



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 12, 2017 – 06:30 pm GMT

PDB ID : 1J5H
Title : Solution Structure of Apo-Neocarzinostatin
Authors : Urbaniak, M.D.; Muskett, F.W.; Finucane, M.D.; Caddick, S.; Woolfson, D.N.
Deposited on : 2002-05-02

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

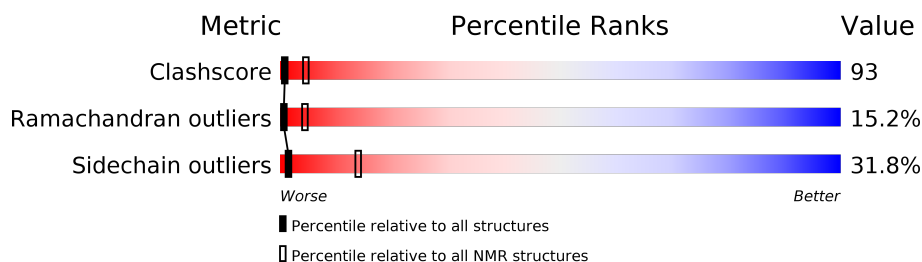
1 Overall quality at a glance

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	122	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 44 models. Model 14 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:4-A:78, A:82-A:99, A:103-A:113 (104)	0.58	14

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 7 clusters and 6 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 3, 4, 5, 11, 12, 16, 19, 21, 22, 24, 25, 29, 37, 40
2	8, 14, 18, 23, 33, 36, 39
3	6, 7, 15, 28, 38, 41
4	10, 20, 26
5	13, 17
6	35, 43
7	9, 31
Single-model clusters	27; 30; 32; 34; 42; 44

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1515 atoms, of which 738 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Apo-Neocarzinostatin.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	113	Total	C	H	N	O	S	0
			1515	476	738	132	165	4	

There are 9 discrepancies between the modelled and reference sequences:

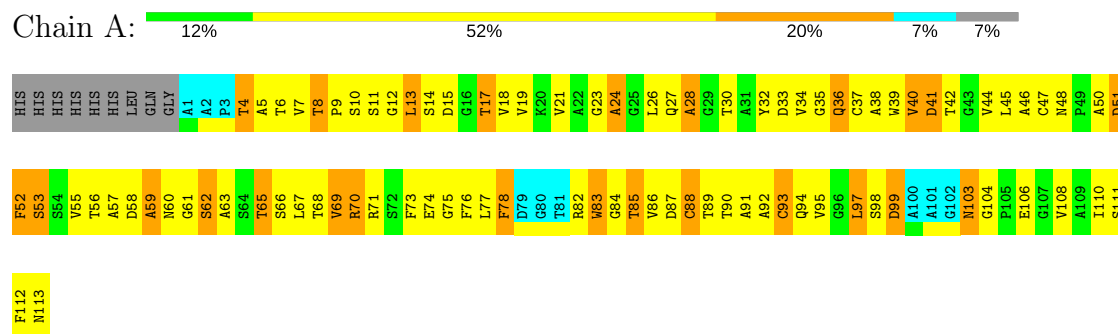
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	-8	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P0A3R9
A	-7	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P0A3R9
A	-6	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P0A3R9
A	-5	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P0A3R9
A	-4	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P0A3R9
A	-3	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P0A3R9
A	-2	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP P0A3R9
A	-1	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP P0A3R9
A	0	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP P0A3R9

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: Apo-Neocarzinostatin

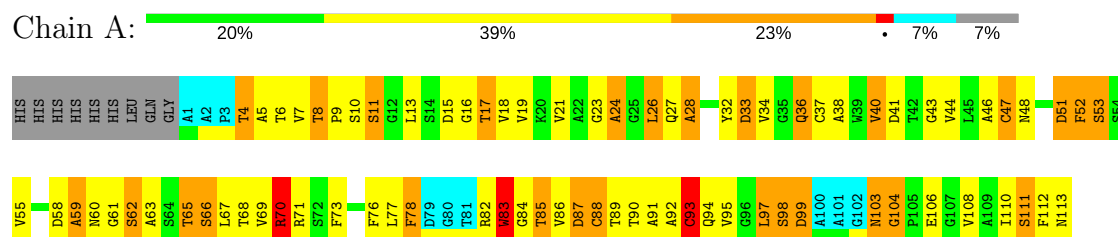


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

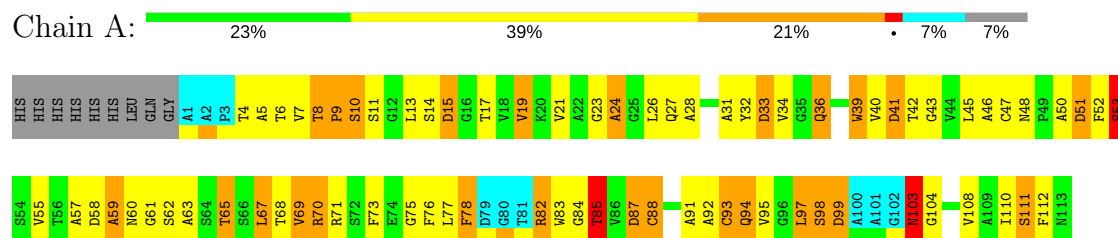
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin

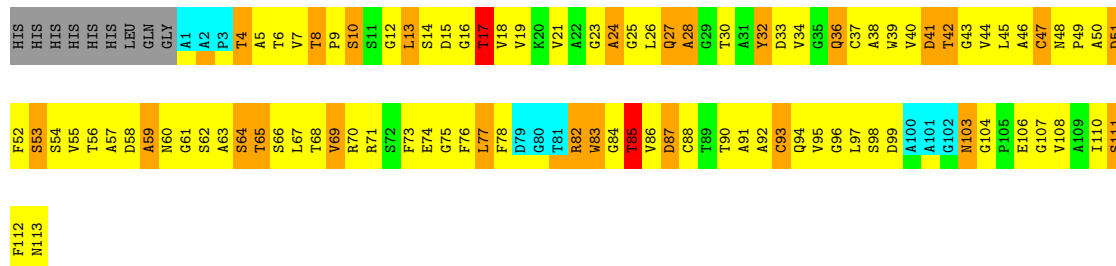


N113

4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin

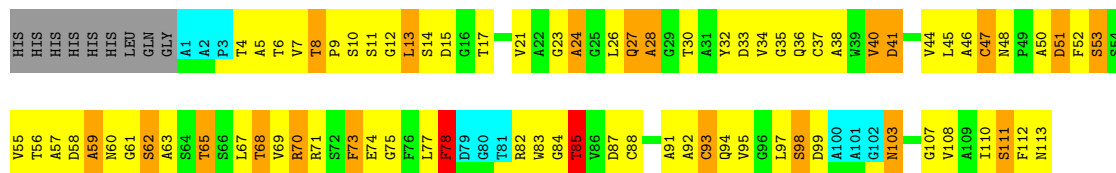
Chain A: 8% 55% 20% 7% 7%

F112
N113

4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin

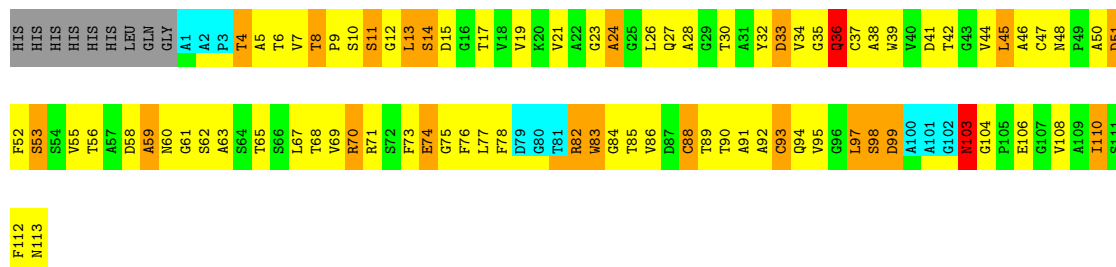
Chain A: 20% 47% 16% 7% 7%



4.2.8 Score per residue for model 8

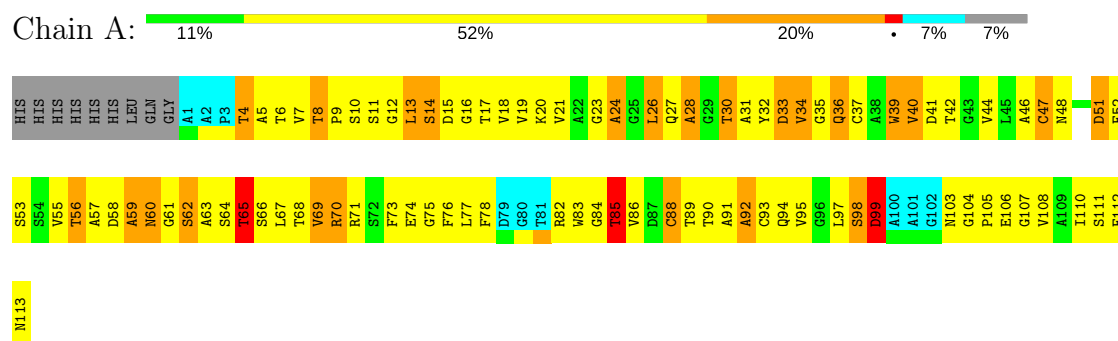
- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin

Chain A: 17% 49% 17% 7% 7%

F112
N113

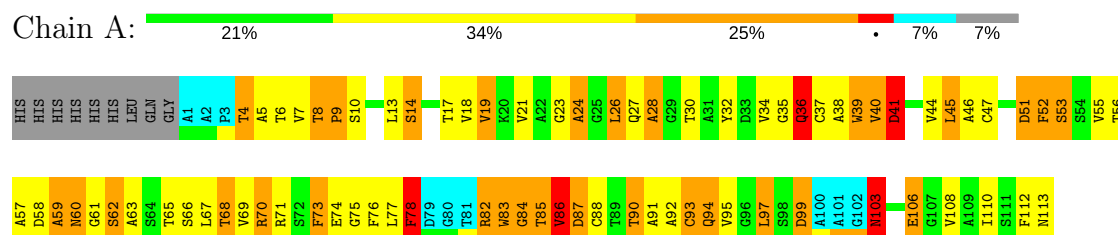
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



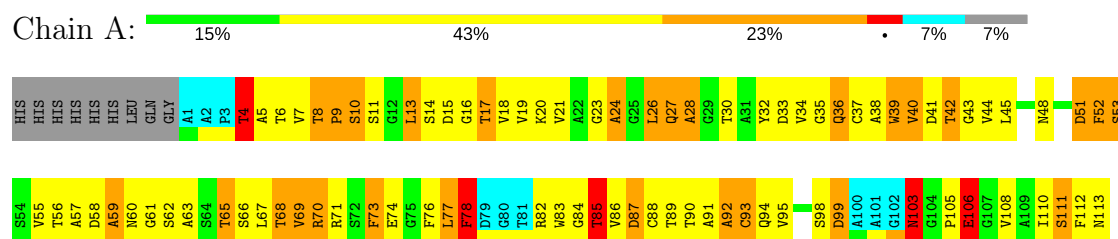
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



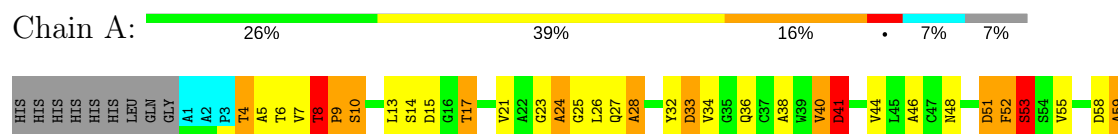
4.2.11 Score per residue for model 11

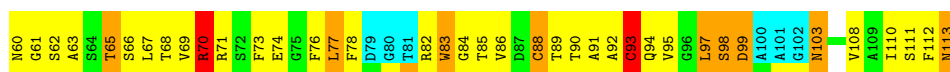
- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



4.2.12 Score per residue for model 12

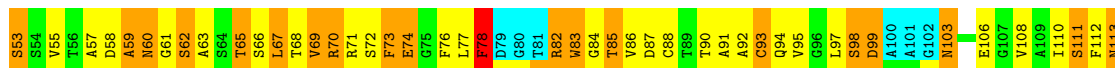
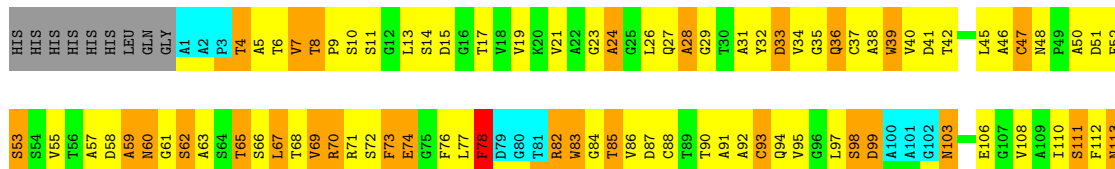
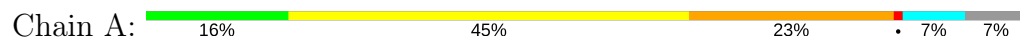
- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin





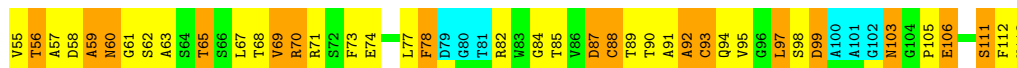
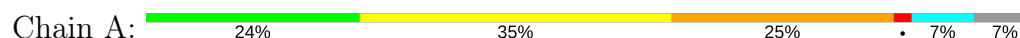
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



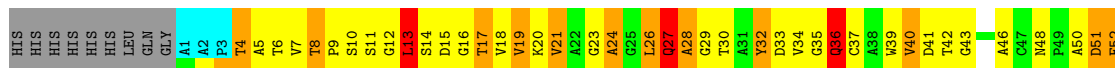
4.2.14 Score per residue for model 14 (medoid)

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



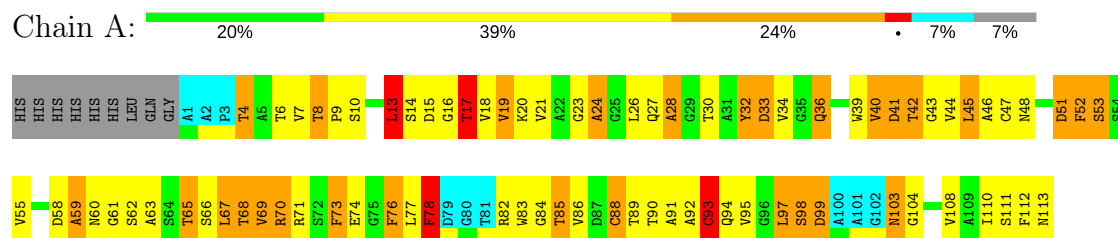
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



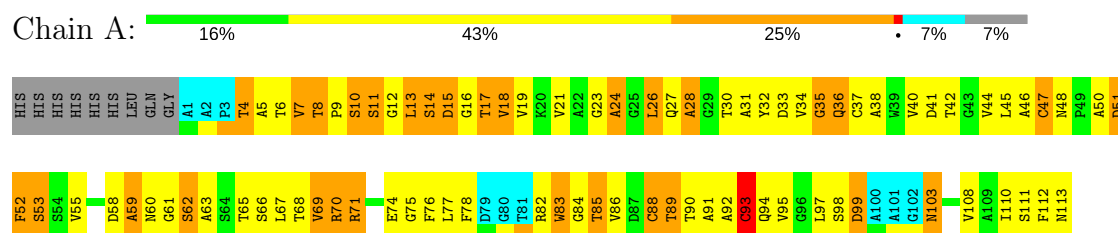
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



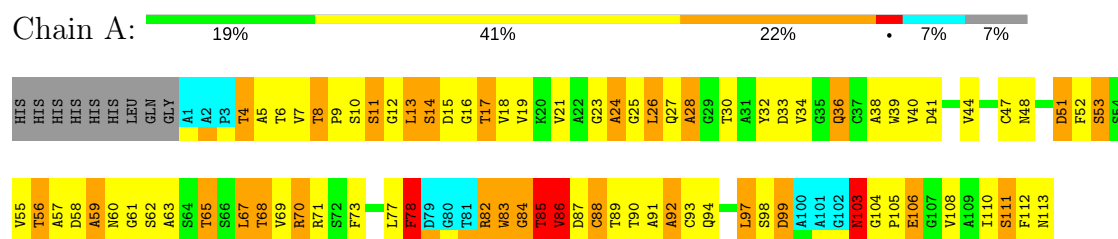
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



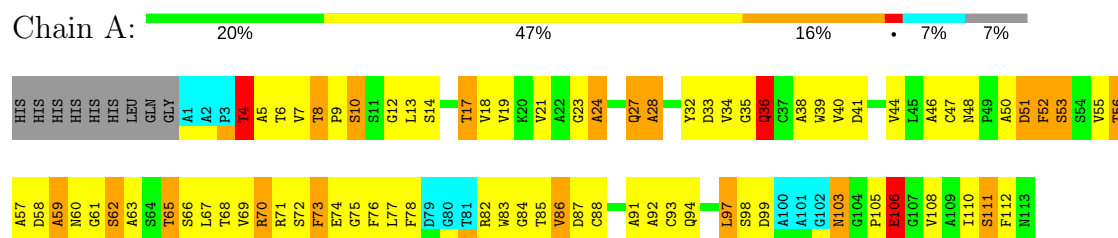
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



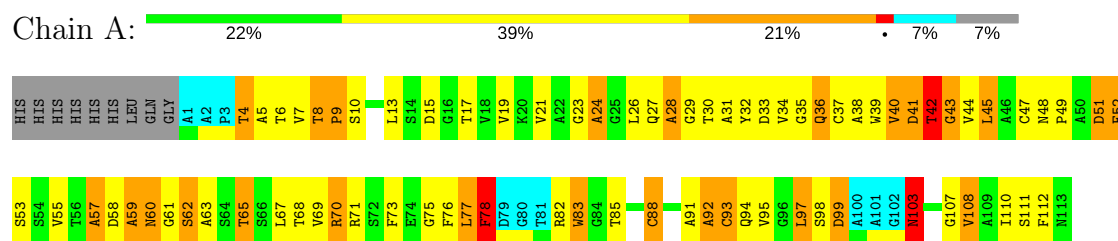
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



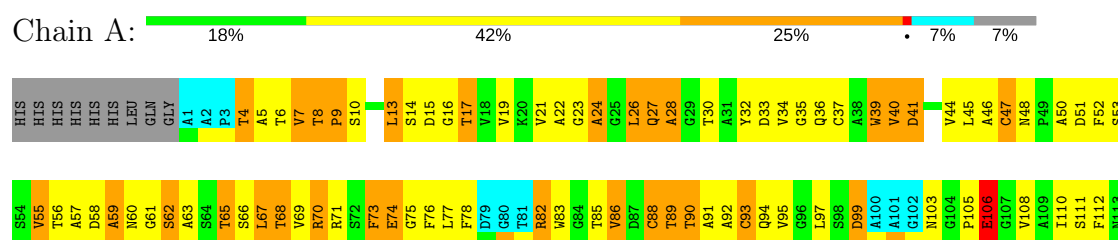
4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



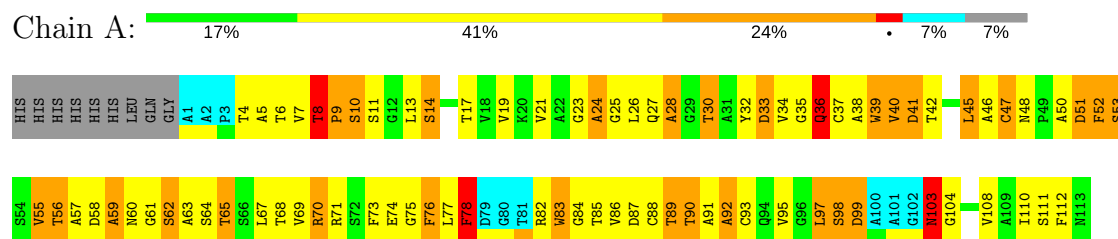
4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



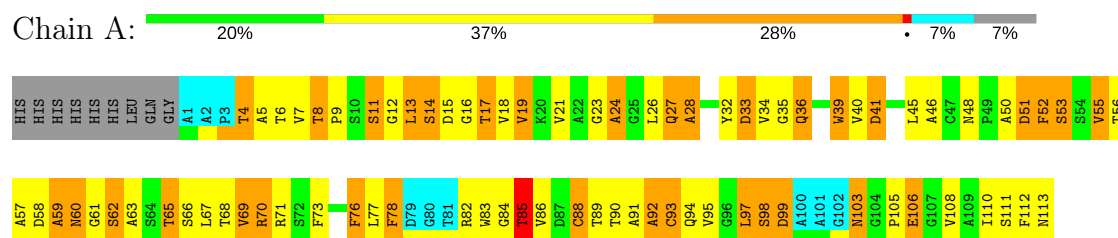
4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



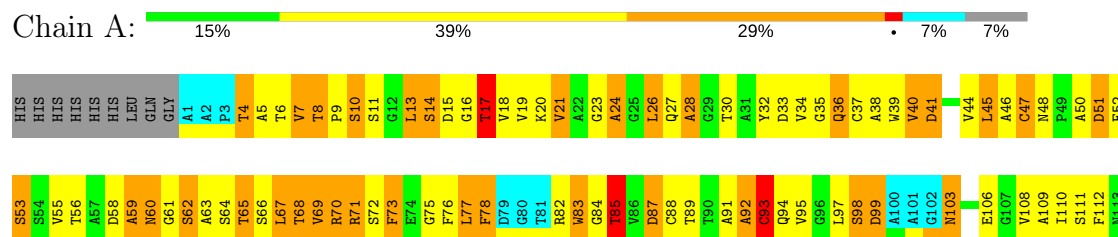
4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



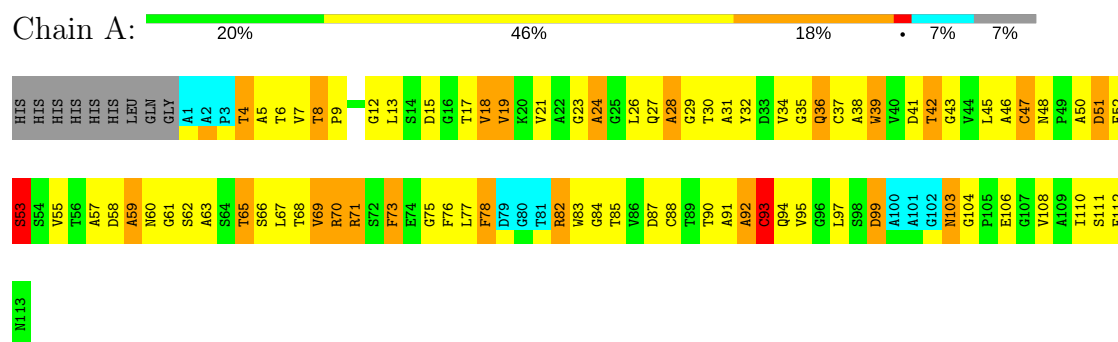
4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



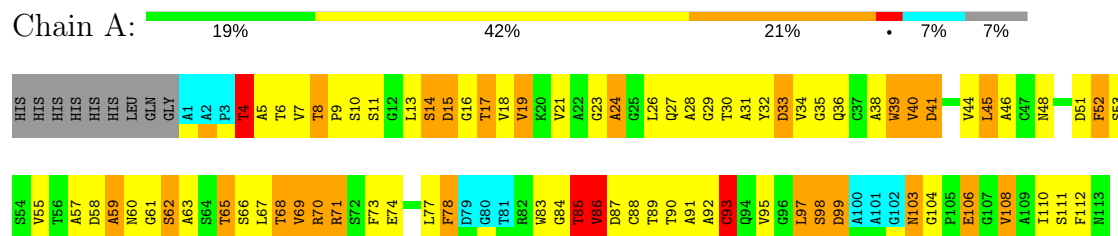
4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



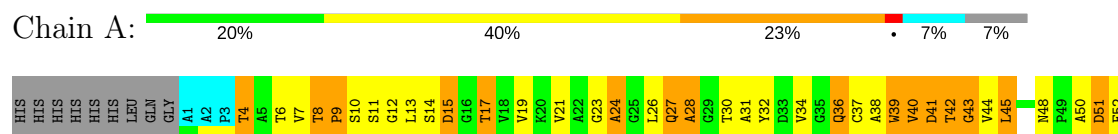
4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



4.2.27 Score per residue for model 27

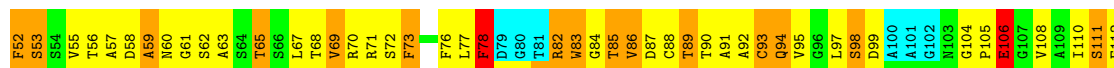
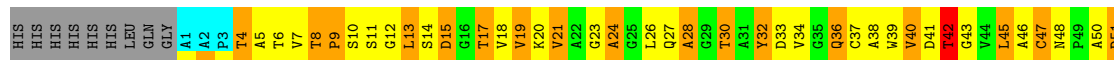
- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin





4.2.28 Score per residue for model 28

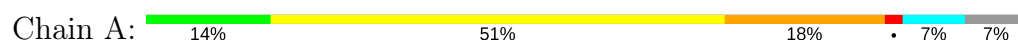
- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



M113

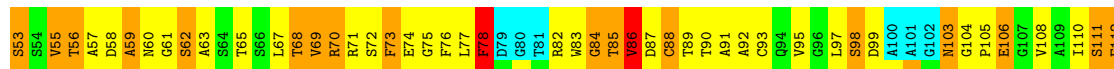
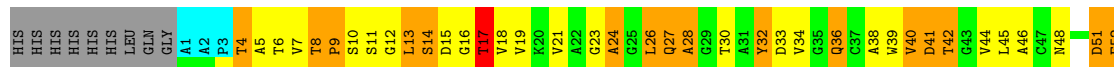
4.2.29 Score per residue for model 29

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



4.2.30 Score per residue for model 30

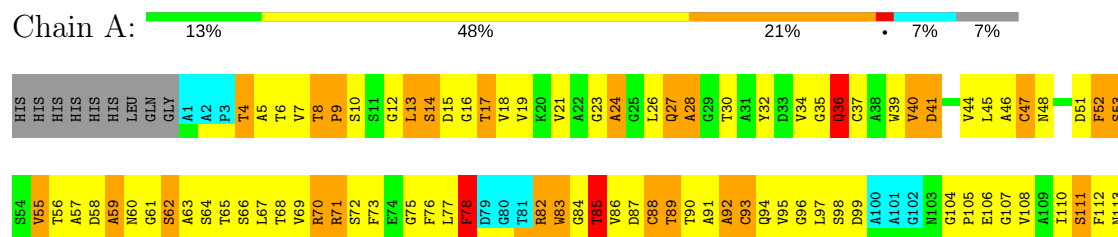
- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



M113

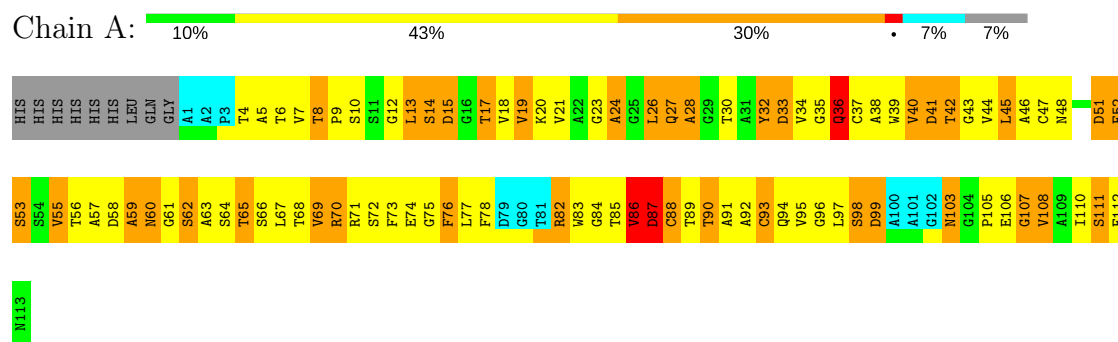
4.2.31 Score per residue for model 31

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



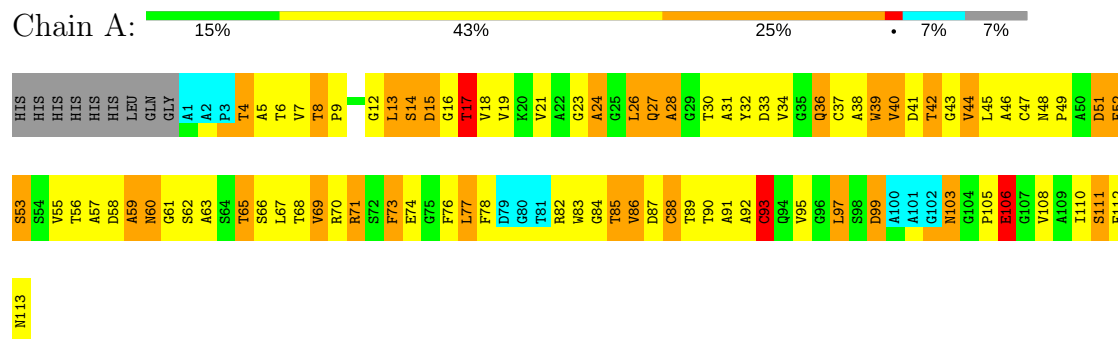
4.2.32 Score per residue for model 32

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



4.2.33 Score per residue for model 33

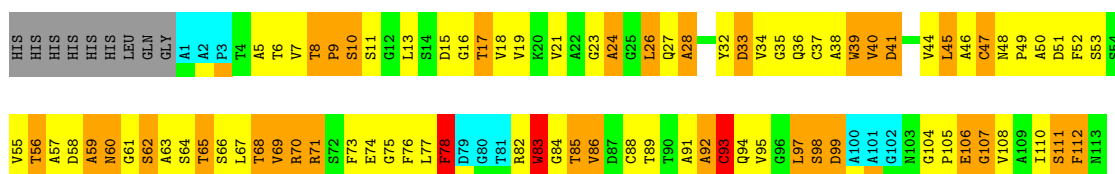
- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



4.2.34 Score per residue for model 34

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin

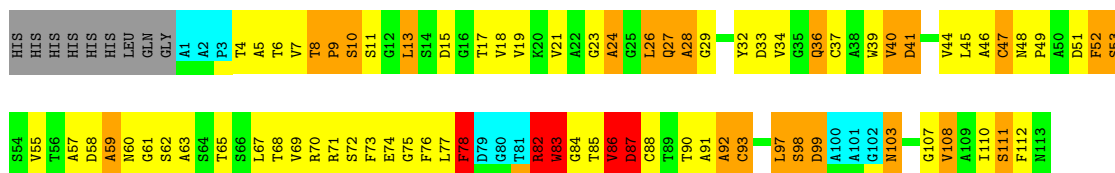




4.2.35 Score per residue for model 35

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin

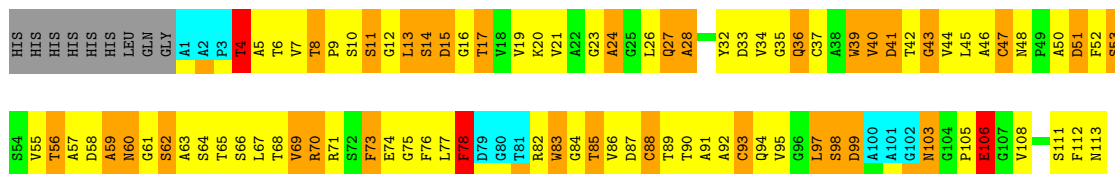
Chain A: 21% 41% 19% 7% 7%



4.2.36 Score per residue for model 36

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin

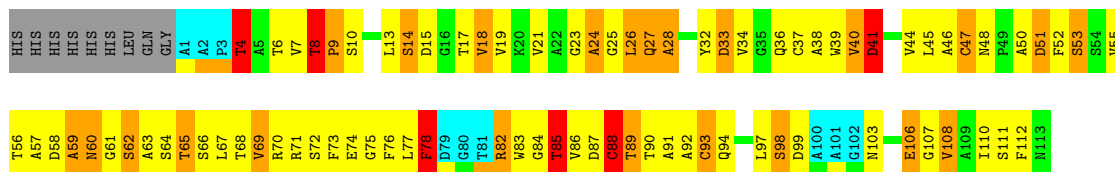
Chain A: 12% 44% 26% 7% 7%



4.2.37 Score per residue for model 37

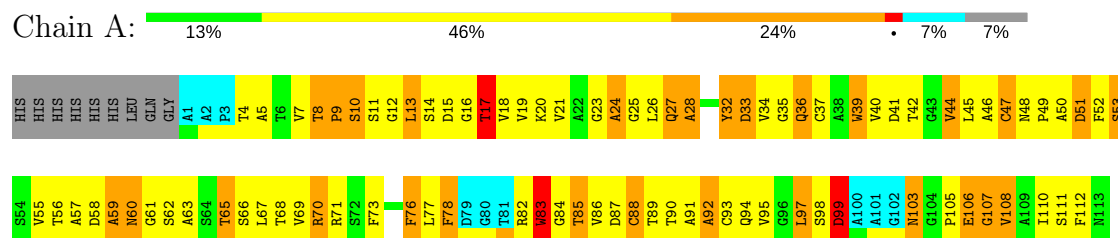
- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin

Chain A: 16% 45% 19% 5% 7% 7%



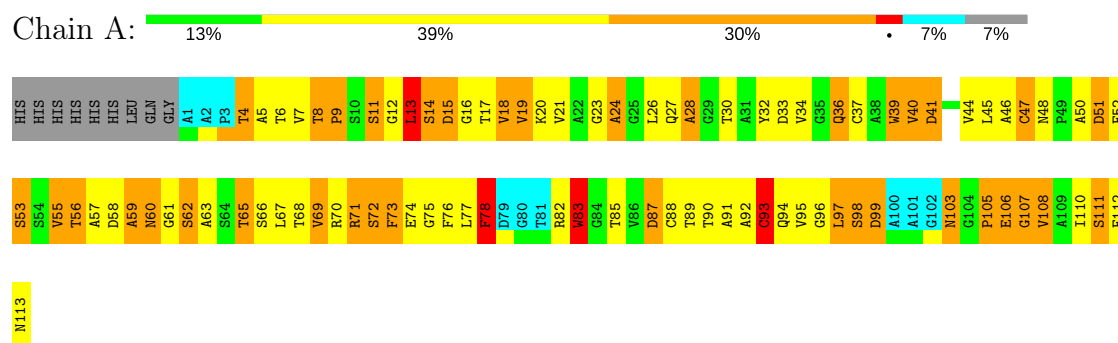
4.2.38 Score per residue for model 38

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



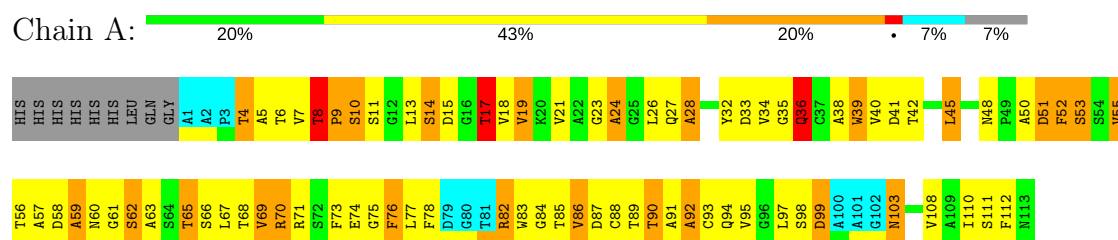
4.2.39 Score per residue for model 39

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



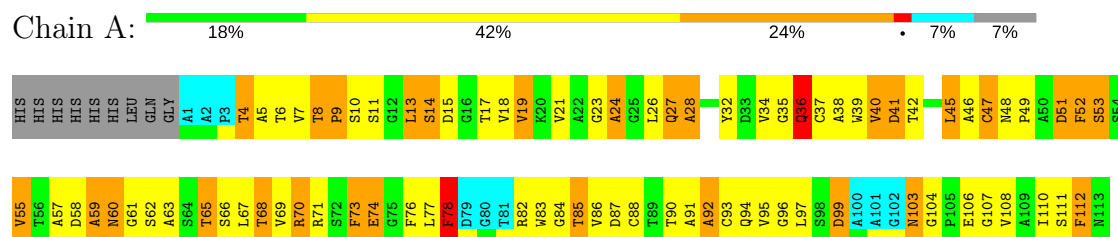
4.2.40 Score per residue for model 40

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



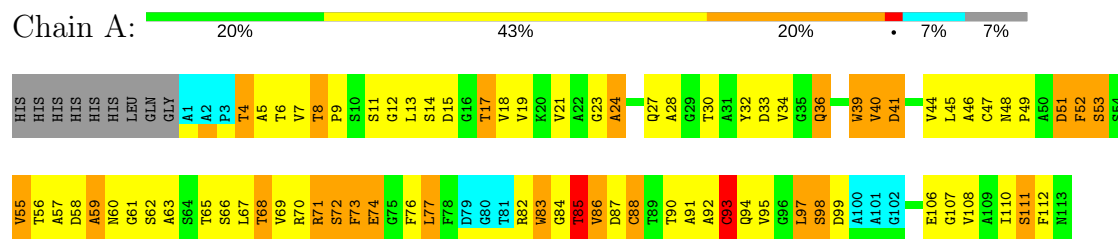
4.2.41 Score per residue for model 41

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



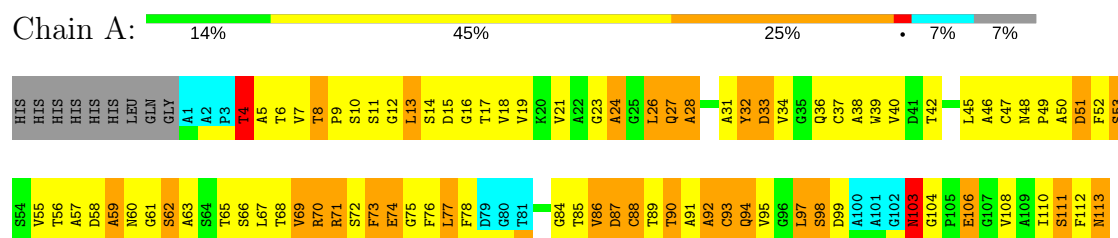
4.2.42 Score per residue for model 42

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



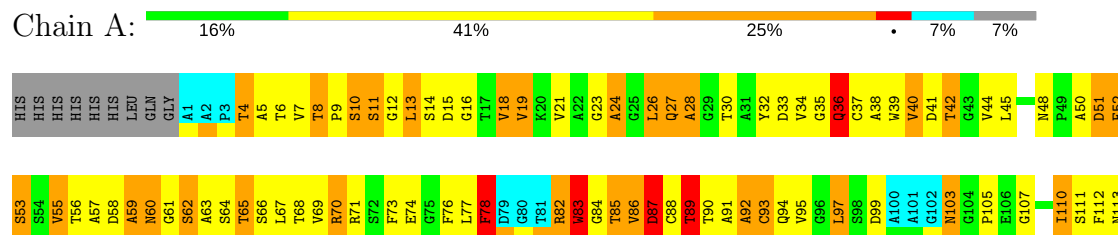
4.2.43 Score per residue for model 43

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



4.2.44 Score per residue for model 44

- Molecule 1: Apo-Neocarzinostatin



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *Simulated annealing with torsion angle dynamics*.

Of the 100 calculated structures, 44 were deposited, based on the following criterion: *structures with favorable non-bond energy*.

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

Software name	Classification	Version
Dyana	refinement	

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 [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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 [i](#)

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	727	693	684	131±13
All	All	31988	30492	30100	5747

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 93.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:VAL:HG12	1:A:112:PHE:CE2	1.08	1.83	44	35
1:A:34:VAL:HG21	1:A:67:LEU:HD21	1.05	1.21	28	3
1:A:83:TRP:CZ3	1:A:86:VAL:HG21	1.04	1.86	42	1
1:A:55:VAL:HG11	1:A:97:LEU:HD22	1.03	1.23	34	1
1:A:32:TYR:CG	1:A:97:LEU:HD21	1.02	1.89	4	1
1:A:69:VAL:HG11	1:A:110:ILE:HG21	1.01	1.32	35	20
1:A:13:LEU:HD12	1:A:69:VAL:HG11	1.01	1.33	16	17
1:A:13:LEU:HD21	1:A:110:ILE:HG21	0.99	1.32	32	2
1:A:42:THR:O	1:A:44:VAL:HG23	0.96	1.60	27	3
1:A:34:VAL:HG13	1:A:67:LEU:HD13	0.96	1.34	31	6
1:A:68:THR:HG23	1:A:70:ARG:NE	0.95	1.74	3	25
1:A:97:LEU:HD22	1:A:98:SER:N	0.94	1.78	26	8
1:A:7:VAL:HG22	1:A:21:VAL:HG22	0.94	1.35	22	10
1:A:40:VAL:HG22	1:A:91:ALA:HB1	0.93	1.37	13	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:GLN:CG	1:A:95:VAL:HG22	0.93	1.93	33	2
1:A:7:VAL:HG13	1:A:21:VAL:CG2	0.93	1.94	34	24
1:A:95:VAL:O	1:A:108:VAL:HG12	0.92	1.65	23	15
1:A:39:TRP:O	1:A:91:ALA:HB1	0.92	1.65	24	15
1:A:46:ALA:HB2	1:A:83:TRP:CD1	0.92	1.99	5	20
1:A:44:VAL:HG13	1:A:77:LEU:HD11	0.91	1.37	9	4
1:A:38:ALA:HB2	1:A:93:CYS:SG	0.91	2.06	12	15
1:A:42:THR:HG22	1:A:44:VAL:HG23	0.91	1.41	44	2
1:A:7:VAL:HG13	1:A:21:VAL:HG22	0.91	1.43	7	23
1:A:69:VAL:HG13	1:A:95:VAL:HG11	0.90	1.43	38	1
1:A:40:VAL:HG22	1:A:83:TRP:NE1	0.89	1.82	32	4
1:A:38:ALA:HB3	1:A:73:PHE:CE2	0.88	2.03	37	1
1:A:6:THR:O	1:A:21:VAL:HG13	0.88	1.69	35	29
1:A:32:TYR:CD1	1:A:97:LEU:HD13	0.88	2.03	12	1
1:A:7:VAL:HG12	1:A:9:PRO:HD2	0.88	1.45	18	28
1:A:21:VAL:HG12	1:A:65:THR:O	0.88	1.68	16	2
1:A:55:VAL:HG21	1:A:65:THR:CG2	0.87	2.00	44	9
1:A:44:VAL:HG13	1:A:83:TRP:CZ2	0.87	2.05	7	3
1:A:55:VAL:CG1	1:A:97:LEU:HD11	0.87	2.00	29	4
1:A:12:GLY:CA	1:A:17:THR:HG21	0.86	2.01	8	3
1:A:95:VAL:CG1	1:A:110:ILE:HD12	0.86	2.00	3	4
1:A:7:VAL:CG2	1:A:110:ILE:HD11	0.86	2.00	2	11
1:A:40:VAL:HG13	1:A:83:TRP:CH2	0.86	2.04	20	1
1:A:5:ALA:HB2	1:A:97:LEU:HD12	0.86	1.48	25	1
1:A:13:LEU:HD11	1:A:110:ILE:HG21	0.86	1.48	30	9
1:A:23:GLY:O	1:A:63:ALA:HB3	0.86	1.71	8	42
1:A:5:ALA:CB	1:A:97:LEU:HD23	0.86	2.00	19	8
1:A:55:VAL:HG23	1:A:65:THR:HB	0.85	1.48	26	13
1:A:69:VAL:HG13	1:A:95:VAL:HG21	0.85	1.47	36	2
1:A:10:SER:C	1:A:110:ILE:HG23	0.85	1.92	16	10
1:A:9:PRO:CG	1:A:19:VAL:HG21	0.85	2.02	6	17
1:A:45:LEU:HD13	1:A:45:LEU:O	0.84	1.72	40	1
1:A:13:LEU:HD11	1:A:110:ILE:CG2	0.84	2.02	43	7
1:A:9:PRO:HG2	1:A:19:VAL:HG21	0.84	1.47	6	13
1:A:44:VAL:HG13	1:A:77:LEU:HD21	0.84	1.49	35	5
1:A:40:VAL:CG2	1:A:91:ALA:HB1	0.84	2.02	43	3
1:A:40:VAL:HG11	1:A:83:TRP:CZ2	0.84	2.07	22	8
1:A:7:VAL:HG22	1:A:21:VAL:CG2	0.84	2.02	22	8
1:A:36:GLN:NE2	1:A:95:VAL:HG22	0.84	1.87	34	6
1:A:13:LEU:CD1	1:A:69:VAL:HG11	0.83	2.01	16	7
1:A:40:VAL:HG22	1:A:83:TRP:CD1	0.83	2.07	32	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:VAL:HG21	1:A:110:ILE:HD11	0.83	1.49	2	8
1:A:88:CYS:O	1:A:89:THR:HG22	0.83	1.72	21	1
1:A:21:VAL:HG11	1:A:67:LEU:HD22	0.83	1.49	1	17
1:A:69:VAL:HG12	1:A:112:PHE:CZ	0.82	2.08	35	13
1:A:45:LEU:O	1:A:77:LEU:HD23	0.82	1.73	10	2
1:A:36:GLN:CG	1:A:95:VAL:HG13	0.82	2.04	36	2
1:A:97:LEU:O	1:A:97:LEU:HD13	0.82	1.74	35	3
1:A:45:LEU:HD23	1:A:45:LEU:O	0.81	1.75	17	3
1:A:13:LEU:HD21	1:A:110:ILE:CG2	0.81	2.03	32	2
1:A:40:VAL:HG13	1:A:83:TRP:CZ2	0.81	2.11	30	2
1:A:55:VAL:HG21	1:A:65:THR:HB	0.81	1.53	23	14
1:A:68:THR:HG23	1:A:70:ARG:CZ	0.81	2.05	37	29
1:A:86:VAL:HG13	1:A:87:ASP:N	0.81	1.90	32	8
1:A:55:VAL:HG23	1:A:65:THR:CG2	0.81	2.05	12	7
1:A:44:VAL:HG13	1:A:77:LEU:HD13	0.81	1.52	39	2
1:A:32:TYR:O	1:A:97:LEU:HD12	0.81	1.75	9	10
1:A:97:LEU:HD13	1:A:97:LEU:O	0.81	1.75	43	5
1:A:69:VAL:O	1:A:112:PHE:CZ	0.80	2.34	42	1
1:A:38:ALA:HB2	1:A:88:CYS:SG	0.80	2.16	33	6
1:A:77:LEU:HD12	1:A:83:TRP:CZ2	0.80	2.10	44	1
1:A:69:VAL:HG11	1:A:110:ILE:HD12	0.80	1.52	19	1
1:A:36:GLN:HG2	1:A:95:VAL:HG13	0.80	1.53	36	1
1:A:57:ALA:HB1	1:A:61:GLY:HA2	0.80	1.53	11	20
1:A:95:VAL:HG12	1:A:110:ILE:HD12	0.80	1.51	3	8
1:A:21:VAL:HG11	1:A:67:LEU:HG	0.79	1.54	16	3
1:A:13:LEU:HD12	1:A:69:VAL:CG1	0.79	2.07	16	8
1:A:12:GLY:HA3	1:A:17:THR:HG21	0.79	1.54	36	3
1:A:45:LEU:O	1:A:45:LEU:HD13	0.79	1.78	8	1
1:A:18:VAL:HG22	1:A:68:THR:HB	0.79	1.55	42	13
1:A:6:THR:HA	1:A:108:VAL:HG21	0.78	1.54	36	6
1:A:10:SER:O	1:A:110:ILE:HG23	0.78	1.78	15	4
1:A:69:VAL:HG13	1:A:112:PHE:CZ	0.78	2.13	16	3
1:A:13:LEU:HB3	1:A:17:THR:HG21	0.78	1.53	12	15
1:A:55:VAL:HG11	1:A:97:LEU:CD2	0.78	2.07	34	1
1:A:85:THR:O	1:A:85:THR:HG23	0.78	1.78	35	11
1:A:36:GLN:CG	1:A:95:VAL:HG23	0.78	2.08	16	15
1:A:40:VAL:HG21	1:A:83:TRP:CZ2	0.78	2.14	41	4
1:A:14:SER:CB	1:A:112:PHE:CD1	0.78	2.67	41	1
1:A:32:TYR:CE2	1:A:57:ALA:HB2	0.77	2.14	42	24
1:A:7:VAL:HG12	1:A:110:ILE:CD1	0.77	2.08	15	2
1:A:7:VAL:HB	1:A:110:ILE:HD11	0.77	1.55	42	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:TYR:CB	1:A:97:LEU:HD21	0.77	2.08	4	1
1:A:34:VAL:CG1	1:A:67:LEU:HD13	0.77	2.09	39	6
1:A:5:ALA:HB2	1:A:24:ALA:HA	0.77	1.55	40	6
1:A:69:VAL:HG13	1:A:95:VAL:CG1	0.77	2.10	42	2
1:A:97:LEU:HD22	1:A:97:LEU:C	0.77	2.00	26	1
1:A:55:VAL:HG22	1:A:65:THR:HG21	0.77	1.56	6	1
1:A:18:VAL:HG12	1:A:66:SER:HB3	0.77	1.57	40	4
1:A:13:LEU:HD12	1:A:110:ILE:HG21	0.77	1.56	19	14
1:A:7:VAL:HG23	1:A:21:VAL:HG23	0.77	1.57	21	2
1:A:88:CYS:SG	1:A:112:PHE:CD1	0.77	2.78	36	5
1:A:69:VAL:CG1	1:A:110:ILE:HG21	0.76	2.10	29	9
1:A:13:LEU:CB	1:A:17:THR:HG21	0.76	2.10	35	2
1:A:13:LEU:HD22	1:A:69:VAL:HG11	0.76	1.56	28	2
1:A:44:VAL:HG13	1:A:77:LEU:CD1	0.76	2.11	39	4
1:A:17:THR:HG23	1:A:19:VAL:HG13	0.76	1.58	24	3
1:A:85:THR:HG23	1:A:85:THR:O	0.76	1.80	38	6
1:A:17:THR:HG22	1:A:19:VAL:HG13	0.76	1.58	20	7
1:A:13:LEU:HB2	1:A:17:THR:HG21	0.76	1.57	35	2
1:A:13:LEU:HD13	1:A:17:THR:HG21	0.76	1.57	29	5
1:A:5:ALA:HB2	1:A:23:GLY:O	0.76	1.81	36	4
1:A:97:LEU:HD13	1:A:98:SER:N	0.76	1.95	24	2
1:A:13:LEU:HD13	1:A:110:ILE:HG23	0.76	1.56	28	1
1:A:69:VAL:HG11	1:A:110:ILE:CG2	0.75	2.12	13	5
1:A:88:CYS:O	1:A:92:ALA:N	0.75	2.19	44	25
1:A:40:VAL:HG11	1:A:83:TRP:CD2	0.75	2.16	10	1
1:A:7:VAL:HG21	1:A:110:ILE:CD1	0.75	2.12	2	6
1:A:44:VAL:HG11	1:A:83:TRP:CZ2	0.75	2.16	10	1
1:A:36:GLN:HG2	1:A:95:VAL:HG23	0.75	1.58	16	14
1:A:38:ALA:HB2	1:A:93:CYS:CB	0.75	2.12	6	6
1:A:44:VAL:CG1	1:A:77:LEU:HD21	0.75	2.11	32	2
1:A:17:THR:HG22	1:A:19:VAL:CG1	0.74	2.12	5	3
1:A:23:GLY:O	1:A:24:ALA:HB2	0.74	1.83	11	44
1:A:32:TYR:O	1:A:55:VAL:HG12	0.74	1.82	34	7
1:A:85:THR:O	1:A:85:THR:HG22	0.74	1.83	4	8
1:A:34:VAL:CG1	1:A:67:LEU:HD22	0.74	2.13	37	1
1:A:5:ALA:HB2	1:A:97:LEU:HD23	0.74	1.60	19	5
1:A:17:THR:O	1:A:69:VAL:HG23	0.74	1.81	31	22
1:A:55:VAL:HG23	1:A:65:THR:HG22	0.74	1.59	12	1
1:A:88:CYS:SG	1:A:93:CYS:CB	0.74	2.76	29	3
1:A:40:VAL:HG21	1:A:83:TRP:CE2	0.74	2.18	22	4
1:A:23:GLY:O	1:A:24:ALA:CB	0.74	2.36	37	44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:PRO:HD3	1:A:19:VAL:HG21	0.74	1.59	11	1
1:A:34:VAL:HG11	1:A:67:LEU:HD22	0.74	1.60	37	1
1:A:6:THR:HA	1:A:108:VAL:HG11	0.73	1.58	21	5
1:A:108:VAL:O	1:A:108:VAL:HG12	0.73	1.82	26	4
1:A:77:LEU:O	1:A:78:PHE:CB	0.73	2.36	35	40
1:A:55:VAL:HG21	1:A:65:THR:CB	0.73	2.13	42	14
1:A:55:VAL:CG1	1:A:97:LEU:HD22	0.73	2.11	34	2
1:A:36:GLN:CD	1:A:95:VAL:HG22	0.73	2.03	28	7
1:A:24:ALA:HB1	1:A:97:LEU:HD13	0.73	1.60	5	1
1:A:48:ASN:CG	1:A:73:PHE:CD2	0.72	2.63	36	7
1:A:69:VAL:HG12	1:A:112:PHE:CE1	0.72	2.19	1	4
1:A:39:TRP:CB	1:A:45:LEU:HD12	0.72	2.14	38	3
1:A:18:VAL:HG12	1:A:66:SER:HB2	0.72	1.61	32	4
1:A:8:THR:CB	1:A:9:PRO:HD3	0.72	2.14	22	42
1:A:13:LEU:CD1	1:A:69:VAL:HG21	0.72	2.15	5	3
1:A:44:VAL:CG1	1:A:83:TRP:CZ2	0.72	2.72	10	3
1:A:7:VAL:HG23	1:A:21:VAL:CG2	0.72	2.14	21	1
1:A:39:TRP:HB2	1:A:45:LEU:HD12	0.72	1.58	39	9
1:A:32:TYR:CD1	1:A:97:LEU:HD23	0.72	2.19	35	5
1:A:46:ALA:CB	1:A:83:TRP:CD1	0.72	2.73	8	3
1:A:13:LEU:HD12	1:A:111:SER:O	0.72	1.84	35	2
1:A:58:ASP:O	1:A:60:ASN:N	0.72	2.23	24	44
1:A:21:VAL:HG21	1:A:67:LEU:HB2	0.72	1.61	31	28
1:A:48:ASN:CG	1:A:73:PHE:CE2	0.72	2.63	13	6
1:A:13:LEU:HD23	1:A:17:THR:HG21	0.72	1.60	28	1
1:A:97:LEU:C	1:A:97:LEU:HD22	0.72	2.04	2	6
1:A:69:VAL:HG13	1:A:95:VAL:CG2	0.72	2.15	36	2
1:A:17:THR:HG22	1:A:17:THR:O	0.71	1.85	16	15
1:A:13:LEU:HD23	1:A:111:SER:O	0.71	1.85	33	2
1:A:91:ALA:O	1:A:92:ALA:HB3	0.71	1.84	44	3
1:A:36:GLN:HB2	1:A:95:VAL:HG22	0.71	1.61	5	1
1:A:13:LEU:HD21	1:A:110:ILE:HG23	0.71	1.60	11	1
1:A:34:VAL:HG22	1:A:67:LEU:HD13	0.71	1.62	42	2
1:A:8:THR:HB	1:A:9:PRO:HD3	0.71	1.62	22	32
1:A:9:PRO:HB2	1:A:13:LEU:HD21	0.71	1.60	37	20
1:A:85:THR:HG22	1:A:85:THR:O	0.71	1.84	24	11
1:A:46:ALA:HB3	1:A:83:TRP:CD1	0.71	2.20	38	3
1:A:108:VAL:O	1:A:110:ILE:HD12	0.71	1.85	20	2
1:A:34:VAL:HG21	1:A:53:SER:CB	0.71	2.15	9	5
1:A:27:GLN:OE1	1:A:30:THR:HG21	0.71	1.85	16	1
1:A:58:ASP:O	1:A:59:ALA:C	0.71	2.29	41	44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:THR:HG23	1:A:70:ARG:HE	0.71	1.46	33	6
1:A:74:GLU:HG2	1:A:86:VAL:HG12	0.71	1.61	21	1
1:A:7:VAL:CG2	1:A:19:VAL:HG23	0.71	2.14	24	6
1:A:44:VAL:HG11	1:A:77:LEU:HD23	0.71	1.61	36	1
1:A:76:PHE:CD1	1:A:76:PHE:O	0.71	2.44	16	3
1:A:44:VAL:HG11	1:A:83:TRP:CH2	0.71	2.21	10	1
1:A:88:CYS:C	1:A:89:THR:HG23	0.71	2.05	37	1
1:A:106:GLU:HG3	1:A:108:VAL:HG23	0.70	1.63	13	1
1:A:32:TYR:HB3	1:A:97:LEU:HD23	0.70	1.60	26	2
1:A:24:ALA:CB	1:A:97:LEU:HD13	0.70	2.15	5	1
1:A:108:VAL:HG12	1:A:108:VAL:O	0.70	1.86	25	2
1:A:89:THR:HG22	1:A:112:PHE:HB2	0.70	1.62	37	2
1:A:48:ASN:ND2	1:A:73:PHE:CE2	0.70	2.59	21	3
1:A:9:PRO:CD	1:A:19:VAL:HG21	0.70	2.16	11	7
1:A:7:VAL:CG1	1:A:110:ILE:HD11	0.70	2.17	28	2
1:A:34:VAL:HG13	1:A:67:LEU:CD1	0.70	2.15	24	4
1:A:97:LEU:HD13	1:A:97:LEU:C	0.70	2.05	43	1
1:A:14:SER:OG	1:A:112:PHE:CD1	0.70	2.44	41	1
1:A:77:LEU:O	1:A:78:PHE:CD1	0.70	2.45	27	4
1:A:32:TYR:CD1	1:A:97:LEU:HD21	0.70	2.21	4	1
1:A:93:CYS:SG	1:A:112:PHE:CD1	0.70	2.85	26	5
1:A:7:VAL:HG23	1:A:108:VAL:HG11	0.70	1.63	38	5
1:A:7:VAL:HG13	1:A:9:PRO:HD2	0.69	1.64	16	8
1:A:38:ALA:HB3	1:A:46:ALA:HB3	0.69	1.64	13	3
1:A:12:GLY:O	1:A:13:LEU:C	0.69	2.30	18	5
1:A:40:VAL:HG22	1:A:91:ALA:CB	0.69	2.17	19	9
1:A:44:VAL:HG11	1:A:77:LEU:CD2	0.69	2.17	36	1
1:A:27:GLN:O	1:A:28:ALA:HB2	0.69	1.86	10	38
1:A:69:VAL:CG1	1:A:112:PHE:CE2	0.69	2.74	26	23
1:A:46:ALA:HB1	1:A:75:GLY:HA3	0.69	1.64	31	8
1:A:40:VAL:HG12	1:A:41:ASP:N	0.69	2.03	20	28
1:A:34:VAL:HG22	1:A:97:LEU:CD1	0.69	2.16	28	3
1:A:55:VAL:CG2	1:A:65:THR:HG21	0.69	2.17	42	10
1:A:55:VAL:HG12	1:A:97:LEU:HD22	0.69	1.61	38	1
1:A:7:VAL:HG22	1:A:21:VAL:HG23	0.69	1.64	44	1
1:A:87:ASP:HB2	1:A:89:THR:HG22	0.69	1.62	40	2
1:A:84:GLY:O	1:A:86:VAL:N	0.69	2.25	43	19
1:A:34:VAL:HG21	1:A:67:LEU:HD22	0.69	1.64	10	6
1:A:63:ALA:HB3	1:A:97:LEU:HD23	0.69	1.62	30	1
1:A:71:ARG:HA	1:A:112:PHE:CD2	0.69	2.22	12	8
1:A:45:LEU:HD23	1:A:45:LEU:C	0.69	2.09	37	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:105:PRO:O	1:A:106:GLU:CB	0.69	2.40	39	11
1:A:11:SER:OG	1:A:13:LEU:HD21	0.69	1.88	44	1
1:A:107:GLY:C	1:A:108:VAL:HG23	0.69	2.08	29	3
1:A:95:VAL:HG12	1:A:110:ILE:CD1	0.68	2.18	6	7
1:A:12:GLY:O	1:A:14:SER:N	0.68	2.26	39	11
1:A:17:THR:O	1:A:17:THR:HG22	0.68	1.88	34	9
1:A:13:LEU:HD23	1:A:13:LEU:N	0.68	2.01	16	8
1:A:91:ALA:O	1:A:92:ALA:C	0.68	2.32	18	35
1:A:38:ALA:HB2	1:A:93:CYS:HB2	0.68	1.65	6	8
1:A:5:ALA:HB3	1:A:97:LEU:HB2	0.68	1.64	13	1
1:A:48:ASN:HB2	1:A:73:PHE:CZ	0.68	2.24	44	2
1:A:89:THR:HG21	1:A:113:ASN:C	0.68	2.08	8	2
1:A:9:PRO:HG3	1:A:19:VAL:HG11	0.68	1.63	25	5
1:A:110:ILE:CG2	1:A:112:PHE:CE2	0.68	2.76	34	1
1:A:32:TYR:CD2	1:A:63:ALA:HB2	0.68	2.24	9	3
1:A:47:CYS:CB	1:A:76:PHE:CZ	0.68	2.77	35	3
1:A:36:GLN:HG2	1:A:95:VAL:HG22	0.68	1.66	32	2
1:A:42:THR:CG2	1:A:44:VAL:HG23	0.68	2.18	30	2
1:A:68:THR:O	1:A:70:ARG:NE	0.67	2.27	35	33
1:A:63:ALA:CB	1:A:97:LEU:HD13	0.67	2.19	23	4
1:A:84:GLY:O	1:A:85:THR:C	0.67	2.33	6	27
1:A:7:VAL:HG11	1:A:69:VAL:HG21	0.67	1.64	30	5
1:A:13:LEU:HD13	1:A:69:VAL:CG1	0.67	2.20	32	2
1:A:38:ALA:HB2	1:A:93:CYS:HB3	0.67	1.66	40	4
1:A:13:LEU:CD1	1:A:110:ILE:HG21	0.67	2.20	7	11
1:A:36:GLN:HG3	1:A:95:VAL:HG23	0.67	1.65	12	4
1:A:88:CYS:SG	1:A:112:PHE:CE1	0.67	2.88	2	5
1:A:93:CYS:SG	1:A:112:PHE:CZ	0.67	2.88	40	16
1:A:7:VAL:HG22	1:A:19:VAL:HG23	0.67	1.65	13	5
1:A:34:VAL:HG22	1:A:67:LEU:CD1	0.67	2.19	42	2
1:A:32:TYR:HB3	1:A:97:LEU:HD13	0.67	1.67	17	1
1:A:70:ARG:O	1:A:112:PHE:CD2	0.66	2.48	5	6
1:A:6:THR:O	1:A:21:VAL:HG23	0.66	1.90	13	3
1:A:32:TYR:CB	1:A:97:LEU:HD11	0.66	2.20	24	1
1:A:63:ALA:CB	1:A:97:LEU:HD23	0.66	2.20	30	1
1:A:89:THR:HG21	1:A:113:ASN:HB3	0.66	1.67	14	3
1:A:110:ILE:O	1:A:112:PHE:CE1	0.66	2.48	17	5
1:A:21:VAL:HG21	1:A:67:LEU:HD22	0.66	1.66	17	2
1:A:36:GLN:HE22	1:A:95:VAL:HG22	0.66	1.50	34	1
1:A:48:ASN:ND2	1:A:73:PHE:CD2	0.66	2.63	34	7
1:A:67:LEU:HD23	1:A:95:VAL:CG1	0.66	2.20	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:VAL:CG2	1:A:63:ALA:HB1	0.66	2.20	5	8
1:A:93:CYS:SG	1:A:112:PHE:CG	0.66	2.89	39	3
1:A:48:ASN:ND2	1:A:73:PHE:CD1	0.66	2.64	8	5
1:A:87:ASP:HB3	1:A:89:THR:HG22	0.66	1.68	39	1
1:A:5:ALA:HB2	1:A:23:GLY:C	0.66	2.11	36	2
1:A:40:VAL:HG21	1:A:83:TRP:CD1	0.66	2.26	4	2
1:A:73:PHE:CG	1:A:74:GLU:N	0.66	2.62	10	4
1:A:32:TYR:CD1	1:A:97:LEU:CD1	0.66	2.77	12	1
1:A:9:PRO:HG3	1:A:19:VAL:HG21	0.66	1.66	28	3
1:A:73:PHE:CZ	1:A:88:CYS:SG	0.65	2.88	43	6
1:A:10:SER:HA	1:A:110:ILE:HG23	0.65	1.66	21	16
1:A:73:PHE:CE1	1:A:88:CYS:SG	0.65	2.89	24	5
1:A:73:PHE:CD2	1:A:74:GLU:N	0.65	2.63	19	4
1:A:93:CYS:SG	1:A:112:PHE:CE1	0.65	2.89	9	14
1:A:13:LEU:HD11	1:A:110:ILE:HG22	0.65	1.67	43	3
1:A:69:VAL:CG1	1:A:95:VAL:HG11	0.65	2.20	38	1
1:A:69:VAL:HG11	1:A:110:ILE:HD13	0.65	1.68	12	1
1:A:70:ARG:O	1:A:112:PHE:CE2	0.65	2.50	1	18
1:A:55:VAL:CB	1:A:65:THR:HG21	0.65	2.22	9	8
1:A:48:ASN:HD21	1:A:50:ALA:HB3	0.65	1.51	28	1
1:A:68:THR:O	1:A:70:ARG:N	0.65	2.29	13	21
1:A:7:VAL:HA	1:A:21:VAL:HG22	0.65	1.68	19	10
1:A:26:LEU:HD11	1:A:60:ASN:OD1	0.65	1.92	36	11
1:A:63:ALA:HB3	1:A:97:LEU:HD13	0.65	1.69	23	3
1:A:63:ALA:CB	1:A:97:LEU:HD22	0.65	2.22	37	2
1:A:13:LEU:HD22	1:A:17:THR:HG21	0.64	1.68	40	2
1:A:88:CYS:O	1:A:91:ALA:N	0.64	2.26	44	20
1:A:65:THR:HG23	1:A:66:SER:N	0.64	2.07	34	17
1:A:55:VAL:HG12	1:A:97:LEU:HD11	0.64	1.69	29	2
1:A:24:ALA:HB1	1:A:97:LEU:HG	0.64	1.68	3	7
1:A:76:PHE:CZ	1:A:82:ARG:CB	0.64	2.80	8	2
1:A:112:PHE:N	1:A:112:PHE:CD1	0.64	2.62	41	6
1:A:32:TYR:HB3	1:A:97:LEU:HD11	0.64	1.68	24	2
1:A:21:VAL:HG11	1:A:67:LEU:HD13	0.64	1.70	17	2
1:A:48:ASN:ND2	1:A:73:PHE:CE1	0.64	2.66	28	1
1:A:55:VAL:HG12	1:A:97:LEU:HD21	0.64	1.69	44	3
1:A:73:PHE:CD1	1:A:73:PHE:C	0.64	2.71	25	2
1:A:65:THR:HG23	1:A:67:LEU:HD21	0.64	1.68	36	2
1:A:55:VAL:HB	1:A:65:THR:HG21	0.64	1.67	24	8
1:A:55:VAL:HG21	1:A:65:THR:HG21	0.64	1.69	44	6
1:A:85:THR:O	1:A:85:THR:CG2	0.64	2.46	35	18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:VAL:HG13	1:A:56:THR:N	0.64	2.08	15	14
1:A:34:VAL:CG1	1:A:67:LEU:HD11	0.64	2.23	13	1
1:A:5:ALA:O	1:A:108:VAL:HG21	0.64	1.93	20	2
1:A:38:ALA:O	1:A:40:VAL:HG23	0.64	1.92	7	1
1:A:9:PRO:O	1:A:10:SER:CB	0.64	2.45	6	12
1:A:91:ALA:O	1:A:92:ALA:CB	0.64	2.46	44	2
1:A:7:VAL:HG21	1:A:19:VAL:HG23	0.64	1.69	16	1
1:A:44:VAL:HA	1:A:77:LEU:HD23	0.63	1.67	6	1
1:A:32:TYR:HB3	1:A:97:LEU:HD12	0.63	1.69	5	4
1:A:10:SER:H	1:A:13:LEU:HD11	0.63	1.53	41	1
1:A:77:LEU:HD12	1:A:83:TRP:HZ2	0.63	1.53	44	1
1:A:40:VAL:HG11	1:A:83:TRP:CE2	0.63	2.28	34	2
1:A:46:ALA:HB2	1:A:83:TRP:HD1	0.63	1.51	2	17
1:A:39:TRP:CE3	1:A:94:GLN:NE2	0.63	2.66	21	2
1:A:41:ASP:O	1:A:42:THR:HG22	0.63	1.93	30	2
1:A:14:SER:OG	1:A:112:PHE:CE1	0.63	2.50	41	1
1:A:84:GLY:O	1:A:86:VAL:HG23	0.63	1.92	11	1
1:A:48:ASN:OD1	1:A:73:PHE:CD1	0.63	2.52	28	2
1:A:34:VAL:HG21	1:A:53:SER:HB3	0.63	1.70	9	10
1:A:69:VAL:CG1	1:A:110:ILE:HD12	0.63	2.24	19	1
1:A:93:CYS:CB	1:A:112:PHE:CZ	0.63	2.81	24	2
1:A:5:ALA:CB	1:A:97:LEU:HD12	0.63	2.24	25	1
1:A:50:ALA:O	1:A:52:PHE:CD2	0.63	2.52	14	13
1:A:34:VAL:HG21	1:A:67:LEU:CD2	0.63	2.22	10	5
1:A:38:ALA:CB	1:A:73:PHE:CE2	0.63	2.81	37	1
1:A:83:TRP:CE3	1:A:86:VAL:HG21	0.63	2.29	36	2
1:A:17:THR:HG23	1:A:69:VAL:HB	0.63	1.70	12	2
1:A:55:VAL:HG12	1:A:97:LEU:CD2	0.63	2.23	22	2
1:A:39:TRP:CG	1:A:45:LEU:HD12	0.63	2.29	24	2
1:A:13:LEU:HD13	1:A:69:VAL:HG11	0.63	1.71	32	1
1:A:50:ALA:O	1:A:52:PHE:CE2	0.62	2.52	43	7
1:A:7:VAL:HG22	1:A:9:PRO:HD2	0.62	1.70	27	4
1:A:67:LEU:HD23	1:A:95:VAL:HG12	0.62	1.69	5	2
1:A:7:VAL:CG1	1:A:19:VAL:CG2	0.62	2.76	8	8
1:A:7:VAL:HG12	1:A:19:VAL:CG2	0.62	2.25	36	5
1:A:95:VAL:HG23	1:A:110:ILE:HD13	0.62	1.71	20	1
1:A:9:PRO:O	1:A:110:ILE:HD13	0.62	1.94	16	1
1:A:65:THR:HG23	1:A:67:LEU:CD2	0.62	2.25	42	2
1:A:34:VAL:HG13	1:A:67:LEU:HD11	0.62	1.71	13	2
1:A:36:GLN:O	1:A:48:ASN:CB	0.62	2.48	25	36
1:A:48:ASN:HB2	1:A:73:PHE:CE1	0.62	2.29	25	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:42:THR:O	1:A:42:THR:HG22	0.62	1.94	27	3
1:A:88:CYS:HB3	1:A:112:PHE:CD1	0.62	2.30	44	3
1:A:59:ALA:O	1:A:60:ASN:CB	0.62	2.47	39	14
1:A:71:ARG:CG	1:A:89:THR:CG2	0.62	2.77	23	1
1:A:110:ILE:HG22	1:A:112:PHE:CD2	0.62	2.29	34	1
1:A:76:PHE:O	1:A:76:PHE:CD1	0.62	2.52	41	3
1:A:7:VAL:CG2	1:A:108:VAL:HG11	0.62	2.23	30	1
1:A:32:TYR:CE1	1:A:99:ASP:OD2	0.62	2.52	27	5
1:A:70:ARG:HG3	1:A:73:PHE:CE1	0.62	2.30	29	2
1:A:88:CYS:SG	1:A:112:PHE:CD2	0.62	2.93	16	2
1:A:69:VAL:HG12	1:A:112:PHE:CD2	0.62	2.29	5	3
1:A:66:SER:C	1:A:67:LEU:HD23	0.61	2.15	39	1
1:A:73:PHE:C	1:A:73:PHE:CD1	0.61	2.72	3	4
1:A:88:CYS:C	1:A:90:THR:H	0.61	1.97	21	1
1:A:72:SER:HB2	1:A:86:VAL:HG22	0.61	1.72	32	1
1:A:110:ILE:HG22	1:A:112:PHE:CE2	0.61	2.30	34	1
1:A:73:PHE:CE2	1:A:88:CYS:SG	0.61	2.93	33	5
1:A:50:ALA:O	1:A:52:PHE:CG	0.61	2.53	2	7
1:A:38:ALA:N	1:A:73:PHE:CZ	0.61	2.68	37	1
1:A:48:ASN:ND2	1:A:73:PHE:CG	0.61	2.68	9	3
1:A:32:TYR:HB3	1:A:97:LEU:HD21	0.61	1.73	4	3
1:A:34:VAL:CG2	1:A:67:LEU:HD13	0.61	2.25	42	2
1:A:82:ARG:C	1:A:83:TRP:CG	0.61	2.72	44	1
1:A:48:ASN:OD1	1:A:73:PHE:CE1	0.61	2.54	27	1
1:A:38:ALA:CB	1:A:93:CYS:SG	0.61	2.89	41	9
1:A:86:VAL:CG1	1:A:87:ASP:N	0.61	2.62	32	6
1:A:46:ALA:HB2	1:A:77:LEU:CD1	0.61	2.25	38	1
1:A:25:GLY:N	1:A:97:LEU:HD22	0.61	2.10	12	1
1:A:68:THR:CG2	1:A:70:ARG:CZ	0.61	2.77	15	18
1:A:86:VAL:O	1:A:87:ASP:C	0.61	2.39	44	3
1:A:57:ALA:HB1	1:A:61:GLY:C	0.61	2.16	6	21
1:A:7:VAL:CG1	1:A:19:VAL:HG23	0.61	2.24	42	15
1:A:77:LEU:O	1:A:78:PHE:CD2	0.61	2.53	44	2
1:A:8:THR:CB	1:A:9:PRO:CD	0.61	2.78	22	26
1:A:9:PRO:CG	1:A:19:VAL:HG11	0.61	2.25	25	4
1:A:71:ARG:O	1:A:73:PHE:CD2	0.61	2.54	20	1
1:A:85:THR:CG2	1:A:85:THR:O	0.61	2.49	38	14
1:A:7:VAL:CG2	1:A:95:VAL:CG1	0.61	2.78	43	6
1:A:40:VAL:HG13	1:A:83:TRP:CZ3	0.61	2.30	20	1
1:A:57:ALA:HB1	1:A:61:GLY:CA	0.60	2.26	14	16
1:A:73:PHE:CD1	1:A:88:CYS:SG	0.60	2.94	6	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:ALA:O	1:A:52:PHE:CD1	0.60	2.54	2	2
1:A:13:LEU:CD1	1:A:110:ILE:CG2	0.60	2.79	35	6
1:A:44:VAL:HA	1:A:77:LEU:HD21	0.60	1.71	38	2
1:A:11:SER:O	1:A:13:LEU:HD23	0.60	1.96	40	10
1:A:69:VAL:HG12	1:A:112:PHE:HE2	0.60	1.52	7	8
1:A:48:ASN:HB2	1:A:73:PHE:CE2	0.60	2.31	41	4
1:A:40:VAL:HG13	1:A:83:TRP:CE2	0.60	2.31	30	2
1:A:40:VAL:HG22	1:A:91:ALA:O	0.60	1.96	35	1
1:A:76:PHE:CD2	1:A:82:ARG:CB	0.60	2.85	17	3
1:A:47:CYS:HB2	1:A:76:PHE:CZ	0.60	2.31	35	3
1:A:32:TYR:CB	1:A:97:LEU:HD23	0.60	2.27	26	1
1:A:86:VAL:HG13	1:A:87:ASP:H	0.60	1.56	32	4
1:A:34:VAL:CG2	1:A:67:LEU:HD11	0.60	2.26	17	5
1:A:44:VAL:HG12	1:A:77:LEU:HD21	0.60	1.73	32	1
1:A:31:ALA:O	1:A:32:TYR:CD1	0.60	2.54	4	8
1:A:13:LEU:HD12	1:A:110:ILE:CG2	0.60	2.26	2	7
1:A:51:ASP:O	1:A:53:SER:N	0.60	2.33	8	27
1:A:103:ASN:CG	1:A:104:GLY:N	0.60	2.55	18	11
1:A:73:PHE:CE2	1:A:74:GLU:O	0.60	2.54	10	2
1:A:39:TRP:CE3	1:A:39:TRP:O	0.60	2.54	11	2
1:A:14:SER:O	1:A:112:PHE:CE2	0.60	2.54	42	1
1:A:16:GLY:O	1:A:18:VAL:HG23	0.60	1.97	11	14
1:A:48:ASN:CB	1:A:73:PHE:CE2	0.60	2.85	41	3
1:A:70:ARG:HD2	1:A:73:PHE:CZ	0.60	2.32	16	8
1:A:74:GLU:HA	1:A:84:GLY:CA	0.60	2.27	40	1
1:A:34:VAL:CG1	1:A:67:LEU:HD21	0.60	2.27	13	1
1:A:70:ARG:HG3	1:A:73:PHE:CZ	0.60	2.32	13	2
1:A:40:VAL:HG22	1:A:83:TRP:CE2	0.60	2.32	32	1
1:A:77:LEU:O	1:A:78:PHE:CG	0.59	2.55	44	5
1:A:40:VAL:HG21	1:A:83:TRP:NE1	0.59	2.12	15	7
1:A:76:PHE:O	1:A:77:LEU:C	0.59	2.39	43	17
1:A:67:LEU:HD12	1:A:95:VAL:CG2	0.59	2.27	13	1
1:A:51:ASP:OD2	1:A:53:SER:N	0.59	2.36	38	2
1:A:32:TYR:HB3	1:A:97:LEU:HD22	0.59	1.73	23	2
1:A:55:VAL:HG22	1:A:63:ALA:HB1	0.59	1.74	5	2
1:A:7:VAL:HG23	1:A:108:VAL:CG1	0.59	2.26	34	4
1:A:45:LEU:O	1:A:78:PHE:CE1	0.59	2.55	34	1
1:A:71:ARG:O	1:A:88:CYS:CB	0.59	2.51	17	12
1:A:34:VAL:HG13	1:A:67:LEU:CD2	0.59	2.28	14	1
1:A:110:ILE:O	1:A:112:PHE:CD1	0.59	2.56	41	15
1:A:65:THR:HG22	1:A:67:LEU:HD21	0.59	1.75	39	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:THR:CG2	1:A:70:ARG:NE	0.59	2.66	15	2
1:A:5:ALA:HB3	1:A:97:LEU:HD23	0.59	1.71	29	1
1:A:27:GLN:O	1:A:28:ALA:CB	0.59	2.50	10	26
1:A:88:CYS:O	1:A:89:THR:CG2	0.59	2.50	21	1
1:A:67:LEU:HD11	1:A:97:LEU:CD1	0.59	2.27	27	2
1:A:55:VAL:CG2	1:A:65:THR:CG2	0.59	2.81	31	8
1:A:24:ALA:HB2	1:A:97:LEU:HD23	0.59	1.74	28	1
1:A:5:ALA:HB1	1:A:97:LEU:HD23	0.59	1.75	14	3
1:A:39:TRP:HB3	1:A:45:LEU:HD12	0.59	1.74	28	3
1:A:48:ASN:ND2	1:A:73:PHE:CZ	0.59	2.70	28	1
1:A:88:CYS:CB	1:A:93:CYS:SG	0.58	2.91	27	3
1:A:48:ASN:OD1	1:A:50:ALA:HB3	0.58	1.98	36	2
1:A:45:LEU:O	1:A:78:PHE:CD1	0.58	2.56	34	1
1:A:34:VAL:HG22	1:A:97:LEU:HD21	0.58	1.73	25	1
1:A:46:ALA:HB3	1:A:83:TRP:HD1	0.58	1.56	38	3
1:A:7:VAL:HG21	1:A:95:VAL:HG13	0.58	1.73	38	1
1:A:65:THR:OG1	1:A:66:SER:N	0.58	2.36	9	9
1:A:83:TRP:CD2	1:A:86:VAL:HG11	0.58	2.33	42	2
1:A:78:PHE:C	1:A:78:PHE:CD1	0.58	2.76	39	2
1:A:49:PRO:HD2	1:A:76:PHE:CD1	0.58	2.34	33	3
1:A:89:THR:HG21	1:A:113:ASN:CB	0.58	2.28	39	1
1:A:71:ARG:O	1:A:73:PHE:CE1	0.58	2.56	38	1
1:A:7:VAL:HG13	1:A:21:VAL:HG23	0.58	1.75	34	2
1:A:13:LEU:CD1	1:A:112:PHE:CD1	0.58	2.86	32	1
1:A:67:LEU:CD1	1:A:97:LEU:HD23	0.58	2.28	34	1
1:A:69:VAL:CG1	1:A:112:PHE:CZ	0.58	2.87	36	12
1:A:12:GLY:N	1:A:110:ILE:CG2	0.58	2.66	31	3
1:A:67:LEU:HD11	1:A:97:LEU:HD23	0.58	1.74	34	1
1:A:17:THR:O	1:A:17:THR:CG2	0.58	2.51	16	9
1:A:73:PHE:CZ	1:A:88:CYS:CB	0.58	2.86	18	2
1:A:16:GLY:N	1:A:70:ARG:HA	0.58	2.14	39	5
1:A:89:THR:CB	1:A:112:PHE:O	0.58	2.51	30	9
1:A:71:ARG:HD3	1:A:89:THR:HG22	0.58	1.74	36	1
1:A:36:GLN:CB	1:A:70:ARG:NH2	0.58	2.67	21	2
1:A:76:PHE:CE2	1:A:78:PHE:HA	0.58	2.34	16	3
1:A:67:LEU:HD12	1:A:95:VAL:HG13	0.58	1.76	24	1
1:A:48:ASN:OD1	1:A:73:PHE:CD2	0.58	2.56	29	2
1:A:35:GLY:O	1:A:36:GLN:CG	0.57	2.52	19	12
1:A:85:THR:O	1:A:86:VAL:C	0.57	2.43	27	2
1:A:63:ALA:CB	1:A:97:LEU:CD2	0.57	2.82	30	3
1:A:42:THR:HG22	1:A:43:GLY:N	0.57	2.15	25	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:VAL:HG23	1:A:65:THR:CB	0.57	2.28	20	8
1:A:97:LEU:HD13	1:A:98:SER:H	0.57	1.56	24	1
1:A:32:TYR:HD2	1:A:63:ALA:HB2	0.57	1.58	25	3
1:A:36:GLN:HG2	1:A:73:PHE:CE2	0.57	2.35	29	2
1:A:74:GLU:CG	1:A:86:VAL:HG12	0.57	2.30	21	1
1:A:7:VAL:O	1:A:8:THR:C	0.57	2.41	22	38
1:A:88:CYS:SG	1:A:112:PHE:CG	0.57	2.98	36	5
1:A:40:VAL:HB	1:A:44:VAL:HG12	0.57	1.76	36	3
1:A:11:SER:HA	1:A:111:SER:O	0.57	1.99	7	9
1:A:37:CYS:C	1:A:73:PHE:CE1	0.57	2.78	37	1
1:A:71:ARG:O	1:A:73:PHE:CE2	0.57	2.58	32	1
1:A:34:VAL:HG12	1:A:51:ASP:OD2	0.57	1.99	2	3
1:A:77:LEU:O	1:A:78:PHE:HB2	0.57	1.99	1	8
1:A:65:THR:CG2	1:A:67:LEU:HD21	0.57	2.29	42	2
1:A:55:VAL:CG1	1:A:97:LEU:HD21	0.57	2.29	44	3
1:A:24:ALA:HB2	1:A:97:LEU:HD21	0.57	1.77	17	1
1:A:95:VAL:O	1:A:95:VAL:HG13	0.57	1.99	7	4
1:A:11:SER:O	1:A:13:LEU:CD2	0.57	2.52	41	5
1:A:76:PHE:CZ	1:A:78:PHE:HA	0.57	2.35	22	2
1:A:51:ASP:O	1:A:52:PHE:CB	0.57	2.53	38	16
1:A:69:VAL:HG13	1:A:110:ILE:HG21	0.57	1.74	5	1
1:A:46:ALA:HB2	1:A:77:LEU:HD12	0.57	1.77	38	1
1:A:34:VAL:CG2	1:A:53:SER:CB	0.57	2.82	9	3
1:A:108:VAL:CG1	1:A:108:VAL:O	0.57	2.53	26	5
1:A:108:VAL:O	1:A:108:VAL:HG13	0.57	2.00	16	4
1:A:7:VAL:HG11	1:A:110:ILE:HD11	0.57	1.75	28	1
1:A:35:GLY:O	1:A:36:GLN:CB	0.57	2.52	13	7
1:A:34:VAL:HG22	1:A:67:LEU:HD21	0.57	1.77	30	9
1:A:112:PHE:N	1:A:112:PHE:HD1	0.57	1.98	41	1
1:A:71:ARG:O	1:A:88:CYS:HB3	0.57	2.00	36	11
1:A:11:SER:O	1:A:13:LEU:HD12	0.57	2.00	8	6
1:A:93:CYS:HB3	1:A:112:PHE:CZ	0.57	2.35	24	6
1:A:35:GLY:O	1:A:95:VAL:HG23	0.57	1.99	41	2
1:A:36:GLN:OE1	1:A:70:ARG:NE	0.56	2.38	34	17
1:A:55:VAL:CG2	1:A:56:THR:N	0.56	2.68	27	11
1:A:10:SER:HA	1:A:110:ILE:HD13	0.56	1.76	8	2
1:A:88:CYS:SG	1:A:112:PHE:CZ	0.56	2.98	37	1
1:A:30:THR:H	1:A:57:ALA:HB3	0.56	1.59	14	8
1:A:77:LEU:CD1	1:A:83:TRP:CD1	0.56	2.87	6	2
1:A:40:VAL:HG12	1:A:41:ASP:OD2	0.56	2.00	29	1
1:A:108:VAL:HG13	1:A:108:VAL:O	0.56	2.00	30	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:67:LEU:HD11	1:A:97:LEU:HD12	0.56	1.77	37	1
1:A:44:VAL:CG1	1:A:77:LEU:HD22	0.56	2.30	4	1
1:A:71:ARG:O	1:A:88:CYS:SG	0.56	2.62	11	23
1:A:11:SER:O	1:A:13:LEU:CD1	0.56	2.54	23	6
1:A:6:THR:C	1:A:21:VAL:HG13	0.56	2.20	26	5
1:A:9:PRO:HB2	1:A:13:LEU:HD11	0.56	1.75	6	3
1:A:50:ALA:HA	1:A:52:PHE:CE1	0.56	2.35	34	8
1:A:45:LEU:C	1:A:45:LEU:HD23	0.56	2.20	33	1
1:A:47:CYS:HB3	1:A:76:PHE:CZ	0.56	2.35	35	2
1:A:103:ASN:OD1	1:A:103:ASN:C	0.56	2.44	15	1
1:A:9:PRO:CB	1:A:13:LEU:HD21	0.56	2.30	37	3
1:A:10:SER:N	1:A:13:LEU:HD11	0.56	2.16	41	1
1:A:83:TRP:N	1:A:83:TRP:CD1	0.56	2.74	10	1
1:A:34:VAL:CG2	1:A:67:LEU:HD21	0.56	2.30	13	1
1:A:40:VAL:HG13	1:A:83:TRP:NE1	0.56	2.16	26	1
1:A:44:VAL:CG1	1:A:77:LEU:HD13	0.56	2.31	34	2
1:A:17:THR:O	1:A:19:VAL:HG22	0.56	2.00	39	10
1:A:33:ASP:CB	1:A:98:SER:O	0.56	2.54	12	1
1:A:32:TYR:HE2	1:A:57:ALA:HB2	0.56	1.61	31	14
1:A:68:THR:O	1:A:68:THR:HG23	0.56	2.01	33	6
1:A:40:VAL:HG21	1:A:91:ALA:HB1	0.56	1.77	35	1
1:A:42:THR:HG23	1:A:42:THR:O	0.56	2.00	30	2
1:A:44:VAL:CG1	1:A:77:LEU:CD1	0.56	2.84	26	2
1:A:13:LEU:CD1	1:A:110:ILE:HG22	0.56	2.30	43	2
1:A:32:TYR:CD2	1:A:57:ALA:HB2	0.56	2.36	30	5
1:A:40:VAL:HG11	1:A:83:TRP:CE3	0.56	2.36	10	1
1:A:34:VAL:HG22	1:A:97:LEU:HD11	0.56	1.78	6	3
1:A:5:ALA:O	1:A:108:VAL:CG2	0.56	2.54	22	5
1:A:7:VAL:CB	1:A:110:ILE:HD11	0.56	2.31	33	2
1:A:93:CYS:SG	1:A:112:PHE:CE2	0.56	2.99	16	2
1:A:19:VAL:O	1:A:66:SER:HA	0.56	2.01	5	18
1:A:40:VAL:CB	1:A:44:VAL:HG12	0.56	2.30	36	1
1:A:12:GLY:HA2	1:A:17:THR:HG21	0.56	1.78	14	2
1:A:55:VAL:HG23	1:A:65:THR:HG21	0.56	1.78	41	1
1:A:83:TRP:CG	1:A:84:GLY:N	0.56	2.74	18	2
1:A:88:CYS:C	1:A:89:THR:CG2	0.56	2.74	37	1
1:A:13:LEU:CB	1:A:69:VAL:HG11	0.56	2.31	32	1
1:A:5:ALA:CB	1:A:97:LEU:CD2	0.55	2.84	20	3
1:A:76:PHE:CD2	1:A:82:ARG:HB3	0.55	2.37	17	6
1:A:48:ASN:ND2	1:A:50:ALA:HB3	0.55	2.15	28	1
1:A:27:GLN:CG	1:A:32:TYR:OH	0.55	2.55	12	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:88:CYS:C	1:A:90:THR:N	0.55	2.60	21	7
1:A:71:ARG:HB3	1:A:112:PHE:CG	0.55	2.37	25	2
1:A:87:ASP:O	1:A:90:THR:N	0.55	2.38	25	7
1:A:34:VAL:HG22	1:A:97:LEU:CD2	0.55	2.31	25	1
1:A:13:LEU:HD23	1:A:113:ASN:C	0.55	2.21	36	1
1:A:93:CYS:HB3	1:A:112:PHE:CE1	0.55	2.36	33	3
1:A:39:TRP:CD1	1:A:41:ASP:O	0.55	2.59	23	1
1:A:32:TYR:CG	1:A:97:LEU:CD2	0.55	2.80	4	1
1:A:46:ALA:HB2	1:A:83:TRP:NE1	0.55	2.17	10	2
1:A:4:THR:OG1	1:A:5:ALA:N	0.55	2.38	36	5
1:A:5:ALA:HB3	1:A:96:GLY:HA2	0.55	1.79	32	2
1:A:13:LEU:HD13	1:A:69:VAL:HG21	0.55	1.76	40	2
1:A:8:THR:CG2	1:A:9:PRO:HD3	0.55	2.32	22	9
1:A:86:VAL:O	1:A:88:CYS:N	0.55	2.39	27	2
1:A:17:THR:CG2	1:A:17:THR:O	0.55	2.54	24	7
1:A:51:ASP:O	1:A:52:PHE:HB2	0.55	2.02	43	17
1:A:39:TRP:O	1:A:39:TRP:CG	0.55	2.59	28	4
1:A:33:ASP:O	1:A:98:SER:O	0.55	2.25	4	7
1:A:5:ALA:HB2	1:A:97:LEU:CD2	0.55	2.32	41	2
1:A:82:ARG:O	1:A:83:TRP:CD2	0.55	2.60	44	1
1:A:7:VAL:HG12	1:A:9:PRO:CD	0.55	2.27	34	1
1:A:39:TRP:CE2	1:A:41:ASP:O	0.55	2.60	14	1
1:A:69:VAL:HG13	1:A:112:PHE:CE2	0.55	2.35	16	3
1:A:88:CYS:HB3	1:A:112:PHE:CE1	0.55	2.37	3	6
1:A:11:SER:HA	1:A:111:SER:CB	0.55	2.32	35	7
1:A:94:GLN:HE21	1:A:94:GLN:N	0.55	2.00	10	1
1:A:48:ASN:CB	1:A:73:PHE:CD2	0.54	2.90	36	2
1:A:76:PHE:CE2	1:A:82:ARG:CB	0.54	2.89	17	2
1:A:13:LEU:O	1:A:14:SER:O	0.54	2.25	32	1
1:A:23:GLY:O	1:A:63:ALA:CB	0.54	2.55	34	26
1:A:71:ARG:O	1:A:73:PHE:N	0.54	2.40	37	2
1:A:65:THR:HG22	1:A:67:LEU:CD1	0.54	2.32	30	5
1:A:66:SER:O	1:A:67:LEU:HD12	0.54	2.03	12	6
1:A:69:VAL:HG13	1:A:112:PHE:CE1	0.54	2.36	16	1
1:A:29:GLY:N	1:A:57:ALA:HB3	0.54	2.17	25	7
1:A:12:GLY:N	1:A:111:SER:O	0.54	2.40	42	16
1:A:13:LEU:O	1:A:17:THR:CG2	0.54	2.55	32	1
1:A:17:THR:CG2	1:A:19:VAL:HG13	0.54	2.32	17	6
1:A:55:VAL:HG11	1:A:97:LEU:HD11	0.54	1.80	25	1
1:A:13:LEU:HD13	1:A:17:THR:CG2	0.54	2.32	6	2
1:A:89:THR:OG1	1:A:113:ASN:N	0.54	2.41	16	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:VAL:HG12	1:A:110:ILE:HD12	0.54	1.79	15	1
1:A:74:GLU:OE1	1:A:83:TRP:CG	0.54	2.60	21	1
1:A:88:CYS:SG	1:A:112:PHE:CE2	0.54	3.01	30	1
1:A:46:ALA:HB1	1:A:75:GLY:C	0.54	2.23	43	12
1:A:88:CYS:CB	1:A:112:PHE:CD1	0.54	2.91	44	1
1:A:89:THR:OG1	1:A:113:ASN:CA	0.54	2.56	15	1
1:A:85:THR:O	1:A:86:VAL:HG12	0.54	2.03	32	1
1:A:5:ALA:O	1:A:107:GLY:CA	0.54	2.56	6	1
1:A:86:VAL:HG12	1:A:86:VAL:O	0.54	2.03	37	1
1:A:76:PHE:CZ	1:A:82:ARG:HB3	0.54	2.38	8	4
1:A:58:ASP:N	1:A:62:SER:O	0.54	2.41	9	14
1:A:83:TRP:CE3	1:A:86:VAL:CG2	0.54	2.90	36	1
1:A:36:GLN:CB	1:A:70:ARG:NH1	0.54	2.71	35	1
1:A:13:LEU:CG	1:A:69:VAL:HG11	0.54	2.33	32	1
1:A:67:LEU:HD11	1:A:97:LEU:HD11	0.54	1.80	7	2
1:A:94:GLN:CB	1:A:108:VAL:O	0.54	2.56	18	7
1:A:68:THR:HG23	1:A:68:THR:O	0.54	2.03	14	7
1:A:71:ARG:CZ	1:A:113:ASN:ND2	0.54	2.70	31	1
1:A:69:VAL:HG13	1:A:95:VAL:HG12	0.54	1.80	42	1
1:A:52:PHE:O	1:A:53:SER:C	0.54	2.45	6	36
1:A:51:ASP:C	1:A:53:SER:H	0.54	2.06	21	4
1:A:15:ASP:CG	1:A:15:ASP:O	0.53	2.46	32	5
1:A:50:ALA:O	1:A:52:PHE:CE1	0.53	2.60	2	2
1:A:47:CYS:HB3	1:A:76:PHE:CE2	0.53	2.39	35	2
1:A:39:TRP:CD1	1:A:39:TRP:C	0.53	2.81	9	2
1:A:7:VAL:CG1	1:A:21:VAL:HG22	0.53	2.32	1	11
1:A:47:CYS:O	1:A:75:GLY:CA	0.53	2.55	20	4
1:A:106:GLU:CG	1:A:108:VAL:HG23	0.53	2.31	13	1
1:A:44:VAL:HG13	1:A:83:TRP:HZ2	0.53	1.53	7	2
1:A:96:GLY:CA	1:A:107:GLY:CA	0.53	2.86	32	1
1:A:55:VAL:HG22	1:A:56:THR:H	0.53	1.64	23	17
1:A:83:TRP:O	1:A:84:GLY:C	0.53	2.47	10	2
1:A:16:GLY:CA	1:A:68:THR:OG1	0.53	2.56	39	2
1:A:7:VAL:CG2	1:A:21:VAL:HG22	0.53	2.21	22	1
1:A:77:LEU:O	1:A:78:PHE:HB3	0.53	2.03	35	2
1:A:73:PHE:O	1:A:74:GLU:CG	0.53	2.56	37	1
1:A:50:ALA:HA	1:A:52:PHE:CZ	0.53	2.38	43	1
1:A:58:ASP:O	1:A:58:ASP:OD1	0.53	2.26	38	20
1:A:88:CYS:O	1:A:90:THR:N	0.53	2.42	21	2
1:A:74:GLU:OE2	1:A:86:VAL:CG1	0.53	2.57	19	1
1:A:39:TRP:CD1	1:A:44:VAL:O	0.53	2.62	31	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:107:GLY:O	1:A:108:VAL:HG23	0.53	2.02	29	1
1:A:112:PHE:O	1:A:113:ASN:C	0.53	2.47	14	8
1:A:39:TRP:CD2	1:A:45:LEU:HD12	0.53	2.39	24	2
1:A:55:VAL:HG21	1:A:63:ALA:HB1	0.53	1.81	27	5
1:A:39:TRP:O	1:A:91:ALA:CB	0.53	2.57	31	5
1:A:35:GLY:O	1:A:36:GLN:HB3	0.53	2.02	29	8
1:A:27:GLN:OE1	1:A:32:TYR:CZ	0.53	2.62	20	1
1:A:44:VAL:HG13	1:A:77:LEU:HD23	0.53	1.81	31	1
1:A:12:GLY:H	1:A:110:ILE:HG22	0.53	1.61	18	3
1:A:13:LEU:O	1:A:17:THR:HB	0.53	2.03	32	1
1:A:34:VAL:HB	1:A:53:SER:CB	0.53	2.34	40	27
1:A:76:PHE:CZ	1:A:82:ARG:HB2	0.53	2.37	8	2
1:A:75:GLY:O	1:A:83:TRP:CB	0.53	2.57	8	1
1:A:95:VAL:CG2	1:A:110:ILE:HD13	0.53	2.34	20	1
1:A:25:GLY:H	1:A:97:LEU:HD22	0.53	1.64	12	1
1:A:74:GLU:HA	1:A:84:GLY:HA3	0.53	1.81	40	1
1:A:55:VAL:CG1	1:A:56:THR:N	0.53	2.72	6	10
1:A:66:SER:C	1:A:67:LEU:HD12	0.53	2.24	5	2
1:A:88:CYS:HB3	1:A:112:PHE:CE2	0.53	2.39	41	1
1:A:73:PHE:CE2	1:A:74:GLU:C	0.53	2.83	10	2
1:A:47:CYS:C	1:A:49:PRO:HD3	0.53	2.25	34	3
1:A:58:ASP:CG	1:A:62:SER:O	0.52	2.47	15	44
1:A:76:PHE:CE2	1:A:82:ARG:HB2	0.52	2.39	17	2
1:A:11:SER:O	1:A:13:LEU:HG	0.52	2.04	23	5
1:A:93:CYS:CB	1:A:112:PHE:CE1	0.52	2.92	17	4
1:A:4:THR:HG22	1:A:106:GLU:CD	0.52	2.23	37	1
1:A:39:TRP:CD1	1:A:39:TRP:O	0.52	2.63	40	2
1:A:103:ASN:OD1	1:A:104:GLY:N	0.52	2.43	41	5
1:A:88:CYS:SG	1:A:93:CYS:HB3	0.52	2.44	29	3
1:A:15:ASP:HA	1:A:71:ARG:CB	0.52	2.34	1	20
1:A:41:ASP:O	1:A:43:GLY:N	0.52	2.42	33	10
1:A:58:ASP:OD1	1:A:58:ASP:O	0.52	2.26	9	23
1:A:44:VAL:HG13	1:A:77:LEU:CG	0.52	2.34	44	1
1:A:24:ALA:HB1	1:A:97:LEU:CD1	0.52	2.31	5	1
1:A:36:GLN:OE1	1:A:70:ARG:HG2	0.52	2.04	13	7
1:A:67:LEU:HD23	1:A:67:LEU:N	0.52	2.19	39	1
1:A:107:GLY:C	1:A:108:VAL:CG2	0.52	2.78	29	2
1:A:72:SER:CB	1:A:87:ASP:N	0.52	2.72	32	1
1:A:14:SER:OG	1:A:15:ASP:N	0.52	2.42	40	2
1:A:37:CYS:HB3	1:A:45:LEU:HD21	0.52	1.79	33	3
1:A:93:CYS:HB3	1:A:112:PHE:CE2	0.52	2.40	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:ASP:CB	1:A:70:ARG:NH1	0.52	2.72	34	2
1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CD2	0.52	2.72	16	1
1:A:47:CYS:HB3	1:A:76:PHE:CE1	0.52	2.39	6	2
1:A:47:CYS:CB	1:A:76:PHE:CE1	0.52	2.93	6	1
1:A:38:ALA:O	1:A:45:LEU:HD23	0.52	2.05	22	1
1:A:76:PHE:CE2	1:A:82:ARG:HB3	0.52	2.39	8	3
1:A:24:ALA:HB2	1:A:97:LEU:HD12	0.52	1.82	38	1
1:A:73:PHE:HB3	1:A:84:GLY:O	0.52	2.05	44	1
1:A:83:TRP:CE3	1:A:83:TRP:C	0.52	2.83	20	1
1:A:69:VAL:HG11	1:A:110:ILE:CD1	0.52	2.35	12	2
1:A:69:VAL:HG11	1:A:110:ILE:HB	0.52	1.81	41	1
1:A:71:ARG:HB2	1:A:112:PHE:CG	0.52	2.40	10	3
1:A:74:GLU:CG	1:A:74:GLU:O	0.52	2.58	13	1
1:A:68:THR:CG2	1:A:70:ARG:NH2	0.52	2.72	17	1
1:A:14:SER:CB	1:A:17:THR:OG1	0.52	2.56	39	4
1:A:83:TRP:O	1:A:85:THR:N	0.52	2.42	30	2
1:A:73:PHE:CZ	1:A:88:CYS:HB3	0.52	2.40	35	1
1:A:97:LEU:CD2	1:A:98:SER:N	0.52	2.68	2	2
1:A:40:VAL:CG1	1:A:83:TRP:CZ2	0.52	2.91	30	1
1:A:34:VAL:CG1	1:A:51:ASP:OD2	0.52	2.58	2	2
1:A:46:ALA:HB1	1:A:75:GLY:CA	0.52	2.35	7	7
1:A:36:GLN:CG	1:A:95:VAL:CG2	0.52	2.87	3	4
1:A:14:SER:OG	1:A:71:ARG:CB	0.52	2.58	24	1
1:A:4:THR:CG2	1:A:106:GLU:O	0.52	2.58	32	1
1:A:5:ALA:C	1:A:6:THR:CG2	0.52	2.78	18	34
1:A:86:VAL:HG22	1:A:87:ASP:H	0.52	1.65	27	3
1:A:45:LEU:CD2	1:A:45:LEU:C	0.52	2.78	42	1
1:A:73:PHE:O	1:A:85:THR:N	0.51	2.44	26	3
1:A:21:VAL:CG1	1:A:67:LEU:HD22	0.51	2.35	18	3
1:A:65:THR:CG2	1:A:67:LEU:CD1	0.51	2.88	30	5
1:A:10:SER:CA	1:A:110:ILE:HG23	0.51	2.35	26	5
1:A:18:VAL:HG12	1:A:66:SER:CB	0.51	2.35	25	3
1:A:41:ASP:O	1:A:42:THR:CB	0.51	2.57	30	2
1:A:33:ASP:O	1:A:98:SER:CB	0.51	2.58	1	4
1:A:95:VAL:CG1	1:A:110:ILE:CD1	0.51	2.83	3	5
1:A:39:TRP:HE1	1:A:94:GLN:NE2	0.51	2.02	44	1
1:A:32:TYR:O	1:A:97:LEU:CD2	0.51	2.59	23	1
1:A:83:TRP:HB3	1:A:86:VAL:HG11	0.51	1.80	17	1
1:A:24:ALA:HB2	1:A:97:LEU:HD13	0.51	1.82	4	1
1:A:56:THR:CG2	1:A:57:ALA:N	0.51	2.73	22	9
1:A:34:VAL:HA	1:A:97:LEU:HD23	0.51	1.82	25	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:CYS:HB2	1:A:112:PHE:CZ	0.51	2.40	35	5
1:A:55:VAL:HG22	1:A:56:THR:N	0.51	2.21	19	12
1:A:89:THR:CB	1:A:113:ASN:C	0.51	2.79	8	2
1:A:38:ALA:CA	1:A:94:GLN:OE1	0.51	2.58	43	1
1:A:58:ASP:OD1	1:A:62:SER:O	0.51	2.29	9	42
1:A:108:VAL:O	1:A:108:VAL:CG1	0.51	2.58	1	3
1:A:108:VAL:HG12	1:A:110:ILE:CD1	0.51	2.35	13	2
1:A:52:PHE:O	1:A:53:SER:O	0.51	2.28	38	25
1:A:48:ASN:OD1	1:A:73:PHE:CE2	0.51	2.63	13	4
1:A:11:SER:CA	1:A:111:SER:O	0.51	2.59	9	2
1:A:6:THR:HA	1:A:108:VAL:HG12	0.51	1.83	6	1
1:A:103:ASN:ND2	1:A:104:GLY:N	0.51	2.59	18	5
1:A:89:THR:CG2	1:A:113:ASN:C	0.51	2.79	8	2
1:A:17:THR:HG23	1:A:17:THR:O	0.51	2.06	8	2
1:A:93:CYS:HB2	1:A:112:PHE:CE1	0.51	2.40	35	3
1:A:38:ALA:O	1:A:45:LEU:HD22	0.51	2.05	40	2
1:A:26:LEU:HA	1:A:61:GLY:C	0.51	2.26	27	30
1:A:92:ALA:O	1:A:93:CYS:O	0.51	2.29	14	27
1:A:39:TRP:C	1:A:39:TRP:CD1	0.51	2.83	42	2
1:A:55:VAL:CG1	1:A:97:LEU:CD2	0.51	2.89	22	1
1:A:37:CYS:O	1:A:93:CYS:HB2	0.51	2.06	31	8
1:A:107:GLY:O	1:A:108:VAL:CB	0.51	2.58	29	3
1:A:18:VAL:HA	1:A:67:LEU:O	0.51	2.06	41	12
1:A:33:ASP:N	1:A:98:SER:O	0.51	2.44	34	14
1:A:5:ALA:CB	1:A:23:GLY:C	0.51	2.79	36	1
1:A:91:ALA:O	1:A:92:ALA:O	0.51	2.28	35	5
1:A:41:ASP:O	1:A:42:THR:CG2	0.51	2.59	30	2
1:A:69:VAL:HG22	1:A:95:VAL:HG11	0.51	1.82	42	2
1:A:74:GLU:O	1:A:76:PHE:CD1	0.51	2.64	42	2
1:A:71:ARG:HB3	1:A:112:PHE:CD2	0.51	2.41	43	2
1:A:105:PRO:O	1:A:106:GLU:CG	0.51	2.59	33	6
1:A:6:THR:O	1:A:21:VAL:CG1	0.51	2.59	41	3
1:A:13:LEU:HA	1:A:113:ASN:N	0.51	2.21	8	5
1:A:5:ALA:HB2	1:A:97:LEU:HD22	0.51	1.81	41	1
1:A:24:ALA:CB	1:A:32:TYR:CD2	0.50	2.94	5	3
1:A:50:ALA:O	1:A:52:PHE:CZ	0.50	2.65	2	2
1:A:6:THR:CA	1:A:108:VAL:HG21	0.50	2.31	36	1
1:A:63:ALA:HB2	1:A:97:LEU:CD2	0.50	2.36	6	2
1:A:112:PHE:CD1	1:A:112:PHE:N	0.50	2.79	35	7
1:A:46:ALA:CA	1:A:77:LEU:HD12	0.50	2.35	38	1
1:A:46:ALA:CB	1:A:83:TRP:CG	0.50	2.94	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:VAL:CG2	1:A:83:TRP:CD1	0.50	2.95	26	2
1:A:27:GLN:OE1	1:A:32:TYR:CE1	0.50	2.65	20	2
1:A:19:VAL:O	1:A:66:SER:CA	0.50	2.60	24	1
1:A:37:CYS:CB	1:A:45:LEU:HD21	0.50	2.36	39	2
1:A:21:VAL:N	1:A:65:THR:O	0.50	2.45	31	11
1:A:16:GLY:HA2	1:A:68:THR:OG1	0.50	2.07	39	2
1:A:51:ASP:OD1	1:A:53:SER:CB	0.50	2.60	38	1
1:A:75:GLY:O	1:A:83:TRP:O	0.50	2.29	40	2
1:A:65:THR:CG2	1:A:66:SER:N	0.50	2.74	1	7
1:A:38:ALA:CB	1:A:88:CYS:SG	0.50	2.98	12	5
1:A:26:LEU:N	1:A:32:TYR:OH	0.50	2.44	38	1
1:A:77:LEU:CD2	1:A:83:TRP:CD1	0.50	2.94	21	1
1:A:10:SER:C	1:A:110:ILE:CG2	0.50	2.80	32	1
1:A:93:CYS:HB2	1:A:112:PHE:CE2	0.50	2.41	1	1
1:A:27:GLN:CB	1:A:32:TYR:OH	0.50	2.60	24	7
1:A:6:THR:C	1:A:21:VAL:HG23	0.50	2.26	13	1
1:A:32:TYR:CD1	1:A:97:LEU:HB3	0.50	2.42	30	2
1:A:39:TRP:CD1	1:A:45:LEU:HB2	0.50	2.42	23	1
1:A:103:ASN:OD1	1:A:103:ASN:N	0.50	2.44	10	5
1:A:12:GLY:C	1:A:14:SER:N	0.50	2.66	17	4
1:A:12:GLY:C	1:A:17:THR:HG21	0.50	2.27	8	1
1:A:74:GLU:HG3	1:A:76:PHE:CE1	0.50	2.41	42	2
1:A:13:LEU:HB2	1:A:112:PHE:CE1	0.50	2.42	42	1
1:A:71:ARG:HB2	1:A:112:PHE:CD2	0.50	2.42	19	4
1:A:75:GLY:N	1:A:83:TRP:O	0.50	2.44	30	2
1:A:40:VAL:CG2	1:A:91:ALA:CB	0.50	2.85	43	1
1:A:98:SER:CB	1:A:103:ASN:O	0.50	2.60	30	1
1:A:94:GLN:CB	1:A:108:VAL:C	0.49	2.81	2	3
1:A:93:CYS:CB	1:A:112:PHE:CE2	0.49	2.95	12	2
1:A:6:THR:O	1:A:21:VAL:CG2	0.49	2.60	16	5
1:A:49:PRO:HG3	1:A:76:PHE:CE2	0.49	2.42	35	2
1:A:13:LEU:HB3	1:A:17:THR:CG2	0.49	2.33	12	4
1:A:40:VAL:CG2	1:A:44:VAL:HG12	0.49	2.37	20	1
1:A:71:ARG:HG3	1:A:89:THR:CG2	0.49	2.37	23	2
1:A:71:ARG:CD	1:A:89:THR:CG2	0.49	2.90	11	1
1:A:14:SER:C	1:A:112:PHE:CE2	0.49	2.85	42	1
1:A:71:ARG:HA	1:A:88:CYS:HB3	0.49	1.84	42	1
1:A:83:TRP:CE3	1:A:83:TRP:HA	0.49	2.42	38	3
1:A:48:ASN:HB2	1:A:73:PHE:CD2	0.49	2.41	6	1
1:A:39:TRP:CE3	1:A:45:LEU:CD1	0.49	2.95	24	1
1:A:70:ARG:HD2	1:A:73:PHE:CE1	0.49	2.43	36	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:VAL:CG1	1:A:97:LEU:CD1	0.49	2.84	29	3
1:A:74:GLU:CD	1:A:83:TRP:CB	0.49	2.81	21	1
1:A:95:VAL:O	1:A:108:VAL:HG11	0.49	2.07	12	1
1:A:51:ASP:OD2	1:A:70:ARG:NH1	0.49	2.46	19	1
1:A:64:SER:O	1:A:65:THR:HB	0.49	2.07	9	11
1:A:40:VAL:HG11	1:A:83:TRP:HZ2	0.49	1.58	22	3
1:A:32:TYR:O	1:A:55:VAL:CG1	0.49	2.60	43	4
1:A:74:GLU:CB	1:A:84:GLY:O	0.49	2.60	33	1
1:A:36:GLN:CB	1:A:70:ARG:CZ	0.49	2.90	21	3
1:A:99:ASP:OD1	1:A:99:ASP:N	0.49	2.46	11	13
1:A:59:ALA:O	1:A:60:ASN:HB2	0.49	2.07	36	14
1:A:87:ASP:CB	1:A:89:THR:HG22	0.49	2.36	40	2
1:A:7:VAL:HG21	1:A:95:VAL:CG1	0.49	2.37	31	8
1:A:4:THR:C	1:A:24:ALA:N	0.49	2.66	13	3
1:A:11:SER:O	1:A:13:LEU:CG	0.49	2.61	23	3
1:A:49:PRO:HG3	1:A:76:PHE:CD2	0.49	2.42	35	2
1:A:71:ARG:CG	1:A:72:SER:H	0.49	2.20	42	3
1:A:13:LEU:CD1	1:A:111:SER:O	0.49	2.58	35	1
1:A:39:TRP:O	1:A:39:TRP:CD1	0.49	2.66	25	1
1:A:34:VAL:CG1	1:A:67:LEU:CD2	0.49	2.90	14	2
1:A:14:SER:N	1:A:17:THR:OG1	0.49	2.45	10	11
1:A:44:VAL:HG13	1:A:77:LEU:CD2	0.49	2.33	35	2
1:A:38:ALA:HB1	1:A:88:CYS:SG	0.49	2.48	32	1
1:A:70:ARG:HD2	1:A:73:PHE:CE2	0.49	2.43	28	2
1:A:14:SER:CB	1:A:112:PHE:CG	0.49	2.96	41	1
1:A:97:LEU:CD2	1:A:97:LEU:C	0.49	2.80	8	3
1:A:95:VAL:HG13	1:A:95:VAL:O	0.49	2.07	30	5
1:A:71:ARG:CZ	1:A:87:ASP:OD2	0.49	2.59	26	2
1:A:38:ALA:CB	1:A:73:PHE:CZ	0.49	2.96	37	1
1:A:75:GLY:H	1:A:84:GLY:HA3	0.49	1.67	32	1
1:A:51:ASP:OD2	1:A:70:ARG:NH2	0.48	2.46	2	3
1:A:42:THR:O	1:A:44:VAL:N	0.48	2.46	20	2
1:A:88:CYS:O	1:A:89:THR:HG23	0.48	2.08	37	1
1:A:51:ASP:O	1:A:70:ARG:NH1	0.48	2.46	42	5
1:A:36:GLN:O	1:A:48:ASN:N	0.48	2.46	25	7
1:A:71:ARG:HA	1:A:88:CYS:SG	0.48	2.48	25	3
1:A:34:VAL:HG21	1:A:67:LEU:HG	0.48	1.84	1	5
1:A:89:THR:CB	1:A:112:PHE:HB2	0.48	2.37	18	2
1:A:34:VAL:CG2	1:A:53:SER:HB3	0.48	2.37	34	8
1:A:70:ARG:HG3	1:A:73:PHE:CD1	0.48	2.44	29	1
1:A:76:PHE:CE1	1:A:82:ARG:HB3	0.48	2.42	32	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:PHE:CE1	1:A:82:ARG:HB2	0.48	2.43	38	3
1:A:42:THR:O	1:A:43:GLY:C	0.48	2.51	36	3
1:A:34:VAL:CG1	1:A:35:GLY:N	0.48	2.76	17	6
1:A:32:TYR:CD1	1:A:97:LEU:CD2	0.48	2.94	35	3
1:A:71:ARG:HG3	1:A:112:PHE:CD1	0.48	2.43	19	2
1:A:38:ALA:N	1:A:94:GLN:OE1	0.48	2.46	43	1
1:A:13:LEU:O	1:A:113:ASN:CB	0.48	2.62	27	1
1:A:47:CYS:O	1:A:76:PHE:CD2	0.48	2.66	36	2
1:A:7:VAL:O	1:A:9:PRO:O	0.48	2.32	17	10
1:A:14:SER:OG	1:A:69:VAL:O	0.48	2.31	41	1
1:A:20:LYS:HA	1:A:65:THR:O	0.48	2.08	9	3
1:A:21:VAL:HG11	1:A:67:LEU:CD2	0.48	2.38	18	1
1:A:48:ASN:CG	1:A:73:PHE:CE1	0.48	2.87	12	2
1:A:39:TRP:CD1	1:A:94:GLN:NE2	0.48	2.81	28	1
1:A:77:LEU:HG	1:A:83:TRP:CD1	0.48	2.44	6	1
1:A:110:ILE:HB	1:A:112:PHE:CE1	0.48	2.44	5	1
1:A:36:GLN:OE1	1:A:69:VAL:HA	0.48	2.08	12	1
1:A:8:THR:HB	1:A:9:PRO:CD	0.48	2.39	25	5
1:A:98:SER:OG	1:A:103:ASN:CB	0.48	2.62	36	1
1:A:71:ARG:O	1:A:88:CYS:HB2	0.48	2.08	43	10
1:A:51:ASP:OD1	1:A:53:SER:HB2	0.48	2.08	38	1
1:A:71:ARG:HG3	1:A:112:PHE:CG	0.48	2.43	19	2
1:A:99:ASP:OD1	1:A:103:ASN:OD1	0.48	2.31	15	1
1:A:76:PHE:CD2	1:A:82:ARG:HB2	0.48	2.43	17	1
1:A:45:LEU:HB3	1:A:78:PHE:CZ	0.48	2.44	34	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:9:PRO:HD2	0.48	2.31	34	9
1:A:99:ASP:N	1:A:99:ASP:OD1	0.48	2.46	27	13
1:A:5:ALA:O	1:A:6:THR:CG2	0.48	2.61	22	5
1:A:73:PHE:O	1:A:84:GLY:O	0.48	2.31	38	6
1:A:88:CYS:CB	1:A:112:PHE:CE2	0.48	2.97	41	1
1:A:106:GLU:N	1:A:106:GLU:CD	0.48	2.67	26	1
1:A:20:LYS:CG	1:A:65:THR:O	0.48	2.61	38	1
1:A:37:CYS:C	1:A:73:PHE:CZ	0.48	2.87	37	1
1:A:59:ALA:O	1:A:60:ASN:C	0.48	2.52	40	26
1:A:37:CYS:CB	1:A:47:CYS:HA	0.48	2.39	7	20
1:A:97:LEU:C	1:A:97:LEU:CD2	0.48	2.78	2	3
1:A:46:ALA:CB	1:A:77:LEU:HD12	0.48	2.39	38	1
1:A:82:ARG:O	1:A:83:TRP:CG	0.48	2.66	44	1
1:A:34:VAL:HG21	1:A:67:LEU:CD1	0.48	2.38	15	3
1:A:39:TRP:HA	1:A:45:LEU:HD12	0.48	1.84	5	2
1:A:34:VAL:HG13	1:A:67:LEU:HD21	0.48	1.86	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:VAL:CG2	1:A:67:LEU:CD1	0.48	2.92	44	4
1:A:7:VAL:HG12	1:A:10:SER:N	0.48	2.23	20	1
1:A:103:ASN:O	1:A:104:GLY:C	0.48	2.51	15	2
1:A:95:VAL:HG12	1:A:110:ILE:HD11	0.48	1.85	17	1
1:A:15:ASP:CA	1:A:71:ARG:CG	0.47	2.92	3	2
1:A:32:TYR:CB	1:A:97:LEU:HD12	0.47	2.39	5	1
1:A:7:VAL:CG2	1:A:110:ILE:CD1	0.47	2.92	7	2
1:A:13:LEU:CB	1:A:69:VAL:CG1	0.47	2.92	32	1
1:A:51:ASP:CG	1:A:52:PHE:N	0.47	2.68	34	1
1:A:16:GLY:O	1:A:18:VAL:N	0.47	2.47	33	6
1:A:39:TRP:CZ2	1:A:45:LEU:HD12	0.47	2.43	44	1
1:A:32:TYR:HB2	1:A:55:VAL:HG13	0.47	1.83	17	1
1:A:87:ASP:OD2	1:A:87:ASP:N	0.47	2.47	2	1
1:A:39:TRP:HA	1:A:45:LEU:HD22	0.47	1.85	14	1
1:A:77:LEU:HD11	1:A:83:TRP:CZ2	0.47	2.45	37	3
1:A:67:LEU:HD12	1:A:95:VAL:CG1	0.47	2.39	13	1
1:A:13:LEU:CD2	1:A:111:SER:O	0.47	2.61	33	1
1:A:7:VAL:HG21	1:A:95:VAL:HG11	0.47	1.85	31	1
1:A:76:PHE:CE2	1:A:82:ARG:HD2	0.47	2.44	2	3
1:A:4:THR:HG22	1:A:106:GLU:OE2	0.47	2.10	37	1
1:A:95:VAL:O	1:A:108:VAL:CB	0.47	2.63	12	1
1:A:13:LEU:O	1:A:14:SER:C	0.47	2.53	8	2
1:A:45:LEU:HD21	1:A:47:CYS:SG	0.47	2.50	13	2
1:A:110:ILE:HB	1:A:112:PHE:CZ	0.47	2.45	17	1
1:A:110:ILE:HG22	1:A:111:SER:N	0.47	2.25	32	1
1:A:13:LEU:CD2	1:A:110:ILE:CG2	0.47	2.91	11	1
1:A:44:VAL:CG1	1:A:77:LEU:HD23	0.47	2.37	36	1
1:A:40:VAL:HG21	1:A:46:ALA:HB2	0.47	1.85	26	1
1:A:34:VAL:HG22	1:A:97:LEU:HD23	0.47	1.85	38	1
1:A:51:ASP:HB2	1:A:70:ARG:NH1	0.47	2.24	38	2
1:A:34:VAL:CG2	1:A:67:LEU:HD22	0.47	2.40	37	1
1:A:87:ASP:O	1:A:88:CYS:O	0.47	2.33	37	1
1:A:39:TRP:N	1:A:94:GLN:OE1	0.47	2.47	43	1
1:A:76:PHE:CE2	1:A:78:PHE:C	0.47	2.88	11	1
1:A:71:ARG:CG	1:A:89:THR:HG23	0.47	2.39	11	1
1:A:51:ASP:HA	1:A:70:ARG:NH1	0.47	2.25	32	15
1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:HD23	0.47	2.24	42	4
1:A:29:GLY:H	1:A:57:ALA:HB3	0.47	1.69	20	2
1:A:9:PRO:HB2	1:A:13:LEU:CD2	0.47	2.39	34	7
1:A:94:GLN:OE1	1:A:94:GLN:N	0.47	2.48	4	10
1:A:73:PHE:O	1:A:86:VAL:HG12	0.47	2.09	4	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:TRP:CD2	1:A:45:LEU:CD1	0.47	2.97	24	1
1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:OE1	0.47	2.48	44	5
1:A:36:GLN:HA	1:A:94:GLN:O	0.47	2.10	5	1
1:A:15:ASP:CB	1:A:71:ARG:HB3	0.47	2.39	11	5
1:A:78:PHE:CD1	1:A:78:PHE:C	0.47	2.87	4	4
1:A:34:VAL:CG2	1:A:67:LEU:HG	0.47	2.40	4	5
1:A:74:GLU:HA	1:A:85:THR:H	0.47	1.70	30	3
1:A:47:CYS:O	1:A:76:PHE:CD1	0.47	2.67	13	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:9:PRO:O	0.47	2.63	13	1
1:A:45:LEU:CD2	1:A:47:CYS:SG	0.47	3.03	13	1
1:A:88:CYS:C	1:A:93:CYS:SG	0.47	2.93	39	2
1:A:51:ASP:HB2	1:A:70:ARG:CZ	0.47	2.39	38	1
1:A:14:SER:O	1:A:16:GLY:N	0.47	2.47	21	4
1:A:8:THR:N	1:A:9:PRO:CD	0.47	2.77	34	8
1:A:34:VAL:HG21	1:A:53:SER:HB2	0.47	1.82	9	2
1:A:10:SER:HA	1:A:110:ILE:CG2	0.47	2.40	32	1
1:A:74:GLU:O	1:A:74:GLU:CG	0.47	2.63	34	2
1:A:71:ARG:CG	1:A:112:PHE:HB2	0.47	2.40	30	1
1:A:11:SER:CB	1:A:111:SER:HB2	0.47	2.40	38	4
1:A:99:ASP:O	1:A:103:ASN:ND2	0.47	2.48	10	5
1:A:83:TRP:HA	1:A:83:TRP:CE3	0.47	2.45	8	2
1:A:68:THR:O	1:A:70:ARG:NH2	0.47	2.48	4	6
1:A:66:SER:O	1:A:67:LEU:HD23	0.47	2.10	41	2
1:A:45:LEU:C	1:A:45:LEU:CD2	0.47	2.82	37	3
1:A:77:LEU:HD22	1:A:83:TRP:CD1	0.47	2.45	39	2
1:A:37:CYS:O	1:A:93:CYS:HB3	0.47	2.08	44	2
1:A:42:THR:O	1:A:42:THR:CG2	0.47	2.63	27	2
1:A:9:PRO:HB2	1:A:13:LEU:HD22	0.47	1.85	11	2
1:A:36:GLN:OE1	1:A:68:THR:O	0.47	2.32	21	1
1:A:76:PHE:CD1	1:A:82:ARG:HB2	0.47	2.45	21	2
1:A:7:VAL:HG23	1:A:110:ILE:HD11	0.47	1.83	3	1
1:A:36:GLN:HG2	1:A:95:VAL:CB	0.47	2.40	3	1
1:A:45:LEU:HD11	1:A:94:GLN:HE22	0.47	1.70	4	1
1:A:110:ILE:CG2	1:A:112:PHE:CD2	0.47	2.98	34	1
1:A:56:THR:HG22	1:A:57:ALA:N	0.47	2.25	40	4
1:A:71:ARG:HA	1:A:88:CYS:HB2	0.47	1.87	7	7
1:A:51:ASP:OD1	1:A:53:SER:N	0.47	2.48	19	3
1:A:69:VAL:CG1	1:A:112:PHE:CE1	0.47	2.95	1	1
1:A:40:VAL:HG22	1:A:83:TRP:HE1	0.47	1.70	12	2
1:A:45:LEU:O	1:A:77:LEU:O	0.47	2.33	22	10
1:A:36:GLN:HB3	1:A:70:ARG:CZ	0.47	2.40	9	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:THR:OG1	1:A:70:ARG:HG3	0.47	2.10	3	1
1:A:34:VAL:HA	1:A:97:LEU:HD13	0.47	1.87	14	2
1:A:37:CYS:C	1:A:94:GLN:NE2	0.47	2.69	6	1
1:A:69:VAL:CG1	1:A:110:ILE:CG2	0.47	2.92	5	1
1:A:30:THR:CG2	1:A:31:ALA:N	0.47	2.77	26	4
1:A:70:ARG:HG3	1:A:73:PHE:CD2	0.47	2.45	31	2
1:A:98:SER:O	1:A:99:ASP:O	0.47	2.33	4	1
1:A:24:ALA:HB1	1:A:32:TYR:CD2	0.46	2.44	5	1
1:A:55:VAL:CG2	1:A:65:THR:HB	0.46	2.39	41	10
1:A:36:GLN:HG2	1:A:95:VAL:CG2	0.46	2.41	3	5
1:A:45:LEU:HD13	1:A:45:LEU:C	0.46	2.30	8	1
1:A:13:LEU:O	1:A:113:ASN:N	0.46	2.48	39	2
1:A:46:ALA:HB1	1:A:76:PHE:N	0.46	2.24	15	4
1:A:34:VAL:HG12	1:A:51:ASP:CB	0.46	2.40	21	1
1:A:4:THR:CB	1:A:24:ALA:O	0.46	2.63	40	1
1:A:34:VAL:O	1:A:51:ASP:CG	0.46	2.53	21	22
1:A:27:GLN:C	1:A:61:GLY:HA3	0.46	2.31	22	16
1:A:15:ASP:CB	1:A:71:ARG:CG	0.46	2.93	39	2
1:A:107:GLY:O	1:A:108:VAL:HB	0.46	2.09	20	2
1:A:96:GLY:HA3	1:A:107:GLY:CA	0.46	2.41	32	5
1:A:36:GLN:HB3	1:A:70:ARG:NH1	0.46	2.26	34	3
1:A:18:VAL:HG22	1:A:68:THR:CB	0.46	2.40	40	5
1:A:5:ALA:C	1:A:6:THR:HG23	0.46	2.31	22	5
1:A:26:LEU:CD1	1:A:60:ASN:OD1	0.46	2.63	10	3
1:A:33:ASP:O	1:A:98:SER:N	0.46	2.49	4	5
1:A:15:ASP:O	1:A:15:ASP:CG	0.46	2.54	35	3
1:A:27:GLN:CD	1:A:30:THR:HG21	0.46	2.31	11	1
1:A:85:THR:O	1:A:86:VAL:O	0.46	2.33	27	1
1:A:17:THR:HB	1:A:112:PHE:CZ	0.46	2.46	42	1
1:A:40:VAL:CG1	1:A:41:ASP:N	0.46	2.75	28	6
1:A:17:THR:O	1:A:69:VAL:CG2	0.46	2.64	28	2
1:A:12:GLY:O	1:A:17:THR:HG21	0.46	2.11	8	1
1:A:57:ALA:HB1	1:A:61:GLY:O	0.46	2.11	13	1
1:A:97:LEU:HD22	1:A:98:SER:CA	0.46	2.41	16	4
1:A:7:VAL:HG11	1:A:19:VAL:HG23	0.46	1.86	4	1
1:A:74:GLU:HG3	1:A:76:PHE:CZ	0.46	2.45	42	1
1:A:48:ASN:ND2	1:A:74:GLU:O	0.46	2.48	8	2
1:A:99:ASP:OD1	1:A:103:ASN:N	0.46	2.49	20	6
1:A:89:THR:CB	1:A:113:ASN:HB3	0.46	2.40	31	1
1:A:38:ALA:HB3	1:A:73:PHE:CD2	0.46	2.45	37	1
1:A:96:GLY:CA	1:A:107:GLY:HA2	0.46	2.41	32	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:LEU:HD11	1:A:110:ILE:CB	0.46	2.41	43	1
1:A:24:ALA:HB1	1:A:97:LEU:HD22	0.46	1.87	4	1
1:A:50:ALA:O	1:A:51:ASP:C	0.46	2.54	39	11
1:A:38:ALA:CB	1:A:93:CYS:HB2	0.46	2.41	3	6
1:A:26:LEU:CD1	1:A:60:ASN:ND2	0.46	2.79	36	1
1:A:19:VAL:O	1:A:66:SER:CB	0.46	2.64	24	1
1:A:35:GLY:O	1:A:36:GLN:HB2	0.46	2.10	13	2
1:A:84:GLY:C	1:A:86:VAL:N	0.46	2.69	44	4
1:A:4:THR:O	1:A:24:ALA:N	0.46	2.49	43	2
1:A:65:THR:HG22	1:A:67:LEU:CD2	0.46	2.39	39	1
1:A:13:LEU:CD1	1:A:69:VAL:CG1	0.46	2.88	38	2
1:A:104:GLY:N	1:A:105:PRO:HD3	0.46	2.26	31	2
1:A:69:VAL:HB	1:A:112:PHE:CZ	0.46	2.45	42	1
1:A:10:SER:OG	1:A:10:SER:O	0.46	2.31	24	2
1:A:14:SER:CB	1:A:71:ARG:HB2	0.46	2.40	24	1
1:A:51:ASP:OD1	1:A:53:SER:OG	0.46	2.33	38	1
1:A:34:VAL:HG22	1:A:67:LEU:HD11	0.46	1.87	21	2
1:A:76:PHE:CG	1:A:82:ARG:HB3	0.46	2.46	23	3
1:A:7:VAL:HG13	1:A:9:PRO:CD	0.46	2.39	16	3
1:A:51:ASP:HB3	1:A:70:ARG:NH1	0.46	2.26	34	1
1:A:34:VAL:CG2	1:A:53:SER:HB2	0.45	2.41	9	3
1:A:27:GLN:C	1:A:27:GLN:CD	0.45	2.74	7	1
1:A:7:VAL:HG12	1:A:19:VAL:HG23	0.45	1.87	9	3
1:A:48:ASN:CG	1:A:73:PHE:CD1	0.45	2.89	14	2
1:A:88:CYS:SG	1:A:93:CYS:N	0.45	2.89	14	1
1:A:63:ALA:HB2	1:A:97:LEU:HD22	0.45	1.87	6	1
1:A:36:GLN:HB3	1:A:70:ARG:NH2	0.45	2.26	20	3
1:A:88:CYS:HB2	1:A:112:PHE:CG	0.45	2.46	44	1
1:A:46:ALA:CB	1:A:83:TRP:HB3	0.45	2.41	32	1
1:A:103:ASN:N	1:A:103:ASN:OD1	0.45	2.47	11	2
1:A:39:TRP:CH2	1:A:42:THR:HA	0.45	2.46	14	1
1:A:94:GLN:CD	1:A:94:GLN:N	0.45	2.70	6	4
1:A:22:ALA:HA	1:A:63:ALA:O	0.45	2.11	21	2
1:A:93:CYS:SG	1:A:94:GLN:N	0.45	2.89	3	2
1:A:69:VAL:HG13	1:A:110:ILE:HD13	0.45	1.89	6	1
1:A:38:ALA:CB	1:A:93:CYS:CB	0.45	2.91	6	1
1:A:75:GLY:N	1:A:84:GLY:O	0.45	2.50	35	1
1:A:11:SER:OG	1:A:13:LEU:CD2	0.45	2.64	44	1
1:A:55:VAL:CG1	1:A:97:LEU:HG	0.45	2.42	21	2
1:A:77:LEU:HD21	1:A:83:TRP:NE1	0.45	2.26	21	1
1:A:94:GLN:HA	1:A:108:VAL:O	0.45	2.12	1	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:VAL:HG11	1:A:67:LEU:HG	0.45	1.88	25	3
1:A:50:ALA:C	1:A:52:PHE:N	0.45	2.69	25	2
1:A:51:ASP:OD2	1:A:52:PHE:N	0.45	2.50	7	4
1:A:6:THR:O	1:A:21:VAL:HG22	0.45	2.11	24	1
1:A:74:GLU:OE2	1:A:75:GLY:N	0.45	2.45	21	1
1:A:36:GLN:HG3	1:A:95:VAL:CG2	0.45	2.41	12	1
1:A:13:LEU:HD12	1:A:112:PHE:CD1	0.45	2.46	32	1
1:A:84:GLY:O	1:A:86:VAL:O	0.45	2.34	32	1
1:A:50:ALA:O	1:A:52:PHE:N	0.45	2.49	25	2
1:A:34:VAL:O	1:A:51:ASP:OD1	0.45	2.35	28	9
1:A:38:ALA:O	1:A:45:LEU:HA	0.45	2.12	33	1
1:A:73:PHE:O	1:A:86:VAL:O	0.45	2.35	19	2
1:A:12:GLY:N	1:A:110:ILE:HG22	0.45	2.26	18	3
1:A:36:GLN:HG2	1:A:73:PHE:CD2	0.45	2.46	29	1
1:A:95:VAL:O	1:A:108:VAL:CG1	0.45	2.60	4	3
1:A:71:ARG:HG3	1:A:89:THR:HG22	0.45	1.88	23	1
1:A:71:ARG:NH2	1:A:113:ASN:OD1	0.45	2.50	43	1
1:A:34:VAL:O	1:A:51:ASP:OD2	0.45	2.34	42	6
1:A:36:GLN:HG2	1:A:70:ARG:CZ	0.45	2.42	21	1
1:A:15:ASP:CB	1:A:71:ARG:HG3	0.45	2.41	3	2
1:A:4:THR:N	1:A:24:ALA:O	0.45	2.50	5	3
1:A:25:GLY:C	1:A:32:TYR:OH	0.45	2.54	6	3
1:A:71:ARG:HA	1:A:112:PHE:CE2	0.45	2.47	41	1
1:A:30:THR:HG22	1:A:31:ALA:N	0.45	2.26	20	4
1:A:76:PHE:CD1	1:A:82:ARG:HB3	0.45	2.47	23	2
1:A:89:THR:CB	1:A:113:ASN:CB	0.45	2.95	31	1
1:A:86:VAL:CG1	1:A:86:VAL:O	0.45	2.65	3	2
1:A:71:ARG:NE	1:A:113:ASN:C	0.45	2.69	30	1
1:A:69:VAL:HA	1:A:95:VAL:HG21	0.45	1.89	40	2
1:A:39:TRP:NE1	1:A:41:ASP:O	0.45	2.50	23	2
1:A:71:ARG:HG3	1:A:112:PHE:CB	0.45	2.42	17	2
1:A:5:ALA:CB	1:A:97:LEU:HG	0.45	2.41	17	1
1:A:24:ALA:CB	1:A:32:TYR:CE2	0.45	2.99	25	2
1:A:76:PHE:CD2	1:A:82:ARG:HG3	0.45	2.47	1	2
1:A:71:ARG:NH1	1:A:87:ASP:CG	0.45	2.70	26	1
1:A:69:VAL:O	1:A:112:PHE:CD2	0.45	2.70	35	2
1:A:83:TRP:CA	1:A:83:TRP:CE3	0.45	3.00	20	1
1:A:39:TRP:CD1	1:A:42:THR:HA	0.45	2.47	11	1
1:A:44:VAL:HG11	1:A:77:LEU:HD13	0.45	1.89	34	1
1:A:87:ASP:C	1:A:89:THR:N	0.44	2.70	26	3
1:A:41:ASP:HB3	1:A:44:VAL:CG2	0.44	2.42	4	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:VAL:CG2	1:A:67:LEU:CG	0.44	2.94	15	1
1:A:71:ARG:CG	1:A:89:THR:HG22	0.44	2.43	23	1
1:A:36:GLN:CD	1:A:70:ARG:NE	0.44	2.71	17	1
1:A:42:THR:HG22	1:A:44:VAL:CG2	0.44	2.35	30	1
1:A:71:ARG:CG	1:A:112:PHE:HB3	0.44	2.42	38	3
1:A:35:GLY:O	1:A:51:ASP:OD1	0.44	2.35	7	3
1:A:15:ASP:HA	1:A:71:ARG:HG2	0.44	1.89	39	2
1:A:87:ASP:N	1:A:87:ASP:OD1	0.44	2.49	28	1
1:A:71:ARG:HD2	1:A:89:THR:CG2	0.44	2.43	11	3
1:A:37:CYS:O	1:A:93:CYS:SG	0.44	2.75	5	2
1:A:47:CYS:HB2	1:A:78:PHE:CG	0.44	2.47	43	2
1:A:40:VAL:O	1:A:41:ASP:O	0.44	2.35	37	5
1:A:51:ASP:OD1	1:A:52:PHE:N	0.44	2.50	13	1
1:A:13:LEU:HD12	1:A:112:PHE:CD2	0.44	2.46	43	1
1:A:89:THR:OG1	1:A:112:PHE:O	0.44	2.36	17	4
1:A:5:ALA:CB	1:A:23:GLY:O	0.44	2.62	36	2
1:A:15:ASP:HA	1:A:71:ARG:HB2	0.44	1.89	5	1
1:A:9:PRO:O	1:A:10:SER:HB3	0.44	2.13	41	2
1:A:32:TYR:O	1:A:97:LEU:CD1	0.44	2.65	42	5
1:A:107:GLY:O	1:A:108:VAL:CG2	0.44	2.65	29	1
1:A:11:SER:OG	1:A:111:SER:CB	0.44	2.65	18	1
1:A:36:GLN:HG3	1:A:70:ARG:NH2	0.44	2.27	12	2
1:A:49:PRO:HG3	1:A:76:PHE:CE1	0.44	2.47	6	1
1:A:14:SER:O	1:A:17:THR:CB	0.44	2.65	41	1
1:A:21:VAL:HG21	1:A:67:LEU:HG	0.44	1.88	37	2
1:A:5:ALA:O	1:A:6:THR:HG22	0.44	2.13	18	3
1:A:45:LEU:HD21	1:A:94:GLN:NE2	0.44	2.27	32	1
1:A:7:VAL:HG11	1:A:69:VAL:CG2	0.44	2.40	30	2
1:A:74:GLU:OE2	1:A:74:GLU:N	0.44	2.50	7	1
1:A:24:ALA:CB	1:A:97:LEU:HB2	0.44	2.43	40	2
1:A:4:THR:HB	1:A:24:ALA:O	0.44	2.13	38	3
1:A:27:GLN:CD	1:A:27:GLN:C	0.44	2.75	25	1
1:A:44:VAL:HA	1:A:77:LEU:HD11	0.44	1.87	1	1
1:A:5:ALA:N	1:A:24:ALA:HA	0.44	2.27	36	1
1:A:76:PHE:CE2	1:A:82:ARG:HD3	0.44	2.47	10	2
1:A:5:ALA:HB2	1:A:97:LEU:HB2	0.44	1.90	23	1
1:A:32:TYR:HB3	1:A:97:LEU:CD2	0.44	2.43	4	1
1:A:71:ARG:CZ	1:A:89:THR:HG21	0.44	2.43	34	1
1:A:74:GLU:HB3	1:A:84:GLY:O	0.44	2.12	33	1
1:A:69:VAL:O	1:A:112:PHE:CE2	0.44	2.71	35	2
1:A:36:GLN:HB2	1:A:70:ARG:NH2	0.44	2.27	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:SER:C	1:A:112:PHE:CD2	0.44	2.91	42	1
1:A:71:ARG:CA	1:A:88:CYS:HB2	0.44	2.43	25	2
1:A:36:GLN:O	1:A:48:ASN:HB3	0.44	2.12	19	3
1:A:71:ARG:CZ	1:A:87:ASP:CG	0.44	2.86	26	1
1:A:93:CYS:N	1:A:112:PHE:CE1	0.44	2.86	43	1
1:A:11:SER:CB	1:A:111:SER:CB	0.44	2.96	11	2
1:A:89:THR:HG22	1:A:112:PHE:O	0.44	2.13	11	1
1:A:83:TRP:CZ2	1:A:91:ALA:HB2	0.44	2.48	42	1
1:A:73:PHE:CZ	1:A:75:GLY:CA	0.44	3.01	10	1
1:A:32:TYR:CB	1:A:97:LEU:HD13	0.44	2.41	17	1
1:A:97:LEU:C	1:A:97:LEU:CD1	0.44	2.78	43	1
1:A:15:ASP:OD2	1:A:71:ARG:N	0.43	2.50	14	1
1:A:10:SER:HB2	1:A:110:ILE:CG1	0.43	2.43	41	2
1:A:105:PRO:O	1:A:106:GLU:HB2	0.43	2.11	39	2
1:A:85:THR:HG21	1:A:91:ALA:HB3	0.43	1.89	44	1
1:A:7:VAL:CA	1:A:21:VAL:HG22	0.43	2.41	19	1
1:A:39:TRP:O	1:A:91:ALA:O	0.43	2.35	19	1
1:A:15:ASP:HB2	1:A:71:ARG:CG	0.43	2.43	42	1
1:A:99:ASP:OD1	1:A:103:ASN:CB	0.43	2.66	1	3
1:A:96:GLY:CA	1:A:107:GLY:HA3	0.43	2.43	32	3
1:A:95:VAL:H	1:A:110:ILE:HD12	0.43	1.73	5	1
1:A:44:VAL:CG1	1:A:77:LEU:HD11	0.43	2.43	12	2
1:A:36:GLN:CG	1:A:70:ARG:CZ	0.43	2.96	21	1
1:A:73:PHE:CD2	1:A:88:CYS:SG	0.43	3.11	3	1
1:A:99:ASP:O	1:A:103:ASN:CG	0.43	2.57	36	3
1:A:65:THR:HG23	1:A:66:SER:H	0.43	1.73	9	2
1:A:15:ASP:HB3	1:A:71:ARG:CG	0.43	2.43	39	1
1:A:40:VAL:CG2	1:A:83:TRP:CZ2	0.43	3.01	38	1
1:A:34:VAL:CG1	1:A:51:ASP:HB2	0.43	2.43	21	1
1:A:95:VAL:CG1	1:A:95:VAL:O	0.43	2.66	7	1
1:A:24:ALA:HB1	1:A:97:LEU:HB2	0.43	1.91	28	1
1:A:15:ASP:HA	1:A:71:ARG:CG	0.43	2.43	31	2
1:A:92:ALA:C	1:A:93:CYS:O	0.43	2.57	14	4
1:A:7:VAL:CG2	1:A:19:VAL:CG2	0.43	2.93	24	2
1:A:14:SER:HB3	1:A:17:THR:CB	0.43	2.43	32	1
1:A:70:ARG:CD	1:A:73:PHE:CZ	0.43	3.00	16	1
1:A:36:GLN:HG3	1:A:70:ARG:CZ	0.43	2.44	8	5
1:A:9:PRO:O	1:A:10:SER:OG	0.43	2.37	12	2
1:A:73:PHE:CE2	1:A:93:CYS:SG	0.43	3.12	5	2
1:A:99:ASP:CG	1:A:103:ASN:CG	0.43	2.77	13	1
1:A:34:VAL:CB	1:A:53:SER:HB2	0.43	2.44	38	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:108:VAL:HG13	1:A:110:ILE:HD11	0.43	1.90	21	1
1:A:17:THR:OG1	1:A:19:VAL:HG13	0.43	2.13	43	1
1:A:48:ASN:O	1:A:51:ASP:OD1	0.43	2.36	5	2
1:A:40:VAL:CG2	1:A:91:ALA:O	0.43	2.65	35	1
1:A:51:ASP:C	1:A:53:SER:N	0.43	2.71	21	1
1:A:13:LEU:O	1:A:17:THR:CB	0.43	2.66	32	1
1:A:13:LEU:CD2	1:A:17:THR:HG21	0.43	2.39	28	1
1:A:5:ALA:HB2	1:A:24:ALA:CA	0.43	2.43	28	1
1:A:48:ASN:OD1	1:A:74:GLU:O	0.43	2.36	40	2
1:A:27:GLN:N	1:A:61:GLY:HA3	0.43	2.29	10	7
1:A:36:GLN:HB2	1:A:70:ARG:CZ	0.43	2.44	12	2
1:A:11:SER:O	1:A:13:LEU:N	0.43	2.52	23	1
1:A:68:THR:HG23	1:A:70:ARG:NH2	0.43	2.28	17	1
1:A:69:VAL:HG12	1:A:69:VAL:O	0.43	2.13	37	1
1:A:72:SER:HB2	1:A:87:ASP:N	0.43	2.29	32	1
1:A:36:GLN:NE2	1:A:93:CYS:SG	0.43	2.92	34	1
1:A:110:ILE:CG2	1:A:112:PHE:CZ	0.43	3.02	28	1
1:A:34:VAL:CG1	1:A:53:SER:HB2	0.43	2.43	24	1
1:A:17:THR:HG22	1:A:69:VAL:O	0.43	2.13	12	1
1:A:27:GLN:OE1	1:A:30:THR:OG1	0.43	2.37	25	1
1:A:37:CYS:O	1:A:94:GLN:OE1	0.43	2.37	24	4
1:A:27:GLN:CG	1:A:28:ALA:N	0.43	2.81	8	6
1:A:27:GLN:OE1	1:A:32:TYR:OH	0.43	2.33	10	1
1:A:36:GLN:NE2	1:A:112:PHE:CZ	0.43	2.87	39	1
1:A:42:THR:CG2	1:A:42:THR:O	0.43	2.67	44	2
1:A:40:VAL:HG21	1:A:83:TRP:CG	0.43	2.48	44	1
1:A:12:GLY:C	1:A:14:SER:H	0.43	2.17	32	1
1:A:71:ARG:HG3	1:A:72:SER:H	0.43	1.74	42	1
1:A:69:VAL:O	1:A:70:ARG:C	0.43	2.58	1	3
1:A:32:TYR:N	1:A:55:VAL:O	0.43	2.52	6	2
1:A:76:PHE:CE2	1:A:78:PHE:CA	0.43	3.01	22	1
1:A:88:CYS:O	1:A:93:CYS:SG	0.43	2.77	18	2
1:A:77:LEU:HG	1:A:83:TRP:CE2	0.43	2.49	37	1
1:A:13:LEU:N	1:A:112:PHE:HA	0.43	2.28	9	1
1:A:15:ASP:HA	1:A:71:ARG:HB3	0.43	1.90	34	1
1:A:82:ARG:O	1:A:83:TRP:O	0.43	2.37	28	1
1:A:34:VAL:HB	1:A:53:SER:C	0.42	2.35	13	2
1:A:15:ASP:CA	1:A:71:ARG:HG2	0.42	2.44	42	2
1:A:40:VAL:HG23	1:A:44:VAL:O	0.42	2.14	38	1
1:A:12:GLY:H	1:A:110:ILE:CG2	0.42	2.26	44	1
1:A:27:GLN:CD	1:A:32:TYR:OH	0.42	2.57	31	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:GLY:N	0.42	2.29	17	2
1:A:12:GLY:HA3	1:A:112:PHE:CD2	0.42	2.49	9	1
1:A:73:PHE:CZ	1:A:93:CYS:SG	0.42	3.12	5	1
1:A:38:ALA:O	1:A:45:LEU:HD13	0.42	2.13	10	1
1:A:60:ASN:OD1	1:A:60:ASN:O	0.42	2.37	10	1
1:A:37:CYS:C	1:A:94:GLN:OE1	0.42	2.57	21	4
1:A:26:LEU:HA	1:A:61:GLY:O	0.42	2.14	6	4
1:A:14:SER:HB3	1:A:112:PHE:CG	0.42	2.49	41	1
1:A:68:THR:O	1:A:70:ARG:CD	0.42	2.67	29	1
1:A:110:ILE:HG21	1:A:112:PHE:CE2	0.42	2.49	28	1
1:A:13:LEU:HD12	1:A:69:VAL:HG21	0.42	1.88	5	2
1:A:5:ALA:CB	1:A:24:ALA:HA	0.42	2.43	38	2
1:A:47:CYS:N	1:A:76:PHE:O	0.42	2.53	10	1
1:A:99:ASP:OD1	1:A:103:ASN:O	0.42	2.38	38	1
1:A:37:CYS:HA	1:A:73:PHE:CZ	0.42	2.50	44	1
1:A:76:PHE:CE1	1:A:82:ARG:CB	0.42	3.02	32	1
1:A:44:VAL:HG11	1:A:77:LEU:CD1	0.42	2.43	30	1
1:A:67:LEU:HD23	1:A:95:VAL:HG22	0.42	1.91	30	1
1:A:47:CYS:O	1:A:75:GLY:HA2	0.42	2.14	6	1
1:A:11:SER:C	1:A:13:LEU:N	0.42	2.73	8	2
1:A:28:ALA:O	1:A:29:GLY:C	0.42	2.58	15	1
1:A:39:TRP:CG	1:A:45:LEU:HG	0.42	2.50	23	1
1:A:45:LEU:HD21	1:A:94:GLN:HE22	0.42	1.74	32	1
1:A:38:ALA:HA	1:A:93:CYS:HA	0.42	1.90	6	1
1:A:95:VAL:O	1:A:108:VAL:N	0.42	2.47	24	1
1:A:74:GLU:CB	1:A:84:GLY:HA2	0.42	2.45	41	3
1:A:13:LEU:HD22	1:A:113:ASN:C	0.42	2.34	33	1
1:A:27:GLN:C	1:A:61:GLY:CA	0.42	2.88	38	1
1:A:106:GLU:O	1:A:107:GLY:O	0.42	2.38	34	2
1:A:40:VAL:HG21	1:A:44:VAL:CG1	0.42	2.44	20	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:110:ILE:CD1	0.42	2.91	15	1
1:A:32:TYR:O	1:A:97:LEU:HD23	0.42	2.13	23	1
1:A:103:ASN:O	1:A:104:GLY:O	0.42	2.36	1	1
1:A:34:VAL:HG23	1:A:54:SER:CA	0.42	2.45	6	1
1:A:55:VAL:HG13	1:A:97:LEU:HD21	0.42	1.90	24	1
1:A:6:THR:O	1:A:21:VAL:HA	0.42	2.14	41	1
1:A:40:VAL:HG21	1:A:44:VAL:HG12	0.42	1.92	20	1
1:A:40:VAL:HB	1:A:44:VAL:CG1	0.42	2.44	19	1
1:A:74:GLU:HB2	1:A:84:GLY:C	0.42	2.34	19	1
1:A:76:PHE:CZ	1:A:82:ARG:HD2	0.42	2.50	9	1
1:A:108:VAL:HG22	1:A:110:ILE:CG1	0.42	2.45	32	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:37:CYS:O	1:A:94:GLN:N	0.42	2.50	28	1
1:A:83:TRP:NE1	1:A:86:VAL:HG11	0.42	2.29	40	1
1:A:87:ASP:O	1:A:88:CYS:C	0.42	2.58	40	1
1:A:24:ALA:C	1:A:26:LEU:N	0.42	2.73	1	2
1:A:34:VAL:N	1:A:53:SER:O	0.42	2.53	1	2
1:A:25:GLY:CA	1:A:32:TYR:OH	0.42	2.68	6	1
1:A:4:THR:HA	1:A:97:LEU:HD12	0.42	1.91	8	1
1:A:5:ALA:O	1:A:107:GLY:O	0.42	2.38	39	2
1:A:51:ASP:O	1:A:70:ARG:NH2	0.42	2.51	39	1
1:A:40:VAL:HG12	1:A:41:ASP:H	0.42	1.75	44	3
1:A:89:THR:OG1	1:A:113:ASN:C	0.42	2.58	16	2
1:A:112:PHE:O	1:A:113:ASN:CB	0.42	2.67	12	1
1:A:82:ARG:O	1:A:83:TRP:C	0.42	2.58	34	1
1:A:28:ALA:C	1:A:30:THR:N	0.42	2.73	16	1
1:A:88:CYS:HB3	1:A:93:CYS:SG	0.42	2.55	27	3
1:A:99:ASP:OD1	1:A:103:ASN:CG	0.42	2.58	1	1
1:A:11:SER:CB	1:A:111:SER:HB3	0.42	2.45	1	1
1:A:99:ASP:OD2	1:A:103:ASN:CG	0.42	2.58	13	2
1:A:15:ASP:CB	1:A:71:ARG:HB2	0.42	2.45	5	1
1:A:14:SER:CB	1:A:17:THR:CB	0.42	2.98	32	1
1:A:39:TRP:CG	1:A:39:TRP:O	0.42	2.73	2	1
1:A:12:GLY:C	1:A:113:ASN:OD1	0.42	2.58	30	1
1:A:55:VAL:HB	1:A:65:THR:CG2	0.42	2.44	24	3
1:A:60:ASN:O	1:A:60:ASN:OD1	0.42	2.37	33	3
1:A:68:THR:O	1:A:68:THR:CG2	0.42	2.68	33	1
1:A:42:THR:C	1:A:44:VAL:N	0.42	2.72	20	1
1:A:11:SER:N	1:A:110:ILE:HG23	0.42	2.29	18	1
1:A:36:GLN:OE1	1:A:70:ARG:N	0.42	2.52	32	1
1:A:71:ARG:NE	1:A:89:THR:CG2	0.42	2.83	34	1
1:A:12:GLY:HA3	1:A:17:THR:CG2	0.41	2.45	8	1
1:A:104:GLY:O	1:A:106:GLU:OE2	0.41	2.37	26	1
1:A:44:VAL:HA	1:A:77:LEU:CD2	0.41	2.45	37	1
1:A:46:ALA:HB1	1:A:76:PHE:C	0.41	2.34	37	1
1:A:13:LEU:CD2	1:A:110:ILE:HG23	0.41	2.40	11	1
1:A:41:ASP:O	1:A:42:THR:HB	0.41	2.15	27	1
1:A:76:PHE:CG	1:A:82:ARG:HB2	0.41	2.50	2	1
1:A:33:ASP:OD1	1:A:53:SER:O	0.41	2.38	40	1
1:A:34:VAL:CG1	1:A:67:LEU:HG	0.41	2.45	4	4
1:A:7:VAL:HG12	1:A:110:ILE:HD11	0.41	1.91	6	1
1:A:14:SER:HB2	1:A:112:PHE:CD1	0.41	2.47	41	1
1:A:38:ALA:N	1:A:46:ALA:O	0.41	2.52	19	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:97:LEU:HD13	1:A:97:LEU:HA	0.41	1.78	33	1
1:A:76:PHE:N	1:A:76:PHE:CD1	0.41	2.88	19	1
1:A:74:GLU:CD	1:A:83:TRP:HB2	0.41	2.36	19	1
1:A:71:ARG:CZ	1:A:113:ASN:CG	0.41	2.89	31	1
1:A:71:ARG:CD	1:A:89:THR:HG23	0.41	2.45	11	1
1:A:50:ALA:HB1	1:A:52:PHE:CZ	0.41	2.50	24	1
1:A:10:SER:OG	1:A:110:ILE:HA	0.41	2.14	41	1
1:A:108:VAL:HG12	1:A:110:ILE:HD11	0.41	1.92	13	1
1:A:104:GLY:O	1:A:106:GLU:OE1	0.41	2.38	26	1
1:A:55:VAL:CG2	1:A:65:THR:CB	0.41	2.97	44	3
1:A:27:GLN:HB2	1:A:32:TYR:CE2	0.41	2.50	15	1
1:A:64:SER:O	1:A:65:THR:CB	0.41	2.67	9	1
1:A:13:LEU:CD2	1:A:69:VAL:HG11	0.41	2.45	32	1
1:A:12:GLY:O	1:A:13:LEU:O	0.41	2.38	43	1
1:A:37:CYS:HB3	1:A:45:LEU:CD2	0.41	2.45	21	2
1:A:41:ASP:CB	1:A:44:VAL:CG2	0.41	2.99	4	2
1:A:5:ALA:O	1:A:108:VAL:HG22	0.41	2.15	40	2
1:A:87:ASP:O	1:A:89:THR:N	0.41	2.53	40	1
1:A:36:GLN:O	1:A:48:ASN:HB2	0.41	2.14	25	1
1:A:10:SER:O	1:A:10:SER:OG	0.41	2.33	6	1
1:A:17:THR:O	1:A:19:VAL:N	0.41	2.53	5	1
1:A:27:GLN:N	1:A:32:TYR:OH	0.41	2.53	29	2
1:A:110:ILE:CG2	1:A:111:SER:N	0.41	2.84	39	1
1:A:41:ASP:HB3	1:A:44:VAL:HG23	0.41	1.92	39	3
1:A:24:ALA:HB2	1:A:97:LEU:HD22	0.41	1.92	27	1
1:A:69:VAL:HB	1:A:112:PHE:CE1	0.41	2.51	42	1
1:A:72:SER:O	1:A:73:PHE:CB	0.41	2.69	30	1
1:A:8:THR:HG22	1:A:9:PRO:CD	0.41	2.45	22	3
1:A:27:GLN:OE1	1:A:28:ALA:N	0.41	2.54	25	1
1:A:32:TYR:CG	1:A:97:LEU:HD12	0.41	2.51	5	1
1:A:76:PHE:C	1:A:76:PHE:CD1	0.41	2.93	41	1
1:A:25:GLY:O	1:A:26:LEU:C	0.41	2.59	38	1
1:A:32:TYR:CD1	1:A:99:ASP:OD2	0.41	2.73	21	1
1:A:34:VAL:HG22	1:A:97:LEU:HD13	0.41	1.92	28	1
1:A:5:ALA:CB	1:A:97:LEU:CD1	0.41	2.98	25	1
1:A:87:ASP:O	1:A:90:THR:CB	0.41	2.68	25	1
1:A:71:ARG:HD2	1:A:113:ASN:CB	0.41	2.46	14	1
1:A:34:VAL:HB	1:A:51:ASP:OD2	0.41	2.15	38	1
1:A:36:GLN:NE2	1:A:95:VAL:CG2	0.41	2.80	29	1
1:A:65:THR:HG23	1:A:67:LEU:CD1	0.41	2.46	32	1
1:A:13:LEU:HD12	1:A:112:PHE:CG	0.41	2.51	43	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:GLN:HB2	1:A:108:VAL:N	0.41	2.30	34	2
1:A:32:TYR:CG	1:A:97:LEU:HD11	0.41	2.51	13	1
1:A:7:VAL:HG22	1:A:19:VAL:CG2	0.41	2.44	17	1
1:A:69:VAL:HG13	1:A:112:PHE:HE2	0.41	1.75	34	1
1:A:16:GLY:N	1:A:69:VAL:O	0.41	2.53	34	1
1:A:105:PRO:O	1:A:106:GLU:C	0.41	2.59	30	1
1:A:86:VAL:HG22	1:A:87:ASP:N	0.41	2.30	1	2
1:A:44:VAL:CG1	1:A:77:LEU:HG	0.41	2.46	36	3
1:A:48:ASN:C	1:A:50:ALA:H	0.41	2.20	19	8
1:A:8:THR:HG22	1:A:9:PRO:HD3	0.41	1.92	22	2
1:A:74:GLU:O	1:A:74:GLU:CD	0.41	2.59	22	1
1:A:95:VAL:O	1:A:108:VAL:HB	0.41	2.16	5	1
1:A:87:ASP:OD1	1:A:87:ASP:N	0.41	2.53	41	1
1:A:34:VAL:CG1	1:A:67:LEU:CD1	0.41	2.95	13	1
1:A:58:ASP:OD1	1:A:62:SER:CB	0.41	2.67	39	1
1:A:40:VAL:CG2	1:A:83:TRP:NE1	0.41	2.84	38	1
1:A:39:TRP:NE1	1:A:94:GLN:NE2	0.41	2.68	44	1
1:A:17:THR:CG2	1:A:19:VAL:CG1	0.41	2.99	20	1
1:A:41:ASP:HB2	1:A:44:VAL:CG2	0.41	2.46	31	1
1:A:33:ASP:O	1:A:34:VAL:C	0.41	2.58	9	1
1:A:94:GLN:N	1:A:94:GLN:CD	0.41	2.74	3	1
1:A:55:VAL:HG12	1:A:97:LEU:CD1	0.41	2.46	28	1
1:A:87:ASP:O	1:A:90:THR:HB	0.41	2.16	3	3
1:A:10:SER:CA	1:A:110:ILE:HD13	0.41	2.44	8	1
1:A:89:THR:OG1	1:A:112:PHE:C	0.41	2.59	33	1
1:A:67:LEU:HD22	1:A:67:LEU:HA	0.41	1.80	13	1
1:A:69:VAL:O	1:A:69:VAL:HG12	0.41	2.16	17	1
1:A:44:VAL:O	1:A:44:VAL:HG12	0.41	2.16	37	1
1:A:70:ARG:HG3	1:A:73:PHE:CE2	0.40	2.51	13	1
1:A:36:GLN:HB2	1:A:95:VAL:HG13	0.40	1.92	34	1
1:A:21:VAL:CG1	1:A:97:LEU:HD21	0.40	2.46	34	1
1:A:74:GLU:CG	1:A:76:PHE:CE1	0.40	3.04	42	1
1:A:45:LEU:CD1	1:A:45:LEU:O	0.40	2.57	40	1
1:A:27:GLN:HG3	1:A:28:ALA:N	0.40	2.32	6	3
1:A:36:GLN:NE2	1:A:95:VAL:HG23	0.40	2.32	5	1
1:A:49:PRO:HD2	1:A:76:PHE:CE1	0.40	2.51	33	1
1:A:71:ARG:HD3	1:A:87:ASP:CB	0.40	2.46	26	1
1:A:74:GLU:N	1:A:74:GLU:OE1	0.40	2.54	35	1
1:A:14:SER:CB	1:A:17:THR:HB	0.40	2.46	32	1
1:A:27:GLN:O	1:A:60:ASN:O	0.40	2.40	11	1
1:A:77:LEU:HD12	1:A:83:TRP:CD1	0.40	2.50	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:97:LEU:HA	1:A:97:LEU:HD13	0.40	1.82	42	1
1:A:88:CYS:CB	1:A:93:CYS:HB3	0.40	2.46	25	1
1:A:97:LEU:C	1:A:97:LEU:HD13	0.40	2.37	1	1
1:A:27:GLN:HG2	1:A:30:THR:CG2	0.40	2.46	22	1
1:A:73:PHE:CD2	1:A:74:GLU:O	0.40	2.74	41	1
1:A:58:ASP:O	1:A:61:GLY:N	0.40	2.48	13	1
1:A:44:VAL:HG13	1:A:77:LEU:HG	0.40	1.93	29	2
1:A:84:GLY:O	1:A:85:THR:O	0.40	2.39	31	1
1:A:87:ASP:C	1:A:88:CYS:O	0.40	2.59	37	1
1:A:103:ASN:ND2	1:A:104:GLY:H	0.40	2.15	43	1
1:A:73:PHE:CE2	1:A:75:GLY:CA	0.40	3.04	2	1
1:A:15:ASP:CB	1:A:71:ARG:HG2	0.40	2.47	42	1
1:A:74:GLU:O	1:A:76:PHE:CE1	0.40	2.74	42	1
1:A:4:THR:O	1:A:23:GLY:HA3	0.40	2.17	40	1
1:A:38:ALA:O	1:A:45:LEU:CD2	0.40	2.70	40	1
1:A:67:LEU:HA	1:A:67:LEU:HD23	0.40	1.80	6	1
1:A:76:PHE:CE2	1:A:78:PHE:CD1	0.40	3.09	6	1
1:A:36:GLN:CD	1:A:95:VAL:CG2	0.40	2.89	5	1
1:A:10:SER:O	1:A:110:ILE:CG2	0.40	2.63	15	1
1:A:71:ARG:HG2	1:A:89:THR:CG2	0.40	2.45	23	1
1:A:48:ASN:O	1:A:51:ASP:OD2	0.40	2.39	17	1
1:A:98:SER:CA	1:A:103:ASN:HB3	0.40	2.46	3	1
1:A:32:TYR:HB3	1:A:97:LEU:CD1	0.40	2.45	4	1
1:A:88:CYS:HB3	1:A:112:PHE:CG	0.40	2.51	11	1
1:A:7:VAL:C	1:A:9:PRO:HD2	0.40	2.37	34	1
1:A:76:PHE:CG	1:A:76:PHE:O	0.40	2.72	16	1
1:A:39:TRP:HE1	1:A:92:ALA:HB3	0.40	1.77	16	1
1:A:97:LEU:O	1:A:106:GLU:OE1	0.40	2.40	1	1
1:A:55:VAL:HG22	1:A:65:THR:CG2	0.40	2.37	6	1
1:A:97:LEU:HG	1:A:98:SER:N	0.40	2.31	5	1
1:A:19:VAL:O	1:A:21:VAL:HG23	0.40	2.16	41	1
1:A:44:VAL:HG13	1:A:83:TRP:CH2	0.40	2.51	19	1
1:A:83:TRP:HB3	1:A:86:VAL:CG1	0.40	2.47	17	1
1:A:110:ILE:HG22	1:A:112:PHE:CE1	0.40	2.52	28	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	103/122 (84%)	66±3 (64±3%)	22±3 (21±3%)	16±3 (15±3%)	1	4
All	All	4532/5368 (84%)	2886 (64%)	957 (21%)	689 (15%)	1	4

All 53 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	24	ALA	44
1	A	59	ALA	44
1	A	28	ALA	43
1	A	53	SER	38
1	A	103	ASN	33
1	A	93	CYS	32
1	A	40	VAL	32
1	A	85	THR	31
1	A	78	PHE	28
1	A	69	VAL	25
1	A	106	GLU	25
1	A	9	PRO	20
1	A	13	LEU	19
1	A	92	ALA	18
1	A	15	ASP	17
1	A	36	GLN	16
1	A	10	SER	16
1	A	27	GLN	15
1	A	83	TRP	14
1	A	60	ASN	14
1	A	42	THR	13
1	A	41	ASP	12
1	A	17	THR	12
1	A	65	THR	11
1	A	108	VAL	10
1	A	107	GLY	9
1	A	55	VAL	8
1	A	104	GLY	8
1	A	4	THR	8
1	A	86	VAL	8
1	A	11	SER	7
1	A	18	VAL	7
1	A	87	ASP	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	8	THR	4
1	A	84	GLY	4
1	A	105	PRO	4
1	A	72	SER	4
1	A	43	GLY	3
1	A	14	SER	3
1	A	44	VAL	3
1	A	70	ARG	3
1	A	77	LEU	3
1	A	99	ASP	3
1	A	89	THR	2
1	A	73	PHE	2
1	A	88	CYS	2
1	A	34	VAL	1
1	A	82	ARG	1
1	A	35	GLY	1
1	A	109	ALA	1
1	A	75	GLY	1
1	A	57	ALA	1
1	A	64	SER	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	77/88 (88%)	52±3 (68±4%)	25±3 (32±4%)	1	14
All	All	3388/3872 (88%)	2309 (68%)	1079 (32%)	1	14

All 62 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	8	THR	44
1	A	99	ASP	44
1	A	111	SER	37
1	A	51	ASP	36
1	A	4	THR	36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	98	SER	35
1	A	70	ARG	34
1	A	36	GLN	33
1	A	33	ASP	31
1	A	41	ASP	29
1	A	14	SER	28
1	A	82	ARG	28
1	A	47	CYS	28
1	A	97	LEU	27
1	A	90	THR	27
1	A	52	PHE	27
1	A	65	THR	26
1	A	62	SER	25
1	A	39	TRP	24
1	A	87	ASP	24
1	A	88	CYS	23
1	A	17	THR	23
1	A	78	PHE	23
1	A	26	LEU	21
1	A	45	LEU	20
1	A	93	CYS	19
1	A	74	GLU	19
1	A	86	VAL	19
1	A	73	PHE	18
1	A	85	THR	17
1	A	19	VAL	17
1	A	68	THR	17
1	A	30	THR	15
1	A	94	GLN	15
1	A	106	GLU	14
1	A	42	THR	14
1	A	83	TRP	13
1	A	103	ASN	12
1	A	71	ARG	11
1	A	13	LEU	10
1	A	10	SER	10
1	A	89	THR	10
1	A	56	THR	9
1	A	20	LYS	9
1	A	67	LEU	9
1	A	32	TYR	8
1	A	76	PHE	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	113	ASN	7
1	A	55	VAL	6
1	A	72	SER	6
1	A	27	GLN	5
1	A	77	LEU	5
1	A	7	VAL	4
1	A	11	SER	3
1	A	60	ASN	3
1	A	21	VAL	3
1	A	53	SER	3
1	A	112	PHE	3
1	A	110	ILE	2
1	A	69	VAL	1
1	A	15	ASP	1
1	A	66	SER	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