



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Jun 12, 2024 – 05:17 PM EDT

PDB ID : 1CX1
Title : SECOND N-TERMINAL CELLULOSE-BINDING DOMAIN FROM CEL-
LULOMONAS FIMI BETA-1,4-GLUCANASE C, NMR, 22 STRUCTURES
Authors : Brun, E.; Johnson, P.E.; Creagh, L.A.; Haynes, C.A.; Tomme, P.; Webster,
P.; Kilburn, D.G.; McIntosh, L.P.
Deposited on : 1999-08-27

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

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/NMRValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

The following versions of software and data (see [references ⓘ](#)) were used in the production of this report:

MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.36.2

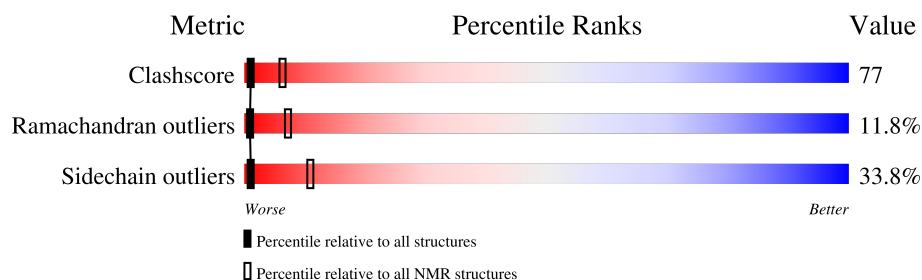
1 Overall quality at a glance

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	158937	12864
Ramachandran outliers	154571	11451
Sidechain outliers	154315	11428

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	153	<div> <div></div> <div>15%</div> <div>56%</div> <div>20%</div> <div>8%</div> </div>

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 22 models. Model 22 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:7-A:87, A:92-A:150 (140)	0.81	22

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 2 clusters and 2 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 11, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22
2	10, 13
Single-model clusters	2; 12

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2164 atoms, of which 1044 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called ENDOGLUCANASE C.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	153	Total	C	H	N	O	S	0
			2164	708	1044	179	229	4	

There are 2 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1	ALA	VAL	CLONING ARTIFACT	UNP P14090
A	2	SER	ALA	CLONING ARTIFACT	UNP P14090

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide 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: ENDOGLUCANASE C

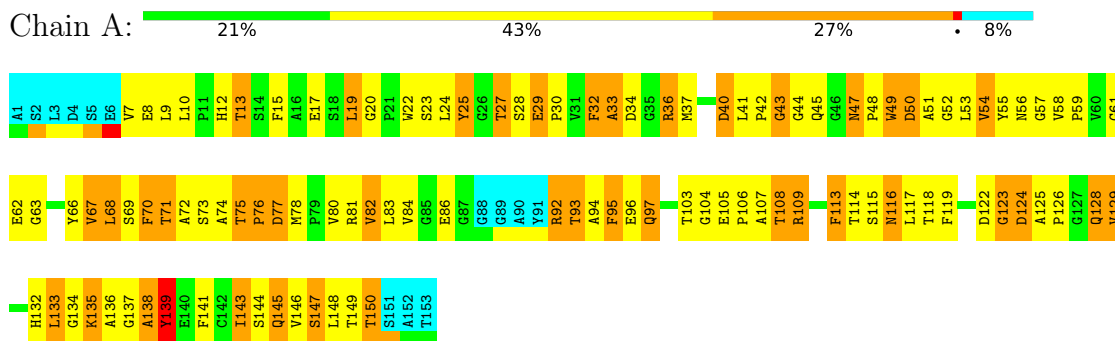


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

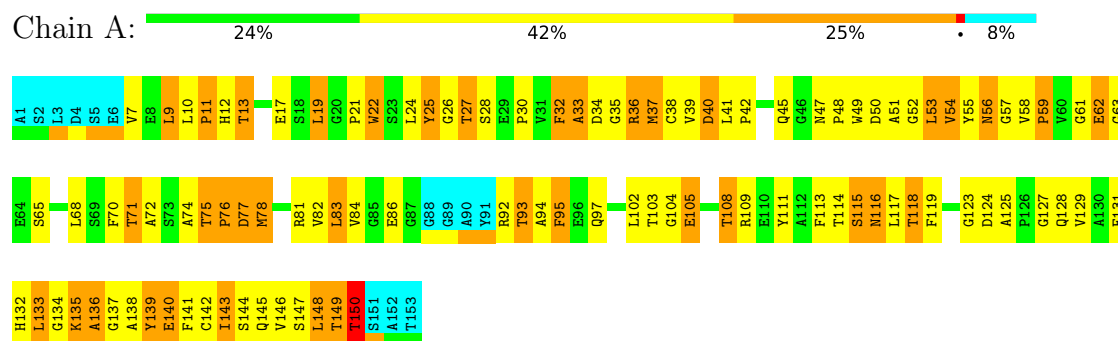
4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: ENDOGLUCANASE C



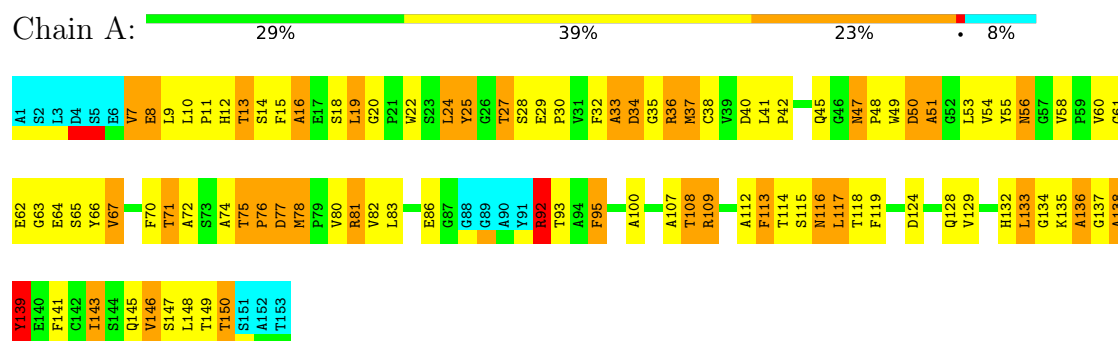
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: ENDOGLUCANASE C



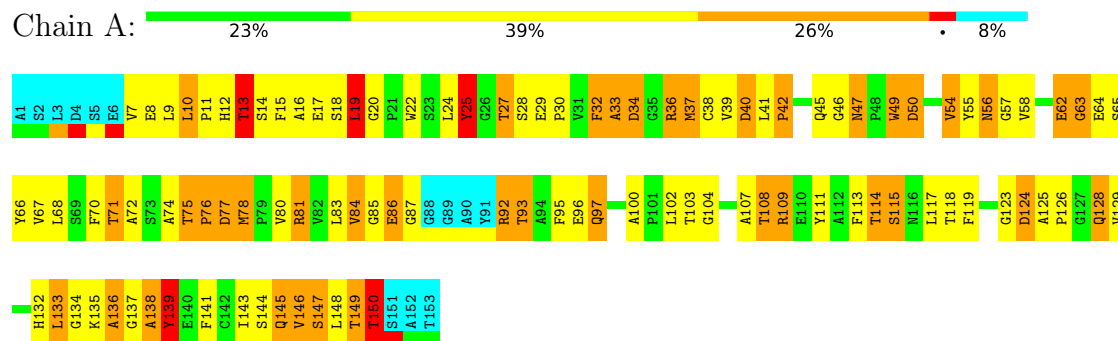
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: ENDOGLUCANASE C



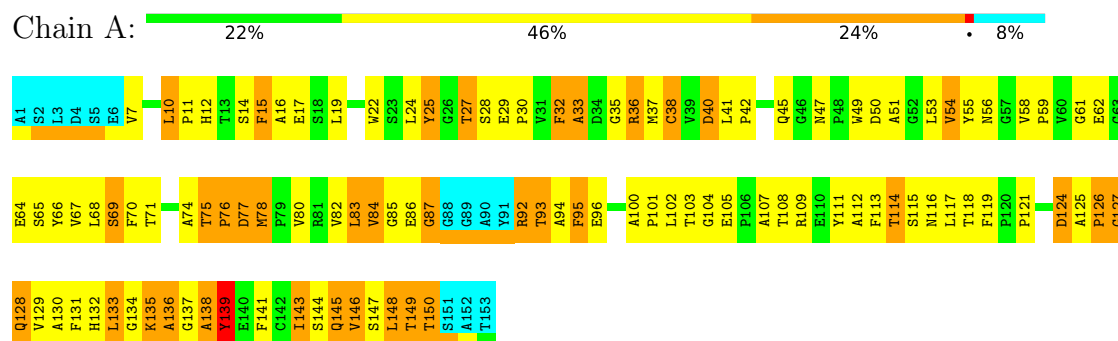
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: ENDOGLUCANASE C



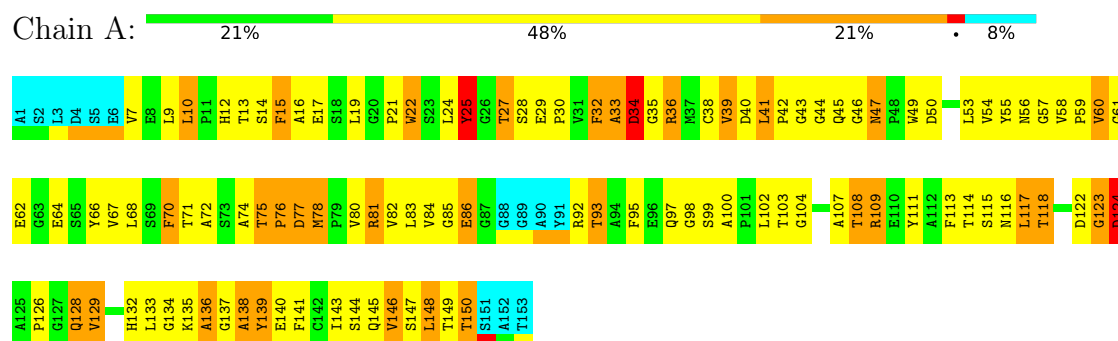
4.2.5 Score per residue for model 5

• Molecule 1: ENDOGLUCANASE C



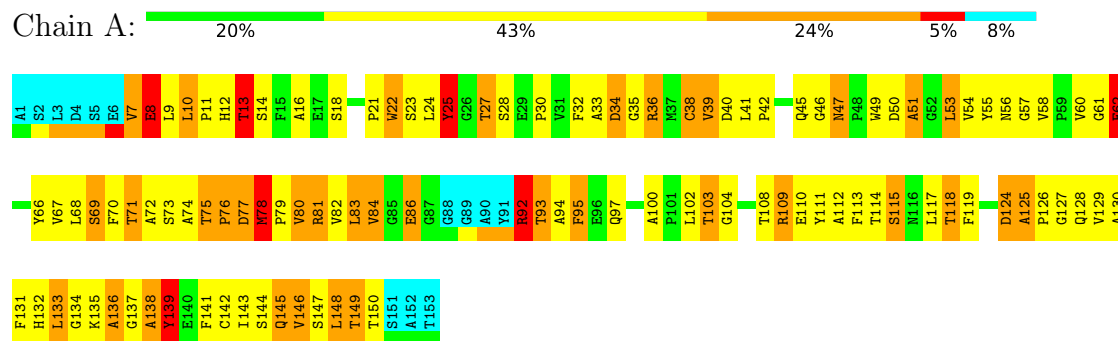
4.2.6 Score per residue for model 6

• Molecule 1: ENDOGLUCANASE C



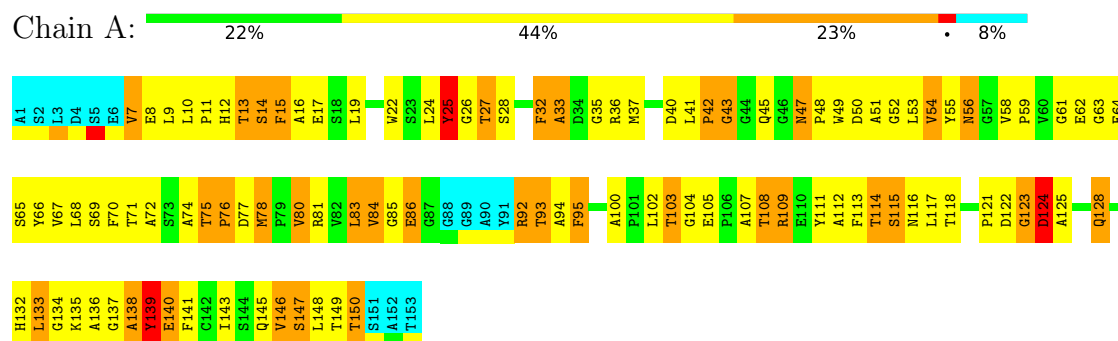
4.2.7 Score per residue for model 7

• Molecule 1: ENDOGLUCANASE C



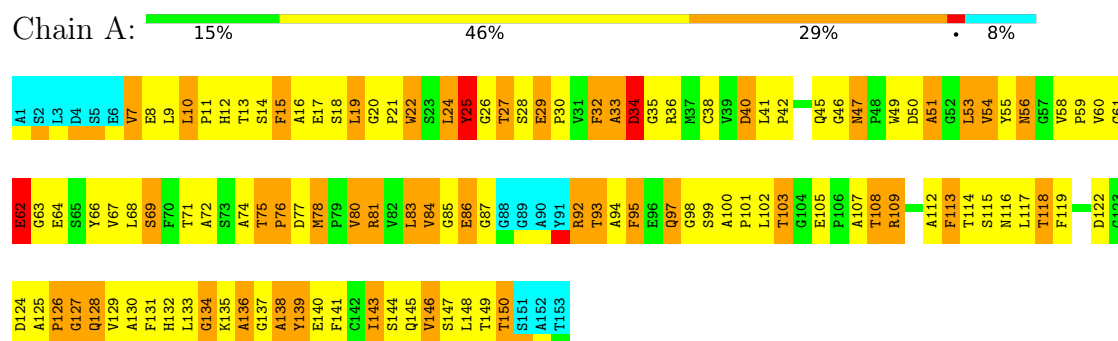
4.2.8 Score per residue for model 8

• Molecule 1: ENDOGLUCANASE C



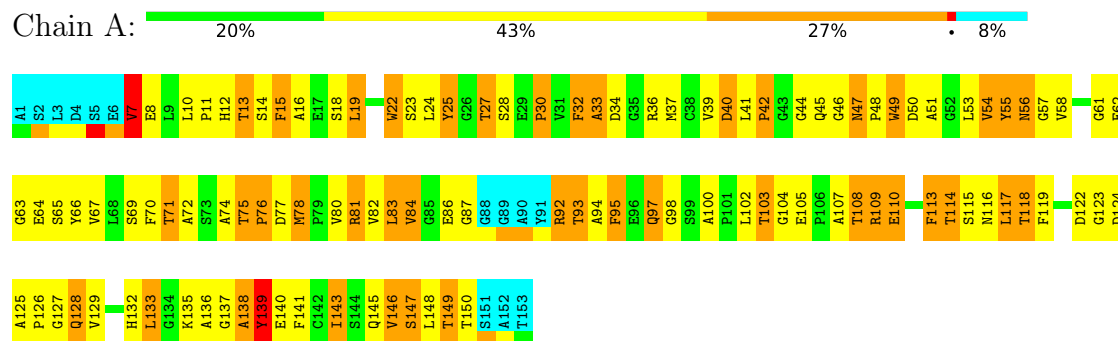
4.2.9 Score per residue for model 9

• Molecule 1: ENDOGLUCANASE C



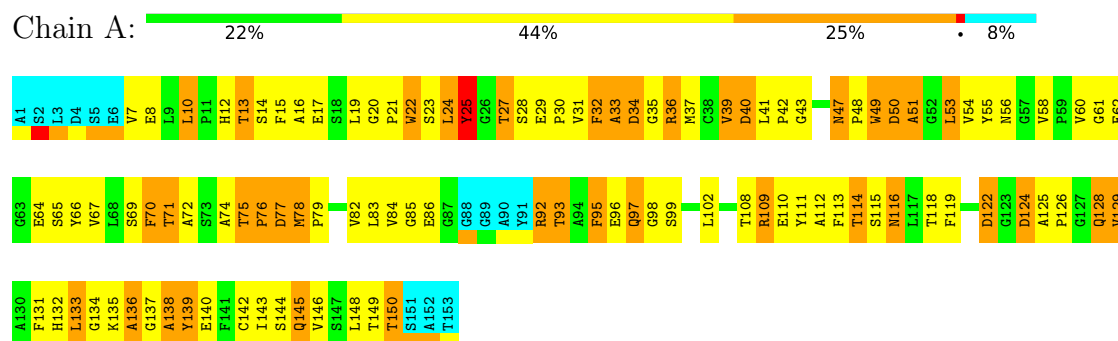
4.2.10 Score per residue for model 10

• Molecule 1: ENDOGLUCANASE C



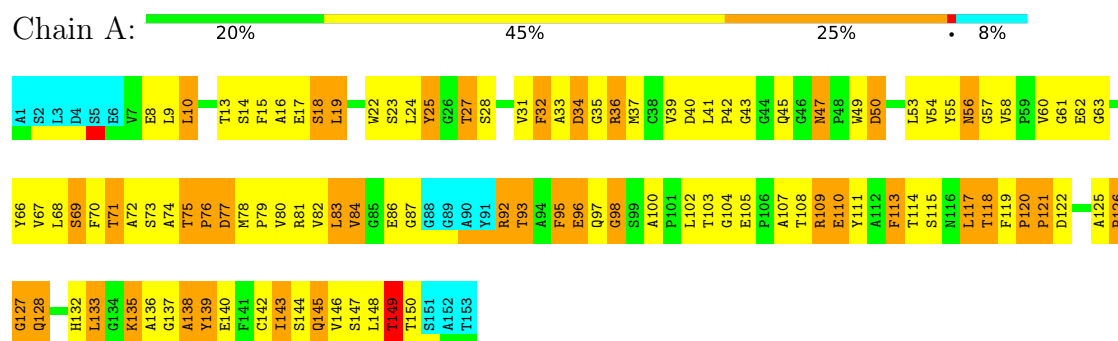
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: ENDOGLUCANASE C



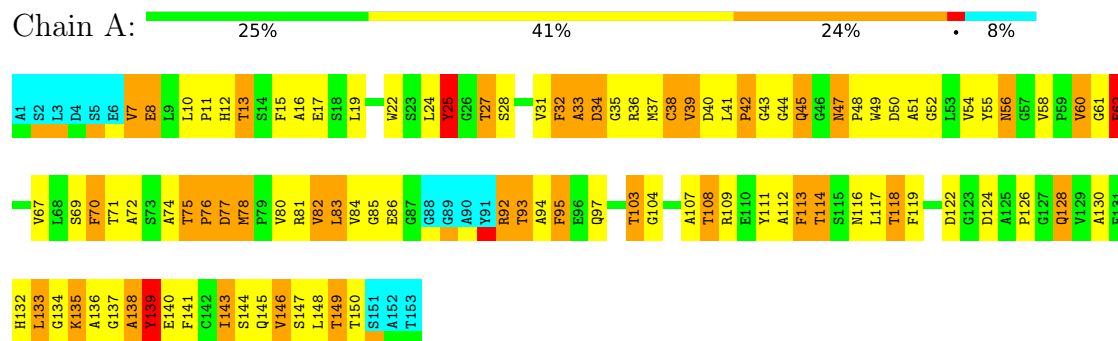
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: ENDOGLUCANASE C



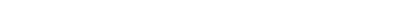
4.2.13 Score per residue for model 13

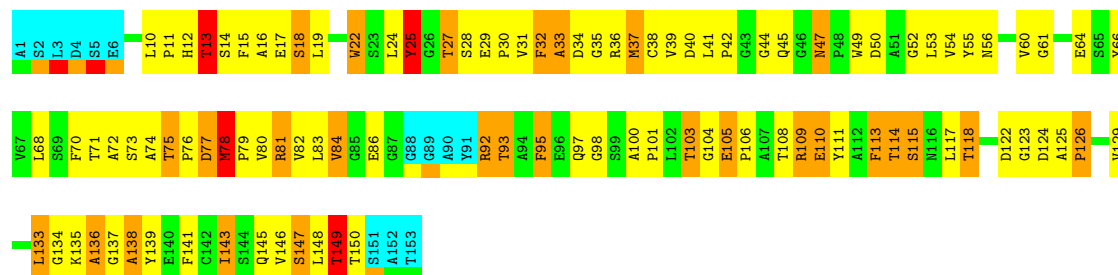
- Molecule 1: ENDOGLUCANASE C



4.2.14 Score per residue for model 14

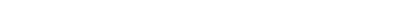
- Molecule 1: ENDOGLUCANASE C

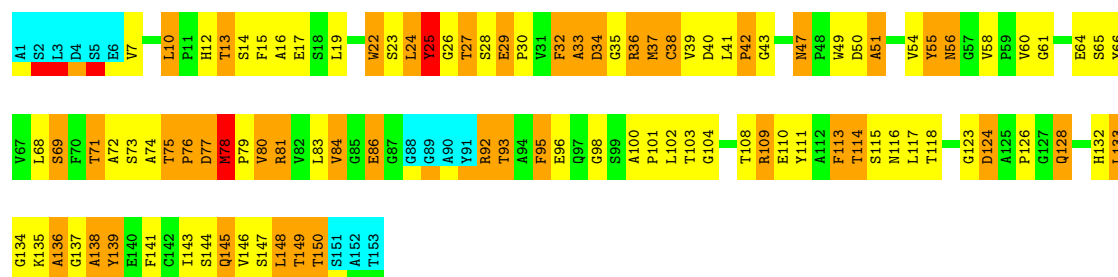
Chain A:  25% 45% 18% 2% 10%



4.2.15 Score per residue for model 15


- Molecule 1: ENDOGLUCANASE C

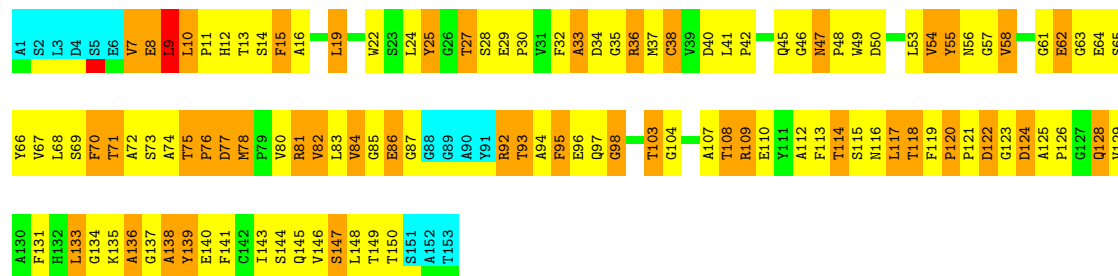
Chain A:  26% 37% 27% 8%



4.2.16 Score per residue for model 16

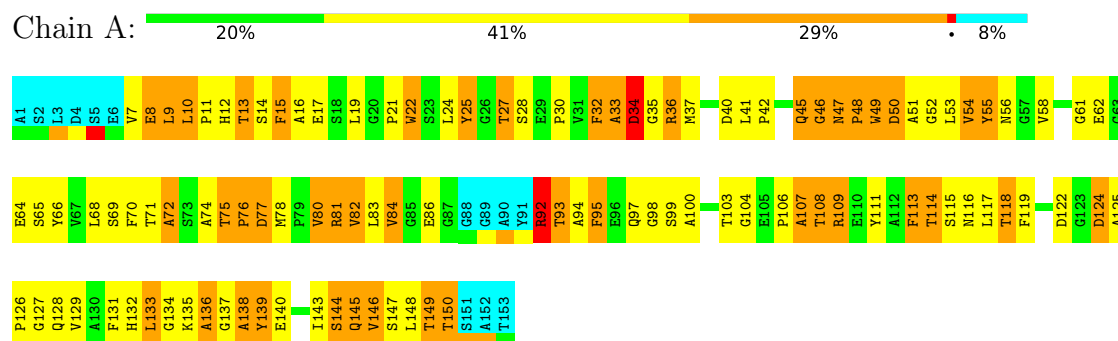
- Molecule 1: ENDOGLUCANASE C

Chain A:  17% 45% 29% 8%



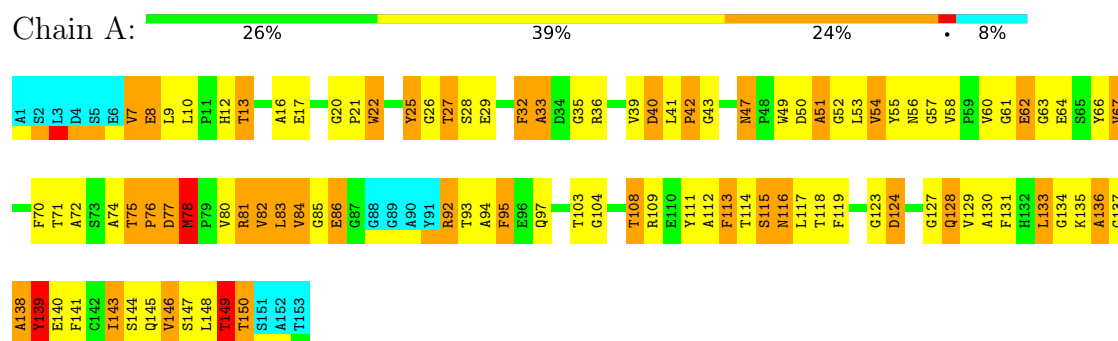
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: ENDOGLUCANASE C



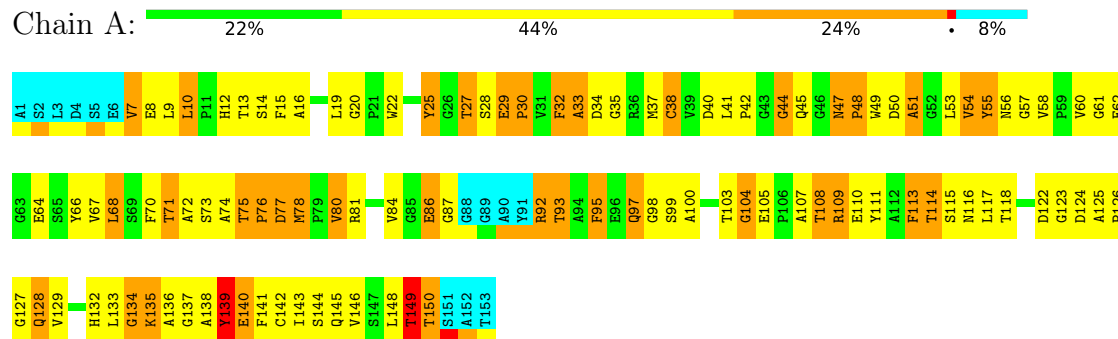
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: ENDOGLUCANASE C



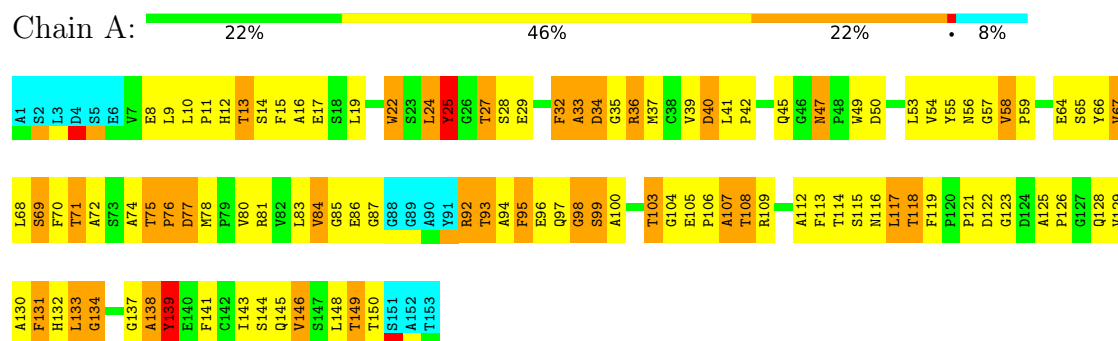
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: ENDOGLUCANASE C



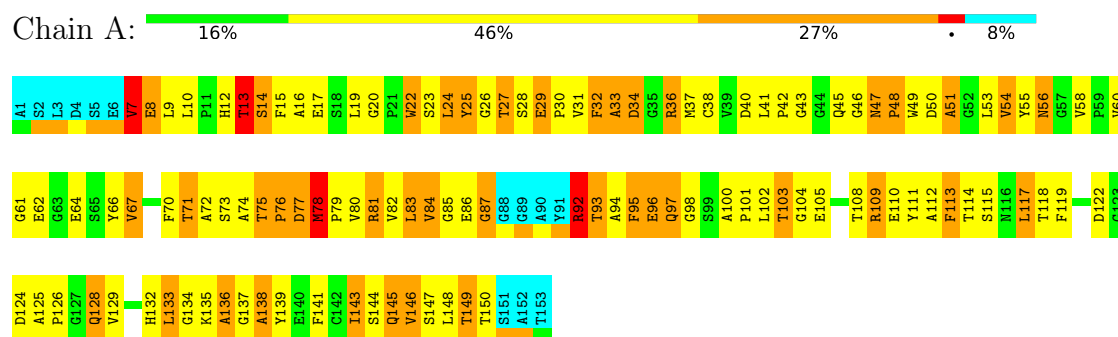
4.2.20 Score per residue for model 20

• Molecule 1: ENDOGLUCANASE C



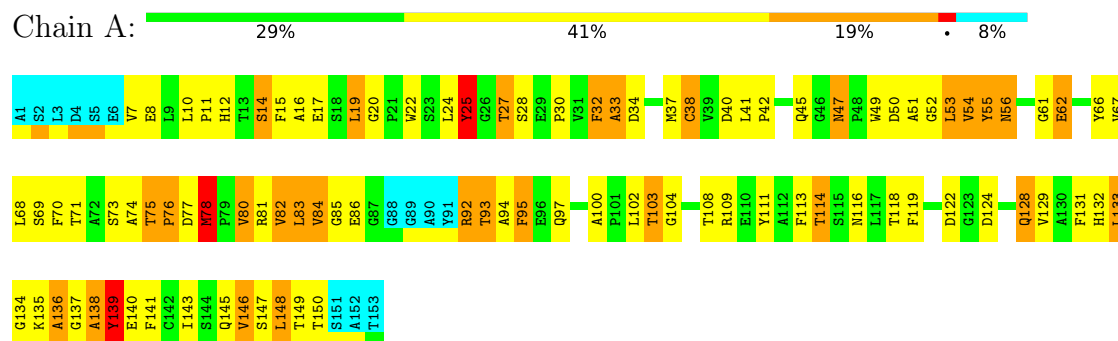
4.2.21 Score per residue for model 21

• Molecule 1: ENDOGLUCANASE C



4.2.22 Score per residue for model 22 (medoid)

• Molecule 1: ENDOGLUCANASE C



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *ALL CALCULATIONS WERE PERFORMED USING X-PLOR V3.8 WITH SCRIPTS FROM THE X-PLOR 3.1 MANUAL A. A. BRUNGER (1992), NEW HAVEN: YALE UNIVERSITY PRESS ACCORDING TO THE METHOD DESCRIBED BY M. NILGES, G. M. CLORE & A. M. GRONENBORN.*

Of the 60 calculated structures, 22 were deposited, based on the following criterion: *STRUCTURES WITH ACCEPTABLE COVALENT GEOMETRY, STRUCTURES WITH THE LEAST RESTRAINT VIOLATIONS, STRUCTURES WITH THE LOWEST ENERGY.*

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	structure solution	3.8
X-PLOR	refinement	3.8

No chemical shift data was provided.

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1034	969	969	153±14
All	All	22748	21318	21318	3375

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 77.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:LEU:HD12	1:A:55:TYR:CZ	0.95	1.95	17	4
1:A:24:LEU:HD12	1:A:24:LEU:O	0.94	1.62	5	4
1:A:53:LEU:HD22	1:A:53:LEU:N	0.90	1.81	17	3
1:A:41:LEU:HD22	1:A:41:LEU:N	0.90	1.81	6	6
1:A:80:VAL:HG11	1:A:102:LEU:HD12	0.90	1.43	22	4
1:A:27:THR:OG1	1:A:28:SER:N	0.88	2.05	22	22
1:A:19:LEU:HD22	1:A:19:LEU:N	0.88	1.84	2	2
1:A:40:ASP:C	1:A:41:LEU:HD22	0.87	1.90	11	15
1:A:55:TYR:O	1:A:129:VAL:HG12	0.87	1.69	5	4
1:A:22:TRP:CH2	1:A:146:VAL:HG21	0.87	2.04	5	9
1:A:68:LEU:HD23	1:A:69:SER:N	0.86	1.86	17	3
1:A:133:LEU:HD12	1:A:133:LEU:N	0.86	1.84	4	18
1:A:19:LEU:HD22	1:A:19:LEU:H	0.85	1.29	1	2
1:A:80:VAL:HG12	1:A:139:TYR:OH	0.85	1.70	5	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:148:LEU:HD12	1:A:149:THR:N	0.84	1.87	22	11
1:A:24:LEU:HD12	1:A:24:LEU:N	0.84	1.88	11	2
1:A:19:LEU:H	1:A:19:LEU:HD13	0.83	1.33	3	3
1:A:24:LEU:C	1:A:24:LEU:HD22	0.83	1.94	20	1
1:A:7:VAL:HG12	1:A:7:VAL:O	0.83	1.72	1	1
1:A:10:LEU:HD12	1:A:55:TYR:CE2	0.83	2.09	4	4
1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:HD13	0.83	1.87	1	3
1:A:13:THR:HG23	1:A:13:THR:O	0.82	1.73	16	1
1:A:22:TRP:CH2	1:A:146:VAL:HG11	0.81	2.10	19	5
1:A:117:LEU:HD23	1:A:118:THR:N	0.81	1.91	7	4
1:A:95:PHE:CD2	1:A:113:PHE:CE1	0.80	2.70	2	8
1:A:58:VAL:O	1:A:58:VAL:HG13	0.80	1.75	8	3
1:A:27:THR:OG1	1:A:41:LEU:HD21	0.80	1.76	8	3
1:A:7:VAL:HG22	1:A:7:VAL:O	0.80	1.76	13	1
1:A:95:PHE:CE2	1:A:113:PHE:CE1	0.80	2.69	1	12
1:A:10:LEU:HD13	1:A:12:HIS:H	0.80	1.34	18	8
1:A:146:VAL:HG13	1:A:146:VAL:O	0.80	1.75	9	1
1:A:22:TRP:CD1	1:A:55:TYR:CD1	0.79	2.70	2	2
1:A:22:TRP:NE1	1:A:55:TYR:CD2	0.79	2.50	1	3
1:A:135:LYS:H	1:A:138:ALA:HB2	0.79	1.37	4	3
1:A:107:ALA:HB1	1:A:109:ARG:NH1	0.79	1.92	13	3
1:A:42:PRO:O	1:A:138:ALA:HB3	0.79	1.78	4	2
1:A:31:VAL:O	1:A:31:VAL:HG13	0.79	1.76	21	2
1:A:24:LEU:N	1:A:24:LEU:HD23	0.78	1.94	21	2
1:A:19:LEU:O	1:A:19:LEU:HD22	0.78	1.78	9	1
1:A:135:LYS:N	1:A:138:ALA:HB2	0.78	1.93	7	10
1:A:19:LEU:HD23	1:A:19:LEU:N	0.78	1.94	15	2
1:A:58:VAL:HG22	1:A:58:VAL:O	0.77	1.77	6	2
1:A:47:ASN:ND2	1:A:49:TRP:NE1	0.77	2.33	15	1
1:A:71:THR:HG23	1:A:108:THR:HG23	0.77	1.54	20	9
1:A:74:ALA:HB1	1:A:139:TYR:CE2	0.77	2.14	3	12
1:A:37:MET:SD	1:A:38:CYS:N	0.77	2.58	14	2
1:A:72:ALA:N	1:A:109:ARG:NH2	0.77	2.32	10	4
1:A:41:LEU:O	1:A:138:ALA:HB1	0.77	1.80	12	2
1:A:117:LEU:HD12	1:A:117:LEU:N	0.77	1.93	21	1
1:A:58:VAL:O	1:A:58:VAL:HG23	0.77	1.79	15	1
1:A:10:LEU:HD13	1:A:10:LEU:O	0.77	1.80	8	8
1:A:24:LEU:HD22	1:A:24:LEU:C	0.76	2.01	9	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:19:LEU:H	0.76	1.40	15	2
1:A:15:PHE:CD2	1:A:143:ILE:HD11	0.76	2.15	5	3
1:A:116:ASN:O	1:A:117:LEU:HD22	0.76	1.81	3	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:TYR:CD1	1:A:25:TYR:N	0.76	2.53	13	10
1:A:39:VAL:HG23	1:A:41:LEU:HD21	0.76	1.55	7	2
1:A:148:LEU:C	1:A:148:LEU:HD12	0.75	2.02	2	2
1:A:47:ASN:ND2	1:A:47:ASN:N	0.75	2.35	3	8
1:A:83:LEU:HD21	1:A:132:HIS:CE1	0.75	2.16	5	4
1:A:146:VAL:O	1:A:146:VAL:HG13	0.75	1.81	3	14
1:A:148:LEU:N	1:A:148:LEU:HD23	0.74	1.96	19	1
1:A:60:VAL:HG12	1:A:115:SER:OG	0.74	1.80	11	2
1:A:148:LEU:H	1:A:148:LEU:HD23	0.74	1.43	7	1
1:A:7:VAL:N	1:A:149:THR:OG1	0.74	2.21	13	6
1:A:113:PHE:CD1	1:A:113:PHE:N	0.74	2.56	14	20
1:A:72:ALA:O	1:A:102:LEU:HD12	0.74	1.83	9	1
1:A:50:ASP:O	1:A:51:ALA:HB2	0.73	1.83	3	9
1:A:58:VAL:HG12	1:A:58:VAL:O	0.73	1.82	21	3
1:A:83:LEU:CD2	1:A:132:HIS:ND1	0.73	2.52	11	5
1:A:32:PHE:N	1:A:32:PHE:CD1	0.73	2.56	11	17
1:A:72:ALA:N	1:A:109:ARG:HH22	0.73	1.81	17	4
1:A:19:LEU:HD13	1:A:19:LEU:N	0.72	1.99	3	1
1:A:78:MET:SD	1:A:139:TYR:CD1	0.72	2.82	17	1
1:A:133:LEU:HD12	1:A:133:LEU:H	0.72	1.44	13	13
1:A:100:ALA:HB1	1:A:111:TYR:OH	0.72	1.85	17	4
1:A:70:PHE:CD1	1:A:70:PHE:N	0.72	2.57	11	10
1:A:19:LEU:CD2	1:A:24:LEU:HD21	0.72	2.14	22	1
1:A:92:ARG:HH11	1:A:92:ARG:CB	0.72	1.98	22	5
1:A:138:ALA:O	1:A:139:TYR:CG	0.72	2.43	11	2
1:A:109:ARG:N	1:A:109:ARG:CD	0.72	2.53	11	1
1:A:77:ASP:O	1:A:78:MET:SD	0.72	2.48	14	5
1:A:36:ARG:NH2	1:A:38:CYS:SG	0.72	2.63	21	1
1:A:117:LEU:HD12	1:A:117:LEU:H	0.71	1.42	21	1
1:A:53:LEU:N	1:A:53:LEU:CD2	0.71	2.53	17	3
1:A:97:GLN:NE2	1:A:99:SER:H	0.71	1.82	9	2
1:A:36:ARG:CZ	1:A:38:CYS:SG	0.71	2.77	21	1
1:A:22:TRP:NE1	1:A:55:TYR:CG	0.71	2.58	2	2
1:A:148:LEU:HD12	1:A:148:LEU:C	0.71	2.05	22	5
1:A:22:TRP:CZ2	1:A:146:VAL:HG11	0.71	2.20	16	2
1:A:117:LEU:HD13	1:A:119:PHE:CE2	0.71	2.20	21	1
1:A:54:VAL:HG13	1:A:130:ALA:HB2	0.71	1.63	20	2
1:A:10:LEU:O	1:A:12:HIS:N	0.70	2.24	7	14
1:A:138:ALA:O	1:A:139:TYR:CD1	0.70	2.44	11	1
1:A:137:GLY:O	1:A:138:ALA:O	0.70	2.08	22	19
1:A:7:VAL:CA	1:A:149:THR:OG1	0.70	2.40	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:THR:OG1	1:A:94:ALA:N	0.70	2.24	10	14
1:A:139:TYR:CD1	1:A:139:TYR:N	0.70	2.57	20	16
1:A:62:GLU:N	1:A:115:SER:OG	0.70	2.25	2	6
1:A:72:ALA:H	1:A:109:ARG:NH2	0.70	1.85	10	4
1:A:95:PHE:CE2	1:A:113:PHE:CZ	0.70	2.80	1	2
1:A:24:LEU:CD1	1:A:24:LEU:N	0.70	2.54	9	2
1:A:24:LEU:N	1:A:24:LEU:HD13	0.70	2.02	9	2
1:A:117:LEU:HD12	1:A:119:PHE:CZ	0.70	2.22	18	1
1:A:137:GLY:O	1:A:139:TYR:CD2	0.70	2.45	20	1
1:A:10:LEU:CD1	1:A:55:TYR:CE2	0.70	2.75	5	1
1:A:10:LEU:HD23	1:A:55:TYR:OH	0.70	1.87	18	3
1:A:78:MET:SD	1:A:139:TYR:CE2	0.70	2.84	18	1
1:A:71:THR:OG1	1:A:145:GLN:N	0.70	2.25	10	15
1:A:107:ALA:HB3	1:A:109:ARG:NH2	0.70	2.02	9	1
1:A:38:CYS:SG	1:A:140:GLU:OE2	0.70	2.50	19	1
1:A:135:LYS:O	1:A:138:ALA:N	0.69	2.24	2	18
1:A:55:TYR:CE2	1:A:56:ASN:O	0.69	2.45	4	13
1:A:135:LYS:O	1:A:137:GLY:N	0.69	2.25	2	18
1:A:33:ALA:O	1:A:35:GLY:N	0.69	2.26	13	10
1:A:58:VAL:HG22	1:A:148:LEU:CD2	0.69	2.17	11	4
1:A:49:TRP:CH2	1:A:50:ASP:OD2	0.69	2.45	17	1
1:A:72:ALA:H	1:A:109:ARG:HH22	0.69	1.29	17	4
1:A:55:TYR:CZ	1:A:56:ASN:O	0.69	2.45	15	9
1:A:17:GLU:O	1:A:32:PHE:CD2	0.69	2.46	15	15
1:A:19:LEU:H	1:A:19:LEU:CD2	0.69	1.94	1	4
1:A:49:TRP:CZ3	1:A:50:ASP:OD1	0.69	2.46	11	5
1:A:116:ASN:C	1:A:117:LEU:HD22	0.69	2.06	8	2
1:A:86:GLU:OE2	1:A:119:PHE:CG	0.69	2.46	20	1
1:A:116:ASN:ND2	1:A:116:ASN:H	0.69	1.84	3	1
1:A:49:TRP:CE3	1:A:50:ASP:OD1	0.69	2.46	11	5
1:A:86:GLU:OE2	1:A:119:PHE:CD2	0.69	2.46	20	2
1:A:19:LEU:HD22	1:A:19:LEU:C	0.69	2.08	9	1
1:A:25:TYR:CD1	1:A:25:TYR:O	0.69	2.46	12	11
1:A:59:PRO:O	1:A:66:TYR:CZ	0.69	2.46	6	3
1:A:17:GLU:O	1:A:32:PHE:CG	0.69	2.46	9	1
1:A:86:GLU:OE2	1:A:119:PHE:CZ	0.69	2.46	21	2
1:A:55:TYR:CE1	1:A:56:ASN:O	0.69	2.46	21	3
1:A:7:VAL:O	1:A:9:LEU:HD12	0.69	1.88	17	1
1:A:7:VAL:O	1:A:7:VAL:HG13	0.69	1.87	18	2
1:A:38:CYS:SG	1:A:140:GLU:OE1	0.69	2.50	19	1
1:A:47:ASN:OD1	1:A:49:TRP:CE3	0.69	2.46	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:138:ALA:O	1:A:139:TYR:CD2	0.69	2.46	8	1
1:A:45:GLN:O	1:A:136:ALA:N	0.69	2.26	8	4
1:A:48:PRO:O	1:A:132:HIS:CD2	0.69	2.46	21	2
1:A:118:THR:O	1:A:119:PHE:CG	0.68	2.46	2	6
1:A:86:GLU:OE1	1:A:119:PHE:CE1	0.68	2.46	5	3
1:A:49:TRP:O	1:A:49:TRP:CD1	0.68	2.46	6	3
1:A:133:LEU:H	1:A:133:LEU:HD12	0.68	1.48	22	4
1:A:131:PHE:N	1:A:131:PHE:CD1	0.68	2.60	20	6
1:A:97:GLN:OE1	1:A:98:GLY:N	0.68	2.27	11	2
1:A:97:GLN:OE1	1:A:111:TYR:CD2	0.68	2.46	12	2
1:A:19:LEU:HD11	1:A:24:LEU:HD21	0.68	1.66	10	2
1:A:148:LEU:C	1:A:149:THR:HG22	0.68	2.09	18	4
1:A:115:SER:O	1:A:117:LEU:N	0.68	2.26	18	2
1:A:49:TRP:CG	1:A:49:TRP:O	0.68	2.45	17	1
1:A:57:GLY:O	1:A:58:VAL:HG13	0.68	1.88	1	3
1:A:47:ASN:OD1	1:A:49:TRP:CD1	0.68	2.46	2	3
1:A:86:GLU:OE1	1:A:119:PHE:CZ	0.68	2.46	2	3
1:A:118:THR:O	1:A:119:PHE:CD1	0.68	2.46	10	3
1:A:72:ALA:O	1:A:109:ARG:NH2	0.68	2.27	17	4
1:A:63:GLY:N	1:A:115:SER:OG	0.68	2.27	10	4
1:A:97:GLN:OE1	1:A:100:ALA:N	0.68	2.27	19	1
1:A:54:VAL:HG12	1:A:129:VAL:O	0.68	1.89	22	7
1:A:24:LEU:O	1:A:25:TYR:CG	0.68	2.46	9	9
1:A:24:LEU:HD13	1:A:30:PRO:HG2	0.68	1.65	7	4
1:A:107:ALA:O	1:A:109:ARG:NH1	0.68	2.27	3	4
1:A:117:LEU:HD22	1:A:119:PHE:CE1	0.68	2.24	9	2
1:A:101:PRO:O	1:A:109:ARG:NH2	0.68	2.27	14	2
1:A:40:ASP:O	1:A:41:LEU:HD22	0.68	1.89	8	11
1:A:144:SER:O	1:A:145:GLN:NE2	0.68	2.26	1	2
1:A:95:PHE:CE2	1:A:113:PHE:CD1	0.68	2.82	11	3
1:A:61:GLY:N	1:A:66:TYR:OH	0.68	2.27	7	1
1:A:97:GLN:OE1	1:A:99:SER:N	0.68	2.26	19	2
1:A:144:SER:OG	1:A:145:GLN:NE2	0.68	2.27	20	2
1:A:123:GLY:O	1:A:125:ALA:N	0.68	2.27	1	2
1:A:7:VAL:O	1:A:9:LEU:N	0.68	2.27	18	3
1:A:77:ASP:OD1	1:A:104:GLY:N	0.68	2.27	14	1
1:A:22:TRP:CE2	1:A:55:TYR:CD2	0.68	2.81	1	4
1:A:106:PRO:O	1:A:107:ALA:HB2	0.68	1.88	17	3
1:A:14:SER:O	1:A:16:ALA:N	0.68	2.27	15	17
1:A:42:PRO:O	1:A:135:LYS:NZ	0.68	2.27	12	1
1:A:109:ARG:NH1	1:A:111:TYR:OH	0.68	2.27	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:ASN:ND2	1:A:50:ASP:OD1	0.67	2.27	5	5
1:A:47:ASN:ND2	1:A:50:ASP:OD2	0.67	2.27	9	3
1:A:83:LEU:HD21	1:A:132:HIS:ND1	0.67	2.04	5	4
1:A:62:GLU:N	1:A:62:GLU:OE1	0.67	2.27	7	1
1:A:62:GLU:N	1:A:62:GLU:OE2	0.67	2.27	9	1
1:A:139:TYR:CD1	1:A:140:GLU:N	0.67	2.62	18	3
1:A:79:PRO:O	1:A:81:ARG:NH1	0.67	2.27	12	1
1:A:97:GLN:OE1	1:A:111:TYR:CG	0.67	2.47	12	1
1:A:48:PRO:O	1:A:50:ASP:N	0.67	2.27	1	4
1:A:86:GLU:OE1	1:A:119:PHE:CG	0.67	2.47	9	2
1:A:97:GLN:NE2	1:A:99:SER:O	0.67	2.27	11	1
1:A:12:HIS:CG	1:A:12:HIS:O	0.67	2.45	6	1
1:A:135:LYS:O	1:A:136:ALA:HB3	0.67	1.89	19	2
1:A:40:ASP:N	1:A:40:ASP:OD1	0.67	2.28	18	9
1:A:62:GLU:OE1	1:A:63:GLY:N	0.67	2.28	2	3
1:A:66:TYR:O	1:A:112:ALA:HB1	0.67	1.90	11	6
1:A:64:GLU:N	1:A:115:SER:OG	0.67	2.27	9	4
1:A:45:GLN:O	1:A:47:ASN:N	0.67	2.27	9	4
1:A:41:LEU:CB	1:A:138:ALA:HB3	0.67	2.19	11	1
1:A:48:PRO:O	1:A:132:HIS:CE1	0.67	2.47	19	1
1:A:109:ARG:NH2	1:A:110:GLU:O	0.67	2.27	21	1
1:A:15:PHE:N	1:A:144:SER:O	0.67	2.27	9	6
1:A:41:LEU:N	1:A:42:PRO:CD	0.67	2.58	1	4
1:A:47:ASN:N	1:A:50:ASP:OD2	0.67	2.27	2	3
1:A:47:ASN:N	1:A:47:ASN:HD22	0.67	1.87	3	3
1:A:34:ASP:OD1	1:A:34:ASP:N	0.67	2.27	7	5
1:A:149:THR:OG1	1:A:150:THR:N	0.67	2.28	12	20
1:A:97:GLN:NE2	1:A:111:TYR:CG	0.67	2.63	18	3
1:A:86:GLU:O	1:A:128:GLN:NE2	0.67	2.27	12	8
1:A:45:GLN:NE2	1:A:50:ASP:O	0.67	2.27	21	3
1:A:143:ILE:HD12	1:A:144:SER:N	0.67	2.05	1	1
1:A:86:GLU:N	1:A:86:GLU:OE1	0.67	2.28	11	6
1:A:41:LEU:N	1:A:41:LEU:CD2	0.67	2.57	6	5
1:A:108:THR:O	1:A:109:ARG:NH1	0.67	2.27	6	4
1:A:64:GLU:O	1:A:115:SER:N	0.67	2.27	16	11
1:A:137:GLY:O	1:A:139:TYR:N	0.67	2.27	11	1
1:A:77:ASP:O	1:A:78:MET:CG	0.66	2.43	22	7
1:A:37:MET:SD	1:A:37:MET:O	0.66	2.54	2	6
1:A:24:LEU:C	1:A:25:TYR:CG	0.66	2.69	14	11
1:A:40:ASP:C	1:A:41:LEU:HD12	0.66	2.11	21	5
1:A:38:CYS:SG	1:A:141:PHE:O	0.66	2.53	13	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:ALA:N	1:A:103:THR:O	0.66	2.27	14	6
1:A:67:VAL:HG13	1:A:112:ALA:HB2	0.66	1.67	18	10
1:A:47:ASN:ND2	1:A:47:ASN:H	0.66	1.88	12	3
1:A:86:GLU:OE2	1:A:119:PHE:CE2	0.66	2.49	7	2
1:A:103:THR:OG1	1:A:104:GLY:N	0.66	2.27	20	17
1:A:81:ARG:NH2	1:A:97:GLN:O	0.66	2.28	6	1
1:A:81:ARG:CG	1:A:81:ARG:HH11	0.66	2.04	10	10
1:A:84:VAL:HG13	1:A:129:VAL:HG22	0.66	1.66	18	4
1:A:86:GLU:CD	1:A:119:PHE:CG	0.66	2.70	7	2
1:A:78:MET:SD	1:A:139:TYR:CD2	0.66	2.89	18	1
1:A:36:ARG:CB	1:A:36:ARG:CZ	0.66	2.74	6	4
1:A:71:THR:HG23	1:A:108:THR:CG2	0.66	2.21	20	10
1:A:92:ARG:CG	1:A:92:ARG:HH11	0.66	2.04	11	11
1:A:109:ARG:HH11	1:A:109:ARG:CG	0.65	2.04	1	5
1:A:10:LEU:CD1	1:A:22:TRP:HE1	0.65	2.04	5	7
1:A:47:ASN:CG	1:A:49:TRP:CZ3	0.65	2.69	5	1
1:A:82:VAL:HG13	1:A:97:GLN:CG	0.65	2.20	6	1
1:A:124:ASP:OD1	1:A:124:ASP:N	0.65	2.29	16	1
1:A:110:GLU:O	1:A:111:TYR:CD1	0.65	2.49	7	1
1:A:58:VAL:CG2	1:A:128:GLN:H	0.65	2.05	1	1
1:A:103:THR:O	1:A:105:GLU:N	0.65	2.30	19	5
1:A:86:GLU:CD	1:A:119:PHE:CE1	0.65	2.70	5	6
1:A:77:ASP:N	1:A:77:ASP:OD1	0.65	2.29	5	9
1:A:55:TYR:CD2	1:A:56:ASN:O	0.65	2.50	11	2
1:A:138:ALA:C	1:A:139:TYR:CG	0.65	2.70	8	3
1:A:92:ARG:HH11	1:A:92:ARG:CG	0.65	2.04	9	2
1:A:8:GLU:OE1	1:A:9:LEU:N	0.65	2.28	20	1
1:A:129:VAL:HG13	1:A:129:VAL:O	0.65	1.89	6	2
1:A:80:VAL:CG1	1:A:102:LEU:HD12	0.65	2.22	12	2
1:A:57:GLY:O	1:A:58:VAL:HG23	0.65	1.91	12	4
1:A:62:GLU:O	1:A:64:GLU:N	0.65	2.27	4	1
1:A:25:TYR:N	1:A:25:TYR:CD1	0.65	2.59	9	1
1:A:47:ASN:N	1:A:47:ASN:OD1	0.65	2.28	10	4
1:A:107:ALA:O	1:A:109:ARG:CZ	0.65	2.44	10	4
1:A:68:LEU:CD1	1:A:148:LEU:HD22	0.65	2.21	15	2
1:A:41:LEU:HD12	1:A:41:LEU:N	0.65	2.06	21	3
1:A:86:GLU:H	1:A:86:GLU:CD	0.65	1.96	22	5
1:A:148:LEU:H	1:A:148:LEU:CD2	0.65	2.05	7	1
1:A:13:THR:OG1	1:A:146:VAL:N	0.64	2.27	19	7
1:A:49:TRP:O	1:A:49:TRP:CD2	0.64	2.50	17	1
1:A:81:ARG:N	1:A:132:HIS:O	0.64	2.28	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:LEU:H	1:A:19:LEU:CD1	0.64	2.04	2	3
1:A:80:VAL:CG1	1:A:139:TYR:OH	0.64	2.45	16	10
1:A:109:ARG:CG	1:A:109:ARG:NH1	0.64	2.61	1	5
1:A:27:THR:CB	1:A:41:LEU:HD21	0.64	2.22	15	3
1:A:8:GLU:N	1:A:149:THR:OG1	0.64	2.30	13	1
1:A:78:MET:SD	1:A:137:GLY:O	0.64	2.56	1	1
1:A:82:VAL:HG13	1:A:97:GLN:HG2	0.64	1.70	6	1
1:A:47:ASN:O	1:A:49:TRP:N	0.64	2.27	17	5
1:A:41:LEU:O	1:A:138:ALA:CB	0.64	2.46	12	2
1:A:47:ASN:ND2	1:A:50:ASP:CG	0.64	2.51	13	6
1:A:81:ARG:CG	1:A:81:ARG:NH1	0.64	2.61	18	9
1:A:133:LEU:N	1:A:133:LEU:CD1	0.64	2.56	4	10
1:A:92:ARG:CG	1:A:92:ARG:NH1	0.64	2.61	11	11
1:A:108:THR:O	1:A:109:ARG:CZ	0.64	2.46	16	2
1:A:28:SER:OG	1:A:40:ASP:N	0.64	2.29	1	11
1:A:66:TYR:O	1:A:67:VAL:HG23	0.64	1.93	12	1
1:A:41:LEU:HD21	1:A:133:LEU:HD13	0.64	1.70	16	1
1:A:124:ASP:N	1:A:124:ASP:OD1	0.64	2.30	17	2
1:A:24:LEU:HD13	1:A:37:MET:SD	0.64	2.31	21	1
1:A:45:GLN:OE1	1:A:51:ALA:HB2	0.64	1.93	2	1
1:A:122:ASP:OD2	1:A:123:GLY:N	0.64	2.29	10	1
1:A:97:GLN:NE2	1:A:99:SER:C	0.64	2.50	11	1
1:A:7:VAL:H	1:A:149:THR:CB	0.64	2.04	17	1
1:A:72:ALA:CB	1:A:141:PHE:CZ	0.64	2.80	21	6
1:A:74:ALA:C	1:A:76:PRO:O	0.64	2.37	22	21
1:A:10:LEU:CD1	1:A:12:HIS:O	0.63	2.45	22	8
1:A:86:GLU:CD	1:A:86:GLU:H	0.63	1.96	7	5
1:A:68:LEU:HD23	1:A:68:LEU:C	0.63	2.14	7	2
1:A:81:ARG:CB	1:A:81:ARG:CZ	0.63	2.75	9	1
1:A:10:LEU:CD2	1:A:55:TYR:OH	0.63	2.47	10	3
1:A:133:LEU:CD2	1:A:141:PHE:CG	0.63	2.81	22	7
1:A:97:GLN:OE1	1:A:98:GLY:CA	0.63	2.46	9	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:30:PRO:CG	0.63	2.22	7	4
1:A:58:VAL:CG1	1:A:128:GLN:H	0.63	2.06	3	2
1:A:62:GLU:N	1:A:62:GLU:CD	0.63	2.51	7	2
1:A:107:ALA:HB3	1:A:109:ARG:HH22	0.63	1.52	4	1
1:A:140:GLU:N	1:A:140:GLU:OE1	0.63	2.32	8	1
1:A:58:VAL:HG22	1:A:148:LEU:HD22	0.63	1.69	11	1
1:A:45:GLN:HB2	1:A:135:LYS:HZ2	0.63	1.54	19	1
1:A:110:GLU:CD	1:A:110:GLU:N	0.63	2.52	14	3
1:A:7:VAL:O	1:A:7:VAL:CG2	0.63	2.46	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:38:CYS:SG	1:A:141:PHE:C	0.63	2.77	6	9
1:A:134:GLY:O	1:A:135:LYS:CG	0.63	2.46	1	15
1:A:16:ALA:HB1	1:A:35:GLY:HA2	0.63	1.70	18	12
1:A:39:VAL:O	1:A:41:LEU:CD2	0.63	2.47	13	2
1:A:37:MET:C	1:A:37:MET:SD	0.62	2.77	3	6
1:A:60:VAL:HG13	1:A:66:TYR:CD1	0.62	2.29	3	1
1:A:100:ALA:CB	1:A:111:TYR:OH	0.62	2.46	17	3
1:A:139:TYR:CG	1:A:140:GLU:N	0.62	2.65	18	2
1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CD1	0.62	2.60	21	1
1:A:87:GLY:O	1:A:125:ALA:CB	0.62	2.46	19	4
1:A:13:THR:O	1:A:13:THR:CG2	0.62	2.47	16	1
1:A:85:GLY:O	1:A:128:GLN:CB	0.62	2.47	20	11
1:A:24:LEU:HD22	1:A:24:LEU:O	0.62	1.94	9	2
1:A:107:ALA:O	1:A:109:ARG:NE	0.62	2.27	9	1
1:A:92:ARG:CZ	1:A:92:ARG:CB	0.62	2.76	5	1
1:A:146:VAL:O	1:A:146:VAL:CG1	0.62	2.46	9	9
1:A:137:GLY:C	1:A:139:TYR:H	0.62	1.96	11	1
1:A:71:THR:CG2	1:A:108:THR:HG23	0.62	2.25	17	9
1:A:24:LEU:HD13	1:A:37:MET:CE	0.62	2.25	21	1
1:A:58:VAL:HG11	1:A:128:GLN:O	0.62	1.95	3	1
1:A:9:LEU:HB2	1:A:148:LEU:HD11	0.61	1.72	2	1
1:A:31:VAL:O	1:A:31:VAL:CG1	0.61	2.47	21	2
1:A:23:SER:C	1:A:24:LEU:HD23	0.61	2.16	21	1
1:A:63:GLY:N	1:A:115:SER:O	0.61	2.27	12	4
1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:HD22	0.61	2.10	3	1
1:A:70:PHE:CD1	1:A:70:PHE:O	0.61	2.52	2	4
1:A:76:PRO:O	1:A:77:ASP:CB	0.61	2.48	14	1
1:A:86:GLU:CD	1:A:119:PHE:CZ	0.61	2.73	21	2
1:A:19:LEU:CD2	1:A:37:MET:SD	0.61	2.88	16	3
1:A:19:LEU:CD2	1:A:24:LEU:HD13	0.61	2.26	11	1
1:A:37:MET:HE2	1:A:39:VAL:HG13	0.61	1.72	15	1
1:A:62:GLU:CD	1:A:63:GLY:N	0.61	2.54	2	2
1:A:34:ASP:H	1:A:36:ARG:HH12	0.61	1.38	15	1
1:A:38:CYS:SG	1:A:140:GLU:CD	0.61	2.78	19	1
1:A:8:GLU:OE1	1:A:10:LEU:N	0.61	2.33	20	1
1:A:101:PRO:C	1:A:102:LEU:HD22	0.61	2.16	9	4
1:A:81:ARG:NH2	1:A:82:VAL:O	0.61	2.34	6	1
1:A:78:MET:CE	1:A:135:LYS:HZ1	0.61	2.08	10	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:37:MET:SD	0.61	2.36	16	1
1:A:81:ARG:O	1:A:132:HIS:N	0.61	2.34	20	1
1:A:77:ASP:O	1:A:78:MET:CB	0.61	2.49	22	18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:101:PRO:O	1:A:102:LEU:HD22	0.61	1.96	21	4
1:A:83:LEU:CD1	1:A:128:GLN:HE22	0.61	2.08	10	1
1:A:146:VAL:CG1	1:A:146:VAL:O	0.61	2.49	22	1
1:A:71:THR:HG1	1:A:145:GLN:N	0.60	1.94	13	4
1:A:39:VAL:O	1:A:41:LEU:HD22	0.60	1.95	7	1
1:A:80:VAL:HG22	1:A:100:ALA:HB3	0.60	1.72	15	12
1:A:15:PHE:CE2	1:A:143:ILE:HD11	0.60	2.31	5	1
1:A:7:VAL:O	1:A:7:VAL:CG1	0.60	2.46	1	1
1:A:10:LEU:HD13	1:A:12:HIS:N	0.60	2.12	13	5
1:A:60:VAL:HG22	1:A:66:TYR:CD1	0.60	2.31	14	1
1:A:86:GLU:OE1	1:A:119:PHE:CE2	0.60	2.55	22	1
1:A:28:SER:CB	1:A:40:ASP:OD2	0.60	2.50	3	1
1:A:24:LEU:HD23	1:A:25:TYR:N	0.60	2.12	6	1
1:A:71:THR:O	1:A:72:ALA:HB2	0.60	1.97	17	1
1:A:41:LEU:O	1:A:137:GLY:O	0.60	2.18	2	1
1:A:58:VAL:HG13	1:A:148:LEU:HD22	0.60	1.74	17	1
1:A:135:LYS:N	1:A:135:LYS:CD	0.60	2.65	19	1
1:A:129:VAL:O	1:A:129:VAL:CG1	0.60	2.49	6	3
1:A:135:LYS:C	1:A:137:GLY:N	0.60	2.54	16	18
1:A:74:ALA:O	1:A:76:PRO:O	0.60	2.20	20	18
1:A:86:GLU:OE1	1:A:119:PHE:CD1	0.60	2.55	9	2
1:A:27:THR:HG22	1:A:51:ALA:HB1	0.59	1.73	1	3
1:A:72:ALA:CA	1:A:109:ARG:HH22	0.59	2.09	3	3
1:A:101:PRO:O	1:A:109:ARG:CZ	0.59	2.50	14	2
1:A:25:TYR:CD1	1:A:25:TYR:C	0.59	2.72	17	7
1:A:50:ASP:O	1:A:51:ALA:CB	0.59	2.48	3	5
1:A:10:LEU:CD1	1:A:55:TYR:CZ	0.59	2.83	9	4
1:A:8:GLU:N	1:A:149:THR:CB	0.59	2.65	13	1
1:A:48:PRO:O	1:A:132:HIS:ND1	0.59	2.35	19	3
1:A:27:THR:OG1	1:A:41:LEU:HD11	0.59	1.97	14	1
1:A:101:PRO:O	1:A:109:ARG:NH1	0.59	2.35	15	2
1:A:49:TRP:CZ3	1:A:50:ASP:OD2	0.59	2.56	17	1
1:A:117:LEU:CD2	1:A:118:THR:N	0.59	2.65	7	3
1:A:58:VAL:O	1:A:58:VAL:CG1	0.59	2.47	8	2
1:A:13:THR:O	1:A:13:THR:OG1	0.59	2.20	7	10
1:A:61:GLY:O	1:A:62:GLU:O	0.59	2.21	18	3
1:A:10:LEU:HD13	1:A:55:TYR:CZ	0.59	2.32	21	2
1:A:24:LEU:HD22	1:A:30:PRO:HG3	0.59	1.72	7	2
1:A:80:VAL:HG23	1:A:81:ARG:N	0.59	2.11	8	5
1:A:92:ARG:H	1:A:92:ARG:CD	0.59	2.09	7	1
1:A:81:ARG:HE	1:A:98:GLY:CA	0.59	2.10	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:THR:CB	1:A:41:LEU:HD11	0.59	2.27	14	1
1:A:34:ASP:H	1:A:36:ARG:NH1	0.59	1.96	15	1
1:A:24:LEU:O	1:A:25:TYR:CB	0.59	2.50	9	10
1:A:15:PHE:CD2	1:A:143:ILE:CD1	0.59	2.85	5	1
1:A:97:GLN:CD	1:A:98:GLY:N	0.59	2.56	9	2
1:A:80:VAL:CG2	1:A:100:ALA:HB3	0.59	2.27	14	2
1:A:32:PHE:O	1:A:33:ALA:O	0.59	2.21	10	10
1:A:41:LEU:N	1:A:42:PRO:HD3	0.59	2.13	1	6
1:A:133:LEU:O	1:A:134:GLY:O	0.59	2.20	9	3
1:A:36:ARG:HH11	1:A:36:ARG:CG	0.58	2.11	15	4
1:A:117:LEU:CD2	1:A:118:THR:H	0.58	2.11	16	3
1:A:19:LEU:O	1:A:19:LEU:HD13	0.58	1.98	16	1
1:A:42:PRO:O	1:A:43:GLY:O	0.58	2.21	8	2
1:A:54:VAL:HG12	1:A:55:TYR:N	0.58	2.14	7	4
1:A:36:ARG:NH1	1:A:36:ARG:CG	0.58	2.66	3	6
1:A:81:ARG:O	1:A:132:HIS:O	0.58	2.22	3	12
1:A:24:LEU:C	1:A:24:LEU:CD2	0.58	2.69	20	2
1:A:62:GLU:CD	1:A:62:GLU:H	0.58	1.98	9	1
1:A:17:GLU:O	1:A:18:SER:CB	0.58	2.51	14	2
1:A:27:THR:CG2	1:A:51:ALA:HB1	0.58	2.29	1	2
1:A:71:THR:OG1	1:A:145:GLN:O	0.58	2.21	14	11
1:A:115:SER:OG	1:A:115:SER:O	0.58	2.20	2	1
1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:CD2	0.58	2.65	13	3
1:A:86:GLU:CD	1:A:86:GLU:N	0.58	2.56	7	7
1:A:139:TYR:CD2	1:A:140:GLU:N	0.58	2.70	12	5
1:A:97:GLN:HE22	1:A:99:SER:CA	0.58	2.11	11	1
1:A:97:GLN:CG	1:A:97:GLN:O	0.58	2.52	14	1
1:A:19:LEU:HD22	1:A:24:LEU:HD21	0.58	1.75	22	1
1:A:62:GLU:CB	1:A:115:SER:O	0.58	2.51	4	3
1:A:47:ASN:OD1	1:A:50:ASP:OD1	0.58	2.22	5	3
1:A:86:GLU:OE2	1:A:92:ARG:O	0.58	2.22	20	5
1:A:49:TRP:CE3	1:A:49:TRP:C	0.58	2.77	17	1
1:A:37:MET:SD	1:A:37:MET:C	0.58	2.82	14	3
1:A:41:LEU:O	1:A:139:TYR:O	0.58	2.22	16	9
1:A:74:ALA:O	1:A:103:THR:O	0.58	2.22	15	9
1:A:82:VAL:O	1:A:97:GLN:O	0.58	2.22	11	8
1:A:49:TRP:O	1:A:50:ASP:OD1	0.58	2.21	17	2
1:A:78:MET:CE	1:A:137:GLY:O	0.58	2.51	10	3
1:A:117:LEU:HD23	1:A:119:PHE:CZ	0.58	2.34	1	2
1:A:65:SER:O	1:A:150:THR:OG1	0.58	2.22	8	3
1:A:47:ASN:HD21	1:A:50:ASP:CG	0.58	2.02	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:SER:OG	1:A:40:ASP:OD1	0.58	2.22	18	1
1:A:45:GLN:OE1	1:A:50:ASP:O	0.58	2.22	2	2
1:A:7:VAL:O	1:A:8:GLU:C	0.58	2.41	21	4
1:A:116:ASN:ND2	1:A:116:ASN:N	0.58	2.52	3	2
1:A:41:LEU:O	1:A:42:PRO:O	0.58	2.22	4	2
1:A:80:VAL:O	1:A:98:GLY:O	0.58	2.22	17	7
1:A:58:VAL:HG22	1:A:148:LEU:HD21	0.58	1.76	12	1
1:A:24:LEU:O	1:A:24:LEU:CD1	0.57	2.46	1	2
1:A:107:ALA:HB1	1:A:109:ARG:HH12	0.57	1.56	16	3
1:A:121:PRO:O	1:A:125:ALA:O	0.57	2.22	20	2
1:A:144:SER:O	1:A:145:GLN:OE1	0.57	2.22	21	2
1:A:36:ARG:CB	1:A:36:ARG:NH1	0.57	2.67	5	5
1:A:21:PRO:O	1:A:22:TRP:O	0.57	2.22	7	6
1:A:78:MET:SD	1:A:139:TYR:CG	0.57	2.97	12	1
1:A:7:VAL:O	1:A:149:THR:OG1	0.57	2.22	16	2
1:A:12:HIS:NE2	1:A:15:PHE:CE1	0.57	2.72	6	1
1:A:61:GLY:O	1:A:115:SER:OG	0.57	2.22	10	4
1:A:84:VAL:CG1	1:A:129:VAL:HG22	0.57	2.29	21	4
1:A:72:ALA:HB1	1:A:141:PHE:CE1	0.57	2.34	19	6
1:A:133:LEU:O	1:A:138:ALA:CB	0.57	2.53	11	2
1:A:17:GLU:O	1:A:18:SER:OG	0.57	2.22	14	1
1:A:9:LEU:O	1:A:57:GLY:O	0.57	2.22	2	1
1:A:26:GLY:O	1:A:50:ASP:O	0.57	2.22	21	5
1:A:56:ASN:OD1	1:A:127:GLY:O	0.57	2.22	18	3
1:A:47:ASN:OD1	1:A:50:ASP:OD2	0.57	2.22	18	8
1:A:69:SER:OG	1:A:147:SER:OG	0.57	2.22	22	1
1:A:42:PRO:O	1:A:43:GLY:C	0.57	2.41	8	2
1:A:65:SER:CB	1:A:113:PHE:O	0.57	2.53	2	7
1:A:7:VAL:O	1:A:149:THR:CB	0.57	2.53	16	3
1:A:60:VAL:O	1:A:117:LEU:O	0.57	2.22	13	1
1:A:74:ALA:O	1:A:77:ASP:OD1	0.57	2.22	14	1
1:A:117:LEU:CD2	1:A:119:PHE:CZ	0.57	2.87	4	2
1:A:86:GLU:OE2	1:A:119:PHE:CE1	0.57	2.58	10	2
1:A:79:PRO:O	1:A:139:TYR:OH	0.57	2.22	15	5
1:A:148:LEU:HD23	1:A:148:LEU:N	0.57	2.11	7	1
1:A:76:PRO:O	1:A:77:ASP:CG	0.57	2.43	14	1
1:A:62:GLU:OE1	1:A:62:GLU:O	0.57	2.22	22	1
1:A:125:ALA:O	1:A:126:PRO:O	0.57	2.22	12	1
1:A:87:GLY:O	1:A:128:GLN:OE1	0.57	2.22	21	1
1:A:64:GLU:O	1:A:115:SER:OG	0.56	2.22	14	6
1:A:62:GLU:CD	1:A:63:GLY:H	0.56	2.02	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:LEU:CD2	1:A:131:PHE:CG	0.56	2.88	9	2
1:A:13:THR:OG1	1:A:146:VAL:O	0.56	2.22	14	2
1:A:43:GLY:O	1:A:136:ALA:O	0.56	2.22	18	1
1:A:28:SER:O	1:A:29:GLU:C	0.56	2.43	11	11
1:A:133:LEU:HD22	1:A:141:PHE:CG	0.56	2.35	7	4
1:A:47:ASN:ND2	1:A:49:TRP:CE2	0.56	2.73	6	3
1:A:46:GLY:C	1:A:47:ASN:HD22	0.56	2.02	7	1
1:A:95:PHE:CD2	1:A:113:PHE:CD1	0.56	2.93	11	1
1:A:106:PRO:O	1:A:107:ALA:CB	0.56	2.53	17	2
1:A:97:GLN:NE2	1:A:98:GLY:N	0.56	2.54	19	1
1:A:140:GLU:CD	1:A:141:PHE:N	0.56	2.59	19	1
1:A:36:ARG:CG	1:A:36:ARG:NH1	0.56	2.66	2	3
1:A:84:VAL:O	1:A:93:THR:OG1	0.56	2.17	22	19
1:A:61:GLY:C	1:A:115:SER:OG	0.56	2.44	6	5
1:A:86:GLU:OE1	1:A:92:ARG:O	0.56	2.22	8	3
1:A:116:ASN:OD1	1:A:116:ASN:N	0.56	2.38	9	2
1:A:58:VAL:HG21	1:A:129:VAL:CG2	0.56	2.31	17	1
1:A:36:ARG:CG	1:A:36:ARG:HH11	0.56	2.12	3	5
1:A:66:TYR:CD2	1:A:150:THR:OG1	0.56	2.47	4	1
1:A:122:ASP:OD1	1:A:122:ASP:N	0.56	2.31	11	3
1:A:10:LEU:HD22	1:A:12:HIS:O	0.56	1.99	2	1
1:A:10:LEU:CD2	1:A:10:LEU:C	0.56	2.73	5	3
1:A:54:VAL:CG2	1:A:55:TYR:N	0.56	2.69	11	4
1:A:19:LEU:HD21	1:A:37:MET:SD	0.56	2.41	5	4
1:A:9:LEU:N	1:A:9:LEU:HD23	0.56	2.14	16	1
1:A:92:ARG:O	1:A:119:PHE:CE1	0.56	2.59	3	1
1:A:137:GLY:O	1:A:138:ALA:C	0.56	2.45	12	4
1:A:19:LEU:HD21	1:A:24:LEU:HD13	0.56	1.78	11	1
1:A:61:GLY:O	1:A:115:SER:CB	0.56	2.53	15	6
1:A:58:VAL:O	1:A:58:VAL:CG2	0.56	2.53	15	2
1:A:110:GLU:O	1:A:111:TYR:CG	0.56	2.59	7	1
1:A:133:LEU:CD2	1:A:141:PHE:CD2	0.56	2.89	10	3
1:A:27:THR:HB	1:A:41:LEU:HD21	0.56	1.78	15	1
1:A:25:TYR:O	1:A:50:ASP:O	0.56	2.24	17	1
1:A:71:THR:OG1	1:A:145:GLN:CB	0.56	2.54	1	14
1:A:148:LEU:C	1:A:148:LEU:CD1	0.56	2.70	2	4
1:A:124:ASP:O	1:A:124:ASP:OD1	0.56	2.24	5	1
1:A:8:GLU:OE2	1:A:148:LEU:N	0.56	2.38	12	1
1:A:53:LEU:C	1:A:54:VAL:HG22	0.55	2.21	22	7
1:A:45:GLN:NE2	1:A:134:GLY:O	0.55	2.34	5	1
1:A:66:TYR:O	1:A:112:ALA:CB	0.55	2.55	11	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:123:GLY:O	1:A:124:ASP:OD1	0.55	2.24	18	2
1:A:23:SER:HB2	1:A:54:VAL:HG13	0.55	1.78	11	2
1:A:81:ARG:HH21	1:A:97:GLN:N	0.55	1.99	6	1
1:A:10:LEU:C	1:A:10:LEU:CD2	0.55	2.75	9	1
1:A:126:PRO:O	1:A:127:GLY:O	0.55	2.24	12	2
1:A:83:LEU:CD2	1:A:132:HIS:CE1	0.55	2.89	11	1
1:A:122:ASP:CB	1:A:125:ALA:O	0.55	2.54	12	1
1:A:110:GLU:N	1:A:110:GLU:OE1	0.55	2.40	19	1
1:A:61:GLY:O	1:A:62:GLU:C	0.55	2.43	6	15
1:A:138:ALA:C	1:A:139:TYR:CD2	0.55	2.79	15	5
1:A:28:SER:HG	1:A:40:ASP:H	0.55	1.44	22	3
1:A:11:PRO:C	1:A:55:TYR:OH	0.55	2.45	2	1
1:A:22:TRP:CH2	1:A:146:VAL:CG2	0.55	2.90	9	2
1:A:135:LYS:O	1:A:136:ALA:CB	0.55	2.54	19	1
1:A:53:LEU:HD22	1:A:53:LEU:H	0.55	1.60	20	1
1:A:144:SER:O	1:A:145:GLN:CD	0.55	2.44	7	4
1:A:97:GLN:NE2	1:A:99:SER:N	0.55	2.55	11	2
1:A:58:VAL:HG13	1:A:148:LEU:HD21	0.55	1.78	4	3
1:A:12:HIS:O	1:A:12:HIS:CD2	0.55	2.59	6	1
1:A:105:GLU:OE2	1:A:106:PRO:O	0.55	2.25	14	1
1:A:9:LEU:HD12	1:A:148:LEU:HG	0.55	1.79	21	1
1:A:24:LEU:N	1:A:24:LEU:CD2	0.55	2.69	8	2
1:A:133:LEU:CD2	1:A:141:PHE:CE2	0.55	2.90	10	2
1:A:135:LYS:C	1:A:137:GLY:H	0.55	2.05	5	14
1:A:41:LEU:C	1:A:139:TYR:O	0.55	2.46	5	2
1:A:45:GLN:HE21	1:A:134:GLY:C	0.55	2.05	5	1
1:A:137:GLY:C	1:A:139:TYR:N	0.55	2.59	11	1
1:A:53:LEU:CD1	1:A:143:ILE:HD13	0.55	2.32	18	3
1:A:13:THR:O	1:A:14:SER:OG	0.55	2.24	7	1
1:A:120:PRO:CB	1:A:121:PRO:CD	0.55	2.85	12	2
1:A:53:LEU:O	1:A:54:VAL:CG2	0.55	2.55	12	2
1:A:72:ALA:C	1:A:109:ARG:HH22	0.54	2.04	17	4
1:A:70:PHE:CZ	1:A:109:ARG:CB	0.54	2.90	7	5
1:A:125:ALA:O	1:A:127:GLY:N	0.54	2.40	7	1
1:A:148:LEU:N	1:A:148:LEU:CD2	0.54	2.68	19	1
1:A:135:LYS:O	1:A:136:ALA:C	0.54	2.46	2	18
1:A:57:GLY:O	1:A:58:VAL:CG2	0.54	2.55	12	4
1:A:71:THR:CB	1:A:144:SER:OG	0.54	2.55	5	1
1:A:10:LEU:O	1:A:10:LEU:CD1	0.54	2.53	8	3
1:A:13:THR:OG1	1:A:146:VAL:C	0.54	2.46	13	3
1:A:41:LEU:N	1:A:41:LEU:CD1	0.54	2.70	21	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:SER:OG	1:A:69:SER:O	0.54	2.21	15	1
1:A:28:SER:OG	1:A:40:ASP:CG	0.54	2.46	7	4
1:A:84:VAL:HG23	1:A:95:PHE:CG	0.54	2.37	22	7
1:A:107:ALA:CB	1:A:109:ARG:NH1	0.54	2.71	5	4
1:A:62:GLU:CD	1:A:116:ASN:O	0.54	2.46	19	5
1:A:45:GLN:O	1:A:46:GLY:C	0.54	2.46	17	3
1:A:108:THR:C	1:A:109:ARG:NH1	0.54	2.60	4	1
1:A:109:ARG:C	1:A:110:GLU:OE1	0.54	2.46	10	1
1:A:72:ALA:O	1:A:107:ALA:O	0.54	2.26	12	1
1:A:84:VAL:CG2	1:A:95:PHE:CG	0.54	2.90	22	6
1:A:116:ASN:N	1:A:116:ASN:OD1	0.54	2.41	19	1
1:A:57:GLY:O	1:A:58:VAL:CG1	0.54	2.55	1	2
1:A:56:ASN:CG	1:A:127:GLY:O	0.54	2.46	17	5
1:A:114:THR:O	1:A:115:SER:C	0.54	2.46	8	8
1:A:86:GLU:C	1:A:86:GLU:OE1	0.54	2.46	6	1
1:A:62:GLU:C	1:A:115:SER:OG	0.54	2.46	9	4
1:A:146:VAL:HG22	1:A:146:VAL:O	0.54	2.03	10	1
1:A:43:GLY:C	1:A:136:ALA:O	0.54	2.46	18	1
1:A:123:GLY:O	1:A:124:ASP:C	0.54	2.46	6	6
1:A:47:ASN:CG	1:A:50:ASP:OD1	0.54	2.46	11	5
1:A:47:ASN:OD1	1:A:50:ASP:CG	0.54	2.46	11	4
1:A:62:GLU:OE2	1:A:117:LEU:C	0.54	2.46	7	1
1:A:76:PRO:O	1:A:77:ASP:OD2	0.54	2.26	14	1
1:A:86:GLU:HB2	1:A:125:ALA:HB1	0.54	1.79	2	2
1:A:133:LEU:O	1:A:134:GLY:C	0.54	2.45	17	8
1:A:72:ALA:HB3	1:A:109:ARG:NH2	0.54	2.17	3	3
1:A:74:ALA:CB	1:A:139:TYR:CE2	0.54	2.91	9	2
1:A:66:TYR:O	1:A:67:VAL:CG2	0.54	2.55	12	1
1:A:117:LEU:HD13	1:A:119:PHE:CZ	0.54	2.37	21	1
1:A:33:ALA:O	1:A:34:ASP:C	0.54	2.46	1	6
1:A:71:THR:OG1	1:A:145:GLN:C	0.54	2.46	12	6
1:A:47:ASN:CG	1:A:49:TRP:CD1	0.54	2.81	2	1
1:A:97:GLN:NE2	1:A:111:TYR:CD1	0.54	2.75	2	2
1:A:8:GLU:O	1:A:8:GLU:CD	0.54	2.46	3	1
1:A:47:ASN:CG	1:A:50:ASP:OD2	0.54	2.46	9	4
1:A:8:GLU:OE1	1:A:8:GLU:C	0.54	2.47	20	1
1:A:58:VAL:CG2	1:A:128:GLN:N	0.53	2.71	1	1
1:A:83:LEU:C	1:A:83:LEU:HD12	0.53	2.24	1	2
1:A:18:SER:C	1:A:20:GLY:H	0.53	2.07	4	2
1:A:24:LEU:C	1:A:25:TYR:CD1	0.53	2.82	9	9
1:A:45:GLN:CD	1:A:50:ASP:O	0.53	2.46	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:ASN:OD1	1:A:47:ASN:C	0.53	2.46	2	1
1:A:8:GLU:O	1:A:8:GLU:OE2	0.53	2.26	3	1
1:A:133:LEU:CD2	1:A:141:PHE:CD1	0.53	2.91	6	5
1:A:81:ARG:O	1:A:82:VAL:CG2	0.53	2.56	12	1
1:A:74:ALA:O	1:A:104:GLY:N	0.53	2.42	16	1
1:A:26:GLY:C	1:A:50:ASP:O	0.53	2.46	2	2
1:A:145:GLN:O	1:A:146:VAL:CG2	0.53	2.56	19	2
1:A:19:LEU:HD13	1:A:19:LEU:C	0.53	2.24	16	1
1:A:140:GLU:CD	1:A:140:GLU:C	0.53	2.66	19	1
1:A:86:GLU:O	1:A:128:GLN:CB	0.53	2.56	17	5
1:A:81:ARG:HH21	1:A:97:GLN:C	0.53	2.06	6	1
1:A:138:ALA:O	1:A:139:TYR:CB	0.53	2.54	8	1
1:A:72:ALA:HB2	1:A:143:ILE:HB	0.53	1.81	14	2
1:A:67:VAL:O	1:A:148:LEU:HD12	0.53	2.04	21	1
1:A:19:LEU:CD1	1:A:20:GLY:O	0.53	2.57	4	1
1:A:34:ASP:O	1:A:35:GLY:C	0.53	2.46	12	3
1:A:10:LEU:HD12	1:A:57:GLY:O	0.53	2.03	7	1
1:A:145:GLN:O	1:A:146:VAL:HG23	0.53	2.03	19	2
1:A:86:GLU:OE2	1:A:119:PHE:CD1	0.53	2.62	20	1
1:A:13:THR:CB	1:A:146:VAL:O	0.53	2.57	14	2
1:A:96:GLU:O	1:A:96:GLU:CD	0.53	2.47	21	1
1:A:30:PRO:CB	1:A:37:MET:SD	0.53	2.97	1	3
1:A:68:LEU:HD12	1:A:148:LEU:HB3	0.53	1.81	20	3
1:A:126:PRO:O	1:A:127:GLY:C	0.53	2.46	12	3
1:A:122:ASP:O	1:A:123:GLY:C	0.53	2.46	8	3
1:A:122:ASP:CG	1:A:123:GLY:H	0.53	2.07	10	1
1:A:48:PRO:O	1:A:132:HIS:CG	0.53	2.62	19	2
1:A:97:GLN:OE1	1:A:99:SER:C	0.53	2.46	19	1
1:A:71:THR:OG1	1:A:145:GLN:CA	0.53	2.57	1	9
1:A:75:THR:CA	1:A:76:PRO:O	0.53	2.57	4	21
1:A:43:GLY:O	1:A:44:GLY:C	0.53	2.46	6	1
1:A:49:TRP:CB	1:A:132:HIS:CE1	0.53	2.92	6	1
1:A:78:MET:HE3	1:A:137:GLY:O	0.53	2.04	10	1
1:A:10:LEU:HD23	1:A:55:TYR:CE2	0.53	2.39	2	1
1:A:45:GLN:NE2	1:A:50:ASP:CB	0.53	2.72	20	1
1:A:28:SER:O	1:A:30:PRO:N	0.52	2.43	14	8
1:A:115:SER:OG	1:A:117:LEU:O	0.52	2.26	2	1
1:A:10:LEU:C	1:A:12:HIS:H	0.52	2.08	7	3
1:A:77:ASP:C	1:A:78:MET:SD	0.52	2.88	9	3
1:A:122:ASP:O	1:A:123:GLY:O	0.52	2.26	6	1
1:A:114:THR:O	1:A:116:ASN:ND2	0.52	2.41	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:GLU:O	1:A:32:PHE:CE2	0.52	2.62	15	1
1:A:19:LEU:HB2	1:A:24:LEU:HD21	0.52	1.79	21	1
1:A:14:SER:C	1:A:16:ALA:H	0.52	2.08	17	16
1:A:86:GLU:CD	1:A:119:PHE:CD1	0.52	2.83	9	2
1:A:10:LEU:HD13	1:A:10:LEU:C	0.52	2.25	13	5
1:A:77:ASP:OD2	1:A:103:THR:OG1	0.52	2.28	8	1
1:A:8:GLU:C	1:A:10:LEU:H	0.52	2.07	17	1
1:A:45:GLN:NE2	1:A:51:ALA:CB	0.52	2.72	17	1
1:A:83:LEU:HD11	1:A:130:ALA:HB3	0.52	1.82	13	3
1:A:140:GLU:OE1	1:A:140:GLU:CA	0.52	2.57	8	1
1:A:54:VAL:HG13	1:A:129:VAL:O	0.52	2.04	14	2
1:A:8:GLU:O	1:A:10:LEU:N	0.52	2.42	17	2
1:A:143:ILE:CD1	1:A:145:GLN:O	0.52	2.57	1	1
1:A:141:PHE:CD2	1:A:143:ILE:HG22	0.52	2.38	9	3
1:A:81:ARG:O	1:A:82:VAL:HG23	0.52	2.04	12	1
1:A:33:ALA:C	1:A:35:GLY:H	0.52	2.08	16	1
1:A:75:THR:OG1	1:A:140:GLU:CG	0.52	2.58	19	1
1:A:77:ASP:O	1:A:78:MET:CE	0.52	2.57	4	3
1:A:19:LEU:HD11	1:A:24:LEU:CD2	0.52	2.34	10	2
1:A:47:ASN:N	1:A:47:ASN:ND2	0.52	2.55	16	2
1:A:97:GLN:CG	1:A:98:GLY:N	0.52	2.73	20	3
1:A:97:GLN:HE22	1:A:99:SER:C	0.52	2.07	11	1
1:A:27:THR:OG1	1:A:40:ASP:O	0.52	2.22	12	1
1:A:140:GLU:OE2	1:A:142:CYS:N	0.52	2.42	19	1
1:A:105:GLU:OE2	1:A:107:ALA:HB2	0.52	2.05	10	1
1:A:123:GLY:C	1:A:125:ALA:N	0.52	2.62	1	1
1:A:72:ALA:HB1	1:A:141:PHE:CZ	0.52	2.38	21	5
1:A:58:VAL:HG22	1:A:148:LEU:HD23	0.52	1.82	4	1
1:A:124:ASP:OD1	1:A:124:ASP:C	0.52	2.49	5	1
1:A:26:GLY:C	1:A:51:ALA:HB2	0.52	2.25	8	1
1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:CD1	0.52	2.73	9	3
1:A:103:THR:C	1:A:105:GLU:H	0.52	2.08	10	5
1:A:24:LEU:HD22	1:A:30:PRO:HG2	0.52	1.81	16	3
1:A:115:SER:O	1:A:116:ASN:C	0.52	2.45	2	2
1:A:117:LEU:HD23	1:A:119:PHE:CE2	0.52	2.40	4	1
1:A:47:ASN:OD1	1:A:49:TRP:CG	0.52	2.63	2	1
1:A:52:GLY:CA	1:A:131:PHE:O	0.51	2.59	18	2
1:A:53:LEU:O	1:A:54:VAL:HG23	0.51	2.05	12	2
1:A:8:GLU:OE1	1:A:147:SER:CB	0.51	2.58	4	2
1:A:45:GLN:HE22	1:A:50:ASP:CB	0.51	2.18	3	1
1:A:58:VAL:HG23	1:A:148:LEU:CD2	0.51	2.35	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:LEU:C	1:A:19:LEU:HD12	0.51	2.25	4	1
1:A:71:THR:HG22	1:A:108:THR:CG2	0.51	2.36	18	3
1:A:148:LEU:CD2	1:A:148:LEU:N	0.51	2.68	7	1
1:A:84:VAL:HG13	1:A:129:VAL:HG23	0.51	1.82	1	1
1:A:52:GLY:C	1:A:53:LEU:HD22	0.51	2.25	1	2
1:A:10:LEU:CD2	1:A:55:TYR:CE2	0.51	2.94	2	1
1:A:45:GLN:NE2	1:A:50:ASP:OD2	0.51	2.35	13	1
1:A:74:ALA:O	1:A:104:GLY:CA	0.51	2.59	16	1
1:A:24:LEU:CD1	1:A:37:MET:SD	0.51	2.99	21	1
1:A:22:TRP:CD1	1:A:55:TYR:CG	0.51	2.99	7	3
1:A:68:LEU:O	1:A:109:ARG:O	0.51	2.28	2	4
1:A:8:GLU:OE2	1:A:147:SER:OG	0.51	2.27	4	1
1:A:144:SER:C	1:A:145:GLN:CD	0.51	2.70	7	3
1:A:54:VAL:HG22	1:A:55:TYR:N	0.51	2.20	11	3
1:A:93:THR:O	1:A:96:GLU:OE2	0.51	2.28	12	1
1:A:19:LEU:CB	1:A:24:LEU:HD21	0.51	2.36	21	1
1:A:117:LEU:HD22	1:A:119:PHE:CZ	0.51	2.41	9	2
1:A:8:GLU:C	1:A:10:LEU:N	0.51	2.63	17	2
1:A:10:LEU:HD23	1:A:12:HIS:O	0.51	2.06	21	1
1:A:92:ARG:HH11	1:A:92:ARG:HB3	0.51	1.65	22	1
1:A:65:SER:OG	1:A:113:PHE:O	0.51	2.28	2	1
1:A:62:GLU:CD	1:A:62:GLU:C	0.51	2.70	8	3
1:A:107:ALA:HB3	1:A:109:ARG:HH21	0.51	1.64	9	1
1:A:75:THR:O	1:A:140:GLU:CD	0.51	2.49	13	1
1:A:46:GLY:C	1:A:47:ASN:OD1	0.51	2.50	6	1
1:A:22:TRP:CH2	1:A:146:VAL:CG1	0.51	2.91	8	3
1:A:46:GLY:C	1:A:47:ASN:ND2	0.51	2.65	7	1
1:A:34:ASP:OD1	1:A:34:ASP:C	0.51	2.49	12	2
1:A:82:VAL:HG13	1:A:97:GLN:CD	0.51	2.26	16	1
1:A:95:PHE:CE1	1:A:97:GLN:OE1	0.51	2.64	20	2
1:A:36:ARG:CB	1:A:36:ARG:HH11	0.50	2.18	5	1
1:A:49:TRP:CD2	1:A:49:TRP:C	0.50	2.85	17	1
1:A:47:ASN:CG	1:A:50:ASP:CG	0.50	2.70	4	7
1:A:133:LEU:HD23	1:A:141:PHE:CG	0.50	2.41	4	1
1:A:53:LEU:HD23	1:A:53:LEU:N	0.50	2.21	10	4
1:A:86:GLU:CD	1:A:92:ARG:O	0.50	2.50	8	1
1:A:62:GLU:O	1:A:62:GLU:CD	0.50	2.49	11	2
1:A:97:GLN:HE22	1:A:99:SER:CB	0.50	2.19	11	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:19:LEU:H	0.50	2.19	13	1
1:A:72:ALA:CA	1:A:109:ARG:NH2	0.50	2.74	10	3
1:A:148:LEU:HD13	1:A:149:THR:N	0.50	2.21	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:97:GLN:CD	1:A:99:SER:H	0.50	2.08	9	2
1:A:123:GLY:O	1:A:124:ASP:CG	0.50	2.50	18	1
1:A:27:THR:HG1	1:A:28:SER:H	0.50	1.48	5	3
1:A:122:ASP:O	1:A:124:ASP:N	0.50	2.45	8	1
1:A:70:PHE:CE2	1:A:109:ARG:NH1	0.50	2.79	11	1
1:A:10:LEU:HD12	1:A:12:HIS:O	0.50	2.06	13	1
1:A:53:LEU:C	1:A:54:VAL:CG2	0.50	2.80	8	12
1:A:27:THR:HB	1:A:51:ALA:HB1	0.50	1.84	3	5
1:A:10:LEU:HD13	1:A:22:TRP:HE1	0.50	1.64	9	2
1:A:133:LEU:HD23	1:A:141:PHE:CE1	0.50	2.42	20	2
1:A:7:VAL:C	1:A:149:THR:HG21	0.50	2.27	13	1
1:A:62:GLU:CD	1:A:62:GLU:O	0.50	2.50	17	1
1:A:54:VAL:CG1	1:A:129:VAL:O	0.50	2.60	17	5
1:A:84:VAL:CG2	1:A:95:PHE:CD2	0.50	2.95	18	8
1:A:60:VAL:HG13	1:A:66:TYR:CE1	0.50	2.41	9	1
1:A:65:SER:OG	1:A:114:THR:HG22	0.50	2.06	17	2
1:A:41:LEU:O	1:A:139:TYR:N	0.50	2.44	5	10
1:A:86:GLU:C	1:A:86:GLU:CD	0.50	2.70	6	1
1:A:121:PRO:O	1:A:125:ALA:C	0.50	2.50	20	1
1:A:95:PHE:CD2	1:A:113:PHE:CZ	0.50	2.99	1	3
1:A:22:TRP:CD2	1:A:55:TYR:CB	0.50	2.95	14	3
1:A:70:PHE:CD1	1:A:70:PHE:C	0.50	2.85	4	3
1:A:49:TRP:O	1:A:49:TRP:CG	0.50	2.65	6	2
1:A:62:GLU:C	1:A:62:GLU:CD	0.50	2.70	10	4
1:A:102:LEU:HD21	1:A:109:ARG:NE	0.50	2.22	11	1
1:A:33:ALA:N	1:A:36:ARG:O	0.50	2.45	20	4
1:A:75:THR:CA	1:A:77:ASP:H	0.50	2.20	14	1
1:A:115:SER:C	1:A:117:LEU:N	0.50	2.60	18	1
1:A:24:LEU:HD21	1:A:39:VAL:HG11	0.49	1.84	6	1
1:A:117:LEU:HD23	1:A:118:THR:C	0.49	2.27	7	2
1:A:117:LEU:HD23	1:A:118:THR:O	0.49	2.06	9	2
1:A:92:ARG:C	1:A:93:THR:HG22	0.49	2.27	17	1
1:A:81:ARG:HH11	1:A:81:ARG:CB	0.49	2.20	3	1
1:A:135:LYS:H	1:A:138:ALA:CB	0.49	2.17	4	1
1:A:47:ASN:CB	1:A:49:TRP:CZ2	0.49	2.95	15	2
1:A:105:GLU:O	1:A:105:GLU:OE1	0.49	2.30	14	1
1:A:77:ASP:C	1:A:78:MET:CG	0.49	2.78	18	1
1:A:87:GLY:C	1:A:125:ALA:HB1	0.49	2.28	9	2
1:A:47:ASN:C	1:A:49:TRP:H	0.49	2.11	19	3
1:A:19:LEU:C	1:A:19:LEU:CD2	0.49	2.81	9	1
1:A:19:LEU:HD12	1:A:20:GLY:O	0.49	2.06	21	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:ARG:O	1:A:92:ARG:CG	0.49	2.60	5	1
1:A:81:ARG:CZ	1:A:97:GLN:O	0.49	2.60	6	1
1:A:72:ALA:CB	1:A:142:CYS:O	0.49	2.60	7	2
1:A:8:GLU:OE2	1:A:148:LEU:O	0.49	2.31	12	1
1:A:71:THR:OG1	1:A:145:GLN:CG	0.49	2.60	16	2
1:A:26:GLY:CA	1:A:50:ASP:O	0.49	2.61	2	1
1:A:36:ARG:NH1	1:A:36:ARG:HB3	0.49	2.22	5	1
1:A:102:LEU:HD22	1:A:109:ARG:CZ	0.49	2.38	10	1
1:A:97:GLN:OE1	1:A:97:GLN:CA	0.49	2.61	11	1
1:A:137:GLY:O	1:A:139:TYR:CE2	0.49	2.65	20	1
1:A:10:LEU:HD13	1:A:55:TYR:CE2	0.49	2.42	21	1
1:A:71:THR:OG1	1:A:144:SER:OG	0.49	2.22	5	1
1:A:72:ALA:O	1:A:102:LEU:HD22	0.49	2.08	8	2
1:A:86:GLU:CD	1:A:86:GLU:C	0.49	2.70	8	1
1:A:133:LEU:CD2	1:A:139:TYR:OH	0.49	2.61	12	1
1:A:22:TRP:CD2	1:A:55:TYR:HB2	0.49	2.43	22	19
1:A:54:VAL:CG1	1:A:55:TYR:N	0.49	2.75	12	2
1:A:16:ALA:HB1	1:A:35:GLY:CA	0.49	2.38	12	3
1:A:148:LEU:O	1:A:149:THR:CB	0.49	2.60	18	3
1:A:74:ALA:HB1	1:A:139:TYR:CZ	0.49	2.42	19	5
1:A:70:PHE:CZ	1:A:109:ARG:HB2	0.49	2.43	7	13
1:A:107:ALA:CB	1:A:109:ARG:HH12	0.49	2.21	8	2
1:A:86:GLU:C	1:A:128:GLN:HE21	0.49	2.10	8	1
1:A:109:ARG:NH1	1:A:109:ARG:HG2	0.49	2.22	6	3
1:A:58:VAL:CG2	1:A:148:LEU:HD21	0.49	2.38	13	1
1:A:92:ARG:NH1	1:A:92:ARG:CG	0.49	2.74	1	2
1:A:92:ARG:NH1	1:A:92:ARG:HG2	0.49	2.23	21	7
1:A:125:ALA:C	1:A:127:GLY:H	0.49	2.12	7	1
1:A:59:PRO:O	1:A:66:TYR:OH	0.49	2.30	20	2
1:A:24:LEU:HD12	1:A:52:GLY:O	0.49	2.07	14	1
1:A:148:LEU:C	1:A:149:THR:CG2	0.49	2.79	19	1
1:A:86:GLU:N	1:A:86:GLU:CD	0.48	2.66	8	1
1:A:34:ASP:O	1:A:34:ASP:CG	0.48	2.50	12	1
1:A:7:VAL:O	1:A:8:GLU:CB	0.48	2.59	13	1
1:A:75:THR:N	1:A:76:PRO:O	0.48	2.45	4	6
1:A:10:LEU:CD2	1:A:12:HIS:O	0.48	2.61	21	2
1:A:47:ASN:CG	1:A:49:TRP:NE1	0.48	2.66	2	1
1:A:105:GLU:N	1:A:105:GLU:OE1	0.48	2.45	2	1
1:A:60:VAL:HG12	1:A:115:SER:HG	0.48	1.68	11	1
1:A:109:ARG:N	1:A:109:ARG:HD2	0.48	2.21	11	1
1:A:54:VAL:HG12	1:A:55:TYR:H	0.48	1.68	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:SER:OG	1:A:40:ASP:CB	0.48	2.61	6	4
1:A:24:LEU:HD12	1:A:30:PRO:HG2	0.48	1.83	21	1
1:A:143:ILE:HD12	1:A:145:GLN:H	0.48	1.67	1	1
1:A:144:SER:C	1:A:145:GLN:CG	0.48	2.82	12	10
1:A:22:TRP:NE1	1:A:55:TYR:CD1	0.48	2.81	2	1
1:A:148:LEU:HD23	1:A:148:LEU:C	0.48	2.29	6	1
1:A:8:GLU:OE1	1:A:147:SER:OG	0.48	2.28	1	2
1:A:117:LEU:O	1:A:119:PHE:CD2	0.48	2.66	3	1
1:A:59:PRO:O	1:A:66:TYR:CE2	0.48	2.66	6	2
1:A:78:MET:CE	1:A:135:LYS:NZ	0.48	2.76	10	1
1:A:25:TYR:CE1	1:A:50:ASP:O	0.48	2.67	17	1
1:A:36:ARG:NH1	1:A:36:ARG:HG3	0.48	2.24	3	5
1:A:84:VAL:HG23	1:A:95:PHE:CD1	0.48	2.43	4	2
1:A:39:VAL:HG23	1:A:41:LEU:HD13	0.48	1.85	14	1
1:A:145:GLN:C	1:A:146:VAL:HG22	0.48	2.28	17	1
1:A:40:ASP:C	1:A:42:PRO:CD	0.48	2.82	13	3
1:A:92:ARG:NH1	1:A:92:ARG:HG3	0.48	2.24	9	5
1:A:109:ARG:NH1	1:A:109:ARG:HG3	0.48	2.24	1	5
1:A:8:GLU:O	1:A:8:GLU:CG	0.48	2.61	3	1
1:A:8:GLU:CD	1:A:147:SER:OG	0.48	2.52	4	1
1:A:42:PRO:O	1:A:138:ALA:CB	0.48	2.57	4	2
1:A:118:THR:C	1:A:119:PHE:CG	0.48	2.87	10	2
1:A:79:PRO:C	1:A:139:TYR:OH	0.48	2.52	21	2
1:A:81:ARG:NH1	1:A:81:ARG:HG3	0.48	2.24	10	8
1:A:122:ASP:CG	1:A:123:GLY:N	0.48	2.64	10	1
1:A:69:SER:HA	1:A:109:ARG:O	0.48	2.09	22	2
1:A:24:LEU:HD12	1:A:24:LEU:C	0.47	2.29	15	4
1:A:58:VAL:HG13	1:A:148:LEU:CD2	0.47	2.39	21	2
1:A:29:GLU:H	1:A:29:GLU:CD	0.47	2.13	6	1
1:A:104:GLY:C	1:A:105:GLU:OE1	0.47	2.53	2	1
1:A:75:THR:CG2	1:A:104:GLY:O	0.47	2.62	12	1
1:A:69:SER:O	1:A:69:SER:OG	0.47	2.26	5	2
1:A:22:TRP:CZ3	1:A:146:VAL:HG21	0.47	2.44	9	1
1:A:81:ARG:NH1	1:A:81:ARG:CG	0.47	2.74	9	1
1:A:97:GLN:HE22	1:A:99:SER:N	0.47	2.07	9	1
1:A:114:THR:O	1:A:116:ASN:OD1	0.47	2.31	13	2
1:A:71:THR:O	1:A:72:ALA:CB	0.47	2.62	17	1
1:A:53:LEU:HD21	1:A:143:ILE:HD13	0.47	1.86	3	1
1:A:107:ALA:CB	1:A:109:ARG:HH22	0.47	2.21	4	1
1:A:133:LEU:HD22	1:A:141:PHE:CD1	0.47	2.44	5	1
1:A:76:PRO:C	1:A:77:ASP:CG	0.47	2.70	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:54:VAL:HG22	1:A:55:TYR:H	0.47	1.69	6	1
1:A:63:GLY:N	1:A:115:SER:HG	0.47	2.06	10	1
1:A:81:ARG:CD	1:A:81:ARG:N	0.47	2.77	12	1
1:A:45:GLN:HE22	1:A:51:ALA:H	0.47	1.52	17	1
1:A:97:GLN:NE2	1:A:97:GLN:CA	0.47	2.76	19	1
1:A:97:GLN:NE2	1:A:98:GLY:H	0.47	2.07	19	1
1:A:96:GLU:C	1:A:96:GLU:OE1	0.47	2.52	20	1
1:A:55:TYR:O	1:A:129:VAL:CG1	0.47	2.63	7	2
1:A:19:LEU:C	1:A:19:LEU:CD1	0.47	2.82	16	1
1:A:140:GLU:OE2	1:A:141:PHE:C	0.47	2.53	19	1
1:A:36:ARG:NH1	1:A:36:ARG:HB2	0.47	2.24	1	4
1:A:83:LEU:C	1:A:84:VAL:CG2	0.47	2.83	22	15
1:A:75:THR:OG1	1:A:140:GLU:CB	0.47	2.63	2	1
1:A:81:ARG:NH1	1:A:81:ARG:HG2	0.47	2.24	3	1
1:A:117:LEU:CD2	1:A:119:PHE:CE2	0.47	2.98	4	1
1:A:68:LEU:HD12	1:A:148:LEU:HD22	0.47	1.87	5	2
1:A:122:ASP:O	1:A:122:ASP:CG	0.47	2.52	9	1
1:A:110:GLU:O	1:A:110:GLU:OE1	0.47	2.32	12	1
1:A:7:VAL:N	1:A:149:THR:CB	0.47	2.75	17	1
1:A:138:ALA:C	1:A:139:TYR:CD1	0.47	2.88	21	1
1:A:45:GLN:OE1	1:A:50:ASP:C	0.47	2.54	7	1
1:A:64:GLU:O	1:A:115:SER:CB	0.47	2.63	8	5
1:A:62:GLU:O	1:A:62:GLU:OE1	0.47	2.33	11	2
1:A:47:ASN:OD1	1:A:47:ASN:N	0.47	2.47	15	1
1:A:24:LEU:HD22	1:A:25:TYR:N	0.47	2.24	20	1
1:A:26:GLY:O	1:A:45:GLN:OE1	0.47	2.33	2	1
1:A:71:THR:HG1	1:A:145:GLN:H	0.47	1.53	9	2
1:A:125:ALA:N	1:A:126:PRO:CD	0.47	2.78	5	2
1:A:58:VAL:HG12	1:A:148:LEU:CD2	0.47	2.40	1	1
1:A:12:HIS:CE1	1:A:21:PRO:HD2	0.47	2.45	7	1
1:A:86:GLU:CD	1:A:119:PHE:CD2	0.47	2.88	7	1
1:A:24:LEU:N	1:A:24:LEU:CD1	0.47	2.59	11	1
1:A:145:GLN:C	1:A:146:VAL:CG2	0.47	2.81	17	1
1:A:41:LEU:N	1:A:139:TYR:O	0.46	2.48	1	1
1:A:62:GLU:CA	1:A:115:SER:O	0.46	2.63	2	1
1:A:133:LEU:HD21	1:A:141:PHE:CD1	0.46	2.45	6	1
1:A:135:LYS:HB2	1:A:138:ALA:HB2	0.46	1.86	11	1
1:A:81:ARG:NE	1:A:97:GLN:O	0.46	2.47	6	1
1:A:12:HIS:CE1	1:A:21:PRO:CD	0.46	2.98	7	1
1:A:87:GLY:O	1:A:125:ALA:HB1	0.46	2.11	10	1
1:A:42:PRO:O	1:A:138:ALA:O	0.46	2.34	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:LEU:HD11	1:A:128:GLN:OE1	0.46	2.10	1	1
1:A:40:ASP:O	1:A:41:LEU:HD12	0.46	2.11	16	2
1:A:45:GLN:HE22	1:A:51:ALA:N	0.46	2.09	17	1
1:A:27:THR:HG1	1:A:28:SER:N	0.46	2.07	14	2
1:A:134:GLY:C	1:A:135:LYS:CG	0.46	2.84	5	1
1:A:148:LEU:C	1:A:148:LEU:HD13	0.46	2.31	15	2
1:A:25:TYR:O	1:A:25:TYR:CG	0.46	2.68	10	2
1:A:9:LEU:N	1:A:9:LEU:CD2	0.46	2.78	16	1
1:A:41:LEU:CD1	1:A:41:LEU:N	0.46	2.78	16	1
1:A:44:GLY:H	1:A:136:ALA:H	0.46	1.53	19	1
1:A:86:GLU:O	1:A:87:GLY:C	0.46	2.54	21	1
1:A:10:LEU:HD12	1:A:148:LEU:HB3	0.46	1.87	2	1
1:A:102:LEU:HD21	1:A:109:ARG:CG	0.46	2.40	4	2
1:A:39:VAL:CG2	1:A:41:LEU:HD21	0.46	2.33	7	1
1:A:121:PRO:C	1:A:125:ALA:O	0.46	2.53	8	1
1:A:86:GLU:OE1	1:A:86:GLU:N	0.46	2.39	13	2
1:A:41:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HB2	0.46	1.87	17	1
1:A:72:ALA:CB	1:A:141:PHE:CE1	0.46	2.99	1	1
1:A:47:ASN:ND2	1:A:49:TRP:CD1	0.46	2.84	2	1
1:A:86:GLU:O	1:A:128:GLN:CD	0.46	2.54	6	2
1:A:94:ALA:HB2	1:A:117:LEU:HD22	0.46	1.88	13	1
1:A:34:ASP:N	1:A:36:ARG:NH1	0.46	2.64	15	1
1:A:29:GLU:CG	1:A:29:GLU:O	0.46	2.63	16	1
1:A:12:HIS:C	1:A:13:THR:HG22	0.46	2.30	7	2
1:A:45:GLN:OE1	1:A:50:ASP:CB	0.46	2.63	12	2
1:A:133:LEU:HD22	1:A:141:PHE:CD2	0.46	2.46	8	2
1:A:109:ARG:HB3	1:A:111:TYR:CZ	0.46	2.46	22	3
1:A:109:ARG:HH11	1:A:109:ARG:HG3	0.46	1.71	18	1
1:A:67:VAL:HG23	1:A:112:ALA:HB2	0.46	1.87	21	1
1:A:66:TYR:C	1:A:67:VAL:CG2	0.46	2.84	20	13
1:A:24:LEU:HD12	1:A:24:LEU:H	0.46	1.70	3	2
1:A:58:VAL:HG23	1:A:148:LEU:HD22	0.46	1.87	3	1
1:A:133:LEU:O	1:A:138:ALA:HB1	0.46	2.10	11	2
1:A:47:ASN:O	1:A:49:TRP:CE3	0.46	2.69	17	1
1:A:74:ALA:HB1	1:A:139:TYR:HE2	0.46	1.70	18	1
1:A:33:ALA:HB3	1:A:36:ARG:NH1	0.46	2.26	2	2
1:A:130:ALA:HB1	1:A:132:HIS:NE2	0.46	2.26	5	1
1:A:81:ARG:NH2	1:A:97:GLN:N	0.46	2.63	6	1
1:A:102:LEU:CD2	1:A:102:LEU:N	0.45	2.79	9	1
1:A:58:VAL:HG12	1:A:148:LEU:HD21	0.45	1.88	10	1
1:A:58:VAL:HG21	1:A:129:VAL:HB	0.45	1.88	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:80:VAL:HG13	1:A:139:TYR:OH	0.45	2.11	1	1
1:A:18:SER:O	1:A:20:GLY:N	0.45	2.48	4	1
1:A:62:GLU:CG	1:A:117:LEU:O	0.45	2.64	6	1
1:A:135:LYS:O	1:A:138:ALA:CB	0.45	2.65	8	1
1:A:84:VAL:CG1	1:A:128:GLN:O	0.45	2.64	6	1
1:A:99:SER:O	1:A:111:TYR:OH	0.45	2.22	6	1
1:A:10:LEU:HD11	1:A:12:HIS:HB3	0.45	1.86	18	3
1:A:97:GLN:NE2	1:A:99:SER:CA	0.45	2.79	11	1
1:A:109:ARG:N	1:A:109:ARG:HD3	0.45	2.26	11	1
1:A:22:TRP:CZ2	1:A:55:TYR:CD2	0.45	3.04	14	1
1:A:45:GLN:HE22	1:A:51:ALA:HB2	0.45	1.72	22	1
1:A:14:SER:C	1:A:16:ALA:N	0.45	2.69	15	14
1:A:92:ARG:CD	1:A:92:ARG:N	0.45	2.78	7	1
1:A:125:ALA:C	1:A:127:GLY:N	0.45	2.70	7	1
1:A:72:ALA:HB2	1:A:143:ILE:HA	0.45	1.88	13	1
1:A:77:ASP:OD1	1:A:103:THR:C	0.45	2.54	14	1
1:A:102:LEU:CD2	1:A:109:ARG:CZ	0.45	2.94	10	2
1:A:98:GLY:O	1:A:100:ALA:N	0.45	2.50	20	1
1:A:143:ILE:HD12	1:A:145:GLN:N	0.45	2.25	1	1
1:A:18:SER:C	1:A:20:GLY:N	0.45	2.69	4	2
1:A:62:GLU:N	1:A:115:SER:CB	0.45	2.80	7	1
1:A:28:SER:OG	1:A:40:ASP:OD2	0.45	2.24	13	1
1:A:22:TRP:CZ2	1:A:146:VAL:CG1	0.45	3.00	21	2
1:A:33:ALA:C	1:A:35:GLY:N	0.45	2.70	16	1
1:A:62:GLU:OE2	1:A:116:ASN:O	0.45	2.34	1	1
1:A:45:GLN:NE2	1:A:50:ASP:HB2	0.45	2.27	20	2
1:A:133:LEU:HD23	1:A:141:PHE:CD1	0.45	2.46	22	2
1:A:85:GLY:O	1:A:128:GLN:N	0.45	2.49	18	3
1:A:102:LEU:HD11	1:A:109:ARG:HD3	0.45	1.89	9	1
1:A:72:ALA:HB3	1:A:109:ARG:HH21	0.45	1.70	10	1
1:A:117:LEU:HD12	1:A:119:PHE:CE2	0.45	2.46	18	2
1:A:60:VAL:HG22	1:A:66:TYR:CE1	0.45	2.46	14	1
1:A:53:LEU:O	1:A:54:VAL:HG22	0.45	2.12	5	6
1:A:117:LEU:HD23	1:A:118:THR:H	0.45	1.71	16	3
1:A:70:PHE:CD2	1:A:109:ARG:NH1	0.45	2.85	11	1
1:A:110:GLU:CD	1:A:110:GLU:H	0.45	2.15	14	2
1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:HD23	0.45	2.26	13	1
1:A:115:SER:C	1:A:117:LEU:H	0.45	2.15	18	1
1:A:123:GLY:C	1:A:124:ASP:OD1	0.45	2.56	18	1
1:A:148:LEU:O	1:A:149:THR:HG22	0.45	2.12	18	2
1:A:52:GLY:HA2	1:A:133:LEU:HD11	0.44	1.90	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:VAL:O	1:A:58:VAL:HG12	0.44	2.10	12	1
1:A:13:THR:OG1	1:A:147:SER:N	0.44	2.50	10	1
1:A:83:LEU:HD23	1:A:132:HIS:ND1	0.44	2.24	11	1
1:A:47:ASN:CB	1:A:49:TRP:CH2	0.44	3.00	12	1
1:A:10:LEU:CD1	1:A:12:HIS:H	0.44	2.15	18	1
1:A:133:LEU:HD22	1:A:141:PHE:HB2	0.44	1.89	18	1
1:A:30:PRO:HB2	1:A:37:MET:SD	0.44	2.52	1	2
1:A:47:ASN:HB3	1:A:49:TRP:CH2	0.44	2.48	18	4
1:A:97:GLN:NE2	1:A:111:TYR:CD2	0.44	2.85	12	1
1:A:53:LEU:CD1	1:A:53:LEU:N	0.44	2.80	21	1
1:A:30:PRO:HB3	1:A:37:MET:SD	0.44	2.53	1	3
1:A:33:ALA:HB3	1:A:36:ARG:HH12	0.44	1.72	2	2
1:A:97:GLN:OE1	1:A:111:TYR:CE2	0.44	2.71	4	1
1:A:69:SER:OG	1:A:147:SER:CB	0.44	2.65	16	3
1:A:41:LEU:HB3	1:A:138:ALA:HB3	0.44	1.85	11	1
1:A:37:MET:O	1:A:37:MET:CG	0.44	2.64	12	1
1:A:47:ASN:HB3	1:A:49:TRP:CZ2	0.44	2.47	12	2
1:A:102:LEU:HD21	1:A:109:ARG:HG3	0.44	1.89	4	2
1:A:22:TRP:CD1	1:A:22:TRP:N	0.44	2.86	3	4
1:A:12:HIS:NE2	1:A:20:GLY:CA	0.44	2.81	4	2
1:A:104:GLY:O	1:A:105:GLU:CG	0.44	2.66	5	1
1:A:34:ASP:C	1:A:36:ARG:H	0.44	2.16	7	1
1:A:97:GLN:HG3	1:A:98:GLY:N	0.44	2.28	20	4
1:A:62:GLU:C	1:A:115:SER:HG	0.44	2.16	8	1
1:A:103:THR:C	1:A:105:GLU:N	0.44	2.71	19	4
1:A:62:GLU:CG	1:A:116:ASN:O	0.44	2.66	10	2
1:A:82:VAL:HG13	1:A:97:GLN:O	0.44	2.12	10	1
1:A:42:PRO:O	1:A:135:LYS:CE	0.44	2.66	12	1
1:A:41:LEU:O	1:A:138:ALA:HB3	0.44	2.12	13	2
1:A:55:TYR:O	1:A:129:VAL:HG23	0.44	2.12	18	1
1:A:68:LEU:CD1	1:A:148:LEU:CD2	0.44	2.95	15	2
1:A:68:LEU:C	1:A:68:LEU:CD2	0.44	2.86	7	1
1:A:46:GLY:CA	1:A:136:ALA:HB2	0.44	2.42	10	1
1:A:19:LEU:H	1:A:19:LEU:HD22	0.44	1.68	3	1
1:A:33:ALA:O	1:A:34:ASP:O	0.44	2.36	4	1
1:A:81:ARG:NE	1:A:98:GLY:CA	0.44	2.81	6	1
1:A:49:TRP:C	1:A:50:ASP:OD1	0.44	2.56	10	1
1:A:75:THR:HA	1:A:77:ASP:N	0.44	2.28	14	1
1:A:19:LEU:HG	1:A:24:LEU:HD21	0.44	1.90	16	1
1:A:82:VAL:HG13	1:A:97:GLN:OE1	0.44	2.13	1	1
1:A:84:VAL:HG21	1:A:95:PHE:CD2	0.44	2.48	14	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:65:SER:OG	1:A:114:THR:HG23	0.44	2.13	4	1
1:A:70:PHE:CZ	1:A:109:ARG:HB3	0.44	2.48	7	1
1:A:10:LEU:HG	1:A:55:TYR:CZ	0.44	2.48	19	10
1:A:81:ARG:N	1:A:81:ARG:HD3	0.44	2.28	12	1
1:A:62:GLU:CG	1:A:63:GLY:N	0.44	2.81	18	1
1:A:112:ALA:C	1:A:113:PHE:CD2	0.44	2.92	18	1
1:A:133:LEU:CD2	1:A:141:PHE:CE1	0.44	3.01	20	1
1:A:19:LEU:HD22	1:A:20:GLY:N	0.43	2.28	3	1
1:A:19:LEU:HD13	1:A:24:LEU:HD21	0.43	1.89	5	1
1:A:53:LEU:HD12	1:A:53:LEU:H	0.43	1.73	7	1
1:A:46:GLY:N	1:A:136:ALA:HB2	0.43	2.27	10	1
1:A:72:ALA:C	1:A:109:ARG:NH2	0.43	2.70	17	1
1:A:109:ARG:NH1	1:A:109:ARG:CG	0.43	2.81	18	1
1:A:13:THR:OG1	1:A:13:THR:O	0.43	2.34	20	1
1:A:47:ASN:HB2	1:A:49:TRP:CE2	0.43	2.48	1	3
1:A:71:THR:HG21	1:A:145:GLN:CD	0.43	2.33	4	3
1:A:92:ARG:NH1	1:A:92:ARG:HB2	0.43	2.29	5	1
1:A:131:PHE:CD1	1:A:131:PHE:N	0.43	2.85	9	1
1:A:102:LEU:HD11	1:A:109:ARG:NH1	0.43	2.28	11	1
1:A:9:LEU:HD12	1:A:148:LEU:CD1	0.43	2.43	1	1
1:A:8:GLU:CD	1:A:8:GLU:H	0.43	2.17	3	1
1:A:117:LEU:CG	1:A:118:THR:N	0.43	2.81	7	2
1:A:62:GLU:CA	1:A:115:SER:OG	0.43	2.67	9	3
1:A:71:THR:HG21	1:A:145:GLN:NE2	0.43	2.29	9	1
1:A:41:LEU:HD11	1:A:51:ALA:CB	0.43	2.43	5	1
1:A:47:ASN:ND2	1:A:49:TRP:CZ3	0.43	2.86	5	1
1:A:125:ALA:N	1:A:126:PRO:HD3	0.43	2.29	5	1
1:A:145:GLN:C	1:A:146:VAL:HG23	0.43	2.34	8	2
1:A:22:TRP:CE2	1:A:55:TYR:HB2	0.43	2.49	2	1
1:A:71:THR:O	1:A:143:ILE:CB	0.43	2.67	2	1
1:A:47:ASN:C	1:A:49:TRP:N	0.43	2.71	8	3
1:A:43:GLY:CA	1:A:136:ALA:O	0.43	2.67	18	2
1:A:55:TYR:O	1:A:129:VAL:N	0.43	2.50	18	1
1:A:81:ARG:NH1	1:A:81:ARG:HB2	0.43	2.28	9	1
1:A:45:GLN:NE2	1:A:134:GLY:CA	0.43	2.81	14	1
1:A:97:GLN:CD	1:A:97:GLN:C	0.43	2.77	19	1
1:A:125:ALA:HB1	1:A:126:PRO:HD2	0.43	1.89	20	1
1:A:47:ASN:O	1:A:50:ASP:CG	0.43	2.56	2	1
1:A:59:PRO:C	1:A:60:VAL:CG2	0.43	2.87	6	2
1:A:72:ALA:HB1	1:A:142:CYS:O	0.43	2.13	7	2
1:A:9:LEU:HD13	1:A:59:PRO:HG2	0.43	1.90	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:73:SER:CB	1:A:105:GLU:O	0.43	2.66	21	2
1:A:41:LEU:CD2	1:A:133:LEU:HD13	0.43	2.41	16	1
1:A:45:GLN:NE2	1:A:51:ALA:HB2	0.43	2.29	17	1
1:A:62:GLU:N	1:A:115:SER:HB3	0.43	2.28	18	1
1:A:45:GLN:NE2	1:A:50:ASP:HB3	0.43	2.29	20	1
1:A:144:SER:CB	1:A:145:GLN:NE2	0.43	2.82	21	1
1:A:38:CYS:SG	1:A:142:CYS:N	0.43	2.92	2	1
1:A:36:ARG:HH11	1:A:36:ARG:HB2	0.43	1.73	5	1
1:A:80:VAL:CG2	1:A:81:ARG:N	0.43	2.81	8	3
1:A:86:GLU:OE2	1:A:92:ARG:C	0.43	2.57	8	1
1:A:62:GLU:CD	1:A:118:THR:HG23	0.43	2.33	12	2
1:A:68:LEU:HD12	1:A:148:LEU:HA	0.43	1.91	9	1
1:A:86:GLU:C	1:A:128:GLN:CB	0.43	2.87	19	1
1:A:82:VAL:HG22	1:A:83:LEU:N	0.43	2.28	21	1
1:A:58:VAL:O	1:A:59:PRO:O	0.43	2.37	2	1
1:A:68:LEU:HD23	1:A:70:PHE:CD1	0.43	2.49	6	1
1:A:141:PHE:CD2	1:A:143:ILE:CG2	0.43	3.01	9	1
1:A:30:PRO:O	1:A:31:VAL:CG2	0.43	2.67	14	1
1:A:24:LEU:C	1:A:24:LEU:HD12	0.43	2.34	22	1
1:A:29:GLU:OE1	1:A:29:GLU:O	0.43	2.36	4	1
1:A:58:VAL:O	1:A:58:VAL:HG22	0.43	2.13	5	2
1:A:10:LEU:CD1	1:A:57:GLY:O	0.43	2.67	7	1
1:A:53:LEU:C	1:A:54:VAL:HG23	0.43	2.33	12	2
1:A:19:LEU:O	1:A:19:LEU:CD2	0.43	2.60	9	1
1:A:78:MET:HE1	1:A:137:GLY:O	0.43	2.13	12	1
1:A:81:ARG:C	1:A:82:VAL:HG23	0.43	2.34	12	1
1:A:45:GLN:NE2	1:A:134:GLY:HA3	0.43	2.28	14	1
1:A:55:TYR:CD1	1:A:56:ASN:N	0.42	2.86	4	1
1:A:81:ARG:CZ	1:A:81:ARG:HB2	0.42	2.44	9	1
1:A:105:GLU:CD	1:A:105:GLU:C	0.42	2.78	14	1
1:A:36:ARG:CZ	1:A:36:ARG:HB3	0.42	2.43	1	2
1:A:55:TYR:CG	1:A:56:ASN:N	0.42	2.87	4	1
1:A:10:LEU:C	1:A:10:LEU:HD23	0.42	2.34	9	3
1:A:10:LEU:HD22	1:A:12:HIS:CB	0.42	2.44	17	3
1:A:56:ASN:ND2	1:A:127:GLY:O	0.42	2.52	10	1
1:A:92:ARG:CZ	1:A:92:ARG:HB2	0.42	2.45	5	1
1:A:81:ARG:CB	1:A:81:ARG:NH1	0.42	2.82	9	1
1:A:62:GLU:C	1:A:62:GLU:OE1	0.42	2.57	13	1
1:A:100:ALA:CA	1:A:111:TYR:OH	0.42	2.68	17	1
1:A:45:GLN:NE2	1:A:135:LYS:NZ	0.42	2.67	19	1
1:A:67:VAL:O	1:A:67:VAL:CG1	0.42	2.67	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:VAL:CG2	1:A:83:LEU:N	0.42	2.82	21	1
1:A:83:LEU:C	1:A:83:LEU:CD1	0.42	2.88	1	1
1:A:22:TRP:CE2	1:A:55:TYR:CG	0.42	3.08	10	2
1:A:12:HIS:NE2	1:A:20:GLY:HA3	0.42	2.29	4	3
1:A:19:LEU:CD1	1:A:19:LEU:C	0.42	2.88	4	1
1:A:29:GLU:OE1	1:A:30:PRO:O	0.42	2.37	4	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:24:LEU:H	0.42	1.69	9	2
1:A:87:GLY:O	1:A:125:ALA:HB3	0.42	2.14	12	1
1:A:47:ASN:CB	1:A:49:TRP:CE2	0.42	3.03	15	2
1:A:105:GLU:OE1	1:A:105:GLU:CA	0.42	2.68	2	1
1:A:10:LEU:HD21	1:A:12:HIS:O	0.42	2.13	6	1
1:A:78:MET:HB3	1:A:139:TYR:CE2	0.42	2.50	14	1
1:A:148:LEU:HD23	1:A:148:LEU:H	0.42	1.70	19	1
1:A:116:ASN:O	1:A:116:ASN:CG	0.42	2.57	20	1
1:A:28:SER:HG	1:A:40:ASP:CG	0.42	2.16	4	1
1:A:92:ARG:HH11	1:A:92:ARG:HG3	0.42	1.74	5	1
1:A:58:VAL:HG23	1:A:148:LEU:HD11	0.42	1.91	6	1
1:A:83:LEU:HD12	1:A:128:GLN:HE22	0.42	1.74	10	1
1:A:58:VAL:HG12	1:A:128:GLN:H	0.42	1.73	3	1
1:A:69:SER:O	1:A:147:SER:CB	0.42	2.68	15	1
1:A:97:GLN:CA	1:A:97:GLN:HE21	0.42	2.27	19	1
1:A:86:GLU:OE1	1:A:119:PHE:CD2	0.42	2.72	21	1
1:A:58:VAL:CG1	1:A:128:GLN:N	0.42	2.81	6	1
1:A:47:ASN:HB2	1:A:49:TRP:CZ3	0.42	2.49	9	1
1:A:102:LEU:HD13	1:A:109:ARG:NH1	0.42	2.30	9	1
1:A:111:TYR:CD1	1:A:111:TYR:N	0.42	2.87	11	2
1:A:22:TRP:NE1	1:A:55:TYR:CE2	0.42	2.88	1	1
1:A:121:PRO:O	1:A:126:PRO:CB	0.42	2.67	5	1
1:A:145:GLN:HG3	1:A:146:VAL:N	0.42	2.30	5	1
1:A:61:GLY:C	1:A:62:GLU:OE1	0.42	2.58	7	1
1:A:70:PHE:CE1	1:A:111:TYR:CE2	0.42	3.08	8	2
1:A:12:HIS:CD2	1:A:21:PRO:HD2	0.42	2.49	18	2
1:A:28:SER:O	1:A:39:VAL:HG12	0.42	2.14	11	1
1:A:23:SER:O	1:A:54:VAL:N	0.42	2.53	12	1
1:A:62:GLU:N	1:A:117:LEU:O	0.42	2.53	21	1
1:A:58:VAL:HG12	1:A:128:GLN:N	0.41	2.29	3	1
1:A:47:ASN:CG	1:A:49:TRP:CE3	0.41	2.91	5	1
1:A:103:THR:HG22	1:A:109:ARG:HH22	0.41	1.74	5	1
1:A:102:LEU:CD2	1:A:107:ALA:HB3	0.41	2.45	6	1
1:A:45:GLN:C	1:A:47:ASN:N	0.41	2.73	17	2
1:A:146:VAL:HG22	1:A:147:SER:N	0.41	2.30	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:ALA:C	1:A:113:PHE:CG	0.41	2.92	18	1
1:A:118:THR:O	1:A:119:PHE:CD2	0.41	2.72	20	1
1:A:52:GLY:HA3	1:A:131:PHE:O	0.41	2.15	22	1
1:A:143:ILE:HG12	1:A:144:SER:N	0.41	2.29	2	1
1:A:10:LEU:C	1:A:12:HIS:N	0.41	2.72	7	1
1:A:121:PRO:HA	1:A:125:ALA:O	0.41	2.15	8	1
1:A:23:SER:CB	1:A:54:VAL:HG13	0.41	2.45	15	2
1:A:71:THR:HG21	1:A:145:GLN:OE1	0.41	2.15	10	1
1:A:43:GLY:N	1:A:138:ALA:HB2	0.41	2.29	12	1
1:A:25:TYR:OH	1:A:54:VAL:HG11	0.41	2.15	15	1
1:A:27:THR:CB	1:A:51:ALA:HB1	0.41	2.45	1	1
1:A:8:GLU:OE1	1:A:8:GLU:N	0.41	2.47	3	1
1:A:19:LEU:HB2	1:A:24:LEU:HD11	0.41	1.92	3	1
1:A:72:ALA:CB	1:A:109:ARG:NH2	0.41	2.83	3	1
1:A:117:LEU:HB3	1:A:119:PHE:CZ	0.41	2.50	3	1
1:A:45:GLN:N	1:A:136:ALA:HA	0.41	2.31	8	1
1:A:77:ASP:CG	1:A:103:THR:CB	0.41	2.89	8	1
1:A:81:ARG:HH11	1:A:81:ARG:HG3	0.41	1.74	9	1
1:A:66:TYR:HB2	1:A:113:PHE:CZ	0.41	2.50	14	4
1:A:78:MET:CG	1:A:139:TYR:CE2	0.41	3.03	10	1
1:A:75:THR:O	1:A:140:GLU:OE1	0.41	2.38	13	1
1:A:75:THR:CA	1:A:77:ASP:N	0.41	2.83	14	1
1:A:53:LEU:N	1:A:53:LEU:HD23	0.41	2.30	18	1
1:A:58:VAL:N	1:A:59:PRO:HD3	0.41	2.31	1	1
1:A:77:ASP:CG	1:A:103:THR:HG1	0.41	2.17	1	1
1:A:48:PRO:C	1:A:50:ASP:N	0.41	2.74	3	1
1:A:62:GLU:N	1:A:115:SER:HB2	0.41	2.30	7	1
1:A:129:VAL:O	1:A:129:VAL:HG13	0.41	2.15	9	1
1:A:39:VAL:O	1:A:140:GLU:CB	0.41	2.69	11	1
1:A:84:VAL:HG13	1:A:129:VAL:HA	0.41	1.91	19	1
1:A:47:ASN:HB2	1:A:49:TRP:NE1	0.41	2.30	21	1
1:A:123:GLY:C	1:A:125:ALA:H	0.41	2.18	2	1
1:A:81:ARG:HD3	1:A:135:LYS:HZ1	0.41	1.74	3	1
1:A:128:GLN:O	1:A:129:VAL:CG2	0.41	2.69	4	1
1:A:141:PHE:CE2	1:A:143:ILE:HG22	0.41	2.50	5	1
1:A:54:VAL:HG13	1:A:55:TYR:N	0.41	2.30	6	1
1:A:84:VAL:CA	1:A:128:GLN:OE1	0.41	2.68	10	1
1:A:86:GLU:HB3	1:A:119:PHE:CD1	0.41	2.50	13	3
1:A:70:PHE:CE2	1:A:109:ARG:HB2	0.41	2.51	20	2
1:A:81:ARG:CB	1:A:132:HIS:O	0.41	2.68	15	1
1:A:13:THR:O	1:A:145:GLN:CB	0.41	2.69	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:GLY:H	1:A:125:ALA:HB3	0.41	1.76	16	1
1:A:78:MET:HB3	1:A:139:TYR:CE1	0.41	2.50	7	1
1:A:15:PHE:CE2	1:A:19:LEU:HD23	0.41	2.51	8	1
1:A:49:TRP:CZ3	1:A:50:ASP:CG	0.41	2.94	17	1
1:A:60:VAL:CG1	1:A:61:GLY:N	0.41	2.83	21	1
1:A:78:MET:HG3	1:A:139:TYR:CD1	0.41	2.51	9	2
1:A:10:LEU:HD13	1:A:148:LEU:HD22	0.41	1.92	7	1
1:A:83:LEU:HD21	1:A:132:HIS:CD2	0.41	2.51	8	1
1:A:74:ALA:HB3	1:A:102:LEU:O	0.41	2.15	10	1
1:A:67:VAL:CG1	1:A:110:GLU:CG	0.41	2.99	11	1
1:A:75:THR:HG23	1:A:104:GLY:O	0.41	2.15	12	1
1:A:45:GLN:C	1:A:47:ASN:H	0.41	2.19	3	1
1:A:12:HIS:CD2	1:A:20:GLY:HA3	0.41	2.51	4	4
1:A:92:ARG:CB	1:A:92:ARG:NH1	0.41	2.82	5	1
1:A:53:LEU:HD12	1:A:131:PHE:HB2	0.41	1.93	7	1
1:A:53:LEU:HG	1:A:54:VAL:N	0.41	2.31	11	1
1:A:66:TYR:HB2	1:A:113:PHE:CE2	0.41	2.51	17	1
1:A:19:LEU:O	1:A:20:GLY:C	0.41	2.59	1	1
1:A:97:GLN:HE22	1:A:111:TYR:CB	0.41	2.29	2	1
1:A:145:GLN:CG	1:A:146:VAL:N	0.41	2.84	5	1
1:A:109:ARG:HH11	1:A:109:ARG:HG2	0.41	1.75	14	2
1:A:74:ALA:HB1	1:A:139:TYR:CD2	0.41	2.50	12	1
1:A:61:GLY:C	1:A:115:SER:CB	0.41	2.89	18	1
1:A:24:LEU:O	1:A:24:LEU:HD12	0.41	2.15	22	1
1:A:49:TRP:HB3	1:A:132:HIS:CE1	0.40	2.51	4	1
1:A:54:VAL:CB	1:A:129:VAL:O	0.40	2.69	4	1
1:A:102:LEU:HD21	1:A:109:ARG:CZ	0.40	2.46	11	1
1:A:36:ARG:NH1	1:A:142:CYS:HB3	0.40	2.31	12	1
1:A:117:LEU:C	1:A:117:LEU:HD13	0.40	2.35	12	1
1:A:92:ARG:HH11	1:A:92:ARG:HG2	0.40	1.76	16	1
1:A:64:GLU:OE1	1:A:64:GLU:N	0.40	2.54	17	1
1:A:145:GLN:O	1:A:146:VAL:HG22	0.40	2.16	17	1
1:A:124:ASP:CG	1:A:125:ALA:H	0.40	2.20	19	1
1:A:9:LEU:HD13	1:A:59:PRO:CG	0.40	2.45	8	1
1:A:70:PHE:CZ	1:A:111:TYR:CE2	0.40	3.10	8	1
1:A:117:LEU:CD2	1:A:117:LEU:N	0.40	2.84	8	1
1:A:116:ASN:N	1:A:116:ASN:HD22	0.40	2.14	11	1
1:A:96:GLU:O	1:A:96:GLU:CG	0.40	2.69	12	1
1:A:139:TYR:CD1	1:A:139:TYR:C	0.40	2.89	18	1
1:A:78:MET:HG2	1:A:139:TYR:CE2	0.40	2.51	10	1
1:A:8:GLU:O	1:A:9:LEU:C	0.40	2.58	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:119:PHE:N	1:A:120:PRO:HD3	0.40	2.31	16	1
1:A:86:GLU:O	1:A:86:GLU:OE2	0.40	2.39	18	1
1:A:84:VAL:HB	1:A:95:PHE:CB	0.40	2.46	22	1
1:A:78:MET:HB2	1:A:139:TYR:CE2	0.40	2.51	3	1
1:A:58:VAL:CG2	1:A:129:VAL:CG2	0.40	3.00	17	1
1:A:81:ARG:NH1	1:A:135:LYS:HE3	0.40	2.32	3	1
1:A:109:ARG:HA	1:A:109:ARG:NE	0.40	2.30	8	1
1:A:102:LEU:HD22	1:A:102:LEU:N	0.40	2.29	9	1
1:A:24:LEU:HD23	1:A:37:MET:CE	0.40	2.47	11	1
1:A:15:PHE:N	1:A:15:PHE:CD1	0.40	2.90	13	1
1:A:10:LEU:HG	1:A:55:TYR:CE2	0.40	2.52	15	1
1:A:45:GLN:HE22	1:A:51:ALA:CB	0.40	2.29	17	1
1:A:133:LEU:C	1:A:134:GLY:O	0.40	2.60	20	1
1:A:10:LEU:C	1:A:10:LEU:HD22	0.40	2.36	22	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	140/153 (92%)	92±5 (66±4%)	31±5 (22±4%)	16±2 (12±2%)	1	7
All	All	3080/3366 (92%)	2026 (66%)	692 (22%)	362 (12%)	1	7

All 57 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	76	PRO	21
1	A	138	ALA	21
1	A	33	ALA	20
1	A	139	TYR	19
1	A	42	PRO	18
1	A	15	PHE	17
1	A	126	PRO	16
1	A	136	ALA	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	11	PRO	14
1	A	34	ASP	13
1	A	78	MET	13
1	A	146	VAL	13
1	A	22	TRP	12
1	A	25	TYR	11
1	A	124	ASP	10
1	A	7	VAL	10
1	A	51	ALA	8
1	A	62	GLU	7
1	A	92	ARG	6
1	A	8	GLU	6
1	A	55	TYR	6
1	A	43	GLY	5
1	A	44	GLY	5
1	A	150	THR	5
1	A	48	PRO	5
1	A	149	THR	5
1	A	13	THR	4
1	A	46	GLY	4
1	A	49	TRP	3
1	A	123	GLY	3
1	A	129	VAL	3
1	A	87	GLY	3
1	A	127	GLY	3
1	A	134	GLY	3
1	A	98	GLY	3
1	A	104	GLY	2
1	A	59	PRO	2
1	A	16	ALA	2
1	A	57	GLY	2
1	A	115	SER	2
1	A	30	PRO	2
1	A	18	SER	2
1	A	120	PRO	2
1	A	9	LEU	2
1	A	107	ALA	2
1	A	135	LYS	1
1	A	19	LEU	1
1	A	63	GLY	1
1	A	60	VAL	1
1	A	125	ALA	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	121	PRO	1
1	A	77	ASP	1
1	A	50	ASP	1
1	A	72	ALA	1
1	A	116	ASN	1
1	A	137	GLY	1
1	A	99	SER	1

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	109/117 (93%)	72±4 (66±4%)	37±4 (34±4%)	1	11
All	All	2398/2574 (93%)	1588 (66%)	810 (34%)	1	11

All 82 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	25	TYR	22
1	A	27	THR	22
1	A	32	PHE	22
1	A	75	THR	22
1	A	108	THR	22
1	A	114	THR	22
1	A	118	THR	22
1	A	143	ILE	22
1	A	93	THR	21
1	A	95	PHE	21
1	A	47	ASN	20
1	A	133	LEU	19
1	A	36	ARG	18
1	A	77	ASP	18
1	A	92	ARG	18
1	A	128	GLN	18
1	A	147	SER	17
1	A	13	THR	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	109	ARG	16
1	A	56	ASN	15
1	A	84	VAL	15
1	A	54	VAL	13
1	A	71	THR	13
1	A	139	TYR	13
1	A	83	LEU	13
1	A	149	THR	13
1	A	10	LEU	12
1	A	113	PHE	12
1	A	81	ARG	12
1	A	19	LEU	11
1	A	78	MET	11
1	A	124	ASP	11
1	A	69	SER	10
1	A	82	VAL	10
1	A	150	THR	10
1	A	39	VAL	10
1	A	38	CYS	10
1	A	103	THR	10
1	A	40	ASP	9
1	A	145	GLN	9
1	A	86	GLU	9
1	A	80	VAL	9
1	A	96	GLU	8
1	A	122	ASP	8
1	A	9	LEU	8
1	A	117	LEU	8
1	A	29	GLU	7
1	A	73	SER	7
1	A	97	GLN	7
1	A	34	ASP	7
1	A	148	LEU	6
1	A	7	VAL	6
1	A	24	LEU	6
1	A	50	ASP	5
1	A	67	VAL	5
1	A	70	PHE	5
1	A	116	ASN	5
1	A	135	LYS	5
1	A	37	MET	5
1	A	53	LEU	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	8	GLU	5
1	A	60	VAL	5
1	A	110	GLU	5
1	A	68	LEU	4
1	A	115	SER	4
1	A	62	GLU	4
1	A	105	GLU	3
1	A	140	GLU	3
1	A	18	SER	3
1	A	49	TRP	3
1	A	58	VAL	3
1	A	14	SER	3
1	A	23	SER	2
1	A	31	VAL	2
1	A	45	GLN	2
1	A	99	SER	2
1	A	65	SER	1
1	A	41	LEU	1
1	A	129	VAL	1
1	A	144	SER	1
1	A	146	VAL	1
1	A	131	PHE	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no monosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry ⓘ

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided