



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 8, 2026 – 11:40 AM UTC

PDB ID : 1IN1 / pdb_00001in1
Title : NMR STRUCTURE OF HUMAN DNA LIGASE IIIALPHA BRCT DOMAIN
Authors : Krishnan, V.V.; Thornton, K.H.; Thelen, M.P.; Cosman, M.
Deposited on : 2001-05-11

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

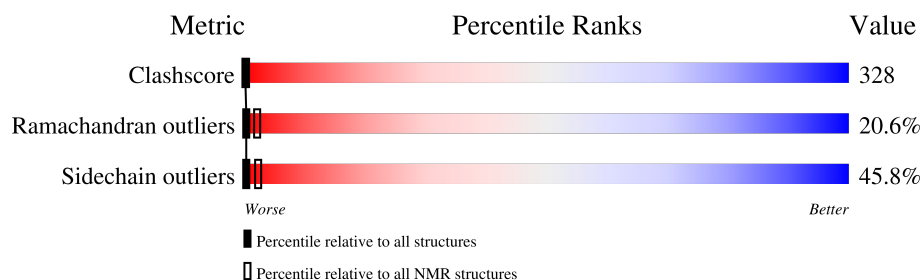
1 Overall quality at a glance

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	88	9% 40% 42% 7%

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 4 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *ensemble of 20 structures*.

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:837-A:922 (86)	0.43	4

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

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

The models can be grouped into 3 clusters. No single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1398 atoms, of which 697 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called DNA LIGASE III.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	88	Total	C	H	N	O	S	0
			1398	446	697	124	127	4	

There are 2 discrepancies between the modelled and reference sequences:

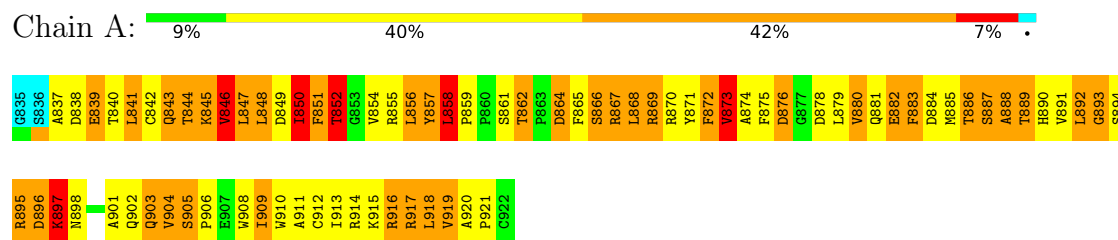
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	835	GLY	LYS	cloning artifact	UNP P49916
A	836	SER	ALA	cloning artifact	UNP P49916

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: DNA LIGASE III

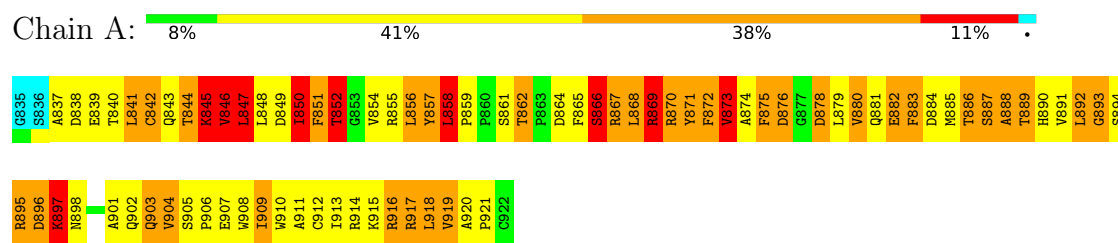


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

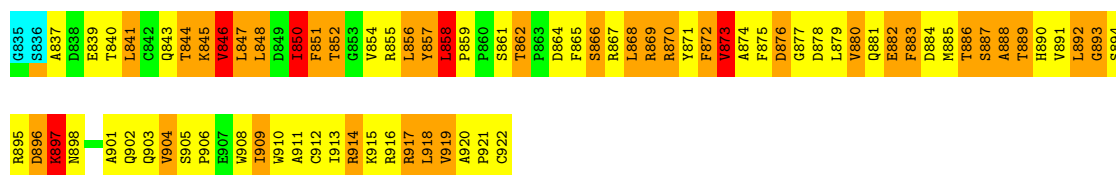
- Molecule 1: DNA LIGASE III



4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: DNA LIGASE III

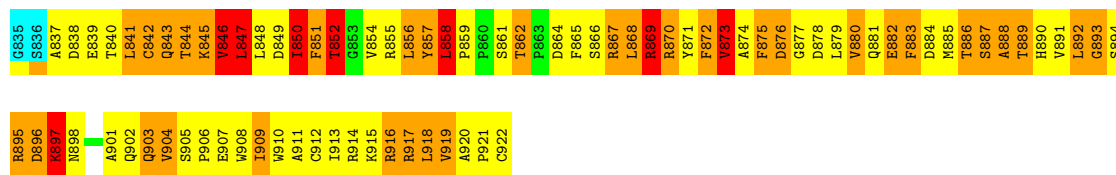




4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: DNA LIGASE III

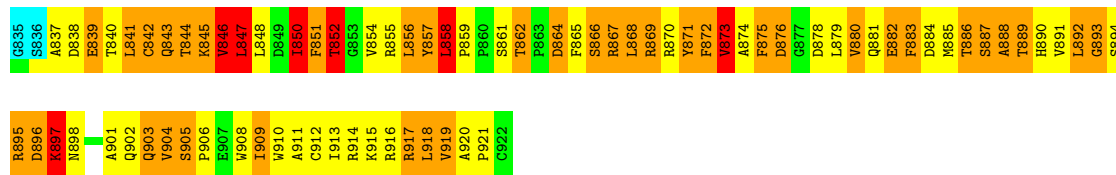
Chain A: 6% 45% 38% 9% .



4.2.4 Score per residue for model 4 (medoid)

- Molecule 1: DNA LIGASE III

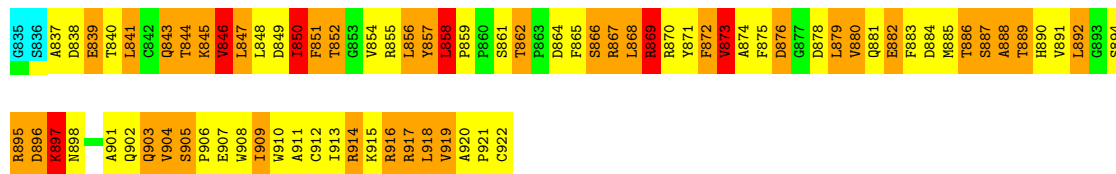
Chain A: 10% 38% 42% 8% .



4.2.5 Score per residue for model 5

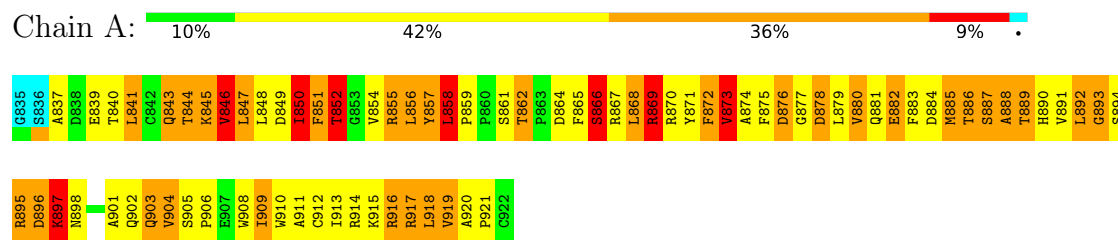
- Molecule 1: DNA LIGASE III

Chain A: 9% 42% 40% 7% .



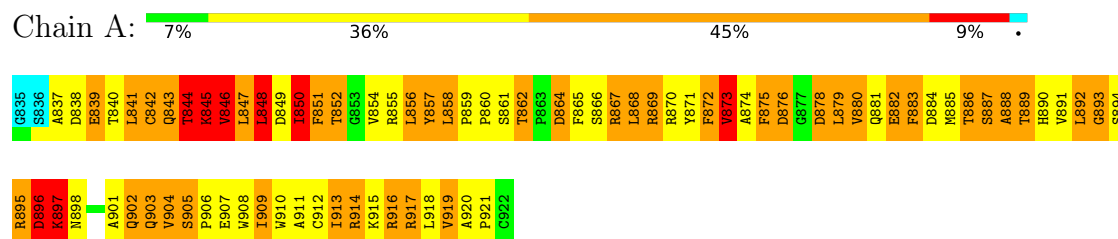
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: DNA LIGASE III



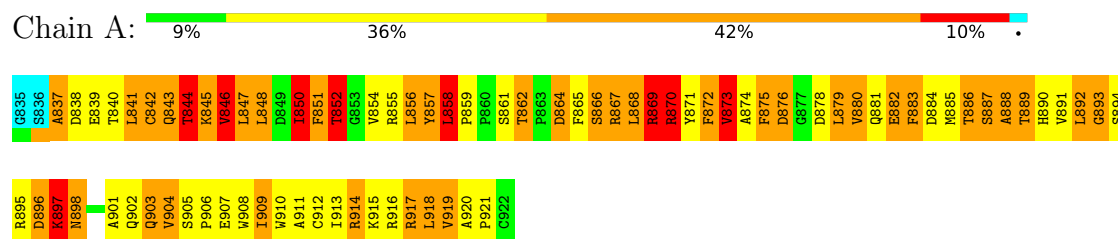
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: DNA LIGASE III



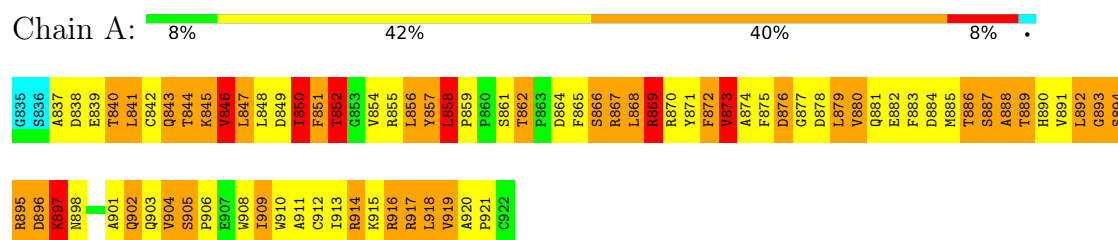
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: DNA LIGASE III



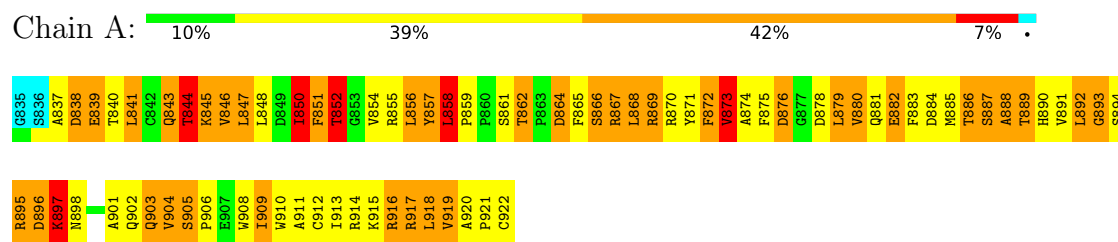
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: DNA LIGASE III



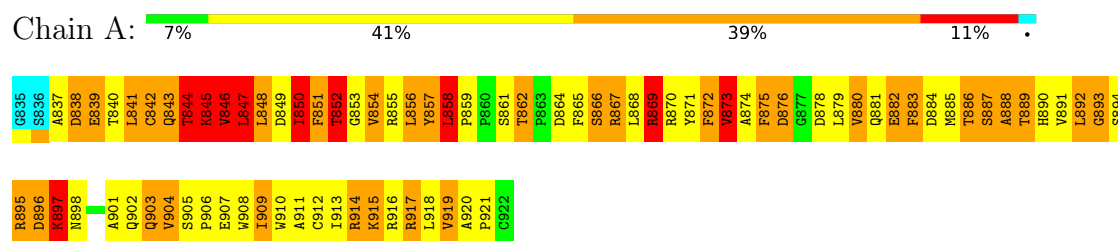
4.2.10 Score per residue for model 10

• Molecule 1: DNA LIGASE III



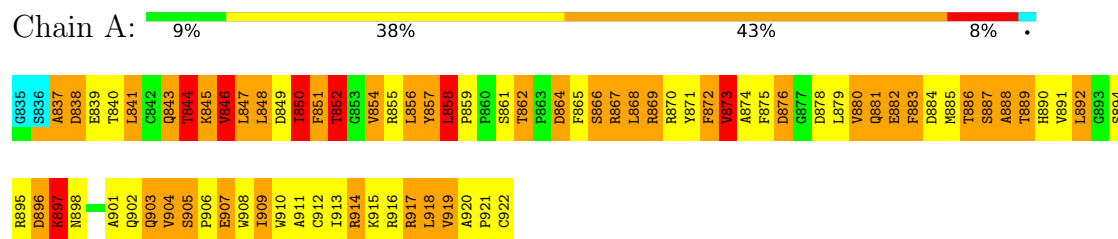
4.2.11 Score per residue for model 11

• Molecule 1: DNA LIGASE III



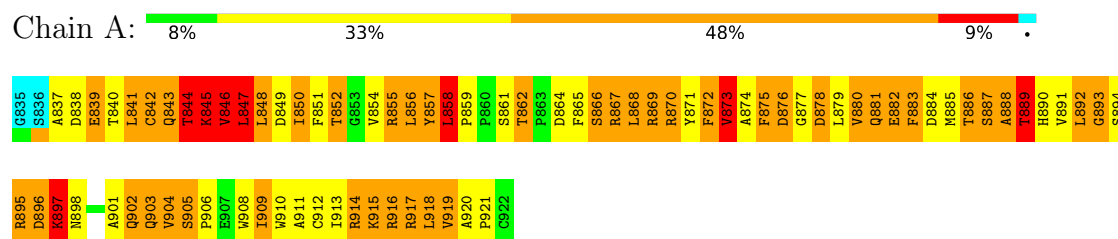
4.2.12 Score per residue for model 12

• Molecule 1: DNA LIGASE III



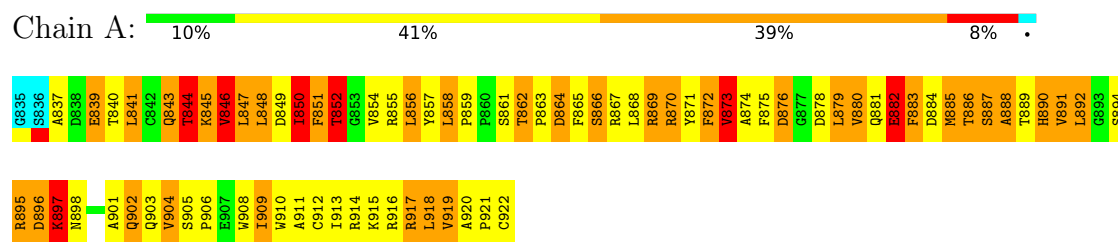
4.2.13 Score per residue for model 13

• Molecule 1: DNA LIGASE III



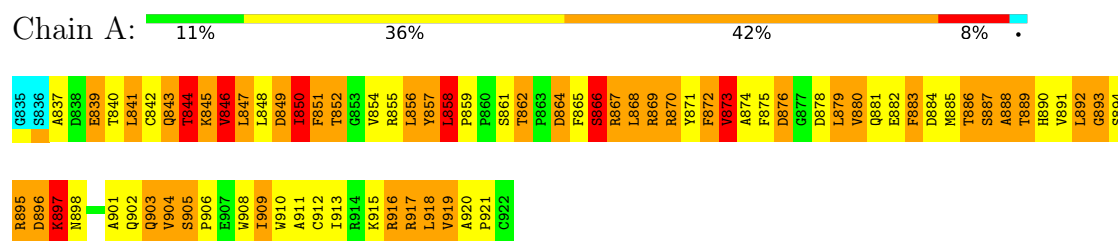
4.2.14 Score per residue for model 14

• Molecule 1: DNA LIGASE III



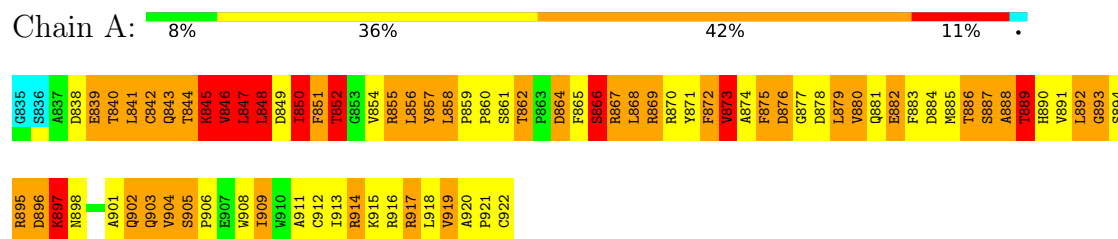
4.2.15 Score per residue for model 15

• Molecule 1: DNA LIGASE III



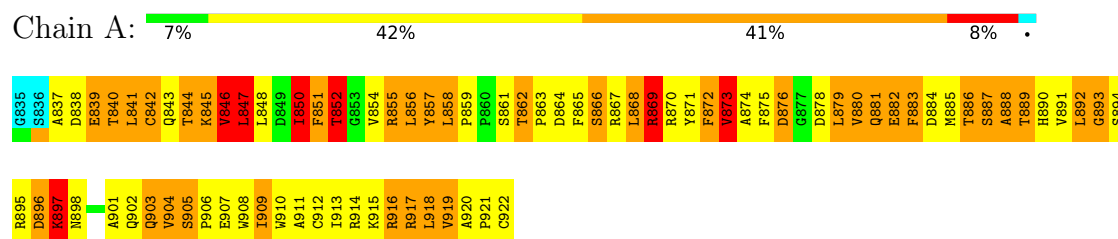
4.2.16 Score per residue for model 16

• Molecule 1: DNA LIGASE III



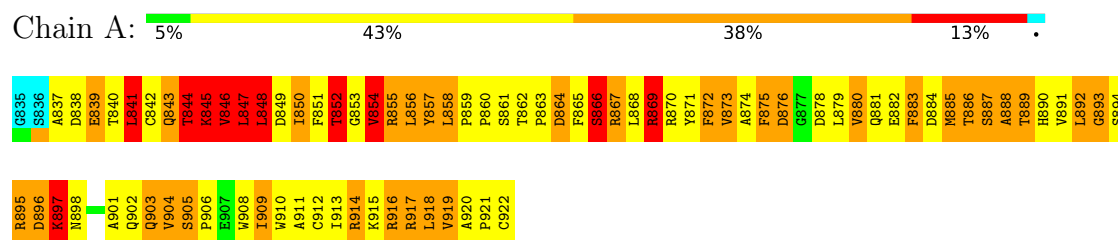
4.2.17 Score per residue for model 17

• Molecule 1: DNA LIGASE III



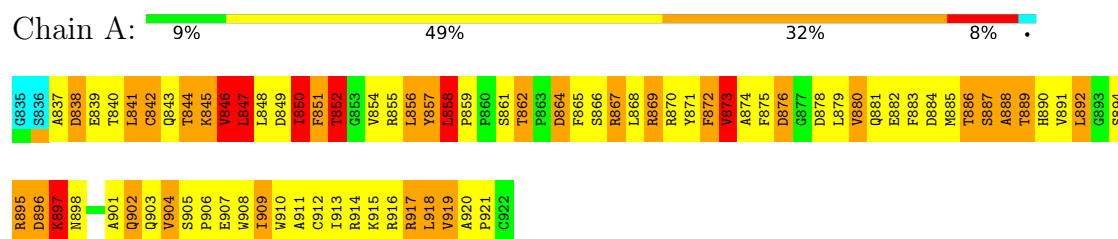
4.2.18 Score per residue for model 18

• Molecule 1: DNA LIGASE III



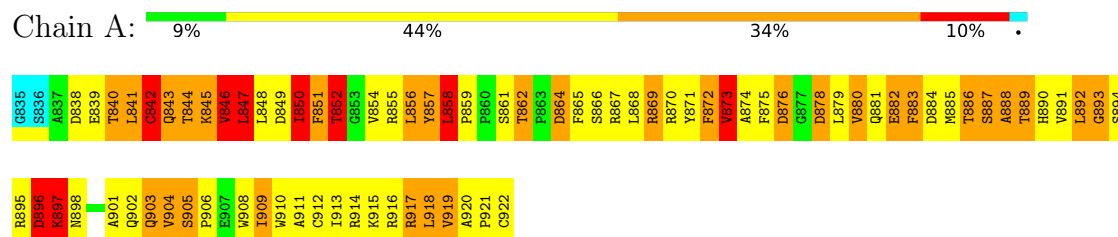
4.2.19 Score per residue for model 19

• Molecule 1: DNA LIGASE III



4.2.20 Score per residue for model 20

• Molecule 1: DNA LIGASE III



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *distance geometry, simulated annealing, torsion angle dynamics*.

Of the 299 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the least restraint violations, target function*.

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

Software name	Classification	Version
DYANA	structure solution	1.5
DYANA	refinement	1.5

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	0.58±0.00	0±0/708 (0.0± 0.0%)	1.04±0.03	2±1/963 (0.2± 0.1%)
All	All	0.58	0/14160 (0.0%)	1.04	30/19260 (0.2%)

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	858	LEU	CA-C-N	6.54	124.37	119.66	2	15
1	A	858	LEU	C-N-CA	6.54	124.37	119.66	2	15

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

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	691	689	687	452±24
All	All	13820	13780	13717	9031

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 328.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:885:MET:SD	1:A:897:LYS:HB2	1.75	1.17	2	20
1:A:847:LEU:HD13	1:A:871:TYR:CD1	1.67	1.23	4	14
1:A:847:LEU:HD13	1:A:871:TYR:CE1	1.66	1.26	8	16
1:A:850:ILE:HD12	1:A:913:ILE:CA	1.65	1.13	2	16
1:A:850:ILE:CD1	1:A:913:ILE:HA	1.63	1.16	2	16
1:A:847:LEU:CD1	1:A:871:TYR:CD1	1.63	1.82	8	16
1:A:847:LEU:HA	1:A:871:TYR:CE1	1.61	1.20	16	10
1:A:846:VAL:C	1:A:847:LEU:HD22	1.60	1.14	2	20
1:A:871:TYR:CE1	1:A:875:PHE:CZ	1.60	1.89	13	16
1:A:854:VAL:HG11	1:A:908:TRP:CH2	1.59	1.24	12	20
1:A:851:PHE:HA	1:A:918:LEU:CD1	1.58	1.24	18	20
1:A:850:ILE:CG1	1:A:913:ILE:HA	1.57	1.21	14	18
1:A:847:LEU:CD1	1:A:871:TYR:CE1	1.56	1.80	19	16
1:A:850:ILE:CD1	1:A:913:ILE:CA	1.55	1.78	5	16
1:A:854:VAL:CG2	1:A:918:LEU:HG	1.54	1.20	18	20
1:A:855:ARG:NE	1:A:889:THR:CB	1.54	1.69	10	2
1:A:850:ILE:HG21	1:A:913:ILE:CA	1.54	1.29	7	4
1:A:851:PHE:CA	1:A:918:LEU:HD11	1.54	1.29	19	20
1:A:871:TYR:CD1	1:A:875:PHE:CE1	1.52	1.97	13	18
1:A:855:ARG:HG2	1:A:889:THR:CG2	1.51	1.00	6	1
1:A:847:LEU:CA	1:A:871:TYR:HE1	1.51	1.16	16	5
1:A:855:ARG:C	1:A:890:HIS:HB2	1.50	1.08	10	19
1:A:855:ARG:CG	1:A:889:THR:CB	1.49	1.82	6	2
1:A:855:ARG:CD	1:A:889:THR:CB	1.49	1.84	6	2
1:A:855:ARG:C	1:A:890:HIS:CB	1.49	1.85	13	16
1:A:855:ARG:CG	1:A:889:THR:CG2	1.49	1.87	6	3
1:A:855:ARG:CD	1:A:889:THR:HB	1.49	1.00	6	2
1:A:885:MET:HE2	1:A:897:LYS:CB	1.47	1.37	18	2
1:A:851:PHE:CE1	1:A:909:ILE:HA	1.47	1.43	12	17
1:A:855:ARG:CB	1:A:889:THR:HG22	1.46	0.95	15	3
1:A:847:LEU:HA	1:A:875:PHE:CE1	1.46	1.44	7	13
1:A:845:LYS:O	1:A:871:TYR:CE1	1.45	1.67	17	11
1:A:855:ARG:O	1:A:890:HIS:CA	1.45	1.65	13	8
1:A:850:ILE:HG21	1:A:913:ILE:N	1.45	1.23	11	3
1:A:855:ARG:HB2	1:A:889:THR:CG2	1.45	0.96	10	2
1:A:885:MET:SD	1:A:897:LYS:CB	1.44	2.04	2	18
1:A:848:LEU:HD13	1:A:916:ARG:CD	1.44	1.43	14	6
1:A:850:ILE:CG2	1:A:912:CYS:C	1.43	1.90	11	5
1:A:856:LEU:HD12	1:A:856:LEU:C	1.43	1.35	4	16
1:A:855:ARG:HG2	1:A:889:THR:CB	1.43	1.31	6	1
1:A:847:LEU:CA	1:A:871:TYR:CE1	1.41	1.93	16	11
1:A:847:LEU:HA	1:A:875:PHE:CE2	1.40	1.50	11	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:841:LEU:O	1:A:841:LEU:CD1	1.39	1.69	13	6
1:A:871:TYR:CD1	1:A:875:PHE:CZ	1.39	2.09	7	14
1:A:841:LEU:O	1:A:841:LEU:CD2	1.38	1.71	20	8
1:A:855:ARG:CG	1:A:889:THR:HG22	1.38	1.43	6	1
1:A:847:LEU:N	1:A:871:TYR:OH	1.37	1.57	16	6
1:A:856:LEU:N	1:A:890:HIS:HB2	1.37	1.33	13	19
1:A:871:TYR:OH	1:A:913:ILE:HD11	1.37	1.16	20	5
1:A:850:ILE:HD12	1:A:913:ILE:C	1.36	1.45	14	16
1:A:871:TYR:CE1	1:A:875:PHE:CE1	1.36	2.13	7	19
1:A:871:TYR:OH	1:A:913:ILE:CD1	1.35	1.72	17	5
1:A:846:VAL:HG22	1:A:871:TYR:OH	1.35	1.15	1	9
1:A:855:ARG:O	1:A:890:HIS:N	1.35	1.58	9	9
1:A:854:VAL:HG21	1:A:918:LEU:CG	1.34	1.52	7	19
1:A:850:ILE:CG2	1:A:913:ILE:HA	1.34	1.50	7	5
1:A:851:PHE:CZ	1:A:909:ILE:CG1	1.34	2.10	8	20
1:A:871:TYR:CE2	1:A:875:PHE:HZ	1.33	1.38	9	15
1:A:855:ARG:NE	1:A:889:THR:HB	1.33	0.98	10	2
1:A:846:VAL:C	1:A:847:LEU:CD2	1.32	2.02	10	20
1:A:854:VAL:CG1	1:A:908:TRP:HH2	1.32	1.34	12	18
1:A:851:PHE:N	1:A:918:LEU:HD11	1.31	1.40	5	15
1:A:849:ASP:OD2	1:A:916:ARG:HD3	1.31	1.25	6	1
1:A:854:VAL:HG21	1:A:918:LEU:CD1	1.30	1.54	7	5
1:A:885:MET:CE	1:A:897:LYS:HB2	1.29	1.56	6	17
1:A:851:PHE:CZ	1:A:909:ILE:HA	1.29	1.62	19	20
1:A:885:MET:O	1:A:887:SER:N	1.29	1.65	6	20
1:A:856:LEU:HD13	1:A:856:LEU:O	1.28	1.15	12	2
1:A:871:TYR:CD2	1:A:875:PHE:HZ	1.28	1.46	20	15
1:A:846:VAL:CG2	1:A:871:TYR:OH	1.27	1.81	3	9
1:A:856:LEU:HD12	1:A:856:LEU:O	1.27	1.15	14	16
1:A:858:LEU:HD21	1:A:868:LEU:CB	1.27	1.60	8	19
1:A:841:LEU:O	1:A:841:LEU:HD12	1.27	1.08	13	2
1:A:850:ILE:CG2	1:A:913:ILE:CA	1.27	2.10	7	5
1:A:841:LEU:O	1:A:841:LEU:HD22	1.26	1.27	4	8
1:A:850:ILE:C	1:A:918:LEU:CD1	1.26	2.08	5	14
1:A:847:LEU:HD12	1:A:871:TYR:CD1	1.26	1.51	13	15
1:A:849:ASP:OD1	1:A:916:ARG:HD2	1.26	1.25	1	4
1:A:851:PHE:HD1	1:A:908:TRP:CZ3	1.26	1.47	11	15
1:A:856:LEU:CB	1:A:890:HIS:HB2	1.26	1.60	14	2
1:A:848:LEU:HD22	1:A:916:ARG:CG	1.26	1.61	14	16
1:A:850:ILE:HG23	1:A:912:CYS:C	1.26	1.54	18	3
1:A:851:PHE:HD2	1:A:908:TRP:CZ3	1.26	1.47	18	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:845:LYS:O	1:A:847:LEU:N	1.26	1.67	16	8
1:A:851:PHE:CD1	1:A:908:TRP:CZ3	1.26	2.24	8	17
1:A:854:VAL:HG13	1:A:890:HIS:CD2	1.25	1.64	5	12
1:A:849:ASP:OD1	1:A:916:ARG:CD	1.25	1.84	1	3
1:A:854:VAL:CG2	1:A:918:LEU:CG	1.25	2.10	7	19
1:A:849:ASP:CG	1:A:916:ARG:HD2	1.24	1.55	6	3
1:A:848:LEU:CD1	1:A:916:ARG:HD2	1.24	1.63	14	3
1:A:847:LEU:CD1	1:A:871:TYR:HD1	1.24	1.33	15	13
1:A:858:LEU:CD2	1:A:868:LEU:HB3	1.24	1.62	20	20
1:A:850:ILE:O	1:A:918:LEU:HD13	1.24	1.29	19	15
1:A:871:TYR:CE1	1:A:875:PHE:CE2	1.23	2.26	11	3
1:A:841:LEU:O	1:A:841:LEU:HD23	1.23	1.25	16	1
1:A:849:ASP:CG	1:A:916:ARG:CD	1.23	2.12	6	3
1:A:871:TYR:CD2	1:A:875:PHE:CZ	1.22	2.27	4	15
1:A:846:VAL:O	1:A:847:LEU:HD13	1.22	1.31	9	9
1:A:856:LEU:HB3	1:A:872:PHE:CE2	1.22	1.68	15	5
1:A:851:PHE:C	1:A:918:LEU:HD21	1.22	1.58	14	20
1:A:850:ILE:C	1:A:918:LEU:HD13	1.22	1.57	5	13
1:A:841:LEU:HD22	1:A:841:LEU:C	1.22	1.56	20	7
1:A:854:VAL:CG1	1:A:908:TRP:CH2	1.21	2.15	12	18
1:A:871:TYR:CE2	1:A:875:PHE:CZ	1.21	2.28	20	15
1:A:856:LEU:C	1:A:856:LEU:CD1	1.21	2.06	13	17
1:A:850:ILE:CG1	1:A:913:ILE:CA	1.21	2.13	14	15
1:A:882:GLU:O	1:A:885:MET:HE3	1.20	1.34	14	18
1:A:847:LEU:CA	1:A:875:PHE:CE2	1.20	2.25	11	3
1:A:849:ASP:OD2	1:A:916:ARG:CD	1.20	1.87	6	3
1:A:880:VAL:HG21	1:A:888:ALA:CB	1.20	1.65	13	20
1:A:856:LEU:HA	1:A:890:HIS:CB	1.19	1.66	12	20
1:A:847:LEU:HD13	1:A:871:TYR:CZ	1.19	1.72	13	3
1:A:851:PHE:CD2	1:A:908:TRP:CZ3	1.19	2.30	18	3
1:A:847:LEU:N	1:A:871:TYR:CZ	1.19	2.09	16	6
1:A:855:ARG:O	1:A:890:HIS:CB	1.18	1.89	10	8
1:A:847:LEU:CA	1:A:875:PHE:CE1	1.18	2.25	16	4
1:A:851:PHE:CE2	1:A:909:ILE:HG13	1.18	1.72	18	3
1:A:885:MET:O	1:A:888:ALA:N	1.18	1.76	17	20
1:A:852:THR:N	1:A:918:LEU:HD21	1.18	1.53	15	19
1:A:855:ARG:HB2	1:A:889:THR:CB	1.18	1.68	10	2
1:A:856:LEU:HB3	1:A:872:PHE:CZ	1.17	1.74	16	4
1:A:850:ILE:HG13	1:A:913:ILE:O	1.17	1.39	13	2
1:A:856:LEU:HA	1:A:890:HIS:C	1.17	1.61	17	16
1:A:856:LEU:CD2	1:A:892:LEU:HD12	1.17	1.70	3	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:856:LEU:C	1:A:856:LEU:HD22	1.17	1.64	12	1
1:A:855:ARG:N	1:A:889:THR:CG2	1.17	2.08	17	17
1:A:856:LEU:HD12	1:A:872:PHE:CE2	1.17	1.73	12	4
1:A:849:ASP:OD2	1:A:916:ARG:NH1	1.16	1.78	1	2
1:A:909:ILE:O	1:A:913:ILE:HG13	1.16	1.40	7	5
1:A:847:LEU:HD22	1:A:847:LEU:N	1.16	1.55	8	20
1:A:856:LEU:HD22	1:A:857:TYR:N	1.16	1.55	10	4
1:A:851:PHE:CA	1:A:918:LEU:CD1	1.16	2.23	14	18
1:A:855:ARG:CA	1:A:889:THR:HG22	1.16	1.69	10	6
1:A:856:LEU:HD11	1:A:892:LEU:CD1	1.15	1.71	15	3
1:A:850:ILE:CG2	1:A:913:ILE:N	1.15	2.03	11	5
1:A:848:LEU:HD22	1:A:916:ARG:HG3	1.15	1.16	12	12
1:A:851:PHE:CE1	1:A:909:ILE:HG13	1.14	1.76	11	17
1:A:855:ARG:H	1:A:889:THR:CG2	1.14	1.54	17	16
1:A:848:LEU:HD22	1:A:916:ARG:CD	1.14	1.70	11	4
1:A:855:ARG:CD	1:A:889:THR:N	1.14	2.09	6	4
1:A:856:LEU:HD21	1:A:892:LEU:HD12	1.13	1.16	11	17
1:A:856:LEU:CD1	1:A:892:LEU:HD12	1.13	1.72	15	3
1:A:851:PHE:CZ	1:A:909:ILE:CA	1.13	2.30	19	20
1:A:854:VAL:HG21	1:A:918:LEU:HG	1.13	1.13	11	19
1:A:848:LEU:CD2	1:A:916:ARG:HG3	1.13	1.73	14	6
1:A:848:LEU:HD13	1:A:916:ARG:HD2	1.12	1.18	12	7
1:A:841:LEU:HD12	1:A:867:ARG:NE	1.12	1.55	12	2
1:A:849:ASP:OD1	1:A:916:ARG:CA	1.13	1.96	19	1
1:A:855:ARG:CB	1:A:889:THR:CG2	1.12	1.75	10	3
1:A:856:LEU:HA	1:A:890:HIS:HB3	1.12	1.14	15	12
1:A:871:TYR:CD1	1:A:875:PHE:CE2	1.11	2.39	16	2
1:A:847:LEU:N	1:A:871:TYR:CE1	1.11	2.18	3	8
1:A:857:TYR:HB3	1:A:891:VAL:HA	1.11	1.13	10	19
1:A:848:LEU:HD22	1:A:916:ARG:HG2	1.11	1.23	5	6
1:A:845:LYS:O	1:A:847:LEU:HD22	1.10	1.45	18	11
1:A:845:LYS:C	1:A:847:LEU:HD22	1.10	1.71	4	11
1:A:885:MET:SD	1:A:897:LYS:C	1.10	2.35	3	18
1:A:855:ARG:CG	1:A:889:THR:HB	1.10	1.57	6	2
1:A:855:ARG:CG	1:A:889:THR:N	1.10	2.14	6	4
1:A:847:LEU:HD11	1:A:871:TYR:CD1	1.09	1.58	19	13
1:A:855:ARG:O	1:A:889:THR:HG22	1.09	1.46	19	15
1:A:855:ARG:HD2	1:A:889:THR:CA	1.09	1.77	6	1
1:A:845:LYS:HZ1	1:A:867:ARG:HB3	1.09	1.06	1	2
1:A:854:VAL:O	1:A:872:PHE:CE1	1.09	2.05	7	18
1:A:856:LEU:N	1:A:890:HIS:CB	1.09	2.07	13	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:841:LEU:O	1:A:841:LEU:HD13	1.09	1.38	7	8
1:A:855:ARG:C	1:A:889:THR:HG22	1.09	1.70	19	15
1:A:850:ILE:HG13	1:A:913:ILE:CA	1.09	1.68	5	6
1:A:850:ILE:O	1:A:917:ARG:C	1.09	1.95	18	2
1:A:858:LEU:HD21	1:A:868:LEU:HB3	1.09	1.21	11	20
1:A:850:ILE:O	1:A:918:LEU:HD22	1.09	1.46	11	18
1:A:878:ASP:C	1:A:879:LEU:HD23	1.09	1.72	16	13
1:A:850:ILE:CG1	1:A:913:ILE:O	1.09	2.01	13	2
1:A:856:LEU:CA	1:A:890:HIS:CB	1.08	2.30	12	20
1:A:841:LEU:HD22	1:A:846:VAL:CG2	1.08	1.77	2	7
1:A:855:ARG:CG	1:A:889:THR:CA	1.08	2.30	6	1
1:A:856:LEU:CA	1:A:890:HIS:HB3	1.08	1.77	13	16
1:A:841:LEU:HD21	1:A:845:LYS:CE	1.08	1.78	13	8
1:A:871:TYR:CZ	1:A:913:ILE:CD1	1.08	2.37	3	5
1:A:889:THR:HG23	1:A:890:HIS:ND1	1.08	1.64	14	20
1:A:847:LEU:HD11	1:A:871:TYR:HD1	1.07	1.09	2	13
1:A:851:PHE:HA	1:A:918:LEU:HD11	1.07	1.17	2	19
1:A:851:PHE:CZ	1:A:909:ILE:HG13	1.07	1.78	8	16
1:A:850:ILE:HG13	1:A:913:ILE:CB	1.07	1.78	5	13
1:A:871:TYR:CD1	1:A:875:PHE:HE1	1.07	1.67	17	17
1:A:878:ASP:O	1:A:879:LEU:HD23	1.07	1.47	11	12
1:A:855:ARG:HD2	1:A:889:THR:CB	1.07	1.63	6	1
1:A:851:PHE:CZ	1:A:909:ILE:CB	1.07	2.37	12	20
1:A:851:PHE:CE1	1:A:909:ILE:CA	1.07	2.38	12	15
1:A:845:LYS:O	1:A:846:VAL:O	1.07	1.71	10	9
1:A:854:VAL:HG23	1:A:918:LEU:CD2	1.07	1.80	19	14
1:A:855:ARG:N	1:A:889:THR:HG21	1.06	1.65	19	12
1:A:854:VAL:HG11	1:A:908:TRP:HH2	1.06	1.05	6	15
1:A:849:ASP:OD1	1:A:916:ARG:O	1.06	1.72	19	3
1:A:850:ILE:HG23	1:A:912:CYS:O	1.06	1.50	11	5
1:A:855:ARG:HE	1:A:889:THR:CB	1.06	1.36	10	1
1:A:850:ILE:CD1	1:A:913:ILE:O	1.06	2.02	11	16
1:A:844:THR:O	1:A:846:VAL:N	1.06	1.88	11	5
1:A:854:VAL:HG12	1:A:872:PHE:CZ	1.06	1.86	12	18
1:A:909:ILE:O	1:A:913:ILE:HG22	1.06	1.51	1	15
1:A:849:ASP:CG	1:A:916:ARG:O	1.06	1.98	19	3
1:A:850:ILE:HG13	1:A:913:ILE:C	1.06	1.74	13	2
1:A:850:ILE:O	1:A:918:LEU:CD2	1.05	2.03	11	18
1:A:855:ARG:H	1:A:889:THR:HG21	1.05	1.03	9	16
1:A:855:ARG:O	1:A:890:HIS:HB2	1.05	1.50	15	8
1:A:851:PHE:CZ	1:A:909:ILE:HG12	1.05	1.87	8	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:850:ILE:O	1:A:918:LEU:CD1	1.05	2.05	19	13
1:A:851:PHE:N	1:A:918:LEU:CD1	1.05	2.16	5	10
1:A:841:LEU:HD11	1:A:845:LYS:HA	1.05	1.24	8	1
1:A:851:PHE:HZ	1:A:909:ILE:CB	1.05	1.62	12	20
1:A:854:VAL:HG23	1:A:918:LEU:HG	1.05	1.18	11	6
1:A:894:SER:C	1:A:897:LYS:HZ1	1.04	1.59	19	18
1:A:848:LEU:HD22	1:A:916:ARG:HD3	1.04	1.27	11	4
1:A:841:LEU:HD21	1:A:845:LYS:HA	1.04	1.27	19	7
1:A:855:ARG:HG3	1:A:889:THR:H	1.04	1.06	6	6
1:A:855:ARG:O	1:A:890:HIS:C	1.03	2.00	13	4
1:A:856:LEU:O	1:A:856:LEU:CD1	1.03	2.05	12	2
1:A:885:MET:HB2	1:A:898:ASN:HB2	1.03	1.26	18	13
1:A:851:PHE:HZ	1:A:909:ILE:CG2	1.03	1.66	12	20
1:A:854:VAL:O	1:A:872:PHE:CZ	1.03	2.10	8	16
1:A:854:VAL:HG12	1:A:872:PHE:HZ	1.03	1.08	10	20
1:A:856:LEU:CA	1:A:890:HIS:HB2	1.03	1.84	1	16
1:A:850:ILE:HG13	1:A:913:ILE:HA	1.03	1.23	14	1
1:A:848:LEU:HB2	1:A:850:ILE:HD11	1.02	1.22	17	17
1:A:856:LEU:HD22	1:A:856:LEU:C	1.02	1.74	10	3
1:A:845:LYS:C	1:A:847:LEU:CD2	1.02	2.32	4	18
1:A:885:MET:HE2	1:A:897:LYS:CG	1.02	1.85	18	2
1:A:850:ILE:CG2	1:A:912:CYS:O	1.02	2.07	7	5
1:A:855:ARG:HD2	1:A:889:THR:HB	1.02	1.17	6	1
1:A:844:THR:CG2	1:A:845:LYS:N	1.02	2.23	8	15
1:A:849:ASP:HB2	1:A:916:ARG:HD2	1.01	1.26	5	1
1:A:847:LEU:CD2	1:A:847:LEU:N	1.01	2.18	12	10
1:A:856:LEU:HD12	1:A:857:TYR:N	1.01	1.69	18	15
1:A:850:ILE:HG13	1:A:913:ILE:HB	1.00	1.31	6	13
1:A:844:THR:HG22	1:A:845:LYS:H	1.00	1.02	8	15
1:A:885:MET:CG	1:A:898:ASN:HB2	1.00	1.86	16	18
1:A:856:LEU:HD21	1:A:892:LEU:CD1	1.00	1.85	13	17
1:A:855:ARG:CD	1:A:889:THR:CA	1.00	2.38	6	1
1:A:844:THR:HG22	1:A:845:LYS:N	1.00	1.71	10	15
1:A:855:ARG:NH2	1:A:889:THR:OG1	1.00	1.90	15	2
1:A:850:ILE:HG12	1:A:913:ILE:HA	1.00	1.09	18	2
1:A:844:THR:O	1:A:845:LYS:HD2	0.99	1.56	1	9
1:A:857:TYR:HB3	1:A:891:VAL:HG12	0.99	1.34	2	19
1:A:841:LEU:HD12	1:A:867:ARG:HE	0.99	0.83	12	2
1:A:854:VAL:CG1	1:A:872:PHE:HZ	0.99	1.70	13	6
1:A:849:ASP:OD1	1:A:916:ARG:C	0.99	2.06	19	1
1:A:871:TYR:CZ	1:A:875:PHE:CZ	0.99	2.49	13	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:856:LEU:HD11	1:A:892:LEU:HD12	0.99	0.99	10	3
1:A:856:LEU:HD22	1:A:892:LEU:HD12	0.99	1.35	2	11
1:A:855:ARG:CA	1:A:889:THR:CG2	0.98	2.40	19	5
1:A:847:LEU:O	1:A:848:LEU:HB2	0.98	1.56	11	10
1:A:845:LYS:HB3	1:A:847:LEU:HD21	0.98	1.29	17	7
1:A:846:VAL:O	1:A:847:LEU:CD1	0.98	2.05	10	9
1:A:850:ILE:HD11	1:A:913:ILE:HG13	0.98	1.35	20	12
1:A:851:PHE:HE1	1:A:909:ILE:HA	0.98	1.16	3	16
1:A:855:ARG:CB	1:A:889:THR:CB	0.98	2.35	10	2
1:A:845:LYS:HZ1	1:A:867:ARG:CB	0.98	1.72	1	2
1:A:850:ILE:CD1	1:A:913:ILE:HG13	0.97	1.87	4	11
1:A:851:PHE:CE2	1:A:909:ILE:HA	0.97	1.94	13	3
1:A:854:VAL:O	1:A:872:PHE:HE1	0.97	1.35	7	13
1:A:881:GLN:O	1:A:884:ASP:N	0.97	1.98	19	20
1:A:854:VAL:CB	1:A:918:LEU:HG	0.97	1.90	18	1
1:A:851:PHE:HZ	1:A:909:ILE:HG23	0.97	1.16	10	17
1:A:847:LEU:CA	1:A:871:TYR:CZ	0.97	2.47	16	6
1:A:849:ASP:O	1:A:916:ARG:O	0.97	1.83	5	7
1:A:850:ILE:HD12	1:A:913:ILE:O	0.96	1.59	14	13
1:A:849:ASP:OD1	1:A:916:ARG:CB	0.96	2.13	19	1
1:A:875:PHE:CZ	1:A:913:ILE:HD12	0.96	1.95	19	13
1:A:850:ILE:HD13	1:A:913:ILE:O	0.96	1.58	16	3
1:A:882:GLU:O	1:A:885:MET:SD	0.96	2.24	6	4
1:A:845:LYS:O	1:A:847:LEU:CD1	0.96	2.14	17	7
1:A:845:LYS:NZ	1:A:867:ARG:HB3	0.96	1.74	1	3
1:A:851:PHE:CZ	1:A:909:ILE:HG23	0.96	1.94	12	20
1:A:885:MET:HB2	1:A:898:ASN:CB	0.96	1.91	15	20
1:A:880:VAL:HG21	1:A:888:ALA:HB1	0.96	1.38	16	19
1:A:841:LEU:HA	1:A:846:VAL:CG2	0.96	1.91	17	11
1:A:847:LEU:HD13	1:A:871:TYR:HE1	0.96	1.18	1	5
1:A:855:ARG:HD2	1:A:889:THR:N	0.95	1.72	6	4
1:A:855:ARG:NE	1:A:889:THR:OG1	0.95	1.98	10	1
1:A:854:VAL:HG22	1:A:890:HIS:NE2	0.95	1.76	18	3
1:A:858:LEU:HG	1:A:865:PHE:CE1	0.95	1.95	19	20
1:A:850:ILE:HD12	1:A:913:ILE:HA	0.95	1.14	16	5
1:A:845:LYS:C	1:A:847:LEU:HD21	0.95	1.86	17	15
1:A:847:LEU:C	1:A:875:PHE:CE1	0.95	2.44	16	2
1:A:847:LEU:HD12	1:A:875:PHE:HE1	0.95	1.22	19	15
1:A:856:LEU:CD1	1:A:857:TYR:N	0.95	2.27	13	16
1:A:909:ILE:O	1:A:913:ILE:CG1	0.95	2.14	16	4
1:A:851:PHE:CE2	1:A:909:ILE:CG1	0.95	2.50	7	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:854:VAL:CG2	1:A:918:LEU:CD2	0.95	2.43	19	13
1:A:851:PHE:HA	1:A:918:LEU:CG	0.95	1.91	14	11
1:A:854:VAL:CG2	1:A:918:LEU:CD1	0.95	2.44	7	2
1:A:854:VAL:HG13	1:A:890:HIS:NE2	0.94	1.76	14	6
1:A:858:LEU:HD13	1:A:859:PRO:HD2	0.94	1.37	16	9
1:A:837:ALA:CB	1:A:864:ASP:OD2	0.94	2.15	17	1
1:A:859:PRO:HG2	1:A:862:THR:OG1	0.94	1.60	18	7
1:A:870:ARG:O	1:A:874:ALA:HB2	0.94	1.63	17	20
1:A:894:SER:O	1:A:897:LYS:NZ	0.94	2.00	5	20
1:A:847:LEU:C	1:A:875:PHE:CE2	0.94	2.45	11	3
1:A:847:LEU:HD12	1:A:875:PHE:CE1	0.94	1.98	17	14
1:A:885:MET:HB2	1:A:898:ASN:CG	0.94	1.87	2	17
1:A:856:LEU:CB	1:A:872:PHE:CZ	0.94	2.51	16	4
1:A:850:ILE:O	1:A:852:THR:N	0.94	2.01	15	18
1:A:894:SER:C	1:A:897:LYS:HZ2	0.94	1.70	14	9
1:A:856:LEU:CB	1:A:872:PHE:CE2	0.94	2.51	16	4
1:A:857:TYR:H	1:A:891:VAL:HA	0.93	1.22	11	20
1:A:855:ARG:HG3	1:A:889:THR:N	0.93	1.75	6	4
1:A:841:LEU:CD1	1:A:867:ARG:HE	0.93	1.75	12	1
1:A:846:VAL:CA	1:A:847:LEU:HD22	0.93	1.93	10	20
1:A:912:CYS:SG	1:A:918:LEU:HD13	0.93	2.02	7	2
1:A:848:LEU:CB	1:A:850:ILE:HD11	0.93	1.94	19	18
1:A:851:PHE:HZ	1:A:909:ILE:CG1	0.93	1.74	17	12
1:A:856:LEU:HD12	1:A:872:PHE:CD2	0.93	1.98	12	4
1:A:852:THR:OG1	1:A:918:LEU:CD2	0.93	2.17	15	1
1:A:847:LEU:CD1	1:A:875:PHE:HE1	0.93	1.76	8	15
1:A:878:ASP:C	1:A:879:LEU:CD2	0.93	2.41	16	12
1:A:871:TYR:CZ	1:A:875:PHE:HZ	0.93	1.82	10	12
1:A:841:LEU:CD1	1:A:841:LEU:C	0.93	2.38	13	2
1:A:841:LEU:HD21	1:A:845:LYS:N	0.93	1.78	11	2
1:A:909:ILE:C	1:A:913:ILE:HG13	0.93	1.87	13	3
1:A:850:ILE:HG22	1:A:912:CYS:C	0.92	1.85	11	3
1:A:841:LEU:HD21	1:A:845:LYS:HE3	0.92	1.41	11	7
1:A:854:VAL:CG1	1:A:890:HIS:CD2	0.92	2.51	5	10
1:A:844:THR:C	1:A:846:VAL:H	0.92	1.72	11	5
1:A:851:PHE:CZ	1:A:909:ILE:CG2	0.92	2.53	12	9
1:A:894:SER:C	1:A:897:LYS:NZ	0.92	2.27	14	20
1:A:841:LEU:CD1	1:A:867:ARG:NE	0.91	2.33	12	2
1:A:885:MET:SD	1:A:897:LYS:CD	0.91	2.59	14	18
1:A:869:ARG:O	1:A:873:VAL:HG12	0.91	1.64	18	14
1:A:847:LEU:HD12	1:A:871:TYR:HD1	0.91	1.25	16	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:856:LEU:C	1:A:856:LEU:CD2	0.91	2.40	12	4
1:A:895:ARG:O	1:A:898:ASN:N	0.91	2.04	5	20
1:A:885:MET:SD	1:A:898:ASN:HB2	0.91	2.05	3	17
1:A:845:LYS:O	1:A:871:TYR:HE1	0.91	1.23	19	2
1:A:889:THR:HG23	1:A:890:HIS:CG	0.91	2.00	14	1
1:A:885:MET:CB	1:A:898:ASN:HB2	0.91	1.95	7	20
1:A:889:THR:O	1:A:901:ALA:HA	0.91	1.65	16	20
1:A:848:LEU:CD2	1:A:916:ARG:CG	0.90	2.49	5	3
1:A:847:LEU:HA	1:A:875:PHE:HE1	0.90	1.26	7	1
1:A:909:ILE:CG2	1:A:913:ILE:HD11	0.90	1.96	13	5
1:A:908:TRP:CZ2	1:A:918:LEU:HD12	0.90	2.01	16	6
1:A:845:LYS:CA	1:A:871:TYR:CE2	0.90	2.52	18	5
1:A:895:ARG:CG	1:A:903:GLN:NE2	0.90	2.34	9	3
1:A:850:ILE:CG1	1:A:913:ILE:CB	0.90	2.48	2	12
1:A:851:PHE:HZ	1:A:909:ILE:CA	0.90	1.74	5	5
1:A:885:MET:CE	1:A:897:LYS:CB	0.90	2.31	18	9
1:A:855:ARG:HE	1:A:889:THR:HA	0.90	1.26	14	1
1:A:850:ILE:CD1	1:A:913:ILE:C	0.90	2.37	20	12
1:A:862:THR:CG2	1:A:868:LEU:HD12	0.90	1.97	19	15
1:A:871:TYR:O	1:A:875:PHE:CD1	0.89	2.25	3	18
1:A:847:LEU:N	1:A:871:TYR:HE1	0.89	1.66	4	5
1:A:843:GLN:HB2	1:A:846:VAL:HG12	0.89	1.42	1	9
1:A:860:PRO:HA	1:A:865:PHE:CD2	0.89	2.01	16	3
1:A:846:VAL:HB	1:A:871:TYR:OH	0.89	1.67	17	3
1:A:848:LEU:CD2	1:A:916:ARG:HG2	0.89	1.96	5	1
1:A:844:THR:HG22	1:A:844:THR:O	0.89	1.63	16	3
1:A:845:LYS:NZ	1:A:867:ARG:CB	0.89	2.35	1	2
1:A:841:LEU:HD21	1:A:845:LYS:HE2	0.89	1.42	7	2
1:A:845:LYS:HA	1:A:871:TYR:CE2	0.89	2.02	18	5
1:A:871:TYR:HE1	1:A:875:PHE:CE1	0.89	1.84	16	2
1:A:919:VAL:HG23	1:A:920:ALA:N	0.89	1.83	16	20
1:A:871:TYR:HD1	1:A:875:PHE:CE1	0.89	1.80	18	3
1:A:841:LEU:HD21	1:A:845:LYS:H	0.88	1.26	18	2
1:A:851:PHE:CE1	1:A:909:ILE:CG1	0.88	2.55	16	8
1:A:856:LEU:HB2	1:A:890:HIS:HB2	0.88	1.44	14	1
1:A:845:LYS:O	1:A:847:LEU:CD2	0.88	2.20	18	10
1:A:847:LEU:HA	1:A:871:TYR:CZ	0.88	2.03	16	6
1:A:912:CYS:SG	1:A:919:VAL:HG13	0.88	2.09	13	7
1:A:852:THR:H	1:A:918:LEU:HD21	0.88	1.14	15	2
1:A:882:GLU:C	1:A:885:MET:HE3	0.88	1.93	14	18
1:A:905:SER:CB	1:A:906:PRO:HD2	0.88	1.98	4	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:855:ARG:HG2	1:A:889:THR:CA	0.88	1.95	6	1
1:A:856:LEU:HD21	1:A:892:LEU:HB2	0.88	1.43	12	2
1:A:848:LEU:CD1	1:A:916:ARG:CD	0.88	2.38	14	1
1:A:871:TYR:CG	1:A:875:PHE:CE1	0.88	2.62	4	18
1:A:906:PRO:HG2	1:A:907:GLU:OE1	0.87	1.69	7	4
1:A:841:LEU:HD12	1:A:841:LEU:C	0.87	1.92	13	2
1:A:841:LEU:CD2	1:A:846:VAL:CG2	0.87	2.52	10	7
1:A:852:THR:N	1:A:918:LEU:CD2	0.87	2.38	14	14
1:A:854:VAL:HG11	1:A:908:TRP:CZ3	0.87	2.03	12	12
1:A:895:ARG:HG2	1:A:903:GLN:NE2	0.87	1.85	19	3
1:A:882:GLU:HA	1:A:885:MET:CE	0.87	2.00	14	20
1:A:855:ARG:CZ	1:A:889:THR:OG1	0.87	2.23	10	2
1:A:854:VAL:O	1:A:872:PHE:HZ	0.86	1.49	17	7
1:A:880:VAL:HG21	1:A:888:ALA:HB2	0.86	1.47	14	19
1:A:857:TYR:CB	1:A:891:VAL:HA	0.86	1.98	10	11
1:A:891:VAL:HG13	1:A:901:ALA:CB	0.86	2.00	3	18
1:A:846:VAL:HG22	1:A:871:TYR:HH	0.86	1.10	1	5
1:A:841:LEU:HD13	1:A:846:VAL:CG2	0.86	1.99	8	1
1:A:849:ASP:HB2	1:A:916:ARG:CD	0.86	1.99	5	1
1:A:845:LYS:HG3	1:A:871:TYR:CD1	0.86	2.05	20	2
1:A:847:LEU:HA	1:A:875:PHE:CZ	0.86	2.06	18	9
1:A:850:ILE:CD1	1:A:913:ILE:CG1	0.86	2.54	20	12
1:A:850:ILE:CD1	1:A:913:ILE:CB	0.86	2.54	8	12
1:A:847:LEU:CB	1:A:871:TYR:CE1	0.86	2.57	13	3
1:A:879:LEU:HD23	1:A:879:LEU:N	0.86	1.84	16	3
1:A:845:LYS:HZ1	1:A:867:ARG:HG2	0.85	1.30	3	3
1:A:850:ILE:HD12	1:A:913:ILE:CG2	0.85	2.00	7	2
1:A:841:LEU:HD13	1:A:846:VAL:HG22	0.85	1.46	8	1
1:A:855:ARG:HE	1:A:889:THR:CA	0.85	1.80	14	1
1:A:847:LEU:CD1	1:A:875:PHE:CE1	0.85	2.59	8	15
1:A:908:TRP:O	1:A:912:CYS:SG	0.85	2.34	14	18
1:A:878:ASP:O	1:A:879:LEU:HD12	0.85	1.71	5	6
1:A:850:ILE:HG22	1:A:912:CYS:SG	0.85	2.11	7	2
1:A:841:LEU:CD2	1:A:845:LYS:HA	0.85	2.01	1	8
1:A:871:TYR:HE1	1:A:875:PHE:CE2	0.85	1.87	11	3
1:A:841:LEU:HD22	1:A:846:VAL:HG21	0.85	1.48	14	5
1:A:840:THR:O	1:A:846:VAL:HG11	0.85	1.72	16	17
1:A:851:PHE:HE2	1:A:909:ILE:HG13	0.85	1.29	7	3
1:A:850:ILE:HG22	1:A:912:CYS:CB	0.84	2.02	3	7
1:A:857:TYR:HB3	1:A:891:VAL:CA	0.84	1.99	10	9
1:A:850:ILE:HG21	1:A:913:ILE:HA	0.84	0.87	16	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:845:LYS:N	1:A:845:LYS:HD2	0.84	1.87	13	3
1:A:846:VAL:O	1:A:847:LEU:CD2	0.84	2.25	11	17
1:A:848:LEU:HD22	1:A:916:ARG:HD2	0.84	1.47	11	1
1:A:886:THR:N	1:A:898:ASN:OD1	0.84	2.11	17	13
1:A:846:VAL:CG2	1:A:871:TYR:HH	0.84	1.73	1	5
1:A:890:HIS:CD2	1:A:902:GLN:HB2	0.84	2.08	17	9
1:A:844:THR:O	1:A:844:THR:CG2	0.84	2.26	16	5
1:A:841:LEU:HD23	1:A:841:LEU:C	0.84	1.98	16	1
1:A:850:ILE:C	1:A:852:THR:H	0.84	1.81	16	17
1:A:858:LEU:CD1	1:A:859:PRO:HD2	0.84	2.02	11	20
1:A:856:LEU:CD2	1:A:892:LEU:CD1	0.84	2.56	2	11
1:A:856:LEU:CB	1:A:890:HIS:HB3	0.83	2.02	2	15
1:A:858:LEU:HG	1:A:865:PHE:CD1	0.83	2.08	7	20
1:A:908:TRP:CH2	1:A:918:LEU:HD12	0.83	2.07	7	6
1:A:850:ILE:CG1	1:A:913:ILE:C	0.83	2.50	13	2
1:A:857:TYR:N	1:A:891:VAL:HA	0.83	1.89	17	19
1:A:872:PHE:CD1	1:A:879:LEU:HD21	0.83	2.09	6	13
1:A:850:ILE:HG12	1:A:913:ILE:CA	0.83	1.95	18	2
1:A:885:MET:SD	1:A:897:LYS:CA	0.83	2.67	2	15
1:A:851:PHE:CD1	1:A:908:TRP:CH2	0.83	2.67	14	12
1:A:918:LEU:HD22	1:A:918:LEU:H	0.83	1.34	7	4
1:A:841:LEU:HD23	1:A:846:VAL:CG2	0.83	2.03	12	4
1:A:855:ARG:O	1:A:890:HIS:O	0.83	1.95	13	4
1:A:845:LYS:CB	1:A:847:LEU:HD21	0.83	2.04	19	6
1:A:859:PRO:CD	1:A:892:LEU:HB3	0.83	2.03	14	19
1:A:871:TYR:O	1:A:874:ALA:HB3	0.83	1.74	13	20
1:A:871:TYR:CE2	1:A:913:ILE:CD1	0.83	2.61	3	5
1:A:855:ARG:HD2	1:A:888:ALA:C	0.83	1.96	17	10
1:A:844:THR:O	1:A:845:LYS:CE	0.83	2.26	15	6
1:A:854:VAL:CG1	1:A:872:PHE:CZ	0.83	2.61	16	7
1:A:841:LEU:HA	1:A:846:VAL:HG21	0.82	1.50	17	3
1:A:895:ARG:C	1:A:897:LYS:HE3	0.82	2.00	14	20
1:A:855:ARG:HG2	1:A:889:THR:HG22	0.82	0.85	6	1
1:A:847:LEU:C	1:A:875:PHE:HE1	0.82	1.77	16	2
1:A:885:MET:C	1:A:898:ASN:ND2	0.82	2.36	11	17
1:A:855:ARG:O	1:A:855:ARG:CG	0.82	2.27	7	14
1:A:850:ILE:HD12	1:A:913:ILE:CB	0.82	2.04	10	4
1:A:889:THR:C	1:A:890:HIS:HD1	0.82	1.81	14	1
1:A:851:PHE:O	1:A:854:VAL:N	0.82	2.10	5	17
1:A:858:LEU:HD12	1:A:859:PRO:CD	0.82	2.05	19	19
1:A:890:HIS:HA	1:A:902:GLN:N	0.82	1.88	14	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:856:LEU:HD13	1:A:856:LEU:C	0.82	1.99	12	1
1:A:838:ASP:O	1:A:842:CYS:HB2	0.82	1.74	3	8
1:A:855:ARG:O	1:A:889:THR:CG2	0.82	2.27	19	10
1:A:849:ASP:OD2	1:A:916:ARG:CZ	0.82	2.27	1	2
1:A:865:PHE:CE2	1:A:869:ARG:NH1	0.82	2.48	10	3
1:A:848:LEU:O	1:A:875:PHE:HD2	0.82	1.56	13	3
1:A:841:LEU:HD13	1:A:845:LYS:HA	0.82	1.52	2	5
1:A:855:ARG:CG	1:A:855:ARG:O	0.82	2.27	6	1
1:A:845:LYS:O	1:A:847:LEU:HD13	0.81	1.74	7	8
1:A:852:THR:CG2	1:A:852:THR:O	0.81	2.29	12	19
1:A:888:ALA:HB3	1:A:898:ASN:ND2	0.81	1.89	6	4
1:A:858:LEU:CD2	1:A:868:LEU:CB	0.81	2.41	8	9
1:A:847:LEU:CD1	1:A:871:TYR:CG	0.81	2.64	13	2
1:A:858:LEU:HD13	1:A:892:LEU:HD13	0.81	1.53	4	15
1:A:862:THR:HG21	1:A:868:LEU:HD12	0.81	1.48	8	14
1:A:841:LEU:HD12	1:A:845:LYS:HE2	0.81	1.52	6	5
1:A:870:ARG:O	1:A:874:ALA:CB	0.81	2.28	10	20
1:A:914:ARG:O	1:A:916:ARG:CZ	0.81	2.28	4	6
1:A:885:MET:O	1:A:898:ASN:ND2	0.81	2.13	11	16
1:A:848:LEU:HD13	1:A:916:ARG:CG	0.81	2.04	14	1
1:A:845:LYS:HD3	1:A:871:TYR:CD1	0.80	2.11	4	2
1:A:851:PHE:CD2	1:A:908:TRP:HZ3	0.80	1.94	18	3
1:A:909:ILE:O	1:A:913:ILE:N	0.80	2.14	13	2
1:A:847:LEU:C	1:A:875:PHE:HE2	0.80	1.81	11	2
1:A:846:VAL:O	1:A:847:LEU:HD23	0.80	1.76	11	7
1:A:845:LYS:HG3	1:A:871:TYR:HD1	0.80	1.36	20	2
1:A:846:VAL:HG22	1:A:871:TYR:CZ	0.80	2.11	3	4
1:A:850:ILE:C	1:A:918:LEU:HD11	0.80	1.99	8	10
1:A:849:ASP:OD1	1:A:916:ARG:HB3	0.80	1.77	19	1
1:A:857:TYR:O	1:A:892:LEU:N	0.79	2.14	12	6
1:A:857:TYR:O	1:A:892:LEU:HB2	0.79	1.76	12	4
1:A:841:LEU:CD1	1:A:845:LYS:HA	0.79	2.05	8	3
1:A:889:THR:O	1:A:901:ALA:CA	0.79	2.29	16	12
1:A:846:VAL:O	1:A:847:LEU:HD22	0.79	1.75	10	6
1:A:848:LEU:CD2	1:A:916:ARG:HD3	0.79	2.05	11	2
1:A:846:VAL:CG2	1:A:913:ILE:HD11	0.79	2.08	1	4
1:A:849:ASP:CG	1:A:916:ARG:HD3	0.79	2.00	1	2
1:A:852:THR:HG22	1:A:918:LEU:HD23	0.79	1.55	11	5
1:A:847:LEU:CB	1:A:871:TYR:HE1	0.79	1.90	13	3
1:A:851:PHE:CD1	1:A:908:TRP:HZ3	0.79	1.93	17	9
1:A:885:MET:CE	1:A:897:LYS:HD3	0.79	2.07	6	18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:855:ARG:CZ	1:A:889:THR:CB	0.79	2.60	10	2
1:A:854:VAL:HG21	1:A:918:LEU:HD12	0.79	1.49	7	1
1:A:885:MET:HA	1:A:888:ALA:HB2	0.79	1.54	17	18
1:A:847:LEU:CA	1:A:875:PHE:HE1	0.79	1.83	16	2
1:A:845:LYS:HZ1	1:A:867:ARG:HD3	0.79	1.37	18	2
1:A:879:LEU:CD2	1:A:879:LEU:N	0.79	2.46	16	2
1:A:849:ASP:O	1:A:917:ARG:HA	0.79	1.78	18	2
1:A:851:PHE:CD2	1:A:872:PHE:CD2	0.79	2.71	8	11
1:A:871:TYR:CE1	1:A:875:PHE:HZ	0.79	1.92	16	3
1:A:856:LEU:HB3	1:A:890:HIS:HB2	0.78	1.54	14	1
1:A:849:ASP:OD1	1:A:916:ARG:HD3	0.78	1.78	1	1
1:A:856:LEU:HA	1:A:890:HIS:CA	0.78	2.08	17	16
1:A:858:LEU:HD12	1:A:859:PRO:HD2	0.78	1.53	17	19
1:A:882:GLU:O	1:A:885:MET:CE	0.78	2.27	14	18
1:A:877:GLY:O	1:A:878:ASP:OD1	0.78	2.02	13	6
1:A:845:LYS:HB3	1:A:847:LEU:HD11	0.78	1.52	18	8
1:A:858:LEU:HD12	1:A:859:PRO:N	0.78	1.94	18	19
1:A:871:TYR:CG	1:A:875:PHE:CZ	0.78	2.72	4	19
1:A:891:VAL:O	1:A:902:GLN:O	0.78	2.01	2	17
1:A:855:ARG:NE	1:A:889:THR:CA	0.78	2.39	14	1
1:A:855:ARG:CB	1:A:890:HIS:N	0.78	2.47	13	4
1:A:844:THR:O	1:A:844:THR:HG22	0.78	1.78	11	2
1:A:880:VAL:CG2	1:A:888:ALA:CB	0.77	2.57	13	16
1:A:891:VAL:HG21	1:A:895:ARG:HA	0.77	1.55	14	5
1:A:846:VAL:CG2	1:A:847:LEU:N	0.77	2.47	3	9
1:A:851:PHE:HD1	1:A:908:TRP:CH2	0.77	1.95	8	17
1:A:841:LEU:HD13	1:A:841:LEU:O	0.77	1.79	19	1
1:A:871:TYR:CZ	1:A:913:ILE:HD12	0.77	2.13	17	5
1:A:847:LEU:CA	1:A:875:PHE:HE2	0.77	1.87	11	2
1:A:850:ILE:HD13	1:A:916:ARG:HA	0.77	1.56	14	1
1:A:851:PHE:CA	1:A:918:LEU:HD21	0.77	2.09	14	1
1:A:915:LYS:O	1:A:917:ARG:HG2	0.77	1.80	16	13
1:A:885:MET:CE	1:A:897:LYS:CD	0.77	2.62	6	2
1:A:859:PRO:HD3	1:A:892:LEU:HB3	0.77	1.56	16	19
1:A:847:LEU:O	1:A:913:ILE:CD1	0.76	2.33	3	4
1:A:885:MET:SD	1:A:897:LYS:HD3	0.76	2.20	14	15
1:A:851:PHE:C	1:A:918:LEU:CD2	0.76	2.52	14	7
1:A:906:PRO:O	1:A:910:TRP:CD1	0.76	2.39	8	15
1:A:855:ARG:N	1:A:890:HIS:ND1	0.76	2.32	13	4
1:A:847:LEU:O	1:A:913:ILE:HG13	0.76	1.81	1	5
1:A:885:MET:SD	1:A:898:ASN:N	0.76	2.58	7	18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:837:ALA:HB2	1:A:864:ASP:OD2	0.76	1.79	17	1
1:A:885:MET:CB	1:A:898:ASN:CB	0.75	2.64	15	17
1:A:854:VAL:HG23	1:A:918:LEU:HD21	0.75	1.58	19	8
1:A:849:ASP:OD1	1:A:916:ARG:HA	0.75	1.79	19	1
1:A:872:PHE:O	1:A:875:PHE:N	0.75	2.19	1	15
1:A:852:THR:H	1:A:918:LEU:CD2	0.75	1.94	15	1
1:A:851:PHE:CE2	1:A:875:PHE:CE2	0.75	2.75	15	15
1:A:878:ASP:O	1:A:879:LEU:CD1	0.75	2.35	14	6
1:A:847:LEU:HA	1:A:871:TYR:HE1	0.75	0.66	7	2
1:A:841:LEU:CD2	1:A:846:VAL:HG23	0.75	2.12	15	3
1:A:841:LEU:CD2	1:A:845:LYS:N	0.75	2.49	11	2
1:A:885:MET:CE	1:A:897:LYS:CG	0.75	2.61	18	3
1:A:847:LEU:CG	1:A:871:TYR:CE1	0.75	2.69	13	3
1:A:885:MET:O	1:A:886:THR:C	0.74	2.29	7	20
1:A:915:LYS:O	1:A:917:ARG:CD	0.74	2.35	7	13
1:A:871:TYR:OH	1:A:913:ILE:HD13	0.74	1.80	4	5
1:A:845:LYS:O	1:A:846:VAL:HG23	0.74	1.82	19	10
1:A:891:VAL:HB	1:A:897:LYS:HZ2	0.74	1.42	11	7
1:A:882:GLU:CA	1:A:885:MET:HE3	0.74	2.12	19	18
1:A:889:THR:HG23	1:A:890:HIS:CE1	0.74	2.17	14	1
1:A:851:PHE:CE1	1:A:908:TRP:CZ3	0.74	2.74	8	17
1:A:891:VAL:HB	1:A:897:LYS:HZ3	0.74	1.43	16	11
1:A:895:ARG:CA	1:A:897:LYS:HE3	0.74	2.13	12	20
1:A:905:SER:HB2	1:A:906:PRO:HD2	0.74	1.59	1	10
1:A:856:LEU:CD2	1:A:857:TYR:N	0.74	2.47	10	2
1:A:857:TYR:N	1:A:890:HIS:O	0.73	2.21	17	20
1:A:905:SER:CB	1:A:906:PRO:CD	0.73	2.66	4	20
1:A:855:ARG:CG	1:A:889:THR:H	0.73	1.76	6	1
1:A:855:ARG:CB	1:A:890:HIS:H	0.73	1.96	13	3
1:A:885:MET:CB	1:A:898:ASN:CG	0.73	2.62	8	14
1:A:856:LEU:CD1	1:A:857:TYR:C	0.73	2.62	18	16
1:A:856:LEU:HG	1:A:872:PHE:CE2	0.73	2.17	14	2
1:A:851:PHE:HE1	1:A:909:ILE:HG13	0.73	1.40	16	2
1:A:841:LEU:HD21	1:A:844:THR:O	0.73	1.83	20	1
1:A:885:MET:HE2	1:A:897:LYS:HB2	0.73	0.75	18	2
1:A:841:LEU:HD13	1:A:845:LYS:CE	0.73	2.13	10	3
1:A:850:ILE:O	1:A:918:LEU:HD21	0.73	1.82	15	5
1:A:848:LEU:HB3	1:A:850:ILE:CD1	0.73	2.12	18	10
1:A:855:ARG:HB3	1:A:890:HIS:H	0.73	1.43	13	2
1:A:847:LEU:CA	1:A:871:TYR:OH	0.73	2.36	16	2
1:A:848:LEU:CG	1:A:916:ARG:HG3	0.73	2.14	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:847:LEU:HB3	1:A:875:PHE:CD1	0.73	2.19	10	5
1:A:837:ALA:HB2	1:A:910:TRP:CZ2	0.73	2.19	10	7
1:A:850:ILE:O	1:A:917:ARG:O	0.73	2.07	18	2
1:A:895:ARG:O	1:A:896:ASP:C	0.72	2.31	5	20
1:A:846:VAL:N	1:A:847:LEU:HD22	0.72	1.97	1	12
1:A:841:LEU:HD13	1:A:845:LYS:HE3	0.72	1.61	12	3
1:A:856:LEU:HD21	1:A:892:LEU:CB	0.72	2.14	12	3
1:A:850:ILE:HG22	1:A:912:CYS:HB3	0.72	1.61	20	7
1:A:855:ARG:O	1:A:855:ARG:HG3	0.72	1.84	6	14
1:A:871:TYR:CE2	1:A:913:ILE:HD13	0.72	2.19	3	4
1:A:855:ARG:C	1:A:889:THR:CG2	0.72	2.59	19	4
1:A:857:TYR:CD1	1:A:857:TYR:C	0.72	2.66	13	5
1:A:912:CYS:SG	1:A:919:VAL:HG22	0.72	2.25	13	2
1:A:882:GLU:HA	1:A:885:MET:HE3	0.72	1.62	7	17
1:A:895:ARG:NE	1:A:903:GLN:OE1	0.72	2.22	15	5
1:A:844:THR:C	1:A:846:VAL:N	0.72	2.39	18	5
1:A:847:LEU:O	1:A:848:LEU:CB	0.72	2.38	16	5
1:A:875:PHE:O	1:A:876:ASP:CB	0.72	2.38	2	20
1:A:845:LYS:C	1:A:846:VAL:CG2	0.72	2.63	19	11
1:A:909:ILE:CG2	1:A:913:ILE:CD1	0.72	2.68	13	2
1:A:841:LEU:CD2	1:A:841:LEU:C	0.72	2.60	16	1
1:A:905:SER:OG	1:A:906:PRO:HD2	0.72	1.84	20	19
1:A:855:ARG:CD	1:A:888:ALA:C	0.71	2.63	19	9
1:A:850:ILE:HG23	1:A:913:ILE:N	0.71	1.98	18	2
1:A:851:PHE:CB	1:A:918:LEU:HD11	0.71	2.14	13	2
1:A:845:LYS:NZ	1:A:867:ARG:HG2	0.71	1.98	3	6
1:A:848:LEU:CB	1:A:850:ILE:CD1	0.71	2.68	13	17
1:A:857:TYR:HB3	1:A:891:VAL:CG1	0.71	2.14	17	17
1:A:841:LEU:HA	1:A:846:VAL:HG22	0.71	1.62	2	9
1:A:850:ILE:CD1	1:A:913:ILE:CG2	0.71	2.68	7	2
1:A:845:LYS:HE2	1:A:867:ARG:HG2	0.71	1.63	13	1
1:A:871:TYR:C	1:A:875:PHE:CE1	0.71	2.69	1	11
1:A:841:LEU:HD12	1:A:845:LYS:CE	0.71	2.15	14	5
1:A:837:ALA:O	1:A:841:LEU:N	0.71	2.20	8	9
1:A:871:TYR:O	1:A:875:PHE:CD2	0.71	2.44	7	2
1:A:845:LYS:CG	1:A:847:LEU:HD11	0.71	2.16	20	2
1:A:845:LYS:C	1:A:846:VAL:HG23	0.71	2.09	17	4
1:A:882:GLU:CA	1:A:885:MET:SD	0.71	2.79	6	2
1:A:850:ILE:HD11	1:A:913:ILE:O	0.71	1.85	14	3
1:A:862:THR:CG2	1:A:863:PRO:HD2	0.71	2.15	18	1
1:A:914:ARG:O	1:A:916:ARG:NE	0.71	2.24	18	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:895:ARG:CG	1:A:903:GLN:HE21	0.70	1.99	14	3
1:A:856:LEU:CD1	1:A:872:PHE:CE2	0.70	2.66	12	3
1:A:851:PHE:HD2	1:A:908:TRP:CH2	0.70	2.03	18	3
1:A:854:VAL:HG23	1:A:918:LEU:HD23	0.70	1.62	19	12
1:A:877:GLY:C	1:A:878:ASP:OD1	0.70	2.34	13	1
1:A:856:LEU:CB	1:A:890:HIS:CB	0.70	2.69	9	15
1:A:890:HIS:CD2	1:A:902:GLN:CB	0.70	2.74	7	10
1:A:885:MET:HG3	1:A:898:ASN:HB2	0.70	1.61	14	3
1:A:850:ILE:N	1:A:850:ILE:HD12	0.70	2.01	18	2
1:A:882:GLU:HA	1:A:885:MET:SD	0.70	2.26	6	2
1:A:845:LYS:CD	1:A:867:ARG:HB3	0.70	2.16	16	2
1:A:857:TYR:CB	1:A:891:VAL:HG12	0.70	2.13	17	18
1:A:847:LEU:N	1:A:847:LEU:CD2	0.70	2.44	3	2
1:A:849:ASP:O	1:A:917:ARG:CA	0.70	2.39	18	1
1:A:857:TYR:H	1:A:891:VAL:CA	0.70	1.99	3	18
1:A:882:GLU:C	1:A:885:MET:SD	0.70	2.75	6	2
1:A:858:LEU:HD21	1:A:868:LEU:HB2	0.70	1.57	8	4
1:A:847:LEU:C	1:A:875:PHE:CD2	0.70	2.70	18	3
1:A:841:LEU:CD1	1:A:845:LYS:H	0.70	2.00	13	2
1:A:840:THR:OG1	1:A:841:LEU:N	0.70	2.22	16	3
1:A:845:LYS:NZ	1:A:867:ARG:HD3	0.70	2.01	18	1
1:A:871:TYR:CE2	1:A:913:ILE:HD12	0.70	2.22	17	5
1:A:880:VAL:HG12	1:A:884:ASP:O	0.70	1.86	10	16
1:A:854:VAL:HG13	1:A:890:HIS:CG	0.70	2.22	13	8
1:A:885:MET:HE2	1:A:897:LYS:CD	0.70	2.15	18	2
1:A:850:ILE:HG22	1:A:912:CYS:O	0.69	1.82	7	2
1:A:878:ASP:O	1:A:879:LEU:CD2	0.69	2.40	10	2
1:A:856:LEU:CD1	1:A:856:LEU:O	0.69	2.31	4	14
1:A:858:LEU:HD12	1:A:858:LEU:C	0.69	2.12	3	19
1:A:858:LEU:HD11	1:A:862:THR:HG21	0.69	1.64	4	18
1:A:871:TYR:HH	1:A:913:ILE:CD1	0.69	2.01	4	4
1:A:893:GLY:O	1:A:894:SER:HB2	0.69	1.86	15	16
1:A:845:LYS:O	1:A:871:TYR:CD1	0.69	2.45	8	9
1:A:846:VAL:HG22	1:A:847:LEU:N	0.69	2.01	3	4
1:A:841:LEU:HD11	1:A:845:LYS:CA	0.69	2.11	8	1
1:A:843:GLN:CB	1:A:846:VAL:HG12	0.69	2.18	16	9
1:A:919:VAL:CG2	1:A:920:ALA:N	0.69	2.55	16	11
1:A:856:LEU:CA	1:A:890:HIS:C	0.69	2.56	17	9
1:A:841:LEU:HD23	1:A:845:LYS:HA	0.69	1.65	1	2
1:A:921:PRO:O	1:A:922:CYS:HB3	0.69	1.85	20	3
1:A:904:VAL:HG23	1:A:905:SER:N	0.69	2.02	9	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:864:ASP:OD1	1:A:867:ARG:CZ	0.69	2.41	13	1
1:A:850:ILE:CD1	1:A:913:ILE:HG23	0.68	2.18	7	2
1:A:841:LEU:CD2	1:A:846:VAL:HG22	0.68	2.18	10	1
1:A:843:GLN:HB2	1:A:846:VAL:HG13	0.68	1.64	8	10
1:A:854:VAL:HG13	1:A:890:HIS:ND1	0.68	2.04	13	2
1:A:859:PRO:HD3	1:A:892:LEU:CB	0.68	2.18	16	15
1:A:891:VAL:HB	1:A:897:LYS:NZ	0.68	2.03	9	19
1:A:855:ARG:HB3	1:A:889:THR:N	0.68	2.04	16	3
1:A:880:VAL:HB	1:A:884:ASP:O	0.68	1.88	6	20
1:A:856:LEU:HA	1:A:890:HIS:O	0.68	1.86	17	9
1:A:854:VAL:HG23	1:A:918:LEU:CG	0.68	1.97	7	4
1:A:854:VAL:HG21	1:A:918:LEU:HD11	0.68	1.61	16	1
1:A:880:VAL:CG1	1:A:884:ASP:O	0.68	2.41	10	17
1:A:851:PHE:HB3	1:A:854:VAL:CG1	0.68	2.19	18	3
1:A:860:PRO:HA	1:A:865:PHE:CE2	0.68	2.24	16	1
1:A:850:ILE:HD11	1:A:913:ILE:CG1	0.68	2.16	17	5
1:A:889:THR:C	1:A:890:HIS:ND1	0.67	2.51	14	1
1:A:880:VAL:CG2	1:A:888:ALA:HB1	0.67	2.18	13	9
1:A:846:VAL:N	1:A:847:LEU:CD2	0.67	2.56	17	19
1:A:848:LEU:HB3	1:A:850:ILE:HD11	0.67	1.65	4	8
1:A:895:ARG:N	1:A:897:LYS:HE3	0.67	2.04	9	20
1:A:885:MET:C	1:A:898:ASN:CG	0.67	2.63	17	14
1:A:912:CYS:O	1:A:915:LYS:N	0.67	2.28	9	15
1:A:869:ARG:HG3	1:A:879:LEU:HD12	0.67	1.67	13	5
1:A:905:SER:HB3	1:A:906:PRO:HD2	0.67	1.64	4	11
1:A:847:LEU:HA	1:A:875:PHE:CD1	0.67	2.21	7	1
1:A:855:ARG:HG3	1:A:890:HIS:H	0.67	1.48	12	1
1:A:858:LEU:HD11	1:A:862:THR:CB	0.67	2.19	18	1
1:A:859:PRO:O	1:A:865:PHE:CD1	0.67	2.47	14	19
1:A:850:ILE:CD1	1:A:850:ILE:N	0.67	2.58	18	5
1:A:855:ARG:HB2	1:A:889:THR:CA	0.67	2.20	10	2
1:A:851:PHE:CG	1:A:872:PHE:CE2	0.67	2.83	17	11
1:A:841:LEU:HD22	1:A:846:VAL:HG22	0.67	1.67	10	2
1:A:908:TRP:CE2	1:A:912:CYS:SG	0.66	2.88	2	18
1:A:846:VAL:C	1:A:847:LEU:HD23	0.66	2.15	18	5
1:A:847:LEU:CA	1:A:875:PHE:CD1	0.66	2.78	7	2
1:A:851:PHE:CA	1:A:854:VAL:HB	0.66	2.20	12	15
1:A:918:LEU:CD2	1:A:918:LEU:H	0.66	2.02	7	2
1:A:845:LYS:HG3	1:A:847:LEU:HD11	0.66	1.66	1	2
1:A:847:LEU:O	1:A:913:ILE:CG1	0.66	2.43	1	5
1:A:856:LEU:CD2	1:A:892:LEU:N	0.66	2.59	15	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:893:GLY:O	1:A:894:SER:CB	0.66	2.42	9	11
1:A:841:LEU:CD2	1:A:845:LYS:HE3	0.66	2.20	11	3
1:A:851:PHE:CE2	1:A:909:ILE:HG12	0.66	2.26	12	7
1:A:878:ASP:O	1:A:879:LEU:HD22	0.66	1.90	10	2
1:A:890:HIS:HB3	1:A:902:GLN:O	0.66	1.91	14	1
1:A:916:ARG:C	1:A:917:ARG:HD3	0.66	2.16	2	12
1:A:844:THR:O	1:A:845:LYS:HE3	0.66	1.91	2	11
1:A:847:LEU:HD13	1:A:875:PHE:CE1	0.66	2.26	14	8
1:A:855:ARG:HG3	1:A:855:ARG:O	0.66	1.90	7	1
1:A:847:LEU:CA	1:A:875:PHE:CD2	0.66	2.78	18	2
1:A:905:SER:OG	1:A:922:CYS:C	0.66	2.39	18	1
1:A:865:PHE:HA	1:A:868:LEU:HB2	0.66	1.66	1	16
1:A:874:ALA:O	1:A:875:PHE:C	0.66	2.39	18	16
1:A:849:ASP:CB	1:A:916:ARG:HD2	0.66	2.13	5	1
1:A:888:ALA:HB3	1:A:898:ASN:HD22	0.66	1.51	20	3
1:A:918:LEU:HD22	1:A:918:LEU:N	0.66	2.04	7	2
1:A:844:THR:O	1:A:845:LYS:CD	0.66	2.41	1	3
1:A:841:LEU:HD21	1:A:845:LYS:CA	0.66	2.21	11	3
1:A:851:PHE:HA	1:A:918:LEU:HD13	0.66	1.58	13	2
1:A:883:PHE:O	1:A:884:ASP:OD1	0.65	2.13	7	15
1:A:911:ALA:O	1:A:915:LYS:CG	0.65	2.43	10	20
1:A:847:LEU:HD13	1:A:875:PHE:HE1	0.65	1.51	5	7
1:A:846:VAL:HG22	1:A:847:LEU:H	0.65	1.52	3	4
1:A:856:LEU:HB2	1:A:890:HIS:HB3	0.65	1.66	6	14
1:A:848:LEU:HB2	1:A:850:ILE:CD1	0.65	2.22	9	4
1:A:857:TYR:C	1:A:857:TYR:CD1	0.65	2.75	20	14
1:A:855:ARG:C	1:A:890:HIS:N	0.65	2.50	13	4
1:A:850:ILE:HG13	1:A:913:ILE:CG1	0.65	2.21	1	7
1:A:837:ALA:O	1:A:840:THR:N	0.65	2.30	12	15
1:A:851:PHE:CA	1:A:918:LEU:CD2	0.65	2.74	14	1
1:A:859:PRO:CG	1:A:862:THR:OG1	0.65	2.42	18	1
1:A:845:LYS:HB3	1:A:847:LEU:CD2	0.65	2.17	17	5
1:A:855:ARG:CG	1:A:889:THR:HG21	0.65	2.22	10	2
1:A:845:LYS:NZ	1:A:867:ARG:CG	0.65	2.60	3	5
1:A:852:THR:O	1:A:852:THR:HG23	0.65	1.91	14	18
1:A:896:ASP:O	1:A:898:ASN:N	0.65	2.30	19	20
1:A:838:ASP:O	1:A:842:CYS:CB	0.65	2.45	1	8
1:A:851:PHE:HB3	1:A:872:PHE:CZ	0.64	2.28	17	11
1:A:855:ARG:HG3	1:A:889:THR:CG2	0.64	2.20	10	1
1:A:883:PHE:CE2	1:A:884:ASP:OD2	0.64	2.50	6	14
1:A:850:ILE:N	1:A:850:ILE:HD13	0.64	2.08	6	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:865:PHE:CZ	1:A:869:ARG:HG3	0.64	2.27	18	3
1:A:850:ILE:O	1:A:917:ARG:CA	0.64	2.44	13	2
1:A:871:TYR:O	1:A:875:PHE:CE1	0.64	2.50	15	15
1:A:847:LEU:CD1	1:A:871:TYR:HE1	0.64	1.53	19	1
1:A:909:ILE:HG22	1:A:913:ILE:CD1	0.64	2.22	13	4
1:A:845:LYS:N	1:A:845:LYS:CD	0.64	2.60	13	3
1:A:873:VAL:HG12	1:A:879:LEU:HD22	0.64	1.68	9	4
1:A:885:MET:SD	1:A:897:LYS:CG	0.64	2.86	7	16
1:A:885:MET:CG	1:A:898:ASN:CB	0.64	2.75	10	15
1:A:921:PRO:O	1:A:922:CYS:CB	0.64	2.45	12	4
1:A:847:LEU:HD13	1:A:871:TYR:CG	0.64	2.24	13	1
1:A:862:THR:HG22	1:A:863:PRO:HD2	0.64	1.68	18	1
1:A:850:ILE:C	1:A:852:THR:N	0.64	2.56	6	18
1:A:887:SER:O	1:A:888:ALA:O	0.64	2.15	15	20
1:A:917:ARG:C	1:A:917:ARG:CD	0.64	2.71	15	7
1:A:895:ARG:N	1:A:903:GLN:HE21	0.64	1.91	9	3
1:A:855:ARG:NH1	1:A:878:ASP:HB2	0.64	1.98	13	1
1:A:845:LYS:CD	1:A:867:ARG:CB	0.64	2.75	16	1
1:A:846:VAL:HG23	1:A:913:ILE:HD11	0.64	1.70	20	2
1:A:857:TYR:O	1:A:892:LEU:CB	0.64	2.45	12	4
1:A:895:ARG:HA	1:A:897:LYS:HZ2	0.64	1.53	6	11
1:A:908:TRP:CD2	1:A:912:CYS:SG	0.64	2.91	19	15
1:A:855:ARG:HG3	1:A:889:THR:HG21	0.64	1.69	10	2
1:A:845:LYS:C	1:A:847:LEU:N	0.63	2.53	16	5
1:A:851:PHE:O	1:A:854:VAL:HB	0.63	1.92	9	17
1:A:857:TYR:CG	1:A:857:TYR:O	0.63	2.51	13	11
1:A:889:THR:CG2	1:A:890:HIS:CE1	0.63	2.81	14	1
1:A:841:LEU:HD11	1:A:845:LYS:HE2	0.63	1.71	8	2
1:A:848:LEU:O	1:A:875:PHE:CD2	0.63	2.48	13	2
1:A:856:LEU:HD21	1:A:892:LEU:N	0.63	2.08	15	2
1:A:890:HIS:HA	1:A:902:GLN:H	0.63	1.54	20	18
1:A:841:LEU:HD22	1:A:846:VAL:HG23	0.63	1.68	2	5
1:A:850:ILE:CB	1:A:913:ILE:HA	0.63	2.22	13	4
1:A:915:LYS:O	1:A:917:ARG:NH1	0.63	2.25	16	1
1:A:840:THR:O	1:A:842:CYS:N	0.63	2.32	16	3
1:A:869:ARG:O	1:A:873:VAL:CG1	0.63	2.47	8	12
1:A:891:VAL:HG13	1:A:901:ALA:HB1	0.62	1.70	3	7
1:A:892:LEU:O	1:A:893:GLY:O	0.62	2.17	16	16
1:A:855:ARG:N	1:A:889:THR:HG22	0.62	2.09	10	2
1:A:909:ILE:HG22	1:A:913:ILE:HD11	0.62	1.71	7	4
1:A:849:ASP:CG	1:A:916:ARG:HH11	0.62	2.01	1	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:851:PHE:CE1	1:A:908:TRP:CE3	0.62	2.87	8	11
1:A:851:PHE:CD2	1:A:875:PHE:CD2	0.62	2.87	20	14
1:A:889:THR:CG2	1:A:890:HIS:ND1	0.62	2.53	14	6
1:A:885:MET:HE1	1:A:897:LYS:HD3	0.62	1.71	3	16
1:A:889:THR:CG2	1:A:890:HIS:N	0.62	2.60	14	19
1:A:855:ARG:CG	1:A:890:HIS:N	0.62	2.62	11	11
1:A:851:PHE:HB3	1:A:854:VAL:HB	0.62	1.71	19	17
1:A:871:TYR:CG	1:A:875:PHE:HE1	0.62	2.06	1	4
1:A:875:PHE:O	1:A:876:ASP:CG	0.62	2.42	10	20
1:A:858:LEU:HD13	1:A:859:PRO:CD	0.62	2.19	16	1
1:A:845:LYS:CE	1:A:867:ARG:HG2	0.62	2.24	13	2
1:A:909:ILE:HG23	1:A:913:ILE:HD11	0.62	1.72	16	3
1:A:842:CYS:SG	1:A:843:GLN:HG2	0.62	2.34	9	2
1:A:845:LYS:C	1:A:846:VAL:O	0.62	2.42	10	1
1:A:854:VAL:CB	1:A:918:LEU:CG	0.62	2.70	18	1
1:A:842:CYS:O	1:A:842:CYS:SG	0.62	2.58	17	7
1:A:856:LEU:O	1:A:879:LEU:HD22	0.62	1.94	13	2
1:A:845:LYS:HD2	1:A:867:ARG:HB3	0.62	1.69	16	1
1:A:851:PHE:O	1:A:852:THR:C	0.62	2.43	16	18
1:A:847:LEU:C	1:A:875:PHE:CD1	0.62	2.77	16	2
1:A:848:LEU:HD23	1:A:849:ASP:H	0.62	1.55	16	2
1:A:851:PHE:HE2	1:A:909:ILE:HA	0.62	1.46	13	2
1:A:865:PHE:CE1	1:A:869:ARG:HB2	0.62	2.29	16	1
1:A:859:PRO:CD	1:A:892:LEU:CB	0.61	2.79	4	14
1:A:865:PHE:O	1:A:866:SER:C	0.61	2.43	16	20
1:A:855:ARG:CZ	1:A:889:THR:HB	0.61	2.20	6	1
1:A:857:TYR:H	1:A:890:HIS:C	0.61	2.03	12	12
1:A:875:PHE:O	1:A:876:ASP:HB2	0.61	1.95	8	20
1:A:895:ARG:HD3	1:A:903:GLN:OE1	0.61	1.94	18	11
1:A:859:PRO:HD2	1:A:892:LEU:HB3	0.61	1.71	14	5
1:A:875:PHE:CD1	1:A:875:PHE:N	0.61	2.68	1	15
1:A:915:LYS:O	1:A:917:ARG:CG	0.61	2.48	16	12
1:A:864:ASP:OD2	1:A:867:ARG:NH1	0.61	2.33	8	1
1:A:881:GLN:O	1:A:882:GLU:C	0.61	2.43	14	20
1:A:851:PHE:HA	1:A:918:LEU:CD2	0.61	2.25	14	1
1:A:883:PHE:CE1	1:A:884:ASP:OD2	0.61	2.54	2	4
1:A:845:LYS:HD3	1:A:871:TYR:HD1	0.61	1.52	4	2
1:A:841:LEU:HD22	1:A:845:LYS:HA	0.61	1.72	13	2
1:A:841:LEU:HD11	1:A:845:LYS:CE	0.61	2.25	8	3
1:A:885:MET:HA	1:A:888:ALA:CB	0.61	2.24	10	16
1:A:912:CYS:HA	1:A:919:VAL:CG1	0.61	2.25	7	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:849:ASP:OD1	1:A:849:ASP:N	0.61	2.33	15	2
1:A:847:LEU:O	1:A:850:ILE:CD1	0.61	2.48	18	1
1:A:856:LEU:O	1:A:879:LEU:CD2	0.61	2.48	18	1
1:A:882:GLU:C	1:A:884:ASP:H	0.61	2.03	14	20
1:A:854:VAL:HG13	1:A:890:HIS:HD2	0.61	1.46	14	1
1:A:848:LEU:O	1:A:875:PHE:HD1	0.61	1.78	16	1
1:A:837:ALA:HB1	1:A:864:ASP:OD2	0.61	1.95	17	1
1:A:837:ALA:HB2	1:A:910:TRP:CH2	0.61	2.31	15	8
1:A:895:ARG:HB3	1:A:903:GLN:CG	0.61	2.25	2	17
1:A:915:LYS:O	1:A:917:ARG:NE	0.61	2.34	6	6
1:A:871:TYR:CZ	1:A:875:PHE:CE1	0.61	2.84	7	2
1:A:841:LEU:HD23	1:A:846:VAL:HG23	0.61	1.73	17	1
1:A:885:MET:HB2	1:A:898:ASN:ND2	0.60	2.10	16	16
1:A:841:LEU:C	1:A:843:GLN:H	0.60	2.03	16	12
1:A:851:PHE:CE2	1:A:908:TRP:CZ3	0.60	2.88	18	3
1:A:845:LYS:HZ1	1:A:867:ARG:CD	0.60	2.08	18	1
1:A:895:ARG:O	1:A:897:LYS:HD2	0.60	1.96	18	19
1:A:856:LEU:CG	1:A:892:LEU:HD12	0.60	2.26	12	4
1:A:841:LEU:O	1:A:843:GLN:N	0.60	2.34	16	3
1:A:845:LYS:HZ2	1:A:867:ARG:CG	0.60	2.09	1	1
1:A:872:PHE:O	1:A:874:ALA:N	0.60	2.34	12	19
1:A:886:THR:CA	1:A:898:ASN:OD1	0.60	2.49	17	15
1:A:844:THR:O	1:A:845:LYS:NZ	0.60	2.34	12	3
1:A:885:MET:C	1:A:887:SER:N	0.60	2.53	6	20
1:A:856:LEU:HD21	1:A:892:LEU:CA	0.60	2.26	15	2
1:A:872:PHE:HA	1:A:875:PHE:CD1	0.60	2.31	11	3
1:A:855:ARG:HB3	1:A:890:HIS:N	0.60	2.10	13	2
1:A:864:ASP:OD1	1:A:867:ARG:NH1	0.60	2.34	10	2
1:A:918:LEU:H	1:A:918:LEU:CD2	0.60	2.09	16	1
1:A:867:ARG:O	1:A:868:LEU:C	0.60	2.44	8	20
1:A:872:PHE:O	1:A:873:VAL:C	0.60	2.44	3	19
1:A:889:THR:C	1:A:901:ALA:HA	0.60	2.22	16	5
1:A:845:LYS:CB	1:A:847:LEU:HD11	0.60	2.27	1	4
1:A:856:LEU:HA	1:A:890:HIS:HB2	0.60	1.72	14	1
1:A:845:LYS:HE3	1:A:845:LYS:N	0.60	2.12	16	2
1:A:880:VAL:CG2	1:A:888:ALA:HB2	0.59	2.23	13	10
1:A:917:ARG:CD	1:A:917:ARG:O	0.59	2.50	8	6
1:A:850:ILE:CG1	1:A:913:ILE:HG13	0.59	2.27	1	7
1:A:850:ILE:CG1	1:A:913:ILE:CG1	0.59	2.80	4	8
1:A:908:TRP:CD1	1:A:921:PRO:HA	0.59	2.33	15	20
1:A:856:LEU:HD13	1:A:857:TYR:N	0.59	2.08	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:871:TYR:C	1:A:875:PHE:CE2	0.59	2.81	7	2
1:A:855:ARG:NH1	1:A:878:ASP:CB	0.59	2.56	13	1
1:A:848:LEU:CD1	1:A:916:ARG:CG	0.59	2.76	14	1
1:A:858:LEU:CG	1:A:865:PHE:CE1	0.59	2.84	13	15
1:A:871:TYR:CZ	1:A:913:ILE:HD11	0.59	2.09	3	3
1:A:881:GLN:HB2	1:A:884:ASP:HB2	0.59	1.75	9	14
1:A:896:ASP:O	1:A:897:LYS:C	0.59	2.46	19	20
1:A:841:LEU:C	1:A:843:GLN:N	0.59	2.58	16	13
1:A:845:LYS:CD	1:A:867:ARG:HG2	0.59	2.27	10	1
1:A:847:LEU:O	1:A:875:PHE:HE2	0.59	1.80	11	3
1:A:840:THR:C	1:A:842:CYS:H	0.59	2.05	18	6
1:A:841:LEU:CD2	1:A:845:LYS:CA	0.59	2.80	11	7
1:A:841:LEU:CD2	1:A:845:LYS:HE2	0.59	2.23	7	1
1:A:865:PHE:CE1	1:A:869:ARG:HG3	0.59	2.33	18	1
1:A:885:MET:HG3	1:A:897:LYS:O	0.58	1.98	11	14
1:A:846:VAL:HG23	1:A:847:LEU:N	0.58	2.11	20	5
1:A:837:ALA:CB	1:A:910:TRP:CH2	0.58	2.86	15	4
1:A:845:LYS:HE3	1:A:845:LYS:HA	0.58	1.74	20	3
1:A:917:ARG:CD	1:A:918:LEU:N	0.58	2.65	18	1
1:A:883:PHE:CD1	1:A:884:ASP:OD1	0.58	2.56	12	2
1:A:849:ASP:CB	1:A:916:ARG:O	0.58	2.51	18	1
1:A:847:LEU:O	1:A:850:ILE:CG1	0.58	2.51	10	5
1:A:869:ARG:HG2	1:A:879:LEU:HD12	0.58	1.76	11	2
1:A:862:THR:HG21	1:A:868:LEU:CD1	0.58	2.27	9	8
1:A:872:PHE:HD1	1:A:873:VAL:N	0.58	1.97	1	6
1:A:882:GLU:CA	1:A:885:MET:CE	0.58	2.77	14	1
1:A:847:LEU:O	1:A:875:PHE:HE1	0.58	1.80	16	1
1:A:889:THR:O	1:A:901:ALA:C	0.58	2.46	16	1
1:A:845:LYS:O	1:A:847:LEU:HD11	0.58	1.97	17	1
1:A:845:LYS:CE	1:A:867:ARG:HB3	0.58	2.29	1	1
1:A:855:ARG:HG3	1:A:890:HIS:N	0.58	2.13	12	7
1:A:846:VAL:C	1:A:847:LEU:CG	0.58	2.76	10	7
1:A:874:ALA:O	1:A:876:ASP:N	0.58	2.37	16	6
1:A:908:TRP:O	1:A:912:CYS:CB	0.58	2.51	16	5
1:A:840:THR:C	1:A:842:CYS:N	0.57	2.61	16	7
1:A:891:VAL:CG2	1:A:902:GLN:O	0.57	2.52	7	17
1:A:847:LEU:N	1:A:847:LEU:HD13	0.57	2.13	17	1
1:A:847:LEU:O	1:A:850:ILE:HD13	0.57	1.99	18	1
1:A:852:THR:HG22	1:A:918:LEU:CD2	0.57	2.27	11	9
1:A:857:TYR:O	1:A:857:TYR:CG	0.57	2.58	7	6
1:A:881:GLN:O	1:A:885:MET:SD	0.57	2.63	18	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:871:TYR:O	1:A:874:ALA:CB	0.57	2.52	18	3
1:A:843:GLN:O	1:A:844:THR:O	0.57	2.22	11	2
1:A:854:VAL:CG1	1:A:890:HIS:NE2	0.57	2.63	14	1
1:A:840:THR:O	1:A:846:VAL:CG1	0.57	2.53	6	10
1:A:847:LEU:O	1:A:913:ILE:HD12	0.57	1.99	3	2
1:A:867:ARG:N	1:A:867:ARG:CD	0.57	2.65	20	2
1:A:848:LEU:HB2	1:A:913:ILE:O	0.57	2.00	5	1
1:A:856:LEU:HD12	1:A:857:TYR:CA	0.57	2.30	18	15
1:A:890:HIS:CG	1:A:902:GLN:HB2	0.57	2.35	19	10
1:A:891:VAL:HG23	1:A:902:GLN:O	0.57	2.00	5	12
1:A:872:PHE:HA	1:A:875:PHE:CD2	0.57	2.35	7	2
1:A:885:MET:SD	1:A:897:LYS:HD2	0.57	2.39	7	14
1:A:856:LEU:HD23	1:A:892:LEU:N	0.57	2.14	12	1
1:A:845:LYS:NZ	1:A:867:ARG:HG3	0.56	2.15	11	2
1:A:854:VAL:HG21	1:A:918:LEU:CB	0.56	2.30	18	1
1:A:845:LYS:HE3	1:A:845:LYS:H	0.56	1.59	16	3
1:A:841:LEU:HA	1:A:846:VAL:HG13	0.56	1.77	16	1
1:A:851:PHE:CB	1:A:854:VAL:HB	0.56	2.30	1	15
1:A:891:VAL:N	1:A:902:GLN:O	0.56	2.37	5	18
1:A:905:SER:OG	1:A:906:PRO:CD	0.56	2.54	20	13
1:A:867:ARG:O	1:A:871:TYR:N	0.56	2.35	8	17
1:A:915:LYS:C	1:A:917:ARG:H	0.56	2.09	5	11
1:A:865:PHE:O	1:A:867:ARG:N	0.56	2.38	11	4
1:A:856:LEU:HD22	1:A:857:TYR:C	0.56	2.25	12	1
1:A:858:LEU:CD1	1:A:858:LEU:C	0.56	2.78	16	2
1:A:841:LEU:CA	1:A:846:VAL:HG21	0.56	2.28	17	1
1:A:895:ARG:CA	1:A:897:LYS:CE	0.56	2.84	7	18
1:A:838:ASP:O	1:A:842:CYS:HB3	0.56	1.99	18	2
1:A:912:CYS:HA	1:A:919:VAL:HG13	0.56	1.77	14	13
1:A:917:ARG:CD	1:A:918:LEU:O	0.56	2.54	18	5
1:A:855:ARG:CG	1:A:890:HIS:H	0.56	2.14	12	1
1:A:858:LEU:HD23	1:A:868:LEU:C	0.56	2.26	13	5
1:A:850:ILE:HG23	1:A:913:ILE:O	0.56	2.01	7	2
1:A:895:ARG:HA	1:A:897:LYS:HZ1	0.56	1.60	20	1
1:A:886:THR:HA	1:A:898:ASN:OD1	0.56	2.01	20	18
1:A:869:ARG:O	1:A:870:ARG:C	0.56	2.48	13	16
1:A:891:VAL:CG1	1:A:901:ALA:CB	0.56	2.81	3	6
1:A:917:ARG:O	1:A:917:ARG:CG	0.56	2.54	5	6
1:A:856:LEU:HD22	1:A:904:VAL:CG2	0.56	2.30	13	1
1:A:857:TYR:CD1	1:A:857:TYR:O	0.56	2.59	13	1
1:A:850:ILE:HB	1:A:912:CYS:HB3	0.56	1.78	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:858:LEU:O	1:A:865:PHE:CE1	0.56	2.59	7	6
1:A:908:TRP:CG	1:A:912:CYS:HG	0.55	2.19	13	1
1:A:848:LEU:H	1:A:913:ILE:HG13	0.55	1.61	5	2
1:A:840:THR:C	1:A:846:VAL:HG21	0.55	2.27	15	3
1:A:871:TYR:CZ	1:A:875:PHE:CE2	0.55	2.90	13	1
1:A:917:ARG:O	1:A:918:LEU:C	0.55	2.49	11	16
1:A:845:LYS:HB3	1:A:847:LEU:CD1	0.55	2.32	4	5
1:A:871:TYR:CG	1:A:875:PHE:CE2	0.55	2.94	16	2
1:A:843:GLN:HB2	1:A:846:VAL:CG1	0.55	2.32	18	5
1:A:915:LYS:O	1:A:917:ARG:HD3	0.55	2.01	16	5
1:A:895:ARG:HB3	1:A:903:GLN:HG3	0.55	1.77	11	18
1:A:890:HIS:CD2	1:A:902:GLN:HB3	0.55	2.37	19	2
1:A:867:ARG:N	1:A:867:ARG:HD3	0.55	2.17	20	1
1:A:851:PHE:CE2	1:A:909:ILE:CA	0.55	2.85	18	2
1:A:859:PRO:HG2	1:A:862:THR:CB	0.55	2.32	1	14
1:A:847:LEU:HD13	1:A:871:TYR:CE2	0.55	2.32	13	1
1:A:841:LEU:O	1:A:844:THR:N	0.55	2.40	16	1
1:A:895:ARG:HB3	1:A:903:GLN:CD	0.55	2.27	3	17
1:A:846:VAL:CA	1:A:847:LEU:CD2	0.55	2.74	5	11
1:A:877:GLY:C	1:A:878:ASP:CG	0.55	2.75	13	2
1:A:854:VAL:HB	1:A:918:LEU:CG	0.55	2.32	18	1
1:A:843:GLN:O	1:A:845:LYS:N	0.55	2.40	15	12
1:A:851:PHE:C	1:A:854:VAL:HB	0.55	2.26	12	16
1:A:851:PHE:HE1	1:A:909:ILE:CA	0.55	1.92	12	3
1:A:844:THR:O	1:A:845:LYS:HG2	0.55	2.01	10	2
1:A:846:VAL:HG23	1:A:871:TYR:OH	0.55	1.97	20	2
1:A:866:SER:OG	1:A:867:ARG:NE	0.54	2.41	3	1
1:A:841:LEU:CD1	1:A:845:LYS:CA	0.54	2.81	8	1
1:A:880:VAL:CB	1:A:884:ASP:O	0.54	2.55	7	18
1:A:855:ARG:CB	1:A:889:THR:CA	0.54	2.85	10	2
1:A:851:PHE:CE2	1:A:909:ILE:HG23	0.54	2.36	12	1
1:A:849:ASP:OD2	1:A:916:ARG:O	0.54	2.25	14	1
1:A:838:ASP:HA	1:A:842:CYS:HB2	0.54	1.78	17	2
1:A:859:PRO:HG2	1:A:862:THR:HB	0.54	1.79	4	17
1:A:851:PHE:CD1	1:A:908:TRP:CE3	0.54	2.94	19	2
1:A:841:LEU:HD11	1:A:845:LYS:H	0.54	1.61	13	1
1:A:841:LEU:HD21	1:A:845:LYS:HD2	0.54	1.78	1	1
1:A:854:VAL:CB	1:A:908:TRP:HH2	0.54	2.12	5	4
1:A:850:ILE:HD12	1:A:913:ILE:HG23	0.54	1.79	16	2
1:A:853:GLY:O	1:A:854:VAL:C	0.54	2.51	18	2
1:A:871:TYR:O	1:A:874:ALA:N	0.54	2.40	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:864:ASP:HA	1:A:867:ARG:NH1	0.54	2.18	19	1
1:A:890:HIS:C	1:A:901:ALA:HB1	0.54	2.28	14	13
1:A:865:PHE:CA	1:A:868:LEU:HB2	0.54	2.32	14	12
1:A:896:ASP:C	1:A:896:ASP:OD1	0.54	2.51	13	5
1:A:892:LEU:HD11	1:A:909:ILE:CD1	0.54	2.33	19	9
1:A:904:VAL:CG2	1:A:905:SER:N	0.54	2.71	9	4
1:A:895:ARG:HG3	1:A:903:GLN:NE2	0.54	2.16	9	3
1:A:838:ASP:OD1	1:A:838:ASP:C	0.54	2.50	11	2
1:A:902:GLN:NE2	1:A:902:GLN:CA	0.54	2.71	14	5
1:A:856:LEU:HD12	1:A:857:TYR:C	0.54	2.27	6	15
1:A:872:PHE:HB3	1:A:879:LEU:HD11	0.54	1.80	13	3
1:A:854:VAL:HG13	1:A:890:HIS:CE1	0.54	2.38	13	1
1:A:855:ARG:C	1:A:890:HIS:H	0.54	2.05	13	2
1:A:845:LYS:CA	1:A:847:LEU:HD21	0.54	2.33	17	2
1:A:912:CYS:SG	1:A:918:LEU:CD1	0.53	2.92	16	2
1:A:917:ARG:O	1:A:917:ARG:HD2	0.53	2.04	8	6
1:A:855:ARG:HG2	1:A:890:HIS:N	0.53	2.18	11	8
1:A:896:ASP:N	1:A:896:ASP:OD1	0.53	2.41	20	2
1:A:889:THR:HG23	1:A:890:HIS:N	0.53	2.16	14	2
1:A:845:LYS:NZ	1:A:867:ARG:CD	0.53	2.71	18	1
1:A:850:ILE:CG2	1:A:913:ILE:C	0.53	2.81	7	2
1:A:912:CYS:SG	1:A:919:VAL:CG1	0.53	2.93	13	1
1:A:852:THR:OG1	1:A:918:LEU:HD22	0.53	2.00	15	1
1:A:852:THR:O	1:A:852:THR:HG22	0.53	2.01	20	16
1:A:896:ASP:C	1:A:898:ASN:N	0.53	2.67	9	20
1:A:919:VAL:HG23	1:A:920:ALA:H	0.53	1.60	7	6
1:A:847:LEU:HD13	1:A:847:LEU:N	0.53	2.18	19	1
1:A:885:MET:CA	1:A:888:ALA:HB2	0.53	2.32	17	4
1:A:851:PHE:CE1	1:A:912:CYS:HB2	0.53	2.39	14	3
1:A:850:ILE:HG22	1:A:912:CYS:CA	0.53	2.32	11	1
1:A:856:LEU:CB	1:A:872:PHE:HE2	0.53	2.10	15	2
1:A:881:GLN:O	1:A:884:ASP:CA	0.53	2.57	16	19
1:A:911:ALA:O	1:A:915:LYS:HG2	0.53	2.04	15	19
1:A:875:PHE:CE2	1:A:913:ILE:HB	0.53	2.39	19	4
1:A:841:LEU:C	1:A:841:LEU:HD13	0.53	2.22	13	1
1:A:915:LYS:O	1:A:917:ARG:HG3	0.53	2.03	18	1
1:A:872:PHE:CD1	1:A:873:VAL:N	0.53	2.76	1	6
1:A:905:SER:HB2	1:A:906:PRO:CD	0.53	2.32	3	6
1:A:908:TRP:CG	1:A:912:CYS:SG	0.53	3.02	19	6
1:A:916:ARG:HD3	1:A:916:ARG:N	0.53	2.19	4	6
1:A:898:ASN:OD1	1:A:901:ALA:N	0.53	2.42	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:849:ASP:HB2	1:A:916:ARG:O	0.53	2.03	18	1
1:A:841:LEU:CD2	1:A:841:LEU:N	0.52	2.73	5	3
1:A:846:VAL:O	1:A:847:LEU:CG	0.52	2.56	10	1
1:A:848:LEU:HB2	1:A:913:ILE:HG13	0.52	1.80	3	2
1:A:867:ARG:CD	1:A:867:ARG:H	0.52	2.17	9	3
1:A:855:ARG:CA	1:A:890:HIS:HB2	0.52	2.11	13	1
1:A:852:THR:OG1	1:A:918:LEU:HD23	0.52	2.03	15	1
1:A:858:LEU:CD1	1:A:862:THR:OG1	0.52	2.58	18	1
1:A:867:ARG:O	1:A:871:TYR:CB	0.52	2.57	9	13
1:A:854:VAL:CG2	1:A:918:LEU:HD21	0.52	2.34	9	2
1:A:856:LEU:HD22	1:A:904:VAL:HG22	0.52	1.81	14	1
1:A:854:VAL:HG22	1:A:890:HIS:HE2	0.52	1.56	18	1
1:A:882:GLU:O	1:A:884:ASP:N	0.52	2.41	14	3
1:A:850:ILE:O	1:A:918:LEU:CG	0.52	2.56	5	3
1:A:862:THR:HG22	1:A:865:PHE:HB2	0.52	1.81	17	3
1:A:851:PHE:CB	1:A:872:PHE:CZ	0.52	2.93	17	2
1:A:917:ARG:C	1:A:917:ARG:HD2	0.52	2.29	18	1
1:A:855:ARG:O	1:A:889:THR:C	0.52	2.35	14	1
1:A:840:THR:C	1:A:846:VAL:HG11	0.52	2.29	16	1
1:A:921:PRO:O	1:A:922:CYS:C	0.52	2.52	14	3
1:A:856:LEU:CG	1:A:872:PHE:CE2	0.52	2.93	16	2
1:A:892:LEU:CD1	1:A:909:ILE:CD1	0.52	2.88	14	1
1:A:858:LEU:C	1:A:858:LEU:HD12	0.52	2.30	16	1
1:A:849:ASP:CG	1:A:916:ARG:NH1	0.52	2.67	3	1
1:A:914:ARG:C	1:A:916:ARG:H	0.52	2.12	18	2
1:A:858:LEU:HD11	1:A:862:THR:CG2	0.52	2.35	15	13
1:A:872:PHE:CD1	1:A:872:PHE:C	0.52	2.88	8	6
1:A:915:LYS:C	1:A:917:ARG:N	0.52	2.65	18	11
1:A:914:ARG:O	1:A:916:ARG:NH1	0.52	2.42	4	4
1:A:848:LEU:O	1:A:875:PHE:CD1	0.52	2.62	16	1
1:A:909:ILE:O	1:A:913:ILE:CD1	0.52	2.58	16	1
1:A:845:LYS:O	1:A:846:VAL:C	0.51	2.46	7	10
1:A:838:ASP:O	1:A:842:CYS:SG	0.51	2.68	7	3
1:A:868:LEU:O	1:A:872:PHE:HB2	0.51	2.05	16	4
1:A:859:PRO:O	1:A:865:PHE:CE1	0.51	2.64	15	13
1:A:869:ARG:C	1:A:871:TYR:N	0.51	2.68	8	3
1:A:871:TYR:O	1:A:872:PHE:C	0.51	2.53	18	6
1:A:882:GLU:C	1:A:884:ASP:N	0.51	2.68	3	18
1:A:895:ARG:O	1:A:898:ASN:C	0.51	2.54	12	6
1:A:869:ARG:HG2	1:A:879:LEU:HD23	0.51	1.82	8	2
1:A:902:GLN:NE2	1:A:903:GLN:N	0.51	2.59	9	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:849:ASP:CB	1:A:916:ARG:CD	0.51	2.82	5	1
1:A:843:GLN:C	1:A:846:VAL:HG12	0.51	2.29	11	2
1:A:914:ARG:C	1:A:916:ARG:N	0.51	2.69	18	4
1:A:854:VAL:HG21	1:A:908:TRP:CZ2	0.51	2.40	12	2
1:A:872:PHE:C	1:A:872:PHE:CD1	0.51	2.89	18	1
1:A:878:ASP:C	1:A:879:LEU:CD1	0.51	2.84	17	5
1:A:850:ILE:HG23	1:A:913:ILE:CA	0.51	2.23	7	1
1:A:856:LEU:CD2	1:A:857:TYR:C	0.51	2.84	12	1
1:A:848:LEU:C	1:A:850:ILE:HD13	0.51	2.31	13	1
1:A:890:HIS:ND1	1:A:902:GLN:HB2	0.51	2.21	14	1
1:A:872:PHE:C	1:A:874:ALA:N	0.51	2.69	14	19
1:A:891:VAL:CG2	1:A:895:ARG:HA	0.51	2.32	14	1
1:A:856:LEU:CD1	1:A:858:LEU:N	0.51	2.74	18	5
1:A:895:ARG:C	1:A:897:LYS:CE	0.50	2.83	18	11
1:A:908:TRP:O	1:A:912:CYS:HB3	0.50	2.06	7	2
1:A:856:LEU:CD2	1:A:892:LEU:CB	0.50	2.89	12	1
1:A:871:TYR:CD1	1:A:875:PHE:CD1	0.50	2.85	13	2
1:A:894:SER:C	1:A:897:LYS:CE	0.50	2.84	12	2
1:A:914:ARG:O	1:A:914:ARG:NE	0.50	2.43	9	2
1:A:889:THR:O	1:A:902:GLN:N	0.50	2.44	13	4
1:A:840:THR:O	1:A:842:CYS:SG	0.50	2.66	16	1
1:A:851:PHE:HB3	1:A:854:VAL:HG12	0.50	1.82	18	1
1:A:847:LEU:O	1:A:875:PHE:CE2	0.50	2.63	13	2
1:A:856:LEU:CA	1:A:890:HIS:O	0.50	2.56	17	1
1:A:854:VAL:HG12	1:A:854:VAL:O	0.50	2.06	18	1
1:A:880:VAL:HG21	1:A:888:ALA:CA	0.50	2.34	13	9
1:A:856:LEU:CD2	1:A:904:VAL:HG21	0.50	2.37	13	2
1:A:841:LEU:CD1	1:A:845:LYS:N	0.50	2.72	13	1
1:A:883:PHE:O	1:A:884:ASP:CG	0.50	2.54	14	1
1:A:844:THR:C	1:A:845:LYS:HD2	0.50	2.32	13	1
1:A:845:LYS:HG3	1:A:867:ARG:HB3	0.50	1.84	13	1
1:A:880:VAL:HG11	1:A:888:ALA:HB2	0.50	1.84	16	1
1:A:847:LEU:H	1:A:913:ILE:HD11	0.50	1.66	19	1
1:A:850:ILE:CG1	1:A:913:ILE:HB	0.50	2.19	10	2
1:A:841:LEU:CD1	1:A:845:LYS:CE	0.50	2.89	14	4
1:A:895:ARG:N	1:A:897:LYS:CE	0.49	2.75	14	16
1:A:858:LEU:HG	1:A:865:PHE:HE1	0.49	1.63	5	5
1:A:888:ALA:CB	1:A:898:ASN:ND2	0.49	2.70	18	2
1:A:892:LEU:O	1:A:893:GLY:C	0.49	2.55	9	1
1:A:848:LEU:HB3	1:A:916:ARG:HG2	0.49	1.84	5	1
1:A:845:LYS:HZ1	1:A:867:ARG:CG	0.49	2.20	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:862:THR:CG2	1:A:868:LEU:CD1	0.49	2.83	19	5
1:A:846:VAL:HB	1:A:913:ILE:HD11	0.49	1.84	14	1
1:A:895:ARG:N	1:A:897:LYS:HZ2	0.49	2.05	14	1
1:A:841:LEU:N	1:A:841:LEU:CD2	0.49	2.74	9	2
1:A:854:VAL:HG22	1:A:890:HIS:CE1	0.49	2.38	18	1
1:A:845:LYS:HA	1:A:845:LYS:HE3	0.49	1.83	3	3
1:A:864:ASP:O	1:A:865:PHE:C	0.49	2.54	18	10
1:A:858:LEU:O	1:A:865:PHE:HE1	0.49	1.90	7	3
1:A:849:ASP:OD1	1:A:849:ASP:C	0.49	2.54	9	1
1:A:909:ILE:HG23	1:A:913:ILE:CG1	0.49	2.37	13	1
1:A:869:ARG:O	1:A:871:TYR:N	0.49	2.46	13	2
1:A:855:ARG:HB2	1:A:890:HIS:N	0.49	2.21	13	3
1:A:846:VAL:CG2	1:A:847:LEU:H	0.49	2.17	20	1
1:A:895:ARG:CA	1:A:897:LYS:HZ2	0.49	2.20	6	7
1:A:855:ARG:CB	1:A:889:THR:N	0.49	2.75	16	2
1:A:850:ILE:CB	1:A:912:CYS:HB3	0.49	2.37	5	1
1:A:852:THR:O	1:A:918:LEU:CD2	0.49	2.60	18	2
1:A:865:PHE:C	1:A:867:ARG:N	0.49	2.69	18	4
1:A:854:VAL:HG11	1:A:872:PHE:HZ	0.49	1.60	13	1
1:A:863:PRO:O	1:A:868:LEU:HD12	0.49	2.07	18	1
1:A:891:VAL:HG21	1:A:895:ARG:CA	0.49	2.36	14	1
1:A:892:LEU:HD11	1:A:909:ILE:HD12	0.49	1.84	14	1
1:A:845:LYS:HZ1	1:A:867:ARG:CA	0.48	2.20	1	1
1:A:908:TRP:CD1	1:A:912:CYS:SG	0.48	3.06	13	7
1:A:895:ARG:CD	1:A:903:GLN:OE1	0.48	2.60	12	1
1:A:845:LYS:HD3	1:A:867:ARG:HB2	0.48	1.82	16	1
1:A:895:ARG:CD	1:A:903:GLN:CD	0.48	2.86	4	10
1:A:891:VAL:CB	1:A:897:LYS:HZ2	0.48	2.21	3	4
1:A:846:VAL:O	1:A:847:LEU:CB	0.48	2.61	11	3
1:A:845:LYS:NZ	1:A:871:TYR:HB2	0.48	2.23	17	1
1:A:871:TYR:O	1:A:872:PHE:O	0.48	2.32	1	4
1:A:909:ILE:O	1:A:913:ILE:CG2	0.48	2.45	4	3
1:A:839:GLU:CA	1:A:839:GLU:OE1	0.48	2.61	14	1
1:A:875:PHE:CE2	1:A:913:ILE:HD12	0.48	2.44	4	4
1:A:846:VAL:O	1:A:847:LEU:HB2	0.48	2.09	11	1
1:A:856:LEU:HD11	1:A:858:LEU:N	0.48	2.24	18	2
1:A:850:ILE:HD13	1:A:916:ARG:CA	0.48	2.33	14	1
1:A:845:LYS:HD3	1:A:867:ARG:CB	0.48	2.38	16	1
1:A:915:LYS:O	1:A:917:ARG:N	0.48	2.47	18	2
1:A:917:ARG:O	1:A:917:ARG:HG3	0.48	2.09	5	6
1:A:870:ARG:O	1:A:874:ALA:N	0.48	2.47	10	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:904:VAL:HG21	1:A:908:TRP:CE3	0.48	2.44	14	3
1:A:845:LYS:HZ3	1:A:867:ARG:CG	0.48	2.21	11	2
1:A:856:LEU:HD11	1:A:892:LEU:HB2	0.48	1.86	13	1
1:A:909:ILE:CG2	1:A:913:ILE:CG1	0.48	2.92	13	1
1:A:912:CYS:O	1:A:913:ILE:C	0.48	2.54	11	10
1:A:872:PHE:CA	1:A:875:PHE:CD1	0.48	2.96	13	3
1:A:845:LYS:HD3	1:A:867:ARG:HB3	0.48	1.85	7	1
1:A:851:PHE:CD1	1:A:872:PHE:CE2	0.48	3.02	11	2
1:A:917:ARG:HD2	1:A:918:LEU:C	0.48	2.34	18	1
1:A:886:THR:N	1:A:898:ASN:CG	0.48	2.71	17	5
1:A:856:LEU:CD2	1:A:904:VAL:CG2	0.48	2.92	14	2
1:A:863:PRO:O	1:A:868:LEU:CD1	0.48	2.62	18	1
1:A:890:HIS:CA	1:A:901:ALA:HB1	0.47	2.39	14	1
1:A:841:LEU:HD12	1:A:841:LEU:O	0.47	2.09	8	1
1:A:869:ARG:NH1	1:A:879:LEU:HB3	0.47	2.25	16	1
1:A:851:PHE:O	1:A:854:VAL:CB	0.47	2.61	9	3
1:A:895:ARG:CD	1:A:903:GLN:NE2	0.47	2.78	11	10
1:A:849:ASP:O	1:A:916:ARG:C	0.47	2.56	19	2
1:A:851:PHE:CE2	1:A:908:TRP:CE3	0.47	3.02	18	1
1:A:895:ARG:N	1:A:897:LYS:HZ1	0.47	2.04	19	1
1:A:910:TRP:O	1:A:914:ARG:CB	0.47	2.63	3	4
1:A:865:PHE:CZ	1:A:869:ARG:NE	0.47	2.83	16	1
1:A:869:ARG:HA	1:A:879:LEU:CD1	0.47	2.39	19	1
1:A:857:TYR:HD2	1:A:897:LYS:HZ3	0.47	1.53	9	3
1:A:870:ARG:O	1:A:871:TYR:C	0.47	2.58	1	8
1:A:875:PHE:N	1:A:875:PHE:HD1	0.47	2.04	1	8
1:A:885:MET:C	1:A:888:ALA:H	0.47	2.13	6	4
1:A:871:TYR:C	1:A:875:PHE:CD1	0.47	2.92	13	3
1:A:850:ILE:O	1:A:917:ARG:HA	0.47	2.08	13	1
1:A:850:ILE:CB	1:A:913:ILE:CA	0.47	2.69	14	1
1:A:895:ARG:N	1:A:897:LYS:NZ	0.47	2.62	14	1
1:A:840:THR:O	1:A:841:LEU:C	0.47	2.58	16	1
1:A:850:ILE:HG23	1:A:913:ILE:C	0.47	2.35	7	1
1:A:847:LEU:CB	1:A:875:PHE:CE1	0.47	2.98	10	1
1:A:845:LYS:HZ3	1:A:867:ARG:HG3	0.47	1.68	11	1
1:A:856:LEU:CD2	1:A:892:LEU:HB2	0.47	2.28	12	1
1:A:895:ARG:CA	1:A:897:LYS:HZ1	0.47	2.23	20	1
1:A:887:SER:C	1:A:888:ALA:O	0.47	2.58	15	19
1:A:837:ALA:O	1:A:838:ASP:C	0.47	2.58	12	5
1:A:867:ARG:O	1:A:869:ARG:N	0.47	2.47	8	4
1:A:908:TRP:CH2	1:A:918:LEU:CD1	0.47	2.96	18	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:890:HIS:N	1:A:890:HIS:ND1	0.47	2.62	14	1
1:A:910:TRP:CE3	1:A:913:ILE:HD12	0.46	2.44	13	2
1:A:845:LYS:H	1:A:845:LYS:HE3	0.46	1.69	18	1
1:A:885:MET:HG3	1:A:897:LYS:C	0.46	2.34	18	1
1:A:851:PHE:HE2	1:A:875:PHE:CE2	0.46	2.23	1	1
1:A:868:LEU:O	1:A:872:PHE:CB	0.46	2.63	8	1
1:A:890:HIS:CE1	1:A:902:GLN:HB2	0.46	2.45	19	2
1:A:872:PHE:HA	1:A:875:PHE:HD2	0.46	1.70	16	2
1:A:855:ARG:HB2	1:A:889:THR:C	0.46	2.36	10	1
1:A:845:LYS:HA	1:A:871:TYR:CD2	0.46	2.42	18	4
1:A:841:LEU:O	1:A:841:LEU:CG	0.46	2.63	1	1
1:A:856:LEU:HD13	1:A:892:LEU:N	0.46	2.26	17	4
1:A:850:ILE:HD12	1:A:913:ILE:CG1	0.46	2.32	10	1
1:A:856:LEU:C	1:A:856:LEU:HD13	0.46	2.23	13	1
1:A:856:LEU:HD22	1:A:904:VAL:HG21	0.46	1.88	13	1
1:A:911:ALA:O	1:A:915:LYS:CB	0.46	2.63	10	1
1:A:845:LYS:HZ3	1:A:867:ARG:HG2	0.46	1.71	18	1
1:A:917:ARG:CD	1:A:918:LEU:C	0.46	2.88	18	1
1:A:849:ASP:OD1	1:A:849:ASP:O	0.46	2.34	9	1
1:A:885:MET:SD	1:A:898:ASN:CB	0.46	2.94	3	4
1:A:895:ARG:HA	1:A:897:LYS:NZ	0.46	2.26	20	8
1:A:848:LEU:CB	1:A:913:ILE:O	0.46	2.64	5	1
1:A:892:LEU:HD11	1:A:909:ILE:HD11	0.46	1.88	18	1
1:A:865:PHE:CZ	1:A:869:ARG:CZ	0.46	2.99	1	2
1:A:914:ARG:O	1:A:916:ARG:N	0.46	2.49	11	3
1:A:856:LEU:CD2	1:A:857:TYR:O	0.46	2.64	12	1
1:A:848:LEU:CB	1:A:916:ARG:HG3	0.46	2.40	14	1
1:A:914:ARG:O	1:A:916:ARG:CD	0.46	2.64	18	1
1:A:841:LEU:CD2	1:A:844:THR:O	0.46	2.61	20	1
1:A:895:ARG:HD3	1:A:903:GLN:CD	0.46	2.35	18	3
1:A:838:ASP:CA	1:A:842:CYS:HB2	0.46	2.39	17	2
1:A:858:LEU:HD21	1:A:868:LEU:CD1	0.46	2.41	10	1
1:A:908:TRP:O	1:A:912:CYS:N	0.45	2.47	17	5
1:A:845:LYS:HA	1:A:845:LYS:CE	0.45	2.40	3	2
1:A:850:ILE:HG13	1:A:912:CYS:O	0.45	2.10	18	1
1:A:846:VAL:O	1:A:848:LEU:N	0.45	2.49	1	2
1:A:858:LEU:C	1:A:865:PHE:HE1	0.45	2.19	13	3
1:A:849:ASP:CG	1:A:916:ARG:HB3	0.45	2.35	19	1
1:A:844:THR:O	1:A:845:LYS:C	0.45	2.57	11	2
1:A:856:LEU:HD23	1:A:891:VAL:C	0.45	2.36	12	1
1:A:891:VAL:HG22	1:A:902:GLN:O	0.45	2.12	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:872:PHE:CA	1:A:875:PHE:HD1	0.45	2.24	11	1
1:A:848:LEU:O	1:A:850:ILE:HG12	0.45	2.11	16	5
1:A:848:LEU:HD23	1:A:849:ASP:N	0.45	2.24	16	2
1:A:848:LEU:CD1	1:A:916:ARG:HG3	0.45	2.40	14	1
1:A:846:VAL:C	1:A:913:ILE:HD11	0.45	2.36	5	1
1:A:872:PHE:CD1	1:A:879:LEU:CD1	0.45	3.00	9	2
1:A:851:PHE:CD2	1:A:872:PHE:CE2	0.45	3.04	7	2
1:A:882:GLU:O	1:A:897:LYS:HB3	0.45	2.12	18	1
1:A:845:LYS:HE2	1:A:867:ARG:HB3	0.45	1.88	20	1
1:A:882:GLU:HG2	1:A:897:LYS:HB3	0.45	1.88	6	1
1:A:866:SER:HB3	1:A:867:ARG:NE	0.45	2.26	7	2
1:A:868:LEU:HD22	1:A:909:ILE:HD13	0.45	1.88	17	2
1:A:895:ARG:CB	1:A:903:GLN:HE21	0.45	2.24	9	1
1:A:852:THR:HG22	1:A:852:THR:O	0.45	2.11	11	1
1:A:849:ASP:OD2	1:A:916:ARG:HD2	0.45	2.05	9	1
1:A:909:ILE:HG23	1:A:913:ILE:CD1	0.45	2.42	13	1
1:A:883:PHE:CD2	1:A:884:ASP:OD2	0.45	2.70	14	1
1:A:864:ASP:CG	1:A:867:ARG:NE	0.45	2.75	18	1
1:A:881:GLN:O	1:A:884:ASP:C	0.45	2.60	9	3
1:A:891:VAL:CG1	1:A:901:ALA:HB3	0.44	2.42	10	2
1:A:851:PHE:CE2	1:A:875:PHE:HE2	0.44	2.26	15	2
1:A:854:VAL:HG21	1:A:908:TRP:CH2	0.44	2.47	15	2
1:A:914:ARG:O	1:A:914:ARG:HD2	0.44	2.12	10	1
1:A:858:LEU:CD1	1:A:859:PRO:CD	0.44	2.91	16	1
1:A:850:ILE:HD11	1:A:913:ILE:CA	0.44	2.14	5	1
1:A:908:TRP:CD1	1:A:919:VAL:HG22	0.44	2.47	11	1
1:A:840:THR:O	1:A:846:VAL:HG21	0.44	2.12	15	1
1:A:851:PHE:HB3	1:A:854:VAL:CB	0.44	2.42	12	3
1:A:856:LEU:HD22	1:A:857:TYR:CA	0.44	2.39	12	1
1:A:905:SER:HB3	1:A:906:PRO:CD	0.44	2.38	4	1
1:A:855:ARG:NH1	1:A:889:THR:OG1	0.44	2.50	6	1
1:A:841:LEU:HD13	1:A:845:LYS:HE2	0.44	1.87	12	1
1:A:883:PHE:CE1	1:A:884:ASP:CG	0.44	2.96	12	1
1:A:847:LEU:HB3	1:A:875:PHE:CE1	0.44	2.47	10	1
1:A:902:GLN:NE2	1:A:902:GLN:HA	0.44	2.28	13	4
1:A:854:VAL:HG21	1:A:908:TRP:HH2	0.44	1.72	15	1
1:A:890:HIS:CG	1:A:902:GLN:CB	0.44	3.00	19	1
1:A:888:ALA:N	1:A:898:ASN:ND2	0.44	2.65	18	1
1:A:864:ASP:OD2	1:A:867:ARG:HD3	0.44	2.13	19	1
1:A:849:ASP:OD2	1:A:916:ARG:NE	0.44	2.49	1	1
1:A:871:TYR:HE2	1:A:913:ILE:HD13	0.44	1.67	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:882:GLU:HA	1:A:885:MET:HE1	0.44	1.87	18	2
1:A:841:LEU:HD11	1:A:845:LYS:HE3	0.44	1.89	18	3
1:A:856:LEU:HB2	1:A:890:HIS:CB	0.44	2.29	14	1
1:A:885:MET:HB2	1:A:898:ASN:HB3	0.44	1.88	14	1
1:A:917:ARG:HD2	1:A:918:LEU:N	0.44	2.27	18	1
1:A:895:ARG:CG	1:A:903:GLN:CD	0.44	2.91	7	10
1:A:845:LYS:HD3	1:A:847:LEU:HD11	0.44	1.88	3	1
1:A:871:TYR:CZ	1:A:913:ILE:HD13	0.44	2.30	3	1
1:A:872:PHE:HE2	1:A:908:TRP:HZ3	0.44	1.54	19	2
1:A:850:ILE:HD12	1:A:916:ARG:HA	0.44	1.90	13	2
1:A:850:ILE:HA	1:A:912:CYS:O	0.44	2.12	18	1
1:A:906:PRO:HG2	1:A:907:GLU:CD	0.44	2.38	19	1
1:A:845:LYS:HZ3	1:A:867:ARG:HB3	0.43	1.73	4	1
1:A:885:MET:O	1:A:887:SER:C	0.43	2.56	7	1
1:A:848:LEU:CD2	1:A:916:ARG:CD	0.43	2.65	11	1
1:A:891:VAL:O	1:A:894:SER:O	0.43	2.36	14	1
1:A:864:ASP:CG	1:A:867:ARG:HH11	0.43	2.21	19	1
1:A:885:MET:CA	1:A:888:ALA:CB	0.43	2.96	11	16
1:A:891:VAL:HG23	1:A:902:GLN:C	0.43	2.38	5	1
1:A:887:SER:O	1:A:888:ALA:C	0.43	2.61	6	1
1:A:889:THR:OG1	1:A:890:HIS:CE1	0.43	2.70	14	1
1:A:908:TRP:C	1:A:912:CYS:SG	0.43	3.01	14	2
1:A:865:PHE:CE2	1:A:869:ARG:NE	0.43	2.86	18	1
1:A:847:LEU:N	1:A:913:ILE:HD11	0.43	2.28	19	1
1:A:908:TRP:O	1:A:909:ILE:C	0.43	2.60	19	1
1:A:844:THR:C	1:A:845:LYS:HG2	0.43	2.38	10	1
1:A:855:ARG:CZ	1:A:889:THR:HG21	0.43	2.43	12	1
1:A:857:TYR:CA	1:A:891:VAL:HA	0.43	2.43	12	1
1:A:856:LEU:HD23	1:A:904:VAL:HG21	0.43	1.90	14	1
1:A:917:ARG:HD3	1:A:918:LEU:O	0.43	2.13	18	1
1:A:896:ASP:N	1:A:897:LYS:HE3	0.43	2.27	14	1
1:A:910:TRP:O	1:A:914:ARG:HB2	0.43	2.14	20	1
1:A:917:ARG:HD2	1:A:918:LEU:O	0.43	2.13	4	4
1:A:852:THR:HG22	1:A:918:LEU:HD22	0.43	1.88	19	2
1:A:841:LEU:HD13	1:A:841:LEU:C	0.43	2.06	7	1
1:A:872:PHE:CA	1:A:875:PHE:CD2	0.43	3.02	7	1
1:A:854:VAL:CG2	1:A:918:LEU:CB	0.43	2.92	18	1
1:A:897:LYS:HD2	1:A:898:ASN:H	0.43	1.73	6	2
1:A:851:PHE:CG	1:A:872:PHE:CD2	0.43	3.05	8	2
1:A:856:LEU:HG	1:A:892:LEU:HD12	0.43	1.89	12	1
1:A:910:TRP:O	1:A:913:ILE:HB	0.43	2.13	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:841:LEU:CD2	1:A:845:LYS:CE	0.43	2.92	19	1
1:A:868:LEU:HD23	1:A:868:LEU:HA	0.43	1.56	3	2
1:A:850:ILE:CD1	1:A:850:ILE:H	0.43	2.26	6	2
1:A:845:LYS:C	1:A:846:VAL:HG22	0.43	2.39	2	2
1:A:838:ASP:OD1	1:A:838:ASP:O	0.43	2.37	5	1
1:A:865:PHE:CD2	1:A:869:ARG:NH1	0.43	2.87	10	1
1:A:857:TYR:O	1:A:857:TYR:CD1	0.43	2.72	11	1
1:A:845:LYS:CA	1:A:871:TYR:CD2	0.43	3.02	13	2
1:A:872:PHE:CE2	1:A:908:TRP:HZ3	0.42	2.31	19	3
1:A:912:CYS:CA	1:A:919:VAL:HG13	0.42	2.44	13	1
1:A:856:LEU:HB3	1:A:890:HIS:CB	0.42	2.34	14	1
1:A:850:ILE:CG2	1:A:912:CYS:CB	0.42	2.85	3	2
1:A:855:ARG:CZ	1:A:889:THR:CG2	0.42	2.85	12	1
1:A:841:LEU:HD23	1:A:845:LYS:CA	0.42	2.39	1	1
1:A:874:ALA:C	1:A:876:ASP:N	0.42	2.77	13	2
1:A:863:PRO:O	1:A:864:ASP:CB	0.42	2.65	17	2
1:A:917:ARG:HD3	1:A:918:LEU:N	0.42	2.30	18	1
1:A:841:LEU:CD1	1:A:845:LYS:HE2	0.42	2.44	15	1
1:A:883:PHE:CD2	1:A:884:ASP:OD1	0.42	2.72	16	2
1:A:871:TYR:C	1:A:875:PHE:CD2	0.42	2.97	16	1
1:A:891:VAL:HG22	1:A:901:ALA:CB	0.42	2.45	5	2
1:A:885:MET:HE3	1:A:897:LYS:HD3	0.42	1.89	6	1
1:A:843:GLN:CA	1:A:846:VAL:HG12	0.42	2.44	7	3
1:A:885:MET:HE1	1:A:897:LYS:CD	0.42	2.42	7	1
1:A:852:THR:N	1:A:918:LEU:HD22	0.42	2.25	14	1
1:A:865:PHE:CD1	1:A:865:PHE:C	0.42	2.96	16	1
1:A:858:LEU:HD11	1:A:862:THR:OG1	0.42	2.13	18	1
1:A:885:MET:O	1:A:887:SER:CA	0.42	2.63	20	2
1:A:843:GLN:O	1:A:844:THR:C	0.42	2.61	11	1
1:A:915:LYS:O	1:A:916:ARG:HB2	0.42	2.15	12	1
1:A:858:LEU:CG	1:A:865:PHE:HE1	0.42	2.27	13	1
1:A:871:TYR:O	1:A:875:PHE:HD1	0.42	1.96	13	2
1:A:845:LYS:HZ3	1:A:867:ARG:CB	0.42	2.26	4	1
1:A:910:TRP:HE3	1:A:913:ILE:HD12	0.42	1.75	18	1
1:A:906:PRO:O	1:A:910:TRP:NE1	0.42	2.53	3	1
1:A:867:ARG:H	1:A:867:ARG:CD	0.42	2.27	4	1
1:A:845:LYS:H	1:A:845:LYS:CE	0.42	2.27	11	1
1:A:857:TYR:HD2	1:A:897:LYS:HZ2	0.42	1.57	12	1
1:A:840:THR:O	1:A:846:VAL:CG2	0.42	2.68	15	1
1:A:841:LEU:CD2	1:A:846:VAL:HG21	0.42	2.40	2	2
1:A:877:GLY:O	1:A:878:ASP:CG	0.42	2.63	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:838:ASP:C	1:A:842:CYS:HB2	0.42	2.40	20	2
1:A:841:LEU:N	1:A:841:LEU:HD23	0.41	2.30	5	3
1:A:914:ARG:O	1:A:916:ARG:HD3	0.41	2.15	7	2
1:A:902:GLN:NE2	1:A:903:GLN:H	0.41	2.12	19	1
1:A:845:LYS:HZ2	1:A:867:ARG:HG2	0.41	1.74	1	1
1:A:865:PHE:O	1:A:866:SER:O	0.41	2.39	6	2
1:A:851:PHE:CD2	1:A:872:PHE:CG	0.41	3.08	8	1
1:A:841:LEU:HD13	1:A:845:LYS:N	0.41	2.30	13	1
1:A:839:GLU:OE1	1:A:839:GLU:N	0.41	2.53	14	1
1:A:852:THR:C	1:A:854:VAL:N	0.41	2.78	15	1
1:A:917:ARG:NH1	1:A:918:LEU:O	0.41	2.51	4	1
1:A:844:THR:HG23	1:A:845:LYS:N	0.41	2.21	8	1
1:A:854:VAL:HG22	1:A:918:LEU:HG	0.41	1.75	13	1
1:A:855:ARG:HG2	1:A:889:THR:C	0.41	2.38	6	1
1:A:838:ASP:OD1	1:A:839:GLU:N	0.41	2.54	11	1
1:A:872:PHE:O	1:A:875:PHE:HD1	0.41	1.99	18	2
1:A:912:CYS:SG	1:A:919:VAL:CG2	0.41	3.04	13	1
1:A:846:VAL:N	1:A:847:LEU:HD21	0.41	2.29	14	2
1:A:848:LEU:O	1:A:850:ILE:N	0.41	2.53	16	1
1:A:846:VAL:C	1:A:847:LEU:CD1	0.41	2.90	8	1
1:A:858:LEU:CG	1:A:865:PHE:CD1	0.41	2.95	7	1
1:A:873:VAL:HG12	1:A:879:LEU:CD1	0.41	2.45	19	1
1:A:841:LEU:HD13	1:A:841:LEU:HA	0.41	1.55	8	1
1:A:890:HIS:CB	1:A:902:GLN:O	0.41	2.67	14	1
1:A:848:LEU:N	1:A:913:ILE:HG13	0.41	2.30	19	1
1:A:912:CYS:C	1:A:914:ARG:N	0.41	2.78	20	1
1:A:855:ARG:O	1:A:855:ARG:HG2	0.41	2.05	7	1
1:A:862:THR:O	1:A:865:PHE:HB2	0.41	2.15	11	2
1:A:872:PHE:CG	1:A:879:LEU:HD21	0.41	2.50	11	1
1:A:881:GLN:O	1:A:884:ASP:O	0.41	2.38	12	1
1:A:841:LEU:HD23	1:A:846:VAL:HG21	0.41	1.91	15	1
1:A:865:PHE:CZ	1:A:869:ARG:CG	0.41	3.02	18	1
1:A:916:ARG:N	1:A:916:ARG:CD	0.40	2.84	4	1
1:A:855:ARG:HD3	1:A:888:ALA:C	0.40	2.37	8	1
1:A:843:GLN:O	1:A:844:THR:CB	0.40	2.69	20	1
1:A:895:ARG:HB3	1:A:903:GLN:NE2	0.40	2.31	13	1
1:A:885:MET:CG	1:A:897:LYS:O	0.40	2.68	2	1
1:A:854:VAL:CG2	1:A:918:LEU:HD11	0.40	2.38	7	1
1:A:841:LEU:HD13	1:A:845:LYS:CA	0.40	2.39	9	1
1:A:908:TRP:CD1	1:A:912:CYS:HG	0.40	2.34	13	1
1:A:880:VAL:CB	1:A:888:ALA:HB2	0.40	2.47	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:910:TRP:C	1:A:912:CYS:N	0.40	2.79	19	1
1:A:897:LYS:H	1:A:897:LYS:HG3	0.40	1.43	1	1
1:A:918:LEU:HD12	1:A:918:LEU:HA	0.40	1.75	2	1
1:A:837:ALA:C	1:A:839:GLU:N	0.40	2.79	4	1
1:A:857:TYR:HD2	1:A:891:VAL:HB	0.40	1.74	15	1
1:A:910:TRP:O	1:A:911:ALA:C	0.40	2.62	19	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	85/88 (97%)	44±3 (51±4%)	24±2 (28±3%)	18±3 (21±3%)	0	2
All	All	1700/1760 (97%)	873 (51%)	477 (28%)	350 (21%)	0	2

All 33 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	846	VAL	20
1	A	850	ILE	20
1	A	872	PHE	20
1	A	876	ASP	20
1	A	886	THR	20
1	A	888	ALA	20
1	A	896	ASP	20
1	A	897	LYS	20
1	A	869	ARG	19
1	A	873	VAL	19
1	A	851	PHE	18
1	A	893	GLY	16
1	A	852	THR	15
1	A	866	SER	15
1	A	882	GLU	15
1	A	883	PHE	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	847	LEU	10
1	A	844	THR	9
1	A	845	LYS	6
1	A	875	PHE	6
1	A	848	LEU	5
1	A	868	LEU	4
1	A	871	TYR	2
1	A	837	ALA	2
1	A	870	ARG	2
1	A	854	VAL	2
1	A	915	LYS	2
1	A	889	THR	2
1	A	841	LEU	2
1	A	842	CYS	2
1	A	913	ILE	1
1	A	894	SER	1
1	A	916	ARG	1

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	76/77 (99%)	41±2 (54±3%)	35±2 (46±3%)	0	2
All	All	1520/1540 (99%)	824 (54%)	696 (46%)	0	2

All 56 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	839	GLU	20
1	A	844	THR	20
1	A	845	LYS	20
1	A	847	LEU	20
1	A	852	THR	20
1	A	856	LEU	20
1	A	858	LEU	20
1	A	861	SER	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	873	VAL	20
1	A	880	VAL	20
1	A	887	SER	20
1	A	892	LEU	20
1	A	897	LYS	20
1	A	904	VAL	20
1	A	909	ILE	20
1	A	917	ARG	20
1	A	919	VAL	20
1	A	841	LEU	19
1	A	846	VAL	19
1	A	857	TYR	19
1	A	862	THR	19
1	A	889	THR	19
1	A	850	ILE	18
1	A	864	ASP	18
1	A	918	LEU	17
1	A	843	GLN	17
1	A	903	GLN	16
1	A	867	ARG	15
1	A	895	ARG	15
1	A	905	SER	12
1	A	842	CYS	11
1	A	868	LEU	11
1	A	914	ARG	11
1	A	869	ARG	10
1	A	916	ARG	10
1	A	879	LEU	9
1	A	848	LEU	7
1	A	866	SER	6
1	A	870	ARG	6
1	A	907	GLU	6
1	A	902	GLN	6
1	A	878	ASP	5
1	A	855	ARG	5
1	A	838	ASP	5
1	A	840	THR	4
1	A	875	PHE	3
1	A	885	MET	3
1	A	881	GLN	3
1	A	882	GLU	2
1	A	896	ASP	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	922	CYS	2
1	A	854	VAL	2
1	A	898	ASN	1
1	A	890	HIS	1
1	A	891	VAL	1
1	A	849	ASP	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

6.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains [i](#)

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided