



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 4, 2026 – 09:19 PM UTC

PDB ID : 1BYM / pdb_00001bym
Title : SOLUTION STRUCTURES OF THE C-TERMINAL DOMAIN OF DIPHTHERIA TOXIN REPRESSOR
Authors : Wang, G.; Wylie, G.P.; Twigg, P.D.; Caspar, D.L.D.; Murphy, J.R.; Logan, T.M.
Deposited on : 1998-10-17

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

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

MolProbity	:	4-5-2 with Phenix2.0
Percentile statistics	:	20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.49

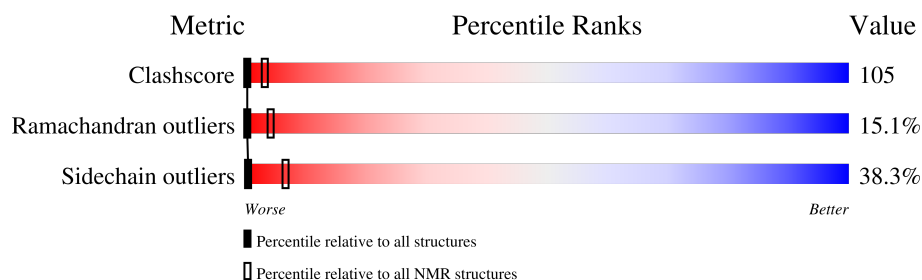
1 Overall quality at a glance

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	229148	14424
Ramachandran outliers	224038	12848
Sidechain outliers	223484	12823

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	97	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 20 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:131-A:138 (8)	1.93	14
2	A:148-A:226 (79)	1.46	20

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 4 clusters. No single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1483 atoms, of which 738 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR).

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	97	Total	C	H	N	O	S	0
			1483	459	738	131	154	1	

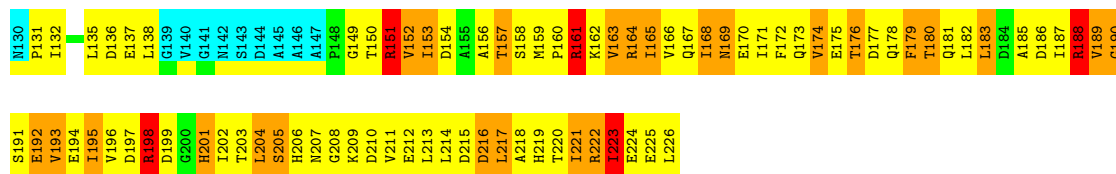
4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic is the same as shown in the summary in section 1 of this report. The second graphic shows the sequence where residues are colour-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. Stretches of 2 or more consecutive residues without any outliers are shown as green connectors. Residues which are classified as ill-defined in the NMR ensemble, are shown in cyan with an underline colour-coded according to the previous scheme. Residues which were present in the experimental sample, but not modelled in the final structure are shown in grey.

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)

Chain A: 

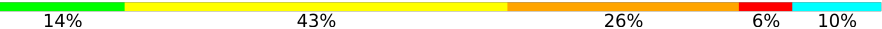


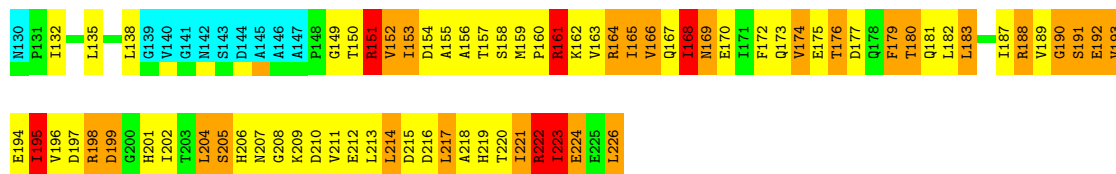
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)

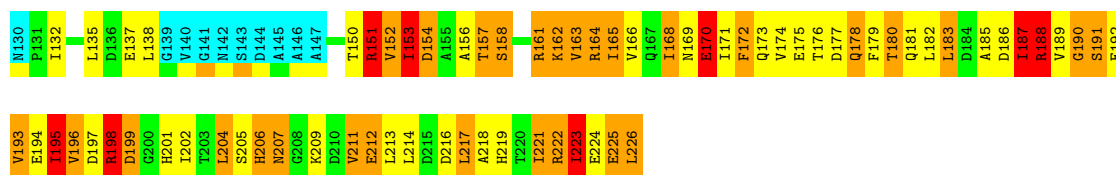
Chain A: 



4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)

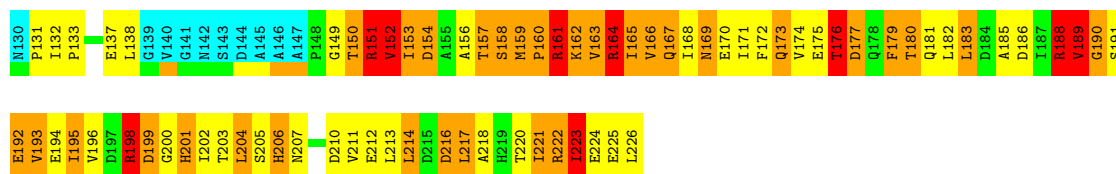
Chain A: 



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)

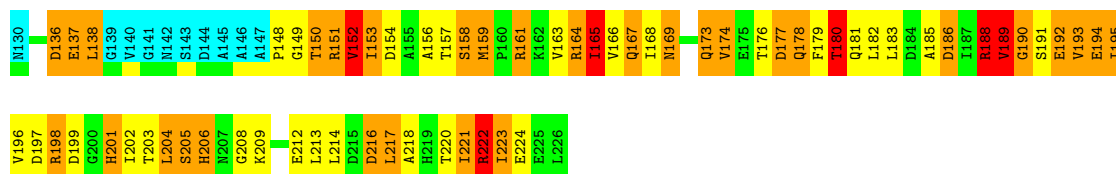
Chain A: 13% 35% 32% 9% 10%



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)

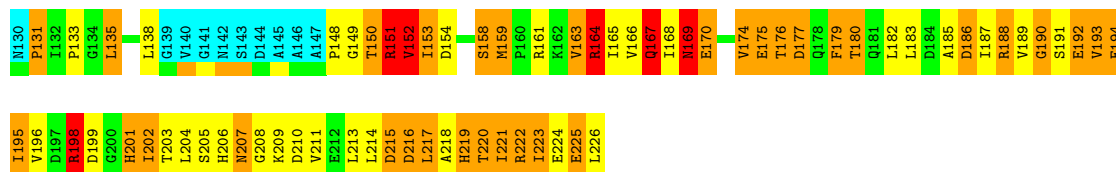
Chain A: 23% 29% 32% 6% 10%



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)

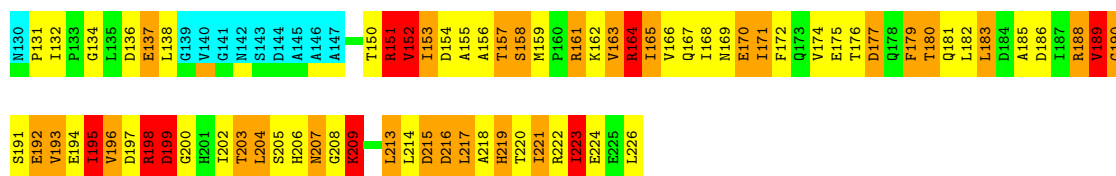
Chain A: 19% 31% 34% 6% 10%



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)

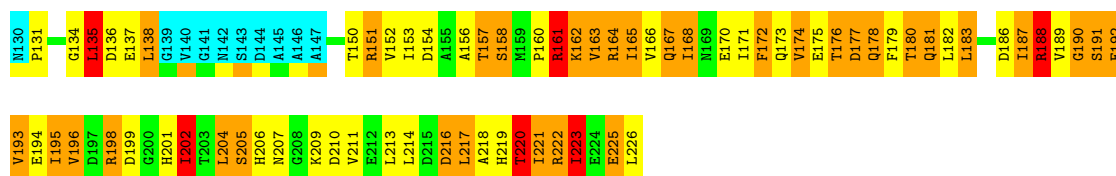
Chain A: 14% 38% 28% 9% 10%



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)

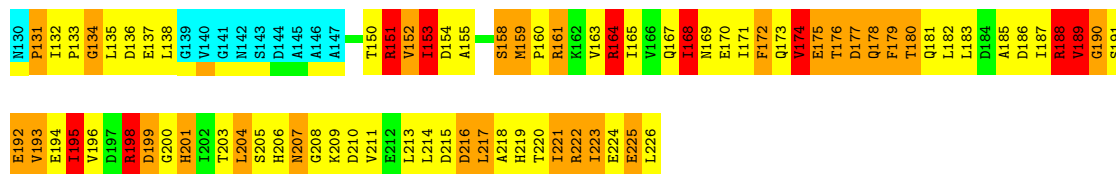
Chain A: 16% 33% 34% 6% 10%



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)

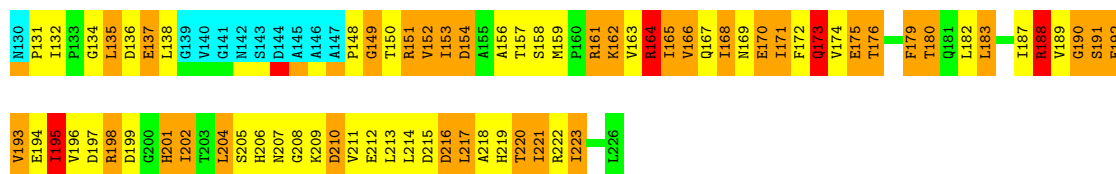
Chain A: 10% 43% 27% 9% 10%



4.2.9 Score per residue for model 9

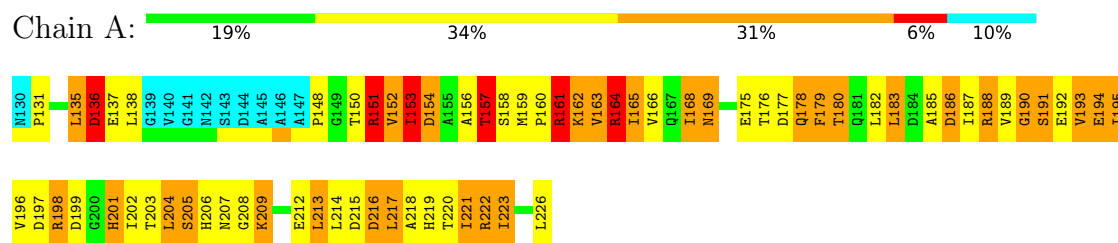
- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)

Chain A: 14% 37% 34% 1% 10%



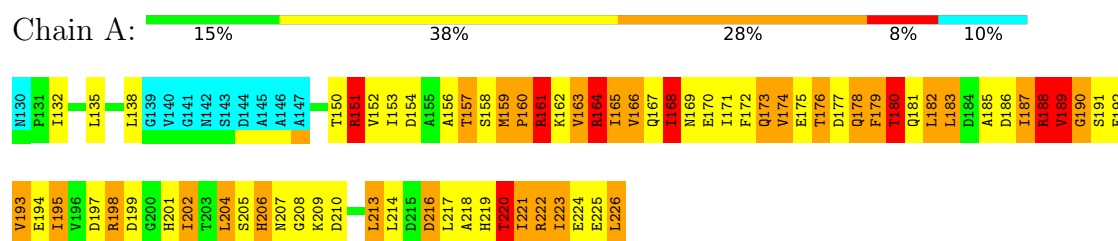
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)



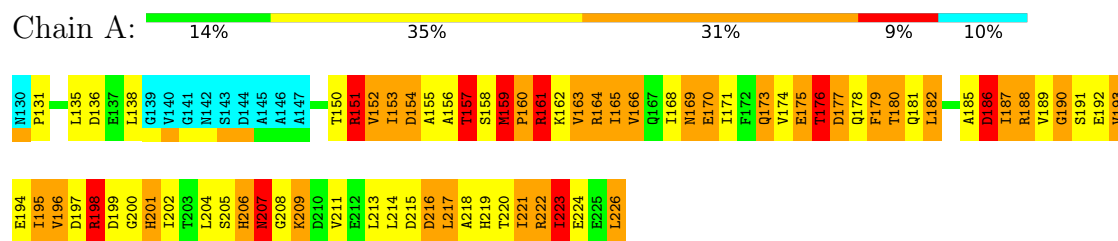
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)



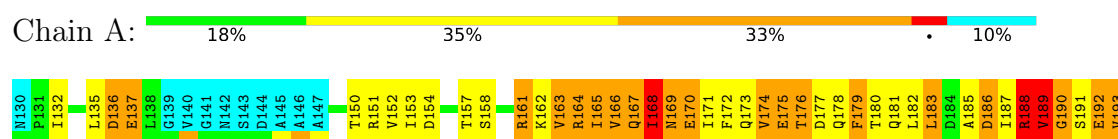
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)



4.2.13 Score per residue for model 13

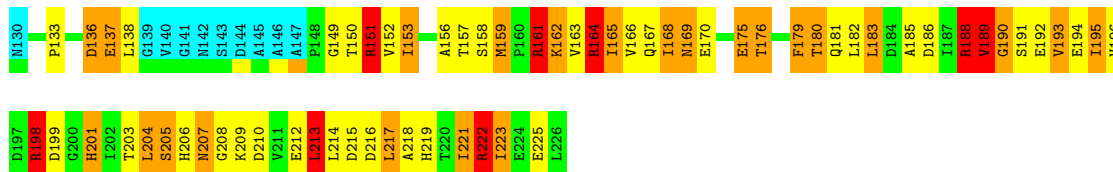
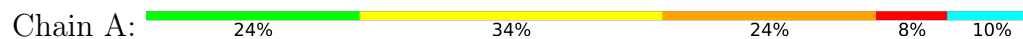
- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)





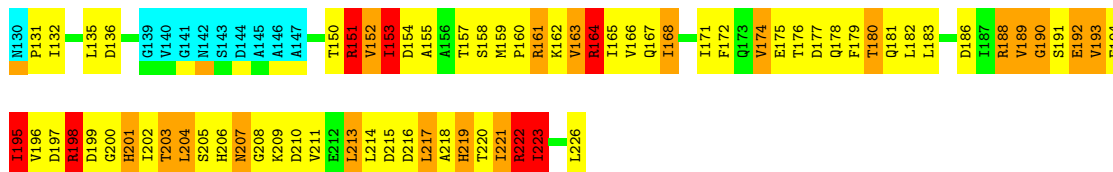
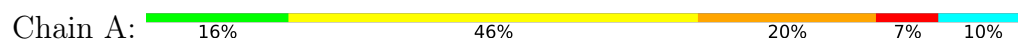
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)



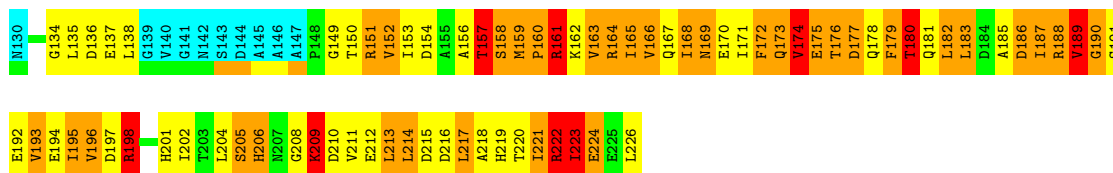
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)



4.2.16 Score per residue for model 16

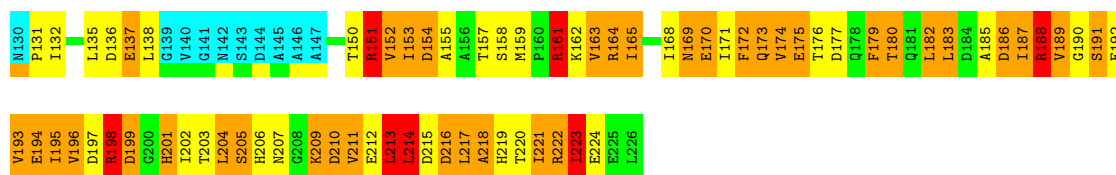
- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)

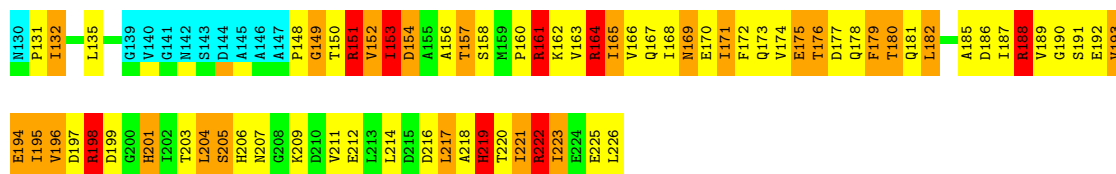




4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)

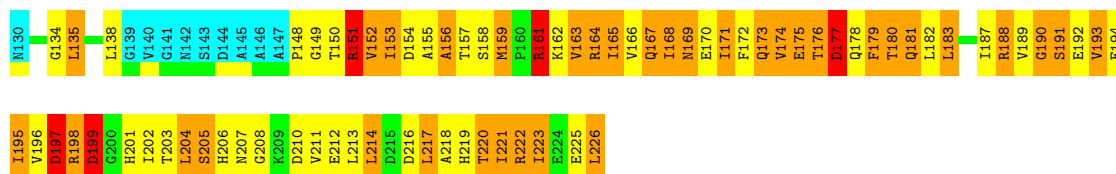
Chain A: 16% 41% 24% 8% 10%



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)

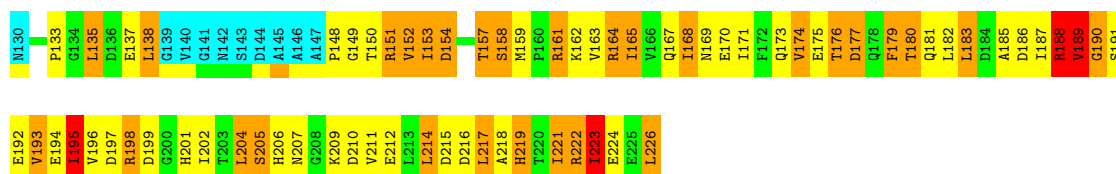
Chain A: 13% 35% 36% 5% 10%



4.2.20 Score per residue for model 20 (medoid)

- Molecule 1: PROTEIN (DIPHThERIA TOXIN REPRESSOR)

Chain A: 18% 38% 30% 10%



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *DISTANCE GEOMETRY AND SIMULATED ANNEALING CALCULATIONS*.

Of the 100 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *NO NOE DISTANCE VIOLATION GREATER THAN 0.35 Å, NO DIHEDRAL ANGLE RESTRAINT VIOLATION GREATER THAN 5 DEG, RMS DIFFERENCE FOR BOND DEVIATIONS FROM IDEALITY LESS THAN 0.01 Å, RMS DIFFERENCE FOR ANGLE DEVIATIONS FROM IDEALITY LESS THAN 2 DEG, LOWEST TOTAL ENERGY*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	
X-PLOR	structure solution	

No chemical shift data was provided.

6 Model quality i

6.1 Standard geometry i

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.45±0.01	0±0/693 (0.0± 0.0%)	1.60±0.02	3±1/938 (0.3± 0.1%)
All	All	1.45	0/13860 (0.0%)	1.60	62/18760 (0.3%)

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	5.8±0.4
All	All	0	117

There are no bond-length outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	196	VAL	N-CA-CB	-7.67	104.98	112.65	18	6
1	A	187	ILE	N-CA-CB	-7.03	104.58	112.45	8	6
1	A	223	ILE	N-CA-CB	-6.92	104.70	112.45	20	10
1	A	174	VAL	N-CA-CB	-6.55	105.00	112.21	9	6
1	A	202	ILE	N-CA-CB	-6.30	104.86	112.35	5	4
1	A	168	ILE	N-CA-CB	-6.29	105.03	112.39	13	8
1	A	171	ILE	N-CA-CB	-6.24	105.09	112.39	18	1
1	A	166	VAL	N-CA-CB	-6.18	104.97	112.33	2	6
1	A	165	ILE	N-CA-CB	-6.05	105.17	112.07	4	1
1	A	169	ASN	N-CA-CB	-5.79	105.14	113.65	18	1
1	A	153	ILE	N-CA-CB	-5.69	104.96	112.36	10	2
1	A	195	ILE	N-CA-CB	-5.55	105.44	112.60	9	7
1	A	211	VAL	N-CA-CB	-5.37	105.00	112.52	18	1
1	A	132	ILE	N-CA-CB	-5.11	104.94	111.23	13	2
1	A	158	SER	N-CA-CB	-5.05	105.05	112.78	8	1

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	161	ARG	Sidechain	20
1	A	188	ARG	Sidechain	20
1	A	198	ARG	Sidechain	20
1	A	151	ARG	Sidechain	19
1	A	164	ARG	Sidechain	19
1	A	222	ARG	Sidechain	19

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	685	685	685	144±15
All	All	13700	13700	13700	2878

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 105.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:152:VAL:HG23	1:A:223:ILE:HG21	1.13	1.21	12	6
1:A:165:ILE:HG23	1:A:223:ILE:HG22	1.11	1.16	3	20
1:A:152:VAL:HG13	1:A:153:ILE:HG23	1.10	1.21	4	2
1:A:176:THR:HG22	1:A:180:THR:HG23	1.09	1.22	8	1
1:A:153:ILE:HG21	1:A:218:ALA:HB1	1.07	1.22	17	7
1:A:165:ILE:HG23	1:A:223:ILE:CG2	1.06	1.80	9	19
1:A:153:ILE:CG2	1:A:218:ALA:HB1	1.02	1.84	17	13
1:A:165:ILE:HG21	1:A:189:VAL:HB	1.02	1.32	5	1
1:A:165:ILE:CG2	1:A:223:ILE:HG22	1.02	1.84	9	17
1:A:189:VAL:O	1:A:191:SER:N	1.00	1.93	19	19
1:A:153:ILE:HG21	1:A:218:ALA:CB	0.98	1.87	4	11
1:A:204:LEU:HD22	1:A:206:HIS:CD2	0.97	1.94	11	12
1:A:176:THR:HG23	1:A:180:THR:HG23	0.97	1.36	10	2
1:A:152:VAL:HG23	1:A:153:ILE:HG23	0.95	1.34	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:179:PHE:O	1:A:182:LEU:HD12	0.95	1.60	16	5
1:A:165:ILE:HG23	1:A:221:ILE:HG23	0.95	1.37	13	1
1:A:214:LEU:O	1:A:218:ALA:HB2	0.95	1.60	17	10
1:A:176:THR:HG23	1:A:179:PHE:CD2	0.94	1.98	15	2
1:A:152:VAL:CG2	1:A:223:ILE:HG21	0.93	1.92	18	4
1:A:152:VAL:HG22	1:A:195:ILE:HD13	0.92	1.40	11	5
1:A:179:PHE:CZ	1:A:183:LEU:HD13	0.92	1.99	17	9
1:A:153:ILE:HD12	1:A:154:ASP:N	0.92	1.79	5	1
1:A:152:VAL:HG13	1:A:195:ILE:HG21	0.91	1.40	20	4
1:A:189:VAL:HG11	1:A:221:ILE:HG21	0.91	1.42	5	1
1:A:165:ILE:HB	1:A:189:VAL:O	0.91	1.64	5	8
1:A:179:PHE:CE2	1:A:183:LEU:HD13	0.90	2.01	14	4
1:A:152:VAL:HG23	1:A:223:ILE:CG2	0.90	1.95	18	4
1:A:204:LEU:HD22	1:A:206:HIS:NE2	0.90	1.82	1	10
1:A:152:VAL:HG13	1:A:153:ILE:CG2	0.89	1.97	2	2
1:A:153:ILE:HD11	1:A:219:HIS:CG	0.89	2.01	18	6
1:A:152:VAL:CG1	1:A:153:ILE:HG23	0.89	1.97	4	2
1:A:176:THR:HG22	1:A:180:THR:CG2	0.89	1.96	8	2
1:A:152:VAL:HG13	1:A:195:ILE:HD13	0.89	1.42	12	4
1:A:152:VAL:C	1:A:153:ILE:HG23	0.89	1.92	18	3
1:A:163:VAL:HG23	1:A:194:GLU:HA	0.88	1.46	11	6
1:A:163:VAL:HG22	1:A:194:GLU:HA	0.88	1.43	19	9
1:A:152:VAL:HG13	1:A:223:ILE:HG21	0.88	1.42	3	2
1:A:204:LEU:HD12	1:A:213:LEU:HD22	0.87	1.44	11	4
1:A:165:ILE:HD12	1:A:223:ILE:CG2	0.87	2.00	13	1
1:A:166:VAL:HG22	1:A:222:ARG:O	0.86	1.70	12	12
1:A:204:LEU:HD11	1:A:213:LEU:CD1	0.85	2.01	17	1
1:A:163:VAL:HG12	1:A:224:GLU:O	0.85	1.70	17	6
1:A:153:ILE:HG21	1:A:218:ALA:HB3	0.85	1.48	9	6
1:A:152:VAL:HG23	1:A:195:ILE:HD13	0.84	1.45	2	2
1:A:195:ILE:HG23	1:A:204:LEU:HG	0.84	1.48	5	16
1:A:165:ILE:HD12	1:A:223:ILE:HG21	0.84	1.50	13	2
1:A:179:PHE:CE2	1:A:183:LEU:HD23	0.83	2.09	19	1
1:A:153:ILE:HG22	1:A:202:ILE:CD1	0.83	2.03	4	7
1:A:176:THR:HG21	1:A:180:THR:HG23	0.82	1.48	15	1
1:A:155:ALA:HB1	1:A:163:VAL:HG11	0.81	1.49	1	3
1:A:193:VAL:HG11	1:A:206:HIS:CD2	0.81	2.11	5	4
1:A:156:ALA:HB2	1:A:195:ILE:HD12	0.81	1.53	16	7
1:A:213:LEU:O	1:A:214:LEU:HD23	0.81	1.76	10	1
1:A:182:LEU:C	1:A:182:LEU:HD12	0.80	2.01	2	10
1:A:171:ILE:HD13	1:A:217:LEU:HD21	0.79	1.53	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:171:ILE:HD13	1:A:217:LEU:CD2	0.79	2.06	7	1
1:A:165:ILE:HB	1:A:189:VAL:C	0.79	2.02	2	8
1:A:152:VAL:N	1:A:223:ILE:HD12	0.79	1.91	3	5
1:A:213:LEU:HD22	1:A:218:ALA:HA	0.79	1.53	17	1
1:A:152:VAL:HB	1:A:223:ILE:HG21	0.79	1.54	14	3
1:A:214:LEU:HD23	1:A:217:LEU:HB2	0.79	1.51	8	1
1:A:183:LEU:HD13	1:A:183:LEU:O	0.79	1.77	15	5
1:A:152:VAL:CG1	1:A:195:ILE:HG21	0.79	2.08	20	4
1:A:165:ILE:HD12	1:A:190:GLY:N	0.78	1.92	10	8
1:A:168:ILE:CD1	1:A:221:ILE:HG22	0.78	2.09	17	2
1:A:174:VAL:HG22	1:A:175:GLU:N	0.77	1.94	8	1
1:A:152:VAL:HG13	1:A:152:VAL:O	0.77	1.79	1	3
1:A:165:ILE:HD13	1:A:165:ILE:N	0.77	1.92	13	1
1:A:151:ARG:HG3	1:A:153:ILE:HD11	0.77	1.54	6	1
1:A:182:LEU:HD12	1:A:183:LEU:N	0.77	1.95	2	7
1:A:165:ILE:CG2	1:A:221:ILE:HG23	0.77	2.08	13	1
1:A:204:LEU:HB2	1:A:213:LEU:HD12	0.77	1.54	16	1
1:A:152:VAL:HG11	1:A:221:ILE:HD11	0.77	1.57	5	2
1:A:168:ILE:HG21	1:A:188:ARG:HG2	0.77	1.54	1	3
1:A:217:LEU:O	1:A:220:THR:HG22	0.77	1.80	3	2
1:A:152:VAL:HG22	1:A:195:ILE:HG21	0.76	1.54	13	6
1:A:153:ILE:HG22	1:A:202:ILE:HD13	0.76	1.57	13	11
1:A:163:VAL:HG12	1:A:224:GLU:C	0.76	2.04	2	5
1:A:188:ARG:O	1:A:189:VAL:O	0.76	2.03	17	10
1:A:204:LEU:HD13	1:A:213:LEU:CB	0.75	2.10	12	1
1:A:153:ILE:HG22	1:A:202:ILE:HD12	0.75	1.59	4	3
1:A:204:LEU:HD12	1:A:213:LEU:CD1	0.75	2.11	16	1
1:A:152:VAL:CG1	1:A:223:ILE:HG21	0.75	2.12	17	1
1:A:168:ILE:HA	1:A:221:ILE:HG22	0.75	1.59	5	2
1:A:165:ILE:CG2	1:A:189:VAL:HB	0.75	2.11	5	4
1:A:203:THR:HG23	1:A:211:VAL:O	0.75	1.82	17	2
1:A:153:ILE:HD13	1:A:153:ILE:N	0.74	1.97	6	3
1:A:189:VAL:O	1:A:189:VAL:CG2	0.74	2.35	13	10
1:A:150:THR:HG22	1:A:151:ARG:N	0.73	1.96	5	2
1:A:213:LEU:HD22	1:A:218:ALA:CA	0.73	2.13	17	1
1:A:168:ILE:HG13	1:A:221:ILE:HG22	0.73	1.58	14	5
1:A:179:PHE:HA	1:A:182:LEU:HD12	0.73	1.61	1	6
1:A:152:VAL:HG12	1:A:218:ALA:O	0.73	1.83	2	6
1:A:182:LEU:HD22	1:A:213:LEU:HD12	0.73	1.61	2	2
1:A:165:ILE:HD12	1:A:190:GLY:H	0.73	1.43	8	9
1:A:152:VAL:O	1:A:153:ILE:HG23	0.73	1.84	18	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:223:ILE:C	1:A:223:ILE:HD13	0.73	2.09	17	2
1:A:223:ILE:HD12	1:A:224:GLU:N	0.72	1.99	5	1
1:A:153:ILE:CG2	1:A:218:ALA:HB3	0.72	2.14	9	5
1:A:152:VAL:HG13	1:A:153:ILE:N	0.72	1.96	4	1
1:A:183:LEU:HD13	1:A:183:LEU:C	0.72	2.09	15	3
1:A:213:LEU:HD12	1:A:214:LEU:N	0.72	1.99	1	1
1:A:214:LEU:N	1:A:214:LEU:HD23	0.72	2.00	2	8
1:A:152:VAL:CG2	1:A:195:ILE:HD13	0.72	2.15	11	4
1:A:223:ILE:HD13	1:A:223:ILE:O	0.72	1.85	17	4
1:A:156:ALA:HB2	1:A:195:ILE:CD1	0.71	2.14	14	3
1:A:204:LEU:HD12	1:A:213:LEU:HD11	0.71	1.60	16	1
1:A:214:LEU:HD11	1:A:217:LEU:HB2	0.71	1.60	2	3
1:A:152:VAL:HA	1:A:223:ILE:HD12	0.71	1.62	11	2
1:A:152:VAL:HG12	1:A:195:ILE:HG21	0.71	1.61	8	1
1:A:213:LEU:HD13	1:A:213:LEU:C	0.71	2.09	12	2
1:A:179:PHE:HZ	1:A:183:LEU:HD13	0.71	1.45	20	6
1:A:188:ARG:C	1:A:189:VAL:HG13	0.71	2.11	13	9
1:A:165:ILE:HB	1:A:189:VAL:CA	0.70	2.16	2	8
1:A:196:VAL:HG13	1:A:196:VAL:O	0.70	1.86	15	1
1:A:213:LEU:HD13	1:A:214:LEU:N	0.70	2.01	6	2
1:A:219:HIS:O	1:A:220:THR:HG23	0.70	1.85	11	3
1:A:221:ILE:H	1:A:221:ILE:HD13	0.70	1.44	8	7
1:A:152:VAL:HB	1:A:221:ILE:HD11	0.70	1.63	18	1
1:A:152:VAL:C	1:A:153:ILE:CG2	0.70	2.65	18	2
1:A:176:THR:CG2	1:A:180:THR:HG23	0.70	2.14	10	4
1:A:214:LEU:HD12	1:A:216:ASP:HB2	0.70	1.64	20	3
1:A:152:VAL:O	1:A:153:ILE:CG1	0.70	2.40	15	6
1:A:174:VAL:O	1:A:174:VAL:HG22	0.69	1.86	5	2
1:A:185:ALA:HB3	1:A:187:ILE:HG22	0.69	1.64	17	3
1:A:150:THR:O	1:A:223:ILE:HD13	0.69	1.88	17	2
1:A:173:GLN:C	1:A:174:VAL:HG23	0.69	2.12	17	1
1:A:189:VAL:C	1:A:191:SER:N	0.69	2.50	2	19
1:A:165:ILE:HG21	1:A:189:VAL:CB	0.69	2.14	5	1
1:A:223:ILE:HD12	1:A:223:ILE:C	0.69	2.13	5	1
1:A:152:VAL:CG1	1:A:195:ILE:HD13	0.68	2.18	12	1
1:A:204:LEU:HD13	1:A:213:LEU:HB3	0.68	1.65	12	1
1:A:168:ILE:HG21	1:A:188:ARG:HD3	0.68	1.64	13	1
1:A:195:ILE:C	1:A:195:ILE:HD13	0.68	2.13	3	2
1:A:176:THR:HG23	1:A:176:THR:O	0.68	1.88	5	2
1:A:152:VAL:HG12	1:A:221:ILE:HD11	0.68	1.65	19	6
1:A:176:THR:HG23	1:A:180:THR:CG2	0.68	2.17	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:213:LEU:CD1	1:A:218:ALA:HB2	0.68	2.17	1	3
1:A:179:PHE:HB2	1:A:217:LEU:HD11	0.68	1.66	17	1
1:A:163:VAL:O	1:A:193:VAL:O	0.68	2.12	4	20
1:A:213:LEU:C	1:A:214:LEU:HD23	0.67	2.14	4	2
1:A:204:LEU:HD11	1:A:213:LEU:CG	0.67	2.18	17	1
1:A:161:ARG:HH21	1:A:163:VAL:HG13	0.67	1.50	1	1
1:A:168:ILE:HD11	1:A:171:ILE:HG13	0.67	1.65	3	1
1:A:156:ALA:O	1:A:157:THR:HG22	0.67	1.88	3	4
1:A:165:ILE:HD11	1:A:204:LEU:HD11	0.67	1.65	8	4
1:A:211:VAL:HG13	1:A:212:GLU:N	0.67	2.05	2	1
1:A:163:VAL:HG12	1:A:225:GLU:HA	0.67	1.64	8	2
1:A:152:VAL:HG12	1:A:223:ILE:HG21	0.67	1.67	17	1
1:A:152:VAL:CG1	1:A:221:ILE:HD11	0.66	2.20	17	6
1:A:164:ARG:HH11	1:A:166:VAL:HG12	0.66	1.50	18	1
1:A:163:VAL:HG21	1:A:195:ILE:HG13	0.66	1.65	11	2
1:A:132:ILE:HG23	1:A:132:ILE:O	0.66	1.90	2	3
1:A:168:ILE:CG1	1:A:221:ILE:HG22	0.66	2.21	17	2
1:A:218:ALA:O	1:A:220:THR:N	0.66	2.29	5	1
1:A:174:VAL:HG12	1:A:175:GLU:N	0.66	2.04	15	1
1:A:193:VAL:CG2	1:A:204:LEU:HD21	0.66	2.21	15	13
1:A:175:GLU:O	1:A:176:THR:C	0.65	2.40	5	4
1:A:164:ARG:NH2	1:A:166:VAL:HG12	0.65	2.06	13	1
1:A:153:ILE:HD12	1:A:218:ALA:C	0.65	2.16	3	1
1:A:152:VAL:HG12	1:A:153:ILE:HG23	0.65	1.67	9	1
1:A:153:ILE:HG21	1:A:219:HIS:CD2	0.65	2.26	12	1
1:A:221:ILE:N	1:A:221:ILE:HD13	0.65	2.06	1	12
1:A:179:PHE:C	1:A:179:PHE:CD1	0.65	2.74	17	8
1:A:171:ILE:O	1:A:172:PHE:C	0.65	2.39	7	5
1:A:193:VAL:CG1	1:A:206:HIS:CD2	0.65	2.80	5	2
1:A:214:LEU:HD23	1:A:214:LEU:N	0.65	2.07	4	2
1:A:164:ARG:NH1	1:A:166:VAL:HG12	0.64	2.06	18	2
1:A:153:ILE:HG23	1:A:218:ALA:CB	0.64	2.21	5	1
1:A:161:ARG:O	1:A:163:VAL:HG22	0.64	1.92	11	1
1:A:187:ILE:O	1:A:188:ARG:CB	0.64	2.45	12	6
1:A:153:ILE:HG23	1:A:218:ALA:HB3	0.64	1.69	5	1
1:A:165:ILE:CD1	1:A:223:ILE:CG2	0.64	2.74	13	1
1:A:153:ILE:HG23	1:A:218:ALA:HB1	0.64	1.68	13	6
1:A:214:LEU:O	1:A:214:LEU:HD12	0.64	1.93	3	1
1:A:182:LEU:HD22	1:A:211:VAL:CG1	0.64	2.23	5	1
1:A:192:GLU:C	1:A:193:VAL:HG13	0.64	2.18	7	17
1:A:187:ILE:HD13	1:A:211:VAL:CG2	0.64	2.23	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:188:ARG:O	1:A:189:VAL:C	0.64	2.39	15	13
1:A:219:HIS:CD2	1:A:219:HIS:N	0.64	2.63	12	1
1:A:195:ILE:HG23	1:A:204:LEU:CG	0.63	2.22	12	2
1:A:195:ILE:HG22	1:A:202:ILE:CG2	0.63	2.24	12	1
1:A:153:ILE:CD1	1:A:219:HIS:CD2	0.63	2.81	19	1
1:A:157:THR:HG23	1:A:158:SER:N	0.63	2.08	12	1
1:A:221:ILE:CG2	1:A:223:ILE:CG2	0.63	2.76	13	1
1:A:192:GLU:C	1:A:193:VAL:CG1	0.63	2.72	17	18
1:A:194:GLU:O	1:A:204:LEU:HD23	0.63	1.92	8	6
1:A:204:LEU:HD11	1:A:213:LEU:HG	0.63	1.68	17	1
1:A:152:VAL:O	1:A:153:ILE:HG12	0.63	1.94	2	4
1:A:151:ARG:C	1:A:223:ILE:HD12	0.63	2.19	3	3
1:A:152:VAL:HG12	1:A:153:ILE:N	0.63	2.09	9	3
1:A:188:ARG:C	1:A:189:VAL:HG12	0.63	2.18	17	1
1:A:213:LEU:HD23	1:A:217:LEU:HB3	0.63	1.70	17	1
1:A:168:ILE:CA	1:A:221:ILE:HG22	0.63	2.23	5	1
1:A:176:THR:OG1	1:A:179:PHE:CD1	0.63	2.50	18	2
1:A:214:LEU:HD13	1:A:217:LEU:CB	0.63	2.24	3	1
1:A:217:LEU:O	1:A:221:ILE:HG23	0.63	1.93	14	1
1:A:189:VAL:O	1:A:190:GLY:C	0.62	2.42	15	17
1:A:189:VAL:C	1:A:191:SER:H	0.62	2.02	12	17
1:A:179:PHE:CD1	1:A:217:LEU:CD2	0.62	2.82	16	1
1:A:151:ARG:HA	1:A:221:ILE:O	0.62	1.95	17	3
1:A:155:ALA:CB	1:A:163:VAL:HG11	0.62	2.24	8	3
1:A:204:LEU:CD1	1:A:213:LEU:CB	0.62	2.78	5	1
1:A:220:THR:HG23	1:A:221:ILE:HG23	0.61	1.72	19	3
1:A:214:LEU:HD11	1:A:216:ASP:HB2	0.61	1.70	12	2
1:A:153:ILE:CD1	1:A:219:HIS:CG	0.61	2.81	18	3
1:A:164:ARG:O	1:A:223:ILE:HB	0.61	1.94	17	18
1:A:161:ARG:HB3	1:A:196:VAL:HG22	0.61	1.71	7	2
1:A:221:ILE:HG12	1:A:223:ILE:HG23	0.61	1.70	9	2
1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:HD23	0.61	2.09	12	1
1:A:188:ARG:C	1:A:189:VAL:HG22	0.61	2.20	15	5
1:A:153:ILE:HD12	1:A:218:ALA:O	0.61	1.96	6	2
1:A:171:ILE:O	1:A:171:ILE:HD12	0.61	1.96	7	2
1:A:173:GLN:C	1:A:176:THR:HG23	0.61	2.21	7	1
1:A:163:VAL:HG12	1:A:225:GLU:CA	0.61	2.25	8	2
1:A:160:PRO:O	1:A:161:ARG:O	0.61	2.19	10	3
1:A:150:THR:HG22	1:A:150:THR:O	0.61	1.94	6	3
1:A:187:ILE:O	1:A:188:ARG:HB3	0.61	1.93	17	2
1:A:192:GLU:C	1:A:193:VAL:HG12	0.61	2.21	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:153:ILE:CG2	1:A:218:ALA:CB	0.60	2.80	13	11
1:A:152:VAL:HG12	1:A:153:ILE:H	0.60	1.55	15	2
1:A:163:VAL:HG21	1:A:195:ILE:CG1	0.60	2.26	11	5
1:A:152:VAL:CG1	1:A:223:ILE:CG2	0.60	2.78	17	1
1:A:165:ILE:CD1	1:A:223:ILE:HG21	0.60	2.26	13	1
1:A:153:ILE:HD11	1:A:219:HIS:CB	0.60	2.27	9	2
1:A:173:GLN:O	1:A:174:VAL:HG12	0.60	1.95	12	1
1:A:179:PHE:CD1	1:A:180:THR:N	0.60	2.69	18	14
1:A:192:GLU:O	1:A:193:VAL:CG1	0.60	2.49	7	17
1:A:153:ILE:HD12	1:A:154:ASP:H	0.60	1.55	5	1
1:A:160:PRO:O	1:A:161:ARG:C	0.60	2.45	7	4
1:A:179:PHE:CA	1:A:182:LEU:HD12	0.60	2.26	1	6
1:A:163:VAL:C	1:A:193:VAL:O	0.60	2.45	12	3
1:A:168:ILE:HB	1:A:189:VAL:HG11	0.60	1.72	17	1
1:A:221:ILE:HD13	1:A:221:ILE:N	0.60	2.12	17	4
1:A:179:PHE:HB2	1:A:217:LEU:HD22	0.60	1.72	7	1
1:A:138:LEU:O	1:A:138:LEU:HD23	0.60	1.97	17	1
1:A:221:ILE:N	1:A:221:ILE:CD1	0.60	2.65	1	14
1:A:167:GLN:CA	1:A:189:VAL:CG2	0.59	2.80	5	1
1:A:193:VAL:HA	1:A:205:SER:O	0.59	1.97	5	3
1:A:195:ILE:CG2	1:A:204:LEU:CD1	0.59	2.81	18	1
1:A:164:ARG:HA	1:A:191:SER:O	0.59	1.97	11	10
1:A:175:GLU:C	1:A:176:THR:HG1	0.59	2.05	20	2
1:A:218:ALA:O	1:A:221:ILE:CD1	0.59	2.50	6	8
1:A:189:VAL:HG22	1:A:190:GLY:N	0.59	2.11	17	1
1:A:189:VAL:HG23	1:A:189:VAL:O	0.59	1.96	18	1
1:A:177:ASP:O	1:A:180:THR:OG1	0.59	2.20	18	15
1:A:161:ARG:CD	1:A:162:LYS:N	0.59	2.66	11	1
1:A:204:LEU:HB3	1:A:211:VAL:HG12	0.59	1.75	1	1
1:A:217:LEU:O	1:A:218:ALA:C	0.59	2.44	5	7
1:A:165:ILE:CB	1:A:189:VAL:C	0.59	2.76	10	7
1:A:191:SER:O	1:A:193:VAL:CG1	0.59	2.50	5	1
1:A:160:PRO:O	1:A:161:ARG:CG	0.59	2.51	11	1
1:A:168:ILE:CG2	1:A:189:VAL:HG11	0.59	2.27	17	1
1:A:206:HIS:CE1	1:A:211:VAL:HG23	0.59	2.33	12	1
1:A:152:VAL:HG23	1:A:223:ILE:HD13	0.59	1.75	14	1
1:A:204:LEU:CD2	1:A:206:HIS:CD2	0.59	2.82	1	4
1:A:206:HIS:CG	1:A:209:LYS:O	0.58	2.56	14	3
1:A:153:ILE:HG21	1:A:219:HIS:HD2	0.58	1.56	12	1
1:A:195:ILE:CG1	1:A:202:ILE:CG2	0.58	2.81	3	1
1:A:152:VAL:N	1:A:223:ILE:CD1	0.58	2.65	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:179:PHE:CZ	1:A:183:LEU:HD23	0.58	2.33	19	2
1:A:188:ARG:O	1:A:189:VAL:CG1	0.58	2.52	17	1
1:A:193:VAL:HG23	1:A:194:GLU:N	0.58	2.13	13	16
1:A:182:LEU:C	1:A:182:LEU:CD1	0.58	2.75	2	9
1:A:174:VAL:CG2	1:A:175:GLU:N	0.58	2.66	8	1
1:A:168:ILE:H	1:A:189:VAL:HG12	0.58	1.58	10	1
1:A:176:THR:HG21	1:A:180:THR:CG2	0.58	2.28	15	1
1:A:176:THR:OG1	1:A:179:PHE:CG	0.58	2.57	18	1
1:A:182:LEU:CD2	1:A:211:VAL:CG1	0.58	2.81	5	1
1:A:221:ILE:H	1:A:221:ILE:CD1	0.58	2.11	17	3
1:A:214:LEU:N	1:A:214:LEU:CD2	0.58	2.67	2	4
1:A:185:ALA:HB3	1:A:187:ILE:CG2	0.58	2.29	2	2
1:A:157:THR:O	1:A:158:SER:C	0.58	2.47	3	12
1:A:167:GLN:HA	1:A:189:VAL:CG2	0.58	2.29	5	1
1:A:173:GLN:O	1:A:174:VAL:CB	0.58	2.52	17	2
1:A:164:ARG:HG2	1:A:165:ILE:N	0.57	2.14	1	5
1:A:153:ILE:N	1:A:153:ILE:CD1	0.57	2.66	3	3
1:A:214:LEU:HD22	1:A:217:LEU:CB	0.57	2.29	3	1
1:A:176:THR:CG2	1:A:180:THR:CG2	0.57	2.81	10	3
1:A:150:THR:N	1:A:223:ILE:O	0.57	2.36	18	7
1:A:179:PHE:CD1	1:A:179:PHE:C	0.57	2.80	14	7
1:A:177:ASP:O	1:A:179:PHE:N	0.57	2.37	4	3
1:A:213:LEU:HD13	1:A:214:LEU:H	0.57	1.60	6	1
1:A:213:LEU:HD13	1:A:218:ALA:HB2	0.57	1.76	1	1
1:A:153:ILE:CG2	1:A:202:ILE:HD13	0.57	2.29	13	5
1:A:176:THR:HG23	1:A:179:PHE:HB3	0.57	1.74	5	1
1:A:191:SER:O	1:A:193:VAL:HG12	0.57	1.99	5	1
1:A:165:ILE:CG1	1:A:189:VAL:C	0.57	2.78	7	7
1:A:150:THR:CG2	1:A:151:ARG:N	0.57	2.68	5	1
1:A:151:ARG:O	1:A:152:VAL:O	0.57	2.22	17	7
1:A:190:GLY:O	1:A:193:VAL:CG1	0.57	2.52	12	10
1:A:152:VAL:CG1	1:A:153:ILE:N	0.57	2.68	4	3
1:A:161:ARG:CG	1:A:161:ARG:O	0.57	2.52	7	1
1:A:168:ILE:HD12	1:A:221:ILE:HG22	0.57	1.74	17	1
1:A:166:VAL:O	1:A:167:GLN:CB	0.57	2.51	5	1
1:A:219:HIS:O	1:A:219:HIS:CG	0.57	2.57	5	3
1:A:176:THR:HG22	1:A:177:ASP:N	0.57	2.15	11	3
1:A:152:VAL:HG22	1:A:223:ILE:HD13	0.57	1.75	8	1
1:A:174:VAL:HG12	1:A:174:VAL:O	0.57	1.98	20	1
1:A:206:HIS:O	1:A:207:ASN:C	0.57	2.47	7	8
1:A:213:LEU:O	1:A:214:LEU:C	0.57	2.48	17	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:165:ILE:HD13	1:A:221:ILE:HG13	0.57	1.77	16	3
1:A:163:VAL:HG12	1:A:225:GLU:CB	0.57	2.30	8	1
1:A:170:GLU:O	1:A:171:ILE:C	0.57	2.46	17	4
1:A:170:GLU:O	1:A:172:PHE:CZ	0.56	2.57	2	1
1:A:188:ARG:C	1:A:189:VAL:CG1	0.56	2.78	13	6
1:A:170:GLU:O	1:A:172:PHE:CE2	0.56	2.58	2	1
1:A:189:VAL:O	1:A:189:VAL:HG22	0.56	1.99	13	8
1:A:152:VAL:HG23	1:A:221:ILE:CG1	0.56	2.29	8	1
1:A:165:ILE:CD1	1:A:190:GLY:N	0.56	2.66	10	5
1:A:190:GLY:O	1:A:191:SER:C	0.56	2.48	19	7
1:A:176:THR:HG22	1:A:179:PHE:HB3	0.56	1.77	4	1
1:A:152:VAL:HG12	1:A:204:LEU:CD2	0.56	2.29	5	1
1:A:153:ILE:HD11	1:A:219:HIS:HB2	0.56	1.77	9	1
1:A:165:ILE:N	1:A:165:ILE:CD1	0.56	2.61	13	1
1:A:164:ARG:HD3	1:A:166:VAL:HG12	0.56	1.75	16	2
1:A:164:ARG:HB2	1:A:192:GLU:HA	0.56	1.77	18	19
1:A:165:ILE:HD12	1:A:189:VAL:C	0.56	2.25	10	5
1:A:214:LEU:O	1:A:218:ALA:CB	0.56	2.52	9	4
1:A:176:THR:CG2	1:A:179:PHE:HB3	0.56	2.30	4	3
1:A:155:ALA:HB3	1:A:195:ILE:HD11	0.56	1.76	19	1
1:A:157:THR:HG22	1:A:158:SER:H	0.56	1.59	11	1
1:A:153:ILE:CG2	1:A:202:ILE:CD1	0.56	2.83	13	4
1:A:172:PHE:O	1:A:172:PHE:CG	0.56	2.58	13	1
1:A:214:LEU:HD12	1:A:216:ASP:HB3	0.56	1.76	14	2
1:A:153:ILE:CD1	1:A:219:HIS:CB	0.56	2.84	18	3
1:A:223:ILE:C	1:A:223:ILE:CD1	0.56	2.78	5	4
1:A:164:ARG:CZ	1:A:166:VAL:HG12	0.56	2.31	13	1
1:A:193:VAL:HG21	1:A:204:LEU:HD21	0.56	1.77	15	9
1:A:151:ARG:C	1:A:223:ILE:CD1	0.56	2.79	3	2
1:A:193:VAL:HG11	1:A:206:HIS:HD2	0.56	1.61	5	1
1:A:168:ILE:HG21	1:A:188:ARG:CG	0.56	2.30	2	1
1:A:161:ARG:O	1:A:161:ARG:CG	0.56	2.53	10	1
1:A:206:HIS:CE1	1:A:209:LYS:O	0.56	2.58	12	1
1:A:216:ASP:O	1:A:219:HIS:CE1	0.56	2.59	20	1
1:A:165:ILE:CB	1:A:189:VAL:O	0.55	2.55	12	7
1:A:153:ILE:CD1	1:A:218:ALA:C	0.55	2.79	3	1
1:A:165:ILE:HB	1:A:189:VAL:HG23	0.55	1.78	17	1
1:A:175:GLU:O	1:A:177:ASP:N	0.55	2.39	12	4
1:A:206:HIS:O	1:A:208:GLY:N	0.55	2.40	6	11
1:A:214:LEU:O	1:A:214:LEU:CD1	0.55	2.54	3	1
1:A:166:VAL:CA	1:A:190:GLY:HA2	0.55	2.32	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:172:PHE:CD1	1:A:175:GLU:OE1	0.55	2.60	1	1
1:A:194:GLU:O	1:A:205:SER:N	0.55	2.39	17	3
1:A:164:ARG:CB	1:A:192:GLU:HA	0.55	2.32	10	9
1:A:151:ARG:N	1:A:223:ILE:O	0.55	2.39	5	1
1:A:175:GLU:O	1:A:176:THR:HG23	0.55	2.02	9	1
1:A:157:THR:OG1	1:A:197:ASP:CB	0.55	2.55	11	2
1:A:152:VAL:O	1:A:152:VAL:CG1	0.55	2.52	1	4
1:A:161:ARG:O	1:A:163:VAL:HG13	0.55	2.01	9	3
1:A:190:GLY:O	1:A:193:VAL:HG12	0.55	2.01	12	1
1:A:171:ILE:CG2	1:A:217:LEU:HD23	0.55	2.32	20	1
1:A:164:ARG:C	1:A:223:ILE:HB	0.55	2.27	16	6
1:A:156:ALA:O	1:A:157:THR:CG2	0.55	2.54	3	1
1:A:151:ARG:CG	1:A:153:ILE:HD11	0.55	2.28	6	1
1:A:164:ARG:CG	1:A:191:SER:C	0.55	2.80	11	7
1:A:192:GLU:O	1:A:193:VAL:HG13	0.55	2.01	2	8
1:A:198:ARG:O	1:A:199:ASP:C	0.55	2.50	4	14
1:A:195:ILE:O	1:A:196:VAL:HG23	0.55	2.02	16	2
1:A:160:PRO:O	1:A:161:ARG:CB	0.55	2.55	12	4
1:A:152:VAL:N	1:A:223:ILE:HG12	0.55	2.16	9	5
1:A:152:VAL:HG12	1:A:153:ILE:CG2	0.55	2.32	18	1
1:A:189:VAL:O	1:A:189:VAL:HG23	0.54	2.02	15	10
1:A:221:ILE:HG12	1:A:223:ILE:CG2	0.54	2.32	10	13
1:A:193:VAL:HG12	1:A:206:HIS:HB3	0.54	1.79	2	7
1:A:150:THR:O	1:A:223:ILE:CG1	0.54	2.56	7	3
1:A:216:ASP:O	1:A:219:HIS:NE2	0.54	2.40	8	1
1:A:153:ILE:HG12	1:A:219:HIS:CD2	0.54	2.37	15	1
1:A:150:THR:O	1:A:223:ILE:CD1	0.54	2.54	17	1
1:A:198:ARG:CB	1:A:201:HIS:O	0.54	2.55	9	9
1:A:219:HIS:O	1:A:219:HIS:ND1	0.54	2.41	8	2
1:A:220:THR:O	1:A:221:ILE:C	0.54	2.49	13	1
1:A:156:ALA:O	1:A:157:THR:O	0.54	2.25	3	6
1:A:217:LEU:HD23	1:A:221:ILE:CG2	0.54	2.32	4	1
1:A:188:ARG:O	1:A:189:VAL:CG2	0.54	2.56	15	2
1:A:152:VAL:O	1:A:195:ILE:CD1	0.54	2.55	10	4
1:A:160:PRO:HB3	1:A:196:VAL:HG22	0.54	1.78	1	1
1:A:188:ARG:O	1:A:189:VAL:HG22	0.54	2.02	14	15
1:A:152:VAL:O	1:A:154:ASP:N	0.54	2.41	4	4
1:A:166:VAL:CG2	1:A:222:ARG:O	0.54	2.56	4	7
1:A:175:GLU:O	1:A:176:THR:CB	0.54	2.55	13	2
1:A:188:ARG:O	1:A:190:GLY:N	0.54	2.41	2	7
1:A:150:THR:O	1:A:151:ARG:C	0.54	2.51	17	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:176:THR:HG23	1:A:179:PHE:HD2	0.54	1.54	15	2
1:A:179:PHE:CZ	1:A:183:LEU:HG	0.54	2.38	19	1
1:A:213:LEU:HD22	1:A:218:ALA:N	0.54	2.18	17	1
1:A:173:GLN:O	1:A:174:VAL:HB	0.54	2.03	17	4
1:A:176:THR:O	1:A:177:ASP:CB	0.54	2.54	20	10
1:A:195:ILE:C	1:A:196:VAL:HG23	0.54	2.27	16	6
1:A:150:THR:O	1:A:223:ILE:N	0.54	2.41	9	4
1:A:179:PHE:O	1:A:180:THR:C	0.54	2.51	11	13
1:A:164:ARG:HB2	1:A:191:SER:O	0.54	2.03	18	5
1:A:161:ARG:HB3	1:A:196:VAL:CG2	0.54	2.33	7	2
1:A:168:ILE:CB	1:A:189:VAL:HG11	0.54	2.32	17	1
1:A:176:THR:HA	1:A:179:PHE:CD1	0.53	2.38	13	4
1:A:176:THR:CG2	1:A:179:PHE:CB	0.53	2.85	4	1
1:A:157:THR:O	1:A:158:SER:CB	0.53	2.56	7	4
1:A:171:ILE:O	1:A:171:ILE:HG22	0.53	2.04	2	2
1:A:179:PHE:HA	1:A:182:LEU:CD1	0.53	2.34	8	7
1:A:176:THR:CB	1:A:179:PHE:HB3	0.53	2.34	4	2
1:A:177:ASP:O	1:A:178:GLN:C	0.53	2.50	4	5
1:A:152:VAL:N	1:A:153:ILE:HD13	0.53	2.19	6	1
1:A:195:ILE:HG22	1:A:203:THR:O	0.53	2.03	4	2
1:A:165:ILE:HA	1:A:223:ILE:HB	0.53	1.78	5	4
1:A:194:GLU:O	1:A:204:LEU:HA	0.53	2.04	17	3
1:A:182:LEU:O	1:A:187:ILE:HD12	0.53	2.02	10	1
1:A:174:VAL:O	1:A:176:THR:N	0.53	2.37	7	2
1:A:170:GLU:CG	1:A:170:GLU:O	0.53	2.56	12	1
1:A:149:GLY:O	1:A:223:ILE:O	0.53	2.26	16	1
1:A:150:THR:O	1:A:151:ARG:CD	0.53	2.56	16	1
1:A:152:VAL:O	1:A:153:ILE:CG2	0.53	2.57	8	4
1:A:174:VAL:O	1:A:174:VAL:HG13	0.53	2.04	1	1
1:A:176:THR:O	1:A:178:GLN:N	0.53	2.42	7	2
1:A:165:ILE:HG13	1:A:190:GLY:N	0.53	2.19	13	2
1:A:213:LEU:CD2	1:A:217:LEU:C	0.53	2.82	17	1
1:A:179:PHE:CD2	1:A:217:LEU:HD13	0.53	2.39	19	1
1:A:215:ASP:O	1:A:218:ALA:N	0.53	2.39	9	3
1:A:177:ASP:OD1	1:A:178:GLN:N	0.53	2.42	7	2
1:A:213:LEU:C	1:A:213:LEU:CD1	0.53	2.81	12	2
1:A:164:ARG:NE	1:A:166:VAL:HG12	0.53	2.19	13	1
1:A:183:LEU:C	1:A:183:LEU:CD1	0.53	2.81	15	2
1:A:188:ARG:C	1:A:189:VAL:CG2	0.53	2.81	15	1
1:A:202:ILE:HD12	1:A:215:ASP:CG	0.53	2.29	15	1
1:A:166:VAL:HG11	1:A:224:GLU:HG2	0.53	1.80	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:149:GLY:O	1:A:151:ARG:N	0.53	2.41	4	1
1:A:206:HIS:ND1	1:A:209:LYS:O	0.53	2.42	14	6
1:A:221:ILE:CD1	1:A:221:ILE:H	0.53	2.17	19	12
1:A:164:ARG:HG3	1:A:191:SER:O	0.53	2.04	12	4
1:A:223:ILE:HD13	1:A:223:ILE:C	0.52	2.28	2	2
1:A:152:VAL:HG21	1:A:218:ALA:O	0.52	2.03	5	1
1:A:213:LEU:O	1:A:214:LEU:HG	0.52	2.03	17	1
1:A:157:THR:CG2	1:A:161:ARG:CG	0.52	2.87	9	1
1:A:173:GLN:O	1:A:174:VAL:CG1	0.52	2.56	12	1
1:A:190:GLY:O	1:A:191:SER:CB	0.52	2.55	15	10
1:A:217:LEU:O	1:A:220:THR:CG2	0.52	2.57	3	2
1:A:151:ARG:O	1:A:223:ILE:CD1	0.52	2.57	13	1
1:A:177:ASP:N	1:A:177:ASP:OD1	0.52	2.41	13	1
1:A:196:VAL:O	1:A:197:ASP:C	0.52	2.53	12	12
1:A:206:HIS:N	1:A:209:LYS:O	0.52	2.43	20	10
1:A:151:ARG:CB	1:A:154:ASP:HB2	0.52	2.34	3	3
1:A:158:SER:O	1:A:159:MET:CB	0.52	2.57	11	5
1:A:173:GLN:O	1:A:176:THR:HG23	0.52	2.05	7	1
1:A:220:THR:HG23	1:A:221:ILE:N	0.52	2.18	8	3
1:A:221:ILE:HG13	1:A:223:ILE:HG21	0.52	1.80	15	1
1:A:174:VAL:HG12	1:A:179:PHE:CZ	0.52	2.39	4	1
1:A:151:ARG:O	1:A:154:ASP:N	0.52	2.40	20	4
1:A:187:ILE:HG22	1:A:188:ARG:N	0.52	2.19	12	5
1:A:214:LEU:H	1:A:214:LEU:HD23	0.52	1.64	19	1
1:A:206:HIS:CB	1:A:209:LYS:O	0.52	2.58	1	1
1:A:153:ILE:CD1	1:A:218:ALA:O	0.52	2.58	3	2
1:A:221:ILE:CG1	1:A:223:ILE:CG2	0.52	2.88	5	2
1:A:155:ALA:O	1:A:161:ARG:CB	0.52	2.57	6	2
1:A:153:ILE:HA	1:A:202:ILE:HD13	0.52	1.79	9	1
1:A:155:ALA:O	1:A:161:ARG:NE	0.52	2.43	1	1
1:A:159:MET:HE3	1:A:161:ARG:CG	0.52	2.34	1	1
1:A:191:SER:OG	1:A:192:GLU:N	0.52	2.43	2	2
1:A:162:LYS:O	1:A:226:LEU:N	0.52	2.42	3	1
1:A:176:THR:O	1:A:177:ASP:C	0.52	2.52	8	2
1:A:152:VAL:HG22	1:A:152:VAL:O	0.52	2.05	13	1
1:A:195:ILE:O	1:A:196:VAL:CG2	0.52	2.57	16	1
1:A:179:PHE:CZ	1:A:183:LEU:CD2	0.52	2.93	19	1
1:A:152:VAL:CG1	1:A:218:ALA:O	0.52	2.56	2	1
1:A:179:PHE:CE1	1:A:183:LEU:HB2	0.52	2.40	15	2
1:A:136:ASP:O	1:A:138:LEU:N	0.52	2.42	16	2
1:A:198:ARG:O	1:A:200:GLY:N	0.52	2.43	12	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:149:GLY:O	1:A:150:THR:HB	0.52	2.04	16	1
1:A:151:ARG:O	1:A:153:ILE:N	0.52	2.39	1	4
1:A:198:ARG:N	1:A:201:HIS:O	0.52	2.42	9	9
1:A:150:THR:O	1:A:154:ASP:CB	0.52	2.58	3	3
1:A:152:VAL:CG2	1:A:221:ILE:HD11	0.52	2.35	3	2
1:A:150:THR:HB	1:A:223:ILE:O	0.52	2.04	5	4
1:A:210:ASP:O	1:A:211:VAL:HG23	0.52	2.04	19	2
1:A:165:ILE:HD11	1:A:204:LEU:CD1	0.52	2.35	8	1
1:A:158:SER:OG	1:A:161:ARG:NH1	0.52	2.43	14	1
1:A:179:PHE:HA	1:A:182:LEU:HD21	0.52	1.82	17	1
1:A:150:THR:O	1:A:151:ARG:O	0.51	2.29	1	9
1:A:152:VAL:CG2	1:A:195:ILE:HG21	0.51	2.35	2	2
1:A:170:GLU:HB3	1:A:172:PHE:CE1	0.51	2.40	2	1
1:A:204:LEU:CD1	1:A:213:LEU:HD22	0.51	2.33	7	2
1:A:214:LEU:HD22	1:A:217:LEU:HB2	0.51	1.82	3	1
1:A:134:GLY:O	1:A:136:ASP:N	0.51	2.43	9	1
1:A:204:LEU:HD11	1:A:213:LEU:HD12	0.51	1.81	17	1
1:A:168:ILE:O	1:A:169:ASN:C	0.51	2.54	12	9
1:A:217:LEU:HD23	1:A:221:ILE:HG21	0.51	1.82	4	1
1:A:168:ILE:N	1:A:189:VAL:HG12	0.51	2.20	10	1
1:A:204:LEU:HD12	1:A:213:LEU:CD2	0.51	2.36	13	2
1:A:173:GLN:C	1:A:174:VAL:HG12	0.51	2.30	12	2
1:A:207:ASN:O	1:A:207:ASN:ND2	0.51	2.43	14	1
1:A:193:VAL:HB	1:A:205:SER:O	0.51	2.06	10	17
1:A:189:VAL:CG2	1:A:190:GLY:N	0.51	2.73	17	2
1:A:152:VAL:HG22	1:A:223:ILE:CD1	0.51	2.35	8	1
1:A:179:PHE:CB	1:A:217:LEU:HD11	0.51	2.34	17	1
1:A:193:VAL:HG12	1:A:206:HIS:HA	0.51	1.82	19	13
1:A:155:ALA:O	1:A:161:ARG:CG	0.51	2.58	8	1
1:A:168:ILE:O	1:A:170:GLU:N	0.51	2.43	17	3
1:A:179:PHE:CE2	1:A:217:LEU:HD13	0.51	2.40	19	1
1:A:179:PHE:O	1:A:181:GLN:N	0.51	2.44	11	10
1:A:167:GLN:CG	1:A:167:GLN:O	0.51	2.58	14	1
1:A:196:VAL:O	1:A:196:VAL:CG1	0.51	2.57	15	1
1:A:187:ILE:CG2	1:A:211:VAL:HG21	0.51	2.35	17	1
1:A:219:HIS:O	1:A:220:THR:CG2	0.51	2.59	6	1
1:A:149:GLY:CA	1:A:222:ARG:HG3	0.51	2.36	1	1
1:A:167:GLN:O	1:A:222:ARG:N	0.51	2.41	4	5
1:A:163:VAL:CG2	1:A:195:ILE:HG12	0.51	2.35	20	5
1:A:175:GLU:O	1:A:176:THR:OG1	0.51	2.29	7	2
1:A:162:LYS:C	1:A:163:VAL:HG13	0.51	2.30	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:215:ASP:OD1	1:A:216:ASP:N	0.51	2.44	10	1
1:A:204:LEU:CD1	1:A:213:LEU:HB2	0.51	2.35	5	1
1:A:168:ILE:O	1:A:169:ASN:CG	0.51	2.54	12	1
1:A:150:THR:O	1:A:223:ILE:O	0.51	2.28	18	2
1:A:161:ARG:NH2	1:A:163:VAL:HG13	0.51	2.19	1	1
1:A:177:ASP:OD1	1:A:177:ASP:N	0.51	2.44	4	1
1:A:197:ASP:N	1:A:197:ASP:OD1	0.51	2.44	1	2
1:A:152:VAL:HG12	1:A:204:LEU:HD21	0.51	1.82	5	1
1:A:175:GLU:C	1:A:176:THR:OG1	0.51	2.53	12	5
1:A:171:ILE:O	1:A:173:GLN:N	0.50	2.44	3	1
1:A:152:VAL:O	1:A:153:ILE:C	0.50	2.54	17	5
1:A:150:THR:O	1:A:151:ARG:CG	0.50	2.59	5	1
1:A:174:VAL:O	1:A:175:GLU:HB3	0.50	2.06	7	1
1:A:179:PHE:CE1	1:A:217:LEU:CD2	0.50	2.94	16	1
1:A:211:VAL:HG22	1:A:212:GLU:H	0.50	1.66	2	1
1:A:150:THR:CB	1:A:223:ILE:O	0.50	2.59	12	1
1:A:153:ILE:HG13	1:A:219:HIS:CD2	0.50	2.42	12	1
1:A:165:ILE:CG1	1:A:190:GLY:N	0.50	2.74	13	1
1:A:213:LEU:HD12	1:A:218:ALA:HB2	0.50	1.81	19	1
1:A:152:VAL:O	1:A:153:ILE:HG13	0.50	2.06	15	4
1:A:206:HIS:CD2	1:A:206:HIS:N	0.50	2.75	12	2
1:A:204:LEU:HD22	1:A:206:HIS:HD2	0.50	1.60	11	3
1:A:179:PHE:CZ	1:A:183:LEU:CG	0.50	2.93	19	1
1:A:149:GLY:CA	1:A:222:ARG:CG	0.50	2.89	1	1
1:A:152:VAL:HG13	1:A:223:ILE:CG2	0.50	2.37	17	2
1:A:210:ASP:C	1:A:211:VAL:HG23	0.50	2.32	19	2
1:A:163:VAL:CG2	1:A:194:GLU:HA	0.50	2.35	12	2
1:A:164:ARG:NH2	1:A:192:GLU:OE1	0.50	2.43	10	1
1:A:167:GLN:CG	1:A:222:ARG:HB2	0.50	2.36	14	1
1:A:150:THR:O	1:A:151:ARG:NE	0.50	2.44	16	1
1:A:185:ALA:O	1:A:186:ASP:C	0.50	2.55	10	15
1:A:173:GLN:O	1:A:174:VAL:C	0.50	2.52	12	2
1:A:171:ILE:C	1:A:171:ILE:HD12	0.50	2.31	6	1
1:A:150:THR:HG22	1:A:154:ASP:CB	0.50	2.36	11	1
1:A:181:GLN:NE2	1:A:212:GLU:OE2	0.50	2.45	16	1
1:A:162:LYS:HA	1:A:194:GLU:CB	0.50	2.37	12	5
1:A:188:ARG:O	1:A:188:ARG:CG	0.50	2.60	6	4
1:A:150:THR:CG2	1:A:154:ASP:HB3	0.50	2.37	11	3
1:A:151:ARG:NH1	1:A:219:HIS:O	0.50	2.44	10	1
1:A:202:ILE:HD12	1:A:215:ASP:HB2	0.50	1.83	12	1
1:A:197:ASP:OD1	1:A:197:ASP:N	0.50	2.43	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:176:THR:HB	1:A:179:PHE:CB	0.50	2.36	4	1
1:A:157:THR:CG2	1:A:161:ARG:HG2	0.50	2.37	9	1
1:A:187:ILE:O	1:A:188:ARG:O	0.50	2.30	2	1
1:A:193:VAL:HB	1:A:206:HIS:CG	0.50	2.42	5	1
1:A:161:ARG:O	1:A:161:ARG:HG3	0.50	2.07	10	2
1:A:156:ALA:C	1:A:157:THR:HG22	0.50	2.32	3	1
1:A:167:GLN:CB	1:A:222:ARG:HD2	0.50	2.37	3	2
1:A:198:ARG:O	1:A:199:ASP:CG	0.50	2.55	11	2
1:A:170:GLU:O	1:A:172:PHE:N	0.50	2.44	17	2
1:A:165:ILE:C	1:A:166:VAL:HG13	0.50	2.31	11	2
1:A:168:ILE:O	1:A:169:ASN:CB	0.49	2.57	18	2
1:A:164:ARG:NH1	1:A:226:LEU:O	0.49	2.45	20	1
1:A:219:HIS:C	1:A:220:THR:HG23	0.49	2.33	6	2
1:A:176:THR:O	1:A:177:ASP:CG	0.49	2.55	8	1
1:A:179:PHE:HB2	1:A:217:LEU:CD1	0.49	2.37	17	1
1:A:149:GLY:HA3	1:A:222:ARG:CG	0.49	2.36	1	1
1:A:157:THR:HG22	1:A:158:SER:N	0.49	2.22	1	2
1:A:157:THR:CB	1:A:161:ARG:HD2	0.49	2.37	1	1
1:A:159:MET:HE3	1:A:161:ARG:HG2	0.49	1.83	1	1
1:A:171:ILE:CD1	1:A:217:LEU:HD21	0.49	2.34	7	1
1:A:162:LYS:C	1:A:163:VAL:CG1	0.49	2.85	19	2
1:A:165:ILE:HG13	1:A:189:VAL:O	0.49	2.08	1	7
1:A:195:ILE:C	1:A:196:VAL:CG2	0.49	2.85	4	2
1:A:153:ILE:HD11	1:A:219:HIS:ND1	0.49	2.21	15	2
1:A:153:ILE:HD11	1:A:219:HIS:CA	0.49	2.37	14	1
1:A:179:PHE:CE1	1:A:183:LEU:HD22	0.49	2.41	20	1
1:A:194:GLU:CG	1:A:205:SER:HB2	0.49	2.38	7	2
1:A:173:GLN:HA	1:A:176:THR:CG2	0.49	2.37	7	1
1:A:152:VAL:O	1:A:195:ILE:HD13	0.49	2.08	10	2
1:A:164:ARG:HG3	1:A:192:GLU:HA	0.49	1.84	17	4
1:A:164:ARG:HG2	1:A:191:SER:O	0.49	2.07	5	3
1:A:215:ASP:O	1:A:216:ASP:C	0.49	2.56	9	8
1:A:179:PHE:CE2	1:A:183:LEU:CD1	0.49	2.89	14	1
1:A:174:VAL:O	1:A:175:GLU:C	0.49	2.54	18	1
1:A:164:ARG:HG2	1:A:191:SER:C	0.49	2.33	16	6
1:A:174:VAL:O	1:A:174:VAL:CG2	0.49	2.59	5	1
1:A:174:VAL:HG13	1:A:175:GLU:H	0.49	1.68	8	1
1:A:150:THR:O	1:A:154:ASP:HB3	0.49	2.07	3	2
1:A:195:ILE:HG12	1:A:196:VAL:N	0.49	2.22	14	2
1:A:223:ILE:C	1:A:224:GLU:CG	0.49	2.86	4	1
1:A:131:PRO:O	1:A:132:ILE:C	0.49	2.56	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:164:ARG:HG3	1:A:191:SER:C	0.49	2.33	11	2
1:A:183:LEU:O	1:A:183:LEU:CD1	0.49	2.61	13	4
1:A:208:GLY:O	1:A:209:LYS:CB	0.49	2.59	6	3
1:A:150:THR:O	1:A:151:ARG:CB	0.49	2.59	5	2
1:A:153:ILE:HD12	1:A:153:ILE:C	0.49	2.32	5	1
1:A:176:THR:O	1:A:176:THR:CG2	0.49	2.60	5	1
1:A:152:VAL:CA	1:A:223:ILE:HD12	0.49	2.38	16	3
1:A:158:SER:OG	1:A:159:MET:N	0.49	2.43	6	1
1:A:161:ARG:O	1:A:162:LYS:C	0.49	2.56	11	1
1:A:206:HIS:O	1:A:207:ASN:CG	0.49	2.55	14	1
1:A:152:VAL:HG12	1:A:153:ILE:HG22	0.49	1.85	18	1
1:A:195:ILE:HG12	1:A:203:THR:O	0.49	2.08	14	2
1:A:195:ILE:HA	1:A:203:THR:O	0.49	2.06	17	4
1:A:150:THR:O	1:A:223:ILE:HG13	0.49	2.08	4	2
1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CD2	0.49	2.76	12	1
1:A:192:GLU:HG2	1:A:226:LEU:HD21	0.49	1.85	12	1
1:A:152:VAL:CG2	1:A:218:ALA:O	0.49	2.61	17	1
1:A:214:LEU:O	1:A:215:ASP:C	0.48	2.56	14	2
1:A:171:ILE:HG22	1:A:171:ILE:O	0.48	2.08	17	1
1:A:179:PHE:O	1:A:182:LEU:N	0.48	2.44	11	6
1:A:151:ARG:O	1:A:152:VAL:C	0.48	2.54	18	8
1:A:153:ILE:HB	1:A:202:ILE:CD1	0.48	2.38	2	1
1:A:164:ARG:CA	1:A:191:SER:O	0.48	2.61	3	9
1:A:187:ILE:CG2	1:A:188:ARG:N	0.48	2.76	11	2
1:A:156:ALA:HB2	1:A:195:ILE:HD11	0.48	1.82	14	1
1:A:157:THR:O	1:A:157:THR:HG22	0.48	2.08	15	1
1:A:164:ARG:O	1:A:223:ILE:CB	0.48	2.60	17	1
1:A:165:ILE:CB	1:A:189:VAL:HG23	0.48	2.37	17	1
1:A:164:ARG:CG	1:A:192:GLU:HA	0.48	2.38	17	2
1:A:135:LEU:O	1:A:136:ASP:C	0.48	2.56	9	1
1:A:166:VAL:O	1:A:167:GLN:NE2	0.48	2.46	19	1
1:A:167:GLN:HB2	1:A:222:ARG:CD	0.48	2.39	7	2
1:A:206:HIS:C	1:A:207:ASN:CG	0.48	2.81	7	1
1:A:165:ILE:HA	1:A:223:ILE:CG2	0.48	2.39	8	1
1:A:176:THR:O	1:A:177:ASP:HB2	0.48	2.08	13	3
1:A:172:PHE:O	1:A:172:PHE:CD1	0.48	2.66	13	1
1:A:192:GLU:O	1:A:193:VAL:HG12	0.48	2.08	17	1
1:A:196:VAL:O	1:A:197:ASP:O	0.48	2.31	19	1
1:A:213:LEU:HD13	1:A:214:LEU:O	0.48	2.07	19	1
1:A:161:ARG:NH1	1:A:195:ILE:O	0.48	2.43	1	1
1:A:168:ILE:CG1	1:A:168:ILE:O	0.48	2.61	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:161:ARG:C	1:A:194:GLU:HB2	0.48	2.33	10	2
1:A:161:ARG:CB	1:A:195:ILE:O	0.48	2.62	10	1
1:A:193:VAL:C	1:A:194:GLU:OE2	0.48	2.56	10	1
1:A:168:ILE:O	1:A:169:ASN:ND2	0.48	2.46	12	1
1:A:174:VAL:O	1:A:175:GLU:O	0.48	2.31	17	2
1:A:203:THR:HG23	1:A:211:VAL:C	0.48	2.32	17	1
1:A:182:LEU:HD21	1:A:212:GLU:O	0.48	2.07	18	1
1:A:166:VAL:O	1:A:167:GLN:CD	0.48	2.57	19	1
1:A:214:LEU:O	1:A:218:ALA:N	0.48	2.42	6	3
1:A:165:ILE:HG22	1:A:166:VAL:N	0.48	2.23	5	1
1:A:167:GLN:CB	1:A:222:ARG:CG	0.48	2.91	7	1
1:A:215:ASP:O	1:A:217:LEU:N	0.48	2.46	10	2
1:A:156:ALA:CB	1:A:197:ASP:OD1	0.48	2.62	10	1
1:A:164:ARG:HH21	1:A:166:VAL:HG12	0.48	1.67	13	1
1:A:179:PHE:CE1	1:A:217:LEU:HD23	0.48	2.43	16	1
1:A:159:MET:N	1:A:160:PRO:CD	0.48	2.76	3	2
1:A:165:ILE:HA	1:A:223:ILE:CB	0.48	2.38	14	14
1:A:204:LEU:O	1:A:210:ASP:HA	0.48	2.08	14	3
1:A:210:ASP:OD1	1:A:211:VAL:N	0.48	2.47	20	3
1:A:182:LEU:CD2	1:A:213:LEU:HD12	0.48	2.37	2	1
1:A:211:VAL:CG1	1:A:212:GLU:N	0.48	2.76	2	2
1:A:165:ILE:CG2	1:A:221:ILE:HB	0.48	2.39	16	3
1:A:190:GLY:O	1:A:191:SER:HB3	0.48	2.08	15	11
1:A:165:ILE:HA	1:A:223:ILE:HG22	0.48	1.84	9	3
1:A:136:ASP:O	1:A:137:GLU:C	0.48	2.57	9	2
1:A:148:PRO:O	1:A:149:GLY:O	0.48	2.31	9	2
1:A:179:PHE:HB2	1:A:214:LEU:HD11	0.48	1.85	18	1
1:A:162:LYS:HA	1:A:194:GLU:HB2	0.48	1.86	19	3
1:A:195:ILE:HG13	1:A:202:ILE:CG2	0.48	2.37	3	1
1:A:171:ILE:O	1:A:172:PHE:O	0.48	2.32	7	3
1:A:176:THR:HG22	1:A:179:PHE:CB	0.48	2.39	4	1
1:A:152:VAL:HG13	1:A:221:ILE:CG1	0.48	2.38	17	2
1:A:165:ILE:CG2	1:A:189:VAL:CB	0.48	2.87	5	1
1:A:164:ARG:NE	1:A:166:VAL:CG1	0.48	2.77	6	2
1:A:172:PHE:O	1:A:173:GLN:C	0.48	2.57	9	1
1:A:175:GLU:O	1:A:177:ASP:OD1	0.48	2.32	13	1
1:A:182:LEU:HD21	1:A:214:LEU:CD2	0.48	2.39	14	1
1:A:195:ILE:HG12	1:A:204:LEU:HD23	0.48	1.86	17	1
1:A:168:ILE:O	1:A:169:ASN:O	0.47	2.31	5	5
1:A:156:ALA:O	1:A:157:THR:C	0.47	2.55	19	4
1:A:135:LEU:HD12	1:A:135:LEU:N	0.47	2.24	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:153:ILE:HD11	1:A:219:HIS:HA	0.47	1.85	14	2
1:A:165:ILE:O	1:A:191:SER:HA	0.47	2.09	11	8
1:A:152:VAL:C	1:A:154:ASP:N	0.47	2.70	4	5
1:A:164:ARG:NH2	1:A:224:GLU:HB2	0.47	2.24	11	1
1:A:186:ASP:OD1	1:A:186:ASP:N	0.47	2.46	18	2
1:A:153:ILE:CD1	1:A:219:HIS:HB2	0.47	2.39	2	5
1:A:179:PHE:CB	1:A:217:LEU:HD22	0.47	2.38	7	1
1:A:221:ILE:HG13	1:A:223:ILE:CG2	0.47	2.38	15	1
1:A:204:LEU:CD1	1:A:213:LEU:CD1	0.47	2.85	17	1
1:A:164:ARG:HD2	1:A:166:VAL:CG1	0.47	2.39	18	1
1:A:178:GLN:O	1:A:179:PHE:C	0.47	2.57	11	4
1:A:157:THR:N	1:A:160:PRO:HB3	0.47	2.23	3	1
1:A:157:THR:HG23	1:A:158:SER:OG	0.47	2.09	14	1
1:A:153:ILE:CG1	1:A:219:HIS:CD2	0.47	2.97	15	1
1:A:163:VAL:HG23	1:A:164:ARG:N	0.47	2.23	19	1
1:A:202:ILE:HG22	1:A:202:ILE:O	0.47	2.10	5	2
1:A:210:ASP:O	1:A:211:VAL:CG2	0.47	2.62	19	2
1:A:196:VAL:O	1:A:196:VAL:HG13	0.47	2.09	6	1
1:A:136:ASP:N	1:A:136:ASP:OD1	0.47	2.47	17	2
1:A:204:LEU:O	1:A:210:ASP:OD1	0.47	2.33	16	3
1:A:135:LEU:O	1:A:137:GLU:N	0.47	2.47	10	2
1:A:157:THR:C	1:A:158:SER:OG	0.47	2.57	14	2
1:A:132:ILE:O	1:A:132:ILE:CG2	0.47	2.62	17	1
1:A:165:ILE:HD12	1:A:189:VAL:HA	0.47	1.84	17	1
1:A:131:PRO:O	1:A:132:ILE:O	0.47	2.31	18	1
1:A:164:ARG:CG	1:A:191:SER:O	0.47	2.63	5	6
1:A:193:VAL:CG1	1:A:206:HIS:HA	0.47	2.39	14	12
1:A:149:GLY:O	1:A:150:THR:C	0.47	2.57	4	2
1:A:192:GLU:C	1:A:192:GLU:OE1	0.47	2.58	6	1
1:A:177:ASP:OD1	1:A:177:ASP:C	0.47	2.57	7	1
1:A:219:HIS:C	1:A:219:HIS:CD2	0.47	2.92	7	1
1:A:179:PHE:CD1	1:A:217:LEU:HG	0.47	2.44	11	1
1:A:193:VAL:CG2	1:A:194:GLU:N	0.47	2.77	12	1
1:A:204:LEU:CD1	1:A:213:LEU:HD12	0.47	2.40	17	1
1:A:204:LEU:CG	1:A:213:LEU:HD12	0.47	2.40	17	1
1:A:198:ARG:CG	1:A:203:THR:OG1	0.47	2.63	19	1
1:A:131:PRO:O	1:A:133:PRO:HD3	0.47	2.09	5	1
1:A:148:PRO:O	1:A:149:GLY:C	0.47	2.57	19	2
1:A:215:ASP:C	1:A:217:LEU:N	0.47	2.73	9	2
1:A:193:VAL:HG23	1:A:204:LEU:HB3	0.47	1.86	17	1
1:A:157:THR:OG1	1:A:197:ASP:OD2	0.47	2.33	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:151:ARG:C	1:A:223:ILE:HG12	0.47	2.35	10	3
1:A:195:ILE:CG2	1:A:204:LEU:HG	0.47	2.39	18	11
1:A:176:THR:OG1	1:A:177:ASP:N	0.47	2.48	20	2
1:A:204:LEU:CD1	1:A:213:LEU:HB3	0.47	2.38	5	2
1:A:194:GLU:OE2	1:A:205:SER:O	0.47	2.32	10	1
1:A:153:ILE:CD1	1:A:219:HIS:CA	0.46	2.92	14	2
1:A:165:ILE:HB	1:A:189:VAL:HA	0.46	1.87	17	2
1:A:179:PHE:C	1:A:181:GLN:N	0.46	2.73	1	11
1:A:207:ASN:N	1:A:207:ASN:OD1	0.46	2.48	5	1
1:A:152:VAL:HG22	1:A:223:ILE:CG1	0.46	2.40	8	1
1:A:212:GLU:O	1:A:213:LEU:O	0.46	2.33	10	2
1:A:193:VAL:CG1	1:A:206:HIS:HB3	0.46	2.40	4	9
1:A:225:GLU:O	1:A:226:LEU:OXT	0.46	2.33	11	1
1:A:160:PRO:O	1:A:194:GLU:OE1	0.46	2.33	15	1
1:A:193:VAL:HG12	1:A:206:HIS:CB	0.46	2.39	2	3
1:A:153:ILE:HA	1:A:202:ILE:CD1	0.46	2.40	9	1
1:A:149:GLY:CA	1:A:222:ARG:HG2	0.46	2.40	14	1
1:A:152:VAL:HG22	1:A:195:ILE:CG2	0.46	2.36	14	1
1:A:168:ILE:HG23	1:A:221:ILE:HG22	0.46	1.87	18	1
1:A:155:ALA:O	1:A:156:ALA:O	0.46	2.32	19	1
1:A:213:LEU:CD1	1:A:214:LEU:O	0.46	2.63	19	1
1:A:153:ILE:CG2	1:A:202:ILE:HD12	0.46	2.36	4	1
1:A:153:ILE:CD1	1:A:219:HIS:HB3	0.46	2.40	8	2
1:A:211:VAL:HG12	1:A:212:GLU:N	0.46	2.24	9	1
1:A:160:PRO:O	1:A:161:ARG:HG3	0.46	2.11	11	1
1:A:168:ILE:O	1:A:168:ILE:CG1	0.46	2.63	16	2
1:A:152:VAL:O	1:A:155:ALA:N	0.46	2.42	12	1
1:A:217:LEU:O	1:A:219:HIS:N	0.46	2.48	12	1
1:A:213:LEU:O	1:A:214:LEU:O	0.46	2.33	17	2
1:A:168:ILE:CD1	1:A:171:ILE:HG13	0.46	2.39	3	1
1:A:168:ILE:HB	1:A:189:VAL:CG1	0.46	2.39	15	1
1:A:152:VAL:HG13	1:A:221:ILE:HG12	0.46	1.88	17	1
1:A:188:ARG:C	1:A:189:VAL:O	0.46	2.57	17	1
1:A:151:ARG:O	1:A:154:ASP:HB2	0.46	2.11	3	4
1:A:162:LYS:O	1:A:225:GLU:OE2	0.46	2.33	3	1
1:A:178:GLN:O	1:A:181:GLN:N	0.46	2.44	15	1
1:A:138:LEU:O	1:A:138:LEU:CD2	0.46	2.62	17	1
1:A:219:HIS:ND1	1:A:219:HIS:C	0.46	2.71	20	1
1:A:176:THR:HB	1:A:179:PHE:HB3	0.46	1.88	4	1
1:A:157:THR:HG21	1:A:161:ARG:CG	0.46	2.41	9	1
1:A:179:PHE:C	1:A:182:LEU:HD12	0.46	2.32	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:157:THR:HG22	1:A:161:ARG:HB2	0.46	1.87	17	1
1:A:171:ILE:C	1:A:171:ILE:CD1	0.46	2.89	6	1
1:A:196:VAL:CG1	1:A:203:THR:HB	0.46	2.41	15	2
1:A:163:VAL:CG2	1:A:195:ILE:CG1	0.46	2.93	13	3
1:A:164:ARG:HD3	1:A:166:VAL:CG1	0.46	2.41	15	2
1:A:176:THR:C	1:A:177:ASP:OD1	0.46	2.59	13	1
1:A:194:GLU:N	1:A:205:SER:O	0.46	2.49	13	1
1:A:194:GLU:CG	1:A:195:ILE:N	0.46	2.78	13	1
1:A:207:ASN:OD1	1:A:207:ASN:O	0.46	2.33	13	1
1:A:158:SER:C	1:A:159:MET:CG	0.46	2.86	14	1
1:A:213:LEU:HD22	1:A:218:ALA:HB2	0.46	1.86	16	1
1:A:204:LEU:O	1:A:210:ASP:CG	0.46	2.59	17	2
1:A:163:VAL:HG12	1:A:225:GLU:HG3	0.46	1.88	18	1
1:A:163:VAL:HG12	1:A:225:GLU:CG	0.46	2.41	18	1
1:A:183:LEU:CD1	1:A:183:LEU:C	0.46	2.88	13	3
1:A:221:ILE:O	1:A:221:ILE:HG12	0.46	2.10	17	3
1:A:198:ARG:HB3	1:A:201:HIS:O	0.46	2.11	14	2
1:A:166:VAL:CG1	1:A:224:GLU:HG2	0.46	2.40	1	1
1:A:175:GLU:O	1:A:176:THR:O	0.46	2.33	5	2
1:A:165:ILE:HG21	1:A:221:ILE:HB	0.46	1.87	17	1
1:A:152:VAL:HA	1:A:223:ILE:HG12	0.45	1.88	5	1
1:A:170:GLU:CD	1:A:220:THR:O	0.45	2.59	9	1
1:A:194:GLU:HG2	1:A:205:SER:O	0.45	2.11	10	1
1:A:160:PRO:O	1:A:194:GLU:CD	0.45	2.59	15	1
1:A:204:LEU:HD12	1:A:213:LEU:HD13	0.45	1.88	15	1
1:A:186:ASP:CG	1:A:186:ASP:O	0.45	2.59	2	1
1:A:224:GLU:O	1:A:225:GLU:C	0.45	2.59	2	1
1:A:201:HIS:O	1:A:202:ILE:CG1	0.45	2.64	4	2
1:A:214:LEU:HD12	1:A:216:ASP:CB	0.45	2.41	4	2
1:A:204:LEU:HD12	1:A:204:LEU:N	0.45	2.26	5	1
1:A:134:GLY:O	1:A:135:LEU:CB	0.45	2.63	19	2
1:A:170:GLU:OE2	1:A:220:THR:O	0.45	2.34	17	1
1:A:203:THR:CG2	1:A:211:VAL:O	0.45	2.58	17	1
1:A:182:LEU:HB3	1:A:211:VAL:HG11	0.45	1.87	7	1
1:A:161:ARG:HD3	1:A:196:VAL:CG2	0.45	2.41	10	1
1:A:219:HIS:O	1:A:220:THR:C	0.45	2.58	13	1
1:A:176:THR:OG1	1:A:179:PHE:HB3	0.45	2.10	18	1
1:A:193:VAL:HB	1:A:206:HIS:CA	0.45	2.42	5	1
1:A:193:VAL:HB	1:A:206:HIS:HA	0.45	1.87	5	2
1:A:152:VAL:HB	1:A:221:ILE:CG1	0.45	2.42	6	1
1:A:222:ARG:C	1:A:223:ILE:CG2	0.45	2.90	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:178:GLN:NE2	1:A:212:GLU:OE1	0.45	2.47	19	1
1:A:171:ILE:HD11	1:A:221:ILE:HG22	0.45	1.89	20	1
1:A:178:GLN:O	1:A:181:GLN:HB3	0.45	2.12	2	1
1:A:163:VAL:HG21	1:A:195:ILE:HG12	0.45	1.88	15	2
1:A:176:THR:CB	1:A:180:THR:HG23	0.45	2.41	12	1
1:A:135:LEU:O	1:A:136:ASP:HB2	0.45	2.12	13	1
1:A:164:ARG:CZ	1:A:166:VAL:CG1	0.45	2.94	13	1
1:A:165:ILE:HG12	1:A:191:SER:N	0.45	2.26	13	1
1:A:192:GLU:O	1:A:206:HIS:HA	0.45	2.11	5	2
1:A:150:THR:O	1:A:223:ILE:HG12	0.45	2.11	7	1
1:A:152:VAL:CG2	1:A:223:ILE:CG2	0.45	2.89	8	1
1:A:164:ARG:NH2	1:A:226:LEU:HD13	0.45	2.27	10	1
1:A:196:VAL:N	1:A:203:THR:O	0.45	2.45	18	1
1:A:150:THR:C	1:A:223:ILE:O	0.45	2.60	9	1
1:A:152:VAL:HG13	1:A:195:ILE:CG2	0.45	2.30	20	2
1:A:136:ASP:OD2	1:A:137:GLU:N	0.45	2.50	13	1
1:A:221:ILE:HG22	1:A:223:ILE:CG2	0.45	2.40	13	1
1:A:194:GLU:CG	1:A:205:SER:OG	0.45	2.64	16	1
1:A:153:ILE:HD12	1:A:219:HIS:CD2	0.45	2.46	19	1
1:A:168:ILE:O	1:A:168:ILE:HG13	0.45	2.12	11	3
1:A:179:PHE:O	1:A:182:LEU:HG	0.45	2.12	15	6
1:A:152:VAL:CG2	1:A:221:ILE:CG1	0.45	2.95	8	1
1:A:157:THR:O	1:A:158:SER:OG	0.45	2.35	10	2
1:A:164:ARG:HG3	1:A:192:GLU:N	0.45	2.27	11	1
1:A:194:GLU:HG2	1:A:195:ILE:N	0.45	2.26	13	3
1:A:176:THR:HB	1:A:180:THR:HG23	0.45	1.89	12	1
1:A:195:ILE:CG2	1:A:202:ILE:CG2	0.45	2.93	12	1
1:A:194:GLU:HG2	1:A:205:SER:OG	0.45	2.12	16	1
1:A:165:ILE:CB	1:A:189:VAL:HB	0.45	2.42	18	1
1:A:169:ASN:O	1:A:170:GLU:CB	0.45	2.64	2	2
1:A:151:ARG:HB2	1:A:154:ASP:HB2	0.45	1.89	3	1
1:A:199:ASP:O	1:A:200:GLY:C	0.45	2.59	3	2
1:A:177:ASP:C	1:A:179:PHE:N	0.45	2.73	4	3
1:A:150:THR:O	1:A:150:THR:HG22	0.45	2.12	8	2
1:A:152:VAL:CG2	1:A:223:ILE:HG12	0.45	2.42	8	1
1:A:204:LEU:HD23	1:A:205:SER:N	0.45	2.26	16	2
1:A:153:ILE:HG12	1:A:219:HIS:CA	0.45	2.42	16	1
1:A:150:THR:HG22	1:A:151:ARG:H	0.45	1.70	5	2
1:A:166:VAL:O	1:A:167:GLN:CG	0.45	2.65	5	1
1:A:166:VAL:O	1:A:167:GLN:HB2	0.45	2.12	5	1
1:A:211:VAL:HG22	1:A:212:GLU:N	0.45	2.27	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:192:GLU:O	1:A:192:GLU:CG	0.44	2.66	2	1
1:A:195:ILE:HG13	1:A:202:ILE:HG22	0.44	1.88	3	1
1:A:165:ILE:HG22	1:A:189:VAL:HB	0.44	1.88	18	5
1:A:166:VAL:O	1:A:167:GLN:HG3	0.44	2.11	5	1
1:A:167:GLN:N	1:A:189:VAL:HG23	0.44	2.27	5	1
1:A:210:ASP:OD1	1:A:210:ASP:N	0.44	2.50	5	1
1:A:170:GLU:HG3	1:A:172:PHE:CZ	0.44	2.47	7	1
1:A:157:THR:OG1	1:A:197:ASP:HB3	0.44	2.11	11	2
1:A:204:LEU:O	1:A:210:ASP:OD2	0.44	2.35	11	1
1:A:165:ILE:CG1	1:A:189:VAL:O	0.44	2.65	12	6
1:A:178:GLN:O	1:A:181:GLN:CB	0.44	2.66	15	2
1:A:174:VAL:HG11	1:A:217:LEU:HD12	0.44	1.89	4	1
1:A:152:VAL:CB	1:A:223:ILE:HG21	0.44	2.42	7	1
1:A:178:GLN:OE1	1:A:212:GLU:OE1	0.44	2.35	10	1
1:A:187:ILE:O	1:A:188:ARG:CG	0.44	2.65	11	1
1:A:150:THR:O	1:A:154:ASP:HB2	0.44	2.12	12	1
1:A:192:GLU:HG3	1:A:226:LEU:HD11	0.44	1.88	13	1
1:A:169:ASN:HB3	1:A:171:ILE:CG1	0.44	2.42	18	1
1:A:157:THR:C	1:A:159:MET:N	0.44	2.74	19	1
1:A:188:ARG:C	1:A:190:GLY:N	0.44	2.75	19	5
1:A:214:LEU:HD23	1:A:214:LEU:H	0.44	1.73	13	3
1:A:133:PRO:O	1:A:134:GLY:C	0.44	2.60	8	1
1:A:215:ASP:HA	1:A:218:ALA:CB	0.44	2.43	12	1
1:A:133:PRO:CG	1:A:135:LEU:CD2	0.44	2.95	20	1
1:A:156:ALA:CB	1:A:195:ILE:CD1	0.44	2.96	3	1
1:A:189:VAL:HG23	1:A:190:GLY:N	0.44	2.26	5	1
1:A:204:LEU:HD11	1:A:213:LEU:HB3	0.44	1.88	5	1
1:A:168:ILE:O	1:A:171:ILE:HG23	0.44	2.13	6	1
1:A:152:VAL:CG1	1:A:195:ILE:CG2	0.44	2.96	8	1
1:A:165:ILE:C	1:A:166:VAL:CG1	0.44	2.91	11	1
1:A:199:ASP:C	1:A:201:HIS:N	0.44	2.76	3	1
1:A:165:ILE:CD1	1:A:189:VAL:HB	0.44	2.42	5	1
1:A:220:THR:CG2	1:A:221:ILE:N	0.44	2.81	8	1
1:A:157:THR:HG21	1:A:161:ARG:HG2	0.44	1.90	9	1
1:A:165:ILE:CD1	1:A:189:VAL:C	0.44	2.91	10	1
1:A:152:VAL:HA	1:A:223:ILE:CD1	0.44	2.42	16	3
1:A:204:LEU:CD1	1:A:213:LEU:HG	0.44	2.40	17	1
1:A:193:VAL:CG1	1:A:206:HIS:CB	0.44	2.96	2	3
1:A:221:ILE:HD13	1:A:221:ILE:O	0.44	2.13	4	3
1:A:169:ASN:O	1:A:170:GLU:HB2	0.44	2.13	5	3
1:A:160:PRO:C	1:A:161:ARG:HG2	0.44	2.38	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:168:ILE:HB	1:A:189:VAL:HG12	0.44	1.88	13	2
1:A:198:ARG:C	1:A:199:ASP:CG	0.44	2.85	11	1
1:A:206:HIS:CE1	1:A:211:VAL:HG12	0.44	2.47	16	1
1:A:164:ARG:NH1	1:A:165:ILE:O	0.44	2.51	19	1
1:A:163:VAL:HA	1:A:224:GLU:O	0.44	2.13	3	1
1:A:158:SER:O	1:A:159:MET:HB2	0.44	2.13	14	2
1:A:136:ASP:OD1	1:A:136:ASP:O	0.44	2.36	6	2
1:A:218:ALA:O	1:A:221:ILE:HD11	0.44	2.13	6	2
1:A:163:VAL:HG21	1:A:195:ILE:HD11	0.44	1.90	7	1
1:A:157:THR:O	1:A:159:MET:N	0.44	2.48	12	4
1:A:165:ILE:HD12	1:A:223:ILE:HG22	0.44	1.82	13	1
1:A:208:GLY:O	1:A:209:LYS:HB3	0.44	2.12	11	2
1:A:193:VAL:CG2	1:A:204:LEU:HB3	0.44	2.41	17	2
1:A:151:ARG:NE	1:A:219:HIS:CE1	0.44	2.86	19	1
1:A:193:VAL:HG12	1:A:206:HIS:CA	0.44	2.42	19	3
1:A:174:VAL:CG1	1:A:179:PHE:CZ	0.44	3.01	4	1
1:A:137:GLU:O	1:A:138:LEU:C	0.44	2.61	9	1
1:A:193:VAL:CG2	1:A:204:LEU:CD2	0.43	2.96	2	1
1:A:193:VAL:CB	1:A:206:HIS:HA	0.43	2.43	16	10
1:A:210:ASP:O	1:A:210:ASP:OD1	0.43	2.36	3	1
1:A:152:VAL:C	1:A:153:ILE:HD13	0.43	2.38	6	1
1:A:215:ASP:HA	1:A:218:ALA:HB3	0.43	1.90	6	2
1:A:190:GLY:O	1:A:193:VAL:HG11	0.43	2.13	11	2
1:A:168:ILE:C	1:A:170:GLU:OE1	0.43	2.61	17	1
1:A:187:ILE:O	1:A:187:ILE:HG22	0.43	2.12	19	1
1:A:176:THR:O	1:A:177:ASP:O	0.43	2.36	4	1
1:A:152:VAL:CG1	1:A:153:ILE:H	0.43	2.26	9	1
1:A:218:ALA:O	1:A:221:ILE:HD12	0.43	2.13	12	1
1:A:198:ARG:HB2	1:A:203:THR:N	0.43	2.28	19	1
1:A:157:THR:HB	1:A:161:ARG:HD2	0.43	1.88	1	1
1:A:152:VAL:O	1:A:153:ILE:CB	0.43	2.65	18	2
1:A:175:GLU:HG3	1:A:176:THR:N	0.43	2.26	5	1
1:A:198:ARG:HB3	1:A:201:HIS:CB	0.43	2.43	8	1
1:A:206:HIS:C	1:A:208:GLY:N	0.43	2.76	8	2
1:A:175:GLU:OE2	1:A:216:ASP:OD2	0.43	2.36	11	1
1:A:150:THR:C	1:A:151:ARG:HG2	0.43	2.38	16	1
1:A:179:PHE:CD1	1:A:217:LEU:HD22	0.43	2.48	16	1
1:A:169:ASN:O	1:A:170:GLU:C	0.43	2.60	18	1
1:A:214:LEU:HB2	1:A:217:LEU:CB	0.43	2.43	18	1
1:A:161:ARG:O	1:A:194:GLU:HG3	0.43	2.14	19	1
1:A:150:THR:O	1:A:151:ARG:HB2	0.43	2.12	1	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:153:ILE:CD1	1:A:219:HIS:HA	0.43	2.43	1	3
1:A:160:PRO:O	1:A:161:ARG:HG2	0.43	2.12	7	2
1:A:156:ALA:HB1	1:A:197:ASP:OD1	0.43	2.13	10	1
1:A:168:ILE:O	1:A:168:ILE:HG12	0.43	2.13	14	1
1:A:174:VAL:CG1	1:A:175:GLU:N	0.43	2.74	15	1
1:A:213:LEU:HD22	1:A:218:ALA:CB	0.43	2.43	16	1
1:A:152:VAL:HG12	1:A:223:ILE:CG2	0.43	2.38	17	1
1:A:185:ALA:O	1:A:187:ILE:N	0.43	2.51	17	1
1:A:225:GLU:OE1	1:A:226:LEU:OXT	0.43	2.36	7	2
1:A:185:ALA:C	1:A:187:ILE:N	0.43	2.75	17	2
1:A:160:PRO:HA	1:A:195:ILE:O	0.43	2.14	8	2
1:A:170:GLU:C	1:A:172:PHE:N	0.43	2.76	8	1
1:A:223:ILE:HG12	1:A:224:GLU:N	0.43	2.27	11	2
1:A:160:PRO:O	1:A:161:ARG:HB2	0.43	2.14	12	1
1:A:148:PRO:O	1:A:222:ARG:HG2	0.43	2.13	18	1
1:A:225:GLU:O	1:A:226:LEU:C	0.43	2.59	18	1
1:A:196:VAL:O	1:A:196:VAL:HG22	0.43	2.13	6	1
1:A:221:ILE:O	1:A:221:ILE:CG1	0.43	2.67	9	2
1:A:168:ILE:HG12	1:A:171:ILE:CD1	0.43	2.44	13	1
1:A:165:ILE:HG22	1:A:166:VAL:H	0.43	1.72	5	1
1:A:152:VAL:HG23	1:A:221:ILE:HG12	0.43	1.90	8	1
1:A:164:ARG:NH2	1:A:166:VAL:CG1	0.43	2.79	13	1
1:A:192:GLU:HB2	1:A:226:LEU:CD1	0.43	2.44	1	1
1:A:193:VAL:HG23	1:A:205:SER:O	0.43	2.13	12	1
1:A:151:ARG:O	1:A:223:ILE:HD11	0.43	2.13	13	1
1:A:192:GLU:HG3	1:A:226:LEU:HD21	0.43	1.91	19	1
1:A:195:ILE:C	1:A:195:ILE:CD1	0.43	2.79	3	1
1:A:136:ASP:O	1:A:137:GLU:HB2	0.43	2.14	16	3
1:A:150:THR:HG22	1:A:154:ASP:HB3	0.43	1.90	11	1
1:A:207:ASN:O	1:A:208:GLY:C	0.43	2.61	12	1
1:A:167:GLN:HB2	1:A:222:ARG:HD2	0.43	1.90	3	2
1:A:195:ILE:CA	1:A:203:THR:O	0.43	2.67	3	1
1:A:165:ILE:CA	1:A:223:ILE:HB	0.43	2.44	5	1
1:A:193:VAL:CB	1:A:206:HIS:CD2	0.43	3.01	5	1
1:A:221:ILE:CG1	1:A:221:ILE:O	0.43	2.67	6	1
1:A:217:LEU:C	1:A:219:HIS:N	0.43	2.75	12	1
1:A:214:LEU:HD21	1:A:217:LEU:HB2	0.43	1.89	19	1
1:A:195:ILE:HD13	1:A:195:ILE:O	0.42	2.13	3	2
1:A:213:LEU:HG	1:A:214:LEU:N	0.42	2.29	9	2
1:A:158:SER:O	1:A:159:MET:HB3	0.42	2.14	8	1
1:A:176:THR:O	1:A:179:PHE:HB3	0.42	2.13	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:196:VAL:HG12	1:A:203:THR:HB	0.42	1.90	15	1
1:A:149:GLY:O	1:A:150:THR:CB	0.42	2.64	16	1
1:A:198:ARG:HB3	1:A:198:ARG:NH2	0.42	2.29	11	1
1:A:214:LEU:HD11	1:A:217:LEU:HD23	0.42	1.90	11	1
1:A:167:GLN:HB3	1:A:222:ARG:HB3	0.42	1.91	15	1
1:A:175:GLU:O	1:A:176:THR:HB	0.42	2.15	16	1
1:A:219:HIS:O	1:A:219:HIS:CD2	0.42	2.72	16	1
1:A:191:SER:O	1:A:193:VAL:HG22	0.42	2.14	4	1
1:A:208:GLY:C	1:A:209:LYS:HG2	0.42	2.39	11	2
1:A:150:THR:O	1:A:150:THR:CG2	0.42	2.64	6	2
1:A:157:THR:CG2	1:A:158:SER:N	0.42	2.76	12	1
1:A:195:ILE:HG22	1:A:202:ILE:HG22	0.42	1.90	12	1
1:A:149:GLY:C	1:A:222:ARG:HG3	0.42	2.39	16	1
1:A:220:THR:HG23	1:A:221:ILE:H	0.42	1.73	19	1
1:A:217:LEU:HA	1:A:219:HIS:CD2	0.42	2.50	5	1
1:A:213:LEU:HD11	1:A:218:ALA:HB2	0.42	1.90	6	1
1:A:170:GLU:O	1:A:170:GLU:CG	0.42	2.68	11	1
1:A:161:ARG:O	1:A:194:GLU:OE1	0.42	2.37	12	1
1:A:219:HIS:C	1:A:220:THR:CG2	0.42	2.92	16	1
1:A:187:ILE:HD13	1:A:211:VAL:HG23	0.42	1.89	17	1
1:A:202:ILE:O	1:A:213:LEU:CB	0.42	2.68	17	1
1:A:193:VAL:O	1:A:194:GLU:HB3	0.42	2.15	2	1
1:A:206:HIS:O	1:A:207:ASN:HB3	0.42	2.13	3	1
1:A:165:ILE:C	1:A:190:GLY:HA2	0.42	2.40	5	1
1:A:167:GLN:HB2	1:A:222:ARG:CG	0.42	2.44	7	1
1:A:174:VAL:HG22	1:A:175:GLU:H	0.42	1.68	8	1
1:A:215:ASP:O	1:A:218:ALA:HB3	0.42	2.14	17	2
1:A:218:ALA:O	1:A:220:THR:OG1	0.42	2.35	5	1
1:A:202:ILE:O	1:A:202:ILE:HG22	0.42	2.13	7	1
1:A:160:PRO:CB	1:A:195:ILE:O	0.42	2.68	8	1
1:A:204:LEU:O	1:A:210:ASP:CA	0.42	2.68	14	1
1:A:217:LEU:O	1:A:220:THR:OG1	0.42	2.36	16	2
1:A:198:ARG:HB2	1:A:201:HIS:O	0.42	2.14	13	2
1:A:220:THR:OG1	1:A:221:ILE:N	0.42	2.53	13	1
1:A:152:VAL:CG1	1:A:221:ILE:CD1	0.42	2.95	17	1
1:A:198:ARG:HB2	1:A:202:ILE:C	0.42	2.39	19	1
1:A:195:ILE:CG1	1:A:202:ILE:HG22	0.42	2.43	3	1
1:A:158:SER:O	1:A:158:SER:OG	0.42	2.33	11	1
1:A:168:ILE:C	1:A:169:ASN:ND2	0.42	2.78	12	1
1:A:202:ILE:CD1	1:A:215:ASP:CG	0.42	2.92	15	1
1:A:204:LEU:CB	1:A:213:LEU:HD12	0.42	2.38	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:198:ARG:CD	1:A:203:THR:OG1	0.42	2.67	19	1
1:A:175:GLU:OE1	1:A:216:ASP:OD2	0.42	2.37	3	1
1:A:172:PHE:C	1:A:172:PHE:CD1	0.42	2.98	11	1
1:A:149:GLY:HA3	1:A:222:ARG:HG2	0.42	1.92	14	1
1:A:198:ARG:HB2	1:A:203:THR:OG1	0.42	2.15	19	1
1:A:167:GLN:HB2	1:A:222:ARG:HB2	0.42	1.92	20	1
1:A:149:GLY:C	1:A:150:THR:OG1	0.42	2.63	3	1
1:A:179:PHE:CG	1:A:217:LEU:HD22	0.42	2.50	7	1
1:A:155:ALA:O	1:A:161:ARG:HB2	0.42	2.15	8	1
1:A:135:LEU:C	1:A:137:GLU:N	0.42	2.76	9	1
1:A:157:THR:O	1:A:158:SER:HB3	0.42	2.14	15	2
1:A:173:GLN:O	1:A:175:GLU:N	0.42	2.53	12	1
1:A:165:ILE:HG13	1:A:193:VAL:CG1	0.42	2.45	17	1
1:A:156:ALA:HA	1:A:161:ARG:NH1	0.41	2.30	1	1
1:A:181:GLN:HB3	1:A:212:GLU:OE2	0.41	2.15	3	1
1:A:165:ILE:HG12	1:A:223:ILE:HB	0.41	1.90	5	1
1:A:150:THR:C	1:A:222:ARG:HA	0.41	2.40	11	1
1:A:152:VAL:HG11	1:A:204:LEU:HD21	0.41	1.90	17	1
1:A:179:PHE:CE2	1:A:217:LEU:CD1	0.41	3.03	19	1
1:A:161:ARG:CZ	1:A:161:ARG:HB2	0.41	2.38	1	1
1:A:197:ASP:OD1	1:A:197:ASP:O	0.41	2.38	2	1
1:A:148:PRO:O	1:A:224:GLU:HG2	0.41	2.15	4	1
1:A:163:VAL:O	1:A:193:VAL:C	0.41	2.62	4	1
1:A:150:THR:O	1:A:151:ARG:HD3	0.41	2.15	16	1
1:A:223:ILE:O	1:A:223:ILE:HD13	0.41	2.15	16	1
1:A:153:ILE:HD13	1:A:219:HIS:HB2	0.41	1.92	17	1
1:A:210:ASP:OD1	1:A:210:ASP:C	0.41	2.63	17	1
1:A:195:ILE:HG23	1:A:204:LEU:CD1	0.41	2.44	18	1
1:A:193:VAL:HG21	1:A:204:LEU:CD2	0.41	2.45	2	3
1:A:167:GLN:C	1:A:189:VAL:HG21	0.41	2.39	5	1
1:A:219:HIS:C	1:A:220:THR:OG1	0.41	2.59	7	1
1:A:150:THR:C	1:A:151:ARG:HG3	0.41	2.40	9	1
1:A:151:ARG:C	1:A:152:VAL:O	0.41	2.62	15	2
1:A:152:VAL:CG1	1:A:218:ALA:HB1	0.41	2.45	11	1
1:A:176:THR:C	1:A:177:ASP:CG	0.41	2.83	11	2
1:A:151:ARG:HB3	1:A:219:HIS:CD2	0.41	2.50	15	1
1:A:213:LEU:C	1:A:214:LEU:CD2	0.41	2.91	4	1
1:A:150:THR:O	1:A:151:ARG:HG3	0.41	2.14	5	1
1:A:192:GLU:O	1:A:192:GLU:OE1	0.41	2.38	6	1
1:A:193:VAL:CA	1:A:194:GLU:OE2	0.41	2.68	10	1
1:A:202:ILE:HD12	1:A:215:ASP:OD1	0.41	2.15	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:150:THR:C	1:A:151:ARG:CG	0.41	2.93	16	1
1:A:195:ILE:CG1	1:A:196:VAL:N	0.41	2.83	14	2
1:A:163:VAL:O	1:A:164:ARG:HB3	0.41	2.14	10	1
1:A:161:ARG:HD2	1:A:162:LYS:N	0.41	2.30	11	1
1:A:172:PHE:CD1	1:A:172:PHE:N	0.41	2.88	13	1
1:A:195:ILE:CD1	1:A:195:ILE:C	0.41	2.79	14	1
1:A:188:ARG:O	1:A:189:VAL:HG12	0.41	2.13	17	1
1:A:136:ASP:C	1:A:136:ASP:OD1	0.41	2.62	8	1
1:A:203:THR:CG2	1:A:204:LEU:N	0.41	2.83	10	1
1:A:163:VAL:CG2	1:A:195:ILE:HG13	0.41	2.44	17	1
1:A:170:GLU:O	1:A:172:PHE:CD1	0.41	2.74	19	1
1:A:206:HIS:CE1	1:A:211:VAL:CG1	0.41	3.03	3	1
1:A:160:PRO:CA	1:A:195:ILE:O	0.41	2.69	8	1
1:A:214:LEU:HD12	1:A:215:ASP:H	0.41	1.75	8	1
1:A:195:ILE:HB	1:A:204:LEU:HG	0.41	1.92	14	1
1:A:173:GLN:C	1:A:174:VAL:CG2	0.41	2.80	17	1
1:A:206:HIS:HB2	1:A:209:LYS:O	0.41	2.15	1	2
1:A:152:VAL:C	1:A:153:ILE:CG1	0.41	2.94	17	2
1:A:176:THR:CB	1:A:179:PHE:CB	0.41	2.99	4	1
1:A:221:ILE:HG22	1:A:221:ILE:O	0.41	2.15	13	1
1:A:164:ARG:O	1:A:223:ILE:CA	0.41	2.68	16	2
1:A:152:VAL:C	1:A:154:ASP:H	0.41	2.24	2	1
1:A:175:GLU:C	1:A:176:THR:HG22	0.41	2.40	3	1
1:A:151:ARG:C	1:A:153:ILE:N	0.41	2.77	7	2
1:A:221:ILE:CD1	1:A:221:ILE:N	0.41	2.82	8	1
1:A:170:GLU:O	1:A:170:GLU:HG2	0.41	2.16	12	1
1:A:168:ILE:HD12	1:A:221:ILE:CD1	0.41	2.45	13	1
1:A:161:ARG:O	1:A:194:GLU:CD	0.41	2.64	19	1
1:A:214:LEU:C	1:A:216:ASP:N	0.41	2.78	20	1
1:A:179:PHE:CD2	1:A:217:LEU:HD22	0.41	2.51	1	1
1:A:182:LEU:HD22	1:A:211:VAL:HG11	0.41	1.93	5	1
1:A:214:LEU:O	1:A:214:LEU:HG	0.41	2.16	14	2
1:A:134:GLY:O	1:A:135:LEU:HB2	0.41	2.16	9	1
1:A:219:HIS:CD2	1:A:219:HIS:C	0.41	2.99	11	1
1:A:152:VAL:HG13	1:A:221:ILE:CD1	0.41	2.46	17	1
1:A:152:VAL:HG22	1:A:218:ALA:O	0.41	2.15	17	1
1:A:152:VAL:CG1	1:A:204:LEU:HD21	0.40	2.46	5	1
1:A:136:ASP:OD2	1:A:137:GLU:OE1	0.40	2.39	13	1
1:A:165:ILE:HB	1:A:189:VAL:HB	0.40	1.93	18	1
1:A:182:LEU:HB3	1:A:211:VAL:CG1	0.40	2.47	7	1
1:A:165:ILE:CB	1:A:223:ILE:HG22	0.40	2.42	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:153:ILE:HG12	1:A:154:ASP:N	0.40	2.32	12	1
1:A:215:ASP:HA	1:A:218:ALA:HB2	0.40	1.91	12	1
1:A:215:ASP:CG	1:A:216:ASP:N	0.40	2.79	12	1
1:A:136:ASP:OD1	1:A:136:ASP:N	0.40	2.54	16	1
1:A:156:ALA:HA	1:A:160:PRO:HB3	0.40	1.93	16	1
1:A:159:MET:N	1:A:160:PRO:HD3	0.40	2.31	16	1
1:A:169:ASN:O	1:A:170:GLU:HB3	0.40	2.17	17	1
1:A:202:ILE:HD12	1:A:215:ASP:CB	0.40	2.46	20	1
1:A:157:THR:HB	1:A:161:ARG:CD	0.40	2.46	1	1
1:A:221:ILE:HG12	1:A:221:ILE:O	0.40	2.14	6	1
1:A:206:HIS:HE1	1:A:211:VAL:HG23	0.40	1.72	12	1
1:A:187:ILE:HG21	1:A:211:VAL:CG2	0.40	2.46	17	1
1:A:176:THR:OG1	1:A:180:THR:HG23	0.40	2.16	3	1
1:A:199:ASP:O	1:A:201:HIS:N	0.40	2.54	3	1
1:A:214:LEU:HD13	1:A:218:ALA:N	0.40	2.32	3	1
1:A:152:VAL:HG23	1:A:153:ILE:H	0.40	1.77	5	1
1:A:198:ARG:HB3	1:A:201:HIS:C	0.40	2.41	8	1
1:A:153:ILE:HG12	1:A:218:ALA:O	0.40	2.16	9	1
1:A:136:ASP:CG	1:A:137:GLU:N	0.40	2.74	13	1
1:A:165:ILE:HG13	1:A:190:GLY:H	0.40	1.75	13	1
1:A:158:SER:O	1:A:159:MET:O	0.40	2.40	5	1
1:A:165:ILE:O	1:A:190:GLY:HA2	0.40	2.16	5	1
1:A:166:VAL:HA	1:A:190:GLY:HA2	0.40	1.93	5	1
1:A:171:ILE:HD13	1:A:217:LEU:HD23	0.40	1.91	7	1
1:A:179:PHE:CD2	1:A:180:THR:N	0.40	2.90	11	1
1:A:214:LEU:CG	1:A:217:LEU:HB2	0.40	2.46	11	1
1:A:165:ILE:N	1:A:165:ILE:HD13	0.40	2.30	15	1
1:A:208:GLY:O	1:A:209:LYS:HB2	0.40	2.15	16	1
1:A:157:THR:HG21	1:A:161:ARG:NH1	0.40	2.31	18	1
1:A:174:VAL:O	1:A:174:VAL:CG1	0.40	2.69	20	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	86/97 (89%)	49±3 (57±3%)	24±3 (28±3%)	13±3 (15±3%)	0	4
All	All	1720/1940 (89%)	984 (57%)	477 (28%)	259 (15%)	0	4

All 56 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	190	GLY	18
1	A	193	VAL	17
1	A	152	VAL	13
1	A	207	ASN	13
1	A	151	ARG	12
1	A	169	ASN	12
1	A	189	VAL	11
1	A	153	ILE	10
1	A	174	VAL	10
1	A	199	ASP	10
1	A	176	THR	8
1	A	161	ARG	6
1	A	191	SER	6
1	A	157	THR	6
1	A	220	THR	6
1	A	163	VAL	6
1	A	172	PHE	5
1	A	177	ASP	5
1	A	175	GLU	5
1	A	186	ASP	5
1	A	196	VAL	4
1	A	131	PRO	4
1	A	160	PRO	4
1	A	136	ASP	4
1	A	170	GLU	3
1	A	180	THR	3
1	A	134	GLY	3
1	A	135	LEU	3
1	A	149	GLY	3
1	A	173	GLN	3
1	A	213	LEU	3
1	A	188	ARG	2
1	A	133	PRO	2
1	A	158	SER	2
1	A	137	GLU	2
1	A	150	THR	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	159	MET	2
1	A	167	GLN	2
1	A	219	HIS	2
1	A	209	LYS	2
1	A	162	LYS	2
1	A	187	ILE	2
1	A	166	VAL	2
1	A	214	LEU	2
1	A	211	VAL	1
1	A	178	GLN	1
1	A	215	ASP	1
1	A	138	LEU	1
1	A	202	ILE	1
1	A	171	ILE	1
1	A	221	ILE	1
1	A	212	GLU	1
1	A	218	ALA	1
1	A	132	ILE	1
1	A	156	ALA	1
1	A	197	ASP	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	78/83 (94%)	48±4 (62±6%)	30±4 (38±6%)	07
All	All	1560/1660 (94%)	962 (62%)	598 (38%)	07

All 71 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	195	ILE	20
1	A	223	ILE	20
1	A	180	THR	19
1	A	221	ILE	19
1	A	217	LEU	18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	165	ILE	17
1	A	183	LEU	17
1	A	204	LEU	17
1	A	179	PHE	16
1	A	216	ASP	16
1	A	201	HIS	15
1	A	154	ASP	14
1	A	135	LEU	13
1	A	138	LEU	13
1	A	198	ARG	13
1	A	161	ARG	12
1	A	226	LEU	12
1	A	173	GLN	12
1	A	159	MET	12
1	A	188	ARG	12
1	A	137	GLU	11
1	A	162	LYS	11
1	A	164	ARG	11
1	A	167	GLN	11
1	A	192	GLU	10
1	A	205	SER	10
1	A	209	LYS	10
1	A	168	ILE	9
1	A	153	ILE	9
1	A	175	GLU	9
1	A	189	VAL	9
1	A	170	GLU	8
1	A	176	THR	8
1	A	222	ARG	8
1	A	213	LEU	8
1	A	220	THR	7
1	A	157	THR	7
1	A	158	SER	7
1	A	163	VAL	7
1	A	178	GLN	7
1	A	225	GLU	7
1	A	152	VAL	7
1	A	151	ARG	6
1	A	214	LEU	6
1	A	206	HIS	6
1	A	177	ASP	6
1	A	224	GLU	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	194	GLU	5
1	A	199	ASP	5
1	A	182	LEU	5
1	A	132	ILE	4
1	A	212	GLU	4
1	A	207	ASN	4
1	A	186	ASP	4
1	A	181	GLN	4
1	A	219	HIS	4
1	A	210	ASP	3
1	A	187	ILE	3
1	A	169	ASN	3
1	A	136	ASP	3
1	A	193	VAL	3
1	A	171	ILE	3
1	A	172	PHE	3
1	A	215	ASP	2
1	A	203	THR	2
1	A	174	VAL	2
1	A	150	THR	1
1	A	202	ILE	1
1	A	191	SER	1
1	A	211	VAL	1
1	A	197	ASP	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 oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry ⓘ

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided