



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 6, 2026 – 06:06 AM UTC

PDB ID : 2JTC / pdb_00002jtc
Title : 3D structure and backbone dynamics of SPE B
Authors : Chuang, W.; Wang, C.; Houng, H.; Chen, C.; Wang, P.
Deposited on : 2007-07-26

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

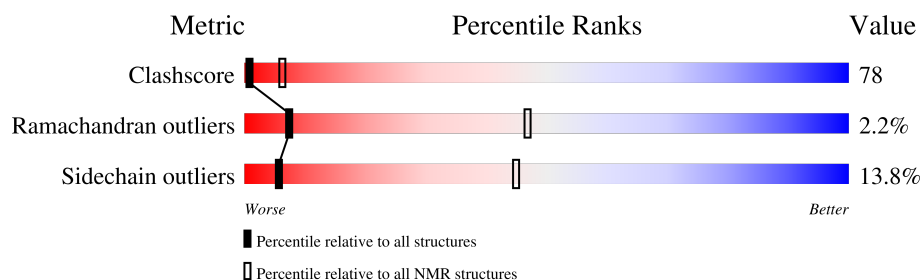
1 Overall quality at a glance

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	253	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 8 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 5 as representative, based on the following criterion: *closest to the average*.

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:4-A:31, A:37-A:212, A:245-A:253 (213)	0.37	8

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 1 clusters and 2 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3782 atoms, of which 1833 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Streptopain.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	253	Total	C	H	N	O	S	0
			3782	1227	1833	343	375	4	

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

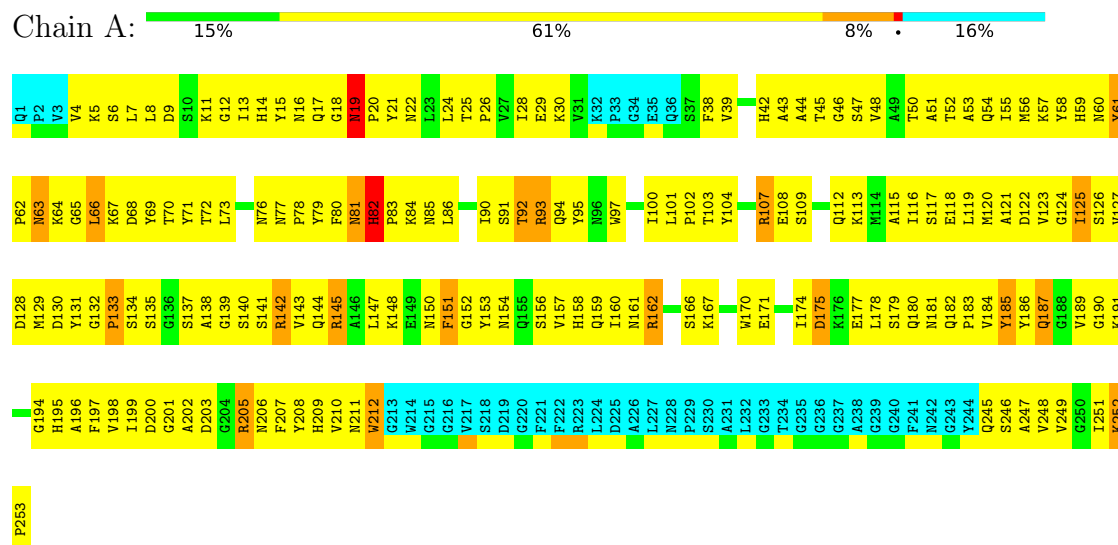
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	47	SER	CYS	engineered mutation	UNP P0C0J1

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: Streptopain

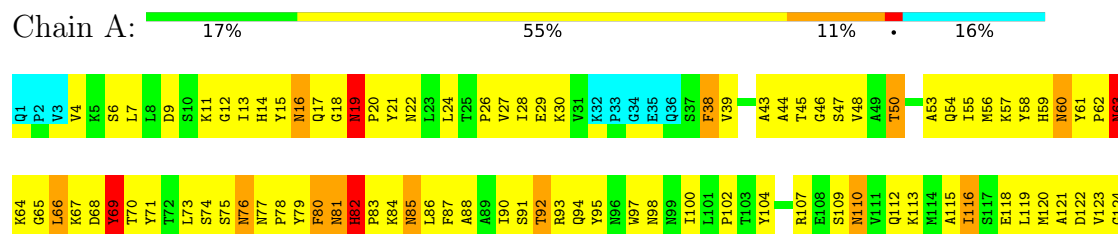


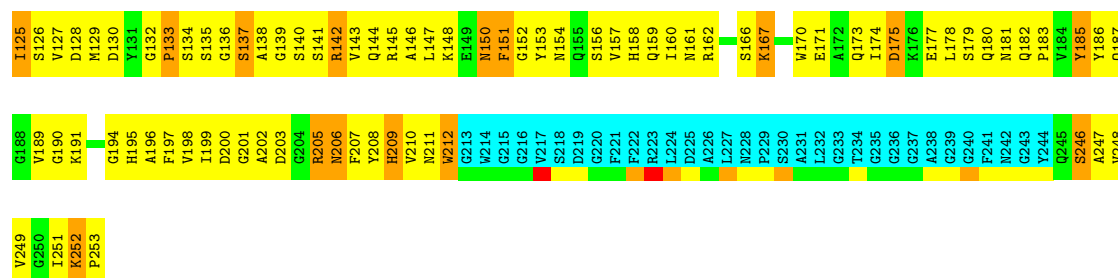
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

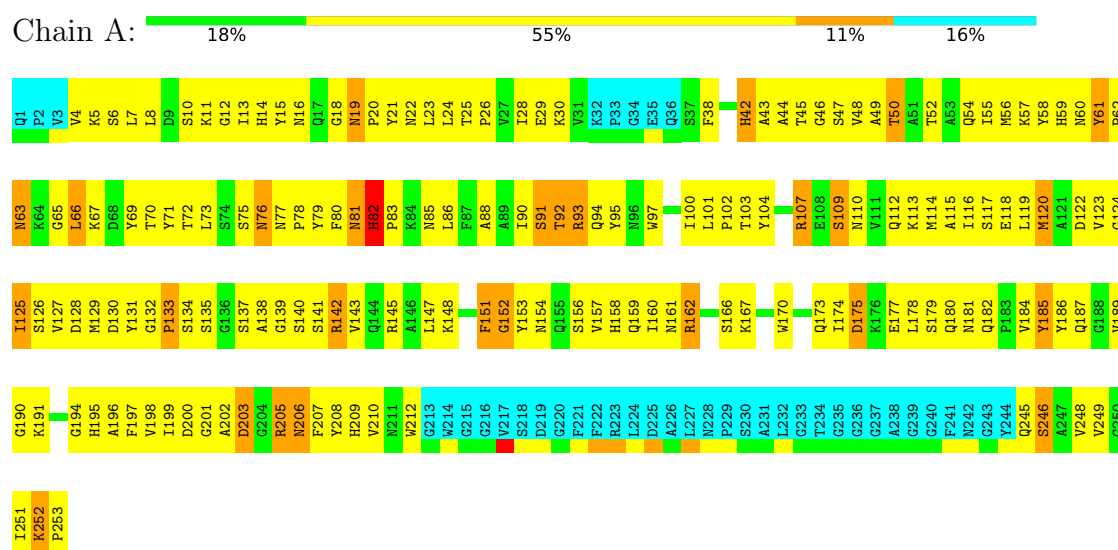
- Molecule 1: Streptopain





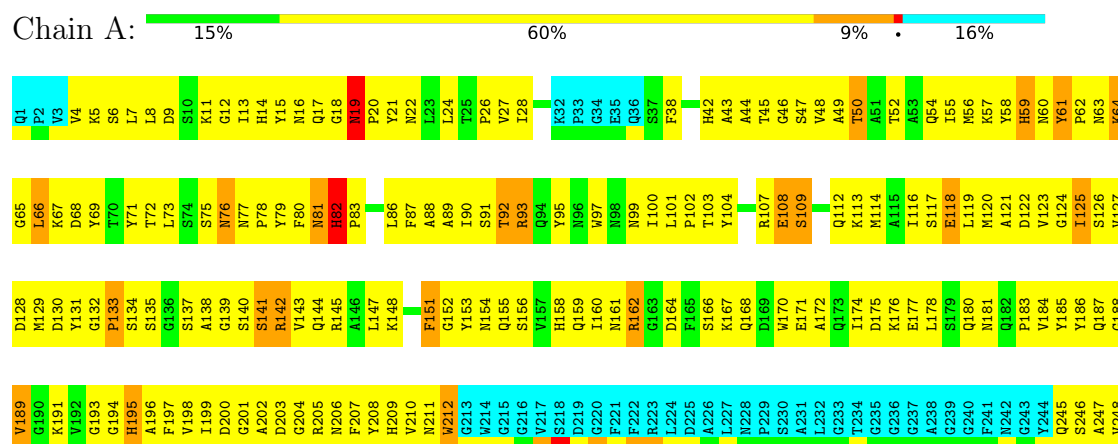
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Streptopain



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Streptopain



V249
G250
I251
K252
P253

4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Streptopain

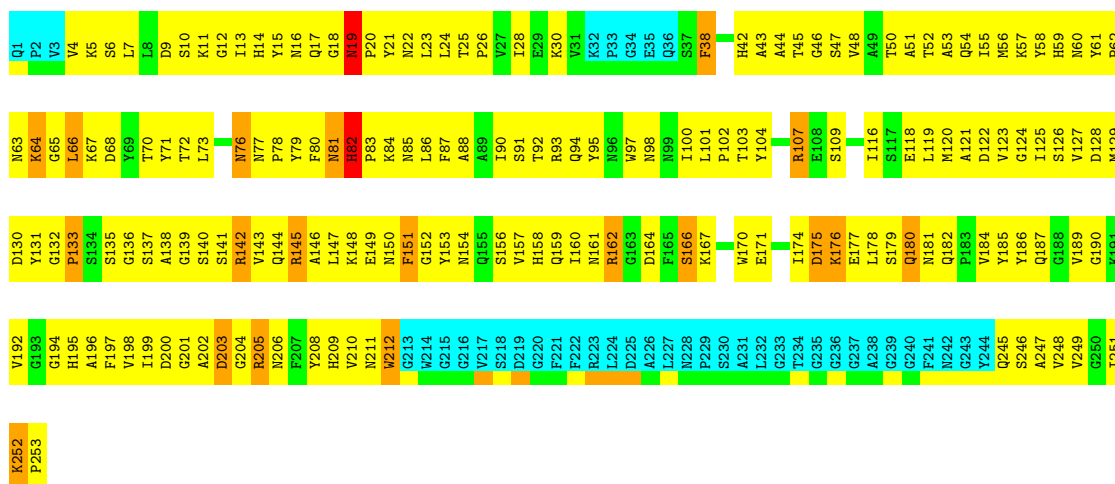
Chain A: 19% 57% 8% 16%



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Streptopain

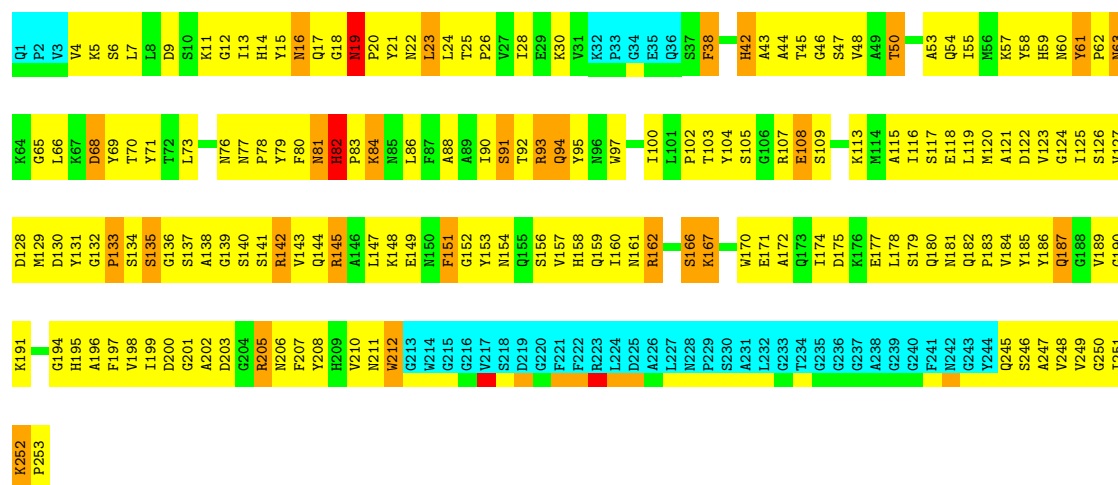
Chain A: 15% 60% 8% 16%



4.2.6 Score per residue for model 6

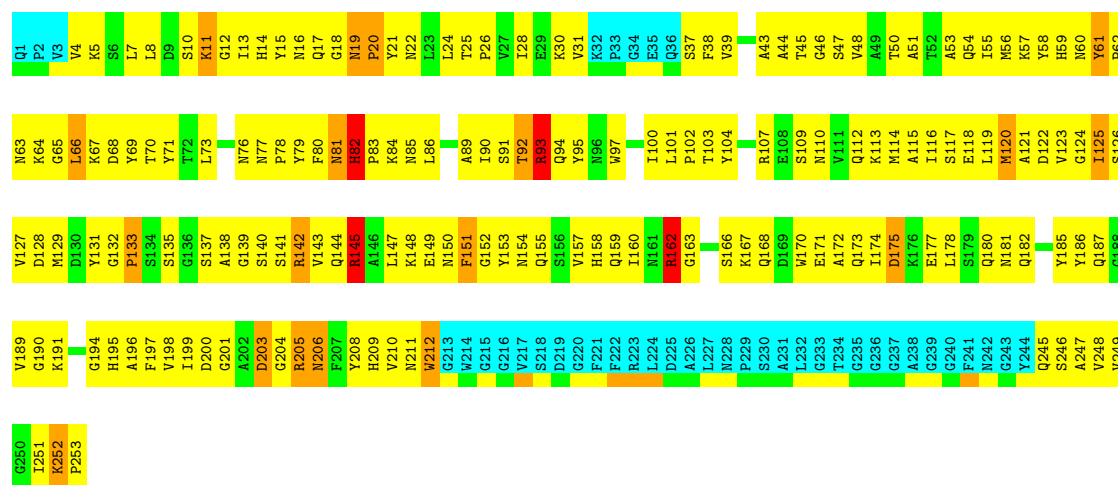
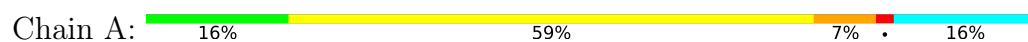
- Molecule 1: Streptopain

Chain A: 18% 55% 10% 16%



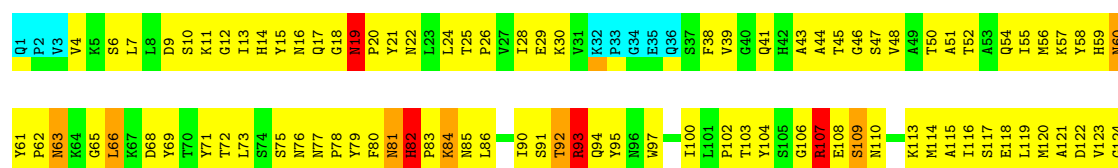
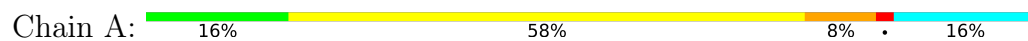
4.2.7 Score per residue for model 7

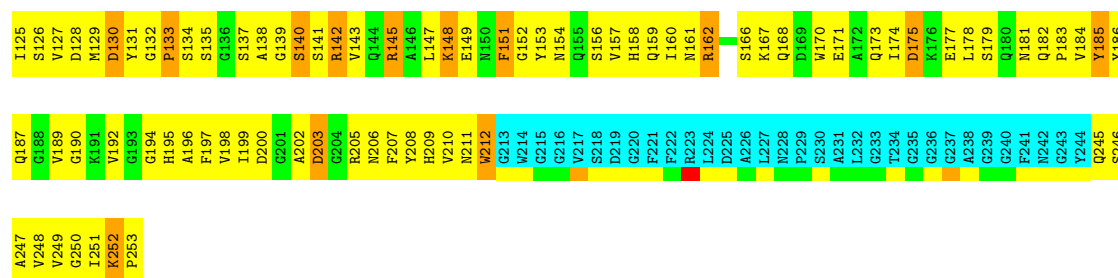
- Molecule 1: Streptopain



4.2.8 Score per residue for model 8 (medoid)

- Molecule 1: Streptopain

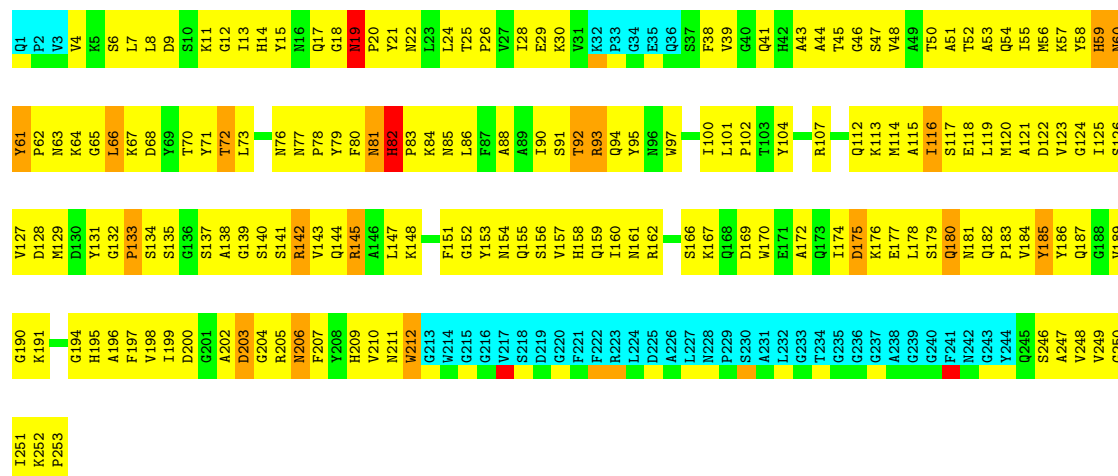




4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Streptopain

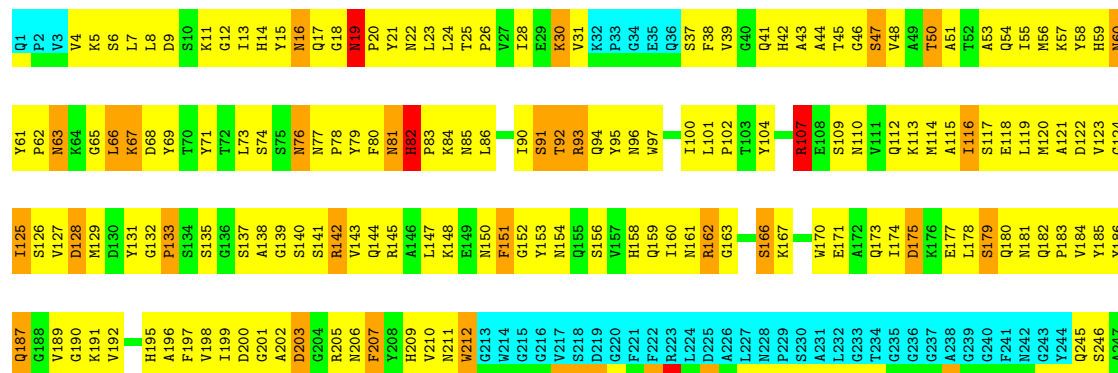
Chain A: 17% 60% 7% 16%



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Streptopain

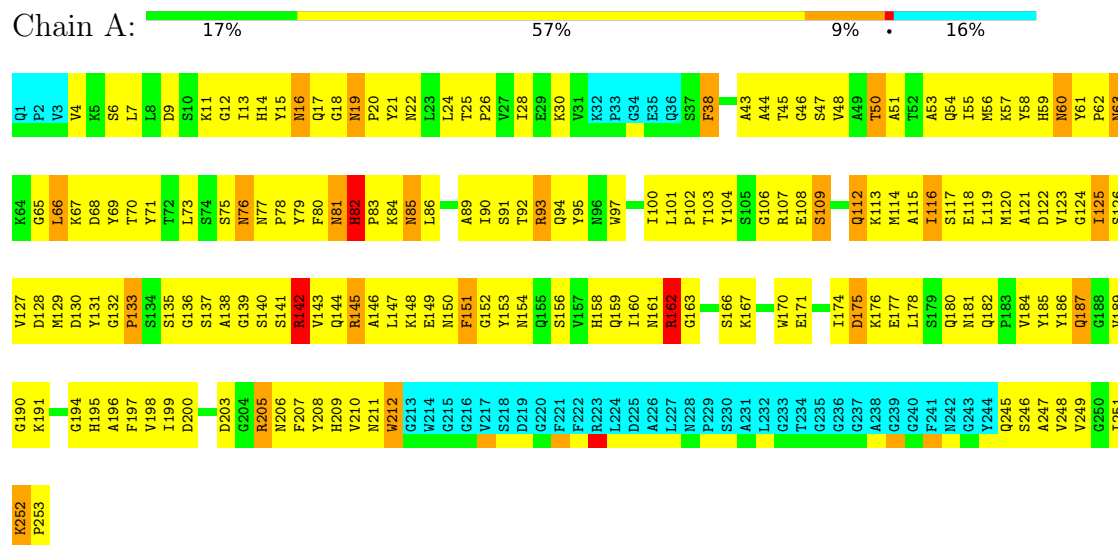
Chain A: 16% 56% 11% 16%



V248
V249
G250
I251
K252
P253

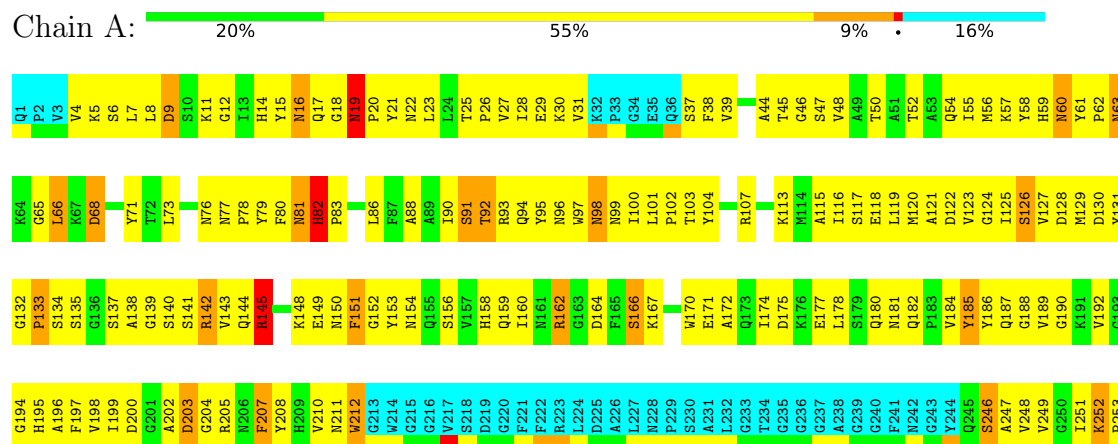
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Streptopain



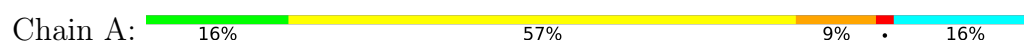
4.2.12 Score per residue for model 12

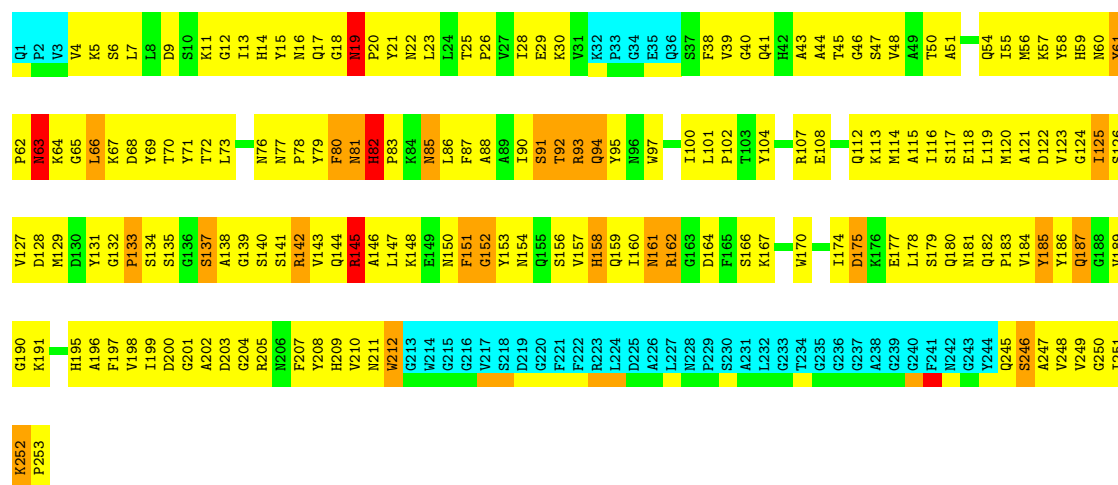
- Molecule 1: Streptopain



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Streptopain

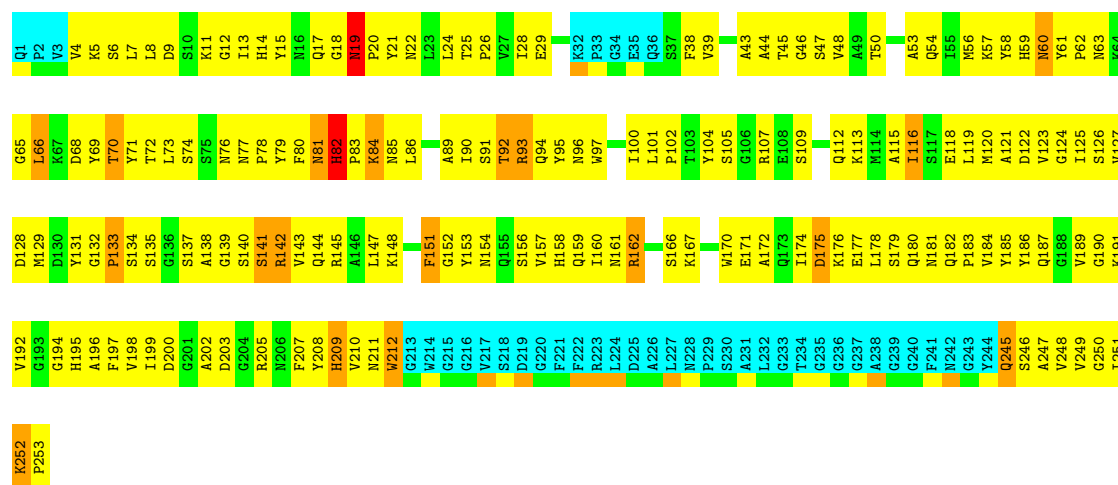




4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Streptopain

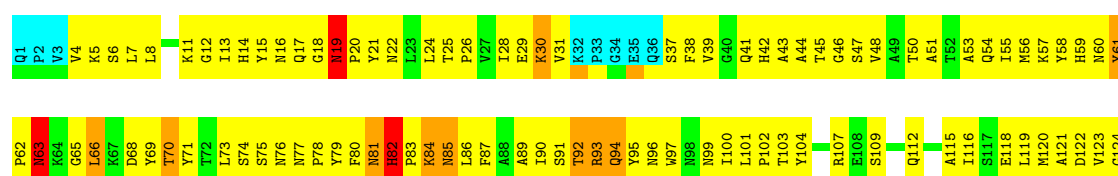
Chain A: 18% 58% 7% 16%

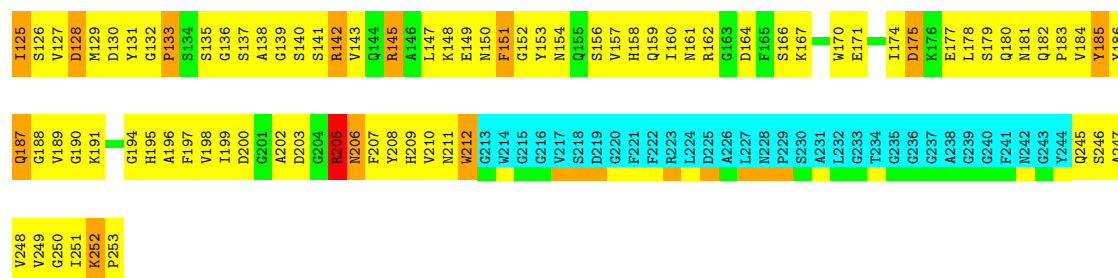


4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Streptopain

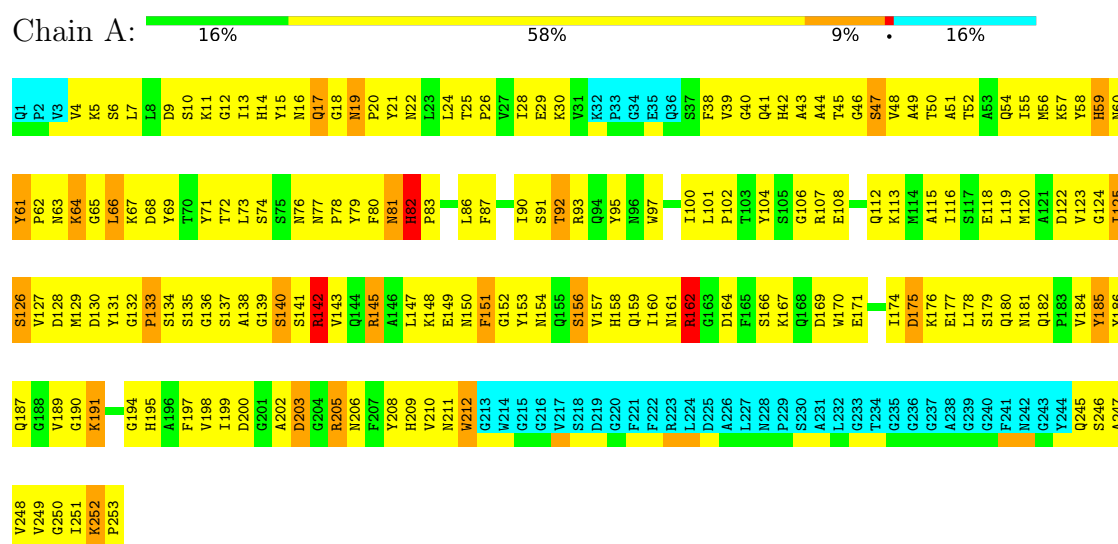
Chain A: 14% 60% 9% 16%





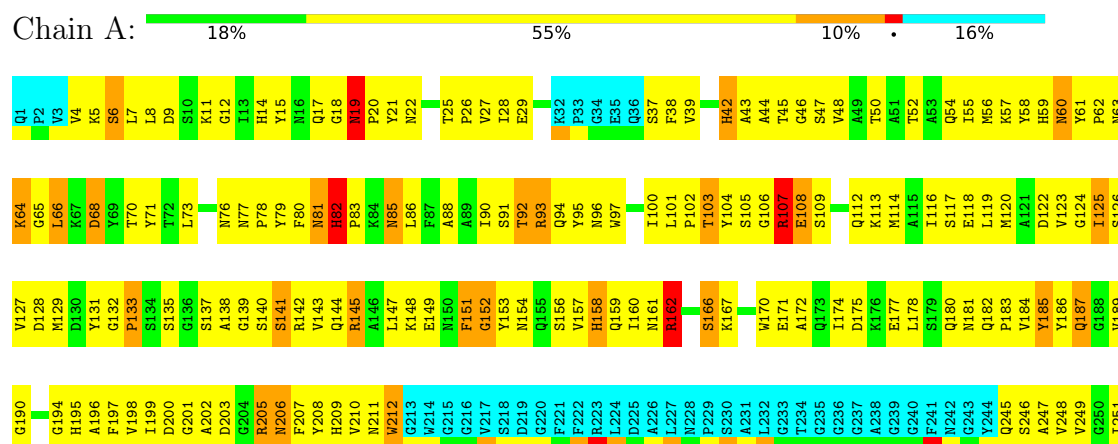
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Streptopain



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Streptopain

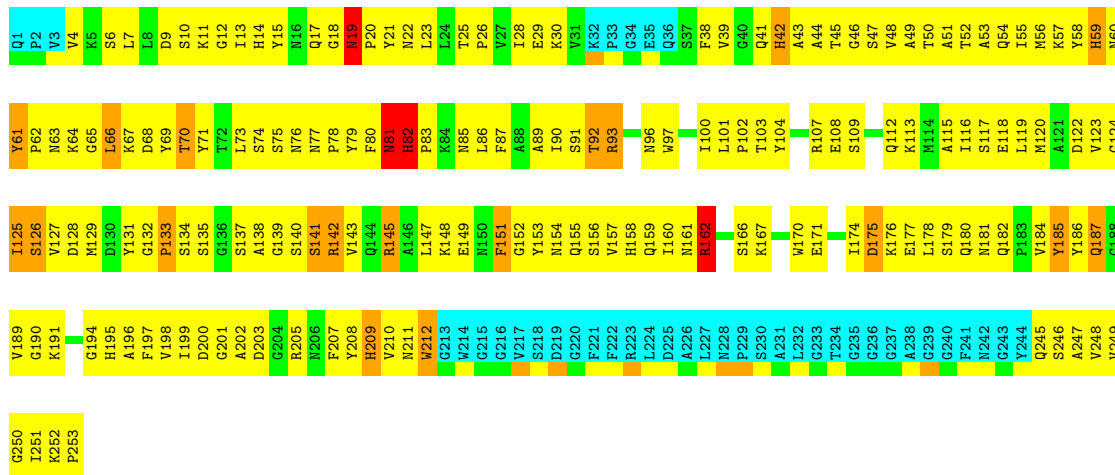


K252
P253

4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Streptopain

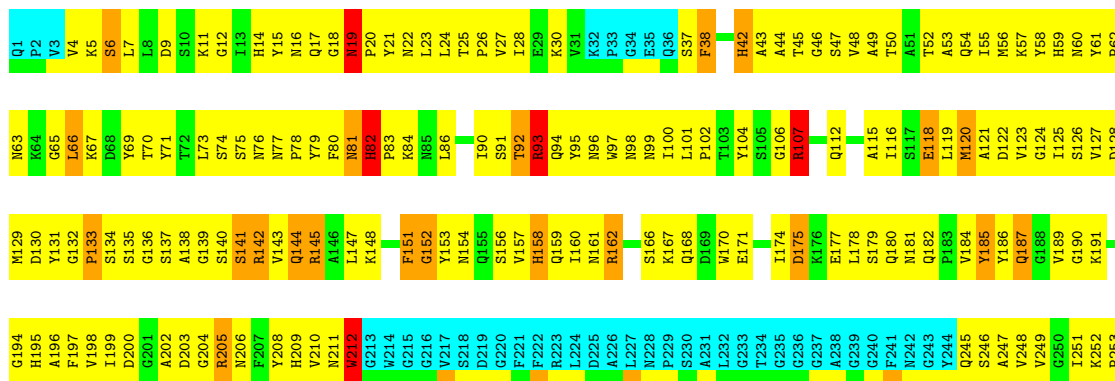
Chain A: 15% 60% 8% 16%



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Streptopain

Chain A: 17% 57% 8% 16%



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Streptopain

Chain A: 15% 58% 9% 16%

G250	V189	S126	P62	Q1
I251	G190	D127	N63	P2
K252	K191	D128	K64	V3
P253		M129	G65	V4
	G194	D130	L66	K5
	H195	I131	K67	S6
	A196	G132	D68	L7
	F197	P133	V69	L8
	V198	S134	T70	L9
	I199	S135	Y71	S10
	D200	G136	T72	K11
	G201	S137	L73	G12
	A202	A138	S74	I13
	D203	G139	S75	H14
	G204	S140	N76	Y15
	K205	S141	N77	N16
	N206	R142	P78	Q17
	P207	V143	Y79	G18
	Y208	R144	F80	R19
	H209	R145	N81	P20
	V210	A146	H82	Y21
	N211	L147	P83	N22
	V212	K148	K84	L23
	G213	E149	N85	L24
	N214	M150	L86	T25
	G215	F151	F87	P26
	G216	G152	A88	V27
	V217	Y153	A89	I28
	S218	N154	T90	F29
	D219	Q155	S91	K30
	G220	S156	T92	V31
	F221	V157	R93	K32
	F222	H158	Q94	P33
	R223	Q159	Y95	G34
	L224	M160	N96	E35
	D225	N161	N97	Q36
	A226	R162	N98	S37
	L227		N99	F38
	N228	S166	I100	V39
	P229	K167	L101	P102
	S230		P102	G40
	A231	W170	T103	A43
	L232	E171	Y104	A44
	G233	A172		T45
	T234	Q173	R107	G46
	G235	I174	E108	S47
	G236	D175	S109	V48
	G237	K176		A49
	A238	E177	M114	T50
	G239	L178	A115	A51
	G240	S179	I116	T52
	F241	Q180	S117	A53
	N242	N181	E118	Q54
	G243	Q182	L119	I55
	Y244	P183	M120	M56
	Q245	V184	A121	K57
	S246	Y185	D122	Y58
	A247	Y186	V123	H59
	V248	Q187	G124	N60
	V249	K188	T195	Y61

5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *DGSA-distance geometry simulated annealing*.

Of the 100 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	3.185

No chemical shift data was provided.

6 Model quality i

6.1 Standard geometry i

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.41±0.00	0±0/1712 (0.0± 0.0%)	1.37±0.01	5±1/2321 (0.2± 0.0%)
All	All	1.41	0/34240 (0.0%)	1.37	103/46420 (0.2%)

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	5.5±0.7
All	All	0	110

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	82	HIS	CA-CB-CG	-8.07	105.73	113.80	20	20
1	A	63	ASN	N-CA-C	-7.24	103.70	112.54	3	20
1	A	151	PHE	CA-CB-CG	-7.00	106.80	113.80	1	20
1	A	133	PRO	N-CA-C	-6.08	105.44	113.65	19	20
1	A	209	HIS	CA-CB-CG	-6.01	107.79	113.80	18	2
1	A	40	GLY	N-CA-C	-5.94	107.62	114.69	4	4
1	A	59	HIS	CA-CB-CG	-5.73	108.07	113.80	3	4
1	A	20	PRO	N-CA-C	-5.40	109.06	114.68	7	1
1	A	38	PHE	CA-CB-CG	-5.24	108.56	113.80	1	5
1	A	125	ILE	N-CA-C	-5.23	105.98	110.74	20	1
1	A	180	GLN	N-CA-C	-5.10	107.57	112.97	9	1
1	A	106	GLY	N-CA-C	-5.09	108.23	115.30	19	3
1	A	69	TYR	CA-CB-CG	-5.05	104.81	113.90	1	1
1	A	195	HIS	CA-CB-CG	-5.04	108.76	113.80	3	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	107	ARG	Sidechain	20
1	A	145	ARG	Sidechain	20
1	A	205	ARG	Sidechain	20
1	A	142	ARG	Sidechain	19
1	A	162	ARG	Sidechain	17
1	A	93	ARG	Sidechain	14

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	1670	1580	1599	254±14
All	All	33400	31600	31980	5072

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 78.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:ILE:HG21	1:A:251:ILE:HD13	1.04	1.28	16	4
1:A:50:THR:HG23	1:A:120:MET:HE1	1.03	1.30	3	3
1:A:160:ILE:HD12	1:A:170:TRP:CH2	0.97	1.94	9	6
1:A:116:ILE:HD11	1:A:120:MET:HE2	0.96	1.31	18	2
1:A:55:ILE:HD11	1:A:198:VAL:HG22	0.96	1.34	4	18
1:A:174:ILE:HG23	1:A:184:VAL:HG21	0.93	1.41	8	14
1:A:158:HIS:CE1	1:A:249:VAL:HG23	0.93	1.98	1	10
1:A:66:LEU:HD12	1:A:152:GLY:HA3	0.92	1.41	3	19
1:A:45:THR:O	1:A:129:MET:HE3	0.90	1.66	9	20
1:A:143:VAL:HG21	1:A:185:TYR:CE2	0.89	2.02	4	19
1:A:55:ILE:CD1	1:A:198:VAL:HG22	0.89	1.98	2	16
1:A:45:THR:HG21	1:A:120:MET:SD	0.88	2.08	7	13
1:A:174:ILE:HD13	1:A:199:ILE:CD1	0.87	1.99	4	3
1:A:19:ASN:ND2	1:A:20:PRO:HD2	0.85	1.85	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:123:VAL:O	1:A:127:VAL:HG22	0.84	1.70	14	14
1:A:160:ILE:HD12	1:A:170:TRP:CZ3	0.84	2.07	6	17
1:A:69:TYR:CD1	1:A:69:TYR:C	0.83	2.56	1	5
1:A:185:TYR:CD1	1:A:248:VAL:HG23	0.83	2.08	12	14
1:A:184:VAL:HG13	1:A:249:VAL:HG12	0.81	1.50	14	7
1:A:138:ALA:HB3	1:A:142:ARG:CG	0.80	2.06	17	13
1:A:69:TYR:CZ	1:A:125:ILE:HG23	0.80	2.11	1	1
1:A:90:ILE:HD12	1:A:150:ASN:CG	0.80	2.02	1	1
1:A:69:TYR:CE1	1:A:125:ILE:CG2	0.79	2.65	1	1
1:A:197:PHE:CD1	1:A:210:VAL:HG13	0.79	2.12	17	15
1:A:210:VAL:HG11	1:A:212:TRP:CZ3	0.79	2.12	6	1
1:A:4:VAL:HG21	1:A:178:LEU:HB2	0.79	1.53	4	1
1:A:197:PHE:CD2	1:A:210:VAL:HG13	0.78	2.13	9	2
1:A:116:ILE:CD1	1:A:119:LEU:HD23	0.78	2.08	12	20
1:A:24:LEU:HD12	1:A:118:GLU:N	0.77	1.93	14	14
1:A:93:ARG:HE	1:A:122:ASP:CG	0.77	1.86	9	10
1:A:138:ALA:HB3	1:A:142:ARG:HG2	0.77	1.55	1	11
1:A:38:PHE:CD2	1:A:133:PRO:HG3	0.76	2.16	16	10
1:A:28:ILE:HD11	1:A:132:GLY:C	0.76	2.04	17	17
1:A:44:ALA:HB3	1:A:135:SER:OG	0.76	1.80	4	3
1:A:174:ILE:HG21	1:A:199:ILE:HD13	0.75	1.57	20	11
1:A:202:ALA:CB	1:A:208:TYR:CE1	0.74	2.70	13	1
1:A:89:ALA:HB1	1:A:92:THR:HG23	0.74	1.57	18	2
1:A:21:TYR:HB3	1:A:120:MET:SD	0.74	2.22	2	14
1:A:18:GLY:O	1:A:19:ASN:O	0.73	2.06	4	19
1:A:19:ASN:HB3	1:A:20:PRO:CD	0.73	2.14	11	19
1:A:73:LEU:HD21	1:A:77:ASN:ND2	0.72	2.00	8	20
1:A:142:ARG:NH2	1:A:143:VAL:HG23	0.72	1.99	16	1
1:A:158:HIS:NE2	1:A:249:VAL:HG23	0.72	1.98	11	19
1:A:138:ALA:HB3	1:A:142:ARG:HG3	0.72	1.60	12	7
1:A:210:VAL:HG11	1:A:212:TRP:CE2	0.72	2.18	18	5
1:A:20:PRO:HA	1:A:23:LEU:HD12	0.72	1.61	6	6
1:A:38:PHE:CD2	1:A:133:PRO:CG	0.72	2.72	13	3
1:A:174:ILE:HG23	1:A:184:VAL:CG2	0.71	2.12	11	9
1:A:170:TRP:NE1	1:A:174:ILE:HD11	0.71	2.01	4	2
1:A:19:ASN:HB3	1:A:20:PRO:HD2	0.71	1.62	10	19
1:A:72:THR:HG23	1:A:85:ASN:OD1	0.71	1.85	9	2
1:A:142:ARG:HB2	1:A:142:ARG:CZ	0.71	2.15	16	1
1:A:89:ALA:HB1	1:A:92:THR:CG2	0.71	2.15	18	2
1:A:197:PHE:CD2	1:A:212:TRP:CZ3	0.70	2.79	15	9
1:A:66:LEU:N	1:A:66:LEU:HD23	0.70	2.02	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:139:GLY:O	1:A:142:ARG:NH2	0.69	2.25	16	1
1:A:19:ASN:ND2	1:A:20:PRO:CD	0.69	2.55	18	1
1:A:66:LEU:HD12	1:A:152:GLY:CA	0.69	2.17	4	19
1:A:4:VAL:HG11	1:A:178:LEU:HB3	0.69	1.64	4	17
1:A:186:TYR:CD1	1:A:197:PHE:CZ	0.69	2.79	18	16
1:A:142:ARG:HH22	1:A:143:VAL:HG23	0.69	1.48	16	1
1:A:186:TYR:CD2	1:A:247:ALA:HB2	0.68	2.23	16	5
1:A:71:TYR:CZ	1:A:86:LEU:HD13	0.68	2.24	9	17
1:A:186:TYR:CG	1:A:197:PHE:CZ	0.68	2.82	4	11
1:A:174:ILE:HD13	1:A:199:ILE:HD12	0.67	1.66	11	3
1:A:4:VAL:HG23	1:A:202:ALA:HB3	0.67	1.66	3	3
1:A:69:TYR:CD2	1:A:70:THR:N	0.67	2.62	1	3
1:A:147:LEU:HD13	1:A:251:ILE:HG12	0.67	1.67	7	5
1:A:60:ASN:CB	1:A:97:TRP:CG	0.66	2.78	9	11
1:A:100:ILE:HG12	1:A:115:ALA:HB1	0.66	1.66	2	16
1:A:139:GLY:H	1:A:142:ARG:NH1	0.66	1.89	16	1
1:A:69:TYR:CE1	1:A:125:ILE:HG21	0.65	2.25	1	1
1:A:139:GLY:C	1:A:142:ARG:HH12	0.65	1.99	16	1
1:A:60:ASN:CB	1:A:97:TRP:CD2	0.65	2.80	1	12
1:A:38:PHE:CE2	1:A:133:PRO:CG	0.65	2.80	4	3
1:A:160:ILE:HD12	1:A:170:TRP:CE3	0.65	2.26	6	1
1:A:178:LEU:HD21	1:A:199:ILE:HG22	0.65	1.67	7	2
1:A:138:ALA:HB2	1:A:142:ARG:NH2	0.65	2.07	10	2
1:A:209:HIS:C	1:A:209:HIS:CD2	0.65	2.75	14	7
1:A:93:ARG:HE	1:A:118:GLU:HG2	0.64	1.52	7	6
1:A:197:PHE:CD1	1:A:212:TRP:CZ3	0.64	2.85	9	2
1:A:19:ASN:CB	1:A:20:PRO:CD	0.64	2.76	4	20
1:A:160:ILE:CD1	1:A:170:TRP:CZ3	0.64	2.81	6	3
1:A:69:TYR:CG	1:A:70:THR:N	0.64	2.60	1	1
1:A:59:HIS:CD2	1:A:251:ILE:O	0.64	2.50	12	20
1:A:210:VAL:CG1	1:A:212:TRP:CE2	0.64	2.81	4	2
1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:HD12	0.64	2.08	8	17
1:A:7:LEU:HB3	1:A:58:TYR:CE2	0.64	2.28	5	18
1:A:28:ILE:HD11	1:A:133:PRO:N	0.64	2.08	17	17
1:A:90:ILE:HD12	1:A:150:ASN:OD1	0.64	1.93	1	1
1:A:158:HIS:CE1	1:A:249:VAL:CG2	0.64	2.81	15	8
1:A:186:TYR:CD1	1:A:197:PHE:CE2	0.64	2.86	11	6
1:A:174:ILE:HG21	1:A:199:ILE:CD1	0.63	2.23	12	6
1:A:50:THR:CG2	1:A:120:MET:HE1	0.63	2.17	6	2
1:A:38:PHE:CD2	1:A:79:TYR:CE1	0.63	2.86	13	3
1:A:7:LEU:HD13	1:A:181:ASN:C	0.63	2.18	19	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:137:SER:OG	1:A:138:ALA:N	0.63	2.31	17	20
1:A:185:TYR:CD1	1:A:248:VAL:CG2	0.63	2.81	18	11
1:A:162:ARG:N	1:A:170:TRP:CH2	0.63	2.66	14	16
1:A:69:TYR:CD1	1:A:70:THR:N	0.63	2.67	2	8
1:A:139:GLY:N	1:A:142:ARG:NH1	0.63	2.47	16	1
1:A:21:TYR:HD1	1:A:120:MET:SD	0.63	2.17	2	1
1:A:19:ASN:CG	1:A:20:PRO:CD	0.63	2.72	18	16
1:A:90:ILE:HG21	1:A:150:ASN:OD1	0.63	1.92	1	1
1:A:116:ILE:HD12	1:A:119:LEU:HD23	0.63	1.70	12	7
1:A:61:TYR:CD1	1:A:61:TYR:C	0.62	2.77	3	20
1:A:107:ARG:HE	1:A:108:GLU:HA	0.62	1.54	17	2
1:A:160:ILE:CD1	1:A:170:TRP:CH2	0.62	2.80	9	5
1:A:80:PHE:CD1	1:A:80:PHE:N	0.62	2.67	13	8
1:A:185:TYR:CD1	1:A:185:TYR:C	0.62	2.77	13	19
1:A:104:TYR:CE2	1:A:116:ILE:HG21	0.62	2.30	6	7
1:A:71:TYR:CE1	1:A:86:LEU:HB2	0.62	2.29	20	19
1:A:177:GLU:CG	1:A:249:VAL:HB	0.61	2.24	6	20
1:A:53:ALA:CB	1:A:120:MET:SD	0.61	2.89	20	4
1:A:27:VAL:HG23	1:A:42:HIS:CE1	0.61	2.30	19	1
1:A:38:PHE:CG	1:A:133:PRO:HG3	0.61	2.31	16	20
1:A:139:GLY:H	1:A:142:ARG:CZ	0.61	2.08	16	1
1:A:200:ASP:OD1	1:A:209:HIS:CG	0.61	2.54	19	6
1:A:139:GLY:O	1:A:142:ARG:NH1	0.61	2.33	16	1
1:A:4:VAL:HG21	1:A:178:LEU:CB	0.61	2.25	4	4
1:A:156:SER:O	1:A:158:HIS:CE1	0.61	2.54	16	8
1:A:81:ASN:O	1:A:82:HIS:CG	0.60	2.53	12	20
1:A:69:TYR:CD1	1:A:125:ILE:CG2	0.60	2.84	1	1
1:A:15:TYR:CD2	1:A:54:GLN:CG	0.60	2.85	19	7
1:A:158:HIS:NE2	1:A:249:VAL:CG2	0.60	2.64	14	18
1:A:158:HIS:CD2	1:A:249:VAL:CG2	0.60	2.84	18	10
1:A:7:LEU:HB3	1:A:58:TYR:CE1	0.60	2.31	17	2
1:A:187:GLN:CA	1:A:195:HIS:O	0.60	2.50	19	17
1:A:200:ASP:CG	1:A:209:HIS:CD2	0.60	2.80	9	8
1:A:184:VAL:CG1	1:A:249:VAL:HG12	0.60	2.26	8	3
1:A:142:ARG:NH1	1:A:142:ARG:HG3	0.60	2.12	16	1
1:A:200:ASP:OD2	1:A:209:HIS:CD2	0.60	2.55	7	8
1:A:90:ILE:HA	1:A:93:ARG:CG	0.59	2.28	1	20
1:A:189:VAL:CG1	1:A:190:GLY:N	0.59	2.65	8	6
1:A:77:ASN:O	1:A:82:HIS:CE1	0.59	2.55	20	19
1:A:187:GLN:HA	1:A:195:HIS:O	0.59	1.97	10	20
1:A:28:ILE:HG23	1:A:79:TYR:HB3	0.59	1.73	20	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:137:SER:OG	1:A:142:ARG:NE	0.59	2.34	16	1
1:A:162:ARG:CD	1:A:170:TRP:CG	0.59	2.85	4	3
1:A:6:SER:OG	1:A:209:HIS:CG	0.59	2.56	2	4
1:A:93:ARG:NE	1:A:118:GLU:CG	0.59	2.66	11	12
1:A:127:VAL:HB	1:A:142:ARG:NE	0.59	2.12	16	1
1:A:90:ILE:CG2	1:A:150:ASN:OD1	0.59	2.50	1	1
1:A:26:PRO:HG2	1:A:131:TYR:CG	0.59	2.31	6	16
1:A:90:ILE:CD1	1:A:150:ASN:OD1	0.59	2.51	1	1
1:A:209:HIS:CD2	1:A:210:VAL:N	0.59	2.71	14	5
1:A:79:TYR:C	1:A:80:PHE:CD1	0.59	2.81	8	5
1:A:162:ARG:HB2	1:A:186:TYR:HH	0.59	1.57	14	7
1:A:60:ASN:OD1	1:A:97:TRP:CE3	0.59	2.55	15	10
1:A:142:ARG:CZ	1:A:142:ARG:CB	0.59	2.77	16	1
1:A:97:TRP:CE3	1:A:100:ILE:HD12	0.58	2.33	2	14
1:A:186:TYR:HB3	1:A:197:PHE:CE1	0.58	2.33	3	16
1:A:170:TRP:HE1	1:A:174:ILE:HD11	0.58	1.56	4	2
1:A:199:ILE:HG23	1:A:208:TYR:HB3	0.58	1.74	1	2
1:A:65:GLY:C	1:A:66:LEU:HD23	0.58	2.23	15	1
1:A:19:ASN:ND2	1:A:20:PRO:HD3	0.58	2.14	19	16
1:A:59:HIS:O	1:A:60:ASN:C	0.58	2.46	8	20
1:A:28:ILE:HD11	1:A:132:GLY:HA2	0.58	1.76	16	3
1:A:202:ALA:HB1	1:A:208:TYR:CE1	0.58	2.33	13	1
1:A:60:ASN:HB2	1:A:97:TRP:CG	0.58	2.34	10	9
1:A:7:LEU:N	1:A:200:ASP:O	0.58	2.36	18	16
1:A:186:TYR:HB3	1:A:197:PHE:CZ	0.58	2.34	12	19
1:A:158:HIS:CE1	1:A:249:VAL:O	0.58	2.56	20	6
1:A:158:HIS:CD2	1:A:249:VAL:HG23	0.58	2.33	18	5
1:A:139:GLY:HA2	1:A:185:TYR:OH	0.58	1.99	18	19
1:A:162:ARG:HB2	1:A:170:TRP:CZ2	0.58	2.34	3	17
1:A:174:ILE:CG2	1:A:199:ILE:HG21	0.58	2.28	7	5
1:A:21:TYR:CD1	1:A:120:MET:SD	0.58	2.96	2	1
1:A:19:ASN:CG	1:A:20:PRO:HD3	0.58	2.23	7	20
1:A:69:TYR:OH	1:A:71:TYR:CD2	0.58	2.54	1	1
1:A:38:PHE:CD1	1:A:41:GLN:NE2	0.58	2.72	13	3
1:A:200:ASP:OD1	1:A:209:HIS:CD2	0.58	2.57	11	8
1:A:162:ARG:CG	1:A:245:GLN:NE2	0.58	2.67	13	2
1:A:142:ARG:NH1	1:A:142:ARG:CG	0.58	2.65	16	1
1:A:48:VAL:HA	1:A:196:ALA:CB	0.58	2.29	13	16
1:A:15:TYR:CG	1:A:54:GLN:HG2	0.58	2.34	19	5
1:A:6:SER:OG	1:A:209:HIS:CD2	0.57	2.56	15	3
1:A:101:LEU:N	1:A:104:TYR:OH	0.57	2.37	3	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:153:TYR:CD2	1:A:251:ILE:HG22	0.57	2.34	19	6
1:A:26:PRO:HG3	1:A:86:LEU:HD21	0.57	1.76	16	3
1:A:186:TYR:CD1	1:A:187:GLN:N	0.57	2.72	4	15
1:A:178:LEU:HD11	1:A:199:ILE:CG2	0.57	2.28	17	5
1:A:210:VAL:HG11	1:A:212:TRP:CH2	0.57	2.34	6	1
1:A:50:THR:HG23	1:A:120:MET:CE	0.57	2.20	6	4
1:A:93:ARG:HE	1:A:118:GLU:CG	0.57	2.11	8	9
1:A:160:ILE:HD11	1:A:247:ALA:HB3	0.57	1.74	17	9
1:A:69:TYR:CZ	1:A:125:ILE:CG2	0.57	2.82	1	1
1:A:52:THR:HG23	1:A:147:LEU:HD21	0.57	1.77	2	1
1:A:59:HIS:NE2	1:A:251:ILE:O	0.57	2.37	3	14
1:A:139:GLY:CA	1:A:185:TYR:OH	0.57	2.52	17	17
1:A:71:TYR:OH	1:A:86:LEU:HD22	0.57	1.99	6	10
1:A:19:ASN:CB	1:A:20:PRO:HD3	0.57	2.30	18	3
1:A:19:ASN:HB2	1:A:20:PRO:HD3	0.57	1.75	18	1
1:A:4:VAL:HB	1:A:202:ALA:N	0.56	2.14	1	14
1:A:60:ASN:HB3	1:A:97:TRP:CD2	0.56	2.34	8	9
1:A:200:ASP:N	1:A:200:ASP:OD1	0.56	2.38	17	2
1:A:60:ASN:HA	1:A:97:TRP:CE2	0.56	2.35	1	18
1:A:60:ASN:HA	1:A:97:TRP:CD2	0.56	2.35	14	20
1:A:15:TYR:CD2	1:A:54:GLN:HG2	0.56	2.35	19	8
1:A:90:ILE:CB	1:A:150:ASN:OD1	0.56	2.53	1	1
1:A:154:ASN:CB	1:A:252:LYS:O	0.56	2.54	12	20
1:A:170:TRP:NE1	1:A:186:TYR:HH	0.56	1.98	10	6
1:A:208:TYR:CD1	1:A:208:TYR:N	0.56	2.74	7	11
1:A:69:TYR:CD1	1:A:150:ASN:OD1	0.56	2.58	13	1
1:A:15:TYR:HB2	1:A:54:GLN:CG	0.56	2.30	14	20
1:A:57:LYS:CE	1:A:100:ILE:O	0.56	2.54	17	16
1:A:13:ILE:HD11	1:A:58:TYR:HA	0.56	1.78	20	10
1:A:166:SER:O	1:A:167:LYS:C	0.56	2.49	3	20
1:A:52:THR:O	1:A:56:MET:N	0.56	2.38	3	10
1:A:128:ASP:HB2	1:A:142:ARG:HE	0.56	1.59	17	2
1:A:62:PRO:O	1:A:95:TYR:HB2	0.56	2.00	15	18
1:A:170:TRP:NE1	1:A:186:TYR:OH	0.56	2.39	1	17
1:A:178:LEU:HD13	1:A:201:GLY:C	0.56	2.26	13	2
1:A:85:ASN:N	1:A:85:ASN:ND2	0.55	2.54	13	4
1:A:160:ILE:O	1:A:246:SER:CB	0.55	2.55	12	15
1:A:205:ARG:O	1:A:206:ASN:CB	0.55	2.55	5	8
1:A:30:LYS:N	1:A:79:TYR:O	0.55	2.40	19	14
1:A:67:LYS:O	1:A:150:ASN:OD1	0.55	2.23	1	1
1:A:61:TYR:CD1	1:A:253:PRO:HB3	0.55	2.36	5	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:126:SER:OG	1:A:146:ALA:HB1	0.55	2.01	1	3
1:A:199:ILE:HA	1:A:209:HIS:O	0.55	2.01	17	2
1:A:162:ARG:N	1:A:170:TRP:CZ3	0.55	2.74	20	8
1:A:162:ARG:HD3	1:A:170:TRP:CD1	0.55	2.37	14	11
1:A:73:LEU:HD21	1:A:80:PHE:CD1	0.55	2.37	13	1
1:A:61:TYR:CB	1:A:62:PRO:CD	0.55	2.85	7	20
1:A:176:LYS:NZ	1:A:176:LYS:HB3	0.55	2.17	5	1
1:A:78:PRO:HD2	1:A:79:TYR:CD2	0.55	2.37	17	20
1:A:100:ILE:CG1	1:A:115:ALA:HB1	0.55	2.31	2	10
1:A:38:PHE:CE2	1:A:79:TYR:CE1	0.55	2.95	13	3
1:A:162:ARG:HD2	1:A:170:TRP:CG	0.55	2.37	4	6
1:A:54:GLN:OE1	1:A:211:ASN:ND2	0.55	2.40	14	15
1:A:174:ILE:CG2	1:A:184:VAL:HG21	0.55	2.25	11	4
1:A:184:VAL:HB	1:A:199:ILE:HB	0.55	1.77	10	5
1:A:60:ASN:HB3	1:A:97:TRP:CG	0.55	2.37	16	15
1:A:72:THR:HG23	1:A:85:ASN:CG	0.55	2.27	9	2
1:A:107:ARG:C	1:A:107:ARG:CD	0.55	2.80	10	2
1:A:93:ARG:CD	1:A:118:GLU:CD	0.55	2.80	11	1
1:A:4:VAL:HG12	1:A:201:GLY:HA2	0.55	1.78	17	1
1:A:8:LEU:HD11	1:A:198:VAL:HG11	0.55	1.77	2	5
1:A:25:THR:O	1:A:42:HIS:CE1	0.55	2.60	17	4
1:A:17:GLN:CG	1:A:50:THR:OG1	0.55	2.55	20	1
1:A:60:ASN:HA	1:A:97:TRP:CE3	0.54	2.37	12	7
1:A:61:TYR:HB3	1:A:62:PRO:HD3	0.54	1.80	13	20
1:A:38:PHE:CE2	1:A:133:PRO:HG2	0.54	2.37	13	3
1:A:177:GLU:CD	1:A:250:GLY:N	0.54	2.66	6	7
1:A:6:SER:HB3	1:A:209:HIS:CD2	0.54	2.37	17	1
1:A:15:TYR:OH	1:A:57:LYS:HB2	0.54	2.03	4	20
1:A:189:VAL:HG12	1:A:190:GLY:N	0.54	2.17	9	17
1:A:93:ARG:NE	1:A:122:ASP:CG	0.54	2.66	6	6
1:A:69:TYR:CD1	1:A:69:TYR:O	0.54	2.60	1	1
1:A:19:ASN:CB	1:A:20:PRO:HD2	0.54	2.33	19	9
1:A:14:HIS:N	1:A:102:PRO:O	0.54	2.39	15	20
1:A:28:ILE:CD1	1:A:133:PRO:HD3	0.54	2.33	13	20
1:A:60:ASN:HB3	1:A:97:TRP:CE3	0.54	2.38	12	4
1:A:19:ASN:ND2	1:A:19:ASN:N	0.54	2.52	18	1
1:A:4:VAL:CG1	1:A:201:GLY:HA2	0.54	2.33	17	3
1:A:156:SER:O	1:A:158:HIS:ND1	0.54	2.41	11	16
1:A:7:LEU:CD1	1:A:181:ASN:C	0.54	2.81	19	11
1:A:38:PHE:CG	1:A:41:GLN:NE2	0.54	2.76	13	3
1:A:93:ARG:CD	1:A:122:ASP:OD2	0.54	2.56	9	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:203:ASP:N	1:A:207:PHE:O	0.54	2.41	12	6
1:A:177:GLU:HG3	1:A:249:VAL:HB	0.54	1.80	6	6
1:A:30:LYS:CD	1:A:80:PHE:C	0.54	2.81	12	3
1:A:174:ILE:HG21	1:A:199:ILE:HG21	0.54	1.79	16	3
1:A:185:TYR:HB3	1:A:248:VAL:HB	0.54	1.79	17	9
1:A:139:GLY:C	1:A:185:TYR:OH	0.54	2.51	16	7
1:A:60:ASN:CA	1:A:97:TRP:CD2	0.53	2.91	1	14
1:A:186:TYR:HB3	1:A:197:PHE:CE2	0.53	2.38	1	1
1:A:107:ARG:O	1:A:107:ARG:CD	0.53	2.57	8	2
1:A:139:GLY:C	1:A:142:ARG:NH1	0.53	2.65	16	1
1:A:29:GLU:HA	1:A:39:VAL:HG13	0.53	1.80	1	5
1:A:60:ASN:CA	1:A:97:TRP:CE2	0.53	2.91	1	15
1:A:65:GLY:HA3	1:A:90:ILE:O	0.53	2.04	3	20
1:A:15:TYR:OH	1:A:57:LYS:CG	0.53	2.57	18	2
1:A:16:ASN:HB2	1:A:21:TYR:CE1	0.53	2.39	6	2
1:A:160:ILE:O	1:A:246:SER:CA	0.53	2.56	12	17
1:A:66:LEU:C	1:A:66:LEU:CD2	0.53	2.81	5	5
1:A:187:GLN:HG3	1:A:187:GLN:O	0.53	2.03	1	10
1:A:200:ASP:OD1	1:A:209:HIS:ND1	0.53	2.42	1	3
1:A:139:GLY:CA	1:A:187:GLN:OE1	0.53	2.56	3	2
1:A:21:TYR:CD2	1:A:116:ILE:HG12	0.53	2.38	3	7
1:A:177:GLU:OE1	1:A:182:GLN:CB	0.53	2.57	18	2
1:A:124:GLY:O	1:A:129:MET:CB	0.53	2.57	6	10
1:A:127:VAL:O	1:A:128:ASP:C	0.53	2.51	4	20
1:A:139:GLY:O	1:A:143:VAL:HG23	0.53	2.03	7	3
1:A:16:ASN:HB2	1:A:21:TYR:CE2	0.53	2.39	20	4
1:A:69:TYR:CD1	1:A:125:ILE:HG21	0.53	2.39	1	1
1:A:170:TRP:CZ2	1:A:186:TYR:CE2	0.53	2.96	3	16
1:A:160:ILE:N	1:A:247:ALA:O	0.53	2.40	9	9
1:A:57:LYS:O	1:A:60:ASN:ND2	0.53	2.42	1	9
1:A:67:LYS:O	1:A:150:ASN:CG	0.53	2.52	1	1
1:A:80:PHE:O	1:A:81:ASN:C	0.53	2.51	5	20
1:A:143:VAL:HG12	1:A:147:LEU:CD1	0.53	2.34	15	13
1:A:38:PHE:CD2	1:A:133:PRO:CD	0.53	2.92	4	3
1:A:44:ALA:CB	1:A:135:SER:OG	0.53	2.57	4	1
1:A:180:GLN:O	1:A:182:GLN:CG	0.53	2.57	13	2
1:A:183:PRO:CB	1:A:199:ILE:O	0.53	2.57	17	1
1:A:120:MET:O	1:A:124:GLY:N	0.53	2.38	14	16
1:A:178:LEU:HD13	1:A:201:GLY:O	0.53	2.03	5	8
1:A:116:ILE:HG23	1:A:117:SER:N	0.53	2.19	18	4
1:A:176:LYS:NZ	1:A:176:LYS:CB	0.53	2.70	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:ARG:CD	1:A:118:GLU:OE1	0.53	2.57	14	1
1:A:62:PRO:O	1:A:95:TYR:CB	0.53	2.57	11	12
1:A:162:ARG:N	1:A:245:GLN:O	0.53	2.42	14	5
1:A:68:ASP:N	1:A:91:SER:OG	0.53	2.42	6	2
1:A:143:VAL:HG21	1:A:185:TYR:CZ	0.52	2.39	14	5
1:A:202:ALA:HB2	1:A:208:TYR:CE1	0.52	2.39	13	1
1:A:48:VAL:HA	1:A:196:ALA:HB3	0.52	1.80	17	14
1:A:56:MET:O	1:A:60:ASN:N	0.52	2.42	10	8
1:A:130:ASP:CB	1:A:136:GLY:O	0.52	2.57	15	8
1:A:162:ARG:HD2	1:A:170:TRP:CD2	0.52	2.38	4	6
1:A:107:ARG:CD	1:A:107:ARG:O	0.52	2.57	10	2
1:A:145:ARG:CG	1:A:149:GLU:OE1	0.52	2.58	17	2
1:A:175:ASP:O	1:A:179:SER:N	0.52	2.41	14	13
1:A:185:TYR:CD1	1:A:185:TYR:O	0.52	2.62	9	16
1:A:15:TYR:OH	1:A:57:LYS:CB	0.52	2.57	2	4
1:A:17:GLN:OE1	1:A:47:SER:N	0.52	2.42	18	2
1:A:197:PHE:CD1	1:A:197:PHE:C	0.52	2.87	20	11
1:A:68:ASP:OD1	1:A:91:SER:N	0.52	2.43	14	5
1:A:93:ARG:NE	1:A:118:GLU:HG2	0.52	2.19	20	9
1:A:44:ALA:N	1:A:135:SER:OG	0.52	2.43	18	9
1:A:197:PHE:HB3	1:A:212:TRP:CE3	0.52	2.40	19	1
1:A:171:GLU:CG	1:A:208:TYR:OH	0.52	2.58	16	1
1:A:8:LEU:HD12	1:A:211:ASN:CB	0.52	2.34	17	1
1:A:7:LEU:HB2	1:A:200:ASP:HB2	0.52	1.81	3	19
1:A:56:MET:SD	1:A:123:VAL:CG2	0.52	2.98	20	3
1:A:82:HIS:N	1:A:83:PRO:HD2	0.52	2.20	18	20
1:A:71:TYR:CB	1:A:128:ASP:OD1	0.52	2.58	15	5
1:A:199:ILE:HG12	1:A:210:VAL:HG22	0.52	1.82	16	2
1:A:153:TYR:CE2	1:A:251:ILE:HG22	0.52	2.40	19	3
1:A:178:LEU:CD1	1:A:201:GLY:O	0.52	2.58	1	3
1:A:11:LYS:HG3	1:A:58:TYR:CE1	0.52	2.40	17	1
1:A:56:MET:SD	1:A:123:VAL:HG22	0.52	2.45	5	8
1:A:104:TYR:CE2	1:A:116:ILE:CG2	0.52	2.93	6	5
1:A:160:ILE:O	1:A:247:ALA:N	0.52	2.42	15	7
1:A:5:LYS:O	1:A:200:ASP:O	0.52	2.28	19	15
1:A:184:VAL:HG22	1:A:249:VAL:HG12	0.52	1.82	18	2
1:A:57:LYS:NZ	1:A:100:ILE:O	0.52	2.43	17	7
1:A:107:ARG:O	1:A:107:ARG:NE	0.52	2.42	17	3
1:A:107:ARG:HE	1:A:108:GLU:CA	0.52	2.18	17	1
1:A:67:LYS:O	1:A:150:ASN:ND2	0.51	2.43	1	2
1:A:90:ILE:O	1:A:91:SER:C	0.51	2.53	3	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:162:ARG:HA	1:A:170:TRP:CE3	0.51	2.40	4	12
1:A:175:ASP:OD1	1:A:175:ASP:N	0.51	2.43	17	3
1:A:93:ARG:NE	1:A:122:ASP:OD2	0.51	2.42	6	4
1:A:210:VAL:HG11	1:A:212:TRP:CE3	0.51	2.40	6	1
1:A:82:HIS:N	1:A:83:PRO:CD	0.51	2.73	5	20
1:A:90:ILE:O	1:A:93:ARG:N	0.51	2.43	14	14
1:A:160:ILE:CG1	1:A:247:ALA:HB3	0.51	2.35	8	9
1:A:24:LEU:HD13	1:A:118:GLU:OE1	0.51	2.05	20	1
1:A:44:ALA:C	1:A:135:SER:OG	0.51	2.53	4	4
1:A:140:SER:CB	1:A:159:GLN:CD	0.51	2.83	15	5
1:A:145:ARG:NE	1:A:149:GLU:OE2	0.51	2.44	5	1
1:A:28:ILE:HD13	1:A:133:PRO:HD3	0.51	1.82	10	19
1:A:162:ARG:HB2	1:A:170:TRP:CE2	0.51	2.41	14	17
1:A:187:GLN:CB	1:A:195:HIS:O	0.51	2.58	13	14
1:A:15:TYR:HA	1:A:21:TYR:CE1	0.51	2.41	2	2
1:A:26:PRO:HD2	1:A:131:TYR:CD1	0.51	2.40	3	10
1:A:55:ILE:CD1	1:A:198:VAL:CG2	0.51	2.84	2	2
1:A:26:PRO:HG3	1:A:86:LEU:CD2	0.51	2.34	1	20
1:A:186:TYR:CB	1:A:197:PHE:CZ	0.51	2.93	4	10
1:A:11:LYS:HG3	1:A:58:TYR:CE2	0.51	2.41	12	5
1:A:61:TYR:HB3	1:A:62:PRO:CD	0.51	2.36	13	20
1:A:13:ILE:O	1:A:14:HIS:ND1	0.51	2.43	8	3
1:A:96:ASN:OD1	1:A:99:ASN:N	0.51	2.43	12	3
1:A:205:ARG:O	1:A:206:ASN:C	0.51	2.54	1	1
1:A:44:ALA:O	1:A:135:SER:OG	0.51	2.26	1	20
1:A:185:TYR:HD1	1:A:248:VAL:HG23	0.51	1.63	12	6
1:A:210:VAL:HG11	1:A:212:TRP:CD2	0.51	2.40	4	2
1:A:90:ILE:HB	1:A:150:ASN:OD1	0.51	2.06	1	1
1:A:171:GLU:CB	1:A:208:TYR:OH	0.51	2.59	16	1
1:A:118:GLU:O	1:A:122:ASP:CG	0.51	2.54	16	19
1:A:138:ALA:HB2	1:A:142:ARG:HH21	0.51	1.66	1	1
1:A:151:PHE:O	1:A:152:GLY:C	0.51	2.54	17	10
1:A:93:ARG:NH2	1:A:122:ASP:OD1	0.51	2.43	8	1
1:A:22:ASN:OD1	1:A:22:ASN:C	0.50	2.54	6	20
1:A:63:ASN:O	1:A:95:TYR:N	0.50	2.44	1	8
1:A:79:TYR:CZ	1:A:133:PRO:HD2	0.50	2.41	1	7
1:A:60:ASN:CG	1:A:97:TRP:CE3	0.50	2.89	19	3
1:A:68:ASP:HB3	1:A:87:PHE:CE1	0.50	2.41	16	6
1:A:145:ARG:CG	1:A:149:GLU:OE2	0.50	2.59	6	2
1:A:17:GLN:NE2	1:A:47:SER:N	0.50	2.59	13	1
1:A:64:LYS:CG	1:A:93:ARG:O	0.50	2.59	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:TYR:OH	1:A:86:LEU:O	0.50	2.30	1	1
1:A:185:TYR:CD1	1:A:248:VAL:HB	0.50	2.42	18	6
1:A:28:ILE:HB	1:A:38:PHE:O	0.50	2.06	19	15
1:A:78:PRO:HG2	1:A:79:TYR:CE2	0.50	2.41	17	3
1:A:127:VAL:HA	1:A:142:ARG:HB3	0.50	1.83	20	18
1:A:160:ILE:HG13	1:A:170:TRP:CH2	0.50	2.41	1	6
1:A:21:TYR:CB	1:A:120:MET:SD	0.50	2.99	2	1
1:A:18:GLY:O	1:A:22:ASN:CG	0.50	2.54	12	17
1:A:140:SER:HB3	1:A:159:GLN:CG	0.50	2.35	5	11
1:A:202:ALA:HA	1:A:208:TYR:CD1	0.50	2.41	13	1
1:A:187:GLN:OE1	1:A:194:GLY:HA3	0.50	2.06	15	17
1:A:159:GLN:CG	1:A:160:ILE:N	0.50	2.74	20	2
1:A:145:ARG:CG	1:A:149:GLU:CD	0.50	2.85	16	3
1:A:180:GLN:O	1:A:181:ASN:C	0.50	2.55	5	14
1:A:4:VAL:O	1:A:202:ALA:N	0.50	2.41	2	3
1:A:19:ASN:HB3	1:A:21:TYR:CE1	0.50	2.42	13	9
1:A:24:LEU:HD12	1:A:117:SER:OG	0.50	2.06	7	2
1:A:101:LEU:HB2	1:A:104:TYR:CZ	0.50	2.42	17	8
1:A:171:GLU:O	1:A:175:ASP:N	0.50	2.44	7	3
1:A:60:ASN:HA	1:A:97:TRP:CZ3	0.50	2.42	12	3
1:A:77:ASN:ND2	1:A:130:ASP:OD1	0.50	2.44	4	1
1:A:140:SER:O	1:A:144:GLN:N	0.49	2.44	5	7
1:A:198:VAL:O	1:A:210:VAL:HA	0.49	2.07	2	6
1:A:93:ARG:NE	1:A:122:ASP:OD1	0.49	2.45	8	7
1:A:125:ILE:HG22	1:A:126:SER:N	0.49	2.21	16	5
1:A:20:PRO:CA	1:A:23:LEU:HD12	0.49	2.36	6	3
1:A:11:LYS:HD2	1:A:58:TYR:CE2	0.49	2.42	10	1
1:A:73:LEU:CD2	1:A:80:PHE:CD1	0.49	2.94	13	1
1:A:107:ARG:C	1:A:107:ARG:NE	0.49	2.70	17	1
1:A:145:ARG:NH1	1:A:149:GLU:OE2	0.49	2.45	18	1
1:A:6:SER:HB2	1:A:209:HIS:CD2	0.49	2.42	1	1
1:A:18:GLY:O	1:A:22:ASN:OD1	0.49	2.30	10	20
1:A:61:TYR:CB	1:A:62:PRO:HD3	0.49	2.36	13	13
1:A:186:TYR:O	1:A:196:ALA:HA	0.49	2.06	3	6
1:A:154:ASN:OD1	1:A:155:GLN:N	0.49	2.45	9	3
1:A:200:ASP:OD1	1:A:200:ASP:C	0.49	2.55	13	1
1:A:200:ASP:OD1	1:A:200:ASP:N	0.49	2.43	16	1
1:A:6:SER:HB2	1:A:209:HIS:CG	0.49	2.42	16	5
1:A:11:LYS:O	1:A:12:GLY:C	0.49	2.55	6	19
1:A:93:ARG:NE	1:A:118:GLU:CD	0.49	2.71	1	2
1:A:197:PHE:CB	1:A:212:TRP:HA	0.49	2.36	4	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:TYR:CD2	1:A:116:ILE:CG1	0.49	2.95	4	10
1:A:68:ASP:O	1:A:150:ASN:ND2	0.49	2.45	11	2
1:A:76:ASN:O	1:A:76:ASN:ND2	0.49	2.44	11	1
1:A:11:LYS:CD	1:A:58:TYR:CD1	0.49	2.95	17	1
1:A:93:ARG:CZ	1:A:118:GLU:OE2	0.49	2.60	17	2
1:A:59:HIS:C	1:A:60:ASN:CG	0.49	2.80	17	9
1:A:7:LEU:HD22	1:A:181:ASN:HB3	0.49	1.83	18	2
1:A:129:MET:HB3	1:A:131:TYR:CZ	0.49	2.42	9	6
1:A:175:ASP:CG	1:A:208:TYR:OH	0.49	2.56	13	3
1:A:185:TYR:CD2	1:A:248:VAL:HG23	0.49	2.42	14	1
1:A:68:ASP:OD1	1:A:68:ASP:N	0.49	2.46	17	2
1:A:160:ILE:CD1	1:A:247:ALA:HB3	0.49	2.38	19	9
1:A:107:ARG:HE	1:A:107:ARG:C	0.49	2.14	17	1
1:A:69:TYR:CB	1:A:150:ASN:ND2	0.49	2.75	1	1
1:A:139:GLY:HA3	1:A:187:GLN:OE1	0.49	2.08	2	19
1:A:205:ARG:O	1:A:207:PHE:N	0.49	2.46	1	1
1:A:154:ASN:ND2	1:A:156:SER:OG	0.49	2.46	3	1
1:A:103:THR:HG23	1:A:103:THR:O	0.49	2.07	20	3
1:A:19:ASN:HB3	1:A:21:TYR:CD2	0.49	2.43	1	1
1:A:61:TYR:CD2	1:A:62:PRO:HD3	0.49	2.42	18	8
1:A:148:LYS:CG	1:A:157:VAL:HB	0.49	2.38	19	13
1:A:93:ARG:NH1	1:A:118:GLU:OE2	0.49	2.46	6	1
1:A:177:GLU:HG3	1:A:184:VAL:HG22	0.49	1.85	6	1
1:A:144:GLN:CD	1:A:144:GLN:C	0.49	2.81	7	1
1:A:157:VAL:CG2	1:A:250:GLY:O	0.49	2.60	18	2
1:A:189:VAL:HG22	1:A:194:GLY:CA	0.49	2.37	1	2
1:A:48:VAL:HG23	1:A:194:GLY:O	0.49	2.07	2	3
1:A:127:VAL:C	1:A:128:ASP:OD1	0.49	2.56	2	1
1:A:29:GLU:C	1:A:39:VAL:HG22	0.49	2.32	15	7
1:A:211:ASN:C	1:A:211:ASN:OD1	0.48	2.56	6	7
1:A:176:LYS:HB3	1:A:176:LYS:HZ3	0.48	1.68	5	1
1:A:66:LEU:O	1:A:66:LEU:CD2	0.48	2.62	1	1
1:A:101:LEU:O	1:A:104:TYR:CE1	0.48	2.66	18	5
1:A:128:ASP:OD2	1:A:142:ARG:NH1	0.48	2.46	5	1
1:A:4:VAL:HG21	1:A:178:LEU:HB3	0.48	1.85	13	1
1:A:6:SER:OG	1:A:9:ASP:CG	0.48	2.56	20	3
1:A:187:GLN:HB2	1:A:195:HIS:O	0.48	2.07	1	15
1:A:48:VAL:CG2	1:A:194:GLY:O	0.48	2.62	17	5
1:A:25:THR:O	1:A:42:HIS:ND1	0.48	2.47	19	6
1:A:154:ASN:HB2	1:A:252:LYS:O	0.48	2.09	10	15
1:A:96:ASN:OD1	1:A:98:ASN:N	0.48	2.46	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:GLY:HA2	1:A:135:SER:O	0.48	2.07	8	17
1:A:160:ILE:CG1	1:A:170:TRP:CZ3	0.48	2.97	6	1
1:A:142:ARG:NH1	1:A:142:ARG:H	0.48	2.06	16	1
1:A:80:PHE:O	1:A:81:ASN:O	0.48	2.31	20	20
1:A:140:SER:HB2	1:A:159:GLN:CD	0.48	2.34	15	9
1:A:128:ASP:OD1	1:A:142:ARG:CD	0.48	2.61	2	1
1:A:197:PHE:CD1	1:A:210:VAL:CG1	0.48	2.95	12	3
1:A:145:ARG:NH2	1:A:149:GLU:OE2	0.48	2.47	5	1
1:A:171:GLU:OE1	1:A:206:ASN:ND2	0.48	2.47	6	2
1:A:166:SER:O	1:A:170:TRP:N	0.48	2.45	8	6
1:A:141:SER:O	1:A:145:ARG:CB	0.48	2.62	13	2
1:A:130:ASP:CG	1:A:136:GLY:O	0.48	2.57	1	1
