



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 12, 2017 – 05:40 pm GMT

PDB ID : 1BYM  
Title : SOLUTION STRUCTURES OF THE C-TERMINAL DOMAIN OF DIPHTHERIA TOXIN REPRESSOR  
Authors : Wang, G.; Wylie, G.P.; Twigg, P.D.; Caspar, D.L.D.; Murphy, J.R.; Logan, T.M.  
Deposited on : 1998-10-17

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
Percentile statistics	:	20161228.v01 (using entries in the PDB archive December 28th 2016)
RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
ShiftChecker	:	trunk28760
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	recalc28949

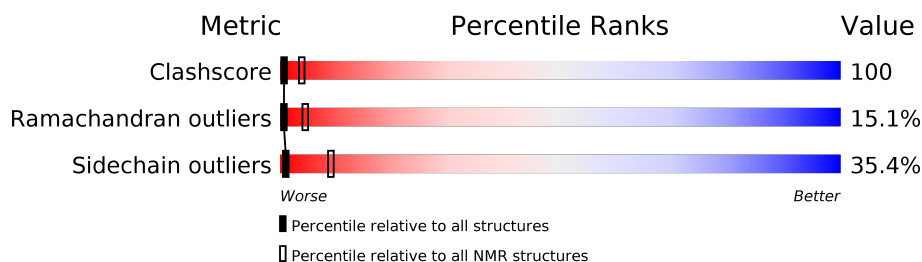
# 1 Overall quality at a glance

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	125131	11601
Ramachandran outliers	121729	10391
Sidechain outliers	121581	10367

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	97	

## 2 Ensemble composition and analysis

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

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:131-A:138 (8)	1.11	14
2	A:148-A:226 (79)	0.84	20

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

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

The models can be grouped into 4 clusters. No single-model clusters were found.

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

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

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1483 atoms, of which 738 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR).

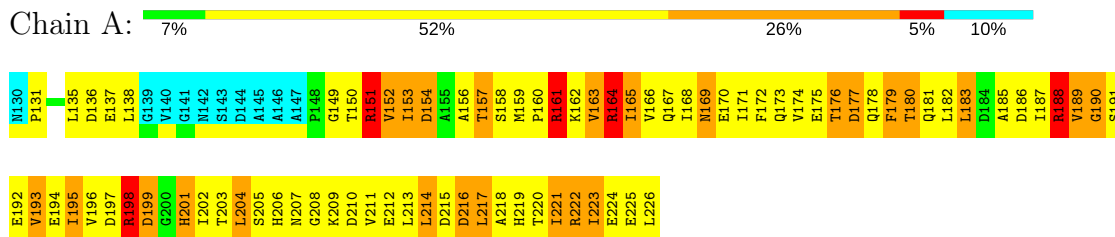
Mol	Chain	Residues	Atoms							Trace
1	A	97	Total	C	H	N	O	S		0
			1483	459	738	131	154	1		

## 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: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)

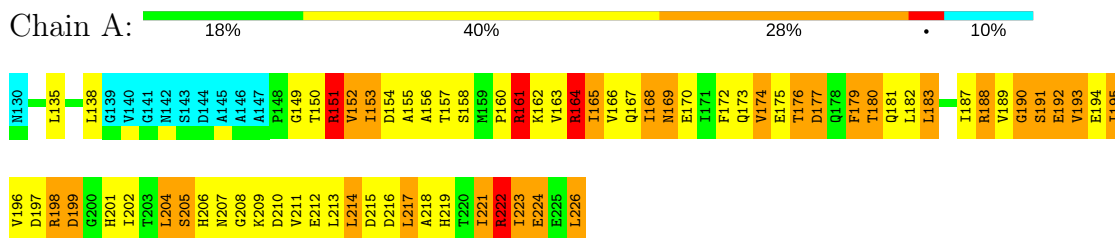


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

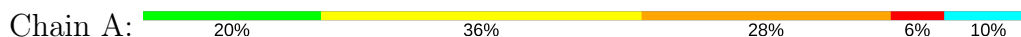
#### 4.2.1 Score per residue for model 1

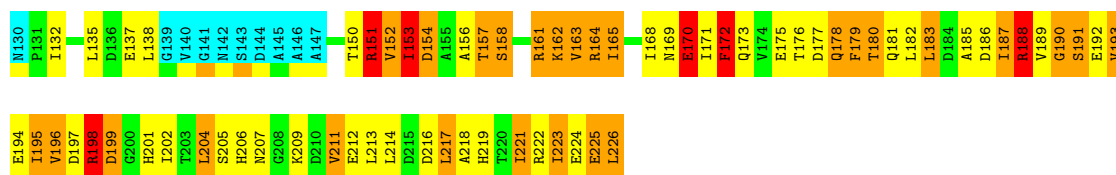
- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)



#### 4.2.2 Score per residue for model 2

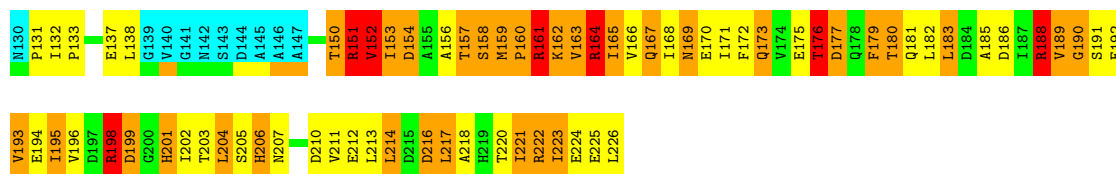
- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)





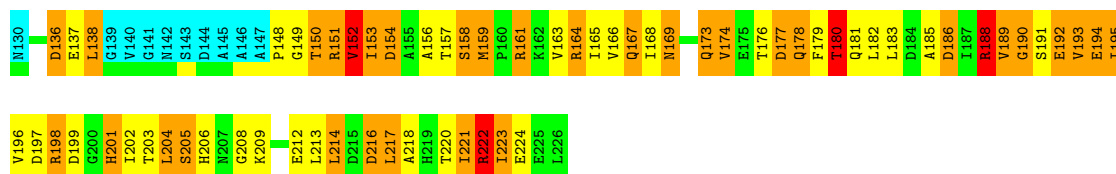
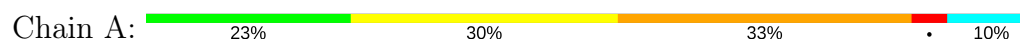
#### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)



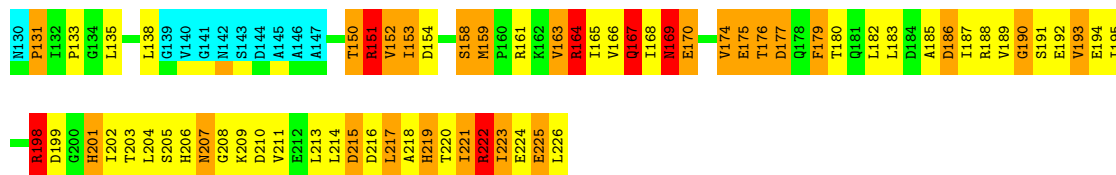
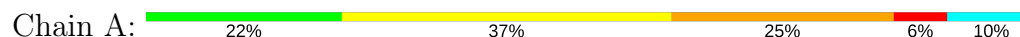
#### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)



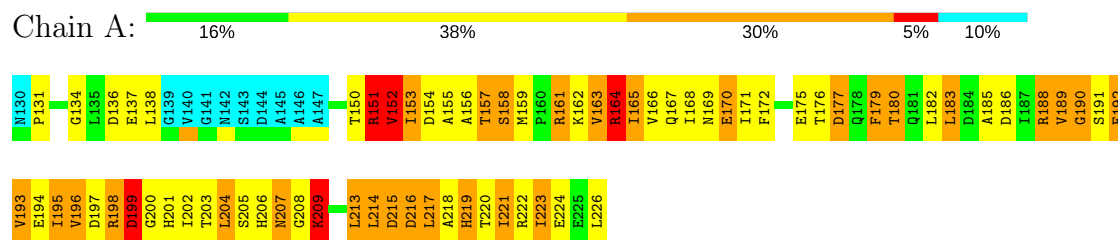
#### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)



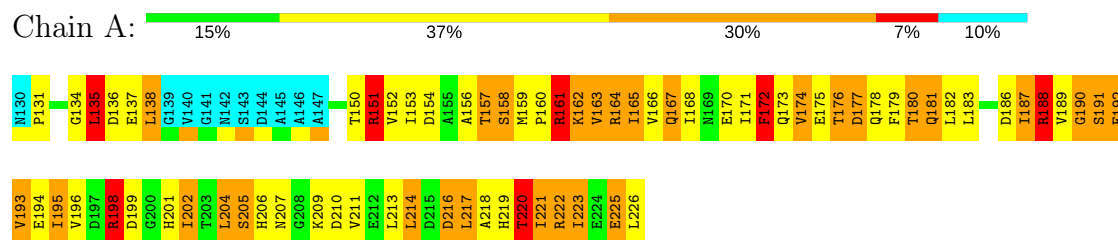
#### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)



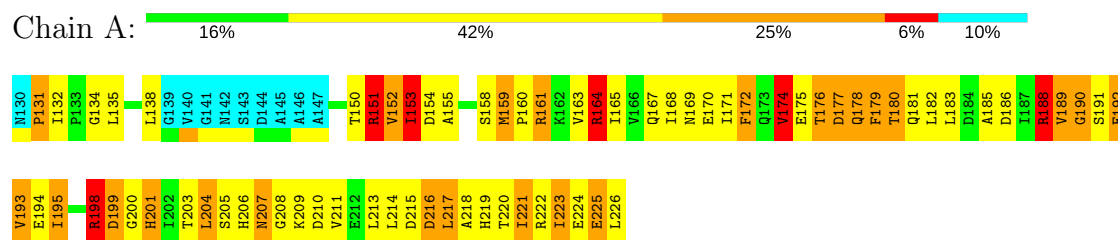
#### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)



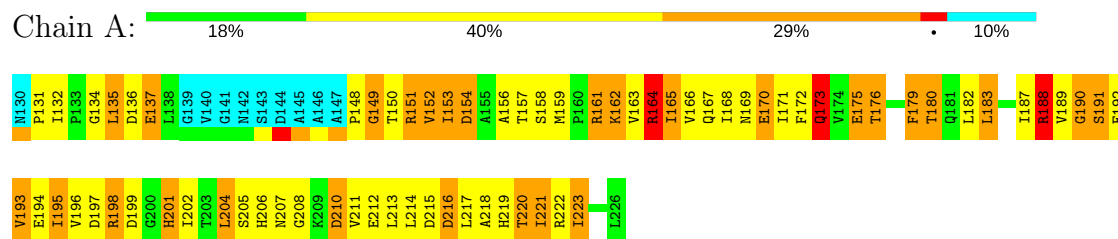
#### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)



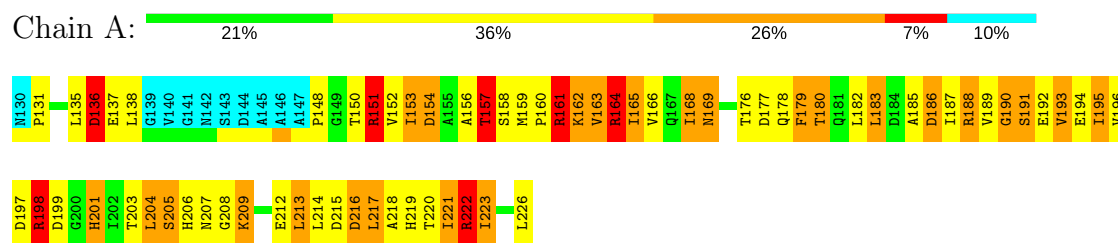
#### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)



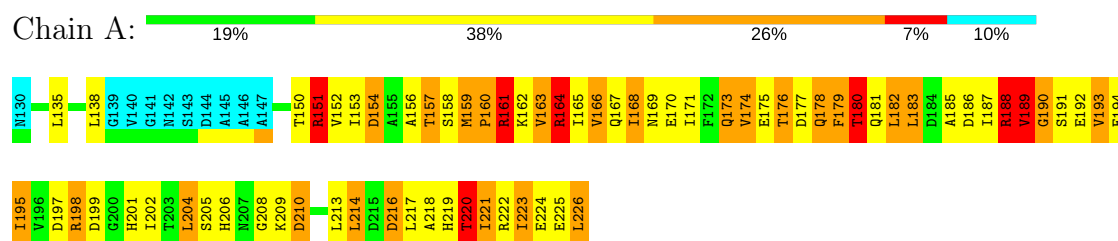
### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)



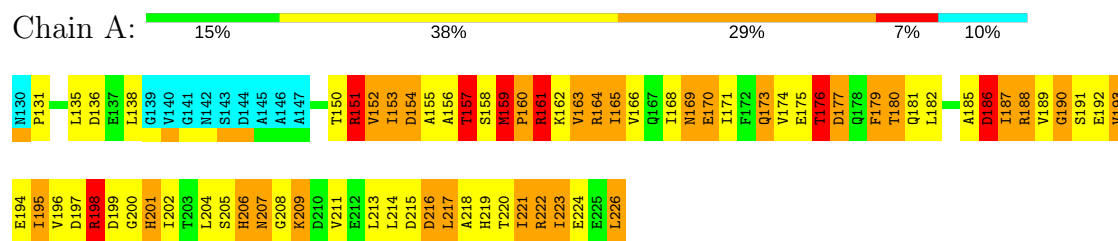
### 4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)



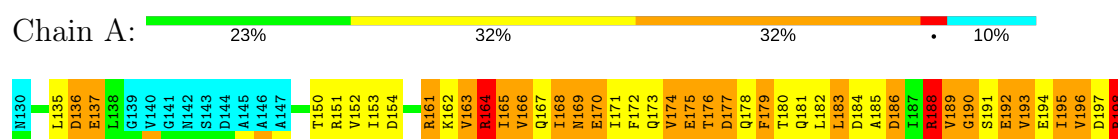
### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)

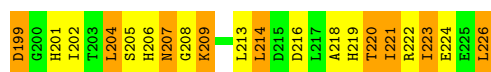


### 4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)

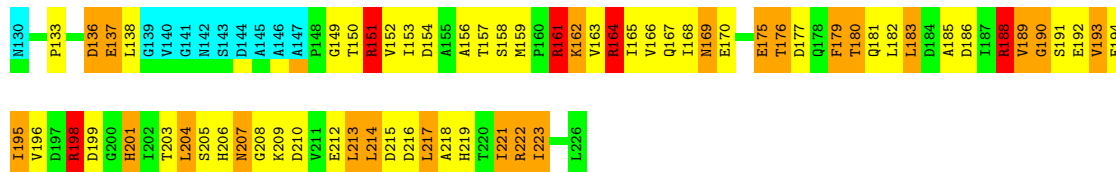
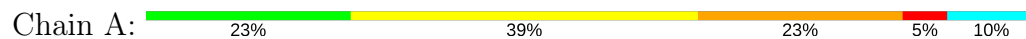






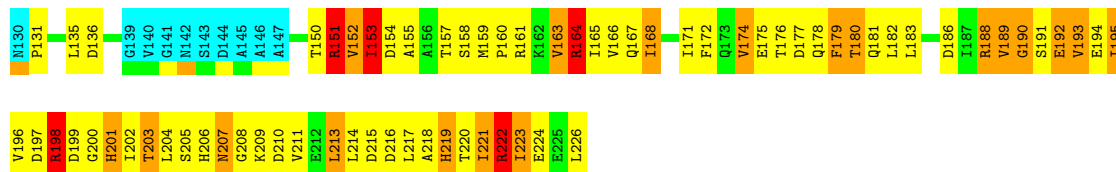
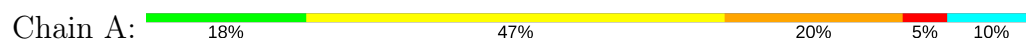
#### 4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)



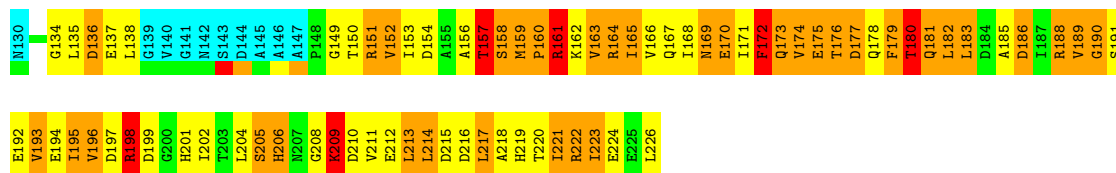
#### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)



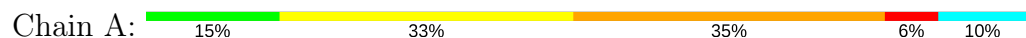
#### 4.2.16 Score per residue for model 16

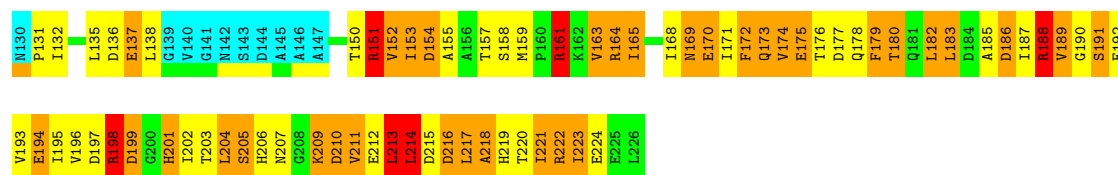
- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)



#### 4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)

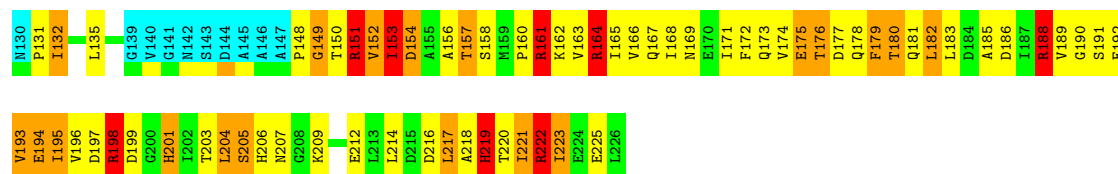




#### 4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)

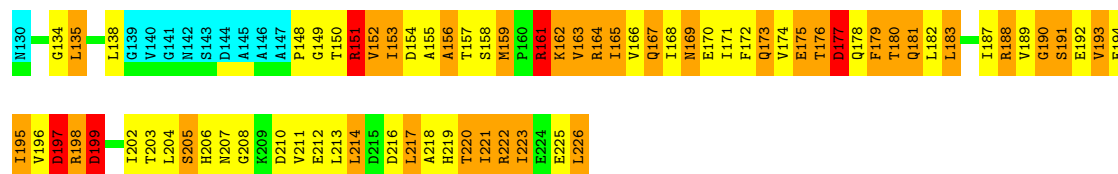
Chain A: 20% 42% 20% 8% 10%



#### 4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)

Chain A: 14% 37% 33% 5% 10%



#### 4.2.20 Score per residue for model 20 (medoid)

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)

Chain A: 21% 40% 28% 10%



## 5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *DISTANCE GEOMETRY AND SIMULATED ANNEALING CALCULATIONS*.

Of the 100 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *NO NOE DISTANCE VIOLATION GREATER THAN 0.35 Å, NO DIHEDRAL ANGLE RESTRAINT VIOLATION GREATER THAN 5 DEG, RMS DIFFERENCE FOR BOND DEVIATIONS FROM IDEALITY LESS THAN 0.01 Å, RMS DIFFERENCE FOR ANGLE DEVIATIONS FROM IDEALITY LESS THAN 2 DEG, LOWEST TOTAL ENERGY*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	
X-PLOR	structure solution	

No chemical shift data was provided. No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.

## 6 Model quality

### 6.1 Standard geometry

There are no covalent bond-length or bond-angle outliers.

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	5.8±0.4
All	All	0	117

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	161	ARG	Sidechain	20
1	A	188	ARG	Sidechain	20
1	A	198	ARG	Sidechain	20
1	A	222	ARG	Sidechain	19
1	A	164	ARG	Sidechain	19
1	A	151	ARG	Sidechain	19

### 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	685	685	685	137±14
All	All	13700	13700	13700	2734

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 100.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:152:VAL:HG23	1:A:223:ILE:HG21	1.13	1.21	12	6
1:A:165:ILE:HG23	1:A:223:ILE:HG22	1.11	1.16	3	20
1:A:152:VAL:HG13	1:A:153:ILE:HG23	1.10	1.21	4	2
1:A:176:THR:HG22	1:A:180:THR:HG23	1.09	1.22	8	1
1:A:153:ILE:HG21	1:A:218:ALA:HB1	1.07	1.22	17	7
1:A:165:ILE:HG23	1:A:223:ILE:CG2	1.06	1.80	9	19
1:A:153:ILE:CG2	1:A:218:ALA:HB1	1.02	1.84	17	13
1:A:165:ILE:HG21	1:A:189:VAL:HB	1.02	1.32	5	1
1:A:165:ILE:CG2	1:A:223:ILE:HG22	1.02	1.84	9	17
1:A:189:VAL:O	1:A:191:SER:N	1.00	1.93	19	19
1:A:153:ILE:HG21	1:A:218:ALA:CB	0.98	1.87	4	11
1:A:204:LEU:HD22	1:A:206:HIS:CD2	0.97	1.94	11	12
1:A:176:THR:HG23	1:A:180:THR:HG23	0.97	1.36	10	2
1:A:152:VAL:HG23	1:A:153:ILE:HG23	0.95	1.34	17	1
1:A:179:PHE:O	1:A:182:LEU:HD12	0.95	1.60	16	5
1:A:165:ILE:HG23	1:A:221:ILE:HG23	0.95	1.37	13	1
1:A:214:LEU:O	1:A:218:ALA:HB2	0.95	1.60	17	10
1:A:176:THR:HG23	1:A:179:PHE:CD2	0.94	1.98	15	2
1:A:152:VAL:CG2	1:A:223:ILE:HG21	0.93	1.92	18	4
1:A:152:VAL:HG22	1:A:195:ILE:HD13	0.92	1.40	11	5
1:A:179:PHE:CZ	1:A:183:LEU:HD13	0.92	1.99	17	9
1:A:153:ILE:HD12	1:A:154:ASP:N	0.92	1.79	5	1
1:A:152:VAL:HG13	1:A:195:ILE:HG21	0.91	1.40	20	4
1:A:189:VAL:HG11	1:A:221:ILE:HG21	0.91	1.42	5	1
1:A:165:ILE:HB	1:A:189:VAL:O	0.91	1.64	5	8
1:A:179:PHE:CE2	1:A:183:LEU:HD13	0.90	2.01	14	4
1:A:152:VAL:HG23	1:A:223:ILE:CG2	0.90	1.95	18	4
1:A:204:LEU:HD22	1:A:206:HIS:NE2	0.90	1.82	1	10
1:A:152:VAL:HG13	1:A:153:ILE:CG2	0.89	1.97	2	2
1:A:153:ILE:HD11	1:A:219:HIS:CG	0.89	2.01	18	6
1:A:152:VAL:CG1	1:A:153:ILE:HG23	0.89	1.97	4	2
1:A:176:THR:HG22	1:A:180:THR:CG2	0.89	1.96	8	2
1:A:152:VAL:HG13	1:A:195:ILE:HD13	0.89	1.42	12	4
1:A:163:VAL:HG23	1:A:194:GLU:HA	0.88	1.46	11	6
1:A:163:VAL:HG22	1:A:194:GLU:HA	0.88	1.43	19	9
1:A:152:VAL:HG13	1:A:223:ILE:HG21	0.88	1.42	3	2
1:A:204:LEU:HD12	1:A:213:LEU:HD22	0.87	1.44	11	4
1:A:165:ILE:HD12	1:A:223:ILE:CG2	0.87	2.00	13	1
1:A:166:VAL:HG22	1:A:222:ARG:O	0.86	1.70	12	12
1:A:204:LEU:HD11	1:A:213:LEU:CD1	0.85	2.01	17	1
1:A:163:VAL:HG12	1:A:224:GLU:O	0.85	1.70	17	6

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:153:ILE:HG21	1:A:218:ALA:HB3	0.85	1.48	9	6
1:A:152:VAL:HG23	1:A:195:ILE:HD13	0.84	1.45	2	2
1:A:195:ILE:HG23	1:A:204:LEU:HG	0.84	1.48	5	16
1:A:152:VAL:C	1:A:153:ILE:HG23	0.84	1.92	18	3
1:A:165:ILE:HD12	1:A:223:ILE:HG21	0.84	1.50	13	2
1:A:179:PHE:CE2	1:A:183:LEU:HD23	0.83	2.09	19	1
1:A:153:ILE:HG22	1:A:202:ILE:CD1	0.83	2.03	4	7
1:A:176:THR:HG21	1:A:180:THR:HG23	0.82	1.48	15	1
1:A:155:ALA:HB1	1:A:163:VAL:HG11	0.81	1.49	1	3
1:A:193:VAL:HG11	1:A:206:HIS:CD2	0.81	2.11	5	4
1:A:156:ALA:HB2	1:A:195:ILE:HD12	0.81	1.53	16	7
1:A:213:LEU:O	1:A:214:LEU:HD23	0.81	1.76	10	1
1:A:171:ILE:HD13	1:A:217:LEU:HD21	0.79	1.53	7	1
1:A:171:ILE:HD13	1:A:217:LEU:CD2	0.79	2.06	7	1
1:A:152:VAL:N	1:A:223:ILE:HD12	0.79	1.91	3	5
1:A:213:LEU:HD22	1:A:218:ALA:HA	0.79	1.53	17	1
1:A:152:VAL:HB	1:A:223:ILE:HG21	0.79	1.54	14	3
1:A:214:LEU:HD23	1:A:217:LEU:HB2	0.79	1.51	8	1
1:A:183:LEU:HD13	1:A:183:LEU:O	0.79	1.77	15	4
1:A:152:VAL:CG1	1:A:195:ILE:HG21	0.79	2.08	20	4
1:A:165:ILE:HD12	1:A:190:GLY:N	0.78	1.92	10	8
1:A:168:ILE:CD1	1:A:221:ILE:HG22	0.78	2.09	17	2
1:A:174:VAL:HG22	1:A:175:GLU:N	0.77	1.94	8	1
1:A:152:VAL:HG13	1:A:152:VAL:O	0.77	1.79	1	3
1:A:165:ILE:N	1:A:165:ILE:HD13	0.77	1.92	13	1
1:A:151:ARG:HG3	1:A:153:ILE:HD11	0.77	1.54	6	1
1:A:182:LEU:HD12	1:A:183:LEU:N	0.77	1.95	2	7
1:A:165:ILE:CG2	1:A:221:ILE:HG23	0.77	2.08	13	1
1:A:204:LEU:HB2	1:A:213:LEU:HD12	0.77	1.54	16	1
1:A:152:VAL:HG11	1:A:221:ILE:HD11	0.77	1.57	5	2
1:A:183:LEU:O	1:A:183:LEU:HD13	0.77	1.80	19	1
1:A:168:ILE:HG21	1:A:188:ARG:HG2	0.77	1.54	1	3
1:A:217:LEU:O	1:A:220:THR:HG22	0.77	1.80	3	2
1:A:152:VAL:HG22	1:A:195:ILE:HG21	0.76	1.54	13	6
1:A:153:ILE:HG22	1:A:202:ILE:HD13	0.76	1.57	13	11
1:A:188:ARG:O	1:A:189:VAL:O	0.76	2.03	17	10
1:A:182:LEU:HD12	1:A:182:LEU:C	0.76	2.01	2	7
1:A:204:LEU:HD13	1:A:213:LEU:CB	0.75	2.10	12	1
1:A:153:ILE:HG22	1:A:202:ILE:HD12	0.75	1.59	4	3
1:A:204:LEU:HD12	1:A:213:LEU:CD1	0.75	2.11	16	1
1:A:165:ILE:HB	1:A:189:VAL:C	0.75	2.02	2	8

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:152:VAL:CG1	1:A:223:ILE:HG21	0.75	2.12	17	1
1:A:168:ILE:HA	1:A:221:ILE:HG22	0.75	1.59	5	2
1:A:165:ILE:CG2	1:A:189:VAL:HB	0.75	2.11	5	4
1:A:203:THR:HG23	1:A:211:VAL:O	0.75	1.82	17	2
1:A:153:ILE:HD13	1:A:153:ILE:N	0.74	1.97	6	3
1:A:189:VAL:CG2	1:A:189:VAL:O	0.74	2.35	13	5
1:A:150:THR:HG22	1:A:151:ARG:N	0.73	1.96	5	2
1:A:213:LEU:HD22	1:A:218:ALA:CA	0.73	2.13	17	1
1:A:168:ILE:HG13	1:A:221:ILE:HG22	0.73	1.58	14	5
1:A:152:VAL:HG12	1:A:218:ALA:O	0.73	1.83	2	6
1:A:179:PHE:HA	1:A:182:LEU:HD12	0.73	1.61	1	6
1:A:165:ILE:HD12	1:A:190:GLY:H	0.73	1.43	8	9
1:A:182:LEU:HD22	1:A:213:LEU:HD12	0.73	1.61	2	2
1:A:152:VAL:O	1:A:153:ILE:HG23	0.73	1.84	18	5
1:A:223:ILE:HD12	1:A:224:GLU:N	0.72	1.99	5	1
1:A:153:ILE:CG2	1:A:218:ALA:HB3	0.72	2.14	9	5
1:A:152:VAL:HG13	1:A:153:ILE:N	0.72	1.96	4	1
1:A:213:LEU:HD12	1:A:214:LEU:N	0.72	1.99	1	1
1:A:214:LEU:N	1:A:214:LEU:HD23	0.72	2.00	2	6
1:A:152:VAL:CG2	1:A:195:ILE:HD13	0.72	2.15	11	4
1:A:223:ILE:HD13	1:A:223:ILE:O	0.72	1.85	17	4
1:A:156:ALA:HB2	1:A:195:ILE:CD1	0.71	2.14	14	3
1:A:204:LEU:HD12	1:A:213:LEU:HD11	0.71	1.60	16	1
1:A:214:LEU:HD11	1:A:217:LEU:HB2	0.71	1.60	2	3
1:A:152:VAL:HA	1:A:223:ILE:HD12	0.71	1.62	11	2
1:A:163:VAL:HG12	1:A:224:GLU:C	0.71	2.04	2	5
1:A:152:VAL:HG12	1:A:195:ILE:HG21	0.71	1.61	8	1
1:A:179:PHE:HZ	1:A:183:LEU:HD13	0.71	1.45	20	6
1:A:182:LEU:C	1:A:182:LEU:HD12	0.71	2.06	9	2
1:A:165:ILE:HB	1:A:189:VAL:CA	0.70	2.16	2	8
1:A:196:VAL:O	1:A:196:VAL:HG13	0.70	1.86	15	2
1:A:219:HIS:O	1:A:220:THR:HG23	0.70	1.85	11	3
1:A:213:LEU:HD13	1:A:214:LEU:N	0.70	2.01	6	2
1:A:221:ILE:H	1:A:221:ILE:HD13	0.70	1.44	8	2
1:A:152:VAL:HB	1:A:221:ILE:HD11	0.70	1.63	18	1
1:A:176:THR:CG2	1:A:180:THR:HG23	0.70	2.14	10	4
1:A:214:LEU:HD12	1:A:216:ASP:HB2	0.70	1.64	20	3
1:A:152:VAL:O	1:A:153:ILE:CG1	0.70	2.40	15	6
1:A:189:VAL:O	1:A:189:VAL:CG2	0.69	2.40	20	5
1:A:174:VAL:HG22	1:A:174:VAL:O	0.69	1.86	5	1
1:A:185:ALA:HB3	1:A:187:ILE:HG22	0.69	1.64	17	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:150:THR:O	1:A:223:ILE:HD13	0.69	1.88	17	2
1:A:176:THR:HG23	1:A:176:THR:O	0.69	1.88	5	2
1:A:165:ILE:HG21	1:A:189:VAL:CB	0.69	2.14	5	1
1:A:168:ILE:HG21	1:A:188:ARG:HD3	0.68	1.64	13	1
1:A:152:VAL:CG1	1:A:195:ILE:HD13	0.68	2.18	12	1
1:A:204:LEU:HD13	1:A:213:LEU:HB3	0.68	1.65	12	1
1:A:221:ILE:HD13	1:A:221:ILE:H	0.68	1.46	18	5
1:A:152:VAL:HG12	1:A:221:ILE:HD11	0.68	1.65	19	6
1:A:176:THR:HG23	1:A:180:THR:CG2	0.68	2.17	10	2
1:A:213:LEU:CD1	1:A:218:ALA:HB2	0.68	2.17	1	3
1:A:223:ILE:HD13	1:A:223:ILE:C	0.68	2.09	17	1
1:A:179:PHE:HB2	1:A:217:LEU:HD11	0.68	1.66	17	1
1:A:163:VAL:O	1:A:193:VAL:O	0.68	2.12	4	20
1:A:174:VAL:HG12	1:A:175:GLU:N	0.67	2.04	15	1
1:A:204:LEU:HD11	1:A:213:LEU:CG	0.67	2.18	17	1
1:A:183:LEU:HD13	1:A:183:LEU:C	0.67	2.09	15	1
1:A:168:ILE:HD11	1:A:171:ILE:HG13	0.67	1.65	3	1
1:A:161:ARG:HH21	1:A:163:VAL:HG13	0.67	1.50	1	1
1:A:156:ALA:O	1:A:157:THR:HG22	0.67	1.88	3	4
1:A:165:ILE:HD11	1:A:204:LEU:HD11	0.67	1.65	8	4
1:A:163:VAL:HG12	1:A:225:GLU:HA	0.67	1.64	8	2
1:A:213:LEU:HD13	1:A:213:LEU:C	0.67	2.09	12	1
1:A:211:VAL:HG13	1:A:212:GLU:N	0.67	2.05	2	1
1:A:152:VAL:HG12	1:A:223:ILE:HG21	0.67	1.67	17	1
1:A:152:VAL:CG1	1:A:221:ILE:HD11	0.66	2.20	17	6
1:A:164:ARG:HH11	1:A:166:VAL:HG12	0.66	1.50	18	1
1:A:163:VAL:HG21	1:A:195:ILE:HG13	0.66	1.65	11	2
1:A:132:ILE:O	1:A:132:ILE:HG23	0.66	1.90	2	1
1:A:188:ARG:C	1:A:189:VAL:HG13	0.66	2.11	13	8
1:A:218:ALA:O	1:A:220:THR:N	0.66	2.29	5	1
1:A:168:ILE:CG1	1:A:221:ILE:HG22	0.66	2.21	17	2
1:A:193:VAL:CG2	1:A:204:LEU:HD21	0.66	2.21	15	13
1:A:164:ARG:NH2	1:A:166:VAL:HG12	0.65	2.06	13	1
1:A:132:ILE:HG23	1:A:132:ILE:O	0.65	1.91	17	2
1:A:223:ILE:C	1:A:223:ILE:HD13	0.65	2.12	11	3
1:A:153:ILE:HG21	1:A:219:HIS:CD2	0.65	2.26	12	1
1:A:152:VAL:HG12	1:A:153:ILE:HG23	0.65	1.67	9	1
1:A:221:ILE:N	1:A:221:ILE:HD13	0.65	2.06	1	9
1:A:193:VAL:CG1	1:A:206:HIS:CD2	0.65	2.80	5	2
1:A:161:ARG:O	1:A:163:VAL:HG22	0.64	1.92	11	1
1:A:153:ILE:HG23	1:A:218:ALA:CB	0.64	2.21	5	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:164:ARG:NH1	1:A:166:VAL:HG12	0.64	2.06	18	2
1:A:187:ILE:O	1:A:188:ARG:CB	0.64	2.45	12	6
1:A:189:VAL:C	1:A:191:SER:N	0.64	2.50	2	18
1:A:165:ILE:CD1	1:A:223:ILE:CG2	0.64	2.74	13	1
1:A:153:ILE:HG23	1:A:218:ALA:HB3	0.64	1.69	5	1
1:A:153:ILE:HG23	1:A:218:ALA:HB1	0.64	1.68	13	6
1:A:221:ILE:HD13	1:A:221:ILE:N	0.64	2.07	6	7
1:A:182:LEU:HD22	1:A:211:VAL:CG1	0.64	2.23	5	1
1:A:223:ILE:C	1:A:223:ILE:HD12	0.64	2.13	5	1
1:A:214:LEU:O	1:A:214:LEU:HD12	0.64	1.93	3	1
1:A:187:ILE:HD13	1:A:211:VAL:CG2	0.64	2.23	17	1
1:A:219:HIS:N	1:A:219:HIS:CD2	0.64	2.63	12	1
1:A:195:ILE:C	1:A:195:ILE:HD13	0.64	2.13	3	2
1:A:153:ILE:CD1	1:A:219:HIS:CD2	0.63	2.81	19	1
1:A:195:ILE:HG22	1:A:202:ILE:CG2	0.63	2.24	12	1
1:A:195:ILE:HG23	1:A:204:LEU:CG	0.63	2.22	12	2
1:A:221:ILE:CG2	1:A:223:ILE:CG2	0.63	2.76	13	1
1:A:157:THR:HG23	1:A:158:SER:N	0.63	2.08	12	1
1:A:213:LEU:C	1:A:214:LEU:HD23	0.63	2.14	4	2
1:A:194:GLU:O	1:A:204:LEU:HD23	0.63	1.92	8	6
1:A:204:LEU:HD11	1:A:213:LEU:HG	0.63	1.68	17	1
1:A:152:VAL:HG12	1:A:153:ILE:N	0.63	2.09	9	3
1:A:152:VAL:O	1:A:153:ILE:HG12	0.63	1.94	2	4
1:A:213:LEU:HD23	1:A:217:LEU:HB3	0.63	1.70	17	1
1:A:176:THR:OG1	1:A:179:PHE:CD1	0.63	2.50	18	2
1:A:168:ILE:CA	1:A:221:ILE:HG22	0.63	2.23	5	1
1:A:217:LEU:O	1:A:221:ILE:HG23	0.63	1.93	14	1
1:A:214:LEU:HD13	1:A:217:LEU:CB	0.63	2.24	3	1
1:A:152:VAL:C	1:A:153:ILE:CG2	0.62	2.65	18	2
1:A:173:GLN:C	1:A:174:VAL:HG23	0.62	2.12	17	1
1:A:179:PHE:CD1	1:A:217:LEU:CD2	0.62	2.82	16	1
1:A:151:ARG:HA	1:A:221:ILE:O	0.62	1.95	17	3
1:A:155:ALA:CB	1:A:163:VAL:HG11	0.62	2.24	8	3
1:A:204:LEU:CD1	1:A:213:LEU:CB	0.62	2.78	5	1
1:A:220:THR:HG23	1:A:221:ILE:HG23	0.61	1.72	19	3
1:A:153:ILE:CD1	1:A:219:HIS:CG	0.61	2.81	18	3
1:A:214:LEU:HD11	1:A:216:ASP:HB2	0.61	1.70	12	2
1:A:164:ARG:O	1:A:223:ILE:HB	0.61	1.94	17	18
1:A:161:ARG:HB3	1:A:196:VAL:HG22	0.61	1.71	7	2
1:A:138:LEU:HD23	1:A:138:LEU:N	0.61	2.09	12	1
1:A:221:ILE:HG12	1:A:223:ILE:HG23	0.61	1.70	9	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:171:ILE:O	1:A:171:ILE:HD12	0.61	1.96	7	2
1:A:153:ILE:HD12	1:A:218:ALA:O	0.61	1.96	6	2
1:A:163:VAL:HG12	1:A:225:GLU:CA	0.61	2.25	8	2
1:A:160:PRO:O	1:A:161:ARG:O	0.61	2.19	10	3
1:A:150:THR:HG22	1:A:150:THR:O	0.61	1.94	6	2
1:A:187:ILE:O	1:A:188:ARG:HB3	0.61	1.93	17	2
1:A:175:GLU:O	1:A:176:THR:C	0.61	2.40	5	3
1:A:153:ILE:HD12	1:A:218:ALA:C	0.60	2.16	3	1
1:A:153:ILE:CG2	1:A:218:ALA:CB	0.60	2.80	13	11
1:A:163:VAL:HG21	1:A:195:ILE:CG1	0.60	2.26	11	5
1:A:152:VAL:CG1	1:A:223:ILE:CG2	0.60	2.78	17	1
1:A:152:VAL:HG12	1:A:153:ILE:H	0.60	1.55	15	2
1:A:165:ILE:CD1	1:A:223:ILE:HG21	0.60	2.26	13	1
1:A:153:ILE:HD11	1:A:219:HIS:CB	0.60	2.27	9	2
1:A:171:ILE:O	1:A:172:PHE:C	0.60	2.39	7	4
1:A:214:LEU:HD23	1:A:214:LEU:N	0.60	2.11	16	4
1:A:179:PHE:CD1	1:A:179:PHE:C	0.60	2.74	17	10
1:A:173:GLN:O	1:A:174:VAL:HG12	0.60	1.95	12	1
1:A:192:GLU:O	1:A:193:VAL:CG1	0.60	2.49	7	17
1:A:179:PHE:CD1	1:A:180:THR:N	0.60	2.69	18	14
1:A:153:ILE:HD12	1:A:154:ASP:H	0.60	1.55	5	1
1:A:179:PHE:CA	1:A:182:LEU:HD12	0.60	2.26	1	6
1:A:168:ILE:HB	1:A:189:VAL:HG11	0.60	1.72	17	1
1:A:179:PHE:HB2	1:A:217:LEU:HD22	0.60	1.72	7	1
1:A:138:LEU:O	1:A:138:LEU:HD23	0.60	1.97	17	1
1:A:221:ILE:N	1:A:221:ILE:CD1	0.60	2.65	1	9
1:A:193:VAL:HA	1:A:205:SER:O	0.59	1.97	5	3
1:A:167:GLN:CA	1:A:189:VAL:CG2	0.59	2.80	5	1
1:A:195:ILE:CG2	1:A:204:LEU:CD1	0.59	2.81	18	1
1:A:164:ARG:HA	1:A:191:SER:O	0.59	1.97	11	10
1:A:218:ALA:O	1:A:221:ILE:CD1	0.59	2.50	6	8
1:A:189:VAL:HG23	1:A:189:VAL:O	0.59	1.96	18	5
1:A:189:VAL:HG22	1:A:190:GLY:N	0.59	2.11	17	1
1:A:177:ASP:O	1:A:180:THR:OG1	0.59	2.20	18	15
1:A:192:GLU:C	1:A:193:VAL:HG13	0.59	2.18	7	17
1:A:161:ARG:CD	1:A:162:LYS:N	0.59	2.66	11	1
1:A:188:ARG:O	1:A:189:VAL:C	0.59	2.39	15	12
1:A:204:LEU:HB3	1:A:211:VAL:HG12	0.59	1.75	1	1
1:A:213:LEU:C	1:A:213:LEU:HD13	0.59	2.18	19	1
1:A:160:PRO:O	1:A:161:ARG:CG	0.59	2.51	11	1
1:A:191:SER:O	1:A:193:VAL:CG1	0.59	2.50	5	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:168:ILE:CG2	1:A:189:VAL:HG11	0.59	2.27	17	1
1:A:221:ILE:CD1	1:A:221:ILE:N	0.59	2.66	6	6
1:A:152:VAL:HG23	1:A:223:ILE:HD13	0.59	1.75	14	1
1:A:206:HIS:CE1	1:A:211:VAL:HG23	0.59	2.33	12	1
1:A:204:LEU:CD2	1:A:206:HIS:CD2	0.59	2.82	1	4
1:A:206:HIS:CG	1:A:209:LYS:O	0.58	2.56	14	3
1:A:153:ILE:HG21	1:A:219:HIS:HD2	0.58	1.56	12	1
1:A:195:ILE:CG1	1:A:202:ILE:CG2	0.58	2.81	3	1
1:A:179:PHE:CZ	1:A:183:LEU:HD23	0.58	2.33	19	2
1:A:151:ARG:C	1:A:223:ILE:HD12	0.58	2.19	3	3
1:A:152:VAL:N	1:A:223:ILE:CD1	0.58	2.65	3	1
1:A:188:ARG:O	1:A:189:VAL:CG1	0.58	2.52	17	1
1:A:193:VAL:HG23	1:A:194:GLU:N	0.58	2.13	13	16
1:A:174:VAL:CG2	1:A:175:GLU:N	0.58	2.66	8	1
1:A:168:ILE:H	1:A:189:VAL:HG12	0.58	1.58	10	1
1:A:176:THR:OG1	1:A:179:PHE:CG	0.58	2.57	18	1
1:A:176:THR:HG21	1:A:180:THR:CG2	0.58	2.28	15	1
1:A:221:ILE:CD1	1:A:221:ILE:H	0.58	2.11	17	7
1:A:182:LEU:CD2	1:A:211:VAL:CG1	0.58	2.81	5	1
1:A:214:LEU:N	1:A:214:LEU:CD2	0.58	2.67	2	3
1:A:185:ALA:HB3	1:A:187:ILE:CG2	0.58	2.29	2	2
1:A:189:VAL:O	1:A:190:GLY:C	0.58	2.42	15	13
1:A:189:VAL:C	1:A:191:SER:H	0.58	2.02	12	15
1:A:167:GLN:HA	1:A:189:VAL:CG2	0.58	2.29	5	1
1:A:173:GLN:O	1:A:174:VAL:CB	0.58	2.52	17	2
1:A:188:ARG:C	1:A:189:VAL:HG12	0.58	2.18	17	1
1:A:192:GLU:C	1:A:193:VAL:CG1	0.57	2.72	17	18
1:A:176:THR:CG2	1:A:180:THR:CG2	0.57	2.81	10	3
1:A:164:ARG:HG2	1:A:165:ILE:N	0.57	2.14	1	5
1:A:153:ILE:CD1	1:A:153:ILE:N	0.57	2.66	3	1
1:A:214:LEU:HD22	1:A:217:LEU:CB	0.57	2.29	3	1
1:A:150:THR:N	1:A:223:ILE:O	0.57	2.36	18	7
1:A:177:ASP:O	1:A:179:PHE:N	0.57	2.37	4	3
1:A:213:LEU:HD13	1:A:214:LEU:H	0.57	1.60	6	1
1:A:153:ILE:CG2	1:A:202:ILE:HD13	0.57	2.29	13	5
1:A:176:THR:HG23	1:A:179:PHE:HB3	0.57	1.74	5	1
1:A:191:SER:O	1:A:193:VAL:HG12	0.57	1.99	5	1
1:A:213:LEU:HD13	1:A:218:ALA:HB2	0.57	1.76	1	1
1:A:150:THR:CG2	1:A:151:ARG:N	0.57	2.68	5	1
1:A:150:THR:O	1:A:150:THR:HG22	0.57	1.99	10	3
1:A:152:VAL:CG1	1:A:153:ILE:N	0.57	2.68	4	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:221:ILE:H	1:A:221:ILE:CD1	0.57	2.13	8	8
1:A:151:ARG:O	1:A:152:VAL:O	0.57	2.22	17	7
1:A:190:GLY:O	1:A:193:VAL:CG1	0.57	2.52	12	10
1:A:161:ARG:O	1:A:161:ARG:CG	0.57	2.52	7	2
1:A:168:ILE:HD12	1:A:221:ILE:HG22	0.57	1.74	17	1
1:A:176:THR:HG22	1:A:177:ASP:N	0.57	2.15	11	3
1:A:152:VAL:HG22	1:A:223:ILE:HD13	0.57	1.75	8	1
1:A:174:VAL:HG12	1:A:174:VAL:O	0.57	1.98	20	1
1:A:219:HIS:O	1:A:219:HIS:CG	0.57	2.57	5	2
1:A:166:VAL:O	1:A:167:GLN:CB	0.57	2.51	5	1
1:A:163:VAL:HG12	1:A:225:GLU:CB	0.57	2.30	8	1
1:A:165:ILE:HD13	1:A:221:ILE:HG13	0.57	1.77	16	3
1:A:170:GLU:O	1:A:172:PHE:CZ	0.56	2.57	2	1
1:A:219:HIS:CG	1:A:219:HIS:O	0.56	2.58	16	1
1:A:189:VAL:HG22	1:A:189:VAL:O	0.56	1.99	13	6
1:A:152:VAL:HG23	1:A:221:ILE:CG1	0.56	2.29	8	1
1:A:153:ILE:N	1:A:153:ILE:CD1	0.56	2.68	12	2
1:A:170:GLU:O	1:A:172:PHE:CE2	0.56	2.58	2	1
1:A:188:ARG:C	1:A:189:VAL:HG22	0.56	2.20	15	1
1:A:165:ILE:CD1	1:A:190:GLY:N	0.56	2.66	10	5
1:A:176:THR:HG22	1:A:179:PHE:HB3	0.56	1.77	4	1
1:A:165:ILE:N	1:A:165:ILE:CD1	0.56	2.61	13	1
1:A:152:VAL:HG12	1:A:204:LEU:CD2	0.56	2.29	5	1
1:A:173:GLN:C	1:A:176:THR:HG23	0.56	2.21	7	1
1:A:164:ARG:HD3	1:A:166:VAL:HG12	0.56	1.75	16	2
1:A:153:ILE:HD11	1:A:219:HIS:HB2	0.56	1.77	9	1
1:A:164:ARG:HB2	1:A:192:GLU:HA	0.56	1.77	18	19
1:A:214:LEU:O	1:A:218:ALA:CB	0.56	2.52	9	4
1:A:155:ALA:HB3	1:A:195:ILE:HD11	0.56	1.76	19	1
1:A:176:THR:CG2	1:A:179:PHE:HB3	0.56	2.30	4	3
1:A:157:THR:HG22	1:A:158:SER:H	0.56	1.59	11	1
1:A:153:ILE:CG2	1:A:202:ILE:CD1	0.56	2.83	13	4
1:A:172:PHE:O	1:A:172:PHE:CG	0.56	2.58	13	1
1:A:214:LEU:HD12	1:A:216:ASP:HB3	0.56	1.76	14	2
1:A:164:ARG:CZ	1:A:166:VAL:HG12	0.56	2.31	13	1
1:A:153:ILE:CD1	1:A:219:HIS:CB	0.56	2.84	18	3
1:A:193:VAL:HG21	1:A:204:LEU:HD21	0.56	1.77	15	9
1:A:193:VAL:HG11	1:A:206:HIS:HD2	0.56	1.61	5	1
1:A:206:HIS:CE1	1:A:209:LYS:O	0.56	2.58	12	1
1:A:216:ASP:O	1:A:219:HIS:CE1	0.56	2.59	20	1
1:A:168:ILE:HG21	1:A:188:ARG:CG	0.56	2.30	2	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:165:ILE:CB	1:A:189:VAL:O	0.55	2.55	12	7
1:A:192:GLU:C	1:A:193:VAL:HG12	0.55	2.21	17	2
1:A:165:ILE:HB	1:A:189:VAL:HG23	0.55	1.78	17	1
1:A:175:GLU:O	1:A:177:ASP:N	0.55	2.39	12	4
1:A:160:PRO:O	1:A:161:ARG:C	0.55	2.45	7	3
1:A:163:VAL:C	1:A:193:VAL:O	0.55	2.45	12	3
1:A:206:HIS:O	1:A:208:GLY:N	0.55	2.40	6	11
1:A:166:VAL:CA	1:A:190:GLY:HA2	0.55	2.32	5	1
1:A:214:LEU:O	1:A:214:LEU:CD1	0.55	2.54	3	1
1:A:164:ARG:CB	1:A:192:GLU:HA	0.55	2.32	10	9
1:A:157:THR:OG1	1:A:197:ASP:CB	0.55	2.55	11	2
1:A:151:ARG:N	1:A:223:ILE:O	0.55	2.39	5	1
1:A:194:GLU:O	1:A:205:SER:N	0.55	2.39	17	3
1:A:172:PHE:CD1	1:A:175:GLU:OE1	0.55	2.60	1	1
1:A:175:GLU:O	1:A:176:THR:HG23	0.55	2.02	9	1
1:A:152:VAL:CG1	1:A:152:VAL:O	0.55	2.52	1	3
1:A:161:ARG:O	1:A:163:VAL:HG13	0.55	2.01	9	3
1:A:190:GLY:O	1:A:193:VAL:HG12	0.55	2.01	12	1
1:A:171:ILE:CG2	1:A:217:LEU:HD23	0.55	2.32	20	1
1:A:151:ARG:CG	1:A:153:ILE:HD11	0.55	2.28	6	1
1:A:156:ALA:O	1:A:157:THR:CG2	0.55	2.54	3	1
1:A:192:GLU:O	1:A:193:VAL:HG13	0.55	2.01	2	8
1:A:195:ILE:O	1:A:196:VAL:HG23	0.55	2.02	16	2
1:A:160:PRO:O	1:A:161:ARG:CB	0.55	2.55	12	4
1:A:152:VAL:N	1:A:223:ILE:HG12	0.55	2.16	9	5
1:A:152:VAL:HG12	1:A:153:ILE:CG2	0.55	2.32	18	1
1:A:193:VAL:HG12	1:A:206:HIS:HB3	0.54	1.79	2	7
1:A:221:ILE:HG12	1:A:223:ILE:CG2	0.54	2.32	10	13
1:A:150:THR:O	1:A:223:ILE:CG1	0.54	2.56	7	3
1:A:189:VAL:O	1:A:189:VAL:HG23	0.54	2.02	15	6
1:A:216:ASP:O	1:A:219:HIS:NE2	0.54	2.40	8	1
1:A:150:THR:O	1:A:223:ILE:CD1	0.54	2.54	17	1
1:A:153:ILE:HG12	1:A:219:HIS:CD2	0.54	2.37	15	1
1:A:198:ARG:CB	1:A:201:HIS:O	0.54	2.55	9	9
1:A:217:LEU:O	1:A:218:ALA:C	0.54	2.44	5	6
1:A:219:HIS:O	1:A:219:HIS:ND1	0.54	2.41	8	2
1:A:217:LEU:HD23	1:A:221:ILE:CG2	0.54	2.32	4	1
1:A:152:VAL:O	1:A:195:ILE:CD1	0.54	2.55	10	4
1:A:156:ALA:O	1:A:157:THR:O	0.54	2.25	3	6
1:A:179:PHE:C	1:A:179:PHE:CD1	0.54	2.81	3	5
1:A:188:ARG:O	1:A:189:VAL:CG2	0.54	2.56	15	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:188:ARG:O	1:A:189:VAL:HG22	0.54	2.02	14	15
1:A:152:VAL:O	1:A:154:ASP:N	0.54	2.41	4	4
1:A:166:VAL:CG2	1:A:222:ARG:O	0.54	2.56	4	7
1:A:175:GLU:O	1:A:176:THR:CB	0.54	2.55	13	2
1:A:160:PRO:HB3	1:A:196:VAL:HG22	0.54	1.78	1	1
1:A:179:PHE:CZ	1:A:183:LEU:HG	0.54	2.38	19	1
1:A:188:ARG:O	1:A:190:GLY:N	0.54	2.41	12	7
1:A:176:THR:HG23	1:A:179:PHE:HD2	0.54	1.54	15	2
1:A:213:LEU:HD22	1:A:218:ALA:N	0.54	2.18	17	1
1:A:165:ILE:CB	1:A:189:VAL:C	0.54	2.76	1	7
1:A:176:THR:O	1:A:177:ASP:CB	0.54	2.54	20	10
1:A:173:GLN:O	1:A:174:VAL:HB	0.54	2.03	17	4
1:A:150:THR:O	1:A:223:ILE:N	0.54	2.41	9	4
1:A:164:ARG:HB2	1:A:191:SER:O	0.54	2.03	18	5
1:A:161:ARG:HB3	1:A:196:VAL:CG2	0.54	2.33	7	2
1:A:168:ILE:CB	1:A:189:VAL:HG11	0.54	2.32	17	1
1:A:176:THR:HA	1:A:179:PHE:CD1	0.53	2.38	13	4
1:A:176:THR:CG2	1:A:179:PHE:CB	0.53	2.85	4	1
1:A:157:THR:O	1:A:158:SER:CB	0.53	2.56	7	4
1:A:171:ILE:O	1:A:171:ILE:HG22	0.53	2.04	2	2
1:A:176:THR:CB	1:A:179:PHE:HB3	0.53	2.34	4	2
1:A:179:PHE:HA	1:A:182:LEU:CD1	0.53	2.34	8	7
1:A:152:VAL:N	1:A:153:ILE:HD13	0.53	2.19	6	1
1:A:157:THR:O	1:A:158:SER:C	0.53	2.47	3	11
1:A:195:ILE:HG22	1:A:203:THR:O	0.53	2.03	4	2
1:A:165:ILE:HA	1:A:223:ILE:HB	0.53	1.78	5	4
1:A:194:GLU:O	1:A:204:LEU:HA	0.53	2.04	17	3
1:A:182:LEU:O	1:A:187:ILE:HD12	0.53	2.02	10	1
1:A:174:VAL:O	1:A:176:THR:N	0.53	2.37	7	2
1:A:170:GLU:CG	1:A:170:GLU:O	0.53	2.56	12	1
1:A:149:GLY:O	1:A:223:ILE:O	0.53	2.26	16	1
1:A:150:THR:O	1:A:151:ARG:CD	0.53	2.56	16	1
1:A:179:PHE:CD2	1:A:217:LEU:HD13	0.53	2.39	19	1
1:A:176:THR:O	1:A:178:GLN:N	0.53	2.42	7	2
1:A:165:ILE:HG13	1:A:190:GLY:N	0.53	2.19	13	2
1:A:152:VAL:O	1:A:153:ILE:CG2	0.53	2.57	8	4
1:A:174:VAL:HG13	1:A:174:VAL:O	0.53	2.04	1	1
1:A:164:ARG:NE	1:A:166:VAL:HG12	0.53	2.19	13	1
1:A:177:ASP:OD1	1:A:178:GLN:N	0.53	2.42	7	2
1:A:215:ASP:O	1:A:218:ALA:N	0.53	2.39	9	3
1:A:149:GLY:O	1:A:151:ARG:N	0.53	2.41	4	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:166:VAL:HG11	1:A:224:GLU:HG2	0.53	1.80	1	1
1:A:164:ARG:HG3	1:A:191:SER:O	0.53	2.04	12	4
1:A:206:HIS:ND1	1:A:209:LYS:O	0.53	2.42	14	6
1:A:165:ILE:CG1	1:A:189:VAL:C	0.52	2.78	7	6
1:A:152:VAL:HG21	1:A:218:ALA:O	0.52	2.03	5	1
1:A:213:LEU:O	1:A:214:LEU:HG	0.52	2.03	17	1
1:A:173:GLN:O	1:A:174:VAL:CG1	0.52	2.56	12	1
1:A:157:THR:CG2	1:A:161:ARG:CG	0.52	2.87	9	1
1:A:217:LEU:O	1:A:220:THR:CG2	0.52	2.57	3	2
1:A:177:ASP:OD1	1:A:177:ASP:N	0.52	2.41	13	2
1:A:190:GLY:O	1:A:191:SER:CB	0.52	2.55	15	10
1:A:151:ARG:O	1:A:223:ILE:CD1	0.52	2.57	13	1
1:A:149:GLY:O	1:A:150:THR:HB	0.52	2.04	16	1
1:A:220:THR:HG23	1:A:221:ILE:N	0.52	2.18	8	3
1:A:206:HIS:N	1:A:209:LYS:O	0.52	2.43	20	10
1:A:158:SER:O	1:A:159:MET:CB	0.52	2.57	11	5
1:A:151:ARG:CB	1:A:154:ASP:HB2	0.52	2.34	3	3
1:A:173:GLN:O	1:A:176:THR:HG23	0.52	2.05	7	1
1:A:221:ILE:HG13	1:A:223:ILE:HG21	0.52	1.80	15	1
1:A:214:LEU:HD23	1:A:214:LEU:H	0.52	1.64	19	2
1:A:174:VAL:HG12	1:A:179:PHE:CZ	0.52	2.39	4	1
1:A:151:ARG:O	1:A:154:ASP:N	0.52	2.40	20	4
1:A:187:ILE:HG22	1:A:188:ARG:N	0.52	2.19	12	5
1:A:206:HIS:O	1:A:207:ASN:C	0.52	2.47	7	5
1:A:170:GLU:O	1:A:171:ILE:C	0.52	2.46	17	4
1:A:155:ALA:O	1:A:161:ARG:CB	0.52	2.57	6	2
1:A:189:VAL:O	1:A:189:VAL:HG22	0.52	2.03	20	2
1:A:153:ILE:CD1	1:A:218:ALA:O	0.52	2.58	3	2
1:A:221:ILE:CG1	1:A:223:ILE:CG2	0.52	2.88	5	2
1:A:152:VAL:O	1:A:152:VAL:CG1	0.52	2.58	10	1
1:A:206:HIS:CB	1:A:209:LYS:O	0.52	2.58	1	1
1:A:153:ILE:HA	1:A:202:ILE:HD13	0.52	1.79	9	1
1:A:179:PHE:CZ	1:A:183:LEU:CD2	0.52	2.93	19	1
1:A:182:LEU:CD1	1:A:182:LEU:C	0.52	2.75	2	4
1:A:152:VAL:HG22	1:A:152:VAL:O	0.52	2.05	13	1
1:A:191:SER:OG	1:A:192:GLU:N	0.52	2.43	2	2
1:A:213:LEU:O	1:A:214:LEU:C	0.52	2.48	17	3
1:A:195:ILE:O	1:A:196:VAL:CG2	0.52	2.57	16	1
1:A:162:LYS:O	1:A:226:LEU:N	0.52	2.42	3	1
1:A:155:ALA:O	1:A:161:ARG:NE	0.52	2.43	1	1
1:A:188:ARG:C	1:A:189:VAL:CG1	0.52	2.78	13	4

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:136:ASP:O	1:A:138:LEU:N	0.52	2.42	16	2
1:A:198:ARG:O	1:A:200:GLY:N	0.52	2.43	12	4
1:A:152:VAL:CG1	1:A:218:ALA:O	0.52	2.56	2	1
1:A:179:PHE:CE1	1:A:183:LEU:HB2	0.52	2.40	15	2
1:A:151:ARG:O	1:A:153:ILE:N	0.52	2.39	1	4
1:A:198:ARG:N	1:A:201:HIS:O	0.52	2.42	9	9
1:A:150:THR:O	1:A:154:ASP:CB	0.52	2.58	3	3
1:A:152:VAL:CG2	1:A:221:ILE:HD11	0.52	2.35	3	2
1:A:190:GLY:O	1:A:191:SER:C	0.52	2.48	19	7
1:A:210:ASP:O	1:A:211:VAL:HG23	0.52	2.04	19	2
1:A:165:ILE:HD11	1:A:204:LEU:CD1	0.52	2.35	8	1
1:A:150:THR:HB	1:A:223:ILE:O	0.52	2.04	5	4
1:A:158:SER:OG	1:A:161:ARG:NH1	0.52	2.43	14	1
1:A:179:PHE:HA	1:A:182:LEU:HD21	0.52	1.82	17	1
1:A:150:THR:O	1:A:151:ARG:O	0.51	2.29	1	9
1:A:152:VAL:CG2	1:A:195:ILE:HG21	0.51	2.35	2	2
1:A:204:LEU:CD1	1:A:213:LEU:HD22	0.51	2.33	7	2
1:A:170:GLU:HB3	1:A:172:PHE:CE1	0.51	2.40	2	1
1:A:214:LEU:HD22	1:A:217:LEU:HB2	0.51	1.82	3	1
1:A:204:LEU:HD11	1:A:213:LEU:HD12	0.51	1.81	17	1
1:A:134:GLY:O	1:A:136:ASP:N	0.51	2.43	9	1
1:A:217:LEU:HD23	1:A:221:ILE:HG21	0.51	1.82	4	1
1:A:204:LEU:HD12	1:A:213:LEU:CD2	0.51	2.36	13	2
1:A:207:ASN:ND2	1:A:207:ASN:O	0.51	2.43	14	1
1:A:165:ILE:HD12	1:A:189:VAL:C	0.51	2.25	10	4
1:A:168:ILE:N	1:A:189:VAL:HG12	0.51	2.20	10	1
1:A:193:VAL:HB	1:A:205:SER:O	0.51	2.06	10	17
1:A:152:VAL:HG22	1:A:223:ILE:CD1	0.51	2.35	8	1
1:A:189:VAL:CG2	1:A:190:GLY:N	0.51	2.73	17	2
1:A:179:PHE:CB	1:A:217:LEU:HD11	0.51	2.34	17	1
1:A:179:PHE:CE2	1:A:217:LEU:HD13	0.51	2.40	19	1
1:A:193:VAL:HG12	1:A:206:HIS:HA	0.51	1.82	19	13
1:A:155:ALA:O	1:A:161:ARG:CG	0.51	2.58	8	1
1:A:168:ILE:O	1:A:170:GLU:N	0.51	2.43	17	3
1:A:179:PHE:O	1:A:181:GLN:N	0.51	2.44	11	10
1:A:223:ILE:C	1:A:223:ILE:CD1	0.51	2.78	5	2
1:A:167:GLN:CG	1:A:167:GLN:O	0.51	2.58	14	1
1:A:187:ILE:CG2	1:A:211:VAL:HG21	0.51	2.35	17	1
1:A:196:VAL:CG1	1:A:196:VAL:O	0.51	2.57	15	1
1:A:219:HIS:O	1:A:220:THR:CG2	0.51	2.59	6	1
1:A:167:GLN:O	1:A:222:ARG:N	0.51	2.41	4	5

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:163:VAL:CG2	1:A:195:ILE:HG12	0.51	2.35	20	5
1:A:151:ARG:C	1:A:223:ILE:CD1	0.51	2.79	3	2
1:A:215:ASP:OD1	1:A:216:ASP:N	0.51	2.44	10	1
1:A:149:GLY:CA	1:A:222:ARG:HG3	0.51	2.36	1	1
1:A:204:LEU:CD1	1:A:213:LEU:HB2	0.51	2.35	5	1
1:A:150:THR:O	1:A:223:ILE:O	0.51	2.28	18	2
1:A:153:ILE:CD1	1:A:218:ALA:C	0.51	2.79	3	1
1:A:161:ARG:NH2	1:A:163:VAL:HG13	0.51	2.19	1	1
1:A:152:VAL:HG12	1:A:204:LEU:HD21	0.51	1.82	5	1
1:A:197:ASP:OD1	1:A:197:ASP:N	0.51	2.44	1	1
1:A:150:THR:O	1:A:151:ARG:CG	0.50	2.59	5	1
1:A:174:VAL:O	1:A:175:GLU:HB3	0.50	2.06	7	1
1:A:179:PHE:CE1	1:A:217:LEU:CD2	0.50	2.94	16	1
1:A:171:ILE:O	1:A:173:GLN:N	0.50	2.44	3	1
1:A:213:LEU:HD12	1:A:218:ALA:HB2	0.50	1.81	19	1
1:A:165:ILE:CG1	1:A:190:GLY:N	0.50	2.74	13	1
1:A:150:THR:CB	1:A:223:ILE:O	0.50	2.59	12	1
1:A:153:ILE:HG13	1:A:219:HIS:CD2	0.50	2.42	12	1
1:A:211:VAL:HG22	1:A:212:GLU:H	0.50	1.66	2	1
1:A:179:PHE:CZ	1:A:183:LEU:CG	0.50	2.93	19	1
1:A:152:VAL:O	1:A:153:ILE:HG13	0.50	2.06	15	4
1:A:204:LEU:HD22	1:A:206:HIS:HD2	0.50	1.60	11	3
1:A:206:HIS:CD2	1:A:206:HIS:N	0.50	2.75	12	1
1:A:164:ARG:CG	1:A:191:SER:C	0.50	2.80	11	6
1:A:163:VAL:CG2	1:A:194:GLU:HA	0.50	2.35	12	2
1:A:167:GLN:CG	1:A:222:ARG:HB2	0.50	2.36	14	1
1:A:164:ARG:NH2	1:A:192:GLU:OE1	0.50	2.43	10	1
1:A:150:THR:O	1:A:151:ARG:NE	0.50	2.44	16	1
1:A:152:VAL:HG13	1:A:223:ILE:CG2	0.50	2.37	17	2
1:A:149:GLY:CA	1:A:222:ARG:CG	0.50	2.89	1	1
1:A:164:ARG:C	1:A:223:ILE:HB	0.50	2.27	16	5
1:A:150:THR:HG22	1:A:154:ASP:CB	0.50	2.36	11	1
1:A:181:GLN:NE2	1:A:212:GLU:OE2	0.50	2.45	16	1
1:A:198:ARG:O	1:A:199:ASP:C	0.50	2.50	4	14
1:A:150:THR:CG2	1:A:154:ASP:HB3	0.50	2.37	11	3
1:A:162:LYS:HA	1:A:194:GLU:CB	0.50	2.37	12	5
1:A:202:ILE:HD12	1:A:215:ASP:HB2	0.50	1.83	12	1
1:A:188:ARG:O	1:A:188:ARG:CG	0.50	2.60	6	1
1:A:151:ARG:NH1	1:A:219:HIS:O	0.50	2.44	10	1
1:A:176:THR:HB	1:A:179:PHE:CB	0.50	2.36	4	1
1:A:197:ASP:N	1:A:197:ASP:OD1	0.50	2.43	2	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:223:ILE:CD1	1:A:223:ILE:C	0.50	2.76	17	1
1:A:157:THR:CG2	1:A:161:ARG:HG2	0.50	2.37	9	1
1:A:193:VAL:HB	1:A:206:HIS:CG	0.50	2.42	5	1
1:A:161:ARG:HG3	1:A:161:ARG:O	0.50	2.07	10	2
1:A:187:ILE:O	1:A:188:ARG:O	0.50	2.30	2	1
1:A:170:GLU:O	1:A:172:PHE:N	0.50	2.44	17	2
1:A:167:GLN:CB	1:A:222:ARG:HD2	0.50	2.37	3	2
1:A:220:THR:O	1:A:221:ILE:C	0.49	2.49	13	1
1:A:164:ARG:NH1	1:A:226:LEU:O	0.49	2.45	20	1
1:A:168:ILE:O	1:A:169:ASN:CB	0.49	2.57	18	2
1:A:179:PHE:HB2	1:A:217:LEU:CD1	0.49	2.37	17	1
1:A:157:THR:HG22	1:A:158:SER:N	0.49	2.22	1	2
1:A:171:ILE:CD1	1:A:217:LEU:HD21	0.49	2.34	7	1
1:A:223:ILE:O	1:A:223:ILE:HD13	0.49	2.06	3	1
1:A:157:THR:CB	1:A:161:ARG:HD2	0.49	2.37	1	1
1:A:149:GLY:HA3	1:A:222:ARG:CG	0.49	2.36	1	1
1:A:165:ILE:HG13	1:A:189:VAL:O	0.49	2.08	1	7
1:A:153:ILE:HD11	1:A:219:HIS:CA	0.49	2.37	14	1
1:A:179:PHE:CE1	1:A:183:LEU:HD22	0.49	2.41	20	1
1:A:153:ILE:HD11	1:A:219:HIS:ND1	0.49	2.21	15	2
1:A:150:THR:O	1:A:151:ARG:C	0.49	2.51	17	3
1:A:195:ILE:C	1:A:196:VAL:HG23	0.49	2.27	16	3
1:A:173:GLN:HA	1:A:176:THR:CG2	0.49	2.37	7	1
1:A:194:GLU:CG	1:A:205:SER:HB2	0.49	2.38	7	2
1:A:152:VAL:O	1:A:195:ILE:HD13	0.49	2.08	10	2
1:A:164:ARG:HG3	1:A:192:GLU:HA	0.49	1.84	17	4
1:A:179:PHE:CE2	1:A:183:LEU:CD1	0.49	2.89	14	1
1:A:164:ARG:HG2	1:A:191:SER:O	0.49	2.07	5	3
1:A:174:VAL:HG13	1:A:175:GLU:H	0.49	1.68	8	1
1:A:174:VAL:CG2	1:A:174:VAL:O	0.49	2.59	5	1
1:A:179:PHE:O	1:A:180:THR:C	0.49	2.51	11	11
1:A:195:ILE:HG12	1:A:196:VAL:N	0.49	2.22	14	2
1:A:150:THR:O	1:A:154:ASP:HB3	0.49	2.07	3	2
1:A:183:LEU:CD1	1:A:183:LEU:O	0.49	2.61	13	3
1:A:208:GLY:O	1:A:209:LYS:CB	0.49	2.59	6	3
1:A:158:SER:OG	1:A:159:MET:N	0.49	2.43	6	1
1:A:150:THR:O	1:A:151:ARG:CB	0.49	2.59	5	2
1:A:152:VAL:CA	1:A:223:ILE:HD12	0.49	2.38	16	3
1:A:176:THR:CG2	1:A:176:THR:O	0.49	2.60	5	1
1:A:152:VAL:HG12	1:A:153:ILE:HG22	0.49	1.85	18	1
1:A:150:THR:O	1:A:223:ILE:HG13	0.49	2.08	4	2

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:195:ILE:HA	1:A:203:THR:O	0.49	2.06	17	4
1:A:195:ILE:HG12	1:A:203:THR:O	0.49	2.08	14	2
1:A:138:LEU:CD2	1:A:138:LEU:N	0.49	2.76	12	1
1:A:192:GLU:HG2	1:A:226:LEU:HD21	0.49	1.85	12	1
1:A:152:VAL:CG2	1:A:218:ALA:O	0.49	2.61	17	1
1:A:195:ILE:C	1:A:195:ILE:CD1	0.48	2.79	3	1
1:A:171:ILE:HG22	1:A:171:ILE:O	0.48	2.08	17	1
1:A:183:LEU:C	1:A:183:LEU:HD13	0.48	2.28	19	1
1:A:177:ASP:O	1:A:178:GLN:C	0.48	2.50	4	3
1:A:164:ARG:CA	1:A:191:SER:O	0.48	2.61	3	9
1:A:179:PHE:O	1:A:182:LEU:N	0.48	2.44	11	6
1:A:187:ILE:CG2	1:A:188:ARG:N	0.48	2.76	11	2
1:A:156:ALA:HB2	1:A:195:ILE:HD11	0.48	1.82	14	1
1:A:153:ILE:HB	1:A:202:ILE:CD1	0.48	2.38	2	1
1:A:165:ILE:CB	1:A:189:VAL:HG23	0.48	2.37	17	1
1:A:164:ARG:O	1:A:223:ILE:CB	0.48	2.60	17	1
1:A:157:THR:HG22	1:A:157:THR:O	0.48	2.08	15	1
1:A:166:VAL:O	1:A:167:GLN:NE2	0.48	2.46	19	1
1:A:164:ARG:CG	1:A:192:GLU:HA	0.48	2.38	17	2
1:A:196:VAL:O	1:A:197:ASP:O	0.48	2.31	19	1
1:A:213:LEU:HD13	1:A:214:LEU:O	0.48	2.07	19	1
1:A:172:PHE:O	1:A:172:PHE:CD1	0.48	2.66	13	1
1:A:176:THR:O	1:A:177:ASP:HB2	0.48	2.08	13	3
1:A:165:ILE:HA	1:A:223:ILE:CG2	0.48	2.39	8	1
1:A:167:GLN:HB2	1:A:222:ARG:CD	0.48	2.39	7	2
1:A:192:GLU:O	1:A:193:VAL:HG12	0.48	2.08	17	1
1:A:183:LEU:CD1	1:A:183:LEU:C	0.48	2.81	15	3
1:A:168:ILE:CG1	1:A:168:ILE:O	0.48	2.61	1	3
1:A:168:ILE:O	1:A:169:ASN:ND2	0.48	2.46	12	1
1:A:213:LEU:CD1	1:A:213:LEU:C	0.48	2.81	12	1
1:A:161:ARG:CB	1:A:195:ILE:O	0.48	2.62	10	1
1:A:182:LEU:HD21	1:A:212:GLU:O	0.48	2.07	18	1
1:A:174:VAL:O	1:A:175:GLU:O	0.48	2.31	17	2
1:A:213:LEU:CD2	1:A:217:LEU:C	0.48	2.82	17	1
1:A:161:ARG:NH1	1:A:195:ILE:O	0.48	2.43	1	1
1:A:164:ARG:HH21	1:A:166:VAL:HG12	0.48	1.67	13	1
1:A:214:LEU:O	1:A:218:ALA:N	0.48	2.42	6	3
1:A:165:ILE:HG22	1:A:166:VAL:N	0.48	2.23	5	1
1:A:167:GLN:CB	1:A:222:ARG:CG	0.48	2.91	7	1
1:A:156:ALA:CB	1:A:197:ASP:OD1	0.48	2.62	10	1
1:A:215:ASP:O	1:A:217:LEU:N	0.48	2.46	10	2

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:179:PHE:CE1	1:A:217:LEU:HD23	0.48	2.43	16	1
1:A:188:ARG:C	1:A:189:VAL:CG2	0.48	2.81	15	1
1:A:202:ILE:HD12	1:A:215:ASP:CG	0.48	2.29	15	1
1:A:213:LEU:C	1:A:213:LEU:CD1	0.48	2.82	19	1
1:A:165:ILE:HA	1:A:223:ILE:CB	0.48	2.38	14	14
1:A:210:ASP:OD1	1:A:211:VAL:N	0.48	2.47	20	3
1:A:204:LEU:O	1:A:210:ASP:HA	0.48	2.08	14	3
1:A:159:MET:N	1:A:160:PRO:CD	0.48	2.76	3	2
1:A:190:GLY:O	1:A:191:SER:HB3	0.48	2.08	15	11
1:A:165:ILE:HA	1:A:223:ILE:HG22	0.48	1.84	9	3
1:A:211:VAL:CG1	1:A:212:GLU:N	0.48	2.76	2	2
1:A:182:LEU:CD2	1:A:213:LEU:HD12	0.48	2.37	2	1
1:A:165:ILE:CG2	1:A:221:ILE:HB	0.48	2.39	16	3
1:A:148:PRO:O	1:A:149:GLY:O	0.48	2.32	18	2
1:A:179:PHE:HB2	1:A:214:LEU:HD11	0.48	1.85	18	1
1:A:162:LYS:HA	1:A:194:GLU:HB2	0.48	1.86	19	3
1:A:195:ILE:HG13	1:A:202:ILE:CG2	0.48	2.37	3	1
1:A:176:THR:HG22	1:A:179:PHE:CB	0.48	2.39	4	1
1:A:175:GLU:O	1:A:177:ASP:OD1	0.48	2.32	13	1
1:A:164:ARG:NE	1:A:166:VAL:CG1	0.48	2.77	6	2
1:A:182:LEU:HD21	1:A:214:LEU:CD2	0.48	2.39	14	1
1:A:165:ILE:CG2	1:A:189:VAL:CB	0.48	2.87	5	1
1:A:152:VAL:HG13	1:A:221:ILE:CG1	0.48	2.38	17	2
1:A:171:ILE:O	1:A:172:PHE:O	0.48	2.32	7	3
1:A:195:ILE:HG12	1:A:204:LEU:HD23	0.48	1.86	17	1
1:A:168:ILE:O	1:A:169:ASN:O	0.47	2.31	5	5
1:A:135:LEU:N	1:A:135:LEU:HD12	0.47	2.24	9	1
1:A:165:ILE:O	1:A:191:SER:HA	0.47	2.09	11	8
1:A:196:VAL:O	1:A:197:ASP:C	0.47	2.53	12	12
1:A:164:ARG:NH2	1:A:224:GLU:HB2	0.47	2.24	11	1
1:A:153:ILE:HD11	1:A:219:HIS:HA	0.47	1.85	14	2
1:A:186:ASP:N	1:A:186:ASP:OD1	0.47	2.46	18	2
1:A:153:ILE:CD1	1:A:219:HIS:HB2	0.47	2.39	2	5
1:A:179:PHE:CB	1:A:217:LEU:HD22	0.47	2.38	7	1
1:A:164:ARG:HD2	1:A:166:VAL:CG1	0.47	2.39	18	1
1:A:204:LEU:CD1	1:A:213:LEU:CD1	0.47	2.85	17	1
1:A:221:ILE:HG13	1:A:223:ILE:CG2	0.47	2.38	15	1
1:A:173:GLN:C	1:A:174:VAL:CG2	0.47	2.80	17	1
1:A:163:VAL:HG23	1:A:164:ARG:N	0.47	2.23	19	1
1:A:157:THR:HG23	1:A:158:SER:OG	0.47	2.09	14	1
1:A:157:THR:N	1:A:160:PRO:HB3	0.47	2.23	3	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:153:ILE:CG1	1:A:219:HIS:CD2	0.47	2.97	15	1
1:A:211:VAL:HG12	1:A:212:GLU:N	0.47	2.24	9	1
1:A:210:ASP:O	1:A:211:VAL:CG2	0.47	2.62	19	2
1:A:176:THR:O	1:A:177:ASP:C	0.47	2.52	8	1
1:A:204:LEU:O	1:A:210:ASP:OD1	0.47	2.33	16	3
1:A:202:ILE:HG22	1:A:202:ILE:O	0.47	2.10	5	1
1:A:135:LEU:O	1:A:137:GLU:N	0.47	2.47	10	2
1:A:136:ASP:N	1:A:136:ASP:OD1	0.47	2.47	17	2
1:A:131:PRO:O	1:A:132:ILE:O	0.47	2.31	18	1
1:A:132:ILE:CG2	1:A:132:ILE:O	0.47	2.62	17	1
1:A:165:ILE:HD12	1:A:189:VAL:HA	0.47	1.84	17	1
1:A:198:ARG:CG	1:A:203:THR:OG1	0.47	2.63	19	1
1:A:193:VAL:CG1	1:A:206:HIS:HA	0.47	2.39	14	12
1:A:179:PHE:CD1	1:A:217:LEU:HG	0.47	2.44	11	1
1:A:164:ARG:CG	1:A:191:SER:O	0.47	2.63	5	6
1:A:173:GLN:C	1:A:174:VAL:HG12	0.47	2.30	12	1
1:A:193:VAL:CG2	1:A:194:GLU:N	0.47	2.77	12	1
1:A:204:LEU:CD1	1:A:213:LEU:HD12	0.47	2.40	17	1
1:A:204:LEU:CG	1:A:213:LEU:HD12	0.47	2.40	17	1
1:A:175:GLU:C	1:A:176:THR:OG1	0.47	2.52	8	4
1:A:131:PRO:O	1:A:133:PRO:HD3	0.47	2.09	5	1
1:A:193:VAL:HG23	1:A:204:LEU:HB3	0.47	1.86	17	1
1:A:168:ILE:O	1:A:169:ASN:C	0.47	2.54	12	8
1:A:157:THR:OG1	1:A:197:ASP:OD2	0.47	2.33	11	1
1:A:182:LEU:C	1:A:182:LEU:CD1	0.47	2.81	14	2
1:A:195:ILE:CG2	1:A:204:LEU:HG	0.47	2.39	18	11
1:A:204:LEU:CD1	1:A:213:LEU:HB3	0.47	2.38	5	2
1:A:176:THR:OG1	1:A:177:ASP:N	0.47	2.48	20	2
1:A:194:GLU:OE2	1:A:205:SER:O	0.47	2.32	10	1
1:A:152:VAL:HG22	1:A:223:ILE:CG1	0.46	2.40	8	1
1:A:153:ILE:CD1	1:A:219:HIS:CA	0.46	2.92	14	2
1:A:212:GLU:O	1:A:213:LEU:O	0.46	2.33	10	2
1:A:207:ASN:N	1:A:207:ASN:OD1	0.46	2.48	5	1
1:A:165:ILE:HB	1:A:189:VAL:HA	0.46	1.87	17	2
1:A:193:VAL:CG1	1:A:206:HIS:HB3	0.46	2.40	4	9
1:A:225:GLU:O	1:A:226:LEU:OXT	0.46	2.33	11	1
1:A:160:PRO:O	1:A:194:GLU:OE1	0.46	2.33	15	1
1:A:155:ALA:O	1:A:156:ALA:O	0.46	2.32	19	1
1:A:213:LEU:CD1	1:A:214:LEU:O	0.46	2.63	19	1
1:A:193:VAL:HG12	1:A:206:HIS:CB	0.46	2.39	2	3
1:A:149:GLY:CA	1:A:222:ARG:HG2	0.46	2.40	14	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:152:VAL:HG22	1:A:195:ILE:CG2	0.46	2.36	14	1
1:A:168:ILE:HG23	1:A:221:ILE:HG22	0.46	1.87	18	1
1:A:153:ILE:HA	1:A:202:ILE:CD1	0.46	2.40	9	1
1:A:213:LEU:O	1:A:214:LEU:O	0.46	2.33	17	2
1:A:153:ILE:CG2	1:A:202:ILE:HD12	0.46	2.36	4	1
1:A:160:PRO:O	1:A:161:ARG:HG3	0.46	2.11	11	1
1:A:153:ILE:CD1	1:A:219:HIS:HB3	0.46	2.40	8	2
1:A:152:VAL:O	1:A:155:ALA:N	0.46	2.42	12	1
1:A:217:LEU:O	1:A:219:HIS:N	0.46	2.48	12	1
1:A:168:ILE:O	1:A:169:ASN:CG	0.46	2.54	12	1
1:A:168:ILE:CD1	1:A:171:ILE:HG13	0.46	2.39	3	1
1:A:152:VAL:HG13	1:A:221:ILE:HG12	0.46	1.88	17	1
1:A:168:ILE:HB	1:A:189:VAL:CG1	0.46	2.39	15	1
1:A:136:ASP:OD1	1:A:136:ASP:N	0.46	2.48	7	1
1:A:151:ARG:O	1:A:154:ASP:HB2	0.46	2.11	3	4
1:A:162:LYS:O	1:A:225:GLU:OE2	0.46	2.33	3	1
1:A:138:LEU:CD2	1:A:138:LEU:O	0.46	2.62	17	1
1:A:178:GLN:O	1:A:181:GLN:N	0.46	2.44	15	1
1:A:176:THR:HB	1:A:179:PHE:HB3	0.46	1.88	4	1
1:A:157:THR:CG2	1:A:158:SER:N	0.46	2.76	12	1
1:A:157:THR:HG22	1:A:161:ARG:HB2	0.46	1.87	17	1
1:A:157:THR:HG21	1:A:161:ARG:CG	0.46	2.41	9	1
1:A:152:VAL:O	1:A:153:ILE:C	0.46	2.54	17	3
1:A:194:GLU:N	1:A:205:SER:O	0.46	2.49	13	1
1:A:163:VAL:CG2	1:A:195:ILE:CG1	0.46	2.93	13	3
1:A:194:GLU:CG	1:A:195:ILE:N	0.46	2.78	13	1
1:A:207:ASN:OD1	1:A:207:ASN:O	0.46	2.33	13	1
1:A:164:ARG:HD3	1:A:166:VAL:CG1	0.46	2.41	15	2
1:A:196:VAL:CG1	1:A:203:THR:HB	0.46	2.41	15	2
1:A:175:GLU:HG3	1:A:176:THR:N	0.46	2.26	5	1
1:A:213:LEU:HD22	1:A:218:ALA:HB2	0.46	1.86	16	1
1:A:163:VAL:HG12	1:A:225:GLU:HG3	0.46	1.88	18	1
1:A:174:VAL:O	1:A:175:GLU:C	0.46	2.54	18	1
1:A:163:VAL:HG12	1:A:225:GLU:CG	0.46	2.41	18	1
1:A:198:ARG:HB3	1:A:201:HIS:O	0.46	2.11	14	2
1:A:221:ILE:HG12	1:A:221:ILE:O	0.46	2.10	17	2
1:A:210:ASP:C	1:A:211:VAL:HG23	0.46	2.32	19	2
1:A:175:GLU:O	1:A:176:THR:O	0.46	2.33	5	2
1:A:165:ILE:HG21	1:A:221:ILE:HB	0.46	1.87	17	1
1:A:166:VAL:CG1	1:A:224:GLU:HG2	0.46	2.40	1	1
1:A:173:GLN:O	1:A:174:VAL:C	0.45	2.52	12	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:152:VAL:HA	1:A:223:ILE:HG12	0.45	1.88	5	1
1:A:194:GLU:HG2	1:A:205:SER:O	0.45	2.11	10	1
1:A:204:LEU:HD12	1:A:213:LEU:HD13	0.45	1.88	15	1
1:A:134:GLY:O	1:A:135:LEU:CB	0.45	2.63	19	2
1:A:201:HIS:O	1:A:202:ILE:CG1	0.45	2.64	4	2
1:A:214:LEU:HD12	1:A:216:ASP:CB	0.45	2.41	4	2
1:A:185:ALA:O	1:A:186:ASP:C	0.45	2.55	10	15
1:A:171:ILE:HD12	1:A:171:ILE:C	0.45	2.31	6	1
1:A:204:LEU:HD12	1:A:204:LEU:N	0.45	2.26	5	1
1:A:203:THR:CG2	1:A:211:VAL:O	0.45	2.58	17	1
1:A:170:GLU:OE2	1:A:220:THR:O	0.45	2.34	17	1
1:A:182:LEU:HB3	1:A:211:VAL:HG11	0.45	1.87	7	1
1:A:161:ARG:HD3	1:A:196:VAL:CG2	0.45	2.41	10	1
1:A:176:THR:OG1	1:A:179:PHE:HB3	0.45	2.10	18	1
1:A:178:GLN:NE2	1:A:212:GLU:OE1	0.45	2.47	19	1
1:A:171:ILE:HD11	1:A:221:ILE:HG22	0.45	1.89	20	1
1:A:193:VAL:HB	1:A:206:HIS:HA	0.45	1.87	5	2
1:A:152:VAL:HB	1:A:221:ILE:CG1	0.45	2.42	6	1
1:A:193:VAL:HB	1:A:206:HIS:CA	0.45	2.42	5	1
1:A:162:LYS:C	1:A:163:VAL:HG13	0.45	2.30	10	1
1:A:163:VAL:HG21	1:A:195:ILE:HG12	0.45	1.88	15	2
1:A:135:LEU:O	1:A:136:ASP:HB2	0.45	2.12	13	1
1:A:164:ARG:CZ	1:A:166:VAL:CG1	0.45	2.94	13	1
1:A:165:ILE:HG12	1:A:191:SER:N	0.45	2.26	13	1
1:A:165:ILE:C	1:A:166:VAL:HG13	0.45	2.31	11	1
1:A:176:THR:CB	1:A:180:THR:HG23	0.45	2.41	12	1
1:A:206:HIS:N	1:A:206:HIS:CD2	0.45	2.84	7	1
1:A:178:GLN:O	1:A:181:GLN:HB3	0.45	2.12	2	1
1:A:214:LEU:CD2	1:A:214:LEU:N	0.45	2.77	16	1
1:A:198:ARG:O	1:A:199:ASP:CG	0.45	2.55	11	2
1:A:152:VAL:CG2	1:A:223:ILE:CG2	0.45	2.89	8	1
1:A:192:GLU:O	1:A:206:HIS:HA	0.45	2.11	5	2
1:A:150:THR:O	1:A:223:ILE:HG12	0.45	2.11	7	1
1:A:164:ARG:NH2	1:A:226:LEU:HD13	0.45	2.27	10	1
1:A:196:VAL:N	1:A:203:THR:O	0.45	2.45	18	1
1:A:156:ALA:C	1:A:157:THR:HG22	0.45	2.32	3	1
1:A:153:ILE:HD12	1:A:219:HIS:CD2	0.45	2.46	19	1
1:A:136:ASP:OD2	1:A:137:GLU:N	0.45	2.50	13	1
1:A:221:ILE:HG22	1:A:223:ILE:CG2	0.45	2.40	13	1
1:A:152:VAL:HG13	1:A:195:ILE:CG2	0.45	2.30	20	2
1:A:194:GLU:CG	1:A:205:SER:OG	0.45	2.64	16	1

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:179:PHE:O	1:A:182:LEU:HG	0.45	2.12	15	6
1:A:168:ILE:HG13	1:A:168:ILE:O	0.45	2.11	13	2
1:A:194:GLU:HG2	1:A:195:ILE:N	0.45	2.26	13	3
1:A:164:ARG:HG3	1:A:192:GLU:N	0.45	2.27	11	1
1:A:152:VAL:CG2	1:A:221:ILE:CG1	0.45	2.95	8	1
1:A:176:THR:O	1:A:177:ASP:CG	0.45	2.55	8	1
1:A:157:THR:O	1:A:158:SER:OG	0.45	2.35	10	2
1:A:176:THR:HB	1:A:180:THR:HG23	0.45	1.89	12	1
1:A:195:ILE:CG2	1:A:202:ILE:CG2	0.45	2.93	12	1
1:A:219:HIS:C	1:A:220:THR:HG23	0.45	2.33	6	1
1:A:194:GLU:HG2	1:A:205:SER:OG	0.45	2.12	16	1
1:A:165:ILE:CB	1:A:189:VAL:HB	0.45	2.42	18	1
1:A:152:VAL:CG2	1:A:223:ILE:HG12	0.45	2.42	8	1
1:A:169:ASN:O	1:A:170:GLU:CB	0.45	2.64	2	2
1:A:204:LEU:HD23	1:A:205:SER:N	0.45	2.26	16	2
1:A:153:ILE:HG12	1:A:219:HIS:CA	0.45	2.42	16	1
1:A:151:ARG:HB2	1:A:154:ASP:HB2	0.45	1.89	3	1
1:A:168:ILE:O	1:A:168:ILE:HG13	0.45	2.12	1	1
1:A:195:ILE:C	1:A:196:VAL:CG2	0.45	2.85	4	1
1:A:150:THR:HG22	1:A:151:ARG:H	0.45	1.70	5	2
1:A:166:VAL:O	1:A:167:GLN:CG	0.45	2.65	5	1
1:A:166:VAL:O	1:A:167:GLN:HB2	0.45	2.12	5	1
1:A:211:VAL:HG22	1:A:212:GLU:N	0.45	2.27	16	1
1:A:162:LYS:C	1:A:163:VAL:CG1	0.44	2.85	19	2
1:A:165:ILE:HG22	1:A:189:VAL:HB	0.44	1.88	18	5
1:A:157:THR:OG1	1:A:197:ASP:HB3	0.44	2.11	11	2
1:A:204:LEU:O	1:A:210:ASP:OD2	0.44	2.35	11	1
1:A:166:VAL:O	1:A:167:GLN:HG3	0.44	2.11	5	1
1:A:167:GLN:N	1:A:189:VAL:HG23	0.44	2.27	5	1
1:A:210:ASP:N	1:A:210:ASP:OD1	0.44	2.50	5	1
1:A:170:GLU:HG3	1:A:172:PHE:CZ	0.44	2.47	7	1
1:A:192:GLU:O	1:A:192:GLU:CG	0.44	2.66	2	1
1:A:195:ILE:HG13	1:A:202:ILE:HG22	0.44	1.88	3	1
1:A:165:ILE:CG1	1:A:189:VAL:O	0.44	2.65	12	6
1:A:174:VAL:HG11	1:A:217:LEU:HD12	0.44	1.89	4	1
1:A:192:GLU:HG3	1:A:226:LEU:HD11	0.44	1.88	13	1
1:A:187:ILE:O	1:A:188:ARG:CG	0.44	2.65	11	1
1:A:150:THR:O	1:A:154:ASP:HB2	0.44	2.12	12	1
1:A:215:ASP:O	1:A:216:ASP:C	0.44	2.56	9	6
1:A:152:VAL:CB	1:A:223:ILE:HG21	0.44	2.42	7	1
1:A:178:GLN:OE1	1:A:212:GLU:OE1	0.44	2.35	10	1

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:178:GLN:O	1:A:181:GLN:CB	0.44	2.66	15	2
1:A:169:ASN:HB3	1:A:171:ILE:CG1	0.44	2.42	18	1
1:A:215:ASP:HA	1:A:218:ALA:CB	0.44	2.43	12	1
1:A:133:PRO:CG	1:A:135:LEU:CD2	0.44	2.95	20	1
1:A:223:ILE:HG12	1:A:224:GLU:N	0.44	2.27	11	2
1:A:164:ARG:HG3	1:A:191:SER:C	0.44	2.33	11	1
1:A:131:PRO:O	1:A:132:ILE:C	0.44	2.56	8	2
1:A:152:VAL:CG1	1:A:195:ILE:CG2	0.44	2.96	8	1
1:A:168:ILE:O	1:A:171:ILE:HG23	0.44	2.13	6	1
1:A:189:VAL:HG23	1:A:190:GLY:N	0.44	2.26	5	1
1:A:204:LEU:HD11	1:A:213:LEU:HB3	0.44	1.88	5	1
1:A:156:ALA:CB	1:A:195:ILE:CD1	0.44	2.96	3	1
1:A:188:ARG:CG	1:A:188:ARG:O	0.44	2.65	17	3
1:A:223:ILE:C	1:A:224:GLU:CG	0.44	2.86	4	1
1:A:161:ARG:O	1:A:162:LYS:C	0.44	2.56	11	1
1:A:152:VAL:HA	1:A:223:ILE:CD1	0.44	2.42	16	3
1:A:220:THR:CG2	1:A:221:ILE:N	0.44	2.81	8	1
1:A:206:HIS:O	1:A:207:ASN:CG	0.44	2.55	14	1
1:A:221:ILE:O	1:A:221:ILE:HG12	0.44	2.13	16	2
1:A:165:ILE:CD1	1:A:189:VAL:HB	0.44	2.42	5	1
1:A:161:ARG:C	1:A:194:GLU:HB2	0.44	2.33	10	1
1:A:204:LEU:CD1	1:A:213:LEU:HG	0.44	2.40	17	1
1:A:157:THR:HG21	1:A:161:ARG:HG2	0.44	1.90	9	1
1:A:164:ARG:NH1	1:A:165:ILE:O	0.44	2.51	19	1
1:A:193:VAL:CG1	1:A:206:HIS:CB	0.44	2.96	2	3
1:A:221:ILE:HD13	1:A:221:ILE:O	0.44	2.13	4	2
1:A:168:ILE:HB	1:A:189:VAL:HG12	0.44	1.88	13	2
1:A:169:ASN:O	1:A:170:GLU:HB2	0.44	2.13	5	3
1:A:206:HIS:CE1	1:A:211:VAL:HG12	0.44	2.47	16	1
1:A:157:THR:O	1:A:159:MET:N	0.44	2.48	12	4
1:A:158:SER:O	1:A:159:MET:HB2	0.44	2.13	14	2
1:A:165:ILE:HD12	1:A:223:ILE:HG22	0.44	1.82	13	1
1:A:164:ARG:HG2	1:A:191:SER:C	0.44	2.33	16	5
1:A:214:LEU:O	1:A:215:ASP:C	0.44	2.56	14	2
1:A:218:ALA:O	1:A:221:ILE:HD11	0.44	2.13	6	2
1:A:136:ASP:OD1	1:A:136:ASP:O	0.44	2.36	6	2
1:A:163:VAL:HG21	1:A:195:ILE:HD11	0.44	1.90	7	1
1:A:163:VAL:HA	1:A:224:GLU:O	0.44	2.13	3	1
1:A:151:ARG:NE	1:A:219:HIS:CE1	0.44	2.86	19	1
1:A:208:GLY:O	1:A:209:LYS:HB3	0.44	2.12	11	2
1:A:151:ARG:O	1:A:152:VAL:C	0.44	2.54	18	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:193:VAL:CG2	1:A:204:LEU:HB3	0.44	2.41	17	2
1:A:193:VAL:HG12	1:A:206:HIS:CA	0.44	2.42	19	3
1:A:174:VAL:CG1	1:A:179:PHE:CZ	0.44	3.01	4	1
1:A:135:LEU:O	1:A:136:ASP:C	0.44	2.56	9	1
1:A:187:ILE:HG22	1:A:187:ILE:O	0.43	2.12	19	1
1:A:193:VAL:CB	1:A:206:HIS:HA	0.43	2.43	16	10
1:A:190:GLY:O	1:A:193:VAL:HG11	0.43	2.13	11	2
1:A:215:ASP:HA	1:A:218:ALA:HB3	0.43	1.90	6	2
1:A:193:VAL:CG2	1:A:204:LEU:CD2	0.43	2.96	2	1
1:A:210:ASP:O	1:A:210:ASP:OD1	0.43	2.36	3	1
1:A:198:ARG:HB2	1:A:203:THR:N	0.43	2.28	19	1
1:A:176:THR:O	1:A:177:ASP:O	0.43	2.36	4	1
1:A:218:ALA:O	1:A:221:ILE:HD12	0.43	2.13	12	1
1:A:193:VAL:C	1:A:194:GLU:OE2	0.43	2.56	10	1
1:A:152:VAL:CG1	1:A:153:ILE:H	0.43	2.26	9	1
1:A:161:ARG:O	1:A:194:GLU:HG3	0.43	2.14	19	1
1:A:166:VAL:O	1:A:167:GLN:CD	0.43	2.57	19	1
1:A:175:GLU:OE2	1:A:216:ASP:OD2	0.43	2.36	11	1
1:A:198:ARG:HB3	1:A:201:HIS:CB	0.43	2.43	8	1
1:A:175:GLU:C	1:A:176:THR:HG1	0.43	2.11	7	1
1:A:152:VAL:O	1:A:153:ILE:CB	0.43	2.65	18	2
1:A:179:PHE:CD1	1:A:217:LEU:HD22	0.43	2.48	16	1
1:A:214:LEU:HB2	1:A:217:LEU:CB	0.43	2.43	18	1
1:A:157:THR:HB	1:A:161:ARG:HD2	0.43	1.88	1	1
1:A:153:ILE:CD1	1:A:219:HIS:HA	0.43	2.43	1	3
1:A:168:ILE:O	1:A:168:ILE:HG12	0.43	2.13	14	1
1:A:175:GLU:O	1:A:176:THR:OG1	0.43	2.36	14	4
1:A:150:THR:O	1:A:151:ARG:HB2	0.43	2.12	1	5
1:A:160:PRO:O	1:A:161:ARG:HG2	0.43	2.12	7	2
1:A:156:ALA:HB1	1:A:197:ASP:OD1	0.43	2.13	10	1
1:A:213:LEU:HD22	1:A:218:ALA:CB	0.43	2.43	16	1
1:A:152:VAL:HG12	1:A:223:ILE:CG2	0.43	2.38	17	1
1:A:185:ALA:O	1:A:187:ILE:N	0.43	2.51	17	1
1:A:174:VAL:CG1	1:A:175:GLU:N	0.43	2.74	15	1
1:A:160:PRO:HA	1:A:195:ILE:O	0.43	2.14	8	2
1:A:160:PRO:O	1:A:161:ARG:HB2	0.43	2.14	12	1
1:A:225:GLU:OE1	1:A:226:LEU:OXT	0.43	2.36	7	2
1:A:148:PRO:O	1:A:222:ARG:HG2	0.43	2.13	18	1
1:A:136:ASP:O	1:A:137:GLU:C	0.43	2.57	9	2
1:A:168:ILE:HG12	1:A:171:ILE:CD1	0.43	2.44	13	1
1:A:221:ILE:O	1:A:221:ILE:CG1	0.43	2.66	12	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:196:VAL:O	1:A:196:VAL:HG22	0.43	2.13	6	1
1:A:214:LEU:H	1:A:214:LEU:HD23	0.43	1.73	1	2
1:A:206:HIS:O	1:A:207:ASN:HB3	0.43	2.13	3	1
1:A:203:THR:HG23	1:A:211:VAL:C	0.43	2.32	17	1
1:A:164:ARG:NH2	1:A:166:VAL:CG1	0.43	2.79	13	1
1:A:152:VAL:HG23	1:A:221:ILE:HG12	0.43	1.90	8	1
1:A:165:ILE:HG22	1:A:166:VAL:H	0.43	1.72	5	1
1:A:172:PHE:O	1:A:173:GLN:C	0.43	2.57	9	1
1:A:156:ALA:O	1:A:157:THR:C	0.43	2.55	19	3
1:A:192:GLU:HG3	1:A:226:LEU:HD21	0.43	1.91	19	1
1:A:151:ARG:O	1:A:223:ILE:HD11	0.43	2.13	13	1
1:A:193:VAL:HG23	1:A:205:SER:O	0.43	2.13	12	1
1:A:192:GLU:HB2	1:A:226:LEU:CD1	0.43	2.44	1	1
1:A:150:THR:HG22	1:A:154:ASP:HB3	0.43	1.90	11	1
1:A:136:ASP:O	1:A:137:GLU:HB2	0.43	2.14	16	3
1:A:221:ILE:O	1:A:221:ILE:HD13	0.43	2.14	12	1
1:A:214:LEU:HD21	1:A:217:LEU:HB2	0.43	1.89	19	1
1:A:152:VAL:C	1:A:154:ASP:N	0.43	2.70	4	3
1:A:221:ILE:CG1	1:A:221:ILE:O	0.43	2.67	6	1
1:A:193:VAL:CB	1:A:206:HIS:CD2	0.43	3.01	5	1
1:A:165:ILE:CA	1:A:223:ILE:HB	0.43	2.44	5	1
1:A:167:GLN:HB2	1:A:222:ARG:HD2	0.43	1.90	3	2
1:A:195:ILE:CA	1:A:203:THR:O	0.43	2.67	3	1
1:A:178:GLN:O	1:A:179:PHE:C	0.42	2.57	11	3
1:A:158:SER:O	1:A:159:MET:HB3	0.42	2.14	8	1
1:A:176:THR:O	1:A:179:PHE:HB3	0.42	2.13	8	2
1:A:213:LEU:HG	1:A:214:LEU:N	0.42	2.29	9	2
1:A:163:VAL:O	1:A:164:ARG:HB3	0.42	2.14	10	1
1:A:149:GLY:O	1:A:150:THR:CB	0.42	2.64	16	1
1:A:195:ILE:O	1:A:195:ILE:HD13	0.42	2.13	3	1
1:A:196:VAL:HG12	1:A:203:THR:HB	0.42	1.90	15	1
1:A:198:ARG:NH2	1:A:198:ARG:HB3	0.42	2.29	11	1
1:A:214:LEU:HD11	1:A:217:LEU:HD23	0.42	1.90	11	1
1:A:157:THR:C	1:A:158:SER:OG	0.42	2.57	14	2
1:A:175:GLU:O	1:A:176:THR:HB	0.42	2.15	16	1
1:A:219:HIS:CD2	1:A:219:HIS:O	0.42	2.72	16	1
1:A:167:GLN:HB3	1:A:222:ARG:HB3	0.42	1.91	15	1
1:A:220:THR:HG23	1:A:221:ILE:H	0.42	1.73	19	1
1:A:191:SER:O	1:A:193:VAL:HG22	0.42	2.14	4	1
1:A:195:ILE:HG22	1:A:202:ILE:HG22	0.42	1.90	12	1
1:A:150:THR:O	1:A:150:THR:CG2	0.42	2.64	6	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:170:GLU:O	1:A:170:GLU:CG	0.42	2.68	11	1
1:A:161:ARG:O	1:A:194:GLU:OE1	0.42	2.37	12	1
1:A:213:LEU:HD11	1:A:218:ALA:HB2	0.42	1.90	6	1
1:A:217:LEU:HA	1:A:219:HIS:CD2	0.42	2.50	5	1
1:A:187:ILE:HD13	1:A:211:VAL:HG23	0.42	1.89	17	1
1:A:202:ILE:O	1:A:213:LEU:CB	0.42	2.68	17	1
1:A:149:GLY:O	1:A:150:THR:C	0.42	2.57	4	1
1:A:202:ILE:O	1:A:202:ILE:HG22	0.42	2.13	13	2
1:A:174:VAL:HG22	1:A:175:GLU:H	0.42	1.68	8	1
1:A:193:VAL:O	1:A:194:GLU:HB3	0.42	2.15	2	3
1:A:215:ASP:O	1:A:218:ALA:HB3	0.42	2.14	17	2
1:A:192:GLU:C	1:A:192:GLU:OE1	0.42	2.58	6	1
1:A:167:GLN:HB2	1:A:222:ARG:CG	0.42	2.44	7	1
1:A:219:HIS:C	1:A:219:HIS:CD2	0.42	2.92	7	1
1:A:160:PRO:CB	1:A:195:ILE:O	0.42	2.68	8	1
1:A:204:LEU:O	1:A:210:ASP:CA	0.42	2.68	14	1
1:A:218:ALA:O	1:A:220:THR:OG1	0.42	2.35	5	1
1:A:177:ASP:C	1:A:177:ASP:OD1	0.42	2.57	7	1
1:A:215:ASP:C	1:A:217:LEU:N	0.42	2.73	9	2
1:A:148:PRO:O	1:A:149:GLY:C	0.42	2.57	19	1
1:A:198:ARG:HB2	1:A:201:HIS:O	0.42	2.14	13	2
1:A:220:THR:OG1	1:A:221:ILE:N	0.42	2.53	13	1
1:A:217:LEU:O	1:A:220:THR:OG1	0.42	2.36	16	2
1:A:152:VAL:CG1	1:A:221:ILE:CD1	0.42	2.95	17	1
1:A:198:ARG:CD	1:A:203:THR:OG1	0.42	2.67	19	1
1:A:151:ARG:C	1:A:223:ILE:HG12	0.42	2.35	10	1
1:A:204:LEU:CB	1:A:213:LEU:HD12	0.42	2.38	16	1
1:A:195:ILE:CG1	1:A:202:ILE:HG22	0.42	2.43	3	1
1:A:198:ARG:HB2	1:A:203:THR:OG1	0.42	2.15	19	1
1:A:179:PHE:C	1:A:181:GLN:N	0.42	2.73	1	7
1:A:149:GLY:HA3	1:A:222:ARG:HG2	0.42	1.92	14	1
1:A:167:GLN:HB2	1:A:222:ARG:HB2	0.42	1.92	20	1
1:A:175:GLU:OE1	1:A:216:ASP:OD2	0.42	2.37	3	1
1:A:155:ALA:O	1:A:161:ARG:HB2	0.42	2.15	8	1
1:A:173:GLN:O	1:A:175:GLU:N	0.42	2.53	12	1
1:A:157:THR:O	1:A:158:SER:HB3	0.42	2.14	15	2
1:A:179:PHE:CG	1:A:217:LEU:HD22	0.42	2.50	7	1
1:A:183:LEU:O	1:A:183:LEU:CD1	0.42	2.66	16	1
1:A:165:ILE:HG13	1:A:193:VAL:CG1	0.42	2.45	17	1
1:A:179:PHE:CE2	1:A:217:LEU:CD1	0.41	3.03	19	1
1:A:219:HIS:O	1:A:220:THR:C	0.41	2.58	13	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:165:ILE:HG12	1:A:223:ILE:HB	0.41	1.90	5	1
1:A:181:GLN:HB3	1:A:212:GLU:OE2	0.41	2.15	3	1
1:A:152:VAL:HG11	1:A:204:LEU:HD21	0.41	1.90	17	1
1:A:156:ALA:HA	1:A:161:ARG:NH1	0.41	2.30	1	1
1:A:148:PRO:O	1:A:224:GLU:HG2	0.41	2.15	4	1
1:A:174:VAL:O	1:A:174:VAL:HG22	0.41	2.14	13	1
1:A:219:HIS:ND1	1:A:219:HIS:C	0.41	2.71	20	1
1:A:197:ASP:O	1:A:197:ASP:OD1	0.41	2.38	2	1
1:A:150:THR:O	1:A:151:ARG:HD3	0.41	2.15	16	1
1:A:195:ILE:HG23	1:A:204:LEU:CD1	0.41	2.44	18	1
1:A:153:ILE:HD13	1:A:219:HIS:HB2	0.41	1.92	17	1
1:A:161:ARG:CZ	1:A:161:ARG:HB2	0.41	2.38	1	1
1:A:152:VAL:CG1	1:A:218:ALA:HB1	0.41	2.45	11	1
1:A:195:ILE:HD13	1:A:195:ILE:O	0.41	2.14	14	1
1:A:193:VAL:HG21	1:A:204:LEU:CD2	0.41	2.45	2	3
1:A:188:ARG:C	1:A:189:VAL:O	0.41	2.57	17	1
1:A:151:ARG:HB3	1:A:219:HIS:CD2	0.41	2.50	15	1
1:A:192:GLU:OE1	1:A:192:GLU:O	0.41	2.38	6	1
1:A:150:THR:O	1:A:151:ARG:HG3	0.41	2.14	5	1
1:A:193:VAL:CA	1:A:194:GLU:OE2	0.41	2.68	10	1
1:A:202:ILE:HD12	1:A:215:ASP:OD1	0.41	2.15	15	1
1:A:172:PHE:CD1	1:A:172:PHE:N	0.41	2.88	13	1
1:A:161:ARG:HD2	1:A:162:LYS:N	0.41	2.30	11	1
1:A:195:ILE:CG1	1:A:196:VAL:N	0.41	2.83	14	2
1:A:215:ASP:N	1:A:215:ASP:OD1	0.41	2.54	20	1
1:A:179:PHE:C	1:A:182:LEU:HD12	0.41	2.32	16	1
1:A:188:ARG:O	1:A:189:VAL:HG12	0.41	2.13	17	1
1:A:170:GLU:O	1:A:172:PHE:CD1	0.41	2.74	19	1
1:A:171:ILE:CD1	1:A:171:ILE:C	0.41	2.89	6	1
1:A:203:THR:CG2	1:A:204:LEU:N	0.41	2.83	10	1
1:A:163:VAL:CG2	1:A:195:ILE:HG13	0.41	2.44	17	1
1:A:204:LEU:O	1:A:210:ASP:CG	0.41	2.59	17	1
1:A:160:PRO:CA	1:A:195:ILE:O	0.41	2.69	8	1
1:A:214:LEU:HD12	1:A:215:ASP:H	0.41	1.75	8	1
1:A:195:ILE:HB	1:A:204:LEU:HG	0.41	1.92	14	1
1:A:206:HIS:CE1	1:A:211:VAL:CG1	0.41	3.03	3	1
1:A:176:THR:CB	1:A:179:PHE:CB	0.41	2.99	4	1
1:A:176:THR:C	1:A:177:ASP:OD1	0.41	2.59	13	1
1:A:221:ILE:O	1:A:221:ILE:HG22	0.41	2.15	13	1
1:A:164:ARG:O	1:A:223:ILE:CA	0.41	2.68	16	2
1:A:206:HIS:HB2	1:A:209:LYS:O	0.41	2.15	1	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:168:ILE:HD12	1:A:221:ILE:CD1	0.41	2.45	13	1
1:A:170:GLU:HG2	1:A:170:GLU:O	0.41	2.16	12	1
1:A:186:ASP:O	1:A:186:ASP:CG	0.41	2.59	2	1
1:A:160:PRO:O	1:A:194:GLU:CD	0.41	2.59	15	1
1:A:170:GLU:CD	1:A:220:THR:O	0.41	2.59	9	1
1:A:158:SER:C	1:A:159:MET:CG	0.41	2.86	14	1
1:A:214:LEU:O	1:A:214:LEU:HG	0.41	2.16	14	1
1:A:182:LEU:HD22	1:A:211:VAL:HG11	0.41	1.93	5	1
1:A:224:GLU:O	1:A:225:GLU:C	0.41	2.59	2	1
1:A:152:VAL:HG22	1:A:218:ALA:O	0.41	2.15	17	1
1:A:152:VAL:HG13	1:A:221:ILE:CD1	0.41	2.46	17	1
1:A:179:PHE:CD2	1:A:217:LEU:HD22	0.41	2.51	1	1
1:A:134:GLY:O	1:A:135:LEU:HB2	0.41	2.16	9	1
1:A:136:ASP:OD2	1:A:137:GLU:OE1	0.40	2.39	13	1
1:A:152:VAL:CG1	1:A:204:LEU:HD21	0.40	2.46	5	1
1:A:165:ILE:HB	1:A:189:VAL:HB	0.40	1.93	18	1
1:A:153:ILE:HG12	1:A:154:ASP:N	0.40	2.32	12	1
1:A:215:ASP:HA	1:A:218:ALA:HB2	0.40	1.91	12	1
1:A:202:ILE:HD12	1:A:215:ASP:CB	0.40	2.46	20	1
1:A:182:LEU:HB3	1:A:211:VAL:CG1	0.40	2.47	7	1
1:A:156:ALA:HA	1:A:160:PRO:HB3	0.40	1.93	16	1
1:A:159:MET:N	1:A:160:PRO:HD3	0.40	2.31	16	1
1:A:169:ASN:O	1:A:170:GLU:HB3	0.40	2.17	17	1
1:A:183:LEU:C	1:A:183:LEU:CD1	0.40	2.89	1	1
1:A:165:ILE:CB	1:A:223:ILE:HG22	0.40	2.42	9	1
1:A:206:HIS:HE1	1:A:211:VAL:HG23	0.40	1.72	12	1
1:A:214:LEU:HG	1:A:214:LEU:O	0.40	2.17	6	1
1:A:187:ILE:HG21	1:A:211:VAL:CG2	0.40	2.46	17	1
1:A:157:THR:HB	1:A:161:ARG:CD	0.40	2.46	1	1
1:A:165:ILE:HG13	1:A:190:GLY:H	0.40	1.75	13	1
1:A:152:VAL:HG23	1:A:153:ILE:H	0.40	1.77	5	1
1:A:176:THR:OG1	1:A:180:THR:HG23	0.40	2.16	3	1
1:A:199:ASP:O	1:A:201:HIS:N	0.40	2.54	3	1
1:A:214:LEU:HD13	1:A:218:ALA:N	0.40	2.32	3	1
1:A:150:THR:C	1:A:223:ILE:O	0.40	2.60	9	1
1:A:153:ILE:HG12	1:A:218:ALA:O	0.40	2.16	9	1
1:A:179:PHE:CD2	1:A:180:THR:N	0.40	2.90	11	1
1:A:214:LEU:CG	1:A:217:LEU:HB2	0.40	2.46	11	1
1:A:174:VAL:CG1	1:A:174:VAL:O	0.40	2.69	20	1
1:A:158:SER:O	1:A:159:MET:O	0.40	2.40	5	1
1:A:165:ILE:O	1:A:190:GLY:HA2	0.40	2.16	5	1

*Continued on next page...*





Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:166:VAL:HA	1:A:190:GLY:HA2	0.40	1.93	5	1
1:A:171:ILE:HD13	1:A:217:LEU:HD23	0.40	1.91	7	1
1:A:208:GLY:O	1:A:209:LYS:HB2	0.40	2.15	16	1
1:A:157:THR:HG21	1:A:161:ARG:NH1	0.40	2.31	18	1
1:A:165:ILE:HD13	1:A:165:ILE:N	0.40	2.30	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	86/97 (89%)	49±3 (57±3%)	24±3 (28±3%)	13±3 (15±3%)		
All	All	1720/1940 (89%)	984 (57%)	477 (28%)	259 (15%)		

All 56 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	190	GLY	18
1	A	193	VAL	17
1	A	152	VAL	13
1	A	207	ASN	13
1	A	169	ASN	12
1	A	151	ARG	12
1	A	189	VAL	11
1	A	199	ASP	10
1	A	153	ILE	10
1	A	174	VAL	10
1	A	176	THR	8
1	A	163	VAL	6
1	A	161	ARG	6
1	A	157	THR	6
1	A	191	SER	6
1	A	220	THR	6
1	A	177	ASP	5

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	172	PHE	5
1	A	186	ASP	5
1	A	175	GLU	5
1	A	196	VAL	4
1	A	160	PRO	4
1	A	131	PRO	4
1	A	136	ASP	4
1	A	134	GLY	3
1	A	213	LEU	3
1	A	170	GLU	3
1	A	149	GLY	3
1	A	180	THR	3
1	A	135	LEU	3
1	A	173	GLN	3
1	A	158	SER	2
1	A	133	PRO	2
1	A	214	LEU	2
1	A	162	LYS	2
1	A	219	HIS	2
1	A	150	THR	2
1	A	187	ILE	2
1	A	167	GLN	2
1	A	188	ARG	2
1	A	137	GLU	2
1	A	159	MET	2
1	A	209	LYS	2
1	A	166	VAL	2
1	A	138	LEU	1
1	A	132	ILE	1
1	A	202	ILE	1
1	A	221	ILE	1
1	A	156	ALA	1
1	A	212	GLU	1
1	A	218	ALA	1
1	A	215	ASP	1
1	A	178	GLN	1
1	A	171	ILE	1
1	A	197	ASP	1
1	A	211	VAL	1



### 6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	78/83 (94%)	50±4 (65±6%)	28±4 (35±6%)	<b>1</b> <b>9</b>
All	All	1560/1660 (94%)	1007 (65%)	553 (35%)	<b>1</b> <b>9</b>

All 71 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	223	ILE	20
1	A	221	ILE	19
1	A	195	ILE	18
1	A	180	THR	18
1	A	179	PHE	18
1	A	217	LEU	17
1	A	183	LEU	17
1	A	154	ASP	17
1	A	216	ASP	16
1	A	204	LEU	15
1	A	201	HIS	14
1	A	198	ARG	14
1	A	164	ARG	13
1	A	138	LEU	13
1	A	165	ILE	13
1	A	226	LEU	12
1	A	161	ARG	12
1	A	214	LEU	11
1	A	159	MET	11
1	A	188	ARG	11
1	A	162	LYS	11
1	A	173	GLN	11
1	A	167	GLN	10
1	A	135	LEU	10
1	A	170	GLU	9
1	A	177	ASP	9
1	A	209	LYS	9
1	A	205	SER	9
1	A	222	ARG	8

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	176	THR	8
1	A	151	ARG	8
1	A	137	GLU	8
1	A	153	ILE	8
1	A	158	SER	7
1	A	163	VAL	7
1	A	157	THR	7
1	A	192	GLU	7
1	A	213	LEU	6
1	A	199	ASP	6
1	A	172	PHE	6
1	A	178	GLN	6
1	A	168	ILE	6
1	A	175	GLU	6
1	A	225	GLU	5
1	A	220	THR	5
1	A	224	GLU	5
1	A	219	HIS	4
1	A	182	LEU	4
1	A	152	VAL	4
1	A	181	GLN	4
1	A	210	ASP	4
1	A	186	ASP	4
1	A	136	ASP	4
1	A	169	ASN	3
1	A	194	GLU	3
1	A	212	GLU	3
1	A	206	HIS	3
1	A	207	ASN	2
1	A	215	ASP	2
1	A	193	VAL	2
1	A	174	VAL	1
1	A	132	ILE	1
1	A	189	VAL	1
1	A	184	ASP	1
1	A	191	SER	1
1	A	187	ILE	1
1	A	203	THR	1
1	A	171	ILE	1
1	A	211	VAL	1
1	A	197	ASP	1
1	A	150	THR	1

### 6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

## 6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no carbohydrates in this entry.

## 6.6 Ligand geometry ⓘ

There are no ligands in this entry.

## 6.7 Other polymers ⓘ

There are no such molecules in this entry.

## 6.8 Polymer linkage issues ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

## 7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided