



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 12, 2017 – 06:55 pm GMT

PDB ID : 1MZK
Title : NMR structure of kinase-interacting FHA domain of kinase associated protein phosphatase, KAPP in Arabidopsis
Authors : Lee, G.; Ding, Z.; Walker, J.C.; Van Doren, S.R.
Deposited on : 2002-10-08

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

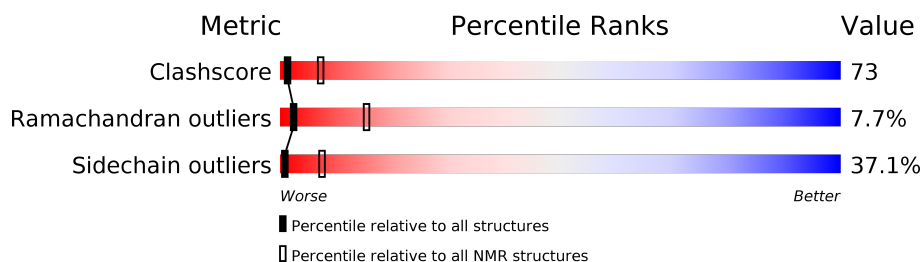
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 91%.

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	139	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 30 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:180-A:260, A:268-A:296 (110)	0.38	1

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

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

The models can be grouped into 3 clusters and 3 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 5, 9, 14, 18, 19, 22, 26, 27, 28, 29
2	3, 6, 8, 13, 15, 20, 21, 24, 25
3	4, 7, 10, 11, 12, 16
Single-model clusters	17; 23; 30

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1854 atoms, of which 930 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	122	Total	C	H	N	O	S	0
			1854	582	930	160	181	1	

There are 5 discrepancies between the modelled and reference sequences:

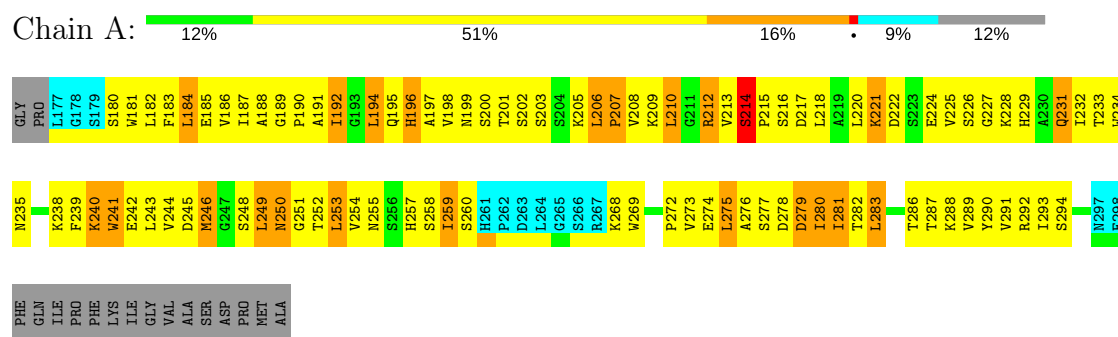
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	175	GLY	-	GST TAG	UNP P46014
A	176	PRO	-	GST TAG	UNP P46014
A	177	LEU	-	GST TAG	UNP P46014
A	178	GLY	-	GST TAG	UNP P46014
A	179	SER	-	GST TAG	UNP P46014

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: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE

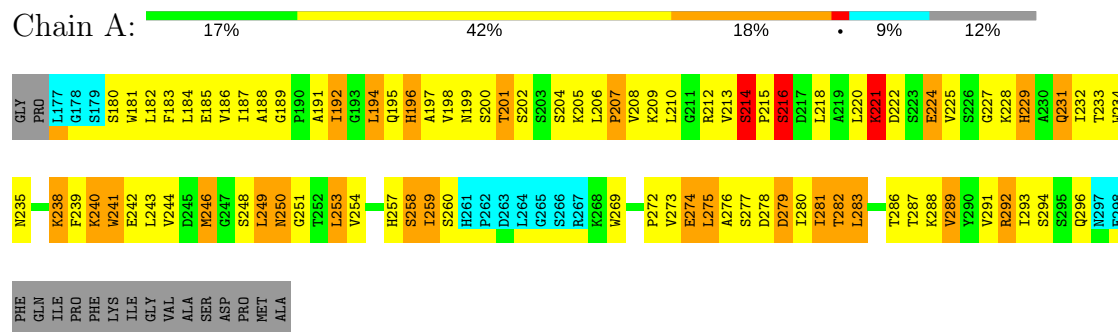


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

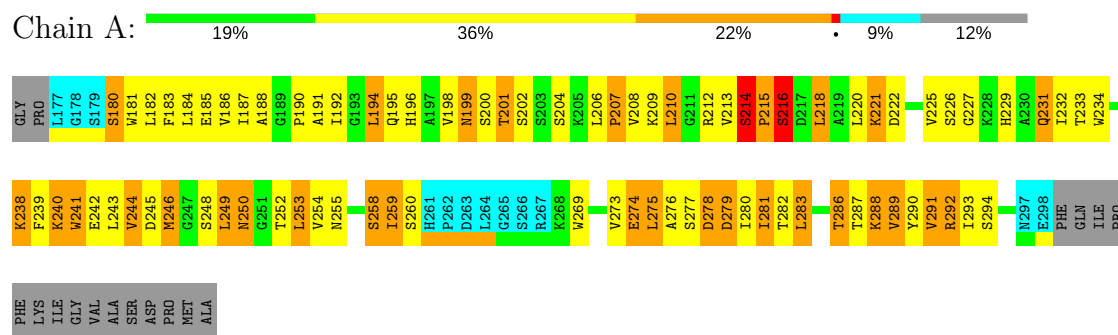
4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE



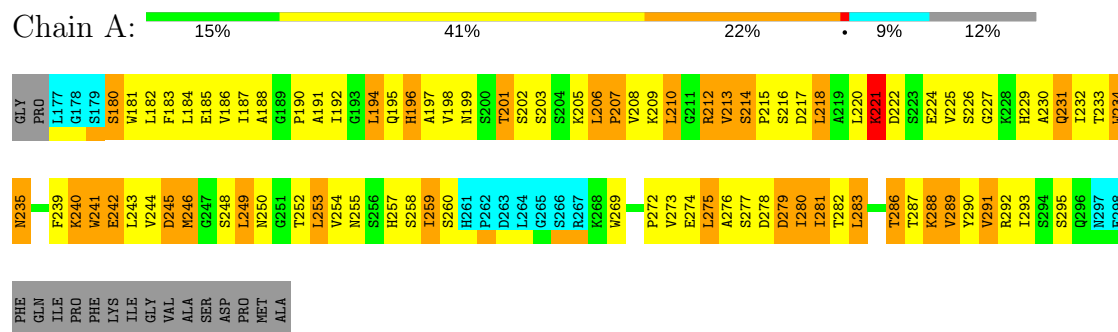
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE



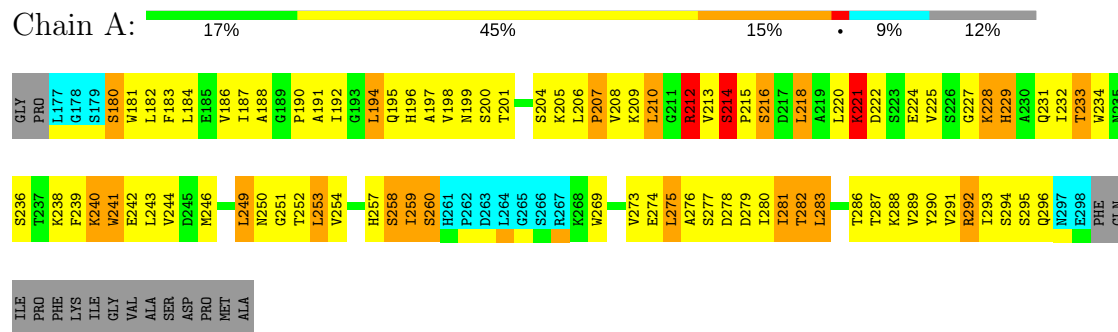
4.2.3 Score per residue for model 3

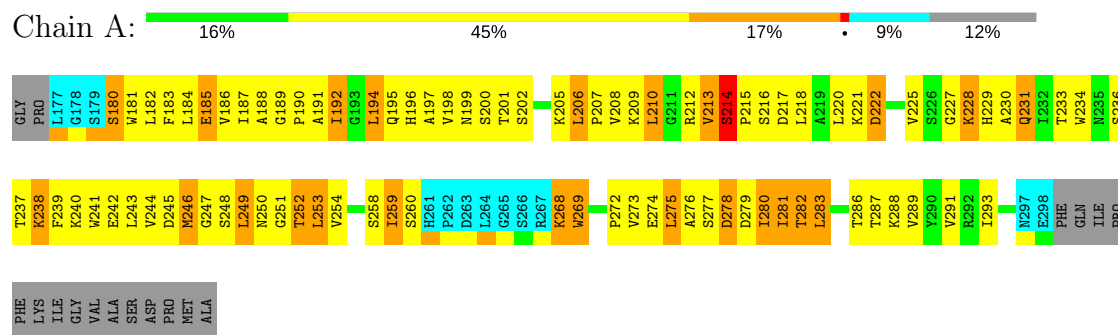
- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE



4.2.4 Score per residue for model 4

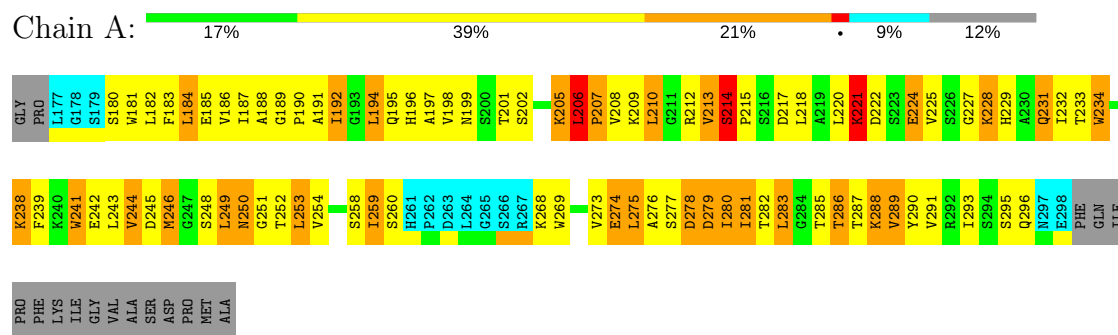
- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE





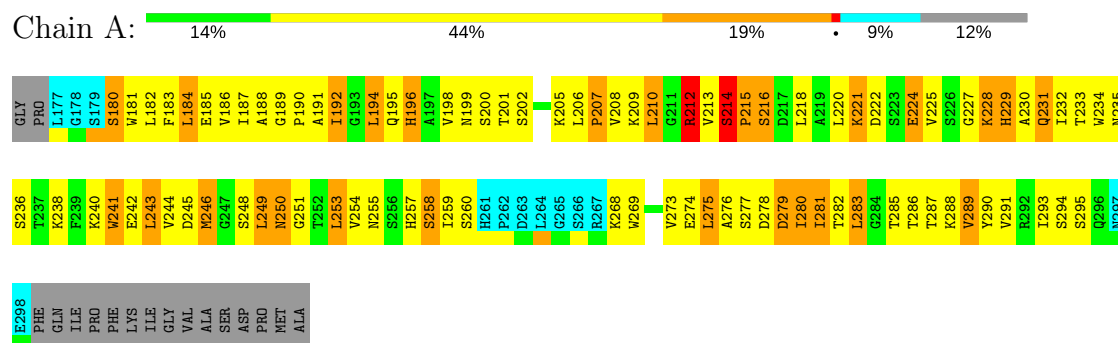
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE



4.2.8 Score per residue for model 8

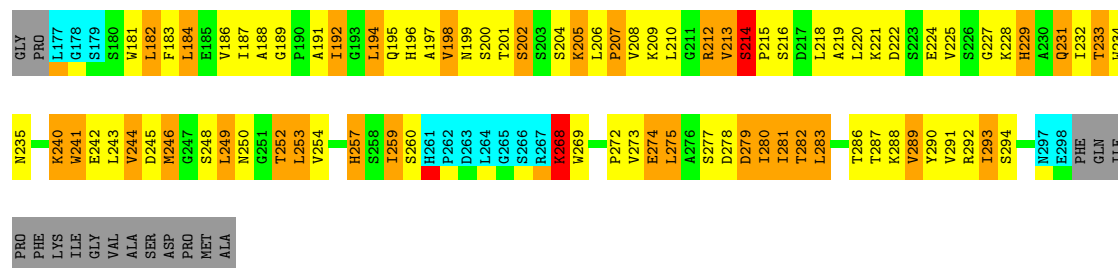
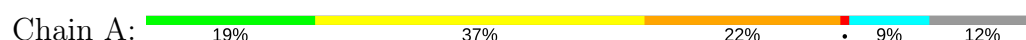
- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE





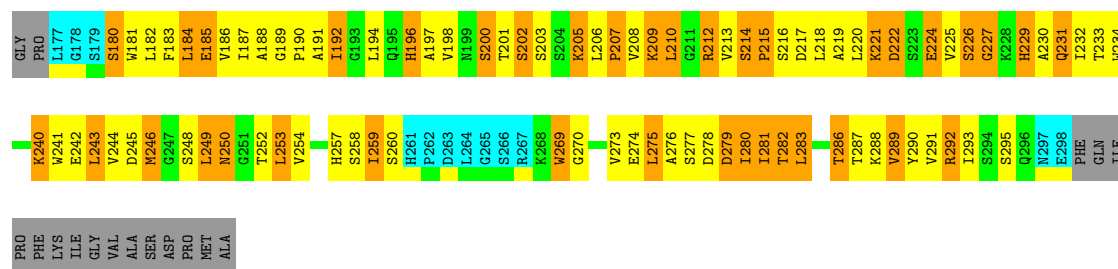
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE



4.2.10 Score per residue for model 10

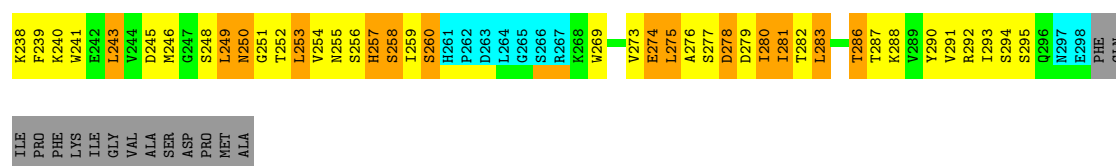
- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE





4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE

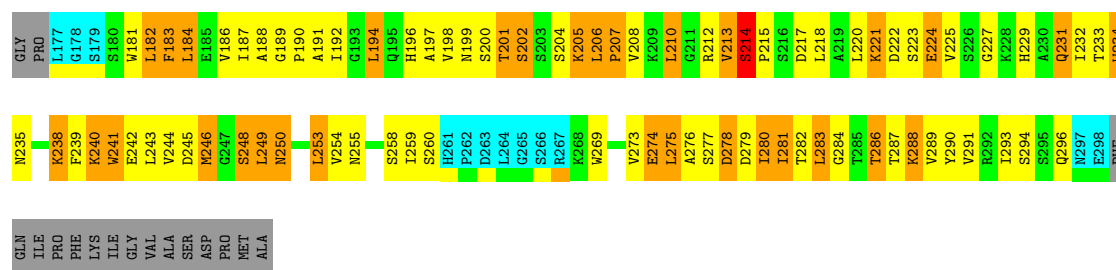
Chain A: 12% 49% 18% 9% 12%



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE

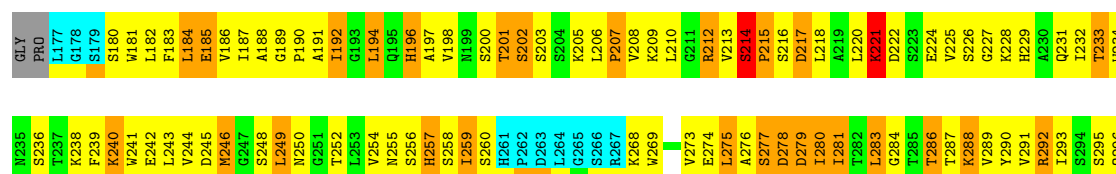
Chain A: 19% 37% 22% 9% 12%

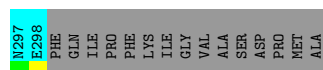


4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE

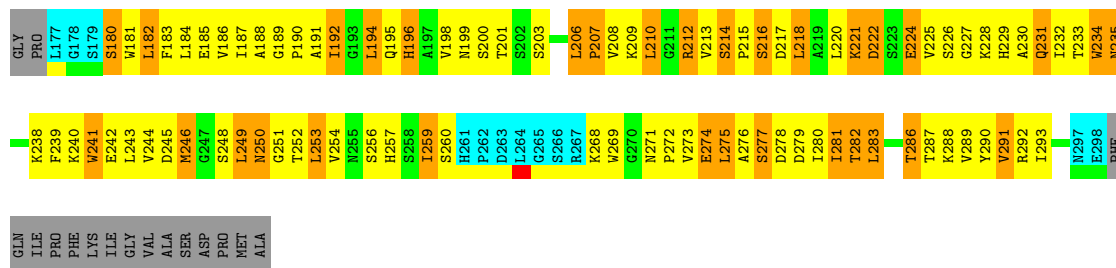
Chain A: 14% 45% 19% 9% 12%





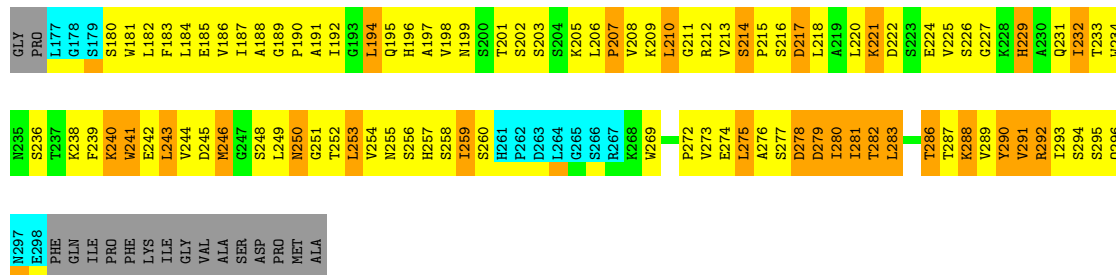
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE



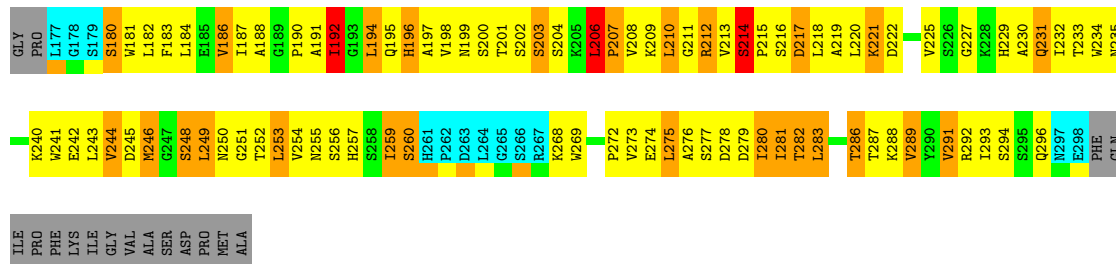
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE



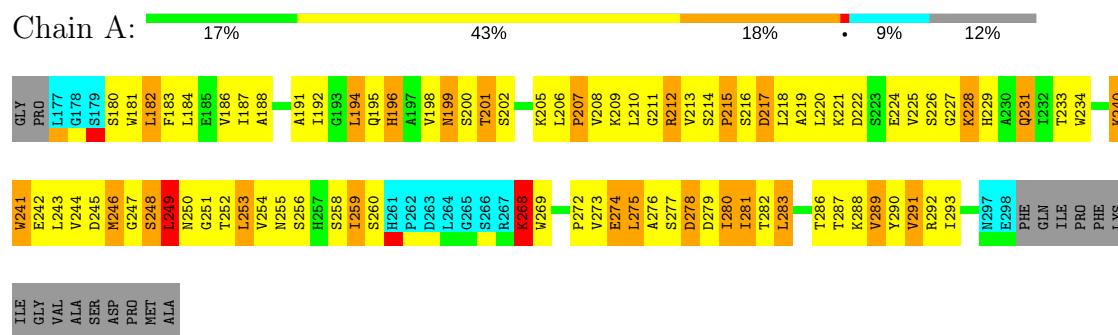
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE



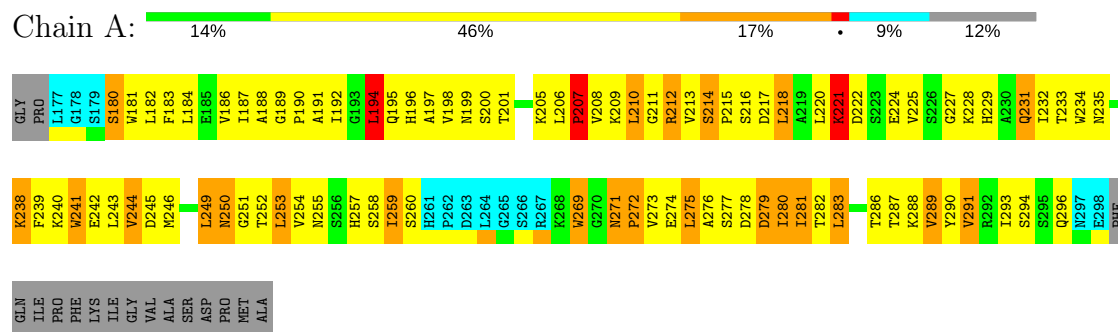
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE



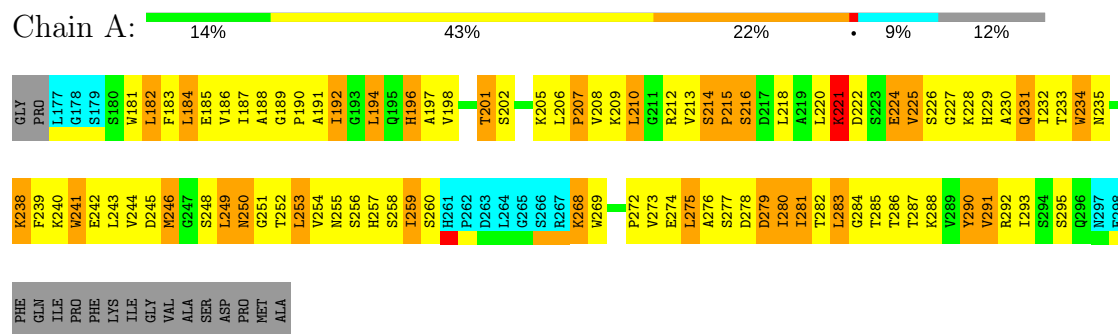
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE



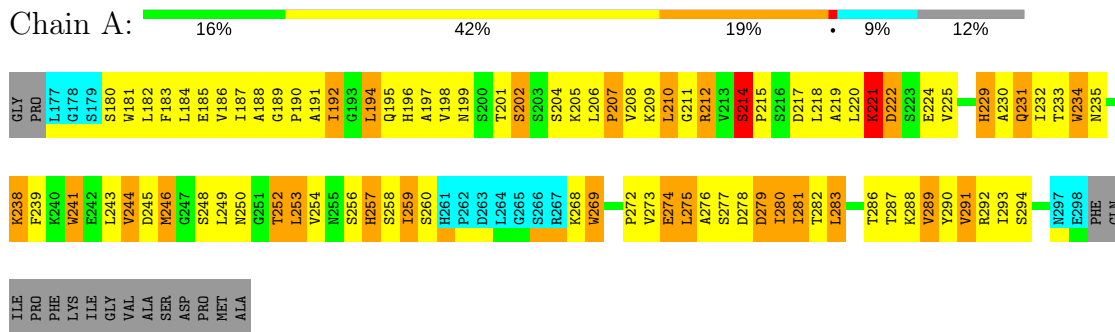
4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE



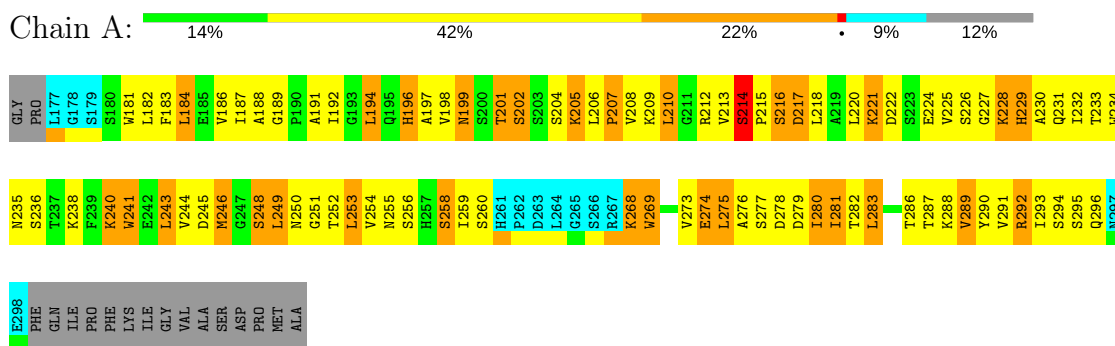
4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE



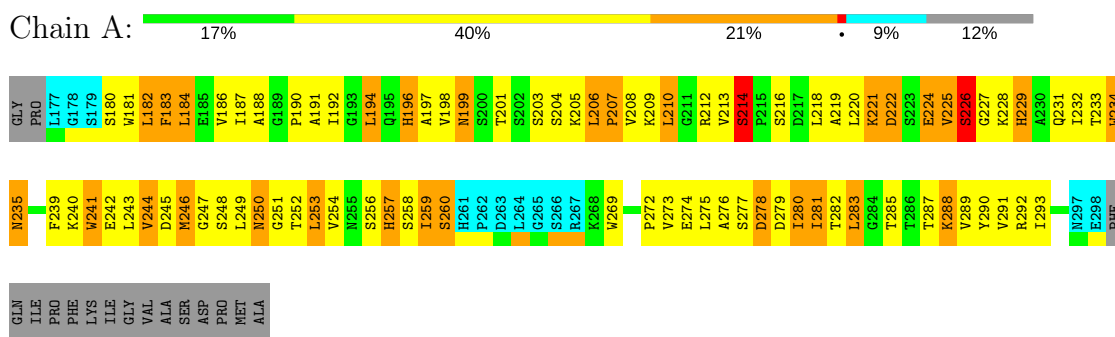
4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE



4.2.23 Score per residue for model 23

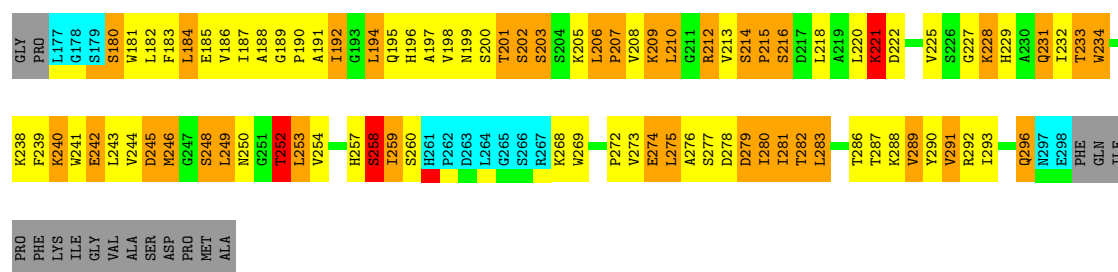
- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE



4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE





4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE

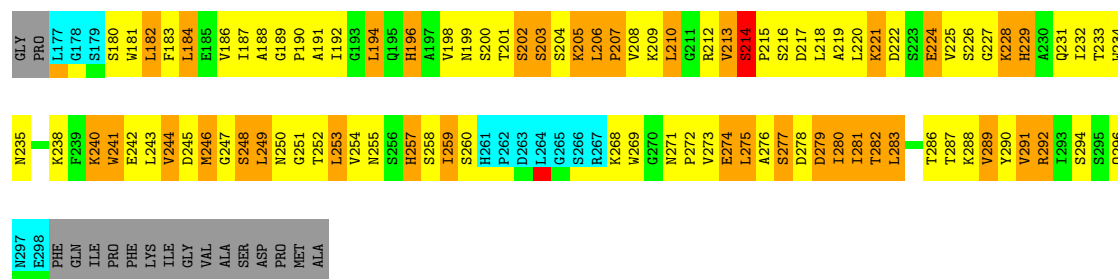
Chain A: 14% 41% 22% 9% 12%



4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE

Chain A: 12% 42% 25% 9% 12%



4.2.27 Score per residue for model 27

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE

Chain A: 17% 40% 22% 9% 12%





- #### 4.2.29 Score per residue for model 29

- #### 4.2.30 Score per residue for model 30

0296	M297	
	E298	
PHE	GLN	
	ILE	
PRO		
PHE	LYS	
ILE		
GLY	VAL	
ALA		
SER	ASP	
PRO		
MET		
ALA		

5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *torsion angle dynamics and simulated annealing in cartesian space and residual dipolar couplings*.

Of the 100 calculated structures, 30 were deposited, based on the following criterion: *structures with favorable non-bond energy, structures with the least restraint violations, structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
CNS	structure solution	1.0
CNS	refinement	1.0

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

Chemical shift file(s)	BMRB entry 5564
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1525
Number of shifts mapped to atoms	1525
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	91%

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	835	850	847	123±12
All	All	25050	25500	25410	3694

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 73.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:254:VAL:HG23	1:A:259:ILE:HD12	1.02	1.28	2	17
1:A:186:VAL:HG21	1:A:194:LEU:HD12	0.99	1.27	15	21
1:A:210:LEU:HD23	1:A:218:LEU:HD12	0.99	1.32	22	26
1:A:281:ILE:HG22	1:A:289:VAL:HG12	0.95	1.34	8	6
1:A:212:ARG:HB2	1:A:225:VAL:HG13	0.94	1.39	28	20
1:A:206:LEU:H	1:A:207:PRO:HD2	0.92	1.24	17	4
1:A:241:TRP:CE3	1:A:293:ILE:HD12	0.92	1.99	23	7
1:A:249:LEU:HD22	1:A:250:ASN:N	0.92	1.80	14	19
1:A:184:LEU:HD13	1:A:196:HIS:CD2	0.91	2.00	24	3
1:A:241:TRP:CZ3	1:A:293:ILE:HG23	0.90	2.02	24	5
1:A:198:VAL:HG21	1:A:206:LEU:HA	0.90	1.44	30	19
1:A:252:THR:HG23	1:A:283:LEU:HD23	0.90	1.44	20	4
1:A:206:LEU:HD22	1:A:206:LEU:O	0.90	1.66	5	5
1:A:196:HIS:CE1	1:A:218:LEU:HD11	0.90	2.02	17	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:196:HIS:ND1	1:A:218:LEU:HD21	0.89	1.82	17	1
1:A:184:LEU:HD23	1:A:196:HIS:CD2	0.89	2.01	29	5
1:A:212:ARG:HA	1:A:220:LEU:O	0.89	1.68	10	27
1:A:184:LEU:HD13	1:A:196:HIS:CE1	0.88	2.03	6	3
1:A:275:LEU:HD22	1:A:291:VAL:HG11	0.87	1.47	9	2
1:A:244:VAL:HG22	1:A:269:TRP:HB2	0.86	1.46	21	1
1:A:244:VAL:HG22	1:A:269:TRP:HB3	0.86	1.46	19	1
1:A:231:GLN:O	1:A:243:LEU:HD13	0.86	1.71	10	6
1:A:207:PRO:HA	1:A:232:ILE:O	0.86	1.71	23	28
1:A:182:LEU:HD11	1:A:184:LEU:CD2	0.86	1.99	15	8
1:A:184:LEU:HD22	1:A:184:LEU:N	0.86	1.86	14	6
1:A:200:SER:HA	1:A:234:TRP:CZ2	0.85	2.06	26	18
1:A:259:ILE:CG1	1:A:273:VAL:HG21	0.85	2.01	14	13
1:A:186:VAL:HG21	1:A:220:LEU:HD11	0.85	1.45	30	9
1:A:198:VAL:HG13	1:A:234:TRP:CH2	0.85	2.05	28	18
1:A:182:LEU:HD12	1:A:183:PHE:N	0.84	1.87	22	23
1:A:254:VAL:HG23	1:A:259:ILE:CD1	0.84	2.02	29	19
1:A:254:VAL:HG22	1:A:281:ILE:HG13	0.84	1.50	29	5
1:A:280:ILE:HD13	1:A:280:ILE:N	0.84	1.88	17	1
1:A:281:ILE:CG2	1:A:289:VAL:HG12	0.84	2.00	8	6
1:A:206:LEU:HD13	1:A:207:PRO:HD3	0.84	1.45	26	5
1:A:279:ASP:O	1:A:291:VAL:HG23	0.83	1.74	15	6
1:A:206:LEU:O	1:A:206:LEU:HD22	0.83	1.72	27	2
1:A:184:LEU:N	1:A:184:LEU:HD22	0.83	1.87	22	2
1:A:234:TRP:HB2	1:A:240:LYS:O	0.83	1.74	1	20
1:A:191:ALA:CB	1:A:194:LEU:HD11	0.83	2.02	5	22
1:A:196:HIS:CD2	1:A:208:VAL:HG21	0.83	2.09	1	1
1:A:208:VAL:O	1:A:231:GLN:HB3	0.83	1.74	16	4
1:A:214:SER:HB2	1:A:215:PRO:HD3	0.82	1.50	29	2
1:A:275:LEU:HB2	1:A:291:VAL:HG11	0.82	1.48	20	21
1:A:254:VAL:HG22	1:A:281:ILE:HD11	0.82	1.52	11	1
1:A:196:HIS:ND1	1:A:208:VAL:HG21	0.82	1.90	12	2
1:A:244:VAL:HG13	1:A:269:TRP:CZ3	0.81	2.09	29	4
1:A:187:ILE:HG22	1:A:288:LYS:O	0.81	1.74	23	29
1:A:191:ALA:HB3	1:A:220:LEU:HD13	0.81	1.51	17	8
1:A:224:GLU:O	1:A:225:VAL:HG23	0.81	1.74	23	1
1:A:243:LEU:HD11	1:A:259:ILE:HD11	0.81	1.51	13	1
1:A:184:LEU:HD13	1:A:196:HIS:ND1	0.81	1.91	4	3
1:A:255:ASN:HA	1:A:280:ILE:HD12	0.81	1.49	11	6
1:A:196:HIS:CD2	1:A:208:VAL:HG11	0.81	2.11	15	8
1:A:206:LEU:HD13	1:A:207:PRO:CD	0.80	2.07	17	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:184:LEU:HD22	1:A:196:HIS:CE1	0.80	2.11	1	1
1:A:283:LEU:HD22	1:A:287:THR:O	0.80	1.77	14	2
1:A:188:ALA:O	1:A:287:THR:HA	0.79	1.77	20	30
1:A:206:LEU:HD11	1:A:234:TRP:CE3	0.79	2.13	23	6
1:A:213:VAL:HG13	1:A:215:PRO:HG2	0.79	1.54	19	2
1:A:191:ALA:HB1	1:A:194:LEU:CD1	0.79	2.08	9	7
1:A:202:SER:O	1:A:206:LEU:HD12	0.79	1.78	26	2
1:A:206:LEU:HD21	1:A:234:TRP:CE3	0.79	2.13	9	10
1:A:206:LEU:HD11	1:A:234:TRP:CZ2	0.78	2.13	10	3
1:A:186:VAL:HG23	1:A:194:LEU:O	0.78	1.77	9	11
1:A:182:LEU:HD11	1:A:184:LEU:CD1	0.78	2.08	20	9
1:A:281:ILE:HG22	1:A:289:VAL:HG23	0.78	1.53	26	5
1:A:281:ILE:CG2	1:A:289:VAL:HG23	0.78	2.08	26	4
1:A:206:LEU:HD22	1:A:206:LEU:C	0.78	2.00	25	7
1:A:212:ARG:HB3	1:A:226:SER:O	0.78	1.79	23	1
1:A:275:LEU:HD23	1:A:293:ILE:HD11	0.77	1.56	4	18
1:A:210:LEU:HD21	1:A:230:ALA:HB3	0.77	1.54	28	2
1:A:254:VAL:CG2	1:A:259:ILE:HD13	0.77	2.09	13	1
1:A:196:HIS:CG	1:A:208:VAL:HG11	0.77	2.14	25	5
1:A:259:ILE:HB	1:A:273:VAL:HG21	0.77	1.56	11	19
1:A:246:MET:HB2	1:A:269:TRP:CZ3	0.77	2.15	26	4
1:A:244:VAL:HG11	1:A:269:TRP:NE1	0.77	1.94	8	15
1:A:186:VAL:HG11	1:A:220:LEU:HD11	0.77	1.56	28	7
1:A:184:LEU:HD23	1:A:196:HIS:CG	0.77	2.14	10	6
1:A:184:LEU:H	1:A:184:LEU:HD22	0.77	1.40	10	2
1:A:254:VAL:HG22	1:A:281:ILE:CG2	0.77	2.10	10	4
1:A:218:LEU:HD13	1:A:220:LEU:HD21	0.76	1.57	3	16
1:A:182:LEU:HD13	1:A:293:ILE:CD1	0.76	2.11	23	1
1:A:212:ARG:HB2	1:A:225:VAL:HG12	0.76	1.56	23	1
1:A:182:LEU:HD23	1:A:234:TRP:CZ3	0.76	2.14	29	11
1:A:243:LEU:HD23	1:A:281:ILE:CD1	0.76	2.11	16	1
1:A:254:VAL:HG22	1:A:281:ILE:HG12	0.75	1.56	27	6
1:A:184:LEU:HD23	1:A:196:HIS:ND1	0.75	1.95	26	1
1:A:244:VAL:HG21	1:A:269:TRP:CD1	0.75	2.16	24	15
1:A:232:ILE:HG12	1:A:243:LEU:HD22	0.75	1.54	10	2
1:A:224:GLU:O	1:A:249:LEU:HD11	0.75	1.80	6	5
1:A:222:ASP:OD2	1:A:287:THR:HG21	0.75	1.81	30	2
1:A:222:ASP:HB3	1:A:225:VAL:HG12	0.75	1.55	21	5
1:A:281:ILE:HD12	1:A:289:VAL:CG2	0.75	2.12	7	6
1:A:206:LEU:HD11	1:A:234:TRP:CE2	0.75	2.17	4	14
1:A:275:LEU:H	1:A:275:LEU:HD13	0.75	1.42	17	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:244:VAL:HG22	1:A:269:TRP:O	0.75	1.80	9	14
1:A:184:LEU:HD22	1:A:184:LEU:H	0.75	1.42	29	6
1:A:218:LEU:HD23	1:A:220:LEU:HD21	0.75	1.59	11	1
1:A:191:ALA:HB1	1:A:194:LEU:HD21	0.74	1.57	3	6
1:A:246:MET:HG2	1:A:269:TRP:CH2	0.74	2.18	5	10
1:A:191:ALA:HB3	1:A:194:LEU:HD11	0.74	1.59	21	21
1:A:241:TRP:CH2	1:A:293:ILE:HG23	0.74	2.16	10	2
1:A:259:ILE:HG21	1:A:273:VAL:HG11	0.74	1.57	6	7
1:A:212:ARG:HD3	1:A:213:VAL:HG12	0.74	1.60	29	8
1:A:275:LEU:HD13	1:A:275:LEU:H	0.74	1.42	3	14
1:A:232:ILE:HG12	1:A:243:LEU:HD11	0.74	1.59	16	1
1:A:196:HIS:CE1	1:A:208:VAL:HG21	0.74	2.18	12	2
1:A:184:LEU:HB3	1:A:196:HIS:CE1	0.73	2.18	15	5
1:A:259:ILE:HG12	1:A:273:VAL:HG21	0.73	1.58	28	9
1:A:281:ILE:HD12	1:A:289:VAL:HG23	0.73	1.56	18	6
1:A:218:LEU:HB3	1:A:220:LEU:CD2	0.73	2.13	16	30
1:A:230:ALA:HB2	1:A:252:THR:HG21	0.73	1.61	28	3
1:A:202:SER:HA	1:A:205:LYS:HE3	0.73	1.60	6	3
1:A:220:LEU:O	1:A:222:ASP:N	0.73	2.21	3	29
1:A:244:VAL:HG21	1:A:269:TRP:NE1	0.73	1.99	4	9
1:A:259:ILE:HD12	1:A:273:VAL:HB	0.73	1.59	13	1
1:A:206:LEU:H	1:A:207:PRO:CD	0.73	1.96	6	2
1:A:259:ILE:HD12	1:A:273:VAL:CB	0.73	2.14	13	1
1:A:243:LEU:O	1:A:243:LEU:HD12	0.72	1.83	19	15
1:A:206:LEU:C	1:A:206:LEU:HD22	0.72	2.05	17	3
1:A:249:LEU:HD13	1:A:250:ASN:H	0.72	1.44	22	19
1:A:230:ALA:HB3	1:A:283:LEU:HD22	0.72	1.60	20	1
1:A:229:HIS:CE1	1:A:248:SER:HB3	0.72	2.20	25	1
1:A:281:ILE:O	1:A:281:ILE:CG2	0.72	2.38	20	3
1:A:246:MET:HG3	1:A:246:MET:O	0.71	1.85	26	3
1:A:243:LEU:HD22	1:A:281:ILE:HD12	0.71	1.62	3	4
1:A:259:ILE:HG12	1:A:273:VAL:HG11	0.71	1.61	18	7
1:A:222:ASP:HB2	1:A:225:VAL:HG12	0.71	1.62	30	7
1:A:212:ARG:HG2	1:A:221:LYS:HA	0.71	1.63	14	12
1:A:182:LEU:HD12	1:A:292:ARG:O	0.70	1.86	4	9
1:A:198:VAL:HG21	1:A:206:LEU:CB	0.70	2.15	8	3
1:A:243:LEU:HD12	1:A:243:LEU:O	0.70	1.84	21	8
1:A:225:VAL:HG13	1:A:229:HIS:CG	0.70	2.22	11	1
1:A:196:HIS:NE2	1:A:210:LEU:HD21	0.70	2.02	15	6
1:A:241:TRP:O	1:A:274:GLU:HA	0.69	1.87	14	29
1:A:283:LEU:N	1:A:283:LEU:HD13	0.69	2.02	23	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:244:VAL:HG11	1:A:269:TRP:CZ2	0.69	2.22	10	4
1:A:184:LEU:HD12	1:A:196:HIS:O	0.69	1.88	19	7
1:A:244:VAL:HG22	1:A:269:TRP:CB	0.69	2.16	19	2
1:A:254:VAL:HG22	1:A:281:ILE:HG23	0.69	1.64	14	8
1:A:208:VAL:O	1:A:208:VAL:HG12	0.69	1.87	14	2
1:A:191:ALA:HB1	1:A:194:LEU:HD11	0.69	1.62	18	18
1:A:275:LEU:CD2	1:A:293:ILE:HD11	0.69	2.17	17	20
1:A:252:THR:CG2	1:A:283:LEU:HD23	0.69	2.18	20	2
1:A:234:TRP:CE3	1:A:241:TRP:CE3	0.69	2.81	5	6
1:A:196:HIS:ND1	1:A:208:VAL:HG11	0.69	2.02	4	4
1:A:210:LEU:HD12	1:A:231:GLN:HA	0.69	1.65	22	22
1:A:259:ILE:HG13	1:A:273:VAL:HG11	0.68	1.64	20	6
1:A:183:PHE:O	1:A:184:LEU:HD12	0.68	1.87	1	1
1:A:214:SER:CB	1:A:215:PRO:HD3	0.68	2.18	21	3
1:A:199:ASN:ND2	1:A:201:THR:HG22	0.68	2.02	18	1
1:A:283:LEU:HD13	1:A:283:LEU:N	0.68	2.02	18	14
1:A:224:GLU:O	1:A:249:LEU:HD21	0.68	1.87	30	1
1:A:246:MET:O	1:A:246:MET:HG3	0.68	1.88	6	1
1:A:234:TRP:CB	1:A:241:TRP:HA	0.68	2.17	14	19
1:A:213:VAL:HG22	1:A:214:SER:H	0.67	1.47	3	11
1:A:246:MET:O	1:A:248:SER:N	0.67	2.24	25	2
1:A:184:LEU:O	1:A:195:GLN:HG2	0.67	1.90	16	18
1:A:206:LEU:HD13	1:A:207:PRO:N	0.67	2.04	27	4
1:A:182:LEU:HD11	1:A:184:LEU:HD13	0.67	1.66	1	9
1:A:282:THR:C	1:A:283:LEU:HD13	0.67	2.10	11	2
1:A:252:THR:C	1:A:253:LEU:HD23	0.67	2.11	21	21
1:A:208:VAL:O	1:A:231:GLN:HB2	0.67	1.90	5	14
1:A:228:LYS:HB2	1:A:246:MET:HG3	0.67	1.66	29	2
1:A:231:GLN:HG2	1:A:246:MET:HE1	0.67	1.67	28	1
1:A:228:LYS:O	1:A:246:MET:HB3	0.67	1.90	29	6
1:A:253:LEU:N	1:A:253:LEU:HD23	0.66	2.06	27	10
1:A:241:TRP:CE3	1:A:293:ILE:HD13	0.66	2.25	4	5
1:A:202:SER:OG	1:A:206:LEU:HB3	0.66	1.91	8	2
1:A:196:HIS:CE1	1:A:218:LEU:HD21	0.66	2.25	17	2
1:A:243:LEU:O	1:A:272:PRO:HA	0.66	1.90	29	16
1:A:218:LEU:CD2	1:A:220:LEU:HD21	0.66	2.19	11	1
1:A:206:LEU:HG	1:A:234:TRP:CZ2	0.66	2.26	25	3
1:A:212:ARG:HD2	1:A:225:VAL:HB	0.66	1.66	27	1
1:A:245:ASP:HB2	1:A:260:SER:HB3	0.66	1.67	5	6
1:A:243:LEU:HD12	1:A:244:VAL:N	0.66	2.05	30	1
1:A:234:TRP:HB3	1:A:241:TRP:HA	0.66	1.68	25	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:243:LEU:HG	1:A:281:ILE:HG13	0.66	1.67	11	2
1:A:209:LYS:O	1:A:217:ASP:HB2	0.66	1.90	28	1
1:A:253:LEU:HD23	1:A:253:LEU:N	0.65	2.06	11	16
1:A:184:LEU:HD22	1:A:196:HIS:O	0.65	1.92	20	8
1:A:191:ALA:O	1:A:194:LEU:HD12	0.65	1.92	23	7
1:A:182:LEU:O	1:A:197:ALA:HA	0.65	1.90	9	23
1:A:182:LEU:HD23	1:A:234:TRP:HZ3	0.65	1.51	7	15
1:A:198:VAL:HG21	1:A:206:LEU:HG	0.65	1.69	3	4
1:A:181:TRP:HB3	1:A:183:PHE:CZ	0.65	2.27	8	29
1:A:206:LEU:HD22	1:A:207:PRO:N	0.65	2.07	17	2
1:A:228:LYS:O	1:A:246:MET:O	0.64	2.15	23	1
1:A:243:LEU:HD21	1:A:281:ILE:HG21	0.64	1.66	30	1
1:A:206:LEU:N	1:A:207:PRO:HD2	0.64	2.08	8	13
1:A:206:LEU:HD22	1:A:233:THR:HA	0.64	1.69	9	5
1:A:253:LEU:O	1:A:281:ILE:HD13	0.64	1.92	11	3
1:A:184:LEU:CD2	1:A:184:LEU:N	0.64	2.61	14	8
1:A:231:GLN:NE2	1:A:244:VAL:HG12	0.64	2.08	24	1
1:A:280:ILE:CD1	1:A:280:ILE:N	0.64	2.60	17	1
1:A:213:VAL:HG13	1:A:215:PRO:CG	0.64	2.22	19	2
1:A:242:GLU:HG2	1:A:274:GLU:HG3	0.64	1.70	7	1
1:A:196:HIS:CE1	1:A:210:LEU:HD21	0.64	2.27	6	4
1:A:253:LEU:HG	1:A:282:THR:HB	0.64	1.69	2	18
1:A:220:LEU:HD22	1:A:220:LEU:N	0.64	2.08	18	8
1:A:229:HIS:CD2	1:A:283:LEU:HB3	0.64	2.28	14	3
1:A:252:THR:HG23	1:A:283:LEU:HD12	0.64	1.69	14	1
1:A:212:ARG:HB2	1:A:225:VAL:O	0.63	1.92	12	16
1:A:206:LEU:N	1:A:207:PRO:CD	0.63	2.60	12	9
1:A:246:MET:HE1	1:A:269:TRP:CZ2	0.63	2.29	30	1
1:A:206:LEU:HD23	1:A:234:TRP:CH2	0.63	2.28	30	1
1:A:196:HIS:NE2	1:A:208:VAL:HG21	0.63	2.08	1	1
1:A:259:ILE:CB	1:A:273:VAL:HG21	0.63	2.23	4	2
1:A:232:ILE:CG1	1:A:243:LEU:HD11	0.63	2.23	16	1
1:A:220:LEU:N	1:A:220:LEU:HD22	0.63	2.09	27	5
1:A:210:LEU:HB2	1:A:230:ALA:O	0.63	1.92	25	3
1:A:190:PRO:HB2	1:A:221:LYS:HG3	0.62	1.72	29	6
1:A:212:ARG:CD	1:A:225:VAL:HB	0.62	2.23	27	1
1:A:275:LEU:HD22	1:A:291:VAL:CG1	0.62	2.22	23	2
1:A:253:LEU:HG	1:A:282:THR:O	0.62	1.93	16	4
1:A:214:SER:HB3	1:A:215:PRO:HD2	0.62	1.71	27	6
1:A:191:ALA:HB1	1:A:194:LEU:HD13	0.62	1.70	9	4
1:A:243:LEU:HD11	1:A:259:ILE:CD1	0.62	2.22	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:231:GLN:O	1:A:243:LEU:HB2	0.62	1.92	5	23
1:A:281:ILE:O	1:A:288:LYS:HA	0.62	1.94	17	19
1:A:184:LEU:HD23	1:A:196:HIS:CE1	0.62	2.29	26	1
1:A:184:LEU:N	1:A:184:LEU:CD2	0.62	2.63	22	4
1:A:210:LEU:N	1:A:210:LEU:HD13	0.62	2.10	17	1
1:A:277:SER:O	1:A:278:ASP:HB2	0.62	1.93	22	25
1:A:257:HIS:O	1:A:259:ILE:HG23	0.62	1.95	17	8
1:A:182:LEU:HD23	1:A:234:TRP:CE3	0.62	2.29	29	2
1:A:181:TRP:HB3	1:A:183:PHE:CE1	0.62	2.29	13	4
1:A:282:THR:HG23	1:A:288:LYS:CG	0.62	2.24	17	7
1:A:198:VAL:HG13	1:A:234:TRP:HH2	0.61	1.51	22	10
1:A:246:MET:HA	1:A:269:TRP:CE3	0.61	2.30	10	5
1:A:206:LEU:HD23	1:A:234:TRP:CZ3	0.61	2.29	5	5
1:A:184:LEU:HD11	1:A:232:ILE:HD12	0.61	1.71	11	1
1:A:281:ILE:HD12	1:A:289:VAL:CG1	0.61	2.24	30	1
1:A:276:ALA:O	1:A:279:ASP:HB2	0.61	1.95	6	26
1:A:196:HIS:CD2	1:A:196:HIS:N	0.61	2.67	29	7
1:A:246:MET:HE2	1:A:246:MET:N	0.61	2.10	28	1
1:A:241:TRP:CD1	1:A:241:TRP:N	0.61	2.68	21	10
1:A:198:VAL:HG21	1:A:206:LEU:HB2	0.61	1.73	8	2
1:A:188:ALA:O	1:A:286:THR:O	0.61	2.18	6	28
1:A:184:LEU:CD2	1:A:196:HIS:O	0.61	2.48	22	12
1:A:180:SER:O	1:A:199:ASN:HA	0.61	1.94	11	16
1:A:196:HIS:CD2	1:A:217:ASP:HB3	0.60	2.31	28	3
1:A:229:HIS:CG	1:A:283:LEU:HB2	0.60	2.32	26	19
1:A:206:LEU:CD2	1:A:233:THR:HA	0.60	2.25	14	2
1:A:249:LEU:HD22	1:A:249:LEU:C	0.60	2.16	4	5
1:A:231:GLN:OE1	1:A:233:THR:HG22	0.60	1.95	9	2
1:A:242:GLU:HA	1:A:273:VAL:O	0.60	1.96	5	23
1:A:218:LEU:HB3	1:A:220:LEU:HD23	0.60	1.74	18	1
1:A:208:VAL:O	1:A:231:GLN:CB	0.60	2.49	18	11
1:A:249:LEU:N	1:A:249:LEU:HD12	0.60	2.12	1	1
1:A:208:VAL:O	1:A:231:GLN:HG3	0.60	1.96	13	1
1:A:230:ALA:HB1	1:A:243:LEU:HD11	0.60	1.73	30	1
1:A:229:HIS:O	1:A:246:MET:N	0.60	2.35	5	16
1:A:254:VAL:HG21	1:A:259:ILE:HD13	0.60	1.73	13	1
1:A:249:LEU:HD13	1:A:249:LEU:C	0.59	2.17	18	2
1:A:210:LEU:HD23	1:A:218:LEU:CD1	0.59	2.21	23	8
1:A:184:LEU:CD2	1:A:291:VAL:HG13	0.59	2.27	21	3
1:A:202:SER:O	1:A:206:LEU:HB2	0.59	1.97	14	3
1:A:252:THR:N	1:A:260:SER:HB3	0.59	2.11	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:218:LEU:HD23	1:A:220:LEU:CD2	0.59	2.27	11	1
1:A:279:ASP:O	1:A:280:ILE:HG23	0.59	1.97	6	10
1:A:275:LEU:CB	1:A:291:VAL:HG11	0.59	2.25	20	9
1:A:190:PRO:HG3	1:A:222:ASP:CB	0.59	2.27	14	9
1:A:182:LEU:HB3	1:A:234:TRP:CZ3	0.59	2.32	29	4
1:A:254:VAL:HG23	1:A:259:ILE:HD11	0.59	1.74	26	14
1:A:194:LEU:HD22	1:A:219:ALA:HB3	0.59	1.74	21	1
1:A:212:ARG:HD3	1:A:222:ASP:CB	0.59	2.27	27	1
1:A:182:LEU:HD11	1:A:184:LEU:HD22	0.59	1.74	5	6
1:A:184:LEU:HD23	1:A:291:VAL:HG13	0.59	1.73	21	3
1:A:212:ARG:CB	1:A:225:VAL:HG12	0.59	2.25	23	1
1:A:218:LEU:HB3	1:A:220:LEU:HD21	0.59	1.74	1	3
1:A:282:THR:OG1	1:A:288:LYS:HG3	0.59	1.97	9	5
1:A:254:VAL:HG22	1:A:281:ILE:CG1	0.59	2.28	15	5
1:A:200:SER:HB2	1:A:241:TRP:CZ2	0.58	2.33	25	1
1:A:254:VAL:HG23	1:A:259:ILE:CG1	0.58	2.28	24	9
1:A:213:VAL:HG22	1:A:215:PRO:HD2	0.58	1.75	18	3
1:A:184:LEU:HB2	1:A:196:HIS:CE1	0.58	2.33	21	4
1:A:214:SER:CB	1:A:215:PRO:CD	0.58	2.81	15	15
1:A:246:MET:HG2	1:A:269:TRP:CZ3	0.58	2.32	5	4
1:A:249:LEU:HD13	1:A:250:ASN:N	0.58	2.13	12	10
1:A:259:ILE:HD13	1:A:259:ILE:H	0.58	1.57	29	7
1:A:189:GLY:H	1:A:192:ILE:HG12	0.58	1.58	19	23
1:A:184:LEU:HD13	1:A:290:TYR:O	0.58	1.99	25	3
1:A:212:ARG:HD3	1:A:222:ASP:CA	0.58	2.27	27	1
1:A:259:ILE:H	1:A:259:ILE:HD13	0.58	1.57	2	7
1:A:281:ILE:HG22	1:A:289:VAL:CG1	0.58	2.29	9	1
1:A:259:ILE:HD12	1:A:260:SER:N	0.58	2.13	3	6
1:A:230:ALA:HB3	1:A:283:LEU:CD2	0.58	2.29	10	3
1:A:188:ALA:N	1:A:192:ILE:HD11	0.58	2.13	11	1
1:A:243:LEU:C	1:A:243:LEU:HD12	0.57	2.19	2	15
1:A:229:HIS:CE1	1:A:283:LEU:O	0.57	2.57	25	4
1:A:181:TRP:CB	1:A:183:PHE:CZ	0.57	2.87	26	3
1:A:249:LEU:HD12	1:A:250:ASN:N	0.57	2.13	30	3
1:A:245:ASP:HB2	1:A:270:GLY:CA	0.57	2.28	30	1
1:A:232:ILE:HD13	1:A:275:LEU:CD1	0.57	2.29	23	1
1:A:249:LEU:O	1:A:249:LEU:HG	0.57	1.99	25	1
1:A:259:ILE:CG2	1:A:273:VAL:HG11	0.57	2.30	22	4
1:A:212:ARG:HE	1:A:212:ARG:HA	0.57	1.58	27	1
1:A:243:LEU:HD12	1:A:243:LEU:C	0.57	2.20	23	8
1:A:202:SER:HB3	1:A:206:LEU:HB2	0.57	1.76	24	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:202:SER:OG	1:A:205:LYS:HG2	0.57	2.00	26	1
1:A:246:MET:HB3	1:A:269:TRP:CH2	0.57	2.35	15	1
1:A:245:ASP:O	1:A:269:TRP:CE3	0.57	2.57	28	1
1:A:212:ARG:HB2	1:A:225:VAL:HB	0.57	1.77	11	2
1:A:212:ARG:NE	1:A:225:VAL:HB	0.57	2.15	27	1
1:A:234:TRP:CH2	1:A:241:TRP:CE3	0.57	2.92	21	3
1:A:196:HIS:HE1	1:A:289:VAL:HG21	0.57	1.59	16	1
1:A:283:LEU:H	1:A:283:LEU:HD22	0.57	1.59	6	7
1:A:282:THR:HG23	1:A:288:LYS:HG3	0.57	1.76	17	5
1:A:243:LEU:HD23	1:A:281:ILE:HD12	0.57	1.75	16	1
1:A:196:HIS:HE1	1:A:289:VAL:HG11	0.57	1.60	18	2
1:A:209:LYS:HB2	1:A:217:ASP:HB2	0.57	1.76	17	1
1:A:283:LEU:HD22	1:A:283:LEU:H	0.56	1.59	14	10
1:A:254:VAL:HG23	1:A:259:ILE:HD13	0.56	1.76	13	1
1:A:184:LEU:HD12	1:A:289:VAL:HG13	0.56	1.77	17	1
1:A:245:ASP:O	1:A:269:TRP:HA	0.56	2.00	23	6
1:A:196:HIS:CE1	1:A:218:LEU:CD2	0.56	2.88	18	1
1:A:186:VAL:N	1:A:289:VAL:HG23	0.56	2.15	16	4
1:A:283:LEU:O	1:A:287:THR:HB	0.56	2.01	11	5
1:A:214:SER:HB2	1:A:215:PRO:CD	0.56	2.31	10	4
1:A:206:LEU:HD23	1:A:206:LEU:C	0.56	2.21	18	6
1:A:225:VAL:HG22	1:A:229:HIS:ND1	0.56	2.14	22	2
1:A:184:LEU:CD2	1:A:196:HIS:CE1	0.56	2.88	1	1
1:A:206:LEU:HD11	1:A:234:TRP:CH2	0.56	2.35	10	1
1:A:254:VAL:HG22	1:A:281:ILE:CD1	0.56	2.30	11	1
1:A:281:ILE:HG22	1:A:281:ILE:O	0.56	2.00	20	1
1:A:185:GLU:C	1:A:289:VAL:HG23	0.56	2.21	30	4
1:A:212:ARG:CG	1:A:221:LYS:HA	0.56	2.30	26	7
1:A:184:LEU:HA	1:A:290:TYR:O	0.56	2.01	27	18
1:A:182:LEU:C	1:A:182:LEU:HD12	0.56	2.21	29	6
1:A:206:LEU:HG	1:A:234:TRP:CE2	0.56	2.35	26	3
1:A:246:MET:HA	1:A:269:TRP:CZ3	0.56	2.35	18	1
1:A:196:HIS:CG	1:A:218:LEU:HD21	0.56	2.36	17	1
1:A:229:HIS:CE1	1:A:250:ASN:HB3	0.56	2.35	4	4
1:A:214:SER:CB	1:A:215:PRO:HD2	0.56	2.31	2	11
1:A:280:ILE:HG22	1:A:290:TYR:HA	0.56	1.77	9	1
1:A:196:HIS:NE2	1:A:208:VAL:HG22	0.56	2.15	5	1
1:A:238:LYS:O	1:A:240:LYS:HD3	0.56	2.01	29	6
1:A:198:VAL:HG11	1:A:206:LEU:HD23	0.56	1.78	6	1
1:A:206:LEU:HD11	1:A:234:TRP:CZ3	0.56	2.36	15	1
1:A:243:LEU:HB2	1:A:275:LEU:HD12	0.55	1.77	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:234:TRP:CH2	1:A:241:TRP:CZ3	0.55	2.94	6	5
1:A:253:LEU:O	1:A:281:ILE:HA	0.55	2.00	24	4
1:A:230:ALA:CB	1:A:252:THR:HG21	0.55	2.32	11	3
1:A:241:TRP:N	1:A:241:TRP:CD1	0.55	2.74	8	3
1:A:186:VAL:HG11	1:A:220:LEU:CD1	0.55	2.32	11	5
1:A:182:LEU:HD11	1:A:184:LEU:HD21	0.55	1.78	2	4
1:A:229:HIS:C	1:A:246:MET:HG2	0.55	2.22	30	1
1:A:229:HIS:CD2	1:A:283:LEU:HB2	0.55	2.37	17	14
1:A:211:GLY:O	1:A:218:LEU:O	0.55	2.24	18	6
1:A:186:VAL:HA	1:A:289:VAL:HG13	0.55	1.79	24	9
1:A:222:ASP:OD2	1:A:287:THR:OG1	0.55	2.25	27	3
1:A:186:VAL:CG2	1:A:220:LEU:HD11	0.55	2.32	20	7
1:A:182:LEU:HB2	1:A:241:TRP:CZ3	0.55	2.35	10	10
1:A:220:LEU:CD2	1:A:220:LEU:N	0.55	2.70	18	1
1:A:252:THR:HA	1:A:282:THR:O	0.55	2.02	30	3
1:A:213:VAL:HG13	1:A:213:VAL:O	0.55	2.02	1	3
1:A:231:GLN:CG	1:A:246:MET:HE1	0.55	2.31	28	1
1:A:208:VAL:HG12	1:A:209:LYS:N	0.54	2.17	1	14
1:A:206:LEU:HB3	1:A:207:PRO:CD	0.54	2.32	7	16
1:A:206:LEU:HD21	1:A:233:THR:HA	0.54	1.80	25	1
1:A:198:VAL:HG13	1:A:234:TRP:CZ3	0.54	2.36	9	6
1:A:196:HIS:N	1:A:196:HIS:CD2	0.54	2.74	14	1
1:A:229:HIS:CE1	1:A:250:ASN:OD1	0.54	2.61	17	1
1:A:241:TRP:CE3	1:A:293:ILE:CD1	0.54	2.89	9	11
1:A:259:ILE:O	1:A:273:VAL:HG21	0.54	2.01	24	3
1:A:184:LEU:HB2	1:A:196:HIS:CD2	0.54	2.37	6	6
1:A:244:VAL:CG1	1:A:269:TRP:CZ3	0.54	2.90	29	3
1:A:230:ALA:HB2	1:A:245:ASP:OD2	0.54	2.03	21	1
1:A:199:ASN:HB3	1:A:201:THR:HG22	0.54	1.79	17	2
1:A:279:ASP:O	1:A:291:VAL:CG2	0.54	2.56	30	1
1:A:252:THR:HG22	1:A:281:ILE:CD1	0.54	2.33	15	4
1:A:225:VAL:HG13	1:A:225:VAL:O	0.54	2.03	15	4
1:A:241:TRP:CD2	1:A:293:ILE:HD12	0.54	2.38	30	3
1:A:208:VAL:CG1	1:A:208:VAL:O	0.54	2.56	14	1
1:A:206:LEU:CD2	1:A:206:LEU:C	0.54	2.76	17	5
1:A:255:ASN:HA	1:A:280:ILE:HG13	0.54	1.79	20	3
1:A:182:LEU:HD13	1:A:293:ILE:HD13	0.54	1.79	23	1
1:A:196:HIS:CD2	1:A:208:VAL:HG13	0.54	2.38	5	1
1:A:246:MET:HB3	1:A:269:TRP:CZ3	0.54	2.38	30	2
1:A:231:GLN:CD	1:A:244:VAL:HG12	0.54	2.24	24	1
1:A:229:HIS:NE2	1:A:251:GLY:O	0.54	2.41	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:210:LEU:HD23	1:A:218:LEU:HD22	0.54	1.78	11	1
1:A:255:ASN:N	1:A:280:ILE:O	0.53	2.36	16	7
1:A:222:ASP:CB	1:A:225:VAL:HG12	0.53	2.32	21	3
1:A:210:LEU:HD11	1:A:232:ILE:HG13	0.53	1.80	29	1
1:A:210:LEU:HD22	1:A:230:ALA:O	0.53	2.03	17	2
1:A:244:VAL:CG2	1:A:269:TRP:CD1	0.53	2.91	3	9
1:A:210:LEU:HD12	1:A:231:GLN:CA	0.53	2.33	12	8
1:A:199:ASN:O	1:A:206:LEU:HD12	0.53	2.02	24	1
1:A:252:THR:HB	1:A:260:SER:OG	0.53	2.03	21	2
1:A:206:LEU:C	1:A:206:LEU:HD23	0.53	2.23	1	8
1:A:259:ILE:HD12	1:A:273:VAL:CG2	0.53	2.34	13	1
1:A:229:HIS:CB	1:A:283:LEU:HB2	0.53	2.34	22	9
1:A:243:LEU:CD2	1:A:281:ILE:HD12	0.53	2.34	25	4
1:A:206:LEU:HD21	1:A:234:TRP:CZ3	0.53	2.39	4	2
1:A:280:ILE:HG23	1:A:290:TYR:HD1	0.53	1.64	8	7
1:A:187:ILE:HG22	1:A:288:LYS:HB3	0.53	1.81	13	3
1:A:194:LEU:CD2	1:A:219:ALA:HB3	0.53	2.34	21	3
1:A:282:THR:HA	1:A:287:THR:O	0.53	2.03	10	3
1:A:190:PRO:O	1:A:221:LYS:HG2	0.53	2.04	7	4
1:A:181:TRP:CZ2	1:A:199:ASN:OD1	0.53	2.62	30	6
1:A:196:HIS:C	1:A:196:HIS:CD2	0.53	2.81	1	1
1:A:280:ILE:HG22	1:A:290:TYR:HD1	0.52	1.63	20	4
1:A:254:VAL:HG12	1:A:255:ASN:HD22	0.52	1.64	26	1
1:A:191:ALA:HB3	1:A:220:LEU:CD1	0.52	2.33	11	6
1:A:255:ASN:HA	1:A:280:ILE:CD1	0.52	2.34	14	5
1:A:221:LYS:O	1:A:221:LYS:HG3	0.52	2.04	7	2
1:A:245:ASP:O	1:A:269:TRP:O	0.52	2.27	6	7
1:A:235:ASN:O	1:A:239:PHE:N	0.52	2.42	23	7
1:A:212:ARG:CZ	1:A:222:ASP:HB2	0.52	2.35	27	1
1:A:213:VAL:HG22	1:A:214:SER:N	0.52	2.19	28	8
1:A:241:TRP:CZ3	1:A:293:ILE:CG2	0.52	2.93	8	4
1:A:206:LEU:C	1:A:206:LEU:CD2	0.52	2.77	26	2
1:A:231:GLN:OE1	1:A:269:TRP:CZ2	0.52	2.63	11	1
1:A:275:LEU:HD13	1:A:275:LEU:N	0.52	2.16	3	1
1:A:275:LEU:O	1:A:275:LEU:HD22	0.52	2.03	18	10
1:A:259:ILE:HG13	1:A:273:VAL:HG21	0.52	1.78	14	2
1:A:186:VAL:CG1	1:A:220:LEU:HD11	0.52	2.31	28	3
1:A:210:LEU:CD2	1:A:218:LEU:HD12	0.52	2.35	25	6
1:A:184:LEU:HD21	1:A:196:HIS:HB3	0.52	1.81	23	1
1:A:208:VAL:O	1:A:231:GLN:HA	0.52	2.04	11	4
1:A:206:LEU:O	1:A:208:VAL:N	0.52	2.43	9	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:198:VAL:HG22	1:A:234:TRP:CH2	0.52	2.38	14	1
1:A:212:ARG:CZ	1:A:225:VAL:HB	0.52	2.35	27	1
1:A:213:VAL:HG13	1:A:214:SER:N	0.52	2.20	6	11
1:A:196:HIS:CE1	1:A:289:VAL:HG11	0.52	2.40	15	3
1:A:220:LEU:C	1:A:222:ASP:H	0.52	2.07	19	5
1:A:206:LEU:HD11	1:A:234:TRP:CD2	0.52	2.39	20	5
1:A:184:LEU:CB	1:A:196:HIS:CE1	0.52	2.92	24	5
1:A:280:ILE:HG23	1:A:290:TYR:CD1	0.52	2.40	11	12
1:A:245:ASP:HB3	1:A:260:SER:HB3	0.52	1.82	29	1
1:A:214:SER:HB3	1:A:215:PRO:HD3	0.52	1.79	21	2
1:A:275:LEU:HD22	1:A:275:LEU:O	0.52	2.05	5	8
1:A:212:ARG:HG3	1:A:222:ASP:O	0.52	2.05	17	3
1:A:252:THR:O	1:A:258:SER:HA	0.52	2.04	29	3
1:A:249:LEU:C	1:A:249:LEU:HD22	0.52	2.25	20	3
1:A:229:HIS:HA	1:A:248:SER:HB3	0.52	1.81	10	1
1:A:200:SER:HA	1:A:234:TRP:CE2	0.52	2.40	24	2
1:A:199:ASN:HD22	1:A:201:THR:HG22	0.52	1.65	18	1
1:A:210:LEU:HA	1:A:218:LEU:HB2	0.52	1.81	28	7
1:A:281:ILE:O	1:A:288:LYS:HG2	0.52	2.05	26	6
1:A:182:LEU:HD12	1:A:182:LEU:C	0.52	2.24	9	6
1:A:212:ARG:NE	1:A:220:LEU:O	0.52	2.43	27	1
1:A:276:ALA:HB3	1:A:279:ASP:OD2	0.51	2.05	4	1
1:A:182:LEU:HD13	1:A:293:ILE:HG12	0.51	1.81	16	3
1:A:241:TRP:O	1:A:275:LEU:N	0.51	2.37	30	2
1:A:210:LEU:HD23	1:A:218:LEU:CD2	0.51	2.34	11	1
1:A:209:LYS:HA	1:A:231:GLN:HB3	0.51	1.83	25	10
1:A:186:VAL:N	1:A:289:VAL:HG13	0.51	2.20	12	1
1:A:181:TRP:CH2	1:A:199:ASN:OD1	0.51	2.64	13	1
1:A:212:ARG:HD3	1:A:222:ASP:C	0.51	2.25	27	1
1:A:244:VAL:HG11	1:A:269:TRP:HE1	0.51	1.64	6	6
1:A:184:LEU:CB	1:A:196:HIS:CD2	0.51	2.93	17	6
1:A:218:LEU:CD1	1:A:220:LEU:HD21	0.51	2.34	15	2
1:A:249:LEU:C	1:A:249:LEU:HD13	0.51	2.25	23	2
1:A:276:ALA:HB3	1:A:279:ASP:OD1	0.51	2.06	3	2
1:A:198:VAL:HG22	1:A:199:ASN:N	0.51	2.21	16	8
1:A:208:VAL:CG1	1:A:209:LYS:N	0.51	2.74	10	9
1:A:275:LEU:CD2	1:A:291:VAL:HG11	0.51	2.31	9	2
1:A:246:MET:CE	1:A:269:TRP:CZ2	0.51	2.93	30	1
1:A:231:GLN:HG3	1:A:244:VAL:HG12	0.51	1.82	26	3
1:A:182:LEU:HD23	1:A:198:VAL:CG1	0.51	2.35	15	2
1:A:224:GLU:CD	1:A:284:GLY:HA3	0.51	2.26	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:234:TRP:CE3	1:A:241:TRP:CZ3	0.51	2.99	17	2
1:A:243:LEU:HD22	1:A:281:ILE:CD1	0.51	2.35	9	5
1:A:241:TRP:CZ3	1:A:293:ILE:HD12	0.51	2.41	19	5
1:A:275:LEU:C	1:A:275:LEU:CD2	0.51	2.80	4	10
1:A:281:ILE:O	1:A:281:ILE:HG22	0.51	2.05	27	2
1:A:245:ASP:CG	1:A:260:SER:HB3	0.51	2.26	28	1
1:A:246:MET:HG3	1:A:269:TRP:CH2	0.51	2.40	28	1
1:A:229:HIS:HB3	1:A:283:LEU:HB2	0.51	1.83	5	3
1:A:280:ILE:HG22	1:A:290:TYR:CD1	0.51	2.41	27	4
1:A:212:ARG:N	1:A:225:VAL:HG12	0.51	2.20	23	1
1:A:191:ALA:O	1:A:194:LEU:HG	0.51	2.06	27	13
1:A:196:HIS:CE1	1:A:218:LEU:CD1	0.51	2.86	17	2
1:A:243:LEU:CD2	1:A:281:ILE:HG13	0.51	2.36	20	2
1:A:212:ARG:HG3	1:A:222:ASP:N	0.50	2.22	23	2
1:A:194:LEU:HD22	1:A:219:ALA:H	0.50	1.66	11	5
1:A:225:VAL:HG23	1:A:228:LYS:C	0.50	2.26	29	3
1:A:214:SER:HB2	1:A:215:PRO:HD2	0.50	1.83	30	3
1:A:213:VAL:O	1:A:213:VAL:HG13	0.50	2.07	2	2
1:A:244:VAL:HG21	1:A:269:TRP:HD1	0.50	1.63	9	3
1:A:182:LEU:CD1	1:A:184:LEU:HD13	0.50	2.37	26	6
1:A:209:LYS:O	1:A:217:ASP:CB	0.50	2.59	17	2
1:A:222:ASP:HB3	1:A:224:GLU:CG	0.50	2.37	14	2
1:A:230:ALA:HA	1:A:246:MET:HE3	0.50	1.84	28	1
1:A:180:SER:HB2	1:A:200:SER:OG	0.50	2.06	8	1
1:A:224:GLU:HG2	1:A:285:THR:HG22	0.50	1.83	20	1
1:A:198:VAL:CG2	1:A:206:LEU:HD23	0.50	2.36	13	1
1:A:249:LEU:HD21	1:A:250:ASN:OD1	0.50	2.05	9	1
1:A:243:LEU:HD22	1:A:281:ILE:HD11	0.50	1.83	5	1
1:A:212:ARG:CA	1:A:225:VAL:HG12	0.50	2.36	23	1
1:A:259:ILE:HG12	1:A:260:SER:N	0.50	2.22	10	5
1:A:230:ALA:HB2	1:A:252:THR:CG2	0.50	2.36	11	1
1:A:196:HIS:N	1:A:196:HIS:ND1	0.50	2.59	17	2
1:A:229:HIS:CD2	1:A:251:GLY:O	0.50	2.65	23	1
1:A:198:VAL:HG21	1:A:206:LEU:CA	0.50	2.36	25	4
1:A:196:HIS:CE1	1:A:218:LEU:HG	0.50	2.42	29	1
1:A:213:VAL:O	1:A:214:SER:CB	0.50	2.60	29	2
1:A:180:SER:N	1:A:296:GLN:HB3	0.50	2.22	17	1
1:A:198:VAL:CG2	1:A:199:ASN:N	0.50	2.74	18	6
1:A:214:SER:HB3	1:A:215:PRO:CD	0.50	2.36	3	1
1:A:182:LEU:O	1:A:197:ALA:CA	0.50	2.60	24	5
1:A:281:ILE:HG22	1:A:289:VAL:CG2	0.50	2.35	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:224:GLU:O	1:A:225:VAL:CG2	0.50	2.56	23	1
1:A:229:HIS:CD2	1:A:283:LEU:O	0.50	2.64	29	2
1:A:242:GLU:OE1	1:A:272:PRO:HB3	0.50	2.07	24	1
1:A:228:LYS:HB2	1:A:246:MET:SD	0.49	2.47	6	2
1:A:187:ILE:CG2	1:A:288:LYS:HG3	0.49	2.37	14	4
1:A:218:LEU:CG	1:A:220:LEU:HD21	0.49	2.37	11	2
1:A:206:LEU:HD21	1:A:234:TRP:HE3	0.49	1.67	24	2
1:A:246:MET:CE	1:A:269:TRP:CH2	0.49	2.95	30	1
1:A:181:TRP:O	1:A:293:ILE:HG23	0.49	2.08	19	1
1:A:231:GLN:HG2	1:A:246:MET:CE	0.49	2.36	28	3
1:A:241:TRP:CH2	1:A:293:ILE:CG2	0.49	2.96	24	3
1:A:252:THR:HG22	1:A:253:LEU:N	0.49	2.22	18	2
1:A:288:LYS:O	1:A:289:VAL:HG22	0.49	2.08	19	1
1:A:190:PRO:HB2	1:A:221:LYS:CG	0.49	2.36	29	1
1:A:184:LEU:HD11	1:A:291:VAL:HG13	0.49	1.84	15	3
1:A:242:GLU:O	1:A:242:GLU:OE1	0.49	2.30	24	1
1:A:229:HIS:NE2	1:A:250:ASN:HB3	0.49	2.22	11	1
1:A:282:THR:OG1	1:A:288:LYS:HG2	0.49	2.07	30	1
1:A:279:ASP:O	1:A:291:VAL:HB	0.49	2.08	30	1
1:A:246:MET:CE	1:A:246:MET:HA	0.49	2.38	5	2
1:A:190:PRO:HB2	1:A:221:LYS:HD2	0.49	1.84	19	2
1:A:278:ASP:N	1:A:291:VAL:O	0.49	2.44	15	3
1:A:186:VAL:HG21	1:A:194:LEU:CD1	0.49	2.38	21	1
1:A:202:SER:CB	1:A:205:LYS:HG2	0.49	2.37	26	2
1:A:254:VAL:N	1:A:259:ILE:HD12	0.49	2.23	28	5
1:A:225:VAL:CG1	1:A:229:HIS:HB2	0.49	2.37	20	1
1:A:212:ARG:NH1	1:A:225:VAL:HG23	0.49	2.22	27	1
1:A:243:LEU:HG	1:A:281:ILE:HG21	0.49	1.83	7	2
1:A:199:ASN:OD1	1:A:201:THR:HG23	0.49	2.08	28	1
1:A:229:HIS:CE1	1:A:249:LEU:CD1	0.49	2.95	1	1
1:A:229:HIS:CD2	1:A:283:LEU:CB	0.48	2.96	17	6
1:A:232:ILE:HD13	1:A:275:LEU:HD13	0.48	1.83	23	1
1:A:224:GLU:HG3	1:A:285:THR:HG22	0.48	1.85	6	2
1:A:220:LEU:N	1:A:220:LEU:CD2	0.48	2.76	27	3
1:A:224:GLU:OE1	1:A:285:THR:HG22	0.48	2.07	7	2
1:A:229:HIS:CE1	1:A:250:ASN:HB2	0.48	2.43	25	3
1:A:259:ILE:HG13	1:A:260:SER:N	0.48	2.23	13	1
1:A:245:ASP:C	1:A:269:TRP:HB3	0.48	2.28	21	1
1:A:214:SER:HB3	1:A:228:LYS:HE2	0.48	1.85	6	3
1:A:224:GLU:HG2	1:A:284:GLY:HA2	0.48	1.85	13	1
1:A:268:LYS:HD3	1:A:269:TRP:CD1	0.48	2.44	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:214:SER:C	1:A:216:SER:H	0.48	2.12	10	9
1:A:269:TRP:HD1	1:A:270:GLY:O	0.48	1.92	10	1
1:A:192:ILE:O	1:A:192:ILE:HG22	0.48	2.07	17	1
1:A:198:VAL:CG2	1:A:206:LEU:HG	0.48	2.38	20	2
1:A:212:ARG:CB	1:A:225:VAL:HG13	0.48	2.38	4	1
1:A:282:THR:OG1	1:A:288:LYS:HB3	0.48	2.08	2	2
1:A:184:LEU:HB3	1:A:196:HIS:NE2	0.48	2.24	3	5
1:A:280:ILE:CG2	1:A:290:TYR:CD1	0.48	2.97	9	7
1:A:198:VAL:CG2	1:A:206:LEU:HA	0.48	2.37	13	2
1:A:241:TRP:CZ3	1:A:293:ILE:CD1	0.48	2.97	9	1
1:A:228:LYS:CB	1:A:246:MET:HG2	0.48	2.39	4	1
1:A:196:HIS:C	1:A:196:HIS:ND1	0.48	2.67	12	1
1:A:229:HIS:HE2	1:A:250:ASN:ND2	0.48	2.06	29	1
1:A:228:LYS:O	1:A:246:MET:HG3	0.48	2.08	18	2
1:A:252:THR:CG2	1:A:281:ILE:CD1	0.48	2.92	20	1
1:A:196:HIS:CE1	1:A:218:LEU:HD22	0.48	2.42	18	1
1:A:212:ARG:CB	1:A:225:VAL:HB	0.48	2.38	11	1
1:A:196:HIS:ND1	1:A:196:HIS:N	0.48	2.61	26	3
1:A:245:ASP:HB2	1:A:260:SER:CB	0.48	2.39	10	2
1:A:209:LYS:O	1:A:218:LEU:N	0.48	2.47	28	1
1:A:190:PRO:HG3	1:A:222:ASP:CA	0.48	2.39	20	1
1:A:279:ASP:O	1:A:291:VAL:CB	0.48	2.62	30	1
1:A:259:ILE:HD13	1:A:273:VAL:HG21	0.48	1.85	18	2
1:A:244:VAL:HG11	1:A:269:TRP:CE2	0.48	2.44	4	2
1:A:245:ASP:OD2	1:A:260:SER:O	0.48	2.32	29	1
1:A:254:VAL:CG2	1:A:281:ILE:HD11	0.48	2.34	11	1
1:A:275:LEU:CD2	1:A:275:LEU:C	0.48	2.83	1	3
1:A:231:GLN:CG	1:A:246:MET:CE	0.48	2.92	15	1
1:A:259:ILE:CB	1:A:273:VAL:HG11	0.48	2.38	24	1
1:A:269:TRP:O	1:A:269:TRP:CD1	0.48	2.67	30	1
1:A:225:VAL:HG22	1:A:225:VAL:O	0.47	2.09	21	1
1:A:211:GLY:HA3	1:A:228:LYS:HA	0.47	1.86	25	1
1:A:225:VAL:HB	1:A:229:HIS:ND1	0.47	2.24	29	1
1:A:251:GLY:O	1:A:253:LEU:HD23	0.47	2.09	6	1
1:A:282:THR:HG23	1:A:287:THR:O	0.47	2.09	12	1
1:A:245:ASP:OD2	1:A:260:SER:HB3	0.47	2.09	20	2
1:A:283:LEU:N	1:A:283:LEU:CD1	0.47	2.78	24	4
1:A:212:ARG:NH1	1:A:225:VAL:CG2	0.47	2.78	27	1
1:A:246:MET:CG	1:A:246:MET:O	0.47	2.61	1	2
1:A:182:LEU:HD12	1:A:183:PHE:H	0.47	1.67	12	4
1:A:259:ILE:HD12	1:A:260:SER:H	0.47	1.68	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:245:ASP:N	1:A:269:TRP:HB3	0.47	2.23	21	1
1:A:182:LEU:O	1:A:197:ALA:CB	0.47	2.63	1	2
1:A:244:VAL:CG1	1:A:269:TRP:CZ2	0.47	2.96	10	3
1:A:281:ILE:HD13	1:A:282:THR:H	0.47	1.68	2	1
1:A:280:ILE:HB	1:A:288:LYS:HD3	0.47	1.86	26	1
1:A:189:GLY:HA3	1:A:287:THR:HG23	0.47	1.87	15	1
1:A:252:THR:HG22	1:A:259:ILE:HD11	0.47	1.85	10	1
1:A:206:LEU:CD1	1:A:234:TRP:CE3	0.47	2.97	15	2
1:A:182:LEU:HB2	1:A:241:TRP:HZ3	0.47	1.68	8	2
1:A:229:HIS:NE2	1:A:250:ASN:ND2	0.47	2.63	29	1
1:A:190:PRO:HD3	1:A:222:ASP:OD2	0.47	2.10	27	1
1:A:184:LEU:HD21	1:A:232:ILE:CD1	0.47	2.39	11	1
1:A:181:TRP:CZ3	1:A:198:VAL:N	0.47	2.83	13	14
1:A:229:HIS:CG	1:A:248:SER:CB	0.47	2.98	25	1
1:A:234:TRP:CD2	1:A:241:TRP:CE3	0.47	3.03	1	3
1:A:241:TRP:O	1:A:274:GLU:HG2	0.47	2.09	1	1
1:A:278:ASP:HA	1:A:290:TYR:CZ	0.47	2.45	2	5
1:A:202:SER:OG	1:A:206:LEU:N	0.47	2.47	26	1
1:A:212:ARG:NH1	1:A:222:ASP:HB2	0.47	2.25	27	1
1:A:252:THR:HG23	1:A:283:LEU:HB3	0.47	1.86	27	1
1:A:209:LYS:N	1:A:217:ASP:HB2	0.47	2.25	11	1
1:A:228:LYS:HB3	1:A:246:MET:HG3	0.47	1.85	30	1
1:A:243:LEU:CB	1:A:275:LEU:HD12	0.47	2.40	30	1
1:A:202:SER:O	1:A:206:LEU:HB3	0.47	2.10	6	1
1:A:282:THR:HG23	1:A:288:LYS:HG2	0.47	1.87	29	2
1:A:246:MET:CA	1:A:269:TRP:CZ3	0.47	2.98	27	1
1:A:184:LEU:N	1:A:196:HIS:O	0.46	2.47	15	5
1:A:277:SER:O	1:A:278:ASP:CB	0.46	2.63	14	12
1:A:281:ILE:O	1:A:289:VAL:N	0.46	2.48	23	3
1:A:242:GLU:HB2	1:A:272:PRO:HB2	0.46	1.86	16	1
1:A:281:ILE:CD1	1:A:289:VAL:CG1	0.46	2.94	14	2
1:A:231:GLN:O	1:A:243:LEU:CD1	0.46	2.62	30	3
1:A:206:LEU:HB2	1:A:234:TRP:CH2	0.46	2.46	25	3
1:A:259:ILE:H	1:A:259:ILE:CD1	0.46	2.22	29	4
1:A:230:ALA:HB2	1:A:252:THR:OG1	0.46	2.10	11	1
1:A:245:ASP:O	1:A:269:TRP:CD2	0.46	2.68	12	4
1:A:231:GLN:HG2	1:A:232:ILE:N	0.46	2.25	29	2
1:A:196:HIS:HE2	1:A:210:LEU:HD21	0.46	1.69	3	2
1:A:185:GLU:HA	1:A:195:GLN:HG2	0.46	1.87	21	4
1:A:240:LYS:HE2	1:A:242:GLU:HG2	0.46	1.88	24	1
1:A:212:ARG:N	1:A:225:VAL:CG1	0.46	2.79	23	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:194:LEU:CD1	1:A:220:LEU:HD13	0.46	2.41	12	3
1:A:271:ASN:O	1:A:273:VAL:HG23	0.46	2.11	19	1
1:A:243:LEU:HD21	1:A:254:VAL:CG2	0.46	2.41	5	2
1:A:210:LEU:HD13	1:A:210:LEU:N	0.46	2.26	28	1
1:A:196:HIS:CE1	1:A:208:VAL:HG11	0.46	2.46	1	3
1:A:225:VAL:HA	1:A:229:HIS:CE1	0.46	2.46	11	1
1:A:190:PRO:HG3	1:A:222:ASP:HB3	0.46	1.88	23	1
1:A:198:VAL:CG1	1:A:206:LEU:HD23	0.46	2.40	6	1
1:A:190:PRO:HD3	1:A:287:THR:OG1	0.46	2.11	15	1
1:A:230:ALA:HB1	1:A:244:VAL:O	0.46	2.11	7	2
1:A:184:LEU:CD1	1:A:291:VAL:HA	0.46	2.41	1	1
1:A:242:GLU:CB	1:A:273:VAL:O	0.46	2.63	30	1
1:A:196:HIS:CB	1:A:208:VAL:HG11	0.46	2.40	4	1
1:A:224:GLU:OE1	1:A:229:HIS:CE1	0.46	2.68	16	1
1:A:181:TRP:CE3	1:A:198:VAL:N	0.46	2.84	26	3
1:A:241:TRP:O	1:A:274:GLU:CA	0.46	2.62	14	1
1:A:185:GLU:HG3	1:A:195:GLN:HG3	0.46	1.88	7	3
1:A:245:ASP:HB3	1:A:260:SER:OG	0.46	2.11	9	1
1:A:243:LEU:O	1:A:273:VAL:N	0.46	2.47	8	4
1:A:238:LYS:O	1:A:239:PHE:CG	0.46	2.69	16	7
1:A:249:LEU:CD2	1:A:250:ASN:N	0.46	2.72	20	3
1:A:185:GLU:C	1:A:289:VAL:HG13	0.46	2.32	12	1
1:A:185:GLU:C	1:A:289:VAL:HG12	0.46	2.32	24	3
1:A:282:THR:HA	1:A:288:LYS:HA	0.46	1.87	15	4
1:A:259:ILE:HG13	1:A:273:VAL:CG1	0.46	2.40	20	1
1:A:246:MET:SD	1:A:269:TRP:CZ2	0.46	3.09	27	1
1:A:225:VAL:O	1:A:225:VAL:HG13	0.45	2.11	18	3
1:A:181:TRP:CE2	1:A:199:ASN:OD1	0.45	2.69	23	4
1:A:190:PRO:HD2	1:A:222:ASP:OD1	0.45	2.11	23	1
1:A:196:HIS:NE2	1:A:217:ASP:HB3	0.45	2.25	8	2
1:A:196:HIS:NE2	1:A:218:LEU:HD11	0.45	2.23	17	1
1:A:238:LYS:HG3	1:A:238:LYS:O	0.45	2.11	11	1
1:A:229:HIS:CE1	1:A:249:LEU:HD13	0.45	2.46	3	1
1:A:229:HIS:HA	1:A:248:SER:HB2	0.45	1.87	16	1
1:A:181:TRP:CZ3	1:A:198:VAL:CA	0.45	3.00	13	5
1:A:200:SER:HA	1:A:234:TRP:NE1	0.45	2.27	30	3
1:A:218:LEU:HG	1:A:220:LEU:HD21	0.45	1.88	18	1
1:A:229:HIS:CG	1:A:283:LEU:HB3	0.45	2.46	10	1
1:A:187:ILE:HG22	1:A:288:LYS:CB	0.45	2.41	19	1
1:A:234:TRP:HB2	1:A:241:TRP:HA	0.45	1.89	4	4
1:A:202:SER:OG	1:A:205:LYS:HG3	0.45	2.11	30	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:246:MET:HA	1:A:246:MET:HE3	0.45	1.88	27	1
1:A:253:LEU:HB3	1:A:258:SER:HA	0.45	1.88	7	1
1:A:260:SER:O	1:A:270:GLY:HA2	0.45	2.12	30	1
1:A:283:LEU:CD1	1:A:283:LEU:N	0.45	2.80	3	3
1:A:206:LEU:CD2	1:A:234:TRP:CE3	0.45	2.99	8	2
1:A:224:GLU:CG	1:A:250:ASN:HB2	0.45	2.41	21	1
1:A:253:LEU:HA	1:A:258:SER:HA	0.45	1.89	4	6
1:A:247:GLY:O	1:A:249:LEU:N	0.45	2.49	25	1
1:A:282:THR:CG2	1:A:288:LYS:HG2	0.45	2.41	25	3
1:A:281:ILE:O	1:A:288:LYS:CA	0.45	2.65	22	1
1:A:200:SER:HB2	1:A:234:TRP:NE1	0.45	2.27	13	1
1:A:245:ASP:CB	1:A:260:SER:HB3	0.45	2.42	29	2
1:A:190:PRO:CG	1:A:222:ASP:OD1	0.45	2.64	5	1
1:A:208:VAL:O	1:A:231:GLN:CG	0.45	2.65	13	1
1:A:209:LYS:O	1:A:216:SER:HB3	0.45	2.11	12	2
1:A:191:ALA:CB	1:A:219:ALA:O	0.45	2.64	28	3
1:A:245:ASP:CG	1:A:260:SER:HA	0.45	2.32	22	1
1:A:181:TRP:CE3	1:A:183:PHE:CE2	0.45	3.05	17	1
1:A:229:HIS:O	1:A:246:MET:HG2	0.45	2.10	30	1
1:A:205:LYS:O	1:A:205:LYS:HG3	0.45	2.11	3	2
1:A:245:ASP:O	1:A:269:TRP:CA	0.45	2.64	21	1
1:A:232:ILE:HG12	1:A:243:LEU:CD1	0.45	2.42	11	2
1:A:209:LYS:HG3	1:A:216:SER:HA	0.45	1.88	25	1
1:A:186:VAL:CA	1:A:289:VAL:HG23	0.45	2.42	8	1
1:A:186:VAL:CA	1:A:289:VAL:HG13	0.45	2.41	24	1
1:A:259:ILE:HD12	1:A:259:ILE:H	0.45	1.71	24	1
1:A:245:ASP:O	1:A:269:TRP:CG	0.45	2.69	30	2
1:A:259:ILE:CD1	1:A:260:SER:N	0.45	2.79	3	4
1:A:244:VAL:CG2	1:A:269:TRP:NE1	0.45	2.80	12	1
1:A:235:ASN:N	1:A:240:LYS:O	0.45	2.43	7	2
1:A:184:LEU:HD13	1:A:196:HIS:NE2	0.45	2.26	24	1
1:A:219:ALA:C	1:A:220:LEU:HD22	0.45	2.31	18	1
1:A:241:TRP:CZ3	1:A:293:ILE:HD13	0.45	2.47	2	2
1:A:200:SER:OG	1:A:241:TRP:CH2	0.45	2.71	14	1
1:A:243:LEU:CD1	1:A:243:LEU:C	0.44	2.86	1	5
1:A:275:LEU:C	1:A:275:LEU:HD22	0.44	2.33	22	9
1:A:231:GLN:O	1:A:243:LEU:CB	0.44	2.65	28	10
1:A:196:HIS:CD2	1:A:218:LEU:HD11	0.44	2.47	6	1
1:A:182:LEU:CD1	1:A:184:LEU:CD1	0.44	2.94	29	3
1:A:208:VAL:O	1:A:208:VAL:CG1	0.44	2.64	29	1
1:A:243:LEU:HD23	1:A:275:LEU:HD11	0.44	1.88	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:255:ASN:HA	1:A:280:ILE:HD11	0.44	1.89	17	1
1:A:184:LEU:HD12	1:A:289:VAL:CG1	0.44	2.40	17	1
1:A:229:HIS:HD2	1:A:283:LEU:HB2	0.44	1.72	11	1
1:A:209:LYS:HD2	1:A:216:SER:HA	0.44	1.87	30	1
1:A:209:LYS:O	1:A:217:ASP:N	0.44	2.50	28	4
1:A:288:LYS:C	1:A:289:VAL:CG2	0.44	2.86	19	1
1:A:243:LEU:C	1:A:243:LEU:CD1	0.44	2.86	2	7
1:A:241:TRP:HB2	1:A:275:LEU:CD2	0.44	2.42	1	3
1:A:275:LEU:HD22	1:A:275:LEU:C	0.44	2.33	2	2
1:A:230:ALA:C	1:A:246:MET:HE3	0.44	2.32	15	1
1:A:210:LEU:H	1:A:210:LEU:HD13	0.44	1.72	28	1
1:A:181:TRP:CZ3	1:A:198:VAL:HA	0.44	2.48	26	2
1:A:268:LYS:HE3	1:A:269:TRP:HB2	0.44	1.88	20	1
1:A:238:LYS:HG2	1:A:240:LYS:HG2	0.44	1.89	24	1
1:A:259:ILE:CG1	1:A:260:SER:N	0.44	2.81	13	1
1:A:280:ILE:HD13	1:A:288:LYS:NZ	0.44	2.27	11	1
1:A:212:ARG:HB2	1:A:225:VAL:CG1	0.44	2.27	16	1
1:A:277:SER:HA	1:A:292:ARG:HA	0.44	1.88	25	1
1:A:245:ASP:N	1:A:245:ASP:OD1	0.44	2.51	29	1
1:A:252:THR:HB	1:A:259:ILE:HD11	0.44	1.88	4	1
1:A:184:LEU:HG	1:A:196:HIS:CD2	0.44	2.47	18	2
1:A:251:GLY:CA	1:A:260:SER:OG	0.44	2.65	22	1
1:A:273:VAL:HG12	1:A:274:GLU:N	0.44	2.28	30	1
1:A:253:LEU:CD2	1:A:253:LEU:N	0.44	2.81	26	3
1:A:196:HIS:CG	1:A:208:VAL:HG21	0.44	2.47	12	1
1:A:234:TRP:CZ3	1:A:241:TRP:CZ3	0.44	3.05	10	1
1:A:205:LYS:CG	1:A:205:LYS:O	0.44	2.66	23	2
1:A:209:LYS:HB2	1:A:217:ASP:N	0.44	2.28	22	1
1:A:182:LEU:O	1:A:197:ALA:HB1	0.44	2.12	1	1
1:A:238:LYS:CG	1:A:240:LYS:HG2	0.44	2.43	24	1
1:A:211:GLY:HA3	1:A:216:SER:OG	0.44	2.13	27	1
1:A:180:SER:O	1:A:199:ASN:OD1	0.44	2.35	11	1
1:A:192:ILE:HG22	1:A:192:ILE:O	0.44	2.13	11	1
1:A:210:LEU:HD13	1:A:231:GLN:HA	0.43	1.89	28	1
1:A:238:LYS:HD2	1:A:240:LYS:HE2	0.43	1.89	8	1
1:A:240:LYS:CD	1:A:242:GLU:HG3	0.43	2.43	24	1
1:A:199:ASN:O	1:A:202:SER:HB2	0.43	2.13	30	2
1:A:245:ASP:OD2	1:A:260:SER:HA	0.43	2.13	13	1
1:A:212:ARG:HD3	1:A:222:ASP:O	0.43	2.12	27	1
1:A:198:VAL:HG11	1:A:206:LEU:HG	0.43	1.90	3	3
1:A:184:LEU:CB	1:A:196:HIS:NE2	0.43	2.80	18	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:280:ILE:HD13	1:A:288:LYS:HD3	0.43	1.89	9	1
1:A:234:TRP:CZ2	1:A:241:TRP:CZ3	0.43	3.06	1	1
1:A:186:VAL:HA	1:A:289:VAL:CG1	0.43	2.44	18	1
1:A:275:LEU:H	1:A:275:LEU:CD1	0.43	2.22	17	2
1:A:245:ASP:HB3	1:A:269:TRP:O	0.43	2.13	10	1
1:A:229:HIS:HB3	1:A:283:LEU:HD22	0.43	1.90	16	1
1:A:208:VAL:O	1:A:210:LEU:HD12	0.43	2.13	25	1
1:A:259:ILE:CD1	1:A:259:ILE:H	0.43	2.27	28	3
1:A:249:LEU:HD22	1:A:249:LEU:O	0.43	2.12	18	1
1:A:234:TRP:CZ3	1:A:241:TRP:CH2	0.43	3.06	10	1
1:A:194:LEU:HD13	1:A:219:ALA:O	0.43	2.13	26	1
1:A:222:ASP:HB3	1:A:224:GLU:HG3	0.43	1.90	20	1
1:A:232:ILE:HG12	1:A:243:LEU:HB3	0.43	1.90	9	1
1:A:184:LEU:CD2	1:A:196:HIS:CG	0.43	2.97	26	1
1:A:259:ILE:CG1	1:A:273:VAL:HG11	0.43	2.39	20	1
1:A:229:HIS:CG	1:A:283:LEU:O	0.43	2.72	20	2
1:A:232:ILE:HG12	1:A:243:LEU:CD2	0.43	2.44	12	1
1:A:218:LEU:CB	1:A:220:LEU:HD21	0.43	2.44	25	1
1:A:229:HIS:CG	1:A:248:SER:HB3	0.43	2.49	25	1
1:A:229:HIS:ND1	1:A:248:SER:HB3	0.43	2.28	25	1
1:A:238:LYS:C	1:A:239:PHE:CG	0.43	2.92	11	3
1:A:235:ASN:HB2	1:A:240:LYS:HD2	0.43	1.91	27	1
1:A:229:HIS:CE1	1:A:250:ASN:CB	0.43	3.02	11	1
1:A:235:ASN:CB	1:A:240:LYS:CD	0.43	2.96	3	1
1:A:180:SER:O	1:A:199:ASN:ND2	0.43	2.51	2	1
1:A:190:PRO:HG3	1:A:222:ASP:HB2	0.43	1.90	14	2
1:A:244:VAL:HG21	1:A:269:TRP:HE1	0.43	1.74	14	3
1:A:212:ARG:CZ	1:A:225:VAL:CG2	0.43	2.97	27	1
1:A:212:ARG:NH1	1:A:222:ASP:CB	0.43	2.81	27	1
1:A:231:GLN:CG	1:A:246:MET:HG3	0.43	2.43	7	1
1:A:206:LEU:CD2	1:A:234:TRP:CZ3	0.43	3.02	30	1
1:A:232:ILE:CD1	1:A:243:LEU:HD11	0.43	2.44	16	1
1:A:206:LEU:CD2	1:A:206:LEU:O	0.43	2.57	12	1
1:A:180:SER:OG	1:A:200:SER:HB3	0.43	2.13	15	1
1:A:283:LEU:N	1:A:283:LEU:HD22	0.43	2.27	15	1
1:A:212:ARG:HB2	1:A:225:VAL:CB	0.43	2.44	20	2
1:A:269:TRP:CD1	1:A:270:GLY:O	0.43	2.71	10	1
1:A:210:LEU:HD12	1:A:230:ALA:C	0.43	2.34	3	2
1:A:238:LYS:O	1:A:239:PHE:C	0.43	2.55	14	9
1:A:281:ILE:CD1	1:A:289:VAL:HG23	0.43	2.40	6	1
1:A:280:ILE:CG2	1:A:290:TYR:HD1	0.43	2.27	11	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:224:GLU:CD	1:A:225:VAL:HG22	0.43	2.33	20	1
1:A:233:THR:O	1:A:242:GLU:OE2	0.43	2.37	24	1
1:A:212:ARG:HG3	1:A:220:LEU:O	0.43	2.14	27	1
1:A:191:ALA:HB2	1:A:219:ALA:O	0.43	2.14	17	1
1:A:255:ASN:OD1	1:A:255:ASN:O	0.43	2.37	19	1
1:A:281:ILE:HD12	1:A:289:VAL:HG21	0.43	1.88	6	1
1:A:208:VAL:C	1:A:231:GLN:HG3	0.43	2.34	12	2
1:A:281:ILE:O	1:A:283:LEU:HD13	0.43	2.13	15	1
1:A:229:HIS:CB	1:A:283:LEU:HB3	0.43	2.44	10	1
1:A:245:ASP:H	1:A:269:TRP:CB	0.42	2.27	21	1
1:A:245:ASP:OD1	1:A:252:THR:CB	0.42	2.67	26	1
1:A:246:MET:CE	1:A:269:TRP:HZ3	0.42	2.26	15	2
1:A:254:VAL:N	1:A:257:HIS:O	0.42	2.48	9	1
1:A:279:ASP:OD2	1:A:291:VAL:HB	0.42	2.14	27	2
1:A:254:VAL:HG12	1:A:279:ASP:OD1	0.42	2.13	13	1
1:A:210:LEU:HD22	1:A:289:VAL:HG21	0.42	1.91	10	1
1:A:213:VAL:HG22	1:A:213:VAL:O	0.42	2.14	4	2
1:A:190:PRO:CG	1:A:222:ASP:HB2	0.42	2.44	26	1
1:A:206:LEU:N	1:A:207:PRO:HD3	0.42	2.28	12	1
1:A:281:ILE:O	1:A:283:LEU:CD1	0.42	2.67	15	2
1:A:283:LEU:N	1:A:287:THR:O	0.42	2.48	13	1
1:A:281:ILE:O	1:A:288:LYS:CG	0.42	2.68	4	1
1:A:278:ASP:O	1:A:290:TYR:CE1	0.42	2.71	15	2
1:A:196:HIS:CE1	1:A:208:VAL:CG2	0.42	2.98	12	1
1:A:185:GLU:HB2	1:A:195:GLN:HG2	0.42	1.91	28	1
1:A:200:SER:CB	1:A:234:TRP:HZ2	0.42	2.27	10	1
1:A:180:SER:OG	1:A:295:SER:HA	0.42	2.15	10	1
1:A:210:LEU:N	1:A:210:LEU:CD1	0.42	2.81	17	1
1:A:199:ASN:OD1	1:A:201:THR:HG22	0.42	2.14	3	1
1:A:253:LEU:CG	1:A:282:THR:HB	0.42	2.44	15	2
1:A:254:VAL:CG2	1:A:259:ILE:HG12	0.42	2.44	22	2
1:A:224:GLU:OE1	1:A:225:VAL:N	0.42	2.52	10	2
1:A:248:SER:HB3	1:A:260:SER:OG	0.42	2.13	24	1
1:A:196:HIS:CE1	1:A:289:VAL:HG21	0.42	2.49	17	1
1:A:182:LEU:HA	1:A:293:ILE:HG23	0.42	1.90	23	1
1:A:254:VAL:CG2	1:A:259:ILE:CG1	0.42	2.98	1	2
1:A:206:LEU:HD23	1:A:207:PRO:N	0.42	2.30	24	1
1:A:213:VAL:O	1:A:213:VAL:HG22	0.42	2.13	10	1
1:A:240:LYS:HG2	1:A:241:TRP:N	0.42	2.30	3	1
1:A:254:VAL:O	1:A:255:ASN:CG	0.42	2.58	16	2
1:A:181:TRP:NE1	1:A:199:ASN:OD1	0.42	2.53	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:182:LEU:N	1:A:198:VAL:O	0.42	2.52	20	2
1:A:181:TRP:HZ3	1:A:198:VAL:N	0.42	2.11	13	3
1:A:190:PRO:HG3	1:A:222:ASP:HA	0.42	1.91	10	1
1:A:218:LEU:CG	1:A:220:LEU:CD2	0.42	2.97	11	1
1:A:209:LYS:CB	1:A:216:SER:HA	0.42	2.44	30	1
1:A:230:ALA:HA	1:A:246:MET:CE	0.42	2.45	15	1
1:A:183:PHE:O	1:A:292:ARG:HG3	0.42	2.14	22	1
1:A:242:GLU:CA	1:A:273:VAL:O	0.42	2.68	4	2
1:A:213:VAL:O	1:A:214:SER:HB2	0.42	2.14	29	1
1:A:222:ASP:CG	1:A:287:THR:HG1	0.42	2.17	29	1
1:A:240:LYS:C	1:A:241:TRP:CD1	0.42	2.93	8	1
1:A:214:SER:O	1:A:216:SER:N	0.42	2.51	10	2
1:A:183:PHE:CD1	1:A:183:PHE:N	0.42	2.88	13	1
1:A:220:LEU:HB3	1:A:222:ASP:OD1	0.42	2.14	10	1
1:A:187:ILE:CG2	1:A:288:LYS:HB3	0.42	2.44	13	2
1:A:210:LEU:HD21	1:A:230:ALA:CB	0.42	2.37	28	1
1:A:232:ILE:HA	1:A:243:LEU:HD12	0.42	1.91	16	1
1:A:212:ARG:CB	1:A:225:VAL:O	0.42	2.68	2	7
1:A:245:ASP:CG	1:A:260:SER:HB2	0.42	2.35	2	1
1:A:189:GLY:O	1:A:192:ILE:HG13	0.42	2.15	26	1
1:A:196:HIS:CD2	1:A:208:VAL:CG1	0.42	3.02	5	1
1:A:212:ARG:HD3	1:A:222:ASP:N	0.42	2.30	27	1
1:A:214:SER:N	1:A:215:PRO:HD2	0.41	2.30	19	1
1:A:257:HIS:O	1:A:259:ILE:N	0.41	2.53	11	3
1:A:249:LEU:CD2	1:A:249:LEU:C	0.41	2.88	4	1
1:A:183:PHE:N	1:A:292:ARG:O	0.41	2.53	26	2
1:A:238:LYS:O	1:A:238:LYS:HG3	0.41	2.14	26	2
1:A:202:SER:HG	1:A:206:LEU:HB3	0.41	1.75	12	1
1:A:241:TRP:CE3	1:A:275:LEU:O	0.41	2.73	28	1
1:A:283:LEU:HD13	1:A:283:LEU:H	0.41	1.73	9	1
1:A:249:LEU:CD1	1:A:249:LEU:C	0.41	2.88	18	1
1:A:281:ILE:O	1:A:281:ILE:HG23	0.41	2.13	27	1
1:A:220:LEU:HG	1:A:287:THR:HG21	0.41	1.91	17	1
1:A:220:LEU:C	1:A:222:ASP:N	0.41	2.73	19	1
1:A:271:ASN:O	1:A:272:PRO:C	0.41	2.58	19	1
1:A:187:ILE:CG2	1:A:288:LYS:CG	0.41	2.97	23	2
1:A:190:PRO:HG2	1:A:222:ASP:OD1	0.41	2.15	23	1
1:A:229:HIS:CD2	1:A:248:SER:OG	0.41	2.73	23	1
1:A:286:THR:O	1:A:288:LYS:HD2	0.41	2.15	6	2
1:A:244:VAL:HG13	1:A:246:MET:HE1	0.41	1.92	15	1
1:A:199:ASN:OD1	1:A:199:ASN:N	0.41	2.52	22	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:259:ILE:C	1:A:259:ILE:CD1	0.41	2.88	5	1
1:A:241:TRP:O	1:A:275:LEU:HD13	0.41	2.14	1	1
1:A:184:LEU:CD1	1:A:196:HIS:CD2	0.41	2.90	24	1
1:A:200:SER:CB	1:A:234:TRP:NE1	0.41	2.83	24	1
1:A:182:LEU:CD2	1:A:234:TRP:HZ3	0.41	2.27	30	1
1:A:203:SER:O	1:A:206:LEU:CD1	0.41	2.69	26	1
1:A:209:LYS:HB3	1:A:216:SER:HA	0.41	1.92	1	2
1:A:206:LEU:O	1:A:208:VAL:HG23	0.41	2.15	9	1
1:A:248:SER:CB	1:A:260:SER:OG	0.41	2.68	24	1
1:A:249:LEU:CD1	1:A:249:LEU:H	0.41	2.29	11	1
1:A:180:SER:O	1:A:181:TRP:CG	0.41	2.74	26	1
1:A:200:SER:CA	1:A:234:TRP:CZ2	0.41	2.94	26	1
1:A:259:ILE:HD13	1:A:259:ILE:N	0.41	2.31	27	3
1:A:209:LYS:HD2	1:A:228:LYS:CD	0.41	2.45	15	1
1:A:245:ASP:OD2	1:A:252:THR:HB	0.41	2.15	28	2
1:A:200:SER:OG	1:A:241:TRP:CZ2	0.41	2.73	14	1
1:A:212:ARG:HE	1:A:212:ARG:CA	0.41	2.28	27	1
1:A:231:GLN:OE1	1:A:269:TRP:CH2	0.41	2.73	7	1
1:A:231:GLN:HG2	1:A:246:MET:HG3	0.41	1.93	7	1
1:A:189:GLY:C	1:A:191:ALA:H	0.41	2.18	30	1
1:A:187:ILE:CG2	1:A:288:LYS:CB	0.41	2.98	19	1
1:A:229:HIS:O	1:A:245:ASP:HA	0.41	2.15	21	1
1:A:235:ASN:CB	1:A:240:LYS:HD2	0.41	2.46	28	1
1:A:225:VAL:O	1:A:226:SER:C	0.41	2.59	8	1
1:A:198:VAL:CG1	1:A:234:TRP:CH2	0.41	2.97	9	1
1:A:181:TRP:CD1	1:A:199:ASN:OD1	0.41	2.73	1	1
1:A:194:LEU:HD21	1:A:219:ALA:HB3	0.41	1.92	10	1
1:A:225:VAL:CG1	1:A:229:HIS:CG	0.41	3.00	11	1
1:A:200:SER:HA	1:A:234:TRP:HE1	0.41	1.74	14	2
1:A:183:PHE:CD2	1:A:197:ALA:CB	0.41	3.03	13	1
1:A:225:VAL:CG1	1:A:225:VAL:O	0.41	2.68	23	1
1:A:184:LEU:HB2	1:A:196:HIS:NE2	0.41	2.30	4	1
1:A:196:HIS:ND1	1:A:196:HIS:C	0.41	2.74	25	1
1:A:254:VAL:CG2	1:A:259:ILE:HD12	0.41	2.35	14	1
1:A:202:SER:OG	1:A:205:LYS:CG	0.41	2.69	9	1
1:A:196:HIS:CD2	1:A:208:VAL:HG22	0.41	2.51	5	1
1:A:200:SER:OG	1:A:234:TRP:NE1	0.41	2.54	24	1
1:A:229:HIS:NE2	1:A:283:LEU:O	0.41	2.54	29	1
1:A:230:ALA:CA	1:A:246:MET:HE3	0.41	2.45	28	1
1:A:230:ALA:HA	1:A:244:VAL:O	0.41	2.16	21	1
1:A:275:LEU:N	1:A:275:LEU:HD13	0.41	2.25	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:243:LEU:HA	1:A:243:LEU:HD12	0.41	1.74	16	1
1:A:184:LEU:CD2	1:A:184:LEU:H	0.41	2.22	26	1
1:A:229:HIS:CD2	1:A:248:SER:HB3	0.41	2.51	25	1
1:A:222:ASP:HB3	1:A:224:GLU:HG2	0.41	1.93	25	1
1:A:229:HIS:CD2	1:A:283:LEU:CA	0.41	3.04	20	1
1:A:208:VAL:N	1:A:232:ILE:O	0.41	2.53	22	2
1:A:240:LYS:HD3	1:A:242:GLU:HG3	0.41	1.92	24	1
1:A:239:PHE:CD2	1:A:239:PHE:O	0.41	2.74	13	1
1:A:253:LEU:N	1:A:253:LEU:CD2	0.41	2.81	13	1
1:A:186:VAL:CG2	1:A:194:LEU:HD12	0.41	2.31	27	1
1:A:182:LEU:CB	1:A:234:TRP:CZ3	0.41	3.04	27	1
1:A:244:VAL:CG2	1:A:269:TRP:O	0.41	2.63	27	1
1:A:222:ASP:OD1	1:A:222:ASP:N	0.41	2.53	10	1
1:A:268:LYS:CG	1:A:269:TRP:N	0.41	2.84	30	1
1:A:235:ASN:HB3	1:A:240:LYS:HD2	0.41	1.92	8	1
1:A:229:HIS:CD2	1:A:283:LEU:C	0.41	2.94	20	1
1:A:245:ASP:HB3	1:A:248:SER:HB2	0.40	1.93	6	1
1:A:250:ASN:HD22	1:A:251:GLY:N	0.40	2.14	29	1
1:A:245:ASP:OD2	1:A:252:THR:CB	0.40	2.69	14	1
1:A:213:VAL:CG1	1:A:213:VAL:O	0.40	2.69	1	1
1:A:246:MET:CB	1:A:269:TRP:CZ3	0.40	3.04	27	1
1:A:225:VAL:O	1:A:227:GLY:N	0.40	2.53	10	1
1:A:234:TRP:HB2	1:A:241:TRP:CD1	0.40	2.51	10	1
1:A:224:GLU:O	1:A:249:LEU:CD1	0.40	2.64	19	1
1:A:238:LYS:HE3	1:A:239:PHE:CE1	0.40	2.51	21	1
1:A:199:ASN:HB2	1:A:201:THR:HG22	0.40	1.94	25	1
1:A:233:THR:O	1:A:242:GLU:O	0.40	2.39	14	1
1:A:208:VAL:HG13	1:A:217:ASP:HB3	0.40	1.92	25	1
1:A:246:MET:SD	1:A:269:TRP:CZ3	0.40	3.15	25	2
1:A:184:LEU:CD2	1:A:196:HIS:HB3	0.40	2.46	13	1
1:A:235:ASN:HB3	1:A:240:LYS:HB2	0.40	1.92	13	1
1:A:192:ILE:HD12	1:A:192:ILE:HA	0.40	1.75	11	1
1:A:235:ASN:ND2	1:A:235:ASN:O	0.40	2.54	11	1
1:A:222:ASP:N	1:A:222:ASP:OD1	0.40	2.54	23	1
1:A:235:ASN:O	1:A:239:PHE:HA	0.40	2.16	25	1
1:A:238:LYS:O	1:A:238:LYS:HD3	0.40	2.16	20	1
1:A:259:ILE:HD12	1:A:259:ILE:N	0.40	2.31	24	1
1:A:184:LEU:H	1:A:184:LEU:CD2	0.40	2.30	30	1
1:A:241:TRP:HB2	1:A:275:LEU:HD21	0.40	1.93	4	1
1:A:211:GLY:HA2	1:A:225:VAL:HG21	0.40	1.93	25	1
1:A:182:LEU:HG	1:A:198:VAL:HG12	0.40	1.92	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:269:TRP:CE3	1:A:269:TRP:HA	0.40	2.51	5	1
1:A:246:MET:SD	1:A:269:TRP:CH2	0.40	3.15	17	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	110/139 (79%)	82±3 (74±3%)	20±3 (18±3%)	9±2 (8±2%)	2	15
All	All	3300/4170 (79%)	2447 (74%)	598 (18%)	255 (8%)	2	15

All 26 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	221	LYS	30
1	A	227	GLY	28
1	A	207	PRO	27
1	A	258	SER	25
1	A	214	SER	25
1	A	192	ILE	24
1	A	215	PRO	11
1	A	213	VAL	10
1	A	203	SER	10
1	A	216	SER	10
1	A	268	LYS	10
1	A	248	SER	9
1	A	212	ARG	8
1	A	206	LEU	6
1	A	252	THR	5
1	A	272	PRO	3
1	A	247	GLY	2
1	A	226	SER	2
1	A	249	LEU	2
1	A	251	GLY	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	186	VAL	1
1	A	225	VAL	1
1	A	279	ASP	1
1	A	223	SER	1
1	A	194	LEU	1
1	A	270	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	96/119 (81%)	60±3 (63±3%)	36±3 (37±3%)	1	7
All	All	2880/3570 (81%)	1812 (63%)	1068 (37%)	1	7

All 81 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	233	THR	30
1	A	283	LEU	30
1	A	281	ILE	30
1	A	280	ILE	29
1	A	253	LEU	29
1	A	275	LEU	29
1	A	194	LEU	29
1	A	246	MET	27
1	A	259	ILE	26
1	A	292	ARG	24
1	A	249	LEU	24
1	A	205	LYS	22
1	A	241	TRP	22
1	A	240	LYS	22
1	A	231	GLN	21
1	A	180	SER	21
1	A	210	LEU	21
1	A	214	SER	21
1	A	202	SER	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	196	HIS	19
1	A	279	ASP	19
1	A	289	VAL	18
1	A	291	VAL	17
1	A	294	SER	17
1	A	257	HIS	17
1	A	184	LEU	16
1	A	217	ASP	16
1	A	216	SER	16
1	A	228	LYS	16
1	A	224	GLU	15
1	A	250	ASN	15
1	A	226	SER	15
1	A	256	SER	15
1	A	221	LYS	15
1	A	212	ARG	14
1	A	229	HIS	14
1	A	274	GLU	14
1	A	248	SER	14
1	A	204	SER	13
1	A	201	THR	13
1	A	286	THR	13
1	A	278	ASP	12
1	A	295	SER	12
1	A	282	THR	12
1	A	182	LEU	12
1	A	238	LYS	12
1	A	235	ASN	11
1	A	288	LYS	11
1	A	209	LYS	11
1	A	185	GLU	10
1	A	206	LEU	10
1	A	244	VAL	9
1	A	268	LYS	9
1	A	236	SER	9
1	A	234	TRP	9
1	A	199	ASN	7
1	A	245	ASP	7
1	A	269	TRP	7
1	A	222	ASP	7
1	A	243	LEU	7
1	A	296	GLN	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	203	SER	6
1	A	242	GLU	6
1	A	252	THR	5
1	A	218	LEU	5
1	A	260	SER	5
1	A	183	PHE	4
1	A	277	SER	4
1	A	271	ASN	4
1	A	255	ASN	3
1	A	200	SER	3
1	A	290	TYR	3
1	A	192	ILE	2
1	A	225	VAL	2
1	A	258	SER	1
1	A	207	PRO	1
1	A	198	VAL	1
1	A	237	THR	1
1	A	272	PRO	1
1	A	232	ILE	1
1	A	293	ILE	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry ⓘ

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

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 91% for the well-defined parts and 90% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: BMRB entry 5564

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_1*

7.1.1 Bookkeeping

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

Total number of shifts	1525
Number of shifts mapped to atoms	1525
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	5

7.1.2 Chemical shift referencing

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction \pm precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	127	-0.20 ± 0.18	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	116	-0.08 ± 0.29	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	118	0.28 ± 0.16	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	114	-1.27 ± 0.31	Should be applied

7.1.3 Completeness of resonance assignments

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 91%, i.e. 1173 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1293. 22 out of 22 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	528/542 (97%)	212/216 (98%)	213/220 (97%)	103/106 (97%)
Sidechain	567/653 (87%)	344/380 (91%)	223/251 (89%)	0/22 (0%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Aromatic	78/98 (80%)	42/50 (84%)	30/38 (79%)	6/10 (60%)
Overall	1173/1293 (91%)	598/646 (93%)	466/509 (92%)	109/138 (79%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 90%, i.e. 1288 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1431. 24 out of 24 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	584/600 (97%)	235/239 (98%)	235/244 (96%)	114/117 (97%)
Sidechain	624/725 (86%)	380/423 (90%)	244/276 (88%)	0/26 (0%)
Aromatic	80/106 (75%)	43/54 (80%)	31/40 (78%)	6/12 (50%)
Overall	1288/1431 (90%)	658/716 (92%)	510/560 (91%)	120/155 (77%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts ⓘ

The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

Mol	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	200	SER	HB3	1.08	5.25 – 2.45	-9.9
1	A	200	SER	HB2	1.61	5.18 – 2.58	-8.7
1	A	182	LEU	HB2	-1.03	3.32 – -0.08	-7.8
1	A	199	ASN	HB3	0.47	4.41 – 1.11	-6.9
1	A	246	MET	HG2	0.40	4.23 – 0.63	-5.6

7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots ⓘ

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

Random coil index (RCI) for chain A:

