Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Mar 24, 2026 – 08:02 AM UTC

PDB ID	:	1FLI / pdb_00001fli
Title	:	DNA-BINDING DOMAIN OF FLI-1
Authors	:	Liang, H.; Mao, X.; Olejniczak, E.T.; Nettesheim, D.G.; Yu, L.; Meadows, R.P.; Thompson, C.B.; Fesik, S.W.
Deposited on	:	1994-09-15

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

We welcome your comments at *validation@mail.wwpdb.org*
A user guide is available at
https://www.wwpdb.org/validation/2017/NMRValidationReportHelp
with specific help available everywhere you see the (i) symbol.

The types of validation reports are described at
http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types.

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

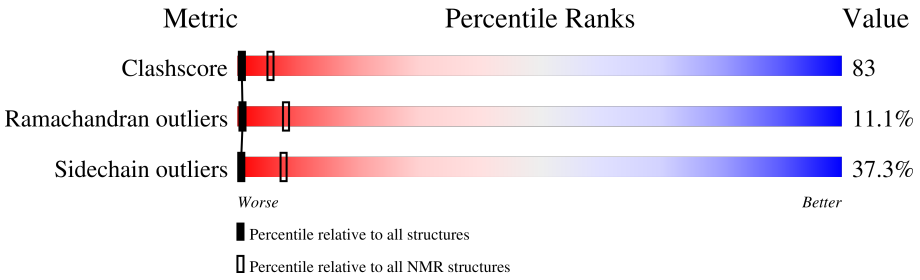
MolProbity	:	4-5-2 with Phenix2.0
Percentile statistics	:	20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	98	. 51% 26% . 17%

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 30 models. Model 5 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:281-A:361 (81)	0.95	5

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 6 clusters and 5 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1585 atoms, of which 778 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called FLI-1.

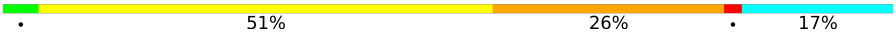
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	98	1585	513	778	143	147	4	0

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: FLI-1

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

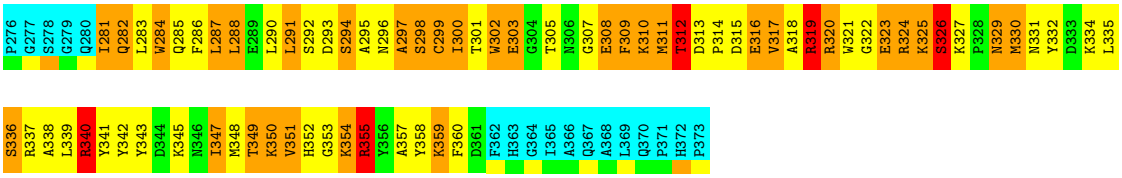
• Molecule 1: FLI-1

Chain A:

4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: FLI-1

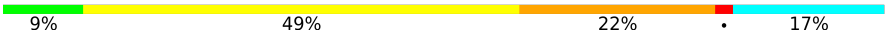
Chain A:

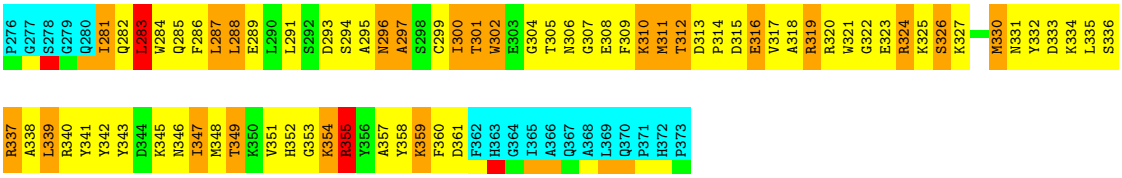


4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: FLI-1

Chain A:

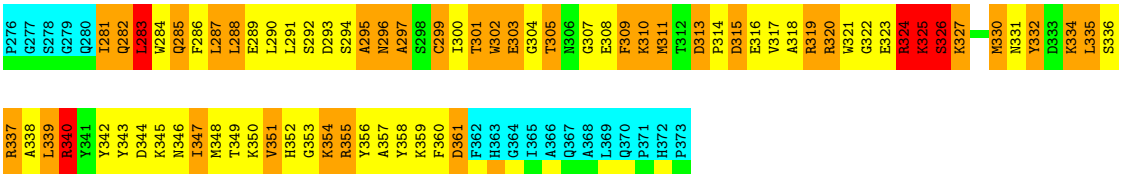




4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: FLI-1

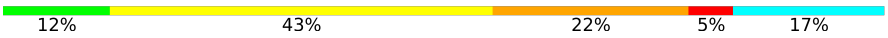
Chain A:

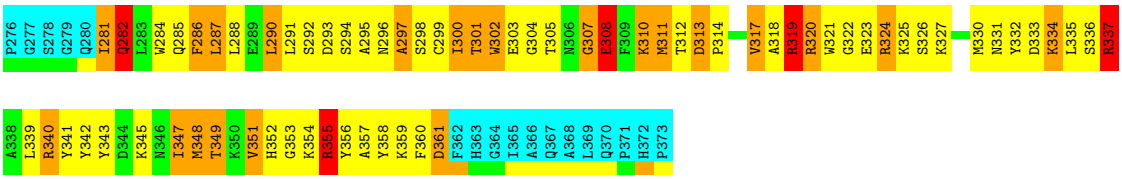


4.2.5 Score per residue for model 5 (medoid)

- Molecule 1: FLI-1

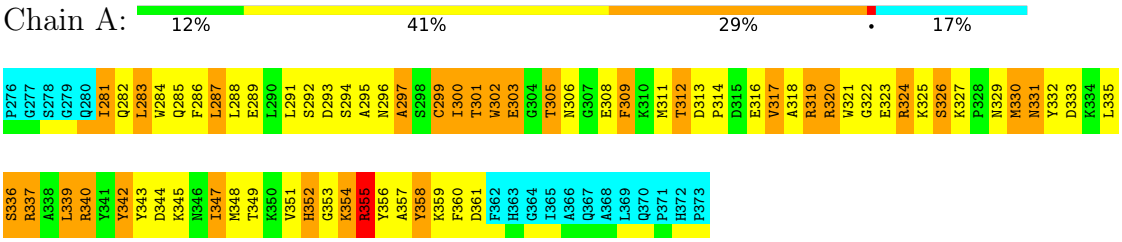
Chain A:





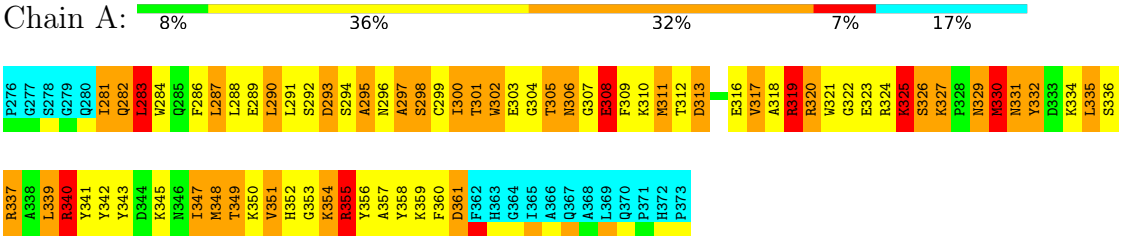
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: FLI-1



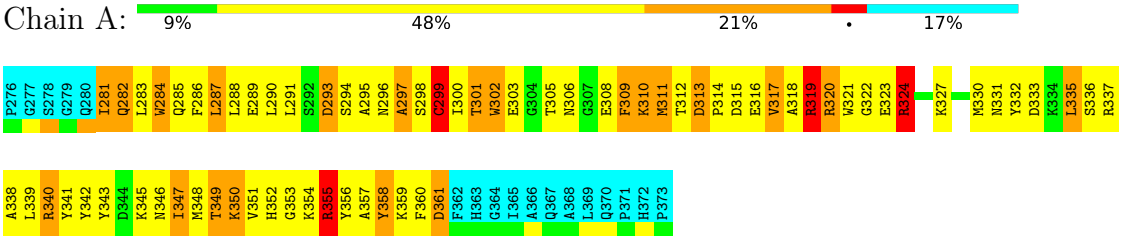
4.2.7 Score per residue for model 7

• Molecule 1: FLI-1



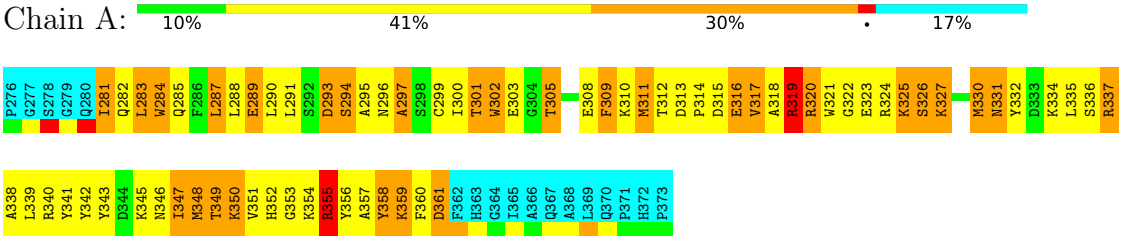
4.2.8 Score per residue for model 8

• Molecule 1: FLI-1



4.2.9 Score per residue for model 9

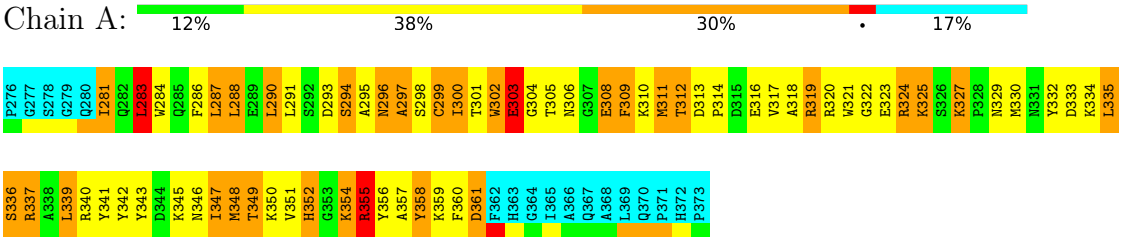
• Molecule 1: FLI-1



4.2.10 Score per residue for model 10

• Molecule 1: FLI-1

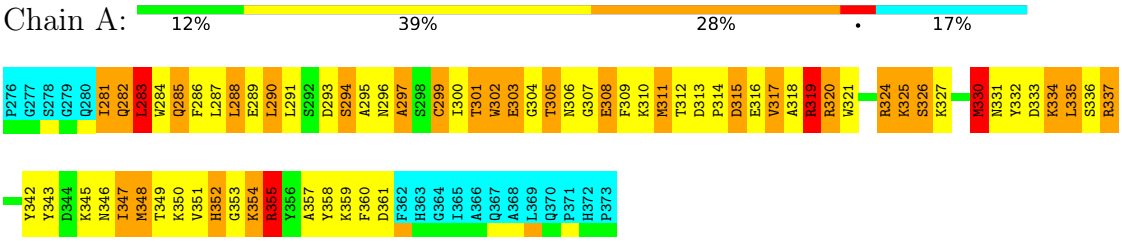
Chain A:



4.2.11 Score per residue for model 11

• Molecule 1: FLI-1

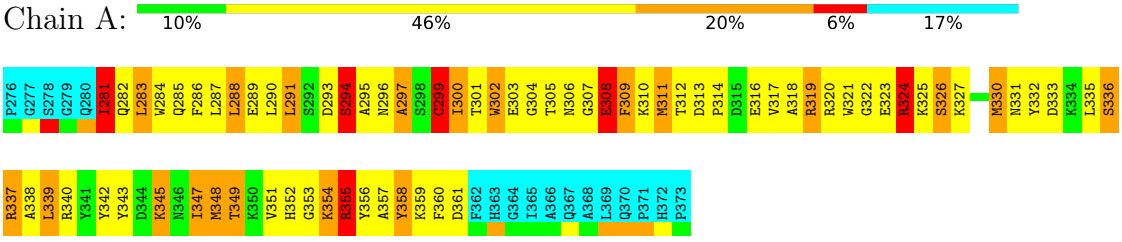
Chain A:



4.2.12 Score per residue for model 12

• Molecule 1: FLI-1

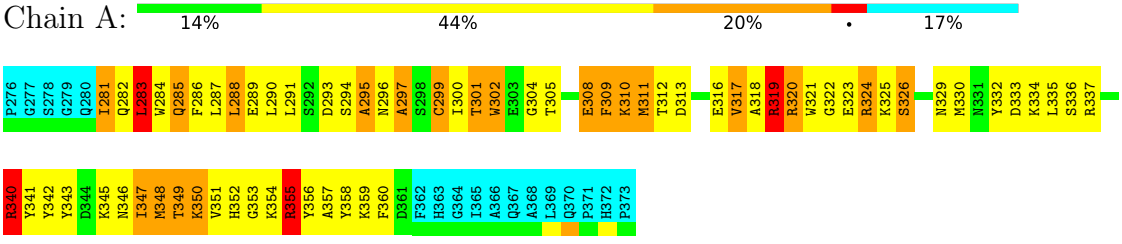
Chain A:



4.2.13 Score per residue for model 13

• Molecule 1: FLI-1

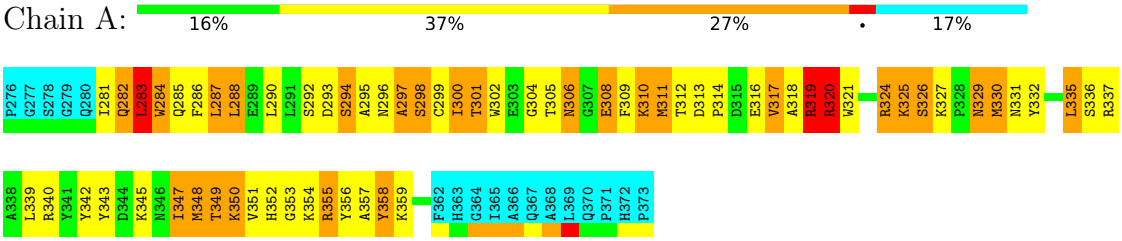
Chain A:



4.2.14 Score per residue for model 14

• Molecule 1: FLI-1

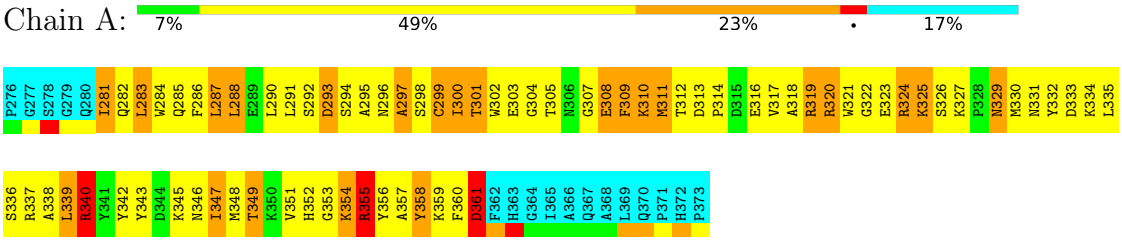
Chain A:



4.2.15 Score per residue for model 15

• Molecule 1: FLI-1

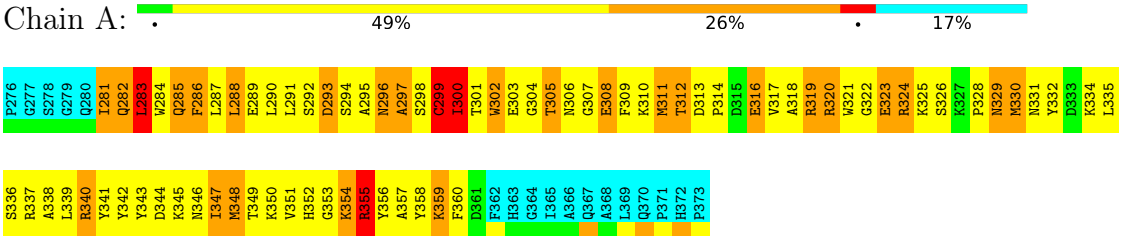
Chain A:



4.2.16 Score per residue for model 16

• Molecule 1: FLI-1

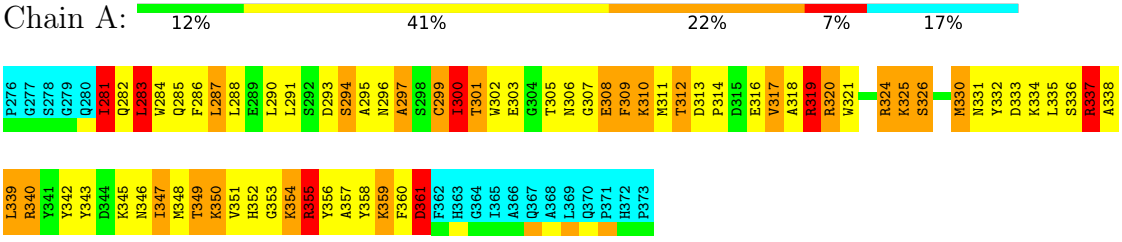
Chain A:



4.2.17 Score per residue for model 17

• Molecule 1: FLI-1

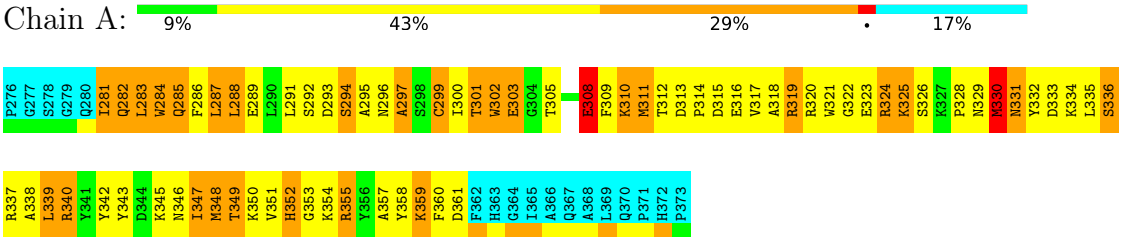
Chain A:



4.2.18 Score per residue for model 18

• Molecule 1: FLI-1

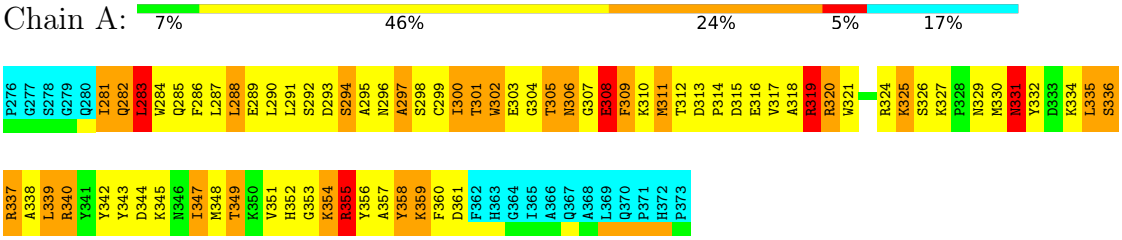
Chain A:



4.2.19 Score per residue for model 19

• Molecule 1: FLI-1

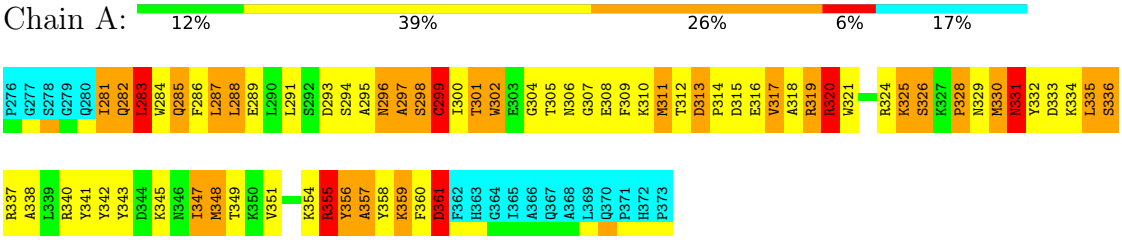
Chain A:



4.2.20 Score per residue for model 20

• Molecule 1: FLI-1

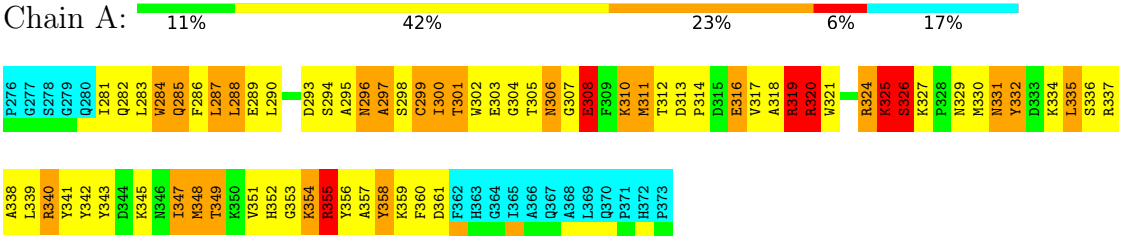
Chain A:



4.2.21 Score per residue for model 21

• Molecule 1: FLI-1

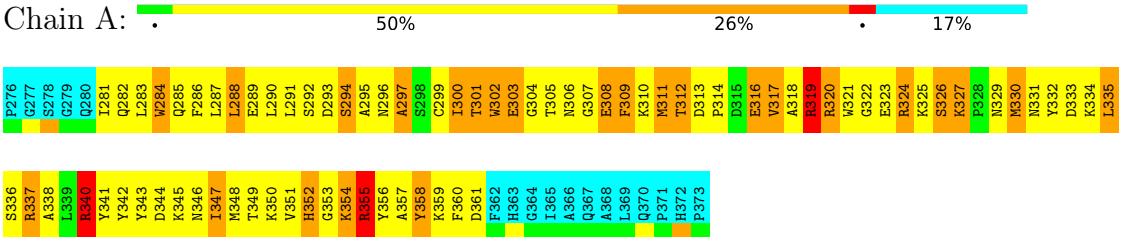
Chain A:



4.2.22 Score per residue for model 22

• Molecule 1: FLI-1

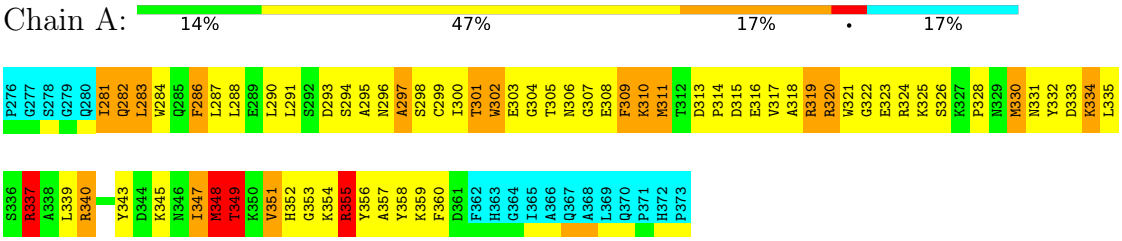
Chain A:



4.2.23 Score per residue for model 23

• Molecule 1: FLI-1

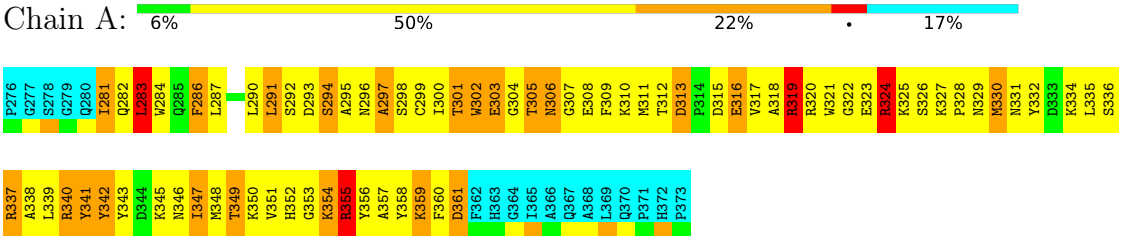
Chain A:



4.2.24 Score per residue for model 24

• Molecule 1: FLI-1

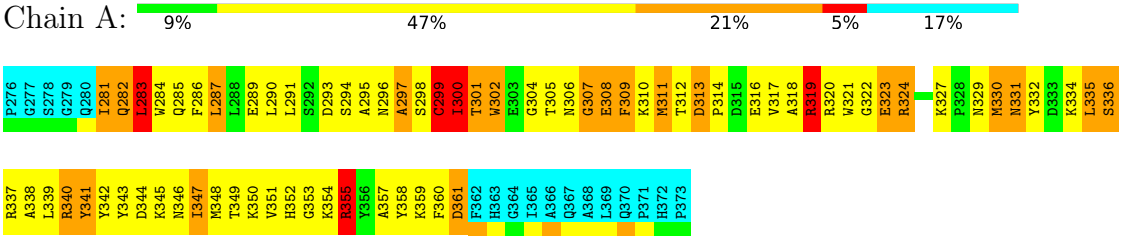
Chain A:



4.2.25 Score per residue for model 25

• Molecule 1: FLI-1

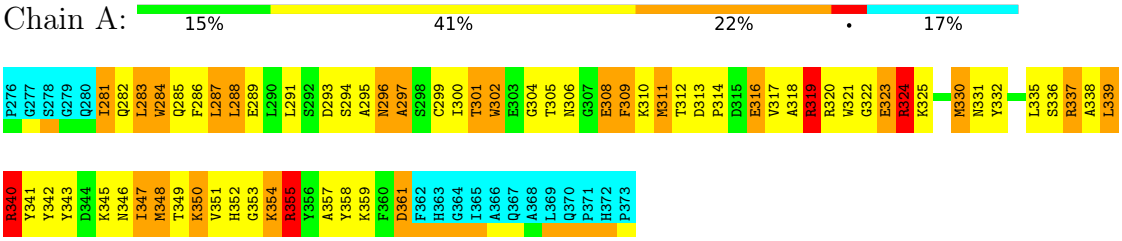
Chain A:



4.2.26 Score per residue for model 26

• Molecule 1: FLI-1

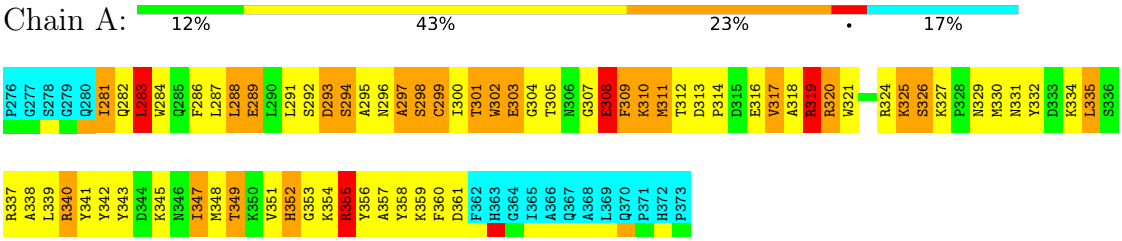
Chain A:



4.2.27 Score per residue for model 27

• Molecule 1: FLI-1

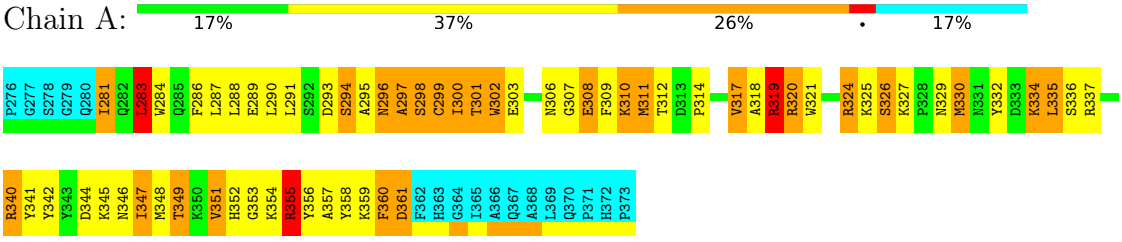
Chain A:



4.2.28 Score per residue for model 28

• Molecule 1: FLI-1

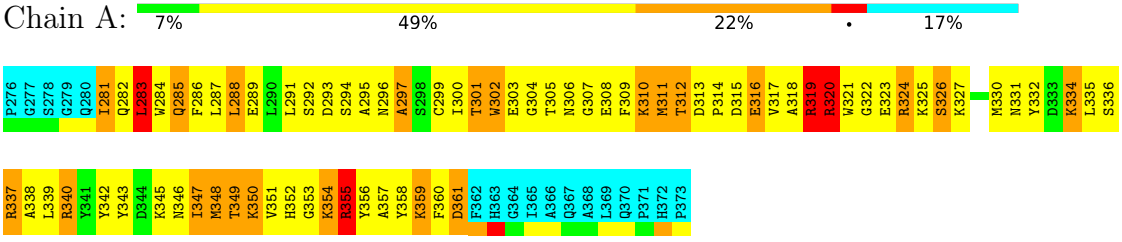
Chain A:



4.2.29 Score per residue for model 29

• Molecule 1: FLI-1

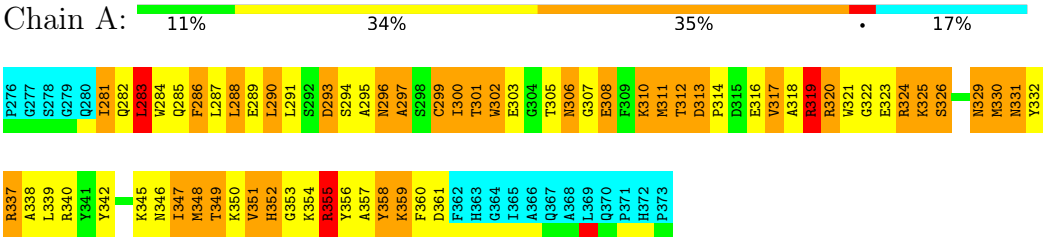
Chain A:



4.2.30 Score per residue for model 30

• Molecule 1: FLI-1

Chain A:



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

The authors did not provide any information on software used for structure solution, optimization or refinement.

No chemical shift data was provided.

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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	1.38±0.01	0±0/701 (0.0± 0.0%)	1.29±0.02	0±0/944 (0.0± 0.0%)
All	All	1.38	0/21030 (0.0%)	1.29	1/28320 (0.0%)

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	5.7±0.5
All	All	0	170

There are no bond-length outliers.

All unique angle outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
1	A	361	ASP	CB-CA-C	-5.37	109.40	115.79	17	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	319	ARG	Sidechain	29
1	A	320	ARG	Sidechain	29
1	A	337	ARG	Sidechain	29
1	A	324	ARG	Sidechain	28
1	A	340	ARG	Sidechain	28
1	A	355	ARG	Sidechain	27

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	683	664	664	112±10
All	All	20490	19920	19920	3374

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 83.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:351:VAL:HG13	1:A:357:ALA:HB3	1.10	1.18	6	13
1:A:284:TRP:CE3	1:A:348:MET:HE1	1.06	1.85	25	12
1:A:287:LEU:HD11	1:A:300:ILE:HG21	1.02	1.29	29	7
1:A:287:LEU:HD11	1:A:300:ILE:HD13	1.02	1.11	27	11
1:A:287:LEU:HD11	1:A:300:ILE:CD1	1.00	1.87	21	9
1:A:281:ILE:HD12	1:A:282:GLN:N	0.99	1.72	11	8
1:A:300:ILE:HD13	1:A:301:THR:N	0.97	1.74	5	3
1:A:351:VAL:CG1	1:A:357:ALA:HB3	0.96	1.89	22	19
1:A:321:TRP:CZ2	1:A:335:LEU:HD21	0.96	1.95	25	8
1:A:287:LEU:CD1	1:A:300:ILE:HG21	0.92	1.94	29	13
1:A:283:LEU:HD13	1:A:342:TYR:OH	0.92	1.63	17	7
1:A:283:LEU:HD21	1:A:339:LEU:HD12	0.92	1.41	4	1
1:A:321:TRP:CH2	1:A:335:LEU:HD11	0.91	2.01	13	2
1:A:284:TRP:CD1	1:A:342:TYR:HH	0.90	1.84	24	3
1:A:321:TRP:CE2	1:A:335:LEU:HD21	0.89	2.02	8	11
1:A:300:ILE:HD12	1:A:311:MET:CG	0.89	1.97	12	5
1:A:339:LEU:HD22	1:A:343:TYR:OH	0.89	1.67	18	3
1:A:283:LEU:HD21	1:A:335:LEU:HD11	0.89	1.42	14	1
1:A:351:VAL:HG12	1:A:357:ALA:O	0.89	1.68	20	9
1:A:351:VAL:HB	1:A:357:ALA:HB3	0.88	1.43	21	15
1:A:284:TRP:CE3	1:A:348:MET:HE2	0.88	2.04	1	19
1:A:311:MET:SD	1:A:358:TYR:CD1	0.88	2.67	11	4
1:A:351:VAL:HG22	1:A:357:ALA:HB3	0.87	1.42	12	2
1:A:348:MET:SD	1:A:358:TYR:CE2	0.87	2.67	22	7
1:A:300:ILE:HD11	1:A:311:MET:CG	0.87	2.00	15	3
1:A:287:LEU:HD11	1:A:300:ILE:HG12	0.87	1.46	13	6
1:A:339:LEU:HD21	1:A:358:TYR:CZ	0.86	2.05	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:305:THR:HG21	1:A:308:GLU:CD	0.86	1.94	2	4
1:A:342:TYR:CD2	1:A:348:MET:SD	0.86	2.68	18	6
1:A:300:ILE:HD12	1:A:311:MET:HG2	0.85	1.47	12	3
1:A:284:TRP:CD2	1:A:348:MET:HE1	0.85	2.06	13	17
1:A:284:TRP:CG	1:A:348:MET:HE1	0.85	2.07	7	16
1:A:300:ILE:HD12	1:A:301:THR:N	0.85	1.87	17	2
1:A:287:LEU:HD12	1:A:287:LEU:O	0.84	1.72	26	8
1:A:288:LEU:HA	1:A:291:LEU:HD12	0.83	1.50	29	7
1:A:287:LEU:CD1	1:A:300:ILE:HD13	0.83	2.03	3	11
1:A:339:LEU:HD11	1:A:358:TYR:OH	0.82	1.74	30	8
1:A:330:MET:SD	1:A:331:ASN:N	0.82	2.53	23	5
1:A:284:TRP:CB	1:A:348:MET:HE1	0.82	2.04	19	16
1:A:349:THR:HG22	1:A:359:LYS:O	0.82	1.74	10	4
1:A:281:ILE:HD11	1:A:286:PHE:HB2	0.81	1.51	18	5
1:A:347:ILE:HG22	1:A:348:MET:HE3	0.81	1.52	7	10
1:A:317:VAL:HG12	1:A:321:TRP:CZ3	0.81	2.11	16	21
1:A:300:ILE:HD11	1:A:358:TYR:OH	0.81	1.76	3	3
1:A:300:ILE:HD12	1:A:311:MET:HG3	0.81	1.53	7	6
1:A:290:LEU:HD13	1:A:299:CYS:SG	0.79	2.17	4	1
1:A:339:LEU:HD23	1:A:343:TYR:OH	0.78	1.77	10	3
1:A:351:VAL:HG13	1:A:357:ALA:CB	0.78	2.02	4	5
1:A:347:ILE:HG22	1:A:348:MET:HE2	0.78	1.54	25	6
1:A:291:LEU:HD11	1:A:300:ILE:CG1	0.78	2.08	28	4
1:A:330:MET:HE2	1:A:331:ASN:N	0.78	1.94	15	1
1:A:347:ILE:O	1:A:348:MET:SD	0.78	2.42	5	5
1:A:311:MET:HE3	1:A:358:TYR:CD2	0.78	2.14	7	5
1:A:348:MET:O	1:A:349:THR:HG23	0.77	1.79	16	2
1:A:281:ILE:HD12	1:A:286:PHE:HB3	0.77	1.54	20	4
1:A:330:MET:SD	1:A:330:MET:O	0.77	2.43	6	3
1:A:291:LEU:HD21	1:A:300:ILE:HG12	0.77	1.57	4	6
1:A:321:TRP:CZ2	1:A:335:LEU:HD11	0.77	2.15	11	3
1:A:291:LEU:HD23	1:A:301:THR:HA	0.76	1.54	11	5
1:A:281:ILE:HD11	1:A:286:PHE:HB3	0.76	1.56	29	4
1:A:330:MET:SD	1:A:330:MET:C	0.76	2.69	6	5
1:A:287:LEU:HD11	1:A:300:ILE:HD12	0.76	1.58	9	3
1:A:287:LEU:HB2	1:A:300:ILE:HG21	0.76	1.56	4	1
1:A:321:TRP:CB	1:A:330:MET:SD	0.76	2.74	2	3
1:A:311:MET:SD	1:A:358:TYR:CE1	0.75	2.79	15	6
1:A:311:MET:HE3	1:A:358:TYR:CE2	0.75	2.15	8	1
1:A:321:TRP:CD1	1:A:330:MET:SD	0.75	2.80	11	2
1:A:291:LEU:HD11	1:A:300:ILE:HG12	0.74	1.57	28	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:300:ILE:HD13	1:A:311:MET:HA	0.74	1.58	17	3
1:A:321:TRP:HB3	1:A:330:MET:SD	0.74	2.22	2	3
1:A:348:MET:SD	1:A:358:TYR:CZ	0.74	2.80	14	2
1:A:284:TRP:HA	1:A:287:LEU:HD23	0.74	1.59	15	1
1:A:335:LEU:N	1:A:335:LEU:HD12	0.73	1.98	3	13
1:A:301:THR:HG23	1:A:302:TRP:N	0.73	1.97	2	13
1:A:299:CYS:SG	1:A:300:ILE:HG22	0.73	2.24	3	3
1:A:299:CYS:SG	1:A:316:GLU:HG2	0.73	2.23	16	2
1:A:281:ILE:HD12	1:A:286:PHE:CB	0.73	2.14	20	8
1:A:321:TRP:HB3	1:A:330:MET:HE1	0.73	1.60	14	3
1:A:287:LEU:O	1:A:291:LEU:HD12	0.73	1.82	24	8
1:A:327:LYS:HB3	1:A:330:MET:SD	0.73	2.24	4	2
1:A:342:TYR:CG	1:A:348:MET:SD	0.73	2.81	11	4
1:A:282:GLN:O	1:A:283:LEU:HD12	0.73	1.83	27	3
1:A:287:LEU:C	1:A:287:LEU:HD12	0.73	2.09	11	1
1:A:342:TYR:HB3	1:A:348:MET:SD	0.72	2.24	6	5
1:A:299:CYS:SG	1:A:299:CYS:O	0.72	2.46	25	2
1:A:349:THR:HG22	1:A:359:LYS:C	0.72	2.09	14	2
1:A:283:LEU:HD23	1:A:342:TYR:CE2	0.71	2.20	19	1
1:A:300:ILE:HD13	1:A:300:ILE:O	0.71	1.85	22	1
1:A:351:VAL:CB	1:A:357:ALA:HB3	0.71	2.14	3	14
1:A:284:TRP:CE2	1:A:288:LEU:HD11	0.71	2.19	6	2
1:A:283:LEU:CD2	1:A:335:LEU:HD11	0.71	2.15	14	1
1:A:300:ILE:HD13	1:A:311:MET:HG2	0.71	1.63	1	2
1:A:321:TRP:CZ3	1:A:335:LEU:HD21	0.70	2.20	12	5
1:A:283:LEU:HD23	1:A:342:TYR:CZ	0.70	2.20	10	2
1:A:300:ILE:HD11	1:A:311:MET:HG3	0.70	1.63	15	3
1:A:299:CYS:SG	1:A:316:GLU:CD	0.70	2.74	2	1
1:A:339:LEU:HD21	1:A:358:TYR:CE2	0.70	2.20	4	3
1:A:351:VAL:CG2	1:A:357:ALA:HB3	0.70	2.17	12	2
1:A:330:MET:SD	1:A:334:LYS:HG3	0.70	2.26	13	2
1:A:281:ILE:HD12	1:A:281:ILE:C	0.70	2.12	1	6
1:A:299:CYS:SG	1:A:316:GLU:HB3	0.70	2.26	25	3
1:A:300:ILE:HD12	1:A:301:THR:H	0.70	1.46	17	2
1:A:305:THR:HG22	1:A:305:THR:O	0.70	1.84	14	9
1:A:321:TRP:CD2	1:A:335:LEU:HD21	0.69	2.21	13	3
1:A:291:LEU:HD23	1:A:302:TRP:HB3	0.69	1.62	17	1
1:A:309:PHE:CZ	1:A:360:PHE:CE2	0.68	2.81	3	1
1:A:311:MET:HE3	1:A:358:TYR:CZ	0.68	2.23	27	5
1:A:300:ILE:HD13	1:A:311:MET:CG	0.68	2.17	28	4
1:A:300:ILE:HD11	1:A:309:PHE:CE2	0.68	2.24	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:284:TRP:HA	1:A:287:LEU:HD21	0.68	1.65	4	1
1:A:287:LEU:HA	1:A:290:LEU:HD12	0.68	1.65	12	5
1:A:317:VAL:HG12	1:A:321:TRP:HZ3	0.68	1.49	1	28
1:A:284:TRP:CE3	1:A:348:MET:CE	0.68	2.77	28	29
1:A:284:TRP:CD2	1:A:348:MET:CE	0.68	2.77	29	22
1:A:342:TYR:CE2	1:A:347:ILE:HG21	0.68	2.24	1	1
1:A:281:ILE:HD11	1:A:286:PHE:CB	0.67	2.19	1	9
1:A:291:LEU:HD23	1:A:301:THR:CA	0.67	2.20	11	3
1:A:311:MET:SD	1:A:314:PRO:HG3	0.67	2.29	30	3
1:A:283:LEU:C	1:A:283:LEU:HD12	0.67	2.15	10	4
1:A:321:TRP:CH2	1:A:335:LEU:HD21	0.67	2.25	16	5
1:A:299:CYS:SG	1:A:316:GLU:CG	0.67	2.83	16	1
1:A:302:TRP:CE3	1:A:309:PHE:CD1	0.67	2.82	20	1
1:A:281:ILE:CD1	1:A:321:TRP:CH2	0.66	2.78	16	7
1:A:283:LEU:HD23	1:A:342:TYR:CE1	0.66	2.25	10	1
1:A:351:VAL:O	1:A:351:VAL:HG23	0.66	1.89	12	2
1:A:283:LEU:CD2	1:A:338:ALA:HB3	0.66	2.20	20	3
1:A:311:MET:SD	1:A:314:PRO:HB3	0.66	2.31	20	1
1:A:327:LYS:CB	1:A:330:MET:SD	0.66	2.83	4	1
1:A:311:MET:SD	1:A:358:TYR:CG	0.66	2.89	9	1
1:A:299:CYS:SG	1:A:316:GLU:CB	0.65	2.85	25	3
1:A:284:TRP:CZ2	1:A:288:LEU:HD11	0.65	2.26	27	3
1:A:342:TYR:CB	1:A:348:MET:SD	0.65	2.84	11	5
1:A:318:ALA:HB1	1:A:331:ASN:C	0.65	2.16	24	7
1:A:302:TRP:N	1:A:302:TRP:CD1	0.65	2.65	22	13
1:A:339:LEU:HD12	1:A:343:TYR:CZ	0.65	2.27	19	2
1:A:286:PHE:CE2	1:A:290:LEU:HD11	0.65	2.26	12	1
1:A:284:TRP:CG	1:A:342:TYR:HH	0.65	2.09	24	1
1:A:330:MET:SD	1:A:334:LYS:HB2	0.65	2.32	30	5
1:A:281:ILE:CD1	1:A:321:TRP:CZ2	0.65	2.80	26	9
1:A:291:LEU:HD11	1:A:300:ILE:CD1	0.65	2.22	24	2
1:A:339:LEU:HD12	1:A:343:TYR:OH	0.65	1.92	7	2
1:A:284:TRP:CZ2	1:A:347:ILE:CG2	0.64	2.80	2	6
1:A:351:VAL:HG22	1:A:353:GLY:H	0.64	1.50	22	7
1:A:351:VAL:HG12	1:A:353:GLY:H	0.64	1.52	21	10
1:A:332:TYR:CD2	1:A:335:LEU:CD1	0.64	2.80	19	6
1:A:332:TYR:CD2	1:A:335:LEU:HD11	0.64	2.26	19	5
1:A:290:LEU:CD1	1:A:299:CYS:SG	0.64	2.86	4	1
1:A:294:SER:O	1:A:295:ALA:HB3	0.64	1.92	27	1
1:A:300:ILE:HD13	1:A:300:ILE:C	0.64	2.17	19	4
1:A:299:CYS:O	1:A:300:ILE:HG22	0.64	1.93	25	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:299:CYS:SG	1:A:316:GLU:HB2	0.64	2.33	1	3
1:A:291:LEU:CB	1:A:302:TRP:CH2	0.64	2.81	26	4
1:A:330:MET:C	1:A:330:MET:SD	0.64	2.81	22	2
1:A:287:LEU:HD22	1:A:311:MET:HE2	0.63	1.70	12	6
1:A:321:TRP:CE2	1:A:335:LEU:CD2	0.63	2.81	8	5
1:A:349:THR:HG23	1:A:360:PHE:N	0.63	2.08	30	1
1:A:281:ILE:CD1	1:A:286:PHE:CG	0.63	2.80	22	1
1:A:300:ILE:HD13	1:A:311:MET:HG3	0.63	1.70	28	2
1:A:300:ILE:HD12	1:A:310:LYS:O	0.63	1.92	13	5
1:A:309:PHE:CB	1:A:358:TYR:CZ	0.63	2.81	29	6
1:A:348:MET:O	1:A:349:THR:HG22	0.63	1.93	30	3
1:A:332:TYR:HA	1:A:335:LEU:HD21	0.63	1.71	27	3
1:A:342:TYR:CD1	1:A:347:ILE:HG21	0.63	2.28	17	4
1:A:339:LEU:CD2	1:A:358:TYR:CZ	0.63	2.82	5	1
1:A:291:LEU:HD11	1:A:300:ILE:HD12	0.62	1.69	2	3
1:A:283:LEU:HD21	1:A:335:LEU:HA	0.62	1.71	27	2
1:A:291:LEU:HD21	1:A:300:ILE:CG1	0.62	2.24	10	2
1:A:283:LEU:HD21	1:A:335:LEU:CD1	0.62	2.21	14	1
1:A:330:MET:SD	1:A:330:MET:N	0.62	2.72	6	2
1:A:288:LEU:HA	1:A:291:LEU:HD21	0.62	1.70	12	1
1:A:283:LEU:HD21	1:A:335:LEU:CA	0.62	2.24	27	1
1:A:287:LEU:HD11	1:A:291:LEU:HD11	0.62	1.70	5	5
1:A:308:GLU:OE1	1:A:357:ALA:HB1	0.62	1.94	26	1
1:A:351:VAL:HG12	1:A:351:VAL:O	0.62	1.94	5	4
1:A:342:TYR:CD2	1:A:348:MET:HE3	0.62	2.28	1	1
1:A:281:ILE:HD12	1:A:321:TRP:CZ2	0.62	2.30	9	7
1:A:335:LEU:H	1:A:335:LEU:HD12	0.62	1.54	17	1
1:A:299:CYS:SG	1:A:316:GLU:OE1	0.61	2.57	2	1
1:A:291:LEU:CD1	1:A:302:TRP:CZ2	0.61	2.82	20	1
1:A:343:TYR:N	1:A:343:TYR:CD1	0.61	2.66	21	11
1:A:330:MET:SD	1:A:334:LYS:HE3	0.61	2.35	9	1
1:A:283:LEU:HD13	1:A:335:LEU:HB2	0.61	1.71	4	1
1:A:351:VAL:HG23	1:A:358:TYR:HA	0.61	1.72	17	1
1:A:297:ALA:CB	1:A:301:THR:HG21	0.61	2.26	21	3
1:A:287:LEU:HD21	1:A:311:MET:SD	0.61	2.35	22	1
1:A:348:MET:SD	1:A:360:PHE:CD1	0.61	2.94	3	1
1:A:287:LEU:HD21	1:A:300:ILE:CD1	0.61	2.26	9	5
1:A:291:LEU:CD1	1:A:309:PHE:CZ	0.61	2.83	20	1
1:A:297:ALA:HB1	1:A:301:THR:CG2	0.61	2.25	21	9
1:A:291:LEU:HD21	1:A:300:ILE:HG13	0.61	1.73	13	1
1:A:284:TRP:CE2	1:A:288:LEU:CD1	0.61	2.84	27	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:356:TYR:CD1	1:A:356:TYR:N	0.61	2.68	12	14
1:A:284:TRP:CD1	1:A:342:TYR:CZ	0.61	2.89	21	1
1:A:335:LEU:HD12	1:A:335:LEU:H	0.61	1.56	16	5
1:A:354:LYS:HB2	1:A:357:ALA:HB2	0.61	1.72	20	1
1:A:335:LEU:HD12	1:A:335:LEU:N	0.60	2.11	17	1
1:A:308:GLU:OE2	1:A:351:VAL:HG21	0.60	1.96	26	1
1:A:330:MET:SD	1:A:334:LYS:CG	0.60	2.89	13	1
1:A:281:ILE:HD12	1:A:282:GLN:H	0.60	1.54	11	4
1:A:354:LYS:O	1:A:355:ARG:CG	0.60	2.49	24	28
1:A:300:ILE:HD11	1:A:311:MET:HG2	0.60	1.72	15	2
1:A:304:GLY:O	1:A:305:THR:HG22	0.60	1.96	27	9
1:A:283:LEU:CD2	1:A:338:ALA:HB1	0.60	2.26	24	1
1:A:287:LEU:CD2	1:A:311:MET:HE2	0.60	2.27	7	5
1:A:332:TYR:CD1	1:A:332:TYR:C	0.59	2.80	19	6
1:A:332:TYR:CG	1:A:332:TYR:O	0.59	2.55	17	15
1:A:281:ILE:CD1	1:A:286:PHE:CB	0.59	2.80	13	14
1:A:332:TYR:CE2	1:A:336:SER:CB	0.59	2.86	18	1
1:A:347:ILE:C	1:A:348:MET:SD	0.59	2.86	3	1
1:A:338:ALA:HB1	1:A:342:TYR:CZ	0.59	2.31	30	2
1:A:359:LYS:CG	1:A:360:PHE:N	0.59	2.65	6	1
1:A:302:TRP:O	1:A:302:TRP:CE3	0.59	2.55	14	4
1:A:283:LEU:HD21	1:A:338:ALA:HB1	0.59	1.72	24	1
1:A:299:CYS:CB	1:A:316:GLU:CB	0.59	2.80	24	4
1:A:298:SER:C	1:A:299:CYS:SG	0.59	2.86	15	1
1:A:293:ASP:O	1:A:294:SER:C	0.59	2.45	22	26
1:A:360:PHE:CD2	1:A:360:PHE:O	0.59	2.56	13	3
1:A:302:TRP:CD2	1:A:302:TRP:O	0.59	2.55	15	1
1:A:311:MET:HE3	1:A:358:TYR:CE1	0.59	2.33	19	2
1:A:283:LEU:CD2	1:A:342:TYR:CE1	0.58	2.86	10	1
1:A:287:LEU:HD13	1:A:300:ILE:HD11	0.58	1.73	24	1
1:A:282:GLN:O	1:A:283:LEU:CB	0.58	2.52	11	8
1:A:287:LEU:HD12	1:A:287:LEU:C	0.58	2.23	26	4
1:A:287:LEU:HD13	1:A:300:ILE:CD1	0.58	2.28	24	1
1:A:354:LYS:O	1:A:355:ARG:CB	0.58	2.50	10	3
1:A:358:TYR:N	1:A:358:TYR:CD1	0.58	2.70	28	3
1:A:348:MET:C	1:A:349:THR:CG2	0.58	2.77	30	5
1:A:283:LEU:CD2	1:A:338:ALA:CB	0.58	2.81	24	2
1:A:299:CYS:SG	1:A:300:ILE:HG23	0.58	2.38	22	1
1:A:321:TRP:NE1	1:A:335:LEU:HD21	0.58	2.13	10	2
1:A:307:GLY:O	1:A:360:PHE:CE2	0.58	2.57	16	1
1:A:358:TYR:CD1	1:A:358:TYR:C	0.58	2.81	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:283:LEU:HD21	1:A:338:ALA:CB	0.58	2.29	24	1
1:A:338:ALA:HB1	1:A:342:TYR:OH	0.58	1.98	27	2
1:A:295:ALA:O	1:A:296:ASN:CB	0.58	2.52	17	25
1:A:335:LEU:CD1	1:A:335:LEU:N	0.58	2.67	2	1
1:A:332:TYR:HA	1:A:335:LEU:HD13	0.58	1.76	24	9
1:A:305:THR:HG21	1:A:308:GLU:HG2	0.58	1.75	19	5
1:A:291:LEU:O	1:A:302:TRP:CZ2	0.58	2.57	13	5
1:A:338:ALA:O	1:A:342:TYR:CD2	0.58	2.56	9	11
1:A:281:ILE:HD12	1:A:321:TRP:CH2	0.58	2.33	10	7
1:A:332:TYR:O	1:A:332:TYR:CD1	0.58	2.57	7	3
1:A:332:TYR:O	1:A:332:TYR:CD2	0.58	2.57	17	3
1:A:302:TRP:O	1:A:302:TRP:CD2	0.58	2.56	21	2
1:A:332:TYR:CD1	1:A:332:TYR:O	0.58	2.57	4	3
1:A:287:LEU:CD1	1:A:291:LEU:HD11	0.58	2.29	5	2
1:A:347:ILE:CG2	1:A:348:MET:HE2	0.58	2.26	25	1
1:A:321:TRP:HB3	1:A:330:MET:HE2	0.57	1.74	19	1
1:A:332:TYR:CD1	1:A:335:LEU:CB	0.57	2.87	13	6
1:A:360:PHE:O	1:A:360:PHE:CD1	0.57	2.56	23	9
1:A:283:LEU:O	1:A:284:TRP:C	0.57	2.46	14	9
1:A:314:PRO:CB	1:A:332:TYR:CE1	0.57	2.86	18	2
1:A:330:MET:HE1	1:A:334:LYS:HB2	0.57	1.75	7	1
1:A:285:GLN:HA	1:A:288:LEU:HD12	0.57	1.74	9	2
1:A:305:THR:O	1:A:305:THR:CG2	0.57	2.53	1	6
1:A:301:THR:CG2	1:A:302:TRP:N	0.57	2.67	2	9
1:A:291:LEU:HD23	1:A:302:TRP:CE3	0.57	2.34	3	2
1:A:332:TYR:O	1:A:332:TYR:CG	0.57	2.57	7	6
1:A:356:TYR:O	1:A:358:TYR:CD1	0.57	2.57	4	2
1:A:349:THR:CG2	1:A:361:ASP:N	0.57	2.68	6	2
1:A:330:MET:HE1	1:A:334:LYS:CB	0.57	2.29	11	1
1:A:282:GLN:OE1	1:A:286:PHE:CE1	0.57	2.57	17	1
1:A:312:THR:CG2	1:A:313:ASP:N	0.57	2.68	24	13
1:A:347:ILE:HG22	1:A:348:MET:CE	0.57	2.27	5	8
1:A:300:ILE:C	1:A:301:THR:HG22	0.57	2.24	4	3
1:A:351:VAL:CG1	1:A:357:ALA:CB	0.57	2.81	25	10
1:A:330:MET:HE1	1:A:334:LYS:HB3	0.57	1.76	11	1
1:A:287:LEU:HD11	1:A:300:ILE:CG1	0.57	2.26	1	4
1:A:335:LEU:N	1:A:335:LEU:CD1	0.57	2.68	30	12
1:A:330:MET:HE2	1:A:330:MET:C	0.57	2.25	15	1
1:A:284:TRP:CD1	1:A:342:TYR:OH	0.57	2.57	24	2
1:A:360:PHE:CG	1:A:360:PHE:O	0.57	2.57	27	2
1:A:291:LEU:HD23	1:A:300:ILE:HG12	0.57	1.76	22	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:291:LEU:HB3	1:A:302:TRP:CH2	0.56	2.34	26	11
1:A:309:PHE:HB3	1:A:358:TYR:CZ	0.56	2.36	1	4
1:A:354:LYS:O	1:A:355:ARG:HB2	0.56	2.00	1	3
1:A:351:VAL:O	1:A:352:HIS:CB	0.56	2.53	13	13
1:A:342:TYR:CD2	1:A:347:ILE:HG21	0.56	2.36	1	1
1:A:284:TRP:NE1	1:A:288:LEU:HD11	0.56	2.15	6	1
1:A:281:ILE:HD11	1:A:321:TRP:CZ2	0.56	2.36	15	3
1:A:345:LYS:CB	1:A:347:ILE:HG13	0.56	2.30	21	23
1:A:331:ASN:O	1:A:335:LEU:HD13	0.56	2.01	23	6
1:A:299:CYS:O	1:A:300:ILE:CB	0.56	2.53	25	3
1:A:305:THR:HG22	1:A:306:ASN:N	0.56	2.16	12	4
1:A:342:TYR:CD1	1:A:347:ILE:HB	0.56	2.36	13	2
1:A:297:ALA:HB1	1:A:301:THR:HG21	0.56	1.78	15	2
1:A:318:ALA:HB1	1:A:331:ASN:O	0.55	2.01	21	2
1:A:284:TRP:CZ2	1:A:347:ILE:HG23	0.55	2.36	22	4
1:A:312:THR:CG2	1:A:312:THR:O	0.55	2.54	16	1
1:A:327:LYS:O	1:A:330:MET:SD	0.55	2.64	14	3
1:A:347:ILE:C	1:A:348:MET:CG	0.55	2.79	20	2
1:A:342:TYR:CD1	1:A:347:ILE:CG2	0.55	2.90	13	1
1:A:332:TYR:CE2	1:A:336:SER:HB3	0.55	2.36	18	3
1:A:309:PHE:HB2	1:A:358:TYR:CE2	0.55	2.36	1	6
1:A:291:LEU:HD12	1:A:302:TRP:CH2	0.55	2.37	20	1
1:A:348:MET:O	1:A:349:THR:CG2	0.55	2.55	6	3
1:A:349:THR:CG2	1:A:359:LYS:C	0.55	2.80	21	2
1:A:284:TRP:CD2	1:A:348:MET:HE3	0.54	2.37	29	1
1:A:309:PHE:HB2	1:A:358:TYR:CZ	0.54	2.37	18	4
1:A:281:ILE:HG12	1:A:321:TRP:CZ3	0.54	2.38	14	2
1:A:321:TRP:CH2	1:A:335:LEU:CD2	0.54	2.90	17	2
1:A:284:TRP:HD1	1:A:342:TYR:HH	0.54	1.44	17	1
1:A:291:LEU:HD22	1:A:309:PHE:CE2	0.54	2.38	24	1
1:A:349:THR:CG2	1:A:361:ASP:CB	0.54	2.86	26	1
1:A:283:LEU:HD13	1:A:342:TYR:CE2	0.54	2.37	22	4
1:A:281:ILE:HD13	1:A:321:TRP:CZ3	0.54	2.36	17	1
1:A:283:LEU:HD21	1:A:338:ALA:HB3	0.54	1.80	20	1
1:A:301:THR:HG1	1:A:302:TRP:CD1	0.54	2.20	6	4
1:A:281:ILE:HD11	1:A:321:TRP:CH2	0.54	2.38	16	7
1:A:343:TYR:CE1	1:A:350:LYS:N	0.54	2.75	11	2
1:A:299:CYS:C	1:A:300:ILE:HG22	0.54	2.28	17	2
1:A:314:PRO:CB	1:A:332:TYR:CZ	0.54	2.90	25	1
1:A:294:SER:O	1:A:295:ALA:CB	0.54	2.55	27	1
1:A:284:TRP:CE3	1:A:348:MET:HE3	0.54	2.38	29	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:312:THR:HG22	1:A:313:ASP:OD1	0.54	2.02	6	1
1:A:351:VAL:CG2	1:A:351:VAL:O	0.54	2.56	12	2
1:A:283:LEU:O	1:A:285:GLN:N	0.54	2.40	14	8
1:A:284:TRP:CE2	1:A:347:ILE:CG2	0.54	2.91	22	4
1:A:321:TRP:CZ2	1:A:335:LEU:CD2	0.54	2.91	16	2
1:A:300:ILE:CD1	1:A:310:LYS:O	0.54	2.56	17	4
1:A:281:ILE:HG21	1:A:321:TRP:CD2	0.54	2.38	13	4
1:A:325:LYS:O	1:A:326:SER:CB	0.54	2.56	4	22
1:A:291:LEU:HD21	1:A:300:ILE:CD1	0.54	2.32	5	1
1:A:349:THR:CG2	1:A:359:LYS:O	0.54	2.55	10	2
1:A:291:LEU:HD21	1:A:300:ILE:HG23	0.54	1.78	25	1
1:A:284:TRP:HB3	1:A:348:MET:HE1	0.54	1.80	1	1
1:A:342:TYR:HD2	1:A:348:MET:SD	0.54	2.24	18	5
1:A:291:LEU:CD2	1:A:300:ILE:HG23	0.54	2.33	25	4
1:A:300:ILE:CD1	1:A:311:MET:CG	0.54	2.82	15	4
1:A:343:TYR:CE1	1:A:349:THR:C	0.54	2.86	11	3
1:A:290:LEU:O	1:A:300:ILE:HD11	0.54	2.03	22	1
1:A:299:CYS:C	1:A:300:ILE:CG2	0.54	2.81	22	1
1:A:309:PHE:CB	1:A:358:TYR:CE2	0.53	2.91	1	2
1:A:331:ASN:O	1:A:335:LEU:CD1	0.53	2.57	23	7
1:A:342:TYR:CE1	1:A:347:ILE:HG21	0.53	2.38	6	2
1:A:281:ILE:O	1:A:283:LEU:N	0.53	2.41	11	2
1:A:318:ALA:HB2	1:A:332:TYR:HA	0.53	1.79	18	1
1:A:300:ILE:HD11	1:A:309:PHE:HE2	0.53	1.63	20	1
1:A:330:MET:C	1:A:330:MET:HE3	0.53	2.28	22	1
1:A:282:GLN:O	1:A:283:LEU:CD1	0.53	2.56	27	1
1:A:349:THR:O	1:A:358:TYR:CB	0.53	2.56	2	5
1:A:287:LEU:O	1:A:291:LEU:CD1	0.53	2.56	24	8
1:A:304:GLY:O	1:A:305:THR:CG2	0.53	2.57	15	9
1:A:348:MET:SD	1:A:358:TYR:HE2	0.53	2.24	22	4
1:A:321:TRP:CE3	1:A:335:LEU:HD22	0.53	2.38	28	1
1:A:281:ILE:C	1:A:281:ILE:CD1	0.53	2.80	1	5
1:A:351:VAL:C	1:A:352:HIS:CG	0.53	2.85	13	1
1:A:337:ARG:CG	1:A:338:ALA:N	0.53	2.71	17	1
1:A:330:MET:SD	1:A:333:ASP:HB3	0.53	2.43	20	2
1:A:284:TRP:CG	1:A:348:MET:CE	0.53	2.91	16	12
1:A:332:TYR:CD1	1:A:335:LEU:HB3	0.53	2.39	1	5
1:A:318:ALA:O	1:A:321:TRP:HB2	0.53	2.02	15	30
1:A:313:ASP:N	1:A:314:PRO:CD	0.53	2.71	20	4
1:A:284:TRP:CB	1:A:342:TYR:CE2	0.53	2.92	6	1
1:A:348:MET:CA	1:A:359:LYS:O	0.53	2.57	9	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:291:LEU:HD23	1:A:300:ILE:HG23	0.53	1.80	9	2
1:A:283:LEU:CD2	1:A:342:TYR:CE2	0.53	2.89	19	1
1:A:348:MET:CB	1:A:359:LYS:O	0.53	2.56	28	1
1:A:351:VAL:CG1	1:A:357:ALA:O	0.53	2.57	2	3
1:A:282:GLN:O	1:A:283:LEU:CG	0.53	2.56	30	6
1:A:343:TYR:CE2	1:A:350:LYS:CD	0.53	2.91	7	1
1:A:349:THR:HG1	1:A:359:LYS:C	0.53	2.12	16	2
1:A:343:TYR:CE1	1:A:349:THR:O	0.53	2.62	20	1
1:A:281:ILE:C	1:A:281:ILE:HD13	0.53	2.29	25	7
1:A:308:GLU:CG	1:A:308:GLU:O	0.53	2.56	2	6
1:A:323:GLU:O	1:A:324:ARG:C	0.53	2.51	2	5
1:A:349:THR:N	1:A:359:LYS:O	0.53	2.41	6	15
1:A:339:LEU:CD2	1:A:358:TYR:OH	0.53	2.57	4	2
1:A:339:LEU:CD1	1:A:358:TYR:OH	0.53	2.57	12	5
1:A:321:TRP:CD1	1:A:330:MET:HE3	0.53	2.38	10	1
1:A:281:ILE:CD1	1:A:286:PHE:CD1	0.53	2.92	14	1
1:A:299:CYS:O	1:A:300:ILE:CG2	0.53	2.57	25	2
1:A:314:PRO:HB3	1:A:332:TYR:CE1	0.53	2.39	18	1
1:A:305:THR:CG2	1:A:306:ASN:N	0.53	2.72	12	3
1:A:349:THR:OG1	1:A:360:PHE:N	0.53	2.42	15	3
1:A:301:THR:OG1	1:A:302:TRP:N	0.52	2.42	17	16
1:A:343:TYR:CZ	1:A:350:LYS:HB2	0.52	2.39	1	2
1:A:305:THR:O	1:A:306:ASN:CB	0.52	2.56	7	4
1:A:360:PHE:O	1:A:360:PHE:CD2	0.52	2.62	27	2
1:A:298:SER:O	1:A:299:CYS:CB	0.52	2.58	8	3
1:A:287:LEU:HD21	1:A:300:ILE:HD11	0.52	1.79	9	1
1:A:281:ILE:O	1:A:286:PHE:CB	0.52	2.57	14	1
1:A:332:TYR:CE1	1:A:335:LEU:HB2	0.52	2.39	17	1
1:A:320:ARG:O	1:A:324:ARG:CG	0.52	2.57	27	2
1:A:281:ILE:CD1	1:A:286:PHE:HB3	0.52	2.34	6	7
1:A:281:ILE:HD12	1:A:286:PHE:HB2	0.52	1.81	6	2
1:A:281:ILE:O	1:A:281:ILE:HD13	0.52	2.03	12	2
1:A:309:PHE:CD1	1:A:309:PHE:N	0.52	2.76	9	4
1:A:349:THR:HG23	1:A:361:ASP:OD1	0.52	2.03	8	1
1:A:351:VAL:CG2	1:A:357:ALA:O	0.52	2.57	24	6
1:A:291:LEU:HD12	1:A:291:LEU:H	0.52	1.64	23	4
1:A:323:GLU:OE1	1:A:324:ARG:N	0.52	2.43	16	1
1:A:339:LEU:CD2	1:A:343:TYR:OH	0.52	2.58	17	1
1:A:314:PRO:HB2	1:A:332:TYR:CE2	0.52	2.40	28	1
1:A:314:PRO:HB2	1:A:332:TYR:CE1	0.52	2.39	14	7
1:A:311:MET:CE	1:A:358:TYR:CE2	0.52	2.92	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:281:ILE:HG13	1:A:321:TRP:CH2	0.52	2.40	15	1
1:A:291:LEU:HD13	1:A:309:PHE:CE1	0.52	2.39	20	1
1:A:332:TYR:CD2	1:A:335:LEU:HD12	0.52	2.39	4	2
1:A:291:LEU:HB3	1:A:302:TRP:CZ3	0.52	2.39	25	4
1:A:339:LEU:CG	1:A:358:TYR:OH	0.52	2.58	9	2
1:A:293:ASP:N	1:A:293:ASP:OD1	0.52	2.43	23	3
1:A:360:PHE:N	1:A:360:PHE:CD1	0.52	2.77	19	1
1:A:291:LEU:CD1	1:A:300:ILE:CG1	0.52	2.84	28	1
1:A:349:THR:OG1	1:A:361:ASP:N	0.52	2.42	22	2
1:A:294:SER:O	1:A:295:ALA:C	0.51	2.53	8	29
1:A:287:LEU:CB	1:A:300:ILE:HG21	0.51	2.33	4	1
1:A:283:LEU:CB	1:A:342:TYR:OH	0.51	2.57	28	2
1:A:343:TYR:CD1	1:A:349:THR:CA	0.51	2.93	24	1
1:A:360:PHE:O	1:A:361:ASP:C	0.51	2.54	28	14
1:A:300:ILE:C	1:A:300:ILE:CD1	0.51	2.83	22	4
1:A:339:LEU:HD22	1:A:343:TYR:CZ	0.51	2.40	29	3
1:A:339:LEU:HD23	1:A:358:TYR:CZ	0.51	2.40	5	1
1:A:343:TYR:CZ	1:A:349:THR:HA	0.51	2.40	6	1
1:A:330:MET:CE	1:A:330:MET:C	0.51	2.83	12	1
1:A:321:TRP:O	1:A:322:GLY:C	0.51	2.54	16	21
1:A:345:LYS:HB3	1:A:347:ILE:CG1	0.51	2.35	1	19
1:A:352:HIS:O	1:A:353:GLY:C	0.51	2.54	27	27
1:A:330:MET:CE	1:A:334:LYS:CB	0.51	2.89	11	2
1:A:305:THR:HG21	1:A:308:GLU:CG	0.51	2.35	10	2
1:A:330:MET:O	1:A:331:ASN:ND2	0.51	2.43	15	2
1:A:330:MET:HE1	1:A:331:ASN:O	0.51	2.05	23	2
1:A:332:TYR:CE1	1:A:335:LEU:HB3	0.51	2.40	11	6
1:A:335:LEU:O	1:A:336:SER:C	0.51	2.53	18	17
1:A:312:THR:C	1:A:314:PRO:CD	0.51	2.84	20	3
1:A:283:LEU:HD22	1:A:338:ALA:HB3	0.51	1.82	27	4
1:A:346:ASN:N	1:A:346:ASN:OD1	0.51	2.43	15	2
1:A:282:GLN:O	1:A:283:LEU:C	0.51	2.54	13	6
1:A:348:MET:C	1:A:349:THR:HG22	0.51	2.29	30	2
1:A:284:TRP:NE1	1:A:288:LEU:CD1	0.51	2.74	27	2
1:A:283:LEU:HD11	1:A:338:ALA:CB	0.51	2.35	25	2
1:A:291:LEU:HD13	1:A:302:TRP:CZ2	0.51	2.41	20	1
1:A:341:TYR:O	1:A:345:LYS:N	0.51	2.43	25	3
1:A:349:THR:HG23	1:A:359:LYS:C	0.51	2.31	30	1
1:A:299:CYS:HB3	1:A:316:GLU:CB	0.51	2.36	19	7
1:A:321:TRP:CE2	1:A:335:LEU:HD11	0.51	2.41	16	8
1:A:299:CYS:CB	1:A:316:GLU:HB3	0.51	2.35	19	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:342:TYR:CE2	1:A:348:MET:HE2	0.51	2.41	24	1
1:A:291:LEU:HB3	1:A:302:TRP:CZ2	0.51	2.41	10	10
1:A:298:SER:O	1:A:299:CYS:SG	0.51	2.69	16	1
1:A:351:VAL:HG12	1:A:353:GLY:N	0.50	2.21	3	10
1:A:311:MET:SD	1:A:358:TYR:CE2	0.50	3.04	7	2
1:A:359:LYS:HG2	1:A:360:PHE:N	0.50	2.21	6	2
1:A:342:TYR:CD1	1:A:347:ILE:CB	0.50	2.93	13	1
1:A:287:LEU:CD1	1:A:300:ILE:HG12	0.50	2.36	17	1
1:A:293:ASP:O	1:A:293:ASP:CG	0.50	2.54	17	2
1:A:287:LEU:O	1:A:287:LEU:CD1	0.50	2.57	25	2
1:A:344:ASP:N	1:A:344:ASP:OD1	0.50	2.45	22	3
1:A:304:GLY:C	1:A:305:THR:HG22	0.50	2.31	29	9
1:A:330:MET:CE	1:A:334:LYS:HB2	0.50	2.36	9	4
1:A:281:ILE:CD1	1:A:286:PHE:HB2	0.50	2.36	20	5
1:A:300:ILE:O	1:A:300:ILE:HG23	0.50	2.06	15	1
1:A:296:ASN:O	1:A:297:ALA:O	0.50	2.30	27	30
1:A:332:TYR:CD1	1:A:335:LEU:HB2	0.50	2.41	18	8
1:A:348:MET:C	1:A:349:THR:HG23	0.50	2.31	6	2
1:A:314:PRO:HB2	1:A:332:TYR:CD1	0.50	2.42	25	2
1:A:343:TYR:CD1	1:A:349:THR:HA	0.50	2.42	9	5
1:A:339:LEU:O	1:A:343:TYR:CD1	0.50	2.64	10	1
1:A:299:CYS:HB2	1:A:316:GLU:CB	0.50	2.36	22	3
1:A:307:GLY:O	1:A:308:GLU:C	0.50	2.54	11	3
1:A:349:THR:OG1	1:A:359:LYS:CB	0.50	2.59	20	2
1:A:339:LEU:HD23	1:A:343:TYR:CZ	0.50	2.40	17	1
1:A:345:LYS:CG	1:A:347:ILE:HG13	0.50	2.37	16	6
1:A:343:TYR:CD1	1:A:343:TYR:N	0.50	2.78	9	3
1:A:283:LEU:HD13	1:A:342:TYR:CZ	0.50	2.42	22	2
1:A:290:LEU:O	1:A:294:SER:N	0.50	2.45	4	10
1:A:330:MET:C	1:A:330:MET:CE	0.50	2.85	15	3
1:A:346:ASN:ND2	1:A:361:ASP:O	0.50	2.44	10	1
1:A:350:LYS:C	1:A:351:VAL:CG1	0.50	2.84	1	1
1:A:302:TRP:O	1:A:303:GLU:C	0.50	2.54	17	3
1:A:311:MET:SD	1:A:358:TYR:HE2	0.50	2.30	7	2
1:A:296:ASN:O	1:A:297:ALA:C	0.50	2.54	27	1
1:A:284:TRP:HB2	1:A:348:MET:HE1	0.50	1.83	20	3
1:A:338:ALA:O	1:A:342:TYR:CG	0.50	2.65	30	2
1:A:343:TYR:CE2	1:A:350:LYS:HD3	0.50	2.41	7	2
1:A:299:CYS:CB	1:A:316:GLU:HB2	0.50	2.37	24	2
1:A:331:ASN:N	1:A:331:ASN:OD1	0.50	2.44	18	2
1:A:291:LEU:CD1	1:A:302:TRP:CH2	0.50	2.95	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:290:LEU:C	1:A:300:ILE:HD11	0.50	2.30	22	1
1:A:345:LYS:HB3	1:A:347:ILE:HG13	0.50	1.83	11	25
1:A:354:LYS:C	1:A:355:ARG:HG3	0.50	2.32	1	3
1:A:348:MET:C	1:A:359:LYS:O	0.50	2.55	10	12
1:A:307:GLY:C	1:A:308:GLU:CG	0.50	2.85	11	1
1:A:287:LEU:CD2	1:A:311:MET:SD	0.50	2.99	22	1
1:A:281:ILE:HG13	1:A:286:PHE:CG	0.50	2.42	24	1
1:A:312:THR:HA	1:A:356:TYR:CD2	0.49	2.42	1	2
1:A:312:THR:C	1:A:314:PRO:HD3	0.49	2.32	20	22
1:A:352:HIS:C	1:A:354:LYS:N	0.49	2.69	7	27
1:A:304:GLY:O	1:A:305:THR:C	0.49	2.55	21	12
1:A:338:ALA:O	1:A:342:TYR:CD1	0.49	2.65	18	4
1:A:356:TYR:O	1:A:357:ALA:C	0.49	2.54	21	17
1:A:291:LEU:HD11	1:A:309:PHE:CZ	0.49	2.41	20	1
1:A:283:LEU:HD12	1:A:342:TYR:OH	0.49	2.06	25	1
1:A:303:GLU:OE2	1:A:310:LYS:CE	0.49	2.60	8	1
1:A:291:LEU:HB2	1:A:302:TRP:CH2	0.49	2.42	26	1
1:A:308:GLU:CD	1:A:351:VAL:HG21	0.49	2.31	26	1
1:A:339:LEU:HD21	1:A:358:TYR:OH	0.49	2.07	19	3
1:A:330:MET:HE3	1:A:330:MET:O	0.49	2.07	22	1
1:A:281:ILE:HG12	1:A:286:PHE:CB	0.49	2.37	26	4
1:A:332:TYR:CE1	1:A:336:SER:HB2	0.49	2.43	7	3
1:A:297:ALA:CB	1:A:301:THR:CG2	0.49	2.90	21	3
1:A:360:PHE:C	1:A:361:ASP:CG	0.49	2.79	20	1
1:A:283:LEU:O	1:A:287:LEU:HB3	0.49	2.07	28	7
1:A:330:MET:HE3	1:A:331:ASN:N	0.49	2.23	16	2
1:A:281:ILE:HD12	1:A:286:PHE:CD1	0.49	2.43	23	2
1:A:291:LEU:CD2	1:A:309:PHE:CD2	0.49	2.95	15	1
1:A:349:THR:CG2	1:A:360:PHE:C	0.49	2.86	30	1
1:A:281:ILE:HA	1:A:286:PHE:CD2	0.49	2.43	17	4
1:A:287:LEU:HD12	1:A:288:LEU:N	0.49	2.23	11	1
1:A:281:ILE:HD12	1:A:286:PHE:CG	0.49	2.42	14	1
1:A:330:MET:C	1:A:331:ASN:ND2	0.49	2.71	15	1
1:A:321:TRP:NE1	1:A:335:LEU:HD11	0.49	2.22	16	1
1:A:342:TYR:CD1	1:A:345:LYS:HE2	0.49	2.43	22	1
1:A:349:THR:HG22	1:A:350:LYS:H	0.49	1.67	25	1
1:A:300:ILE:CD1	1:A:311:MET:HG3	0.49	2.37	11	7
1:A:321:TRP:O	1:A:325:LYS:CB	0.49	2.60	10	1
1:A:305:THR:CG2	1:A:308:GLU:HG3	0.49	2.38	10	1
1:A:351:VAL:HG12	1:A:357:ALA:HB3	0.49	1.80	22	2
1:A:286:PHE:CD1	1:A:320:ARG:HG3	0.49	2.42	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:342:TYR:O	1:A:343:TYR:C	0.49	2.56	13	3
1:A:311:MET:SD	1:A:358:TYR:CD2	0.49	3.06	9	1
1:A:281:ILE:HD11	1:A:286:PHE:CG	0.49	2.42	11	1
1:A:339:LEU:HA	1:A:342:TYR:CD2	0.48	2.42	27	3
1:A:291:LEU:HD13	1:A:309:PHE:CZ	0.48	2.43	20	1
1:A:319:ARG:O	1:A:320:ARG:C	0.48	2.56	7	13
1:A:283:LEU:O	1:A:287:LEU:CB	0.48	2.61	27	4
1:A:282:GLN:HB3	1:A:285:GLN:CB	0.48	2.38	25	4
1:A:349:THR:HG23	1:A:359:LYS:HB3	0.48	1.84	21	2
1:A:287:LEU:O	1:A:291:LEU:HD13	0.48	2.08	15	1
1:A:327:LYS:O	1:A:330:MET:CG	0.48	2.61	19	1
1:A:283:LEU:CD1	1:A:338:ALA:CB	0.48	2.91	20	1
1:A:297:ALA:HB1	1:A:301:THR:HB	0.48	1.85	19	5
1:A:286:PHE:CE2	1:A:320:ARG:HB3	0.48	2.43	4	1
1:A:281:ILE:HA	1:A:286:PHE:CE2	0.48	2.43	10	1
1:A:287:LEU:HD21	1:A:358:TYR:OH	0.48	2.07	17	1
1:A:281:ILE:HG13	1:A:286:PHE:CB	0.48	2.39	24	2
1:A:294:SER:OG	1:A:295:ALA:N	0.48	2.46	27	1
1:A:348:MET:C	1:A:349:THR:OG1	0.48	2.55	9	4
1:A:297:ALA:CB	1:A:301:THR:HB	0.48	2.38	19	6
1:A:349:THR:OG1	1:A:360:PHE:CA	0.48	2.60	27	3
1:A:301:THR:O	1:A:310:LYS:O	0.48	2.32	15	3
1:A:321:TRP:CZ2	1:A:335:LEU:HB3	0.48	2.43	4	1
1:A:351:VAL:HG23	1:A:357:ALA:O	0.48	2.09	26	4
1:A:328:PRO:O	1:A:329:ASN:C	0.48	2.57	24	3
1:A:343:TYR:CE2	1:A:350:LYS:HB3	0.48	2.44	26	2
1:A:321:TRP:C	1:A:323:GLU:N	0.48	2.72	30	21
1:A:315:ASP:O	1:A:316:GLU:C	0.48	2.57	29	3
1:A:282:GLN:HB2	1:A:286:PHE:CD1	0.48	2.44	6	3
1:A:299:CYS:CB	1:A:313:ASP:O	0.48	2.62	11	1
1:A:330:MET:C	1:A:331:ASN:CG	0.48	2.81	17	1
1:A:308:GLU:CD	1:A:357:ALA:HB1	0.48	2.34	18	1
1:A:340:ARG:HA	1:A:343:TYR:CD2	0.48	2.44	27	11
1:A:308:GLU:O	1:A:309:PHE:O	0.48	2.32	6	11
1:A:281:ILE:HD11	1:A:283:LEU:CA	0.48	2.39	10	2
1:A:282:GLN:CB	1:A:285:GLN:HB3	0.48	2.39	12	3
1:A:339:LEU:HD12	1:A:343:TYR:CE1	0.48	2.44	19	1
1:A:350:LYS:C	1:A:351:VAL:HG13	0.48	2.34	1	1
1:A:321:TRP:CG	1:A:330:MET:SD	0.48	3.07	2	2
1:A:352:HIS:HA	1:A:355:ARG:O	0.48	2.09	22	19
1:A:281:ILE:O	1:A:282:GLN:C	0.48	2.57	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:351:VAL:O	1:A:352:HIS:CG	0.48	2.67	13	1
1:A:291:LEU:HD12	1:A:291:LEU:N	0.48	2.24	7	2
1:A:334:LYS:O	1:A:335:LEU:C	0.48	2.56	27	6
1:A:343:TYR:CE2	1:A:350:LYS:HG2	0.48	2.44	14	2
1:A:283:LEU:HD13	1:A:338:ALA:HB1	0.48	1.85	20	1
1:A:283:LEU:HA	1:A:321:TRP:CH2	0.48	2.43	4	1
1:A:349:THR:CG2	1:A:361:ASP:HA	0.48	2.39	4	2
1:A:293:ASP:O	1:A:295:ALA:N	0.48	2.47	22	4
1:A:295:ALA:C	1:A:296:ASN:CG	0.48	2.81	23	3
1:A:360:PHE:C	1:A:361:ASP:OD1	0.48	2.57	20	1
1:A:312:THR:HA	1:A:356:TYR:CE2	0.47	2.43	1	1
1:A:311:MET:HB2	1:A:358:TYR:CD2	0.47	2.44	5	1
1:A:305:THR:O	1:A:306:ASN:CG	0.47	2.57	14	2
1:A:308:GLU:O	1:A:309:PHE:C	0.47	2.57	24	7
1:A:321:TRP:HD1	1:A:330:MET:SD	0.47	2.27	11	1
1:A:281:ILE:CG1	1:A:286:PHE:CG	0.47	2.97	24	1
1:A:354:LYS:O	1:A:355:ARG:HG3	0.47	2.10	3	28
1:A:314:PRO:HB3	1:A:332:TYR:CE2	0.47	2.44	4	2
1:A:305:THR:O	1:A:305:THR:HG23	0.47	2.08	9	2
1:A:360:PHE:CD1	1:A:360:PHE:N	0.47	2.82	25	4
1:A:287:LEU:CG	1:A:300:ILE:HD13	0.47	2.39	9	2
1:A:300:ILE:HD12	1:A:300:ILE:C	0.47	2.33	17	1
1:A:337:ARG:HG3	1:A:338:ALA:N	0.47	2.23	17	1
1:A:306:ASN:O	1:A:307:GLY:C	0.47	2.57	25	2
1:A:291:LEU:CD1	1:A:300:ILE:HG13	0.47	2.40	28	1
1:A:349:THR:HG21	1:A:361:ASP:HA	0.47	1.86	4	1
1:A:339:LEU:O	1:A:340:ARG:C	0.47	2.57	25	5
1:A:349:THR:OG1	1:A:359:LYS:O	0.47	2.31	16	2
1:A:324:ARG:O	1:A:325:LYS:C	0.47	2.57	30	4
1:A:281:ILE:HA	1:A:286:PHE:CZ	0.47	2.44	10	1
1:A:281:ILE:CG1	1:A:286:PHE:HB2	0.47	2.39	24	2
1:A:300:ILE:HD11	1:A:311:MET:SD	0.47	2.49	16	1
1:A:309:PHE:N	1:A:309:PHE:CD1	0.47	2.82	17	1
1:A:300:ILE:HG12	1:A:301:THR:N	0.47	2.25	26	2
1:A:281:ILE:HG12	1:A:321:TRP:CZ2	0.47	2.44	30	2
1:A:342:TYR:HB3	1:A:348:MET:CG	0.47	2.40	25	5
1:A:288:LEU:O	1:A:289:GLU:C	0.47	2.57	7	9
1:A:282:GLN:CB	1:A:285:GLN:OE1	0.47	2.62	4	1
1:A:349:THR:HG23	1:A:361:ASP:N	0.47	2.24	6	2
1:A:295:ALA:C	1:A:296:ASN:OD1	0.47	2.57	9	1
1:A:287:LEU:C	1:A:287:LEU:CD1	0.47	2.81	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:343:TYR:CE2	1:A:350:LYS:HB2	0.47	2.44	29	2
1:A:321:TRP:O	1:A:323:GLU:N	0.47	2.48	13	16
1:A:287:LEU:CD1	1:A:300:ILE:CD1	0.47	2.82	9	1
1:A:348:MET:HA	1:A:360:PHE:HA	0.47	1.87	4	7
1:A:312:THR:O	1:A:314:PRO:HD3	0.47	2.10	12	9
1:A:348:MET:HA	1:A:359:LYS:O	0.47	2.10	16	21
1:A:351:VAL:CG1	1:A:357:ALA:C	0.47	2.87	2	1
1:A:341:TYR:O	1:A:342:TYR:C	0.47	2.57	25	2
1:A:282:GLN:HB2	1:A:286:PHE:CG	0.47	2.44	6	1
1:A:348:MET:O	1:A:349:THR:HB	0.47	2.09	10	2
1:A:307:GLY:C	1:A:308:GLU:HG2	0.47	2.35	11	2
1:A:284:TRP:C	1:A:284:TRP:CD1	0.47	2.93	14	1
1:A:314:PRO:HB3	1:A:332:TYR:CZ	0.47	2.44	25	2
1:A:349:THR:CG2	1:A:361:ASP:CA	0.47	2.92	26	1
1:A:351:VAL:O	1:A:355:ARG:O	0.47	2.32	12	5
1:A:300:ILE:CG1	1:A:311:MET:HG3	0.47	2.40	2	1
1:A:312:THR:O	1:A:314:PRO:CD	0.47	2.63	9	10
1:A:313:ASP:N	1:A:314:PRO:HD3	0.47	2.25	18	7
1:A:342:TYR:CD2	1:A:348:MET:HG2	0.47	2.44	3	1
1:A:349:THR:OG1	1:A:359:LYS:C	0.47	2.57	7	2
1:A:307:GLY:O	1:A:308:GLU:CG	0.47	2.62	11	1
1:A:307:GLY:O	1:A:308:GLU:O	0.47	2.33	11	1
1:A:321:TRP:CE3	1:A:335:LEU:HD21	0.47	2.45	13	1
1:A:346:ASN:CG	1:A:361:ASP:OD2	0.47	2.58	24	1
1:A:286:PHE:CE1	1:A:324:ARG:NH2	0.47	2.83	26	1
1:A:311:MET:CB	1:A:356:TYR:HB2	0.47	2.40	15	8
1:A:318:ALA:HB2	1:A:332:TYR:CA	0.47	2.39	18	3
1:A:343:TYR:CZ	1:A:350:LYS:HB3	0.47	2.45	14	1
1:A:351:VAL:HG13	1:A:351:VAL:O	0.47	2.10	20	1
1:A:298:SER:O	1:A:299:CYS:C	0.47	2.57	27	1
1:A:309:PHE:N	1:A:358:TYR:O	0.47	2.47	19	10
1:A:340:ARG:HG3	1:A:341:TYR:N	0.47	2.25	26	1
1:A:342:TYR:CD2	1:A:347:ILE:CG2	0.46	2.98	1	1
1:A:312:THR:HG23	1:A:313:ASP:N	0.46	2.24	11	4
1:A:283:LEU:HD12	1:A:283:LEU:O	0.46	2.09	4	3
1:A:282:GLN:OE1	1:A:285:GLN:CB	0.46	2.63	5	1
1:A:281:ILE:HB	1:A:286:PHE:CD2	0.46	2.45	15	1
1:A:313:ASP:OD1	1:A:315:ASP:CG	0.46	2.58	19	1
1:A:299:CYS:O	1:A:313:ASP:OD1	0.46	2.32	4	1
1:A:318:ALA:HB1	1:A:332:TYR:N	0.46	2.24	5	5
1:A:332:TYR:O	1:A:333:ASP:C	0.46	2.58	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:313:ASP:OD2	1:A:316:GLU:OE1	0.46	2.34	8	1
1:A:304:GLY:O	1:A:308:GLU:OE2	0.46	2.34	22	2
1:A:300:ILE:CD1	1:A:311:MET:HG2	0.46	2.39	25	3
1:A:284:TRP:CZ3	1:A:348:MET:HE2	0.46	2.45	23	1
1:A:317:VAL:O	1:A:320:ARG:N	0.46	2.48	5	4
1:A:284:TRP:CD1	1:A:284:TRP:C	0.46	2.92	27	3
1:A:305:THR:CG2	1:A:308:GLU:HG2	0.46	2.40	12	3
1:A:343:TYR:CD1	1:A:350:LYS:N	0.46	2.82	17	1
1:A:291:LEU:HD12	1:A:302:TRP:CZ2	0.46	2.45	20	1
1:A:286:PHE:CD1	1:A:286:PHE:C	0.46	2.94	25	1
1:A:297:ALA:CB	1:A:301:THR:CB	0.46	2.94	19	2
1:A:300:ILE:O	1:A:300:ILE:CG2	0.46	2.64	15	2
1:A:314:PRO:HD3	1:A:356:TYR:CE2	0.46	2.45	23	1
1:A:314:PRO:O	1:A:315:ASP:C	0.46	2.57	29	4
1:A:291:LEU:CD2	1:A:301:THR:HA	0.46	2.41	25	2
1:A:303:GLU:OE1	1:A:310:LYS:NZ	0.46	2.45	29	1
1:A:302:TRP:O	1:A:304:GLY:N	0.46	2.49	4	1
1:A:284:TRP:HB2	1:A:342:TYR:CE2	0.46	2.46	6	1
1:A:349:THR:OG1	1:A:359:LYS:CG	0.46	2.64	6	2
1:A:345:LYS:HE2	1:A:347:ILE:CD1	0.46	2.41	23	3
1:A:298:SER:O	1:A:298:SER:OG	0.46	2.33	20	2
1:A:299:CYS:SG	1:A:313:ASP:O	0.46	2.71	1	1
1:A:317:VAL:O	1:A:318:ALA:C	0.46	2.59	17	11
1:A:324:ARG:O	1:A:325:LYS:O	0.46	2.34	17	2
1:A:360:PHE:O	1:A:361:ASP:O	0.46	2.34	15	4
1:A:283:LEU:HG	1:A:284:TRP:N	0.46	2.26	24	4
1:A:308:GLU:OE1	1:A:351:VAL:HG21	0.46	2.10	28	1
1:A:329:ASN:O	1:A:330:MET:O	0.46	2.33	7	1
1:A:345:LYS:HG2	1:A:347:ILE:CG1	0.46	2.41	11	2
1:A:352:HIS:O	1:A:352:HIS:CG	0.46	2.69	14	1
1:A:313:ASP:O	1:A:313:ASP:CG	0.46	2.58	27	2
1:A:344:ASP:OD1	1:A:344:ASP:C	0.46	2.59	28	1
1:A:302:TRP:CD1	1:A:302:TRP:H	0.46	2.29	20	18
1:A:308:GLU:CB	1:A:359:LYS:HB3	0.46	2.41	2	2
1:A:317:VAL:O	1:A:321:TRP:CE3	0.46	2.69	25	4
1:A:282:GLN:O	1:A:283:LEU:HB2	0.46	2.11	11	2
1:A:291:LEU:CD2	1:A:300:ILE:HG12	0.46	2.40	22	2
1:A:283:LEU:HD13	1:A:335:LEU:CB	0.46	2.41	19	1
1:A:351:VAL:O	1:A:352:HIS:HB3	0.46	2.11	21	4
1:A:348:MET:SD	1:A:358:TYR:OH	0.46	2.70	22	1
1:A:305:THR:O	1:A:306:ASN:C	0.46	2.57	24	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:342:TYR:CE1	1:A:347:ILE:HD12	0.45	2.45	2	1
1:A:307:GLY:O	1:A:308:GLU:HG3	0.45	2.11	11	1
1:A:308:GLU:CB	1:A:359:LYS:HD3	0.45	2.41	12	1
1:A:303:GLU:O	1:A:308:GLU:O	0.45	2.35	21	2
1:A:349:THR:HB	1:A:359:LYS:CD	0.45	2.40	19	1
1:A:349:THR:O	1:A:358:TYR:HB2	0.45	2.11	1	4
1:A:324:ARG:O	1:A:326:SER:OG	0.45	2.33	3	1
1:A:283:LEU:C	1:A:283:LEU:CD1	0.45	2.81	24	3
1:A:314:PRO:CB	1:A:332:TYR:CD2	0.45	2.99	4	1
1:A:287:LEU:HD21	1:A:300:ILE:HD13	0.45	1.88	8	1
1:A:311:MET:CB	1:A:356:TYR:O	0.45	2.65	10	1
1:A:281:ILE:O	1:A:286:PHE:HB3	0.45	2.10	14	1
1:A:325:LYS:C	1:A:326:SER:OG	0.45	2.59	14	1
1:A:332:TYR:CD2	1:A:332:TYR:O	0.45	2.69	30	1
1:A:308:GLU:HA	1:A:359:LYS:CG	0.45	2.41	3	1
1:A:291:LEU:CB	1:A:302:TRP:CZ3	0.45	2.99	5	2
1:A:311:MET:HE1	1:A:358:TYR:CZ	0.45	2.47	9	1
1:A:281:ILE:HG12	1:A:283:LEU:N	0.45	2.27	15	2
1:A:332:TYR:CE2	1:A:336:SER:HB2	0.45	2.47	13	1
1:A:287:LEU:HD12	1:A:300:ILE:HG21	0.45	1.86	1	2
1:A:295:ALA:O	1:A:296:ASN:HB2	0.45	2.11	6	11
1:A:325:LYS:O	1:A:326:SER:HB2	0.45	2.10	20	3
1:A:356:TYR:HB3	1:A:358:TYR:CZ	0.45	2.47	24	1
1:A:318:ALA:CB	1:A:332:TYR:HB2	0.45	2.41	26	8
1:A:348:MET:O	1:A:349:THR:OG1	0.45	2.31	22	2
1:A:309:PHE:CE1	1:A:360:PHE:CE2	0.45	3.04	3	1
1:A:348:MET:O	1:A:349:THR:CB	0.45	2.64	10	1
1:A:284:TRP:HA	1:A:287:LEU:CD2	0.45	2.42	11	3
1:A:349:THR:OG1	1:A:359:LYS:HB2	0.45	2.11	20	1
1:A:309:PHE:CD2	1:A:358:TYR:O	0.45	2.70	23	1
1:A:349:THR:HG22	1:A:361:ASP:N	0.45	2.27	30	1
1:A:321:TRP:O	1:A:324:ARG:N	0.45	2.50	30	4
1:A:327:LYS:CE	1:A:330:MET:SD	0.45	3.05	3	1
1:A:289:GLU:OE2	1:A:293:ASP:OD2	0.45	2.35	7	1
1:A:286:PHE:O	1:A:287:LEU:C	0.45	2.58	11	2
1:A:312:THR:O	1:A:312:THR:HG22	0.45	2.12	16	1
1:A:302:TRP:H	1:A:302:TRP:CD1	0.45	2.29	27	2
1:A:354:LYS:O	1:A:355:ARG:HG2	0.45	2.12	12	5
1:A:313:ASP:OD1	1:A:315:ASP:OD2	0.45	2.35	19	1
1:A:304:GLY:O	1:A:305:THR:O	0.45	2.35	4	3
1:A:311:MET:CE	1:A:358:TYR:CD2	0.45	2.96	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:304:GLY:O	1:A:308:GLU:CG	0.45	2.65	22	1
1:A:292:SER:OG	1:A:293:ASP:OD1	0.45	2.35	1	1
1:A:283:LEU:C	1:A:285:GLN:N	0.45	2.75	22	7
1:A:330:MET:HE3	1:A:334:LYS:CB	0.45	2.41	3	1
1:A:342:TYR:HB3	1:A:348:MET:CB	0.45	2.42	25	2
1:A:321:TRP:O	1:A:325:LYS:HB3	0.45	2.11	10	1
1:A:287:LEU:HB2	1:A:300:ILE:HD13	0.45	1.89	24	1
1:A:350:LYS:O	1:A:351:VAL:CG1	0.45	2.65	1	1
1:A:287:LEU:CD1	1:A:291:LEU:CD1	0.45	2.95	5	2
1:A:286:PHE:O	1:A:290:LEU:HD12	0.45	2.12	22	1
1:A:282:GLN:OE1	1:A:285:GLN:CD	0.45	2.59	25	1
1:A:282:GLN:OE1	1:A:285:GLN:HB2	0.44	2.12	5	1
1:A:281:ILE:HD13	1:A:281:ILE:O	0.44	2.13	10	1
1:A:308:GLU:CB	1:A:359:LYS:HE2	0.44	2.42	20	1
1:A:284:TRP:CB	1:A:348:MET:HE3	0.44	2.42	5	1
1:A:320:ARG:O	1:A:324:ARG:CB	0.44	2.66	27	1
1:A:329:ASN:O	1:A:331:ASN:OD1	0.44	2.34	2	2
1:A:327:LYS:HB3	1:A:330:MET:CB	0.44	2.42	9	2
1:A:282:GLN:O	1:A:283:LEU:O	0.44	2.34	16	3
1:A:351:VAL:CG2	1:A:359:LYS:HB2	0.44	2.42	21	1
1:A:342:TYR:CD1	1:A:347:ILE:HD12	0.44	2.46	2	1
1:A:330:MET:O	1:A:331:ASN:OD1	0.44	2.35	12	2
1:A:342:TYR:CD2	1:A:348:MET:HE2	0.44	2.47	24	1
1:A:307:GLY:O	1:A:359:LYS:HG3	0.44	2.12	27	1
1:A:307:GLY:C	1:A:308:GLU:HG3	0.44	2.38	1	1
1:A:349:THR:O	1:A:358:TYR:HA	0.44	2.12	2	7
1:A:308:GLU:HA	1:A:359:LYS:CB	0.44	2.42	2	1
1:A:303:GLU:HB2	1:A:310:LYS:CB	0.44	2.43	27	4
1:A:303:GLU:CD	1:A:310:LYS:HE2	0.44	2.37	23	4
1:A:308:GLU:C	1:A:358:TYR:O	0.44	2.61	27	3
1:A:291:LEU:CD2	1:A:301:THR:CA	0.44	2.95	11	1
1:A:300:ILE:CG1	1:A:311:MET:HG2	0.44	2.43	16	2
1:A:325:LYS:HD2	1:A:327:LYS:CE	0.44	2.42	22	1
1:A:281:ILE:HG13	1:A:286:PHE:HB2	0.44	1.89	24	1
1:A:319:ARG:C	1:A:321:TRP:N	0.44	2.74	11	4
1:A:308:GLU:O	1:A:308:GLU:CD	0.44	2.61	22	3
1:A:281:ILE:CD1	1:A:286:PHE:CD2	0.44	3.01	18	1
1:A:321:TRP:CD1	1:A:325:LYS:HG3	0.44	2.48	3	1
1:A:290:LEU:O	1:A:291:LEU:C	0.44	2.59	25	7
1:A:330:MET:C	1:A:331:ASN:OD1	0.44	2.61	17	1
1:A:329:ASN:CG	1:A:329:ASN:O	0.44	2.60	27	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:307:GLY:O	1:A:308:GLU:CB	0.44	2.65	17	3
1:A:342:TYR:CB	1:A:348:MET:HB2	0.44	2.43	3	2
1:A:287:LEU:HD21	1:A:311:MET:HE2	0.44	1.89	7	1
1:A:289:GLU:O	1:A:293:ASP:OD2	0.44	2.35	9	2
1:A:336:SER:O	1:A:339:LEU:HB2	0.44	2.13	10	6
1:A:287:LEU:HD22	1:A:311:MET:HE3	0.44	1.89	11	1
1:A:348:MET:HB2	1:A:359:LYS:O	0.44	2.12	1	2
1:A:281:ILE:HG12	1:A:286:PHE:HB3	0.44	1.89	3	1
1:A:299:CYS:SG	1:A:300:ILE:N	0.44	2.91	3	2
1:A:330:MET:C	1:A:330:MET:HE2	0.44	2.38	12	2
1:A:284:TRP:CE3	1:A:288:LEU:CD1	0.44	3.01	16	1
1:A:291:LEU:HD13	1:A:309:PHE:CD1	0.44	2.48	16	1
1:A:350:LYS:HG3	1:A:351:VAL:N	0.44	2.27	17	1
1:A:303:GLU:OE1	1:A:310:LYS:CE	0.44	2.65	29	1
1:A:308:GLU:CB	1:A:359:LYS:HE3	0.44	2.43	30	1
1:A:305:THR:OG1	1:A:354:LYS:NZ	0.43	2.51	18	2
1:A:349:THR:OG1	1:A:359:LYS:HB3	0.43	2.13	6	2
1:A:350:LYS:HG2	1:A:351:VAL:N	0.43	2.28	29	2
1:A:347:ILE:O	1:A:348:MET:CB	0.43	2.64	23	2
1:A:330:MET:CE	1:A:331:ASN:N	0.43	2.81	12	1
1:A:299:CYS:HB3	1:A:316:GLU:HB3	0.43	1.91	13	1
1:A:295:ALA:O	1:A:296:ASN:HB3	0.43	2.13	19	1
1:A:322:GLY:HA2	1:A:327:LYS:O	0.43	2.13	2	1
1:A:310:LYS:CD	1:A:310:LYS:C	0.43	2.90	21	2
1:A:304:GLY:O	1:A:306:ASN:N	0.43	2.52	7	1
1:A:351:VAL:O	1:A:352:HIS:HB2	0.43	2.13	10	2
1:A:316:GLU:O	1:A:319:ARG:HB2	0.43	2.13	24	8
1:A:283:LEU:HB3	1:A:342:TYR:OH	0.43	2.14	13	3
1:A:308:GLU:O	1:A:308:GLU:OE2	0.43	2.37	10	1
1:A:354:LYS:HB2	1:A:357:ALA:CB	0.43	2.42	20	1
1:A:308:GLU:HA	1:A:359:LYS:HG3	0.43	1.90	27	1
1:A:308:GLU:HB3	1:A:359:LYS:NZ	0.43	2.29	30	1
1:A:304:GLY:O	1:A:305:THR:OG1	0.43	2.35	10	1
1:A:321:TRP:CD1	1:A:330:MET:HE1	0.43	2.49	27	2
1:A:337:ARG:O	1:A:340:ARG:HG2	0.43	2.13	23	2
1:A:351:VAL:HB	1:A:357:ALA:O	0.43	2.13	26	8
1:A:283:LEU:HD21	1:A:339:LEU:CD1	0.43	2.30	4	1
1:A:286:PHE:CE1	1:A:320:ARG:CD	0.43	3.02	4	1
1:A:334:LYS:C	1:A:336:SER:N	0.43	2.77	19	4
1:A:330:MET:SD	1:A:334:LYS:CB	0.43	3.06	13	1
1:A:349:THR:CG2	1:A:361:ASP:OD1	0.43	2.67	26	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:300:ILE:CD1	1:A:301:THR:N	0.43	2.79	2	1
1:A:321:TRP:HB3	1:A:330:MET:CG	0.43	2.44	28	3
1:A:300:ILE:CG1	1:A:301:THR:N	0.43	2.81	4	1
1:A:286:PHE:C	1:A:288:LEU:N	0.43	2.77	11	2
1:A:343:TYR:CD2	1:A:350:LYS:HD3	0.43	2.49	13	1
1:A:349:THR:CG2	1:A:359:LYS:HB3	0.43	2.44	14	1
1:A:318:ALA:HB1	1:A:331:ASN:HB3	0.43	1.89	15	1
1:A:349:THR:CB	1:A:359:LYS:HG3	0.43	2.42	19	1
1:A:342:TYR:CD2	1:A:348:MET:HG3	0.43	2.48	25	1
1:A:286:PHE:CE1	1:A:320:ARG:HD2	0.43	2.49	4	1
1:A:308:GLU:OE2	1:A:357:ALA:HB1	0.43	2.14	18	1
1:A:331:ASN:OD1	1:A:331:ASN:N	0.43	2.51	25	3
1:A:307:GLY:O	1:A:359:LYS:CG	0.43	2.66	27	1
1:A:339:LEU:HG	1:A:358:TYR:OH	0.43	2.14	12	2
1:A:330:MET:HE2	1:A:331:ASN:H	0.43	1.73	17	1
1:A:330:MET:HE1	1:A:334:LYS:HG3	0.43	1.91	29	1
1:A:345:LYS:O	1:A:347:ILE:HG12	0.43	2.14	16	19
1:A:299:CYS:O	1:A:300:ILE:HB	0.43	2.14	17	7
1:A:281:ILE:HB	1:A:324:ARG:CG	0.43	2.44	11	1
1:A:345:LYS:HG2	1:A:347:ILE:HG13	0.43	1.91	22	2
1:A:283:LEU:HD22	1:A:321:TRP:HZ2	0.43	1.74	13	1
1:A:342:TYR:CB	1:A:347:ILE:HB	0.43	2.44	13	1
1:A:291:LEU:CD2	1:A:309:PHE:CE2	0.43	3.01	15	1
1:A:282:GLN:HB3	1:A:285:GLN:HB3	0.43	1.90	16	2
1:A:305:THR:O	1:A:306:ASN:HB2	0.43	2.13	19	1
1:A:283:LEU:HD11	1:A:338:ALA:HB1	0.43	1.90	21	1
1:A:333:ASP:O	1:A:334:LYS:C	0.43	2.61	23	1
1:A:336:SER:O	1:A:337:ARG:C	0.42	2.60	1	2
1:A:283:LEU:HA	1:A:321:TRP:CZ2	0.42	2.48	4	1
1:A:281:ILE:C	1:A:283:LEU:N	0.42	2.78	11	1
1:A:297:ALA:HB2	1:A:301:THR:HB	0.42	1.90	14	2
1:A:291:LEU:HD23	1:A:302:TRP:CB	0.42	2.39	17	1
1:A:303:GLU:OE1	1:A:310:LYS:HE2	0.42	2.14	23	1
1:A:308:GLU:O	1:A:308:GLU:HG2	0.42	2.14	24	1
1:A:345:LYS:C	1:A:347:ILE:N	0.42	2.76	27	5
1:A:324:ARG:N	1:A:324:ARG:HD3	0.42	2.28	7	2
1:A:352:HIS:O	1:A:352:HIS:CD2	0.42	2.72	12	1
1:A:321:TRP:HB3	1:A:330:MET:CE	0.42	2.44	19	1
1:A:320:ARG:O	1:A:324:ARG:N	0.42	2.53	21	1
1:A:287:LEU:HD13	1:A:300:ILE:HD13	0.42	1.90	25	1
1:A:352:HIS:C	1:A:352:HIS:CD2	0.42	2.97	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:332:TYR:O	1:A:336:SER:HB2	0.42	2.14	7	2
1:A:349:THR:OG1	1:A:359:LYS:HG3	0.42	2.14	16	1
1:A:332:TYR:HA	1:A:335:LEU:HD11	0.42	1.91	27	1
1:A:304:GLY:C	1:A:305:THR:CG2	0.42	2.91	29	1
1:A:349:THR:HG23	1:A:360:PHE:CA	0.42	2.44	30	1
1:A:307:GLY:O	1:A:309:PHE:N	0.42	2.52	2	2
1:A:299:CYS:HA	1:A:313:ASP:CB	0.42	2.44	7	1
1:A:281:ILE:HD11	1:A:283:LEU:HA	0.42	1.91	10	1
1:A:308:GLU:O	1:A:308:GLU:HG3	0.42	2.14	25	2
1:A:317:VAL:O	1:A:320:ARG:HB2	0.42	2.14	5	7
1:A:311:MET:HG3	1:A:358:TYR:CE1	0.42	2.49	3	1
1:A:318:ALA:CB	1:A:332:TYR:CA	0.42	2.98	11	2
1:A:282:GLN:O	1:A:283:LEU:HG	0.42	2.14	14	3
1:A:305:THR:HB	1:A:308:GLU:CG	0.42	2.45	12	1
1:A:313:ASP:CB	1:A:316:GLU:HB2	0.42	2.43	16	1
1:A:351:VAL:HG11	1:A:357:ALA:HB3	0.42	1.91	17	1
1:A:328:PRO:O	1:A:330:MET:N	0.42	2.53	24	1
1:A:352:HIS:O	1:A:354:LYS:N	0.42	2.52	2	7
1:A:336:SER:OG	1:A:337:ARG:N	0.42	2.53	4	1
1:A:303:GLU:CG	1:A:310:LYS:HE2	0.42	2.44	5	1
1:A:314:PRO:HB2	1:A:332:TYR:CZ	0.42	2.50	14	1
1:A:282:GLN:HG3	1:A:286:PHE:CE1	0.42	2.49	21	1
1:A:315:ASP:OD1	1:A:315:ASP:N	0.42	2.51	23	1
1:A:299:CYS:HA	1:A:313:ASP:OD1	0.42	2.15	4	1
1:A:302:TRP:C	1:A:304:GLY:N	0.42	2.75	4	1
1:A:298:SER:O	1:A:299:CYS:HB3	0.42	2.14	8	1
1:A:303:GLU:OE2	1:A:310:LYS:HE3	0.42	2.15	8	1
1:A:354:LYS:C	1:A:355:ARG:CG	0.42	2.93	12	2
1:A:281:ILE:CD1	1:A:321:TRP:CZ3	0.42	3.02	17	1
1:A:281:ILE:O	1:A:282:GLN:O	0.42	2.37	19	1
1:A:358:TYR:CD1	1:A:358:TYR:N	0.42	2.87	29	1
1:A:281:ILE:CG1	1:A:286:PHE:HB3	0.42	2.45	3	1
1:A:291:LEU:CD1	1:A:300:ILE:HD12	0.42	2.44	5	1
1:A:300:ILE:O	1:A:301:THR:HB	0.42	2.15	22	2
1:A:309:PHE:HB2	1:A:358:TYR:CB	0.42	2.45	9	1
1:A:308:GLU:HA	1:A:359:LYS:HD3	0.42	1.92	12	2
1:A:281:ILE:N	1:A:324:ARG:HG2	0.42	2.29	14	1
1:A:344:ASP:O	1:A:344:ASP:OD1	0.42	2.36	16	1
1:A:299:CYS:SG	1:A:317:VAL:CG2	0.42	3.08	20	1
1:A:341:TYR:O	1:A:345:LYS:HD3	0.42	2.15	27	2
1:A:284:TRP:HE3	1:A:348:MET:HE1	0.42	1.73	30	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:359:LYS:CE	1:A:359:LYS:HA	0.42	2.44	30	1
1:A:349:THR:CG2	1:A:361:ASP:HB2	0.42	2.45	26	2
1:A:306:ASN:OD1	1:A:306:ASN:N	0.42	2.52	22	1
1:A:349:THR:CG2	1:A:359:LYS:HG3	0.42	2.45	23	1
1:A:323:GLU:HG2	1:A:324:ARG:N	0.42	2.30	24	1
1:A:325:LYS:HD2	1:A:330:MET:SD	0.42	2.55	26	1
1:A:304:GLY:O	1:A:305:THR:HB	0.41	2.15	16	6
1:A:310:LYS:C	1:A:310:LYS:HE3	0.41	2.41	4	1
1:A:350:LYS:HB2	1:A:352:HIS:NE2	0.41	2.30	13	1
1:A:288:LEU:HA	1:A:291:LEU:HD13	0.41	1.92	17	1
1:A:351:VAL:HG22	1:A:353:GLY:N	0.41	2.26	22	1
1:A:309:PHE:CB	1:A:358:TYR:O	0.41	2.68	23	1
1:A:308:GLU:CB	1:A:359:LYS:HG2	0.41	2.45	28	1
1:A:313:ASP:O	1:A:317:VAL:HG23	0.41	2.16	2	1
1:A:348:MET:SD	1:A:360:PHE:HD1	0.41	2.35	3	1
1:A:293:ASP:OD1	1:A:293:ASP:N	0.41	2.53	7	1
1:A:341:TYR:O	1:A:345:LYS:HB2	0.41	2.15	25	3
1:A:282:GLN:O	1:A:285:GLN:HB2	0.41	2.15	15	1
1:A:329:ASN:O	1:A:329:ASN:OD1	0.41	2.38	25	1
1:A:308:GLU:HA	1:A:359:LYS:HB3	0.41	1.91	2	1
1:A:320:ARG:O	1:A:324:ARG:HG2	0.41	2.15	5	1
1:A:308:GLU:CB	1:A:359:LYS:HB2	0.41	2.45	6	1
1:A:302:TRP:HA	1:A:309:PHE:HA	0.41	1.93	14	1
1:A:316:GLU:OE1	1:A:316:GLU:CA	0.41	2.67	16	1
1:A:287:LEU:CD1	1:A:287:LEU:C	0.41	2.87	26	1
1:A:300:ILE:C	1:A:301:THR:CG2	0.41	2.93	4	1
1:A:284:TRP:HB3	1:A:342:TYR:CE2	0.41	2.49	6	1
1:A:283:LEU:O	1:A:286:PHE:N	0.41	2.54	14	1
1:A:351:VAL:HG21	1:A:359:LYS:HB2	0.41	1.91	14	1
1:A:330:MET:O	1:A:331:ASN:CG	0.41	2.64	17	1
1:A:333:ASP:C	1:A:335:LEU:N	0.41	2.77	23	1
1:A:346:ASN:HA	1:A:361:ASP:CG	0.41	2.40	24	2
1:A:347:ILE:C	1:A:348:MET:HG2	0.41	2.40	4	2
1:A:307:GLY:O	1:A:308:GLU:HB3	0.41	2.16	17	5
1:A:308:GLU:C	1:A:309:PHE:O	0.41	2.63	6	4
1:A:291:LEU:CD1	1:A:300:ILE:HG23	0.41	2.46	8	1
1:A:318:ALA:HB2	1:A:332:TYR:HD1	0.41	1.75	8	1
1:A:295:ALA:O	1:A:296:ASN:OD1	0.41	2.39	9	1
1:A:360:PHE:O	1:A:360:PHE:CG	0.41	2.73	13	1
1:A:343:TYR:OH	1:A:358:TYR:CE1	0.41	2.73	16	1
1:A:327:LYS:O	1:A:330:MET:HG2	0.41	2.14	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:339:LEU:O	1:A:342:TYR:HB2	0.41	2.15	24	1
1:A:351:VAL:HG13	1:A:352:HIS:N	0.41	2.30	25	1
1:A:334:LYS:O	1:A:336:SER:N	0.41	2.53	28	1
1:A:284:TRP:CD1	1:A:285:GLN:N	0.41	2.88	2	1
1:A:347:ILE:O	1:A:347:ILE:HG22	0.41	2.15	6	1
1:A:294:SER:HB3	1:A:297:ALA:HA	0.41	1.92	9	2
1:A:321:TRP:CD1	1:A:330:MET:CE	0.41	3.04	10	1
1:A:318:ALA:CB	1:A:332:TYR:HA	0.41	2.45	11	1
1:A:284:TRP:O	1:A:287:LEU:HG	0.41	2.16	15	1
1:A:287:LEU:HA	1:A:290:LEU:CD1	0.41	2.45	15	1
1:A:345:LYS:HB2	1:A:347:ILE:HG13	0.41	1.93	19	1
1:A:284:TRP:O	1:A:285:GLN:C	0.41	2.62	22	1
1:A:349:THR:HG23	1:A:359:LYS:HG3	0.41	1.91	23	1
1:A:328:PRO:C	1:A:330:MET:N	0.41	2.77	24	1
1:A:298:SER:O	1:A:299:CYS:HB2	0.41	2.16	1	1
1:A:304:GLY:O	1:A:306:ASN:ND2	0.41	2.53	3	1
1:A:289:GLU:O	1:A:290:LEU:C	0.41	2.64	4	1
1:A:285:GLN:O	1:A:288:LEU:HB3	0.41	2.14	11	1
1:A:320:ARG:O	1:A:323:GLU:HB3	0.41	2.16	15	1
1:A:338:ALA:O	1:A:339:LEU:C	0.41	2.61	1	1
1:A:332:TYR:HA	1:A:335:LEU:CD2	0.41	2.44	4	1
1:A:326:SER:O	1:A:327:LYS:C	0.41	2.64	7	1
1:A:310:LYS:HD2	1:A:311:MET:N	0.41	2.31	14	1
1:A:339:LEU:HD21	1:A:358:TYR:CE1	0.41	2.49	16	1
1:A:320:ARG:O	1:A:324:ARG:HB2	0.41	2.16	17	2
1:A:299:CYS:SG	1:A:317:VAL:HG23	0.41	2.56	20	1
1:A:284:TRP:CE3	1:A:288:LEU:HD23	0.41	2.51	4	1
1:A:327:LYS:HB2	1:A:330:MET:SD	0.41	2.55	4	1
1:A:301:THR:HG23	1:A:302:TRP:H	0.41	1.74	18	2
1:A:314:PRO:O	1:A:332:TYR:CD1	0.41	2.74	8	1
1:A:345:LYS:O	1:A:346:ASN:C	0.41	2.63	8	2
1:A:347:ILE:CG2	1:A:348:MET:HE3	0.41	2.46	10	1
1:A:330:MET:O	1:A:331:ASN:CB	0.41	2.69	11	1
1:A:312:THR:HG23	1:A:313:ASP:OD1	0.41	2.15	12	1
1:A:349:THR:O	1:A:350:LYS:C	0.41	2.64	14	1
1:A:345:LYS:O	1:A:346:ASN:HB2	0.41	2.16	18	1
1:A:309:PHE:HB2	1:A:358:TYR:O	0.41	2.16	23	1
1:A:306:ASN:HB3	1:A:308:GLU:OE2	0.41	2.16	25	1
1:A:335:LEU:HD13	1:A:335:LEU:HA	0.41	1.76	5	2
1:A:313:ASP:OD1	1:A:315:ASP:OD1	0.41	2.39	2	1
1:A:343:TYR:OH	1:A:350:LYS:HG3	0.41	2.16	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:281:ILE:HG12	1:A:282:GLN:N	0.41	2.31	3	2
1:A:325:LYS:O	1:A:326:SER:HB3	0.41	2.16	11	1
1:A:283:LEU:HD22	1:A:342:TYR:OH	0.41	2.16	18	1
1:A:361:ASP:OD1	1:A:361:ASP:N	0.41	2.54	20	1
1:A:303:GLU:CD	1:A:310:LYS:CE	0.41	2.94	23	1
1:A:349:THR:OG1	1:A:360:PHE:C	0.41	2.63	27	1
1:A:350:LYS:O	1:A:350:LYS:HG3	0.40	2.15	11	1
1:A:329:ASN:O	1:A:330:MET:C	0.40	2.61	14	1
1:A:346:ASN:O	1:A:361:ASP:HB2	0.40	2.15	25	1
1:A:305:THR:CG2	1:A:308:GLU:CG	0.40	3.00	10	1
1:A:299:CYS:CA	1:A:313:ASP:O	0.40	2.69	11	1
1:A:308:GLU:HB3	1:A:359:LYS:HD3	0.40	1.93	12	1
1:A:287:LEU:HG	1:A:288:LEU:N	0.40	2.29	15	1
1:A:316:GLU:O	1:A:319:ARG:CB	0.40	2.69	22	1
1:A:311:MET:HB3	1:A:356:TYR:HB2	0.40	1.94	1	1
1:A:349:THR:OG1	1:A:361:ASP:HA	0.40	2.16	9	1
1:A:342:TYR:HB3	1:A:348:MET:N	0.40	2.31	13	1
1:A:308:GLU:HB3	1:A:359:LYS:CD	0.40	2.45	14	1
1:A:314:PRO:CG	1:A:356:TYR:CE2	0.40	3.03	16	1
1:A:348:MET:HB3	1:A:359:LYS:O	0.40	2.17	20	1
1:A:308:GLU:HB3	1:A:359:LYS:CE	0.40	2.46	21	1
1:A:317:VAL:C	1:A:319:ARG:N	0.40	2.77	22	1
1:A:341:TYR:HB3	1:A:345:LYS:CD	0.40	2.47	24	1
1:A:359:LYS:N	1:A:359:LYS:HE3	0.40	2.31	2	1
1:A:291:LEU:HD23	1:A:302:TRP:CZ3	0.40	2.51	3	1
1:A:338:ALA:O	1:A:342:TYR:HB2	0.40	2.17	8	1
1:A:339:LEU:HD22	1:A:343:TYR:HH	0.40	1.69	18	1
1:A:349:THR:HG22	1:A:350:LYS:N	0.40	2.32	25	1
1:A:305:THR:HG23	1:A:305:THR:O	0.40	2.16	29	1
1:A:347:ILE:O	1:A:348:MET:HB3	0.40	2.16	30	1
1:A:342:TYR:HB3	1:A:348:MET:HG2	0.40	1.93	3	1
1:A:327:LYS:CB	1:A:330:MET:HB3	0.40	2.47	9	1
1:A:321:TRP:CZ2	1:A:335:LEU:HG	0.40	2.52	12	1
1:A:347:ILE:O	1:A:348:MET:HG2	0.40	2.16	20	1
1:A:351:VAL:CB	1:A:357:ALA:O	0.40	2.69	26	1
1:A:314:PRO:HB2	1:A:332:TYR:CD2	0.40	2.52	28	1
1:A:347:ILE:C	1:A:348:MET:HG3	0.40	2.42	29	1

6.3 Torsion angles (i)

6.3.1 Protein backbone (i)

In the following table, the Percentiles column shows the percent Ramachandran outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all NMR entries. The Analysed column shows the number of residues for which the backbone conformation was analysed and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	81/98 (83%)	52±3 (65±3%)	20±2 (24±3%)	9±2 (11±3%)	1 8
All	All	2430/2940 (83%)	1568 (65%)	593 (24%)	269 (11%)	1 8

All 30 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	297	ALA	30
1	A	355	ARG	30
1	A	283	LEU	21
1	A	308	GLU	17
1	A	309	PHE	16
1	A	306	ASN	12
1	A	361	ASP	11
1	A	299	CYS	9
1	A	300	ILE	9
1	A	301	THR	9
1	A	284	TRP	8
1	A	298	SER	8
1	A	303	GLU	8
1	A	307	GLY	8
1	A	282	GLN	8
1	A	305	THR	8
1	A	325	LYS	7
1	A	326	SER	7
1	A	331	ASN	7
1	A	348	MET	7
1	A	351	VAL	5
1	A	330	MET	4
1	A	329	ASN	4
1	A	295	ALA	3
1	A	349	THR	3
1	A	328	PRO	3
1	A	312	THR	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	281	ILE	2
1	A	294	SER	2
1	A	357	ALA	1

6.3.2 Protein sidechains (i)

In the following table, the Percentiles column shows the percent sidechain outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all NMR entries. The Analysed column shows the number of residues for which the sidechain conformation was analysed and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	72/84 (86%)	45±4 (63±6%)	27±4 (37±6%)	0 7
All	All	2160/2520 (86%)	1354 (63%)	806 (37%)	0 7

All 64 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	319	ARG	30
1	A	347	ILE	30
1	A	310	LYS	29
1	A	311	MET	29
1	A	281	ILE	27
1	A	302	TRP	26
1	A	288	LEU	22
1	A	349	THR	20
1	A	330	MET	20
1	A	283	LEU	20
1	A	316	GLU	18
1	A	299	CYS	18
1	A	301	THR	17
1	A	326	SER	17
1	A	287	LEU	17
1	A	354	LYS	17
1	A	317	VAL	16
1	A	337	ARG	16
1	A	327	LYS	16
1	A	292	SER	15
1	A	334	LYS	15
1	A	339	LEU	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	340	ARG	15
1	A	335	LEU	14
1	A	303	GLU	14
1	A	294	SER	13
1	A	341	TYR	13
1	A	350	LYS	13
1	A	285	GLN	12
1	A	289	GLU	12
1	A	359	LYS	12
1	A	336	SER	12
1	A	325	LYS	12
1	A	300	ILE	11
1	A	313	ASP	11
1	A	331	ASN	11
1	A	308	GLU	11
1	A	358	TYR	11
1	A	324	ARG	10
1	A	290	LEU	10
1	A	329	ASN	10
1	A	293	ASP	10
1	A	348	MET	10
1	A	282	GLN	9
1	A	296	ASN	9
1	A	333	ASP	9
1	A	352	HIS	8
1	A	298	SER	8
1	A	312	THR	8
1	A	320	ARG	8
1	A	315	ASP	7
1	A	346	ASN	7
1	A	286	PHE	5
1	A	361	ASP	5
1	A	291	LEU	4
1	A	306	ASN	4
1	A	323	GLU	4
1	A	332	TYR	3
1	A	344	ASP	3
1	A	342	TYR	3
1	A	351	VAL	2
1	A	345	LYS	1
1	A	356	TYR	1
1	A	360	PHE	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

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