Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Feb 8, 2022 – 01:52 PM EST

PDB ID	:	1BVH
Title	:	SOLUTION STRUCTURE OF A LOW MOLECULAR WEIGHT PROTEIN TYROSINE PHOSPHATASE
Authors	:	Logan, T.M.; Zhou, M.-M.; Nettesheim, D.G.; Meadows, R.P.; Van Etten, R.L.; Fesik, S.W.
Deposited on	:	1994-05-03

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 (i) symbol.

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

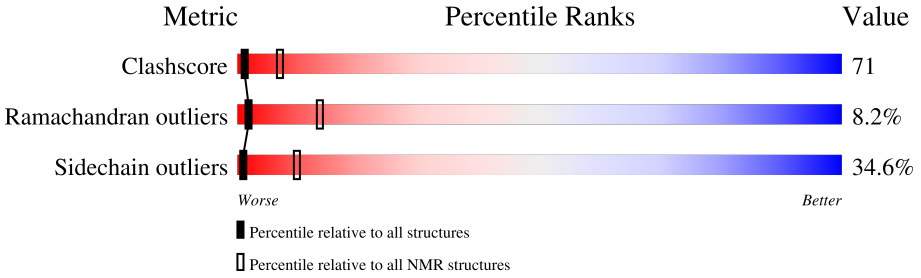
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
ShiftChecker	:	2.26
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.26

1 Overall quality at a glance (i)

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 <=5%

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	157	16% 61% 19% • •

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 15 models. Model 12 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:4-A:157 (154)	0.79	12

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

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

The models can be grouped into 3 clusters and 1 single-model cluster was found.

Cluster number	Models
1	3, 4, 5, 7, 8, 9, 10, 12, 13, 15
2	6, 11
3	1, 2
Single-model clusters	14

3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2493 atoms, of which 1237 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called ACID PHOSPHATASE.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	157	2493	780	1237	227	240	9	0

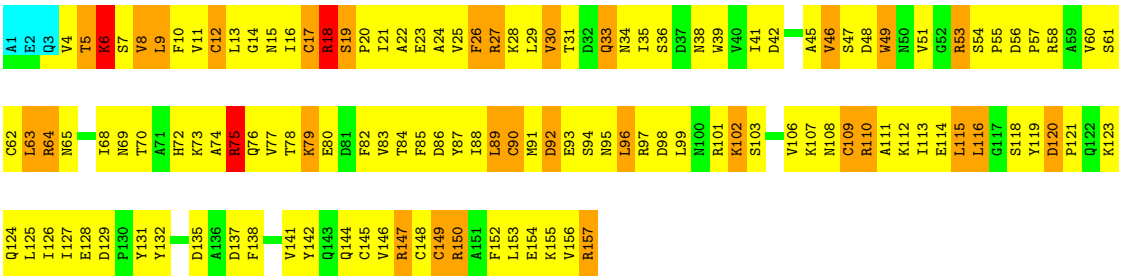
4 Residue-property plots (i)

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: ACID PHOSPHATASE

Chain A: 16% 61% 19%



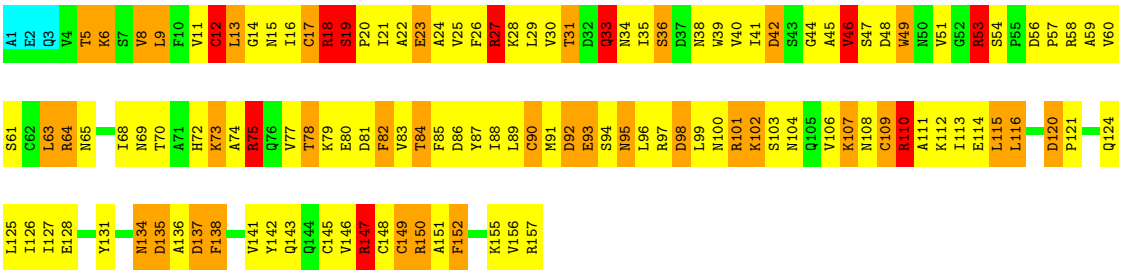
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: ACID PHOSPHATASE

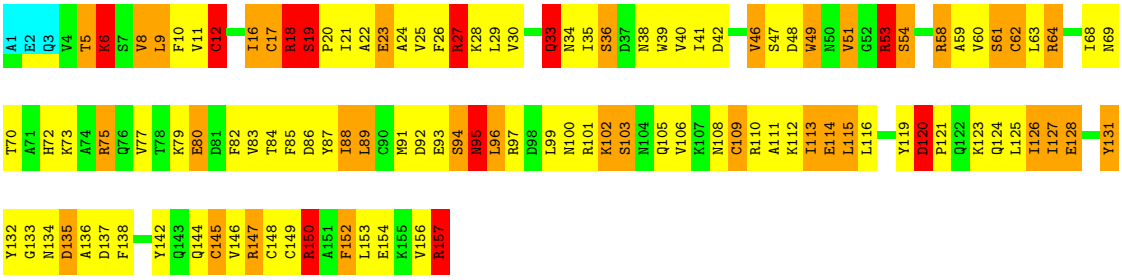
Chain A: 18% 50% 23% 6%



4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: ACID PHOSPHATASE

Chain A: 25% 44% 22% 7% •



4.2.3 Score per residue for model 3

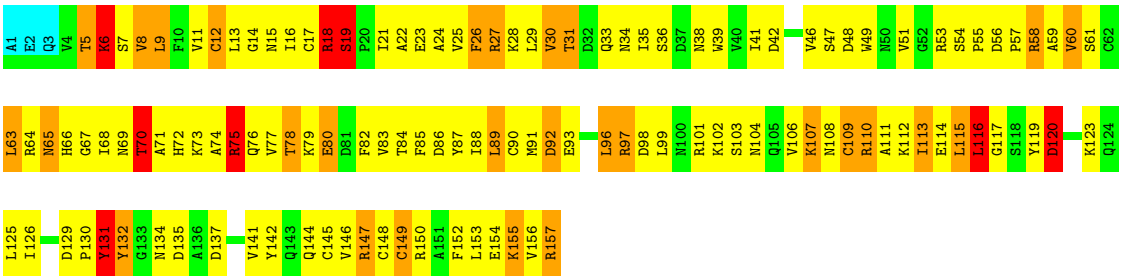
- Molecule 1: ACID PHOSPHATASE

Chain A: 24% 46% 22% 6% •

4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: ACID PHOSPHATASE

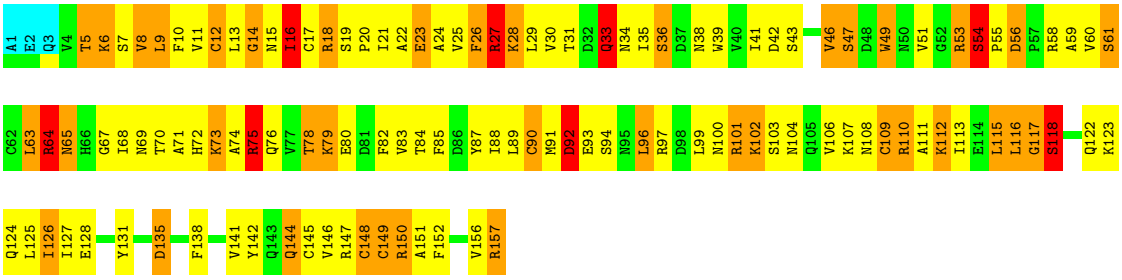
Chain A: 19% 56% 18% 5% •



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: ACID PHOSPHATASE

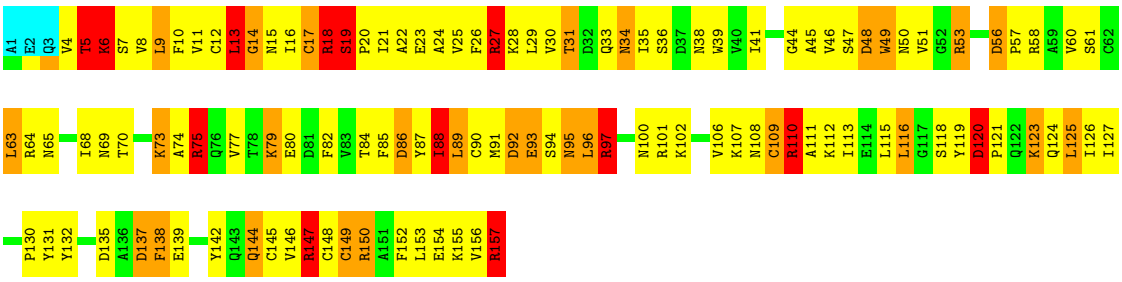
Chain A: 22% 46% 25% 5% •



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: ACID PHOSPHATASE

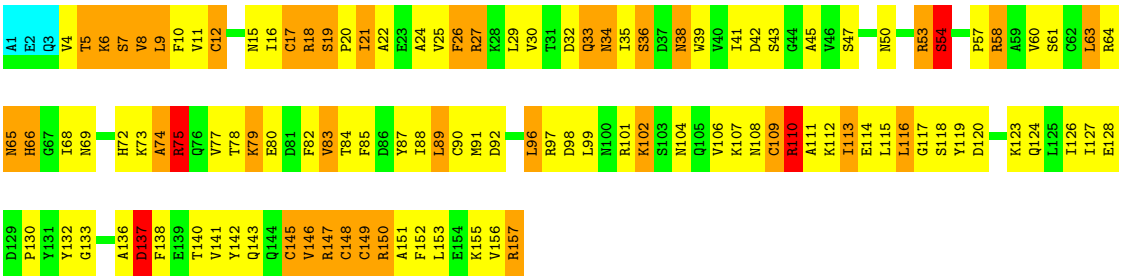
Chain A: 22% 50% 17% 8% •



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: ACID PHOSPHATASE

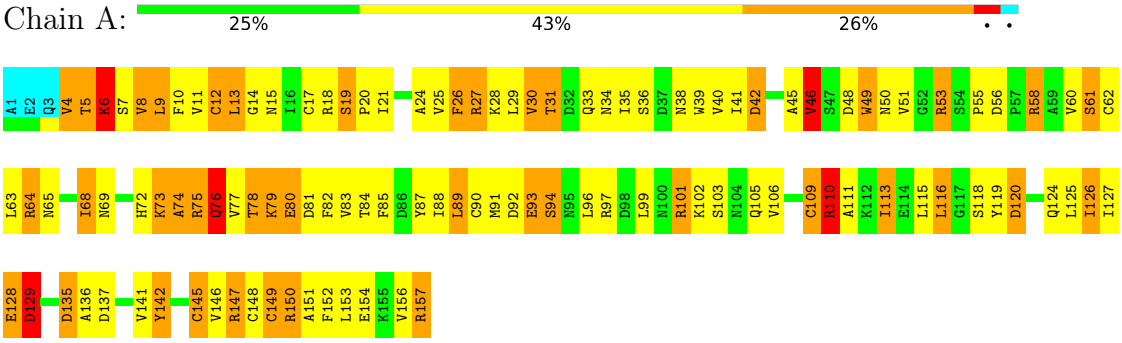
Chain A: 25% 47% 24% • •



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: ACID PHOSPHATASE

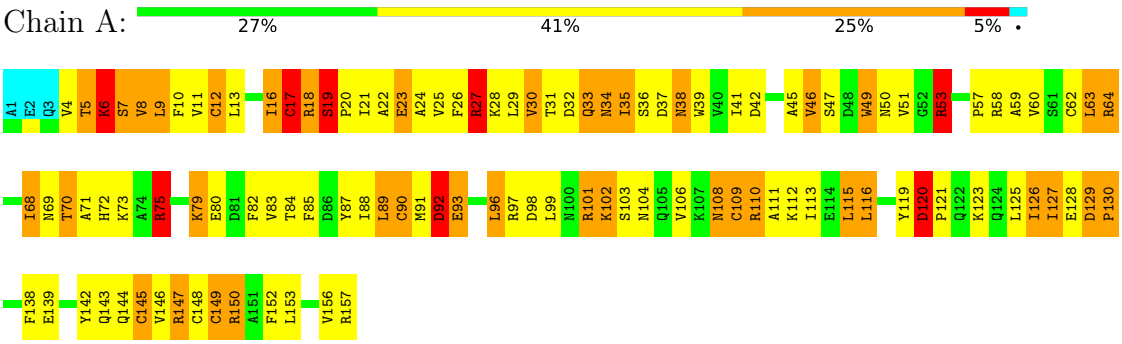
Chain A:



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: ACID PHOSPHATASE

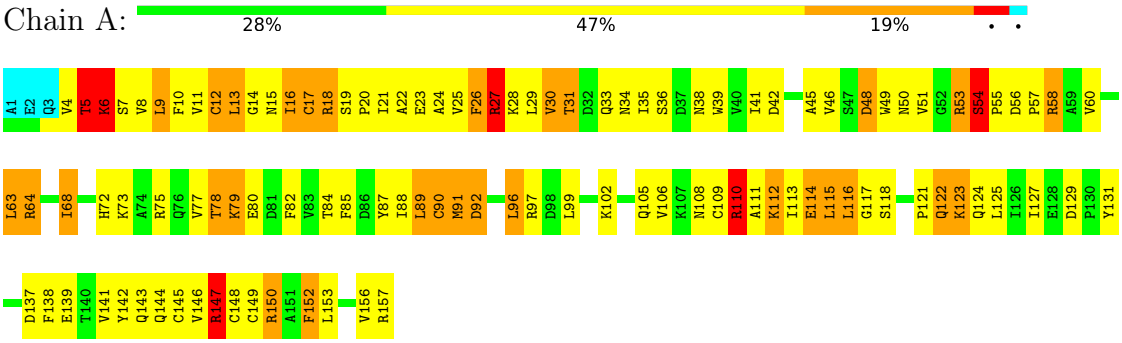
Chain A:



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: ACID PHOSPHATASE

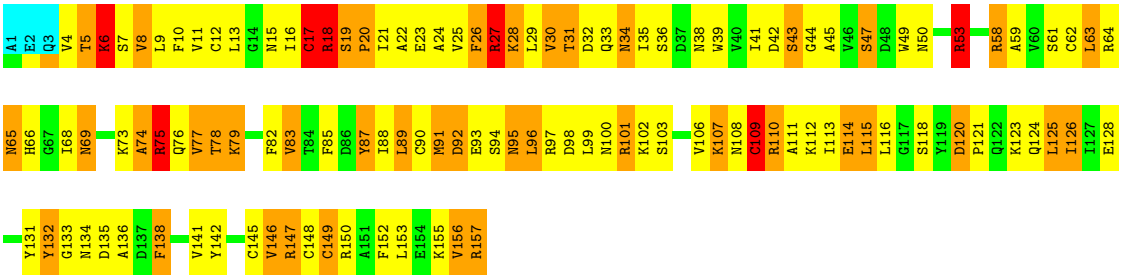
Chain A:



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: ACID PHOSPHATASE

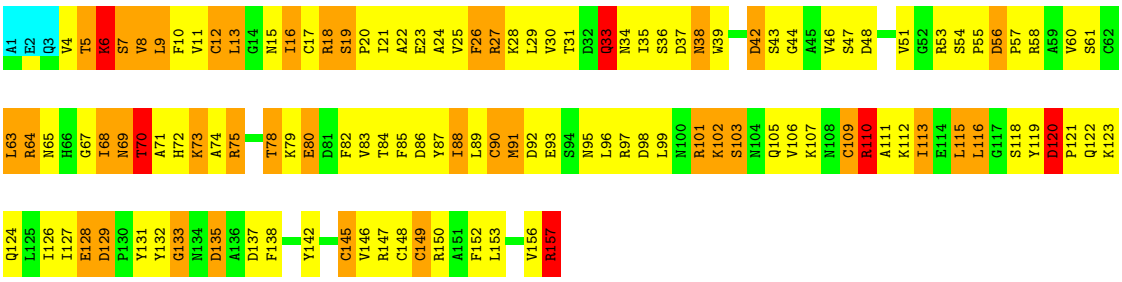
Chain A: 22% 45% 26%



4.2.12 Score per residue for model 12 (medoid)

- Molecule 1: ACID PHOSPHATASE

Chain A: 20% 50% 24%



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: ACID PHOSPHATASE

Chain A: 15% 54% 27%

4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: ACID PHOSPHATASE

Chain A: 20% 48% 25% 5%

A1 E2 Q3 V4 T5 K6 S7 V8 L9 F10 V11 C12 L13 G14 N15 I16 C17 R18 S19 P20 I21 A22 E23 A24 V25 F26 R27 K28 L29 V30 T31 D32 Q33 N34 I35 S36 D37 N38 W39 V40 I41 D42 S43 G44 A45 V46 S47 D48 W49 N50 V51 G52 R53 S54 P55 D56 P57 R58 A59 V60

S61 C62 L63 R64 N65 H66 G67 I68 N69 T70 K73 A74 R75 Q76 V77 T78 K79 E80 D81 F82 V83 T84 F85 D86 Y87 I88 L89 C90 M91 D92 E93 S94 N95 L96 R97 D98 L99 N100 R101 K102 V106 C109 R110 A111 K112 I113 E114 L115 L116 G117 S118 Y119 D120 P121 Q122 K123 Q124

L125 I126 I127 E128 D129 Y132 G133 D137 F138 E139 T140 V141 Y142 Q143 Q144 C145 V146 R147 C148 C149 R150 A151 F152 L153 E154 K155 V156 R157

4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: ACID PHOSPHATASE

Chain A: 27% 45% 23%

A1 E2 Q3 V4 T5 K6 S7 V8 L9 F10 V11 C12 L13 G14 N15 I16 C17 R18 S19 P20 I21 A22 E23 A24 V25 F26 R27 K28 L29 V30 Q33 N34 I35 S36 D37 N38 W39 V40 I41 D42 A45 V46 S47 D48 W49 N50 V51 G52 R53 S54 P55 D56 P57 R58 S61 C62 L63

R64 N65 H66 G67 I68 N69 T70 A71 H72 K73 A74 R75 Q76 V77 T78 K79 F82 V83 T84 F85 D86 Y87 I88 L89 C90 M91 D92 E93 S94 N95 L96 R97 D98 L99 N100 R101 K102 V106 K107 N108 C109 R110 A111 K112 I113 E114 L115 L116 Y119 D120 P121 L125 I126 I127 E128 D129

P130 Y131 F138 E139 T140 V141 Y142 Q143 Q144 C145 V146 R147 C148 C149 R150 A151 F152 L153 E154 K155 V156 R157

5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

Of the ? calculated structures, 15 were deposited, based on the following criterion: *?*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	

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	11.3±0.6
All	All	0	170

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	27	ARG	Sidechain	15
1	A	58	ARG	Sidechain	15
1	A	75	ARG	Sidechain	15
1	A	18	ARG	Sidechain	14
1	A	53	ARG	Sidechain	14
1	A	64	ARG	Sidechain	14
1	A	97	ARG	Sidechain	14
1	A	110	ARG	Sidechain	14
1	A	147	ARG	Sidechain	14
1	A	150	ARG	Sidechain	14
1	A	157	ARG	Sidechain	14
1	A	101	ARG	Sidechain	13

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	1233	1216	1216	174±14
All	All	18495	18240	18240	2611

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 71.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:ALA:HB1	1:A:148:CYS:SG	1.14	1.81	14	4
1:A:22:ALA:HB2	1:A:145:CYS:SG	1.10	1.87	12	6
1:A:152:PHE:CZ	1:A:156:VAL:HG21	1.03	1.88	13	13
1:A:116:LEU:HD21	1:A:148:CYS:SG	1.01	1.96	9	3
1:A:96:LEU:HD21	1:A:113:ILE:CG2	0.96	1.90	14	8
1:A:59:ALA:O	1:A:63:LEU:HD12	0.93	1.62	5	1
1:A:11:VAL:HG11	1:A:99:LEU:HD11	0.93	1.38	8	7
1:A:82:PHE:O	1:A:111:ALA:HB2	0.92	1.64	11	13
1:A:106:VAL:HG11	1:A:109:CYS:SG	0.91	2.05	12	2
1:A:21:ILE:O	1:A:25:VAL:HG23	0.91	1.64	7	14
1:A:115:LEU:HD12	1:A:126:ILE:HD11	0.91	1.43	15	1
1:A:25:VAL:HG12	1:A:149:CYS:SG	0.91	2.06	1	5
1:A:9:LEU:HD13	1:A:85:PHE:CD1	0.90	2.01	11	3
1:A:92:ASP:OD2	1:A:126:ILE:HD12	0.90	1.67	11	1
1:A:152:PHE:O	1:A:156:VAL:HG22	0.89	1.67	14	13
1:A:21:ILE:HG21	1:A:142:TYR:HA	0.89	1.44	8	9
1:A:8:VAL:HG12	1:A:39:TRP:CZ3	0.89	2.02	2	15
1:A:5:THR:HG22	1:A:38:ASN:HA	0.88	1.43	13	15
1:A:102:LYS:O	1:A:106:VAL:HG23	0.87	1.70	7	13
1:A:25:VAL:HG11	1:A:146:VAL:HA	0.87	1.46	8	15
1:A:8:VAL:HG11	1:A:26:PHE:CE2	0.87	2.05	6	11
1:A:96:LEU:HD13	1:A:100:ASN:OD1	0.86	1.71	1	1
1:A:31:THR:HG23	1:A:36:SER:CB	0.86	2.01	6	1
1:A:63:LEU:CD2	1:A:68:ILE:HG21	0.86	2.00	5	1
1:A:25:VAL:HG12	1:A:29:LEU:CD1	0.86	2.01	8	7
1:A:138:PHE:O	1:A:141:VAL:HG12	0.86	1.70	10	3
1:A:116:LEU:HD22	1:A:148:CYS:SG	0.86	2.10	3	4
1:A:88:ILE:CG1	1:A:111:ALA:HB1	0.85	2.02	11	15
1:A:8:VAL:O	1:A:41:ILE:HG23	0.85	1.71	14	1
1:A:96:LEU:HD21	1:A:113:ILE:HG21	0.85	1.46	6	4
1:A:106:VAL:CB	1:A:109:CYS:SG	0.84	2.66	12	2
1:A:126:ILE:HG21	1:A:128:GLU:OE2	0.84	1.73	7	1
1:A:26:PHE:CE1	1:A:30:VAL:HG12	0.84	2.07	13	4
1:A:22:ALA:CA	1:A:148:CYS:SG	0.83	2.66	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:116:LEU:O	1:A:126:ILE:HD11	0.83	1.74	3	1
1:A:89:LEU:HD11	1:A:152:PHE:CE2	0.82	2.09	14	5
1:A:25:VAL:CG1	1:A:149:CYS:SG	0.82	2.67	1	4
1:A:91:MET:CE	1:A:148:CYS:SG	0.82	2.67	10	3
1:A:25:VAL:HG12	1:A:29:LEU:HD11	0.82	1.52	9	5
1:A:106:VAL:CG1	1:A:109:CYS:SG	0.81	2.67	12	2
1:A:25:VAL:HA	1:A:68:ILE:HD11	0.81	1.52	13	4
1:A:96:LEU:HD22	1:A:100:ASN:HB2	0.81	1.50	2	5
1:A:30:VAL:HG23	1:A:35:ILE:CG1	0.81	2.05	4	8
1:A:24:ALA:HB1	1:A:68:ILE:HG12	0.81	1.52	15	4
1:A:10:PHE:CE1	1:A:89:LEU:HD13	0.81	2.11	7	3
1:A:29:LEU:HD21	1:A:150:ARG:HB2	0.81	1.50	6	2
1:A:22:ALA:N	1:A:145:CYS:SG	0.81	2.54	11	8
1:A:88:ILE:HG13	1:A:111:ALA:HB1	0.80	1.54	12	15
1:A:96:LEU:HD11	1:A:114:GLU:O	0.80	1.76	4	1
1:A:116:LEU:CD2	1:A:148:CYS:SG	0.80	2.70	9	5
1:A:19:SER:O	1:A:21:ILE:HD12	0.80	1.74	11	1
1:A:30:VAL:HG22	1:A:36:SER:HA	0.80	1.53	5	6
1:A:116:LEU:HD13	1:A:148:CYS:SG	0.79	2.17	11	2
1:A:16:ILE:HD12	1:A:17:CYS:N	0.79	1.91	15	5
1:A:116:LEU:HD11	1:A:148:CYS:O	0.79	1.78	13	4
1:A:22:ALA:CB	1:A:148:CYS:SG	0.79	2.71	15	4
1:A:96:LEU:HD21	1:A:113:ILE:HG22	0.78	1.53	15	5
1:A:116:LEU:HD11	1:A:148:CYS:HA	0.78	1.55	9	8
1:A:57:PRO:O	1:A:60:VAL:HG12	0.78	1.77	9	6
1:A:92:ASP:OD1	1:A:116:LEU:HD23	0.78	1.77	4	1
1:A:17:CYS:SG	1:A:138:PHE:CZ	0.78	2.76	1	1
1:A:17:CYS:SG	1:A:138:PHE:CE1	0.78	2.77	1	1
1:A:31:THR:HG23	1:A:36:SER:OG	0.77	1.79	6	1
1:A:51:VAL:HG13	1:A:75:ARG:HA	0.77	1.54	8	4
1:A:63:LEU:HD22	1:A:68:ILE:HG21	0.77	1.54	5	1
1:A:15:ASN:O	1:A:16:ILE:HG23	0.77	1.78	5	4
1:A:29:LEU:HD11	1:A:150:ARG:HG3	0.77	1.53	15	2
1:A:18:ARG:O	1:A:145:CYS:SG	0.77	2.43	8	1
1:A:29:LEU:HD21	1:A:150:ARG:HA	0.77	1.57	15	1
1:A:10:PHE:CZ	1:A:148:CYS:SG	0.76	2.77	9	1
1:A:30:VAL:HA	1:A:35:ILE:HD11	0.76	1.56	9	1
1:A:141:VAL:O	1:A:145:CYS:SG	0.76	2.44	5	2
1:A:111:ALA:O	1:A:113:ILE:HD13	0.76	1.80	14	12
1:A:11:VAL:O	1:A:12:CYS:SG	0.76	2.44	6	1
1:A:79:LYS:HG2	1:A:106:VAL:HG13	0.76	1.56	9	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:ALA:HB1	1:A:68:ILE:CG2	0.76	2.11	14	8
1:A:144:GLN:O	1:A:148:CYS:SG	0.76	2.43	4	2
1:A:57:PRO:HA	1:A:60:VAL:HG23	0.75	1.59	4	1
1:A:79:LYS:HB2	1:A:106:VAL:HG22	0.75	1.55	6	1
1:A:152:PHE:CE1	1:A:156:VAL:HG21	0.75	2.16	14	6
1:A:58:ARG:O	1:A:62:CYS:SG	0.75	2.45	8	1
1:A:26:PHE:CE1	1:A:41:ILE:HD11	0.74	2.17	9	3
1:A:63:LEU:N	1:A:63:LEU:HD23	0.74	1.98	15	8
1:A:96:LEU:HD23	1:A:96:LEU:O	0.74	1.82	8	2
1:A:79:LYS:CB	1:A:106:VAL:HG22	0.74	2.12	6	1
1:A:19:SER:OG	1:A:141:VAL:HG21	0.74	1.82	10	1
1:A:29:LEU:HD22	1:A:149:CYS:SG	0.74	2.22	14	2
1:A:30:VAL:HG23	1:A:35:ILE:HG12	0.74	1.59	2	13
1:A:90:CYS:SG	1:A:91:MET:N	0.74	2.60	12	3
1:A:96:LEU:HD23	1:A:99:LEU:HB2	0.73	1.61	4	4
1:A:29:LEU:HD21	1:A:150:ARG:CA	0.73	2.13	15	4
1:A:106:VAL:HB	1:A:109:CYS:SG	0.73	2.23	12	2
1:A:29:LEU:HD21	1:A:150:ARG:HG3	0.73	1.58	7	1
1:A:24:ALA:HB1	1:A:68:ILE:HG21	0.73	1.59	5	3
1:A:116:LEU:HD21	1:A:148:CYS:HA	0.73	1.60	15	3
1:A:82:PHE:HA	1:A:111:ALA:HB2	0.73	1.60	6	5
1:A:92:ASP:CG	1:A:126:ILE:HG21	0.73	2.03	3	1
1:A:45:ALA:HB1	1:A:50:ASN:ND2	0.73	1.99	6	1
1:A:82:PHE:CA	1:A:111:ALA:HB2	0.73	2.13	6	1
1:A:88:ILE:CD1	1:A:111:ALA:HB1	0.72	2.14	12	14
1:A:21:ILE:HD13	1:A:21:ILE:N	0.72	1.97	7	3
1:A:9:LEU:HD13	1:A:85:PHE:CE2	0.72	2.19	1	2
1:A:11:VAL:HG13	1:A:44:GLY:O	0.72	1.85	11	2
1:A:16:ILE:HG22	1:A:54:SER:O	0.72	1.84	5	1
1:A:127:ILE:HG22	1:A:127:ILE:O	0.72	1.85	7	1
1:A:89:LEU:HD21	1:A:152:PHE:CE2	0.72	2.20	3	1
1:A:12:CYS:SG	1:A:15:ASN:HA	0.72	2.25	15	1
1:A:126:ILE:O	1:A:126:ILE:HG23	0.71	1.82	2	1
1:A:26:PHE:O	1:A:30:VAL:HG13	0.71	1.85	13	2
1:A:29:LEU:HD21	1:A:150:ARG:CB	0.71	2.15	11	4
1:A:11:VAL:C	1:A:12:CYS:SG	0.71	2.69	6	1
1:A:22:ALA:CB	1:A:145:CYS:SG	0.70	2.74	12	2
1:A:116:LEU:CD1	1:A:148:CYS:SG	0.70	2.79	11	2
1:A:91:MET:HE1	1:A:148:CYS:SG	0.70	2.26	10	2
1:A:92:ASP:CG	1:A:126:ILE:HG23	0.70	2.07	11	1
1:A:29:LEU:HD21	1:A:150:ARG:CG	0.70	2.17	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:ALA:HA	1:A:145:CYS:SG	0.70	2.25	3	1
1:A:25:VAL:HG21	1:A:145:CYS:SG	0.70	2.26	3	3
1:A:24:ALA:HB1	1:A:68:ILE:HG22	0.70	1.64	14	1
1:A:9:LEU:HD13	1:A:85:PHE:CD2	0.70	2.22	1	4
1:A:70:THR:O	1:A:70:THR:HG23	0.69	1.86	3	2
1:A:45:ALA:HB2	1:A:50:ASN:OD1	0.69	1.87	10	1
1:A:21:ILE:HG21	1:A:142:TYR:CA	0.69	2.15	13	9
1:A:12:CYS:SG	1:A:19:SER:HB2	0.69	2.27	2	3
1:A:17:CYS:SG	1:A:17:CYS:O	0.69	2.50	2	3
1:A:21:ILE:HG22	1:A:142:TYR:CD1	0.69	2.23	7	1
1:A:45:ALA:O	1:A:46:VAL:HG12	0.69	1.88	8	2
1:A:82:PHE:CD2	1:A:106:VAL:HG21	0.69	2.22	5	4
1:A:95:ASN:HB2	1:A:115:LEU:HD22	0.69	1.64	6	1
1:A:29:LEU:HD22	1:A:150:ARG:HG3	0.68	1.64	1	4
1:A:116:LEU:HG	1:A:148:CYS:SG	0.68	2.28	2	1
1:A:88:ILE:HD12	1:A:111:ALA:CB	0.68	2.18	5	15
1:A:26:PHE:N	1:A:149:CYS:SG	0.68	2.66	1	5
1:A:59:ALA:O	1:A:63:LEU:HD22	0.68	1.88	2	2
1:A:26:PHE:CD1	1:A:30:VAL:HG12	0.68	2.23	6	8
1:A:22:ALA:HA	1:A:148:CYS:SG	0.68	2.27	15	1
1:A:8:VAL:HG12	1:A:39:TRP:CE3	0.68	2.24	11	14
1:A:82:PHE:HB3	1:A:109:CYS:SG	0.68	2.27	12	2
1:A:8:VAL:HG11	1:A:26:PHE:HE2	0.68	1.49	10	3
1:A:103:SER:HB2	1:A:109:CYS:SG	0.68	2.28	4	5
1:A:62:CYS:SG	1:A:139:GLU:OE2	0.68	2.51	3	1
1:A:21:ILE:HG22	1:A:145:CYS:SG	0.67	2.29	14	3
1:A:16:ILE:HD12	1:A:17:CYS:H	0.67	1.47	7	2
1:A:142:TYR:O	1:A:146:VAL:HG23	0.67	1.89	10	1
1:A:51:VAL:HG13	1:A:75:ARG:HD3	0.67	1.65	6	1
1:A:12:CYS:SG	1:A:91:MET:HG2	0.67	2.30	6	1
1:A:152:PHE:CE2	1:A:156:VAL:HG21	0.67	2.24	12	3
1:A:25:VAL:CG1	1:A:29:LEU:HD11	0.66	2.20	8	3
1:A:16:ILE:C	1:A:16:ILE:HD12	0.66	2.11	4	1
1:A:145:CYS:HA	1:A:148:CYS:SG	0.66	2.29	13	4
1:A:6:LYS:CB	1:A:39:TRP:CH2	0.66	2.78	13	3
1:A:12:CYS:SG	1:A:14:GLY:O	0.66	2.54	4	2
1:A:12:CYS:SG	1:A:15:ASN:CA	0.66	2.83	15	1
1:A:91:MET:N	1:A:91:MET:SD	0.66	2.68	12	2
1:A:21:ILE:HB	1:A:145:CYS:SG	0.65	2.30	13	6
1:A:6:LYS:CB	1:A:39:TRP:CZ3	0.65	2.78	15	3
1:A:19:SER:N	1:A:20:PRO:CD	0.65	2.59	7	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:VAL:HG12	1:A:29:LEU:HD12	0.65	1.68	4	5
1:A:35:ILE:CD1	1:A:153:LEU:HD21	0.65	2.22	6	6
1:A:125:LEU:HD23	1:A:125:LEU:O	0.65	1.91	8	1
1:A:99:LEU:HB3	1:A:113:ILE:HG21	0.65	1.69	4	3
1:A:109:CYS:SG	1:A:110:ARG:N	0.65	2.69	11	6
1:A:6:LYS:CG	1:A:87:TYR:CE1	0.65	2.80	14	1
1:A:79:LYS:CG	1:A:106:VAL:HG13	0.65	2.22	9	5
1:A:57:PRO:CA	1:A:60:VAL:HG23	0.65	2.22	4	1
1:A:115:LEU:HD12	1:A:126:ILE:CD1	0.65	2.18	15	1
1:A:30:VAL:CA	1:A:35:ILE:HD11	0.64	2.23	9	1
1:A:35:ILE:HD12	1:A:153:LEU:HD21	0.64	1.68	11	1
1:A:25:VAL:HG22	1:A:68:ILE:HD11	0.64	1.70	1	1
1:A:46:VAL:HG13	1:A:99:LEU:HG	0.64	1.70	12	1
1:A:6:LYS:CG	1:A:87:TYR:CZ	0.64	2.81	14	1
1:A:26:PHE:CE1	1:A:30:VAL:CG1	0.64	2.81	6	5
1:A:35:ILE:HD13	1:A:153:LEU:HD21	0.64	1.69	14	3
1:A:30:VAL:HG23	1:A:36:SER:N	0.63	2.08	9	9
1:A:12:CYS:SG	1:A:15:ASN:N	0.63	2.71	15	4
1:A:21:ILE:CG2	1:A:142:TYR:CD2	0.63	2.82	3	4
1:A:29:LEU:CD1	1:A:149:CYS:SG	0.63	2.87	3	6
1:A:63:LEU:HD22	1:A:68:ILE:CG2	0.63	2.24	5	1
1:A:9:LEU:CD1	1:A:85:PHE:CD1	0.63	2.81	11	3
1:A:30:VAL:HG23	1:A:35:ILE:C	0.63	2.14	11	4
1:A:8:VAL:HG21	1:A:26:PHE:HE2	0.63	1.54	15	1
1:A:49:TRP:N	1:A:49:TRP:CD1	0.63	2.66	13	6
1:A:35:ILE:H	1:A:35:ILE:HD13	0.63	1.53	9	1
1:A:35:ILE:HD13	1:A:35:ILE:N	0.63	2.08	9	1
1:A:18:ARG:HA	1:A:141:VAL:HG11	0.63	1.69	3	2
1:A:9:LEU:HD22	1:A:88:ILE:HG12	0.63	1.71	3	9
1:A:127:ILE:HG22	1:A:128:GLU:N	0.63	2.09	14	1
1:A:22:ALA:O	1:A:149:CYS:SG	0.62	2.52	9	5
1:A:90:CYS:SG	1:A:96:LEU:HG	0.62	2.33	15	4
1:A:9:LEU:CD1	1:A:85:PHE:CE1	0.62	2.82	11	3
1:A:8:VAL:HG11	1:A:26:PHE:CZ	0.62	2.29	14	4
1:A:26:PHE:CE1	1:A:41:ILE:CD1	0.62	2.81	9	4
1:A:95:ASN:CB	1:A:115:LEU:HD22	0.62	2.23	6	1
1:A:96:LEU:HD22	1:A:100:ASN:CB	0.62	2.23	1	2
1:A:106:VAL:HG21	1:A:109:CYS:SG	0.62	2.35	1	2
1:A:96:LEU:HD11	1:A:113:ILE:HB	0.62	1.69	2	1
1:A:73:LYS:O	1:A:74:ALA:HB3	0.62	1.95	14	2
1:A:103:SER:OG	1:A:109:CYS:SG	0.61	2.45	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:LYS:HB3	1:A:39:TRP:CZ3	0.61	2.30	15	15
1:A:46:VAL:O	1:A:46:VAL:HG12	0.61	1.95	5	4
1:A:82:PHE:CG	1:A:106:VAL:HG21	0.61	2.30	15	7
1:A:40:VAL:HG12	1:A:85:PHE:CE1	0.61	2.30	8	2
1:A:59:ALA:O	1:A:63:LEU:HD23	0.61	1.94	9	1
1:A:147:ARG:HB3	1:A:151:ALA:HB2	0.61	1.72	15	3
1:A:135:ASP:O	1:A:136:ALA:HB3	0.60	1.96	11	4
1:A:7:SER:O	1:A:87:TYR:CD2	0.60	2.54	11	11
1:A:30:VAL:CG2	1:A:36:SER:CA	0.60	2.79	9	9
1:A:113:ILE:N	1:A:113:ILE:HD13	0.60	2.11	7	3
1:A:94:SER:O	1:A:96:LEU:N	0.60	2.34	14	5
1:A:11:VAL:HB	1:A:90:CYS:SG	0.60	2.36	5	2
1:A:127:ILE:O	1:A:127:ILE:HG23	0.60	1.96	5	5
1:A:45:ALA:HB1	1:A:50:ASN:HD21	0.60	1.55	6	1
1:A:63:LEU:HD23	1:A:64:ARG:N	0.60	2.11	1	2
1:A:11:VAL:CG1	1:A:46:VAL:HG23	0.60	2.26	5	5
1:A:9:LEU:CD1	1:A:85:PHE:CE2	0.60	2.83	1	2
1:A:22:ALA:HB1	1:A:148:CYS:HB3	0.60	1.74	5	2
1:A:91:MET:HA	1:A:91:MET:HE2	0.60	1.73	15	2
1:A:93:GLU:HB2	1:A:115:LEU:HD11	0.60	1.73	8	1
1:A:89:LEU:HD23	1:A:114:GLU:HB3	0.60	1.73	10	1
1:A:30:VAL:CG2	1:A:36:SER:HA	0.60	2.27	13	9
1:A:9:LEU:HD22	1:A:88:ILE:CD1	0.60	2.27	6	8
1:A:120:ASP:CB	1:A:121:PRO:CD	0.60	2.80	15	5
1:A:17:CYS:SG	1:A:131:TYR:OH	0.60	2.60	5	1
1:A:138:PHE:CD1	1:A:141:VAL:HG11	0.60	2.31	7	1
1:A:88:ILE:CD1	1:A:111:ALA:CB	0.60	2.79	12	14
1:A:115:LEU:HD23	1:A:115:LEU:N	0.59	2.12	1	2
1:A:11:VAL:HG13	1:A:44:GLY:C	0.59	2.18	11	2
1:A:6:LYS:HB3	1:A:39:TRP:CH2	0.59	2.33	6	14
1:A:6:LYS:CB	1:A:39:TRP:CZ2	0.59	2.86	6	8
1:A:8:VAL:CG1	1:A:39:TRP:CZ3	0.59	2.84	2	8
1:A:84:THR:HG22	1:A:85:PHE:N	0.59	2.12	10	4
1:A:120:ASP:N	1:A:121:PRO:CD	0.59	2.66	3	5
1:A:30:VAL:CG2	1:A:36:SER:N	0.59	2.66	3	8
1:A:77:VAL:HG12	1:A:82:PHE:CE1	0.59	2.32	7	1
1:A:90:CYS:SG	1:A:99:LEU:HD12	0.59	2.37	9	4
1:A:26:PHE:CD1	1:A:41:ILE:CD1	0.59	2.86	9	4
1:A:11:VAL:CG1	1:A:46:VAL:CG2	0.59	2.81	2	5
1:A:30:VAL:O	1:A:36:SER:N	0.58	2.35	15	6
1:A:10:PHE:CZ	1:A:89:LEU:HD13	0.58	2.32	7	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:ALA:O	1:A:148:CYS:SG	0.58	2.61	15	1
1:A:26:PHE:O	1:A:30:VAL:HG12	0.58	1.97	15	7
1:A:89:LEU:HD11	1:A:152:PHE:CD2	0.58	2.32	14	2
1:A:26:PHE:CD2	1:A:149:CYS:CB	0.58	2.85	5	4
1:A:8:VAL:HG21	1:A:26:PHE:CE2	0.58	2.33	15	1
1:A:29:LEU:HD12	1:A:149:CYS:SG	0.58	2.39	9	6
1:A:72:HIS:CD2	1:A:73:LYS:N	0.58	2.72	1	4
1:A:116:LEU:HD23	1:A:116:LEU:O	0.58	1.97	8	1
1:A:30:VAL:HG23	1:A:35:ILE:HG13	0.58	1.71	4	4
1:A:21:ILE:HD12	1:A:21:ILE:N	0.58	2.13	12	2
1:A:31:THR:HG23	1:A:36:SER:HB3	0.58	1.72	6	1
1:A:91:MET:O	1:A:127:ILE:HG23	0.58	1.98	5	2
1:A:82:PHE:CZ	1:A:99:LEU:HD23	0.58	2.34	11	3
1:A:6:LYS:CD	1:A:39:TRP:CZ2	0.58	2.86	12	2
1:A:6:LYS:O	1:A:39:TRP:CE3	0.58	2.56	14	1
1:A:72:HIS:CD2	1:A:73:LYS:O	0.58	2.57	1	5
1:A:18:ARG:CD	1:A:19:SER:N	0.58	2.67	3	1
1:A:21:ILE:C	1:A:145:CYS:SG	0.58	2.82	3	3
1:A:17:CYS:SG	1:A:18:ARG:HG3	0.58	2.39	12	1
1:A:54:SER:CB	1:A:55:PRO:CD	0.57	2.81	5	3
1:A:127:ILE:CG1	1:A:144:GLN:CB	0.57	2.82	9	1
1:A:42:ASP:OD1	1:A:72:HIS:CE1	0.57	2.57	12	1
1:A:19:SER:CB	1:A:20:PRO:CD	0.57	2.81	1	2
1:A:17:CYS:O	1:A:18:ARG:CB	0.57	2.52	8	4
1:A:6:LYS:CD	1:A:39:TRP:CH2	0.57	2.87	15	4
1:A:82:PHE:C	1:A:111:ALA:HB2	0.57	2.18	6	1
1:A:89:LEU:HD21	1:A:152:PHE:CE1	0.57	2.35	8	3
1:A:21:ILE:HG22	1:A:25:VAL:HG23	0.57	1.75	10	1
1:A:24:ALA:CB	1:A:68:ILE:CG2	0.57	2.82	14	3
1:A:30:VAL:CG2	1:A:35:ILE:CG1	0.57	2.81	4	7
1:A:30:VAL:HG21	1:A:39:TRP:HB2	0.57	1.75	1	5
1:A:116:LEU:HD11	1:A:148:CYS:CA	0.57	2.29	4	4
1:A:63:LEU:CD2	1:A:68:ILE:CG2	0.57	2.80	5	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:41:ILE:CG1	0.57	2.83	8	6
1:A:110:ARG:CZ	1:A:110:ARG:CB	0.57	2.83	6	1
1:A:81:ASP:O	1:A:85:PHE:CD2	0.57	2.57	14	2
1:A:142:TYR:CD1	1:A:142:TYR:C	0.57	2.79	3	13
1:A:29:LEU:HD22	1:A:150:ARG:CG	0.56	2.30	9	2
1:A:63:LEU:HD23	1:A:64:ARG:H	0.56	1.59	1	2
1:A:83:VAL:HG13	1:A:84:THR:N	0.56	2.15	1	2
1:A:131:TYR:CE2	1:A:132:TYR:CE2	0.56	2.93	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:118:SER:O	1:A:119:TYR:CD1	0.56	2.58	12	1
1:A:72:HIS:CD2	1:A:72:HIS:C	0.56	2.79	3	7
1:A:153:LEU:O	1:A:157:ARG:N	0.56	2.38	2	2
1:A:21:ILE:CG2	1:A:142:TYR:CD1	0.56	2.88	7	1
1:A:30:VAL:HG11	1:A:41:ILE:HD11	0.56	1.75	11	3
1:A:35:ILE:HD11	1:A:153:LEU:HD21	0.56	1.77	13	2
1:A:137:ASP:O	1:A:138:PHE:CB	0.56	2.53	10	1
1:A:60:VAL:HG13	1:A:61:SER:N	0.56	2.16	5	7
1:A:96:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	0.56	1.78	9	3
1:A:25:VAL:HB	1:A:149:CYS:SG	0.56	2.41	5	4
1:A:44:GLY:CA	1:A:77:VAL:CG2	0.56	2.83	1	1
1:A:11:VAL:HG11	1:A:46:VAL:CG2	0.56	2.31	15	5
1:A:96:LEU:HD11	1:A:114:GLU:C	0.56	2.19	4	1
1:A:131:TYR:CD1	1:A:131:TYR:O	0.56	2.58	11	2
1:A:6:LYS:HG2	1:A:87:TYR:CE1	0.56	2.36	14	1
1:A:22:ALA:CA	1:A:145:CYS:SG	0.56	2.92	3	1
1:A:96:LEU:CD2	1:A:113:ILE:HG21	0.56	2.28	6	1
1:A:83:VAL:HG23	1:A:110:ARG:HG2	0.56	1.75	13	1
1:A:24:ALA:CB	1:A:63:LEU:CD2	0.56	2.84	5	1
1:A:83:VAL:CG2	1:A:110:ARG:CB	0.56	2.84	11	1
1:A:6:LYS:HG3	1:A:87:TYR:CE1	0.56	2.36	14	1
1:A:8:VAL:HG13	1:A:41:ILE:CG1	0.56	2.31	14	7
1:A:26:PHE:CD2	1:A:149:CYS:HB2	0.56	2.36	5	6
1:A:56:ASP:O	1:A:60:VAL:CG2	0.56	2.54	4	1
1:A:25:VAL:HG11	1:A:146:VAL:HG13	0.56	1.78	7	2
1:A:141:VAL:CG1	1:A:142:TYR:N	0.56	2.69	13	1
1:A:6:LYS:HB3	1:A:39:TRP:CZ2	0.55	2.36	10	8
1:A:16:ILE:HD12	1:A:17:CYS:SG	0.55	2.41	9	2
1:A:11:VAL:HB	1:A:99:LEU:HD11	0.55	1.78	1	1
1:A:82:PHE:CZ	1:A:102:LYS:HG2	0.55	2.36	1	1
1:A:126:ILE:HG22	1:A:128:GLU:HG3	0.55	1.79	5	2
1:A:5:THR:HG22	1:A:38:ASN:CA	0.55	2.25	3	9
1:A:26:PHE:CG	1:A:149:CYS:HB2	0.55	2.37	6	12
1:A:48:ASP:HA	1:A:51:VAL:HG23	0.55	1.78	6	6
1:A:6:LYS:HG2	1:A:87:TYR:CZ	0.55	2.37	14	1
1:A:126:ILE:O	1:A:127:ILE:HG22	0.55	2.00	15	1
1:A:6:LYS:HD2	1:A:39:TRP:CH2	0.55	2.37	5	3
1:A:106:VAL:CG2	1:A:109:CYS:SG	0.55	2.95	12	2
1:A:25:VAL:CG2	1:A:145:CYS:SG	0.55	2.94	3	1
1:A:13:LEU:HD21	1:A:49:TRP:CZ3	0.55	2.36	3	1
1:A:12:CYS:SG	1:A:14:GLY:C	0.55	2.84	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:142:TYR:CD1	1:A:142:TYR:O	0.55	2.60	11	2
1:A:87:TYR:N	1:A:87:TYR:CD1	0.55	2.73	14	2
1:A:33:GLN:O	1:A:34:ASN:CB	0.55	2.55	13	8
1:A:19:SER:N	1:A:20:PRO:HD2	0.55	2.16	7	10
1:A:12:CYS:SG	1:A:19:SER:CB	0.55	2.95	2	2
1:A:35:ILE:CD1	1:A:153:LEU:HD11	0.55	2.32	10	4
1:A:30:VAL:CB	1:A:35:ILE:HD11	0.55	2.31	9	1
1:A:12:CYS:SG	1:A:13:LEU:O	0.55	2.65	3	1
1:A:145:CYS:SG	1:A:146:VAL:N	0.55	2.80	9	2
1:A:12:CYS:SG	1:A:12:CYS:O	0.55	2.65	8	3
1:A:39:TRP:CZ2	1:A:153:LEU:HD12	0.55	2.37	9	3
1:A:11:VAL:HG22	1:A:44:GLY:HA3	0.55	1.76	14	1
1:A:22:ALA:C	1:A:148:CYS:SG	0.55	2.85	15	1
1:A:111:ALA:O	1:A:113:ILE:CD1	0.54	2.56	8	12
1:A:86:ASP:C	1:A:87:TYR:CD1	0.54	2.81	14	3
1:A:126:ILE:O	1:A:126:ILE:CD1	0.54	2.55	2	1
1:A:152:PHE:C	1:A:152:PHE:CD1	0.54	2.80	2	5
1:A:25:VAL:CG1	1:A:146:VAL:HG13	0.54	2.32	3	2
1:A:29:LEU:HD13	1:A:150:ARG:CA	0.54	2.33	2	3
1:A:77:VAL:HG12	1:A:78:THR:N	0.54	2.17	10	4
1:A:22:ALA:HB2	1:A:148:CYS:SG	0.54	2.41	10	1
1:A:6:LYS:HG2	1:A:87:TYR:CE2	0.54	2.37	2	7
1:A:30:VAL:HG21	1:A:36:SER:HA	0.54	1.80	9	7
1:A:63:LEU:N	1:A:63:LEU:CD2	0.54	2.67	13	7
1:A:15:ASN:ND2	1:A:45:ALA:HB2	0.54	2.16	7	1
1:A:16:ILE:HG22	1:A:53:ARG:O	0.54	2.02	12	5
1:A:127:ILE:HD11	1:A:144:GLN:CB	0.54	2.32	9	1
1:A:9:LEU:HB2	1:A:85:PHE:CD2	0.54	2.38	1	4
1:A:24:ALA:HB1	1:A:68:ILE:HG23	0.54	1.80	3	1
1:A:26:PHE:O	1:A:30:VAL:CG1	0.54	2.56	13	7
1:A:82:PHE:CZ	1:A:102:LYS:HB3	0.54	2.38	3	3
1:A:26:PHE:CD1	1:A:41:ILE:HG12	0.54	2.38	14	4
1:A:21:ILE:HG22	1:A:25:VAL:CG2	0.54	2.33	10	2
1:A:146:VAL:O	1:A:149:CYS:SG	0.54	2.65	7	1
1:A:21:ILE:O	1:A:25:VAL:CG2	0.54	2.56	13	10
1:A:6:LYS:CG	1:A:87:TYR:OH	0.54	2.56	3	5
1:A:92:ASP:OD2	1:A:126:ILE:HD13	0.54	2.03	3	1
1:A:21:ILE:HG23	1:A:142:TYR:CD2	0.54	2.38	13	3
1:A:26:PHE:CZ	1:A:153:LEU:HD13	0.54	2.37	9	3
1:A:6:LYS:CD	1:A:156:VAL:O	0.54	2.56	12	2
1:A:49:TRP:C	1:A:49:TRP:CD1	0.54	2.80	15	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:153:LEU:O	1:A:157:ARG:CA	0.54	2.56	13	4
1:A:83:VAL:O	1:A:110:ARG:CD	0.54	2.56	15	6
1:A:29:LEU:CD2	1:A:150:ARG:N	0.54	2.71	15	2
1:A:45:ALA:O	1:A:46:VAL:CG1	0.53	2.55	8	2
1:A:6:LYS:CB	1:A:39:TRP:CE2	0.53	2.91	6	4
1:A:126:ILE:O	1:A:127:ILE:CG2	0.53	2.56	15	1
1:A:119:TYR:O	1:A:120:ASP:CB	0.53	2.56	2	6
1:A:6:LYS:HD2	1:A:39:TRP:CZ2	0.53	2.39	15	6
1:A:33:GLN:HB3	1:A:35:ILE:CG2	0.53	2.34	5	6
1:A:19:SER:OG	1:A:91:MET:SD	0.53	2.66	3	1
1:A:56:ASP:O	1:A:60:VAL:HG22	0.53	2.03	4	1
1:A:116:LEU:CD1	1:A:148:CYS:O	0.53	2.57	8	3
1:A:30:VAL:O	1:A:36:SER:CB	0.53	2.56	2	4
1:A:117:GLY:O	1:A:118:SER:CB	0.53	2.56	10	3
1:A:22:ALA:HB2	1:A:145:CYS:HA	0.53	1.79	7	1
1:A:93:GLU:CB	1:A:115:LEU:HD11	0.53	2.33	8	1
1:A:121:PRO:CB	1:A:147:ARG:NH2	0.53	2.72	10	1
1:A:83:VAL:CG2	1:A:110:ARG:HB3	0.53	2.34	11	1
1:A:6:LYS:HB2	1:A:39:TRP:CH2	0.53	2.38	15	3
1:A:21:ILE:CG2	1:A:145:CYS:SG	0.53	2.97	9	1
1:A:83:VAL:HG23	1:A:108:ASN:O	0.53	2.04	15	2
1:A:90:CYS:SG	1:A:99:LEU:CD1	0.53	2.97	9	1
1:A:9:LEU:HB2	1:A:85:PHE:CG	0.53	2.39	5	10
1:A:30:VAL:CG2	1:A:35:ILE:HG13	0.53	2.33	11	7
1:A:92:ASP:OD1	1:A:128:GLU:CG	0.53	2.57	11	2
1:A:14:GLY:O	1:A:15:ASN:CB	0.53	2.57	5	2
1:A:25:VAL:HG21	1:A:146:VAL:HA	0.53	1.79	7	1
1:A:29:LEU:CD1	1:A:146:VAL:O	0.53	2.57	13	1
1:A:25:VAL:CB	1:A:149:CYS:SG	0.53	2.97	5	3
1:A:21:ILE:HD12	1:A:141:VAL:HG12	0.53	1.81	3	1
1:A:57:PRO:HA	1:A:60:VAL:CG2	0.53	2.33	4	1
1:A:29:LEU:HD22	1:A:150:ARG:HB2	0.53	1.79	3	1
1:A:96:LEU:CD2	1:A:113:ILE:CG2	0.53	2.81	6	2
1:A:35:ILE:CG1	1:A:39:TRP:CD1	0.53	2.92	9	1
1:A:141:VAL:HG13	1:A:142:TYR:N	0.53	2.18	13	1
1:A:9:LEU:CD2	1:A:85:PHE:CD2	0.53	2.92	14	1
1:A:66:HIS:CE1	1:A:142:TYR:OH	0.53	2.62	15	1
1:A:87:TYR:CE2	1:A:156:VAL:HG11	0.52	2.38	1	1
1:A:120:ASP:CB	1:A:121:PRO:HD3	0.52	2.34	15	9
1:A:126:ILE:O	1:A:126:ILE:CG2	0.52	2.54	2	1
1:A:91:MET:SD	1:A:148:CYS:SG	0.52	3.07	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:63:LEU:O	1:A:68:ILE:CG2	0.52	2.57	9	1
1:A:29:LEU:HD11	1:A:146:VAL:HG13	0.52	1.79	13	1
1:A:5:THR:O	1:A:6:LYS:O	0.52	2.27	3	10
1:A:57:PRO:O	1:A:61:SER:CB	0.52	2.57	4	1
1:A:16:ILE:CG2	1:A:53:ARG:O	0.52	2.57	5	3
1:A:18:ARG:O	1:A:19:SER:CB	0.52	2.56	9	7
1:A:96:LEU:O	1:A:96:LEU:CD2	0.52	2.57	10	3
1:A:91:MET:HE2	1:A:148:CYS:SG	0.52	2.44	11	2
1:A:19:SER:OG	1:A:63:LEU:HD11	0.52	2.05	11	1
1:A:107:LYS:O	1:A:107:LYS:CD	0.52	2.57	11	1
1:A:83:VAL:CG1	1:A:84:THR:N	0.52	2.72	1	2
1:A:96:LEU:HD22	1:A:100:ASN:CA	0.52	2.34	1	2
1:A:87:TYR:CE2	1:A:156:VAL:HB	0.52	2.39	14	3
1:A:19:SER:O	1:A:21:ILE:N	0.52	2.42	11	1
1:A:152:PHE:O	1:A:156:VAL:CG2	0.52	2.58	12	2
1:A:82:PHE:CE2	1:A:102:LYS:HB3	0.52	2.39	13	1
1:A:92:ASP:O	1:A:94:SER:N	0.52	2.42	1	2
1:A:30:VAL:HB	1:A:35:ILE:HD11	0.52	1.81	9	1
1:A:6:LYS:HB2	1:A:39:TRP:CZ3	0.52	2.39	15	2
1:A:87:TYR:CD2	1:A:156:VAL:HG11	0.52	2.38	1	1
1:A:107:LYS:O	1:A:107:LYS:CG	0.52	2.57	11	1
1:A:19:SER:HB2	1:A:141:VAL:HG11	0.52	1.81	4	1
1:A:42:ASP:OD1	1:A:72:HIS:NE2	0.52	2.43	5	1
1:A:11:VAL:O	1:A:90:CYS:CB	0.52	2.57	7	1
1:A:127:ILE:O	1:A:129:ASP:N	0.52	2.43	8	1
1:A:60:VAL:CG1	1:A:61:SER:N	0.52	2.73	12	7
1:A:60:VAL:O	1:A:63:LEU:CD2	0.52	2.57	2	2
1:A:80:GLU:O	1:A:84:THR:CB	0.52	2.57	2	7
1:A:103:SER:HA	1:A:109:CYS:SG	0.52	2.45	1	2
1:A:8:VAL:CG1	1:A:41:ILE:HG13	0.52	2.35	8	5
1:A:27:ARG:O	1:A:30:VAL:HG12	0.52	2.04	2	1
1:A:13:LEU:HD11	1:A:49:TRP:CH2	0.52	2.40	5	2
1:A:4:VAL:HG22	1:A:5:THR:H	0.52	1.65	8	1
1:A:42:ASP:HB2	1:A:85:PHE:CZ	0.52	2.40	2	7
1:A:70:THR:O	1:A:70:THR:CG2	0.52	2.58	3	1
1:A:19:SER:N	1:A:20:PRO:HD3	0.52	2.19	15	2
1:A:26:PHE:CE1	1:A:41:ILE:HG12	0.52	2.40	1	2
1:A:29:LEU:HD13	1:A:150:ARG:HB2	0.52	1.82	9	3
1:A:49:TRP:CD1	1:A:49:TRP:N	0.52	2.77	3	4
1:A:74:ALA:O	1:A:75:ARG:CB	0.52	2.58	5	3
1:A:152:PHE:CE1	1:A:156:VAL:CG2	0.52	2.90	13	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:4:VAL:O	1:A:6:LYS:N	0.52	2.43	12	2
1:A:77:VAL:CG1	1:A:82:PHE:CE1	0.52	2.92	7	1
1:A:120:ASP:N	1:A:121:PRO:HD2	0.51	2.21	12	9
1:A:59:ALA:O	1:A:63:LEU:CD2	0.51	2.57	9	1
1:A:23:GLU:OE1	1:A:43:SER:CB	0.51	2.59	13	1
1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:HD11	0.51	1.80	4	1
1:A:45:ALA:O	1:A:46:VAL:CB	0.51	2.57	8	4
1:A:12:CYS:O	1:A:14:GLY:N	0.51	2.43	6	2
1:A:8:VAL:CG2	1:A:152:PHE:CE2	0.51	2.93	9	1
1:A:68:ILE:O	1:A:69:ASN:CB	0.51	2.58	15	2
1:A:23:GLU:CA	1:A:23:GLU:OE1	0.51	2.58	2	1
1:A:82:PHE:O	1:A:111:ALA:CB	0.51	2.57	9	6
1:A:54:SER:CB	1:A:55:PRO:HD2	0.51	2.35	5	1
1:A:14:GLY:O	1:A:18:ARG:CG	0.51	2.59	10	1
1:A:13:LEU:HD11	1:A:49:TRP:HH2	0.51	1.66	13	1
1:A:25:VAL:HG11	1:A:146:VAL:CA	0.51	2.33	7	4
1:A:87:TYR:CE2	1:A:156:VAL:CG1	0.51	2.93	1	1
1:A:19:SER:HB2	1:A:141:VAL:CG1	0.51	2.36	15	1
1:A:11:VAL:CB	1:A:99:LEU:HD11	0.51	2.36	1	4
1:A:30:VAL:O	1:A:36:SER:CA	0.51	2.59	2	3
1:A:10:PHE:CE1	1:A:89:LEU:CD1	0.51	2.92	3	1
1:A:64:ARG:HG3	1:A:142:TYR:CE1	0.51	2.41	5	1
1:A:48:ASP:CG	1:A:51:VAL:HG21	0.51	2.25	10	2
1:A:24:ALA:HB2	1:A:70:THR:HB	0.51	1.83	9	1
1:A:77:VAL:CG1	1:A:78:THR:N	0.51	2.73	10	2
1:A:92:ASP:CB	1:A:126:ILE:HG23	0.51	2.36	11	1
1:A:64:ARG:HD3	1:A:142:TYR:CE2	0.51	2.41	5	1
1:A:110:ARG:CZ	1:A:110:ARG:HB2	0.51	2.36	6	1
1:A:115:LEU:HD12	1:A:116:LEU:O	0.51	2.06	6	1
1:A:62:CYS:SG	1:A:142:TYR:CD2	0.51	3.01	15	1
1:A:19:SER:CB	1:A:20:PRO:HD3	0.51	2.35	1	9
1:A:27:ARG:O	1:A:31:THR:OG1	0.51	2.28	8	8
1:A:15:ASN:ND2	1:A:74:ALA:HB2	0.51	2.21	4	1
1:A:35:ILE:HD11	1:A:153:LEU:CD2	0.51	2.35	13	2
1:A:39:TRP:CH2	1:A:87:TYR:CE2	0.51	2.99	6	1
1:A:22:ALA:HB2	1:A:145:CYS:CA	0.51	2.36	7	1
1:A:69:ASN:ND2	1:A:69:ASN:N	0.51	2.59	11	2
1:A:6:LYS:HD3	1:A:39:TRP:CH2	0.51	2.41	12	1
1:A:132:TYR:CD1	1:A:132:TYR:N	0.51	2.74	14	1
1:A:11:VAL:CG1	1:A:99:LEU:HD11	0.50	2.36	9	5
1:A:29:LEU:HD13	1:A:150:ARG:N	0.50	2.21	9	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:ARG:O	1:A:110:ARG:CG	0.50	2.60	3	2
1:A:6:LYS:HB3	1:A:39:TRP:CE2	0.50	2.41	10	6
1:A:8:VAL:HG12	1:A:39:TRP:HZ3	0.50	1.62	2	2
1:A:30:VAL:O	1:A:35:ILE:HG23	0.50	2.06	5	4
1:A:22:ALA:HB1	1:A:148:CYS:CB	0.50	2.36	14	3
1:A:30:VAL:HG22	1:A:36:SER:CA	0.50	2.34	15	6
1:A:95:ASN:O	1:A:96:LEU:C	0.50	2.49	1	5
1:A:89:LEU:HA	1:A:114:GLU:O	0.50	2.07	13	4
1:A:29:LEU:HD13	1:A:149:CYS:SG	0.50	2.45	3	1
1:A:64:ARG:O	1:A:65:ASN:O	0.50	2.30	5	1
1:A:8:VAL:HG21	1:A:152:PHE:CE2	0.50	2.41	9	1
1:A:10:PHE:CE1	1:A:116:LEU:CD2	0.50	2.95	9	1
1:A:11:VAL:CG1	1:A:44:GLY:O	0.50	2.57	11	1
1:A:15:ASN:O	1:A:20:PRO:CG	0.50	2.60	11	1
1:A:126:ILE:CG2	1:A:126:ILE:O	0.50	2.59	14	1
1:A:63:LEU:O	1:A:66:HIS:CD2	0.50	2.65	4	1
1:A:21:ILE:N	1:A:21:ILE:CD1	0.50	2.67	7	3
1:A:65:ASN:OD1	1:A:66:HIS:CD2	0.50	2.65	7	1
1:A:116:LEU:O	1:A:116:LEU:CG	0.50	2.59	8	1
1:A:66:HIS:CD2	1:A:68:ILE:HG12	0.50	2.42	11	1
1:A:92:ASP:CG	1:A:126:ILE:CG2	0.50	2.80	1	3
1:A:157:ARG:O	1:A:157:ARG:NE	0.50	2.45	14	1
1:A:98:ASP:O	1:A:102:LYS:CG	0.50	2.60	15	1
1:A:92:ASP:HB3	1:A:126:ILE:HG23	0.50	1.83	5	3
1:A:16:ILE:HD12	1:A:56:ASP:OD1	0.50	2.07	5	1
1:A:47:SER:HB3	1:A:49:TRP:CE2	0.50	2.42	5	2
1:A:57:PRO:HA	1:A:60:VAL:CG1	0.50	2.37	12	3
1:A:24:ALA:CB	1:A:63:LEU:HD21	0.50	2.37	5	1
1:A:64:ARG:CB	1:A:68:ILE:HG12	0.50	2.37	5	1
1:A:64:ARG:CG	1:A:142:TYR:CZ	0.50	2.95	5	1
1:A:64:ARG:HB2	1:A:68:ILE:CG1	0.50	2.37	5	1
1:A:82:PHE:CD2	1:A:106:VAL:CG2	0.50	2.94	5	1
1:A:40:VAL:HG12	1:A:85:PHE:HE1	0.50	1.66	8	1
1:A:88:ILE:HG22	1:A:88:ILE:O	0.49	2.07	12	8
1:A:96:LEU:HD12	1:A:115:LEU:CD2	0.49	2.36	3	2
1:A:95:ASN:O	1:A:97:ARG:N	0.49	2.45	14	2
1:A:131:TYR:CG	1:A:131:TYR:O	0.49	2.63	6	1
1:A:19:SER:CB	1:A:141:VAL:CG1	0.49	2.90	15	1
1:A:60:VAL:O	1:A:63:LEU:HD23	0.49	2.07	8	2
1:A:140:THR:HG23	1:A:141:VAL:N	0.49	2.22	7	1
1:A:92:ASP:O	1:A:93:GLU:CB	0.49	2.57	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:ASN:O	1:A:16:ILE:CG2	0.49	2.57	5	3
1:A:77:VAL:HG22	1:A:78:THR:N	0.49	2.21	8	1
1:A:82:PHE:CE2	1:A:99:LEU:HD23	0.49	2.42	11	1
1:A:77:VAL:O	1:A:78:THR:HG23	0.49	2.06	13	1
1:A:63:LEU:O	1:A:68:ILE:CG1	0.49	2.60	3	1
1:A:82:PHE:CZ	1:A:102:LYS:CB	0.49	2.95	3	3
1:A:124:GLN:O	1:A:125:LEU:C	0.49	2.51	6	2
1:A:73:LYS:O	1:A:74:ALA:CB	0.49	2.60	14	1
1:A:87:TYR:CD1	1:A:87:TYR:N	0.49	2.79	1	2
1:A:124:GLN:O	1:A:125:LEU:CB	0.49	2.61	3	1
1:A:24:ALA:CB	1:A:68:ILE:HG21	0.49	2.37	5	1
1:A:9:LEU:HB2	1:A:85:PHE:CD1	0.49	2.42	7	1
1:A:12:CYS:SG	1:A:19:SER:OG	0.49	2.70	8	1
1:A:22:ALA:HB2	1:A:145:CYS:HG	0.49	1.62	12	1
1:A:48:ASP:OD1	1:A:51:VAL:HG21	0.49	2.08	8	2
1:A:25:VAL:O	1:A:29:LEU:CB	0.49	2.61	15	1
1:A:42:ASP:HB2	1:A:85:PHE:CE2	0.49	2.43	3	4
1:A:92:ASP:OD2	1:A:128:GLU:CG	0.49	2.61	9	1
1:A:107:LYS:O	1:A:108:ASN:CB	0.49	2.60	1	1
1:A:110:ARG:O	1:A:110:ARG:CD	0.49	2.61	3	1
1:A:129:ASP:N	1:A:129:ASP:OD1	0.49	2.46	4	1
1:A:30:VAL:CG2	1:A:35:ILE:C	0.49	2.81	11	1
1:A:43:SER:OG	1:A:44:GLY:N	0.49	2.44	11	1
1:A:132:TYR:O	1:A:134:ASN:N	0.49	2.45	11	1
1:A:6:LYS:HB3	1:A:39:TRP:CE3	0.49	2.43	7	10
1:A:136:ALA:O	1:A:137:ASP:CB	0.49	2.59	7	1
1:A:151:ALA:O	1:A:154:GLU:CG	0.49	2.61	8	1
1:A:18:ARG:O	1:A:19:SER:O	0.49	2.31	11	1
1:A:18:ARG:HB2	1:A:141:VAL:CG2	0.49	2.38	13	1
1:A:99:LEU:CB	1:A:113:ILE:HG21	0.49	2.38	13	1
1:A:64:ARG:HG3	1:A:142:TYR:CZ	0.48	2.42	5	1
1:A:50:ASN:OD1	1:A:53:ARG:CD	0.48	2.61	9	1
1:A:98:ASP:OD1	1:A:99:LEU:N	0.48	2.46	13	1
1:A:78:THR:O	1:A:82:PHE:CD2	0.48	2.66	14	1
1:A:130:PRO:O	1:A:132:TYR:N	0.48	2.46	4	1
1:A:17:CYS:N	1:A:56:ASP:OD1	0.48	2.46	5	1
1:A:120:ASP:HB3	1:A:121:PRO:CD	0.48	2.38	13	1
1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:OD1	0.48	2.45	15	2
1:A:83:VAL:HA	1:A:110:ARG:CG	0.48	2.38	7	2
1:A:138:PHE:O	1:A:138:PHE:CD2	0.48	2.66	7	1
1:A:88:ILE:HD12	1:A:111:ALA:HB1	0.48	1.82	13	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:TYR:CZ	1:A:156:VAL:CG1	0.48	2.96	12	1
1:A:79:LYS:HD2	1:A:106:VAL:HG13	0.48	1.85	6	1
1:A:83:VAL:HG22	1:A:110:ARG:HB3	0.48	1.85	11	1
1:A:10:PHE:CZ	1:A:148:CYS:O	0.48	2.67	7	2
1:A:86:ASP:HB3	1:A:87:TYR:CE1	0.48	2.44	15	1
1:A:82:PHE:CE2	1:A:102:LYS:HE2	0.48	2.43	2	1
1:A:13:LEU:HD21	1:A:49:TRP:HZ3	0.48	1.69	3	1
1:A:53:ARG:O	1:A:54:SER:O	0.48	2.32	7	3
1:A:9:LEU:O	1:A:9:LEU:HD23	0.48	2.09	5	1
1:A:60:VAL:O	1:A:64:ARG:CB	0.48	2.61	10	2
1:A:8:VAL:HB	1:A:152:PHE:CE1	0.48	2.44	13	1
1:A:68:ILE:O	1:A:69:ASN:O	0.48	2.32	14	1
1:A:87:TYR:CE2	1:A:156:VAL:CB	0.48	2.96	2	1
1:A:16:ILE:C	1:A:16:ILE:CD1	0.48	2.81	4	1
1:A:47:SER:HB3	1:A:49:TRP:CZ2	0.48	2.43	5	2
1:A:65:ASN:O	1:A:65:ASN:CG	0.48	2.52	5	1
1:A:4:VAL:HG22	1:A:5:THR:N	0.48	2.24	11	1
1:A:82:PHE:CE2	1:A:102:LYS:CB	0.48	2.97	11	1
1:A:148:CYS:SG	1:A:149:CYS:N	0.48	2.86	15	1
1:A:11:VAL:O	1:A:90:CYS:SG	0.47	2.72	5	1
1:A:63:LEU:CB	1:A:68:ILE:HB	0.47	2.39	6	2
1:A:26:PHE:CG	1:A:149:CYS:CB	0.47	2.97	11	4
1:A:70:THR:OG1	1:A:71:ALA:N	0.47	2.46	12	2
1:A:25:VAL:O	1:A:29:LEU:N	0.47	2.47	14	2
1:A:128:GLU:O	1:A:129:ASP:O	0.47	2.32	12	1
1:A:88:ILE:HG13	1:A:111:ALA:CB	0.47	2.38	13	1
1:A:135:ASP:OD1	1:A:135:ASP:N	0.47	2.46	1	1
1:A:8:VAL:HG13	1:A:41:ILE:HG13	0.47	1.85	14	2
1:A:106:VAL:CG1	1:A:109:CYS:HB2	0.47	2.39	5	8
1:A:72:HIS:CD2	1:A:72:HIS:O	0.47	2.66	13	4
1:A:68:ILE:CG2	1:A:69:ASN:N	0.47	2.77	7	3
1:A:26:PHE:CD2	1:A:41:ILE:HG12	0.47	2.44	10	3
1:A:28:LYS:HA	1:A:31:THR:CG2	0.47	2.39	13	1
1:A:115:LEU:HD12	1:A:117:GLY:N	0.47	2.24	13	1
1:A:26:PHE:HB2	1:A:149:CYS:CB	0.47	2.39	13	9
1:A:88:ILE:O	1:A:112:LYS:O	0.47	2.32	4	2
1:A:39:TRP:CZ2	1:A:153:LEU:CD1	0.47	2.98	7	1
1:A:92:ASP:OD2	1:A:115:LEU:CD1	0.47	2.63	11	1
1:A:6:LYS:HB2	1:A:39:TRP:CZ2	0.47	2.44	5	1
1:A:10:PHE:CZ	1:A:116:LEU:HD21	0.47	2.44	9	1
1:A:17:CYS:C	1:A:18:ARG:CG	0.47	2.80	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:VAL:HG22	1:A:99:LEU:CD1	0.47	2.39	12	1
1:A:68:ILE:C	1:A:69:ASN:ND2	0.47	2.68	4	1
1:A:91:MET:O	1:A:92:ASP:O	0.47	2.33	9	2
1:A:45:ALA:O	1:A:76:GLN:OE1	0.47	2.33	11	1
1:A:62:CYS:O	1:A:66:HIS:CE1	0.47	2.67	11	1
1:A:21:ILE:HB	1:A:145:CYS:CB	0.47	2.40	2	4
1:A:33:GLN:O	1:A:34:ASN:C	0.47	2.53	7	6
1:A:63:LEU:HA	1:A:142:TYR:CE2	0.47	2.45	2	1
1:A:5:THR:O	1:A:39:TRP:HA	0.47	2.09	3	1
1:A:85:PHE:CD1	1:A:85:PHE:N	0.47	2.82	7	2
1:A:35:ILE:CD1	1:A:153:LEU:CD2	0.47	2.93	14	2
1:A:77:VAL:HG12	1:A:82:PHE:CE2	0.47	2.45	4	1
1:A:96:LEU:O	1:A:96:LEU:HD23	0.47	2.09	10	2
1:A:116:LEU:O	1:A:116:LEU:CD2	0.47	2.62	8	1
1:A:16:ILE:O	1:A:17:CYS:O	0.47	2.33	11	1
1:A:21:ILE:HG21	1:A:142:TYR:CD1	0.47	2.45	11	1
1:A:30:VAL:HG22	1:A:36:SER:HB3	0.47	1.86	11	1
1:A:135:ASP:O	1:A:136:ALA:CB	0.47	2.61	11	2
1:A:18:ARG:CB	1:A:141:VAL:HG21	0.47	2.39	13	1
1:A:5:THR:CG2	1:A:38:ASN:HA	0.47	2.40	10	3
1:A:88:ILE:O	1:A:88:ILE:HG22	0.47	2.10	1	3
1:A:26:PHE:HZ	1:A:153:LEU:HD13	0.47	1.70	3	2
1:A:22:ALA:CB	1:A:91:MET:SD	0.47	3.03	4	1
1:A:19:SER:HB2	1:A:59:ALA:CB	0.47	2.39	11	1
1:A:30:VAL:HG13	1:A:36:SER:OG	0.47	2.10	15	1
1:A:10:PHE:CE1	1:A:89:LEU:HB2	0.47	2.45	14	3
1:A:26:PHE:CD1	1:A:30:VAL:CG1	0.47	2.95	6	3
1:A:89:LEU:HD21	1:A:152:PHE:CD1	0.47	2.44	7	1
1:A:21:ILE:HG13	1:A:63:LEU:HD22	0.47	1.87	11	1
1:A:11:VAL:HG12	1:A:12:CYS:N	0.47	2.25	13	1
1:A:44:GLY:CA	1:A:77:VAL:HG22	0.47	2.40	1	1
1:A:6:LYS:HG3	1:A:87:TYR:OH	0.47	2.10	4	7
1:A:55:PRO:HB2	1:A:60:VAL:CG1	0.47	2.40	4	1
1:A:11:VAL:HG11	1:A:99:LEU:CD1	0.47	2.28	8	3
1:A:29:LEU:HD11	1:A:146:VAL:CG1	0.47	2.40	13	1
1:A:120:ASP:HB3	1:A:121:PRO:HD3	0.47	1.87	13	1
1:A:29:LEU:HD21	1:A:150:ARG:N	0.47	2.25	14	1
1:A:55:PRO:O	1:A:56:ASP:O	0.46	2.34	3	2
1:A:26:PHE:CZ	1:A:153:LEU:HB2	0.46	2.46	7	3
1:A:49:TRP:O	1:A:50:ASN:OD1	0.46	2.34	8	1
1:A:129:ASP:O	1:A:130:PRO:O	0.46	2.33	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:ARG:C	1:A:59:ALA:CB	0.46	2.83	11	1
1:A:45:ALA:CB	1:A:50:ASN:OD1	0.46	2.63	15	2
1:A:42:ASP:CB	1:A:85:PHE:CZ	0.46	2.99	2	4
1:A:18:ARG:HD3	1:A:19:SER:N	0.46	2.25	3	1
1:A:92:ASP:OD1	1:A:92:ASP:N	0.46	2.48	5	1
1:A:17:CYS:HB3	1:A:131:TYR:CE1	0.46	2.45	10	1
1:A:121:PRO:O	1:A:122:GLN:CB	0.46	2.61	10	1
1:A:92:ASP:OD2	1:A:127:ILE:CG2	0.46	2.63	12	1
1:A:69:ASN:O	1:A:70:THR:CG2	0.46	2.63	14	1
1:A:45:ALA:HB1	1:A:50:ASN:OD1	0.46	2.10	15	1
1:A:153:LEU:O	1:A:157:ARG:CB	0.46	2.64	6	4
1:A:83:VAL:HG22	1:A:110:ARG:CB	0.46	2.40	11	1
1:A:9:LEU:CD2	1:A:88:ILE:HG12	0.46	2.41	9	10
1:A:22:ALA:N	1:A:145:CYS:HB3	0.46	2.26	7	3
1:A:6:LYS:HD3	1:A:156:VAL:O	0.46	2.11	7	8
1:A:149:CYS:SG	1:A:150:ARG:N	0.46	2.89	3	1
1:A:89:LEU:HD22	1:A:116:LEU:O	0.46	2.09	4	1
1:A:106:VAL:HB	1:A:109:CYS:CB	0.46	2.41	5	2
1:A:106:VAL:CB	1:A:109:CYS:HB2	0.46	2.40	5	1
1:A:13:LEU:H	1:A:46:VAL:HG23	0.46	1.71	6	1
1:A:73:LYS:O	1:A:74:ALA:O	0.46	2.34	7	3
1:A:90:CYS:SG	1:A:92:ASP:O	0.46	2.74	12	1
1:A:25:VAL:CG2	1:A:68:ILE:HD11	0.46	2.39	1	1
1:A:6:LYS:HD3	1:A:87:TYR:CE2	0.46	2.45	5	1
1:A:47:SER:HB2	1:A:49:TRP:CD2	0.46	2.46	5	1
1:A:142:TYR:O	1:A:145:CYS:SG	0.46	2.73	9	1
1:A:73:LYS:O	1:A:75:ARG:N	0.46	2.48	11	1
1:A:6:LYS:HB3	1:A:39:TRP:CD2	0.46	2.46	10	4
1:A:35:ILE:N	1:A:35:ILE:CD1	0.46	2.78	9	1
1:A:92:ASP:CB	1:A:127:ILE:O	0.46	2.64	9	1
1:A:70:THR:O	1:A:71:ALA:HB3	0.46	2.10	12	1
1:A:90:CYS:SG	1:A:91:MET:O	0.46	2.73	13	1
1:A:40:VAL:O	1:A:40:VAL:HG12	0.46	2.11	13	2
1:A:80:GLU:O	1:A:84:THR:OG1	0.46	2.32	7	13
1:A:63:LEU:HD12	1:A:68:ILE:HG21	0.46	1.87	8	2
1:A:47:SER:O	1:A:76:GLN:OE1	0.46	2.33	11	1
1:A:76:GLN:O	1:A:77:VAL:O	0.46	2.33	14	2
1:A:16:ILE:HD12	1:A:17:CYS:CB	0.46	2.41	15	1
1:A:29:LEU:HD13	1:A:150:ARG:CB	0.46	2.41	9	3
1:A:96:LEU:O	1:A:100:ASN:HB2	0.46	2.10	14	3
1:A:46:VAL:HA	1:A:77:VAL:HG12	0.46	1.87	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:LYS:HG2	1:A:87:TYR:OH	0.46	2.11	6	1
1:A:25:VAL:CA	1:A:68:ILE:HD11	0.46	2.36	10	1
1:A:89:LEU:CD1	1:A:152:PHE:CD2	0.46	2.99	14	1
1:A:41:ILE:O	1:A:42:ASP:OD1	0.46	2.34	1	2
1:A:83:VAL:O	1:A:110:ARG:HG2	0.46	2.11	3	4
1:A:60:VAL:HA	1:A:63:LEU:CD2	0.46	2.40	8	1
1:A:30:VAL:CB	1:A:35:ILE:CD1	0.46	2.94	9	1
1:A:92:ASP:HB2	1:A:127:ILE:O	0.46	2.11	9	1
1:A:21:ILE:N	1:A:21:ILE:HD13	0.46	2.26	1	3
1:A:21:ILE:HD12	1:A:63:LEU:HG	0.46	1.86	5	1
1:A:151:ALA:O	1:A:154:GLU:HG2	0.46	2.11	8	1
1:A:113:ILE:HD13	1:A:113:ILE:N	0.46	2.25	14	3
1:A:17:CYS:O	1:A:18:ARG:CG	0.46	2.64	12	1
1:A:132:TYR:O	1:A:133:GLY:O	0.46	2.33	14	2
1:A:29:LEU:CD2	1:A:150:ARG:CA	0.46	2.92	15	1
1:A:30:VAL:HG21	1:A:39:TRP:CB	0.45	2.41	1	5
1:A:22:ALA:N	1:A:145:CYS:HB2	0.45	2.26	3	3
1:A:8:VAL:CG1	1:A:39:TRP:CE3	0.45	2.99	11	1
1:A:33:GLN:HB3	1:A:35:ILE:HG22	0.45	1.87	5	4
1:A:140:THR:CG2	1:A:141:VAL:N	0.45	2.79	7	1
1:A:15:ASN:O	1:A:20:PRO:HG2	0.45	2.10	11	1
1:A:19:SER:O	1:A:21:ILE:CD1	0.45	2.57	11	1
1:A:138:PHE:C	1:A:138:PHE:CD1	0.45	2.90	15	2
1:A:68:ILE:HG22	1:A:69:ASN:N	0.45	2.27	7	4
1:A:126:ILE:HD13	1:A:127:ILE:N	0.45	2.26	9	2
1:A:31:THR:CA	1:A:36:SER:HB3	0.45	2.41	13	1
1:A:61:SER:O	1:A:65:ASN:N	0.45	2.48	15	1
1:A:126:ILE:O	1:A:126:ILE:HD12	0.45	2.11	2	1
1:A:30:VAL:HG22	1:A:31:THR:N	0.45	2.26	3	1
1:A:64:ARG:NE	1:A:67:GLY:HA3	0.45	2.26	5	1
1:A:63:LEU:CB	1:A:68:ILE:O	0.45	2.64	7	1
1:A:68:ILE:O	1:A:69:ASN:CG	0.45	2.55	14	2
1:A:82:PHE:CE2	1:A:102:LYS:HB2	0.45	2.47	11	1
1:A:5:THR:O	1:A:6:LYS:C	0.45	2.55	8	10
1:A:152:PHE:CD1	1:A:152:PHE:C	0.45	2.90	1	2
1:A:59:ALA:O	1:A:61:SER:N	0.45	2.50	4	2
1:A:10:PHE:CZ	1:A:116:LEU:HD12	0.45	2.47	5	1
1:A:10:PHE:CD1	1:A:89:LEU:O	0.45	2.70	10	1
1:A:123:LYS:O	1:A:124:GLN:CB	0.45	2.64	13	1
1:A:26:PHE:CB	1:A:149:CYS:CB	0.45	2.94	12	2
1:A:83:VAL:HG23	1:A:110:ARG:HB3	0.45	1.88	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:88:ILE:O	1:A:113:ILE:HA	0.45	2.12	13	14
1:A:63:LEU:HG	1:A:68:ILE:HG21	0.45	1.89	3	1
1:A:45:ALA:CB	1:A:50:ASN:ND2	0.45	2.76	6	1
1:A:49:TRP:CD1	1:A:50:ASN:N	0.45	2.85	6	1
1:A:19:SER:CB	1:A:141:VAL:HG11	0.45	2.41	15	1
1:A:94:SER:O	1:A:95:ASN:C	0.45	2.54	1	1
1:A:17:CYS:O	1:A:18:ARG:HB2	0.45	2.11	3	1
1:A:21:ILE:HG21	1:A:142:TYR:CD2	0.45	2.45	3	2
1:A:91:MET:O	1:A:92:ASP:C	0.45	2.55	14	4
1:A:82:PHE:HA	1:A:111:ALA:CB	0.45	2.38	6	2
1:A:92:ASP:O	1:A:115:LEU:CD2	0.45	2.65	8	1
1:A:9:LEU:HD13	1:A:85:PHE:CG	0.45	2.45	11	1
1:A:74:ALA:O	1:A:75:ARG:O	0.45	2.34	11	1
1:A:25:VAL:O	1:A:26:PHE:C	0.45	2.55	5	10
1:A:110:ARG:O	1:A:110:ARG:HG3	0.45	2.11	5	10
1:A:154:GLU:HA	1:A:157:ARG:CB	0.45	2.41	2	2
1:A:63:LEU:O	1:A:68:ILE:HG13	0.45	2.12	3	1
1:A:123:LYS:O	1:A:124:GLN:O	0.45	2.35	3	1
1:A:64:ARG:NH2	1:A:142:TYR:OH	0.45	2.50	5	1
1:A:92:ASP:OD1	1:A:117:GLY:N	0.45	2.49	7	1
1:A:127:ILE:O	1:A:127:ILE:CG2	0.45	2.57	7	1
1:A:85:PHE:O	1:A:110:ARG:O	0.45	2.34	11	1
1:A:29:LEU:CD2	1:A:149:CYS:SG	0.45	3.01	14	2
1:A:66:HIS:CE1	1:A:68:ILE:CG1	0.45	3.00	14	1
1:A:44:GLY:HA2	1:A:77:VAL:HG22	0.45	1.89	1	1
1:A:75:ARG:O	1:A:76:GLN:O	0.45	2.35	8	1
1:A:30:VAL:CG2	1:A:35:ILE:HG12	0.44	2.42	9	4
1:A:92:ASP:OD1	1:A:116:LEU:CB	0.44	2.65	5	1
1:A:17:CYS:SG	1:A:56:ASP:HB2	0.44	2.52	6	1
1:A:30:VAL:CB	1:A:35:ILE:CG1	0.44	2.95	11	1
1:A:11:VAL:HB	1:A:99:LEU:CD1	0.44	2.42	1	1
1:A:82:PHE:CZ	1:A:102:LYS:CG	0.44	3.00	1	1
1:A:6:LYS:HD2	1:A:156:VAL:O	0.44	2.12	2	4
1:A:63:LEU:HB3	1:A:68:ILE:HG21	0.44	1.89	6	1
1:A:96:LEU:CD2	1:A:99:LEU:HB2	0.44	2.42	13	1
1:A:15:ASN:OD1	1:A:15:ASN:O	0.44	2.36	1	1
1:A:48:ASP:HA	1:A:51:VAL:CG2	0.44	2.42	4	5
1:A:115:LEU:O	1:A:116:LEU:C	0.44	2.55	13	8
1:A:92:ASP:O	1:A:127:ILE:O	0.44	2.36	3	1
1:A:70:THR:HG23	1:A:71:ALA:H	0.44	1.70	4	1
1:A:77:VAL:HG11	1:A:82:PHE:CZ	0.44	2.48	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:VAL:HA	1:A:110:ARG:HB3	0.44	1.89	11	1
1:A:90:CYS:HB3	1:A:99:LEU:CD1	0.44	2.43	11	1
1:A:91:MET:SD	1:A:91:MET:N	0.44	2.91	11	1
1:A:10:PHE:O	1:A:44:GLY:N	0.44	2.51	13	1
1:A:92:ASP:O	1:A:93:GLU:C	0.44	2.55	6	4
1:A:21:ILE:HG21	1:A:142:TYR:CB	0.44	2.43	9	2
1:A:99:LEU:HB3	1:A:113:ILE:CG2	0.44	2.41	4	2
1:A:47:SER:CB	1:A:49:TRP:CE2	0.44	3.01	5	1
1:A:91:MET:CE	1:A:91:MET:HA	0.44	2.42	10	2
1:A:30:VAL:HA	1:A:35:ILE:CD1	0.44	2.37	9	1
1:A:26:PHE:HB2	1:A:149:CYS:SG	0.44	2.52	11	1
1:A:68:ILE:O	1:A:69:ASN:ND2	0.44	2.51	14	1
1:A:9:LEU:CD1	1:A:85:PHE:CD2	0.44	2.99	1	1
1:A:92:ASP:OD2	1:A:128:GLU:CA	0.44	2.66	1	1
1:A:126:ILE:O	1:A:127:ILE:CB	0.44	2.65	2	1
1:A:92:ASP:OD1	1:A:126:ILE:HD12	0.44	2.12	6	1
1:A:69:ASN:C	1:A:70:THR:CG2	0.44	2.85	14	1
1:A:29:LEU:CD1	1:A:150:ARG:HB2	0.44	2.43	1	4
1:A:64:ARG:O	1:A:65:ASN:C	0.44	2.56	5	1
1:A:90:CYS:O	1:A:91:MET:C	0.44	2.56	6	1
1:A:135:ASP:OD1	1:A:137:ASP:CB	0.44	2.66	6	1
1:A:126:ILE:O	1:A:127:ILE:C	0.44	2.56	15	3
1:A:77:VAL:HG11	1:A:82:PHE:CE1	0.44	2.47	11	1
1:A:140:THR:O	1:A:144:GLN:OE1	0.44	2.36	15	1
1:A:93:GLU:HG2	1:A:94:SER:N	0.44	2.27	1	1
1:A:89:LEU:HB3	1:A:114:GLU:O	0.44	2.13	2	2
1:A:24:ALA:CB	1:A:68:ILE:HG12	0.44	2.41	4	1
1:A:64:ARG:CD	1:A:142:TYR:CZ	0.44	3.01	5	1
1:A:72:HIS:NE2	1:A:73:LYS:O	0.44	2.50	8	1
1:A:60:VAL:CG2	1:A:64:ARG:HD2	0.44	2.43	9	1
1:A:30:VAL:HB	1:A:35:ILE:CG1	0.44	2.42	11	1
1:A:17:CYS:O	1:A:18:ARG:C	0.44	2.56	4	2
1:A:63:LEU:O	1:A:68:ILE:HG22	0.44	2.12	1	2
1:A:108:ASN:O	1:A:109:CYS:C	0.44	2.56	7	2
1:A:9:LEU:HD12	1:A:85:PHE:CZ	0.44	2.48	11	1
1:A:12:CYS:O	1:A:13:LEU:C	0.44	2.56	10	8
1:A:111:ALA:O	1:A:112:LYS:C	0.44	2.53	11	6
1:A:147:ARG:O	1:A:148:CYS:C	0.44	2.56	7	6
1:A:66:HIS:NE2	1:A:68:ILE:CG1	0.44	2.81	11	1
1:A:26:PHE:CA	1:A:149:CYS:SG	0.43	3.05	3	1
1:A:51:VAL:HG22	1:A:76:GLN:H	0.43	1.73	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:63:LEU:HD13	1:A:70:THR:HG21	0.43	1.89	5	1
1:A:18:ARG:NH1	1:A:18:ARG:HG2	0.43	2.28	7	1
1:A:22:ALA:CB	1:A:148:CYS:HB3	0.43	2.43	9	1
1:A:4:VAL:O	1:A:5:THR:HG23	0.43	2.12	10	1
1:A:107:LYS:O	1:A:108:ASN:C	0.43	2.56	11	2
1:A:82:PHE:HA	1:A:88:ILE:CD1	0.43	2.43	1	3
1:A:119:TYR:O	1:A:120:ASP:OD1	0.43	2.36	8	1
1:A:24:ALA:CB	1:A:70:THR:HB	0.43	2.43	9	1
1:A:121:PRO:O	1:A:123:LYS:N	0.43	2.51	14	1
1:A:30:VAL:O	1:A:36:SER:HB2	0.43	2.13	2	3
1:A:80:GLU:O	1:A:84:THR:HB	0.43	2.12	6	3
1:A:83:VAL:O	1:A:110:ARG:HD3	0.43	2.13	9	4
1:A:106:VAL:HG11	1:A:109:CYS:HB2	0.43	1.89	5	2
1:A:58:ARG:O	1:A:61:SER:OG	0.43	2.35	3	1
1:A:56:ASP:O	1:A:56:ASP:OD1	0.43	2.36	4	1
1:A:57:PRO:O	1:A:61:SER:HB2	0.43	2.13	4	1
1:A:46:VAL:O	1:A:46:VAL:CG1	0.43	2.66	5	1
1:A:25:VAL:CG1	1:A:146:VAL:HA	0.43	2.40	7	1
1:A:84:THR:CG2	1:A:85:PHE:CE1	0.43	3.02	7	1
1:A:92:ASP:OD2	1:A:128:GLU:HG2	0.43	2.13	9	2
1:A:9:LEU:HD13	1:A:85:PHE:CE1	0.43	2.40	11	1
1:A:53:ARG:O	1:A:74:ALA:HB2	0.43	2.13	11	1
1:A:28:LYS:C	1:A:31:THR:HG22	0.43	2.34	13	1
1:A:20:PRO:O	1:A:21:ILE:C	0.43	2.57	15	1
1:A:55:PRO:O	1:A:56:ASP:C	0.43	2.57	15	5
1:A:21:ILE:O	1:A:25:VAL:HB	0.43	2.13	13	2
1:A:88:ILE:CG1	1:A:111:ALA:CB	0.43	2.90	13	1
1:A:91:MET:CE	1:A:116:LEU:HD13	0.43	2.43	1	2
1:A:23:GLU:OE1	1:A:24:ALA:N	0.43	2.52	3	1
1:A:92:ASP:O	1:A:93:GLU:O	0.43	2.37	6	1
1:A:145:CYS:O	1:A:148:CYS:HB2	0.43	2.14	7	1
1:A:47:SER:HB2	1:A:49:TRP:CE2	0.43	2.47	2	1
1:A:96:LEU:O	1:A:100:ASN:CB	0.43	2.67	2	1
1:A:92:ASP:OD1	1:A:128:GLU:HG3	0.43	2.13	3	1
1:A:106:VAL:HB	1:A:109:CYS:HB2	0.43	1.90	5	3
1:A:79:LYS:HB2	1:A:106:VAL:CG2	0.43	2.36	6	1
1:A:138:PHE:CE1	1:A:141:VAL:HG11	0.43	2.48	7	1
1:A:26:PHE:CD1	1:A:26:PHE:C	0.43	2.92	9	1
1:A:34:ASN:CG	1:A:34:ASN:O	0.43	2.57	11	1
1:A:35:ILE:O	1:A:35:ILE:CG1	0.43	2.65	12	1
1:A:23:GLU:O	1:A:24:ALA:C	0.43	2.56	4	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:95:ASN:OD1	1:A:95:ASN:N	0.43	2.51	1	1
1:A:26:PHE:HA	1:A:149:CYS:SG	0.43	2.54	3	1
1:A:92:ASP:OD1	1:A:116:LEU:HB2	0.43	2.13	5	1
1:A:79:LYS:HG3	1:A:80:GLU:N	0.43	2.27	6	1
1:A:113:ILE:N	1:A:113:ILE:CD1	0.43	2.77	7	2
1:A:126:ILE:CG2	1:A:128:GLU:HG3	0.43	2.44	7	5
1:A:125:LEU:O	1:A:126:ILE:O	0.43	2.36	8	2
1:A:33:GLN:O	1:A:34:ASN:HB2	0.43	2.14	11	1
1:A:18:ARG:HD2	1:A:19:SER:N	0.43	2.28	13	1
1:A:69:ASN:C	1:A:70:THR:HG23	0.43	2.34	14	1
1:A:19:SER:HB3	1:A:141:VAL:HG11	0.43	1.91	15	1
1:A:53:ARG:O	1:A:54:SER:C	0.43	2.57	14	4
1:A:78:THR:O	1:A:79:LYS:C	0.43	2.57	12	5
1:A:9:LEU:HD12	1:A:85:PHE:CE1	0.43	2.49	3	1
1:A:63:LEU:O	1:A:64:ARG:C	0.43	2.57	4	1
1:A:68:ILE:O	1:A:69:ASN:C	0.43	2.56	4	1
1:A:45:ALA:O	1:A:46:VAL:HB	0.43	2.12	14	3
1:A:127:ILE:CD1	1:A:144:GLN:CB	0.43	2.97	9	1
1:A:51:VAL:CG2	1:A:76:GLN:HB2	0.43	2.44	15	1
1:A:98:ASP:O	1:A:102:LYS:HG2	0.43	2.13	15	1
1:A:9:LEU:HD22	1:A:88:ILE:CG1	0.43	2.42	13	3
1:A:59:ALA:O	1:A:60:VAL:C	0.43	2.56	4	2
1:A:134:ASN:O	1:A:135:ASP:CB	0.43	2.66	11	1
1:A:63:LEU:CG	1:A:68:ILE:HG21	0.43	2.44	1	1
1:A:106:VAL:O	1:A:108:ASN:N	0.43	2.51	4	1
1:A:6:LYS:CG	1:A:39:TRP:CZ2	0.43	3.02	6	1
1:A:79:LYS:CA	1:A:106:VAL:HG22	0.43	2.44	6	1
1:A:26:PHE:HA	1:A:29:LEU:HD12	0.43	1.90	8	1
1:A:4:VAL:O	1:A:38:ASN:CG	0.43	2.57	9	1
1:A:30:VAL:HG22	1:A:36:SER:CB	0.43	2.43	11	1
1:A:45:ALA:C	1:A:46:VAL:HG23	0.43	2.34	14	1
1:A:63:LEU:HB3	1:A:68:ILE:CG2	0.43	2.43	14	1
1:A:73:LYS:O	1:A:74:ALA:C	0.42	2.58	8	3
1:A:92:ASP:OD2	1:A:127:ILE:C	0.42	2.57	1	1
1:A:29:LEU:O	1:A:30:VAL:C	0.42	2.57	10	2
1:A:107:LYS:O	1:A:108:ASN:HB3	0.42	2.14	5	1
1:A:126:ILE:O	1:A:128:GLU:N	0.42	2.52	13	2
1:A:9:LEU:HD23	1:A:85:PHE:CD2	0.42	2.49	14	1
1:A:66:HIS:CE1	1:A:68:ILE:HG12	0.42	2.49	14	1
1:A:75:ARG:HG3	1:A:76:GLN:N	0.42	2.28	15	1
1:A:130:PRO:O	1:A:131:TYR:C	0.42	2.57	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:95:ASN:CA	1:A:115:LEU:HD22	0.42	2.44	6	1
1:A:26:PHE:O	1:A:26:PHE:CD1	0.42	2.72	13	1
1:A:127:ILE:CG2	1:A:128:GLU:N	0.42	2.77	14	1
1:A:140:THR:O	1:A:141:VAL:C	0.42	2.57	14	1
1:A:11:VAL:O	1:A:90:CYS:HA	0.42	2.14	7	5
1:A:154:GLU:HG3	1:A:155:LYS:N	0.42	2.29	4	2
1:A:64:ARG:CG	1:A:142:TYR:CE2	0.42	3.02	5	1
1:A:147:ARG:HA	1:A:150:ARG:CB	0.42	2.44	7	1
1:A:123:LYS:C	1:A:124:GLN:CG	0.42	2.88	13	1
1:A:91:MET:HA	1:A:91:MET:CE	0.42	2.42	15	1
1:A:26:PHE:CB	1:A:149:CYS:HB2	0.42	2.45	2	2
1:A:92:ASP:OD2	1:A:128:GLU:HA	0.42	2.14	1	2
1:A:15:ASN:CG	1:A:15:ASN:O	0.42	2.57	4	1
1:A:75:ARG:O	1:A:76:GLN:C	0.42	2.57	5	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:152:PHE:CE1	0.42	3.02	6	1
1:A:15:ASN:O	1:A:15:ASN:CG	0.42	2.57	6	1
1:A:7:SER:CB	1:A:85:PHE:HA	0.42	2.44	8	1
1:A:27:ARG:HD3	1:A:69:ASN:O	0.42	2.14	9	1
1:A:92:ASP:O	1:A:93:GLU:HB2	0.42	2.14	12	2
1:A:44:GLY:HA3	1:A:77:VAL:CG2	0.42	2.44	6	2
1:A:48:ASP:CG	1:A:48:ASP:O	0.42	2.58	1	1
1:A:22:ALA:HA	1:A:145:CYS:O	0.42	2.13	7	1
1:A:92:ASP:OD1	1:A:92:ASP:C	0.42	2.57	10	1
1:A:127:ILE:O	1:A:127:ILE:HG12	0.42	2.15	15	3
1:A:115:LEU:HD23	1:A:115:LEU:H	0.42	1.73	2	1
1:A:57:PRO:C	1:A:60:VAL:HG12	0.42	2.34	7	1
1:A:17:CYS:O	1:A:18:ARG:HB3	0.42	2.14	8	1
1:A:13:LEU:HD13	1:A:95:ASN:ND2	0.42	2.30	12	1
1:A:21:ILE:HD12	1:A:21:ILE:H	0.42	1.73	12	1
1:A:126:ILE:C	1:A:127:ILE:HG22	0.42	2.35	15	1
1:A:16:ILE:CG2	1:A:54:SER:O	0.42	2.63	5	1
1:A:104:ASN:N	1:A:104:ASN:OD1	0.42	2.53	5	1
1:A:122:GLN:O	1:A:122:GLN:CG	0.42	2.67	5	1
1:A:93:GLU:O	1:A:94:SER:C	0.42	2.58	8	1
1:A:27:ARG:HD3	1:A:69:ASN:CB	0.42	2.44	9	1
1:A:19:SER:OG	1:A:19:SER:O	0.42	2.34	10	1
1:A:67:GLY:O	1:A:68:ILE:C	0.42	2.57	12	1
1:A:126:ILE:HG23	1:A:128:GLU:HG3	0.42	1.91	15	1
1:A:15:ASN:CB	1:A:45:ALA:HB2	0.42	2.44	3	1
1:A:56:ASP:C	1:A:60:VAL:CG2	0.42	2.88	4	1
1:A:92:ASP:CG	1:A:116:LEU:O	0.42	2.58	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:VAL:HG13	1:A:75:ARG:CA	0.42	2.35	8	1
1:A:83:VAL:O	1:A:110:ARG:HD2	0.42	2.15	8	1
1:A:33:GLN:O	1:A:34:ASN:CG	0.42	2.57	9	1
1:A:116:LEU:CD1	1:A:148:CYS:HA	0.42	2.44	10	1
1:A:10:PHE:CZ	1:A:116:LEU:CD1	0.42	3.02	15	1
1:A:16:ILE:O	1:A:17:CYS:HB3	0.42	2.15	1	1
1:A:62:CYS:O	1:A:63:LEU:C	0.42	2.57	2	1
1:A:30:VAL:O	1:A:31:THR:C	0.42	2.57	3	2
1:A:83:VAL:HA	1:A:110:ARG:HG3	0.42	1.91	3	2
1:A:107:LYS:O	1:A:107:LYS:HG3	0.42	2.14	11	1
1:A:91:MET:C	1:A:92:ASP:CG	0.42	2.79	14	1
1:A:26:PHE:CD1	1:A:41:ILE:HD13	0.42	2.50	1	1
1:A:42:ASP:HB2	1:A:85:PHE:CE1	0.42	2.49	2	1
1:A:126:ILE:O	1:A:127:ILE:HB	0.42	2.15	14	2
1:A:18:ARG:HA	1:A:141:VAL:CG1	0.42	2.44	8	2
1:A:24:ALA:HB1	1:A:68:ILE:CG1	0.42	2.45	4	1
1:A:82:PHE:O	1:A:111:ALA:N	0.42	2.53	9	2
1:A:26:PHE:CE1	1:A:30:VAL:HG11	0.42	2.50	9	2
1:A:89:LEU:HD21	1:A:152:PHE:CD2	0.42	2.49	13	1
1:A:26:PHE:CD1	1:A:41:ILE:CG1	0.42	3.03	14	1
1:A:54:SER:O	1:A:55:PRO:O	0.42	2.38	14	1
1:A:132:TYR:O	1:A:133:GLY:C	0.41	2.57	2	1
1:A:135:ASP:O	1:A:136:ALA:C	0.41	2.58	2	1
1:A:46:VAL:CG2	1:A:99:LEU:HD11	0.41	2.44	3	1
1:A:106:VAL:O	1:A:107:LYS:C	0.41	2.59	4	2
1:A:28:LYS:O	1:A:29:LEU:C	0.41	2.59	5	1
1:A:122:GLN:O	1:A:122:GLN:HG3	0.41	2.14	5	1
1:A:144:GLN:HG3	1:A:145:CYS:N	0.41	2.29	5	1
1:A:18:ARG:N	1:A:138:PHE:CZ	0.41	2.88	6	1
1:A:21:ILE:O	1:A:25:VAL:CB	0.41	2.68	6	2
1:A:4:VAL:C	1:A:38:ASN:OD1	0.41	2.57	7	1
1:A:92:ASP:OD2	1:A:128:GLU:CD	0.41	2.58	9	1
1:A:35:ILE:HD11	1:A:153:LEU:CD1	0.41	2.44	10	1
1:A:76:GLN:OE1	1:A:76:GLN:HA	0.41	2.15	11	1
1:A:30:VAL:CG2	1:A:31:THR:N	0.41	2.83	13	1
1:A:68:ILE:O	1:A:69:ASN:HB2	0.41	2.15	15	2
1:A:92:ASP:OD2	1:A:126:ILE:CG2	0.41	2.68	1	1
1:A:154:GLU:HA	1:A:157:ARG:HB3	0.41	1.91	6	1
1:A:92:ASP:O	1:A:115:LEU:HB2	0.41	2.15	10	1
1:A:30:VAL:O	1:A:32:ASP:N	0.41	2.53	13	1
1:A:8:VAL:O	1:A:41:ILE:HA	0.41	2.16	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:61:SER:O	1:A:65:ASN:HB2	0.41	2.15	1	2
1:A:58:ARG:NH2	1:A:138:PHE:CD2	0.41	2.87	2	1
1:A:114:GLU:HG3	1:A:115:LEU:N	0.41	2.30	3	1
1:A:26:PHE:O	1:A:27:ARG:C	0.41	2.58	8	1
1:A:50:ASN:OD1	1:A:53:ARG:CB	0.41	2.68	9	1
1:A:4:VAL:HG12	1:A:5:THR:N	0.41	2.30	14	1
1:A:22:ALA:HA	1:A:148:CYS:HG	0.41	1.76	15	1
1:A:56:ASP:CB	1:A:57:PRO:HD2	0.41	2.45	15	1
1:A:137:ASP:OD1	1:A:137:ASP:O	0.41	2.38	1	1
1:A:125:LEU:O	1:A:126:ILE:HB	0.41	2.15	11	2
1:A:12:CYS:HB3	1:A:19:SER:OG	0.41	2.15	9	1
1:A:50:ASN:OD1	1:A:53:ARG:HD3	0.41	2.16	9	1
1:A:28:LYS:O	1:A:32:ASP:HB2	0.41	2.15	11	1
1:A:120:ASP:HB2	1:A:121:PRO:HD3	0.41	1.92	11	1
1:A:92:ASP:C	1:A:92:ASP:OD1	0.41	2.57	13	1
1:A:131:TYR:C	1:A:131:TYR:CD1	0.41	2.90	15	1
1:A:29:LEU:HD11	1:A:149:CYS:SG	0.41	2.53	2	1
1:A:35:ILE:HD12	1:A:153:LEU:HD11	0.41	1.92	4	2
1:A:51:VAL:CG1	1:A:75:ARG:HD2	0.41	2.46	4	1
1:A:115:LEU:O	1:A:117:GLY:N	0.41	2.53	4	2
1:A:15:ASN:OD1	1:A:43:SER:OG	0.41	2.39	5	1
1:A:13:LEU:O	1:A:50:ASN:ND2	0.41	2.54	6	1
1:A:8:VAL:O	1:A:85:PHE:CD2	0.41	2.74	7	1
1:A:7:SER:HA	1:A:40:VAL:O	0.41	2.15	14	1
1:A:9:LEU:HD21	1:A:88:ILE:HD11	0.41	1.92	14	1
1:A:14:GLY:O	1:A:15:ASN:HB3	0.41	2.14	15	1
1:A:24:ALA:HB3	1:A:63:LEU:HD21	0.41	1.91	5	1
1:A:119:TYR:CD1	1:A:119:TYR:N	0.41	2.88	8	2
1:A:98:ASP:O	1:A:102:LYS:HG3	0.41	2.14	9	1
1:A:8:VAL:O	1:A:41:ILE:CG2	0.41	2.57	14	1
1:A:35:ILE:HG13	1:A:39:TRP:CD1	0.41	2.50	14	1
1:A:120:ASP:N	1:A:121:PRO:HD3	0.41	2.30	14	1
1:A:54:SER:OG	1:A:55:PRO:HD2	0.41	2.15	5	1
1:A:86:ASP:O	1:A:112:LYS:HB3	0.41	2.16	6	1
1:A:16:ILE:C	1:A:17:CYS:SG	0.41	2.98	9	1
1:A:83:VAL:HG23	1:A:110:ARG:N	0.41	2.30	11	1
1:A:83:VAL:HG23	1:A:110:ARG:CB	0.41	2.46	11	1
1:A:8:VAL:HB	1:A:152:PHE:CZ	0.41	2.51	13	1
1:A:153:LEU:O	1:A:157:ARG:HB2	0.41	2.15	14	2
1:A:123:LYS:CG	1:A:123:LYS:O	0.41	2.68	10	1
1:A:26:PHE:CE2	1:A:41:ILE:HG12	0.41	2.50	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:ASN:ND2	1:A:20:PRO:HG3	0.41	2.30	12	1
1:A:69:ASN:N	1:A:69:ASN:ND2	0.41	2.69	12	1
1:A:12:CYS:O	1:A:13:LEU:HB3	0.41	2.16	15	1
1:A:19:SER:HB3	1:A:20:PRO:HD3	0.41	1.92	1	1
1:A:98:ASP:O	1:A:99:LEU:C	0.41	2.58	1	1
1:A:25:VAL:O	1:A:27:ARG:N	0.41	2.54	2	1
1:A:59:ALA:O	1:A:63:LEU:HB3	0.41	2.15	3	1
1:A:63:LEU:O	1:A:65:ASN:N	0.41	2.53	4	1
1:A:142:TYR:O	1:A:145:CYS:HB2	0.41	2.16	7	1
1:A:91:MET:O	1:A:92:ASP:CB	0.41	2.68	8	1
1:A:152:PHE:CZ	1:A:156:VAL:CG2	0.41	2.92	8	1
1:A:127:ILE:CG1	1:A:144:GLN:HB3	0.41	2.46	9	1
1:A:46:VAL:CG2	1:A:99:LEU:HG	0.41	2.46	10	1
1:A:82:PHE:CB	1:A:109:CYS:SG	0.41	3.08	1	1
1:A:13:LEU:O	1:A:14:GLY:C	0.41	2.57	3	1
1:A:8:VAL:HB	1:A:152:PHE:CE2	0.41	2.50	9	1
1:A:87:TYR:CE2	1:A:156:VAL:HG21	0.40	2.51	2	1
1:A:13:LEU:O	1:A:15:ASN:N	0.40	2.54	6	1
1:A:16:ILE:CD1	1:A:17:CYS:N	0.40	2.75	15	1
1:A:91:MET:HA	1:A:91:MET:HE3	0.40	1.91	10	1
1:A:9:LEU:HD22	1:A:85:PHE:CD2	0.40	2.52	14	1
1:A:33:GLN:C	1:A:35:ILE:N	0.40	2.74	1	1
1:A:82:PHE:HA	1:A:88:ILE:HD11	0.40	1.92	1	1
1:A:96:LEU:CD2	1:A:100:ASN:N	0.40	2.84	2	1
1:A:119:TYR:O	1:A:120:ASP:HB2	0.40	2.16	2	1
1:A:150:ARG:O	1:A:151:ALA:C	0.40	2.59	7	1
1:A:153:LEU:O	1:A:154:GLU:C	0.40	2.56	2	1
1:A:76:GLN:OE1	1:A:77:VAL:O	0.40	2.39	3	1
1:A:25:VAL:O	1:A:29:LEU:HB2	0.40	2.17	6	1
1:A:28:LYS:HA	1:A:31:THR:OG1	0.40	2.17	6	1
1:A:87:TYR:CE1	1:A:156:VAL:HG11	0.40	2.51	6	1
1:A:65:ASN:OD1	1:A:66:HIS:N	0.40	2.55	7	1
1:A:30:VAL:CA	1:A:35:ILE:CD1	0.40	2.98	9	1
1:A:121:PRO:HG3	1:A:147:ARG:CG	0.40	2.47	10	1
1:A:6:LYS:CG	1:A:39:TRP:CH2	0.40	3.04	12	1
1:A:13:LEU:HB2	1:A:95:ASN:ND2	0.40	2.32	12	1
1:A:76:GLN:O	1:A:77:VAL:C	0.40	2.60	14	1
1:A:50:ASN:HA	1:A:53:ARG:CD	0.40	2.46	15	1
1:A:63:LEU:HD23	1:A:68:ILE:HG21	0.40	1.87	5	1
1:A:147:ARG:C	1:A:149:CYS:N	0.40	2.75	6	1
1:A:18:ARG:C	1:A:59:ALA:HB1	0.40	2.36	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:SER:O	1:A:51:VAL:CG2	0.40	2.69	13	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	153/157 (97%)	108±4 (70±3%)	33±5 (21±3%)	13±3 (8±2%)	2	13
All	All	2295/2355 (97%)	1617 (70%)	489 (21%)	189 (8%)	2	13

All 65 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	6	LYS	12
1	A	19	SER	8
1	A	46	VAL	8
1	A	92	ASP	7
1	A	33	GLN	6
1	A	120	ASP	6
1	A	74	ALA	6
1	A	18	ARG	5
1	A	95	ASN	5
1	A	16	ILE	5
1	A	14	GLY	4
1	A	17	CYS	4
1	A	69	ASN	4
1	A	75	ARG	4
1	A	93	GLU	4
1	A	68	ILE	4
1	A	127	ILE	4
1	A	13	LEU	4
1	A	135	ASP	4
1	A	116	LEU	4
1	A	65	ASN	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	133	GLY	4
1	A	134	ASN	3
1	A	128	GLU	3
1	A	131	TYR	3
1	A	54	SER	3
1	A	126	ILE	3
1	A	5	THR	3
1	A	130	PRO	3
1	A	34	ASN	3
1	A	77	VAL	3
1	A	12	CYS	2
1	A	107	LYS	2
1	A	138	PHE	2
1	A	67	GLY	2
1	A	109	CYS	2
1	A	121	PRO	2
1	A	123	LYS	2
1	A	70	THR	2
1	A	88	ILE	2
1	A	125	LEU	2
1	A	146	VAL	2
1	A	129	ASP	2
1	A	82	PHE	1
1	A	84	THR	1
1	A	51	VAL	1
1	A	56	ASP	1
1	A	61	SER	1
1	A	124	GLN	1
1	A	71	ALA	1
1	A	117	GLY	1
1	A	118	SER	1
1	A	137	ASP	1
1	A	4	VAL	1
1	A	76	GLN	1
1	A	38	ASN	1
1	A	53	ARG	1
1	A	112	LYS	1
1	A	20	PRO	1
1	A	156	VAL	1
1	A	55	PRO	1
1	A	96	LEU	1
1	A	114	GLU	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	122	GLN	1
1	A	119	TYR	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	139/141 (99%)	91±5 (65±4%)	48±5 (35±4%)	1 10
All	All	2085/2115 (99%)	1363 (65%)	722 (35%)	1 10

All 114 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	89	LEU	15
1	A	109	CYS	15
1	A	8	VAL	13
1	A	9	LEU	13
1	A	12	CYS	13
1	A	63	LEU	13
1	A	5	THR	12
1	A	27	ARG	12
1	A	49	TRP	12
1	A	79	LYS	12
1	A	96	LEU	12
1	A	157	ARG	12
1	A	19	SER	11
1	A	73	LYS	11
1	A	75	ARG	11
1	A	78	THR	11
1	A	116	LEU	11
1	A	120	ASP	11
1	A	125	LEU	11
1	A	147	ARG	11
1	A	149	CYS	11
1	A	6	LYS	11
1	A	28	LYS	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	47	SER	10
1	A	102	LYS	10
1	A	115	LEU	10
1	A	123	LYS	10
1	A	31	THR	9
1	A	90	CYS	9
1	A	137	ASP	9
1	A	33	GLN	8
1	A	42	ASP	8
1	A	98	ASP	8
1	A	101	ARG	8
1	A	124	GLN	8
1	A	54	SER	8
1	A	61	SER	8
1	A	145	CYS	8
1	A	30	VAL	8
1	A	26	PHE	8
1	A	13	LEU	7
1	A	18	ARG	7
1	A	53	ARG	7
1	A	70	THR	7
1	A	86	ASP	7
1	A	110	ARG	7
1	A	135	ASP	7
1	A	143	GLN	7
1	A	155	LYS	7
1	A	17	CYS	7
1	A	113	ILE	7
1	A	118	SER	7
1	A	129	ASP	7
1	A	132	TYR	7
1	A	91	MET	6
1	A	112	LYS	6
1	A	64	ARG	6
1	A	93	GLU	6
1	A	36	SER	5
1	A	56	ASP	5
1	A	114	GLU	5
1	A	152	PHE	5
1	A	105	GLN	5
1	A	144	GLN	5
1	A	97	ARG	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	148	CYS	5
1	A	65	ASN	5
1	A	92	ASP	5
1	A	7	SER	5
1	A	23	GLU	4
1	A	104	ASN	4
1	A	131	TYR	4
1	A	62	CYS	4
1	A	80	GLU	4
1	A	94	SER	4
1	A	16	ILE	4
1	A	76	GLN	4
1	A	58	ARG	4
1	A	34	ASN	4
1	A	48	ASP	4
1	A	107	LYS	4
1	A	138	PHE	4
1	A	139	GLU	4
1	A	43	SER	4
1	A	134	ASN	3
1	A	88	ILE	3
1	A	103	SER	3
1	A	108	ASN	3
1	A	126	ILE	3
1	A	150	ARG	3
1	A	83	VAL	3
1	A	154	GLU	3
1	A	38	ASN	3
1	A	142	TYR	3
1	A	68	ILE	3
1	A	122	GLN	3
1	A	10	PHE	3
1	A	46	VAL	2
1	A	95	ASN	2
1	A	100	ASN	2
1	A	32	ASP	2
1	A	119	TYR	2
1	A	81	ASP	2
1	A	69	ASN	2
1	A	140	THR	2
1	A	60	VAL	1
1	A	21	ILE	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	50	ASN	1
1	A	66	HIS	1
1	A	15	ASN	1
1	A	35	ILE	1
1	A	87	TYR	1
1	A	37	ASP	1
1	A	77	VAL	1

6.3.3 RNA (i)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates (i)

There are no 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 (i)

No chemical shift data were provided