



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 06:42 PM BST

PDB ID : 1Z8S
Title : DnaB binding domain of DnaG (P16) from *Bacillus stearothermophilus*
(residues 452-597)
Authors : Syson, K.; Thirlway, J.; Hounslow, A.M.; Soultanas, P.; Waltho, J.P.
Deposited on : 2005-03-31

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

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

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

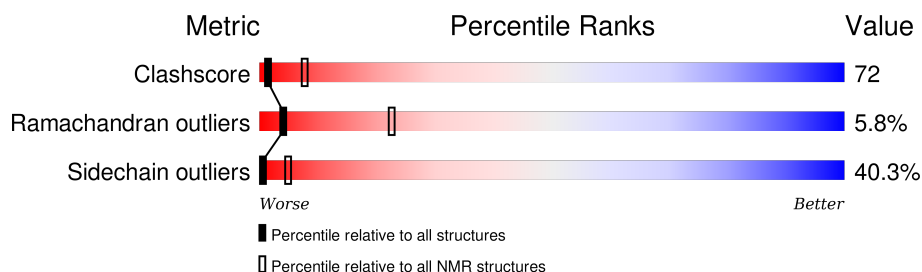
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 77%.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	146	

2 Ensemble composition and analysis ⓘ

This entry contains 10 models. The atoms present in the NMR models are not consistent. Some calculations may have failed as a result. All residues are included in the validation scores. Model 4 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:460-A:554 (95)	0.75	4
2	A:557-A:575, A:580-A:594 (34)	0.62	4

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

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

NmrClust was unable to cluster the ensemble.

Error message: Inconsistent models in file

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2397 atoms, of which 1217 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called DNA primase.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	146	Total	C	H	N	O	S	0
			2397	747	1217	209	217	7	

There are 3 discrepancies between the modelled and reference sequences:

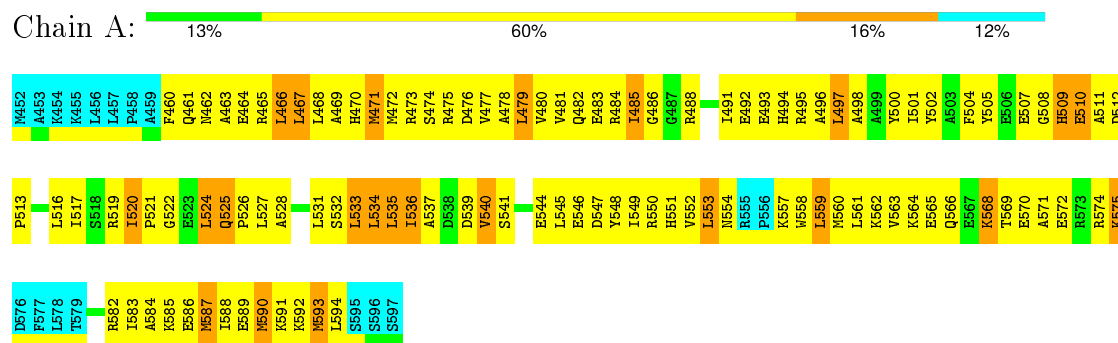
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	452	MET	LEU	ENGINEERED	UNP Q9X4D0
A	530	GLU	ASP	SEE REMARK 999	UNP Q9X4D0
A	531	LEU	VAL	SEE REMARK 999	UNP Q9X4D0

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: DNA primase

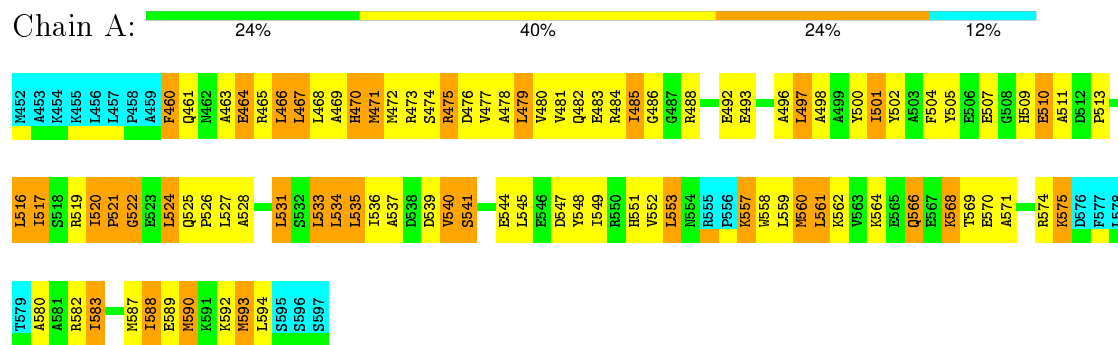


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

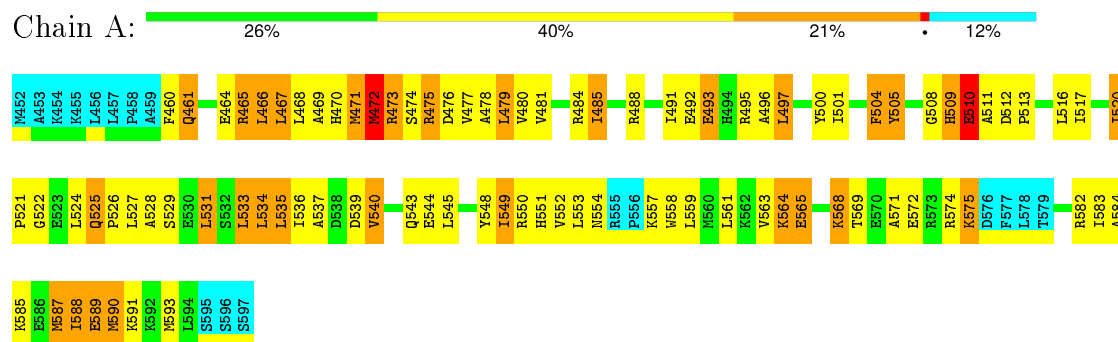
- Molecule 1: DNA primase





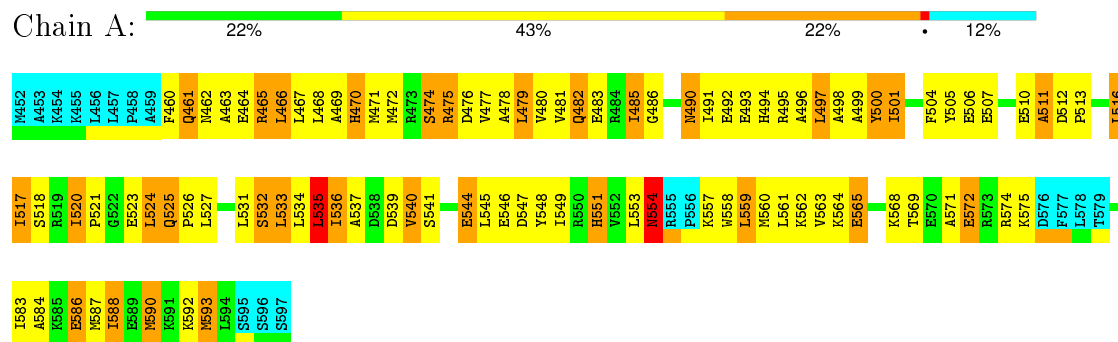
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: DNA primase



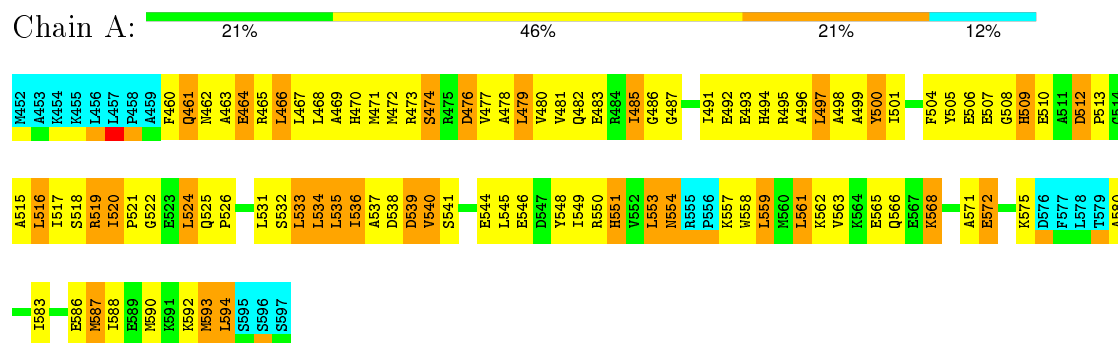
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: DNA primase



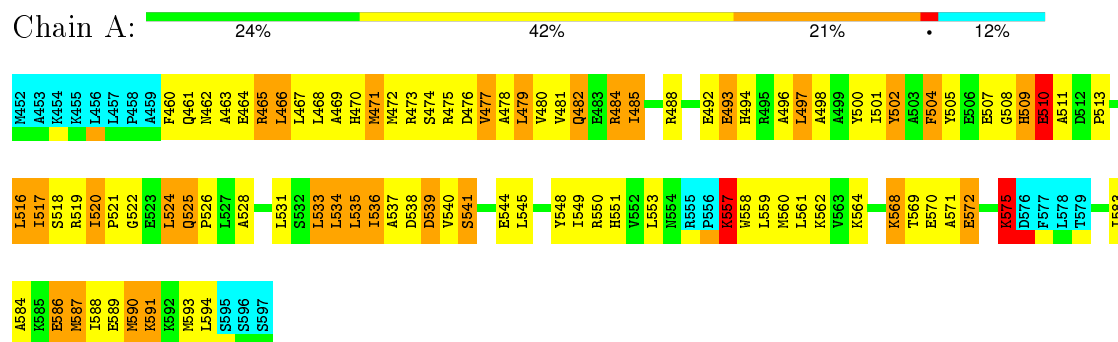
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: DNA primase



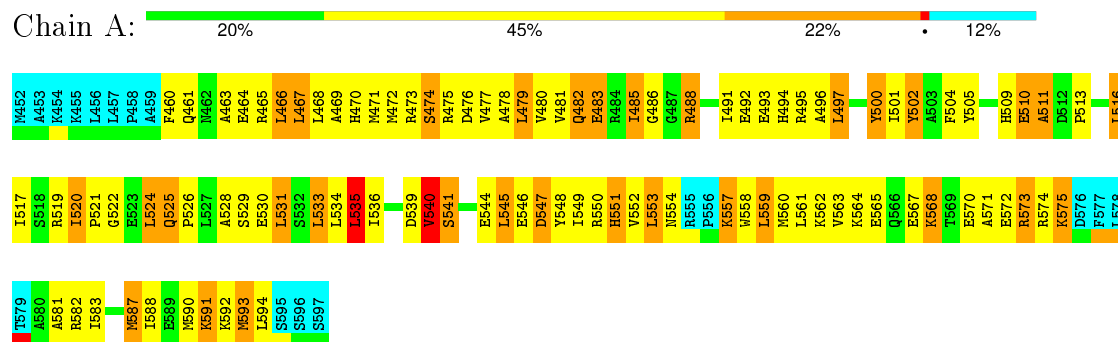
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: DNA primase



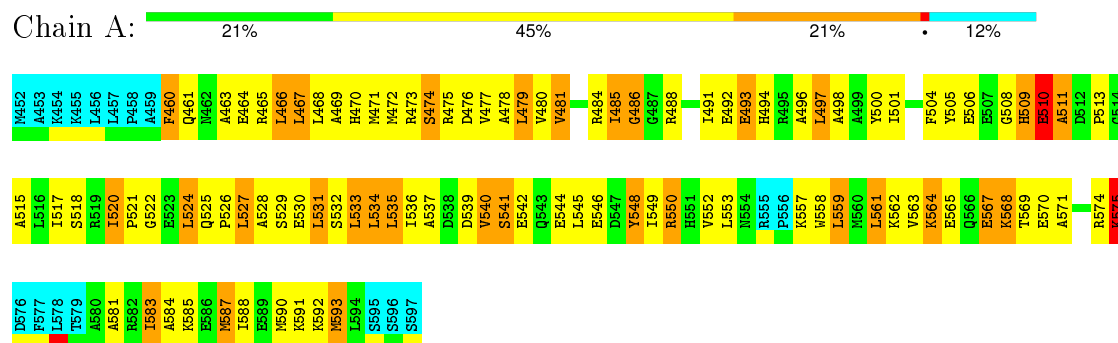
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: DNA primase



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: DNA primase



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *torsion angle dynamics followed by cartesian slow-cool annealing energy minimisation*.

Of the 100 calculated structures, 10 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
CNS	structure solution	1.1
CNS	refinement	1.1

The following table shows chemical shift validation statistics as aggregates over all chemical shift files. Detailed validation can be found in section 7 of this report.

Chemical shift file(s)	BMRB entry 6716
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1613
Number of shifts mapped to atoms	1613
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	77%

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	1050	1075	1071	153±16
All	All	10500	10750	10710	1528

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 72.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:571:ALA:HB3	1:A:583:ILE:HD11	1.13	1.18	3	5
1:A:568:LYS:HA	1:A:583:ILE:HD12	1.11	1.22	7	5
1:A:497:LEU:HD23	1:A:524:LEU:HD21	1.07	1.10	3	2
1:A:478:ALA:HB3	1:A:505:TYR:OH	1.02	1.54	9	2
1:A:467:LEU:HD22	1:A:548:TYR:CZ	0.98	1.93	3	2
1:A:520:ILE:HD13	1:A:528:ALA:HB3	0.98	1.32	10	2
1:A:497:LEU:HD12	1:A:524:LEU:HD11	0.97	1.29	4	1
1:A:540:VAL:HG11	1:A:545:LEU:HD13	0.97	1.33	10	2
1:A:468:LEU:HD13	1:A:497:LEU:HD13	0.95	1.35	2	2
1:A:553:LEU:HD11	1:A:558:TRP:CH2	0.93	1.99	9	1
1:A:568:LYS:CA	1:A:583:ILE:HD12	0.92	1.93	7	5
1:A:545:LEU:HA	1:A:548:TYR:CZ	0.90	2.01	7	6
1:A:470:HIS:CD2	1:A:540:VAL:HG21	0.90	2.01	8	3
1:A:477:VAL:O	1:A:480:VAL:HG22	0.89	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:467:LEU:HD13	1:A:485:ILE:HD13	0.89	1.43	2	1
1:A:466:LEU:HD21	1:A:535:LEU:HD11	0.89	1.43	9	1
1:A:520:ILE:HB	1:A:524:LEU:HD13	0.87	1.44	7	2
1:A:466:LEU:HD13	1:A:535:LEU:HD11	0.87	1.43	3	2
1:A:470:HIS:CD2	1:A:540:VAL:HG13	0.87	2.03	4	2
1:A:520:ILE:HG23	1:A:524:LEU:HD23	0.87	1.44	5	4
1:A:545:LEU:HA	1:A:548:TYR:CE1	0.85	2.05	3	3
1:A:520:ILE:HD12	1:A:525:GLN:HA	0.85	1.49	10	2
1:A:467:LEU:HD11	1:A:481:VAL:HB	0.85	1.45	8	2
1:A:485:ILE:HG22	1:A:549:ILE:HG23	0.85	1.47	9	6
1:A:553:LEU:HD21	1:A:558:TRP:CE2	0.84	2.06	9	1
1:A:520:ILE:HG22	1:A:524:LEU:CG	0.84	2.02	10	2
1:A:464:GLU:O	1:A:468:LEU:HD13	0.84	1.73	9	5
1:A:568:LYS:HA	1:A:583:ILE:CD1	0.83	2.02	4	6
1:A:471:MET:SD	1:A:481:VAL:HG11	0.83	2.12	9	3
1:A:466:LEU:HD11	1:A:535:LEU:HD21	0.83	1.49	9	1
1:A:520:ILE:HG22	1:A:521:PRO:HD2	0.83	1.48	2	5
1:A:540:VAL:HG21	1:A:545:LEU:HD13	0.83	1.51	3	1
1:A:571:ALA:HB2	1:A:583:ILE:HD12	0.83	1.50	10	2
1:A:466:LEU:CD1	1:A:535:LEU:HD21	0.83	2.03	9	1
1:A:558:TRP:CH2	1:A:594:LEU:HD13	0.82	2.09	4	1
1:A:466:LEU:HD22	1:A:535:LEU:HD21	0.82	1.51	4	2
1:A:493:GLU:OE1	1:A:527:LEU:HD22	0.82	1.73	10	1
1:A:467:LEU:HD21	1:A:485:ILE:HG21	0.81	1.52	1	1
1:A:571:ALA:HB3	1:A:583:ILE:CD1	0.81	2.03	3	3
1:A:520:ILE:HG22	1:A:524:LEU:CD2	0.81	2.06	9	2
1:A:559:LEU:O	1:A:563:VAL:HG23	0.81	1.76	6	4
1:A:546:GLU:CB	1:A:563:VAL:HG11	0.81	2.06	2	1
1:A:561:LEU:HD23	1:A:590:MET:CB	0.80	2.06	1	5
1:A:466:LEU:HD12	1:A:548:TYR:CD2	0.80	2.11	7	1
1:A:536:ILE:HB	1:A:540:VAL:HG23	0.80	1.53	8	1
1:A:520:ILE:HG21	1:A:524:LEU:CB	0.80	2.06	2	6
1:A:501:ILE:CG2	1:A:516:LEU:HD21	0.80	2.07	7	1
1:A:553:LEU:HD11	1:A:558:TRP:CZ2	0.80	2.11	9	1
1:A:475:ARG:HA	1:A:511:ALA:HB3	0.80	1.54	10	1
1:A:546:GLU:HB2	1:A:563:VAL:HG22	0.80	1.53	6	1
1:A:467:LEU:HD12	1:A:548:TYR:CB	0.80	2.07	5	2
1:A:520:ILE:HG22	1:A:524:LEU:HD23	0.80	1.51	9	2
1:A:468:LEU:HD13	1:A:497:LEU:CD1	0.80	2.07	2	1
1:A:497:LEU:CD1	1:A:524:LEU:HD11	0.80	2.06	4	1
1:A:478:ALA:HB1	1:A:505:TYR:CE2	0.80	2.11	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:470:HIS:CG	1:A:540:VAL:HG21	0.79	2.12	6	3
1:A:546:GLU:CB	1:A:563:VAL:HG22	0.79	2.08	6	2
1:A:533:LEU:HD13	1:A:536:ILE:O	0.79	1.77	7	1
1:A:568:LYS:HB2	1:A:583:ILE:HG23	0.79	1.54	4	3
1:A:571:ALA:CB	1:A:583:ILE:HD11	0.79	2.03	8	5
1:A:533:LEU:HD13	1:A:536:ILE:HG12	0.78	1.53	3	6
1:A:553:LEU:HD21	1:A:558:TRP:CZ2	0.78	2.13	9	1
1:A:520:ILE:HG22	1:A:524:LEU:HD22	0.78	1.56	7	2
1:A:474:SER:OG	1:A:477:VAL:HG23	0.78	1.79	1	1
1:A:478:ALA:HB1	1:A:501:ILE:CG1	0.78	2.08	5	1
1:A:470:HIS:ND1	1:A:540:VAL:HG22	0.78	1.94	9	1
1:A:561:LEU:HD22	1:A:590:MET:CB	0.78	2.09	5	1
1:A:467:LEU:HD12	1:A:548:TYR:HB3	0.78	1.55	2	2
1:A:497:LEU:HA	1:A:500:TYR:CE1	0.77	2.13	6	2
1:A:540:VAL:CG1	1:A:545:LEU:HD13	0.77	2.09	10	1
1:A:524:LEU:H	1:A:524:LEU:HD12	0.77	1.40	6	1
1:A:516:LEU:HD22	1:A:517:ILE:HD13	0.77	1.57	4	3
1:A:470:HIS:CD2	1:A:536:ILE:HG22	0.77	2.14	4	5
1:A:478:ALA:HB3	1:A:505:TYR:CZ	0.76	2.15	9	3
1:A:480:VAL:CG1	1:A:549:ILE:HD13	0.76	2.10	9	3
1:A:520:ILE:CG2	1:A:524:LEU:HD22	0.76	2.09	6	2
1:A:497:LEU:HD23	1:A:524:LEU:CD1	0.76	2.09	1	1
1:A:516:LEU:HD23	1:A:516:LEU:C	0.75	2.02	5	2
1:A:588:ILE:HD12	1:A:589:GLU:N	0.75	1.96	8	1
1:A:536:ILE:HD11	1:A:540:VAL:HA	0.75	1.57	1	1
1:A:497:LEU:HD12	1:A:524:LEU:CD1	0.74	2.12	4	1
1:A:497:LEU:HA	1:A:500:TYR:CD2	0.74	2.17	3	7
1:A:561:LEU:HD13	1:A:564:LYS:HD2	0.74	1.57	10	1
1:A:524:LEU:HD12	1:A:524:LEU:H	0.74	1.42	7	1
1:A:500:TYR:OH	1:A:520:ILE:HG23	0.74	1.82	1	2
1:A:476:ASP:HA	1:A:479:LEU:HD23	0.74	1.57	9	4
1:A:583:ILE:HG22	1:A:587:MET:SD	0.74	2.23	10	1
1:A:553:LEU:HD22	1:A:559:LEU:CD2	0.74	2.12	9	2
1:A:566:GLN:O	1:A:569:THR:HG22	0.74	1.81	1	2
1:A:465:ARG:CZ	1:A:527:LEU:HD11	0.74	2.13	4	1
1:A:533:LEU:HD22	1:A:536:ILE:CG1	0.74	2.13	2	5
1:A:497:LEU:HA	1:A:500:TYR:CE2	0.73	2.17	9	1
1:A:504:PHE:CE2	1:A:516:LEU:HD22	0.73	2.18	3	1
1:A:571:ALA:HB3	1:A:583:ILE:HG21	0.73	1.59	1	2
1:A:534:LEU:HD12	1:A:534:LEU:O	0.73	1.82	8	2
1:A:468:LEU:HD21	1:A:494:HIS:HA	0.73	1.60	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:520:ILE:HG21	1:A:524:LEU:HB2	0.73	1.58	2	1
1:A:476:ASP:O	1:A:480:VAL:HG23	0.73	1.82	9	2
1:A:545:LEU:O	1:A:549:ILE:HG12	0.73	1.82	4	1
1:A:466:LEU:HD13	1:A:535:LEU:HD23	0.73	1.60	7	1
1:A:561:LEU:HD21	1:A:590:MET:HB2	0.73	1.59	8	1
1:A:516:LEU:HG	1:A:517:ILE:HD13	0.73	1.61	9	2
1:A:478:ALA:O	1:A:481:VAL:HG22	0.72	1.84	9	2
1:A:496:ALA:HB3	1:A:524:LEU:HD21	0.72	1.60	10	1
1:A:561:LEU:HD12	1:A:590:MET:CB	0.72	2.14	3	1
1:A:470:HIS:CG	1:A:540:VAL:HG23	0.71	2.20	3	1
1:A:478:ALA:HB1	1:A:505:TYR:OH	0.71	1.85	7	2
1:A:467:LEU:HD12	1:A:548:TYR:CE1	0.71	2.19	9	1
1:A:470:HIS:CB	1:A:540:VAL:HG23	0.71	2.16	3	1
1:A:545:LEU:HA	1:A:548:TYR:CE2	0.71	2.20	6	3
1:A:493:GLU:HA	1:A:524:LEU:HB3	0.71	1.60	7	2
1:A:561:LEU:HD21	1:A:587:MET:HG3	0.71	1.62	9	1
1:A:466:LEU:CD1	1:A:535:LEU:HD11	0.71	2.14	3	2
1:A:467:LEU:HD13	1:A:485:ILE:CD1	0.71	2.16	2	3
1:A:467:LEU:HD21	1:A:481:VAL:HB	0.70	1.62	6	2
1:A:472:MET:HG3	1:A:517:ILE:HD11	0.70	1.62	5	2
1:A:466:LEU:CD2	1:A:535:LEU:HD21	0.70	2.16	1	2
1:A:491:ILE:HD13	1:A:494:HIS:CE1	0.70	2.20	6	1
1:A:571:ALA:O	1:A:575:LYS:N	0.70	2.24	8	10
1:A:568:LYS:HB3	1:A:587:MET:HE1	0.70	1.61	2	2
1:A:520:ILE:HG21	1:A:524:LEU:C	0.70	2.06	3	4
1:A:461:GLN:HG3	1:A:491:ILE:HG21	0.70	1.62	2	1
1:A:468:LEU:CD1	1:A:497:LEU:HD13	0.70	2.16	2	1
1:A:587:MET:O	1:A:590:MET:HB3	0.70	1.86	8	1
1:A:535:LEU:HD22	1:A:535:LEU:O	0.69	1.87	6	1
1:A:463:ALA:HB1	1:A:548:TYR:HB2	0.69	1.63	4	4
1:A:553:LEU:HD13	1:A:559:LEU:CD2	0.69	2.17	2	1
1:A:564:LYS:O	1:A:568:LYS:CB	0.69	2.41	10	2
1:A:561:LEU:HD23	1:A:590:MET:HB2	0.69	1.64	9	2
1:A:497:LEU:CD2	1:A:524:LEU:HD21	0.69	2.05	3	1
1:A:466:LEU:HB3	1:A:535:LEU:HD21	0.69	1.64	8	2
1:A:561:LEU:HD23	1:A:590:MET:CG	0.69	2.18	2	2
1:A:468:LEU:HG	1:A:497:LEU:HG	0.69	1.65	9	1
1:A:481:VAL:O	1:A:485:ILE:HG23	0.69	1.88	1	1
1:A:478:ALA:O	1:A:481:VAL:HG13	0.69	1.88	10	2
1:A:462:ASN:O	1:A:466:LEU:HD23	0.69	1.88	3	1
1:A:559:LEU:H	1:A:559:LEU:HD13	0.69	1.48	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:584:ALA:O	1:A:588:ILE:HG23	0.68	1.87	8	1
1:A:467:LEU:HD12	1:A:548:TYR:HE1	0.68	1.47	9	1
1:A:520:ILE:HA	1:A:524:LEU:HD23	0.68	1.65	9	2
1:A:524:LEU:HD22	1:A:528:ALA:HB2	0.68	1.65	1	1
1:A:540:VAL:HG13	1:A:541:SER:N	0.68	2.03	9	1
1:A:553:LEU:HD22	1:A:559:LEU:HD23	0.68	1.63	3	2
1:A:480:VAL:HG11	1:A:545:LEU:HD21	0.68	1.65	3	1
1:A:568:LYS:O	1:A:571:ALA:HB3	0.67	1.89	9	3
1:A:572:GLU:HG2	1:A:583:ILE:HG21	0.67	1.66	7	2
1:A:471:MET:SD	1:A:481:VAL:HG21	0.67	2.29	1	2
1:A:481:VAL:O	1:A:485:ILE:HG22	0.67	1.90	4	1
1:A:545:LEU:CD1	1:A:549:ILE:HD11	0.67	2.20	1	3
1:A:520:ILE:HG22	1:A:521:PRO:CD	0.67	2.20	3	5
1:A:536:ILE:HB	1:A:540:VAL:HG22	0.67	1.66	6	2
1:A:587:MET:O	1:A:590:MET:HG3	0.67	1.89	5	1
1:A:465:ARG:HB2	1:A:531:LEU:HD21	0.67	1.67	8	1
1:A:501:ILE:O	1:A:505:TYR:HB2	0.66	1.89	5	1
1:A:465:ARG:CG	1:A:531:LEU:HD21	0.66	2.20	10	1
1:A:500:TYR:OH	1:A:516:LEU:HD23	0.66	1.90	7	1
1:A:546:GLU:HB3	1:A:563:VAL:HG22	0.66	1.67	3	1
1:A:467:LEU:HD23	1:A:471:MET:HG2	0.66	1.64	5	2
1:A:493:GLU:OE2	1:A:527:LEU:HD13	0.66	1.91	10	1
1:A:501:ILE:HD12	1:A:516:LEU:HD13	0.66	1.65	6	1
1:A:539:ASP:O	1:A:540:VAL:HG12	0.66	1.91	3	3
1:A:534:LEU:O	1:A:534:LEU:HD12	0.66	1.90	3	1
1:A:520:ILE:HG22	1:A:524:LEU:CB	0.66	2.19	10	1
1:A:480:VAL:HG11	1:A:549:ILE:HD13	0.66	1.66	9	2
1:A:478:ALA:HB1	1:A:501:ILE:HD13	0.66	1.66	9	1
1:A:470:HIS:NE2	1:A:477:VAL:HG22	0.66	2.05	8	1
1:A:504:PHE:CD2	1:A:510:GLU:HA	0.66	2.26	8	1
1:A:478:ALA:HB1	1:A:501:ILE:HG12	0.66	1.68	5	1
1:A:496:ALA:HB1	1:A:500:TYR:CE1	0.66	2.26	9	3
1:A:520:ILE:CB	1:A:524:LEU:HB3	0.66	2.21	10	2
1:A:470:HIS:CE1	1:A:536:ILE:HG22	0.66	2.26	10	2
1:A:584:ALA:O	1:A:588:ILE:HD13	0.66	1.91	10	1
1:A:467:LEU:HD13	1:A:467:LEU:C	0.66	2.11	8	1
1:A:472:MET:CG	1:A:517:ILE:HD11	0.65	2.20	5	2
1:A:550:ARG:HG2	1:A:563:VAL:HG23	0.65	1.68	5	1
1:A:546:GLU:HB3	1:A:563:VAL:HG11	0.65	1.65	2	1
1:A:470:HIS:CD2	1:A:477:VAL:CG1	0.65	2.80	1	2
1:A:497:LEU:HD23	1:A:524:LEU:HD13	0.65	1.67	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:572:GLU:CG	1:A:583:ILE:HG21	0.65	2.20	7	2
1:A:561:LEU:HD21	1:A:590:MET:CB	0.65	2.20	8	1
1:A:504:PHE:CE2	1:A:515:ALA:HB3	0.65	2.27	10	1
1:A:521:PRO:HD2	1:A:524:LEU:HD22	0.65	1.67	10	1
1:A:463:ALA:HA	1:A:548:TYR:HB2	0.65	1.67	6	1
1:A:553:LEU:HD22	1:A:559:LEU:HD21	0.65	1.69	9	1
1:A:516:LEU:CD2	1:A:517:ILE:HD13	0.65	2.21	4	2
1:A:465:ARG:HA	1:A:531:LEU:HD21	0.64	1.69	7	3
1:A:553:LEU:CB	1:A:559:LEU:HD11	0.64	2.21	9	1
1:A:471:MET:SD	1:A:501:ILE:HG21	0.64	2.33	8	1
1:A:490:ASN:HB3	1:A:491:ILE:HD12	0.64	1.68	6	1
1:A:493:GLU:HB2	1:A:524:LEU:HB3	0.64	1.68	8	3
1:A:553:LEU:HD12	1:A:554:ASN:HB2	0.64	1.69	4	1
1:A:561:LEU:O	1:A:561:LEU:HD13	0.64	1.93	8	2
1:A:535:LEU:HD12	1:A:535:LEU:O	0.64	1.92	8	2
1:A:475:ARG:HB3	1:A:510:GLU:HA	0.64	1.70	1	2
1:A:533:LEU:HD12	1:A:536:ILE:HG23	0.64	1.68	1	1
1:A:520:ILE:HG12	1:A:524:LEU:HD12	0.64	1.70	2	1
1:A:553:LEU:HD22	1:A:559:LEU:HD22	0.63	1.69	6	2
1:A:470:HIS:ND1	1:A:540:VAL:HG21	0.63	2.07	6	1
1:A:558:TRP:CZ3	1:A:559:LEU:HD22	0.63	2.28	7	1
1:A:553:LEU:HD13	1:A:559:LEU:CD1	0.63	2.22	9	1
1:A:465:ARG:O	1:A:468:LEU:HB2	0.63	1.93	5	2
1:A:512:ASP:HB3	1:A:515:ALA:HB3	0.63	1.70	7	1
1:A:540:VAL:CG2	1:A:545:LEU:HD13	0.63	2.23	3	1
1:A:590:MET:HE2	1:A:591:LYS:N	0.63	2.08	5	1
1:A:520:ILE:HG21	1:A:524:LEU:HB3	0.63	1.71	1	4
1:A:546:GLU:HB2	1:A:563:VAL:HG13	0.63	1.68	9	1
1:A:520:ILE:HG13	1:A:525:GLN:HA	0.63	1.71	3	4
1:A:478:ALA:HB1	1:A:501:ILE:HG13	0.63	1.70	5	1
1:A:467:LEU:O	1:A:471:MET:HG2	0.63	1.93	10	5
1:A:468:LEU:HD13	1:A:497:LEU:HG	0.63	1.71	3	2
1:A:550:ARG:HD3	1:A:563:VAL:HG21	0.63	1.70	9	1
1:A:478:ALA:HA	1:A:481:VAL:HG13	0.63	1.69	9	1
1:A:496:ALA:CB	1:A:524:LEU:HD21	0.63	2.23	10	1
1:A:465:ARG:HG2	1:A:531:LEU:HD21	0.62	1.71	10	2
1:A:485:ILE:CG2	1:A:549:ILE:HG23	0.62	2.23	9	3
1:A:470:HIS:CE1	1:A:545:LEU:HD11	0.62	2.28	8	1
1:A:520:ILE:HB	1:A:524:LEU:CD1	0.62	2.23	6	2
1:A:568:LYS:C	1:A:583:ILE:CD1	0.62	2.68	9	2
1:A:481:VAL:HA	1:A:485:ILE:HG23	0.62	1.71	2	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:535:LEU:HD21	1:A:544:GLU:HB3	0.62	1.71	7	1
1:A:561:LEU:HA	1:A:564:LYS:HB3	0.62	1.71	10	1
1:A:471:MET:HA	1:A:477:VAL:HG13	0.62	1.71	2	5
1:A:513:PRO:O	1:A:517:ILE:HG12	0.62	1.95	10	9
1:A:534:LEU:CG	1:A:535:LEU:HD23	0.62	2.24	10	2
1:A:504:PHE:CD2	1:A:516:LEU:HD22	0.62	2.30	3	1
1:A:493:GLU:O	1:A:497:LEU:HD23	0.61	1.94	6	1
1:A:531:LEU:HG	1:A:534:LEU:HD23	0.61	1.72	2	1
1:A:550:ARG:HD2	1:A:559:LEU:HD12	0.61	1.72	5	1
1:A:478:ALA:O	1:A:481:VAL:HG12	0.61	1.95	2	4
1:A:466:LEU:HD12	1:A:548:TYR:HB3	0.61	1.72	1	1
1:A:561:LEU:HD23	1:A:590:MET:HB3	0.61	1.70	1	1
1:A:500:TYR:OH	1:A:520:ILE:HA	0.61	1.95	10	1
1:A:568:LYS:O	1:A:583:ILE:HD11	0.61	1.96	9	2
1:A:540:VAL:HG22	1:A:540:VAL:O	0.61	1.95	8	1
1:A:544:GLU:O	1:A:548:TYR:CD2	0.61	2.53	1	5
1:A:484:ARG:HB3	1:A:549:ILE:HG21	0.61	1.70	2	1
1:A:517:ILE:HG23	1:A:520:ILE:HD11	0.61	1.70	9	2
1:A:497:LEU:HD22	1:A:500:TYR:CD2	0.61	2.30	5	3
1:A:501:ILE:HD12	1:A:502:TYR:N	0.61	2.11	3	3
1:A:540:VAL:HG11	1:A:545:LEU:CD1	0.61	2.18	10	1
1:A:517:ILE:HD13	1:A:517:ILE:N	0.61	2.10	3	3
1:A:470:HIS:CD2	1:A:477:VAL:HG13	0.61	2.30	8	2
1:A:553:LEU:HD13	1:A:559:LEU:HD21	0.61	1.71	2	1
1:A:520:ILE:CG2	1:A:524:LEU:HD23	0.61	2.23	9	4
1:A:522:GLY:O	1:A:526:PRO:HD2	0.61	1.96	10	3
1:A:534:LEU:HG	1:A:535:LEU:HD22	0.61	1.72	5	1
1:A:493:GLU:CD	1:A:527:LEU:HD22	0.61	2.16	10	1
1:A:561:LEU:HD23	1:A:590:MET:HG3	0.61	1.72	7	2
1:A:467:LEU:HD21	1:A:485:ILE:HD11	0.60	1.72	3	1
1:A:571:ALA:HB2	1:A:583:ILE:CD1	0.60	2.25	10	2
1:A:466:LEU:HB2	1:A:548:TYR:OH	0.60	1.96	5	2
1:A:520:ILE:HG22	1:A:524:LEU:HG	0.60	1.72	10	2
1:A:568:LYS:HB3	1:A:583:ILE:HG23	0.60	1.72	7	2
1:A:517:ILE:CG2	1:A:520:ILE:HD11	0.60	2.26	9	2
1:A:467:LEU:O	1:A:467:LEU:HD13	0.60	1.97	8	1
1:A:467:LEU:HD12	1:A:471:MET:HG2	0.60	1.71	10	2
1:A:520:ILE:CG2	1:A:524:LEU:HB3	0.60	2.25	4	5
1:A:466:LEU:HD13	1:A:535:LEU:CD1	0.60	2.25	3	2
1:A:467:LEU:CD2	1:A:481:VAL:HG22	0.60	2.27	5	1
1:A:471:MET:HB2	1:A:478:ALA:HA	0.60	1.74	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:462:ASN:O	1:A:466:LEU:HG	0.60	1.96	4	3
1:A:500:TYR:CZ	1:A:516:LEU:HD23	0.60	2.32	7	1
1:A:561:LEU:HD12	1:A:590:MET:HB3	0.60	1.72	3	1
1:A:571:ALA:HB2	1:A:583:ILE:HD13	0.60	1.73	1	1
1:A:467:LEU:CD2	1:A:485:ILE:HD11	0.60	2.27	3	1
1:A:479:LEU:N	1:A:505:TYR:OH	0.60	2.35	5	3
1:A:471:MET:CE	1:A:501:ILE:HD13	0.60	2.26	5	2
1:A:493:GLU:O	1:A:497:LEU:HB2	0.60	1.96	7	2
1:A:468:LEU:HD22	1:A:497:LEU:HB3	0.60	1.73	4	3
1:A:533:LEU:HD13	1:A:536:ILE:CG1	0.59	2.27	3	1
1:A:535:LEU:HD13	1:A:536:ILE:CG2	0.59	2.27	6	1
1:A:469:ALA:HB2	1:A:531:LEU:O	0.59	1.98	7	1
1:A:497:LEU:HD21	1:A:520:ILE:HD12	0.59	1.74	6	1
1:A:471:MET:HE2	1:A:497:LEU:CD1	0.59	2.27	3	1
1:A:501:ILE:HD13	1:A:505:TYR:CE2	0.59	2.32	8	1
1:A:546:GLU:HB2	1:A:563:VAL:HG21	0.59	1.75	2	1
1:A:535:LEU:HD21	1:A:544:GLU:CB	0.59	2.28	7	1
1:A:501:ILE:HG22	1:A:511:ALA:HB2	0.59	1.73	1	2
1:A:584:ALA:O	1:A:587:MET:HG2	0.59	1.98	2	1
1:A:480:VAL:HG13	1:A:484:ARG:NH1	0.58	2.13	2	1
1:A:472:MET:SD	1:A:517:ILE:HD11	0.58	2.38	8	2
1:A:477:VAL:HB	1:A:540:VAL:HG21	0.58	1.73	4	1
1:A:470:HIS:HB3	1:A:540:VAL:HG22	0.58	1.74	10	2
1:A:520:ILE:CA	1:A:524:LEU:HB3	0.58	2.28	10	1
1:A:584:ALA:O	1:A:588:ILE:HG22	0.58	1.99	5	1
1:A:568:LYS:CB	1:A:587:MET:HE1	0.58	2.28	1	4
1:A:470:HIS:O	1:A:477:VAL:HG11	0.58	1.98	8	3
1:A:467:LEU:HD11	1:A:549:ILE:HD13	0.58	1.75	4	1
1:A:467:LEU:CD1	1:A:481:VAL:HB	0.58	2.23	8	2
1:A:468:LEU:HD23	1:A:493:GLU:OE2	0.58	1.98	9	2
1:A:510:GLU:O	1:A:511:ALA:HB2	0.58	1.98	10	2
1:A:493:GLU:O	1:A:496:ALA:HB3	0.58	1.99	4	3
1:A:484:ARG:CB	1:A:549:ILE:HG21	0.58	2.29	2	4
1:A:553:LEU:HD21	1:A:558:TRP:NE1	0.58	2.13	9	1
1:A:493:GLU:OE2	1:A:497:LEU:HD23	0.57	1.99	9	1
1:A:508:GLY:O	1:A:509:HIS:CB	0.57	2.52	10	1
1:A:491:ILE:HG21	1:A:494:HIS:CD2	0.57	2.34	9	1
1:A:470:HIS:CG	1:A:536:ILE:HG22	0.57	2.34	4	1
1:A:463:ALA:HB1	1:A:548:TYR:CA	0.57	2.28	8	1
1:A:478:ALA:CB	1:A:505:TYR:OH	0.57	2.52	8	4
1:A:467:LEU:HB2	1:A:548:TYR:CD1	0.57	2.35	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:501:ILE:HA	1:A:504:PHE:CD1	0.57	2.34	5	1
1:A:558:TRP:CA	1:A:594:LEU:HD21	0.57	2.29	9	1
1:A:485:ILE:HG13	1:A:552:VAL:HG11	0.57	1.76	10	2
1:A:477:VAL:HG23	1:A:545:LEU:HD11	0.57	1.76	3	2
1:A:469:ALA:O	1:A:536:ILE:HD13	0.57	1.99	9	3
1:A:525:GLN:CB	1:A:526:PRO:HD3	0.57	2.30	8	3
1:A:545:LEU:HD12	1:A:548:TYR:OH	0.57	2.00	3	1
1:A:497:LEU:HD23	1:A:524:LEU:HD11	0.57	1.75	8	3
1:A:501:ILE:HD12	1:A:516:LEU:CD1	0.57	2.30	6	1
1:A:548:TYR:O	1:A:552:VAL:HG23	0.57	2.00	3	4
1:A:558:TRP:HA	1:A:594:LEU:HD22	0.56	1.77	1	1
1:A:520:ILE:HB	1:A:524:LEU:C	0.56	2.20	10	1
1:A:510:GLU:O	1:A:511:ALA:HB3	0.56	1.98	8	1
1:A:478:ALA:O	1:A:481:VAL:CG1	0.56	2.53	2	7
1:A:590:MET:O	1:A:593:MET:HG3	0.56	2.00	1	6
1:A:544:GLU:O	1:A:548:TYR:CD1	0.56	2.59	2	4
1:A:533:LEU:HD22	1:A:536:ILE:HG12	0.56	1.77	4	5
1:A:564:LYS:O	1:A:568:LYS:CG	0.56	2.54	2	1
1:A:536:ILE:CB	1:A:540:VAL:HG23	0.56	2.30	8	1
1:A:465:ARG:CA	1:A:531:LEU:HD21	0.56	2.31	7	2
1:A:500:TYR:CD2	1:A:516:LEU:HD13	0.56	2.35	1	1
1:A:470:HIS:CG	1:A:540:VAL:HG13	0.56	2.35	10	4
1:A:568:LYS:O	1:A:583:ILE:CD1	0.56	2.54	9	3
1:A:539:ASP:O	1:A:540:VAL:CG1	0.56	2.54	3	3
1:A:545:LEU:HD12	1:A:548:TYR:CE1	0.56	2.36	3	2
1:A:463:ALA:HB1	1:A:548:TYR:CB	0.56	2.30	8	1
1:A:497:LEU:CD2	1:A:520:ILE:HG21	0.56	2.30	6	1
1:A:466:LEU:HD22	1:A:535:LEU:CD2	0.56	2.31	1	1
1:A:520:ILE:CB	1:A:524:LEU:HB2	0.55	2.31	7	2
1:A:501:ILE:HG23	1:A:516:LEU:HD21	0.55	1.77	7	1
1:A:509:HIS:N	1:A:509:HIS:CD2	0.55	2.75	9	1
1:A:500:TYR:HD2	1:A:516:LEU:HD21	0.55	1.62	5	2
1:A:533:LEU:C	1:A:533:LEU:HD12	0.55	2.21	7	2
1:A:558:TRP:HA	1:A:594:LEU:HD21	0.55	1.78	9	1
1:A:475:ARG:O	1:A:478:ALA:HB3	0.55	2.01	1	1
1:A:546:GLU:HB2	1:A:563:VAL:HG11	0.55	1.74	2	1
1:A:568:LYS:C	1:A:583:ILE:HD13	0.55	2.21	6	1
1:A:470:HIS:CB	1:A:536:ILE:CD1	0.55	2.84	1	1
1:A:520:ILE:HG12	1:A:524:LEU:CD1	0.55	2.31	2	1
1:A:466:LEU:HA	1:A:534:LEU:HD21	0.55	1.77	2	1
1:A:496:ALA:CB	1:A:500:TYR:CE1	0.55	2.89	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:517:ILE:O	1:A:520:ILE:HG13	0.55	2.02	9	2
1:A:561:LEU:HD23	1:A:593:MET:HE3	0.55	1.78	8	1
1:A:536:ILE:CD1	1:A:540:VAL:HA	0.55	2.30	1	1
1:A:561:LEU:C	1:A:561:LEU:HD13	0.55	2.21	1	2
1:A:590:MET:HE3	1:A:591:LYS:N	0.55	2.15	2	2
1:A:467:LEU:HD22	1:A:548:TYR:CE1	0.55	2.35	3	2
1:A:466:LEU:HD12	1:A:470:HIS:CE1	0.55	2.36	3	1
1:A:561:LEU:HG	1:A:590:MET:HB3	0.55	1.77	4	1
1:A:467:LEU:HG	1:A:548:TYR:CE1	0.55	2.37	4	1
1:A:540:VAL:CG1	1:A:545:LEU:HD22	0.55	2.31	8	1
1:A:588:ILE:HD13	1:A:589:GLU:N	0.55	2.17	1	2
1:A:558:TRP:HE3	1:A:558:TRP:N	0.55	2.00	4	1
1:A:525:GLN:HB2	1:A:526:PRO:HD3	0.55	1.78	6	2
1:A:517:ILE:N	1:A:517:ILE:HD13	0.55	2.16	10	3
1:A:588:ILE:HD13	1:A:588:ILE:C	0.55	2.22	1	1
1:A:481:VAL:O	1:A:485:ILE:HB	0.55	2.02	3	1
1:A:465:ARG:NE	1:A:527:LEU:HD11	0.55	2.16	4	1
1:A:564:LYS:HD3	1:A:565:GLU:N	0.55	2.17	10	1
1:A:561:LEU:O	1:A:561:LEU:HD22	0.55	2.02	7	1
1:A:546:GLU:HG3	1:A:563:VAL:HG13	0.54	1.79	9	1
1:A:553:LEU:HB2	1:A:559:LEU:HD11	0.54	1.77	9	1
1:A:553:LEU:HD13	1:A:559:LEU:HD11	0.54	1.79	9	1
1:A:534:LEU:HD11	1:A:535:LEU:HD23	0.54	1.78	8	3
1:A:534:LEU:HG	1:A:535:LEU:HD23	0.54	1.80	10	1
1:A:501:ILE:HG22	1:A:510:GLU:HG3	0.54	1.80	8	1
1:A:520:ILE:O	1:A:525:GLN:HG2	0.54	2.02	9	1
1:A:588:ILE:C	1:A:588:ILE:HD13	0.54	2.23	5	1
1:A:568:LYS:HA	1:A:583:ILE:HD13	0.54	1.80	2	1
1:A:461:GLN:OE1	1:A:491:ILE:HD12	0.54	2.02	5	1
1:A:500:TYR:HE2	1:A:520:ILE:HG23	0.54	1.63	10	1
1:A:509:HIS:O	1:A:510:GLU:HB2	0.54	2.02	10	1
1:A:545:LEU:HD11	1:A:549:ILE:HD11	0.54	1.80	8	2
1:A:467:LEU:HD22	1:A:481:VAL:HB	0.54	1.79	2	1
1:A:534:LEU:CD1	1:A:535:LEU:HD23	0.54	2.31	10	3
1:A:561:LEU:HD23	1:A:593:MET:CE	0.54	2.33	8	1
1:A:537:ALA:O	1:A:539:ASP:N	0.54	2.41	6	3
1:A:501:ILE:HG22	1:A:516:LEU:HD11	0.54	1.80	7	1
1:A:467:LEU:O	1:A:471:MET:HB2	0.54	2.03	3	1
1:A:465:ARG:NH2	1:A:527:LEU:HD11	0.54	2.18	4	1
1:A:467:LEU:HG	1:A:485:ILE:HD13	0.54	1.77	10	1
1:A:504:PHE:HE2	1:A:515:ALA:HB3	0.54	1.62	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:470:HIS:HA	1:A:536:ILE:HD13	0.53	1.78	1	1
1:A:485:ILE:HD12	1:A:552:VAL:HG11	0.53	1.80	1	1
1:A:561:LEU:HD11	1:A:591:LYS:HG3	0.53	1.81	10	1
1:A:567:GLU:HB3	1:A:583:ILE:HG21	0.53	1.80	10	1
1:A:520:ILE:HD12	1:A:524:LEU:HD23	0.53	1.80	3	1
1:A:470:HIS:CD2	1:A:540:VAL:CG2	0.53	2.86	8	1
1:A:535:LEU:O	1:A:535:LEU:HG	0.53	2.04	2	2
1:A:524:LEU:O	1:A:524:LEU:HG	0.53	2.03	3	3
1:A:471:MET:HA	1:A:477:VAL:HG12	0.53	1.80	8	1
1:A:501:ILE:HD13	1:A:505:TYR:HE2	0.53	1.64	8	1
1:A:497:LEU:HD22	1:A:500:TYR:HD2	0.53	1.62	3	2
1:A:520:ILE:HB	1:A:524:LEU:HB3	0.53	1.80	9	1
1:A:477:VAL:HG13	1:A:545:LEU:HD21	0.53	1.80	5	1
1:A:481:VAL:O	1:A:485:ILE:CG2	0.53	2.57	4	1
1:A:561:LEU:HD22	1:A:590:MET:HB3	0.53	1.80	5	1
1:A:501:ILE:HA	1:A:504:PHE:CE1	0.53	2.39	5	1
1:A:493:GLU:HB3	1:A:524:LEU:HB3	0.53	1.80	5	1
1:A:508:GLY:O	1:A:510:GLU:N	0.53	2.40	8	1
1:A:501:ILE:HD11	1:A:511:ALA:CB	0.53	2.34	6	1
1:A:477:VAL:CG2	1:A:545:LEU:HD11	0.53	2.34	9	1
1:A:588:ILE:C	1:A:588:ILE:HD12	0.53	2.24	8	1
1:A:535:LEU:N	1:A:535:LEU:CD1	0.53	2.72	6	1
1:A:545:LEU:HD13	1:A:548:TYR:OH	0.53	2.04	7	2
1:A:544:GLU:O	1:A:548:TYR:HD1	0.53	1.86	5	2
1:A:470:HIS:CG	1:A:540:VAL:HG22	0.53	2.39	9	1
1:A:492:GLU:O	1:A:496:ALA:HB3	0.52	2.04	9	3
1:A:568:LYS:CB	1:A:587:MET:CE	0.52	2.87	1	4
1:A:516:LEU:C	1:A:516:LEU:HD12	0.52	2.24	9	1
1:A:509:HIS:O	1:A:510:GLU:O	0.52	2.26	8	2
1:A:545:LEU:O	1:A:548:TYR:CE1	0.52	2.62	4	2
1:A:480:VAL:HG11	1:A:549:ILE:CD1	0.52	2.34	9	3
1:A:470:HIS:CE1	1:A:548:TYR:CE1	0.52	2.97	2	1
1:A:521:PRO:O	1:A:524:LEU:HB2	0.52	2.04	9	1
1:A:470:HIS:CD2	1:A:536:ILE:CG2	0.52	2.92	5	4
1:A:558:TRP:O	1:A:561:LEU:HB3	0.52	2.05	9	1
1:A:558:TRP:CE3	1:A:558:TRP:N	0.52	2.78	4	1
1:A:470:HIS:CE1	1:A:545:LEU:CD1	0.52	2.92	8	1
1:A:480:VAL:HG12	1:A:549:ILE:HD13	0.52	1.81	9	2
1:A:500:TYR:CD2	1:A:516:LEU:CD1	0.52	2.92	1	1
1:A:500:TYR:CE2	1:A:520:ILE:HG23	0.52	2.39	9	3
1:A:493:GLU:CA	1:A:524:LEU:HB3	0.52	2.34	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:467:LEU:HD11	1:A:481:VAL:HG12	0.52	1.82	9	1
1:A:510:GLU:OE2	1:A:516:LEU:HD23	0.52	2.04	9	1
1:A:496:ALA:HA	1:A:499:ALA:HB3	0.52	1.81	7	2
1:A:540:VAL:HG12	1:A:541:SER:N	0.52	2.19	10	4
1:A:572:GLU:HB2	1:A:583:ILE:HD11	0.52	1.81	6	2
1:A:470:HIS:C	1:A:477:VAL:HG11	0.52	2.24	1	2
1:A:496:ALA:O	1:A:499:ALA:HB3	0.52	2.04	2	1
1:A:540:VAL:CG1	1:A:541:SER:N	0.52	2.73	9	3
1:A:500:TYR:CD2	1:A:516:LEU:HD21	0.52	2.40	5	2
1:A:505:TYR:CE1	1:A:511:ALA:HB2	0.52	2.40	6	1
1:A:474:SER:HB2	1:A:477:VAL:HG23	0.52	1.81	9	1
1:A:564:LYS:HG2	1:A:568:LYS:HB2	0.52	1.82	10	1
1:A:463:ALA:HB1	1:A:548:TYR:O	0.52	2.05	9	3
1:A:590:MET:CE	1:A:591:LYS:N	0.52	2.73	8	2
1:A:467:LEU:CD1	1:A:470:HIS:CE1	0.52	2.93	1	1
1:A:520:ILE:CD1	1:A:528:ALA:HB3	0.52	2.22	9	1
1:A:568:LYS:O	1:A:583:ILE:HD12	0.52	2.05	8	3
1:A:545:LEU:O	1:A:548:TYR:CD1	0.52	2.62	4	2
1:A:493:GLU:CD	1:A:527:LEU:HD13	0.52	2.24	10	1
1:A:471:MET:CB	1:A:481:VAL:HG11	0.52	2.35	8	1
1:A:467:LEU:HD13	1:A:470:HIS:CE1	0.51	2.40	1	1
1:A:531:LEU:HA	1:A:534:LEU:HD22	0.51	1.82	1	1
1:A:467:LEU:HD13	1:A:485:ILE:HD12	0.51	1.82	5	2
1:A:470:HIS:ND1	1:A:540:VAL:HG13	0.51	2.20	10	1
1:A:471:MET:CG	1:A:501:ILE:HG21	0.51	2.34	8	1
1:A:501:ILE:HG22	1:A:511:ALA:CB	0.51	2.35	2	1
1:A:561:LEU:HD13	1:A:561:LEU:C	0.51	2.26	7	2
1:A:501:ILE:HD11	1:A:511:ALA:HB1	0.51	1.82	6	1
1:A:470:HIS:CE1	1:A:540:VAL:HG21	0.51	2.40	6	1
1:A:485:ILE:HG12	1:A:486:GLY:N	0.51	2.21	1	3
1:A:484:ARG:O	1:A:549:ILE:HG22	0.51	2.05	2	1
1:A:568:LYS:HB3	1:A:587:MET:CE	0.51	2.33	2	1
1:A:541:SER:O	1:A:545:LEU:N	0.51	2.42	3	1
1:A:564:LYS:O	1:A:568:LYS:HB3	0.51	2.04	10	3
1:A:464:GLU:O	1:A:468:LEU:HG	0.51	2.05	8	2
1:A:493:GLU:HA	1:A:524:LEU:HG	0.51	1.81	10	1
1:A:550:ARG:C	1:A:559:LEU:HD13	0.51	2.26	10	1
1:A:493:GLU:OE2	1:A:528:ALA:HB2	0.51	2.05	9	1
1:A:477:VAL:HG23	1:A:545:LEU:CD1	0.51	2.35	4	1
1:A:481:VAL:HG12	1:A:485:ILE:HG21	0.51	1.81	5	1
1:A:501:ILE:O	1:A:505:TYR:CD1	0.51	2.64	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:535:LEU:CG	1:A:535:LEU:O	0.51	2.58	5	3
1:A:480:VAL:CG2	1:A:549:ILE:HD11	0.51	2.36	3	1
1:A:468:LEU:HB3	1:A:497:LEU:HD13	0.51	1.81	4	1
1:A:533:LEU:HA	1:A:536:ILE:CD1	0.51	2.36	8	1
1:A:467:LEU:N	1:A:548:TYR:CE2	0.51	2.79	2	2
1:A:520:ILE:HB	1:A:524:LEU:HB2	0.51	1.82	7	2
1:A:520:ILE:HG21	1:A:524:LEU:CA	0.51	2.35	8	4
1:A:470:HIS:NE2	1:A:536:ILE:HG22	0.51	2.19	4	1
1:A:493:GLU:HA	1:A:524:LEU:CG	0.51	2.35	10	1
1:A:496:ALA:O	1:A:500:TYR:CD1	0.51	2.64	8	6
1:A:469:ALA:CB	1:A:531:LEU:O	0.51	2.59	2	7
1:A:470:HIS:HB2	1:A:477:VAL:HG21	0.51	1.81	4	1
1:A:469:ALA:HB1	1:A:536:ILE:CG2	0.51	2.35	1	1
1:A:500:TYR:CZ	1:A:520:ILE:CG2	0.51	2.94	9	1
1:A:500:TYR:CD1	1:A:501:ILE:N	0.50	2.79	6	1
1:A:559:LEU:HD13	1:A:559:LEU:N	0.50	2.19	4	1
1:A:478:ALA:CB	1:A:511:ALA:HB2	0.50	2.36	10	1
1:A:468:LEU:HB2	1:A:531:LEU:HD23	0.50	1.82	2	3
1:A:559:LEU:HD22	1:A:560:MET:H	0.50	1.66	4	1
1:A:485:ILE:CG1	1:A:552:VAL:HG21	0.50	2.36	5	1
1:A:470:HIS:CB	1:A:477:VAL:HG21	0.50	2.36	4	1
1:A:557:LYS:HG3	1:A:593:MET:HE3	0.50	1.84	4	1
1:A:467:LEU:HD12	1:A:548:TYR:CG	0.50	2.41	5	1
1:A:478:ALA:CB	1:A:505:TYR:CE2	0.50	2.91	6	2
1:A:465:ARG:HG3	1:A:466:LEU:HD23	0.50	1.83	1	2
1:A:500:TYR:CZ	1:A:516:LEU:CD1	0.50	2.95	6	1
1:A:517:ILE:HG23	1:A:528:ALA:CB	0.50	2.37	2	1
1:A:475:ARG:O	1:A:505:TYR:OH	0.50	2.24	5	3
1:A:498:ALA:O	1:A:501:ILE:HG13	0.50	2.06	1	5
1:A:548:TYR:CD1	1:A:549:ILE:N	0.50	2.80	10	4
1:A:553:LEU:CD2	1:A:559:LEU:HD21	0.50	2.36	9	2
1:A:520:ILE:HD13	1:A:528:ALA:CB	0.50	2.21	10	1
1:A:564:LYS:HG3	1:A:587:MET:HB3	0.50	1.83	10	1
1:A:561:LEU:HD21	1:A:590:MET:CG	0.50	2.37	8	1
1:A:465:ARG:HG3	1:A:466:LEU:N	0.50	2.22	3	2
1:A:517:ILE:HG23	1:A:528:ALA:HB3	0.50	1.84	2	1
1:A:471:MET:O	1:A:473:ARG:N	0.50	2.45	5	2
1:A:548:TYR:CE1	1:A:549:ILE:HG13	0.50	2.42	10	3
1:A:546:GLU:CB	1:A:563:VAL:HG13	0.50	2.36	9	1
1:A:467:LEU:HA	1:A:548:TYR:CE2	0.50	2.42	3	2
1:A:466:LEU:O	1:A:469:ALA:HB3	0.50	2.07	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:524:LEU:O	1:A:528:ALA:CB	0.50	2.60	3	6
1:A:466:LEU:HD13	1:A:535:LEU:CD2	0.50	2.36	7	1
1:A:568:LYS:O	1:A:571:ALA:N	0.49	2.44	9	2
1:A:460:PHE:CZ	1:A:551:HIS:CD2	0.49	2.99	1	2
1:A:553:LEU:HD21	1:A:557:LYS:CB	0.49	2.37	1	1
1:A:472:MET:CG	1:A:497:LEU:HD11	0.49	2.37	7	1
1:A:472:MET:SD	1:A:517:ILE:HD12	0.49	2.47	7	1
1:A:553:LEU:HD12	1:A:559:LEU:HD23	0.49	1.83	5	1
1:A:481:VAL:O	1:A:486:GLY:N	0.49	2.44	6	1
1:A:568:LYS:CE	1:A:583:ILE:HG12	0.49	2.37	2	1
1:A:462:ASN:O	1:A:465:ARG:HG2	0.49	2.07	7	1
1:A:510:GLU:O	1:A:511:ALA:CB	0.49	2.60	10	3
1:A:497:LEU:HD22	1:A:500:TYR:CE2	0.49	2.42	5	1
1:A:501:ILE:HB	1:A:505:TYR:CE2	0.49	2.42	8	1
1:A:478:ALA:HB1	1:A:505:TYR:HE2	0.49	1.60	6	1
1:A:469:ALA:HA	1:A:531:LEU:O	0.49	2.07	1	4
1:A:466:LEU:HD12	1:A:548:TYR:CB	0.49	2.37	1	1
1:A:550:ARG:HD2	1:A:563:VAL:HG21	0.49	1.85	7	1
1:A:485:ILE:CG1	1:A:552:VAL:HG11	0.49	2.37	9	2
1:A:536:ILE:CG1	1:A:537:ALA:N	0.49	2.75	3	2
1:A:467:LEU:HG	1:A:485:ILE:CD1	0.49	2.38	3	3
1:A:565:GLU:O	1:A:568:LYS:HG3	0.49	2.07	5	2
1:A:481:VAL:O	1:A:485:ILE:HG12	0.49	2.08	8	3
1:A:478:ALA:CB	1:A:505:TYR:CZ	0.49	2.95	6	1
1:A:535:LEU:O	1:A:535:LEU:CG	0.49	2.59	3	2
1:A:471:MET:HE1	1:A:501:ILE:HG12	0.49	1.84	7	1
1:A:508:GLY:O	1:A:509:HIS:HB2	0.49	2.08	10	1
1:A:468:LEU:HD23	1:A:497:LEU:HD23	0.49	1.84	9	1
1:A:508:GLY:O	1:A:509:HIS:CG	0.49	2.65	10	1
1:A:520:ILE:HG22	1:A:524:LEU:HB3	0.49	1.84	10	1
1:A:467:LEU:CD1	1:A:467:LEU:C	0.49	2.81	8	1
1:A:492:GLU:C	1:A:524:LEU:HD23	0.49	2.28	6	1
1:A:467:LEU:CD1	1:A:549:ILE:HG12	0.49	2.38	6	2
1:A:462:ASN:O	1:A:466:LEU:CD2	0.49	2.61	7	2
1:A:547:ASP:O	1:A:550:ARG:HG2	0.49	2.08	9	1
1:A:470:HIS:CE1	1:A:477:VAL:HG13	0.49	2.43	8	1
1:A:505:TYR:CE1	1:A:510:GLU:CB	0.49	2.95	8	1
1:A:501:ILE:HG22	1:A:510:GLU:CD	0.49	2.28	8	1
1:A:586:GLU:O	1:A:590:MET:HG2	0.49	2.08	4	1
1:A:491:ILE:HG22	1:A:494:HIS:HB2	0.49	1.84	4	1
1:A:478:ALA:HB2	1:A:505:TYR:OH	0.48	2.08	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:468:LEU:CD2	1:A:497:LEU:HG	0.48	2.38	6	2
1:A:466:LEU:HB2	1:A:548:TYR:CE2	0.48	2.43	2	1
1:A:568:LYS:C	1:A:583:ILE:HD12	0.48	2.29	5	4
1:A:590:MET:CA	1:A:593:MET:HE2	0.48	2.38	9	1
1:A:564:LYS:O	1:A:568:LYS:CD	0.48	2.60	8	1
1:A:500:TYR:OH	1:A:520:ILE:CG2	0.48	2.59	2	2
1:A:470:HIS:HB3	1:A:477:VAL:HG21	0.48	1.85	2	1
1:A:525:GLN:O	1:A:529:SER:CB	0.48	2.62	10	2
1:A:561:LEU:HD22	1:A:590:MET:HB2	0.48	1.81	5	1
1:A:523:GLU:O	1:A:527:LEU:HD13	0.48	2.08	6	1
1:A:478:ALA:O	1:A:505:TYR:OH	0.48	2.29	2	1
1:A:517:ILE:O	1:A:520:ILE:HD12	0.48	2.08	2	1
1:A:533:LEU:O	1:A:533:LEU:HD12	0.48	2.08	3	3
1:A:471:MET:HA	1:A:477:VAL:CG1	0.48	2.38	6	3
1:A:568:LYS:HD2	1:A:568:LYS:N	0.48	2.23	7	2
1:A:467:LEU:HD13	1:A:548:TYR:OH	0.48	2.08	3	1
1:A:470:HIS:CD2	1:A:545:LEU:CD1	0.48	2.97	1	1
1:A:460:PHE:CD1	1:A:460:PHE:N	0.48	2.81	10	1
1:A:501:ILE:HG22	1:A:510:GLU:CG	0.48	2.38	8	1
1:A:535:LEU:HG	1:A:535:LEU:O	0.48	2.08	5	2
1:A:504:PHE:CD1	1:A:516:LEU:HD12	0.48	2.44	2	1
1:A:533:LEU:HD22	1:A:536:ILE:CD1	0.48	2.38	10	3
1:A:481:VAL:CG2	1:A:482:GLN:N	0.48	2.76	9	2
1:A:493:GLU:HG2	1:A:494:HIS:N	0.48	2.22	3	1
1:A:481:VAL:CG1	1:A:501:ILE:CD1	0.48	2.91	10	1
1:A:568:LYS:HB2	1:A:587:MET:CE	0.48	2.39	10	2
1:A:470:HIS:CE1	1:A:545:LEU:HD22	0.48	2.43	7	1
1:A:546:GLU:CG	1:A:563:VAL:HG13	0.48	2.39	9	1
1:A:485:ILE:CD1	1:A:552:VAL:HG11	0.47	2.38	1	1
1:A:468:LEU:CD1	1:A:494:HIS:HA	0.47	2.39	10	1
1:A:561:LEU:CG	1:A:590:MET:HG3	0.47	2.39	8	1
1:A:468:LEU:HB3	1:A:472:MET:CE	0.47	2.39	7	2
1:A:584:ALA:O	1:A:588:ILE:HD12	0.47	2.09	6	1
1:A:561:LEU:HB2	1:A:590:MET:HB3	0.47	1.85	7	1
1:A:493:GLU:N	1:A:524:LEU:HD11	0.47	2.24	9	1
1:A:516:LEU:CD2	1:A:516:LEU:C	0.47	2.76	5	1
1:A:491:ILE:HD13	1:A:494:HIS:ND1	0.47	2.25	6	1
1:A:467:LEU:HD11	1:A:549:ILE:HG12	0.47	1.86	7	1
1:A:540:VAL:O	1:A:541:SER:HB2	0.47	2.09	10	1
1:A:467:LEU:HA	1:A:548:TYR:CE1	0.47	2.45	8	2
1:A:474:SER:O	1:A:477:VAL:CG1	0.47	2.62	7	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:535:LEU:HD13	1:A:536:ILE:HG22	0.47	1.86	6	1
1:A:546:GLU:CB	1:A:563:VAL:HG21	0.47	2.39	2	1
1:A:465:ARG:HB2	1:A:531:LEU:HD11	0.47	1.85	7	1
1:A:492:GLU:C	1:A:524:LEU:HD11	0.47	2.29	9	2
1:A:533:LEU:CD1	1:A:536:ILE:H	0.47	2.23	3	1
1:A:524:LEU:HD12	1:A:524:LEU:N	0.47	2.18	6	1
1:A:564:LYS:HB3	1:A:568:LYS:HG3	0.47	1.85	2	1
1:A:561:LEU:HD13	1:A:590:MET:HB3	0.47	1.85	5	1
1:A:564:LYS:HG3	1:A:587:MET:CB	0.47	2.39	10	1
1:A:505:TYR:CE1	1:A:510:GLU:HB2	0.47	2.45	8	1
1:A:484:ARG:NH2	1:A:563:VAL:HG22	0.47	2.25	2	1
1:A:470:HIS:HB3	1:A:540:VAL:HG21	0.47	1.85	9	1
1:A:467:LEU:HD22	1:A:548:TYR:CE2	0.47	2.41	3	1
1:A:545:LEU:CA	1:A:548:TYR:CE1	0.47	2.91	3	1
1:A:480:VAL:HG11	1:A:545:LEU:CD2	0.47	2.38	3	1
1:A:477:VAL:CB	1:A:540:VAL:HG21	0.47	2.40	4	1
1:A:524:LEU:HG	1:A:524:LEU:O	0.47	2.09	4	1
1:A:564:LYS:HB2	1:A:587:MET:HB3	0.47	1.86	10	1
1:A:586:GLU:HA	1:A:589:GLU:HG2	0.47	1.87	8	1
1:A:590:MET:O	1:A:594:LEU:HG	0.47	2.10	8	1
1:A:470:HIS:NE2	1:A:477:VAL:HG13	0.47	2.24	8	1
1:A:492:GLU:O	1:A:524:LEU:HD23	0.47	2.10	6	1
1:A:472:MET:HE1	1:A:528:ALA:HB1	0.47	1.87	10	1
1:A:559:LEU:HD23	1:A:559:LEU:N	0.47	2.25	10	1
1:A:510:GLU:OE2	1:A:516:LEU:HD21	0.47	2.10	8	1
1:A:497:LEU:O	1:A:501:ILE:CG1	0.47	2.63	7	1
1:A:493:GLU:O	1:A:524:LEU:HD22	0.47	2.10	3	2
1:A:525:GLN:HB2	1:A:526:PRO:CD	0.47	2.40	7	3
1:A:470:HIS:CG	1:A:540:VAL:CG2	0.47	2.98	9	1
1:A:479:LEU:HD12	1:A:483:GLU:HG2	0.47	1.85	9	1
1:A:465:ARG:HA	1:A:531:LEU:CD2	0.47	2.40	9	1
1:A:591:LYS:HA	1:A:594:LEU:HD12	0.47	1.87	9	1
1:A:533:LEU:CD2	1:A:536:ILE:O	0.46	2.63	6	1
1:A:477:VAL:HG22	1:A:545:LEU:HD11	0.46	1.86	9	1
1:A:571:ALA:HB2	1:A:583:ILE:HB	0.46	1.87	10	1
1:A:479:LEU:HG	1:A:480:VAL:N	0.46	2.25	3	8
1:A:539:ASP:O	1:A:540:VAL:HB	0.46	2.10	1	1
1:A:545:LEU:HD12	1:A:548:TYR:CZ	0.46	2.45	3	1
1:A:527:LEU:O	1:A:531:LEU:HB2	0.46	2.11	3	1
1:A:587:MET:O	1:A:590:MET:N	0.46	2.48	10	1
1:A:531:LEU:HD12	1:A:534:LEU:HG	0.46	1.88	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:525:GLN:CB	1:A:526:PRO:CD	0.46	2.94	5	4
1:A:471:MET:CE	1:A:501:ILE:CD1	0.46	2.94	2	2
1:A:466:LEU:N	1:A:466:LEU:HD23	0.46	2.25	4	1
1:A:520:ILE:HG21	1:A:524:LEU:HD12	0.46	1.87	1	1
1:A:497:LEU:HD22	1:A:500:TYR:HE2	0.46	1.70	9	1
1:A:493:GLU:CB	1:A:524:LEU:HB3	0.46	2.39	5	1
1:A:511:ALA:HB1	1:A:516:LEU:CD2	0.46	2.40	1	1
1:A:460:PHE:CE1	1:A:551:HIS:CG	0.46	3.04	9	1
1:A:520:ILE:CG2	1:A:524:LEU:CB	0.46	2.93	4	1
1:A:472:MET:HE2	1:A:531:LEU:HB3	0.46	1.87	5	1
1:A:460:PHE:N	1:A:460:PHE:CD1	0.46	2.84	2	1
1:A:533:LEU:O	1:A:533:LEU:CG	0.46	2.63	7	1
1:A:485:ILE:HD12	1:A:552:VAL:HG21	0.46	1.88	10	1
1:A:550:ARG:O	1:A:559:LEU:HD13	0.46	2.09	10	1
1:A:467:LEU:O	1:A:471:MET:CG	0.46	2.63	10	4
1:A:481:VAL:O	1:A:485:ILE:O	0.46	2.34	2	1
1:A:472:MET:SD	1:A:497:LEU:HD21	0.46	2.51	2	1
1:A:467:LEU:HD23	1:A:468:LEU:HD12	0.46	1.88	9	1
1:A:525:GLN:N	1:A:526:PRO:HD2	0.46	2.26	9	2
1:A:467:LEU:HD11	1:A:549:ILE:CD1	0.46	2.40	4	1
1:A:471:MET:HG3	1:A:481:VAL:CG1	0.46	2.41	7	2
1:A:461:GLN:O	1:A:465:ARG:CG	0.46	2.64	6	1
1:A:535:LEU:HD22	1:A:535:LEU:C	0.46	2.30	6	1
1:A:558:TRP:CB	1:A:594:LEU:HD22	0.46	2.40	1	1
1:A:536:ILE:HD13	1:A:536:ILE:O	0.46	2.10	8	1
1:A:470:HIS:ND1	1:A:471:MET:N	0.46	2.64	1	1
1:A:505:TYR:CD1	1:A:505:TYR:N	0.46	2.81	2	1
1:A:471:MET:SD	1:A:478:ALA:HA	0.46	2.51	7	1
1:A:497:LEU:O	1:A:501:ILE:HG12	0.46	2.11	7	1
1:A:505:TYR:N	1:A:505:TYR:CD1	0.46	2.83	7	1
1:A:491:ILE:N	1:A:491:ILE:HD13	0.46	2.26	3	1
1:A:470:HIS:CD2	1:A:548:TYR:OH	0.46	2.69	10	1
1:A:496:ALA:O	1:A:500:TYR:N	0.46	2.49	2	5
1:A:564:LYS:O	1:A:568:LYS:HG2	0.45	2.09	2	1
1:A:465:ARG:HD3	1:A:531:LEU:HD11	0.45	1.88	4	1
1:A:589:GLU:O	1:A:593:MET:HG3	0.45	2.11	5	1
1:A:466:LEU:HB3	1:A:535:LEU:HD11	0.45	1.88	1	1
1:A:574:ARG:O	1:A:575:LYS:HB2	0.45	2.11	1	1
1:A:536:ILE:HG13	1:A:537:ALA:N	0.45	2.25	10	3
1:A:460:PHE:CE1	1:A:551:HIS:ND1	0.45	2.84	7	1
1:A:478:ALA:HB3	1:A:505:TYR:CE2	0.45	2.47	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:497:LEU:HD13	1:A:500:TYR:OH	0.45	2.11	6	1
1:A:496:ALA:O	1:A:500:TYR:CG	0.45	2.70	10	4
1:A:536:ILE:HG13	1:A:540:VAL:HG22	0.45	1.88	7	1
1:A:553:LEU:O	1:A:554:ASN:C	0.45	2.55	7	1
1:A:504:PHE:CE2	1:A:510:GLU:HA	0.45	2.46	5	1
1:A:471:MET:CG	1:A:478:ALA:HA	0.45	2.42	6	2
1:A:470:HIS:HB2	1:A:536:ILE:CD1	0.45	2.41	1	1
1:A:472:MET:HE1	1:A:528:ALA:O	0.45	2.11	1	1
1:A:465:ARG:CB	1:A:531:LEU:HD21	0.45	2.39	8	2
1:A:542:GLU:HA	1:A:545:LEU:HB3	0.45	1.88	4	1
1:A:550:ARG:O	1:A:553:LEU:HB3	0.45	2.11	10	1
1:A:467:LEU:HD23	1:A:549:ILE:HG12	0.45	1.88	8	1
1:A:480:VAL:CG1	1:A:549:ILE:CD1	0.45	2.95	6	2
1:A:504:PHE:CE1	1:A:516:LEU:HD12	0.45	2.47	2	1
1:A:533:LEU:HD22	1:A:536:ILE:HD11	0.45	1.87	10	2
1:A:561:LEU:HD12	1:A:590:MET:HB2	0.45	1.85	3	1
1:A:471:MET:HA	1:A:477:VAL:HG22	0.45	1.88	10	1
1:A:462:ASN:O	1:A:465:ARG:HG3	0.45	2.12	8	1
1:A:466:LEU:HD23	1:A:534:LEU:HD13	0.45	1.87	6	1
1:A:497:LEU:HD22	1:A:500:TYR:CZ	0.45	2.47	7	1
1:A:492:GLU:HA	1:A:495:ARG:HG2	0.45	1.88	3	1
1:A:505:TYR:CD1	1:A:510:GLU:HB3	0.45	2.47	5	1
1:A:500:TYR:OH	1:A:520:ILE:CA	0.45	2.64	10	1
1:A:594:LEU:HD23	1:A:594:LEU:N	0.45	2.25	8	1
1:A:590:MET:O	1:A:593:MET:HE2	0.45	2.11	6	1
1:A:586:GLU:HB3	1:A:587:MET:HE2	0.45	1.89	6	1
1:A:470:HIS:CG	1:A:477:VAL:CG1	0.45	3.00	1	1
1:A:520:ILE:HG21	1:A:524:LEU:CD1	0.45	2.42	1	1
1:A:536:ILE:CG1	1:A:540:VAL:HG22	0.45	2.42	7	1
1:A:516:LEU:HD23	1:A:517:ILE:N	0.45	2.27	4	2
1:A:460:PHE:CE1	1:A:551:HIS:CD2	0.45	3.05	8	1
1:A:569:THR:CG2	1:A:570:GLU:N	0.45	2.79	8	1
1:A:520:ILE:CG1	1:A:525:GLN:HA	0.45	2.42	8	1
1:A:465:ARG:HD2	1:A:531:LEU:HD11	0.45	1.88	6	1
1:A:534:LEU:HD21	1:A:535:LEU:HD23	0.45	1.87	1	1
1:A:471:MET:C	1:A:473:ARG:N	0.45	2.70	2	1
1:A:583:ILE:O	1:A:586:GLU:HB2	0.45	2.12	2	1
1:A:586:GLU:O	1:A:589:GLU:HB2	0.45	2.12	2	1
1:A:501:ILE:HG22	1:A:516:LEU:HD21	0.45	1.82	7	1
1:A:475:ARG:HA	1:A:505:TYR:CE1	0.45	2.47	9	1
1:A:493:GLU:OE1	1:A:494:HIS:CD2	0.45	2.70	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:466:LEU:O	1:A:470:HIS:ND1	0.45	2.49	4	2
1:A:470:HIS:HB3	1:A:477:VAL:HG11	0.45	1.89	5	1
1:A:520:ILE:C	1:A:524:LEU:HB3	0.45	2.32	10	1
1:A:476:ASP:O	1:A:479:LEU:HD23	0.44	2.12	4	5
1:A:553:LEU:HD21	1:A:557:LYS:HB2	0.44	1.89	1	1
1:A:491:ILE:HG22	1:A:492:GLU:N	0.44	2.27	10	2
1:A:478:ALA:HA	1:A:481:VAL:CG1	0.44	2.41	9	1
1:A:466:LEU:O	1:A:470:HIS:CE1	0.44	2.70	3	1
1:A:545:LEU:HA	1:A:548:TYR:CD1	0.44	2.47	5	1
1:A:492:GLU:O	1:A:496:ALA:CB	0.44	2.64	9	2
1:A:478:ALA:HB1	1:A:505:TYR:CE1	0.44	2.47	1	1
1:A:501:ILE:HB	1:A:505:TYR:OH	0.44	2.12	2	1
1:A:484:ARG:HB2	1:A:549:ILE:HG21	0.44	1.89	4	1
1:A:550:ARG:O	1:A:559:LEU:CD1	0.44	2.65	10	1
1:A:536:ILE:HA	1:A:540:VAL:HA	0.44	1.88	8	1
1:A:517:ILE:O	1:A:520:ILE:HD11	0.44	2.12	1	2
1:A:568:LYS:CD	1:A:587:MET:CE	0.44	2.96	2	1
1:A:471:MET:CG	1:A:481:VAL:HG11	0.44	2.43	9	1
1:A:550:ARG:HB2	1:A:559:LEU:HB3	0.44	1.89	9	1
1:A:520:ILE:HD13	1:A:520:ILE:N	0.44	2.27	4	1
1:A:550:ARG:HA	1:A:553:LEU:HD23	0.44	1.87	4	1
1:A:481:VAL:HG11	1:A:501:ILE:HD13	0.44	1.89	10	1
1:A:470:HIS:NE2	1:A:477:VAL:CG2	0.44	2.80	8	1
1:A:472:MET:SD	1:A:517:ILE:CD1	0.44	3.06	1	1
1:A:533:LEU:HG	1:A:536:ILE:O	0.44	2.12	1	1
1:A:501:ILE:O	1:A:505:TYR:CE1	0.44	2.71	2	2
1:A:534:LEU:C	1:A:534:LEU:HD12	0.44	2.33	3	2
1:A:540:VAL:O	1:A:541:SER:CB	0.44	2.64	10	1
1:A:471:MET:HE1	1:A:497:LEU:HD12	0.44	1.89	8	1
1:A:501:ILE:CG1	1:A:505:TYR:OH	0.44	2.66	6	1
1:A:498:ALA:O	1:A:501:ILE:CG1	0.44	2.66	10	1
1:A:466:LEU:CD2	1:A:534:LEU:HD21	0.44	2.43	8	1
1:A:559:LEU:CD1	1:A:559:LEU:N	0.44	2.81	6	1
1:A:470:HIS:CE1	1:A:477:VAL:HG12	0.44	2.47	1	1
1:A:470:HIS:CD2	1:A:545:LEU:HD13	0.44	2.47	1	1
1:A:561:LEU:HD22	1:A:561:LEU:O	0.44	2.13	1	1
1:A:535:LEU:C	1:A:536:ILE:HG22	0.44	2.33	7	1
1:A:470:HIS:ND1	1:A:540:VAL:CG2	0.44	2.76	9	1
1:A:504:PHE:CD2	1:A:509:HIS:NE2	0.44	2.85	4	1
1:A:504:PHE:CD1	1:A:504:PHE:C	0.44	2.89	5	1
1:A:465:ARG:HG3	1:A:531:LEU:HD21	0.44	1.89	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:568:LYS:O	1:A:572:GLU:HB3	0.44	2.13	8	1
1:A:520:ILE:CG1	1:A:524:LEU:HB3	0.44	2.43	1	1
1:A:590:MET:O	1:A:593:MET:CE	0.44	2.66	1	1
1:A:565:GLU:O	1:A:569:THR:CB	0.44	2.66	2	3
1:A:465:ARG:HB3	1:A:534:LEU:HD11	0.44	1.90	9	1
1:A:533:LEU:HD13	1:A:536:ILE:H	0.44	1.72	4	2
1:A:535:LEU:O	1:A:535:LEU:HD12	0.44	2.13	3	1
1:A:523:GLU:O	1:A:527:LEU:HD12	0.44	2.11	3	1
1:A:468:LEU:O	1:A:472:MET:HG2	0.44	2.13	4	1
1:A:484:ARG:CB	1:A:549:ILE:CG2	0.44	2.96	5	2
1:A:466:LEU:O	1:A:470:HIS:CD2	0.44	2.71	10	1
1:A:468:LEU:HD13	1:A:497:LEU:CG	0.44	2.42	8	1
1:A:500:TYR:OH	1:A:520:ILE:N	0.44	2.51	1	1
1:A:568:LYS:O	1:A:571:ALA:CB	0.44	2.62	9	1
1:A:500:TYR:OH	1:A:520:ILE:HD13	0.44	2.13	4	1
1:A:550:ARG:CG	1:A:553:LEU:HD23	0.44	2.43	4	1
1:A:533:LEU:HD12	1:A:533:LEU:O	0.44	2.12	5	1
1:A:470:HIS:CD2	1:A:540:VAL:HG11	0.44	2.48	8	1
1:A:471:MET:HG2	1:A:478:ALA:HA	0.43	1.89	6	1
1:A:501:ILE:CG1	1:A:505:TYR:CZ	0.43	3.00	6	1
1:A:540:VAL:CG1	1:A:540:VAL:O	0.43	2.65	1	1
1:A:508:GLY:O	1:A:509:HIS:HB3	0.43	2.13	7	2
1:A:568:LYS:O	1:A:583:ILE:CG2	0.43	2.66	5	3
1:A:561:LEU:O	1:A:565:GLU:N	0.43	2.51	5	2
1:A:463:ALA:CB	1:A:548:TYR:HB2	0.43	2.42	8	1
1:A:465:ARG:HA	1:A:468:LEU:HG	0.43	1.89	2	1
1:A:500:TYR:CE2	1:A:520:ILE:CG2	0.43	3.01	9	1
1:A:496:ALA:HB3	1:A:524:LEU:CD2	0.43	2.43	6	1
1:A:472:MET:HG2	1:A:517:ILE:HD11	0.43	1.90	9	1
1:A:524:LEU:HG	1:A:528:ALA:HB2	0.43	1.89	3	1
1:A:553:LEU:CD1	1:A:558:TRP:CZ2	0.43	2.97	9	1
1:A:493:GLU:CG	1:A:524:LEU:HB2	0.43	2.43	3	1
1:A:561:LEU:HD21	1:A:590:MET:HG3	0.43	1.89	8	1
1:A:588:ILE:CA	1:A:591:LYS:HE2	0.43	2.43	8	1
1:A:509:HIS:O	1:A:510:GLU:C	0.43	2.57	8	1
1:A:485:ILE:HB	1:A:552:VAL:HG11	0.43	1.91	9	1
1:A:468:LEU:HA	1:A:471:MET:HB2	0.43	1.89	3	1
1:A:504:PHE:O	1:A:508:GLY:N	0.43	2.52	8	2
1:A:491:ILE:H	1:A:491:ILE:HD13	0.43	1.72	3	1
1:A:468:LEU:HD11	1:A:494:HIS:CD2	0.43	2.49	10	1
1:A:561:LEU:CA	1:A:564:LYS:HB3	0.43	2.42	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:588:ILE:CD1	1:A:588:ILE:C	0.43	2.87	1	1
1:A:481:VAL:HA	1:A:485:ILE:CG2	0.43	2.43	7	1
1:A:558:TRP:CE3	1:A:559:LEU:HD22	0.43	2.49	7	1
1:A:497:LEU:O	1:A:500:TYR:HB2	0.43	2.13	4	1
1:A:493:GLU:N	1:A:493:GLU:OE1	0.43	2.51	5	1
1:A:474:SER:O	1:A:477:VAL:HG13	0.43	2.14	10	1
1:A:534:LEU:HD11	1:A:535:LEU:CD2	0.43	2.43	10	1
1:A:481:VAL:HG13	1:A:482:GLN:N	0.43	2.29	6	1
1:A:471:MET:C	1:A:473:ARG:H	0.43	2.16	2	1
1:A:484:ARG:HH22	1:A:563:VAL:HG22	0.43	1.72	2	1
1:A:575:LYS:HG2	1:A:580:ALA:HB2	0.43	1.90	2	1
1:A:572:GLU:N	1:A:583:ILE:HG13	0.43	2.29	3	1
1:A:468:LEU:HD22	1:A:497:LEU:HD22	0.43	1.89	4	1
1:A:568:LYS:O	1:A:572:GLU:HB2	0.43	2.13	5	1
1:A:589:GLU:CG	1:A:590:MET:N	0.43	2.81	5	1
1:A:481:VAL:HG23	1:A:482:GLN:N	0.43	2.28	8	1
1:A:522:GLY:O	1:A:526:PRO:CD	0.43	2.65	10	2
1:A:471:MET:HG2	1:A:481:VAL:CG1	0.43	2.44	2	1
1:A:500:TYR:OH	1:A:520:ILE:CG1	0.43	2.67	2	1
1:A:571:ALA:HB1	1:A:575:LYS:CG	0.43	2.43	7	1
1:A:470:HIS:CB	1:A:536:ILE:HD12	0.43	2.44	1	1
1:A:513:PRO:O	1:A:517:ILE:HB	0.43	2.14	1	1
1:A:568:LYS:CG	1:A:587:MET:CE	0.43	2.97	10	4
1:A:539:ASP:O	1:A:540:VAL:O	0.43	2.37	3	1
1:A:484:ARG:HD3	1:A:549:ILE:HG21	0.43	1.91	5	1
1:A:468:LEU:O	1:A:472:MET:HB3	0.43	2.14	10	1
1:A:479:LEU:C	1:A:479:LEU:HD12	0.43	2.35	8	1
1:A:558:TRP:CB	1:A:594:LEU:HD11	0.43	2.44	7	1
1:A:570:GLU:O	1:A:573:ARG:CG	0.43	2.67	9	1
1:A:501:ILE:O	1:A:505:TYR:CB	0.43	2.64	5	1
1:A:520:ILE:HG13	1:A:524:LEU:HB3	0.42	1.90	1	1
1:A:575:LYS:CG	1:A:580:ALA:N	0.42	2.82	1	1
1:A:558:TRP:CA	1:A:594:LEU:HD22	0.42	2.44	1	1
1:A:467:LEU:HD21	1:A:481:VAL:CB	0.42	2.40	6	1
1:A:473:ARG:O	1:A:511:ALA:HA	0.42	2.14	9	1
1:A:583:ILE:O	1:A:587:MET:HE3	0.42	2.13	9	1
1:A:481:VAL:CG2	1:A:498:ALA:HB1	0.42	2.44	3	1
1:A:512:ASP:O	1:A:516:LEU:N	0.42	2.50	3	1
1:A:510:GLU:CG	1:A:510:GLU:O	0.42	2.67	3	1
1:A:545:LEU:O	1:A:549:ILE:CG1	0.42	2.61	4	1
1:A:477:VAL:HG21	1:A:540:VAL:HG21	0.42	1.91	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:498:ALA:O	1:A:501:ILE:HG22	0.42	2.14	6	1
1:A:561:LEU:C	1:A:561:LEU:HD23	0.42	2.34	6	1
1:A:460:PHE:CZ	1:A:551:HIS:O	0.42	2.73	4	2
1:A:485:ILE:CG1	1:A:486:GLY:N	0.42	2.81	2	1
1:A:535:LEU:C	1:A:536:ILE:CG2	0.42	2.87	7	2
1:A:478:ALA:CB	1:A:511:ALA:CB	0.42	2.97	10	1
1:A:588:ILE:O	1:A:591:LYS:CD	0.42	2.67	8	1
1:A:553:LEU:HD23	1:A:554:ASN:N	0.42	2.29	7	1
1:A:493:GLU:CA	1:A:524:LEU:CD1	0.42	2.98	9	1
1:A:460:PHE:CE1	1:A:551:HIS:HB3	0.42	2.50	4	1
1:A:585:LYS:HA	1:A:588:ILE:HG23	0.42	1.91	5	1
1:A:568:LYS:CG	1:A:587:MET:HE1	0.42	2.44	10	1
1:A:478:ALA:HA	1:A:481:VAL:HG12	0.42	1.92	6	1
1:A:502:TYR:HA	1:A:505:TYR:CE2	0.42	2.49	2	1
1:A:536:ILE:HB	1:A:540:VAL:HG13	0.42	1.91	7	1
1:A:590:MET:N	1:A:590:MET:CE	0.42	2.82	4	1
1:A:505:TYR:CE1	1:A:510:GLU:O	0.42	2.72	10	1
1:A:561:LEU:O	1:A:564:LYS:HB3	0.42	2.14	10	1
1:A:561:LEU:CD2	1:A:590:MET:CB	0.42	2.94	8	1
1:A:471:MET:HE1	1:A:501:ILE:HG21	0.42	1.90	6	1
1:A:501:ILE:HG13	1:A:505:TYR:CZ	0.42	2.49	6	1
1:A:500:TYR:CZ	1:A:516:LEU:HD11	0.42	2.49	6	1
1:A:493:GLU:HA	1:A:524:LEU:HD23	0.42	1.90	7	2
1:A:535:LEU:HD13	1:A:536:ILE:HG23	0.42	1.92	6	1
1:A:571:ALA:O	1:A:575:LYS:CA	0.42	2.66	8	3
1:A:485:ILE:HG13	1:A:486:GLY:N	0.42	2.30	7	1
1:A:471:MET:CE	1:A:501:ILE:HG21	0.42	2.45	7	1
1:A:590:MET:CE	1:A:590:MET:N	0.42	2.83	7	1
1:A:521:PRO:O	1:A:524:LEU:N	0.42	2.52	9	1
1:A:493:GLU:HG3	1:A:524:LEU:HD12	0.42	1.92	10	1
1:A:588:ILE:HB	1:A:591:LYS:HE2	0.42	1.91	8	1
1:A:481:VAL:HG13	1:A:501:ILE:CD1	0.42	2.44	10	1
1:A:497:LEU:HD21	1:A:528:ALA:CB	0.42	2.45	10	1
1:A:532:SER:O	1:A:536:ILE:HD11	0.42	2.14	10	1
1:A:536:ILE:HB	1:A:540:VAL:CG2	0.42	2.42	6	1
1:A:501:ILE:CD1	1:A:505:TYR:OH	0.42	2.68	7	1
1:A:517:ILE:CD1	1:A:517:ILE:N	0.42	2.80	3	2
1:A:533:LEU:CD2	1:A:536:ILE:CG1	0.42	2.96	9	1
1:A:470:HIS:CB	1:A:540:VAL:CG2	0.42	2.98	9	1
1:A:549:ILE:N	1:A:549:ILE:HD13	0.42	2.30	5	1
1:A:574:ARG:O	1:A:575:LYS:C	0.42	2.58	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:504:PHE:CZ	1:A:516:LEU:HB3	0.42	2.50	1	1
1:A:527:LEU:O	1:A:531:LEU:HD13	0.42	2.14	2	1
1:A:500:TYR:CD2	1:A:516:LEU:CD2	0.42	3.02	4	1
1:A:470:HIS:CE1	1:A:541:SER:OG	0.42	2.73	2	1
1:A:558:TRP:O	1:A:561:LEU:N	0.42	2.53	7	1
1:A:500:TYR:OH	1:A:524:LEU:HD21	0.42	2.15	9	1
1:A:468:LEU:HD23	1:A:471:MET:SD	0.42	2.54	4	1
1:A:474:SER:O	1:A:477:VAL:HG12	0.41	2.15	6	1
1:A:472:MET:HE1	1:A:528:ALA:HA	0.41	1.92	1	1
1:A:476:ASP:O	1:A:479:LEU:HG	0.41	2.14	2	2
1:A:546:GLU:HG2	1:A:547:ASP:N	0.41	2.29	2	1
1:A:480:VAL:O	1:A:484:ARG:HB2	0.41	2.15	8	1
1:A:553:LEU:HD21	1:A:557:LYS:HG2	0.41	1.92	8	1
1:A:471:MET:SD	1:A:481:VAL:CG2	0.41	3.06	1	1
1:A:540:VAL:HG11	1:A:545:LEU:HD22	0.41	1.91	1	2
1:A:470:HIS:ND1	1:A:540:VAL:CG1	0.41	2.83	2	1
1:A:517:ILE:O	1:A:520:ILE:HG12	0.41	2.16	5	1
1:A:476:ASP:O	1:A:479:LEU:CG	0.41	2.68	6	1
1:A:467:LEU:HA	1:A:548:TYR:CZ	0.41	2.51	6	1
1:A:565:GLU:O	1:A:569:THR:N	0.41	2.53	6	1
1:A:505:TYR:O	1:A:509:HIS:CD2	0.41	2.74	1	1
1:A:460:PHE:CD2	1:A:551:HIS:O	0.41	2.73	1	1
1:A:480:VAL:O	1:A:484:ARG:CB	0.41	2.68	1	1
1:A:590:MET:HE2	1:A:591:LYS:CA	0.41	2.44	5	1
1:A:561:LEU:HD21	1:A:591:LYS:CD	0.41	2.45	10	1
1:A:469:ALA:O	1:A:536:ILE:CD1	0.41	2.68	2	1
1:A:558:TRP:HB3	1:A:594:LEU:CD1	0.41	2.45	7	1
1:A:466:LEU:HD13	1:A:535:LEU:HD21	0.41	1.92	3	1
1:A:493:GLU:O	1:A:497:LEU:N	0.41	2.53	10	1
1:A:561:LEU:CD1	1:A:564:LYS:HD2	0.41	2.40	10	1
1:A:561:LEU:CD2	1:A:590:MET:CG	0.41	2.98	8	1
1:A:540:VAL:CG2	1:A:540:VAL:O	0.41	2.67	8	1
1:A:475:ARG:O	1:A:505:TYR:CZ	0.41	2.74	9	1
1:A:494:HIS:CE1	1:A:527:LEU:CD2	0.41	3.04	4	1
1:A:481:VAL:HG13	1:A:485:ILE:HD13	0.41	1.93	5	1
1:A:564:LYS:O	1:A:568:LYS:N	0.41	2.46	10	1
1:A:471:MET:HB2	1:A:478:ALA:CA	0.41	2.45	8	1
1:A:466:LEU:HB3	1:A:535:LEU:CD1	0.41	2.45	6	1
1:A:536:ILE:O	1:A:536:ILE:HD13	0.41	2.15	6	1
1:A:470:HIS:HA	1:A:536:ILE:CD1	0.41	2.44	1	1
1:A:531:LEU:HG	1:A:534:LEU:HD22	0.41	1.92	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:541:SER:HB3	1:A:544:GLU:CG	0.41	2.46	1	1
1:A:517:ILE:O	1:A:520:ILE:CD1	0.41	2.69	2	1
1:A:504:PHE:CZ	1:A:510:GLU:HA	0.41	2.51	5	1
1:A:571:ALA:HB2	1:A:583:ILE:CG1	0.41	2.45	10	1
1:A:589:GLU:O	1:A:593:MET:HG2	0.41	2.15	8	1
1:A:520:ILE:N	1:A:520:ILE:HD13	0.41	2.30	8	1
1:A:534:LEU:HG	1:A:535:LEU:HG	0.41	1.91	8	1
1:A:470:HIS:CA	1:A:536:ILE:CD1	0.41	2.99	1	1
1:A:470:HIS:CA	1:A:536:ILE:HD13	0.41	2.45	1	1
1:A:551:HIS:CD2	1:A:560:MET:CE	0.41	3.04	1	1
1:A:471:MET:HE3	1:A:501:ILE:CD1	0.41	2.45	2	1
1:A:468:LEU:O	1:A:472:MET:HB2	0.41	2.16	5	1
1:A:468:LEU:CD1	1:A:494:HIS:CD2	0.41	3.04	10	1
1:A:471:MET:CB	1:A:481:VAL:HG21	0.41	2.46	8	1
1:A:533:LEU:O	1:A:533:LEU:HD22	0.41	2.16	8	1
1:A:545:LEU:HD12	1:A:549:ILE:HD11	0.41	1.91	8	1
1:A:460:PHE:CE2	1:A:554:ASN:OD1	0.41	2.73	6	1
1:A:471:MET:HB3	1:A:478:ALA:HA	0.41	1.93	2	1
1:A:568:LYS:O	1:A:583:ILE:HG21	0.41	2.16	2	1
1:A:553:LEU:C	1:A:553:LEU:HD12	0.41	2.36	4	1
1:A:564:LYS:O	1:A:568:LYS:HB2	0.41	2.11	10	1
1:A:533:LEU:HD22	1:A:533:LEU:O	0.41	2.15	6	1
1:A:465:ARG:HE	1:A:527:LEU:HD11	0.41	1.76	2	1
1:A:481:VAL:CA	1:A:485:ILE:HG23	0.41	2.45	7	1
1:A:465:ARG:NE	1:A:534:LEU:CD1	0.41	2.84	7	1
1:A:470:HIS:CB	1:A:477:VAL:HG11	0.41	2.46	9	1
1:A:553:LEU:CD2	1:A:558:TRP:CZ2	0.41	2.98	9	1
1:A:559:LEU:HD22	1:A:560:MET:N	0.41	2.31	4	1
1:A:534:LEU:HD12	1:A:534:LEU:C	0.41	2.36	5	1
1:A:475:ARG:HB2	1:A:510:GLU:HB3	0.41	1.92	10	1
1:A:564:LYS:CG	1:A:587:MET:HB3	0.41	2.46	10	1
1:A:512:ASP:O	1:A:516:LEU:HB3	0.41	2.15	6	1
1:A:500:TYR:CD2	1:A:519:ARG:HB3	0.41	2.51	7	1
1:A:500:TYR:OH	1:A:520:ILE:HG22	0.41	2.15	9	1
1:A:472:MET:HB2	1:A:517:ILE:HD11	0.41	1.92	4	1
1:A:481:VAL:HG13	1:A:485:ILE:CD1	0.41	2.46	5	1
1:A:520:ILE:HB	1:A:525:GLN:CG	0.41	2.46	8	1
1:A:468:LEU:HG	1:A:497:LEU:CG	0.40	2.46	7	1
1:A:472:MET:SD	1:A:532:SER:HA	0.40	2.56	4	1
1:A:553:LEU:CD1	1:A:559:LEU:HD23	0.40	2.45	5	1
1:A:471:MET:HE3	1:A:471:MET:HB2	0.40	1.79	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:571:ALA:CB	1:A:583:ILE:HD12	0.40	2.33	10	1
1:A:500:TYR:CE2	1:A:520:ILE:CD1	0.40	3.04	8	1
1:A:466:LEU:HD23	1:A:534:LEU:HD21	0.40	1.93	8	1
1:A:497:LEU:O	1:A:500:TYR:CE1	0.40	2.73	6	1
1:A:535:LEU:CD2	1:A:535:LEU:O	0.40	2.66	6	1
1:A:532:SER:O	1:A:536:ILE:CD1	0.40	2.70	6	1
1:A:493:GLU:O	1:A:524:LEU:CD1	0.40	2.69	1	1
1:A:534:LEU:CD2	1:A:535:LEU:HD23	0.40	2.46	1	1
1:A:565:GLU:O	1:A:569:THR:HB	0.40	2.15	2	1
1:A:582:ARG:N	1:A:582:ARG:HD2	0.40	2.31	3	1
1:A:516:LEU:C	1:A:516:LEU:CD2	0.40	2.84	4	1
1:A:587:MET:O	1:A:590:MET:CG	0.40	2.65	5	1
1:A:520:ILE:O	1:A:525:GLN:NE2	0.40	2.54	10	1
1:A:520:ILE:CB	1:A:521:PRO:CD	0.40	2.99	1	1
1:A:558:TRP:HB3	1:A:594:LEU:HD13	0.40	1.93	1	1
1:A:500:TYR:CE2	1:A:520:ILE:CG1	0.40	3.04	2	1
1:A:553:LEU:CD1	1:A:559:LEU:HD11	0.40	2.46	9	1
1:A:550:ARG:HG3	1:A:553:LEU:CD2	0.40	2.47	4	1
1:A:467:LEU:HB2	1:A:548:TYR:CD2	0.40	2.52	5	1
1:A:472:MET:HE3	1:A:528:ALA:O	0.40	2.16	10	1
1:A:485:ILE:HG22	1:A:549:ILE:CG2	0.40	2.36	10	1
1:A:504:PHE:CE2	1:A:515:ALA:CB	0.40	3.02	10	1
1:A:504:PHE:CD2	1:A:508:GLY:O	0.40	2.74	8	1
1:A:536:ILE:HG12	1:A:537:ALA:N	0.40	2.32	1	1
1:A:571:ALA:O	1:A:575:LYS:CB	0.40	2.70	7	1
1:A:520:ILE:CG1	1:A:524:LEU:HB2	0.40	2.46	7	1
1:A:590:MET:HA	1:A:593:MET:CG	0.40	2.46	7	1
1:A:471:MET:HB3	1:A:481:VAL:HG21	0.40	1.92	5	1
1:A:510:GLU:CD	1:A:511:ALA:N	0.40	2.75	5	1
1:A:493:GLU:HA	1:A:524:LEU:CD1	0.40	2.47	10	1
1:A:568:LYS:HD3	1:A:586:GLU:HG2	0.40	1.93	8	1
1:A:463:ALA:CB	1:A:548:TYR:CB	0.40	2.99	8	1
1:A:559:LEU:N	1:A:559:LEU:CD2	0.40	2.85	8	1
1:A:500:TYR:C	1:A:500:TYR:CD1	0.40	2.93	6	1
1:A:467:LEU:CD2	1:A:549:ILE:HG12	0.40	2.46	1	1
1:A:500:TYR:HD2	1:A:516:LEU:HD13	0.40	1.77	9	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	129/146 (88%)	107±1 (83±1%)	14±1 (11±1%)	8±2 (6±1%)	4	22
All	All	1290/1460 (88%)	1072 (83%)	143 (11%)	75 (6%)	4	22

All 22 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	540	VAL	9
1	A	510	GLU	7
1	A	522	GLY	7
1	A	509	HIS	6
1	A	535	LEU	6
1	A	554	ASN	5
1	A	575	LYS	4
1	A	521	PRO	4
1	A	511	ALA	3
1	A	488	ARG	3
1	A	512	ASP	3
1	A	486	GLY	2
1	A	541	SER	2
1	A	536	ILE	2
1	A	557	LYS	2
1	A	489	PHE	2
1	A	490	ASN	2
1	A	472	MET	2
1	A	508	GLY	1
1	A	539	ASP	1
1	A	533	LEU	1
1	A	487	GLY	1

6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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	109/124 (88%)	65±3 (60±2%)	44±3 (40±2%)	0	5
All	All	1090/1240 (88%)	651 (60%)	439 (40%)	0	5

All 102 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	497	LEU	10
1	A	479	LEU	10
1	A	461	GLN	10
1	A	520	ILE	10
1	A	466	LEU	10
1	A	485	ILE	9
1	A	533	LEU	9
1	A	557	LYS	8
1	A	524	LEU	8
1	A	474	SER	8
1	A	534	LEU	8
1	A	587	MET	8
1	A	568	LYS	8
1	A	535	LEU	7
1	A	558	TRP	7
1	A	467	LEU	7
1	A	562	LYS	7
1	A	482	GLN	7
1	A	460	PHE	6
1	A	588	ILE	6
1	A	488	ARG	6
1	A	516	LEU	6
1	A	495	ARG	6
1	A	565	GLU	6
1	A	592	LYS	6
1	A	593	MET	6
1	A	525	GLN	6
1	A	582	ARG	6
1	A	559	LEU	6
1	A	473	ARG	6
1	A	572	GLU	5
1	A	519	ARG	5
1	A	553	LEU	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	527	LEU	5
1	A	483	GLU	5
1	A	539	ASP	5
1	A	590	MET	5
1	A	507	GLU	5
1	A	564	LYS	5
1	A	475	ARG	5
1	A	471	MET	5
1	A	504	PHE	5
1	A	585	LYS	4
1	A	464	GLU	4
1	A	554	ASN	4
1	A	536	ILE	4
1	A	570	GLU	4
1	A	510	GLU	4
1	A	493	GLU	4
1	A	506	GLU	4
1	A	591	LYS	4
1	A	575	LYS	4
1	A	518	SER	4
1	A	550	ARG	4
1	A	551	HIS	4
1	A	465	ARG	4
1	A	531	LEU	4
1	A	560	MET	4
1	A	547	ASP	4
1	A	502	TYR	4
1	A	517	ILE	3
1	A	548	TYR	3
1	A	586	GLU	3
1	A	561	LEU	3
1	A	476	ASP	3
1	A	541	SER	3
1	A	574	ARG	3
1	A	500	TYR	3
1	A	532	SER	3
1	A	470	HIS	3
1	A	583	ILE	3
1	A	566	GLN	3
1	A	484	ARG	3
1	A	501	ILE	3
1	A	492	GLU	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	472	MET	2
1	A	567	GLU	2
1	A	546	GLU	2
1	A	523	GLU	2
1	A	573	ARG	2
1	A	544	GLU	2
1	A	509	HIS	2
1	A	594	LEU	2
1	A	530	GLU	2
1	A	549	ILE	2
1	A	538	ASP	2
1	A	494	HIS	2
1	A	542	GLU	1
1	A	529	SER	1
1	A	569	THR	1
1	A	505	TYR	1
1	A	477	VAL	1
1	A	481	VAL	1
1	A	543	GLN	1
1	A	545	LEU	1
1	A	540	VAL	1
1	A	489	PHE	1
1	A	491	ILE	1
1	A	462	ASN	1
1	A	512	ASP	1
1	A	490	ASN	1
1	A	589	GLU	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 77% for the well-defined parts and 75% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: BMRB entry 6716

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_1*

7.1.1 Bookkeeping

The following table shows the results of parsing the chemical shift list and reports the number of nuclei with statistically unusual chemical shifts.

Total number of shifts	1613
Number of shifts mapped to atoms	1613
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	0

7.1.2 Chemical shift referencing

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction \pm precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	135	-0.77 ± 0.13	Should be applied
$^{13}\text{C}_\beta$	126	0.12 ± 0.07	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	136	-0.60 ± 0.20	Should be applied
^{15}N	129	0.59 ± 0.35	None needed (imprecise)

7.1.3 Completeness of resonance assignments

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 77%, i.e. 1297 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1691. 21 out of 23 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	596/639 (93%)	235/255 (92%)	243/258 (94%)	118/126 (94%)
Sidechain	643/949 (68%)	386/556 (69%)	253/344 (74%)	4/49 (8%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Aromatic	58/103 (56%)	29/53 (55%)	28/41 (68%)	1/9 (11%)
Overall	1297/1691 (77%)	650/864 (75%)	524/643 (81%)	123/184 (67%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 75%, i.e. 1426 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1902. 24 out of 26 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	658/720 (91%)	258/287 (90%)	271/292 (93%)	129/141 (91%)
Sidechain	710/1070 (66%)	426/629 (68%)	280/387 (72%)	4/54 (7%)
Aromatic	58/112 (52%)	29/58 (50%)	28/45 (62%)	1/9 (11%)
Overall	1426/1902 (75%)	713/974 (73%)	579/724 (80%)	134/204 (66%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts ⓘ

There are no statistically unusual chemical shifts.

7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots ⓘ

The image below reports *random coil index* values for the protein chains in the structure. The height of each bar gives a probability of a given residue to be disordered, as predicted from the available chemical shifts and the amino acid sequence. A value above 0.2 is an indication of significant predicted disorder. The colour of the bar shows whether the residue is in the well-defined core (black) or in the ill-defined residue ranges (cyan), as described in section 2 on ensemble composition.

Random coil index (RCI) for chain A:

