



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 05:54 PM BST

PDB ID : 1WIU  
Title : TWITCHIN IMMUNOGLOBULIN SUPERFAMILY DOMAIN (IGSF MODULE) (IG 18'), NMR, 30 STRUCTURES  
Authors : Fong, S.; Bycroft, M.  
Deposited on : 1996-06-23

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

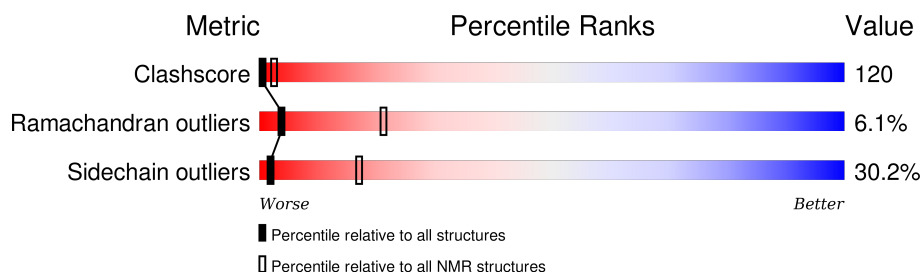
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

The overall completeness of chemical shifts assignment 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	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	93	

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 30 models. Model 9 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:2-A:38, A:43-A:45, A:49-A:93 (85)	0.29	9

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

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

The models can be grouped into 5 clusters and 6 single-model clusters were found.

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

### 3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1432 atoms, of which 726 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called TWITCHIN 18TH IGSF MODULE.

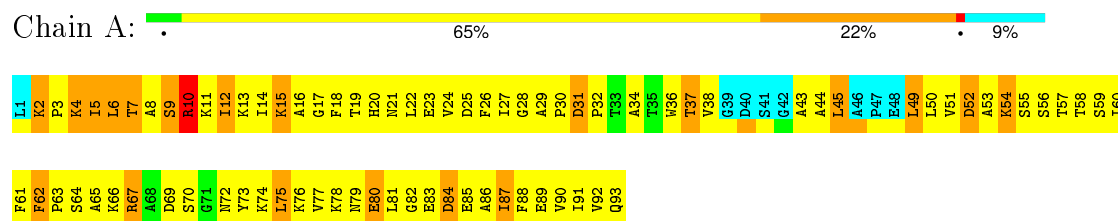
Mol	Chain	Residues	Atoms					Trace
1	A	93	Total	C	H	N	O	0
			1432	453	726	116	137	

## 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: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE

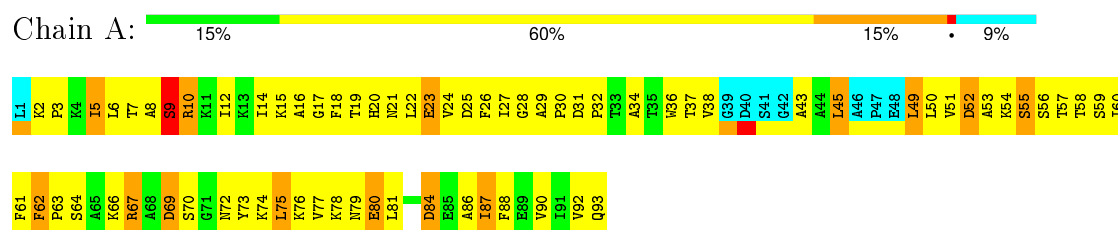


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

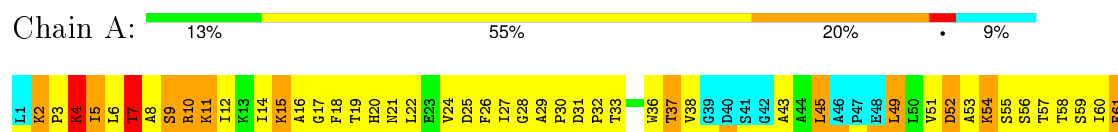
#### 4.2.1 Score per residue for model 1

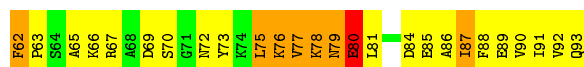
- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE



#### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE

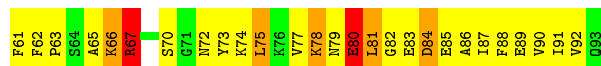
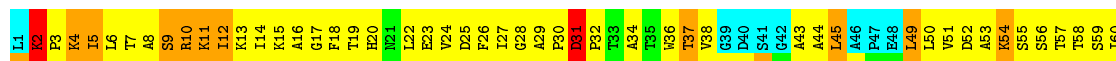




### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE

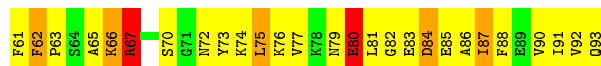
Chain A: 10% 61% 16% 9%



### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE

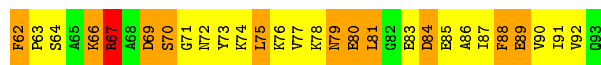
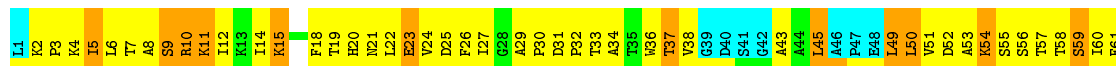
Chain A: 11% 61% 15% 9%



### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE

Chain A: 11% 55% 25% 9%



### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE

Chain A: 68% 20% 9%





#### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE

Chain A: 10% 57% 25% 9%



#### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE

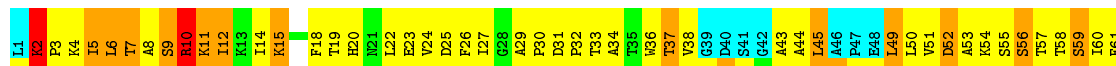
Chain A: 12% 53% 25% 9%



#### 4.2.9 Score per residue for model 9 (medoid)

- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE

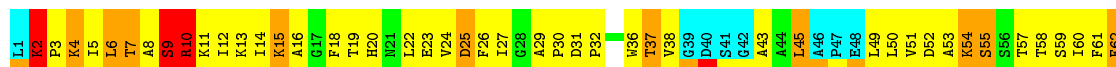
Chain A: 10% 61% 18% 9%

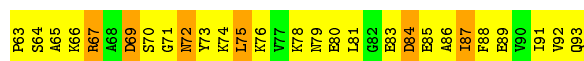


#### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE

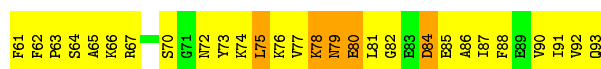
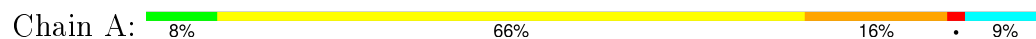
Chain A: 13% 58% 17% 9%





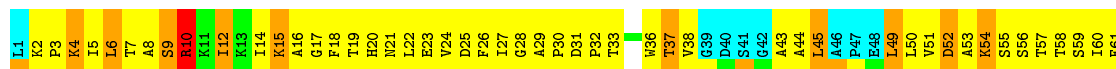
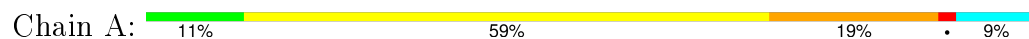
#### 4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE



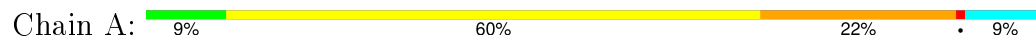
#### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE



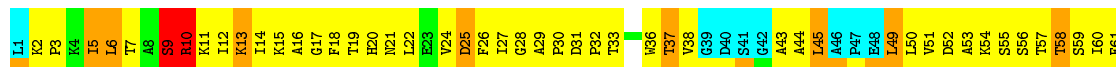
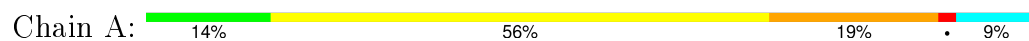
#### 4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE



#### 4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE

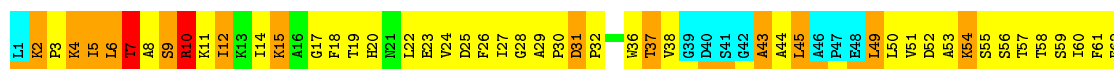
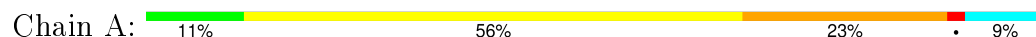






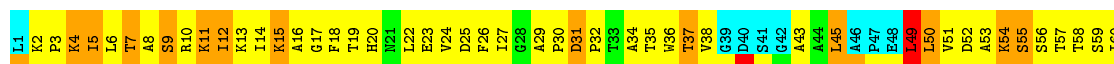
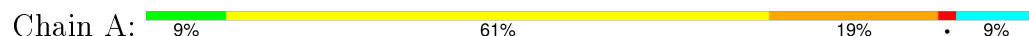
#### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE



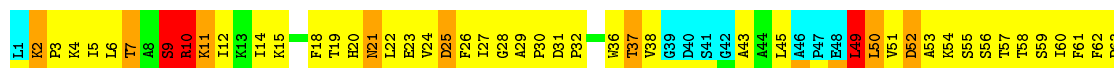
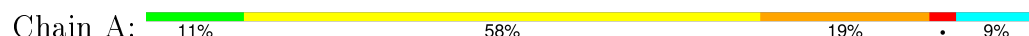
#### 4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE



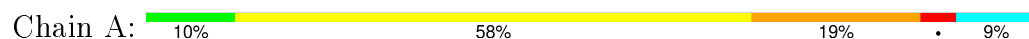
#### 4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE



#### 4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE

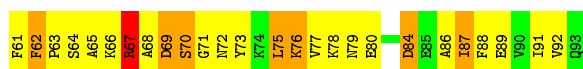




#### 4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE

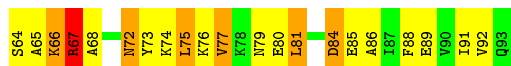
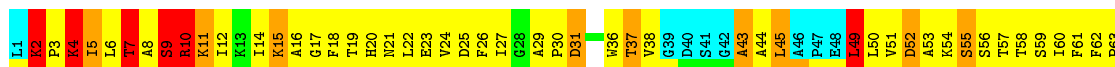
Chain A: 10% 59% 19% 9%



#### 4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE

Chain A: 16% 52% 16% 8% 9%



#### 4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE

Chain A: 9% 61% 18% 9%



#### 4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE

Chain A: 6% 65% 19% 9%

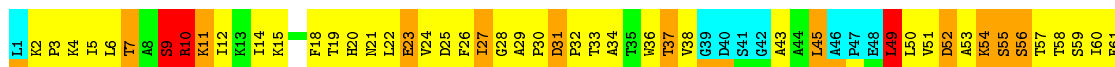




#### 4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE

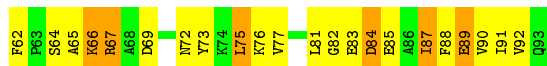
Chain A: 14% 52% 22% • 9%



#### 4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE

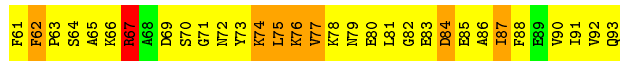
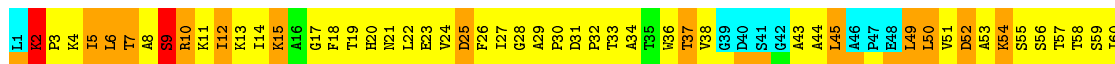
Chain A: 16% 55% 16% • 9%



#### 4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE

Chain A: • 62% 22% • 9%



#### 4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE

Chain A: 9% 59% 20% • 9%

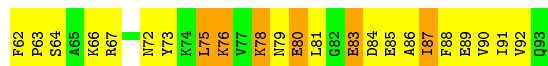




#### 4.2.27 Score per residue for model 27

- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE

Chain A: 16% 49% 25% 9%



#### 4.2.28 Score per residue for model 28

- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE

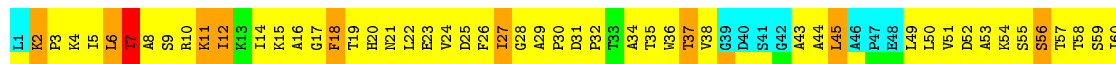
Chain A: 8% 57% 26% 9%



#### 4.2.29 Score per residue for model 29

- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE

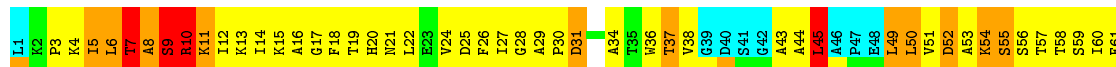
Chain A: 6% 68% 16% 9%



#### 4.2.30 Score per residue for model 30

- Molecule 1: TWITCHIN 18TH IGSF MODULE

Chain A: 9% 58% 19% 5% 9%



F62	F63	S64	A65	K66	R67	A68	D69	S70	G71	N72	Y73	K74	L75	K76	V77	K78	N79	E80	L81	G82	E83	D84	E85	A86	I87	F88	E89	V90	I91	V92	Q93
-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----

## 5 Refinement protocol and experimental data overview

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

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	

No chemical shift data was provided. No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.

## 6 Model quality [i](#)

### 6.1 Standard geometry [i](#)

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

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	2.3±0.5
All	All	0	70

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	10	ARG	Sidechain	30
1	A	67	ARG	Sidechain	30
1	A	2	LYS	Peptide	10

### 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	655	680	680	160±11
All	All	19650	20400	20400	4806

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 120.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:LEU:HD23	1:A:49:LEU:HD11	1.12	1.21	4	18
1:A:45:LEU:HD23	1:A:49:LEU:CD1	1.04	1.82	6	9
1:A:91:ILE:HD13	1:A:92:VAL:N	0.98	1.73	21	1
1:A:45:LEU:HD21	1:A:73:TYR:CE2	0.97	1.94	5	5
1:A:87:ILE:HD13	1:A:88:PHE:N	0.97	1.73	25	16
1:A:45:LEU:HD21	1:A:73:TYR:CD2	0.96	1.95	17	7
1:A:50:LEU:HD13	1:A:51:VAL:N	0.95	1.76	23	1
1:A:37:THR:HG22	1:A:43:ALA:O	0.94	1.62	10	28
1:A:12:ILE:HG23	1:A:20:HIS:NE2	0.94	1.78	21	26
1:A:45:LEU:HD11	1:A:73:TYR:CD2	0.94	1.96	10	5
1:A:12:ILE:HG21	1:A:20:HIS:NE2	0.91	1.80	18	5
1:A:86:ALA:HB3	1:A:88:PHE:CE1	0.91	2.01	30	13
1:A:22:LEU:HD21	1:A:36:TRP:CH2	0.90	2.02	27	30
1:A:9:SER:HB3	1:A:86:ALA:HB1	0.90	1.44	29	4
1:A:26:PHE:CD2	1:A:77:VAL:HG21	0.89	2.02	13	5
1:A:45:LEU:CD2	1:A:49:LEU:HD11	0.88	1.99	18	6
1:A:66:LYS:O	1:A:92:VAL:HG11	0.88	1.69	1	10
1:A:29:ALA:HB1	1:A:30:PRO:HA	0.88	1.46	26	30
1:A:77:VAL:HG22	1:A:84:ASP:OD1	0.87	1.70	26	1
1:A:36:TRP:CE2	1:A:75:LEU:HD13	0.87	2.04	6	30
1:A:51:VAL:HG13	1:A:60:ILE:CG2	0.87	2.00	24	30
1:A:26:PHE:CD1	1:A:77:VAL:HG21	0.85	2.05	29	5
1:A:34:ALA:CB	1:A:77:VAL:HG12	0.84	2.03	1	14
1:A:26:PHE:C	1:A:27:ILE:HD12	0.84	1.93	20	3
1:A:45:LEU:HD11	1:A:73:TYR:CG	0.84	2.07	10	3
1:A:66:LYS:C	1:A:92:VAL:HG11	0.83	1.93	27	28
1:A:50:LEU:HD11	1:A:63:PRO:HG3	0.83	1.47	18	8
1:A:81:LEU:HD22	1:A:81:LEU:O	0.83	1.72	26	1
1:A:49:LEU:HD12	1:A:61:PHE:O	0.83	1.74	8	7
1:A:50:LEU:O	1:A:50:LEU:HD13	0.82	1.73	7	1
1:A:5:ILE:HG22	1:A:84:ASP:CG	0.82	1.95	18	10
1:A:7:THR:HG21	1:A:24:VAL:HG13	0.82	1.52	14	11
1:A:75:LEU:HD21	1:A:77:VAL:CG1	0.81	2.05	2	2
1:A:81:LEU:N	1:A:81:LEU:HD13	0.80	1.91	30	1
1:A:12:ILE:HG22	1:A:14:ILE:CG1	0.80	2.07	6	28
1:A:38:VAL:O	1:A:38:VAL:HG13	0.79	1.76	8	7
1:A:50:LEU:HD23	1:A:63:PRO:HG3	0.78	1.55	21	1
1:A:9:SER:CB	1:A:86:ALA:HB1	0.78	2.08	3	5
1:A:6:LEU:HD13	1:A:6:LEU:N	0.78	1.92	13	2
1:A:38:VAL:HG13	1:A:38:VAL:O	0.78	1.77	9	11
1:A:49:LEU:C	1:A:50:LEU:HD23	0.78	1.99	16	8
1:A:24:VAL:HG22	1:A:88:PHE:CZ	0.78	2.13	22	17

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:5:ILE:HD12	1:A:26:PHE:CB	0.77	2.08	14	9
1:A:12:ILE:O	1:A:91:ILE:HG22	0.77	1.79	4	1
1:A:49:LEU:HD12	1:A:50:LEU:O	0.77	1.80	29	9
1:A:37:THR:HG22	1:A:44:ALA:HA	0.77	1.57	3	3
1:A:37:THR:O	1:A:45:LEU:HD12	0.77	1.80	19	11
1:A:7:THR:CG2	1:A:24:VAL:HG13	0.76	2.10	14	19
1:A:81:LEU:HD12	1:A:82:GLY:N	0.76	1.95	28	3
1:A:12:ILE:HB	1:A:90:VAL:HG13	0.76	1.56	29	11
1:A:87:ILE:HD11	1:A:89:GLU:HG3	0.76	1.58	21	1
1:A:5:ILE:HG22	1:A:84:ASP:OD1	0.76	1.81	12	10
1:A:45:LEU:HD22	1:A:60:ILE:HD12	0.75	1.55	10	4
1:A:26:PHE:CZ	1:A:34:ALA:HB2	0.75	2.15	13	9
1:A:14:ILE:O	1:A:92:VAL:HG13	0.75	1.82	24	3
1:A:45:LEU:HD22	1:A:45:LEU:C	0.75	2.03	18	13
1:A:9:SER:HB2	1:A:86:ALA:HB1	0.74	1.58	13	2
1:A:27:ILE:HD13	1:A:27:ILE:N	0.74	1.98	29	2
1:A:45:LEU:HD23	1:A:49:LEU:HD12	0.74	1.60	6	1
1:A:12:ILE:HB	1:A:90:VAL:HG22	0.74	1.60	9	8
1:A:12:ILE:HG22	1:A:14:ILE:HG13	0.73	1.61	21	18
1:A:45:LEU:C	1:A:45:LEU:HD22	0.73	2.03	21	7
1:A:27:ILE:N	1:A:27:ILE:HD13	0.73	1.97	26	5
1:A:86:ALA:HB3	1:A:88:PHE:CZ	0.73	2.18	30	13
1:A:81:LEU:HD22	1:A:82:GLY:N	0.72	1.98	30	1
1:A:4:LYS:O	1:A:6:LEU:HD13	0.72	1.85	8	5
1:A:6:LEU:HD22	1:A:7:THR:N	0.72	1.99	13	6
1:A:69:ASP:HB3	1:A:92:VAL:HG21	0.72	1.59	1	2
1:A:50:LEU:HD23	1:A:50:LEU:N	0.72	1.99	8	3
1:A:13:LYS:HA	1:A:91:ILE:HG22	0.71	1.59	28	1
1:A:45:LEU:CD2	1:A:60:ILE:HD12	0.71	2.15	13	8
1:A:19:THR:HG22	1:A:63:PRO:HA	0.71	1.63	11	28
1:A:51:VAL:HG22	1:A:60:ILE:HB	0.70	1.60	24	3
1:A:62:PHE:CE2	1:A:73:TYR:CE2	0.70	2.79	26	22
1:A:81:LEU:HD22	1:A:81:LEU:C	0.70	2.05	26	2
1:A:50:LEU:HD23	1:A:63:PRO:CG	0.70	2.15	21	1
1:A:66:LYS:O	1:A:92:VAL:HG21	0.70	1.86	2	21
1:A:6:LEU:HD22	1:A:6:LEU:N	0.70	2.00	23	1
1:A:14:ILE:HG23	1:A:18:PHE:CE1	0.70	2.20	6	3
1:A:62:PHE:HB3	1:A:65:ALA:HB2	0.70	1.64	13	12
1:A:14:ILE:HB	1:A:92:VAL:HG22	0.70	1.63	21	2
1:A:45:LEU:HD21	1:A:60:ILE:HD12	0.70	1.62	30	16
1:A:62:PHE:CE2	1:A:73:TYR:CZ	0.70	2.80	24	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:ILE:HD13	1:A:87:ILE:C	0.69	2.07	13	10
1:A:34:ALA:HB1	1:A:77:VAL:HG12	0.69	1.64	1	3
1:A:22:LEU:HD22	1:A:60:ILE:HG12	0.69	1.62	17	28
1:A:87:ILE:C	1:A:87:ILE:HD13	0.69	2.08	29	10
1:A:14:ILE:HG23	1:A:20:HIS:ND1	0.68	2.04	18	24
1:A:12:ILE:HD12	1:A:20:HIS:NE2	0.68	2.04	21	1
1:A:27:ILE:HG22	1:A:27:ILE:O	0.68	1.88	20	8
1:A:45:LEU:O	1:A:45:LEU:HD22	0.67	1.89	8	8
1:A:38:VAL:CG1	1:A:43:ALA:HB1	0.67	2.20	23	15
1:A:45:LEU:HD21	1:A:73:TYR:HE2	0.67	1.40	5	2
1:A:73:TYR:CG	1:A:90:VAL:HG21	0.67	2.25	17	6
1:A:6:LEU:N	1:A:6:LEU:HD13	0.67	2.04	21	4
1:A:24:VAL:CG2	1:A:88:PHE:CZ	0.67	2.78	14	23
1:A:80:GLU:O	1:A:81:LEU:HD12	0.67	1.90	23	2
1:A:7:THR:O	1:A:8:ALA:HB3	0.67	1.89	21	2
1:A:50:LEU:HD11	1:A:63:PRO:CG	0.67	2.20	17	8
1:A:12:ILE:CG2	1:A:14:ILE:HD11	0.67	2.20	21	2
1:A:62:PHE:CE2	1:A:90:VAL:HG11	0.67	2.25	22	1
1:A:86:ALA:HB1	1:A:88:PHE:CZ	0.66	2.25	2	8
1:A:50:LEU:N	1:A:50:LEU:HD23	0.66	2.05	16	5
1:A:88:PHE:N	1:A:88:PHE:CD1	0.66	2.64	5	7
1:A:87:ILE:O	1:A:87:ILE:HG23	0.66	1.90	30	2
1:A:49:LEU:HD22	1:A:62:PHE:CD1	0.66	2.25	2	1
1:A:22:LEU:CD2	1:A:36:TRP:CH2	0.66	2.79	27	30
1:A:81:LEU:C	1:A:81:LEU:HD12	0.66	2.11	11	1
1:A:45:LEU:HD23	1:A:49:LEU:HD21	0.66	1.68	24	4
1:A:38:VAL:CG1	1:A:43:ALA:HB3	0.66	2.19	16	9
1:A:28:GLY:O	1:A:29:ALA:HB2	0.65	1.91	7	14
1:A:9:SER:CB	1:A:88:PHE:CD2	0.65	2.79	1	1
1:A:11:LYS:O	1:A:12:ILE:HD13	0.65	1.92	22	5
1:A:15:LYS:CD	1:A:18:PHE:CE2	0.65	2.80	4	2
1:A:18:PHE:CD1	1:A:18:PHE:C	0.65	2.69	29	2
1:A:12:ILE:CG2	1:A:20:HIS:NE2	0.65	2.60	22	25
1:A:12:ILE:HG23	1:A:20:HIS:CE1	0.65	2.26	21	1
1:A:73:TYR:CD1	1:A:90:VAL:HG21	0.65	2.26	21	6
1:A:38:VAL:HG23	1:A:73:TYR:CD1	0.65	2.27	14	4
1:A:86:ALA:HB3	1:A:88:PHE:CE2	0.65	2.27	26	7
1:A:15:LYS:CB	1:A:18:PHE:CD2	0.65	2.80	19	11
1:A:50:LEU:C	1:A:50:LEU:HD13	0.65	2.13	23	1
1:A:73:TYR:CD1	1:A:90:VAL:CG2	0.65	2.80	17	11
1:A:38:VAL:HG12	1:A:44:ALA:N	0.65	2.07	14	11

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:ASN:HA	1:A:61:PHE:HB3	0.65	1.69	2	3
1:A:18:PHE:CD1	1:A:19:THR:N	0.64	2.66	29	3
1:A:12:ILE:HG22	1:A:14:ILE:HG12	0.64	1.69	29	20
1:A:36:TRP:CZ2	1:A:75:LEU:HD13	0.64	2.28	20	28
1:A:27:ILE:HD12	1:A:27:ILE:N	0.64	2.08	18	10
1:A:62:PHE:CZ	1:A:73:TYR:CE2	0.64	2.86	24	14
1:A:45:LEU:CD2	1:A:73:TYR:CE2	0.64	2.80	19	5
1:A:27:ILE:N	1:A:27:ILE:HD12	0.64	2.07	16	12
1:A:45:LEU:H	1:A:45:LEU:HD13	0.64	1.53	23	11
1:A:45:LEU:HD22	1:A:45:LEU:O	0.64	1.93	15	10
1:A:5:ILE:HG23	1:A:5:ILE:O	0.64	1.93	17	11
1:A:62:PHE:N	1:A:63:PRO:CD	0.63	2.61	17	27
1:A:37:THR:C	1:A:45:LEU:HD12	0.63	2.13	29	17
1:A:66:LYS:CA	1:A:92:VAL:HG11	0.63	2.24	22	4
1:A:18:PHE:CG	1:A:19:THR:N	0.63	2.67	6	3
1:A:6:LEU:HD11	1:A:25:ASP:OD1	0.63	1.93	15	1
1:A:91:ILE:N	1:A:91:ILE:HD12	0.63	2.08	12	2
1:A:12:ILE:CB	1:A:90:VAL:HG13	0.63	2.24	13	9
1:A:9:SER:CB	1:A:88:PHE:CE2	0.63	2.82	1	2
1:A:18:PHE:C	1:A:18:PHE:CD1	0.63	2.71	6	1
1:A:45:LEU:CD2	1:A:60:ILE:CD1	0.63	2.77	29	4
1:A:45:LEU:CD1	1:A:73:TYR:CD2	0.63	2.79	19	4
1:A:12:ILE:CG2	1:A:20:HIS:CE1	0.63	2.81	2	2
1:A:38:VAL:HG12	1:A:43:ALA:HB3	0.63	1.69	16	4
1:A:27:ILE:O	1:A:27:ILE:HG22	0.62	1.94	8	11
1:A:86:ALA:CB	1:A:88:PHE:CE1	0.62	2.80	30	10
1:A:12:ILE:HG23	1:A:20:HIS:CD2	0.62	2.29	15	13
1:A:38:VAL:CG1	1:A:38:VAL:O	0.62	2.48	8	6
1:A:24:VAL:HG21	1:A:36:TRP:CH2	0.62	2.28	22	17
1:A:5:ILE:HA	1:A:26:PHE:CB	0.62	2.25	13	29
1:A:51:VAL:HG13	1:A:60:ILE:HG22	0.62	1.71	17	30
1:A:86:ALA:CB	1:A:88:PHE:CZ	0.62	2.82	6	16
1:A:15:LYS:HB2	1:A:18:PHE:CD2	0.62	2.29	11	19
1:A:36:TRP:CD1	1:A:60:ILE:HG21	0.62	2.30	22	29
1:A:12:ILE:CG2	1:A:90:VAL:HG13	0.62	2.24	21	16
1:A:14:ILE:HD13	1:A:20:HIS:CG	0.62	2.30	2	12
1:A:36:TRP:C	1:A:45:LEU:HD13	0.62	2.14	13	4
1:A:36:TRP:HB3	1:A:45:LEU:HD22	0.62	1.71	13	2
1:A:69:ASP:CB	1:A:92:VAL:HG21	0.62	2.25	1	2
1:A:5:ILE:HG22	1:A:84:ASP:HB3	0.62	1.72	27	4
1:A:51:VAL:HG13	1:A:60:ILE:HG21	0.62	1.69	2	13

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:PHE:CG	1:A:56:SER:O	0.61	2.53	30	3
1:A:45:LEU:HG	1:A:73:TYR:CD2	0.61	2.30	11	20
1:A:5:ILE:O	1:A:5:ILE:HG23	0.61	1.96	8	15
1:A:38:VAL:HG12	1:A:43:ALA:CB	0.61	2.25	16	14
1:A:14:ILE:HG12	1:A:20:HIS:CE1	0.61	2.30	21	30
1:A:74:LYS:HD3	1:A:87:ILE:HG23	0.61	1.72	9	1
1:A:36:TRP:NE1	1:A:60:ILE:CG2	0.61	2.64	13	28
1:A:38:VAL:CG1	1:A:43:ALA:CB	0.61	2.79	23	19
1:A:26:PHE:CD1	1:A:26:PHE:O	0.61	2.54	29	7
1:A:7:THR:CG2	1:A:86:ALA:CB	0.61	2.79	22	11
1:A:19:THR:HG22	1:A:63:PRO:O	0.61	1.96	13	3
1:A:7:THR:HG23	1:A:7:THR:O	0.60	1.96	25	1
1:A:36:TRP:CE3	1:A:75:LEU:HB2	0.60	2.31	6	30
1:A:26:PHE:CG	1:A:77:VAL:HG21	0.60	2.32	4	7
1:A:61:PHE:HB3	1:A:63:PRO:HD3	0.60	1.73	23	27
1:A:62:PHE:CZ	1:A:73:TYR:CZ	0.60	2.90	24	1
1:A:45:LEU:HD13	1:A:45:LEU:H	0.60	1.55	20	8
1:A:45:LEU:HD22	1:A:60:ILE:CD1	0.60	2.27	2	2
1:A:6:LEU:HD11	1:A:25:ASP:OD2	0.60	1.96	13	1
1:A:20:HIS:O	1:A:61:PHE:CB	0.60	2.50	2	3
1:A:45:LEU:HD21	1:A:60:ILE:CD1	0.60	2.26	13	5
1:A:7:THR:O	1:A:7:THR:HG23	0.60	1.95	1	1
1:A:12:ILE:HG23	1:A:20:HIS:HE2	0.60	1.57	10	13
1:A:62:PHE:CD1	1:A:62:PHE:N	0.60	2.65	2	7
1:A:18:PHE:CZ	1:A:19:THR:O	0.60	2.55	6	3
1:A:16:ALA:HB2	1:A:93:GLN:OXT	0.60	1.96	14	1
1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:CD1	0.59	2.65	8	7
1:A:77:VAL:HG23	1:A:77:VAL:O	0.59	1.97	4	3
1:A:49:LEU:HD13	1:A:62:PHE:CD2	0.59	2.32	19	1
1:A:91:ILE:HG22	1:A:92:VAL:N	0.59	2.11	12	25
1:A:7:THR:CG2	1:A:86:ALA:HB2	0.59	2.27	9	10
1:A:45:LEU:C	1:A:45:LEU:CD2	0.59	2.71	22	11
1:A:49:LEU:CB	1:A:61:PHE:O	0.59	2.50	15	7
1:A:38:VAL:HB	1:A:45:LEU:HD12	0.59	1.74	17	1
1:A:53:ALA:CB	1:A:58:THR:OG1	0.59	2.50	13	30
1:A:5:ILE:HD12	1:A:26:PHE:CG	0.59	2.31	14	5
1:A:27:ILE:N	1:A:27:ILE:CD1	0.59	2.66	19	12
1:A:27:ILE:H	1:A:27:ILE:HD13	0.59	1.56	27	1
1:A:12:ILE:HG21	1:A:14:ILE:HD11	0.59	1.72	21	3
1:A:6:LEU:H	1:A:6:LEU:HD13	0.59	1.57	21	4
1:A:14:ILE:HG23	1:A:18:PHE:HE1	0.59	1.55	6	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:HIS:CB	1:A:62:PHE:HB2	0.59	2.27	18	27
1:A:27:ILE:CD1	1:A:27:ILE:N	0.59	2.65	23	12
1:A:36:TRP:CE2	1:A:60:ILE:CG2	0.59	2.85	13	28
1:A:45:LEU:HD13	1:A:45:LEU:N	0.59	2.13	8	12
1:A:36:TRP:O	1:A:45:LEU:CD1	0.59	2.51	12	21
1:A:35:THR:HG21	1:A:76:LYS:NZ	0.59	2.13	29	1
1:A:36:TRP:CE2	1:A:75:LEU:CD1	0.59	2.86	26	30
1:A:29:ALA:HB1	1:A:30:PRO:CA	0.58	2.26	5	20
1:A:36:TRP:CD1	1:A:51:VAL:CG1	0.58	2.85	30	6
1:A:12:ILE:HG21	1:A:20:HIS:HE2	0.58	1.53	5	1
1:A:72:ASN:OD1	1:A:87:ILE:HD11	0.58	1.98	18	1
1:A:26:PHE:CD2	1:A:77:VAL:CG2	0.58	2.84	13	1
1:A:23:GLU:O	1:A:24:VAL:HG23	0.58	1.99	17	22
1:A:36:TRP:O	1:A:45:LEU:HD13	0.58	1.98	4	21
1:A:45:LEU:CD1	1:A:45:LEU:N	0.58	2.67	26	11
1:A:14:ILE:CD1	1:A:90:VAL:CG1	0.58	2.82	2	10
1:A:5:ILE:HG22	1:A:84:ASP:HB2	0.58	1.74	7	2
1:A:26:PHE:O	1:A:26:PHE:CD1	0.58	2.57	3	5
1:A:9:SER:OG	1:A:88:PHE:CE2	0.58	2.57	1	1
1:A:91:ILE:CG2	1:A:92:VAL:N	0.58	2.66	3	21
1:A:26:PHE:O	1:A:27:ILE:HD12	0.58	1.97	30	3
1:A:26:PHE:CE1	1:A:55:SER:O	0.58	2.57	5	5
1:A:80:GLU:HB3	1:A:81:LEU:HD13	0.58	1.76	30	1
1:A:14:ILE:CD1	1:A:90:VAL:HG11	0.58	2.29	23	1
1:A:12:ILE:CB	1:A:90:VAL:HG22	0.58	2.29	9	4
1:A:5:ILE:HG12	1:A:26:PHE:HB3	0.58	1.75	20	2
1:A:6:LEU:O	1:A:8:ALA:N	0.57	2.37	2	2
1:A:26:PHE:O	1:A:26:PHE:CG	0.57	2.57	23	5
1:A:86:ALA:O	1:A:88:PHE:CE1	0.57	2.57	30	7
1:A:5:ILE:HG22	1:A:84:ASP:OD2	0.57	2.00	8	8
1:A:35:THR:HG22	1:A:76:LYS:O	0.57	1.99	16	2
1:A:5:ILE:CD1	1:A:26:PHE:CB	0.57	2.83	14	3
1:A:81:LEU:HD12	1:A:81:LEU:C	0.57	2.19	28	2
1:A:50:LEU:HB3	1:A:61:PHE:CE2	0.57	2.35	24	2
1:A:19:THR:HG22	1:A:63:PRO:CA	0.57	2.29	11	21
1:A:7:THR:HB	1:A:24:VAL:HG13	0.57	1.75	26	5
1:A:89:GLU:HG2	1:A:91:ILE:HD11	0.57	1.77	9	1
1:A:24:VAL:CG2	1:A:88:PHE:CE2	0.57	2.87	1	9
1:A:9:SER:OG	1:A:88:PHE:CD2	0.57	2.56	21	2
1:A:62:PHE:N	1:A:62:PHE:CD1	0.57	2.73	7	15
1:A:38:VAL:O	1:A:38:VAL:CG1	0.57	2.53	28	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:LEU:CB	1:A:61:PHE:HB2	0.57	2.30	27	10
1:A:9:SER:HA	1:A:87:ILE:HG23	0.57	1.76	22	1
1:A:45:LEU:HD21	1:A:73:TYR:HD2	0.56	1.60	29	2
1:A:73:TYR:CG	1:A:90:VAL:CG2	0.56	2.88	17	4
1:A:37:THR:C	1:A:45:LEU:CD1	0.56	2.73	7	5
1:A:27:ILE:HG22	1:A:56:SER:CA	0.56	2.30	27	1
1:A:49:LEU:HD22	1:A:73:TYR:OH	0.56	2.00	26	3
1:A:26:PHE:CE1	1:A:34:ALA:HB2	0.56	2.34	13	2
1:A:45:LEU:N	1:A:45:LEU:HD13	0.56	2.15	6	8
1:A:7:THR:O	1:A:8:ALA:CB	0.56	2.54	2	2
1:A:27:ILE:CG2	1:A:28:GLY:N	0.56	2.68	14	3
1:A:73:TYR:HB2	1:A:90:VAL:HG23	0.56	1.77	28	4
1:A:38:VAL:HG23	1:A:73:TYR:CE1	0.56	2.36	14	2
1:A:6:LEU:HD21	1:A:25:ASP:OD2	0.56	2.01	13	1
1:A:45:LEU:HD23	1:A:73:TYR:CE2	0.56	2.36	11	2
1:A:87:ILE:HG23	1:A:87:ILE:O	0.56	1.99	26	3
1:A:15:LYS:HG3	1:A:18:PHE:CD1	0.56	2.36	24	1
1:A:49:LEU:HB2	1:A:61:PHE:O	0.56	2.01	14	24
1:A:22:LEU:HD21	1:A:36:TRP:CZ2	0.56	2.35	4	12
1:A:36:TRP:CD1	1:A:60:ILE:CG2	0.56	2.89	6	18
1:A:6:LEU:C	1:A:6:LEU:CD2	0.56	2.74	15	3
1:A:72:ASN:ND2	1:A:87:ILE:HD11	0.56	2.16	30	1
1:A:81:LEU:CD1	1:A:81:LEU:N	0.55	2.66	30	2
1:A:9:SER:HB3	1:A:88:PHE:CE2	0.55	2.37	25	1
1:A:22:LEU:CD2	1:A:36:TRP:CZ2	0.55	2.89	4	20
1:A:15:LYS:HB3	1:A:18:PHE:CG	0.55	2.36	7	17
1:A:87:ILE:C	1:A:88:PHE:CD1	0.55	2.79	5	5
1:A:18:PHE:CE1	1:A:19:THR:C	0.55	2.79	29	3
1:A:38:VAL:HG13	1:A:43:ALA:HB1	0.55	1.78	14	2
1:A:26:PHE:CD1	1:A:56:SER:O	0.55	2.59	30	1
1:A:37:THR:CB	1:A:43:ALA:O	0.55	2.55	1	3
1:A:36:TRP:CD2	1:A:60:ILE:HD13	0.55	2.37	23	15
1:A:53:ALA:HB2	1:A:58:THR:OG1	0.55	2.01	30	10
1:A:5:ILE:O	1:A:5:ILE:CG2	0.55	2.55	8	15
1:A:78:LYS:CG	1:A:79:ASN:N	0.55	2.69	15	6
1:A:54:LYS:CD	1:A:55:SER:N	0.55	2.70	23	2
1:A:24:VAL:HG21	1:A:36:TRP:CZ2	0.55	2.35	22	1
1:A:45:LEU:HD11	1:A:73:TYR:CE2	0.55	2.35	2	1
1:A:5:ILE:HD12	1:A:26:PHE:HB3	0.55	1.79	22	15
1:A:7:THR:CB	1:A:24:VAL:HG13	0.55	2.32	26	4
1:A:26:PHE:CD1	1:A:26:PHE:C	0.54	2.80	27	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:LYS:HG3	1:A:18:PHE:CG	0.54	2.38	24	1
1:A:7:THR:HG21	1:A:24:VAL:CG1	0.54	2.30	14	2
1:A:15:LYS:CG	1:A:18:PHE:CD1	0.54	2.90	24	1
1:A:26:PHE:O	1:A:56:SER:O	0.54	2.25	20	6
1:A:32:PRO:CG	1:A:55:SER:O	0.54	2.56	7	15
1:A:16:ALA:O	1:A:18:PHE:CD1	0.54	2.60	24	16
1:A:36:TRP:CG	1:A:60:ILE:HG21	0.54	2.37	6	15
1:A:38:VAL:HG12	1:A:43:ALA:HB1	0.54	1.80	1	5
1:A:5:ILE:CG2	1:A:5:ILE:O	0.54	2.56	16	13
1:A:19:THR:CG2	1:A:63:PRO:HA	0.54	2.31	11	22
1:A:18:PHE:CE1	1:A:19:THR:O	0.54	2.61	29	3
1:A:54:LYS:O	1:A:57:THR:O	0.54	2.26	25	29
1:A:16:ALA:O	1:A:18:PHE:CE1	0.54	2.60	24	1
1:A:35:THR:HG22	1:A:37:THR:HG23	0.54	1.80	7	1
1:A:7:THR:OG1	1:A:8:ALA:N	0.54	2.41	29	5
1:A:84:ASP:O	1:A:85:GLU:CG	0.54	2.56	20	5
1:A:86:ALA:O	1:A:88:PHE:CD1	0.54	2.61	30	1
1:A:37:THR:CG2	1:A:43:ALA:O	0.54	2.56	7	16
1:A:17:GLY:C	1:A:18:PHE:CD1	0.54	2.81	1	3
1:A:36:TRP:O	1:A:45:LEU:CB	0.54	2.55	19	1
1:A:12:ILE:CG2	1:A:20:HIS:CD2	0.54	2.91	28	17
1:A:79:ASN:ND2	1:A:79:ASN:O	0.54	2.41	5	1
1:A:87:ILE:CG2	1:A:87:ILE:O	0.54	2.56	30	2
1:A:9:SER:HB3	1:A:88:PHE:CD2	0.54	2.38	1	1
1:A:27:ILE:HG22	1:A:56:SER:O	0.54	2.03	27	1
1:A:3:PRO:CG	1:A:79:ASN:OD1	0.54	2.56	29	1
1:A:22:LEU:CB	1:A:60:ILE:O	0.54	2.56	24	2
1:A:38:VAL:CG2	1:A:72:ASN:O	0.54	2.56	10	1
1:A:79:ASN:O	1:A:81:LEU:N	0.53	2.42	5	14
1:A:6:LEU:CD2	1:A:6:LEU:C	0.53	2.76	30	3
1:A:49:LEU:CD2	1:A:73:TYR:OH	0.53	2.57	17	7
1:A:77:VAL:CG2	1:A:84:ASP:OD1	0.53	2.57	7	1
1:A:52:ASP:O	1:A:59:SER:O	0.53	2.26	5	30
1:A:50:LEU:O	1:A:51:VAL:CG2	0.53	2.57	29	9
1:A:45:LEU:HG	1:A:73:TYR:CE2	0.53	2.37	14	16
1:A:50:LEU:HB2	1:A:61:PHE:CD2	0.53	2.37	24	1
1:A:17:GLY:N	1:A:65:ALA:O	0.53	2.41	30	15
1:A:6:LEU:CD1	1:A:6:LEU:N	0.53	2.66	13	2
1:A:49:LEU:HD12	1:A:51:VAL:CG2	0.53	2.34	13	1
1:A:73:TYR:CD1	1:A:90:VAL:HB	0.53	2.39	6	7
1:A:6:LEU:O	1:A:7:THR:O	0.53	2.27	29	11

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:LEU:CG	1:A:73:TYR:CD2	0.53	2.92	19	2
1:A:49:LEU:N	1:A:49:LEU:HD23	0.53	2.19	13	1
1:A:24:VAL:O	1:A:57:THR:OG1	0.53	2.27	22	27
1:A:22:LEU:HB3	1:A:60:ILE:O	0.53	2.04	21	4
1:A:14:ILE:HD13	1:A:20:HIS:CB	0.53	2.34	28	15
1:A:15:LYS:HB2	1:A:18:PHE:CG	0.53	2.39	26	9
1:A:9:SER:CA	1:A:87:ILE:O	0.53	2.56	6	1
1:A:70:SER:CA	1:A:92:VAL:HG23	0.53	2.33	18	6
1:A:9:SER:HA	1:A:88:PHE:CE1	0.53	2.39	12	10
1:A:45:LEU:CD2	1:A:45:LEU:C	0.53	2.77	16	10
1:A:26:PHE:CG	1:A:26:PHE:O	0.53	2.61	26	5
1:A:28:GLY:O	1:A:32:PRO:CG	0.53	2.57	3	1
1:A:45:LEU:O	1:A:49:LEU:CD1	0.53	2.57	1	2
1:A:2:LYS:CG	1:A:81:LEU:O	0.53	2.57	15	1
1:A:38:VAL:HG23	1:A:72:ASN:O	0.53	2.04	10	1
1:A:27:ILE:HG22	1:A:28:GLY:N	0.53	2.18	23	3
1:A:4:LYS:O	1:A:6:LEU:CD1	0.53	2.57	8	6
1:A:35:THR:O	1:A:35:THR:HG23	0.53	2.03	16	3
1:A:9:SER:O	1:A:10:ARG:CD	0.53	2.57	12	1
1:A:50:LEU:O	1:A:50:LEU:CD1	0.53	2.55	7	1
1:A:87:ILE:O	1:A:87:ILE:CG2	0.52	2.57	26	2
1:A:69:ASP:O	1:A:71:GLY:N	0.52	2.42	17	13
1:A:32:PRO:CA	1:A:79:ASN:OD1	0.52	2.57	16	2
1:A:45:LEU:HD23	1:A:60:ILE:HD12	0.52	1.80	17	1
1:A:6:LEU:N	1:A:6:LEU:CD2	0.52	2.71	23	1
1:A:5:ILE:HG21	1:A:85:GLU:O	0.52	2.04	21	1
1:A:77:VAL:CG2	1:A:77:VAL:O	0.52	2.56	4	3
1:A:61:PHE:C	1:A:62:PHE:CD1	0.52	2.82	30	21
1:A:54:LYS:O	1:A:55:SER:C	0.52	2.47	21	3
1:A:91:ILE:O	1:A:92:VAL:CG2	0.52	2.58	28	2
1:A:29:ALA:N	1:A:79:ASN:OD1	0.52	2.43	15	3
1:A:38:VAL:O	1:A:38:VAL:HG22	0.52	2.05	13	2
1:A:5:ILE:CG1	1:A:7:THR:HG22	0.52	2.34	17	2
1:A:5:ILE:CD1	1:A:26:PHE:HB3	0.52	2.34	14	7
1:A:8:ALA:O	1:A:9:SER:CB	0.52	2.57	24	1
1:A:3:PRO:HA	1:A:27:ILE:O	0.52	2.05	23	23
1:A:6:LEU:O	1:A:7:THR:C	0.52	2.47	6	29
1:A:3:PRO:CD	1:A:79:ASN:OD1	0.52	2.57	29	1
1:A:69:ASP:CG	1:A:73:TYR:HH	0.52	2.08	22	1
1:A:37:THR:HA	1:A:44:ALA:HA	0.52	1.81	8	13
1:A:9:SER:CB	1:A:87:ILE:O	0.52	2.58	11	4

