



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 12, 2017 – 07:26 pm GMT

PDB ID : 1PMS
Title : PLECKSTRIN HOMOLOGY DOMAIN OF SON OF SEVENLESS 1 (SOS1)
WITH GLYCINE-SERINE ADDED TO THE N-TERMINUS, NMR, 20
STRUCTURES
Authors : Koshiba, S.; Kigawa, T.; Kim, J.; Shirouzu, M.; Bowtell, D.; Yokoyama, S.;
RIKEN Structural Genomics/Proteomics Initiative (RSGI)
Deposited on : 1997-02-18

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

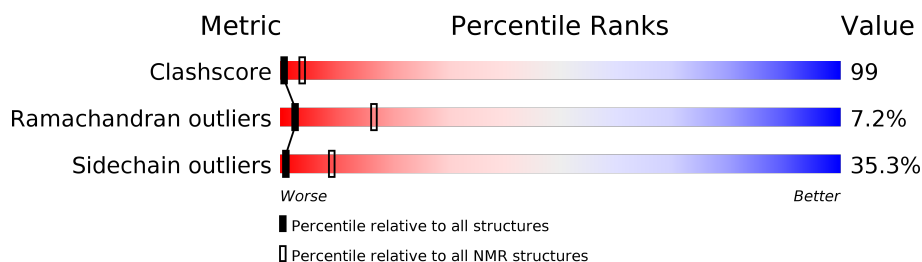
1 Overall quality at a glance

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	136	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. The atoms present in the NMR models are not consistent. Some calculations may have failed as a result. All residues are included in the validation scores. Model 2 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:436-A:443, A:460-A:489, A:508-A:521, A:529-A:565 (89)	0.55	2

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. No single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2165 atoms, of which 1080 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called SOS 1.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	135	Total	C	H	N	O	S	0
			2165	682	1080	192	202	9	

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

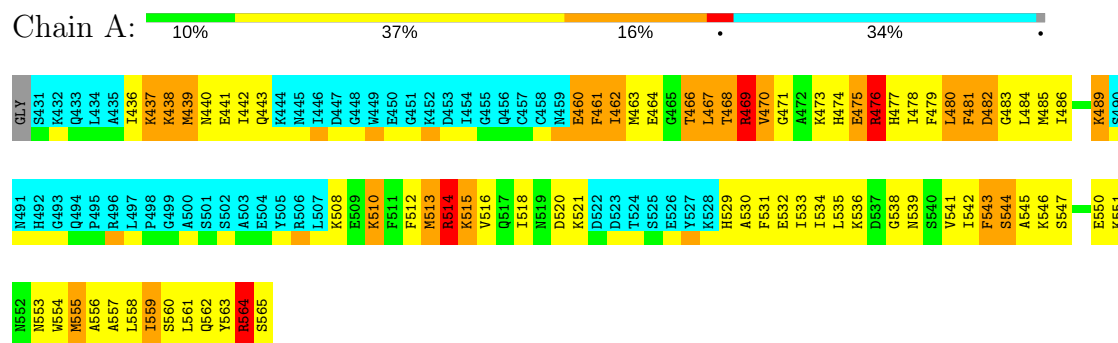
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	431	SER	GLY	ENGINEERED	UNP Q62245

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: SOS 1

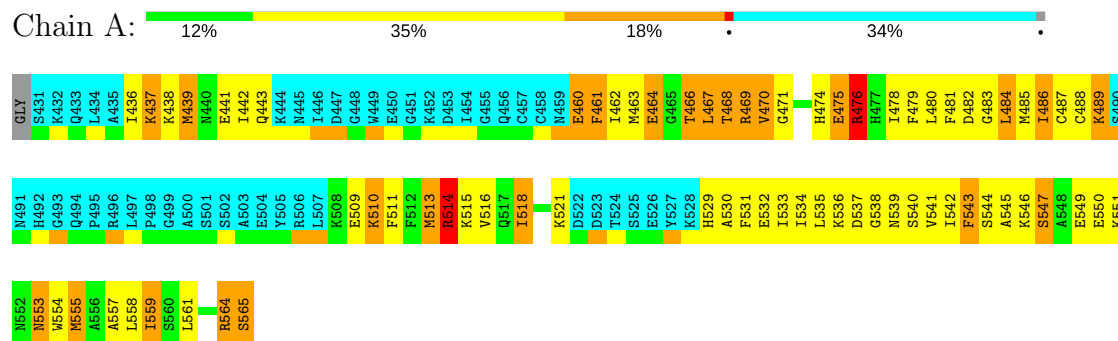


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

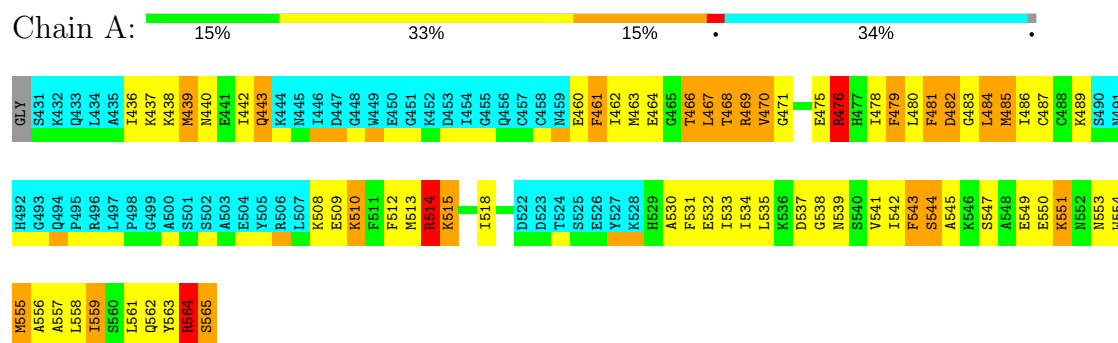
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: SOS 1



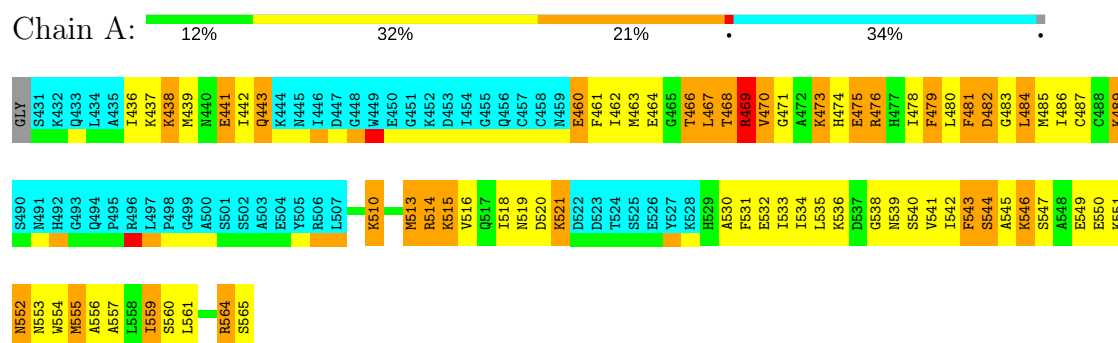
4.2.2 Score per residue for model 2 (medoid)

• Molecule 1: SOS 1



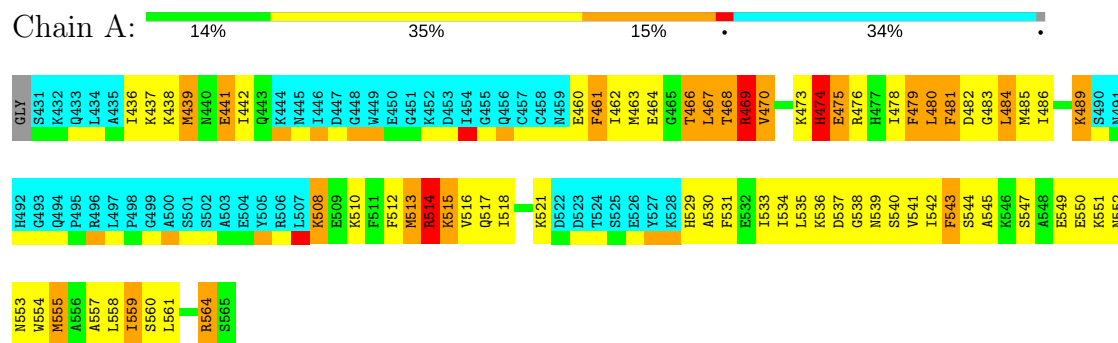
4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: SOS 1



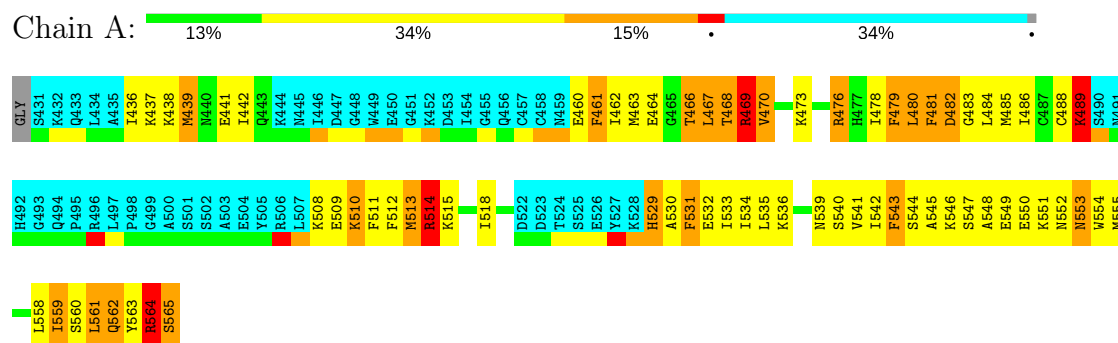
4.2.4 Score per residue for model 4

• Molecule 1: SOS 1



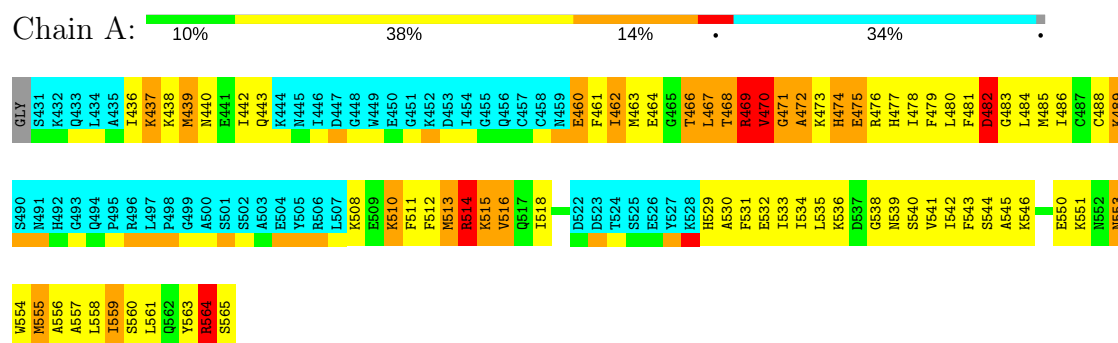
4.2.5 Score per residue for model 5

• Molecule 1: SOS 1



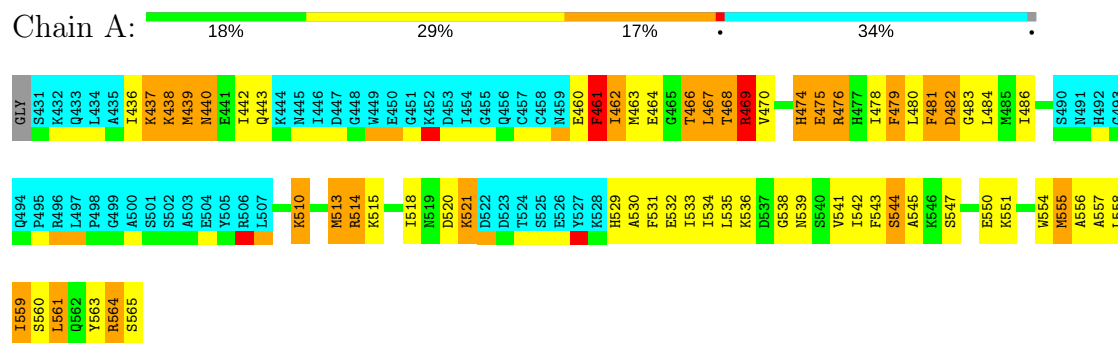
4.2.6 Score per residue for model 6

• Molecule 1: SOS 1



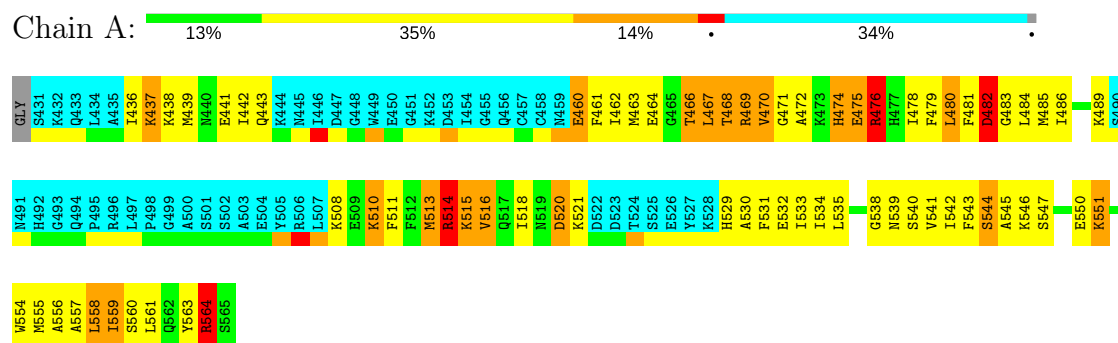
4.2.7 Score per residue for model 7

• Molecule 1: SOS 1



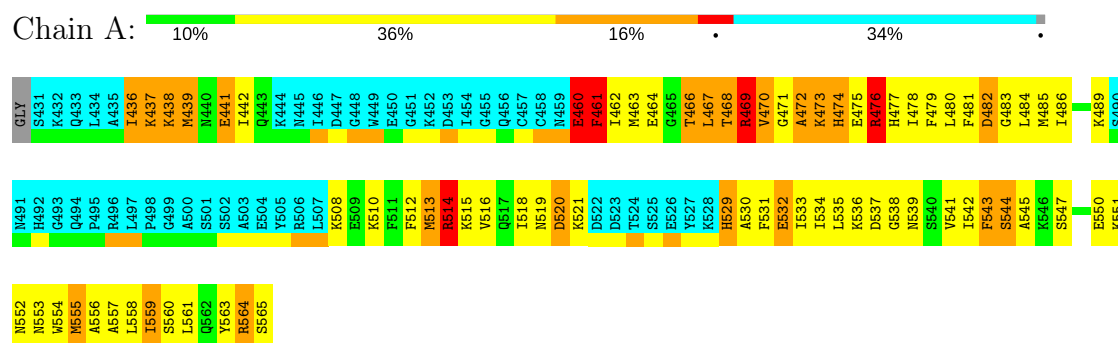
4.2.8 Score per residue for model 8

• Molecule 1: SOS 1



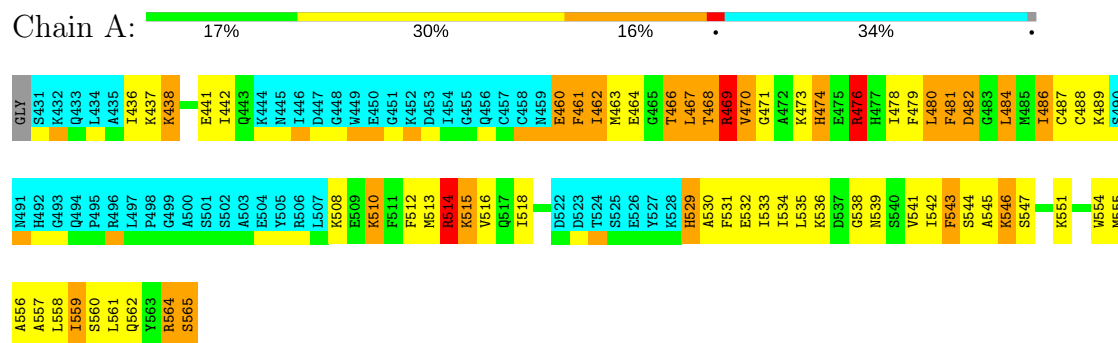
4.2.9 Score per residue for model 9

• Molecule 1: SOS 1



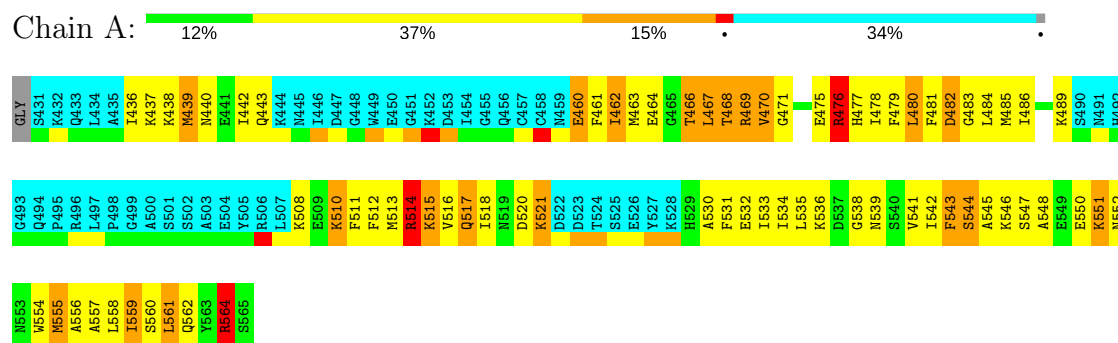
4.2.10 Score per residue for model 10

• Molecule 1: SOS 1



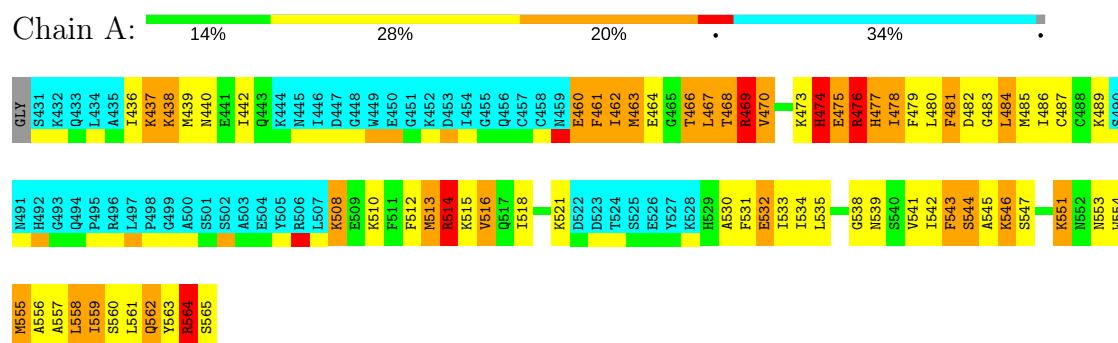
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: SOS 1



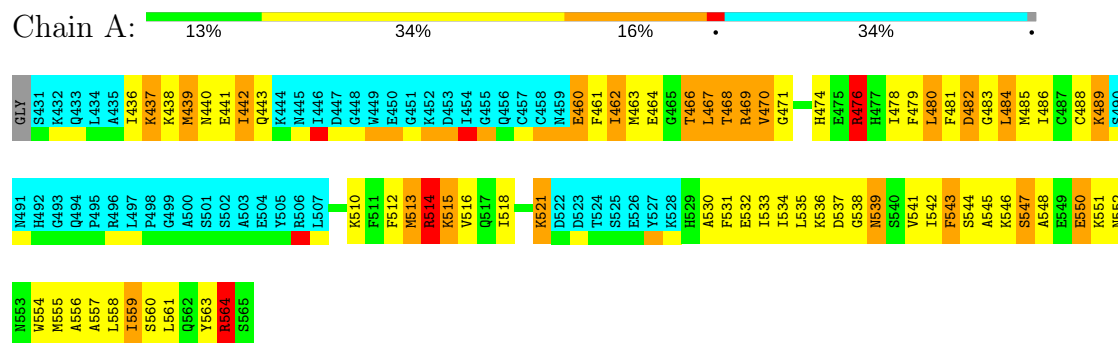
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: SOS 1



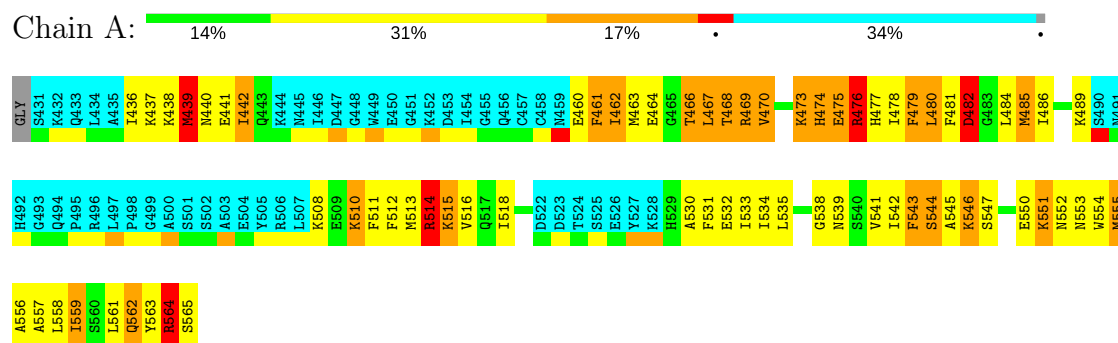
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: SOS 1



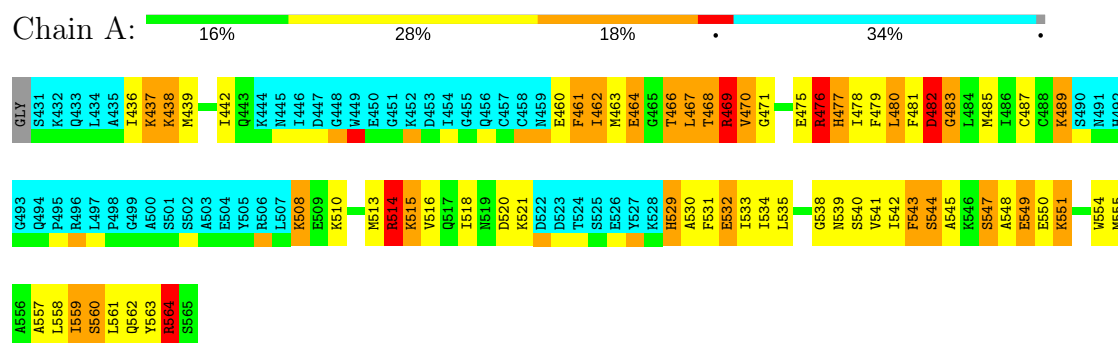
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: SOS 1



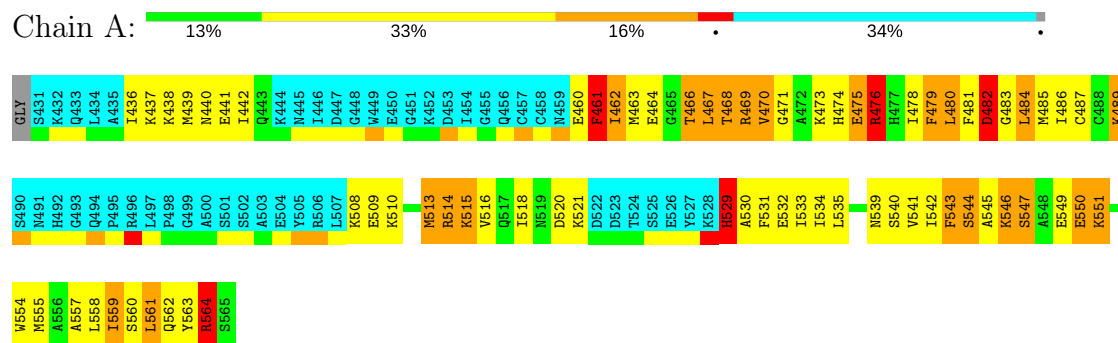
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: SOS 1



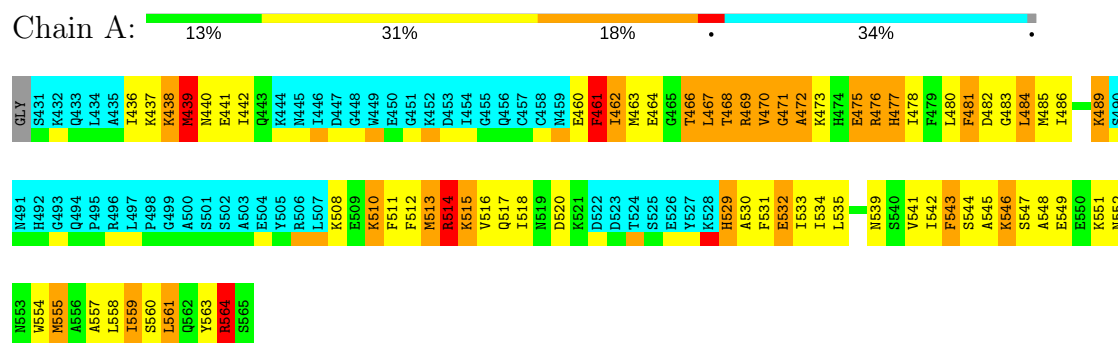
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: SOS 1



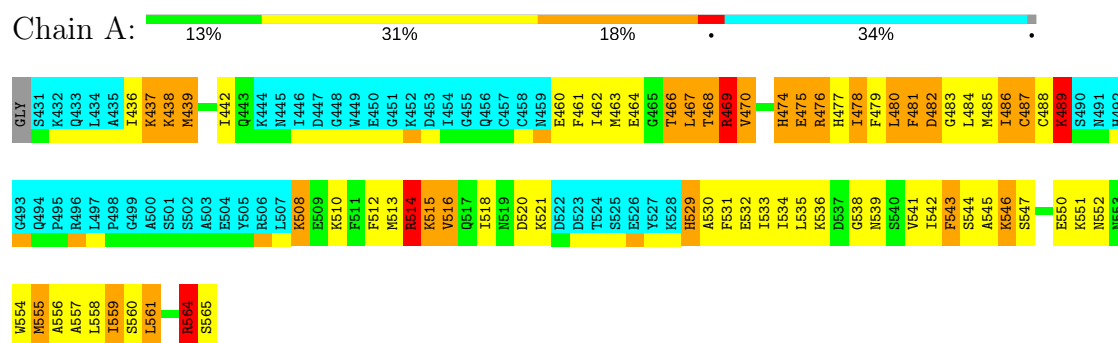
4.2.17 Score per residue for model 17

• Molecule 1: SOS 1



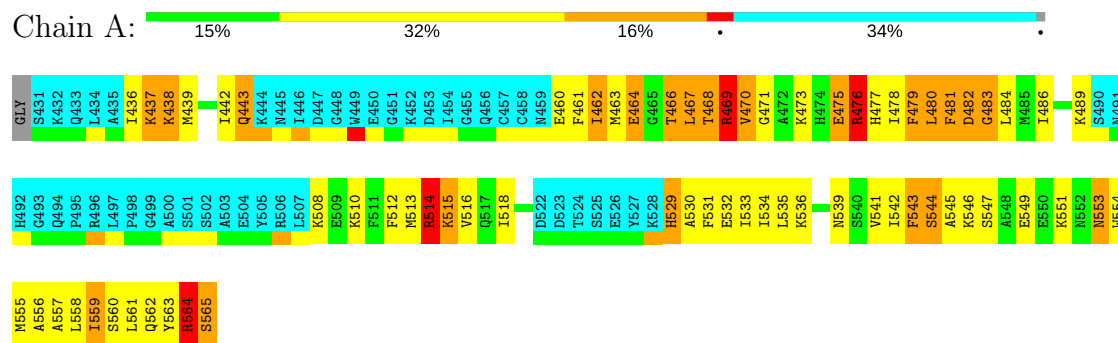
4.2.18 Score per residue for model 18

• Molecule 1: SOS 1



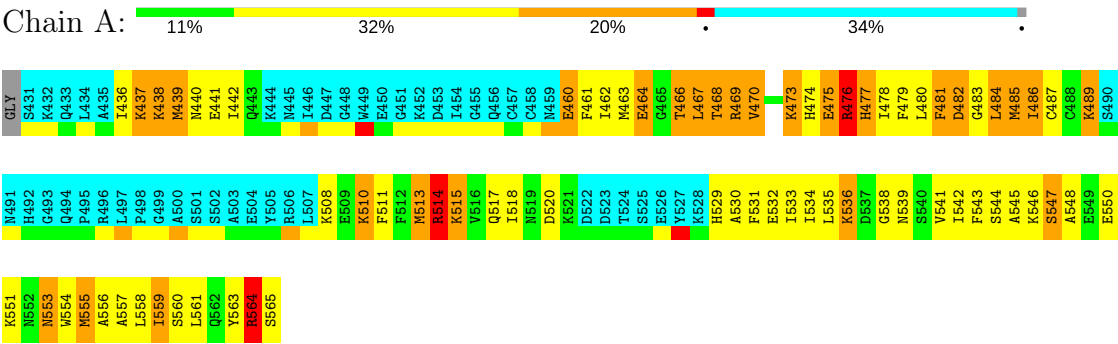
4.2.19 Score per residue for model 19

• Molecule 1: SOS 1



4.2.20 Score per residue for model 20

● Molecule 1: SOS 1



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the ? calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: ?.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	3.1
X-PLOR	structure solution	

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

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	3.9±0.3
All	All	0	78

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	469	ARG	Sidechain	20
1	A	476	ARG	Sidechain	20
1	A	514	ARG	Sidechain	20
1	A	564	ARG	Sidechain	18

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	731	751	751	147±15
All	All	14620	15020	15020	2936

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 99.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:533:ILE:HD11	1:A:558:LEU:HD13	1.06	1.08	14	4
1:A:470:VAL:HG21	1:A:542:ILE:HG22	1.02	1.21	13	2
1:A:484:LEU:HD23	1:A:485:MET:N	0.95	1.75	8	2
1:A:516:VAL:HG12	1:A:534:ILE:O	0.95	1.62	18	3
1:A:533:ILE:CD1	1:A:558:LEU:HD13	0.95	1.91	14	4
1:A:480:LEU:HD12	1:A:484:LEU:O	0.93	1.62	7	2
1:A:484:LEU:HD13	1:A:485:MET:N	0.93	1.77	9	1
1:A:513:MET:CE	1:A:541:VAL:HG21	0.93	1.94	12	3
1:A:470:VAL:HG22	1:A:542:ILE:HG22	0.93	1.37	9	4
1:A:463:MET:SD	1:A:480:LEU:HD22	0.92	2.04	2	5
1:A:462:ILE:HD12	1:A:482:ASP:CB	0.90	1.97	19	1
1:A:484:LEU:HD23	1:A:486:ILE:CD1	0.89	1.96	1	1
1:A:513:MET:HE3	1:A:541:VAL:HG11	0.89	1.42	2	2
1:A:482:ASP:CA	1:A:561:LEU:HD21	0.89	1.97	16	1
1:A:533:ILE:HD11	1:A:558:LEU:CD1	0.88	1.98	14	4
1:A:463:MET:CE	1:A:480:LEU:HD22	0.88	1.99	3	4
1:A:470:VAL:HG21	1:A:542:ILE:CG2	0.88	1.98	13	5
1:A:470:VAL:CG2	1:A:542:ILE:HG22	0.87	2.00	13	4
1:A:480:LEU:HD23	1:A:481:PHE:N	0.86	1.85	2	3
1:A:518:ILE:HG22	1:A:559:ILE:HD13	0.86	1.45	9	19
1:A:482:ASP:CG	1:A:561:LEU:HD11	0.86	1.89	6	3
1:A:484:LEU:HD23	1:A:486:ILE:HD12	0.85	1.48	1	1
1:A:532:GLU:CA	1:A:542:ILE:HD12	0.84	2.02	11	10
1:A:530:ALA:HB2	1:A:544:SER:OG	0.84	1.71	1	5
1:A:518:ILE:HG22	1:A:559:ILE:CD1	0.84	2.03	4	20
1:A:513:MET:HE1	1:A:541:VAL:HG21	0.84	1.49	3	1
1:A:480:LEU:HD23	1:A:484:LEU:O	0.83	1.73	18	3
1:A:532:GLU:HA	1:A:542:ILE:HG23	0.83	1.50	11	10
1:A:462:ILE:HD12	1:A:482:ASP:HB3	0.82	1.50	19	1
1:A:470:VAL:HG11	1:A:542:ILE:HG22	0.82	1.49	20	4
1:A:442:ILE:HG21	1:A:481:PHE:CE2	0.82	2.09	1	3
1:A:482:ASP:HA	1:A:561:LEU:HD11	0.82	1.51	15	4
1:A:463:MET:SD	1:A:480:LEU:HD13	0.82	2.14	15	2
1:A:484:LEU:HD12	1:A:485:MET:N	0.81	1.90	5	1
1:A:463:MET:HE1	1:A:480:LEU:HD22	0.81	1.50	11	4
1:A:541:VAL:C	1:A:542:ILE:HD13	0.81	1.96	5	10
1:A:439:MET:HA	1:A:442:ILE:HD12	0.81	1.53	18	16
1:A:482:ASP:HB2	1:A:561:LEU:HD11	0.81	1.50	9	4
1:A:480:LEU:HD12	1:A:554:TRP:CZ3	0.80	2.10	18	1
1:A:513:MET:SD	1:A:558:LEU:HD23	0.80	2.17	4	2
1:A:470:VAL:HG22	1:A:542:ILE:CG2	0.79	2.07	3	4
1:A:533:ILE:HG12	1:A:558:LEU:HD13	0.79	1.51	11	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:467:LEU:HD21	1:A:545:ALA:HB2	0.79	1.54	16	13
1:A:542:ILE:N	1:A:542:ILE:HD13	0.78	1.92	17	7
1:A:463:MET:HE1	1:A:480:LEU:HD13	0.78	1.53	4	4
1:A:482:ASP:C	1:A:561:LEU:HD21	0.78	2.00	16	1
1:A:533:ILE:CG1	1:A:558:LEU:HD13	0.77	2.09	11	2
1:A:482:ASP:OD2	1:A:561:LEU:HD11	0.77	1.78	6	2
1:A:462:ILE:HG23	1:A:557:ALA:HB1	0.77	1.55	9	9
1:A:480:LEU:HD12	1:A:554:TRP:CE3	0.77	2.15	5	4
1:A:481:PHE:O	1:A:481:PHE:CG	0.76	2.37	19	6
1:A:436:ILE:HD13	1:A:436:ILE:N	0.76	1.96	18	7
1:A:532:GLU:HA	1:A:542:ILE:HD12	0.76	1.58	18	10
1:A:463:MET:CE	1:A:557:ALA:HB3	0.76	2.10	15	4
1:A:463:MET:HE3	1:A:480:LEU:HD22	0.76	1.57	17	2
1:A:513:MET:CE	1:A:558:LEU:HD21	0.75	2.11	19	2
1:A:530:ALA:HB1	1:A:543:PHE:O	0.75	1.80	7	20
1:A:442:ILE:HG22	1:A:461:PHE:CZ	0.75	2.16	14	1
1:A:466:THR:O	1:A:467:LEU:HD22	0.75	1.81	12	20
1:A:518:ILE:HD13	1:A:555:MET:HG3	0.74	1.58	11	7
1:A:513:MET:HE2	1:A:541:VAL:HG21	0.74	1.59	12	1
1:A:542:ILE:HD13	1:A:542:ILE:N	0.74	1.97	11	3
1:A:436:ILE:N	1:A:436:ILE:HD13	0.74	1.97	2	5
1:A:545:ALA:HB1	1:A:550:GLU:CG	0.74	2.12	13	2
1:A:486:ILE:N	1:A:486:ILE:HD13	0.74	1.97	18	1
1:A:485:MET:C	1:A:486:ILE:HD13	0.74	2.03	18	1
1:A:480:LEU:HD11	1:A:513:MET:SD	0.73	2.23	15	1
1:A:470:VAL:O	1:A:470:VAL:HG12	0.73	1.82	8	1
1:A:531:PHE:O	1:A:542:ILE:HG23	0.73	1.82	6	4
1:A:469:ARG:O	1:A:470:VAL:HG12	0.72	1.83	15	4
1:A:530:ALA:HB2	1:A:544:SER:HB2	0.72	1.60	3	9
1:A:513:MET:CE	1:A:541:VAL:HG11	0.72	2.13	2	4
1:A:541:VAL:HG12	1:A:541:VAL:O	0.72	1.85	1	10
1:A:555:MET:HA	1:A:558:LEU:HD12	0.72	1.62	16	13
1:A:541:VAL:O	1:A:541:VAL:HG12	0.72	1.84	14	10
1:A:486:ILE:HD13	1:A:486:ILE:N	0.71	2.00	20	2
1:A:461:PHE:CE1	1:A:481:PHE:CE1	0.71	2.78	1	1
1:A:518:ILE:HD12	1:A:555:MET:HA	0.71	1.62	4	15
1:A:518:ILE:CG2	1:A:559:ILE:HD13	0.71	2.15	1	12
1:A:436:ILE:HG23	1:A:510:LYS:HD3	0.71	1.60	10	1
1:A:480:LEU:HD22	1:A:485:MET:HA	0.71	1.63	16	3
1:A:482:ASP:OD2	1:A:561:LEU:HD12	0.71	1.86	10	2
1:A:463:MET:HE2	1:A:557:ALA:HB3	0.70	1.62	15	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:543:PHE:CD1	1:A:543:PHE:N	0.70	2.59	16	11
1:A:478:ILE:CG2	1:A:554:TRP:CH2	0.70	2.74	11	20
1:A:482:ASP:HB2	1:A:561:LEU:HD21	0.70	1.63	15	2
1:A:480:LEU:HD23	1:A:480:LEU:C	0.70	2.07	2	1
1:A:484:LEU:HD12	1:A:485:MET:H	0.69	1.45	5	3
1:A:469:ARG:C	1:A:470:VAL:HG23	0.69	2.08	3	4
1:A:462:ILE:HG22	1:A:463:MET:HG3	0.69	1.61	9	3
1:A:467:LEU:HD23	1:A:554:TRP:CD1	0.68	2.23	13	18
1:A:532:GLU:CA	1:A:542:ILE:HG23	0.68	2.17	11	10
1:A:543:PHE:N	1:A:543:PHE:CD1	0.68	2.61	17	9
1:A:480:LEU:HD13	1:A:484:LEU:O	0.68	1.88	14	1
1:A:482:ASP:HA	1:A:561:LEU:HD21	0.68	1.64	16	1
1:A:482:ASP:OD1	1:A:561:LEU:HD12	0.68	1.88	7	1
1:A:478:ILE:CG2	1:A:554:TRP:CZ3	0.67	2.78	14	19
1:A:518:ILE:HB	1:A:558:LEU:HD13	0.67	1.64	8	6
1:A:478:ILE:HG22	1:A:554:TRP:CH2	0.67	2.25	13	20
1:A:513:MET:HE2	1:A:541:VAL:HG11	0.67	1.65	14	2
1:A:468:THR:HG23	1:A:469:ARG:N	0.67	2.04	8	8
1:A:462:ILE:HD13	1:A:561:LEU:HD21	0.67	1.67	1	3
1:A:467:LEU:CD2	1:A:545:ALA:HB2	0.67	2.19	16	6
1:A:480:LEU:HD12	1:A:485:MET:HG3	0.67	1.64	4	3
1:A:513:MET:HG2	1:A:516:VAL:HG21	0.67	1.66	8	1
1:A:461:PHE:CE2	1:A:486:ILE:HD11	0.66	2.25	12	1
1:A:480:LEU:C	1:A:480:LEU:HD23	0.66	2.10	9	2
1:A:557:ALA:O	1:A:561:LEU:HD12	0.66	1.89	16	1
1:A:470:VAL:HG23	1:A:543:PHE:C	0.66	2.10	8	1
1:A:466:THR:HG22	1:A:477:HIS:HA	0.66	1.67	6	2
1:A:470:VAL:O	1:A:470:VAL:HG23	0.66	1.90	20	2
1:A:480:LEU:HD12	1:A:554:TRP:HE3	0.66	1.48	5	1
1:A:513:MET:HE2	1:A:558:LEU:HD21	0.66	1.66	20	1
1:A:561:LEU:CD2	1:A:561:LEU:N	0.66	2.58	5	9
1:A:462:ILE:CG2	1:A:557:ALA:HB1	0.66	2.21	6	6
1:A:442:ILE:HD12	1:A:484:LEU:CD1	0.65	2.21	13	1
1:A:481:PHE:CG	1:A:481:PHE:O	0.65	2.49	4	7
1:A:513:MET:HG2	1:A:558:LEU:HD23	0.65	1.66	6	3
1:A:479:PHE:N	1:A:479:PHE:CD1	0.65	2.64	5	3
1:A:482:ASP:CA	1:A:561:LEU:HD11	0.65	2.21	8	5
1:A:480:LEU:O	1:A:480:LEU:HD23	0.65	1.92	9	1
1:A:482:ASP:CG	1:A:561:LEU:HD12	0.65	2.11	7	2
1:A:563:TYR:CD1	1:A:564:ARG:N	0.65	2.65	20	7
1:A:545:ALA:HB3	1:A:551:LYS:HA	0.65	1.67	16	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:471:GLY:O	1:A:472:ALA:HB3	0.65	1.91	9	1
1:A:463:MET:SD	1:A:557:ALA:HB3	0.65	2.31	18	8
1:A:471:GLY:O	1:A:472:ALA:HB2	0.65	1.92	6	2
1:A:561:LEU:N	1:A:561:LEU:HD22	0.64	2.07	10	9
1:A:480:LEU:HD12	1:A:485:MET:CB	0.64	2.21	3	2
1:A:463:MET:CB	1:A:554:TRP:CE2	0.64	2.81	20	1
1:A:478:ILE:HG22	1:A:554:TRP:CZ3	0.64	2.28	14	19
1:A:533:ILE:HD13	1:A:543:PHE:CE1	0.64	2.27	15	11
1:A:546:LYS:CG	1:A:546:LYS:O	0.64	2.45	16	2
1:A:513:MET:HE3	1:A:558:LEU:HD21	0.64	1.70	19	1
1:A:482:ASP:CB	1:A:561:LEU:HD11	0.64	2.23	9	3
1:A:478:ILE:HB	1:A:554:TRP:CH2	0.64	2.27	11	20
1:A:439:MET:CA	1:A:442:ILE:HD12	0.64	2.23	20	14
1:A:470:VAL:HG23	1:A:542:ILE:O	0.64	1.92	9	2
1:A:563:TYR:CG	1:A:564:ARG:N	0.64	2.66	15	8
1:A:439:MET:SD	1:A:484:LEU:HD21	0.63	2.32	6	1
1:A:513:MET:HE2	1:A:516:VAL:HG11	0.63	1.69	15	1
1:A:545:ALA:HB1	1:A:550:GLU:CB	0.63	2.24	9	12
1:A:461:PHE:CD1	1:A:461:PHE:N	0.63	2.66	9	4
1:A:462:ILE:HG22	1:A:463:MET:N	0.63	2.08	16	5
1:A:484:LEU:HD23	1:A:485:MET:H	0.63	1.53	8	1
1:A:533:ILE:HD12	1:A:533:ILE:N	0.63	2.09	6	6
1:A:470:VAL:CB	1:A:542:ILE:HG22	0.63	2.23	15	1
1:A:481:PHE:CE2	1:A:486:ILE:CD1	0.63	2.81	6	3
1:A:462:ILE:HD11	1:A:561:LEU:HD21	0.63	1.70	7	2
1:A:563:TYR:CD2	1:A:564:ARG:CD	0.63	2.81	8	2
1:A:535:LEU:HD12	1:A:539:ASN:CB	0.62	2.24	17	19
1:A:463:MET:SD	1:A:554:TRP:CE3	0.62	2.93	11	7
1:A:470:VAL:HG11	1:A:542:ILE:HB	0.62	1.72	19	3
1:A:481:PHE:O	1:A:483:GLY:N	0.62	2.32	7	16
1:A:467:LEU:HD23	1:A:554:TRP:NE1	0.62	2.10	7	17
1:A:561:LEU:HD22	1:A:561:LEU:H	0.62	1.53	17	1
1:A:439:MET:CG	1:A:486:ILE:HG21	0.62	2.25	20	2
1:A:470:VAL:HG12	1:A:544:SER:OG	0.62	1.94	5	2
1:A:545:ALA:HB1	1:A:550:GLU:HB2	0.62	1.72	9	4
1:A:561:LEU:N	1:A:561:LEU:CD2	0.62	2.63	10	4
1:A:463:MET:CG	1:A:557:ALA:CB	0.62	2.78	11	6
1:A:534:ILE:HG22	1:A:535:LEU:O	0.62	1.95	10	19
1:A:518:ILE:HD13	1:A:555:MET:CG	0.61	2.25	11	5
1:A:545:ALA:HB3	1:A:551:LYS:CA	0.61	2.25	8	17
1:A:515:LYS:NZ	1:A:535:LEU:HD23	0.61	2.10	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:436:ILE:HD12	1:A:510:LYS:HE2	0.61	1.71	11	3
1:A:436:ILE:HD12	1:A:510:LYS:CE	0.61	2.26	3	1
1:A:515:LYS:HE3	1:A:516:VAL:HG13	0.61	1.71	6	1
1:A:533:ILE:N	1:A:533:ILE:HD12	0.61	2.10	3	10
1:A:518:ILE:HD11	1:A:531:PHE:CD2	0.61	2.30	14	6
1:A:484:LEU:HD13	1:A:485:MET:H	0.61	1.52	9	1
1:A:518:ILE:HD11	1:A:531:PHE:CD1	0.61	2.30	9	2
1:A:518:ILE:CD1	1:A:555:MET:CG	0.61	2.79	20	16
1:A:518:ILE:HD13	1:A:555:MET:HG2	0.61	1.72	9	8
1:A:481:PHE:C	1:A:481:PHE:CD1	0.61	2.74	4	8
1:A:467:LEU:CD1	1:A:545:ALA:N	0.61	2.64	16	15
1:A:560:SER:O	1:A:563:TYR:CD2	0.60	2.55	13	6
1:A:461:PHE:N	1:A:461:PHE:CD1	0.60	2.67	7	3
1:A:563:TYR:CD2	1:A:564:ARG:HG2	0.60	2.32	8	1
1:A:518:ILE:CD1	1:A:555:MET:CB	0.60	2.79	18	16
1:A:546:LYS:CA	1:A:546:LYS:CE	0.60	2.79	3	3
1:A:480:LEU:HD13	1:A:513:MET:SD	0.60	2.37	7	1
1:A:560:SER:O	1:A:563:TYR:CD1	0.60	2.55	5	2
1:A:478:ILE:HD13	1:A:487:CYS:SG	0.60	2.35	3	4
1:A:461:PHE:O	1:A:461:PHE:CD1	0.60	2.54	4	2
1:A:463:MET:O	1:A:554:TRP:CZ2	0.60	2.54	19	3
1:A:460:GLU:O	1:A:462:ILE:N	0.60	2.34	14	2
1:A:484:LEU:HD12	1:A:511:PHE:O	0.60	1.97	14	2
1:A:532:GLU:C	1:A:533:ILE:HD12	0.60	2.17	3	2
1:A:545:ALA:HB3	1:A:551:LYS:N	0.60	2.12	9	15
1:A:481:PHE:O	1:A:481:PHE:CD2	0.60	2.55	14	2
1:A:481:PHE:CE2	1:A:486:ILE:HD11	0.60	2.32	9	5
1:A:546:LYS:HG3	1:A:546:LYS:O	0.60	1.97	16	1
1:A:467:LEU:CD2	1:A:554:TRP:CD1	0.59	2.85	13	15
1:A:461:PHE:CZ	1:A:486:ILE:HD11	0.59	2.33	12	1
1:A:546:LYS:O	1:A:546:LYS:HG3	0.59	1.98	17	1
1:A:563:TYR:CD2	1:A:564:ARG:HG3	0.59	2.33	5	1
1:A:463:MET:HG3	1:A:557:ALA:CB	0.59	2.28	11	5
1:A:561:LEU:HD12	1:A:565:SER:OXT	0.59	1.98	5	1
1:A:468:THR:HG23	1:A:470:VAL:N	0.59	2.13	17	9
1:A:463:MET:HB3	1:A:554:TRP:CD2	0.59	2.32	18	10
1:A:438:LYS:HD3	1:A:442:ILE:HD11	0.59	1.74	18	1
1:A:531:PHE:CD1	1:A:555:MET:CE	0.59	2.85	16	2
1:A:560:SER:O	1:A:563:TYR:CE1	0.59	2.56	5	1
1:A:461:PHE:CD2	1:A:480:LEU:O	0.59	2.56	12	1
1:A:542:ILE:CD1	1:A:542:ILE:N	0.58	2.65	17	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:560:SER:O	1:A:563:TYR:CE2	0.58	2.56	15	5
1:A:481:PHE:CE1	1:A:482:ASP:OD2	0.58	2.56	8	1
1:A:518:ILE:HG13	1:A:533:ILE:HD11	0.58	1.75	20	14
1:A:481:PHE:CD1	1:A:481:PHE:O	0.58	2.56	2	1
1:A:438:LYS:HG2	1:A:442:ILE:HD11	0.58	1.74	17	3
1:A:531:PHE:CE1	1:A:551:LYS:O	0.58	2.57	5	6
1:A:533:ILE:N	1:A:533:ILE:CD1	0.58	2.66	6	11
1:A:481:PHE:O	1:A:481:PHE:CD1	0.58	2.56	12	6
1:A:478:ILE:O	1:A:479:PHE:CD1	0.58	2.56	13	6
1:A:510:LYS:O	1:A:511:PHE:CD1	0.58	2.57	20	8
1:A:482:ASP:OD1	1:A:561:LEU:HD11	0.58	1.99	2	1
1:A:480:LEU:HD11	1:A:513:MET:HG3	0.58	1.76	9	1
1:A:464:GLU:OE2	1:A:479:PHE:CD1	0.58	2.57	12	2
1:A:476:ARG:CB	1:A:489:LYS:CB	0.58	2.81	13	1
1:A:533:ILE:CD1	1:A:533:ILE:N	0.58	2.66	10	5
1:A:531:PHE:CE2	1:A:551:LYS:O	0.58	2.57	11	4
1:A:518:ILE:CG1	1:A:533:ILE:HD11	0.58	2.29	3	14
1:A:473:LYS:O	1:A:474:HIS:CG	0.58	2.57	10	2
1:A:463:MET:HB3	1:A:554:TRP:CZ3	0.58	2.34	15	2
1:A:561:LEU:HD13	1:A:561:LEU:N	0.58	2.13	17	1
1:A:530:ALA:O	1:A:531:PHE:CD1	0.58	2.56	17	4
1:A:561:LEU:HD22	1:A:561:LEU:N	0.58	2.13	5	4
1:A:542:ILE:N	1:A:542:ILE:CD1	0.57	2.67	5	4
1:A:462:ILE:HD12	1:A:561:LEU:HD21	0.57	1.76	17	1
1:A:543:PHE:CE2	1:A:555:MET:SD	0.57	2.97	17	1
1:A:563:TYR:CD2	1:A:564:ARG:CG	0.57	2.87	8	2
1:A:531:PHE:CE1	1:A:555:MET:SD	0.57	2.98	15	4
1:A:564:ARG:N	1:A:564:ARG:CD	0.57	2.67	18	3
1:A:463:MET:CE	1:A:480:LEU:HD13	0.57	2.27	4	2
1:A:468:THR:O	1:A:543:PHE:CB	0.57	2.52	8	17
1:A:480:LEU:HD11	1:A:513:MET:CG	0.57	2.30	15	1
1:A:532:GLU:HG3	1:A:542:ILE:HD11	0.57	1.75	12	1
1:A:480:LEU:HB2	1:A:554:TRP:CZ3	0.57	2.34	7	10
1:A:545:ALA:CB	1:A:551:LYS:N	0.57	2.68	6	13
1:A:531:PHE:CD1	1:A:555:MET:SD	0.57	2.97	16	4
1:A:535:LEU:HD12	1:A:539:ASN:HB3	0.57	1.75	13	7
1:A:531:PHE:CG	1:A:555:MET:SD	0.57	2.98	16	1
1:A:508:LYS:CD	1:A:508:LYS:N	0.57	2.67	4	1
1:A:546:LYS:O	1:A:546:LYS:CD	0.57	2.52	17	1
1:A:484:LEU:HD21	1:A:486:ILE:HD11	0.57	1.77	5	1
1:A:546:LYS:CD	1:A:546:LYS:O	0.57	2.52	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:464:GLU:HG2	1:A:479:PHE:CD1	0.57	2.35	7	1
1:A:442:ILE:HG21	1:A:481:PHE:HE2	0.57	1.58	9	1
1:A:462:ILE:CD1	1:A:561:LEU:HD21	0.57	2.30	7	3
1:A:460:GLU:OE2	1:A:461:PHE:CZ	0.57	2.58	10	1
1:A:464:GLU:OE1	1:A:479:PHE:CE1	0.56	2.58	6	1
1:A:484:LEU:HD21	1:A:486:ILE:HG12	0.56	1.76	7	1
1:A:460:GLU:O	1:A:461:PHE:C	0.56	2.42	12	4
1:A:460:GLU:CD	1:A:481:PHE:CD1	0.56	2.79	11	1
1:A:481:PHE:CD1	1:A:481:PHE:N	0.56	2.67	11	1
1:A:513:MET:CE	1:A:561:LEU:HD13	0.56	2.30	11	1
1:A:481:PHE:CD1	1:A:482:ASP:OD1	0.56	2.58	19	1
1:A:470:VAL:HG22	1:A:530:ALA:CB	0.56	2.30	8	1
1:A:466:THR:CG2	1:A:477:HIS:ND1	0.56	2.69	20	1
1:A:535:LEU:HD12	1:A:539:ASN:C	0.56	2.21	10	1
1:A:439:MET:HG2	1:A:486:ILE:HG21	0.56	1.76	20	1
1:A:462:ILE:HD12	1:A:463:MET:HG3	0.56	1.78	11	1
1:A:463:MET:HB3	1:A:554:TRP:CE2	0.56	2.35	20	7
1:A:531:PHE:CE2	1:A:555:MET:SD	0.56	2.98	5	4
1:A:481:PHE:CE2	1:A:484:LEU:HB2	0.56	2.35	12	3
1:A:478:ILE:CB	1:A:554:TRP:CH2	0.56	2.89	11	20
1:A:557:ALA:O	1:A:561:LEU:CD2	0.56	2.54	17	1
1:A:563:TYR:CE2	1:A:564:ARG:CD	0.56	2.89	5	1
1:A:481:PHE:HE2	1:A:484:LEU:HD12	0.55	1.61	12	3
1:A:470:VAL:CG2	1:A:471:GLY:N	0.55	2.69	16	1
1:A:564:ARG:CD	1:A:564:ARG:N	0.55	2.69	12	2
1:A:470:VAL:HG22	1:A:542:ILE:CB	0.55	2.31	1	3
1:A:470:VAL:HB	1:A:542:ILE:HG22	0.55	1.77	15	1
1:A:513:MET:CG	1:A:516:VAL:HG21	0.55	2.31	8	1
1:A:563:TYR:CD2	1:A:564:ARG:HD3	0.55	2.36	8	1
1:A:531:PHE:CD2	1:A:555:MET:SD	0.55	3.00	5	4
1:A:470:VAL:CG1	1:A:542:ILE:O	0.55	2.55	6	1
1:A:520:ASP:OD1	1:A:531:PHE:CE2	0.55	2.59	16	1
1:A:469:ARG:O	1:A:470:VAL:CG1	0.55	2.54	11	4
1:A:545:ALA:HB3	1:A:551:LYS:CG	0.55	2.31	16	3
1:A:561:LEU:HD23	1:A:564:ARG:HG3	0.55	1.78	13	1
1:A:463:MET:HE2	1:A:554:TRP:CB	0.55	2.32	4	4
1:A:555:MET:SD	1:A:555:MET:N	0.55	2.80	17	1
1:A:442:ILE:HG22	1:A:461:PHE:HZ	0.55	1.62	20	1
1:A:482:ASP:O	1:A:561:LEU:CD1	0.55	2.55	8	3
1:A:518:ILE:HD11	1:A:531:PHE:CG	0.55	2.37	4	2
1:A:460:GLU:C	1:A:461:PHE:CD1	0.55	2.80	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:470:VAL:CG2	1:A:543:PHE:O	0.55	2.54	8	1
1:A:530:ALA:C	1:A:531:PHE:CD1	0.55	2.80	16	6
1:A:436:ILE:N	1:A:436:ILE:CD1	0.55	2.68	15	6
1:A:520:ASP:CG	1:A:531:PHE:CE2	0.55	2.80	17	1
1:A:461:PHE:O	1:A:463:MET:N	0.55	2.40	7	3
1:A:533:ILE:C	1:A:534:ILE:HD12	0.55	2.22	7	2
1:A:463:MET:HB3	1:A:554:TRP:CE3	0.55	2.36	15	8
1:A:518:ILE:CD1	1:A:555:MET:HB2	0.55	2.32	18	12
1:A:556:ALA:O	1:A:560:SER:CB	0.55	2.55	7	9
1:A:463:MET:HE2	1:A:554:TRP:HA	0.55	1.78	4	3
1:A:460:GLU:CD	1:A:481:PHE:CG	0.54	2.80	11	1
1:A:480:LEU:HD12	1:A:485:MET:HB2	0.54	1.79	2	2
1:A:443:GLN:HG3	1:A:479:PHE:CE2	0.54	2.37	3	2
1:A:463:MET:CE	1:A:480:LEU:CD2	0.54	2.81	3	2
1:A:467:LEU:N	1:A:478:ILE:HG13	0.54	2.17	10	20
1:A:486:ILE:N	1:A:486:ILE:CD1	0.54	2.67	20	3
1:A:532:GLU:C	1:A:542:ILE:HD12	0.54	2.23	11	10
1:A:438:LYS:O	1:A:442:ILE:CG1	0.54	2.54	13	2
1:A:469:ARG:O	1:A:470:VAL:CB	0.54	2.55	1	4
1:A:462:ILE:CG2	1:A:480:LEU:HD23	0.54	2.32	1	1
1:A:482:ASP:O	1:A:561:LEU:CD2	0.54	2.56	11	1
1:A:546:LYS:HA	1:A:546:LYS:CE	0.54	2.33	19	2
1:A:481:PHE:CD2	1:A:484:LEU:HB2	0.54	2.38	20	2
1:A:481:PHE:CE1	1:A:482:ASP:OD1	0.54	2.61	19	1
1:A:531:PHE:CD1	1:A:531:PHE:N	0.54	2.75	5	3
1:A:560:SER:O	1:A:564:ARG:CD	0.54	2.56	13	4
1:A:481:PHE:O	1:A:482:ASP:C	0.54	2.46	8	10
1:A:484:LEU:HD23	1:A:484:LEU:C	0.54	2.22	18	1
1:A:531:PHE:CZ	1:A:551:LYS:C	0.54	2.80	1	3
1:A:463:MET:HB3	1:A:554:TRP:CH2	0.54	2.38	15	1
1:A:481:PHE:CD1	1:A:481:PHE:C	0.54	2.81	17	2
1:A:469:ARG:O	1:A:470:VAL:O	0.54	2.25	20	11
1:A:463:MET:HB2	1:A:554:TRP:CE2	0.54	2.38	20	1
1:A:468:THR:CG2	1:A:544:SER:OG	0.54	2.56	9	4
1:A:518:ILE:HG22	1:A:559:ILE:HD11	0.54	1.75	11	3
1:A:466:THR:O	1:A:467:LEU:CD2	0.54	2.56	18	12
1:A:480:LEU:HD12	1:A:485:MET:CA	0.54	2.33	3	1
1:A:470:VAL:O	1:A:470:VAL:CG2	0.54	2.55	20	2
1:A:470:VAL:HG22	1:A:471:GLY:N	0.53	2.18	16	4
1:A:551:LYS:CG	1:A:552:ASN:N	0.53	2.72	18	5
1:A:439:MET:CG	1:A:486:ILE:CG2	0.53	2.85	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:482:ASP:OD1	1:A:561:LEU:CD1	0.53	2.56	7	1
1:A:482:ASP:O	1:A:561:LEU:HD22	0.53	2.03	11	1
1:A:551:LYS:O	1:A:555:MET:CE	0.53	2.56	17	1
1:A:470:VAL:HG22	1:A:471:GLY:H	0.53	1.64	19	4
1:A:436:ILE:CD1	1:A:436:ILE:N	0.53	2.70	3	5
1:A:480:LEU:CB	1:A:554:TRP:CZ3	0.53	2.91	20	3
1:A:460:GLU:C	1:A:461:PHE:CG	0.53	2.81	9	1
1:A:470:VAL:HG23	1:A:542:ILE:C	0.53	2.24	17	1
1:A:529:HIS:O	1:A:551:LYS:CD	0.53	2.57	7	4
1:A:463:MET:SD	1:A:480:LEU:CB	0.53	2.97	15	2
1:A:472:ALA:O	1:A:473:LYS:CB	0.53	2.56	9	1
1:A:480:LEU:HD12	1:A:554:TRP:HZ3	0.53	1.60	18	1
1:A:463:MET:SD	1:A:557:ALA:CB	0.53	2.97	4	4
1:A:479:PHE:HB3	1:A:486:ILE:HD12	0.53	1.80	7	1
1:A:482:ASP:CG	1:A:483:GLY:N	0.53	2.62	13	2
1:A:529:HIS:O	1:A:551:LYS:CE	0.53	2.57	8	1
1:A:469:ARG:C	1:A:470:VAL:HG13	0.53	2.24	6	1
1:A:471:GLY:O	1:A:472:ALA:CB	0.53	2.57	6	2
1:A:531:PHE:CE2	1:A:551:LYS:CG	0.53	2.92	6	1
1:A:478:ILE:C	1:A:479:PHE:CD1	0.53	2.82	4	2
1:A:438:LYS:O	1:A:440:ASN:N	0.53	2.42	13	9
1:A:462:ILE:CG1	1:A:482:ASP:OD1	0.53	2.57	6	1
1:A:463:MET:CB	1:A:554:TRP:CZ3	0.53	2.92	15	1
1:A:479:PHE:O	1:A:486:ILE:HG13	0.53	2.03	10	6
1:A:543:PHE:HZ	1:A:558:LEU:HD11	0.53	1.64	16	9
1:A:475:GLU:OE2	1:A:546:LYS:CG	0.53	2.57	14	3
1:A:481:PHE:CD2	1:A:484:LEU:HB3	0.53	2.38	12	5
1:A:475:GLU:OE1	1:A:546:LYS:CG	0.53	2.57	8	2
1:A:484:LEU:CD2	1:A:486:ILE:CG1	0.52	2.87	7	2
1:A:468:THR:CB	1:A:475:GLU:HG2	0.52	2.34	14	2
1:A:547:SER:OG	1:A:548:ALA:N	0.52	2.42	20	2
1:A:479:PHE:O	1:A:486:ILE:HG12	0.52	2.05	1	3
1:A:488:CYS:O	1:A:489:LYS:CB	0.52	2.56	18	3
1:A:470:VAL:CG1	1:A:544:SER:OG	0.52	2.57	18	1
1:A:533:ILE:HD13	1:A:543:PHE:HE1	0.52	1.62	15	6
1:A:436:ILE:O	1:A:439:MET:CG	0.52	2.58	1	1
1:A:437:LYS:CD	1:A:438:LYS:N	0.52	2.73	13	7
1:A:463:MET:HB2	1:A:554:TRP:CZ2	0.52	2.39	20	1
1:A:470:VAL:CG2	1:A:542:ILE:O	0.52	2.57	9	1
1:A:467:LEU:HD11	1:A:545:ALA:N	0.52	2.19	16	17
1:A:532:GLU:CG	1:A:532:GLU:O	0.52	2.58	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:462:ILE:HG22	1:A:463:MET:HG2	0.52	1.81	10	2
1:A:482:ASP:OD1	1:A:561:LEU:CG	0.52	2.57	7	1
1:A:477:HIS:O	1:A:478:ILE:HD13	0.52	2.05	11	2
1:A:484:LEU:HD23	1:A:486:ILE:HG12	0.52	1.82	11	1
1:A:518:ILE:CG2	1:A:559:ILE:CD1	0.52	2.87	6	13
1:A:463:MET:HE2	1:A:554:TRP:NE1	0.52	2.20	5	3
1:A:563:TYR:OH	1:A:565:SER:CB	0.52	2.57	5	1
1:A:469:ARG:O	1:A:470:VAL:C	0.52	2.48	5	9
1:A:461:PHE:CD1	1:A:461:PHE:C	0.52	2.83	6	4
1:A:515:LYS:HZ1	1:A:535:LEU:HD23	0.52	1.65	15	1
1:A:470:VAL:CG1	1:A:542:ILE:HG22	0.52	2.32	4	2
1:A:467:LEU:CD1	1:A:544:SER:C	0.52	2.79	8	20
1:A:463:MET:N	1:A:464:GLU:OE2	0.52	2.43	2	2
1:A:463:MET:HE2	1:A:557:ALA:CB	0.52	2.34	16	1
1:A:480:LEU:HD21	1:A:513:MET:HG3	0.52	1.82	11	2
1:A:541:VAL:O	1:A:541:VAL:CG1	0.52	2.57	1	3
1:A:484:LEU:CD2	1:A:486:ILE:HD12	0.52	2.31	1	1
1:A:532:GLU:O	1:A:532:GLU:CG	0.52	2.58	17	3
1:A:513:MET:SD	1:A:558:LEU:CD2	0.51	2.99	5	5
1:A:480:LEU:CD2	1:A:481:PHE:N	0.51	2.70	2	1
1:A:439:MET:SD	1:A:484:LEU:CD2	0.51	2.98	6	1
1:A:439:MET:HG3	1:A:486:ILE:HG21	0.51	1.81	5	1
1:A:463:MET:HB2	1:A:480:LEU:CB	0.51	2.35	11	8
1:A:530:ALA:HB2	1:A:544:SER:CB	0.51	2.36	9	5
1:A:467:LEU:HD13	1:A:545:ALA:HA	0.51	1.82	12	8
1:A:516:VAL:HG21	1:A:533:ILE:HG21	0.51	1.81	19	2
1:A:482:ASP:OD1	1:A:483:GLY:N	0.51	2.43	8	1
1:A:513:MET:HE2	1:A:561:LEU:HD13	0.51	1.81	11	1
1:A:484:LEU:HD23	1:A:486:ILE:HD11	0.51	1.83	19	1
1:A:532:GLU:HB2	1:A:542:ILE:CD1	0.51	2.35	6	4
1:A:481:PHE:CZ	1:A:486:ILE:HD11	0.51	2.40	13	1
1:A:437:LYS:HE2	1:A:438:LYS:CA	0.51	2.35	18	4
1:A:460:GLU:CG	1:A:461:PHE:N	0.51	2.73	5	3
1:A:481:PHE:CE2	1:A:484:LEU:CB	0.51	2.93	2	3
1:A:531:PHE:N	1:A:531:PHE:CD1	0.51	2.79	1	2
1:A:520:ASP:CB	1:A:531:PHE:CE2	0.51	2.93	3	1
1:A:546:LYS:CE	1:A:546:LYS:HA	0.51	2.35	3	1
1:A:468:THR:HG22	1:A:544:SER:N	0.51	2.21	14	5
1:A:518:ILE:CB	1:A:533:ILE:HD11	0.51	2.35	8	7
1:A:531:PHE:CZ	1:A:551:LYS:O	0.51	2.64	5	2
1:A:480:LEU:HD12	1:A:485:MET:CE	0.51	2.35	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:512:PHE:HB2	1:A:515:LYS:CE	0.51	2.36	4	1
1:A:516:VAL:CG2	1:A:533:ILE:HG21	0.51	2.35	19	2
1:A:480:LEU:CD1	1:A:513:MET:SD	0.51	2.99	15	1
1:A:480:LEU:HD12	1:A:485:MET:CG	0.51	2.34	2	2
1:A:470:VAL:HG12	1:A:471:GLY:H	0.51	1.66	10	3
1:A:470:VAL:HG12	1:A:471:GLY:N	0.51	2.21	13	2
1:A:461:PHE:CB	1:A:464:GLU:HG3	0.51	2.36	18	1
1:A:557:ALA:O	1:A:561:LEU:HD23	0.51	2.06	19	5
1:A:484:LEU:HD22	1:A:486:ILE:CD1	0.51	2.36	20	1
1:A:464:GLU:CG	1:A:479:PHE:CE1	0.51	2.94	7	1
1:A:533:ILE:O	1:A:542:ILE:CD1	0.51	2.59	17	10
1:A:464:GLU:OE1	1:A:479:PHE:CD1	0.51	2.64	6	2
1:A:464:GLU:O	1:A:464:GLU:CG	0.51	2.58	19	1
1:A:462:ILE:O	1:A:463:MET:SD	0.51	2.69	5	5
1:A:484:LEU:CD2	1:A:485:MET:O	0.51	2.59	8	1
1:A:463:MET:CE	1:A:557:ALA:CB	0.50	2.89	16	3
1:A:518:ILE:HD11	1:A:555:MET:HB2	0.50	1.82	19	10
1:A:438:LYS:O	1:A:442:ILE:HG13	0.50	2.06	13	3
1:A:479:PHE:O	1:A:486:ILE:CG1	0.50	2.59	10	5
1:A:442:ILE:HG22	1:A:481:PHE:CE2	0.50	2.41	13	1
1:A:468:THR:CG2	1:A:469:ARG:N	0.50	2.75	11	5
1:A:515:LYS:O	1:A:536:LYS:CG	0.50	2.59	18	1
1:A:531:PHE:CD1	1:A:555:MET:HG2	0.50	2.42	17	1
1:A:460:GLU:CD	1:A:461:PHE:CZ	0.50	2.85	10	1
1:A:481:PHE:CZ	1:A:486:ILE:HD12	0.50	2.41	11	1
1:A:518:ILE:HD12	1:A:558:LEU:HD12	0.50	1.82	11	2
1:A:545:ALA:CB	1:A:551:LYS:HA	0.50	2.37	20	11
1:A:476:ARG:CD	1:A:476:ARG:N	0.50	2.73	2	1
1:A:463:MET:HE2	1:A:554:TRP:CA	0.50	2.36	4	4
1:A:518:ILE:HD12	1:A:555:MET:CA	0.50	2.35	4	3
1:A:469:ARG:C	1:A:470:VAL:CG2	0.50	2.79	10	2
1:A:442:ILE:CD1	1:A:484:LEU:CD1	0.50	2.89	13	1
1:A:551:LYS:HG3	1:A:552:ASN:N	0.50	2.21	14	8
1:A:555:MET:SD	1:A:556:ALA:N	0.50	2.84	9	5
1:A:545:ALA:HB3	1:A:551:LYS:HG3	0.50	1.84	10	1
1:A:463:MET:HE1	1:A:480:LEU:CD2	0.50	2.36	3	2
1:A:439:MET:CA	1:A:442:ILE:HG13	0.50	2.36	13	2
1:A:563:TYR:CE2	1:A:564:ARG:HD2	0.50	2.41	6	4
1:A:513:MET:HE3	1:A:541:VAL:HG21	0.50	1.82	17	1
1:A:470:VAL:CG2	1:A:542:ILE:CG2	0.50	2.90	9	1
1:A:437:LYS:CE	1:A:438:LYS:CA	0.50	2.90	6	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:460:GLU:HG3	1:A:461:PHE:N	0.50	2.22	15	2
1:A:545:ALA:CB	1:A:551:LYS:CA	0.50	2.90	6	8
1:A:468:THR:HG22	1:A:544:SER:CB	0.50	2.37	3	7
1:A:460:GLU:O	1:A:461:PHE:O	0.50	2.30	16	5
1:A:463:MET:HB3	1:A:554:TRP:CZ2	0.50	2.42	15	1
1:A:470:VAL:HG11	1:A:542:ILE:CG2	0.50	2.37	16	2
1:A:463:MET:CE	1:A:554:TRP:CE3	0.50	2.95	4	3
1:A:461:PHE:CD2	1:A:464:GLU:HG2	0.50	2.42	4	1
1:A:552:ASN:HA	1:A:555:MET:CG	0.50	2.37	18	1
1:A:468:THR:HA	1:A:475:GLU:CB	0.50	2.36	20	2
1:A:484:LEU:CD2	1:A:484:LEU:C	0.50	2.80	13	3
1:A:532:GLU:CG	1:A:542:ILE:HD13	0.50	2.37	3	2
1:A:463:MET:CB	1:A:554:TRP:CE3	0.49	2.94	15	1
1:A:484:LEU:C	1:A:484:LEU:CD2	0.49	2.81	2	5
1:A:518:ILE:CD1	1:A:555:MET:HG2	0.49	2.36	20	3
1:A:460:GLU:HG3	1:A:461:PHE:CD1	0.49	2.42	16	2
1:A:476:ARG:HB3	1:A:489:LYS:CB	0.49	2.36	13	2
1:A:481:PHE:CE2	1:A:486:ILE:HD12	0.49	2.40	6	2
1:A:481:PHE:CZ	1:A:486:ILE:HG13	0.49	2.43	1	1
1:A:473:LYS:O	1:A:474:HIS:CB	0.49	2.58	20	4
1:A:460:GLU:CD	1:A:462:ILE:CG1	0.49	2.81	8	1
1:A:546:LYS:N	1:A:546:LYS:CE	0.49	2.76	3	1
1:A:463:MET:HE2	1:A:554:TRP:CD1	0.49	2.42	19	4
1:A:461:PHE:O	1:A:462:ILE:HB	0.49	2.07	9	3
1:A:520:ASP:HB3	1:A:531:PHE:CE2	0.49	2.42	3	1
1:A:546:LYS:HE3	1:A:546:LYS:N	0.49	2.21	3	1
1:A:532:GLU:CB	1:A:542:ILE:CD1	0.49	2.91	6	4
1:A:468:THR:HG22	1:A:544:SER:HB3	0.49	1.84	1	6
1:A:470:VAL:HG22	1:A:542:ILE:HB	0.49	1.83	1	1
1:A:462:ILE:HD11	1:A:561:LEU:HG	0.49	1.83	20	2
1:A:563:TYR:O	1:A:564:ARG:CD	0.49	2.61	8	1
1:A:518:ILE:CD1	1:A:555:MET:HB3	0.49	2.37	16	1
1:A:476:ARG:HB2	1:A:489:LYS:CB	0.49	2.37	13	1
1:A:470:VAL:O	1:A:471:GLY:C	0.49	2.51	2	6
1:A:482:ASP:O	1:A:513:MET:HE3	0.49	2.08	18	1
1:A:437:LYS:HD2	1:A:438:LYS:N	0.49	2.23	15	5
1:A:480:LEU:CD1	1:A:484:LEU:O	0.49	2.59	20	2
1:A:470:VAL:CG1	1:A:470:VAL:O	0.49	2.55	8	1
1:A:535:LEU:CD1	1:A:539:ASN:HB2	0.49	2.37	12	17
1:A:535:LEU:HD12	1:A:539:ASN:HB2	0.49	1.83	5	11
1:A:468:THR:HG23	1:A:470:VAL:H	0.49	1.67	17	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:549:GLU:O	1:A:553:ASN:ND2	0.49	2.45	1	1
1:A:468:THR:HG22	1:A:544:SER:O	0.49	2.07	3	4
1:A:460:GLU:HB2	1:A:481:PHE:CA	0.49	2.38	11	1
1:A:483:GLY:CA	1:A:514:ARG:HG3	0.49	2.37	13	3
1:A:437:LYS:CE	1:A:438:LYS:N	0.49	2.76	6	3
1:A:513:MET:CE	1:A:558:LEU:CD2	0.49	2.90	19	1
1:A:563:TYR:CZ	1:A:564:ARG:HD2	0.49	2.43	7	4
1:A:545:ALA:HB1	1:A:550:GLU:HB3	0.49	1.84	1	1
1:A:464:GLU:HG2	1:A:479:PHE:CE1	0.49	2.42	7	1
1:A:512:PHE:CB	1:A:515:LYS:CE	0.49	2.91	4	1
1:A:481:PHE:CD2	1:A:484:LEU:CB	0.48	2.95	5	4
1:A:532:GLU:CB	1:A:542:ILE:HD13	0.48	2.38	6	2
1:A:531:PHE:CE1	1:A:551:LYS:HB2	0.48	2.42	5	1
1:A:518:ILE:HA	1:A:533:ILE:CG1	0.48	2.38	14	4
1:A:518:ILE:CA	1:A:533:ILE:HG12	0.48	2.37	1	2
1:A:557:ALA:O	1:A:561:LEU:HD22	0.48	2.08	17	1
1:A:460:GLU:HG3	1:A:461:PHE:CD2	0.48	2.44	10	1
1:A:543:PHE:CE2	1:A:555:MET:CE	0.48	2.96	16	1
1:A:545:ALA:HB1	1:A:550:GLU:HG3	0.48	1.83	13	2
1:A:479:PHE:O	1:A:486:ILE:CB	0.48	2.61	9	3
1:A:463:MET:HE2	1:A:554:TRP:CE3	0.48	2.43	8	1
1:A:468:THR:O	1:A:543:PHE:HB2	0.48	2.08	19	15
1:A:468:THR:OG1	1:A:475:GLU:CA	0.48	2.61	16	2
1:A:516:VAL:CG2	1:A:533:ILE:CG2	0.48	2.91	19	2
1:A:518:ILE:CD1	1:A:555:MET:HG3	0.48	2.39	19	6
1:A:468:THR:OG1	1:A:475:GLU:HG3	0.48	2.07	12	2
1:A:463:MET:O	1:A:554:TRP:CH2	0.48	2.67	1	2
1:A:515:LYS:N	1:A:515:LYS:HD3	0.48	2.23	4	1
1:A:479:PHE:HB2	1:A:486:ILE:CG1	0.48	2.38	18	1
1:A:532:GLU:HB3	1:A:542:ILE:HD13	0.48	1.86	15	4
1:A:485:MET:CB	1:A:513:MET:SD	0.48	3.01	1	2
1:A:478:ILE:HG21	1:A:554:TRP:CZ3	0.48	2.44	11	4
1:A:464:GLU:N	1:A:464:GLU:CD	0.48	2.66	10	1
1:A:531:PHE:CD2	1:A:555:MET:HG3	0.48	2.44	16	1
1:A:563:TYR:C	1:A:564:ARG:CD	0.48	2.82	8	1
1:A:521:LYS:O	1:A:521:LYS:CG	0.48	2.61	13	2
1:A:463:MET:CE	1:A:554:TRP:O	0.48	2.62	15	1
1:A:531:PHE:CG	1:A:555:MET:HB2	0.48	2.44	7	1
1:A:555:MET:HA	1:A:558:LEU:CD1	0.48	2.39	12	3
1:A:474:HIS:O	1:A:475:GLU:O	0.48	2.31	12	8
1:A:460:GLU:O	1:A:479:PHE:CZ	0.48	2.66	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:531:PHE:CE2	1:A:555:MET:HG3	0.48	2.43	3	2
1:A:483:GLY:HA3	1:A:514:ARG:CG	0.48	2.39	20	2
1:A:515:LYS:HE3	1:A:516:VAL:HG12	0.48	1.86	17	1
1:A:436:ILE:HG23	1:A:510:LYS:HE2	0.48	1.86	7	1
1:A:464:GLU:CB	1:A:479:PHE:CD1	0.48	2.96	19	1
1:A:513:MET:CG	1:A:558:LEU:HD23	0.48	2.37	6	2
1:A:482:ASP:C	1:A:561:LEU:CD2	0.48	2.79	16	1
1:A:480:LEU:HD12	1:A:485:MET:HA	0.48	1.85	3	1
1:A:533:ILE:CG2	1:A:534:ILE:N	0.48	2.77	11	20
1:A:554:TRP:O	1:A:558:LEU:HG	0.48	2.09	18	5
1:A:483:GLY:O	1:A:513:MET:N	0.48	2.47	19	1
1:A:479:PHE:CG	1:A:486:ILE:HD12	0.48	2.44	7	1
1:A:470:VAL:CG1	1:A:542:ILE:HB	0.48	2.39	16	3
1:A:513:MET:SD	1:A:558:LEU:HD21	0.48	2.49	7	1
1:A:436:ILE:HD12	1:A:510:LYS:HE3	0.48	1.85	3	1
1:A:479:PHE:HB2	1:A:486:ILE:HG12	0.47	1.86	18	2
1:A:546:LYS:HE2	1:A:546:LYS:N	0.47	2.24	18	1
1:A:484:LEU:CD2	1:A:486:ILE:HD11	0.47	2.39	5	1
1:A:467:LEU:CB	1:A:478:ILE:HG13	0.47	2.39	8	13
1:A:438:LYS:O	1:A:439:MET:C	0.47	2.52	6	18
1:A:480:LEU:CD2	1:A:484:LEU:O	0.47	2.57	18	2
1:A:515:LYS:HE3	1:A:535:LEU:HD23	0.47	1.86	2	1
1:A:518:ILE:HB	1:A:533:ILE:HD11	0.47	1.85	16	4
1:A:481:PHE:N	1:A:481:PHE:CD1	0.47	2.79	1	1
1:A:463:MET:SD	1:A:480:LEU:CD1	0.47	2.98	15	1
1:A:461:PHE:O	1:A:464:GLU:OE1	0.47	2.33	7	1
1:A:479:PHE:C	1:A:479:PHE:CD1	0.47	2.87	7	1
1:A:442:ILE:CG2	1:A:481:PHE:CE2	0.47	2.97	13	2
1:A:513:MET:SD	1:A:516:VAL:HG21	0.47	2.50	8	1
1:A:462:ILE:HD12	1:A:482:ASP:CA	0.47	2.39	19	1
1:A:520:ASP:OD1	1:A:531:PHE:CD2	0.47	2.67	16	1
1:A:484:LEU:HD23	1:A:485:MET:O	0.47	2.09	8	1
1:A:530:ALA:C	1:A:531:PHE:CG	0.47	2.88	5	10
1:A:468:THR:HA	1:A:475:GLU:CG	0.47	2.40	6	2
1:A:531:PHE:CD2	1:A:555:MET:HB2	0.47	2.45	6	2
1:A:563:TYR:C	1:A:563:TYR:CD1	0.47	2.87	16	3
1:A:469:ARG:O	1:A:471:GLY:N	0.47	2.48	8	1
1:A:460:GLU:OE2	1:A:481:PHE:CD1	0.47	2.68	11	1
1:A:518:ILE:CD1	1:A:555:MET:HA	0.47	2.38	11	2
1:A:518:ILE:HG13	1:A:533:ILE:CD1	0.47	2.40	3	12
1:A:460:GLU:O	1:A:479:PHE:CE1	0.47	2.66	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:468:THR:HG21	1:A:544:SER:OG	0.47	2.09	12	1
1:A:484:LEU:HD12	1:A:486:ILE:CG1	0.47	2.40	9	1
1:A:460:GLU:O	1:A:464:GLU:OE2	0.47	2.33	3	1
1:A:479:PHE:CB	1:A:486:ILE:HG12	0.47	2.40	18	1
1:A:531:PHE:CZ	1:A:555:MET:HG2	0.47	2.45	18	1
1:A:469:ARG:O	1:A:470:VAL:HB	0.47	2.09	9	4
1:A:531:PHE:CG	1:A:555:MET:HG2	0.47	2.45	17	1
1:A:463:MET:HE2	1:A:554:TRP:O	0.47	2.10	15	1
1:A:563:TYR:CE2	1:A:564:ARG:HD3	0.47	2.44	5	1
1:A:564:ARG:N	1:A:564:ARG:HD2	0.47	2.25	18	1
1:A:470:VAL:CG2	1:A:542:ILE:HB	0.47	2.40	4	3
1:A:439:MET:HG3	1:A:486:ILE:CG2	0.47	2.40	5	2
1:A:515:LYS:HE3	1:A:516:VAL:CG1	0.47	2.40	17	3
1:A:437:LYS:CD	1:A:437:LYS:C	0.47	2.83	9	3
1:A:480:LEU:CD2	1:A:485:MET:HA	0.47	2.40	13	3
1:A:559:ILE:HG23	1:A:563:TYR:CE1	0.47	2.45	9	1
1:A:531:PHE:CE1	1:A:555:MET:HG3	0.47	2.44	4	2
1:A:468:THR:O	1:A:543:PHE:CA	0.47	2.63	20	6
1:A:461:PHE:HB3	1:A:464:GLU:CG	0.47	2.40	1	2
1:A:468:THR:CB	1:A:475:GLU:CG	0.47	2.93	14	2
1:A:518:ILE:HB	1:A:533:ILE:CG1	0.47	2.40	1	2
1:A:480:LEU:HD11	1:A:513:MET:CB	0.47	2.40	16	1
1:A:474:HIS:CG	1:A:474:HIS:O	0.47	2.67	9	1
1:A:476:ARG:O	1:A:478:ILE:HG12	0.47	2.10	8	10
1:A:481:PHE:O	1:A:484:LEU:O	0.46	2.33	8	2
1:A:437:LYS:CE	1:A:438:LYS:HA	0.46	2.39	7	5
1:A:513:MET:CG	1:A:558:LEU:CD2	0.46	2.93	19	2
1:A:482:ASP:HB2	1:A:561:LEU:CD1	0.46	2.39	8	2
1:A:461:PHE:O	1:A:464:GLU:OE2	0.46	2.33	17	3
1:A:438:LYS:C	1:A:442:ILE:HD12	0.46	2.31	10	1
1:A:461:PHE:CB	1:A:464:GLU:CG	0.46	2.94	18	1
1:A:561:LEU:O	1:A:565:SER:OXT	0.46	2.34	14	4
1:A:484:LEU:HD21	1:A:486:ILE:CG1	0.46	2.40	7	1
1:A:467:LEU:HD13	1:A:545:ALA:CA	0.46	2.40	13	3
1:A:484:LEU:CD1	1:A:486:ILE:HG12	0.46	2.41	9	1
1:A:520:ASP:HB3	1:A:531:PHE:CD2	0.46	2.45	3	1
1:A:464:GLU:CD	1:A:464:GLU:N	0.46	2.69	2	1
1:A:480:LEU:CD1	1:A:554:TRP:CE3	0.46	2.98	10	1
1:A:470:VAL:CG2	1:A:543:PHE:C	0.46	2.83	8	1
1:A:520:ASP:OD1	1:A:520:ASP:O	0.46	2.34	18	1
1:A:518:ILE:CA	1:A:533:ILE:HG13	0.46	2.41	5	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:462:ILE:HG21	1:A:480:LEU:HD23	0.46	1.87	1	1
1:A:513:MET:CE	1:A:516:VAL:HG11	0.46	2.40	15	1
1:A:563:TYR:OH	1:A:565:SER:HB2	0.46	2.10	5	1
1:A:517:GLN:O	1:A:533:ILE:HA	0.46	2.11	11	4
1:A:513:MET:HE2	1:A:558:LEU:HD23	0.46	1.87	18	1
1:A:480:LEU:C	1:A:480:LEU:CD2	0.46	2.81	9	2
1:A:460:GLU:OE2	1:A:482:ASP:OD2	0.46	2.33	15	2
1:A:476:ARG:HG2	1:A:489:LYS:CA	0.46	2.39	20	1
1:A:462:ILE:HG13	1:A:482:ASP:HB3	0.46	1.88	15	1
1:A:518:ILE:HA	1:A:533:ILE:CD1	0.46	2.41	17	3
1:A:531:PHE:CE2	1:A:551:LYS:HG2	0.46	2.45	8	2
1:A:551:LYS:O	1:A:555:MET:SD	0.46	2.74	17	1
1:A:462:ILE:HD11	1:A:482:ASP:N	0.46	2.25	11	1
1:A:463:MET:CE	1:A:480:LEU:HB3	0.46	2.41	18	1
1:A:463:MET:CE	1:A:553:ASN:HB3	0.46	2.41	20	3
1:A:546:LYS:O	1:A:546:LYS:HD3	0.46	2.10	17	1
1:A:476:ARG:CB	1:A:489:LYS:HB2	0.46	2.40	13	2
1:A:488:CYS:O	1:A:489:LYS:HB2	0.46	2.11	13	2
1:A:460:GLU:O	1:A:464:GLU:OE1	0.46	2.33	16	1
1:A:460:GLU:OE1	1:A:482:ASP:OD1	0.46	2.33	9	1
1:A:520:ASP:O	1:A:520:ASP:OD1	0.46	2.33	11	1
1:A:464:GLU:O	1:A:464:GLU:HG2	0.46	2.10	19	1
1:A:480:LEU:HD13	1:A:557:ALA:HB3	0.46	1.87	19	1
1:A:545:ALA:O	1:A:551:LYS:CE	0.46	2.63	19	1
1:A:549:GLU:O	1:A:553:ASN:OD1	0.46	2.33	5	2
1:A:560:SER:O	1:A:564:ARG:HD3	0.46	2.11	6	3
1:A:468:THR:CG2	1:A:544:SER:HB3	0.46	2.41	15	5
1:A:476:ARG:CG	1:A:489:LYS:HG3	0.46	2.41	1	3
1:A:469:ARG:O	1:A:470:VAL:HG23	0.46	2.11	3	3
1:A:463:MET:SD	1:A:480:LEU:HB3	0.46	2.51	4	1
1:A:479:PHE:O	1:A:486:ILE:O	0.46	2.33	8	1
1:A:485:MET:CE	1:A:541:VAL:HG21	0.46	2.41	11	1
1:A:512:PHE:HB3	1:A:514:ARG:CD	0.46	2.41	12	11
1:A:464:GLU:CG	1:A:479:PHE:CD1	0.46	2.99	7	1
1:A:552:ASN:OD1	1:A:552:ASN:O	0.46	2.33	9	2
1:A:514:ARG:HG2	1:A:515:LYS:N	0.45	2.26	8	3
1:A:478:ILE:C	1:A:479:PHE:CG	0.45	2.89	16	2
1:A:565:SER:OXT	1:A:565:SER:OG	0.45	2.34	2	1
1:A:561:LEU:HA	1:A:564:ARG:CG	0.45	2.42	20	6
1:A:531:PHE:CE1	1:A:551:LYS:HB3	0.45	2.46	1	1
1:A:560:SER:O	1:A:564:ARG:HD2	0.45	2.11	20	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:479:PHE:HB2	1:A:486:ILE:CD1	0.45	2.41	13	1
1:A:532:GLU:CB	1:A:542:ILE:HD12	0.45	2.41	11	5
1:A:483:GLY:HA2	1:A:513:MET:O	0.45	2.11	4	3
1:A:481:PHE:HD2	1:A:484:LEU:HD12	0.45	1.71	20	1
1:A:529:HIS:O	1:A:551:LYS:HD2	0.45	2.10	7	2
1:A:484:LEU:CD1	1:A:485:MET:N	0.45	2.74	5	1
1:A:461:PHE:O	1:A:461:PHE:CG	0.45	2.69	4	1
1:A:476:ARG:CD	1:A:489:LYS:CB	0.45	2.94	3	1
1:A:463:MET:SD	1:A:554:TRP:HA	0.45	2.51	11	5
1:A:473:LYS:O	1:A:474:HIS:HB2	0.45	2.11	9	2
1:A:481:PHE:CZ	1:A:486:ILE:CD1	0.45	3.00	1	1
1:A:515:LYS:CE	1:A:516:VAL:CG1	0.45	2.95	10	2
1:A:531:PHE:CZ	1:A:551:LYS:HB2	0.45	2.46	5	1
1:A:533:ILE:HG22	1:A:534:ILE:N	0.45	2.27	12	12
1:A:562:GLN:O	1:A:563:TYR:C	0.45	2.55	14	5
1:A:549:GLU:CG	1:A:550:GLU:N	0.45	2.79	16	2
1:A:518:ILE:CG1	1:A:531:PHE:HB3	0.45	2.41	11	2
1:A:480:LEU:HD11	1:A:485:MET:HG3	0.45	1.88	8	2
1:A:557:ALA:O	1:A:560:SER:OG	0.45	2.35	4	2
1:A:478:ILE:HG23	1:A:486:ILE:O	0.45	2.11	19	1
1:A:476:ARG:HD2	1:A:489:LYS:CG	0.45	2.41	14	1
1:A:476:ARG:CG	1:A:489:LYS:HA	0.45	2.41	20	1
1:A:482:ASP:OD1	1:A:561:LEU:CB	0.45	2.64	7	1
1:A:481:PHE:O	1:A:484:LEU:N	0.45	2.50	8	1
1:A:517:GLN:CG	1:A:562:GLN:NE2	0.45	2.80	11	1
1:A:464:GLU:O	1:A:464:GLU:OE2	0.45	2.33	19	1
1:A:470:VAL:HG11	1:A:542:ILE:CB	0.45	2.42	19	1
1:A:531:PHE:CE1	1:A:551:LYS:C	0.45	2.90	1	1
1:A:481:PHE:CE2	1:A:484:LEU:HD12	0.45	2.46	12	1
1:A:470:VAL:HG22	1:A:542:ILE:O	0.45	2.12	7	2
1:A:463:MET:HE1	1:A:553:ASN:HB3	0.45	1.89	6	1
1:A:547:SER:O	1:A:551:LYS:CE	0.45	2.64	1	2
1:A:470:VAL:HG13	1:A:543:PHE:CA	0.45	2.41	20	2
1:A:482:ASP:CA	1:A:561:LEU:CD1	0.45	2.94	13	1
1:A:461:PHE:O	1:A:462:ILE:C	0.45	2.54	11	4
1:A:513:MET:O	1:A:513:MET:SD	0.45	2.74	18	2
1:A:478:ILE:HB	1:A:554:TRP:CZ2	0.45	2.47	19	1
1:A:482:ASP:OD1	1:A:561:LEU:HB3	0.45	2.12	7	1
1:A:468:THR:OG1	1:A:475:GLU:HA	0.45	2.11	11	8
1:A:556:ALA:O	1:A:560:SER:OG	0.45	2.35	8	5
1:A:468:THR:O	1:A:543:PHE:HA	0.45	2.12	1	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:482:ASP:C	1:A:482:ASP:OD1	0.45	2.54	7	3
1:A:464:GLU:OE2	1:A:464:GLU:N	0.45	2.50	4	1
1:A:513:MET:HE2	1:A:513:MET:O	0.45	2.12	4	1
1:A:460:GLU:CG	1:A:460:GLU:O	0.45	2.63	11	2
1:A:477:HIS:C	1:A:478:ILE:HG12	0.45	2.32	11	6
1:A:548:ALA:O	1:A:551:LYS:HG2	0.45	2.12	13	4
1:A:513:MET:HG2	1:A:558:LEU:CD2	0.45	2.42	19	2
1:A:513:MET:SD	1:A:541:VAL:HG11	0.45	2.52	19	1
1:A:565:SER:O	1:A:565:SER:OG	0.45	2.35	12	1
1:A:532:GLU:HB3	1:A:542:ILE:CD1	0.45	2.42	8	2
1:A:530:ALA:CB	1:A:544:SER:HB2	0.45	2.39	3	2
1:A:476:ARG:HB2	1:A:489:LYS:HB2	0.44	1.89	13	1
1:A:463:MET:HB2	1:A:480:LEU:HB3	0.44	1.89	8	3
1:A:464:GLU:HB3	1:A:479:PHE:CD1	0.44	2.46	19	1
1:A:481:PHE:O	1:A:482:ASP:OD1	0.44	2.35	19	2
1:A:470:VAL:HG13	1:A:543:PHE:HA	0.44	1.87	14	3
1:A:463:MET:SD	1:A:557:ALA:HB2	0.44	2.52	20	1
1:A:532:GLU:HG2	1:A:532:GLU:O	0.44	2.12	17	1
1:A:482:ASP:OD1	1:A:482:ASP:C	0.44	2.55	10	2
1:A:518:ILE:CB	1:A:533:ILE:CD1	0.44	2.96	8	3
1:A:472:ALA:O	1:A:473:LYS:HB3	0.44	2.12	9	1
1:A:463:MET:CE	1:A:554:TRP:HA	0.44	2.42	4	1
1:A:556:ALA:O	1:A:560:SER:HB2	0.44	2.13	13	7
1:A:515:LYS:CE	1:A:516:VAL:HG13	0.44	2.41	6	1
1:A:514:ARG:HD3	1:A:514:ARG:N	0.44	2.27	1	1
1:A:561:LEU:O	1:A:565:SER:O	0.44	2.35	1	1
1:A:535:LEU:O	1:A:536:LYS:HG2	0.44	2.12	10	1
1:A:482:ASP:OD1	1:A:482:ASP:N	0.44	2.50	16	1
1:A:532:GLU:O	1:A:532:GLU:OE2	0.44	2.35	12	1
1:A:485:MET:C	1:A:486:ILE:CG1	0.44	2.85	9	2
1:A:470:VAL:HG23	1:A:543:PHE:CA	0.44	2.41	8	1
1:A:479:PHE:O	1:A:486:ILE:HB	0.44	2.12	8	4
1:A:468:THR:HB	1:A:475:GLU:HG2	0.44	1.89	14	2
1:A:529:HIS:O	1:A:551:LYS:HD3	0.44	2.11	1	1
1:A:515:LYS:CB	1:A:536:LYS:HD3	0.44	2.43	20	1
1:A:437:LYS:C	1:A:437:LYS:CD	0.44	2.86	13	2
1:A:479:PHE:CB	1:A:486:ILE:CG1	0.44	2.96	18	1
1:A:439:MET:HA	1:A:442:ILE:CD1	0.44	2.41	14	1
1:A:461:PHE:HA	1:A:480:LEU:O	0.44	2.12	14	1
1:A:485:MET:SD	1:A:513:MET:SD	0.44	3.16	14	1
1:A:510:LYS:CD	1:A:510:LYS:C	0.44	2.85	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:468:THR:HG22	1:A:544:SER:OG	0.44	2.13	9	3
1:A:482:ASP:CG	1:A:561:LEU:CD1	0.44	2.86	10	1
1:A:467:LEU:HD13	1:A:545:ALA:N	0.44	2.27	13	2
1:A:547:SER:HB2	1:A:550:GLU:CG	0.44	2.43	13	1
1:A:478:ILE:CD1	1:A:487:CYS:SG	0.44	3.06	3	1
1:A:443:GLN:OE1	1:A:478:ILE:C	0.44	2.56	19	1
1:A:519:ASN:O	1:A:521:LYS:N	0.44	2.51	9	1
1:A:462:ILE:HG22	1:A:463:MET:CG	0.44	2.43	8	1
1:A:468:THR:CB	1:A:475:GLU:HB3	0.44	2.43	8	1
1:A:482:ASP:HB2	1:A:561:LEU:CD2	0.44	2.43	8	1
1:A:480:LEU:HG	1:A:485:MET:HA	0.44	1.90	11	1
1:A:483:GLY:O	1:A:514:ARG:HG3	0.44	2.12	6	2
1:A:515:LYS:HE3	1:A:516:VAL:HG22	0.44	1.89	6	1
1:A:531:PHE:CE2	1:A:551:LYS:HG3	0.44	2.47	6	1
1:A:531:PHE:CZ	1:A:551:LYS:HB3	0.44	2.48	1	1
1:A:463:MET:SD	1:A:480:LEU:CD2	0.44	2.98	4	1
1:A:443:GLN:CG	1:A:479:PHE:CE2	0.44	3.01	3	1
1:A:470:VAL:CG1	1:A:471:GLY:N	0.44	2.81	13	1
1:A:484:LEU:HD22	1:A:486:ILE:HG12	0.44	1.89	3	1
1:A:510:LYS:C	1:A:511:PHE:CD1	0.44	2.92	1	7
1:A:481:PHE:CD2	1:A:486:ILE:HD11	0.44	2.48	6	1
1:A:461:PHE:HB2	1:A:464:GLU:CG	0.44	2.43	4	1
1:A:545:ALA:CB	1:A:550:GLU:C	0.43	2.87	7	6
1:A:461:PHE:CD1	1:A:462:ILE:N	0.43	2.86	17	1
1:A:513:MET:HG3	1:A:516:VAL:CG2	0.43	2.43	17	1
1:A:463:MET:CE	1:A:480:LEU:HG	0.43	2.43	13	1
1:A:462:ILE:N	1:A:480:LEU:O	0.43	2.51	14	1
1:A:480:LEU:HD21	1:A:485:MET:HG3	0.43	1.90	14	1
1:A:475:GLU:CD	1:A:546:LYS:CG	0.43	2.87	14	1
1:A:483:GLY:HA2	1:A:514:ARG:HG3	0.43	1.89	15	1
1:A:549:GLU:HG2	1:A:550:GLU:N	0.43	2.28	3	3
1:A:468:THR:CG2	1:A:470:VAL:O	0.43	2.66	3	2
1:A:519:ASN:O	1:A:532:GLU:OE1	0.43	2.36	3	1
1:A:462:ILE:CD1	1:A:482:ASP:CB	0.43	2.86	19	1
1:A:480:LEU:HD23	1:A:554:TRP:CZ3	0.43	2.47	14	1
1:A:460:GLU:HG3	1:A:461:PHE:CE1	0.43	2.49	17	1
1:A:460:GLU:O	1:A:462:ILE:HG13	0.43	2.13	11	1
1:A:461:PHE:HB3	1:A:464:GLU:HG3	0.43	1.89	18	2
1:A:484:LEU:HD23	1:A:486:ILE:CG1	0.43	2.43	19	1
1:A:483:GLY:O	1:A:514:ARG:CG	0.43	2.66	6	1
1:A:476:ARG:HG2	1:A:489:LYS:HA	0.43	1.90	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:518:ILE:HD12	1:A:555:MET:HG3	0.43	1.89	17	1
1:A:485:MET:SD	1:A:487:CYS:SG	0.43	3.17	16	1
1:A:518:ILE:HA	1:A:533:ILE:HG13	0.43	1.91	18	12
1:A:464:GLU:N	1:A:464:GLU:OE2	0.43	2.51	2	1
1:A:469:ARG:O	1:A:470:VAL:HG22	0.43	2.13	6	1
1:A:513:MET:HE3	1:A:516:VAL:HG11	0.43	1.89	3	2
1:A:520:ASP:OD1	1:A:531:PHE:CE1	0.43	2.72	15	1
1:A:475:GLU:O	1:A:476:ARG:CD	0.43	2.66	12	1
1:A:463:MET:HE2	1:A:554:TRP:CG	0.43	2.47	4	2
1:A:464:GLU:HB3	1:A:479:PHE:CE1	0.43	2.49	19	1
1:A:462:ILE:CG2	1:A:557:ALA:CB	0.43	2.96	6	1
1:A:437:LYS:HD3	1:A:438:LYS:N	0.43	2.29	20	1
1:A:475:GLU:O	1:A:476:ARG:HD2	0.43	2.14	12	1
1:A:476:ARG:HG3	1:A:489:LYS:CB	0.43	2.42	11	1
1:A:475:GLU:OE1	1:A:546:LYS:HG3	0.43	2.13	14	3
1:A:563:TYR:OH	1:A:564:ARG:NH2	0.43	2.51	20	1
1:A:479:PHE:HB2	1:A:486:ILE:HG13	0.43	1.90	10	1
1:A:439:MET:CE	1:A:443:GLN:NE2	0.43	2.82	13	1
1:A:515:LYS:O	1:A:515:LYS:HD2	0.43	2.14	13	4
1:A:468:THR:CG2	1:A:544:SER:HB2	0.43	2.44	14	1
1:A:476:ARG:HD3	1:A:476:ARG:N	0.43	2.28	2	1
1:A:437:LYS:HE2	1:A:438:LYS:HA	0.43	1.91	1	1
1:A:563:TYR:CD1	1:A:563:TYR:C	0.43	2.92	20	2
1:A:463:MET:HG2	1:A:557:ALA:HB2	0.43	1.91	7	1
1:A:479:PHE:CB	1:A:486:ILE:HG13	0.43	2.43	12	1
1:A:552:ASN:HA	1:A:555:MET:HG2	0.43	1.91	18	1
1:A:480:LEU:CD2	1:A:485:MET:HG2	0.43	2.44	16	1
1:A:533:ILE:HB	1:A:541:VAL:O	0.43	2.14	10	4
1:A:462:ILE:HG13	1:A:482:ASP:CA	0.43	2.44	7	3
1:A:461:PHE:O	1:A:464:GLU:CD	0.43	2.57	4	1
1:A:443:GLN:HG3	1:A:479:PHE:CD2	0.42	2.49	2	1
1:A:475:GLU:OE1	1:A:546:LYS:HG2	0.42	2.14	8	2
1:A:536:LYS:O	1:A:536:LYS:HG3	0.42	2.13	20	1
1:A:460:GLU:HG3	1:A:461:PHE:CG	0.42	2.49	10	1
1:A:476:ARG:HB3	1:A:489:LYS:CG	0.42	2.44	5	1
1:A:462:ILE:HG21	1:A:482:ASP:H	0.42	1.73	3	2
1:A:476:ARG:CD	1:A:489:LYS:HA	0.42	2.44	11	1
1:A:481:PHE:O	1:A:482:ASP:CG	0.42	2.57	19	2
1:A:470:VAL:CG1	1:A:542:ILE:C	0.42	2.87	6	1
1:A:484:LEU:HD22	1:A:486:ILE:CG1	0.42	2.44	3	2
1:A:512:PHE:HB3	1:A:514:ARG:NE	0.42	2.28	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:535:LEU:O	1:A:536:LYS:CG	0.42	2.67	10	1
1:A:482:ASP:O	1:A:561:LEU:HD13	0.42	2.13	8	1
1:A:518:ILE:CD1	1:A:555:MET:CA	0.42	2.97	13	3
1:A:461:PHE:CD1	1:A:481:PHE:CE1	0.42	3.07	1	1
1:A:518:ILE:HA	1:A:533:ILE:HG12	0.42	1.91	12	3
1:A:470:VAL:HG21	1:A:542:ILE:HB	0.42	1.90	4	1
1:A:564:ARG:O	1:A:565:SER:C	0.42	2.57	19	1
1:A:462:ILE:HG13	1:A:482:ASP:OD1	0.42	2.14	6	2
1:A:531:PHE:CZ	1:A:551:LYS:HG2	0.42	2.50	6	2
1:A:516:VAL:HB	1:A:533:ILE:CG2	0.42	2.44	17	3
1:A:546:LYS:O	1:A:547:SER:OG	0.42	2.34	10	1
1:A:461:PHE:HB2	1:A:464:GLU:HG2	0.42	1.92	2	1
1:A:545:ALA:O	1:A:551:LYS:HD3	0.42	2.14	2	1
1:A:515:LYS:HG3	1:A:536:LYS:CG	0.42	2.45	20	1
1:A:563:TYR:C	1:A:564:ARG:HD3	0.42	2.34	8	1
1:A:482:ASP:O	1:A:561:LEU:HG	0.42	2.14	1	2
1:A:438:LYS:O	1:A:441:GLU:N	0.42	2.52	14	1
1:A:462:ILE:HG22	1:A:463:MET:SD	0.42	2.54	20	1
1:A:508:LYS:O	1:A:508:LYS:CG	0.42	2.67	17	2
1:A:509:GLU:N	1:A:509:GLU:OE1	0.42	2.52	16	1
1:A:461:PHE:C	1:A:461:PHE:CD1	0.42	2.92	8	1
1:A:547:SER:CB	1:A:550:GLU:OE2	0.42	2.67	1	1
1:A:518:ILE:HD11	1:A:555:MET:SD	0.42	2.54	1	1
1:A:482:ASP:OD2	1:A:561:LEU:CD1	0.42	2.64	10	1
1:A:487:CYS:C	1:A:488:CYS:SG	0.42	2.97	10	1
1:A:546:LYS:HD3	1:A:546:LYS:C	0.42	2.35	16	1
1:A:467:LEU:CB	1:A:478:ILE:HD12	0.42	2.45	12	1
1:A:460:GLU:O	1:A:462:ILE:HG12	0.42	2.14	9	1
1:A:481:PHE:CZ	1:A:482:ASP:OD2	0.42	2.72	8	1
1:A:481:PHE:C	1:A:483:GLY:N	0.42	2.69	15	3
1:A:462:ILE:HG12	1:A:557:ALA:HB1	0.42	1.91	14	1
1:A:460:GLU:HA	1:A:481:PHE:CE1	0.42	2.50	14	1
1:A:488:CYS:SG	1:A:489:LYS:N	0.42	2.92	1	1
1:A:518:ILE:HG12	1:A:520:ASP:OD1	0.42	2.14	20	1
1:A:475:GLU:OE2	1:A:546:LYS:HG3	0.42	2.14	8	1
1:A:460:GLU:OE2	1:A:482:ASP:CG	0.42	2.57	6	1
1:A:484:LEU:HD21	1:A:486:ILE:CD1	0.42	2.43	5	1
1:A:470:VAL:HG23	1:A:543:PHE:O	0.42	2.14	8	1
1:A:442:ILE:HD12	1:A:484:LEU:HD13	0.42	1.88	13	1
1:A:461:PHE:CD1	1:A:461:PHE:O	0.42	2.73	13	1
1:A:482:ASP:C	1:A:561:LEU:CD1	0.42	2.88	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:533:ILE:CG2	1:A:541:VAL:HB	0.42	2.45	4	2
1:A:481:PHE:O	1:A:482:ASP:HB3	0.42	2.14	10	1
1:A:482:ASP:OD1	1:A:561:LEU:HG	0.42	2.14	10	1
1:A:482:ASP:HB3	1:A:561:LEU:CD1	0.42	2.44	5	1
1:A:437:LYS:CD	1:A:438:LYS:HG2	0.42	2.45	12	1
1:A:474:HIS:O	1:A:476:ARG:HD3	0.42	2.15	12	1
1:A:469:ARG:C	1:A:471:GLY:N	0.42	2.73	8	1
1:A:463:MET:HB2	1:A:480:LEU:HB2	0.42	1.92	13	1
1:A:480:LEU:HD23	1:A:481:PHE:CA	0.41	2.45	2	1
1:A:467:LEU:HD13	1:A:544:SER:C	0.41	2.35	1	4
1:A:535:LEU:CD1	1:A:539:ASN:CB	0.41	2.98	6	3
1:A:485:MET:HB2	1:A:513:MET:SD	0.41	2.55	3	2
1:A:460:GLU:O	1:A:481:PHE:HA	0.41	2.15	20	1
1:A:518:ILE:HG13	1:A:531:PHE:HB3	0.41	1.92	13	4
1:A:520:ASP:O	1:A:520:ASP:CG	0.41	2.57	3	2
1:A:520:ASP:C	1:A:520:ASP:OD1	0.41	2.58	8	1
1:A:468:THR:HA	1:A:475:GLU:HG3	0.41	1.91	6	2
1:A:481:PHE:O	1:A:482:ASP:HB2	0.41	2.13	6	1
1:A:439:MET:N	1:A:442:ILE:HD12	0.41	2.30	17	1
1:A:563:TYR:C	1:A:564:ARG:HG3	0.41	2.34	5	1
1:A:531:PHE:HB2	1:A:555:MET:SD	0.41	2.55	16	1
1:A:512:PHE:CB	1:A:515:LYS:HE2	0.41	2.45	4	1
1:A:482:ASP:HA	1:A:561:LEU:CD1	0.41	2.44	13	1
1:A:476:ARG:HD2	1:A:489:LYS:O	0.41	2.14	18	1
1:A:531:PHE:CE2	1:A:551:LYS:C	0.41	2.93	10	1
1:A:551:LYS:O	1:A:555:MET:HG2	0.41	2.14	16	1
1:A:462:ILE:HG21	1:A:557:ALA:HB1	0.41	1.92	19	1
1:A:439:MET:HG3	1:A:486:ILE:HG23	0.41	1.92	2	1
1:A:462:ILE:CG2	1:A:480:LEU:HB3	0.41	2.45	1	1
1:A:462:ILE:C	1:A:463:MET:SD	0.41	2.98	20	1
1:A:476:ARG:HB3	1:A:489:LYS:HB2	0.41	1.92	15	1
1:A:483:GLY:CA	1:A:514:ARG:CG	0.41	2.99	15	1
1:A:479:PHE:CB	1:A:486:ILE:HD12	0.41	2.44	7	1
1:A:547:SER:CB	1:A:550:GLU:HB3	0.41	2.44	13	1
1:A:480:LEU:HA	1:A:484:LEU:O	0.41	2.16	3	1
1:A:513:MET:HE1	1:A:541:VAL:HG11	0.41	1.92	20	1
1:A:443:GLN:OE1	1:A:479:PHE:CE2	0.41	2.74	8	1
1:A:518:ILE:HD11	1:A:555:MET:CB	0.41	2.44	3	1
1:A:460:GLU:HB2	1:A:481:PHE:HA	0.41	1.91	11	1
1:A:515:LYS:HD2	1:A:515:LYS:O	0.41	2.15	8	2
1:A:463:MET:CB	1:A:554:TRP:CD2	0.41	3.04	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:513:MET:SD	1:A:558:LEU:HD22	0.41	2.55	17	1
1:A:480:LEU:HD11	1:A:513:MET:HB3	0.41	1.92	16	1
1:A:547:SER:O	1:A:551:LYS:HB2	0.41	2.15	16	1
1:A:482:ASP:O	1:A:561:LEU:HD21	0.41	2.13	16	1
1:A:468:THR:OG1	1:A:472:ALA:HB3	0.41	2.16	8	1
1:A:460:GLU:OE2	1:A:462:ILE:HG12	0.41	2.15	3	1
1:A:549:GLU:O	1:A:553:ASN:HB2	0.41	2.16	4	2
1:A:468:THR:CB	1:A:475:GLU:CB	0.41	2.99	2	1
1:A:466:THR:CG2	1:A:477:HIS:HA	0.41	2.43	6	1
1:A:488:CYS:O	1:A:489:LYS:C	0.41	2.57	6	1
1:A:485:MET:C	1:A:485:MET:SD	0.41	2.99	20	1
1:A:532:GLU:HG3	1:A:542:ILE:CD1	0.41	2.45	12	1
1:A:510:LYS:O	1:A:510:LYS:CD	0.41	2.69	2	1
1:A:462:ILE:HG13	1:A:482:ASP:CB	0.41	2.45	15	1
1:A:437:LYS:HE2	1:A:438:LYS:CE	0.41	2.46	7	1
1:A:547:SER:O	1:A:551:LYS:CG	0.41	2.68	16	2
1:A:560:SER:O	1:A:564:ARG:HG2	0.41	2.15	16	1
1:A:485:MET:C	1:A:486:ILE:HG13	0.41	2.35	9	1
1:A:460:GLU:CD	1:A:462:ILE:HG12	0.41	2.36	8	1
1:A:476:ARG:CD	1:A:489:LYS:O	0.41	2.69	18	1
1:A:546:LYS:CA	1:A:546:LYS:HE2	0.41	2.45	18	1
1:A:462:ILE:CD1	1:A:561:LEU:HG	0.41	2.45	20	1
1:A:461:PHE:C	1:A:464:GLU:OE2	0.41	2.59	15	2
1:A:483:GLY:HA2	1:A:514:ARG:CG	0.41	2.46	15	1
1:A:561:LEU:HA	1:A:564:ARG:CD	0.41	2.46	15	1
1:A:547:SER:O	1:A:551:LYS:HG3	0.41	2.16	16	1
1:A:519:ASN:O	1:A:520:ASP:C	0.41	2.59	9	1
1:A:514:ARG:NH1	1:A:515:LYS:HG2	0.41	2.30	8	1
1:A:548:ALA:HA	1:A:551:LYS:CD	0.41	2.46	13	1
1:A:460:GLU:HB2	1:A:481:PHE:HB3	0.41	1.93	11	1
1:A:516:VAL:C	1:A:517:GLN:OE1	0.41	2.59	11	1
1:A:480:LEU:HD13	1:A:557:ALA:CB	0.41	2.46	19	1
1:A:532:GLU:O	1:A:532:GLU:HG2	0.41	2.15	10	1
1:A:460:GLU:N	1:A:479:PHE:CZ	0.40	2.90	19	1
1:A:442:ILE:HG22	1:A:461:PHE:CE1	0.40	2.50	14	1
1:A:480:LEU:HG	1:A:484:LEU:O	0.40	2.16	2	2
1:A:512:PHE:O	1:A:515:LYS:HE2	0.40	2.16	6	1
1:A:520:ASP:HB2	1:A:531:PHE:CE2	0.40	2.51	17	1
1:A:477:HIS:HB3	1:A:479:PHE:CZ	0.40	2.51	15	1
1:A:463:MET:O	1:A:464:GLU:HG3	0.40	2.16	16	1
1:A:514:ARG:N	1:A:514:ARG:CD	0.40	2.84	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:508:LYS:HD2	1:A:508:LYS:O	0.40	2.16	18	1
1:A:476:ARG:HB2	1:A:487:CYS:SG	0.40	2.56	1	1
1:A:479:PHE:CD2	1:A:486:ILE:HD12	0.40	2.52	7	1
1:A:441:GLU:O	1:A:441:GLU:HG2	0.40	2.17	9	1
1:A:545:ALA:CB	1:A:550:GLU:CG	0.40	2.94	13	1
1:A:518:ILE:HD11	1:A:555:MET:CG	0.40	2.46	3	1
1:A:556:ALA:O	1:A:560:SER:HB3	0.40	2.16	11	1
1:A:475:GLU:C	1:A:476:ARG:CG	0.40	2.89	19	1
1:A:470:VAL:HG13	1:A:542:ILE:O	0.40	2.16	6	1
1:A:463:MET:C	1:A:464:GLU:OE2	0.40	2.59	17	1
1:A:460:GLU:OE1	1:A:481:PHE:CE1	0.40	2.75	15	1
1:A:476:ARG:CZ	1:A:489:LYS:HD2	0.40	2.46	9	1
1:A:460:GLU:CD	1:A:462:ILE:HG13	0.40	2.37	8	1
1:A:470:VAL:HG22	1:A:530:ALA:HB1	0.40	1.91	8	1
1:A:474:HIS:O	1:A:475:GLU:C	0.40	2.59	18	1
1:A:463:MET:CG	1:A:557:ALA:HB3	0.40	2.47	18	1
1:A:533:ILE:N	1:A:542:ILE:HD12	0.40	2.31	17	2
1:A:534:ILE:CG2	1:A:535:LEU:N	0.40	2.84	15	2
1:A:487:CYS:O	1:A:508:LYS:CB	0.40	2.70	15	1
1:A:547:SER:O	1:A:551:LYS:HG2	0.40	2.15	15	1
1:A:486:ILE:C	1:A:487:CYS:SG	0.40	2.99	10	1
1:A:541:VAL:CG1	1:A:541:VAL:O	0.40	2.58	12	1
1:A:510:LYS:HD2	1:A:510:LYS:O	0.40	2.16	2	1
1:A:515:LYS:HE3	1:A:515:LYS:C	0.40	2.37	15	1
1:A:548:ALA:O	1:A:551:LYS:HG3	0.40	2.17	15	1
1:A:516:VAL:HB	1:A:534:ILE:O	0.40	2.16	10	2

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	88/136 (65%)	68±3 (77±3%)	14±3 (16±3%)	6±2 (7±3%)	3	17
All	All	1760/2720 (65%)	1352 (77%)	282 (16%)	126 (7%)	3	17

All 17 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	470	VAL	19
1	A	482	ASP	18
1	A	538	GLY	16
1	A	475	GLU	10
1	A	474	HIS	9
1	A	529	HIS	8
1	A	461	PHE	8
1	A	460	GLU	7
1	A	439	MET	7
1	A	462	ILE	7
1	A	489	LYS	4
1	A	472	ALA	3
1	A	564	ARG	3
1	A	483	GLY	2
1	A	471	GLY	2
1	A	520	ASP	2
1	A	473	LYS	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	79/117 (68%)	51±3 (65±4%)	28±3 (35±4%)	1	9
All	All	1580/2340 (68%)	1023 (65%)	557 (35%)	1	9

All 67 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	468	THR	20
1	A	437	LYS	20
1	A	510	LYS	20
1	A	467	LEU	20
1	A	514	ARG	20
1	A	515	LYS	20
1	A	466	THR	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	559	ILE	20
1	A	564	ARG	19
1	A	547	SER	17
1	A	543	PHE	16
1	A	508	LYS	15
1	A	513	MET	14
1	A	489	LYS	13
1	A	476	ARG	13
1	A	555	MET	13
1	A	546	LYS	12
1	A	481	PHE	11
1	A	536	LYS	11
1	A	469	ARG	11
1	A	544	SER	11
1	A	480	LEU	11
1	A	484	LEU	10
1	A	565	SER	10
1	A	438	LYS	10
1	A	521	LYS	10
1	A	553	ASN	9
1	A	479	PHE	8
1	A	540	SER	8
1	A	461	PHE	8
1	A	473	LYS	8
1	A	516	VAL	8
1	A	529	HIS	8
1	A	439	MET	8
1	A	551	LYS	7
1	A	482	ASP	6
1	A	443	GLN	6
1	A	561	LEU	6
1	A	562	GLN	6
1	A	477	HIS	5
1	A	532	GLU	5
1	A	441	GLU	5
1	A	537	ASP	5
1	A	474	HIS	5
1	A	464	GLU	4
1	A	462	ILE	4
1	A	486	ILE	4
1	A	460	GLU	4
1	A	485	MET	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	475	GLU	3
1	A	509	GLU	3
1	A	440	ASN	2
1	A	478	ILE	2
1	A	550	GLU	2
1	A	487	CYS	2
1	A	442	ILE	2
1	A	558	LEU	2
1	A	549	GLU	2
1	A	560	SER	1
1	A	463	MET	1
1	A	552	ASN	1
1	A	470	VAL	1
1	A	436	ILE	1
1	A	517	GLN	1
1	A	531	PHE	1
1	A	518	ILE	1
1	A	539	ASN	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided