Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Jun 11, 2024 – 09:29 PM EDT

PDB ID	:	1PKT
Title	:	STRUCTURE OF THE PI3K SH3 DOMAIN AND ANALYSIS OF THE SH3 FAMILY
Authors	:	Koyama, S.; Yu, H.; Dalgarno, D.C.; Shin, T.B.; Zydowsky, L.D.; Schreiber, S.L.
Deposited on	:	1994-03-07

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 (i)) were used in the production of this report:

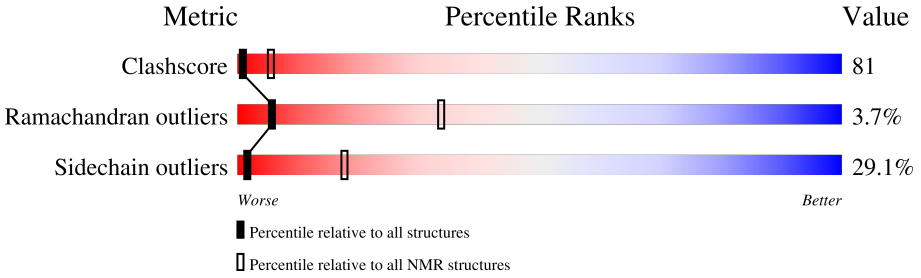
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson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

1 Overall quality at a glance (i)

The following experimental techniques were used to determine the structure:
SOLUTION NMR

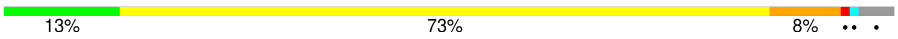
The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

Percentile scores (ranging between 0-100) for global validation metrics of the entry are shown in the following graphic. The table shows the number of entries on which the scores are based.



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	158937	12864
Ramachandran outliers	154571	11451
Sidechain outliers	154315	11428

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the experimental data. The red, orange, yellow and green segments indicate the fraction of residues that contain outliers for >=3, 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. A cyan segment indicates the fraction of residues that are not part of the well-defined cores, and a grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions <=5%

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	79	

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 30 models. The atoms present in the NMR models are not consistent. Some calculations may have failed as a result. All residues are included in the validation scores. Model 10 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

The following residues are included in the computation of the global validation metrics.

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	**Residue range (total)**	**Backbone RMSD (Å)**	**Medoid model**
1	A:5-A:79 (75)	0.83	10

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 5 clusters and 3 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	2, 3, 8, 9, 10, 13, 14, 15, 17, 18, 28, 30
2	4, 5, 11, 12, 16, 19, 22, 25
3	6, 26, 29
4	1, 7
5	23, 27
Single-model clusters	20; 21; 24

3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1182 atoms, of which 567 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN.

Mol	Chain	Residues	Atoms					Trace
			Total	C	H	N	O	
1	A	76	1182	386	567	102	127	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: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

Chain A: 13% 73% 8%

MET SER ALA E4 G5 Y6 Q7 Y8 R9 A10 L11 Y12 D13 Y14 K15 K16 E17 R18 E19 E20 D21 I22 D23 L24 H25 L26 G27 D28 I29 L30 T31 V32 N33 K34 G35 S36 L37 V38 A39 L40 G41 F42 S43 D44 G45 Q46 E47 A48 R49 P50 E51 E52 I53 G54 W55 L56 N57 G58 Y59 N60

E61 T62 T63 G64 E65 R66 G67 D68 F69 P70 G71 T72 Y73 V74 E75 Y76 I77 G78 R79

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: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

Chain A: 22% 51% 22%

MET SER ALA E4 G5 Y6 Q7 Y8 L11 Y12 D13 Y14 K15 K16 E17 R18 E19 E20 D21 I22 D23 L24 H25 L26 G27 D28 I29 L30 T31 V32 N33 K34 G35 S36 L37 V38 A39 L40 G41 F42 S43 E47 A48 R49 P50 E51 E52 I53 G54 W55 L56 N57 G58 Y59 N60 E61 T62 T63

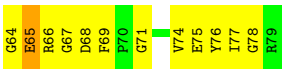
G64 E65 R66 G67 D68 F69 P70 G71 T72 Y73 V74 E75 Y76 I77 G78 R79

4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

Chain A: 25% 52% 16%

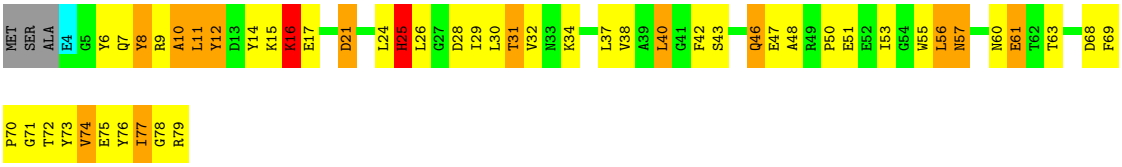
MET SER ALA E4 G5 Y6 Q7 Y8 R9 A10 L11 Y12 D13 Y14 K15 K16 E17 R18 E19 E20 D21 I22 D23 L24 H25 D28 I29 L30 T31 V32 N33 K34 G35 S36 L37 V38 A39 L40 G41 F42 S43 Q46 E47 A48 R49 P50 E51 E52 I53 G54 W55 L56 N57 G58 Y59 N60 T63



4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

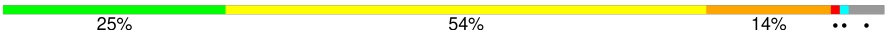
Chain A:

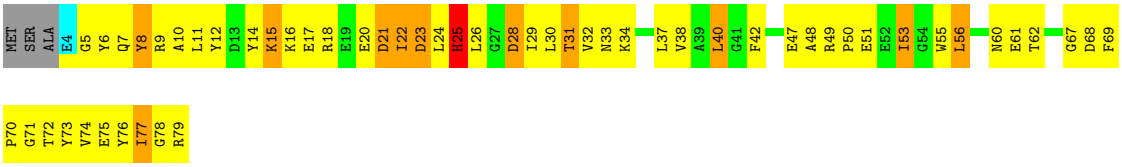


4.2.4 Score per residue for model 4

• Molecule 1: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

Chain A:

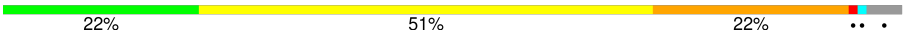


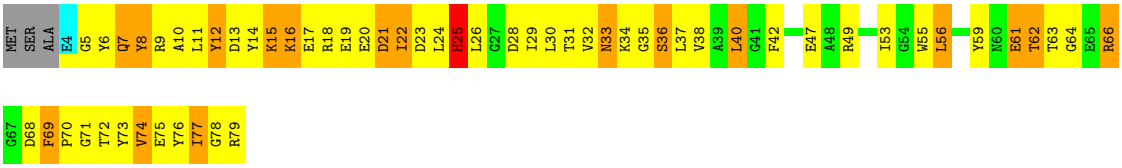


4.2.5 Score per residue for model 5

• Molecule 1: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

Chain A:

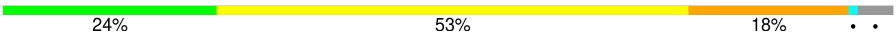




4.2.6 Score per residue for model 6

• Molecule 1: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

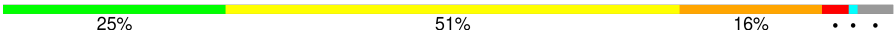
Chain A:

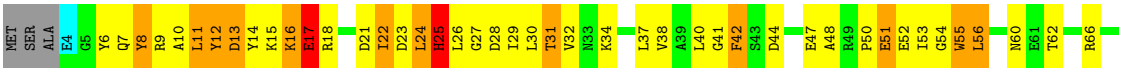


4.2.7 Score per residue for model 7

• Molecule 1: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

Chain A:

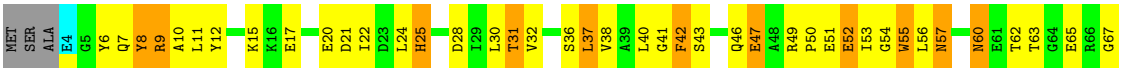


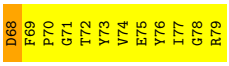


4.2.8 Score per residue for model 8

• Molecule 1: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

Chain A:

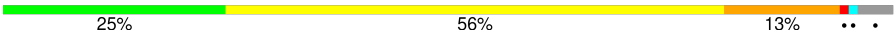




4.2.9 Score per residue for model 9

• Molecule 1: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

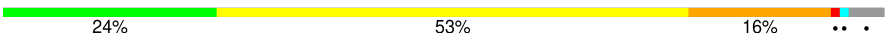
Chain A:

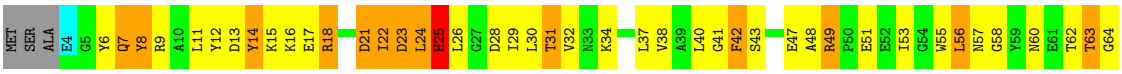


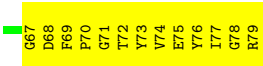
4.2.10 Score per residue for model 10 (medoid)

• Molecule 1: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

Chain A:



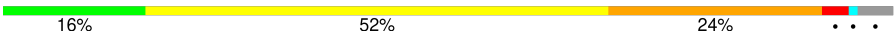


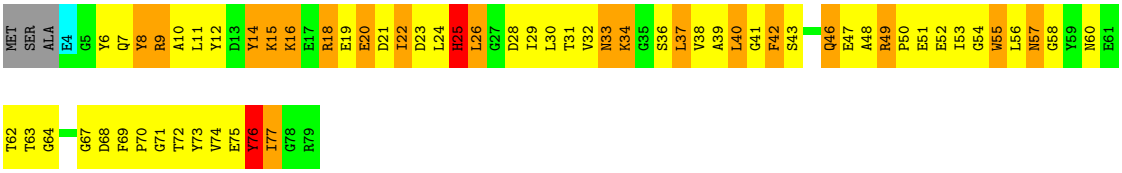


4.2.11 Score per residue for model 11

• Molecule 1: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

Chain A:

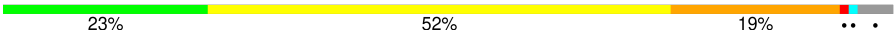




4.2.12 Score per residue for model 12

• Molecule 1: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

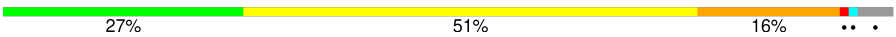
Chain A:

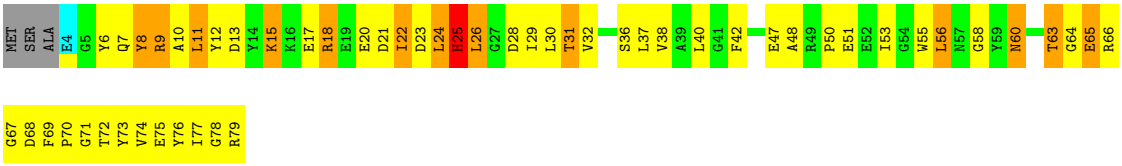


4.2.13 Score per residue for model 13

• Molecule 1: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

Chain A:

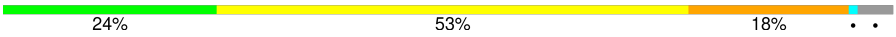


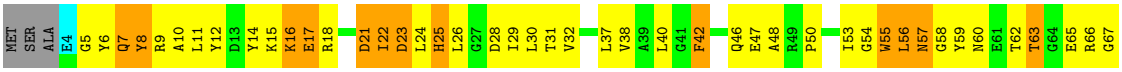


4.2.14 Score per residue for model 14

• Molecule 1: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

Chain A:

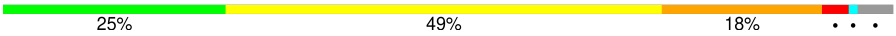




4.2.15 Score per residue for model 15

• Molecule 1: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

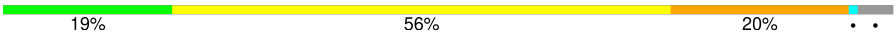
Chain A:

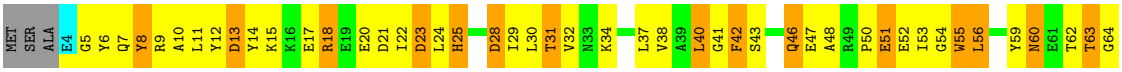


4.2.16 Score per residue for model 16

• Molecule 1: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

Chain A:

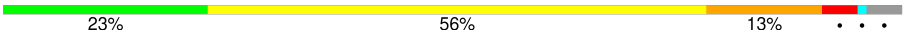


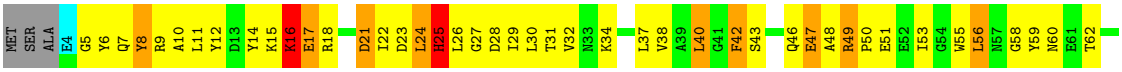


4.2.17 Score per residue for model 17

• Molecule 1: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

Chain A:

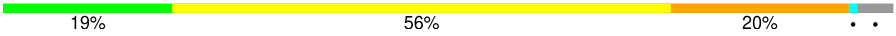


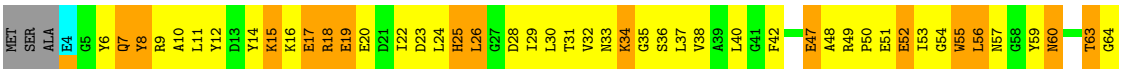


4.2.18 Score per residue for model 18

• Molecule 1: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

Chain A:





E65 R66 G67 D68 F69 P70 G71 T72 Y73 V74 E75 Y76 I77 G78 R79

4.2.19 Score per residue for model 19

• Molecule 1: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

Chain A: 24% 49% 20%

MET SER ALA E4 G5 Y6 Q7 Y8 R9 A10 L11 Y12 D13 Y14 K15 K16 E17 R18 E19 E20 D21 I22 D23 L24 H25 L26 G27 D28 I29 L30 T31 V32 N33 L37 V38 A39 L40 G41 F42 S43 Q46 E47 A48 R49 P50 E51 E52 I53 G54 W55 L56 N57 G58 Y59 N60 E61 R66

G67 D68 F69 P70 G71 T72 Y73 V74 E75 Y76 I77 G78 R79

4.2.20 Score per residue for model 20

• Molecule 1: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

Chain A: 19% 53% 23%

MET SER ALA E4 G5 Y6 Q7 Y8 R9 A10 L11 Y12 D13 Y14 K15 K16 E17 R18 E19 E20 D21 I22 D23 L24 H25 L26 G27 D28 I29 L30 T31 V32 N33 S36 L37 V38 A39 L40 G41 F42 S43 Q46 E47 A48 R49 P50 E51 E52 I53 G54 W55 L56 N57 G58 Y59 N60 E61 T62

T63 R66 G67 D68 F69 P70 G71 T72 Y73 V74 E75 Y76 I77 G78 R79

4.2.21 Score per residue for model 21

• Molecule 1: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

Chain A: 27% 47% 20%

MET SER ALA E4 G5 Y6 Q7 Y8 R9 A10 L11 Y12 D13 Y14 K15 K16 E17 R18 E19 E20 D21 I22 D23 L24 H25 L26 G27 D28 I29 L30 T31 V32 N33 S36 L37 V38 A39 L40 G41 F42 E47 A48 R49 P50 E51 E52 I53 G54 W55 L56 N60 T63 G64 E65 R66 G67

D68 F69 P70 G71 T72 Y73 V74 E75 Y76 I77 G78 R79

4.2.22 Score per residue for model 22

• Molecule 1: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

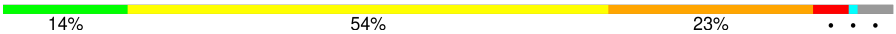
Chain A: 22% 49% 23%

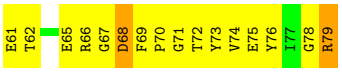
MET SER ALA E4 G5 Y6 Q7 Y8 R9 A10 L11 Y12 D13 Y14 K15 K16 E17 R18 E19 E20 D21 I22 D23 L24 H25 D28 I29 L30 T31 V32 N33 K34 L37 V38 A39 L40 G41 F42 S43 D44 G45 Q46 E47 A48 R49 P50 E51 E52 I53 G54 W55 L56 N57 G58 Y59 N60 T63

4.2.23 Score per residue for model 23

• Molecule 1: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

Chain A:

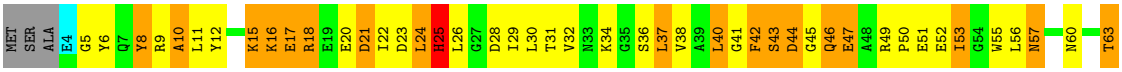




4.2.24 Score per residue for model 24

• Molecule 1: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

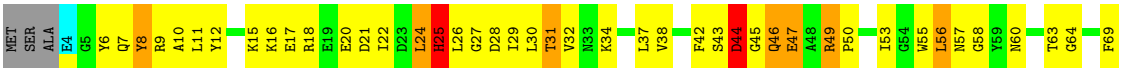
Chain A:



4.2.25 Score per residue for model 25

• Molecule 1: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

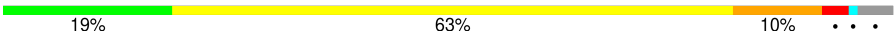
Chain A:

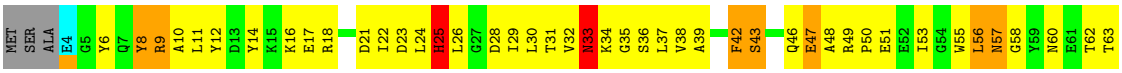


4.2.26 Score per residue for model 26

• Molecule 1: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

Chain A:





G64 E65 R66 G67 D68 F69 P70 G71 T72 Y73 V74 E75 Y76 I77 G78 R79

4.2.27 Score per residue for model 27

• Molecule 1: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

Chain A: 22% 54% 18%

MET SER ALA E4 G5 Y6 Q7 Y8 R9 A10 L11 Y12 D13 Y14 K15 K16 E17 R18 E19 E20 D21 I22 D23 L24 H25 D28 I29 L30 T31 V32 N33 K34 L37 V38 A39 L40 G41 F42 S43 D44 G45 Q46 E47 A48 R49 P50 E51 E52 I53 G54 W55 L56 N57 G58 Y59 N60 E61 T62

T63 G64 G67 D68 F69 P70 G71 T72 Y73 V74 E75 Y76 I77 G78 R79

4.2.28 Score per residue for model 28

• Molecule 1: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

Chain A: 24% 56% 14%

MET SER ALA E4 G5 Y6 Q7 Y8 R9 A10 L11 Y12 D13 Y14 K15 K16 E17 R18 E19 E20 D21 I22 D23 L24 H25 L26 G27 D28 I29 L30 T31 V32 N33 K34 L37 V38 A39 L40 G41 F42 S43 D44 G45 Q46 E47 A48 R49 P50 E51 E52 I53 G54 W55 L56 N57 N60 T63

G64 E65 R66 G67 D68 F69 P70 G71 T72 Y73 V74 E75 Y76 I77 G78 R79

4.2.29 Score per residue for model 29

• Molecule 1: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

Chain A: 20% 56% 18%

MET SER ALA E4 G5 Y6 Q7 Y8 R9 A10 L11 Y12 D13 Y14 K15 K16 E17 E20 D21 I22 D23 L24 H25 L26 G27 D28 I29 L30 T31 V32 N33 K34 G35 S36 L37 V38 A39 L40 G41 F42 S43 Q46 E47 A48 R49 P50 E51 E52 I53 G54 W55 L56 N57 G58 Y59 N60 E61 T62

T63 R66 G67 D68 F69 P70 G71 T72 Y73 V74 E75 Y76 I77 G78 R79

4.2.30 Score per residue for model 30

• Molecule 1: PHOSPHATIDYLINOSITOL 3-KINASE P85-ALPHA SUBUNIT SH3 DOMAIN

Chain A: 19% 53% 22%

MET SER ALA E4 G5 Y6 Q7 Y8 R9 A10 L11 Y12 D13 Y14 K15 K16 E17 R18 D21 I22 D23 L24 H25 L26 G27 D28 I29 L30 T31 V32 N33 K34 G35 S36 L37 V38 A39 L40 G41 F42 S43 D44 G45 A48 R49 P50 E51 E52 I53 G54 W55 L56 N57 G58 Y59 N60 E61 T62

T63
G64
E65
R66
G67
D68
F69
P70
G71
T72
Y73
V74
E75
Y76
I77
G78
R79

5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

Of the ? calculated structures, 30 were deposited, based on the following criterion: *?*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	

No chemical shift data was provided.

6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.14±0.00	2±0/619 (0.3± 0.0%)	1.04±0.00	4±0/834 (0.5± 0.0%)
All	All	1.14	60/18570 (0.3%)	1.04	120/25020 (0.5%)

All unique bond outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	55	TRP	CG-CD2	-6.03	1.33	1.43	5	30
1	A	25	HIS	CG-ND1	-5.29	1.27	1.38	26	30

All unique angle outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
1	A	55	TRP	NE1-CE2-CZ2	7.85	139.03	130.40	5	30
1	A	55	TRP	CD1-NE1-CE2	6.90	115.21	109.00	17	30
1	A	55	TRP	CG-CD1-NE1	-6.62	103.48	110.10	19	30
1	A	55	TRP	NE1-CE2-CD2	-6.35	100.95	107.30	7	30

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	606	562	562	95±11
All	All	18180	16860	16860	2851

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 81.

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:LEU:HD11	1:A:56:LEU:HD23	1.14	1.16	1	6
1:A:30:LEU:HD23	1:A:69:PHE:CE2	1.10	1.81	11	20
1:A:32:VAL:HG11	1:A:37:LEU:HD12	1.08	1.12	25	3
1:A:40:LEU:HD23	1:A:42:PHE:CE2	1.02	1.88	16	2
1:A:32:VAL:HG11	1:A:37:LEU:HD23	1.00	1.25	27	2
1:A:37:LEU:HD21	1:A:53:ILE:HD13	0.99	1.07	21	2
1:A:8:TYR:CZ	1:A:32:VAL:HG21	0.99	1.92	24	16
1:A:38:VAL:HG23	1:A:47:GLU:OE1	0.98	1.58	27	1
1:A:30:LEU:HD23	1:A:69:PHE:CZ	0.95	1.95	14	14
1:A:42:PHE:CZ	1:A:53:ILE:HG23	0.95	1.96	22	24
1:A:42:PHE:CE2	1:A:53:ILE:HG23	0.95	1.96	1	20
1:A:75:GLU:O	1:A:77:ILE:HD12	0.94	1.61	12	2
1:A:71:GLY:O	1:A:74:VAL:HG22	0.93	1.63	6	25
1:A:37:LEU:HD11	1:A:53:ILE:HD13	0.91	1.40	10	2
1:A:37:LEU:HD13	1:A:47:GLU:OE1	0.91	1.64	14	1
1:A:40:LEU:HD12	1:A:42:PHE:CE2	0.91	2.01	2	5
1:A:37:LEU:HD13	1:A:37:LEU:O	0.91	1.66	16	1
1:A:28:ASP:C	1:A:29:ILE:HD12	0.89	1.88	17	6
1:A:24:LEU:HD11	1:A:30:LEU:HD21	0.87	1.44	6	12
1:A:37:LEU:CD2	1:A:53:ILE:HD13	0.87	1.98	21	1
1:A:37:LEU:HD23	1:A:37:LEU:O	0.87	1.69	10	10
1:A:11:LEU:HD21	1:A:74:VAL:C	0.87	1.90	13	2
1:A:29:ILE:C	1:A:30:LEU:HD12	0.86	1.90	10	21
1:A:29:ILE:C	1:A:30:LEU:HD23	0.86	1.90	21	1
1:A:37:LEU:HD21	1:A:53:ILE:CD1	0.85	1.98	21	1
1:A:11:LEU:HD21	1:A:75:GLU:CD	0.84	1.92	5	4
1:A:37:LEU:HD12	1:A:37:LEU:O	0.83	1.71	27	2
1:A:28:ASP:OD1	1:A:62:THR:HG21	0.83	1.72	27	7
1:A:56:LEU:HD11	1:A:71:GLY:HA2	0.83	1.48	21	11
1:A:48:ALA:HB1	1:A:76:TYR:CD2	0.82	2.10	22	3
1:A:30:LEU:HD22	1:A:60:ASN:OD1	0.82	1.75	21	2
1:A:30:LEU:HD23	1:A:69:PHE:CD2	0.81	2.11	7	3
1:A:11:LEU:O	1:A:26:LEU:HD12	0.81	1.75	1	6
1:A:46:GLN:O	1:A:53:ILE:HD11	0.81	1.76	22	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:8:TYR:OH	1:A:32:VAL:HG21	0.80	1.76	28	14
1:A:30:LEU:HD12	1:A:30:LEU:N	0.80	1.90	26	24
1:A:56:LEU:HD11	1:A:71:GLY:CA	0.80	2.07	29	26
1:A:32:VAL:CG1	1:A:37:LEU:HD12	0.79	2.03	25	1
1:A:40:LEU:HD22	1:A:40:LEU:N	0.79	1.92	4	13
1:A:10:ALA:HB2	1:A:28:ASP:OD1	0.79	1.77	22	2
1:A:28:ASP:O	1:A:29:ILE:HD13	0.77	1.80	25	3
1:A:25:HIS:CE1	1:A:63:THR:HG21	0.77	2.15	15	15
1:A:11:LEU:HD11	1:A:74:VAL:O	0.76	1.80	28	2
1:A:37:LEU:HD11	1:A:53:ILE:CD1	0.76	2.10	10	1
1:A:9:ARG:CD	1:A:77:ILE:HD12	0.75	2.11	10	1
1:A:32:VAL:HG11	1:A:37:LEU:CD2	0.75	2.11	27	1
1:A:60:ASN:HB3	1:A:63:THR:HG22	0.74	1.58	20	3
1:A:53:ILE:HD13	1:A:56:LEU:HD21	0.74	1.57	11	1
1:A:40:LEU:HD23	1:A:42:PHE:CZ	0.74	2.17	24	2
1:A:23:ASP:O	1:A:24:LEU:HD22	0.74	1.82	19	2
1:A:56:LEU:HD11	1:A:71:GLY:HA3	0.74	1.60	18	19
1:A:37:LEU:HD21	1:A:47:GLU:HG3	0.74	1.57	27	1
1:A:77:ILE:HG22	1:A:77:ILE:O	0.74	1.82	6	9
1:A:37:LEU:HD21	1:A:42:PHE:CE2	0.74	2.18	10	6
1:A:22:ILE:HD11	1:A:60:ASN:ND2	0.74	1.96	10	2
1:A:32:VAL:HG22	1:A:58:GLY:CA	0.73	2.13	11	16
1:A:37:LEU:HD11	1:A:56:LEU:CD2	0.73	2.07	1	1
1:A:37:LEU:HD21	1:A:53:ILE:CG2	0.73	2.13	1	1
1:A:37:LEU:HD22	1:A:47:GLU:OE1	0.72	1.84	25	2
1:A:12:TYR:CD1	1:A:12:TYR:N	0.72	2.56	3	30
1:A:10:ALA:O	1:A:26:LEU:HD12	0.72	1.84	4	3
1:A:53:ILE:HG22	1:A:54:GLY:N	0.72	1.98	22	2
1:A:6:TYR:CG	1:A:76:TYR:OH	0.71	2.42	11	2
1:A:22:ILE:HG21	1:A:66:ARG:C	0.71	2.05	12	6
1:A:29:ILE:HD12	1:A:29:ILE:N	0.71	2.00	15	8
1:A:11:LEU:HD23	1:A:11:LEU:N	0.71	2.00	28	1
1:A:25:HIS:HE1	1:A:63:THR:HG21	0.71	1.46	11	11
1:A:28:ASP:CG	1:A:62:THR:HG21	0.71	2.06	20	7
1:A:22:ILE:HD12	1:A:60:ASN:ND2	0.70	2.02	25	5
1:A:37:LEU:HD21	1:A:53:ILE:HG21	0.70	1.64	1	1
1:A:50:PRO:HG2	1:A:74:VAL:HG23	0.70	1.62	9	5
1:A:22:ILE:HD12	1:A:22:ILE:O	0.70	1.87	18	3
1:A:25:HIS:N	1:A:25:HIS:CD2	0.70	2.58	29	2
1:A:24:LEU:HD11	1:A:69:PHE:CB	0.69	2.18	26	4
1:A:40:LEU:HD22	1:A:40:LEU:H	0.69	1.47	24	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:8:TYR:N	1:A:8:TYR:CD1	0.69	2.60	10	27
1:A:9:ARG:HB2	1:A:77:ILE:HD11	0.69	1.63	7	5
1:A:30:LEU:CD1	1:A:69:PHE:CE2	0.69	2.76	21	1
1:A:14:TYR:HB2	1:A:24:LEU:HD22	0.69	1.64	17	1
1:A:22:ILE:HD13	1:A:67:GLY:N	0.68	2.03	11	2
1:A:8:TYR:OH	1:A:37:LEU:HD12	0.68	1.87	30	2
1:A:37:LEU:HD11	1:A:47:GLU:CG	0.68	2.19	20	1
1:A:42:PHE:HE2	1:A:53:ILE:HG23	0.68	1.47	1	11
1:A:37:LEU:HD21	1:A:47:GLU:CB	0.67	2.19	7	1
1:A:37:LEU:HD21	1:A:47:GLU:HB3	0.67	1.66	7	1
1:A:11:LEU:HD22	1:A:75:GLU:CD	0.67	2.10	28	1
1:A:7:GLN:CG	1:A:31:THR:HG23	0.67	2.19	21	9
1:A:32:VAL:HG22	1:A:58:GLY:HA2	0.67	1.66	11	5
1:A:11:LEU:HD21	1:A:74:VAL:O	0.67	1.89	13	1
1:A:30:LEU:CD2	1:A:69:PHE:CE2	0.67	2.78	2	23
1:A:24:LEU:HD22	1:A:24:LEU:N	0.67	2.05	16	1
1:A:50:PRO:HA	1:A:53:ILE:HD12	0.67	1.66	21	3
1:A:38:VAL:HG22	1:A:47:GLU:OE2	0.66	1.90	5	1
1:A:53:ILE:CD1	1:A:56:LEU:HD21	0.66	2.20	11	3
1:A:30:LEU:HD22	1:A:60:ASN:ND2	0.66	2.05	27	1
1:A:37:LEU:HD13	1:A:47:GLU:HG3	0.66	1.68	1	1
1:A:24:LEU:HD11	1:A:69:PHE:HB2	0.66	1.67	11	3
1:A:11:LEU:HD12	1:A:73:TYR:O	0.65	1.90	1	1
1:A:24:LEU:HD21	1:A:30:LEU:HD21	0.65	1.68	11	3
1:A:9:ARG:CB	1:A:77:ILE:HD11	0.65	2.20	24	2
1:A:37:LEU:HD21	1:A:42:PHE:CD2	0.65	2.26	10	2
1:A:8:TYR:CZ	1:A:32:VAL:CG2	0.65	2.79	6	14
1:A:11:LEU:HD12	1:A:74:VAL:O	0.65	1.91	15	5
1:A:24:LEU:HD11	1:A:69:PHE:HB3	0.65	1.68	26	1
1:A:8:TYR:OH	1:A:32:VAL:HG11	0.65	1.92	26	20
1:A:40:LEU:CB	1:A:42:PHE:CE1	0.65	2.79	9	3
1:A:38:VAL:HG23	1:A:47:GLU:OE2	0.64	1.92	2	5
1:A:6:TYR:CE2	1:A:47:GLU:CB	0.64	2.81	22	9
1:A:69:PHE:HE2	1:A:74:VAL:HG11	0.64	1.52	9	6
1:A:8:TYR:CE2	1:A:32:VAL:HG21	0.64	2.27	18	13
1:A:29:ILE:O	1:A:30:LEU:HD12	0.64	1.92	14	3
1:A:22:ILE:HD12	1:A:60:ASN:HD21	0.64	1.50	13	2
1:A:30:LEU:HD22	1:A:69:PHE:CE2	0.64	2.27	1	12
1:A:42:PHE:CZ	1:A:53:ILE:CG2	0.64	2.81	20	7
1:A:10:ALA:HB2	1:A:28:ASP:CG	0.64	2.13	14	1
1:A:24:LEU:CD1	1:A:30:LEU:HD21	0.64	2.22	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:LEU:HD21	1:A:75:GLU:HB3	0.64	1.68	3	1
1:A:53:ILE:HD13	1:A:56:LEU:CD2	0.64	2.22	11	3
1:A:69:PHE:CD1	1:A:69:PHE:N	0.64	2.66	5	21
1:A:40:LEU:CD1	1:A:42:PHE:CE2	0.64	2.80	2	4
1:A:37:LEU:HD21	1:A:47:GLU:CG	0.63	2.23	7	2
1:A:42:PHE:CE1	1:A:53:ILE:HG23	0.63	2.28	16	3
1:A:6:TYR:HB3	1:A:76:TYR:CZ	0.63	2.28	17	3
1:A:37:LEU:CD2	1:A:42:PHE:CE2	0.63	2.81	15	6
1:A:8:TYR:CE2	1:A:56:LEU:HD22	0.63	2.28	10	4
1:A:37:LEU:HD21	1:A:47:GLU:HG2	0.63	1.69	20	2
1:A:10:ALA:HB3	1:A:25:HIS:O	0.63	1.94	21	6
1:A:25:HIS:CE1	1:A:63:THR:CG2	0.63	2.81	5	4
1:A:32:VAL:HG13	1:A:57:ASN:O	0.63	1.92	6	5
1:A:14:TYR:CB	1:A:24:LEU:HD22	0.63	2.23	17	2
1:A:22:ILE:HG13	1:A:24:LEU:HD21	0.63	1.70	16	1
1:A:76:TYR:CE1	1:A:78:GLY:N	0.62	2.67	1	3
1:A:50:PRO:CG	1:A:74:VAL:HG23	0.62	2.24	18	6
1:A:37:LEU:HD21	1:A:47:GLU:HA	0.62	1.70	3	5
1:A:47:GLU:O	1:A:76:TYR:CE1	0.62	2.52	11	2
1:A:69:PHE:CE2	1:A:74:VAL:HG11	0.62	2.28	16	11
1:A:51:GLU:CA	1:A:72:THR:HG22	0.62	2.24	20	2
1:A:38:VAL:HG12	1:A:38:VAL:O	0.61	1.95	1	27
1:A:26:LEU:HD23	1:A:26:LEU:O	0.61	1.95	11	1
1:A:56:LEU:O	1:A:69:PHE:CE1	0.61	2.54	21	20
1:A:50:PRO:CB	1:A:74:VAL:HG23	0.61	2.24	18	9
1:A:77:ILE:O	1:A:77:ILE:CG2	0.61	2.48	12	12
1:A:24:LEU:C	1:A:24:LEU:HD23	0.61	2.16	22	1
1:A:11:LEU:HB2	1:A:12:TYR:CD1	0.61	2.31	3	3
1:A:37:LEU:HD23	1:A:37:LEU:C	0.61	2.15	10	8
1:A:42:PHE:HZ	1:A:53:ILE:HG23	0.61	1.53	8	3
1:A:32:VAL:HG22	1:A:58:GLY:HA3	0.61	1.72	10	4
1:A:6:TYR:CD2	1:A:47:GLU:CB	0.61	2.83	21	6
1:A:37:LEU:HD13	1:A:37:LEU:C	0.61	2.15	16	1
1:A:10:ALA:CB	1:A:24:LEU:HD12	0.61	2.26	5	1
1:A:48:ALA:CB	1:A:76:TYR:CD2	0.61	2.82	22	5
1:A:37:LEU:HD13	1:A:56:LEU:HD23	0.61	1.71	28	1
1:A:53:ILE:HD12	1:A:56:LEU:HD21	0.61	1.73	26	9
1:A:11:LEU:HD21	1:A:75:GLU:OE1	0.61	1.94	5	7
1:A:22:ILE:HD11	1:A:60:ASN:HD22	0.60	1.54	10	1
1:A:30:LEU:HD22	1:A:74:VAL:HG11	0.60	1.73	30	5
1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CD1	0.60	2.64	26	18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:LEU:C	1:A:26:LEU:HD23	0.60	2.17	24	2
1:A:30:LEU:CD2	1:A:69:PHE:CD2	0.60	2.84	28	12
1:A:40:LEU:HD23	1:A:42:PHE:CE1	0.60	2.32	15	5
1:A:50:PRO:CB	1:A:74:VAL:CG2	0.60	2.80	18	11
1:A:40:LEU:CD2	1:A:42:PHE:CE2	0.60	2.79	16	1
1:A:37:LEU:O	1:A:42:PHE:CD1	0.60	2.55	13	17
1:A:11:LEU:HD11	1:A:75:GLU:HB3	0.60	1.74	25	4
1:A:11:LEU:HB2	1:A:12:TYR:CE1	0.60	2.31	3	2
1:A:37:LEU:CB	1:A:47:GLU:CG	0.60	2.80	21	1
1:A:37:LEU:HD23	1:A:42:PHE:CE1	0.60	2.32	25	2
1:A:40:LEU:HB2	1:A:42:PHE:CE1	0.60	2.32	9	6
1:A:56:LEU:CD1	1:A:71:GLY:CA	0.59	2.80	29	18
1:A:29:ILE:C	1:A:30:LEU:HD22	0.59	2.16	5	1
1:A:22:ILE:HG21	1:A:66:ARG:O	0.59	1.96	5	5
1:A:22:ILE:HD11	1:A:69:PHE:HB3	0.59	1.71	18	1
1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:ILE:HD12	0.59	1.73	6	1
1:A:24:LEU:N	1:A:24:LEU:CD2	0.59	2.66	16	1
1:A:37:LEU:HD11	1:A:47:GLU:HG2	0.59	1.71	20	1
1:A:56:LEU:O	1:A:69:PHE:CD1	0.59	2.56	13	20
1:A:37:LEU:CD2	1:A:42:PHE:CE1	0.59	2.86	25	2
1:A:38:VAL:HG23	1:A:47:GLU:CD	0.59	2.17	2	1
1:A:7:GLN:HG2	1:A:31:THR:HG23	0.59	1.74	25	3
1:A:40:LEU:N	1:A:40:LEU:CD2	0.59	2.66	6	13
1:A:37:LEU:O	1:A:42:PHE:CD2	0.59	2.55	24	2
1:A:32:VAL:CG1	1:A:37:LEU:HD23	0.59	2.15	27	1
1:A:6:TYR:CD2	1:A:47:GLU:HB3	0.59	2.33	21	11
1:A:11:LEU:HD21	1:A:75:GLU:OE2	0.59	1.98	5	4
1:A:40:LEU:HB3	1:A:42:PHE:CE1	0.59	2.33	20	3
1:A:50:PRO:HB3	1:A:56:LEU:HD21	0.59	1.75	21	1
1:A:56:LEU:HD13	1:A:69:PHE:CE2	0.59	2.33	21	1
1:A:22:ILE:HD11	1:A:60:ASN:CG	0.59	2.18	24	1
1:A:6:TYR:CE1	1:A:47:GLU:CB	0.59	2.86	24	1
1:A:25:HIS:CD2	1:A:28:ASP:OD2	0.58	2.56	29	1
1:A:59:TYR:CD1	1:A:65:GLU:O	0.58	2.56	23	3
1:A:72:THR:OG1	1:A:73:TYR:CE1	0.58	2.56	10	3
1:A:32:VAL:CG2	1:A:58:GLY:CA	0.58	2.81	11	4
1:A:11:LEU:HA	1:A:26:LEU:HD12	0.58	1.74	28	3
1:A:23:ASP:O	1:A:25:HIS:CE1	0.58	2.56	6	10
1:A:54:GLY:O	1:A:55:TRP:CD1	0.58	2.57	15	14
1:A:6:TYR:O	1:A:8:TYR:CE1	0.58	2.56	8	8
1:A:37:LEU:HD13	1:A:47:GLU:CG	0.58	2.27	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:37:LEU:HD23	1:A:42:PHE:HE2	0.58	1.59	21	1
1:A:76:TYR:CZ	1:A:78:GLY:O	0.58	2.56	16	5
1:A:5:GLY:O	1:A:6:TYR:CD1	0.58	2.57	14	6
1:A:24:LEU:O	1:A:25:HIS:CD2	0.58	2.56	8	15
1:A:14:TYR:CD2	1:A:15:LYS:O	0.58	2.57	7	1
1:A:40:LEU:HB3	1:A:42:PHE:CD1	0.58	2.34	20	1
1:A:8:TYR:CZ	1:A:47:GLU:OE2	0.58	2.57	23	1
1:A:46:GLN:NE2	1:A:47:GLU:N	0.58	2.52	24	1
1:A:14:TYR:CE2	1:A:15:LYS:O	0.58	2.57	10	4
1:A:28:ASP:O	1:A:29:ILE:HD12	0.58	1.97	30	2
1:A:5:GLY:O	1:A:6:TYR:CG	0.58	2.57	24	2
1:A:77:ILE:CG2	1:A:77:ILE:O	0.58	2.52	22	3
1:A:28:ASP:C	1:A:29:ILE:HD13	0.58	2.19	25	1
1:A:22:ILE:HD12	1:A:60:ASN:HD22	0.58	1.59	2	2
1:A:37:LEU:O	1:A:42:PHE:CE2	0.57	2.57	9	3
1:A:24:LEU:CD2	1:A:30:LEU:HD21	0.57	2.28	26	2
1:A:14:TYR:CB	1:A:24:LEU:CD2	0.57	2.82	15	1
1:A:11:LEU:H	1:A:11:LEU:HD22	0.57	1.58	3	1
1:A:37:LEU:HD22	1:A:56:LEU:HB3	0.57	1.74	27	1
1:A:22:ILE:CD1	1:A:24:LEU:CD2	0.57	2.82	5	2
1:A:42:PHE:CE2	1:A:53:ILE:CG2	0.57	2.88	11	2
1:A:76:TYR:CZ	1:A:78:GLY:CA	0.57	2.87	26	3
1:A:29:ILE:N	1:A:29:ILE:CD1	0.57	2.67	15	7
1:A:14:TYR:CZ	1:A:17:GLU:OE2	0.57	2.58	14	1
1:A:24:LEU:HD21	1:A:60:ASN:ND2	0.57	2.14	4	1
1:A:53:ILE:HG21	1:A:56:LEU:CD2	0.57	2.29	4	2
1:A:24:LEU:HD21	1:A:69:PHE:HB3	0.57	1.76	5	1
1:A:24:LEU:C	1:A:25:HIS:CG	0.56	2.78	21	26
1:A:6:TYR:CE2	1:A:47:GLU:HB2	0.56	2.34	22	12
1:A:15:LYS:O	1:A:16:LYS:CB	0.56	2.52	1	2
1:A:11:LEU:HB3	1:A:12:TYR:CD1	0.56	2.35	22	21
1:A:77:ILE:O	1:A:77:ILE:HG23	0.56	1.99	22	4
1:A:14:TYR:CE2	1:A:21:ASP:OD2	0.56	2.58	5	5
1:A:37:LEU:CD1	1:A:47:GLU:CG	0.56	2.83	20	1
1:A:6:TYR:CZ	1:A:34:LYS:CG	0.56	2.89	30	1
1:A:6:TYR:CE2	1:A:47:GLU:HB3	0.56	2.35	10	5
1:A:30:LEU:CD1	1:A:74:VAL:CG1	0.56	2.84	8	2
1:A:6:TYR:CD1	1:A:37:LEU:HD22	0.56	2.36	20	1
1:A:30:LEU:HD12	1:A:69:PHE:CZ	0.56	2.36	21	1
1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CD2	0.56	2.67	28	1
1:A:8:TYR:OH	1:A:32:VAL:CB	0.56	2.54	20	23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:ALA:HB3	1:A:28:ASP:H	0.56	1.59	13	4
1:A:37:LEU:HD12	1:A:56:LEU:HD23	0.56	1.77	9	2
1:A:53:ILE:CG2	1:A:54:GLY:N	0.56	2.69	22	2
1:A:10:ALA:CB	1:A:25:HIS:O	0.56	2.54	21	12
1:A:55:TRP:CE3	1:A:68:ASP:OD2	0.56	2.58	22	1
1:A:8:TYR:OH	1:A:32:VAL:CG2	0.56	2.54	15	10
1:A:16:LYS:O	1:A:16:LYS:CG	0.55	2.55	2	6
1:A:37:LEU:CD2	1:A:42:PHE:CD2	0.55	2.89	10	4
1:A:6:TYR:CZ	1:A:47:GLU:OE2	0.55	2.59	7	1
1:A:8:TYR:CE1	1:A:47:GLU:OE1	0.55	2.59	23	2
1:A:11:LEU:C	1:A:12:TYR:CD1	0.55	2.80	22	16
1:A:51:GLU:HA	1:A:72:THR:HG22	0.55	1.77	17	7
1:A:10:ALA:CB	1:A:28:ASP:OD1	0.55	2.53	22	1
1:A:8:TYR:CE2	1:A:32:VAL:CG2	0.55	2.89	18	2
1:A:37:LEU:CD2	1:A:42:PHE:CZ	0.55	2.89	25	2
1:A:6:TYR:CE1	1:A:47:GLU:HB2	0.55	2.36	24	1
1:A:55:TRP:CZ3	1:A:69:PHE:CA	0.55	2.89	22	5
1:A:15:LYS:CG	1:A:15:LYS:O	0.55	2.54	21	1
1:A:71:GLY:O	1:A:74:VAL:CG2	0.55	2.55	10	12
1:A:6:TYR:HB3	1:A:76:TYR:CE2	0.55	2.37	17	2
1:A:6:TYR:CD2	1:A:76:TYR:OH	0.55	2.60	17	1
1:A:32:VAL:HG12	1:A:37:LEU:HB2	0.55	1.76	20	1
1:A:25:HIS:CD2	1:A:28:ASP:CG	0.55	2.80	29	1
1:A:75:GLU:O	1:A:75:GLU:HG3	0.55	2.01	3	18
1:A:5:GLY:C	1:A:6:TYR:CD1	0.55	2.80	4	1
1:A:16:LYS:CD	1:A:16:LYS:O	0.54	2.55	3	1
1:A:34:LYS:CG	1:A:34:LYS:O	0.54	2.55	28	1
1:A:6:TYR:CZ	1:A:47:GLU:CD	0.54	2.81	7	1
1:A:12:TYR:HB2	1:A:73:TYR:CD2	0.54	2.37	30	10
1:A:7:GLN:C	1:A:8:TYR:CD1	0.54	2.81	18	2
1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:CD	0.54	2.70	13	1
1:A:35:GLY:O	1:A:39:ALA:HB2	0.54	2.01	29	2
1:A:20:GLU:CG	1:A:21:ASP:N	0.54	2.69	28	1
1:A:28:ASP:OD2	1:A:62:THR:CG2	0.54	2.56	26	8
1:A:28:ASP:OD2	1:A:62:THR:HG21	0.54	2.01	26	5
1:A:28:ASP:OD1	1:A:30:LEU:CD1	0.54	2.56	14	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:60:ASN:HD21	0.54	1.60	16	1
1:A:75:GLU:O	1:A:75:GLU:CG	0.54	2.56	3	8
1:A:6:TYR:CD1	1:A:6:TYR:N	0.54	2.76	22	5
1:A:18:ARG:CB	1:A:21:ASP:OD1	0.54	2.55	1	1
1:A:56:LEU:CD1	1:A:71:GLY:HA2	0.54	2.33	30	27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:SER:O	1:A:44:ASP:C	0.54	2.46	22	5
1:A:12:TYR:CB	1:A:73:TYR:CD2	0.54	2.90	28	1
1:A:37:LEU:O	1:A:40:LEU:CD2	0.53	2.56	16	2
1:A:37:LEU:HD22	1:A:47:GLU:HA	0.53	1.80	21	1
1:A:11:LEU:O	1:A:26:LEU:CD1	0.53	2.57	5	2
1:A:55:TRP:CZ3	1:A:69:PHE:HA	0.53	2.38	21	8
1:A:33:ASN:OD1	1:A:36:SER:CB	0.53	2.55	11	1
1:A:24:LEU:HD11	1:A:69:PHE:CD2	0.53	2.38	18	1
1:A:15:LYS:O	1:A:17:GLU:N	0.53	2.42	3	8
1:A:9:ARG:HB2	1:A:75:GLU:CG	0.53	2.34	29	6
1:A:7:GLN:O	1:A:78:GLY:N	0.53	2.42	22	2
1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:OD1	0.53	2.41	8	4
1:A:16:LYS:CD	1:A:23:ASP:OD1	0.53	2.57	28	2
1:A:16:LYS:CB	1:A:23:ASP:OD1	0.53	2.56	23	2
1:A:8:TYR:CE1	1:A:76:TYR:CE1	0.53	2.97	17	1
1:A:16:LYS:CG	1:A:21:ASP:O	0.53	2.57	14	2
1:A:7:GLN:OE1	1:A:29:ILE:CG2	0.53	2.57	9	2
1:A:37:LEU:CB	1:A:47:GLU:HG2	0.53	2.34	21	1
1:A:28:ASP:OD1	1:A:29:ILE:N	0.53	2.42	16	5
1:A:8:TYR:OH	1:A:32:VAL:CG1	0.53	2.57	19	12
1:A:34:LYS:CD	1:A:34:LYS:C	0.53	2.77	1	2
1:A:23:ASP:O	1:A:24:LEU:CD2	0.53	2.57	4	1
1:A:56:LEU:HB2	1:A:69:PHE:CE1	0.53	2.39	27	9
1:A:51:GLU:N	1:A:51:GLU:OE1	0.53	2.42	10	1
1:A:25:HIS:ND1	1:A:25:HIS:N	0.53	2.57	15	2
1:A:6:TYR:OH	1:A:34:LYS:CG	0.53	2.57	30	1
1:A:56:LEU:HB2	1:A:69:PHE:CZ	0.53	2.39	5	20
1:A:23:ASP:O	1:A:25:HIS:NE2	0.53	2.42	5	2
1:A:6:TYR:CD2	1:A:47:GLU:HG3	0.53	2.39	20	1
1:A:43:SER:O	1:A:45:GLY:N	0.53	2.42	22	5
1:A:17:GLU:N	1:A:21:ASP:OD2	0.53	2.42	2	6
1:A:8:TYR:OH	1:A:37:LEU:CD1	0.53	2.57	22	3
1:A:37:LEU:O	1:A:42:PHE:CZ	0.53	2.62	21	2
1:A:30:LEU:HD23	1:A:30:LEU:N	0.53	2.18	21	1
1:A:16:LYS:CG	1:A:21:ASP:OD1	0.53	2.57	26	1
1:A:18:ARG:N	1:A:21:ASP:OD2	0.52	2.43	10	4
1:A:9:ARG:CB	1:A:75:GLU:CG	0.52	2.87	29	3
1:A:24:LEU:C	1:A:25:HIS:CD2	0.52	2.82	25	3
1:A:38:VAL:O	1:A:38:VAL:CG1	0.52	2.57	12	24
1:A:14:TYR:HB3	1:A:24:LEU:CD2	0.52	2.34	15	2
1:A:16:LYS:CG	1:A:21:ASP:OD2	0.52	2.57	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:LEU:HB3	1:A:12:TYR:CE1	0.52	2.40	14	24
1:A:46:GLN:OE1	1:A:46:GLN:CA	0.52	2.57	12	2
1:A:8:TYR:CD1	1:A:8:TYR:N	0.52	2.77	18	2
1:A:23:ASP:CB	1:A:25:HIS:NE2	0.52	2.72	27	2
1:A:70:PRO:HB2	1:A:73:TYR:CD1	0.52	2.40	12	19
1:A:22:ILE:HD13	1:A:24:LEU:CD2	0.52	2.34	18	3
1:A:6:TYR:CZ	1:A:47:GLU:CB	0.52	2.93	9	1
1:A:9:ARG:CD	1:A:77:ILE:CD1	0.52	2.88	10	1
1:A:48:ALA:HA	1:A:76:TYR:CD1	0.52	2.39	17	2
1:A:75:GLU:O	1:A:76:TYR:O	0.52	2.27	11	2
1:A:10:ALA:CB	1:A:28:ASP:O	0.52	2.57	18	2
1:A:29:ILE:HG22	1:A:30:LEU:N	0.52	2.20	21	1
1:A:50:PRO:HB2	1:A:74:VAL:CG2	0.52	2.34	2	3
1:A:7:GLN:CD	1:A:31:THR:HG23	0.52	2.25	21	4
1:A:22:ILE:CG2	1:A:66:ARG:O	0.52	2.58	7	5
1:A:11:LEU:CD2	1:A:75:GLU:OE2	0.52	2.57	15	4
1:A:30:LEU:CD1	1:A:69:PHE:CZ	0.52	2.92	21	1
1:A:11:LEU:HD23	1:A:75:GLU:CD	0.52	2.25	13	1
1:A:32:VAL:HG11	1:A:37:LEU:CD1	0.52	2.35	22	1
1:A:48:ALA:HA	1:A:76:TYR:CD2	0.52	2.40	10	11
1:A:76:TYR:OH	1:A:79:ARG:CA	0.52	2.57	19	1
1:A:48:ALA:HA	1:A:76:TYR:CG	0.52	2.40	17	6
1:A:22:ILE:HD13	1:A:68:ASP:O	0.52	2.05	14	1
1:A:30:LEU:CD1	1:A:60:ASN:OD1	0.52	2.58	14	1
1:A:14:TYR:HD2	1:A:24:LEU:HD21	0.52	1.63	2	1
1:A:17:GLU:N	1:A:21:ASP:OD1	0.52	2.43	6	3
1:A:50:PRO:HB2	1:A:74:VAL:HG23	0.52	1.80	19	1
1:A:6:TYR:CG	1:A:47:GLU:HG3	0.52	2.40	20	1
1:A:22:ILE:CD1	1:A:60:ASN:OD1	0.52	2.57	24	1
1:A:37:LEU:O	1:A:37:LEU:CD2	0.52	2.58	8	2
1:A:43:SER:CB	1:A:46:GLN:OE1	0.52	2.57	26	1
1:A:72:THR:HG1	1:A:73:TYR:HD1	0.51	1.47	4	3
1:A:59:TYR:CZ	1:A:64:GLY:HA2	0.51	2.39	5	1
1:A:23:ASP:N	1:A:23:ASP:OD1	0.51	2.43	20	9
1:A:78:GLY:O	1:A:79:ARG:CB	0.51	2.57	6	1
1:A:47:GLU:HA	1:A:53:ILE:HD11	0.51	1.80	26	3
1:A:8:TYR:CZ	1:A:32:VAL:HB	0.51	2.39	5	6
1:A:76:TYR:CE2	1:A:78:GLY:HA2	0.51	2.41	4	7
1:A:38:VAL:CG2	1:A:47:GLU:OE2	0.51	2.58	5	4
1:A:76:TYR:CZ	1:A:78:GLY:C	0.51	2.83	19	2
1:A:51:GLU:CG	1:A:52:GLU:N	0.51	2.73	24	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:ASP:N	1:A:13:ASP:OD1	0.51	2.43	7	2
1:A:60:ASN:O	1:A:64:GLY:N	0.51	2.43	2	9
1:A:22:ILE:CD1	1:A:24:LEU:HD21	0.51	2.36	5	2
1:A:75:GLU:O	1:A:77:ILE:CD1	0.51	2.58	19	1
1:A:18:ARG:N	1:A:21:ASP:OD1	0.51	2.44	9	3
1:A:68:ASP:OD1	1:A:68:ASP:N	0.51	2.44	6	3
1:A:10:ALA:HB1	1:A:25:HIS:O	0.51	2.06	29	3
1:A:14:TYR:CB	1:A:24:LEU:HB2	0.51	2.36	23	7
1:A:50:PRO:HB3	1:A:56:LEU:HD11	0.51	1.83	7	1
1:A:49:ARG:O	1:A:53:ILE:N	0.51	2.44	11	3
1:A:22:ILE:CD1	1:A:68:ASP:O	0.51	2.58	28	2
1:A:29:ILE:CG2	1:A:30:LEU:N	0.51	2.73	21	1
1:A:15:LYS:O	1:A:16:LYS:HB2	0.51	2.06	1	1
1:A:13:ASP:OD1	1:A:13:ASP:N	0.51	2.43	2	2
1:A:76:TYR:CZ	1:A:78:GLY:HA2	0.51	2.40	26	9
1:A:7:GLN:OE1	1:A:29:ILE:HG21	0.51	2.06	14	1
1:A:30:LEU:CD2	1:A:60:ASN:CG	0.51	2.80	27	1
1:A:73:TYR:N	1:A:73:TYR:CD1	0.50	2.78	10	7
1:A:16:LYS:CG	1:A:23:ASP:OD2	0.50	2.59	7	1
1:A:46:GLN:O	1:A:53:ILE:CD1	0.50	2.57	29	2
1:A:46:GLN:O	1:A:53:ILE:CG1	0.50	2.58	14	2
1:A:8:TYR:OH	1:A:37:LEU:HD11	0.50	2.07	22	1
1:A:14:TYR:HB3	1:A:24:LEU:HD11	0.50	1.84	2	1
1:A:70:PRO:HG2	1:A:73:TYR:CD2	0.50	2.42	19	7
1:A:41:GLY:O	1:A:42:PHE:O	0.50	2.29	20	12
1:A:6:TYR:CE1	1:A:47:GLU:HG3	0.50	2.42	9	1
1:A:14:TYR:OH	1:A:17:GLU:CG	0.50	2.59	16	1
1:A:22:ILE:O	1:A:24:LEU:CD2	0.50	2.60	16	1
1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:ND2	0.50	2.59	19	1
1:A:6:TYR:CD1	1:A:47:GLU:HB2	0.50	2.41	24	1
1:A:22:ILE:HG23	1:A:67:GLY:HA3	0.50	1.84	27	8
1:A:11:LEU:O	1:A:26:LEU:HD13	0.50	2.07	5	1
1:A:57:ASN:ND2	1:A:67:GLY:O	0.50	2.45	14	2
1:A:22:ILE:CG2	1:A:66:ARG:C	0.50	2.80	29	2
1:A:65:GLU:OE1	1:A:66:ARG:N	0.50	2.45	2	1
1:A:6:TYR:CZ	1:A:34:LYS:HG2	0.50	2.41	30	3
1:A:22:ILE:HD13	1:A:24:LEU:HD21	0.50	1.84	18	1
1:A:70:PRO:HB2	1:A:73:TYR:CD2	0.50	2.42	18	2
1:A:5:GLY:C	1:A:6:TYR:CD2	0.50	2.85	24	1
1:A:78:GLY:O	1:A:79:ARG:C	0.50	2.49	23	4
1:A:49:ARG:N	1:A:50:PRO:HD3	0.50	2.22	25	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:LYS:O	1:A:16:LYS:CD	0.50	2.59	20	1
1:A:32:VAL:CG2	1:A:58:GLY:HA3	0.49	2.37	9	3
1:A:11:LEU:CD2	1:A:74:VAL:C	0.49	2.81	3	1
1:A:9:ARG:NE	1:A:77:ILE:HD12	0.49	2.21	10	1
1:A:59:TYR:CG	1:A:66:ARG:HB2	0.49	2.42	23	1
1:A:16:LYS:CB	1:A:21:ASP:O	0.49	2.60	24	1
1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:HD2	0.49	2.22	13	1
1:A:30:LEU:CD2	1:A:60:ASN:ND2	0.49	2.74	27	1
1:A:33:ASN:N	1:A:33:ASN:OD1	0.49	2.45	9	1
1:A:23:ASP:HB3	1:A:25:HIS:NE2	0.49	2.21	27	4
1:A:22:ILE:CD1	1:A:67:GLY:C	0.49	2.81	14	1
1:A:37:LEU:C	1:A:37:LEU:CD1	0.49	2.80	16	1
1:A:22:ILE:CD1	1:A:60:ASN:CG	0.49	2.81	24	1
1:A:49:ARG:N	1:A:50:PRO:CD	0.49	2.75	17	9
1:A:37:LEU:HD11	1:A:47:GLU:CD	0.49	2.27	20	1
1:A:56:LEU:HD13	1:A:69:PHE:HE1	0.49	1.66	27	2
1:A:77:ILE:O	1:A:77:ILE:HG22	0.49	2.05	27	1
1:A:75:GLU:CG	1:A:75:GLU:O	0.49	2.60	29	3
1:A:11:LEU:CD2	1:A:75:GLU:CD	0.49	2.81	27	3
1:A:37:LEU:HD13	1:A:47:GLU:HG2	0.49	1.85	21	1
1:A:76:TYR:CE1	1:A:78:GLY:CA	0.49	2.96	1	3
1:A:56:LEU:CD1	1:A:71:GLY:HA3	0.49	2.36	9	2
1:A:7:GLN:OE1	1:A:29:ILE:HG23	0.49	2.08	9	1
1:A:6:TYR:O	1:A:32:VAL:O	0.49	2.31	11	3
1:A:6:TYR:CZ	1:A:47:GLU:HG3	0.49	2.43	19	1
1:A:22:ILE:CG2	1:A:67:GLY:CA	0.49	2.90	20	1
1:A:18:ARG:O	1:A:21:ASP:OD2	0.49	2.31	2	2
1:A:22:ILE:HD13	1:A:22:ILE:N	0.49	2.22	14	1
1:A:30:LEU:HD11	1:A:60:ASN:OD1	0.49	2.08	15	2
1:A:8:TYR:OH	1:A:32:VAL:HB	0.49	2.08	14	15
1:A:38:VAL:CG1	1:A:38:VAL:O	0.49	2.60	2	1
1:A:59:TYR:OH	1:A:64:GLY:CA	0.49	2.61	5	1
1:A:25:HIS:CB	1:A:28:ASP:OD2	0.49	2.61	8	1
1:A:37:LEU:CD1	1:A:56:LEU:HD23	0.49	2.38	11	2
1:A:40:LEU:HD23	1:A:42:PHE:HE1	0.48	1.67	6	5
1:A:10:ALA:HB2	1:A:24:LEU:HD12	0.48	1.85	5	1
1:A:6:TYR:CB	1:A:76:TYR:OH	0.48	2.60	17	2
1:A:9:ARG:CB	1:A:75:GLU:HG3	0.48	2.38	11	1
1:A:24:LEU:HG	1:A:25:HIS:N	0.48	2.23	22	2
1:A:76:TYR:OH	1:A:79:ARG:N	0.48	2.45	19	1
1:A:22:ILE:HD12	1:A:60:ASN:HB2	0.48	1.84	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:42:PHE:CZ	1:A:53:ILE:HG12	0.48	2.43	2	2
1:A:14:TYR:HB3	1:A:24:LEU:HD21	0.48	1.85	12	2
1:A:22:ILE:HG21	1:A:67:GLY:N	0.48	2.23	20	2
1:A:22:ILE:CD1	1:A:60:ASN:ND2	0.48	2.77	22	3
1:A:37:LEU:HD12	1:A:47:GLU:HG2	0.48	1.84	16	1
1:A:6:TYR:CD2	1:A:47:GLU:HB2	0.48	2.43	4	4
1:A:75:GLU:O	1:A:76:TYR:C	0.48	2.52	15	20
1:A:6:TYR:CE2	1:A:34:LYS:HA	0.48	2.43	11	2
1:A:12:TYR:HB2	1:A:73:TYR:CG	0.48	2.43	26	2
1:A:6:TYR:HB3	1:A:76:TYR:CE1	0.48	2.43	23	3
1:A:28:ASP:OD2	1:A:30:LEU:HD11	0.48	2.08	9	1
1:A:28:ASP:CG	1:A:62:THR:CG2	0.48	2.81	10	4
1:A:37:LEU:O	1:A:42:PHE:CE1	0.48	2.67	11	2
1:A:75:GLU:O	1:A:77:ILE:CG1	0.48	2.61	20	2
1:A:38:VAL:HG23	1:A:47:GLU:CG	0.48	2.38	22	1
1:A:8:TYR:HB3	1:A:76:TYR:N	0.48	2.23	9	12
1:A:10:ALA:HB2	1:A:28:ASP:OD2	0.48	2.08	14	1
1:A:32:VAL:HG12	1:A:32:VAL:O	0.48	2.08	15	1
1:A:7:GLN:NE2	1:A:79:ARG:O	0.48	2.46	21	1
1:A:46:GLN:CD	1:A:47:GLU:N	0.48	2.66	25	1
1:A:14:TYR:O	1:A:24:LEU:O	0.48	2.31	1	1
1:A:28:ASP:OD1	1:A:60:ASN:OD1	0.48	2.32	2	2
1:A:5:GLY:O	1:A:79:ARG:O	0.48	2.31	17	2
1:A:40:LEU:CG	1:A:42:PHE:CZ	0.48	2.96	16	1
1:A:34:LYS:HD3	1:A:35:GLY:N	0.48	2.23	18	1
1:A:59:TYR:CD1	1:A:66:ARG:HB3	0.48	2.44	16	1
1:A:6:TYR:CB	1:A:47:GLU:OE1	0.48	2.62	23	1
1:A:16:LYS:CA	1:A:21:ASP:OD1	0.48	2.61	3	1
1:A:18:ARG:O	1:A:21:ASP:OD1	0.48	2.32	11	16
1:A:30:LEU:HD22	1:A:74:VAL:CG1	0.48	2.39	14	2
1:A:34:LYS:CD	1:A:35:GLY:N	0.48	2.76	18	1
1:A:22:ILE:HD12	1:A:23:ASP:O	0.48	2.08	24	1
1:A:57:ASN:ND2	1:A:67:GLY:C	0.48	2.67	23	4
1:A:28:ASP:OD1	1:A:28:ASP:C	0.48	2.52	22	2
1:A:76:TYR:CE2	1:A:78:GLY:N	0.48	2.82	24	3
1:A:8:TYR:CZ	1:A:56:LEU:HD22	0.48	2.44	5	1
1:A:32:VAL:HG22	1:A:57:ASN:O	0.48	2.09	28	3
1:A:24:LEU:O	1:A:24:LEU:HD23	0.48	2.07	28	1
1:A:76:TYR:CE1	1:A:78:GLY:HA2	0.47	2.44	30	2
1:A:16:LYS:O	1:A:16:LYS:HG3	0.47	2.09	2	4
1:A:5:GLY:C	1:A:6:TYR:CG	0.47	2.87	24	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:TYR:CE1	1:A:78:GLY:O	0.47	2.67	6	2
1:A:9:ARG:HB3	1:A:75:GLU:CG	0.47	2.40	13	8
1:A:11:LEU:CD1	1:A:74:VAL:O	0.47	2.62	15	1
1:A:18:ARG:O	1:A:19:GLU:C	0.47	2.51	23	5
1:A:11:LEU:CB	1:A:12:TYR:CD1	0.47	2.97	3	2
1:A:16:LYS:HD2	1:A:16:LYS:N	0.47	2.23	3	1
1:A:15:LYS:O	1:A:16:LYS:HB3	0.47	2.10	14	3
1:A:28:ASP:OD2	1:A:60:ASN:OD1	0.47	2.32	7	5
1:A:76:TYR:CE2	1:A:78:GLY:CA	0.47	2.98	2	2
1:A:25:HIS:O	1:A:28:ASP:OD2	0.47	2.32	8	3
1:A:51:GLU:HA	1:A:72:THR:CG2	0.47	2.39	20	1
1:A:14:TYR:HB2	1:A:24:LEU:CB	0.47	2.38	23	1
1:A:46:GLN:OE1	1:A:47:GLU:N	0.47	2.47	25	1
1:A:11:LEU:HD12	1:A:74:VAL:C	0.47	2.28	15	2
1:A:14:TYR:CD1	1:A:70:PRO:CG	0.47	2.97	18	1
1:A:28:ASP:N	1:A:28:ASP:OD1	0.47	2.47	26	1
1:A:7:GLN:NE2	1:A:31:THR:HG23	0.47	2.24	6	1
1:A:32:VAL:O	1:A:33:ASN:O	0.47	2.31	6	8
1:A:37:LEU:HD21	1:A:42:PHE:CZ	0.47	2.45	25	2
1:A:30:LEU:HD21	1:A:60:ASN:OD1	0.47	2.09	27	1
1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:ILE:CD1	0.47	2.38	3	2
1:A:24:LEU:C	1:A:25:HIS:ND1	0.47	2.68	17	1
1:A:22:ILE:HD12	1:A:22:ILE:C	0.47	2.30	18	2
1:A:42:PHE:CE2	1:A:53:ILE:HG12	0.47	2.45	2	3
1:A:11:LEU:N	1:A:73:TYR:O	0.47	2.48	3	1
1:A:12:TYR:CZ	1:A:72:THR:O	0.47	2.68	3	1
1:A:76:TYR:C	1:A:76:TYR:CD1	0.47	2.88	25	5
1:A:47:GLU:OE2	1:A:56:LEU:CD2	0.47	2.62	20	1
1:A:49:ARG:NH2	1:A:52:GLU:CD	0.47	2.68	24	1
1:A:55:TRP:CH2	1:A:70:PRO:HD3	0.47	2.45	29	1
1:A:22:ILE:HG13	1:A:24:LEU:CD2	0.47	2.39	6	1
1:A:72:THR:OG1	1:A:73:TYR:CD1	0.47	2.68	10	5
1:A:37:LEU:HD23	1:A:42:PHE:CE2	0.47	2.44	21	1
1:A:16:LYS:O	1:A:16:LYS:HD3	0.47	2.10	20	3
1:A:37:LEU:C	1:A:37:LEU:CD2	0.47	2.83	18	5
1:A:22:ILE:CG2	1:A:65:GLU:OE1	0.47	2.63	6	1
1:A:7:GLN:HG3	1:A:31:THR:HG23	0.47	1.86	15	3
1:A:50:PRO:HB3	1:A:74:VAL:CG2	0.47	2.40	23	1
1:A:50:PRO:O	1:A:51:GLU:C	0.47	2.54	2	7
1:A:24:LEU:CD2	1:A:69:PHE:HB3	0.47	2.40	5	1
1:A:57:ASN:OD1	1:A:68:ASP:OD1	0.47	2.33	6	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:PRO:HB2	1:A:71:GLY:CA	0.47	2.40	7	1
1:A:23:ASP:O	1:A:60:ASN:ND2	0.47	2.48	17	2
1:A:29:ILE:O	1:A:61:GLU:OE2	0.47	2.33	27	1
1:A:75:GLU:O	1:A:77:ILE:HG13	0.46	2.10	20	5
1:A:51:GLU:HA	1:A:72:THR:CA	0.46	2.39	11	4
1:A:50:PRO:HB3	1:A:56:LEU:CD1	0.46	2.40	7	1
1:A:20:GLU:O	1:A:68:ASP:OD2	0.46	2.33	19	4
1:A:18:ARG:HG3	1:A:55:TRP:CZ2	0.46	2.45	23	1
1:A:11:LEU:HD11	1:A:74:VAL:C	0.46	2.30	1	1
1:A:32:VAL:CG1	1:A:37:LEU:HB2	0.46	2.40	2	2
1:A:37:LEU:HD23	1:A:47:GLU:HB3	0.46	1.87	2	1
1:A:15:LYS:O	1:A:16:LYS:O	0.46	2.33	15	2
1:A:20:GLU:OE2	1:A:68:ASP:OD2	0.46	2.33	11	1
1:A:76:TYR:OH	1:A:78:GLY:O	0.46	2.33	16	1
1:A:78:GLY:O	1:A:79:ARG:OXT	0.46	2.33	17	1
1:A:14:TYR:CE1	1:A:70:PRO:HG3	0.46	2.46	18	1
1:A:37:LEU:HB2	1:A:47:GLU:CG	0.46	2.40	21	1
1:A:12:TYR:CD2	1:A:73:TYR:CD2	0.46	3.04	3	1
1:A:24:LEU:HD21	1:A:60:ASN:HD21	0.46	1.69	4	1
1:A:20:GLU:O	1:A:68:ASP:OD1	0.46	2.33	5	1
1:A:37:LEU:HD23	1:A:42:PHE:CZ	0.46	2.45	15	2
1:A:22:ILE:H	1:A:22:ILE:HD12	0.46	1.70	7	1
1:A:12:TYR:CD1	1:A:73:TYR:HA	0.46	2.44	11	2
1:A:7:GLN:HA	1:A:30:LEU:O	0.46	2.10	21	3
1:A:22:ILE:HD11	1:A:69:PHE:CD1	0.46	2.45	13	1
1:A:76:TYR:OH	1:A:79:ARG:OXT	0.46	2.33	16	1
1:A:9:ARG:HB2	1:A:77:ILE:CD1	0.46	2.40	30	3
1:A:14:TYR:HB3	1:A:24:LEU:CG	0.46	2.40	12	3
1:A:60:ASN:OD1	1:A:63:THR:OG1	0.46	2.32	2	1
1:A:6:TYR:N	1:A:32:VAL:O	0.46	2.49	6	1
1:A:43:SER:O	1:A:47:GLU:OE2	0.46	2.34	10	1
1:A:7:GLN:CG	1:A:31:THR:CG2	0.46	2.94	8	1
1:A:23:ASP:O	1:A:24:LEU:HG	0.46	2.10	11	1
1:A:10:ALA:CB	1:A:28:ASP:OD2	0.46	2.64	14	1
1:A:16:LYS:HG3	1:A:21:ASP:O	0.46	2.11	14	1
1:A:59:TYR:CD1	1:A:66:ARG:HB2	0.46	2.46	18	3
1:A:8:TYR:OH	1:A:47:GLU:OE2	0.46	2.34	23	1
1:A:5:GLY:O	1:A:7:GLN:OE1	0.46	2.34	5	1
1:A:25:HIS:O	1:A:28:ASP:CB	0.46	2.64	5	1
1:A:62:THR:HG22	1:A:63:THR:N	0.46	2.23	5	1
1:A:40:LEU:HD12	1:A:42:PHE:HE1	0.46	1.71	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:TYR:CB	1:A:24:LEU:HD21	0.46	2.40	15	1
1:A:24:LEU:HD23	1:A:24:LEU:O	0.46	2.10	22	1
1:A:23:ASP:O	1:A:65:GLU:OE2	0.46	2.34	26	1
1:A:8:TYR:HA	1:A:77:ILE:HD12	0.46	1.87	30	2
1:A:22:ILE:CG2	1:A:67:GLY:HA3	0.46	2.40	20	4
1:A:25:HIS:N	1:A:28:ASP:OD2	0.46	2.48	8	1
1:A:54:GLY:C	1:A:55:TRP:CD1	0.46	2.89	12	5
1:A:24:LEU:HD11	1:A:69:PHE:CG	0.46	2.46	18	1
1:A:9:ARG:O	1:A:74:VAL:HA	0.46	2.10	19	2
1:A:22:ILE:O	1:A:24:LEU:HD23	0.46	2.10	14	2
1:A:76:TYR:CE1	1:A:79:ARG:HD3	0.46	2.45	5	1
1:A:78:GLY:O	1:A:79:ARG:HB3	0.46	2.10	6	1
1:A:40:LEU:HB2	1:A:42:PHE:CD1	0.46	2.46	24	1
1:A:43:SER:HB2	1:A:46:GLN:OE1	0.46	2.11	26	1
1:A:10:ALA:HB2	1:A:28:ASP:HB2	0.46	1.87	8	1
1:A:11:LEU:HD23	1:A:75:GLU:OE2	0.46	2.10	13	1
1:A:29:ILE:O	1:A:30:LEU:HD23	0.46	2.10	21	1
1:A:38:VAL:O	1:A:38:VAL:HG12	0.45	2.11	2	1
1:A:48:ALA:O	1:A:76:TYR:HB3	0.45	2.11	2	2
1:A:16:LYS:HG2	1:A:23:ASP:OD2	0.45	2.12	7	1
1:A:51:GLU:CB	1:A:72:THR:HA	0.45	2.41	20	2
1:A:37:LEU:CD2	1:A:47:GLU:CG	0.45	2.94	20	1
1:A:25:HIS:O	1:A:28:ASP:HB2	0.45	2.12	2	1
1:A:5:GLY:O	1:A:79:ARG:OXT	0.45	2.34	4	1
1:A:24:LEU:CD1	1:A:69:PHE:HB2	0.45	2.40	11	2
1:A:46:GLN:CD	1:A:46:GLN:N	0.45	2.67	12	1
1:A:8:TYR:CE2	1:A:56:LEU:HD13	0.45	2.47	14	1
1:A:14:TYR:CD1	1:A:70:PRO:HG2	0.45	2.46	18	1
1:A:14:TYR:CE1	1:A:17:GLU:OE1	0.45	2.69	4	1
1:A:23:ASP:OD1	1:A:65:GLU:OE2	0.45	2.34	13	1
1:A:16:LYS:HB2	1:A:21:ASP:O	0.45	2.11	24	1
1:A:6:TYR:CD2	1:A:76:TYR:CE1	0.45	3.04	29	2
1:A:37:LEU:CD2	1:A:47:GLU:HG2	0.45	2.41	7	2
1:A:30:LEU:HD11	1:A:74:VAL:HG12	0.45	1.87	8	1
1:A:43:SER:O	1:A:47:GLU:OE1	0.45	2.35	8	1
1:A:18:ARG:HB3	1:A:20:GLU:CG	0.45	2.40	12	1
1:A:28:ASP:OD1	1:A:62:THR:CG2	0.45	2.57	27	1
1:A:6:TYR:HB2	1:A:32:VAL:O	0.45	2.11	11	2
1:A:7:GLN:HG2	1:A:31:THR:CG2	0.45	2.41	13	1
1:A:27:GLY:O	1:A:29:ILE:HD12	0.45	2.11	21	1
1:A:63:THR:O	1:A:65:GLU:OE1	0.45	2.35	30	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:SER:OG	1:A:46:GLN:CG	0.45	2.65	8	1
1:A:37:LEU:CD2	1:A:47:GLU:HA	0.45	2.42	9	1
1:A:21:ASP:O	1:A:21:ASP:OD1	0.45	2.35	23	1
1:A:14:TYR:HB3	1:A:24:LEU:CD1	0.45	2.42	2	1
1:A:15:LYS:O	1:A:16:LYS:C	0.45	2.56	28	8
1:A:69:PHE:HE2	1:A:74:VAL:HG21	0.45	1.72	3	1
1:A:8:TYR:HE2	1:A:32:VAL:HG21	0.45	1.72	5	1
1:A:30:LEU:HD12	1:A:74:VAL:CG1	0.45	2.42	8	1
1:A:76:TYR:OH	1:A:79:ARG:HA	0.45	2.12	16	1
1:A:56:LEU:N	1:A:56:LEU:HD12	0.45	2.27	25	4
1:A:63:THR:O	1:A:64:GLY:C	0.45	2.55	10	16
1:A:69:PHE:CD1	1:A:69:PHE:C	0.45	2.91	26	6
1:A:33:ASN:OD1	1:A:36:SER:HB2	0.45	2.11	11	1
1:A:6:TYR:CD2	1:A:76:TYR:CE2	0.45	3.05	16	1
1:A:59:TYR:CD2	1:A:66:ARG:HB2	0.45	2.47	23	1
1:A:48:ALA:O	1:A:76:TYR:HB2	0.45	2.12	3	1
1:A:25:HIS:O	1:A:28:ASP:HB3	0.45	2.12	5	1
1:A:58:GLY:O	1:A:66:ARG:HG2	0.45	2.12	15	2
1:A:40:LEU:HG	1:A:42:PHE:CZ	0.45	2.47	16	1
1:A:8:TYR:OH	1:A:37:LEU:HD13	0.45	2.11	24	1
1:A:24:LEU:N	1:A:24:LEU:HD23	0.44	2.28	2	2
1:A:22:ILE:CD1	1:A:69:PHE:HB3	0.44	2.42	18	1
1:A:30:LEU:CD2	1:A:60:ASN:OD1	0.44	2.65	27	1
1:A:76:TYR:OH	1:A:78:GLY:C	0.44	2.56	19	4
1:A:30:LEU:HG	1:A:60:ASN:ND2	0.44	2.27	15	3
1:A:57:ASN:CB	1:A:68:ASP:OD1	0.44	2.64	11	1
1:A:63:THR:OG1	1:A:65:GLU:HG3	0.44	2.12	14	1
1:A:57:ASN:ND2	1:A:57:ASN:C	0.44	2.71	15	2
1:A:47:GLU:O	1:A:47:GLU:CD	0.44	2.56	23	1
1:A:16:LYS:C	1:A:21:ASP:OD1	0.44	2.56	24	3
1:A:56:LEU:CD1	1:A:74:VAL:HG21	0.44	2.42	5	1
1:A:30:LEU:CD1	1:A:74:VAL:HG11	0.44	2.42	27	2
1:A:47:GLU:CD	1:A:47:GLU:N	0.44	2.71	17	1
1:A:10:ALA:HB2	1:A:28:ASP:O	0.44	2.12	26	2
1:A:46:GLN:OE1	1:A:46:GLN:C	0.44	2.56	25	1
1:A:33:ASN:HB2	1:A:36:SER:CB	0.44	2.43	29	1
1:A:6:TYR:OH	1:A:34:LYS:HG3	0.44	2.12	30	1
1:A:17:GLU:O	1:A:18:ARG:C	0.44	2.56	23	2
1:A:37:LEU:HD22	1:A:47:GLU:CG	0.44	2.43	21	2
1:A:48:ALA:HB1	1:A:76:TYR:CD1	0.44	2.47	16	1
1:A:15:LYS:O	1:A:15:LYS:HG2	0.44	2.12	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:LEU:HD12	1:A:69:PHE:CE2	0.44	2.45	21	1
1:A:6:TYR:HB3	1:A:47:GLU:OE1	0.44	2.13	23	1
1:A:56:LEU:HD12	1:A:56:LEU:H	0.44	1.72	25	1
1:A:40:LEU:HD12	1:A:42:PHE:HE2	0.44	1.72	30	1
1:A:6:TYR:CD2	1:A:47:GLU:CG	0.44	3.00	1	2
1:A:51:GLU:HG3	1:A:52:GLU:N	0.44	2.28	24	7
1:A:21:ASP:OD1	1:A:21:ASP:C	0.44	2.55	11	5
1:A:9:ARG:O	1:A:75:GLU:HG2	0.44	2.11	15	2
1:A:14:TYR:OH	1:A:17:GLU:HG3	0.44	2.12	16	1
1:A:34:LYS:O	1:A:34:LYS:HG3	0.44	2.12	28	1
1:A:7:GLN:OE1	1:A:31:THR:CG2	0.44	2.66	15	1
1:A:18:ARG:O	1:A:20:GLU:N	0.44	2.51	28	2
1:A:42:PHE:CZ	1:A:53:ILE:HG21	0.44	2.46	20	1
1:A:13:ASP:O	1:A:14:TYR:CB	0.44	2.65	29	1
1:A:11:LEU:HD12	1:A:73:TYR:C	0.44	2.33	1	1
1:A:49:ARG:O	1:A:53:ILE:HG13	0.44	2.13	1	6
1:A:11:LEU:CD1	1:A:75:GLU:HB3	0.44	2.43	7	9
1:A:48:ALA:HB1	1:A:76:TYR:CG	0.44	2.48	3	1
1:A:5:GLY:C	1:A:79:ARG:OXT	0.44	2.56	4	1
1:A:40:LEU:HD22	1:A:42:PHE:HE1	0.44	1.73	9	1
1:A:16:LYS:HB2	1:A:23:ASP:OD1	0.44	2.12	23	5
1:A:49:ARG:CD	1:A:52:GLU:HB3	0.44	2.43	24	1
1:A:73:TYR:CD1	1:A:73:TYR:N	0.44	2.83	8	17
1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:HD13	0.44	2.27	3	1
1:A:35:GLY:O	1:A:36:SER:C	0.44	2.56	5	3
1:A:76:TYR:OH	1:A:79:ARG:C	0.44	2.56	6	1
1:A:46:GLN:O	1:A:47:GLU:C	0.44	2.56	24	6
1:A:16:LYS:HD2	1:A:23:ASP:OD1	0.44	2.13	10	1
1:A:14:TYR:N	1:A:24:LEU:HB2	0.44	2.28	14	1
1:A:14:TYR:CB	1:A:24:LEU:CB	0.44	2.96	23	1
1:A:22:ILE:CG1	1:A:67:GLY:CA	0.44	2.95	28	1
1:A:21:ASP:OD1	1:A:21:ASP:O	0.44	2.36	7	1
1:A:18:ARG:O	1:A:21:ASP:CG	0.44	2.56	14	1
1:A:8:TYR:OH	1:A:47:GLU:CD	0.44	2.56	23	1
1:A:16:LYS:CG	1:A:23:ASP:OD1	0.44	2.65	28	1
1:A:13:ASP:O	1:A:73:TYR:CD2	0.44	2.71	30	1
1:A:48:ALA:O	1:A:50:PRO:HD3	0.43	2.13	2	6
1:A:24:LEU:HD21	1:A:69:PHE:CB	0.43	2.42	5	1
1:A:30:LEU:CD1	1:A:30:LEU:N	0.43	2.81	14	1
1:A:9:ARG:HD3	1:A:29:ILE:CD1	0.43	2.43	18	1
1:A:55:TRP:CE3	1:A:68:ASP:CG	0.43	2.92	22	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:LEU:C	1:A:26:LEU:CD2	0.43	2.86	24	1
1:A:14:TYR:OH	1:A:17:GLU:HB2	0.43	2.13	1	2
1:A:48:ALA:O	1:A:76:TYR:CB	0.43	2.67	3	3
1:A:13:ASP:CB	1:A:25:HIS:HA	0.43	2.44	5	1
1:A:38:VAL:O	1:A:39:ALA:C	0.43	2.57	11	2
1:A:7:GLN:O	1:A:77:ILE:HB	0.43	2.13	17	1
1:A:58:GLY:O	1:A:66:ARG:HG3	0.43	2.13	20	1
1:A:14:TYR:HB3	1:A:24:LEU:CB	0.43	2.44	1	1
1:A:65:GLU:OE1	1:A:65:GLU:C	0.43	2.57	2	1
1:A:25:HIS:O	1:A:26:LEU:C	0.43	2.56	13	5
1:A:50:PRO:HG2	1:A:74:VAL:CG2	0.43	2.42	7	2
1:A:18:ARG:CB	1:A:21:ASP:HB3	0.43	2.43	16	1
1:A:68:ASP:OD1	1:A:68:ASP:C	0.43	2.56	19	3
1:A:17:GLU:O	1:A:17:GLU:OE1	0.43	2.36	27	1
1:A:33:ASN:OD1	1:A:33:ASN:C	0.43	2.56	28	1
1:A:50:PRO:O	1:A:52:GLU:N	0.43	2.51	2	3
1:A:6:TYR:OH	1:A:47:GLU:OE1	0.43	2.35	7	2
1:A:37:LEU:CD2	1:A:42:PHE:CG	0.43	3.02	10	1
1:A:22:ILE:HG12	1:A:68:ASP:O	0.43	2.13	13	1
1:A:28:ASP:C	1:A:28:ASP:OD1	0.43	2.57	13	1
1:A:40:LEU:O	1:A:41:GLY:C	0.43	2.56	20	1
1:A:17:GLU:O	1:A:18:ARG:O	0.43	2.36	23	1
1:A:41:GLY:O	1:A:42:PHE:C	0.43	2.54	11	2
1:A:57:ASN:OD1	1:A:68:ASP:CG	0.43	2.57	3	3
1:A:61:GLU:O	1:A:62:THR:C	0.43	2.56	5	2
1:A:26:LEU:HG	1:A:27:GLY:N	0.43	2.27	28	5
1:A:21:ASP:HA	1:A:68:ASP:OD1	0.43	2.13	22	2
1:A:32:VAL:HG22	1:A:58:GLY:N	0.43	2.29	14	2
1:A:50:PRO:HB2	1:A:71:GLY:O	0.43	2.13	17	7
1:A:24:LEU:HD11	1:A:30:LEU:CD2	0.43	2.30	6	1
1:A:37:LEU:CD2	1:A:47:GLU:HB3	0.43	2.41	7	1
1:A:10:ALA:HB3	1:A:28:ASP:N	0.43	2.28	8	1
1:A:48:ALA:CA	1:A:76:TYR:CD2	0.43	3.01	10	1
1:A:24:LEU:HA	1:A:60:ASN:OD1	0.43	2.14	12	1
1:A:18:ARG:HG3	1:A:55:TRP:CH2	0.43	2.48	23	1
1:A:9:ARG:CB	1:A:75:GLU:HG2	0.43	2.44	29	1
1:A:48:ALA:HA	1:A:76:TYR:CB	0.43	2.43	9	1
1:A:13:ASP:O	1:A:14:TYR:HB2	0.43	2.13	29	3
1:A:48:ALA:HA	1:A:76:TYR:CE1	0.43	2.49	11	1
1:A:14:TYR:OH	1:A:17:GLU:OE2	0.43	2.36	14	1
1:A:30:LEU:HG	1:A:60:ASN:OD1	0.43	2.14	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:ALA:CB	1:A:76:TYR:CE2	0.43	3.01	22	1
1:A:29:ILE:CG2	1:A:61:GLU:OE1	0.43	2.67	27	1
1:A:37:LEU:CB	1:A:47:GLU:OE2	0.43	2.67	1	1
1:A:11:LEU:HD22	1:A:74:VAL:CA	0.43	2.43	3	1
1:A:49:ARG:CG	1:A:49:ARG:O	0.43	2.65	9	1
1:A:33:ASN:OD1	1:A:33:ASN:N	0.43	2.52	11	1
1:A:7:GLN:NE2	1:A:31:THR:CG2	0.43	2.82	28	1
1:A:71:GLY:HA2	1:A:74:VAL:CG2	0.43	2.44	29	1
1:A:16:LYS:C	1:A:21:ASP:OD2	0.43	2.57	2	3
1:A:14:TYR:OH	1:A:17:GLU:HB3	0.43	2.13	6	1
1:A:51:GLU:CG	1:A:72:THR:HA	0.43	2.44	11	2
1:A:61:GLU:O	1:A:61:GLU:CD	0.43	2.57	12	1
1:A:22:ILE:CG2	1:A:67:GLY:N	0.43	2.82	20	2
1:A:78:GLY:C	1:A:79:ARG:HG2	0.43	2.34	17	1
1:A:32:VAL:O	1:A:33:ASN:C	0.43	2.57	23	2
1:A:28:ASP:OD2	1:A:62:THR:HB	0.42	2.14	30	3
1:A:28:ASP:OD1	1:A:62:THR:HB	0.42	2.14	9	4
1:A:7:GLN:O	1:A:77:ILE:N	0.42	2.52	11	1
1:A:49:ARG:O	1:A:53:ILE:CG1	0.42	2.67	11	1
1:A:63:THR:CG2	1:A:65:GLU:HG3	0.42	2.44	14	1
1:A:75:GLU:O	1:A:77:ILE:HG12	0.42	2.14	25	2
1:A:61:GLU:O	1:A:61:GLU:OE2	0.42	2.37	19	1
1:A:32:VAL:HA	1:A:58:GLY:CA	0.42	2.44	20	1
1:A:50:PRO:O	1:A:53:ILE:N	0.42	2.52	2	1
1:A:25:HIS:CE1	1:A:63:THR:HG1	0.42	2.31	5	1
1:A:29:ILE:O	1:A:30:LEU:HD22	0.42	2.14	5	1
1:A:30:LEU:CD1	1:A:74:VAL:HG12	0.42	2.44	8	1
1:A:30:LEU:HD23	1:A:69:PHE:CE1	0.42	2.43	14	1
1:A:7:GLN:HG3	1:A:31:THR:CG2	0.42	2.44	16	1
1:A:33:ASN:O	1:A:36:SER:OG	0.42	2.37	21	1
1:A:37:LEU:CD2	1:A:47:GLU:HG3	0.42	2.36	27	1
1:A:16:LYS:HD3	1:A:23:ASP:OD1	0.42	2.14	28	1
1:A:37:LEU:O	1:A:37:LEU:HD23	0.42	2.13	29	1
1:A:66:ARG:CZ	1:A:66:ARG:CB	0.42	2.96	2	1
1:A:7:GLN:OE1	1:A:31:THR:HG23	0.42	2.14	4	2
1:A:48:ALA:C	1:A:50:PRO:HD3	0.42	2.35	23	2
1:A:43:SER:HB2	1:A:46:GLN:HB2	0.42	1.91	20	1
1:A:50:PRO:CG	1:A:74:VAL:CG2	0.42	2.96	16	2
1:A:30:LEU:CD2	1:A:69:PHE:CZ	0.42	3.00	18	1
1:A:6:TYR:CE1	1:A:34:LYS:CB	0.42	3.02	30	1
1:A:60:ASN:HB2	1:A:65:GLU:O	0.42	2.13	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:TYR:OH	1:A:47:GLU:CD	0.42	2.57	9	1
1:A:33:ASN:OD1	1:A:36:SER:HB3	0.42	2.14	9	1
1:A:7:GLN:O	1:A:77:ILE:HD12	0.42	2.15	14	1
1:A:40:LEU:N	1:A:40:LEU:HD13	0.42	2.28	24	2
1:A:16:LYS:O	1:A:16:LYS:HG2	0.42	2.13	20	1
1:A:16:LYS:HB3	1:A:23:ASP:OD1	0.42	2.15	23	1
1:A:65:GLU:HG3	1:A:65:GLU:O	0.42	2.15	26	1
1:A:75:GLU:HG3	1:A:75:GLU:O	0.42	2.14	6	1
1:A:51:GLU:HA	1:A:72:THR:HA	0.42	1.91	11	1
1:A:22:ILE:C	1:A:22:ILE:CD1	0.42	2.88	18	1
1:A:9:ARG:N	1:A:77:ILE:HD11	0.42	2.29	19	1
1:A:46:GLN:HG2	1:A:53:ILE:HD11	0.42	1.91	24	1
1:A:37:LEU:HD23	1:A:47:GLU:OE1	0.42	2.14	2	1
1:A:25:HIS:O	1:A:28:ASP:CG	0.42	2.57	8	1
1:A:6:TYR:HB3	1:A:76:TYR:OH	0.42	2.14	11	1
1:A:58:GLY:O	1:A:66:ARG:CG	0.42	2.68	15	1
1:A:14:TYR:HB2	1:A:24:LEU:HB2	0.42	1.92	23	1
1:A:9:ARG:HB3	1:A:77:ILE:HD11	0.42	1.92	24	1
1:A:12:TYR:O	1:A:26:LEU:N	0.42	2.53	13	1
1:A:17:GLU:OE1	1:A:17:GLU:C	0.42	2.58	16	1
1:A:37:LEU:O	1:A:40:LEU:HD23	0.42	2.15	16	1
1:A:49:ARG:CG	1:A:52:GLU:HB2	0.42	2.45	22	2
1:A:23:ASP:OD1	1:A:23:ASP:N	0.42	2.52	23	1
1:A:53:ILE:HD12	1:A:56:LEU:CD2	0.42	2.43	26	1
1:A:77:ILE:HD12	1:A:77:ILE:N	0.42	2.29	1	1
1:A:8:TYR:HB3	1:A:76:TYR:HA	0.42	1.91	15	5
1:A:25:HIS:HB2	1:A:28:ASP:OD2	0.42	2.14	8	2
1:A:19:GLU:HG2	1:A:19:GLU:O	0.42	2.14	11	1
1:A:16:LYS:HB3	1:A:23:ASP:N	0.42	2.30	28	1
1:A:51:GLU:HG2	1:A:52:GLU:N	0.42	2.29	30	1
1:A:20:GLU:O	1:A:68:ASP:HB2	0.42	2.15	16	2
1:A:22:ILE:HG22	1:A:65:GLU:OE1	0.42	2.15	15	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:60:ASN:ND2	0.42	2.29	16	1
1:A:50:PRO:HB3	1:A:74:VAL:HG23	0.42	1.91	23	1
1:A:70:PRO:HG2	1:A:73:TYR:CE2	0.42	2.50	29	1
1:A:12:TYR:OH	1:A:72:THR:O	0.41	2.33	3	1
1:A:56:LEU:O	1:A:68:ASP:HA	0.41	2.16	21	1
1:A:49:ARG:NE	1:A:52:GLU:HB3	0.41	2.30	24	1
1:A:11:LEU:CD2	1:A:75:GLU:HB3	0.41	2.45	13	1
1:A:49:ARG:HG2	1:A:52:GLU:HB2	0.41	1.92	18	1
1:A:6:TYR:N	1:A:6:TYR:CD1	0.41	2.87	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:LEU:CD1	1:A:42:PHE:CE1	0.41	3.04	17	1
1:A:14:TYR:CG	1:A:15:LYS:N	0.41	2.89	18	1
1:A:9:ARG:HD3	1:A:77:ILE:CD1	0.41	2.45	20	1
1:A:16:LYS:HG2	1:A:21:ASP:OD1	0.41	2.16	6	1
1:A:11:LEU:HD23	1:A:11:LEU:HA	0.41	1.72	8	3
1:A:57:ASN:HA	1:A:67:GLY:O	0.41	2.15	14	3
1:A:10:ALA:HB1	1:A:24:LEU:HD12	0.41	1.93	5	1
1:A:12:TYR:HB2	1:A:73:TYR:CB	0.41	2.46	9	1
1:A:35:GLY:O	1:A:37:LEU:N	0.41	2.53	9	1
1:A:49:ARG:HG3	1:A:51:GLU:OE2	0.41	2.15	10	1
1:A:6:TYR:CE2	1:A:47:GLU:CG	0.41	3.04	17	1
1:A:22:ILE:HD12	1:A:23:ASP:N	0.41	2.29	24	1
1:A:37:LEU:HD21	1:A:47:GLU:CA	0.41	2.43	3	1
1:A:16:LYS:HA	1:A:21:ASP:OD2	0.41	2.15	14	1
1:A:44:ASP:O	1:A:44:ASP:CG	0.41	2.57	23	1
1:A:9:ARG:O	1:A:10:ALA:C	0.41	2.58	24	1
1:A:42:PHE:HB3	1:A:46:GLN:CB	0.41	2.44	2	1
1:A:57:ASN:OD1	1:A:68:ASP:OD2	0.41	2.38	3	1
1:A:56:LEU:HD12	1:A:71:GLY:CA	0.41	2.46	8	1
1:A:32:VAL:CG2	1:A:58:GLY:HA2	0.41	2.42	27	1
1:A:37:LEU:O	1:A:37:LEU:CD1	0.41	2.58	27	1
1:A:55:TRP:CZ3	1:A:70:PRO:HD3	0.41	2.51	29	1
1:A:78:GLY:O	1:A:79:ARG:O	0.41	2.38	4	1
1:A:47:GLU:OE1	1:A:47:GLU:HA	0.41	2.16	5	1
1:A:57:ASN:HB2	1:A:68:ASP:OD1	0.41	2.16	11	1
1:A:10:ALA:HB2	1:A:28:ASP:HB3	0.41	1.93	24	1
1:A:8:TYR:HB3	1:A:76:TYR:CA	0.41	2.46	2	1
1:A:60:ASN:O	1:A:61:GLU:C	0.41	2.59	23	2
1:A:76:TYR:O	1:A:77:ILE:HG13	0.41	2.15	6	1
1:A:28:ASP:HA	1:A:62:THR:OG1	0.41	2.16	16	3
1:A:37:LEU:HD22	1:A:47:GLU:HG3	0.41	1.93	10	1
1:A:59:TYR:CD1	1:A:66:ARG:CZ	0.41	3.04	12	1
1:A:9:ARG:HB2	1:A:77:ILE:CG1	0.41	2.46	13	1
1:A:37:LEU:CD1	1:A:47:GLU:HG2	0.41	2.42	20	1
1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CD2	0.41	2.79	21	1
1:A:37:LEU:HB2	1:A:47:GLU:HG2	0.41	1.93	21	1
1:A:48:ALA:HB1	1:A:76:TYR:CE2	0.41	2.50	22	1
1:A:51:GLU:O	1:A:51:GLU:HG3	0.41	2.15	23	1
1:A:55:TRP:CZ3	1:A:69:PHE:N	0.41	2.89	23	1
1:A:29:ILE:HB	1:A:61:GLU:OE1	0.41	2.16	27	1
1:A:22:ILE:HD11	1:A:68:ASP:O	0.41	2.15	28	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:GLN:HE21	1:A:31:THR:HG23	0.41	1.75	1	1
1:A:48:ALA:HB1	1:A:76:TYR:HD2	0.41	1.76	10	1
1:A:11:LEU:CG	1:A:75:GLU:CD	0.41	2.89	27	1
1:A:56:LEU:HD13	1:A:69:PHE:CE1	0.41	2.49	27	1
1:A:50:PRO:HA	1:A:53:ILE:CD1	0.40	2.46	1	1
1:A:42:PHE:HB3	1:A:47:GLU:OE2	0.40	2.15	3	1
1:A:37:LEU:CD2	1:A:37:LEU:C	0.40	2.89	8	1
1:A:24:LEU:O	1:A:25:HIS:CG	0.40	2.74	21	2
1:A:63:THR:HG23	1:A:65:GLU:HG3	0.40	1.92	14	1
1:A:42:PHE:CE2	1:A:53:ILE:HD13	0.40	2.51	20	1
1:A:9:ARG:HG2	1:A:75:GLU:OE2	0.40	2.16	24	1
1:A:33:ASN:HB2	1:A:36:SER:OG	0.40	2.16	30	1
1:A:37:LEU:HB3	1:A:47:GLU:OE1	0.40	2.16	2	1
1:A:66:ARG:CZ	1:A:66:ARG:HB3	0.40	2.45	2	1
1:A:8:TYR:HB2	1:A:74:VAL:HB	0.40	1.92	3	1
1:A:10:ALA:O	1:A:26:LEU:HA	0.40	2.17	3	1
1:A:32:VAL:HG23	1:A:58:GLY:HA3	0.40	1.92	15	1
1:A:15:LYS:O	1:A:16:LYS:HG2	0.40	2.16	17	1
1:A:16:LYS:HG2	1:A:16:LYS:O	0.40	2.16	18	1
1:A:21:ASP:HB3	1:A:68:ASP:OD1	0.40	2.16	19	1
1:A:47:GLU:C	1:A:47:GLU:OE1	0.40	2.59	26	1
1:A:66:ARG:CB	1:A:66:ARG:NH1	0.40	2.85	2	1
1:A:16:LYS:CE	1:A:19:GLU:HA	0.40	2.46	12	1
1:A:24:LEU:HD12	1:A:60:ASN:ND2	0.40	2.31	13	1
1:A:33:ASN:HB2	1:A:36:SER:HB3	0.40	1.92	29	1
1:A:14:TYR:HB3	1:A:24:LEU:HB2	0.40	1.92	1	1
1:A:20:GLU:OE1	1:A:68:ASP:OD1	0.40	2.39	5	1
1:A:14:TYR:O	1:A:23:ASP:HA	0.40	2.16	11	1
1:A:38:VAL:C	1:A:40:LEU:N	0.40	2.74	11	1
1:A:51:GLU:CA	1:A:72:THR:HA	0.40	2.46	11	1
1:A:74:VAL:HG23	1:A:75:GLU:N	0.40	2.31	13	1
1:A:5:GLY:N	1:A:33:ASN:HA	0.40	2.31	23	1
1:A:78:GLY:O	1:A:79:ARG:HG2	0.40	2.16	23	1
1:A:60:ASN:OD1	1:A:65:GLU:O	0.40	2.38	26	1
1:A:37:LEU:HD12	1:A:40:LEU:CD1	0.40	2.46	27	1
1:A:22:ILE:HG12	1:A:67:GLY:CA	0.40	2.46	4	1
1:A:76:TYR:HH	1:A:79:ARG:C	0.40	2.18	6	1
1:A:63:THR:HG23	1:A:65:GLU:HB2	0.40	1.92	8	1
1:A:36:SER:OG	1:A:57:ASN:HB3	0.40	2.16	9	1
1:A:53:ILE:HG21	1:A:56:LEU:HG	0.40	1.91	11	1
1:A:9:ARG:O	1:A:75:GLU:CG	0.40	2.70	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:TYR:CZ	1:A:47:GLU:OE1	0.40	2.75	16	1
1:A:17:GLU:OE1	1:A:17:GLU:HA	0.40	2.16	17	1
1:A:53:ILE:HD13	1:A:56:LEU:HD23	0.40	1.92	19	1
1:A:14:TYR:N	1:A:24:LEU:HD23	0.40	2.32	22	1
1:A:11:LEU:HG	1:A:75:GLU:OE2	0.40	2.16	30	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	74/79 (94%)	60±3 (81±4%)	11±3 (15±3%)	3±1 (4±2%)	6	34
All	All	2220/2370 (94%)	1795 (81%)	342 (15%)	83 (4%)	6	34

All 18 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	42	PHE	19
1	A	16	LYS	14
1	A	33	ASN	14
1	A	44	ASP	9
1	A	14	TYR	4
1	A	17	GLU	4
1	A	10	ALA	3
1	A	77	ILE	3
1	A	62	THR	2
1	A	76	TYR	2
1	A	53	ILE	2
1	A	35	GLY	1
1	A	50	PRO	1
1	A	45	GLY	1
1	A	5	GLY	1
1	A	18	ARG	1
1	A	34	LYS	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	20	GLU	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	61/64 (95%)	43±3 (71±4%)	18±3 (29±4%)	1 18
All	All	1830/1920 (95%)	1298 (71%)	532 (29%)	1 18

All 52 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	8	TYR	30
1	A	31	THR	30
1	A	56	LEU	24
1	A	25	HIS	22
1	A	34	LYS	20
1	A	68	ASP	19
1	A	43	SER	17
1	A	15	LYS	16
1	A	21	ASP	16
1	A	24	LEU	16
1	A	40	LEU	16
1	A	79	ARG	16
1	A	17	GLU	16
1	A	18	ARG	15
1	A	9	ARG	15
1	A	22	ILE	14
1	A	49	ARG	14
1	A	37	LEU	12
1	A	57	ASN	12
1	A	51	GLU	11
1	A	77	ILE	11
1	A	63	THR	11
1	A	23	ASP	11
1	A	19	GLU	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	20	GLU	10
1	A	26	LEU	10
1	A	36	SER	9
1	A	47	GLU	9
1	A	46	GLN	9
1	A	16	LYS	9
1	A	66	ARG	8
1	A	61	GLU	7
1	A	13	ASP	7
1	A	7	GLN	6
1	A	52	GLU	6
1	A	65	GLU	6
1	A	60	ASN	6
1	A	11	LEU	5
1	A	28	ASP	5
1	A	33	ASN	5
1	A	12	TYR	3
1	A	53	ILE	3
1	A	74	VAL	2
1	A	42	PHE	2
1	A	14	TYR	2
1	A	76	TYR	2
1	A	44	ASP	2
1	A	69	PHE	1
1	A	72	THR	1
1	A	30	LEU	1
1	A	59	TYR	1
1	A	50	PRO	1

6.3.3 RNA (i)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates (i)

There are no monosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry (i)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers (i)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues (i)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation (i)

No chemical shift data were provided