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:LEU:HD21	1:A:73:TYR:CE2	0.52	2.39	5	5
1:A:6:LEU:CD2	1:A:25:ASP:OD1	0.52	2.57	8	1
1:A:28:GLY:O	1:A:29:ALA:CB	0.52	2.57	18	4
1:A:14:ILE:HG23	1:A:20:HIS:HD1	0.52	1.65	14	3
1:A:9:SER:OG	1:A:88:PHE:CE1	0.52	2.63	13	1
1:A:49:LEU:CD1	1:A:61:PHE:O	0.52	2.57	19	7
1:A:5:ILE:HG12	1:A:7:THR:HG22	0.52	1.82	17	3
1:A:24:VAL:CG1	1:A:25:ASP:N	0.52	2.72	30	17
1:A:79:ASN:N	1:A:79:ASN:OD1	0.52	2.42	11	1
1:A:14:ILE:CD1	1:A:20:HIS:CG	0.52	2.93	21	4
1:A:36:TRP:HB3	1:A:45:LEU:HD11	0.52	1.79	21	7
1:A:45:LEU:CD2	1:A:73:TYR:CD2	0.52	2.91	19	3
1:A:78:LYS:O	1:A:79:ASN:ND2	0.52	2.43	29	2
1:A:88:PHE:CD1	1:A:88:PHE:N	0.52	2.77	30	1
1:A:20:HIS:O	1:A:61:PHE:HB3	0.52	2.05	21	2
1:A:8:ALA:O	1:A:9:SER:C	0.52	2.48	25	8
1:A:50:LEU:HB2	1:A:61:PHE:CB	0.52	2.35	3	10
1:A:79:ASN:O	1:A:80:GLU:CG	0.52	2.57	25	1
1:A:62:PHE:CD2	1:A:69:ASP:OD1	0.52	2.63	24	1
1:A:30:PRO:O	1:A:79:ASN:ND2	0.52	2.43	27	1
1:A:14:ILE:HD13	1:A:20:HIS:HB2	0.52	1.80	28	10
1:A:15:LYS:HB3	1:A:18:PHE:CD1	0.52	2.41	1	5
1:A:7:THR:HG23	1:A:86:ALA:CB	0.52	2.34	22	1
1:A:8:ALA:O	1:A:87:ILE:CG2	0.52	2.58	22	1
1:A:34:ALA:CB	1:A:77:VAL:CG1	0.52	2.86	1	1
1:A:70:SER:OG	1:A:92:VAL:CG2	0.51	2.58	11	2
1:A:14:ILE:HD11	1:A:90:VAL:HG11	0.51	1.82	23	1
1:A:20:HIS:HB3	1:A:62:PHE:HB2	0.51	1.81	29	8
1:A:50:LEU:CB	1:A:61:PHE:CE2	0.51	2.93	24	1
1:A:19:THR:HA	1:A:62:PHE:O	0.51	2.05	24	20
1:A:7:THR:HG21	1:A:86:ALA:CB	0.51	2.36	4	6
1:A:36:TRP:CZ3	1:A:75:LEU:HB2	0.51	2.40	8	14
1:A:87:ILE:CD1	1:A:87:ILE:C	0.51	2.79	13	12
1:A:17:GLY:O	1:A:18:PHE:CD1	0.51	2.64	1	3
1:A:9:SER:HB2	1:A:88:PHE:CE2	0.51	2.40	5	2
1:A:9:SER:O	1:A:10:ARG:CG	0.51	2.59	24	5
1:A:54:LYS:HD2	1:A:55:SER:N	0.51	2.21	23	2
1:A:12:ILE:CG2	1:A:14:ILE:CG1	0.51	2.88	21	10
1:A:5:ILE:HA	1:A:26:PHE:HB3	0.51	1.83	30	13
1:A:62:PHE:CE2	1:A:69:ASP:OD1	0.51	2.64	24	1
1:A:15:LYS:HG3	1:A:18:PHE:CE1	0.51	2.40	24	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:ILE:HG22	1:A:92:VAL:H	0.51	1.66	29	5
1:A:52:ASP:OD1	1:A:52:ASP:N	0.51	2.43	6	4
1:A:25:ASP:OD1	1:A:25:ASP:N	0.51	2.43	8	1
1:A:9:SER:HB2	1:A:88:PHE:CD1	0.51	2.40	2	1
1:A:5:ILE:HD12	1:A:26:PHE:CD2	0.51	2.41	6	2
1:A:26:PHE:CD2	1:A:56:SER:O	0.51	2.64	21	2
1:A:15:LYS:HG3	1:A:18:PHE:CD2	0.51	2.40	4	3
1:A:9:SER:HB2	1:A:88:PHE:CE1	0.51	2.41	2	1
1:A:79:ASN:OD1	1:A:82:GLY:N	0.50	2.43	23	1
1:A:24:VAL:HG21	1:A:88:PHE:CZ	0.50	2.41	1	15
1:A:62:PHE:N	1:A:63:PRO:HD3	0.50	2.21	10	27
1:A:75:LEU:HG	1:A:76:LYS:N	0.50	2.22	21	27
1:A:36:TRP:CH2	1:A:88:PHE:CE2	0.50	3.00	2	2
1:A:49:LEU:HD21	1:A:73:TYR:OH	0.50	2.06	10	2
1:A:15:LYS:HB2	1:A:18:PHE:CE1	0.50	2.41	24	1
1:A:27:ILE:HG22	1:A:28:GLY:H	0.50	1.66	25	3
1:A:50:LEU:HB3	1:A:61:PHE:HB2	0.50	1.83	23	8
1:A:14:ILE:O	1:A:92:VAL:HA	0.50	2.06	5	25
1:A:25:ASP:HA	1:A:57:THR:OG1	0.50	2.06	21	29
1:A:3:PRO:CD	1:A:82:GLY:C	0.50	2.80	29	3
1:A:73:TYR:CE1	1:A:90:VAL:HB	0.50	2.42	22	1
1:A:82:GLY:O	1:A:83:GLU:CB	0.50	2.59	22	1
1:A:45:LEU:O	1:A:49:LEU:HD11	0.50	2.06	1	2
1:A:13:LYS:CG	1:A:13:LYS:O	0.50	2.59	14	2
1:A:5:ILE:HB	1:A:84:ASP:HB3	0.50	1.82	20	1
1:A:32:PRO:HG2	1:A:55:SER:O	0.50	2.06	10	24
1:A:2:LYS:HB3	1:A:3:PRO:CA	0.50	2.37	3	1
1:A:50:LEU:CD1	1:A:63:PRO:HG3	0.50	2.36	25	4
1:A:4:LYS:HE3	1:A:27:ILE:HG21	0.50	1.83	4	1
1:A:25:ASP:OD1	1:A:26:PHE:N	0.50	2.44	9	1
1:A:69:ASP:HB2	1:A:92:VAL:HG21	0.50	1.84	26	4
1:A:81:LEU:C	1:A:81:LEU:CD2	0.50	2.80	30	2
1:A:5:ILE:O	1:A:5:ILE:HG22	0.50	2.06	2	2
1:A:54:LYS:HB2	1:A:57:THR:HG22	0.50	1.82	22	9
1:A:36:TRP:CE2	1:A:60:ILE:HG21	0.50	2.42	30	26
1:A:5:ILE:CG2	1:A:84:ASP:CG	0.50	2.81	26	3
1:A:5:ILE:CG2	1:A:84:ASP:OD1	0.50	2.57	12	5
1:A:52:ASP:N	1:A:52:ASP:OD1	0.50	2.44	1	1
1:A:70:SER:CB	1:A:92:VAL:HG23	0.50	2.37	13	1
1:A:72:ASN:N	1:A:72:ASN:ND2	0.50	2.58	14	1
1:A:36:TRP:C	1:A:45:LEU:CD1	0.49	2.81	15	6

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:77:VAL:C	1:A:78:LYS:CG	0.49	2.79	6	1
1:A:85:GLU:OE1	1:A:85:GLU:N	0.49	2.45	4	1
1:A:50:LEU:HD23	1:A:61:PHE:CG	0.49	2.42	9	2
1:A:79:ASN:O	1:A:80:GLU:C	0.49	2.50	9	14
1:A:57:THR:O	1:A:58:THR:HB	0.49	2.08	5	29
1:A:60:ILE:HG13	1:A:62:PHE:CE1	0.49	2.42	13	14
1:A:87:ILE:C	1:A:87:ILE:CD1	0.49	2.80	24	2
1:A:78:LYS:HG2	1:A:79:ASN:N	0.49	2.22	25	5
1:A:11:LYS:C	1:A:12:ILE:CG1	0.49	2.80	18	2
1:A:45:LEU:H	1:A:45:LEU:CD1	0.49	2.20	18	6
1:A:66:LYS:C	1:A:92:VAL:CG1	0.49	2.81	4	6
1:A:6:LEU:C	1:A:7:THR:CG2	0.49	2.81	29	2
1:A:81:LEU:C	1:A:81:LEU:CD1	0.49	2.81	11	2
1:A:75:LEU:O	1:A:85:GLU:CG	0.49	2.60	10	2
1:A:89:GLU:CG	1:A:91:ILE:HD11	0.49	2.37	9	1
1:A:3:PRO:CA	1:A:27:ILE:O	0.49	2.60	23	1
1:A:14:ILE:CD1	1:A:90:VAL:HG13	0.49	2.37	22	1
1:A:79:ASN:O	1:A:82:GLY:O	0.49	2.30	14	4
1:A:50:LEU:HB3	1:A:61:PHE:CB	0.49	2.38	9	7
1:A:70:SER:O	1:A:70:SER:OG	0.49	2.30	21	4
1:A:25:ASP:HA	1:A:57:THR:HG1	0.49	1.67	20	10
1:A:6:LEU:HD21	1:A:25:ASP:HB3	0.49	1.83	13	1
1:A:16:ALA:CB	1:A:93:GLN:OXT	0.49	2.61	14	1
1:A:8:ALA:O	1:A:9:SER:O	0.49	2.31	11	22
1:A:32:PRO:HB3	1:A:79:ASN:ND2	0.49	2.23	29	2
1:A:11:LYS:HA	1:A:89:GLU:CB	0.49	2.37	22	1
1:A:5:ILE:HG12	1:A:26:PHE:CB	0.49	2.37	2	2
1:A:14:ILE:O	1:A:92:VAL:CG1	0.49	2.58	24	2
1:A:35:THR:O	1:A:75:LEU:HD12	0.49	2.07	13	1
1:A:67:ARG:HG2	1:A:68:ALA:N	0.49	2.22	20	1
1:A:6:LEU:N	1:A:6:LEU:CD1	0.49	2.76	21	2
1:A:91:ILE:C	1:A:91:ILE:HD13	0.49	2.27	21	1
1:A:79:ASN:O	1:A:80:GLU:HG2	0.48	2.08	25	1
1:A:15:LYS:HB2	1:A:18:PHE:CD1	0.48	2.43	17	1
1:A:45:LEU:O	1:A:49:LEU:HG	0.48	2.08	7	1
1:A:30:PRO:O	1:A:31:ASP:C	0.48	2.52	6	15
1:A:6:LEU:C	1:A:7:THR:HG23	0.48	2.28	20	2
1:A:25:ASP:N	1:A:25:ASP:OD1	0.48	2.46	3	3
1:A:15:LYS:HD3	1:A:18:PHE:CE2	0.48	2.42	28	2
1:A:26:PHE:CE2	1:A:55:SER:O	0.48	2.67	7	4
1:A:9:SER:HA	1:A:88:PHE:CE2	0.48	2.43	24	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:70:SER:OG	1:A:92:VAL:HG23	0.48	2.08	11	2
1:A:12:ILE:CG2	1:A:14:ILE:CD1	0.48	2.90	21	1
1:A:81:LEU:HD13	1:A:82:GLY:N	0.48	2.23	26	1
1:A:74:LYS:CE	1:A:85:GLU:CD	0.48	2.82	15	2
1:A:70:SER:N	1:A:92:VAL:HG23	0.48	2.24	6	1
1:A:9:SER:O	1:A:87:ILE:O	0.48	2.32	5	1
1:A:24:VAL:HG21	1:A:36:TRP:HH2	0.48	1.68	2	1
1:A:92:VAL:O	1:A:93:GLN:CG	0.48	2.61	10	1
1:A:26:PHE:O	1:A:56:SER:C	0.48	2.52	25	26
1:A:15:LYS:HB3	1:A:18:PHE:CD2	0.48	2.44	8	12
1:A:26:PHE:O	1:A:26:PHE:CD2	0.48	2.66	26	2
1:A:22:LEU:HD23	1:A:22:LEU:C	0.48	2.28	17	15
1:A:77:VAL:O	1:A:77:VAL:CG2	0.48	2.61	9	4
1:A:54:LYS:HG3	1:A:55:SER:N	0.48	2.23	6	2
1:A:60:ILE:O	1:A:60:ILE:HG13	0.48	2.08	24	2
1:A:49:LEU:HB2	1:A:62:PHE:HA	0.48	1.84	19	2
1:A:22:LEU:HD23	1:A:23:GLU:N	0.48	2.24	29	1
1:A:11:LYS:C	1:A:12:ILE:HG13	0.48	2.29	18	2
1:A:49:LEU:HD22	1:A:62:PHE:CD2	0.48	2.44	1	4
1:A:89:GLU:HG2	1:A:91:ILE:CD1	0.48	2.38	9	1
1:A:29:ALA:CB	1:A:30:PRO:HA	0.48	2.32	4	7
1:A:49:LEU:HD11	1:A:51:VAL:CG2	0.48	2.39	24	2
1:A:16:ALA:HA	1:A:92:VAL:CG1	0.48	2.39	6	5
1:A:2:LYS:HB2	1:A:3:PRO:CD	0.48	2.38	25	1
1:A:84:ASP:OD1	1:A:84:ASP:N	0.48	2.43	7	1
1:A:4:LYS:CG	1:A:27:ILE:HB	0.48	2.39	23	1
1:A:54:LYS:HB2	1:A:57:THR:CG2	0.48	2.39	7	14
1:A:62:PHE:CB	1:A:65:ALA:HB2	0.48	2.39	24	2
1:A:5:ILE:CG1	1:A:26:PHE:HB3	0.48	2.39	25	19
1:A:80:GLU:OE2	1:A:81:LEU:CD2	0.48	2.61	25	1
1:A:67:ARG:HG3	1:A:68:ALA:N	0.48	2.24	6	2
1:A:36:TRP:HB3	1:A:45:LEU:HD21	0.48	1.85	7	3
1:A:49:LEU:HD13	1:A:62:PHE:CG	0.48	2.43	19	1
1:A:11:LYS:O	1:A:12:ILE:CG1	0.48	2.62	18	3
1:A:31:ASP:O	1:A:31:ASP:CG	0.48	2.53	5	1
1:A:6:LEU:HD13	1:A:6:LEU:H	0.48	1.67	15	2
1:A:65:ALA:C	1:A:66:LYS:CG	0.48	2.82	11	1
1:A:45:LEU:CD1	1:A:45:LEU:H	0.47	2.22	24	8
1:A:22:LEU:HB3	1:A:60:ILE:CG1	0.47	2.39	29	1
1:A:11:LYS:HA	1:A:89:GLU:O	0.47	2.09	18	9
1:A:50:LEU:HB2	1:A:61:PHE:HB3	0.47	1.86	20	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:LYS:CG	1:A:18:PHE:CD2	0.47	2.97	4	2
1:A:76:LYS:CB	1:A:85:GLU:CD	0.47	2.83	8	1
1:A:22:LEU:HB3	1:A:60:ILE:HG12	0.47	1.86	29	21
1:A:38:VAL:HA	1:A:72:ASN:O	0.47	2.09	26	7
1:A:77:VAL:O	1:A:84:ASP:O	0.47	2.31	14	7
1:A:77:VAL:O	1:A:84:ASP:OD1	0.47	2.33	7	1
1:A:19:THR:CB	1:A:63:PRO:HA	0.47	2.39	1	26
1:A:5:ILE:CG2	1:A:84:ASP:HB3	0.47	2.39	6	14
1:A:21:ASN:OD1	1:A:21:ASN:O	0.47	2.33	21	1
1:A:3:PRO:HA	1:A:28:GLY:CA	0.47	2.39	3	6
1:A:3:PRO:CB	1:A:79:ASN:OD1	0.47	2.62	29	1
1:A:29:ALA:O	1:A:79:ASN:OD1	0.47	2.32	27	8
1:A:75:LEU:CD2	1:A:77:VAL:CG1	0.47	2.89	2	1
1:A:78:LYS:O	1:A:79:ASN:OD1	0.47	2.32	14	1
1:A:9:SER:OG	1:A:9:SER:O	0.47	2.31	11	2
1:A:2:LYS:CG	1:A:3:PRO:HD2	0.47	2.39	12	1
1:A:14:ILE:HD11	1:A:90:VAL:CG1	0.47	2.39	18	3
1:A:10:ARG:CG	1:A:11:LYS:HG2	0.47	2.40	26	1
1:A:50:LEU:HG	1:A:51:VAL:N	0.47	2.24	11	5
1:A:75:LEU:HD23	1:A:86:ALA:HB3	0.47	1.86	22	1
1:A:91:ILE:O	1:A:92:VAL:HG23	0.47	2.09	28	1
1:A:72:ASN:ND2	1:A:89:GLU:HG3	0.47	2.25	2	1
1:A:3:PRO:O	1:A:84:ASP:OD2	0.47	2.33	21	10
1:A:29:ALA:HA	1:A:31:ASP:N	0.47	2.25	25	14
1:A:9:SER:O	1:A:9:SER:OG	0.47	2.33	3	2
1:A:3:PRO:HG2	1:A:84:ASP:N	0.47	2.25	14	4
1:A:2:LYS:HD3	1:A:2:LYS:N	0.47	2.24	3	1
1:A:24:VAL:CG1	1:A:58:THR:HG22	0.47	2.40	6	1
1:A:2:LYS:O	1:A:27:ILE:O	0.47	2.33	12	8
1:A:79:ASN:OD1	1:A:82:GLY:O	0.47	2.33	26	1
1:A:38:VAL:O	1:A:43:ALA:HB3	0.47	2.09	3	5
1:A:54:LYS:CG	1:A:55:SER:N	0.47	2.77	15	2
1:A:4:LYS:HB2	1:A:27:ILE:CG1	0.47	2.40	28	1
1:A:52:ASP:O	1:A:58:THR:OG1	0.47	2.31	30	1
1:A:66:LYS:O	1:A:92:VAL:CG1	0.47	2.56	1	1
1:A:36:TRP:CD2	1:A:60:ILE:HG21	0.47	2.45	17	10
1:A:36:TRP:CD2	1:A:75:LEU:HB2	0.47	2.45	6	2
1:A:5:ILE:CG2	1:A:84:ASP:HB2	0.47	2.39	26	2
1:A:49:LEU:CB	1:A:62:PHE:HA	0.47	2.40	2	2
1:A:38:VAL:C	1:A:72:ASN:O	0.47	2.53	24	16
1:A:2:LYS:HG2	1:A:82:GLY:CA	0.47	2.40	21	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:3:PRO:CG	1:A:83:GLU:HA	0.47	2.40	4	2
1:A:50:LEU:N	1:A:50:LEU:CD2	0.47	2.72	17	4
1:A:80:GLU:OE1	1:A:80:GLU:O	0.47	2.33	23	1
1:A:22:LEU:C	1:A:22:LEU:HD23	0.47	2.29	21	9
1:A:21:ASN:ND2	1:A:21:ASN:O	0.47	2.48	26	1
1:A:29:ALA:O	1:A:79:ASN:ND2	0.46	2.48	23	2
1:A:28:GLY:O	1:A:56:SER:OG	0.46	2.32	30	2
1:A:6:LEU:HD22	1:A:6:LEU:C	0.46	2.30	13	2
1:A:84:ASP:O	1:A:85:GLU:HG2	0.46	2.10	20	5
1:A:7:THR:CG2	1:A:86:ALA:HB1	0.46	2.40	22	1
1:A:14:ILE:HD12	1:A:90:VAL:CG1	0.46	2.40	22	1
1:A:7:THR:HG21	1:A:86:ALA:HB2	0.46	1.87	20	2
1:A:91:ILE:C	1:A:92:VAL:HG23	0.46	2.30	28	2
1:A:83:GLU:OE2	1:A:83:GLU:N	0.46	2.48	29	1
1:A:14:ILE:CG2	1:A:18:PHE:CE1	0.46	2.97	11	2
1:A:69:ASP:OD1	1:A:73:TYR:OH	0.46	2.33	22	2
1:A:21:ASN:O	1:A:21:ASN:CG	0.46	2.54	24	2
1:A:60:ILE:O	1:A:60:ILE:CG1	0.46	2.63	24	1
1:A:54:LYS:CB	1:A:57:THR:HG22	0.46	2.41	12	5
1:A:37:THR:O	1:A:74:LYS:O	0.46	2.34	3	1
1:A:32:PRO:HD2	1:A:55:SER:CB	0.46	2.40	6	1
1:A:24:VAL:O	1:A:25:ASP:OD1	0.46	2.33	20	1
1:A:27:ILE:O	1:A:27:ILE:CG2	0.46	2.60	20	1
1:A:3:PRO:CD	1:A:82:GLY:HA3	0.46	2.40	23	3
1:A:3:PRO:O	1:A:5:ILE:N	0.46	2.49	21	2
1:A:30:PRO:O	1:A:31:ASP:O	0.46	2.33	3	2
1:A:3:PRO:O	1:A:84:ASP:OD1	0.46	2.34	1	7
1:A:73:TYR:HB2	1:A:90:VAL:CG2	0.46	2.40	18	2
1:A:44:ALA:O	1:A:45:LEU:O	0.46	2.33	13	1
1:A:87:ILE:HD11	1:A:89:GLU:CG	0.46	2.40	7	1
1:A:22:LEU:HD13	1:A:60:ILE:HD11	0.46	1.86	29	1
1:A:10:ARG:HG2	1:A:11:LYS:N	0.46	2.26	10	3
1:A:78:LYS:C	1:A:78:LYS:CD	0.46	2.84	28	1
1:A:5:ILE:HB	1:A:84:ASP:CB	0.46	2.41	2	2
1:A:50:LEU:C	1:A:50:LEU:CD1	0.46	2.84	23	1
1:A:20:HIS:HB3	1:A:62:PHE:CD2	0.46	2.45	2	1
1:A:66:LYS:HE3	1:A:68:ALA:HB3	0.46	1.87	7	1
1:A:4:LYS:O	1:A:26:PHE:HA	0.46	2.11	2	26
1:A:33:THR:O	1:A:77:VAL:HA	0.46	2.11	24	10
1:A:91:ILE:C	1:A:92:VAL:CG2	0.46	2.83	29	1
1:A:2:LYS:HB3	1:A:3:PRO:HA	0.46	1.88	3	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:79:ASN:ND2	1:A:80:GLU:OE1	0.46	2.48	3	1
1:A:12:ILE:CG2	1:A:14:ILE:HG12	0.46	2.41	22	5
1:A:32:PRO:HG3	1:A:55:SER:O	0.46	2.11	22	1
1:A:5:ILE:HG13	1:A:77:VAL:HG22	0.46	1.87	2	2
1:A:80:GLU:O	1:A:81:LEU:CB	0.46	2.62	15	1
1:A:26:PHE:CE1	1:A:57:THR:CA	0.46	2.98	20	1
1:A:50:LEU:CG	1:A:61:PHE:HB2	0.46	2.41	12	2
1:A:7:THR:HG23	1:A:8:ALA:H	0.46	1.69	21	1
1:A:24:VAL:HG12	1:A:25:ASP:N	0.46	2.25	1	8
1:A:69:ASP:OD1	1:A:69:ASP:O	0.46	2.34	2	1
1:A:45:LEU:CD2	1:A:49:LEU:CD1	0.46	2.86	14	1
1:A:37:THR:C	1:A:45:LEU:HD13	0.46	2.32	17	1
1:A:16:ALA:O	1:A:17:GLY:C	0.46	2.54	11	3
1:A:78:LYS:CD	1:A:83:GLU:OE1	0.46	2.64	25	1
1:A:35:THR:O	1:A:35:THR:CG2	0.46	2.64	16	2
1:A:36:TRP:O	1:A:45:LEU:HB2	0.46	2.11	2	3
1:A:38:VAL:HG22	1:A:38:VAL:O	0.46	2.11	5	4
1:A:6:LEU:CD2	1:A:7:THR:N	0.46	2.77	13	1
1:A:31:ASP:O	1:A:31:ASP:OD2	0.46	2.34	12	1
1:A:36:TRP:CE3	1:A:60:ILE:HD13	0.45	2.46	23	3
1:A:5:ILE:CB	1:A:26:PHE:HB3	0.45	2.42	6	3
1:A:70:SER:N	1:A:92:VAL:CG2	0.45	2.80	6	1
1:A:49:LEU:HD22	1:A:62:PHE:CE2	0.45	2.47	17	2
1:A:54:LYS:CG	1:A:57:THR:HG22	0.45	2.40	4	4
1:A:21:ASN:O	1:A:21:ASN:OD1	0.45	2.33	22	2
1:A:12:ILE:HG21	1:A:20:HIS:CE1	0.45	2.40	2	1
1:A:20:HIS:O	1:A:61:PHE:HB2	0.45	2.10	2	1
1:A:15:LYS:HG3	1:A:18:PHE:CZ	0.45	2.45	24	1
1:A:29:ALA:CB	1:A:30:PRO:CA	0.45	2.92	5	16
1:A:50:LEU:C	1:A:51:VAL:HG23	0.45	2.32	30	8
1:A:36:TRP:CZ3	1:A:88:PHE:CE2	0.45	3.04	2	1
1:A:69:ASP:OD2	1:A:73:TYR:OH	0.45	2.34	18	1
1:A:36:TRP:NE1	1:A:60:ILE:HG21	0.45	2.26	29	6
1:A:81:LEU:CD2	1:A:81:LEU:O	0.45	2.56	26	1
1:A:9:SER:HA	1:A:88:PHE:CD1	0.45	2.46	28	3
1:A:79:ASN:OD1	1:A:79:ASN:N	0.45	2.50	6	1
1:A:31:ASP:O	1:A:31:ASP:OD1	0.45	2.35	22	1
1:A:75:LEU:O	1:A:86:ALA:O	0.45	2.34	22	1
1:A:86:ALA:CB	1:A:88:PHE:CE2	0.45	3.00	15	4
1:A:68:ALA:O	1:A:70:SER:N	0.45	2.50	17	5
1:A:83:GLU:O	1:A:84:ASP:OD1	0.45	2.35	16	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:LEU:CB	1:A:61:PHE:CB	0.45	2.94	27	4
1:A:9:SER:HB2	1:A:88:PHE:CD2	0.45	2.47	5	1
1:A:86:ALA:HB3	1:A:88:PHE:HE1	0.45	1.71	16	2
1:A:87:ILE:CD1	1:A:89:GLU:HG2	0.45	2.41	8	1
1:A:77:VAL:HG23	1:A:84:ASP:OD1	0.45	2.11	7	1
1:A:85:GLU:HG2	1:A:86:ALA:N	0.45	2.27	12	6
1:A:75:LEU:O	1:A:85:GLU:HG3	0.45	2.11	10	3
1:A:70:SER:HA	1:A:92:VAL:HG23	0.45	1.89	12	1
1:A:72:ASN:OD1	1:A:89:GLU:OE2	0.45	2.35	23	1
1:A:2:LYS:CB	1:A:82:GLY:HA3	0.45	2.42	29	3
1:A:75:LEU:O	1:A:85:GLU:HG2	0.45	2.12	15	5
1:A:25:ASP:OD1	1:A:56:SER:O	0.45	2.35	28	1
1:A:80:GLU:CB	1:A:81:LEU:HD13	0.45	2.40	30	1
1:A:72:ASN:OD1	1:A:89:GLU:CG	0.45	2.65	10	1
1:A:15:LYS:HG3	1:A:18:PHE:CE2	0.45	2.47	24	1
1:A:15:LYS:CG	1:A:18:PHE:CG	0.45	3.00	24	1
1:A:3:PRO:O	1:A:84:ASP:HB2	0.45	2.12	21	2
1:A:33:THR:O	1:A:77:VAL:HB	0.45	2.12	18	6
1:A:9:SER:HA	1:A:87:ILE:O	0.45	2.12	6	1
1:A:3:PRO:O	1:A:84:ASP:CG	0.45	2.56	7	9
1:A:26:PHE:O	1:A:56:SER:CA	0.45	2.64	2	1
1:A:81:LEU:HD13	1:A:81:LEU:H	0.45	1.63	30	1
1:A:12:ILE:HG22	1:A:12:ILE:O	0.45	2.11	21	2
1:A:38:VAL:HG13	1:A:43:ALA:HB3	0.45	1.89	29	4
1:A:45:LEU:HD11	1:A:73:TYR:CB	0.45	2.42	19	2
1:A:91:ILE:CD1	1:A:91:ILE:N	0.45	2.80	12	1
1:A:2:LYS:HG3	1:A:3:PRO:CD	0.44	2.41	26	1
1:A:20:HIS:HB2	1:A:62:PHE:HB2	0.44	1.90	14	5
1:A:49:LEU:CD1	1:A:50:LEU:O	0.44	2.65	22	1
1:A:26:PHE:CE2	1:A:57:THR:O	0.44	2.70	5	2
1:A:36:TRP:CE2	1:A:60:ILE:HG23	0.44	2.46	13	7
1:A:7:THR:O	1:A:7:THR:CG2	0.44	2.64	1	1
1:A:45:LEU:O	1:A:49:LEU:CG	0.44	2.65	7	1
1:A:11:LYS:O	1:A:12:ILE:HG12	0.44	2.13	5	15
1:A:3:PRO:HD3	1:A:82:GLY:C	0.44	2.33	29	2
1:A:37:THR:HB	1:A:43:ALA:O	0.44	2.12	13	3
1:A:84:ASP:C	1:A:85:GLU:CG	0.44	2.84	8	7
1:A:38:VAL:HB	1:A:45:LEU:CD1	0.44	2.41	17	1
1:A:19:THR:HA	1:A:63:PRO:HA	0.44	1.89	4	14
1:A:57:THR:HG23	1:A:58:THR:N	0.44	2.27	27	5
1:A:31:ASP:OD1	1:A:31:ASP:O	0.44	2.36	21	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:ASN:HA	1:A:61:PHE:CB	0.44	2.40	2	2
1:A:5:ILE:HG23	1:A:7:THR:CG2	0.44	2.41	2	1
1:A:6:LEU:C	1:A:6:LEU:HD22	0.44	2.32	30	1
1:A:3:PRO:HB3	1:A:79:ASN:ND2	0.44	2.27	14	1
1:A:23:GLU:CG	1:A:59:SER:HB3	0.44	2.42	27	1
1:A:9:SER:OG	1:A:88:PHE:CD1	0.44	2.70	13	1
1:A:26:PHE:CD2	1:A:26:PHE:O	0.44	2.70	19	1
1:A:26:PHE:C	1:A:26:PHE:CD1	0.44	2.90	3	2
1:A:49:LEU:HD21	1:A:73:TYR:HE2	0.44	1.73	5	3
1:A:52:ASP:OD2	1:A:59:SER:O	0.44	2.34	13	2
1:A:87:ILE:HD12	1:A:87:ILE:H	0.44	1.72	15	1
1:A:14:ILE:HG12	1:A:20:HIS:ND1	0.44	2.27	21	1
1:A:7:THR:HG23	1:A:8:ALA:N	0.44	2.28	21	1
1:A:66:LYS:O	1:A:67:ARG:C	0.44	2.56	3	14
1:A:38:VAL:HG12	1:A:43:ALA:C	0.44	2.32	26	3
1:A:23:GLU:O	1:A:24:VAL:CG2	0.44	2.66	22	3
1:A:11:LYS:O	1:A:12:ILE:CD1	0.44	2.66	2	3
1:A:16:ALA:HA	1:A:92:VAL:HG12	0.44	1.89	6	1
1:A:17:GLY:N	1:A:66:LYS:HD3	0.44	2.28	15	2
1:A:79:ASN:OD1	1:A:82:GLY:C	0.44	2.56	17	1
1:A:9:SER:HA	1:A:88:PHE:CD2	0.44	2.47	24	1
1:A:74:LYS:CE	1:A:85:GLU:OE2	0.44	2.66	12	1
1:A:49:LEU:HB3	1:A:61:PHE:O	0.44	2.13	25	3
1:A:78:LYS:HD2	1:A:83:GLU:OE1	0.44	2.13	25	1
1:A:75:LEU:O	1:A:85:GLU:CA	0.44	2.65	2	1
1:A:2:LYS:HA	1:A:79:ASN:CB	0.44	2.42	9	1
1:A:61:PHE:O	1:A:63:PRO:HD3	0.44	2.12	2	2
1:A:78:LYS:CB	1:A:83:GLU:HB3	0.44	2.43	26	1
1:A:36:TRP:CD2	1:A:75:LEU:CD1	0.44	3.01	19	13
1:A:78:LYS:HG3	1:A:83:GLU:CB	0.44	2.43	3	1
1:A:80:GLU:HG3	1:A:81:LEU:N	0.44	2.26	20	3
1:A:86:ALA:HB3	1:A:88:PHE:HE2	0.44	1.73	15	1
1:A:59:SER:C	1:A:60:ILE:CG2	0.44	2.86	24	1
1:A:16:ALA:HB2	1:A:93:GLN:O	0.43	2.13	21	1
1:A:13:LYS:HA	1:A:91:ILE:CG2	0.43	2.43	4	1
1:A:45:LEU:O	1:A:45:LEU:HD13	0.43	2.13	15	1
1:A:9:SER:O	1:A:10:ARG:HG3	0.43	2.13	9	4
1:A:91:ILE:HD13	1:A:92:VAL:H	0.43	1.64	21	1
1:A:77:VAL:O	1:A:77:VAL:HG23	0.43	2.12	29	2
1:A:52:ASP:CG	1:A:59:SER:O	0.43	2.57	28	10
1:A:7:THR:O	1:A:8:ALA:C	0.43	2.56	12	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:5:ILE:HB	1:A:84:ASP:OD2	0.43	2.14	2	1
1:A:72:ASN:OD1	1:A:89:GLU:HG2	0.43	2.12	10	1
1:A:50:LEU:CD2	1:A:63:PRO:HG3	0.43	2.38	21	1
1:A:26:PHE:CE2	1:A:34:ALA:HB2	0.43	2.48	3	1
1:A:81:LEU:CD2	1:A:82:GLY:N	0.43	2.77	30	1
1:A:45:LEU:HD23	1:A:49:LEU:CD2	0.43	2.43	18	1
1:A:70:SER:HB3	1:A:92:VAL:HG23	0.43	1.89	13	1
1:A:12:ILE:O	1:A:12:ILE:HG22	0.43	2.13	29	1
1:A:17:GLY:CA	1:A:65:ALA:O	0.43	2.66	6	2
1:A:83:GLU:C	1:A:84:ASP:OD1	0.43	2.57	29	2
1:A:81:LEU:H	1:A:81:LEU:HD23	0.43	1.74	25	1
1:A:69:ASP:CG	1:A:73:TYR:OH	0.43	2.56	22	1
1:A:73:TYR:N	1:A:73:TYR:CD1	0.43	2.86	17	2
1:A:45:LEU:HD11	1:A:73:TYR:HD2	0.43	1.65	19	1
1:A:17:GLY:HA2	1:A:65:ALA:O	0.43	2.13	6	2
1:A:50:LEU:O	1:A:51:VAL:HG23	0.43	2.13	22	2
1:A:68:ALA:O	1:A:69:ASP:C	0.43	2.57	6	4
1:A:16:ALA:CB	1:A:67:ARG:HG2	0.43	2.43	1	1
1:A:45:LEU:O	1:A:45:LEU:HD23	0.43	2.13	1	1
1:A:70:SER:OG	1:A:70:SER:O	0.43	2.36	13	1
1:A:26:PHE:CE2	1:A:56:SER:HA	0.43	2.48	21	2
1:A:22:LEU:O	1:A:59:SER:HB2	0.43	2.13	30	2
1:A:51:VAL:HG13	1:A:60:ILE:CB	0.43	2.43	11	1
1:A:50:LEU:HD23	1:A:61:PHE:CB	0.43	2.43	9	2
1:A:61:PHE:HB3	1:A:63:PRO:CD	0.43	2.42	23	6
1:A:44:ALA:O	1:A:45:LEU:C	0.43	2.57	30	2
1:A:3:PRO:HD3	1:A:82:GLY:O	0.43	2.13	29	1
1:A:53:ALA:HA	1:A:58:THR:OG1	0.43	2.13	2	6
1:A:50:LEU:O	1:A:61:PHE:HB2	0.43	2.14	6	5
1:A:26:PHE:O	1:A:56:SER:HA	0.43	2.14	11	7
1:A:75:LEU:HD21	1:A:77:VAL:HG11	0.43	1.87	2	1
1:A:32:PRO:HD2	1:A:55:SER:OG	0.43	2.14	23	1
1:A:76:LYS:HG2	1:A:85:GLU:CB	0.43	2.44	23	1
1:A:4:LYS:O	1:A:6:LEU:CD2	0.43	2.67	23	1
1:A:24:VAL:C	1:A:25:ASP:OD1	0.43	2.57	21	1
1:A:9:SER:HB2	1:A:87:ILE:N	0.43	2.28	29	3
1:A:28:GLY:O	1:A:32:PRO:HG3	0.43	2.14	3	3
1:A:45:LEU:HD22	1:A:51:VAL:HG21	0.43	1.90	6	1
1:A:69:ASP:O	1:A:69:ASP:OD1	0.43	2.37	28	1
1:A:73:TYR:HB2	1:A:88:PHE:O	0.43	2.14	19	3
1:A:20:HIS:HB3	1:A:62:PHE:CG	0.43	2.49	2	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:ILE:O	1:A:15:LYS:C	0.43	2.57	18	3
1:A:92:VAL:O	1:A:93:GLN:HG3	0.43	2.13	10	1
1:A:2:LYS:CE	1:A:81:LEU:O	0.43	2.67	12	1
1:A:22:LEU:HB2	1:A:62:PHE:CE1	0.43	2.49	12	6
1:A:24:VAL:HG21	1:A:88:PHE:CE2	0.43	2.49	8	4
1:A:76:LYS:CG	1:A:85:GLU:HB2	0.43	2.44	6	2
1:A:17:GLY:CA	1:A:66:LYS:HD2	0.43	2.44	22	1
1:A:37:THR:OG1	1:A:74:LYS:O	0.43	2.35	30	4
1:A:36:TRP:O	1:A:45:LEU:HB3	0.43	2.14	19	1
1:A:5:ILE:HD12	1:A:86:ALA:HB2	0.43	1.90	20	1
1:A:3:PRO:HD3	1:A:79:ASN:CB	0.42	2.44	9	2
1:A:5:ILE:HA	1:A:26:PHE:HA	0.42	1.91	22	9
1:A:53:ALA:CA	1:A:58:THR:OG1	0.42	2.67	30	1
1:A:38:VAL:CA	1:A:72:ASN:O	0.42	2.67	10	1
1:A:28:GLY:O	1:A:32:PRO:CD	0.42	2.67	3	1
1:A:37:THR:OG1	1:A:76:LYS:HD3	0.42	2.13	15	1
1:A:4:LYS:HE3	1:A:6:LEU:CD1	0.42	2.44	10	1
1:A:36:TRP:CE3	1:A:75:LEU:CB	0.42	3.02	6	1
1:A:84:ASP:O	1:A:85:GLU:HG3	0.42	2.14	5	1
1:A:2:LYS:HE3	1:A:81:LEU:O	0.42	2.14	12	1
1:A:5:ILE:HG13	1:A:26:PHE:HB3	0.42	1.91	14	3
1:A:26:PHE:CE2	1:A:77:VAL:HG11	0.42	2.49	4	1
1:A:72:ASN:OD1	1:A:89:GLU:HG3	0.42	2.14	20	1
1:A:76:LYS:CG	1:A:85:GLU:HG3	0.42	2.44	12	1
1:A:5:ILE:CA	1:A:26:PHE:CB	0.42	2.97	6	3
1:A:24:VAL:HB	1:A:58:THR:CG2	0.42	2.44	22	1
1:A:76:LYS:HG3	1:A:85:GLU:CB	0.42	2.45	2	2
1:A:76:LYS:HB3	1:A:85:GLU:CD	0.42	2.35	8	1
1:A:75:LEU:O	1:A:85:GLU:HB2	0.42	2.15	2	1
1:A:26:PHE:C	1:A:27:ILE:CD1	0.42	2.82	30	1
1:A:54:LYS:CD	1:A:57:THR:HG22	0.42	2.45	15	1
1:A:65:ALA:C	1:A:66:LYS:HG3	0.42	2.35	11	1
1:A:5:ILE:HG12	1:A:7:THR:CG2	0.42	2.44	17	1
1:A:32:PRO:CB	1:A:79:ASN:ND2	0.42	2.83	29	1
1:A:73:TYR:CD1	1:A:73:TYR:N	0.42	2.87	16	3
1:A:81:LEU:N	1:A:81:LEU:HD23	0.42	2.29	25	1
1:A:36:TRP:CD2	1:A:75:LEU:HD13	0.42	2.49	17	5
1:A:50:LEU:CB	1:A:61:PHE:CD2	0.42	3.02	24	1
1:A:15:LYS:HE3	1:A:18:PHE:CZ	0.42	2.49	9	1
1:A:45:LEU:HD13	1:A:45:LEU:O	0.42	2.14	21	3
1:A:60:ILE:CG1	1:A:60:ILE:O	0.42	2.68	21	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:LEU:HD13	1:A:81:LEU:C	0.42	2.35	26	1
1:A:22:LEU:HD21	1:A:36:TRP:HH2	0.42	1.66	8	3
1:A:9:SER:OG	1:A:87:ILE:O	0.42	2.38	11	1
1:A:65:ALA:CB	1:A:69:ASP:OD2	0.42	2.68	17	1
1:A:87:ILE:O	1:A:87:ILE:HD13	0.42	2.15	7	1
1:A:24:VAL:CG2	1:A:36:TRP:CZ2	0.42	3.03	22	1
1:A:7:THR:HG23	1:A:86:ALA:HB1	0.42	1.92	22	1
1:A:5:ILE:HD11	1:A:75:LEU:CD2	0.42	2.45	8	1
1:A:85:GLU:CG	1:A:85:GLU:O	0.42	2.67	2	1
1:A:50:LEU:HD12	1:A:51:VAL:H	0.42	1.74	12	2
1:A:3:PRO:HD2	1:A:82:GLY:HA3	0.42	1.90	7	1
1:A:34:ALA:CA	1:A:77:VAL:HG12	0.42	2.45	29	1
1:A:7:THR:HA	1:A:25:ASP:OD1	0.42	2.15	8	1
1:A:32:PRO:HB3	1:A:79:ASN:OD1	0.42	2.15	2	2
1:A:80:GLU:HG2	1:A:81:LEU:CD1	0.42	2.44	30	1
1:A:70:SER:OG	1:A:92:VAL:HB	0.42	2.15	18	1
1:A:26:PHE:CD1	1:A:57:THR:HA	0.42	2.50	20	1
1:A:78:LYS:HB3	1:A:83:GLU:HB3	0.42	1.91	26	1
1:A:84:ASP:C	1:A:85:GLU:HG3	0.42	2.35	20	4
1:A:5:ILE:HG22	1:A:84:ASP:CB	0.41	2.44	26	1
1:A:81:LEU:CD1	1:A:81:LEU:H	0.41	2.28	26	1
1:A:6:LEU:O	1:A:7:THR:HG23	0.41	2.15	29	1
1:A:32:PRO:CD	1:A:55:SER:HB2	0.41	2.44	22	1
1:A:15:LYS:CB	1:A:18:PHE:CG	0.41	3.03	16	2
1:A:85:GLU:HG2	1:A:85:GLU:O	0.41	2.14	2	1
1:A:79:ASN:O	1:A:79:ASN:OD1	0.41	2.38	26	1
1:A:34:ALA:HA	1:A:77:VAL:HG12	0.41	1.92	13	2
1:A:90:VAL:C	1:A:91:ILE:HD12	0.41	2.36	3	2
1:A:75:LEU:O	1:A:85:GLU:HA	0.41	2.15	2	1
1:A:50:LEU:CG	1:A:51:VAL:N	0.41	2.83	1	2
1:A:20:HIS:HB3	1:A:62:PHE:CB	0.41	2.45	17	1
1:A:37:THR:O	1:A:73:TYR:HA	0.41	2.15	14	1
1:A:24:VAL:HG22	1:A:88:PHE:HZ	0.41	1.68	15	1
1:A:72:ASN:OD1	1:A:89:GLU:CD	0.41	2.59	24	1
1:A:21:ASN:HA	1:A:61:PHE:HA	0.41	1.93	21	3
1:A:82:GLY:C	1:A:83:GLU:CG	0.41	2.88	25	1
1:A:36:TRP:HB2	1:A:51:VAL:HG11	0.41	1.92	6	1
1:A:24:VAL:CG2	1:A:36:TRP:CH2	0.41	3.03	22	1
1:A:82:GLY:O	1:A:83:GLU:HB3	0.41	2.16	18	4
1:A:7:THR:HG23	1:A:86:ALA:HB2	0.41	1.91	9	3
1:A:9:SER:HB2	1:A:87:ILE:O	0.41	2.16	18	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:ILE:HD12	1:A:91:ILE:N	0.41	2.30	27	1
1:A:82:GLY:O	1:A:83:GLU:HG3	0.41	2.15	21	1
1:A:53:ALA:HA	1:A:58:THR:HA	0.41	1.93	11	4
1:A:23:GLU:C	1:A:24:VAL:HG23	0.41	2.36	22	1
1:A:23:GLU:OE1	1:A:24:VAL:N	0.41	2.54	22	1
1:A:2:LYS:HD2	1:A:82:GLY:CA	0.41	2.46	28	1
1:A:28:GLY:CA	1:A:32:PRO:HG3	0.41	2.45	14	1
1:A:80:GLU:HG3	1:A:81:LEU:HD12	0.41	1.92	20	1
1:A:66:LYS:O	1:A:69:ASP:HB3	0.41	2.15	29	1
1:A:66:LYS:O	1:A:69:ASP:HB2	0.41	2.16	6	1
1:A:50:LEU:CD2	1:A:50:LEU:N	0.41	2.71	16	1
1:A:6:LEU:HD21	1:A:25:ASP:OD1	0.41	2.16	15	1
1:A:45:LEU:C	1:A:45:LEU:HD23	0.41	2.36	19	1
1:A:58:THR:HG23	1:A:58:THR:O	0.41	2.14	27	1
1:A:73:TYR:O	1:A:88:PHE:HB2	0.41	2.15	16	3
1:A:3:PRO:CD	1:A:82:GLY:O	0.41	2.69	29	2
1:A:75:LEU:CD2	1:A:86:ALA:HB3	0.41	2.46	22	1
1:A:32:PRO:CD	1:A:55:SER:OG	0.41	2.69	8	1
1:A:2:LYS:HB3	1:A:3:PRO:CD	0.41	2.45	10	1
1:A:71:GLY:O	1:A:90:VAL:O	0.41	2.38	12	1
1:A:77:VAL:O	1:A:78:LYS:HG2	0.41	2.16	6	1
1:A:4:LYS:HE3	1:A:27:ILE:CG2	0.41	2.45	4	1
1:A:54:LYS:HB3	1:A:57:THR:HG22	0.41	1.93	8	2
1:A:5:ILE:HA	1:A:26:PHE:CA	0.41	2.46	8	2
1:A:76:LYS:HA	1:A:85:GLU:CB	0.41	2.45	8	1
1:A:78:LYS:O	1:A:79:ASN:HB2	0.41	2.16	2	1
1:A:5:ILE:CG1	1:A:26:PHE:CB	0.41	2.99	14	1
1:A:21:ASN:ND2	1:A:21:ASN:N	0.41	2.69	17	1
1:A:9:SER:HB2	1:A:87:ILE:HG22	0.41	1.91	6	1
1:A:56:SER:O	1:A:57:THR:HB	0.41	2.15	22	5
1:A:32:PRO:CB	1:A:79:ASN:OD1	0.41	2.68	2	1
1:A:9:SER:O	1:A:10:ARG:HD3	0.41	2.15	12	1
1:A:36:TRP:CD1	1:A:51:VAL:HG11	0.40	2.51	21	1
1:A:35:THR:O	1:A:75:LEU:HA	0.40	2.16	29	1
1:A:37:THR:O	1:A:74:LYS:N	0.40	2.54	3	1
1:A:24:VAL:HG12	1:A:58:THR:HG22	0.40	1.91	6	1
1:A:22:LEU:HD22	1:A:36:TRP:CH2	0.40	2.51	2	1
1:A:20:HIS:CB	1:A:62:PHE:CD2	0.40	3.04	2	1
1:A:52:ASP:OD2	1:A:59:SER:OG	0.40	2.39	2	1
1:A:24:VAL:HG22	1:A:88:PHE:CE2	0.40	2.51	13	2
1:A:89:GLU:CD	1:A:91:ILE:HD11	0.40	2.36	13	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:TRP:CZ3	1:A:88:PHE:CD2	0.40	3.09	14	1
1:A:4:LYS:CB	1:A:27:ILE:HB	0.40	2.45	20	1
1:A:65:ALA:O	1:A:66:LYS:HG2	0.40	2.17	9	1
1:A:38:VAL:HB	1:A:45:LEU:HB3	0.40	1.92	23	1
1:A:3:PRO:HG3	1:A:83:GLU:HA	0.40	1.93	26	1
1:A:49:LEU:O	1:A:50:LEU:HD12	0.40	2.17	6	1
1:A:33:THR:HG22	1:A:34:ALA:N	0.40	2.31	6	1
1:A:23:GLU:OE1	1:A:59:SER:OG	0.40	2.34	5	1
1:A:25:ASP:CG	1:A:57:THR:OG1	0.40	2.59	5	1
1:A:76:LYS:HG3	1:A:85:GLU:CG	0.40	2.46	11	1
1:A:78:LYS:HA	1:A:83:GLU:CB	0.40	2.45	27	1
1:A:13:LYS:HG3	1:A:13:LYS:O	0.40	2.17	7	1
1:A:30:PRO:O	1:A:31:ASP:CG	0.40	2.60	4	1
1:A:50:LEU:HG	1:A:50:LEU:O	0.40	2.15	13	1
1:A:9:SER:O	1:A:10:ARG:CB	0.40	2.67	20	1
1:A:87:ILE:H	1:A:87:ILE:HD12	0.40	1.76	9	1
1:A:3:PRO:HA	1:A:27:ILE:C	0.40	2.36	21	1
1:A:20:HIS:HB3	1:A:62:PHE:CD1	0.40	2.51	5	1
1:A:45:LEU:HD23	1:A:45:LEU:O	0.40	2.17	7	1
1:A:76:LYS:HG2	1:A:85:GLU:HB3	0.40	1.94	23	1
1:A:53:ALA:HA	1:A:58:THR:HG1	0.40	1.76	26	1
1:A:7:THR:HB	1:A:24:VAL:HA	0.40	1.91	6	1
1:A:73:TYR:CD1	1:A:90:VAL:CB	0.40	3.04	6	1
1:A:68:ALA:C	1:A:70:SER:N	0.40	2.74	6	1
1:A:36:TRP:CH2	1:A:88:PHE:CD2	0.40	3.10	22	1
1:A:25:ASP:OD1	1:A:57:THR:HB	0.40	2.17	4	1
1:A:2:LYS:HA	1:A:79:ASN:ND2	0.40	2.32	5	1
1:A:87:ILE:HD13	1:A:87:ILE:O	0.40	2.17	1	1
1:A:49:LEU:N	1:A:49:LEU:CD2	0.40	2.83	13	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	84/93 (90%)	64±2 (76±3%)	15±3 (18±3%)	5±1 (6±2%)	4	21

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
All	All	2520/2790 (90%)	1917 (76%)	450 (18%)	153 (6%)	4	21

All 21 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	9	SER	28
1	A	10	ARG	19
1	A	70	SER	19
1	A	80	GLU	18
1	A	12	ILE	15
1	A	7	THR	14
1	A	49	LEU	11
1	A	83	GLU	3
1	A	31	ASP	3
1	A	55	SER	3
1	A	8	ALA	3
1	A	4	LYS	3
1	A	58	THR	2
1	A	45	LEU	2
1	A	79	ASN	2
1	A	29	ALA	2
1	A	43	ALA	2
1	A	2	LYS	1
1	A	38	VAL	1
1	A	73	TYR	1
1	A	15	LYS	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	71/76 (93%)	50±3 (70±4%)	21±3 (30±4%)	2	17
All	All	2130/2280 (93%)	1487 (70%)	643 (30%)	2	17

All 50 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	75	LEU	30
1	A	37	THR	28
1	A	45	LEU	27
1	A	87	ILE	24
1	A	49	LEU	24
1	A	54	LYS	22
1	A	7	THR	21
1	A	84	ASP	21
1	A	64	SER	20
1	A	6	LEU	18
1	A	11	LYS	18
1	A	52	ASP	17
1	A	81	LEU	17
1	A	21	ASN	17
1	A	15	LYS	17
1	A	5	ILE	17
1	A	10	ARG	17
1	A	62	PHE	15
1	A	2	LYS	15
1	A	4	LYS	15
1	A	67	ARG	15
1	A	93	GLN	14
1	A	69	ASP	14
1	A	9	SER	14
1	A	74	LYS	13
1	A	78	LYS	13
1	A	66	LYS	13
1	A	13	LYS	13
1	A	31	ASP	12
1	A	76	LYS	11
1	A	56	SER	11
1	A	80	GLU	10
1	A	83	GLU	9
1	A	77	VAL	9
1	A	89	GLU	9
1	A	50	LEU	8
1	A	79	ASN	8
1	A	55	SER	7
1	A	23	GLU	7
1	A	25	ASP	6
1	A	72	ASN	5
1	A	85	GLU	5
1	A	18	PHE	3

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	27	ILE	3
1	A	59	SER	3
1	A	61	PHE	3
1	A	70	SER	2
1	A	26	PHE	1
1	A	88	PHE	1
1	A	91	ILE	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

No chemical shift data were provided