



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 19, 2026 – 09:19 PM UTC

PDB ID : 1K19 / pdb_00001k19
Title : NMR Solution Structure of the Chemosensory Protein CSP2 from Moth
Mamestra brassicae
Authors : Mosbah, A.; Campanacci, V.; Lartigue, A.; Tegoni, M.; Cambillau, C.; Dar-
bon, H.
Deposited on : 2001-09-24

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

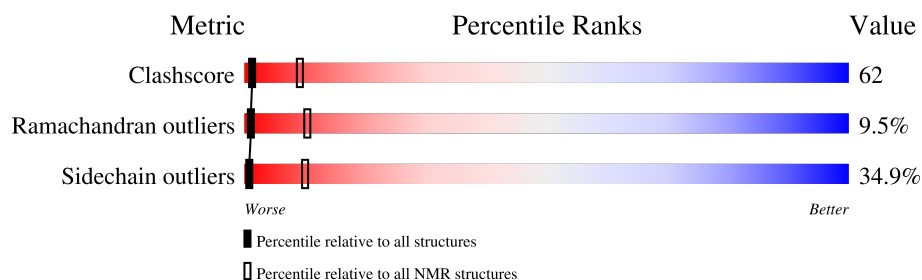
1 Overall quality at a glance

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	112	12% 53% 18% • 13%

2 Ensemble composition and analysis

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

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:8-A:51, A:60-A:112 (97)	1.71	20

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

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

The models can be grouped into 3 clusters and 1 single-model cluster was found.

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

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1826 atoms, of which 909 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Chemosensory Protein CSP2.

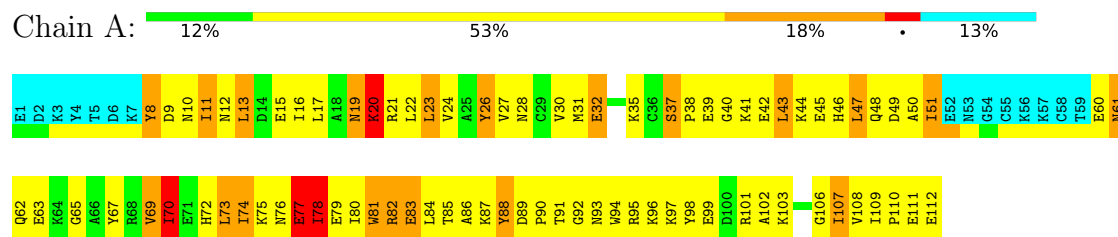
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	112	Total	C	H	N	O	S	0
			1826	572	909	160	180	5	

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: Chemosensory Protein CSP2

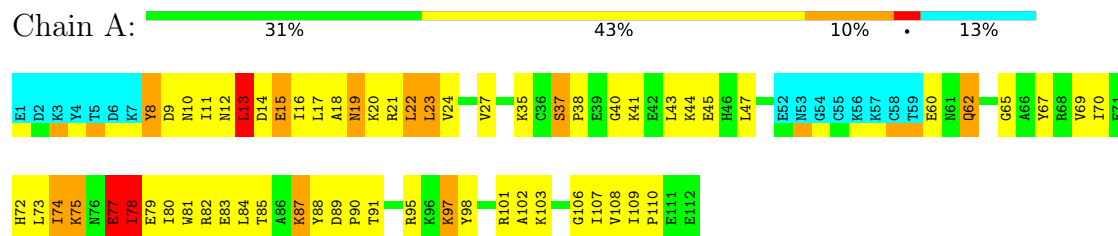


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

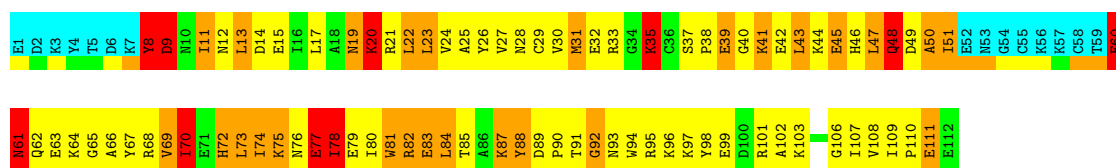
• Molecule 1: Chemosensory Protein CSP2



4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: Chemosensory Protein CSP2

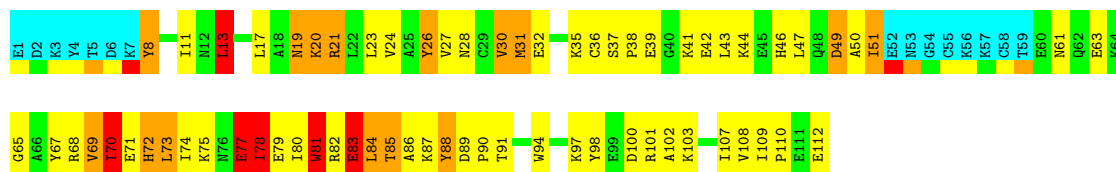




4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Chemosensory Protein CSP2

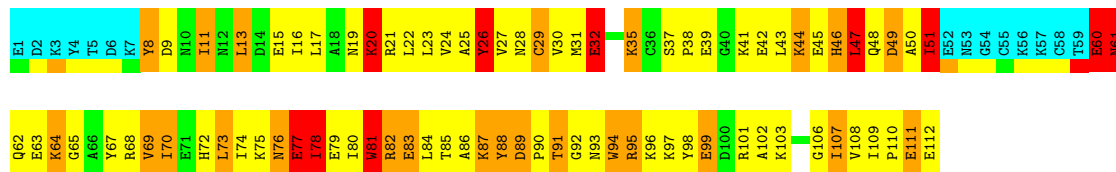
Chain A: 26% 42% 13% 5% 13%



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Chemosensory Protein CSP2

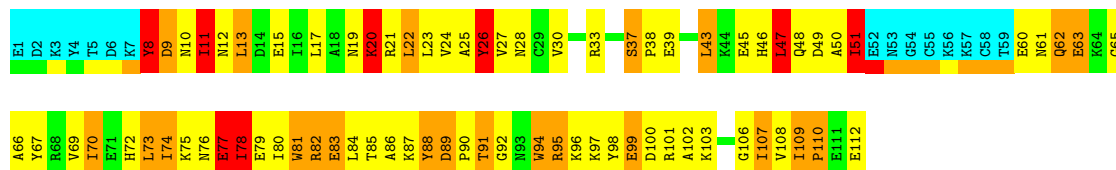
Chain A: 12% 45% 21% 9% 13%



4.2.5 Score per residue for model 5

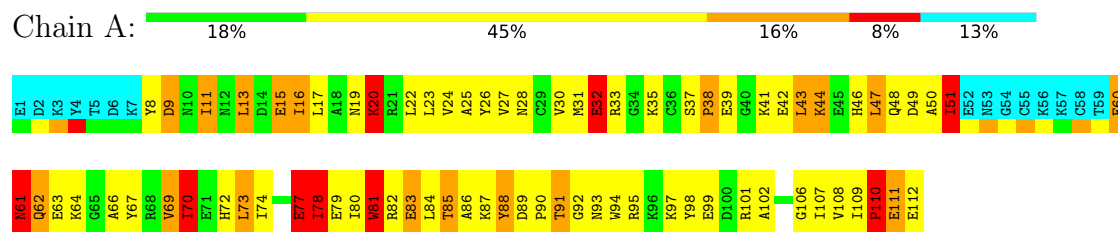
- Molecule 1: Chemosensory Protein CSP2

Chain A: 18% 42% 20% 7% 13%



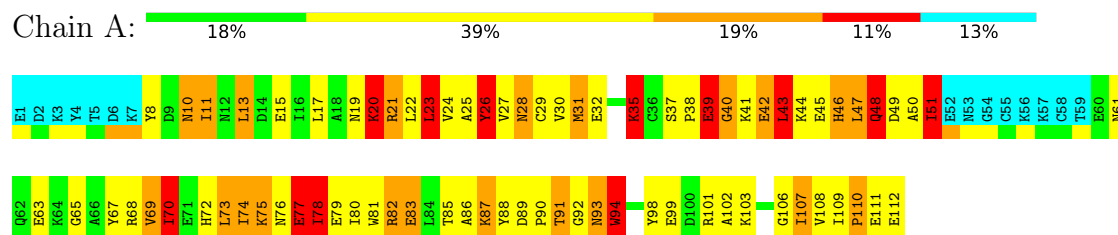
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Chemosensory Protein CSP2



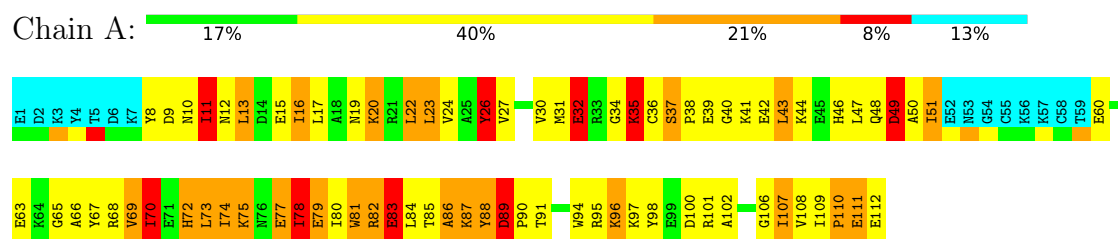
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Chemosensory Protein CSP2



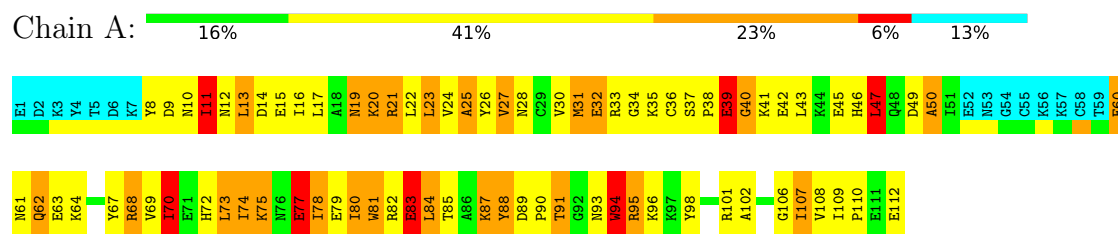
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Chemosensory Protein CSP2



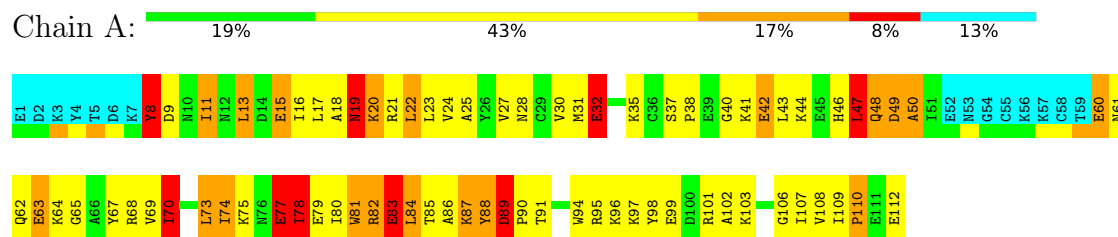
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Chemosensory Protein CSP2



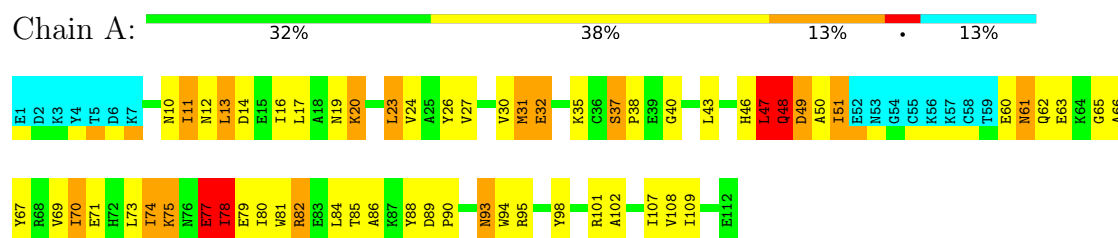
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Chemosensory Protein CSP2



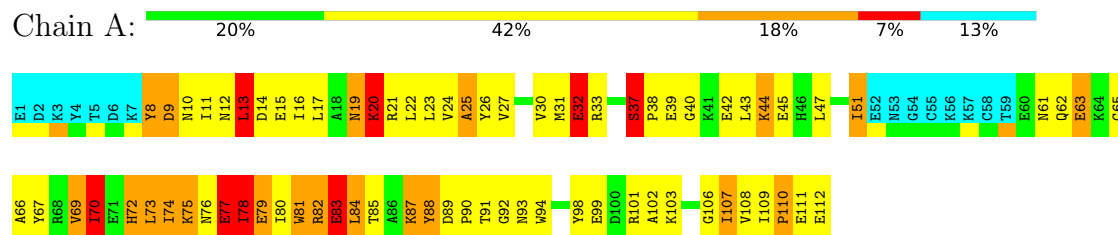
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Chemosensory Protein CSP2



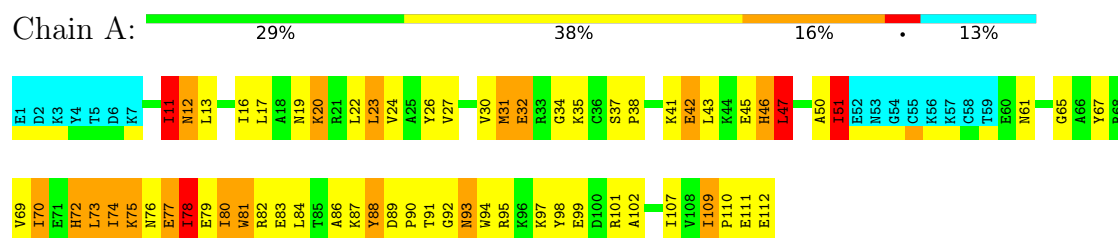
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Chemosensory Protein CSP2



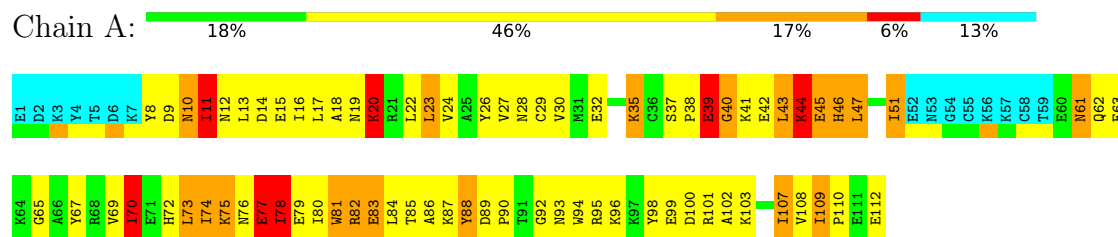
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Chemosensory Protein CSP2



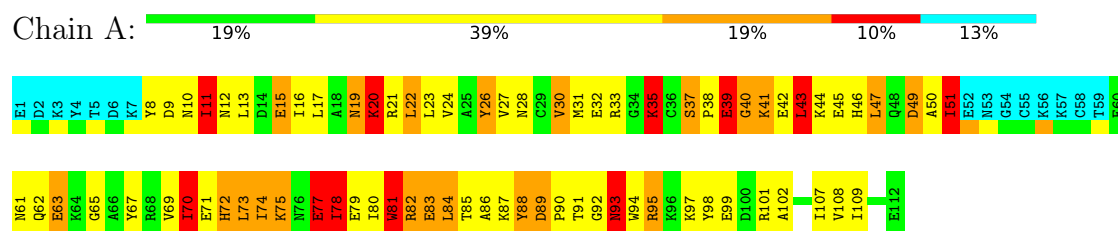
4.2.14 Score per residue for model 14

• Molecule 1: Chemosensory Protein CSP2



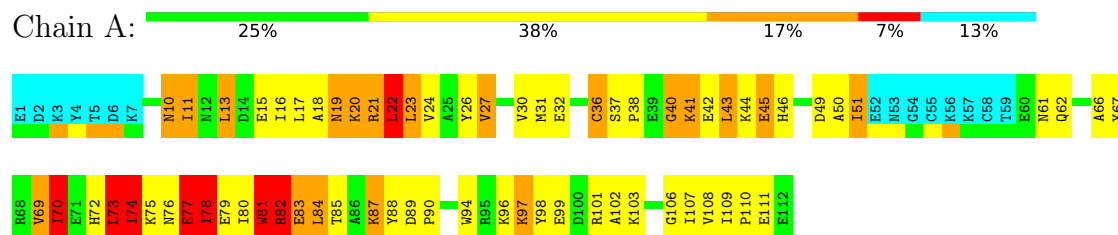
4.2.15 Score per residue for model 15

• Molecule 1: Chemosensory Protein CSP2



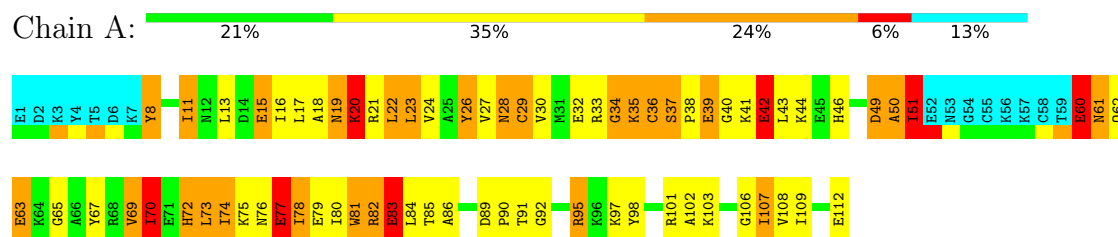
4.2.16 Score per residue for model 16

• Molecule 1: Chemosensory Protein CSP2



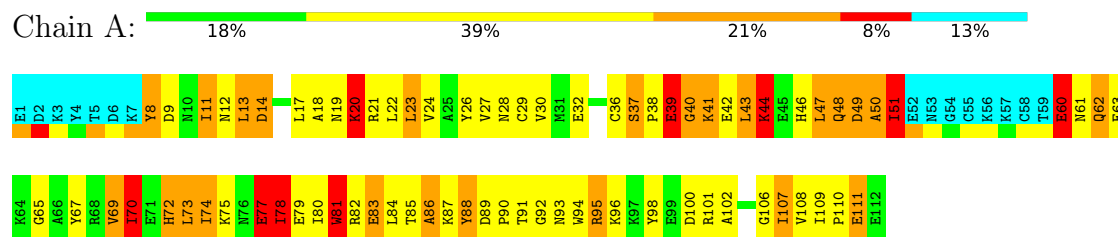
4.2.17 Score per residue for model 17

• Molecule 1: Chemosensory Protein CSP2



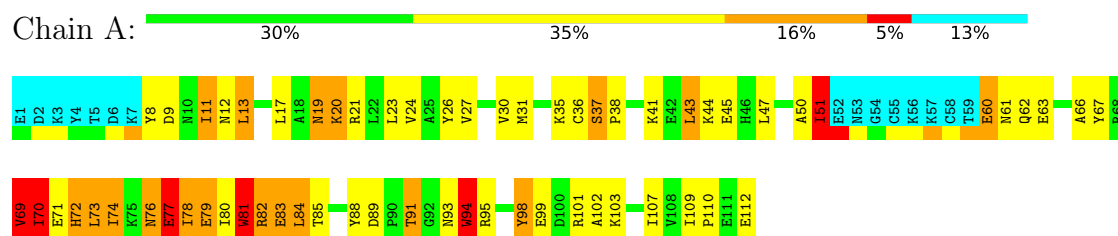
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Chemosensory Protein CSP2



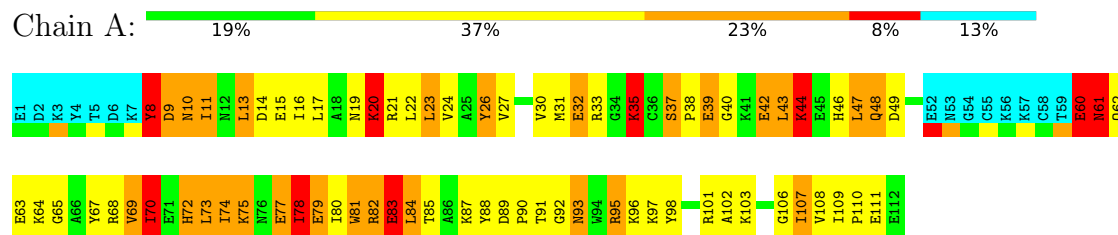
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Chemosensory Protein CSP2



4.2.20 Score per residue for model 20 (medoid)

- Molecule 1: Chemosensory Protein CSP2



5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

Of the 50 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with acceptable covalent geometry, structures with favorable non-bond energy, structures with the least restraint violations, structures with the lowest energy, target function.*

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

Software name	Classification	Version
DIANA	structure solution	2.8
CNS	refinement	1.0

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	1.11±0.28	12±6/810 (1.5± 0.7%)	0.79±0.06	0±1/1089 (0.0± 0.1%)
All	All	1.14	242/16200 (1.5%)	0.79	6/21780 (0.0%)

All unique bond 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(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	83	GLU	C-N	-8.81	1.22	1.33	9	11
1	A	8	TYR	C-O	-8.24	1.13	1.23	14	2
1	A	81	TRP	C-N	-7.94	1.23	1.33	6	12
1	A	43	LEU	C-O	-7.76	1.14	1.24	7	7
1	A	47	LEU	CA-C	-7.25	1.45	1.53	5	1
1	A	70	ILE	C-O	-6.98	1.15	1.24	7	17
1	A	39	GLU	C-O	-6.89	1.15	1.24	20	5
1	A	73	LEU	N-CA	-6.82	1.38	1.46	19	17
1	A	72	HIS	N-CA	-6.75	1.37	1.46	2	12
1	A	83	GLU	N-CA	-6.74	1.38	1.46	12	12
1	A	26	TYR	C-N	-6.70	1.25	1.33	7	8
1	A	28	ASN	CA-C	-6.61	1.43	1.52	4	4
1	A	10	ASN	CA-CB	-6.57	1.44	1.53	16	1
1	A	20	LYS	N-CA	-6.45	1.38	1.46	2	12
1	A	44	LYS	CA-C	-6.45	1.44	1.52	8	1
1	A	48	GLN	C-O	-6.44	1.15	1.24	2	1
1	A	44	LYS	C-O	-6.43	1.16	1.24	12	5
1	A	60	GLU	C-N	-6.41	1.24	1.33	17	1
1	A	110	PRO	C-N	-6.36	1.25	1.33	2	5
1	A	82	ARG	C-O	-6.25	1.16	1.24	15	3
1	A	46	HIS	CE1-NE2	-6.23	1.26	1.32	7	3
1	A	74	ILE	CA-CB	-6.20	1.47	1.54	16	1
1	A	68	ARG	NE-CZ	-6.19	1.26	1.33	20	1
1	A	61	ASN	C-N	-6.14	1.25	1.34	4	5
1	A	69	VAL	N-CA	-6.12	1.38	1.46	19	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	83	GLU	CA-C	-6.07	1.44	1.52	4	6
1	A	25	ALA	N-CA	-6.05	1.39	1.46	6	2
1	A	63	GLU	CA-C	-6.00	1.45	1.52	19	4
1	A	61	ASN	C-O	-5.96	1.17	1.24	9	5
1	A	9	ASP	N-CA	-5.95	1.38	1.46	4	2
1	A	86	ALA	CA-CB	-5.92	1.43	1.53	5	6
1	A	45	GLU	N-CA	-5.82	1.39	1.46	12	1
1	A	46	HIS	CG-ND1	-5.81	1.31	1.38	7	1
1	A	41	LYS	CA-C	-5.80	1.45	1.52	8	1
1	A	82	ARG	CZ-NH2	-5.79	1.25	1.33	16	1
1	A	13	LEU	N-CA	-5.77	1.39	1.46	9	7
1	A	111	GLU	C-N	-5.76	1.25	1.33	6	3
1	A	69	VAL	C-O	-5.72	1.16	1.24	8	3
1	A	93	ASN	C-O	-5.72	1.16	1.24	15	2
1	A	110	PRO	N-CD	-5.68	1.39	1.47	5	2
1	A	8	TYR	CA-C	-5.64	1.45	1.52	5	4
1	A	23	LEU	CA-C	-5.58	1.45	1.52	7	1
1	A	94	TRP	CA-C	-5.57	1.45	1.52	5	4
1	A	111	GLU	C-O	-5.53	1.18	1.23	18	2
1	A	49	ASP	CA-CB	-5.50	1.45	1.53	18	1
1	A	94	TRP	NE1-CE2	-5.50	1.31	1.37	16	3
1	A	27	VAL	CA-CB	-5.49	1.47	1.54	9	1
1	A	25	ALA	C-O	-5.46	1.17	1.24	5	1
1	A	38	PRO	C-O	-5.46	1.17	1.24	6	1
1	A	42	GLU	C-O	-5.44	1.17	1.24	17	1
1	A	63	GLU	N-CA	-5.43	1.39	1.46	7	1
1	A	21	ARG	C-N	-5.42	1.27	1.33	7	1
1	A	9	ASP	CA-C	-5.38	1.45	1.52	2	1
1	A	45	GLU	CD-OE1	-5.38	1.15	1.25	12	1
1	A	13	LEU	CA-C	-5.35	1.45	1.52	3	1
1	A	60	GLU	C-O	-5.31	1.17	1.24	4	3
1	A	44	LYS	CA-CB	-5.29	1.44	1.53	18	1
1	A	49	ASP	C-N	-5.27	1.26	1.33	20	1
1	A	22	LEU	CA-CB	-5.27	1.45	1.53	16	1
1	A	60	GLU	N-CA	-5.22	1.39	1.46	18	1
1	A	41	LYS	C-N	-5.21	1.26	1.33	3	1
1	A	11	ILE	N-CA	-5.21	1.39	1.46	5	1
1	A	51	ILE	N-CA	-5.20	1.39	1.46	15	1
1	A	25	ALA	CA-C	-5.18	1.46	1.52	12	1
1	A	44	LYS	N-CA	-5.18	1.39	1.46	14	2
1	A	19	ASN	C-N	-5.17	1.27	1.33	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	68	ARG	CD-NE	-5.12	1.39	1.46	9	2
1	A	26	TYR	N-CA	-5.07	1.40	1.46	4	1
1	A	10	ASN	CA-C	-5.06	1.47	1.53	20	1

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	69	VAL	CA-C-O	5.58	126.50	120.47	7	5
1	A	62	GLN	O-C-N	5.01	127.43	122.12	18	1

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in each chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen atoms added and optimized by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes averaged over the ensemble.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	797	795	793	99±12
All	All	15940	15900	15860	1984

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 62.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:LEU:HD22	1:A:69:VAL:HG21	1.06	1.24	14	9
1:A:84:LEU:HD12	1:A:85:THR:N	1.02	1.68	6	1
1:A:78:ILE:HB	1:A:107:ILE:HD11	1.01	1.31	2	14
1:A:70:ILE:HD13	1:A:98:TYR:CD2	0.99	1.91	13	18
1:A:13:LEU:HD23	1:A:16:ILE:HD11	0.95	1.33	13	1
1:A:26:TYR:CZ	1:A:43:LEU:HD13	0.94	1.97	9	7
1:A:82:ARG:O	1:A:85:THR:HG22	0.90	1.67	9	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:VAL:HG11	1:A:87:LYS:HG2	0.90	1.43	9	1
1:A:70:ILE:HG21	1:A:98:TYR:CD1	0.90	2.01	2	16
1:A:30:VAL:HG11	1:A:82:ARG:O	0.90	1.66	6	1
1:A:13:LEU:HD23	1:A:69:VAL:HG21	0.89	1.42	16	2
1:A:23:LEU:CD1	1:A:73:LEU:HD22	0.87	1.98	8	1
1:A:23:LEU:HD22	1:A:73:LEU:HD21	0.86	1.46	3	3
1:A:17:LEU:HD11	1:A:69:VAL:HG22	0.85	1.46	13	3
1:A:23:LEU:HD23	1:A:24:VAL:N	0.85	1.87	14	3
1:A:11:ILE:HD13	1:A:43:LEU:HD23	0.85	1.46	10	2
1:A:51:ILE:HG23	1:A:66:ALA:HB1	0.85	1.46	11	1
1:A:81:TRP:HB2	1:A:109:ILE:HD13	0.85	1.47	19	15
1:A:30:VAL:HG22	1:A:86:ALA:HB3	0.85	1.47	3	3
1:A:13:LEU:HD23	1:A:69:VAL:CG2	0.85	2.01	16	3
1:A:74:ILE:HD11	1:A:81:TRP:CH2	0.84	2.06	8	18
1:A:78:ILE:HD11	1:A:81:TRP:NE1	0.84	1.86	9	13
1:A:11:ILE:HD13	1:A:46:HIS:ND1	0.84	1.88	15	2
1:A:65:GLY:O	1:A:69:VAL:HG23	0.84	1.73	14	16
1:A:26:TYR:CE2	1:A:43:LEU:HD22	0.83	2.09	13	2
1:A:60:GLU:O	1:A:62:GLN:N	0.83	2.11	4	6
1:A:11:ILE:HD12	1:A:43:LEU:HD23	0.82	1.49	16	1
1:A:73:LEU:CB	1:A:80:ILE:HD11	0.82	2.03	2	16
1:A:102:ALA:HB1	1:A:107:ILE:O	0.82	1.74	14	20
1:A:30:VAL:HG21	1:A:83:GLU:HA	0.82	1.52	3	2
1:A:13:LEU:HD21	1:A:69:VAL:CG2	0.82	2.05	2	3
1:A:11:ILE:CG2	1:A:13:LEU:HD13	0.81	2.06	8	2
1:A:77:GLU:O	1:A:79:GLU:N	0.81	2.13	9	19
1:A:82:ARG:CD	1:A:109:ILE:HD11	0.81	2.06	8	3
1:A:11:ILE:HD13	1:A:46:HIS:CG	0.81	2.10	15	3
1:A:26:TYR:O	1:A:30:VAL:HG23	0.81	1.75	5	13
1:A:13:LEU:HD22	1:A:69:VAL:CG2	0.80	2.05	20	8
1:A:23:LEU:HD12	1:A:73:LEU:HD22	0.80	1.51	8	1
1:A:67:TYR:O	1:A:70:ILE:HG22	0.80	1.77	12	19
1:A:23:LEU:O	1:A:27:VAL:HG23	0.80	1.77	19	20
1:A:78:ILE:HG21	1:A:108:VAL:O	0.79	1.78	3	4
1:A:30:VAL:HG21	1:A:83:GLU:CD	0.79	2.03	12	3
1:A:18:ALA:HB3	1:A:22:LEU:HD13	0.78	1.55	10	2
1:A:49:ASP:O	1:A:91:THR:HG21	0.78	1.79	5	1
1:A:27:VAL:HG22	1:A:83:GLU:CD	0.78	2.04	8	5
1:A:26:TYR:CE2	1:A:43:LEU:HD11	0.78	2.14	7	1
1:A:23:LEU:HD12	1:A:73:LEU:HG	0.78	1.53	14	1
1:A:73:LEU:HB2	1:A:80:ILE:HD11	0.78	1.55	10	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:VAL:HG22	1:A:83:GLU:OE1	0.78	1.79	12	7
1:A:51:ILE:HD12	1:A:88:TYR:HB3	0.78	1.55	5	1
1:A:13:LEU:CD2	1:A:69:VAL:HG21	0.78	2.07	5	10
1:A:27:VAL:HG21	1:A:79:GLU:OE2	0.77	1.79	20	2
1:A:70:ILE:HG21	1:A:98:TYR:CG	0.77	2.13	2	5
1:A:82:ARG:HD3	1:A:109:ILE:HD11	0.77	1.53	11	5
1:A:16:ILE:HD12	1:A:43:LEU:HD21	0.77	1.57	6	1
1:A:84:LEU:HD13	1:A:90:PRO:CG	0.77	2.09	11	1
1:A:70:ILE:HD11	1:A:80:ILE:HG21	0.76	1.57	5	8
1:A:84:LEU:HD11	1:A:95:ARG:CD	0.76	2.09	1	1
1:A:74:ILE:HG23	1:A:107:ILE:HG21	0.76	1.56	13	5
1:A:15:GLU:O	1:A:22:LEU:HD23	0.76	1.80	7	3
1:A:23:LEU:CD2	1:A:73:LEU:HD21	0.75	2.10	3	3
1:A:30:VAL:HG12	1:A:86:ALA:HB3	0.75	1.56	13	3
1:A:30:VAL:HG11	1:A:83:GLU:HB2	0.75	1.57	4	2
1:A:16:ILE:HD13	1:A:26:TYR:CD2	0.75	2.16	11	1
1:A:74:ILE:HG13	1:A:80:ILE:HD12	0.75	1.58	4	7
1:A:27:VAL:HG13	1:A:83:GLU:CD	0.75	2.06	2	2
1:A:23:LEU:HD21	1:A:79:GLU:OE1	0.75	1.82	14	1
1:A:16:ILE:O	1:A:73:LEU:HD21	0.74	1.82	16	2
1:A:23:LEU:HD12	1:A:73:LEU:HD21	0.74	1.59	10	1
1:A:73:LEU:HB3	1:A:80:ILE:HD11	0.74	1.58	2	4
1:A:17:LEU:HD11	1:A:72:HIS:CG	0.74	2.17	18	7
1:A:91:THR:HG1	1:A:94:TRP:CD1	0.73	2.00	6	1
1:A:17:LEU:HD11	1:A:72:HIS:CD2	0.73	2.18	7	7
1:A:18:ALA:HB3	1:A:22:LEU:CD1	0.73	2.13	14	3
1:A:27:VAL:HG22	1:A:83:GLU:HB3	0.73	1.59	16	1
1:A:30:VAL:HG13	1:A:87:LYS:HE3	0.73	1.60	4	1
1:A:50:ALA:O	1:A:94:TRP:NE1	0.73	2.22	5	1
1:A:51:ILE:HG22	1:A:91:THR:HG21	0.72	1.61	19	1
1:A:30:VAL:HG11	1:A:83:GLU:O	0.72	1.84	16	1
1:A:89:ASP:N	1:A:90:PRO:CD	0.72	2.52	11	5
1:A:30:VAL:CG1	1:A:82:ARG:O	0.72	2.36	6	1
1:A:77:GLU:C	1:A:79:GLU:H	0.71	1.93	9	1
1:A:106:GLY:O	1:A:108:VAL:HG23	0.71	1.86	17	14
1:A:30:VAL:HG13	1:A:86:ALA:CB	0.71	2.15	6	1
1:A:15:GLU:O	1:A:22:LEU:HD22	0.71	1.85	10	9
1:A:51:ILE:HG21	1:A:66:ALA:CB	0.71	2.15	12	1
1:A:27:VAL:HG11	1:A:79:GLU:HB2	0.71	1.62	6	2
1:A:37:SER:N	1:A:38:PRO:CD	0.71	2.53	17	4
1:A:10:ASN:ND2	1:A:13:LEU:HD12	0.71	2.00	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:ILE:HD13	1:A:108:VAL:CA	0.70	2.16	8	12
1:A:51:ILE:HG23	1:A:88:TYR:HB3	0.70	1.62	5	1
1:A:26:TYR:CE1	1:A:43:LEU:HD13	0.70	2.21	9	2
1:A:78:ILE:HD13	1:A:108:VAL:HA	0.70	1.63	8	11
1:A:84:LEU:HD12	1:A:95:ARG:CG	0.70	2.16	20	5
1:A:70:ILE:HD13	1:A:98:TYR:CG	0.70	2.21	6	4
1:A:10:ASN:OD1	1:A:13:LEU:HD13	0.70	1.86	1	1
1:A:10:ASN:OD1	1:A:13:LEU:HD22	0.70	1.86	16	1
1:A:13:LEU:HB3	1:A:69:VAL:HG21	0.70	1.64	17	1
1:A:17:LEU:HD11	1:A:69:VAL:CG2	0.69	2.17	13	2
1:A:23:LEU:HD22	1:A:73:LEU:HD11	0.69	1.63	9	3
1:A:27:VAL:HG22	1:A:83:GLU:HG3	0.69	1.63	17	1
1:A:16:ILE:CD1	1:A:43:LEU:HD21	0.69	2.16	6	2
1:A:10:ASN:OD1	1:A:11:ILE:HD12	0.69	1.87	12	1
1:A:84:LEU:HD12	1:A:95:ARG:HG3	0.69	1.65	20	3
1:A:23:LEU:HD11	1:A:79:GLU:OE2	0.69	1.86	18	1
1:A:13:LEU:HD21	1:A:69:VAL:HG23	0.69	1.62	2	1
1:A:17:LEU:HD11	1:A:72:HIS:ND1	0.68	2.02	19	6
1:A:46:HIS:O	1:A:47:LEU:HB3	0.68	1.88	15	2
1:A:23:LEU:HD13	1:A:76:ASN:CG	0.68	2.12	14	1
1:A:78:ILE:O	1:A:78:ILE:HG23	0.68	1.87	14	7
1:A:81:TRP:HA	1:A:84:LEU:HD21	0.68	1.65	16	2
1:A:27:VAL:HG11	1:A:79:GLU:CD	0.68	2.14	7	4
1:A:74:ILE:N	1:A:80:ILE:HD11	0.68	2.04	11	2
1:A:30:VAL:HG11	1:A:87:LYS:CG	0.68	2.18	9	1
1:A:70:ILE:O	1:A:74:ILE:HD12	0.68	1.89	9	18
1:A:78:ILE:HD11	1:A:81:TRP:CD1	0.68	2.23	5	19
1:A:30:VAL:HG11	1:A:83:GLU:HB3	0.68	1.66	7	2
1:A:80:ILE:O	1:A:84:LEU:HD13	0.68	1.88	16	2
1:A:51:ILE:HD12	1:A:51:ILE:O	0.67	1.88	6	1
1:A:21:ARG:O	1:A:25:ALA:HB2	0.67	1.89	2	6
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LEU:HD22	0.67	1.65	11	4
1:A:30:VAL:HG21	1:A:83:GLU:CA	0.67	2.19	3	2
1:A:11:ILE:CG2	1:A:13:LEU:HD12	0.67	2.20	3	2
1:A:23:LEU:HB3	1:A:73:LEU:HD11	0.67	1.65	3	1
1:A:40:GLY:HA2	1:A:43:LEU:HD12	0.66	1.66	10	3
1:A:12:ASN:O	1:A:14:ASP:N	0.66	2.28	12	2
1:A:84:LEU:HD12	1:A:84:LEU:C	0.66	2.14	6	1
1:A:11:ILE:HD11	1:A:46:HIS:CE1	0.66	2.26	8	1
1:A:84:LEU:HD12	1:A:95:ARG:HB3	0.66	1.66	19	3
1:A:16:ILE:HD11	1:A:43:LEU:CD2	0.66	2.20	8	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:VAL:HG21	1:A:79:GLU:HG3	0.66	1.66	8	4
1:A:19:ASN:ND2	1:A:22:LEU:HD12	0.66	2.06	9	1
1:A:15:GLU:O	1:A:22:LEU:HD13	0.66	1.91	5	6
1:A:47:LEU:HD22	1:A:88:TYR:OH	0.65	1.92	1	1
1:A:17:LEU:HD11	1:A:72:HIS:CE1	0.65	2.26	2	10
1:A:84:LEU:HD11	1:A:95:ARG:HD3	0.65	1.67	1	1
1:A:18:ALA:HB3	1:A:22:LEU:HD12	0.65	1.68	14	1
1:A:13:LEU:CD2	1:A:16:ILE:HD11	0.65	2.17	13	1
1:A:73:LEU:CB	1:A:80:ILE:HG23	0.65	2.21	13	1
1:A:84:LEU:HD13	1:A:88:TYR:CE2	0.65	2.26	18	2
1:A:22:LEU:C	1:A:22:LEU:HD23	0.65	2.17	20	2
1:A:30:VAL:HG21	1:A:83:GLU:CG	0.65	2.22	10	2
1:A:13:LEU:HD21	1:A:69:VAL:HG21	0.65	1.69	6	3
1:A:11:ILE:HD12	1:A:46:HIS:CD2	0.65	2.26	18	2
1:A:23:LEU:HD22	1:A:73:LEU:CD2	0.64	2.22	20	3
1:A:24:VAL:HG22	1:A:79:GLU:CD	0.64	2.17	16	1
1:A:49:ASP:OD2	1:A:84:LEU:HD11	0.64	1.93	4	1
1:A:11:ILE:HG23	1:A:11:ILE:O	0.64	1.91	17	2
1:A:30:VAL:HG21	1:A:83:GLU:HB2	0.64	1.67	16	2
1:A:23:LEU:HD13	1:A:73:LEU:HG	0.64	1.69	4	3
1:A:30:VAL:HG13	1:A:87:LYS:CE	0.64	2.22	4	1
1:A:17:LEU:CD1	1:A:69:VAL:HG22	0.64	2.19	13	1
1:A:30:VAL:HG13	1:A:86:ALA:HB3	0.64	1.70	6	1
1:A:70:ILE:HG13	1:A:80:ILE:HG21	0.64	1.69	13	1
1:A:11:ILE:HG22	1:A:13:LEU:HD12	0.64	1.69	19	1
1:A:47:LEU:C	1:A:47:LEU:CD1	0.63	2.71	11	1
1:A:70:ILE:HG21	1:A:98:TYR:CD2	0.63	2.28	19	1
1:A:92:GLY:O	1:A:94:TRP:CD1	0.63	2.51	13	4
1:A:16:ILE:HD13	1:A:43:LEU:HD21	0.63	1.69	14	1
1:A:11:ILE:HG23	1:A:12:ASN:N	0.63	2.07	15	9
1:A:23:LEU:CD2	1:A:24:VAL:HG23	0.63	2.23	14	3
1:A:27:VAL:HG21	1:A:73:LEU:HD21	0.63	1.70	13	1
1:A:30:VAL:HG21	1:A:83:GLU:OE2	0.63	1.94	20	1
1:A:26:TYR:CE2	1:A:43:LEU:HD13	0.62	2.28	14	4
1:A:47:LEU:HD22	1:A:62:GLN:OE1	0.62	1.94	10	2
1:A:70:ILE:CD1	1:A:80:ILE:HG21	0.62	2.24	20	9
1:A:109:ILE:HG23	1:A:109:ILE:O	0.62	1.93	20	5
1:A:82:ARG:CG	1:A:109:ILE:HD11	0.62	2.24	8	1
1:A:13:LEU:HD21	1:A:66:ALA:HA	0.62	1.72	16	1
1:A:15:GLU:C	1:A:22:LEU:HD22	0.62	2.20	20	4
1:A:23:LEU:HD13	1:A:73:LEU:HD12	0.62	1.71	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:ILE:HG23	1:A:110:PRO:HD3	0.62	1.71	18	9
1:A:15:GLU:HB3	1:A:22:LEU:HD13	0.62	1.71	20	1
1:A:78:ILE:O	1:A:109:ILE:HD12	0.61	1.94	14	10
1:A:16:ILE:HG22	1:A:23:LEU:HD13	0.61	1.72	10	1
1:A:26:TYR:CD2	1:A:43:LEU:HD22	0.61	2.29	13	1
1:A:51:ILE:HG21	1:A:88:TYR:CD1	0.61	2.30	13	1
1:A:30:VAL:HG23	1:A:87:LYS:HD3	0.61	1.72	3	1
1:A:23:LEU:HD13	1:A:73:LEU:HD11	0.61	1.71	19	1
1:A:46:HIS:O	1:A:47:LEU:HD12	0.61	1.95	13	1
1:A:78:ILE:HD13	1:A:108:VAL:C	0.61	2.20	17	7
1:A:48:GLN:O	1:A:51:ILE:HG23	0.61	1.94	6	1
1:A:13:LEU:O	1:A:17:LEU:HD12	0.61	1.96	14	2
1:A:51:ILE:HG21	1:A:66:ALA:HB1	0.61	1.73	12	1
1:A:73:LEU:C	1:A:80:ILE:HD11	0.60	2.21	16	1
1:A:27:VAL:O	1:A:30:VAL:HG12	0.60	1.96	3	2
1:A:84:LEU:HD13	1:A:84:LEU:H	0.60	1.56	3	2
1:A:19:ASN:HD22	1:A:22:LEU:HD12	0.60	1.56	9	1
1:A:81:TRP:O	1:A:85:THR:HG22	0.60	1.95	11	5
1:A:30:VAL:HG21	1:A:83:GLU:HG2	0.60	1.71	10	3
1:A:23:LEU:HD21	1:A:79:GLU:OE2	0.60	1.97	1	1
1:A:26:TYR:CZ	1:A:43:LEU:HD11	0.60	2.32	20	3
1:A:30:VAL:HG12	1:A:86:ALA:CB	0.60	2.26	13	1
1:A:27:VAL:CG2	1:A:73:LEU:HD21	0.60	2.27	13	1
1:A:12:ASN:ND2	1:A:16:ILE:HD11	0.60	2.12	9	1
1:A:70:ILE:CD1	1:A:80:ILE:HD13	0.60	2.27	5	2
1:A:30:VAL:HG21	1:A:87:LYS:CD	0.60	2.27	9	1
1:A:20:LYS:O	1:A:24:VAL:HB	0.59	1.97	14	20
1:A:84:LEU:HD13	1:A:88:TYR:CD2	0.59	2.31	18	3
1:A:51:ILE:HG21	1:A:94:TRP:CB	0.59	2.27	14	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:43:LEU:HD23	0.59	2.26	10	1
1:A:81:TRP:CH2	1:A:98:TYR:HB3	0.59	2.31	11	4
1:A:49:ASP:O	1:A:50:ALA:HB3	0.59	1.97	4	5
1:A:46:HIS:O	1:A:50:ALA:HB3	0.59	1.96	8	1
1:A:34:GLY:O	1:A:36:CYS:N	0.59	2.36	8	1
1:A:89:ASP:O	1:A:94:TRP:CD1	0.59	2.56	10	2
1:A:10:ASN:CG	1:A:13:LEU:HD13	0.59	2.23	12	2
1:A:74:ILE:CG2	1:A:107:ILE:HG21	0.58	2.28	15	11
1:A:73:LEU:HD23	1:A:79:GLU:HG3	0.58	1.74	13	1
1:A:46:HIS:O	1:A:47:LEU:HB2	0.58	1.97	11	4
1:A:49:ASP:O	1:A:50:ALA:HB2	0.58	1.97	18	4
1:A:27:VAL:HG13	1:A:83:GLU:OE2	0.58	1.98	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:80:ILE:HG22	1:A:81:TRP:CE3	0.58	2.33	3	15
1:A:39:GLU:O	1:A:40:GLY:C	0.58	2.46	7	6
1:A:23:LEU:HD13	1:A:73:LEU:HD22	0.58	1.75	8	1
1:A:78:ILE:O	1:A:78:ILE:CG1	0.58	2.52	8	13
1:A:27:VAL:HG13	1:A:83:GLU:HB2	0.58	1.74	12	1
1:A:31:MET:O	1:A:32:GLU:CG	0.58	2.52	4	4
1:A:81:TRP:O	1:A:84:LEU:HD22	0.58	1.98	3	2
1:A:30:VAL:CG1	1:A:86:ALA:HB3	0.57	2.28	17	3
1:A:11:ILE:HG21	1:A:13:LEU:HD13	0.57	1.74	8	1
1:A:91:THR:C	1:A:93:ASN:H	0.57	2.07	15	1
1:A:13:LEU:CB	1:A:69:VAL:HG21	0.57	2.29	17	1
1:A:47:LEU:HD22	1:A:88:TYR:CZ	0.57	2.34	1	1
1:A:30:VAL:HG21	1:A:87:LYS:HD3	0.57	1.76	9	1
1:A:16:ILE:HD11	1:A:43:LEU:HD22	0.57	1.76	1	3
1:A:48:GLN:O	1:A:49:ASP:CB	0.57	2.52	11	2
1:A:70:ILE:HG12	1:A:98:TYR:HB3	0.57	1.77	1	16
1:A:49:ASP:O	1:A:50:ALA:CB	0.57	2.52	9	6
1:A:84:LEU:HD12	1:A:95:ARG:HB2	0.57	1.76	2	2
1:A:30:VAL:HG11	1:A:83:GLU:CB	0.57	2.28	4	1
1:A:27:VAL:HG21	1:A:79:GLU:CD	0.57	2.23	20	5
1:A:41:LYS:O	1:A:45:GLU:N	0.57	2.37	14	4
1:A:47:LEU:O	1:A:50:ALA:N	0.56	2.38	11	1
1:A:51:ILE:HD11	1:A:91:THR:CB	0.56	2.30	5	1
1:A:51:ILE:C	1:A:51:ILE:HD13	0.56	2.25	17	1
1:A:81:TRP:CZ2	1:A:99:GLU:HA	0.56	2.35	19	4
1:A:51:ILE:H	1:A:51:ILE:HD13	0.56	1.58	5	2
1:A:70:ILE:O	1:A:74:ILE:HB	0.56	2.01	15	9
1:A:23:LEU:HD23	1:A:24:VAL:HG23	0.56	1.75	8	5
1:A:17:LEU:HD12	1:A:23:LEU:HD11	0.56	1.77	19	3
1:A:26:TYR:CD2	1:A:43:LEU:HD11	0.56	2.35	7	1
1:A:70:ILE:HD13	1:A:98:TYR:HD2	0.56	1.59	2	1
1:A:84:LEU:HD11	1:A:95:ARG:CG	0.56	2.30	1	1
1:A:84:LEU:HD22	1:A:85:THR:N	0.56	2.16	16	2
1:A:23:LEU:HD12	1:A:79:GLU:OE2	0.56	2.01	12	1
1:A:78:ILE:O	1:A:78:ILE:HD12	0.56	2.00	3	2
1:A:50:ALA:O	1:A:51:ILE:C	0.56	2.49	6	4
1:A:8:TYR:CG	1:A:8:TYR:O	0.56	2.59	8	2
1:A:12:ASN:O	1:A:16:ILE:HD12	0.56	2.01	8	1
1:A:74:ILE:HD11	1:A:81:TRP:CZ2	0.56	2.36	8	8
1:A:70:ILE:C	1:A:74:ILE:HD12	0.55	2.27	16	6
1:A:89:ASP:N	1:A:90:PRO:HD2	0.55	2.15	2	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:109:ILE:HD12	1:A:110:PRO:HD3	0.55	1.78	19	2
1:A:80:ILE:HG22	1:A:84:LEU:HG	0.55	1.78	11	2
1:A:34:GLY:O	1:A:35:LYS:CB	0.55	2.54	17	1
1:A:38:PRO:O	1:A:39:GLU:C	0.55	2.49	17	1
1:A:95:ARG:NH2	1:A:98:TYR:CE2	0.55	2.74	20	1
1:A:74:ILE:HG22	1:A:75:LYS:N	0.55	2.16	7	12
1:A:47:LEU:HD11	1:A:62:GLN:CD	0.55	2.27	9	1
1:A:109:ILE:HG23	1:A:111:GLU:HG2	0.55	1.78	16	6
1:A:51:ILE:O	1:A:51:ILE:HG23	0.55	2.00	18	1
1:A:11:ILE:HG23	1:A:13:LEU:HD12	0.55	1.77	3	1
1:A:17:LEU:HD11	1:A:72:HIS:NE2	0.55	2.17	15	2
1:A:78:ILE:O	1:A:78:ILE:CD1	0.55	2.55	3	7
1:A:74:ILE:HD11	1:A:81:TRP:HH2	0.55	1.54	10	9
1:A:88:TYR:N	1:A:88:TYR:CD1	0.55	2.73	2	7
1:A:73:LEU:HB2	1:A:80:ILE:HG23	0.55	1.78	13	1
1:A:84:LEU:HA	1:A:87:LYS:O	0.54	2.02	6	4
1:A:17:LEU:N	1:A:23:LEU:HD11	0.54	2.16	6	1
1:A:91:THR:O	1:A:93:ASN:N	0.54	2.39	15	1
1:A:27:VAL:HG22	1:A:83:GLU:OE2	0.54	2.02	8	2
1:A:27:VAL:HG11	1:A:79:GLU:CB	0.54	2.31	6	2
1:A:78:ILE:O	1:A:78:ILE:HD13	0.54	2.02	13	3
1:A:81:TRP:O	1:A:84:LEU:CD1	0.54	2.56	6	1
1:A:32:GLU:O	1:A:32:GLU:CG	0.54	2.54	8	1
1:A:17:LEU:HD13	1:A:68:ARG:NH2	0.54	2.17	9	1
1:A:93:ASN:O	1:A:94:TRP:CD2	0.54	2.60	13	1
1:A:78:ILE:HG21	1:A:110:PRO:HD3	0.54	1.79	7	5
1:A:82:ARG:HG2	1:A:109:ILE:HD11	0.54	1.79	8	1
1:A:47:LEU:O	1:A:51:ILE:N	0.54	2.36	11	1
1:A:47:LEU:HD13	1:A:50:ALA:H	0.54	1.62	4	1
1:A:46:HIS:O	1:A:47:LEU:HD22	0.54	2.02	5	1
1:A:16:ILE:O	1:A:16:ILE:HG22	0.54	2.03	15	3
1:A:29:CYS:O	1:A:34:GLY:N	0.54	2.41	17	1
1:A:51:ILE:HD12	1:A:88:TYR:CB	0.54	2.29	5	1
1:A:84:LEU:C	1:A:84:LEU:CD1	0.54	2.80	6	1
1:A:78:ILE:CB	1:A:107:ILE:HD11	0.54	2.25	3	4
1:A:87:LYS:C	1:A:88:TYR:CG	0.54	2.86	4	12
1:A:17:LEU:HD11	1:A:69:VAL:HG23	0.54	1.77	6	1
1:A:70:ILE:HD11	1:A:80:ILE:CG2	0.54	2.30	5	5
1:A:80:ILE:CG2	1:A:81:TRP:CZ3	0.54	2.90	19	19
1:A:90:PRO:C	1:A:91:THR:HG22	0.54	2.28	4	1
