



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Oct 17, 2021 – 12:52 AM EDT

PDB ID : 1Q8K
Title : Solution structure of alpha subunit of human eIF2
Authors : Ito, T.; Marintchev, A.; Wagner, G.
Deposited on : 2003-08-21

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

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

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

MolProbity : 4.02b-467
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
ShiftChecker : 2.23.2
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.23.2

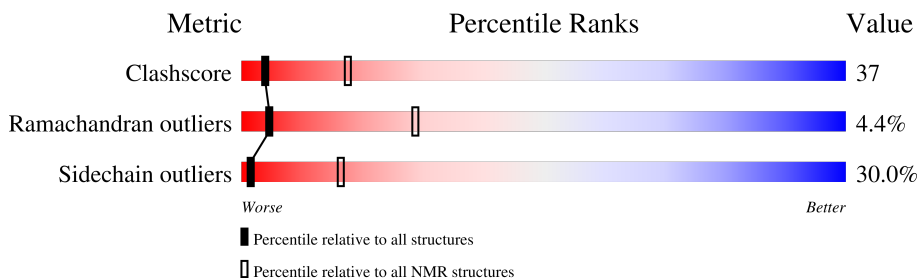
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	308	

2 Ensemble composition and analysis i

This entry contains 15 models. Model 7 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:11-A:35, A:42-A:183 (167)	0.83	7
2	A:187-A:198, A:206-A:219, A:223-A:228, A:233-A:276 (76)	0.27	6
3	A:278-A:292 (15)	1.30	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 2 clusters. No single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 4874 atoms, of which 2449 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Eukaryotic translation initiation factor 2 subunit 1.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	300	4874	1515	2449	427	469	14	0

There are 12 discrepancies between the modelled and reference sequences:

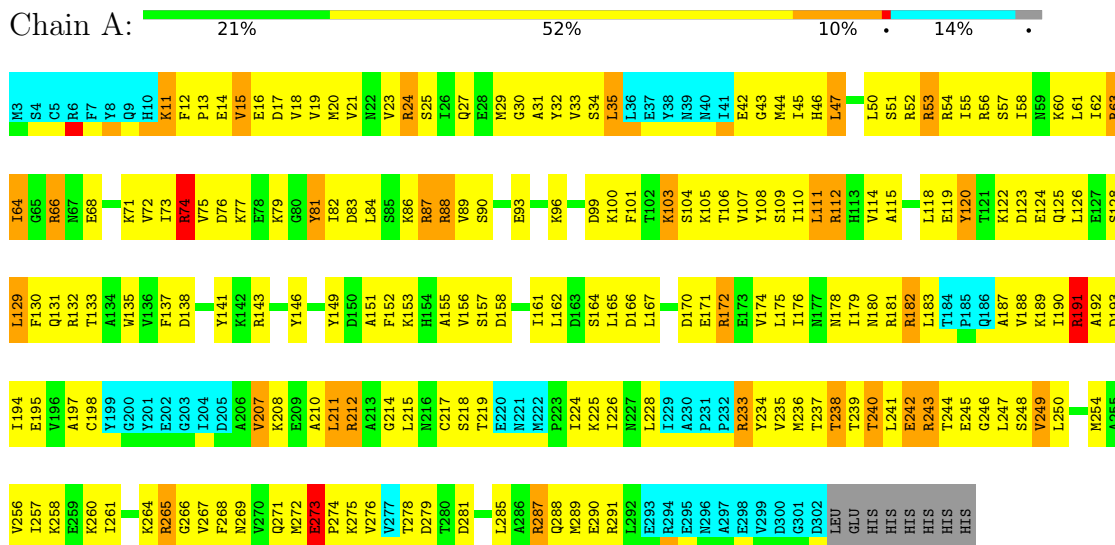
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	3	MET	-	cloning artifact	UNP P05198
A	27	GLN	ALA	engineered mutation	UNP P05198
A	46	HIS	LEU	engineered mutation	UNP P05198
A	71	LYS	VAL	engineered mutation	UNP P05198
A	303	LEU	-	cloning artifact	UNP P05198
A	304	GLU	-	cloning artifact	UNP P05198
A	305	HIS	-	expression tag	UNP P05198
A	306	HIS	-	expression tag	UNP P05198
A	307	HIS	-	expression tag	UNP P05198
A	308	HIS	-	expression tag	UNP P05198
A	309	HIS	-	expression tag	UNP P05198
A	310	HIS	-	expression tag	UNP P05198

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: Eukaryotic translation initiation factor 2 subunit 1

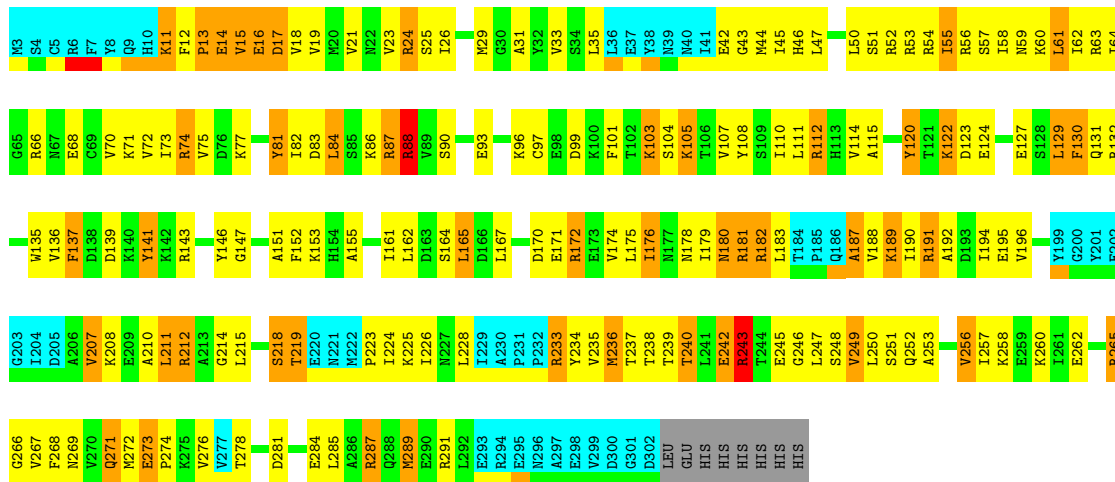




4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 2 subunit 1

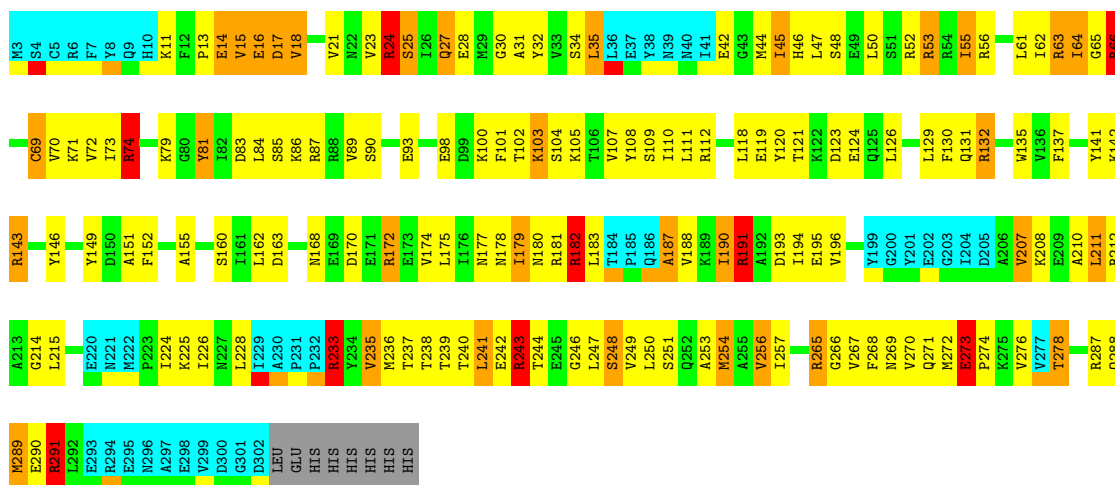
Chain A: 28% 40% 15% 14%



4.2.5 Score per residue for model 5

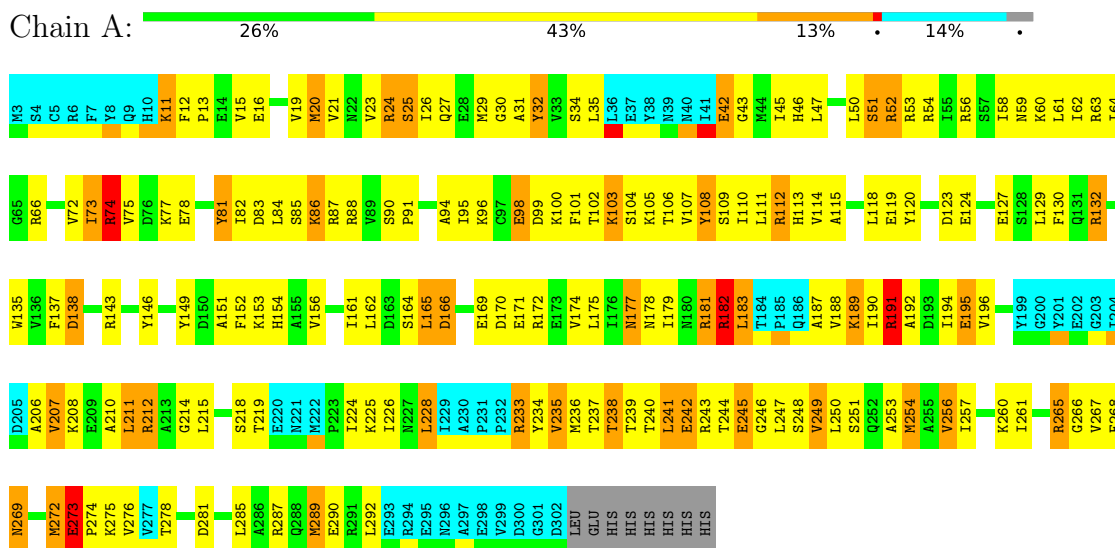
- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 2 subunit 1

Chain A: 33% 38% 10% 14%



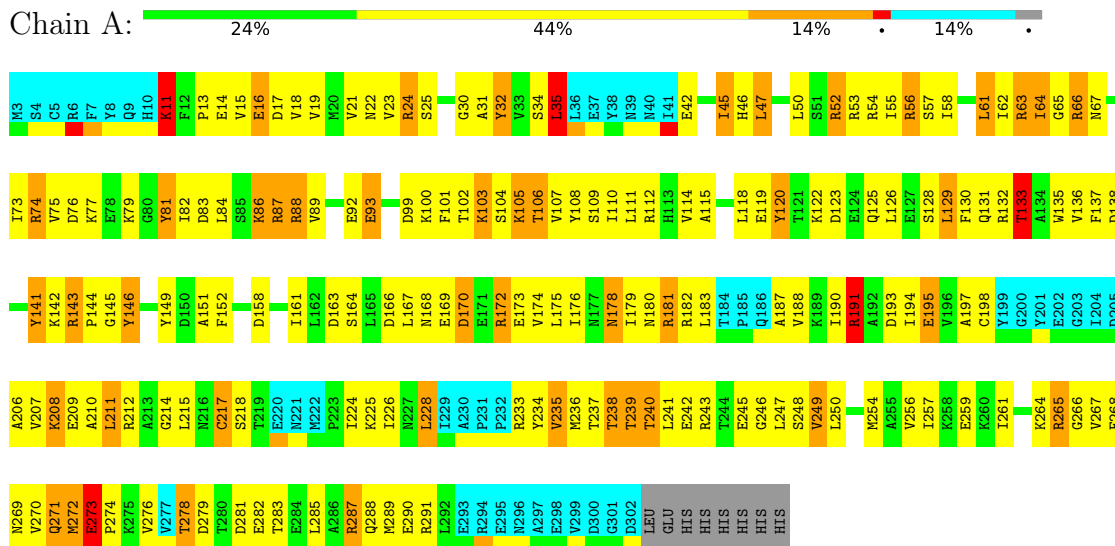
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 2 subunit 1



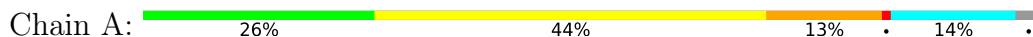
4.2.7 Score per residue for model 7 (medoid)

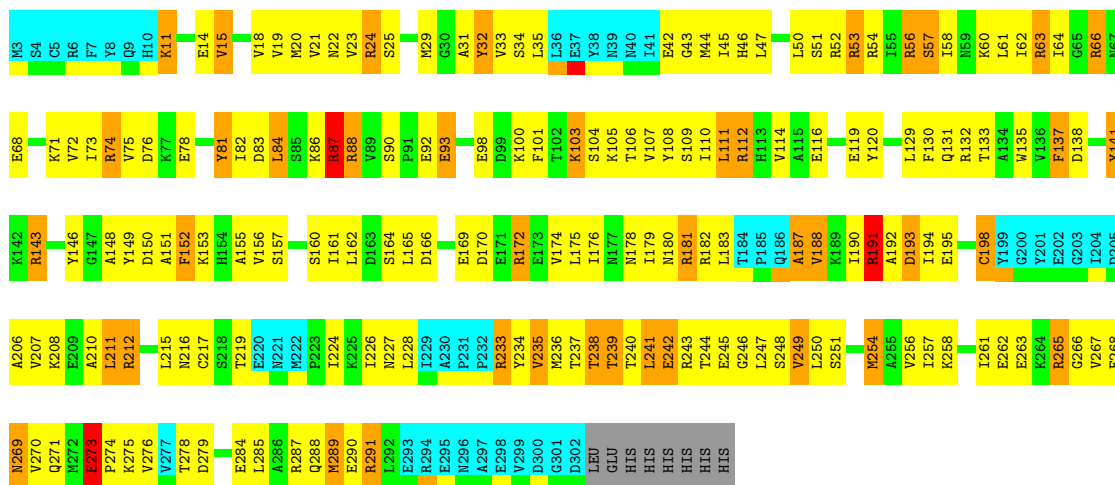
- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 2 subunit 1



4.2.8 Score per residue for model 8

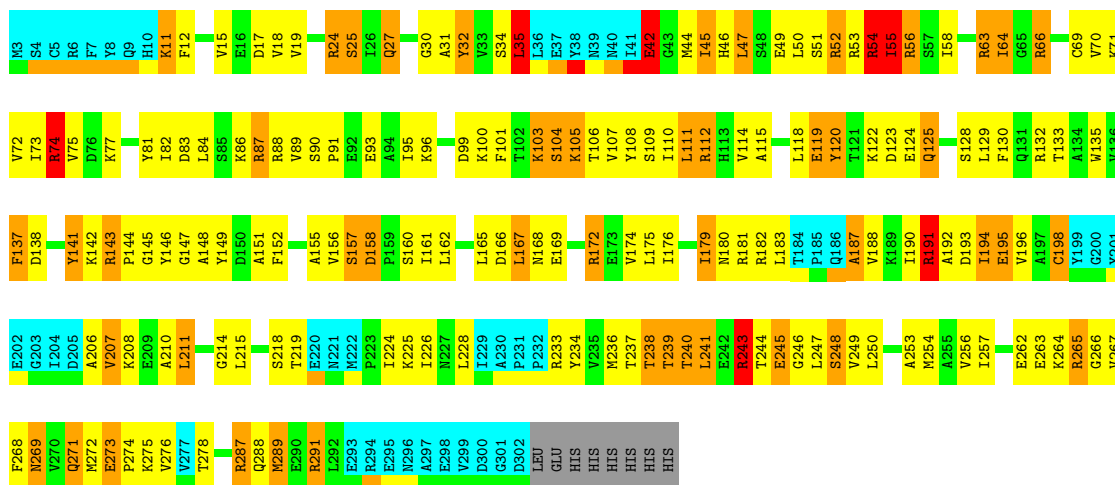
- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 2 subunit 1





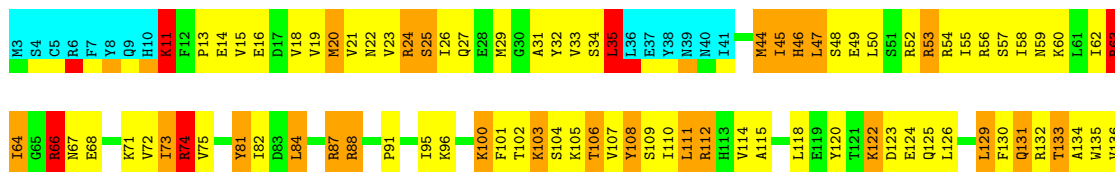
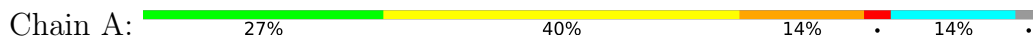
4.2.9 Score per residue for model 9

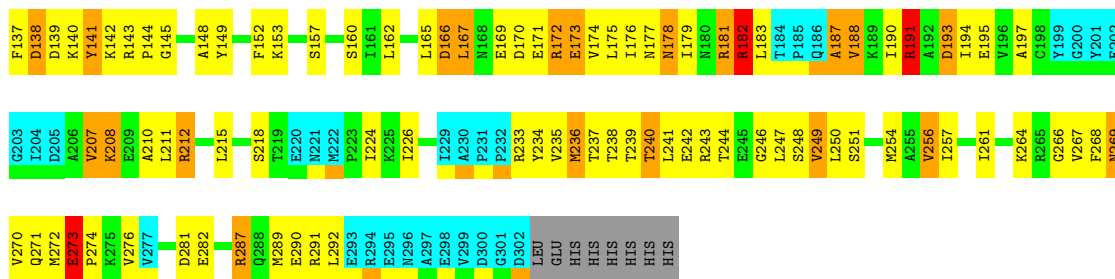
- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 2 subunit 1



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 2 subunit 1

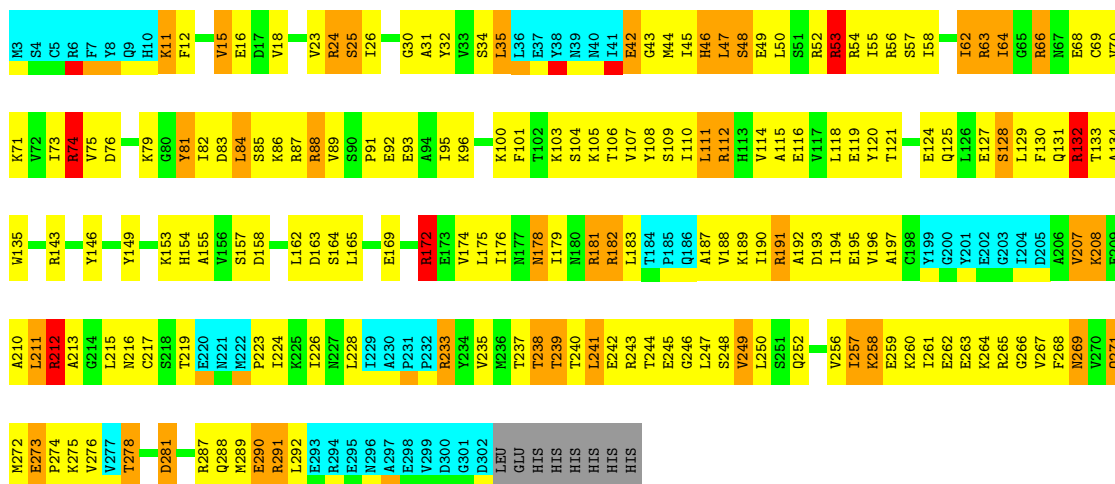




4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 2 subunit 1

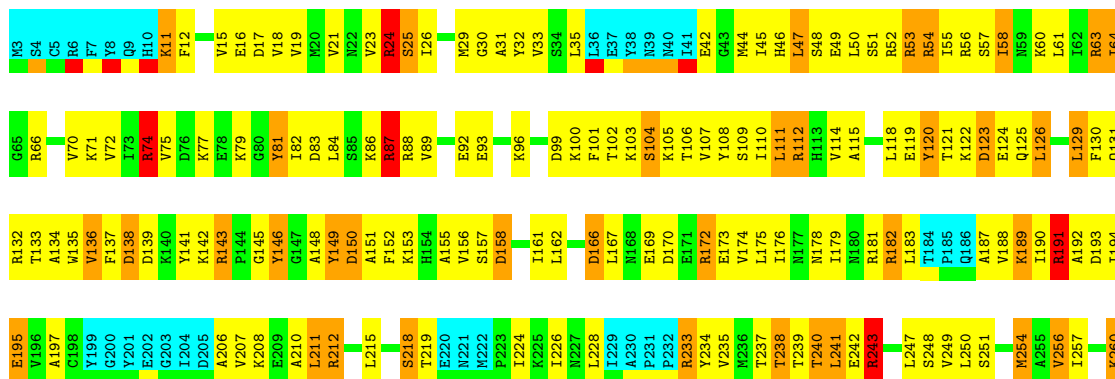
Chain A: 26% 44% 13% 14%



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 2 subunit 1

Chain A: 23% 45% 14% 14%



5 Refinement protocol and experimental data overview

Of the 51 calculated structures, 15 were deposited, based on the following criterion: ?.

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

Software name	Classification	Version
NIH-XPLOR1	refinement	2.1
NIH-XPLOR1	structure solution	2.1

No chemical shift data was provided.

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	22.1±0.7
All	All	0	332

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	24	ARG	Sidechain	15
1	A	52	ARG	Sidechain	15
1	A	53	ARG	Sidechain	15
1	A	56	ARG	Sidechain	15
1	A	63	ARG	Sidechain	15
1	A	112	ARG	Sidechain	15
1	A	172	ARG	Sidechain	15
1	A	181	ARG	Sidechain	15
1	A	182	ARG	Sidechain	15
1	A	191	ARG	Sidechain	15
1	A	243	ARG	Sidechain	15
1	A	287	ARG	Sidechain	15
1	A	54	ARG	Sidechain	14
1	A	66	ARG	Sidechain	14
1	A	74	ARG	Sidechain	14
1	A	87	ARG	Sidechain	14
1	A	88	ARG	Sidechain	14
1	A	132	ARG	Sidechain	14
1	A	143	ARG	Sidechain	14
1	A	212	ARG	Sidechain	14
1	A	291	ARG	Sidechain	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	233	ARG	Sidechain	13
1	A	265	ARG	Sidechain	13

6.2 Too-close contacts (i)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	2082	2144	2144	158±12
All	All	31230	32160	32160	2374

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 37.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:190:ILE:HG21	1:A:247:LEU:HD21	1.10	1.18	7	2
1:A:190:ILE:CG2	1:A:247:LEU:HD21	1.02	1.83	7	2
1:A:194:ILE:HD11	1:A:196:VAL:HG23	0.99	1.31	9	1
1:A:247:LEU:HD11	1:A:276:VAL:HG13	0.97	1.36	14	9
1:A:31:ALA:HB3	1:A:45:ILE:HG23	0.93	1.40	10	6
1:A:190:ILE:HG21	1:A:247:LEU:CD2	0.92	1.94	7	2
1:A:228:LEU:HD13	1:A:234:TYR:CE2	0.91	2.00	12	4
1:A:187:ALA:HB2	1:A:241:LEU:HD22	0.89	1.43	11	8
1:A:247:LEU:HD11	1:A:276:VAL:HG23	0.89	1.41	1	3
1:A:47:LEU:HD23	1:A:55:ILE:HD11	0.89	1.43	1	1
1:A:188:VAL:HG12	1:A:240:THR:O	0.88	1.68	5	8
1:A:126:LEU:HD21	1:A:130:PHE:CZ	0.88	2.03	10	1
1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:HIS:N	0.87	1.83	7	3
1:A:247:LEU:HD22	1:A:274:PRO:CB	0.86	1.99	5	15
1:A:45:ILE:HG22	1:A:84:LEU:HB2	0.86	1.45	11	5
1:A:45:ILE:HD12	1:A:50:LEU:HD22	0.86	1.47	7	1
1:A:215:LEU:HD21	1:A:226:ILE:HG22	0.86	1.46	13	5
1:A:31:ALA:O	1:A:45:ILE:HG22	0.85	1.71	7	6
1:A:31:ALA:HB3	1:A:45:ILE:CG1	0.85	1.99	13	9
1:A:31:ALA:HB2	1:A:47:LEU:HD21	0.85	1.49	15	1
1:A:45:ILE:HD13	1:A:50:LEU:HD22	0.84	1.48	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:156:VAL:HG12	1:A:179:ILE:CG2	0.84	2.03	6	1
1:A:131:GLN:O	1:A:136:VAL:HG23	0.84	1.73	12	6
1:A:115:ALA:HB1	1:A:120:TYR:CB	0.83	2.04	14	10
1:A:47:LEU:HD23	1:A:48:SER:N	0.83	1.88	11	1
1:A:115:ALA:HB1	1:A:120:TYR:HB3	0.83	1.49	9	7
1:A:47:LEU:HD23	1:A:50:LEU:HD21	0.83	1.51	15	2
1:A:98:GLU:O	1:A:102:THR:HG23	0.83	1.74	5	1
1:A:15:VAL:HG13	1:A:73:ILE:O	0.82	1.73	8	9
1:A:107:VAL:HG23	1:A:152:PHE:CD2	0.82	2.09	8	7
1:A:103:LYS:O	1:A:107:VAL:HG12	0.82	1.75	6	15
1:A:31:ALA:HB3	1:A:45:ILE:CG2	0.82	2.05	10	6
1:A:191:ARG:CB	1:A:237:THR:HG22	0.81	2.04	10	11
1:A:31:ALA:HB3	1:A:45:ILE:CD1	0.81	2.06	14	6
1:A:210:ALA:HB1	1:A:257:ILE:HG23	0.81	1.52	6	13
1:A:31:ALA:HB3	1:A:45:ILE:HD11	0.81	1.53	14	4
1:A:190:ILE:HG23	1:A:247:LEU:HD23	0.81	1.50	15	8
1:A:45:ILE:HG22	1:A:84:LEU:HB3	0.81	1.53	1	4
1:A:120:TYR:CE2	1:A:129:LEU:HD23	0.81	2.11	14	2
1:A:228:LEU:HD12	1:A:234:TYR:CE2	0.78	2.13	1	3
1:A:179:ILE:HG23	1:A:183:LEU:HD12	0.78	1.55	1	3
1:A:190:ILE:CG2	1:A:247:LEU:HD23	0.78	2.07	14	12
1:A:110:ILE:HD11	1:A:182:ARG:CB	0.78	2.09	2	1
1:A:247:LEU:HD22	1:A:274:PRO:HB2	0.78	1.53	7	15
1:A:126:LEU:HD21	1:A:130:PHE:CE2	0.78	2.13	10	1
1:A:253:ALA:O	1:A:257:ILE:HD12	0.78	1.79	1	4
1:A:26:ILE:CG2	1:A:58:ILE:HD12	0.78	2.08	4	1
1:A:238:THR:CG2	1:A:250:LEU:HD11	0.78	2.08	5	2
1:A:165:LEU:HD22	1:A:167:LEU:HD11	0.78	1.56	4	1
1:A:17:ASP:O	1:A:18:VAL:HG23	0.77	1.78	5	1
1:A:211:LEU:O	1:A:215:LEU:HD12	0.77	1.78	8	8
1:A:21:VAL:HG23	1:A:35:LEU:HD12	0.77	1.55	7	1
1:A:45:ILE:HD11	1:A:50:LEU:HD11	0.77	1.57	3	2
1:A:111:LEU:HD23	1:A:129:LEU:HD12	0.77	1.57	3	4
1:A:243:ARG:HA	1:A:276:VAL:HG11	0.77	1.57	4	1
1:A:179:ILE:O	1:A:183:LEU:HD12	0.77	1.80	8	5
1:A:190:ILE:CG2	1:A:250:LEU:HD11	0.76	2.10	4	4
1:A:238:THR:CG2	1:A:250:LEU:HD21	0.76	2.10	8	8
1:A:45:ILE:HG22	1:A:84:LEU:CB	0.76	2.11	8	7
1:A:211:LEU:HD13	1:A:226:ILE:HG22	0.76	1.56	2	2
1:A:190:ILE:HG23	1:A:247:LEU:CD2	0.76	2.10	15	13
1:A:194:ILE:HD11	1:A:226:ILE:HD11	0.75	1.58	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:224:ILE:HG23	1:A:238:THR:HB	0.75	1.58	10	11
1:A:70:VAL:HG21	1:A:84:LEU:HD23	0.75	1.57	4	1
1:A:45:ILE:HD11	1:A:50:LEU:CD2	0.75	2.11	5	2
1:A:47:LEU:HA	1:A:50:LEU:HD22	0.75	1.57	11	2
1:A:211:LEU:HD13	1:A:226:ILE:CG2	0.75	2.12	2	2
1:A:50:LEU:HD12	1:A:86:LYS:HG2	0.75	1.58	13	1
1:A:111:LEU:CD1	1:A:134:ALA:HB2	0.75	2.11	14	4
1:A:72:VAL:HG21	1:A:82:ILE:HG22	0.75	1.58	4	1
1:A:108:TYR:CD2	1:A:130:PHE:CE1	0.74	2.75	14	6
1:A:81:TYR:O	1:A:82:ILE:HD13	0.74	1.82	15	1
1:A:118:LEU:HD21	1:A:174:VAL:HG21	0.74	1.57	7	4
1:A:47:LEU:HD21	1:A:58:ILE:CD1	0.74	2.12	6	2
1:A:111:LEU:CD2	1:A:129:LEU:HD12	0.73	2.13	15	8
1:A:247:LEU:CD1	1:A:276:VAL:HG23	0.73	2.12	1	1
1:A:243:ARG:CB	1:A:276:VAL:HG21	0.73	2.13	15	3
1:A:206:ALA:HB2	1:A:264:LYS:HD2	0.73	1.61	9	1
1:A:247:LEU:HD11	1:A:276:VAL:CG2	0.73	2.13	9	1
1:A:75:VAL:CG2	1:A:82:ILE:HG23	0.73	2.13	4	1
1:A:190:ILE:CG1	1:A:276:VAL:HG12	0.73	2.14	4	5
1:A:47:LEU:HD13	1:A:58:ILE:HD13	0.72	1.60	15	1
1:A:108:TYR:CD2	1:A:130:PHE:CE2	0.72	2.78	2	6
1:A:78:GLU:O	1:A:79:LYS:CB	0.72	2.36	13	1
1:A:134:ALA:O	1:A:148:ALA:HB2	0.72	1.84	13	2
1:A:191:ARG:HB2	1:A:237:THR:HG22	0.72	1.62	13	5
1:A:188:VAL:HG13	1:A:190:ILE:CG1	0.72	2.15	7	1
1:A:21:VAL:HG21	1:A:33:VAL:HG21	0.72	1.60	8	3
1:A:190:ILE:HG21	1:A:250:LEU:CD2	0.72	2.15	14	9
1:A:211:LEU:HD13	1:A:226:ILE:HG21	0.71	1.62	12	1
1:A:45:ILE:HD11	1:A:50:LEU:CD1	0.71	2.15	3	1
1:A:247:LEU:CD1	1:A:276:VAL:HG13	0.71	2.14	14	7
1:A:61:LEU:O	1:A:62:ILE:HG23	0.71	1.85	4	2
1:A:110:ILE:O	1:A:114:VAL:HG23	0.70	1.86	14	6
1:A:110:ILE:HD11	1:A:182:ARG:HB3	0.70	1.62	2	1
1:A:70:VAL:HG23	1:A:84:LEU:HD22	0.70	1.62	9	2
1:A:188:VAL:HG13	1:A:190:ILE:HG12	0.70	1.63	5	1
1:A:246:GLY:O	1:A:249:VAL:HG22	0.70	1.85	5	10
1:A:155:ALA:HB1	1:A:162:LEU:HD22	0.70	1.61	3	2
1:A:170:ASP:O	1:A:174:VAL:HG23	0.70	1.86	10	6
1:A:45:ILE:HD13	1:A:50:LEU:HD11	0.70	1.62	12	1
1:A:155:ALA:HB1	1:A:162:LEU:HD13	0.69	1.65	5	2
1:A:47:LEU:HD11	1:A:58:ILE:CD1	0.69	2.17	12	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:PHE:CE2	1:A:82:ILE:HD11	0.69	2.23	11	1
1:A:191:ARG:HB3	1:A:237:THR:HG22	0.69	1.64	10	7
1:A:243:ARG:HB3	1:A:276:VAL:HG21	0.69	1.64	15	1
1:A:210:ALA:O	1:A:257:ILE:HG22	0.68	1.87	15	1
1:A:114:VAL:HG12	1:A:174:VAL:HG12	0.68	1.62	12	1
1:A:243:ARG:CA	1:A:276:VAL:HG11	0.68	2.19	4	1
1:A:179:ILE:CG2	1:A:183:LEU:HD12	0.68	2.18	1	1
1:A:111:LEU:HD21	1:A:129:LEU:HD12	0.68	1.65	15	3
1:A:75:VAL:HG22	1:A:82:ILE:HG23	0.68	1.64	4	1
1:A:26:ILE:HG23	1:A:58:ILE:HD12	0.68	1.65	4	1
1:A:50:LEU:HD12	1:A:50:LEU:C	0.68	2.08	15	4
1:A:190:ILE:HG12	1:A:276:VAL:HG12	0.68	1.63	8	6
1:A:266:GLY:O	1:A:267:VAL:HG23	0.68	1.88	10	14
1:A:158:ASP:O	1:A:161:ILE:HG22	0.68	1.88	7	3
1:A:238:THR:HG22	1:A:250:LEU:HD11	0.68	1.65	5	2
1:A:83:ASP:C	1:A:84:LEU:HD12	0.68	2.08	15	3
1:A:18:VAL:HG12	1:A:97:CYS:SG	0.67	2.29	4	1
1:A:23:VAL:HA	1:A:33:VAL:HG12	0.67	1.65	12	3
1:A:21:VAL:HG12	1:A:35:LEU:HG	0.67	1.63	2	1
1:A:214:GLY:HA2	1:A:253:ALA:HB1	0.67	1.65	5	6
1:A:243:ARG:HB2	1:A:276:VAL:HG21	0.67	1.66	4	2
1:A:107:VAL:HA	1:A:110:ILE:HD12	0.67	1.65	13	10
1:A:72:VAL:HG21	1:A:82:ILE:CG2	0.67	2.18	4	1
1:A:15:VAL:HG13	1:A:74:ARG:HA	0.67	1.63	12	2
1:A:33:VAL:HG21	1:A:84:LEU:HD22	0.67	1.66	1	3
1:A:236:MET:HG2	1:A:250:LEU:HD12	0.67	1.63	10	2
1:A:187:ALA:CB	1:A:241:LEU:HD22	0.67	2.19	11	5
1:A:206:ALA:HB1	1:A:260:LYS:O	0.67	1.89	12	1
1:A:31:ALA:HB3	1:A:45:ILE:HG12	0.67	1.64	13	7
1:A:47:LEU:HD11	1:A:58:ILE:HD13	0.67	1.66	12	3
1:A:211:LEU:HD13	1:A:226:ILE:HD13	0.67	1.66	7	2
1:A:137:PHE:CZ	1:A:161:ILE:HG22	0.67	2.25	4	1
1:A:26:ILE:CG2	1:A:58:ILE:HG21	0.67	2.18	6	1
1:A:238:THR:HG21	1:A:250:LEU:HD21	0.66	1.66	1	9
1:A:47:LEU:HD21	1:A:58:ILE:HB	0.66	1.67	9	1
1:A:62:ILE:HG21	1:A:68:GLU:CG	0.66	2.21	15	1
1:A:187:ALA:HB2	1:A:241:LEU:CD2	0.66	2.20	14	4
1:A:108:TYR:CD2	1:A:130:PHE:CZ	0.66	2.83	8	11
1:A:50:LEU:HD12	1:A:51:SER:N	0.66	2.05	6	2
1:A:45:ILE:HD11	1:A:50:LEU:HD21	0.66	1.66	5	1
1:A:215:LEU:HD21	1:A:226:ILE:CG2	0.66	2.20	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:VAL:HG13	1:A:89:VAL:O	0.66	1.89	15	4
1:A:72:VAL:CG2	1:A:82:ILE:HG22	0.66	2.20	4	1
1:A:103:LYS:CB	1:A:149:TYR:CG	0.66	2.78	12	1
1:A:192:ALA:HB2	1:A:274:PRO:HA	0.66	1.68	2	11
1:A:75:VAL:HG12	1:A:82:ILE:HA	0.66	1.68	9	6
1:A:47:LEU:HD11	1:A:58:ILE:HD12	0.66	1.64	8	2
1:A:55:ILE:HD11	1:A:58:ILE:HG22	0.66	1.67	13	2
1:A:126:LEU:C	1:A:126:LEU:HD23	0.66	2.11	10	3
1:A:111:LEU:HD21	1:A:133:THR:OG1	0.65	1.90	2	2
1:A:72:VAL:HG22	1:A:83:ASP:O	0.65	1.90	4	1
1:A:47:LEU:HD21	1:A:58:ILE:HD12	0.65	1.66	14	2
1:A:23:VAL:HG11	1:A:64:ILE:N	0.65	2.06	1	1
1:A:95:ILE:HD12	1:A:96:LYS:N	0.65	2.07	10	1
1:A:47:LEU:CD2	1:A:50:LEU:HD21	0.65	2.21	15	1
1:A:153:LYS:HB2	1:A:183:LEU:HD22	0.65	1.66	8	1
1:A:161:ILE:HG23	1:A:162:LEU:HG	0.65	1.68	2	2
1:A:243:ARG:HB3	1:A:276:VAL:HG11	0.64	1.69	5	3
1:A:45:ILE:CD1	1:A:50:LEU:HD11	0.64	2.20	3	3
1:A:45:ILE:HD12	1:A:46:HIS:N	0.64	2.07	11	2
1:A:23:VAL:HG21	1:A:62:ILE:HG13	0.64	1.68	2	2
1:A:187:ALA:HB1	1:A:241:LEU:N	0.64	2.08	15	4
1:A:45:ILE:C	1:A:45:ILE:HD12	0.64	2.12	13	6
1:A:45:ILE:HD13	1:A:45:ILE:C	0.64	2.12	7	2
1:A:190:ILE:HG12	1:A:276:VAL:HG22	0.63	1.70	1	2
1:A:175:LEU:C	1:A:175:LEU:HD13	0.63	2.14	15	13
1:A:114:VAL:O	1:A:118:LEU:HD12	0.63	1.93	2	6
1:A:245:GLU:O	1:A:249:VAL:HG13	0.63	1.93	3	10
1:A:214:GLY:HA3	1:A:257:ILE:HD11	0.63	1.70	1	5
1:A:241:LEU:HD12	1:A:241:LEU:N	0.63	2.09	9	2
1:A:30:GLY:C	1:A:47:LEU:HD12	0.63	2.13	14	3
1:A:188:VAL:HG13	1:A:190:ILE:HG13	0.63	1.70	7	5
1:A:219:THR:HG23	1:A:219:THR:O	0.63	1.93	9	2
1:A:102:THR:O	1:A:106:THR:HG23	0.63	1.93	12	1
1:A:61:LEU:HB3	1:A:62:ILE:HD12	0.63	1.70	5	1
1:A:15:VAL:HG22	1:A:74:ARG:HA	0.63	1.69	6	9
1:A:247:LEU:HD13	1:A:274:PRO:HB2	0.63	1.71	5	7
1:A:190:ILE:HG23	1:A:276:VAL:HA	0.63	1.71	7	1
1:A:18:VAL:HG11	1:A:93:GLU:CG	0.62	2.24	1	3
1:A:18:VAL:HG13	1:A:71:LYS:HG2	0.62	1.70	8	1
1:A:114:VAL:HG13	1:A:174:VAL:CG1	0.62	2.23	4	2
1:A:126:LEU:HD11	1:A:130:PHE:CE2	0.62	2.29	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:HIS:O	1:A:50:LEU:HD23	0.62	1.94	9	1
1:A:228:LEU:HD13	1:A:234:TYR:CZ	0.62	2.30	13	5
1:A:190:ILE:HG22	1:A:247:LEU:HD21	0.62	1.69	5	1
1:A:215:LEU:HD11	1:A:226:ILE:CG2	0.62	2.25	15	6
1:A:23:VAL:CG2	1:A:62:ILE:HD12	0.62	2.24	8	6
1:A:33:VAL:HG21	1:A:84:LEU:HG	0.62	1.71	3	1
1:A:75:VAL:CG1	1:A:82:ILE:HD12	0.62	2.25	6	1
1:A:31:ALA:HB2	1:A:58:ILE:HD11	0.62	1.69	1	1
1:A:153:LYS:O	1:A:156:VAL:HG22	0.62	1.94	2	1
1:A:75:VAL:HG12	1:A:82:ILE:HG13	0.62	1.71	8	1
1:A:175:LEU:HD13	1:A:175:LEU:C	0.62	2.15	14	1
1:A:73:ILE:HD11	1:A:85:SER:N	0.62	2.10	2	1
1:A:194:ILE:C	1:A:194:ILE:HD13	0.62	2.16	9	1
1:A:187:ALA:N	1:A:241:LEU:HD13	0.61	2.10	13	2
1:A:211:LEU:O	1:A:215:LEU:HD13	0.61	1.95	10	2
1:A:18:VAL:HG11	1:A:93:GLU:HG2	0.61	1.71	1	3
1:A:108:TYR:CD1	1:A:130:PHE:CZ	0.61	2.89	4	2
1:A:107:VAL:HG23	1:A:152:PHE:CE2	0.61	2.31	8	8
1:A:211:LEU:CD1	1:A:226:ILE:HG22	0.61	2.26	2	1
1:A:165:LEU:HD22	1:A:167:LEU:CD1	0.61	2.25	4	1
1:A:18:VAL:HG11	1:A:93:GLU:HB3	0.61	1.73	7	2
1:A:21:VAL:HG12	1:A:35:LEU:HA	0.60	1.73	8	4
1:A:103:LYS:HB2	1:A:149:TYR:CD2	0.60	2.31	2	3
1:A:187:ALA:HB1	1:A:240:THR:C	0.60	2.17	15	5
1:A:81:TYR:C	1:A:81:TYR:CD1	0.60	2.74	13	7
1:A:81:TYR:CG	1:A:82:ILE:N	0.60	2.69	6	7
1:A:187:ALA:HA	1:A:241:LEU:HD13	0.60	1.73	3	2
1:A:126:LEU:HD23	1:A:126:LEU:O	0.60	1.96	10	1
1:A:207:VAL:HG12	1:A:208:LYS:N	0.60	2.11	10	15
1:A:49:GLU:C	1:A:50:LEU:HD22	0.60	2.16	9	1
1:A:159:PRO:HA	1:A:162:LEU:HD21	0.60	1.72	14	1
1:A:31:ALA:CB	1:A:47:LEU:HD21	0.60	2.24	15	1
1:A:268:PHE:HE1	1:A:270:VAL:HG23	0.60	1.55	15	6
1:A:72:VAL:HG21	1:A:82:ILE:HD11	0.60	1.73	10	3
1:A:91:PRO:O	1:A:95:ILE:HG23	0.60	1.95	9	2
1:A:256:VAL:HG12	1:A:257:ILE:N	0.60	2.11	15	15
1:A:73:ILE:HG22	1:A:74:ARG:HG2	0.60	1.71	2	1
1:A:149:TYR:CD1	1:A:149:TYR:N	0.60	2.70	2	2
1:A:187:ALA:HA	1:A:241:LEU:N	0.60	2.11	5	3
1:A:138:ASP:HB2	1:A:148:ALA:HB2	0.60	1.74	8	1
1:A:18:VAL:HG13	1:A:18:VAL:O	0.60	1.96	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:103:LYS:HB3	1:A:149:TYR:CG	0.60	2.32	12	2
1:A:110:ILE:O	1:A:114:VAL:HG13	0.60	1.96	12	2
1:A:47:LEU:HD23	1:A:50:LEU:CD2	0.60	2.26	15	1
1:A:101:PHE:O	1:A:105:LYS:N	0.59	2.35	9	13
1:A:190:ILE:HG12	1:A:247:LEU:HD21	0.59	1.75	4	3
1:A:103:LYS:CG	1:A:149:TYR:CD2	0.59	2.85	9	6
1:A:172:ARG:NH2	1:A:176:ILE:HD11	0.59	2.11	9	1
1:A:215:LEU:HD21	1:A:226:ILE:H	0.59	1.58	2	4
1:A:247:LEU:HD13	1:A:274:PRO:O	0.59	1.98	4	3
1:A:47:LEU:CA	1:A:50:LEU:HD22	0.59	2.26	11	2
1:A:257:ILE:O	1:A:261:ILE:HG22	0.59	1.97	8	8
1:A:15:VAL:O	1:A:72:VAL:HB	0.59	1.97	4	1
1:A:120:TYR:CG	1:A:120:TYR:O	0.59	2.55	12	1
1:A:156:VAL:HG12	1:A:179:ILE:HG13	0.59	1.75	13	2
1:A:135:TRP:CD1	1:A:135:TRP:N	0.59	2.65	13	10
1:A:214:GLY:N	1:A:257:ILE:HD11	0.59	2.12	13	3
1:A:215:LEU:CD2	1:A:226:ILE:HG22	0.59	2.28	4	2
1:A:45:ILE:HD13	1:A:50:LEU:CD2	0.59	2.27	4	1
1:A:91:PRO:O	1:A:95:ILE:HD12	0.58	1.98	6	1
1:A:33:VAL:CG2	1:A:84:LEU:HD22	0.58	2.28	15	1
1:A:190:ILE:CG2	1:A:247:LEU:CD2	0.58	2.79	5	12
1:A:241:LEU:N	1:A:241:LEU:HD12	0.58	2.13	5	1
1:A:18:VAL:O	1:A:18:VAL:HG13	0.58	1.98	15	6
1:A:122:LYS:O	1:A:124:GLU:N	0.58	2.37	13	7
1:A:18:VAL:HG21	1:A:93:GLU:HB3	0.58	1.75	15	3
1:A:170:ASP:O	1:A:174:VAL:HG22	0.58	1.98	13	1
1:A:104:SER:O	1:A:108:TYR:CB	0.58	2.52	13	13
1:A:12:PHE:O	1:A:12:PHE:CD1	0.58	2.57	9	2
1:A:89:VAL:O	1:A:89:VAL:HG23	0.58	1.98	3	2
1:A:62:ILE:HD11	1:A:86:LYS:NZ	0.58	2.13	5	1
1:A:73:ILE:HD11	1:A:83:ASP:OD1	0.58	1.98	11	1
1:A:70:VAL:CG2	1:A:84:LEU:HD12	0.58	2.29	3	1
1:A:114:VAL:HG12	1:A:174:VAL:CG1	0.57	2.29	12	1
1:A:121:THR:HG22	1:A:121:THR:O	0.57	1.99	13	1
1:A:115:ALA:HB1	1:A:120:TYR:HB2	0.57	1.75	15	5
1:A:21:VAL:CG2	1:A:35:LEU:HD12	0.57	2.28	7	1
1:A:235:VAL:O	1:A:235:VAL:HG13	0.57	2.00	11	2
1:A:55:ILE:CD1	1:A:58:ILE:HG22	0.57	2.29	13	1
1:A:224:ILE:HG23	1:A:237:THR:O	0.57	1.99	9	10
1:A:194:ILE:HG21	1:A:236:MET:SD	0.57	2.39	9	1
1:A:18:VAL:HG22	1:A:71:LYS:HB3	0.57	1.75	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:SER:CB	1:A:55:ILE:HG21	0.57	2.29	12	1
1:A:179:ILE:HB	1:A:183:LEU:HD12	0.57	1.75	4	3
1:A:115:ALA:HB1	1:A:120:TYR:O	0.57	2.00	12	1
1:A:130:PHE:HB3	1:A:135:TRP:CZ2	0.57	2.35	13	10
1:A:215:LEU:HG	1:A:226:ILE:HD12	0.57	1.75	12	5
1:A:26:ILE:HD11	1:A:62:ILE:O	0.57	1.98	3	1
1:A:190:ILE:O	1:A:237:THR:HA	0.56	2.00	14	15
1:A:107:VAL:O	1:A:111:LEU:HD12	0.56	1.99	7	2
1:A:190:ILE:HB	1:A:238:THR:HG23	0.56	1.76	6	2
1:A:236:MET:SD	1:A:250:LEU:HD13	0.56	2.40	5	1
1:A:21:VAL:HG12	1:A:35:LEU:HD23	0.56	1.76	4	2
1:A:141:TYR:OH	1:A:148:ALA:HB2	0.56	2.00	2	1
1:A:206:ALA:HB2	1:A:264:LYS:CB	0.56	2.30	12	1
1:A:108:TYR:CD2	1:A:130:PHE:HE2	0.56	2.15	2	2
1:A:214:GLY:CA	1:A:257:ILE:HD11	0.56	2.30	2	4
1:A:249:VAL:HG23	1:A:250:LEU:HD23	0.56	1.77	2	3
1:A:141:TYR:CZ	1:A:148:ALA:N	0.56	2.74	2	1
1:A:35:LEU:HD12	1:A:82:ILE:HD12	0.56	1.78	9	1
1:A:228:LEU:HD12	1:A:234:TYR:CZ	0.56	2.36	2	4
1:A:138:ASP:HA	1:A:141:TYR:CE1	0.56	2.36	2	1
1:A:23:VAL:HG11	1:A:26:ILE:HD11	0.56	1.78	6	3
1:A:111:LEU:HD22	1:A:130:PHE:CD1	0.56	2.35	9	2
1:A:194:ILE:HB	1:A:268:PHE:CZ	0.56	2.36	8	3
1:A:228:LEU:O	1:A:228:LEU:HD23	0.56	2.00	7	1
1:A:72:VAL:HG22	1:A:82:ILE:CG2	0.56	2.31	8	1
1:A:118:LEU:HD11	1:A:174:VAL:HG21	0.56	1.77	13	1
1:A:53:ARG:O	1:A:55:ILE:HG23	0.56	2.00	12	1
1:A:55:ILE:HD11	1:A:58:ILE:CG2	0.56	2.31	15	1
1:A:73:ILE:HG22	1:A:83:ASP:OD1	0.56	2.00	4	1
1:A:151:ALA:HB1	1:A:161:ILE:HD11	0.56	1.79	8	1
1:A:21:VAL:HG11	1:A:35:LEU:CD1	0.55	2.32	6	1
1:A:179:ILE:C	1:A:183:LEU:HD12	0.55	2.20	8	1
1:A:103:LYS:CB	1:A:149:TYR:CD2	0.55	2.89	2	12
1:A:137:PHE:CG	1:A:141:TYR:OH	0.55	2.59	1	3
1:A:25:SER:O	1:A:32:TYR:CB	0.55	2.54	15	11
1:A:114:VAL:HG13	1:A:174:VAL:HG11	0.55	1.77	4	2
1:A:197:ALA:O	1:A:267:VAL:N	0.55	2.39	15	3
1:A:47:LEU:HD21	1:A:58:ILE:HG12	0.55	1.79	12	2
1:A:104:SER:HA	1:A:107:VAL:CG1	0.55	2.32	13	13
1:A:114:VAL:HG22	1:A:174:VAL:HG22	0.55	1.77	3	2
1:A:108:TYR:HD1	1:A:130:PHE:CZ	0.55	2.20	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:137:PHE:CD1	1:A:151:ALA:HB1	0.55	2.36	7	2
1:A:190:ILE:HG21	1:A:247:LEU:HD23	0.55	1.79	10	10
1:A:55:ILE:HG23	1:A:55:ILE:O	0.55	2.01	9	4
1:A:155:ALA:O	1:A:176:ILE:HD11	0.55	2.02	8	1
1:A:115:ALA:HB1	1:A:120:TYR:CG	0.55	2.36	10	1
1:A:70:VAL:CG2	1:A:84:LEU:HD22	0.55	2.32	12	1
1:A:206:ALA:O	1:A:210:ALA:HB2	0.55	2.02	7	5
1:A:190:ILE:CG1	1:A:276:VAL:HG22	0.55	2.32	2	2
1:A:190:ILE:HG21	1:A:250:LEU:HD11	0.55	1.78	4	1
1:A:16:GLU:O	1:A:18:VAL:N	0.55	2.40	5	1
1:A:156:VAL:HG21	1:A:180:ASN:ND2	0.55	2.17	9	1
1:A:226:ILE:O	1:A:226:ILE:HG23	0.55	2.02	1	7
1:A:45:ILE:C	1:A:45:ILE:HD13	0.55	2.23	5	4
1:A:238:THR:HG21	1:A:250:LEU:HD11	0.55	1.78	5	1
1:A:148:ALA:O	1:A:152:PHE:CD2	0.54	2.60	2	2
1:A:83:ASP:C	1:A:84:LEU:HD22	0.54	2.23	7	2
1:A:15:VAL:HG22	1:A:75:VAL:HG22	0.54	1.77	12	1
1:A:62:ILE:HG21	1:A:68:GLU:HG3	0.54	1.78	15	2
1:A:215:LEU:HD21	1:A:226:ILE:N	0.54	2.17	9	4
1:A:156:VAL:HG21	1:A:180:ASN:CG	0.54	2.23	9	1
1:A:175:LEU:HD13	1:A:176:ILE:N	0.54	2.18	15	1
1:A:62:ILE:HG23	1:A:66:ARG:HB3	0.54	1.78	5	1
1:A:45:ILE:HD12	1:A:45:ILE:C	0.54	2.23	11	1
1:A:197:ALA:HB3	1:A:267:VAL:HB	0.54	1.79	15	2
1:A:149:TYR:HB3	1:A:183:LEU:HD22	0.54	1.77	2	2
1:A:23:VAL:HG21	1:A:62:ILE:O	0.54	2.02	5	3
1:A:135:TRP:N	1:A:135:TRP:CD1	0.54	2.72	14	1
1:A:101:PHE:O	1:A:105:LYS:CB	0.54	2.55	5	9
1:A:103:LYS:HB2	1:A:149:TYR:CG	0.54	2.38	12	1
1:A:75:VAL:HG11	1:A:82:ILE:HD12	0.54	1.77	6	1
1:A:23:VAL:HG23	1:A:62:ILE:HD12	0.54	1.80	4	2
1:A:16:GLU:O	1:A:17:ASP:O	0.54	2.25	4	2
1:A:198:CYS:SG	1:A:206:ALA:HB3	0.54	2.42	9	2
1:A:175:LEU:HD13	1:A:175:LEU:O	0.54	2.03	10	1
1:A:70:VAL:HA	1:A:89:VAL:HG21	0.54	1.79	12	1
1:A:33:VAL:O	1:A:43:GLY:N	0.53	2.41	14	3
1:A:247:LEU:HD22	1:A:274:PRO:CA	0.53	2.32	5	1
1:A:194:ILE:HD11	1:A:196:VAL:CG2	0.53	2.20	9	1
1:A:76:ASP:HB2	1:A:81:TYR:CD1	0.53	2.37	13	2
1:A:31:ALA:O	1:A:45:ILE:HG13	0.53	2.03	8	6
1:A:62:ILE:HG22	1:A:66:ARG:HB3	0.53	1.78	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:141:TYR:OH	1:A:148:ALA:N	0.53	2.42	2	1
1:A:190:ILE:HD13	1:A:247:LEU:HD23	0.53	1.79	11	1
1:A:62:ILE:HG22	1:A:66:ARG:CB	0.53	2.33	2	1
1:A:190:ILE:HG21	1:A:247:LEU:CG	0.53	2.33	5	1
1:A:35:LEU:HD21	1:A:84:LEU:HD11	0.53	1.80	15	1
1:A:14:GLU:HG3	1:A:75:VAL:HG22	0.53	1.80	7	1
1:A:213:ALA:HB2	1:A:260:LYS:HE3	0.53	1.80	3	1
1:A:70:VAL:CG2	1:A:84:LEU:HD23	0.53	2.34	4	1
1:A:190:ILE:HD13	1:A:247:LEU:N	0.53	2.19	13	5
1:A:19:VAL:HG12	1:A:20:MET:H	0.53	1.64	10	1
1:A:12:PHE:O	1:A:12:PHE:CD2	0.53	2.61	12	1
1:A:215:LEU:HD11	1:A:226:ILE:HG21	0.53	1.81	15	2
1:A:24:ARG:O	1:A:64:ILE:HD11	0.53	2.04	5	2
1:A:44:MET:O	1:A:83:ASP:HA	0.53	2.04	9	2
1:A:247:LEU:CD1	1:A:276:VAL:CG2	0.53	2.87	9	1
1:A:126:LEU:CD2	1:A:130:PHE:CE2	0.53	2.90	10	1
1:A:247:LEU:HD11	1:A:276:VAL:CG1	0.53	2.27	11	1
1:A:73:ILE:HD11	1:A:84:LEU:C	0.53	2.24	14	1
1:A:249:VAL:HG22	1:A:250:LEU:HD22	0.53	1.79	11	7
1:A:111:LEU:HD11	1:A:134:ALA:HB2	0.53	1.80	3	1
1:A:15:VAL:O	1:A:72:VAL:CB	0.53	2.57	4	1
1:A:26:ILE:HG23	1:A:58:ILE:HD11	0.52	1.81	15	3
1:A:110:ILE:HG23	1:A:178:ASN:HB3	0.52	1.81	7	2
1:A:137:PHE:O	1:A:141:TYR:CE1	0.52	2.62	9	2
1:A:81:TYR:C	1:A:82:ILE:HD12	0.52	2.25	8	1
1:A:35:LEU:HD11	1:A:84:LEU:HD11	0.52	1.81	15	1
1:A:84:LEU:HD12	1:A:84:LEU:N	0.52	2.19	6	1
1:A:141:TYR:CE1	1:A:147:GLY:HA3	0.52	2.39	9	1
1:A:47:LEU:HD23	1:A:55:ILE:HD12	0.52	1.81	12	1
1:A:187:ALA:HB2	1:A:241:LEU:HD21	0.52	1.80	13	1
1:A:31:ALA:CB	1:A:58:ILE:HD11	0.52	2.35	1	1
1:A:187:ALA:CA	1:A:241:LEU:HD22	0.52	2.35	15	2
1:A:211:LEU:N	1:A:211:LEU:CD2	0.52	2.72	4	9
1:A:130:PHE:HB3	1:A:135:TRP:CE2	0.52	2.40	15	4
1:A:147:GLY:O	1:A:151:ALA:HB3	0.52	2.05	2	1
1:A:137:PHE:CG	1:A:151:ALA:CB	0.52	2.92	6	5
1:A:243:ARG:CB	1:A:276:VAL:HG11	0.52	2.34	5	1
1:A:106:THR:O	1:A:110:ILE:HD12	0.52	2.05	11	2
1:A:278:THR:O	1:A:280:THR:N	0.52	2.42	12	2
1:A:171:GLU:HA	1:A:174:VAL:HG12	0.52	1.82	4	2
1:A:30:GLY:CA	1:A:47:LEU:HD12	0.52	2.35	5	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:268:PHE:CE1	1:A:270:VAL:HG23	0.52	2.39	15	1
1:A:23:VAL:HG11	1:A:63:ARG:C	0.52	2.26	3	1
1:A:235:VAL:CG1	1:A:235:VAL:O	0.52	2.57	7	5
1:A:32:TYR:CD1	1:A:43:GLY:O	0.51	2.62	6	7
1:A:81:TYR:CD1	1:A:81:TYR:C	0.51	2.83	14	5
1:A:30:GLY:C	1:A:47:LEU:HD13	0.51	2.25	12	1
1:A:273:GLU:CB	1:A:274:PRO:HD2	0.51	2.35	15	10
1:A:23:VAL:HG21	1:A:62:ILE:CG1	0.51	2.35	2	2
1:A:115:ALA:HB1	1:A:120:TYR:CD2	0.51	2.40	3	1
1:A:15:VAL:O	1:A:72:VAL:HG12	0.51	2.05	9	2
1:A:45:ILE:HG22	1:A:84:LEU:HD22	0.51	1.82	4	1
1:A:179:ILE:O	1:A:183:LEU:CG	0.51	2.58	7	5
1:A:254:MET:HG2	1:A:268:PHE:CZ	0.51	2.40	10	7
1:A:195:GLU:N	1:A:269:ASN:O	0.51	2.44	7	14
1:A:152:PHE:CD2	1:A:179:ILE:HD11	0.51	2.40	9	2
1:A:228:LEU:CD1	1:A:234:TYR:CZ	0.51	2.94	14	2
1:A:108:TYR:HA	1:A:130:PHE:CZ	0.51	2.40	4	3
1:A:83:ASP:O	1:A:84:LEU:HD12	0.51	2.05	5	2
1:A:137:PHE:CD1	1:A:151:ALA:CB	0.51	2.93	7	1
1:A:18:VAL:O	1:A:19:VAL:HG13	0.51	2.05	1	2
1:A:254:MET:CG	1:A:268:PHE:CZ	0.51	2.94	14	6
1:A:130:PHE:O	1:A:135:TRP:CG	0.51	2.63	11	4
1:A:151:ALA:O	1:A:155:ALA:HB2	0.51	2.06	3	4
1:A:152:PHE:O	1:A:179:ILE:HG23	0.51	2.05	5	2
1:A:18:VAL:HG12	1:A:18:VAL:O	0.51	2.06	5	1
1:A:101:PHE:HA	1:A:104:SER:OG	0.51	2.05	5	1
1:A:18:VAL:HG12	1:A:93:GLU:HB3	0.51	1.82	3	1
1:A:172:ARG:O	1:A:176:ILE:HD12	0.51	2.06	12	1
1:A:45:ILE:CD1	1:A:50:LEU:HD22	0.51	2.36	10	2
1:A:187:ALA:CA	1:A:241:LEU:HD13	0.51	2.35	3	2
1:A:14:GLU:O	1:A:15:VAL:HG23	0.51	2.06	4	1
1:A:50:LEU:HD23	1:A:58:ILE:HD11	0.51	1.83	7	1
1:A:47:LEU:HD11	1:A:58:ILE:CG1	0.51	2.36	10	1
1:A:14:GLU:C	1:A:15:VAL:HG23	0.51	2.27	5	3
1:A:45:ILE:HD11	1:A:50:LEU:HD23	0.51	1.82	15	2
1:A:100:LYS:O	1:A:104:SER:HB2	0.51	2.06	12	4
1:A:240:THR:CB	1:A:246:GLY:HA2	0.51	2.36	10	3
1:A:241:LEU:CD2	1:A:241:LEU:N	0.51	2.73	13	1
1:A:218:SER:OG	1:A:224:ILE:HD12	0.51	2.06	14	1
1:A:235:VAL:O	1:A:235:VAL:CG1	0.50	2.59	11	8
1:A:71:LYS:HD3	1:A:89:VAL:HG23	0.50	1.82	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:SER:O	1:A:108:TYR:HB3	0.50	2.06	11	8
1:A:194:ILE:O	1:A:234:TYR:N	0.50	2.45	14	6
1:A:73:ILE:HD11	1:A:85:SER:HB3	0.50	1.83	3	2
1:A:256:VAL:CG1	1:A:257:ILE:N	0.50	2.75	15	8
1:A:43:GLY:HA2	1:A:82:ILE:HG23	0.50	1.84	14	1
1:A:268:PHE:CD1	1:A:269:ASN:N	0.50	2.79	6	11
1:A:118:LEU:HD11	1:A:174:VAL:HG11	0.50	1.83	9	2
1:A:193:ASP:CB	1:A:271:GLN:HB3	0.50	2.36	2	5
1:A:107:VAL:HG13	1:A:108:TYR:N	0.50	2.22	15	11
1:A:108:TYR:CD1	1:A:109:SER:N	0.50	2.79	10	13
1:A:247:LEU:CD2	1:A:274:PRO:HB2	0.50	2.31	7	9
1:A:152:PHE:O	1:A:183:LEU:HD13	0.50	2.06	8	1
1:A:31:ALA:CB	1:A:45:ILE:HD11	0.50	2.33	14	1
1:A:226:ILE:HA	1:A:235:VAL:O	0.50	2.06	4	7
1:A:82:ILE:O	1:A:82:ILE:HG23	0.50	2.05	10	2
1:A:45:ILE:HD11	1:A:50:LEU:HD22	0.50	1.83	10	1
1:A:72:VAL:CG2	1:A:82:ILE:HD11	0.50	2.36	10	1
1:A:62:ILE:CG2	1:A:66:ARG:O	0.50	2.60	11	1
1:A:207:VAL:CG1	1:A:208:LYS:N	0.50	2.75	14	6
1:A:137:PHE:C	1:A:141:TYR:CZ	0.50	2.85	2	1
1:A:81:TYR:CD1	1:A:82:ILE:N	0.50	2.80	14	2
1:A:14:GLU:HG2	1:A:15:VAL:HG23	0.50	1.83	7	1
1:A:12:PHE:O	1:A:12:PHE:CG	0.50	2.64	12	2
1:A:76:ASP:O	1:A:77:LYS:CB	0.50	2.60	13	1
1:A:215:LEU:HD23	1:A:224:ILE:HB	0.49	1.83	14	1
1:A:62:ILE:HG21	1:A:68:GLU:HG2	0.49	1.83	15	1
1:A:15:VAL:O	1:A:16:GLU:CB	0.49	2.59	3	1
1:A:17:ASP:O	1:A:19:VAL:HG13	0.49	2.07	12	2
1:A:30:GLY:N	1:A:47:LEU:HD22	0.49	2.22	11	1
1:A:243:ARG:HB2	1:A:276:VAL:HG11	0.49	1.83	14	2
1:A:190:ILE:HG22	1:A:250:LEU:HD11	0.49	1.84	4	4
1:A:72:VAL:HG13	1:A:83:ASP:O	0.49	2.07	3	4
1:A:114:VAL:HG22	1:A:178:ASN:OD1	0.49	2.06	6	2
1:A:247:LEU:HA	1:A:250:LEU:HD23	0.49	1.83	7	1
1:A:12:PHE:CG	1:A:12:PHE:O	0.49	2.65	3	1
1:A:226:ILE:HD12	1:A:236:MET:HG3	0.49	1.84	7	1
1:A:120:TYR:O	1:A:120:TYR:CD1	0.49	2.65	12	1
1:A:234:TYR:CD1	1:A:234:TYR:N	0.49	2.81	2	6
1:A:190:ILE:HG23	1:A:276:VAL:CA	0.49	2.37	7	1
1:A:176:ILE:HA	1:A:179:ILE:CG2	0.49	2.37	10	1
1:A:249:VAL:CG2	1:A:250:LEU:HD22	0.49	2.38	11	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:190:ILE:CG2	1:A:250:LEU:CD1	0.49	2.91	2	3
1:A:238:THR:HG21	1:A:250:LEU:CD2	0.49	2.37	8	2
1:A:158:ASP:N	1:A:158:ASP:OD1	0.49	2.46	9	1
1:A:120:TYR:CD1	1:A:120:TYR:C	0.49	2.85	12	1
1:A:115:ALA:HA	1:A:120:TYR:CD2	0.49	2.41	12	1
1:A:152:PHE:HB3	1:A:183:LEU:CD1	0.49	2.38	12	1
1:A:108:TYR:CD1	1:A:108:TYR:C	0.49	2.87	1	7
1:A:247:LEU:HB3	1:A:274:PRO:HB2	0.49	1.84	12	10
1:A:190:ILE:CG2	1:A:250:LEU:HG	0.49	2.37	15	2
1:A:137:PHE:O	1:A:141:TYR:CD2	0.49	2.66	5	3
1:A:170:ASP:O	1:A:174:VAL:HG13	0.49	2.08	13	1
1:A:197:ALA:O	1:A:266:GLY:CA	0.48	2.62	15	6
1:A:237:THR:C	1:A:238:THR:HG22	0.48	2.29	9	5
1:A:72:VAL:HA	1:A:83:ASP:O	0.48	2.09	4	5
1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:HD12	0.48	2.24	6	2
1:A:196:VAL:HG12	1:A:261:ILE:HD13	0.48	1.85	6	1
1:A:241:LEU:O	1:A:242:GLU:O	0.48	2.31	6	1
1:A:272:MET:O	1:A:273:GLU:O	0.48	2.31	15	9
1:A:31:ALA:O	1:A:45:ILE:CG2	0.48	2.61	5	4
1:A:243:ARG:O	1:A:247:LEU:HD12	0.48	2.08	5	1
1:A:103:LYS:HB3	1:A:149:TYR:CD2	0.48	2.43	7	4
1:A:137:PHE:CE1	1:A:151:ALA:HB1	0.48	2.43	7	1
1:A:226:ILE:HD11	1:A:236:MET:SD	0.48	2.48	10	1
1:A:14:GLU:O	1:A:15:VAL:CB	0.48	2.61	4	5
1:A:83:ASP:O	1:A:84:LEU:HD22	0.48	2.08	7	2
1:A:15:VAL:O	1:A:15:VAL:HG12	0.48	2.08	6	1
1:A:164:SER:O	1:A:166:ASP:N	0.48	2.43	6	1
1:A:78:GLU:O	1:A:79:LYS:HB3	0.48	2.08	13	1
1:A:63:ARG:O	1:A:64:ILE:C	0.48	2.52	11	6
1:A:193:ASP:O	1:A:270:VAL:HA	0.48	2.09	5	4
1:A:17:ASP:O	1:A:72:VAL:HG23	0.48	2.08	9	1
1:A:89:VAL:O	1:A:89:VAL:CG1	0.48	2.61	15	3
1:A:273:GLU:CG	1:A:274:PRO:HD2	0.48	2.38	5	4
1:A:87:ARG:O	1:A:88:ARG:CB	0.48	2.62	14	2
1:A:70:VAL:HG23	1:A:84:LEU:CD2	0.48	2.38	12	1
1:A:45:ILE:HD12	1:A:45:ILE:O	0.48	2.08	4	1
1:A:35:LEU:CD1	1:A:35:LEU:N	0.48	2.77	6	1
1:A:149:TYR:CZ	1:A:183:LEU:CD2	0.48	2.96	10	1
1:A:179:ILE:HG23	1:A:183:LEU:CD1	0.48	2.35	1	1
1:A:70:VAL:HG21	1:A:84:LEU:CD2	0.48	2.35	4	1
1:A:211:LEU:HD23	1:A:211:LEU:N	0.48	2.23	14	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:179:ILE:O	1:A:183:LEU:HB2	0.48	2.09	11	4
1:A:31:ALA:HB3	1:A:45:ILE:HG13	0.48	1.84	13	1
1:A:273:GLU:HB2	1:A:274:PRO:HD2	0.48	1.86	15	1
1:A:197:ALA:O	1:A:261:ILE:HD11	0.48	2.09	12	2
1:A:177:ASN:O	1:A:181:ARG:CB	0.48	2.62	6	2
1:A:69:CYS:O	1:A:70:VAL:HG13	0.48	2.09	11	1
1:A:141:TYR:OH	1:A:151:ALA:CB	0.47	2.62	1	3
1:A:193:ASP:CB	1:A:271:GLN:CB	0.47	2.91	7	4
1:A:178:ASN:O	1:A:182:ARG:CB	0.47	2.62	5	3
1:A:18:VAL:O	1:A:18:VAL:CG1	0.47	2.62	10	5
1:A:131:GLN:O	1:A:136:VAL:CG2	0.47	2.62	10	2
1:A:228:LEU:C	1:A:228:LEU:HD23	0.47	2.29	1	1
1:A:110:ILE:HD11	1:A:182:ARG:HB2	0.47	1.85	2	1
1:A:12:PHE:CD1	1:A:12:PHE:N	0.47	2.82	3	1
1:A:44:MET:O	1:A:84:LEU:N	0.47	2.47	5	4
1:A:26:ILE:CG2	1:A:58:ILE:HD11	0.47	2.39	12	1
1:A:82:ILE:HG23	1:A:82:ILE:O	0.47	2.08	12	1
1:A:101:PHE:O	1:A:105:LYS:HB2	0.47	2.09	14	1
1:A:282:GLU:O	1:A:285:LEU:HD23	0.47	2.09	14	1
1:A:226:ILE:O	1:A:226:ILE:CG2	0.47	2.63	4	3
1:A:26:ILE:HG23	1:A:58:ILE:HG21	0.47	1.85	6	1
1:A:12:PHE:CZ	1:A:82:ILE:HD13	0.47	2.45	9	1
1:A:130:PHE:O	1:A:135:TRP:CD1	0.47	2.68	12	4
1:A:211:LEU:N	1:A:211:LEU:HD23	0.47	2.24	2	9
1:A:47:LEU:HD11	1:A:58:ILE:HG12	0.47	1.85	10	1
1:A:22:ASN:O	1:A:34:SER:N	0.47	2.48	1	3
1:A:137:PHE:CD1	1:A:141:TYR:OH	0.47	2.65	3	6
1:A:15:VAL:O	1:A:72:VAL:CG1	0.47	2.63	4	1
1:A:16:GLU:CB	1:A:72:VAL:HB	0.47	2.39	4	1
1:A:243:ARG:CB	1:A:276:VAL:CG1	0.47	2.92	5	1
1:A:126:LEU:HD23	1:A:127:GLU:N	0.47	2.25	15	1
1:A:179:ILE:O	1:A:183:LEU:N	0.47	2.43	4	2
1:A:31:ALA:O	1:A:45:ILE:CG1	0.47	2.63	8	2
1:A:155:ALA:CB	1:A:161:ILE:HG21	0.47	2.40	2	1
1:A:268:PHE:C	1:A:268:PHE:CD1	0.47	2.88	4	7
1:A:104:SER:O	1:A:108:TYR:HB2	0.47	2.10	7	3
1:A:137:PHE:HB3	1:A:141:TYR:OH	0.47	2.10	4	1
1:A:176:ILE:HA	1:A:179:ILE:HG22	0.47	1.87	10	1
1:A:190:ILE:HG21	1:A:250:LEU:HD23	0.47	1.86	12	4
1:A:170:ASP:O	1:A:174:VAL:HG12	0.47	2.10	2	1
1:A:153:LYS:HA	1:A:183:LEU:HD13	0.47	1.85	4	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:215:LEU:HD11	1:A:226:ILE:HG22	0.47	1.87	4	2
1:A:27:GLN:HB3	1:A:30:GLY:O	0.47	2.10	9	1
1:A:50:LEU:HD12	1:A:50:LEU:O	0.47	2.10	15	1
1:A:12:PHE:CD2	1:A:13:PRO:O	0.47	2.67	4	1
1:A:107:VAL:CA	1:A:110:ILE:HD12	0.47	2.40	13	2
1:A:151:ALA:HB1	1:A:161:ILE:CD1	0.47	2.40	8	1
1:A:62:ILE:HD13	1:A:68:GLU:HG3	0.47	1.85	15	1
1:A:256:VAL:O	1:A:260:LYS:HG3	0.47	2.10	15	1
1:A:193:ASP:HB2	1:A:271:GLN:CB	0.47	2.40	7	2
1:A:108:TYR:HA	1:A:130:PHE:CE1	0.47	2.45	4	2
1:A:86:LYS:O	1:A:89:VAL:HG12	0.47	2.09	9	2
1:A:21:VAL:CG2	1:A:33:VAL:HG21	0.47	2.37	8	1
1:A:188:VAL:CG1	1:A:276:VAL:HG23	0.47	2.40	15	1
1:A:234:TYR:N	1:A:234:TYR:CD1	0.46	2.83	14	3
1:A:126:LEU:C	1:A:126:LEU:CD2	0.46	2.84	10	1
1:A:78:GLU:O	1:A:79:LYS:HB2	0.46	2.08	13	1
1:A:261:ILE:O	1:A:266:GLY:N	0.46	2.48	15	1
1:A:214:GLY:CA	1:A:253:ALA:HB1	0.46	2.37	2	4
1:A:21:VAL:HG22	1:A:22:ASN:N	0.46	2.25	3	1
1:A:129:LEU:O	1:A:133:THR:OG1	0.46	2.34	15	3
1:A:161:ILE:CG2	1:A:162:LEU:HD12	0.46	2.41	8	1
1:A:194:ILE:CG1	1:A:268:PHE:CZ	0.46	2.98	9	1
1:A:31:ALA:HB2	1:A:58:ILE:CD1	0.46	2.40	10	1
1:A:67:ASN:N	1:A:67:ASN:OD1	0.46	2.47	10	1
1:A:190:ILE:CG2	1:A:250:LEU:CD2	0.46	2.93	10	3
1:A:131:GLN:CA	1:A:135:TRP:CE3	0.46	2.99	11	3
1:A:137:PHE:O	1:A:141:TYR:CZ	0.46	2.69	2	1
1:A:166:ASP:C	1:A:167:LEU:HD12	0.46	2.30	13	1
1:A:91:PRO:O	1:A:95:ILE:HD13	0.46	2.10	1	1
1:A:114:VAL:HG21	1:A:175:LEU:HD23	0.46	1.88	1	1
1:A:195:GLU:O	1:A:268:PHE:HA	0.46	2.10	14	11
1:A:131:GLN:HA	1:A:135:TRP:HB2	0.46	1.87	2	3
1:A:210:ALA:O	1:A:257:ILE:CG1	0.46	2.64	10	8
1:A:62:ILE:HD12	1:A:62:ILE:N	0.46	2.25	11	2
1:A:118:LEU:O	1:A:119:GLU:CB	0.46	2.60	7	6
1:A:170:ASP:O	1:A:174:VAL:CG2	0.46	2.63	7	4
1:A:238:THR:OG1	1:A:239:THR:N	0.46	2.49	11	5
1:A:190:ILE:CD1	1:A:246:GLY:HA3	0.46	2.41	8	6
1:A:213:ALA:CB	1:A:260:LYS:HD2	0.46	2.40	15	1
1:A:145:GLY:C	1:A:149:TYR:CZ	0.46	2.89	12	2
1:A:179:ILE:HG13	1:A:180:ASN:N	0.46	2.26	8	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:247:LEU:HD23	1:A:250:LEU:HD12	0.46	1.88	5	1
1:A:103:LYS:O	1:A:107:VAL:CG1	0.46	2.60	8	1
1:A:50:LEU:HD22	1:A:50:LEU:N	0.46	2.25	9	1
1:A:190:ILE:CD1	1:A:247:LEU:N	0.46	2.78	11	1
1:A:162:LEU:N	1:A:162:LEU:HD23	0.46	2.25	14	1
1:A:266:GLY:C	1:A:267:VAL:HG23	0.46	2.31	8	7
1:A:210:ALA:O	1:A:213:ALA:HB3	0.46	2.11	14	3
1:A:176:ILE:HA	1:A:179:ILE:HD11	0.46	1.88	12	1
1:A:206:ALA:CB	1:A:264:LYS:HB2	0.46	2.41	12	1
1:A:12:PHE:CE2	1:A:13:PRO:O	0.46	2.69	4	1
1:A:162:LEU:HD23	1:A:165:LEU:HD13	0.46	1.86	8	1
1:A:241:LEU:N	1:A:241:LEU:HD22	0.46	2.26	13	1
1:A:63:ARG:O	1:A:65:GLY:N	0.46	2.49	7	3
1:A:194:ILE:HD12	1:A:196:VAL:HG23	0.46	1.87	4	1
1:A:240:THR:HG21	1:A:246:GLY:HA2	0.46	1.88	5	2
1:A:245:GLU:O	1:A:249:VAL:CG1	0.46	2.64	6	1
1:A:23:VAL:HG21	1:A:62:ILE:C	0.46	2.32	7	1
1:A:45:ILE:CD1	1:A:46:HIS:N	0.46	2.71	7	2
1:A:149:TYR:CE1	1:A:183:LEU:CD2	0.46	2.99	7	1
1:A:75:VAL:CB	1:A:81:TYR:O	0.46	2.64	2	2
1:A:190:ILE:HD12	1:A:240:THR:OG1	0.46	2.11	3	1
1:A:146:TYR:HA	1:A:149:TYR:CE2	0.46	2.46	12	1
1:A:167:LEU:HD23	1:A:171:GLU:HB3	0.46	1.88	14	1
1:A:63:ARG:O	1:A:64:ILE:O	0.46	2.34	15	1
1:A:171:GLU:O	1:A:175:LEU:CB	0.45	2.64	6	4
1:A:69:CYS:O	1:A:89:VAL:HG21	0.45	2.12	5	1
1:A:210:ALA:O	1:A:257:ILE:HG13	0.45	2.10	14	1
1:A:257:ILE:HG13	1:A:258:LYS:N	0.45	2.26	15	1
1:A:268:PHE:CD1	1:A:268:PHE:C	0.45	2.90	12	8
1:A:26:ILE:HG21	1:A:58:ILE:HD12	0.45	1.86	4	1
1:A:152:PHE:O	1:A:183:LEU:CD1	0.45	2.64	6	1
1:A:241:LEU:O	1:A:242:GLU:CB	0.45	2.65	1	3
1:A:14:GLU:O	1:A:15:VAL:HB	0.45	2.11	13	4
1:A:47:LEU:CD1	1:A:58:ILE:HD13	0.45	2.39	15	2
1:A:61:LEU:O	1:A:62:ILE:CG2	0.45	2.60	4	1
1:A:147:GLY:O	1:A:151:ALA:CB	0.45	2.64	2	1
1:A:150:ASP:O	1:A:154:HIS:CG	0.45	2.70	2	1
1:A:224:ILE:HG12	1:A:238:THR:OG1	0.45	2.12	11	4
1:A:190:ILE:O	1:A:237:THR:CA	0.45	2.64	13	1
1:A:120:TYR:CE1	1:A:125:GLN:NE2	0.45	2.84	1	1
1:A:73:ILE:HD11	1:A:85:SER:CB	0.45	2.41	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:SER:HA	1:A:149:TYR:CE1	0.45	2.47	2	1
1:A:266:GLY:O	1:A:267:VAL:CG2	0.45	2.62	10	8
1:A:31:ALA:HB3	1:A:45:ILE:HG21	0.45	1.87	3	1
1:A:273:GLU:CB	1:A:274:PRO:CD	0.45	2.95	15	4
1:A:226:ILE:HD12	1:A:236:MET:CG	0.45	2.42	15	1
1:A:149:TYR:O	1:A:152:PHE:N	0.45	2.50	14	4
1:A:137:PHE:CE1	1:A:161:ILE:CG2	0.45	2.99	6	1
1:A:241:LEU:HD22	1:A:241:LEU:N	0.45	2.26	7	1
1:A:129:LEU:CD1	1:A:133:THR:OG1	0.45	2.65	10	1
1:A:113:HIS:NE2	1:A:117:VAL:CG2	0.45	2.80	15	1
1:A:19:VAL:HG22	1:A:20:MET:H	0.45	1.71	6	2
1:A:34:SER:O	1:A:35:LEU:O	0.45	2.35	14	2
1:A:25:SER:O	1:A:32:TYR:N	0.45	2.50	11	3
1:A:21:VAL:CG1	1:A:35:LEU:HD23	0.45	2.42	4	1
1:A:50:LEU:HD23	1:A:51:SER:N	0.45	2.27	8	1
1:A:50:LEU:CD2	1:A:50:LEU:N	0.45	2.80	9	1
1:A:94:ALA:O	1:A:98:GLU:HB2	0.45	2.12	14	1
1:A:210:ALA:O	1:A:257:ILE:CG2	0.45	2.62	15	1
1:A:226:ILE:CG2	1:A:226:ILE:O	0.45	2.65	1	2
1:A:191:ARG:HA	1:A:236:MET:O	0.45	2.11	7	6
1:A:114:VAL:HG22	1:A:174:VAL:HG12	0.45	1.88	7	1
1:A:172:ARG:O	1:A:176:ILE:CG1	0.45	2.65	7	2
1:A:62:ILE:HG22	1:A:66:ARG:CG	0.45	2.42	8	1
1:A:120:TYR:CE2	1:A:125:GLN:HG3	0.45	2.48	13	1
1:A:272:MET:O	1:A:272:MET:CG	0.44	2.65	2	2
1:A:107:VAL:CG2	1:A:152:PHE:CE2	0.44	2.99	4	2
1:A:190:ILE:CD1	1:A:276:VAL:HG12	0.44	2.42	4	2
1:A:179:ILE:O	1:A:183:LEU:CD1	0.44	2.63	9	2
1:A:246:GLY:O	1:A:249:VAL:N	0.44	2.49	10	1
1:A:12:PHE:CD1	1:A:15:VAL:HG13	0.44	2.47	14	1
1:A:137:PHE:CE1	1:A:161:ILE:HG22	0.44	2.47	14	1
1:A:210:ALA:O	1:A:213:ALA:N	0.44	2.50	15	2
1:A:166:ASP:OD1	1:A:166:ASP:N	0.44	2.50	2	1
1:A:138:ASP:OD2	1:A:145:GLY:N	0.44	2.47	10	4
1:A:129:LEU:HD13	1:A:133:THR:OG1	0.44	2.12	10	1
1:A:210:ALA:HB1	1:A:257:ILE:CG1	0.44	2.42	11	1
1:A:240:THR:HB	1:A:246:GLY:CA	0.44	2.42	15	3
1:A:131:GLN:HA	1:A:135:TRP:CE3	0.44	2.47	11	4
1:A:211:LEU:C	1:A:215:LEU:HD12	0.44	2.32	8	4
1:A:137:PHE:HZ	1:A:161:ILE:HG22	0.44	1.67	4	1
1:A:141:TYR:CD1	1:A:147:GLY:HA3	0.44	2.47	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:LEU:O	1:A:86:LYS:CE	0.44	2.65	6	1
1:A:156:VAL:HG12	1:A:179:ILE:HG22	0.44	1.82	6	1
1:A:62:ILE:HA	1:A:66:ARG:CB	0.44	2.42	14	2
1:A:126:LEU:CD2	1:A:130:PHE:CE1	0.44	3.00	12	1
1:A:146:TYR:HA	1:A:149:TYR:CD2	0.44	2.47	12	1
1:A:91:PRO:O	1:A:95:ILE:HG12	0.44	2.13	13	1
1:A:114:VAL:O	1:A:117:VAL:HG22	0.44	2.13	1	1
1:A:70:VAL:HG21	1:A:84:LEU:HD12	0.44	1.88	3	1
1:A:108:TYR:CD2	1:A:130:PHE:HE1	0.44	2.29	3	1
1:A:102:THR:O	1:A:106:THR:OG1	0.44	2.35	7	4
1:A:178:ASN:O	1:A:182:ARG:HB2	0.44	2.12	6	1
1:A:190:ILE:HD13	1:A:246:GLY:HA3	0.44	1.90	14	1
1:A:272:MET:CG	1:A:272:MET:O	0.44	2.65	14	1
1:A:141:TYR:CD1	1:A:143:ARG:HB2	0.44	2.48	2	1
1:A:115:ALA:HA	1:A:120:TYR:HB2	0.44	1.89	4	1
1:A:288:GLN:O	1:A:289:MET:O	0.44	2.36	5	1
1:A:129:LEU:HD21	1:A:171:GLU:CD	0.44	2.33	15	1
1:A:118:LEU:HD13	1:A:171:GLU:CD	0.44	2.33	1	1
1:A:156:VAL:HG23	1:A:157:SER:N	0.44	2.28	2	3
1:A:258:LYS:O	1:A:262:GLU:CG	0.44	2.66	8	3
1:A:70:VAL:HG12	1:A:71:LYS:H	0.44	1.73	5	1
1:A:50:LEU:HD11	1:A:86:LYS:HB2	0.44	1.89	9	1
1:A:100:LYS:O	1:A:104:SER:CB	0.44	2.65	6	5
1:A:118:LEU:HD22	1:A:170:ASP:HB3	0.44	1.88	6	1
1:A:179:ILE:HG22	1:A:180:ASN:N	0.44	2.26	9	1
1:A:103:LYS:CD	1:A:149:TYR:CD2	0.44	3.01	12	1
1:A:191:ARG:HB3	1:A:237:THR:CG2	0.44	2.43	15	2
1:A:23:VAL:CG1	1:A:64:ILE:N	0.44	2.79	1	2
1:A:106:THR:O	1:A:110:ILE:CG1	0.44	2.66	11	6
1:A:138:ASP:OD1	1:A:145:GLY:CA	0.44	2.66	7	1
1:A:188:VAL:CG1	1:A:190:ILE:CG1	0.44	2.91	7	1
1:A:167:LEU:CD2	1:A:171:GLU:HB3	0.44	2.43	10	1
1:A:57:SER:O	1:A:58:ILE:C	0.44	2.55	1	1
1:A:175:LEU:C	1:A:175:LEU:CD1	0.44	2.86	15	3
1:A:24:ARG:O	1:A:64:ILE:CD1	0.44	2.66	12	2
1:A:129:LEU:HD21	1:A:171:GLU:OE2	0.44	2.12	15	1
1:A:47:LEU:HD23	1:A:47:LEU:C	0.43	2.30	11	1
1:A:188:VAL:HG11	1:A:276:VAL:HG23	0.43	1.90	15	1
1:A:243:ARG:O	1:A:276:VAL:HG11	0.43	2.13	4	1
1:A:156:VAL:CG2	1:A:157:SER:N	0.43	2.81	8	2
1:A:219:THR:O	1:A:219:THR:CG2	0.43	2.63	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:95:ILE:CD1	1:A:96:LYS:N	0.43	2.80	10	1
1:A:246:GLY:O	1:A:250:LEU:CD2	0.43	2.66	10	1
1:A:12:PHE:CE2	1:A:82:ILE:CD1	0.43	3.00	11	1
1:A:16:GLU:HA	1:A:72:VAL:O	0.43	2.13	12	1
1:A:13:PRO:O	1:A:15:VAL:N	0.43	2.52	2	2
1:A:73:ILE:CG2	1:A:83:ASP:HB3	0.43	2.44	9	1
1:A:100:LYS:CG	1:A:144:PRO:O	0.43	2.66	10	1
1:A:190:ILE:HD13	1:A:247:LEU:CD2	0.43	2.42	11	1
1:A:33:VAL:O	1:A:42:GLU:HA	0.43	2.13	3	2
1:A:218:SER:OG	1:A:219:THR:N	0.43	2.51	4	1
1:A:75:VAL:HG12	1:A:82:ILE:CA	0.43	2.41	6	1
1:A:217:CYS:SG	1:A:256:VAL:HG21	0.43	2.53	7	1
1:A:254:MET:HE2	1:A:270:VAL:HG22	0.43	1.89	7	1
1:A:137:PHE:CZ	1:A:161:ILE:HD12	0.43	2.48	9	1
1:A:165:LEU:O	1:A:167:LEU:N	0.43	2.51	9	2
1:A:108:TYR:O	1:A:130:PHE:CZ	0.43	2.71	14	1
1:A:111:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HB3	0.43	1.91	15	1
1:A:156:VAL:HG12	1:A:180:ASN:OD1	0.43	2.13	1	1
1:A:244:THR:HG23	1:A:245:GLU:N	0.43	2.28	6	2
1:A:113:HIS:CD2	1:A:117:VAL:CG2	0.43	3.02	15	1
1:A:103:LYS:HG2	1:A:149:TYR:CD2	0.43	2.48	3	1
1:A:155:ALA:CB	1:A:162:LEU:HD22	0.43	2.37	3	1
1:A:187:ALA:N	1:A:241:LEU:HB3	0.43	2.27	5	2
1:A:50:LEU:CD1	1:A:51:SER:N	0.43	2.79	6	1
1:A:120:TYR:CG	1:A:125:GLN:HG2	0.43	2.49	9	1
1:A:47:LEU:HD12	1:A:58:ILE:HD12	0.43	1.91	11	1
1:A:194:ILE:CD1	1:A:196:VAL:HG23	0.43	2.43	3	2
1:A:171:GLU:HA	1:A:174:VAL:CG1	0.43	2.44	4	2
1:A:117:VAL:HG23	1:A:118:LEU:HG	0.43	1.88	1	1
1:A:103:LYS:CA	1:A:149:TYR:CD2	0.43	3.02	3	5
1:A:89:VAL:O	1:A:89:VAL:HG13	0.43	2.13	5	1
1:A:73:ILE:CG2	1:A:83:ASP:CB	0.43	2.96	9	1
1:A:91:PRO:O	1:A:95:ILE:HG22	0.43	2.14	11	1
1:A:95:ILE:HG23	1:A:96:LYS:N	0.43	2.29	11	1
1:A:247:LEU:CD1	1:A:276:VAL:CG1	0.43	2.97	11	1
1:A:103:LYS:CB	1:A:149:TYR:CD1	0.43	3.02	12	1
1:A:187:ALA:CB	1:A:241:LEU:N	0.43	2.81	15	1
1:A:235:VAL:O	1:A:235:VAL:HG12	0.43	2.14	5	1
1:A:108:TYR:CD2	1:A:109:SER:N	0.43	2.87	9	1
1:A:22:ASN:N	1:A:22:ASN:OD1	0.43	2.52	10	1
1:A:114:VAL:HG23	1:A:115:ALA:N	0.43	2.29	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:138:ASP:HB2	1:A:145:GLY:CA	0.43	2.43	12	1
1:A:45:ILE:C	1:A:45:ILE:CD1	0.43	2.84	13	3
1:A:247:LEU:CG	1:A:276:VAL:HG23	0.43	2.43	1	1
1:A:228:LEU:HD22	1:A:234:TYR:CE2	0.43	2.48	3	1
1:A:94:ALA:O	1:A:98:GLU:CB	0.43	2.67	6	1
1:A:103:LYS:HD3	1:A:146:TYR:CE1	0.43	2.49	7	1
1:A:47:LEU:C	1:A:50:LEU:HD22	0.43	2.35	11	2
1:A:95:ILE:CG1	1:A:96:LYS:N	0.43	2.82	9	1
1:A:194:ILE:HG13	1:A:268:PHE:CZ	0.43	2.49	9	1
1:A:187:ALA:H	1:A:241:LEU:HD13	0.43	1.72	13	1
1:A:261:ILE:O	1:A:266:GLY:CA	0.43	2.67	15	1
1:A:141:TYR:CE2	1:A:147:GLY:C	0.42	2.92	2	1
1:A:58:ILE:HA	1:A:61:LEU:HD13	0.42	1.91	8	1
1:A:149:TYR:C	1:A:149:TYR:CD1	0.42	2.92	8	1
1:A:210:ALA:C	1:A:257:ILE:CG1	0.42	2.87	11	2
1:A:111:LEU:HD13	1:A:134:ALA:HB2	0.42	1.91	11	1
1:A:212:ARG:O	1:A:216:ASN:N	0.42	2.52	11	1
1:A:288:GLN:O	1:A:290:GLU:N	0.42	2.52	3	1
1:A:70:VAL:CG2	1:A:84:LEU:CD2	0.42	2.96	4	1
1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:HIS:C	0.42	2.35	7	1
1:A:141:TYR:CZ	1:A:147:GLY:C	0.42	2.92	9	1
1:A:62:ILE:HD12	1:A:62:ILE:H	0.42	1.73	11	1
1:A:120:TYR:CD2	1:A:125:GLN:HB3	0.42	2.49	11	1
1:A:45:ILE:CD1	1:A:50:LEU:HD23	0.42	2.44	15	1
1:A:211:LEU:O	1:A:215:LEU:CG	0.42	2.67	15	1
1:A:30:GLY:CA	1:A:47:LEU:HD13	0.42	2.45	3	1
1:A:86:LYS:O	1:A:87:ARG:C	0.42	2.58	4	3
1:A:178:ASN:O	1:A:182:ARG:N	0.42	2.52	5	2
1:A:179:ILE:CA	1:A:183:LEU:HD12	0.42	2.44	8	1
1:A:218:SER:CB	1:A:224:ILE:HG13	0.42	2.44	9	1
1:A:172:ARG:O	1:A:176:ILE:HG22	0.42	2.14	10	1
1:A:23:VAL:CG2	1:A:26:ILE:CG2	0.42	2.98	11	1
1:A:175:LEU:CD1	1:A:179:ILE:HD13	0.42	2.45	2	1
1:A:194:ILE:HD12	1:A:194:ILE:C	0.42	2.35	3	1
1:A:62:ILE:HD13	1:A:68:GLU:HB3	0.42	1.92	4	1
1:A:174:VAL:CG1	1:A:175:LEU:N	0.42	2.81	4	2
1:A:34:SER:O	1:A:35:LEU:C	0.42	2.57	14	2
1:A:244:THR:O	1:A:248:SER:HB2	0.42	2.14	5	1
1:A:138:ASP:OD1	1:A:143:ARG:O	0.42	2.37	8	1
1:A:161:ILE:HG22	1:A:162:LEU:HD12	0.42	1.91	8	1
1:A:152:PHE:HA	1:A:179:ILE:HD11	0.42	1.91	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:226:ILE:HD11	1:A:236:MET:CE	0.42	2.44	10	1
1:A:213:ALA:HB1	1:A:256:VAL:CG1	0.42	2.44	11	1
1:A:103:LYS:HB3	1:A:149:TYR:CB	0.42	2.45	2	1
1:A:137:PHE:CE2	1:A:165:LEU:CD1	0.42	3.03	8	1
1:A:278:THR:CG2	1:A:281:ASP:HB2	0.42	2.43	11	1
1:A:70:VAL:HG12	1:A:71:LYS:N	0.42	2.29	14	1
1:A:151:ALA:O	1:A:155:ALA:CB	0.42	2.68	3	3
1:A:196:VAL:HG21	1:A:257:ILE:HG21	0.42	1.91	5	2
1:A:253:ALA:O	1:A:256:VAL:N	0.42	2.52	6	1
1:A:179:ILE:O	1:A:183:LEU:CB	0.42	2.67	7	2
1:A:72:VAL:CG2	1:A:82:ILE:CG2	0.42	2.98	8	1
1:A:31:ALA:CB	1:A:45:ILE:HG23	0.42	2.29	10	1
1:A:240:THR:CB	1:A:246:GLY:CA	0.42	2.97	10	1
1:A:104:SER:N	1:A:149:TYR:CE1	0.42	2.87	12	1
1:A:149:TYR:O	1:A:150:ASP:C	0.42	2.57	12	1
1:A:123:ASP:OD1	1:A:124:GLU:N	0.42	2.53	3	2
1:A:193:ASP:HB3	1:A:271:GLN:CB	0.42	2.45	5	2
1:A:91:PRO:O	1:A:95:ILE:CD1	0.42	2.66	6	1
1:A:148:ALA:O	1:A:152:PHE:CD1	0.42	2.73	13	2
1:A:149:TYR:OH	1:A:183:LEU:CD2	0.42	2.67	10	1
1:A:197:ALA:O	1:A:261:ILE:CG1	0.42	2.68	14	1
1:A:188:VAL:HG21	1:A:276:VAL:CG2	0.42	2.44	15	1
1:A:123:ASP:OD1	1:A:123:ASP:N	0.42	2.52	3	1
1:A:155:ALA:HB1	1:A:162:LEU:CD2	0.42	2.38	3	1
1:A:19:VAL:HG21	1:A:35:LEU:CD2	0.42	2.45	4	1
1:A:176:ILE:O	1:A:179:ILE:CG1	0.42	2.67	4	1
1:A:110:ILE:O	1:A:114:VAL:CG2	0.42	2.67	7	2
1:A:190:ILE:HD13	1:A:247:LEU:HG	0.42	1.90	7	1
1:A:194:ILE:C	1:A:194:ILE:CD1	0.42	2.85	9	1
1:A:23:VAL:HB	1:A:62:ILE:HB	0.42	1.90	10	1
1:A:130:PHE:C	1:A:135:TRP:CD1	0.42	2.93	10	1
1:A:240:THR:HB	1:A:246:GLY:HA2	0.42	1.92	11	1
1:A:45:ILE:HB	1:A:50:LEU:HD11	0.42	1.91	14	1
1:A:236:MET:HG3	1:A:236:MET:O	0.42	2.14	14	1
1:A:15:VAL:CG2	1:A:75:VAL:HG13	0.42	2.45	2	1
1:A:115:ALA:CB	1:A:120:TYR:CD2	0.42	3.03	3	1
1:A:281:ASP:OD1	1:A:282:GLU:N	0.42	2.53	3	1
1:A:32:TYR:CZ	1:A:42:GLU:HG3	0.42	2.50	9	1
1:A:18:VAL:C	1:A:19:VAL:CG2	0.42	2.88	10	1
1:A:173:GLU:O	1:A:177:ASN:HB2	0.42	2.15	10	1
1:A:236:MET:O	1:A:236:MET:CG	0.42	2.67	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:VAL:HG12	1:A:20:MET:N	0.42	2.29	10	3
1:A:62:ILE:O	1:A:62:ILE:HG13	0.42	2.15	3	1
1:A:138:ASP:OD1	1:A:145:GLY:N	0.42	2.51	9	1
1:A:47:LEU:HB2	1:A:58:ILE:HD12	0.42	1.91	11	1
1:A:272:MET:O	1:A:275:LYS:CE	0.42	2.68	12	1
1:A:137:PHE:CB	1:A:148:ALA:HA	0.42	2.45	15	1
1:A:258:LYS:O	1:A:262:GLU:HB2	0.41	2.14	2	1
1:A:45:ILE:HG22	1:A:84:LEU:CD2	0.41	2.44	4	1
1:A:24:ARG:O	1:A:64:ILE:HG12	0.41	2.15	7	1
1:A:178:ASN:O	1:A:182:ARG:CG	0.41	2.68	12	1
1:A:15:VAL:HG22	1:A:73:ILE:O	0.41	2.15	13	1
1:A:187:ALA:N	1:A:241:LEU:CD1	0.41	2.83	13	1
1:A:47:LEU:CD2	1:A:55:ILE:HD11	0.41	2.45	14	1
1:A:190:ILE:HG13	1:A:276:VAL:HG12	0.41	1.92	14	1
1:A:137:PHE:O	1:A:141:TYR:CE2	0.41	2.73	2	2
1:A:115:ALA:CA	1:A:120:TYR:HB2	0.41	2.45	2	3
1:A:118:LEU:HB2	1:A:120:TYR:CE1	0.41	2.50	5	2
1:A:43:GLY:HA3	1:A:82:ILE:HG23	0.41	1.91	6	1
1:A:112:ARG:O	1:A:115:ALA:HB3	0.41	2.13	6	1
1:A:95:ILE:HG13	1:A:96:LYS:N	0.41	2.30	9	1
1:A:218:SER:HB3	1:A:224:ILE:CD1	0.41	2.45	9	1
1:A:120:TYR:HE2	1:A:129:LEU:HD23	0.41	1.65	14	1
1:A:17:ASP:O	1:A:18:VAL:CG2	0.41	2.60	5	1
1:A:26:ILE:HG21	1:A:58:ILE:HG21	0.41	1.89	6	1
1:A:45:ILE:HG13	1:A:50:LEU:CD2	0.41	2.45	6	1
1:A:156:VAL:CG1	1:A:179:ILE:CG2	0.41	2.90	6	1
1:A:133:THR:HG22	1:A:152:PHE:HZ	0.41	1.73	8	1
1:A:111:LEU:HA	1:A:114:VAL:CG2	0.41	2.44	12	2
1:A:152:PHE:CG	1:A:179:ILE:HG12	0.41	2.51	2	1
1:A:27:GLN:CB	1:A:30:GLY:O	0.41	2.68	13	3
1:A:250:LEU:O	1:A:251:SER:C	0.41	2.59	6	1
1:A:257:ILE:O	1:A:261:ILE:N	0.41	2.53	6	2
1:A:76:ASP:CB	1:A:81:TYR:HB3	0.41	2.45	8	3
1:A:108:TYR:HA	1:A:130:PHE:HE1	0.41	1.75	8	1
1:A:156:VAL:CG1	1:A:157:SER:N	0.41	2.83	9	1
1:A:149:TYR:O	1:A:153:LYS:N	0.41	2.52	12	1
1:A:81:TYR:OH	1:A:83:ASP:CB	0.41	2.68	14	1
1:A:113:HIS:O	1:A:117:VAL:N	0.41	2.53	15	1
1:A:174:VAL:HG13	1:A:175:LEU:N	0.41	2.29	11	3
1:A:47:LEU:HA	1:A:50:LEU:HG	0.41	1.93	6	1
1:A:168:ASN:OD1	1:A:169:GLU:N	0.41	2.53	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:249:VAL:HG12	1:A:250:LEU:HD22	0.41	1.92	12	1
1:A:19:VAL:O	1:A:70:VAL:O	0.41	2.38	14	1
1:A:134:ALA:O	1:A:138:ASP:HB2	0.41	2.16	15	1
1:A:137:PHE:HA	1:A:140:LYS:HB2	0.41	1.92	1	1
1:A:50:LEU:C	1:A:50:LEU:CD1	0.41	2.89	5	1
1:A:121:THR:O	1:A:121:THR:HG23	0.41	2.14	5	1
1:A:206:ALA:CB	1:A:264:LYS:CB	0.41	2.98	12	1
1:A:21:VAL:CG1	1:A:35:LEU:HA	0.41	2.45	15	1
1:A:57:SER:O	1:A:58:ILE:CG1	0.41	2.69	1	1
1:A:73:ILE:HD12	1:A:73:ILE:N	0.41	2.31	2	1
1:A:145:GLY:O	1:A:149:TYR:CZ	0.41	2.74	12	2
1:A:267:VAL:CG1	1:A:268:PHE:N	0.41	2.84	10	2
1:A:78:GLU:O	1:A:79:LYS:CE	0.41	2.69	14	1
1:A:190:ILE:HD12	1:A:246:GLY:HA3	0.41	1.93	6	1
1:A:244:THR:O	1:A:248:SER:CB	0.41	2.69	6	1
1:A:26:ILE:CD1	1:A:58:ILE:CG2	0.41	2.99	10	1
1:A:35:LEU:CD2	1:A:42:GLU:O	0.41	2.68	12	1
1:A:223:PRO:HB2	1:A:239:THR:OG1	0.41	2.16	14	1
1:A:113:HIS:O	1:A:117:VAL:HG13	0.41	2.15	1	1
1:A:193:ASP:C	1:A:194:ILE:HG23	0.41	2.36	14	2
1:A:101:PHE:O	1:A:105:LYS:HB3	0.41	2.16	3	1
1:A:153:LYS:CA	1:A:183:LEU:HD13	0.41	2.46	4	1
1:A:211:LEU:O	1:A:215:LEU:CD1	0.41	2.69	5	2
1:A:254:MET:O	1:A:268:PHE:CE2	0.41	2.74	6	1
1:A:168:ASN:O	1:A:169:GLU:CB	0.41	2.68	7	1
1:A:188:VAL:O	1:A:239:THR:HA	0.41	2.16	7	1
1:A:214:GLY:HA3	1:A:257:ILE:CD1	0.41	2.46	7	1
1:A:12:PHE:CD1	1:A:12:PHE:C	0.41	2.93	9	1
1:A:156:VAL:HG13	1:A:157:SER:N	0.41	2.31	9	1
1:A:236:MET:SD	1:A:254:MET:HG2	0.41	2.55	9	1
1:A:241:LEU:N	1:A:241:LEU:CD1	0.41	2.75	9	1
1:A:45:ILE:HB	1:A:84:LEU:CB	0.41	2.45	10	1
1:A:122:LYS:O	1:A:125:GLN:N	0.41	2.52	10	1
1:A:195:GLU:HB3	1:A:269:ASN:CB	0.41	2.46	11	1
1:A:45:ILE:HD11	1:A:47:LEU:HD12	0.41	1.92	12	1
1:A:155:ALA:HB2	1:A:161:ILE:HG21	0.41	1.93	12	1
1:A:206:ALA:HB2	1:A:264:LYS:CG	0.41	2.45	12	1
1:A:211:LEU:O	1:A:215:LEU:HG	0.41	2.16	13	1
1:A:223:PRO:O	1:A:224:ILE:HG12	0.41	2.16	14	1
1:A:250:LEU:HD22	1:A:250:LEU:N	0.41	2.31	14	1
1:A:74:ARG:O	1:A:83:ASP:CB	0.41	2.69	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:LEU:HA	1:A:50:LEU:HD12	0.41	1.93	2	1
1:A:89:VAL:O	1:A:89:VAL:CG2	0.41	2.67	3	1
1:A:190:ILE:HG22	1:A:238:THR:HG22	0.41	1.92	4	1
1:A:131:GLN:O	1:A:131:GLN:HG2	0.41	2.15	5	1
1:A:75:VAL:HB	1:A:81:TYR:O	0.41	2.15	6	1
1:A:141:TYR:CD1	1:A:141:TYR:N	0.41	2.88	7	1
1:A:11:LYS:O	1:A:11:LYS:CG	0.41	2.68	10	1
1:A:134:ALA:O	1:A:148:ALA:CB	0.41	2.69	10	1
1:A:179:ILE:HG12	1:A:183:LEU:HD12	0.41	1.92	10	1
1:A:45:ILE:HA	1:A:84:LEU:O	0.41	2.16	11	1
1:A:55:ILE:O	1:A:55:ILE:CG2	0.41	2.69	11	1
1:A:99:ASP:O	1:A:100:LYS:C	0.41	2.60	13	1
1:A:176:ILE:HD13	1:A:179:ILE:HD11	0.41	1.91	14	1
1:A:156:VAL:HG11	1:A:180:ASN:OD1	0.40	2.16	2	1
1:A:179:ILE:O	1:A:183:LEU:C	0.40	2.59	3	1
1:A:194:ILE:O	1:A:234:TYR:HB2	0.40	2.16	7	1
1:A:81:TYR:C	1:A:82:ILE:CG1	0.40	2.90	9	1
1:A:162:LEU:HD12	1:A:162:LEU:O	0.40	2.16	11	1
1:A:12:PHE:CD1	1:A:12:PHE:O	0.40	2.74	14	1
1:A:21:VAL:HG12	1:A:70:VAL:CG2	0.40	2.46	14	1
1:A:212:ARG:O	1:A:216:ASN:CB	0.40	2.69	8	1
1:A:244:THR:O	1:A:248:SER:HB3	0.40	2.16	9	1
1:A:128:SER:O	1:A:132:ARG:CG	0.40	2.69	11	1
1:A:104:SER:CB	1:A:149:TYR:OH	0.40	2.70	12	1
1:A:73:ILE:CG2	1:A:83:ASP:CG	0.40	2.90	15	1
1:A:23:VAL:HG11	1:A:63:ARG:O	0.40	2.16	3	1
1:A:243:ARG:CB	1:A:243:ARG:CZ	0.40	3.00	4	1
1:A:17:ASP:HA	1:A:72:VAL:N	0.40	2.31	5	1
1:A:47:LEU:HB3	1:A:55:ILE:HD11	0.40	1.93	9	1
1:A:141:TYR:CE1	1:A:147:GLY:C	0.40	2.95	9	1
1:A:289:MET:O	1:A:290:GLU:O	0.40	2.39	11	1
1:A:137:PHE:HE1	1:A:161:ILE:HG22	0.40	1.77	14	1
1:A:218:SER:OG	1:A:224:ILE:CD1	0.40	2.69	14	1
1:A:76:ASP:CB	1:A:81:TYR:HB2	0.40	2.46	2	1
1:A:194:ILE:HA	1:A:269:ASN:O	0.40	2.16	2	1
1:A:167:LEU:HD13	1:A:172:ARG:N	0.40	2.32	7	1
1:A:21:VAL:HG11	1:A:84:LEU:HD21	0.40	1.92	8	1
1:A:167:LEU:CD2	1:A:171:GLU:CB	0.40	3.00	10	1
1:A:14:GLU:O	1:A:15:VAL:O	0.40	2.39	14	1
1:A:101:PHE:CD1	1:A:105:LYS:HB2	0.40	2.50	14	1
1:A:47:LEU:HA	1:A:50:LEU:CD2	0.40	2.47	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:271:GLN:OE1	1:A:271:GLN:CA	0.40	2.70	4	1
1:A:240:THR:CG2	1:A:246:GLY:HA2	0.40	2.47	5	1
1:A:83:ASP:OD1	1:A:84:LEU:N	0.40	2.54	6	1
1:A:242:GLU:HB2	1:A:245:GLU:CB	0.40	2.47	6	1
1:A:18:VAL:C	1:A:19:VAL:HG13	0.40	2.36	7	1
1:A:61:LEU:C	1:A:62:ILE:HG23	0.40	2.36	7	1
1:A:179:ILE:CG2	1:A:180:ASN:N	0.40	2.84	9	1
1:A:261:ILE:CG2	1:A:262:GLU:N	0.40	2.85	11	1
1:A:272:MET:CE	1:A:275:LYS:HB3	0.40	2.47	11	1
1:A:138:ASP:OD1	1:A:139:ASP:N	0.40	2.55	12	1
1:A:228:LEU:CD1	1:A:234:TYR:CE2	0.40	3.05	14	1
1:A:18:VAL:C	1:A:19:VAL:CG1	0.40	2.89	15	1
1:A:134:ALA:O	1:A:138:ASP:CB	0.40	2.69	15	1
1:A:191:ARG:O	1:A:275:LYS:HB3	0.40	2.17	15	1
1:A:210:ALA:C	1:A:257:ILE:HG22	0.40	2.36	15	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	258/308 (84%)	219±4 (85±1%)	27±3 (11±1%)	11±2 (4±1%)	4	29
All	All	3870/4620 (84%)	3288 (85%)	412 (11%)	170 (4%)	4	29

All 35 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	64	ILE	15
1	A	273	GLU	15
1	A	242	GLU	13
1	A	11	LYS	12
1	A	218	SER	9
1	A	289	MET	9
1	A	187	ALA	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	13	PRO	8
1	A	15	VAL	8
1	A	16	GLU	7
1	A	123	ASP	7
1	A	166	ASP	7
1	A	79	LYS	6
1	A	35	LEU	6
1	A	290	GLU	5
1	A	42	GLU	5
1	A	52	ARG	3
1	A	241	LEU	3
1	A	14	GLU	3
1	A	17	ASP	3
1	A	55	ILE	2
1	A	74	ARG	2
1	A	54	ARG	2
1	A	278	THR	1
1	A	18	VAL	1
1	A	291	ARG	1
1	A	165	LEU	1
1	A	133	THR	1
1	A	57	SER	1
1	A	56	ARG	1
1	A	53	ARG	1
1	A	58	ILE	1
1	A	61	LEU	1
1	A	279	ASP	1
1	A	77	LYS	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	233/278 (84%)	163±7 (70±3%)	70±7 (30±3%)	1 16
All	All	3495/4170 (84%)	2446 (70%)	1049 (30%)	1 16

All 184 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	129	LEU	15
1	A	81	TYR	14
1	A	248	SER	14
1	A	11	LYS	13
1	A	211	LEU	13
1	A	239	THR	13
1	A	111	LEU	12
1	A	146	TYR	12
1	A	191	ARG	12
1	A	249	VAL	12
1	A	240	THR	11
1	A	265	ARG	11
1	A	273	GLU	11
1	A	24	ARG	11
1	A	87	ARG	11
1	A	25	SER	10
1	A	57	SER	10
1	A	207	VAL	10
1	A	74	ARG	10
1	A	90	SER	10
1	A	233	ARG	10
1	A	103	LYS	10
1	A	278	THR	10
1	A	29	MET	9
1	A	44	MET	9
1	A	47	LEU	9
1	A	96	LYS	9
1	A	120	TYR	9
1	A	212	ARG	9
1	A	238	THR	9
1	A	287	ARG	9
1	A	289	MET	9
1	A	133	THR	9
1	A	46	HIS	9
1	A	27	GLN	8
1	A	35	LEU	8
1	A	53	ARG	8
1	A	60	LYS	8
1	A	66	ARG	8
1	A	141	TYR	8
1	A	225	LYS	8
1	A	279	ASP	8
1	A	77	LYS	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	86	LYS	8
1	A	271	GLN	8
1	A	112	ARG	8
1	A	269	ASN	8
1	A	20	MET	7
1	A	71	LYS	7
1	A	84	LEU	7
1	A	88	ARG	7
1	A	93	GLU	7
1	A	128	SER	7
1	A	189	LYS	7
1	A	217	CYS	7
1	A	244	THR	7
1	A	259	GLU	7
1	A	264	LYS	7
1	A	285	LEU	7
1	A	288	GLN	7
1	A	99	ASP	7
1	A	119	GLU	7
1	A	142	LYS	7
1	A	164	SER	7
1	A	208	LYS	7
1	A	219	THR	7
1	A	132	ARG	7
1	A	165	LEU	7
1	A	235	VAL	7
1	A	49	GLU	6
1	A	162	LEU	6
1	A	242	GLU	6
1	A	243	ARG	6
1	A	254	MET	6
1	A	275	LYS	6
1	A	292	LEU	6
1	A	68	GLU	6
1	A	125	GLN	6
1	A	127	GLU	6
1	A	182	ARG	6
1	A	195	GLU	6
1	A	251	SER	6
1	A	260	LYS	6
1	A	45	ILE	6
1	A	63	ARG	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	256	VAL	6
1	A	281	ASP	6
1	A	241	LEU	6
1	A	32	TYR	6
1	A	48	SER	5
1	A	54	ARG	5
1	A	92	GLU	5
1	A	123	ASP	5
1	A	137	PHE	5
1	A	158	ASP	5
1	A	160	SER	5
1	A	198	CYS	5
1	A	172	ARG	5
1	A	258	LYS	5
1	A	263	GLU	5
1	A	14	GLU	5
1	A	122	LYS	5
1	A	105	LYS	5
1	A	181	ARG	5
1	A	284	GLU	5
1	A	291	ARG	5
1	A	169	GLU	5
1	A	228	LEU	5
1	A	106	THR	5
1	A	173	GLU	5
1	A	157	SER	5
1	A	16	GLU	4
1	A	51	SER	4
1	A	139	ASP	4
1	A	154	HIS	4
1	A	168	ASN	4
1	A	245	GLU	4
1	A	282	GLU	4
1	A	85	SER	4
1	A	138	ASP	4
1	A	170	ASP	4
1	A	59	ASN	4
1	A	116	GLU	4
1	A	166	ASP	4
1	A	290	GLU	4
1	A	42	GLU	4
1	A	55	ILE	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	100	LYS	4
1	A	124	GLU	4
1	A	143	ARG	4
1	A	178	ASN	4
1	A	167	LEU	4
1	A	61	LEU	3
1	A	108	TYR	3
1	A	209	GLU	3
1	A	179	ILE	3
1	A	188	VAL	3
1	A	140	LYS	3
1	A	218	SER	3
1	A	252	GLN	3
1	A	236	MET	3
1	A	69	CYS	3
1	A	163	ASP	3
1	A	190	ILE	3
1	A	52	ARG	3
1	A	73	ILE	3
1	A	98	GLU	3
1	A	153	LYS	3
1	A	56	ARG	3
1	A	79	LYS	3
1	A	34	SER	2
1	A	283	THR	2
1	A	28	GLU	2
1	A	149	TYR	2
1	A	152	PHE	2
1	A	280	THR	2
1	A	67	ASN	2
1	A	183	LEU	2
1	A	227	ASN	2
1	A	257	ILE	2
1	A	130	PHE	2
1	A	176	ILE	2
1	A	177	ASN	2
1	A	78	GLU	2
1	A	113	HIS	2
1	A	272	MET	2
1	A	131	GLN	2
1	A	150	ASP	2
1	A	193	ASP	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	104	SER	2
1	A	194	ILE	2
1	A	262	GLU	2
1	A	121	THR	2
1	A	76	ASP	2
1	A	171	GLU	2
1	A	95	ILE	1
1	A	83	ASP	1
1	A	180	ASN	1
1	A	17	ASP	1
1	A	62	ILE	1
1	A	126	LEU	1
1	A	136	VAL	1
1	A	175	LEU	1
1	A	50	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

No chemical shift data were provided