1:A:202:ALA:HA	1:A:208:TYR:HA	0.48	1.85	2	1
1:A:68:ASP:OD1	1:A:89:ALA:C	0.48	2.57	4	5
1:A:47:SER:O	1:A:48:VAL:C	0.48	2.56	16	20
1:A:16:ASN:HB3	1:A:21:TYR:CD2	0.48	2.43	16	2
1:A:108:GLU:OE1	1:A:108:GLU:N	0.48	2.47	3	1
1:A:66:LEU:CB	1:A:150:ASN:O	0.48	2.61	5	3
1:A:116:ILE:O	1:A:117:SER:C	0.48	2.56	18	2
1:A:187:GLN:NE2	1:A:189:VAL:HG22	0.48	2.23	17	1
1:A:46:GLY:CA	1:A:135:SER:HB2	0.48	2.39	1	4
1:A:6:SER:CA	1:A:200:ASP:OD2	0.48	2.61	3	1
1:A:187:GLN:CG	1:A:246:SER:O	0.48	2.61	4	1
1:A:6:SER:OG	1:A:9:ASP:CB	0.48	2.62	5	4
1:A:127:VAL:CB	1:A:142:ARG:HB3	0.48	2.39	10	10
1:A:211:ASN:O	1:A:212:TRP:O	0.48	2.32	5	8
1:A:21:TYR:CD2	1:A:120:MET:HE3	0.48	2.43	13	5
1:A:79:TYR:CE1	1:A:133:PRO:CD	0.47	2.97	3	5
1:A:15:TYR:HA	1:A:21:TYR:CZ	0.47	2.44	7	5
1:A:43:ALA:CB	1:A:131:TYR:HB3	0.47	2.39	15	14
1:A:210:VAL:CG1	1:A:211:ASN:N	0.47	2.77	4	1
1:A:20:PRO:HA	1:A:23:LEU:CD1	0.47	2.39	5	3
1:A:203:ASP:HB2	1:A:207:PHE:CB	0.47	2.39	9	2
1:A:153:TYR:O	1:A:154:ASN:C	0.47	2.57	10	20
1:A:183:PRO:HA	1:A:199:ILE:O	0.47	2.09	8	8
1:A:13:ILE:CD1	1:A:58:TYR:HA	0.47	2.40	20	3
1:A:92:THR:O	1:A:92:THR:OG1	0.47	2.31	18	5
1:A:64:LYS:NZ	1:A:64:LYS:CB	0.47	2.77	17	1
1:A:174:ILE:HA	1:A:184:VAL:HG21	0.47	1.86	18	1
1:A:59:HIS:O	1:A:60:ASN:OD1	0.47	2.32	9	9
1:A:140:SER:O	1:A:141:SER:C	0.47	2.56	3	19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:148:LYS:O	1:A:152:GLY:HA2	0.47	2.08	15	20
1:A:160:ILE:O	1:A:246:SER:HA	0.47	2.10	4	17
1:A:163:GLY:N	1:A:245:GLN:HG3	0.47	2.24	10	4
1:A:203:ASP:O	1:A:204:GLY:C	0.47	2.55	5	3
1:A:104:TYR:CE2	1:A:116:ILE:HB	0.47	2.44	16	1
1:A:69:TYR:CE2	1:A:71:TYR:HD2	0.47	2.26	1	1
1:A:178:LEU:HD12	1:A:208:TYR:CD1	0.47	2.44	1	1
1:A:175:ASP:OD1	1:A:208:TYR:CE2	0.47	2.67	3	3
1:A:211:ASN:OD1	1:A:211:ASN:O	0.47	2.32	20	7
1:A:107:ARG:CD	1:A:107:ARG:C	0.47	2.87	8	2
1:A:94:GLN:NE2	1:A:94:GLN:CA	0.47	2.77	13	3
1:A:175:ASP:OD1	1:A:208:TYR:OH	0.47	2.32	3	3
1:A:48:VAL:HG12	1:A:127:VAL:HG21	0.47	1.86	16	2
1:A:166:SER:OG	1:A:169:ASP:OD2	0.47	2.33	16	1
1:A:116:ILE:CD1	1:A:120:MET:HE2	0.47	2.22	18	1
1:A:50:THR:HG23	1:A:120:MET:HE3	0.47	1.87	10	4
1:A:69:TYR:CZ	1:A:70:THR:HA	0.47	2.44	1	1
1:A:127:VAL:CA	1:A:142:ARG:HB3	0.47	2.39	7	10
1:A:139:GLY:HA3	1:A:187:GLN:CD	0.47	2.35	1	6
1:A:140:SER:CB	1:A:159:GLN:HG3	0.47	2.40	1	4
1:A:49:ALA:HB2	1:A:124:GLY:HA2	0.47	1.87	16	4
1:A:16:ASN:HB3	1:A:21:TYR:CD1	0.47	2.45	3	1
1:A:161:ASN:C	1:A:170:TRP:CZ3	0.47	2.92	8	1
1:A:61:TYR:CG	1:A:253:PRO:HB3	0.47	2.45	9	2
1:A:189:VAL:HG12	1:A:190:GLY:H	0.47	1.69	18	4
1:A:85:ASN:ND2	1:A:85:ASN:N	0.47	2.62	15	1
1:A:139:GLY:O	1:A:142:ARG:CZ	0.47	2.62	16	1
1:A:61:TYR:HB3	1:A:153:TYR:CZ	0.47	2.45	18	2
1:A:61:TYR:CE1	1:A:253:PRO:HB3	0.47	2.45	18	1
1:A:76:ASN:O	1:A:78:PRO:HD3	0.47	2.10	2	19
1:A:160:ILE:O	1:A:246:SER:HB2	0.47	2.10	20	9
1:A:175:ASP:OD2	1:A:208:TYR:OH	0.47	2.33	3	5
1:A:73:LEU:HD21	1:A:77:ASN:CG	0.47	2.34	9	10
1:A:7:LEU:O	1:A:10:SER:OG	0.47	2.33	7	3
1:A:101:LEU:O	1:A:104:TYR:CE2	0.47	2.67	9	1
1:A:118:GLU:O	1:A:122:ASP:OD1	0.47	2.33	12	1
1:A:28:ILE:HD11	1:A:132:GLY:CA	0.47	2.40	18	16
1:A:58:TYR:CD1	1:A:58:TYR:C	0.47	2.93	19	7
1:A:16:ASN:CB	1:A:21:TYR:CE1	0.47	2.97	6	1
1:A:17:GLN:NE2	1:A:47:SER:HA	0.47	2.25	18	2
1:A:66:LEU:CD1	1:A:152:GLY:HA3	0.47	2.40	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:72:THR:O	1:A:73:LEU:C	0.47	2.58	13	9
1:A:116:ILE:O	1:A:120:MET:CG	0.47	2.63	2	1
1:A:125:ILE:O	1:A:128:ASP:N	0.47	2.47	5	8
1:A:185:TYR:HD2	1:A:248:VAL:HG23	0.47	1.69	14	1
1:A:127:VAL:C	1:A:142:ARG:HD2	0.47	2.35	16	1
1:A:171:GLU:O	1:A:172:ALA:C	0.46	2.57	14	7
1:A:162:ARG:CD	1:A:170:TRP:CD1	0.46	2.98	14	2
1:A:187:GLN:NE2	1:A:189:VAL:HG23	0.46	2.24	15	1
1:A:212:TRP:CE3	1:A:212:TRP:HA	0.46	2.44	19	1
1:A:6:SER:HA	1:A:200:ASP:O	0.46	2.09	1	3
1:A:88:ALA:O	1:A:90:ILE:N	0.46	2.47	17	8
1:A:53:ALA:HB1	1:A:119:LEU:CD2	0.46	2.40	19	8
1:A:52:THR:HB	1:A:123:VAL:HG11	0.46	1.87	16	1
1:A:100:ILE:O	1:A:100:ILE:HG22	0.46	2.10	17	1
1:A:161:ASN:O	1:A:162:ARG:C	0.46	2.56	10	16
1:A:4:VAL:N	1:A:202:ALA:O	0.46	2.43	3	1
1:A:95:TYR:OH	1:A:122:ASP:CB	0.46	2.63	9	3
1:A:171:GLU:O	1:A:175:ASP:OD1	0.46	2.32	3	3
1:A:188:GLY:O	1:A:195:HIS:N	0.46	2.44	3	1
1:A:11:LYS:CD	1:A:58:TYR:CD2	0.46	2.98	10	1
1:A:13:ILE:HG12	1:A:57:LYS:CG	0.46	2.40	15	1
1:A:81:ASN:N	1:A:81:ASN:ND2	0.46	2.63	18	1
1:A:87:PHE:CZ	1:A:89:ALA:HA	0.46	2.45	20	1
1:A:53:ALA:HA	1:A:56:MET:HB2	0.46	1.88	10	4
1:A:140:SER:O	1:A:144:GLN:CG	0.46	2.64	14	5
1:A:177:GLU:OE1	1:A:250:GLY:N	0.46	2.48	6	3
1:A:57:LYS:O	1:A:60:ASN:OD1	0.46	2.33	19	2
1:A:205:ARG:C	1:A:206:ASN:CG	0.46	2.82	11	1
1:A:19:ASN:ND2	1:A:106:GLY:HA3	0.46	2.26	16	1
1:A:15:TYR:HB2	1:A:54:GLN:HG2	0.46	1.87	1	13
1:A:52:THR:CG2	1:A:147:LEU:HD21	0.46	2.40	2	1
1:A:67:LYS:O	1:A:90:ILE:HB	0.46	2.11	18	12
1:A:4:VAL:CG2	1:A:202:ALA:HB3	0.46	2.37	3	1
1:A:26:PRO:CG	1:A:131:TYR:CG	0.46	2.98	6	11
1:A:47:SER:O	1:A:51:ALA:N	0.46	2.41	16	8
1:A:6:SER:HB2	1:A:209:HIS:ND1	0.46	2.25	18	4
1:A:145:ARG:HG3	1:A:149:GLU:CD	0.46	2.36	11	1
1:A:69:TYR:HB3	1:A:150:ASN:ND2	0.46	2.26	1	1
1:A:173:GLN:NE2	1:A:249:VAL:HG21	0.46	2.26	10	4
1:A:162:ARG:HB3	1:A:245:GLN:CB	0.46	2.41	14	4
1:A:140:SER:HB3	1:A:159:GLN:CD	0.46	2.36	5	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:PRO:HD2	1:A:79:TYR:CE2	0.46	2.46	19	7
1:A:144:GLN:C	1:A:144:GLN:OE1	0.46	2.59	7	1
1:A:140:SER:N	1:A:187:GLN:OE1	0.46	2.40	13	2
1:A:55:ILE:HG21	1:A:251:ILE:CD1	0.46	2.41	13	2
1:A:180:GLN:O	1:A:182:GLN:HG3	0.46	2.10	10	9
1:A:25:THR:HB	1:A:26:PRO:HD2	0.46	1.87	6	14
1:A:30:LYS:HD3	1:A:80:PHE:C	0.46	2.36	8	5
1:A:124:GLY:O	1:A:129:MET:HB2	0.46	2.10	18	14
1:A:128:ASP:OD1	1:A:142:ARG:HD2	0.46	2.11	2	1
1:A:159:GLN:HG2	1:A:160:ILE:N	0.46	2.26	20	4
1:A:51:ALA:O	1:A:198:VAL:CG2	0.46	2.64	18	5
1:A:69:TYR:CG	1:A:126:SER:HA	0.46	2.45	6	5
1:A:7:LEU:HD13	1:A:183:PRO:HD3	0.46	1.88	3	2
1:A:129:MET:SD	1:A:137:SER:HB2	0.46	2.51	14	5
1:A:130:ASP:N	1:A:136:GLY:O	0.46	2.44	20	1
1:A:20:PRO:CB	1:A:113:LYS:HG2	0.46	2.41	7	12
1:A:46:GLY:HA3	1:A:129:MET:SD	0.46	2.50	16	13
1:A:90:ILE:C	1:A:92:THR:N	0.46	2.73	16	18
1:A:121:ALA:O	1:A:125:ILE:HB	0.46	2.11	14	16
1:A:6:SER:OG	1:A:9:ASP:HB2	0.46	2.11	5	4
1:A:171:GLU:O	1:A:174:ILE:N	0.46	2.48	17	2
1:A:171:GLU:OE2	1:A:206:ASN:OD1	0.46	2.34	10	1
1:A:30:LYS:HD2	1:A:80:PHE:C	0.46	2.36	15	2
1:A:96:ASN:OD1	1:A:96:ASN:C	0.46	2.58	12	2
1:A:60:ASN:C	1:A:97:TRP:CE2	0.45	2.94	12	7
1:A:140:SER:O	1:A:144:GLN:HG3	0.45	2.12	9	7
1:A:178:LEU:O	1:A:181:ASN:N	0.45	2.47	5	2
1:A:17:GLN:HG2	1:A:50:THR:OG1	0.45	2.11	16	11
1:A:147:LEU:HD12	1:A:248:VAL:HG11	0.45	1.87	7	2
1:A:68:ASP:CG	1:A:91:SER:OG	0.45	2.60	12	1
1:A:64:LYS:HG2	1:A:93:ARG:O	0.45	2.11	1	2
1:A:123:VAL:O	1:A:124:GLY:C	0.45	2.58	1	15
1:A:13:ILE:HA	1:A:102:PRO:HB2	0.45	1.89	18	3
1:A:177:GLU:OE1	1:A:182:GLN:HB3	0.45	2.10	18	3
1:A:45:THR:CB	1:A:120:MET:SD	0.45	3.05	6	5
1:A:107:ARG:O	1:A:107:ARG:HD3	0.45	2.10	19	2
1:A:180:GLN:O	1:A:182:GLN:HG2	0.45	2.11	13	1
1:A:199:ILE:HG21	1:A:208:TYR:HD2	0.45	1.69	13	1
1:A:26:PRO:HG2	1:A:131:TYR:CB	0.45	2.42	8	14
1:A:57:LYS:HD3	1:A:100:ILE:O	0.45	2.11	13	3
1:A:69:TYR:OH	1:A:128:ASP:OD1	0.45	2.32	7	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:TYR:CD1	1:A:58:TYR:O	0.45	2.69	6	2
1:A:28:ILE:HG22	1:A:39:VAL:HA	0.45	1.86	17	5
1:A:60:ASN:HA	1:A:97:TRP:CZ2	0.45	2.47	12	3
1:A:141:SER:O	1:A:145:ARG:HB2	0.45	2.11	13	2
1:A:15:TYR:CE2	1:A:54:GLN:HA	0.45	2.47	19	2
1:A:69:TYR:CE2	1:A:70:THR:C	0.45	2.94	1	1
1:A:43:ALA:HA	1:A:132:GLY:O	0.45	2.11	20	10
1:A:16:ASN:OD1	1:A:17:GLN:N	0.45	2.46	3	1
1:A:160:ILE:HG21	1:A:173:GLN:HE21	0.45	1.71	8	1
1:A:178:LEU:HD12	1:A:208:TYR:CE2	0.45	2.46	13	1
1:A:118:GLU:O	1:A:122:ASP:OD2	0.45	2.34	17	2
1:A:189:VAL:HG22	1:A:194:GLY:HA2	0.45	1.89	9	4
1:A:147:LEU:HB2	1:A:157:VAL:HG11	0.45	1.88	13	8
1:A:53:ALA:HB1	1:A:119:LEU:HD21	0.45	1.87	20	5
1:A:171:GLU:HA	1:A:174:ILE:HD12	0.45	1.88	15	6
1:A:168:GLN:N	1:A:168:GLN:CD	0.45	2.73	8	2
1:A:71:TYR:HB3	1:A:128:ASP:OD1	0.45	2.12	13	2
1:A:38:PHE:CE2	1:A:133:PRO:HG3	0.45	2.46	16	1
1:A:11:LYS:O	1:A:102:PRO:CB	0.45	2.64	18	1
1:A:7:LEU:HG	1:A:200:ASP:O	0.45	2.12	1	6
1:A:19:ASN:HB3	1:A:21:TYR:CE2	0.45	2.47	1	1
1:A:110:ASN:OD1	1:A:110:ASN:N	0.45	2.49	7	2
1:A:205:ARG:C	1:A:207:PHE:N	0.45	2.74	1	1
1:A:13:ILE:HA	1:A:102:PRO:O	0.45	2.12	18	5
1:A:50:THR:O	1:A:54:GLN:HG3	0.45	2.12	14	12
1:A:140:SER:CB	1:A:159:GLN:OE1	0.45	2.65	6	1
1:A:162:ARG:HG2	1:A:245:GLN:NE2	0.45	2.25	13	3
1:A:93:ARG:NE	1:A:118:GLU:OE2	0.45	2.50	8	1
1:A:15:TYR:CD2	1:A:120:MET:HE1	0.45	2.46	20	2
1:A:69:TYR:CE1	1:A:87:PHE:HA	0.45	2.46	1	1
1:A:119:LEU:O	1:A:123:VAL:HG23	0.45	2.12	3	6
1:A:82:HIS:H	1:A:83:PRO:HD2	0.45	1.72	3	6
1:A:31:VAL:CG2	1:A:37:SER:OG	0.45	2.65	4	1
1:A:27:VAL:O	1:A:80:PHE:CZ	0.45	2.69	12	1
1:A:66:LEU:O	1:A:66:LEU:HD22	0.45	2.12	1	1
1:A:187:GLN:CB	1:A:196:ALA:HA	0.45	2.41	3	3
1:A:186:TYR:CB	1:A:197:PHE:CE1	0.45	3.00	6	3
1:A:171:GLU:HG2	1:A:208:TYR:CZ	0.45	2.47	11	1
1:A:80:PHE:CE1	1:A:131:TYR:O	0.45	2.70	13	1
1:A:14:HIS:CD2	1:A:103:THR:HB	0.45	2.47	17	1
1:A:212:TRP:H	1:A:212:TRP:CD1	0.45	2.29	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:ASN:O	1:A:50:THR:OG1	0.45	2.35	19	1
1:A:6:SER:OG	1:A:200:ASP:OD2	0.45	2.33	20	1
1:A:57:LYS:HE2	1:A:102:PRO:N	0.45	2.27	20	18
1:A:45:THR:CG2	1:A:120:MET:SD	0.45	2.95	7	7
1:A:118:GLU:O	1:A:119:LEU:C	0.45	2.58	18	3
1:A:66:LEU:HB3	1:A:150:ASN:O	0.45	2.12	5	2
1:A:27:VAL:O	1:A:80:PHE:CE2	0.45	2.70	17	2
1:A:140:SER:HB2	1:A:159:GLN:OE1	0.45	2.12	6	4
1:A:71:TYR:OH	1:A:131:TYR:CD2	0.45	2.70	6	1
1:A:94:GLN:NE2	1:A:94:GLN:HA	0.45	2.25	6	2
1:A:45:THR:O	1:A:129:MET:CE	0.45	2.54	9	5
1:A:118:GLU:O	1:A:122:ASP:N	0.45	2.41	12	2
1:A:178:LEU:HD22	1:A:201:GLY:N	0.45	2.27	10	1
1:A:154:ASN:ND2	1:A:156:SER:HB3	0.45	2.27	12	1
1:A:144:GLN:HA	1:A:157:VAL:CG1	0.45	2.42	13	1
1:A:81:ASN:O	1:A:82:HIS:CB	0.44	2.65	15	20
1:A:130:ASP:HB2	1:A:136:GLY:O	0.44	2.11	5	4
1:A:13:ILE:C	1:A:14:HIS:ND1	0.44	2.75	8	3
1:A:185:TYR:O	1:A:247:ALA:HB1	0.44	2.12	7	2
1:A:201:GLY:O	1:A:208:TYR:CG	0.44	2.70	13	1
1:A:129:MET:SD	1:A:137:SER:CB	0.44	3.05	14	2
1:A:101:LEU:HD12	1:A:108:GLU:HG2	0.44	1.88	18	1
1:A:177:GLU:O	1:A:182:GLN:HB2	0.44	2.12	19	14
1:A:19:ASN:HB3	1:A:21:TYR:CD1	0.44	2.48	5	7
1:A:6:SER:CB	1:A:9:ASP:HB2	0.44	2.43	6	8
1:A:17:GLN:O	1:A:45:THR:HG23	0.44	2.12	9	4
1:A:20:PRO:HB3	1:A:113:LYS:CD	0.44	2.41	8	1
1:A:17:GLN:O	1:A:22:ASN:HB3	0.44	2.12	3	9
1:A:56:MET:HE1	1:A:151:PHE:CD1	0.44	2.48	7	5
1:A:61:TYR:CE2	1:A:151:PHE:O	0.44	2.70	4	12
1:A:7:LEU:HB3	1:A:58:TYR:CZ	0.44	2.47	13	3
1:A:189:VAL:HG13	1:A:194:GLY:N	0.44	2.27	3	1
1:A:203:ASP:O	1:A:205:ARG:N	0.44	2.51	5	2
1:A:185:TYR:CD1	1:A:248:VAL:CB	0.44	3.00	18	1
1:A:30:LYS:CB	1:A:78:PRO:O	0.44	2.66	18	2
1:A:68:ASP:OD1	1:A:91:SER:CB	0.44	2.65	9	2
1:A:15:TYR:OH	1:A:57:LYS:HD3	0.44	2.11	7	9
1:A:44:ALA:N	1:A:132:GLY:O	0.44	2.44	4	1
1:A:93:ARG:CD	1:A:118:GLU:OE2	0.44	2.65	13	2
1:A:60:ASN:HA	1:A:97:TRP:CH2	0.44	2.47	12	1
1:A:113:LYS:O	1:A:117:SER:CB	0.44	2.65	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:178:LEU:CD1	1:A:201:GLY:C	0.44	2.90	13	1
1:A:71:TYR:CD1	1:A:71:TYR:C	0.44	2.96	1	1
1:A:211:ASN:O	1:A:212:TRP:C	0.44	2.60	17	10
1:A:17:GLN:OE1	1:A:46:GLY:C	0.44	2.60	3	2
1:A:25:THR:OG1	1:A:43:ALA:O	0.44	2.30	4	3
1:A:18:GLY:HA2	1:A:22:ASN:ND2	0.44	2.28	20	2
1:A:93:ARG:NE	1:A:118:GLU:HG3	0.44	2.28	11	1
1:A:90:ILE:HA	1:A:93:ARG:HG3	0.44	1.90	1	13
1:A:116:ILE:O	1:A:120:MET:HG2	0.44	2.13	10	4
1:A:109:SER:OG	1:A:110:ASN:N	0.44	2.49	2	2
1:A:202:ALA:HB2	1:A:208:TYR:CZ	0.44	2.47	13	1
1:A:19:ASN:ND2	1:A:21:TYR:CD2	0.44	2.86	18	1
1:A:174:ILE:O	1:A:175:ASP:C	0.44	2.61	9	9
1:A:109:SER:CB	1:A:112:GLN:OE1	0.44	2.66	3	2
1:A:175:ASP:O	1:A:176:LYS:C	0.44	2.61	5	6
1:A:145:ARG:HG2	1:A:149:GLU:CD	0.44	2.37	8	4
1:A:6:SER:HA	1:A:200:ASP:OD1	0.44	2.13	19	5
1:A:46:GLY:N	1:A:135:SER:HB2	0.44	2.28	1	1
1:A:68:ASP:N	1:A:91:SER:HB3	0.44	2.28	1	1
1:A:160:ILE:HG12	1:A:247:ALA:O	0.44	2.13	6	3
1:A:129:MET:HB3	1:A:131:TYR:CE2	0.44	2.48	3	1
1:A:161:ASN:C	1:A:163:GLY:N	0.44	2.74	10	1
1:A:161:ASN:CB	1:A:164:ASP:OD2	0.44	2.66	13	1
1:A:87:PHE:CD1	1:A:87:PHE:C	0.44	2.96	20	1
1:A:139:GLY:HA3	1:A:187:GLN:NE2	0.43	2.28	5	3
1:A:161:ASN:O	1:A:164:ASP:N	0.43	2.44	5	2
1:A:61:TYR:CG	1:A:62:PRO:HD3	0.43	2.48	16	4
1:A:124:GLY:C	1:A:131:TYR:OH	0.43	2.61	11	1
1:A:64:LYS:NZ	1:A:64:LYS:HB2	0.43	2.28	17	1
1:A:13:ILE:CD1	1:A:58:TYR:CA	0.43	2.96	20	1
1:A:125:ILE:O	1:A:126:SER:C	0.43	2.59	2	17
1:A:126:SER:OG	1:A:146:ALA:CB	0.43	2.65	1	3
1:A:130:ASP:O	1:A:135:SER:HA	0.43	2.13	2	5
1:A:161:ASN:HB3	1:A:164:ASP:OD2	0.43	2.13	13	2
1:A:203:ASP:C	1:A:205:ARG:N	0.43	2.74	5	3
1:A:31:VAL:HG23	1:A:39:VAL:HG23	0.43	1.89	7	3
1:A:177:GLU:HB3	1:A:182:GLN:O	0.43	2.14	17	8
1:A:93:ARG:NH2	1:A:118:GLU:OE2	0.43	2.52	17	1
1:A:187:GLN:NE2	1:A:189:VAL:CG2	0.43	2.81	16	3
1:A:7:LEU:CB	1:A:200:ASP:HB2	0.43	2.43	16	7
1:A:8:LEU:HD11	1:A:198:VAL:CG1	0.43	2.43	3	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:TYR:HB3	1:A:120:MET:HG3	0.43	1.90	3	5
1:A:52:THR:O	1:A:56:MET:HG3	0.43	2.13	4	2
1:A:188:GLY:N	1:A:195:HIS:O	0.43	2.43	4	1
1:A:26:PRO:CG	1:A:131:TYR:CD2	0.43	3.01	12	4
1:A:144:GLN:CD	1:A:145:ARG:N	0.43	2.76	7	1
1:A:30:LYS:HD3	1:A:80:PHE:O	0.43	2.13	12	1
1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CD1	0.43	2.79	15	3
1:A:6:SER:CB	1:A:9:ASP:CB	0.43	2.97	3	1
1:A:23:LEU:CD1	1:A:113:LYS:HD3	0.43	2.43	12	1
1:A:162:ARG:HB2	1:A:186:TYR:OH	0.43	2.13	16	1
1:A:11:LYS:CD	1:A:58:TYR:CE1	0.43	3.01	17	1
1:A:52:THR:HG22	1:A:56:MET:HG3	0.43	1.90	3	3
1:A:164:ASP:N	1:A:164:ASP:OD1	0.43	2.52	5	2
1:A:11:LYS:HD3	1:A:58:TYR:CD1	0.43	2.48	17	1
1:A:195:HIS:ND1	1:A:212:TRP:CZ3	0.43	2.86	19	1
1:A:90:ILE:O	1:A:92:THR:N	0.43	2.52	1	14
1:A:158:HIS:ND1	1:A:158:HIS:N	0.43	2.66	1	4
1:A:4:VAL:HG21	1:A:178:LEU:C	0.43	2.38	2	1
1:A:122:ASP:O	1:A:126:SER:HB3	0.43	2.13	7	9
1:A:203:ASP:OD1	1:A:203:ASP:C	0.43	2.60	11	1
1:A:205:ARG:O	1:A:206:ASN:HB2	0.43	2.14	16	2
1:A:114:MET:HA	1:A:117:SER:OG	0.43	2.14	2	7
1:A:100:ILE:O	1:A:101:LEU:C	0.43	2.59	16	4
1:A:107:ARG:O	1:A:107:ARG:HD2	0.43	2.13	17	2
1:A:211:ASN:OD1	1:A:211:ASN:C	0.43	2.61	11	3
1:A:145:ARG:CD	1:A:149:GLU:OE1	0.43	2.66	12	1
1:A:160:ILE:HD12	1:A:170:TRP:CZ2	0.43	2.46	14	1
1:A:22:ASN:HB2	1:A:43:ALA:O	0.43	2.14	1	1
1:A:171:GLU:HB3	1:A:208:TYR:OH	0.43	2.13	16	7
1:A:15:TYR:CZ	1:A:57:LYS:HB2	0.43	2.49	15	1
1:A:188:GLY:HA2	1:A:245:GLN:OE1	0.43	2.14	15	1
1:A:21:TYR:CD1	1:A:116:ILE:CG1	0.43	3.01	20	1
1:A:11:LYS:HB2	1:A:13:ILE:HG13	0.43	1.90	18	3
1:A:38:PHE:HD2	1:A:79:TYR:CE1	0.43	2.29	13	3
1:A:162:ARG:HG3	1:A:245:GLN:OE1	0.43	2.13	4	1
1:A:174:ILE:HG23	1:A:199:ILE:HG21	0.43	1.90	18	1
1:A:65:GLY:HA3	1:A:90:ILE:HG22	0.43	1.91	1	1
1:A:202:ALA:HA	1:A:207:PHE:O	0.43	2.14	1	6
1:A:64:LYS:HA	1:A:93:ARG:O	0.43	2.13	16	4
1:A:70:THR:HA	1:A:86:LEU:O	0.43	2.14	4	4
1:A:7:LEU:N	1:A:200:ASP:HB2	0.43	2.29	16	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:171:GLU:HG2	1:A:208:TYR:OH	0.43	2.14	16	1
1:A:8:LEU:HD12	1:A:211:ASN:HB2	0.43	1.89	17	1
1:A:144:GLN:HG3	1:A:145:ARG:N	0.43	2.27	19	2
1:A:197:PHE:CE2	1:A:212:TRP:CZ3	0.42	3.07	2	1
1:A:21:TYR:CE2	1:A:104:TYR:CD1	0.42	3.07	3	1
1:A:178:LEU:HD11	1:A:199:ILE:HG22	0.42	1.90	3	1
1:A:187:GLN:O	1:A:187:GLN:HG3	0.42	2.14	3	3
1:A:106:GLY:O	1:A:113:LYS:NZ	0.42	2.43	16	2
1:A:98:ASN:OD1	1:A:98:ASN:O	0.42	2.36	1	1
1:A:6:SER:HB2	1:A:9:ASP:HB3	0.42	1.91	3	3
1:A:178:LEU:HD21	1:A:199:ILE:O	0.42	2.12	4	2
1:A:127:VAL:HB	1:A:142:ARG:HB3	0.42	1.91	10	5
1:A:177:GLU:C	1:A:182:GLN:O	0.42	2.62	14	1
1:A:187:GLN:HA	1:A:196:ALA:HA	0.42	1.90	3	1
1:A:210:VAL:CG1	1:A:212:TRP:CD2	0.42	3.03	4	1
1:A:157:VAL:HG22	1:A:251:ILE:HA	0.42	1.91	5	2
1:A:185:TYR:CD2	1:A:185:TYR:C	0.42	2.98	14	1
1:A:8:LEU:HD11	1:A:198:VAL:CB	0.42	2.44	17	1
1:A:116:ILE:O	1:A:120:MET:HG3	0.42	2.14	2	1
1:A:69:TYR:HB2	1:A:150:ASN:ND2	0.42	2.29	4	4
1:A:130:ASP:OD1	1:A:130:ASP:C	0.42	2.62	4	1
1:A:93:ARG:HD3	1:A:118:GLU:OE2	0.42	2.14	12	1
1:A:49:ALA:HA	1:A:123:VAL:HG12	0.42	1.90	16	1
1:A:88:ALA:CB	1:A:90:ILE:HG13	0.42	2.45	1	1
1:A:89:ALA:CB	1:A:92:THR:HG23	0.42	2.39	3	2
1:A:113:LYS:O	1:A:117:SER:HB3	0.42	2.15	13	4
1:A:145:ARG:O	1:A:149:GLU:HB2	0.42	2.14	7	1
1:A:174:ILE:HG12	1:A:184:VAL:HG11	0.42	1.92	17	1
1:A:56:MET:HE2	1:A:56:MET:HB3	0.42	1.75	13	3
1:A:161:ASN:O	1:A:163:GLY:N	0.42	2.52	10	1
1:A:197:PHE:HB2	1:A:211:ASN:O	0.42	2.14	12	1
1:A:55:ILE:HD13	1:A:251:ILE:HD13	0.42	1.90	17	1
1:A:124:GLY:HA2	1:A:127:VAL:HG22	0.42	1.89	20	1
1:A:140:SER:HA	1:A:248:VAL:CG2	0.42	2.45	1	1
1:A:38:PHE:HB3	1:A:41:GLN:NE2	0.42	2.30	4	2
1:A:162:ARG:HD3	1:A:170:TRP:CG	0.42	2.50	4	1
1:A:176:LYS:C	1:A:176:LYS:HD2	0.42	2.40	5	1
1:A:147:LEU:CD1	1:A:251:ILE:HG12	0.42	2.42	7	1
1:A:59:HIS:C	1:A:60:ASN:OD1	0.42	2.62	8	1
1:A:142:ARG:HG3	1:A:142:ARG:HH11	0.42	1.73	16	1
1:A:21:TYR:CE1	1:A:104:TYR:CD1	0.42	3.08	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:148:LYS:NZ	1:A:157:VAL:O	0.42	2.49	19	1
1:A:62:PRO:O	1:A:95:TYR:CD2	0.42	2.73	2	3
1:A:69:TYR:CD1	1:A:126:SER:HA	0.42	2.49	6	3
1:A:8:LEU:HG	1:A:200:ASP:OD2	0.42	2.15	9	3
1:A:142:ARG:NH2	1:A:145:ARG:HE	0.42	2.13	7	1
1:A:57:LYS:CD	1:A:100:ILE:O	0.42	2.68	13	1
1:A:127:VAL:HB	1:A:142:ARG:HE	0.42	1.75	16	1
1:A:128:ASP:OD1	1:A:142:ARG:HG3	0.42	2.15	2	1
1:A:145:ARG:HG2	1:A:149:GLU:OE1	0.42	2.15	11	3
1:A:24:LEU:HD12	1:A:118:GLU:CA	0.42	2.45	11	1
1:A:38:PHE:CE2	1:A:79:TYR:HE1	0.42	2.33	13	1
1:A:145:ARG:CZ	1:A:149:GLU:OE2	0.42	2.68	18	1
1:A:128:ASP:HB2	1:A:142:ARG:NE	0.42	2.30	19	1
1:A:145:ARG:HG3	1:A:149:GLU:OE2	0.41	2.14	6	2
1:A:138:ALA:O	1:A:187:GLN:OE1	0.41	2.38	11	1
1:A:203:ASP:CG	1:A:207:PHE:HB2	0.41	2.40	11	1
1:A:143:VAL:HG12	1:A:147:LEU:HD11	0.41	1.91	15	1
1:A:19:ASN:CG	1:A:106:GLY:HA3	0.41	2.40	16	1
1:A:69:TYR:CD2	1:A:150:ASN:OD1	0.41	2.73	20	1
1:A:87:PHE:CZ	1:A:89:ALA:CA	0.41	3.03	20	1
1:A:6:SER:HB3	1:A:9:ASP:HB2	0.41	1.91	6	3
1:A:189:VAL:HG13	1:A:193:GLY:C	0.41	2.40	3	1
1:A:31:VAL:HG22	1:A:37:SER:OG	0.41	2.15	4	1
1:A:93:ARG:HD2	1:A:122:ASP:OD2	0.41	2.15	9	3
1:A:44:ALA:HB3	1:A:135:SER:HB2	0.41	1.92	6	1
1:A:146:ALA:O	1:A:151:PHE:CD2	0.41	2.73	11	1
1:A:177:GLU:OE1	1:A:250:GLY:HA2	0.41	2.14	13	1
1:A:157:VAL:HG23	1:A:250:GLY:O	0.41	2.16	18	1
1:A:27:VAL:CG2	1:A:42:HIS:CE1	0.41	3.03	3	1
1:A:123:VAL:HA	1:A:126:SER:OG	0.41	2.15	7	2
1:A:170:TRP:CE2	1:A:186:TYR:OH	0.41	2.73	9	1
1:A:189:VAL:HA	1:A:194:GLY:HA2	0.41	1.91	16	2
1:A:58:TYR:CD1	1:A:59:HIS:CE1	0.41	3.08	20	1
1:A:13:ILE:HG12	1:A:102:PRO:HB3	0.41	1.90	2	3
1:A:67:LYS:HA	1:A:91:SER:HB3	0.41	1.92	9	4
1:A:54:GLN:O	1:A:57:LYS:N	0.41	2.53	4	1
1:A:68:ASP:CG	1:A:91:SER:HB3	0.41	2.40	7	1
1:A:187:GLN:CA	1:A:196:ALA:HA	0.41	2.46	3	1
1:A:200:ASP:OD1	1:A:209:HIS:HB3	0.41	2.15	13	1
1:A:60:ASN:HB3	1:A:97:TRP:CD1	0.41	2.51	16	1
1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:HD22	0.41	2.13	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:174:ILE:O	1:A:177:GLU:HB2	0.41	2.15	4	3
1:A:57:LYS:HD3	1:A:100:ILE:HG22	0.41	1.93	5	1
1:A:19:ASN:OD1	1:A:106:GLY:HA3	0.41	2.16	11	1
1:A:63:ASN:OD1	1:A:95:TYR:O	0.41	2.39	11	1
1:A:127:VAL:HB	1:A:142:ARG:HH21	0.41	1.75	16	1
1:A:116:ILE:CG2	1:A:117:SER:N	0.41	2.83	18	2
1:A:209:HIS:ND1	1:A:210:VAL:N	0.41	2.69	17	1
1:A:169:ASP:OD1	1:A:169:ASP:N	0.41	2.53	4	1
1:A:48:VAL:HG13	1:A:143:VAL:CG2	0.41	2.46	7	1
1:A:38:PHE:O	1:A:41:GLN:HG3	0.41	2.16	10	2
1:A:71:TYR:HB2	1:A:128:ASP:OD1	0.41	2.15	15	1
1:A:48:VAL:CB	1:A:137:SER:HB3	0.41	2.46	3	2
1:A:158:HIS:ND1	1:A:249:VAL:O	0.41	2.54	20	2
1:A:7:LEU:HD12	1:A:183:PRO:N	0.41	2.31	13	1
1:A:154:ASN:OD1	1:A:156:SER:N	0.41	2.45	19	2
1:A:177:GLU:OE1	1:A:177:GLU:HA	0.41	2.14	13	1
1:A:122:ASP:O	1:A:126:SER:N	0.41	2.43	14	1
1:A:154:ASN:N	1:A:252:LYS:O	0.41	2.50	18	1
1:A:159:GLN:HA	1:A:247:ALA:O	0.41	2.16	20	1
1:A:13:ILE:HG12	1:A:102:PRO:CB	0.41	2.46	3	3
1:A:24:LEU:HD23	1:A:24:LEU:HA	0.41	1.77	1	2
1:A:48:VAL:HG11	1:A:137:SER:OG	0.41	2.16	1	1
1:A:178:LEU:O	1:A:179:SER:C	0.41	2.64	2	2
1:A:21:TYR:CD1	1:A:21:TYR:N	0.41	2.89	3	1
1:A:187:GLN:HB3	1:A:196:ALA:CB	0.41	2.46	3	1
1:A:38:PHE:CB	1:A:41:GLN:NE2	0.41	2.83	4	1
1:A:201:GLY:O	1:A:208:TYR:HB3	0.41	2.16	4	1
1:A:9:ASP:C	1:A:11:LYS:N	0.41	2.79	19	2
1:A:125:ILE:C	1:A:127:VAL:N	0.41	2.78	5	1
1:A:11:LYS:CB	1:A:13:ILE:HG13	0.41	2.46	6	1
1:A:105:SER:OG	1:A:108:GLU:OE1	0.41	2.39	6	1
1:A:155:GLN:NE2	1:A:155:GLN:HA	0.41	2.30	7	1
1:A:67:LYS:HG2	1:A:68:ASP:N	0.41	2.30	11	1
1:A:15:TYR:HA	1:A:21:TYR:CE2	0.41	2.50	12	2
1:A:161:ASN:HA	1:A:245:GLN:O	0.41	2.16	13	1
1:A:164:ASP:OD1	1:A:164:ASP:N	0.41	2.53	16	1
1:A:162:ARG:O	1:A:162:ARG:NE	0.41	2.53	17	1
1:A:187:GLN:HE22	1:A:189:VAL:HG22	0.41	1.75	17	1
1:A:140:SER:HB3	1:A:159:GLN:HG3	0.41	1.93	1	2
1:A:55:ILE:HD11	1:A:198:VAL:CG2	0.41	2.28	2	1
1:A:42:HIS:O	1:A:43:ALA:C	0.41	2.64	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:173:GLN:HE21	1:A:249:VAL:HG21	0.41	1.76	7	1
1:A:174:ILE:HG21	1:A:199:ILE:HD12	0.41	1.91	12	1
1:A:200:ASP:C	1:A:200:ASP:OD1	0.41	2.62	12	1
1:A:122:ASP:O	1:A:126:SER:CB	0.41	2.69	14	1
1:A:252:LYS:O	1:A:252:LYS:HG3	0.41	2.16	16	1
1:A:104:TYR:OH	1:A:116:ILE:HB	0.41	2.16	17	1
1:A:148:LYS:HG3	1:A:157:VAL:HB	0.41	1.93	17	1
1:A:99:ASN:O	1:A:101:LEU:N	0.40	2.54	3	1
1:A:38:PHE:C	1:A:41:GLN:HG3	0.40	2.41	8	4
1:A:167:LYS:HE2	1:A:171:GLU:OE2	0.40	2.16	10	1
1:A:93:ARG:HD3	1:A:118:GLU:CD	0.40	2.42	11	1
1:A:104:TYR:CZ	1:A:116:ILE:CG2	0.40	3.05	18	1
1:A:187:GLN:HB3	1:A:196:ALA:CA	0.40	2.46	3	1
1:A:187:GLN:HG3	1:A:246:SER:O	0.40	2.15	4	1
1:A:168:GLN:N	1:A:168:GLN:OE1	0.40	2.54	7	1
1:A:8:LEU:HB2	1:A:200:ASP:OD2	0.40	2.16	12	1
1:A:48:VAL:HA	1:A:196:ALA:HB2	0.40	1.93	13	1
1:A:46:GLY:HA2	1:A:135:SER:HB2	0.40	1.93	16	1
1:A:60:ASN:ND2	1:A:97:TRP:HB3	0.40	2.32	18	1
1:A:6:SER:HB3	1:A:209:HIS:ND1	0.40	2.32	19	1
1:A:71:TYR:CE1	1:A:86:LEU:CB	0.40	3.02	20	1
1:A:84:LYS:O	1:A:84:LYS:HG3	0.40	2.16	8	2
1:A:110:ASN:O	1:A:114:MET:N	0.40	2.44	8	1
1:A:71:TYR:CB	1:A:128:ASP:OD2	0.40	2.69	11	1
1:A:179:SER:OG	1:A:180:GLN:N	0.40	2.55	13	1
1:A:49:ALA:HB2	1:A:129:MET:HE3	0.40	1.93	19	1
1:A:201:GLY:O	1:A:208:TYR:HA	0.40	2.16	2	1
1:A:84:LYS:HG3	1:A:84:LYS:O	0.40	2.16	14	2
1:A:139:GLY:O	1:A:143:VAL:N	0.40	2.38	7	1
1:A:68:ASP:OD1	1:A:91:SER:HB3	0.40	2.17	9	1
1:A:172:ALA:O	1:A:176:LYS:HB2	0.40	2.17	9	1
1:A:206:ASN:ND2	1:A:206:ASN:N	0.40	2.69	9	1
1:A:19:ASN:ND2	1:A:106:GLY:CA	0.40	2.85	11	1
1:A:197:PHE:HB3	1:A:212:TRP:HA	0.40	1.92	18	1
1:A:99:ASN:HB3	1:A:115:ALA:HB2	0.40	1.93	20	1
1:A:138:ALA:CB	1:A:142:ARG:NH2	0.40	2.82	1	1
1:A:23:LEU:HD11	1:A:113:LYS:NZ	0.40	2.31	12	1
1:A:20:PRO:HB3	1:A:113:LYS:CE	0.40	2.46	13	1
1:A:21:TYR:CD1	1:A:116:ILE:HG12	0.40	2.51	18	1
1:A:7:LEU:HD13	1:A:181:ASN:O	0.40	2.16	19	1
1:A:15:TYR:CD2	1:A:54:GLN:HG3	0.40	2.50	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:151:PHE:O	1:A:153:TYR:N	0.40	2.54	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	212/253 (84%)	184±3 (87±1%)	24±2 (11±1%)	5±1 (2±0%)	7	47
All	All	4240/5060 (84%)	3673 (87%)	473 (11%)	94 (2%)	7	47

All 7 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	19	ASN	20
1	A	81	ASN	20
1	A	82	HIS	20
1	A	212	TRP	18
1	A	61	TYR	10
1	A	152	GLY	5
1	A	206	ASN	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	179/204 (88%)	154±4 (86±2%)	25±4 (14±2%)	6	45
All	All	3580/4080 (88%)	3087 (86%)	493 (14%)	6	45

All 89 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	66	LEU	20
1	A	82	HIS	20
1	A	92	THR	18
1	A	94	GLN	17
1	A	19	ASN	16
1	A	175	ASP	16
1	A	191	LYS	16
1	A	252	LYS	16
1	A	109	SER	15
1	A	112	GLN	14
1	A	125	ILE	13
1	A	185	TYR	13
1	A	85	ASN	12
1	A	134	SER	12
1	A	203	ASP	12
1	A	16	ASN	11
1	A	84	LYS	11
1	A	187	GLN	10
1	A	60	ASN	9
1	A	75	SER	9
1	A	103	THR	9
1	A	74	SER	8
1	A	50	THR	7
1	A	76	ASN	7
1	A	206	ASN	7
1	A	64	LYS	7
1	A	37	SER	7
1	A	116	ILE	6
1	A	42	HIS	6
1	A	107	ARG	6
1	A	108	GLU	6
1	A	141	SER	6
1	A	70	THR	6
1	A	166	SER	6
1	A	91	SER	5
1	A	68	ASP	5
1	A	162	ARG	5
1	A	63	ASN	4
1	A	246	SER	4
1	A	118	GLU	4
1	A	96	ASN	4
1	A	205	ARG	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	93	ARG	4
1	A	145	ARG	4
1	A	10	SER	3
1	A	120	MET	3
1	A	130	ASP	3
1	A	47	SER	3
1	A	98	ASN	3
1	A	114	MET	3
1	A	126	SER	3
1	A	158	HIS	3
1	A	80	PHE	2
1	A	110	ASN	2
1	A	137	SER	2
1	A	167	LYS	2
1	A	168	GLN	2
1	A	245	GLN	2
1	A	140	SER	2
1	A	72	THR	2
1	A	30	LYS	2
1	A	128	ASP	2
1	A	207	PHE	2
1	A	142	ARG	2
1	A	9	ASP	2
1	A	105	SER	2
1	A	6	SER	2
1	A	27	VAL	1
1	A	69	TYR	1
1	A	150	ASN	1
1	A	29	GLU	1
1	A	189	VAL	1
1	A	155	GLN	1
1	A	176	LYS	1
1	A	180	GLN	1
1	A	23	LEU	1
1	A	135	SER	1
1	A	11	LYS	1
1	A	148	LYS	1
1	A	169	ASP	1
1	A	67	LYS	1
1	A	179	SER	1
1	A	161	ASN	1
1	A	209	HIS	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	17	GLN	1
1	A	156	SER	1
1	A	81	ASN	1
1	A	144	GLN	1
1	A	212	TRP	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