1:A:80:ILE:O	1:A:83:GLU:N	0.54	2.40	3	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:70:ILE:HD12	1:A:80:ILE:HD13	0.54	1.80	4	1
1:A:84:LEU:HD13	1:A:90:PRO:CB	0.54	2.32	11	1
1:A:84:LEU:O	1:A:87:LYS:O	0.53	2.26	3	7
1:A:31:MET:O	1:A:31:MET:HE2	0.53	2.02	9	1
1:A:11:ILE:C	1:A:11:ILE:HD13	0.53	2.28	16	1
1:A:23:LEU:HD23	1:A:23:LEU:C	0.53	2.29	1	3
1:A:26:TYR:CE2	1:A:43:LEU:CD1	0.53	2.91	15	2
1:A:26:TYR:OH	1:A:43:LEU:HD13	0.53	2.04	9	2
1:A:30:VAL:HG11	1:A:83:GLU:HA	0.53	1.79	6	4
1:A:84:LEU:HD12	1:A:95:ARG:CB	0.53	2.34	2	3
1:A:85:THR:O	1:A:88:TYR:CE1	0.53	2.61	15	4
1:A:30:VAL:HG13	1:A:87:LYS:HG3	0.53	1.79	13	1
1:A:78:ILE:CG2	1:A:110:PRO:HD3	0.53	2.34	6	1
1:A:78:ILE:HD12	1:A:109:ILE:CA	0.53	2.33	13	2
1:A:78:ILE:HD11	1:A:81:TRP:HE1	0.53	1.63	9	7
1:A:51:ILE:HA	1:A:66:ALA:CB	0.53	2.32	11	1
1:A:70:ILE:HD11	1:A:81:TRP:HZ3	0.53	1.63	13	1
1:A:27:VAL:HG13	1:A:83:GLU:HG3	0.53	1.78	20	1
1:A:12:ASN:C	1:A:14:ASP:N	0.53	2.66	12	2
1:A:84:LEU:HD12	1:A:95:ARG:HH11	0.53	1.64	18	1
1:A:37:SER:N	1:A:38:PRO:HD2	0.53	2.19	16	10
1:A:90:PRO:O	1:A:91:THR:HG22	0.53	2.03	4	1
1:A:17:LEU:CD1	1:A:72:HIS:CG	0.53	2.92	16	4
1:A:47:LEU:C	1:A:47:LEU:HD13	0.53	2.28	11	1
1:A:23:LEU:HD13	1:A:73:LEU:CD1	0.53	2.34	19	1
1:A:30:VAL:HG11	1:A:83:GLU:CA	0.53	2.34	6	2
1:A:47:LEU:O	1:A:49:ASP:N	0.53	2.42	8	3
1:A:47:LEU:O	1:A:48:GLN:C	0.53	2.51	11	1
1:A:47:LEU:HD12	1:A:51:ILE:HD12	0.52	1.80	8	1
1:A:69:VAL:HG12	1:A:73:LEU:HD12	0.52	1.80	5	1
1:A:70:ILE:HG12	1:A:98:TYR:CD2	0.52	2.39	5	1
1:A:87:LYS:CB	1:A:88:TYR:CE1	0.52	2.93	9	1
1:A:11:ILE:HD11	1:A:42:GLU:HG2	0.52	1.82	13	1
1:A:29:CYS:CB	1:A:38:PRO:HD3	0.52	2.33	17	1
1:A:84:LEU:HD22	1:A:85:THR:H	0.52	1.64	3	2
1:A:49:ASP:O	1:A:51:ILE:HD12	0.52	2.04	16	1
1:A:84:LEU:HD12	1:A:95:ARG:CD	0.52	2.34	17	1
1:A:50:ALA:O	1:A:94:TRP:CD1	0.52	2.62	5	1
1:A:27:VAL:HG11	1:A:79:GLU:HB3	0.52	1.82	17	1
1:A:29:CYS:CB	1:A:38:PRO:HG3	0.52	2.35	17	1
1:A:27:VAL:HG13	1:A:83:GLU:CB	0.52	2.34	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:ILE:HA	1:A:66:ALA:HB2	0.52	1.79	11	1
1:A:50:ALA:O	1:A:51:ILE:CG1	0.52	2.58	15	1
1:A:51:ILE:HD11	1:A:91:THR:HB	0.52	1.82	5	1
1:A:63:GLU:O	1:A:67:TYR:HB2	0.52	2.05	5	1
1:A:23:LEU:HD21	1:A:76:ASN:ND2	0.52	2.20	12	1
1:A:70:ILE:HA	1:A:80:ILE:HD13	0.52	1.81	11	4
1:A:74:ILE:HG13	1:A:80:ILE:HD13	0.52	1.82	16	1
1:A:67:TYR:CD1	1:A:98:TYR:CE2	0.52	2.98	19	1
1:A:84:LEU:HD13	1:A:90:PRO:HG3	0.51	1.80	10	2
1:A:24:VAL:HG22	1:A:79:GLU:OE1	0.51	2.05	16	1
1:A:47:LEU:HD21	1:A:62:GLN:OE1	0.51	2.05	18	1
1:A:70:ILE:HD13	1:A:98:TYR:CE2	0.51	2.40	16	6
1:A:24:VAL:O	1:A:28:ASN:N	0.51	2.33	6	8
1:A:31:MET:O	1:A:32:GLU:CB	0.51	2.58	6	7
1:A:82:ARG:O	1:A:86:ALA:HB2	0.51	2.06	11	1
1:A:67:TYR:CE2	1:A:98:TYR:CZ	0.51	2.99	19	1
1:A:37:SER:CB	1:A:38:PRO:CD	0.51	2.89	8	8
1:A:46:HIS:O	1:A:47:LEU:CB	0.51	2.58	15	2
1:A:81:TRP:CE3	1:A:81:TRP:N	0.51	2.79	16	19
1:A:44:LYS:HA	1:A:48:GLN:HB2	0.51	1.83	7	1
1:A:38:PRO:O	1:A:40:GLY:N	0.51	2.43	17	1
1:A:23:LEU:HD22	1:A:73:LEU:CD1	0.51	2.34	9	2
1:A:84:LEU:HD13	1:A:84:LEU:N	0.51	2.21	3	2
1:A:47:LEU:HG	1:A:51:ILE:O	0.51	2.04	11	1
1:A:30:VAL:HG22	1:A:86:ALA:CB	0.51	2.36	15	1
1:A:51:ILE:HG21	1:A:94:TRP:HB2	0.51	1.81	14	1
1:A:37:SER:O	1:A:41:LYS:N	0.50	2.44	16	3
1:A:11:ILE:HD13	1:A:46:HIS:CD2	0.50	2.41	20	3
1:A:11:ILE:CG1	1:A:46:HIS:CD2	0.50	2.94	2	1
1:A:27:VAL:HG11	1:A:79:GLU:OE1	0.50	2.06	2	2
1:A:11:ILE:CD1	1:A:46:HIS:CD2	0.50	2.95	6	1
1:A:26:TYR:CD1	1:A:38:PRO:CB	0.50	2.94	17	1
1:A:29:CYS:HB2	1:A:38:PRO:HD3	0.50	1.82	17	1
1:A:15:GLU:CD	1:A:22:LEU:HD21	0.50	2.32	1	1
1:A:44:LYS:O	1:A:49:ASP:N	0.50	2.44	17	1
1:A:87:LYS:O	1:A:88:TYR:CD2	0.50	2.64	15	4
1:A:67:TYR:CG	1:A:98:TYR:CE2	0.50	2.98	19	1
1:A:8:TYR:O	1:A:8:TYR:CD2	0.50	2.65	20	4
1:A:78:ILE:O	1:A:78:ILE:CG2	0.50	2.60	7	6
1:A:60:GLU:O	1:A:62:GLN:HG3	0.50	2.07	6	1
1:A:70:ILE:CG1	1:A:98:TYR:CD2	0.50	2.95	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:109:ILE:O	1:A:109:ILE:CG2	0.50	2.59	20	7
1:A:11:ILE:HD13	1:A:46:HIS:CE1	0.50	2.42	15	2
1:A:90:PRO:HA	1:A:94:TRP:CD1	0.50	2.40	10	2
1:A:16:ILE:HG23	1:A:23:LEU:HA	0.50	1.84	9	2
1:A:16:ILE:O	1:A:23:LEU:HD21	0.50	2.06	6	1
1:A:50:ALA:O	1:A:51:ILE:HG22	0.50	2.06	18	1
1:A:70:ILE:O	1:A:74:ILE:CG1	0.50	2.60	6	3
1:A:70:ILE:HG13	1:A:80:ILE:HD13	0.50	1.84	14	2
1:A:83:GLU:O	1:A:87:LYS:CG	0.50	2.60	9	1
1:A:27:VAL:HG13	1:A:83:GLU:CG	0.49	2.37	2	1
1:A:50:ALA:HB2	1:A:94:TRP:CZ2	0.49	2.42	9	1
1:A:77:GLU:O	1:A:78:ILE:C	0.49	2.55	1	18
1:A:26:TYR:CZ	1:A:43:LEU:CD1	0.49	2.89	18	5
1:A:67:TYR:CD1	1:A:70:ILE:CG2	0.49	2.96	18	10
1:A:23:LEU:HD13	1:A:73:LEU:CD2	0.49	2.37	20	2
1:A:69:VAL:O	1:A:73:LEU:HD23	0.49	2.07	19	1
1:A:11:ILE:CG2	1:A:12:ASN:N	0.49	2.74	2	5
1:A:84:LEU:CD2	1:A:84:LEU:N	0.49	2.74	15	3
1:A:50:ALA:O	1:A:51:ILE:HB	0.49	2.07	17	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:46:HIS:CG	0.49	2.93	14	3
1:A:16:ILE:C	1:A:23:LEU:HD11	0.49	2.31	6	1
1:A:84:LEU:CD1	1:A:90:PRO:HB2	0.49	2.38	11	1
1:A:8:TYR:CD1	1:A:8:TYR:O	0.49	2.66	10	3
1:A:74:ILE:N	1:A:80:ILE:CD1	0.49	2.75	11	3
1:A:51:ILE:HD11	1:A:91:THR:OG1	0.49	2.07	5	1
1:A:30:VAL:HG12	1:A:87:LYS:HB2	0.49	1.83	16	1
1:A:70:ILE:CG2	1:A:98:TYR:CD2	0.49	2.95	19	1
1:A:78:ILE:HG13	1:A:109:ILE:HA	0.49	1.85	2	1
1:A:43:LEU:O	1:A:47:LEU:CA	0.49	2.60	5	1
1:A:47:LEU:HD11	1:A:90:PRO:HA	0.49	1.84	11	1
1:A:78:ILE:CD1	1:A:108:VAL:HA	0.49	2.38	9	12
1:A:8:TYR:O	1:A:8:TYR:CG	0.49	2.63	20	2
1:A:32:GLU:CG	1:A:32:GLU:O	0.49	2.60	4	3
1:A:87:LYS:HB2	1:A:88:TYR:CE1	0.49	2.43	9	1
1:A:39:GLU:O	1:A:41:LYS:N	0.49	2.46	7	5
1:A:32:GLU:O	1:A:32:GLU:HG3	0.48	2.08	8	1
1:A:48:GLN:CG	1:A:84:LEU:HD13	0.48	2.37	8	1
1:A:51:ILE:CD1	1:A:51:ILE:N	0.48	2.76	13	1
1:A:23:LEU:C	1:A:23:LEU:HD12	0.48	2.33	18	2
1:A:81:TRP:O	1:A:84:LEU:CD2	0.48	2.60	3	1
1:A:74:ILE:O	1:A:107:ILE:HG12	0.48	2.07	18	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:LEU:O	1:A:47:LEU:N	0.48	2.46	5	2
1:A:44:LYS:CB	1:A:48:GLN:OE1	0.48	2.60	10	1
1:A:69:VAL:O	1:A:73:LEU:HD12	0.48	2.08	5	1
1:A:82:ARG:NE	1:A:109:ILE:HD11	0.48	2.23	8	1
1:A:90:PRO:O	1:A:95:ARG:N	0.48	2.38	8	2
1:A:84:LEU:HD11	1:A:88:TYR:CE2	0.48	2.44	9	1
1:A:49:ASP:CB	1:A:90:PRO:HA	0.48	2.39	15	1
1:A:50:ALA:CB	1:A:94:TRP:NE1	0.48	2.76	2	1
1:A:81:TRP:O	1:A:84:LEU:HG	0.48	2.07	6	1
1:A:70:ILE:CD1	1:A:98:TYR:CD2	0.48	2.90	9	12
1:A:11:ILE:HG23	1:A:13:LEU:HB2	0.48	1.84	6	1
1:A:91:THR:HG21	1:A:94:TRP:HE1	0.48	1.69	9	1
1:A:47:LEU:HD13	1:A:51:ILE:HA	0.48	1.85	5	1
1:A:78:ILE:CD1	1:A:81:TRP:CD1	0.48	2.96	5	4
1:A:16:ILE:O	1:A:23:LEU:HD12	0.48	2.09	13	1
1:A:20:LYS:O	1:A:24:VAL:CB	0.48	2.62	6	10
1:A:78:ILE:HD12	1:A:107:ILE:HG13	0.48	1.86	17	1
1:A:17:LEU:HA	1:A:23:LEU:HD21	0.48	1.86	3	2
1:A:87:LYS:HE2	1:A:88:TYR:CZ	0.48	2.43	3	1
1:A:17:LEU:O	1:A:17:LEU:HD12	0.48	2.08	20	10
1:A:90:PRO:C	1:A:91:THR:CG2	0.48	2.86	4	1
1:A:43:LEU:O	1:A:47:LEU:C	0.48	2.57	5	1
1:A:40:GLY:CA	1:A:43:LEU:HD12	0.48	2.39	17	2
1:A:48:GLN:CG	1:A:88:TYR:CD1	0.47	2.96	2	1
1:A:107:ILE:O	1:A:107:ILE:HG23	0.47	2.09	7	6
1:A:47:LEU:HD13	1:A:50:ALA:N	0.47	2.24	4	1
1:A:47:LEU:HD23	1:A:48:GLN:OE1	0.47	2.08	8	1
1:A:51:ILE:CG2	1:A:94:TRP:CB	0.47	2.92	14	1
1:A:35:LYS:O	1:A:37:SER:N	0.47	2.44	7	5
1:A:91:THR:CG2	1:A:92:GLY:N	0.47	2.77	6	3
1:A:80:ILE:HG22	1:A:84:LEU:HD11	0.47	1.85	16	2
1:A:43:LEU:O	1:A:47:LEU:HD13	0.47	2.08	19	1
1:A:92:GLY:CA	1:A:95:ARG:CG	0.47	2.93	5	1
1:A:81:TRP:HA	1:A:84:LEU:HG	0.47	1.87	6	1
1:A:91:THR:C	1:A:93:ASN:N	0.47	2.72	15	1
1:A:87:LYS:O	1:A:88:TYR:CB	0.47	2.61	3	5
1:A:109:ILE:O	1:A:109:ILE:HG23	0.47	2.08	14	1
1:A:30:VAL:CG2	1:A:83:GLU:HA	0.47	2.33	3	2
1:A:60:GLU:C	1:A:61:ASN:CG	0.47	2.83	4	1
1:A:51:ILE:HD13	1:A:51:ILE:N	0.47	2.25	12	2
1:A:88:TYR:CD1	1:A:88:TYR:N	0.47	2.81	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:ALA:HB3	1:A:98:TYR:OH	0.47	2.10	16	1
1:A:82:ARG:HA	1:A:85:THR:HG22	0.47	1.87	16	1
1:A:30:VAL:HG21	1:A:83:GLU:O	0.47	2.10	3	2
1:A:83:GLU:O	1:A:87:LYS:HG2	0.47	2.10	9	1
1:A:23:LEU:HD21	1:A:73:LEU:HD21	0.47	1.87	15	1
1:A:47:LEU:O	1:A:51:ILE:HD13	0.47	2.09	8	2
1:A:23:LEU:HD12	1:A:23:LEU:C	0.47	2.34	12	2
1:A:11:ILE:CD1	1:A:46:HIS:ND1	0.47	2.78	14	1
1:A:62:GLN:O	1:A:66:ALA:CB	0.47	2.62	2	2
1:A:82:ARG:HD2	1:A:109:ILE:HD11	0.47	1.87	4	1
1:A:20:LYS:N	1:A:20:LYS:HD2	0.46	2.25	6	1
1:A:47:LEU:C	1:A:49:ASP:N	0.46	2.71	11	1
1:A:46:HIS:HB3	1:A:47:LEU:HD23	0.46	1.87	10	1
1:A:27:VAL:HG11	1:A:79:GLU:CG	0.46	2.41	6	2
1:A:74:ILE:O	1:A:78:ILE:N	0.46	2.48	9	1
1:A:28:ASN:O	1:A:32:GLU:CB	0.46	2.63	15	1
1:A:81:TRP:HA	1:A:84:LEU:CD2	0.46	2.38	16	1
1:A:85:THR:O	1:A:88:TYR:CZ	0.46	2.69	11	1
1:A:43:LEU:O	1:A:47:LEU:CB	0.46	2.64	14	4
1:A:81:TRP:HE3	1:A:84:LEU:HD11	0.46	1.70	3	2
1:A:70:ILE:CG2	1:A:74:ILE:CD1	0.46	2.93	19	1
1:A:49:ASP:O	1:A:94:TRP:CD1	0.46	2.69	18	2
1:A:84:LEU:CD2	1:A:85:THR:N	0.46	2.79	16	2
1:A:27:VAL:HG21	1:A:73:LEU:HD22	0.46	1.88	5	1
1:A:83:GLU:HG2	1:A:84:LEU:N	0.46	2.24	9	1
1:A:48:GLN:HG3	1:A:90:PRO:HD3	0.46	1.87	11	1
1:A:19:ASN:ND2	1:A:21:ARG:CG	0.46	2.78	16	8
1:A:17:LEU:HD12	1:A:17:LEU:O	0.46	2.10	19	2
1:A:42:GLU:OE2	1:A:46:HIS:CD2	0.46	2.69	16	1
1:A:26:TYR:OH	1:A:43:LEU:CD1	0.46	2.64	19	1
1:A:67:TYR:HA	1:A:70:ILE:HG22	0.46	1.86	5	1
1:A:86:ALA:O	1:A:88:TYR:CE2	0.46	2.68	15	3
1:A:85:THR:O	1:A:88:TYR:CE2	0.46	2.69	11	1
1:A:78:ILE:O	1:A:78:ILE:HG13	0.46	2.09	15	7
1:A:60:GLU:O	1:A:61:ASN:C	0.46	2.59	18	3
1:A:41:LYS:HA	1:A:44:LYS:CG	0.46	2.41	10	2
1:A:88:TYR:CD2	1:A:95:ARG:NH2	0.46	2.84	19	1
1:A:30:VAL:HG11	1:A:82:ARG:C	0.46	2.32	6	1
1:A:26:TYR:CD1	1:A:38:PRO:HB3	0.46	2.46	17	1
1:A:33:ARG:O	1:A:34:GLY:O	0.46	2.34	17	1
1:A:16:ILE:CD1	1:A:43:LEU:HD22	0.45	2.39	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:ASP:CB	1:A:88:TYR:CG	0.45	2.98	6	1
1:A:46:HIS:CG	1:A:47:LEU:CD2	0.45	2.99	15	1
1:A:93:ASN:C	1:A:94:TRP:CG	0.45	2.94	4	1
1:A:84:LEU:CD1	1:A:88:TYR:CE2	0.45	2.99	9	1
1:A:27:VAL:HG21	1:A:79:GLU:OE1	0.45	2.11	10	2
1:A:13:LEU:HB3	1:A:17:LEU:HD12	0.45	1.88	11	1
1:A:36:CYS:O	1:A:40:GLY:N	0.45	2.49	16	1
1:A:47:LEU:O	1:A:47:LEU:CG	0.45	2.64	20	1
1:A:94:TRP:CD1	1:A:94:TRP:N	0.45	2.84	6	1
1:A:51:ILE:HB	1:A:90:PRO:CB	0.45	2.42	11	1
1:A:92:GLY:O	1:A:93:ASN:CB	0.45	2.63	18	2
1:A:86:ALA:O	1:A:88:TYR:CZ	0.45	2.69	10	3
1:A:51:ILE:CG1	1:A:51:ILE:O	0.45	2.65	13	1
1:A:23:LEU:CB	1:A:73:LEU:CD1	0.45	2.94	16	1
1:A:67:TYR:CE2	1:A:97:LYS:CG	0.45	3.00	16	1
1:A:44:LYS:O	1:A:48:GLN:CG	0.45	2.65	20	1
1:A:85:THR:O	1:A:88:TYR:CD2	0.45	2.70	11	1
1:A:27:VAL:HG21	1:A:73:LEU:CD2	0.45	2.41	13	1
1:A:38:PRO:C	1:A:40:GLY:N	0.45	2.72	17	1
1:A:8:TYR:CG	1:A:9:ASP:N	0.45	2.82	2	1
1:A:30:VAL:HG13	1:A:87:LYS:CD	0.45	2.41	4	1
1:A:80:ILE:O	1:A:84:LEU:HD23	0.45	2.12	18	3
1:A:84:LEU:CD1	1:A:90:PRO:CG	0.45	2.91	11	1
1:A:67:TYR:CD1	1:A:70:ILE:HG22	0.45	2.47	11	7
1:A:17:LEU:CD1	1:A:72:HIS:ND1	0.45	2.80	4	3
1:A:23:LEU:HD11	1:A:76:ASN:CG	0.45	2.36	7	1
1:A:60:GLU:O	1:A:63:GLU:N	0.45	2.50	18	2
1:A:76:ASN:CG	1:A:77:GLU:N	0.45	2.75	19	1
1:A:67:TYR:CD2	1:A:98:TYR:CZ	0.45	3.05	19	1
1:A:24:VAL:O	1:A:25:ALA:C	0.45	2.60	2	1
1:A:48:GLN:HG3	1:A:88:TYR:CE1	0.45	2.46	2	1
1:A:44:LYS:O	1:A:48:GLN:HG2	0.45	2.11	4	1
1:A:74:ILE:CD1	1:A:81:TRP:CH2	0.45	2.98	6	2
1:A:23:LEU:HD12	1:A:73:LEU:CD2	0.45	2.35	8	1
1:A:28:ASN:C	1:A:28:ASN:OD1	0.45	2.59	10	1
1:A:70:ILE:O	1:A:80:ILE:CD1	0.45	2.65	11	2
1:A:11:ILE:O	1:A:11:ILE:CG2	0.45	2.62	17	1
1:A:8:TYR:CZ	1:A:64:LYS:CG	0.45	3.00	6	1
1:A:23:LEU:CD1	1:A:73:LEU:HD11	0.45	2.42	10	1
1:A:23:LEU:CD2	1:A:76:ASN:ND2	0.45	2.79	17	1
1:A:11:ILE:HD12	1:A:46:HIS:CG	0.44	2.47	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:ALA:CB	1:A:22:LEU:HD13	0.44	2.36	10	1
1:A:19:ASN:ND2	1:A:19:ASN:N	0.44	2.66	15	6
1:A:85:THR:O	1:A:88:TYR:CD1	0.44	2.70	15	4
1:A:47:LEU:O	1:A:47:LEU:HD12	0.44	2.12	11	1
1:A:70:ILE:HD13	1:A:80:ILE:HG21	0.44	1.89	19	1
1:A:14:ASP:O	1:A:18:ALA:N	0.44	2.49	18	2
1:A:68:ARG:O	1:A:72:HIS:CB	0.44	2.65	2	1
1:A:81:TRP:CE3	1:A:81:TRP:CA	0.44	3.00	6	12
1:A:47:LEU:O	1:A:51:ILE:CD1	0.44	2.66	8	1
1:A:16:ILE:HG22	1:A:23:LEU:CD1	0.44	2.41	10	1
1:A:26:TYR:CD2	1:A:38:PRO:HA	0.44	2.47	17	1
1:A:22:LEU:C	1:A:22:LEU:CD2	0.44	2.86	20	2
1:A:70:ILE:HG12	1:A:80:ILE:HD12	0.44	1.89	19	1
1:A:28:ASN:O	1:A:32:GLU:N	0.44	2.50	7	3
1:A:108:VAL:HG12	1:A:109:ILE:N	0.44	2.27	5	5
1:A:15:GLU:HG3	1:A:16:ILE:N	0.44	2.28	12	1
1:A:91:THR:OG1	1:A:92:GLY:N	0.44	2.51	17	3
1:A:72:HIS:CD2	1:A:72:HIS:C	0.44	2.94	5	2
1:A:77:GLU:C	1:A:79:GLU:N	0.44	2.60	9	11
1:A:51:ILE:HD13	1:A:51:ILE:O	0.44	2.13	17	1
1:A:17:LEU:O	1:A:17:LEU:CG	0.44	2.65	19	5
1:A:41:LYS:O	1:A:45:GLU:CB	0.44	2.66	2	2
1:A:60:GLU:O	1:A:62:GLN:CG	0.44	2.66	2	1
1:A:81:TRP:O	1:A:85:THR:CG2	0.44	2.66	15	1
1:A:8:TYR:CD2	1:A:9:ASP:N	0.44	2.86	15	3
1:A:47:LEU:O	1:A:88:TYR:CE1	0.44	2.71	5	1
1:A:70:ILE:HG12	1:A:98:TYR:CG	0.44	2.48	11	1
1:A:19:ASN:HD21	1:A:22:LEU:HD12	0.44	1.73	15	1
1:A:43:LEU:O	1:A:47:LEU:CD2	0.44	2.65	20	1
1:A:48:GLN:O	1:A:88:TYR:CD1	0.43	2.71	4	1
1:A:78:ILE:C	1:A:80:ILE:N	0.43	2.74	9	1
1:A:44:LYS:HB2	1:A:48:GLN:OE1	0.43	2.13	10	1
1:A:26:TYR:CE1	1:A:40:GLY:HA3	0.43	2.48	11	1
1:A:92:GLY:O	1:A:94:TRP:N	0.43	2.51	13	1
1:A:48:GLN:HG3	1:A:88:TYR:CD1	0.43	2.48	2	1
1:A:23:LEU:HD22	1:A:73:LEU:CG	0.43	2.43	3	1
1:A:12:ASN:O	1:A:13:LEU:C	0.43	2.60	12	1
1:A:13:LEU:CD2	1:A:69:VAL:CG2	0.43	2.97	9	3
1:A:8:TYR:O	1:A:10:ASN:N	0.43	2.51	9	1
1:A:73:LEU:HB3	1:A:80:ILE:HG23	0.43	1.90	13	1
1:A:80:ILE:HG22	1:A:84:LEU:CD1	0.43	2.42	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:CYS:CB	1:A:38:PRO:CD	0.43	2.96	17	1
1:A:70:ILE:CG2	1:A:71:GLU:N	0.43	2.81	3	3
1:A:20:LYS:O	1:A:24:VAL:HG23	0.43	2.14	12	2
1:A:84:LEU:HD12	1:A:90:PRO:HG3	0.43	1.90	8	1
1:A:33:ARG:O	1:A:34:GLY:C	0.43	2.60	17	1
1:A:44:LYS:CG	1:A:48:GLN:NE2	0.43	2.81	6	3
1:A:70:ILE:HG23	1:A:74:ILE:HD12	0.43	1.90	16	1
1:A:41:LYS:O	1:A:45:GLU:HB3	0.43	2.13	19	2
1:A:80:ILE:HG22	1:A:81:TRP:CZ3	0.43	2.48	3	3
1:A:79:GLU:O	1:A:80:ILE:C	0.43	2.61	9	1
1:A:84:LEU:CD1	1:A:90:PRO:CB	0.43	2.96	15	2
1:A:61:ASN:ND2	1:A:62:GLN:N	0.43	2.66	12	2
1:A:67:TYR:CE1	1:A:98:TYR:CD2	0.43	3.07	19	1
1:A:47:LEU:HD11	1:A:50:ALA:CA	0.43	2.44	2	1
1:A:87:LYS:O	1:A:88:TYR:CG	0.43	2.71	15	4
1:A:92:GLY:O	1:A:93:ASN:HB3	0.43	2.13	4	2
1:A:70:ILE:CG1	1:A:80:ILE:HD13	0.43	2.43	5	1
1:A:23:LEU:CD2	1:A:73:LEU:HD11	0.43	2.44	6	1
1:A:82:ARG:O	1:A:85:THR:CG2	0.43	2.58	6	1
1:A:19:ASN:OD1	1:A:21:ARG:CG	0.43	2.66	9	2
1:A:92:GLY:O	1:A:94:TRP:NE1	0.43	2.52	18	1
1:A:102:ALA:HB1	1:A:107:ILE:HG23	0.43	1.89	19	1
1:A:34:GLY:C	1:A:35:LYS:CG	0.43	2.92	8	1
1:A:30:VAL:CG1	1:A:87:LYS:CB	0.43	2.96	16	1
1:A:42:GLU:O	1:A:46:HIS:CB	0.43	2.67	17	1
1:A:65:GLY:O	1:A:69:VAL:CG2	0.43	2.67	2	3
1:A:78:ILE:CD1	1:A:78:ILE:C	0.43	2.92	3	1
1:A:79:GLU:O	1:A:82:ARG:N	0.43	2.52	9	1
1:A:26:TYR:CE1	1:A:43:LEU:CD1	0.43	3.02	14	1
1:A:78:ILE:HB	1:A:107:ILE:CD1	0.42	2.33	19	2
1:A:109:ILE:O	1:A:111:GLU:N	0.42	2.52	6	1
1:A:87:LYS:O	1:A:88:TYR:HB2	0.42	2.14	7	1
1:A:48:GLN:NE2	1:A:87:LYS:CD	0.42	2.82	8	1
1:A:25:ALA:HA	1:A:28:ASN:ND2	0.42	2.29	10	1
1:A:12:ASN:C	1:A:14:ASP:H	0.42	2.22	12	1
1:A:23:LEU:HD11	1:A:73:LEU:HG	0.42	1.90	13	1
1:A:91:THR:CB	1:A:95:ARG:HB3	0.42	2.44	15	1
1:A:42:GLU:O	1:A:46:HIS:N	0.42	2.52	20	1
1:A:84:LEU:HD11	1:A:95:ARG:HG2	0.42	1.91	1	1
1:A:81:TRP:O	1:A:85:THR:HB	0.42	2.14	3	2
1:A:72:HIS:O	1:A:76:ASN:N	0.42	2.52	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:VAL:HG21	1:A:79:GLU:CG	0.42	2.45	6	1
1:A:84:LEU:C	1:A:91:THR:HG23	0.42	2.39	15	1
1:A:50:ALA:HB2	1:A:94:TRP:NE1	0.42	2.28	18	1
1:A:30:VAL:HA	1:A:37:SER:CB	0.42	2.44	15	1
1:A:36:CYS:C	1:A:38:PRO:HD2	0.42	2.40	17	1
1:A:84:LEU:CD1	1:A:95:ARG:CG	0.42	2.98	19	1
1:A:88:TYR:CG	1:A:95:ARG:NH2	0.42	2.87	19	1
1:A:10:ASN:ND2	1:A:13:LEU:CD1	0.42	2.77	20	1
1:A:64:LYS:O	1:A:68:ARG:HB2	0.42	2.14	4	2
1:A:73:LEU:HB3	1:A:80:ILE:CD1	0.42	2.42	6	2
1:A:43:LEU:O	1:A:47:LEU:O	0.42	2.37	7	1
1:A:42:GLU:O	1:A:46:HIS:CG	0.42	2.72	10	1
1:A:26:TYR:OH	1:A:40:GLY:CA	0.42	2.68	12	1
1:A:73:LEU:CB	1:A:80:ILE:CD1	0.42	2.94	3	2
1:A:87:LYS:CE	1:A:88:TYR:CZ	0.42	3.02	3	1
1:A:24:VAL:HG13	1:A:79:GLU:OE2	0.42	2.14	4	1
1:A:80:ILE:O	1:A:83:GLU:CG	0.42	2.68	4	1
1:A:11:ILE:HD11	1:A:46:HIS:CD2	0.42	2.50	6	1
1:A:28:ASN:CG	1:A:32:GLU:CG	0.42	2.92	18	1
1:A:87:LYS:CE	1:A:88:TYR:OH	0.42	2.68	3	1
1:A:92:GLY:HA2	1:A:95:ARG:CG	0.42	2.45	5	1
1:A:74:ILE:CG2	1:A:107:ILE:CG2	0.42	2.97	9	2
1:A:85:THR:HB	1:A:95:ARG:NH2	0.42	2.30	11	1
1:A:23:LEU:CD2	1:A:73:LEU:CD2	0.42	2.98	15	1
1:A:26:TYR:OH	1:A:40:GLY:HA3	0.42	2.15	15	1
1:A:73:LEU:HA	1:A:76:ASN:HB3	0.42	1.91	19	1
1:A:44:LYS:O	1:A:48:GLN:CB	0.42	2.68	20	1
1:A:47:LEU:CD2	1:A:47:LEU:N	0.42	2.82	20	1
1:A:70:ILE:HG21	1:A:98:TYR:CE1	0.42	2.48	2	1
1:A:50:ALA:C	1:A:51:ILE:CG1	0.42	2.91	7	2
1:A:49:ASP:HB2	1:A:88:TYR:CD1	0.42	2.50	6	1
1:A:85:THR:O	1:A:88:TYR:CG	0.42	2.72	11	1
1:A:81:TRP:HA	1:A:84:LEU:HB2	0.42	1.90	13	1
1:A:109:ILE:HG13	1:A:110:PRO:HD2	0.42	1.92	19	1
1:A:91:THR:HG21	1:A:94:TRP:CD1	0.42	2.50	2	1
1:A:8:TYR:CE2	1:A:64:LYS:CG	0.42	3.02	6	1
1:A:49:ASP:O	1:A:51:ILE:CD1	0.42	2.68	16	1
1:A:20:LYS:CD	1:A:20:LYS:N	0.42	2.82	20	1
1:A:26:TYR:CZ	1:A:38:PRO:O	0.42	2.73	17	1
1:A:11:ILE:CG2	1:A:46:HIS:CD2	0.42	3.03	20	1
1:A:20:LYS:HA	1:A:23:LEU:HG	0.41	1.92	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:ASP:CG	1:A:88:TYR:CD2	0.41	2.98	3	1
1:A:23:LEU:HD21	1:A:76:ASN:CG	0.41	2.41	4	1
1:A:72:HIS:CD2	1:A:76:ASN:OD1	0.41	2.73	4	1
1:A:11:ILE:CG2	1:A:13:LEU:CD1	0.41	2.98	9	1
1:A:47:LEU:O	1:A:47:LEU:HG	0.41	2.15	10	2
1:A:73:LEU:HB3	1:A:80:ILE:CG1	0.41	2.45	11	1
1:A:47:LEU:CD1	1:A:50:ALA:N	0.41	2.83	18	1
1:A:83:GLU:HG3	1:A:84:LEU:HD23	0.41	1.90	5	2
1:A:78:ILE:CD1	1:A:109:ILE:N	0.41	2.83	13	1
1:A:46:HIS:CD2	1:A:47:LEU:CD2	0.41	3.03	15	1
1:A:19:ASN:ND2	1:A:21:ARG:HG2	0.41	2.29	16	1
1:A:61:ASN:O	1:A:65:GLY:N	0.41	2.52	2	1
1:A:49:ASP:CG	1:A:94:TRP:CD1	0.41	2.98	9	1
1:A:49:ASP:OD2	1:A:88:TYR:CE2	0.41	2.74	9	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:46:HIS:CE1	0.41	3.03	14	1
1:A:46:HIS:CG	1:A:47:LEU:HD22	0.41	2.50	15	1
1:A:23:LEU:CB	1:A:73:LEU:HD12	0.41	2.46	16	1
1:A:76:ASN:O	1:A:77:GLU:CG	0.41	2.69	14	3
1:A:15:GLU:O	1:A:22:LEU:CB	0.41	2.67	8	1
1:A:46:HIS:C	1:A:47:LEU:HD22	0.41	2.41	9	1
1:A:72:HIS:O	1:A:76:ASN:HB2	0.41	2.16	13	1
1:A:66:ALA:O	1:A:70:ILE:N	0.41	2.52	16	1
1:A:80:ILE:HG23	1:A:84:LEU:CD2	0.41	2.45	18	1
1:A:31:MET:HE2	1:A:33:ARG:CG	0.41	2.44	20	1
1:A:51:ILE:O	1:A:94:TRP:NE1	0.41	2.54	4	1
1:A:96:LYS:O	1:A:100:ASP:N	0.41	2.53	8	1
1:A:88:TYR:O	1:A:89:ASP:CB	0.41	2.68	15	1
1:A:10:ASN:O	1:A:46:HIS:CD2	0.41	2.73	7	2
1:A:11:ILE:HG22	1:A:42:GLU:CG	0.41	2.46	7	1
1:A:89:ASP:CB	1:A:90:PRO:HD3	0.41	2.45	8	1
1:A:17:LEU:HD13	1:A:73:LEU:CD1	0.41	2.45	15	1
1:A:74:ILE:HA	1:A:80:ILE:HD13	0.41	1.93	16	1
1:A:66:ALA:O	1:A:69:VAL:HB	0.41	2.15	19	1
1:A:67:TYR:CD2	1:A:98:TYR:CE2	0.41	3.09	19	1
1:A:47:LEU:CD2	1:A:88:TYR:CZ	0.41	3.03	1	1
1:A:78:ILE:O	1:A:109:ILE:CD1	0.41	2.68	2	1
1:A:30:VAL:CG1	1:A:31:MET:N	0.41	2.83	3	1
1:A:67:TYR:HA	1:A:98:TYR:CE1	0.41	2.51	6	2
1:A:16:ILE:HD13	1:A:43:LEU:CD2	0.41	2.41	14	1
1:A:87:LYS:HD3	1:A:88:TYR:CE1	0.41	2.51	18	1
1:A:20:LYS:HD3	1:A:21:ARG:N	0.41	2.31	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:ILE:CD1	1:A:81:TRP:NE1	0.41	2.81	20	1
1:A:75:LYS:HE2	1:A:107:ILE:HG21	0.41	1.93	1	1
1:A:26:TYR:OH	1:A:43:LEU:HD11	0.41	2.15	4	2
1:A:67:TYR:N	1:A:98:TYR:OH	0.41	2.54	5	1
1:A:30:VAL:CB	1:A:83:GLU:HA	0.41	2.46	6	1
1:A:23:LEU:HD11	1:A:73:LEU:CD1	0.41	2.45	13	1
1:A:87:LYS:C	1:A:89:ASP:N	0.41	2.79	13	1
1:A:8:TYR:CE1	1:A:10:ASN:OD1	0.41	2.74	15	1
1:A:41:LYS:CD	1:A:45:GLU:CG	0.41	2.99	16	1
1:A:69:VAL:O	1:A:73:LEU:HD13	0.41	2.16	1	1
1:A:15:GLU:O	1:A:22:LEU:CD2	0.41	2.67	2	1
1:A:77:GLU:O	1:A:79:GLU:CG	0.41	2.69	3	1
1:A:13:LEU:HD13	1:A:65:GLY:O	0.41	2.16	4	1
1:A:8:TYR:CE2	1:A:64:LYS:HG3	0.41	2.51	6	1
1:A:93:ASN:O	1:A:94:TRP:CG	0.41	2.74	7	1
1:A:83:GLU:OE2	1:A:87:LYS:NZ	0.41	2.54	9	1
1:A:87:LYS:C	1:A:88:TYR:CD1	0.41	2.99	9	1
1:A:51:ILE:HD13	1:A:84:LEU:HD11	0.41	1.93	11	1
1:A:26:TYR:O	1:A:37:SER:OG	0.41	2.39	15	1
1:A:33:ARG:O	1:A:36:CYS:SG	0.41	2.79	17	1
1:A:11:ILE:HB	1:A:46:HIS:CE1	0.41	2.50	18	1
1:A:87:LYS:HB3	1:A:88:TYR:CE1	0.41	2.51	2	1
1:A:93:ASN:O	1:A:94:TRP:CE3	0.41	2.74	2	1
1:A:43:LEU:O	1:A:47:LEU:HB3	0.41	2.16	3	1
1:A:16:ILE:HD11	1:A:43:LEU:HD21	0.41	1.92	4	1
1:A:84:LEU:N	1:A:84:LEU:CD2	0.41	2.83	19	2
1:A:16:ILE:HD13	1:A:26:TYR:HD2	0.41	1.68	11	1
1:A:78:ILE:HG12	1:A:109:ILE:HA	0.41	1.93	12	1
1:A:78:ILE:HB	1:A:107:ILE:CG1	0.41	2.46	15	1
1:A:49:ASP:OD1	1:A:49:ASP:N	0.41	2.53	18	1
1:A:84:LEU:CD1	1:A:95:ARG:NH1	0.41	2.84	20	1
1:A:10:ASN:ND2	1:A:13:LEU:CB	0.40	2.85	1	1
1:A:75:LYS:CE	1:A:107:ILE:HG21	0.40	2.46	1	1
1:A:29:CYS:SG	1:A:37:SER:N	0.40	2.94	4	1
1:A:37:SER:HB2	1:A:38:PRO:CD	0.40	2.46	4	1
1:A:23:LEU:CD1	1:A:72:HIS:CD2	0.40	3.04	5	1
1:A:49:ASP:OD2	1:A:88:TYR:CD2	0.40	2.74	6	1
1:A:108:VAL:O	1:A:110:PRO:HD3	0.40	2.16	20	2
1:A:70:ILE:O	1:A:74:ILE:CD1	0.40	2.69	10	1
1:A:61:ASN:OD1	1:A:61:ASN:N	0.40	2.54	11	1
1:A:43:LEU:O	1:A:46:HIS:CD2	0.40	2.73	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:HIS:C	1:A:47:LEU:CD2	0.40	2.94	15	1
1:A:29:CYS:HB3	1:A:38:PRO:CG	0.40	2.46	17	1
1:A:30:VAL:CG1	1:A:83:GLU:HA	0.40	2.46	6	1
1:A:47:LEU:HD12	1:A:51:ILE:CD1	0.40	2.46	8	1
1:A:67:TYR:CE2	1:A:97:LYS:HG2	0.40	2.52	1	1
1:A:70:ILE:O	1:A:74:ILE:CB	0.40	2.70	2	1
1:A:31:MET:O	1:A:32:GLU:HB2	0.40	2.15	13	1
1:A:26:TYR:CE1	1:A:83:GLU:OE2	0.40	2.74	17	1
1:A:83:GLU:HG3	1:A:84:LEU:CD2	0.40	2.46	18	1
1:A:81:TRP:CZ2	1:A:98:TYR:O	0.40	2.74	19	1
1:A:84:LEU:HD11	1:A:95:ARG:NH1	0.40	2.31	20	1
1:A:91:THR:HG23	1:A:92:GLY:N	0.40	2.32	2	1
1:A:47:LEU:CD1	1:A:66:ALA:HB1	0.40	2.46	8	1
1:A:48:GLN:OE1	1:A:87:LYS:CE	0.40	2.70	10	1
1:A:70:ILE:HG22	1:A:74:ILE:HD12	0.40	1.94	19	1
1:A:92:GLY:C	1:A:94:TRP:N	0.40	2.79	13	1
1:A:23:LEU:O	1:A:27:VAL:CG2	0.40	2.68	16	1
1:A:70:ILE:HB	1:A:98:TYR:CE2	0.40	2.51	19	1

6.3 Torsion angles ⓘ

6.3.1 Protein backbone ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	96/112 (86%)	73±5 (76±5%)	14±3 (15±3%)	9±3 (9±3%)	1	10
All	All	1920/2240 (86%)	1453 (76%)	285 (15%)	182 (9%)	1	10

All 29 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	77	GLU	20
1	A	78	ILE	19
1	A	51	ILE	13
1	A	8	TYR	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	60	GLU	11
1	A	47	LEU	10
1	A	32	GLU	10
1	A	35	LYS	9
1	A	107	ILE	9
1	A	39	GLU	7
1	A	9	ASP	6
1	A	61	ASN	6
1	A	93	ASN	6
1	A	40	GLY	6
1	A	50	ALA	5
1	A	11	ILE	5
1	A	10	ASN	3
1	A	49	ASP	3
1	A	88	TYR	3
1	A	89	ASP	3
1	A	34	GLY	3
1	A	13	LEU	2
1	A	31	MET	2
1	A	92	GLY	2
1	A	94	TRP	2
1	A	48	GLN	2
1	A	37	SER	2
1	A	110	PRO	1
1	A	80	ILE	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	84/98 (86%)	55±4 (65±4%)	29±4 (35±4%)	1	10
All	All	1680/1960 (86%)	1094 (65%)	586 (35%)	1	10

All 76 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	19	ASN	20
1	A	101	ARG	20
1	A	11	ILE	18
1	A	77	GLU	18
1	A	78	ILE	18
1	A	20	LYS	18
1	A	74	ILE	17
1	A	70	ILE	17
1	A	75	LYS	16
1	A	42	GLU	15
1	A	82	ARG	15
1	A	35	LYS	13
1	A	97	LYS	13
1	A	103	LYS	13
1	A	112	GLU	13
1	A	23	LEU	12
1	A	81	TRP	12
1	A	91	THR	11
1	A	51	ILE	11
1	A	22	LEU	10
1	A	88	TYR	10
1	A	96	LYS	10
1	A	99	GLU	10
1	A	63	GLU	10
1	A	13	LEU	9
1	A	37	SER	9
1	A	45	GLU	9
1	A	87	LYS	9
1	A	31	MET	9
1	A	84	LEU	9
1	A	41	LYS	8
1	A	44	LYS	8
1	A	83	GLU	8
1	A	9	ASP	8
1	A	32	GLU	8
1	A	47	LEU	8
1	A	95	ARG	8
1	A	39	GLU	8
1	A	62	GLN	7
1	A	48	GLN	7
1	A	14	ASP	6
1	A	29	CYS	6
1	A	33	ARG	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	36	CYS	6
1	A	49	ASP	6
1	A	43	LEU	6
1	A	15	GLU	5
1	A	21	ARG	5
1	A	26	TYR	5
1	A	61	ASN	5
1	A	89	ASP	5
1	A	111	GLU	4
1	A	100	ASP	4
1	A	64	LYS	4
1	A	79	GLU	4
1	A	93	ASN	4
1	A	68	ARG	3
1	A	76	ASN	3
1	A	109	ILE	3
1	A	30	VAL	2
1	A	85	THR	2
1	A	16	ILE	2
1	A	69	VAL	2
1	A	94	TRP	2
1	A	46	HIS	2
1	A	73	LEU	2
1	A	8	TYR	1
1	A	10	ASN	1
1	A	107	ILE	1
1	A	12	ASN	1
1	A	72	HIS	1
1	A	80	ILE	1
1	A	27	VAL	1
1	A	71	GLU	1
1	A	98	TYR	1
1	A	60	GLU	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

6.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains ⓘ

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

6.5 Carbohydrates [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