:A:52:PHE:CE2	0.57	2.35	18	23
1:A:48:ASN:ND2	1:A:48:ASN:N	0.57	2.51	13	18
1:A:34:VAL:HG12	1:A:67:LEU:HD11	0.57	1.75	37	1
1:A:78:PHE:CD1	1:A:78:PHE:C	0.57	2.78	23	4
1:A:77:LEU:H	1:A:77:LEU:HD22	0.57	1.58	40	1
1:A:46:ALA:HB2	1:A:77:LEU:HD21	0.57	1.75	31	1
1:A:27:GLN:CD	1:A:32:TYR:CE1	0.57	2.78	17	4
1:A:40:VAL:HG11	1:A:83:TRP:CD1	0.57	2.34	24	2
1:A:51:ASP:OD1	2:A:130:NCZ:C7	0.57	2.53	18	6
1:A:50:ALA:HB2	1:A:73:PHE:CD1	0.57	2.34	15	3
1:A:69:VAL:HG11	1:A:110:ILE:CG2	0.57	2.30	39	1
1:A:9:PRO:CG	1:A:13:LEU:HD21	0.57	2.30	2	1
1:A:37:CYS:SG	2:A:130:NCZ:C10	0.57	2.93	1	26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:GLN:CG	1:A:32:TYR:CE2	0.57	2.87	31	6
1:A:5:ALA:HB2	1:A:26:LEU:HD23	0.57	1.75	25	3
1:A:49:PRO:HA	1:A:52:PHE:CD2	0.57	2.34	21	1
1:A:13:LEU:HD21	1:A:110:ILE:CG2	0.57	2.27	34	1
1:A:41:ASP:OD1	1:A:83:TRP:CD2	0.57	2.58	13	2
1:A:7:VAL:HG12	1:A:19:VAL:HG21	0.57	1.77	21	6
1:A:26:LEU:O	1:A:28:ALA:N	0.57	2.38	30	20
1:A:78:PHE:CD1	1:A:79:ASP:N	0.57	2.72	14	4
1:A:86:VAL:HG12	1:A:87:ASP:N	0.57	2.15	13	17
1:A:74:GLU:CA	1:A:86:VAL:HG23	0.57	2.30	36	3
1:A:32:TYR:CD2	1:A:98:SER:C	0.57	2.79	16	6
1:A:55:VAL:CG1	1:A:97:LEU:HD13	0.57	2.29	44	1
1:A:95:VAL:HG21	1:A:110:ILE:HG12	0.56	1.76	39	1
1:A:7:VAL:HG21	1:A:110:ILE:HG13	0.56	1.75	26	1
1:A:10:SER:HA	1:A:110:ILE:HD11	0.56	1.76	24	2
1:A:35:GLY:HA3	1:A:51:ASP:CA	0.56	2.30	33	39
1:A:80:GLY:O	1:A:81:THR:C	0.56	2.43	31	2
1:A:32:TYR:CD1	1:A:97:LEU:HB2	0.56	2.35	15	3
1:A:5:ALA:HB2	1:A:97:LEU:HD21	0.56	1.76	14	8
1:A:27:GLN:CG	1:A:32:TYR:CG	0.56	2.88	30	4
1:A:108:VAL:HG13	1:A:110:ILE:CD1	0.56	2.30	34	2
1:A:39:TRP:CE3	1:A:39:TRP:O	0.56	2.59	23	1
1:A:7:VAL:H	1:A:108:VAL:HG11	0.56	1.59	22	4
1:A:7:VAL:H	1:A:108:VAL:HG21	0.56	1.61	17	1
1:A:77:LEU:CD1	1:A:83:TRP:N	0.56	2.68	24	2
1:A:36:GLN:HG3	1:A:95:VAL:HG13	0.56	1.77	36	1
1:A:32:TYR:CE2	1:A:99:ASP:CG	0.56	2.79	39	5
1:A:69:VAL:HG21	1:A:110:ILE:HG21	0.56	1.78	33	1
1:A:41:ASP:OD2	1:A:83:TRP:CD2	0.56	2.59	18	5
1:A:26:LEU:HD13	1:A:63:ALA:CB	0.56	2.29	40	1
1:A:32:TYR:CD1	1:A:99:ASP:HA	0.56	2.36	5	12
1:A:35:GLY:O	1:A:96:GLY:O	0.56	2.24	11	19
1:A:9:PRO:HD3	1:A:19:VAL:HG11	0.56	1.77	4	3
1:A:32:TYR:CG	1:A:98:SER:O	0.56	2.59	30	2
1:A:27:GLN:HG2	1:A:32:TYR:CE2	0.56	2.36	21	4
1:A:49:PRO:CD	1:A:74:GLU:O	0.56	2.54	19	3
1:A:9:PRO:O	1:A:110:ILE:HD11	0.56	2.01	9	2
1:A:13:LEU:HD23	1:A:13:LEU:N	0.56	2.16	38	2
1:A:95:VAL:CG2	1:A:110:ILE:HG22	0.56	2.31	27	3
1:A:96:GLY:O	2:A:130:NCZ:H183	0.56	2.00	14	5
1:A:69:VAL:HG22	1:A:110:ILE:HD11	0.56	1.77	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:SER:O	1:A:110:ILE:HD13	0.56	2.01	26	3
1:A:69:VAL:HG21	1:A:110:ILE:CD1	0.56	2.30	29	1
1:A:45:LEU:CD2	2:A:130:NCZ:C12	0.56	2.84	35	1
1:A:97:LEU:H	1:A:97:LEU:HD23	0.56	1.61	33	6
1:A:35:GLY:HA2	1:A:51:ASP:HA	0.56	1.77	23	12
1:A:27:GLN:HG2	1:A:32:TYR:CD2	0.56	2.35	8	3
1:A:7:VAL:HG21	1:A:110:ILE:HD12	0.56	1.76	11	1
1:A:45:LEU:HD22	2:A:130:NCZ:C12	0.56	2.31	35	1
1:A:40:VAL:CG1	1:A:83:TRP:CD1	0.56	2.88	31	6
1:A:108:VAL:HG13	1:A:108:VAL:O	0.56	1.99	30	4
1:A:45:LEU:HD13	2:A:130:NCZ:C14	0.56	2.30	43	3
1:A:77:LEU:N	1:A:77:LEU:HD13	0.56	2.16	1	3
1:A:12:GLY:CA	1:A:69:VAL:HG21	0.56	2.31	10	1
1:A:16:GLY:C	1:A:68:THR:HG23	0.56	2.22	25	2
1:A:77:LEU:CD1	1:A:77:LEU:N	0.56	2.68	24	1
1:A:72:SER:C	1:A:73:PHE:CG	0.55	2.79	3	5
1:A:36:GLN:HA	1:A:94:GLN:O	0.55	2.01	3	23
1:A:51:ASP:OD2	2:A:130:NCZ:C7	0.55	2.55	22	3
1:A:48:ASN:N	1:A:48:ASN:HD22	0.55	1.98	22	6
1:A:13:LEU:HD23	1:A:111:SER:CA	0.55	2.31	4	2
1:A:27:GLN:O	1:A:28:ALA:C	0.55	2.45	5	1
1:A:8:THR:HB	1:A:9:PRO:CD	0.55	2.31	42	15
1:A:97:LEU:HD13	1:A:97:LEU:H	0.55	1.61	22	3
1:A:41:ASP:CG	1:A:83:TRP:CE2	0.55	2.79	20	2
1:A:77:LEU:HD13	1:A:83:TRP:CB	0.55	2.32	41	1
1:A:6:THR:HG22	1:A:108:VAL:CG2	0.55	2.32	16	3
1:A:48:ASN:HB3	1:A:73:PHE:CD2	0.55	2.37	13	5
1:A:41:ASP:OD2	1:A:77:LEU:HD21	0.55	2.02	32	1
1:A:34:VAL:CG2	1:A:55:VAL:CG1	0.55	2.84	9	2
1:A:8:THR:HG22	1:A:11:SER:HB2	0.55	1.79	15	1
1:A:76:PHE:CG	1:A:76:PHE:O	0.55	2.59	15	2
1:A:13:LEU:CD1	1:A:111:SER:O	0.55	2.55	11	5
1:A:72:SER:O	1:A:73:PHE:CB	0.55	2.54	26	22
1:A:49:PRO:HA	1:A:52:PHE:CZ	0.55	2.36	14	16
1:A:13:LEU:HD12	1:A:110:ILE:CG2	0.55	2.30	24	3
1:A:76:PHE:CD1	1:A:76:PHE:O	0.55	2.59	34	1
1:A:13:LEU:CD1	1:A:13:LEU:C	0.55	2.75	6	3
1:A:40:VAL:HG21	1:A:85:THR:HG23	0.55	1.78	18	2
1:A:13:LEU:C	1:A:13:LEU:CD1	0.55	2.74	22	2
1:A:95:VAL:HG21	1:A:110:ILE:CG2	0.55	2.32	27	1
1:A:75:GLY:HA3	1:A:83:TRP:CE3	0.55	2.37	24	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:41:ASP:OD2	1:A:83:TRP:CE2	0.55	2.60	33	4
1:A:32:TYR:CB	1:A:97:LEU:HD12	0.55	2.30	10	2
1:A:71:ARG:HD2	1:A:89:THR:HG22	0.55	1.79	40	1
1:A:68:THR:HG23	1:A:70:ARG:HG3	0.55	1.77	10	1
1:A:85:THR:C	1:A:86:VAL:CG2	0.54	2.74	44	8
1:A:39:TRP:CD1	1:A:39:TRP:O	0.54	2.60	2	3
1:A:12:GLY:N	1:A:111:SER:O	0.54	2.40	39	5
1:A:72:SER:CB	1:A:86:VAL:O	0.54	2.55	24	3
1:A:85:THR:O	1:A:86:VAL:CB	0.54	2.56	38	17
1:A:97:LEU:O	1:A:97:LEU:CD2	0.54	2.54	43	2
1:A:76:PHE:CD2	1:A:77:LEU:O	0.54	2.60	36	2
1:A:83:TRP:C	1:A:83:TRP:CD1	0.54	2.80	24	2
1:A:73:PHE:CZ	1:A:88:CYS:HB2	0.54	2.37	12	5
1:A:73:PHE:CD1	1:A:73:PHE:O	0.54	2.60	36	3
1:A:16:GLY:C	1:A:68:THR:CG2	0.54	2.76	5	5
1:A:40:VAL:CG2	1:A:41:ASP:N	0.54	2.70	44	2
1:A:37:CYS:HB2	2:A:130:NCZ:C6	0.54	2.32	19	11
1:A:41:ASP:OD2	1:A:44:VAL:HG21	0.54	2.02	25	2
1:A:34:VAL:CG2	1:A:65:THR:HG21	0.54	2.33	44	4
1:A:39:TRP:O	1:A:91:ALA:CB	0.54	2.56	41	13
1:A:31:ALA:HB2	1:A:56:THR:HG1	0.54	1.61	4	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:9:PRO:HD2	0.54	2.33	38	10
1:A:55:VAL:HG23	1:A:65:THR:HG21	0.54	1.79	8	1
1:A:44:VAL:HG11	1:A:77:LEU:HG	0.54	1.78	1	1
1:A:40:VAL:HG23	1:A:91:ALA:HB3	0.54	1.79	24	1
1:A:37:CYS:HB3	2:A:130:NCZ:C1	0.54	2.32	30	33
1:A:99:ASP:N	1:A:99:ASP:OD2	0.54	2.40	21	6
1:A:45:LEU:HD22	2:A:130:NCZ:H13	0.54	1.79	17	2
1:A:12:GLY:CA	1:A:69:VAL:HG11	0.54	2.30	37	3
1:A:13:LEU:HD13	1:A:69:VAL:CG1	0.54	2.32	19	1
1:A:34:VAL:HG23	1:A:97:LEU:CB	0.54	2.29	14	1
1:A:52:PHE:CD1	1:A:52:PHE:N	0.54	2.73	20	11
1:A:6:THR:OG1	1:A:7:VAL:N	0.54	2.41	37	2
1:A:44:VAL:HG13	1:A:78:PHE:CD1	0.54	2.38	26	1
1:A:25:GLY:O	1:A:26:LEU:O	0.54	2.25	40	2
1:A:37:CYS:HB2	2:A:130:NCZ:C5	0.54	2.34	12	37
1:A:108:VAL:CG1	1:A:110:ILE:HD13	0.54	2.32	15	2
1:A:98:SER:OG	2:A:130:NCZ:C8	0.54	2.56	21	3
1:A:13:LEU:CD2	1:A:111:SER:O	0.53	2.55	35	4
1:A:34:VAL:HG21	1:A:55:VAL:HG21	0.53	1.80	31	2
1:A:7:VAL:HG21	1:A:110:ILE:CD1	0.53	2.33	31	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:PHE:CD1	1:A:76:PHE:N	0.53	2.76	18	2
1:A:26:LEU:CD1	1:A:27:GLN:OE1	0.53	2.57	39	3
1:A:34:VAL:HG11	1:A:67:LEU:HD12	0.53	1.79	27	3
1:A:7:VAL:CG1	1:A:110:ILE:HD11	0.53	2.34	39	2
1:A:13:LEU:CD1	1:A:14:SER:N	0.53	2.68	4	2
1:A:26:LEU:CD1	1:A:27:GLN:N	0.53	2.71	26	6
1:A:72:SER:O	1:A:73:PHE:CG	0.53	2.62	31	10
1:A:104:GLY:O	2:A:130:NCZ:C2	0.53	2.55	33	2
1:A:36:GLN:N	1:A:51:ASP:OD1	0.53	2.41	21	2
1:A:10:SER:HA	1:A:13:LEU:HD23	0.53	1.81	34	1
1:A:38:ALA:HB1	1:A:92:ALA:O	0.53	2.03	2	7
1:A:27:GLN:OE1	1:A:31:ALA:N	0.53	2.42	35	1
1:A:7:VAL:HG21	1:A:110:ILE:HD13	0.53	1.81	23	2
1:A:21:VAL:HB	1:A:65:THR:HG23	0.53	1.79	36	4
1:A:28:ALA:HB1	1:A:59:ALA:O	0.53	2.04	15	2
1:A:97:LEU:CD1	1:A:97:LEU:N	0.53	2.68	13	7
1:A:13:LEU:HD13	1:A:111:SER:N	0.53	2.18	7	1
1:A:95:VAL:HG23	1:A:110:ILE:HD13	0.53	1.80	44	1
1:A:32:TYR:OH	1:A:63:ALA:HB2	0.53	2.03	42	1
1:A:27:GLN:O	1:A:28:ALA:HB3	0.53	2.04	16	10
1:A:26:LEU:HD11	1:A:97:LEU:CG	0.53	2.33	31	2
1:A:88:CYS:SG	1:A:88:CYS:O	0.53	2.66	30	7
1:A:95:VAL:HG21	1:A:110:ILE:HG22	0.53	1.81	27	1
1:A:35:GLY:CA	1:A:51:ASP:OD1	0.53	2.57	21	2
1:A:70:ARG:O	1:A:72:SER:N	0.53	2.42	44	14
1:A:6:THR:HG22	1:A:108:VAL:HG21	0.53	1.80	36	1
1:A:72:SER:HA	1:A:86:VAL:O	0.53	2.04	13	18
1:A:7:VAL:CB	1:A:110:ILE:HD13	0.53	2.33	9	1
1:A:26:LEU:HD12	1:A:27:GLN:H	0.53	1.64	15	9
1:A:26:LEU:HD22	1:A:63:ALA:HB2	0.53	1.80	19	1
1:A:11:SER:O	1:A:111:SER:CB	0.53	2.57	16	1
1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CD1	0.53	2.75	42	1
1:A:41:ASP:CG	1:A:42:THR:N	0.53	2.62	21	5
1:A:76:PHE:CD2	1:A:82:ARG:HB3	0.53	2.38	30	2
1:A:9:PRO:CG	1:A:19:VAL:HG12	0.53	2.33	22	1
1:A:40:VAL:CG1	1:A:41:ASP:N	0.53	2.72	37	30
1:A:7:VAL:O	1:A:8:THR:C	0.53	2.47	9	25
1:A:34:VAL:HG23	1:A:97:LEU:HD22	0.53	1.75	27	3
1:A:73:PHE:CZ	1:A:88:CYS:CB	0.53	2.92	32	2
1:A:13:LEU:CD2	1:A:69:VAL:HG11	0.53	2.31	34	1
1:A:40:VAL:HG21	1:A:85:THR:HG1	0.53	1.63	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:88:CYS:O	1:A:88:CYS:SG	0.52	2.67	42	13
1:A:44:VAL:HB	1:A:77:LEU:HD22	0.52	1.81	15	1
1:A:77:LEU:CD1	1:A:82:ARG:C	0.52	2.77	24	1
1:A:36:GLN:O	1:A:36:GLN:CG	0.52	2.56	35	8
1:A:37:CYS:O	1:A:38:ALA:CB	0.52	2.57	27	6
1:A:37:CYS:SG	2:A:130:NCZ:C6	0.52	2.98	21	11
1:A:3:PRO:O	1:A:6:THR:HG23	0.52	2.04	8	4
1:A:69:VAL:HG11	1:A:110:ILE:HD13	0.52	1.81	11	1
1:A:41:ASP:CG	1:A:77:LEU:HD21	0.52	2.23	4	1
1:A:45:LEU:HD22	2:A:130:NCZ:C14	0.52	2.34	15	3
1:A:34:VAL:CG1	1:A:53:SER:O	0.52	2.58	20	1
1:A:53:SER:OG	1:A:67:LEU:CD2	0.52	2.56	4	2
1:A:37:CYS:HB3	2:A:130:NCZ:C6	0.52	2.34	29	20
1:A:77:LEU:HD11	1:A:83:TRP:CB	0.52	2.35	27	4
1:A:14:SER:CB	1:A:17:THR:OG1	0.52	2.57	35	9
1:A:53:SER:HB2	1:A:67:LEU:HD11	0.52	1.81	40	3
1:A:44:VAL:HG11	1:A:77:LEU:HD13	0.52	1.79	39	3
1:A:78:PHE:CD1	1:A:78:PHE:O	0.52	2.62	17	2
1:A:99:ASP:OD1	1:A:99:ASP:N	0.52	2.42	39	9
1:A:32:TYR:CE1	1:A:97:LEU:HG	0.52	2.39	13	2
1:A:45:LEU:HD22	2:A:130:NCZ:C17	0.52	2.34	3	2
1:A:76:PHE:CE2	1:A:82:ARG:HB3	0.52	2.39	30	7
1:A:75:GLY:C	1:A:83:TRP:HB3	0.52	2.25	43	2
1:A:10:SER:OG	1:A:13:LEU:CD2	0.52	2.58	25	1
1:A:36:GLN:CG	1:A:36:GLN:O	0.52	2.57	31	9
1:A:26:LEU:HD11	1:A:97:LEU:CD1	0.52	2.34	31	2
1:A:8:THR:CG2	1:A:11:SER:N	0.52	2.72	15	1
1:A:96:GLY:O	2:A:130:NCZ:C18	0.52	2.58	22	10
1:A:27:GLN:HG3	1:A:32:TYR:CD2	0.52	2.39	29	2
1:A:26:LEU:CD1	1:A:97:LEU:CD2	0.52	2.87	28	1
1:A:41:ASP:OD1	1:A:77:LEU:HD11	0.52	2.05	10	1
1:A:32:TYR:CG	1:A:97:LEU:CB	0.52	2.93	15	1
1:A:10:SER:O	1:A:111:SER:CB	0.52	2.58	8	3
1:A:27:GLN:HE21	1:A:97:LEU:HD12	0.52	1.64	41	1
1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:OD2	0.52	2.43	44	8
1:A:6:THR:HG22	1:A:108:VAL:HG23	0.52	1.80	16	1
1:A:37:CYS:CB	2:A:130:NCZ:C1	0.52	2.88	2	8
1:A:10:SER:HA	1:A:13:LEU:HD11	0.52	1.82	8	1
1:A:71:ARG:CG	1:A:88:CYS:CB	0.52	2.88	26	1
1:A:7:VAL:HG23	1:A:21:VAL:CG2	0.52	2.35	10	1
1:A:81:THR:OG1	1:A:82:ARG:N	0.51	2.42	41	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:41:ASP:HB2	1:A:77:LEU:HD21	0.51	1.82	26	2
1:A:4:THR:O	1:A:6:THR:CG2	0.51	2.52	40	1
1:A:45:LEU:HD21	2:A:130:NCZ:C17	0.51	2.35	38	1
1:A:10:SER:O	1:A:11:SER:O	0.51	2.29	28	5
1:A:44:VAL:CB	1:A:77:LEU:HD22	0.51	2.34	15	1
1:A:55:VAL:HG21	1:A:65:THR:CG2	0.51	2.35	34	2
1:A:71:ARG:O	1:A:88:CYS:CB	0.51	2.58	9	5
1:A:17:THR:HG22	1:A:69:VAL:CG1	0.51	2.34	1	1
1:A:11:SER:HB2	1:A:69:VAL:HG11	0.51	1.82	16	1
1:A:18:VAL:HG22	1:A:68:THR:CG2	0.51	2.35	35	2
1:A:38:ALA:O	1:A:46:ALA:O	0.51	2.28	1	27
1:A:96:GLY:C	2:A:130:NCZ:H183	0.51	2.26	11	6
1:A:55:VAL:CG1	1:A:56:THR:N	0.51	2.73	37	6
1:A:71:ARG:CD	1:A:88:CYS:O	0.51	2.58	41	1
1:A:94:GLN:CG	1:A:94:GLN:O	0.51	2.58	41	6
1:A:48:ASN:CB	1:A:49:PRO:CD	0.51	2.88	2	2
1:A:41:ASP:O	1:A:43:GLY:N	0.51	2.44	24	13
1:A:73:PHE:CE1	1:A:88:CYS:HB2	0.51	2.40	17	5
1:A:44:VAL:HG12	1:A:77:LEU:HD12	0.51	1.83	25	1
1:A:25:GLY:N	1:A:61:GLY:O	0.51	2.44	28	15
1:A:70:ARG:O	1:A:71:ARG:C	0.51	2.49	44	16
1:A:36:GLN:NE2	1:A:48:ASN:CB	0.51	2.74	28	3
1:A:85:THR:CG2	1:A:87:ASP:O	0.51	2.59	2	7
1:A:37:CYS:SG	1:A:45:LEU:HD21	0.51	2.46	18	1
1:A:11:SER:OG	1:A:69:VAL:CG2	0.51	2.59	25	1
1:A:32:TYR:HE1	1:A:55:VAL:HG12	0.51	1.66	42	1
1:A:108:VAL:CG1	1:A:108:VAL:O	0.51	2.58	30	4
1:A:34:VAL:CG1	1:A:51:ASP:OD2	0.51	2.59	21	1
1:A:29:GLY:HA2	1:A:57:ALA:CB	0.51	2.36	22	6
1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CD1	0.51	2.75	14	7
1:A:34:VAL:O	1:A:51:ASP:O	0.51	2.29	32	14
1:A:41:ASP:CG	1:A:83:TRP:CD2	0.51	2.84	19	1
1:A:4:THR:OG1	1:A:5:ALA:N	0.51	2.41	23	15
1:A:19:VAL:HG22	1:A:69:VAL:HG23	0.51	1.83	8	3
1:A:32:TYR:CB	1:A:98:SER:O	0.51	2.59	15	5
1:A:10:SER:O	1:A:12:GLY:N	0.51	2.44	37	7
1:A:71:ARG:NH1	1:A:89:THR:HG22	0.51	2.20	7	1
1:A:41:ASP:HB2	1:A:77:LEU:HD11	0.51	1.81	40	2
1:A:55:VAL:HG23	1:A:65:THR:CB	0.51	2.36	31	3
1:A:76:PHE:CD2	1:A:82:ARG:HB2	0.51	2.40	30	1
1:A:27:GLN:HG3	1:A:32:TYR:CE1	0.51	2.40	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:SER:HB2	1:A:67:LEU:HD21	0.51	1.82	29	1
1:A:72:SER:O	1:A:73:PHE:CD2	0.51	2.64	25	2
1:A:3:PRO:C	1:A:4:THR:CG2	0.50	2.80	38	8
1:A:27:GLN:HB3	1:A:30:THR:CB	0.50	2.36	7	14
1:A:85:THR:O	1:A:87:ASP:N	0.50	2.44	33	1
1:A:45:LEU:O	1:A:78:PHE:CB	0.50	2.59	37	4
1:A:76:PHE:N	1:A:76:PHE:CD1	0.50	2.79	25	4
1:A:36:GLN:CB	1:A:95:VAL:HG22	0.50	2.37	35	4
1:A:44:VAL:HG12	1:A:77:LEU:HD22	0.50	1.83	31	1
1:A:34:VAL:CG1	1:A:53:SER:CB	0.50	2.90	15	1
1:A:76:PHE:CD1	1:A:77:LEU:O	0.50	2.64	15	2
1:A:40:VAL:HG11	1:A:83:TRP:CE2	0.50	2.41	43	2
1:A:69:VAL:O	1:A:69:VAL:HG12	0.50	2.05	16	2
1:A:41:ASP:OD2	1:A:44:VAL:CG2	0.50	2.59	25	2
1:A:23:GLY:O	1:A:61:GLY:O	0.50	2.30	41	28
1:A:87:ASP:O	1:A:89:THR:N	0.50	2.42	44	8
1:A:35:GLY:HA3	1:A:51:ASP:O	0.50	2.06	39	9
1:A:36:GLN:NE2	1:A:48:ASN:OD1	0.50	2.45	39	16
1:A:34:VAL:HG11	1:A:67:LEU:HD13	0.50	1.83	12	1
1:A:17:THR:HB	1:A:69:VAL:HG12	0.50	1.82	44	1
1:A:13:LEU:CD1	1:A:13:LEU:O	0.50	2.55	35	2
1:A:75:GLY:CA	1:A:84:GLY:HA3	0.50	2.36	35	5
1:A:103:ASN:O	1:A:105:PRO:N	0.50	2.44	21	12
1:A:38:ALA:CB	1:A:92:ALA:O	0.50	2.60	23	9
1:A:36:GLN:O	1:A:48:ASN:ND2	0.50	2.45	19	2
1:A:27:GLN:OE1	1:A:27:GLN:CA	0.50	2.59	22	1
1:A:77:LEU:HD13	1:A:82:ARG:C	0.50	2.27	24	1
1:A:14:SER:O	1:A:17:THR:OG1	0.50	2.28	33	2
1:A:13:LEU:CD1	1:A:110:ILE:HG23	0.50	2.30	5	2
1:A:8:THR:N	1:A:9:PRO:CD	0.50	2.74	6	8
1:A:48:ASN:ND2	1:A:83:TRP:CZ3	0.50	2.80	24	2
1:A:76:PHE:CZ	1:A:82:ARG:HB3	0.50	2.42	22	4
1:A:69:VAL:CG1	1:A:110:ILE:CD1	0.50	2.88	17	1
1:A:37:CYS:SG	1:A:45:LEU:CD1	0.50	3.00	25	4
1:A:78:PHE:C	1:A:78:PHE:CD1	0.50	2.85	6	2
1:A:34:VAL:HG21	1:A:65:THR:CB	0.50	2.37	44	2
1:A:75:GLY:HA3	1:A:83:TRP:CD2	0.50	2.42	24	1
1:A:13:LEU:HD23	1:A:111:SER:HA	0.50	1.84	4	2
1:A:32:TYR:CZ	1:A:99:ASP:HA	0.50	2.42	2	7
1:A:83:TRP:NE1	1:A:85:THR:OG1	0.50	2.44	43	7
1:A:49:PRO:HG2	1:A:73:PHE:CD1	0.50	2.41	11	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:SER:O	1:A:111:SER:O	0.50	2.30	28	4
1:A:9:PRO:HG2	1:A:19:VAL:HG11	0.50	1.84	28	3
1:A:32:TYR:OH	1:A:63:ALA:CB	0.50	2.59	42	1
1:A:75:GLY:O	1:A:83:TRP:N	0.49	2.45	29	6
1:A:77:LEU:CD1	1:A:83:TRP:CB	0.49	2.90	41	2
1:A:77:LEU:CD1	1:A:81:THR:O	0.49	2.59	7	1
1:A:6:THR:O	1:A:21:VAL:CA	0.49	2.60	10	1
1:A:99:ASP:N	1:A:99:ASP:OD1	0.49	2.46	26	6
1:A:40:VAL:CG2	1:A:85:THR:CB	0.49	2.90	14	2
1:A:34:VAL:HG12	1:A:51:ASP:O	0.49	2.07	21	1
1:A:34:VAL:HG23	1:A:97:LEU:CD2	0.49	2.37	41	1
1:A:77:LEU:HD21	1:A:83:TRP:CB	0.49	2.35	19	2
1:A:13:LEU:CD1	1:A:111:SER:N	0.49	2.76	7	2
1:A:29:GLY:CA	1:A:57:ALA:O	0.49	2.61	22	5
1:A:74:GLU:OE2	1:A:84:GLY:CA	0.49	2.59	4	6
1:A:13:LEU:O	1:A:13:LEU:CG	0.49	2.60	1	1
1:A:7:VAL:HG22	1:A:21:VAL:HG22	0.49	1.85	44	2
1:A:13:LEU:HD23	1:A:111:SER:HB3	0.49	1.82	6	1
1:A:74:GLU:CG	1:A:83:TRP:O	0.49	2.60	35	2
1:A:85:THR:O	1:A:86:VAL:CG1	0.49	2.60	16	6
1:A:71:ARG:NH1	1:A:110:ILE:O	0.49	2.45	18	2
1:A:3:PRO:CD	1:A:6:THR:HG21	0.49	2.36	19	1
1:A:93:CYS:O	1:A:110:ILE:CG2	0.49	2.60	17	1
1:A:11:SER:CB	1:A:69:VAL:HG11	0.49	2.37	16	1
1:A:16:GLY:O	1:A:68:THR:CG2	0.49	2.60	40	1
1:A:77:LEU:CD1	1:A:83:TRP:HB3	0.49	2.38	41	6
1:A:37:CYS:HB3	2:A:130:NCZ:C5	0.49	2.37	29	7
1:A:69:VAL:HG13	1:A:71:ARG:CZ	0.49	2.37	18	1
1:A:97:LEU:O	1:A:105:PRO:CG	0.49	2.60	11	1
1:A:108:VAL:O	1:A:108:VAL:CG1	0.49	2.60	11	1
1:A:41:ASP:O	1:A:42:THR:C	0.49	2.51	37	5
1:A:36:GLN:NE2	1:A:73:PHE:CE2	0.49	2.81	30	1
1:A:36:GLN:HE21	1:A:48:ASN:CB	0.49	2.20	41	3
1:A:38:ALA:N	1:A:45:LEU:HD23	0.49	2.23	19	1
1:A:76:PHE:CE2	1:A:82:ARG:HG2	0.49	2.43	9	2
1:A:58:ASP:CG	1:A:62:SER:O	0.49	2.52	13	13
1:A:69:VAL:CG1	1:A:71:ARG:NH2	0.49	2.72	18	1
1:A:85:THR:O	1:A:86:VAL:HB	0.48	2.07	14	19
1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:OD1	0.48	2.46	38	8
1:A:37:CYS:HB3	2:A:130:NCZ:C4	0.48	2.38	12	2
1:A:49:PRO:CG	1:A:73:PHE:HB3	0.48	2.38	18	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:GLY:HA2	1:A:68:THR:HG22	0.48	1.85	20	4
1:A:76:PHE:CZ	1:A:82:ARG:HG2	0.48	2.43	21	2
1:A:7:VAL:HG11	1:A:110:ILE:CG1	0.48	2.37	22	1
1:A:26:LEU:CD2	1:A:27:GLN:N	0.48	2.76	11	1
1:A:27:GLN:HG3	1:A:32:TYR:CE2	0.48	2.42	44	2
1:A:39:TRP:CD1	1:A:45:LEU:HG	0.48	2.42	44	1
1:A:76:PHE:CE2	1:A:82:ARG:HB2	0.48	2.43	3	2
1:A:110:ILE:HD13	1:A:111:SER:H	0.48	1.69	30	1
1:A:57:ALA:HB2	1:A:63:ALA:CB	0.48	2.32	11	1
1:A:78:PHE:CE1	2:A:130:NCZ:O6	0.48	2.65	16	1
1:A:7:VAL:HG11	1:A:19:VAL:HG21	0.48	1.85	24	1
1:A:45:LEU:CD2	2:A:130:NCZ:O4	0.48	2.61	35	1
1:A:90:THR:HG23	1:A:91:ALA:N	0.48	2.24	40	7
1:A:32:TYR:CG	1:A:97:LEU:HB2	0.48	2.44	15	3
1:A:66:SER:O	1:A:67:LEU:CD2	0.48	2.60	11	3
1:A:34:VAL:HG22	1:A:97:LEU:HB3	0.48	1.86	9	2
1:A:6:THR:O	1:A:21:VAL:CG1	0.48	2.59	10	1
1:A:7:VAL:O	1:A:9:PRO:O	0.48	2.32	38	12
1:A:108:VAL:O	1:A:110:ILE:N	0.48	2.47	30	8
1:A:81:THR:HG23	1:A:82:ARG:H	0.48	1.68	41	2
1:A:80:GLY:O	1:A:81:THR:O	0.48	2.31	41	2
1:A:37:CYS:HB3	2:A:130:NCZ:C2	0.48	2.39	21	2
1:A:4:THR:O	1:A:22:ALA:O	0.48	2.32	19	12
1:A:70:ARG:O	1:A:70:ARG:NH1	0.48	2.46	23	1
1:A:26:LEU:CD2	1:A:27:GLN:OE1	0.48	2.62	18	2
1:A:85:THR:HG22	1:A:87:ASP:N	0.48	2.23	4	4
1:A:27:GLN:NE2	1:A:32:TYR:CD1	0.48	2.81	2	2
1:A:32:TYR:CZ	1:A:99:ASP:HB3	0.48	2.44	16	2
1:A:40:VAL:HG12	1:A:46:ALA:CB	0.48	2.39	36	4
1:A:53:SER:O	1:A:54:SER:C	0.48	2.52	1	16
1:A:55:VAL:CG1	1:A:65:THR:OG1	0.48	2.62	20	1
1:A:86:VAL:CG1	1:A:87:ASP:N	0.48	2.76	26	4
1:A:13:LEU:HD13	1:A:69:VAL:HG12	0.48	1.84	29	1
1:A:7:VAL:HG22	1:A:19:VAL:HG23	0.48	1.85	42	1
1:A:105:PRO:HA	2:A:130:NCZ:C17	0.48	2.38	34	7
1:A:54:SER:O	1:A:55:VAL:HG23	0.48	2.08	24	5
1:A:13:LEU:HD11	1:A:71:ARG:HD2	0.48	1.85	21	1
1:A:72:SER:C	1:A:73:PHE:CD1	0.48	2.87	44	1
1:A:13:LEU:HD22	1:A:69:VAL:CG1	0.48	2.34	34	1
1:A:40:VAL:HG21	1:A:83:TRP:NE1	0.48	2.22	24	1
1:A:40:VAL:HG12	1:A:46:ALA:HB3	0.48	1.85	21	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:VAL:HG22	1:A:65:THR:CG2	0.48	2.34	39	2
1:A:12:GLY:O	1:A:13:LEU:C	0.48	2.52	15	2
1:A:5:ALA:CB	1:A:97:LEU:CD2	0.48	2.92	21	2
1:A:69:VAL:CG1	1:A:71:ARG:CZ	0.48	2.91	18	1
1:A:106:GLU:O	2:A:130:NCZ:C18	0.48	2.57	27	6
1:A:27:GLN:OE1	1:A:97:LEU:CD1	0.48	2.60	38	1
1:A:85:THR:HG21	1:A:88:CYS:SG	0.48	2.49	27	1
1:A:110:ILE:HG23	1:A:111:SER:N	0.48	2.24	15	1
1:A:35:GLY:O	1:A:37:CYS:N	0.48	2.47	15	2
1:A:75:GLY:C	1:A:76:PHE:CD1	0.48	2.88	43	1
1:A:77:LEU:HD21	1:A:83:TRP:HB3	0.48	1.86	44	1
1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CD2	0.48	2.77	3	1
1:A:26:LEU:C	1:A:28:ALA:N	0.47	2.68	35	8
1:A:46:ALA:CB	1:A:77:LEU:HA	0.47	2.39	27	4
1:A:35:GLY:HA3	1:A:51:ASP:CB	0.47	2.39	23	8
1:A:34:VAL:HG13	1:A:67:LEU:HD12	0.47	1.85	7	1
1:A:53:SER:OG	1:A:67:LEU:HD21	0.47	2.08	29	2
1:A:7:VAL:HG23	1:A:108:VAL:HG11	0.47	1.85	26	2
1:A:32:TYR:CE1	1:A:55:VAL:O	0.47	2.67	42	1
1:A:98:SER:OG	2:A:130:NCZ:C5	0.47	2.62	31	2
1:A:103:ASN:O	1:A:104:GLY:C	0.47	2.52	21	13
1:A:37:CYS:HB2	2:A:130:NCZ:C4	0.47	2.39	15	1
1:A:41:ASP:CG	1:A:83:TRP:CD1	0.47	2.88	15	1
1:A:58:ASP:OD1	1:A:58:ASP:N	0.47	2.47	41	2
1:A:17:THR:CG2	1:A:69:VAL:HG12	0.47	2.39	1	1
1:A:88:CYS:SG	1:A:91:ALA:O	0.47	2.72	30	31
1:A:76:PHE:CD2	1:A:82:ARG:HG2	0.47	2.44	18	1
1:A:26:LEU:CD1	1:A:26:LEU:C	0.47	2.82	2	2
1:A:98:SER:HB3	2:A:130:NCZ:C7	0.47	2.39	5	2
1:A:68:THR:HG23	1:A:70:ARG:CG	0.47	2.38	10	2
1:A:102:GLY:O	2:A:130:NCZ:C16	0.47	2.62	44	1
1:A:40:VAL:HG13	1:A:41:ASP:N	0.47	2.24	36	4
1:A:11:SER:HA	1:A:111:SER:CB	0.47	2.40	31	1
1:A:33:ASP:O	1:A:97:LEU:HA	0.47	2.09	11	12
1:A:54:SER:O	1:A:55:VAL:CG1	0.47	2.62	23	1
1:A:30:THR:HG22	1:A:31:ALA:H	0.47	1.68	40	6
1:A:14:SER:HB3	1:A:17:THR:OG1	0.47	2.10	16	6
1:A:36:GLN:NE2	1:A:48:ASN:CG	0.47	2.68	14	3
1:A:77:LEU:HD22	1:A:81:THR:O	0.47	2.08	9	2
1:A:7:VAL:CG2	1:A:110:ILE:HD13	0.47	2.39	23	1
1:A:97:LEU:CD2	1:A:97:LEU:O	0.47	2.62	22	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:GLU:OE1	1:A:76:PHE:CE1	0.47	2.67	14	1
1:A:69:VAL:HG11	1:A:110:ILE:CG1	0.47	2.39	42	1
1:A:102:GLY:C	1:A:103:ASN:ND2	0.47	2.67	42	3
1:A:31:ALA:HB1	1:A:56:THR:OG1	0.47	2.10	31	1
1:A:36:GLN:OE1	1:A:71:ARG:NH2	0.47	2.47	21	2
1:A:17:THR:HG22	1:A:19:VAL:HG13	0.47	1.86	32	3
1:A:32:TYR:CD2	1:A:98:SER:O	0.47	2.67	16	1
1:A:76:PHE:CZ	1:A:82:ARG:HG3	0.47	2.44	3	1
1:A:95:VAL:HG21	1:A:110:ILE:HD13	0.47	1.85	31	1
1:A:97:LEU:N	1:A:97:LEU:CD2	0.47	2.66	27	3
1:A:36:GLN:OE1	1:A:70:ARG:N	0.47	2.48	33	1
1:A:46:ALA:HA	1:A:76:PHE:O	0.47	2.09	20	15
1:A:7:VAL:O	1:A:7:VAL:HG13	0.47	2.09	15	1
1:A:76:PHE:CD1	1:A:76:PHE:C	0.47	2.86	15	1
1:A:17:THR:HG23	1:A:19:VAL:HG13	0.47	1.87	37	1
1:A:48:ASN:OD1	1:A:70:ARG:NH2	0.47	2.47	23	1
1:A:34:VAL:HG12	1:A:51:ASP:OD2	0.47	2.10	21	1
1:A:36:GLN:CD	1:A:48:ASN:OD1	0.47	2.53	43	1
1:A:27:GLN:NE2	1:A:30:THR:CB	0.47	2.78	26	1
1:A:86:VAL:O	1:A:88:CYS:N	0.47	2.48	10	2
1:A:77:LEU:H	1:A:77:LEU:HD12	0.47	1.69	4	1
1:A:83:TRP:HE1	1:A:85:THR:CB	0.47	2.21	43	1
1:A:10:SER:O	1:A:110:ILE:CD1	0.47	2.63	12	2
1:A:49:PRO:HG2	1:A:73:PHE:CD2	0.47	2.45	23	2
1:A:17:THR:O	1:A:69:VAL:CG2	0.47	2.63	4	2
1:A:49:PRO:HG2	1:A:73:PHE:CG	0.47	2.45	14	10
1:A:58:ASP:OD2	1:A:58:ASP:N	0.47	2.47	17	7
1:A:42:THR:O	1:A:44:VAL:N	0.47	2.48	25	4
1:A:11:SER:O	1:A:12:GLY:C	0.47	2.54	29	5
1:A:77:LEU:N	1:A:77:LEU:HD23	0.47	2.25	39	1
1:A:77:LEU:HD22	1:A:77:LEU:N	0.47	2.22	40	1
1:A:45:LEU:O	1:A:78:PHE:CA	0.47	2.63	20	2
1:A:48:ASN:ND2	1:A:73:PHE:CD1	0.47	2.83	34	1
1:A:87:ASP:CG	1:A:89:THR:CG2	0.47	2.83	36	1
1:A:58:ASP:C	1:A:60:ASN:N	0.46	2.68	41	29
1:A:32:TYR:CE2	1:A:97:LEU:HD13	0.46	2.45	37	1
1:A:12:GLY:O	1:A:69:VAL:CG1	0.46	2.62	37	1
1:A:41:ASP:OD1	1:A:83:TRP:CE2	0.46	2.68	22	2
1:A:19:VAL:CG2	1:A:69:VAL:CG2	0.46	2.93	22	1
1:A:32:TYR:CE2	1:A:99:ASP:CA	0.46	2.98	16	1
2:A:130:NCZ:H1	2:A:130:NCZ:O4	0.46	2.11	41	23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:ALA:HB2	1:A:61:GLY:HA2	0.46	1.88	5	2
1:A:30:THR:O	1:A:56:THR:HG23	0.46	2.10	19	1
1:A:17:THR:HB	1:A:69:VAL:CG1	0.46	2.41	3	1
1:A:28:ALA:HA	1:A:61:GLY:CA	0.46	2.41	25	4
1:A:77:LEU:N	1:A:81:THR:HA	0.46	2.26	31	2
1:A:77:LEU:HD12	1:A:77:LEU:H	0.46	1.71	30	1
1:A:51:ASP:OD1	1:A:52:PHE:CD1	0.46	2.68	32	2
1:A:38:ALA:O	1:A:40:VAL:N	0.46	2.49	19	2
1:A:45:LEU:C	1:A:45:LEU:CD1	0.46	2.83	12	1
1:A:26:LEU:CG	1:A:97:LEU:HD11	0.46	2.35	25	2
1:A:76:PHE:CZ	1:A:82:ARG:HD3	0.46	2.45	5	1
1:A:95:VAL:HB	1:A:108:VAL:HG12	0.46	1.87	16	2
1:A:7:VAL:CG1	1:A:110:ILE:HG13	0.46	2.39	4	1
2:A:130:NCZ:O4	2:A:130:NCZ:H1	0.46	2.11	43	21
1:A:7:VAL:HG12	1:A:19:VAL:HG23	0.46	1.81	21	2
1:A:11:SER:O	1:A:111:SER:C	0.46	2.53	15	1
1:A:36:GLN:CD	1:A:51:ASP:HB2	0.46	2.29	41	2
1:A:37:CYS:SG	1:A:45:LEU:HD12	0.46	2.51	32	1
1:A:3:PRO:C	1:A:4:THR:HG1	0.46	2.13	19	1
1:A:76:PHE:CZ	1:A:82:ARG:HB2	0.46	2.46	10	1
1:A:40:VAL:HG22	1:A:85:THR:HB	0.46	1.85	40	1
1:A:41:ASP:OD2	1:A:42:THR:N	0.46	2.48	21	2
1:A:26:LEU:HD22	1:A:27:GLN:H	0.46	1.69	1	4
1:A:97:LEU:H	1:A:97:LEU:HD22	0.46	1.70	9	2
1:A:11:SER:HB3	1:A:69:VAL:HG11	0.46	1.88	28	1
1:A:11:SER:O	1:A:13:LEU:N	0.46	2.49	10	1
1:A:94:GLN:O	1:A:94:GLN:CG	0.46	2.64	40	3
1:A:34:VAL:HG22	1:A:97:LEU:CD2	0.46	2.36	37	1
1:A:77:LEU:CD1	1:A:81:THR:CG2	0.46	2.92	29	1
1:A:27:GLN:HG3	1:A:32:TYR:CG	0.46	2.46	16	4
1:A:110:ILE:O	1:A:111:SER:OG	0.46	2.33	4	5
1:A:7:VAL:HG13	1:A:21:VAL:HG22	0.46	1.86	31	1
1:A:9:PRO:CD	1:A:19:VAL:HG11	0.46	2.39	13	3
1:A:27:GLN:OE1	1:A:57:ALA:N	0.46	2.48	32	1
1:A:13:LEU:CD1	1:A:110:ILE:CG2	0.46	2.93	5	1
1:A:93:CYS:SG	1:A:110:ILE:HG21	0.46	2.51	17	1
1:A:26:LEU:HD12	1:A:97:LEU:HD23	0.46	1.87	9	1
1:A:40:VAL:HG23	1:A:41:ASP:N	0.46	2.26	44	2
1:A:58:ASP:OD1	1:A:62:SER:CB	0.46	2.64	5	2
1:A:12:GLY:C	1:A:71:ARG:NH2	0.46	2.69	41	1
1:A:12:GLY:O	1:A:13:LEU:O	0.46	2.34	32	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:SER:O	1:A:17:THR:N	0.46	2.49	40	2
1:A:58:ASP:O	1:A:60:ASN:N	0.46	2.49	32	24
1:A:7:VAL:HG13	1:A:110:ILE:HG12	0.46	1.87	15	1
1:A:8:THR:OG1	1:A:9:PRO:HD2	0.46	2.11	15	1
1:A:70:ARG:C	1:A:72:SER:N	0.46	2.70	22	12
1:A:10:SER:CA	1:A:13:LEU:HD11	0.46	2.40	8	1
1:A:48:ASN:OD1	1:A:70:ARG:NE	0.46	2.48	23	1
1:A:98:SER:CB	1:A:105:PRO:HB3	0.46	2.41	21	2
1:A:27:GLN:CG	1:A:32:TYR:OH	0.46	2.64	22	1
1:A:71:ARG:NH1	1:A:87:ASP:OD2	0.46	2.49	16	1
1:A:85:THR:HG21	1:A:93:CYS:SG	0.46	2.50	36	1
1:A:21:VAL:O	1:A:63:ALA:O	0.46	2.34	40	3
1:A:36:GLN:HA	1:A:95:VAL:HA	0.46	1.88	32	1
1:A:46:ALA:HB2	1:A:77:LEU:HD13	0.46	1.88	28	2
1:A:13:LEU:CD2	1:A:110:ILE:HG13	0.46	2.41	19	1
1:A:11:SER:CB	1:A:69:VAL:HG21	0.46	2.40	42	3
1:A:11:SER:CB	1:A:110:ILE:HG13	0.46	2.41	25	2
1:A:48:ASN:CB	1:A:73:PHE:CE2	0.46	2.99	24	1
1:A:37:CYS:SG	1:A:45:LEU:CD2	0.45	3.05	18	2
1:A:7:VAL:CG1	1:A:9:PRO:O	0.45	2.62	30	1
1:A:32:TYR:CZ	1:A:97:LEU:HG	0.45	2.45	42	1
1:A:71:ARG:NH2	1:A:111:SER:CB	0.45	2.80	12	1
1:A:13:LEU:HB2	1:A:69:VAL:HG11	0.45	1.88	29	1
1:A:85:THR:HG22	1:A:86:VAL:N	0.45	2.26	29	2
1:A:77:LEU:HD23	1:A:77:LEU:N	0.45	2.26	10	2
1:A:68:THR:HG22	1:A:70:ARG:HG3	0.45	1.88	25	1
1:A:32:TYR:CB	1:A:97:LEU:HD13	0.45	2.42	16	1
1:A:49:PRO:CD	1:A:73:PHE:HB3	0.45	2.41	31	7
1:A:21:VAL:HG12	1:A:21:VAL:O	0.45	2.10	12	1
1:A:31:ALA:HA	1:A:56:THR:OG1	0.45	2.12	16	4
1:A:83:TRP:HD1	1:A:85:THR:HG1	0.45	1.43	19	1
1:A:71:ARG:NH2	1:A:111:SER:O	0.45	2.50	5	2
1:A:34:VAL:HG12	1:A:53:SER:OG	0.45	2.12	44	1
1:A:45:LEU:HD11	2:A:130:NCZ:C11	0.45	2.42	36	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:19:VAL:HG23	0.45	2.42	33	1
1:A:77:LEU:HD13	1:A:83:TRP:HB2	0.45	1.89	41	1
1:A:65:THR:HG21	1:A:97:LEU:HD22	0.45	1.88	41	1
1:A:6:THR:O	1:A:21:VAL:CB	0.45	2.64	10	1
1:A:71:ARG:CG	1:A:88:CYS:O	0.45	2.64	3	4
1:A:41:ASP:OD1	1:A:42:THR:N	0.45	2.48	25	2
1:A:44:VAL:O	1:A:46:ALA:N	0.45	2.50	40	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:GLY:N	1:A:57:ALA:O	0.45	2.49	17	1
1:A:99:ASP:O	1:A:102:GLY:N	0.45	2.50	2	3
1:A:99:ASP:OD2	1:A:99:ASP:N	0.45	2.49	27	5
1:A:104:GLY:O	2:A:130:NCZ:C3	0.45	2.65	33	2
1:A:49:PRO:HG3	1:A:74:GLU:O	0.45	2.12	20	1
1:A:33:ASP:N	1:A:98:SER:O	0.45	2.48	21	3
1:A:81:THR:HG22	1:A:82:ARG:N	0.45	2.27	43	2
1:A:32:TYR:CE2	1:A:99:ASP:HA	0.45	2.47	12	1
1:A:26:LEU:HD22	1:A:27:GLN:OE1	0.45	2.12	18	1
1:A:51:ASP:OD1	1:A:52:PHE:CE1	0.45	2.70	32	1
1:A:6:THR:HA	1:A:108:VAL:HG11	0.45	1.89	1	1
1:A:11:SER:HB2	1:A:69:VAL:HG21	0.45	1.87	17	1
1:A:90:THR:CG2	1:A:91:ALA:N	0.45	2.80	17	5
1:A:41:ASP:OD1	1:A:83:TRP:CG	0.45	2.70	15	1
1:A:27:GLN:HG3	1:A:32:TYR:CZ	0.45	2.47	22	1
1:A:13:LEU:HD11	1:A:110:ILE:HG13	0.45	1.88	7	1
1:A:9:PRO:HG2	1:A:19:VAL:CG1	0.45	2.41	28	2
1:A:5:ALA:HA	1:A:23:GLY:CA	0.45	2.42	40	3
1:A:4:THR:C	1:A:23:GLY:HA2	0.45	2.32	16	5
1:A:40:VAL:HG13	1:A:85:THR:OG1	0.45	2.12	41	1
1:A:33:ASP:OD2	1:A:54:SER:N	0.45	2.49	43	1
1:A:27:GLN:NE2	1:A:30:THR:HG21	0.45	2.26	26	2
1:A:13:LEU:CG	1:A:111:SER:HA	0.45	2.42	6	1
1:A:71:ARG:HG2	1:A:88:CYS:CB	0.45	2.42	35	6
1:A:7:VAL:HG11	1:A:69:VAL:HG21	0.45	1.87	31	1
1:A:71:ARG:NH1	1:A:89:THR:OG1	0.45	2.50	16	1
2:A:130:NCZ:H13	2:A:130:NCZ:C1	0.45	2.42	24	1
1:A:110:ILE:O	1:A:111:SER:HB3	0.45	2.11	4	1
1:A:103:ASN:N	1:A:103:ASN:OD1	0.45	2.50	23	1
1:A:3:PRO:O	1:A:4:THR:OG1	0.45	2.35	7	2
1:A:16:GLY:C	1:A:68:THR:HG22	0.45	2.32	12	1
1:A:27:GLN:HB2	1:A:32:TYR:CE1	0.45	2.47	19	1
1:A:102:GLY:O	2:A:130:NCZ:H16	0.45	2.12	44	1
1:A:17:THR:CG2	1:A:19:VAL:CG1	0.45	2.95	17	1
1:A:13:LEU:HD13	1:A:69:VAL:HG21	0.45	1.89	24	1
1:A:35:GLY:HA3	1:A:51:ASP:HA	0.44	1.87	33	5
1:A:71:ARG:O	1:A:86:VAL:O	0.44	2.35	41	4
1:A:72:SER:O	1:A:73:PHE:HB3	0.44	2.12	36	4
1:A:32:TYR:HH	1:A:63:ALA:HB2	0.44	1.72	42	1
1:A:55:VAL:CG1	1:A:65:THR:CG2	0.44	2.86	33	1
1:A:39:TRP:CZ3	1:A:45:LEU:HB2	0.44	2.47	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:SER:O	1:A:69:VAL:O	0.44	2.35	34	5
1:A:5:ALA:H	1:A:26:LEU:HD22	0.44	1.72	17	1
1:A:48:ASN:HB3	1:A:49:PRO:HD2	0.44	1.88	27	10
1:A:14:SER:N	1:A:17:THR:OG1	0.44	2.48	27	2
1:A:26:LEU:HD22	1:A:27:GLN:N	0.44	2.28	11	1
1:A:39:TRP:CE2	1:A:45:LEU:HD23	0.44	2.47	25	1
1:A:16:GLY:CA	1:A:70:ARG:NE	0.44	2.80	4	1
1:A:103:ASN:HA	2:A:130:NCZ:C15	0.44	2.43	35	1
1:A:27:GLN:CD	1:A:30:THR:HB	0.44	2.33	35	1
1:A:58:ASP:O	1:A:59:ALA:C	0.44	2.55	34	17
1:A:83:TRP:CG	1:A:84:GLY:N	0.44	2.86	24	3
1:A:39:TRP:CH2	1:A:45:LEU:HD12	0.44	2.48	33	1
1:A:50:ALA:HB2	1:A:73:PHE:CZ	0.44	2.47	15	1
1:A:17:THR:O	1:A:69:VAL:N	0.44	2.42	23	4
1:A:67:LEU:HD13	1:A:68:THR:N	0.44	2.23	43	3
1:A:72:SER:CA	1:A:86:VAL:O	0.44	2.65	24	5
1:A:27:GLN:OE1	1:A:27:GLN:C	0.44	2.55	22	1
1:A:15:ASP:OD2	1:A:71:ARG:NH2	0.44	2.50	29	1
1:A:31:ALA:CA	1:A:56:THR:OG1	0.44	2.66	40	4
1:A:37:CYS:SG	1:A:45:LEU:HD23	0.44	2.52	33	3
1:A:39:TRP:CD1	1:A:45:LEU:HB2	0.44	2.48	15	1
1:A:49:PRO:CG	1:A:74:GLU:O	0.44	2.65	20	1
1:A:97:LEU:HD22	1:A:97:LEU:H	0.44	1.72	23	1
1:A:55:VAL:HG12	1:A:56:THR:N	0.44	2.28	41	1
1:A:35:GLY:O	2:A:130:NCZ:C7	0.44	2.65	41	1
1:A:83:TRP:NE1	1:A:85:THR:CB	0.44	2.81	43	1
1:A:15:ASP:OD1	1:A:71:ARG:NH2	0.44	2.50	29	1
1:A:44:VAL:CG1	1:A:78:PHE:CD1	0.44	3.00	26	1
1:A:8:THR:HG22	1:A:9:PRO:CD	0.44	2.43	42	16
1:A:8:THR:OG1	1:A:19:VAL:CG1	0.44	2.63	15	1
1:A:42:THR:C	1:A:44:VAL:N	0.44	2.70	25	5
1:A:14:SER:HB3	1:A:17:THR:CB	0.44	2.43	13	4
1:A:4:THR:N	1:A:24:ALA:O	0.44	2.50	39	1
1:A:50:ALA:HB3	1:A:70:ARG:HB2	0.44	1.90	41	1
1:A:12:GLY:HA3	1:A:110:ILE:HD12	0.44	1.88	26	1
1:A:57:ALA:HB1	1:A:61:GLY:C	0.44	2.33	34	3
1:A:11:SER:OG	1:A:19:VAL:CG1	0.44	2.61	25	1
1:A:104:GLY:N	2:A:130:NCZ:O5	0.44	2.50	24	1
1:A:95:VAL:HG23	1:A:110:ILE:HG22	0.44	1.89	9	1
1:A:58:ASP:OD1	1:A:62:SER:O	0.44	2.36	21	14
1:A:53:SER:OG	1:A:67:LEU:HD23	0.44	2.12	30	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:GLN:HG2	1:A:32:TYR:CZ	0.44	2.48	40	1
1:A:47:CYS:HB2	1:A:76:PHE:CE1	0.44	2.48	35	1
1:A:101:ALA:HB3	1:A:103:ASN:ND2	0.44	2.28	38	1
1:A:26:LEU:HD11	1:A:97:LEU:HD22	0.44	1.90	6	1
1:A:35:GLY:CA	1:A:51:ASP:CA	0.44	2.96	23	12
1:A:45:LEU:HD11	2:A:130:NCZ:C17	0.44	2.43	18	3
1:A:8:THR:HG22	1:A:9:PRO:HD3	0.44	1.89	42	9
1:A:46:ALA:HB1	1:A:76:PHE:O	0.44	2.13	23	1
1:A:27:GLN:OE1	1:A:32:TYR:CG	0.44	2.70	41	1
1:A:10:SER:HA	1:A:110:ILE:CD1	0.44	2.42	22	1
1:A:13:LEU:HD22	1:A:17:THR:CG2	0.44	2.43	2	2
1:A:74:GLU:OE1	1:A:84:GLY:CA	0.44	2.66	9	1
1:A:27:GLN:OE1	1:A:30:THR:CB	0.44	2.66	36	1
1:A:13:LEU:CD2	1:A:111:SER:HB3	0.44	2.42	6	1
1:A:98:SER:HB3	2:A:130:NCZ:C8	0.43	2.43	10	3
1:A:53:SER:CB	1:A:67:LEU:CD1	0.43	2.96	28	1
1:A:69:VAL:CG2	1:A:110:ILE:HD13	0.43	2.43	10	1
1:A:14:SER:OG	1:A:17:THR:OG1	0.43	2.36	10	2
1:A:7:VAL:N	1:A:108:VAL:HG11	0.43	2.27	14	1
1:A:21:VAL:O	1:A:21:VAL:HG12	0.43	2.13	14	2
1:A:39:TRP:O	1:A:39:TRP:CE3	0.43	2.71	16	1
1:A:105:PRO:HG2	2:A:130:NCZ:C2	0.43	2.43	31	7
1:A:5:ALA:CB	1:A:97:LEU:HD21	0.43	2.43	27	2
1:A:12:GLY:C	1:A:14:SER:H	0.43	2.17	11	1
1:A:29:GLY:O	1:A:57:ALA:O	0.43	2.35	19	1
1:A:83:TRP:CD1	1:A:86:VAL:HG23	0.43	2.49	44	1
1:A:13:LEU:CD2	1:A:111:SER:CB	0.43	2.96	6	1
1:A:21:VAL:N	1:A:65:THR:O	0.43	2.49	38	2
1:A:110:ILE:O	1:A:110:ILE:CG2	0.43	2.65	31	1
1:A:40:VAL:CG2	1:A:46:ALA:HB3	0.43	2.43	44	2
1:A:76:PHE:CE2	1:A:77:LEU:O	0.43	2.71	33	1
1:A:98:SER:HB3	2:A:130:NCZ:C5	0.43	2.43	15	1
1:A:32:TYR:CZ	1:A:99:ASP:CB	0.43	3.01	10	4
1:A:36:GLN:O	1:A:48:ASN:OD1	0.43	2.36	43	4
1:A:30:THR:O	1:A:56:THR:OG1	0.43	2.34	43	1
1:A:26:LEU:CD1	1:A:97:LEU:CG	0.43	2.96	28	1
1:A:53:SER:HB2	1:A:67:LEU:CD1	0.43	2.43	28	1
1:A:26:LEU:HD13	1:A:26:LEU:C	0.43	2.34	26	1
1:A:48:ASN:CB	1:A:49:PRO:HD2	0.43	2.43	2	1
1:A:83:TRP:CD1	1:A:85:THR:N	0.43	2.87	6	2
1:A:34:VAL:C	1:A:51:ASP:OD1	0.43	2.56	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:ASP:CG	1:A:103:ASN:O	0.43	2.57	14	7
1:A:77:LEU:CD1	1:A:83:TRP:HB2	0.43	2.44	33	2
1:A:3:PRO:C	1:A:24:ALA:O	0.43	2.57	39	1
1:A:34:VAL:HG23	1:A:97:LEU:CD1	0.43	2.36	20	1
1:A:77:LEU:HD12	1:A:81:THR:CB	0.43	2.32	43	1
1:A:27:GLN:O	1:A:30:THR:OG1	0.43	2.29	19	3
1:A:13:LEU:HD23	1:A:111:SER:CB	0.43	2.43	6	1
1:A:99:ASP:OD1	1:A:103:ASN:O	0.43	2.37	39	7
1:A:7:VAL:HB	1:A:21:VAL:HG13	0.43	1.89	15	1
1:A:7:VAL:HB	1:A:110:ILE:CD1	0.43	2.43	39	2
1:A:5:ALA:HB2	1:A:26:LEU:HD13	0.43	1.91	20	1
1:A:77:LEU:CD2	1:A:83:TRP:HB2	0.43	2.44	20	4
1:A:78:PHE:CG	1:A:79:ASP:N	0.43	2.87	22	1
1:A:7:VAL:HG23	1:A:108:VAL:CG1	0.43	2.44	26	1
1:A:73:PHE:CE2	1:A:88:CYS:HB2	0.43	2.48	10	1
1:A:99:ASP:OD2	1:A:103:ASN:O	0.43	2.37	35	1
1:A:46:ALA:CA	1:A:77:LEU:HD23	0.43	2.44	31	1
1:A:53:SER:CB	1:A:67:LEU:HG	0.43	2.44	4	2
1:A:76:PHE:CE1	1:A:82:ARG:HB2	0.43	2.49	22	3
1:A:29:GLY:CA	1:A:57:ALA:HB3	0.43	2.44	28	1
1:A:11:SER:C	1:A:13:LEU:N	0.43	2.71	10	2
1:A:6:THR:O	1:A:21:VAL:CG2	0.43	2.66	10	1
1:A:73:PHE:HD1	1:A:73:PHE:N	0.43	2.07	36	2
1:A:27:GLN:HB3	1:A:30:THR:CA	0.43	2.43	25	1
1:A:11:SER:O	1:A:111:SER:N	0.43	2.50	42	1
1:A:55:VAL:HG11	1:A:97:LEU:HB3	0.43	1.88	4	1
1:A:15:ASP:O	1:A:15:ASP:CG	0.43	2.55	31	1
1:A:51:ASP:O	1:A:67:LEU:CD1	0.43	2.67	15	1
1:A:46:ALA:CB	1:A:77:LEU:HD12	0.43	2.44	41	1
1:A:55:VAL:CG2	1:A:65:THR:HB	0.43	2.44	34	2
1:A:76:PHE:CD2	1:A:80:GLY:O	0.43	2.72	26	1
1:A:83:TRP:CD1	1:A:84:GLY:N	0.43	2.87	6	5
1:A:27:GLN:HB3	1:A:30:THR:C	0.43	2.33	25	1
1:A:98:SER:OG	2:A:130:NCZ:C7	0.43	2.67	21	2
1:A:12:GLY:O	1:A:69:VAL:HG12	0.43	2.13	37	1
1:A:41:ASP:HB3	1:A:44:VAL:CG2	0.43	2.44	29	4
1:A:45:LEU:O	1:A:45:LEU:HD13	0.43	2.14	7	1
1:A:10:SER:HA	1:A:110:ILE:CG1	0.43	2.43	5	2
1:A:71:ARG:CG	1:A:88:CYS:HB3	0.43	2.43	26	1
1:A:71:ARG:NH1	1:A:88:CYS:O	0.43	2.48	26	1
1:A:10:SER:OG	1:A:13:LEU:HD23	0.43	2.13	44	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:GLY:N	1:A:105:PRO:HD3	0.43	2.29	42	1
1:A:11:SER:CB	1:A:110:ILE:CG1	0.43	2.97	15	2
1:A:9:PRO:HG3	1:A:19:VAL:CG1	0.43	2.40	5	2
1:A:78:PHE:CG	2:A:130:NCZ:O5	0.43	2.72	17	1
1:A:78:PHE:CZ	2:A:130:NCZ:O6	0.43	2.71	16	1
1:A:58:ASP:OD2	1:A:62:SER:O	0.43	2.36	42	13
1:A:3:PRO:O	1:A:4:THR:O	0.43	2.36	39	4
1:A:26:LEU:HD11	1:A:106:GLU:HG2	0.43	1.89	15	2
1:A:74:GLU:CG	1:A:84:GLY:HA2	0.43	2.44	21	4
1:A:42:THR:HG22	1:A:42:THR:O	0.43	2.14	15	1
1:A:24:ALA:HA	1:A:61:GLY:O	0.43	2.14	39	1
1:A:12:GLY:O	1:A:71:ARG:NH2	0.43	2.50	41	1
1:A:77:LEU:HD22	1:A:81:THR:CB	0.43	2.39	24	1
1:A:77:LEU:O	1:A:81:THR:HA	0.42	2.13	31	1
1:A:19:VAL:CG2	1:A:69:VAL:HG23	0.42	2.44	39	3
1:A:44:VAL:CG1	1:A:77:LEU:HB3	0.42	2.44	41	1
1:A:49:PRO:HD3	1:A:74:GLU:O	0.42	2.14	41	1
1:A:55:VAL:HG22	1:A:56:THR:H	0.42	1.74	43	1
1:A:29:GLY:HA2	1:A:57:ALA:O	0.42	2.14	16	5
1:A:76:PHE:CE1	1:A:82:ARG:CB	0.42	3.02	22	1
1:A:26:LEU:CD1	1:A:97:LEU:HG	0.42	2.44	28	1
1:A:81:THR:CG2	1:A:82:ARG:N	0.42	2.82	16	1
1:A:26:LEU:HD12	1:A:26:LEU:C	0.42	2.35	34	1
1:A:27:GLN:CD	1:A:30:THR:OG1	0.42	2.58	4	1
1:A:31:ALA:HB1	1:A:55:VAL:O	0.42	2.13	4	1
1:A:40:VAL:HG23	1:A:85:THR:HA	0.42	1.91	35	1
1:A:15:ASP:CG	1:A:15:ASP:O	0.42	2.57	38	2
1:A:23:GLY:N	1:A:63:ALA:O	0.42	2.52	31	1
1:A:18:VAL:CG2	1:A:68:THR:OG1	0.42	2.64	33	1
1:A:45:LEU:CD1	2:A:130:NCZ:H173	0.42	2.44	33	1
1:A:110:ILE:HD13	1:A:111:SER:N	0.42	2.28	22	1
1:A:9:PRO:HG2	1:A:19:VAL:CB	0.42	2.43	32	1
1:A:28:ALA:CA	1:A:61:GLY:HA2	0.42	2.43	5	1
1:A:12:GLY:HA2	1:A:69:VAL:HG21	0.42	1.88	10	1
1:A:76:PHE:CE2	1:A:82:ARG:HG3	0.42	2.49	3	1
1:A:76:PHE:CZ	1:A:77:LEU:O	0.42	2.73	23	1
1:A:5:ALA:N	1:A:26:LEU:CD2	0.42	2.82	23	1
1:A:32:TYR:CB	1:A:97:LEU:HB2	0.42	2.45	21	2
1:A:71:ARG:HG3	1:A:88:CYS:CB	0.42	2.43	26	1
1:A:3:PRO:O	1:A:4:THR:C	0.42	2.57	24	2
1:A:7:VAL:HG23	1:A:21:VAL:HG23	0.42	1.89	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:TYR:O	1:A:55:VAL:N	0.42	2.52	4	1
1:A:26:LEU:HG	1:A:97:LEU:CG	0.42	2.45	35	1
1:A:32:TYR:CZ	1:A:99:ASP:OD1	0.42	2.72	28	2
1:A:40:VAL:HG13	1:A:83:TRP:CG	0.42	2.50	4	2
1:A:39:TRP:O	1:A:39:TRP:CG	0.42	2.72	11	1
1:A:38:ALA:HB2	1:A:94:GLN:H	0.42	1.74	19	1
1:A:26:LEU:CD1	1:A:97:LEU:CD1	0.42	2.96	16	1
1:A:13:LEU:HD11	1:A:71:ARG:CZ	0.42	2.44	6	1
1:A:13:LEU:CD2	1:A:69:VAL:HG21	0.42	2.44	8	1
1:A:41:ASP:OD2	1:A:83:TRP:NE1	0.42	2.52	41	1
1:A:27:GLN:OE1	1:A:56:THR:C	0.42	2.57	32	1
1:A:7:VAL:HA	1:A:21:VAL:HG22	0.42	1.91	1	1
1:A:95:VAL:HG23	1:A:110:ILE:HB	0.42	1.92	42	1
1:A:75:GLY:O	1:A:84:GLY:N	0.42	2.52	24	1
1:A:96:GLY:C	1:A:97:LEU:HD23	0.42	2.35	27	2
1:A:70:ARG:CZ	1:A:73:PHE:CZ	0.42	3.02	38	1
1:A:77:LEU:CD1	1:A:81:THR:HB	0.42	2.45	27	1
1:A:46:ALA:HB1	1:A:76:PHE:C	0.42	2.35	19	2
1:A:71:ARG:CZ	1:A:71:ARG:HB2	0.42	2.43	20	1
1:A:15:ASP:CG	1:A:72:SER:OG	0.42	2.57	28	1
1:A:69:VAL:CG1	1:A:69:VAL:O	0.42	2.67	1	1
1:A:11:SER:HB2	1:A:110:ILE:CG1	0.42	2.45	44	1
1:A:69:VAL:HG21	1:A:110:ILE:HG12	0.42	1.92	19	1
1:A:13:LEU:HD12	1:A:13:LEU:N	0.42	2.29	40	1
1:A:32:TYR:OH	1:A:99:ASP:OD1	0.42	2.36	21	1
1:A:29:GLY:O	1:A:30:THR:O	0.42	2.38	19	4
1:A:104:GLY:HA3	2:A:130:NCZ:C2	0.42	2.44	18	1
1:A:98:SER:HB2	2:A:130:NCZ:C7	0.42	2.45	2	1
1:A:55:VAL:CG2	1:A:65:THR:CG2	0.42	2.97	11	2
1:A:77:LEU:HD22	1:A:82:ARG:C	0.42	2.35	25	2
1:A:13:LEU:HD12	1:A:14:SER:CA	0.42	2.44	4	1
1:A:9:PRO:CG	1:A:19:VAL:CG1	0.42	2.97	38	2
1:A:84:GLY:C	1:A:85:THR:OG1	0.42	2.57	25	2
1:A:76:PHE:HA	1:A:81:THR:O	0.42	2.15	44	2
1:A:11:SER:CB	1:A:110:ILE:HG12	0.42	2.45	44	2
1:A:40:VAL:CG2	1:A:85:THR:OG1	0.42	2.67	32	2
1:A:39:TRP:CH2	1:A:91:ALA:HA	0.42	2.50	23	1
1:A:41:ASP:HB2	1:A:83:TRP:CG	0.42	2.49	21	1
1:A:41:ASP:OD1	1:A:77:LEU:HD21	0.42	2.14	41	1
1:A:94:GLN:HA	1:A:108:VAL:O	0.42	2.14	43	2
1:A:7:VAL:CG2	1:A:110:ILE:HG13	0.42	2.45	26	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:GLU:HA	1:A:84:GLY:HA2	0.42	1.90	24	1
1:A:37:CYS:HB3	2:A:130:NCZ:C3	0.42	2.44	27	1
1:A:32:TYR:O	1:A:55:VAL:O	0.42	2.38	41	1
1:A:13:LEU:CA	1:A:71:ARG:NH2	0.42	2.83	12	1
1:A:78:PHE:O	1:A:78:PHE:CD1	0.42	2.73	28	1
1:A:53:SER:O	1:A:54:SER:O	0.42	2.38	1	3
1:A:7:VAL:HG11	1:A:11:SER:HB3	0.42	1.91	17	1
1:A:40:VAL:CG2	1:A:85:THR:CG2	0.42	2.94	3	1
1:A:27:GLN:OE1	1:A:31:ALA:C	0.41	2.59	2	3
1:A:34:VAL:CG1	1:A:53:SER:HB2	0.41	2.44	15	1
1:A:13:LEU:CD2	1:A:19:VAL:HG11	0.41	2.45	8	1
1:A:13:LEU:H	1:A:13:LEU:HD12	0.41	1.74	20	1
1:A:5:ALA:N	1:A:26:LEU:HD12	0.41	2.29	20	1
1:A:76:PHE:O	1:A:77:LEU:O	0.41	2.38	20	2
1:A:48:ASN:ND2	1:A:83:TRP:CH2	0.41	2.88	24	1
1:A:16:GLY:C	1:A:68:THR:OG1	0.41	2.59	24	1
1:A:13:LEU:CB	1:A:71:ARG:NH1	0.41	2.83	40	1
1:A:77:LEU:HD11	1:A:83:TRP:HB3	0.41	1.90	27	1
1:A:95:VAL:CG2	1:A:110:ILE:CG2	0.41	2.97	27	1
1:A:51:ASP:O	1:A:51:ASP:OD1	0.41	2.38	30	1
1:A:48:ASN:O	1:A:52:PHE:CZ	0.41	2.73	20	1
1:A:32:TYR:HB2	1:A:97:LEU:CD1	0.41	2.42	21	1
1:A:110:ILE:O	1:A:111:SER:HB2	0.41	2.15	22	1
1:A:71:ARG:CG	1:A:88:CYS:HB2	0.41	2.44	26	1
1:A:27:GLN:CD	1:A:32:TYR:OH	0.41	2.59	19	1
1:A:73:PHE:O	1:A:84:GLY:O	0.41	2.38	3	3
1:A:16:GLY:HA2	1:A:68:THR:CG2	0.41	2.46	5	1
1:A:32:TYR:CE2	1:A:99:ASP:CB	0.41	3.03	16	1
1:A:27:GLN:HE21	1:A:97:LEU:HD23	0.41	1.75	9	1
1:A:77:LEU:CD2	1:A:81:THR:O	0.41	2.68	9	1
1:A:103:ASN:OD1	2:A:130:NCZ:C15	0.41	2.68	35	1
1:A:3:PRO:HD2	1:A:24:ALA:HB3	0.41	1.90	35	1
1:A:34:VAL:CG2	1:A:55:VAL:CG2	0.41	2.99	31	1
1:A:7:VAL:CG2	1:A:110:ILE:CD1	0.41	2.97	31	1
1:A:37:CYS:SG	1:A:46:ALA:O	0.41	2.79	44	2
1:A:76:PHE:O	1:A:76:PHE:CG	0.41	2.72	33	1
1:A:68:THR:HG22	1:A:70:ARG:CG	0.41	2.44	8	1
1:A:77:LEU:HD12	1:A:81:THR:C	0.41	2.35	7	1
1:A:20:LYS:HG3	1:A:20:LYS:O	0.41	2.14	18	1
1:A:28:ALA:CB	1:A:61:GLY:CA	0.41	2.97	5	1
1:A:27:GLN:HB2	1:A:57:ALA:CB	0.41	2.43	25	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:LEU:HD23	1:A:97:LEU:HD21	0.41	1.90	25	1
1:A:82:ARG:CG	1:A:82:ARG:O	0.41	2.68	35	1
1:A:37:CYS:HA	1:A:47:CYS:HA	0.41	1.90	15	1
1:A:32:TYR:CZ	1:A:97:LEU:HD13	0.41	2.50	37	1
1:A:46:ALA:CB	1:A:76:PHE:O	0.41	2.68	23	1
1:A:63:ALA:HB1	1:A:97:LEU:CD1	0.41	2.45	41	1
1:A:27:GLN:OE1	1:A:27:GLN:HA	0.41	2.14	22	1
1:A:74:GLU:HA	1:A:83:TRP:O	0.41	2.16	38	3
1:A:13:LEU:HD13	1:A:110:ILE:HG13	0.41	1.91	31	1
1:A:69:VAL:CG2	1:A:110:ILE:HD11	0.41	2.45	8	1
1:A:10:SER:C	1:A:13:LEU:HD11	0.41	2.36	8	1
1:A:34:VAL:CG2	1:A:97:LEU:HG	0.41	2.42	32	1
1:A:37:CYS:SG	1:A:45:LEU:HD13	0.41	2.56	25	1
1:A:39:TRP:CD2	1:A:45:LEU:HD23	0.41	2.51	25	1
1:A:45:LEU:CB	2:A:130:NCZ:O5	0.41	2.68	40	1
1:A:12:GLY:C	1:A:14:SER:N	0.41	2.72	15	1
1:A:70:ARG:NH1	1:A:73:PHE:HB2	0.41	2.29	23	1
1:A:70:ARG:CD	1:A:73:PHE:CD2	0.41	3.04	23	1
1:A:31:ALA:HA	1:A:55:VAL:O	0.41	2.15	18	1
1:A:26:LEU:HD22	1:A:27:GLN:HG2	0.41	1.93	16	1
1:A:4:THR:HB	1:A:26:LEU:CD2	0.41	2.46	3	1
1:A:88:CYS:O	1:A:93:CYS:SG	0.41	2.79	19	2
1:A:16:GLY:HA2	1:A:70:ARG:CD	0.41	2.46	28	1
1:A:57:ALA:CA	1:A:63:ALA:HB2	0.41	2.46	11	1
1:A:39:TRP:HA	1:A:44:VAL:O	0.41	2.15	24	1
1:A:35:GLY:C	1:A:51:ASP:OD2	0.41	2.59	3	1
1:A:73:PHE:O	1:A:86:VAL:HA	0.41	2.15	37	1
1:A:55:VAL:HG11	1:A:65:THR:HB	0.41	1.92	30	1
1:A:95:VAL:CG2	1:A:110:ILE:HG12	0.41	2.45	39	1
1:A:32:TYR:CZ	1:A:99:ASP:OD2	0.41	2.74	41	1
1:A:45:LEU:CD1	1:A:45:LEU:C	0.41	2.88	7	1
1:A:71:ARG:NH2	1:A:111:SER:CA	0.41	2.83	12	1
1:A:34:VAL:HB	1:A:55:VAL:CG2	0.41	2.45	13	1
1:A:71:ARG:CD	1:A:89:THR:HG22	0.41	2.45	40	1
1:A:11:SER:HA	1:A:111:SER:O	0.41	2.16	36	1
1:A:98:SER:OG	2:A:130:NCZ:C6	0.41	2.69	31	1
1:A:50:ALA:HB1	1:A:73:PHE:CZ	0.41	2.50	21	1
1:A:74:GLU:HA	1:A:84:GLY:O	0.41	2.15	18	1
1:A:40:VAL:HG12	1:A:41:ASP:N	0.41	2.31	11	1
1:A:15:ASP:O	1:A:15:ASP:OD2	0.41	2.38	5	2
1:A:5:ALA:CA	1:A:23:GLY:HA3	0.41	2.46	44	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:41:ASP:CB	1:A:44:VAL:HB	0.41	2.46	24	2
1:A:41:ASP:CB	1:A:77:LEU:HD21	0.41	2.46	4	1
1:A:67:LEU:HD13	1:A:67:LEU:HA	0.41	1.79	33	1
1:A:46:ALA:CA	1:A:76:PHE:O	0.41	2.69	23	2
1:A:36:GLN:NE2	1:A:70:ARG:O	0.41	2.54	41	1
1:A:48:ASN:HB3	1:A:49:PRO:CD	0.41	2.45	2	1
1:A:9:PRO:HG2	1:A:19:VAL:HA	0.41	1.92	19	1
1:A:95:VAL:HB	1:A:108:VAL:CG1	0.41	2.46	17	1
1:A:34:VAL:HB	1:A:53:SER:O	0.41	2.16	3	1
1:A:39:TRP:CZ3	1:A:45:LEU:HD12	0.40	2.51	33	1
1:A:32:TYR:CD2	1:A:97:LEU:HD23	0.40	2.52	43	1
1:A:45:LEU:CD2	2:A:130:NCZ:H173	0.40	2.46	44	3
1:A:96:GLY:C	1:A:97:LEU:HD13	0.40	2.33	9	1
1:A:13:LEU:O	1:A:71:ARG:HB2	0.40	2.16	33	1
1:A:50:ALA:CB	1:A:70:ARG:HB2	0.40	2.46	41	1
1:A:46:ALA:CB	1:A:83:TRP:CE3	0.40	3.04	43	1
1:A:45:LEU:HD12	2:A:130:NCZ:H13	0.40	1.93	12	1
1:A:35:GLY:C	1:A:51:ASP:OD1	0.40	2.60	28	1
1:A:35:GLY:N	1:A:51:ASP:OD1	0.40	2.54	19	1
1:A:23:GLY:O	1:A:62:SER:HA	0.40	2.16	44	1
1:A:5:ALA:N	1:A:23:GLY:HA3	0.40	2.30	16	1
1:A:36:GLN:CB	1:A:95:VAL:HA	0.40	2.46	3	1
1:A:7:VAL:HG13	1:A:19:VAL:HG23	0.40	1.94	33	1
1:A:27:GLN:HB2	1:A:32:TYR:CZ	0.40	2.50	13	1
1:A:53:SER:OG	1:A:67:LEU:HD11	0.40	2.15	28	1
1:A:16:GLY:N	1:A:70:ARG:HA	0.40	2.31	17	1
1:A:17:THR:O	1:A:69:VAL:CB	0.40	2.69	31	1
1:A:45:LEU:HD21	2:A:130:NCZ:C1	0.40	2.47	33	1
1:A:103:ASN:O	1:A:105:PRO:CD	0.40	2.69	21	1
1:A:71:ARG:NH2	1:A:111:SER:HA	0.40	2.32	12	1
1:A:5:ALA:CB	1:A:26:LEU:HD22	0.40	2.46	29	1
1:A:51:ASP:O	1:A:51:ASP:OD2	0.40	2.40	28	1
1:A:27:GLN:O	1:A:28:ALA:O	0.40	2.38	5	1
1:A:102:GLY:O	1:A:103:ASN:ND2	0.40	2.55	42	1
1:A:48:ASN:CG	1:A:73:PHE:CG	0.40	2.95	34	1
1:A:98:SER:OG	1:A:104:GLY:O	0.40	2.38	35	1
1:A:47:CYS:O	1:A:76:PHE:N	0.40	2.54	31	1
1:A:15:ASP:O	1:A:16:GLY:C	0.40	2.60	33	1
1:A:37:CYS:SG	2:A:130:NCZ:C1	0.40	3.09	15	1
1:A:60:ASN:O	1:A:61:GLY:C	0.40	2.60	37	1
1:A:19:VAL:HG21	1:A:69:VAL:CG2	0.40	2.47	39	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:77:LEU:HD13	1:A:83:TRP:HB3	0.40	1.93	41	1
1:A:12:GLY:CA	1:A:110:ILE:CD1	0.40	2.99	26	1
1:A:26:LEU:O	1:A:27:GLN:C	0.40	2.58	5	2
1:A:40:VAL:HG11	1:A:83:TRP:HB3	0.40	1.94	34	1
1:A:51:ASP:OD1	1:A:51:ASP:O	0.40	2.39	40	1
1:A:5:ALA:CB	1:A:26:LEU:HD21	0.40	2.41	4	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	109/122 (89%)	77±3 (71±3%)	22±3 (20±3%)	10±2 (9±2%)	2	13
All	All	4796/5368 (89%)	3404 (71%)	965 (20%)	427 (9%)	2	13

All 39 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	86	VAL	41
1	A	111	SER	38
1	A	15	ASP	38
1	A	73	PHE	23
1	A	27	GLN	21
1	A	28	ALA	20
1	A	109	ALA	19
1	A	42	THR	18
1	A	26	LEU	17
1	A	9	PRO	17
1	A	104	GLY	16
1	A	4	THR	16
1	A	71	ARG	14
1	A	85	THR	14
1	A	54	SER	11
1	A	11	SER	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	13	LEU	10
1	A	102	GLY	9
1	A	30	THR	9
1	A	84	GLY	7
1	A	38	ALA	6
1	A	8	THR	6
1	A	87	ASP	6
1	A	77	LEU	5
1	A	45	LEU	4
1	A	81	THR	4
1	A	16	GLY	4
1	A	19	VAL	4
1	A	39	TRP	3
1	A	36	GLN	3
1	A	99	ASP	3
1	A	82	ARG	2
1	A	41	ASP	2
1	A	3	PRO	2
1	A	14	SER	1
1	A	12	GLY	1
1	A	43	GLY	1
1	A	52	PHE	1
1	A	75	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	78/88 (89%)	51±4 (66±5%)	27±4 (34±5%)	1	11
All	All	3432/3872 (89%)	2260 (66%)	1172 (34%)	1	11

All 66 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	8	THR	44
1	A	99	ASP	44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	73	PHE	42
1	A	58	ASP	40
1	A	67	LEU	40
1	A	56	THR	40
1	A	36	GLN	39
1	A	93	CYS	39
1	A	97	LEU	37
1	A	40	VAL	36
1	A	106	GLU	34
1	A	51	ASP	34
1	A	30	THR	33
1	A	26	LEU	31
1	A	48	ASN	30
1	A	6	THR	29
1	A	110	ILE	28
1	A	14	SER	26
1	A	45	LEU	26
1	A	41	ASP	26
1	A	34	VAL	25
1	A	53	SER	25
1	A	87	ASP	20
1	A	62	SER	20
1	A	111	SER	19
1	A	13	LEU	19
1	A	82	ARG	18
1	A	33	ASP	18
1	A	17	THR	18
1	A	52	PHE	18
1	A	76	PHE	17
1	A	11	SER	16
1	A	19	VAL	16
1	A	79	ASP	15
1	A	10	SER	14
1	A	20	LYS	13
1	A	72	SER	12
1	A	70	ARG	11
1	A	103	ASN	11
1	A	77	LEU	11
1	A	78	PHE	10
1	A	88	CYS	9
1	A	71	ARG	9
1	A	86	VAL	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	15	ASP	9
1	A	55	VAL	8
1	A	4	THR	8
1	A	27	GLN	8
1	A	37	CYS	7
1	A	81	THR	6
1	A	98	SER	6
1	A	32	TYR	6
1	A	54	SER	5
1	A	108	VAL	5
1	A	7	VAL	5
1	A	65	THR	5
1	A	18	VAL	5
1	A	74	GLU	5
1	A	39	TRP	3
1	A	89	THR	2
1	A	94	GLN	2
1	A	66	SER	2
1	A	60	ASN	1
1	A	21	VAL	1
1	A	85	THR	1
1	A	95	VAL	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](#)

1 ligand is modelled in this entry.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds that are observed in the model and the number of bonds

that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond length is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the average root-mean-square of all Z scores of the bond lengths.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths		
					Counts	RMSZ	#Z>2
2	NCZ	A	130	-	26,26,26	3.57±0.02	3±0 (11±0%)

In the following table, the Counts columns list the number of angles for which Mogul statistics could be retrieved, the number of angles that are observed in the model and the number of angles that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond angle is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond angle with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the average root-mean-square of all Z scores of the bond angles.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond angles		
					Counts	RMSZ	#Z>2
2	NCZ	A	130	-	31,38,38	1.91±0.01	0±0 (0±0%)

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the chemical component dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	NCZ	A	130	-	-	0±0,10,23,23	0±0,3,3,3

All unique bond outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
2	A	130	NCZ	C13-C14	14.98	1.34	1.50	14	44
2	A	130	NCZ	O4-C11	5.97	1.47	1.34	35	44
2	A	130	NCZ	C15-C14	5.40	1.49	1.32	32	44

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

All unique torsion outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Models (Total)
2	A	130	NCZ	C12-O4-C11-C10	1

There are no ring outliers.

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