Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Jun 5, 2023 – 04:36 PM JST

PDB ID	:	6LKF
BMRB ID	:	36303
Title	:	Solution structure of Anti-CRISPR protein AcrIIA5
Authors	:	An, S.Y.; Bae, E.; Suh, J.Y.
Deposited on	:	2019-12-19

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 types of validation reports are described at
http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types.

The following versions of software and data (see references (1)) were used in the production of this report:

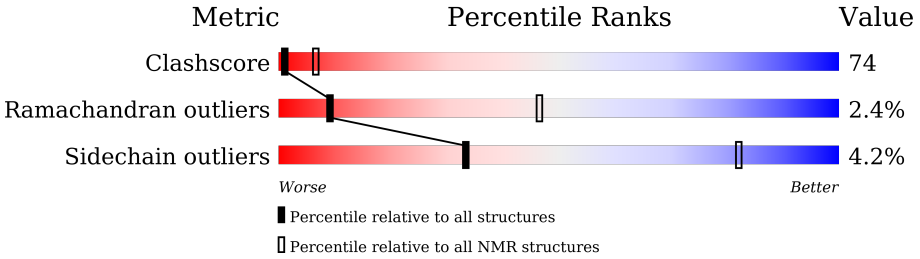
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
BMRB Restraints Analysis	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.33

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 is 75%.

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	140	22% 53% · 24%

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 20 models. Model 4 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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:24-A:67, A:78-A:140 (107)	0.97	4

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 6 clusters. No single-model clusters were found.

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

3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2376 atoms, of which 1187 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called AcrIIA5.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	140	2376	752	1187	211	222	4	0

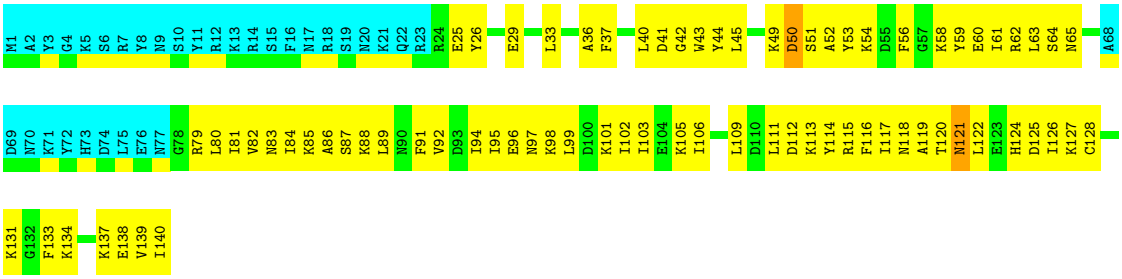
4 Residue-property plots (i)

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: AcrIIA5

Chain A: 22% 53% • 24%



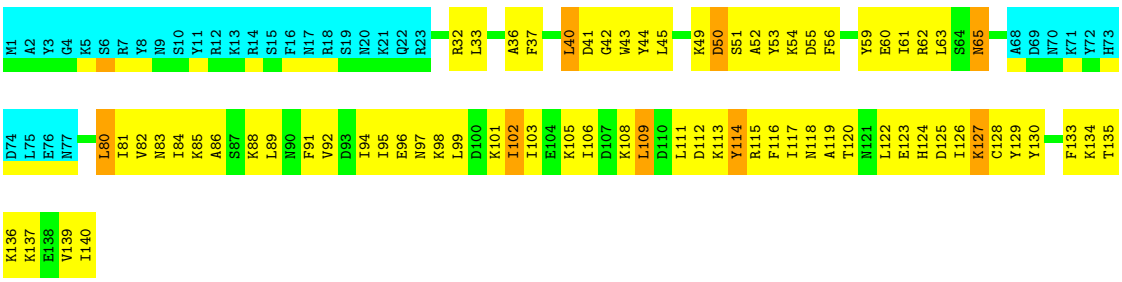
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: AcrIIA5

Chain A: 24% 47% 6% 24%



4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: AcrIIA5

Chain A: 24% 47% 6% 24%

M1 A2 Y3 G4 K5 S6 R7 Y8 N9 S10 Y11 R12 K13 R14 S15 F16 N17 R18 S19 N20 K21 Q22 R23 Y26 E29 A36 F37 L40 D41 G42 W43 Y44 L45 K49 D50 S51 A52 Y53 K54 D55 F56 Y59 E60 I61 R62 L63 S64 N65 H66 S67 A68 D69 N70 K71
Y72 H73 D74 L75 E76 N77 G78 R79 L80 I81 V82 N83 I84 K85 A86 S87 K88 L89 N90 F91 V92 D93 I94 I95 E96 N97 K98 L99 D100 K101 I102 I103 E104 K105 I106 D107 K108 L109 D110 L111 D112 K113 Y114 R115 F116 I117 N118 A119 T120 N121 L122 E123 H124 D125 I126 K127 C128 Y129 Y130 K131
G132 F133 K134 T135 K136 K137 E138 V139 I140

4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: AcrIIA5

Chain A: 22% 50% • 24%

M1 A2 Y3 G4 K5 S6 R7 Y8 N9 S10 Y11 R12 K13 R14 S15 F16 N17 R18 S19 N20 K21 Q22 R23 Y26 E29 M30 D31 R32 L33 E34 K35 A36 F37 L40 D41 G42 W43 Y44 L45 S46 K49 D50 S51 A52 Y53 K54 D55 F56 G57 K58 Y59 E60 I61 R62 L63 S64
N65 H66 S67 A68 D69 N70 K71 Y72 H73 D74 L75 E76 N77 G78 R79 L80 I81 V82 N83 I84 K85 A86 S87 K88 L89 N90 F91 I94 I95 E96 N97 K98 L99 D100 K101 I102 I103 E104 K105 I106 L109 D110 L111 D112 K113 Y114 R115 F116 I117 N118 A119 T120 N121 L122 E123 H124 D125 I126
K127 C128 Y129 Y130 K131 G132 F133 K134 T135 E138 V139 I140

4.2.4 Score per residue for model 4 (medoid)

- Molecule 1: AcrIIA5

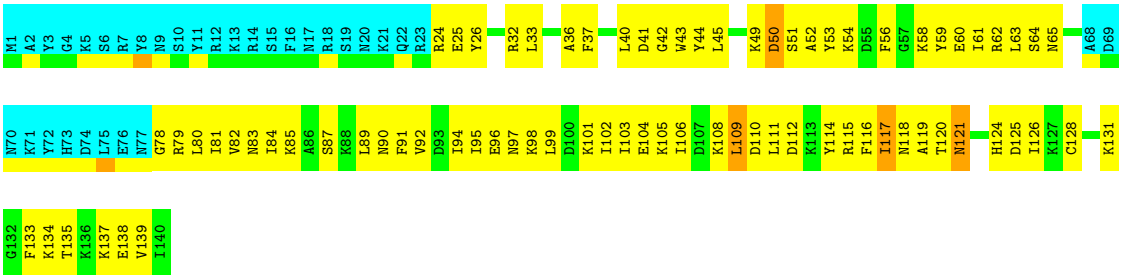
Chain A: 21% 51% • 24%

M1 A2 Y3 G4 K5 S6 R7 Y8 N9 S10 Y11 R12 K13 R14 S15 F16 N17 R18 S19 N20 K21 Q22 R23 R24 E25 E29 A36 F37 L40 D41 G42 W43 Y44 L45 S46 S47 N48 K49 D50 S51 A52 Y53 K54 D55 F56 G57 K58 Y59 E60 I61 R62 L63 S64 N65 H66 S67 A68
D69 N70 K71 Y72 H73 D74 L75 E76 N77 G78 R79 L80 I81 V82 N83 I84 K85 A86 S87 K88 L89 N90 F91 V92 D93 I94 I95 E96 N97 K98 L99 D100 K101 I102 I103 E104 K105 I106 D107 K108 L109 D110 L111 Y114 R115 F116 I117 N118 A119 T120 N121 H124 D125 I126 K127 C128 Y129 Y130
K131 G132 F133 K134 T135 K136 K137 E138 V139 I140

4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: AcrIIA5

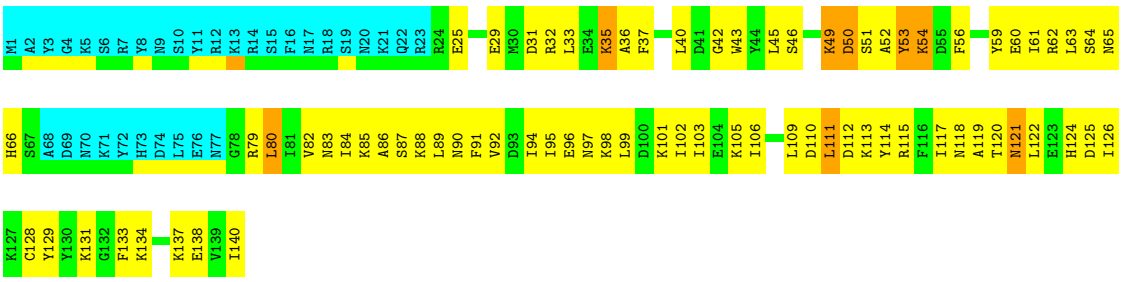
Chain A: 21% 52% • 24%



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: AcrIIA5

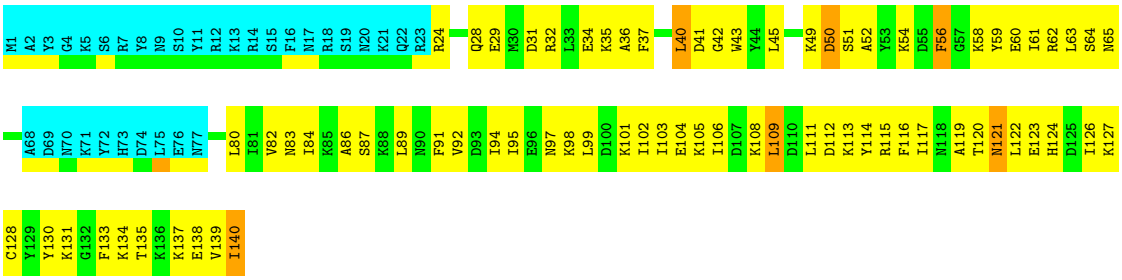
Chain A: 22% 49% 6% 24%



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: AcrIIA5

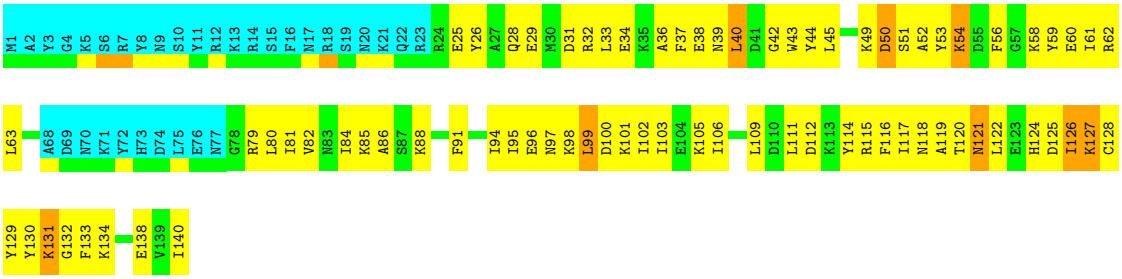
Chain A: 23% 49% • 24%



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: AcrIIA5

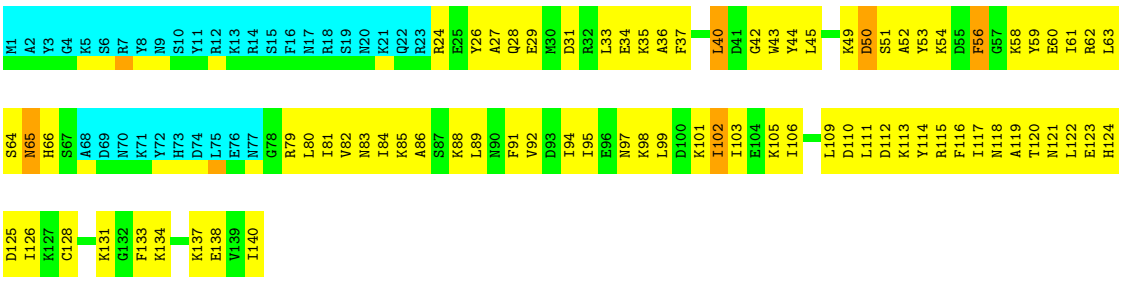
Chain A: 22% 49% 6% 24%



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: AcrIIA5

Chain A: 20% 53% • 24%



4.2.10 Score per residue for model 10

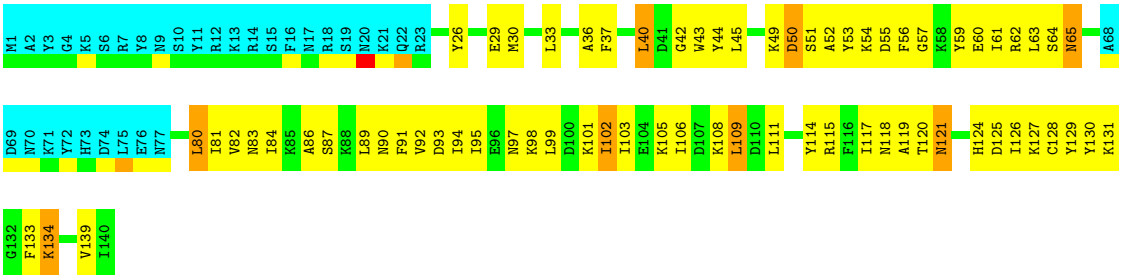
- Molecule 1: AcrIIA5

Chain A: 26% 47% • 24%

4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: AcrIIA5

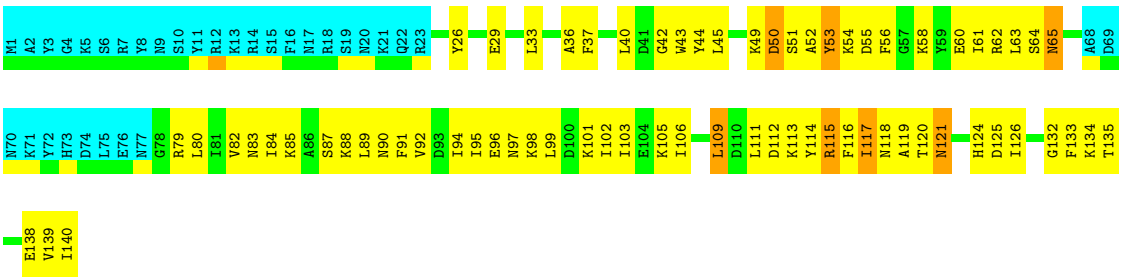
Chain A: 26% 44% 6% 24%



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: AcrIIA5

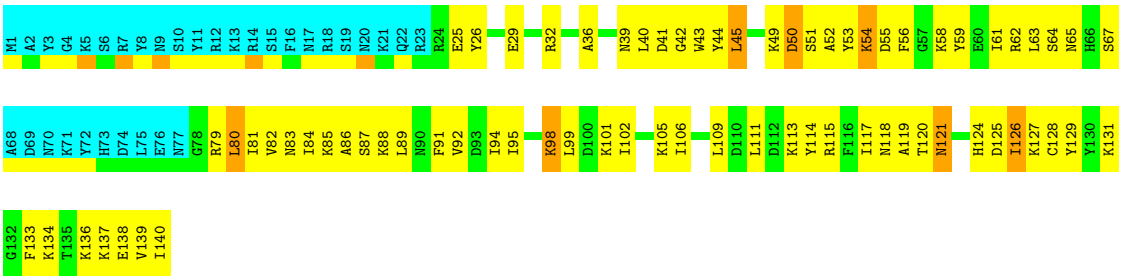
Chain A: 26% 45% 5% 24%



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: AcrIIA5

Chain A: 24% 47% 5% 24%



4.2.14 Score per residue for model 14

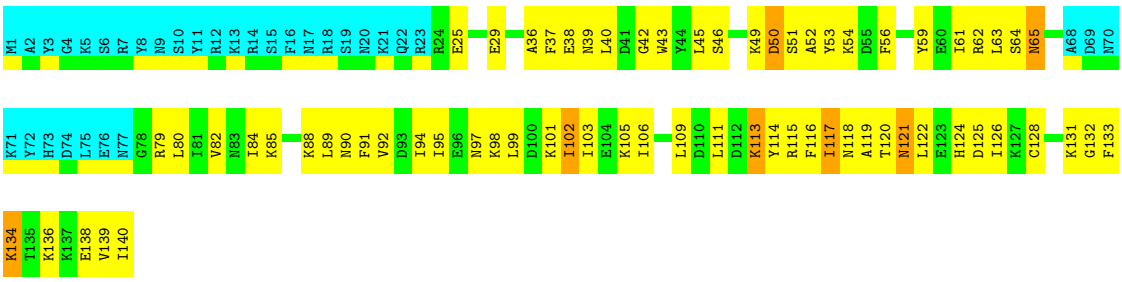
- Molecule 1: AcrIIA5

Chain A: 19% 52% 5% 24%

4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: AcrIIA5

Chain A: 28% 44% 5% 24%



4.2.16 Score per residue for model 16

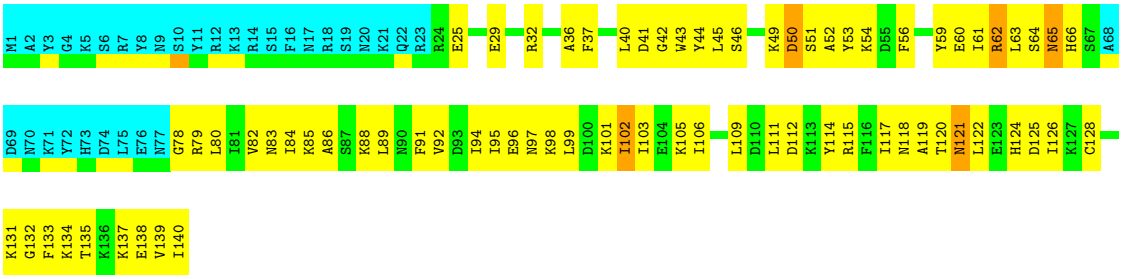
- Molecule 1: AcrIIA5

Chain A: 24% 49% • 24%

4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: AcrIIA5

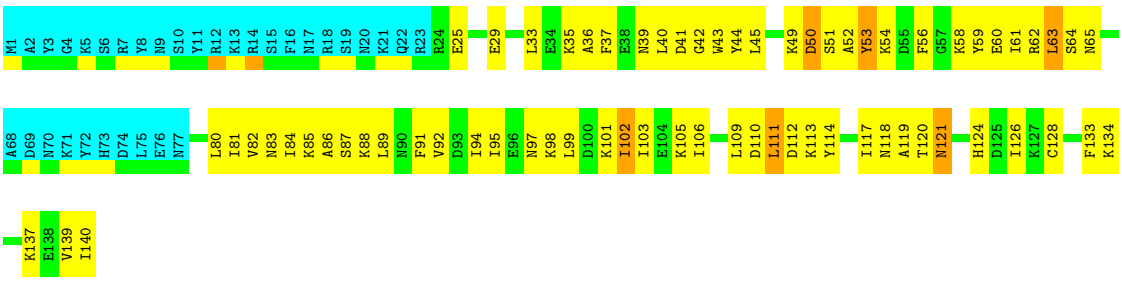
Chain A: 24% 49% • 24%



4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: AcrIIA5

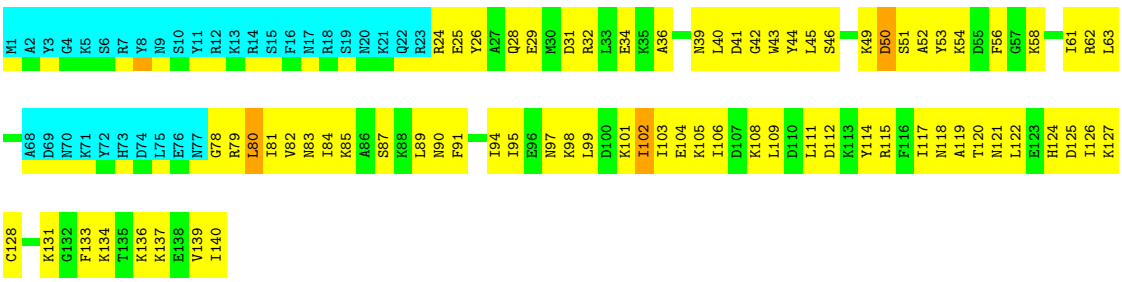
Chain A: 27% 45% • 24%



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: AcrIIA5

Chain A: 23% 51% • 24%



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: AcrIIA5

Chain A: 24% 49% • 24%

M1 A2 Y3 G4 K5 S6 R7 Y8 N9 S10 Y11 R12 K13 R14 S15 F16 N17 R18 S19 N20 K21 Q22 R23 R24 E25 Y26 A27 Q28 E29 M30 D31 R32 L33 E34 K35 A36 F37 L40 D41 G42 W43 Y44 L45 K49 D50 S51 A52 Y53 K54 D55 F56 Y59 E60 I61 R62 L63 S64

N65 H66 S67 A68 D69 N70 K71 Y72 H73 D74 L75 E76 N77 G78 R79 L80 I81 V82 N83 I84 K85 K88 L89 N90 F91 V92 D93 I94 I95 E96 N97 K98 L99 D100 K101 I102 I103 E104 K105 I106 L109 D110 L111 D112 K113 Y114 R115 F116 I117 N118 A119 T120 N121 H124 D125 I126 K127

C128 Y129 Y130 F133 K134 T135 K136 K137 E138 V139 I140

5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

The models were refined using the following method: *simulated annealing*.

Of the 200 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR NIH	structure calculation	

The following table shows chemical shift validation statistics as aggregates over all chemical shift files. Detailed validation can be found in section 7 of this report.

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1440
Number of shifts mapped to atoms	1439
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	1
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	75%

6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts (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	901	911	911	134±11
All	All	18020	18220	18220	2688

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 74.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:37:PHE:CG	1:A:45:LEU:HD11	1.07	1.84	8	9
1:A:37:PHE:CE1	1:A:45:LEU:HD21	1.07	1.84	8	5
1:A:109:LEU:HD11	1:A:114:TYR:CE1	1.04	1.85	9	3
1:A:63:LEU:HD22	1:A:91:PHE:CE1	1.04	1.86	12	5
1:A:59:TYR:CE2	1:A:111:LEU:HD21	1.03	1.89	1	5
1:A:63:LEU:HD11	1:A:84:ILE:HD12	1.00	1.29	8	6
1:A:126:ILE:O	1:A:139:VAL:HG23	1.00	1.56	2	13
1:A:92:VAL:O	1:A:95:ILE:HG22	0.99	1.56	15	4
1:A:84:ILE:CG1	1:A:119:ALA:HB3	0.97	1.89	19	4
1:A:80:LEU:HD23	1:A:81:ILE:N	0.97	1.72	18	2
1:A:122:LEU:HD12	1:A:123:GLU:N	0.97	1.75	1	4
1:A:59:TYR:CZ	1:A:111:LEU:HD21	0.97	1.94	18	5
1:A:99:LEU:HD22	1:A:102:ILE:HD11	0.96	1.35	8	1
1:A:103:ILE:O	1:A:106:ILE:HG22	0.95	1.61	18	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:59:TYR:CZ	1:A:111:LEU:HD12	0.95	1.95	5	1
1:A:80:LEU:HD12	1:A:111:LEU:O	0.95	1.62	9	1
1:A:111:LEU:HD23	1:A:112:ASP:N	0.95	1.77	6	1
1:A:109:LEU:HD12	1:A:114:TYR:OH	0.94	1.62	1	1
1:A:37:PHE:CD1	1:A:45:LEU:HD11	0.94	1.96	10	5
1:A:59:TYR:OH	1:A:106:ILE:HD11	0.93	1.63	5	3
1:A:117:ILE:HG23	1:A:128:CYS:SG	0.93	2.03	16	2
1:A:40:LEU:HD12	1:A:43:TRP:CD1	0.92	1.98	1	10
1:A:117:ILE:HD11	1:A:128:CYS:SG	0.92	2.04	9	1
1:A:60:GLU:O	1:A:81:ILE:HD12	0.91	1.65	14	3
1:A:37:PHE:CD2	1:A:45:LEU:HD11	0.91	1.99	7	5
1:A:37:PHE:CB	1:A:45:LEU:HD11	0.91	1.95	6	5
1:A:82:VAL:HG13	1:A:117:ILE:HG22	0.90	1.42	4	7
1:A:117:ILE:HG22	1:A:128:CYS:CB	0.90	1.95	17	3
1:A:82:VAL:CG2	1:A:117:ILE:HD11	0.90	1.96	13	8
1:A:84:ILE:HD13	1:A:98:LYS:HG2	0.90	1.42	14	4
1:A:80:LEU:HD23	1:A:114:TYR:O	0.90	1.67	8	2
1:A:43:TRP:CH2	1:A:95:ILE:HG23	0.89	2.03	2	1
1:A:109:LEU:HD12	1:A:109:LEU:O	0.88	1.68	14	4
1:A:109:LEU:HD13	1:A:114:TYR:OH	0.88	1.67	20	5
1:A:82:VAL:HG22	1:A:117:ILE:HD11	0.88	1.44	13	7
1:A:37:PHE:CD1	1:A:45:LEU:HD21	0.88	2.03	6	5
1:A:82:VAL:HG22	1:A:117:ILE:HB	0.88	1.46	15	11
1:A:36:ALA:O	1:A:40:LEU:HD13	0.87	1.70	20	3
1:A:102:ILE:HG22	1:A:111:LEU:HD11	0.86	1.44	19	1
1:A:139:VAL:O	1:A:140:ILE:HD13	0.86	1.69	13	2
1:A:82:VAL:HG22	1:A:117:ILE:CD1	0.85	2.02	20	8
1:A:109:LEU:HD13	1:A:109:LEU:N	0.85	1.87	16	3
1:A:82:VAL:HG22	1:A:117:ILE:HD13	0.85	1.48	16	2
1:A:84:ILE:HA	1:A:119:ALA:HB3	0.85	1.46	8	5
1:A:36:ALA:O	1:A:40:LEU:HD23	0.85	1.72	18	14
1:A:86:ALA:HB2	1:A:94:ILE:HG12	0.84	1.48	7	9
1:A:54:LYS:HD3	1:A:61:ILE:HD11	0.84	1.49	17	2
1:A:82:VAL:HG22	1:A:117:ILE:CG1	0.84	2.02	18	9
1:A:82:VAL:CG2	1:A:117:ILE:HD13	0.84	2.03	16	3
1:A:80:LEU:HD21	1:A:114:TYR:O	0.83	1.73	11	7
1:A:101:LYS:HD2	1:A:140:ILE:HG21	0.83	1.48	8	1
1:A:84:ILE:HG13	1:A:119:ALA:HB3	0.83	1.51	5	3
1:A:126:ILE:O	1:A:126:ILE:HD13	0.83	1.73	8	1
1:A:80:LEU:HD11	1:A:114:TYR:O	0.82	1.75	11	12
1:A:59:TYR:CG	1:A:111:LEU:HD22	0.82	2.09	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:63:LEU:HD12	1:A:63:LEU:N	0.81	1.90	17	5
1:A:105:LYS:HE3	1:A:140:ILE:HD13	0.81	1.49	17	1
1:A:91:PHE:O	1:A:94:ILE:HG22	0.81	1.76	19	20
1:A:54:LYS:HD2	1:A:61:ILE:HD11	0.81	1.53	12	2
1:A:63:LEU:CD1	1:A:84:ILE:HD12	0.81	2.06	8	4
1:A:126:ILE:O	1:A:139:VAL:HG13	0.80	1.76	17	2
1:A:94:ILE:HD11	1:A:98:LYS:NZ	0.80	1.90	13	1
1:A:80:LEU:HD13	1:A:81:ILE:N	0.80	1.91	8	4
1:A:105:LYS:CE	1:A:140:ILE:HG21	0.80	2.06	17	1
1:A:99:LEU:CD2	1:A:103:ILE:HD11	0.80	2.06	4	2
1:A:59:TYR:CD2	1:A:111:LEU:HD21	0.80	2.11	13	3
1:A:98:LYS:NZ	1:A:119:ALA:HB2	0.80	1.92	20	1
1:A:84:ILE:HG21	1:A:98:LYS:HG2	0.80	1.53	16	2
1:A:59:TYR:CD2	1:A:111:LEU:HD22	0.80	2.12	3	2
1:A:29:GLU:OE1	1:A:89:LEU:HD23	0.79	1.77	18	2
1:A:80:LEU:HD23	1:A:115:ARG:NH2	0.79	1.91	13	1
1:A:117:ILE:HG22	1:A:128:CYS:HB3	0.79	1.53	20	2
1:A:40:LEU:HD22	1:A:43:TRP:CD1	0.79	2.12	11	1
1:A:117:ILE:HG22	1:A:128:CYS:HB2	0.79	1.54	17	1
1:A:63:LEU:HD23	1:A:91:PHE:CE1	0.79	2.13	8	1
1:A:80:LEU:HD11	1:A:115:ARG:CA	0.78	2.08	14	5
1:A:37:PHE:CE2	1:A:45:LEU:HD21	0.78	2.12	7	1
1:A:52:ALA:HB3	1:A:63:LEU:CG	0.78	2.09	18	1
1:A:52:ALA:HB3	1:A:91:PHE:HZ	0.78	1.39	3	2
1:A:56:PHE:CD1	1:A:59:TYR:CZ	0.78	2.72	10	10
1:A:126:ILE:C	1:A:126:ILE:HD13	0.78	1.98	14	1
1:A:63:LEU:HD13	1:A:94:ILE:CG2	0.77	2.09	15	2
1:A:61:ILE:HG22	1:A:82:VAL:HB	0.77	1.57	12	9
1:A:95:ILE:O	1:A:99:LEU:HD13	0.77	1.79	15	6
1:A:59:TYR:CB	1:A:111:LEU:HD21	0.77	2.09	6	1
1:A:82:VAL:HG13	1:A:117:ILE:CG2	0.77	2.09	3	7
1:A:119:ALA:CA	1:A:126:ILE:HD13	0.77	2.09	13	2
1:A:52:ALA:HB3	1:A:63:LEU:HG	0.76	1.56	18	1
1:A:109:LEU:HD23	1:A:114:TYR:OH	0.76	1.79	13	1
1:A:105:LYS:HE2	1:A:140:ILE:HD12	0.76	1.57	6	2
1:A:45:LEU:HD21	1:A:52:ALA:HB2	0.76	1.56	1	8
1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:HD23	0.76	1.96	2	1
1:A:29:GLU:OE2	1:A:89:LEU:HD21	0.76	1.80	13	1
1:A:99:LEU:O	1:A:99:LEU:HD23	0.75	1.81	5	2
1:A:106:ILE:HD11	1:A:111:LEU:HD22	0.75	1.57	6	1
1:A:59:TYR:CD2	1:A:111:LEU:HD11	0.75	2.16	1	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:91:PHE:CZ	0.75	2.16	2	1
1:A:99:LEU:HD13	1:A:99:LEU:O	0.75	1.81	8	1
1:A:99:LEU:HD13	1:A:102:ILE:HD11	0.75	1.58	16	2
1:A:80:LEU:HD22	1:A:80:LEU:N	0.74	1.97	12	2
1:A:109:LEU:HD22	1:A:109:LEU:O	0.74	1.82	11	3
1:A:99:LEU:CD2	1:A:102:ILE:HD11	0.74	2.10	8	1
1:A:36:ALA:HB3	1:A:91:PHE:HZ	0.74	1.41	11	1
1:A:117:ILE:HG22	1:A:128:CYS:SG	0.74	2.22	19	5
1:A:95:ILE:O	1:A:99:LEU:HD22	0.73	1.83	15	1
1:A:45:LEU:CD2	1:A:52:ALA:HB2	0.73	2.12	1	7
1:A:59:TYR:CG	1:A:111:LEU:HD11	0.73	2.18	16	4
1:A:97:ASN:ND2	1:A:122:LEU:HD21	0.73	1.99	19	4
1:A:52:ALA:HB3	1:A:91:PHE:CZ	0.73	2.18	3	4
1:A:126:ILE:HD13	1:A:126:ILE:C	0.73	2.04	8	1
1:A:80:LEU:HD11	1:A:115:ARG:HA	0.73	1.57	14	5
1:A:106:ILE:CG1	1:A:111:LEU:HD13	0.73	2.13	7	1
1:A:109:LEU:HD22	1:A:114:TYR:OH	0.73	1.84	15	2
1:A:91:PHE:O	1:A:95:ILE:HG23	0.73	1.83	17	2
1:A:119:ALA:HA	1:A:126:ILE:HD13	0.73	1.59	15	2
1:A:97:ASN:HD22	1:A:122:LEU:HD21	0.72	1.43	2	4
1:A:102:ILE:N	1:A:102:ILE:HD13	0.72	1.99	11	3
1:A:54:LYS:NZ	1:A:99:LEU:HD11	0.72	2.00	4	2
1:A:140:ILE:HG22	1:A:140:ILE:O	0.72	1.83	17	3
1:A:33:LEU:HD11	1:A:45:LEU:CD2	0.72	2.14	20	1
1:A:29:GLU:OE2	1:A:33:LEU:HD11	0.72	1.85	12	1
1:A:39:ASN:OD1	1:A:40:LEU:HD13	0.72	1.83	13	1
1:A:106:ILE:HG13	1:A:111:LEU:HD13	0.71	1.62	7	2
1:A:114:TYR:CG	1:A:128:CYS:SG	0.71	2.83	10	7
1:A:126:ILE:HD12	1:A:140:ILE:CD1	0.71	2.15	14	1
1:A:84:ILE:HG12	1:A:119:ALA:HB3	0.71	1.61	18	10
1:A:59:TYR:CZ	1:A:111:LEU:HD22	0.71	2.20	9	1
1:A:114:TYR:CD2	1:A:128:CYS:SG	0.71	2.83	9	6
1:A:102:ILE:CG2	1:A:111:LEU:HD11	0.71	2.15	19	1
1:A:127:LYS:NZ	1:A:129:TYR:CZ	0.71	2.57	11	1
1:A:89:LEU:HD12	1:A:90:ASN:OD1	0.71	1.85	15	1
1:A:140:ILE:HG22	1:A:140:ILE:OXT	0.71	1.85	4	1
1:A:26:TYR:CE2	1:A:30:MET:SD	0.70	2.84	11	1
1:A:134:LYS:NZ	1:A:135:THR:HG22	0.70	2.01	17	1
1:A:82:VAL:HG22	1:A:117:ILE:HG13	0.70	1.64	18	7
1:A:63:LEU:HD11	1:A:98:LYS:NZ	0.70	2.02	12	1
1:A:33:LEU:HD21	1:A:37:PHE:CE1	0.69	2.22	11	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:LEU:HD22	1:A:43:TRP:CG	0.69	2.22	15	2
1:A:102:ILE:HG22	1:A:111:LEU:HD22	0.69	1.64	18	1
1:A:105:LYS:HD2	1:A:109:LEU:HD11	0.69	1.64	2	1
1:A:37:PHE:CZ	1:A:91:PHE:CE2	0.69	2.80	7	7
1:A:37:PHE:CZ	1:A:91:PHE:CZ	0.69	2.80	9	4
1:A:98:LYS:NZ	1:A:122:LEU:HD23	0.69	2.02	17	1
1:A:33:LEU:HD11	1:A:45:LEU:HD22	0.69	1.64	20	1
1:A:54:LYS:HZ2	1:A:99:LEU:HD11	0.69	1.48	4	1
1:A:109:LEU:HD22	1:A:138:GLU:OE1	0.69	1.88	14	1
1:A:109:LEU:HD11	1:A:113:LYS:HG3	0.68	1.62	13	1
1:A:45:LEU:HD21	1:A:91:PHE:CE2	0.68	2.23	20	1
1:A:62:ARG:C	1:A:63:LEU:HD12	0.68	2.07	3	7
1:A:114:TYR:CD1	1:A:128:CYS:SG	0.68	2.86	15	3
1:A:29:GLU:O	1:A:33:LEU:HD13	0.68	1.87	9	2
1:A:59:TYR:CD1	1:A:111:LEU:HD11	0.68	2.23	18	1
1:A:105:LYS:HD3	1:A:109:LEU:HD21	0.68	1.66	2	1
1:A:42:GLY:HA3	1:A:54:LYS:HZ2	0.68	1.47	19	1
1:A:86:ALA:HB2	1:A:94:ILE:HD13	0.68	1.65	18	3
1:A:101:LYS:NZ	1:A:140:ILE:HG22	0.68	2.03	12	1
1:A:120:THR:HG1	1:A:125:ASP:C	0.68	1.92	19	1
1:A:37:PHE:CZ	1:A:45:LEU:HD21	0.67	2.24	7	5
1:A:40:LEU:HD12	1:A:43:TRP:HD1	0.67	1.49	18	1
1:A:48:MET:SD	1:A:48:MET:N	0.67	2.67	4	1
1:A:117:ILE:CG2	1:A:128:CYS:SG	0.67	2.83	10	7
1:A:53:TYR:CZ	1:A:60:GLU:OE2	0.67	2.48	6	1
1:A:117:ILE:CD1	1:A:128:CYS:SG	0.67	2.83	9	1
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:54:LYS:NZ	0.67	2.63	8	2
1:A:99:LEU:HD22	1:A:102:ILE:CD1	0.67	2.18	8	1
1:A:80:LEU:HD23	1:A:112:ASP:HA	0.67	1.67	16	2
1:A:111:LEU:C	1:A:111:LEU:HD12	0.67	2.10	20	2
1:A:37:PHE:CE2	1:A:52:ALA:CB	0.66	2.79	9	7
1:A:62:ARG:CZ	1:A:83:ASN:OD1	0.66	2.44	17	1
1:A:63:LEU:HD23	1:A:64:SER:N	0.66	2.05	2	1
1:A:43:TRP:HZ2	1:A:99:LEU:HD21	0.66	1.49	3	3
1:A:82:VAL:HG22	1:A:117:ILE:CG2	0.66	2.21	3	4
1:A:63:LEU:HD11	1:A:95:ILE:HD11	0.66	1.66	11	1
1:A:40:LEU:HD22	1:A:43:TRP:CB	0.66	2.20	15	2
1:A:43:TRP:HZ2	1:A:99:LEU:HD11	0.66	1.51	16	1
1:A:105:LYS:CE	1:A:140:ILE:HD12	0.66	2.21	6	2
1:A:37:PHE:CD1	1:A:45:LEU:CD1	0.66	2.79	5	2
1:A:105:LYS:HE3	1:A:140:ILE:HD12	0.66	1.67	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:109:LEU:C	1:A:109:LEU:HD22	0.66	2.11	16	2
1:A:106:ILE:CG1	1:A:111:LEU:HD23	0.66	2.21	16	1
1:A:54:LYS:CE	1:A:56:PHE:CZ	0.65	2.79	1	5
1:A:29:GLU:OE1	1:A:89:LEU:HD22	0.65	1.90	3	1
1:A:53:TYR:CE1	1:A:62:ARG:NH2	0.65	2.64	6	3
1:A:62:ARG:CZ	1:A:83:ASN:ND2	0.65	2.58	14	2
1:A:117:ILE:CG1	1:A:128:CYS:SG	0.65	2.84	8	5
1:A:126:ILE:HD12	1:A:127:LYS:N	0.65	2.06	13	1
1:A:126:ILE:HD12	1:A:140:ILE:HD12	0.65	1.68	14	1
1:A:33:LEU:CD1	1:A:91:PHE:CD2	0.65	2.80	6	4
1:A:37:PHE:CZ	1:A:52:ALA:CB	0.65	2.79	1	4
1:A:63:LEU:CD2	1:A:95:ILE:HG22	0.65	2.21	17	2
1:A:109:LEU:CD1	1:A:114:TYR:CE1	0.65	2.80	15	6
1:A:36:ALA:HB3	1:A:91:PHE:CZ	0.65	2.26	11	1
1:A:63:LEU:HD13	1:A:94:ILE:HG21	0.65	1.67	19	1
1:A:52:ALA:HB3	1:A:63:LEU:HD13	0.65	1.68	12	1
1:A:54:LYS:NZ	1:A:63:LEU:HD13	0.65	2.06	8	2
1:A:80:LEU:H	1:A:80:LEU:HD22	0.65	1.50	16	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:54:LYS:CE	0.65	2.79	5	1
1:A:54:LYS:CE	1:A:56:PHE:CE1	0.65	2.79	17	2
1:A:59:TYR:CE2	1:A:111:LEU:HD22	0.65	2.28	9	2
1:A:33:LEU:O	1:A:37:PHE:CD1	0.65	2.50	9	2
1:A:32:ARG:CZ	1:A:89:LEU:O	0.65	2.45	17	1
1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CD1	0.64	2.60	16	3
1:A:109:LEU:HD13	1:A:114:TYR:HE1	0.64	1.52	14	1
1:A:98:LYS:NZ	1:A:119:ALA:HB1	0.64	2.05	11	3
1:A:43:TRP:CH2	1:A:95:ILE:CG2	0.64	2.80	2	1
1:A:59:TYR:CE2	1:A:111:LEU:HD12	0.64	2.27	11	5
1:A:105:LYS:NZ	1:A:128:CYS:SG	0.64	2.69	5	2
1:A:54:LYS:CD	1:A:56:PHE:CZ	0.64	2.80	15	2
1:A:94:ILE:HD11	1:A:98:LYS:HZ1	0.64	1.51	13	1
1:A:84:ILE:HD13	1:A:98:LYS:CG	0.64	2.22	14	4
1:A:37:PHE:CE2	1:A:52:ALA:HB1	0.64	2.27	10	4
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:99:LEU:HD21	0.64	2.27	3	2
1:A:105:LYS:HD2	1:A:111:LEU:HD21	0.64	1.69	5	1
1:A:66:HIS:CD2	1:A:121:ASN:ND2	0.64	2.66	6	1
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:56:PHE:CZ	0.64	2.85	20	1
1:A:114:TYR:CB	1:A:117:ILE:HD11	0.64	2.22	14	5
1:A:42:GLY:O	1:A:43:TRP:CE3	0.64	2.51	18	2
1:A:49:LYS:O	1:A:50:ASP:C	0.63	2.36	8	20
1:A:80:LEU:HD11	1:A:115:ARG:O	0.63	1.93	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:ALA:CB	1:A:94:ILE:HD13	0.63	2.23	18	2
1:A:101:LYS:C	1:A:105:LYS:HZ3	0.63	1.97	12	2
1:A:49:LYS:O	1:A:51:SER:N	0.63	2.31	16	20
1:A:53:TYR:CD2	1:A:60:GLU:OE2	0.63	2.51	12	1
1:A:56:PHE:CD1	1:A:59:TYR:CE1	0.63	2.86	20	9
1:A:80:LEU:HD13	1:A:80:LEU:C	0.63	2.13	4	2
1:A:109:LEU:HD13	1:A:114:TYR:CE1	0.63	2.28	14	4
1:A:133:PHE:CD1	1:A:133:PHE:O	0.63	2.52	15	1
1:A:33:LEU:HD11	1:A:91:PHE:CD2	0.63	2.29	6	3
1:A:37:PHE:HB3	1:A:45:LEU:HD11	0.63	1.68	11	2
1:A:59:TYR:CZ	1:A:106:ILE:HD11	0.63	2.29	4	3
1:A:53:TYR:CE2	1:A:60:GLU:OE2	0.63	2.52	6	1
1:A:126:ILE:HG23	1:A:140:ILE:HD12	0.63	1.70	20	1
1:A:56:PHE:CD2	1:A:59:TYR:OH	0.63	2.52	9	2
1:A:63:LEU:HD21	1:A:98:LYS:NZ	0.63	2.08	19	1
1:A:62:ARG:NH2	1:A:83:ASN:ND2	0.63	2.47	11	2
1:A:80:LEU:HD12	1:A:112:ASP:HA	0.63	1.70	18	1
1:A:63:LEU:HD11	1:A:98:LYS:HZ1	0.62	1.52	12	1
1:A:37:PHE:CE1	1:A:43:TRP:O	0.62	2.51	12	4
1:A:53:TYR:CZ	1:A:62:ARG:NH2	0.62	2.66	6	2
1:A:63:LEU:N	1:A:63:LEU:CD1	0.62	2.63	12	5
1:A:80:LEU:HD23	1:A:80:LEU:C	0.62	2.14	9	2
1:A:59:TYR:CG	1:A:111:LEU:CD2	0.62	2.82	15	2
1:A:63:LEU:HD12	1:A:91:PHE:CE1	0.62	2.29	19	1
1:A:59:TYR:N	1:A:79:ARG:NH2	0.62	2.47	4	1
1:A:82:VAL:HG22	1:A:117:ILE:HG21	0.62	1.72	3	1
1:A:63:LEU:HD21	1:A:95:ILE:HG22	0.62	1.72	7	2
1:A:109:LEU:CD2	1:A:109:LEU:C	0.62	2.68	11	1
1:A:134:LYS:CE	1:A:134:LYS:N	0.62	2.63	11	1
1:A:89:LEU:HD12	1:A:89:LEU:N	0.62	2.10	20	3
1:A:54:LYS:NZ	1:A:56:PHE:CZ	0.61	2.68	6	3
1:A:63:LEU:CB	1:A:91:PHE:CE1	0.61	2.84	3	3
1:A:52:ALA:CB	1:A:91:PHE:CZ	0.61	2.83	17	5
1:A:120:THR:CG2	1:A:124:HIS:CB	0.61	2.79	14	4
1:A:86:ALA:HB2	1:A:94:ILE:CD1	0.61	2.26	10	1
1:A:119:ALA:HB2	1:A:126:ILE:HD12	0.61	1.70	16	4
1:A:80:LEU:CD1	1:A:111:LEU:O	0.61	2.49	5	3
1:A:109:LEU:HD12	1:A:110:ASP:O	0.61	1.96	9	1
1:A:114:TYR:CE2	1:A:138:GLU:OE1	0.61	2.54	5	1
1:A:59:TYR:CE2	1:A:111:LEU:CD2	0.61	2.80	20	3
1:A:45:LEU:HD12	1:A:45:LEU:N	0.61	2.11	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:120:THR:O	1:A:121:ASN:O	0.61	2.18	14	13
1:A:98:LYS:O	1:A:101:LYS:CG	0.61	2.49	13	1
1:A:35:LYS:NZ	1:A:39:ASN:ND2	0.61	2.48	18	1
1:A:140:ILE:HD12	1:A:140:ILE:N	0.61	2.11	20	1
1:A:29:GLU:CD	1:A:89:LEU:HD11	0.61	2.16	13	1
1:A:86:ALA:HB2	1:A:94:ILE:CG1	0.61	2.26	2	3
1:A:101:LYS:NZ	1:A:119:ALA:CB	0.61	2.63	13	1
1:A:117:ILE:HG13	1:A:128:CYS:SG	0.60	2.36	8	4
1:A:92:VAL:HA	1:A:95:ILE:HD12	0.60	1.72	10	5
1:A:65:ASN:OD1	1:A:66:HIS:N	0.60	2.35	6	2
1:A:99:LEU:CD2	1:A:103:ILE:CD1	0.60	2.79	4	2
1:A:126:ILE:CG2	1:A:140:ILE:HD12	0.60	2.26	7	2
1:A:113:LYS:CD	1:A:113:LYS:N	0.60	2.63	15	1
1:A:82:VAL:CG2	1:A:117:ILE:CG1	0.60	2.79	18	1
1:A:44:TYR:HB2	1:A:53:TYR:CZ	0.60	2.32	5	10
1:A:80:LEU:CG	1:A:114:TYR:O	0.60	2.50	2	8
1:A:29:GLU:CG	1:A:89:LEU:HD23	0.60	2.26	12	1
1:A:63:LEU:HD11	1:A:95:ILE:HD13	0.60	1.73	14	1
1:A:98:LYS:CE	1:A:119:ALA:CB	0.60	2.80	1	1
1:A:109:LEU:C	1:A:109:LEU:CD2	0.60	2.69	4	2
1:A:29:GLU:HG3	1:A:89:LEU:HD23	0.60	1.74	12	1
1:A:63:LEU:HD11	1:A:95:ILE:CD1	0.60	2.27	14	1
1:A:84:ILE:HG23	1:A:98:LYS:HG2	0.60	1.72	2	1
1:A:37:PHE:CE2	1:A:52:ALA:HB2	0.60	2.31	9	1
1:A:98:LYS:O	1:A:102:ILE:CG1	0.60	2.49	17	7
1:A:80:LEU:CD1	1:A:114:TYR:O	0.60	2.50	6	14
1:A:37:PHE:CE2	1:A:91:PHE:CZ	0.60	2.90	9	2
1:A:30:MET:O	1:A:34:GLU:OE1	0.60	2.20	3	1
1:A:127:LYS:HG2	1:A:139:VAL:HG22	0.60	1.73	14	1
1:A:87:SER:O	1:A:91:PHE:N	0.60	2.35	11	10
1:A:114:TYR:HB3	1:A:117:ILE:HD11	0.60	1.71	3	6
1:A:80:LEU:HD11	1:A:114:TYR:C	0.60	2.17	3	2
1:A:54:LYS:HD2	1:A:56:PHE:CZ	0.60	2.32	15	2
1:A:120:THR:OG1	1:A:124:HIS:CB	0.59	2.50	13	9
1:A:89:LEU:O	1:A:89:LEU:CD1	0.59	2.50	3	1
1:A:80:LEU:HD13	1:A:114:TYR:O	0.59	1.97	5	1
1:A:43:TRP:NE1	1:A:54:LYS:CE	0.59	2.65	19	3
1:A:56:PHE:CE1	1:A:59:TYR:OH	0.59	2.51	15	2
1:A:109:LEU:HD21	1:A:114:TYR:OH	0.59	1.97	9	1
1:A:121:ASN:ND2	1:A:123:GLU:OE1	0.59	2.35	2	1
1:A:95:ILE:O	1:A:99:LEU:CB	0.59	2.51	4	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:59:TYR:HB3	1:A:111:LEU:HD21	0.59	1.74	6	1
1:A:63:LEU:CB	1:A:84:ILE:O	0.59	2.51	18	1
1:A:99:LEU:O	1:A:102:ILE:CG1	0.59	2.50	4	10
1:A:54:LYS:NZ	1:A:56:PHE:CE1	0.59	2.63	7	1
1:A:38:GLU:OE1	1:A:39:ASN:ND2	0.59	2.36	15	2
1:A:105:LYS:HD3	1:A:140:ILE:HD13	0.59	1.75	14	1
1:A:79:ARG:NH2	1:A:112:ASP:OD2	0.59	2.36	2	2
1:A:36:ALA:O	1:A:40:LEU:CD1	0.59	2.49	13	3
1:A:53:TYR:OH	1:A:62:ARG:NH2	0.59	2.35	12	2
1:A:95:ILE:O	1:A:99:LEU:CG	0.59	2.51	18	3
1:A:82:VAL:HG11	1:A:98:LYS:NZ	0.59	2.12	8	1
1:A:32:ARG:NH1	1:A:89:LEU:CD1	0.59	2.66	3	1
1:A:98:LYS:NZ	1:A:126:ILE:CD1	0.59	2.65	9	2
1:A:40:LEU:CD2	1:A:43:TRP:CD1	0.59	2.84	11	2
1:A:109:LEU:HD22	1:A:109:LEU:C	0.59	2.17	11	1
1:A:101:LYS:NZ	1:A:119:ALA:HB2	0.59	2.11	13	1
1:A:63:LEU:HD11	1:A:84:ILE:CD1	0.59	2.27	1	1
1:A:120:THR:OG1	1:A:124:HIS:ND1	0.59	2.35	1	1
1:A:105:LYS:NZ	1:A:138:GLU:CD	0.59	2.56	2	2
1:A:94:ILE:CD1	1:A:98:LYS:NZ	0.59	2.65	13	1
1:A:99:LEU:HD21	1:A:103:ILE:HD11	0.59	1.73	19	2
1:A:37:PHE:HB2	1:A:45:LEU:HD12	0.59	1.75	15	1
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:54:LYS:CD	0.59	2.85	2	2
1:A:32:ARG:NH1	1:A:89:LEU:O	0.59	2.36	17	2
1:A:51:SER:OG	1:A:62:ARG:NH2	0.59	2.35	7	1
1:A:101:LYS:HD2	1:A:140:ILE:HD13	0.59	1.73	9	1
1:A:65:ASN:OD1	1:A:88:LYS:NZ	0.59	2.36	10	1
1:A:47:SER:OG	1:A:48:MET:CE	0.59	2.51	4	1
1:A:109:LEU:CD2	1:A:114:TYR:OH	0.59	2.51	13	3
1:A:104:GLU:O	1:A:107:ASP:OD1	0.58	2.21	14	1
1:A:82:VAL:HG22	1:A:117:ILE:HG12	0.58	1.75	18	1
1:A:82:VAL:CG2	1:A:117:ILE:CD1	0.58	2.79	20	6
1:A:42:GLY:O	1:A:54:LYS:CB	0.58	2.51	8	7
1:A:43:TRP:CH2	1:A:63:LEU:HD11	0.58	2.32	10	1
1:A:109:LEU:HD13	1:A:114:TYR:CZ	0.58	2.33	19	2
1:A:94:ILE:O	1:A:98:LYS:CB	0.58	2.52	1	4
1:A:28:GLN:O	1:A:31:ASP:OD1	0.58	2.22	9	2
1:A:127:LYS:CE	1:A:129:TYR:OH	0.58	2.52	11	1
1:A:36:ALA:O	1:A:39:ASN:OD1	0.58	2.22	13	2
1:A:80:LEU:CD1	1:A:115:ARG:O	0.58	2.51	1	4
1:A:105:LYS:O	1:A:109:LEU:O	0.58	2.21	20	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:63:LEU:CD1	0.58	2.87	10	2
1:A:66:HIS:O	1:A:85:LYS:CE	0.58	2.52	4	2
1:A:80:LEU:CD2	1:A:115:ARG:C	0.58	2.72	8	2
1:A:33:LEU:CD2	1:A:37:PHE:CE1	0.58	2.86	11	3
1:A:38:GLU:OE1	1:A:39:ASN:OD1	0.58	2.21	14	1
1:A:109:LEU:CD2	1:A:138:GLU:OE1	0.58	2.52	14	1
1:A:83:ASN:O	1:A:118:ASN:OD1	0.58	2.22	18	10
1:A:54:LYS:NZ	1:A:61:ILE:O	0.58	2.36	2	1
1:A:121:ASN:O	1:A:124:HIS:O	0.58	2.22	8	1
1:A:120:THR:OG1	1:A:125:ASP:O	0.58	2.21	10	14
1:A:29:GLU:OE1	1:A:32:ARG:NH2	0.58	2.36	7	1
1:A:54:LYS:HE3	1:A:56:PHE:CZ	0.58	2.34	11	3
1:A:87:SER:O	1:A:90:ASN:OD1	0.58	2.22	19	2
1:A:124:HIS:ND1	1:A:125:ASP:O	0.58	2.35	19	2
1:A:60:GLU:OE2	1:A:62:ARG:NH2	0.58	2.37	4	1
1:A:106:ILE:O	1:A:109:LEU:O	0.58	2.22	15	6
1:A:43:TRP:HZ3	1:A:54:LYS:HZ3	0.58	1.39	8	1
1:A:29:GLU:O	1:A:33:LEU:CD1	0.58	2.52	9	1
1:A:95:ILE:O	1:A:99:LEU:HD23	0.58	1.99	9	3
1:A:43:TRP:CE2	1:A:54:LYS:HE2	0.58	2.34	19	3
1:A:98:LYS:O	1:A:102:ILE:CD1	0.58	2.51	19	1
1:A:96:GLU:OE1	1:A:97:ASN:OD1	0.58	2.22	20	2
1:A:101:LYS:O	1:A:105:LYS:CG	0.58	2.51	17	4
1:A:43:TRP:CH2	1:A:95:ILE:HD12	0.58	2.33	8	1
1:A:60:GLU:OE1	1:A:81:ILE:CD1	0.58	2.51	18	1
1:A:29:GLU:CB	1:A:88:LYS:NZ	0.58	2.67	2	1
1:A:62:ARG:CG	1:A:83:ASN:OD1	0.58	2.52	4	1
1:A:43:TRP:CH2	1:A:54:LYS:CD	0.58	2.86	8	1
1:A:95:ILE:O	1:A:99:LEU:CD1	0.58	2.51	14	2
1:A:109:LEU:CD1	1:A:114:TYR:OH	0.57	2.52	19	8
1:A:29:GLU:OE2	1:A:33:LEU:CD1	0.57	2.51	12	1
1:A:121:ASN:OD1	1:A:124:HIS:CB	0.57	2.52	19	1
1:A:116:PHE:C	1:A:117:ILE:HD12	0.57	2.19	8	7
1:A:92:VAL:O	1:A:96:GLU:OE1	0.57	2.21	12	4
1:A:125:ASP:OD2	1:A:139:VAL:CG1	0.57	2.52	5	1
1:A:25:GLU:OE2	1:A:29:GLU:CG	0.57	2.52	6	2
1:A:98:LYS:CE	1:A:119:ALA:HB2	0.57	2.29	1	2
1:A:99:LEU:HD23	1:A:103:ILE:CD1	0.57	2.29	4	1
1:A:55:ASP:O	1:A:55:ASP:OD1	0.57	2.23	13	3
1:A:115:ARG:CD	1:A:116:PHE:CE1	0.57	2.88	1	1
1:A:80:LEU:CD2	1:A:114:TYR:O	0.57	2.52	3	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:LEU:HD23	1:A:90:ASN:OD1	0.57	2.00	6	2
1:A:79:ARG:NH2	1:A:112:ASP:CG	0.57	2.57	8	1
1:A:101:LYS:C	1:A:105:LYS:NZ	0.57	2.58	20	2
1:A:126:ILE:HG23	1:A:140:ILE:H	0.57	1.58	13	1
1:A:59:TYR:CG	1:A:111:LEU:HD12	0.57	2.34	14	1
1:A:66:HIS:NE2	1:A:121:ASN:ND2	0.57	2.53	6	1
1:A:106:ILE:HB	1:A:111:LEU:HD11	0.57	1.75	9	1
1:A:84:ILE:CD1	1:A:119:ALA:HB3	0.57	2.29	11	1
1:A:45:LEU:HD23	1:A:52:ALA:HA	0.57	1.75	12	1
1:A:52:ALA:HB2	1:A:91:PHE:CZ	0.57	2.35	12	1
1:A:54:LYS:O	1:A:60:GLU:OE1	0.57	2.22	12	1
1:A:65:ASN:ND2	1:A:66:HIS:ND1	0.57	2.53	9	2
1:A:53:TYR:CD1	1:A:60:GLU:OE2	0.57	2.57	17	1
1:A:80:LEU:CD2	1:A:115:ARG:O	0.57	2.53	4	1
1:A:37:PHE:CD2	1:A:45:LEU:HD21	0.57	2.34	7	1
1:A:96:GLU:O	1:A:100:ASP:CG	0.57	2.43	8	1
1:A:37:PHE:CE1	1:A:91:PHE:CE1	0.57	2.92	11	1
1:A:89:LEU:CD1	1:A:90:ASN:OD1	0.57	2.52	15	1
1:A:106:ILE:HG12	1:A:111:LEU:HD23	0.57	1.76	16	1
1:A:24:ARG:O	1:A:28:GLN:OE1	0.57	2.22	19	1
1:A:36:ALA:O	1:A:40:LEU:CD2	0.57	2.52	9	9
1:A:41:ASP:O	1:A:41:ASP:OD1	0.57	2.23	7	3
1:A:59:TYR:OH	1:A:106:ILE:CD1	0.57	2.52	4	1
1:A:86:ALA:CB	1:A:94:ILE:HG21	0.57	2.30	13	4
1:A:126:ILE:HD13	1:A:126:ILE:O	0.57	1.99	14	1
1:A:114:TYR:OH	1:A:138:GLU:OE1	0.57	2.23	2	8
1:A:113:LYS:O	1:A:115:ARG:NH1	0.57	2.38	7	2
1:A:80:LEU:HB3	1:A:117:ILE:HD11	0.57	1.77	12	2
1:A:54:LYS:HZ3	1:A:56:PHE:HE1	0.57	1.35	7	1
1:A:29:GLU:CD	1:A:89:LEU:HD23	0.56	2.20	11	3
1:A:50:ASP:O	1:A:50:ASP:OD1	0.56	2.23	11	3
1:A:37:PHE:CD1	1:A:43:TRP:O	0.56	2.58	12	1
1:A:54:LYS:HE2	1:A:56:PHE:CZ	0.56	2.35	1	3
1:A:105:LYS:HZ2	1:A:138:GLU:CD	0.56	2.03	2	2
1:A:119:ALA:CB	1:A:126:ILE:HD13	0.56	2.30	13	1
1:A:60:GLU:OE1	1:A:81:ILE:HD12	0.56	2.00	18	1
1:A:60:GLU:O	1:A:80:LEU:O	0.56	2.23	6	3
1:A:63:LEU:CD2	1:A:91:PHE:CE1	0.56	2.89	7	4
1:A:63:LEU:HD21	1:A:95:ILE:CG2	0.56	2.31	7	1
1:A:54:LYS:HE3	1:A:56:PHE:CE2	0.56	2.35	11	1
1:A:55:ASP:OD1	1:A:60:GLU:OE1	0.56	2.24	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:59:TYR:CZ	1:A:106:ILE:CD1	0.56	2.88	14	1
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:54:LYS:HE3	0.56	2.35	18	1
1:A:110:ASP:CG	1:A:112:ASP:CG	0.56	2.64	18	1
1:A:110:ASP:OD2	1:A:112:ASP:OD2	0.56	2.23	18	1
1:A:40:LEU:HD12	1:A:43:TRP:NE1	0.56	2.14	1	4
1:A:105:LYS:NZ	1:A:138:GLU:OE2	0.56	2.37	2	2
1:A:29:GLU:OE2	1:A:88:LYS:O	0.56	2.24	16	4
1:A:43:TRP:CH2	1:A:54:LYS:HD3	0.56	2.35	8	2
1:A:58:LYS:O	1:A:112:ASP:OD1	0.56	2.23	19	1
1:A:84:ILE:HD13	1:A:98:LYS:HB3	0.56	1.77	3	3
1:A:112:ASP:O	1:A:112:ASP:OD1	0.56	2.24	9	4
1:A:43:TRP:CE2	1:A:95:ILE:HD11	0.56	2.36	15	2
1:A:63:LEU:CD1	1:A:98:LYS:NZ	0.56	2.68	12	1
1:A:64:SER:OG	1:A:67:SER:O	0.56	2.23	2	1
1:A:58:LYS:NZ	1:A:110:ASP:OD2	0.56	2.38	5	1
1:A:100:ASP:O	1:A:104:GLU:OE1	0.56	2.22	16	1
1:A:63:LEU:CD2	1:A:95:ILE:CG2	0.56	2.84	7	1
1:A:129:TYR:CE2	1:A:137:LYS:HD3	0.56	2.35	13	1
1:A:45:LEU:O	1:A:45:LEU:HD12	0.56	2.01	13	1
1:A:78:GLY:O	1:A:79:ARG:NE	0.56	2.39	19	1
1:A:80:LEU:C	1:A:80:LEU:CD2	0.56	2.74	9	2
1:A:63:LEU:HD12	1:A:91:PHE:CZ	0.56	2.35	14	1
1:A:111:LEU:HD23	1:A:112:ASP:H	0.56	1.57	6	1
1:A:27:ALA:O	1:A:31:ASP:OD1	0.56	2.23	20	2
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:54:LYS:HD3	0.55	2.36	2	2
1:A:63:LEU:HB2	1:A:91:PHE:CE1	0.55	2.35	3	3
1:A:86:ALA:HB1	1:A:94:ILE:HG21	0.55	1.78	11	2
1:A:108:LYS:HB2	1:A:109:LEU:HD23	0.55	1.78	2	1
1:A:63:LEU:HD22	1:A:91:PHE:CD1	0.55	2.35	12	1
1:A:80:LEU:HD11	1:A:115:ARG:C	0.55	2.22	14	5
1:A:59:TYR:CE2	1:A:106:ILE:HD11	0.55	2.35	2	1
1:A:56:PHE:CD1	1:A:59:TYR:OH	0.55	2.56	15	2
1:A:80:LEU:CD1	1:A:82:VAL:HG23	0.55	2.31	4	1
1:A:127:LYS:NZ	1:A:129:TYR:CE1	0.55	2.69	11	2
1:A:80:LEU:N	1:A:80:LEU:CD2	0.55	2.68	12	1
1:A:98:LYS:HZ3	1:A:119:ALA:HB2	0.55	1.59	20	1
1:A:43:TRP:CE2	1:A:54:LYS:HE3	0.55	2.37	10	5
1:A:85:LYS:O	1:A:121:ASN:OD1	0.55	2.23	9	2
1:A:52:ALA:HB3	1:A:91:PHE:CE1	0.55	2.37	17	2
1:A:120:THR:HG22	1:A:124:HIS:HB2	0.55	1.78	7	4
1:A:32:ARG:NH2	1:A:89:LEU:CD2	0.55	2.70	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:80:LEU:HD22	1:A:80:LEU:H	0.55	1.59	12	1
1:A:65:ASN:OD1	1:A:67:SER:N	0.55	2.40	13	1
1:A:54:LYS:HZ1	1:A:99:LEU:HD23	0.55	1.62	18	1
1:A:64:SER:O	1:A:65:ASN:O	0.55	2.23	11	6
1:A:92:VAL:O	1:A:95:ILE:CG1	0.55	2.55	13	3
1:A:59:TYR:CD1	1:A:61:ILE:HG23	0.55	2.37	6	17
1:A:98:LYS:HE2	1:A:119:ALA:HB2	0.55	1.78	1	1
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:54:LYS:HE2	0.55	2.37	2	1
1:A:96:GLU:OE2	1:A:100:ASP:OD2	0.55	2.24	2	1
1:A:120:THR:CG2	1:A:124:HIS:HB2	0.55	2.32	14	5
1:A:80:LEU:HD23	1:A:81:ILE:H	0.55	1.58	18	1
1:A:36:ALA:C	1:A:40:LEU:HD12	0.55	2.22	19	1
1:A:63:LEU:CD2	1:A:98:LYS:NZ	0.55	2.70	19	1
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:54:LYS:CE	0.55	2.90	13	4
1:A:99:LEU:HD23	1:A:99:LEU:C	0.55	2.21	17	6
1:A:58:LYS:CE	1:A:110:ASP:OD2	0.55	2.54	5	1
1:A:101:LYS:O	1:A:105:LYS:NZ	0.55	2.36	20	2
1:A:43:TRP:CH2	1:A:54:LYS:HB2	0.55	2.36	3	1
1:A:54:LYS:NZ	1:A:99:LEU:CD2	0.55	2.70	18	1
1:A:84:ILE:HG21	1:A:98:LYS:HG3	0.54	1.78	6	3
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:99:LEU:HD11	0.54	2.37	15	2
1:A:118:ASN:O	1:A:126:ILE:HD12	0.54	2.02	15	1
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:54:LYS:HB2	0.54	2.38	3	1
1:A:89:LEU:CD1	1:A:89:LEU:C	0.54	2.75	3	1
1:A:54:LYS:CD	1:A:61:ILE:HD11	0.54	2.30	12	1
1:A:54:LYS:HD2	1:A:56:PHE:CE1	0.54	2.36	15	1
1:A:106:ILE:HA	1:A:109:LEU:O	0.54	2.02	8	18
1:A:43:TRP:CE3	1:A:54:LYS:HE2	0.54	2.37	2	2
1:A:97:ASN:O	1:A:101:LYS:HG2	0.54	2.02	8	19
1:A:35:LYS:CD	1:A:35:LYS:N	0.54	2.71	6	1
1:A:61:ILE:CD1	1:A:102:ILE:CD1	0.54	2.86	6	1
1:A:111:LEU:HD12	1:A:111:LEU:N	0.54	2.16	9	3
1:A:63:LEU:HD13	1:A:94:ILE:HG23	0.54	1.78	15	1
1:A:81:ILE:O	1:A:117:ILE:HD12	0.54	2.01	16	1
1:A:99:LEU:O	1:A:102:ILE:HG12	0.54	2.03	5	10
1:A:99:LEU:CD2	1:A:99:LEU:N	0.54	2.70	2	1
1:A:129:TYR:CB	1:A:134:LYS:NZ	0.54	2.71	11	1
1:A:33:LEU:HG	1:A:45:LEU:HD13	0.54	1.79	18	1
1:A:31:ASP:O	1:A:35:LYS:CD	0.54	2.55	20	1
1:A:98:LYS:HE3	1:A:119:ALA:CB	0.54	2.33	1	1
1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CD2	0.54	2.69	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:98:LYS:NZ	1:A:120:THR:O	0.54	2.40	4	4
1:A:40:LEU:HD11	1:A:95:ILE:HD13	0.54	1.79	4	1
1:A:105:LYS:O	1:A:109:LEU:CD2	0.54	2.55	8	1
1:A:63:LEU:CD2	1:A:84:ILE:CG2	0.54	2.85	15	1
1:A:59:TYR:CZ	1:A:111:LEU:CD2	0.54	2.89	20	3
1:A:114:TYR:CZ	1:A:138:GLU:OE1	0.54	2.61	16	2
1:A:118:ASN:O	1:A:126:ILE:CD1	0.54	2.56	15	1
1:A:134:LYS:NZ	1:A:136:LYS:NZ	0.54	2.56	16	1
1:A:29:GLU:HB2	1:A:88:LYS:NZ	0.54	2.18	2	1
1:A:63:LEU:HD13	1:A:91:PHE:CE2	0.54	2.38	2	1
1:A:62:ARG:O	1:A:63:LEU:HD12	0.54	2.02	16	2
1:A:134:LYS:N	1:A:134:LYS:HE3	0.54	2.19	11	1
1:A:98:LYS:O	1:A:101:LYS:HG2	0.54	2.03	13	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:54:LYS:HB2	0.53	2.38	3	1
1:A:43:TRP:CE3	1:A:53:TYR:C	0.53	2.82	3	3
1:A:54:LYS:HD3	1:A:56:PHE:CZ	0.53	2.37	6	2
1:A:130:TYR:CE1	1:A:136:LYS:HG3	0.53	2.38	1	1
1:A:116:PHE:O	1:A:117:ILE:HD12	0.53	2.03	8	4
1:A:94:ILE:CD1	1:A:98:LYS:HZ2	0.53	2.15	13	1
1:A:131:LYS:CB	1:A:134:LYS:NZ	0.53	2.72	15	1
1:A:80:LEU:HD21	1:A:115:ARG:HA	0.53	1.80	13	1
1:A:56:PHE:CE1	1:A:59:TYR:CZ	0.53	2.97	10	1
1:A:43:TRP:NE1	1:A:54:LYS:HE3	0.53	2.19	15	1
1:A:80:LEU:HD23	1:A:112:ASP:CA	0.53	2.33	16	1
1:A:54:LYS:HB3	1:A:61:ILE:HD11	0.53	1.79	11	3
1:A:80:LEU:HD12	1:A:117:ILE:HD11	0.53	1.81	15	1
1:A:131:LYS:HB2	1:A:134:LYS:NZ	0.53	2.19	15	1
1:A:123:GLU:HG3	1:A:124:HIS:CD2	0.53	2.38	16	1
1:A:54:LYS:HD3	1:A:56:PHE:CE1	0.53	2.38	5	2
1:A:63:LEU:CD2	1:A:84:ILE:HG21	0.53	2.33	15	1
1:A:115:ARG:HG2	1:A:116:PHE:CE1	0.53	2.39	1	1
1:A:43:TRP:CE3	1:A:54:LYS:CE	0.53	2.92	2	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:54:LYS:HE3	0.53	2.39	7	4
1:A:54:LYS:N	1:A:54:LYS:HE3	0.53	2.19	8	1
1:A:126:ILE:C	1:A:126:ILE:CD1	0.53	2.71	14	2
1:A:56:PHE:CE1	1:A:59:TYR:CE1	0.53	2.97	10	1
1:A:116:PHE:CD1	1:A:132:GLY:HA3	0.53	2.39	15	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:54:LYS:HD2	0.53	2.39	6	2
1:A:54:LYS:NZ	1:A:99:LEU:HD23	0.53	2.19	18	1
1:A:54:LYS:NZ	1:A:56:PHE:CE2	0.53	2.74	6	1
1:A:43:TRP:CH2	1:A:56:PHE:CE2	0.53	2.97	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:VAL:O	1:A:95:ILE:HG12	0.53	2.03	13	6
1:A:122:LEU:HD12	1:A:123:GLU:H	0.53	1.60	1	1
1:A:89:LEU:CD2	1:A:90:ASN:OD1	0.53	2.57	6	2
1:A:62:ARG:O	1:A:84:ILE:HD12	0.53	2.03	5	1
1:A:35:LYS:N	1:A:35:LYS:HD3	0.53	2.19	6	1
1:A:53:TYR:OH	1:A:60:GLU:OE2	0.53	2.23	6	1
1:A:56:PHE:HE1	1:A:61:ILE:HD11	0.53	1.64	6	1
1:A:63:LEU:HD23	1:A:84:ILE:CG2	0.53	2.34	15	1
1:A:98:LYS:O	1:A:102:ILE:HG13	0.52	2.04	3	7
1:A:108:LYS:C	1:A:109:LEU:HD23	0.52	2.25	1	2
1:A:43:TRP:CD2	1:A:54:LYS:HB2	0.52	2.39	16	5
1:A:108:LYS:HB2	1:A:109:LEU:HD13	0.52	1.81	11	3
1:A:42:GLY:O	1:A:54:LYS:CG	0.52	2.57	7	3
1:A:95:ILE:O	1:A:99:LEU:HB2	0.52	2.05	7	16
1:A:109:LEU:HD11	1:A:114:TYR:OH	0.52	2.03	2	2
1:A:59:TYR:CE1	1:A:61:ILE:CG2	0.52	2.93	4	7
1:A:83:ASN:O	1:A:83:ASN:OD1	0.52	2.27	2	1
1:A:84:ILE:HG21	1:A:98:LYS:HD3	0.52	1.81	12	2
1:A:43:TRP:CE2	1:A:54:LYS:CE	0.52	2.92	19	1
1:A:94:ILE:O	1:A:98:LYS:HB3	0.52	2.04	15	3
1:A:120:THR:CB	1:A:124:HIS:ND1	0.52	2.73	1	1
1:A:31:ASP:O	1:A:34:GLU:HG2	0.52	2.05	9	4
1:A:140:ILE:O	1:A:140:ILE:CG2	0.52	2.54	17	2
1:A:29:GLU:OE2	1:A:88:LYS:C	0.52	2.48	17	1
1:A:37:PHE:CZ	1:A:52:ALA:HB2	0.52	2.40	14	3
1:A:114:TYR:HB3	1:A:117:ILE:CD1	0.52	2.34	7	7
1:A:114:TYR:CD2	1:A:128:CYS:HB3	0.52	2.39	2	1
1:A:127:LYS:N	1:A:127:LYS:HD2	0.52	2.19	13	3
1:A:56:PHE:CD2	1:A:59:TYR:CZ	0.52	2.97	9	2
1:A:105:LYS:NZ	1:A:126:ILE:HD13	0.52	2.19	6	1
1:A:131:LYS:HE3	1:A:133:PHE:CZ	0.52	2.39	15	1
1:A:105:LYS:HE3	1:A:140:ILE:HG21	0.52	1.80	17	1
1:A:130:TYR:CD2	1:A:131:LYS:HG3	0.52	2.40	3	4
1:A:106:ILE:CG1	1:A:111:LEU:CD1	0.52	2.88	9	3
1:A:101:LYS:O	1:A:105:LYS:HG2	0.52	2.05	17	2
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:99:LEU:HD22	0.52	2.40	18	1
1:A:43:TRP:CE3	1:A:54:LYS:HD2	0.52	2.39	20	1
1:A:45:LEU:CD2	1:A:91:PHE:CE2	0.52	2.93	20	1
1:A:33:LEU:HG	1:A:37:PHE:CE1	0.52	2.40	1	1
1:A:120:THR:OG1	1:A:124:HIS:HB3	0.52	2.05	13	5
1:A:109:LEU:HD11	1:A:114:TYR:HE1	0.52	1.51	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:53:TYR:HA	0.52	2.39	15	2
1:A:66:HIS:CD2	1:A:121:ASN:HD21	0.52	2.23	6	1
1:A:124:HIS:ND1	1:A:125:ASP:N	0.52	2.57	1	2
1:A:120:THR:CB	1:A:124:HIS:CB	0.52	2.88	13	7
1:A:112:ASP:O	1:A:115:ARG:NH1	0.52	2.43	3	1
1:A:104:GLU:HG2	1:A:108:LYS:NZ	0.52	2.20	5	2
1:A:102:ILE:N	1:A:102:ILE:CD1	0.52	2.66	11	2
1:A:59:TYR:CE2	1:A:106:ILE:HD12	0.52	2.39	3	1
1:A:111:LEU:CD2	1:A:112:ASP:N	0.52	2.65	6	1
1:A:127:LYS:NZ	1:A:129:TYR:OH	0.52	2.40	8	2
1:A:94:ILE:HD11	1:A:98:LYS:HZ2	0.52	1.63	13	1
1:A:43:TRP:CE2	1:A:54:LYS:HD3	0.51	2.40	1	2
1:A:129:TYR:CA	1:A:134:LYS:NZ	0.51	2.73	11	1
1:A:42:GLY:O	1:A:54:LYS:HG3	0.51	2.06	1	5
1:A:82:VAL:HG22	1:A:117:ILE:CB	0.51	2.28	12	8
1:A:31:ASP:O	1:A:35:LYS:HD3	0.51	2.05	20	2
1:A:37:PHE:CG	1:A:45:LEU:CD1	0.51	2.80	6	3
1:A:51:SER:CB	1:A:62:ARG:NH2	0.51	2.73	7	2
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:54:LYS:HD3	0.51	2.40	8	2
1:A:59:TYR:HD1	1:A:61:ILE:HG23	0.51	1.64	6	3
1:A:98:LYS:N	1:A:98:LYS:CD	0.51	2.72	13	1
1:A:63:LEU:HB2	1:A:91:PHE:CZ	0.51	2.41	3	2
1:A:62:ARG:HH12	1:A:81:ILE:HG21	0.51	1.65	9	1
1:A:60:GLU:HB3	1:A:79:ARG:NH1	0.51	2.20	12	1
1:A:37:PHE:HD1	1:A:45:LEU:HD12	0.51	1.66	20	1
1:A:94:ILE:CG2	1:A:95:ILE:N	0.51	2.73	18	8
1:A:105:LYS:CE	1:A:140:ILE:HD11	0.51	2.35	9	2
1:A:36:ALA:HB2	1:A:92:VAL:HG22	0.51	1.81	12	1
1:A:105:LYS:HE2	1:A:140:ILE:HG21	0.51	1.80	17	1
1:A:36:ALA:O	1:A:40:LEU:HB2	0.51	2.06	19	19
1:A:62:ARG:NE	1:A:83:ASN:ND2	0.51	2.58	14	1
1:A:120:THR:OG1	1:A:124:HIS:HB2	0.51	2.06	15	1
1:A:121:ASN:O	1:A:124:HIS:N	0.51	2.44	9	4
1:A:61:ILE:HG22	1:A:82:VAL:CG2	0.51	2.36	6	3
1:A:37:PHE:CE2	1:A:91:PHE:CE2	0.51	2.99	9	1
1:A:129:TYR:HA	1:A:134:LYS:NZ	0.51	2.20	11	1
1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CD1	0.51	2.73	1	1
1:A:102:ILE:O	1:A:106:ILE:HD12	0.51	2.06	4	2
1:A:61:ILE:HG22	1:A:82:VAL:CB	0.51	2.33	17	2
1:A:37:PHE:CD2	1:A:45:LEU:CD1	0.51	2.87	7	2
1:A:63:LEU:HB3	1:A:91:PHE:CE1	0.51	2.41	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:ARG:CZ	1:A:83:ASN:HD22	0.51	2.18	11	1
1:A:110:ASP:O	1:A:112:ASP:N	0.51	2.44	18	1
1:A:105:LYS:O	1:A:109:LEU:HD23	0.51	2.06	8	1
1:A:59:TYR:CD2	1:A:111:LEU:HD12	0.51	2.41	17	1
1:A:63:LEU:HD11	1:A:91:PHE:HE1	0.51	1.66	18	1
1:A:114:TYR:CB	1:A:117:ILE:CD1	0.50	2.89	9	5
1:A:130:TYR:CD2	1:A:131:LYS:HD3	0.50	2.41	8	1
1:A:134:LYS:HD3	1:A:136:LYS:O	0.50	2.06	15	1
1:A:120:THR:HB	1:A:124:HIS:CB	0.50	2.36	13	10
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:63:LEU:HD13	0.50	2.41	4	2
1:A:92:VAL:HG13	1:A:93:ASP:N	0.50	2.21	11	2
1:A:83:ASN:OD1	1:A:118:ASN:OD1	0.50	2.30	11	1
1:A:59:TYR:CE1	1:A:111:LEU:HD12	0.50	2.40	5	1
1:A:80:LEU:CD1	1:A:112:ASP:HA	0.50	2.36	5	2
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:54:LYS:HG3	0.50	2.42	6	1
1:A:46:SER:OG	1:A:49:LYS:HG3	0.50	2.06	14	1
1:A:98:LYS:O	1:A:102:ILE:HG12	0.50	2.06	19	5
1:A:54:LYS:HG3	1:A:56:PHE:CE1	0.50	2.41	8	2
1:A:66:HIS:O	1:A:85:LYS:NZ	0.50	2.45	4	1
1:A:101:LYS:HG3	1:A:102:ILE:N	0.50	2.21	13	1
1:A:82:VAL:HG13	1:A:117:ILE:HG13	0.50	1.82	18	1
1:A:140:ILE:N	1:A:140:ILE:CD1	0.50	2.73	20	1
1:A:43:TRP:CE3	1:A:54:LYS:HB2	0.50	2.42	3	1
1:A:80:LEU:CD1	1:A:115:ARG:C	0.50	2.80	14	3
1:A:128:CYS:SG	1:A:138:GLU:HB3	0.50	2.46	14	2
1:A:111:LEU:HD23	1:A:111:LEU:C	0.50	2.27	6	1
1:A:84:ILE:CD1	1:A:98:LYS:HG2	0.50	2.37	7	2
1:A:114:TYR:HD1	1:A:117:ILE:HG21	0.50	1.66	1	1
1:A:29:GLU:CB	1:A:88:LYS:HZ3	0.50	2.19	2	1
1:A:82:VAL:CG1	1:A:117:ILE:HG22	0.50	2.31	9	2
1:A:54:LYS:HE2	1:A:56:PHE:CE1	0.50	2.41	6	3
1:A:37:PHE:HB3	1:A:45:LEU:CD1	0.50	2.36	11	2
1:A:106:ILE:HG13	1:A:111:LEU:CD1	0.50	2.37	10	4
1:A:80:LEU:HG	1:A:114:TYR:O	0.50	2.06	14	5
1:A:119:ALA:CB	1:A:126:ILE:HD12	0.50	2.37	2	4
1:A:120:THR:HG21	1:A:124:HIS:CE1	0.50	2.42	1	1
1:A:80:LEU:HD23	1:A:114:TYR:C	0.50	2.27	8	1
1:A:82:VAL:CG2	1:A:117:ILE:HG13	0.50	2.34	18	1
1:A:41:ASP:O	1:A:54:LYS:NZ	0.50	2.44	19	1
1:A:42:GLY:O	1:A:54:LYS:HA	0.50	2.06	14	17
1:A:43:TRP:CH2	1:A:54:LYS:CB	0.50	2.95	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:TRP:CE2	1:A:54:LYS:HD2	0.50	2.42	4	2
1:A:92:VAL:O	1:A:95:ILE:HG13	0.50	2.06	4	1
1:A:106:ILE:HD12	1:A:111:LEU:CD1	0.50	2.37	9	2
1:A:59:TYR:CD1	1:A:111:LEU:CD2	0.50	2.95	15	1
1:A:130:TYR:CE2	1:A:131:LYS:HE3	0.50	2.42	16	1
1:A:115:ARG:HB2	1:A:132:GLY:N	0.49	2.22	3	5
1:A:66:HIS:O	1:A:85:LYS:HE3	0.49	2.07	4	2
1:A:36:ALA:C	1:A:40:LEU:HD22	0.49	2.27	20	3
1:A:63:LEU:CD1	1:A:95:ILE:HD11	0.49	2.36	11	1
1:A:43:TRP:CE2	1:A:54:LYS:HB2	0.49	2.41	3	4
1:A:134:LYS:HG2	1:A:135:THR:N	0.49	2.22	4	7
1:A:62:ARG:HG2	1:A:83:ASN:OD1	0.49	2.07	4	2
1:A:98:LYS:HE3	1:A:119:ALA:HB1	0.49	1.85	7	1
1:A:120:THR:OG1	1:A:124:HIS:C	0.49	2.50	12	2
1:A:80:LEU:HD13	1:A:81:ILE:H	0.49	1.68	11	1
1:A:97:ASN:ND2	1:A:122:LEU:CD2	0.49	2.72	19	2
1:A:104:GLU:HG3	1:A:108:LYS:NZ	0.49	2.22	7	1
1:A:33:LEU:HG	1:A:91:PHE:CE2	0.49	2.42	11	1
1:A:105:LYS:HD3	1:A:114:TYR:CE1	0.49	2.41	13	1
1:A:109:LEU:CD1	1:A:114:TYR:CZ	0.49	2.95	19	1
1:A:43:TRP:CE3	1:A:54:LYS:HD3	0.49	2.42	8	2
1:A:63:LEU:HB3	1:A:91:PHE:CZ	0.49	2.42	2	1
1:A:59:TYR:CE1	1:A:61:ILE:HG23	0.49	2.42	10	3
1:A:131:LYS:HE2	1:A:133:PHE:CZ	0.49	2.42	9	1
1:A:131:LYS:CB	1:A:134:LYS:HZ2	0.49	2.21	15	1
1:A:63:LEU:CG	1:A:98:LYS:NZ	0.49	2.76	12	1
1:A:35:LYS:HD2	1:A:35:LYS:N	0.49	2.22	20	1
1:A:59:TYR:HE1	1:A:61:ILE:HG21	0.49	1.67	4	4
1:A:40:LEU:HB3	1:A:43:TRP:CD1	0.49	2.43	5	4
1:A:104:GLU:CG	1:A:108:LYS:NZ	0.49	2.75	5	1
1:A:110:ASP:OD1	1:A:111:LEU:N	0.49	2.45	5	1
1:A:30:MET:C	1:A:30:MET:SD	0.49	2.91	10	1
1:A:98:LYS:N	1:A:98:LYS:HD2	0.49	2.21	13	1
1:A:40:LEU:HD22	1:A:43:TRP:HB2	0.49	1.84	15	1
1:A:80:LEU:CD2	1:A:81:ILE:N	0.49	2.63	18	1
1:A:95:ILE:CG2	1:A:99:LEU:CD1	0.49	2.91	3	1
1:A:54:LYS:N	1:A:54:LYS:CE	0.49	2.76	8	1
1:A:95:ILE:HG22	1:A:99:LEU:HD22	0.49	1.83	10	1
1:A:133:PHE:O	1:A:134:LYS:HB3	0.49	2.07	11	1
1:A:115:ARG:C	1:A:115:ARG:HD3	0.49	2.28	12	1
1:A:102:ILE:O	1:A:105:LYS:HG2	0.49	2.07	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:101:LYS:HB3	1:A:105:LYS:HZ3	0.49	1.68	19	1
1:A:114:TYR:HB2	1:A:117:ILE:HG23	0.49	1.84	1	2
1:A:46:SER:O	1:A:50:ASP:HA	0.49	2.08	16	6
1:A:94:ILE:O	1:A:98:LYS:HG2	0.49	2.08	18	2
1:A:28:GLN:HA	1:A:31:ASP:OD1	0.49	2.08	9	2
1:A:56:PHE:CE2	1:A:59:TYR:OH	0.49	2.62	9	1
1:A:129:TYR:HB3	1:A:134:LYS:NZ	0.49	2.23	11	1
1:A:63:LEU:CD2	1:A:98:LYS:HZ2	0.49	2.20	19	1
1:A:114:TYR:HB2	1:A:117:ILE:CG2	0.49	2.38	1	1
1:A:128:CYS:O	1:A:137:LYS:HB2	0.49	2.08	10	12
1:A:26:TYR:CE1	1:A:88:LYS:NZ	0.49	2.81	3	1
1:A:31:ASP:HA	1:A:34:GLU:OE1	0.49	2.08	3	1
1:A:80:LEU:C	1:A:80:LEU:CD1	0.49	2.81	8	2
1:A:58:LYS:HE2	1:A:110:ASP:OD2	0.49	2.08	5	2
1:A:90:ASN:ND2	1:A:93:ASP:HB3	0.49	2.23	11	1
1:A:113:LYS:HD2	1:A:113:LYS:N	0.49	2.23	12	1
1:A:43:TRP:CE3	1:A:54:LYS:HB3	0.49	2.42	20	1
1:A:41:ASP:OD1	1:A:42:GLY:N	0.48	2.47	10	6
1:A:59:TYR:CD1	1:A:111:LEU:HD22	0.48	2.41	15	2
1:A:43:TRP:CH2	1:A:54:LYS:HG3	0.48	2.43	6	1
1:A:129:TYR:CA	1:A:134:LYS:HZ3	0.48	2.21	11	1
1:A:54:LYS:O	1:A:61:ILE:HG12	0.48	2.08	4	4
1:A:129:TYR:CE2	1:A:137:LYS:CD	0.48	2.96	13	1
1:A:117:ILE:HG13	1:A:128:CYS:CB	0.48	2.39	14	1
1:A:29:GLU:CG	1:A:88:LYS:HB3	0.48	2.39	20	1
1:A:99:LEU:C	1:A:99:LEU:CD2	0.48	2.82	5	1
1:A:99:LEU:CD1	1:A:103:ILE:HG12	0.48	2.38	8	1
1:A:97:ASN:HB2	1:A:122:LEU:HD21	0.48	1.84	14	1
1:A:63:LEU:CA	1:A:84:ILE:O	0.48	2.62	18	1
1:A:63:LEU:HB2	1:A:84:ILE:O	0.48	2.08	18	1
1:A:89:LEU:HD23	1:A:89:LEU:C	0.48	2.28	2	2
1:A:46:SER:O	1:A:50:ASP:N	0.48	2.46	15	5
1:A:95:ILE:HG13	1:A:96:GLU:N	0.48	2.23	4	1
1:A:89:LEU:CD1	1:A:90:ASN:ND2	0.48	2.76	5	1
1:A:130:TYR:CE2	1:A:131:LYS:NZ	0.48	2.82	8	1
1:A:28:GLN:C	1:A:31:ASP:OD1	0.48	2.52	9	2
1:A:117:ILE:HG21	1:A:128:CYS:SG	0.48	2.47	18	4
1:A:63:LEU:HD23	1:A:84:ILE:HB	0.48	1.85	15	3
1:A:131:LYS:NZ	1:A:134:LYS:HD3	0.48	2.22	13	1
1:A:95:ILE:O	1:A:99:LEU:CD2	0.48	2.60	15	1
1:A:105:LYS:CE	1:A:140:ILE:HD13	0.48	2.30	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:122:LEU:CD1	1:A:123:GLU:N	0.48	2.65	1	1
1:A:65:ASN:OD1	1:A:65:ASN:C	0.48	2.52	13	2
1:A:84:ILE:HG21	1:A:98:LYS:CG	0.48	2.32	16	1
1:A:53:TYR:HB2	1:A:61:ILE:O	0.48	2.09	15	5
1:A:44:TYR:HB2	1:A:53:TYR:CE2	0.48	2.44	3	2
1:A:120:THR:CG2	1:A:125:ASP:O	0.48	2.60	12	1
1:A:126:ILE:HG22	1:A:140:ILE:OXT	0.48	2.08	19	1
1:A:111:LEU:HA	1:A:114:TYR:CE1	0.48	2.44	13	3
1:A:37:PHE:CE1	1:A:44:TYR:HA	0.48	2.43	12	2
1:A:102:ILE:HG13	1:A:103:ILE:N	0.48	2.24	6	8
1:A:108:LYS:CB	1:A:109:LEU:HD13	0.48	2.39	11	2
1:A:36:ALA:HB1	1:A:40:LEU:CD2	0.48	2.39	5	1
1:A:84:ILE:CD1	1:A:98:LYS:HD2	0.48	2.39	5	3
1:A:53:TYR:HB3	1:A:62:ARG:CB	0.48	2.39	16	2
1:A:43:TRP:CE3	1:A:54:LYS:HG2	0.48	2.44	18	1
1:A:86:ALA:CB	1:A:94:ILE:HB	0.48	2.39	2	1
1:A:115:ARG:HB3	1:A:132:GLY:N	0.48	2.24	12	2
1:A:89:LEU:C	1:A:89:LEU:HD23	0.48	2.29	14	1
1:A:95:ILE:CG2	1:A:96:GLU:N	0.48	2.76	14	1
1:A:94:ILE:O	1:A:98:LYS:CG	0.48	2.62	18	1
1:A:127:LYS:HB2	1:A:137:LYS:CE	0.48	2.39	2	2
1:A:109:LEU:C	1:A:109:LEU:HD12	0.48	2.29	6	2
1:A:99:LEU:HD13	1:A:99:LEU:C	0.48	2.28	8	1
1:A:131:LYS:HG2	1:A:131:LYS:O	0.48	2.09	15	1
1:A:53:TYR:HA	1:A:54:LYS:NZ	0.47	2.23	2	1
1:A:115:ARG:HB3	1:A:131:LYS:C	0.47	2.29	4	1
1:A:106:ILE:CD1	1:A:111:LEU:HD13	0.47	2.39	15	1
1:A:113:LYS:N	1:A:113:LYS:HD2	0.47	2.22	15	1
1:A:116:PHE:CD1	1:A:132:GLY:CA	0.47	2.97	15	1
1:A:134:LYS:HZ3	1:A:135:THR:HG22	0.47	1.68	17	1
1:A:84:ILE:CG1	1:A:119:ALA:CB	0.47	2.80	19	2
1:A:120:THR:CB	1:A:124:HIS:HB2	0.47	2.39	5	5
1:A:89:LEU:CD2	1:A:90:ASN:ND2	0.47	2.78	14	1
1:A:36:ALA:O	1:A:40:LEU:CB	0.47	2.62	15	5
1:A:29:GLU:HB3	1:A:88:LYS:CD	0.47	2.39	8	2
1:A:106:ILE:HD11	1:A:111:LEU:HD23	0.47	1.85	13	1
1:A:115:ARG:NE	1:A:116:PHE:CE1	0.47	2.82	1	1
1:A:89:LEU:O	1:A:89:LEU:HD12	0.47	2.10	3	1
1:A:52:ALA:O	1:A:62:ARG:HB2	0.47	2.10	19	4
1:A:56:PHE:CE1	1:A:61:ILE:HD11	0.47	2.45	6	1
1:A:82:VAL:HG21	1:A:117:ILE:HD11	0.47	1.79	11	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:ALA:HA	1:A:94:ILE:HD13	0.47	1.86	11	1
1:A:99:LEU:HD23	1:A:103:ILE:CG1	0.47	2.39	11	1
1:A:133:PHE:O	1:A:134:LYS:HB2	0.47	2.09	14	13
1:A:28:GLN:O	1:A:32:ARG:HD3	0.47	2.09	8	1
1:A:115:ARG:HD3	1:A:131:LYS:CA	0.47	2.39	10	1
1:A:92:VAL:CG1	1:A:93:ASP:N	0.47	2.77	11	1
1:A:54:LYS:HE2	1:A:56:PHE:CD1	0.47	2.45	17	1
1:A:115:ARG:HB2	1:A:131:LYS:C	0.47	2.30	3	5
1:A:134:LYS:HG3	1:A:135:THR:N	0.47	2.24	20	3
1:A:133:PHE:O	1:A:134:LYS:HG2	0.47	2.09	8	2
1:A:65:ASN:O	1:A:85:LYS:HD2	0.47	2.09	10	1
1:A:53:TYR:CE1	1:A:62:ARG:CZ	0.47	2.98	12	1
1:A:119:ALA:HA	1:A:126:ILE:CD1	0.47	2.37	13	3
1:A:83:ASN:HB2	1:A:118:ASN:OD1	0.47	2.10	1	7
1:A:116:PHE:CE2	1:A:118:ASN:HB2	0.47	2.45	9	3
1:A:61:ILE:CD1	1:A:102:ILE:HD13	0.47	2.40	6	1
1:A:115:ARG:CG	1:A:131:LYS:HA	0.47	2.38	17	4
1:A:28:GLN:CA	1:A:31:ASP:OD1	0.47	2.63	20	2
1:A:95:ILE:CG2	1:A:99:LEU:HD22	0.47	2.40	10	1
1:A:119:ALA:HB2	1:A:126:ILE:HD13	0.47	1.87	13	1
1:A:33:LEU:HD11	1:A:37:PHE:CE1	0.47	2.45	1	2
1:A:106:ILE:CG1	1:A:111:LEU:HG	0.47	2.40	2	1
1:A:80:LEU:HD11	1:A:115:ARG:N	0.47	2.24	3	1
1:A:99:LEU:HD23	1:A:99:LEU:O	0.47	2.10	13	2
1:A:63:LEU:HD23	1:A:86:ALA:CB	0.47	2.40	13	1
1:A:114:TYR:CB	1:A:117:ILE:CG2	0.47	2.93	13	2
1:A:63:LEU:HD11	1:A:91:PHE:CE1	0.47	2.45	18	1
1:A:61:ILE:CG2	1:A:82:VAL:HB	0.47	2.40	20	1
1:A:56:PHE:HE1	1:A:61:ILE:HD13	0.47	1.70	11	2
1:A:131:LYS:HE3	1:A:134:LYS:NZ	0.47	2.25	7	1
1:A:99:LEU:CD2	1:A:103:ILE:CG1	0.47	2.91	11	1
1:A:84:ILE:HD13	1:A:98:LYS:HD2	0.47	1.86	19	2
1:A:45:LEU:HD21	1:A:91:PHE:CE1	0.47	2.44	18	1
1:A:105:LYS:O	1:A:109:LEU:N	0.47	2.44	5	3
1:A:37:PHE:CD2	1:A:43:TRP:HB3	0.47	2.45	6	1
1:A:29:GLU:CD	1:A:89:LEU:CD2	0.47	2.83	18	2
1:A:63:LEU:CD1	1:A:98:LYS:HZ1	0.47	2.22	12	1
1:A:97:ASN:CB	1:A:122:LEU:HD21	0.47	2.40	14	1
1:A:29:GLU:HG2	1:A:32:ARG:NH2	0.47	2.26	19	1
1:A:99:LEU:O	1:A:103:ILE:HG12	0.46	2.11	20	10
1:A:40:LEU:HB3	1:A:43:TRP:CG	0.46	2.45	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:105:LYS:HD2	1:A:111:LEU:CD2	0.46	2.39	5	1
1:A:61:ILE:HD13	1:A:102:ILE:CD1	0.46	2.40	6	1
1:A:32:ARG:NH2	1:A:89:LEU:HD23	0.46	2.25	19	2
1:A:54:LYS:O	1:A:60:GLU:CD	0.46	2.53	12	1
1:A:89:LEU:N	1:A:89:LEU:CD1	0.46	2.77	20	3
1:A:89:LEU:HD23	1:A:90:ASN:ND2	0.46	2.25	14	1
1:A:37:PHE:HZ	1:A:91:PHE:CZ	0.46	2.29	1	3
1:A:80:LEU:CD2	1:A:112:ASP:HA	0.46	2.39	16	2
1:A:32:ARG:NH2	1:A:89:LEU:O	0.46	2.48	1	1
1:A:54:LYS:HB3	1:A:61:ILE:CD1	0.46	2.41	4	3
1:A:58:LYS:HG2	1:A:112:ASP:OD2	0.46	2.10	8	1
1:A:37:PHE:CZ	1:A:91:PHE:HE2	0.46	2.29	10	2
1:A:53:TYR:HB2	1:A:60:GLU:OE2	0.46	2.09	10	2
1:A:51:SER:OG	1:A:63:LEU:O	0.46	2.24	17	1
1:A:25:GLU:OE2	1:A:89:LEU:HD11	0.46	2.10	20	1
1:A:56:PHE:CG	1:A:59:TYR:CZ	0.46	3.04	20	1
1:A:109:LEU:HD13	1:A:114:TYR:HH	0.46	1.66	20	1
1:A:53:TYR:HE1	1:A:62:ARG:CZ	0.46	2.22	12	1
1:A:82:VAL:CG2	1:A:117:ILE:HG21	0.46	2.39	3	1
1:A:59:TYR:CE1	1:A:111:LEU:HD22	0.46	2.46	9	2
1:A:105:LYS:O	1:A:109:LEU:HG	0.46	2.10	8	6
1:A:95:ILE:O	1:A:99:LEU:HG	0.46	2.10	18	3
1:A:105:LYS:HD2	1:A:138:GLU:OE2	0.46	2.10	9	1
1:A:133:PHE:O	1:A:133:PHE:CD1	0.46	2.68	9	1
1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:HE2	0.46	2.30	11	1
1:A:24:ARG:HD2	1:A:24:ARG:C	0.46	2.31	16	1
1:A:45:LEU:HA	1:A:51:SER:O	0.46	2.11	13	9
1:A:115:ARG:HD3	1:A:131:LYS:O	0.46	2.10	9	2
1:A:131:LYS:HB3	1:A:134:LYS:HZ2	0.46	1.70	15	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:99:LEU:CD2	0.46	2.99	18	1
1:A:101:LYS:O	1:A:105:LYS:HG3	0.46	2.10	18	10
1:A:117:ILE:HB	1:A:128:CYS:SG	0.46	2.51	1	2
1:A:29:GLU:OE1	1:A:89:LEU:HD12	0.46	2.10	16	1
1:A:33:LEU:HD21	1:A:88:LYS:HB2	0.46	1.87	8	2
1:A:84:ILE:CG1	1:A:98:LYS:HE2	0.46	2.40	9	1
1:A:94:ILE:HA	1:A:97:ASN:ND2	0.46	2.25	10	1
1:A:43:TRP:CD1	1:A:54:LYS:NZ	0.46	2.84	19	1
1:A:120:THR:OG1	1:A:125:ASP:C	0.46	2.54	19	1
1:A:52:ALA:O	1:A:62:ARG:HA	0.46	2.11	12	5
1:A:25:GLU:O	1:A:28:GLN:HG3	0.46	2.11	14	1
1:A:134:LYS:CD	1:A:136:LYS:O	0.46	2.64	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:ARG:HD2	1:A:32:ARG:C	0.46	2.31	1	1
1:A:106:ILE:HD11	1:A:111:LEU:HD12	0.46	1.88	8	2
1:A:133:PHE:O	1:A:134:LYS:HG3	0.46	2.10	16	2
1:A:99:LEU:CD1	1:A:99:LEU:C	0.46	2.84	8	1
1:A:105:LYS:HB3	1:A:140:ILE:CD1	0.46	2.40	15	1
1:A:39:ASN:OD1	1:A:39:ASN:C	0.46	2.55	19	1
1:A:63:LEU:HD22	1:A:91:PHE:HE1	0.45	1.62	2	2
1:A:80:LEU:HB3	1:A:117:ILE:CD1	0.45	2.41	5	1
1:A:84:ILE:HG13	1:A:119:ALA:CB	0.45	2.34	5	1
1:A:58:LYS:HE2	1:A:112:ASP:OD2	0.45	2.11	7	1
1:A:101:LYS:NZ	1:A:140:ILE:HG21	0.45	2.26	9	1
1:A:105:LYS:HE3	1:A:140:ILE:HD11	0.45	1.87	9	1
1:A:90:ASN:CG	1:A:93:ASP:HB3	0.45	2.30	11	1
1:A:61:ILE:CD1	1:A:102:ILE:HD12	0.45	2.41	17	1
1:A:42:GLY:HA3	1:A:54:LYS:NZ	0.45	2.25	19	1
1:A:63:LEU:CD1	1:A:94:ILE:HG23	0.45	2.41	15	1
1:A:33:LEU:CG	1:A:37:PHE:CE1	0.45	3.00	1	1
1:A:43:TRP:HA	1:A:53:TYR:O	0.45	2.11	16	5
1:A:106:ILE:CA	1:A:109:LEU:O	0.45	2.63	8	2
1:A:52:ALA:HB3	1:A:63:LEU:CD2	0.45	2.41	18	1
1:A:31:ASP:HB2	1:A:35:LYS:NZ	0.45	2.27	20	1
1:A:112:ASP:OD1	1:A:113:LYS:N	0.45	2.50	6	5
1:A:60:GLU:HB2	1:A:79:ARG:NE	0.45	2.26	3	1
1:A:102:ILE:O	1:A:106:ILE:HG12	0.45	2.12	6	1
1:A:111:LEU:CD2	1:A:111:LEU:C	0.45	2.85	6	1
1:A:66:HIS:O	1:A:85:LYS:HD2	0.45	2.12	20	2
1:A:95:ILE:O	1:A:99:LEU:HB3	0.45	2.10	13	1
1:A:81:ILE:O	1:A:81:ILE:HG23	0.45	2.11	18	1
1:A:25:GLU:HA	1:A:28:GLN:OE1	0.45	2.10	19	1
1:A:41:ASP:O	1:A:43:TRP:CD1	0.45	2.70	2	2
1:A:84:ILE:HG12	1:A:119:ALA:CB	0.45	2.41	8	3
1:A:97:ASN:HD22	1:A:122:LEU:CD2	0.45	2.24	6	1
1:A:25:GLU:O	1:A:28:GLN:HG2	0.45	2.12	8	1
1:A:58:LYS:CG	1:A:112:ASP:OD2	0.45	2.65	8	1
1:A:80:LEU:HD23	1:A:115:ARG:CA	0.45	2.41	8	1
1:A:37:PHE:HZ	1:A:91:PHE:CE2	0.45	2.29	14	2
1:A:60:GLU:HG2	1:A:81:ILE:CD1	0.45	2.42	14	1
1:A:133:PHE:O	1:A:133:PHE:CG	0.45	2.69	15	1
1:A:63:LEU:CD1	1:A:63:LEU:N	0.45	2.80	16	1
1:A:54:LYS:HB3	1:A:61:ILE:CG1	0.45	2.41	19	1
1:A:108:LYS:HB2	1:A:109:LEU:CD1	0.45	2.42	11	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:98:LYS:O	1:A:98:LYS:HD3	0.45	2.11	8	1
1:A:87:SER:O	1:A:91:PHE:HB2	0.45	2.12	14	2
1:A:54:LYS:N	1:A:60:GLU:OE2	0.45	2.50	12	1
1:A:98:LYS:O	1:A:102:ILE:HD11	0.45	2.10	19	1
1:A:108:LYS:HB2	1:A:109:LEU:CD2	0.45	2.41	2	1
1:A:63:LEU:HA	1:A:84:ILE:O	0.45	2.12	13	5
1:A:29:GLU:HG2	1:A:89:LEU:CD2	0.45	2.42	4	1
1:A:105:LYS:NZ	1:A:126:ILE:CD1	0.45	2.80	6	1
1:A:83:ASN:HB3	1:A:118:ASN:OD1	0.45	2.11	11	1
1:A:90:ASN:OD1	1:A:93:ASP:CB	0.45	2.65	11	1
1:A:127:LYS:HD3	1:A:137:LYS:NZ	0.45	2.27	7	1
1:A:99:LEU:CD2	1:A:103:ILE:HG13	0.45	2.41	11	1
1:A:115:ARG:HA	1:A:115:ARG:NE	0.45	2.27	13	1
1:A:110:ASP:C	1:A:112:ASP:N	0.45	2.67	18	1
1:A:121:ASN:OD1	1:A:124:HIS:HB3	0.45	2.12	19	1
1:A:43:TRP:HZ3	1:A:56:PHE:CZ	0.45	2.27	20	1
1:A:114:TYR:CD1	1:A:117:ILE:HG21	0.45	2.46	1	1
1:A:47:SER:OG	1:A:48:MET:SD	0.45	2.75	4	1
1:A:98:LYS:HZ2	1:A:119:ALA:HB1	0.45	1.71	4	1
1:A:36:ALA:HA	1:A:39:ASN:OD1	0.45	2.11	13	1
1:A:63:LEU:CD2	1:A:84:ILE:HB	0.45	2.41	14	1
1:A:31:ASP:CA	1:A:34:GLU:OE1	0.45	2.65	3	1
1:A:131:LYS:HD2	1:A:134:LYS:CE	0.45	2.42	14	2
1:A:65:ASN:ND2	1:A:88:LYS:NZ	0.45	2.64	4	1
1:A:101:LYS:HZ1	1:A:140:ILE:HG22	0.45	1.69	12	1
1:A:89:LEU:O	1:A:89:LEU:HD13	0.44	2.11	3	1
1:A:99:LEU:HD23	1:A:103:ILE:HG12	0.44	1.89	5	2
1:A:53:TYR:HA	1:A:61:ILE:O	0.44	2.12	9	3
1:A:131:LYS:O	1:A:131:LYS:HG3	0.44	2.11	9	1
1:A:87:SER:O	1:A:91:PHE:HB3	0.44	2.12	11	1
1:A:29:GLU:OE1	1:A:88:LYS:HD3	0.44	2.12	12	1
1:A:126:ILE:O	1:A:139:VAL:HA	0.44	2.12	17	2
1:A:106:ILE:CD1	1:A:111:LEU:HD23	0.44	2.43	13	2
1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:CD2	0.44	2.80	16	1
1:A:63:LEU:HD23	1:A:64:SER:H	0.44	1.71	2	1
1:A:80:LEU:HD22	1:A:114:TYR:O	0.44	2.12	5	1
1:A:95:ILE:HB	1:A:99:LEU:HD11	0.44	1.88	7	2
1:A:106:ILE:CB	1:A:111:LEU:HD11	0.44	2.42	9	1
1:A:53:TYR:CE2	1:A:60:GLU:CD	0.44	2.91	12	1
1:A:83:ASN:O	1:A:118:ASN:HA	0.44	2.12	13	1
1:A:45:LEU:HD11	1:A:91:PHE:CE2	0.44	2.46	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:115:ARG:HG2	1:A:130:TYR:O	0.44	2.13	20	2
1:A:110:ASP:HB3	1:A:112:ASP:OD1	0.44	2.12	20	3
1:A:131:LYS:HE3	1:A:134:LYS:HZ1	0.44	1.73	7	1
1:A:65:ASN:CG	1:A:88:LYS:NZ	0.44	2.70	10	1
1:A:87:SER:O	1:A:91:PHE:CA	0.44	2.65	11	2
1:A:63:LEU:HD23	1:A:86:ALA:HB2	0.44	1.88	13	1
1:A:60:GLU:C	1:A:81:ILE:HD12	0.44	2.31	14	1
1:A:53:TYR:CB	1:A:61:ILE:O	0.44	2.65	15	1
1:A:102:ILE:CG2	1:A:111:LEU:HD22	0.44	2.41	18	1
1:A:42:GLY:O	1:A:54:LYS:HD3	0.44	2.12	19	1
1:A:102:ILE:O	1:A:106:ILE:HG13	0.44	2.13	20	1
1:A:49:LYS:O	1:A:49:LYS:HG3	0.44	2.11	3	1
1:A:65:ASN:HD22	1:A:88:LYS:NZ	0.44	2.10	4	1
1:A:99:LEU:O	1:A:99:LEU:CD1	0.44	2.63	8	1
1:A:37:PHE:CB	1:A:45:LEU:CD1	0.44	2.92	11	1
1:A:120:THR:HG22	1:A:124:HIS:CB	0.44	2.42	18	1
1:A:95:ILE:HB	1:A:99:LEU:CD1	0.44	2.42	7	2
1:A:105:LYS:O	1:A:109:LEU:CG	0.44	2.66	8	1
1:A:86:ALA:HA	1:A:94:ILE:CD1	0.44	2.42	11	1
1:A:115:ARG:HD3	1:A:115:ARG:O	0.44	2.12	12	1
1:A:134:LYS:HE3	1:A:136:LYS:HB3	0.44	1.89	13	2
1:A:120:THR:HB	1:A:124:HIS:HB2	0.44	1.90	13	3
1:A:63:LEU:HD21	1:A:98:LYS:HE2	0.44	1.88	5	1
1:A:120:THR:O	1:A:121:ASN:C	0.44	2.56	15	4
1:A:126:ILE:O	1:A:139:VAL:CG2	0.44	2.53	7	1
1:A:111:LEU:HD12	1:A:111:LEU:H	0.44	1.73	9	1
1:A:134:LYS:CE	1:A:136:LYS:HB3	0.44	2.42	13	1
1:A:80:LEU:HD12	1:A:112:ASP:CA	0.44	2.40	18	1
1:A:54:LYS:HZ2	1:A:99:LEU:CD1	0.44	2.23	4	1
1:A:54:LYS:HG2	1:A:61:ILE:CG1	0.44	2.42	8	1
1:A:94:ILE:HG12	1:A:98:LYS:CG	0.44	2.42	10	2
1:A:80:LEU:CD2	1:A:80:LEU:H	0.44	2.23	12	1
1:A:59:TYR:CB	1:A:111:LEU:HD11	0.44	2.41	13	1
1:A:105:LYS:HD3	1:A:140:ILE:CD1	0.44	2.40	14	1
1:A:63:LEU:HG	1:A:84:ILE:CG2	0.44	2.43	1	1
1:A:105:LYS:NZ	1:A:140:ILE:HD12	0.44	2.28	19	1
1:A:115:ARG:HD3	1:A:130:TYR:O	0.44	2.13	7	2
1:A:108:LYS:C	1:A:109:LEU:HD13	0.44	2.32	11	2
1:A:43:TRP:CD2	1:A:54:LYS:HD3	0.44	2.48	8	1
1:A:95:ILE:HG13	1:A:99:LEU:CD1	0.44	2.43	14	1
1:A:80:LEU:HD21	1:A:115:ARG:C	0.43	2.33	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:LEU:O	1:A:103:ILE:HG13	0.43	2.13	16	3
1:A:133:PHE:O	1:A:134:LYS:CG	0.43	2.66	16	2
1:A:109:LEU:O	1:A:109:LEU:HD12	0.43	2.13	12	2
1:A:92:VAL:O	1:A:95:ILE:CG2	0.43	2.62	14	1
1:A:40:LEU:CD2	1:A:43:TRP:CG	0.43	2.98	15	1
1:A:62:ARG:HD3	1:A:62:ARG:O	0.43	2.12	17	1
1:A:139:VAL:C	1:A:140:ILE:HG13	0.43	2.33	20	1
1:A:84:ILE:CG2	1:A:98:LYS:HG3	0.43	2.44	4	1
1:A:80:LEU:HD22	1:A:82:VAL:HG23	0.43	1.90	9	2
1:A:131:LYS:HG2	1:A:133:PHE:O	0.43	2.12	9	1
1:A:121:ASN:OD1	1:A:124:HIS:N	0.43	2.47	19	1
1:A:98:LYS:NZ	1:A:126:ILE:HD11	0.43	2.28	20	1
1:A:29:GLU:OE2	1:A:89:LEU:HA	0.43	2.13	14	3
1:A:31:ASP:O	1:A:34:GLU:OE1	0.43	2.36	3	1
1:A:115:ARG:HD2	1:A:131:LYS:O	0.43	2.13	16	2
1:A:24:ARG:O	1:A:28:GLN:HG2	0.43	2.13	7	3
1:A:33:LEU:O	1:A:37:PHE:HD1	0.43	1.96	8	1
1:A:47:SER:HA	1:A:50:ASP:OD1	0.43	2.13	10	1
1:A:29:GLU:HB2	1:A:88:LYS:HZ3	0.43	1.70	2	1
1:A:94:ILE:O	1:A:98:LYS:HB2	0.43	2.13	16	5
1:A:32:ARG:HH12	1:A:89:LEU:CD1	0.43	2.27	3	1
1:A:44:TYR:O	1:A:52:ALA:HA	0.43	2.14	18	6
1:A:58:LYS:O	1:A:79:ARG:HB2	0.43	2.12	12	2
1:A:94:ILE:HG13	1:A:98:LYS:CG	0.43	2.43	3	2
1:A:106:ILE:CD1	1:A:111:LEU:HD22	0.43	2.36	6	1
1:A:98:LYS:HZ2	1:A:126:ILE:CD1	0.43	2.25	9	1
1:A:60:GLU:CB	1:A:79:ARG:NH1	0.43	2.81	12	1
1:A:66:HIS:O	1:A:85:LYS:HD3	0.43	2.14	14	1
1:A:53:TYR:O	1:A:54:LYS:HD3	0.43	2.13	20	1
1:A:98:LYS:HE2	1:A:119:ALA:CB	0.43	2.40	1	1
1:A:138:GLU:OE1	1:A:138:GLU:N	0.43	2.52	5	1
1:A:60:GLU:HB3	1:A:80:LEU:O	0.43	2.13	6	1
1:A:114:TYR:OH	1:A:138:GLU:OE2	0.43	2.33	6	1
1:A:125:ASP:C	1:A:125:ASP:OD1	0.43	2.56	15	3
1:A:86:ALA:HA	1:A:121:ASN:OD1	0.43	2.14	9	1
1:A:128:CYS:O	1:A:137:LYS:CB	0.43	2.67	20	4
1:A:54:LYS:CE	1:A:56:PHE:CE2	0.43	3.00	11	1
1:A:37:PHE:CD1	1:A:44:TYR:HA	0.43	2.49	12	1
1:A:114:TYR:HA	1:A:129:TYR:O	0.43	2.14	16	1
1:A:43:TRP:NE1	1:A:54:LYS:HD2	0.43	2.28	11	2
1:A:55:ASP:OD1	1:A:57:GLY:N	0.43	2.48	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:120:THR:CB	1:A:124:HIS:HB3	0.43	2.44	17	3
1:A:37:PHE:HE2	1:A:52:ALA:HB1	0.43	1.73	7	2
1:A:109:LEU:CD2	1:A:138:GLU:CD	0.43	2.87	14	1
1:A:127:LYS:NZ	1:A:129:TYR:HE1	0.43	2.11	20	1
1:A:99:LEU:O	1:A:102:ILE:HG13	0.43	2.13	4	4
1:A:31:ASP:O	1:A:35:LYS:HG3	0.43	2.12	7	2
1:A:58:LYS:NZ	1:A:112:ASP:H	0.43	2.12	8	1
1:A:63:LEU:HG	1:A:98:LYS:HZ3	0.43	1.74	12	1
1:A:82:VAL:HG13	1:A:117:ILE:HG21	0.43	1.85	3	1
1:A:59:TYR:CZ	1:A:111:LEU:CD1	0.43	2.87	5	1
1:A:98:LYS:HE3	1:A:119:ALA:HB2	0.43	1.91	8	1
1:A:106:ILE:HD12	1:A:111:LEU:HD13	0.43	1.90	9	1
1:A:33:LEU:HD21	1:A:37:PHE:HE1	0.43	1.72	10	1
1:A:95:ILE:HG12	1:A:99:LEU:HD22	0.43	1.91	12	1
1:A:43:TRP:CE3	1:A:53:TYR:CA	0.43	3.02	16	2
1:A:25:GLU:OE2	1:A:29:GLU:HG3	0.43	2.13	18	1
1:A:29:GLU:CD	1:A:88:LYS:HD3	0.43	2.33	20	1
1:A:63:LEU:CD1	1:A:84:ILE:HB	0.43	2.43	7	3
1:A:59:TYR:CE1	1:A:111:LEU:CD1	0.43	3.02	5	1
1:A:125:ASP:OD2	1:A:139:VAL:HG12	0.43	2.14	5	1
1:A:106:ILE:CD1	1:A:111:LEU:HB3	0.43	2.44	6	1
1:A:88:LYS:N	1:A:88:LYS:HD2	0.43	2.29	10	1
1:A:133:PHE:N	1:A:134:LYS:HE2	0.43	2.29	11	1
1:A:116:PHE:C	1:A:117:ILE:HG13	0.43	2.33	15	1
1:A:43:TRP:CB	1:A:54:LYS:HD2	0.43	2.44	20	1
1:A:33:LEU:CD1	1:A:37:PHE:CE1	0.43	3.02	1	2
1:A:58:LYS:O	1:A:79:ARG:NE	0.43	2.50	9	1
1:A:60:GLU:HB3	1:A:81:ILE:CD1	0.43	2.43	11	1
1:A:127:LYS:HG2	1:A:139:VAL:CG2	0.43	2.44	14	1
1:A:52:ALA:O	1:A:62:ARG:CB	0.43	2.67	19	1
1:A:33:LEU:CD1	1:A:45:LEU:HD22	0.43	2.39	20	1
1:A:43:TRP:HB3	1:A:54:LYS:CD	0.43	2.43	20	1
1:A:115:ARG:CG	1:A:116:PHE:CE1	0.42	3.02	1	1
1:A:118:ASN:O	1:A:126:ILE:HG13	0.42	2.14	3	5
1:A:29:GLU:HB3	1:A:88:LYS:HD3	0.42	1.91	8	1
1:A:126:ILE:CG2	1:A:140:ILE:C	0.42	2.87	13	1
1:A:107:ASP:OD1	1:A:108:LYS:HG2	0.42	2.14	14	1
1:A:98:LYS:NZ	1:A:122:LEU:CD2	0.42	2.78	17	1
1:A:33:LEU:CG	1:A:45:LEU:HD13	0.42	2.42	18	1
1:A:80:LEU:HG	1:A:111:LEU:O	0.42	2.13	3	4
1:A:59:TYR:N	1:A:79:ARG:HH21	0.42	2.09	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:59:TYR:HB3	1:A:112:ASP:OD1	0.42	2.13	8	2
1:A:126:ILE:HG21	1:A:140:ILE:OXT	0.42	2.14	13	1
1:A:51:SER:CB	1:A:62:ARG:HH21	0.42	2.26	15	1
1:A:64:SER:O	1:A:85:LYS:HA	0.42	2.15	13	6
1:A:105:LYS:HE2	1:A:140:ILE:CD1	0.42	2.38	6	1
1:A:106:ILE:HG12	1:A:111:LEU:HD13	0.42	1.90	7	1
1:A:25:GLU:O	1:A:29:GLU:HG2	0.42	2.14	8	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:54:LYS:HE2	0.42	2.49	14	1
1:A:24:ARG:HD2	1:A:24:ARG:O	0.42	2.14	16	1
1:A:78:GLY:C	1:A:79:ARG:HD2	0.42	2.35	17	1
1:A:43:TRP:HB3	1:A:54:LYS:CE	0.42	2.44	20	1
1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CD1	0.42	2.78	2	1
1:A:37:PHE:HE1	1:A:44:TYR:CD2	0.42	2.33	12	1
1:A:46:SER:O	1:A:50:ASP:CA	0.42	2.67	15	1
1:A:58:LYS:O	1:A:112:ASP:OD2	0.42	2.37	19	1
1:A:59:TYR:CA	1:A:79:ARG:NH2	0.42	2.82	4	1
1:A:63:LEU:CG	1:A:98:LYS:HE2	0.42	2.45	5	1
1:A:117:ILE:HG12	1:A:128:CYS:SG	0.42	2.53	8	1
1:A:126:ILE:C	1:A:127:LYS:HD2	0.42	2.35	10	1
1:A:53:TYR:HE1	1:A:62:ARG:NH2	0.42	2.10	18	1
1:A:92:VAL:O	1:A:95:ILE:HB	0.42	2.14	2	1
1:A:60:GLU:O	1:A:81:ILE:HA	0.42	2.15	9	4
1:A:114:TYR:CE2	1:A:138:GLU:CD	0.42	2.92	5	1
1:A:109:LEU:HG	1:A:114:TYR:OH	0.42	2.15	11	1
1:A:90:ASN:OD1	1:A:90:ASN:C	0.42	2.55	19	2
1:A:83:ASN:OD1	1:A:83:ASN:C	0.42	2.56	2	1
1:A:134:LYS:NZ	1:A:136:LYS:HZ1	0.42	2.13	16	1
1:A:134:LYS:HZ2	1:A:135:THR:HG22	0.42	1.69	17	1
1:A:114:TYR:CB	1:A:117:ILE:HG23	0.42	2.45	19	2
1:A:52:ALA:O	1:A:62:ARG:CA	0.42	2.68	19	1
1:A:42:GLY:O	1:A:54:LYS:CA	0.42	2.68	8	2
1:A:54:LYS:O	1:A:61:ILE:CG1	0.42	2.68	3	1
1:A:63:LEU:CB	1:A:91:PHE:HE1	0.42	2.28	14	2
1:A:40:LEU:HD21	1:A:92:VAL:HG23	0.42	1.90	4	1
1:A:62:ARG:CG	1:A:83:ASN:HD22	0.42	2.28	7	1
1:A:118:ASN:O	1:A:126:ILE:HB	0.42	2.15	8	1
1:A:130:TYR:CE2	1:A:131:LYS:CE	0.42	3.03	8	1
1:A:63:LEU:HD23	1:A:84:ILE:CB	0.42	2.45	15	1
1:A:59:TYR:HE1	1:A:61:ILE:CG2	0.42	2.27	3	3
1:A:24:ARG:N	1:A:24:ARG:HD2	0.42	2.29	5	1
1:A:82:VAL:HA	1:A:117:ILE:O	0.42	2.15	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:79:ARG:O	1:A:81:ILE:HG13	0.42	2.15	13	1
1:A:63:LEU:HD11	1:A:84:ILE:HD13	0.42	1.90	9	1
1:A:58:LYS:O	1:A:79:ARG:HD2	0.42	2.14	13	1
1:A:36:ALA:O	1:A:40:LEU:N	0.42	2.53	15	2
1:A:37:PHE:HB2	1:A:45:LEU:CD1	0.42	2.43	15	1
1:A:33:LEU:CG	1:A:37:PHE:HE1	0.41	2.28	1	1
1:A:92:VAL:O	1:A:96:GLU:HG2	0.41	2.15	1	1
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:54:LYS:CB	0.41	3.02	3	1
1:A:60:GLU:N	1:A:79:ARG:HE	0.41	2.13	4	1
1:A:84:ILE:CD1	1:A:98:LYS:CG	0.41	2.98	7	1
1:A:28:GLN:O	1:A:32:ARG:NH1	0.41	2.52	8	1
1:A:106:ILE:HD11	1:A:111:LEU:CD1	0.41	2.45	8	1
1:A:62:ARG:O	1:A:84:ILE:HB	0.41	2.14	15	1
1:A:120:THR:HG21	1:A:124:HIS:ND1	0.41	2.30	19	1
1:A:83:ASN:ND2	1:A:118:ASN:OD1	0.41	2.51	2	1
1:A:63:LEU:CD2	1:A:98:LYS:HE2	0.41	2.45	5	1
1:A:85:LYS:O	1:A:121:ASN:ND2	0.41	2.53	5	1
1:A:91:PHE:O	1:A:95:ILE:HG12	0.41	2.15	11	1
1:A:102:ILE:O	1:A:105:LYS:CG	0.41	2.68	15	1
1:A:35:LYS:NZ	1:A:39:ASN:HD21	0.41	2.12	18	1
1:A:84:ILE:CG2	1:A:98:LYS:HG2	0.41	2.43	2	1
1:A:58:LYS:NZ	1:A:112:ASP:OD2	0.41	2.52	7	1
1:A:127:LYS:N	1:A:127:LYS:CD	0.41	2.84	10	2
1:A:51:SER:HB2	1:A:63:LEU:O	0.41	2.14	12	1
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:56:PHE:CE2	0.41	3.09	20	1
1:A:98:LYS:NZ	1:A:126:ILE:HD12	0.41	2.30	20	1
1:A:43:TRP:CE2	1:A:54:LYS:CG	0.41	3.03	6	1
1:A:114:TYR:OH	1:A:138:GLU:HG3	0.41	2.15	15	2
1:A:62:ARG:NH2	1:A:83:ASN:HD22	0.41	2.10	11	1
1:A:94:ILE:HG12	1:A:98:LYS:HG3	0.41	1.92	11	1
1:A:29:GLU:OE2	1:A:33:LEU:CG	0.41	2.68	12	1
1:A:89:LEU:HD12	1:A:89:LEU:H	0.41	1.74	13	1
1:A:101:LYS:O	1:A:105:LYS:HE2	0.41	2.15	14	1
1:A:115:ARG:HG3	1:A:131:LYS:HA	0.41	1.91	17	1
1:A:114:TYR:HB3	1:A:129:TYR:O	0.41	2.15	6	2
1:A:56:PHE:HE1	1:A:61:ILE:CD1	0.41	2.28	3	2
1:A:114:TYR:CG	1:A:128:CYS:HB3	0.41	2.51	8	1
1:A:116:PHE:HD2	1:A:129:TYR:CD1	0.41	2.34	8	1
1:A:111:LEU:C	1:A:113:LYS:N	0.41	2.73	9	1
1:A:43:TRP:HH2	1:A:56:PHE:CE2	0.41	2.33	20	1
1:A:33:LEU:CD2	1:A:37:PHE:CD1	0.41	3.03	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:111:LEU:N	1:A:111:LEU:CD1	0.41	2.84	12	1
1:A:129:TYR:CD2	1:A:137:LYS:HD3	0.41	2.50	13	1
1:A:53:TYR:CA	1:A:61:ILE:O	0.41	2.68	15	1
1:A:92:VAL:O	1:A:96:GLU:HG3	0.41	2.15	17	1
1:A:98:LYS:HZ3	1:A:122:LEU:CD2	0.41	2.28	17	1
1:A:54:LYS:CG	1:A:56:PHE:CD1	0.41	3.04	19	1
1:A:42:GLY:O	1:A:54:LYS:HB2	0.41	2.15	5	1
1:A:115:ARG:HD3	1:A:131:LYS:HA	0.41	1.93	10	1
1:A:116:PHE:HD1	1:A:132:GLY:CA	0.41	2.29	15	1
1:A:64:SER:OG	1:A:83:ASN:OD1	0.41	2.24	5	1
1:A:78:GLY:C	1:A:79:ARG:HD3	0.41	2.36	5	1
1:A:105:LYS:HZ2	1:A:126:ILE:HD13	0.41	1.75	6	1
1:A:54:LYS:HG2	1:A:61:ILE:HG13	0.41	1.92	8	1
1:A:98:LYS:HZ1	1:A:119:ALA:HB1	0.41	1.73	11	1
1:A:120:THR:C	1:A:121:ASN:O	0.41	2.59	12	1
1:A:99:LEU:HD23	1:A:102:ILE:HD11	0.41	1.93	20	1
1:A:63:LEU:CD2	1:A:95:ILE:HG12	0.41	2.46	3	1
1:A:82:VAL:CG1	1:A:117:ILE:CG2	0.41	2.94	3	1
1:A:95:ILE:HG22	1:A:99:LEU:HD12	0.41	1.93	3	1
1:A:79:ARG:HH21	1:A:112:ASP:CG	0.41	2.18	8	1
1:A:99:LEU:HD13	1:A:103:ILE:HG12	0.41	1.93	8	1
1:A:62:ARG:HH12	1:A:81:ILE:CG2	0.41	2.28	9	1
1:A:33:LEU:HA	1:A:91:PHE:CE2	0.41	2.51	11	1
1:A:102:ILE:CG2	1:A:111:LEU:HD21	0.41	2.46	12	1
1:A:102:ILE:HG23	1:A:111:LEU:HD21	0.41	1.93	12	1
1:A:45:LEU:HD12	1:A:45:LEU:H	0.41	1.76	13	1
1:A:98:LYS:O	1:A:101:LYS:HG3	0.41	2.15	13	1
1:A:126:ILE:HD12	1:A:127:LYS:H	0.41	1.74	13	1
1:A:46:SER:OG	1:A:49:LYS:CG	0.41	2.68	14	1
1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:CG	0.41	2.89	15	1
1:A:65:ASN:HA	1:A:86:ALA:O	0.41	2.15	16	1
1:A:80:LEU:HG	1:A:112:ASP:O	0.41	2.16	16	1
1:A:37:PHE:HE1	1:A:43:TRP:O	0.41	1.99	17	1
1:A:58:LYS:C	1:A:79:ARG:NH2	0.41	2.75	4	1
1:A:104:GLU:CG	1:A:108:LYS:HZ1	0.41	2.29	5	1
1:A:126:ILE:HG22	1:A:140:ILE:O	0.41	2.16	6	1
1:A:113:LYS:N	1:A:113:LYS:CD	0.41	2.84	12	1
1:A:106:ILE:CD1	1:A:111:LEU:CD1	0.40	2.99	9	1
1:A:84:ILE:HD13	1:A:119:ALA:HB3	0.40	1.93	11	1
1:A:95:ILE:HG12	1:A:99:LEU:CD2	0.40	2.45	12	1
1:A:101:LYS:HZ3	1:A:119:ALA:CB	0.40	2.29	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:97:ASN:HD22	1:A:122:LEU:HD13	0.40	1.76	14	1
1:A:94:ILE:CG1	1:A:98:LYS:HE3	0.40	2.46	16	1
1:A:43:TRP:HB3	1:A:54:LYS:HD2	0.40	1.93	20	1
1:A:65:ASN:ND2	1:A:88:LYS:HE3	0.40	2.30	1	1
1:A:120:THR:HB	1:A:124:HIS:HB3	0.40	1.94	1	2
1:A:87:SER:HB2	1:A:90:ASN:OD1	0.40	2.17	5	1
1:A:88:LYS:N	1:A:88:LYS:CD	0.40	2.83	6	1
1:A:54:LYS:HE3	1:A:61:ILE:O	0.40	2.16	8	1
1:A:33:LEU:C	1:A:33:LEU:HD23	0.40	2.37	11	1
1:A:45:LEU:CD2	1:A:52:ALA:CB	0.40	2.97	16	1
1:A:105:LYS:HG3	1:A:138:GLU:OE2	0.40	2.15	16	1
1:A:84:ILE:HG12	1:A:98:LYS:CD	0.40	2.46	5	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:54:LYS:CG	0.40	3.03	6	1
1:A:37:PHE:CG	1:A:45:LEU:HD21	0.40	2.51	11	1
1:A:28:GLN:CD	1:A:28:GLN:C	0.40	2.80	14	1
1:A:49:LYS:O	1:A:51:SER:OG	0.40	2.23	16	1
1:A:123:GLU:CG	1:A:124:HIS:CD2	0.40	3.04	16	1
1:A:43:TRP:CD1	1:A:54:LYS:CE	0.40	3.04	19	1
1:A:29:GLU:OE2	1:A:88:LYS:HB3	0.40	2.16	20	1
1:A:83:ASN:O	1:A:119:ALA:HB3	0.40	2.16	2	1
1:A:122:LEU:HD12	1:A:122:LEU:C	0.40	2.36	3	1
1:A:37:PHE:HE2	1:A:52:ALA:CB	0.40	2.29	7	1
1:A:54:LYS:CG	1:A:61:ILE:CG1	0.40	2.99	8	1
1:A:114:TYR:HB3	1:A:117:ILE:HG23	0.40	1.92	11	1
1:A:80:LEU:HD12	1:A:115:ARG:O	0.40	2.16	12	1
1:A:44:TYR:CD1	1:A:44:TYR:N	0.40	2.89	16	2
1:A:37:PHE:HA	1:A:40:LEU:HB2	0.40	1.94	15	1
1:A:29:GLU:OE1	1:A:89:LEU:HG	0.40	2.17	17	1
1:A:45:LEU:HD21	1:A:91:PHE:CZ	0.40	2.51	18	1
1:A:98:LYS:HZ3	1:A:119:ALA:CB	0.40	2.28	20	1
1:A:56:PHE:CE1	1:A:61:ILE:HD13	0.40	2.50	4	1
1:A:110:ASP:HB2	1:A:113:LYS:HG3	0.40	1.94	10	1
1:A:139:VAL:O	1:A:140:ILE:CD1	0.40	2.57	13	1
1:A:58:LYS:O	1:A:79:ARG:NH2	0.40	2.54	14	1
1:A:94:ILE:CD1	1:A:122:LEU:HG	0.40	2.46	17	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	106/140 (76%)	101±1 (95±1%)	3±1 (3±1%)	2±1 (2±1%)	9 46
All	All	2120/2800 (76%)	2012 (95%)	58 (3%)	50 (2%)	9 46

All 4 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	50	ASP	20
1	A	121	ASN	17
1	A	65	ASN	12
1	A	111	LEU	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	98/128 (77%)	94±2 (96±2%)	4±2 (4±2%)	33 82
All	All	1960/2560 (77%)	1878 (96%)	82 (4%)	33 82

All 31 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	109	LEU	9
1	A	102	ILE	8
1	A	40	LEU	7
1	A	80	LEU	7
1	A	127	LYS	4
1	A	54	LYS	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	117	ILE	4
1	A	32	ARG	3
1	A	53	TYR	3
1	A	140	ILE	3
1	A	126	ILE	3
1	A	134	LYS	3
1	A	45	LEU	2
1	A	99	LEU	2
1	A	106	ILE	2
1	A	56	PHE	2
1	A	98	LYS	2
1	A	114	TYR	1
1	A	89	LEU	1
1	A	48	MET	1
1	A	95	ILE	1
1	A	35	LYS	1
1	A	49	LYS	1
1	A	79	ARG	1
1	A	111	LEU	1
1	A	131	LYS	1
1	A	115	ARG	1
1	A	113	LYS	1
1	A	122	LEU	1
1	A	62	ARG	1
1	A	63	LEU	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)

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 75% for the well-defined parts and 71% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *starch_output*

7.1.1 Bookkeeping (i)

The following table shows the results of parsing the chemical shift list and reports the number of nuclei with statistically unusual chemical shifts.

Total number of shifts	1440
Number of shifts mapped to atoms	1439
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	1
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	5

The following assigned chemical shifts were not mapped to the molecules present in the coordinate file.

- No matching atom found in the structure. All 1 occurrences are reported below.

List ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
1	A	124	HIS	HD1	10.138	.	.

7.1.2 Chemical shift referencing (i)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction ± precision, *ppm*	Suggested action
$^{13}C_{\alpha}$	128	-0.34 ± 0.11	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}C_{\beta}$	122	-0.04 ± 0.12	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}C'$	126	-0.02 ± 0.08	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	118	-0.39 ± 0.36	None needed (< 0.5 ppm)

7.1.3 Completeness of resonance assignments (i)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 75%, i.e. 1169 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1559. 0 out of 13 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^{1}H	^{13}C	^{15}N
Backbone	488/539 (91%)	195/218 (89%)	199/214 (93%)	94/107 (88%)
Sidechain	628/881 (71%)	419/564 (74%)	208/278 (75%)	1/39 (3%)
Aromatic	53/139 (38%)	28/67 (42%)	24/69 (35%)	1/3 (33%)
Overall	1169/1559 (75%)	642/849 (76%)	431/561 (77%)	96/149 (64%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 71%, i.e. 1439 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2041. 0 out of 14 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^{1}H	^{13}C	^{15}N
Backbone	618/705 (88%)	246/285 (86%)	254/280 (91%)	118/140 (84%)
Sidechain	760/1144 (66%)	507/727 (70%)	251/353 (71%)	2/64 (3%)
Aromatic	61/192 (32%)	32/92 (35%)	28/96 (29%)	1/4 (25%)
Overall	1439/2041 (71%)	785/1104 (71%)	533/729 (73%)	121/208 (58%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts (i)

The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

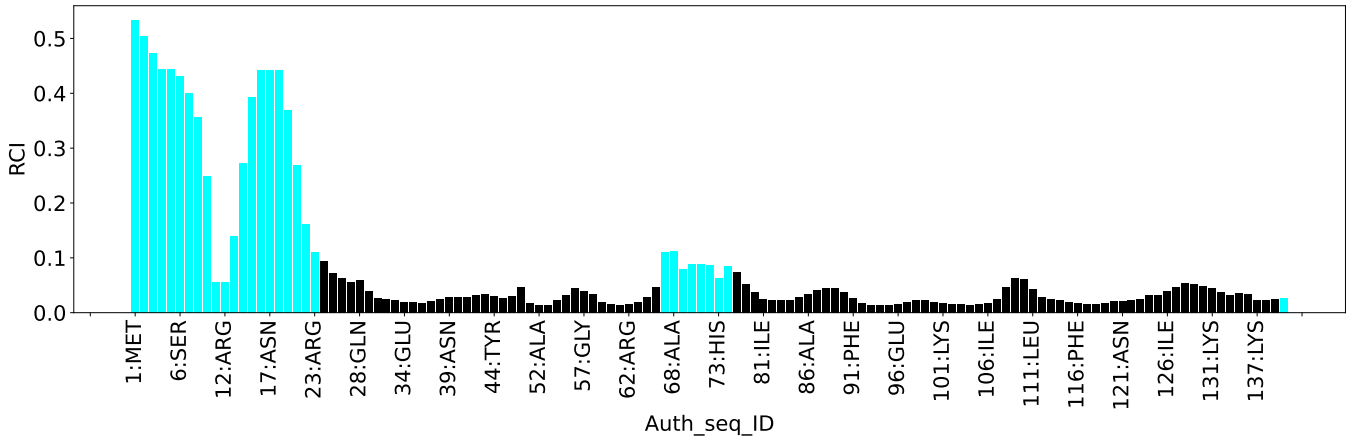
List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, *ppm*	Expected range, *ppm*	Z-score
1	A	12	ARG	CD	36.05	38.57 – 47.75	-7.7
1	A	126	ILE	CG2	27.40	10.93 – 24.12	7.5
1	A	85	LYS	HD2	3.01	0.58 – 2.64	6.8
1	A	85	LYS	HD3	3.01	0.54 – 2.65	6.7
1	A	126	ILE	CG1	17.99	19.24 – 36.26	-5.7

7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots (i)

The image below reports *random coil index* values for the protein chains in the structure. The height of each bar gives a probability of a given residue to be disordered, as predicted from the available chemical shifts and the amino acid sequence. A value above 0.2 is an indication of significant predicted disorder. The colour of the bar shows whether the residue is in the well-defined core (black) or in the ill-defined residue ranges (cyan), as described in section 2 on ensemble composition.If well-defined core and ill-defined regions are not identified then it is shown as gray

bars.

Random coil index (RCI) for chain A:



8 NMR restraints analysis (i)

8.1 Conformationally restricting restraints (i)

The following table provides the summary of experimentally observed NMR restraints in different categories. Restraints are classified into different categories based on the sequence separation of the atoms involved.

Description	Value
Total distance restraints	2027
Intra-residue (|i-j|=0)	878
Sequential (|i-j|=1)	572
Medium range (|i-j|>1 and |i-j|<5)	263
Long range (|i-j|≥5)	314
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	0
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	195
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	15.9
Number of long range restraints per residue[1]	2.2

[1]Long range hydrogen bonds and disulfide bonds are counted as long range restraints while calculating the number of long range restraints per residue

8.2 Residual restraint violations (i)

This section provides the overview of the restraint violations analysis. The violations are binned as small, medium and large violations based on its absolute value. Average number of violations per model is calculated by dividing the total number of violations in each bin by the size of the ensemble.

8.2.1 Average number of distance violations per model (i)

Distance violations less than 0.1 Å are not included in the calculation.

Bins (Å)	Average number of violations per model	Max (Å)
0.1-0.2 (Small)	10.7	0.2
0.2-0.5 (Medium)	1.9	0.35
>0.5 (Large)	None	None

8.2.2 Average number of dihedral-angle violations per model (i)

Dihedral-angle violations less than 1° are not included in the calculation.

Bins (°)	Average number of violations per model	Max (°)
1.0-10.0 (Small)	9.1	4.6
10.0-20.0 (Medium)	None	None
>20.0 (Large)	None	None

9 Distance violation analysis (i)

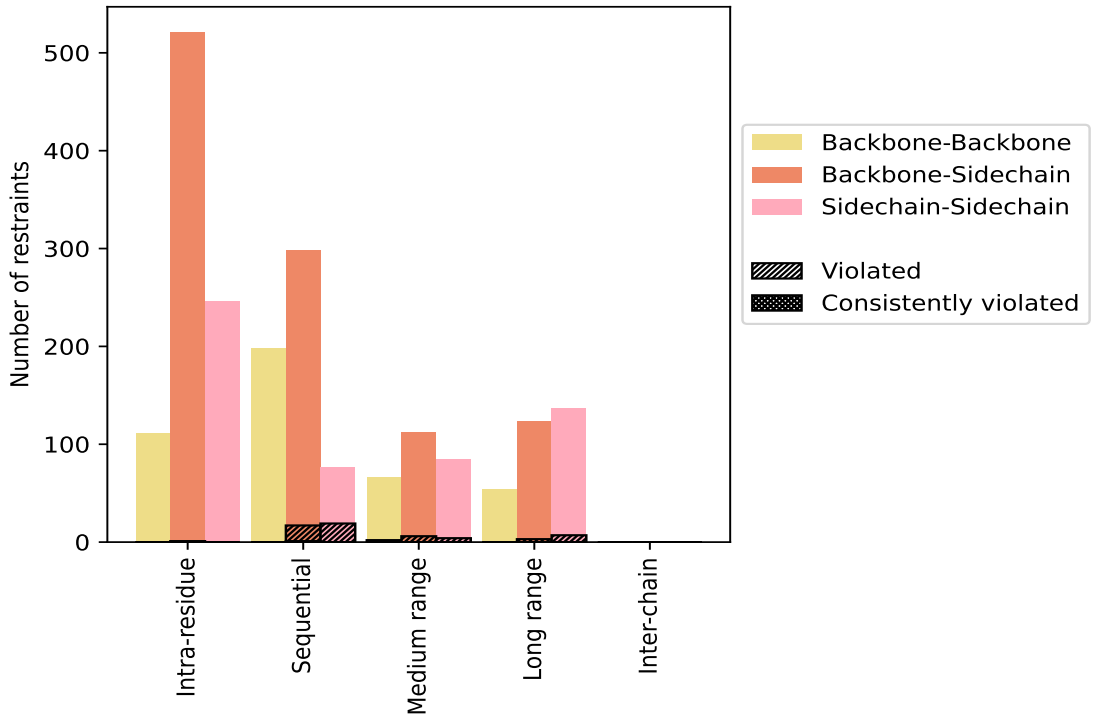
9.1 Summary of distance violations (i)

The following table shows the summary of distance violations in different restraint categories based on the sequence separation of the atoms involved. Each category is further sub-divided into three sub-categories based on the atoms involved. Violations less than 0.1 Å are not included in the statistics.

Restraints type	Count	%[1]	Violated[3]			Consistently Violated[4]		
			Count	%[2]	%[1]	Count	%[2]	%[1]
Intra-residue (|i-j|=0)	878	43.3	1	0.1	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	111	5.5	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	521	25.7	1	0.2	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	246	12.1	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sequential (|i-j|=1)	572	28.2	36	6.3	1.8	1	0.2	0.0
Backbone-Backbone	198	9.8	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	298	14.7	17	5.7	0.8	1	0.3	0.0
Sidechain-Sidechain	76	3.7	19	25.0	0.9	0	0.0	0.0
Medium range (|i-j|>1 & |i-j|<5)	263	13.0	12	4.6	0.6	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	66	3.3	2	3.0	0.1	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	112	5.5	6	5.4	0.3	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	85	4.2	4	4.7	0.2	0	0.0	0.0
Long range (|i-j|≥5)	314	15.5	10	3.2	0.5	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	54	2.7	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	123	6.1	3	2.4	0.1	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	137	6.8	7	5.1	0.3	0	0.0	0.0
Inter-chain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Hydrogen bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Disulfide bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	2027	100.0	59	2.9	2.9	1	0.0	0.0
Backbone-Backbone	429	21.2	2	0.5	0.1	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	1054	52.0	27	2.6	1.3	1	0.1	0.0
Sidechain-Sidechain	544	26.8	30	5.5	1.5	0	0.0	0.0

[1] percentage calculated with respect to the total number of distance restraints, [2] percentage calculated with respect to the number of restraints in a particular restraint category, [3] violated in at least one model, [4] violated in all the models

9.1.1 Bar chart : Distribution of distance restraints and violations (i)



Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories. The hydrogen bonds and disulfied bonds are counted in their appropriate category on the x-axis

9.2 Distance violation statistics for each model (i)

The following table provides the distance violation statistics for each model in the ensemble. Violations less than 0.1 Å are not included in the statistics.

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD[6] (Å)	Median (Å)
	IR[1]	SQ[2]	MR[3]	LR[4]	IC[5]	Total				
1	0	5	1	2	0	8	0.15	0.2	0.03	0.15
2	0	7	3	1	0	11	0.18	0.31	0.05	0.17
3	0	9	4	2	0	15	0.16	0.21	0.03	0.17
4	0	10	2	3	0	15	0.15	0.29	0.05	0.13
5	0	7	1	2	0	10	0.19	0.34	0.07	0.18
6	0	6	2	2	0	10	0.18	0.35	0.06	0.18
7	0	9	2	1	0	12	0.17	0.31	0.05	0.15
8	0	11	3	3	0	17	0.16	0.3	0.05	0.15
9	0	8	2	2	0	12	0.16	0.32	0.07	0.13
10	0	9	3	2	0	14	0.17	0.29	0.05	0.16
11	0	10	3	2	0	15	0.16	0.25	0.04	0.15

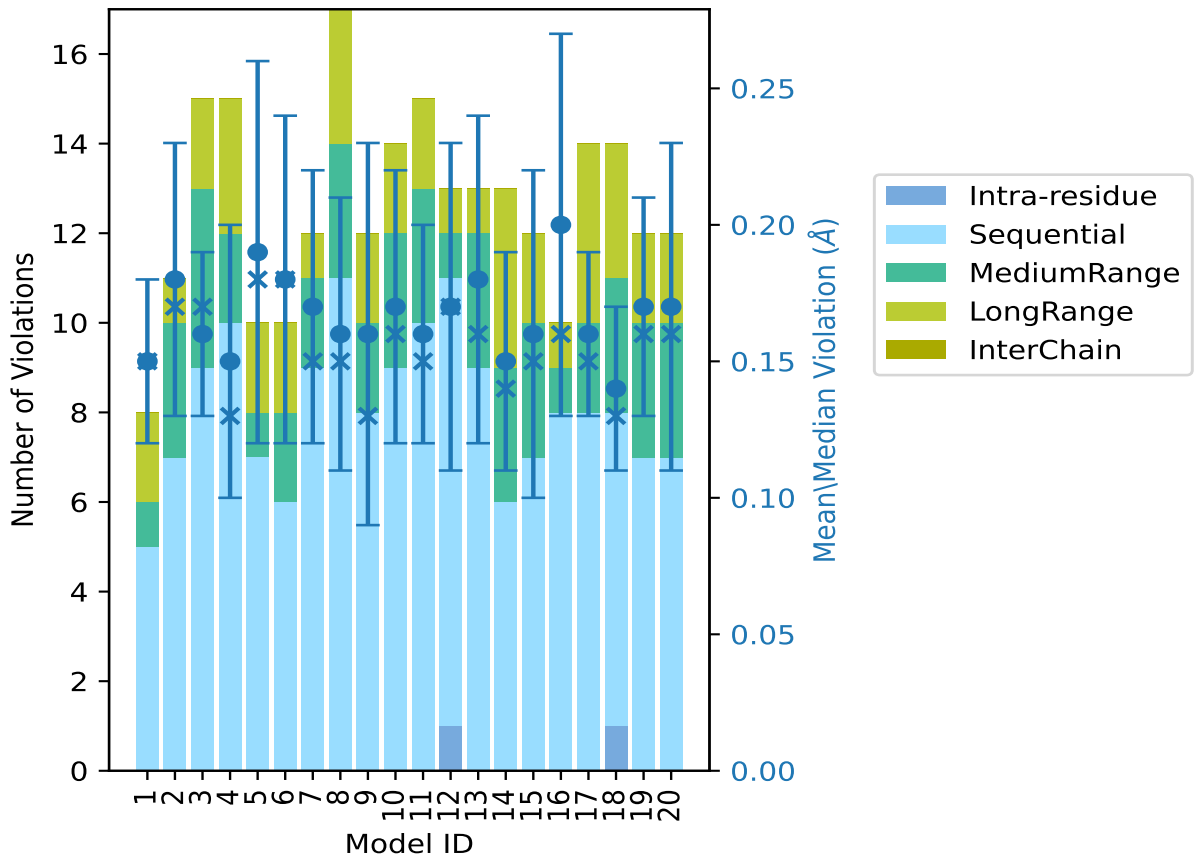
Continued on next page...

Continued from previous page...

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD[6] (Å)	Median (Å)
	IR[1]	SQ[2]	MR[3]	LR[4]	IC[5]	Total				
12	1	10	1	1	0	13	0.17	0.3	0.06	0.17
13	0	9	3	1	0	13	0.18	0.32	0.06	0.16
14	0	6	3	4	0	13	0.15	0.27	0.04	0.14
15	0	7	3	2	0	12	0.16	0.34	0.06	0.15
16	0	8	1	1	0	10	0.2	0.32	0.07	0.16
17	0	8	2	4	0	14	0.16	0.21	0.03	0.15
18	1	7	3	3	0	14	0.14	0.19	0.03	0.13
19	0	7	3	2	0	12	0.17	0.28	0.04	0.16
20	0	7	3	2	0	12	0.17	0.3	0.06	0.16

[1]Intra-residue restraints, [2]Sequential restraints, [3]Medium range restraints, [4]Long range restraints, [5]Inter-chain restraints, [6]Standard deviation

9.2.1 Bar graph : Distance Violation statistics for each model (i)



The mean(dot),median(x) and the standard deviation are shown in blue with respect to the y axis on the right

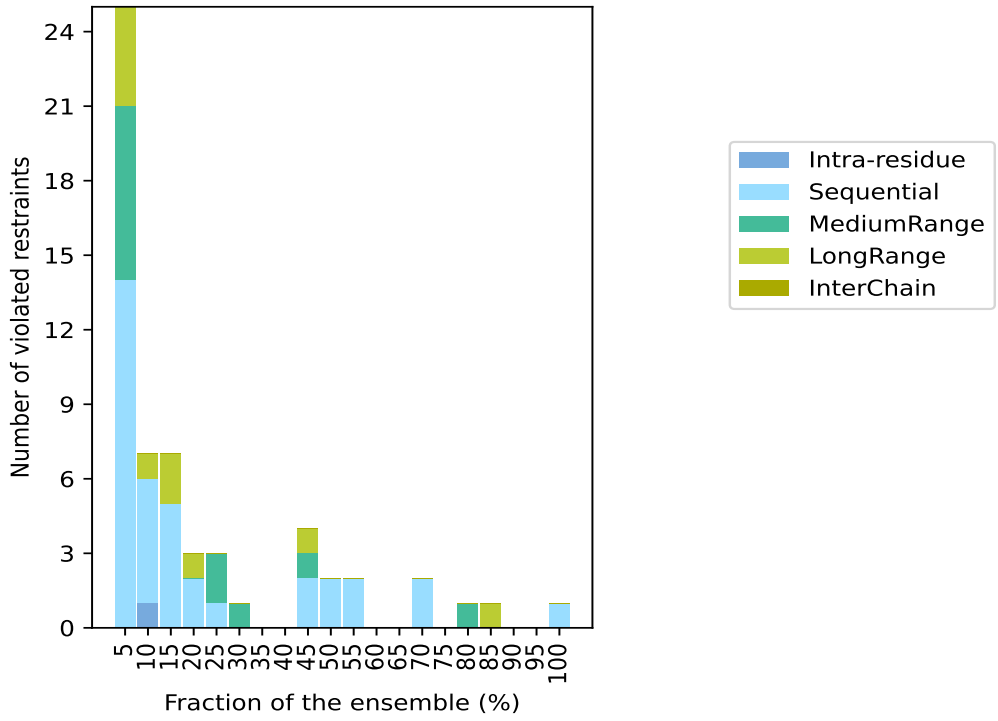
9.3 Distance violation statistics for the ensemble (i)

Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 1968(IR:877, SQ:536, MR:251, LR:304, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR[1]	SQ[2]	MR[3]	LR[4]	IC[5]	Total	Count[6]	%
0	14	7	4	0	25	1	5.0
1	5	0	1	0	7	2	10.0
0	5	0	2	0	7	3	15.0
0	2	0	1	0	3	4	20.0
0	1	2	0	0	3	5	25.0
0	0	1	0	0	1	6	30.0
0	0	0	0	0	0	7	35.0
0	0	0	0	0	0	8	40.0
0	2	1	1	0	4	9	45.0
0	2	0	0	0	2	10	50.0
0	2	0	0	0	2	11	55.0
0	0	0	0	0	0	12	60.0
0	0	0	0	0	0	13	65.0
0	2	0	0	0	2	14	70.0
0	0	0	0	0	0	15	75.0
0	0	1	0	0	1	16	80.0
0	0	0	1	0	1	17	85.0
0	0	0	0	0	0	18	90.0
0	0	0	0	0	0	19	95.0
0	1	0	0	0	1	20	100.0

[1]Intra-residue restraints, [2]Sequential restraints, [3]Medium range restraints, [4]Long range restraints, [5]Inter-chain restraints, [6] Number of models with violations

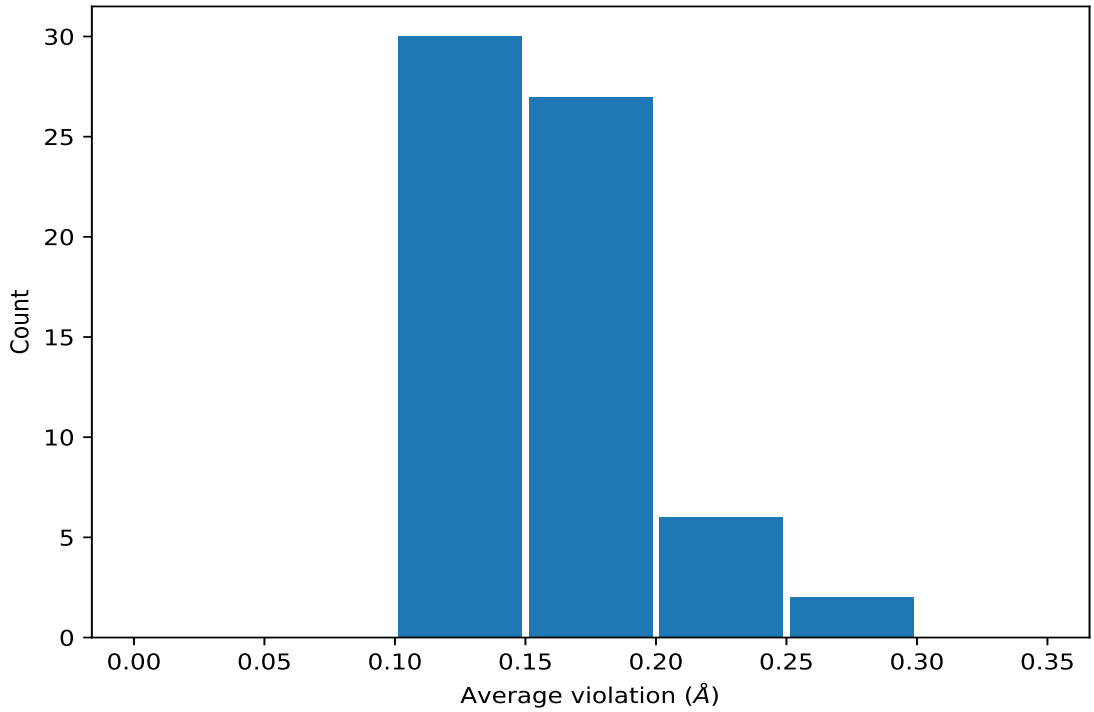
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble (i)



9.4 Most violated distance restraints in the ensemble (i)

9.4.1 Histogram : Distribution of mean distance violations (i)

The following histogram shows the distribution of the average value of the violation. The average is calculated for each restraint that is violated in more than one model over all the violated models in the ensemble



9.4.2 Table: Most violated distance restraints (i)

The following table provides the mean and the standard deviation of the violation for each restraint sorted by number of violated models and the mean value. The Key (restraint list ID, restraint ID) is the unique identifier for a given restraint. Rows with same key represent combinatorial or ambiguous restraints and are counted as a single restraint.

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,1664)	1:A:113:LYS:H	1:A:114:TYR:HB3	20	0.15	0.02	0.15
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG21	1:A:99:LEU:HA	17	0.18	0.04	0.19
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG22	1:A:99:LEU:HA	17	0.18	0.04	0.19
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG23	1:A:99:LEU:HA	17	0.18	0.04	0.19
(1,1715)	1:A:116:PHE:HA	1:A:118:ASN:HB2	16	0.17	0.03	0.16
(1,1562)	1:A:108:LYS:H	1:A:109:LEU:HB2	14	0.2	0.06	0.2
(1,1471)	1:A:104:GLU:H	1:A:105:LYS:HB3	14	0.13	0.02	0.12
(1,1739)	1:A:117:ILE:HG13	1:A:118:ASN:HB2	11	0.21	0.09	0.17
(1,1657)	1:A:113:LYS:HB3	1:A:114:TYR:HB3	11	0.14	0.03	0.13
(1,1514)	1:A:106:ILE:HG12	1:A:107:ASP:HA	10	0.29	0.06	0.3
(1,1381)	1:A:101:LYS:H	1:A:102:ILE:HB	10	0.19	0.01	0.19
(1,967)	1:A:82:VAL:HB	1:A:117:ILE:HB	9	0.17	0.03	0.18
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG21	9	0.14	0.04	0.12
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG22	9	0.14	0.04	0.12
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG23	9	0.14	0.04	0.12
(1,1282)	1:A:97:ASN:H	1:A:101:LYS:HG2	9	0.13	0.02	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,445)	1:A:43:TRP:HB3	1:A:44:TYR:HE1	9	0.13	0.01	0.12
(1,445)	1:A:43:TRP:HB3	1:A:44:TYR:HE2	9	0.13	0.01	0.12
(1,834)	1:A:65:ASN:HB3	1:A:68:ALA:HB1	6	0.16	0.04	0.15
(1,834)	1:A:65:ASN:HB3	1:A:68:ALA:HB2	6	0.16	0.04	0.15
(1,834)	1:A:65:ASN:HB3	1:A:68:ALA:HB3	6	0.16	0.04	0.15
(1,57)	1:A:7:ARG:HB2	1:A:9:ASN:HA	5	0.16	0.04	0.16
(1,57)	1:A:7:ARG:HB3	1:A:9:ASN:HA	5	0.16	0.04	0.16
(1,1689)	1:A:114:TYR:HE1	1:A:117:ILE:HG12	5	0.14	0.01	0.14
(1,1689)	1:A:114:TYR:HE2	1:A:117:ILE:HG12	5	0.14	0.01	0.14
(1,1742)	1:A:117:ILE:HD11	1:A:118:ASN:HB3	5	0.13	0.02	0.12
(1,1742)	1:A:117:ILE:HD12	1:A:118:ASN:HB3	5	0.13	0.02	0.12
(1,1742)	1:A:117:ILE:HD13	1:A:118:ASN:HB3	5	0.13	0.02	0.12
(1,878)	1:A:71:LYS:HG2	1:A:72:TYR:HD1	4	0.22	0.04	0.22
(1,878)	1:A:71:LYS:HG2	1:A:72:TYR:HD2	4	0.22	0.04	0.22
(1,878)	1:A:71:LYS:HG3	1:A:72:TYR:HD1	4	0.22	0.04	0.22
(1,878)	1:A:71:LYS:HG3	1:A:72:TYR:HD2	4	0.22	0.04	0.22
(1,1163)	1:A:92:VAL:HG21	1:A:93:ASP:HB3	4	0.19	0.0	0.19
(1,1163)	1:A:92:VAL:HG22	1:A:93:ASP:HB3	4	0.19	0.0	0.19
(1,1163)	1:A:92:VAL:HG23	1:A:93:ASP:HB3	4	0.19	0.0	0.19
(1,963)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:114:TYR:HE1	4	0.13	0.02	0.12
(1,963)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:114:TYR:HE2	4	0.13	0.02	0.12
(1,963)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:114:TYR:HE1	4	0.13	0.02	0.12
(1,963)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:114:TYR:HE2	4	0.13	0.02	0.12
(1,963)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:114:TYR:HE1	4	0.13	0.02	0.12
(1,963)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:114:TYR:HE2	4	0.13	0.02	0.12
(1,1289)	1:A:98:LYS:HB3	1:A:99:LEU:HG	3	0.18	0.02	0.18
(1,1375)	1:A:101:LYS:HG3	1:A:102:ILE:HG21	3	0.17	0.03	0.15
(1,1375)	1:A:101:LYS:HG3	1:A:102:ILE:HG22	3	0.17	0.03	0.15
(1,1375)	1:A:101:LYS:HG3	1:A:102:ILE:HG23	3	0.17	0.03	0.15
(1,605)	1:A:54:LYS:HE2	1:A:61:ILE:HB	3	0.16	0.02	0.17
(1,605)	1:A:54:LYS:HE3	1:A:61:ILE:HB	3	0.16	0.02	0.17
(1,200)	1:A:31:ASP:HB2	1:A:32:ARG:HB3	3	0.15	0.0	0.15
(1,1288)	1:A:98:LYS:H	1:A:99:LEU:HB3	3	0.15	0.01	0.15
(1,1746)	1:A:117:ILE:HB	1:A:126:ILE:HG12	3	0.13	0.02	0.13
(1,1338)	1:A:100:ASP:HB3	1:A:101:LYS:HG3	3	0.13	0.02	0.11
(1,335)	1:A:38:GLU:H	1:A:39:ASN:HB2	2	0.26	0.02	0.26
(1,1246)	1:A:95:ILE:HG21	1:A:96:GLU:HB3	2	0.18	0.03	0.18
(1,1246)	1:A:95:ILE:HG22	1:A:96:GLU:HB3	2	0.18	0.03	0.18
(1,1246)	1:A:95:ILE:HG23	1:A:96:GLU:HB3	2	0.18	0.03	0.18
(1,1269)	1:A:96:GLU:HB3	1:A:97:ASN:HB3	2	0.16	0.02	0.16
(1,113)	1:A:20:ASN:HB3	1:A:21:LYS:HD2	2	0.12	0.02	0.12
(1,113)	1:A:20:ASN:HB3	1:A:21:LYS:HD3	2	0.12	0.02	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

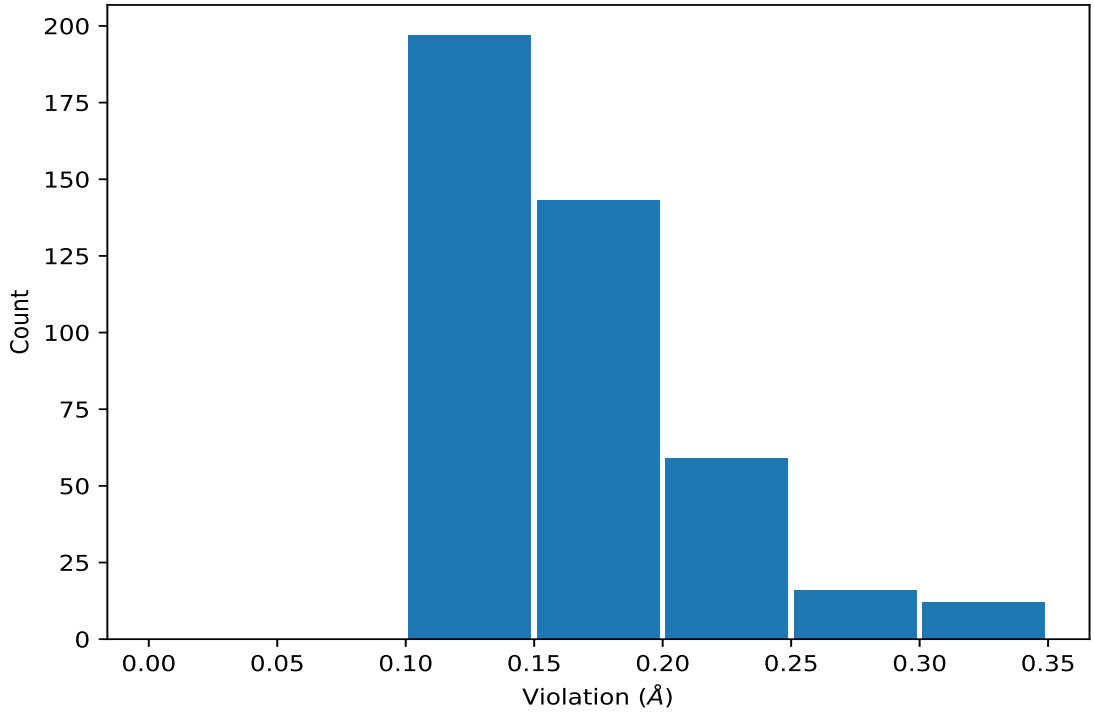
Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,575)	1:A:53:TYR:HE1	1:A:53:TYR:H	2	0.12	0.01	0.12
(1,575)	1:A:53:TYR:HE2	1:A:53:TYR:H	2	0.12	0.01	0.12
(1,1340)	1:A:100:ASP:HB2	1:A:101:LYS:HB2	2	0.12	0.0	0.12
(1,485)	1:A:44:TYR:HE1	1:A:54:LYS:HE2	2	0.12	0.0	0.12
(1,485)	1:A:44:TYR:HE1	1:A:54:LYS:HE3	2	0.12	0.0	0.12
(1,485)	1:A:44:TYR:HE2	1:A:54:LYS:HE2	2	0.12	0.0	0.12
(1,485)	1:A:44:TYR:HE2	1:A:54:LYS:HE3	2	0.12	0.0	0.12

[1]Number of violated models, [2]Standard deviation

9.5 All violated distance restraints (i)

9.5.1 Histogram : Distribution of distance violations (i)

The following histogram shows the distribution of the absolute value of the violation for all violated restraints in the ensemble.



9.5.2 Table : All distance violations (i)

The following table lists the absolute value of the violation for each restraint in the ensemble sorted by its value. The Key (restraint list ID, restraint ID) is the unique identifier for a given restraint. Rows with same key represent combinatorial or ambiguous restraints and are counted as a single restraint.

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1514)	1:A:106:ILE:HG12	1:A:107:ASP:HA	6	0.35
(1,1739)	1:A:117:ILE:HG13	1:A:118:ASN:HB2	5	0.34
(1,1739)	1:A:117:ILE:HG13	1:A:118:ASN:HB2	15	0.34
(1,1562)	1:A:108:LYS:H	1:A:109:LEU:HB2	9	0.32
(1,1514)	1:A:106:ILE:HG12	1:A:107:ASP:HA	13	0.32
(1,1514)	1:A:106:ILE:HG12	1:A:107:ASP:HA	16	0.32
(1,1514)	1:A:106:ILE:HG12	1:A:107:ASP:HA	2	0.31
(1,1514)	1:A:106:ILE:HG12	1:A:107:ASP:HA	7	0.31
(1,1739)	1:A:117:ILE:HG13	1:A:118:ASN:HB2	12	0.3
(1,1514)	1:A:106:ILE:HG12	1:A:107:ASP:HA	5	0.3
(1,1514)	1:A:106:ILE:HG12	1:A:107:ASP:HA	8	0.3
(1,1514)	1:A:106:ILE:HG12	1:A:107:ASP:HA	20	0.3
(1,1739)	1:A:117:ILE:HG13	1:A:118:ASN:HB2	16	0.29
(1,1562)	1:A:108:LYS:H	1:A:109:LEU:HB2	4	0.29
(1,1562)	1:A:108:LYS:H	1:A:109:LEU:HB2	16	0.29
(1,1514)	1:A:106:ILE:HG12	1:A:107:ASP:HA	10	0.29
(1,878)	1:A:71:LYS:HG2	1:A:72:TYR:HD1	20	0.28
(1,878)	1:A:71:LYS:HG2	1:A:72:TYR:HD2	20	0.28
(1,878)	1:A:71:LYS:HG3	1:A:72:TYR:HD1	20	0.28
(1,878)	1:A:71:LYS:HG3	1:A:72:TYR:HD2	20	0.28
(1,335)	1:A:38:GLU:H	1:A:39:ASN:HB2	19	0.28
(1,1559)	1:A:108:LYS:H	1:A:109:LEU:HG	13	0.27
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG21	1:A:99:LEU:HA	14	0.27
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG22	1:A:99:LEU:HA	14	0.27
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG23	1:A:99:LEU:HA	14	0.27
(1,335)	1:A:38:GLU:H	1:A:39:ASN:HB2	13	0.25
(1,1715)	1:A:116:PHE:HA	1:A:118:ASN:HB2	9	0.25
(1,1562)	1:A:108:LYS:H	1:A:109:LEU:HB2	11	0.25
(1,878)	1:A:71:LYS:HG2	1:A:72:TYR:HD1	15	0.24
(1,878)	1:A:71:LYS:HG2	1:A:72:TYR:HD2	15	0.24
(1,878)	1:A:71:LYS:HG3	1:A:72:TYR:HD1	15	0.24
(1,878)	1:A:71:LYS:HG3	1:A:72:TYR:HD2	15	0.24
(1,834)	1:A:65:ASN:HB3	1:A:68:ALA:HB1	10	0.24
(1,834)	1:A:65:ASN:HB3	1:A:68:ALA:HB2	10	0.24
(1,834)	1:A:65:ASN:HB3	1:A:68:ALA:HB3	10	0.24
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG21	1:A:99:LEU:HA	9	0.24
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG22	1:A:99:LEU:HA	9	0.24
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG23	1:A:99:LEU:HA	9	0.24
(1,1562)	1:A:108:LYS:H	1:A:109:LEU:HB2	6	0.23
(1,1657)	1:A:113:LYS:HB3	1:A:114:TYR:HB3	4	0.22
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG21	12	0.22
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG22	12	0.22
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG23	12	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1375)	1:A:101:LYS:HG3	1:A:102:ILE:HG21	12	0.22
(1,1375)	1:A:101:LYS:HG3	1:A:102:ILE:HG22	12	0.22
(1,1375)	1:A:101:LYS:HG3	1:A:102:ILE:HG23	12	0.22
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG21	1:A:99:LEU:HA	16	0.22
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG22	1:A:99:LEU:HA	16	0.22
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG23	1:A:99:LEU:HA	16	0.22
(1,857)	1:A:69:ASP:H	1:A:70:ASN:HB2	5	0.21
(1,1715)	1:A:116:PHE:HA	1:A:118:ASN:HB2	19	0.21
(1,1562)	1:A:108:LYS:H	1:A:109:LEU:HB2	3	0.21
(1,1381)	1:A:101:LYS:H	1:A:102:ILE:HB	4	0.21
(1,1381)	1:A:101:LYS:H	1:A:102:ILE:HB	8	0.21
(1,1289)	1:A:98:LYS:HB3	1:A:99:LEU:HG	11	0.21
(1,1246)	1:A:95:ILE:HG21	1:A:96:GLU:HB3	17	0.21
(1,1246)	1:A:95:ILE:HG22	1:A:96:GLU:HB3	17	0.21
(1,1246)	1:A:95:ILE:HG23	1:A:96:GLU:HB3	17	0.21
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG21	1:A:99:LEU:HA	12	0.21
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG22	1:A:99:LEU:HA	12	0.21
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG23	1:A:99:LEU:HA	12	0.21
(1,967)	1:A:82:VAL:HB	1:A:117:ILE:HB	10	0.2
(1,967)	1:A:82:VAL:HB	1:A:117:ILE:HB	17	0.2
(1,878)	1:A:71:LYS:HG2	1:A:72:TYR:HD1	8	0.2
(1,878)	1:A:71:LYS:HG2	1:A:72:TYR:HD2	8	0.2
(1,878)	1:A:71:LYS:HG3	1:A:72:TYR:HD1	8	0.2
(1,878)	1:A:71:LYS:HG3	1:A:72:TYR:HD2	8	0.2
(1,57)	1:A:7:ARG:HB2	1:A:9:ASN:HA	2	0.2
(1,57)	1:A:7:ARG:HB3	1:A:9:ASN:HA	2	0.2
(1,57)	1:A:7:ARG:HB2	1:A:9:ASN:HA	12	0.2
(1,57)	1:A:7:ARG:HB3	1:A:9:ASN:HA	12	0.2
(1,1562)	1:A:108:LYS:H	1:A:109:LEU:HB2	10	0.2
(1,1381)	1:A:101:LYS:H	1:A:102:ILE:HB	10	0.2
(1,1344)	1:A:100:ASP:H	1:A:101:LYS:HB2	13	0.2
(1,1253)	1:A:95:ILE:HG12	1:A:99:LEU:HB2	3	0.2
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG21	1:A:99:LEU:HA	1	0.2
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG22	1:A:99:LEU:HA	1	0.2
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG23	1:A:99:LEU:HA	1	0.2
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG21	1:A:99:LEU:HA	3	0.2
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG22	1:A:99:LEU:HA	3	0.2
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG23	1:A:99:LEU:HA	3	0.2
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG21	1:A:99:LEU:HA	6	0.2
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG22	1:A:99:LEU:HA	6	0.2
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG23	1:A:99:LEU:HA	6	0.2
(1,1163)	1:A:92:VAL:HG21	1:A:93:ASP:HB3	8	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1163)	1:A:92:VAL:HG22	1:A:93:ASP:HB3	8	0.2
(1,1163)	1:A:92:VAL:HG23	1:A:93:ASP:HB3	8	0.2
(1,967)	1:A:82:VAL:HB	1:A:117:ILE:HB	11	0.19
(1,967)	1:A:82:VAL:HB	1:A:117:ILE:HB	20	0.19
(1,1715)	1:A:116:PHE:HA	1:A:118:ASN:HB2	1	0.19
(1,1664)	1:A:113:LYS:H	1:A:114:TYR:HB3	11	0.19
(1,1562)	1:A:108:LYS:H	1:A:109:LEU:HB2	17	0.19
(1,1538)	1:A:107:ASP:H	1:A:108:LYS:HB2	18	0.19
(1,1381)	1:A:101:LYS:H	1:A:102:ILE:HB	2	0.19
(1,1381)	1:A:101:LYS:H	1:A:102:ILE:HB	5	0.19
(1,1381)	1:A:101:LYS:H	1:A:102:ILE:HB	7	0.19
(1,1373)	1:A:101:LYS:HB3	1:A:102:ILE:HG12	13	0.19
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG21	1:A:99:LEU:HA	2	0.19
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG22	1:A:99:LEU:HA	2	0.19
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG23	1:A:99:LEU:HA	2	0.19
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG21	1:A:99:LEU:HA	18	0.19
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG22	1:A:99:LEU:HA	18	0.19
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG23	1:A:99:LEU:HA	18	0.19
(1,1163)	1:A:92:VAL:HG21	1:A:93:ASP:HB3	7	0.19
(1,1163)	1:A:92:VAL:HG22	1:A:93:ASP:HB3	7	0.19
(1,1163)	1:A:92:VAL:HG23	1:A:93:ASP:HB3	7	0.19
(1,1163)	1:A:92:VAL:HG21	1:A:93:ASP:HB3	12	0.19
(1,1163)	1:A:92:VAL:HG22	1:A:93:ASP:HB3	12	0.19
(1,1163)	1:A:92:VAL:HG23	1:A:93:ASP:HB3	12	0.19
(1,1163)	1:A:92:VAL:HG21	1:A:93:ASP:HB3	17	0.19
(1,1163)	1:A:92:VAL:HG22	1:A:93:ASP:HB3	17	0.19
(1,1163)	1:A:92:VAL:HG23	1:A:93:ASP:HB3	17	0.19
(1,967)	1:A:82:VAL:HB	1:A:117:ILE:HB	13	0.18
(1,967)	1:A:82:VAL:HB	1:A:117:ILE:HB	19	0.18
(1,878)	1:A:71:LYS:HG2	1:A:72:TYR:HD1	2	0.18
(1,878)	1:A:71:LYS:HG2	1:A:72:TYR:HD2	2	0.18
(1,878)	1:A:71:LYS:HG3	1:A:72:TYR:HD1	2	0.18
(1,878)	1:A:71:LYS:HG3	1:A:72:TYR:HD2	2	0.18
(1,834)	1:A:65:ASN:HB3	1:A:68:ALA:HB1	6	0.18
(1,834)	1:A:65:ASN:HB3	1:A:68:ALA:HB2	6	0.18
(1,834)	1:A:65:ASN:HB3	1:A:68:ALA:HB3	6	0.18
(1,605)	1:A:54:LYS:HE2	1:A:61:ILE:HB	3	0.18
(1,605)	1:A:54:LYS:HE3	1:A:61:ILE:HB	3	0.18
(1,1873)	1:A:126:ILE:HG12	1:A:127:LYS:HA	17	0.18
(1,1715)	1:A:116:PHE:HA	1:A:118:ASN:HB2	8	0.18
(1,1715)	1:A:116:PHE:HA	1:A:118:ASN:HB2	18	0.18
(1,1664)	1:A:113:LYS:H	1:A:114:TYR:HB3	5	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1562)	1:A:108:LYS:H	1:A:109:LEU:HB2	7	0.18
(1,1381)	1:A:101:LYS:H	1:A:102:ILE:HB	6	0.18
(1,1381)	1:A:101:LYS:H	1:A:102:ILE:HB	14	0.18
(1,1381)	1:A:101:LYS:H	1:A:102:ILE:HB	16	0.18
(1,1381)	1:A:101:LYS:H	1:A:102:ILE:HB	20	0.18
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG21	19	0.18
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG22	19	0.18
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG23	19	0.18
(1,1289)	1:A:98:LYS:HB3	1:A:99:LEU:HG	4	0.18
(1,1258)	1:A:95:ILE:HG21	1:A:99:LEU:HD11	3	0.18
(1,1258)	1:A:95:ILE:HG21	1:A:99:LEU:HD12	3	0.18
(1,1258)	1:A:95:ILE:HG21	1:A:99:LEU:HD13	3	0.18
(1,1258)	1:A:95:ILE:HG22	1:A:99:LEU:HD11	3	0.18
(1,1258)	1:A:95:ILE:HG22	1:A:99:LEU:HD12	3	0.18
(1,1258)	1:A:95:ILE:HG22	1:A:99:LEU:HD13	3	0.18
(1,1258)	1:A:95:ILE:HG23	1:A:99:LEU:HD11	3	0.18
(1,1258)	1:A:95:ILE:HG23	1:A:99:LEU:HD12	3	0.18
(1,1258)	1:A:95:ILE:HG23	1:A:99:LEU:HD13	3	0.18
(1,102)	1:A:18:ARG:HB2	1:A:19:SER:HA	18	0.18
(1,605)	1:A:54:LYS:HE2	1:A:61:ILE:HB	11	0.17
(1,605)	1:A:54:LYS:HE3	1:A:61:ILE:HB	11	0.17
(1,1739)	1:A:117:ILE:HG13	1:A:118:ASN:HB2	3	0.17
(1,1739)	1:A:117:ILE:HG13	1:A:118:ASN:HB2	14	0.17
(1,1715)	1:A:116:PHE:HA	1:A:118:ASN:HB2	6	0.17
(1,1715)	1:A:116:PHE:HA	1:A:118:ASN:HB2	11	0.17
(1,1715)	1:A:116:PHE:HA	1:A:118:ASN:HB2	20	0.17
(1,1664)	1:A:113:LYS:H	1:A:114:TYR:HB3	3	0.17
(1,1664)	1:A:113:LYS:H	1:A:114:TYR:HB3	9	0.17
(1,1664)	1:A:113:LYS:H	1:A:114:TYR:HB3	12	0.17
(1,1664)	1:A:113:LYS:H	1:A:114:TYR:HB3	17	0.17
(1,1657)	1:A:113:LYS:HB3	1:A:114:TYR:HB3	2	0.17
(1,1657)	1:A:113:LYS:HB3	1:A:114:TYR:HB3	3	0.17
(1,1471)	1:A:104:GLU:H	1:A:105:LYS:HB3	12	0.17
(1,1282)	1:A:97:ASN:H	1:A:101:LYS:HG2	2	0.17
(1,1269)	1:A:96:GLU:HB3	1:A:97:ASN:HB3	8	0.17
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG21	1:A:99:LEU:HA	5	0.17
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG22	1:A:99:LEU:HA	5	0.17
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG23	1:A:99:LEU:HA	5	0.17
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG21	1:A:99:LEU:HA	10	0.17
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG22	1:A:99:LEU:HA	10	0.17
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG23	1:A:99:LEU:HA	10	0.17
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG21	1:A:99:LEU:HA	19	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG22	1:A:99:LEU:HA	19	0.17
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG23	1:A:99:LEU:HA	19	0.17
(1,967)	1:A:82:VAL:HB	1:A:117:ILE:HB	6	0.16
(1,963)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:114:TYR:HE1	14	0.16
(1,963)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:114:TYR:HE2	14	0.16
(1,963)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:114:TYR:HE1	14	0.16
(1,963)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:114:TYR:HE2	14	0.16
(1,963)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:114:TYR:HE1	14	0.16
(1,963)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:114:TYR:HE2	14	0.16
(1,834)	1:A:65:ASN:HB3	1:A:68:ALA:HB1	20	0.16
(1,834)	1:A:65:ASN:HB3	1:A:68:ALA:HB2	20	0.16
(1,834)	1:A:65:ASN:HB3	1:A:68:ALA:HB3	20	0.16
(1,57)	1:A:7:ARG:HB2	1:A:9:ASN:HA	7	0.16
(1,57)	1:A:7:ARG:HB3	1:A:9:ASN:HA	7	0.16
(1,26)	1:A:3:TYR:HA	1:A:5:LYS:HG2	15	0.16
(1,26)	1:A:3:TYR:HA	1:A:5:LYS:HG3	15	0.16
(1,200)	1:A:31:ASP:HB2	1:A:32:ARG:HB3	10	0.16
(1,1715)	1:A:116:PHE:HA	1:A:118:ASN:HB2	17	0.16
(1,1664)	1:A:113:LYS:H	1:A:114:TYR:HB3	19	0.16
(1,1664)	1:A:113:LYS:H	1:A:114:TYR:HB3	20	0.16
(1,1657)	1:A:113:LYS:HB3	1:A:114:TYR:HB3	8	0.16
(1,1483)	1:A:105:LYS:HB2	1:A:106:ILE:HG13	15	0.16
(1,1471)	1:A:104:GLU:H	1:A:105:LYS:HB3	20	0.16
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG21	11	0.16
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG22	11	0.16
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG23	11	0.16
(1,1338)	1:A:100:ASP:HB3	1:A:101:LYS:HG3	13	0.16
(1,1289)	1:A:98:LYS:HB3	1:A:99:LEU:HG	8	0.16
(1,1288)	1:A:98:LYS:H	1:A:99:LEU:HB3	3	0.16
(1,445)	1:A:43:TRP:HB3	1:A:44:TYR:HE1	15	0.15
(1,445)	1:A:43:TRP:HB3	1:A:44:TYR:HE2	15	0.15
(1,356)	1:A:39:ASN:H	1:A:40:LEU:HG	13	0.15
(1,200)	1:A:31:ASP:HB2	1:A:32:ARG:HB3	7	0.15
(1,200)	1:A:31:ASP:HB2	1:A:32:ARG:HB3	11	0.15
(1,1746)	1:A:117:ILE:HB	1:A:126:ILE:HG12	14	0.15
(1,1742)	1:A:117:ILE:HD11	1:A:118:ASN:HB3	16	0.15
(1,1742)	1:A:117:ILE:HD12	1:A:118:ASN:HB3	16	0.15
(1,1742)	1:A:117:ILE:HD13	1:A:118:ASN:HB3	16	0.15
(1,1739)	1:A:117:ILE:HG13	1:A:118:ASN:HB2	4	0.15
(1,1715)	1:A:116:PHE:HA	1:A:118:ASN:HB2	4	0.15
(1,1715)	1:A:116:PHE:HA	1:A:118:ASN:HB2	7	0.15
(1,1689)	1:A:114:TYR:HE1	1:A:117:ILE:HG12	11	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1689)	1:A:114:TYR:HE2	1:A:117:ILE:HG12	11	0.15
(1,1664)	1:A:113:LYS:H	1:A:114:TYR:HB3	10	0.15
(1,1664)	1:A:113:LYS:H	1:A:114:TYR:HB3	14	0.15
(1,1562)	1:A:108:LYS:H	1:A:109:LEU:HB2	1	0.15
(1,1562)	1:A:108:LYS:H	1:A:109:LEU:HB2	2	0.15
(1,1562)	1:A:108:LYS:H	1:A:109:LEU:HB2	8	0.15
(1,1375)	1:A:101:LYS:HG3	1:A:102:ILE:HG21	11	0.15
(1,1375)	1:A:101:LYS:HG3	1:A:102:ILE:HG22	11	0.15
(1,1375)	1:A:101:LYS:HG3	1:A:102:ILE:HG23	11	0.15
(1,1375)	1:A:101:LYS:HG3	1:A:102:ILE:HG21	19	0.15
(1,1375)	1:A:101:LYS:HG3	1:A:102:ILE:HG22	19	0.15
(1,1375)	1:A:101:LYS:HG3	1:A:102:ILE:HG23	19	0.15
(1,1288)	1:A:98:LYS:H	1:A:99:LEU:HB3	7	0.15
(1,1246)	1:A:95:ILE:HG21	1:A:96:GLU:HB3	1	0.15
(1,1246)	1:A:95:ILE:HG22	1:A:96:GLU:HB3	1	0.15
(1,1246)	1:A:95:ILE:HG23	1:A:96:GLU:HB3	1	0.15
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG21	1:A:99:LEU:HA	15	0.15
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG22	1:A:99:LEU:HA	15	0.15
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG23	1:A:99:LEU:HA	15	0.15
(1,882)	1:A:71:LYS:HB2	1:A:72:TYR:HD1	11	0.14
(1,882)	1:A:71:LYS:HB2	1:A:72:TYR:HD2	11	0.14
(1,605)	1:A:54:LYS:HE2	1:A:61:ILE:HB	4	0.14
(1,605)	1:A:54:LYS:HE3	1:A:61:ILE:HB	4	0.14
(1,445)	1:A:43:TRP:HB3	1:A:44:TYR:HE1	17	0.14
(1,445)	1:A:43:TRP:HB3	1:A:44:TYR:HE2	17	0.14
(1,445)	1:A:43:TRP:HB3	1:A:44:TYR:HE1	19	0.14
(1,445)	1:A:43:TRP:HB3	1:A:44:TYR:HE2	19	0.14
(1,28)	1:A:3:TYR:H	1:A:6:SER:H	5	0.14
(1,1751)	1:A:117:ILE:HG21	1:A:128:CYS:HB2	17	0.14
(1,1751)	1:A:117:ILE:HG21	1:A:128:CYS:HB3	17	0.14
(1,1751)	1:A:117:ILE:HG22	1:A:128:CYS:HB2	17	0.14
(1,1751)	1:A:117:ILE:HG22	1:A:128:CYS:HB3	17	0.14
(1,1751)	1:A:117:ILE:HG23	1:A:128:CYS:HB2	17	0.14
(1,1751)	1:A:117:ILE:HG23	1:A:128:CYS:HB3	17	0.14
(1,1742)	1:A:117:ILE:HD11	1:A:118:ASN:HB3	12	0.14
(1,1742)	1:A:117:ILE:HD12	1:A:118:ASN:HB3	12	0.14
(1,1742)	1:A:117:ILE:HD13	1:A:118:ASN:HB3	12	0.14
(1,1739)	1:A:117:ILE:HG13	1:A:118:ASN:HB2	2	0.14
(1,1739)	1:A:117:ILE:HG13	1:A:118:ASN:HB2	7	0.14
(1,1715)	1:A:116:PHE:HA	1:A:118:ASN:HB2	2	0.14
(1,1715)	1:A:116:PHE:HA	1:A:118:ASN:HB2	10	0.14
(1,1715)	1:A:116:PHE:HA	1:A:118:ASN:HB2	13	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1715)	1:A:116:PHE:HA	1:A:118:ASN:HB2	14	0.14
(1,1689)	1:A:114:TYR:HE1	1:A:117:ILE:HG12	17	0.14
(1,1689)	1:A:114:TYR:HE2	1:A:117:ILE:HG12	17	0.14
(1,1689)	1:A:114:TYR:HE1	1:A:117:ILE:HG12	18	0.14
(1,1689)	1:A:114:TYR:HE2	1:A:117:ILE:HG12	18	0.14
(1,1689)	1:A:114:TYR:HE1	1:A:117:ILE:HG12	19	0.14
(1,1689)	1:A:114:TYR:HE2	1:A:117:ILE:HG12	19	0.14
(1,1664)	1:A:113:LYS:H	1:A:114:TYR:HB3	7	0.14
(1,1664)	1:A:113:LYS:H	1:A:114:TYR:HB3	8	0.14
(1,1664)	1:A:113:LYS:H	1:A:114:TYR:HB3	15	0.14
(1,1664)	1:A:113:LYS:H	1:A:114:TYR:HB3	16	0.14
(1,1657)	1:A:113:LYS:HB3	1:A:114:TYR:HB3	14	0.14
(1,1562)	1:A:108:LYS:H	1:A:109:LEU:HB2	18	0.14
(1,1471)	1:A:104:GLU:H	1:A:105:LYS:HB3	6	0.14
(1,1471)	1:A:104:GLU:H	1:A:105:LYS:HB3	9	0.14
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG21	1	0.14
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG22	1	0.14
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG23	1	0.14
(1,1282)	1:A:97:ASN:H	1:A:101:LYS:HG2	8	0.14
(1,1282)	1:A:97:ASN:H	1:A:101:LYS:HG2	15	0.14
(1,1282)	1:A:97:ASN:H	1:A:101:LYS:HG2	19	0.14
(1,1269)	1:A:96:GLU:HB3	1:A:97:ASN:HB3	16	0.14
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG21	1:A:99:LEU:HA	7	0.14
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG22	1:A:99:LEU:HA	7	0.14
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG23	1:A:99:LEU:HA	7	0.14
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG21	1:A:99:LEU:HA	8	0.14
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG22	1:A:99:LEU:HA	8	0.14
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG23	1:A:99:LEU:HA	8	0.14
(1,113)	1:A:20:ASN:HB3	1:A:21:LYS:HD2	11	0.14
(1,113)	1:A:20:ASN:HB3	1:A:21:LYS:HD3	11	0.14
(1,967)	1:A:82:VAL:HB	1:A:117:ILE:HB	1	0.13
(1,967)	1:A:82:VAL:HB	1:A:117:ILE:HB	18	0.13
(1,963)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:114:TYR:HE1	9	0.13
(1,963)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:114:TYR:HE2	9	0.13
(1,963)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:114:TYR:HE1	9	0.13
(1,963)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:114:TYR:HE2	9	0.13
(1,963)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:114:TYR:HE1	9	0.13
(1,963)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:114:TYR:HE2	9	0.13
(1,834)	1:A:65:ASN:HB3	1:A:68:ALA:HB1	4	0.13
(1,834)	1:A:65:ASN:HB3	1:A:68:ALA:HB2	4	0.13
(1,834)	1:A:65:ASN:HB3	1:A:68:ALA:HB3	4	0.13
(1,575)	1:A:53:TYR:HE1	1:A:53:TYR:H	18	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,575)	1:A:53:TYR:HE2	1:A:53:TYR:H	18	0.13
(1,57)	1:A:7:ARG:HB2	1:A:9:ASN:HA	15	0.13
(1,57)	1:A:7:ARG:HB3	1:A:9:ASN:HA	15	0.13
(1,445)	1:A:43:TRP:HB3	1:A:44:TYR:HE1	9	0.13
(1,445)	1:A:43:TRP:HB3	1:A:44:TYR:HE2	9	0.13
(1,1789)	1:A:120:THR:HB	1:A:121:ASN:HB3	3	0.13
(1,1746)	1:A:117:ILE:HB	1:A:126:ILE:HG12	17	0.13
(1,1664)	1:A:113:LYS:H	1:A:114:TYR:HB3	1	0.13
(1,1664)	1:A:113:LYS:H	1:A:114:TYR:HB3	13	0.13
(1,1657)	1:A:113:LYS:HB3	1:A:114:TYR:HB3	7	0.13
(1,1657)	1:A:113:LYS:HB3	1:A:114:TYR:HB3	19	0.13
(1,1514)	1:A:106:ILE:HG12	1:A:107:ASP:HA	4	0.13
(1,1471)	1:A:104:GLU:H	1:A:105:LYS:HB3	3	0.13
(1,1288)	1:A:98:LYS:H	1:A:99:LEU:HB3	20	0.13
(1,1282)	1:A:97:ASN:H	1:A:101:LYS:HG2	3	0.13
(1,1282)	1:A:97:ASN:H	1:A:101:LYS:HG2	14	0.13
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG21	1:A:99:LEU:HA	17	0.13
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG22	1:A:99:LEU:HA	17	0.13
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG23	1:A:99:LEU:HA	17	0.13
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG21	1:A:99:LEU:HA	20	0.13
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG22	1:A:99:LEU:HA	20	0.13
(1,1221)	1:A:94:ILE:HG23	1:A:99:LEU:HA	20	0.13
(1,108)	1:A:19:SER:HA	1:A:26:TYR:HE1	8	0.13
(1,108)	1:A:19:SER:HA	1:A:26:TYR:HE2	8	0.13
(1,963)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:114:TYR:HE1	5	0.12
(1,963)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:114:TYR:HE2	5	0.12
(1,963)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:114:TYR:HE1	5	0.12
(1,963)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:114:TYR:HE2	5	0.12
(1,963)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:114:TYR:HE1	5	0.12
(1,963)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:114:TYR:HE2	5	0.12
(1,834)	1:A:65:ASN:HB3	1:A:68:ALA:HB1	18	0.12
(1,834)	1:A:65:ASN:HB3	1:A:68:ALA:HB2	18	0.12
(1,834)	1:A:65:ASN:HB3	1:A:68:ALA:HB3	18	0.12
(1,707)	1:A:60:GLU:H	1:A:77:ASN:HB3	4	0.12
(1,67)	1:A:9:ASN:H	1:A:12:ARG:HB2	20	0.12
(1,67)	1:A:9:ASN:H	1:A:12:ARG:HB3	20	0.12
(1,56)	1:A:7:ARG:HB2	1:A:8:TYR:H	9	0.12
(1,56)	1:A:7:ARG:HB3	1:A:8:TYR:H	9	0.12
(1,485)	1:A:44:TYR:HE1	1:A:54:LYS:HE2	18	0.12
(1,485)	1:A:44:TYR:HE1	1:A:54:LYS:HE3	18	0.12
(1,485)	1:A:44:TYR:HE2	1:A:54:LYS:HE2	18	0.12
(1,485)	1:A:44:TYR:HE2	1:A:54:LYS:HE3	18	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,445)	1:A:43:TRP:HB3	1:A:44:TYR:HE1	3	0.12
(1,445)	1:A:43:TRP:HB3	1:A:44:TYR:HE2	3	0.12
(1,445)	1:A:43:TRP:HB3	1:A:44:TYR:HE1	4	0.12
(1,445)	1:A:43:TRP:HB3	1:A:44:TYR:HE2	4	0.12
(1,445)	1:A:43:TRP:HB3	1:A:44:TYR:HE1	10	0.12
(1,445)	1:A:43:TRP:HB3	1:A:44:TYR:HE2	10	0.12
(1,1998)	1:A:138:GLU:H	1:A:139:VAL:HB	14	0.12
(1,1799)	1:A:120:THR:HB	1:A:127:LYS:HD2	15	0.12
(1,1799)	1:A:120:THR:HB	1:A:127:LYS:HD3	15	0.12
(1,1742)	1:A:117:ILE:HD11	1:A:118:ASN:HB3	5	0.12
(1,1742)	1:A:117:ILE:HD12	1:A:118:ASN:HB3	5	0.12
(1,1742)	1:A:117:ILE:HD13	1:A:118:ASN:HB3	5	0.12
(1,1739)	1:A:117:ILE:HG13	1:A:118:ASN:HB2	9	0.12
(1,1715)	1:A:116:PHE:HA	1:A:118:ASN:HB2	3	0.12
(1,1664)	1:A:113:LYS:H	1:A:114:TYR:HB3	2	0.12
(1,1664)	1:A:113:LYS:H	1:A:114:TYR:HB3	6	0.12
(1,1664)	1:A:113:LYS:H	1:A:114:TYR:HB3	18	0.12
(1,1657)	1:A:113:LYS:HB3	1:A:114:TYR:HB3	15	0.12
(1,1657)	1:A:113:LYS:HB3	1:A:114:TYR:HB3	16	0.12
(1,1471)	1:A:104:GLU:H	1:A:105:LYS:HB3	1	0.12
(1,1471)	1:A:104:GLU:H	1:A:105:LYS:HB3	4	0.12
(1,1471)	1:A:104:GLU:H	1:A:105:LYS:HB3	8	0.12
(1,1471)	1:A:104:GLU:H	1:A:105:LYS:HB3	10	0.12
(1,1471)	1:A:104:GLU:H	1:A:105:LYS:HB3	14	0.12
(1,1471)	1:A:104:GLU:H	1:A:105:LYS:HB3	17	0.12
(1,1471)	1:A:104:GLU:H	1:A:105:LYS:HB3	18	0.12
(1,1471)	1:A:104:GLU:H	1:A:105:LYS:HB3	19	0.12
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG21	15	0.12
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG22	15	0.12
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG23	15	0.12
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG21	17	0.12
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG22	17	0.12
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG23	17	0.12
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG21	18	0.12
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG22	18	0.12
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG23	18	0.12
(1,1340)	1:A:100:ASP:HB2	1:A:101:LYS:HB2	4	0.12
(1,1340)	1:A:100:ASP:HB2	1:A:101:LYS:HB2	10	0.12
(1,1282)	1:A:97:ASN:H	1:A:101:LYS:HG2	16	0.12
(1,963)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:114:TYR:HE1	4	0.11
(1,963)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:114:TYR:HE2	4	0.11
(1,963)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:114:TYR:HE1	4	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,963)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:114:TYR:HE2	4	0.11
(1,963)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:114:TYR:HE1	4	0.11
(1,963)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:114:TYR:HE2	4	0.11
(1,834)	1:A:65:ASN:HB3	1:A:68:ALA:HB1	14	0.11
(1,834)	1:A:65:ASN:HB3	1:A:68:ALA:HB2	14	0.11
(1,834)	1:A:65:ASN:HB3	1:A:68:ALA:HB3	14	0.11
(1,575)	1:A:53:TYR:HE1	1:A:53:TYR:H	12	0.11
(1,575)	1:A:53:TYR:HE2	1:A:53:TYR:H	12	0.11
(1,57)	1:A:7:ARG:HB2	1:A:9:ASN:HA	13	0.11
(1,57)	1:A:7:ARG:HB3	1:A:9:ASN:HA	13	0.11
(1,485)	1:A:44:TYR:HE1	1:A:54:LYS:HE2	14	0.11
(1,485)	1:A:44:TYR:HE1	1:A:54:LYS:HE3	14	0.11
(1,485)	1:A:44:TYR:HE2	1:A:54:LYS:HE2	14	0.11
(1,485)	1:A:44:TYR:HE2	1:A:54:LYS:HE3	14	0.11
(1,46)	1:A:6:SER:HA	1:A:9:ASN:HA	8	0.11
(1,445)	1:A:43:TRP:HB3	1:A:44:TYR:HE1	6	0.11
(1,445)	1:A:43:TRP:HB3	1:A:44:TYR:HE2	6	0.11
(1,445)	1:A:43:TRP:HB3	1:A:44:TYR:HE1	12	0.11
(1,445)	1:A:43:TRP:HB3	1:A:44:TYR:HE2	12	0.11
(1,324)	1:A:37:PHE:H	1:A:40:LEU:HG	13	0.11
(1,1746)	1:A:117:ILE:HB	1:A:126:ILE:HG12	8	0.11
(1,1742)	1:A:117:ILE:HD11	1:A:118:ASN:HB3	13	0.11
(1,1742)	1:A:117:ILE:HD12	1:A:118:ASN:HB3	13	0.11
(1,1742)	1:A:117:ILE:HD13	1:A:118:ASN:HB3	13	0.11
(1,1742)	1:A:117:ILE:HD11	1:A:118:ASN:HB3	20	0.11
(1,1742)	1:A:117:ILE:HD12	1:A:118:ASN:HB3	20	0.11
(1,1742)	1:A:117:ILE:HD13	1:A:118:ASN:HB3	20	0.11
(1,1739)	1:A:117:ILE:HG13	1:A:118:ASN:HB2	8	0.11
(1,1713)	1:A:116:PHE:H	1:A:117:ILE:HG12	9	0.11
(1,1689)	1:A:114:TYR:HE1	1:A:117:ILE:HG12	10	0.11
(1,1689)	1:A:114:TYR:HE2	1:A:117:ILE:HG12	10	0.11
(1,1664)	1:A:113:LYS:H	1:A:114:TYR:HB3	4	0.11
(1,1657)	1:A:113:LYS:HB3	1:A:114:TYR:HB3	10	0.11
(1,1657)	1:A:113:LYS:HB3	1:A:114:TYR:HB3	18	0.11
(1,1562)	1:A:108:LYS:H	1:A:109:LEU:HB2	12	0.11
(1,1471)	1:A:104:GLU:H	1:A:105:LYS:HB3	11	0.11
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG21	3	0.11
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG22	3	0.11
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG23	3	0.11
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG21	9	0.11
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG22	9	0.11
(1,1376)	1:A:101:LYS:HG2	1:A:102:ILE:HG23	9	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1338)	1:A:100:ASP:HB3	1:A:101:LYS:HG3	11	0.11
(1,1338)	1:A:100:ASP:HB3	1:A:101:LYS:HG3	12	0.11
(1,1282)	1:A:97:ASN:H	1:A:101:LYS:HG2	9	0.11
(1,1282)	1:A:97:ASN:H	1:A:101:LYS:HG2	11	0.11
(1,113)	1:A:20:ASN:HB3	1:A:21:LYS:HD2	5	0.11
(1,113)	1:A:20:ASN:HB3	1:A:21:LYS:HD3	5	0.11

10 Dihedral-angle violation analysis (i)

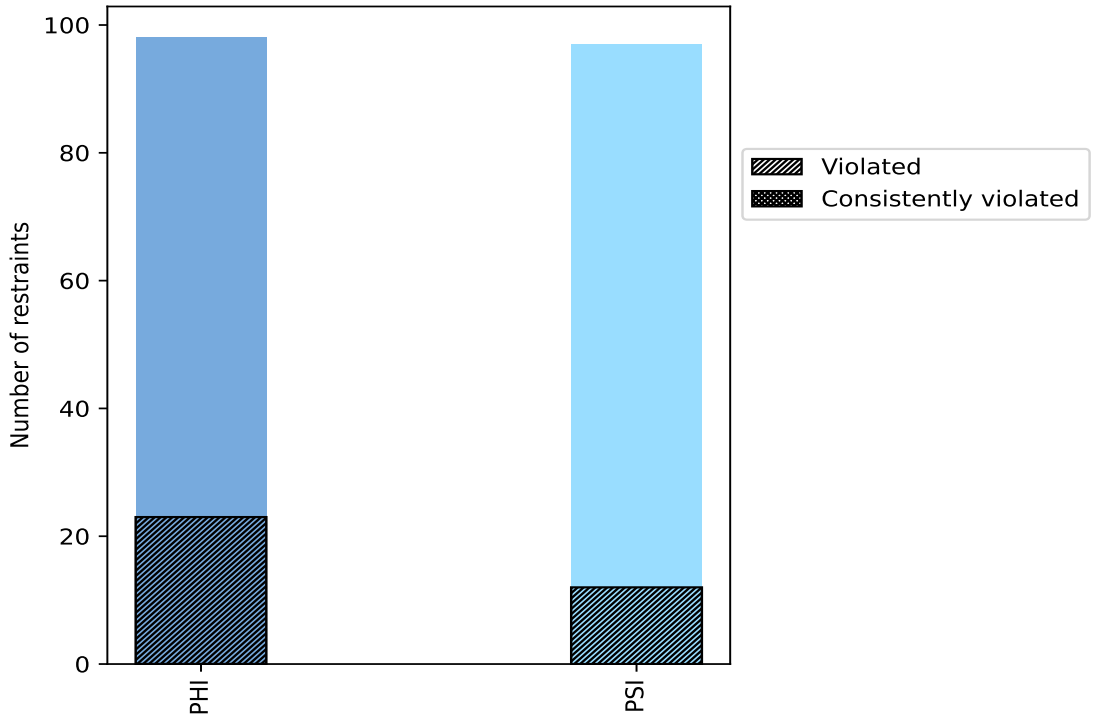
10.1 Summary of dihedral-angle violations (i)

The following table provides the summary of dihedral-angle violations in different dihedral-angle types. Violations less than 1° are not included in the calculation.

Angle type	Count	%[1]	Violated[3]			Consistently Violated[4]		
			Count	%[2]	%[1]	Count	%[2]	%[1]
PHI	98	50.3	23	23.5	11.8	0	0.0	0.0
PSI	97	49.7	12	12.4	6.2	0	0.0	0.0
Total	195	100.0	35	17.9	17.9	0	0.0	0.0

[1] percentage calculated with respect to total number of dihedral-angle restraints, [2] percentage calculated with respect to number of restraints in a particular dihedral-angle type, [3] violated in at least one model, [4] violated in all the models

10.1.1 Bar chart : Distribution of dihedral-angles and violations (i)



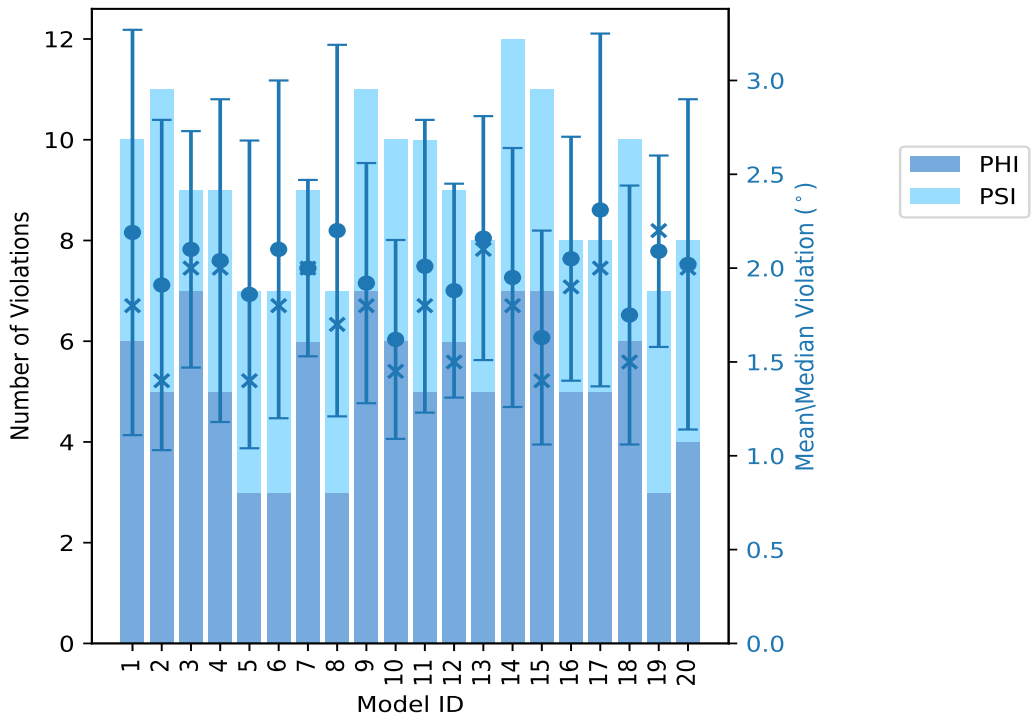
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

10.2 Dihedral-angle violation statistics for each model (i)

The following table provides the dihedral-angle violation statistics for each model in the ensemble. Violations less than 1° are not included in the statistics.

Model ID	Number of violations			Mean (°)	Max (°)	SD (°)	Median (°)
	PHI	PSI	Total				
1	6	4	10	2.19	4.6	1.08	1.8
2	5	6	11	1.91	3.9	0.88	1.4
3	7	2	9	2.1	3.0	0.63	2.0
4	5	4	9	2.04	3.2	0.86	2.0
5	3	4	7	1.86	3.1	0.82	1.4
6	3	4	7	2.1	4.1	0.9	1.8
7	6	3	9	2.0	2.9	0.47	2.0
8	3	4	7	2.2	3.9	0.99	1.7
9	7	4	11	1.92	3.4	0.64	1.8
10	6	4	10	1.62	2.7	0.53	1.45
11	5	5	10	2.01	3.8	0.78	1.8
12	6	3	9	1.88	2.9	0.57	1.5
13	5	3	8	2.16	3.1	0.65	2.1
14	7	5	12	1.95	3.5	0.69	1.8
15	7	4	11	1.63	2.8	0.57	1.4
16	5	3	8	2.05	3.1	0.65	1.9
17	5	3	8	2.31	4.0	0.94	2.0
18	6	4	10	1.75	3.4	0.69	1.5
19	3	4	7	2.09	2.9	0.51	2.2
20	4	4	8	2.02	4.0	0.88	2.0

10.2.1 Bar graph : Dihedral violation statistics for each model (i)



The mean(dot),median(x) and the standard deviation are shown in blue with respect to the y axis on the right

10.3 Dihedral-angle violation statistics for the ensemble (i)

Violation analysis may find that some restraints are violated in very few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of ensemble.

Number of violated restraints			Fraction of the ensemble	
PHI	PSI	Total	Count[1]	%
7	4	11	1	5.0
4	0	4	2	10.0
4	3	7	3	15.0
0	1	1	4	20.0
3	0	3	5	25.0
0	0	0	6	30.0
1	1	2	7	35.0
0	0	0	8	40.0
0	0	0	9	45.0
1	0	1	10	50.0
0	0	0	11	55.0

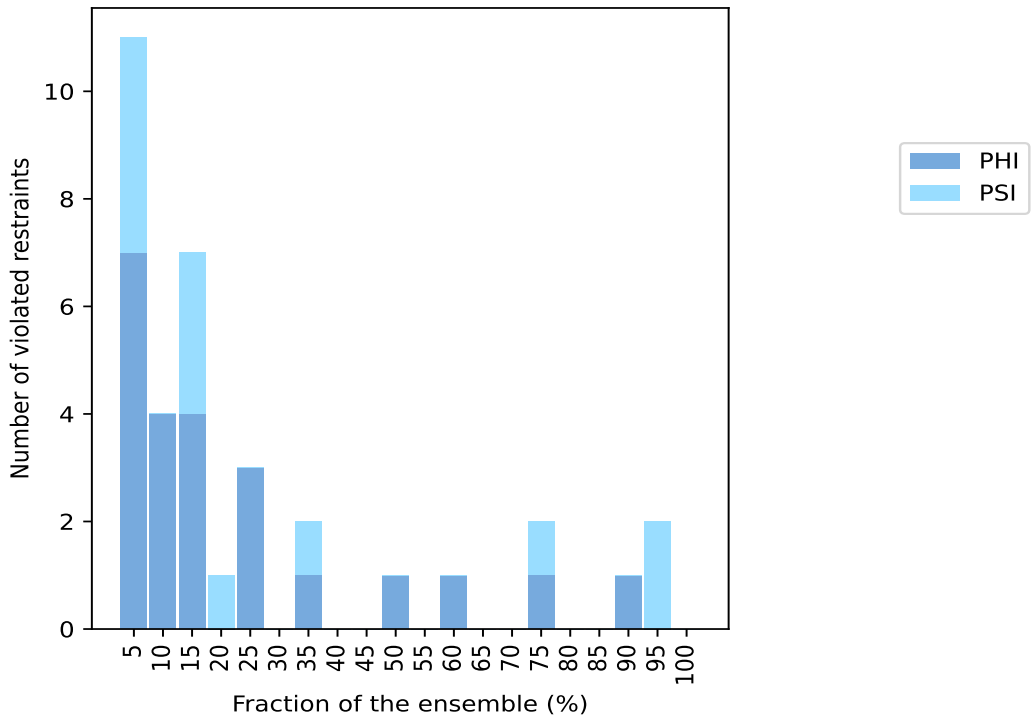
Continued on next page...

Continued from previous page...

Number of violated restraints			Fraction of the ensemble	
PHI	PSI	Total	Count[1]	%
1	0	1	12	60.0
0	0	0	13	65.0
0	0	0	14	70.0
1	1	2	15	75.0
0	0	0	16	80.0
0	0	0	17	85.0
1	0	1	18	90.0
0	2	2	19	95.0
0	0	0	20	100.0

[1] Number of models with violations

10.3.1 Bar graph : Dihedral-angle Violation statistics for the ensemble (i)

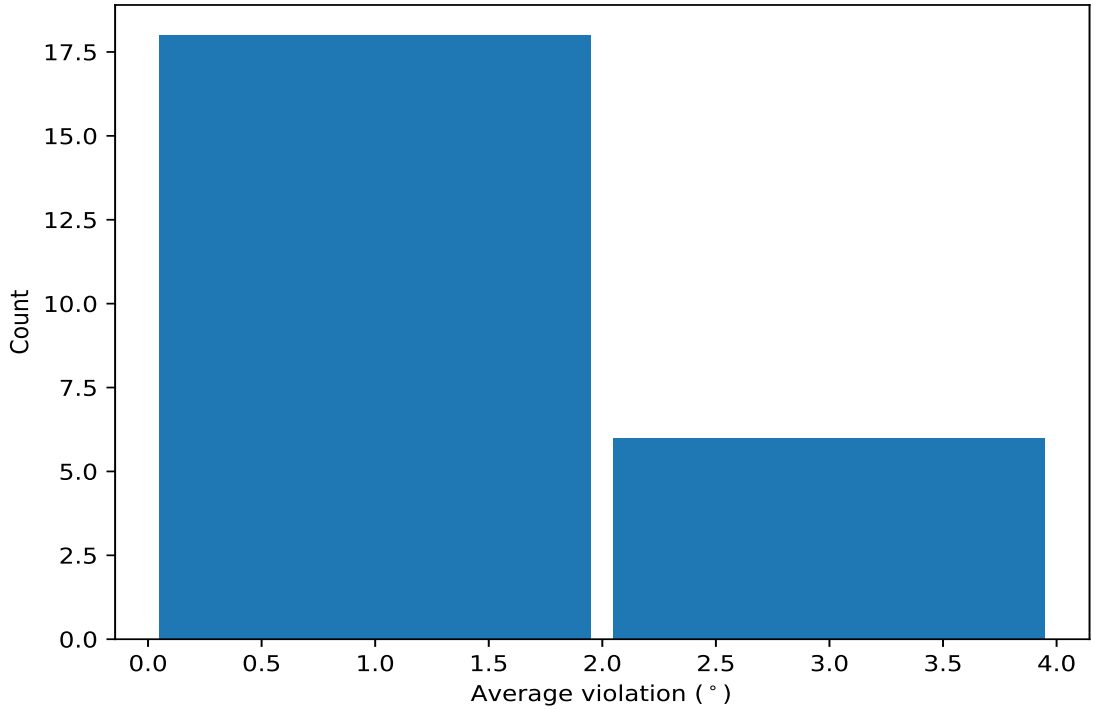


10.4 Most violated dihedral-angle restraints in the ensemble (i)

10.4.1 Histogram : Distribution of mean dihedral-angle violations (i)

The following histogram shows the distribution of the average value of the violation. The average is calculated for each restraint that is violated in more than one model over all the violated models

in the ensemble



10.4.2 Table: Most violated dihedral-angle restraints (i)

The following table provides the mean and the standard deviation of the violation for each restraint sorted by number of violated models and the mean value. The Key (restraint list ID, restraint ID) is the unique identifier for a given restraint.

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models[1]	Mean	SD[2]	Median
(1,182)	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	1:A:124:HIS:N	19	3.01	0.66	2.9
(1,129)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:ARG:N	19	2.94	0.72	2.9
(1,76)	1:A:112:ASP:C	1:A:113:LYS:N	1:A:113:LYS:CA	1:A:113:LYS:C	18	2.04	0.41	2.0
(1,179)	1:A:120:THR:N	1:A:120:THR:CA	1:A:120:THR:C	1:A:121:ASN:N	15	1.54	0.46	1.3
(1,85)	1:A:122:LEU:C	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	15	1.51	0.41	1.5
(1,62)	1:A:97:ASN:C	1:A:98:LYS:N	1:A:98:LYS:CA	1:A:98:LYS:C	12	1.94	0.28	2.05
(1,72)	1:A:107:ASP:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	10	2.42	0.65	2.7
(1,189)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	7	1.44	0.25	1.5
(1,96)	1:A:136:LYS:C	1:A:137:LYS:N	1:A:137:LYS:CA	1:A:137:LYS:C	7	1.33	0.1	1.4
(1,87)	1:A:127:LYS:C	1:A:128:CYS:N	1:A:128:CYS:CA	1:A:128:CYS:C	5	2.18	0.74	2.0
(1,94)	1:A:134:LYS:C	1:A:135:THR:N	1:A:135:THR:CA	1:A:135:THR:C	5	2.06	0.49	2.2
(1,81)	1:A:118:ASN:C	1:A:119:ALA:N	1:A:119:ALA:CA	1:A:119:ALA:C	5	1.46	0.29	1.5
(1,172)	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	1:A:113:LYS:N	4	1.68	0.41	1.7
(1,43)	1:A:78:GLY:C	1:A:79:ARG:N	1:A:79:ARG:CA	1:A:79:ARG:C	3	1.93	0.56	1.7
(1,33)	1:A:61:ILE:C	1:A:62:ARG:N	1:A:62:ARG:CA	1:A:62:ARG:C	3	1.87	0.82	1.5
(1,190)	1:A:134:LYS:N	1:A:134:LYS:CA	1:A:134:LYS:C	1:A:135:THR:N	3	1.67	0.12	1.7
(1,83)	1:A:120:THR:C	1:A:121:ASN:N	1:A:121:ASN:CA	1:A:121:ASN:C	3	1.53	0.26	1.4
(1,84)	1:A:121:ASN:C	1:A:122:LEU:N	1:A:122:LEU:CA	1:A:122:LEU:C	3	1.33	0.17	1.4
(1,116)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	1:A:42:GLY:N	3	1.2	0.08	1.2
(1,155)	1:A:94:ILE:N	1:A:94:ILE:CA	1:A:94:ILE:C	1:A:95:ILE:N	3	1.13	0.05	1.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

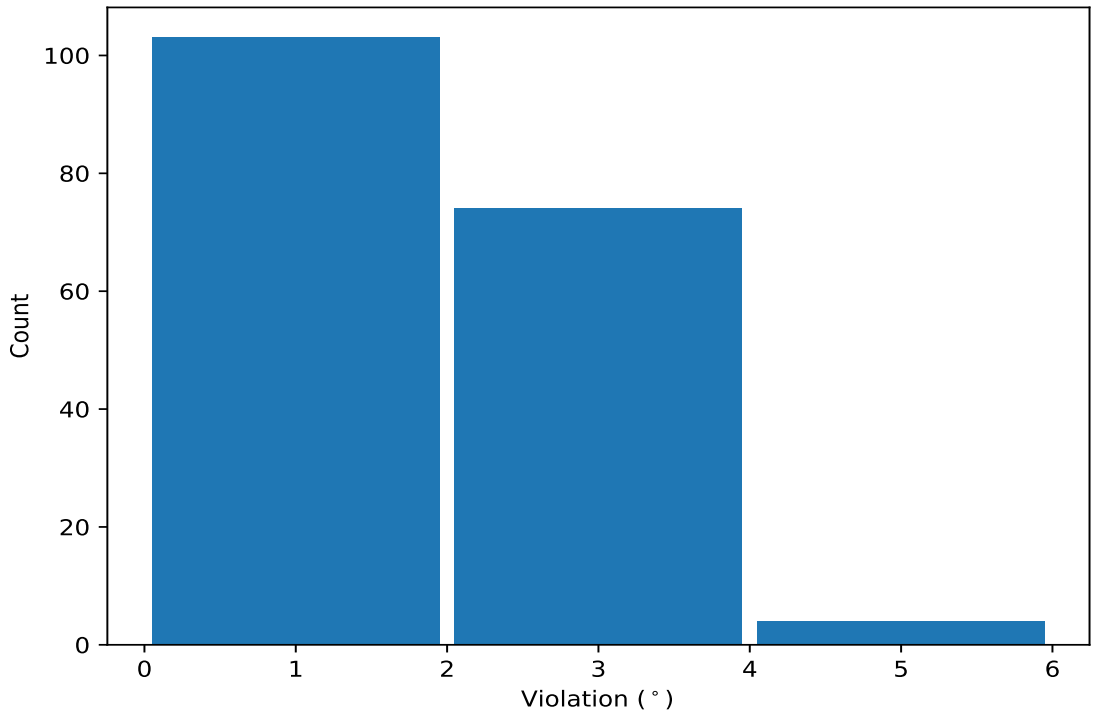
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models[1]	Mean	SD[2]	Median
(1,18)	1:A:40:LEU:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	2	1.45	0.05	1.45
(1,36)	1:A:64:SER:C	1:A:65:ASN:N	1:A:65:ASN:CA	1:A:65:ASN:C	2	1.45	0.05	1.45
(1,73)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CA	1:A:109:LEU:C	2	1.3	0.1	1.3
(1,93)	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	1:A:134:LYS:CA	1:A:134:LYS:C	2	1.2	0.1	1.2

[1] Number of violated models, [2]Standard deviation, All angle values are in degree (°)

10.5 All violated dihedral-angle restraints (i)

10.5.1 Histogram : Distribution of violations (i)

The following histogram shows the distribution of the absolute value of the violation for all violated restraints in the ensemble.



10.5.2 Table: All violated dihedral-angle restraints (i)

The following table lists the absolute value of the violation for each restraint in the ensemble sorted by its value. The Key (restraint list ID, restraint ID) is the unique identifier for a given restraint.

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,182)	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	1:A:124:HIS:N	1	4.6
(1,182)	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	1:A:124:HIS:N	6	4.1
(1,182)	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	1:A:124:HIS:N	17	4.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,129)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:ARG:N	20	4.0
(1,129)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:ARG:N	2	3.9
(1,129)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:ARG:N	8	3.9
(1,129)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:ARG:N	11	3.8
(1,129)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:ARG:N	1	3.5
(1,129)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:ARG:N	14	3.5
(1,87)	1:A:127:LYS:C	1:A:128:CYS:N	1:A:128:CYS:CA	1:A:128:CYS:C	17	3.4
(1,182)	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	1:A:124:HIS:N	9	3.4
(1,129)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:ARG:N	18	3.4
(1,182)	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	1:A:124:HIS:N	8	3.3
(1,182)	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	1:A:124:HIS:N	4	3.2
(1,129)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:ARG:N	4	3.2
(1,72)	1:A:107:ASP:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	4	3.1
(1,72)	1:A:107:ASP:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	16	3.1
(1,182)	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	1:A:124:HIS:N	5	3.1
(1,182)	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	1:A:124:HIS:N	13	3.1
(1,72)	1:A:107:ASP:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	3	3.0
(1,33)	1:A:61:ILE:C	1:A:62:ARG:N	1:A:62:ARG:CA	1:A:62:ARG:C	3	3.0
(1,182)	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	1:A:124:HIS:N	2	3.0
(1,129)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:ARG:N	5	3.0
(1,182)	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	1:A:124:HIS:N	12	2.9
(1,182)	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	1:A:124:HIS:N	19	2.9
(1,129)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:ARG:N	7	2.9
(1,129)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:ARG:N	13	2.9
(1,76)	1:A:112:ASP:C	1:A:113:LYS:N	1:A:113:LYS:CA	1:A:113:LYS:C	15	2.8
(1,72)	1:A:107:ASP:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	1	2.8
(1,72)	1:A:107:ASP:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	17	2.8
(1,182)	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	1:A:124:HIS:N	15	2.8
(1,129)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:ARG:N	9	2.8
(1,76)	1:A:112:ASP:C	1:A:113:LYS:N	1:A:113:LYS:CA	1:A:113:LYS:C	3	2.7
(1,43)	1:A:78:GLY:C	1:A:79:ARG:N	1:A:79:ARG:CA	1:A:79:ARG:C	16	2.7
(1,182)	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	1:A:124:HIS:N	10	2.7
(1,182)	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	1:A:124:HIS:N	11	2.7
(1,182)	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	1:A:124:HIS:N	18	2.7
(1,179)	1:A:120:THR:N	1:A:120:THR:CA	1:A:120:THR:C	1:A:121:ASN:N	13	2.7
(1,94)	1:A:134:LYS:C	1:A:135:THR:N	1:A:135:THR:CA	1:A:135:THR:C	14	2.6
(1,87)	1:A:127:LYS:C	1:A:128:CYS:N	1:A:128:CYS:CA	1:A:128:CYS:C	12	2.6
(1,85)	1:A:122:LEU:C	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	14	2.6
(1,72)	1:A:107:ASP:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	11	2.6
(1,129)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:ARG:N	16	2.6
(1,94)	1:A:134:LYS:C	1:A:135:THR:N	1:A:135:THR:CA	1:A:135:THR:C	2	2.5
(1,76)	1:A:112:ASP:C	1:A:113:LYS:N	1:A:113:LYS:CA	1:A:113:LYS:C	8	2.5
(1,90)	1:A:130:TYR:C	1:A:131:LYS:N	1:A:131:LYS:CA	1:A:131:LYS:C	13	2.4
(1,76)	1:A:112:ASP:C	1:A:113:LYS:N	1:A:113:LYS:CA	1:A:113:LYS:C	2	2.4
(1,76)	1:A:112:ASP:C	1:A:113:LYS:N	1:A:113:LYS:CA	1:A:113:LYS:C	7	2.4
(1,76)	1:A:112:ASP:C	1:A:113:LYS:N	1:A:113:LYS:CA	1:A:113:LYS:C	19	2.4
(1,182)	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	1:A:124:HIS:N	20	2.4
(1,129)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:ARG:N	6	2.4
(1,62)	1:A:97:ASN:C	1:A:98:LYS:N	1:A:98:LYS:CA	1:A:98:LYS:C	1	2.3
(1,62)	1:A:97:ASN:C	1:A:98:LYS:N	1:A:98:LYS:CA	1:A:98:LYS:C	12	2.3
(1,179)	1:A:120:THR:N	1:A:120:THR:CA	1:A:120:THR:C	1:A:121:ASN:N	14	2.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,136)	1:A:69:ASP:N	1:A:69:ASP:CA	1:A:69:ASP:C	1:A:70:ASN:N	9	2.3
(1,129)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:ARG:N	19	2.3
(1,94)	1:A:134:LYS:C	1:A:135:THR:N	1:A:135:THR:CA	1:A:135:THR:C	10	2.2
(1,72)	1:A:107:ASP:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	7	2.2
(1,62)	1:A:97:ASN:C	1:A:98:LYS:N	1:A:98:LYS:CA	1:A:98:LYS:C	19	2.2
(1,182)	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	1:A:124:HIS:N	3	2.2
(1,182)	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	1:A:124:HIS:N	14	2.2
(1,172)	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	1:A:113:LYS:N	20	2.2
(1,129)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:ARG:N	17	2.2
(1,76)	1:A:112:ASP:C	1:A:113:LYS:N	1:A:113:LYS:CA	1:A:113:LYS:C	14	2.1
(1,62)	1:A:97:ASN:C	1:A:98:LYS:N	1:A:98:LYS:CA	1:A:98:LYS:C	4	2.1
(1,62)	1:A:97:ASN:C	1:A:98:LYS:N	1:A:98:LYS:CA	1:A:98:LYS:C	5	2.1
(1,62)	1:A:97:ASN:C	1:A:98:LYS:N	1:A:98:LYS:CA	1:A:98:LYS:C	7	2.1
(1,129)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:ARG:N	10	2.1
(1,87)	1:A:127:LYS:C	1:A:128:CYS:N	1:A:128:CYS:CA	1:A:128:CYS:C	3	2.0
(1,85)	1:A:122:LEU:C	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	6	2.0
(1,85)	1:A:122:LEU:C	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	7	2.0
(1,76)	1:A:112:ASP:C	1:A:113:LYS:N	1:A:113:LYS:CA	1:A:113:LYS:C	4	2.0
(1,76)	1:A:112:ASP:C	1:A:113:LYS:N	1:A:113:LYS:CA	1:A:113:LYS:C	11	2.0
(1,76)	1:A:112:ASP:C	1:A:113:LYS:N	1:A:113:LYS:CA	1:A:113:LYS:C	16	2.0
(1,76)	1:A:112:ASP:C	1:A:113:LYS:N	1:A:113:LYS:CA	1:A:113:LYS:C	20	2.0
(1,62)	1:A:97:ASN:C	1:A:98:LYS:N	1:A:98:LYS:CA	1:A:98:LYS:C	20	2.0
(1,179)	1:A:120:THR:N	1:A:120:THR:CA	1:A:120:THR:C	1:A:121:ASN:N	19	2.0
(1,129)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:ARG:N	12	2.0
(1,83)	1:A:120:THR:C	1:A:121:ASN:N	1:A:121:ASN:CA	1:A:121:ASN:C	7	1.9
(1,81)	1:A:118:ASN:C	1:A:119:ALA:N	1:A:119:ALA:CA	1:A:119:ALA:C	9	1.9
(1,189)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	11	1.9
(1,182)	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	1:A:124:HIS:N	7	1.9
(1,172)	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	1:A:113:LYS:N	1	1.9
(1,76)	1:A:112:ASP:C	1:A:113:LYS:N	1:A:113:LYS:CA	1:A:113:LYS:C	6	1.8
(1,76)	1:A:112:ASP:C	1:A:113:LYS:N	1:A:113:LYS:CA	1:A:113:LYS:C	10	1.8
(1,76)	1:A:112:ASP:C	1:A:113:LYS:N	1:A:113:LYS:CA	1:A:113:LYS:C	17	1.8
(1,72)	1:A:107:ASP:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	6	1.8
(1,62)	1:A:97:ASN:C	1:A:98:LYS:N	1:A:98:LYS:CA	1:A:98:LYS:C	9	1.8
(1,62)	1:A:97:ASN:C	1:A:98:LYS:N	1:A:98:LYS:CA	1:A:98:LYS:C	13	1.8
(1,190)	1:A:134:LYS:N	1:A:134:LYS:CA	1:A:134:LYS:C	1:A:135:THR:N	16	1.8
(1,179)	1:A:120:THR:N	1:A:120:THR:CA	1:A:120:THR:C	1:A:121:ASN:N	9	1.8
(1,94)	1:A:134:LYS:C	1:A:135:THR:N	1:A:135:THR:CA	1:A:135:THR:C	16	1.7
(1,85)	1:A:122:LEU:C	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	8	1.7
(1,76)	1:A:112:ASP:C	1:A:113:LYS:N	1:A:113:LYS:CA	1:A:113:LYS:C	1	1.7
(1,72)	1:A:107:ASP:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	9	1.7
(1,43)	1:A:78:GLY:C	1:A:79:ARG:N	1:A:79:ARG:CA	1:A:79:ARG:C	3	1.7
(1,190)	1:A:134:LYS:N	1:A:134:LYS:CA	1:A:134:LYS:C	1:A:135:THR:N	11	1.7
(1,183)	1:A:124:HIS:N	1:A:124:HIS:CA	1:A:124:HIS:C	1:A:125:ASP:N	18	1.7
(1,179)	1:A:120:THR:N	1:A:120:THR:CA	1:A:120:THR:C	1:A:121:ASN:N	17	1.7
(1,85)	1:A:122:LEU:C	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	3	1.6
(1,81)	1:A:118:ASN:C	1:A:119:ALA:N	1:A:119:ALA:CA	1:A:119:ALA:C	8	1.6
(1,62)	1:A:97:ASN:C	1:A:98:LYS:N	1:A:98:LYS:CA	1:A:98:LYS:C	11	1.6
(1,44)	1:A:79:ARG:C	1:A:80:LEU:N	1:A:80:LEU:CA	1:A:80:LEU:C	13	1.6
(1,23)	1:A:51:SER:C	1:A:52:ALA:N	1:A:52:ALA:CA	1:A:52:ALA:C	18	1.6
(1,189)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	2	1.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,179)	1:A:120:THR:N	1:A:120:THR:CA	1:A:120:THR:C	1:A:121:ASN:N	15	1.6
(1,87)	1:A:127:LYS:C	1:A:128:CYS:N	1:A:128:CYS:CA	1:A:128:CYS:C	14	1.5
(1,85)	1:A:122:LEU:C	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	1	1.5
(1,85)	1:A:122:LEU:C	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	13	1.5
(1,85)	1:A:122:LEU:C	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	18	1.5
(1,84)	1:A:121:ASN:C	1:A:122:LEU:N	1:A:122:LEU:CA	1:A:122:LEU:C	9	1.5
(1,81)	1:A:118:ASN:C	1:A:119:ALA:N	1:A:119:ALA:CA	1:A:119:ALA:C	12	1.5
(1,76)	1:A:112:ASP:C	1:A:113:LYS:N	1:A:113:LYS:CA	1:A:113:LYS:C	12	1.5
(1,76)	1:A:112:ASP:C	1:A:113:LYS:N	1:A:113:LYS:CA	1:A:113:LYS:C	18	1.5
(1,62)	1:A:97:ASN:C	1:A:98:LYS:N	1:A:98:LYS:CA	1:A:98:LYS:C	10	1.5
(1,62)	1:A:97:ASN:C	1:A:98:LYS:N	1:A:98:LYS:CA	1:A:98:LYS:C	17	1.5
(1,36)	1:A:64:SER:C	1:A:65:ASN:N	1:A:65:ASN:CA	1:A:65:ASN:C	18	1.5
(1,33)	1:A:61:ILE:C	1:A:62:ARG:N	1:A:62:ARG:CA	1:A:62:ARG:C	15	1.5
(1,190)	1:A:134:LYS:N	1:A:134:LYS:CA	1:A:134:LYS:C	1:A:135:THR:N	15	1.5
(1,189)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	14	1.5
(1,189)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	19	1.5
(1,18)	1:A:40:LEU:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	12	1.5
(1,172)	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	1:A:113:LYS:N	6	1.5
(1,96)	1:A:136:LYS:C	1:A:137:LYS:N	1:A:137:LYS:CA	1:A:137:LYS:C	2	1.4
(1,96)	1:A:136:LYS:C	1:A:137:LYS:N	1:A:137:LYS:CA	1:A:137:LYS:C	10	1.4
(1,96)	1:A:136:LYS:C	1:A:137:LYS:N	1:A:137:LYS:CA	1:A:137:LYS:C	14	1.4
(1,96)	1:A:136:LYS:C	1:A:137:LYS:N	1:A:137:LYS:CA	1:A:137:LYS:C	16	1.4
(1,87)	1:A:127:LYS:C	1:A:128:CYS:N	1:A:128:CYS:CA	1:A:128:CYS:C	15	1.4
(1,84)	1:A:121:ASN:C	1:A:122:LEU:N	1:A:122:LEU:CA	1:A:122:LEU:C	15	1.4
(1,83)	1:A:120:THR:C	1:A:121:ASN:N	1:A:121:ASN:CA	1:A:121:ASN:C	14	1.4
(1,73)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CA	1:A:109:LEU:C	9	1.4
(1,43)	1:A:78:GLY:C	1:A:79:ARG:N	1:A:79:ARG:CA	1:A:79:ARG:C	12	1.4
(1,36)	1:A:64:SER:C	1:A:65:ASN:N	1:A:65:ASN:CA	1:A:65:ASN:C	11	1.4
(1,18)	1:A:40:LEU:C	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	3	1.4
(1,179)	1:A:120:THR:N	1:A:120:THR:CA	1:A:120:THR:C	1:A:121:ASN:N	5	1.4
(1,177)	1:A:118:ASN:N	1:A:118:ASN:CA	1:A:118:ASN:C	1:A:119:ALA:N	2	1.4
(1,149)	1:A:88:LYS:N	1:A:88:LYS:CA	1:A:88:LYS:C	1:A:89:LEU:N	2	1.4
(1,129)	1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CA	1:A:61:ILE:C	1:A:62:ARG:N	15	1.4
(1,96)	1:A:136:LYS:C	1:A:137:LYS:N	1:A:137:LYS:CA	1:A:137:LYS:C	7	1.3
(1,96)	1:A:136:LYS:C	1:A:137:LYS:N	1:A:137:LYS:CA	1:A:137:LYS:C	19	1.3
(1,94)	1:A:134:LYS:C	1:A:135:THR:N	1:A:135:THR:CA	1:A:135:THR:C	20	1.3
(1,93)	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	1:A:134:LYS:CA	1:A:134:LYS:C	9	1.3
(1,85)	1:A:122:LEU:C	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	4	1.3
(1,85)	1:A:122:LEU:C	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	15	1.3
(1,83)	1:A:120:THR:C	1:A:121:ASN:N	1:A:121:ASN:CA	1:A:121:ASN:C	18	1.3
(1,76)	1:A:112:ASP:C	1:A:113:LYS:N	1:A:113:LYS:CA	1:A:113:LYS:C	13	1.3
(1,189)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	3	1.3
(1,179)	1:A:120:THR:N	1:A:120:THR:CA	1:A:120:THR:C	1:A:121:ASN:N	1	1.3
(1,179)	1:A:120:THR:N	1:A:120:THR:CA	1:A:120:THR:C	1:A:121:ASN:N	11	1.3
(1,116)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	1:A:42:GLY:N	7	1.3
(1,85)	1:A:122:LEU:C	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	2	1.2
(1,85)	1:A:122:LEU:C	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	9	1.2
(1,81)	1:A:118:ASN:C	1:A:119:ALA:N	1:A:119:ALA:CA	1:A:119:ALA:C	4	1.2
(1,77)	1:A:114:TYR:C	1:A:115:ARG:N	1:A:115:ARG:CA	1:A:115:ARG:C	1	1.2
(1,75)	1:A:111:LEU:C	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	5	1.2
(1,73)	1:A:108:LYS:C	1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CA	1:A:109:LEU:C	20	1.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,189)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	18	1.2
(1,179)	1:A:120:THR:N	1:A:120:THR:CA	1:A:120:THR:C	1:A:121:ASN:N	4	1.2
(1,179)	1:A:120:THR:N	1:A:120:THR:CA	1:A:120:THR:C	1:A:121:ASN:N	8	1.2
(1,179)	1:A:120:THR:N	1:A:120:THR:CA	1:A:120:THR:C	1:A:121:ASN:N	10	1.2
(1,179)	1:A:120:THR:N	1:A:120:THR:CA	1:A:120:THR:C	1:A:121:ASN:N	12	1.2
(1,155)	1:A:94:ILE:N	1:A:94:ILE:CA	1:A:94:ILE:C	1:A:95:ILE:N	8	1.2
(1,116)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	1:A:42:GLY:N	14	1.2
(1,96)	1:A:136:LYS:C	1:A:137:LYS:N	1:A:137:LYS:CA	1:A:137:LYS:C	18	1.1
(1,93)	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	1:A:134:LYS:CA	1:A:134:LYS:C	15	1.1
(1,85)	1:A:122:LEU:C	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	5	1.1
(1,85)	1:A:122:LEU:C	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	11	1.1
(1,85)	1:A:122:LEU:C	1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CA	1:A:123:GLU:C	17	1.1
(1,84)	1:A:121:ASN:C	1:A:122:LEU:N	1:A:122:LEU:CA	1:A:122:LEU:C	1	1.1
(1,81)	1:A:118:ASN:C	1:A:119:ALA:N	1:A:119:ALA:CA	1:A:119:ALA:C	15	1.1
(1,72)	1:A:107:ASP:C	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	10	1.1
(1,56)	1:A:91:PHE:C	1:A:92:VAL:N	1:A:92:VAL:CA	1:A:92:VAL:C	14	1.1
(1,38)	1:A:67:SER:C	1:A:68:ALA:N	1:A:68:ALA:CA	1:A:68:ALA:C	2	1.1
(1,33)	1:A:61:ILE:C	1:A:62:ARG:N	1:A:62:ARG:CA	1:A:62:ARG:C	10	1.1
(1,189)	1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CA	1:A:133:PHE:C	1:A:134:LYS:N	4	1.1
(1,179)	1:A:120:THR:N	1:A:120:THR:CA	1:A:120:THR:C	1:A:121:ASN:N	2	1.1
(1,179)	1:A:120:THR:N	1:A:120:THR:CA	1:A:120:THR:C	1:A:121:ASN:N	20	1.1
(1,172)	1:A:112:ASP:N	1:A:112:ASP:CA	1:A:112:ASP:C	1:A:113:LYS:N	10	1.1
(1,155)	1:A:94:ILE:N	1:A:94:ILE:CA	1:A:94:ILE:C	1:A:95:ILE:N	5	1.1
(1,155)	1:A:94:ILE:N	1:A:94:ILE:CA	1:A:94:ILE:C	1:A:95:ILE:N	6	1.1
(1,116)	1:A:41:ASP:N	1:A:41:ASP:CA	1:A:41:ASP:C	1:A:42:GLY:N	16	1.1