



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 05:25 PM BST

PDB ID : 1TR4  
Title : Solution structure of human oncogenic protein gankyrin  
Authors : Yuan, C.; Li, J.; Mahajan, A.; Poi, M.J.; Byeon, I.J.; Tsai, M.D.  
Deposited on : 2004-06-19

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

---

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

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)  
NmrClust : Kelley et al. (1996)  
MolProbity : 4.02b-467  
Mogul : unknown  
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)  
RCI : v\_1n\_11\_5\_13\_A (Berjanski et al., 2005)  
PANAV : Wang et al. (2010)  
ShiftChecker : rb-20027457  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : rb-20027457

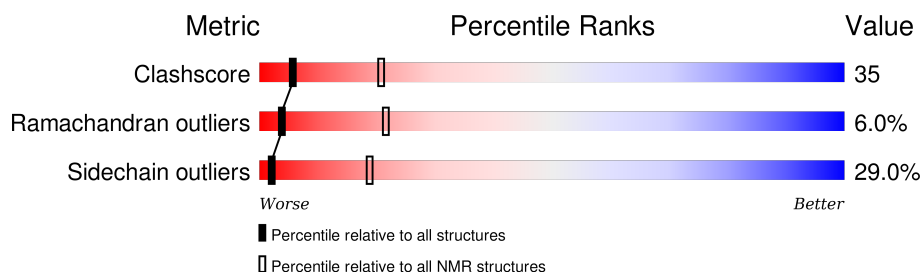
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	226	<div> <div>30%</div> <div>62%</div> <div>5% •</div> </div>

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:8-A:226 (219)	0.49	1

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

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

The models can be grouped into 4 clusters and 7 single-model clusters were found.

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

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

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3427 atoms, of which 1717 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10.

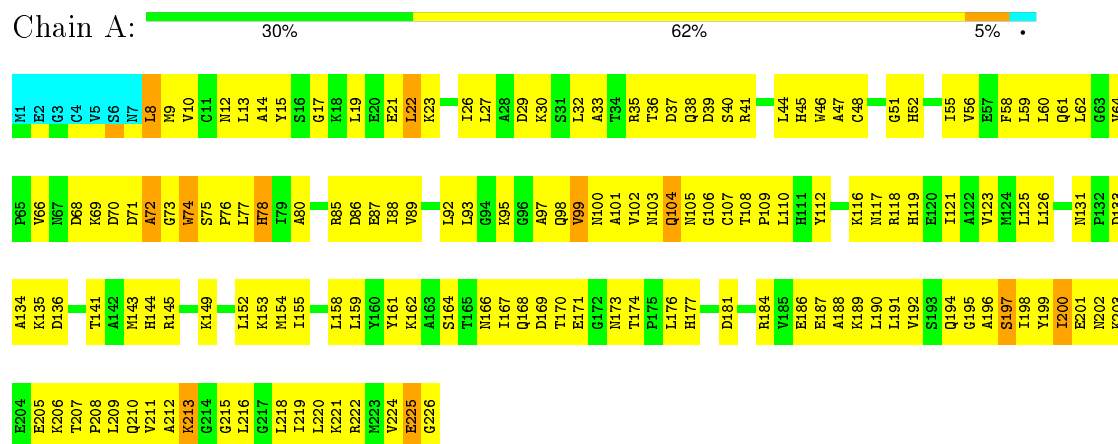
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	226	Total	C	H	N	O	S	0
			3427	1063	1717	302	334	11	

## 4 Residue-property plots

### 4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10

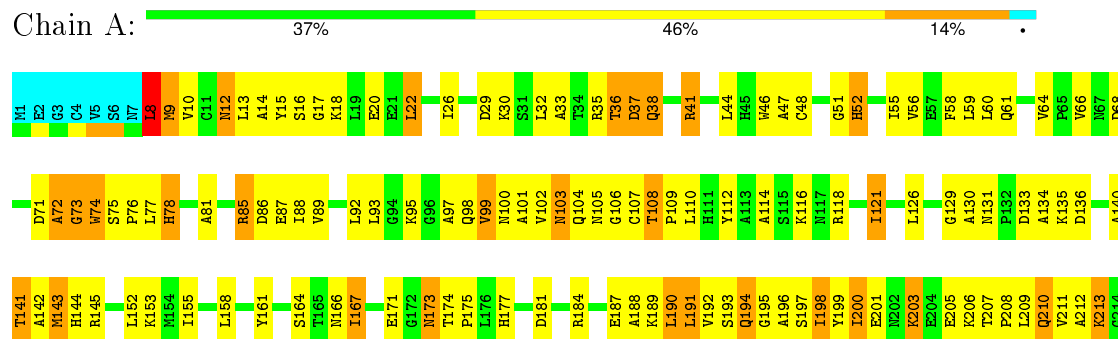


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

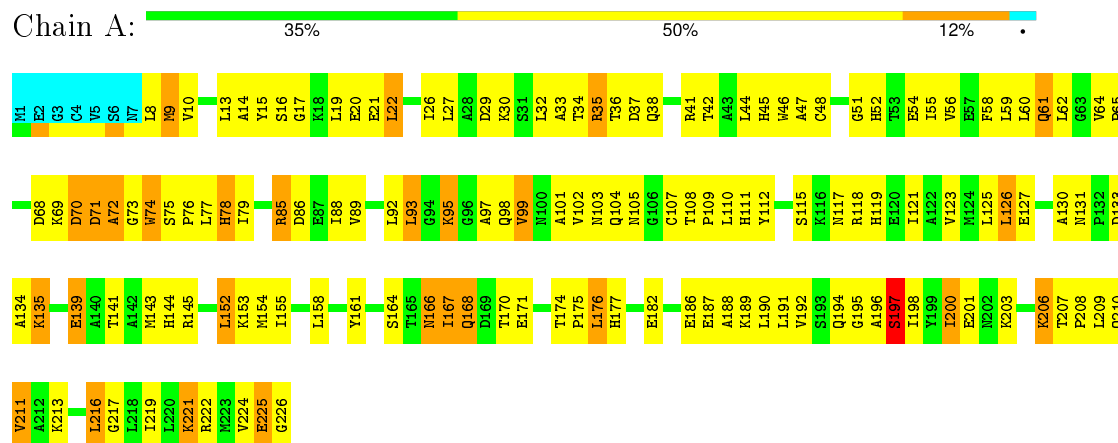
#### 4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10



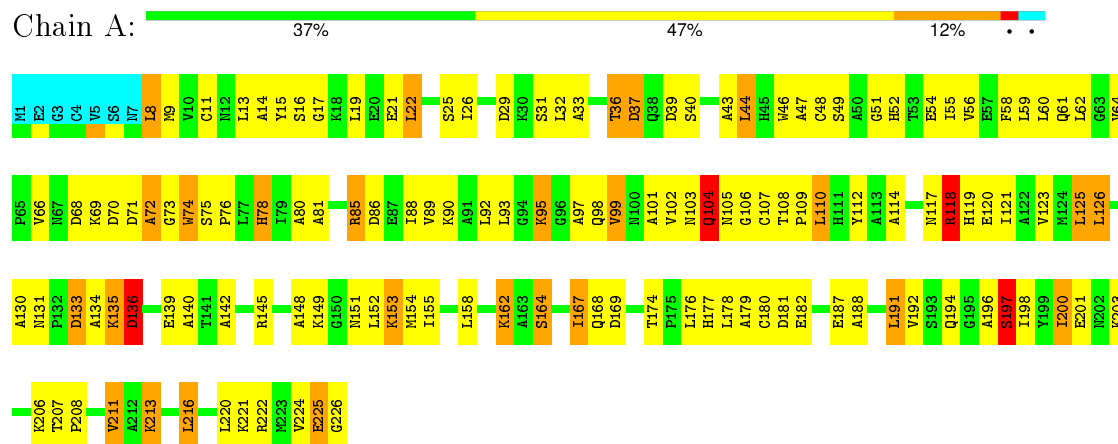
#### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10



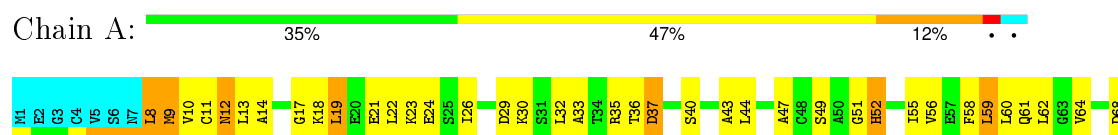
### 4.2.3 Score per residue for model 3

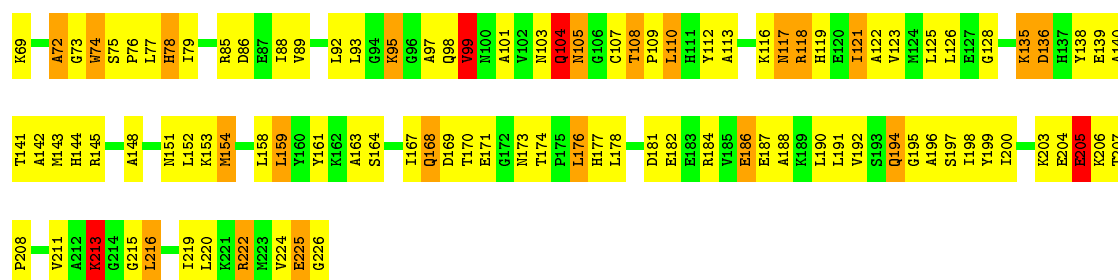
- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10



#### 4.2.4 Score per residue for model 4

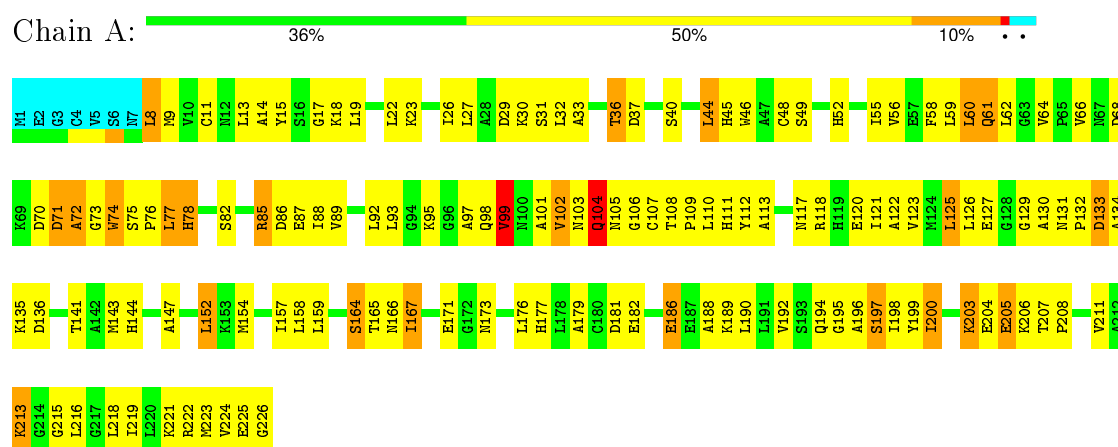
- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10





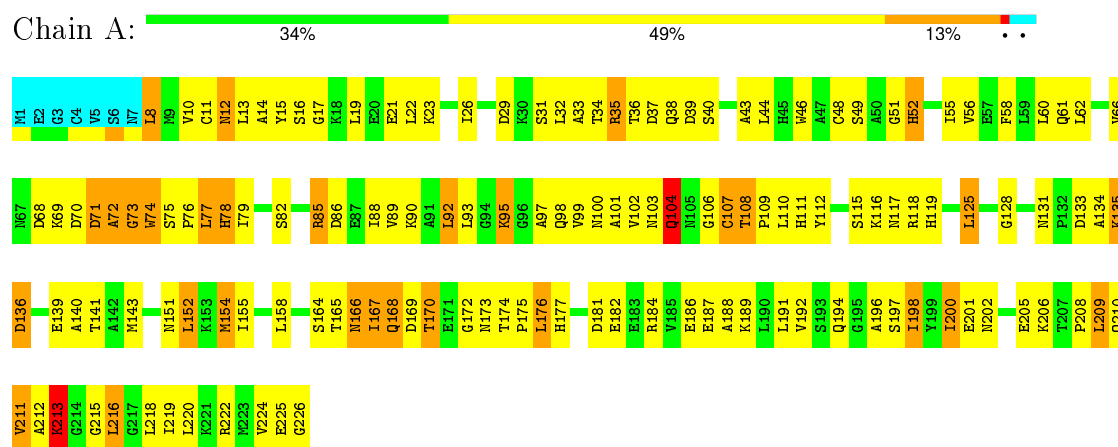
#### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10



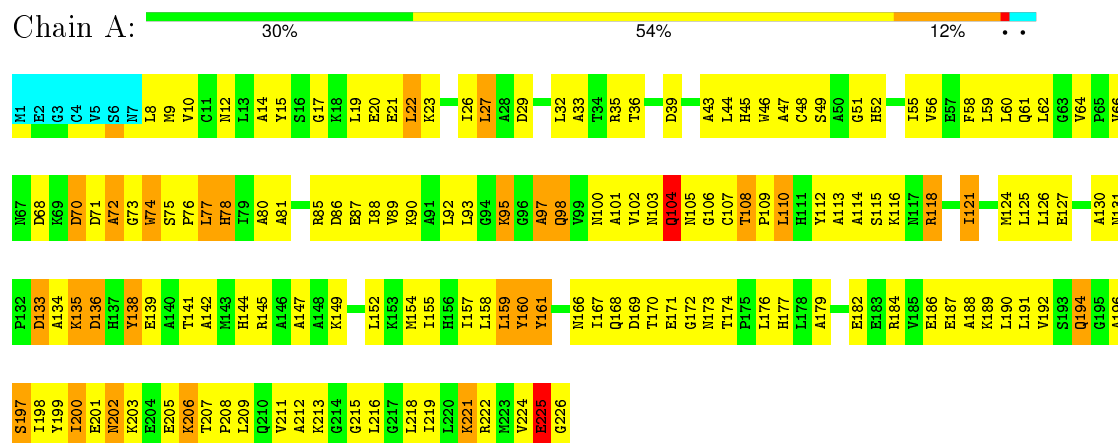
#### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10



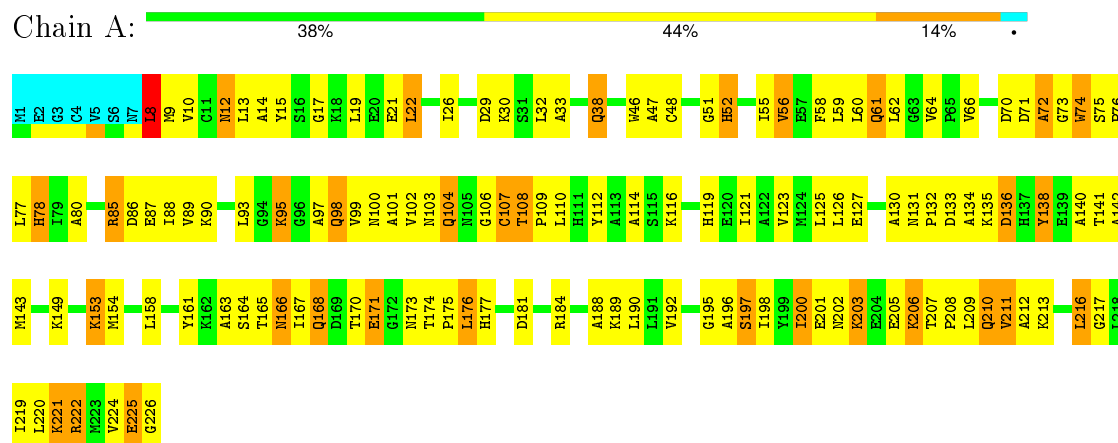
### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10



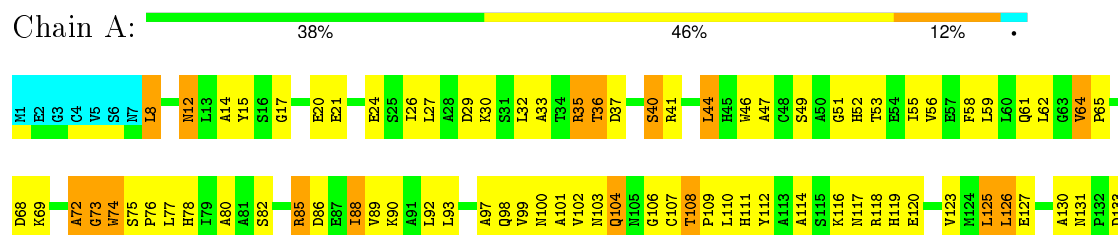
### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10

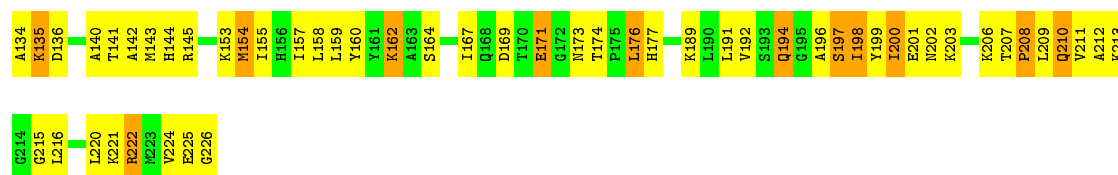


### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10

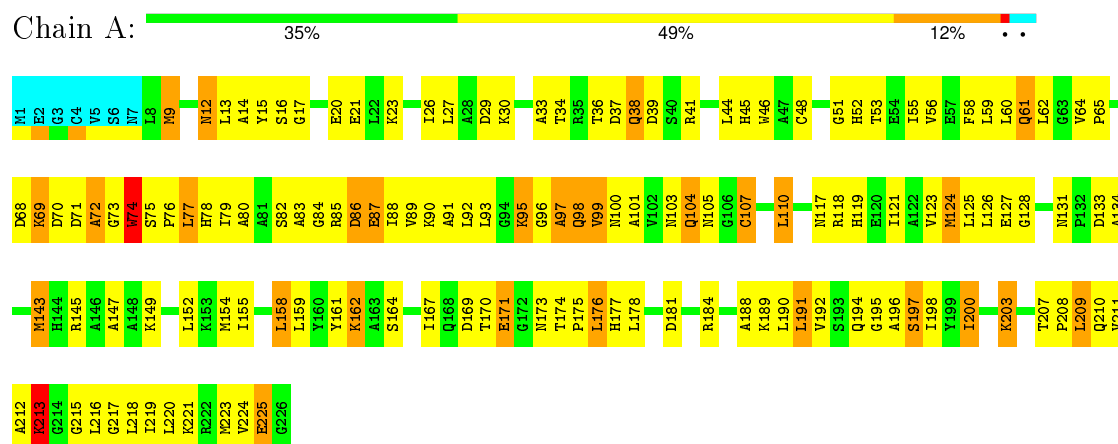






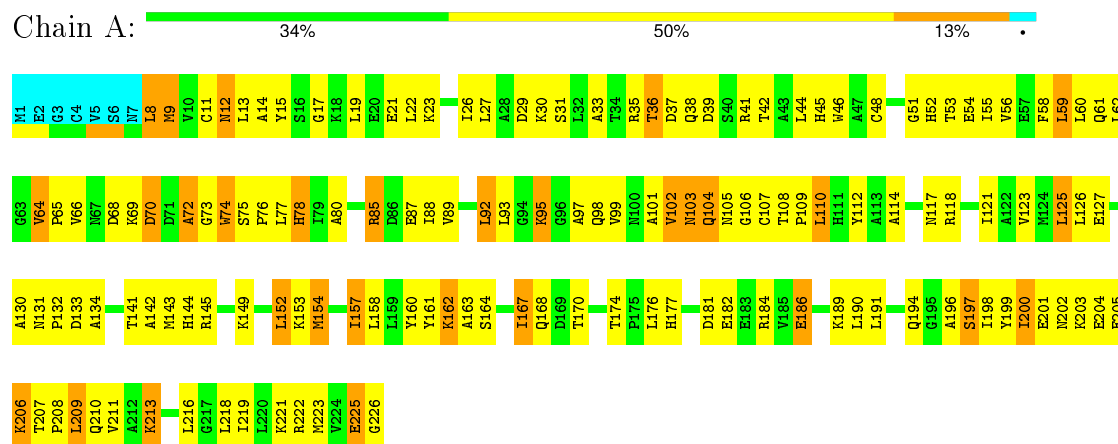
#### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10



#### 4.2.11 Score per residue for model 11

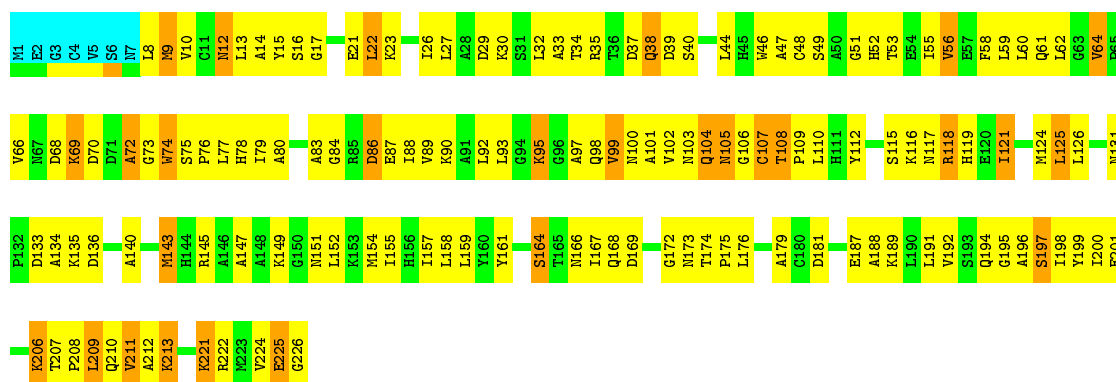
- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10



#### 4.2.12 Score per residue for model 12

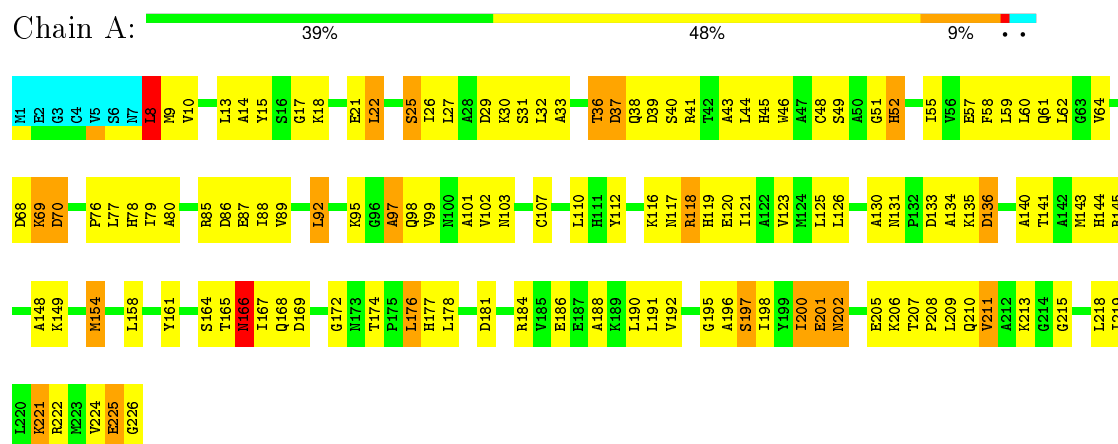
- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10





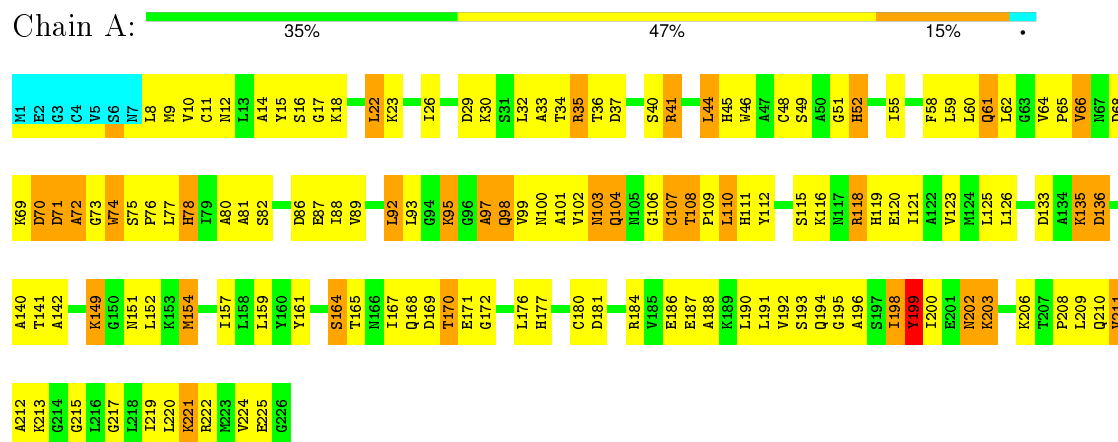
#### 4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10



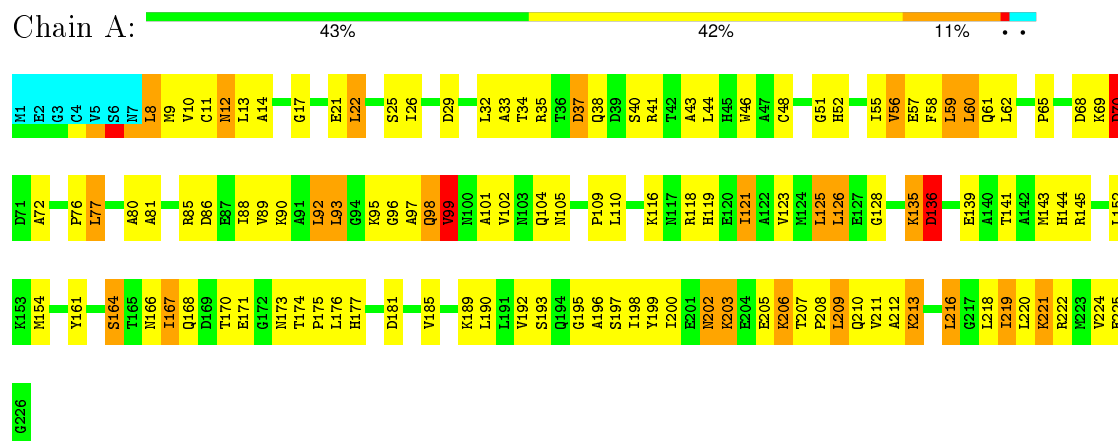
#### 4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10



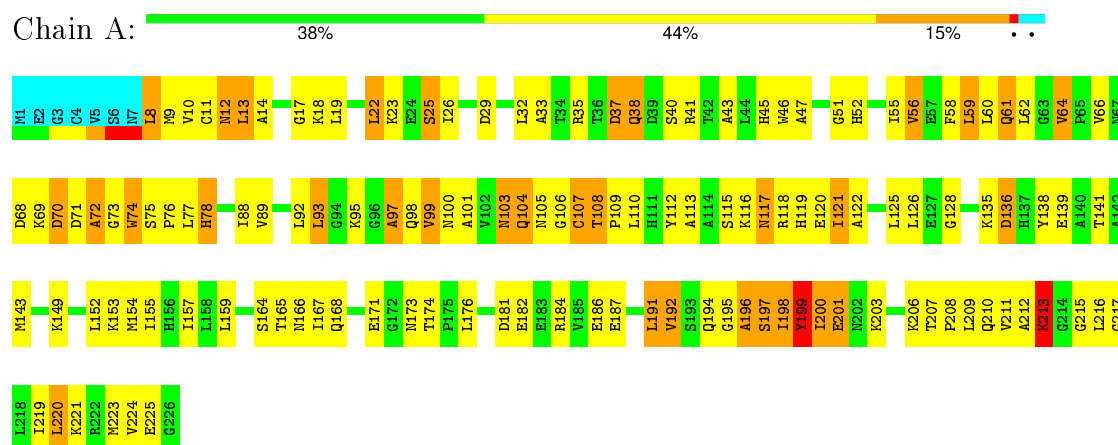
### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10



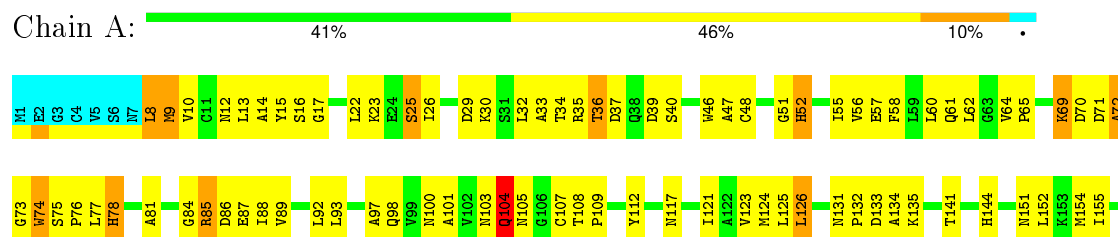
### 4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10



### 4.2.17 Score per residue for model 17

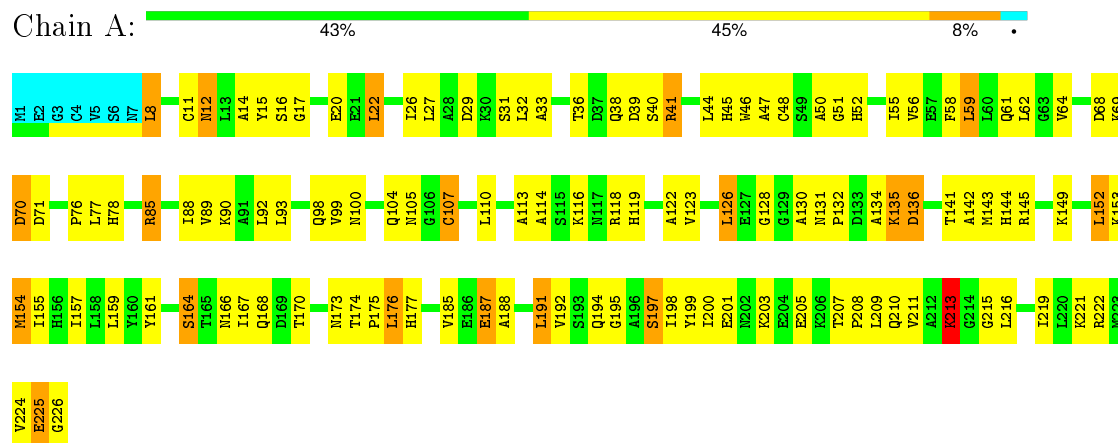
- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10





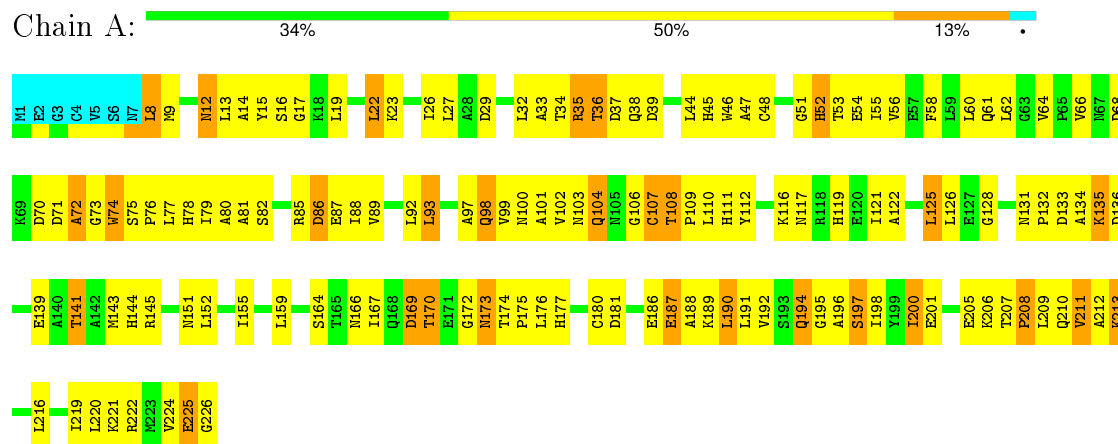
#### 4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10



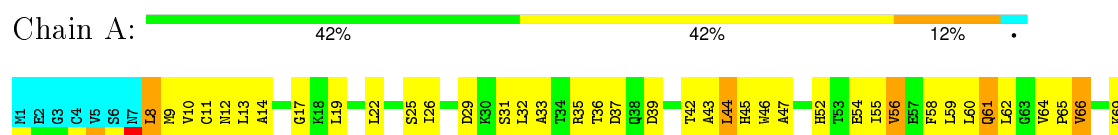
#### 4.2.19 Score per residue for model 19

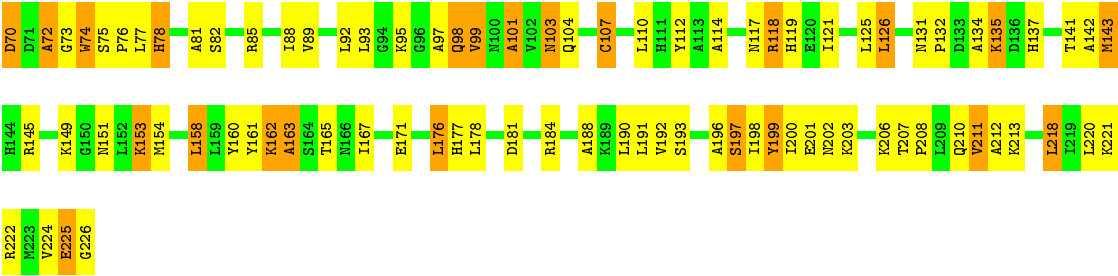
- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10



#### 4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10





## 5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

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

Of the 80 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the least restraint violations, structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
CNS	structure solution	1.0
CNS	refinement	1.0

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

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	1662	1672	1668	117±15
All	All	33240	33440	33360	2334

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 35.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:152:LEU:HD13	1:A:155:ILE:HD11	1.02	1.13	7	1
1:A:110:LEU:HD11	1:A:130:ALA:HB1	1.02	1.25	1	3
1:A:77:LEU:HD21	1:A:125:LEU:HD11	1.01	1.27	19	1
1:A:89:VAL:HG21	1:A:121:ILE:HG23	1.01	1.29	10	3
1:A:141:THR:HG21	1:A:167:ILE:HD13	0.93	1.39	14	6
1:A:77:LEU:HD11	1:A:89:VAL:HG13	0.91	1.42	7	1
1:A:174:THR:HG21	1:A:200:ILE:HG21	0.90	1.42	9	14
1:A:110:LEU:HD22	1:A:111:HIS:N	0.90	1.82	14	1
1:A:212:ALA:HB1	1:A:216:LEU:HD11	0.90	1.42	7	1
1:A:110:LEU:HD13	1:A:126:LEU:HD21	0.89	1.39	5	1
1:A:126:LEU:HD22	1:A:161:TYR:CG	0.88	2.02	20	2
1:A:209:LEU:HD22	1:A:210:GLN:N	0.87	1.84	17	1
1:A:200:ILE:O	1:A:207:THR:HG22	0.86	1.71	16	1
1:A:74:TRP:CD1	1:A:103:ASN:CB	0.86	2.58	11	16

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:ALA:HB2	1:A:43:ALA:HB1	0.86	1.47	4	8
1:A:176:LEU:HD21	1:A:196:ALA:HB1	0.86	1.47	19	2
1:A:126:LEU:HD13	1:A:161:TYR:CD2	0.85	2.07	12	4
1:A:114:ALA:HB2	1:A:142:ALA:HB1	0.84	1.48	11	7
1:A:131:ASN:CB	1:A:134:ALA:HB2	0.84	2.02	20	11
1:A:26:ILE:HG23	1:A:33:ALA:HB2	0.84	1.50	3	20
1:A:10:VAL:CG2	1:A:32:LEU:HD22	0.84	2.03	6	2
1:A:14:ALA:CB	1:A:43:ALA:HB1	0.84	2.02	4	6
1:A:36:THR:HG22	1:A:41:ARG:O	0.83	1.73	1	5
1:A:126:LEU:HD22	1:A:161:TYR:CD1	0.83	2.06	11	1
1:A:52:HIS:O	1:A:56:VAL:HG23	0.83	1.72	3	6
1:A:176:LEU:HD22	1:A:177:HIS:N	0.83	1.88	9	1
1:A:74:TRP:CD1	1:A:74:TRP:N	0.82	2.46	4	9
1:A:52:HIS:HB3	1:A:55:ILE:HD12	0.82	1.52	6	8
1:A:176:LEU:HD12	1:A:177:HIS:N	0.82	1.89	14	2
1:A:59:LEU:CD1	1:A:64:VAL:HG21	0.82	2.04	20	1
1:A:141:THR:HG21	1:A:167:ILE:HD12	0.82	1.49	6	3
1:A:74:TRP:N	1:A:74:TRP:CD1	0.81	2.48	8	8
1:A:14:ALA:CB	1:A:55:ILE:HG21	0.81	2.05	18	17
1:A:176:LEU:HD21	1:A:196:ALA:CB	0.81	2.05	12	2
1:A:135:LYS:O	1:A:136:ASP:O	0.81	1.99	8	10
1:A:58:PHE:CE1	1:A:62:LEU:HD11	0.80	2.11	19	11
1:A:74:TRP:CD1	1:A:103:ASN:HB3	0.80	2.11	1	13
1:A:56:VAL:O	1:A:60:LEU:HD13	0.80	1.77	2	2
1:A:14:ALA:HA	1:A:55:ILE:HD13	0.79	1.54	17	16
1:A:64:VAL:HG22	1:A:65:PRO:HD2	0.79	1.51	11	3
1:A:52:HIS:CB	1:A:55:ILE:HD12	0.78	2.09	19	12
1:A:32:LEU:HD12	1:A:33:ALA:N	0.78	1.92	13	1
1:A:199:TYR:O	1:A:207:THR:HG22	0.78	1.77	15	10
1:A:221:LYS:O	1:A:224:VAL:HG12	0.78	1.78	14	1
1:A:176:LEU:HD11	1:A:196:ALA:HB1	0.77	1.54	17	2
1:A:19:LEU:HD23	1:A:55:ILE:HA	0.77	1.55	19	8
1:A:131:ASN:HB3	1:A:134:ALA:HB2	0.77	1.57	9	16
1:A:162:LYS:CD	1:A:162:LYS:N	0.77	2.48	10	5
1:A:109:PRO:CB	1:A:125:LEU:HD11	0.77	2.09	6	2
1:A:78:HIS:CE1	1:A:101:ALA:O	0.77	2.38	20	18
1:A:74:TRP:CD1	1:A:103:ASN:HB2	0.77	2.15	11	13
1:A:69:LYS:CD	1:A:101:ALA:HB1	0.76	2.10	17	1
1:A:77:LEU:HD21	1:A:125:LEU:CD1	0.76	2.10	19	1
1:A:89:VAL:HG11	1:A:121:ILE:HG13	0.76	1.55	7	2
1:A:174:THR:OG1	1:A:176:LEU:HD23	0.76	1.81	18	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:VAL:HG21	1:A:32:LEU:HD22	0.76	1.58	6	1
1:A:77:LEU:CD1	1:A:89:VAL:HG13	0.76	2.11	7	1
1:A:26:ILE:HD12	1:A:58:PHE:CE2	0.76	2.15	6	11
1:A:125:LEU:HD12	1:A:126:LEU:N	0.76	1.96	14	2
1:A:125:LEU:HD23	1:A:130:ALA:HB2	0.75	1.57	5	2
1:A:141:THR:CG2	1:A:167:ILE:HD12	0.75	2.11	13	2
1:A:197:SER:OG	1:A:200:ILE:HD11	0.75	1.80	11	2
1:A:99:VAL:HG11	1:A:128:GLY:O	0.75	1.81	19	5
1:A:176:LEU:HD13	1:A:208:PRO:HB3	0.75	1.57	14	2
1:A:110:LEU:HD21	1:A:126:LEU:CD2	0.74	2.12	9	2
1:A:110:LEU:CD1	1:A:130:ALA:HB1	0.74	2.09	1	3
1:A:110:LEU:HD12	1:A:125:LEU:HD11	0.74	1.59	10	1
1:A:76:PRO:C	1:A:92:LEU:HD23	0.74	2.02	14	3
1:A:176:LEU:HD21	1:A:208:PRO:HG3	0.74	1.60	18	1
1:A:8:LEU:HD23	1:A:37:ASP:OD1	0.73	1.83	5	1
1:A:77:LEU:CD2	1:A:125:LEU:HD11	0.73	2.09	19	1
1:A:135:LYS:HG2	1:A:167:ILE:HG21	0.73	1.58	18	2
1:A:51:GLY:HA2	1:A:88:ILE:HD11	0.73	1.60	11	17
1:A:48:CYS:HA	1:A:88:ILE:HD13	0.73	1.60	1	14
1:A:22:LEU:CD2	1:A:55:ILE:HG23	0.73	2.13	5	1
1:A:9:MET:O	1:A:13:LEU:HD13	0.73	1.82	12	9
1:A:59:LEU:HD12	1:A:64:VAL:HG21	0.73	1.58	20	2
1:A:85:ARG:O	1:A:89:VAL:HG23	0.73	1.83	4	6
1:A:89:VAL:HG21	1:A:121:ILE:CG2	0.72	2.13	13	3
1:A:52:HIS:O	1:A:56:VAL:HG22	0.72	1.83	18	4
1:A:126:LEU:HD13	1:A:161:TYR:CE2	0.72	2.18	20	1
1:A:26:ILE:CG2	1:A:33:ALA:HB2	0.72	2.14	6	18
1:A:126:LEU:HD22	1:A:161:TYR:CD2	0.72	2.19	20	1
1:A:73:GLY:C	1:A:74:TRP:CD1	0.72	2.63	1	17
1:A:60:LEU:HD23	1:A:60:LEU:O	0.72	1.85	20	2
1:A:188:ALA:O	1:A:192:VAL:HG23	0.71	1.84	10	15
1:A:152:LEU:HD12	1:A:187:GLU:OE1	0.71	1.83	14	1
1:A:53:THR:HG21	1:A:87:GLU:HG2	0.71	1.62	10	1
1:A:152:LEU:HD13	1:A:155:ILE:CD1	0.71	2.07	7	1
1:A:143:MET:CG	1:A:158:LEU:HD23	0.71	2.15	5	1
1:A:198:ILE:HG23	1:A:224:VAL:HG21	0.71	1.61	8	6
1:A:197:SER:O	1:A:224:VAL:HG21	0.71	1.85	16	1
1:A:143:MET:HG3	1:A:158:LEU:HD23	0.71	1.62	5	1
1:A:17:GLY:HA2	1:A:55:ILE:HD11	0.70	1.63	7	17
1:A:36:THR:CG2	1:A:42:THR:HG22	0.70	2.16	2	1
1:A:10:VAL:O	1:A:22:LEU:HD11	0.70	1.86	20	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:133:ASP:OD1	1:A:167:ILE:HD11	0.70	1.86	13	12
1:A:29:ASP:CG	1:A:32:LEU:HD23	0.70	2.06	19	3
1:A:166:ASN:ND2	1:A:196:ALA:HB1	0.70	2.02	7	1
1:A:58:PHE:CZ	1:A:62:LEU:HD11	0.70	2.22	9	8
1:A:197:SER:HB2	1:A:200:ILE:HD11	0.70	1.63	12	8
1:A:110:LEU:HD11	1:A:126:LEU:HG	0.69	1.63	20	1
1:A:107:CYS:HB3	1:A:112:TYR:CZ	0.69	2.21	20	16
1:A:60:LEU:HD21	1:A:66:VAL:HG11	0.69	1.64	1	1
1:A:60:LEU:HD21	1:A:66:VAL:CG1	0.69	2.17	1	1
1:A:176:LEU:HD12	1:A:196:ALA:HB1	0.69	1.65	13	3
1:A:198:ILE:HD13	1:A:221:LYS:CB	0.69	2.18	1	1
1:A:198:ILE:HG23	1:A:199:TYR:CE1	0.69	2.23	14	1
1:A:60:LEU:HD21	1:A:95:LYS:HB2	0.69	1.64	5	2
1:A:126:LEU:HD23	1:A:161:TYR:CG	0.69	2.23	7	2
1:A:60:LEU:HD12	1:A:61:GLN:N	0.69	2.03	3	3
1:A:76:PRO:HA	1:A:79:ILE:HD12	0.69	1.65	12	3
1:A:209:LEU:HD12	1:A:210:GLN:N	0.69	2.03	18	2
1:A:218:LEU:HD13	1:A:218:LEU:O	0.69	1.87	20	3
1:A:22:LEU:HD22	1:A:55:ILE:HG23	0.69	1.63	5	3
1:A:176:LEU:CD2	1:A:196:ALA:HB1	0.69	2.18	19	1
1:A:74:TRP:CD1	1:A:103:ASN:HA	0.69	2.23	2	4
1:A:13:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HD12	0.69	1.65	3	3
1:A:155:ILE:HD11	1:A:187:GLU:HG2	0.68	1.64	19	5
1:A:29:ASP:CG	1:A:32:LEU:HD13	0.68	2.08	4	4
1:A:147:ALA:HB1	1:A:179:ALA:HB2	0.68	1.65	7	3
1:A:73:GLY:C	1:A:74:TRP:CG	0.68	2.67	14	16
1:A:110:LEU:HD22	1:A:132:PRO:HA	0.68	1.64	8	3
1:A:59:LEU:O	1:A:64:VAL:HG13	0.68	1.89	14	6
1:A:29:ASP:CB	1:A:32:LEU:HD12	0.68	2.18	18	4
1:A:148:ALA:HB2	1:A:178:LEU:HD22	0.68	1.65	3	2
1:A:10:VAL:CG2	1:A:32:LEU:HD12	0.68	2.18	2	1
1:A:8:LEU:HD23	1:A:37:ASP:HB2	0.68	1.66	1	2
1:A:192:VAL:HA	1:A:196:ALA:HB3	0.68	1.66	15	6
1:A:155:ILE:HD11	1:A:187:GLU:CG	0.68	2.19	19	4
1:A:15:TYR:CD1	1:A:50:ALA:HB2	0.68	2.24	18	1
1:A:209:LEU:HD23	1:A:210:GLN:N	0.67	2.04	12	3
1:A:209:LEU:HD21	1:A:221:LYS:HB3	0.67	1.63	19	1
1:A:176:LEU:HD22	1:A:196:ALA:HB1	0.67	1.65	8	1
1:A:198:ILE:HD13	1:A:221:LYS:HA	0.67	1.66	8	6
1:A:176:LEU:H	1:A:176:LEU:HD13	0.67	1.48	9	1
1:A:44:LEU:HD21	1:A:64:VAL:CG1	0.67	2.20	19	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:80:ALA:HB2	1:A:88:ILE:HG22	0.67	1.65	11	3
1:A:56:VAL:HG11	1:A:92:LEU:HD21	0.67	1.65	16	1
1:A:133:ASP:OD2	1:A:167:ILE:HD11	0.67	1.90	10	3
1:A:192:VAL:HG21	1:A:220:LEU:HD22	0.67	1.65	14	1
1:A:212:ALA:HB1	1:A:216:LEU:CD1	0.67	2.19	7	1
1:A:135:LYS:HE2	1:A:167:ILE:HD13	0.66	1.68	13	3
1:A:167:ILE:O	1:A:174:THR:HG22	0.66	1.91	16	2
1:A:108:THR:HB	1:A:109:PRO:HD2	0.66	1.67	9	10
1:A:176:LEU:HD11	1:A:208:PRO:CB	0.66	2.21	18	1
1:A:209:LEU:HD22	1:A:217:GLY:O	0.66	1.90	14	2
1:A:209:LEU:H	1:A:209:LEU:HD13	0.66	1.50	17	1
1:A:14:ALA:HB1	1:A:55:ILE:HG21	0.66	1.66	18	9
1:A:85:ARG:O	1:A:89:VAL:HG22	0.66	1.91	5	3
1:A:168:GLN:HG3	1:A:174:THR:HG22	0.66	1.66	11	2
1:A:168:GLN:NE2	1:A:174:THR:HG23	0.66	2.05	2	4
1:A:118:ARG:CG	1:A:121:ILE:HD12	0.66	2.19	13	5
1:A:44:LEU:HD11	1:A:64:VAL:HG11	0.66	1.66	19	1
1:A:118:ARG:HG2	1:A:121:ILE:HD12	0.66	1.65	13	2
1:A:143:MET:HE2	1:A:158:LEU:HB3	0.66	1.67	9	1
1:A:55:ILE:O	1:A:59:LEU:HD23	0.66	1.91	20	1
1:A:209:LEU:HD22	1:A:221:LYS:HG3	0.66	1.66	7	3
1:A:208:PRO:O	1:A:212:ALA:HB2	0.66	1.91	14	10
1:A:152:LEU:HD13	1:A:155:ILE:HD12	0.65	1.65	18	1
1:A:198:ILE:HG12	1:A:224:VAL:HG11	0.65	1.68	14	3
1:A:143:MET:HG3	1:A:158:LEU:HD22	0.65	1.69	20	1
1:A:103:ASN:OD1	1:A:106:GLY:N	0.65	2.29	11	1
1:A:198:ILE:HD13	1:A:221:LYS:HG3	0.65	1.67	18	1
1:A:140:ALA:HB2	1:A:169:ASP:OD2	0.65	1.90	3	5
1:A:69:LYS:HD2	1:A:101:ALA:HB1	0.65	1.66	17	2
1:A:72:ALA:O	1:A:74:TRP:HD1	0.65	1.75	1	15
1:A:76:PRO:CB	1:A:92:LEU:HD11	0.65	2.22	13	1
1:A:213:LYS:CB	1:A:216:LEU:HD21	0.65	2.21	4	1
1:A:141:THR:HG21	1:A:167:ILE:HG21	0.65	1.67	7	1
1:A:126:LEU:HD12	1:A:161:TYR:CD1	0.65	2.27	18	1
1:A:190:LEU:HD12	1:A:191:LEU:N	0.65	2.07	2	1
1:A:110:LEU:HD23	1:A:142:ALA:HB2	0.65	1.67	14	1
1:A:188:ALA:HB1	1:A:220:LEU:CD2	0.65	2.22	3	3
1:A:198:ILE:HD13	1:A:221:LYS:CA	0.65	2.22	1	2
1:A:85:ARG:O	1:A:89:VAL:HG13	0.64	1.91	1	5
1:A:29:ASP:HB3	1:A:32:LEU:HD12	0.64	1.66	8	8
1:A:44:LEU:HD12	1:A:59:LEU:HB3	0.64	1.67	3	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:192:VAL:HG21	1:A:220:LEU:O	0.64	1.91	16	1
1:A:141:THR:HG21	1:A:167:ILE:CD1	0.64	2.22	9	4
1:A:126:LEU:HD22	1:A:132:PRO:HB3	0.64	1.69	5	1
1:A:10:VAL:HG21	1:A:32:LEU:HB3	0.64	1.70	17	2
1:A:72:ALA:HB2	1:A:104:GLN:HG3	0.64	1.67	6	1
1:A:155:ILE:HD11	1:A:187:GLU:OE2	0.64	1.91	18	1
1:A:154:MET:O	1:A:158:LEU:HD12	0.64	1.92	20	4
1:A:110:LEU:HD12	1:A:142:ALA:HB2	0.64	1.69	4	1
1:A:209:LEU:HD12	1:A:217:GLY:C	0.64	2.13	16	2
1:A:110:LEU:HD11	1:A:130:ALA:CB	0.64	2.15	1	2
1:A:209:LEU:HD22	1:A:221:LYS:CG	0.64	2.23	13	2
1:A:99:VAL:HG21	1:A:128:GLY:C	0.64	2.13	18	1
1:A:176:LEU:HD22	1:A:196:ALA:O	0.64	1.93	2	1
1:A:220:LEU:O	1:A:224:VAL:HG23	0.64	1.91	20	2
1:A:92:LEU:HD23	1:A:97:ALA:CB	0.63	2.22	13	1
1:A:60:LEU:HD11	1:A:95:LYS:HB3	0.63	1.69	8	3
1:A:162:LYS:O	1:A:163:ALA:O	0.63	2.16	20	1
1:A:88:ILE:HG22	1:A:92:LEU:CD1	0.63	2.24	17	3
1:A:119:HIS:O	1:A:123:VAL:HG23	0.63	1.91	3	4
1:A:95:LYS:O	1:A:95:LYS:HD3	0.63	1.93	8	2
1:A:176:LEU:HD21	1:A:208:PRO:CG	0.63	2.24	18	1
1:A:110:LEU:CD2	1:A:126:LEU:HD13	0.63	2.23	7	1
1:A:165:THR:OG1	1:A:196:ALA:HB2	0.63	1.93	20	1
1:A:110:LEU:HD13	1:A:131:ASN:O	0.63	1.94	19	1
1:A:74:TRP:HE3	1:A:78:HIS:HB3	0.63	1.53	2	17
1:A:44:LEU:CD2	1:A:59:LEU:HD22	0.62	2.24	5	1
1:A:152:LEU:HA	1:A:155:ILE:HD12	0.62	1.71	16	7
1:A:136:ASP:OD1	1:A:140:ALA:HB3	0.62	1.93	12	1
1:A:59:LEU:CD1	1:A:64:VAL:HG11	0.62	2.24	8	3
1:A:44:LEU:HD12	1:A:59:LEU:CD1	0.62	2.24	12	1
1:A:126:LEU:HD21	1:A:132:PRO:HB3	0.62	1.71	18	1
1:A:165:THR:CB	1:A:196:ALA:HB2	0.62	2.24	20	1
1:A:126:LEU:HA	1:A:130:ALA:HB3	0.62	1.72	1	5
1:A:59:LEU:O	1:A:64:VAL:HG22	0.62	1.94	18	3
1:A:114:ALA:HB3	1:A:145:ARG:HD2	0.62	1.70	1	1
1:A:88:ILE:HG22	1:A:92:LEU:HD11	0.62	1.70	17	2
1:A:66:VAL:HG13	1:A:95:LYS:NZ	0.62	2.09	20	1
1:A:99:VAL:HG21	1:A:128:GLY:O	0.62	1.95	15	2
1:A:44:LEU:HD11	1:A:92:LEU:HD11	0.61	1.70	5	1
1:A:143:MET:HG2	1:A:158:LEU:HD23	0.61	1.71	12	2
1:A:77:LEU:O	1:A:77:LEU:HD23	0.61	1.95	2	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:155:ILE:HD13	1:A:187:GLU:OE1	0.61	1.94	7	1
1:A:36:THR:HG22	1:A:40:SER:C	0.61	2.15	3	3
1:A:18:LYS:O	1:A:22:LEU:HD12	0.61	1.95	16	1
1:A:66:VAL:HG12	1:A:76:PRO:HG3	0.61	1.70	20	1
1:A:60:LEU:HD21	1:A:95:LYS:CB	0.61	2.25	8	3
1:A:141:THR:CG2	1:A:167:ILE:HG21	0.61	2.26	7	3
1:A:80:ALA:CB	1:A:88:ILE:HG22	0.61	2.24	13	2
1:A:80:ALA:CB	1:A:88:ILE:HG23	0.61	2.25	9	1
1:A:109:PRO:HB3	1:A:125:LEU:HD11	0.61	1.71	6	1
1:A:185:VAL:CG2	1:A:216:LEU:HD21	0.61	2.26	18	1
1:A:110:LEU:HD21	1:A:126:LEU:CD1	0.61	2.26	1	1
1:A:176:LEU:HD21	1:A:200:ILE:HD12	0.61	1.72	14	1
1:A:95:LYS:HD3	1:A:95:LYS:O	0.61	1.95	7	1
1:A:72:ALA:O	1:A:74:TRP:CD1	0.61	2.54	12	15
1:A:196:ALA:O	1:A:197:SER:O	0.61	2.17	3	4
1:A:206:LYS:CE	1:A:211:VAL:HG23	0.61	2.24	2	1
1:A:26:ILE:HA	1:A:32:LEU:HD11	0.61	1.70	13	1
1:A:176:LEU:HD11	1:A:192:VAL:HG22	0.60	1.72	20	4
1:A:64:VAL:HG22	1:A:65:PRO:CD	0.60	2.26	11	2
1:A:198:ILE:HG12	1:A:224:VAL:HG21	0.60	1.73	5	6
1:A:84:GLY:O	1:A:86:ASP:N	0.60	2.34	17	1
1:A:98:GLN:CD	1:A:101:ALA:HB2	0.60	2.16	10	3
1:A:14:ALA:O	1:A:55:ILE:HD13	0.60	1.96	5	6
1:A:89:VAL:HG11	1:A:121:ILE:CG1	0.60	2.25	7	1
1:A:76:PRO:HB2	1:A:92:LEU:HD22	0.60	1.72	20	5
1:A:72:ALA:O	1:A:103:ASN:OD1	0.60	2.19	17	3
1:A:188:ALA:HB1	1:A:220:LEU:HD21	0.60	1.74	19	3
1:A:77:LEU:HD23	1:A:125:LEU:CD2	0.60	2.27	12	1
1:A:176:LEU:HD23	1:A:208:PRO:HB3	0.60	1.71	9	2
1:A:110:LEU:HD21	1:A:126:LEU:HD21	0.60	1.72	9	2
1:A:98:GLN:OE1	1:A:101:ALA:HB2	0.60	1.95	20	3
1:A:89:VAL:HG21	1:A:125:LEU:HD21	0.60	1.71	20	1
1:A:192:VAL:CB	1:A:220:LEU:HD12	0.60	2.27	4	1
1:A:152:LEU:CD2	1:A:155:ILE:HD11	0.59	2.28	17	1
1:A:131:ASN:HB2	1:A:134:ALA:HB2	0.59	1.72	20	3
1:A:208:PRO:HA	1:A:211:VAL:HG12	0.59	1.75	19	6
1:A:152:LEU:HD21	1:A:186:GLU:HB3	0.59	1.73	11	1
1:A:88:ILE:HG22	1:A:92:LEU:HD12	0.59	1.75	4	1
1:A:209:LEU:HD21	1:A:221:LYS:HB2	0.59	1.75	2	1
1:A:80:ALA:CB	1:A:89:VAL:HG23	0.59	2.28	12	2
1:A:123:VAL:HG13	1:A:161:TYR:CE2	0.59	2.32	4	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:LEU:HD23	1:A:59:LEU:HD22	0.59	1.73	5	1
1:A:209:LEU:HD13	1:A:209:LEU:C	0.59	2.17	6	1
1:A:126:LEU:O	1:A:126:LEU:HD13	0.59	1.98	18	1
1:A:109:PRO:HB2	1:A:125:LEU:HD11	0.59	1.74	6	2
1:A:209:LEU:HD13	1:A:210:GLN:N	0.59	2.13	6	1
1:A:44:LEU:CD1	1:A:66:VAL:HG12	0.59	2.28	12	1
1:A:168:GLN:CG	1:A:174:THR:HG22	0.58	2.28	12	2
1:A:59:LEU:HD23	1:A:64:VAL:HG21	0.58	1.72	18	1
1:A:198:ILE:CG2	1:A:224:VAL:HG21	0.58	2.28	19	10
1:A:59:LEU:HD23	1:A:64:VAL:HG11	0.58	1.75	5	3
1:A:154:MET:O	1:A:158:LEU:HD23	0.58	1.98	8	4
1:A:176:LEU:HD11	1:A:192:VAL:CG2	0.58	2.29	20	1
1:A:80:ALA:HB1	1:A:88:ILE:HG23	0.58	1.74	9	1
1:A:110:LEU:HD13	1:A:126:LEU:HD13	0.58	1.76	8	1
1:A:58:PHE:O	1:A:61:GLN:HG2	0.58	1.98	1	19
1:A:81:ALA:HB1	1:A:121:ILE:HG21	0.58	1.76	7	2
1:A:44:LEU:HD23	1:A:56:VAL:HG12	0.58	1.73	1	1
1:A:198:ILE:CG1	1:A:224:VAL:HG21	0.58	2.28	14	5
1:A:176:LEU:CD2	1:A:192:VAL:HG22	0.58	2.28	17	1
1:A:207:THR:HB	1:A:208:PRO:HD2	0.58	1.75	2	3
1:A:77:LEU:HD21	1:A:89:VAL:O	0.58	1.97	7	1
1:A:174:THR:HB	1:A:175:PRO:HD2	0.58	1.75	8	7
1:A:85:ARG:HG2	1:A:88:ILE:HD12	0.58	1.75	5	2
1:A:60:LEU:C	1:A:60:LEU:HD23	0.58	2.19	12	2
1:A:89:VAL:CG2	1:A:125:LEU:HD21	0.58	2.29	20	1
1:A:209:LEU:HD21	1:A:221:LYS:CB	0.58	2.28	19	2
1:A:69:LYS:CE	1:A:101:ALA:HB1	0.58	2.28	6	2
1:A:109:PRO:CG	1:A:125:LEU:HD21	0.58	2.28	3	1
1:A:123:VAL:HG13	1:A:161:TYR:CE1	0.57	2.34	8	1
1:A:192:VAL:HG11	1:A:220:LEU:HB3	0.57	1.75	14	1
1:A:60:LEU:HD22	1:A:95:LYS:HG3	0.57	1.74	1	2
1:A:198:ILE:CG1	1:A:224:VAL:HG11	0.57	2.30	16	2
1:A:72:ALA:HA	1:A:103:ASN:O	0.57	2.00	12	6
1:A:171:GLU:O	1:A:203:LYS:HG2	0.57	1.99	8	3
1:A:88:ILE:O	1:A:92:LEU:HD23	0.57	1.99	2	3
1:A:171:GLU:O	1:A:203:LYS:CG	0.57	2.51	8	4
1:A:10:VAL:HG23	1:A:32:LEU:HD22	0.57	1.77	1	3
1:A:47:ALA:CB	1:A:56:VAL:HG13	0.57	2.29	2	7
1:A:209:LEU:HD13	1:A:221:LYS:HD2	0.57	1.76	10	1
1:A:192:VAL:HA	1:A:196:ALA:HB2	0.57	1.77	14	1
1:A:44:LEU:HD12	1:A:76:PRO:HB3	0.57	1.76	20	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:103:ASN:OD1	1:A:107:CYS:N	0.57	2.37	11	1
1:A:99:VAL:CG2	1:A:130:ALA:HB2	0.57	2.29	3	1
1:A:77:LEU:HB2	1:A:92:LEU:HD13	0.56	1.77	19	1
1:A:60:LEU:HD21	1:A:91:ALA:O	0.56	2.00	10	1
1:A:114:ALA:CB	1:A:142:ALA:HB1	0.56	2.29	11	2
1:A:218:LEU:O	1:A:218:LEU:HD13	0.56	1.99	15	1
1:A:197:SER:O	1:A:198:ILE:CG1	0.56	2.52	16	1
1:A:8:LEU:HD11	1:A:35:ARG:HB3	0.56	1.77	9	1
1:A:76:PRO:CB	1:A:92:LEU:HD13	0.56	2.30	18	1
1:A:10:VAL:HG22	1:A:32:LEU:HD12	0.56	1.78	2	1
1:A:176:LEU:HD12	1:A:208:PRO:HB3	0.56	1.77	2	1
1:A:107:CYS:HB3	1:A:112:TYR:CE1	0.56	2.36	8	10
1:A:77:LEU:HD12	1:A:109:PRO:HB3	0.56	1.77	15	1
1:A:59:LEU:HD13	1:A:64:VAL:HG21	0.56	1.78	20	1
1:A:174:THR:CG2	1:A:200:ILE:HG21	0.56	2.27	9	5
1:A:59:LEU:HD12	1:A:64:VAL:HG11	0.56	1.76	1	3
1:A:216:LEU:O	1:A:219:ILE:HG22	0.56	2.01	11	5
1:A:13:LEU:HD13	1:A:21:GLU:HB3	0.56	1.76	15	1
1:A:122:ALA:HA	1:A:125:LEU:HD12	0.56	1.77	4	2
1:A:176:LEU:HD21	1:A:196:ALA:HB3	0.56	1.76	12	1
1:A:22:LEU:HD21	1:A:59:LEU:HD21	0.56	1.78	13	2
1:A:26:ILE:HD12	1:A:58:PHE:CZ	0.56	2.35	10	5
1:A:123:VAL:HG21	1:A:157:ILE:CG2	0.56	2.30	11	2
1:A:69:LYS:HE2	1:A:101:ALA:HB1	0.56	1.77	6	2
1:A:126:LEU:HD13	1:A:161:TYR:CG	0.56	2.35	15	3
1:A:196:ALA:O	1:A:197:SER:HB2	0.56	2.00	16	1
1:A:76:PRO:HB3	1:A:92:LEU:HD11	0.56	1.77	13	1
1:A:109:PRO:HB2	1:A:125:LEU:HD13	0.56	1.78	4	2
1:A:80:ALA:HB1	1:A:89:VAL:HG23	0.56	1.77	10	1
1:A:8:LEU:HD12	1:A:37:ASP:HB2	0.56	1.78	3	1
1:A:44:LEU:HD12	1:A:59:LEU:HD13	0.56	1.76	12	1
1:A:93:LEU:HD12	1:A:97:ALA:HB3	0.56	1.78	15	1
1:A:44:LEU:HD11	1:A:64:VAL:CG1	0.56	2.31	19	1
1:A:198:ILE:HD13	1:A:221:LYS:HB2	0.55	1.76	1	1
1:A:118:ARG:O	1:A:121:ILE:HG22	0.55	2.01	15	1
1:A:110:LEU:HD12	1:A:142:ALA:CB	0.55	2.31	4	2
1:A:103:ASN:C	1:A:104:GLN:HG3	0.55	2.21	4	4
1:A:74:TRP:CE3	1:A:78:HIS:HB3	0.55	2.36	10	7
1:A:44:LEU:CD2	1:A:66:VAL:HG12	0.55	2.31	6	1
1:A:152:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD12	0.55	1.78	16	1
1:A:148:ALA:HB2	1:A:178:LEU:HD12	0.55	1.78	13	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:PRO:HB3	1:A:92:LEU:HD22	0.55	1.78	18	2
1:A:152:LEU:HD13	1:A:186:GLU:HG3	0.55	1.78	4	1
1:A:74:TRP:HB2	1:A:78:HIS:CB	0.55	2.31	2	13
1:A:198:ILE:O	1:A:208:PRO:HD2	0.55	2.01	8	5
1:A:57:GLU:HA	1:A:60:LEU:HD23	0.55	1.79	15	1
1:A:159:LEU:HD21	1:A:194:GLN:HG2	0.55	1.79	4	2
1:A:19:LEU:HD21	1:A:58:PHE:CB	0.55	2.32	19	7
1:A:162:LYS:HD3	1:A:162:LYS:N	0.55	2.16	11	2
1:A:132:PRO:HB3	1:A:163:ALA:HB2	0.55	1.78	11	1
1:A:80:ALA:HB2	1:A:88:ILE:CG2	0.55	2.32	11	4
1:A:200:ILE:HG22	1:A:201:GLU:H	0.55	1.61	16	1
1:A:103:ASN:OD1	1:A:107:CYS:CB	0.55	2.55	16	2
1:A:140:ALA:HB2	1:A:169:ASP:OD1	0.55	2.02	6	2
1:A:74:TRP:CD1	1:A:103:ASN:ND2	0.54	2.75	16	2
1:A:141:THR:HG23	1:A:144:HIS:CE1	0.54	2.37	1	7
1:A:79:ILE:O	1:A:83:ALA:N	0.54	2.41	10	2
1:A:99:VAL:HG11	1:A:128:GLY:C	0.54	2.21	15	2
1:A:107:CYS:O	1:A:112:TYR:CE2	0.54	2.59	4	10
1:A:119:HIS:CD2	1:A:153:LYS:HB3	0.54	2.38	20	2
1:A:48:CYS:SG	1:A:92:LEU:HD21	0.54	2.42	14	3
1:A:17:GLY:C	1:A:55:ILE:HD11	0.54	2.22	4	1
1:A:110:LEU:CD2	1:A:142:ALA:HB2	0.54	2.33	14	1
1:A:44:LEU:HD12	1:A:59:LEU:CB	0.54	2.31	3	1
1:A:213:LYS:CB	1:A:216:LEU:HD13	0.54	2.33	16	1
1:A:52:HIS:HB2	1:A:55:ILE:HD12	0.54	1.78	19	4
1:A:152:LEU:HD11	1:A:186:GLU:HB3	0.54	1.77	6	1
1:A:60:LEU:HD13	1:A:95:LYS:HD2	0.54	1.79	3	1
1:A:159:LEU:HD11	1:A:194:GLN:HG2	0.54	1.79	4	1
1:A:154:MET:SD	1:A:157:ILE:HD11	0.54	2.43	16	3
1:A:77:LEU:HD11	1:A:125:LEU:HG	0.54	1.79	15	1
1:A:219:ILE:HG23	1:A:220:LEU:HD22	0.54	1.80	4	1
1:A:34:THR:HG22	1:A:65:PRO:HD2	0.54	1.79	15	3
1:A:152:LEU:HD11	1:A:186:GLU:HG2	0.54	1.79	5	1
1:A:118:ARG:HG3	1:A:121:ILE:HD12	0.54	1.78	5	3
1:A:10:VAL:HG11	1:A:32:LEU:HB3	0.54	1.79	14	1
1:A:60:LEU:HD12	1:A:60:LEU:C	0.54	2.23	3	4
1:A:8:LEU:HD12	1:A:37:ASP:OD1	0.54	2.01	17	1
1:A:23:LYS:O	1:A:27:LEU:HD12	0.54	2.03	19	5
1:A:44:LEU:HD11	1:A:64:VAL:HG21	0.54	1.79	19	1
1:A:199:TYR:CD1	1:A:209:LEU:HD11	0.54	2.38	14	1
1:A:74:TRP:CG	1:A:103:ASN:OD1	0.54	2.61	6	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:192:VAL:HB	1:A:220:LEU:HD12	0.54	1.78	4	1
1:A:176:LEU:HD11	1:A:196:ALA:CB	0.54	2.33	19	2
1:A:191:LEU:O	1:A:196:ALA:HB2	0.54	2.02	16	1
1:A:106:GLY:O	1:A:108:THR:N	0.53	2.41	12	8
1:A:213:LYS:CB	1:A:216:LEU:HD12	0.53	2.33	10	2
1:A:75:SER:O	1:A:78:HIS:HB2	0.53	2.03	20	11
1:A:14:ALA:HB1	1:A:47:ALA:HB2	0.53	1.79	18	6
1:A:220:LEU:HD12	1:A:221:LYS:N	0.53	2.18	10	1
1:A:74:TRP:HD1	1:A:103:ASN:HA	0.53	1.64	10	4
1:A:109:PRO:HB2	1:A:125:LEU:HD22	0.53	1.80	17	1
1:A:86:ASP:O	1:A:89:VAL:HG12	0.53	2.03	10	2
1:A:187:GLU:O	1:A:191:LEU:HD12	0.53	2.03	6	2
1:A:155:ILE:HD11	1:A:187:GLU:CD	0.53	2.24	2	3
1:A:59:LEU:O	1:A:64:VAL:HG23	0.53	2.04	20	6
1:A:190:LEU:HD23	1:A:194:GLN:OE1	0.53	2.04	19	1
1:A:36:THR:HG22	1:A:41:ARG:C	0.53	2.24	2	3
1:A:132:PRO:CB	1:A:163:ALA:HB2	0.53	2.34	11	1
1:A:8:LEU:HD12	1:A:10:VAL:CG2	0.53	2.33	8	2
1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:HD3	0.53	2.17	9	3
1:A:8:LEU:O	1:A:12:ASN:OD1	0.53	2.27	6	5
1:A:159:LEU:HD22	1:A:194:GLN:HG2	0.53	1.81	19	1
1:A:29:ASP:OD2	1:A:32:LEU:HD23	0.53	2.04	3	1
1:A:198:ILE:HG22	1:A:199:TYR:CE2	0.53	2.38	16	1
1:A:80:ALA:HB1	1:A:89:VAL:HB	0.53	1.80	12	1
1:A:110:LEU:HD23	1:A:142:ALA:CB	0.53	2.34	14	1
1:A:77:LEU:HD22	1:A:92:LEU:CD1	0.53	2.33	15	1
1:A:212:ALA:O	1:A:213:LYS:CB	0.53	2.57	15	1
1:A:81:ALA:HB1	1:A:121:ILE:CG2	0.53	2.34	7	1
1:A:135:LYS:HG3	1:A:141:THR:HG22	0.53	1.81	9	2
1:A:198:ILE:CG2	1:A:199:TYR:CE1	0.53	2.92	14	1
1:A:110:LEU:H	1:A:110:LEU:HD13	0.52	1.64	14	1
1:A:152:LEU:HD21	1:A:186:GLU:HG2	0.52	1.81	6	1
1:A:155:ILE:O	1:A:159:LEU:HD13	0.52	2.04	10	1
1:A:135:LYS:HB3	1:A:139:GLU:HA	0.52	1.80	16	1
1:A:198:ILE:HD12	1:A:221:LYS:HD3	0.52	1.80	9	1
1:A:15:TYR:CD1	1:A:46:TRP:CE3	0.52	2.97	2	4
1:A:36:THR:HG22	1:A:40:SER:HA	0.52	1.80	9	1
1:A:216:LEU:HA	1:A:219:ILE:HD12	0.52	1.80	7	3
1:A:93:LEU:O	1:A:93:LEU:HD13	0.52	2.04	2	1
1:A:135:LYS:CE	1:A:167:ILE:HD13	0.52	2.33	6	1
1:A:80:ALA:O	1:A:84:GLY:N	0.52	2.38	12	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:TRP:CD2	1:A:112:TYR:CE2	0.52	2.97	19	8
1:A:26:ILE:HA	1:A:29:ASP:O	0.52	2.04	13	18
1:A:177:HIS:CE1	1:A:200:ILE:O	0.52	2.63	15	17
1:A:26:ILE:HD11	1:A:59:LEU:HD21	0.52	1.81	14	1
1:A:123:VAL:HG21	1:A:157:ILE:HG21	0.52	1.82	11	2
1:A:109:PRO:HB2	1:A:125:LEU:HD21	0.52	1.81	2	2
1:A:138:TYR:CE1	1:A:140:ALA:HB3	0.52	2.39	8	1
1:A:89:VAL:HG21	1:A:121:ILE:HG21	0.52	1.82	13	1
1:A:8:LEU:HD11	1:A:35:ARG:HD2	0.52	1.80	14	1
1:A:209:LEU:HD22	1:A:210:GLN:NE2	0.52	2.19	12	1
1:A:8:LEU:HD21	1:A:37:ASP:HB2	0.52	1.81	2	1
1:A:13:LEU:HD21	1:A:21:GLU:HB3	0.52	1.82	6	4
1:A:217:GLY:O	1:A:220:LEU:HG	0.52	2.05	17	1
1:A:133:ASP:CG	1:A:167:ILE:HD11	0.52	2.25	10	10
1:A:206:LYS:CE	1:A:206:LYS:HA	0.52	2.35	11	1
1:A:10:VAL:HG12	1:A:25:SER:OG	0.52	2.04	15	1
1:A:219:ILE:CG2	1:A:220:LEU:HD22	0.52	2.35	4	1
1:A:42:THR:OG1	1:A:44:LEU:CD2	0.52	2.58	20	1
1:A:160:TYR:O	1:A:162:LYS:HD3	0.52	2.05	20	3
1:A:75:SER:CB	1:A:76:PRO:CD	0.52	2.88	12	6
1:A:74:TRP:CG	1:A:103:ASN:ND2	0.51	2.78	14	2
1:A:89:VAL:HG11	1:A:121:ILE:HD11	0.51	1.82	15	3
1:A:8:LEU:HD21	1:A:35:ARG:CG	0.51	2.35	16	1
1:A:213:LYS:HB3	1:A:216:LEU:HD23	0.51	1.83	19	1
1:A:206:LYS:HA	1:A:206:LYS:CE	0.51	2.36	12	1
1:A:74:TRP:CG	1:A:103:ASN:HB3	0.51	2.41	1	1
1:A:74:TRP:CE2	1:A:112:TYR:OH	0.51	2.62	20	1
1:A:48:CYS:HB2	1:A:79:ILE:HD13	0.51	1.83	10	2
1:A:60:LEU:HD11	1:A:95:LYS:HG2	0.51	1.83	14	1
1:A:99:VAL:HG23	1:A:100:ASN:ND2	0.51	2.20	19	3
1:A:48:CYS:HA	1:A:88:ILE:HD12	0.51	1.83	10	1
1:A:126:LEU:HD21	1:A:132:PRO:HG3	0.51	1.82	11	1
1:A:10:VAL:HG12	1:A:25:SER:HB3	0.51	1.82	16	2
1:A:177:HIS:HE1	1:A:200:ILE:HG22	0.51	1.65	9	3
1:A:69:LYS:NZ	1:A:74:TRP:HA	0.51	2.19	11	1
1:A:176:LEU:CG	1:A:196:ALA:HB1	0.51	2.36	19	1
1:A:92:LEU:HD12	1:A:93:LEU:N	0.51	2.21	19	1
1:A:44:LEU:HD23	1:A:76:PRO:HG3	0.51	1.81	6	1
1:A:77:LEU:HD21	1:A:125:LEU:HD23	0.51	1.82	4	1
1:A:216:LEU:C	1:A:216:LEU:HD12	0.51	2.25	7	1
1:A:165:THR:HB	1:A:196:ALA:HB2	0.51	1.83	20	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:42:THR:OG1	1:A:44:LEU:HD12	0.51	2.06	11	1
1:A:66:VAL:HG11	1:A:95:LYS:HG2	0.51	1.83	3	1
1:A:81:ALA:HB2	1:A:89:VAL:HG21	0.51	1.82	3	1
1:A:158:LEU:HD12	1:A:163:ALA:CB	0.51	2.35	8	2
1:A:180:CYS:HB3	1:A:211:VAL:HG13	0.50	1.83	19	2
1:A:26:ILE:HD12	1:A:58:PHE:HE2	0.50	1.66	2	3
1:A:74:TRP:CE3	1:A:112:TYR:CE2	0.50	3.00	3	7
1:A:11:CYS:HA	1:A:43:ALA:HB2	0.50	1.83	16	4
1:A:47:ALA:HB2	1:A:55:ILE:CG2	0.50	2.36	3	2
1:A:114:ALA:HA	1:A:154:MET:HE3	0.50	1.82	7	1
1:A:103:ASN:ND2	1:A:112:TYR:OH	0.50	2.44	6	1
1:A:176:LEU:HD11	1:A:200:ILE:HD12	0.50	1.82	9	1
1:A:60:LEU:HA	1:A:64:VAL:HG12	0.50	1.81	17	1
1:A:44:LEU:HD21	1:A:64:VAL:HG11	0.50	1.82	19	1
1:A:107:CYS:CB	1:A:112:TYR:CZ	0.50	2.94	4	9
1:A:13:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HD23	0.50	1.84	1	2
1:A:143:MET:HG2	1:A:158:LEU:HD22	0.50	1.83	10	1
1:A:155:ILE:HD11	1:A:187:GLU:OE1	0.50	2.07	2	2
1:A:222:ARG:O	1:A:226:GLY:N	0.50	2.39	8	1
1:A:110:LEU:HD23	1:A:130:ALA:HB1	0.50	1.82	2	1
1:A:60:LEU:HD23	1:A:60:LEU:C	0.50	2.27	4	3
1:A:26:ILE:CD1	1:A:59:LEU:HD21	0.50	2.37	14	2
1:A:119:HIS:CD2	1:A:154:MET:HE2	0.50	2.41	6	2
1:A:216:LEU:O	1:A:220:LEU:HD12	0.50	2.06	1	2
1:A:60:LEU:O	1:A:60:LEU:HD23	0.50	2.07	7	1
1:A:219:ILE:O	1:A:223:MET:HG3	0.50	2.07	16	4
1:A:22:LEU:HD23	1:A:58:PHE:CE2	0.50	2.42	15	2
1:A:66:VAL:HG21	1:A:95:LYS:HE3	0.50	1.82	8	1
1:A:222:ARG:HA	1:A:226:GLY:CA	0.50	2.37	20	15
1:A:60:LEU:HD22	1:A:95:LYS:NZ	0.50	2.22	5	1
1:A:113:ALA:HB1	1:A:122:ALA:HB2	0.50	1.82	5	2
1:A:159:LEU:HD13	1:A:194:GLN:HG2	0.50	1.82	19	1
1:A:8:LEU:HD11	1:A:36:THR:C	0.50	2.27	6	1
1:A:135:LYS:NZ	1:A:167:ILE:HD12	0.50	2.21	16	1
1:A:125:LEU:C	1:A:125:LEU:HD12	0.50	2.28	8	1
1:A:176:LEU:HD21	1:A:192:VAL:HG22	0.50	1.84	17	3
1:A:213:LYS:HB2	1:A:216:LEU:HD21	0.50	1.84	4	1
1:A:10:VAL:HG12	1:A:25:SER:CB	0.50	2.37	16	1
1:A:207:THR:HB	1:A:208:PRO:CD	0.49	2.37	13	5
1:A:99:VAL:HG11	1:A:128:GLY:HA3	0.49	1.83	15	2
1:A:85:ARG:HB3	1:A:88:ILE:HG22	0.49	1.84	9	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:160:TYR:CD1	1:A:160:TYR:C	0.49	2.85	7	1
1:A:59:LEU:HB3	1:A:64:VAL:HG21	0.49	1.83	4	2
1:A:51:GLY:HA2	1:A:88:ILE:HD13	0.49	1.84	9	1
1:A:166:ASN:O	1:A:167:ILE:C	0.49	2.51	5	6
1:A:99:VAL:HG11	1:A:128:GLY:CA	0.49	2.37	15	2
1:A:192:VAL:HG21	1:A:220:LEU:HD23	0.49	1.84	3	1
1:A:19:LEU:C	1:A:19:LEU:HD13	0.49	2.27	5	2
1:A:22:LEU:HD13	1:A:55:ILE:HG23	0.49	1.83	12	2
1:A:107:CYS:CB	1:A:112:TYR:CE1	0.49	2.96	1	1
1:A:219:ILE:O	1:A:222:ARG:HG2	0.49	2.08	4	7
1:A:60:LEU:HG	1:A:95:LYS:CD	0.49	2.37	4	3
1:A:126:LEU:HD23	1:A:161:TYR:CD2	0.49	2.43	8	1
1:A:71:ASP:O	1:A:72:ALA:HB2	0.49	2.07	2	3
1:A:78:HIS:CE1	1:A:109:PRO:HD3	0.49	2.42	9	8
1:A:53:THR:HA	1:A:56:VAL:CG2	0.49	2.38	12	3
1:A:69:LYS:O	1:A:70:ASP:O	0.49	2.31	13	2
1:A:59:LEU:HD12	1:A:60:LEU:N	0.49	2.23	12	1
1:A:74:TRP:HB3	1:A:78:HIS:CG	0.49	2.42	9	3
1:A:141:THR:HG21	1:A:167:ILE:HG13	0.49	1.84	16	2
1:A:110:LEU:N	1:A:110:LEU:HD13	0.49	2.22	14	1
1:A:169:ASP:O	1:A:170:THR:C	0.49	2.51	19	2
1:A:74:TRP:CB	1:A:78:HIS:CG	0.49	2.96	2	3
1:A:74:TRP:CD1	1:A:103:ASN:CA	0.49	2.95	2	1
1:A:44:LEU:C	1:A:44:LEU:HD12	0.48	2.28	14	2
1:A:108:THR:HB	1:A:109:PRO:CD	0.48	2.38	1	5
1:A:119:HIS:CG	1:A:154:MET:HE1	0.48	2.44	16	1
1:A:216:LEU:HD13	1:A:219:ILE:CD1	0.48	2.37	2	1
1:A:81:ALA:CB	1:A:121:ILE:HG21	0.48	2.37	14	2
1:A:69:LYS:HD3	1:A:101:ALA:HB1	0.48	1.84	16	2
1:A:159:LEU:CD2	1:A:165:THR:HG21	0.48	2.38	5	1
1:A:66:VAL:HG12	1:A:76:PRO:CG	0.48	2.38	20	1
1:A:8:LEU:O	1:A:12:ASN:ND2	0.48	2.46	14	7
1:A:199:TYR:HB2	1:A:207:THR:HG21	0.48	1.85	20	1
1:A:76:PRO:C	1:A:92:LEU:HD13	0.48	2.29	1	2
1:A:81:ALA:HB2	1:A:125:LEU:HD21	0.48	1.84	20	1
1:A:180:CYS:CB	1:A:211:VAL:HG13	0.48	2.38	19	3
1:A:51:GLY:CA	1:A:88:ILE:HD11	0.48	2.38	1	6
1:A:92:LEU:O	1:A:97:ALA:HB2	0.48	2.08	12	3
1:A:66:VAL:HG23	1:A:92:LEU:HD12	0.48	1.85	16	1
1:A:168:GLN:HB3	1:A:174:THR:HG22	0.48	1.84	17	1
1:A:60:LEU:HD13	1:A:95:LYS:HG3	0.48	1.85	11	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:201:GLU:HA	1:A:206:LYS:O	0.48	2.09	12	2
1:A:114:ALA:HB3	1:A:145:ARG:CD	0.48	2.38	1	1
1:A:75:SER:HB2	1:A:76:PRO:HD2	0.48	1.84	17	7
1:A:66:VAL:O	1:A:66:VAL:HG22	0.48	2.08	5	1
1:A:58:PHE:CE1	1:A:62:LEU:CD1	0.48	2.97	7	4
1:A:198:ILE:HB	1:A:209:LEU:HD21	0.48	1.85	8	1
1:A:66:VAL:HG21	1:A:95:LYS:CE	0.48	2.39	8	1
1:A:73:GLY:CA	1:A:74:TRP:CD1	0.48	2.97	4	12
1:A:102:VAL:CG1	1:A:106:GLY:HA2	0.48	2.39	11	9
1:A:77:LEU:O	1:A:80:ALA:HB3	0.48	2.09	10	1
1:A:176:LEU:CD1	1:A:196:ALA:HB1	0.48	2.39	4	2
1:A:22:LEU:CD2	1:A:59:LEU:HD21	0.48	2.38	13	1
1:A:77:LEU:HD23	1:A:125:LEU:CD1	0.48	2.39	20	1
1:A:117:ASN:O	1:A:119:HIS:ND1	0.48	2.47	9	8
1:A:34:THR:HG22	1:A:65:PRO:CD	0.48	2.38	14	3
1:A:72:ALA:HB1	1:A:104:GLN:HG2	0.48	1.85	11	2
1:A:44:LEU:HD23	1:A:76:PRO:HB3	0.48	1.84	3	1
1:A:197:SER:C	1:A:198:ILE:HG13	0.48	2.29	16	1
1:A:166:ASN:HB3	1:A:200:ILE:HD13	0.48	1.86	12	1
1:A:76:PRO:HG2	1:A:92:LEU:HD12	0.48	1.85	2	1
1:A:137:HIS:H	1:A:137:HIS:CD2	0.48	2.26	20	1
1:A:44:LEU:HD23	1:A:59:LEU:CD2	0.48	2.38	5	1
1:A:176:LEU:HD23	1:A:208:PRO:CB	0.48	2.39	3	1
1:A:26:ILE:HG21	1:A:62:LEU:HD13	0.47	1.86	20	1
1:A:176:LEU:HD13	1:A:208:PRO:CB	0.47	2.34	14	2
1:A:109:PRO:CB	1:A:125:LEU:HD22	0.47	2.38	17	2
1:A:198:ILE:HD13	1:A:224:VAL:HG21	0.47	1.86	6	1
1:A:202:ASN:OD1	1:A:206:LYS:CB	0.47	2.61	11	1
1:A:197:SER:O	1:A:198:ILE:HG12	0.47	2.09	16	1
1:A:209:LEU:CD1	1:A:209:LEU:H	0.47	2.21	17	1
1:A:200:ILE:O	1:A:208:PRO:HD3	0.47	2.08	17	2
1:A:77:LEU:HD21	1:A:125:LEU:HD21	0.47	1.86	11	1
1:A:110:LEU:HD22	1:A:131:ASN:O	0.47	2.09	18	2
1:A:66:VAL:HG13	1:A:95:LYS:HZ3	0.47	1.66	20	1
1:A:218:LEU:HD22	1:A:221:LYS:HD3	0.47	1.86	20	1
1:A:14:ALA:HB2	1:A:55:ILE:HG21	0.47	1.84	9	2
1:A:22:LEU:HD23	1:A:58:PHE:HD2	0.47	1.69	5	1
1:A:99:VAL:HG13	1:A:100:ASN:ND2	0.47	2.25	18	1
1:A:118:ARG:CB	1:A:121:ILE:HD12	0.47	2.40	2	1
1:A:26:ILE:CD1	1:A:59:LEU:HD11	0.47	2.39	1	1
1:A:61:GLN:CG	1:A:62:LEU:N	0.47	2.77	16	14

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:SER:CB	1:A:76:PRO:HD2	0.47	2.39	3	4
1:A:209:LEU:HD21	1:A:221:LYS:CG	0.47	2.39	19	1
1:A:201:GLU:HB3	1:A:205:GLU:HA	0.47	1.87	8	3
1:A:187:GLU:O	1:A:191:LEU:HD13	0.47	2.09	12	1
1:A:17:GLY:HA3	1:A:52:HIS:CE1	0.47	2.45	19	8
1:A:60:LEU:HD11	1:A:95:LYS:CG	0.47	2.40	14	1
1:A:144:HIS:NE2	1:A:173:ASN:O	0.47	2.48	7	6
1:A:76:PRO:CB	1:A:92:LEU:HD22	0.47	2.39	15	1
1:A:166:ASN:ND2	1:A:196:ALA:O	0.47	2.47	16	1
1:A:110:LEU:CD1	1:A:126:LEU:HD21	0.47	2.39	16	1
1:A:126:LEU:HD11	1:A:132:PRO:HG3	0.47	1.86	17	1
1:A:166:ASN:O	1:A:174:THR:HG22	0.47	2.10	15	3
1:A:8:LEU:HD13	1:A:35:ARG:HB3	0.47	1.87	4	2
1:A:45:HIS:CE1	1:A:70:ASP:OD1	0.47	2.68	14	3
1:A:48:CYS:SG	1:A:56:VAL:HG11	0.47	2.50	6	2
1:A:14:ALA:HB1	1:A:55:ILE:CG2	0.47	2.39	3	1
1:A:206:LYS:HE3	1:A:211:VAL:HG23	0.47	1.85	2	1
1:A:34:THR:O	1:A:35:ARG:C	0.47	2.53	17	5
1:A:19:LEU:HD13	1:A:54:GLU:O	0.47	2.09	3	1
1:A:207:THR:O	1:A:209:LEU:N	0.47	2.48	19	1
1:A:212:ALA:O	1:A:213:LYS:HB2	0.47	2.10	15	1
1:A:76:PRO:C	1:A:92:LEU:HD22	0.47	2.30	9	1
1:A:80:ALA:HB1	1:A:89:VAL:N	0.47	2.25	3	2
1:A:80:ALA:CB	1:A:89:VAL:CG2	0.47	2.93	12	1
1:A:185:VAL:HG21	1:A:216:LEU:HD21	0.47	1.86	18	1
1:A:71:ASP:O	1:A:104:GLN:CG	0.46	2.63	6	1
1:A:8:LEU:HD13	1:A:11:CYS:SG	0.46	2.50	11	2
1:A:167:ILE:O	1:A:174:THR:HA	0.46	2.09	7	1
1:A:166:ASN:OD1	1:A:200:ILE:HD13	0.46	2.09	13	1
1:A:200:ILE:O	1:A:208:PRO:CD	0.46	2.63	17	4
1:A:197:SER:O	1:A:200:ILE:HD12	0.46	2.10	19	1
1:A:14:ALA:CA	1:A:55:ILE:HD13	0.46	2.38	13	5
1:A:76:PRO:HB2	1:A:92:LEU:HD11	0.46	1.88	13	1
1:A:23:LYS:CD	1:A:58:PHE:CE1	0.46	2.99	14	1
1:A:103:ASN:CG	1:A:104:GLN:HG3	0.46	2.31	17	2
1:A:23:LYS:HA	1:A:58:PHE:CZ	0.46	2.45	11	7
1:A:70:ASP:C	1:A:72:ALA:H	0.46	2.12	6	2
1:A:174:THR:HG21	1:A:200:ILE:CG2	0.46	2.38	12	1
1:A:152:LEU:CD1	1:A:155:ILE:HD11	0.46	2.09	7	1
1:A:197:SER:CB	1:A:200:ILE:HD11	0.46	2.37	12	5
1:A:119:HIS:CD2	1:A:153:LYS:CG	0.46	2.99	9	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:126:LEU:HD23	1:A:161:TYR:CB	0.46	2.40	1	2
1:A:121:ILE:O	1:A:125:LEU:HD23	0.46	2.10	20	1
1:A:175:PRO:HB2	1:A:191:LEU:HD21	0.46	1.88	18	2
1:A:219:ILE:CG2	1:A:220:LEU:HD12	0.46	2.41	15	1
1:A:198:ILE:CG2	1:A:199:TYR:CE2	0.46	2.99	16	1
1:A:159:LEU:HD23	1:A:194:GLN:HG2	0.46	1.87	9	2
1:A:56:VAL:CG1	1:A:92:LEU:HD21	0.46	2.39	16	1
1:A:198:ILE:CG2	1:A:209:LEU:HD21	0.46	2.40	8	1
1:A:9:MET:O	1:A:12:ASN:OD1	0.46	2.34	8	4
1:A:89:VAL:O	1:A:93:LEU:HD12	0.46	2.11	19	2
1:A:53:THR:HG22	1:A:88:ILE:HA	0.46	1.87	9	1
1:A:89:VAL:O	1:A:93:LEU:HD13	0.46	2.11	1	1
1:A:190:LEU:HD12	1:A:194:GLN:OE1	0.46	2.11	1	1
1:A:126:LEU:HD23	1:A:132:PRO:HG3	0.46	1.88	20	1
1:A:110:LEU:H	1:A:110:LEU:CD1	0.46	2.23	14	1
1:A:119:HIS:CD2	1:A:154:MET:CE	0.46	2.99	14	4
1:A:191:LEU:HD23	1:A:196:ALA:CB	0.46	2.40	10	1
1:A:118:ARG:HB3	1:A:121:ILE:HG22	0.46	1.85	12	2
1:A:66:VAL:HG21	1:A:95:LYS:CD	0.46	2.41	8	1
1:A:206:LYS:HE3	1:A:206:LYS:HA	0.46	1.88	8	1
1:A:126:LEU:CD1	1:A:161:TYR:CD1	0.46	2.99	18	1
1:A:10:VAL:CG1	1:A:32:LEU:HD23	0.46	2.41	16	1
1:A:158:LEU:HD12	1:A:163:ALA:HB1	0.46	1.88	8	1
1:A:74:TRP:NE1	1:A:103:ASN:CB	0.46	2.79	2	1
1:A:191:LEU:HD12	1:A:196:ALA:HB3	0.46	1.87	2	1
1:A:52:HIS:O	1:A:56:VAL:CG2	0.45	2.63	16	3
1:A:152:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD11	0.45	1.87	17	1
1:A:106:GLY:O	1:A:108:THR:HG23	0.45	2.10	12	5
1:A:66:VAL:HG13	1:A:76:PRO:HG2	0.45	1.86	8	1
1:A:110:LEU:HD21	1:A:126:LEU:HG	0.45	1.88	2	1
1:A:208:PRO:O	1:A:212:ALA:N	0.45	2.50	19	3
1:A:14:ALA:HA	1:A:55:ILE:HD12	0.45	1.86	3	1
1:A:209:LEU:C	1:A:209:LEU:HD23	0.45	2.31	9	1
1:A:198:ILE:HG21	1:A:221:LYS:HA	0.45	1.88	8	2
1:A:117:ASN:O	1:A:119:HIS:N	0.45	2.50	4	7
1:A:198:ILE:CD1	1:A:224:VAL:HB	0.45	2.42	6	1
1:A:155:ILE:HG21	1:A:191:LEU:HG	0.45	1.88	9	1
1:A:202:ASN:ND2	1:A:206:LYS:HB2	0.45	2.27	7	1
1:A:80:ALA:CB	1:A:88:ILE:CG2	0.45	2.94	13	1
1:A:80:ALA:CB	1:A:89:VAL:HG12	0.45	2.41	19	1
1:A:74:TRP:HE3	1:A:78:HIS:CB	0.45	2.24	10	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:PHE:CE1	1:A:62:LEU:HD12	0.45	2.46	15	1
1:A:191:LEU:O	1:A:195:GLY:N	0.45	2.48	14	1
1:A:192:VAL:CG1	1:A:224:VAL:HG22	0.45	2.42	17	1
1:A:81:ALA:HA	1:A:121:ILE:HG21	0.45	1.89	19	1
1:A:77:LEU:O	1:A:81:ALA:HB3	0.45	2.11	15	1
1:A:93:LEU:O	1:A:96:GLY:N	0.45	2.37	15	1
1:A:113:ALA:HB1	1:A:121:ILE:HG22	0.45	1.88	4	2
1:A:198:ILE:CD1	1:A:199:TYR:CD2	0.45	2.99	4	1
1:A:209:LEU:HA	1:A:217:GLY:HA3	0.45	1.89	2	2
1:A:175:PRO:HB3	1:A:191:LEU:HD11	0.45	1.89	1	1
1:A:8:LEU:HD21	1:A:35:ARG:HG2	0.45	1.88	20	1
1:A:80:ALA:HB1	1:A:89:VAL:CG2	0.45	2.41	10	1
1:A:188:ALA:CB	1:A:220:LEU:HD21	0.45	2.42	3	2
1:A:108:THR:CB	1:A:109:PRO:HD2	0.45	2.41	16	2
1:A:59:LEU:HD13	1:A:64:VAL:HG11	0.45	1.88	12	1
1:A:11:CYS:HB3	1:A:46:TRP:CD1	0.45	2.47	14	2
1:A:15:TYR:CD1	1:A:46:TRP:HE3	0.45	2.30	7	7
1:A:22:LEU:HD23	1:A:58:PHE:CD2	0.45	2.47	5	1
1:A:122:ALA:O	1:A:126:LEU:HD23	0.45	2.11	19	1
1:A:39:ASP:O	1:A:70:ASP:CB	0.45	2.64	6	1
1:A:70:ASP:C	1:A:72:ALA:N	0.45	2.71	6	2
1:A:44:LEU:HD23	1:A:76:PRO:CG	0.45	2.42	4	1
1:A:198:ILE:CG2	1:A:199:TYR:CZ	0.45	2.99	14	1
1:A:123:VAL:HG23	1:A:157:ILE:HG21	0.45	1.89	14	1
1:A:60:LEU:CD2	1:A:66:VAL:CG1	0.45	2.95	19	1
1:A:119:HIS:CE1	1:A:154:MET:CE	0.45	2.99	10	1
1:A:123:VAL:HG13	1:A:161:TYR:HE2	0.45	1.71	2	2
1:A:196:ALA:O	1:A:197:SER:CB	0.45	2.64	8	3
1:A:123:VAL:CG2	1:A:157:ILE:HG21	0.45	2.42	9	1
1:A:47:ALA:HB3	1:A:56:VAL:HG13	0.45	1.88	9	4
1:A:110:LEU:HD12	1:A:130:ALA:HB1	0.45	1.87	13	1
1:A:73:GLY:HA2	1:A:74:TRP:CD1	0.45	2.47	11	6
1:A:10:VAL:O	1:A:22:LEU:CD1	0.45	2.63	20	1
1:A:58:PHE:CZ	1:A:62:LEU:CD1	0.45	3.00	3	4
1:A:185:VAL:HG12	1:A:189:LYS:CG	0.45	2.41	15	1
1:A:192:VAL:HG21	1:A:220:LEU:HD12	0.45	1.88	8	1
1:A:172:GLY:O	1:A:202:ASN:ND2	0.45	2.50	13	1
1:A:199:TYR:N	1:A:199:TYR:CD1	0.45	2.84	14	1
1:A:77:LEU:N	1:A:92:LEU:HD23	0.45	2.27	5	2
1:A:44:LEU:HD11	1:A:64:VAL:CG2	0.45	2.42	19	1
1:A:197:SER:C	1:A:198:ILE:CG1	0.45	2.85	16	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:GLY:O	1:A:19:LEU:N	0.45	2.50	2	2
1:A:192:VAL:HG13	1:A:198:ILE:CG2	0.45	2.42	2	1
1:A:192:VAL:HG13	1:A:198:ILE:HG23	0.45	1.86	2	1
1:A:19:LEU:HD21	1:A:58:PHE:HB2	0.44	1.89	5	3
1:A:155:ILE:CD1	1:A:187:GLU:CG	0.44	2.95	3	4
1:A:179:ALA:HB1	1:A:187:GLU:HB3	0.44	1.87	3	1
1:A:126:LEU:HD23	1:A:161:TYR:HB3	0.44	1.88	8	1
1:A:191:LEU:CD2	1:A:196:ALA:HB2	0.44	2.42	1	1
1:A:80:ALA:CB	1:A:92:LEU:HD21	0.44	2.41	15	3
1:A:172:GLY:O	1:A:173:ASN:CG	0.44	2.56	19	1
1:A:143:MET:SD	1:A:158:LEU:HD13	0.44	2.52	1	1
1:A:13:LEU:HD21	1:A:21:GLU:CG	0.44	2.42	10	2
1:A:45:HIS:CG	1:A:70:ASP:OD2	0.44	2.71	7	2
1:A:138:TYR:O	1:A:170:THR:N	0.44	2.51	8	1
1:A:14:ALA:CA	1:A:55:ILE:HG21	0.44	2.42	4	3
1:A:192:VAL:CG2	1:A:220:LEU:HD22	0.44	2.41	14	1
1:A:111:HIS:CE1	1:A:136:ASP:OD1	0.44	2.71	6	4
1:A:198:ILE:CD1	1:A:224:VAL:HG21	0.44	2.41	6	1
1:A:192:VAL:HG13	1:A:193:SER:N	0.44	2.27	15	2
1:A:66:VAL:HG21	1:A:95:LYS:HD2	0.44	1.90	8	1
1:A:198:ILE:HD13	1:A:221:LYS:CG	0.44	2.38	18	1
1:A:176:LEU:HD13	1:A:197:SER:O	0.44	2.13	2	1
1:A:152:LEU:HD11	1:A:186:GLU:CG	0.44	2.42	5	1
1:A:9:MET:HA	1:A:12:ASN:OD1	0.44	2.11	16	2
1:A:77:LEU:HD22	1:A:92:LEU:HD11	0.44	1.87	15	1
1:A:199:TYR:CG	1:A:209:LEU:HD11	0.44	2.48	14	1
1:A:60:LEU:CD1	1:A:95:LYS:CG	0.44	2.96	14	1
1:A:144:HIS:CD2	1:A:173:ASN:O	0.44	2.70	15	6
1:A:51:GLY:O	1:A:52:HIS:C	0.44	2.56	4	1
1:A:78:HIS:NE2	1:A:107:CYS:O	0.44	2.50	18	1
1:A:10:VAL:HG11	1:A:32:LEU:HD22	0.44	1.88	13	1
1:A:192:VAL:CG1	1:A:224:VAL:CG2	0.44	2.96	3	5
1:A:8:LEU:HD22	1:A:32:LEU:HD23	0.44	1.88	15	1
1:A:14:ALA:HA	1:A:55:ILE:HG21	0.44	1.90	4	1
1:A:49:SER:OG	1:A:79:ILE:HG21	0.44	2.12	4	1
1:A:198:ILE:HD12	1:A:221:LYS:HA	0.44	1.90	12	1
1:A:143:MET:CE	1:A:163:ALA:HB3	0.44	2.43	8	1
1:A:22:LEU:HD21	1:A:59:LEU:CD1	0.44	2.43	18	1
1:A:44:LEU:HD12	1:A:56:VAL:HA	0.44	1.90	6	1
1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:HD2	0.44	2.25	10	1
1:A:66:VAL:CG2	1:A:92:LEU:HD13	0.44	2.43	11	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:LEU:HD21	1:A:126:LEU:HD13	0.44	1.90	7	1
1:A:198:ILE:HG13	1:A:224:VAL:HG21	0.44	1.88	4	1
1:A:10:VAL:HG11	1:A:32:LEU:HB2	0.44	1.88	13	1
1:A:198:ILE:HD13	1:A:224:VAL:CG2	0.43	2.42	12	2
1:A:109:PRO:HG3	1:A:125:LEU:HD21	0.43	1.89	3	1
1:A:36:THR:HG22	1:A:40:SER:O	0.43	2.12	3	1
1:A:138:TYR:O	1:A:169:ASP:HB2	0.43	2.13	7	1
1:A:26:ILE:HG12	1:A:33:ALA:HB2	0.43	1.89	13	1
1:A:66:VAL:HG21	1:A:95:LYS:HB3	0.43	1.90	14	1
1:A:123:VAL:HG22	1:A:161:TYR:CE2	0.43	2.48	10	1
1:A:80:ALA:CB	1:A:89:VAL:HG22	0.43	2.43	9	1
1:A:168:GLN:NE2	1:A:174:THR:CG2	0.43	2.81	2	2
1:A:74:TRP:CD1	1:A:103:ASN:CG	0.43	2.91	16	2
1:A:213:LYS:O	1:A:215:GLY:N	0.43	2.51	1	3
1:A:69:LYS:HG3	1:A:101:ALA:HB1	0.43	1.90	12	1
1:A:169:ASP:OD1	1:A:172:GLY:N	0.43	2.51	7	1
1:A:26:ILE:CA	1:A:32:LEU:HD11	0.43	2.41	13	1
1:A:25:SER:O	1:A:32:LEU:HD21	0.43	2.13	13	1
1:A:77:LEU:CD2	1:A:125:LEU:HD13	0.43	2.43	20	1
1:A:17:GLY:CA	1:A:52:HIS:CE1	0.43	3.02	14	1
1:A:80:ALA:HB1	1:A:89:VAL:CG1	0.43	2.43	19	1
1:A:126:LEU:HD13	1:A:161:TYR:CB	0.43	2.43	15	1
1:A:74:TRP:HD1	1:A:103:ASN:CB	0.43	2.25	12	1
1:A:209:LEU:HD23	1:A:209:LEU:C	0.43	2.33	12	1
1:A:47:ALA:HB3	1:A:56:VAL:CG1	0.43	2.43	9	1
1:A:42:THR:OG1	1:A:44:LEU:HG	0.43	2.13	20	1
1:A:74:TRP:HB2	1:A:78:HIS:CG	0.43	2.48	2	2
1:A:119:HIS:CD2	1:A:154:MET:HE3	0.43	2.48	4	2
1:A:209:LEU:HD13	1:A:221:LYS:HG3	0.43	1.90	12	1
1:A:85:ARG:CB	1:A:88:ILE:HG22	0.43	2.43	9	1
1:A:103:ASN:OD1	1:A:104:GLN:N	0.43	2.52	2	1
1:A:224:VAL:HG12	1:A:225:GLU:OE2	0.43	2.14	7	1
1:A:126:LEU:HD22	1:A:161:TYR:CB	0.43	2.44	20	1
1:A:10:VAL:HG22	1:A:25:SER:HB3	0.43	1.91	17	1
1:A:113:ALA:HB1	1:A:121:ILE:CG2	0.43	2.44	4	2
1:A:32:LEU:C	1:A:32:LEU:HD12	0.43	2.34	13	1
1:A:220:LEU:N	1:A:220:LEU:HD22	0.43	2.29	9	1
1:A:136:ASP:OD2	1:A:140:ALA:HB3	0.43	2.13	1	1
1:A:171:GLU:HB3	1:A:203:LYS:CG	0.43	2.44	14	1
1:A:168:GLN:HG3	1:A:172:GLY:HA2	0.43	1.89	6	1
1:A:177:HIS:CE1	1:A:201:GLU:O	0.43	2.72	8	3

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:SER:HB2	1:A:76:PRO:CD	0.43	2.44	12	4
1:A:152:LEU:O	1:A:155:ILE:CG1	0.43	2.67	17	1
1:A:102:VAL:HB	1:A:106:GLY:HA2	0.43	1.91	3	5
1:A:159:LEU:HD21	1:A:165:THR:HG21	0.43	1.91	5	1
1:A:23:LYS:C	1:A:27:LEU:HD12	0.43	2.33	19	1
1:A:74:TRP:CD1	1:A:103:ASN:OD1	0.43	2.72	6	1
1:A:110:LEU:HD11	1:A:126:LEU:HD12	0.43	1.89	11	1
1:A:198:ILE:C	1:A:199:TYR:CG	0.43	2.92	16	1
1:A:207:THR:O	1:A:210:GLN:HG2	0.43	2.14	8	1
1:A:166:ASN:ND2	1:A:197:SER:N	0.43	2.67	7	1
1:A:41:ARG:CG	1:A:45:HIS:CB	0.43	2.96	14	2
1:A:110:LEU:HD13	1:A:126:LEU:CD2	0.43	2.28	5	1
1:A:77:LEU:HA	1:A:92:LEU:CD2	0.43	2.44	19	1
1:A:169:ASP:CB	1:A:173:ASN:OD1	0.43	2.67	10	1
1:A:88:ILE:O	1:A:92:LEU:CD2	0.43	2.67	15	1
1:A:177:HIS:NE2	1:A:208:PRO:HD3	0.42	2.29	1	2
1:A:174:THR:HB	1:A:175:PRO:CD	0.42	2.44	6	3
1:A:201:GLU:HG2	1:A:207:THR:HG22	0.42	1.91	3	1
1:A:8:LEU:CD2	1:A:35:ARG:CG	0.42	2.97	16	1
1:A:75:SER:HB3	1:A:101:ALA:HB3	0.42	1.90	12	1
1:A:64:VAL:O	1:A:66:VAL:HG23	0.42	2.14	8	1
1:A:103:ASN:ND2	1:A:105:ASN:ND2	0.42	2.67	2	1
1:A:76:PRO:HB2	1:A:92:LEU:HD13	0.42	1.90	1	1
1:A:126:LEU:CD2	1:A:161:TYR:CG	0.42	3.00	7	1
1:A:219:ILE:O	1:A:222:ARG:CG	0.42	2.67	19	2
1:A:45:HIS:HD2	1:A:79:ILE:HD11	0.42	1.73	19	1
1:A:168:GLN:CG	1:A:172:GLY:HA2	0.42	2.44	6	1
1:A:102:VAL:HG12	1:A:106:GLY:HA2	0.42	1.91	8	2
1:A:103:ASN:HB3	1:A:107:CYS:HB2	0.42	1.91	10	1
1:A:66:VAL:CG2	1:A:97:ALA:HB2	0.42	2.44	16	1
1:A:80:ALA:HB2	1:A:92:LEU:CD2	0.42	2.44	9	1
1:A:178:LEU:HD22	1:A:178:LEU:N	0.42	2.29	20	1
1:A:76:PRO:O	1:A:92:LEU:HD23	0.42	2.13	14	1
1:A:166:ASN:ND2	1:A:200:ILE:CD1	0.42	2.82	1	3
1:A:166:ASN:ND2	1:A:200:ILE:HD11	0.42	2.29	19	1
1:A:198:ILE:HG22	1:A:199:TYR:CD2	0.42	2.48	16	1
1:A:176:LEU:H	1:A:176:LEU:CD1	0.42	2.25	9	1
1:A:57:GLU:O	1:A:61:GLN:HB3	0.42	2.15	13	2
1:A:66:VAL:O	1:A:76:PRO:CD	0.42	2.68	7	1
1:A:60:LEU:HD13	1:A:95:LYS:CG	0.42	2.44	13	1
1:A:74:TRP:NE1	1:A:103:ASN:HB2	0.42	2.29	2	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:119:HIS:CD2	1:A:153:LYS:HG3	0.42	2.49	9	1
1:A:196:ALA:O	1:A:200:ILE:CD1	0.42	2.67	8	1
1:A:138:TYR:CE1	1:A:140:ALA:CB	0.42	3.02	8	1
1:A:136:ASP:OD1	1:A:138:TYR:CD2	0.42	2.73	7	1
1:A:13:LEU:HD23	1:A:22:LEU:CA	0.42	2.44	13	1
1:A:99:VAL:CG2	1:A:129:GLY:O	0.42	2.68	5	1
1:A:204:GLU:O	1:A:205:GLU:CB	0.42	2.68	4	2
1:A:168:GLN:NE2	1:A:173:ASN:N	0.42	2.68	6	1
1:A:147:ALA:HB3	1:A:178:LEU:CB	0.42	2.45	10	1
1:A:22:LEU:HD13	1:A:22:LEU:O	0.42	2.14	1	1
1:A:48:CYS:HA	1:A:88:ILE:HG21	0.42	1.91	17	1
1:A:80:ALA:CB	1:A:92:LEU:CD2	0.42	2.97	9	1
1:A:198:ILE:HD12	1:A:199:TYR:CD2	0.42	2.49	18	1
1:A:111:HIS:CE1	1:A:134:ALA:O	0.42	2.73	2	1
1:A:157:ILE:HA	1:A:160:TYR:CD2	0.42	2.50	7	1
1:A:213:LYS:HG3	1:A:216:LEU:HD12	0.42	1.91	10	1
1:A:105:ASN:N	1:A:105:ASN:OD1	0.42	2.52	4	1
1:A:107:CYS:O	1:A:108:THR:O	0.42	2.37	1	2
1:A:8:LEU:HD12	1:A:10:VAL:HG22	0.42	1.90	8	1
1:A:74:TRP:CZ2	1:A:112:TYR:CZ	0.42	3.08	4	1
1:A:213:LYS:CB	1:A:216:LEU:CD2	0.42	2.98	4	1
1:A:76:PRO:CB	1:A:92:LEU:HD12	0.42	2.45	12	1
1:A:10:VAL:HG13	1:A:32:LEU:HD23	0.42	1.92	12	1
1:A:60:LEU:HG	1:A:95:LYS:CG	0.42	2.45	2	1
1:A:58:PHE:CD2	1:A:59:LEU:HD22	0.42	2.50	13	1
1:A:209:LEU:HD22	1:A:221:LYS:HB2	0.42	1.92	11	1
1:A:123:VAL:CG2	1:A:157:ILE:CG2	0.42	2.98	11	2
1:A:152:LEU:HD12	1:A:187:GLU:HG2	0.42	1.92	4	1
1:A:103:ASN:ND2	1:A:103:ASN:N	0.42	2.68	16	1
1:A:52:HIS:CG	1:A:55:ILE:HD12	0.42	2.50	12	1
1:A:14:ALA:O	1:A:52:HIS:CD2	0.42	2.73	18	1
1:A:47:ALA:HB1	1:A:56:VAL:HG13	0.42	1.92	2	1
1:A:110:LEU:CD2	1:A:130:ALA:CB	0.42	2.97	2	1
1:A:192:VAL:CG2	1:A:224:VAL:CG2	0.42	2.98	1	1
1:A:72:ALA:HB1	1:A:104:GLN:HG3	0.41	1.92	20	1
1:A:44:LEU:CD1	1:A:76:PRO:HB3	0.41	2.44	20	1
1:A:178:LEU:CD2	1:A:178:LEU:N	0.41	2.83	20	1
1:A:135:LYS:HE3	1:A:167:ILE:HD13	0.41	1.90	6	1
1:A:103:ASN:ND2	1:A:107:CYS:CB	0.41	2.83	6	1
1:A:202:ASN:O	1:A:204:GLU:N	0.41	2.52	11	1
1:A:99:VAL:HG22	1:A:130:ALA:CB	0.41	2.45	3	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:LEU:HD12	1:A:110:LEU:H	0.41	1.75	1	1
1:A:23:LYS:O	1:A:27:LEU:HD23	0.41	2.14	7	1
1:A:13:LEU:HD21	1:A:21:GLU:CB	0.41	2.45	13	1
1:A:64:VAL:O	1:A:95:LYS:NZ	0.41	2.52	20	1
1:A:60:LEU:CD2	1:A:66:VAL:HG11	0.41	2.45	19	1
1:A:135:LYS:CE	1:A:167:ILE:CD1	0.41	2.99	6	1
1:A:177:HIS:CE1	1:A:202:ASN:OD1	0.41	2.73	6	1
1:A:66:VAL:CG2	1:A:92:LEU:CD1	0.41	2.98	11	1
1:A:198:ILE:HD13	1:A:224:VAL:HB	0.41	1.91	12	1
1:A:162:LYS:HD2	1:A:162:LYS:N	0.41	2.29	9	1
1:A:45:HIS:CD2	1:A:70:ASP:OD2	0.41	2.73	16	2
1:A:60:LEU:HD23	1:A:66:VAL:CG1	0.41	2.45	19	1
1:A:198:ILE:CD1	1:A:224:VAL:CG2	0.41	2.98	6	1
1:A:124:MET:O	1:A:127:GLU:HG2	0.41	2.15	10	1
1:A:72:ALA:O	1:A:104:GLN:HG2	0.41	2.15	15	1
1:A:86:ASP:HA	1:A:89:VAL:HG12	0.41	1.91	17	1
1:A:48:CYS:CA	1:A:88:ILE:HD13	0.41	2.42	13	1
1:A:177:HIS:CD2	1:A:202:ASN:OD1	0.41	2.73	14	1
1:A:166:ASN:O	1:A:167:ILE:O	0.41	2.37	5	1
1:A:154:MET:O	1:A:158:LEU:HD13	0.41	2.15	11	1
1:A:56:VAL:HA	1:A:59:LEU:HD21	0.41	1.92	12	1
1:A:119:HIS:CD2	1:A:153:LYS:HG2	0.41	2.50	8	1
1:A:169:ASP:OD1	1:A:173:ASN:N	0.41	2.54	7	1
1:A:107:CYS:SG	1:A:112:TYR:CE1	0.41	3.13	20	2
1:A:201:GLU:HG3	1:A:207:THR:HG22	0.41	1.92	19	1
1:A:152:LEU:HA	1:A:155:ILE:HG22	0.41	1.91	10	1
1:A:218:LEU:C	1:A:218:LEU:HD13	0.41	2.35	15	1
1:A:202:ASN:O	1:A:203:LYS:HB2	0.41	2.16	15	1
1:A:176:LEU:HD11	1:A:208:PRO:CG	0.41	2.45	18	1
1:A:107:CYS:HB2	1:A:112:TYR:CZ	0.41	2.51	1	1
1:A:74:TRP:NE1	1:A:103:ASN:OD1	0.41	2.54	20	2
1:A:197:SER:CB	1:A:200:ILE:CD1	0.41	2.98	3	1
1:A:45:HIS:CG	1:A:70:ASP:OD1	0.41	2.73	2	1
1:A:8:LEU:CD2	1:A:37:ASP:CB	0.41	2.98	2	1
1:A:110:LEU:CD2	1:A:130:ALA:HB1	0.41	2.46	2	1
1:A:45:HIS:CD2	1:A:70:ASP:OD1	0.41	2.73	14	1
1:A:198:ILE:HD12	1:A:221:LYS:HG3	0.41	1.92	17	1
1:A:127:GLU:HG3	1:A:128:GLY:N	0.41	2.31	10	1
1:A:195:GLY:O	1:A:197:SER:N	0.41	2.54	16	1
1:A:177:HIS:CG	1:A:202:ASN:OD1	0.41	2.74	8	1
1:A:135:LYS:HB2	1:A:139:GLU:HA	0.41	1.92	7	2

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:LEU:CD1	1:A:26:ILE:CD1	0.41	2.98	1	1
1:A:126:LEU:HB3	1:A:161:TYR:CZ	0.41	2.51	20	1
1:A:110:LEU:HD22	1:A:110:LEU:C	0.41	2.33	14	1
1:A:208:PRO:O	1:A:212:ALA:CB	0.41	2.66	14	1
1:A:154:MET:C	1:A:158:LEU:HD12	0.41	2.36	17	1
1:A:84:GLY:O	1:A:85:ARG:C	0.41	2.59	17	1
1:A:13:LEU:CB	1:A:22:LEU:CD2	0.41	2.99	19	1
1:A:198:ILE:HD12	1:A:221:LYS:CG	0.41	2.45	10	1
1:A:185:VAL:HG12	1:A:189:LYS:HG2	0.41	1.92	15	1
1:A:99:VAL:HG22	1:A:130:ALA:HA	0.41	1.92	3	1
1:A:76:PRO:CB	1:A:92:LEU:CD1	0.41	2.99	12	1
1:A:77:LEU:HD23	1:A:125:LEU:HD21	0.41	1.91	12	1
1:A:8:LEU:HD11	1:A:35:ARG:CB	0.41	2.44	9	1
1:A:171:GLU:O	1:A:203:LYS:HG3	0.41	2.16	9	1
1:A:135:LYS:O	1:A:135:LYS:HG3	0.41	2.16	8	1
1:A:135:LYS:CG	1:A:141:THR:HG22	0.41	2.46	18	1
1:A:166:ASN:O	1:A:174:THR:CG2	0.41	2.69	2	1
1:A:136:ASP:OD2	1:A:138:TYR:CE2	0.41	2.74	7	1
1:A:45:HIS:CD2	1:A:79:ILE:HD11	0.41	2.50	13	1
1:A:126:LEU:CB	1:A:161:TYR:CZ	0.41	3.04	20	1
1:A:133:ASP:OD1	1:A:164:SER:N	0.41	2.54	5	1
1:A:22:LEU:HD23	1:A:58:PHE:HE2	0.41	1.75	15	1
1:A:202:ASN:HB3	1:A:206:LYS:HB2	0.41	1.93	15	1
1:A:78:HIS:HE1	1:A:101:ALA:O	0.41	1.96	4	1
1:A:166:ASN:CB	1:A:200:ILE:HD13	0.41	2.45	8	1
1:A:103:ASN:CG	1:A:104:GLN:N	0.41	2.74	2	1
1:A:26:ILE:CG1	1:A:33:ALA:HB2	0.41	2.46	13	1
1:A:64:VAL:HG13	1:A:65:PRO:HD2	0.40	1.94	20	2
1:A:23:LYS:HD2	1:A:58:PHE:CE1	0.40	2.52	14	1
1:A:77:LEU:CD1	1:A:97:ALA:HB3	0.40	2.45	14	1
1:A:221:LYS:HG3	1:A:222:ARG:N	0.40	2.32	19	1
1:A:159:LEU:HD13	1:A:194:GLN:OE1	0.40	2.15	19	1
1:A:44:LEU:HG	1:A:59:LEU:HD22	0.40	1.93	15	1
1:A:36:THR:OG1	1:A:40:SER:HA	0.40	2.15	4	1
1:A:206:LYS:HE2	1:A:211:VAL:HG23	0.40	1.92	13	1
1:A:96:GLY:O	1:A:97:ALA:O	0.40	2.39	10	1
1:A:207:THR:OG1	1:A:209:LEU:HG	0.40	2.16	11	1
1:A:167:ILE:HG22	1:A:168:GLN:N	0.40	2.30	3	1
1:A:197:SER:HB3	1:A:200:ILE:HG13	0.40	1.93	12	1
1:A:105:ASN:O	1:A:136:ASP:CB	0.40	2.70	12	1
1:A:60:LEU:HD21	1:A:95:LYS:HB3	0.40	1.92	8	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:LEU:HD11	1:A:26:ILE:HD11	0.40	1.91	1	1
1:A:26:ILE:HG12	1:A:32:LEU:CD1	0.40	2.47	13	1
1:A:163:ALA:O	1:A:164:SER:O	0.40	2.39	17	1
1:A:12:ASN:N	1:A:12:ASN:OD1	0.40	2.55	10	1
1:A:192:VAL:CG1	1:A:193:SER:N	0.40	2.84	15	1
1:A:185:VAL:CG2	1:A:216:LEU:CD2	0.40	2.99	15	1
1:A:60:LEU:HB2	1:A:95:LYS:CD	0.40	2.47	3	1
1:A:77:LEU:CD2	1:A:125:LEU:HD23	0.40	2.46	4	1
1:A:10:VAL:CG2	1:A:32:LEU:HD23	0.40	2.45	4	1
1:A:220:LEU:CD2	1:A:220:LEU:N	0.40	2.84	9	1
1:A:59:LEU:O	1:A:64:VAL:CG2	0.40	2.69	18	1
1:A:81:ALA:N	1:A:89:VAL:HG12	0.40	2.32	1	1
1:A:99:VAL:HG11	1:A:129:GLY:C	0.40	2.36	1	1
1:A:35:ARG:O	1:A:36:THR:O	0.40	2.40	19	1
1:A:8:LEU:HD11	1:A:36:THR:CA	0.40	2.46	6	1
1:A:109:PRO:CG	1:A:125:LEU:HD22	0.40	2.46	9	1
1:A:118:ARG:CD	1:A:121:ILE:HD12	0.40	2.47	14	1
1:A:158:LEU:O	1:A:163:ALA:HB2	0.40	2.16	17	1
1:A:86:ASP:HA	1:A:89:VAL:CG2	0.40	2.47	19	1
1:A:77:LEU:HD12	1:A:109:PRO:CB	0.40	2.45	15	1
1:A:213:LYS:HB2	1:A:216:LEU:HD13	0.40	1.93	16	1
1:A:8:LEU:HD21	1:A:37:ASP:CB	0.40	2.45	2	1
1:A:224:VAL:O	1:A:225:GLU:HB2	0.40	2.17	13	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	218/226 (96%)	183±4 (84±2%)	22±4 (10±2%)	13±3 (6±1%)	4	21
All	All	4360/4520 (96%)	3654 (84%)	445 (10%)	261 (6%)	4	21

All 43 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	225	GLU	20
1	A	213	LYS	20
1	A	164	SER	17
1	A	72	ALA	17
1	A	97	ALA	16
1	A	200	ILE	14
1	A	104	GLN	12
1	A	195	GLY	11
1	A	108	THR	10
1	A	8	LEU	10
1	A	38	GLN	10
1	A	99	VAL	10
1	A	136	ASP	10
1	A	52	HIS	9
1	A	215	GLY	9
1	A	167	ILE	8
1	A	197	SER	6
1	A	118	ARG	6
1	A	103	ASN	3
1	A	170	THR	3
1	A	196	ALA	3
1	A	205	GLU	3
1	A	73	GLY	3
1	A	107	CYS	3
1	A	173	ASN	3
1	A	70	ASP	3
1	A	172	GLY	2
1	A	18	LYS	2
1	A	198	ILE	2
1	A	37	ASP	2
1	A	199	TYR	2
1	A	149	LYS	1
1	A	85	ARG	1
1	A	74	TRP	1
1	A	151	ASN	1
1	A	163	ALA	1
1	A	166	ASN	1
1	A	36	THR	1
1	A	208	PRO	1
1	A	203	LYS	1
1	A	101	ALA	1
1	A	98	GLN	1
1	A	66	VAL	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	174/180 (97%)	124±5 (71±3%)	50±5 (29±3%)	2	19
All	All	3480/3600 (97%)	2472 (71%)	1008 (29%)	2	19

All 127 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	211	VAL	20
1	A	98	GLN	20
1	A	93	LEU	18
1	A	74	TRP	17
1	A	68	ASP	17
1	A	206	LYS	17
1	A	104	GLN	16
1	A	22	LEU	16
1	A	86	ASP	15
1	A	181	ASP	15
1	A	194	GLN	15
1	A	135	LYS	14
1	A	71	ASP	13
1	A	145	ARG	13
1	A	78	HIS	13
1	A	85	ARG	13
1	A	12	ASN	13
1	A	116	LYS	13
1	A	225	GLU	13
1	A	70	ASP	13
1	A	197	SER	13
1	A	190	LEU	13
1	A	176	LEU	12
1	A	203	LYS	12
1	A	77	LEU	12
1	A	9	MET	12
1	A	105	ASN	12
1	A	30	LYS	12
1	A	191	LEU	12

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	37	ASP	12
1	A	95	LYS	12
1	A	184	ARG	12
1	A	143	MET	12
1	A	36	THR	11
1	A	69	LYS	11
1	A	210	GLN	11
1	A	189	LYS	11
1	A	149	LYS	11
1	A	87	GLU	11
1	A	16	SER	10
1	A	99	VAL	10
1	A	125	LEU	10
1	A	44	LEU	10
1	A	126	LEU	10
1	A	168	GLN	10
1	A	154	MET	10
1	A	39	ASP	10
1	A	221	LYS	10
1	A	186	GLU	9
1	A	8	LEU	9
1	A	118	ARG	9
1	A	110	LEU	9
1	A	35	ARG	9
1	A	90	LYS	9
1	A	153	LYS	9
1	A	182	GLU	9
1	A	216	LEU	8
1	A	100	ASN	8
1	A	171	GLU	8
1	A	49	SER	8
1	A	213	LYS	8
1	A	40	SER	8
1	A	170	THR	8
1	A	121	ILE	7
1	A	151	ASN	7
1	A	31	SER	7
1	A	201	GLU	7
1	A	152	LEU	7
1	A	38	GLN	7
1	A	82	SER	7
1	A	61	GLN	7

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	117	ASN	7
1	A	164	SER	6
1	A	218	LEU	6
1	A	120	GLU	6
1	A	107	CYS	6
1	A	205	GLU	6
1	A	159	LEU	6
1	A	41	ARG	6
1	A	202	ASN	6
1	A	20	GLU	6
1	A	59	LEU	6
1	A	127	GLU	6
1	A	209	LEU	6
1	A	139	GLU	6
1	A	115	SER	6
1	A	166	ASN	5
1	A	102	VAL	5
1	A	56	VAL	5
1	A	27	LEU	5
1	A	92	LEU	5
1	A	162	LYS	5
1	A	165	THR	5
1	A	21	GLU	4
1	A	25	SER	4
1	A	54	GLU	4
1	A	198	ILE	4
1	A	138	TYR	4
1	A	124	MET	4
1	A	64	VAL	4
1	A	103	ASN	3
1	A	158	LEU	3
1	A	133	ASP	3
1	A	222	ARG	3
1	A	18	LYS	3
1	A	199	TYR	3
1	A	173	ASN	3
1	A	193	SER	3
1	A	13	LEU	3
1	A	11	CYS	2
1	A	187	GLU	2
1	A	220	LEU	2
1	A	60	LEU	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	24	GLU	2
1	A	141	THR	2
1	A	136	ASP	2
1	A	160	TYR	1
1	A	169	ASP	1
1	A	192	VAL	1
1	A	66	VAL	1
1	A	88	ILE	1
1	A	79	ILE	1
1	A	157	ILE	1
1	A	19	LEU	1
1	A	208	PRO	1
1	A	219	ILE	1
1	A	161	TYR	1

### 6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

## 6.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains [i](#)

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

## 6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

## 6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

## 6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

## 6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

## 7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided