



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

May 7, 2024 – 12:26 pm BST

PDB ID : 1E41  
Title : Death domain from human FADD/MORT1  
Authors : Driscoll, P.C.; Berglund, H.; Olerenshaw, D.; McDonald, N.Q.  
Deposited on : 2000-06-27

This is a Full wwPDB NMR Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.

We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto: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

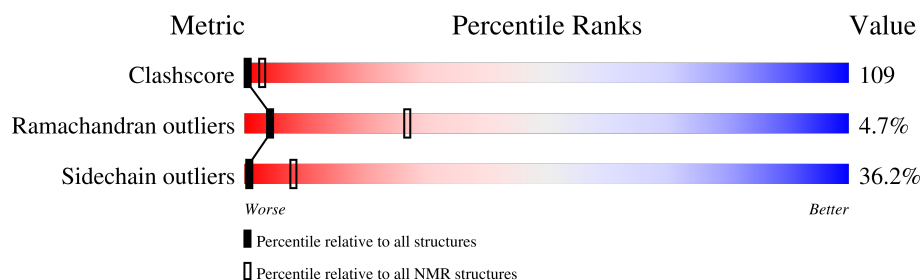
# 1 Overall quality at a glance

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  $\geq 3$ , 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	104	

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 25 models. Model 25 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative.

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:96-A:182 (87)	0.91	25

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

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

The models can be grouped into 3 clusters. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 11, 14, 17, 18, 21, 22, 23, 25
2	8, 10, 12, 13, 15, 16, 20, 24
3	9, 19

### 3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1654 atoms, of which 825 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called FADD PROTEIN.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	104	Total	C	H	N	O	S	0
			1654	502	825	161	161	5	

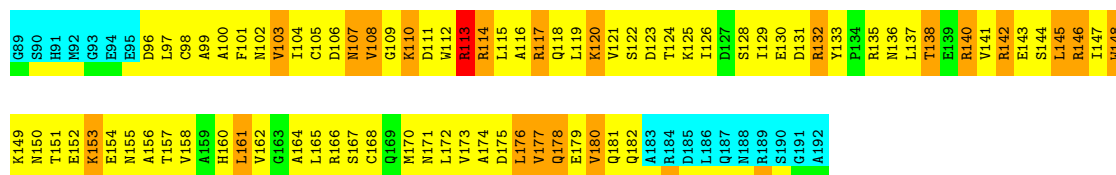
## 4 Residue-property plots

### 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: FADD PROTEIN

Chain A: 



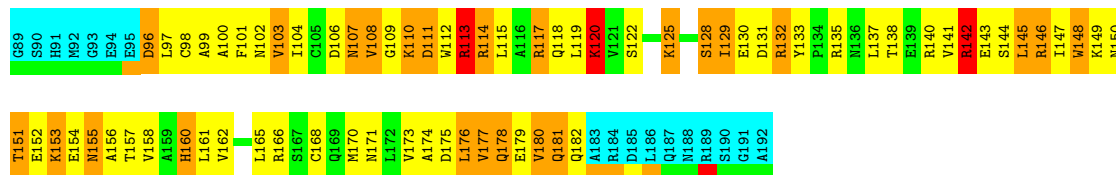
### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

#### 4.2.1 Score per residue for model 1

##### • Molecule 1: FADD PROTEIN

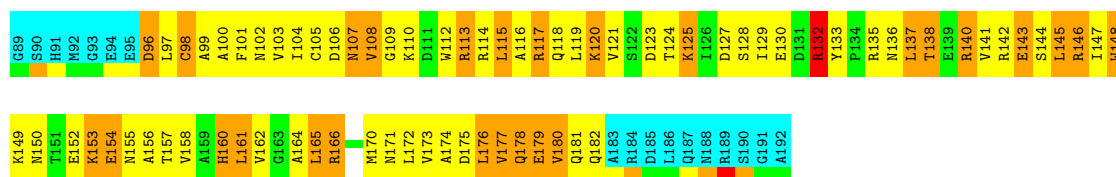
Chain A: 



#### 4.2.2 Score per residue for model 2

##### • Molecule 1: FADD PROTEIN

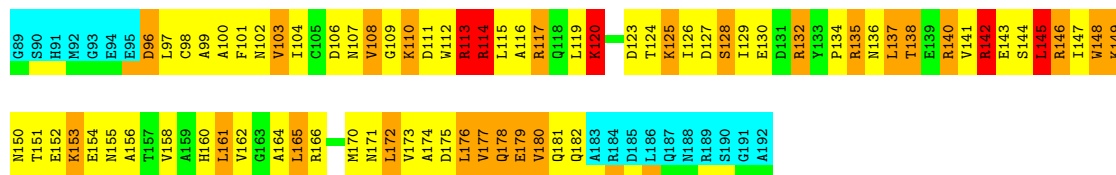
Chain A: 



### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: FADD PROTEIN

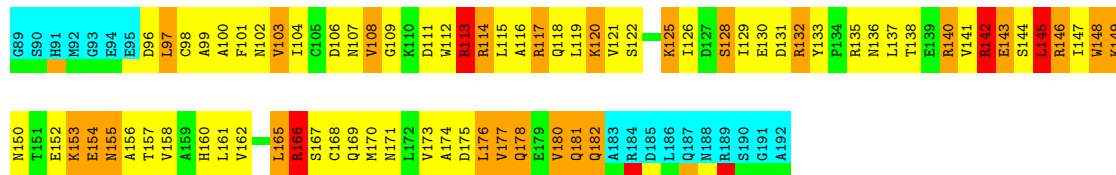
Chain A: 12% 43% 23% 5% 16%



### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: FADD PROTEIN

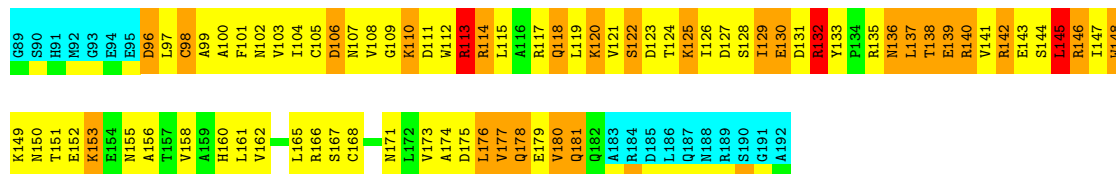
Chain A: 12% 44% 23% 16%



### 4.2.5 Score per residue for model 5

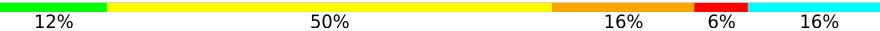
- Molecule 1: FADD PROTEIN

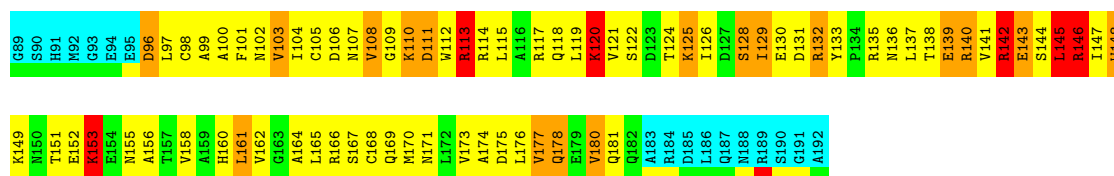
Chain A: 11% 46% 24% 16%



### 4.2.6 Score per residue for model 6


- Molecule 1: FADD PROTEIN

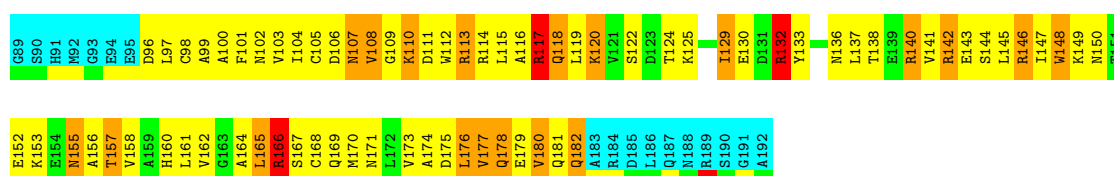
Chain A:  12% 50% 16% 6% 16%



#### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: FADD PROTEIN

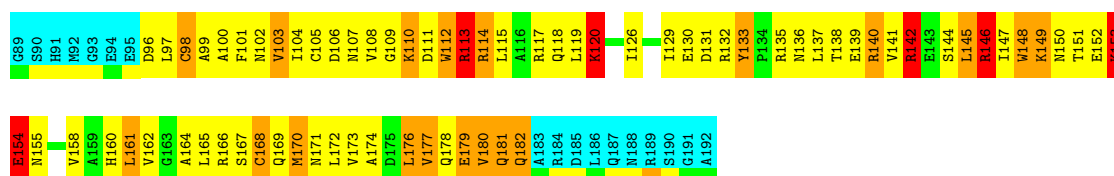
Chain A:  13% 49% 18% 16%



#### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: FADD PROTEIN

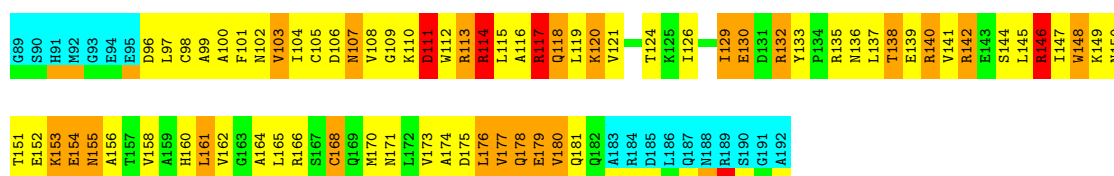
Chain A:  14% 45% 18% 6% 16%



#### 4.2.9 Score per residue for model 9

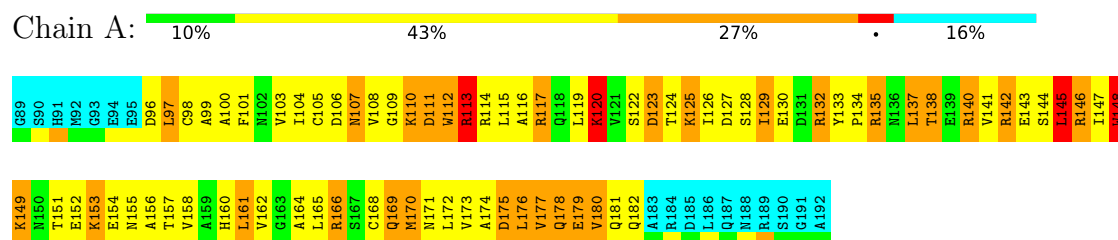
- Molecule 1: FADD PROTEIN

Chain A:  14% 44% 21% 16%



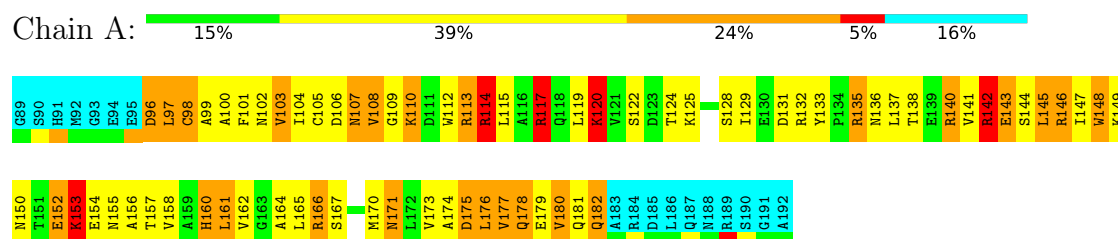
### 4.2.10 Score per residue for model 10

#### • Molecule 1: FADD PROTEIN



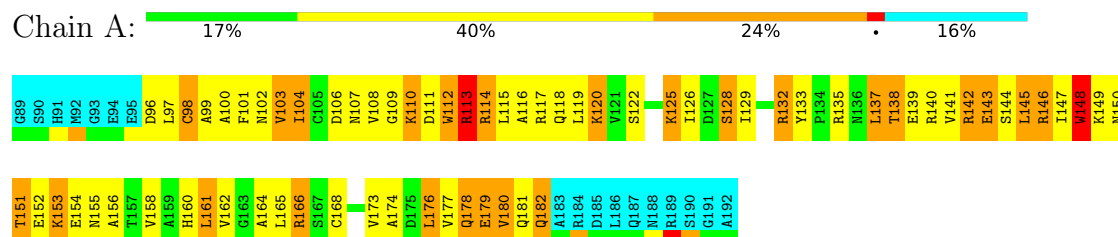
### 4.2.11 Score per residue for model 11

#### • Molecule 1: FADD PROTEIN



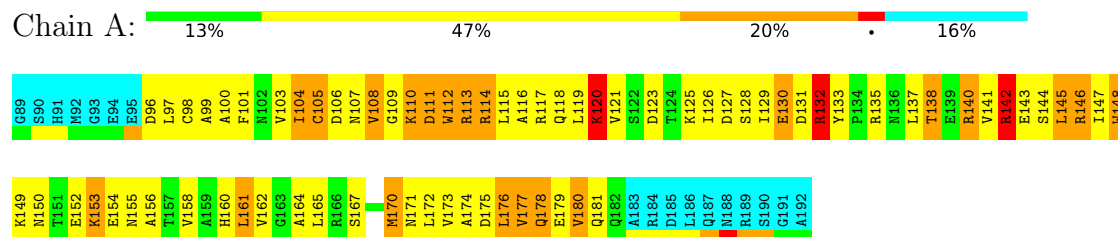
### 4.2.12 Score per residue for model 12

#### • Molecule 1: FADD PROTEIN



### 4.2.13 Score per residue for model 13

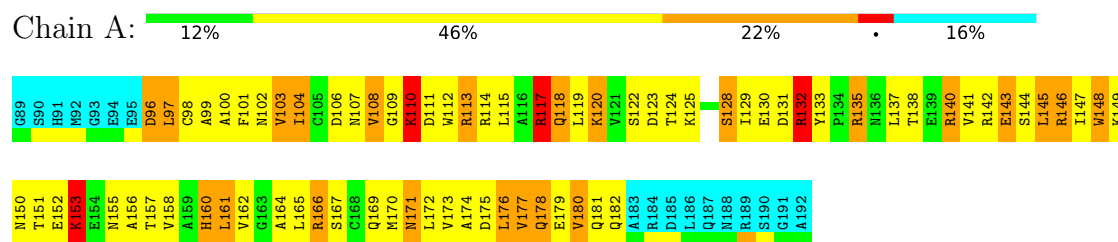
#### • Molecule 1: FADD PROTEIN





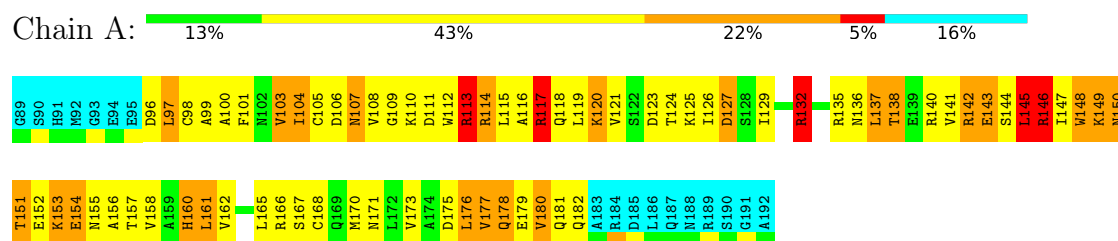
#### 4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: FADD PROTEIN



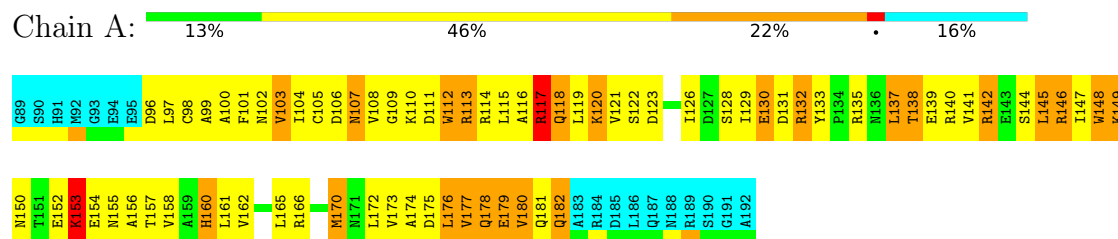
#### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: FADD PROTEIN



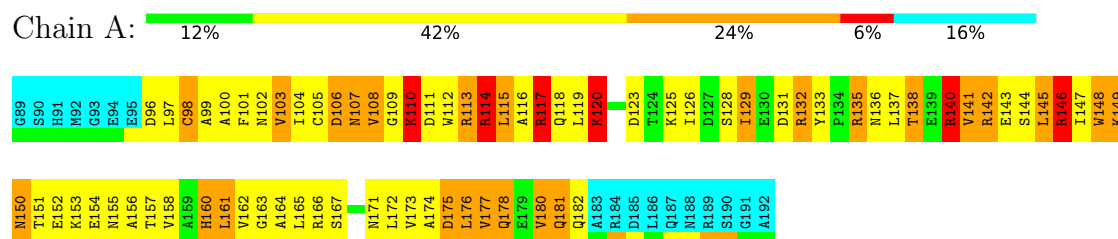
#### 4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: FADD PROTEIN



#### 4.2.17 Score per residue for model 17

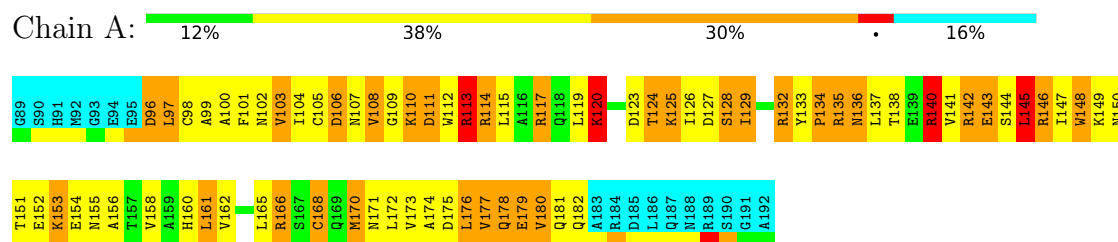
- Molecule 1: FADD PROTEIN





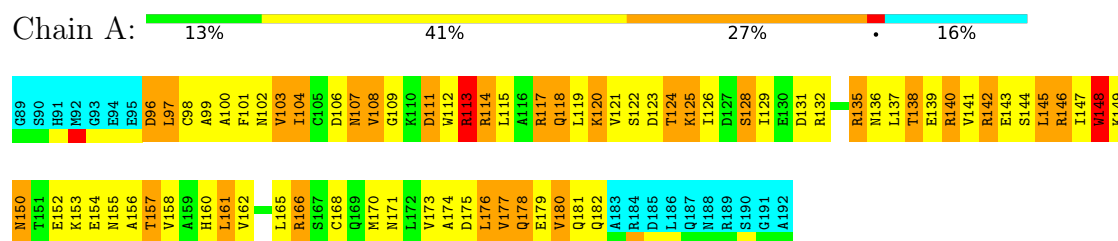
### 4.2.22 Score per residue for model 22

#### • Molecule 1: FADD PROTEIN



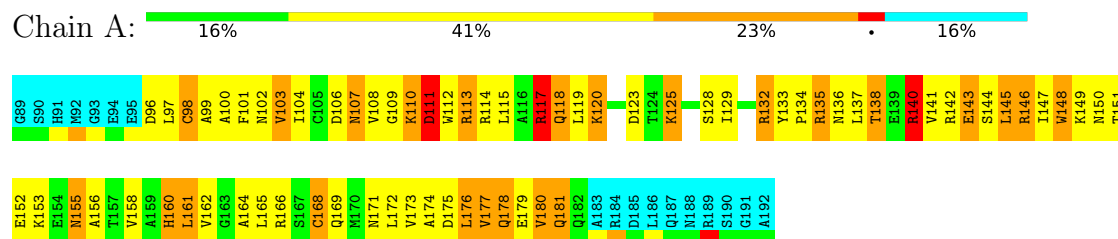
### 4.2.23 Score per residue for model 23

#### • Molecule 1: FADD PROTEIN



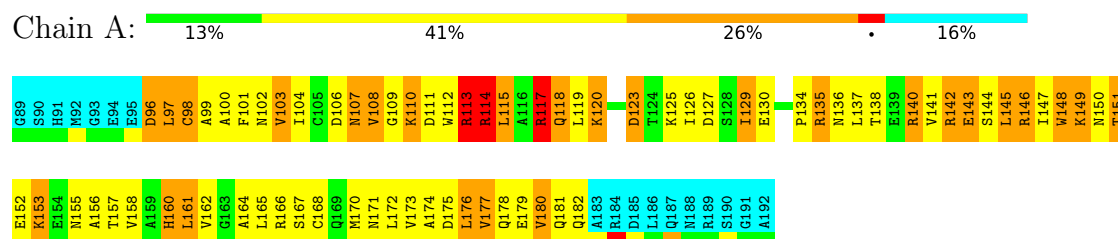
### 4.2.24 Score per residue for model 24

#### • Molecule 1: FADD PROTEIN



### 4.2.25 Score per residue for model 25 (medoid)

#### • Molecule 1: FADD PROTEIN



## 5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *SIMULATED ANNEALING FROM RANDOM CHAIN STARTING CONFORMERS*.

Of the 100 calculated structures, 25 were deposited, based on the following criterion: *LEAST RESTRAINT VIOLATION AND GOOD NON-BONDED CONTACTS*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	3.851
NMRPipe	structure solution	
ANSIG	structure solution	
X-PLOR	structure solution	

No chemical shift data was provided.

## 6 Model quality [i](#)

### 6.1 Standard geometry [i](#)

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

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	8.6±0.6
All	All	0	215

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	117	ARG	Sidechain	25
1	A	146	ARG	Sidechain	25
1	A	113	ARG	Sidechain	24
1	A	114	ARG	Sidechain	24
1	A	132	ARG	Sidechain	24
1	A	142	ARG	Sidechain	24
1	A	166	ARG	Sidechain	24
1	A	135	ARG	Sidechain	23
1	A	140	ARG	Sidechain	22

### 6.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	703	711	711	154±14
All	All	17575	17775	17775	3848

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 109.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:173:VAL:O	1:A:176:LEU:HD23	1.23	1.32	18	22
1:A:103:VAL:HG21	1:A:177:VAL:HG22	1.09	1.12	3	25
1:A:100:ALA:CB	1:A:161:LEU:HD21	1.06	1.79	12	2
1:A:100:ALA:HB1	1:A:161:LEU:HD22	1.06	1.09	24	9
1:A:103:VAL:HG23	1:A:176:LEU:HD11	1.05	1.21	23	3
1:A:162:VAL:HG22	1:A:177:VAL:HB	1.04	1.28	9	25
1:A:99:ALA:HB3	1:A:180:VAL:HG23	1.03	1.28	1	16
1:A:119:LEU:HD13	1:A:148:TRP:CD1	1.02	1.88	25	15
1:A:145:LEU:HD12	1:A:145:LEU:C	1.01	1.76	18	2
1:A:165:LEU:HD13	1:A:166:ARG:N	1.00	1.72	2	3
1:A:160:HIS:CE1	1:A:161:LEU:HD12	0.99	1.92	2	3
1:A:103:VAL:HG21	1:A:177:VAL:CG2	0.99	1.86	6	18
1:A:103:VAL:HG22	1:A:176:LEU:HD11	0.99	1.34	1	21
1:A:97:LEU:HD11	1:A:101:PHE:CE2	0.97	1.95	18	8
1:A:97:LEU:HD22	1:A:101:PHE:CZ	0.96	1.95	13	11
1:A:100:ALA:HB1	1:A:161:LEU:HD21	0.96	1.32	8	2
1:A:119:LEU:HD22	1:A:148:TRP:CD1	0.96	1.95	14	20
1:A:173:VAL:HA	1:A:176:LEU:CD2	0.96	1.89	4	25
1:A:145:LEU:HA	1:A:148:TRP:HB3	0.96	1.38	14	22
1:A:160:HIS:NE2	1:A:161:LEU:HD12	0.95	1.74	21	4
1:A:137:LEU:O	1:A:141:VAL:HG23	0.95	1.61	7	15
1:A:173:VAL:HA	1:A:176:LEU:HD21	0.95	1.34	4	3
1:A:141:VAL:HG12	1:A:145:LEU:HD11	0.94	1.39	8	9
1:A:99:ALA:HB1	1:A:180:VAL:CG2	0.93	1.94	5	2
1:A:165:LEU:HD22	1:A:165:LEU:C	0.93	1.83	4	3
1:A:100:ALA:CB	1:A:161:LEU:HD22	0.93	1.93	14	6
1:A:97:LEU:C	1:A:97:LEU:HD12	0.92	1.85	22	1
1:A:142:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD12	0.92	1.37	16	2
1:A:100:ALA:HB1	1:A:161:LEU:HD12	0.92	1.41	13	4
1:A:103:VAL:HG11	1:A:177:VAL:HG21	0.91	1.40	8	9
1:A:97:LEU:HD12	1:A:97:LEU:O	0.91	1.65	22	10
1:A:103:VAL:HG11	1:A:177:VAL:CG2	0.91	1.95	8	7
1:A:97:LEU:HD11	1:A:101:PHE:CZ	0.90	2.01	21	6
1:A:99:ALA:HB3	1:A:180:VAL:CG2	0.90	1.97	1	19
1:A:173:VAL:O	1:A:176:LEU:CD2	0.90	2.19	6	18
1:A:119:LEU:HD22	1:A:148:TRP:NE1	0.90	1.81	18	13
1:A:112:TRP:CB	1:A:141:VAL:HG22	0.90	1.97	24	16
1:A:100:ALA:HB1	1:A:161:LEU:CD1	0.90	1.97	13	6

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:ALA:CB	1:A:180:VAL:HG21	0.89	1.97	14	2
1:A:165:LEU:HD22	1:A:165:LEU:O	0.89	1.66	4	3
1:A:165:LEU:HD11	1:A:174:ALA:HB2	0.89	1.44	7	3
1:A:103:VAL:CG2	1:A:177:VAL:HG22	0.89	1.96	19	19
1:A:160:HIS:NE2	1:A:161:LEU:HD23	0.89	1.81	20	2
1:A:103:VAL:CG2	1:A:176:LEU:HD11	0.88	1.99	12	20
1:A:104:ILE:HD11	1:A:161:LEU:HD11	0.88	1.45	18	10
1:A:97:LEU:HD11	1:A:101:PHE:CE1	0.88	2.03	15	4
1:A:162:VAL:HG22	1:A:177:VAL:CB	0.88	1.99	23	23
1:A:112:TRP:HB3	1:A:141:VAL:HG22	0.87	1.43	24	9
1:A:141:VAL:O	1:A:145:LEU:HD12	0.87	1.69	22	20
1:A:110:LYS:O	1:A:112:TRP:N	0.86	2.07	10	2
1:A:177:VAL:O	1:A:180:VAL:HB	0.86	1.71	12	25
1:A:137:LEU:HD12	1:A:138:THR:N	0.86	1.85	13	6
1:A:104:ILE:HG12	1:A:115:LEU:HD23	0.86	1.48	20	3
1:A:111:ASP:OD1	1:A:137:LEU:HD13	0.86	1.70	20	2
1:A:100:ALA:HB1	1:A:161:LEU:CD2	0.85	2.01	14	8
1:A:104:ILE:HD11	1:A:161:LEU:HD21	0.85	1.44	9	5
1:A:137:LEU:O	1:A:141:VAL:HG12	0.85	1.71	13	1
1:A:162:VAL:HG11	1:A:178:GLN:HG2	0.84	1.49	17	8
1:A:109:GLY:C	1:A:137:LEU:HD22	0.84	1.90	10	2
1:A:165:LEU:HD11	1:A:174:ALA:CB	0.84	2.02	2	3
1:A:104:ILE:HG23	1:A:141:VAL:CG2	0.84	2.03	23	1
1:A:104:ILE:HG23	1:A:141:VAL:HG22	0.83	1.48	23	1
1:A:144:SER:O	1:A:147:ILE:N	0.83	2.12	9	23
1:A:101:PHE:HA	1:A:104:ILE:HD12	0.83	1.50	18	3
1:A:165:LEU:HD22	1:A:173:VAL:CG1	0.83	2.04	25	9
1:A:100:ALA:HB1	1:A:161:LEU:HG	0.82	1.49	4	7
1:A:104:ILE:HD13	1:A:145:LEU:HD21	0.82	1.49	12	1
1:A:99:ALA:CB	1:A:180:VAL:HG23	0.82	2.04	22	11
1:A:115:LEU:O	1:A:119:LEU:HG	0.82	1.75	12	24
1:A:119:LEU:O	1:A:120:LYS:CG	0.82	2.27	1	14
1:A:156:ALA:O	1:A:157:THR:HG23	0.82	1.72	23	1
1:A:141:VAL:HG12	1:A:145:LEU:CD1	0.82	2.05	8	6
1:A:165:LEU:HB3	1:A:174:ALA:HB2	0.81	1.49	22	10
1:A:100:ALA:HB1	1:A:161:LEU:HD13	0.81	1.51	11	4
1:A:162:VAL:HG11	1:A:178:GLN:CG	0.81	2.04	17	9
1:A:157:THR:OG1	1:A:160:HIS:CD2	0.81	2.34	25	1
1:A:157:THR:O	1:A:160:HIS:ND1	0.80	2.14	20	6
1:A:115:LEU:C	1:A:115:LEU:HD13	0.80	1.96	21	3
1:A:173:VAL:HA	1:A:176:LEU:HD23	0.79	1.53	25	10

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:160:HIS:CD2	1:A:161:LEU:HD23	0.79	2.12	20	4
1:A:109:GLY:O	1:A:137:LEU:HD13	0.79	1.77	19	5
1:A:107:ASN:CB	1:A:173:VAL:HG22	0.79	2.07	9	6
1:A:104:ILE:HD11	1:A:161:LEU:HD23	0.79	1.53	10	1
1:A:108:VAL:CG1	1:A:111:ASP:CB	0.79	2.60	13	1
1:A:104:ILE:HG23	1:A:141:VAL:HG12	0.79	1.55	14	1
1:A:104:ILE:HD11	1:A:161:LEU:CD2	0.79	2.08	10	3
1:A:112:TRP:CZ3	1:A:126:ILE:HG23	0.78	2.12	9	2
1:A:104:ILE:HG22	1:A:141:VAL:CG1	0.78	2.08	7	15
1:A:104:ILE:HG22	1:A:141:VAL:HG13	0.78	1.54	22	5
1:A:112:TRP:HB2	1:A:141:VAL:HG22	0.78	1.54	21	10
1:A:165:LEU:HB2	1:A:174:ALA:HB2	0.78	1.54	9	9
1:A:119:LEU:O	1:A:120:LYS:HB2	0.78	1.76	12	15
1:A:99:ALA:HB1	1:A:180:VAL:HG22	0.78	1.55	5	1
1:A:99:ALA:HB3	1:A:180:VAL:HG21	0.78	1.55	4	8
1:A:162:VAL:HG11	1:A:178:GLN:CA	0.77	2.10	13	6
1:A:177:VAL:O	1:A:180:VAL:CB	0.77	2.32	20	25
1:A:109:GLY:HA2	1:A:137:LEU:HD12	0.77	1.55	23	4
1:A:177:VAL:O	1:A:180:VAL:HG12	0.77	1.80	25	24
1:A:119:LEU:HD13	1:A:148:TRP:CG	0.77	2.14	8	10
1:A:148:TRP:CZ2	1:A:161:LEU:HD11	0.77	2.14	10	3
1:A:165:LEU:CB	1:A:174:ALA:HB2	0.77	2.10	19	12
1:A:145:LEU:C	1:A:145:LEU:CD1	0.76	2.53	18	2
1:A:119:LEU:O	1:A:120:LYS:CB	0.76	2.34	20	23
1:A:148:TRP:CG	1:A:149:LYS:N	0.76	2.53	21	24
1:A:116:ALA:HA	1:A:119:LEU:HD12	0.76	1.56	4	3
1:A:108:VAL:HB	1:A:111:ASP:CA	0.76	2.09	10	8
1:A:161:LEU:O	1:A:165:LEU:HD12	0.76	1.81	20	5
1:A:110:LYS:CB	1:A:137:LEU:HD22	0.76	2.11	24	2
1:A:97:LEU:HD22	1:A:101:PHE:CE2	0.75	2.17	16	2
1:A:177:VAL:O	1:A:180:VAL:CG1	0.75	2.34	25	25
1:A:103:VAL:HG12	1:A:104:ILE:N	0.75	1.96	6	25
1:A:165:LEU:CD1	1:A:177:VAL:HG21	0.75	2.11	21	7
1:A:104:ILE:HG22	1:A:141:VAL:HG11	0.75	1.56	8	9
1:A:173:VAL:O	1:A:177:VAL:HG23	0.75	1.81	7	23
1:A:109:GLY:O	1:A:137:LEU:HD22	0.75	1.79	10	3
1:A:104:ILE:HG12	1:A:115:LEU:HD22	0.75	1.57	24	2
1:A:142:ARG:HA	1:A:145:LEU:HD13	0.75	1.57	13	11
1:A:115:LEU:HD11	1:A:119:LEU:HD11	0.75	1.58	10	3
1:A:161:LEU:C	1:A:161:LEU:HD12	0.75	2.00	8	2
1:A:111:ASP:OD2	1:A:141:VAL:HG21	0.75	1.81	16	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:156:ALA:O	1:A:157:THR:CG2	0.75	2.34	23	2
1:A:97:LEU:HD13	1:A:101:PHE:CZ	0.74	2.17	5	3
1:A:108:VAL:HG11	1:A:111:ASP:CA	0.74	2.12	13	1
1:A:104:ILE:O	1:A:111:ASP:HB3	0.74	1.82	8	3
1:A:175:ASP:O	1:A:178:GLN:HG3	0.74	1.83	13	6
1:A:108:VAL:HG12	1:A:137:LEU:HD12	0.74	1.57	5	1
1:A:97:LEU:HD12	1:A:97:LEU:C	0.74	2.03	25	9
1:A:97:LEU:HD11	1:A:101:PHE:CD2	0.73	2.17	23	6
1:A:161:LEU:O	1:A:164:ALA:HB3	0.73	1.83	14	9
1:A:119:LEU:O	1:A:120:LYS:HB3	0.73	1.83	20	10
1:A:173:VAL:HA	1:A:176:LEU:HD22	0.73	1.60	6	12
1:A:104:ILE:HD11	1:A:161:LEU:CD1	0.73	2.14	4	5
1:A:140:ARG:N	1:A:140:ARG:HD2	0.73	1.97	17	2
1:A:162:VAL:HG11	1:A:178:GLN:HA	0.73	1.60	11	7
1:A:152:GLU:O	1:A:156:ALA:N	0.72	2.22	6	23
1:A:110:LYS:CA	1:A:137:LEU:HD22	0.72	2.13	15	5
1:A:100:ALA:HB1	1:A:161:LEU:CG	0.72	2.14	3	7
1:A:97:LEU:O	1:A:101:PHE:HB2	0.72	1.84	7	2
1:A:96:ASP:OD1	1:A:180:VAL:HG22	0.71	1.84	18	4
1:A:99:ALA:O	1:A:103:VAL:HB	0.71	1.85	12	21
1:A:97:LEU:HD13	1:A:101:PHE:CE2	0.71	2.21	22	2
1:A:160:HIS:HE2	1:A:161:LEU:HD12	0.71	1.45	23	2
1:A:103:VAL:O	1:A:107:ASN:ND2	0.71	2.23	13	11
1:A:165:LEU:HD22	1:A:173:VAL:HG11	0.71	1.61	25	2
1:A:156:ALA:O	1:A:157:THR:OG1	0.71	2.07	23	1
1:A:165:LEU:HD23	1:A:165:LEU:N	0.70	2.00	9	1
1:A:165:LEU:HD23	1:A:170:MET:CE	0.70	2.17	10	6
1:A:161:LEU:HG	1:A:162:VAL:N	0.70	1.99	17	2
1:A:112:TRP:CB	1:A:141:VAL:HB	0.70	2.17	15	2
1:A:104:ILE:O	1:A:108:VAL:CG2	0.69	2.40	14	7
1:A:110:LYS:HG2	1:A:137:LEU:HD22	0.69	1.64	12	2
1:A:116:ALA:CB	1:A:117:ARG:NH1	0.69	2.55	17	1
1:A:112:TRP:CG	1:A:113:ARG:N	0.69	2.61	7	23
1:A:104:ILE:O	1:A:111:ASP:HB2	0.69	1.86	20	5
1:A:162:VAL:HG11	1:A:178:GLN:CB	0.69	2.18	13	6
1:A:104:ILE:HG23	1:A:141:VAL:CG1	0.69	2.18	14	2
1:A:103:VAL:HG13	1:A:173:VAL:CG1	0.69	2.18	20	14
1:A:160:HIS:CD2	1:A:160:HIS:H	0.69	2.04	25	1
1:A:165:LEU:C	1:A:165:LEU:CD2	0.68	2.61	2	3
1:A:136:ASN:O	1:A:140:ARG:HG3	0.68	1.88	18	1
1:A:103:VAL:HG13	1:A:173:VAL:HG13	0.68	1.64	12	5

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:165:LEU:HD12	1:A:174:ALA:CA	0.68	2.19	9	1
1:A:145:LEU:HA	1:A:148:TRP:CB	0.68	2.18	14	3
1:A:157:THR:O	1:A:160:HIS:N	0.68	2.27	23	6
1:A:129:ILE:HG22	1:A:140:ARG:HD2	0.67	1.67	2	1
1:A:108:VAL:HB	1:A:111:ASP:N	0.67	2.04	24	9
1:A:145:LEU:CA	1:A:148:TRP:HB3	0.67	2.18	14	21
1:A:155:ASN:O	1:A:160:HIS:HB2	0.67	1.90	11	5
1:A:117:ARG:NH1	1:A:126:ILE:HD11	0.67	2.04	17	1
1:A:107:ASN:HB3	1:A:173:VAL:HG22	0.67	1.66	15	5
1:A:103:VAL:HG22	1:A:176:LEU:CD1	0.67	2.19	19	9
1:A:111:ASP:OD2	1:A:137:LEU:HD13	0.67	1.89	13	2
1:A:104:ILE:CG2	1:A:141:VAL:HG13	0.67	2.19	22	3
1:A:180:VAL:CG1	1:A:181:GLN:N	0.67	2.57	22	25
1:A:121:VAL:HG11	1:A:126:ILE:HG13	0.67	1.65	5	2
1:A:110:LYS:O	1:A:141:VAL:HG21	0.67	1.90	19	2
1:A:119:LEU:HA	1:A:152:GLU:OE2	0.67	1.90	21	1
1:A:112:TRP:CG	1:A:141:VAL:HG22	0.66	2.25	5	3
1:A:100:ALA:HA	1:A:177:VAL:HG11	0.66	1.67	8	5
1:A:136:ASN:O	1:A:140:ARG:CD	0.66	2.43	17	2
1:A:160:HIS:CG	1:A:161:LEU:N	0.66	2.63	2	6
1:A:112:TRP:O	1:A:116:ALA:N	0.66	2.19	10	2
1:A:112:TRP:CH2	1:A:126:ILE:HG23	0.66	2.25	12	4
1:A:165:LEU:HD13	1:A:166:ARG:H	0.66	1.48	2	3
1:A:103:VAL:HG22	1:A:176:LEU:HD21	0.66	1.67	7	6
1:A:107:ASN:HB2	1:A:173:VAL:HG22	0.66	1.68	9	4
1:A:111:ASP:OD1	1:A:115:LEU:HD23	0.66	1.91	19	2
1:A:160:HIS:HD2	1:A:161:LEU:HD22	0.66	1.51	7	5
1:A:173:VAL:C	1:A:176:LEU:HD23	0.66	2.12	21	21
1:A:115:LEU:HD21	1:A:165:LEU:HD21	0.65	1.69	19	3
1:A:129:ILE:HG22	1:A:140:ARG:HB3	0.65	1.66	19	1
1:A:134:PRO:O	1:A:135:ARG:HB2	0.65	1.91	3	3
1:A:108:VAL:HG12	1:A:137:LEU:CD1	0.65	2.22	5	1
1:A:141:VAL:C	1:A:145:LEU:HD12	0.65	2.12	22	3
1:A:97:LEU:CD1	1:A:101:PHE:CD2	0.65	2.80	22	1
1:A:112:TRP:CD2	1:A:113:ARG:N	0.65	2.65	18	12
1:A:144:SER:O	1:A:145:LEU:C	0.65	2.32	19	23
1:A:104:ILE:CD1	1:A:161:LEU:HD11	0.65	2.20	6	5
1:A:115:LEU:CD2	1:A:170:MET:HE1	0.65	2.22	6	2
1:A:146:ARG:HG2	1:A:147:ILE:HD12	0.65	1.67	9	2
1:A:165:LEU:HD12	1:A:174:ALA:HA	0.65	1.65	17	2
1:A:173:VAL:CA	1:A:176:LEU:HD23	0.65	2.22	1	12

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:ALA:HB1	1:A:180:VAL:HG21	0.65	1.67	5	2
1:A:110:LYS:HA	1:A:137:LEU:HD22	0.65	1.69	15	4
1:A:145:LEU:HD12	1:A:146:ARG:N	0.65	2.07	18	2
1:A:115:LEU:HD21	1:A:165:LEU:CD2	0.65	2.22	19	1
1:A:156:ALA:O	1:A:157:THR:CB	0.65	2.45	23	1
1:A:108:VAL:HG12	1:A:109:GLY:N	0.64	2.07	14	19
1:A:174:ALA:O	1:A:178:GLN:CG	0.64	2.45	14	5
1:A:104:ILE:CD1	1:A:161:LEU:HD21	0.64	2.22	21	3
1:A:160:HIS:HE2	1:A:161:LEU:HD23	0.64	1.48	20	2
1:A:134:PRO:O	1:A:135:ARG:CB	0.64	2.45	3	3
1:A:117:ARG:CD	1:A:126:ILE:HD11	0.64	2.23	17	1
1:A:140:ARG:O	1:A:143:GLU:HG3	0.64	1.93	22	1
1:A:102:ASN:O	1:A:106:ASP:HB2	0.64	1.93	14	8
1:A:140:ARG:NE	1:A:140:ARG:HA	0.64	2.08	24	1
1:A:171:ASN:O	1:A:175:ASP:N	0.64	2.31	13	20
1:A:133:TYR:HB3	1:A:140:ARG:NE	0.64	2.08	22	1
1:A:176:LEU:HG	1:A:177:VAL:N	0.64	2.07	25	21
1:A:100:ALA:CB	1:A:161:LEU:HG	0.64	2.23	5	3
1:A:107:ASN:O	1:A:108:VAL:O	0.64	2.16	14	12
1:A:175:ASP:HA	1:A:178:GLN:HG2	0.64	1.69	14	6
1:A:133:TYR:HB3	1:A:140:ARG:CZ	0.64	2.23	22	1
1:A:180:VAL:HG12	1:A:181:GLN:N	0.64	2.08	4	24
1:A:162:VAL:HG11	1:A:178:GLN:HB3	0.64	1.70	13	4
1:A:162:VAL:HA	1:A:165:LEU:HD12	0.63	1.71	4	3
1:A:110:LYS:HB3	1:A:137:LEU:HD22	0.63	1.69	24	1
1:A:165:LEU:HD22	1:A:173:VAL:HB	0.63	1.70	13	9
1:A:160:HIS:HD2	1:A:161:LEU:HD23	0.63	1.54	22	2
1:A:107:ASN:ND2	1:A:173:VAL:HG11	0.63	2.09	4	6
1:A:162:VAL:CG1	1:A:178:GLN:HB3	0.63	2.23	13	5
1:A:98:CYS:O	1:A:102:ASN:CB	0.63	2.46	6	13
1:A:146:ARG:CG	1:A:147:ILE:HD12	0.63	2.24	25	1
1:A:162:VAL:HG13	1:A:174:ALA:O	0.63	1.92	10	5
1:A:165:LEU:HD12	1:A:174:ALA:N	0.63	2.08	9	1
1:A:137:LEU:HA	1:A:140:ARG:HD2	0.63	1.71	10	1
1:A:103:VAL:CG1	1:A:173:VAL:CG1	0.63	2.76	13	7
1:A:140:ARG:N	1:A:140:ARG:CD	0.63	2.62	17	2
1:A:148:TRP:HZ2	1:A:161:LEU:HD11	0.62	1.53	10	2
1:A:112:TRP:CZ3	1:A:129:ILE:HG21	0.62	2.29	23	3
1:A:104:ILE:HG23	1:A:141:VAL:HG11	0.62	1.71	12	1
1:A:148:TRP:CZ2	1:A:161:LEU:HD21	0.62	2.29	5	4
1:A:160:HIS:CD2	1:A:161:LEU:N	0.62	2.67	20	7

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:165:LEU:HD11	1:A:174:ALA:CA	0.62	2.24	2	2
1:A:108:VAL:HG22	1:A:141:VAL:HG21	0.62	1.70	14	2
1:A:157:THR:N	1:A:160:HIS:CD2	0.62	2.67	25	1
1:A:160:HIS:NE2	1:A:161:LEU:CD1	0.62	2.62	23	3
1:A:107:ASN:OD1	1:A:111:ASP:CB	0.62	2.47	3	7
1:A:107:ASN:CB	1:A:173:VAL:CG2	0.62	2.78	15	4
1:A:108:VAL:HG11	1:A:111:ASP:HA	0.62	1.70	13	1
1:A:104:ILE:O	1:A:108:VAL:HG22	0.62	1.94	4	3
1:A:108:VAL:HG11	1:A:138:THR:HA	0.62	1.71	5	1
1:A:162:VAL:HG12	1:A:178:GLN:NE2	0.62	2.09	6	1
1:A:141:VAL:HG13	1:A:142:ARG:H	0.62	1.54	13	2
1:A:113:ARG:HD3	1:A:126:ILE:HD13	0.62	1.69	3	1
1:A:136:ASN:HB3	1:A:139:GLU:HB2	0.62	1.70	21	1
1:A:158:VAL:CG1	1:A:180:VAL:HG13	0.62	2.25	6	16
1:A:133:TYR:CD1	1:A:140:ARG:NH1	0.62	2.68	8	3
1:A:175:ASP:O	1:A:178:GLN:CG	0.62	2.47	13	6
1:A:108:VAL:CG1	1:A:109:GLY:N	0.61	2.63	3	14
1:A:129:ILE:HG23	1:A:143:GLU:OE2	0.61	1.95	22	1
1:A:177:VAL:O	1:A:180:VAL:N	0.61	2.34	5	25
1:A:145:LEU:HA	1:A:148:TRP:CE3	0.61	2.30	11	24
1:A:112:TRP:CH2	1:A:140:ARG:HD3	0.61	2.30	7	1
1:A:107:ASN:ND2	1:A:173:VAL:HG13	0.61	2.11	8	8
1:A:108:VAL:HG12	1:A:108:VAL:O	0.61	1.96	22	5
1:A:108:VAL:HG22	1:A:109:GLY:N	0.61	2.10	13	1
1:A:139:GLU:CB	1:A:140:ARG:CZ	0.61	2.78	8	1
1:A:108:VAL:HB	1:A:111:ASP:H	0.61	1.54	9	3
1:A:173:VAL:CA	1:A:176:LEU:CD2	0.61	2.76	4	23
1:A:137:LEU:CD1	1:A:138:THR:N	0.61	2.64	13	1
1:A:119:LEU:HD22	1:A:148:TRP:HD1	0.61	1.50	1	2
1:A:100:ALA:HB2	1:A:161:LEU:HD21	0.61	1.69	12	1
1:A:137:LEU:HD12	1:A:137:LEU:C	0.61	2.15	13	1
1:A:143:GLU:O	1:A:147:ILE:HD12	0.60	1.95	20	1
1:A:104:ILE:CG2	1:A:141:VAL:HG11	0.60	2.25	8	2
1:A:110:LYS:N	1:A:137:LEU:HD22	0.60	2.10	8	2
1:A:155:ASN:O	1:A:160:HIS:ND1	0.60	2.34	7	9
1:A:99:ALA:CB	1:A:180:VAL:CG2	0.60	2.80	9	5
1:A:160:HIS:O	1:A:164:ALA:HB2	0.60	1.96	25	5
1:A:157:THR:O	1:A:160:HIS:CG	0.60	2.55	20	6
1:A:173:VAL:CA	1:A:176:LEU:HD21	0.60	2.20	4	1
1:A:121:VAL:HG12	1:A:123:ASP:H	0.60	1.54	5	2
1:A:112:TRP:HZ3	1:A:126:ILE:HG23	0.60	1.56	19	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:171:ASN:HA	1:A:174:ALA:HB3	0.60	1.72	14	3
1:A:141:VAL:HG13	1:A:142:ARG:N	0.60	2.12	18	3
1:A:115:LEU:O	1:A:119:LEU:CG	0.60	2.50	16	13
1:A:156:ALA:C	1:A:160:HIS:ND1	0.60	2.55	15	5
1:A:130:GLU:HA	1:A:140:ARG:NH2	0.60	2.12	14	1
1:A:103:VAL:CG1	1:A:104:ILE:N	0.60	2.65	23	18
1:A:119:LEU:HD21	1:A:161:LEU:CD2	0.60	2.26	6	1
1:A:100:ALA:CA	1:A:161:LEU:HD22	0.60	2.25	14	3
1:A:149:LYS:O	1:A:153:LYS:N	0.60	2.35	3	12
1:A:116:ALA:HB1	1:A:117:ARG:NH1	0.60	2.12	17	1
1:A:108:VAL:CG1	1:A:137:LEU:HB2	0.59	2.27	14	10
1:A:104:ILE:O	1:A:108:VAL:HG23	0.59	1.97	3	4
1:A:162:VAL:O	1:A:165:LEU:CD1	0.59	2.50	7	3
1:A:119:LEU:O	1:A:120:LYS:HG2	0.59	1.96	17	7
1:A:125:LYS:O	1:A:128:SER:N	0.59	2.35	3	17
1:A:112:TRP:CH2	1:A:113:ARG:HG2	0.59	2.32	4	1
1:A:105:CYS:HA	1:A:108:VAL:CG2	0.59	2.28	6	7
1:A:129:ILE:HG22	1:A:140:ARG:CG	0.59	2.28	3	2
1:A:165:LEU:HD23	1:A:170:MET:HE3	0.59	1.72	25	7
1:A:144:SER:O	1:A:148:TRP:CB	0.59	2.50	14	2
1:A:100:ALA:CB	1:A:161:LEU:CD2	0.59	2.80	17	3
1:A:104:ILE:O	1:A:111:ASP:CB	0.59	2.50	19	7
1:A:104:ILE:O	1:A:111:ASP:CG	0.59	2.41	24	5
1:A:133:TYR:O	1:A:140:ARG:HD2	0.59	1.95	8	1
1:A:157:THR:OG1	1:A:160:HIS:NE2	0.59	2.35	25	1
1:A:165:LEU:CD1	1:A:174:ALA:HB2	0.59	2.26	7	3
1:A:97:LEU:HD22	1:A:101:PHE:CE1	0.59	2.33	5	3
1:A:152:GLU:O	1:A:153:LYS:C	0.59	2.40	23	25
1:A:103:VAL:HG11	1:A:177:VAL:HG22	0.59	1.75	10	3
1:A:112:TRP:CE3	1:A:126:ILE:HG23	0.59	2.32	9	1
1:A:104:ILE:HD13	1:A:115:LEU:HD21	0.59	1.74	13	1
1:A:103:VAL:HG22	1:A:173:VAL:HG13	0.59	1.75	23	1
1:A:145:LEU:HA	1:A:148:TRP:HE3	0.58	1.57	8	21
1:A:112:TRP:CH2	1:A:129:ILE:HB	0.58	2.33	19	1
1:A:149:LYS:O	1:A:153:LYS:HG2	0.58	1.98	21	1
1:A:112:TRP:CZ2	1:A:140:ARG:HB3	0.58	2.33	9	2
1:A:116:ALA:O	1:A:121:VAL:HB	0.58	1.98	19	6
1:A:165:LEU:HB2	1:A:174:ALA:CB	0.58	2.28	9	2
1:A:112:TRP:HB2	1:A:141:VAL:HB	0.58	1.73	23	4
1:A:117:ARG:CZ	1:A:126:ILE:CD1	0.58	2.81	17	1
1:A:160:HIS:HD2	1:A:161:LEU:HD12	0.58	1.58	24	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:TRP:CH2	1:A:130:GLU:CG	0.58	2.86	9	2
1:A:165:LEU:HD23	1:A:170:MET:HE2	0.58	1.73	18	3
1:A:140:ARG:HD2	1:A:140:ARG:H	0.58	1.57	17	2
1:A:129:ILE:HG23	1:A:140:ARG:HB2	0.58	1.75	1	3
1:A:101:PHE:CD1	1:A:145:LEU:CD2	0.58	2.87	8	2
1:A:140:ARG:N	1:A:140:ARG:NE	0.58	2.51	8	1
1:A:157:THR:N	1:A:160:HIS:HB3	0.58	2.13	15	5
1:A:137:LEU:HD12	1:A:138:THR:H	0.58	1.59	12	5
1:A:129:ILE:HG22	1:A:140:ARG:HG2	0.58	1.76	3	1
1:A:121:VAL:CG1	1:A:126:ILE:HG13	0.58	2.28	4	4
1:A:122:SER:C	1:A:124:THR:H	0.58	2.02	5	2
1:A:107:ASN:OD1	1:A:111:ASP:HB2	0.58	1.98	5	4
1:A:115:LEU:O	1:A:115:LEU:HD22	0.58	1.99	2	2
1:A:173:VAL:O	1:A:176:LEU:HG	0.58	1.99	14	3
1:A:120:LYS:O	1:A:120:LYS:CD	0.58	2.52	1	6
1:A:160:HIS:CD2	1:A:161:LEU:HD22	0.58	2.34	1	4
1:A:174:ALA:O	1:A:178:GLN:N	0.58	2.37	4	14
1:A:177:VAL:HA	1:A:180:VAL:HB	0.58	1.76	5	2
1:A:103:VAL:O	1:A:106:ASP:N	0.57	2.37	15	13
1:A:165:LEU:HD21	1:A:173:VAL:HB	0.57	1.75	8	1
1:A:117:ARG:NH1	1:A:126:ILE:CG1	0.57	2.67	17	1
1:A:140:ARG:O	1:A:143:GLU:HB2	0.57	2.00	1	6
1:A:109:GLY:O	1:A:137:LEU:CD2	0.57	2.52	13	3
1:A:127:ASP:HA	1:A:130:GLU:HG2	0.57	1.75	13	1
1:A:97:LEU:HD21	1:A:101:PHE:CZ	0.57	2.33	15	1
1:A:125:LYS:HE3	1:A:147:ILE:HG21	0.57	1.76	19	1
1:A:103:VAL:HG13	1:A:173:VAL:HG11	0.57	1.75	20	1
1:A:117:ARG:CD	1:A:118:GLN:N	0.57	2.67	15	1
1:A:117:ARG:NH1	1:A:126:ILE:CD1	0.57	2.67	17	1
1:A:97:LEU:CD1	1:A:101:PHE:CE2	0.57	2.87	22	1
1:A:158:VAL:CG1	1:A:180:VAL:CG1	0.57	2.82	25	19
1:A:103:VAL:CG2	1:A:176:LEU:HD21	0.57	2.29	20	3
1:A:111:ASP:OD1	1:A:141:VAL:HG21	0.57	1.99	13	1
1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:O	0.57	1.98	21	1
1:A:108:VAL:HG11	1:A:111:ASP:CB	0.57	2.27	13	1
1:A:98:CYS:O	1:A:102:ASN:HB2	0.57	2.00	1	12
1:A:109:GLY:O	1:A:137:LEU:HD23	0.57	1.99	20	2
1:A:165:LEU:CD2	1:A:173:VAL:HG11	0.57	2.29	25	3
1:A:170:MET:CG	1:A:170:MET:O	0.57	2.51	13	1
1:A:125:LYS:CE	1:A:147:ILE:HG21	0.57	2.29	19	1
1:A:147:ILE:O	1:A:148:TRP:C	0.57	2.43	10	24

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:ASP:O	1:A:180:VAL:CG2	0.57	2.53	4	8
1:A:136:ASN:O	1:A:140:ARG:HG2	0.57	2.00	8	1
1:A:129:ILE:HG23	1:A:140:ARG:HA	0.57	1.76	23	2
1:A:108:VAL:HG13	1:A:111:ASP:HB3	0.57	1.76	13	1
1:A:117:ARG:HG3	1:A:118:GLN:N	0.57	2.14	25	1
1:A:174:ALA:O	1:A:178:GLN:HB2	0.57	1.99	3	7
1:A:114:ARG:NH1	1:A:170:MET:HE2	0.57	2.15	22	1
1:A:101:PHE:CZ	1:A:148:TRP:CH2	0.56	2.93	7	3
1:A:176:LEU:O	1:A:179:GLU:HB2	0.56	2.00	10	5
1:A:115:LEU:CD1	1:A:119:LEU:HD11	0.56	2.28	10	2
1:A:119:LEU:CD1	1:A:148:TRP:CD1	0.56	2.84	11	4
1:A:137:LEU:CD2	1:A:140:ARG:CZ	0.56	2.83	1	1
1:A:137:LEU:HA	1:A:140:ARG:HG2	0.56	1.78	1	3
1:A:160:HIS:CD2	1:A:161:LEU:CD2	0.56	2.88	22	3
1:A:108:VAL:O	1:A:108:VAL:CG1	0.56	2.53	22	4
1:A:115:LEU:HD22	1:A:165:LEU:HD21	0.56	1.76	5	1
1:A:149:LYS:O	1:A:153:LYS:CG	0.56	2.54	21	1
1:A:144:SER:O	1:A:146:ARG:N	0.56	2.38	21	22
1:A:174:ALA:O	1:A:178:GLN:NE2	0.56	2.38	7	8
1:A:112:TRP:O	1:A:116:ALA:CB	0.56	2.53	20	7
1:A:112:TRP:CZ3	1:A:129:ILE:CG2	0.56	2.88	13	1
1:A:125:LYS:HG3	1:A:129:ILE:HD12	0.56	1.76	5	2
1:A:108:VAL:CG1	1:A:137:LEU:HD12	0.56	2.30	5	2
1:A:125:LYS:O	1:A:129:ILE:HG12	0.56	2.01	13	4
1:A:158:VAL:CG1	1:A:180:VAL:HG11	0.56	2.30	25	5
1:A:171:ASN:O	1:A:175:ASP:CB	0.56	2.54	3	3
1:A:109:GLY:O	1:A:110:LYS:HG2	0.56	2.00	22	2
1:A:107:ASN:ND2	1:A:173:VAL:CG1	0.56	2.69	10	16
1:A:97:LEU:CD2	1:A:158:VAL:HG22	0.56	2.29	6	2
1:A:108:VAL:CG1	1:A:111:ASP:CA	0.56	2.82	13	1
1:A:168:CYS:HB3	1:A:170:MET:HG2	0.56	1.77	21	1
1:A:140:ARG:NE	1:A:140:ARG:CA	0.56	2.69	24	1
1:A:119:LEU:HB3	1:A:148:TRP:CD1	0.56	2.35	18	4
1:A:110:LYS:HG2	1:A:137:LEU:CD2	0.56	2.31	12	2
1:A:165:LEU:HD22	1:A:173:VAL:CB	0.56	2.31	13	5
1:A:162:VAL:CG1	1:A:178:GLN:HG2	0.56	2.29	25	4
1:A:97:LEU:CD1	1:A:101:PHE:CZ	0.56	2.89	10	6
1:A:107:ASN:OD1	1:A:111:ASP:HB3	0.56	2.01	18	3
1:A:108:VAL:HG13	1:A:137:LEU:HD12	0.55	1.78	3	1
1:A:144:SER:O	1:A:148:TRP:HB3	0.55	2.01	18	2
1:A:110:LYS:HA	1:A:137:LEU:HB2	0.55	1.77	15	3

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:ILE:HG23	1:A:115:LEU:HD22	0.55	1.78	13	1
1:A:112:TRP:CZ2	1:A:140:ARG:CD	0.55	2.90	7	2
1:A:130:GLU:CG	1:A:131:ASP:N	0.55	2.69	8	1
1:A:147:ILE:HD12	1:A:147:ILE:H	0.55	1.61	24	2
1:A:112:TRP:NE1	1:A:140:ARG:HD2	0.55	2.17	1	1
1:A:162:VAL:HG22	1:A:177:VAL:CG1	0.55	2.31	6	5
1:A:112:TRP:CZ2	1:A:113:ARG:HG2	0.55	2.37	4	1
1:A:137:LEU:C	1:A:137:LEU:HD12	0.55	2.22	20	1
1:A:112:TRP:NE1	1:A:140:ARG:HD3	0.55	2.17	10	1
1:A:165:LEU:HD13	1:A:177:VAL:HG21	0.55	1.77	18	3
1:A:119:LEU:HD22	1:A:148:TRP:HE1	0.55	1.61	11	2
1:A:129:ILE:HG22	1:A:140:ARG:HE	0.55	1.61	14	1
1:A:108:VAL:HG11	1:A:138:THR:HG23	0.55	1.76	2	2
1:A:112:TRP:CE2	1:A:140:ARG:HD2	0.55	2.37	1	2
1:A:133:TYR:O	1:A:140:ARG:NH2	0.55	2.40	7	4
1:A:119:LEU:HD13	1:A:148:TRP:NE1	0.55	2.17	2	2
1:A:101:PHE:CZ	1:A:148:TRP:CZ3	0.55	2.95	5	5
1:A:132:ARG:CG	1:A:133:TYR:CE1	0.55	2.90	5	1
1:A:103:VAL:CG1	1:A:173:VAL:HG12	0.55	2.32	13	4
1:A:107:ASN:CG	1:A:173:VAL:HG21	0.55	2.22	4	1
1:A:115:LEU:HD21	1:A:170:MET:CE	0.55	2.31	9	1
1:A:108:VAL:HB	1:A:111:ASP:HA	0.55	1.79	10	1
1:A:112:TRP:O	1:A:116:ALA:HB2	0.55	2.01	16	3
1:A:110:LYS:O	1:A:110:LYS:HG3	0.55	2.00	21	1
1:A:97:LEU:HB3	1:A:101:PHE:CE2	0.55	2.37	2	5
1:A:155:ASN:O	1:A:160:HIS:CG	0.55	2.60	16	10
1:A:171:ASN:O	1:A:175:ASP:HB2	0.55	2.02	14	9
1:A:108:VAL:HB	1:A:111:ASP:HB2	0.55	1.79	12	1
1:A:104:ILE:CD1	1:A:115:LEU:HD21	0.55	2.32	13	1
1:A:104:ILE:CG2	1:A:141:VAL:HG21	0.55	2.31	13	1
1:A:101:PHE:CE1	1:A:148:TRP:CH2	0.54	2.95	9	8
1:A:161:LEU:HD12	1:A:161:LEU:O	0.54	2.02	8	1
1:A:133:TYR:CD2	1:A:140:ARG:HG3	0.54	2.37	24	1
1:A:157:THR:H	1:A:160:HIS:CD2	0.54	2.20	25	1
1:A:146:ARG:CG	1:A:147:ILE:N	0.54	2.70	6	7
1:A:97:LEU:HD12	1:A:100:ALA:HB3	0.54	1.77	15	1
1:A:125:LYS:HE2	1:A:147:ILE:HG21	0.54	1.79	17	1
1:A:100:ALA:CB	1:A:161:LEU:CG	0.54	2.85	5	1
1:A:133:TYR:CD2	1:A:140:ARG:NE	0.54	2.75	17	2
1:A:107:ASN:ND2	1:A:173:VAL:CG2	0.54	2.70	5	2
1:A:108:VAL:CG1	1:A:111:ASP:HB3	0.54	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:101:PHE:N	1:A:101:PHE:CD1	0.54	2.73	11	18
1:A:115:LEU:C	1:A:115:LEU:CD1	0.54	2.72	21	3
1:A:137:LEU:HG	1:A:138:THR:N	0.54	2.17	5	2
1:A:127:ASP:HA	1:A:130:GLU:CG	0.54	2.32	13	1
1:A:112:TRP:CE2	1:A:140:ARG:CD	0.54	2.91	1	1
1:A:147:ILE:O	1:A:150:ASN:N	0.54	2.41	21	15
1:A:100:ALA:CB	1:A:161:LEU:CB	0.54	2.85	5	1
1:A:137:LEU:HA	1:A:140:ARG:CD	0.54	2.33	10	3
1:A:112:TRP:CE3	1:A:140:ARG:CB	0.54	2.90	18	1
1:A:148:TRP:CZ3	1:A:149:LYS:HB2	0.54	2.38	5	4
1:A:102:ASN:O	1:A:106:ASP:CB	0.54	2.56	9	7
1:A:116:ALA:HB3	1:A:117:ARG:NH1	0.54	2.17	17	1
1:A:144:SER:O	1:A:148:TRP:N	0.54	2.39	18	17
1:A:103:VAL:HG11	1:A:165:LEU:HD11	0.54	1.77	21	3
1:A:152:GLU:O	1:A:154:GLU:N	0.54	2.41	11	7
1:A:162:VAL:CG2	1:A:177:VAL:HB	0.54	2.18	7	4
1:A:104:ILE:HG21	1:A:145:LEU:HD11	0.54	1.78	23	1
1:A:140:ARG:N	1:A:140:ARG:HD3	0.54	2.15	22	1
1:A:103:VAL:CG2	1:A:176:LEU:CD1	0.53	2.83	1	8
1:A:133:TYR:CG	1:A:140:ARG:CZ	0.53	2.91	8	3
1:A:133:TYR:CB	1:A:140:ARG:HD2	0.53	2.33	22	1
1:A:115:LEU:HD21	1:A:165:LEU:HG	0.53	1.78	25	1
1:A:109:GLY:O	1:A:110:LYS:CB	0.53	2.56	22	2
1:A:104:ILE:CG2	1:A:141:VAL:CG1	0.53	2.85	22	9
1:A:155:ASN:O	1:A:160:HIS:CB	0.53	2.57	4	5
1:A:152:GLU:O	1:A:156:ALA:HB2	0.53	2.03	24	5
1:A:111:ASP:OD1	1:A:170:MET:CE	0.53	2.56	8	1
1:A:139:GLU:HB2	1:A:140:ARG:CZ	0.53	2.34	8	1
1:A:103:VAL:HG21	1:A:177:VAL:HG13	0.53	1.81	15	1
1:A:104:ILE:O	1:A:111:ASP:O	0.53	2.26	24	2
1:A:129:ILE:HG22	1:A:140:ARG:CB	0.53	2.33	3	2
1:A:112:TRP:CE2	1:A:113:ARG:HB3	0.53	2.38	18	3
1:A:108:VAL:CG1	1:A:109:GLY:H	0.53	2.16	14	6
1:A:165:LEU:HD22	1:A:174:ALA:CA	0.53	2.34	8	1
1:A:133:TYR:HD1	1:A:140:ARG:CD	0.53	2.17	8	1
1:A:162:VAL:CG1	1:A:178:GLN:CA	0.53	2.85	24	4
1:A:111:ASP:OD1	1:A:111:ASP:O	0.53	2.26	17	4
1:A:162:VAL:HG12	1:A:166:ARG:NH2	0.53	2.19	23	1
1:A:107:ASN:ND2	1:A:173:VAL:HG22	0.53	2.19	5	1
1:A:100:ALA:HA	1:A:177:VAL:CG1	0.53	2.33	8	5
1:A:133:TYR:CD1	1:A:133:TYR:N	0.53	2.76	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:133:TYR:CG	1:A:140:ARG:NE	0.53	2.77	17	2
1:A:148:TRP:CD2	1:A:149:LYS:N	0.53	2.77	2	12
1:A:120:LYS:O	1:A:120:LYS:HD3	0.53	2.04	17	2
1:A:162:VAL:CG1	1:A:178:GLN:CG	0.53	2.87	25	6
1:A:107:ASN:OD1	1:A:108:VAL:N	0.53	2.41	14	1
1:A:147:ILE:O	1:A:150:ASN:CB	0.53	2.57	21	2
1:A:160:HIS:CD2	1:A:160:HIS:C	0.53	2.82	1	13
1:A:121:VAL:HG11	1:A:126:ILE:CG1	0.53	2.33	5	1
1:A:133:TYR:CD1	1:A:140:ARG:CZ	0.53	2.92	8	3
1:A:101:PHE:CG	1:A:145:LEU:HD13	0.53	2.39	9	1
1:A:145:LEU:HD12	1:A:145:LEU:O	0.53	2.02	18	2
1:A:140:ARG:O	1:A:143:GLU:CG	0.53	2.57	22	1
1:A:158:VAL:O	1:A:161:LEU:HB2	0.52	2.04	7	6
1:A:165:LEU:HD13	1:A:165:LEU:C	0.52	2.24	4	3
1:A:105:CYS:HA	1:A:108:VAL:HG21	0.52	1.81	6	2
1:A:120:LYS:HD3	1:A:151:THR:HG21	0.52	1.80	22	2
1:A:141:VAL:CG1	1:A:142:ARG:N	0.52	2.72	23	4
1:A:120:LYS:HE3	1:A:120:LYS:O	0.52	2.05	18	1
1:A:121:VAL:HG21	1:A:144:SER:CB	0.52	2.34	18	1
1:A:121:VAL:HG22	1:A:125:LYS:NZ	0.52	2.19	2	1
1:A:145:LEU:O	1:A:149:LYS:CG	0.52	2.57	3	2
1:A:132:ARG:O	1:A:133:TYR:CD1	0.52	2.63	7	3
1:A:113:ARG:O	1:A:117:ARG:HB2	0.52	2.04	9	2
1:A:146:ARG:HG2	1:A:147:ILE:HG12	0.52	1.80	1	1
1:A:152:GLU:O	1:A:155:ASN:N	0.52	2.43	23	15
1:A:99:ALA:O	1:A:103:VAL:CB	0.52	2.56	6	7
1:A:129:ILE:CG2	1:A:140:ARG:HB2	0.52	2.34	7	2
1:A:133:TYR:CD1	1:A:140:ARG:CD	0.52	2.92	8	1
1:A:162:VAL:HG22	1:A:177:VAL:C	0.52	2.24	11	4
1:A:112:TRP:NE1	1:A:137:LEU:HD22	0.52	2.20	17	1
1:A:121:VAL:HG12	1:A:126:ILE:HG13	0.52	1.82	21	2
1:A:96:ASP:OD1	1:A:97:LEU:N	0.52	2.43	3	2
1:A:108:VAL:HG12	1:A:110:LYS:H	0.52	1.63	15	3
1:A:117:ARG:CZ	1:A:126:ILE:HG12	0.52	2.35	17	1
1:A:165:LEU:HD11	1:A:177:VAL:HG21	0.52	1.78	21	1
1:A:136:ASN:CB	1:A:140:ARG:CZ	0.52	2.88	22	1
1:A:142:ARG:HA	1:A:145:LEU:CD1	0.52	2.35	19	8
1:A:109:GLY:O	1:A:110:LYS:CG	0.52	2.58	22	3
1:A:107:ASN:CG	1:A:173:VAL:HG22	0.52	2.25	5	5
1:A:133:TYR:CB	1:A:140:ARG:NH2	0.52	2.73	8	1
1:A:118:GLN:HG3	1:A:119:LEU:N	0.52	2.20	25	3

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:101:PHE:CD1	1:A:101:PHE:N	0.52	2.72	17	1
1:A:133:TYR:CE1	1:A:140:ARG:NH1	0.52	2.77	24	1
1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:C	0.52	2.25	3	1
1:A:173:VAL:O	1:A:174:ALA:C	0.52	2.47	18	16
1:A:133:TYR:CZ	1:A:139:GLU:OE2	0.52	2.62	5	1
1:A:108:VAL:HG11	1:A:137:LEU:HB2	0.52	1.82	6	2
1:A:129:ILE:HG12	1:A:143:GLU:HG2	0.52	1.82	6	2
1:A:162:VAL:CG1	1:A:178:GLN:NE2	0.52	2.73	6	1
1:A:133:TYR:O	1:A:140:ARG:CG	0.52	2.58	9	2
1:A:140:ARG:CG	1:A:141:VAL:N	0.52	2.73	20	2
1:A:107:ASN:ND2	1:A:111:ASP:OD2	0.52	2.43	12	1
1:A:129:ILE:CG2	1:A:143:GLU:OE2	0.52	2.58	22	1
1:A:119:LEU:CD2	1:A:148:TRP:CD1	0.51	2.88	8	6
1:A:129:ILE:HG22	1:A:140:ARG:CD	0.51	2.34	2	1
1:A:165:LEU:HD13	1:A:173:VAL:HG12	0.51	1.82	21	3
1:A:107:ASN:O	1:A:109:GLY:N	0.51	2.43	22	1
1:A:112:TRP:CZ3	1:A:140:ARG:HB3	0.51	2.40	18	2
1:A:107:ASN:HD21	1:A:173:VAL:HG13	0.51	1.65	21	5
1:A:165:LEU:C	1:A:165:LEU:HD23	0.51	2.25	8	1
1:A:97:LEU:HD23	1:A:98:CYS:N	0.51	2.20	10	1
1:A:115:LEU:CD1	1:A:119:LEU:CD1	0.51	2.88	21	2
1:A:110:LYS:HB2	1:A:112:TRP:CD1	0.51	2.40	12	1
1:A:170:MET:O	1:A:170:MET:HG3	0.51	2.04	13	1
1:A:157:THR:O	1:A:160:HIS:CB	0.51	2.57	11	5
1:A:108:VAL:CG2	1:A:109:GLY:N	0.51	2.73	13	1
1:A:104:ILE:CG2	1:A:141:VAL:HG22	0.51	2.35	18	2
1:A:112:TRP:CZ2	1:A:140:ARG:HD3	0.51	2.41	1	2
1:A:165:LEU:HD21	1:A:170:MET:O	0.51	2.05	4	2
1:A:100:ALA:CA	1:A:161:LEU:HD12	0.51	2.35	15	2
1:A:136:ASN:O	1:A:140:ARG:NE	0.51	2.44	22	1
1:A:133:TYR:HB2	1:A:140:ARG:CZ	0.51	2.36	8	1
1:A:165:LEU:CD2	1:A:174:ALA:HB2	0.51	2.35	8	1
1:A:173:VAL:O	1:A:175:ASP:N	0.51	2.43	18	6
1:A:104:ILE:HG12	1:A:115:LEU:HG	0.51	1.83	17	3
1:A:108:VAL:HB	1:A:111:ASP:CB	0.51	2.35	8	5
1:A:112:TRP:CH2	1:A:130:GLU:HG3	0.51	2.41	9	2
1:A:111:ASP:OD1	1:A:141:VAL:HG11	0.51	2.06	13	1
1:A:117:ARG:HD3	1:A:118:GLN:N	0.51	2.20	16	2
1:A:138:THR:O	1:A:142:ARG:HB2	0.51	2.06	15	1
1:A:140:ARG:O	1:A:143:GLU:CB	0.51	2.59	19	1
1:A:104:ILE:CG1	1:A:161:LEU:HD21	0.51	2.36	21	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:129:ILE:CG2	1:A:140:ARG:HB3	0.51	2.36	23	4
1:A:177:VAL:HG12	1:A:180:VAL:HG11	0.51	1.81	6	3
1:A:148:TRP:CD1	1:A:148:TRP:C	0.51	2.82	21	6
1:A:136:ASN:HB3	1:A:140:ARG:CZ	0.51	2.36	22	1
1:A:125:LYS:HG3	1:A:129:ILE:HG12	0.51	1.82	23	1
1:A:137:LEU:HD22	1:A:140:ARG:CZ	0.51	2.36	1	1
1:A:161:LEU:HA	1:A:164:ALA:HB3	0.51	1.82	2	1
1:A:130:GLU:HG3	1:A:131:ASP:N	0.51	2.20	16	1
1:A:112:TRP:HB2	1:A:141:VAL:CG2	0.51	2.36	6	4
1:A:108:VAL:CB	1:A:111:ASP:H	0.51	2.19	9	1
1:A:99:ALA:CB	1:A:180:VAL:HG22	0.50	2.31	5	1
1:A:98:CYS:O	1:A:102:ASN:HB3	0.50	2.05	6	3
1:A:165:LEU:CD1	1:A:173:VAL:HG12	0.50	2.36	9	1
1:A:157:THR:O	1:A:161:LEU:HB2	0.50	2.06	25	1
1:A:120:LYS:O	1:A:120:LYS:HD2	0.50	2.05	13	2
1:A:129:ILE:HD12	1:A:143:GLU:HB3	0.50	1.82	3	2
1:A:133:TYR:O	1:A:140:ARG:CZ	0.50	2.60	6	1
1:A:104:ILE:CD1	1:A:145:LEU:HD21	0.50	2.37	19	2
1:A:172:LEU:O	1:A:175:ASP:HB3	0.50	2.07	25	5
1:A:112:TRP:HA	1:A:141:VAL:HG21	0.50	1.83	17	1
1:A:145:LEU:O	1:A:149:LYS:HG2	0.50	2.06	3	2
1:A:119:LEU:HD23	1:A:160:HIS:NE2	0.50	2.21	14	2
1:A:148:TRP:CZ2	1:A:161:LEU:CD1	0.50	2.92	19	1
1:A:165:LEU:CD2	1:A:173:VAL:CG1	0.50	2.89	20	4
1:A:179:GLU:O	1:A:182:GLN:HB2	0.50	2.07	16	2
1:A:176:LEU:HG	1:A:177:VAL:H	0.50	1.66	2	3
1:A:158:VAL:HG12	1:A:180:VAL:CG1	0.50	2.36	17	5
1:A:118:GLN:HB3	1:A:164:ALA:HB1	0.50	1.83	12	1
1:A:148:TRP:CZ2	1:A:161:LEU:CD2	0.50	2.95	13	1
1:A:156:ALA:C	1:A:157:THR:HG23	0.50	2.27	23	2
1:A:102:ASN:O	1:A:106:ASP:N	0.50	2.45	6	13
1:A:108:VAL:HG11	1:A:138:THR:N	0.50	2.22	17	2
1:A:160:HIS:CD2	1:A:161:LEU:HD12	0.50	2.42	24	2
1:A:149:LYS:O	1:A:150:ASN:C	0.50	2.50	18	4
1:A:110:LYS:O	1:A:111:ASP:C	0.50	2.50	9	2
1:A:133:TYR:HB3	1:A:140:ARG:CD	0.50	2.37	22	2
1:A:151:THR:HG22	1:A:152:GLU:N	0.50	2.21	15	5
1:A:165:LEU:CD2	1:A:173:VAL:HB	0.50	2.37	6	1
1:A:129:ILE:CG2	1:A:140:ARG:CB	0.50	2.90	23	1
1:A:119:LEU:CD2	1:A:160:HIS:CE1	0.49	2.95	3	1
1:A:139:GLU:CG	1:A:140:ARG:N	0.49	2.74	5	2

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:132:ARG:HG3	1:A:133:TYR:CD2	0.49	2.42	21	2
1:A:108:VAL:CG1	1:A:137:LEU:CB	0.49	2.90	22	3
1:A:105:CYS:O	1:A:137:LEU:HD11	0.49	2.07	9	1
1:A:108:VAL:CG1	1:A:111:ASP:HB2	0.49	2.37	13	1
1:A:145:LEU:HB2	1:A:148:TRP:CE3	0.49	2.42	18	2
1:A:136:ASN:O	1:A:140:ARG:HD2	0.49	2.06	24	2
1:A:104:ILE:CD1	1:A:115:LEU:CD2	0.49	2.91	24	1
1:A:117:ARG:O	1:A:120:LYS:N	0.49	2.45	9	9
1:A:100:ALA:CB	1:A:161:LEU:HD12	0.49	2.37	6	4
1:A:107:ASN:HB2	1:A:111:ASP:CB	0.49	2.37	7	1
1:A:107:ASN:HB2	1:A:173:VAL:CG2	0.49	2.37	15	1
1:A:160:HIS:NE2	1:A:161:LEU:CD2	0.49	2.67	20	2
1:A:117:ARG:CZ	1:A:126:ILE:HD11	0.49	2.37	17	1
1:A:108:VAL:HB	1:A:111:ASP:HB3	0.49	1.85	20	1
1:A:129:ILE:HG21	1:A:140:ARG:HB3	0.49	1.83	23	1
1:A:160:HIS:HE2	1:A:161:LEU:CD1	0.49	2.16	23	1
1:A:100:ALA:O	1:A:104:ILE:HB	0.49	2.08	12	1
1:A:166:ARG:HG3	1:A:174:ALA:HB1	0.49	1.83	22	1
1:A:146:ARG:HG3	1:A:147:ILE:N	0.49	2.22	23	2
1:A:103:VAL:O	1:A:105:CYS:N	0.49	2.45	10	5
1:A:161:LEU:C	1:A:161:LEU:CD1	0.49	2.73	8	1
1:A:111:ASP:OD2	1:A:141:VAL:HG11	0.49	2.07	13	1
1:A:112:TRP:CE3	1:A:140:ARG:HB2	0.49	2.43	18	1
1:A:114:ARG:HG3	1:A:115:LEU:N	0.49	2.22	22	1
1:A:117:ARG:CG	1:A:118:GLN:N	0.49	2.76	25	1
1:A:111:ASP:O	1:A:111:ASP:CG	0.49	2.51	13	1
1:A:104:ILE:CG1	1:A:115:LEU:HD22	0.49	2.34	24	1
1:A:157:THR:O	1:A:160:HIS:HB3	0.49	2.07	16	7
1:A:112:TRP:CZ2	1:A:140:ARG:HD2	0.49	2.43	11	3
1:A:104:ILE:O	1:A:141:VAL:HG11	0.49	2.07	14	1
1:A:117:ARG:HD2	1:A:126:ILE:CD1	0.49	2.38	17	1
1:A:100:ALA:HB1	1:A:161:LEU:CB	0.49	2.37	2	2
1:A:133:TYR:HB2	1:A:140:ARG:CG	0.49	2.38	11	1
1:A:147:ILE:N	1:A:147:ILE:HD12	0.49	2.21	24	2
1:A:157:THR:O	1:A:158:VAL:C	0.49	2.49	20	6
1:A:100:ALA:O	1:A:104:ILE:HG13	0.49	2.07	16	7
1:A:133:TYR:CB	1:A:140:ARG:HG3	0.49	2.38	24	3
1:A:121:VAL:HG21	1:A:144:SER:HB2	0.49	1.85	18	1
1:A:110:LYS:HG3	1:A:111:ASP:N	0.49	2.23	20	1
1:A:111:ASP:OD2	1:A:170:MET:CE	0.49	2.60	23	1
1:A:108:VAL:H	1:A:111:ASP:HB3	0.49	1.68	24	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:148:TRP:CE3	1:A:149:LYS:HB2	0.49	2.43	5	4
1:A:173:VAL:C	1:A:176:LEU:CD2	0.49	2.81	6	2
1:A:162:VAL:CG2	1:A:177:VAL:C	0.49	2.81	11	5
1:A:114:ARG:O	1:A:117:ARG:HG3	0.49	2.08	15	1
1:A:112:TRP:CD1	1:A:137:LEU:HB3	0.49	2.43	17	1
1:A:160:HIS:O	1:A:164:ALA:N	0.48	2.46	7	6
1:A:117:ARG:CD	1:A:126:ILE:CD1	0.48	2.91	17	1
1:A:97:LEU:HD12	1:A:158:VAL:HG22	0.48	1.83	7	1
1:A:100:ALA:O	1:A:161:LEU:CD2	0.48	2.61	9	1
1:A:145:LEU:CA	1:A:148:TRP:HE3	0.48	2.20	21	11
1:A:112:TRP:CH2	1:A:140:ARG:HB3	0.48	2.43	3	2
1:A:97:LEU:C	1:A:97:LEU:CD1	0.48	2.60	22	4
1:A:103:VAL:HG13	1:A:173:VAL:HG12	0.48	1.84	6	1
1:A:100:ALA:CA	1:A:177:VAL:CG1	0.48	2.91	12	2
1:A:103:VAL:O	1:A:104:ILE:C	0.48	2.51	16	11
1:A:115:LEU:HA	1:A:168:CYS:SG	0.48	2.49	12	2
1:A:134:PRO:HA	1:A:140:ARG:NH2	0.48	2.24	25	1
1:A:116:ALA:O	1:A:117:ARG:C	0.48	2.51	21	4
1:A:97:LEU:HD23	1:A:158:VAL:HG22	0.48	1.84	6	1
1:A:129:ILE:CG1	1:A:143:GLU:HG2	0.48	2.39	17	1
1:A:146:ARG:HG3	1:A:147:ILE:HD13	0.48	1.83	1	1
1:A:107:ASN:CG	1:A:173:VAL:CG2	0.48	2.82	4	3
1:A:174:ALA:O	1:A:178:GLN:CB	0.48	2.62	13	6
1:A:142:ARG:CA	1:A:145:LEU:HD13	0.48	2.35	13	1
1:A:113:ARG:O	1:A:117:ARG:NE	0.48	2.47	17	1
1:A:104:ILE:HG22	1:A:141:VAL:HG22	0.48	1.84	18	1
1:A:112:TRP:CE3	1:A:141:VAL:HG22	0.48	2.44	6	1
1:A:115:LEU:CD2	1:A:170:MET:CE	0.48	2.91	9	3
1:A:165:LEU:HD13	1:A:173:VAL:CG1	0.48	2.39	9	1
1:A:140:ARG:HG3	1:A:141:VAL:N	0.48	2.23	6	3
1:A:147:ILE:O	1:A:150:ASN:HB3	0.48	2.09	13	4
1:A:142:ARG:O	1:A:145:LEU:HB2	0.48	2.08	9	2
1:A:103:VAL:HG22	1:A:176:LEU:CG	0.48	2.39	22	2
1:A:136:ASN:HB2	1:A:140:ARG:NH2	0.48	2.24	22	1
1:A:126:ILE:HG22	1:A:130:GLU:OE2	0.48	2.09	3	2
1:A:110:LYS:HA	1:A:137:LEU:CD2	0.48	2.39	9	3
1:A:115:LEU:HD21	1:A:170:MET:HE1	0.48	1.85	9	1
1:A:99:ALA:HB2	1:A:180:VAL:CG2	0.48	2.38	14	1
1:A:161:LEU:O	1:A:164:ALA:N	0.47	2.47	9	6
1:A:151:THR:HG22	1:A:152:GLU:HG2	0.47	1.84	3	1
1:A:110:LYS:HB2	1:A:112:TRP:HD1	0.47	1.67	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:165:LEU:HB3	1:A:174:ALA:CB	0.47	2.34	23	3
1:A:104:ILE:O	1:A:111:ASP:OD1	0.47	2.32	13	2
1:A:104:ILE:CG2	1:A:141:VAL:CG2	0.47	2.92	18	2
1:A:97:LEU:CD1	1:A:101:PHE:CE1	0.47	2.96	19	2
1:A:162:VAL:O	1:A:165:LEU:N	0.47	2.47	17	1
1:A:99:ALA:O	1:A:103:VAL:CG2	0.47	2.63	19	6
1:A:125:LYS:CG	1:A:129:ILE:HD12	0.47	2.39	5	1
1:A:100:ALA:CA	1:A:177:VAL:HG11	0.47	2.39	12	3
1:A:138:THR:O	1:A:142:ARG:CB	0.47	2.62	9	2
1:A:112:TRP:CE3	1:A:116:ALA:HB2	0.47	2.44	10	1
1:A:112:TRP:CZ3	1:A:113:ARG:HG2	0.47	2.45	4	1
1:A:132:ARG:C	1:A:133:TYR:CD1	0.47	2.88	10	1
1:A:105:CYS:C	1:A:108:VAL:HG23	0.47	2.29	11	2
1:A:112:TRP:CH2	1:A:130:GLU:HG2	0.47	2.45	9	2
1:A:112:TRP:CZ3	1:A:129:ILE:HB	0.47	2.44	13	1
1:A:112:TRP:CE3	1:A:140:ARG:HB3	0.47	2.44	23	2
1:A:160:HIS:HE2	1:A:161:LEU:CD2	0.47	2.20	20	1
1:A:165:LEU:HD11	1:A:174:ALA:HA	0.47	1.85	4	2
1:A:129:ILE:CG2	1:A:140:ARG:HG2	0.47	2.39	5	1
1:A:111:ASP:CG	1:A:137:LEU:HD13	0.47	2.30	9	1
1:A:108:VAL:HG13	1:A:111:ASP:CB	0.47	2.35	13	1
1:A:112:TRP:CE3	1:A:129:ILE:HG21	0.47	2.45	13	1
1:A:136:ASN:HB3	1:A:139:GLU:HG3	0.47	1.86	18	1
1:A:165:LEU:HD23	1:A:170:MET:HB3	0.47	1.86	20	1
1:A:115:LEU:HD11	1:A:119:LEU:CD1	0.47	2.34	21	1
1:A:146:ARG:HG3	1:A:147:ILE:CD1	0.47	2.39	1	1
1:A:180:VAL:HG12	1:A:181:GLN:H	0.47	1.70	1	17
1:A:96:ASP:OD2	1:A:158:VAL:HG21	0.47	2.08	2	2
1:A:132:ARG:HG3	1:A:133:TYR:CG	0.47	2.45	2	2
1:A:114:ARG:O	1:A:114:ARG:NE	0.47	2.47	3	1
1:A:100:ALA:HB3	1:A:161:LEU:HG	0.47	1.86	5	1
1:A:137:LEU:HA	1:A:140:ARG:HD3	0.47	1.85	5	3
1:A:112:TRP:HB2	1:A:141:VAL:HG21	0.47	1.87	6	1
1:A:133:TYR:CE1	1:A:139:GLU:OE2	0.47	2.68	6	1
1:A:161:LEU:O	1:A:162:VAL:C	0.47	2.52	10	8
1:A:120:LYS:O	1:A:120:LYS:CE	0.47	2.62	10	1
1:A:165:LEU:HD22	1:A:173:VAL:HG12	0.47	1.85	10	1
1:A:133:TYR:CB	1:A:140:ARG:CG	0.47	2.93	24	3
1:A:117:ARG:NH1	1:A:126:ILE:HG12	0.47	2.24	17	1
1:A:136:ASN:O	1:A:140:ARG:CG	0.47	2.62	17	1
1:A:165:LEU:CD1	1:A:174:ALA:HA	0.47	2.38	17	1

Continued on next page...



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:121:VAL:CG2	1:A:144:SER:HB2	0.47	2.40	18	1
1:A:120:LYS:O	1:A:120:LYS:HG3	0.47	2.10	25	1
1:A:107:ASN:O	1:A:108:VAL:C	0.47	2.53	14	2
1:A:156:ALA:HA	1:A:160:HIS:CG	0.47	2.45	1	4
1:A:154:GLU:CG	1:A:155:ASN:N	0.47	2.77	3	3
1:A:129:ILE:O	1:A:140:ARG:NH2	0.47	2.46	14	1
1:A:152:GLU:O	1:A:156:ALA:CB	0.47	2.63	20	4
1:A:108:VAL:HA	1:A:111:ASP:HB2	0.47	1.87	1	1
1:A:126:ILE:O	1:A:130:GLU:HB2	0.47	2.09	10	2
1:A:137:LEU:O	1:A:140:ARG:CG	0.47	2.63	7	1
1:A:112:TRP:CZ2	1:A:140:ARG:CB	0.47	2.97	9	1
1:A:123:ASP:N	1:A:123:ASP:OD1	0.47	2.48	25	2
1:A:129:ILE:HG23	1:A:133:TYR:HD2	0.47	1.69	17	1
1:A:132:ARG:HG3	1:A:133:TYR:CD1	0.47	2.44	20	1
1:A:162:VAL:CG1	1:A:178:GLN:CB	0.47	2.91	24	1
1:A:111:ASP:O	1:A:115:LEU:HD23	0.46	2.11	3	1
1:A:168:CYS:O	1:A:169:GLN:HB2	0.46	2.10	8	5
1:A:104:ILE:HA	1:A:111:ASP:OD2	0.46	2.10	12	1
1:A:108:VAL:CG1	1:A:108:VAL:O	0.46	2.63	5	1
1:A:115:LEU:HD13	1:A:165:LEU:HG	0.46	1.88	14	1
1:A:143:GLU:O	1:A:146:ARG:HG2	0.46	2.10	25	2
1:A:146:ARG:HG2	1:A:147:ILE:N	0.46	2.25	1	2
1:A:130:GLU:HA	1:A:140:ARG:HD3	0.46	1.87	2	1
1:A:165:LEU:HD12	1:A:165:LEU:H	0.46	1.70	6	1
1:A:137:LEU:N	1:A:137:LEU:HD23	0.46	2.24	14	2
1:A:112:TRP:HB3	1:A:141:VAL:CG2	0.46	2.36	12	1
1:A:156:ALA:O	1:A:160:HIS:ND1	0.46	2.49	15	1
1:A:132:ARG:O	1:A:132:ARG:CD	0.46	2.64	18	1
1:A:99:ALA:HB1	1:A:180:VAL:HG23	0.46	1.84	9	2
1:A:108:VAL:CG1	1:A:111:ASP:H	0.46	2.23	16	3
1:A:142:ARG:HG3	1:A:145:LEU:HD12	0.46	1.86	9	1
1:A:120:LYS:CG	1:A:120:LYS:O	0.46	2.64	3	5
1:A:161:LEU:O	1:A:164:ALA:CB	0.46	2.59	14	1
1:A:177:VAL:CA	1:A:180:VAL:HB	0.46	2.40	5	1
1:A:155:ASN:N	1:A:155:ASN:OD1	0.46	2.47	8	1
1:A:110:LYS:CG	1:A:110:LYS:O	0.46	2.63	14	1
1:A:97:LEU:O	1:A:97:LEU:CD1	0.46	2.62	15	1
1:A:168:CYS:CB	1:A:170:MET:HG2	0.46	2.41	21	1
1:A:177:VAL:O	1:A:178:GLN:C	0.46	2.53	5	6
1:A:143:GLU:CA	1:A:143:GLU:OE1	0.46	2.62	6	1
1:A:133:TYR:HB3	1:A:140:ARG:CG	0.46	2.41	17	1

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:143:GLU:OE2	1:A:147:ILE:HD12	0.46	2.11	17	1
1:A:172:LEU:HD12	1:A:173:VAL:HG23	0.46	1.86	3	1
1:A:108:VAL:O	1:A:137:LEU:CD1	0.46	2.63	5	1
1:A:107:ASN:OD1	1:A:173:VAL:HG21	0.46	2.10	13	1
1:A:123:ASP:HA	1:A:126:ILE:HB	0.46	1.87	17	2
1:A:158:VAL:HG13	1:A:180:VAL:HG13	0.46	1.87	1	2
1:A:162:VAL:HG12	1:A:178:GLN:HE21	0.46	1.71	2	2
1:A:104:ILE:HG12	1:A:115:LEU:CD2	0.46	2.39	5	2
1:A:118:GLN:C	1:A:120:LYS:N	0.46	2.69	5	8
1:A:97:LEU:HG	1:A:101:PHE:CE1	0.46	2.46	7	1
1:A:108:VAL:CG2	1:A:141:VAL:HG21	0.46	2.39	14	1
1:A:141:VAL:O	1:A:142:ARG:C	0.45	2.55	12	9
1:A:119:LEU:C	1:A:120:LYS:CG	0.45	2.83	5	3
1:A:111:ASP:OD2	1:A:173:VAL:HG21	0.45	2.11	5	1
1:A:165:LEU:CD2	1:A:174:ALA:N	0.45	2.80	8	1
1:A:112:TRP:NE1	1:A:140:ARG:CD	0.45	2.79	10	1
1:A:129:ILE:HD12	1:A:143:GLU:HG2	0.45	1.88	13	1
1:A:133:TYR:CE1	1:A:139:GLU:HB3	0.45	2.46	18	2
1:A:102:ASN:ND2	1:A:106:ASP:OD2	0.45	2.49	17	1
1:A:165:LEU:HA	1:A:168:CYS:SG	0.45	2.51	23	1
1:A:112:TRP:CZ2	1:A:113:ARG:HB3	0.45	2.46	25	1
1:A:133:TYR:HD1	1:A:140:ARG:HD3	0.45	1.71	8	1
1:A:115:LEU:O	1:A:119:LEU:N	0.45	2.49	12	1
1:A:154:GLU:HG3	1:A:155:ASN:N	0.45	2.26	3	3
1:A:168:CYS:SG	1:A:168:CYS:O	0.45	2.74	21	2
1:A:115:LEU:O	1:A:119:LEU:HB2	0.45	2.11	9	4
1:A:114:ARG:NH1	1:A:170:MET:CE	0.45	2.79	22	1
1:A:143:GLU:O	1:A:146:ARG:HB2	0.45	2.11	4	1
1:A:122:SER:C	1:A:124:THR:N	0.45	2.70	5	1
1:A:122:SER:O	1:A:124:THR:N	0.45	2.49	5	1
1:A:104:ILE:CD1	1:A:161:LEU:CD2	0.45	2.89	9	1
1:A:100:ALA:O	1:A:104:ILE:HD12	0.45	2.12	10	1
1:A:129:ILE:HD11	1:A:143:GLU:CG	0.45	2.41	17	1
1:A:128:SER:HA	1:A:131:ASP:HB2	0.45	1.89	21	1
1:A:109:GLY:O	1:A:110:LYS:HG3	0.45	2.12	2	1
1:A:179:GLU:O	1:A:182:GLN:N	0.45	2.49	20	6
1:A:100:ALA:CB	1:A:161:LEU:HB3	0.45	2.41	5	1
1:A:118:GLN:CG	1:A:119:LEU:N	0.45	2.79	13	1
1:A:100:ALA:CB	1:A:161:LEU:HD13	0.45	2.42	14	1
1:A:97:LEU:HD21	1:A:101:PHE:CE2	0.45	2.47	15	1
1:A:155:ASN:O	1:A:155:ASN:ND2	0.45	2.50	24	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:158:VAL:HG12	1:A:180:VAL:HG11	0.45	1.89	25	1
1:A:112:TRP:CB	1:A:141:VAL:CG2	0.45	2.92	5	2
1:A:147:ILE:N	1:A:147:ILE:HD13	0.45	2.26	8	2
1:A:114:ARG:O	1:A:168:CYS:SG	0.45	2.75	9	1
1:A:100:ALA:O	1:A:104:ILE:CG1	0.45	2.65	10	1
1:A:107:ASN:OD1	1:A:173:VAL:CG2	0.45	2.64	13	1
1:A:108:VAL:HG12	1:A:109:GLY:H	0.45	1.64	14	1
1:A:135:ARG:O	1:A:135:ARG:HD2	0.45	2.12	18	1
1:A:136:ASN:HB3	1:A:139:GLU:CG	0.45	2.41	18	1
1:A:114:ARG:CZ	1:A:168:CYS:CB	0.45	2.94	22	1
1:A:110:LYS:O	1:A:110:LYS:CG	0.45	2.65	5	1
1:A:179:GLU:HA	1:A:182:GLN:HB3	0.45	1.87	7	1
1:A:115:LEU:CD2	1:A:164:ALA:HB1	0.45	2.41	21	1
1:A:108:VAL:HG22	1:A:141:VAL:CG2	0.45	2.41	22	1
1:A:162:VAL:HA	1:A:165:LEU:CD1	0.45	2.41	20	2
1:A:111:ASP:CG	1:A:141:VAL:HG11	0.45	2.32	13	1
1:A:137:LEU:HD12	1:A:138:THR:CA	0.45	2.42	13	1
1:A:117:ARG:NH2	1:A:126:ILE:HG12	0.45	2.26	17	1
1:A:132:ARG:HD2	1:A:133:TYR:CE1	0.45	2.46	20	1
1:A:140:ARG:HA	1:A:143:GLU:CD	0.45	2.31	22	1
1:A:107:ASN:OD1	1:A:111:ASP:CG	0.45	2.55	4	2
1:A:137:LEU:HA	1:A:140:ARG:CG	0.45	2.41	7	1
1:A:133:TYR:CB	1:A:140:ARG:CZ	0.45	2.95	8	2
1:A:104:ILE:CG1	1:A:161:LEU:HD11	0.45	2.41	15	1
1:A:135:ARG:O	1:A:135:ARG:CD	0.45	2.65	18	1
1:A:112:TRP:CZ2	1:A:113:ARG:HG3	0.45	2.47	17	2
1:A:148:TRP:HZ2	1:A:161:LEU:HD21	0.45	1.72	1	2
1:A:136:ASN:O	1:A:140:ARG:HD3	0.45	2.11	21	1
1:A:100:ALA:HB2	1:A:158:VAL:HG13	0.45	1.89	22	1
1:A:107:ASN:C	1:A:109:GLY:H	0.44	2.16	18	2
1:A:140:ARG:O	1:A:143:GLU:HB3	0.44	2.12	6	1
1:A:115:LEU:HD12	1:A:118:GLN:NE2	0.44	2.28	13	1
1:A:104:ILE:HG22	1:A:141:VAL:CG2	0.44	2.42	18	1
1:A:137:LEU:HD23	1:A:140:ARG:NH1	0.44	2.27	18	1
1:A:103:VAL:HA	1:A:106:ASP:HB2	0.44	1.88	6	1
1:A:115:LEU:O	1:A:119:LEU:CB	0.44	2.65	9	4
1:A:120:LYS:O	1:A:120:LYS:NZ	0.44	2.50	10	1
1:A:175:ASP:C	1:A:178:GLN:HG3	0.44	2.33	24	4
1:A:158:VAL:HG11	1:A:180:VAL:HG13	0.44	1.87	12	2
1:A:104:ILE:O	1:A:111:ASP:OD2	0.44	2.35	19	2
1:A:168:CYS:HB3	1:A:170:MET:SD	0.44	2.52	25	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:168:CYS:O	1:A:168:CYS:SG	0.44	2.75	7	1
1:A:115:LEU:HD22	1:A:115:LEU:N	0.44	2.28	9	1
1:A:110:LYS:CB	1:A:112:TRP:CD1	0.44	3.01	12	1
1:A:110:LYS:O	1:A:114:ARG:HG2	0.44	2.12	17	1
1:A:148:TRP:CZ3	1:A:149:LYS:HB3	0.44	2.47	25	1
1:A:125:LYS:O	1:A:126:ILE:C	0.44	2.55	13	2
1:A:141:VAL:O	1:A:143:GLU:N	0.44	2.51	13	5
1:A:171:ASN:O	1:A:172:LEU:C	0.44	2.54	21	3
1:A:107:ASN:CG	1:A:108:VAL:N	0.44	2.70	14	1
1:A:119:LEU:O	1:A:152:GLU:OE1	0.44	2.36	18	1
1:A:114:ARG:O	1:A:118:GLN:HB3	0.44	2.12	19	1
1:A:107:ASN:O	1:A:111:ASP:HB2	0.44	2.13	21	1
1:A:109:GLY:CA	1:A:137:LEU:HD12	0.44	2.36	23	2
1:A:158:VAL:HG12	1:A:180:VAL:HG13	0.44	1.89	6	1
1:A:137:LEU:CD1	1:A:137:LEU:C	0.44	2.86	13	1
1:A:105:CYS:HA	1:A:111:ASP:OD2	0.44	2.12	15	1
1:A:112:TRP:CD2	1:A:140:ARG:HB3	0.44	2.47	22	1
1:A:112:TRP:CH2	1:A:129:ILE:HG21	0.44	2.47	1	1
1:A:115:LEU:HD12	1:A:168:CYS:SG	0.44	2.52	1	1
1:A:97:LEU:CD1	1:A:158:VAL:HG22	0.44	2.42	7	1
1:A:100:ALA:O	1:A:161:LEU:HD22	0.44	2.12	9	1
1:A:172:LEU:O	1:A:175:ASP:HB2	0.44	2.12	13	2
1:A:133:TYR:CG	1:A:140:ARG:HG3	0.44	2.48	24	1
1:A:133:TYR:CD1	1:A:140:ARG:HD3	0.44	2.48	8	1
1:A:110:LYS:O	1:A:112:TRP:CD1	0.44	2.71	10	1
1:A:111:ASP:OD2	1:A:111:ASP:O	0.44	2.36	15	1
1:A:179:GLU:HA	1:A:182:GLN:HB2	0.44	1.90	15	1
1:A:170:MET:SD	1:A:173:VAL:HG21	0.44	2.53	19	1
1:A:114:ARG:NH1	1:A:168:CYS:HB3	0.44	2.28	22	1
1:A:146:ARG:CG	1:A:147:ILE:CD1	0.44	2.96	1	1
1:A:103:VAL:C	1:A:105:CYS:N	0.44	2.70	10	2
1:A:112:TRP:CZ3	1:A:129:ILE:CB	0.44	3.01	13	1
1:A:115:LEU:HA	1:A:118:GLN:HG2	0.44	1.90	13	1
1:A:141:VAL:O	1:A:145:LEU:CD1	0.44	2.66	24	2
1:A:110:LYS:O	1:A:111:ASP:OD1	0.44	2.35	20	1
1:A:171:ASN:ND2	1:A:171:ASN:H	0.44	2.09	21	1
1:A:107:ASN:OD1	1:A:107:ASN:O	0.44	2.35	4	1
1:A:126:ILE:O	1:A:130:GLU:CG	0.44	2.66	13	1
1:A:119:LEU:CD2	1:A:160:HIS:NE2	0.44	2.81	14	1
1:A:107:ASN:C	1:A:109:GLY:N	0.44	2.70	22	2
1:A:133:TYR:CE1	1:A:140:ARG:CZ	0.44	3.01	24	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:178:GLN:NE2	1:A:179:GLU:N	0.43	2.65	5	1
1:A:174:ALA:O	1:A:178:GLN:HG3	0.43	2.13	8	1
1:A:173:VAL:C	1:A:175:ASP:N	0.43	2.70	17	5
1:A:105:CYS:SG	1:A:141:VAL:HG11	0.43	2.53	11	2
1:A:136:ASN:CB	1:A:140:ARG:HD3	0.43	2.42	17	1
1:A:157:THR:OG1	1:A:160:HIS:HB3	0.43	2.12	17	1
1:A:113:ARG:O	1:A:117:ARG:HG3	0.43	2.13	19	1
1:A:170:MET:HE3	1:A:173:VAL:HG21	0.43	1.88	19	1
1:A:139:GLU:O	1:A:143:GLU:HG2	0.43	2.12	23	1
1:A:114:ARG:HB3	1:A:168:CYS:HB3	0.43	1.89	1	1
1:A:174:ALA:C	1:A:178:GLN:NE2	0.43	2.72	23	6
1:A:100:ALA:HB1	1:A:161:LEU:HB3	0.43	1.91	2	2
1:A:107:ASN:ND2	1:A:173:VAL:HG21	0.43	2.28	4	1
1:A:128:SER:O	1:A:132:ARG:HG2	0.43	2.14	6	1
1:A:160:HIS:CD2	1:A:160:HIS:O	0.43	2.71	8	1
1:A:112:TRP:CZ2	1:A:130:GLU:HG2	0.43	2.48	9	1
1:A:133:TYR:HB2	1:A:140:ARG:HG3	0.43	1.90	9	1
1:A:100:ALA:O	1:A:104:ILE:CD1	0.43	2.65	10	1
1:A:109:GLY:HA2	1:A:137:LEU:CD1	0.43	2.43	11	1
1:A:110:LYS:O	1:A:137:LEU:HB2	0.43	2.12	13	1
1:A:115:LEU:HD23	1:A:119:LEU:HD11	0.43	1.90	22	2
1:A:133:TYR:CB	1:A:140:ARG:HG2	0.43	2.44	16	1
1:A:157:THR:C	1:A:160:HIS:ND1	0.43	2.72	20	1
1:A:165:LEU:HD21	1:A:174:ALA:H	0.43	1.73	2	1
1:A:178:GLN:C	1:A:178:GLN:NE2	0.43	2.72	5	1
1:A:104:ILE:CG2	1:A:115:LEU:HD22	0.43	2.42	13	1
1:A:113:ARG:O	1:A:113:ARG:HD2	0.43	2.13	20	1
1:A:123:ASP:OD1	1:A:124:THR:N	0.43	2.51	22	1
1:A:103:VAL:HG22	1:A:173:VAL:CG1	0.43	2.44	23	1
1:A:100:ALA:CB	1:A:177:VAL:HG11	0.43	2.44	12	1
1:A:135:ARG:O	1:A:136:ASN:ND2	0.43	2.51	20	2
1:A:133:TYR:O	1:A:140:ARG:NE	0.43	2.51	4	1
1:A:174:ALA:O	1:A:178:GLN:CD	0.43	2.57	6	1
1:A:101:PHE:CE1	1:A:145:LEU:HD23	0.43	2.48	8	1
1:A:108:VAL:N	1:A:111:ASP:OD2	0.43	2.48	8	1
1:A:117:ARG:CZ	1:A:126:ILE:CG1	0.43	2.97	17	1
1:A:162:VAL:O	1:A:165:LEU:HB2	0.43	2.13	17	1
1:A:116:ALA:O	1:A:121:VAL:HG23	0.43	2.13	18	1
1:A:113:ARG:O	1:A:113:ARG:CD	0.43	2.66	20	1
1:A:160:HIS:CE1	1:A:161:LEU:HB2	0.43	2.49	23	1
1:A:96:ASP:OD1	1:A:158:VAL:HG21	0.43	2.13	9	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:ILE:HD13	1:A:115:LEU:CD2	0.43	2.42	13	1
1:A:132:ARG:HD3	1:A:133:TYR:CZ	0.43	2.48	13	1
1:A:114:ARG:HB3	1:A:168:CYS:SG	0.43	2.53	21	1
1:A:112:TRP:CZ2	1:A:113:ARG:CG	0.43	3.02	4	2
1:A:118:GLN:OE1	1:A:164:ALA:O	0.43	2.37	8	1
1:A:96:ASP:O	1:A:180:VAL:HG21	0.43	2.14	11	1
1:A:152:GLU:C	1:A:156:ALA:HB2	0.43	2.34	12	2
1:A:117:ARG:CD	1:A:118:GLN:H	0.43	2.27	15	1
1:A:114:ARG:NH1	1:A:168:CYS:CB	0.43	2.82	22	1
1:A:157:THR:N	1:A:160:HIS:HD2	0.43	2.12	25	1
1:A:130:GLU:HG2	1:A:140:ARG:NH1	0.43	2.28	1	1
1:A:97:LEU:HB3	1:A:101:PHE:CZ	0.43	2.48	5	1
1:A:162:VAL:CG1	1:A:174:ALA:O	0.43	2.67	6	1
1:A:143:GLU:O	1:A:144:SER:C	0.43	2.57	7	2
1:A:179:GLU:O	1:A:180:VAL:C	0.43	2.56	20	1
1:A:111:ASP:OD2	1:A:173:VAL:CG2	0.43	2.66	5	1
1:A:109:GLY:C	1:A:137:LEU:CD2	0.43	2.87	8	1
1:A:129:ILE:HG23	1:A:140:ARG:CA	0.43	2.42	9	1
1:A:177:VAL:C	1:A:180:VAL:HB	0.43	2.34	5	1
1:A:110:LYS:HG2	1:A:111:ASP:N	0.43	2.29	9	1
1:A:136:ASN:OD1	1:A:139:GLU:N	0.43	2.52	9	1
1:A:97:LEU:CD2	1:A:101:PHE:CZ	0.43	2.90	20	1
1:A:133:TYR:CG	1:A:140:ARG:CD	0.43	3.02	24	1
1:A:168:CYS:CB	1:A:170:MET:SD	0.43	3.07	25	1
1:A:165:LEU:HB3	1:A:170:MET:HB2	0.42	1.91	6	1
1:A:118:GLN:HG2	1:A:167:SER:HB3	0.42	1.91	7	1
1:A:165:LEU:CD1	1:A:174:ALA:N	0.42	2.82	9	1
1:A:110:LYS:O	1:A:114:ARG:HG3	0.42	2.12	11	2
1:A:137:LEU:HD23	1:A:140:ARG:CZ	0.42	2.43	7	1
1:A:130:GLU:HG2	1:A:131:ASP:N	0.42	2.28	8	1
1:A:168:CYS:HB2	1:A:170:MET:CG	0.42	2.44	10	1
1:A:150:ASN:O	1:A:153:LYS:CG	0.42	2.67	12	1
1:A:145:LEU:HD12	1:A:145:LEU:H	0.42	1.74	24	2
1:A:128:SER:O	1:A:132:ARG:HD2	0.42	2.15	14	1
1:A:116:ALA:O	1:A:121:VAL:CG2	0.42	2.67	18	1
1:A:173:VAL:O	1:A:176:LEU:CG	0.42	2.67	2	2
1:A:129:ILE:CD1	1:A:143:GLU:OE1	0.42	2.67	3	1
1:A:148:TRP:HZ2	1:A:160:HIS:CE1	0.42	2.32	20	1
1:A:114:ARG:CD	1:A:114:ARG:C	0.42	2.87	22	1
1:A:178:GLN:CD	1:A:179:GLU:N	0.42	2.72	5	1
1:A:104:ILE:HD13	1:A:119:LEU:HD11	0.42	1.90	9	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:141:VAL:O	1:A:144:SER:N	0.42	2.52	9	1
1:A:125:LYS:O	1:A:129:ILE:N	0.42	2.45	14	1
1:A:108:VAL:O	1:A:109:GLY:C	0.42	2.57	5	1
1:A:178:GLN:O	1:A:181:GLN:N	0.42	2.52	10	1
1:A:96:ASP:O	1:A:158:VAL:CG2	0.42	2.68	5	1
1:A:115:LEU:O	1:A:116:ALA:C	0.42	2.57	7	1
1:A:110:LYS:HB3	1:A:137:LEU:HB2	0.42	1.92	12	1
1:A:132:ARG:C	1:A:133:TYR:CG	0.42	2.93	12	1
1:A:116:ALA:O	1:A:121:VAL:N	0.42	2.51	19	1
1:A:132:ARG:CG	1:A:133:TYR:CE2	0.42	3.03	21	1
1:A:156:ALA:C	1:A:157:THR:CG2	0.42	2.88	25	1
1:A:118:GLN:O	1:A:120:LYS:N	0.42	2.52	20	2
1:A:139:GLU:O	1:A:143:GLU:OE1	0.42	2.38	12	1
1:A:96:ASP:OD1	1:A:180:VAL:O	0.42	2.38	17	1
1:A:173:VAL:O	1:A:176:LEU:N	0.42	2.53	18	1
1:A:116:ALA:O	1:A:119:LEU:N	0.42	2.53	4	1
1:A:139:GLU:O	1:A:140:ARG:C	0.42	2.57	21	2
1:A:104:ILE:CD1	1:A:161:LEU:CD1	0.42	2.97	13	2
1:A:112:TRP:O	1:A:116:ALA:HB3	0.42	2.15	9	2
1:A:143:GLU:OE1	1:A:143:GLU:HA	0.42	2.15	15	1
1:A:108:VAL:CG2	1:A:170:MET:SD	0.42	3.07	16	1
1:A:99:ALA:O	1:A:103:VAL:HG23	0.42	2.15	19	1
1:A:108:VAL:O	1:A:110:LYS:N	0.42	2.50	24	1
1:A:112:TRP:NE1	1:A:137:LEU:HB2	0.41	2.29	3	1
1:A:162:VAL:O	1:A:165:LEU:HD13	0.41	2.15	4	1
1:A:132:ARG:HG2	1:A:133:TYR:CE1	0.41	2.49	5	1
1:A:104:ILE:HG23	1:A:115:LEU:CB	0.41	2.45	19	2
1:A:108:VAL:CG2	1:A:109:GLY:H	0.41	2.28	13	1
1:A:127:ASP:O	1:A:130:GLU:HG3	0.41	2.14	13	1
1:A:132:ARG:O	1:A:132:ARG:HD2	0.41	2.14	15	1
1:A:118:GLN:O	1:A:119:LEU:C	0.41	2.57	6	1
1:A:112:TRP:CH2	1:A:126:ILE:HA	0.41	2.51	8	1
1:A:165:LEU:HD23	1:A:174:ALA:HB2	0.41	1.92	8	1
1:A:178:GLN:O	1:A:179:GLU:C	0.41	2.57	10	1
1:A:178:GLN:O	1:A:182:GLN:HG2	0.41	2.15	14	1
1:A:161:LEU:HD22	1:A:161:LEU:HA	0.41	1.71	15	1
1:A:112:TRP:HA	1:A:141:VAL:CG2	0.41	2.45	17	1
1:A:111:ASP:HA	1:A:114:ARG:HB3	0.41	1.92	22	1
1:A:122:SER:O	1:A:123:ASP:CB	0.41	2.67	23	1
1:A:109:GLY:HA2	1:A:137:LEU:HD11	0.41	1.91	3	1
1:A:119:LEU:CD2	1:A:161:LEU:CD2	0.41	2.98	6	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:101:PHE:CD2	1:A:145:LEU:HD22	0.41	2.50	7	1
1:A:139:GLU:HB3	1:A:140:ARG:CZ	0.41	2.42	8	1
1:A:107:ASN:OD1	1:A:108:VAL:HG23	0.41	2.15	19	1
1:A:117:ARG:HG2	1:A:126:ILE:HD11	0.41	1.90	22	1
1:A:111:ASP:N	1:A:111:ASP:OD1	0.41	2.54	24	1
1:A:137:LEU:HA	1:A:140:ARG:HB2	0.41	1.92	24	1
1:A:107:ASN:HB3	1:A:173:VAL:HG13	0.41	1.90	15	1
1:A:180:VAL:HG13	1:A:181:GLN:N	0.41	2.29	22	1
1:A:137:LEU:O	1:A:140:ARG:HG2	0.41	2.14	1	1
1:A:102:ASN:O	1:A:102:ASN:OD1	0.41	2.38	2	1
1:A:118:GLN:CG	1:A:167:SER:HB3	0.41	2.46	7	1
1:A:134:PRO:C	1:A:140:ARG:NH2	0.41	2.74	25	1
1:A:96:ASP:C	1:A:158:VAL:CG2	0.41	2.89	5	1
1:A:130:GLU:OE2	1:A:140:ARG:NH2	0.41	2.54	5	1
1:A:97:LEU:O	1:A:101:PHE:N	0.41	2.48	7	1
1:A:136:ASN:OD1	1:A:136:ASN:O	0.41	2.39	9	1
1:A:145:LEU:CA	1:A:148:TRP:CE3	0.41	3.03	18	1
1:A:149:LYS:O	1:A:151:THR:N	0.41	2.54	18	2
1:A:165:LEU:CD1	1:A:177:VAL:CG2	0.41	2.92	21	1
1:A:152:GLU:OE1	1:A:160:HIS:ND1	0.41	2.53	1	1
1:A:104:ILE:HG23	1:A:115:LEU:HD21	0.41	1.90	3	1
1:A:112:TRP:O	1:A:113:ARG:C	0.41	2.59	12	2
1:A:105:CYS:HA	1:A:108:VAL:HG23	0.41	1.91	17	1
1:A:133:TYR:CD2	1:A:140:ARG:HA	0.41	2.51	20	1
1:A:114:ARG:CG	1:A:168:CYS:HB3	0.41	2.45	25	1
1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HA	0.41	1.74	6	1
1:A:115:LEU:O	1:A:115:LEU:HD13	0.41	2.15	10	1
1:A:101:PHE:CD1	1:A:145:LEU:HD23	0.41	2.50	17	1
1:A:104:ILE:HA	1:A:115:LEU:HD23	0.41	1.93	17	1
1:A:104:ILE:HG23	1:A:141:VAL:HG21	0.41	1.86	23	1
1:A:156:ALA:C	1:A:160:HIS:HB3	0.41	2.36	23	1
1:A:168:CYS:HB3	1:A:170:MET:HG3	0.41	1.93	6	1
1:A:104:ILE:HG12	1:A:165:LEU:HD12	0.41	1.92	8	1
1:A:139:GLU:CB	1:A:140:ARG:NH2	0.41	2.84	8	1
1:A:123:ASP:O	1:A:127:ASP:HB2	0.41	2.15	15	2
1:A:104:ILE:HG13	1:A:161:LEU:HD11	0.41	1.92	15	1
1:A:129:ILE:HG13	1:A:143:GLU:CD	0.41	2.36	18	1
1:A:101:PHE:HE1	1:A:148:TRP:CH2	0.41	2.33	19	1
1:A:147:ILE:HA	1:A:150:ASN:HB2	0.41	1.93	23	1
1:A:108:VAL:C	1:A:110:LYS:N	0.41	2.74	24	1
1:A:114:ARG:HB2	1:A:114:ARG:NH1	0.41	2.31	25	1

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:126:ILE:HG22	1:A:130:GLU:OE1	0.41	2.16	4	2
1:A:178:GLN:O	1:A:182:GLN:OE1	0.41	2.39	4	1
1:A:108:VAL:N	1:A:111:ASP:HB3	0.41	2.30	10	1
1:A:125:LYS:HD2	1:A:129:ILE:HG12	0.41	1.92	12	1
1:A:110:LYS:HA	1:A:137:LEU:CB	0.41	2.45	16	2
1:A:126:ILE:O	1:A:130:GLU:HG3	0.41	2.15	18	1
1:A:129:ILE:O	1:A:133:TYR:CD2	0.41	2.74	18	1
1:A:127:ASP:OD1	1:A:127:ASP:O	0.41	2.39	19	1
1:A:121:VAL:HG12	1:A:126:ILE:CG1	0.41	2.45	21	1
1:A:141:VAL:C	1:A:143:GLU:N	0.40	2.75	21	2
1:A:98:CYS:O	1:A:102:ASN:OD1	0.40	2.39	3	1
1:A:97:LEU:O	1:A:101:PHE:CB	0.40	2.70	5	1
1:A:112:TRP:CE2	1:A:140:ARG:NE	0.40	2.89	10	1
1:A:141:VAL:O	1:A:144:SER:OG	0.40	2.37	17	1
1:A:135:ARG:O	1:A:135:ARG:CG	0.40	2.69	18	1
1:A:97:LEU:HD11	1:A:101:PHE:CD1	0.40	2.50	19	1
1:A:101:PHE:CD1	1:A:145:LEU:HD22	0.40	2.51	19	1
1:A:104:ILE:CA	1:A:111:ASP:OD2	0.40	2.70	12	1
1:A:120:LYS:CD	1:A:152:GLU:OE2	0.40	2.70	12	1
1:A:108:VAL:HG23	1:A:170:MET:SD	0.40	2.55	16	1
1:A:162:VAL:O	1:A:163:GLY:C	0.40	2.59	17	1
1:A:133:TYR:O	1:A:140:ARG:NH1	0.40	2.50	21	1
1:A:140:ARG:O	1:A:141:VAL:C	0.40	2.59	8	1
1:A:119:LEU:HB3	1:A:148:TRP:HD1	0.40	1.75	12	1
1:A:153:LYS:O	1:A:156:ALA:N	0.40	2.45	16	1
1:A:134:PRO:O	1:A:135:ARG:HG2	0.40	2.17	22	1
1:A:110:LYS:HA	1:A:137:LEU:HB3	0.40	1.93	8	1
1:A:120:LYS:CD	1:A:151:THR:HG21	0.40	2.46	10	1
1:A:107:ASN:OD1	1:A:108:VAL:HG12	0.40	2.16	13	1
1:A:107:ASN:CG	1:A:108:VAL:H	0.40	2.17	13	1
1:A:117:ARG:N	1:A:117:ARG:HD3	0.40	2.29	17	1
1:A:149:LYS:HG2	1:A:153:LYS:HA	0.40	1.93	18	1
1:A:165:LEU:HB3	1:A:170:MET:CB	0.40	2.46	20	1
1:A:133:TYR:CE2	1:A:143:GLU:HG3	0.40	2.52	24	1
1:A:129:ILE:HG12	1:A:143:GLU:HB3	0.40	1.93	25	1
1:A:129:ILE:HG22	1:A:130:GLU:N	0.40	2.32	7	1



## 6.3 Torsion angles [i](#)

### 6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	87/104 (84%)	68±3 (78±4%)	15±3 (18±4%)	4±1 (5±1%)	4	27
All	All	2175/2600 (84%)	1688 (78%)	384 (18%)	103 (5%)	4	27

All 16 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	120	LYS	23
1	A	145	LEU	20
1	A	108	VAL	15
1	A	153	LYS	9
1	A	110	LYS	9
1	A	112	TRP	6
1	A	148	TRP	5
1	A	96	ASP	3
1	A	136	ASN	3
1	A	111	ASP	3
1	A	104	ILE	2
1	A	135	ARG	1
1	A	154	GLU	1
1	A	142	ARG	1
1	A	134	PRO	1
1	A	157	THR	1

### 6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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	78/90 (87%)	50±4 (64±5%)	28±4 (36±5%)	1	8

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
All	All	1950/2250 (87%)	1244 (64%)	706 (36%)	<b>1</b> <b>8</b>

All 68 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	138	THR	25
1	A	180	VAL	25
1	A	148	TRP	24
1	A	176	LEU	24
1	A	177	VAL	24
1	A	178	GLN	23
1	A	103	VAL	19
1	A	161	LEU	19
1	A	132	ARG	17
1	A	153	LYS	17
1	A	113	ARG	16
1	A	125	LYS	16
1	A	129	ILE	16
1	A	143	GLU	16
1	A	110	LYS	15
1	A	117	ARG	15
1	A	98	CYS	15
1	A	107	ASN	14
1	A	118	GLN	14
1	A	124	THR	14
1	A	114	ARG	14
1	A	128	SER	13
1	A	167	SER	13
1	A	120	LYS	12
1	A	122	SER	12
1	A	179	GLU	12
1	A	182	GLN	12
1	A	136	ASN	12
1	A	145	LEU	12
1	A	160	HIS	11
1	A	170	MET	11
1	A	97	LEU	11
1	A	111	ASP	10
1	A	131	ASP	10
1	A	142	ARG	10
1	A	154	GLU	10

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	96	ASP	10
1	A	151	THR	9
1	A	123	ASP	8
1	A	137	LEU	8
1	A	149	LYS	8
1	A	150	ASN	8
1	A	181	GLN	7
1	A	166	ARG	7
1	A	168	CYS	7
1	A	155	ASN	6
1	A	127	ASP	6
1	A	106	ASP	6
1	A	146	ARG	6
1	A	135	ARG	6
1	A	172	LEU	5
1	A	130	GLU	5
1	A	157	THR	4
1	A	165	LEU	4
1	A	169	GLN	4
1	A	175	ASP	4
1	A	115	LEU	3
1	A	105	CYS	3
1	A	171	ASN	3
1	A	104	ILE	3
1	A	140	ARG	3
1	A	139	GLU	2
1	A	112	TRP	2
1	A	126	ILE	2
1	A	133	TYR	1
1	A	152	GLU	1
1	A	141	VAL	1
1	A	102	ASN	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 [i](#)

There are no monosaccharides 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