



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 04:25 PM BST

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](mailto:validation@mail.wwpdb.org)  
A user guide is available at  
<http://wwpdb.org/validation/2016/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:

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)  
NmrClust : Kelley et al. (1996)  
MolProbity : 4.02b-467  
Mogul : unknown  
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)  
RCI : v\_1n\_11\_5\_13\_A (Berjanski et al., 2005)  
PANAV : Wang et al. (2010)  
ShiftChecker : rb-20027457  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : rb-20027457

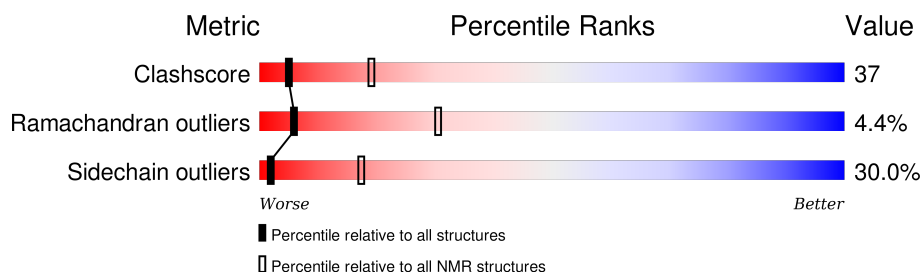
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

The overall completeness of chemical shifts assignment is 30%.

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	114402	11133
Ramachandran outliers	111179	9975
Sidechain outliers	111093	9958

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	308	

## 2 Ensemble composition and analysis

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 3 clusters. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 4, 6, 11, 14, 15
2	3, 9, 10, 12, 13
3	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
1	A	300	Total	C	H	N	O	S	0
			4874	1515	2449	427	469	14	

There are 12 discrepancies between the modelled and reference sequences:

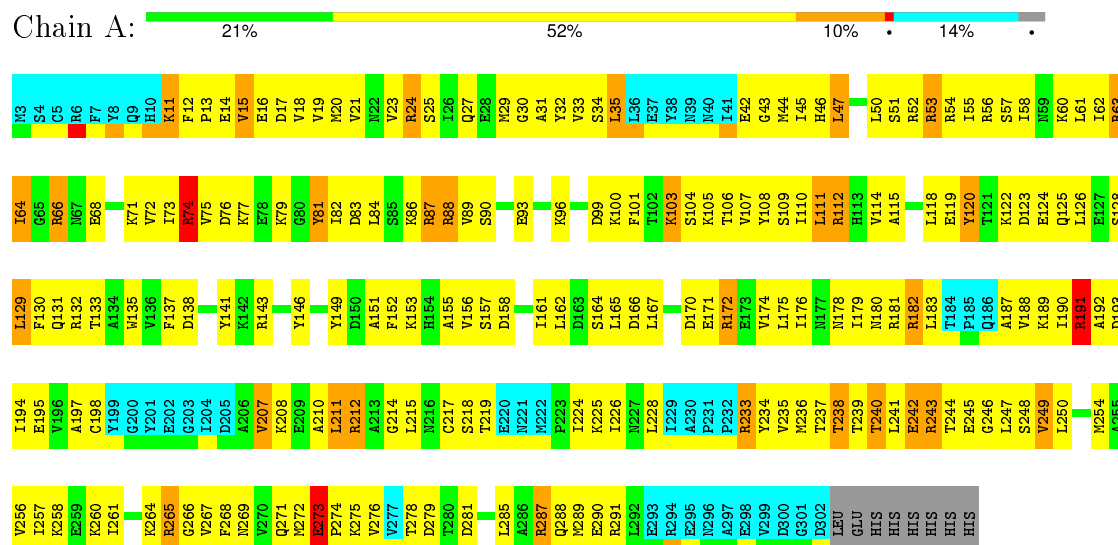
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	3	MET	-	CLONING ARTIFACT	UNP P05198
A	27	GLN	ALA	ENGINEERED	UNP P05198
A	46	HIS	LEU	ENGINEERED	UNP P05198
A	71	LYS	VAL	ENGINEERED	UNP P05198
A	303	LEU	-	CLONING ARTIFACT	UNP P05198
A	304	GLU	-	CLONING ARTIFACT	UNP P05198
A	305	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP 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 and DNA 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

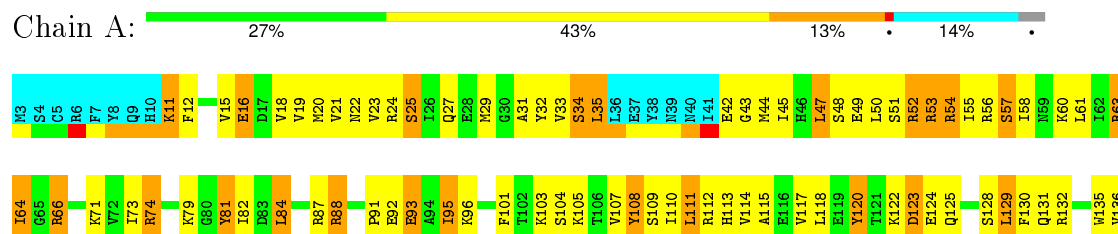


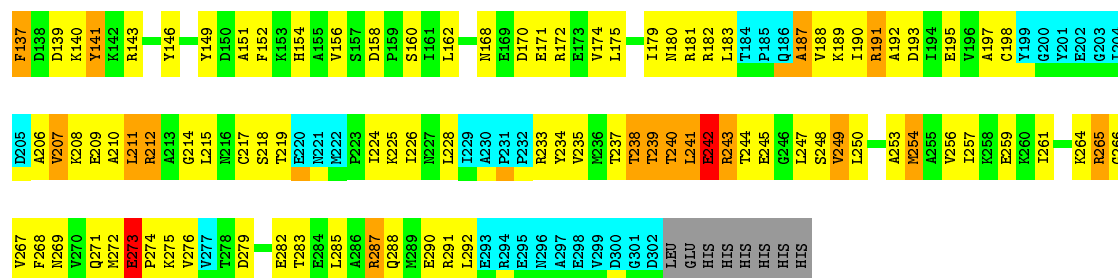
### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

#### 4.2.1 Score per residue for model 1

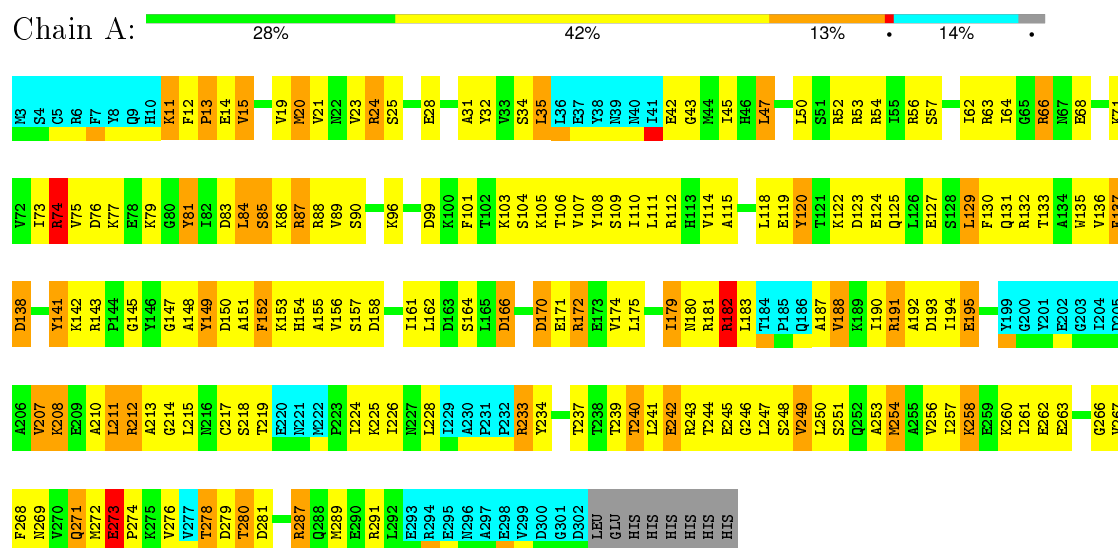
- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 2 subunit 1





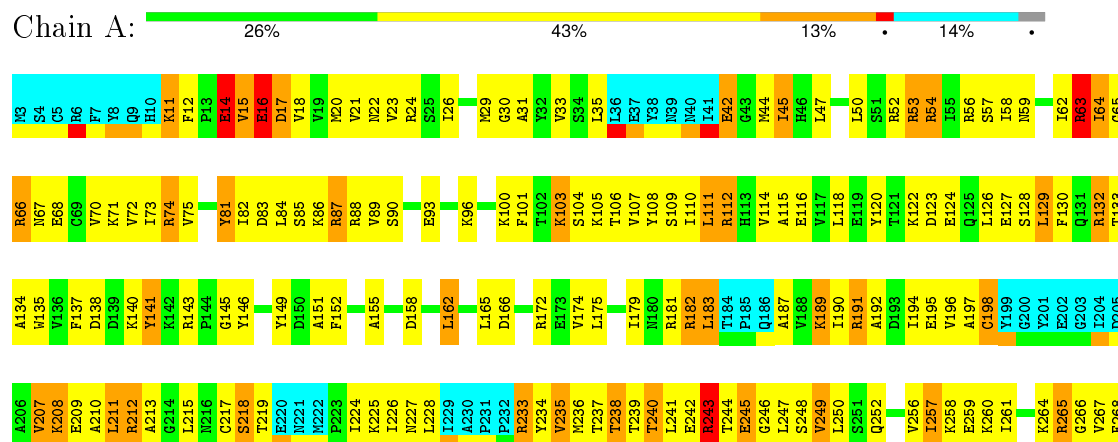
#### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 2 subunit 1



#### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 2 subunit 1

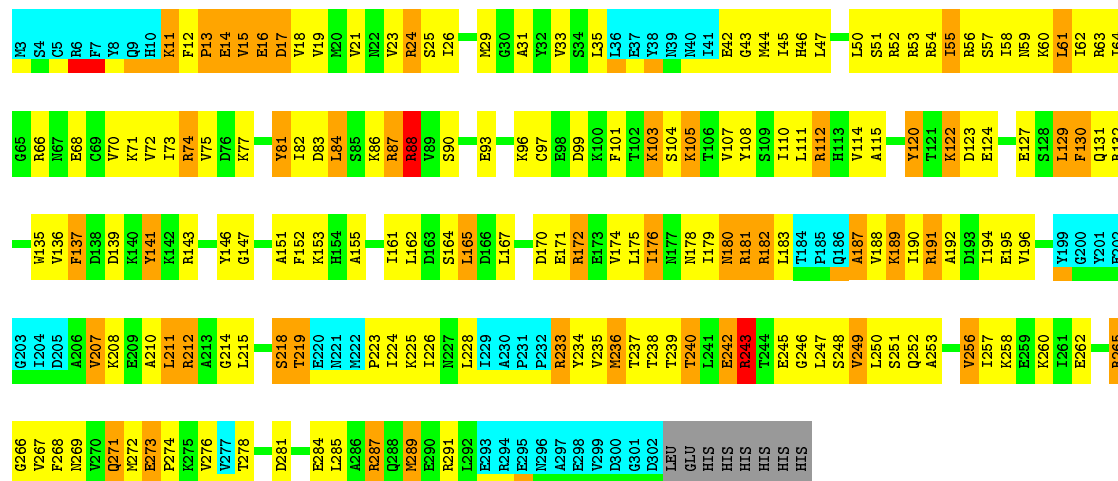




#### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 2 subunit 1

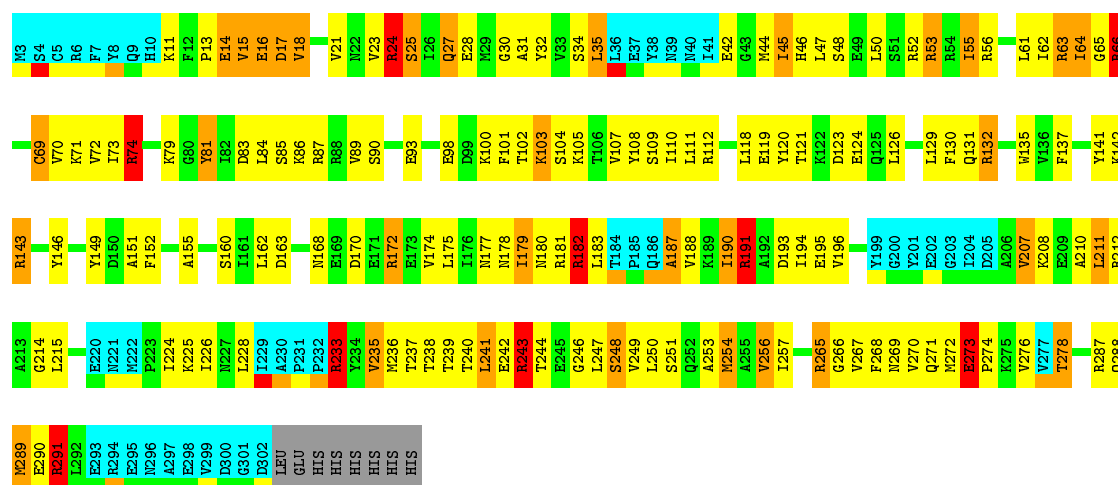
Chain A: 28% 40% 15% 14%



#### 4.2.5 Score per residue for model 5

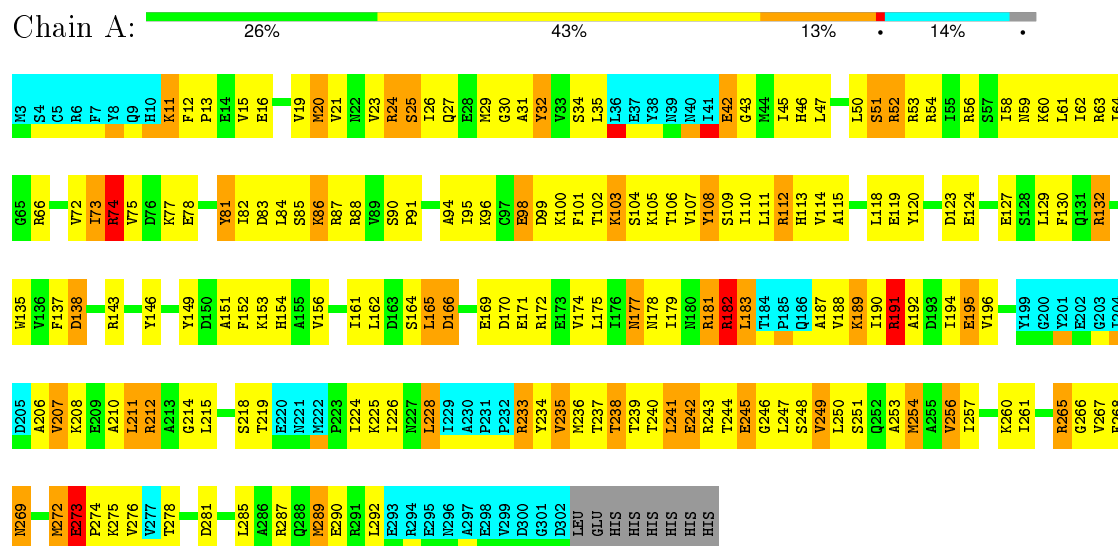
- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 2 subunit 1

Chain A: 33% 38% 10% 14%



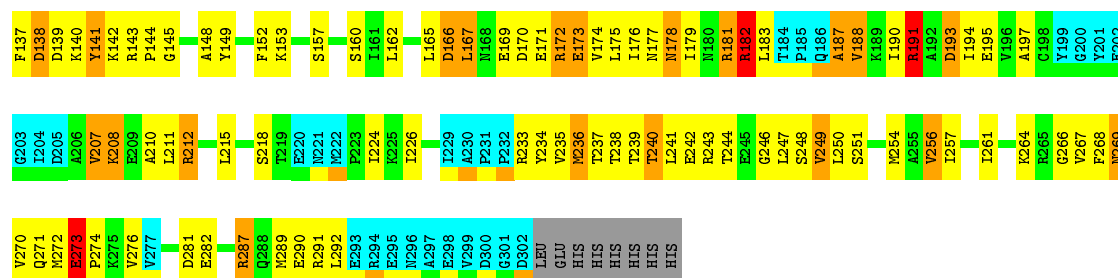
### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 2 subunit 1



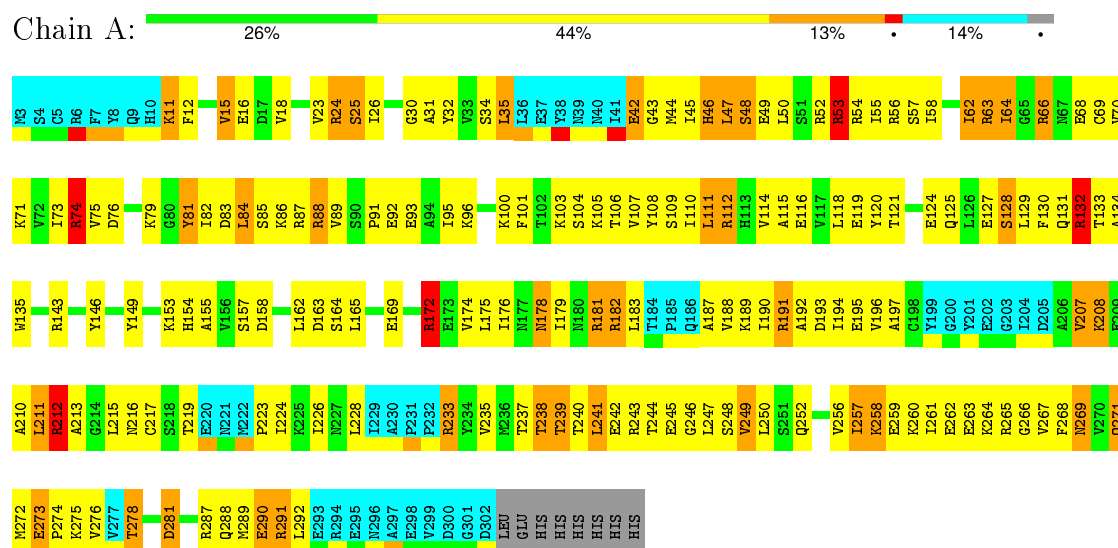






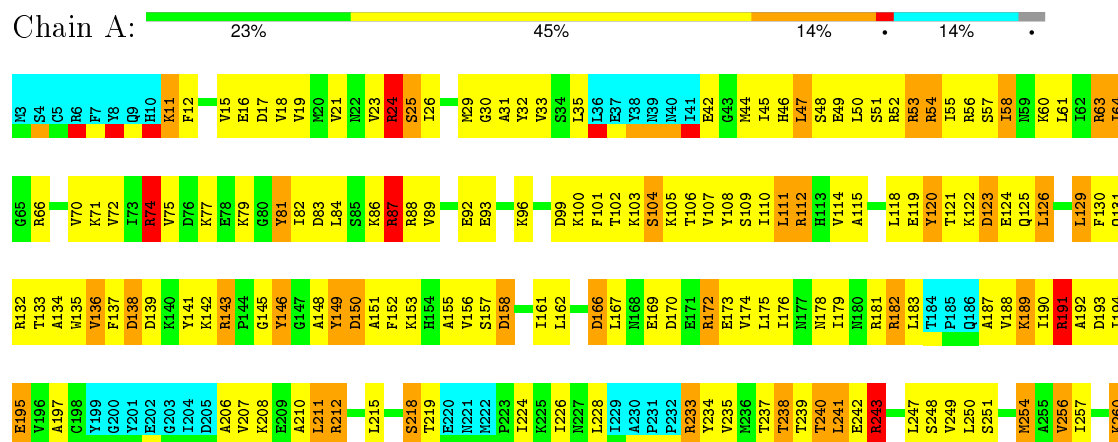
#### 4.2.11 Score per residue for model 11

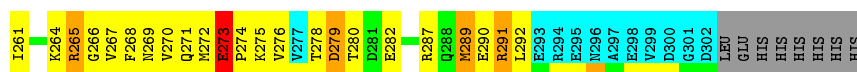
- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 2 subunit 1



#### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 2 subunit 1

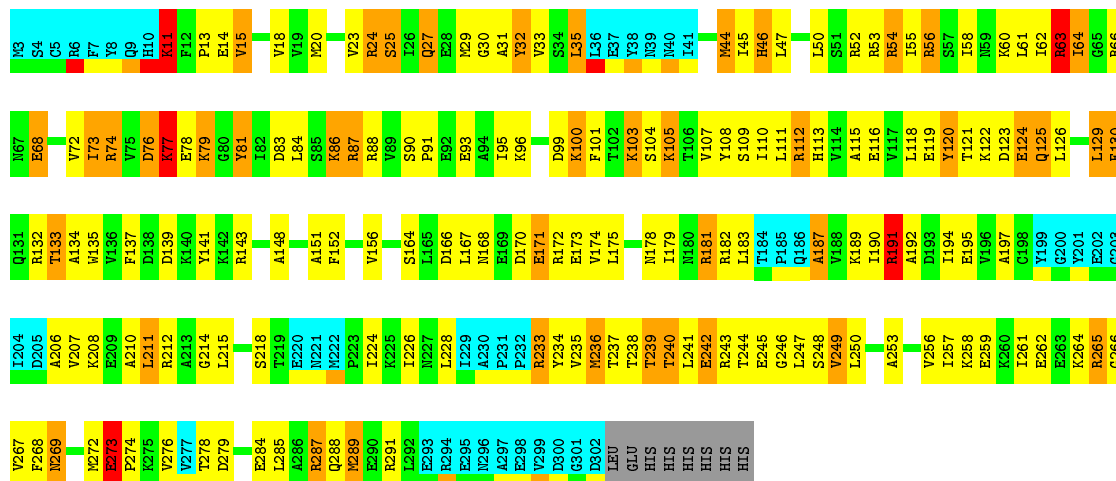




#### 4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 2 subunit 1

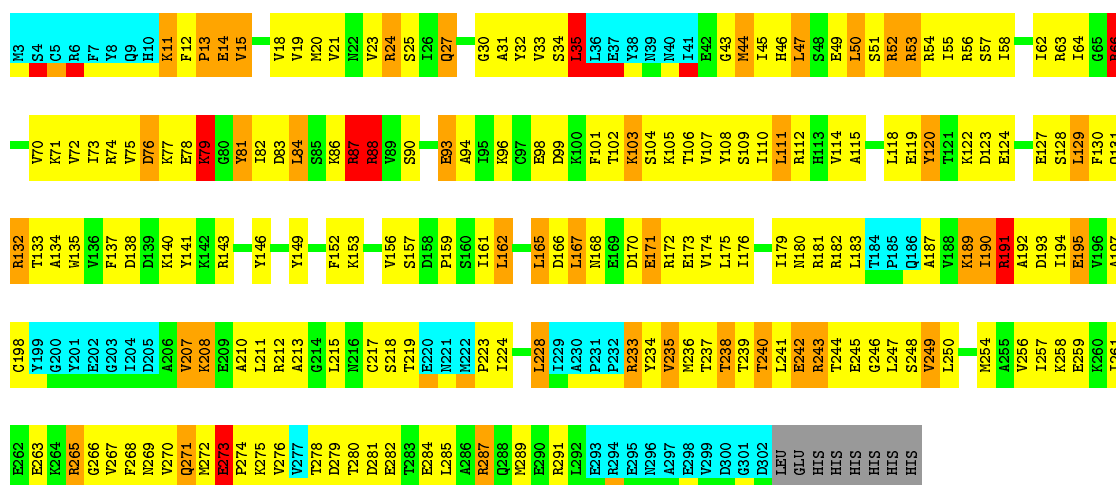
Chain A:  29% 39% 14% • 14% •



#### 4.2.14 Score per residue for model 14

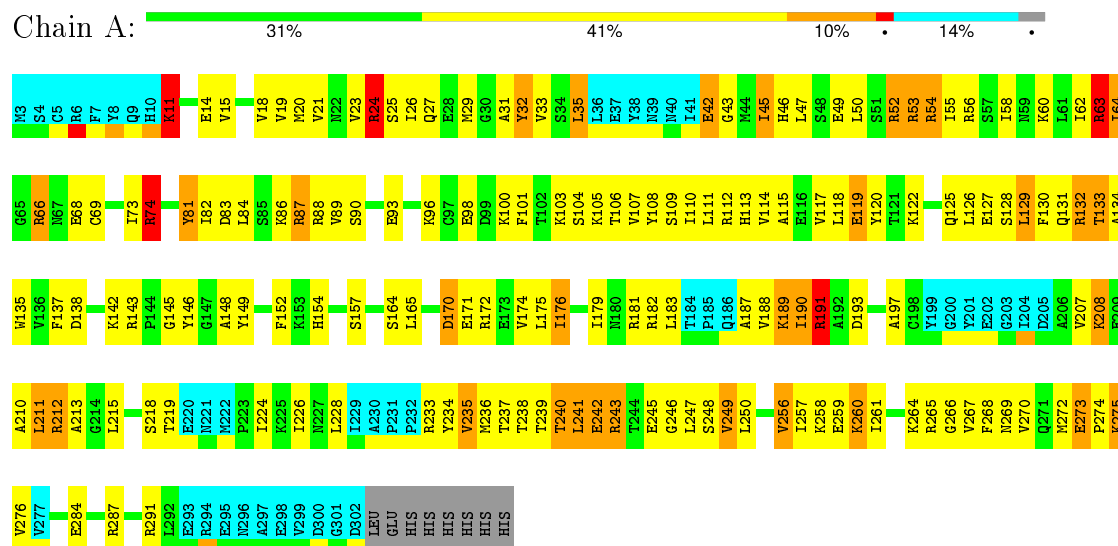
- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 2 subunit 1

Chain A:  22% 46% 13% 1% 14% 1%



### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 2 subunit 1



## 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

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

Chemical shift file(s)	BMRB entry 5917
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1122
Number of shifts mapped to atoms	1122
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	30%

No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.

## 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	287	ARG	Sidechain	15
1	A	182	ARG	Sidechain	15
1	A	24	ARG	Sidechain	15
1	A	52	ARG	Sidechain	15
1	A	191	ARG	Sidechain	15
1	A	243	ARG	Sidechain	15
1	A	112	ARG	Sidechain	15
1	A	53	ARG	Sidechain	15
1	A	56	ARG	Sidechain	15
1	A	63	ARG	Sidechain	15
1	A	181	ARG	Sidechain	15
1	A	172	ARG	Sidechain	15
1	A	87	ARG	Sidechain	14
1	A	291	ARG	Sidechain	14
1	A	66	ARG	Sidechain	14
1	A	54	ARG	Sidechain	14
1	A	74	ARG	Sidechain	14
1	A	143	ARG	Sidechain	14
1	A	132	ARG	Sidechain	14
1	A	212	ARG	Sidechain	14
1	A	88	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

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:190:ILE:CG2	1:A:247:LEU:HD23	0.78	2.07	14	12
1:A:179:ILE:HG23	1:A:183:LEU:HD12	0.78	1.55	1	3
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:179:ILE:O	1:A:183:LEU:HD12	0.77	1.80	8	5
1:A:243:ARG:HA	1:A:276:VAL:HG11	0.77	1.57	4	1
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:247:LEU:CD1	1:A:276:VAL:HG23	0.73	2.12	1	1
1:A:111:LEU:CD2	1:A:129:LEU:HD12	0.73	2.13	15	8
1:A:247:LEU:HD11	1:A:276:VAL:CG2	0.73	2.13	9	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: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:21:VAL:HG21	1:A:33:VAL:HG21	0.72	1.60	8	3
1:A:188:VAL:HG13	1:A:190:ILE:CG1	0.72	2.15	7	1
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:70:VAL:HG23	1:A:84:LEU:HD22	0.70	1.62	9	2
1:A:110:ILE:HD11	1:A:182:ARG:HB3	0.70	1.62	2	1
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:45:ILE:HD13	1:A:50:LEU:HD11	0.70	1.62	12	1
1:A:170:ASP:O	1:A:174:VAL:HG23	0.70	1.86	10	6
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:190:ILE:HG12	1:A:276:VAL:HG12	0.68	1.63	8	6
1:A:50:LEU:HD12	1:A:50:LEU:C	0.68	2.08	15	2
1:A:26:ILE:HG23	1:A:58:ILE:HD12	0.68	1.65	4	1
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: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:21:VAL:HG12	1:A:35:LEU:HG	0.67	1.63	2	1
1:A:107:VAL:HA	1:A:110:ILE:HD12	0.67	1.65	13	10
1:A:15:VAL:HG13	1:A:74:ARG:HA	0.67	1.63	12	2
1:A:72:VAL:HG21	1:A:82:ILE:CG2	0.67	2.18	4	1
1:A:33:VAL:HG21	1:A:84:LEU:HD22	0.67	1.66	1	3
1:A:187:ALA:CB	1:A:241:LEU:HD22	0.67	2.19	11	5
1:A:236:MET:HG2	1:A:250:LEU:HD12	0.67	1.63	10	2
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:26:ILE:CG2	1:A:58:ILE:HG21	0.67	2.18	6	1
1:A:137:PHE:CZ	1:A:161:ILE:HG22	0.67	2.25	4	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:103:LYS:CB	1:A:149:TYR:CG	0.66	2.78	12	1
1:A:89:VAL:O	1:A:89:VAL:HG13	0.66	1.89	15	2
1:A:72:VAL:CG2	1:A:82:ILE:HG22	0.66	2.20	4	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:HD23	1:A:126:LEU:C	0.66	2.11	10	2
1:A:72:VAL:HG22	1:A:83:ASP:O	0.65	1.90	4	1
1:A:111:LEU:HD21	1:A:133:THR:OG1	0.65	1.90	2	2
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:50:LEU:C	1:A:50:LEU:HD12	0.65	2.11	6	2
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	4
1:A:45:ILE:C	1:A:45:ILE:HD13	0.64	2.12	7	4
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	10
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	1
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:46:HIS:O	1:A:50:LEU:HD23	0.62	1.94	9	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
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
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:75:VAL:HG12	1:A:82:ILE:HG13	0.62	1.71	8	1
1:A:153:LYS:O	1:A:156:VAL:HG22	0.62	1.94	2	1
1:A:194:ILE:C	1:A:194:ILE:HD13	0.62	2.16	9	1
1:A:73:ILE:HD11	1:A:85:SER:N	0.62	2.10	2	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:187:ALA:HB1	1:A:240:THR:C	0.60	2.17	15	5
1:A:103:LYS:HB2	1:A:149:TYR:CD2	0.60	2.31	2	3
1:A:81:TYR:CG	1:A:82:ILE:N	0.60	2.69	6	7
1:A:89:VAL:HG13	1:A:89:VAL:O	0.60	1.96	2	3
1:A:187:ALA:HA	1:A:241:LEU:HD13	0.60	1.73	3	2
1:A:81:TYR:C	1:A:81:TYR:CD1	0.60	2.74	13	7
1:A:126:LEU:O	1:A:126:LEU:HD23	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:31:ALA:CB	1:A:47:LEU:HD21	0.60	2.24	15	1
1:A:159:PRO:HA	1:A:162:LEU:HD21	0.60	1.72	14	1
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:268:PHE:HE1	1:A:270:VAL:HG23	0.60	1.55	15	6
1:A:256:VAL:HG12	1:A:257:ILE:N	0.60	2.11	15	15
1:A:187:ALA:HA	1:A:241:LEU:N	0.60	2.11	5	3
1:A:18:VAL:HG13	1:A:18:VAL:O	0.60	1.96	14	5
1:A:149:TYR:N	1:A:149:TYR:CD1	0.60	2.70	2	2
1:A:138:ASP:HB2	1:A:148:ALA:HB2	0.60	1.74	8	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:73:ILE:HG22	1:A:74:ARG:HG2	0.60	1.71	2	1
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: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:190:ILE:HG12	1:A:247:LEU:HD21	0.59	1.75	4	3
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:156:VAL:HG12	1:A:179:ILE:HG13	0.59	1.75	13	2
1:A:120:TYR:O	1:A:120:TYR:CG	0.59	2.55	12	1
1:A:15:VAL:O	1:A:72:VAL:HB	0.59	1.97	4	1
1:A:135:TRP:N	1:A:135:TRP:CD1	0.59	2.65	13	5
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:219:THR:O	1:A:219:THR:HG23	0.58	1.98	8	1
1:A:241:LEU:N	1:A:241:LEU:HD12	0.58	2.13	5	1
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:HG23	1:A:89:VAL:O	0.58	1.98	3	1
1:A:73:ILE:HD11	1:A:83:ASP:OD1	0.58	1.98	11	1
1:A:62:ILE:HD11	1:A:86:LYS:NZ	0.58	2.13	5	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:89:VAL:O	1:A:89:VAL:HG23	0.57	1.98	11	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:HG13	1:A:235:VAL:O	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

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
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
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:135:TRP:CD1	1:A:135:TRP:N	0.57	2.67	5	6
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:190:ILE:HB	1:A:238:THR:HG23	0.56	1.76	6	2
1:A:107:VAL:O	1:A:111:LEU:HD12	0.56	1.99	7	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:206:ALA:HB2	1:A:264:LYS:CB	0.56	2.30	12	1
1:A:141:TYR:OH	1:A:148:ALA:HB2	0.56	2.00	2	1
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:108:TYR:CD2	1:A:130:PHE:HE2	0.56	2.15	2	2
1:A:35:LEU:HD12	1:A:82:ILE:HD12	0.56	1.78	9	1
1:A:141:TYR:CZ	1:A:148:ALA:N	0.56	2.74	2	1
1:A:228:LEU:HD12	1:A:234:TYR:CZ	0.56	2.36	2	4
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:138:ASP:HA	1:A:141:TYR:CE1	0.56	2.36	2	1
1:A:228:LEU:HD23	1:A:228:LEU:O	0.56	2.00	7	1
1:A:72:VAL:HG22	1:A:82:ILE:CG2	0.56	2.31	8	1
1:A:194:ILE:HB	1:A:268:PHE:CZ	0.56	2.36	8	3
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:175:LEU:HD13	1:A:175:LEU:C	0.55	2.22	13	4
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:18:VAL:O	1:A:18:VAL:HG13	0.55	1.99	7	3
1:A:114:VAL:HG13	1:A:174:VAL:HG11	0.55	1.77	4	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:197:ALA:O	1:A:267:VAL:N	0.55	2.39	15	3
1:A:104:SER:HA	1:A:107:VAL:CG1	0.55	2.32	13	13
1:A:47:LEU:HD21	1:A:58:ILE:HG12	0.55	1.79	12	2
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
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	2
1:A:70:VAL:CG2	1:A:84:LEU:HD22	0.55	2.32	12	1
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: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:156:VAL:HG21	1:A:180:ASN:ND2	0.55	2.17	9	1
1:A:190:ILE:HG21	1:A:250:LEU:HD11	0.55	1.78	4	1
1:A:55:ILE:O	1:A:55:ILE:HG23	0.55	2.00	11	2
1:A:16:GLU:O	1:A:18:VAL:N	0.55	2.40	5	1
1:A:226:ILE:HG23	1:A:226:ILE:O	0.55	2.02	1	5
1:A:45:ILE:HD13	1:A:45:ILE:C	0.55	2.23	5	2
1:A:238:THR:HG21	1:A:250:LEU:HD11	0.55	1.78	5	1
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:148:ALA:O	1:A:152:PHE:CD2	0.54	2.60	2	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:45:ILE:HD12	1:A:45:ILE:C	0.54	2.22	4	3
1:A:175:LEU:HD13	1:A:176:ILE:N	0.54	2.18	15	1
1:A:197:ALA:HB3	1:A:267:VAL:HB	0.54	1.79	15	2
1:A:62:ILE:HG23	1:A:66:ARG:HB3	0.54	1.78	5	1
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: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:198:CYS:SG	1:A:206:ALA:HB3	0.54	2.42	9	2
1:A:16:GLU:O	1:A:17:ASP:O	0.54	2.25	4	2
1:A:70:VAL:HA	1:A:89:VAL:HG21	0.54	1.79	12	1
1:A:23:VAL:HG23	1:A:62:ILE:HD12	0.54	1.80	4	2
1:A:175:LEU:O	1:A:175:LEU:HD13	0.54	2.03	10	1
1:A:226:ILE:O	1:A:226:ILE:HG23	0.53	2.03	4	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:194:ILE:HD11	1:A:196:VAL:CG2	0.53	2.20	9	1
1:A:33:VAL:O	1:A:43:GLY:N	0.53	2.41	14	3
1:A:76:ASP:HB2	1:A:81:TYR:CD1	0.53	2.37	13	2
1:A:247:LEU:HD22	1:A:274:PRO:CA	0.53	2.32	5	1
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
1:A:190:ILE:HD13	1:A:247:LEU:HD23	0.53	1.79	11	1
1:A:141:TYR:OH	1:A:148:ALA:N	0.53	2.42	2	1
1:A:35:LEU:HD21	1:A:84:LEU:HD11	0.53	1.80	15	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:14:GLU:HG3	1:A:75:VAL:HG22	0.53	1.80	7	1
1:A:190:ILE:HD13	1:A:247:LEU:N	0.53	2.19	13	5
1:A:213:ALA:HB2	1:A:260:LYS:HE3	0.53	1.80	3	1
1:A:12:PHE:CD2	1:A:12:PHE:O	0.53	2.61	12	1
1:A:70:VAL:CG2	1:A:84:LEU:HD23	0.53	2.34	4	1
1:A:19:VAL:HG12	1:A:20:MET:H	0.53	1.64	10	1
1:A:215:LEU:HD11	1:A:226:ILE:HG21	0.53	1.81	15	2
1:A:247:LEU:CD1	1:A:276:VAL:CG2	0.53	2.87	9	1
1:A:44:MET:O	1:A:83:ASP:HA	0.53	2.04	9	2
1:A:247:LEU:HD11	1:A:276:VAL:CG1	0.53	2.27	11	1
1:A:24:ARG:O	1:A:64:ILE:HD11	0.53	2.04	5	2
1:A:126:LEU:CD2	1:A:130:PHE:CE2	0.53	2.90	10	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:137:PHE:O	1:A:141:TYR:CE1	0.52	2.62	9	2
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: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:81:TYR:CD1	1:A:81:TYR:C	0.52	2.82	5	5
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:CD2	1:A:211:LEU:N	0.52	2.72	4	3
1:A:137:PHE:CG	1:A:151:ALA:CB	0.52	2.92	6	5

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
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: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:30:GLY:CA	1:A:47:LEU:HD12	0.52	2.35	5	3
1:A:171:GLU:HA	1:A:174:VAL:HG12	0.52	1.82	4	2
1:A:278:THR:O	1:A:280:THR:N	0.52	2.42	12	2
1:A:268:PHE:CE1	1:A:270:VAL:HG23	0.52	2.39	15	1
1:A:235:VAL:CG1	1:A:235:VAL:O	0.52	2.57	7	7
1:A:23:VAL:HG11	1:A:63:ARG:C	0.52	2.26	3	1
1:A:32:TYR:CD1	1:A:43:GLY:O	0.51	2.62	6	7
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:179:ILE:O	1:A:183:LEU:CG	0.51	2.58	7	5
1:A:15:VAL:O	1:A:72:VAL:HG12	0.51	2.05	9	2
1:A:115:ALA:HB1	1:A:120:TYR:CD2	0.51	2.40	3	1
1:A:45:ILE:HG22	1:A:84:LEU:HD22	0.51	1.82	4	1
1:A:23:VAL:HG21	1:A:62:ILE:CG1	0.51	2.35	2	2
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:228:LEU:CD1	1:A:234:TYR:CZ	0.51	2.94	14	2
1:A:152:PHE:CD2	1:A:179:ILE:HD11	0.51	2.40	9	2
1:A:108:TYR:HA	1:A:130:PHE:CZ	0.51	2.40	4	3
1:A:137:PHE:CD1	1:A:151:ALA:CB	0.51	2.93	7	1
1:A:83:ASP:O	1:A:84:LEU:HD12	0.51	2.05	5	2
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: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:130:PHE:O	1:A:135:TRP:CG	0.51	2.63	11	4
1:A:101:PHE:HA	1:A:104:SER:OG	0.51	2.05	5	1
1:A:18:VAL:HG12	1:A:18:VAL:O	0.51	2.06	5	1
1:A:18:VAL:HG12	1:A:93:GLU:HB3	0.51	1.82	3	1
1:A:211:LEU:N	1:A:211:LEU:CD2	0.51	2.74	5	6
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:50:LEU:HD23	1:A:58:ILE:HD11	0.51	1.83	7	1
1:A:14:GLU:O	1:A:15:VAL:HG23	0.51	2.06	4	1
1:A:47:LEU:HD11	1:A:58:ILE:CG1	0.51	2.36	10	1
1:A:100:LYS:O	1:A:104:SER:HB2	0.51	2.06	12	4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:GLU:C	1:A:15:VAL:HG23	0.51	2.27	5	3
1:A:240:THR:CB	1:A:246:GLY:HA2	0.51	2.36	10	3
1:A:45:ILE:HD11	1:A:50:LEU:HD23	0.51	1.82	15	2
1:A:218:SER:OG	1:A:224:ILE:HD12	0.51	2.06	14	1
1:A:241:LEU:CD2	1:A:241:LEU:N	0.51	2.73	13	1
1:A:71:LYS:HD3	1:A:89:VAL:HG23	0.50	1.82	5	1
1:A:194:ILE:O	1:A:234:TYR:N	0.50	2.45	14	6
1:A:104:SER:O	1:A:108:TYR:HB3	0.50	2.06	11	8
1:A:256:VAL:CG1	1:A:257:ILE:N	0.50	2.75	15	8
1:A:73:ILE:HD11	1:A:85:SER:HB3	0.50	1.83	3	2
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:247:LEU:CD2	1:A:274:PRO:HB2	0.50	2.31	7	9
1:A:235:VAL:O	1:A:235:VAL:CG1	0.50	2.60	15	6
1:A:108:TYR:CD1	1:A:109:SER:N	0.50	2.79	10	13
1:A:107:VAL:HG13	1:A:108:TYR:N	0.50	2.22	15	11
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:HG23	1:A:82:ILE:O	0.50	2.05	10	2
1:A:62:ILE:CG2	1:A:66:ARG:O	0.50	2.60	11	1
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:207:VAL:CG1	1:A:208:LYS:N	0.50	2.75	14	6
1:A:81:TYR:CD1	1:A:82:ILE:N	0.50	2.80	14	2
1:A:12:PHE:CG	1:A:12:PHE:O	0.50	2.64	12	2
1:A:14:GLU:HG2	1:A:15:VAL:HG23	0.50	1.83	7	1
1:A:137:PHE:C	1:A:141:TYR:CZ	0.50	2.85	2	1
1:A:76:ASP:O	1:A:77:LYS:CB	0.50	2.60	13	1
1:A:62:ILE:HG21	1:A:68:GLU:HG2	0.49	1.83	15	1
1:A:215:LEU:HD23	1:A:224:ILE:HB	0.49	1.83	14	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:114:VAL:HG22	1:A:178:ASN:OD1	0.49	2.06	6	2
1:A:72:VAL:HG13	1:A:83:ASP:O	0.49	2.07	3	4
1:A:247:LEU:HA	1:A:250:LEU:HD23	0.49	1.83	7	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:120:TYR:O	1:A:120:TYR:CD1	0.49	2.65	12	1
1:A:226:ILE:HD12	1:A:236:MET:HG3	0.49	1.84	7	1
1:A:234:TYR:CD1	1:A:234:TYR:N	0.49	2.81	2	5
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
1:A:158:ASP:N	1:A:158:ASP:OD1	0.49	2.46	9	1
1:A:190:ILE:CG2	1:A:250:LEU:CD1	0.49	2.91	2	3
1:A:120:TYR:C	1:A:120:TYR:CD1	0.49	2.85	12	1
1:A:238:THR:HG21	1:A:250:LEU:CD2	0.49	2.37	8	2
1:A:152:PHE:HB3	1:A:183:LEU:CD1	0.49	2.38	12	1
1:A:115:ALA:HA	1:A:120:TYR:CD2	0.49	2.41	12	1
1:A:247:LEU:HB3	1:A:274:PRO:HB2	0.49	1.84	12	10
1:A:108:TYR:C	1:A:108:TYR:CD1	0.49	2.87	1	4
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:241:LEU:O	1:A:242:GLU:O	0.48	2.31	6	1
1:A:196:VAL:HG12	1:A:261:ILE:HD13	0.48	1.85	6	1
1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:HD12	0.48	2.24	6	2
1:A:72:VAL:HA	1:A:83:ASP:O	0.48	2.09	4	5
1:A:272:MET:O	1:A:273:GLU:O	0.48	2.31	15	9
1:A:103:LYS:HB3	1:A:149:TYR:CD2	0.48	2.43	7	4
1:A:31:ALA:O	1:A:45:ILE:CG2	0.48	2.61	5	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:243:ARG:O	1:A:247:LEU:HD12	0.48	2.08	5	1
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:83:ASP:O	1:A:84:LEU:HD22	0.48	2.08	7	2
1:A:14:GLU:O	1:A:15:VAL:CB	0.48	2.61	4	5
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:234:TYR:N	1:A:234:TYR:CD1	0.48	2.82	6	4
1:A:17:ASP:O	1:A:72:VAL:HG23	0.48	2.08	9	1
1:A:193:ASP:O	1:A:270:VAL:HA	0.48	2.09	5	4
1:A:273:GLU:CG	1:A:274:PRO:HD2	0.48	2.38	5	4
1:A:70:VAL:HG23	1:A:84:LEU:CD2	0.48	2.38	12	1
1:A:87:ARG:O	1:A:88:ARG:CB	0.48	2.62	14	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:VAL:O	1:A:89:VAL:CG1	0.48	2.61	15	2
1:A:35:LEU:N	1:A:35:LEU:CD1	0.48	2.77	6	1
1:A:45:ILE:O	1:A:45:ILE:HD12	0.48	2.08	4	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:211:LEU:N	1:A:211:LEU:HD23	0.48	2.23	14	6
1:A:70:VAL:HG21	1:A:84:LEU:CD2	0.48	2.35	4	1
1:A:179:ILE:O	1:A:183:LEU:HB2	0.48	2.09	11	4
1:A:273:GLU:HB2	1:A:274:PRO:HD2	0.48	1.86	15	1
1:A:31:ALA:HB3	1:A:45:ILE:HG13	0.48	1.84	13	1
1:A:177:ASN:O	1:A:181:ARG:CB	0.48	2.62	6	2
1:A:197:ALA:O	1:A:261:ILE:HD11	0.48	2.09	12	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:18:VAL:CG1	1:A:18:VAL:O	0.47	2.62	10	5
1:A:178:ASN:O	1:A:182:ARG:CB	0.47	2.62	5	3
1:A:228:LEU:C	1:A:228:LEU:HD23	0.47	2.29	1	1
1:A:131:GLN:O	1:A:136:VAL:CG2	0.47	2.62	10	2
1:A:12:PHE:CD1	1:A:12:PHE:N	0.47	2.82	3	1
1:A:26:ILE:CG2	1:A:58:ILE:HD11	0.47	2.39	12	1
1:A:82:ILE:O	1:A:82:ILE:HG23	0.47	2.08	12	1
1:A:44:MET:O	1:A:84:LEU:N	0.47	2.47	5	4
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:110:ILE:HD11	1:A:182:ARG:HB2	0.47	1.85	2	1
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:226:ILE:O	1:A:226:ILE:CG2	0.47	2.63	4	2
1:A:12:PHE:CD1	1:A:12:PHE:O	0.47	2.68	2	1
1:A:130:PHE:O	1:A:135:TRP:CD1	0.47	2.68	12	4
1:A:211:LEU:HD23	1:A:211:LEU:N	0.47	2.24	2	6
1:A:126:LEU:C	1:A:126:LEU:HD23	0.47	2.30	15	1
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:126:LEU:HD23	1:A:127:GLU:N	0.47	2.25	15	1
1:A:243:ARG:CB	1:A:276:VAL:CG1	0.47	2.92	5	1
1:A:179:ILE:O	1:A:183:LEU:N	0.47	2.43	4	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:268:PHE:C	1:A:268:PHE:CD1	0.47	2.88	4	6
1:A:190:ILE:HG21	1:A:250:LEU:HD23	0.47	1.86	12	4
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:31:ALA:O	1:A:45:ILE:CG1	0.47	2.63	8	2
1:A:176:ILE:HA	1:A:179:ILE:HG22	0.47	1.87	10	1
1:A:155:ALA:CB	1:A:161:ILE:HG21	0.47	2.40	2	1
1:A:27:GLN:HB3	1:A:30:GLY:O	0.47	2.10	9	1
1:A:215:LEU:HD11	1:A:226:ILE:HG22	0.47	1.87	4	2
1:A:153:LYS:HA	1:A:183:LEU:HD13	0.47	1.85	4	3
1:A:50:LEU:HD12	1:A:50:LEU:O	0.47	2.10	15	1
1:A:170:ASP:O	1:A:174:VAL:HG12	0.47	2.10	2	1
1:A:107:VAL:CA	1:A:110:ILE:HD12	0.47	2.40	13	2
1:A:12:PHE:CD2	1:A:13:PRO:O	0.47	2.67	4	1
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:86:LYS:O	1:A:89:VAL:HG12	0.47	2.09	9	2
1:A:108:TYR:HA	1:A:130:PHE:CE1	0.47	2.45	4	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:261:ILE:O	1:A:266:GLY:N	0.46	2.48	15	1
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:268:PHE:CD1	1:A:268:PHE:C	0.46	2.89	10	9
1:A:214:GLY:CA	1:A:253:ALA:HB1	0.46	2.37	2	4
1:A:194:ILE:CG1	1:A:268:PHE:CZ	0.46	2.98	9	1
1:A:21:VAL:HG22	1:A:22:ASN:N	0.46	2.25	3	1
1:A:190:ILE:CG2	1:A:250:LEU:CD2	0.46	2.93	10	3
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:31:ALA:HB2	1:A:58:ILE:CD1	0.46	2.40	10	1
1:A:67:ASN:OD1	1:A:67:ASN:N	0.46	2.47	10	1
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:114:VAL:HG21	1:A:175:LEU:HD23	0.46	1.88	1	1
1:A:91:PRO:O	1:A:95:ILE:HD13	0.46	2.10	1	1
1:A:195:GLU:O	1:A:268:PHE:HA	0.46	2.10	14	11
1:A:210:ALA:O	1:A:257:ILE:CG1	0.46	2.64	10	8

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:118:LEU:O	1:A:119:GLU:CB	0.46	2.60	7	6
1:A:131:GLN:HA	1:A:135:TRP:HB2	0.46	1.87	2	3
1:A:62:ILE:HD12	1:A:62:ILE:N	0.46	2.25	11	1
1:A:238:THR:OG1	1:A:239:THR:N	0.46	2.49	11	5
1:A:170:ASP:O	1:A:174:VAL:CG2	0.46	2.63	7	4
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:50:LEU:HD22	1:A:50:LEU:N	0.46	2.25	9	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
1:A:190:ILE:CD1	1:A:247:LEU:N	0.46	2.78	11	1
1:A:103:LYS:O	1:A:107:VAL:CG1	0.46	2.60	8	1
1:A:162:LEU:HD23	1:A:162:LEU:N	0.46	2.25	14	1
1:A:247:LEU:HD23	1:A:250:LEU:HD12	0.46	1.88	5	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:226:ILE:CG2	1:A:226:ILE:O	0.46	2.63	3	3
1:A:245:GLU:O	1:A:249:VAL:CG1	0.46	2.64	6	1
1:A:63:ARG:O	1:A:65:GLY:N	0.46	2.49	7	3
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:23:VAL:HG21	1:A:62:ILE:C	0.46	2.32	7	1
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: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:63:ARG:O	1:A:64:ILE:O	0.46	2.34	15	1
1:A:75:VAL:CB	1:A:81:TYR:O	0.46	2.64	2	2
1:A:167:LEU:HD23	1:A:171:GLU:HB3	0.46	1.88	14	1
1:A:171:GLU:O	1:A:175:LEU:CB	0.45	2.64	6	4
1:A:257:ILE:HG13	1:A:258:LYS:N	0.45	2.26	15	1
1:A:210:ALA:O	1:A:257:ILE:HG13	0.45	2.10	14	1
1:A:69:CYS:O	1:A:89:VAL:HG21	0.45	2.12	5	1
1:A:152:PHE:O	1:A:183:LEU:CD1	0.45	2.64	6	1
1:A:26:ILE:HG21	1:A:58:ILE:HD12	0.45	1.86	4	1
1:A:241:LEU:O	1:A:242:GLU:CB	0.45	2.65	1	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:LEU:CD1	1:A:58:ILE:HD13	0.45	2.39	15	2
1:A:14:GLU:O	1:A:15:VAL:HB	0.45	2.11	13	4
1:A:61:LEU:O	1:A:62:ILE:CG2	0.45	2.60	4	1
1:A:224:ILE:HG12	1:A:238:THR:OG1	0.45	2.12	11	4
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: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:266:GLY:O	1:A:267:VAL:CG2	0.45	2.62	10	8
1:A:73:ILE:HD11	1:A:85:SER:CB	0.45	2.41	3	2
1:A:104:SER:HA	1:A:149:TYR:CE1	0.45	2.47	2	1
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:137:PHE:CE1	1:A:161:ILE:CG2	0.45	2.99	6	1
1:A:149:TYR:O	1:A:152:PHE:N	0.45	2.50	14	4
1:A:241:LEU:HD22	1:A:241:LEU:N	0.45	2.26	7	1
1:A:113:HIS:NE2	1:A:117:VAL:CG2	0.45	2.80	15	1
1:A:129:LEU:CD1	1:A:133:THR:OG1	0.45	2.65	10	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:50:LEU:N	1:A:50:LEU:CD2	0.45	2.80	9	1
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:210:ALA:O	1:A:257:ILE:CG2	0.45	2.62	15	1
1:A:94:ALA:O	1:A:98:GLU:HB2	0.45	2.12	14	1
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:179:ILE:O	1:A:183:LEU:CD1	0.44	2.63	9	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:210:ALA:O	1:A:213:ALA:N	0.44	2.50	15	2
1:A:246:GLY:O	1:A:249:VAL:N	0.44	2.49	10	1
1:A:137:PHE:CE1	1:A:161:ILE:HG22	0.44	2.47	14	1
1:A:12:PHE:CD1	1:A:15:VAL:HG13	0.44	2.47	14	1
1:A:272:MET:O	1:A:272:MET:CG	0.44	2.65	2	1
1:A:138:ASP:OD2	1:A:145:GLY:N	0.44	2.47	10	4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
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:129:LEU:HD13	1:A:133:THR:OG1	0.44	2.12	10	1
1:A:166:ASP:N	1:A:166:ASP:OD1	0.44	2.50	2	1
1:A:156:VAL:HG12	1:A:179:ILE:HG22	0.44	1.82	6	1
1:A:50:LEU:O	1:A:86:LYS:CE	0.44	2.65	6	1
1:A:211:LEU:C	1:A:215:LEU:HD12	0.44	2.32	8	4
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:131:GLN:HA	1:A:135:TRP:CE3	0.44	2.47	11	4
1:A:141:TYR:CD1	1:A:147:GLY:HA3	0.44	2.47	4	1
1:A:137:PHE:HZ	1:A:161:ILE:HG22	0.44	1.67	4	1
1:A:62:ILE:HA	1:A:66:ARG:CB	0.44	2.42	14	2
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:178:ASN:O	1:A:182:ARG:HB2	0.44	2.12	6	1
1:A:102:THR:O	1:A:106:THR:OG1	0.44	2.35	7	4
1:A:108:TYR:CD2	1:A:130:PHE:HE1	0.44	2.29	3	1
1:A:70:VAL:HG21	1:A:84:LEU:HD12	0.44	1.88	3	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	2
1:A:115:ALA:HA	1:A:120:TYR:HB2	0.44	1.89	4	1
1:A:129:LEU:HD21	1:A:171:GLU:CD	0.44	2.33	15	1
1:A:141:TYR:CD1	1:A:143:ARG:HB2	0.44	2.48	2	1
1:A:288:GLN:O	1:A:289:MET:O	0.44	2.36	5	1
1:A:118:LEU:HD13	1:A:171:GLU:CD	0.44	2.33	1	1
1:A:50:LEU:HD11	1:A:86:LYS:HB2	0.44	1.89	9	1
1:A:258:LYS:O	1:A:262:GLU:CG	0.44	2.66	8	3
1:A:156:VAL:HG23	1:A:157:SER:N	0.44	2.28	2	3
1:A:70:VAL:HG12	1:A:71:LYS:H	0.44	1.73	5	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:188:VAL:CG1	1:A:190:ILE:CG1	0.44	2.91	7	1
1:A:138:ASP:OD1	1:A:145:GLY:CA	0.44	2.66	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

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
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:175:LEU:C	1:A:175:LEU:CD1	0.44	2.86	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:219:THR:CG2	1:A:219:THR:O	0.43	2.63	9	1
1:A:16:GLU:HA	1:A:72:VAL:O	0.43	2.13	12	1
1:A:243:ARG:O	1:A:276:VAL:HG11	0.43	2.13	4	1
1:A:12:PHE:CE2	1:A:82:ILE:CD1	0.43	3.00	11	1
1:A:156:VAL:CG2	1:A:157:SER:N	0.43	2.81	8	2
1:A:246:GLY:O	1:A:250:LEU:CD2	0.43	2.66	10	1
1:A:95:ILE:CD1	1:A:96:LYS:N	0.43	2.80	10	1
1:A:73:ILE:CG2	1:A:83:ASP:HB3	0.43	2.44	9	1
1:A:190:ILE:HD13	1:A:247:LEU:CD2	0.43	2.42	11	1
1:A:100:LYS:CG	1:A:144:PRO:O	0.43	2.66	10	1
1:A:13:PRO:O	1:A:15:VAL:N	0.43	2.52	2	2
1:A:75:VAL:HG12	1:A:82:ILE:CA	0.43	2.41	6	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:33:VAL:O	1:A:42:GLU:HA	0.43	2.13	3	2
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:218:SER:OG	1:A:219:THR:N	0.43	2.51	4	1
1:A:111:LEU:HD22	1:A:129:LEU:HB3	0.43	1.91	15	1
1:A:108:TYR:O	1:A:130:PHE:CZ	0.43	2.71	14	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: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: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:47:LEU:HD12	1:A:58:ILE:HD12	0.43	1.91	11	1
1:A:187:ALA:N	1:A:241:LEU:HB3	0.43	2.27	5	2
1:A:171:GLU:HA	1:A:174:VAL:CG1	0.43	2.44	4	2
1:A:194:ILE:CD1	1:A:196:VAL:HG23	0.43	2.43	3	2
1:A:117:VAL:HG23	1:A:118:LEU:HG	0.43	1.88	1	1
1:A:73:ILE:CG2	1:A:83:ASP:CB	0.43	2.96	9	1
1:A:103:LYS:CA	1:A:149:TYR:CD2	0.43	3.02	3	5
1:A:103:LYS:CB	1:A:149:TYR:CD1	0.43	3.02	12	1
1:A:247:LEU:CD1	1:A:276:VAL:CG1	0.43	2.97	11	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
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:187:ALA:CB	1:A:241:LEU:N	0.43	2.81	15	1
1:A:108:TYR:CD2	1:A:109:SER:N	0.43	2.87	9	1
1:A:138:ASP:HB2	1:A:145:GLY:CA	0.43	2.43	12	1
1:A:114:VAL:HG23	1:A:115:ALA:N	0.43	2.29	10	1
1:A:22:ASN:N	1:A:22:ASN:OD1	0.43	2.52	10	1
1:A:235:VAL:HG12	1:A:235:VAL:O	0.43	2.14	5	1
1:A:247:LEU:CG	1:A:276:VAL:HG23	0.43	2.43	1	1
1:A:45:ILE:C	1:A:45:ILE:CD1	0.43	2.84	13	2
1:A:94:ALA:O	1:A:98:GLU:CB	0.43	2.67	6	1
1:A:194:ILE:HG13	1:A:268:PHE:CZ	0.43	2.49	9	1
1:A:95:ILE:CG1	1:A:96:LYS:N	0.43	2.82	9	1
1:A:228:LEU:HD22	1:A:234:TYR:CE2	0.43	2.48	3	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:261:ILE:O	1:A:266:GLY:CA	0.43	2.67	15	1
1:A:187:ALA:H	1:A:241:LEU:HD13	0.43	1.72	13	1
1:A:111:LEU:HD13	1:A:134:ALA:HB2	0.42	1.91	11	1
1:A:210:ALA:C	1:A:257:ILE:CG1	0.42	2.87	11	2
1:A:212:ARG:O	1:A:216:ASN:N	0.42	2.52	11	1
1:A:149:TYR:C	1:A:149:TYR:CD1	0.42	2.92	8	1
1:A:58:ILE:HA	1:A:61:LEU:HD13	0.42	1.91	8	1
1:A:141:TYR:CE2	1:A:147:GLY:C	0.42	2.92	2	1
1:A:175:LEU:CD1	1:A:175:LEU:C	0.42	2.87	5	2
1:A:141:TYR:CZ	1:A:147:GLY:C	0.42	2.92	9	1
1:A:288:GLN:O	1:A:290:GLU:N	0.42	2.52	3	1
1:A:45:ILE:HD13	1:A:46:HIS:C	0.42	2.35	7	1
1:A:70:VAL:CG2	1:A:84:LEU:CD2	0.42	2.96	4	1
1:A:120:TYR:CD2	1:A:125:GLN:HB3	0.42	2.49	11	1
1:A:62:ILE:H	1:A:62:ILE:HD12	0.42	1.73	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:218:SER:CB	1:A:224:ILE:HG13	0.42	2.44	9	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:23:VAL:CG2	1:A:26:ILE:CG2	0.42	2.98	11	1
1:A:179:ILE:CA	1:A:183:LEU:HD12	0.42	2.44	8	1
1:A:172:ARG:O	1:A:176:ILE:HG22	0.42	2.14	10	1
1:A:178:ASN:O	1:A:182:ARG:N	0.42	2.52	5	2
1:A:194:ILE:HD12	1:A:194:ILE:C	0.42	2.35	3	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
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:213:ALA:HB1	1:A:256:VAL:CG1	0.42	2.44	11	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
1:A:226:ILE:HD11	1:A:236:MET:CE	0.42	2.44	10	1
1:A:34:SER:O	1:A:35:LEU:C	0.42	2.57	14	2
1:A:175:LEU:CD1	1:A:179:ILE:HD13	0.42	2.45	2	1
1:A:244:THR:O	1:A:248:SER:HB2	0.42	2.14	5	1
1:A:278:THR:CG2	1:A:281:ASP:HB2	0.42	2.43	11	1
1:A:137:PHE:CE2	1:A:165:LEU:CD1	0.42	3.03	8	1
1:A:70:VAL:HG12	1:A:71:LYS:N	0.42	2.29	14	1
1:A:103:LYS:HB3	1:A:149:TYR:CB	0.42	2.45	2	1
1:A:253:ALA:O	1:A:256:VAL:N	0.42	2.52	6	1
1:A:151:ALA:O	1:A:155:ALA:CB	0.42	2.68	3	3
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:179:ILE:O	1:A:183:LEU:CB	0.42	2.67	7	2
1:A:196:VAL:HG21	1:A:257:ILE:HG21	0.42	1.91	5	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:91:PRO:O	1:A:95:ILE:CD1	0.42	2.66	6	1
1:A:123:ASP:OD1	1:A:124:GLU:N	0.42	2.53	3	2
1:A:148:ALA:O	1:A:152:PHE:CD1	0.42	2.73	13	2
1:A:193:ASP:HB3	1:A:271:GLN:CB	0.42	2.45	5	2
1:A:188:VAL:HG21	1:A:276:VAL:CG2	0.42	2.44	15	1
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:194:ILE:C	1:A:194:ILE:CD1	0.42	2.85	9	1
1:A:155:ALA:HB1	1:A:162:LEU:CD2	0.42	2.38	3	1
1:A:123:ASP:OD1	1:A:123:ASP:N	0.42	2.52	3	1
1:A:190:ILE:HD13	1:A:247:LEU:HG	0.42	1.90	7	1
1:A:110:ILE:O	1:A:114:VAL:CG2	0.42	2.67	7	2
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:240:THR:HB	1:A:246:GLY:HA2	0.42	1.92	11	1
1:A:130:PHE:C	1:A:135:TRP:CD1	0.42	2.93	10	1
1:A:23:VAL:HB	1:A:62:ILE:HB	0.42	1.90	10	1
1:A:45:ILE:HB	1:A:50:LEU:HD11	0.42	1.91	14	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:236:MET:HG3	1:A:236:MET:O	0.42	2.14	14	1
1:A:32:TYR:CZ	1:A:42:GLU:HG3	0.42	2.50	9	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:45:ILE:CD1	1:A:45:ILE:C	0.42	2.86	7	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
1:A:15:VAL:CG2	1:A:75:VAL:HG13	0.42	2.45	2	1
1:A:138:ASP:OD1	1:A:145:GLY:N	0.42	2.51	9	1
1:A:62:ILE:HG13	1:A:62:ILE:O	0.42	2.15	3	1
1:A:272:MET:O	1:A:275:LYS:CE	0.42	2.68	12	1
1:A:108:TYR:CD1	1:A:108:TYR:C	0.42	2.94	7	3
1:A:47:LEU:HB2	1:A:58:ILE:HD12	0.42	1.91	11	1
1:A:137:PHE:CB	1:A:148:ALA:HA	0.42	2.45	15	1
1:A:19:VAL:HG12	1:A:20:MET:N	0.42	2.29	10	3
1:A:178:ASN:O	1:A:182:ARG:CG	0.41	2.68	12	1
1:A:24:ARG:O	1:A:64:ILE:HG12	0.41	2.15	7	1
1:A:45:ILE:HG22	1:A:84:LEU:CD2	0.41	2.44	4	1
1:A:190:ILE:HG13	1:A:276:VAL:HG12	0.41	1.92	14	1
1:A:47:LEU:CD2	1:A:55:ILE:HD11	0.41	2.45	14	1
1:A:258:LYS:O	1:A:262:GLU:HB2	0.41	2.14	2	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:137:PHE:O	1:A:141:TYR:CE2	0.41	2.73	2	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:218:SER:HB3	1:A:224:ILE:CD1	0.41	2.45	9	1
1:A:95:ILE:HG13	1:A:96:LYS:N	0.41	2.30	9	1
1:A:118:LEU:HB2	1:A:120:TYR:CE1	0.41	2.50	5	2
1:A:115:ALA:CA	1:A:120:TYR:HB2	0.41	2.45	2	3
1:A:120:TYR:HE2	1:A:129:LEU:HD23	0.41	1.65	14	1
1:A:156:VAL:CG1	1:A:179:ILE:CG2	0.41	2.90	6	1
1:A:45:ILE:HG13	1:A:50:LEU:CD2	0.41	2.45	6	1
1:A:26:ILE:HG21	1:A:58:ILE:HG21	0.41	1.89	6	1
1:A:111:LEU:HA	1:A:114:VAL:CG2	0.41	2.44	12	2
1:A:133:THR:HG22	1:A:152:PHE:HZ	0.41	1.73	8	1
1:A:17:ASP:O	1:A:18:VAL:CG2	0.41	2.60	5	1
1:A:89:VAL:CG1	1:A:89:VAL:O	0.41	2.68	5	1
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

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
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: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:113:HIS:O	1:A:117:VAL:N	0.41	2.53	15	1
1:A:27:GLN:CB	1:A:30:GLY:O	0.41	2.68	13	3
1:A:81:TYR:OH	1:A:83:ASP:CB	0.41	2.68	14	1
1:A:152:PHE:CG	1:A:179:ILE:HG12	0.41	2.51	2	1
1:A:47:LEU:HA	1:A:50:LEU:HG	0.41	1.93	6	1
1:A:174:VAL:HG13	1:A:175:LEU:N	0.41	2.29	11	3
1:A:168:ASN:OD1	1:A:169:GLU:N	0.41	2.53	9	1
1:A:249:VAL:HG12	1:A:250:LEU:HD22	0.41	1.92	12	1
1:A:134:ALA:O	1:A:138:ASP:HB2	0.41	2.16	15	1
1:A:19:VAL:O	1:A:70:VAL:O	0.41	2.38	14	1
1:A:137:PHE:HA	1:A:140:LYS:HB2	0.41	1.92	1	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:50:LEU:C	1:A:50:LEU:CD1	0.41	2.89	5	1
1:A:62:ILE:N	1:A:62:ILE:HD12	0.41	2.29	5	1
1:A:121:THR:O	1:A:121:THR:HG23	0.41	2.14	5	1
1:A:57:SER:O	1:A:58:ILE:CG1	0.41	2.69	1	1
1:A:267:VAL:CG1	1:A:268:PHE:N	0.41	2.84	10	2
1:A:145:GLY:O	1:A:149:TYR:CZ	0.41	2.74	12	2
1:A:78:GLU:O	1:A:79:LYS:CE	0.41	2.69	14	1
1:A:73:ILE:HD12	1:A:73:ILE:N	0.41	2.31	2	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:35:LEU:CD2	1:A:42:GLU:O	0.41	2.68	12	1
1:A:26:ILE:CD1	1:A:58:ILE:CG2	0.41	2.99	10	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:254:MET:O	1:A:268:PHE:CE2	0.41	2.74	6	1
1:A:236:MET:SD	1:A:254:MET:HG2	0.41	2.55	9	1
1:A:156:VAL:HG13	1:A:157:SER:N	0.41	2.31	9	1
1:A:12:PHE:C	1:A:12:PHE:CD1	0.41	2.93	9	1
1:A:241:LEU:CD1	1:A:241:LEU:N	0.41	2.75	9	1
1:A:101:PHE:O	1:A:105:LYS:HB3	0.41	2.16	3	1
1:A:45:ILE:HD11	1:A:47:LEU:HD12	0.41	1.92	12	1
1:A:211:LEU:O	1:A:215:LEU:CD1	0.41	2.69	5	2
1:A:206:ALA:HB2	1:A:264:LYS:CG	0.41	2.45	12	1
1:A:155:ALA:HB2	1:A:161:ILE:HG21	0.41	1.93	12	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
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:168:ASN:O	1:A:169:GLU:CB	0.41	2.68	7	1
1:A:153:LYS:CA	1:A:183:LEU:HD13	0.41	2.46	4	1
1:A:195:GLU:HB3	1:A:269:ASN:CB	0.41	2.46	11	1
1:A:74:ARG:O	1:A:83:ASP:CB	0.41	2.69	15	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: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:193:ASP:C	1:A:194:ILE:HG23	0.41	2.36	14	2
1:A:211:LEU:O	1:A:215:LEU:HG	0.41	2.16	13	1
1:A:75:VAL:HB	1:A:81:TYR:O	0.41	2.15	6	1
1:A:89:VAL:CG2	1:A:89:VAL:O	0.41	2.67	3	1
1:A:141:TYR:N	1:A:141:TYR:CD1	0.41	2.88	7	1
1:A:190:ILE:HG22	1:A:238:THR:HG22	0.41	1.92	4	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:219:THR:O	1:A:219:THR:CG2	0.41	2.69	8	1
1:A:11:LYS:CG	1:A:11:LYS:O	0.41	2.68	10	1
1:A:179:ILE:HG12	1:A:183:LEU:HD12	0.41	1.92	10	1
1:A:134:ALA:O	1:A:148:ALA:CB	0.41	2.69	10	1
1:A:176:ILE:HD13	1:A:179:ILE:HD11	0.41	1.91	14	1
1:A:47:LEU:HA	1:A:50:LEU:HD12	0.41	1.93	2	1
1:A:131:GLN:HG2	1:A:131:GLN:O	0.41	2.15	5	1
1:A:99:ASP:O	1:A:100:LYS:C	0.41	2.60	13	1
1:A:12:PHE:O	1:A:12:PHE:CG	0.40	2.74	9	1
1:A:81:TYR:C	1:A:82:ILE:CG1	0.40	2.90	9	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:162:LEU:O	1:A:162:LEU:HD12	0.40	2.16	11	1
1:A:21:VAL:HG12	1:A:70:VAL:CG2	0.40	2.46	14	1
1:A:156:VAL:HG11	1:A:180:ASN:OD1	0.40	2.16	2	1
1:A:244:THR:O	1:A:248:SER:HB3	0.40	2.16	9	1
1:A:104:SER:CB	1:A:149:TYR:OH	0.40	2.70	12	1
1:A:128:SER:O	1:A:132:ARG:CG	0.40	2.69	11	1
1:A:212:ARG:O	1:A:216:ASN:CB	0.40	2.69	8	1
1:A:73:ILE:CG2	1:A:83:ASP:CG	0.40	2.90	15	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:23:VAL:HG11	1:A:63:ARG:O	0.40	2.16	3	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:243:ARG:CB	1:A:243:ARG:CZ	0.40	3.00	4	1
1:A:289:MET:O	1:A:290:GLU:O	0.40	2.39	11	1
1:A:218:SER:OG	1:A:224:ILE:CD1	0.40	2.69	14	1
1:A:137:PHE:HE1	1:A:161:ILE:HG22	0.40	1.77	14	1
1:A:17:ASP:HA	1:A:72:VAL:N	0.40	2.31	5	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:101:PHE:CD1	1:A:105:LYS:HB2	0.40	2.50	14	1
1:A:14:GLU:O	1:A:15:VAL:O	0.40	2.39	14	1
1:A:194:ILE:HA	1:A:269:ASN:O	0.40	2.16	2	1
1:A:76:ASP:CB	1:A:81:TYR:HB2	0.40	2.46	2	1
1:A:242:GLU:HB2	1:A:245:GLU:CB	0.40	2.47	6	1
1:A:83:ASP:OD1	1:A:84:LEU:N	0.40	2.54	6	1
1:A:179:ILE:CG2	1:A:180:ASN:N	0.40	2.84	9	1
1:A:138:ASP:OD1	1:A:139:ASP:N	0.40	2.55	12	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:47:LEU:HA	1:A:50:LEU:CD2	0.40	2.47	4	1
1:A:271:GLN:OE1	1:A:271:GLN:CA	0.40	2.70	4	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:191:ARG:O	1:A:275:LYS:HB3	0.40	2.17	15	1
1:A:134:ALA:O	1:A:138:ASP:CB	0.40	2.69	15	1
1:A:210:ALA:C	1:A:257:ILE:HG22	0.40	2.36	15	1
1:A:18:VAL:C	1:A:19:VAL:CG1	0.40	2.89	15	1
1:A:228:LEU:CD1	1:A:234:TYR:CE2	0.40	3.05	14	1
1:A:240:THR:CG2	1:A:246:GLY:HA2	0.40	2.47	5	1

## 6.3 Torsion angles ⓘ

### 6.3.1 Protein backbone ⓘ

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%)	6	30

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
All	All	3870/4620 (84%)	3288 (85%)	412 (11%)	170 (4%)	6	30

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	273	GLU	15
1	A	64	ILE	15
1	A	242	GLU	13
1	A	11	LYS	12
1	A	289	MET	9
1	A	218	SER	9
1	A	13	PRO	8
1	A	15	VAL	8
1	A	187	ALA	8
1	A	166	ASP	7
1	A	123	ASP	7
1	A	16	GLU	7
1	A	35	LEU	6
1	A	79	LYS	6
1	A	42	GLU	5
1	A	290	GLU	5
1	A	241	LEU	3
1	A	17	ASP	3
1	A	14	GLU	3
1	A	52	ARG	3
1	A	55	ILE	2
1	A	74	ARG	2
1	A	54	ARG	2
1	A	165	LEU	1
1	A	18	VAL	1
1	A	278	THR	1
1	A	53	ARG	1
1	A	77	LYS	1
1	A	58	ILE	1
1	A	61	LEU	1
1	A	291	ARG	1
1	A	57	SER	1
1	A	133	THR	1
1	A	279	ASP	1
1	A	56	ARG	1



### 6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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%)	2	17
All	All	3495/4170 (84%)	2446 (70%)	1049 (30%)	2	17

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	248	SER	14
1	A	81	TYR	14
1	A	11	LYS	13
1	A	211	LEU	13
1	A	239	THR	13
1	A	249	VAL	12
1	A	111	LEU	12
1	A	146	TYR	12
1	A	191	ARG	12
1	A	273	GLU	11
1	A	265	ARG	11
1	A	87	ARG	11
1	A	240	THR	11
1	A	24	ARG	11
1	A	233	ARG	10
1	A	103	LYS	10
1	A	278	THR	10
1	A	207	VAL	10
1	A	25	SER	10
1	A	74	ARG	10
1	A	57	SER	10
1	A	90	SER	10
1	A	44	MET	9
1	A	120	TYR	9
1	A	287	ARG	9
1	A	46	HIS	9
1	A	47	LEU	9
1	A	133	THR	9

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	289	MET	9
1	A	96	LYS	9
1	A	212	ARG	9
1	A	29	MET	9
1	A	238	THR	9
1	A	53	ARG	8
1	A	112	ARG	8
1	A	60	LYS	8
1	A	35	LEU	8
1	A	27	GLN	8
1	A	86	LYS	8
1	A	77	LYS	8
1	A	269	ASN	8
1	A	225	LYS	8
1	A	66	ARG	8
1	A	279	ASP	8
1	A	271	GLN	8
1	A	141	TYR	8
1	A	84	LEU	7
1	A	119	GLU	7
1	A	208	LYS	7
1	A	285	LEU	7
1	A	128	SER	7
1	A	189	LYS	7
1	A	20	MET	7
1	A	99	ASP	7
1	A	235	VAL	7
1	A	71	LYS	7
1	A	219	THR	7
1	A	93	GLU	7
1	A	244	THR	7
1	A	164	SER	7
1	A	264	LYS	7
1	A	142	LYS	7
1	A	165	LEU	7
1	A	132	ARG	7
1	A	88	ARG	7
1	A	259	GLU	7
1	A	288	GLN	7
1	A	217	CYS	7
1	A	241	LEU	6
1	A	32	TYR	6

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	195	GLU	6
1	A	242	GLU	6
1	A	182	ARG	6
1	A	260	LYS	6
1	A	45	ILE	6
1	A	243	ARG	6
1	A	127	GLU	6
1	A	254	MET	6
1	A	125	GLN	6
1	A	275	LYS	6
1	A	49	GLU	6
1	A	162	LEU	6
1	A	63	ARG	6
1	A	251	SER	6
1	A	281	ASP	6
1	A	68	GLU	6
1	A	256	VAL	6
1	A	292	LEU	6
1	A	123	ASP	5
1	A	181	ARG	5
1	A	198	CYS	5
1	A	137	PHE	5
1	A	291	ARG	5
1	A	157	SER	5
1	A	172	ARG	5
1	A	169	GLU	5
1	A	48	SER	5
1	A	158	ASP	5
1	A	54	ARG	5
1	A	228	LEU	5
1	A	106	THR	5
1	A	14	GLU	5
1	A	92	GLU	5
1	A	284	GLU	5
1	A	258	LYS	5
1	A	122	LYS	5
1	A	160	SER	5
1	A	173	GLU	5
1	A	263	GLU	5
1	A	105	LYS	5
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	59	ASN	4
1	A	85	SER	4
1	A	143	ARG	4
1	A	168	ASN	4
1	A	16	GLU	4
1	A	116	GLU	4
1	A	124	GLU	4
1	A	139	ASP	4
1	A	178	ASN	4
1	A	166	ASP	4
1	A	290	GLU	4
1	A	138	ASP	4
1	A	245	GLU	4
1	A	282	GLU	4
1	A	170	ASP	4
1	A	167	LEU	4
1	A	51	SER	4
1	A	154	HIS	4
1	A	100	LYS	4
1	A	190	ILE	3
1	A	188	VAL	3
1	A	252	GLN	3
1	A	69	CYS	3
1	A	108	TYR	3
1	A	179	ILE	3
1	A	98	GLU	3
1	A	236	MET	3
1	A	52	ARG	3
1	A	218	SER	3
1	A	153	LYS	3
1	A	209	GLU	3
1	A	163	ASP	3
1	A	79	LYS	3
1	A	61	LEU	3
1	A	140	LYS	3
1	A	73	ILE	3
1	A	56	ARG	3
1	A	183	LEU	2
1	A	131	GLN	2
1	A	280	THR	2
1	A	149	TYR	2
1	A	130	PHE	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	34	SER	2
1	A	257	ILE	2
1	A	171	GLU	2
1	A	28	GLU	2
1	A	76	ASP	2
1	A	67	ASN	2
1	A	283	THR	2
1	A	177	ASN	2
1	A	272	MET	2
1	A	78	GLU	2
1	A	194	ILE	2
1	A	152	PHE	2
1	A	262	GLU	2
1	A	176	ILE	2
1	A	150	ASP	2
1	A	193	ASP	2
1	A	104	SER	2
1	A	121	THR	2
1	A	227	ASN	2
1	A	113	HIS	2
1	A	175	LEU	1
1	A	126	LEU	1
1	A	95	ILE	1
1	A	17	ASP	1
1	A	83	ASP	1
1	A	180	ASN	1
1	A	136	VAL	1
1	A	62	ILE	1
1	A	50	LEU	1

### 6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

### 6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no carbohydrates in this entry.

## 6.6 Ligand geometry

There are no ligands in this entry.

## 6.7 Other polymers

There are no such molecules in this entry.

## 6.8 Polymer linkage issues

There are no chain breaks in this entry.

## 7 Chemical shift validation [i](#)

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 30% for the well-defined parts and 29% for the entire structure.

### 7.1 Chemical shift list 1

File name: BMRB entry 5917

Chemical shift list name: *assigned\_chem\_shift\_list\_1*

#### 7.1.1 Bookkeeping [i](#)

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

Total number of shifts	1122
Number of shifts mapped to atoms	1122
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	0

#### 7.1.2 Chemical shift referencing [i](#)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction $\pm$ precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	288	$0.09 \pm 0.14$	None needed ( $< 0.5$ ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	0	—	—
$^{13}\text{C}'$	278	$-0.14 \pm 0.07$	None needed ( $< 0.5$ ppm)
$^{15}\text{N}$	278	$0.36 \pm 0.17$	None needed ( $< 0.5$ ppm)

#### 7.1.3 Completeness of resonance assignments [i](#)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 30%, i.e. 991 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 3329. 0 out of 47 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	$^1\text{H}$	$^{13}\text{C}$	$^{15}\text{N}$
Backbone	991/1278 (78%)	246/510 (48%)	499/516 (97%)	246/252 (98%)
Sidechain	0/1900 (0%)	0/1108 (0%)	0/686 (0%)	0/106 (0%)

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

	Total	<sup>1</sup> H	<sup>13</sup> C	<sup>15</sup> N
Aromatic	0/151 (0%)	0/80 (0%)	0/67 (0%)	0/4 (0%)
Overall	991/3329 (30%)	246/1698 (14%)	499/1269 (39%)	246/362 (68%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 29%, i.e. 1122 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 3842. 0 out of 50 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	<sup>1</sup> H	<sup>13</sup> C	<sup>15</sup> N
Backbone	1122/1482 (76%)	278/591 (47%)	566/600 (94%)	278/291 (96%)
Sidechain	0/2161 (0%)	0/1262 (0%)	0/781 (0%)	0/118 (0%)
Aromatic	0/199 (0%)	0/105 (0%)	0/89 (0%)	0/5 (0%)
Overall	1122/3842 (29%)	278/1958 (14%)	566/1470 (39%)	278/414 (67%)

#### 7.1.4 Statistically unusual chemical shifts ⓘ

There are no statistically unusual chemical shifts.

#### 7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots ⓘ

The image below reports *random coil index* values for the protein chains in the structure. The height of each bar gives a probability of a given residue to be disordered, as predicted from the available chemical shifts and the amino acid sequence. A value above 0.2 is an indication of significant predicted disorder. The colour of the bar shows whether the residue is in the well-defined core (black) or in the ill-defined residue ranges (cyan), as described in section 2 on ensemble composition.

Random coil index (RCI) for chain A:

