



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 12, 2017 – 05:48 pm GMT

PDB ID : 1D1D
Title : NMR SOLUTION STRUCTURE OF THE CAPSID PROTEIN FROM ROUS SARCOMA VIRUS
Authors : Campos-Olivas, R.; Newman, J.L.; Summers, M.F.
Deposited on : 1999-09-15

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
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

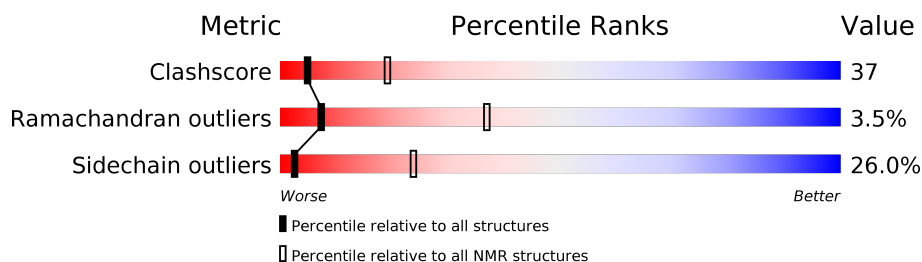
1 Overall quality at a glance

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 ≥ 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	262	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 8 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 7 as representative.

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:15-A:93, A:100-A:145 (125)	0.48	8
2	A:152-A:226 (75)	0.28	19

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

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

The models can be grouped into 4 clusters and 1 single-model cluster was found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3395 atoms, of which 1721 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called PROTEIN (CAPSID PROTEIN).

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	220	Total	C	H	N	O	S	0
			3395	1058	1721	303	307	6	

There are 21 discrepancies between the modelled and reference sequences:

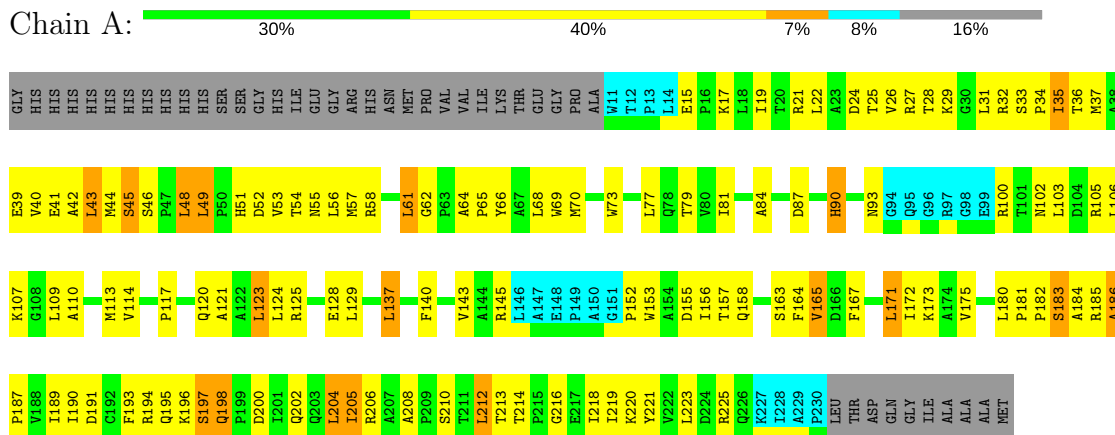
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	-22	GLY	-	N-TERMINAL HIS TAG	UNP O92954
A	-21	HIS	-	N-TERMINAL HIS TAG	UNP O92954
A	-20	HIS	-	N-TERMINAL HIS TAG	UNP O92954
A	-19	HIS	-	N-TERMINAL HIS TAG	UNP O92954
A	-18	HIS	-	N-TERMINAL HIS TAG	UNP O92954
A	-17	HIS	-	N-TERMINAL HIS TAG	UNP O92954
A	-16	HIS	-	N-TERMINAL HIS TAG	UNP O92954
A	-15	HIS	-	N-TERMINAL HIS TAG	UNP O92954
A	-14	HIS	-	N-TERMINAL HIS TAG	UNP O92954
A	-13	HIS	-	N-TERMINAL HIS TAG	UNP O92954
A	-12	HIS	-	N-TERMINAL HIS TAG	UNP O92954
A	-11	SER	-	N-TERMINAL HIS TAG	UNP O92954
A	-10	SER	-	N-TERMINAL HIS TAG	UNP O92954
A	-9	GLY	-	N-TERMINAL HIS TAG	UNP O92954
A	-8	HIS	-	N-TERMINAL HIS TAG	UNP O92954
A	-7	ILE	-	N-TERMINAL HIS TAG	UNP O92954
A	-6	GLU	-	N-TERMINAL HIS TAG	UNP O92954
A	-5	GLY	-	N-TERMINAL HIS TAG	UNP O92954
A	-4	ARG	-	N-TERMINAL HIS TAG	UNP O92954
A	-3	HIS	-	N-TERMINAL HIS TAG	UNP O92954
A	-2	ASN	-	N-TERMINAL HIS TAG	UNP O92954

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 (CAPSID PROTEIN)

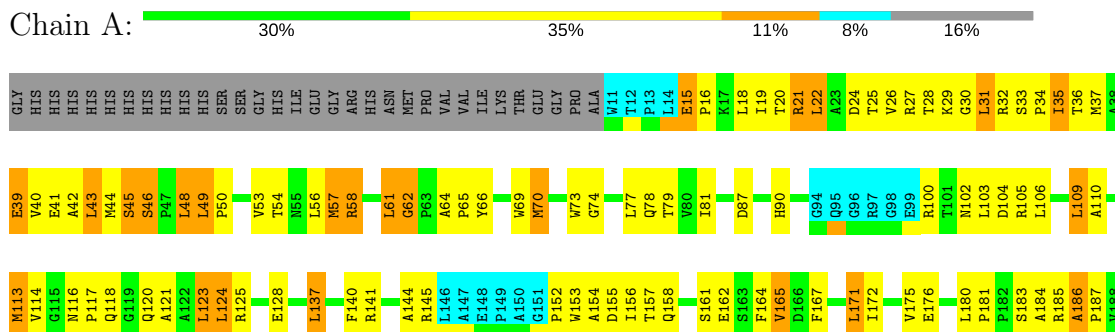


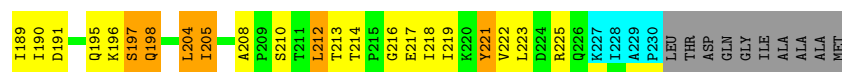
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: PROTEIN (CAPSID PROTEIN)

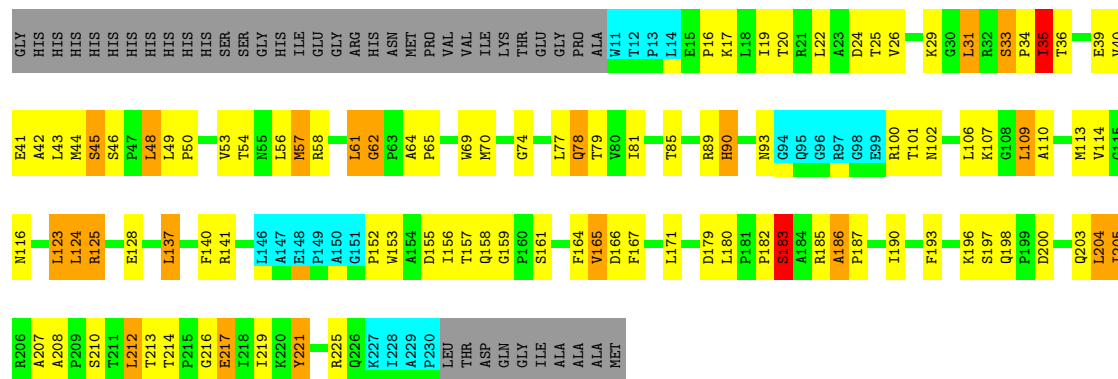




4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: PROTEIN (CAPSID PROTEIN)

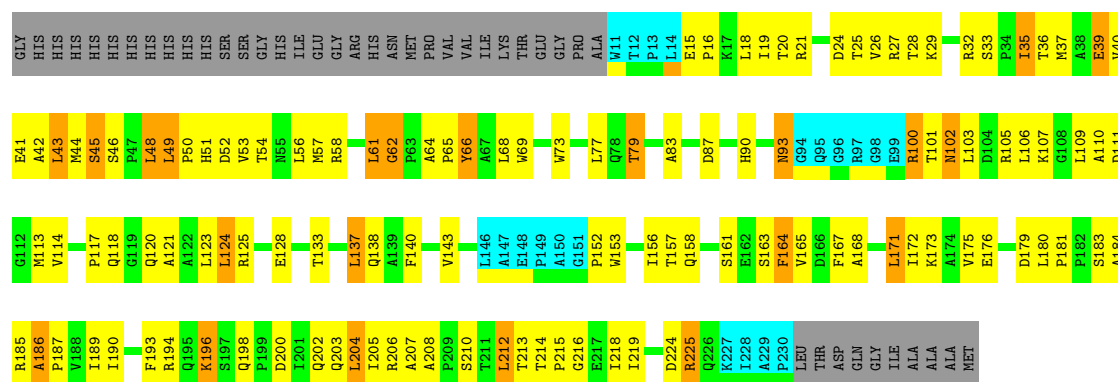
Chain A: 37% 30% 8% 8% 16%



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: PROTEIN (CAPSID PROTEIN)

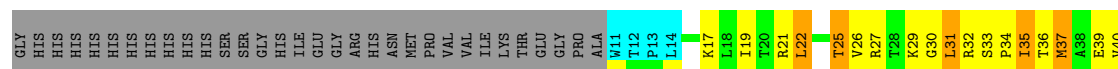
Chain A: 30% 38% 8% 8% 16%

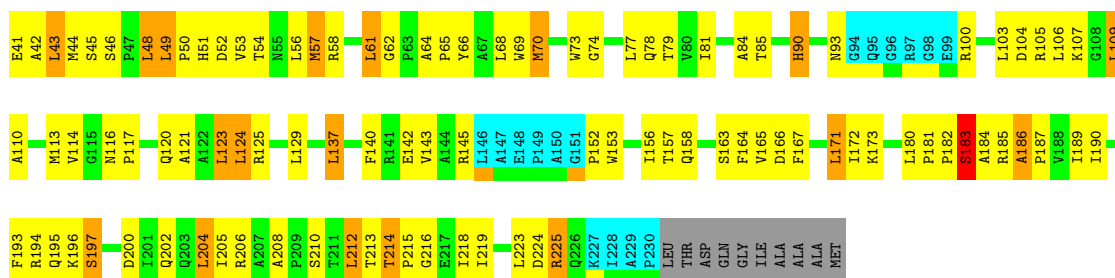


4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: PROTEIN (CAPSID PROTEIN)

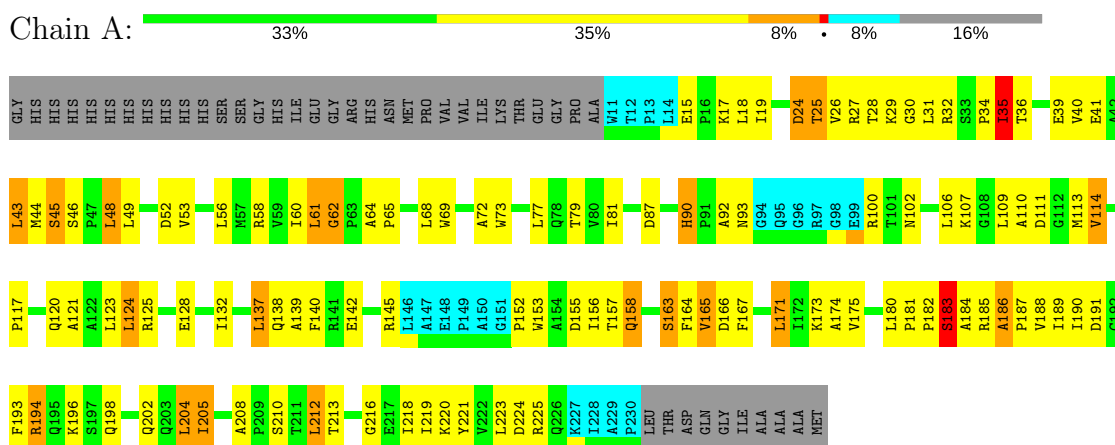
Chain A: 31% 37% 9% 8% 16%





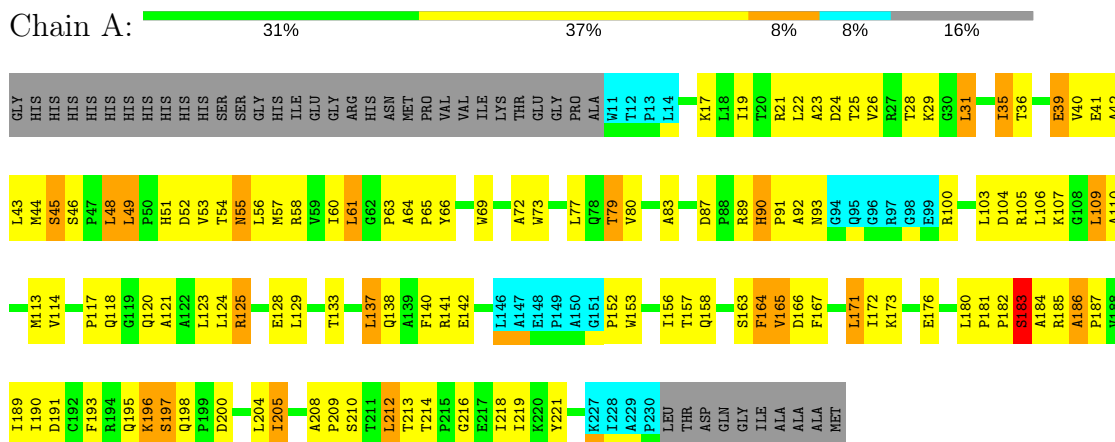
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: PROTEIN (CAPSID PROTEIN)



4.2.6 Score per residue for model 6

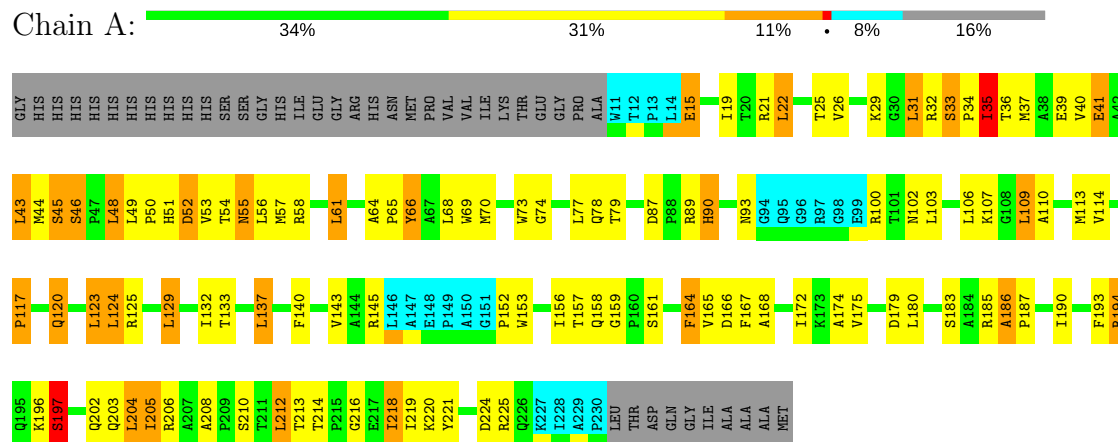
- Molecule 1: PROTEIN (CAPSID PROTEIN)



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: PROTEIN (CAPSID PROTEIN)

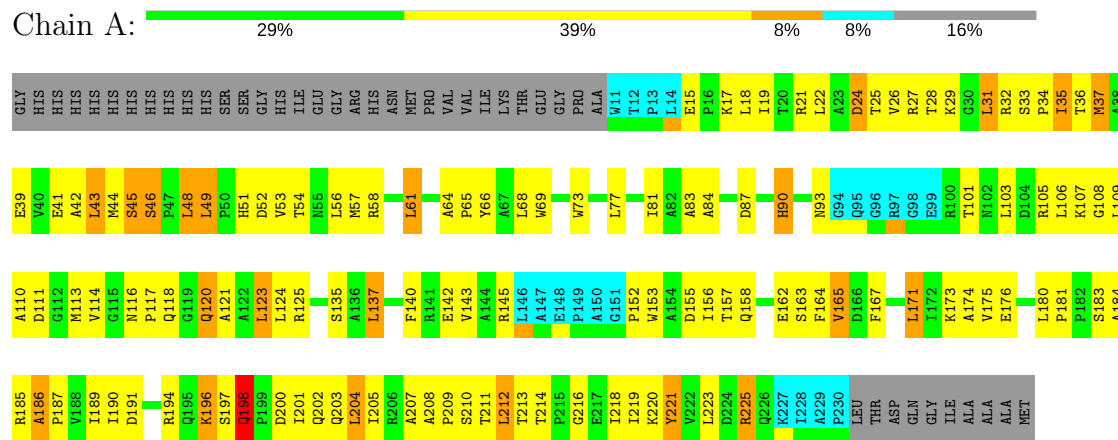
Chain A:



4.2.8 Score per residue for model 8 (medoid)

- Molecule 1: PROTEIN (CAPSID PROTEIN)

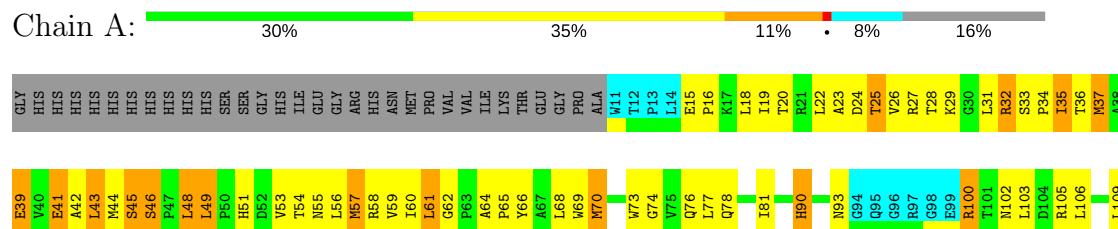
Chain A:

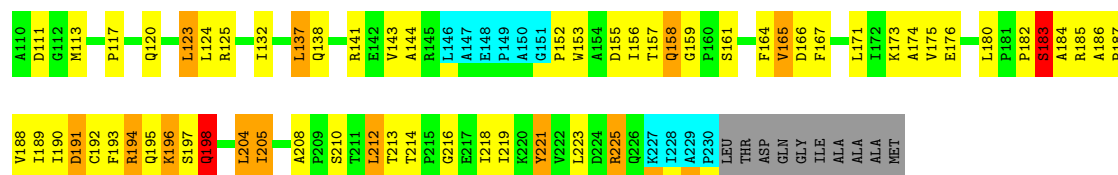


4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: PROTEIN (CAPSID PROTEIN)

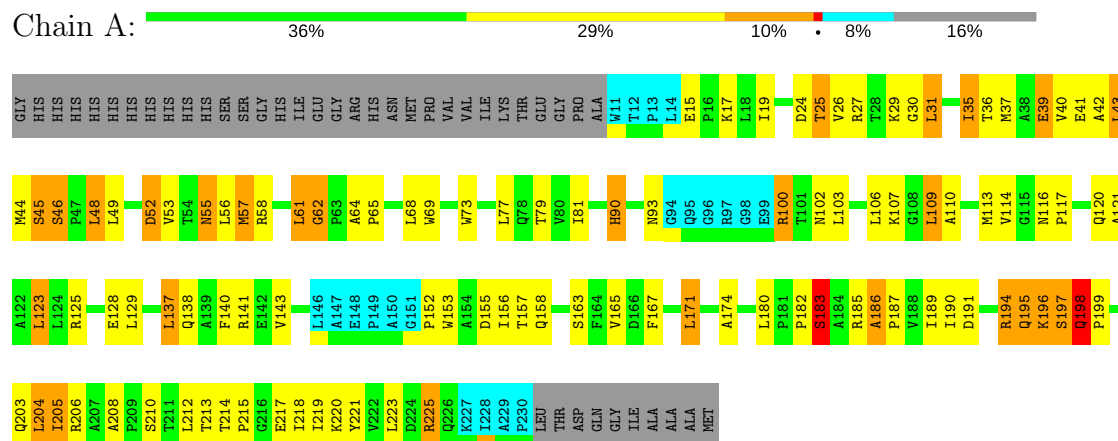
Chain A:





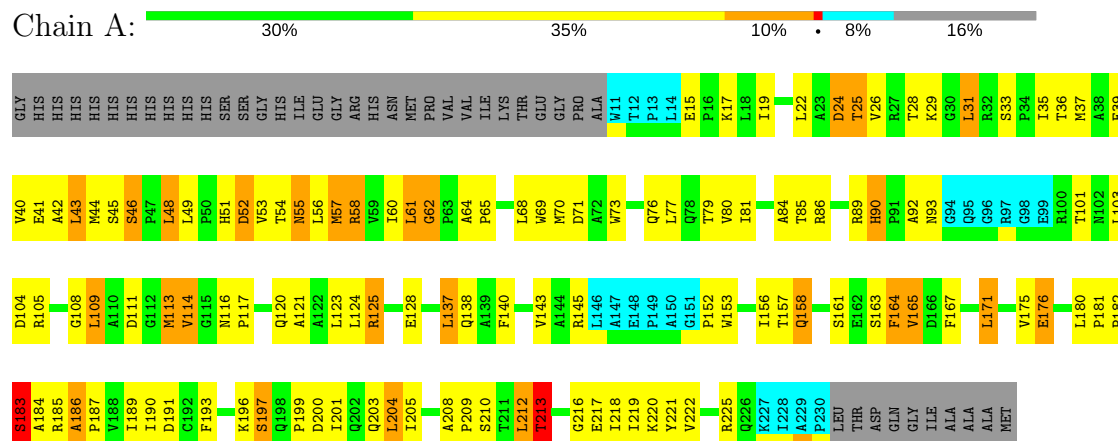
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: PROTEIN (CAPSID PROTEIN)



4.2.11 Score per residue for model 11

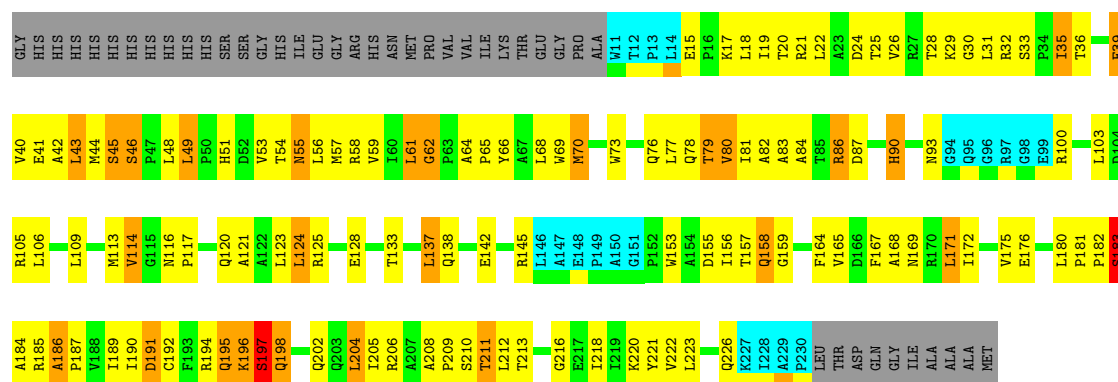
- Molecule 1: PROTEIN (CAPSID PROTEIN)



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: PROTEIN (CAPSID PROTEIN)

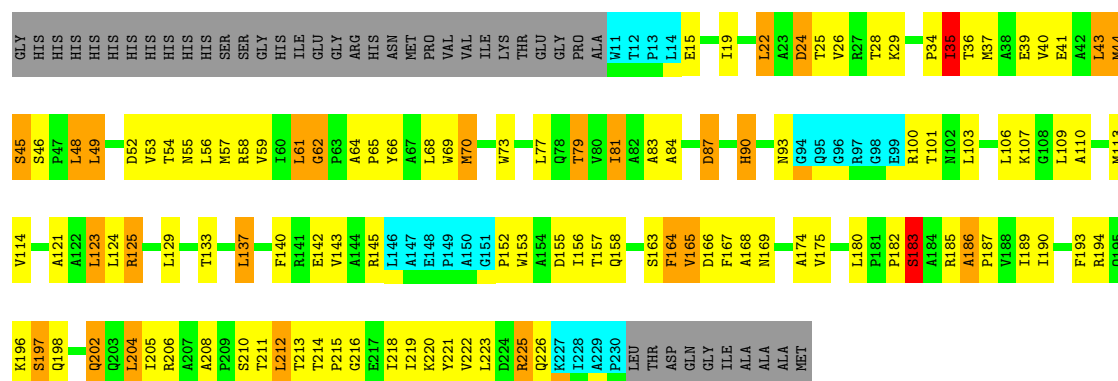




4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: PROTEIN (CAPSID PROTEIN)

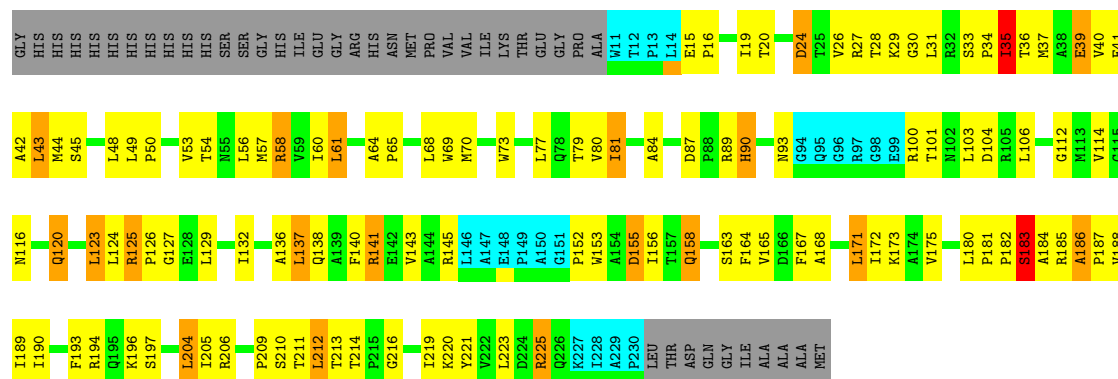
Chain A: 33% 33% 10% 8%



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: PROTEIN (CAPSID PROTEIN)

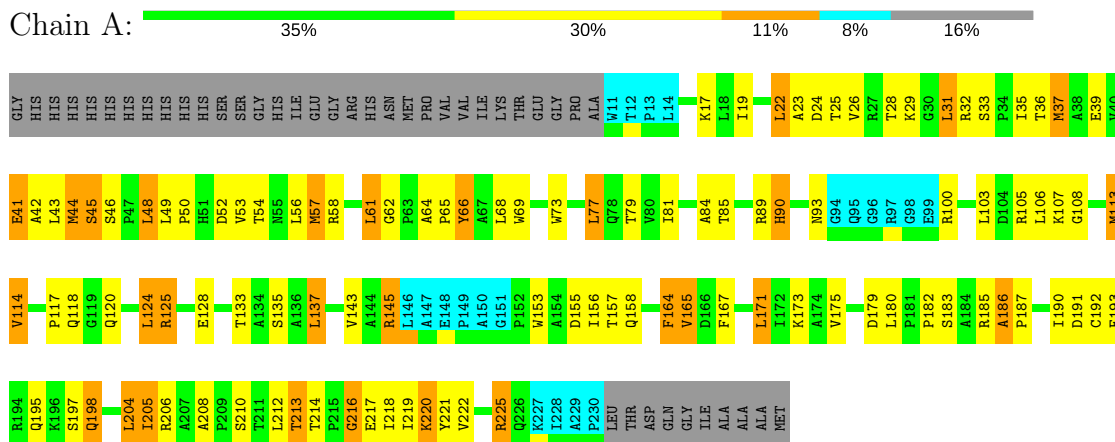
Chain A: 32% 36% 7% 8%



4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: PROTEIN (CAPSID PROTEIN)

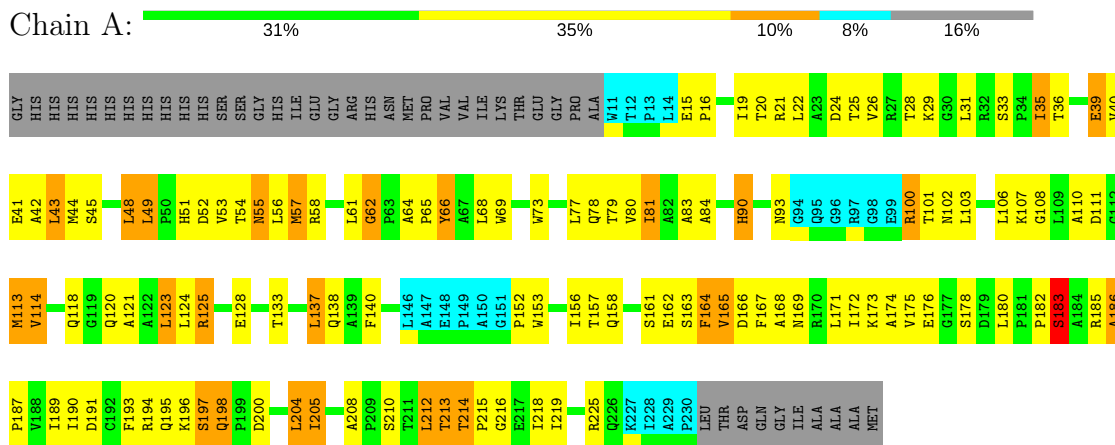
Chain A:



4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: PROTEIN (CAPSID PROTEIN)

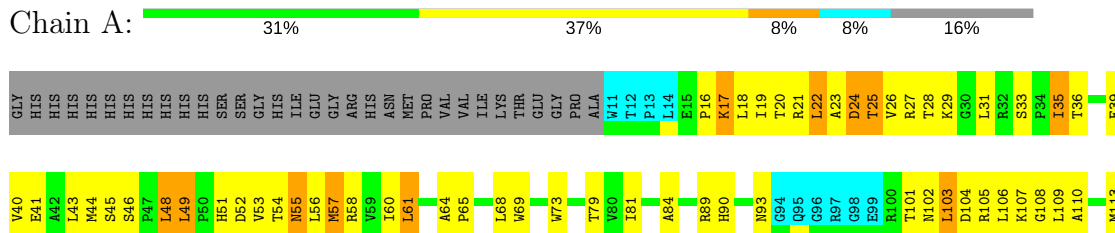
Chain A:

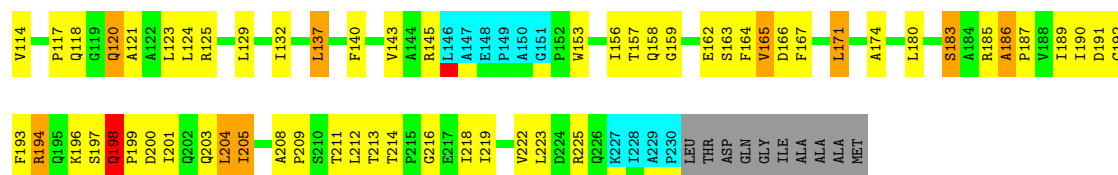


4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: PROTEIN (CAPSID PROTEIN)

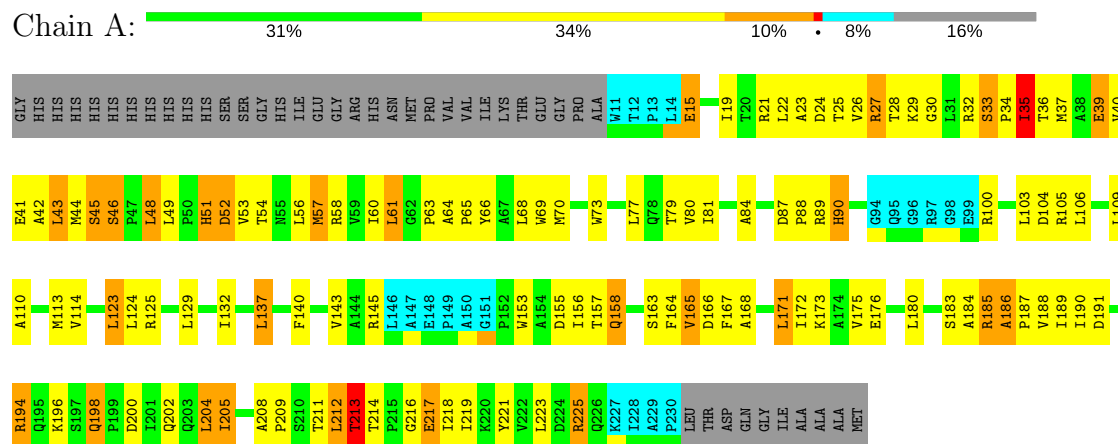
Chain A:





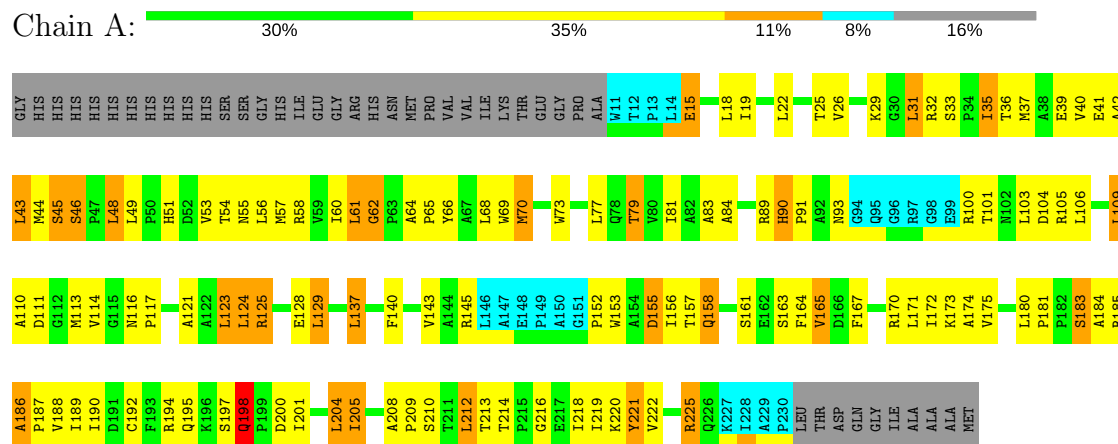
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: PROTEIN (CAPSID PROTEIN)



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: PROTEIN (CAPSID PROTEIN)



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: PROTEIN (CAPSID PROTEIN)



D191	C192	F193	R194	Q195	K196	S197	Q198	P199	D200	I201	Q202	Q203	L204	I205	R206	A207	A208	P209	S210	T211	L212	T213	T214	P215	G216	T217	T218	T219	K220	L223	D224	R225	Q226	T227	T228	A229	P230	LEU	THR	ASP	GLN	GLY	ILE	ALA	ALA	MET								
V114	Q120	A121	A122	L123	L124	R125	L129	I132	T133	L137	F140	V143	A144	L146	A147	E148	P149	A150	G151	P152	W153	D155	I156	T157	Q158	S161	E162	S163	F164	V165	D166	F167	L171	I172	K173	A174	D179	L180	P181	P182	S183	A184	R185	A186	P187	V188	I189	I190						
M44	S45	S46	P47	L48	L49	P50	H51	D52	V53	T54	N55	L56	M57	R58	V59	T60	L61	A64	P65	Y66	A67	L68	W69	N70	W73	L77	Q78	T79	V80	A83	A84	T85	R86	D87	H90	N93	G94	Q95	G96	R97	G98	E99	R100	T101	N102	L106	K107	G108	L109	A110	M113			
GLY	HIS	HIS	HIS	HIS	HIS	HIS	HIS	HIS	HIS	HIS	SER	SER	GLY	HIS	ILE	ILE	GLU	ARG	HIS	ASN	MET	PRO	VAL	ILE	LYS	THR	GLU	GLY	PRO	ALA	W11	T112	P113	L114	K117	L118	L222	T225	V226	R227	T228	K229	G230	L231	R232	S233	P234	I235	T236	M237	V240	E241	A242	L243

5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *TORSION ANGLE DYNAMICS SIMULATED ANNEALING*.

Of the 20 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *TARGET FUNCTION*.

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

Software name	Classification	Version
DYANA	refinement	1.5
XWINNMR	structure solution	2.5
NMRPIPE	structure solution	1999
NMRVIEW	structure solution	3.0
TALOS	structure solution	1999.019.15.47

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

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in each chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen atoms added and optimized by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes averaged over the ensemble.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1530	1577	1575	114±10
All	All	30600	31540	31500	2282

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 37.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:LEU:CD1	1:A:56:LEU:HD21	0.95	1.90	11	16
1:A:57:MET:O	1:A:61:LEU:HD12	0.92	1.65	3	5
1:A:113:MET:SD	1:A:124:LEU:HD21	0.91	2.05	15	6
1:A:44:MET:SD	1:A:48:LEU:HD21	0.90	2.05	13	1
1:A:81:ILE:HD13	1:A:103:LEU:HD12	0.90	1.41	13	3
1:A:108:GLY:O	1:A:114:VAL:HG13	0.89	1.68	16	4
1:A:123:LEU:HD23	1:A:123:LEU:O	0.88	1.68	20	2
1:A:165:VAL:HG23	1:A:219:ILE:HG21	0.88	1.42	13	13
1:A:222:VAL:HG12	1:A:226:GLN:OE1	0.87	1.69	13	1
1:A:167:PHE:CE2	1:A:171:LEU:HD12	0.87	2.05	8	12
1:A:165:VAL:CG2	1:A:223:LEU:HD11	0.86	2.00	18	11
1:A:26:VAL:HG13	1:A:36:THR:OG1	0.86	1.71	10	5
1:A:24:ASP:O	1:A:28:THR:HG23	0.86	1.69	1	13
1:A:113:MET:SD	1:A:123:LEU:HD13	0.85	2.11	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:ALA:HB3	1:A:113:MET:SD	0.84	2.13	8	12
1:A:120:GLN:OE1	1:A:123:LEU:HD22	0.83	1.73	14	1
1:A:105:ARG:O	1:A:113:MET:HE1	0.83	1.72	15	1
1:A:211:THR:HG23	1:A:212:LEU:HD23	0.83	1.51	20	2
1:A:43:LEU:HD13	1:A:56:LEU:HD11	0.82	1.49	9	4
1:A:211:THR:HG23	1:A:212:LEU:CD2	0.82	2.05	20	2
1:A:165:VAL:HG21	1:A:223:LEU:HD11	0.82	1.51	18	7
1:A:49:LEU:O	1:A:53:VAL:HG23	0.82	1.73	17	15
1:A:190:ILE:HD11	1:A:214:THR:C	0.82	1.95	13	16
1:A:156:ILE:HG22	1:A:167:PHE:CE1	0.81	2.09	14	18
1:A:36:THR:HG21	1:A:140:PHE:CE1	0.81	2.10	10	4
1:A:19:ILE:CD1	1:A:56:LEU:HD12	0.81	2.04	9	1
1:A:64:ALA:HB3	1:A:65:PRO:HD3	0.81	1.51	12	20
1:A:212:LEU:O	1:A:213:THR:HG23	0.80	1.75	18	18
1:A:204:LEU:HD21	1:A:225:ARG:HG3	0.80	1.54	13	2
1:A:43:LEU:HD11	1:A:56:LEU:HD21	0.80	1.53	10	17
1:A:157:THR:HG21	1:A:196:LYS:HE2	0.80	1.54	5	1
1:A:69:TRP:CH2	1:A:73:TRP:CE3	0.79	2.71	11	16
1:A:26:VAL:CG1	1:A:36:THR:HG23	0.79	2.07	12	13
1:A:123:LEU:C	1:A:123:LEU:HD23	0.79	1.98	14	4
1:A:165:VAL:HG22	1:A:219:ILE:CG2	0.79	2.08	10	3
1:A:167:PHE:CZ	1:A:171:LEU:HD12	0.79	2.12	19	9
1:A:186:ALA:HB3	1:A:187:PRO:HD3	0.78	1.55	9	20
1:A:49:LEU:HD21	1:A:121:ALA:HB2	0.78	1.55	12	11
1:A:81:ILE:HG13	1:A:101:THR:HG23	0.78	1.54	19	7
1:A:69:TRP:CZ3	1:A:73:TRP:CE3	0.77	2.72	11	14
1:A:165:VAL:HG23	1:A:219:ILE:CG2	0.77	2.09	19	13
1:A:153:TRP:CH2	1:A:180:LEU:HD11	0.77	2.15	2	19
1:A:113:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD21	0.76	1.57	13	3
1:A:164:PHE:CE2	1:A:219:ILE:HG23	0.76	2.15	6	17
1:A:214:THR:HG23	1:A:215:PRO:HD2	0.76	1.57	13	2
1:A:44:MET:HG2	1:A:133:THR:HG23	0.76	1.58	20	1
1:A:113:MET:SD	1:A:123:LEU:HD22	0.76	2.21	5	1
1:A:48:LEU:HD13	1:A:53:VAL:CG2	0.76	2.11	15	10
1:A:123:LEU:HD23	1:A:124:LEU:N	0.75	1.96	14	1
1:A:175:VAL:HG12	1:A:185:ARG:HG3	0.75	1.57	18	1
1:A:69:TRP:CH2	1:A:73:TRP:CD2	0.75	2.75	17	16
1:A:26:VAL:HG13	1:A:36:THR:HG23	0.75	1.57	3	12
1:A:113:MET:CE	1:A:124:LEU:HD21	0.75	2.12	16	9
1:A:61:LEU:HD23	1:A:140:PHE:CE1	0.73	2.18	6	1
1:A:153:TRP:CZ3	1:A:180:LEU:HD11	0.73	2.17	2	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:172:ILE:CD1	1:A:189:ILE:HG21	0.73	2.13	18	2
1:A:22:LEU:HD21	1:A:39:GLU:OE1	0.73	1.81	4	1
1:A:156:ILE:HG22	1:A:167:PHE:CZ	0.72	2.19	4	11
1:A:68:LEU:HB3	1:A:143:VAL:HG22	0.72	1.59	20	12
1:A:204:LEU:HD21	1:A:225:ARG:CB	0.72	2.14	5	13
1:A:77:LEU:CD2	1:A:106:LEU:HD13	0.72	2.15	6	18
1:A:48:LEU:HD13	1:A:53:VAL:HG23	0.72	1.60	15	15
1:A:92:ALA:HB1	1:A:101:THR:CG2	0.71	2.15	11	1
1:A:175:VAL:HG13	1:A:180:LEU:HD12	0.71	1.62	3	10
1:A:109:LEU:HA	1:A:114:VAL:HG22	0.71	1.63	1	10
1:A:19:ILE:HG21	1:A:56:LEU:HD12	0.71	1.63	11	3
1:A:204:LEU:HD11	1:A:225:ARG:HB3	0.70	1.63	15	10
1:A:113:MET:CE	1:A:124:LEU:HD11	0.70	2.16	2	1
1:A:189:ILE:CG2	1:A:193:PHE:CZ	0.70	2.75	16	2
1:A:204:LEU:CD2	1:A:221:TYR:CE2	0.70	2.74	15	3
1:A:204:LEU:HD23	1:A:221:TYR:CE2	0.70	2.22	15	2
1:A:157:THR:HG22	1:A:196:LYS:HD2	0.69	1.63	10	1
1:A:36:THR:O	1:A:40:VAL:HG23	0.69	1.87	4	16
1:A:29:LYS:CB	1:A:35:ILE:HG21	0.69	2.17	10	10
1:A:44:MET:SD	1:A:133:THR:HG23	0.69	2.27	15	3
1:A:110:ALA:HB3	1:A:113:MET:CE	0.69	2.18	3	1
1:A:204:LEU:HD21	1:A:225:ARG:CG	0.69	2.18	16	7
1:A:19:ILE:HD13	1:A:56:LEU:CD1	0.69	2.17	11	3
1:A:123:LEU:O	1:A:123:LEU:HD23	0.68	1.89	6	4
1:A:26:VAL:HG12	1:A:31:LEU:HD22	0.68	1.65	1	1
1:A:190:ILE:HD11	1:A:214:THR:CA	0.68	2.19	16	7
1:A:204:LEU:HD23	1:A:221:TYR:CZ	0.67	2.25	10	7
1:A:204:LEU:HD22	1:A:221:TYR:CE2	0.66	2.25	12	2
1:A:165:VAL:HG22	1:A:219:ILE:HG21	0.66	1.65	4	5
1:A:158:GLN:N	1:A:167:PHE:CZ	0.66	2.64	7	15
1:A:190:ILE:HD11	1:A:214:THR:O	0.66	1.90	10	7
1:A:37:MET:SD	1:A:137:LEU:HD23	0.66	2.30	15	3
1:A:189:ILE:HG22	1:A:193:PHE:CZ	0.66	2.26	20	6
1:A:36:THR:CG2	1:A:140:PHE:CZ	0.66	2.79	10	5
1:A:190:ILE:HD11	1:A:214:THR:N	0.65	2.07	16	9
1:A:184:ALA:O	1:A:188:VAL:HG23	0.65	1.90	9	3
1:A:153:TRP:HA	1:A:156:ILE:HD12	0.65	1.69	19	8
1:A:113:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD11	0.65	1.67	2	1
1:A:153:TRP:CZ3	1:A:180:LEU:CD1	0.65	2.80	18	10
1:A:77:LEU:HD22	1:A:106:LEU:HD13	0.65	1.69	14	6
1:A:15:GLU:CG	1:A:18:LEU:HD12	0.65	2.21	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:VAL:HG11	1:A:36:THR:HG23	0.64	1.69	12	5
1:A:31:LEU:HD21	1:A:140:PHE:CZ	0.64	2.27	4	2
1:A:57:MET:SD	1:A:61:LEU:HD11	0.64	2.32	3	3
1:A:61:LEU:HD11	1:A:65:PRO:HB2	0.64	1.69	4	1
1:A:209:PRO:HD2	1:A:212:LEU:HD11	0.64	1.70	12	5
1:A:120:GLN:HG2	1:A:124:LEU:HD21	0.63	1.69	7	1
1:A:61:LEU:HD22	1:A:140:PHE:CE1	0.63	2.29	19	3
1:A:81:ILE:HG13	1:A:103:LEU:HD13	0.63	1.68	4	2
1:A:43:LEU:HD12	1:A:56:LEU:HD21	0.63	1.70	11	2
1:A:26:VAL:HG12	1:A:31:LEU:HD12	0.63	1.70	10	2
1:A:15:GLU:HG3	1:A:18:LEU:HD12	0.63	1.70	1	1
1:A:49:LEU:HD11	1:A:121:ALA:HB2	0.62	1.70	17	1
1:A:185:ARG:O	1:A:189:ILE:HD12	0.62	1.93	9	1
1:A:15:GLU:CD	1:A:18:LEU:HD12	0.62	2.15	1	2
1:A:81:ILE:CG1	1:A:103:LEU:HD13	0.62	2.25	4	1
1:A:153:TRP:CH2	1:A:180:LEU:HD21	0.62	2.30	5	13
1:A:31:LEU:HD13	1:A:140:PHE:CE1	0.62	2.30	2	1
1:A:31:LEU:HD13	1:A:31:LEU:O	0.62	1.94	8	1
1:A:157:THR:C	1:A:167:PHE:CE2	0.62	2.74	18	2
1:A:157:THR:C	1:A:167:PHE:CE1	0.61	2.74	16	16
1:A:26:VAL:HG12	1:A:31:LEU:CD2	0.61	2.25	17	1
1:A:186:ALA:HB1	1:A:214:THR:OG1	0.61	1.95	16	1
1:A:157:THR:C	1:A:167:PHE:CZ	0.61	2.74	10	12
1:A:184:ALA:O	1:A:188:VAL:CG2	0.61	2.47	9	3
1:A:129:LEU:HA	1:A:132:ILE:HD12	0.61	1.73	18	4
1:A:197:SER:O	1:A:198:GLN:O	0.61	2.19	8	9
1:A:31:LEU:HD23	1:A:31:LEU:N	0.60	2.10	15	1
1:A:113:MET:CE	1:A:123:LEU:HD13	0.60	2.26	1	1
1:A:156:ILE:CD1	1:A:174:ALA:CB	0.60	2.78	9	9
1:A:208:ALA:HB2	1:A:221:TYR:CE2	0.60	2.30	15	1
1:A:19:ILE:HD13	1:A:56:LEU:HD12	0.60	1.71	9	4
1:A:92:ALA:HB1	1:A:101:THR:HG23	0.60	1.74	11	1
1:A:36:THR:CG2	1:A:140:PHE:CE1	0.60	2.84	10	3
1:A:22:LEU:HD23	1:A:39:GLU:CD	0.60	2.17	15	3
1:A:157:THR:O	1:A:167:PHE:CE1	0.60	2.55	17	9
1:A:41:GLU:HG3	1:A:137:LEU:HD22	0.59	1.74	15	4
1:A:109:LEU:HD12	1:A:114:VAL:HG11	0.59	1.71	5	1
1:A:168:ALA:O	1:A:172:ILE:HD12	0.59	1.96	14	4
1:A:113:MET:HG3	1:A:123:LEU:HD13	0.59	1.74	5	5
1:A:26:VAL:HG13	1:A:36:THR:CG2	0.59	2.27	7	4
1:A:31:LEU:CD1	1:A:61:LEU:HD23	0.59	2.27	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:212:LEU:O	1:A:212:LEU:HD12	0.59	1.97	12	1
1:A:61:LEU:CD2	1:A:140:PHE:CE1	0.59	2.86	6	1
1:A:124:LEU:O	1:A:125:ARG:CG	0.59	2.51	13	1
1:A:156:ILE:HG22	1:A:167:PHE:CE2	0.59	2.32	18	1
1:A:77:LEU:HD22	1:A:106:LEU:CD1	0.59	2.28	6	5
1:A:165:VAL:HG23	1:A:223:LEU:HD11	0.59	1.74	12	2
1:A:204:LEU:HD13	1:A:222:VAL:HG13	0.59	1.74	12	4
1:A:84:ALA:HB1	1:A:93:ASN:OD1	0.58	1.97	15	2
1:A:172:ILE:N	1:A:172:ILE:HD13	0.58	2.12	12	1
1:A:77:LEU:HB3	1:A:103:LEU:HD11	0.58	1.73	3	7
1:A:158:GLN:CG	1:A:167:PHE:CD2	0.58	2.86	19	1
1:A:26:VAL:HG22	1:A:36:THR:HA	0.58	1.73	9	6
1:A:48:LEU:CD1	1:A:53:VAL:HG23	0.58	2.28	16	3
1:A:19:ILE:HD11	1:A:56:LEU:HD12	0.58	1.75	9	1
1:A:60:ILE:HG22	1:A:61:LEU:HD23	0.58	1.75	20	1
1:A:49:LEU:HD23	1:A:49:LEU:N	0.58	2.14	18	2
1:A:110:ALA:O	1:A:114:VAL:HG23	0.58	1.98	4	5
1:A:204:LEU:CD2	1:A:221:TYR:CZ	0.58	2.86	19	4
1:A:55:ASN:O	1:A:59:VAL:HG23	0.58	1.98	13	3
1:A:123:LEU:HD23	1:A:123:LEU:C	0.57	2.19	5	2
1:A:106:LEU:HD22	1:A:132:ILE:CG1	0.57	2.29	5	4
1:A:181:PRO:HD2	1:A:184:ALA:HB3	0.57	1.75	1	11
1:A:175:VAL:HG21	1:A:189:ILE:HG13	0.57	1.77	16	7
1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:HD23	0.57	2.15	9	6
1:A:66:TYR:CE1	1:A:70:MET:SD	0.57	2.98	9	2
1:A:185:ARG:O	1:A:186:ALA:HB2	0.57	2.00	14	18
1:A:120:GLN:O	1:A:124:LEU:HD12	0.57	1.98	5	1
1:A:43:LEU:CD1	1:A:56:LEU:HD11	0.57	2.27	9	1
1:A:43:LEU:CD1	1:A:56:LEU:CD2	0.57	2.83	3	10
1:A:29:LYS:HB3	1:A:35:ILE:HG21	0.57	1.75	10	8
1:A:36:THR:HG21	1:A:140:PHE:CZ	0.56	2.34	10	3
1:A:78:GLN:HA	1:A:103:LEU:HD13	0.56	1.76	16	1
1:A:77:LEU:CD2	1:A:106:LEU:CD1	0.56	2.83	19	3
1:A:53:VAL:HG12	1:A:69:TRP:CH2	0.56	2.35	5	7
1:A:66:TYR:CZ	1:A:70:MET:SD	0.56	2.99	13	4
1:A:153:TRP:CH2	1:A:180:LEU:CD1	0.56	2.89	2	13
1:A:31:LEU:CD2	1:A:140:PHE:CZ	0.56	2.89	7	2
1:A:204:LEU:HD21	1:A:225:ARG:HG2	0.56	1.77	16	2
1:A:49:LEU:HD13	1:A:120:GLN:CD	0.56	2.20	20	1
1:A:223:LEU:HD23	1:A:226:GLN:OE1	0.55	2.01	13	1
1:A:22:LEU:HD21	1:A:39:GLU:HG3	0.55	1.79	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:MET:SD	1:A:69:TRP:CZ2	0.55	2.99	9	2
1:A:41:GLU:HG3	1:A:137:LEU:HD21	0.55	1.78	5	2
1:A:190:ILE:HG23	1:A:218:ILE:HG21	0.55	1.78	15	2
1:A:31:LEU:HD21	1:A:140:PHE:CE1	0.55	2.36	4	3
1:A:84:ALA:HB2	1:A:90:HIS:CB	0.55	2.31	19	4
1:A:31:LEU:O	1:A:31:LEU:HD13	0.55	2.01	6	1
1:A:201:ILE:HD12	1:A:222:VAL:HG11	0.55	1.76	19	1
1:A:164:PHE:O	1:A:168:ALA:HB2	0.55	2.01	18	2
1:A:50:PRO:O	1:A:54:THR:HG23	0.55	2.02	15	7
1:A:57:MET:O	1:A:61:LEU:N	0.55	2.38	6	6
1:A:78:GLN:HG2	1:A:103:LEU:HD22	0.55	1.79	16	1
1:A:31:LEU:HD11	1:A:140:PHE:HE1	0.55	1.61	6	1
1:A:175:VAL:HG11	1:A:185:ARG:HB3	0.54	1.78	9	1
1:A:205:ILE:O	1:A:208:ALA:HB3	0.54	2.03	1	18
1:A:39:GLU:O	1:A:42:ALA:HB3	0.54	2.01	16	15
1:A:209:PRO:HG2	1:A:212:LEU:HD11	0.54	1.77	19	1
1:A:153:TRP:CH2	1:A:180:LEU:CG	0.54	2.90	18	10
1:A:61:LEU:HD12	1:A:66:TYR:HA	0.54	1.78	16	1
1:A:113:MET:CG	1:A:123:LEU:HD13	0.54	2.32	3	3
1:A:212:LEU:O	1:A:213:THR:CG2	0.54	2.55	18	16
1:A:190:ILE:CD1	1:A:214:THR:N	0.54	2.70	16	5
1:A:31:LEU:HD11	1:A:140:PHE:CE1	0.54	2.38	6	1
1:A:48:LEU:HD22	1:A:52:ASP:OD1	0.54	2.03	16	1
1:A:15:GLU:OE2	1:A:18:LEU:CD1	0.54	2.55	19	2
1:A:209:PRO:HB2	1:A:211:THR:HG22	0.54	1.80	18	4
1:A:215:PRO:O	1:A:219:ILE:CG1	0.54	2.56	10	1
1:A:212:LEU:CD1	1:A:218:ILE:HD13	0.54	2.32	12	1
1:A:113:MET:CE	1:A:124:LEU:CD2	0.54	2.86	7	1
1:A:40:VAL:HG21	1:A:140:PHE:CE2	0.54	2.38	7	1
1:A:57:MET:SD	1:A:69:TRP:CE2	0.54	3.01	9	2
1:A:72:ALA:HB2	1:A:142:GLU:OE1	0.54	2.03	5	1
1:A:156:ILE:HD11	1:A:174:ALA:CB	0.54	2.33	9	6
1:A:156:ILE:CG2	1:A:167:PHE:CE1	0.54	2.91	10	2
1:A:175:VAL:HG13	1:A:180:LEU:CD1	0.54	2.33	12	6
1:A:81:ILE:CD1	1:A:101:THR:CG2	0.54	2.86	11	1
1:A:49:LEU:HD11	1:A:120:GLN:OE1	0.53	2.02	4	1
1:A:22:LEU:HD13	1:A:43:LEU:HD22	0.53	1.80	8	1
1:A:19:ILE:HG23	1:A:56:LEU:CD1	0.53	2.33	19	8
1:A:44:MET:SD	1:A:137:LEU:HD11	0.53	2.43	6	8
1:A:79:THR:O	1:A:83:ALA:HB2	0.53	2.03	12	6
1:A:190:ILE:CD1	1:A:213:THR:C	0.53	2.77	11	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:102:ASN:ND2	1:A:102:ASN:N	0.53	2.56	3	1
1:A:48:LEU:CD1	1:A:53:VAL:CG2	0.53	2.85	15	11
1:A:214:THR:HG22	1:A:215:PRO:HD2	0.53	1.79	4	1
1:A:204:LEU:HD11	1:A:225:ARG:CB	0.53	2.33	13	1
1:A:185:ARG:O	1:A:189:ILE:CD1	0.53	2.57	9	1
1:A:190:ILE:HD13	1:A:218:ILE:HG12	0.53	1.81	1	6
1:A:29:LYS:CG	1:A:35:ILE:HG21	0.53	2.33	3	7
1:A:44:MET:SD	1:A:137:LEU:CD1	0.53	2.97	6	17
1:A:109:LEU:HD12	1:A:114:VAL:HG13	0.53	1.81	3	2
1:A:165:VAL:CG2	1:A:219:ILE:CG2	0.53	2.86	10	1
1:A:211:THR:CG2	1:A:212:LEU:CD2	0.53	2.86	20	1
1:A:168:ALA:CB	1:A:193:PHE:CZ	0.53	2.92	13	3
1:A:22:LEU:HD13	1:A:22:LEU:O	0.53	2.04	16	1
1:A:22:LEU:HD21	1:A:39:GLU:CG	0.53	2.33	18	2
1:A:157:THR:O	1:A:167:PHE:CE2	0.53	2.62	18	1
1:A:185:ARG:O	1:A:189:ILE:CG1	0.53	2.57	9	1
1:A:19:ILE:CG2	1:A:56:LEU:CD1	0.52	2.87	14	3
1:A:110:ALA:HB3	1:A:113:MET:HB2	0.52	1.81	10	1
1:A:22:LEU:HD13	1:A:43:LEU:CD2	0.52	2.34	8	3
1:A:25:THR:O	1:A:29:LYS:CG	0.52	2.58	16	16
1:A:153:TRP:CH2	1:A:180:LEU:HG	0.52	2.40	9	5
1:A:167:PHE:CE2	1:A:171:LEU:CD1	0.52	2.89	8	1
1:A:109:LEU:CA	1:A:114:VAL:HG22	0.52	2.32	1	2
1:A:54:THR:CG2	1:A:73:TRP:CZ3	0.52	2.92	9	1
1:A:90:HIS:CB	1:A:93:ASN:OD1	0.52	2.58	12	2
1:A:182:PRO:O	1:A:183:SER:CB	0.52	2.57	9	13
1:A:171:LEU:HD11	1:A:192:CYS:HB3	0.52	1.82	15	5
1:A:79:THR:O	1:A:83:ALA:CB	0.52	2.58	12	6
1:A:44:MET:SD	1:A:137:LEU:HD12	0.52	2.45	7	3
1:A:68:LEU:N	1:A:68:LEU:HD12	0.52	2.20	16	5
1:A:40:VAL:HG22	1:A:60:ILE:HD13	0.52	1.82	19	1
1:A:158:GLN:HG3	1:A:167:PHE:CD2	0.52	2.40	19	1
1:A:92:ALA:CB	1:A:101:THR:CG2	0.51	2.89	11	1
1:A:64:ALA:HB3	1:A:65:PRO:CD	0.51	2.32	10	17
1:A:44:MET:SD	1:A:133:THR:CG2	0.51	2.99	15	3
1:A:64:ALA:N	1:A:65:PRO:CD	0.51	2.73	6	8
1:A:57:MET:O	1:A:61:LEU:CD2	0.51	2.58	19	2
1:A:40:VAL:CG1	1:A:44:MET:SD	0.51	2.99	14	12
1:A:26:VAL:CG1	1:A:31:LEU:HD22	0.51	2.35	2	2
1:A:44:MET:CE	1:A:57:MET:CE	0.51	2.88	2	3
1:A:194:ARG:O	1:A:194:ARG:CD	0.51	2.58	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:198:GLN:N	1:A:198:GLN:CD	0.51	2.64	1	1
1:A:156:ILE:HD11	1:A:174:ALA:HB2	0.51	1.83	7	2
1:A:80:VAL:HG22	1:A:90:HIS:HE1	0.51	1.65	16	1
1:A:57:MET:O	1:A:61:LEU:HD23	0.51	2.05	1	2
1:A:34:PRO:O	1:A:35:ILE:CG1	0.51	2.59	5	5
1:A:36:THR:O	1:A:40:VAL:CG2	0.51	2.59	10	5
1:A:80:VAL:HG13	1:A:90:HIS:NE2	0.51	2.20	20	1
1:A:57:MET:O	1:A:61:LEU:CB	0.51	2.58	6	3
1:A:25:THR:CG2	1:A:39:GLU:OE2	0.51	2.59	2	2
1:A:60:ILE:HB	1:A:61:LEU:HD23	0.51	1.83	11	2
1:A:34:PRO:O	1:A:35:ILE:CB	0.51	2.58	5	6
1:A:54:THR:CG2	1:A:70:MET:CE	0.51	2.89	19	1
1:A:158:GLN:HB2	1:A:167:PHE:CE2	0.50	2.42	10	12
1:A:201:ILE:CD1	1:A:222:VAL:HG11	0.50	2.36	19	2
1:A:63:PRO:O	1:A:66:TYR:CB	0.50	2.59	6	2
1:A:25:THR:HG22	1:A:39:GLU:CD	0.50	2.27	2	4
1:A:40:VAL:HG12	1:A:137:LEU:CD1	0.50	2.36	7	1
1:A:125:ARG:CD	1:A:128:GLU:OE1	0.50	2.59	16	1
1:A:84:ALA:HB2	1:A:90:HIS:HD2	0.50	1.65	20	1
1:A:158:GLN:HB2	1:A:167:PHE:CD2	0.50	2.42	16	2
1:A:61:LEU:HD22	1:A:140:PHE:CE2	0.50	2.40	1	1
1:A:31:LEU:HD13	1:A:140:PHE:CZ	0.50	2.41	2	1
1:A:29:LYS:O	1:A:33:SER:CB	0.50	2.59	7	6
1:A:15:GLU:O	1:A:19:ILE:CG1	0.50	2.59	18	3
1:A:66:TYR:OH	1:A:70:MET:CE	0.50	2.60	4	4
1:A:184:ALA:HB1	1:A:188:VAL:HG21	0.50	1.84	18	1
1:A:76:GLN:O	1:A:79:THR:HG22	0.50	2.06	12	1
1:A:66:TYR:CZ	1:A:70:MET:CE	0.50	2.94	4	1
1:A:106:LEU:HD21	1:A:128:GLU:HG2	0.50	1.84	19	1
1:A:109:LEU:O	1:A:109:LEU:CD1	0.50	2.60	20	2
1:A:58:ARG:HB2	1:A:66:TYR:CE1	0.50	2.42	3	3
1:A:172:ILE:CG2	1:A:176:GLU:OE2	0.50	2.60	6	2
1:A:60:ILE:HG21	1:A:140:PHE:HE2	0.50	1.67	5	1
1:A:31:LEU:CD2	1:A:140:PHE:CE1	0.50	2.94	7	1
1:A:57:MET:SD	1:A:61:LEU:HD21	0.50	2.46	19	2
1:A:202:GLN:HG3	1:A:203:GLN:N	0.49	2.21	20	1
1:A:41:GLU:O	1:A:45:SER:N	0.49	2.44	16	18
1:A:19:ILE:CG2	1:A:56:LEU:HD12	0.49	2.37	14	3
1:A:22:LEU:HD21	1:A:39:GLU:HG2	0.49	1.83	11	1
1:A:15:GLU:O	1:A:19:ILE:HD12	0.49	2.07	18	1
1:A:186:ALA:CA	1:A:215:PRO:HD3	0.49	2.36	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:153:TRP:CH2	1:A:180:LEU:CD2	0.49	2.95	5	5
1:A:81:ILE:HD11	1:A:106:LEU:HD12	0.49	1.84	10	4
1:A:106:LEU:HD22	1:A:132:ILE:HG12	0.49	1.85	5	1
1:A:32:ARG:CZ	1:A:144:ALA:O	0.49	2.59	1	1
1:A:22:LEU:HD13	1:A:43:LEU:HD23	0.49	1.83	2	1
1:A:49:LEU:N	1:A:49:LEU:HD23	0.49	2.21	20	1
1:A:110:ALA:CB	1:A:113:MET:SD	0.49	3.00	10	4
1:A:187:PRO:O	1:A:191:ASP:CB	0.49	2.60	1	3
1:A:120:GLN:O	1:A:124:LEU:CD1	0.49	2.59	5	1
1:A:60:ILE:HG21	1:A:140:PHE:CE2	0.49	2.42	5	2
1:A:203:GLN:O	1:A:207:ALA:CB	0.49	2.60	8	1
1:A:186:ALA:HB3	1:A:187:PRO:CD	0.49	2.33	18	10
1:A:168:ALA:HB1	1:A:193:PHE:CZ	0.49	2.41	13	2
1:A:92:ALA:HB1	1:A:101:THR:HG21	0.49	1.82	11	1
1:A:165:VAL:HG23	1:A:219:ILE:HG22	0.49	1.85	5	1
1:A:24:ASP:O	1:A:27:ARG:CG	0.49	2.60	18	1
1:A:180:LEU:HD11	1:A:188:VAL:HG11	0.49	1.84	9	1
1:A:168:ALA:O	1:A:172:ILE:CD1	0.49	2.60	14	3
1:A:62:GLY:C	1:A:65:PRO:HD2	0.49	2.28	15	5
1:A:110:ALA:HB3	1:A:113:MET:HE2	0.49	1.84	3	1
1:A:120:GLN:CD	1:A:124:LEU:HD11	0.49	2.28	17	1
1:A:54:THR:HG22	1:A:69:TRP:CH2	0.49	2.43	16	1
1:A:21:ARG:CG	1:A:22:LEU:N	0.49	2.75	1	2
1:A:153:TRP:HB2	1:A:171:LEU:HD21	0.49	1.85	4	4
1:A:109:LEU:CD1	1:A:109:LEU:O	0.49	2.60	2	1
1:A:80:VAL:HG12	1:A:81:ILE:HD12	0.49	1.83	12	1
1:A:29:LYS:CB	1:A:35:ILE:CG2	0.49	2.91	6	4
1:A:109:LEU:O	1:A:114:VAL:CG2	0.49	2.61	3	3
1:A:84:ALA:HB1	1:A:93:ASN:HB3	0.48	1.85	12	1
1:A:198:GLN:O	1:A:202:GLN:CB	0.48	2.61	3	3
1:A:158:GLN:OE1	1:A:167:PHE:CG	0.48	2.66	1	1
1:A:25:THR:HG22	1:A:39:GLU:OE1	0.48	2.08	2	3
1:A:165:VAL:CG1	1:A:166:ASP:N	0.48	2.76	9	6
1:A:157:THR:HG22	1:A:196:LYS:HD3	0.48	1.84	6	1
1:A:193:PHE:O	1:A:197:SER:CB	0.48	2.60	6	2
1:A:31:LEU:HD21	1:A:61:LEU:HD22	0.48	1.83	20	1
1:A:69:TRP:O	1:A:73:TRP:N	0.48	2.47	11	9
1:A:22:LEU:HD12	1:A:43:LEU:CD2	0.48	2.37	16	1
1:A:49:LEU:HD23	1:A:129:LEU:CD2	0.48	2.39	19	2
1:A:180:LEU:CD1	1:A:188:VAL:HG11	0.48	2.37	9	1
1:A:55:ASN:C	1:A:55:ASN:ND2	0.48	2.67	11	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:116:ASN:O	1:A:120:GLN:CB	0.48	2.62	12	6
1:A:211:THR:O	1:A:211:THR:CG2	0.48	2.62	12	1
1:A:25:THR:O	1:A:29:LYS:N	0.48	2.46	18	13
1:A:53:VAL:CG1	1:A:69:TRP:CZ2	0.48	2.96	20	6
1:A:49:LEU:CD1	1:A:117:PRO:CB	0.48	2.91	7	1
1:A:93:ASN:O	1:A:93:ASN:OD1	0.48	2.32	7	2
1:A:157:THR:HG23	1:A:196:LYS:HD2	0.48	1.86	11	1
1:A:102:ASN:HD22	1:A:102:ASN:N	0.48	2.05	3	1
1:A:77:LEU:HD21	1:A:106:LEU:HD13	0.48	1.85	9	1
1:A:205:ILE:O	1:A:208:ALA:CB	0.48	2.62	17	7
1:A:44:MET:HB3	1:A:133:THR:HG22	0.48	1.85	16	3
1:A:48:LEU:HD12	1:A:48:LEU:H	0.48	1.69	8	1
1:A:22:LEU:HD22	1:A:43:LEU:HD23	0.48	1.86	20	1
1:A:212:LEU:HD13	1:A:218:ILE:HD12	0.48	1.86	3	3
1:A:189:ILE:HD12	1:A:215:PRO:HG3	0.48	1.84	3	2
1:A:213:THR:O	1:A:213:THR:OG1	0.48	2.30	11	1
1:A:158:GLN:HG2	1:A:167:PHE:CD2	0.48	2.44	9	2
1:A:214:THR:HG1	1:A:217:GLU:CD	0.47	2.12	15	1
1:A:158:GLN:HG2	1:A:167:PHE:CD1	0.47	2.44	12	1
1:A:110:ALA:HB3	1:A:113:MET:HE3	0.47	1.84	3	1
1:A:25:THR:HG22	1:A:39:GLU:OE2	0.47	2.09	2	1
1:A:193:PHE:N	1:A:193:PHE:CD1	0.47	2.81	17	5
1:A:49:LEU:CD1	1:A:117:PRO:CA	0.47	2.91	7	1
1:A:44:MET:O	1:A:46:SER:N	0.47	2.48	6	15
1:A:53:VAL:CG1	1:A:69:TRP:CH2	0.47	2.98	5	1
1:A:57:MET:SD	1:A:69:TRP:NE1	0.47	2.87	16	7
1:A:57:MET:HG2	1:A:69:TRP:CE2	0.47	2.44	9	8
1:A:193:PHE:CD1	1:A:193:PHE:N	0.47	2.80	9	2
1:A:16:PRO:O	1:A:20:THR:N	0.47	2.46	2	6
1:A:171:LEU:O	1:A:171:LEU:HD23	0.47	2.10	9	1
1:A:55:ASN:CG	1:A:56:LEU:N	0.47	2.68	6	6
1:A:120:GLN:CG	1:A:124:LEU:HD11	0.47	2.39	1	5
1:A:152:PRO:HD2	1:A:153:TRP:CE3	0.47	2.45	3	6
1:A:120:GLN:NE2	1:A:124:LEU:HD11	0.47	2.25	4	1
1:A:49:LEU:N	1:A:52:ASP:OD2	0.47	2.47	15	2
1:A:164:PHE:CE2	1:A:222:VAL:HG11	0.47	2.45	15	1
1:A:200:ASP:CG	1:A:201:ILE:N	0.47	2.68	11	1
1:A:153:TRP:CZ3	1:A:180:LEU:HG	0.47	2.44	9	3
1:A:172:ILE:HD11	1:A:189:ILE:HG21	0.47	1.86	18	1
1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:HD23	0.47	2.25	2	1
1:A:194:ARG:HB3	1:A:205:ILE:HG21	0.47	1.86	18	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:LEU:CD2	1:A:39:GLU:CD	0.47	2.83	7	1
1:A:53:VAL:HG12	1:A:69:TRP:CZ2	0.47	2.44	7	2
1:A:101:THR:C	1:A:102:ASN:ND2	0.47	2.69	3	1
1:A:218:ILE:CD1	1:A:218:ILE:N	0.47	2.78	8	1
1:A:51:HIS:O	1:A:54:THR:OG1	0.47	2.31	16	10
1:A:22:LEU:CD2	1:A:39:GLU:OE1	0.47	2.58	4	1
1:A:49:LEU:CD1	1:A:120:GLN:OE1	0.47	2.63	4	1
1:A:214:THR:CG2	1:A:215:PRO:HD2	0.47	2.36	13	2
1:A:113:MET:HG2	1:A:123:LEU:HD13	0.47	1.86	3	1
1:A:186:ALA:N	1:A:187:PRO:CD	0.46	2.79	16	18
1:A:57:MET:HG2	1:A:69:TRP:CD1	0.46	2.44	4	4
1:A:61:LEU:HD23	1:A:140:PHE:CD1	0.46	2.44	6	1
1:A:44:MET:O	1:A:45:SER:C	0.46	2.53	5	20
1:A:18:LEU:O	1:A:21:ARG:CG	0.46	2.64	3	1
1:A:68:LEU:N	1:A:68:LEU:CD1	0.46	2.79	16	1
1:A:91:PRO:O	1:A:125:ARG:NH2	0.46	2.48	19	1
1:A:124:LEU:O	1:A:125:ARG:CB	0.46	2.63	13	1
1:A:123:LEU:CD2	1:A:123:LEU:O	0.46	2.63	18	1
1:A:61:LEU:HB2	1:A:140:PHE:CE2	0.46	2.46	16	1
1:A:110:ALA:HB3	1:A:113:MET:CB	0.46	2.40	10	1
1:A:54:THR:HG22	1:A:70:MET:CE	0.46	2.40	9	2
1:A:209:PRO:HD3	1:A:221:TYR:CE1	0.46	2.45	12	1
1:A:26:VAL:HG12	1:A:31:LEU:CD1	0.46	2.40	11	1
1:A:171:LEU:HD11	1:A:192:CYS:CB	0.46	2.41	9	1
1:A:157:THR:HG23	1:A:196:LYS:HG2	0.46	1.86	20	1
1:A:204:LEU:HD21	1:A:225:ARG:HB2	0.46	1.88	10	1
1:A:90:HIS:O	1:A:93:ASN:ND2	0.46	2.49	5	6
1:A:164:PHE:O	1:A:168:ALA:CB	0.46	2.63	18	1
1:A:194:ARG:O	1:A:202:GLN:NE2	0.46	2.49	7	3
1:A:152:PRO:HG2	1:A:153:TRP:CE3	0.46	2.46	1	5
1:A:49:LEU:HD21	1:A:121:ALA:CB	0.46	2.41	16	3
1:A:212:LEU:CB	1:A:218:ILE:CD1	0.46	2.93	18	1
1:A:34:PRO:O	1:A:37:MET:N	0.46	2.49	9	3
1:A:164:PHE:CD1	1:A:164:PHE:C	0.46	2.89	3	1
1:A:106:LEU:HD21	1:A:128:GLU:HB2	0.46	1.86	16	1
1:A:23:ALA:HB2	1:A:60:ILE:HG12	0.46	1.88	18	2
1:A:172:ILE:HD13	1:A:172:ILE:N	0.46	2.25	18	1
1:A:54:THR:HG22	1:A:70:MET:HE1	0.46	1.87	9	1
1:A:68:LEU:CB	1:A:143:VAL:HG22	0.46	2.38	20	2
1:A:191:ASP:O	1:A:195:GLN:N	0.46	2.49	9	5
1:A:44:MET:O	1:A:46:SER:O	0.46	2.34	15	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:ALA:HB3	1:A:90:HIS:NE2	0.46	2.25	16	2
1:A:55:ASN:ND2	1:A:55:ASN:C	0.46	2.69	6	2
1:A:57:MET:HG3	1:A:69:TRP:CZ2	0.46	2.46	14	3
1:A:84:ALA:HA	1:A:90:HIS:CD2	0.46	2.46	15	4
1:A:22:LEU:HD23	1:A:39:GLU:HG2	0.46	1.87	13	1
1:A:123:LEU:O	1:A:123:LEU:CD2	0.46	2.64	8	2
1:A:120:GLN:C	1:A:120:GLN:NE2	0.46	2.69	14	1
1:A:124:LEU:HD12	1:A:124:LEU:O	0.46	2.10	14	1
1:A:113:MET:O	1:A:120:GLN:NE2	0.46	2.49	20	2
1:A:60:ILE:CG2	1:A:61:LEU:HD23	0.46	2.41	20	1
1:A:93:ASN:OD1	1:A:93:ASN:O	0.46	2.33	8	2
1:A:76:GLN:OE1	1:A:138:GLN:CB	0.46	2.64	9	2
1:A:57:MET:CG	1:A:69:TRP:CE2	0.46	2.99	9	1
1:A:110:ALA:HB3	1:A:113:MET:CG	0.45	2.41	16	2
1:A:83:ALA:HB3	1:A:90:HIS:CD2	0.45	2.46	8	3
1:A:184:ALA:HB1	1:A:188:VAL:CG2	0.45	2.41	18	1
1:A:158:GLN:OE1	1:A:159:GLY:N	0.45	2.49	9	1
1:A:123:LEU:C	1:A:123:LEU:CD2	0.45	2.78	16	4
1:A:158:GLN:NE2	1:A:159:GLY:O	0.45	2.50	9	3
1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CD2	0.45	2.79	15	1
1:A:81:ILE:CD1	1:A:101:THR:HG22	0.45	2.40	11	1
1:A:158:GLN:HB3	1:A:167:PHE:CD2	0.45	2.45	14	1
1:A:90:HIS:O	1:A:93:ASN:CG	0.45	2.55	11	7
1:A:74:GLY:O	1:A:78:GLN:NE2	0.45	2.49	4	4
1:A:52:ASP:OD1	1:A:53:VAL:N	0.45	2.49	4	3
1:A:106:LEU:HD21	1:A:128:GLU:OE1	0.45	2.11	6	1
1:A:78:GLN:HG3	1:A:103:LEU:HD21	0.45	1.88	12	1
1:A:217:GLU:N	1:A:217:GLU:OE1	0.45	2.50	18	2
1:A:164:PHE:CE2	1:A:222:VAL:CG1	0.45	3.00	17	2
1:A:209:PRO:CG	1:A:212:LEU:HD11	0.45	2.41	19	1
1:A:44:MET:C	1:A:46:SER:N	0.45	2.70	10	15
1:A:81:ILE:CG1	1:A:103:LEU:CD1	0.45	2.94	10	1
1:A:221:TYR:C	1:A:221:TYR:CD1	0.45	2.90	19	1
1:A:223:LEU:HD23	1:A:226:GLN:NE2	0.45	2.26	12	1
1:A:196:LYS:O	1:A:197:SER:C	0.45	2.53	1	9
1:A:203:GLN:NE2	1:A:203:GLN:O	0.45	2.49	7	2
1:A:168:ALA:O	1:A:172:ILE:CG1	0.45	2.65	14	2
1:A:26:VAL:O	1:A:30:GLY:N	0.45	2.49	4	7
1:A:212:LEU:HB2	1:A:218:ILE:CD1	0.45	2.42	17	3
1:A:61:LEU:HD11	1:A:65:PRO:C	0.45	2.32	16	1
1:A:72:ALA:HB2	1:A:142:GLU:OE2	0.45	2.12	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:216:GLY:O	1:A:220:LYS:CB	0.45	2.65	15	1
1:A:109:LEU:O	1:A:109:LEU:HD12	0.45	2.11	11	1
1:A:113:MET:SD	1:A:123:LEU:CD1	0.45	3.03	1	1
1:A:93:ASN:OD1	1:A:93:ASN:C	0.45	2.55	11	5
1:A:189:ILE:HG23	1:A:193:PHE:CZ	0.45	2.44	16	1
1:A:40:VAL:CG1	1:A:137:LEU:HD21	0.45	2.42	6	1
1:A:83:ALA:CB	1:A:90:HIS:CD2	0.45	2.99	19	1
1:A:194:ARG:CA	1:A:202:GLN:OE1	0.45	2.64	13	1
1:A:93:ASN:O	1:A:125:ARG:NH1	0.45	2.50	11	1
1:A:203:GLN:O	1:A:203:GLN:NE2	0.45	2.50	2	1
1:A:209:PRO:O	1:A:211:THR:N	0.44	2.49	17	1
1:A:91:PRO:O	1:A:125:ARG:NH1	0.44	2.50	6	1
1:A:72:ALA:CB	1:A:142:GLU:OE2	0.44	2.65	6	1
1:A:88:PRO:O	1:A:89:ARG:CG	0.44	2.65	18	1
1:A:57:MET:C	1:A:61:LEU:HD12	0.44	2.32	14	1
1:A:57:MET:HG3	1:A:61:LEU:HD21	0.44	1.89	9	1
1:A:208:ALA:HA	1:A:221:TYR:CE2	0.44	2.47	7	2
1:A:57:MET:HG2	1:A:69:TRP:CZ2	0.44	2.48	18	1
1:A:49:LEU:HD12	1:A:117:PRO:CB	0.44	2.43	7	1
1:A:113:MET:SD	1:A:124:LEU:CD2	0.44	3.05	19	2
1:A:205:ILE:HG13	1:A:222:VAL:HG21	0.44	1.89	11	1
1:A:81:ILE:CG1	1:A:101:THR:HG23	0.44	2.42	14	1
1:A:171:LEU:C	1:A:171:LEU:HD23	0.44	2.32	9	1
1:A:61:LEU:CD1	1:A:65:PRO:C	0.44	2.86	4	2
1:A:92:ALA:HB1	1:A:128:GLU:OE1	0.44	2.12	6	1
1:A:157:THR:HG23	1:A:196:LYS:HD3	0.44	1.90	4	1
1:A:171:LEU:O	1:A:175:VAL:HG23	0.44	2.13	12	2
1:A:26:VAL:HG22	1:A:36:THR:HG23	0.44	1.89	20	1
1:A:121:ALA:O	1:A:124:LEU:O	0.44	2.36	19	2
1:A:61:LEU:CD1	1:A:65:PRO:O	0.44	2.65	6	1
1:A:54:THR:CG2	1:A:70:MET:HE3	0.44	2.43	19	1
1:A:172:ILE:HG22	1:A:176:GLU:OE1	0.44	2.13	3	1
1:A:109:LEU:C	1:A:114:VAL:CG2	0.44	2.86	1	1
1:A:15:GLU:CB	1:A:18:LEU:HD12	0.44	2.42	8	1
1:A:80:VAL:HG13	1:A:90:HIS:CE1	0.44	2.47	6	1
1:A:176:GLU:OE1	1:A:185:ARG:NH2	0.44	2.50	11	1
1:A:93:ASN:C	1:A:93:ASN:OD1	0.44	2.55	9	4
1:A:201:ILE:CD1	1:A:222:VAL:CG1	0.44	2.95	19	2
1:A:66:TYR:CE1	1:A:70:MET:HE3	0.44	2.47	4	1
1:A:69:TRP:NE1	1:A:139:ALA:HB3	0.44	2.27	5	1
1:A:61:LEU:HD23	1:A:140:PHE:CE2	0.44	2.47	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:61:LEU:HD12	1:A:65:PRO:O	0.44	2.12	13	2
1:A:34:PRO:C	1:A:36:THR:N	0.44	2.71	9	4
1:A:217:GLU:O	1:A:221:TYR:CB	0.44	2.66	11	1
1:A:158:GLN:OE1	1:A:167:PHE:CD2	0.44	2.71	20	2
1:A:58:ARG:O	1:A:61:LEU:O	0.44	2.36	13	18
1:A:16:PRO:O	1:A:20:THR:CB	0.44	2.66	2	2
1:A:152:PRO:O	1:A:155:ASP:N	0.43	2.50	9	7
1:A:158:GLN:HA	1:A:167:PHE:CE1	0.43	2.47	7	1
1:A:158:GLN:N	1:A:167:PHE:CE1	0.43	2.86	7	2
1:A:25:THR:O	1:A:29:LYS:CB	0.43	2.66	2	6
1:A:209:PRO:HD2	1:A:212:LEU:CD1	0.43	2.43	17	1
1:A:219:ILE:N	1:A:219:ILE:HD13	0.43	2.28	10	1
1:A:113:MET:SD	1:A:124:LEU:HD23	0.43	2.53	19	1
1:A:80:VAL:O	1:A:84:ALA:CB	0.43	2.66	11	1
1:A:44:MET:CG	1:A:133:THR:HG23	0.43	2.38	20	1
1:A:209:PRO:CD	1:A:212:LEU:HD11	0.43	2.43	19	1
1:A:27:ARG:HG3	1:A:28:THR:HG23	0.43	1.89	18	1
1:A:221:TYR:CD1	1:A:221:TYR:C	0.43	2.91	8	1
1:A:61:LEU:HD23	1:A:61:LEU:N	0.43	2.28	7	1
1:A:159:GLY:N	1:A:162:GLU:OE2	0.43	2.51	17	1
1:A:17:LYS:CG	1:A:18:LEU:N	0.43	2.81	17	3
1:A:81:ILE:CG1	1:A:103:LEU:HD12	0.43	2.42	9	3
1:A:156:ILE:HG22	1:A:167:PHE:HE1	0.43	1.63	2	1
1:A:57:MET:HG3	1:A:69:TRP:CE2	0.43	2.49	20	6
1:A:203:GLN:OE1	1:A:206:ARG:NH1	0.43	2.50	20	1
1:A:194:ARG:HB3	1:A:205:ILE:CG2	0.43	2.43	20	4
1:A:52:ASP:O	1:A:55:ASN:OD1	0.43	2.37	7	7
1:A:165:VAL:O	1:A:169:ASN:ND2	0.43	2.51	16	2
1:A:212:LEU:CB	1:A:217:GLU:OE1	0.43	2.66	10	1
1:A:40:VAL:HG12	1:A:137:LEU:HD21	0.43	1.90	11	3
1:A:49:LEU:HD13	1:A:120:GLN:OE1	0.43	2.13	15	1
1:A:187:PRO:O	1:A:191:ASP:N	0.43	2.49	11	1
1:A:175:VAL:HG12	1:A:185:ARG:CG	0.43	2.37	18	1
1:A:21:ARG:HG2	1:A:22:LEU:N	0.43	2.27	1	1
1:A:196:LYS:O	1:A:197:SER:O	0.43	2.36	7	7
1:A:58:ARG:HB2	1:A:66:TYR:CZ	0.43	2.49	6	1
1:A:132:ILE:O	1:A:136:ALA:HB2	0.43	2.13	14	1
1:A:202:GLN:O	1:A:202:GLN:OE1	0.43	2.37	20	1
1:A:29:LYS:HB3	1:A:35:ILE:CG2	0.43	2.44	16	5
1:A:84:ALA:HB2	1:A:90:HIS:HB2	0.43	1.91	19	1
1:A:125:ARG:O	1:A:128:GLU:OE2	0.43	2.37	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:184:ALA:O	1:A:188:VAL:CB	0.43	2.67	9	1
1:A:90:HIS:O	1:A:93:ASN:OD1	0.43	2.37	8	2
1:A:22:LEU:CD1	1:A:43:LEU:CD2	0.43	2.97	16	1
1:A:81:ILE:HG12	1:A:103:LEU:CD1	0.43	2.44	10	1
1:A:61:LEU:O	1:A:62:GLY:O	0.43	2.37	13	8
1:A:193:PHE:HB3	1:A:205:ILE:HD13	0.43	1.90	4	2
1:A:65:PRO:HA	1:A:68:LEU:HD13	0.43	1.91	5	1
1:A:203:GLN:NE2	1:A:207:ALA:HB2	0.43	2.29	3	2
1:A:197:SER:C	1:A:198:GLN:HG2	0.43	2.33	8	1
1:A:112:GLY:O	1:A:116:ASN:O	0.43	2.36	14	1
1:A:48:LEU:HD12	1:A:48:LEU:N	0.43	2.28	8	1
1:A:171:LEU:HD21	1:A:192:CYS:SG	0.42	2.54	12	1
1:A:158:GLN:HB3	1:A:167:PHE:CG	0.42	2.49	14	1
1:A:185:ARG:O	1:A:186:ALA:CB	0.42	2.66	14	1
1:A:158:GLN:NE2	1:A:158:GLN:HA	0.42	2.30	2	1
1:A:133:THR:O	1:A:137:LEU:HD12	0.42	2.14	16	2
1:A:175:VAL:CG1	1:A:185:ARG:HG2	0.42	2.45	9	1
1:A:172:ILE:HG12	1:A:189:ILE:HD13	0.42	1.91	19	2
1:A:40:VAL:HG12	1:A:44:MET:SD	0.42	2.54	5	2
1:A:125:ARG:O	1:A:128:GLU:OE1	0.42	2.37	15	1
1:A:169:ASN:HA	1:A:172:ILE:HG12	0.42	1.90	12	1
1:A:48:LEU:CD1	1:A:133:THR:OG1	0.42	2.68	7	1
1:A:64:ALA:CB	1:A:65:PRO:HD3	0.42	2.35	10	4
1:A:120:GLN:HG3	1:A:124:LEU:HD11	0.42	1.91	6	1
1:A:66:TYR:OH	1:A:70:MET:HE1	0.42	2.14	4	1
1:A:158:GLN:OE1	1:A:159:GLY:O	0.42	2.38	2	2
1:A:113:MET:CG	1:A:120:GLN:HA	0.42	2.44	5	1
1:A:202:GLN:O	1:A:202:GLN:NE2	0.42	2.52	5	1
1:A:157:THR:HG22	1:A:196:LYS:HG3	0.42	1.91	9	1
1:A:29:LYS:CD	1:A:35:ILE:HG21	0.42	2.44	4	2
1:A:31:LEU:HD21	1:A:140:PHE:HZ	0.42	1.75	16	1
1:A:104:ASP:HA	1:A:107:LYS:CG	0.42	2.45	6	1
1:A:19:ILE:HG23	1:A:56:LEU:HD13	0.42	1.92	19	1
1:A:66:TYR:CD1	1:A:66:TYR:C	0.42	2.93	19	1
1:A:64:ALA:CB	1:A:65:PRO:CD	0.42	2.97	13	3
1:A:81:ILE:HG13	1:A:103:LEU:CD1	0.42	2.45	18	1
1:A:112:GLY:O	1:A:116:ASN:CG	0.42	2.58	14	1
1:A:17:LYS:HG3	1:A:18:LEU:N	0.42	2.30	20	1
1:A:44:MET:HB3	1:A:133:THR:CG2	0.42	2.45	7	1
1:A:106:LEU:CD2	1:A:128:GLU:HG3	0.42	2.45	10	1
1:A:208:ALA:HA	1:A:221:TYR:CZ	0.42	2.50	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:MET:HG3	1:A:61:LEU:CD1	0.42	2.45	15	1
1:A:41:GLU:HG3	1:A:137:LEU:CD2	0.42	2.45	3	3
1:A:203:GLN:O	1:A:207:ALA:HB3	0.42	2.15	8	1
1:A:80:VAL:O	1:A:84:ALA:HB2	0.42	2.15	11	1
1:A:132:ILE:O	1:A:136:ALA:CB	0.42	2.67	14	1
1:A:113:MET:HA	1:A:120:GLN:CB	0.42	2.44	20	2
1:A:68:LEU:C	1:A:143:VAL:HG21	0.42	2.35	7	1
1:A:25:THR:CG2	1:A:39:GLU:OE1	0.42	2.68	17	1
1:A:197:SER:O	1:A:198:GLN:C	0.42	2.57	19	2
1:A:198:GLN:OE1	1:A:198:GLN:N	0.42	2.53	1	1
1:A:108:GLY:HA2	1:A:113:MET:HE2	0.42	1.91	8	1
1:A:197:SER:O	1:A:201:ILE:HB	0.42	2.14	8	1
1:A:163:SER:O	1:A:167:PHE:CB	0.41	2.68	5	1
1:A:201:ILE:O	1:A:205:ILE:HD12	0.41	2.15	8	1
1:A:204:LEU:HD23	1:A:221:TYR:OH	0.41	2.14	19	1
1:A:78:GLN:HG3	1:A:103:LEU:CD2	0.41	2.45	12	1
1:A:213:THR:HA	1:A:218:ILE:HD11	0.41	1.92	11	1
1:A:80:VAL:HG11	1:A:106:LEU:HD11	0.41	1.92	18	1
1:A:113:MET:SD	1:A:120:GLN:CG	0.41	3.08	15	2
1:A:62:GLY:O	1:A:66:TYR:CB	0.41	2.68	16	1
1:A:189:ILE:O	1:A:193:PHE:CD1	0.41	2.72	6	1
1:A:19:ILE:O	1:A:23:ALA:CB	0.41	2.69	15	2
1:A:57:MET:HG3	1:A:61:LEU:HD11	0.41	1.91	15	1
1:A:117:PRO:O	1:A:120:GLN:CG	0.41	2.68	5	1
1:A:199:PRO:O	1:A:203:GLN:N	0.41	2.45	17	3
1:A:93:ASN:OD1	1:A:100:ARG:N	0.41	2.52	3	1
1:A:26:VAL:HG23	1:A:39:GLU:OE1	0.41	2.15	2	1
1:A:35:ILE:HG23	1:A:39:GLU:OE2	0.41	2.15	2	1
1:A:184:ALA:O	1:A:188:VAL:HB	0.41	2.15	9	1
1:A:110:ALA:HB3	1:A:113:MET:HG3	0.41	1.91	16	1
1:A:44:MET:HG2	1:A:133:THR:CG2	0.41	2.46	16	1
1:A:215:PRO:C	1:A:219:ILE:HD12	0.41	2.36	16	1
1:A:36:THR:HG22	1:A:140:PHE:CE2	0.41	2.51	6	1
1:A:158:GLN:CA	1:A:158:GLN:NE2	0.41	2.83	2	1
1:A:32:ARG:CG	1:A:144:ALA:O	0.41	2.68	9	1
1:A:193:PHE:O	1:A:197:SER:OG	0.41	2.39	20	2
1:A:113:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD22	0.41	1.91	7	1
1:A:22:LEU:CD2	1:A:39:GLU:CG	0.41	2.98	6	1
1:A:158:GLN:CD	1:A:159:GLY:N	0.41	2.74	9	1
1:A:184:ALA:C	1:A:187:PRO:HD2	0.41	2.35	9	1
1:A:197:SER:OG	1:A:201:ILE:HG22	0.41	2.15	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:PRO:O	1:A:35:ILE:HB	0.41	2.15	20	1
1:A:84:ALA:O	1:A:87:ASP:O	0.41	2.37	20	3
1:A:36:THR:CG2	1:A:140:PHE:CE2	0.41	3.03	6	1
1:A:195:GLN:NE2	1:A:195:GLN:O	0.41	2.53	6	1
1:A:84:ALA:CB	1:A:90:HIS:HB2	0.41	2.45	13	2
1:A:209:PRO:HD2	1:A:212:LEU:HD12	0.41	1.93	20	2
1:A:80:VAL:HA	1:A:90:HIS:CE1	0.41	2.50	16	1
1:A:199:PRO:O	1:A:203:GLN:CB	0.41	2.69	10	1
1:A:212:LEU:HD13	1:A:218:ILE:HD13	0.41	1.93	12	1
1:A:81:ILE:CD1	1:A:103:LEU:HD12	0.41	2.45	14	1
1:A:125:ARG:CB	1:A:126:PRO:CD	0.41	2.99	14	1
1:A:141:ARG:O	1:A:141:ARG:HG2	0.41	2.15	14	1
1:A:202:GLN:C	1:A:202:GLN:OE1	0.41	2.59	20	1
1:A:120:GLN:HG3	1:A:121:ALA:N	0.41	2.31	20	1
1:A:172:ILE:CG1	1:A:189:ILE:HG21	0.41	2.46	20	1
1:A:60:ILE:HG22	1:A:61:LEU:CD2	0.41	2.45	20	1
1:A:26:VAL:CG1	1:A:31:LEU:CD2	0.41	2.99	17	1
1:A:103:LEU:O	1:A:107:LYS:CD	0.41	2.69	16	1
1:A:124:LEU:O	1:A:125:ARG:O	0.41	2.39	6	2
1:A:212:LEU:CD1	1:A:218:ILE:CD1	0.41	2.98	12	1
1:A:194:ARG:HG2	1:A:205:ILE:CG2	0.41	2.46	12	1
1:A:213:THR:HA	1:A:218:ILE:CD1	0.41	2.46	11	1
1:A:37:MET:CE	1:A:140:PHE:CD1	0.41	3.04	8	1
1:A:186:ALA:CB	1:A:187:PRO:HD3	0.41	2.41	8	1
1:A:34:PRO:O	1:A:36:THR:N	0.41	2.54	4	2
1:A:92:ALA:O	1:A:128:GLU:CG	0.41	2.68	5	1
1:A:157:THR:CG2	1:A:196:LYS:HG2	0.41	2.46	5	1
1:A:222:VAL:C	1:A:226:GLN:OE1	0.41	2.59	13	1
1:A:54:THR:HB	1:A:70:MET:CE	0.41	2.45	13	1
1:A:77:LEU:C	1:A:103:LEU:HD11	0.41	2.36	14	1
1:A:113:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD22	0.40	1.92	20	1
1:A:164:PHE:C	1:A:164:PHE:CD1	0.40	2.95	20	1
1:A:214:THR:OG1	1:A:217:GLU:CD	0.40	2.60	2	2
1:A:23:ALA:CB	1:A:60:ILE:HG12	0.40	2.45	17	1
1:A:62:GLY:O	1:A:66:TYR:HB2	0.40	2.16	15	1
1:A:194:ARG:C	1:A:202:GLN:OE1	0.40	2.60	12	1
1:A:77:LEU:HA	1:A:77:LEU:HD23	0.40	1.81	3	1
1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CD2	0.40	2.83	9	1
1:A:108:GLY:CA	1:A:120:GLN:OE1	0.40	2.70	17	1
1:A:113:MET:HG2	1:A:123:LEU:HD12	0.40	1.92	4	1
1:A:81:ILE:HD12	1:A:101:THR:CG2	0.40	2.46	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:LEU:HD23	1:A:143:VAL:HG13	0.40	1.94	11	1
1:A:194:ARG:O	1:A:202:GLN:OE1	0.40	2.40	13	1
1:A:15:GLU:O	1:A:19:ILE:CD1	0.40	2.69	18	1
1:A:172:ILE:HG22	1:A:176:GLU:OE2	0.40	2.16	1	1
1:A:113:MET:HE3	1:A:124:LEU:CD1	0.40	2.44	2	1
1:A:74:GLY:O	1:A:78:GLN:OE1	0.40	2.40	2	1
1:A:182:PRO:HA	1:A:185:ARG:NH2	0.40	2.32	9	1
1:A:175:VAL:HG12	1:A:185:ARG:HG2	0.40	1.93	7	1
1:A:191:ASP:OD1	1:A:191:ASP:C	0.40	2.60	17	1
1:A:124:LEU:O	1:A:125:ARG:C	0.40	2.59	6	1
1:A:208:ALA:CB	1:A:221:TYR:CE2	0.40	3.02	15	1
1:A:87:ASP:O	1:A:87:ASP:OD1	0.40	2.40	12	1
1:A:84:ALA:CB	1:A:90:HIS:CB	0.40	2.99	13	1
1:A:19:ILE:HG22	1:A:59:VAL:HG11	0.40	1.92	9	1
1:A:155:ASP:C	1:A:155:ASP:OD1	0.40	2.60	20	1
1:A:40:VAL:HG12	1:A:137:LEU:HD11	0.40	1.91	7	1
1:A:188:VAL:O	1:A:192:CYS:SG	0.40	2.79	19	1
1:A:52:ASP:OD1	1:A:52:ASP:C	0.40	2.59	15	1
1:A:20:THR:O	1:A:24:ASP:CG	0.40	2.60	12	1
1:A:190:ILE:HD12	1:A:213:THR:C	0.40	2.36	13	1
1:A:66:TYR:CE2	1:A:70:MET:SD	0.40	3.15	13	1
1:A:49:LEU:CD1	1:A:121:ALA:HB2	0.40	2.44	17	1
1:A:78:GLN:HG2	1:A:103:LEU:CD2	0.40	2.46	16	1
1:A:54:THR:CG2	1:A:70:MET:HE1	0.40	2.47	12	1
1:A:82:ALA:O	1:A:86:ARG:CG	0.40	2.70	12	1
1:A:191:ASP:C	1:A:191:ASP:OD1	0.40	2.59	5	1
1:A:69:TRP:N	1:A:143:VAL:HG21	0.40	2.31	18	1
1:A:158:GLN:OE1	1:A:158:GLN:C	0.40	2.60	8	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	200/262 (76%)	185±2 (92±1%)	9±2 (4±1%)	7±1 (3±1%)	7	37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
All	All	4000/5240 (76%)	3690 (92%)	171 (4%)	139 (3%)	7 37

All 14 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	216	GLY	19
1	A	186	ALA	19
1	A	183	SER	18
1	A	45	SER	14
1	A	117	PRO	13
1	A	62	GLY	12
1	A	198	GLN	12
1	A	100	ARG	10
1	A	197	SER	9
1	A	35	ILE	7
1	A	196	LYS	2
1	A	213	THR	2
1	A	127	GLY	1
1	A	30	GLY	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	164/210 (78%)	121±4 (74±2%)	43±4 (26±2%)	2 24
All	All	3280/4200 (78%)	2426 (74%)	854 (26%)	2 24

All 101 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	35	ILE	20
1	A	125	ARG	20
1	A	137	LEU	20
1	A	90	HIS	20
1	A	204	LEU	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	48	LEU	20
1	A	61	LEU	19
1	A	210	SER	18
1	A	79	THR	18
1	A	43	LEU	17
1	A	212	LEU	16
1	A	183	SER	15
1	A	31	LEU	15
1	A	33	SER	14
1	A	123	LEU	14
1	A	171	LEU	14
1	A	163	SER	14
1	A	205	ILE	14
1	A	165	VAL	13
1	A	225	ARG	13
1	A	57	MET	12
1	A	37	MET	12
1	A	46	SER	12
1	A	70	MET	12
1	A	15	GLU	11
1	A	107	LYS	11
1	A	109	LEU	11
1	A	49	LEU	11
1	A	145	ARG	11
1	A	173	LYS	11
1	A	220	LYS	11
1	A	124	LEU	11
1	A	27	ARG	11
1	A	196	LYS	11
1	A	32	ARG	11
1	A	105	ARG	10
1	A	102	ASN	10
1	A	22	LEU	10
1	A	200	ASP	10
1	A	55	ASN	9
1	A	39	GLU	9
1	A	194	ARG	9
1	A	161	SER	9
1	A	17	LYS	9
1	A	206	ARG	9
1	A	87	ASP	9
1	A	100	ARG	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	129	LEU	8
1	A	89	ARG	8
1	A	164	PHE	8
1	A	114	VAL	8
1	A	52	ASP	8
1	A	21	ARG	8
1	A	155	ASP	8
1	A	24	ASP	8
1	A	138	GLN	7
1	A	104	ASP	7
1	A	158	GLN	7
1	A	111	ASP	7
1	A	141	ARG	6
1	A	221	TYR	6
1	A	195	GLN	6
1	A	176	GLU	6
1	A	25	THR	6
1	A	198	GLN	6
1	A	118	GLN	5
1	A	120	GLN	5
1	A	128	GLU	5
1	A	66	TYR	5
1	A	85	THR	5
1	A	197	SER	5
1	A	179	ASP	5
1	A	224	ASP	5
1	A	213	THR	4
1	A	162	GLU	4
1	A	113	MET	4
1	A	51	HIS	4
1	A	41	GLU	4
1	A	191	ASP	4
1	A	58	ARG	4
1	A	166	ASP	4
1	A	202	GLN	3
1	A	217	GLU	3
1	A	44	MET	3
1	A	93	ASN	3
1	A	142	GLU	3
1	A	218	ILE	3
1	A	81	ILE	3
1	A	80	VAL	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	116	ASN	2
1	A	135	SER	2
1	A	214	THR	2
1	A	211	THR	2
1	A	86	ARG	2
1	A	178	SER	1
1	A	78	GLN	1
1	A	71	ASP	1
1	A	77	LEU	1
1	A	170	ARG	1
1	A	103	LEU	1
1	A	185	ARG	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided