



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 12, 2017 – 07:36 pm GMT

PDB ID : 1QU5
Title : NMR STRUCTURE OF A NEW PHOSPHOTYROSINE BINDING DOMAIN CONTAINING THE FHA2 DOMAIN OF RAD 53
Authors : Byeon, I.-J.L.; Liao, H.; Tsai, M.-D.
Deposited on : 1999-07-06

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

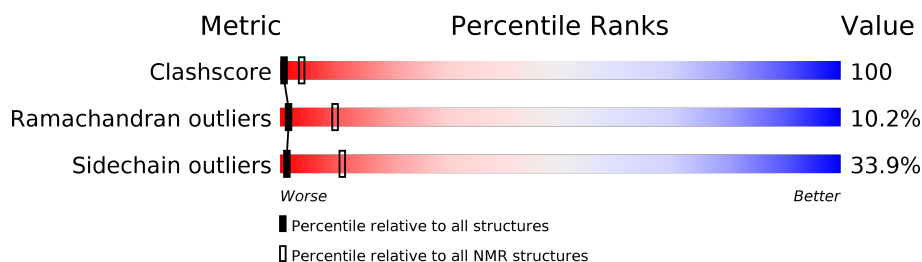
1 Overall quality at a glance

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	182	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 16 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:575-A:630, A:643-A:705, A:713-A:730 (137)	0.32	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 1 clusters. No single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2945 atoms, of which 1476 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called PROTEIN KINASE SPK1.

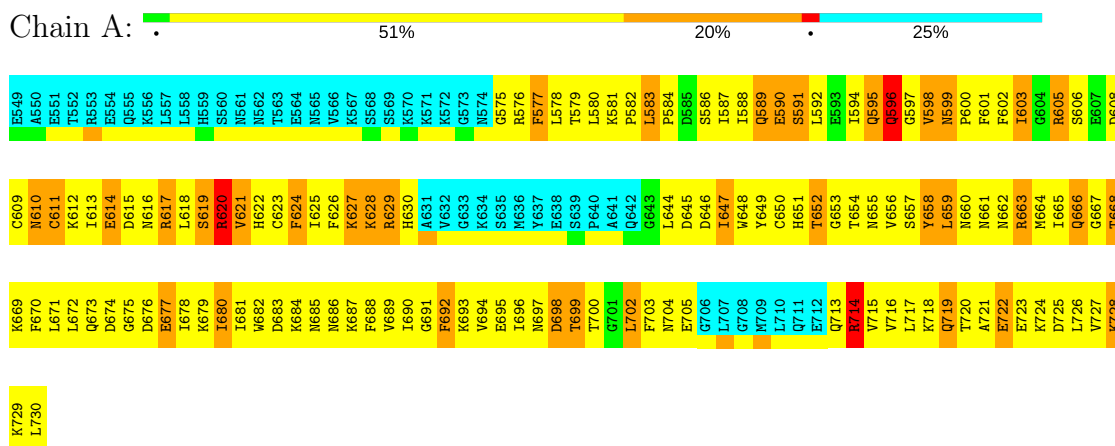
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	182	Total	C	H	N	O	S	0
			2945	922	1476	260	280	7	

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA and DNA chains in the entry. The first graphic is the same as shown in the summary in section 1 of this report. The second graphic shows the sequence where residues are colour-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. Stretches of 2 or more consecutive residues without any outliers are shown as green connectors. Residues which are classified as ill-defined in the NMR ensemble, are shown in cyan with an underline colour-coded according to the previous scheme. Residues which were present in the experimental sample, but not modelled in the final structure are shown in grey.

- Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1

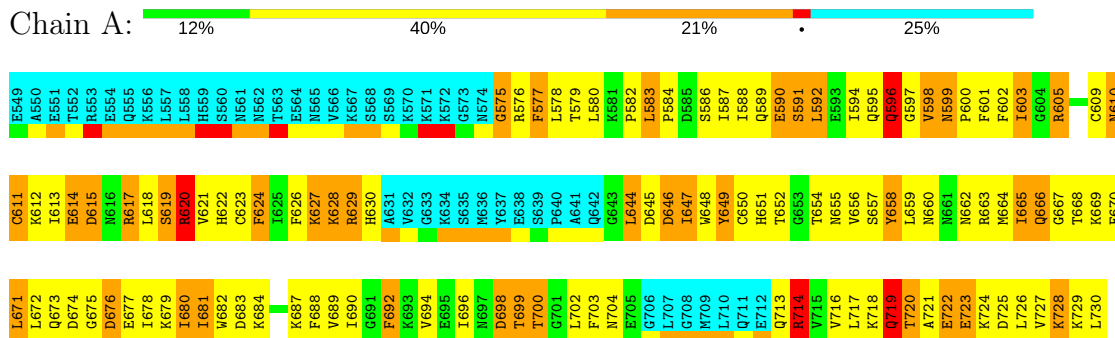


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

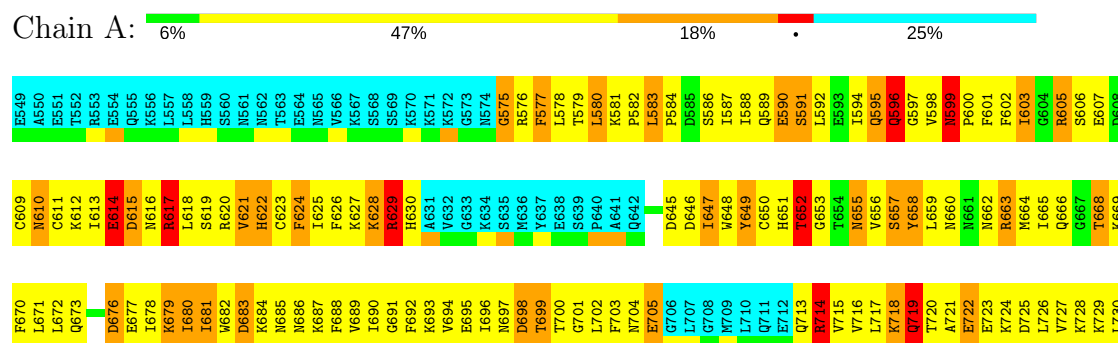
4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

- Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1



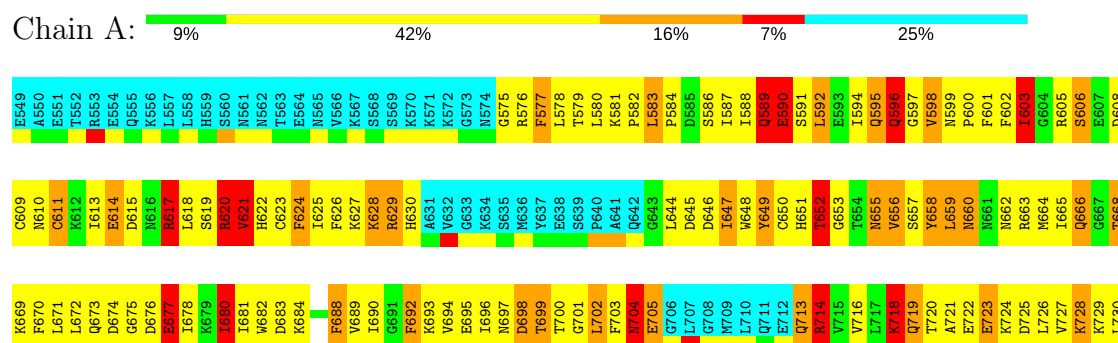
4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1



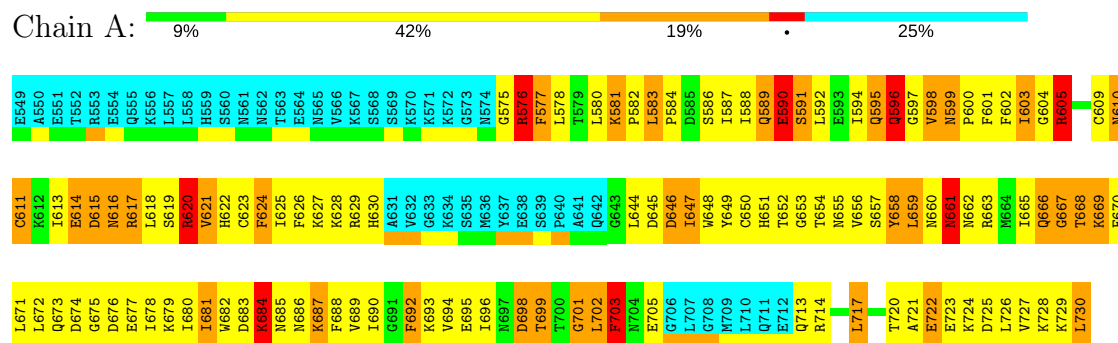
4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1



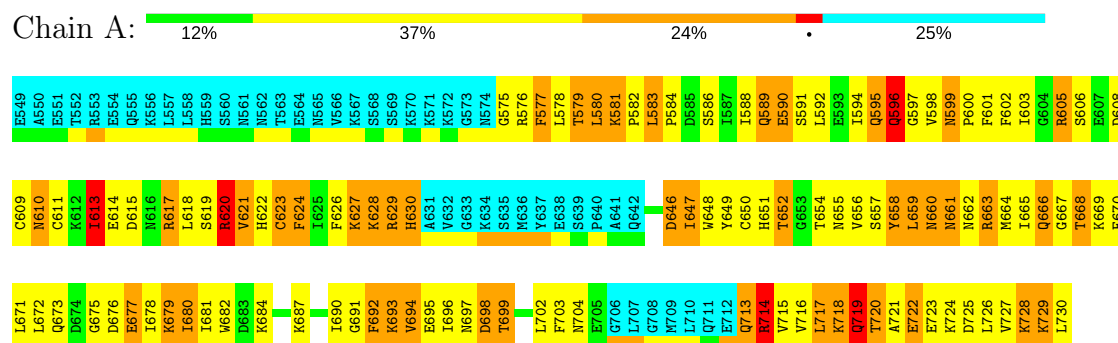
4.2.4 Score per residue for model 4

• Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1



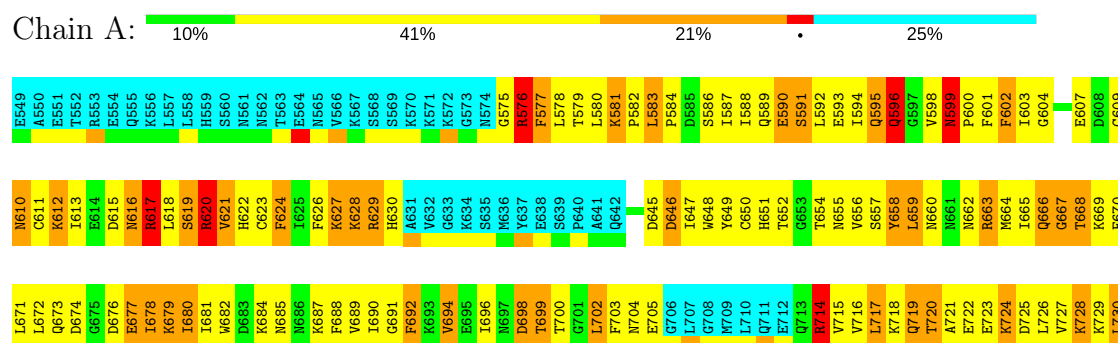
4.2.5 Score per residue for model 5

• Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1



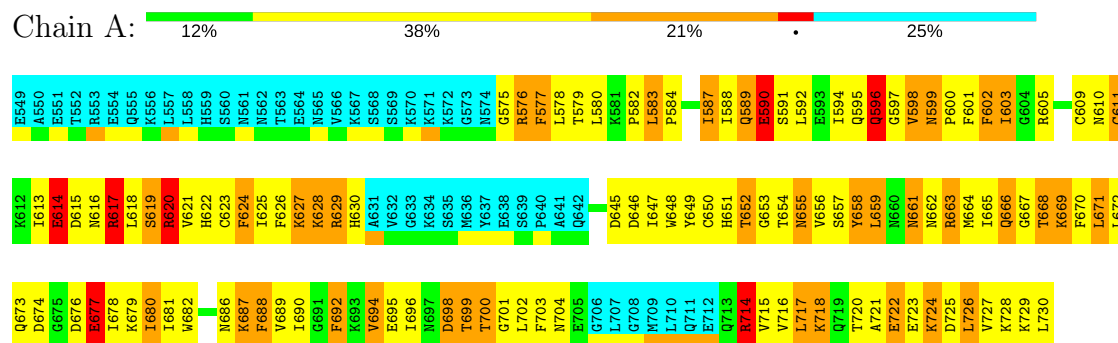
4.2.6 Score per residue for model 6

• Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1



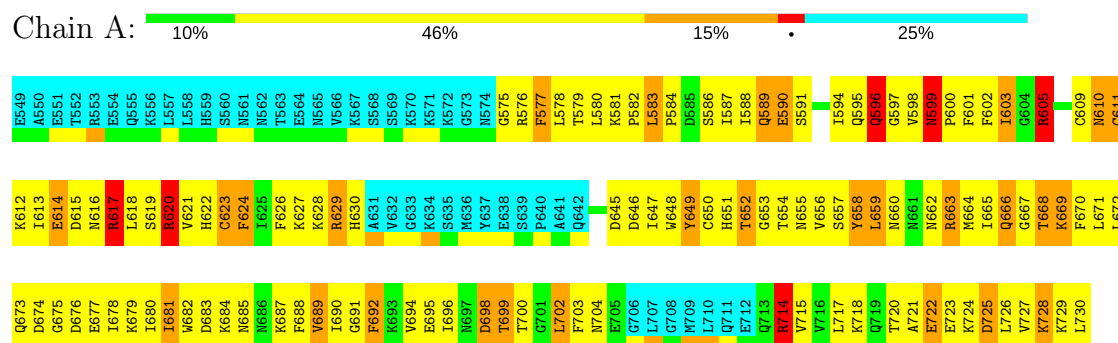
4.2.7 Score per residue for model 7

• Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1



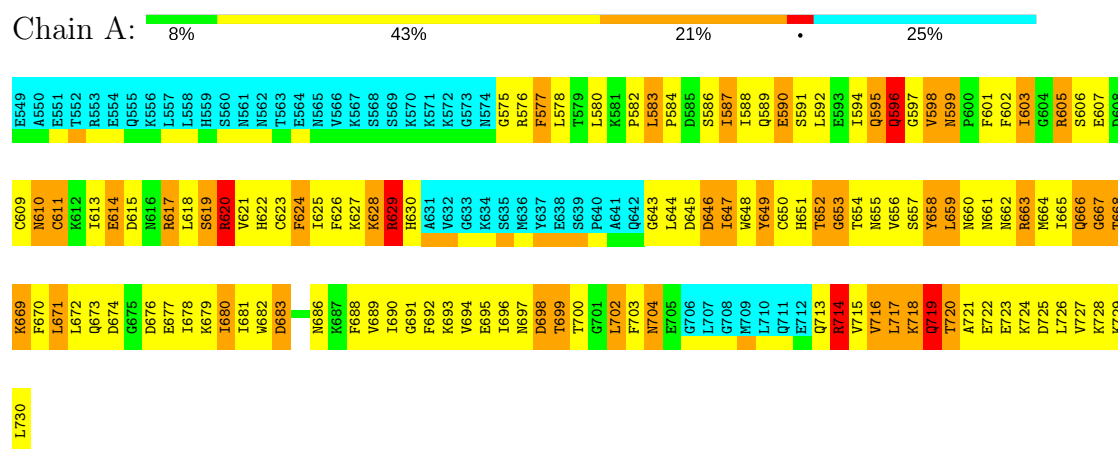
4.2.8 Score per residue for model 8

• Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1



4.2.9 Score per residue for model 9

• Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1



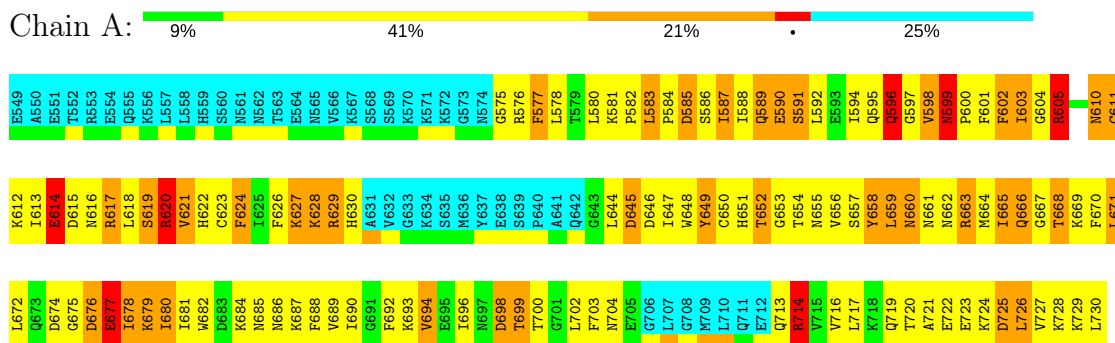
4.2.10 Score per residue for model 10

• Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1



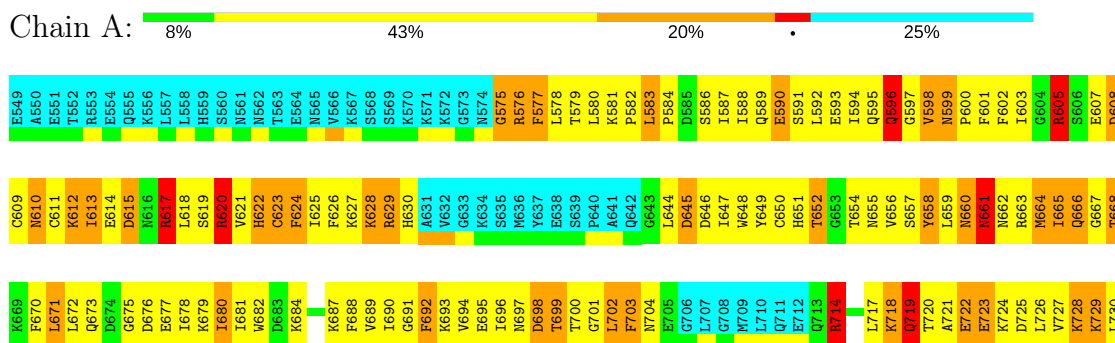
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1



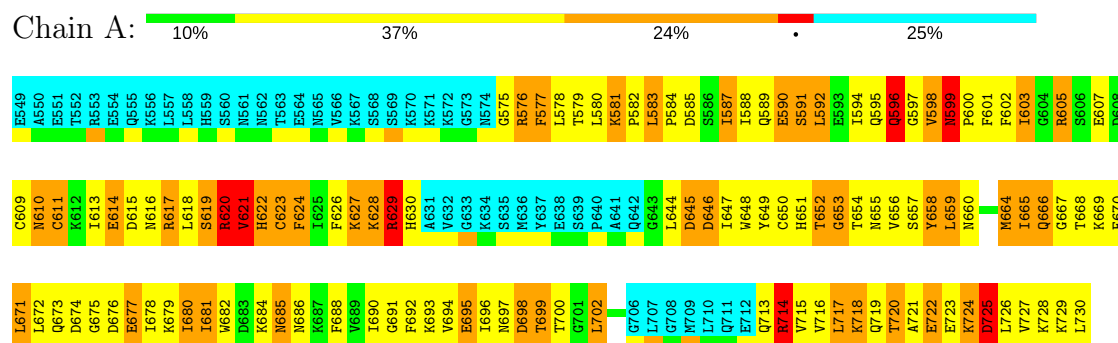
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1



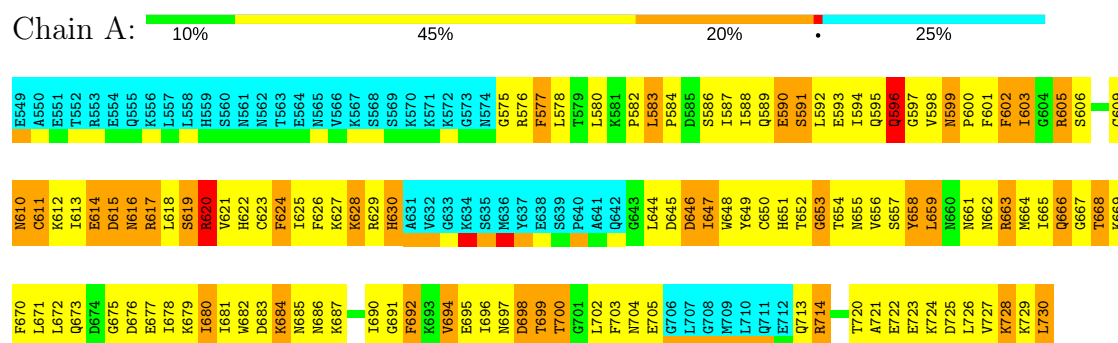
4.2.14 Score per residue for model 14

• Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1



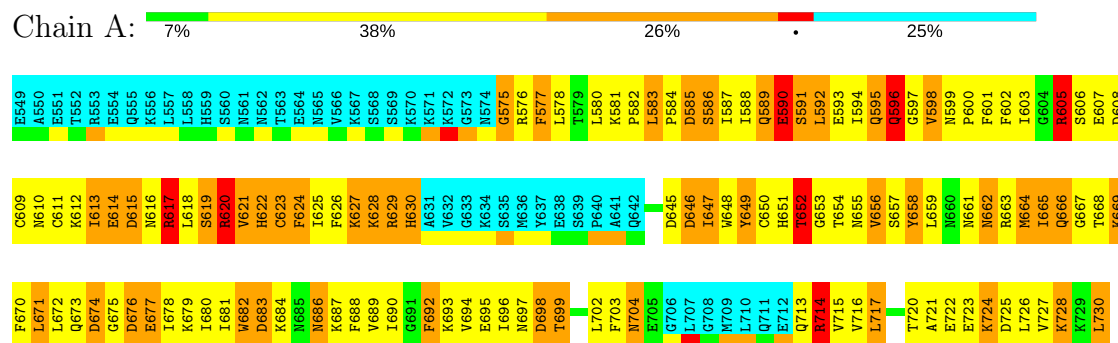
4.2.15 Score per residue for model 15

• Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1



4.2.16 Score per residue for model 16

• Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 32 calculated structures, 16 were deposited, based on the following criterion: *STRUCTURES WITH THE LOWEST ENERGY*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	3.1
XWINNMR	structure solution	2.1
FELIX	structure solution	98

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

The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 5$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the (average) root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.04±0.00	0±0/1145 (0.0±0.0%)	1.22±0.01	0±0/1538 (0.0±0.0%)
All	All	1.04	0/18320 (0.0%)	1.22	4/24608 (0.0%)

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	6.5±0.7
All	All	0	104

There are no bond-length outliers.

All unique angle outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	622	HIS	N-CA-CB	-5.20	101.24	110.60	12	4

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	617	ARG	Sidechain	16
1	A	576	ARG	Sidechain	16
1	A	714	ARG	Sidechain	16
1	A	663	ARG	Sidechain	15
1	A	605	ARG	Sidechain	15
1	A	620	ARG	Sidechain	13
1	A	629	ARG	Sidechain	13

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	1125	1130	1130	226±23
All	All	18000	18080	18080	3610

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 100.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:603:ILE:HG21	1:A:613:ILE:HD12	1.06	1.24	6	1
1:A:696:ILE:HG22	1:A:699:THR:HG22	1.05	1.14	14	14
1:A:652:THR:HG21	1:A:727:VAL:HG11	1.02	1.23	16	1
1:A:578:LEU:HD11	1:A:694:VAL:HG22	1.01	1.32	7	14
1:A:624:PHE:CE1	1:A:727:VAL:HG21	0.97	1.94	11	15
1:A:624:PHE:CE2	1:A:727:VAL:HG11	0.96	1.95	14	15
1:A:624:PHE:CD2	1:A:727:VAL:HG11	0.95	1.94	7	15
1:A:726:LEU:CD1	1:A:727:VAL:HG23	0.95	1.91	5	16
1:A:726:LEU:HD12	1:A:727:VAL:N	0.94	1.77	9	16
1:A:602:PHE:CE1	1:A:727:VAL:HG22	0.94	1.97	15	9
1:A:580:LEU:HD12	1:A:692:PHE:CD1	0.94	1.98	5	3
1:A:618:LEU:HD22	1:A:622:HIS:CD2	0.93	1.99	7	8
1:A:618:LEU:HD23	1:A:622:HIS:CD2	0.93	1.97	16	4
1:A:726:LEU:HD12	1:A:727:VAL:HG23	0.92	1.37	11	16
1:A:603:ILE:HG23	1:A:611:CYS:HB3	0.91	1.42	12	5
1:A:623:CYS:SG	1:A:680:ILE:HD12	0.91	2.06	14	12
1:A:578:LEU:HD22	1:A:594:ILE:HD12	0.90	1.43	15	5
1:A:624:PHE:CG	1:A:727:VAL:HG21	0.90	2.01	16	1
1:A:583:LEU:N	1:A:583:LEU:HD13	0.90	1.82	6	1
1:A:602:PHE:CE2	1:A:727:VAL:HG22	0.88	2.03	5	6
1:A:598:VAL:HG11	1:A:610:ASN:ND2	0.88	1.83	16	6
1:A:624:PHE:CZ	1:A:726:LEU:HD11	0.87	2.04	16	1
1:A:659:LEU:HD23	1:A:670:PHE:CE2	0.87	2.03	2	2
1:A:618:LEU:HA	1:A:622:HIS:ND1	0.87	1.83	2	16
1:A:649:TYR:CE2	1:A:678:ILE:HG21	0.87	2.03	15	4
1:A:587:ILE:CG2	1:A:690:ILE:HD12	0.87	2.00	6	1
1:A:681:ILE:HD13	1:A:682:TRP:N	0.86	1.85	4	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:620:ARG:O	1:A:621:VAL:HG12	0.85	1.72	5	7
1:A:649:TYR:OH	1:A:680:ILE:HD13	0.84	1.73	14	10
1:A:598:VAL:HG11	1:A:610:ASN:OD1	0.84	1.72	7	7
1:A:659:LEU:HD11	1:A:672:LEU:CD2	0.83	2.01	13	9
1:A:598:VAL:HG21	1:A:601:PHE:CD1	0.83	2.08	15	11
1:A:656:VAL:O	1:A:657:SER:O	0.83	1.96	2	2
1:A:647:ILE:HD12	1:A:672:LEU:HB3	0.82	1.49	15	7
1:A:696:ILE:CG2	1:A:699:THR:HG22	0.82	2.01	14	9
1:A:652:THR:HG21	1:A:727:VAL:CG1	0.81	2.03	16	2
1:A:721:ALA:HB3	1:A:724:LYS:HA	0.81	1.53	16	2
1:A:656:VAL:HG23	1:A:658:TYR:OH	0.81	1.77	4	10
1:A:602:PHE:CZ	1:A:727:VAL:HG22	0.80	2.11	9	10
1:A:603:ILE:HG21	1:A:613:ILE:CD1	0.80	2.06	6	1
1:A:605:ARG:HG2	1:A:618:LEU:HD12	0.80	1.54	16	2
1:A:659:LEU:HD13	1:A:678:ILE:HG22	0.79	1.54	16	1
1:A:676:ASP:O	1:A:678:ILE:HG23	0.79	1.78	3	8
1:A:602:PHE:CE2	1:A:730:LEU:HD12	0.79	2.12	8	6
1:A:622:HIS:CE1	1:A:655:ASN:CB	0.78	2.67	10	16
1:A:689:VAL:C	1:A:690:ILE:HD12	0.78	1.99	11	1
1:A:674:ASP:CA	1:A:696:ILE:HD12	0.78	2.09	9	1
1:A:603:ILE:HG22	1:A:611:CYS:HB3	0.78	1.54	14	7
1:A:578:LEU:HD11	1:A:694:VAL:CG2	0.78	2.09	7	9
1:A:624:PHE:CZ	1:A:727:VAL:HG21	0.77	2.13	12	13
1:A:618:LEU:CD1	1:A:681:ILE:HD11	0.77	2.09	6	1
1:A:598:VAL:HG21	1:A:610:ASN:ND2	0.77	1.94	14	1
1:A:623:CYS:SG	1:A:680:ILE:HG23	0.77	2.19	2	11
1:A:656:VAL:HG12	1:A:665:ILE:HA	0.76	1.57	12	11
1:A:658:TYR:CD1	1:A:658:TYR:N	0.76	2.53	2	8
1:A:577:PHE:CZ	1:A:647:ILE:HG21	0.76	2.15	16	8
1:A:621:VAL:HG21	1:A:730:LEU:HB3	0.76	1.57	10	7
1:A:688:PHE:CE1	1:A:690:ILE:HD11	0.76	2.16	6	2
1:A:689:VAL:C	1:A:690:ILE:HD13	0.75	2.01	6	1
1:A:578:LEU:HD11	1:A:694:VAL:HG13	0.74	1.59	5	3
1:A:577:PHE:CE2	1:A:647:ILE:HG21	0.74	2.16	13	12
1:A:602:PHE:CE1	1:A:727:VAL:HG23	0.74	2.17	16	1
1:A:681:ILE:HG22	1:A:690:ILE:CG1	0.74	2.13	3	6
1:A:613:ILE:O	1:A:618:LEU:HD22	0.74	1.83	6	1
1:A:665:ILE:O	1:A:665:ILE:CG1	0.74	2.36	1	1
1:A:702:LEU:HD13	1:A:703:PHE:N	0.73	1.98	3	5
1:A:618:LEU:N	1:A:618:LEU:HD23	0.73	1.97	13	1
1:A:622:HIS:O	1:A:651:HIS:CE1	0.73	2.41	8	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:657:SER:C	1:A:658:TYR:CG	0.73	2.62	7	16
1:A:690:ILE:O	1:A:690:ILE:HG22	0.73	1.82	16	6
1:A:577:PHE:CZ	1:A:647:ILE:HD12	0.73	2.19	2	2
1:A:582:PRO:C	1:A:583:LEU:HD13	0.72	2.04	6	1
1:A:602:PHE:CE1	1:A:730:LEU:HD12	0.72	2.20	13	3
1:A:602:PHE:HE2	1:A:727:VAL:HG22	0.72	1.42	10	2
1:A:620:ARG:O	1:A:621:VAL:HG22	0.72	1.84	12	1
1:A:651:HIS:CD2	1:A:656:VAL:HA	0.72	2.19	3	12
1:A:583:LEU:HD22	1:A:583:LEU:H	0.72	1.43	6	1
1:A:600:PRO:HG3	1:A:726:LEU:HD13	0.72	1.61	7	2
1:A:659:LEU:HD21	1:A:676:ASP:OD2	0.72	1.85	11	2
1:A:624:PHE:CD1	1:A:727:VAL:HG21	0.71	2.20	16	2
1:A:589:GLN:O	1:A:590:GLU:CG	0.71	2.38	2	11
1:A:624:PHE:CG	1:A:727:VAL:HG11	0.71	2.21	11	14
1:A:588:ILE:CG1	1:A:613:ILE:HG23	0.71	2.16	5	3
1:A:615:ASP:CG	1:A:690:ILE:HD11	0.71	2.05	12	5
1:A:624:PHE:CZ	1:A:727:VAL:HG11	0.71	2.20	9	11
1:A:658:TYR:N	1:A:658:TYR:CD1	0.71	2.59	7	5
1:A:618:LEU:HD13	1:A:680:ILE:HG21	0.71	1.61	2	1
1:A:577:PHE:HZ	1:A:647:ILE:HD13	0.70	1.45	9	6
1:A:615:ASP:HB2	1:A:618:LEU:HD22	0.70	1.62	15	2
1:A:622:HIS:CE1	1:A:655:ASN:HB2	0.70	2.19	2	16
1:A:583:LEU:CB	1:A:584:PRO:HD2	0.70	2.17	15	15
1:A:698:ASP:C	1:A:699:THR:HG23	0.70	2.07	5	15
1:A:659:LEU:HD11	1:A:672:LEU:HD23	0.70	1.62	12	7
1:A:615:ASP:OD2	1:A:681:ILE:HG21	0.70	1.87	16	2
1:A:681:ILE:HG22	1:A:690:ILE:HG12	0.70	1.64	3	3
1:A:605:ARG:HD2	1:A:618:LEU:HD12	0.69	1.64	10	1
1:A:719:GLN:O	1:A:720:THR:HG23	0.69	1.87	9	6
1:A:592:LEU:HD12	1:A:611:CYS:SG	0.69	2.27	1	2
1:A:729:LYS:O	1:A:730:LEU:HD23	0.69	1.88	5	3
1:A:578:LEU:CD1	1:A:694:VAL:HG22	0.69	2.15	7	2
1:A:580:LEU:HD11	1:A:678:ILE:HD11	0.69	1.64	2	1
1:A:646:ASP:OD1	1:A:671:LEU:HD11	0.69	1.88	15	1
1:A:690:ILE:HG22	1:A:690:ILE:O	0.69	1.85	9	4
1:A:587:ILE:HG22	1:A:690:ILE:HD12	0.69	1.64	6	1
1:A:622:HIS:CD2	1:A:680:ILE:HG22	0.69	2.23	2	4
1:A:589:GLN:O	1:A:590:GLU:HB2	0.68	1.86	11	4
1:A:618:LEU:CD2	1:A:681:ILE:HD11	0.68	2.18	5	3
1:A:588:ILE:HD11	1:A:613:ILE:HG23	0.68	1.64	6	1
1:A:602:PHE:CZ	1:A:730:LEU:HD23	0.68	2.23	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:617:ARG:HB3	1:A:681:ILE:HG21	0.68	1.65	10	3
1:A:647:ILE:HD12	1:A:672:LEU:CB	0.68	2.18	16	7
1:A:604:GLY:HA2	1:A:618:LEU:HD23	0.68	1.66	6	1
1:A:656:VAL:O	1:A:658:TYR:CD2	0.68	2.46	2	1
1:A:592:LEU:HD23	1:A:611:CYS:SG	0.67	2.29	6	3
1:A:623:CYS:SG	1:A:680:ILE:HD11	0.67	2.29	11	3
1:A:674:ASP:HA	1:A:696:ILE:HD12	0.67	1.66	9	1
1:A:580:LEU:HD11	1:A:678:ILE:HD12	0.67	1.66	5	1
1:A:681:ILE:CG2	1:A:690:ILE:HD13	0.67	2.19	11	1
1:A:681:ILE:HG21	1:A:688:PHE:CE2	0.67	2.24	3	2
1:A:577:PHE:CE1	1:A:702:LEU:HD13	0.67	2.24	4	1
1:A:672:LEU:HD21	1:A:678:ILE:HG21	0.67	1.65	3	1
1:A:649:TYR:CE2	1:A:678:ILE:HD13	0.67	2.25	13	3
1:A:603:ILE:CG2	1:A:613:ILE:HD12	0.67	2.11	6	1
1:A:580:LEU:HD22	1:A:692:PHE:CD1	0.66	2.24	8	8
1:A:617:ARG:CB	1:A:681:ILE:HD13	0.66	2.20	12	1
1:A:723:GLU:HG2	1:A:727:VAL:HG12	0.66	1.64	15	10
1:A:589:GLN:O	1:A:590:GLU:CB	0.66	2.43	6	16
1:A:603:ILE:HD11	1:A:625:ILE:HD12	0.66	1.66	16	2
1:A:602:PHE:CD2	1:A:730:LEU:HD12	0.66	2.25	12	3
1:A:577:PHE:CE2	1:A:578:LEU:HB2	0.66	2.25	2	16
1:A:578:LEU:HD23	1:A:579:THR:N	0.66	2.04	10	9
1:A:644:LEU:N	1:A:644:LEU:HD23	0.66	2.06	3	1
1:A:656:VAL:O	1:A:658:TYR:CZ	0.66	2.48	12	14
1:A:602:PHE:CE1	1:A:727:VAL:CG2	0.66	2.78	16	3
1:A:622:HIS:HE1	1:A:655:ASN:CB	0.66	2.02	4	16
1:A:648:TRP:CH2	1:A:671:LEU:HD13	0.66	2.26	10	7
1:A:621:VAL:HG11	1:A:730:LEU:CD1	0.65	2.21	15	1
1:A:602:PHE:CZ	1:A:730:LEU:HD12	0.65	2.27	9	2
1:A:724:LYS:CB	1:A:726:LEU:HD21	0.65	2.20	16	10
1:A:587:ILE:HG21	1:A:615:ASP:OD1	0.65	1.92	15	4
1:A:656:VAL:HG22	1:A:658:TYR:CE1	0.65	2.27	16	2
1:A:602:PHE:O	1:A:603:ILE:HG23	0.64	1.91	14	5
1:A:681:ILE:HB	1:A:690:ILE:HD13	0.64	1.70	11	2
1:A:658:TYR:CD2	1:A:679:LYS:O	0.64	2.50	16	2
1:A:665:ILE:HG22	1:A:668:THR:HG21	0.64	1.70	3	4
1:A:601:PHE:CD1	1:A:610:ASN:HB3	0.64	2.28	3	15
1:A:618:LEU:HD23	1:A:618:LEU:N	0.64	2.07	14	3
1:A:622:HIS:CE1	1:A:655:ASN:HB3	0.64	2.28	4	14
1:A:624:PHE:O	1:A:650:CYS:N	0.64	2.30	6	16
1:A:656:VAL:HG13	1:A:665:ILE:HA	0.64	1.69	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:721:ALA:O	1:A:725:ASP:N	0.63	2.31	16	16
1:A:656:VAL:HG22	1:A:658:TYR:CE2	0.63	2.29	14	2
1:A:577:PHE:CB	1:A:596:GLN:HA	0.63	2.23	13	16
1:A:592:LEU:HD11	1:A:613:ILE:HD11	0.63	1.69	10	1
1:A:682:TRP:CD1	1:A:689:VAL:HG12	0.63	2.29	6	6
1:A:658:TYR:HB3	1:A:663:ARG:HA	0.63	1.70	7	2
1:A:723:GLU:O	1:A:726:LEU:HG	0.63	1.94	16	16
1:A:613:ILE:CG2	1:A:690:ILE:HD13	0.63	2.23	4	1
1:A:588:ILE:HG13	1:A:613:ILE:HG23	0.63	1.69	5	3
1:A:624:PHE:CD2	1:A:650:CYS:HB2	0.63	2.29	3	13
1:A:702:LEU:HD23	1:A:703:PHE:N	0.63	2.08	9	1
1:A:603:ILE:HD12	1:A:623:CYS:SG	0.63	2.33	15	9
1:A:619:SER:O	1:A:620:ARG:CB	0.63	2.46	16	12
1:A:578:LEU:HD22	1:A:580:LEU:HD22	0.62	1.71	14	1
1:A:622:HIS:HD2	1:A:680:ILE:HG22	0.62	1.53	9	4
1:A:578:LEU:C	1:A:578:LEU:HD23	0.62	2.15	9	9
1:A:681:ILE:HG13	1:A:690:ILE:HD12	0.62	1.71	12	1
1:A:602:PHE:CD1	1:A:730:LEU:HD12	0.62	2.29	14	3
1:A:681:ILE:CB	1:A:690:ILE:HD13	0.62	2.24	11	2
1:A:656:VAL:O	1:A:658:TYR:CE2	0.62	2.52	2	2
1:A:621:VAL:HG11	1:A:730:LEU:HB3	0.62	1.70	1	7
1:A:630:HIS:ND1	1:A:703:PHE:CE2	0.62	2.68	2	5
1:A:690:ILE:HG22	1:A:692:PHE:CD2	0.62	2.29	14	5
1:A:578:LEU:HD22	1:A:580:LEU:CD2	0.62	2.24	14	1
1:A:680:ILE:HB	1:A:690:ILE:HG21	0.62	1.72	15	2
1:A:665:ILE:HG22	1:A:668:THR:CG2	0.62	2.25	3	2
1:A:618:LEU:CD2	1:A:622:HIS:CD2	0.61	2.82	16	6
1:A:602:PHE:CD1	1:A:727:VAL:HG22	0.61	2.30	6	1
1:A:605:ARG:HB2	1:A:618:LEU:HB2	0.61	1.72	5	8
1:A:598:VAL:HG11	1:A:610:ASN:CG	0.61	2.15	3	4
1:A:681:ILE:HD13	1:A:682:TRP:H	0.61	1.55	2	3
1:A:664:MET:O	1:A:665:ILE:HG23	0.61	1.95	16	2
1:A:722:GLU:O	1:A:725:ASP:N	0.61	2.33	16	16
1:A:659:LEU:HD23	1:A:670:PHE:CD2	0.61	2.30	2	2
1:A:624:PHE:HB3	1:A:650:CYS:O	0.61	1.95	4	16
1:A:677:GLU:HA	1:A:692:PHE:O	0.61	1.95	6	16
1:A:658:TYR:CD1	1:A:679:LYS:O	0.61	2.53	14	13
1:A:582:PRO:CG	1:A:588:ILE:HG22	0.61	2.25	10	13
1:A:624:PHE:CD1	1:A:624:PHE:C	0.61	2.74	7	12
1:A:621:VAL:O	1:A:621:VAL:HG13	0.61	1.96	3	4
1:A:659:LEU:HD21	1:A:676:ASP:HB3	0.61	1.72	7	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:575:GLY:O	1:A:595:GLN:NE2	0.60	2.34	8	3
1:A:578:LEU:CD2	1:A:580:LEU:HD22	0.60	2.27	5	3
1:A:670:PHE:CZ	1:A:714:ARG:HD2	0.60	2.32	2	13
1:A:665:ILE:HG12	1:A:668:THR:HG21	0.60	1.74	9	2
1:A:615:ASP:HB2	1:A:618:LEU:HD11	0.60	1.73	5	4
1:A:649:TYR:HE2	1:A:678:ILE:HD13	0.60	1.54	6	2
1:A:587:ILE:HG22	1:A:690:ILE:HD13	0.60	1.72	15	2
1:A:649:TYR:HD2	1:A:672:LEU:HD11	0.60	1.56	6	2
1:A:578:LEU:HD21	1:A:694:VAL:HA	0.60	1.72	14	2
1:A:578:LEU:CD1	1:A:694:VAL:HG13	0.60	2.26	12	3
1:A:583:LEU:HB3	1:A:584:PRO:HD2	0.60	1.71	14	16
1:A:602:PHE:CE1	1:A:730:LEU:HD23	0.60	2.32	15	1
1:A:618:LEU:HD21	1:A:681:ILE:HD11	0.60	1.72	5	1
1:A:618:LEU:HD21	1:A:680:ILE:HG21	0.60	1.73	15	2
1:A:578:LEU:HD21	1:A:580:LEU:HG	0.60	1.74	16	1
1:A:578:LEU:HD11	1:A:694:VAL:CG1	0.60	2.26	12	3
1:A:618:LEU:HD22	1:A:622:HIS:CG	0.60	2.32	1	4
1:A:618:LEU:HG	1:A:681:ILE:HD11	0.60	1.72	10	2
1:A:690:ILE:HD12	1:A:690:ILE:N	0.60	2.12	10	1
1:A:613:ILE:O	1:A:613:ILE:HG22	0.60	1.97	5	2
1:A:575:GLY:O	1:A:596:GLN:N	0.59	2.35	11	11
1:A:582:PRO:HG3	1:A:588:ILE:HG22	0.59	1.73	10	6
1:A:690:ILE:N	1:A:690:ILE:HD12	0.59	2.12	11	1
1:A:619:SER:O	1:A:620:ARG:HB2	0.59	1.97	16	10
1:A:651:HIS:CE1	1:A:655:ASN:O	0.59	2.55	3	1
1:A:592:LEU:HD23	1:A:592:LEU:N	0.59	2.13	1	1
1:A:580:LEU:HD21	1:A:678:ILE:HD11	0.59	1.73	16	4
1:A:615:ASP:OD2	1:A:690:ILE:CG1	0.59	2.51	9	4
1:A:681:ILE:HG22	1:A:690:ILE:CD1	0.59	2.27	14	2
1:A:648:TRP:CZ2	1:A:671:LEU:HD13	0.59	2.31	10	5
1:A:582:PRO:CB	1:A:588:ILE:HG22	0.59	2.27	12	10
1:A:615:ASP:CB	1:A:618:LEU:HD11	0.59	2.27	16	1
1:A:647:ILE:O	1:A:671:LEU:HD12	0.59	1.97	3	3
1:A:618:LEU:HB3	1:A:622:HIS:HB2	0.59	1.75	14	3
1:A:673:GLN:O	1:A:694:VAL:HG11	0.59	1.98	8	7
1:A:659:LEU:HD23	1:A:660:ASN:H	0.59	1.58	4	1
1:A:723:GLU:CB	1:A:728:LYS:N	0.59	2.66	12	10
1:A:615:ASP:OD2	1:A:690:ILE:HD11	0.58	1.98	4	3
1:A:618:LEU:N	1:A:618:LEU:CD2	0.58	2.66	13	2
1:A:615:ASP:OD1	1:A:690:ILE:HD11	0.58	1.98	11	1
1:A:600:PRO:HB2	1:A:602:PHE:CE1	0.58	2.33	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:588:ILE:CG2	1:A:589:GLN:N	0.58	2.66	14	11
1:A:617:ARG:HB2	1:A:681:ILE:HD13	0.58	1.73	5	2
1:A:621:VAL:O	1:A:621:VAL:CG1	0.58	2.51	11	3
1:A:577:PHE:CE2	1:A:578:LEU:CB	0.58	2.87	2	1
1:A:659:LEU:HD11	1:A:672:LEU:HA	0.58	1.74	3	3
1:A:578:LEU:HD23	1:A:578:LEU:C	0.58	2.19	7	5
1:A:621:VAL:HG13	1:A:621:VAL:O	0.58	1.99	11	3
1:A:674:ASP:HB2	1:A:696:ILE:HD12	0.58	1.75	14	1
1:A:594:ILE:HG12	1:A:601:PHE:CE2	0.58	2.33	10	14
1:A:617:ARG:CG	1:A:688:PHE:CE2	0.58	2.87	14	4
1:A:580:LEU:HD21	1:A:678:ILE:HD12	0.58	1.74	13	1
1:A:583:LEU:CD1	1:A:583:LEU:N	0.58	2.54	6	1
1:A:583:LEU:CB	1:A:584:PRO:CD	0.58	2.82	15	15
1:A:651:HIS:O	1:A:652:THR:HG23	0.58	1.99	16	3
1:A:601:PHE:CZ	1:A:611:CYS:HB2	0.58	2.34	9	3
1:A:577:PHE:O	1:A:696:ILE:HG23	0.58	1.99	13	4
1:A:603:ILE:HG22	1:A:611:CYS:CB	0.58	2.28	14	1
1:A:598:VAL:HG12	1:A:599:ASN:N	0.58	2.13	4	1
1:A:618:LEU:HA	1:A:622:HIS:CG	0.58	2.33	16	12
1:A:613:ILE:HG22	1:A:613:ILE:O	0.58	1.98	10	2
1:A:649:TYR:O	1:A:664:MET:HE3	0.57	1.99	10	5
1:A:588:ILE:C	1:A:589:GLN:CG	0.57	2.72	9	1
1:A:613:ILE:O	1:A:614:GLU:C	0.57	2.42	8	11
1:A:625:ILE:HD11	1:A:649:TYR:CE2	0.57	2.34	7	3
1:A:657:SER:C	1:A:658:TYR:CD1	0.57	2.78	3	4
1:A:582:PRO:HG2	1:A:590:GLU:N	0.57	2.15	10	16
1:A:649:TYR:CE2	1:A:678:ILE:HG23	0.57	2.34	5	1
1:A:582:PRO:HB3	1:A:692:PHE:CE1	0.57	2.35	2	6
1:A:656:VAL:HG21	1:A:664:MET:O	0.57	1.99	16	2
1:A:688:PHE:CD2	1:A:688:PHE:O	0.57	2.57	14	3
1:A:624:PHE:N	1:A:650:CYS:O	0.57	2.37	2	16
1:A:669:LYS:CB	1:A:720:THR:HG22	0.57	2.30	16	1
1:A:620:ARG:O	1:A:621:VAL:CG2	0.57	2.51	12	1
1:A:664:MET:SD	1:A:716:VAL:HG22	0.57	2.40	9	1
1:A:681:ILE:HB	1:A:690:ILE:HD12	0.57	1.77	13	1
1:A:595:GLN:O	1:A:596:GLN:C	0.57	2.43	8	15
1:A:702:LEU:HD13	1:A:703:PHE:H	0.57	1.60	3	1
1:A:601:PHE:CE2	1:A:611:CYS:HB2	0.57	2.35	4	12
1:A:630:HIS:CE1	1:A:703:PHE:CZ	0.57	2.92	3	3
1:A:577:PHE:HB3	1:A:596:GLN:CA	0.57	2.30	4	14
1:A:589:GLN:O	1:A:590:GLU:HB3	0.57	2.00	4	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:578:LEU:HD21	1:A:580:LEU:HD22	0.57	1.77	2	1
1:A:587:ILE:HD12	1:A:689:VAL:O	0.57	2.00	12	1
1:A:656:VAL:HG21	1:A:663:ARG:NH2	0.57	2.14	7	1
1:A:649:TYR:O	1:A:670:PHE:N	0.56	2.38	13	15
1:A:600:PRO:HG2	1:A:602:PHE:CE2	0.56	2.34	14	1
1:A:665:ILE:HG13	1:A:665:ILE:O	0.56	1.97	1	1
1:A:621:VAL:HG11	1:A:730:LEU:HD12	0.56	1.75	15	1
1:A:615:ASP:CB	1:A:618:LEU:HD22	0.56	2.31	4	2
1:A:657:SER:O	1:A:658:TYR:CD2	0.56	2.58	9	11
1:A:615:ASP:O	1:A:617:ARG:N	0.56	2.38	11	5
1:A:598:VAL:HG21	1:A:610:ASN:HD21	0.56	1.60	14	1
1:A:588:ILE:HG22	1:A:589:GLN:N	0.56	2.15	6	12
1:A:670:PHE:CD1	1:A:716:VAL:HA	0.56	2.35	16	11
1:A:592:LEU:CD2	1:A:592:LEU:N	0.56	2.68	1	1
1:A:651:HIS:CG	1:A:656:VAL:O	0.56	2.59	10	1
1:A:723:GLU:HB3	1:A:727:VAL:HB	0.56	1.77	8	16
1:A:690:ILE:CG2	1:A:690:ILE:O	0.56	2.54	16	4
1:A:613:ILE:HD12	1:A:692:PHE:CE2	0.56	2.35	7	2
1:A:659:LEU:HD22	1:A:670:PHE:CE2	0.56	2.36	12	1
1:A:726:LEU:HD12	1:A:727:VAL:CG2	0.56	2.31	8	15
1:A:613:ILE:O	1:A:615:ASP:N	0.56	2.39	14	10
1:A:656:VAL:HG13	1:A:665:ILE:CA	0.56	2.30	2	1
1:A:603:ILE:CG2	1:A:611:CYS:HB3	0.56	2.31	11	8
1:A:677:GLU:CB	1:A:692:PHE:O	0.56	2.54	5	7
1:A:575:GLY:O	1:A:595:GLN:HA	0.55	2.01	16	7
1:A:651:HIS:ND1	1:A:657:SER:CB	0.55	2.70	5	11
1:A:595:GLN:O	1:A:597:GLY:N	0.55	2.39	8	10
1:A:624:PHE:O	1:A:650:CYS:HB3	0.55	2.01	6	1
1:A:649:TYR:OH	1:A:680:ILE:CG1	0.55	2.54	16	1
1:A:628:LYS:O	1:A:646:ASP:N	0.55	2.39	14	12
1:A:620:ARG:O	1:A:621:VAL:CG1	0.55	2.52	5	4
1:A:649:TYR:OH	1:A:657:SER:HB2	0.55	2.01	5	3
1:A:594:ILE:HG23	1:A:598:VAL:HG23	0.55	1.77	15	5
1:A:630:HIS:CE1	1:A:703:PHE:CE2	0.55	2.94	3	5
1:A:648:TRP:CZ3	1:A:671:LEU:HG	0.55	2.37	1	8
1:A:624:PHE:C	1:A:624:PHE:CD1	0.55	2.80	11	4
1:A:598:VAL:CG1	1:A:599:ASN:N	0.55	2.69	4	2
1:A:649:TYR:OH	1:A:680:ILE:CD1	0.55	2.55	12	3
1:A:594:ILE:HG12	1:A:601:PHE:CD2	0.55	2.37	15	9
1:A:615:ASP:O	1:A:688:PHE:CZ	0.55	2.60	14	1
1:A:681:ILE:CG2	1:A:690:ILE:HD12	0.55	2.32	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:615:ASP:CB	1:A:690:ILE:HD11	0.55	2.32	4	3
1:A:698:ASP:C	1:A:699:THR:CG2	0.55	2.75	5	10
1:A:664:MET:HG2	1:A:716:VAL:CG2	0.55	2.31	16	2
1:A:595:GLN:O	1:A:598:VAL:N	0.55	2.39	4	2
1:A:659:LEU:HD11	1:A:672:LEU:HG	0.55	1.79	4	2
1:A:626:PHE:N	1:A:648:TRP:O	0.55	2.40	15	11
1:A:656:VAL:O	1:A:657:SER:C	0.55	2.45	2	1
1:A:626:PHE:CZ	1:A:724:LYS:HD2	0.55	2.37	12	5
1:A:599:ASN:ND2	1:A:626:PHE:CE1	0.55	2.75	4	4
1:A:618:LEU:HG	1:A:622:HIS:CG	0.55	2.37	15	4
1:A:659:LEU:HD11	1:A:672:LEU:CG	0.55	2.31	4	3
1:A:622:HIS:NE2	1:A:655:ASN:O	0.55	2.39	3	1
1:A:663:ARG:O	1:A:716:VAL:HG21	0.55	2.02	9	1
1:A:603:ILE:O	1:A:623:CYS:SG	0.54	2.65	7	7
1:A:577:PHE:HB3	1:A:596:GLN:HA	0.54	1.79	9	15
1:A:624:PHE:CE1	1:A:626:PHE:HB2	0.54	2.37	6	7
1:A:662:ASN:CB	1:A:670:PHE:CE2	0.54	2.90	12	10
1:A:681:ILE:HG22	1:A:690:ILE:HG13	0.54	1.79	9	5
1:A:649:TYR:N	1:A:670:PHE:O	0.54	2.40	3	15
1:A:586:SER:O	1:A:589:GLN:NE2	0.54	2.40	8	8
1:A:617:ARG:HG3	1:A:688:PHE:CE2	0.54	2.37	7	2
1:A:724:LYS:HB2	1:A:726:LEU:HD21	0.54	1.77	16	9
1:A:651:HIS:CG	1:A:657:SER:HG	0.54	2.20	10	3
1:A:582:PRO:CD	1:A:590:GLU:O	0.54	2.56	12	8
1:A:651:HIS:ND1	1:A:657:SER:OG	0.54	2.39	13	14
1:A:624:PHE:CB	1:A:650:CYS:O	0.54	2.56	10	15
1:A:587:ILE:HG22	1:A:690:ILE:HG13	0.54	1.78	11	1
1:A:580:LEU:HB3	1:A:592:LEU:HD12	0.54	1.80	2	2
1:A:583:LEU:O	1:A:589:GLN:HG3	0.54	2.03	8	2
1:A:665:ILE:O	1:A:666:GLN:C	0.54	2.45	3	1
1:A:681:ILE:CB	1:A:690:ILE:HD12	0.54	2.32	13	1
1:A:602:PHE:HE2	1:A:727:VAL:HG13	0.54	1.61	9	3
1:A:598:VAL:HG21	1:A:601:PHE:CE1	0.54	2.37	11	1
1:A:648:TRP:CD2	1:A:669:LYS:HE3	0.54	2.38	9	6
1:A:657:SER:C	1:A:658:TYR:CD2	0.54	2.81	9	8
1:A:617:ARG:HG2	1:A:688:PHE:CE2	0.54	2.36	2	1
1:A:618:LEU:CG	1:A:681:ILE:HD11	0.54	2.33	10	2
1:A:650:CYS:CA	1:A:668:THR:O	0.54	2.56	3	9
1:A:587:ILE:CD1	1:A:688:PHE:CE1	0.54	2.90	2	1
1:A:621:VAL:HG21	1:A:730:LEU:CB	0.54	2.31	10	2
1:A:587:ILE:HG21	1:A:615:ASP:OD2	0.54	2.03	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:587:ILE:HB	1:A:690:ILE:CD1	0.54	2.33	9	1
1:A:630:HIS:CD2	1:A:703:PHE:CE2	0.54	2.96	8	2
1:A:724:LYS:CB	1:A:726:LEU:CD2	0.53	2.86	16	7
1:A:648:TRP:CH2	1:A:671:LEU:CD1	0.53	2.91	16	1
1:A:624:PHE:CD2	1:A:727:VAL:CG1	0.53	2.89	4	7
1:A:648:TRP:CZ3	1:A:671:LEU:HD13	0.53	2.38	5	1
1:A:592:LEU:HD13	1:A:611:CYS:SG	0.53	2.42	10	2
1:A:681:ILE:HG21	1:A:688:PHE:CZ	0.53	2.37	3	1
1:A:598:VAL:HG21	1:A:601:PHE:HD1	0.53	1.61	2	8
1:A:690:ILE:HD13	1:A:690:ILE:N	0.53	2.17	6	1
1:A:665:ILE:CG1	1:A:668:THR:HG21	0.53	2.34	14	2
1:A:723:GLU:HB2	1:A:728:LYS:N	0.53	2.18	8	6
1:A:723:GLU:HB3	1:A:728:LYS:N	0.53	2.19	12	10
1:A:613:ILE:O	1:A:618:LEU:CD1	0.53	2.57	12	4
1:A:622:HIS:CD2	1:A:680:ILE:O	0.53	2.62	2	3
1:A:651:HIS:CD2	1:A:666:GLN:HA	0.53	2.38	3	3
1:A:721:ALA:HB1	1:A:724:LYS:HA	0.53	1.80	10	12
1:A:680:ILE:CG1	1:A:690:ILE:HG21	0.53	2.33	15	1
1:A:587:ILE:HG22	1:A:690:ILE:CD1	0.53	2.33	15	2
1:A:682:TRP:CG	1:A:683:ASP:N	0.53	2.75	16	1
1:A:646:ASP:OD1	1:A:703:PHE:CD2	0.53	2.62	4	2
1:A:677:GLU:CG	1:A:692:PHE:O	0.53	2.56	6	3
1:A:615:ASP:HB2	1:A:618:LEU:CD1	0.53	2.33	6	2
1:A:682:TRP:O	1:A:689:VAL:HG12	0.53	2.04	16	1
1:A:663:ARG:O	1:A:716:VAL:HG11	0.53	2.04	13	1
1:A:681:ILE:HD12	1:A:690:ILE:HD11	0.53	1.79	5	1
1:A:694:VAL:O	1:A:694:VAL:HG12	0.53	2.03	6	6
1:A:659:LEU:HD22	1:A:714:ARG:NH1	0.53	2.18	15	1
1:A:623:CYS:HB2	1:A:649:TYR:CE1	0.53	2.39	3	1
1:A:630:HIS:CG	1:A:703:PHE:CE2	0.53	2.97	7	1
1:A:587:ILE:HD13	1:A:688:PHE:CZ	0.53	2.38	2	1
1:A:603:ILE:HD12	1:A:680:ILE:CD1	0.53	2.33	14	2
1:A:617:ARG:HB3	1:A:681:ILE:HD13	0.53	1.81	12	1
1:A:594:ILE:HG12	1:A:601:PHE:CZ	0.53	2.39	14	8
1:A:647:ILE:N	1:A:647:ILE:HD13	0.53	2.19	5	1
1:A:624:PHE:CZ	1:A:626:PHE:HB2	0.52	2.40	12	12
1:A:618:LEU:HD23	1:A:622:HIS:CG	0.52	2.38	10	3
1:A:622:HIS:CD2	1:A:651:HIS:HE1	0.52	2.21	1	4
1:A:673:GLN:O	1:A:676:ASP:CB	0.52	2.57	12	1
1:A:647:ILE:O	1:A:671:LEU:HD23	0.52	2.04	4	2
1:A:645:ASP:O	1:A:702:LEU:HG	0.52	2.04	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:582:PRO:CG	1:A:590:GLU:O	0.52	2.58	6	5
1:A:664:MET:O	1:A:665:ILE:CG2	0.52	2.57	16	2
1:A:679:LYS:O	1:A:680:ILE:C	0.52	2.46	2	14
1:A:577:PHE:CZ	1:A:647:ILE:HD13	0.52	2.36	16	2
1:A:662:ASN:CG	1:A:670:PHE:CZ	0.52	2.83	9	9
1:A:626:PHE:CD2	1:A:724:LYS:CD	0.52	2.92	16	1
1:A:658:TYR:CE1	1:A:679:LYS:O	0.52	2.62	2	10
1:A:602:PHE:CD1	1:A:602:PHE:N	0.52	2.77	11	2
1:A:676:ASP:O	1:A:678:ILE:N	0.52	2.42	7	3
1:A:649:TYR:HH	1:A:680:ILE:HD13	0.52	1.64	13	1
1:A:617:ARG:CG	1:A:688:PHE:CE1	0.52	2.92	4	1
1:A:581:LYS:HB3	1:A:693:LYS:HB3	0.52	1.81	14	2
1:A:644:LEU:HD23	1:A:644:LEU:N	0.52	2.20	9	1
1:A:675:GLY:N	1:A:694:VAL:O	0.52	2.43	12	12
1:A:580:LEU:O	1:A:591:SER:HA	0.52	2.04	14	7
1:A:669:LYS:O	1:A:717:LEU:N	0.52	2.42	13	7
1:A:588:ILE:CD1	1:A:613:ILE:HG23	0.52	2.35	6	2
1:A:651:HIS:ND1	1:A:657:SER:N	0.52	2.57	11	8
1:A:599:ASN:CB	1:A:627:LYS:HB3	0.52	2.35	6	5
1:A:626:PHE:CE2	1:A:628:LYS:HB2	0.52	2.39	7	7
1:A:602:PHE:CE2	1:A:730:LEU:CD1	0.52	2.93	11	2
1:A:659:LEU:CD1	1:A:671:LEU:O	0.52	2.58	3	1
1:A:630:HIS:CG	1:A:703:PHE:CD2	0.52	2.97	7	1
1:A:669:LYS:N	1:A:717:LEU:O	0.52	2.37	9	6
1:A:586:SER:CB	1:A:691:GLY:N	0.52	2.72	5	6
1:A:670:PHE:CE1	1:A:715:VAL:C	0.52	2.83	14	6
1:A:602:PHE:HB2	1:A:609:CYS:HA	0.52	1.82	15	12
1:A:618:LEU:HG	1:A:622:HIS:CD2	0.52	2.40	6	4
1:A:657:SER:O	1:A:658:TYR:CD1	0.52	2.62	16	2
1:A:659:LEU:HD22	1:A:670:PHE:CD2	0.52	2.40	12	1
1:A:648:TRP:HZ3	1:A:717:LEU:HD13	0.52	1.64	9	1
1:A:724:LYS:HB3	1:A:726:LEU:CD2	0.51	2.35	14	4
1:A:621:VAL:HG11	1:A:730:LEU:CG	0.51	2.35	15	1
1:A:600:PRO:CB	1:A:602:PHE:CE1	0.51	2.93	16	1
1:A:622:HIS:CD2	1:A:680:ILE:HG23	0.51	2.40	3	2
1:A:666:GLN:CG	1:A:667:GLY:N	0.51	2.74	15	11
1:A:575:GLY:O	1:A:595:GLN:HG3	0.51	2.05	6	3
1:A:659:LEU:O	1:A:660:ASN:C	0.51	2.48	6	3
1:A:703:PHE:CD2	1:A:704:ASN:HB3	0.51	2.40	16	1
1:A:724:LYS:HB2	1:A:726:LEU:CD2	0.51	2.35	16	9
1:A:724:LYS:HB2	1:A:726:LEU:CG	0.51	2.34	10	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:648:TRP:HA	1:A:670:PHE:O	0.51	2.05	3	4
1:A:587:ILE:HD13	1:A:615:ASP:OD1	0.51	2.06	14	1
1:A:702:LEU:O	1:A:702:LEU:CG	0.51	2.59	4	1
1:A:695:GLU:O	1:A:697:ASN:ND2	0.51	2.43	5	5
1:A:678:ILE:HG13	1:A:692:PHE:CB	0.51	2.34	6	1
1:A:599:ASN:ND2	1:A:627:LYS:O	0.51	2.44	7	6
1:A:615:ASP:OD1	1:A:688:PHE:CE1	0.51	2.63	7	5
1:A:702:LEU:HD13	1:A:702:LEU:C	0.51	2.25	15	4
1:A:669:LYS:HB3	1:A:720:THR:HG22	0.51	1.83	16	1
1:A:582:PRO:HG2	1:A:590:GLU:H	0.51	1.65	10	5
1:A:617:ARG:CB	1:A:681:ILE:HG21	0.51	2.33	10	3
1:A:680:ILE:CB	1:A:690:ILE:HG21	0.51	2.35	15	1
1:A:717:LEU:HD12	1:A:717:LEU:N	0.51	2.20	12	1
1:A:656:VAL:HG12	1:A:656:VAL:O	0.51	2.05	2	1
1:A:690:ILE:O	1:A:690:ILE:CG2	0.51	2.58	9	3
1:A:649:TYR:CD2	1:A:672:LEU:HD11	0.51	2.39	6	2
1:A:702:LEU:C	1:A:702:LEU:HD13	0.51	2.27	2	2
1:A:626:PHE:CZ	1:A:724:LYS:CD	0.51	2.94	7	4
1:A:587:ILE:HG21	1:A:615:ASP:CG	0.51	2.26	14	2
1:A:703:PHE:O	1:A:704:ASN:ND2	0.51	2.43	3	2
1:A:678:ILE:O	1:A:679:LYS:CG	0.51	2.58	14	1
1:A:577:PHE:HE2	1:A:647:ILE:HG21	0.51	1.65	10	5
1:A:615:ASP:O	1:A:615:ASP:CG	0.51	2.48	11	1
1:A:681:ILE:HD11	1:A:683:ASP:OD2	0.51	2.06	2	1
1:A:697:ASN:N	1:A:697:ASN:ND2	0.51	2.58	12	3
1:A:602:PHE:N	1:A:602:PHE:CD1	0.51	2.77	7	1
1:A:681:ILE:HG22	1:A:690:ILE:HD12	0.51	1.83	4	3
1:A:724:LYS:HB3	1:A:726:LEU:HD21	0.51	1.82	14	8
1:A:623:CYS:SG	1:A:680:ILE:CG1	0.51	2.99	3	3
1:A:618:LEU:CD2	1:A:622:HIS:CG	0.51	2.94	1	1
1:A:600:PRO:CG	1:A:602:PHE:CE1	0.51	2.93	16	1
1:A:679:LYS:O	1:A:681:ILE:N	0.50	2.44	10	6
1:A:670:PHE:CD1	1:A:671:LEU:N	0.50	2.79	11	2
1:A:702:LEU:HD13	1:A:703:PHE:O	0.50	2.05	15	2
1:A:580:LEU:O	1:A:592:LEU:N	0.50	2.43	16	8
1:A:618:LEU:CD1	1:A:681:ILE:HG13	0.50	2.36	15	1
1:A:656:VAL:HB	1:A:665:ILE:HA	0.50	1.83	3	1
1:A:587:ILE:CG2	1:A:688:PHE:CE1	0.50	2.95	3	1
1:A:654:THR:HA	1:A:666:GLN:NE2	0.50	2.22	13	13
1:A:600:PRO:HG2	1:A:602:PHE:CE1	0.50	2.41	7	4
1:A:583:LEU:HD11	1:A:677:GLU:OE2	0.50	2.05	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:651:HIS:O	1:A:667:GLY:N	0.50	2.45	6	4
1:A:602:PHE:C	1:A:603:ILE:CG1	0.50	2.80	3	12
1:A:613:ILE:HG22	1:A:690:ILE:HD13	0.50	1.83	4	1
1:A:615:ASP:HB3	1:A:618:LEU:HD13	0.50	1.82	9	2
1:A:600:PRO:HG2	1:A:602:PHE:CZ	0.50	2.42	15	13
1:A:723:GLU:HB3	1:A:727:VAL:CB	0.50	2.37	15	12
1:A:622:HIS:O	1:A:651:HIS:NE2	0.50	2.44	8	3
1:A:615:ASP:CB	1:A:618:LEU:HG	0.50	2.37	13	2
1:A:617:ARG:CG	1:A:688:PHE:CD1	0.50	2.94	10	1
1:A:617:ARG:HB2	1:A:688:PHE:CE2	0.50	2.41	16	1
1:A:650:CYS:HA	1:A:668:THR:O	0.50	2.06	4	6
1:A:623:CYS:HA	1:A:651:HIS:HA	0.50	1.84	11	9
1:A:615:ASP:O	1:A:616:ASN:C	0.50	2.50	15	4
1:A:605:ARG:CB	1:A:618:LEU:HB2	0.50	2.37	12	3
1:A:681:ILE:CG2	1:A:688:PHE:CE1	0.50	2.95	2	1
1:A:656:VAL:HG22	1:A:658:TYR:CD1	0.50	2.41	16	1
1:A:659:LEU:CD2	1:A:670:PHE:CE2	0.50	2.95	12	1
1:A:647:ILE:CD1	1:A:672:LEU:HB3	0.50	2.37	6	6
1:A:618:LEU:CD1	1:A:618:LEU:N	0.50	2.75	4	2
1:A:615:ASP:OD2	1:A:688:PHE:CZ	0.50	2.64	4	4
1:A:622:HIS:HE1	1:A:655:ASN:HB2	0.50	1.67	3	1
1:A:586:SER:HB2	1:A:691:GLY:O	0.50	2.07	13	2
1:A:613:ILE:CG2	1:A:690:ILE:HG21	0.50	2.37	14	1
1:A:626:PHE:CG	1:A:627:LYS:N	0.49	2.79	2	15
1:A:622:HIS:CD2	1:A:681:ILE:HG12	0.49	2.41	6	1
1:A:703:PHE:O	1:A:704:ASN:HB3	0.49	2.08	6	6
1:A:655:ASN:O	1:A:666:GLN:HB2	0.49	2.07	11	6
1:A:623:CYS:SG	1:A:680:ILE:CD1	0.49	3.00	15	4
1:A:648:TRP:CH2	1:A:671:LEU:HG	0.49	2.42	7	6
1:A:624:PHE:HB3	1:A:652:THR:OG1	0.49	2.07	3	5
1:A:606:SER:CB	1:A:620:ARG:CG	0.49	2.89	9	1
1:A:617:ARG:HG2	1:A:688:PHE:CZ	0.49	2.42	14	1
1:A:702:LEU:O	1:A:703:PHE:O	0.49	2.30	4	1
1:A:651:HIS:CG	1:A:656:VAL:HA	0.49	2.42	16	3
1:A:618:LEU:HD22	1:A:680:ILE:HG22	0.49	1.83	2	1
1:A:686:ASN:O	1:A:687:LYS:C	0.49	2.50	16	1
1:A:656:VAL:HG22	1:A:658:TYR:CD2	0.49	2.41	14	1
1:A:678:ILE:N	1:A:692:PHE:O	0.49	2.45	7	1
1:A:626:PHE:O	1:A:648:TRP:N	0.49	2.44	6	1
1:A:589:GLN:O	1:A:590:GLU:HG3	0.49	2.06	14	3
1:A:662:ASN:OD1	1:A:716:VAL:N	0.49	2.45	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:666:GLN:O	1:A:667:GLY:C	0.49	2.50	16	12
1:A:670:PHE:CD2	1:A:716:VAL:HG22	0.49	2.43	11	1
1:A:589:GLN:O	1:A:590:GLU:HG2	0.49	2.06	8	2
1:A:586:SER:OG	1:A:588:ILE:O	0.49	2.31	3	1
1:A:680:ILE:HG22	1:A:690:ILE:HG13	0.49	1.85	3	1
1:A:613:ILE:CG2	1:A:690:ILE:HD12	0.49	2.37	3	1
1:A:646:ASP:OD1	1:A:703:PHE:CD1	0.49	2.66	11	2
1:A:649:TYR:CZ	1:A:657:SER:HB2	0.49	2.42	16	2
1:A:588:ILE:O	1:A:589:GLN:HG2	0.49	2.07	9	1
1:A:723:GLU:CB	1:A:727:VAL:HB	0.49	2.37	14	5
1:A:606:SER:OG	1:A:621:VAL:N	0.49	2.46	5	1
1:A:659:LEU:HB3	1:A:670:PHE:CD2	0.49	2.43	2	1
1:A:617:ARG:CG	1:A:688:PHE:CZ	0.49	2.95	14	1
1:A:681:ILE:CG2	1:A:690:ILE:CD1	0.49	2.90	13	1
1:A:580:LEU:HD23	1:A:592:LEU:HD12	0.49	1.84	11	1
1:A:577:PHE:CE1	1:A:647:ILE:HD12	0.49	2.43	2	1
1:A:575:GLY:CA	1:A:595:GLN:NE2	0.49	2.75	5	3
1:A:615:ASP:HB2	1:A:618:LEU:HD13	0.49	1.85	6	1
1:A:577:PHE:HB2	1:A:596:GLN:HA	0.49	1.84	13	8
1:A:615:ASP:OD1	1:A:688:PHE:CZ	0.49	2.66	12	6
1:A:621:VAL:HG11	1:A:730:LEU:CB	0.49	2.37	7	2
1:A:624:PHE:CE1	1:A:625:ILE:O	0.49	2.66	15	2
1:A:586:SER:CB	1:A:689:VAL:O	0.49	2.61	3	1
1:A:681:ILE:CG2	1:A:690:ILE:CG1	0.49	2.90	9	1
1:A:602:PHE:HE1	1:A:727:VAL:HG13	0.49	1.68	3	3
1:A:698:ASP:O	1:A:699:THR:HG23	0.49	2.07	5	4
1:A:575:GLY:O	1:A:595:GLN:CA	0.49	2.61	1	5
1:A:617:ARG:O	1:A:655:ASN:ND2	0.49	2.46	3	1
1:A:723:GLU:CG	1:A:728:LYS:HB2	0.49	2.38	14	1
1:A:615:ASP:O	1:A:618:LEU:N	0.49	2.40	4	1
1:A:622:HIS:O	1:A:651:HIS:CD2	0.49	2.66	16	3
1:A:727:VAL:CG1	1:A:727:VAL:O	0.49	2.61	16	1
1:A:720:THR:O	1:A:722:GLU:N	0.49	2.46	12	1
1:A:594:ILE:CD1	1:A:601:PHE:CD2	0.48	2.95	5	1
1:A:669:LYS:CG	1:A:670:PHE:N	0.48	2.75	9	4
1:A:624:PHE:O	1:A:624:PHE:CG	0.48	2.66	3	5
1:A:681:ILE:CG2	1:A:682:TRP:N	0.48	2.75	15	2
1:A:615:ASP:O	1:A:688:PHE:CE1	0.48	2.66	14	1
1:A:588:ILE:O	1:A:589:GLN:HG3	0.48	2.08	4	6
1:A:662:ASN:HB2	1:A:670:PHE:CE2	0.48	2.42	2	4
1:A:672:LEU:HD22	1:A:694:VAL:HG21	0.48	1.85	6	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:703:PHE:CG	1:A:704:ASN:N	0.48	2.81	11	1
1:A:583:LEU:H	1:A:583:LEU:HD12	0.48	1.68	9	4
1:A:656:VAL:HG13	1:A:658:TYR:HE1	0.48	1.68	16	2
1:A:601:PHE:O	1:A:601:PHE:CD2	0.48	2.66	9	1
1:A:602:PHE:CE2	1:A:730:LEU:HD11	0.48	2.43	11	1
1:A:659:LEU:O	1:A:660:ASN:CB	0.48	2.61	3	7
1:A:659:LEU:HG	1:A:678:ILE:HG22	0.48	1.84	4	3
1:A:726:LEU:CD1	1:A:727:VAL:N	0.48	2.69	4	6
1:A:721:ALA:O	1:A:724:LYS:CA	0.48	2.61	12	14
1:A:724:LYS:HB3	1:A:726:LEU:CG	0.48	2.38	6	6
1:A:724:LYS:HG2	1:A:726:LEU:HD21	0.48	1.84	6	2
1:A:619:SER:O	1:A:620:ARG:CG	0.48	2.62	8	2
1:A:625:ILE:HG12	1:A:649:TYR:CD1	0.48	2.44	3	1
1:A:613:ILE:O	1:A:618:LEU:HD11	0.48	2.09	5	3
1:A:703:PHE:CE2	1:A:704:ASN:HB2	0.48	2.43	5	2
1:A:602:PHE:HE1	1:A:727:VAL:HG22	0.48	1.60	2	3
1:A:583:LEU:HB2	1:A:584:PRO:HD2	0.48	1.86	15	1
1:A:601:PHE:HB3	1:A:625:ILE:CG2	0.48	2.39	16	1
1:A:651:HIS:CD2	1:A:655:ASN:O	0.48	2.67	11	9
1:A:615:ASP:O	1:A:618:LEU:HG	0.48	2.08	1	5
1:A:681:ILE:HG22	1:A:690:ILE:HD13	0.48	1.82	11	1
1:A:577:PHE:HZ	1:A:647:ILE:HG21	0.48	1.62	16	1
1:A:615:ASP:CG	1:A:688:PHE:CZ	0.48	2.87	14	3
1:A:577:PHE:CZ	1:A:647:ILE:CG2	0.48	2.97	4	5
1:A:597:GLY:O	1:A:599:ASN:N	0.48	2.44	4	8
1:A:656:VAL:CG1	1:A:665:ILE:HA	0.48	2.38	15	6
1:A:721:ALA:CB	1:A:724:LYS:HA	0.48	2.38	6	9
1:A:658:TYR:HB3	1:A:662:ASN:O	0.48	2.09	7	3
1:A:618:LEU:HD11	1:A:681:ILE:HD11	0.48	1.83	6	1
1:A:676:ASP:OD2	1:A:714:ARG:NH1	0.48	2.45	10	1
1:A:615:ASP:OD2	1:A:688:PHE:CE1	0.48	2.67	9	1
1:A:598:VAL:CG2	1:A:601:PHE:CD1	0.48	2.96	11	2
1:A:577:PHE:CZ	1:A:578:LEU:HB2	0.48	2.44	2	1
1:A:588:ILE:HG23	1:A:590:GLU:OE2	0.48	2.08	10	1
1:A:606:SER:HB3	1:A:620:ARG:CA	0.48	2.38	10	2
1:A:622:HIS:HE2	1:A:681:ILE:HG23	0.48	1.69	10	1
1:A:681:ILE:CG2	1:A:688:PHE:CZ	0.48	2.97	3	1
1:A:615:ASP:OD1	1:A:688:PHE:CE2	0.48	2.66	12	2
1:A:604:GLY:HA2	1:A:618:LEU:HD13	0.48	1.86	11	1
1:A:718:LYS:O	1:A:719:GLN:O	0.48	2.31	2	3
1:A:617:ARG:HG3	1:A:688:PHE:CD1	0.48	2.44	13	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:664:MET:HG2	1:A:716:VAL:HG21	0.48	1.86	16	1
1:A:618:LEU:N	1:A:618:LEU:CD1	0.48	2.77	9	1
1:A:587:ILE:CB	1:A:615:ASP:OD1	0.47	2.62	4	1
1:A:630:HIS:HB2	1:A:646:ASP:OD1	0.47	2.09	4	1
1:A:621:VAL:CG1	1:A:621:VAL:O	0.47	2.62	14	2
1:A:662:ASN:ND2	1:A:670:PHE:CZ	0.47	2.82	2	1
1:A:580:LEU:HD21	1:A:678:ILE:CD1	0.47	2.39	15	2
1:A:581:LYS:O	1:A:583:LEU:CD1	0.47	2.62	6	1
1:A:577:PHE:HE1	1:A:702:LEU:HD11	0.47	1.68	11	1
1:A:585:ASP:O	1:A:689:VAL:CG2	0.47	2.62	16	1
1:A:615:ASP:OD2	1:A:690:ILE:HG12	0.47	2.09	9	1
1:A:577:PHE:O	1:A:696:ILE:HA	0.47	2.09	4	6
1:A:580:LEU:O	1:A:582:PRO:HD3	0.47	2.08	14	8
1:A:723:GLU:HB2	1:A:728:LYS:HB2	0.47	1.87	9	2
1:A:615:ASP:HB3	1:A:618:LEU:HD11	0.47	1.87	16	1
1:A:615:ASP:CG	1:A:615:ASP:O	0.47	2.52	7	1
1:A:615:ASP:OD2	1:A:690:ILE:CD1	0.47	2.62	4	1
1:A:659:LEU:HD23	1:A:660:ASN:N	0.47	2.24	4	1
1:A:665:ILE:O	1:A:666:GLN:O	0.47	2.33	1	9
1:A:603:ILE:HB	1:A:623:CYS:SG	0.47	2.50	10	3
1:A:682:TRP:CD1	1:A:682:TRP:C	0.47	2.85	6	6
1:A:689:VAL:O	1:A:690:ILE:HD13	0.47	2.09	6	1
1:A:694:VAL:HG12	1:A:694:VAL:O	0.47	2.10	11	3
1:A:624:PHE:CG	1:A:624:PHE:O	0.47	2.67	15	2
1:A:601:PHE:CD2	1:A:601:PHE:O	0.47	2.68	7	2
1:A:617:ARG:HB2	1:A:681:ILE:CD1	0.47	2.39	12	1
1:A:656:VAL:HG23	1:A:658:TYR:HH	0.47	1.69	7	1
1:A:682:TRP:HA	1:A:689:VAL:HG12	0.47	1.87	7	1
1:A:659:LEU:O	1:A:661:ASN:N	0.47	2.48	10	7
1:A:651:HIS:ND1	1:A:657:SER:HB3	0.47	2.25	5	4
1:A:586:SER:OG	1:A:690:ILE:HA	0.47	2.10	15	6
1:A:714:ARG:CG	1:A:714:ARG:O	0.47	2.62	12	4
1:A:619:SER:O	1:A:620:ARG:HB3	0.47	2.10	10	1
1:A:714:ARG:O	1:A:714:ARG:CG	0.47	2.63	16	2
1:A:688:PHE:CD1	1:A:690:ILE:HD11	0.47	2.44	10	1
1:A:649:TYR:OH	1:A:680:ILE:HG12	0.47	2.09	16	1
1:A:678:ILE:HG12	1:A:692:PHE:CB	0.47	2.39	4	2
1:A:618:LEU:CD1	1:A:622:HIS:CD2	0.47	2.98	9	2
1:A:577:PHE:CD2	1:A:578:LEU:HB2	0.47	2.45	14	3
1:A:659:LEU:HD12	1:A:670:PHE:CD2	0.47	2.45	5	1
1:A:580:LEU:CB	1:A:592:LEU:HB2	0.47	2.39	12	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:602:PHE:O	1:A:603:ILE:HG12	0.47	2.09	12	2
1:A:586:SER:HB2	1:A:691:GLY:N	0.47	2.24	15	5
1:A:624:PHE:CD2	1:A:650:CYS:HB3	0.47	2.45	6	1
1:A:649:TYR:O	1:A:664:MET:CE	0.47	2.63	15	2
1:A:618:LEU:CD1	1:A:681:ILE:CG1	0.47	2.92	15	1
1:A:680:ILE:HB	1:A:690:ILE:CG2	0.47	2.39	3	2
1:A:626:PHE:CD2	1:A:724:LYS:HD3	0.47	2.45	16	1
1:A:656:VAL:HG13	1:A:658:TYR:HE2	0.47	1.70	14	1
1:A:627:LYS:HE3	1:A:647:ILE:HG23	0.47	1.87	11	1
1:A:653:GLY:O	1:A:666:GLN:CB	0.47	2.63	2	2
1:A:688:PHE:C	1:A:688:PHE:CD1	0.47	2.84	3	1
1:A:722:GLU:OE1	1:A:722:GLU:N	0.47	2.48	14	1
1:A:702:LEU:HD23	1:A:703:PHE:O	0.47	2.10	7	1
1:A:582:PRO:HD2	1:A:590:GLU:O	0.47	2.10	15	5
1:A:653:GLY:O	1:A:666:GLN:NE2	0.47	2.48	15	1
1:A:678:ILE:HG12	1:A:692:PHE:HB3	0.47	1.87	10	1
1:A:651:HIS:HB2	1:A:657:SER:OG	0.47	2.10	16	6
1:A:597:GLY:O	1:A:598:VAL:C	0.47	2.53	7	14
1:A:630:HIS:CE1	1:A:703:PHE:CD2	0.47	3.03	11	1
1:A:599:ASN:HB2	1:A:627:LYS:CB	0.47	2.40	15	3
1:A:664:MET:CG	1:A:716:VAL:HG21	0.47	2.39	16	1
1:A:577:PHE:CE1	1:A:702:LEU:CD1	0.47	2.98	9	1
1:A:629:ARG:HD2	1:A:644:LEU:O	0.47	2.10	14	1
1:A:579:THR:HA	1:A:592:LEU:O	0.46	2.10	5	1
1:A:724:LYS:CG	1:A:726:LEU:HD21	0.46	2.40	6	2
1:A:670:PHE:CD2	1:A:716:VAL:HA	0.46	2.46	11	1
1:A:681:ILE:HG21	1:A:688:PHE:CD2	0.46	2.44	8	1
1:A:626:PHE:CE1	1:A:726:LEU:CD2	0.46	2.98	16	1
1:A:626:PHE:CE2	1:A:724:LYS:HD3	0.46	2.45	16	1
1:A:616:ASN:OD1	1:A:617:ARG:NH2	0.46	2.47	14	1
1:A:588:ILE:O	1:A:589:GLN:CG	0.46	2.64	12	9
1:A:666:GLN:O	1:A:668:THR:N	0.46	2.47	9	8
1:A:583:LEU:HD22	1:A:583:LEU:N	0.46	2.21	6	1
1:A:657:SER:O	1:A:664:MET:SD	0.46	2.73	16	2
1:A:603:ILE:CG2	1:A:613:ILE:CD1	0.46	2.93	5	2
1:A:724:LYS:O	1:A:726:LEU:HG	0.46	2.11	11	5
1:A:605:ARG:HD2	1:A:615:ASP:N	0.46	2.25	2	1
1:A:656:VAL:HA	1:A:664:MET:O	0.46	2.10	2	1
1:A:580:LEU:CD1	1:A:692:PHE:CD1	0.46	2.87	2	1
1:A:682:TRP:HD1	1:A:689:VAL:HG12	0.46	1.70	1	2
1:A:621:VAL:HG11	1:A:730:LEU:HG	0.46	1.86	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:618:LEU:HG	1:A:622:HIS:CB	0.46	2.40	9	2
1:A:615:ASP:HB3	1:A:618:LEU:CD1	0.46	2.40	16	2
1:A:688:PHE:CD1	1:A:689:VAL:N	0.46	2.83	3	1
1:A:596:GLN:NE2	1:A:698:ASP:OD2	0.46	2.49	4	2
1:A:598:VAL:CG1	1:A:600:PRO:C	0.46	2.83	4	1
1:A:598:VAL:HG11	1:A:601:PHE:CB	0.46	2.41	4	1
1:A:605:ARG:HG2	1:A:618:LEU:HB2	0.46	1.88	4	4
1:A:622:HIS:NE2	1:A:681:ILE:HG12	0.46	2.24	1	2
1:A:716:VAL:HG13	1:A:716:VAL:O	0.46	2.10	10	1
1:A:681:ILE:CG2	1:A:690:ILE:HG12	0.46	2.40	7	2
1:A:723:GLU:HB3	1:A:727:VAL:C	0.46	2.31	12	1
1:A:717:LEU:O	1:A:718:LYS:C	0.46	2.53	14	1
1:A:615:ASP:HB2	1:A:690:ILE:HD11	0.46	1.88	7	1
1:A:581:LYS:O	1:A:693:LYS:N	0.46	2.48	2	2
1:A:615:ASP:HB3	1:A:618:LEU:HD21	0.46	1.87	14	1
1:A:684:LYS:O	1:A:685:ASN:C	0.46	2.54	14	1
1:A:626:PHE:CD2	1:A:627:LYS:N	0.46	2.84	4	1
1:A:588:ILE:HG12	1:A:615:ASP:OD2	0.46	2.10	6	1
1:A:622:HIS:NE2	1:A:680:ILE:O	0.46	2.49	2	1
1:A:682:TRP:O	1:A:688:PHE:O	0.46	2.34	2	2
1:A:617:ARG:CG	1:A:688:PHE:CG	0.46	2.98	10	1
1:A:587:ILE:O	1:A:589:GLN:OE1	0.46	2.33	3	1
1:A:594:ILE:HG12	1:A:601:PHE:CE1	0.46	2.45	3	3
1:A:678:ILE:HG22	1:A:679:LYS:H	0.46	1.71	7	1
1:A:602:PHE:CE1	1:A:730:LEU:HG	0.46	2.46	4	1
1:A:670:PHE:CE1	1:A:714:ARG:HD2	0.46	2.46	11	1
1:A:603:ILE:CG2	1:A:611:CYS:CB	0.46	2.93	14	3
1:A:623:CYS:SG	1:A:680:ILE:CG2	0.46	3.04	16	1
1:A:609:CYS:SG	1:A:621:VAL:HA	0.46	2.51	4	3
1:A:702:LEU:CD1	1:A:703:PHE:O	0.46	2.64	2	3
1:A:684:LYS:O	1:A:685:ASN:CB	0.46	2.62	15	1
1:A:615:ASP:O	1:A:618:LEU:HB2	0.46	2.10	9	2
1:A:723:GLU:OE1	1:A:723:GLU:N	0.46	2.48	3	1
1:A:603:ILE:C	1:A:623:CYS:HG	0.46	2.11	14	1
1:A:705:GLU:CG	1:A:705:GLU:O	0.46	2.64	4	1
1:A:602:PHE:CD1	1:A:730:LEU:HG	0.46	2.46	4	1
1:A:603:ILE:HG12	1:A:611:CYS:CB	0.46	2.40	5	1
1:A:605:ARG:HB2	1:A:618:LEU:HD12	0.46	1.86	5	1
1:A:617:ARG:HB2	1:A:688:PHE:CE1	0.46	2.45	9	1
1:A:648:TRP:CE3	1:A:669:LYS:HE3	0.46	2.46	7	1
1:A:664:MET:HG2	1:A:716:VAL:HG13	0.46	1.86	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:675:GLY:CA	1:A:694:VAL:O	0.46	2.64	4	1
1:A:618:LEU:HA	1:A:622:HIS:CE1	0.46	2.46	7	8
1:A:623:CYS:HB3	1:A:657:SER:CB	0.46	2.40	15	4
1:A:624:PHE:CB	1:A:652:THR:OG1	0.46	2.64	5	8
1:A:587:ILE:CD1	1:A:688:PHE:CD1	0.46	2.99	2	1
1:A:653:GLY:O	1:A:666:GLN:HB2	0.46	2.11	2	2
1:A:681:ILE:CG2	1:A:690:ILE:HG13	0.46	2.40	9	1
1:A:599:ASN:HB2	1:A:627:LYS:HB3	0.45	1.88	4	10
1:A:624:PHE:CE2	1:A:727:VAL:CG1	0.45	2.89	13	3
1:A:594:ILE:CG1	1:A:601:PHE:CE2	0.45	2.99	10	2
1:A:659:LEU:CD2	1:A:671:LEU:O	0.45	2.64	2	1
1:A:700:THR:OG1	1:A:701:GLY:N	0.45	2.49	2	1
1:A:599:ASN:HB2	1:A:627:LYS:CG	0.45	2.40	16	1
1:A:727:VAL:HG12	1:A:727:VAL:O	0.45	2.10	16	1
1:A:651:HIS:CG	1:A:652:THR:N	0.45	2.85	3	1
1:A:624:PHE:O	1:A:650:CYS:O	0.45	2.33	12	5
1:A:618:LEU:HD21	1:A:680:ILE:CG2	0.45	2.41	11	3
1:A:690:ILE:HG22	1:A:692:PHE:HD2	0.45	1.70	7	3
1:A:603:ILE:HD12	1:A:680:ILE:HD11	0.45	1.89	3	1
1:A:605:ARG:HB3	1:A:605:ARG:CZ	0.45	2.40	12	1
1:A:604:GLY:CA	1:A:618:LEU:HD23	0.45	2.40	6	1
1:A:652:THR:O	1:A:653:GLY:O	0.45	2.34	14	2
1:A:587:ILE:CG1	1:A:615:ASP:OD1	0.45	2.65	14	1
1:A:617:ARG:HG3	1:A:688:PHE:CE1	0.45	2.45	4	1
1:A:674:ASP:HB3	1:A:696:ILE:HD12	0.45	1.88	4	3
1:A:678:ILE:HG22	1:A:679:LYS:N	0.45	2.27	5	2
1:A:645:ASP:O	1:A:702:LEU:HD22	0.45	2.12	2	2
1:A:674:ASP:HA	1:A:696:ILE:HG13	0.45	1.88	10	1
1:A:644:LEU:N	1:A:644:LEU:CD2	0.45	2.74	3	1
1:A:713:GLN:CA	1:A:713:GLN:OE1	0.45	2.65	3	1
1:A:587:ILE:HD11	1:A:688:PHE:HA	0.45	1.89	9	1
1:A:630:HIS:ND1	1:A:703:PHE:CD1	0.45	2.84	4	1
1:A:603:ILE:HD11	1:A:625:ILE:HG13	0.45	1.88	15	4
1:A:601:PHE:O	1:A:625:ILE:HB	0.45	2.12	15	3
1:A:686:ASN:O	1:A:686:ASN:OD1	0.45	2.35	15	1
1:A:670:PHE:CD1	1:A:715:VAL:O	0.45	2.70	10	1
1:A:665:ILE:CG2	1:A:668:THR:HG21	0.45	2.42	12	1
1:A:620:ARG:HG3	1:A:621:VAL:HG23	0.45	1.88	7	1
1:A:677:GLU:CA	1:A:692:PHE:O	0.45	2.64	15	8
1:A:581:LYS:O	1:A:693:LYS:CB	0.45	2.65	3	3
1:A:592:LEU:CD1	1:A:613:ILE:HD11	0.45	2.41	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:678:ILE:O	1:A:692:PHE:N	0.45	2.47	3	1
1:A:625:ILE:CG1	1:A:649:TYR:CD2	0.45	2.99	12	1
1:A:659:LEU:HD21	1:A:676:ASP:CB	0.45	2.41	7	1
1:A:658:TYR:CE1	1:A:682:TRP:CB	0.45	3.00	5	2
1:A:586:SER:O	1:A:589:GLN:CG	0.45	2.65	11	1
1:A:618:LEU:CD2	1:A:681:ILE:HB	0.45	2.42	2	1
1:A:697:ASN:ND2	1:A:697:ASN:N	0.45	2.61	15	1
1:A:704:ASN:C	1:A:704:ASN:OD1	0.45	2.54	16	1
1:A:624:PHE:CD2	1:A:650:CYS:SG	0.45	3.10	6	1
1:A:690:ILE:CD1	1:A:690:ILE:N	0.45	2.80	11	1
1:A:626:PHE:CZ	1:A:628:LYS:HG2	0.45	2.47	2	1
1:A:613:ILE:HG21	1:A:690:ILE:HG21	0.45	1.89	14	1
1:A:587:ILE:CB	1:A:615:ASP:OD2	0.45	2.65	13	1
1:A:587:ILE:CG1	1:A:615:ASP:OD2	0.45	2.65	13	1
1:A:649:TYR:HB2	1:A:672:LEU:CD1	0.45	2.41	5	4
1:A:587:ILE:CG2	1:A:615:ASP:CG	0.45	2.85	6	1
1:A:651:HIS:NE2	1:A:655:ASN:C	0.45	2.70	2	3
1:A:591:SER:C	1:A:592:LEU:HD23	0.45	2.31	1	1
1:A:681:ILE:HB	1:A:690:ILE:CG1	0.45	2.41	15	1
1:A:703:PHE:O	1:A:704:ASN:C	0.45	2.55	3	2
1:A:627:LYS:NZ	1:A:647:ILE:HG23	0.45	2.26	3	1
1:A:598:VAL:HG13	1:A:599:ASN:N	0.45	2.27	14	1
1:A:615:ASP:CG	1:A:688:PHE:CE1	0.45	2.89	14	1
1:A:650:CYS:SG	1:A:668:THR:O	0.45	2.74	6	2
1:A:579:THR:OG1	1:A:697:ASN:ND2	0.45	2.50	5	2
1:A:600:PRO:O	1:A:610:ASN:ND2	0.45	2.50	7	3
1:A:714:ARG:O	1:A:714:ARG:HG3	0.45	2.12	3	1
1:A:594:ILE:HG12	1:A:601:PHE:CD1	0.45	2.46	9	3
1:A:598:VAL:CG1	1:A:601:PHE:HB2	0.44	2.42	4	2
1:A:684:LYS:O	1:A:686:ASN:N	0.44	2.50	4	1
1:A:663:ARG:NH2	1:A:665:ILE:CG2	0.44	2.80	5	1
1:A:658:TYR:CE2	1:A:679:LYS:O	0.44	2.70	11	1
1:A:587:ILE:HD13	1:A:615:ASP:OD2	0.44	2.12	2	1
1:A:725:ASP:O	1:A:725:ASP:CG	0.44	2.55	2	2
1:A:685:ASN:OD1	1:A:685:ASN:N	0.44	2.50	8	1
1:A:673:GLN:O	1:A:694:VAL:CG1	0.44	2.65	14	2
1:A:659:LEU:CD2	1:A:678:ILE:HG22	0.44	2.42	9	1
1:A:629:ARG:CD	1:A:644:LEU:O	0.44	2.65	14	1
1:A:658:TYR:CZ	1:A:682:TRP:HB3	0.44	2.47	5	1
1:A:649:TYR:HB2	1:A:672:LEU:CG	0.44	2.42	2	2
1:A:670:PHE:HA	1:A:717:LEU:HD12	0.44	1.89	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:656:VAL:HG23	1:A:658:TYR:CZ	0.44	2.45	15	1
1:A:606:SER:OG	1:A:606:SER:O	0.44	2.36	10	1
1:A:653:GLY:O	1:A:666:GLN:HG3	0.44	2.12	10	2
1:A:662:ASN:CG	1:A:670:PHE:CE2	0.44	2.91	9	2
1:A:619:SER:O	1:A:620:ARG:O	0.44	2.36	9	1
1:A:582:PRO:HD2	1:A:590:GLU:C	0.44	2.32	5	2
1:A:680:ILE:C	1:A:681:ILE:CG1	0.44	2.86	6	1
1:A:703:PHE:CD2	1:A:704:ASN:HB2	0.44	2.48	2	2
1:A:651:HIS:CB	1:A:657:SER:HG	0.44	2.26	2	1
1:A:659:LEU:CD2	1:A:659:LEU:C	0.44	2.85	3	1
1:A:714:ARG:CD	1:A:714:ARG:O	0.44	2.66	14	1
1:A:576:ARG:NH1	1:A:576:ARG:CB	0.44	2.80	4	1
1:A:659:LEU:CD1	1:A:672:LEU:HG	0.44	2.42	4	1
1:A:645:ASP:O	1:A:702:LEU:CD2	0.44	2.65	9	2
1:A:647:ILE:CG1	1:A:672:LEU:HB2	0.44	2.41	2	1
1:A:609:CYS:SG	1:A:611:CYS:O	0.44	2.75	1	4
1:A:597:GLY:HA3	1:A:627:LYS:CE	0.44	2.42	8	1
1:A:662:ASN:OD1	1:A:715:VAL:HA	0.44	2.12	8	1
1:A:582:PRO:HG3	1:A:588:ILE:CG2	0.44	2.41	10	1
1:A:656:VAL:CB	1:A:664:MET:O	0.44	2.65	10	1
1:A:651:HIS:CE1	1:A:656:VAL:C	0.44	2.91	16	1
1:A:681:ILE:CG2	1:A:688:PHE:CE2	0.44	2.99	3	1
1:A:592:LEU:O	1:A:593:GLU:CG	0.44	2.65	16	2
1:A:659:LEU:HD11	1:A:676:ASP:OD2	0.44	2.11	2	1
1:A:681:ILE:HG21	1:A:688:PHE:CD1	0.44	2.47	1	1
1:A:656:VAL:HB	1:A:664:MET:O	0.44	2.13	15	2
1:A:630:HIS:CD2	1:A:703:PHE:CZ	0.44	3.06	10	1
1:A:623:CYS:SG	1:A:680:ILE:HD13	0.44	2.53	16	1
1:A:651:HIS:CD2	1:A:656:VAL:CA	0.44	2.99	16	2
1:A:664:MET:C	1:A:665:ILE:HG23	0.44	2.33	16	1
1:A:606:SER:CB	1:A:620:ARG:HB3	0.44	2.43	3	1
1:A:670:PHE:HA	1:A:717:LEU:CD1	0.44	2.43	12	1
1:A:626:PHE:CE2	1:A:628:LYS:CG	0.44	3.00	14	1
1:A:598:VAL:HG11	1:A:601:PHE:HB2	0.44	1.90	4	1
1:A:650:CYS:CB	1:A:669:LYS:HA	0.44	2.43	7	5
1:A:677:GLU:HG3	1:A:692:PHE:O	0.44	2.13	6	1
1:A:617:ARG:CG	1:A:688:PHE:CD2	0.44	3.00	2	1
1:A:657:SER:O	1:A:664:MET:CG	0.44	2.66	9	1
1:A:583:LEU:HD12	1:A:583:LEU:H	0.44	1.71	8	1
1:A:613:ILE:HD12	1:A:692:PHE:CZ	0.44	2.47	3	1
1:A:626:PHE:CZ	1:A:628:LYS:CG	0.44	3.01	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:647:ILE:CD1	1:A:672:LEU:CB	0.44	2.96	13	1
1:A:699:THR:O	1:A:701:GLY:N	0.44	2.50	3	3
1:A:605:ARG:CG	1:A:618:LEU:HB2	0.44	2.42	12	2
1:A:627:LYS:HZ3	1:A:647:ILE:HG23	0.44	1.73	13	1
1:A:644:LEU:HA	1:A:701:GLY:O	0.44	2.12	4	1
1:A:588:ILE:HG13	1:A:613:ILE:CG1	0.44	2.43	5	1
1:A:650:CYS:CA	1:A:664:MET:HE1	0.44	2.43	13	2
1:A:659:LEU:HB3	1:A:670:PHE:CE2	0.44	2.48	2	1
1:A:681:ILE:HG21	1:A:688:PHE:CE1	0.44	2.48	2	2
1:A:620:ARG:C	1:A:621:VAL:HG23	0.44	2.33	15	1
1:A:686:ASN:O	1:A:687:LYS:CB	0.44	2.66	15	1
1:A:624:PHE:CZ	1:A:727:VAL:CG2	0.44	2.97	12	1
1:A:644:LEU:O	1:A:645:ASP:OD2	0.44	2.35	14	1
1:A:582:PRO:HB3	1:A:692:PHE:CZ	0.43	2.47	10	1
1:A:613:ILE:O	1:A:613:ILE:CG2	0.43	2.66	10	2
1:A:630:HIS:CG	1:A:703:PHE:CZ	0.43	3.06	10	1
1:A:670:PHE:CE1	1:A:715:VAL:O	0.43	2.71	10	1
1:A:652:THR:HG22	1:A:723:GLU:OE1	0.43	2.13	16	1
1:A:722:GLU:C	1:A:724:LYS:N	0.43	2.71	16	1
1:A:693:LYS:HE3	1:A:695:GLU:CG	0.43	2.44	9	1
1:A:726:LEU:HD12	1:A:726:LEU:C	0.43	2.32	13	2
1:A:621:VAL:O	1:A:622:HIS:C	0.43	2.56	4	3
1:A:680:ILE:HG22	1:A:681:ILE:CG1	0.43	2.43	6	1
1:A:617:ARG:HB2	1:A:688:PHE:CZ	0.43	2.48	2	3
1:A:624:PHE:CD1	1:A:727:VAL:CG2	0.43	2.96	16	1
1:A:615:ASP:O	1:A:616:ASN:CB	0.43	2.66	14	1
1:A:648:TRP:CE3	1:A:669:LYS:CE	0.43	3.01	15	2
1:A:575:GLY:HA3	1:A:595:GLN:NE2	0.43	2.29	14	3
1:A:587:ILE:HD13	1:A:688:PHE:CE1	0.43	2.48	2	1
1:A:629:ARG:N	1:A:645:ASP:OD1	0.43	2.50	2	1
1:A:620:ARG:C	1:A:622:HIS:N	0.43	2.70	12	1
1:A:659:LEU:HG	1:A:676:ASP:OD1	0.43	2.12	12	1
1:A:664:MET:CB	1:A:716:VAL:HG21	0.43	2.44	14	1
1:A:658:TYR:CB	1:A:663:ARG:HA	0.43	2.42	7	1
1:A:726:LEU:CD1	1:A:727:VAL:CG2	0.43	2.84	13	2
1:A:662:ASN:HB3	1:A:670:PHE:CE2	0.43	2.48	11	1
1:A:603:ILE:CG1	1:A:623:CYS:SG	0.43	3.06	2	1
1:A:655:ASN:C	1:A:656:VAL:HG23	0.43	2.33	2	1
1:A:615:ASP:HB3	1:A:618:LEU:CG	0.43	2.44	7	1
1:A:586:SER:HB3	1:A:691:GLY:N	0.43	2.27	8	2
1:A:624:PHE:CD1	1:A:625:ILE:O	0.43	2.71	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:673:GLN:O	1:A:676:ASP:HB2	0.43	2.14	15	5
1:A:682:TRP:C	1:A:682:TRP:CD1	0.43	2.92	10	2
1:A:648:TRP:CH2	1:A:671:LEU:HD12	0.43	2.46	16	1
1:A:622:HIS:HA	1:A:653:GLY:HA3	0.43	1.91	3	1
1:A:583:LEU:HD12	1:A:691:GLY:O	0.43	2.14	9	1
1:A:606:SER:O	1:A:607:GLU:HB3	0.43	2.13	9	1
1:A:587:ILE:CD1	1:A:615:ASP:OD1	0.43	2.67	14	1
1:A:669:LYS:HG3	1:A:670:PHE:N	0.43	2.29	13	2
1:A:703:PHE:C	1:A:703:PHE:CD1	0.43	2.91	7	1
1:A:649:TYR:CD1	1:A:650:CYS:N	0.43	2.87	4	1
1:A:702:LEU:HG	1:A:702:LEU:O	0.43	2.13	4	1
1:A:576:ARG:NE	1:A:593:GLU:HG2	0.43	2.28	6	1
1:A:613:ILE:HB	1:A:618:LEU:HD12	0.43	1.91	2	1
1:A:650:CYS:HB3	1:A:668:THR:O	0.43	2.13	2	2
1:A:587:ILE:CG2	1:A:615:ASP:OD2	0.43	2.67	15	2
1:A:683:ASP:OD2	1:A:686:ASN:CB	0.43	2.66	15	1
1:A:722:GLU:O	1:A:723:GLU:C	0.43	2.57	9	6
1:A:648:TRP:CG	1:A:669:LYS:HE3	0.43	2.47	5	1
1:A:648:TRP:CZ3	1:A:717:LEU:HD21	0.43	2.49	6	1
1:A:681:ILE:HG13	1:A:690:ILE:HG13	0.43	1.89	6	1
1:A:615:ASP:CB	1:A:618:LEU:CD1	0.43	2.97	16	2
1:A:678:ILE:HG13	1:A:692:PHE:HB2	0.43	1.90	2	3
1:A:602:PHE:CD2	1:A:730:LEU:CD1	0.43	3.02	16	2
1:A:664:MET:HB3	1:A:668:THR:OG1	0.43	2.14	2	1
1:A:673:GLN:N	1:A:676:ASP:OD2	0.43	2.52	7	2
1:A:587:ILE:HB	1:A:690:ILE:HD11	0.43	1.90	8	1
1:A:626:PHE:CE2	1:A:724:LYS:CD	0.43	3.01	16	1
1:A:728:LYS:HG2	1:A:728:LYS:O	0.43	2.13	14	1
1:A:703:PHE:O	1:A:705:GLU:N	0.43	2.52	13	1
1:A:615:ASP:HB2	1:A:618:LEU:CD2	0.43	2.44	4	1
1:A:630:HIS:C	1:A:630:HIS:CD2	0.43	2.92	4	1
1:A:705:GLU:O	1:A:705:GLU:HG3	0.43	2.13	4	1
1:A:647:ILE:N	1:A:647:ILE:CD1	0.43	2.82	5	1
1:A:696:ILE:HG21	1:A:699:THR:HB	0.43	1.89	11	1
1:A:597:GLY:HA3	1:A:627:LYS:CD	0.43	2.44	12	3
1:A:655:ASN:C	1:A:656:VAL:CG2	0.43	2.87	2	1
1:A:613:ILE:HB	1:A:618:LEU:CD1	0.43	2.44	7	2
1:A:658:TYR:O	1:A:679:LYS:N	0.43	2.50	16	2
1:A:624:PHE:CE1	1:A:727:VAL:CG2	0.43	2.86	12	1
1:A:578:LEU:CD2	1:A:578:LEU:C	0.43	2.86	9	2
1:A:659:LEU:CD2	1:A:676:ASP:OD2	0.43	2.66	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:602:PHE:CE1	1:A:727:VAL:HG13	0.43	2.49	4	1
1:A:580:LEU:HD12	1:A:692:PHE:CG	0.43	2.45	5	1
1:A:690:ILE:HG22	1:A:692:PHE:CE2	0.43	2.48	5	1
1:A:603:ILE:N	1:A:609:CYS:HB2	0.43	2.29	2	1
1:A:592:LEU:C	1:A:593:GLU:CG	0.43	2.87	15	2
1:A:678:ILE:HD11	1:A:694:VAL:HG23	0.43	1.91	15	1
1:A:652:THR:CG2	1:A:727:VAL:HG11	0.43	2.16	16	1
1:A:655:ASN:O	1:A:656:VAL:C	0.43	2.57	3	1
1:A:655:ASN:HB2	1:A:681:ILE:CD1	0.43	2.43	3	1
1:A:584:PRO:HA	1:A:589:GLN:NE2	0.43	2.28	5	2
1:A:586:SER:CB	1:A:691:GLY:O	0.43	2.67	12	3
1:A:606:SER:N	1:A:620:ARG:HA	0.43	2.29	2	1
1:A:664:MET:C	1:A:668:THR:OG1	0.43	2.57	2	1
1:A:724:LYS:HB2	1:A:726:LEU:HG	0.43	1.91	10	1
1:A:678:ILE:C	1:A:679:LYS:CG	0.43	2.88	16	1
1:A:699:THR:HA	1:A:702:LEU:CB	0.43	2.43	16	1
1:A:702:LEU:O	1:A:703:PHE:C	0.43	2.56	12	1
1:A:683:ASP:N	1:A:688:PHE:O	0.43	2.51	9	1
1:A:617:ARG:C	1:A:618:LEU:HD23	0.43	2.34	13	1
1:A:613:ILE:CG2	1:A:613:ILE:O	0.42	2.66	5	1
1:A:615:ASP:O	1:A:618:LEU:CG	0.42	2.66	5	1
1:A:665:ILE:HG12	1:A:665:ILE:O	0.42	2.13	1	1
1:A:714:ARG:HG3	1:A:714:ARG:O	0.42	2.14	1	2
1:A:589:GLN:C	1:A:590:GLU:CG	0.42	2.86	16	2
1:A:645:ASP:O	1:A:646:ASP:OD1	0.42	2.37	12	1
1:A:722:GLU:CG	1:A:728:LYS:HD2	0.42	2.44	7	1
1:A:677:GLU:HG2	1:A:692:PHE:O	0.42	2.14	9	2
1:A:703:PHE:CD2	1:A:704:ASN:OD1	0.42	2.71	3	2
1:A:601:PHE:HA	1:A:610:ASN:CB	0.42	2.44	16	2
1:A:598:VAL:CG1	1:A:610:ASN:ND2	0.42	2.72	16	1
1:A:626:PHE:CE2	1:A:724:LYS:CE	0.42	3.02	16	1
1:A:586:SER:HB2	1:A:689:VAL:O	0.42	2.14	3	1
1:A:649:TYR:O	1:A:664:MET:HE1	0.42	2.13	9	1
1:A:703:PHE:O	1:A:704:ASN:CB	0.42	2.67	9	1
1:A:605:ARG:HD2	1:A:614:GLU:HA	0.42	1.91	14	1
1:A:580:LEU:HD23	1:A:594:ILE:CD1	0.42	2.44	5	2
1:A:649:TYR:HB2	1:A:672:LEU:HD11	0.42	1.90	5	1
1:A:669:LYS:NZ	1:A:717:LEU:HD11	0.42	2.28	6	1
1:A:603:ILE:HG23	1:A:611:CYS:CB	0.42	2.44	11	2
1:A:649:TYR:C	1:A:664:MET:HE3	0.42	2.35	2	1
1:A:609:CYS:SG	1:A:621:VAL:HG23	0.42	2.54	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:657:SER:O	1:A:658:TYR:CG	0.42	2.72	3	1
1:A:722:GLU:C	1:A:723:GLU:HG2	0.42	2.35	14	1
1:A:579:THR:O	1:A:695:GLU:HB2	0.42	2.14	7	1
1:A:605:ARG:NE	1:A:605:ARG:O	0.42	2.52	13	1
1:A:625:ILE:HG12	1:A:649:TYR:CD2	0.42	2.49	12	1
1:A:655:ASN:C	1:A:656:VAL:HG13	0.42	2.34	7	1
1:A:649:TYR:CE2	1:A:678:ILE:CG2	0.42	2.92	15	1
1:A:682:TRP:HA	1:A:689:VAL:HG23	0.42	1.91	8	1
1:A:723:GLU:HG3	1:A:728:LYS:CA	0.42	2.44	3	1
1:A:588:ILE:HG21	1:A:692:PHE:CZ	0.42	2.49	6	1
1:A:705:GLU:HG2	1:A:705:GLU:O	0.42	2.15	15	1
1:A:606:SER:HB3	1:A:620:ARG:HA	0.42	1.91	10	1
1:A:598:VAL:HG13	1:A:600:PRO:C	0.42	2.35	14	1
1:A:598:VAL:O	1:A:599:ASN:O	0.42	2.37	6	1
1:A:650:CYS:HA	1:A:669:LYS:HA	0.42	1.92	6	1
1:A:624:PHE:CA	1:A:650:CYS:O	0.42	2.68	3	4
1:A:626:PHE:HB3	1:A:648:TRP:HB2	0.42	1.92	1	1
1:A:580:LEU:O	1:A:591:SER:CA	0.42	2.67	15	1
1:A:662:ASN:OD1	1:A:670:PHE:CZ	0.42	2.73	10	1
1:A:655:ASN:N	1:A:655:ASN:OD1	0.42	2.53	3	1
1:A:674:ASP:HB3	1:A:705:GLU:O	0.42	2.14	3	1
1:A:703:PHE:O	1:A:704:ASN:OD1	0.42	2.38	9	1
1:A:704:ASN:OD1	1:A:704:ASN:C	0.42	2.57	9	1
1:A:713:GLN:O	1:A:713:GLN:CG	0.42	2.68	14	1
1:A:605:ARG:HG2	1:A:615:ASP:O	0.42	2.15	13	1
1:A:723:GLU:HG2	1:A:728:LYS:HG2	0.42	1.91	13	1
1:A:621:VAL:CG2	1:A:730:LEU:HD12	0.42	2.45	4	1
1:A:602:PHE:HB2	1:A:609:CYS:CA	0.42	2.45	13	3
1:A:603:ILE:HG12	1:A:611:CYS:HB2	0.42	1.91	5	1
1:A:616:ASN:O	1:A:618:LEU:N	0.42	2.53	6	1
1:A:618:LEU:HD12	1:A:681:ILE:HD11	0.42	1.86	6	1
1:A:582:PRO:HA	1:A:692:PHE:HA	0.42	1.92	11	2
1:A:601:PHE:CZ	1:A:611:CYS:SG	0.42	3.12	8	1
1:A:601:PHE:CE2	1:A:611:CYS:SG	0.42	3.12	16	1
1:A:659:LEU:CD1	1:A:678:ILE:HG22	0.42	2.37	16	1
1:A:650:CYS:HA	1:A:664:MET:HE1	0.42	1.91	12	2
1:A:669:LYS:HG2	1:A:670:PHE:N	0.42	2.29	9	1
1:A:649:TYR:HB2	1:A:672:LEU:HG	0.42	1.90	16	2
1:A:578:LEU:C	1:A:578:LEU:CD2	0.42	2.88	3	2
1:A:601:PHE:CZ	1:A:611:CYS:CB	0.42	3.02	3	2
1:A:580:LEU:HB2	1:A:592:LEU:CB	0.42	2.44	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:629:ARG:O	1:A:630:HIS:C	0.42	2.58	14	2
1:A:617:ARG:CB	1:A:681:ILE:HG13	0.42	2.45	13	1
1:A:674:ASP:CB	1:A:696:ILE:HD12	0.42	2.45	4	2
1:A:678:ILE:CG1	1:A:692:PHE:HB3	0.42	2.44	11	2
1:A:589:GLN:C	1:A:590:GLU:HG2	0.42	2.35	1	1
1:A:615:ASP:OD2	1:A:690:ILE:HD12	0.42	2.14	15	1
1:A:618:LEU:HB3	1:A:622:HIS:CB	0.42	2.43	14	1
1:A:690:ILE:CG2	1:A:692:PHE:CE2	0.42	3.03	14	2
1:A:608:ASP:OD2	1:A:730:LEU:HD22	0.41	2.15	5	1
1:A:627:LYS:HD3	1:A:646:ASP:O	0.41	2.15	1	1
1:A:597:GLY:HA3	1:A:627:LYS:HE2	0.41	1.91	8	1
1:A:624:PHE:CD1	1:A:727:VAL:HG11	0.41	2.48	10	1
1:A:662:ASN:OD1	1:A:670:PHE:CE1	0.41	2.73	10	1
1:A:606:SER:HB3	1:A:620:ARG:HB3	0.41	1.91	16	1
1:A:656:VAL:O	1:A:658:TYR:CE1	0.41	2.73	16	1
1:A:666:GLN:HG2	1:A:667:GLY:N	0.41	2.30	16	1
1:A:607:GLU:O	1:A:609:CYS:O	0.41	2.38	2	1
1:A:723:GLU:HB2	1:A:728:LYS:CB	0.41	2.45	15	1
1:A:656:VAL:CG2	1:A:664:MET:C	0.41	2.89	16	1
1:A:721:ALA:O	1:A:722:GLU:HB2	0.41	2.15	16	1
1:A:581:LYS:O	1:A:693:LYS:HB3	0.41	2.15	3	2
1:A:674:ASP:CB	1:A:696:ILE:HG13	0.41	2.45	3	1
1:A:583:LEU:O	1:A:588:ILE:O	0.41	2.37	7	1
1:A:577:PHE:CD2	1:A:597:GLY:HA2	0.41	2.51	4	1
1:A:587:ILE:N	1:A:587:ILE:HD13	0.41	2.30	4	1
1:A:588:ILE:C	1:A:589:GLN:HG3	0.41	2.36	11	1
1:A:644:LEU:HD13	1:A:703:PHE:HA	0.41	1.92	11	1
1:A:723:GLU:N	1:A:723:GLU:OE1	0.41	2.52	2	1
1:A:649:TYR:HE2	1:A:678:ILE:HD12	0.41	1.75	10	1
1:A:587:ILE:HG22	1:A:690:ILE:HD11	0.41	1.92	16	1
1:A:621:VAL:HG11	1:A:730:LEU:HD13	0.41	1.91	16	1
1:A:605:ARG:CB	1:A:605:ARG:CZ	0.41	2.98	12	1
1:A:606:SER:O	1:A:608:ASP:N	0.41	2.53	5	2
1:A:725:ASP:CG	1:A:725:ASP:O	0.41	2.59	13	3
1:A:603:ILE:CD1	1:A:623:CYS:SG	0.41	3.07	15	1
1:A:587:ILE:HG22	1:A:688:PHE:CE1	0.41	2.50	3	1
1:A:649:TYR:CD2	1:A:678:ILE:HD13	0.41	2.49	12	1
1:A:647:ILE:HD12	1:A:672:LEU:HD13	0.41	1.90	13	1
1:A:583:LEU:CD2	1:A:583:LEU:N	0.41	2.83	6	1
1:A:678:ILE:CG1	1:A:692:PHE:CB	0.41	2.99	11	2
1:A:666:GLN:O	1:A:668:THR:HG23	0.41	2.16	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:620:ARG:O	1:A:621:VAL:CB	0.41	2.69	3	2
1:A:586:SER:O	1:A:587:ILE:C	0.41	2.59	9	1
1:A:703:PHE:CE1	1:A:704:ASN:HB2	0.41	2.51	7	1
1:A:680:ILE:HB	1:A:690:ILE:CD1	0.41	2.46	13	1
1:A:630:HIS:CE1	1:A:703:PHE:CD1	0.41	3.09	4	1
1:A:727:VAL:O	1:A:727:VAL:CG1	0.41	2.68	4	1
1:A:587:ILE:CG2	1:A:690:ILE:CD1	0.41	2.98	15	1
1:A:615:ASP:OD2	1:A:681:ILE:CB	0.41	2.68	8	1
1:A:617:ARG:O	1:A:622:HIS:CE1	0.41	2.73	16	1
1:A:578:LEU:HA	1:A:695:GLU:O	0.41	2.15	3	1
1:A:581:LYS:CB	1:A:693:LYS:HB3	0.41	2.45	14	2
1:A:588:ILE:HG13	1:A:613:ILE:CG2	0.41	2.45	5	1
1:A:724:LYS:HG2	1:A:726:LEU:CD2	0.41	2.46	6	2
1:A:664:MET:HE2	1:A:670:PHE:HB2	0.41	1.91	11	1
1:A:696:ILE:HD13	1:A:696:ILE:N	0.41	2.31	11	1
1:A:620:ARG:HD3	1:A:620:ARG:O	0.41	2.15	10	1
1:A:606:SER:O	1:A:609:CYS:SG	0.41	2.79	3	1
1:A:582:PRO:HA	1:A:691:GLY:O	0.41	2.15	14	1
1:A:724:LYS:O	1:A:725:ASP:OD1	0.41	2.38	14	1
1:A:658:TYR:CD2	1:A:663:ARG:CG	0.41	3.03	7	1
1:A:649:TYR:CE2	1:A:678:ILE:HD12	0.41	2.50	4	1
1:A:698:ASP:O	1:A:700:THR:N	0.41	2.54	11	1
1:A:586:SER:HA	1:A:689:VAL:O	0.41	2.16	2	2
1:A:724:LYS:HB3	1:A:726:LEU:HG	0.41	1.92	15	1
1:A:580:LEU:CD2	1:A:678:ILE:HD11	0.41	2.45	8	1
1:A:592:LEU:CD2	1:A:611:CYS:SG	0.41	3.08	16	1
1:A:607:GLU:O	1:A:608:ASP:C	0.41	2.58	12	1
1:A:650:CYS:HA	1:A:664:MET:CE	0.41	2.46	9	1
1:A:702:LEU:HD22	1:A:702:LEU:HA	0.41	1.78	14	1
1:A:577:PHE:HB3	1:A:597:GLY:N	0.41	2.31	7	1
1:A:604:GLY:C	1:A:618:LEU:HD23	0.41	2.36	4	1
1:A:727:VAL:O	1:A:727:VAL:HG12	0.41	2.16	4	1
1:A:587:ILE:CG2	1:A:615:ASP:OD1	0.41	2.69	4	1
1:A:669:LYS:HB3	1:A:717:LEU:O	0.41	2.16	11	1
1:A:722:GLU:O	1:A:728:LYS:HB2	0.41	2.15	2	1
1:A:606:SER:HB3	1:A:620:ARG:CB	0.41	2.46	15	1
1:A:721:ALA:O	1:A:724:LYS:N	0.41	2.54	12	4
1:A:617:ARG:HB3	1:A:681:ILE:CD1	0.41	2.45	8	1
1:A:626:PHE:CE2	1:A:724:LYS:HE2	0.41	2.50	16	1
1:A:652:THR:HA	1:A:667:GLY:H	0.41	1.76	16	1
1:A:624:PHE:O	1:A:650:CYS:HB2	0.41	2.15	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:659:LEU:C	1:A:659:LEU:HD23	0.41	2.36	3	1
1:A:725:ASP:O	1:A:725:ASP:OD1	0.41	2.39	3	1
1:A:582:PRO:CB	1:A:588:ILE:CG2	0.41	2.99	12	1
1:A:586:SER:OG	1:A:690:ILE:C	0.41	2.60	12	1
1:A:594:ILE:HG23	1:A:601:PHE:CD1	0.41	2.51	14	1
1:A:656:VAL:HG13	1:A:658:TYR:CE2	0.41	2.50	14	1
1:A:717:LEU:O	1:A:717:LEU:HG	0.41	2.16	6	1
1:A:580:LEU:HB2	1:A:592:LEU:HB2	0.41	1.92	15	1
1:A:592:LEU:O	1:A:593:GLU:HG2	0.41	2.16	16	1
1:A:586:SER:HA	1:A:689:VAL:HG23	0.41	1.92	16	1
1:A:718:LYS:O	1:A:719:GLN:C	0.41	2.58	3	1
1:A:618:LEU:CD2	1:A:680:ILE:CG2	0.41	2.99	12	1
1:A:627:LYS:O	1:A:628:LYS:CB	0.41	2.68	9	1
1:A:690:ILE:CG2	1:A:692:PHE:CD2	0.41	3.04	9	1
1:A:645:ASP:O	1:A:702:LEU:HD21	0.41	2.16	9	1
1:A:715:VAL:O	1:A:716:VAL:C	0.41	2.58	9	2
1:A:724:LYS:O	1:A:726:LEU:N	0.41	2.54	14	1
1:A:662:ASN:ND2	1:A:715:VAL:HA	0.41	2.31	7	1
1:A:613:ILE:HG21	1:A:690:ILE:HD13	0.40	1.90	4	1
1:A:649:TYR:CZ	1:A:664:MET:SD	0.40	3.14	5	1
1:A:651:HIS:CB	1:A:657:SER:OG	0.40	2.69	14	2
1:A:656:VAL:CA	1:A:664:MET:O	0.40	2.68	10	1
1:A:719:GLN:O	1:A:720:THR:CG2	0.40	2.65	10	1
1:A:583:LEU:O	1:A:589:GLN:HB3	0.40	2.16	16	1
1:A:601:PHE:O	1:A:603:ILE:HG13	0.40	2.16	16	1
1:A:723:GLU:O	1:A:726:LEU:CG	0.40	2.69	16	1
1:A:664:MET:HA	1:A:716:VAL:HG21	0.40	1.92	13	1
1:A:585:ASP:N	1:A:585:ASP:OD1	0.40	2.53	11	1
1:A:659:LEU:HD11	1:A:672:LEU:HD21	0.40	1.90	11	1
1:A:626:PHE:CZ	1:A:628:LYS:HG3	0.40	2.51	15	1
1:A:682:TRP:CD1	1:A:689:VAL:CG1	0.40	3.04	3	1
1:A:650:CYS:SG	1:A:669:LYS:HA	0.40	2.56	5	1
1:A:665:ILE:O	1:A:668:THR:OG1	0.40	2.29	2	1
1:A:682:TRP:O	1:A:683:ASP:C	0.40	2.60	2	1
1:A:575:GLY:C	1:A:595:GLN:NE2	0.40	2.74	1	1
1:A:651:HIS:HE2	1:A:655:ASN:C	0.40	2.19	1	1
1:A:723:GLU:CG	1:A:727:VAL:HG12	0.40	2.41	15	1
1:A:617:ARG:HG3	1:A:688:PHE:CG	0.40	2.51	10	1
1:A:657:SER:CB	1:A:680:ILE:O	0.40	2.69	10	1
1:A:659:LEU:HD23	1:A:678:ILE:HG22	0.40	1.94	9	1
1:A:657:SER:O	1:A:664:MET:CB	0.40	2.69	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:680:ILE:HB	1:A:690:ILE:HD13	0.40	1.92	13	1
1:A:675:GLY:HA2	1:A:694:VAL:O	0.40	2.16	4	1
1:A:618:LEU:HD12	1:A:681:ILE:CD1	0.40	2.47	6	1
1:A:602:PHE:CE2	1:A:730:LEU:HD21	0.40	2.51	6	1
1:A:577:PHE:CG	1:A:578:LEU:N	0.40	2.88	2	1
1:A:644:LEU:CB	1:A:703:PHE:HB2	0.40	2.46	15	1
1:A:606:SER:HB3	1:A:620:ARG:CD	0.40	2.46	16	1
1:A:624:PHE:CE1	1:A:727:VAL:HG11	0.40	2.52	3	1
1:A:665:ILE:CG1	1:A:665:ILE:O	0.40	2.69	12	1
1:A:618:LEU:HD12	1:A:622:HIS:CD2	0.40	2.51	9	1
1:A:629:ARG:HG3	1:A:643:GLY:O	0.40	2.16	9	1
1:A:720:THR:O	1:A:721:ALA:C	0.40	2.60	14	1
1:A:618:LEU:HD12	1:A:618:LEU:N	0.40	2.32	6	1
1:A:670:PHE:HD2	1:A:716:VAL:HG22	0.40	1.76	11	1
1:A:704:ASN:O	1:A:705:GLU:C	0.40	2.60	2	1
1:A:599:ASN:CB	1:A:627:LYS:CB	0.40	3.00	15	1
1:A:602:PHE:C	1:A:609:CYS:HB2	0.40	2.37	10	1
1:A:656:VAL:HB	1:A:658:TYR:CE2	0.40	2.51	10	1
1:A:648:TRP:CZ3	1:A:717:LEU:HD13	0.40	2.49	9	1
1:A:582:PRO:HG3	1:A:692:PHE:CE1	0.40	2.52	7	1
1:A:603:ILE:HB	1:A:613:ILE:CG1	0.40	2.47	7	1

6.3 Torsion angles ⓘ

6.3.1 Protein backbone ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	136/182 (75%)	85±4 (62±3%)	37±3 (27±2%)	14±2 (10±2%)	1	10
All	All	2176/2912 (75%)	1357 (62%)	597 (27%)	222 (10%)	1	10

All 48 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	596	GLN	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	590	GLU	16
1	A	620	ARG	15
1	A	614	GLU	15
1	A	666	GLN	14
1	A	680	ILE	11
1	A	653	GLY	10
1	A	719	GLN	9
1	A	599	ASN	9
1	A	598	VAL	8
1	A	687	LYS	7
1	A	700	THR	7
1	A	718	LYS	7
1	A	616	ASN	6
1	A	677	GLU	5
1	A	589	GLN	4
1	A	683	ASP	4
1	A	661	ASN	4
1	A	665	ILE	4
1	A	575	GLY	4
1	A	630	HIS	3
1	A	652	THR	3
1	A	667	GLY	3
1	A	612	LYS	3
1	A	713	GLN	2
1	A	657	SER	2
1	A	704	ASN	2
1	A	682	TRP	2
1	A	621	VAL	2
1	A	644	LEU	2
1	A	685	ASN	2
1	A	686	ASN	2
1	A	703	PHE	2
1	A	660	ASN	2
1	A	678	ILE	2
1	A	645	ASP	1
1	A	613	ILE	1
1	A	602	PHE	1
1	A	701	GLY	1
1	A	629	ARG	1
1	A	688	PHE	1
1	A	684	LYS	1
1	A	603	ILE	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	656	VAL	1
1	A	694	VAL	1
1	A	716	VAL	1
1	A	617	ARG	1
1	A	725	ASP	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	127/165 (77%)	84±4 (66±3%)	43±4 (34±3%)	1	11
All	All	2032/2640 (77%)	1343 (66%)	689 (34%)	1	11

All 99 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	596	GLN	16
1	A	591	SER	16
1	A	583	LEU	16
1	A	577	PHE	16
1	A	698	ASP	16
1	A	624	PHE	16
1	A	699	THR	16
1	A	658	TYR	16
1	A	652	THR	16
1	A	629	ARG	15
1	A	628	LYS	15
1	A	729	LYS	15
1	A	720	THR	14
1	A	684	LYS	13
1	A	610	ASN	13
1	A	668	THR	13
1	A	714	ARG	13
1	A	659	LEU	12
1	A	645	ASP	11
1	A	611	CYS	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	603	ILE	11
1	A	692	PHE	11
1	A	599	ASN	10
1	A	612	LYS	10
1	A	702	LEU	10
1	A	713	GLN	9
1	A	719	GLN	9
1	A	619	SER	9
1	A	722	GLU	9
1	A	728	LYS	9
1	A	605	ARG	9
1	A	621	VAL	9
1	A	646	ASP	9
1	A	717	LEU	9
1	A	595	GLN	9
1	A	627	LYS	8
1	A	620	ARG	8
1	A	647	ILE	8
1	A	649	TYR	7
1	A	676	ASP	7
1	A	615	ASP	7
1	A	671	LEU	7
1	A	687	LYS	7
1	A	617	ARG	7
1	A	695	GLU	7
1	A	681	ILE	7
1	A	590	GLU	6
1	A	700	THR	6
1	A	623	CYS	6
1	A	679	LYS	6
1	A	718	LYS	6
1	A	663	ARG	6
1	A	581	LYS	6
1	A	587	ILE	5
1	A	686	ASN	5
1	A	724	LYS	5
1	A	669	LYS	5
1	A	677	GLU	5
1	A	608	ASP	5
1	A	576	ARG	5
1	A	664	MET	4
1	A	614	GLU	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	589	GLN	4
1	A	683	ASP	4
1	A	704	ASN	4
1	A	660	ASN	4
1	A	705	GLU	4
1	A	592	LEU	4
1	A	613	ILE	4
1	A	602	PHE	4
1	A	694	VAL	4
1	A	730	LEU	4
1	A	685	ASN	4
1	A	661	ASN	4
1	A	723	GLU	3
1	A	680	ILE	3
1	A	725	ASP	3
1	A	585	ASP	3
1	A	655	ASN	3
1	A	662	ASN	3
1	A	607	GLU	3
1	A	579	THR	2
1	A	693	LYS	2
1	A	656	VAL	2
1	A	726	LEU	2
1	A	580	LEU	2
1	A	606	SER	2
1	A	618	LEU	1
1	A	688	PHE	1
1	A	609	CYS	1
1	A	674	ASP	1
1	A	593	GLU	1
1	A	630	HIS	1
1	A	586	SER	1
1	A	616	ASN	1
1	A	665	ILE	1
1	A	598	VAL	1
1	A	689	VAL	1
1	A	703	PHE	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided