



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 04:17 PM BST

PDB ID : 1NYO
Title : Solution structure of the antigenic TB protein MPT70/MPB70
Authors : Bloemink, M.J.; Dentten, E.; Hewinson, R.G.; Williamson, R.A.; Carr, M.D.;
TB Structural Genomics Consortium (TBSGC)
Deposited on : 2003-02-13

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

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

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

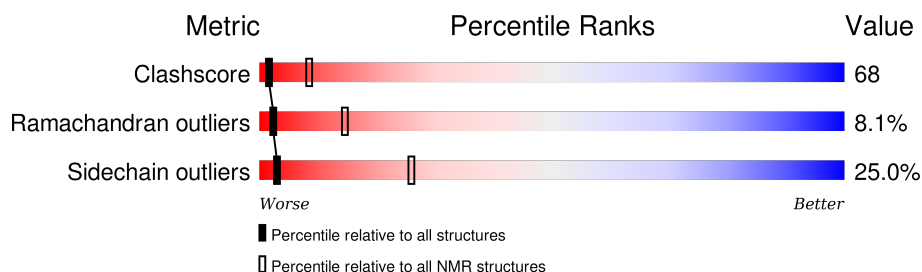
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment 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	163	<div> <div></div> <div>20%</div> <div>61%</div> <div>15%</div> <div>•</div> </div>

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 38 models. Model 27 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *closest to the average*.

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:128, A:133-A:162 (156)	0.31	27

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 6 clusters. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 3, 4, 7, 12, 13, 14, 16, 17, 18, 24, 25, 27, 28, 29, 32, 35
2	10, 11, 20, 21, 26, 33, 37, 38
3	9, 15, 22, 34, 36
4	6, 8, 19, 31
5	2, 23
6	5, 30

3 Entry composition [i](#)

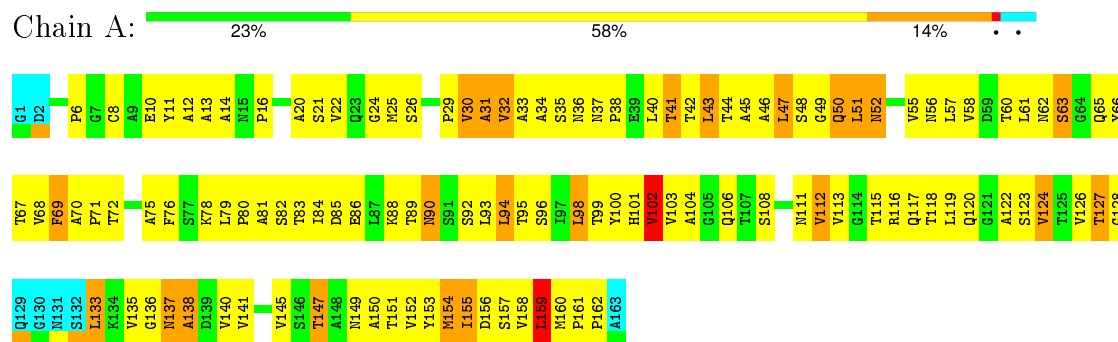
There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2277 atoms, of which 1136 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Immunogenic protein MPT70.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	163	Total	C	H	N	O	S	0
			2277	705	1136	192	239	5	

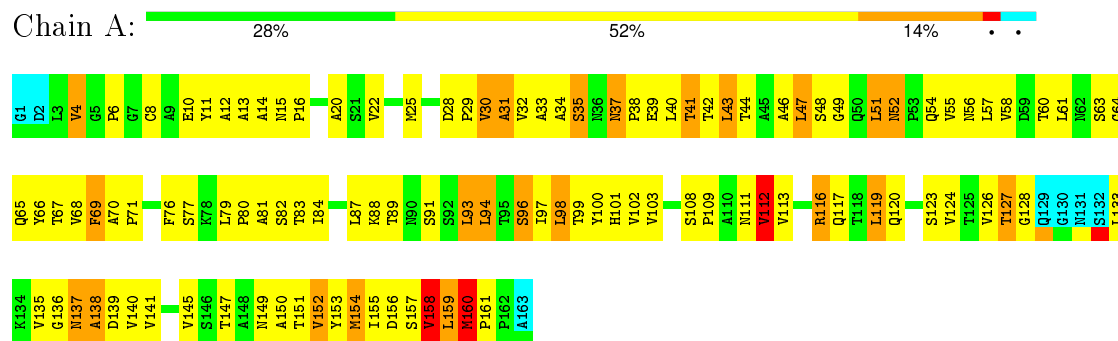
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



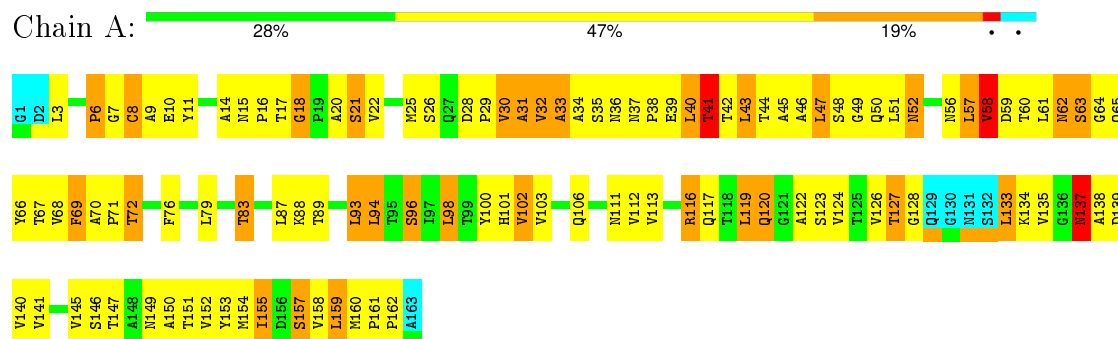
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



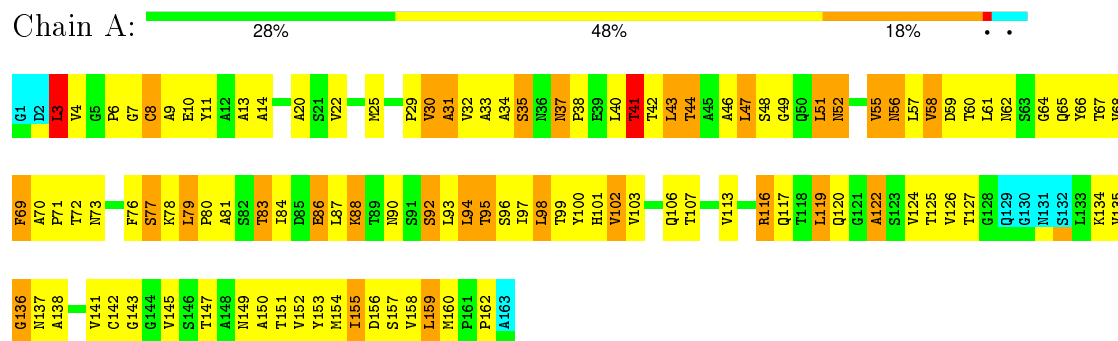
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



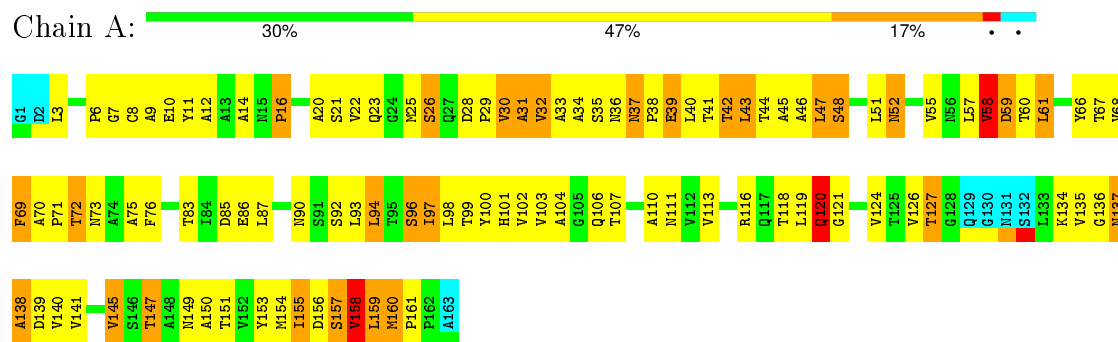
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



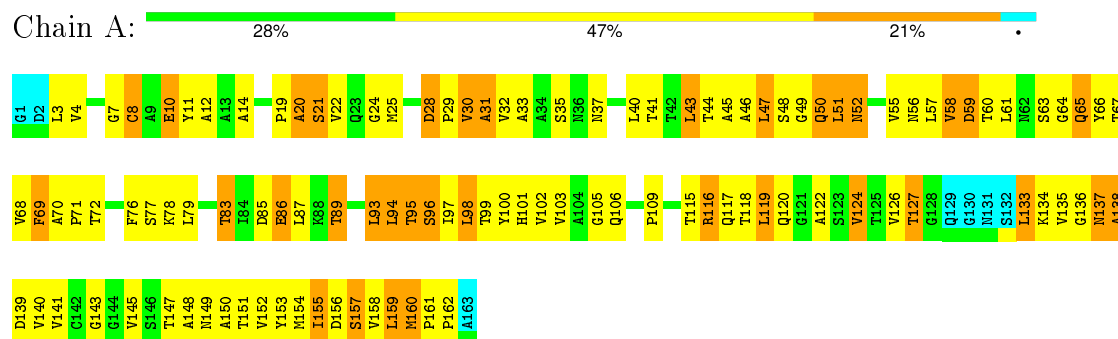
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



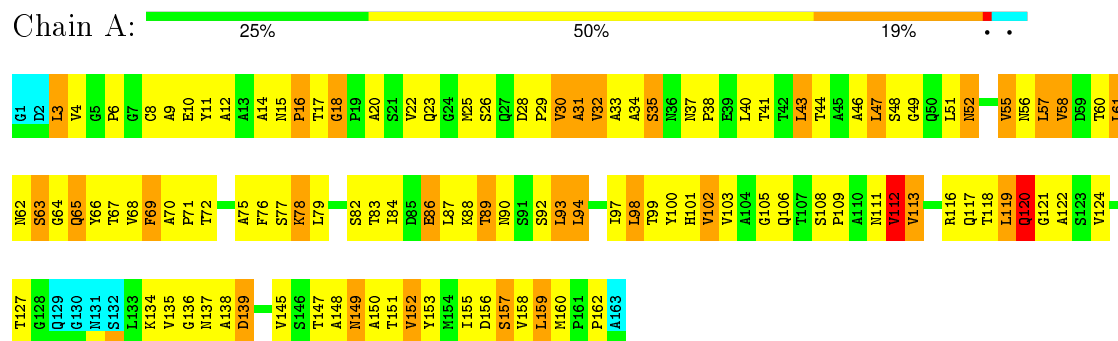
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



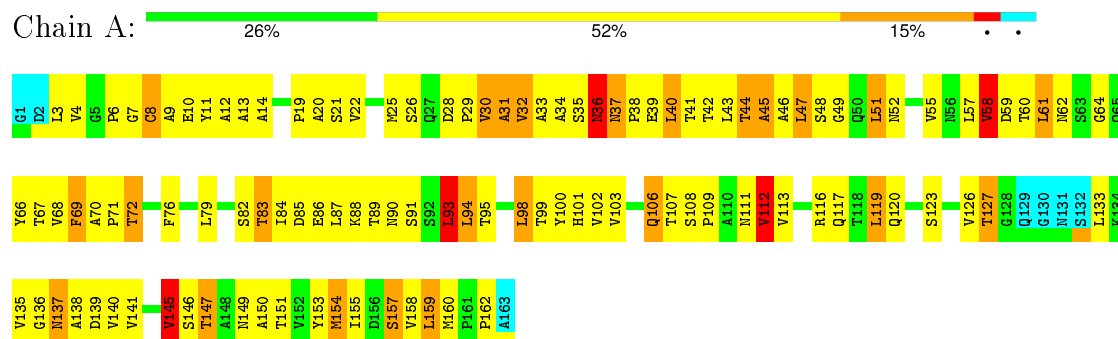
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



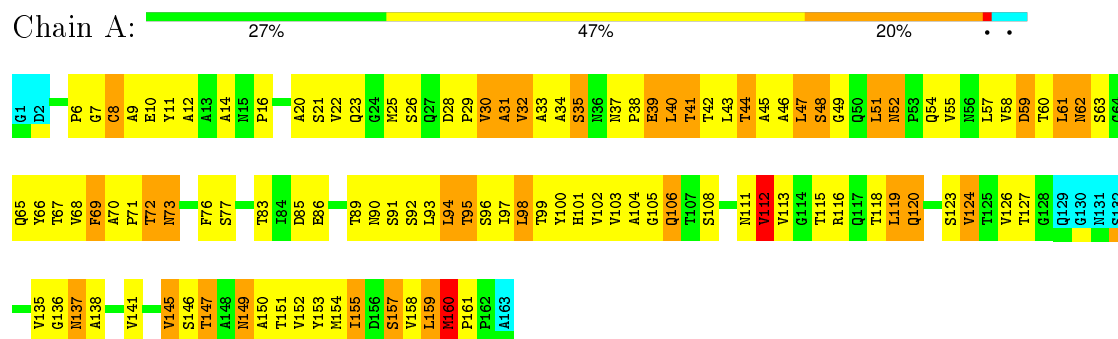
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



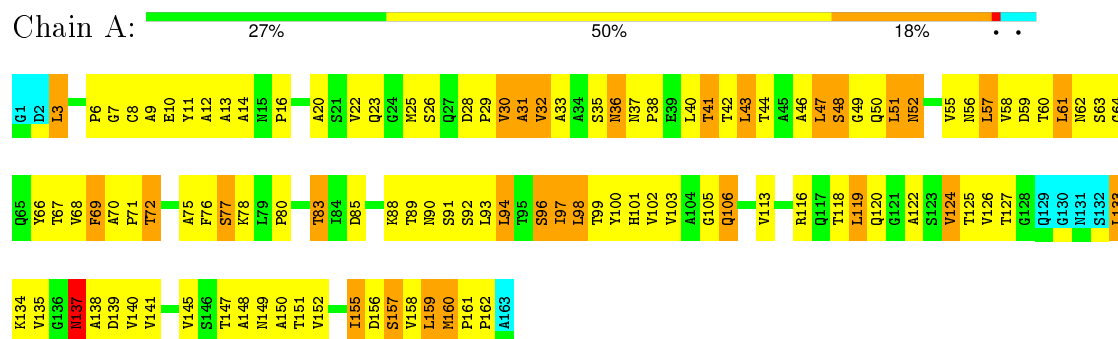
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



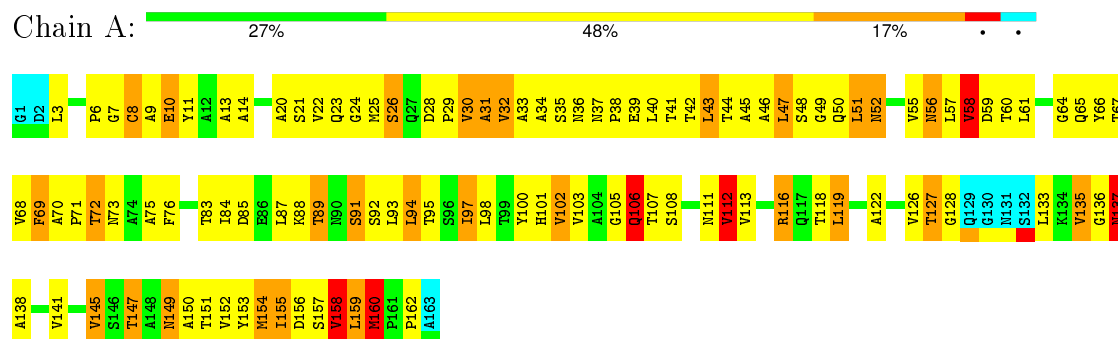
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



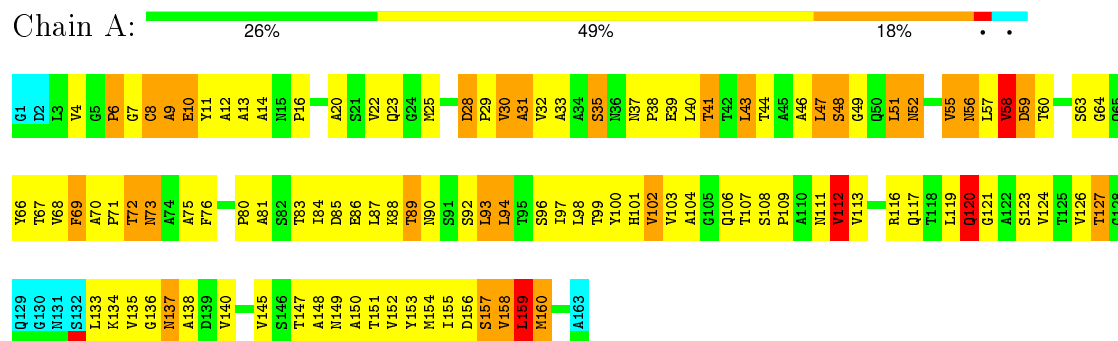
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



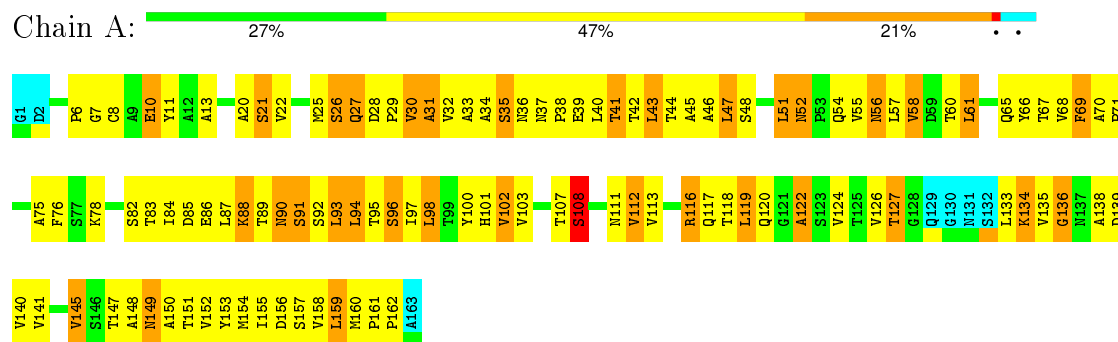
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



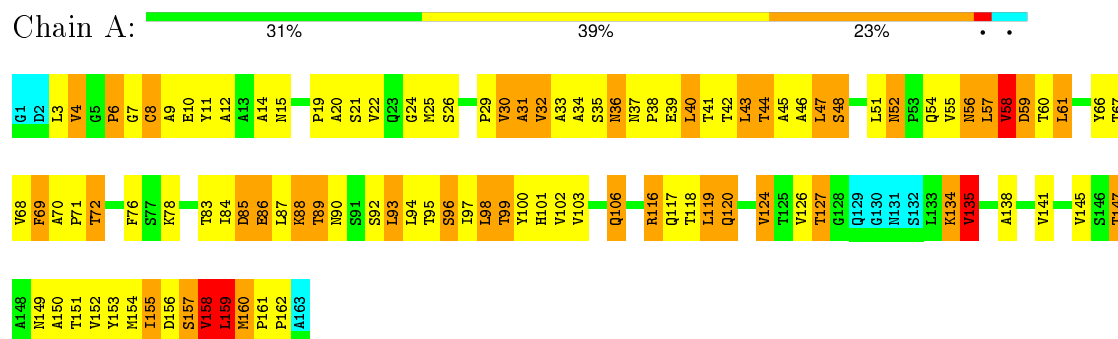
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



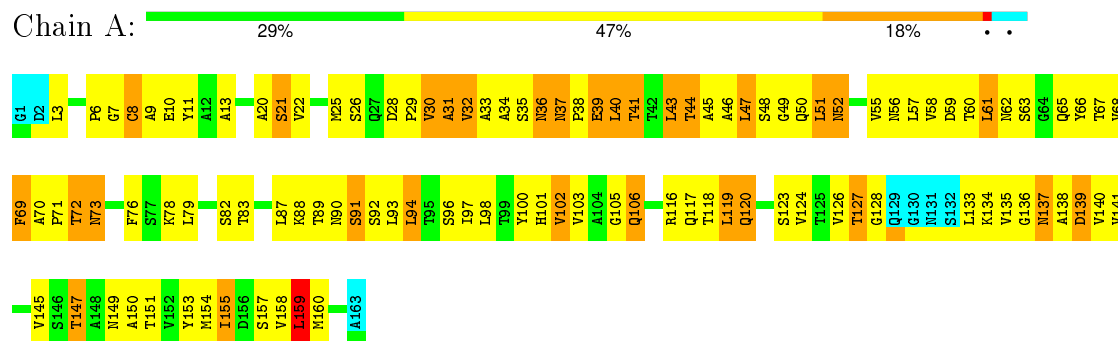
4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



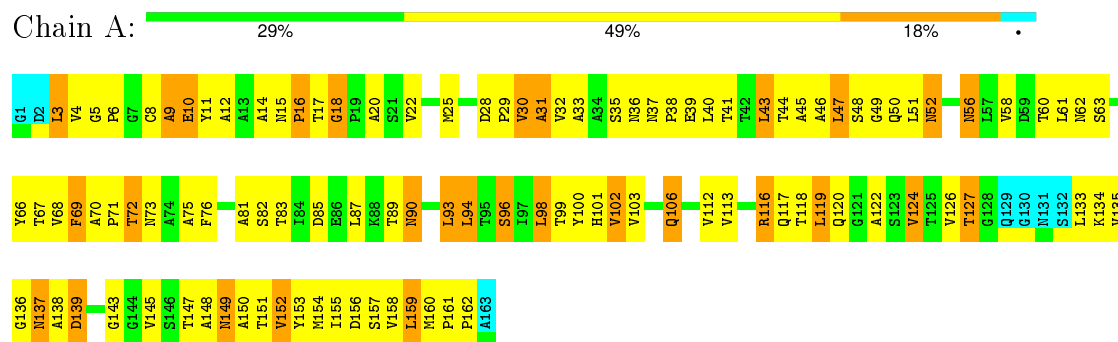
4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



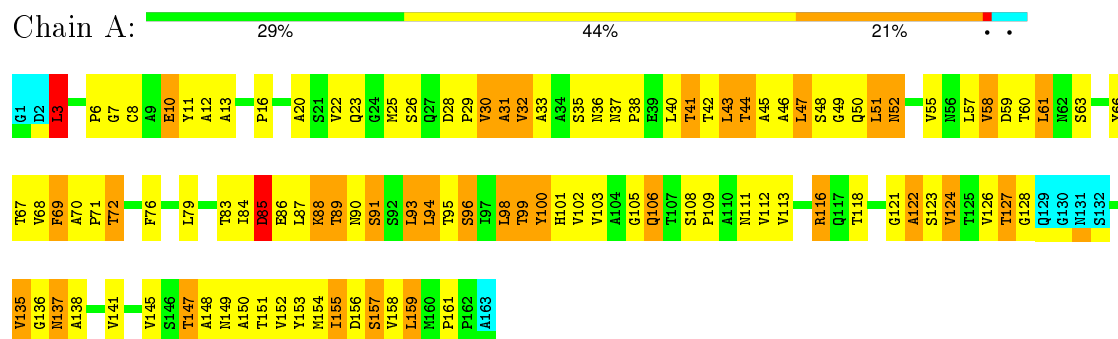
4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



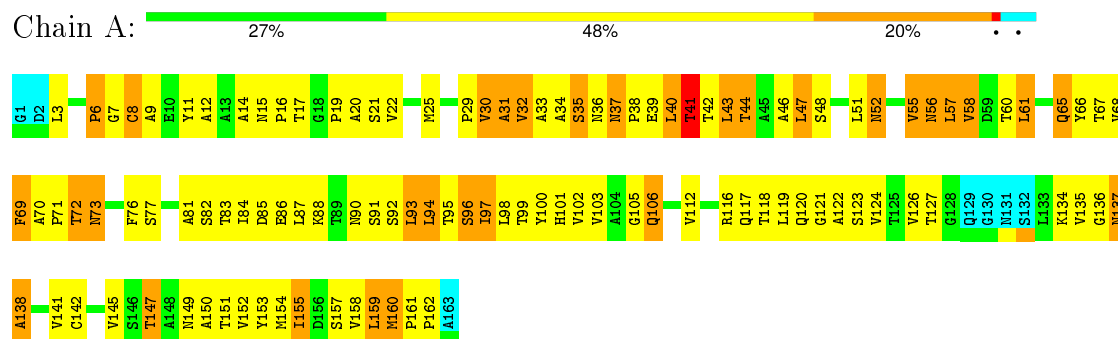
4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



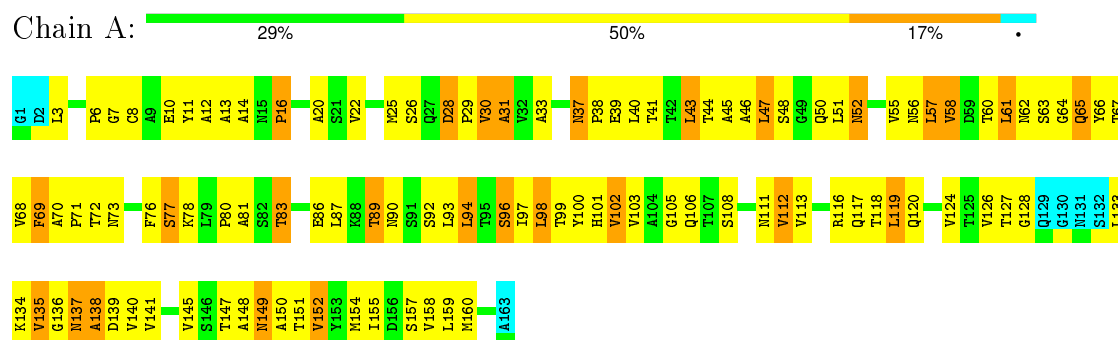
4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



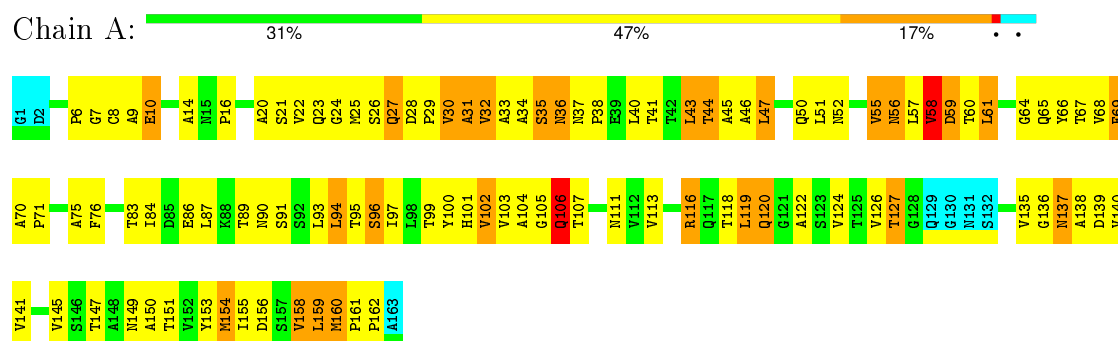
4.2.27 Score per residue for model 27 (medoid)

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



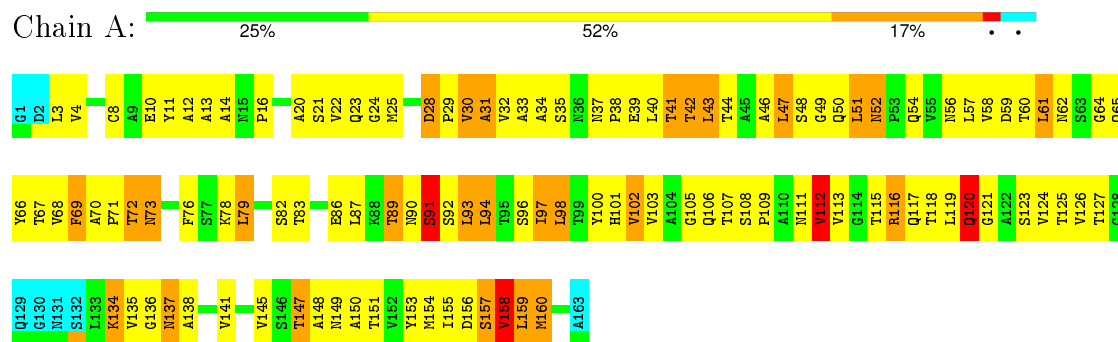
4.2.28 Score per residue for model 28

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



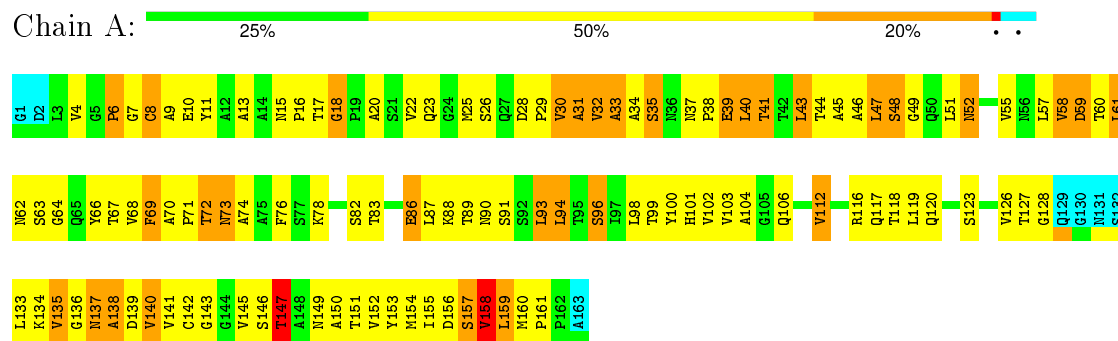
4.2.29 Score per residue for model 29

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



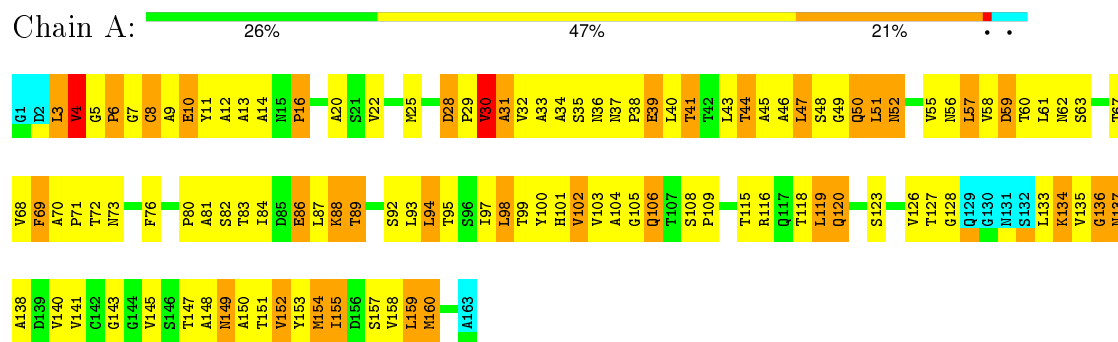
4.2.30 Score per residue for model 30

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



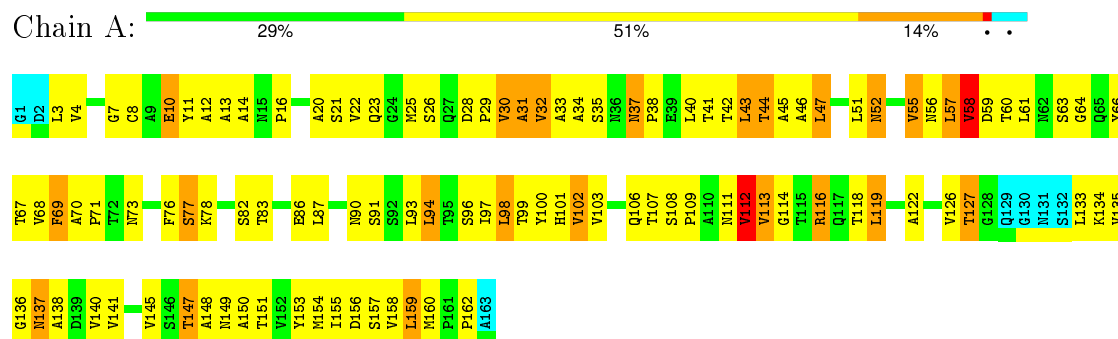
4.2.31 Score per residue for model 31

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



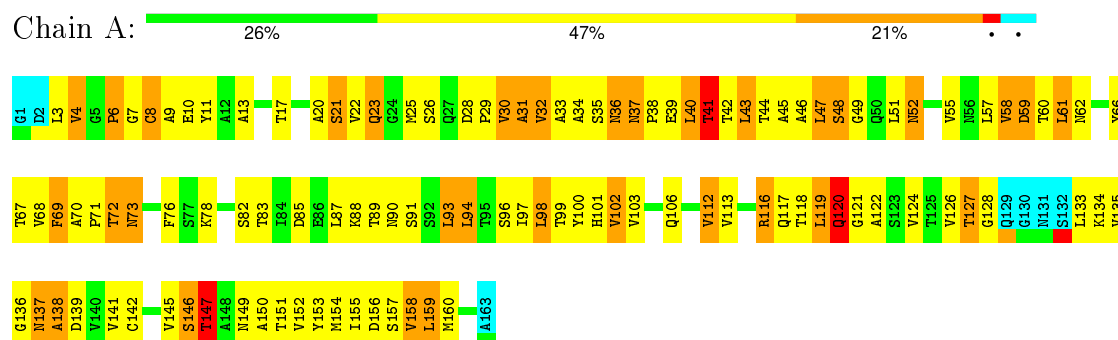
4.2.32 Score per residue for model 32

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



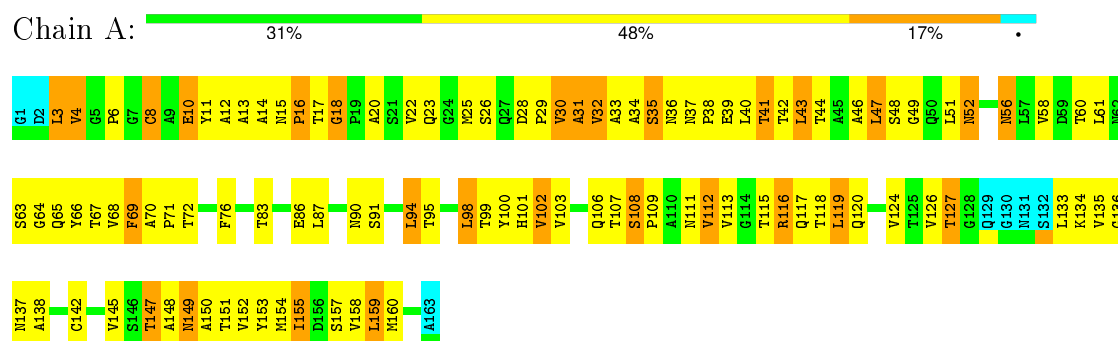
4.2.33 Score per residue for model 33

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



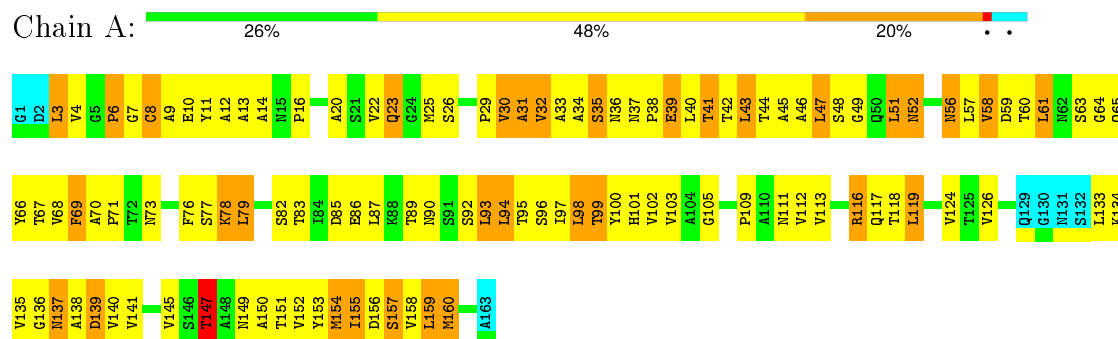
4.2.34 Score per residue for model 34

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



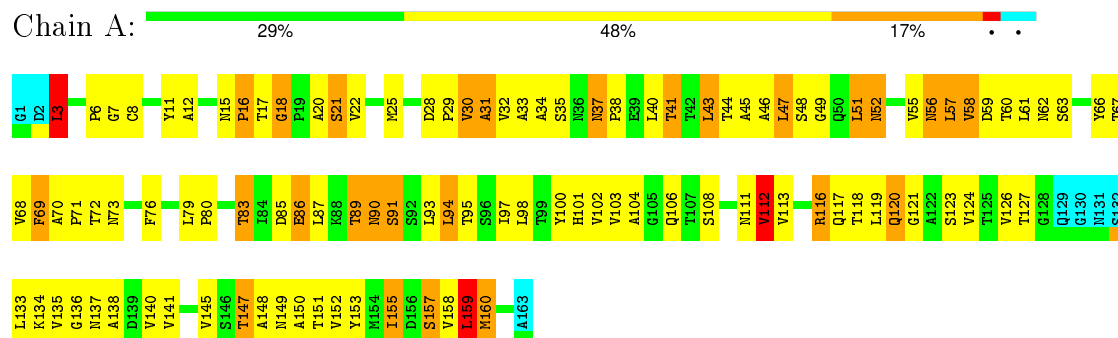
4.2.35 Score per residue for model 35

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



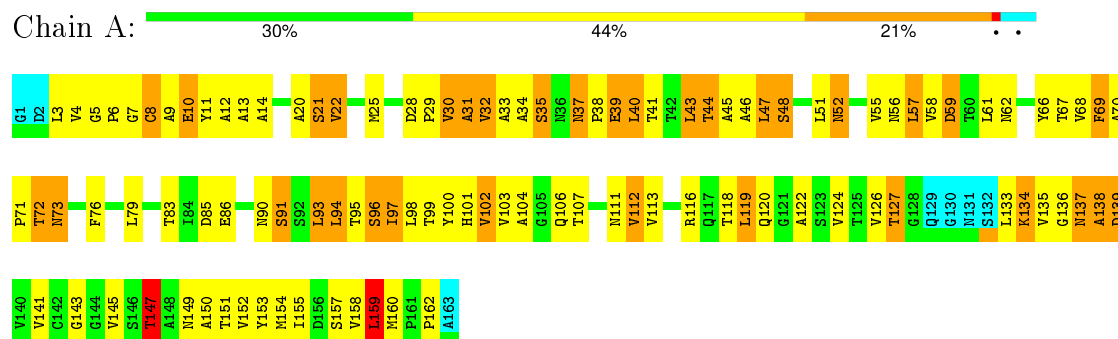
4.2.36 Score per residue for model 36

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



4.2.37 Score per residue for model 37

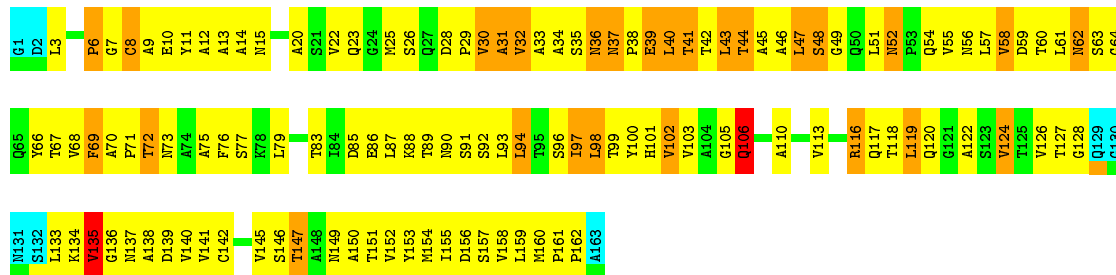
- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



4.2.38 Score per residue for model 38

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70

Chain A: 



5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

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

Of the 100 calculated structures, 38 were deposited, based on the following criterion: *structures with the least restraint violations*.

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

Software name	Classification	Version
CYANA	structure solution	1.0.3
CYANA	refinement	1.0.3

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	1.2±0.4
All	All	0	44

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	69	PHE	Peptide	38
1	A	36	ASN	Peptide	5
1	A	4	VAL	Peptide	1

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	1097	1101	1097	148±17
All	All	41686	41838	41686	5633

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 68.

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:VAL:HG22	1:A:145:VAL:HG13	1.07	1.20	17	15
1:A:22:VAL:HG12	1:A:145:VAL:HG13	1.06	1.19	7	8
1:A:99:THR:HG22	1:A:119:LEU:HD11	1.05	1.27	20	7
1:A:22:VAL:HG13	1:A:145:VAL:HG13	1.02	1.23	30	17
1:A:40:LEU:N	1:A:40:LEU:HD23	1.02	1.69	5	6
1:A:35:SER:N	1:A:44:THR:HG21	1.00	1.70	33	6
1:A:40:LEU:HD23	1:A:40:LEU:N	1.00	1.71	26	4
1:A:126:VAL:HG22	1:A:135:VAL:HG22	0.99	1.33	38	15
1:A:94:LEU:HD12	1:A:98:LEU:HD21	0.98	1.32	14	33
1:A:119:LEU:HD23	1:A:120:GLN:N	0.97	1.75	28	10
1:A:40:LEU:N	1:A:40:LEU:CD2	0.94	2.29	5	4
1:A:37:ASN:O	1:A:41:THR:HG23	0.94	1.62	1	34
1:A:135:VAL:HG12	1:A:159:LEU:HD21	0.93	1.41	3	9
1:A:135:VAL:O	1:A:159:LEU:HD11	0.92	1.65	17	7
1:A:155:ILE:HD13	1:A:157:SER:O	0.92	1.65	29	9
1:A:55:VAL:HG11	1:A:94:LEU:HD21	0.92	1.37	28	9
1:A:79:LEU:HD12	1:A:84:ILE:HD11	0.92	1.39	3	1
1:A:103:VAL:HG13	1:A:117:GLN:O	0.91	1.64	33	22
1:A:40:LEU:CD2	1:A:40:LEU:N	0.91	2.33	11	6
1:A:31:ALA:HB1	1:A:58:VAL:HG23	0.91	1.42	16	4
1:A:100:TYR:CE1	1:A:124:VAL:HG13	0.91	2.01	11	8
1:A:48:SER:HA	1:A:58:VAL:HG23	0.90	1.42	24	15
1:A:99:THR:HG22	1:A:119:LEU:HD22	0.89	1.42	13	4
1:A:22:VAL:HG12	1:A:145:VAL:CG1	0.89	1.97	7	4
1:A:86:GLU:O	1:A:89:THR:HG22	0.89	1.67	23	14
1:A:135:VAL:CG1	1:A:159:LEU:HD11	0.88	1.97	14	12
1:A:22:VAL:HG22	1:A:145:VAL:CG1	0.87	1.99	17	9
1:A:35:SER:HB2	1:A:44:THR:HG21	0.87	1.45	11	8
1:A:79:LEU:HD12	1:A:83:THR:HG21	0.86	1.46	6	1
1:A:158:VAL:HG23	1:A:158:VAL:O	0.86	1.71	33	5
1:A:56:ASN:C	1:A:57:LEU:HD23	0.86	1.90	9	5
1:A:22:VAL:CG1	1:A:145:VAL:HG13	0.85	1.99	7	14
1:A:119:LEU:C	1:A:119:LEU:HD23	0.85	1.91	14	5
1:A:135:VAL:CG1	1:A:159:LEU:HD21	0.85	2.02	20	6
1:A:35:SER:CB	1:A:44:THR:HG21	0.84	2.01	37	25
1:A:57:LEU:N	1:A:57:LEU:HD23	0.84	1.87	20	2
1:A:61:LEU:HD22	1:A:102:VAL:HG21	0.84	1.47	37	4
1:A:119:LEU:HD23	1:A:119:LEU:C	0.84	1.93	11	5
1:A:52:ASN:HB2	1:A:55:VAL:HG12	0.84	1.47	19	7
1:A:67:THR:HG23	1:A:151:THR:HB	0.83	1.51	12	38
1:A:116:ARG:O	1:A:124:VAL:HG12	0.83	1.72	21	12
1:A:68:VAL:HG12	1:A:70:ALA:HB2	0.83	1.51	29	37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:LEU:HD23	1:A:57:LEU:N	0.82	1.87	9	4
1:A:22:VAL:HB	1:A:145:VAL:HG13	0.82	1.51	18	8
1:A:30:VAL:HG11	1:A:61:LEU:O	0.81	1.75	33	15
1:A:35:SER:O	1:A:41:THR:HG22	0.81	1.75	2	3
1:A:103:VAL:HG11	1:A:116:ARG:CD	0.81	2.04	18	7
1:A:100:TYR:CD1	1:A:118:THR:HG21	0.81	2.09	11	16
1:A:35:SER:OG	1:A:44:THR:HG21	0.80	1.76	9	9
1:A:22:VAL:HG13	1:A:145:VAL:CG1	0.80	2.07	6	10
1:A:61:LEU:CD2	1:A:102:VAL:HG21	0.80	2.07	17	5
1:A:158:VAL:HG23	1:A:160:MET:CG	0.80	2.07	18	4
1:A:99:THR:HA	1:A:119:LEU:HD21	0.79	1.53	16	1
1:A:35:SER:HB3	1:A:44:THR:HG21	0.79	1.53	30	5
1:A:118:THR:HG23	1:A:124:VAL:HG22	0.79	1.55	14	8
1:A:43:LEU:HD13	1:A:71:PRO:HD2	0.78	1.53	11	36
1:A:158:VAL:CG2	1:A:158:VAL:O	0.78	2.31	7	5
1:A:22:VAL:CG2	1:A:145:VAL:HG13	0.78	2.05	17	7
1:A:97:ILE:HG22	1:A:98:LEU:HD23	0.78	1.54	17	17
1:A:7:GLY:HA3	1:A:141:VAL:HG12	0.78	1.55	6	24
1:A:102:VAL:HB	1:A:119:LEU:HD23	0.78	1.56	3	6
1:A:15:ASN:OD1	1:A:20:ALA:HB3	0.77	1.78	5	6
1:A:34:ALA:C	1:A:44:THR:HG21	0.77	2.00	34	6
1:A:31:ALA:CB	1:A:58:VAL:HG23	0.77	2.08	15	5
1:A:39:GLU:C	1:A:40:LEU:HD23	0.77	2.00	38	13
1:A:79:LEU:HD12	1:A:84:ILE:CD1	0.77	2.09	3	1
1:A:31:ALA:HB1	1:A:58:VAL:CG2	0.77	2.09	16	1
1:A:93:LEU:O	1:A:93:LEU:HD12	0.77	1.78	3	7
1:A:71:PRO:HG2	1:A:76:PHE:CE2	0.76	2.15	3	24
1:A:100:TYR:CE2	1:A:160:MET:O	0.76	2.39	11	35
1:A:103:VAL:HG22	1:A:118:THR:HA	0.76	1.58	36	21
1:A:101:HIS:NE2	1:A:158:VAL:C	0.76	2.38	12	12
1:A:30:VAL:O	1:A:33:ALA:HB3	0.76	1.80	36	13
1:A:126:VAL:HG13	1:A:135:VAL:CG2	0.75	2.11	19	18
1:A:43:LEU:HG	1:A:47:LEU:HD21	0.75	1.58	31	38
1:A:94:LEU:CD1	1:A:98:LEU:HD21	0.75	2.10	14	30
1:A:127:THR:O	1:A:133:LEU:HD23	0.75	1.80	38	5
1:A:99:THR:CG2	1:A:119:LEU:HD11	0.75	2.12	8	5
1:A:30:VAL:HG13	1:A:31:ALA:H	0.75	1.41	13	25
1:A:4:VAL:HG13	1:A:5:GLY:N	0.75	1.97	31	1
1:A:55:VAL:HG21	1:A:94:LEU:CD2	0.75	2.12	30	7
1:A:135:VAL:HG12	1:A:159:LEU:HD11	0.74	1.59	10	12
1:A:35:SER:CA	1:A:44:THR:HG21	0.74	2.10	5	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:158:VAL:HG23	1:A:160:MET:HG2	0.74	1.59	18	2
1:A:30:VAL:O	1:A:33:ALA:N	0.74	2.20	4	25
1:A:84:ILE:HG22	1:A:88:LYS:HD2	0.74	1.60	19	2
1:A:101:HIS:NE2	1:A:159:LEU:N	0.74	2.35	7	24
1:A:101:HIS:CE1	1:A:155:ILE:HD11	0.74	2.18	9	14
1:A:118:THR:CG2	1:A:124:VAL:CG2	0.74	2.66	8	2
1:A:135:VAL:O	1:A:138:ALA:HB3	0.74	1.82	31	16
1:A:138:ALA:HB2	1:A:157:SER:HB2	0.74	1.59	26	24
1:A:118:THR:CG2	1:A:124:VAL:HG22	0.74	2.12	2	3
1:A:118:THR:HG23	1:A:124:VAL:CG2	0.74	2.12	22	6
1:A:4:VAL:HG12	1:A:143:GLY:O	0.74	1.82	37	3
1:A:133:LEU:N	1:A:133:LEU:HD23	0.74	1.98	5	2
1:A:103:VAL:HG11	1:A:116:ARG:NE	0.74	1.98	18	2
1:A:52:ASN:HB2	1:A:55:VAL:HG22	0.73	1.58	18	7
1:A:40:LEU:HD11	1:A:154:MET:CG	0.73	2.12	30	1
1:A:25:MET:HB2	1:A:33:ALA:HB1	0.73	1.61	14	27
1:A:34:ALA:HB1	1:A:40:LEU:CB	0.73	2.14	26	9
1:A:72:THR:HG23	1:A:155:ILE:O	0.73	1.84	36	18
1:A:107:THR:HG21	1:A:116:ARG:NH2	0.72	1.99	12	3
1:A:158:VAL:O	1:A:158:VAL:HG23	0.72	1.83	23	6
1:A:10:GLU:O	1:A:13:ALA:HB3	0.72	1.83	33	27
1:A:20:ALA:HB1	1:A:38:PRO:HD3	0.72	1.62	38	34
1:A:151:THR:CG2	1:A:153:TYR:CE2	0.72	2.73	10	33
1:A:139:ASP:O	1:A:155:ILE:HG22	0.72	1.83	33	1
1:A:58:VAL:HG22	1:A:59:ASP:N	0.72	2.00	28	6
1:A:52:ASN:HB3	1:A:55:VAL:HG13	0.72	1.61	20	11
1:A:99:THR:HG22	1:A:119:LEU:CD2	0.72	2.14	13	3
1:A:142:CYS:SG	1:A:145:VAL:HG21	0.71	2.25	6	6
1:A:72:THR:HG22	1:A:154:MET:SD	0.71	2.25	29	2
1:A:55:VAL:HG21	1:A:94:LEU:HD21	0.71	1.63	4	6
1:A:57:LEU:O	1:A:61:LEU:HD22	0.71	1.86	9	1
1:A:30:VAL:O	1:A:31:ALA:C	0.71	2.29	23	25
1:A:113:VAL:HG13	1:A:127:THR:HA	0.71	1.61	36	7
1:A:52:ASN:CB	1:A:55:VAL:HG13	0.71	2.15	6	6
1:A:30:VAL:HB	1:A:150:ALA:HB3	0.71	1.62	18	14
1:A:126:VAL:HG13	1:A:135:VAL:HG23	0.71	1.63	11	9
1:A:113:VAL:HG23	1:A:127:THR:HA	0.71	1.61	29	13
1:A:102:VAL:HG13	1:A:119:LEU:HD23	0.70	1.60	35	8
1:A:79:LEU:HD12	1:A:83:THR:CG2	0.70	2.16	6	1
1:A:42:THR:CG2	1:A:76:PHE:CD2	0.70	2.75	35	7
1:A:122:ALA:HB1	1:A:162:PRO:HD2	0.70	1.64	6	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:126:VAL:HG22	1:A:135:VAL:CG2	0.69	2.15	38	5
1:A:84:ILE:HG22	1:A:88:LYS:HE3	0.69	1.64	23	3
1:A:43:LEU:HD22	1:A:70:ALA:HB1	0.69	1.64	10	9
1:A:158:VAL:O	1:A:160:MET:N	0.69	2.26	36	10
1:A:87:LEU:HD23	1:A:90:ASN:ND2	0.69	2.02	6	17
1:A:134:LYS:O	1:A:135:VAL:HG23	0.69	1.88	31	12
1:A:104:ALA:HB2	1:A:119:LEU:CD2	0.69	2.18	36	5
1:A:88:LYS:O	1:A:89:THR:HG23	0.69	1.88	33	3
1:A:104:ALA:HB2	1:A:119:LEU:HD21	0.69	1.64	36	4
1:A:4:VAL:CG1	1:A:5:GLY:N	0.68	2.55	31	1
1:A:52:ASN:OD1	1:A:94:LEU:HD11	0.68	1.87	6	7
1:A:55:VAL:HG11	1:A:94:LEU:HD23	0.68	1.65	18	3
1:A:33:ALA:HB1	1:A:147:THR:CG2	0.68	2.19	31	14
1:A:158:VAL:O	1:A:158:VAL:CG2	0.68	2.41	2	3
1:A:68:VAL:CG1	1:A:70:ALA:HB2	0.68	2.17	6	29
1:A:55:VAL:HG21	1:A:94:LEU:HD23	0.68	1.66	30	1
1:A:30:VAL:CG2	1:A:68:VAL:CG2	0.68	2.72	26	24
1:A:48:SER:CA	1:A:58:VAL:HG23	0.68	2.19	24	8
1:A:28:ASP:O	1:A:148:ALA:HB2	0.68	1.89	27	15
1:A:55:VAL:HG11	1:A:94:LEU:CD2	0.67	2.19	2	7
1:A:75:ALA:O	1:A:158:VAL:HG23	0.67	1.88	28	6
1:A:40:LEU:HD22	1:A:70:ALA:HB1	0.67	1.65	25	15
1:A:30:VAL:HG13	1:A:31:ALA:N	0.67	2.04	11	28
1:A:101:HIS:NE2	1:A:158:VAL:O	0.67	2.27	3	12
1:A:57:LEU:O	1:A:60:THR:N	0.67	2.27	5	27
1:A:147:THR:HG23	1:A:152:VAL:CG2	0.67	2.20	38	4
1:A:151:THR:HG21	1:A:153:TYR:CE2	0.67	2.24	11	28
1:A:57:LEU:O	1:A:58:VAL:C	0.67	2.33	28	26
1:A:52:ASN:CG	1:A:94:LEU:HD21	0.67	2.10	32	5
1:A:4:VAL:CG1	1:A:133:LEU:HD22	0.67	2.20	33	2
1:A:71:PRO:HD3	1:A:101:HIS:ND1	0.66	2.05	2	38
1:A:99:THR:O	1:A:119:LEU:HD22	0.66	1.90	16	8
1:A:39:GLU:C	1:A:40:LEU:CD2	0.66	2.62	38	10
1:A:76:PHE:CD1	1:A:158:VAL:HG11	0.66	2.25	23	2
1:A:25:MET:SD	1:A:147:THR:HG22	0.66	2.31	14	27
1:A:71:PRO:HG2	1:A:76:PHE:CE1	0.66	2.26	28	14
1:A:71:PRO:HA	1:A:155:ILE:HD12	0.66	1.67	35	13
1:A:147:THR:HG23	1:A:152:VAL:HG21	0.65	1.66	38	2
1:A:47:LEU:HD12	1:A:58:VAL:CG2	0.65	2.21	37	1
1:A:87:LEU:HB3	1:A:94:LEU:HD13	0.65	1.66	32	7
1:A:30:VAL:HG23	1:A:68:VAL:CG2	0.65	2.21	5	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:LEU:N	1:A:57:LEU:CD2	0.65	2.60	9	3
1:A:138:ALA:HB1	1:A:155:ILE:HB	0.65	1.66	2	29
1:A:30:VAL:HG22	1:A:31:ALA:N	0.65	2.06	32	29
1:A:47:LEU:HD13	1:A:61:LEU:CD2	0.65	2.22	19	1
1:A:71:PRO:HG3	1:A:101:HIS:CE1	0.64	2.27	18	37
1:A:108:SER:O	1:A:112:VAL:CG2	0.64	2.45	11	11
1:A:31:ALA:HB2	1:A:61:LEU:HB2	0.64	1.68	9	2
1:A:64:GLY:O	1:A:66:TYR:CD1	0.64	2.51	28	21
1:A:22:VAL:CB	1:A:145:VAL:HG13	0.64	2.23	18	9
1:A:103:VAL:HG11	1:A:116:ARG:HD2	0.64	1.69	27	4
1:A:99:THR:O	1:A:119:LEU:CD2	0.64	2.46	16	1
1:A:3:LEU:HD13	1:A:8:CYS:SG	0.64	2.32	34	1
1:A:69:PHE:CD2	1:A:103:VAL:HG23	0.64	2.28	29	13
1:A:71:PRO:HG2	1:A:76:PHE:CZ	0.64	2.28	20	27
1:A:40:LEU:HD22	1:A:70:ALA:CB	0.64	2.23	14	7
1:A:44:THR:HA	1:A:47:LEU:HD11	0.64	1.70	19	34
1:A:126:VAL:HG13	1:A:135:VAL:HG22	0.64	1.69	5	15
1:A:103:VAL:HG13	1:A:116:ARG:HH21	0.64	1.53	11	1
1:A:84:ILE:HG22	1:A:88:LYS:CE	0.63	2.21	17	7
1:A:4:VAL:HG21	1:A:109:PRO:HB2	0.63	1.69	34	4
1:A:57:LEU:CD2	1:A:57:LEU:N	0.63	2.60	20	2
1:A:158:VAL:O	1:A:159:LEU:O	0.63	2.16	26	19
1:A:69:PHE:CE2	1:A:103:VAL:CG2	0.63	2.82	12	19
1:A:128:GLY:HA3	1:A:133:LEU:HD23	0.63	1.69	27	2
1:A:61:LEU:HD21	1:A:102:VAL:HG21	0.63	1.70	8	2
1:A:116:ARG:O	1:A:124:VAL:HG23	0.63	1.92	8	2
1:A:158:VAL:O	1:A:159:LEU:C	0.63	2.37	33	30
1:A:29:PRO:O	1:A:30:VAL:C	0.63	2.36	15	38
1:A:119:LEU:HD12	1:A:119:LEU:C	0.62	2.14	19	6
1:A:25:MET:HG3	1:A:147:THR:HG22	0.62	1.71	14	22
1:A:135:VAL:O	1:A:135:VAL:HG12	0.62	1.93	20	3
1:A:159:LEU:O	1:A:160:MET:CB	0.62	2.45	29	10
1:A:6:PRO:O	1:A:9:ALA:HB3	0.62	1.93	31	10
1:A:3:LEU:N	1:A:3:LEU:HD22	0.62	2.09	15	3
1:A:95:THR:O	1:A:99:THR:HG23	0.62	1.93	34	3
1:A:158:VAL:CG2	1:A:160:MET:CG	0.62	2.78	3	3
1:A:32:VAL:HG12	1:A:36:ASN:ND2	0.62	2.08	15	1
1:A:4:VAL:HG21	1:A:109:PRO:CB	0.62	2.25	29	8
1:A:128:GLY:CA	1:A:133:LEU:HD23	0.62	2.25	30	2
1:A:158:VAL:HG12	1:A:158:VAL:O	0.62	1.94	11	11
1:A:32:VAL:O	1:A:35:SER:N	0.62	2.32	11	31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:133:LEU:CB	1:A:140:VAL:HB	0.61	2.25	14	9
1:A:60:THR:O	1:A:66:TYR:CE2	0.61	2.53	6	2
1:A:155:ILE:CD1	1:A:157:SER:O	0.61	2.48	35	9
1:A:47:LEU:HD13	1:A:61:LEU:HD23	0.61	1.71	19	2
1:A:119:LEU:O	1:A:119:LEU:HD12	0.61	1.96	25	2
1:A:147:THR:CG2	1:A:152:VAL:HG21	0.61	2.26	38	3
1:A:69:PHE:O	1:A:101:HIS:ND1	0.61	2.32	23	21
1:A:25:MET:CG	1:A:147:THR:HG22	0.61	2.26	14	24
1:A:11:TYR:CE1	1:A:37:ASN:OD1	0.61	2.54	38	2
1:A:118:THR:HG22	1:A:124:VAL:CG2	0.61	2.25	8	2
1:A:101:HIS:CE1	1:A:159:LEU:HB2	0.61	2.31	19	26
1:A:112:VAL:HG13	1:A:126:VAL:HG11	0.61	1.72	37	10
1:A:66:TYR:HB3	1:A:102:VAL:HG23	0.61	1.73	17	1
1:A:99:THR:CG2	1:A:119:LEU:HD22	0.60	2.24	13	3
1:A:67:THR:HG21	1:A:116:ARG:NH2	0.60	2.11	6	4
1:A:42:THR:HG23	1:A:76:PHE:CD2	0.60	2.31	35	6
1:A:119:LEU:C	1:A:119:LEU:CD2	0.60	2.66	14	5
1:A:31:ALA:HB2	1:A:62:ASN:OD1	0.60	1.96	15	1
1:A:37:ASN:CB	1:A:40:LEU:HD12	0.60	2.26	31	2
1:A:30:VAL:HG22	1:A:31:ALA:H	0.60	1.56	21	19
1:A:97:ILE:HG22	1:A:98:LEU:N	0.60	2.12	12	7
1:A:142:CYS:SG	1:A:145:VAL:CG2	0.60	2.89	6	5
1:A:99:THR:CA	1:A:119:LEU:HD21	0.60	2.24	16	1
1:A:34:ALA:HB1	1:A:40:LEU:HB3	0.60	1.74	11	7
1:A:51:LEU:HD21	1:A:87:LEU:O	0.60	1.97	16	2
1:A:3:LEU:CD2	1:A:145:VAL:HG22	0.60	2.26	34	1
1:A:47:LEU:HA	1:A:98:LEU:HD13	0.60	1.73	35	6
1:A:22:VAL:HG13	1:A:145:VAL:HA	0.60	1.74	3	3
1:A:25:MET:SD	1:A:145:VAL:HG12	0.59	2.37	12	4
1:A:71:PRO:HA	1:A:155:ILE:CD1	0.59	2.27	13	7
1:A:30:VAL:CG1	1:A:150:ALA:HB3	0.59	2.27	27	4
1:A:72:THR:HG21	1:A:141:VAL:HG21	0.59	1.74	31	9
1:A:34:ALA:HB1	1:A:43:LEU:CD2	0.59	2.27	38	1
1:A:124:VAL:CG2	1:A:159:LEU:HD21	0.59	2.28	27	2
1:A:29:PRO:O	1:A:31:ALA:N	0.59	2.36	15	13
1:A:107:THR:CB	1:A:116:ARG:HH21	0.59	2.10	13	2
1:A:136:GLY:O	1:A:137:ASN:CB	0.59	2.51	33	23
1:A:90:ASN:ND2	1:A:93:LEU:HD23	0.59	2.11	20	7
1:A:93:LEU:HD12	1:A:93:LEU:O	0.59	1.97	29	4
1:A:128:GLY:HA2	1:A:133:LEU:HD23	0.59	1.74	30	1
1:A:57:LEU:C	1:A:61:LEU:HD22	0.59	2.17	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:159:LEU:O	1:A:160:MET:HB2	0.59	1.98	29	8
1:A:99:THR:HG22	1:A:119:LEU:CD1	0.59	2.18	20	1
1:A:119:LEU:CD2	1:A:119:LEU:C	0.59	2.69	27	4
1:A:133:LEU:HB2	1:A:140:VAL:HG21	0.59	1.73	3	5
1:A:158:VAL:O	1:A:158:VAL:HG12	0.58	1.97	25	10
1:A:103:VAL:HG11	1:A:116:ARG:CZ	0.58	2.28	23	2
1:A:69:PHE:CE2	1:A:103:VAL:HG23	0.58	2.33	29	11
1:A:103:VAL:HG22	1:A:118:THR:CA	0.58	2.26	36	7
1:A:28:ASP:CG	1:A:32:VAL:HG12	0.58	2.18	5	13
1:A:43:LEU:O	1:A:46:ALA:HB3	0.58	1.97	17	38
1:A:4:VAL:O	1:A:4:VAL:HG13	0.58	1.98	33	1
1:A:69:PHE:O	1:A:155:ILE:CD1	0.58	2.51	26	14
1:A:52:ASN:CB	1:A:55:VAL:CG1	0.58	2.81	6	5
1:A:87:LEU:O	1:A:94:LEU:HD22	0.58	1.97	31	5
1:A:34:ALA:HB1	1:A:40:LEU:HB2	0.58	1.76	26	7
1:A:3:LEU:CD1	1:A:22:VAL:HG21	0.58	2.28	16	1
1:A:57:LEU:O	1:A:61:LEU:N	0.58	2.37	6	3
1:A:47:LEU:HD13	1:A:61:LEU:HD12	0.58	1.75	27	4
1:A:103:VAL:HG11	1:A:116:ARG:CG	0.58	2.29	27	4
1:A:101:HIS:HE1	1:A:155:ILE:HD11	0.57	1.58	9	5
1:A:61:LEU:HA	1:A:66:TYR:CE2	0.57	2.34	17	4
1:A:64:GLY:O	1:A:66:TYR:CD2	0.57	2.57	17	1
1:A:119:LEU:HD12	1:A:119:LEU:O	0.57	1.98	19	4
1:A:69:PHE:O	1:A:155:ILE:HD11	0.57	1.99	14	7
1:A:30:VAL:O	1:A:33:ALA:CB	0.57	2.51	36	5
1:A:46:ALA:HB1	1:A:94:LEU:HD11	0.57	1.75	20	3
1:A:58:VAL:HG13	1:A:59:ASP:H	0.57	1.60	33	11
1:A:59:ASP:O	1:A:62:ASN:OD1	0.57	2.23	6	4
1:A:37:ASN:HB2	1:A:40:LEU:HD12	0.57	1.77	31	1
1:A:47:LEU:HD13	1:A:61:LEU:CD1	0.57	2.29	34	1
1:A:141:VAL:HG23	1:A:155:ILE:CA	0.57	2.30	20	7
1:A:40:LEU:HD21	1:A:154:MET:HG3	0.57	1.75	3	2
1:A:79:LEU:HD11	1:A:158:VAL:HB	0.57	1.75	37	5
1:A:57:LEU:HD21	1:A:99:THR:HG22	0.57	1.75	32	3
1:A:103:VAL:CG1	1:A:116:ARG:NE	0.57	2.68	18	1
1:A:73:ASN:H	1:A:73:ASN:ND2	0.57	1.98	30	1
1:A:100:TYR:CE2	1:A:160:MET:C	0.57	2.78	37	15
1:A:159:LEU:C	1:A:160:MET:CG	0.57	2.73	12	9
1:A:133:LEU:HB2	1:A:140:VAL:CG2	0.57	2.30	3	4
1:A:43:LEU:CD1	1:A:47:LEU:CD2	0.56	2.83	14	1
1:A:111:ASN:O	1:A:112:VAL:C	0.56	2.43	17	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:107:THR:CB	1:A:116:ARG:NH2	0.56	2.68	13	2
1:A:57:LEU:C	1:A:61:LEU:CD2	0.56	2.73	9	1
1:A:32:VAL:HG12	1:A:36:ASN:OD1	0.56	2.00	19	2
1:A:79:LEU:HD22	1:A:79:LEU:H	0.56	1.60	12	2
1:A:75:ALA:HB1	1:A:157:SER:N	0.56	2.16	17	3
1:A:115:THR:HG23	1:A:123:SER:HB2	0.56	1.76	11	2
1:A:101:HIS:CE1	1:A:159:LEU:N	0.56	2.74	33	5
1:A:33:ALA:HB1	1:A:147:THR:HG21	0.56	1.78	22	3
1:A:67:THR:CG2	1:A:153:TYR:CE2	0.56	2.89	37	24
1:A:103:VAL:CG1	1:A:116:ARG:NH2	0.56	2.69	11	1
1:A:135:VAL:HG11	1:A:159:LEU:HD11	0.56	1.77	14	2
1:A:58:VAL:O	1:A:61:LEU:N	0.56	2.38	5	5
1:A:52:ASN:OD1	1:A:87:LEU:O	0.56	2.23	9	5
1:A:147:THR:OG1	1:A:150:ALA:O	0.56	2.24	13	38
1:A:39:GLU:O	1:A:40:LEU:HD23	0.56	2.01	19	4
1:A:4:VAL:HG11	1:A:109:PRO:CG	0.56	2.31	4	2
1:A:61:LEU:CD2	1:A:102:VAL:HG11	0.56	2.31	8	1
1:A:98:LEU:O	1:A:102:VAL:HG12	0.55	2.00	34	6
1:A:52:ASN:OD1	1:A:94:LEU:CD2	0.55	2.54	9	1
1:A:124:VAL:CG2	1:A:135:VAL:HG13	0.55	2.31	18	3
1:A:156:ASP:CG	1:A:156:ASP:O	0.55	2.45	7	11
1:A:101:HIS:CE1	1:A:158:VAL:HA	0.55	2.35	30	3
1:A:52:ASN:O	1:A:55:VAL:HG22	0.55	2.01	20	2
1:A:79:LEU:HD21	1:A:158:VAL:CG2	0.55	2.30	35	1
1:A:100:TYR:CD2	1:A:160:MET:C	0.55	2.80	11	34
1:A:99:THR:CG2	1:A:119:LEU:CD2	0.55	2.84	26	2
1:A:135:VAL:O	1:A:136:GLY:C	0.55	2.43	19	5
1:A:97:ILE:HG23	1:A:101:HIS:CD2	0.55	2.37	26	12
1:A:103:VAL:CG1	1:A:116:ARG:HH21	0.55	2.14	11	1
1:A:136:GLY:HA3	1:A:159:LEU:HD22	0.55	1.77	8	2
1:A:52:ASN:CB	1:A:55:VAL:HG22	0.55	2.31	2	3
1:A:30:VAL:O	1:A:32:VAL:N	0.55	2.40	21	16
1:A:111:ASN:O	1:A:113:VAL:N	0.55	2.40	15	16
1:A:133:LEU:CD2	1:A:133:LEU:N	0.55	2.70	5	1
1:A:124:VAL:O	1:A:126:VAL:HG23	0.55	2.01	14	12
1:A:44:THR:HA	1:A:47:LEU:CD1	0.55	2.32	26	36
1:A:31:ALA:HB1	1:A:58:VAL:HG13	0.55	1.78	3	1
1:A:11:TYR:CZ	1:A:37:ASN:OD1	0.55	2.60	38	2
1:A:66:TYR:HB2	1:A:150:ALA:HB2	0.55	1.77	9	2
1:A:124:VAL:HG12	1:A:135:VAL:HG13	0.55	1.79	8	1
1:A:29:PRO:HA	1:A:148:ALA:HB3	0.55	1.76	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:PHE:CE1	1:A:135:VAL:HG21	0.55	2.37	17	5
1:A:84:ILE:O	1:A:87:LEU:N	0.55	2.39	20	4
1:A:60:THR:O	1:A:63:SER:CB	0.55	2.55	5	6
1:A:44:THR:HG22	1:A:45:ALA:N	0.55	2.17	38	1
1:A:42:THR:HG23	1:A:76:PHE:CE2	0.55	2.37	24	4
1:A:100:TYR:CZ	1:A:124:VAL:HG13	0.55	2.36	8	2
1:A:99:THR:OG1	1:A:120:GLN:CG	0.55	2.55	34	3
1:A:3:LEU:CD1	1:A:22:VAL:HG11	0.55	2.32	22	1
1:A:90:ASN:O	1:A:91:SER:CB	0.55	2.55	15	8
1:A:46:ALA:O	1:A:55:VAL:HG23	0.55	2.02	21	2
1:A:40:LEU:HD11	1:A:154:MET:HG3	0.55	1.77	30	1
1:A:107:THR:HB	1:A:116:ARG:HH21	0.54	1.62	13	1
1:A:42:THR:CG2	1:A:43:LEU:N	0.54	2.71	1	5
1:A:6:PRO:O	1:A:9:ALA:CB	0.54	2.55	31	3
1:A:52:ASN:HB2	1:A:55:VAL:HG13	0.54	1.78	6	4
1:A:84:ILE:HG22	1:A:88:LYS:HE2	0.54	1.78	10	2
1:A:134:LYS:CE	1:A:137:ASN:O	0.54	2.55	14	4
1:A:32:VAL:O	1:A:33:ALA:C	0.54	2.46	20	22
1:A:40:LEU:HB3	1:A:43:LEU:HD22	0.54	1.78	38	1
1:A:57:LEU:HD11	1:A:99:THR:HG22	0.54	1.80	28	1
1:A:40:LEU:O	1:A:43:LEU:HD23	0.54	2.01	23	1
1:A:112:VAL:HG23	1:A:116:ARG:NH2	0.54	2.16	19	1
1:A:7:GLY:O	1:A:11:TYR:CB	0.54	2.56	25	5
1:A:4:VAL:HG22	1:A:143:GLY:O	0.54	2.02	30	2
1:A:159:LEU:C	1:A:160:MET:HG3	0.54	2.22	3	9
1:A:126:VAL:C	1:A:127:THR:HG22	0.54	2.23	5	10
1:A:4:VAL:HG13	1:A:4:VAL:O	0.54	2.03	13	1
1:A:64:GLY:O	1:A:65:GLN:O	0.54	2.26	9	1
1:A:58:VAL:HG13	1:A:59:ASP:N	0.54	2.18	30	7
1:A:87:LEU:HD23	1:A:90:ASN:HD22	0.54	1.62	6	1
1:A:3:LEU:HD22	1:A:8:CYS:SG	0.54	2.42	34	1
1:A:96:SER:CB	1:A:161:PRO:HG3	0.54	2.33	22	18
1:A:33:ALA:CB	1:A:147:THR:CG2	0.54	2.86	17	16
1:A:141:VAL:HG23	1:A:155:ILE:HA	0.54	1.80	20	2
1:A:99:THR:HB	1:A:119:LEU:CD2	0.54	2.33	37	5
1:A:31:ALA:O	1:A:32:VAL:C	0.54	2.45	28	31
1:A:99:THR:O	1:A:102:VAL:HG13	0.54	2.03	27	15
1:A:90:ASN:O	1:A:94:LEU:HD23	0.54	2.02	2	2
1:A:98:LEU:O	1:A:101:HIS:N	0.54	2.38	7	12
1:A:103:VAL:CG1	1:A:104:ALA:N	0.54	2.71	15	7
1:A:60:THR:O	1:A:61:LEU:C	0.54	2.46	16	24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:52:ASN:HB3	1:A:55:VAL:HG22	0.54	1.79	2	2
1:A:25:MET:O	1:A:33:ALA:CB	0.54	2.56	12	2
1:A:52:ASN:OD1	1:A:94:LEU:HD21	0.53	2.03	34	7
1:A:58:VAL:HG12	1:A:59:ASP:N	0.53	2.18	6	2
1:A:52:ASN:N	1:A:52:ASN:ND2	0.53	2.55	12	7
1:A:33:ALA:CB	1:A:147:THR:HG21	0.53	2.33	37	16
1:A:125:THR:HG22	1:A:125:THR:O	0.53	2.03	14	1
1:A:39:GLU:O	1:A:73:ASN:ND2	0.53	2.41	21	6
1:A:135:VAL:O	1:A:138:ALA:N	0.53	2.41	3	21
1:A:157:SER:C	1:A:159:LEU:H	0.53	2.05	12	13
1:A:101:HIS:CE1	1:A:159:LEU:CB	0.53	2.91	34	7
1:A:39:GLU:HB2	1:A:40:LEU:CD2	0.53	2.32	38	10
1:A:116:ARG:NE	1:A:117:GLN:H	0.53	2.01	2	2
1:A:116:ARG:HH21	1:A:117:GLN:HB3	0.53	1.63	30	2
1:A:72:THR:CG2	1:A:154:MET:HB3	0.53	2.33	10	11
1:A:40:LEU:HD21	1:A:154:MET:CG	0.53	2.34	3	3
1:A:67:THR:HG23	1:A:153:TYR:CE2	0.53	2.38	24	2
1:A:75:ALA:CB	1:A:157:SER:N	0.53	2.71	7	3
1:A:100:TYR:HD1	1:A:118:THR:HG21	0.53	1.63	38	1
1:A:3:LEU:HD22	1:A:3:LEU:N	0.53	2.19	4	1
1:A:101:HIS:NE2	1:A:158:VAL:HA	0.53	2.18	30	3
1:A:4:VAL:CG2	1:A:4:VAL:O	0.53	2.56	20	1
1:A:141:VAL:HG23	1:A:154:MET:O	0.53	2.04	29	3
1:A:31:ALA:HB3	1:A:58:VAL:HG23	0.53	1.80	4	1
1:A:25:MET:SD	1:A:147:THR:CG2	0.53	2.96	32	20
1:A:138:ALA:HB2	1:A:157:SER:CB	0.53	2.34	20	9
1:A:47:LEU:CA	1:A:98:LEU:HD13	0.53	2.34	33	3
1:A:48:SER:OG	1:A:49:GLY:N	0.53	2.42	18	5
1:A:57:LEU:HD11	1:A:99:THR:HG23	0.53	1.81	33	3
1:A:67:THR:OG1	1:A:106:GLN:HA	0.53	2.04	28	5
1:A:28:ASP:HB3	1:A:32:VAL:HG12	0.53	1.81	4	1
1:A:70:ALA:O	1:A:154:MET:HA	0.53	2.03	3	12
1:A:58:VAL:CG2	1:A:59:ASP:N	0.53	2.72	17	6
1:A:120:GLN:OE1	1:A:120:GLN:O	0.53	2.27	15	9
1:A:108:SER:O	1:A:112:VAL:HG22	0.53	2.04	10	11
1:A:103:VAL:CG2	1:A:118:THR:HG22	0.53	2.34	38	3
1:A:40:LEU:HD13	1:A:70:ALA:CB	0.53	2.34	38	1
1:A:3:LEU:N	1:A:3:LEU:CD2	0.53	2.71	15	1
1:A:37:ASN:CB	1:A:40:LEU:HG	0.53	2.34	30	8
1:A:35:SER:HA	1:A:44:THR:HG21	0.52	1.81	24	6
1:A:135:VAL:O	1:A:138:ALA:CB	0.52	2.56	19	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:4:VAL:HG11	1:A:133:LEU:HD22	0.52	1.80	13	2
1:A:79:LEU:HD11	1:A:158:VAL:CB	0.52	2.35	38	2
1:A:100:TYR:HE1	1:A:124:VAL:HG13	0.52	1.64	23	2
1:A:70:ALA:O	1:A:155:ILE:HD13	0.52	2.05	31	10
1:A:113:VAL:HG23	1:A:127:THR:CA	0.52	2.34	34	3
1:A:128:GLY:HA3	1:A:133:LEU:HD22	0.52	1.80	2	1
1:A:102:VAL:HG13	1:A:119:LEU:CD2	0.52	2.33	35	1
1:A:151:THR:HG22	1:A:153:TYR:CE2	0.52	2.39	19	12
1:A:75:ALA:HB1	1:A:157:SER:CA	0.52	2.34	18	2
1:A:23:GLN:O	1:A:26:SER:CB	0.52	2.57	33	5
1:A:33:ALA:O	1:A:37:ASN:N	0.52	2.42	10	5
1:A:141:VAL:N	1:A:154:MET:O	0.52	2.43	16	13
1:A:38:PRO:HA	1:A:41:THR:CG2	0.52	2.34	20	3
1:A:29:PRO:CB	1:A:62:ASN:OD1	0.52	2.58	29	1
1:A:71:PRO:CG	1:A:101:HIS:CE1	0.52	2.92	23	8
1:A:62:ASN:O	1:A:62:ASN:CG	0.52	2.46	6	4
1:A:40:LEU:HD21	1:A:154:MET:SD	0.52	2.44	24	7
1:A:80:PRO:O	1:A:81:ALA:HB3	0.52	2.04	6	2
1:A:63:SER:O	1:A:66:TYR:CZ	0.52	2.62	2	2
1:A:72:THR:O	1:A:75:ALA:HB3	0.52	2.05	9	4
1:A:101:HIS:CE1	1:A:158:VAL:C	0.52	2.83	3	3
1:A:57:LEU:HB2	1:A:61:LEU:HD21	0.52	1.81	9	1
1:A:135:VAL:O	1:A:137:ASN:N	0.52	2.40	29	10
1:A:30:VAL:CG1	1:A:31:ALA:H	0.52	2.15	23	11
1:A:126:VAL:C	1:A:127:THR:CG2	0.52	2.78	34	17
1:A:158:VAL:HG23	1:A:160:MET:HG3	0.52	1.82	20	2
1:A:90:ASN:ND2	1:A:93:LEU:CD2	0.52	2.73	29	2
1:A:84:ILE:O	1:A:88:LYS:CD	0.52	2.58	23	4
1:A:42:THR:CG2	1:A:76:PHE:CD1	0.52	2.92	1	3
1:A:79:LEU:N	1:A:79:LEU:HD13	0.52	2.18	35	1
1:A:3:LEU:HD11	1:A:22:VAL:HG11	0.52	1.81	22	1
1:A:52:ASN:HB2	1:A:55:VAL:CG2	0.51	2.35	32	7
1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	0.51	1.65	29	1
1:A:22:VAL:HG23	1:A:23:GLN:HG2	0.51	1.81	35	1
1:A:52:ASN:ND2	1:A:52:ASN:N	0.51	2.58	37	5
1:A:57:LEU:HB3	1:A:61:LEU:HD13	0.51	1.82	19	1
1:A:42:THR:HG21	1:A:76:PHE:CG	0.51	2.40	10	1
1:A:151:THR:HG22	1:A:152:VAL:H	0.51	1.65	15	10
1:A:8:CYS:N	1:A:142:CYS:HB2	0.51	2.21	25	1
1:A:133:LEU:N	1:A:133:LEU:CD2	0.51	2.71	3	1
1:A:119:LEU:C	1:A:119:LEU:HD12	0.51	2.26	32	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:ALA:CB	1:A:44:THR:CG2	0.51	2.88	15	2
1:A:30:VAL:HG22	1:A:68:VAL:CG2	0.51	2.36	19	4
1:A:21:SER:O	1:A:25:MET:HE3	0.51	2.06	32	7
1:A:94:LEU:O	1:A:97:ILE:N	0.51	2.44	6	4
1:A:21:SER:O	1:A:25:MET:CE	0.51	2.58	32	6
1:A:31:ALA:O	1:A:34:ALA:HB3	0.51	2.05	2	1
1:A:36:ASN:ND2	1:A:36:ASN:N	0.51	2.59	10	1
1:A:101:HIS:NE2	1:A:159:LEU:O	0.51	2.44	33	2
1:A:58:VAL:O	1:A:59:ASP:C	0.51	2.49	20	13
1:A:30:VAL:CG2	1:A:31:ALA:N	0.51	2.74	15	13
1:A:44:THR:O	1:A:45:ALA:C	0.51	2.48	10	21
1:A:136:GLY:O	1:A:159:LEU:CD1	0.51	2.59	19	1
1:A:96:SER:CB	1:A:161:PRO:CG	0.51	2.89	2	11
1:A:97:ILE:CG2	1:A:98:LEU:N	0.51	2.73	12	3
1:A:159:LEU:O	1:A:160:MET:HG3	0.51	2.05	29	2
1:A:158:VAL:O	1:A:158:VAL:CG1	0.51	2.59	11	5
1:A:11:TYR:CD2	1:A:12:ALA:N	0.51	2.79	36	1
1:A:158:VAL:O	1:A:160:MET:CG	0.51	2.59	18	4
1:A:101:HIS:C	1:A:102:VAL:CG2	0.51	2.80	23	7
1:A:91:SER:O	1:A:95:THR:CB	0.51	2.59	13	2
1:A:45:ALA:HB1	1:A:50:GLN:HB2	0.51	1.82	5	5
1:A:79:LEU:HD21	1:A:158:VAL:CG1	0.51	2.35	12	2
1:A:79:LEU:HB3	1:A:83:THR:HG21	0.50	1.82	5	3
1:A:4:VAL:HG11	1:A:109:PRO:CB	0.50	2.36	3	4
1:A:124:VAL:HG23	1:A:159:LEU:HD21	0.50	1.82	27	2
1:A:62:ASN:CG	1:A:62:ASN:O	0.50	2.47	24	3
1:A:98:LEU:HD23	1:A:98:LEU:N	0.50	2.21	2	8
1:A:72:THR:CG2	1:A:155:ILE:O	0.50	2.58	36	12
1:A:31:ALA:O	1:A:34:ALA:N	0.50	2.44	4	14
1:A:135:VAL:HG12	1:A:159:LEU:CD2	0.50	2.28	3	2
1:A:40:LEU:HD21	1:A:154:MET:HG2	0.50	1.82	23	3
1:A:134:LYS:CE	1:A:139:ASP:OD1	0.50	2.60	27	1
1:A:151:THR:HG22	1:A:152:VAL:N	0.50	2.22	2	15
1:A:57:LEU:CD1	1:A:98:LEU:HB2	0.50	2.37	26	2
1:A:100:TYR:CE2	1:A:159:LEU:HB3	0.50	2.42	8	1
1:A:40:LEU:HB3	1:A:43:LEU:HD23	0.50	1.82	14	4
1:A:122:ALA:CB	1:A:162:PRO:HD2	0.50	2.37	22	11
1:A:135:VAL:O	1:A:135:VAL:CG1	0.50	2.59	20	3
1:A:68:VAL:HB	1:A:152:VAL:HG22	0.50	1.83	3	4
1:A:35:SER:CA	1:A:44:THR:OG1	0.50	2.60	20	1
1:A:4:VAL:CG1	1:A:4:VAL:O	0.50	2.59	33	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:107:THR:CG2	1:A:116:ARG:NH2	0.50	2.74	17	3
1:A:66:TYR:O	1:A:150:ALA:HA	0.50	2.07	3	30
1:A:43:LEU:HD13	1:A:71:PRO:CD	0.50	2.32	11	7
1:A:4:VAL:HG13	1:A:133:LEU:CD1	0.50	2.37	34	1
1:A:63:SER:HB2	1:A:66:TYR:CZ	0.50	2.41	9	1
1:A:73:ASN:N	1:A:73:ASN:ND2	0.50	2.59	30	1
1:A:67:THR:O	1:A:69:PHE:CD2	0.50	2.65	29	27
1:A:44:THR:O	1:A:48:SER:N	0.50	2.44	37	8
1:A:88:LYS:O	1:A:89:THR:CG2	0.50	2.60	33	3
1:A:103:VAL:HG21	1:A:116:ARG:HG2	0.50	1.82	24	1
1:A:95:THR:O	1:A:99:THR:OG1	0.49	2.30	13	11
1:A:46:ALA:O	1:A:55:VAL:CG2	0.49	2.60	21	2
1:A:133:LEU:N	1:A:133:LEU:CD1	0.49	2.75	33	2
1:A:70:ALA:C	1:A:155:ILE:HD13	0.49	2.27	23	9
1:A:34:ALA:HB1	1:A:43:LEU:HD23	0.49	1.83	10	1
1:A:34:ALA:CB	1:A:43:LEU:CD2	0.49	2.90	38	1
1:A:120:GLN:O	1:A:120:GLN:OE1	0.49	2.30	11	5
1:A:133:LEU:HD23	1:A:133:LEU:N	0.49	2.21	2	3
1:A:155:ILE:HD12	1:A:159:LEU:HG	0.49	1.84	14	1
1:A:107:THR:O	1:A:153:TYR:OH	0.49	2.26	15	8
1:A:156:ASP:O	1:A:157:SER:OG	0.49	2.29	22	11
1:A:79:LEU:HD11	1:A:158:VAL:CG2	0.49	2.38	23	1
1:A:139:ASP:O	1:A:155:ILE:HA	0.49	2.08	33	1
1:A:3:LEU:CB	1:A:8:CYS:SG	0.49	3.01	26	6
1:A:3:LEU:CD1	1:A:8:CYS:SG	0.49	3.00	13	1
1:A:52:ASN:OD1	1:A:94:LEU:HD22	0.49	2.07	9	1
1:A:139:ASP:N	1:A:156:ASP:OD1	0.49	2.45	8	2
1:A:30:VAL:CG1	1:A:31:ALA:N	0.49	2.74	33	14
1:A:20:ALA:CB	1:A:38:PRO:HD3	0.49	2.38	20	8
1:A:57:LEU:O	1:A:59:ASP:N	0.49	2.46	23	2
1:A:46:ALA:HA	1:A:51:LEU:HD22	0.49	1.82	10	1
1:A:135:VAL:CG1	1:A:159:LEU:CD1	0.49	2.82	14	1
1:A:60:THR:O	1:A:63:SER:N	0.49	2.46	9	12
1:A:28:ASP:OD1	1:A:32:VAL:HG12	0.49	2.08	10	2
1:A:61:LEU:HD22	1:A:102:VAL:HG11	0.49	1.84	16	1
1:A:52:ASN:HB2	1:A:55:VAL:CG1	0.49	2.38	6	4
1:A:31:ALA:HB2	1:A:61:LEU:HD12	0.49	1.85	38	1
1:A:31:ALA:HB1	1:A:58:VAL:HG22	0.49	1.83	31	1
1:A:133:LEU:HB3	1:A:140:VAL:HG21	0.49	1.84	18	2
1:A:118:THR:CG2	1:A:124:VAL:CG1	0.49	2.90	7	2
1:A:94:LEU:HD11	1:A:98:LEU:HD21	0.49	1.82	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:GLN:O	1:A:26:SER:N	0.49	2.44	7	11
1:A:102:VAL:HG22	1:A:119:LEU:HD23	0.49	1.84	21	1
1:A:40:LEU:O	1:A:43:LEU:N	0.49	2.46	6	32
1:A:120:GLN:NE2	1:A:120:GLN:O	0.49	2.46	16	3
1:A:69:PHE:C	1:A:155:ILE:CD1	0.49	2.81	11	2
1:A:103:VAL:CG1	1:A:117:GLN:O	0.49	2.58	18	4
1:A:48:SER:O	1:A:56:ASN:CG	0.49	2.50	19	1
1:A:43:LEU:CG	1:A:47:LEU:HD21	0.48	2.36	14	1
1:A:49:GLY:O	1:A:52:ASN:N	0.48	2.46	23	7
1:A:133:LEU:HB2	1:A:140:VAL:CB	0.48	2.39	3	5
1:A:54:GLN:CB	1:A:91:SER:CB	0.48	2.92	19	1
1:A:105:GLY:O	1:A:116:ARG:NH1	0.48	2.46	29	1
1:A:7:GLY:O	1:A:9:ALA:N	0.48	2.46	33	11
1:A:79:LEU:CD1	1:A:83:THR:HG21	0.48	2.29	6	1
1:A:90:ASN:CG	1:A:93:LEU:HD23	0.48	2.28	4	4
1:A:67:THR:CB	1:A:116:ARG:NH2	0.48	2.76	29	2
1:A:136:GLY:O	1:A:159:LEU:HD11	0.48	2.08	19	1
1:A:36:ASN:N	1:A:36:ASN:HD22	0.48	2.06	10	1
1:A:52:ASN:ND2	1:A:88:LYS:C	0.48	2.67	2	8
1:A:40:LEU:O	1:A:42:THR:N	0.48	2.46	34	18
1:A:26:SER:OG	1:A:27:GLN:N	0.48	2.47	28	1
1:A:32:VAL:O	1:A:35:SER:CB	0.48	2.60	9	6
1:A:7:GLY:O	1:A:11:TYR:N	0.48	2.45	33	14
1:A:10:GLU:O	1:A:13:ALA:CB	0.48	2.58	33	2
1:A:135:VAL:O	1:A:159:LEU:HD21	0.48	2.08	35	4
1:A:103:VAL:HG21	1:A:116:ARG:CG	0.48	2.38	24	3
1:A:78:LYS:NZ	1:A:156:ASP:O	0.48	2.47	33	3
1:A:86:GLU:O	1:A:89:THR:CG2	0.48	2.61	25	3
1:A:11:TYR:OH	1:A:37:ASN:ND2	0.48	2.46	9	17
1:A:44:THR:CG2	1:A:45:ALA:N	0.48	2.77	38	1
1:A:32:VAL:HG12	1:A:36:ASN:HD21	0.48	1.67	15	1
1:A:39:GLU:O	1:A:73:ASN:N	0.48	2.46	21	2
1:A:42:THR:CG2	1:A:76:PHE:CG	0.48	2.96	10	1
1:A:115:THR:HG23	1:A:123:SER:HB3	0.48	1.84	29	1
1:A:49:GLY:O	1:A:51:LEU:N	0.48	2.46	2	9
1:A:40:LEU:O	1:A:41:THR:C	0.48	2.52	13	28
1:A:11:TYR:CE1	1:A:15:ASN:ND2	0.48	2.82	3	1
1:A:67:THR:HG23	1:A:153:TYR:HE2	0.48	1.68	28	3
1:A:51:LEU:HD21	1:A:88:LYS:NZ	0.48	2.24	19	1
1:A:52:ASN:ND2	1:A:88:LYS:O	0.48	2.47	24	2
1:A:30:VAL:CG1	1:A:149:ASN:ND2	0.48	2.77	27	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:GLY:HA2	1:A:52:ASN:O	0.48	2.09	15	3
1:A:51:LEU:HD21	1:A:88:LYS:HZ2	0.48	1.68	19	1
1:A:133:LEU:N	1:A:133:LEU:HD12	0.48	2.24	33	2
1:A:60:THR:O	1:A:62:ASN:N	0.48	2.46	25	13
1:A:106:GLN:HE21	1:A:151:THR:N	0.48	2.06	13	1
1:A:100:TYR:CE1	1:A:118:THR:HG21	0.48	2.44	2	3
1:A:120:GLN:O	1:A:120:GLN:NE2	0.48	2.47	3	6
1:A:102:VAL:O	1:A:119:LEU:HB2	0.48	2.09	13	1
1:A:99:THR:CA	1:A:119:LEU:CD2	0.48	2.92	16	1
1:A:11:TYR:CE1	1:A:37:ASN:ND2	0.48	2.82	36	1
1:A:56:ASN:ND2	1:A:56:ASN:O	0.48	2.46	36	2
1:A:76:PHE:CD1	1:A:158:VAL:CG1	0.48	2.96	18	1
1:A:52:ASN:ND2	1:A:87:LEU:O	0.48	2.47	18	11
1:A:20:ALA:HA	1:A:36:ASN:O	0.48	2.09	33	4
1:A:116:ARG:HB3	1:A:124:VAL:HG23	0.48	1.85	22	4
1:A:17:THR:O	1:A:18:GLY:O	0.48	2.32	30	7
1:A:57:LEU:CD2	1:A:99:THR:HG22	0.48	2.37	37	1
1:A:103:VAL:HG11	1:A:116:ARG:NH1	0.48	2.24	23	1
1:A:57:LEU:HD12	1:A:98:LEU:HB2	0.47	1.86	14	2
1:A:139:ASP:O	1:A:155:ILE:CG2	0.47	2.61	33	1
1:A:119:LEU:O	1:A:121:GLY:N	0.47	2.47	33	7
1:A:124:VAL:O	1:A:124:VAL:HG13	0.47	2.09	25	1
1:A:55:VAL:HG23	1:A:56:ASN:N	0.47	2.24	6	2
1:A:99:THR:OG1	1:A:120:GLN:HB2	0.47	2.09	2	4
1:A:34:ALA:HA	1:A:40:LEU:HD12	0.47	1.85	17	2
1:A:107:THR:CG2	1:A:116:ARG:HH21	0.47	2.21	17	1
1:A:30:VAL:HG23	1:A:68:VAL:HG23	0.47	1.85	5	3
1:A:11:TYR:O	1:A:14:ALA:N	0.47	2.47	34	26
1:A:70:ALA:C	1:A:155:ILE:CD1	0.47	2.83	26	9
1:A:94:LEU:HD11	1:A:98:LEU:HD11	0.47	1.86	14	6
1:A:7:GLY:C	1:A:9:ALA:N	0.47	2.67	33	15
1:A:48:SER:HA	1:A:58:VAL:CG2	0.47	2.39	6	9
1:A:48:SER:O	1:A:56:ASN:ND2	0.47	2.48	34	5
1:A:46:ALA:HA	1:A:52:ASN:ND2	0.47	2.24	9	2
1:A:47:LEU:O	1:A:56:ASN:HA	0.47	2.09	37	4
1:A:109:PRO:HA	1:A:112:VAL:HG12	0.47	1.86	23	1
1:A:20:ALA:HB2	1:A:36:ASN:O	0.47	2.10	20	2
1:A:127:THR:HG23	1:A:134:LYS:HB3	0.47	1.86	19	1
1:A:69:PHE:HE1	1:A:135:VAL:HG21	0.47	1.68	22	4
1:A:34:ALA:O	1:A:37:ASN:N	0.47	2.48	25	1
1:A:116:ARG:HB2	1:A:124:VAL:HG13	0.47	1.86	6	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:151:THR:HG21	1:A:153:TYR:CZ	0.47	2.44	12	7
1:A:61:LEU:HA	1:A:66:TYR:CD2	0.47	2.45	8	3
1:A:29:PRO:O	1:A:33:ALA:CB	0.47	2.63	19	4
1:A:39:GLU:C	1:A:73:ASN:ND2	0.47	2.68	18	3
1:A:12:ALA:O	1:A:16:PRO:N	0.47	2.47	1	20
1:A:11:TYR:OH	1:A:37:ASN:OD1	0.47	2.32	33	3
1:A:4:VAL:HG22	1:A:5:GLY:N	0.47	2.24	25	3
1:A:86:GLU:CG	1:A:90:ASN:OD1	0.47	2.62	6	2
1:A:147:THR:CG2	1:A:152:VAL:CG2	0.47	2.90	38	2
1:A:127:THR:HG23	1:A:134:LYS:CB	0.47	2.40	8	2
1:A:35:SER:O	1:A:36:ASN:ND2	0.47	2.47	14	2
1:A:7:GLY:O	1:A:8:CYS:C	0.47	2.52	33	19
1:A:4:VAL:HG13	1:A:133:LEU:HD22	0.47	1.85	33	1
1:A:40:LEU:HD11	1:A:154:MET:HG2	0.47	1.85	37	3
1:A:84:ILE:O	1:A:86:GLU:N	0.47	2.48	23	3
1:A:99:THR:HA	1:A:119:LEU:CD2	0.47	2.34	16	1
1:A:19:PRO:O	1:A:25:MET:N	0.47	2.48	10	1
1:A:51:LEU:HD12	1:A:88:LYS:CG	0.47	2.39	10	1
1:A:4:VAL:HG22	1:A:133:LEU:HD12	0.47	1.87	35	1
1:A:135:VAL:HG12	1:A:135:VAL:O	0.47	2.09	15	3
1:A:30:VAL:CG2	1:A:68:VAL:HG23	0.47	2.39	6	2
1:A:61:LEU:HD23	1:A:66:TYR:CD2	0.47	2.44	6	1
1:A:52:ASN:HD21	1:A:89:THR:N	0.47	2.07	17	2
1:A:40:LEU:CD1	1:A:70:ALA:CB	0.47	2.93	38	1
1:A:42:THR:HG21	1:A:76:PHE:CD2	0.47	2.43	32	5
1:A:95:THR:CG2	1:A:96:SER:N	0.47	2.77	37	4
1:A:65:GLN:O	1:A:105:GLY:N	0.47	2.47	11	7
1:A:47:LEU:O	1:A:57:LEU:N	0.47	2.48	2	2
1:A:15:ASN:CB	1:A:20:ALA:O	0.47	2.61	36	2
1:A:29:PRO:HD2	1:A:32:VAL:HB	0.47	1.85	4	9
1:A:105:GLY:O	1:A:106:GLN:C	0.47	2.52	14	3
1:A:3:LEU:HD12	1:A:142:CYS:SG	0.47	2.49	33	1
1:A:98:LEU:N	1:A:98:LEU:HD23	0.47	2.25	10	16
1:A:33:ALA:HB1	1:A:147:THR:HG22	0.47	1.87	8	6
1:A:52:ASN:CG	1:A:94:LEU:CD2	0.47	2.83	32	3
1:A:105:GLY:O	1:A:116:ARG:NH2	0.47	2.47	29	2
1:A:22:VAL:HG23	1:A:22:VAL:O	0.47	2.09	18	1
1:A:11:TYR:OH	1:A:37:ASN:CG	0.47	2.53	26	14
1:A:40:LEU:CD1	1:A:70:ALA:HB3	0.47	2.40	38	1
1:A:48:SER:HA	1:A:58:VAL:HG12	0.47	1.87	5	1
1:A:55:VAL:HG22	1:A:95:THR:OG1	0.47	2.10	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:107:THR:CG2	1:A:111:ASN:CB	0.47	2.93	37	1
1:A:97:ILE:HD13	1:A:158:VAL:CG1	0.47	2.40	31	1
1:A:52:ASN:CB	1:A:55:VAL:HG12	0.47	2.38	7	1
1:A:119:LEU:C	1:A:121:GLY:N	0.46	2.68	36	8
1:A:52:ASN:OD1	1:A:87:LEU:C	0.46	2.54	4	1
1:A:124:VAL:CG1	1:A:135:VAL:HG13	0.46	2.39	8	1
1:A:69:PHE:N	1:A:101:HIS:O	0.46	2.48	30	3
1:A:120:GLN:CD	1:A:120:GLN:O	0.46	2.54	13	3
1:A:56:ASN:CG	1:A:56:ASN:O	0.46	2.53	21	6
1:A:4:VAL:CG1	1:A:143:GLY:O	0.46	2.64	6	3
1:A:111:ASN:C	1:A:113:VAL:N	0.46	2.68	34	20
1:A:139:ASP:N	1:A:139:ASP:OD1	0.46	2.48	21	2
1:A:120:GLN:C	1:A:120:GLN:OE1	0.46	2.54	34	2
1:A:46:ALA:CA	1:A:52:ASN:OD1	0.46	2.63	32	2
1:A:57:LEU:C	1:A:59:ASP:N	0.46	2.67	23	2
1:A:57:LEU:HB3	1:A:61:LEU:HD22	0.46	1.85	29	1
1:A:47:LEU:O	1:A:55:VAL:HG12	0.46	2.11	38	1
1:A:106:GLN:NE2	1:A:151:THR:OG1	0.46	2.49	13	4
1:A:96:SER:O	1:A:100:TYR:HB2	0.46	2.09	37	3
1:A:55:VAL:O	1:A:55:VAL:HG23	0.46	2.10	8	1
1:A:96:SER:HB3	1:A:161:PRO:CG	0.46	2.40	23	4
1:A:44:THR:O	1:A:46:ALA:N	0.46	2.48	16	3
1:A:39:GLU:HB3	1:A:73:ASN:ND2	0.46	2.26	38	1
1:A:37:ASN:OD1	1:A:39:GLU:N	0.46	2.48	24	3
1:A:54:GLN:N	1:A:54:GLN:CD	0.46	2.68	20	1
1:A:139:ASP:OD2	1:A:139:ASP:N	0.46	2.48	35	2
1:A:79:LEU:HD13	1:A:83:THR:HG21	0.46	1.88	10	2
1:A:79:LEU:HD21	1:A:158:VAL:HG13	0.46	1.87	12	2
1:A:55:VAL:HG22	1:A:57:LEU:HD21	0.46	1.87	36	1
1:A:42:THR:HG23	1:A:76:PHE:CD1	0.46	2.45	16	2
1:A:49:GLY:C	1:A:51:LEU:N	0.46	2.69	2	16
1:A:7:GLY:N	1:A:141:VAL:O	0.46	2.48	25	1
1:A:84:ILE:C	1:A:86:GLU:N	0.46	2.69	31	7
1:A:139:ASP:N	1:A:156:ASP:OD2	0.46	2.49	28	2
1:A:100:TYR:CD2	1:A:160:MET:O	0.46	2.68	11	1
1:A:31:ALA:HB2	1:A:61:LEU:CB	0.46	2.41	34	1
1:A:51:LEU:CD1	1:A:88:LYS:HG2	0.46	2.40	16	2
1:A:116:ARG:CB	1:A:124:VAL:HG23	0.46	2.41	11	5
1:A:29:PRO:CB	1:A:62:ASN:ND2	0.46	2.79	4	5
1:A:29:PRO:HD2	1:A:32:VAL:CB	0.46	2.40	30	13
1:A:22:VAL:HA	1:A:145:VAL:CG1	0.46	2.41	11	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:LEU:O	1:A:48:SER:C	0.46	2.54	37	7
1:A:89:THR:O	1:A:90:ASN:C	0.46	2.54	12	3
1:A:52:ASN:HB3	1:A:55:VAL:CG1	0.46	2.39	6	7
1:A:86:GLU:O	1:A:89:THR:N	0.46	2.46	2	9
1:A:47:LEU:HD12	1:A:58:VAL:HG23	0.46	1.88	37	1
1:A:99:THR:CB	1:A:120:GLN:HB2	0.46	2.41	14	5
1:A:102:VAL:CG1	1:A:119:LEU:HD23	0.46	2.40	4	5
1:A:158:VAL:C	1:A:159:LEU:O	0.46	2.54	26	2
1:A:159:LEU:O	1:A:160:MET:CG	0.46	2.64	3	3
1:A:47:LEU:HD12	1:A:58:VAL:HG22	0.46	1.85	37	1
1:A:42:THR:HG22	1:A:76:PHE:CD1	0.46	2.46	10	1
1:A:32:VAL:CG1	1:A:36:ASN:OD1	0.46	2.64	20	1
1:A:12:ALA:O	1:A:15:ASN:N	0.46	2.48	20	4
1:A:26:SER:O	1:A:28:ASP:N	0.46	2.49	28	2
1:A:93:LEU:HD12	1:A:93:LEU:C	0.46	2.32	4	1
1:A:115:THR:HG23	1:A:123:SER:CB	0.46	2.40	29	1
1:A:103:VAL:HG11	1:A:116:ARG:HD3	0.46	1.87	18	1
1:A:35:SER:O	1:A:41:THR:CG2	0.45	2.64	25	1
1:A:67:THR:N	1:A:103:VAL:O	0.45	2.49	22	5
1:A:25:MET:HB2	1:A:33:ALA:CB	0.45	2.39	37	10
1:A:58:VAL:O	1:A:62:ASN:N	0.45	2.44	33	1
1:A:69:PHE:CE2	1:A:103:VAL:HG21	0.45	2.46	3	3
1:A:78:LYS:NZ	1:A:157:SER:OG	0.45	2.49	13	1
1:A:96:SER:O	1:A:100:TYR:CB	0.45	2.64	37	1
1:A:84:ILE:O	1:A:88:LYS:HD2	0.45	2.12	23	3
1:A:103:VAL:HG22	1:A:118:THR:HG22	0.45	1.88	33	2
1:A:20:ALA:CA	1:A:36:ASN:O	0.45	2.64	21	2
1:A:34:ALA:CB	1:A:43:LEU:HD23	0.45	2.42	10	2
1:A:47:LEU:CB	1:A:57:LEU:HD12	0.45	2.42	19	1
1:A:60:THR:C	1:A:62:ASN:N	0.45	2.68	31	9
1:A:21:SER:OG	1:A:24:GLY:N	0.45	2.48	2	4
1:A:89:THR:O	1:A:90:ASN:O	0.45	2.35	15	3
1:A:118:THR:OG1	1:A:122:ALA:O	0.45	2.35	13	5
1:A:107:THR:OG1	1:A:116:ARG:NH2	0.45	2.50	13	3
1:A:35:SER:CB	1:A:44:THR:CG2	0.45	2.95	20	3
1:A:118:THR:HG22	1:A:124:VAL:HG21	0.45	1.88	2	1
1:A:42:THR:HG22	1:A:43:LEU:N	0.45	2.26	1	1
1:A:22:VAL:O	1:A:24:GLY:N	0.45	2.49	16	1
1:A:28:ASP:O	1:A:148:ALA:CB	0.45	2.62	27	1
1:A:79:LEU:HD21	1:A:160:MET:CE	0.45	2.42	25	1
1:A:49:GLY:CA	1:A:55:VAL:O	0.45	2.65	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:138:ALA:CB	1:A:155:ILE:HB	0.45	2.42	10	3
1:A:71:PRO:CA	1:A:155:ILE:CD1	0.45	2.94	12	1
1:A:71:PRO:O	1:A:72:THR:O	0.45	2.34	30	8
1:A:87:LEU:HD23	1:A:87:LEU:N	0.45	2.26	38	7
1:A:62:ASN:O	1:A:62:ASN:OD1	0.45	2.35	6	1
1:A:158:VAL:CG2	1:A:160:MET:HG3	0.45	2.41	3	2
1:A:159:LEU:O	1:A:160:MET:CE	0.45	2.64	3	2
1:A:34:ALA:CA	1:A:40:LEU:HB2	0.45	2.42	11	1
1:A:97:ILE:HG23	1:A:101:HIS:HD2	0.45	1.72	21	1
1:A:107:THR:O	1:A:108:SER:CB	0.45	2.63	19	1
1:A:48:SER:CB	1:A:58:VAL:HG23	0.45	2.41	24	1
1:A:32:VAL:O	1:A:36:ASN:ND2	0.45	2.50	31	3
1:A:29:PRO:C	1:A:31:ALA:N	0.45	2.70	8	3
1:A:28:ASP:CG	1:A:32:VAL:CG1	0.45	2.85	14	5
1:A:8:CYS:SG	1:A:22:VAL:CG2	0.45	3.05	33	1
1:A:86:GLU:O	1:A:90:ASN:CG	0.45	2.55	28	14
1:A:120:GLN:O	1:A:120:GLN:CD	0.45	2.55	25	7
1:A:62:ASN:C	1:A:62:ASN:OD1	0.45	2.55	6	1
1:A:12:ALA:C	1:A:14:ALA:N	0.45	2.70	38	4
1:A:120:GLN:HA	1:A:120:GLN:OE1	0.45	2.10	9	5
1:A:107:THR:CG2	1:A:111:ASN:HB2	0.45	2.42	28	4
1:A:37:ASN:HB3	1:A:40:LEU:CG	0.45	2.42	9	2
1:A:25:MET:CE	1:A:145:VAL:HG11	0.45	2.42	8	2
1:A:25:MET:CE	1:A:145:VAL:CG1	0.45	2.95	19	2
1:A:80:PRO:O	1:A:83:THR:N	0.45	2.48	14	5
1:A:102:VAL:O	1:A:119:LEU:CB	0.45	2.65	13	1
1:A:118:THR:CG2	1:A:124:VAL:HB	0.45	2.42	13	1
1:A:116:ARG:O	1:A:123:SER:HA	0.45	2.11	13	2
1:A:10:GLU:O	1:A:13:ALA:N	0.45	2.50	15	2
1:A:103:VAL:HG13	1:A:118:THR:HA	0.45	1.87	29	1
1:A:15:ASN:CG	1:A:20:ALA:HB3	0.45	2.32	15	1
1:A:90:ASN:O	1:A:94:LEU:CD2	0.45	2.65	2	2
1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:HD23	0.45	2.25	19	4
1:A:101:HIS:O	1:A:102:VAL:HG22	0.45	2.11	23	3
1:A:157:SER:C	1:A:159:LEU:N	0.45	2.70	12	1
1:A:124:VAL:HG13	1:A:124:VAL:O	0.44	2.12	33	2
1:A:99:THR:OG1	1:A:120:GLN:HG2	0.44	2.12	28	5
1:A:75:ALA:O	1:A:158:VAL:CG2	0.44	2.64	28	1
1:A:99:THR:HB	1:A:119:LEU:HD21	0.44	1.88	28	2
1:A:78:LYS:O	1:A:79:LEU:C	0.44	2.56	29	4
1:A:72:THR:OG1	1:A:155:ILE:O	0.44	2.34	16	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:3:LEU:HD22	1:A:22:VAL:HG11	0.44	1.88	25	1
1:A:158:VAL:CG1	1:A:158:VAL:O	0.44	2.65	37	4
1:A:73:ASN:HD22	1:A:74:ALA:N	0.44	2.10	30	1
1:A:11:TYR:O	1:A:12:ALA:C	0.44	2.55	34	4
1:A:101:HIS:NE2	1:A:158:VAL:CA	0.44	2.80	12	2
1:A:79:LEU:HD21	1:A:158:VAL:HG21	0.44	1.88	35	1
1:A:56:ASN:O	1:A:56:ASN:CG	0.44	2.56	8	11
1:A:77:SER:O	1:A:78:LYS:C	0.44	2.55	14	7
1:A:40:LEU:C	1:A:42:THR:N	0.44	2.70	5	7
1:A:67:THR:HG21	1:A:116:ARG:HH22	0.44	1.72	6	1
1:A:105:GLY:O	1:A:106:GLN:CB	0.44	2.66	17	5
1:A:11:TYR:CE1	1:A:154:MET:CE	0.44	3.00	15	1
1:A:49:GLY:O	1:A:52:ASN:C	0.44	2.56	4	1
1:A:76:PHE:HA	1:A:79:LEU:CD2	0.44	2.43	29	2
1:A:76:PHE:HA	1:A:79:LEU:HD23	0.44	1.88	29	2
1:A:35:SER:HB2	1:A:44:THR:CG2	0.44	2.43	10	1
1:A:116:ARG:O	1:A:124:VAL:CG1	0.44	2.65	24	1
1:A:79:LEU:HD23	1:A:79:LEU:N	0.44	2.27	36	1
1:A:120:GLN:C	1:A:120:GLN:CD	0.44	2.75	20	1
1:A:52:ASN:CG	1:A:90:ASN:O	0.44	2.55	2	1
1:A:37:ASN:O	1:A:41:THR:CG2	0.44	2.66	37	2
1:A:37:ASN:CB	1:A:40:LEU:CD1	0.44	2.95	31	1
1:A:3:LEU:HD11	1:A:22:VAL:HG21	0.44	1.90	16	1
1:A:90:ASN:C	1:A:92:SER:N	0.44	2.70	29	2
1:A:23:GLN:CG	1:A:24:GLY:N	0.44	2.81	17	1
1:A:156:ASP:O	1:A:156:ASP:CG	0.44	2.56	14	7
1:A:62:ASN:OD1	1:A:62:ASN:N	0.44	2.50	38	1
1:A:96:SER:OG	1:A:161:PRO:CG	0.44	2.65	13	2
1:A:96:SER:HB2	1:A:161:PRO:CG	0.44	2.43	2	4
1:A:80:PRO:C	1:A:82:SER:N	0.44	2.70	2	1
1:A:55:VAL:CG1	1:A:56:ASN:N	0.44	2.80	1	1
1:A:102:VAL:HB	1:A:119:LEU:HD13	0.44	1.90	16	1
1:A:55:VAL:HG11	1:A:98:LEU:CD1	0.44	2.42	17	2
1:A:20:ALA:O	1:A:21:SER:O	0.44	2.35	19	2
1:A:46:ALA:C	1:A:52:ASN:OD1	0.44	2.56	32	2
1:A:33:ALA:O	1:A:36:ASN:N	0.44	2.42	5	2
1:A:109:PRO:HA	1:A:112:VAL:CG1	0.44	2.43	23	1
1:A:158:VAL:CG2	1:A:160:MET:CE	0.44	2.96	29	1
1:A:6:PRO:O	1:A:9:ALA:N	0.44	2.45	33	5
1:A:29:PRO:HG2	1:A:32:VAL:HG21	0.44	1.89	20	2
1:A:4:VAL:O	1:A:4:VAL:CG1	0.44	2.65	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:33:ALA:C	1:A:35:SER:N	0.44	2.71	9	3
1:A:47:LEU:HB3	1:A:57:LEU:HD12	0.44	1.89	19	1
1:A:124:VAL:O	1:A:126:VAL:N	0.43	2.49	14	3
1:A:39:GLU:O	1:A:72:THR:C	0.43	2.56	26	2
1:A:119:LEU:O	1:A:120:GLN:C	0.43	2.56	33	3
1:A:48:SER:HA	1:A:58:VAL:CG1	0.43	2.43	11	6
1:A:51:LEU:CD1	1:A:88:LYS:HG3	0.43	2.42	17	1
1:A:110:ALA:O	1:A:113:VAL:HG12	0.43	2.13	38	3
1:A:118:THR:C	1:A:120:GLN:N	0.43	2.70	12	5
1:A:87:LEU:C	1:A:89:THR:H	0.43	2.16	9	1
1:A:120:GLN:CG	1:A:120:GLN:O	0.43	2.66	6	1
1:A:51:LEU:CD1	1:A:88:LYS:CG	0.43	2.96	17	2
1:A:15:ASN:O	1:A:21:SER:CB	0.43	2.66	15	1
1:A:149:ASN:O	1:A:150:ALA:HB2	0.43	2.12	11	1
1:A:74:ALA:O	1:A:78:LYS:NZ	0.43	2.50	30	1
1:A:133:LEU:HB3	1:A:140:VAL:CB	0.43	2.42	8	2
1:A:145:VAL:O	1:A:146:SER:C	0.43	2.56	30	6
1:A:127:THR:HG22	1:A:128:GLY:H	0.43	1.72	38	1
1:A:119:LEU:CD1	1:A:119:LEU:C	0.43	2.86	19	1
1:A:35:SER:OG	1:A:35:SER:O	0.43	2.35	32	2
1:A:17:THR:C	1:A:21:SER:OG	0.43	2.57	33	2
1:A:106:GLN:CD	1:A:151:THR:OG1	0.43	2.57	26	3
1:A:99:THR:CB	1:A:119:LEU:HD21	0.43	2.44	28	1
1:A:87:LEU:C	1:A:89:THR:N	0.43	2.72	4	1
1:A:90:ASN:O	1:A:92:SER:N	0.43	2.51	29	2
1:A:51:LEU:HD12	1:A:88:LYS:HG2	0.43	1.89	10	2
1:A:133:LEU:CB	1:A:140:VAL:CB	0.43	2.97	8	2
1:A:10:GLU:O	1:A:11:TYR:C	0.43	2.56	34	13
1:A:135:VAL:HB	1:A:155:ILE:HG21	0.43	1.90	13	1
1:A:32:VAL:C	1:A:34:ALA:N	0.43	2.71	31	2
1:A:51:LEU:HD21	1:A:88:LYS:HE2	0.43	1.89	15	1
1:A:58:VAL:CG1	1:A:59:ASP:N	0.43	2.81	11	2
1:A:26:SER:C	1:A:28:ASP:N	0.43	2.71	19	3
1:A:4:VAL:CG2	1:A:109:PRO:HB2	0.43	2.43	31	1
1:A:3:LEU:HD13	1:A:22:VAL:HG21	0.43	1.91	16	1
1:A:134:LYS:CE	1:A:138:ALA:O	0.43	2.66	35	1
1:A:151:THR:CG2	1:A:153:TYR:CE1	0.43	3.01	35	1
1:A:145:VAL:HB	1:A:152:VAL:CG1	0.43	2.43	11	5
1:A:49:GLY:O	1:A:52:ASN:O	0.43	2.35	34	3
1:A:65:GLN:HA	1:A:149:ASN:O	0.43	2.14	34	3
1:A:70:ALA:N	1:A:155:ILE:CD1	0.43	2.81	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:4:VAL:HG23	1:A:4:VAL:O	0.43	2.13	20	1
1:A:46:ALA:HB1	1:A:94:LEU:CD1	0.43	2.43	33	1
1:A:35:SER:O	1:A:35:SER:OG	0.43	2.37	17	1
1:A:57:LEU:HD11	1:A:99:THR:CG2	0.43	2.43	28	1
1:A:101:HIS:CE1	1:A:159:LEU:H	0.43	2.31	30	3
1:A:90:ASN:O	1:A:91:SER:OG	0.43	2.35	37	1
1:A:16:PRO:C	1:A:17:THR:HG23	0.43	2.34	26	1
1:A:116:ARG:CB	1:A:124:VAL:HG13	0.43	2.43	34	4
1:A:3:LEU:CD2	1:A:3:LEU:N	0.43	2.82	4	1
1:A:28:ASP:HB3	1:A:32:VAL:CG1	0.43	2.44	14	7
1:A:139:ASP:OD2	1:A:156:ASP:CG	0.43	2.57	14	1
1:A:44:THR:C	1:A:46:ALA:N	0.43	2.72	17	2
1:A:57:LEU:O	1:A:60:THR:HB	0.43	2.14	17	1
1:A:112:VAL:O	1:A:113:VAL:C	0.43	2.56	18	4
1:A:116:ARG:NE	1:A:117:GLN:N	0.43	2.67	2	1
1:A:80:PRO:O	1:A:82:SER:N	0.43	2.52	2	1
1:A:86:GLU:C	1:A:90:ASN:ND2	0.43	2.72	1	1
1:A:28:ASP:OD2	1:A:32:VAL:HG12	0.43	2.12	34	2
1:A:84:ILE:O	1:A:85:ASP:C	0.43	2.56	23	2
1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD13	0.43	1.74	35	1
1:A:56:ASN:OD1	1:A:56:ASN:O	0.43	2.36	6	2
1:A:158:VAL:CG2	1:A:160:MET:HG2	0.43	2.44	3	1
1:A:86:GLU:O	1:A:90:ASN:OD1	0.43	2.36	11	5
1:A:28:ASP:OD2	1:A:36:ASN:OD1	0.43	2.37	4	1
1:A:35:SER:HA	1:A:44:THR:CB	0.43	2.43	20	2
1:A:42:THR:HG22	1:A:76:PHE:CD2	0.43	2.49	29	1
1:A:33:ALA:HB3	1:A:147:THR:HG21	0.42	1.91	2	3
1:A:119:LEU:CD2	1:A:120:GLN:N	0.42	2.69	27	4
1:A:49:GLY:HA2	1:A:55:VAL:HG23	0.42	1.92	2	1
1:A:62:ASN:OD1	1:A:62:ASN:C	0.42	2.58	5	3
1:A:9:ALA:O	1:A:10:GLU:C	0.42	2.57	5	2
1:A:19:PRO:O	1:A:21:SER:N	0.42	2.50	26	2
1:A:61:LEU:O	1:A:66:TYR:CD2	0.42	2.73	17	1
1:A:151:THR:CG2	1:A:152:VAL:N	0.42	2.82	2	2
1:A:139:ASP:O	1:A:141:VAL:N	0.42	2.52	30	3
1:A:126:VAL:O	1:A:127:THR:HG22	0.42	2.14	24	5
1:A:90:ASN:C	1:A:91:SER:OG	0.42	2.58	37	2
1:A:118:THR:O	1:A:120:GLN:N	0.42	2.52	1	2
1:A:16:PRO:O	1:A:17:THR:CG2	0.42	2.67	26	1
1:A:26:SER:O	1:A:28:ASP:O	0.42	2.37	19	2
1:A:57:LEU:HD11	1:A:98:LEU:HB2	0.42	1.92	26	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:ALA:CB	1:A:36:ASN:O	0.42	2.67	21	1
1:A:51:LEU:O	1:A:88:LYS:CG	0.42	2.67	30	1
1:A:49:GLY:O	1:A:50:GLN:C	0.42	2.57	1	10
1:A:40:LEU:O	1:A:44:THR:OG1	0.42	2.37	6	1
1:A:31:ALA:CB	1:A:58:VAL:HG13	0.42	2.44	3	1
1:A:34:ALA:O	1:A:36:ASN:N	0.42	2.53	38	1
1:A:34:ALA:C	1:A:36:ASN:N	0.42	2.70	38	3
1:A:12:ALA:O	1:A:14:ALA:N	0.42	2.53	38	1
1:A:34:ALA:CB	1:A:40:LEU:HB2	0.42	2.43	21	2
1:A:39:GLU:C	1:A:40:LEU:HD22	0.42	2.35	5	1
1:A:78:LYS:O	1:A:79:LEU:O	0.42	2.38	12	1
1:A:80:PRO:O	1:A:81:ALA:C	0.42	2.57	31	7
1:A:57:LEU:O	1:A:61:LEU:CD2	0.42	2.64	9	1
1:A:37:ASN:HB3	1:A:40:LEU:HG	0.42	1.90	23	1
1:A:102:VAL:HB	1:A:119:LEU:HD22	0.42	1.90	16	1
1:A:18:GLY:O	1:A:21:SER:OG	0.42	2.37	16	1
1:A:44:THR:HA	1:A:47:LEU:CG	0.42	2.45	21	5
1:A:159:LEU:O	1:A:160:MET:HG2	0.42	2.15	17	2
1:A:52:ASN:OD1	1:A:90:ASN:O	0.42	2.38	13	3
1:A:61:LEU:H	1:A:61:LEU:HD22	0.42	1.73	9	1
1:A:61:LEU:HD12	1:A:102:VAL:HG21	0.42	1.90	9	1
1:A:51:LEU:HG	1:A:88:LYS:CG	0.42	2.45	21	1
1:A:25:MET:O	1:A:28:ASP:O	0.42	2.38	19	1
1:A:29:PRO:HB2	1:A:62:ASN:ND2	0.42	2.29	12	1
1:A:81:ALA:O	1:A:82:SER:C	0.42	2.58	15	3
1:A:99:THR:CB	1:A:120:GLN:HG2	0.42	2.44	31	1
1:A:113:VAL:CG1	1:A:114:GLY:N	0.42	2.82	32	1
1:A:51:LEU:CD2	1:A:88:LYS:HG3	0.42	2.45	23	2
1:A:42:THR:HG23	1:A:43:LEU:N	0.42	2.30	16	1
1:A:7:GLY:O	1:A:10:GLU:N	0.42	2.53	31	2
1:A:29:PRO:HD2	1:A:32:VAL:HG21	0.42	1.92	5	2
1:A:19:PRO:O	1:A:24:GLY:C	0.42	2.58	8	2
1:A:121:GLY:O	1:A:122:ALA:C	0.42	2.57	23	1
1:A:22:VAL:C	1:A:24:GLY:N	0.42	2.70	16	1
1:A:139:ASP:OD2	1:A:156:ASP:OD1	0.42	2.38	25	2
1:A:52:ASN:OD1	1:A:91:SER:CB	0.42	2.68	17	1
1:A:85:ASP:HA	1:A:88:LYS:CD	0.42	2.45	4	1
1:A:31:ALA:CB	1:A:58:VAL:HA	0.41	2.45	18	4
1:A:105:GLY:O	1:A:106:GLN:HB2	0.41	2.15	17	1
1:A:100:TYR:CD1	1:A:100:TYR:O	0.41	2.73	2	1
1:A:137:ASN:O	1:A:138:ALA:O	0.41	2.38	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:127:THR:O	1:A:134:LYS:O	0.41	2.38	27	2
1:A:57:LEU:CB	1:A:61:LEU:HD22	0.41	2.45	29	1
1:A:61:LEU:CD1	1:A:61:LEU:N	0.41	2.83	20	1
1:A:52:ASN:C	1:A:54:GLN:H	0.41	2.19	3	5
1:A:68:VAL:N	1:A:151:THR:O	0.41	2.54	23	3
1:A:127:THR:HG22	1:A:128:GLY:N	0.41	2.31	38	1
1:A:32:VAL:O	1:A:34:ALA:N	0.41	2.53	2	1
1:A:101:HIS:CE1	1:A:159:LEU:HG	0.41	2.50	31	1
1:A:55:VAL:O	1:A:55:VAL:CG2	0.41	2.67	8	1
1:A:156:ASP:C	1:A:157:SER:OG	0.41	2.59	29	1
1:A:97:ILE:HD11	1:A:160:MET:HE2	0.41	1.91	36	1
1:A:36:ASN:N	1:A:36:ASN:ND2	0.41	2.68	33	1
1:A:57:LEU:HB2	1:A:61:LEU:CD2	0.41	2.44	9	1
1:A:43:LEU:HA	1:A:76:PHE:CZ	0.41	2.51	35	2
1:A:22:VAL:HB	1:A:145:VAL:CG1	0.41	2.44	21	1
1:A:55:VAL:CG2	1:A:91:SER:HA	0.41	2.45	33	1
1:A:34:ALA:HB3	1:A:44:THR:CG2	0.41	2.46	15	1
1:A:107:THR:HG22	1:A:111:ASN:HB2	0.41	1.92	15	1
1:A:95:THR:HG23	1:A:96:SER:N	0.41	2.30	37	1
1:A:11:TYR:OH	1:A:20:ALA:O	0.41	2.38	34	3
1:A:136:GLY:O	1:A:137:ASN:C	0.41	2.59	31	1
1:A:112:VAL:O	1:A:113:VAL:O	0.41	2.38	32	1
1:A:6:PRO:C	1:A:8:CYS:N	0.41	2.74	5	1
1:A:76:PHE:C	1:A:78:LYS:N	0.41	2.73	19	1
1:A:133:LEU:CD1	1:A:133:LEU:N	0.41	2.83	10	1
1:A:62:ASN:OD1	1:A:62:ASN:O	0.41	2.38	24	1
1:A:100:TYR:CD2	1:A:159:LEU:HB3	0.41	2.51	36	2
1:A:67:THR:CG2	1:A:153:TYR:CE1	0.41	3.03	35	1
1:A:159:LEU:O	1:A:160:MET:SD	0.41	2.77	11	1
1:A:10:GLU:O	1:A:14:ALA:N	0.41	2.50	28	1
1:A:12:ALA:O	1:A:15:ASN:C	0.41	2.59	34	1
1:A:45:ALA:O	1:A:50:GLN:N	0.41	2.54	22	1
1:A:116:ARG:HB3	1:A:124:VAL:CG1	0.41	2.46	4	1
1:A:30:VAL:CG1	1:A:150:ALA:CB	0.41	2.97	27	1
1:A:126:VAL:C	1:A:127:THR:OG1	0.41	2.59	26	1
1:A:157:SER:O	1:A:159:LEU:N	0.41	2.53	30	1
1:A:125:THR:O	1:A:136:GLY:N	0.41	2.49	6	1
1:A:71:PRO:HG3	1:A:101:HIS:NE2	0.41	2.31	3	1
1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:OD1	0.41	2.54	11	1
1:A:66:TYR:HA	1:A:103:VAL:O	0.41	2.16	24	2
1:A:26:SER:O	1:A:27:GLN:C	0.41	2.58	28	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:79:LEU:HD11	1:A:158:VAL:HG21	0.41	1.92	23	2
1:A:118:THR:O	1:A:119:LEU:C	0.41	2.59	1	2
1:A:66:TYR:HB2	1:A:150:ALA:CB	0.41	2.45	10	2
1:A:133:LEU:HB3	1:A:140:VAL:CG2	0.41	2.45	8	1
1:A:106:GLN:O	1:A:107:THR:OG1	0.41	2.37	24	1
1:A:156:ASP:O	1:A:156:ASP:OD1	0.41	2.39	38	1
1:A:43:LEU:HG	1:A:47:LEU:CD2	0.41	2.42	28	3
1:A:35:SER:OG	1:A:44:THR:CG2	0.41	2.66	1	1
1:A:64:GLY:O	1:A:65:GLN:C	0.41	2.58	9	1
1:A:86:GLU:HA	1:A:89:THR:HG22	0.41	1.93	30	1
1:A:126:VAL:HG12	1:A:127:THR:N	0.41	2.30	29	1
1:A:47:LEU:HD13	1:A:61:LEU:HD11	0.41	1.93	34	1
1:A:100:TYR:OH	1:A:123:SER:O	0.41	2.32	23	1
1:A:30:VAL:CG2	1:A:150:ALA:HB3	0.41	2.46	19	2
1:A:30:VAL:HG13	1:A:61:LEU:HB3	0.41	1.91	12	1
1:A:103:VAL:HG22	1:A:118:THR:CB	0.41	2.46	29	1
1:A:156:ASP:OD1	1:A:156:ASP:O	0.41	2.38	35	1
1:A:43:LEU:HD11	1:A:47:LEU:CD2	0.41	2.46	14	1
1:A:6:PRO:O	1:A:7:GLY:C	0.41	2.58	38	3
1:A:12:ALA:O	1:A:13:ALA:C	0.41	2.59	34	2
1:A:97:ILE:O	1:A:98:LEU:C	0.41	2.58	9	1
1:A:99:THR:O	1:A:119:LEU:HB3	0.41	2.15	26	1
1:A:91:SER:OG	1:A:91:SER:O	0.41	2.37	12	1
1:A:86:GLU:O	1:A:90:ASN:ND2	0.41	2.54	18	1
1:A:57:LEU:CD2	1:A:98:LEU:HB2	0.41	2.46	35	1
1:A:160:MET:O	1:A:162:PRO:HD3	0.41	2.16	20	1
1:A:7:GLY:CA	1:A:141:VAL:HG12	0.41	2.40	25	1
1:A:70:ALA:N	1:A:155:ILE:HD13	0.41	2.31	11	1
1:A:139:ASP:OD1	1:A:156:ASP:OD1	0.41	2.39	22	1
1:A:19:PRO:O	1:A:24:GLY:O	0.41	2.38	8	1
1:A:17:THR:O	1:A:21:SER:OG	0.41	2.39	26	1
1:A:54:GLN:HB3	1:A:91:SER:CB	0.41	2.46	19	1
1:A:37:ASN:HB2	1:A:40:LEU:HG	0.41	1.93	30	1
1:A:11:TYR:CZ	1:A:37:ASN:ND2	0.40	2.90	6	1
1:A:79:LEU:HD11	1:A:158:VAL:HG11	0.40	1.92	16	1
1:A:106:GLN:OE1	1:A:151:THR:OG1	0.40	2.39	21	1
1:A:122:ALA:HB2	1:A:162:PRO:HD2	0.40	1.93	38	1
1:A:143:GLY:HA3	1:A:153:TYR:CD1	0.40	2.51	31	1
1:A:31:ALA:C	1:A:33:ALA:N	0.40	2.73	1	1
1:A:29:PRO:HB3	1:A:62:ASN:ND2	0.40	2.31	4	1
1:A:4:VAL:HG22	1:A:5:GLY:H	0.40	1.75	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:120:GLN:OE1	1:A:120:GLN:C	0.40	2.59	10	1
1:A:39:GLU:CD	1:A:73:ASN:OD1	0.40	2.59	30	1
1:A:46:ALA:CB	1:A:94:LEU:HD11	0.40	2.43	20	1
1:A:8:CYS:O	1:A:9:ALA:C	0.40	2.59	6	1
1:A:30:VAL:CG2	1:A:31:ALA:H	0.40	2.28	38	1
1:A:30:VAL:HG11	1:A:150:ALA:CB	0.40	2.47	27	2
1:A:108:SER:O	1:A:112:VAL:HB	0.40	2.16	34	1
1:A:40:LEU:HB3	1:A:43:LEU:CD2	0.40	2.47	24	2
1:A:67:THR:OG1	1:A:105:GLY:O	0.40	2.38	27	1
1:A:61:LEU:HD23	1:A:61:LEU:N	0.40	2.30	21	1
1:A:90:ASN:O	1:A:91:SER:C	0.40	2.60	29	1
1:A:35:SER:N	1:A:44:THR:OG1	0.40	2.54	20	1
1:A:135:VAL:HG23	1:A:140:VAL:CG2	0.40	2.47	16	1
1:A:119:LEU:HD23	1:A:120:GLN:CA	0.40	2.46	27	1
1:A:20:ALA:O	1:A:21:SER:C	0.40	2.60	21	1
1:A:44:THR:O	1:A:47:LEU:N	0.40	2.55	10	1
1:A:46:ALA:O	1:A:52:ASN:OD1	0.40	2.39	18	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	156/163 (96%)	103±5 (66±3%)	41±4 (26±3%)	13±3 (8±2%)	2	14
All	All	5928/6194 (96%)	3902 (66%)	1546 (26%)	480 (8%)	2	14

All 51 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	31	ALA	38
1	A	30	VAL	37
1	A	159	LEU	33
1	A	6	PRO	30
1	A	137	ASN	24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	58	VAL	24
1	A	32	VAL	21
1	A	89	THR	19
1	A	72	THR	19
1	A	3	LEU	15
1	A	16	PRO	14
1	A	147	THR	13
1	A	41	THR	12
1	A	160	MET	11
1	A	112	VAL	11
1	A	140	VAL	10
1	A	158	VAL	10
1	A	136	GLY	10
1	A	138	ALA	10
1	A	91	SER	9
1	A	21	SER	8
1	A	61	LEU	8
1	A	18	GLY	7
1	A	36	ASN	7
1	A	120	GLN	7
1	A	56	ASN	6
1	A	145	VAL	6
1	A	90	ASN	6
1	A	50	GLN	6
1	A	106	GLN	5
1	A	93	LEU	4
1	A	9	ALA	4
1	A	122	ALA	4
1	A	113	VAL	3
1	A	63	SER	3
1	A	85	ASP	2
1	A	65	GLN	2
1	A	33	ALA	2
1	A	45	ALA	2
1	A	78	LYS	2
1	A	27	GLN	2
1	A	22	VAL	2
1	A	102	VAL	2
1	A	135	VAL	2
1	A	23	GLN	2
1	A	105	GLY	1
1	A	108	SER	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	20	ALA	1
1	A	133	LEU	1
1	A	125	THR	1
1	A	149	ASN	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	123/127 (97%)	92±3 (75±2%)	31±3 (25±2%)	3	26
All	All	4674/4826 (97%)	3506 (75%)	1168 (25%)	3	26

All 82 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	83	THR	38
1	A	47	LEU	38
1	A	8	CYS	38
1	A	149	ASN	38
1	A	93	LEU	37
1	A	52	ASN	37
1	A	94	LEU	37
1	A	51	LEU	36
1	A	43	LEU	35
1	A	106	GLN	34
1	A	119	LEU	29
1	A	102	VAL	29
1	A	96	SER	28
1	A	98	LEU	28
1	A	116	ARG	26
1	A	157	SER	26
1	A	112	VAL	23
1	A	155	ILE	21
1	A	85	ASP	21
1	A	73	ASN	21
1	A	127	THR	21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	92	SER	20
1	A	10	GLU	20
1	A	41	THR	18
1	A	154	MET	17
1	A	120	GLN	16
1	A	37	ASN	16
1	A	77	SER	15
1	A	35	SER	15
1	A	86	GLU	15
1	A	134	LYS	15
1	A	82	SER	15
1	A	59	ASP	14
1	A	39	GLU	14
1	A	61	LEU	13
1	A	57	LEU	13
1	A	65	GLN	13
1	A	44	THR	13
1	A	147	THR	11
1	A	97	ILE	11
1	A	91	SER	11
1	A	26	SER	11
1	A	139	ASP	10
1	A	40	LEU	10
1	A	160	MET	10
1	A	123	SER	9
1	A	48	SER	9
1	A	124	VAL	9
1	A	28	ASP	9
1	A	23	GLN	9
1	A	56	ASN	8
1	A	58	VAL	8
1	A	137	ASN	8
1	A	3	LEU	8
1	A	55	VAL	8
1	A	95	THR	7
1	A	108	SER	7
1	A	159	LEU	7
1	A	158	VAL	7
1	A	63	SER	7
1	A	152	VAL	7
1	A	135	VAL	6
1	A	21	SER	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	88	LYS	6
1	A	4	VAL	6
1	A	99	THR	4
1	A	79	LEU	4
1	A	78	LYS	4
1	A	115	THR	4
1	A	133	LEU	3
1	A	42	THR	3
1	A	145	VAL	3
1	A	62	ASN	3
1	A	156	ASP	2
1	A	50	GLN	2
1	A	36	ASN	2
1	A	89	THR	1
1	A	146	SER	1
1	A	100	TYR	1
1	A	54	GLN	1
1	A	30	VAL	1
1	A	90	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 ⓘ

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided