



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 03:46 PM BST

PDB ID : 1KRW  
Title : SOLUTION STRUCTURE AND BACKBONE DYNAMICS OF BERYLLO  
FLUORIDE-ACTIVATED NTRC RECEIVER DOMAIN  
Authors : Hastings, C.A.; Lee, S.-Y.; Cho, H.S.; Yan, D.; Kustu, S.; Wemmer, D.E.  
Deposited on : 2002-01-10

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

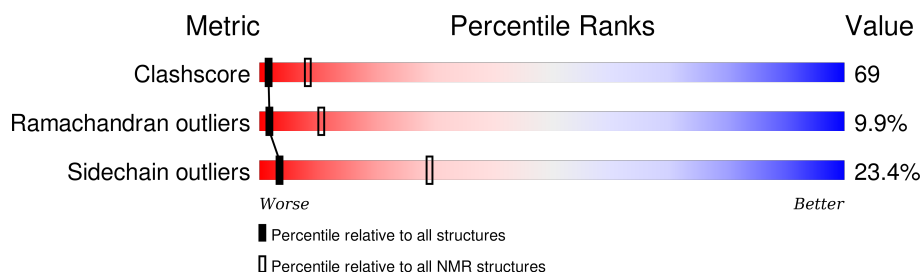
# 1 Overall quality at a glance

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	124	<div> <div>19%</div> <div>63%</div> <div>15%</div> <div>.</div> </div>

## 2 Ensemble composition and analysis ⓘ

This entry contains 26 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 2 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:121 (119)	0.34	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 3 clusters. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 3, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 12, 14, 15, 16, 17, 19, 20, 23, 24
2	4, 11, 13, 18, 21, 26
3	22, 25

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

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1915 atoms, of which 960 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I).

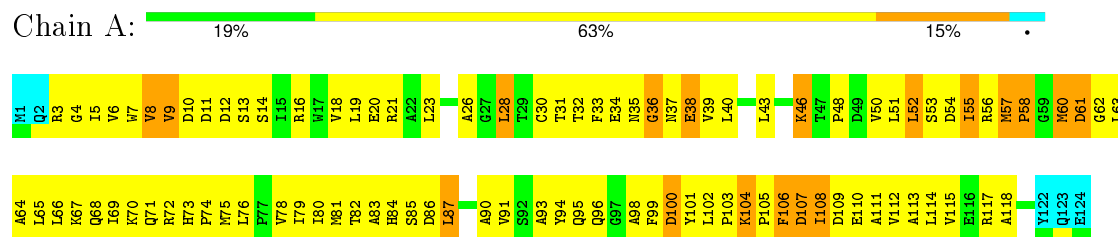
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	124	Total	C	H	N	O	S	0
			1915	606	960	162	181	6	

## 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: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)

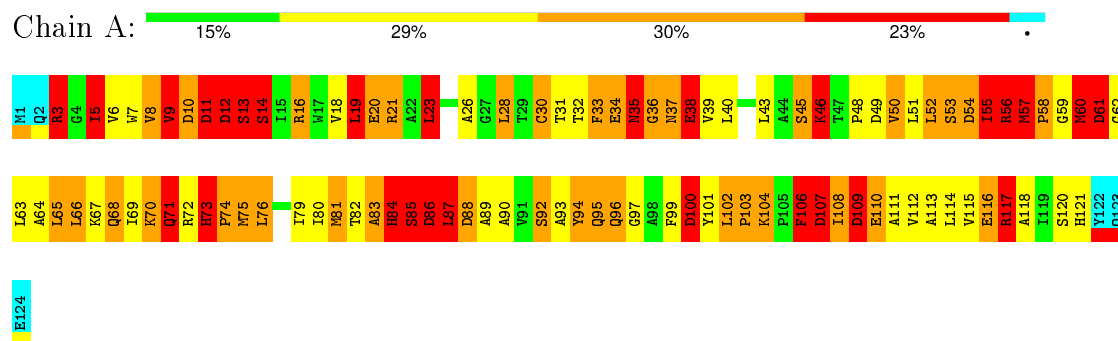


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

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

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



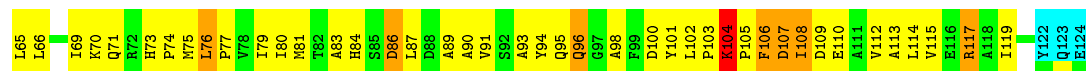
#### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



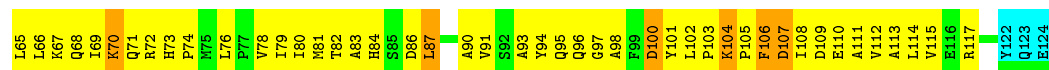
### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



#### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



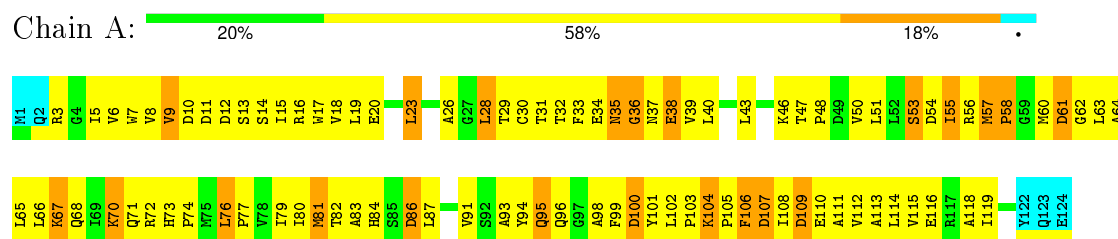
#### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



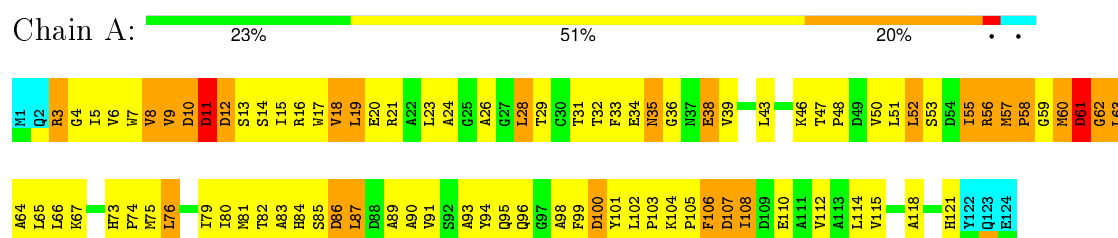
### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



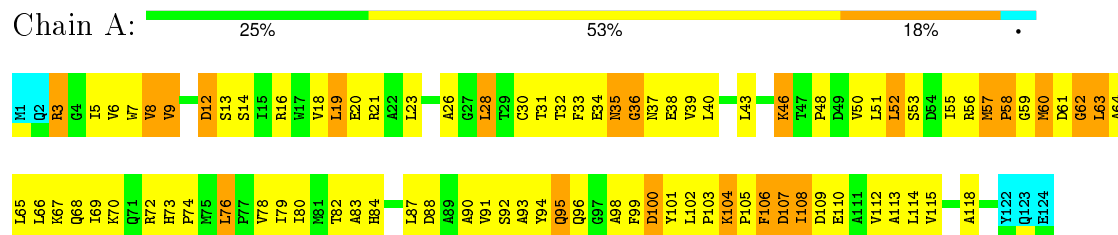
### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



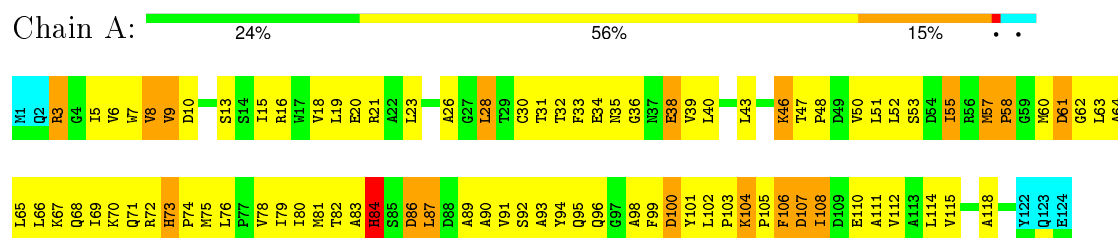
### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



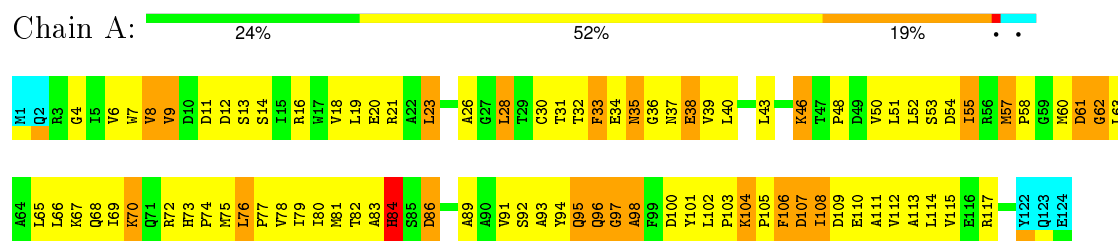
### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



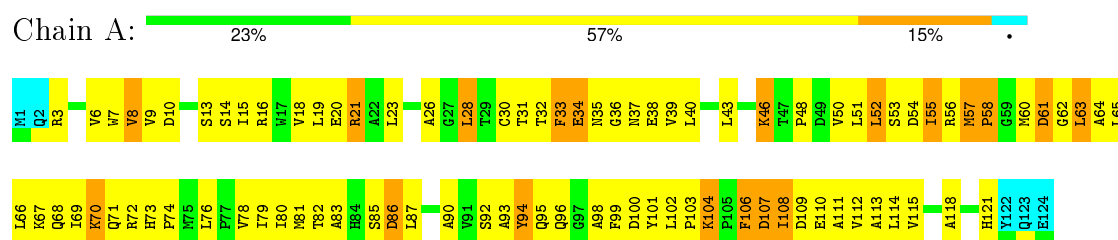
### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



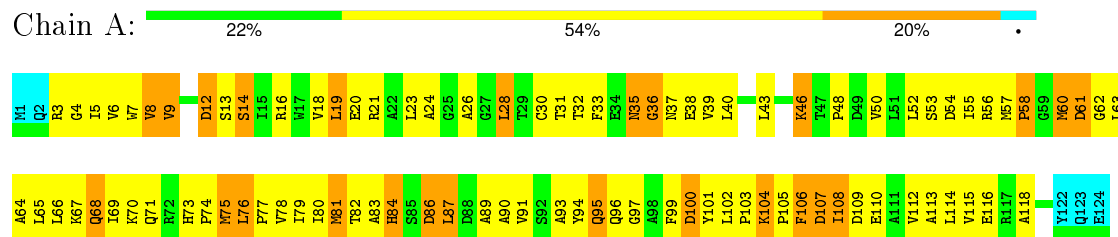
### 4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



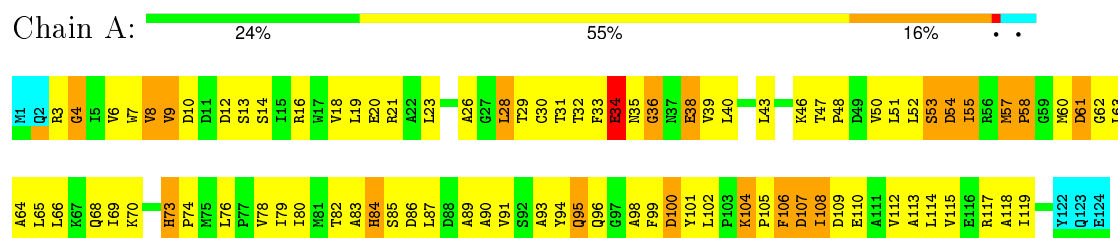
### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



### 4.2.13 Score per residue for model 13

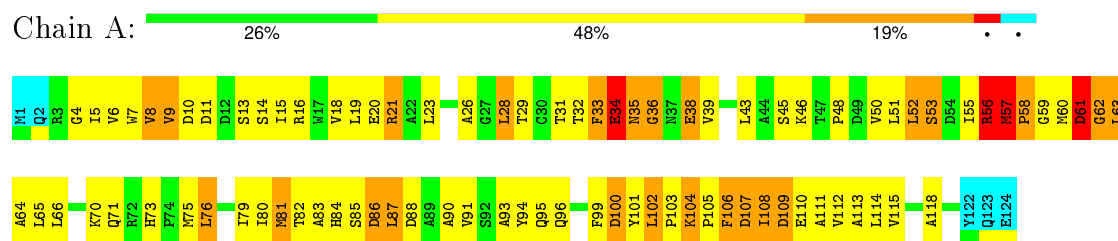
- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)





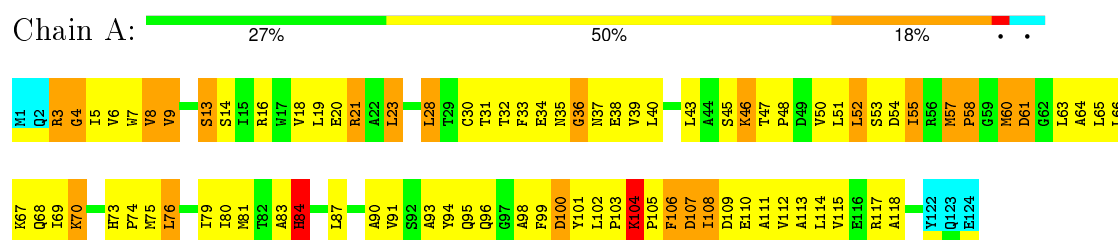
## 4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



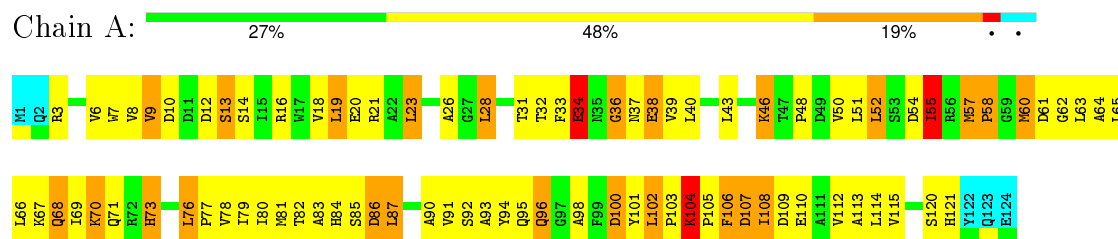
## 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



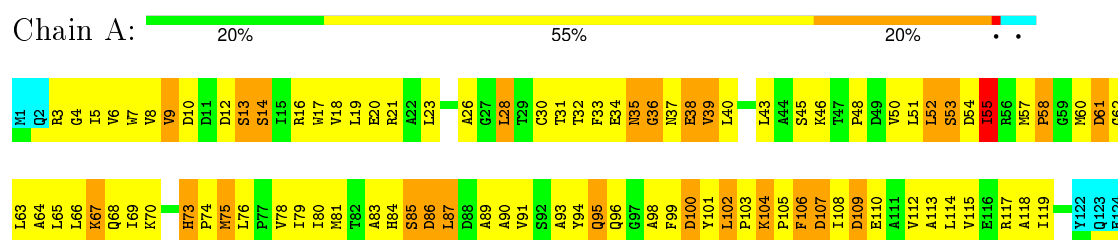
## 4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



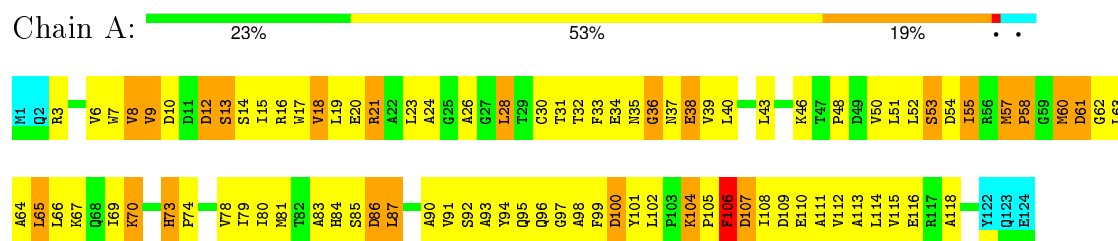
## 4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



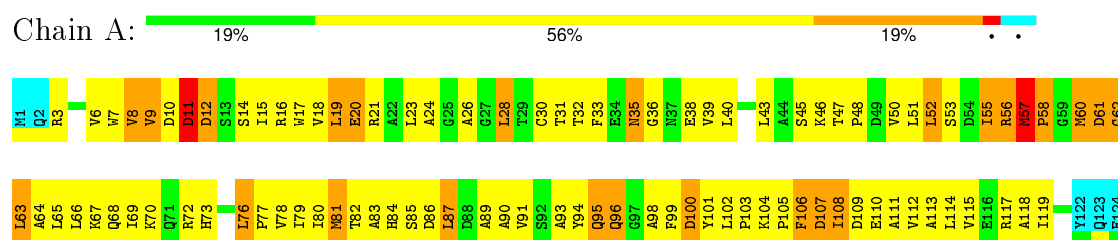
### 4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



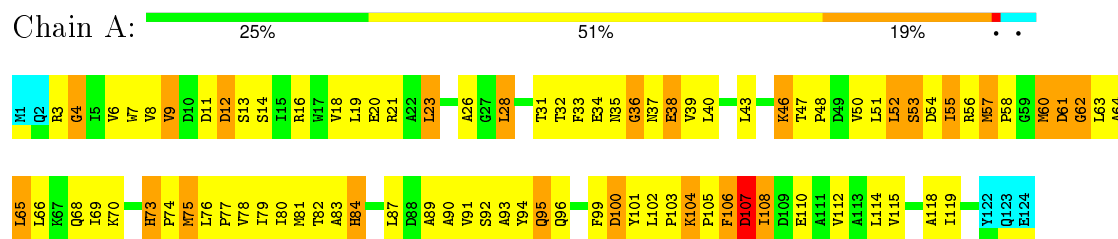
### 4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



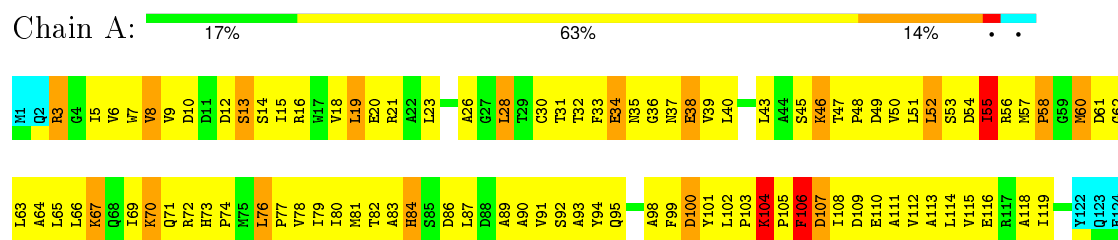
### 4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



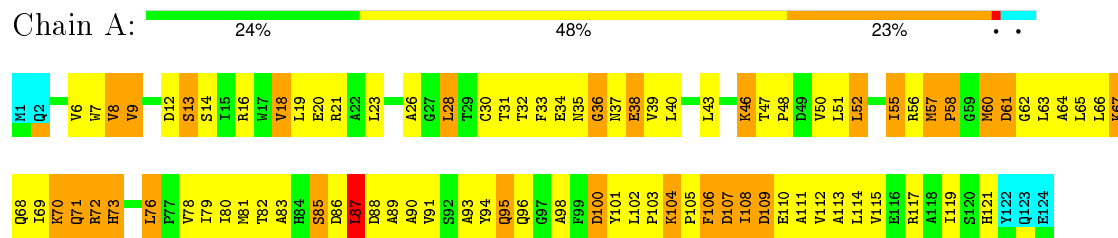
### 4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



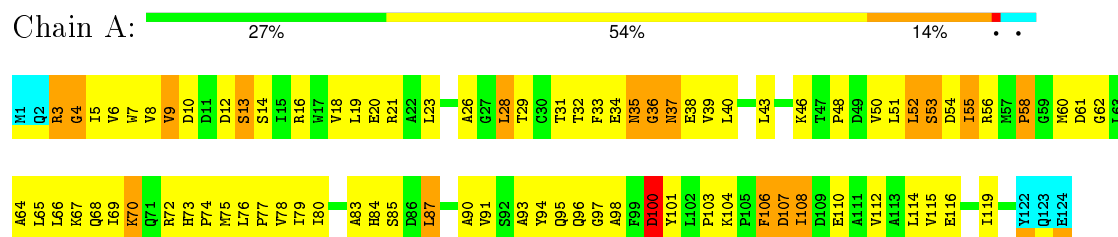
### 4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



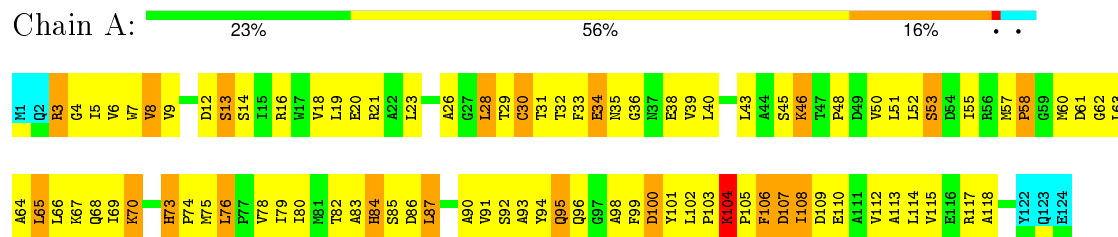
### 4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



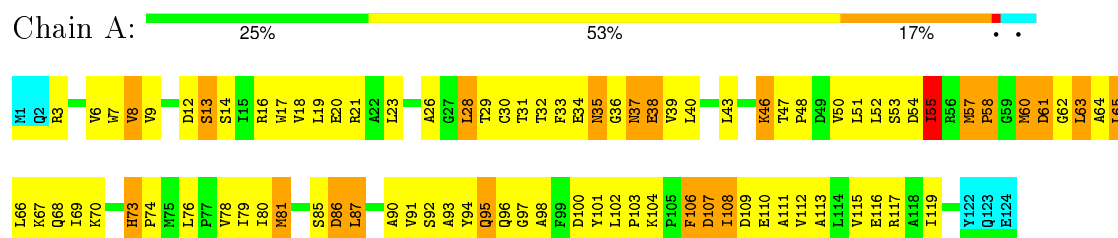
### 4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



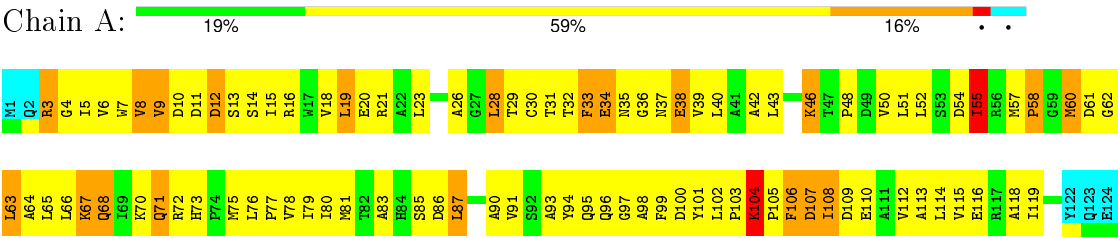
### 4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



4.2.26 Score per residue for model 26

● Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



## 5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 100 calculated structures, 26 were deposited, based on the following criterion: *STRUCTURES WITH THE LOWEST ENERGY*.

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

Software name	Classification	Version
DYANA	structure solution	1.5
X-PLOR	structure solution	CNS 1.0
X-PLOR	refinement	CNS 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 ⓘ

The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with  $|Z| > 5$  is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the (average) root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	0.82±2.84	9±46/926 (1.0±4.9%)	0.87±2.41	8±40/1262 (0.6±3.2%)
All	All	2.95	237/24076 (1.0%)	2.56	208/32812 (0.6%)

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	117	ARG	CZ-NH1	-82.73	0.25	1.33	1	1
1	A	38	GLU	CD-OE2	-80.56	0.37	1.25	1	1
1	A	38	GLU	CD-OE1	-79.92	0.37	1.25	1	1
1	A	56	ARG	CZ-NH1	-79.03	0.30	1.33	1	1
1	A	72	ARG	CZ-NH1	-78.63	0.30	1.33	1	1
1	A	85	SER	CB-OG	-73.78	0.46	1.42	1	1
1	A	16	ARG	CZ-NH1	-72.31	0.39	1.33	1	1
1	A	3	ARG	CZ-NH1	-68.57	0.43	1.33	1	1
1	A	116	GLU	CD-OE2	-62.49	0.56	1.25	1	1
1	A	110	GLU	CD-OE1	-61.03	0.58	1.25	1	1
1	A	13	SER	CB-OG	-57.41	0.67	1.42	1	1
1	A	110	GLU	CD-OE2	-56.69	0.63	1.25	1	1
1	A	56	ARG	NE-CZ	-56.54	0.59	1.33	1	1
1	A	106	PHE	CG-CD2	-56.00	0.54	1.38	1	1
1	A	94	TYR	CE1-CZ	-54.62	0.67	1.38	1	1
1	A	116	GLU	CD-OE1	-54.46	0.65	1.25	1	1
1	A	30	CYS	CB-SG	-54.09	0.90	1.82	1	1
1	A	94	TYR	CG-CD2	-53.11	0.70	1.39	1	1
1	A	94	TYR	CE2-CZ	-52.14	0.70	1.38	1	1
1	A	94	TYR	CG-CD1	-50.72	0.73	1.39	1	1
1	A	20	GLU	CD-OE1	-49.65	0.71	1.25	1	1
1	A	85	SER	C-O	-48.80	0.30	1.23	1	1
1	A	35	ASN	CG-OD1	-48.64	0.17	1.24	1	1
1	A	3	ARG	CZ-NH2	-46.07	0.73	1.33	1	1
1	A	21	ARG	CZ-NH1	-45.64	0.73	1.33	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	117	ARG	CZ-NH2	-45.23	0.74	1.33	1	1
1	A	54	ASP	CG-OD1	-45.13	0.21	1.25	1	1
1	A	21	ARG	CZ-NH2	-45.10	0.74	1.33	1	1
1	A	106	PHE	CG-CD1	-45.03	0.71	1.38	1	1
1	A	106	PHE	CE1-CZ	-44.12	0.53	1.37	1	1
1	A	3	ARG	NE-CZ	-43.65	0.76	1.33	1	1
1	A	20	GLU	CD-OE2	-42.82	0.78	1.25	1	1
1	A	16	ARG	CZ-NH2	-42.03	0.78	1.33	1	1
1	A	56	ARG	CZ-NH2	-41.76	0.78	1.33	1	1
1	A	84	HIS	CG-ND1	-41.64	0.47	1.38	1	1
1	A	100	ASP	CG-OD1	-41.43	0.30	1.25	1	1
1	A	92	SER	CB-OG	-41.31	0.88	1.42	1	1
1	A	73	HIS	CG-ND1	-41.28	0.47	1.38	1	1
1	A	104	LYS	CE-NZ	-40.41	0.48	1.49	1	1
1	A	34	GLU	CG-CD	-40.22	0.91	1.51	1	1
1	A	38	GLU	CG-CD	-39.80	0.92	1.51	1	1
1	A	54	ASP	C-O	-39.42	0.48	1.23	1	1
1	A	86	ASP	CG-OD1	-38.92	0.35	1.25	1	1
1	A	109	ASP	CG-OD2	-38.23	0.37	1.25	1	1
1	A	3	ARG	CD-NE	-37.52	0.82	1.46	1	1
1	A	21	ARG	CD-NE	-37.22	0.83	1.46	1	1
1	A	54	ASP	CG-OD2	-37.12	0.40	1.25	1	1
1	A	54	ASP	CB-CG	-36.90	0.74	1.51	1	1
1	A	88	ASP	CG-OD2	-36.89	0.40	1.25	1	1
1	A	21	ARG	NE-CZ	-35.67	0.86	1.33	1	1
1	A	84	HIS	C-O	-35.51	0.55	1.23	1	1
1	A	106	PHE	CE2-CZ	-35.46	0.69	1.37	1	1
1	A	117	ARG	CD-NE	-35.40	0.86	1.46	1	1
1	A	117	ARG	NE-CZ	-35.28	0.87	1.33	1	1
1	A	100	ASP	CB-CG	-35.11	0.78	1.51	1	1
1	A	11	ASP	CG-OD1	-34.78	0.45	1.25	1	1
1	A	88	ASP	CG-OD1	-34.30	0.46	1.25	1	1
1	A	56	ARG	CD-NE	-34.15	0.88	1.46	1	1
1	A	10	ASP	CG-OD1	-33.99	0.47	1.25	1	1
1	A	96	GLN	CG-CD	-33.75	0.73	1.51	1	1
1	A	96	GLN	CD-OE1	-33.09	0.51	1.24	1	1
1	A	100	ASP	CG-OD2	-32.95	0.49	1.25	1	1
1	A	84	HIS	CE1-NE2	-32.81	0.57	1.32	1	1
1	A	35	ASN	CG-ND2	-32.24	0.52	1.32	1	1
1	A	12	ASP	CG-OD1	-32.18	0.51	1.25	1	1
1	A	16	ARG	CD-NE	-32.04	0.92	1.46	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	12	ASP	CG-OD2	-31.86	0.52	1.25	1	1
1	A	68	GLN	CD-NE2	-31.38	0.54	1.32	1	1
1	A	57	MET	CA-CB	-30.93	0.85	1.53	1	1
1	A	10	ASP	CG-OD2	-30.92	0.54	1.25	1	1
1	A	35	ASN	CB-CG	-30.80	0.80	1.51	1	1
1	A	68	GLN	CD-OE1	-30.43	0.57	1.24	1	1
1	A	109	ASP	CG-OD1	-30.38	0.55	1.25	1	1
1	A	85	SER	CA-CB	-30.28	1.07	1.52	1	1
1	A	57	MET	CG-SD	-29.82	1.03	1.81	1	1
1	A	61	ASP	CG-OD1	-29.74	0.56	1.25	1	1
1	A	67	LYS	CE-NZ	-29.41	0.75	1.49	1	1
1	A	65	LEU	CG-CD1	-29.04	0.44	1.51	1	1
1	A	33	PHE	CG-CD2	-28.92	0.95	1.38	1	1
1	A	33	PHE	CG-CD1	-28.69	0.95	1.38	1	1
1	A	72	ARG	NE-CZ	-28.18	0.96	1.33	1	1
1	A	72	ARG	CZ-NH2	-28.17	0.96	1.33	1	1
1	A	86	ASP	CG-OD2	-27.98	0.60	1.25	1	1
1	A	34	GLU	CD-OE1	-27.70	0.95	1.25	1	1
1	A	45	SER	CB-OG	-27.62	1.06	1.42	1	1
1	A	23	LEU	CG-CD1	-27.39	0.50	1.51	1	1
1	A	11	ASP	CG-OD2	-27.32	0.62	1.25	1	1
1	A	56	ARG	CB-CG	-27.29	0.78	1.52	1	1
1	A	120	SER	CB-OG	-27.11	1.07	1.42	1	1
1	A	46	LYS	CE-NZ	-26.88	0.81	1.49	1	1
1	A	73	HIS	CD2-NE2	-25.92	0.81	1.38	1	1
1	A	61	ASP	CG-OD2	-25.35	0.67	1.25	1	1
1	A	117	ARG	CB-CG	-24.76	0.85	1.52	1	1
1	A	70	LYS	CE-NZ	-24.64	0.87	1.49	1	1
1	A	54	ASP	C-N	-24.36	0.78	1.34	1	1
1	A	84	HIS	CD2-NE2	-23.86	0.85	1.38	1	1
1	A	73	HIS	CE1-NE2	-23.84	0.77	1.32	1	1
1	A	19	LEU	CG-CD1	-23.68	0.64	1.51	1	1
1	A	95	GLN	CD-OE1	-23.66	0.71	1.24	1	1
1	A	76	LEU	CG-CD1	-23.64	0.64	1.51	1	1
1	A	57	MET	CB-CG	-23.63	0.75	1.51	1	1
1	A	65	LEU	CB-CG	-23.52	0.84	1.52	1	1
1	A	76	LEU	CG-CD2	-23.14	0.66	1.51	1	1
1	A	74	PRO	C-O	-22.70	0.77	1.23	1	1
1	A	14	SER	CB-OG	-22.50	1.13	1.42	1	1
1	A	33	PHE	CE2-CZ	-22.50	0.94	1.37	1	1
1	A	33	PHE	CE1-CZ	-22.44	0.94	1.37	1	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	84	HIS	CG-CD2	-22.19	0.98	1.35	1	1
1	A	67	LYS	CD-CE	-21.85	0.96	1.51	1	1
1	A	72	ARG	CD-NE	-21.39	1.10	1.46	1	1
1	A	16	ARG	NE-CZ	-20.97	1.05	1.33	1	1
1	A	88	ASP	CB-CG	-20.92	1.07	1.51	1	1
1	A	65	LEU	CG-CD2	-20.74	0.75	1.51	1	1
1	A	74	PRO	N-CD	-20.43	1.19	1.47	1	1
1	A	85	SER	C-N	-20.42	0.87	1.34	1	1
1	A	97	GLY	C-O	-20.41	0.91	1.23	1	1
1	A	66	LEU	CG-CD1	-20.01	0.77	1.51	1	1
1	A	84	HIS	CB-CG	-19.49	1.15	1.50	1	1
1	A	12	ASP	CB-CG	-19.31	1.11	1.51	1	1
1	A	104	LYS	CD-CE	-19.16	1.03	1.51	1	1
1	A	56	ARG	CG-CD	-19.06	1.04	1.51	1	1
1	A	20	GLU	CG-CD	-18.74	1.23	1.51	1	1
1	A	10	ASP	CB-CG	-18.70	1.12	1.51	1	1
1	A	23	LEU	CG-CD2	-18.53	0.83	1.51	1	1
1	A	19	LEU	CG-CD2	-18.41	0.83	1.51	1	1
1	A	35	ASN	C-O	-18.05	0.89	1.23	1	1
1	A	37	ASN	CG-OD1	-17.99	0.84	1.24	1	1
1	A	109	ASP	CB-CG	-17.98	1.14	1.51	1	1
1	A	73	HIS	CB-CG	-17.76	1.18	1.50	1	1
1	A	86	ASP	CB-CG	-17.61	1.14	1.51	1	1
1	A	10	ASP	C-O	-17.58	0.90	1.23	1	1
1	A	66	LEU	CG-CD2	-17.17	0.88	1.51	1	1
1	A	72	ARG	CG-CD	-17.13	1.09	1.51	1	1
1	A	75	MET	CG-SD	-17.00	1.36	1.81	1	1
1	A	59	GLY	C-O	-16.70	0.96	1.23	1	1
1	A	68	GLN	CG-CD	-16.00	1.14	1.51	1	1
1	A	96	GLN	CD-NE2	-15.93	0.93	1.32	1	1
1	A	95	GLN	CG-CD	-15.93	1.14	1.51	1	1
1	A	74	PRO	CA-CB	-15.84	1.21	1.53	1	1
1	A	53	SER	CB-OG	-15.79	1.21	1.42	1	1
1	A	60	MET	CG-SD	-15.78	1.40	1.81	1	1
1	A	81	MET	SD-CE	-15.59	0.90	1.77	1	1
1	A	84	HIS	C-N	-15.55	0.98	1.34	1	1
1	A	74	PRO	C-N	-15.34	0.98	1.34	1	1
1	A	71	GLN	CB-CG	-15.29	1.11	1.52	1	1
1	A	87	LEU	CG-CD1	-15.04	0.96	1.51	1	1
1	A	11	ASP	CB-CG	-14.96	1.20	1.51	1	1
1	A	60	MET	SD-CE	-14.90	0.94	1.77	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	35	ASN	C-N	-14.46	1.07	1.33	1	1
1	A	83	ALA	C-O	-14.41	0.95	1.23	1	1
1	A	57	MET	SD-CE	-14.38	0.97	1.77	1	1
1	A	106	PHE	CB-CG	-14.24	1.27	1.51	1	1
1	A	70	LYS	CD-CE	-13.91	1.16	1.51	1	1
1	A	97	GLY	C-N	-13.63	1.02	1.34	1	1
1	A	75	MET	SD-CE	-13.35	1.03	1.77	1	1
1	A	107	ASP	CG-OD2	-13.03	0.95	1.25	1	1
1	A	104	LYS	CG-CD	-12.76	1.09	1.52	1	1
1	A	67	LYS	CG-CD	-12.62	1.09	1.52	1	1
1	A	117	ARG	CG-CD	-12.36	1.21	1.51	1	1
1	A	58	PRO	C-O	-12.23	0.98	1.23	1	1
1	A	73	HIS	C-O	-11.98	1.00	1.23	1	1
1	A	73	HIS	CG-CD2	-11.94	1.15	1.35	1	1
1	A	87	LEU	CG-CD2	-11.78	1.08	1.51	1	1
1	A	84	HIS	CA-CB	-11.67	1.28	1.53	1	1
1	A	3	ARG	CB-CG	-11.63	1.21	1.52	1	1
1	A	10	ASP	C-N	-11.41	1.07	1.34	1	1
1	A	67	LYS	CB-CG	-11.35	1.21	1.52	1	1
1	A	106	PHE	CD1-CE1	-11.30	1.16	1.39	1	1
1	A	106	PHE	CD2-CE2	-11.28	1.16	1.39	1	1
1	A	84	HIS	ND1-CE1	-11.25	1.06	1.34	1	1
1	A	56	ARG	CA-CB	-11.08	1.29	1.53	1	1
1	A	73	HIS	C-N	-11.04	1.13	1.34	1	1
1	A	20	GLU	CB-CG	-10.95	1.31	1.52	1	1
1	A	95	GLN	CB-CG	-10.67	1.23	1.52	1	1
1	A	81	MET	CB-CG	-10.61	1.17	1.51	1	1
1	A	57	MET	N-CA	-10.12	1.26	1.46	1	1
1	A	107	ASP	CG-OD1	-9.92	1.02	1.25	1	1
1	A	3	ARG	C-N	-9.83	1.15	1.33	1	1
1	A	61	ASP	C-O	-9.72	1.04	1.23	1	1
1	A	55	ILE	C-O	-9.54	1.05	1.23	1	1
1	A	3	ARG	CA-CB	-9.39	1.33	1.53	1	1
1	A	56	ARG	C-N	-9.33	1.12	1.34	1	1
1	A	3	ARG	N-CA	-9.24	1.27	1.46	1	1
1	A	5	ILE	CG1-CD1	-9.20	0.86	1.50	1	1
1	A	121	HIS	CE1-NE2	-9.18	1.11	1.32	1	1
1	A	3	ARG	C-O	-8.94	1.06	1.23	1	1
1	A	121	HIS	CG-CD2	-8.77	1.20	1.35	1	1
1	A	104	LYS	CB-CG	-8.75	1.28	1.52	1	1
1	A	58	PRO	N-CA	-8.71	1.32	1.47	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	73	HIS	ND1-CE1	-8.61	1.13	1.34	1	1
1	A	86	ASP	CA-CB	-8.51	1.35	1.53	1	1
1	A	49	ASP	CG-OD1	-8.50	1.05	1.25	1	1
1	A	3	ARG	CG-CD	-8.33	1.31	1.51	1	1
1	A	61	ASP	CB-CG	-8.31	1.34	1.51	1	1
1	A	83	ALA	C-N	-7.93	1.15	1.34	1	1
1	A	50	VAL	C-O	-7.92	1.08	1.23	1	1
1	A	75	MET	CA-CB	-7.92	1.36	1.53	1	1
1	A	55	ILE	C-N	-7.90	1.15	1.34	1	1
1	A	61	ASP	C-N	-7.81	1.19	1.33	1	1
1	A	96	GLN	CB-CG	-7.81	1.31	1.52	1	1
1	A	56	ARG	CA-C	-7.71	1.32	1.52	1	1
1	A	59	GLY	C-N	-7.54	1.16	1.34	1	1
1	A	74	PRO	CA-C	-7.31	1.38	1.52	1	1
1	A	56	ARG	C-O	-7.29	1.09	1.23	1	1
1	A	85	SER	CA-C	-7.02	1.34	1.52	1	1
1	A	86	ASP	N-CA	-6.90	1.32	1.46	1	1
1	A	46	LYS	CD-CE	-6.83	1.34	1.51	1	1
1	A	85	SER	N-CA	-6.70	1.32	1.46	1	1
1	A	59	GLY	N-CA	-6.65	1.36	1.46	1	1
1	A	103	PRO	C-N	-6.62	1.18	1.34	1	1
1	A	11	ASP	C-O	-6.51	1.10	1.23	1	1
1	A	75	MET	N-CA	-6.49	1.33	1.46	1	1
1	A	9	VAL	CB-CG1	-6.36	1.39	1.52	1	1
1	A	9	VAL	CB-CG2	-6.36	1.39	1.52	1	1
1	A	103	PRO	C-O	-6.35	1.10	1.23	1	1
1	A	84	HIS	CA-C	-6.26	1.36	1.52	1	1
1	A	121	HIS	CG-ND1	-6.24	1.25	1.38	1	1
1	A	58	PRO	CA-C	-5.88	1.41	1.52	1	1
1	A	57	MET	CA-C	-5.81	1.37	1.52	1	1
1	A	110	GLU	CB-CG	-5.81	1.41	1.52	1	1
1	A	95	GLN	CD-NE2	-5.79	1.18	1.32	1	1
1	A	50	VAL	C-N	-5.77	1.20	1.34	1	1
1	A	16	ARG	CB-CG	-5.76	1.37	1.52	1	1
1	A	75	MET	CB-CG	-5.76	1.32	1.51	1	1
1	A	70	LYS	CG-CD	-5.56	1.33	1.52	1	1
1	A	81	MET	CG-SD	-5.56	1.66	1.81	1	1
1	A	49	ASP	CG-OD2	-5.48	1.12	1.25	1	1
1	A	58	PRO	C-N	-5.45	1.23	1.33	1	1
1	A	12	ASP	C-O	-5.21	1.13	1.23	1	1
1	A	97	GLY	N-CA	-5.19	1.38	1.46	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	58	PRO	CG-CD	-5.13	1.33	1.50	1	1
1	A	74	PRO	CG-CD	-5.13	1.33	1.50	1	1
1	A	71	GLN	CG-CD	-5.09	1.39	1.51	1	1
1	A	37	ASN	CG-ND2	-5.08	1.20	1.32	1	1
1	A	94	TYR	CB-CG	-5.06	1.44	1.51	1	1
1	A	94	TYR	CD2-CE2	-5.05	1.31	1.39	1	1
1	A	116	GLU	CG-CD	-5.04	1.44	1.51	1	1

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	56	ARG	NE-CZ-NH1	-117.44	61.58	120.30	1	1
1	A	117	ARG	NE-CZ-NH2	88.74	164.67	120.30	1	1
1	A	16	ARG	NE-CZ-NH2	85.52	163.06	120.30	1	1
1	A	72	ARG	NE-CZ-NH2	82.89	161.74	120.30	1	1
1	A	56	ARG	NE-CZ-NH2	79.91	160.26	120.30	1	1
1	A	38	GLU	OE1-CD-OE2	-79.29	28.16	123.30	1	1
1	A	94	TYR	CD1-CG-CD2	-74.84	35.57	117.90	1	1
1	A	94	TYR	CB-CG-CD1	69.34	162.60	121.00	1	1
1	A	110	GLU	OE1-CD-OE2	-68.47	41.14	123.30	1	1
1	A	94	TYR	CB-CG-CD2	68.04	161.82	121.00	1	1
1	A	116	GLU	OE1-CD-OE2	-65.90	44.22	123.30	1	1
1	A	106	PHE	CD1-CG-CD2	-63.05	36.34	118.30	1	1
1	A	106	PHE	CB-CG-CD1	62.01	164.20	120.80	1	1
1	A	16	ARG	NH1-CZ-NH2	-60.65	52.68	119.40	1	1
1	A	54	ASP	O-C-N	-58.68	28.81	122.70	1	1
1	A	88	ASP	CB-CG-OD1	55.48	168.23	118.30	1	1
1	A	106	PHE	CB-CG-CD2	55.22	159.45	120.80	1	1
1	A	54	ASP	CB-CG-OD2	54.98	167.78	118.30	1	1
1	A	109	ASP	CB-CG-OD1	54.91	167.72	118.30	1	1
1	A	88	ASP	CB-CG-OD2	53.73	166.66	118.30	1	1
1	A	94	TYR	CG-CD1-CE1	51.77	162.72	121.30	1	1
1	A	94	TYR	CE1-CZ-CE2	-51.75	37.00	119.80	1	1
1	A	88	ASP	OD1-CG-OD2	-51.68	25.11	123.30	1	1
1	A	86	ASP	CB-CG-OD2	51.21	164.39	118.30	1	1
1	A	3	ARG	NE-CZ-NH2	51.10	145.85	120.30	1	1
1	A	85	SER	O-C-N	-50.65	41.67	122.70	1	1
1	A	94	TYR	CG-CD2-CE2	50.56	161.75	121.30	1	1
1	A	117	ARG	NH1-CZ-NH2	-48.78	65.74	119.40	1	1
1	A	109	ASP	OD1-CG-OD2	-48.63	30.91	123.30	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	16	ARG	NE-CZ-NH1	47.92	144.26	120.30	1	1
1	A	109	ASP	CB-CG-OD2	47.85	161.37	118.30	1	1
1	A	94	TYR	CZ-CE2-CD2	46.86	161.98	119.80	1	1
1	A	106	PHE	CE1-CZ-CE2	-46.11	37.01	120.00	1	1
1	A	94	TYR	CD1-CE1-CZ	45.75	160.98	119.80	1	1
1	A	54	ASP	OD1-CG-OD2	-45.73	36.42	123.30	1	1
1	A	86	ASP	OD1-CG-OD2	-42.23	43.06	123.30	1	1
1	A	11	ASP	CB-CG-OD2	42.07	156.16	118.30	1	1
1	A	54	ASP	CB-CG-OD1	41.66	155.80	118.30	1	1
1	A	72	ARG	NE-CZ-NH1	-40.70	99.95	120.30	1	1
1	A	35	ASN	OD1-CG-ND2	-39.94	30.05	121.90	1	1
1	A	106	PHE	CG-CD1-CE1	39.58	164.34	120.80	1	1
1	A	10	ASP	CB-CG-OD2	38.30	152.77	118.30	1	1
1	A	86	ASP	CB-CG-OD1	38.06	152.55	118.30	1	1
1	A	65	LEU	CB-CG-CD2	37.83	175.31	111.00	1	1
1	A	61	ASP	CB-CG-OD2	36.63	151.27	118.30	1	1
1	A	106	PHE	CZ-CE2-CD2	36.62	164.05	120.10	1	1
1	A	100	ASP	CB-CG-OD2	36.26	150.93	118.30	1	1
1	A	106	PHE	CG-CD2-CE2	34.98	159.28	120.80	1	1
1	A	11	ASP	OD1-CG-OD2	-34.48	57.79	123.30	1	1
1	A	10	ASP	OD1-CG-OD2	-33.70	59.27	123.30	1	1
1	A	10	ASP	CB-CG-OD1	32.95	147.96	118.30	1	1
1	A	12	ASP	CB-CG-OD2	32.68	147.71	118.30	1	1
1	A	106	PHE	CD1-CE1-CZ	32.41	158.99	120.10	1	1
1	A	12	ASP	CB-CG-OD1	32.13	147.22	118.30	1	1
1	A	61	ASP	OD1-CG-OD2	-31.46	63.52	123.30	1	1
1	A	76	LEU	CB-CG-CD2	30.95	163.62	111.00	1	1
1	A	11	ASP	CB-CG-OD1	30.83	146.05	118.30	1	1
1	A	12	ASP	OD1-CG-OD2	-30.65	65.07	123.30	1	1
1	A	117	ARG	CD-NE-CZ	30.40	166.16	123.60	1	1
1	A	23	LEU	CB-CG-CD2	30.26	162.44	111.00	1	1
1	A	76	LEU	CB-CG-CD1	30.20	162.35	111.00	1	1
1	A	61	ASP	CB-CG-OD1	29.90	145.21	118.30	1	1
1	A	16	ARG	CD-NE-CZ	29.36	164.71	123.60	1	1
1	A	72	ARG	CD-NE-CZ	28.09	162.93	123.60	1	1
1	A	81	MET	CG-SD-CE	27.34	143.94	100.20	1	1
1	A	76	LEU	CD1-CG-CD2	-27.16	29.02	110.50	1	1
1	A	56	ARG	CD-NE-CZ	26.95	161.33	123.60	1	1
1	A	84	HIS	ND1-CG-CD2	-26.74	68.56	106.00	1	1
1	A	104	LYS	CD-CE-NZ	26.71	173.14	111.70	1	1
1	A	33	PHE	CD1-CG-CD2	-26.30	84.11	118.30	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	56	ARG	CA-CB-CG	26.01	170.62	113.40	1	1
1	A	65	LEU	CD1-CG-CD2	-25.82	33.04	110.50	1	1
1	A	23	LEU	CB-CG-CD1	25.58	154.49	111.00	1	1
1	A	33	PHE	CB-CG-CD1	24.63	138.04	120.80	1	1
1	A	56	ARG	CG-CD-NE	24.57	163.40	111.80	1	1
1	A	23	LEU	CD1-CG-CD2	-24.44	37.18	110.50	1	1
1	A	33	PHE	CB-CG-CD2	24.36	137.85	120.80	1	1
1	A	38	GLU	CG-CD-OE2	23.83	165.96	118.30	1	1
1	A	38	GLU	CG-CD-OE1	23.79	165.88	118.30	1	1
1	A	85	SER	CA-C-N	23.61	169.13	117.20	1	1
1	A	68	GLN	OE1-CD-NE2	-23.58	67.67	121.90	1	1
1	A	54	ASP	CA-C-N	23.28	168.41	117.20	1	1
1	A	35	ASN	CB-CG-ND2	23.09	172.11	116.70	1	1
1	A	19	LEU	CB-CG-CD2	22.96	150.03	111.00	1	1
1	A	57	MET	CG-SD-CE	22.66	136.45	100.20	1	1
1	A	117	ARG	CG-CD-NE	22.49	159.03	111.80	1	1
1	A	100	ASP	OD1-CG-OD2	-21.73	82.02	123.30	1	1
1	A	96	GLN	CG-CD-OE1	-21.34	78.93	121.60	1	1
1	A	84	HIS	CG-CD2-NE2	21.29	149.65	109.20	1	1
1	A	110	GLU	CG-CD-OE2	21.01	160.33	118.30	1	1
1	A	116	GLU	CG-CD-OE1	20.57	159.43	118.30	1	1
1	A	56	ARG	CB-CG-CD	20.56	165.05	111.60	1	1
1	A	84	HIS	O-C-N	-20.42	90.03	122.70	1	1
1	A	75	MET	CG-SD-CE	20.41	132.85	100.20	1	1
1	A	54	ASP	CA-C-O	20.32	162.77	120.10	1	1
1	A	20	GLU	OE1-CD-OE2	-20.31	98.93	123.30	1	1
1	A	110	GLU	CG-CD-OE1	20.12	158.53	118.30	1	1
1	A	73	HIS	CE1-NE2-CD2	-19.89	56.86	106.60	1	1
1	A	84	HIS	CE1-NE2-CD2	-19.81	57.08	106.60	1	1
1	A	72	ARG	NH1-CZ-NH2	-19.18	98.30	119.40	1	1
1	A	33	PHE	CE1-CZ-CE2	-19.17	85.49	120.00	1	1
1	A	116	GLU	CG-CD-OE2	19.03	156.35	118.30	1	1
1	A	85	SER	C-N-CA	19.01	169.22	121.70	1	1
1	A	54	ASP	C-N-CA	18.93	169.04	121.70	1	1
1	A	65	LEU	CB-CG-CD1	18.74	142.86	111.00	1	1
1	A	117	ARG	NE-CZ-NH1	18.59	129.59	120.30	1	1
1	A	73	HIS	CG-CD2-NE2	18.52	144.38	109.20	1	1
1	A	70	LYS	CD-CE-NZ	18.43	154.08	111.70	1	1
1	A	35	ASN	CB-CG-OD1	18.12	157.84	121.60	1	1
1	A	67	LYS	CD-CE-NZ	18.11	153.35	111.70	1	1
1	A	19	LEU	CB-CG-CD1	18.09	141.76	111.00	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	95	GLN	CB-CG-CD	18.05	158.52	111.60	1	1
1	A	3	ARG	CD-NE-CZ	17.91	148.68	123.60	1	1
1	A	16	ARG	CG-CD-NE	17.89	149.36	111.80	1	1
1	A	34	GLU	OE1-CD-OE2	17.72	144.56	123.30	1	1
1	A	3	ARG	NE-CZ-NH1	-17.62	111.49	120.30	1	1
1	A	56	ARG	NH1-CZ-NH2	17.06	138.16	119.40	1	1
1	A	60	MET	CG-SD-CE	16.92	127.28	100.20	1	1
1	A	19	LEU	CD1-CG-CD2	-16.89	59.81	110.50	1	1
1	A	34	GLU	CG-CD-OE1	-16.14	86.01	118.30	1	1
1	A	84	HIS	CA-CB-CG	16.12	141.00	113.60	1	1
1	A	33	PHE	CG-CD1-CE1	15.86	138.25	120.80	1	1
1	A	73	HIS	ND1-CE1-NE2	15.81	144.68	109.90	1	1
1	A	33	PHE	CG-CD2-CE2	15.50	137.85	120.80	1	1
1	A	94	TYR	OH-CZ-CE2	15.48	161.89	120.10	1	1
1	A	66	LEU	CB-CG-CD2	15.39	137.17	111.00	1	1
1	A	3	ARG	NH1-CZ-NH2	-15.22	102.66	119.40	1	1
1	A	94	TYR	CE1-CZ-OH	15.19	161.10	120.10	1	1
1	A	3	ARG	CA-CB-CG	15.15	146.74	113.40	1	1
1	A	65	LEU	CA-CB-CG	15.15	150.15	115.30	1	1
1	A	33	PHE	CZ-CE2-CD2	14.51	137.51	120.10	1	1
1	A	68	GLN	CG-CD-OE1	13.93	149.47	121.60	1	1
1	A	33	PHE	CD1-CE1-CZ	13.92	136.80	120.10	1	1
1	A	85	SER	CA-C-O	13.86	149.20	120.10	1	1
1	A	84	HIS	CA-C-N	13.59	147.09	117.20	1	1
1	A	84	HIS	ND1-CE1-NE2	13.52	139.64	109.90	1	1
1	A	34	GLU	CB-CG-CD	13.46	150.54	114.20	1	1
1	A	30	CYS	CA-CB-SG	13.21	137.77	114.00	1	1
1	A	74	PRO	O-C-N	-13.15	101.66	122.70	1	1
1	A	97	GLY	O-C-N	-12.86	102.12	122.70	1	1
1	A	35	ASN	CA-CB-CG	12.52	140.94	113.40	1	1
1	A	107	ASP	CB-CG-OD1	12.23	129.31	118.30	1	1
1	A	84	HIS	CG-ND1-CE1	12.05	125.07	108.20	1	1
1	A	95	GLN	CG-CD-OE1	-11.74	98.12	121.60	1	1
1	A	10	ASP	O-C-N	-11.64	104.07	122.70	1	1
1	A	21	ARG	NE-CZ-NH2	11.52	126.06	120.30	1	1
1	A	35	ASN	O-C-N	-11.43	103.78	123.20	1	1
1	A	67	LYS	CG-CD-CE	11.40	146.11	111.90	1	1
1	A	84	HIS	C-N-CA	11.33	150.01	121.70	1	1
1	A	117	ARG	CA-CB-CG	11.13	137.88	113.40	1	1
1	A	68	GLN	CG-CD-NE2	10.90	142.86	116.70	1	1
1	A	96	GLN	CG-CD-NE2	10.84	142.71	116.70	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	21	ARG	NE-CZ-NH1	10.69	125.64	120.30	1	1
1	A	73	HIS	ND1-CG-CD2	-10.50	91.30	106.00	1	1
1	A	57	MET	N-CA-C	10.44	139.18	111.00	1	1
1	A	66	LEU	CB-CG-CD1	10.20	128.34	111.00	1	1
1	A	13	SER	CA-CB-OG	10.18	138.68	111.20	1	1
1	A	21	ARG	NH1-CZ-NH2	-10.09	108.30	119.40	1	1
1	A	66	LEU	CD1-CG-CD2	-10.09	80.24	110.50	1	1
1	A	87	LEU	CB-CG-CD2	9.82	127.70	111.00	1	1
1	A	84	HIS	CB-CG-CD2	9.79	161.16	130.80	1	1
1	A	100	ASP	CB-CG-OD1	9.72	127.05	118.30	1	1
1	A	100	ASP	CA-CB-CG	9.71	134.77	113.40	1	1
1	A	67	LYS	CB-CG-CD	9.65	136.69	111.60	1	1
1	A	38	GLU	CB-CG-CD	9.40	139.58	114.20	1	1
1	A	73	HIS	CB-CG-CD2	9.16	159.19	130.80	1	1
1	A	104	LYS	CG-CD-CE	9.06	139.09	111.90	1	1
1	A	3	ARG	CG-CD-NE	9.03	130.77	111.80	1	1
1	A	46	LYS	CD-CE-NZ	8.77	131.88	111.70	1	1
1	A	85	SER	CA-CB-OG	8.76	134.85	111.20	1	1
1	A	95	GLN	CG-CD-NE2	8.63	137.42	116.70	1	1
1	A	107	ASP	OD1-CG-OD2	-8.57	107.02	123.30	1	1
1	A	5	ILE	CB-CG1-CD1	8.37	137.33	113.90	1	1
1	A	54	ASP	CA-CB-CG	8.12	131.25	113.40	1	1
1	A	21	ARG	CG-CD-NE	7.84	128.27	111.80	1	1
1	A	20	GLU	CG-CD-OE2	7.73	133.75	118.30	1	1
1	A	74	PRO	CA-C-N	7.51	133.73	117.20	1	1
1	A	35	ASN	CA-C-N	7.31	130.82	116.20	1	1
1	A	96	GLN	OE1-CD-NE2	7.16	138.37	121.90	1	1
1	A	83	ALA	O-C-N	-7.14	111.28	122.70	1	1
1	A	57	MET	N-CA-CB	-7.06	97.89	110.60	1	1
1	A	37	ASN	CB-CG-ND2	7.05	133.62	116.70	1	1
1	A	12	ASP	CA-CB-CG	6.76	128.28	113.40	1	1
1	A	70	LYS	CG-CD-CE	6.74	132.12	111.90	1	1
1	A	92	SER	CA-CB-OG	6.60	129.03	111.20	1	1
1	A	121	HIS	ND1-CG-CD2	-6.33	97.14	106.00	1	1
1	A	71	GLN	CA-CB-CG	6.31	127.29	113.40	1	1
1	A	55	ILE	O-C-N	-6.12	112.90	122.70	1	1
1	A	121	HIS	CG-ND1-CE1	6.10	116.74	108.20	1	1
1	A	49	ASP	CB-CG-OD2	6.06	123.75	118.30	1	1
1	A	81	MET	CB-CG-SD	5.99	130.36	112.40	1	1
1	A	107	ASP	CB-CG-OD2	5.98	123.68	118.30	1	1
1	A	85	SER	N-CA-C	5.93	127.01	111.00	1	1

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	74	PRO	C-N-CA	5.90	136.45	121.70	1	1
1	A	10	ASP	CA-C-N	5.82	130.00	117.20	1	1
1	A	59	GLY	O-C-N	-5.75	113.50	122.70	1	1
1	A	97	GLY	CA-C-N	5.70	129.73	117.20	1	1
1	A	3	ARG	O-C-N	-5.67	113.56	123.20	1	1
1	A	81	MET	CA-CB-CG	5.59	122.80	113.30	1	1
1	A	96	GLN	CB-CG-CD	5.56	126.07	111.60	1	1
1	A	34	GLU	CG-CD-OE2	5.56	129.42	118.30	1	1
1	A	73	HIS	CB-CG-ND1	-5.48	109.49	123.20	1	1
1	A	35	ASN	C-N-CA	5.42	133.68	122.30	1	1
1	A	86	ASP	CA-CB-CG	5.25	124.94	113.40	1	1
1	A	87	LEU	CD1-CG-CD2	-5.24	94.78	110.50	1	1
1	A	61	ASP	O-C-N	-5.09	114.55	123.20	1	1
1	A	87	LEU	CB-CG-CD1	5.06	119.59	111.00	1	1
1	A	21	ARG	CD-NE-CZ	5.01	130.62	123.60	1	1

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	908	918	915	126±51
All	All	23608	23868	23773	3263

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 69.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:ARG:CD	1:A:56:ARG:CB	1.55	1.81	1	1
1:A:57:MET:CE	1:A:57:MET:CG	1.53	1.86	1	1
1:A:117:ARG:CB	1:A:117:ARG:CD	1.51	1.80	1	1
1:A:94:TYR:CZ	1:A:94:TYR:CD1	1.51	1.96	1	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:TYR:CE2	1:A:94:TYR:CG	1.48	1.99	1	1
1:A:23:LEU:CD1	1:A:23:LEU:CB	1.48	1.91	1	1
1:A:68:GLN:CG	1:A:68:GLN:OE1	1.45	1.65	1	1
1:A:94:TYR:CZ	1:A:94:TYR:CD2	1.44	1.99	1	1
1:A:94:TYR:CE1	1:A:94:TYR:CG	1.42	2.02	1	1
1:A:19:LEU:CD1	1:A:19:LEU:CB	1.42	1.97	1	1
1:A:73:HIS:NE2	1:A:73:HIS:CG	1.42	1.86	1	1
1:A:109:ASP:OD1	1:A:109:ASP:CB	1.41	1.68	1	1
1:A:86:ASP:OD2	1:A:86:ASP:CB	1.35	1.73	1	1
1:A:65:LEU:HG	1:A:65:LEU:CA	1.34	1.49	1	1
1:A:20:GLU:CG	1:A:20:GLU:OE1	1.33	1.75	1	1
1:A:94:TYR:CB	1:A:94:TYR:CD2	1.32	2.11	1	1
1:A:66:LEU:CD1	1:A:66:LEU:CB	1.31	2.07	1	1
1:A:76:LEU:CD1	1:A:76:LEU:CB	1.31	2.09	1	1
1:A:56:ARG:CG	1:A:56:ARG:CA	1.30	2.07	1	1
1:A:11:ASP:CB	1:A:11:ASP:OD2	1.30	1.78	1	1
1:A:76:LEU:CD2	1:A:76:LEU:CB	1.28	2.11	1	1
1:A:54:ASP:O	1:A:55:ILE:CA	1.28	1.78	1	1
1:A:60:MET:CE	1:A:60:MET:CG	1.28	2.10	1	1
1:A:94:TYR:CB	1:A:94:TYR:CD1	1.27	2.14	1	1
1:A:46:LYS:CD	1:A:46:LYS:NZ	1.26	1.98	1	1
1:A:16:ARG:NH2	1:A:16:ARG:NE	1.25	1.81	1	1
1:A:70:LYS:NZ	1:A:70:LYS:CD	1.25	1.98	1	1
1:A:61:ASP:OD1	1:A:61:ASP:CB	1.25	1.83	1	1
1:A:73:HIS:NE2	1:A:73:HIS:ND1	1.24	1.81	1	1
1:A:20:GLU:CG	1:A:20:GLU:OE2	1.23	1.86	1	1
1:A:30:CYS:CA	1:A:30:CYS:SG	1.22	2.27	1	1
1:A:54:ASP:CG	1:A:54:ASP:CA	1.22	2.07	1	1
1:A:117:ARG:NE	1:A:117:ARG:CG	1.20	2.03	1	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:21:ARG:CG	1.20	2.02	1	1
1:A:75:MET:CG	1:A:75:MET:CE	1.19	2.20	1	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:19:LEU:CB	1.19	2.19	1	1
1:A:94:TYR:CE1	1:A:94:TYR:OH	1.16	1.96	1	1
1:A:117:ARG:CA	1:A:117:ARG:CG	1.15	2.23	1	1
1:A:85:SER:O	1:A:86:ASP:CA	1.15	1.94	1	1
1:A:66:LEU:CD2	1:A:66:LEU:CB	1.14	2.23	1	1
1:A:100:ASP:CG	1:A:100:ASP:CA	1.14	2.15	1	1
1:A:5:ILE:CD1	1:A:5:ILE:CB	1.13	2.24	1	1
1:A:61:ASP:OD2	1:A:61:ASP:CB	1.13	1.95	1	1
1:A:116:GLU:CG	1:A:116:GLU:OE2	1.13	1.97	1	1
1:A:57:MET:SD	1:A:57:MET:CG	1.12	1.03	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:LEU:CD2	1:A:23:LEU:CB	1.12	2.25	1	1
1:A:54:ASP:O	1:A:54:ASP:CA	1.12	1.97	1	1
1:A:75:MET:SD	1:A:75:MET:CE	1.12	1.03	1	1
1:A:69:ILE:HD13	1:A:78:VAL:HG21	1.11	1.22	13	9
1:A:35:ASN:CA	1:A:35:ASN:CG	1.10	2.19	1	1
1:A:94:TYR:CE2	1:A:94:TYR:OH	1.10	1.99	1	1
1:A:110:GLU:OE1	1:A:110:GLU:CG	1.10	2.00	1	1
1:A:54:ASP:C	1:A:55:ILE:CA	1.08	2.22	1	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:19:LEU:HD12	1.07	1.66	1	1
1:A:38:GLU:CD	1:A:38:GLU:CB	1.07	2.22	1	1
1:A:23:LEU:HG	1:A:23:LEU:CD2	1.06	1.75	1	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:19:LEU:HG	1.06	1.69	1	1
1:A:57:MET:SD	1:A:57:MET:CE	1.06	0.97	1	1
1:A:13:SER:CA	1:A:13:SER:OG	1.06	2.02	1	1
1:A:13:SER:HB3	1:A:13:SER:OG	1.06	1.29	1	1
1:A:13:SER:HB2	1:A:13:SER:OG	1.06	1.29	1	1
1:A:43:LEU:HD13	1:A:73:HIS:CE1	1.05	1.85	1	6
1:A:110:GLU:OE2	1:A:110:GLU:CG	1.05	2.05	1	1
1:A:6:VAL:HG11	1:A:23:LEU:HD13	1.04	1.24	2	6
1:A:60:MET:CE	1:A:60:MET:SD	1.04	0.94	1	1
1:A:85:SER:C	1:A:86:ASP:CA	1.03	2.18	1	1
1:A:38:GLU:HG3	1:A:38:GLU:CD	1.03	1.47	1	1
1:A:66:LEU:CD2	1:A:66:LEU:HG	1.03	1.63	1	1
1:A:38:GLU:HG2	1:A:38:GLU:CD	1.03	1.47	1	1
1:A:85:SER:CA	1:A:86:ASP:N	1.03	2.20	1	1
1:A:23:LEU:HD22	1:A:28:LEU:HD13	1.03	1.28	2	4
1:A:19:LEU:HD23	1:A:19:LEU:CD1	1.02	1.66	1	1
1:A:116:GLU:CG	1:A:116:GLU:OE1	1.02	2.06	1	1
1:A:46:LYS:NZ	1:A:46:LYS:HE2	1.02	1.41	1	1
1:A:38:GLU:CG	1:A:38:GLU:CD	1.01	0.92	1	1
1:A:21:ARG:HD2	1:A:21:ARG:NE	1.01	1.43	1	1
1:A:117:ARG:CB	1:A:117:ARG:HD3	1.01	1.80	1	1
1:A:70:LYS:NZ	1:A:70:LYS:CE	1.01	0.87	1	1
1:A:73:HIS:NE2	1:A:73:HIS:CD2	1.00	0.80	1	1
1:A:66:LEU:CD1	1:A:66:LEU:HG	1.00	1.61	1	1
1:A:19:LEU:CD1	1:A:19:LEU:HG	1.00	1.55	1	1
1:A:81:MET:SD	1:A:81:MET:CE	1.00	0.90	1	1
1:A:117:ARG:NE	1:A:117:ARG:CD	1.00	0.86	1	1
1:A:30:CYS:SG	1:A:30:CYS:CB	1.00	0.90	1	1
1:A:46:LYS:NZ	1:A:46:LYS:HE3	0.99	1.41	1	1
1:A:70:LYS:HE3	1:A:70:LYS:NZ	0.99	1.39	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:LEU:HD12	1:A:108:ILE:HD12	0.99	1.30	22	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:21:ARG:HD3	0.98	1.43	1	1
1:A:75:MET:SD	1:A:75:MET:HE3	0.97	1.63	1	1
1:A:117:ARG:NE	1:A:117:ARG:HD3	0.97	1.36	1	1
1:A:21:ARG:CD	1:A:21:ARG:NE	0.97	0.83	1	1
1:A:73:HIS:NE2	1:A:73:HIS:CE1	0.97	0.77	1	1
1:A:75:MET:SD	1:A:75:MET:HE1	0.97	1.63	1	1
1:A:13:SER:CB	1:A:13:SER:OG	0.97	0.67	1	1
1:A:70:LYS:HE2	1:A:70:LYS:NZ	0.96	1.39	1	1
1:A:46:LYS:NZ	1:A:46:LYS:CE	0.96	0.81	1	1
1:A:66:LEU:CG	1:A:66:LEU:HD22	0.96	1.51	1	1
1:A:75:MET:SD	1:A:75:MET:HE2	0.96	1.63	1	1
1:A:54:ASP:CA	1:A:55:ILE:N	0.96	2.27	1	1
1:A:5:ILE:CG1	1:A:5:ILE:HD12	0.96	1.50	1	1
1:A:83:ALA:HB1	1:A:87:LEU:HD23	0.96	1.32	20	3
1:A:66:LEU:CG	1:A:66:LEU:HD23	0.95	1.51	1	1
1:A:69:ILE:HG22	1:A:73:HIS:CD2	0.95	1.97	10	2
1:A:5:ILE:HD13	1:A:5:ILE:CG1	0.94	1.50	1	1
1:A:117:ARG:NE	1:A:117:ARG:HD2	0.94	1.36	1	1
1:A:19:LEU:HD21	1:A:19:LEU:CG	0.94	1.47	1	1
1:A:100:ASP:CG	1:A:100:ASP:HB2	0.94	1.37	1	1
1:A:81:MET:CG	1:A:81:MET:CE	0.94	2.45	1	1
1:A:66:LEU:CG	1:A:66:LEU:HD21	0.94	1.51	1	1
1:A:117:ARG:HG3	1:A:117:ARG:CB	0.93	1.47	1	1
1:A:100:ASP:CG	1:A:100:ASP:HB3	0.93	1.37	1	1
1:A:60:MET:HB3	1:A:64:ALA:HB2	0.93	1.39	23	17
1:A:23:LEU:HD22	1:A:23:LEU:CG	0.93	1.47	1	1
1:A:60:MET:HE3	1:A:60:MET:SD	0.93	1.56	1	1
1:A:5:ILE:CG1	1:A:5:ILE:HD11	0.93	1.50	1	1
1:A:16:ARG:HA	1:A:32:THR:HG21	0.93	1.41	8	24
1:A:57:MET:SD	1:A:57:MET:HE1	0.93	1.58	1	1
1:A:69:ILE:HG22	1:A:73:HIS:HD2	0.93	1.22	10	1
1:A:35:ASN:HB3	1:A:35:ASN:CG	0.92	1.37	1	1
1:A:57:MET:SD	1:A:57:MET:HE3	0.92	1.58	1	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:19:LEU:CG	0.92	1.47	1	1
1:A:23:LEU:HD21	1:A:23:LEU:CG	0.92	1.47	1	1
1:A:23:LEU:HD23	1:A:23:LEU:CG	0.92	1.47	1	1
1:A:60:MET:HE2	1:A:60:MET:SD	0.92	1.56	1	1
1:A:35:ASN:HB2	1:A:35:ASN:CG	0.92	1.37	1	1
1:A:57:MET:SD	1:A:57:MET:HE2	0.91	1.58	1	1
1:A:54:ASP:CG	1:A:54:ASP:HB2	0.91	1.36	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:LEU:HD22	1:A:19:LEU:CG	0.91	1.47	1	1
1:A:69:ILE:HG23	1:A:73:HIS:ND1	0.91	1.80	9	6
1:A:9:VAL:HG13	1:A:33:PHE:HB2	0.91	1.39	4	20
1:A:54:ASP:CG	1:A:54:ASP:HB3	0.90	1.36	1	1
1:A:5:ILE:CD1	1:A:5:ILE:HG13	0.90	1.43	1	1
1:A:117:ARG:HG2	1:A:117:ARG:CB	0.90	1.47	1	1
1:A:35:ASN:CG	1:A:35:ASN:CB	0.89	0.80	1	1
1:A:6:VAL:HG11	1:A:23:LEU:CD2	0.89	1.98	4	13
1:A:83:ALA:HB2	1:A:101:TYR:CD2	0.89	2.02	24	19
1:A:60:MET:SD	1:A:60:MET:HE1	0.89	1.56	1	1
1:A:5:ILE:CD1	1:A:5:ILE:HG12	0.89	1.43	1	1
1:A:55:ILE:HG13	1:A:62:GLY:HA3	0.89	1.45	1	9
1:A:66:LEU:CG	1:A:66:LEU:HD11	0.89	1.43	1	1
1:A:60:MET:CB	1:A:64:ALA:HB2	0.89	1.97	21	22
1:A:81:MET:SD	1:A:81:MET:HE1	0.89	1.53	1	1
1:A:81:MET:SD	1:A:81:MET:HE2	0.88	1.53	1	1
1:A:55:ILE:HD11	1:A:84:HIS:CE1	0.88	2.02	9	3
1:A:117:ARG:HB3	1:A:117:ARG:CG	0.88	1.42	1	1
1:A:16:ARG:NH2	1:A:16:ARG:CZ	0.88	0.78	1	1
1:A:66:LEU:CG	1:A:66:LEU:HD13	0.88	1.43	1	1
1:A:43:LEU:HD13	1:A:73:HIS:NE2	0.88	1.84	1	13
1:A:66:LEU:CD2	1:A:66:LEU:CG	0.88	0.88	1	1
1:A:81:MET:SD	1:A:81:MET:HE3	0.88	1.53	1	1
1:A:65:LEU:CG	1:A:65:LEU:CA	0.87	2.29	1	1
1:A:65:LEU:HD23	1:A:65:LEU:CG	0.87	1.41	1	1
1:A:66:LEU:CG	1:A:66:LEU:HD12	0.87	1.43	1	1
1:A:65:LEU:HD22	1:A:65:LEU:CG	0.87	1.41	1	1
1:A:85:SER:C	1:A:86:ASP:N	0.87	0.87	1	1
1:A:30:CYS:CB	1:A:30:CYS:HG	0.87	1.72	1	1
1:A:100:ASP:CB	1:A:100:ASP:CG	0.87	0.78	1	1
1:A:117:ARG:HB2	1:A:117:ARG:CG	0.87	1.42	1	1
1:A:65:LEU:HD21	1:A:65:LEU:CG	0.86	1.41	1	1
1:A:5:ILE:CG1	1:A:5:ILE:CD1	0.86	0.87	1	1
1:A:7:TRP:CD1	1:A:31:THR:HG22	0.86	2.05	21	26
1:A:69:ILE:HG23	1:A:73:HIS:CE1	0.85	2.06	13	4
1:A:117:ARG:CB	1:A:117:ARG:CG	0.85	0.85	1	1
1:A:16:ARG:HH11	1:A:16:ARG:NH2	0.85	1.41	1	1
1:A:116:GLU:CD	1:A:116:GLU:OE1	0.84	0.65	1	1
1:A:61:ASP:CG	1:A:61:ASP:OD2	0.84	0.67	1	1
1:A:65:LEU:HB3	1:A:65:LEU:CG	0.84	1.38	1	1
1:A:70:LYS:HB3	1:A:96:GLN:OE1	0.84	1.72	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:THR:HG23	1:A:76:LEU:HD23	0.84	1.50	2	5
1:A:36:GLY:CA	1:A:65:LEU:HD21	0.84	2.03	20	4
1:A:65:LEU:CB	1:A:65:LEU:CG	0.84	0.84	1	1
1:A:6:VAL:HG11	1:A:23:LEU:HD23	0.83	1.50	4	10
1:A:54:ASP:CG	1:A:54:ASP:CB	0.83	0.74	1	1
1:A:55:ILE:HG12	1:A:62:GLY:HA3	0.83	1.50	26	5
1:A:47:THR:HG23	1:A:76:LEU:HD12	0.83	1.48	22	4
1:A:23:LEU:HD12	1:A:23:LEU:CD2	0.83	1.37	1	1
1:A:19:LEU:CG	1:A:19:LEU:CD2	0.83	0.83	1	1
1:A:20:GLU:HA	1:A:30:CYS:SG	0.82	2.14	1	3
1:A:43:LEU:HD13	1:A:73:HIS:HE1	0.82	1.27	1	1
1:A:23:LEU:CG	1:A:23:LEU:CD2	0.82	0.83	1	1
1:A:65:LEU:HB2	1:A:65:LEU:CG	0.82	1.38	1	1
1:A:30:CYS:SG	1:A:30:CYS:HB3	0.82	1.46	1	1
1:A:73:HIS:HE2	1:A:73:HIS:CD2	0.81	1.61	1	1
1:A:102:LEU:HD13	1:A:114:LEU:HD22	0.81	1.52	19	4
1:A:73:HIS:HE1	1:A:73:HIS:NE2	0.81	1.38	1	1
1:A:66:LEU:HA	1:A:69:ILE:HD12	0.81	1.52	13	14
1:A:6:VAL:HG11	1:A:23:LEU:HG	0.81	1.51	25	7
1:A:8:VAL:HG11	1:A:19:LEU:HD13	0.81	1.51	18	4
1:A:30:CYS:SG	1:A:30:CYS:HB2	0.81	1.46	1	1
1:A:110:GLU:OE2	1:A:110:GLU:CD	0.81	0.63	1	1
1:A:9:VAL:HG12	1:A:33:PHE:HB2	0.81	1.53	11	3
1:A:63:LEU:HA	1:A:66:LEU:HD23	0.81	1.53	11	4
1:A:9:VAL:HG11	1:A:36:GLY:HA2	0.80	1.53	13	21
1:A:76:LEU:CG	1:A:76:LEU:HD21	0.80	1.34	1	1
1:A:66:LEU:HD22	1:A:93:ALA:HB1	0.80	1.52	3	7
1:A:23:LEU:CD2	1:A:28:LEU:HD13	0.80	2.06	20	8
1:A:66:LEU:HD13	1:A:93:ALA:HB2	0.80	1.54	4	11
1:A:14:SER:O	1:A:18:VAL:HG23	0.80	1.76	16	24
1:A:36:GLY:HA3	1:A:65:LEU:HD23	0.80	1.51	1	1
1:A:76:LEU:HD13	1:A:76:LEU:CG	0.80	1.33	1	1
1:A:23:LEU:HD22	1:A:28:LEU:CD1	0.80	2.07	21	4
1:A:76:LEU:CG	1:A:76:LEU:HD22	0.80	1.34	1	1
1:A:76:LEU:CG	1:A:76:LEU:HD23	0.80	1.34	1	1
1:A:69:ILE:HG23	1:A:73:HIS:CD2	0.80	2.12	24	1
1:A:79:ILE:CG2	1:A:114:LEU:HD23	0.79	2.07	5	18
1:A:19:LEU:CG	1:A:19:LEU:HD12	0.79	1.33	1	1
1:A:19:LEU:CG	1:A:19:LEU:HD13	0.79	1.33	1	1
1:A:57:MET:SD	1:A:57:MET:HG3	0.79	1.59	1	1
1:A:73:HIS:HD2	1:A:73:HIS:NE2	0.79	1.40	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:54:ASP:C	1:A:55:ILE:N	0.79	0.78	1	1
1:A:10:ASP:HB3	1:A:15:ILE:HG13	0.79	1.54	18	2
1:A:76:LEU:CG	1:A:76:LEU:HD11	0.78	1.33	1	1
1:A:73:HIS:HE2	1:A:73:HIS:CE1	0.78	1.58	1	1
1:A:76:LEU:HD12	1:A:76:LEU:CG	0.78	1.33	1	1
1:A:11:ASP:CG	1:A:11:ASP:OD2	0.78	0.62	1	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:19:LEU:HD11	0.78	1.26	1	1
1:A:69:ILE:HG12	1:A:73:HIS:CE1	0.77	2.13	5	5
1:A:21:ARG:HD3	1:A:21:ARG:NH1	0.77	1.76	1	1
1:A:60:MET:HB2	1:A:64:ALA:HB2	0.77	1.56	7	11
1:A:6:VAL:HG23	1:A:50:VAL:HG13	0.77	1.54	13	24
1:A:66:LEU:CD1	1:A:66:LEU:CG	0.77	0.77	1	1
1:A:19:LEU:HD22	1:A:19:LEU:CD1	0.77	1.32	1	1
1:A:19:LEU:CG	1:A:19:LEU:HD11	0.77	1.33	1	1
1:A:4:GLY:O	1:A:5:ILE:HD13	0.77	1.80	26	5
1:A:56:ARG:HD2	1:A:56:ARG:CB	0.77	2.03	1	1
1:A:65:LEU:HD12	1:A:66:LEU:N	0.76	1.94	2	3
1:A:19:LEU:CD2	1:A:19:LEU:HD13	0.76	1.30	1	1
1:A:16:ARG:O	1:A:20:GLU:HG2	0.76	1.80	1	3
1:A:65:LEU:HG	1:A:65:LEU:CB	0.76	0.64	1	1
1:A:40:LEU:HD13	1:A:68:GLN:CB	0.76	2.11	8	18
1:A:79:ILE:HD13	1:A:115:VAL:HG23	0.76	1.54	22	3
1:A:110:GLU:OE1	1:A:110:GLU:CD	0.76	0.58	1	1
1:A:56:ARG:HG3	1:A:56:ARG:CB	0.76	1.29	1	1
1:A:55:ILE:HG21	1:A:82:THR:O	0.76	1.80	6	4
1:A:93:ALA:HB1	1:A:98:ALA:HB2	0.76	1.58	24	12
1:A:6:VAL:CG1	1:A:23:LEU:HD13	0.76	2.10	17	4
1:A:69:ILE:HD13	1:A:78:VAL:CG2	0.75	2.11	9	5
1:A:55:ILE:HG22	1:A:81:MET:HG3	0.75	1.58	12	6
1:A:34:GLU:HG3	1:A:38:GLU:HB2	0.75	1.57	3	13
1:A:19:LEU:CD1	1:A:19:LEU:CD2	0.75	0.75	1	1
1:A:61:ASP:CG	1:A:61:ASP:OD1	0.75	0.57	1	1
1:A:116:GLU:CD	1:A:116:GLU:OE2	0.75	0.56	1	1
1:A:56:ARG:HG2	1:A:56:ARG:CB	0.75	1.29	1	1
1:A:18:VAL:HG12	1:A:108:ILE:HG12	0.75	1.59	20	19
1:A:7:TRP:O	1:A:51:LEU:HD12	0.75	1.82	10	14
1:A:23:LEU:HD23	1:A:28:LEU:HD13	0.74	1.58	20	3
1:A:47:THR:HG23	1:A:76:LEU:HD13	0.74	1.58	9	2
1:A:65:LEU:CG	1:A:65:LEU:CD2	0.74	0.75	1	1
1:A:78:VAL:H	1:A:98:ALA:HA	0.74	1.42	23	12
1:A:48:PRO:O	1:A:76:LEU:HD11	0.74	1.83	16	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:ARG:CG	1:A:56:ARG:HB3	0.74	1.28	1	1
1:A:102:LEU:HD23	1:A:106:PHE:CD1	0.74	2.16	22	2
1:A:18:VAL:HG12	1:A:108:ILE:HD13	0.73	1.57	22	1
1:A:39:VAL:HG11	1:A:51:LEU:HD11	0.73	1.59	19	9
1:A:65:LEU:CD2	1:A:78:VAL:HG11	0.73	2.14	24	1
1:A:9:VAL:HG13	1:A:39:VAL:HG23	0.73	1.58	23	14
1:A:83:ALA:HB1	1:A:87:LEU:HD21	0.73	1.60	18	5
1:A:15:ILE:HG23	1:A:19:LEU:HD12	0.73	1.58	18	1
1:A:102:LEU:CD1	1:A:114:LEU:HD22	0.73	2.13	10	13
1:A:33:PHE:HB3	1:A:38:GLU:HB3	0.73	1.57	19	25
1:A:68:GLN:OE1	1:A:68:GLN:CD	0.73	0.57	1	1
1:A:68:GLN:OE1	1:A:68:GLN:NE2	0.73	0.62	1	1
1:A:66:LEU:HD21	1:A:80:ILE:HD11	0.73	1.59	14	4
1:A:69:ILE:CD1	1:A:78:VAL:HG21	0.73	2.14	9	6
1:A:70:LYS:HZ2	1:A:70:LYS:CE	0.73	1.44	1	1
1:A:39:VAL:HG12	1:A:43:LEU:CD1	0.73	2.14	20	17
1:A:57:MET:CE	1:A:57:MET:HG3	0.73	2.08	1	1
1:A:70:LYS:HZ3	1:A:70:LYS:CE	0.73	1.44	1	1
1:A:56:ARG:HB2	1:A:56:ARG:CG	0.72	1.28	1	1
1:A:74:PRO:O	1:A:75:MET:HG3	0.72	1.82	1	2
1:A:23:LEU:CD1	1:A:28:LEU:HD13	0.72	2.14	19	10
1:A:79:ILE:HG23	1:A:114:LEU:HD23	0.72	1.60	5	3
1:A:70:LYS:HB3	1:A:96:GLN:CD	0.72	2.02	1	3
1:A:40:LEU:HD21	1:A:65:LEU:CD1	0.72	2.15	18	1
1:A:16:ARG:HH21	1:A:16:ARG:CZ	0.72	1.42	1	1
1:A:70:LYS:HA	1:A:73:HIS:CD2	0.72	2.20	10	1
1:A:69:ILE:HG22	1:A:73:HIS:NE2	0.72	1.98	23	1
1:A:6:VAL:HG21	1:A:23:LEU:HD21	0.72	1.61	19	7
1:A:69:ILE:HG23	1:A:73:HIS:NE2	0.72	2.00	24	2
1:A:70:LYS:HZ1	1:A:70:LYS:CE	0.72	1.44	1	1
1:A:57:MET:SD	1:A:57:MET:HG2	0.71	1.59	1	1
1:A:55:ILE:HD13	1:A:82:THR:O	0.71	1.86	10	8
1:A:21:ARG:HH11	1:A:21:ARG:HD3	0.71	1.33	1	1
1:A:47:THR:CG2	1:A:76:LEU:HD13	0.71	2.14	9	2
1:A:9:VAL:HG23	1:A:52:LEU:O	0.71	1.86	18	12
1:A:4:GLY:C	1:A:5:ILE:HD13	0.71	2.05	5	6
1:A:86:ASP:OD2	1:A:86:ASP:CG	0.71	0.61	1	1
1:A:48:PRO:HG2	1:A:76:LEU:HD11	0.70	1.60	14	1
1:A:9:VAL:HG22	1:A:39:VAL:HG21	0.70	1.62	19	13
1:A:48:PRO:HD2	1:A:76:LEU:HD11	0.70	1.62	10	6
1:A:8:VAL:O	1:A:32:THR:HA	0.70	1.86	3	22

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:3:ARG:HG2	1:A:5:ILE:HD11	0.70	1.62	5	7
1:A:23:LEU:CG	1:A:23:LEU:HD13	0.69	1.23	1	1
1:A:83:ALA:HB1	1:A:87:LEU:HG	0.69	1.62	7	5
1:A:56:ARG:C	1:A:58:PRO:HD2	0.69	2.08	5	1
1:A:9:VAL:HG23	1:A:53:SER:HA	0.69	1.63	11	2
1:A:87:LEU:HD13	1:A:90:ALA:HB3	0.69	1.65	12	7
1:A:63:LEU:HD13	1:A:86:ASP:HB3	0.69	1.63	6	6
1:A:6:VAL:HG12	1:A:29:THR:O	0.69	1.87	25	8
1:A:6:VAL:HG21	1:A:23:LEU:CD1	0.69	2.18	18	5
1:A:46:LYS:CE	1:A:46:LYS:HZ1	0.69	1.39	1	1
1:A:31:THR:HG23	1:A:33:PHE:CE1	0.69	2.22	6	23
1:A:23:LEU:HD23	1:A:23:LEU:HD11	0.69	0.69	1	1
1:A:23:LEU:HD12	1:A:23:LEU:CG	0.69	1.23	1	1
1:A:50:VAL:CG2	1:A:79:ILE:HD11	0.69	2.18	12	18
1:A:87:LEU:HD23	1:A:90:ALA:HB3	0.69	1.62	23	9
1:A:36:GLY:HA3	1:A:65:LEU:HD22	0.69	1.62	7	5
1:A:8:VAL:HG11	1:A:19:LEU:CD1	0.69	2.17	2	3
1:A:75:MET:HA	1:A:96:GLN:O	0.69	1.88	1	11
1:A:15:ILE:CG2	1:A:19:LEU:HD12	0.69	2.18	18	1
1:A:80:ILE:HG13	1:A:101:TYR:CZ	0.68	2.23	21	19
1:A:3:ARG:CG	1:A:5:ILE:HD11	0.68	2.18	24	4
1:A:46:LYS:CE	1:A:46:LYS:HZ2	0.68	1.39	1	1
1:A:102:LEU:HD11	1:A:114:LEU:HD22	0.68	1.64	26	8
1:A:106:PHE:O	1:A:107:ASP:O	0.68	2.11	20	25
1:A:8:VAL:HG21	1:A:19:LEU:HD23	0.68	1.65	17	6
1:A:33:PHE:CG	1:A:39:VAL:HG22	0.68	2.23	15	11
1:A:53:SER:O	1:A:80:ILE:HA	0.68	1.89	11	9
1:A:10:ASP:HB3	1:A:15:ILE:HG21	0.68	1.65	7	6
1:A:53:SER:HB2	1:A:80:ILE:HD13	0.68	1.63	9	4
1:A:23:LEU:HG	1:A:23:LEU:CD1	0.68	1.46	1	1
1:A:117:ARG:CZ	1:A:117:ARG:HH21	0.68	1.39	1	1
1:A:21:ARG:CD	1:A:21:ARG:HE	0.68	1.42	1	1
1:A:69:ILE:HG21	1:A:78:VAL:HG22	0.68	1.65	17	2
1:A:52:LEU:HG	1:A:79:ILE:HB	0.68	1.65	14	5
1:A:55:ILE:HD12	1:A:82:THR:HB	0.68	1.66	16	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:19:LEU:HD11	0.68	0.70	1	1
1:A:56:ARG:HG2	1:A:56:ARG:HB3	0.67	0.99	1	1
1:A:21:ARG:HH11	1:A:21:ARG:CZ	0.67	1.38	1	1
1:A:69:ILE:HG21	1:A:78:VAL:CG2	0.67	2.19	22	3
1:A:21:ARG:HH21	1:A:21:ARG:CZ	0.67	1.39	1	1
1:A:46:LYS:CE	1:A:46:LYS:HZ3	0.67	1.39	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:67:LYS:O	1:A:70:LYS:HG3	0.67	1.90	16	9
1:A:93:ALA:O	1:A:96:GLN:HG3	0.67	1.89	2	11
1:A:21:ARG:CZ	1:A:21:ARG:HH12	0.67	1.38	1	1
1:A:26:ALA:HB3	1:A:28:LEU:CD1	0.67	2.20	18	25
1:A:23:LEU:O	1:A:28:LEU:HD12	0.67	1.90	2	15
1:A:117:ARG:CZ	1:A:117:ARG:HH22	0.67	1.39	1	1
1:A:112:VAL:O	1:A:115:VAL:HG12	0.67	1.90	18	26
1:A:80:ILE:HD13	1:A:101:TYR:CE1	0.67	2.25	16	3
1:A:6:VAL:HG11	1:A:23:LEU:HD22	0.66	1.64	20	4
1:A:80:ILE:N	1:A:80:ILE:HD12	0.66	2.05	12	2
1:A:52:LEU:HD23	1:A:79:ILE:O	0.66	1.91	4	11
1:A:65:LEU:HD13	1:A:65:LEU:CG	0.66	1.19	1	1
1:A:40:LEU:HD13	1:A:68:GLN:HB3	0.66	1.66	22	14
1:A:90:ALA:HB1	1:A:101:TYR:CE1	0.66	2.25	23	6
1:A:76:LEU:CG	1:A:76:LEU:CD2	0.66	0.66	1	1
1:A:63:LEU:HD11	1:A:85:SER:HB2	0.66	1.68	22	1
1:A:34:GLU:HG2	1:A:38:GLU:CD	0.66	2.11	8	1
1:A:67:LYS:O	1:A:70:LYS:HG2	0.66	1.89	2	8
1:A:56:ARG:CG	1:A:56:ARG:CB	0.66	0.78	1	1
1:A:48:PRO:HD2	1:A:76:LEU:HD21	0.66	1.68	14	2
1:A:19:LEU:HG	1:A:108:ILE:HD11	0.66	1.66	18	4
1:A:21:ARG:HH22	1:A:21:ARG:CZ	0.66	1.39	1	1
1:A:51:LEU:O	1:A:78:VAL:HA	0.66	1.91	11	3
1:A:50:VAL:HG21	1:A:115:VAL:HG23	0.66	1.67	24	2
1:A:8:VAL:HG21	1:A:20:GLU:OE2	0.66	1.91	7	1
1:A:68:GLN:HA	1:A:71:GLN:NE2	0.65	2.06	1	1
1:A:9:VAL:HG13	1:A:39:VAL:CG2	0.65	2.21	16	15
1:A:65:LEU:CD1	1:A:66:LEU:HD12	0.65	2.21	12	1
1:A:50:VAL:HG21	1:A:115:VAL:CG2	0.65	2.21	24	2
1:A:65:LEU:HD12	1:A:65:LEU:CG	0.65	1.19	1	1
1:A:82:THR:HG23	1:A:84:HIS:HD2	0.65	1.52	24	1
1:A:61:ASP:OD1	1:A:61:ASP:OD2	0.65	0.65	1	1
1:A:3:ARG:HG3	1:A:5:ILE:HD11	0.65	1.68	24	2
1:A:87:LEU:HD23	1:A:90:ALA:CB	0.65	2.22	5	10
1:A:40:LEU:HD21	1:A:65:LEU:HD13	0.65	1.69	18	1
1:A:40:LEU:HD13	1:A:68:GLN:HB2	0.65	1.69	25	6
1:A:43:LEU:HD13	1:A:73:HIS:CD2	0.65	2.27	13	8
1:A:63:LEU:HA	1:A:66:LEU:HD13	0.65	1.69	12	2
1:A:6:VAL:HG13	1:A:30:CYS:HA	0.64	1.67	3	12
1:A:9:VAL:CG1	1:A:39:VAL:HG23	0.64	2.22	11	21
1:A:16:ARG:HH21	1:A:16:ARG:HH12	0.64	0.95	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:LEU:HD12	1:A:23:LEU:HD21	0.64	1.03	1	1
1:A:76:LEU:HD12	1:A:76:LEU:HD21	0.64	0.67	1	1
1:A:26:ALA:HB3	1:A:28:LEU:HD11	0.64	1.69	18	15
1:A:65:LEU:HD21	1:A:78:VAL:HG11	0.64	1.70	24	1
1:A:87:LEU:HD22	1:A:90:ALA:HB3	0.64	1.67	11	1
1:A:54:ASP:C	1:A:54:ASP:O	0.64	0.48	1	1
1:A:17:TRP:O	1:A:21:ARG:HB2	0.64	1.93	18	3
1:A:39:VAL:HG11	1:A:51:LEU:CD2	0.64	2.23	8	1
1:A:8:VAL:HB	1:A:32:THR:HG22	0.64	1.68	6	6
1:A:91:VAL:HA	1:A:94:TYR:CE2	0.64	2.28	13	13
1:A:19:LEU:CD1	1:A:23:LEU:HD12	0.64	2.23	16	1
1:A:76:LEU:CG	1:A:76:LEU:CD1	0.64	0.64	1	1
1:A:19:LEU:HD22	1:A:19:LEU:HD13	0.64	1.03	1	1
1:A:56:ARG:HG3	1:A:56:ARG:O	0.64	1.93	1	1
1:A:19:LEU:CG	1:A:19:LEU:CD1	0.64	0.64	1	1
1:A:76:LEU:HD11	1:A:76:LEU:HD23	0.63	0.65	1	1
1:A:77:PRO:HB2	1:A:99:PHE:HD1	0.63	1.52	12	1
1:A:23:LEU:CG	1:A:23:LEU:HD11	0.63	1.23	1	1
1:A:62:GLY:O	1:A:65:LEU:HG	0.63	1.93	9	5
1:A:58:PRO:HD2	1:A:61:ASP:O	0.63	1.93	3	4
1:A:63:LEU:HD23	1:A:90:ALA:HB2	0.63	1.69	16	10
1:A:94:TYR:CE1	1:A:100:ASP:HA	0.63	2.28	13	8
1:A:50:VAL:HG11	1:A:119:ILE:HD11	0.63	1.70	23	4
1:A:50:VAL:HG13	1:A:50:VAL:O	0.63	1.93	18	9
1:A:63:LEU:HD21	1:A:87:LEU:HA	0.63	1.70	3	1
1:A:8:VAL:HG13	1:A:52:LEU:HB3	0.63	1.70	3	16
1:A:92:SER:O	1:A:95:GLN:NE2	0.62	2.32	8	2
1:A:117:ARG:HB3	1:A:117:ARG:CD	0.62	1.82	1	1
1:A:102:LEU:HD23	1:A:106:PHE:HD1	0.62	1.52	22	1
1:A:33:PHE:CD1	1:A:39:VAL:HG22	0.62	2.28	7	14
1:A:83:ALA:HB1	1:A:87:LEU:CD2	0.62	2.24	14	6
1:A:48:PRO:O	1:A:76:LEU:HD21	0.62	1.94	24	2
1:A:21:ARG:CZ	1:A:21:ARG:HE	0.62	1.45	1	1
1:A:47:THR:CG2	1:A:76:LEU:HD23	0.62	2.23	2	2
1:A:6:VAL:HG21	1:A:23:LEU:CD2	0.62	2.24	19	8
1:A:73:HIS:CB	1:A:76:LEU:HB2	0.62	2.24	12	2
1:A:87:LEU:O	1:A:87:LEU:HD13	0.62	1.94	20	2
1:A:51:LEU:O	1:A:79:ILE:HD12	0.62	1.94	18	11
1:A:53:SER:OG	1:A:65:LEU:HD23	0.62	1.93	17	1
1:A:9:VAL:HG11	1:A:35:ASN:C	0.62	2.15	3	2
1:A:8:VAL:HG21	1:A:20:GLU:OE1	0.62	1.95	4	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:GLY:HA3	1:A:65:LEU:HD21	0.62	1.70	22	3
1:A:66:LEU:HD13	1:A:93:ALA:CB	0.62	2.24	21	8
1:A:74:PRO:HA	1:A:96:GLN:HB2	0.62	1.72	6	1
1:A:93:ALA:C	1:A:98:ALA:HB3	0.62	2.15	2	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:108:ILE:HD11	0.61	1.72	12	3
1:A:79:ILE:CD1	1:A:115:VAL:HG23	0.61	2.25	22	4
1:A:55:ILE:HG13	1:A:61:ASP:O	0.61	1.95	3	7
1:A:56:ARG:HD3	1:A:56:ARG:CB	0.61	2.13	1	1
1:A:65:LEU:CD2	1:A:69:ILE:HD11	0.61	2.25	21	2
1:A:90:ALA:O	1:A:93:ALA:HB3	0.61	1.96	26	16
1:A:23:LEU:HD22	1:A:23:LEU:CD1	0.61	1.19	1	1
1:A:55:ILE:HG22	1:A:81:MET:HG2	0.61	1.70	22	1
1:A:43:LEU:HD21	1:A:48:PRO:HD2	0.61	1.72	13	20
1:A:109:ASP:CG	1:A:109:ASP:OD1	0.61	0.55	1	1
1:A:69:ILE:HG22	1:A:73:HIS:HE2	0.61	1.55	23	1
1:A:99:PHE:CD2	1:A:118:ALA:HB2	0.61	2.31	21	1
1:A:106:PHE:O	1:A:110:GLU:HB2	0.61	1.94	21	26
1:A:56:ARG:C	1:A:56:ARG:CG	0.61	2.68	1	1
1:A:6:VAL:HG11	1:A:23:LEU:CD1	0.61	2.26	15	4
1:A:23:LEU:HD23	1:A:23:LEU:CD1	0.61	1.42	1	1
1:A:63:LEU:HD11	1:A:90:ALA:HB2	0.61	1.71	13	1
1:A:94:TYR:CD1	1:A:94:TYR:CG	0.60	0.73	1	1
1:A:76:LEU:HD12	1:A:76:LEU:CD2	0.60	1.26	1	1
1:A:53:SER:CB	1:A:65:LEU:HD22	0.60	2.26	24	1
1:A:3:ARG:HB3	1:A:5:ILE:HD11	0.60	1.72	12	7
1:A:48:PRO:HG2	1:A:76:LEU:HD21	0.60	1.72	17	1
1:A:79:ILE:HG21	1:A:114:LEU:HD23	0.60	1.73	4	7
1:A:94:TYR:HA	1:A:98:ALA:HB3	0.60	1.74	11	5
1:A:80:ILE:HG21	1:A:101:TYR:CE2	0.60	2.31	25	8
1:A:92:SER:O	1:A:95:GLN:HG3	0.60	1.97	18	6
1:A:83:ALA:HB2	1:A:101:TYR:CG	0.60	2.32	23	2
1:A:83:ALA:CB	1:A:87:LEU:HD23	0.60	2.25	11	1
1:A:50:VAL:HG22	1:A:79:ILE:HD11	0.60	1.72	26	3
1:A:94:TYR:CE2	1:A:94:TYR:CZ	0.60	0.70	1	1
1:A:20:GLU:CD	1:A:20:GLU:OE2	0.60	0.78	1	1
1:A:76:LEU:CD1	1:A:76:LEU:HG	0.60	1.59	1	1
1:A:36:GLY:HA2	1:A:65:LEU:HD21	0.60	1.74	8	2
1:A:43:LEU:HD13	1:A:73:HIS:HE2	0.60	1.55	16	1
1:A:35:ASN:CG	1:A:35:ASN:HD21	0.60	1.21	1	1
1:A:6:VAL:HG21	1:A:23:LEU:HD11	0.59	1.73	6	4
1:A:58:PRO:HG3	1:A:65:LEU:HD21	0.59	1.73	14	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:GLU:HG2	1:A:35:ASN:N	0.59	2.10	26	5
1:A:7:TRP:CH2	1:A:46:LYS:HG2	0.59	2.32	17	2
1:A:34:GLU:HG3	1:A:35:ASN:N	0.59	2.12	1	1
1:A:69:ILE:O	1:A:73:HIS:CD2	0.59	2.55	23	2
1:A:63:LEU:CB	1:A:89:ALA:HB3	0.59	2.27	19	10
1:A:6:VAL:HG23	1:A:50:VAL:CG1	0.59	2.27	22	11
1:A:16:ARG:CA	1:A:32:THR:HG21	0.59	2.27	4	6
1:A:35:ASN:HD22	1:A:35:ASN:CG	0.59	1.21	1	1
1:A:60:MET:O	1:A:62:GLY:N	0.59	2.36	20	10
1:A:66:LEU:CD1	1:A:90:ALA:HA	0.59	2.27	13	1
1:A:55:ILE:HA	1:A:62:GLY:HA3	0.59	1.75	19	6
1:A:39:VAL:HG11	1:A:51:LEU:HD21	0.59	1.74	8	1
1:A:81:MET:O	1:A:102:LEU:O	0.59	2.21	22	3
1:A:21:ARG:CZ	1:A:21:ARG:NH2	0.59	0.74	1	1
1:A:73:HIS:CE1	1:A:76:LEU:HG	0.59	2.33	24	1
1:A:23:LEU:HD22	1:A:23:LEU:HD13	0.59	0.68	1	1
1:A:65:LEU:N	1:A:65:LEU:HG	0.59	2.12	1	1
1:A:23:LEU:HD13	1:A:23:LEU:O	0.59	1.98	14	4
1:A:66:LEU:HD22	1:A:93:ALA:CB	0.59	2.25	3	1
1:A:54:ASP:O	1:A:55:ILE:HG22	0.58	1.98	10	3
1:A:43:LEU:HD23	1:A:46:LYS:O	0.58	1.98	20	11
1:A:91:VAL:HA	1:A:94:TYR:CD2	0.58	2.33	8	19
1:A:76:LEU:HD23	1:A:76:LEU:CD1	0.58	1.27	1	1
1:A:19:LEU:HD11	1:A:112:VAL:HG22	0.58	1.74	9	2
1:A:117:ARG:CZ	1:A:117:ARG:NH2	0.58	0.74	1	1
1:A:80:ILE:HD12	1:A:80:ILE:N	0.58	2.13	15	1
1:A:11:ASP:O	1:A:12:ASP:HB2	0.58	1.97	4	3
1:A:55:ILE:CG2	1:A:82:THR:HB	0.58	2.29	24	4
1:A:21:ARG:CZ	1:A:21:ARG:NH1	0.58	0.73	1	1
1:A:28:LEU:CD2	1:A:119:ILE:HD13	0.58	2.28	3	4
1:A:80:ILE:HD13	1:A:101:TYR:CD1	0.58	2.34	15	2
1:A:66:LEU:HD23	1:A:78:VAL:HG11	0.58	1.76	16	2
1:A:16:ARG:O	1:A:20:GLU:CG	0.58	2.51	1	5
1:A:66:LEU:HD11	1:A:80:ILE:HD11	0.58	1.75	11	2
1:A:19:LEU:CD2	1:A:108:ILE:HD11	0.58	2.29	26	3
1:A:112:VAL:HG12	1:A:116:GLU:OE2	0.58	1.98	6	2
1:A:79:ILE:HG21	1:A:114:LEU:CD2	0.58	2.28	4	2
1:A:37:ASN:HA	1:A:40:LEU:CD1	0.58	2.29	6	2
1:A:9:VAL:HG22	1:A:39:VAL:HG23	0.58	1.74	3	1
1:A:19:LEU:HD12	1:A:23:LEU:HD12	0.57	1.76	16	2
1:A:47:THR:CG2	1:A:76:LEU:HD12	0.57	2.26	22	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:VAL:O	1:A:50:VAL:HG13	0.57	1.99	26	3
1:A:19:LEU:CD1	1:A:108:ILE:HD11	0.57	2.29	15	1
1:A:39:VAL:HG12	1:A:43:LEU:HD11	0.57	1.76	22	5
1:A:55:ILE:HG21	1:A:82:THR:H	0.57	1.59	16	2
1:A:94:TYR:CD2	1:A:94:TYR:CG	0.57	0.70	1	1
1:A:73:HIS:HB2	1:A:76:LEU:HB2	0.57	1.76	12	1
1:A:19:LEU:CA	1:A:19:LEU:CD1	0.57	2.81	1	1
1:A:81:MET:HB2	1:A:106:PHE:CD2	0.57	2.35	21	1
1:A:77:PRO:HB2	1:A:99:PHE:CD1	0.57	2.35	12	1
1:A:21:ARG:CD	1:A:21:ARG:HH11	0.57	1.65	1	1
1:A:73:HIS:N	1:A:73:HIS:CD2	0.56	2.73	17	3
1:A:20:GLU:CB	1:A:20:GLU:OE1	0.56	2.44	1	1
1:A:66:LEU:HD11	1:A:80:ILE:HG13	0.56	1.77	23	2
1:A:40:LEU:HB3	1:A:72:ARG:HD2	0.56	1.76	9	1
1:A:81:MET:O	1:A:102:LEU:HB2	0.56	2.00	26	2
1:A:55:ILE:HB	1:A:80:ILE:HG23	0.56	1.76	16	4
1:A:66:LEU:HD23	1:A:69:ILE:HD12	0.56	1.77	13	2
1:A:6:VAL:O	1:A:30:CYS:HA	0.56	2.01	18	11
1:A:38:GLU:H	1:A:38:GLU:CD	0.56	2.02	8	1
1:A:63:LEU:HD22	1:A:86:ASP:O	0.56	1.99	3	11
1:A:43:LEU:CD1	1:A:73:HIS:CE1	0.56	2.88	24	5
1:A:73:HIS:CD2	1:A:73:HIS:N	0.56	2.73	22	4
1:A:100:ASP:OD1	1:A:114:LEU:HD21	0.56	1.99	10	3
1:A:65:LEU:HB2	1:A:65:LEU:HG	0.56	1.17	1	1
1:A:65:LEU:O	1:A:69:ILE:HG13	0.56	2.00	9	7
1:A:19:LEU:O	1:A:23:LEU:HB2	0.56	2.00	21	9
1:A:114:LEU:HD12	1:A:117:ARG:HD3	0.56	1.77	10	1
1:A:93:ALA:CB	1:A:98:ALA:HB2	0.56	2.29	6	1
1:A:83:ALA:O	1:A:84:HIS:O	0.56	2.24	1	2
1:A:106:PHE:HA	1:A:110:GLU:HB2	0.56	1.78	18	2
1:A:102:LEU:HB3	1:A:106:PHE:CE1	0.56	2.36	6	1
1:A:9:VAL:CG2	1:A:39:VAL:HG21	0.56	2.31	14	8
1:A:9:VAL:CG2	1:A:53:SER:HA	0.56	2.31	11	3
1:A:23:LEU:HD23	1:A:28:LEU:CD1	0.56	2.31	20	2
1:A:54:ASP:O	1:A:55:ILE:N	0.56	0.42	1	1
1:A:102:LEU:HD23	1:A:105:PRO:O	0.56	2.00	12	2
1:A:94:TYR:CE1	1:A:94:TYR:CZ	0.56	0.67	1	1
1:A:18:VAL:HG12	1:A:108:ILE:CG1	0.56	2.30	20	3
1:A:36:GLY:HA3	1:A:65:LEU:HD13	0.56	1.77	11	1
1:A:102:LEU:HD23	1:A:106:PHE:HA	0.55	1.77	8	10
1:A:33:PHE:HB3	1:A:38:GLU:CB	0.55	2.31	11	10

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:LEU:HD21	1:A:80:ILE:CD1	0.55	2.31	11	3
1:A:108:ILE:HG23	1:A:109:ASP:N	0.55	2.15	22	1
1:A:20:GLU:HA	1:A:30:CYS:HB3	0.55	1.79	26	10
1:A:43:LEU:HB3	1:A:73:HIS:NE2	0.55	2.15	6	3
1:A:95:GLN:HG2	1:A:96:GLN:N	0.55	2.15	12	7
1:A:104:LYS:HB2	1:A:105:PRO:HD3	0.55	1.78	9	2
1:A:7:TRP:CG	1:A:48:PRO:HB3	0.55	2.36	26	4
1:A:99:PHE:CZ	1:A:118:ALA:HB2	0.55	2.37	17	5
1:A:63:LEU:HD11	1:A:84:HIS:O	0.55	2.01	4	1
1:A:94:TYR:N	1:A:98:ALA:HB3	0.55	2.17	18	5
1:A:63:LEU:HA	1:A:66:LEU:HD12	0.55	1.78	2	1
1:A:58:PRO:CD	1:A:62:GLY:HA2	0.55	2.31	16	5
1:A:107:ASP:O	1:A:111:ALA:CB	0.55	2.55	18	14
1:A:66:LEU:HD21	1:A:80:ILE:HG13	0.55	1.78	20	1
1:A:39:VAL:HG12	1:A:43:LEU:HG	0.55	1.78	4	5
1:A:94:TYR:HA	1:A:98:ALA:O	0.55	2.02	25	3
1:A:36:GLY:C	1:A:65:LEU:HD21	0.55	2.21	22	2
1:A:76:LEU:CD2	1:A:76:LEU:HG	0.55	1.61	1	1
1:A:66:LEU:HD11	1:A:101:TYR:OH	0.55	2.02	4	2
1:A:28:LEU:HD22	1:A:119:ILE:HD13	0.55	1.78	3	2
1:A:47:THR:HG23	1:A:76:LEU:CD2	0.55	2.32	21	4
1:A:104:LYS:H	1:A:105:PRO:HD2	0.54	1.62	26	13
1:A:114:LEU:HA	1:A:117:ARG:HD3	0.54	1.78	3	2
1:A:93:ALA:HB1	1:A:98:ALA:CB	0.54	2.32	16	7
1:A:53:SER:HB2	1:A:80:ILE:CD1	0.54	2.32	21	4
1:A:20:GLU:HG3	1:A:21:ARG:N	0.54	2.17	1	20
1:A:37:ASN:HA	1:A:40:LEU:HD12	0.54	1.79	23	3
1:A:9:VAL:CG1	1:A:33:PHE:HB2	0.54	2.32	10	12
1:A:81:MET:CB	1:A:106:PHE:CE1	0.54	2.91	7	3
1:A:112:VAL:HA	1:A:115:VAL:HG12	0.54	1.80	13	17
1:A:60:MET:HB3	1:A:64:ALA:CB	0.54	2.26	22	6
1:A:55:ILE:HG21	1:A:82:THR:N	0.54	2.18	16	1
1:A:53:SER:HB2	1:A:65:LEU:HD22	0.54	1.78	24	1
1:A:63:LEU:HA	1:A:66:LEU:CD1	0.54	2.33	17	2
1:A:33:PHE:CE2	1:A:39:VAL:HA	0.54	2.37	15	3
1:A:65:LEU:HG	1:A:69:ILE:HD11	0.54	1.80	24	2
1:A:34:GLU:OE2	1:A:38:GLU:HG3	0.54	2.03	8	1
1:A:63:LEU:HB3	1:A:89:ALA:HB3	0.54	1.80	20	3
1:A:76:LEU:HD12	1:A:77:PRO:HD2	0.54	1.78	20	1
1:A:36:GLY:O	1:A:40:LEU:HG	0.54	2.03	24	6
1:A:20:GLU:CD	1:A:20:GLU:OE1	0.54	0.71	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:102:LEU:HD11	1:A:114:LEU:CD2	0.53	2.33	26	2
1:A:16:ARG:HG2	1:A:20:GLU:HG3	0.53	1.80	4	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:19:LEU:CD2	0.53	2.33	15	4
1:A:11:ASP:OD1	1:A:11:ASP:OD2	0.53	0.54	1	1
1:A:58:PRO:HG3	1:A:65:LEU:HG	0.53	1.79	10	1
1:A:12:ASP:O	1:A:14:SER:N	0.53	2.41	25	9
1:A:57:MET:HB3	1:A:58:PRO:CD	0.53	2.34	19	5
1:A:16:ARG:NH2	1:A:16:ARG:NH1	0.53	0.63	1	1
1:A:43:LEU:HD21	1:A:48:PRO:CD	0.53	2.34	18	11
1:A:7:TRP:CD1	1:A:31:THR:CG2	0.53	2.91	8	14
1:A:55:ILE:HB	1:A:80:ILE:CG2	0.53	2.33	7	7
1:A:23:LEU:HD11	1:A:28:LEU:HB2	0.53	1.81	14	6
1:A:104:LYS:HB3	1:A:105:PRO:HD3	0.53	1.81	20	3
1:A:66:LEU:HD11	1:A:101:TYR:CE1	0.53	2.38	13	1
1:A:66:LEU:HG	1:A:93:ALA:CB	0.53	2.34	25	1
1:A:33:PHE:CE1	1:A:39:VAL:HG22	0.53	2.39	21	3
1:A:23:LEU:HD12	1:A:28:LEU:CD1	0.53	2.33	10	7
1:A:6:VAL:HG11	1:A:23:LEU:CG	0.53	2.33	24	8
1:A:56:ARG:O	1:A:57:MET:CB	0.53	2.56	5	1
1:A:74:PRO:O	1:A:75:MET:CG	0.53	2.49	1	1
1:A:82:THR:HG21	1:A:84:HIS:CE1	0.53	2.39	4	2
1:A:36:GLY:HA3	1:A:65:LEU:HD11	0.53	1.80	20	2
1:A:90:ALA:CB	1:A:101:TYR:CZ	0.53	2.92	11	1
1:A:9:VAL:HG11	1:A:36:GLY:CA	0.53	2.31	7	9
1:A:93:ALA:HA	1:A:96:GLN:CD	0.53	2.24	12	1
1:A:48:PRO:CD	1:A:76:LEU:HD11	0.53	2.34	22	5
1:A:43:LEU:CD2	1:A:48:PRO:HD2	0.53	2.33	13	5
1:A:90:ALA:HB1	1:A:101:TYR:CD1	0.53	2.39	11	1
1:A:84:HIS:CD2	1:A:84:HIS:H	0.53	2.22	24	1
1:A:43:LEU:HB3	1:A:73:HIS:CE1	0.53	2.39	3	6
1:A:39:VAL:HG11	1:A:51:LEU:CD1	0.53	2.32	19	5
1:A:83:ALA:HB2	1:A:101:TYR:HD2	0.53	1.56	11	3
1:A:109:ASP:O	1:A:113:ALA:HB2	0.52	2.03	6	22
1:A:55:ILE:HG23	1:A:55:ILE:O	0.52	2.04	26	5
1:A:23:LEU:CD2	1:A:23:LEU:HD13	0.52	1.09	1	1
1:A:50:VAL:HG11	1:A:115:VAL:HG22	0.52	1.81	20	1
1:A:43:LEU:HD22	1:A:73:HIS:CE1	0.52	2.39	3	1
1:A:13:SER:CB	1:A:13:SER:HG	0.52	1.24	1	1
1:A:107:ASP:O	1:A:111:ALA:HB3	0.52	2.04	18	1
1:A:23:LEU:CD1	1:A:28:LEU:CD1	0.52	2.87	22	9
1:A:23:LEU:CD1	1:A:23:LEU:CD2	0.52	0.53	1	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:ASP:OD2	1:A:119:ILE:HG12	0.52	2.03	21	1
1:A:54:ASP:O	1:A:55:ILE:CG2	0.52	2.56	5	6
1:A:33:PHE:CD2	1:A:39:VAL:HG22	0.52	2.39	23	2
1:A:39:VAL:C	1:A:43:LEU:HD12	0.52	2.25	17	2
1:A:69:ILE:HA	1:A:73:HIS:CE1	0.52	2.39	17	1
1:A:53:SER:OG	1:A:65:LEU:HD22	0.52	2.04	20	1
1:A:87:LEU:O	1:A:90:ALA:HB3	0.52	2.05	8	6
1:A:16:ARG:HA	1:A:20:GLU:CG	0.52	2.35	7	2
1:A:19:LEU:HD13	1:A:108:ILE:HD11	0.52	1.81	15	2
1:A:34:GLU:HG2	1:A:38:GLU:HG3	0.52	1.81	16	1
1:A:55:ILE:HG22	1:A:81:MET:CG	0.52	2.34	2	2
1:A:37:ASN:ND2	1:A:40:LEU:HD12	0.52	2.20	6	2
1:A:43:LEU:CB	1:A:73:HIS:CE1	0.52	2.93	7	8
1:A:74:PRO:O	1:A:75:MET:HG2	0.51	2.05	20	2
1:A:83:ALA:CB	1:A:101:TYR:CD2	0.51	2.91	18	3
1:A:66:LEU:CD2	1:A:78:VAL:HG11	0.51	2.35	16	2
1:A:55:ILE:CG2	1:A:81:MET:HG3	0.51	2.35	19	1
1:A:20:GLU:HA	1:A:30:CYS:CB	0.51	2.35	21	2
1:A:21:ARG:HD2	1:A:21:ARG:H	0.51	1.64	17	1
1:A:9:VAL:HG13	1:A:33:PHE:CB	0.51	2.25	4	1
1:A:82:THR:HG22	1:A:84:HIS:H	0.51	1.65	9	2
1:A:33:PHE:CB	1:A:38:GLU:OE1	0.51	2.58	8	1
1:A:31:THR:HG23	1:A:33:PHE:HE1	0.51	1.66	25	3
1:A:75:MET:HB2	1:A:96:GLN:O	0.51	2.04	20	1
1:A:69:ILE:CG2	1:A:76:LEU:HB3	0.51	2.35	3	1
1:A:93:ALA:O	1:A:97:GLY:N	0.51	2.42	25	5
1:A:94:TYR:HD1	1:A:94:TYR:CG	0.51	1.26	1	1
1:A:69:ILE:CG1	1:A:73:HIS:CE1	0.51	2.93	20	1
1:A:9:VAL:HG22	1:A:52:LEU:O	0.51	2.06	21	1
1:A:12:ASP:O	1:A:16:ARG:N	0.51	2.44	18	2
1:A:43:LEU:HB2	1:A:73:HIS:CE1	0.51	2.41	8	3
1:A:50:VAL:HG22	1:A:51:LEU:N	0.51	2.21	24	10
1:A:5:ILE:HG21	1:A:46:LYS:NZ	0.51	2.19	26	2
1:A:102:LEU:HD21	1:A:106:PHE:HA	0.51	1.83	25	2
1:A:58:PRO:HB2	1:A:64:ALA:HB3	0.51	1.82	5	1
1:A:69:ILE:HG23	1:A:73:HIS:HD1	0.51	1.66	5	1
1:A:83:ALA:HB1	1:A:87:LEU:HD22	0.51	1.83	14	1
1:A:92:SER:HA	1:A:95:GLN:CG	0.51	2.35	11	1
1:A:33:PHE:N	1:A:33:PHE:CD1	0.51	2.79	26	15
1:A:69:ILE:HG22	1:A:96:GLN:OE1	0.51	2.06	19	2
1:A:70:LYS:HB3	1:A:96:GLN:HG3	0.51	1.82	8	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:PRO:HD2	1:A:62:GLY:N	0.51	2.21	17	9
1:A:17:TRP:O	1:A:21:ARG:HD2	0.51	2.05	17	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:112:VAL:HG22	0.51	2.35	25	1
1:A:19:LEU:HD22	1:A:108:ILE:HD11	0.51	1.83	26	1
1:A:16:ARG:O	1:A:20:GLU:HB2	0.51	2.06	7	2
1:A:26:ALA:CB	1:A:28:LEU:HD11	0.51	2.35	19	9
1:A:9:VAL:HB	1:A:35:ASN:C	0.51	2.26	25	1
1:A:55:ILE:CG2	1:A:82:THR:H	0.51	2.19	24	2
1:A:43:LEU:HA	1:A:46:LYS:O	0.50	2.06	11	12
1:A:95:GLN:NE2	1:A:96:GLN:HG3	0.50	2.20	25	1
1:A:53:SER:HB3	1:A:80:ILE:HD12	0.50	1.80	24	1
1:A:66:LEU:HG	1:A:93:ALA:HB2	0.50	1.82	25	1
1:A:66:LEU:O	1:A:69:ILE:HB	0.50	2.06	5	2
1:A:55:ILE:HG21	1:A:82:THR:HB	0.50	1.82	24	2
1:A:7:TRP:HB2	1:A:48:PRO:HG3	0.50	1.83	13	3
1:A:36:GLY:CA	1:A:65:LEU:HD23	0.50	2.32	1	1
1:A:9:VAL:CG1	1:A:39:VAL:CG2	0.50	2.89	21	9
1:A:58:PRO:CG	1:A:62:GLY:HA2	0.50	2.36	12	4
1:A:70:LYS:CB	1:A:96:GLN:HG3	0.50	2.37	8	1
1:A:93:ALA:HA	1:A:96:GLN:OE1	0.50	2.07	10	1
1:A:106:PHE:CA	1:A:110:GLU:HB2	0.50	2.36	18	2
1:A:57:MET:N	1:A:58:PRO:CD	0.50	2.75	6	15
1:A:79:ILE:HG23	1:A:114:LEU:CD2	0.50	2.35	5	2
1:A:76:LEU:HD23	1:A:77:PRO:HD2	0.50	1.82	6	3
1:A:4:GLY:O	1:A:28:LEU:HB3	0.50	2.07	13	6
1:A:8:VAL:HG11	1:A:19:LEU:HD23	0.50	1.82	20	4
1:A:8:VAL:HA	1:A:52:LEU:O	0.50	2.07	3	1
1:A:5:ILE:HG23	1:A:29:THR:HB	0.50	1.83	7	1
1:A:80:ILE:HB	1:A:101:TYR:CZ	0.50	2.42	13	1
1:A:57:MET:CB	1:A:58:PRO:CD	0.50	2.90	8	3
1:A:10:ASP:O	1:A:12:ASP:N	0.50	2.44	1	3
1:A:23:LEU:CD1	1:A:23:LEU:CG	0.50	0.50	1	1
1:A:39:VAL:HG12	1:A:43:LEU:CG	0.50	2.37	2	2
1:A:63:LEU:HD12	1:A:63:LEU:H	0.50	1.66	1	12
1:A:94:TYR:HD2	1:A:94:TYR:CG	0.50	1.25	1	1
1:A:89:ALA:O	1:A:93:ALA:HB2	0.50	2.07	10	1
1:A:79:ILE:HG12	1:A:99:PHE:CD2	0.50	2.42	12	1
1:A:6:VAL:CG1	1:A:23:LEU:CD1	0.50	2.89	24	2
1:A:6:VAL:CG1	1:A:23:LEU:HD23	0.50	2.36	7	2
1:A:20:GLU:CG	1:A:21:ARG:N	0.49	2.75	10	20
1:A:23:LEU:HD21	1:A:23:LEU:CD1	0.49	1.03	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:GLY:HA3	1:A:65:LEU:CD2	0.49	2.32	1	1
1:A:57:MET:HA	1:A:61:ASP:HA	0.49	1.84	4	5
1:A:43:LEU:HD22	1:A:73:HIS:CD2	0.49	2.42	14	1
1:A:94:TYR:CZ	1:A:94:TYR:HE2	0.49	1.25	1	1
1:A:80:ILE:HD12	1:A:80:ILE:H	0.49	1.67	15	2
1:A:16:ARG:HA	1:A:20:GLU:HG3	0.49	1.84	18	1
1:A:70:LYS:HB3	1:A:96:GLN:CB	0.49	2.37	9	4
1:A:57:MET:HB3	1:A:58:PRO:HD3	0.49	1.84	2	4
1:A:76:LEU:HD22	1:A:77:PRO:HD2	0.49	1.84	12	2
1:A:55:ILE:O	1:A:56:ARG:CG	0.49	2.61	8	1
1:A:55:ILE:HG13	1:A:62:GLY:N	0.49	2.22	19	4
1:A:90:ALA:CB	1:A:101:TYR:CE1	0.49	2.96	19	5
1:A:70:LYS:HA	1:A:73:HIS:CE1	0.49	2.42	23	1
1:A:19:LEU:HD21	1:A:112:VAL:HG22	0.49	1.83	25	1
1:A:60:MET:H	1:A:64:ALA:HB2	0.49	1.68	3	2
1:A:63:LEU:H	1:A:63:LEU:HD12	0.49	1.67	10	6
1:A:63:LEU:HD12	1:A:101:TYR:OH	0.49	2.08	13	1
1:A:99:PHE:CE1	1:A:118:ALA:HA	0.49	2.41	24	7
1:A:21:ARG:O	1:A:24:ALA:HB3	0.49	2.07	19	1
1:A:23:LEU:HD11	1:A:28:LEU:HD13	0.49	1.85	19	1
1:A:19:LEU:HD21	1:A:19:LEU:HD12	0.49	1.43	1	1
1:A:80:ILE:HG12	1:A:101:TYR:CZ	0.49	2.43	12	2
1:A:56:ARG:O	1:A:58:PRO:HD2	0.49	2.07	5	1
1:A:80:ILE:N	1:A:80:ILE:CD1	0.49	2.75	12	2
1:A:73:HIS:CE1	1:A:76:LEU:CB	0.49	2.95	24	1
1:A:99:PHE:CZ	1:A:118:ALA:HA	0.49	2.42	9	6
1:A:92:SER:O	1:A:95:GLN:HB3	0.49	2.07	10	2
1:A:108:ILE:HG23	1:A:109:ASP:H	0.49	1.68	22	1
1:A:117:ARG:CD	1:A:117:ARG:HE	0.49	1.29	1	1
1:A:81:MET:HB2	1:A:106:PHE:CE1	0.49	2.43	22	6
1:A:33:PHE:HB3	1:A:38:GLU:OE1	0.48	2.08	8	1
1:A:20:GLU:O	1:A:24:ALA:HB2	0.48	2.08	2	2
1:A:55:ILE:HG21	1:A:80:ILE:HG22	0.48	1.85	17	4
1:A:16:ARG:HH12	1:A:16:ARG:NH2	0.48	0.37	1	1
1:A:36:GLY:HA2	1:A:65:LEU:HD11	0.48	1.85	15	1
1:A:55:ILE:HG12	1:A:56:ARG:N	0.48	2.23	8	1
1:A:63:LEU:HG	1:A:89:ALA:HB3	0.48	1.84	13	1
1:A:48:PRO:CG	1:A:76:LEU:HD11	0.48	2.34	14	1
1:A:81:MET:HB3	1:A:106:PHE:CE1	0.48	2.43	14	6
1:A:36:GLY:HA3	1:A:65:LEU:HB3	0.48	1.85	26	1
1:A:94:TYR:CZ	1:A:94:TYR:HE1	0.48	1.23	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:ILE:HG22	1:A:19:LEU:HD12	0.48	1.85	14	1
1:A:32:THR:C	1:A:33:PHE:CD1	0.48	2.87	21	18
1:A:50:VAL:HG23	1:A:79:ILE:HD11	0.48	1.85	3	3
1:A:81:MET:O	1:A:106:PHE:HE1	0.48	1.92	22	1
1:A:99:PHE:O	1:A:100:ASP:HB3	0.48	2.08	12	4
1:A:80:ILE:H	1:A:80:ILE:HD12	0.48	1.68	16	1
1:A:16:ARG:HH22	1:A:16:ARG:NH1	0.48	1.07	1	1
1:A:5:ILE:HD12	1:A:5:ILE:N	0.48	2.22	1	2
1:A:58:PRO:HD2	1:A:62:GLY:HA2	0.48	1.85	10	1
1:A:55:ILE:CG1	1:A:56:ARG:N	0.48	2.77	22	2
1:A:19:LEU:HD23	1:A:108:ILE:CD1	0.48	2.39	16	1
1:A:63:LEU:HB2	1:A:89:ALA:HB3	0.48	1.84	3	4
1:A:23:LEU:CD2	1:A:23:LEU:HD11	0.48	0.54	1	1
1:A:69:ILE:HA	1:A:73:HIS:CD2	0.48	2.43	22	5
1:A:9:VAL:HG11	1:A:36:GLY:N	0.48	2.24	9	2
1:A:60:MET:C	1:A:62:GLY:H	0.48	2.10	13	7
1:A:63:LEU:O	1:A:66:LEU:HB2	0.48	2.09	9	1
1:A:9:VAL:HG11	1:A:39:VAL:HG23	0.48	1.85	11	1
1:A:83:ALA:O	1:A:87:LEU:HG	0.47	2.09	19	3
1:A:55:ILE:O	1:A:55:ILE:HG23	0.47	2.08	25	5
1:A:63:LEU:CD2	1:A:101:TYR:OH	0.47	2.62	9	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:19:LEU:HD12	0.47	1.84	2	1
1:A:99:PHE:CE2	1:A:118:ALA:HB2	0.47	2.44	13	5
1:A:63:LEU:CD2	1:A:87:LEU:HA	0.47	2.39	3	1
1:A:102:LEU:HG	1:A:106:PHE:CB	0.47	2.39	21	1
1:A:50:VAL:CG2	1:A:115:VAL:HG23	0.47	2.40	24	1
1:A:73:HIS:ND1	1:A:76:LEU:HB2	0.47	2.24	24	1
1:A:99:PHE:CE1	1:A:118:ALA:CB	0.47	2.97	17	2
1:A:9:VAL:HG22	1:A:39:VAL:CG2	0.47	2.39	4	3
1:A:82:THR:HA	1:A:102:LEU:O	0.47	2.10	8	2
1:A:10:ASP:CB	1:A:15:ILE:HG21	0.47	2.37	7	3
1:A:62:GLY:O	1:A:65:LEU:CD2	0.47	2.63	26	1
1:A:70:LYS:HB2	1:A:96:GLN:HB2	0.47	1.86	26	2
1:A:81:MET:HB2	1:A:106:PHE:CD1	0.47	2.44	16	3
1:A:55:ILE:CD1	1:A:84:HIS:CE1	0.47	2.98	23	2
1:A:66:LEU:HD21	1:A:80:ILE:CG1	0.47	2.38	20	1
1:A:81:MET:O	1:A:102:LEU:HB3	0.47	2.10	19	4
1:A:40:LEU:CD1	1:A:68:GLN:CB	0.47	2.92	23	2
1:A:114:LEU:HD12	1:A:117:ARG:HD2	0.47	1.85	15	2
1:A:43:LEU:HD12	1:A:73:HIS:NE2	0.47	2.25	8	1
1:A:40:LEU:CD1	1:A:68:GLN:HB3	0.47	2.40	16	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:63:LEU:HD13	1:A:86:ASP:CB	0.47	2.37	6	2
1:A:51:LEU:HB3	1:A:77:PRO:O	0.47	2.10	3	1
1:A:99:PHE:CZ	1:A:118:ALA:HB1	0.47	2.45	12	1
1:A:93:ALA:O	1:A:96:GLN:HG2	0.47	2.10	11	1
1:A:23:LEU:O	1:A:23:LEU:HD13	0.47	2.10	25	1
1:A:104:LYS:O	1:A:106:PHE:CE1	0.47	2.67	18	1
1:A:81:MET:HB2	1:A:106:PHE:CG	0.47	2.45	18	1
1:A:55:ILE:CG2	1:A:81:MET:HG2	0.47	2.40	22	1
1:A:34:GLU:HG2	1:A:38:GLU:OE2	0.47	2.09	8	1
1:A:5:ILE:N	1:A:5:ILE:HD13	0.47	2.25	3	1
1:A:33:PHE:CD1	1:A:39:VAL:CG2	0.47	2.98	21	2
1:A:81:MET:HB3	1:A:106:PHE:CZ	0.47	2.45	12	1
1:A:13:SER:OG	1:A:14:SER:N	0.47	2.48	15	7
1:A:55:ILE:HG23	1:A:82:THR:HB	0.47	1.85	16	1
1:A:70:LYS:HB3	1:A:96:GLN:CG	0.47	2.40	25	1
1:A:8:VAL:HG13	1:A:52:LEU:CB	0.47	2.39	5	3
1:A:16:ARG:HA	1:A:32:THR:CG2	0.47	2.38	4	2
1:A:116:GLU:OE2	1:A:116:GLU:OE1	0.47	0.47	1	1
1:A:63:LEU:CD2	1:A:90:ALA:HB2	0.47	2.40	14	4
1:A:74:PRO:O	1:A:96:GLN:O	0.47	2.33	12	1
1:A:65:LEU:CG	1:A:69:ILE:HD11	0.47	2.40	24	1
1:A:81:MET:CE	1:A:106:PHE:CD2	0.46	2.98	19	1
1:A:16:ARG:HH12	1:A:16:ARG:HH22	0.46	0.56	1	1
1:A:35:ASN:ND2	1:A:35:ASN:CG	0.46	0.52	1	1
1:A:53:SER:HB3	1:A:65:LEU:HD12	0.46	1.87	7	1
1:A:66:LEU:HD11	1:A:80:ILE:CD1	0.46	2.39	17	1
1:A:33:PHE:HE2	1:A:42:ALA:HB3	0.46	1.71	26	1
1:A:16:ARG:CB	1:A:32:THR:HG21	0.46	2.39	22	2
1:A:33:PHE:CD1	1:A:33:PHE:N	0.46	2.82	10	7
1:A:6:VAL:HG13	1:A:6:VAL:O	0.46	2.09	14	2
1:A:94:TYR:CA	1:A:98:ALA:HB3	0.46	2.39	11	3
1:A:63:LEU:HG	1:A:101:TYR:OH	0.46	2.10	12	2
1:A:61:ASP:OD2	1:A:63:LEU:CD1	0.46	2.64	3	1
1:A:104:LYS:O	1:A:106:PHE:CE2	0.46	2.67	22	1
1:A:99:PHE:O	1:A:100:ASP:HB2	0.46	2.10	2	3
1:A:36:GLY:CA	1:A:65:LEU:HD22	0.46	2.40	10	1
1:A:70:LYS:CA	1:A:73:HIS:CD2	0.46	2.98	10	1
1:A:56:ARG:CG	1:A:56:ARG:O	0.46	2.60	1	1
1:A:21:ARG:CD	1:A:21:ARG:NH1	0.46	1.83	1	1
1:A:73:HIS:CE1	1:A:76:LEU:H	0.46	2.28	23	1
1:A:58:PRO:CG	1:A:65:LEU:HD21	0.46	2.41	16	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:ARG:HG3	1:A:32:THR:OG1	0.46	2.11	14	4
1:A:83:ALA:HA	1:A:101:TYR:CE2	0.46	2.45	21	2
1:A:54:ASP:HA	1:A:81:MET:HG2	0.46	1.88	12	1
1:A:51:LEU:HD23	1:A:78:VAL:HG22	0.46	1.87	21	1
1:A:40:LEU:HD11	1:A:65:LEU:HG	0.46	1.87	25	1
1:A:69:ILE:HG12	1:A:73:HIS:ND1	0.46	2.26	5	2
1:A:39:VAL:HG12	1:A:43:LEU:HD12	0.46	1.87	8	4
1:A:36:GLY:HA3	1:A:65:LEU:CB	0.46	2.41	26	1
1:A:33:PHE:CG	1:A:39:VAL:CG2	0.46	2.99	23	2
1:A:80:ILE:HB	1:A:101:TYR:CE2	0.46	2.46	20	6
1:A:33:PHE:CB	1:A:38:GLU:HB3	0.46	2.41	11	1
1:A:57:MET:HE2	1:A:57:MET:CG	0.45	2.18	1	1
1:A:66:LEU:N	1:A:66:LEU:HD22	0.45	2.26	20	1
1:A:9:VAL:CG2	1:A:39:VAL:CG2	0.45	2.94	3	1
1:A:6:VAL:HG13	1:A:30:CYS:CA	0.45	2.41	3	1
1:A:63:LEU:HD21	1:A:86:ASP:O	0.45	2.09	13	1
1:A:105:PRO:O	1:A:106:PHE:CD1	0.45	2.69	22	1
1:A:7:TRP:CZ2	1:A:46:LYS:HG2	0.45	2.46	14	2
1:A:117:ARG:CG	1:A:117:ARG:N	0.45	2.78	1	1
1:A:36:GLY:HA3	1:A:65:LEU:CG	0.45	2.41	21	1
1:A:43:LEU:CD2	1:A:76:LEU:HD11	0.45	2.40	26	1
1:A:93:ALA:HA	1:A:96:GLN:HG2	0.45	1.89	23	2
1:A:16:ARG:HA	1:A:20:GLU:HG2	0.45	1.88	7	2
1:A:53:SER:OG	1:A:65:LEU:HD13	0.45	2.11	12	1
1:A:3:ARG:HG3	1:A:3:ARG:O	0.45	2.12	12	1
1:A:65:LEU:HD21	1:A:78:VAL:CG1	0.45	2.40	24	1
1:A:83:ALA:HB1	1:A:87:LEU:CG	0.45	2.40	7	1
1:A:23:LEU:HB3	1:A:30:CYS:SG	0.45	2.51	19	1
1:A:104:LYS:N	1:A:105:PRO:HD2	0.45	2.26	19	3
1:A:104:LYS:HB2	1:A:105:PRO:CD	0.45	2.42	3	4
1:A:36:GLY:CA	1:A:65:LEU:HD11	0.45	2.41	15	2
1:A:50:VAL:CG1	1:A:50:VAL:O	0.45	2.64	18	1
1:A:66:LEU:CA	1:A:69:ILE:HD12	0.45	2.35	20	2
1:A:115:VAL:HG13	1:A:116:GLU:N	0.45	2.27	12	3
1:A:6:VAL:HG11	1:A:23:LEU:HD21	0.45	1.87	19	1
1:A:5:ILE:N	1:A:49:ASP:OD1	0.45	2.50	21	1
1:A:36:GLY:O	1:A:65:LEU:HD11	0.45	2.12	18	1
1:A:99:PHE:CD2	1:A:100:ASP:OD2	0.45	2.69	6	1
1:A:23:LEU:HG	1:A:28:LEU:HD13	0.45	1.88	7	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:108:ILE:CD1	0.45	2.95	16	3
1:A:21:ARG:HD2	1:A:21:ARG:NH1	0.45	1.97	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:LEU:HD21	1:A:65:LEU:HD23	0.45	1.88	20	1
1:A:83:ALA:HA	1:A:101:TYR:CD2	0.45	2.46	21	1
1:A:8:VAL:O	1:A:33:PHE:HD1	0.45	1.93	15	2
1:A:69:ILE:CG2	1:A:73:HIS:CE1	0.45	2.92	13	2
1:A:66:LEU:CD2	1:A:80:ILE:HD11	0.45	2.39	14	1
1:A:11:ASP:O	1:A:12:ASP:CB	0.45	2.64	7	1
1:A:7:TRP:CG	1:A:31:THR:HG22	0.45	2.47	8	1
1:A:40:LEU:HD11	1:A:68:GLN:HE21	0.45	1.72	16	3
1:A:3:ARG:HG2	1:A:5:ILE:CD1	0.45	2.40	1	1
1:A:67:LYS:HA	1:A:70:LYS:CE	0.45	2.42	10	1
1:A:76:LEU:O	1:A:78:VAL:HG23	0.45	2.12	11	2
1:A:87:LEU:HD13	1:A:90:ALA:CB	0.45	2.42	25	1
1:A:70:LYS:CB	1:A:96:GLN:CB	0.45	2.95	5	2
1:A:85:SER:O	1:A:86:ASP:N	0.45	0.67	1	1
1:A:33:PHE:CD2	1:A:39:VAL:CG2	0.45	3.00	23	1
1:A:108:ILE:O	1:A:112:VAL:HG23	0.45	2.12	23	3
1:A:7:TRP:O	1:A:51:LEU:HA	0.45	2.11	10	3
1:A:65:LEU:CD1	1:A:69:ILE:HD11	0.45	2.42	3	1
1:A:69:ILE:HG12	1:A:73:HIS:HE1	0.45	1.71	13	1
1:A:87:LEU:CD2	1:A:90:ALA:HB3	0.45	2.39	13	1
1:A:84:HIS:H	1:A:84:HIS:CD2	0.45	2.29	15	1
1:A:17:TRP:CD1	1:A:21:ARG:CZ	0.45	3.00	17	1
1:A:3:ARG:CD	1:A:5:ILE:HD11	0.45	2.41	26	1
1:A:6:VAL:O	1:A:6:VAL:HG13	0.45	2.11	7	2
1:A:17:TRP:HA	1:A:20:GLU:HG2	0.45	1.88	6	1
1:A:81:MET:O	1:A:102:LEU:CB	0.44	2.65	20	2
1:A:10:ASP:OD2	1:A:54:ASP:OD2	0.44	2.35	13	1
1:A:17:TRP:NE1	1:A:21:ARG:CZ	0.44	2.80	17	1
1:A:71:GLN:NE2	1:A:72:ARG:HG3	0.44	2.28	22	2
1:A:12:ASP:OD1	1:A:13:SER:N	0.44	2.50	25	1
1:A:117:ARG:CZ	1:A:117:ARG:HE	0.44	1.29	1	1
1:A:19:LEU:HD21	1:A:19:LEU:CD1	0.44	1.01	1	1
1:A:69:ILE:O	1:A:73:HIS:HD2	0.44	1.95	1	1
1:A:51:LEU:O	1:A:79:ILE:N	0.44	2.50	7	2
1:A:65:LEU:HD11	1:A:80:ILE:HD11	0.44	1.89	6	1
1:A:66:LEU:HD13	1:A:69:ILE:HD12	0.44	1.89	11	1
1:A:17:TRP:HA	1:A:21:ARG:HG3	0.44	1.89	7	1
1:A:33:PHE:CE2	1:A:39:VAL:HG22	0.44	2.47	23	1
1:A:50:VAL:HA	1:A:77:PRO:HG2	0.44	1.88	6	1
1:A:23:LEU:CD2	1:A:28:LEU:CD1	0.44	2.92	17	3
1:A:97:GLY:O	1:A:98:ALA:C	0.44	2.55	10	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:LEU:CD1	1:A:112:VAL:HG22	0.44	2.41	9	2
1:A:39:VAL:O	1:A:43:LEU:N	0.44	2.47	17	4
1:A:66:LEU:H	1:A:66:LEU:HD12	0.44	1.72	17	1
1:A:20:GLU:O	1:A:24:ALA:N	0.44	2.51	4	4
1:A:100:ASP:OD2	1:A:114:LEU:HD11	0.44	2.13	17	1
1:A:80:ILE:HB	1:A:101:TYR:CD2	0.44	2.48	22	5
1:A:19:LEU:O	1:A:19:LEU:HD13	0.44	2.12	19	1
1:A:87:LEU:O	1:A:91:VAL:HG23	0.44	2.13	12	2
1:A:63:LEU:HD23	1:A:101:TYR:OH	0.44	2.13	9	1
1:A:55:ILE:HG12	1:A:55:ILE:O	0.44	2.13	11	1
1:A:16:ARG:HB3	1:A:32:THR:OG1	0.44	2.12	22	1
1:A:37:ASN:HD22	1:A:40:LEU:HD12	0.44	1.71	8	3
1:A:58:PRO:CB	1:A:65:LEU:HD21	0.44	2.43	16	1
1:A:40:LEU:HD11	1:A:68:GLN:OE1	0.44	2.12	4	1
1:A:80:ILE:CB	1:A:101:TYR:CZ	0.44	3.00	13	1
1:A:23:LEU:CD1	1:A:23:LEU:CA	0.44	2.85	1	1
1:A:65:LEU:O	1:A:69:ILE:CG1	0.44	2.66	4	1
1:A:7:TRP:CH2	1:A:46:LYS:HB3	0.44	2.48	4	1
1:A:63:LEU:HD23	1:A:90:ALA:CB	0.44	2.43	3	1
1:A:9:VAL:HG13	1:A:39:VAL:HG21	0.44	1.89	21	1
1:A:105:PRO:O	1:A:106:PHE:CG	0.44	2.71	6	2
1:A:76:LEU:HD13	1:A:77:PRO:HD2	0.44	1.88	21	1
1:A:78:VAL:O	1:A:99:PHE:N	0.44	2.50	13	1
1:A:63:LEU:HD23	1:A:90:ALA:N	0.44	2.28	11	1
1:A:10:ASP:O	1:A:33:PHE:O	0.43	2.36	16	2
1:A:63:LEU:CD1	1:A:86:ASP:HB3	0.43	2.42	10	1
1:A:5:ILE:HB	1:A:48:PRO:HA	0.43	1.89	21	2
1:A:16:ARG:HB2	1:A:32:THR:OG1	0.43	2.13	14	1
1:A:90:ALA:HA	1:A:101:TYR:CE1	0.43	2.48	11	1
1:A:67:LYS:O	1:A:70:LYS:CG	0.43	2.66	26	4
1:A:70:LYS:CB	1:A:96:GLN:OE1	0.43	2.58	1	1
1:A:4:GLY:HA3	1:A:28:LEU:HD23	0.43	1.90	14	1
1:A:90:ALA:CA	1:A:101:TYR:CE1	0.43	3.01	11	1
1:A:55:ILE:CG1	1:A:61:ASP:O	0.43	2.65	22	1
1:A:33:PHE:HD2	1:A:38:GLU:HB3	0.43	1.74	20	2
1:A:53:SER:CB	1:A:65:LEU:HD23	0.43	2.42	3	1
1:A:82:THR:HG23	1:A:84:HIS:CD2	0.43	2.40	24	1
1:A:39:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	0.43	1.90	11	1
1:A:86:ASP:O	1:A:86:ASP:OD1	0.43	2.36	2	1
1:A:102:LEU:CD2	1:A:106:PHE:HA	0.43	2.43	12	2
1:A:102:LEU:HG	1:A:106:PHE:HB3	0.43	1.90	21	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:33:PHE:CD2	1:A:38:GLU:OE2	0.43	2.71	24	1
1:A:55:ILE:HA	1:A:62:GLY:CA	0.43	2.42	2	1
1:A:114:LEU:O	1:A:118:ALA:HB2	0.43	2.13	12	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:19:LEU:HD22	0.43	1.90	15	1
1:A:55:ILE:HG12	1:A:61:ASP:O	0.43	2.13	25	2
1:A:17:TRP:HA	1:A:20:GLU:CG	0.43	2.44	6	2
1:A:78:VAL:N	1:A:98:ALA:HA	0.43	2.28	10	1
1:A:55:ILE:HD12	1:A:62:GLY:HA3	0.43	1.91	22	1
1:A:50:VAL:CG2	1:A:79:ILE:CD1	0.43	2.97	17	2
1:A:116:GLU:HA	1:A:119:ILE:HD12	0.43	1.90	26	2
1:A:43:LEU:HD13	1:A:73:HIS:CG	0.43	2.49	20	1
1:A:99:PHE:CE2	1:A:118:ALA:CB	0.43	3.02	12	1
1:A:52:LEU:HD23	1:A:53:SER:N	0.43	2.29	13	1
1:A:106:PHE:CG	1:A:107:ASP:N	0.43	2.85	21	6
1:A:57:MET:N	1:A:58:PRO:HD3	0.43	2.29	17	1
1:A:26:ALA:CB	1:A:28:LEU:CD1	0.43	2.97	16	1
1:A:66:LEU:HG	1:A:78:VAL:HG11	0.43	1.90	17	1
1:A:26:ALA:HB3	1:A:28:LEU:HD12	0.43	1.91	25	2
1:A:69:ILE:CG2	1:A:73:HIS:CD2	0.43	2.97	23	1
1:A:39:VAL:CG1	1:A:43:LEU:HD11	0.43	2.44	8	1
1:A:81:MET:HG3	1:A:82:THR:N	0.43	2.29	1	1
1:A:110:GLU:OE1	1:A:110:GLU:OE2	0.43	0.43	1	1
1:A:6:VAL:CG1	1:A:23:LEU:HD12	0.43	2.43	24	1
1:A:54:ASP:O	1:A:55:ILE:O	0.42	2.37	10	2
1:A:94:TYR:HH	1:A:101:TYR:HD1	0.42	1.53	25	1
1:A:81:MET:HE2	1:A:106:PHE:CE2	0.42	2.49	19	1
1:A:76:LEU:C	1:A:76:LEU:HD13	0.42	2.34	4	1
1:A:75:MET:O	1:A:75:MET:CG	0.42	2.66	17	1
1:A:6:VAL:CG1	1:A:30:CYS:HA	0.42	2.44	13	2
1:A:70:LYS:HB3	1:A:96:GLN:NE2	0.42	2.25	1	1
1:A:69:ILE:HG21	1:A:76:LEU:HB3	0.42	1.91	3	1
1:A:10:ASP:OD1	1:A:15:ILE:HB	0.42	2.14	21	1
1:A:107:ASP:OD1	1:A:109:ASP:HB2	0.42	2.14	18	3
1:A:104:LYS:O	1:A:106:PHE:CD2	0.42	2.72	6	2
1:A:87:LEU:C	1:A:87:LEU:HD13	0.42	2.34	11	1
1:A:16:ARG:HG3	1:A:17:TRP:H	0.42	1.75	25	1
1:A:34:GLU:OE2	1:A:38:GLU:HB2	0.42	2.13	24	1
1:A:19:LEU:CD1	1:A:108:ILE:CD1	0.42	2.96	15	1
1:A:113:ALA:O	1:A:117:ARG:HG3	0.42	2.14	25	1
1:A:48:PRO:HD2	1:A:76:LEU:CD1	0.42	2.45	22	2
1:A:70:LYS:HB3	1:A:96:GLN:HB2	0.42	1.91	15	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:80:ILE:HG13	1:A:101:TYR:CE1	0.42	2.49	26	1
1:A:102:LEU:CD1	1:A:114:LEU:CD2	0.42	2.97	26	1
1:A:10:ASP:HA	1:A:54:ASP:HB3	0.42	1.89	16	1
1:A:80:ILE:CD1	1:A:101:TYR:CE1	0.42	3.02	15	2
1:A:80:ILE:CG2	1:A:101:TYR:CE2	0.42	3.01	25	2
1:A:13:SER:N	1:A:16:ARG:HG2	0.42	2.30	25	1
1:A:55:ILE:CG2	1:A:80:ILE:HG22	0.42	2.44	4	1
1:A:73:HIS:HB3	1:A:76:LEU:HB2	0.42	1.90	22	1
1:A:76:LEU:HG	1:A:77:PRO:HD2	0.42	1.92	16	1
1:A:50:VAL:CG2	1:A:51:LEU:N	0.42	2.82	10	5
1:A:43:LEU:CD1	1:A:73:HIS:NE2	0.42	2.83	5	2
1:A:92:SER:O	1:A:96:GLN:OE1	0.42	2.37	10	1
1:A:16:ARG:CD	1:A:20:GLU:OE1	0.42	2.68	21	1
1:A:99:PHE:CE2	1:A:114:LEU:O	0.42	2.72	18	2
1:A:77:PRO:HA	1:A:97:GLY:O	0.42	2.14	12	1
1:A:99:PHE:CZ	1:A:118:ALA:CB	0.42	3.02	9	2
1:A:23:LEU:CD1	1:A:28:LEU:HB2	0.42	2.45	24	1
1:A:87:LEU:HD22	1:A:90:ALA:CB	0.42	2.42	11	1
1:A:61:ASP:OD1	1:A:84:HIS:CE1	0.42	2.73	17	1
1:A:115:VAL:CG1	1:A:116:GLU:N	0.42	2.83	5	6
1:A:58:PRO:HG3	1:A:65:LEU:CD1	0.42	2.44	19	1
1:A:87:LEU:HD23	1:A:90:ALA:HB2	0.42	1.90	21	1
1:A:55:ILE:CD1	1:A:62:GLY:HA3	0.42	2.44	22	2
1:A:66:LEU:HD11	1:A:101:TYR:HE1	0.42	1.72	13	1
1:A:73:HIS:CE1	1:A:76:LEU:CG	0.42	3.02	24	1
1:A:16:ARG:O	1:A:20:GLU:CB	0.42	2.68	7	1
1:A:55:ILE:CG2	1:A:80:ILE:CG2	0.42	2.97	17	1
1:A:53:SER:CB	1:A:80:ILE:HD13	0.42	2.45	17	1
1:A:57:MET:HA	1:A:61:ASP:O	0.42	2.14	3	1
1:A:37:ASN:N	1:A:65:LEU:HD11	0.42	2.28	25	1
1:A:36:GLY:C	1:A:65:LEU:HD11	0.42	2.35	13	1
1:A:57:MET:HA	1:A:61:ASP:CA	0.42	2.45	11	2
1:A:23:LEU:CG	1:A:28:LEU:HD13	0.42	2.43	7	1
1:A:55:ILE:HD12	1:A:62:GLY:CA	0.42	2.45	2	1
1:A:93:ALA:O	1:A:98:ALA:N	0.42	2.53	2	1
1:A:81:MET:HA	1:A:102:LEU:HB2	0.42	1.91	16	1
1:A:63:LEU:HD11	1:A:85:SER:O	0.42	2.14	24	1
1:A:70:LYS:HB3	1:A:96:GLN:HG2	0.42	1.90	6	1
1:A:9:VAL:HG11	1:A:35:ASN:O	0.42	2.15	11	1
1:A:82:THR:OG1	1:A:106:PHE:CZ	0.42	2.73	22	1
1:A:39:VAL:CG1	1:A:43:LEU:CD1	0.41	2.94	8	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:70:LYS:CB	1:A:96:GLN:HB2	0.41	2.44	26	1
1:A:107:ASP:OD2	1:A:109:ASP:HB2	0.41	2.15	10	1
1:A:108:ILE:CG2	1:A:109:ASP:N	0.41	2.83	22	1
1:A:107:ASP:OD2	1:A:109:ASP:HB3	0.41	2.16	19	1
1:A:28:LEU:HD21	1:A:119:ILE:HD13	0.41	1.92	19	1
1:A:104:LYS:HB3	1:A:105:PRO:CD	0.41	2.45	4	1
1:A:112:VAL:HA	1:A:115:VAL:CG1	0.41	2.45	21	1
1:A:61:ASP:OD2	1:A:84:HIS:ND1	0.41	2.53	18	1
1:A:60:MET:N	1:A:64:ALA:HB2	0.41	2.29	9	2
1:A:10:ASP:O	1:A:15:ILE:CG1	0.41	2.68	11	1
1:A:55:ILE:HG13	1:A:61:ASP:HB3	0.41	1.91	7	1
1:A:65:LEU:HA	1:A:68:GLN:NE2	0.41	2.29	12	2
1:A:66:LEU:HD23	1:A:93:ALA:CB	0.41	2.46	5	1
1:A:54:ASP:C	1:A:54:ASP:CG	0.41	2.74	1	1
1:A:33:PHE:CG	1:A:39:VAL:HG23	0.41	2.51	25	1
1:A:20:GLU:HA	1:A:30:CYS:HG	0.41	1.73	1	1
1:A:103:PRO:O	1:A:106:PHE:CZ	0.41	2.73	22	1
1:A:65:LEU:CG	1:A:65:LEU:CD1	0.41	0.44	1	1
1:A:6:VAL:CG1	1:A:6:VAL:O	0.41	2.68	23	1
1:A:55:ILE:CG1	1:A:62:GLY:HA3	0.41	2.45	2	3
1:A:3:ARG:HD3	1:A:5:ILE:HD11	0.41	1.93	17	1
1:A:62:GLY:O	1:A:65:LEU:HD23	0.41	2.16	14	1
1:A:83:ALA:O	1:A:84:HIS:C	0.41	2.58	10	1
1:A:9:VAL:CG2	1:A:39:VAL:HG23	0.41	2.44	3	1
1:A:83:ALA:O	1:A:85:SER:N	0.41	2.54	13	1
1:A:104:LYS:CB	1:A:105:PRO:HD3	0.41	2.45	14	1
1:A:69:ILE:O	1:A:73:HIS:CG	0.41	2.74	22	1
1:A:66:LEU:HD11	1:A:80:ILE:CG1	0.41	2.44	2	1
1:A:75:MET:HA	1:A:97:GLY:CA	0.41	2.45	26	1
1:A:51:LEU:HB3	1:A:78:VAL:HG22	0.41	1.91	13	1
1:A:35:ASN:O	1:A:54:ASP:OD1	0.41	2.38	15	1
1:A:51:LEU:HD22	1:A:73:HIS:HE1	0.41	1.75	22	1
1:A:10:ASP:OD2	1:A:15:ILE:HG21	0.41	2.16	26	1
1:A:16:ARG:HG3	1:A:17:TRP:N	0.41	2.31	25	1
1:A:81:MET:HA	1:A:102:LEU:HB3	0.41	1.92	25	1
1:A:55:ILE:C	1:A:62:GLY:HA3	0.41	2.36	5	1
1:A:54:ASP:C	1:A:55:ILE:HG22	0.41	2.36	5	1
1:A:79:ILE:CG2	1:A:114:LEU:CD2	0.41	2.97	19	2
1:A:84:HIS:O	1:A:85:SER:OG	0.41	2.36	23	1
1:A:112:VAL:CA	1:A:115:VAL:HG12	0.41	2.45	21	1
1:A:9:VAL:HG12	1:A:35:ASN:C	0.41	2.35	12	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:ASN:OD1	1:A:58:PRO:HD3	0.41	2.16	14	1
1:A:9:VAL:N	1:A:52:LEU:O	0.41	2.51	2	1
1:A:12:ASP:O	1:A:13:SER:C	0.41	2.58	1	1
1:A:94:TYR:CE1	1:A:100:ASP:CA	0.41	3.03	13	1
1:A:55:ILE:O	1:A:56:ARG:HB3	0.41	2.16	14	1
1:A:96:GLN:NE2	1:A:98:ALA:N	0.41	2.69	6	1
1:A:56:ARG:N	1:A:61:ASP:O	0.40	2.54	8	1
1:A:35:ASN:OD1	1:A:58:PRO:HB3	0.40	2.16	17	1
1:A:33:PHE:CD2	1:A:38:GLU:HB3	0.40	2.50	20	1
1:A:69:ILE:HA	1:A:73:HIS:CG	0.40	2.52	20	1
1:A:17:TRP:O	1:A:20:GLU:HG3	0.40	2.16	6	1
1:A:90:ALA:HA	1:A:101:TYR:CZ	0.40	2.51	11	1
1:A:85:SER:O	1:A:86:ASP:HB2	0.40	2.17	2	1
1:A:10:ASP:O	1:A:34:GLU:O	0.40	2.40	23	1
1:A:113:ALA:O	1:A:117:ARG:HG2	0.40	2.16	4	1
1:A:106:PHE:O	1:A:107:ASP:C	0.40	2.60	18	1
1:A:117:ARG:HB3	1:A:117:ARG:HD3	0.40	1.65	1	1
1:A:50:VAL:O	1:A:50:VAL:CG1	0.40	2.69	4	1
1:A:104:LYS:H	1:A:105:PRO:CD	0.40	2.30	20	1
1:A:107:ASP:OD2	1:A:109:ASP:CB	0.40	2.70	3	1
1:A:78:VAL:O	1:A:99:PHE:HB2	0.40	2.16	12	1
1:A:55:ILE:HG12	1:A:84:HIS:CD2	0.40	2.51	13	1
1:A:10:ASP:OD1	1:A:54:ASP:CB	0.40	2.70	13	1
1:A:73:HIS:ND1	1:A:76:LEU:HG	0.40	2.30	24	1
1:A:94:TYR:HA	1:A:98:ALA:CB	0.40	2.45	11	1
1:A:82:THR:HG22	1:A:83:ALA:N	0.40	2.32	8	1
1:A:34:GLU:OE2	1:A:38:GLU:CB	0.40	2.70	21	1
1:A:48:PRO:O	1:A:76:LEU:CD1	0.40	2.68	9	1
1:A:69:ILE:HG23	1:A:73:HIS:HD2	0.40	1.76	15	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	119/124 (96%)	94±3 (79±2%)	13±3 (11±2%)	12±3 (10±2%)	2	10

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
All	All	3094/3224 (96%)	2444 (79%)	344 (11%)	306 (10%)	2 10

All 26 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	107	ASP	26
1	A	106	PHE	26
1	A	13	SER	24
1	A	103	PRO	23
1	A	58	PRO	22
1	A	104	LYS	20
1	A	100	ASP	19
1	A	55	ILE	18
1	A	84	HIS	15
1	A	35	ASN	15
1	A	36	GLY	15
1	A	74	PRO	14
1	A	57	MET	9
1	A	61	ASP	8
1	A	62	GLY	7
1	A	4	GLY	7
1	A	85	SER	7
1	A	86	ASP	7
1	A	12	ASP	6
1	A	56	ARG	5
1	A	11	ASP	4
1	A	59	GLY	3
1	A	34	GLU	3
1	A	97	GLY	1
1	A	87	LEU	1
1	A	98	ALA	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	97/102 (95%)	74±4 (77±4%)	23±4 (23±4%)	3	29
All	All	2522/2652 (95%)	1933 (77%)	589 (23%)	3	29

All 63 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	28	LEU	26
1	A	108	ILE	24
1	A	61	ASP	24
1	A	46	LYS	23
1	A	9	VAL	21
1	A	3	ARG	20
1	A	8	VAL	20
1	A	95	GLN	19
1	A	38	GLU	19
1	A	52	LEU	18
1	A	60	MET	17
1	A	37	ASN	15
1	A	87	LEU	15
1	A	100	ASP	14
1	A	86	ASP	14
1	A	70	LYS	14
1	A	76	LEU	13
1	A	71	GLN	13
1	A	57	MET	12
1	A	12	ASP	11
1	A	19	LEU	11
1	A	73	HIS	11
1	A	63	LEU	11
1	A	53	SER	11
1	A	56	ARG	10
1	A	104	LYS	10
1	A	72	ARG	10
1	A	34	GLU	10
1	A	11	ASP	9
1	A	55	ILE	9
1	A	45	SER	9
1	A	35	ASN	9
1	A	84	HIS	8
1	A	67	LYS	8
1	A	81	MET	7
1	A	117	ARG	7

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	85	SER	7
1	A	102	LEU	6
1	A	54	ASP	6
1	A	23	LEU	6
1	A	109	ASP	5
1	A	21	ARG	5
1	A	33	PHE	4
1	A	121	HIS	4
1	A	88	ASP	4
1	A	96	GLN	4
1	A	14	SER	4
1	A	75	MET	4
1	A	65	LEU	4
1	A	18	VAL	4
1	A	68	GLN	3
1	A	10	ASP	2
1	A	13	SER	2
1	A	120	SER	2
1	A	107	ASP	2
1	A	106	PHE	2
1	A	92	SER	1
1	A	94	TYR	1
1	A	39	VAL	1
1	A	30	CYS	1
1	A	20	GLU	1
1	A	16	ARG	1
1	A	5	ILE	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 [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