



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 26, 2026 – 10:46 AM UTC

PDB ID : 1KRW / pdb_00001krw
Title : SOLUTION STRUCTURE AND BACKBONE DYNAMICS OF BERYLLO
FLUORIDE-ACTIVATED NTRC RECEIVER DOMAIN
Authors : Hastings, C.A.; Lee, S.-Y.; Cho, H.S.; Yan, D.; Kustu, S.; Wemmer, D.E.
Deposited on : 2002-01-10

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

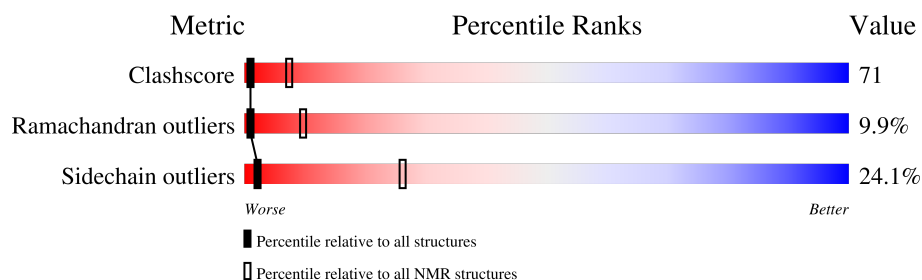
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

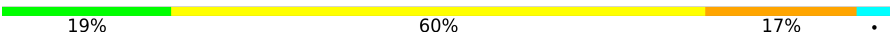
The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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	124	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 26 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 2 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:3-A:121 (119)	0.59	1

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

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

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

Cluster number	Models
1	1, 2, 3, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 12, 14, 15, 16, 17, 19, 20, 23, 24
2	4, 11, 13, 18, 21, 26
3	22, 25

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1915 atoms, of which 960 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I).

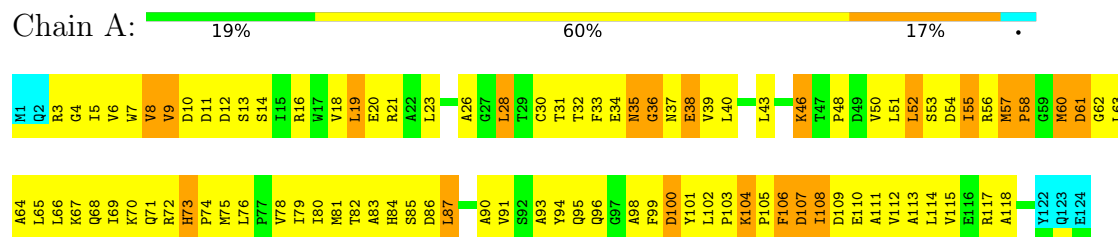
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	124	Total	C	H	N	O	S	0
			1915	606	960	162	181	6	

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: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)

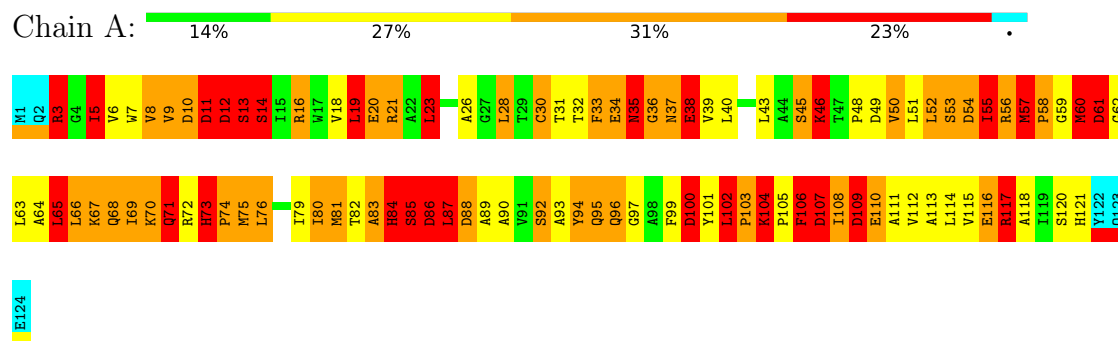


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

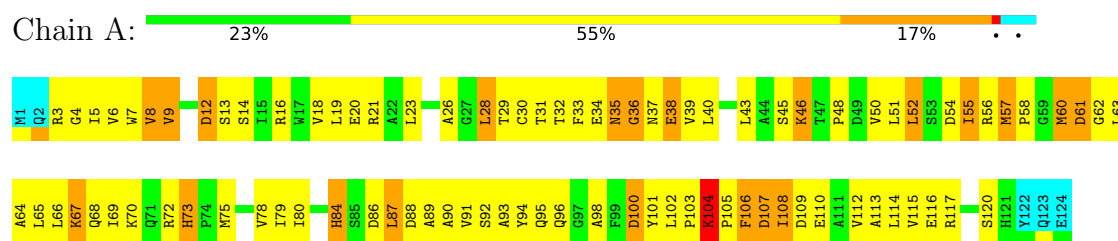
4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



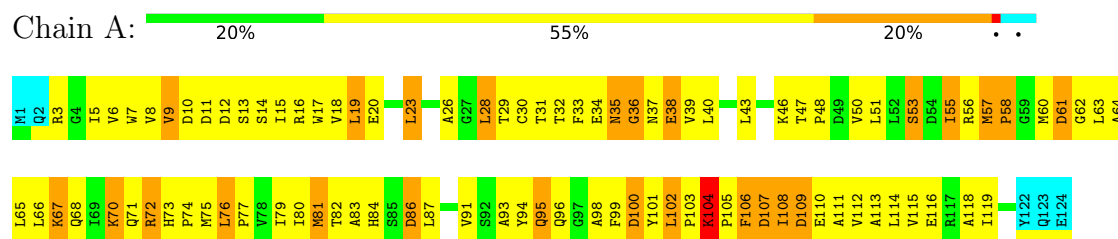
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



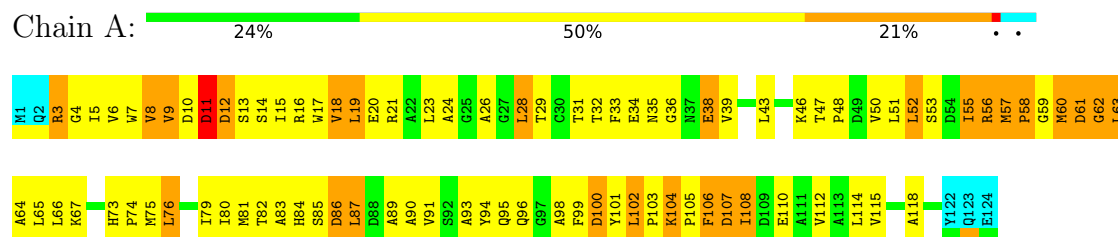
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



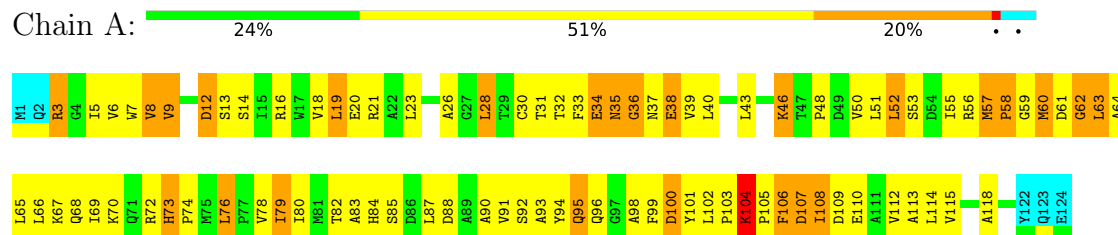
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



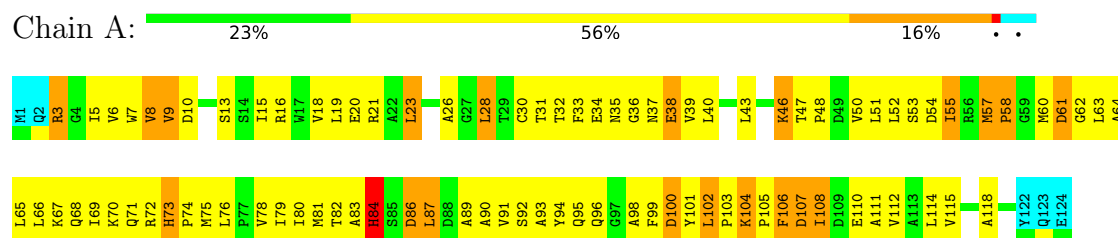
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



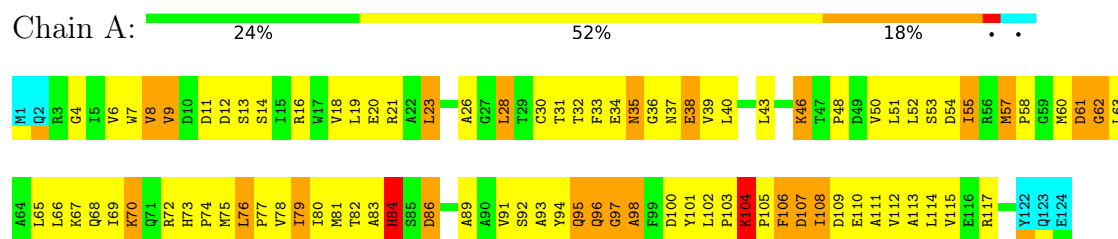
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



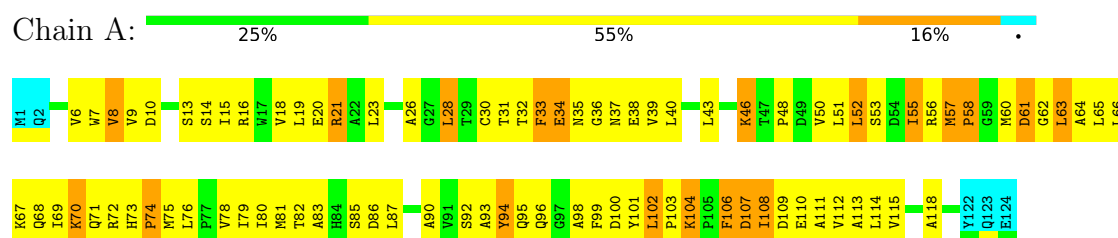
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



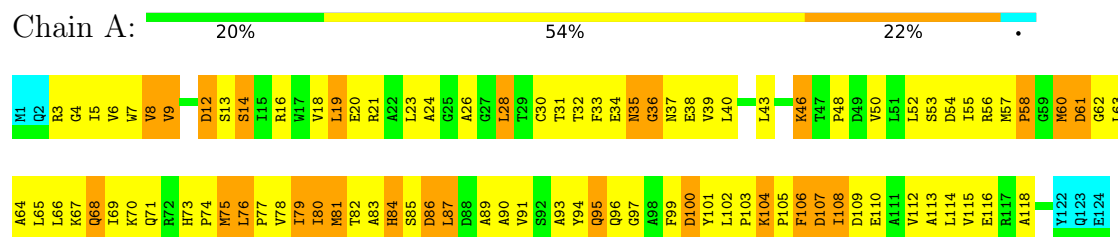
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



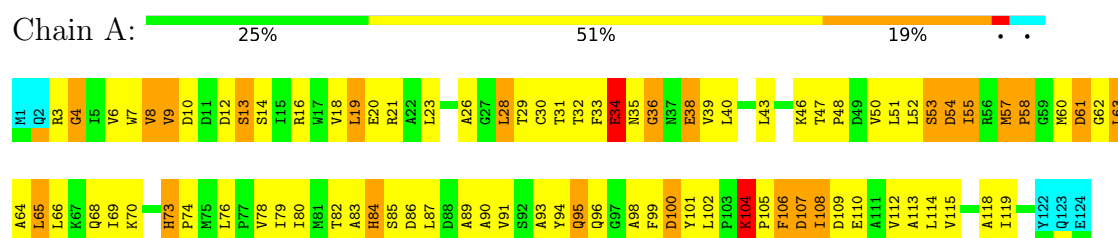
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



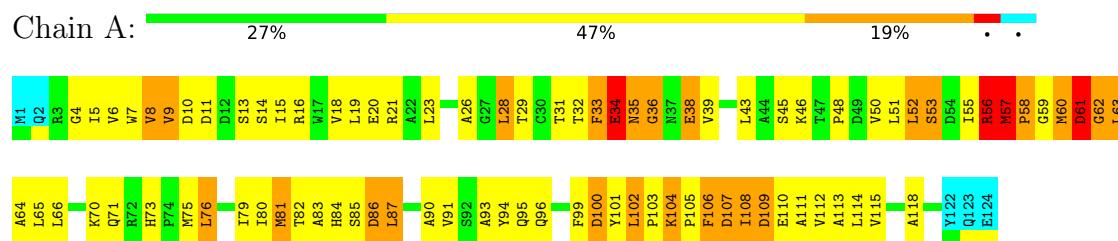
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



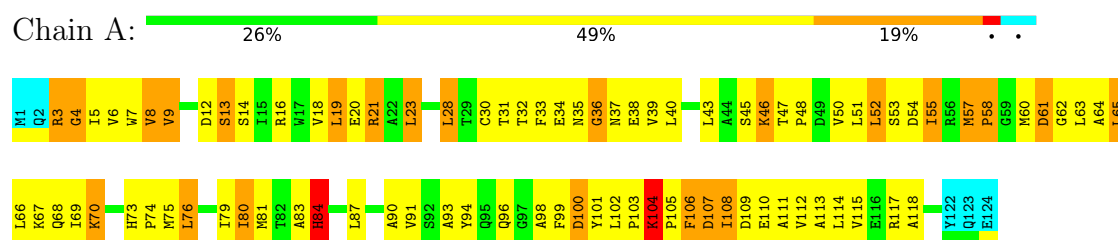
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



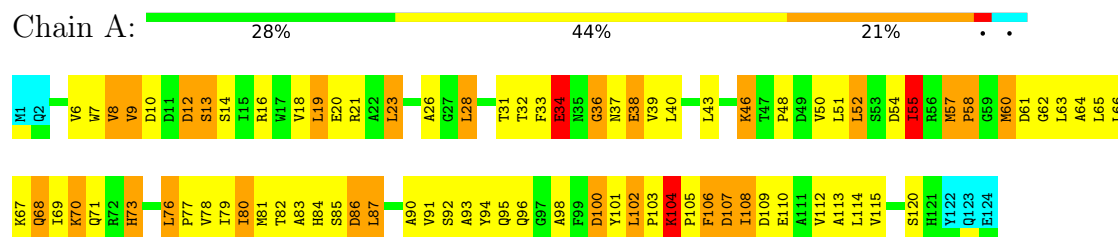
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



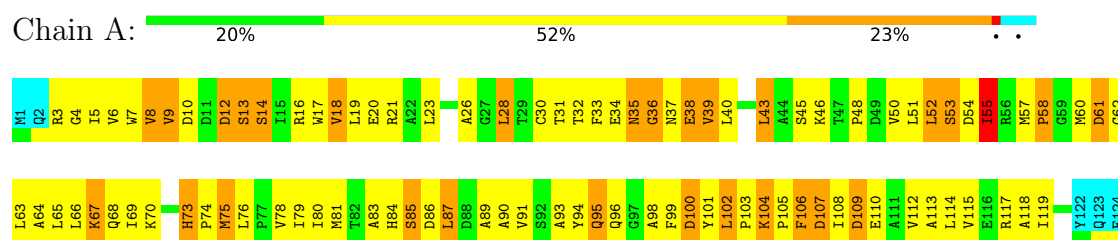
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



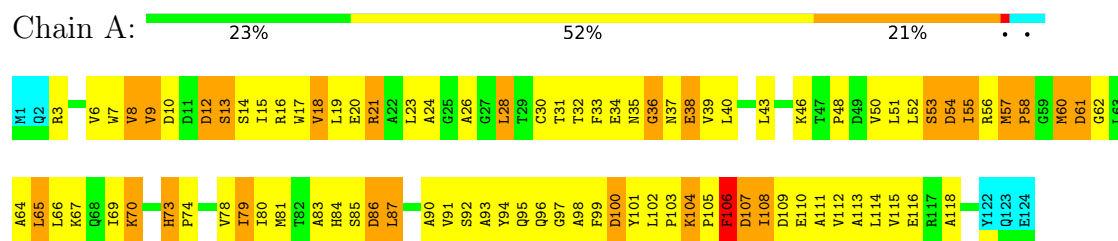
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



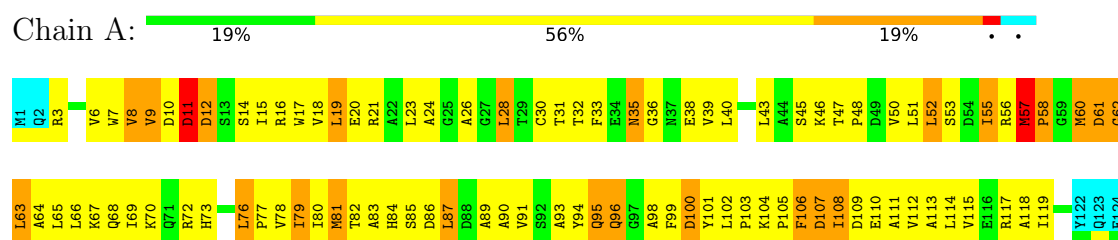
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



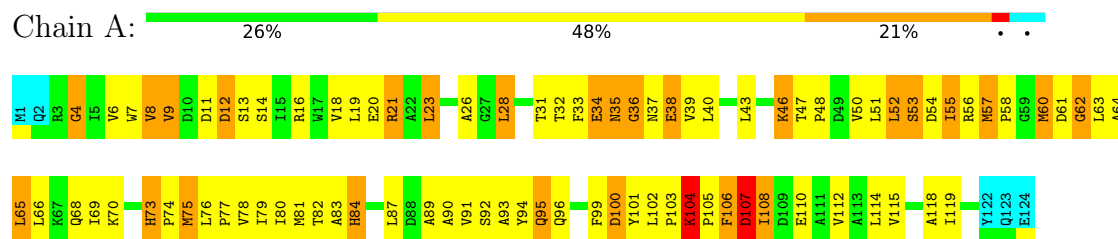
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



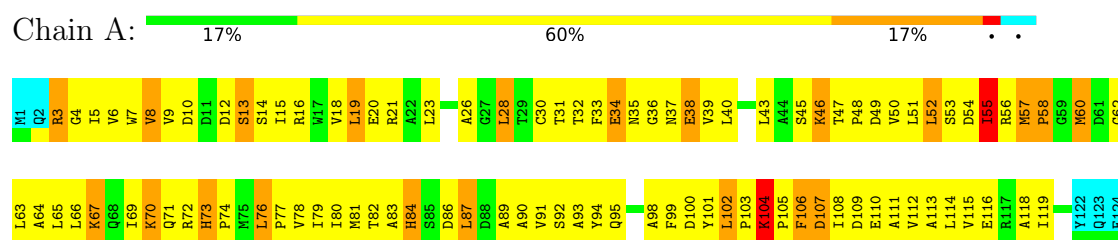
4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



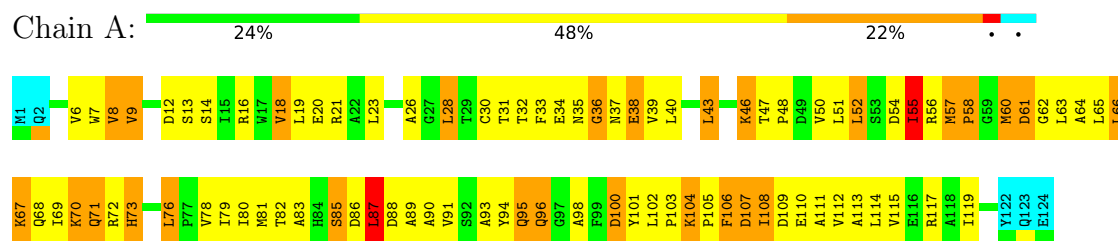
4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



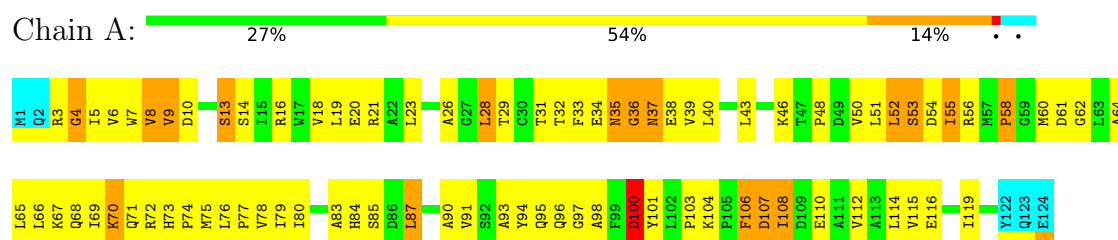
4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



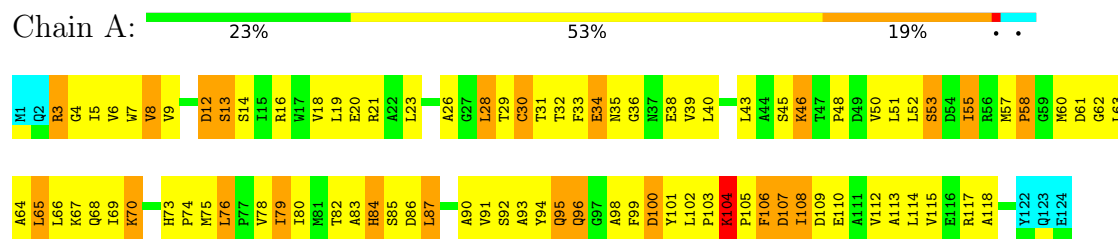
4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



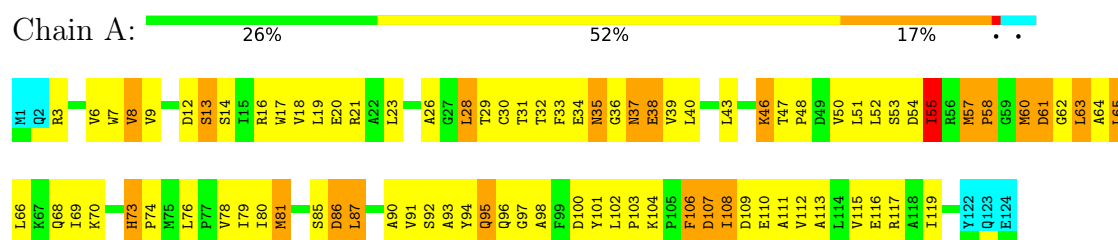
4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



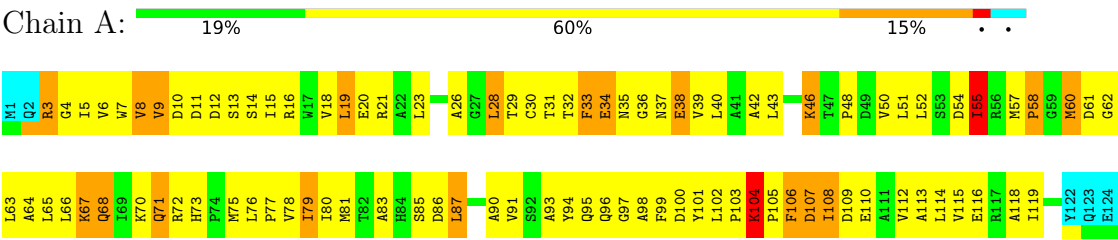
4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



4.2.26 Score per residue for model 26

● Molecule 1: NITROGEN REGULATION PROTEIN NR(I)



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 100 calculated structures, 26 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
DYANA	structure solution	1.5
X-PLOR	structure solution	CNS 1.0
X-PLOR	refinement	CNS 1.0

No chemical shift data was provided.

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	0.95±2.89	9±47/926 (1.0± 5.1%)	1.03±1.80	8±42/1262 (0.7± 3.4%)
All	All	3.04	244/24076 (1.0%)	2.07	220/32812 (0.7%)

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	84	HIS	CG-ND1	-82.82	0.47	1.38	1	1
1	A	73	HIS	CG-ND1	-82.11	0.47	1.38	1	1
1	A	117	ARG	CZ-NH1	-76.61	0.25	1.32	1	1
1	A	84	HIS	CE1-NE2	-75.36	0.57	1.32	1	1
1	A	85	SER	C-O	-74.08	0.30	1.24	1	1
1	A	56	ARG	CZ-NH1	-73.17	0.30	1.32	1	1
1	A	72	ARG	CZ-NH1	-72.80	0.30	1.32	1	1
1	A	16	ARG	CZ-NH1	-66.93	0.39	1.32	1	1
1	A	56	ARG	NE-CZ	-66.82	0.59	1.33	1	1
1	A	3	ARG	CZ-NH1	-63.46	0.43	1.32	1	1
1	A	35	ASN	CG-OD1	-56.11	0.17	1.23	1	1
1	A	54	ASP	C-O	-55.99	0.48	1.24	1	1
1	A	73	HIS	CE1-NE2	-54.74	0.77	1.32	1	1
1	A	54	ASP	CG-OD1	-54.63	0.21	1.25	1	1
1	A	84	HIS	C-O	-54.05	0.55	1.24	1	1
1	A	73	HIS	CD2-NE2	-51.75	0.81	1.37	1	1
1	A	3	ARG	NE-CZ	-51.59	0.76	1.33	1	1
1	A	100	ASP	CG-OD1	-50.15	0.30	1.25	1	1
1	A	85	SER	CB-OG	-47.91	0.46	1.42	1	1
1	A	84	HIS	CD2-NE2	-47.62	0.85	1.37	1	1
1	A	86	ASP	CG-OD1	-47.12	0.35	1.25	1	1
1	A	38	GLU	CD-OE2	-46.48	0.37	1.25	1	1
1	A	3	ARG	CZ-NH2	-46.37	0.73	1.33	1	1
1	A	109	ASP	CG-OD2	-46.27	0.37	1.25	1	1
1	A	38	GLU	CD-OE1	-46.11	0.37	1.25	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	117	ARG	CZ-NH2	-45.54	0.74	1.33	1	1
1	A	3	ARG	CD-NE	-45.42	0.82	1.46	1	1
1	A	21	ARG	CZ-NH2	-45.41	0.74	1.33	1	1
1	A	21	ARG	CD-NE	-45.05	0.83	1.46	1	1
1	A	54	ASP	CG-OD2	-44.93	0.40	1.25	1	1
1	A	88	ASP	CG-OD2	-44.66	0.40	1.25	1	1
1	A	117	ARG	CD-NE	-42.85	0.86	1.46	1	1
1	A	57	MET	CA-CB	-42.74	0.85	1.53	1	1
1	A	16	ARG	CZ-NH2	-42.34	0.78	1.33	1	1
1	A	21	ARG	CZ-NH1	-42.16	0.73	1.32	1	1
1	A	21	ARG	NE-CZ	-42.15	0.86	1.33	1	1
1	A	11	ASP	CG-OD1	-42.10	0.45	1.25	1	1
1	A	56	ARG	CZ-NH2	-42.07	0.78	1.33	1	1
1	A	117	ARG	NE-CZ	-41.69	0.87	1.33	1	1
1	A	88	ASP	CG-OD1	-41.52	0.46	1.25	1	1
1	A	56	ARG	CD-NE	-41.32	0.88	1.46	1	1
1	A	10	ASP	CG-OD1	-41.15	0.47	1.25	1	1
1	A	54	ASP	C-N	-40.90	0.78	1.33	1	1
1	A	106	PHE	CG-CD2	-40.05	0.54	1.38	1	1
1	A	100	ASP	CG-OD2	-39.89	0.49	1.25	1	1
1	A	12	ASP	CG-OD1	-38.95	0.51	1.25	1	1
1	A	16	ARG	CD-NE	-38.76	0.92	1.46	1	1
1	A	74	PRO	C-O	-38.62	0.77	1.24	1	1
1	A	12	ASP	CG-OD2	-38.57	0.52	1.25	1	1
1	A	35	ASN	CG-ND2	-38.57	0.52	1.33	1	1
1	A	96	GLN	CD-OE1	-38.11	0.51	1.23	1	1
1	A	68	GLN	CD-NE2	-37.54	0.54	1.33	1	1
1	A	10	ASP	CG-OD2	-37.42	0.54	1.25	1	1
1	A	13	SER	CB-OG	-37.26	0.67	1.42	1	1
1	A	109	ASP	CG-OD1	-36.77	0.55	1.25	1	1
1	A	116	GLU	CD-OE2	-36.02	0.56	1.25	1	1
1	A	61	ASP	CG-OD1	-36.00	0.56	1.25	1	1
1	A	81	MET	SD-CE	-35.59	0.90	1.79	1	1
1	A	110	GLU	CD-OE1	-35.17	0.58	1.25	1	1
1	A	68	GLN	CD-OE1	-35.02	0.57	1.23	1	1
1	A	65	LEU	CB-CG	-34.56	0.84	1.53	1	1
1	A	84	HIS	CG-CD2	-34.39	0.98	1.35	1	1
1	A	60	MET	SD-CE	-34.07	0.94	1.79	1	1
1	A	86	ASP	CG-OD2	-33.88	0.60	1.25	1	1
1	A	104	LYS	CE-NZ	-33.78	0.48	1.49	1	1
1	A	72	ARG	NE-CZ	-33.30	0.96	1.33	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	11	ASP	CG-OD2	-33.07	0.62	1.25	1	1
1	A	94	TYR	CG-CD2	-32.97	0.70	1.39	1	1
1	A	57	MET	SD-CE	-32.90	0.97	1.79	1	1
1	A	65	LEU	CG-CD1	-32.77	0.44	1.52	1	1
1	A	85	SER	C-N	-32.69	0.87	1.33	1	1
1	A	110	GLU	CD-OE2	-32.66	0.63	1.25	1	1
1	A	106	PHE	CG-CD1	-32.21	0.71	1.38	1	1
1	A	94	TYR	CG-CD1	-31.49	0.73	1.39	1	1
1	A	96	GLN	CG-CD	-31.45	0.73	1.52	1	1
1	A	116	GLU	CD-OE1	-31.37	0.65	1.25	1	1
1	A	54	ASP	CB-CG	-31.12	0.74	1.52	1	1
1	A	23	LEU	CG-CD1	-30.92	0.50	1.52	1	1
1	A	57	MET	CG-SD	-30.85	1.03	1.80	1	1
1	A	10	ASP	C-O	-30.83	0.90	1.23	1	1
1	A	61	ASP	CG-OD2	-30.69	0.67	1.25	1	1
1	A	75	MET	SD-CE	-30.58	1.03	1.79	1	1
1	A	100	ASP	CB-CG	-29.61	0.78	1.52	1	1
1	A	94	TYR	CE1-CZ	-29.46	0.67	1.38	1	1
1	A	35	ASN	CB-CG	-28.74	0.80	1.52	1	1
1	A	20	GLU	CD-OE1	-28.59	0.71	1.25	1	1
1	A	72	ARG	CZ-NH2	-28.48	0.96	1.33	1	1
1	A	106	PHE	CE1-CZ	-28.38	0.53	1.38	1	1
1	A	94	TYR	CE2-CZ	-28.12	0.70	1.38	1	1
1	A	35	ASN	C-O	-27.72	0.89	1.24	1	1
1	A	30	CYS	CB-SG	-27.56	0.90	1.81	1	1
1	A	95	GLN	CD-OE1	-27.19	0.71	1.23	1	1
1	A	85	SER	CA-CB	-27.18	1.07	1.53	1	1
1	A	92	SER	CB-OG	-26.80	0.88	1.42	1	1
1	A	19	LEU	CG-CD1	-26.76	0.64	1.52	1	1
1	A	76	LEU	CG-CD1	-26.71	0.64	1.52	1	1
1	A	76	LEU	CG-CD2	-26.15	0.66	1.52	1	1
1	A	84	HIS	ND1-CE1	-25.92	1.06	1.32	1	1
1	A	72	ARG	CD-NE	-25.84	1.10	1.46	1	1
1	A	57	MET	CB-CG	-25.57	0.75	1.52	1	1
1	A	84	HIS	C-N	-25.29	0.98	1.33	1	1
1	A	84	HIS	CB-CG	-25.13	1.15	1.50	1	1
1	A	74	PRO	C-N	-24.94	0.98	1.33	1	1
1	A	16	ARG	NE-CZ	-24.78	1.05	1.33	1	1
1	A	20	GLU	CD-OE2	-24.64	0.78	1.25	1	1
1	A	67	LYS	CE-NZ	-24.61	0.75	1.49	1	1
1	A	56	ARG	CB-CG	-24.52	0.78	1.52	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	97	GLY	C-O	-24.39	0.91	1.23	1	1
1	A	34	GLU	CG-CD	-24.17	0.91	1.52	1	1
1	A	38	GLU	CG-CD	-23.92	0.92	1.52	1	1
1	A	65	LEU	CG-CD2	-23.46	0.75	1.52	1	1
1	A	73	HIS	CB-CG	-22.90	1.18	1.50	1	1
1	A	106	PHE	CE2-CZ	-22.89	0.69	1.38	1	1
1	A	66	LEU	CG-CD1	-22.65	0.77	1.52	1	1
1	A	97	GLY	C-N	-22.58	1.02	1.33	1	1
1	A	46	LYS	CE-NZ	-22.50	0.81	1.49	1	1
1	A	117	ARG	CB-CG	-22.25	0.85	1.52	1	1
1	A	74	PRO	CA-CB	-22.21	1.21	1.53	1	1
1	A	121	HIS	CE1-NE2	-21.01	1.11	1.32	1	1
1	A	23	LEU	CG-CD2	-20.99	0.83	1.52	1	1
1	A	19	LEU	CG-CD2	-20.86	0.83	1.52	1	1
1	A	33	PHE	CG-CD2	-20.70	0.95	1.38	1	1
1	A	70	LYS	CE-NZ	-20.64	0.87	1.49	1	1
1	A	37	ASN	CG-OD1	-20.62	0.84	1.23	1	1
1	A	33	PHE	CG-CD1	-20.54	0.95	1.38	1	1
1	A	74	PRO	N-CD	-20.36	1.19	1.47	1	1
1	A	59	GLY	C-O	-20.00	0.96	1.23	1	1
1	A	83	ALA	C-O	-19.99	0.95	1.24	1	1
1	A	66	LEU	CG-CD2	-19.47	0.88	1.52	1	1
1	A	58	PRO	C-O	-19.36	0.98	1.24	1	1
1	A	73	HIS	ND1-CE1	-19.33	1.13	1.32	1	1
1	A	96	GLN	CD-NE2	-19.15	0.93	1.33	1	1
1	A	73	HIS	C-O	-18.79	1.00	1.24	1	1
1	A	67	LYS	CD-CE	-18.61	0.96	1.52	1	1
1	A	73	HIS	CG-CD2	-18.55	1.15	1.35	1	1
1	A	10	ASP	C-N	-18.49	1.07	1.33	1	1
1	A	35	ASN	C-N	-18.14	1.07	1.33	1	1
1	A	45	SER	CB-OG	-17.91	1.06	1.42	1	1
1	A	88	ASP	CB-CG	-17.69	1.07	1.52	1	1
1	A	120	SER	CB-OG	-17.57	1.07	1.42	1	1
1	A	75	MET	CG-SD	-17.52	1.36	1.80	1	1
1	A	73	HIS	C-N	-17.32	1.13	1.34	1	1
1	A	87	LEU	CG-CD1	-17.07	0.96	1.52	1	1
1	A	5	ILE	CG1-CD1	-16.61	0.86	1.51	1	1
1	A	104	LYS	CD-CE	-16.37	1.03	1.52	1	1
1	A	12	ASP	CB-CG	-16.34	1.11	1.52	1	1
1	A	60	MET	CG-SD	-16.25	1.40	1.80	1	1
1	A	56	ARG	CG-CD	-16.05	1.04	1.52	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	34	GLU	CD-OE1	-15.88	0.95	1.25	1	1
1	A	55	ILE	C-O	-15.83	1.05	1.24	1	1
1	A	10	ASP	CB-CG	-15.83	1.12	1.52	1	1
1	A	107	ASP	CG-OD2	-15.77	0.95	1.25	1	1
1	A	50	VAL	C-O	-15.31	1.08	1.23	1	1
1	A	109	ASP	CB-CG	-15.22	1.14	1.52	1	1
1	A	61	ASP	C-O	-15.16	1.04	1.24	1	1
1	A	68	GLN	CG-CD	-15.12	1.14	1.52	1	1
1	A	95	GLN	CG-CD	-15.05	1.14	1.52	1	1
1	A	86	ASP	CB-CG	-14.92	1.14	1.52	1	1
1	A	84	HIS	CA-CB	-14.91	1.28	1.53	1	1
1	A	56	ARG	CA-C	-14.83	1.32	1.52	1	1
1	A	33	PHE	CE2-CZ	-14.68	0.94	1.38	1	1
1	A	33	PHE	CE1-CZ	-14.64	0.94	1.38	1	1
1	A	14	SER	CB-OG	-14.57	1.13	1.42	1	1
1	A	3	ARG	N-CA	-14.51	1.27	1.46	1	1
1	A	104	LYS	CG-CD	-14.46	1.09	1.52	1	1
1	A	72	ARG	CG-CD	-14.45	1.09	1.52	1	1
1	A	3	ARG	C-O	-14.30	1.06	1.24	1	1
1	A	67	LYS	CG-CD	-14.30	1.09	1.52	1	1
1	A	57	MET	N-CA	-14.21	1.26	1.46	1	1
1	A	56	ARG	CA-CB	-14.14	1.29	1.53	1	1
1	A	71	GLN	CB-CG	-13.73	1.11	1.52	1	1
1	A	121	HIS	CG-CD2	-13.64	1.20	1.35	1	1
1	A	86	ASP	CA-CB	-13.64	1.35	1.53	1	1
1	A	85	SER	CA-C	-13.49	1.34	1.52	1	1
1	A	87	LEU	CG-CD2	-13.42	1.08	1.52	1	1
1	A	83	ALA	C-N	-12.76	1.15	1.33	1	1
1	A	55	ILE	C-N	-12.72	1.15	1.33	1	1
1	A	11	ASP	CB-CG	-12.69	1.20	1.52	1	1
1	A	3	ARG	C-N	-12.43	1.15	1.33	1	1
1	A	59	GLY	C-N	-12.12	1.16	1.33	1	1
1	A	121	HIS	CG-ND1	-12.03	1.25	1.38	1	1
1	A	84	HIS	CA-C	-12.01	1.36	1.52	1	1
1	A	107	ASP	CG-OD1	-12.01	1.02	1.25	1	1
1	A	70	LYS	CD-CE	-11.99	1.16	1.52	1	1
1	A	3	ARG	CA-CB	-11.91	1.33	1.53	1	1
1	A	57	MET	CA-C	-11.89	1.37	1.52	1	1
1	A	81	MET	CB-CG	-11.68	1.17	1.52	1	1
1	A	58	PRO	N-CA	-11.62	1.32	1.47	1	1
1	A	56	ARG	C-O	-11.49	1.09	1.24	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	20	GLU	CG-CD	-11.28	1.23	1.52	1	1
1	A	117	ARG	CG-CD	-10.46	1.21	1.52	1	1
1	A	3	ARG	CB-CG	-10.44	1.21	1.52	1	1
1	A	86	ASP	N-CA	-10.33	1.32	1.46	1	1
1	A	11	ASP	C-O	-10.32	1.10	1.24	1	1
1	A	103	PRO	C-O	-10.31	1.10	1.24	1	1
1	A	49	ASP	CG-OD1	-10.29	1.05	1.25	1	1
1	A	85	SER	N-CA	-10.26	1.32	1.46	1	1
1	A	53	SER	CB-OG	-10.22	1.21	1.42	1	1
1	A	106	PHE	CB-CG	-10.22	1.27	1.50	1	1
1	A	67	LYS	CB-CG	-10.19	1.21	1.52	1	1
1	A	56	ARG	C-N	-10.12	1.12	1.33	1	1
1	A	75	MET	CA-CB	-10.02	1.36	1.53	1	1
1	A	61	ASP	C-N	-9.94	1.19	1.33	1	1
1	A	75	MET	N-CA	-9.94	1.33	1.46	1	1
1	A	74	PRO	CA-C	-9.75	1.38	1.52	1	1
1	A	95	GLN	CB-CG	-9.57	1.23	1.52	1	1
1	A	50	VAL	C-N	-9.49	1.20	1.33	1	1
1	A	55	ILE	CG1-CD1	-8.77	1.17	1.51	1	1
1	A	12	ASP	C-O	-8.36	1.13	1.24	1	1
1	A	58	PRO	CA-C	-7.97	1.41	1.52	1	1
1	A	104	LYS	CB-CG	-7.84	1.28	1.52	1	1
1	A	34	GLU	C-O	-7.61	1.15	1.24	1	1
1	A	106	PHE	CD1-CE1	-7.34	1.16	1.38	1	1
1	A	106	PHE	CD2-CE2	-7.32	1.16	1.38	1	1
1	A	103	PRO	C-N	-7.11	1.18	1.33	1	1
1	A	3	ARG	CG-CD	-7.11	1.31	1.52	1	1
1	A	61	ASP	CB-CG	-7.10	1.34	1.52	1	1
1	A	95	GLN	CD-NE2	-7.08	1.18	1.33	1	1
1	A	20	GLU	CB-CG	-7.04	1.31	1.52	1	1
1	A	58	PRO	C-N	-7.03	1.23	1.33	1	1
1	A	96	GLN	CB-CG	-7.00	1.31	1.52	1	1
1	A	49	ASP	CG-OD2	-6.63	1.12	1.25	1	1
1	A	75	MET	CB-CG	-6.51	1.32	1.52	1	1
1	A	59	GLY	N-CA	-6.41	1.36	1.45	1	1
1	A	80	ILE	CG1-CD1	-6.38	1.26	1.51	1	1
1	A	70	LYS	CG-CD	-6.31	1.33	1.52	1	1
1	A	37	ASN	CG-ND2	-6.24	1.20	1.33	1	1
1	A	74	PRO	N-CA	-6.19	1.39	1.47	1	1
1	A	46	LYS	CD-CE	-6.09	1.34	1.52	1	1
1	A	81	MET	C-O	-6.04	1.17	1.24	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	96	GLN	C-O	-5.79	1.16	1.24	1	1
1	A	69	ILE	CG1-CD1	-5.68	1.29	1.51	1	1
1	A	81	MET	CG-SD	-5.62	1.66	1.80	1	1
1	A	34	GLU	C-N	-5.44	1.26	1.33	1	1
1	A	96	GLN	CA-C	-5.43	1.45	1.52	1	1
1	A	73	HIS	CA-C	-5.40	1.45	1.52	1	1
1	A	102	LEU	CB-CG	-5.31	1.42	1.53	1	1
1	A	11	ASP	C-N	-5.24	1.26	1.33	1	1
1	A	46	LYS	CG-CD	-5.18	1.36	1.52	1	1
1	A	16	ARG	CB-CG	-5.15	1.37	1.52	1	1
1	A	71	GLN	CG-CD	-5.09	1.39	1.52	1	1
1	A	19	LEU	CB-CG	-5.02	1.43	1.53	1	1
1	A	58	PRO	CG-CD	-5.01	1.33	1.50	1	1
1	A	74	PRO	CG-CD	-5.00	1.33	1.50	1	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	35	ASN	OD1-CG-ND2	-92.55	30.05	122.60	1	1
1	A	54	ASP	O-C-N	-63.23	28.81	122.39	1	1
1	A	85	SER	O-C-N	-60.84	41.67	122.59	1	1
1	A	56	ARG	NE-CZ-NH1	-59.92	61.58	121.50	1	1
1	A	94	TYR	CD1-CG-CD2	-55.02	35.57	118.10	1	1
1	A	68	GLN	OE1-CD-NE2	-54.93	67.67	122.60	1	1
1	A	106	PHE	CD1-CG-CD2	-54.84	36.34	118.60	1	1
1	A	73	HIS	CE1-NE2-CD2	-52.14	56.86	109.00	1	1
1	A	84	HIS	CE1-NE2-CD2	-51.92	57.08	109.00	1	1
1	A	16	ARG	NH1-CZ-NH2	-51.24	52.68	119.30	1	1
1	A	117	ARG	NE-CZ-NH2	50.52	164.67	119.20	1	1
1	A	16	ARG	NE-CZ-NH2	48.73	163.06	119.20	1	1
1	A	72	ARG	NE-CZ-NH2	47.27	161.74	119.20	1	1
1	A	106	PHE	CE1-CZ-CE2	-46.11	37.01	120.00	1	1
1	A	56	ARG	NE-CZ-NH2	45.62	160.26	119.20	1	1
1	A	84	HIS	CG-CD2-NE2	42.45	149.65	107.20	1	1
1	A	94	TYR	CE1-CZ-CE2	-41.65	37.00	120.30	1	1
1	A	117	ARG	NH1-CZ-NH2	-41.20	65.74	119.30	1	1
1	A	88	ASP	OD1-CG-OD2	-40.75	25.11	122.90	1	1
1	A	38	GLU	OE1-CD-OE2	-39.48	28.16	122.90	1	1
1	A	109	ASP	OD1-CG-OD2	-38.33	30.91	122.90	1	1
1	A	84	HIS	ND1-CG-CD2	-37.54	68.56	106.10	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	73	HIS	CG-CD2-NE2	37.18	144.38	107.20	1	1
1	A	76	LEU	CD1-CG-CD2	-37.17	29.02	110.80	1	1
1	A	35	ASN	CB-CG-ND2	37.14	172.11	116.40	1	1
1	A	73	HIS	ND1-CE1-NE2	36.28	144.68	108.40	1	1
1	A	54	ASP	OD1-CG-OD2	-36.03	36.42	122.90	1	1
1	A	65	LEU	CD1-CG-CD2	-35.35	33.04	110.80	1	1
1	A	110	GLU	OE1-CD-OE2	-34.07	41.14	122.90	1	1
1	A	23	LEU	CD1-CG-CD2	-33.46	37.18	110.80	1	1
1	A	54	ASP	CA-C-O	33.32	162.77	119.12	1	1
1	A	86	ASP	OD1-CG-OD2	-33.27	43.06	122.90	1	1
1	A	116	GLU	OE1-CD-OE2	-32.78	44.22	122.90	1	1
1	A	84	HIS	ND1-CE1-NE2	31.24	139.64	108.40	1	1
1	A	85	SER	CA-C-N	31.17	169.22	121.53	1	1
1	A	85	SER	C-N-CA	31.17	169.22	121.53	1	1
1	A	117	ARG	CD-NE-CZ	29.83	166.16	124.40	1	1
1	A	3	ARG	NE-CZ-NH2	29.61	145.85	119.20	1	1
1	A	16	ARG	CD-NE-CZ	28.79	164.71	124.40	1	1
1	A	35	ASN	CA-CB-CG	28.34	140.94	112.60	1	1
1	A	56	ARG	CA-CB-CG	28.26	170.62	114.10	1	1
1	A	94	TYR	CB-CG-CD1	27.87	162.60	120.80	1	1
1	A	94	TYR	CG-CD1-CE1	27.68	162.72	121.20	1	1
1	A	72	ARG	CD-NE-CZ	27.52	162.93	124.40	1	1
1	A	94	TYR	CB-CG-CD2	27.35	161.82	120.80	1	1
1	A	84	HIS	CA-CB-CG	27.20	141.00	113.80	1	1
1	A	11	ASP	OD1-CG-OD2	-27.13	57.79	122.90	1	1
1	A	94	TYR	CG-CD2-CE2	27.03	161.75	121.20	1	1
1	A	95	GLN	CB-CG-CD	27.01	158.52	112.60	1	1
1	A	10	ASP	OD1-CG-OD2	-26.51	59.27	122.90	1	1
1	A	56	ARG	CD-NE-CZ	26.38	161.33	124.40	1	1
1	A	54	ASP	CA-C-N	26.15	169.04	121.97	1	1
1	A	54	ASP	C-N-CA	26.15	169.04	121.97	1	1
1	A	106	PHE	CG-CD1-CE1	25.67	164.34	120.70	1	1
1	A	106	PHE	CB-CG-CD1	25.59	164.20	120.70	1	1
1	A	61	ASP	OD1-CG-OD2	-24.74	63.52	122.90	1	1
1	A	84	HIS	O-C-N	-24.48	90.03	122.59	1	1
1	A	106	PHE	CZ-CE2-CD2	24.47	164.05	120.00	1	1
1	A	12	ASP	OD1-CG-OD2	-24.09	65.07	122.90	1	1
1	A	94	TYR	CZ-CE2-CD2	23.54	161.98	119.60	1	1
1	A	56	ARG	CB-CG-CD	23.37	165.05	111.30	1	1
1	A	56	ARG	CG-CD-NE	23.36	163.40	112.00	1	1
1	A	19	LEU	CD1-CG-CD2	-23.18	59.81	110.80	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	84	HIS	CB-CG-CD2	23.05	161.16	131.20	1	1
1	A	33	PHE	CD1-CG-CD2	-23.00	84.11	118.60	1	1
1	A	94	TYR	CD1-CE1-CZ	22.99	160.98	119.60	1	1
1	A	106	PHE	CB-CG-CD2	22.80	159.45	120.70	1	1
1	A	16	ARG	NE-CZ-NH1	22.76	144.26	121.50	1	1
1	A	106	PHE	CG-CD2-CE2	22.69	159.28	120.70	1	1
1	A	34	GLU	CB-CG-CD	22.32	150.54	112.60	1	1
1	A	100	ASP	CA-CB-CG	22.17	134.77	112.60	1	1
1	A	88	ASP	CB-CG-OD1	21.67	168.23	118.40	1	1
1	A	106	PHE	CD1-CE1-CZ	21.66	158.99	120.00	1	1
1	A	72	ARG	NE-CZ-NH1	-21.55	99.95	121.50	1	1
1	A	65	LEU	CB-CG-CD2	21.54	175.31	110.70	1	1
1	A	73	HIS	CB-CG-CD2	21.54	159.19	131.20	1	1
1	A	54	ASP	CB-CG-OD2	21.47	167.78	118.40	1	1
1	A	109	ASP	CB-CG-OD1	21.45	167.72	118.40	1	1
1	A	117	ARG	CG-CD-NE	21.38	159.03	112.00	1	1
1	A	88	ASP	CB-CG-OD2	20.98	166.66	118.40	1	1
1	A	96	GLN	CG-CD-OE1	-20.94	78.93	120.80	1	1
1	A	38	GLU	CG-CD-OE2	20.68	165.96	118.40	1	1
1	A	38	GLU	CG-CD-OE1	20.64	165.88	118.40	1	1
1	A	85	SER	CA-C-O	20.06	149.20	120.51	1	1
1	A	86	ASP	CB-CG-OD2	20.00	164.39	118.40	1	1
1	A	81	MET	CG-SD-CE	19.57	143.94	100.90	1	1
1	A	33	PHE	CE1-CZ-CE2	-19.17	85.49	120.00	1	1
1	A	104	LYS	CD-CE-NZ	19.14	173.14	111.90	1	1
1	A	109	ASP	CB-CG-OD2	18.68	161.37	118.40	1	1
1	A	54	ASP	CA-CB-CG	18.65	131.25	112.60	1	1
1	A	35	ASN	CB-CG-OD1	18.52	157.84	120.80	1	1
1	A	110	GLU	CG-CD-OE2	18.23	160.33	118.40	1	1
1	A	116	GLU	CG-CD-OE1	17.84	159.43	118.40	1	1
1	A	10	ASP	O-C-N	-17.68	104.07	122.99	1	1
1	A	68	GLN	CG-CD-NE2	17.64	142.86	116.40	1	1
1	A	76	LEU	CB-CG-CD2	17.64	163.62	110.70	1	1
1	A	96	GLN	CG-CD-NE2	17.54	142.71	116.40	1	1
1	A	110	GLU	CG-CD-OE1	17.45	158.53	118.40	1	1
1	A	3	ARG	CD-NE-CZ	17.34	148.68	124.40	1	1
1	A	23	LEU	CB-CG-CD2	17.25	162.44	110.70	1	1
1	A	76	LEU	CB-CG-CD1	17.22	162.35	110.70	1	1
1	A	100	ASP	OD1-CG-OD2	-17.03	82.02	122.90	1	1
1	A	16	ARG	CG-CD-NE	16.98	149.36	112.00	1	1
1	A	116	GLU	CG-CD-OE2	16.50	156.35	118.40	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	74	PRO	O-C-N	-16.46	101.66	122.23	1	1
1	A	11	ASP	CB-CG-OD2	16.42	156.16	118.40	1	1
1	A	3	ARG	CA-CB-CG	16.32	146.74	114.10	1	1
1	A	54	ASP	CB-CG-OD1	16.26	155.80	118.40	1	1
1	A	57	MET	CG-SD-CE	16.16	136.45	100.90	1	1
1	A	72	ARG	NH1-CZ-NH2	-16.15	98.30	119.30	1	1
1	A	38	GLU	CB-CG-CD	15.87	139.58	112.60	1	1
1	A	97	GLY	O-C-N	-15.83	102.12	122.70	1	1
1	A	96	GLN	OE1-CD-NE2	15.77	138.37	122.60	1	1
1	A	12	ASP	CA-CB-CG	15.68	128.28	112.60	1	1
1	A	67	LYS	CG-CD-CE	15.13	146.11	111.30	1	1
1	A	10	ASP	CB-CG-OD2	14.94	152.77	118.40	1	1
1	A	84	HIS	CA-C-N	14.91	150.01	121.54	1	1
1	A	84	HIS	C-N-CA	14.91	150.01	121.54	1	1
1	A	86	ASP	CB-CG-OD1	14.85	152.55	118.40	1	1
1	A	73	HIS	ND1-CG-CD2	-14.80	91.30	106.10	1	1
1	A	23	LEU	CB-CG-CD1	14.60	154.49	110.70	1	1
1	A	75	MET	CG-SD-CE	14.53	132.85	100.90	1	1
1	A	56	ARG	NH1-CZ-NH2	14.51	138.16	119.30	1	1
1	A	68	GLN	CG-CD-OE1	14.33	149.47	120.80	1	1
1	A	61	ASP	CB-CG-OD2	14.29	151.27	118.40	1	1
1	A	35	ASN	O-C-N	-14.14	103.78	122.59	1	1
1	A	100	ASP	CB-CG-OD2	14.14	150.93	118.40	1	1
1	A	34	GLU	CG-CD-OE1	-14.08	86.01	118.40	1	1
1	A	95	GLN	CG-CD-NE2	14.01	137.42	116.40	1	1
1	A	94	TYR	OH-CZ-CE2	14.00	161.89	119.90	1	1
1	A	66	LEU	CD1-CG-CD2	-13.89	80.24	110.80	1	1
1	A	13	SER	CA-CB-OG	13.79	138.68	111.10	1	1
1	A	94	TYR	CE1-CZ-OH	13.73	161.10	119.90	1	1
1	A	57	MET	N-CA-C	13.29	139.18	109.81	1	1
1	A	70	LYS	CD-CE-NZ	13.18	154.08	111.90	1	1
1	A	19	LEU	CB-CG-CD2	13.11	150.03	110.70	1	1
1	A	67	LYS	CD-CE-NZ	12.95	153.35	111.90	1	1
1	A	10	ASP	CB-CG-OD1	12.85	147.96	118.40	1	1
1	A	3	ARG	NH1-CZ-NH2	-12.80	102.66	119.30	1	1
1	A	12	ASP	CB-CG-OD2	12.74	147.71	118.40	1	1
1	A	12	ASP	CB-CG-OD1	12.53	147.22	118.40	1	1
1	A	86	ASP	CA-CB-CG	12.34	124.94	112.60	1	1
1	A	104	LYS	CG-CD-CE	12.08	139.09	111.30	1	1
1	A	11	ASP	CB-CG-OD1	12.02	146.05	118.40	1	1
1	A	60	MET	CG-SD-CE	11.99	127.28	100.90	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	117	ARG	CA-CB-CG	11.89	137.88	114.10	1	1
1	A	85	SER	CA-CB-OG	11.87	134.85	111.10	1	1
1	A	61	ASP	CB-CG-OD1	11.66	145.21	118.40	1	1
1	A	37	ASN	CB-CG-ND2	11.48	133.62	116.40	1	1
1	A	95	GLN	CG-CD-OE1	-11.34	98.12	120.80	1	1
1	A	5	ILE	CB-CG1-CD1	11.20	137.33	113.80	1	1
1	A	67	LYS	CB-CG-CD	11.04	136.69	111.30	1	1
1	A	65	LEU	CB-CG-CD1	10.72	142.86	110.70	1	1
1	A	19	LEU	CB-CG-CD1	10.35	141.76	110.70	1	1
1	A	33	PHE	CG-CD1-CE1	10.32	138.25	120.70	1	1
1	A	33	PHE	CB-CG-CD1	10.20	138.04	120.70	1	1
1	A	30	CYS	CA-CB-SG	10.16	137.77	114.40	1	1
1	A	33	PHE	CB-CG-CD2	10.09	137.85	120.70	1	1
1	A	33	PHE	CG-CD2-CE2	10.09	137.85	120.70	1	1
1	A	37	ASN	OD1-CG-ND2	-10.03	112.57	122.60	1	1
1	A	3	ARG	NE-CZ-NH1	-10.01	111.49	121.50	1	1
1	A	20	GLU	OE1-CD-OE2	-9.99	98.93	122.90	1	1
1	A	33	PHE	CZ-CE2-CD2	9.73	137.51	120.00	1	1
1	A	65	LEU	CA-CB-CG	9.67	150.15	116.30	1	1
1	A	33	PHE	CD1-CE1-CZ	9.33	136.80	120.00	1	1
1	A	84	HIS	CG-ND1-CE1	9.27	125.07	109.30	1	1
1	A	70	LYS	CG-CD-CE	9.05	132.12	111.30	1	1
1	A	34	GLU	OE1-CD-OE2	9.03	144.56	122.90	1	1
1	A	92	SER	CA-CB-OG	8.96	129.03	111.10	1	1
1	A	121	HIS	ND1-CG-CD2	-8.96	97.14	106.10	1	1
1	A	106	PHE	CA-CB-CG	8.91	122.71	113.80	1	1
1	A	66	LEU	CB-CG-CD2	8.82	137.17	110.70	1	1
1	A	73	HIS	CB-CG-ND1	-8.81	109.49	122.70	1	1
1	A	3	ARG	CG-CD-NE	8.53	130.77	112.00	1	1
1	A	73	HIS	CA-C-N	8.53	128.15	118.85	1	1
1	A	73	HIS	C-N-CA	8.53	128.15	118.85	1	1
1	A	21	ARG	NH1-CZ-NH2	-8.46	108.30	119.30	1	1
1	A	83	ALA	O-C-N	-8.42	111.28	122.22	1	1
1	A	109	ASP	CA-CB-CG	8.20	120.80	112.60	1	1
1	A	117	ARG	NE-CZ-NH1	8.10	129.59	121.50	1	1
1	A	96	GLN	CB-CG-CD	7.92	126.07	112.60	1	1
1	A	74	PRO	CA-C-N	7.81	136.45	121.54	1	1
1	A	74	PRO	C-N-CA	7.81	136.45	121.54	1	1
1	A	55	ILE	O-C-N	-7.74	112.90	122.57	1	1
1	A	21	ARG	NE-CZ-NH2	7.62	126.06	119.20	1	1
1	A	85	SER	N-CA-C	7.61	127.01	110.80	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	3	ARG	O-C-N	-7.57	113.56	122.20	1	1
1	A	73	HIS	O-C-N	-7.44	112.10	121.70	1	1
1	A	10	ASP	CA-CB-CG	7.42	120.02	112.60	1	1
1	A	21	ARG	CG-CD-NE	7.39	128.27	112.00	1	1
1	A	74	PRO	N-CA-C	7.30	123.19	113.40	1	1
1	A	87	LEU	CD1-CG-CD2	-7.28	94.78	110.80	1	1
1	A	50	VAL	O-C-N	-7.11	114.86	123.03	1	1
1	A	59	GLY	O-C-N	-7.08	113.50	122.70	1	1
1	A	57	MET	N-CA-CB	-7.01	97.89	110.37	1	1
1	A	121	HIS	CG-CD2-NE2	6.82	114.02	107.20	1	1
1	A	20	GLU	CG-CD-OE2	6.67	133.75	118.40	1	1
1	A	107	ASP	OD1-CG-OD2	-6.62	107.02	122.90	1	1
1	A	71	GLN	CA-CB-CG	6.60	127.29	114.10	1	1
1	A	97	GLY	CA-C-N	6.54	132.24	121.39	1	1
1	A	97	GLY	C-N-CA	6.54	132.24	121.39	1	1
1	A	10	ASP	CA-C-N	6.52	134.00	121.54	1	1
1	A	10	ASP	C-N-CA	6.52	134.00	121.54	1	1
1	A	35	ASN	CA-C-N	6.26	133.68	121.41	1	1
1	A	35	ASN	C-N-CA	6.26	133.68	121.41	1	1
1	A	46	LYS	CD-CE-NZ	6.24	131.88	111.90	1	1
1	A	88	ASP	CA-CB-CG	6.22	118.82	112.60	1	1
1	A	68	GLN	CB-CG-CD	6.16	123.07	112.60	1	1
1	A	61	ASP	O-C-N	-6.04	114.55	122.59	1	1
1	A	81	MET	CB-CG-SD	5.89	130.36	112.70	1	1
1	A	66	LEU	CB-CG-CD1	5.88	128.34	110.70	1	1
1	A	61	ASP	CA-CB-CG	5.67	118.27	112.60	1	1
1	A	87	LEU	CB-CG-CD2	5.67	127.70	110.70	1	1
1	A	71	GLN	CB-CG-CD	-5.41	103.40	112.60	1	1
1	A	104	LYS	CB-CG-CD	5.37	123.66	111.30	1	1
1	A	83	ALA	CA-C-N	5.27	131.61	121.54	1	1
1	A	83	ALA	C-N-CA	5.27	131.61	121.54	1	1
1	A	11	ASP	CA-CB-CG	5.19	117.79	112.60	1	1
1	A	74	PRO	CB-CA-C	-5.10	104.90	112.55	1	1
1	A	84	HIS	CB-CG-ND1	5.05	130.28	122.70	1	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	908	918	915	129±50
All	All	23608	23868	23777	3345

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 71.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:ARG:CB	1:A:56:ARG:CD	1.55	1.81	1	1
1:A:57:MET:CE	1:A:57:MET:CG	1.53	1.86	1	1
1:A:117:ARG:CB	1:A:117:ARG:CD	1.51	1.80	1	1
1:A:94:TYR:CZ	1:A:94:TYR:CD1	1.51	1.96	1	1
1:A:94:TYR:CG	1:A:94:TYR:CE2	1.48	1.99	1	1
1:A:23:LEU:CD1	1:A:23:LEU:CB	1.48	1.91	1	1
1:A:68:GLN:OE1	1:A:68:GLN:CG	1.45	1.65	1	1
1:A:94:TYR:CZ	1:A:94:TYR:CD2	1.44	1.99	1	1
1:A:94:TYR:CG	1:A:94:TYR:CE1	1.42	2.02	1	1
1:A:19:LEU:CD1	1:A:19:LEU:CB	1.42	1.97	1	1
1:A:73:HIS:NE2	1:A:73:HIS:CG	1.42	1.86	1	1
1:A:109:ASP:OD1	1:A:109:ASP:CB	1.41	1.68	1	1
1:A:86:ASP:OD2	1:A:86:ASP:CB	1.35	1.73	1	1
1:A:65:LEU:HG	1:A:65:LEU:CA	1.34	1.49	1	1
1:A:20:GLU:OE1	1:A:20:GLU:CG	1.33	1.75	1	1
1:A:94:TYR:CD2	1:A:94:TYR:CB	1.32	2.11	1	1
1:A:66:LEU:CD1	1:A:66:LEU:CB	1.31	2.07	1	1
1:A:76:LEU:CD1	1:A:76:LEU:CB	1.31	2.09	1	1
1:A:56:ARG:CG	1:A:56:ARG:CA	1.30	2.07	1	1
1:A:11:ASP:OD2	1:A:11:ASP:CB	1.30	1.78	1	1
1:A:76:LEU:CB	1:A:76:LEU:CD2	1.28	2.11	1	1
1:A:54:ASP:O	1:A:55:ILE:CA	1.28	1.78	1	1
1:A:60:MET:CE	1:A:60:MET:CG	1.28	2.10	1	1
1:A:54:ASP:CG	1:A:54:ASP:CA	1.27	2.07	1	1
1:A:94:TYR:CD1	1:A:94:TYR:CB	1.27	2.14	1	1
1:A:46:LYS:NZ	1:A:46:LYS:CD	1.26	1.98	1	1
1:A:16:ARG:NH2	1:A:16:ARG:NE	1.25	1.81	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:70:LYS:NZ	1:A:70:LYS:CD	1.25	1.98	1	1
1:A:61:ASP:OD1	1:A:61:ASP:CB	1.25	1.83	1	1
1:A:73:HIS:NE2	1:A:73:HIS:ND1	1.24	1.81	1	1
1:A:20:GLU:CG	1:A:20:GLU:OE2	1.23	1.86	1	1
1:A:30:CYS:SG	1:A:30:CYS:CA	1.22	2.27	1	1
1:A:117:ARG:NE	1:A:117:ARG:CG	1.20	2.03	1	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:21:ARG:CG	1.20	2.02	1	1
1:A:75:MET:CE	1:A:75:MET:CG	1.19	2.20	1	1
1:A:19:LEU:CB	1:A:19:LEU:CD2	1.19	2.19	1	1
1:A:100:ASP:CG	1:A:100:ASP:CA	1.19	2.15	1	1
1:A:85:SER:C	1:A:86:ASP:CA	1.16	2.18	1	1
1:A:94:TYR:CE1	1:A:94:TYR:OH	1.16	1.96	1	1
1:A:35:ASN:CG	1:A:35:ASN:CA	1.15	2.19	1	1
1:A:117:ARG:CG	1:A:117:ARG:CA	1.15	2.23	1	1
1:A:85:SER:O	1:A:86:ASP:CA	1.15	1.94	1	1
1:A:66:LEU:CB	1:A:66:LEU:CD2	1.14	2.23	1	1
1:A:5:ILE:CD1	1:A:5:ILE:CB	1.13	2.24	1	1
1:A:61:ASP:CB	1:A:61:ASP:OD2	1.13	1.95	1	1
1:A:54:ASP:C	1:A:55:ILE:CA	1.13	2.22	1	1
1:A:116:GLU:OE2	1:A:116:GLU:CG	1.13	1.97	1	1
1:A:23:LEU:CB	1:A:23:LEU:CD2	1.12	2.25	1	1
1:A:57:MET:CG	1:A:57:MET:SD	1.12	1.03	1	1
1:A:54:ASP:O	1:A:54:ASP:CA	1.12	1.97	1	1
1:A:75:MET:CE	1:A:75:MET:SD	1.12	1.03	1	1
1:A:38:GLU:CD	1:A:38:GLU:CB	1.11	2.22	1	1
1:A:69:ILE:HD13	1:A:78:VAL:HG21	1.11	1.22	13	9
1:A:94:TYR:CE2	1:A:94:TYR:OH	1.10	1.99	1	1
1:A:110:GLU:OE1	1:A:110:GLU:CG	1.10	2.00	1	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:19:LEU:HD12	1.07	1.66	1	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:19:LEU:HG	1.06	1.69	1	1
1:A:23:LEU:CD2	1:A:23:LEU:HG	1.06	1.75	1	1
1:A:57:MET:CE	1:A:57:MET:SD	1.06	0.97	1	1
1:A:13:SER:OG	1:A:13:SER:CA	1.06	2.02	1	1
1:A:13:SER:OG	1:A:13:SER:HB3	1.06	1.29	1	1
1:A:13:SER:OG	1:A:13:SER:HB2	1.06	1.29	1	1
1:A:43:LEU:HD13	1:A:73:HIS:CE1	1.05	1.85	1	6
1:A:110:GLU:CG	1:A:110:GLU:OE2	1.05	2.05	1	1
1:A:6:VAL:HG11	1:A:23:LEU:HD13	1.04	1.24	2	6
1:A:60:MET:CE	1:A:60:MET:SD	1.04	0.94	1	1
1:A:66:LEU:CD2	1:A:66:LEU:HG	1.03	1.63	1	1
1:A:85:SER:CA	1:A:86:ASP:N	1.03	2.20	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:LEU:HD22	1:A:28:LEU:HD13	1.03	1.28	2	4
1:A:19:LEU:CD1	1:A:19:LEU:HD23	1.02	1.66	1	1
1:A:116:GLU:CG	1:A:116:GLU:OE1	1.02	2.06	1	1
1:A:46:LYS:NZ	1:A:46:LYS:HE2	1.02	1.41	1	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:21:ARG:HD2	1.01	1.43	1	1
1:A:117:ARG:CB	1:A:117:ARG:HD3	1.01	1.80	1	1
1:A:70:LYS:NZ	1:A:70:LYS:CE	1.01	0.87	1	1
1:A:66:LEU:CD1	1:A:66:LEU:HG	1.00	1.61	1	1
1:A:73:HIS:NE2	1:A:73:HIS:CD2	1.00	0.80	1	1
1:A:19:LEU:CD1	1:A:19:LEU:HG	1.00	1.55	1	1
1:A:81:MET:SD	1:A:81:MET:CE	1.00	0.90	1	1
1:A:117:ARG:CD	1:A:117:ARG:NE	1.00	0.86	1	1
1:A:30:CYS:SG	1:A:30:CYS:CB	1.00	0.90	1	1
1:A:46:LYS:NZ	1:A:46:LYS:HE3	0.99	1.41	1	1
1:A:70:LYS:NZ	1:A:70:LYS:HE3	0.99	1.39	1	1
1:A:75:MET:SD	1:A:75:MET:HE3	0.99	1.63	1	1
1:A:19:LEU:HD12	1:A:108:ILE:HD12	0.99	1.30	22	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:21:ARG:HD3	0.98	1.43	1	1
1:A:117:ARG:NE	1:A:117:ARG:HD3	0.97	1.36	1	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:21:ARG:CD	0.97	0.83	1	1
1:A:73:HIS:NE2	1:A:73:HIS:CE1	0.97	0.77	1	1
1:A:38:GLU:CD	1:A:38:GLU:HG3	0.97	1.47	1	1
1:A:13:SER:OG	1:A:13:SER:CB	0.97	0.67	1	1
1:A:38:GLU:CD	1:A:38:GLU:CG	0.97	0.92	1	1
1:A:70:LYS:NZ	1:A:70:LYS:HE2	0.96	1.39	1	1
1:A:46:LYS:NZ	1:A:46:LYS:CE	0.96	0.81	1	1
1:A:66:LEU:CG	1:A:66:LEU:HD22	0.96	1.51	1	1
1:A:75:MET:SD	1:A:75:MET:HE1	0.96	1.63	1	1
1:A:54:ASP:CA	1:A:55:ILE:N	0.96	2.27	1	1
1:A:5:ILE:CG1	1:A:5:ILE:HD12	0.96	1.50	1	1
1:A:83:ALA:HB1	1:A:87:LEU:HD23	0.96	1.32	20	3
1:A:38:GLU:CD	1:A:38:GLU:HG2	0.95	1.47	1	1
1:A:66:LEU:CG	1:A:66:LEU:HD23	0.95	1.51	1	1
1:A:75:MET:SD	1:A:75:MET:HE2	0.95	1.63	1	1
1:A:69:ILE:HG22	1:A:73:HIS:CD2	0.95	1.97	10	2
1:A:85:SER:C	1:A:86:ASP:N	0.95	0.87	1	1
1:A:57:MET:SD	1:A:57:MET:HE1	0.95	1.58	1	1
1:A:5:ILE:CG1	1:A:5:ILE:HD13	0.94	1.50	1	1
1:A:19:LEU:CG	1:A:19:LEU:HD21	0.94	1.47	1	1
1:A:117:ARG:NE	1:A:117:ARG:HD2	0.94	1.36	1	1
1:A:81:MET:CE	1:A:81:MET:CG	0.94	2.45	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:LEU:CG	1:A:66:LEU:HD21	0.94	1.51	1	1
1:A:117:ARG:CB	1:A:117:ARG:HG3	0.93	1.47	1	1
1:A:60:MET:HB3	1:A:64:ALA:HB2	0.93	1.39	23	17
1:A:23:LEU:CG	1:A:23:LEU:HD22	0.93	1.47	1	1
1:A:57:MET:SD	1:A:57:MET:HE2	0.93	1.58	1	1
1:A:57:MET:SD	1:A:57:MET:HE3	0.93	1.58	1	1
1:A:60:MET:SD	1:A:60:MET:HE2	0.93	1.56	1	1
1:A:5:ILE:CG1	1:A:5:ILE:HD11	0.93	1.50	1	1
1:A:16:ARG:HA	1:A:32:THR:HG21	0.93	1.41	8	24
1:A:69:ILE:HG22	1:A:73:HIS:HD2	0.93	1.22	10	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:19:LEU:CG	0.92	1.47	1	1
1:A:23:LEU:CG	1:A:23:LEU:HD21	0.92	1.47	1	1
1:A:23:LEU:CG	1:A:23:LEU:HD23	0.92	1.47	1	1
1:A:61:ASP:OD2	1:A:61:ASP:CG	0.92	0.67	1	1
1:A:19:LEU:CG	1:A:19:LEU:HD22	0.91	1.47	1	1
1:A:60:MET:SD	1:A:60:MET:HE3	0.91	1.56	1	1
1:A:60:MET:SD	1:A:60:MET:HE1	0.91	1.56	1	1
1:A:69:ILE:HG23	1:A:73:HIS:ND1	0.91	1.80	9	6
1:A:9:VAL:HG13	1:A:33:PHE:HB2	0.91	1.39	4	20
1:A:5:ILE:CD1	1:A:5:ILE:HG13	0.90	1.43	1	1
1:A:30:CYS:CB	1:A:30:CYS:HG	0.90	1.72	1	1
1:A:117:ARG:CB	1:A:117:ARG:HG2	0.90	1.47	1	1
1:A:6:VAL:HG11	1:A:23:LEU:CD2	0.89	1.98	4	13
1:A:35:ASN:CG	1:A:35:ASN:HB3	0.89	1.37	1	1
1:A:100:ASP:CG	1:A:100:ASP:HB2	0.89	1.37	1	1
1:A:83:ALA:HB2	1:A:101:TYR:CD2	0.89	2.02	24	19
1:A:116:GLU:OE1	1:A:116:GLU:CD	0.89	0.65	1	1
1:A:5:ILE:CD1	1:A:5:ILE:HG12	0.89	1.43	1	1
1:A:100:ASP:CG	1:A:100:ASP:HB3	0.89	1.37	1	1
1:A:55:ILE:HG13	1:A:62:GLY:HA3	0.89	1.45	1	9
1:A:66:LEU:CG	1:A:66:LEU:HD11	0.89	1.43	1	1
1:A:60:MET:CB	1:A:64:ALA:HB2	0.89	1.97	21	22
1:A:55:ILE:HD11	1:A:84:HIS:CE1	0.88	2.02	9	3
1:A:81:MET:SD	1:A:81:MET:HE1	0.88	1.53	1	1
1:A:16:ARG:NH2	1:A:16:ARG:CZ	0.88	0.78	1	1
1:A:66:LEU:CG	1:A:66:LEU:HD13	0.88	1.43	1	1
1:A:81:MET:SD	1:A:81:MET:HE2	0.88	1.53	1	1
1:A:117:ARG:CG	1:A:117:ARG:HB3	0.88	1.42	1	1
1:A:43:LEU:HD13	1:A:73:HIS:NE2	0.88	1.84	1	13
1:A:66:LEU:CD2	1:A:66:LEU:CG	0.88	0.88	1	1
1:A:110:GLU:OE2	1:A:110:GLU:CD	0.88	0.63	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:65:LEU:CA	1:A:65:LEU:CG	0.87	2.29	1	1
1:A:65:LEU:CG	1:A:65:LEU:HD23	0.87	1.41	1	1
1:A:66:LEU:CG	1:A:66:LEU:HD12	0.87	1.43	1	1
1:A:35:ASN:CG	1:A:35:ASN:HB2	0.87	1.37	1	1
1:A:81:MET:SD	1:A:81:MET:HE3	0.87	1.53	1	1
1:A:65:LEU:CG	1:A:65:LEU:HD22	0.87	1.41	1	1
1:A:54:ASP:C	1:A:55:ILE:N	0.87	0.78	1	1
1:A:117:ARG:CG	1:A:117:ARG:HB2	0.87	1.42	1	1
1:A:54:ASP:CG	1:A:54:ASP:HB2	0.86	1.36	1	1
1:A:65:LEU:CG	1:A:65:LEU:HD21	0.86	1.41	1	1
1:A:5:ILE:CD1	1:A:5:ILE:CG1	0.86	0.87	1	1
1:A:7:TRP:CD1	1:A:31:THR:HG22	0.86	2.05	21	26
1:A:54:ASP:CG	1:A:54:ASP:HB3	0.86	1.36	1	1
1:A:16:ARG:NH2	1:A:16:ARG:HH11	0.85	1.41	1	1
1:A:117:ARG:CB	1:A:117:ARG:CG	0.85	0.85	1	1
1:A:69:ILE:HG23	1:A:73:HIS:CE1	0.85	2.06	13	4
1:A:35:ASN:CG	1:A:35:ASN:CB	0.84	0.80	1	1
1:A:65:LEU:CG	1:A:65:LEU:HB3	0.84	1.38	1	1
1:A:70:LYS:HB3	1:A:96:GLN:OE1	0.84	1.72	1	1
1:A:47:THR:HG23	1:A:76:LEU:HD23	0.84	1.50	2	5
1:A:65:LEU:CG	1:A:65:LEU:CB	0.84	0.84	1	1
1:A:36:GLY:CA	1:A:65:LEU:HD21	0.84	2.03	20	4
1:A:6:VAL:HG11	1:A:23:LEU:HD23	0.83	1.50	4	10
1:A:11:ASP:OD2	1:A:11:ASP:CG	0.83	0.62	1	1
1:A:47:THR:HG23	1:A:76:LEU:HD12	0.83	1.48	22	4
1:A:55:ILE:HG12	1:A:62:GLY:HA3	0.83	1.50	26	5
1:A:23:LEU:CD2	1:A:23:LEU:HD12	0.83	1.37	1	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:19:LEU:CG	0.83	0.83	1	1
1:A:20:GLU:HA	1:A:30:CYS:SG	0.82	2.14	1	3
1:A:43:LEU:HD13	1:A:73:HIS:HE1	0.82	1.27	1	1
1:A:23:LEU:CD2	1:A:23:LEU:CG	0.82	0.83	1	1
1:A:100:ASP:CG	1:A:100:ASP:CB	0.82	0.78	1	1
1:A:65:LEU:CG	1:A:65:LEU:HB2	0.82	1.38	1	1
1:A:30:CYS:SG	1:A:30:CYS:HB3	0.82	1.46	1	1
1:A:73:HIS:CD2	1:A:73:HIS:HE2	0.81	1.61	1	1
1:A:73:HIS:NE2	1:A:73:HIS:HE1	0.81	1.38	1	1
1:A:102:LEU:HD13	1:A:114:LEU:HD22	0.81	1.52	19	4
1:A:110:GLU:OE1	1:A:110:GLU:CD	0.81	0.58	1	1
1:A:66:LEU:HA	1:A:69:ILE:HD12	0.81	1.52	13	14
1:A:6:VAL:HG11	1:A:23:LEU:HG	0.81	1.51	25	7
1:A:8:VAL:HG11	1:A:19:LEU:HD13	0.81	1.51	18	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:CYS:SG	1:A:30:CYS:HB2	0.81	1.46	1	1
1:A:9:VAL:HG12	1:A:33:PHE:HB2	0.81	1.53	11	3
1:A:63:LEU:HA	1:A:66:LEU:HD23	0.81	1.53	11	4
1:A:9:VAL:HG11	1:A:36:GLY:HA2	0.80	1.53	13	21
1:A:76:LEU:CG	1:A:76:LEU:HD21	0.80	1.34	1	1
1:A:66:LEU:HD22	1:A:93:ALA:HB1	0.80	1.52	3	7
1:A:23:LEU:CD2	1:A:28:LEU:HD13	0.80	2.06	20	8
1:A:66:LEU:HD13	1:A:93:ALA:HB2	0.80	1.54	4	11
1:A:14:SER:O	1:A:18:VAL:HG23	0.80	1.76	16	24
1:A:36:GLY:HA3	1:A:65:LEU:HD23	0.80	1.51	1	1
1:A:76:LEU:CG	1:A:76:LEU:HD13	0.80	1.33	1	1
1:A:61:ASP:OD1	1:A:61:ASP:CG	0.80	0.57	1	1
1:A:116:GLU:OE2	1:A:116:GLU:CD	0.80	0.56	1	1
1:A:76:LEU:CG	1:A:76:LEU:HD22	0.80	1.34	1	1
1:A:76:LEU:CG	1:A:76:LEU:HD23	0.80	1.34	1	1
1:A:23:LEU:HD22	1:A:28:LEU:CD1	0.80	2.07	21	4
1:A:69:ILE:HG23	1:A:73:HIS:CD2	0.80	2.12	24	1
1:A:79:ILE:CG2	1:A:114:LEU:HD23	0.79	2.07	5	18
1:A:19:LEU:HD12	1:A:19:LEU:CG	0.79	1.33	1	1
1:A:19:LEU:CG	1:A:19:LEU:HD13	0.79	1.33	1	1
1:A:57:MET:SD	1:A:57:MET:HG3	0.79	1.59	1	1
1:A:73:HIS:NE2	1:A:73:HIS:HD2	0.79	1.40	1	1
1:A:54:ASP:CG	1:A:54:ASP:CB	0.79	0.74	1	1
1:A:10:ASP:HB3	1:A:15:ILE:HG13	0.79	1.54	18	2
1:A:68:GLN:OE1	1:A:68:GLN:CD	0.78	0.57	1	1
1:A:76:LEU:CG	1:A:76:LEU:HD11	0.78	1.33	1	1
1:A:73:HIS:CE1	1:A:73:HIS:HE2	0.78	1.58	1	1
1:A:76:LEU:CG	1:A:76:LEU:HD12	0.78	1.33	1	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:19:LEU:HD11	0.78	1.26	1	1
1:A:21:ARG:HD3	1:A:21:ARG:NH1	0.77	1.76	1	1
1:A:69:ILE:HG12	1:A:73:HIS:CE1	0.77	2.13	5	5
1:A:60:MET:HB2	1:A:64:ALA:HB2	0.77	1.56	7	11
1:A:6:VAL:HG23	1:A:50:VAL:HG13	0.77	1.54	13	24
1:A:66:LEU:CD1	1:A:66:LEU:CG	0.77	0.77	1	1
1:A:19:LEU:CD1	1:A:19:LEU:HD22	0.77	1.32	1	1
1:A:19:LEU:CG	1:A:19:LEU:HD11	0.77	1.33	1	1
1:A:70:LYS:HB3	1:A:96:GLN:CD	0.77	2.02	1	3
1:A:56:ARG:CB	1:A:56:ARG:HD2	0.77	2.03	1	1
1:A:4:GLY:O	1:A:5:ILE:HD13	0.77	1.80	26	5
1:A:86:ASP:OD2	1:A:86:ASP:CG	0.76	0.61	1	1
1:A:65:LEU:HD12	1:A:66:LEU:N	0.76	1.94	2	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:LEU:CD2	1:A:19:LEU:HD13	0.76	1.30	1	1
1:A:16:ARG:O	1:A:20:GLU:HG2	0.76	1.80	1	3
1:A:65:LEU:HG	1:A:65:LEU:CB	0.76	0.64	1	1
1:A:40:LEU:HD13	1:A:68:GLN:CB	0.76	2.11	8	18
1:A:79:ILE:HD13	1:A:115:VAL:HG23	0.76	1.54	22	3
1:A:56:ARG:CB	1:A:56:ARG:HG3	0.76	1.29	1	1
1:A:55:ILE:HG21	1:A:82:THR:O	0.76	1.80	6	4
1:A:6:VAL:CG1	1:A:23:LEU:HD13	0.76	2.10	17	4
1:A:93:ALA:HB1	1:A:98:ALA:HB2	0.76	1.58	24	12
1:A:4:GLY:C	1:A:5:ILE:HD13	0.75	2.05	5	7
1:A:55:ILE:HG22	1:A:81:MET:HG3	0.75	1.58	12	6
1:A:69:ILE:HD13	1:A:78:VAL:CG2	0.75	2.11	9	5
1:A:19:LEU:CD1	1:A:19:LEU:CD2	0.75	0.75	1	1
1:A:34:GLU:HG3	1:A:38:GLU:HB2	0.75	1.57	3	13
1:A:56:ARG:CB	1:A:56:ARG:HG2	0.75	1.29	1	1
1:A:18:VAL:HG12	1:A:108:ILE:HG12	0.75	1.59	20	19
1:A:7:TRP:O	1:A:51:LEU:HD12	0.75	1.82	10	14
1:A:47:THR:HG23	1:A:76:LEU:HD13	0.74	1.58	9	2
1:A:23:LEU:HD23	1:A:28:LEU:HD13	0.74	1.58	20	3
1:A:65:LEU:CG	1:A:65:LEU:CD2	0.74	0.75	1	1
1:A:56:ARG:CG	1:A:56:ARG:HB3	0.74	1.28	1	1
1:A:78:VAL:H	1:A:98:ALA:HA	0.74	1.42	23	12
1:A:48:PRO:O	1:A:76:LEU:HD11	0.74	1.83	16	3
1:A:102:LEU:HD23	1:A:106:PHE:CD1	0.74	2.16	22	2
1:A:56:ARG:C	1:A:58:PRO:HD2	0.74	2.08	5	1
1:A:18:VAL:HG12	1:A:108:ILE:HD13	0.73	1.57	22	1
1:A:39:VAL:HG11	1:A:51:LEU:HD11	0.73	1.59	19	9
1:A:65:LEU:CD2	1:A:78:VAL:HG11	0.73	2.14	24	1
1:A:9:VAL:HG13	1:A:39:VAL:HG23	0.73	1.58	23	14
1:A:83:ALA:HB1	1:A:87:LEU:HD21	0.73	1.60	18	5
1:A:15:ILE:HG23	1:A:19:LEU:HD12	0.73	1.58	18	1
1:A:33:PHE:HB3	1:A:38:GLU:HB3	0.73	1.57	19	25
1:A:102:LEU:CD1	1:A:114:LEU:HD22	0.73	2.13	10	13
1:A:66:LEU:HD21	1:A:80:ILE:HD11	0.73	1.59	14	4
1:A:68:GLN:OE1	1:A:68:GLN:NE2	0.73	0.62	1	1
1:A:69:ILE:CD1	1:A:78:VAL:HG21	0.73	2.14	9	6
1:A:70:LYS:CE	1:A:70:LYS:HZ2	0.73	1.44	1	1
1:A:39:VAL:HG12	1:A:43:LEU:CD1	0.73	2.14	20	17
1:A:57:MET:CE	1:A:57:MET:HG3	0.73	2.08	1	1
1:A:70:LYS:CE	1:A:70:LYS:HZ3	0.73	1.44	1	1
1:A:56:ARG:CG	1:A:56:ARG:HB2	0.72	1.28	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:PRO:O	1:A:75:MET:HG3	0.72	1.82	1	2
1:A:23:LEU:CD1	1:A:28:LEU:HD13	0.72	2.14	19	10
1:A:79:ILE:HG23	1:A:114:LEU:HD23	0.72	1.60	5	3
1:A:40:LEU:HD21	1:A:65:LEU:CD1	0.72	2.15	18	1
1:A:16:ARG:CZ	1:A:16:ARG:HH21	0.72	1.42	1	1
1:A:70:LYS:HA	1:A:73:HIS:CD2	0.72	2.20	10	1
1:A:20:GLU:OE1	1:A:20:GLU:CD	0.72	0.71	1	1
1:A:69:ILE:HG22	1:A:73:HIS:NE2	0.72	1.98	23	1
1:A:6:VAL:HG21	1:A:23:LEU:HD21	0.72	1.61	19	7
1:A:70:LYS:CE	1:A:70:LYS:HZ1	0.72	1.44	1	1
1:A:69:ILE:HG23	1:A:73:HIS:NE2	0.72	2.00	24	2
1:A:57:MET:SD	1:A:57:MET:HG2	0.71	1.59	1	1
1:A:55:ILE:HD13	1:A:82:THR:O	0.71	1.86	10	8
1:A:21:ARG:HD3	1:A:21:ARG:HH11	0.71	1.33	1	1
1:A:47:THR:CG2	1:A:76:LEU:HD13	0.71	2.14	9	2
1:A:9:VAL:HG23	1:A:52:LEU:O	0.71	1.86	18	12
1:A:48:PRO:HG2	1:A:76:LEU:HD11	0.70	1.60	14	1
1:A:34:GLU:HG2	1:A:38:GLU:CD	0.70	2.11	8	1
1:A:9:VAL:HG22	1:A:39:VAL:HG21	0.70	1.62	19	13
1:A:48:PRO:HD2	1:A:76:LEU:HD11	0.70	1.62	10	6
1:A:3:ARG:HG2	1:A:5:ILE:HD11	0.70	1.62	5	7
1:A:8:VAL:O	1:A:32:THR:HA	0.70	1.86	3	22
1:A:23:LEU:CG	1:A:23:LEU:HD13	0.69	1.23	1	1
1:A:83:ALA:HB1	1:A:87:LEU:HG	0.69	1.62	7	5
1:A:9:VAL:HG23	1:A:53:SER:HA	0.69	1.63	11	2
1:A:87:LEU:HD13	1:A:90:ALA:HB3	0.69	1.65	12	7
1:A:46:LYS:CE	1:A:46:LYS:HZ1	0.69	1.39	1	1
1:A:6:VAL:HG12	1:A:29:THR:O	0.69	1.87	25	8
1:A:63:LEU:HD13	1:A:86:ASP:HB3	0.69	1.63	6	6
1:A:6:VAL:HG21	1:A:23:LEU:CD1	0.69	2.18	18	5
1:A:23:LEU:CG	1:A:23:LEU:HD12	0.69	1.23	1	1
1:A:23:LEU:HD23	1:A:23:LEU:HD11	0.69	0.69	1	1
1:A:54:ASP:O	1:A:54:ASP:C	0.69	0.48	1	1
1:A:31:THR:HG23	1:A:33:PHE:CE1	0.69	2.22	6	23
1:A:46:LYS:CE	1:A:46:LYS:HZ2	0.69	1.39	1	1
1:A:50:VAL:CG2	1:A:79:ILE:HD11	0.69	2.18	12	18
1:A:75:MET:HA	1:A:96:GLN:O	0.69	1.88	1	11
1:A:8:VAL:HG11	1:A:19:LEU:CD1	0.69	2.17	2	3
1:A:87:LEU:HD23	1:A:90:ALA:HB3	0.69	1.62	23	9
1:A:36:GLY:HA3	1:A:65:LEU:HD22	0.69	1.62	7	5
1:A:15:ILE:CG2	1:A:19:LEU:HD12	0.69	2.18	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:80:ILE:HG13	1:A:101:TYR:CZ	0.68	2.23	21	19
1:A:3:ARG:CG	1:A:5:ILE:HD11	0.68	2.18	24	4
1:A:102:LEU:HD11	1:A:114:LEU:HD22	0.68	1.64	26	8
1:A:106:PHE:O	1:A:107:ASP:O	0.68	2.11	20	25
1:A:8:VAL:HG21	1:A:19:LEU:HD23	0.68	1.65	17	6
1:A:33:PHE:CG	1:A:39:VAL:HG22	0.68	2.23	15	11
1:A:10:ASP:HB3	1:A:15:ILE:HG21	0.68	1.65	7	6
1:A:53:SER:O	1:A:80:ILE:HA	0.68	1.89	11	9
1:A:53:SER:HB2	1:A:80:ILE:HD13	0.68	1.63	9	4
1:A:46:LYS:CE	1:A:46:LYS:HZ3	0.68	1.39	1	1
1:A:23:LEU:CD1	1:A:23:LEU:HG	0.68	1.46	1	1
1:A:21:ARG:CD	1:A:21:ARG:HE	0.68	1.42	1	1
1:A:117:ARG:CZ	1:A:117:ARG:HH21	0.68	1.39	1	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:19:LEU:HD11	0.68	0.70	1	1
1:A:52:LEU:HG	1:A:79:ILE:HB	0.68	1.65	14	5
1:A:55:ILE:HD12	1:A:82:THR:HB	0.68	1.66	16	1
1:A:69:ILE:HG21	1:A:78:VAL:HG22	0.68	1.65	17	2
1:A:56:ARG:HG2	1:A:56:ARG:HB3	0.67	0.99	1	1
1:A:21:ARG:HH11	1:A:21:ARG:CZ	0.67	1.38	1	1
1:A:21:ARG:CZ	1:A:21:ARG:HH21	0.67	1.39	1	1
1:A:69:ILE:HG21	1:A:78:VAL:CG2	0.67	2.19	22	3
1:A:21:ARG:CZ	1:A:21:ARG:HH12	0.67	1.38	1	1
1:A:93:ALA:O	1:A:96:GLN:HG3	0.67	1.89	2	11
1:A:67:LYS:O	1:A:70:LYS:HG3	0.67	1.90	16	9
1:A:26:ALA:HB3	1:A:28:LEU:CD1	0.67	2.20	18	25
1:A:23:LEU:O	1:A:28:LEU:HD12	0.67	1.90	2	15
1:A:117:ARG:CZ	1:A:117:ARG:HH22	0.67	1.39	1	1
1:A:112:VAL:O	1:A:115:VAL:HG12	0.67	1.90	18	26
1:A:80:ILE:HD13	1:A:101:TYR:CE1	0.67	2.25	16	3
1:A:9:VAL:HG11	1:A:35:ASN:C	0.67	2.15	3	2
1:A:93:ALA:C	1:A:98:ALA:HB3	0.66	2.15	2	2
1:A:6:VAL:HG11	1:A:23:LEU:HD22	0.66	1.64	20	4
1:A:80:ILE:N	1:A:80:ILE:HD12	0.66	2.05	12	3
1:A:52:LEU:HD23	1:A:79:ILE:O	0.66	1.91	4	11
1:A:65:LEU:CG	1:A:65:LEU:HD13	0.66	1.19	1	1
1:A:40:LEU:HD13	1:A:68:GLN:HB3	0.66	1.66	22	14
1:A:76:LEU:CD2	1:A:76:LEU:CG	0.66	0.66	1	1
1:A:109:ASP:OD1	1:A:109:ASP:CG	0.66	0.55	1	1
1:A:90:ALA:HB1	1:A:101:TYR:CE1	0.66	2.25	23	6
1:A:63:LEU:HD11	1:A:85:SER:HB2	0.66	1.68	22	1
1:A:56:ARG:CB	1:A:56:ARG:CG	0.66	0.78	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:ARG:CG	1:A:56:ARG:C	0.66	2.68	1	1
1:A:67:LYS:O	1:A:70:LYS:HG2	0.66	1.89	2	8
1:A:48:PRO:HD2	1:A:76:LEU:HD21	0.66	1.68	14	2
1:A:21:ARG:CZ	1:A:21:ARG:HH22	0.66	1.39	1	1
1:A:19:LEU:HG	1:A:108:ILE:HD11	0.66	1.66	18	4
1:A:8:VAL:HG21	1:A:20:GLU:OE2	0.66	1.91	7	1
1:A:51:LEU:O	1:A:78:VAL:HA	0.66	1.91	11	3
1:A:50:VAL:HG21	1:A:115:VAL:HG23	0.66	1.67	24	2
1:A:68:GLN:HA	1:A:71:GLN:NE2	0.65	2.06	1	1
1:A:9:VAL:HG13	1:A:39:VAL:CG2	0.65	2.21	16	15
1:A:65:LEU:CD1	1:A:66:LEU:HD12	0.65	2.21	12	1
1:A:50:VAL:HG21	1:A:115:VAL:CG2	0.65	2.21	24	2
1:A:65:LEU:CG	1:A:65:LEU:HD12	0.65	1.19	1	1
1:A:82:THR:HG23	1:A:84:HIS:HD2	0.65	1.52	24	1
1:A:61:ASP:OD1	1:A:61:ASP:OD2	0.65	0.65	1	1
1:A:3:ARG:HG3	1:A:5:ILE:HD11	0.65	1.68	24	2
1:A:20:GLU:OE2	1:A:20:GLU:CD	0.65	0.78	1	1
1:A:87:LEU:HD23	1:A:90:ALA:CB	0.65	2.22	5	10
1:A:40:LEU:HD21	1:A:65:LEU:HD13	0.65	1.69	18	1
1:A:43:LEU:HD13	1:A:73:HIS:CD2	0.65	2.27	13	8
1:A:40:LEU:HD13	1:A:68:GLN:HB2	0.65	1.69	25	6
1:A:63:LEU:HA	1:A:66:LEU:HD13	0.65	1.69	12	2
1:A:6:VAL:HG13	1:A:30:CYS:HA	0.64	1.67	3	12
1:A:9:VAL:CG1	1:A:39:VAL:HG23	0.64	2.22	11	21
1:A:16:ARG:HH21	1:A:16:ARG:HH12	0.64	0.95	1	1
1:A:23:LEU:HD21	1:A:23:LEU:HD12	0.64	1.03	1	1
1:A:76:LEU:HD21	1:A:76:LEU:HD12	0.64	0.67	1	1
1:A:26:ALA:HB3	1:A:28:LEU:HD11	0.64	1.69	18	15
1:A:87:LEU:HD22	1:A:90:ALA:HB3	0.64	1.67	11	1
1:A:65:LEU:HD21	1:A:78:VAL:HG11	0.64	1.70	24	1
1:A:17:TRP:O	1:A:21:ARG:HB2	0.64	1.93	18	3
1:A:8:VAL:HB	1:A:32:THR:HG22	0.64	1.68	6	6
1:A:39:VAL:HG11	1:A:51:LEU:CD2	0.64	2.23	8	1
1:A:91:VAL:HA	1:A:94:TYR:CE2	0.64	2.28	13	13
1:A:76:LEU:CD1	1:A:76:LEU:CG	0.64	0.64	1	1
1:A:19:LEU:CD1	1:A:23:LEU:HD12	0.64	2.23	16	1
1:A:19:LEU:HD22	1:A:19:LEU:HD13	0.64	1.03	1	1
1:A:19:LEU:CD1	1:A:19:LEU:CG	0.64	0.64	1	1
1:A:56:ARG:HG3	1:A:56:ARG:O	0.64	1.93	1	1
1:A:76:LEU:HD23	1:A:76:LEU:HD11	0.63	0.65	1	1
1:A:77:PRO:HB2	1:A:99:PHE:HD1	0.63	1.52	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:LEU:CG	1:A:23:LEU:HD11	0.63	1.23	1	1
1:A:62:GLY:O	1:A:65:LEU:HG	0.63	1.93	9	5
1:A:63:LEU:HD23	1:A:90:ALA:HB2	0.63	1.69	16	10
1:A:58:PRO:HD2	1:A:61:ASP:O	0.63	1.93	3	4
1:A:94:TYR:CE1	1:A:100:ASP:HA	0.63	2.28	13	8
1:A:50:VAL:HG11	1:A:119:ILE:HD11	0.63	1.70	23	4
1:A:50:VAL:HG13	1:A:50:VAL:O	0.63	1.93	18	12
1:A:63:LEU:HD21	1:A:87:LEU:HA	0.63	1.70	3	1
1:A:8:VAL:HG13	1:A:52:LEU:HB3	0.63	1.70	3	16
1:A:92:SER:O	1:A:95:GLN:NE2	0.62	2.32	8	2
1:A:117:ARG:CD	1:A:117:ARG:HB3	0.62	1.82	1	1
1:A:102:LEU:HD23	1:A:106:PHE:HD1	0.62	1.52	22	1
1:A:33:PHE:CD1	1:A:39:VAL:HG22	0.62	2.28	7	14
1:A:21:ARG:HE	1:A:21:ARG:CZ	0.62	1.45	1	1
1:A:47:THR:CG2	1:A:76:LEU:HD23	0.62	2.23	2	2
1:A:83:ALA:HB1	1:A:87:LEU:CD2	0.62	2.24	14	6
1:A:48:PRO:O	1:A:76:LEU:HD21	0.62	1.94	24	2
1:A:6:VAL:HG21	1:A:23:LEU:CD2	0.62	2.24	19	8
1:A:73:HIS:CB	1:A:76:LEU:HB2	0.62	2.24	12	2
1:A:87:LEU:O	1:A:87:LEU:HD13	0.62	1.94	20	2
1:A:51:LEU:O	1:A:79:ILE:HD12	0.62	1.94	18	11
1:A:8:VAL:HG21	1:A:20:GLU:OE1	0.62	1.95	4	1
1:A:53:SER:OG	1:A:65:LEU:HD23	0.62	1.93	17	1
1:A:66:LEU:HD13	1:A:93:ALA:CB	0.62	2.24	21	8
1:A:74:PRO:HA	1:A:96:GLN:HB2	0.62	1.72	6	1
1:A:36:GLY:HA3	1:A:65:LEU:HD21	0.62	1.70	22	3
1:A:55:ILE:HG13	1:A:61:ASP:O	0.61	1.95	3	7
1:A:19:LEU:HD23	1:A:108:ILE:HD11	0.61	1.72	12	3
1:A:79:ILE:CD1	1:A:115:VAL:HG23	0.61	2.25	22	4
1:A:56:ARG:CB	1:A:56:ARG:HD3	0.61	2.13	1	1
1:A:65:LEU:CD2	1:A:69:ILE:HD11	0.61	2.25	21	2
1:A:23:LEU:CD1	1:A:23:LEU:HD22	0.61	1.19	1	1
1:A:90:ALA:O	1:A:93:ALA:HB3	0.61	1.96	26	16
1:A:55:ILE:HG22	1:A:81:MET:HG2	0.61	1.70	22	1
1:A:43:LEU:HD21	1:A:48:PRO:HD2	0.61	1.72	13	20
1:A:99:PHE:CD2	1:A:118:ALA:HB2	0.61	2.31	21	1
1:A:69:ILE:HG22	1:A:73:HIS:HE2	0.61	1.55	23	1
1:A:106:PHE:O	1:A:110:GLU:HB2	0.61	1.94	21	26
1:A:38:GLU:CD	1:A:38:GLU:H	0.61	2.02	8	1
1:A:6:VAL:HG11	1:A:23:LEU:CD1	0.61	2.26	15	4
1:A:23:LEU:CD1	1:A:23:LEU:HD23	0.61	1.42	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:63:LEU:HD11	1:A:90:ALA:HB2	0.61	1.71	13	1
1:A:76:LEU:CD2	1:A:76:LEU:HD12	0.60	1.26	1	1
1:A:94:TYR:CD1	1:A:94:TYR:CG	0.60	0.73	1	1
1:A:53:SER:CB	1:A:65:LEU:HD22	0.60	2.26	24	1
1:A:3:ARG:HB3	1:A:5:ILE:HD11	0.60	1.72	12	7
1:A:81:MET:HE2	1:A:106:PHE:CD2	0.60	2.30	19	1
1:A:79:ILE:HG21	1:A:114:LEU:HD23	0.60	1.73	4	7
1:A:48:PRO:HG2	1:A:76:LEU:HD21	0.60	1.72	17	1
1:A:94:TYR:HA	1:A:98:ALA:HB3	0.60	1.74	11	5
1:A:80:ILE:HG21	1:A:101:TYR:CE2	0.60	2.31	25	8
1:A:92:SER:O	1:A:95:GLN:HG3	0.60	1.97	18	6
1:A:83:ALA:CB	1:A:87:LEU:HD23	0.60	2.25	11	1
1:A:83:ALA:HB2	1:A:101:TYR:CG	0.60	2.32	23	2
1:A:94:TYR:CZ	1:A:94:TYR:CE2	0.60	0.70	1	1
1:A:50:VAL:HG22	1:A:79:ILE:HD11	0.60	1.72	26	3
1:A:76:LEU:CD1	1:A:76:LEU:HG	0.60	1.59	1	1
1:A:36:GLY:HA2	1:A:65:LEU:HD21	0.60	1.74	8	2
1:A:43:LEU:HD13	1:A:73:HIS:HE2	0.60	1.55	16	1
1:A:6:VAL:HG21	1:A:23:LEU:HD11	0.59	1.73	6	4
1:A:58:PRO:HG3	1:A:65:LEU:HD21	0.59	1.73	14	2
1:A:34:GLU:HG3	1:A:35:ASN:N	0.59	2.12	1	1
1:A:34:GLU:HG2	1:A:35:ASN:N	0.59	2.10	26	5
1:A:7:TRP:CH2	1:A:46:LYS:HG2	0.59	2.32	17	2
1:A:69:ILE:O	1:A:73:HIS:CD2	0.59	2.55	23	2
1:A:63:LEU:CB	1:A:89:ALA:HB3	0.59	2.27	19	10
1:A:16:ARG:CA	1:A:32:THR:HG21	0.59	2.27	4	6
1:A:6:VAL:HG23	1:A:50:VAL:CG1	0.59	2.27	22	11
1:A:60:MET:O	1:A:62:GLY:N	0.59	2.36	20	9
1:A:66:LEU:CD1	1:A:90:ALA:HA	0.59	2.27	13	1
1:A:55:ILE:HA	1:A:62:GLY:HA3	0.59	1.75	19	6
1:A:36:GLY:C	1:A:65:LEU:HD21	0.59	2.21	22	2
1:A:21:ARG:CZ	1:A:21:ARG:NH2	0.59	0.74	1	1
1:A:39:VAL:HG11	1:A:51:LEU:HD21	0.59	1.74	8	1
1:A:81:MET:O	1:A:102:LEU:O	0.59	2.21	22	3
1:A:73:HIS:CE1	1:A:76:LEU:HG	0.59	2.33	24	1
1:A:23:LEU:HD22	1:A:23:LEU:HD13	0.59	0.68	1	1
1:A:65:LEU:HG	1:A:65:LEU:N	0.59	2.12	1	1
1:A:66:LEU:HD22	1:A:93:ALA:CB	0.59	2.25	3	1
1:A:23:LEU:O	1:A:23:LEU:HD13	0.59	1.98	14	5
1:A:43:LEU:HD23	1:A:46:LYS:O	0.58	1.98	20	11
1:A:54:ASP:O	1:A:55:ILE:HG22	0.58	1.98	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:LEU:CD1	1:A:76:LEU:HD23	0.58	1.27	1	1
1:A:91:VAL:HA	1:A:94:TYR:CD2	0.58	2.33	8	19
1:A:19:LEU:HD11	1:A:112:VAL:HG22	0.58	1.74	9	2
1:A:117:ARG:CZ	1:A:117:ARG:NH2	0.58	0.74	1	1
1:A:11:ASP:O	1:A:12:ASP:HB2	0.58	1.97	4	3
1:A:21:ARG:NH1	1:A:21:ARG:CZ	0.58	0.73	1	1
1:A:55:ILE:CG2	1:A:82:THR:HB	0.58	2.29	24	4
1:A:16:ARG:O	1:A:20:GLU:CG	0.58	2.51	1	5
1:A:28:LEU:CD2	1:A:119:ILE:HD13	0.58	2.28	3	4
1:A:80:ILE:HD13	1:A:101:TYR:CD1	0.58	2.34	15	2
1:A:66:LEU:HD23	1:A:78:VAL:HG11	0.58	1.76	16	2
1:A:66:LEU:HD11	1:A:80:ILE:HD11	0.58	1.75	11	2
1:A:79:ILE:HG21	1:A:114:LEU:CD2	0.58	2.28	4	2
1:A:112:VAL:HG12	1:A:116:GLU:OE2	0.58	1.98	6	2
1:A:19:LEU:CD2	1:A:108:ILE:HD11	0.58	2.29	26	3
1:A:9:VAL:HG22	1:A:39:VAL:HG23	0.58	1.74	3	1
1:A:37:ASN:HA	1:A:40:LEU:CD1	0.58	2.29	6	2
1:A:93:ALA:HA	1:A:96:GLN:CD	0.57	2.24	12	2
1:A:19:LEU:HD12	1:A:23:LEU:HD12	0.57	1.76	16	2
1:A:47:THR:CG2	1:A:76:LEU:HD12	0.57	2.26	22	2
1:A:19:LEU:CD1	1:A:108:ILE:HD11	0.57	2.29	15	1
1:A:55:ILE:HG21	1:A:82:THR:H	0.57	1.59	16	2
1:A:94:TYR:CG	1:A:94:TYR:CD2	0.57	0.70	1	1
1:A:39:VAL:HG12	1:A:43:LEU:HD11	0.57	1.76	22	5
1:A:73:HIS:HB2	1:A:76:LEU:HB2	0.57	1.76	12	1
1:A:19:LEU:CD1	1:A:19:LEU:CA	0.57	2.81	1	1
1:A:77:PRO:HB2	1:A:99:PHE:CD1	0.57	2.35	12	1
1:A:81:MET:HB2	1:A:106:PHE:CD2	0.57	2.35	21	1
1:A:21:ARG:CD	1:A:21:ARG:HH11	0.57	1.65	1	1
1:A:39:VAL:C	1:A:43:LEU:HD12	0.57	2.25	17	2
1:A:20:GLU:OE1	1:A:20:GLU:CB	0.56	2.44	1	1
1:A:66:LEU:HD11	1:A:80:ILE:HG13	0.56	1.77	23	2
1:A:73:HIS:N	1:A:73:HIS:CD2	0.56	2.73	17	6
1:A:40:LEU:HB3	1:A:72:ARG:HD2	0.56	1.76	9	1
1:A:55:ILE:HB	1:A:80:ILE:HG23	0.56	1.76	16	4
1:A:66:LEU:HD23	1:A:69:ILE:HD12	0.56	1.77	13	2
1:A:81:MET:O	1:A:102:LEU:HB2	0.56	2.00	26	2
1:A:63:LEU:HD22	1:A:86:ASP:O	0.56	1.99	3	11
1:A:6:VAL:O	1:A:30:CYS:HA	0.56	2.01	18	11
1:A:43:LEU:CD1	1:A:73:HIS:CE1	0.56	2.88	24	5
1:A:100:ASP:OD1	1:A:114:LEU:HD21	0.56	1.99	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:65:LEU:HG	1:A:65:LEU:HB2	0.56	1.17	1	1
1:A:65:LEU:O	1:A:69:ILE:HG13	0.56	2.00	9	7
1:A:19:LEU:O	1:A:23:LEU:HB2	0.56	2.00	21	9
1:A:93:ALA:CB	1:A:98:ALA:HB2	0.56	2.29	6	1
1:A:114:LEU:HD12	1:A:117:ARG:HD3	0.56	1.77	10	1
1:A:83:ALA:O	1:A:84:HIS:O	0.56	2.24	1	2
1:A:106:PHE:HA	1:A:110:GLU:HB2	0.56	1.78	18	2
1:A:102:LEU:HB3	1:A:106:PHE:CE1	0.56	2.36	6	1
1:A:9:VAL:CG2	1:A:39:VAL:HG21	0.56	2.31	14	8
1:A:9:VAL:CG2	1:A:53:SER:HA	0.56	2.31	11	3
1:A:23:LEU:HD23	1:A:28:LEU:CD1	0.56	2.31	20	2
1:A:54:ASP:O	1:A:55:ILE:N	0.56	0.42	1	1
1:A:102:LEU:HD23	1:A:105:PRO:O	0.56	2.00	12	2
1:A:94:TYR:CZ	1:A:94:TYR:CE1	0.56	0.67	1	1
1:A:36:GLY:HA3	1:A:65:LEU:HD13	0.56	1.77	11	1
1:A:18:VAL:HG12	1:A:108:ILE:CG1	0.56	2.30	20	3
1:A:33:PHE:HB3	1:A:38:GLU:CB	0.55	2.31	11	10
1:A:102:LEU:HD23	1:A:106:PHE:HA	0.55	1.77	8	10
1:A:66:LEU:HD21	1:A:80:ILE:CD1	0.55	2.31	11	3
1:A:108:ILE:HG23	1:A:109:ASP:N	0.55	2.15	22	1
1:A:20:GLU:HA	1:A:30:CYS:HB3	0.55	1.79	26	10
1:A:43:LEU:HB3	1:A:73:HIS:NE2	0.55	2.15	6	3
1:A:9:VAL:HB	1:A:35:ASN:C	0.55	2.26	25	3
1:A:95:GLN:HG2	1:A:96:GLN:N	0.55	2.15	12	7
1:A:104:LYS:HB2	1:A:105:PRO:HD3	0.55	1.78	9	2
1:A:7:TRP:CG	1:A:48:PRO:HB3	0.55	2.36	26	4
1:A:35:ASN:CG	1:A:35:ASN:HD21	0.55	1.21	1	1
1:A:63:LEU:HD11	1:A:84:HIS:O	0.55	2.01	4	1
1:A:99:PHE:CZ	1:A:118:ALA:HB2	0.55	2.37	17	5
1:A:63:LEU:HA	1:A:66:LEU:HD12	0.55	1.78	2	1
1:A:94:TYR:N	1:A:98:ALA:HB3	0.55	2.17	18	5
1:A:107:ASP:O	1:A:111:ALA:CB	0.55	2.55	18	14
1:A:58:PRO:CD	1:A:62:GLY:HA2	0.55	2.31	16	5
1:A:66:LEU:HD21	1:A:80:ILE:HG13	0.55	1.78	20	1
1:A:39:VAL:HG12	1:A:43:LEU:HG	0.55	1.78	2	5
1:A:35:ASN:CG	1:A:35:ASN:HD22	0.55	1.21	1	1
1:A:76:LEU:CD2	1:A:76:LEU:HG	0.55	1.61	1	1
1:A:28:LEU:HD22	1:A:119:ILE:HD13	0.55	1.78	3	2
1:A:47:THR:HG23	1:A:76:LEU:CD2	0.55	2.32	21	4
1:A:66:LEU:HD11	1:A:101:TYR:OH	0.55	2.02	4	2
1:A:94:TYR:HA	1:A:98:ALA:O	0.55	2.02	25	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:LYS:H	1:A:105:PRO:HD2	0.54	1.62	26	14
1:A:114:LEU:HA	1:A:117:ARG:HD3	0.54	1.78	3	2
1:A:93:ALA:HB1	1:A:98:ALA:CB	0.54	2.32	16	7
1:A:53:SER:HB2	1:A:80:ILE:CD1	0.54	2.32	21	4
1:A:20:GLU:HG3	1:A:21:ARG:N	0.54	2.17	1	20
1:A:37:ASN:HA	1:A:40:LEU:HD12	0.54	1.79	23	3
1:A:9:VAL:CG1	1:A:33:PHE:HB2	0.54	2.32	10	12
1:A:54:ASP:CG	1:A:54:ASP:C	0.54	2.74	1	1
1:A:81:MET:CB	1:A:106:PHE:CE1	0.54	2.91	7	3
1:A:112:VAL:HA	1:A:115:VAL:HG12	0.54	1.80	13	17
1:A:60:MET:HB3	1:A:64:ALA:CB	0.54	2.26	22	6
1:A:55:ILE:HG21	1:A:82:THR:N	0.54	2.18	16	1
1:A:53:SER:HB2	1:A:65:LEU:HD22	0.54	1.78	24	1
1:A:65:LEU:HG	1:A:69:ILE:HD11	0.54	1.80	24	2
1:A:63:LEU:HA	1:A:66:LEU:CD1	0.54	2.33	17	2
1:A:33:PHE:CE2	1:A:39:VAL:HA	0.54	2.37	15	3
1:A:34:GLU:OE2	1:A:38:GLU:HG3	0.54	2.03	8	1
1:A:63:LEU:HB3	1:A:89:ALA:HB3	0.54	1.80	20	3
1:A:76:LEU:HD12	1:A:77:PRO:HD2	0.54	1.78	20	1
1:A:36:GLY:O	1:A:40:LEU:HG	0.54	2.03	24	6
1:A:16:ARG:HG2	1:A:20:GLU:HG3	0.53	1.80	4	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:19:LEU:CD2	0.53	2.33	15	4
1:A:102:LEU:HD11	1:A:114:LEU:CD2	0.53	2.33	26	2
1:A:58:PRO:HG3	1:A:65:LEU:HG	0.53	1.79	10	1
1:A:16:ARG:NH2	1:A:16:ARG:NH1	0.53	0.63	1	1
1:A:57:MET:HB3	1:A:58:PRO:CD	0.53	2.34	19	5
1:A:12:ASP:O	1:A:14:SER:N	0.53	2.41	25	9
1:A:7:TRP:CD1	1:A:31:THR:CG2	0.53	2.91	8	14
1:A:43:LEU:HD21	1:A:48:PRO:CD	0.53	2.34	18	11
1:A:55:ILE:HB	1:A:80:ILE:CG2	0.53	2.33	7	7
1:A:23:LEU:HD11	1:A:28:LEU:HB2	0.53	1.81	14	6
1:A:66:LEU:HD11	1:A:101:TYR:CE1	0.53	2.38	13	1
1:A:104:LYS:HB3	1:A:105:PRO:HD3	0.53	1.81	20	3
1:A:33:PHE:CE1	1:A:39:VAL:HG22	0.53	2.39	21	3
1:A:66:LEU:HG	1:A:93:ALA:CB	0.53	2.34	25	1
1:A:74:PRO:O	1:A:75:MET:CG	0.53	2.49	1	1
1:A:23:LEU:HD12	1:A:28:LEU:CD1	0.53	2.33	10	7
1:A:82:THR:HG21	1:A:84:HIS:CE1	0.53	2.39	4	2
1:A:6:VAL:HG11	1:A:23:LEU:CG	0.53	2.33	24	8
1:A:56:ARG:O	1:A:57:MET:CB	0.53	2.56	5	1
1:A:90:ALA:CB	1:A:101:TYR:CZ	0.53	2.92	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:GLY:HA3	1:A:65:LEU:HD11	0.53	1.80	20	2
1:A:32:THR:C	1:A:33:PHE:CD1	0.53	2.87	21	20
1:A:9:VAL:HG11	1:A:36:GLY:CA	0.53	2.31	7	9
1:A:43:LEU:CD2	1:A:48:PRO:HD2	0.53	2.33	13	5
1:A:48:PRO:CD	1:A:76:LEU:HD11	0.53	2.34	22	5
1:A:90:ALA:HB1	1:A:101:TYR:CD1	0.53	2.39	11	1
1:A:84:HIS:H	1:A:84:HIS:CD2	0.53	2.22	24	1
1:A:43:LEU:HB3	1:A:73:HIS:CE1	0.53	2.39	3	6
1:A:39:VAL:HG11	1:A:51:LEU:CD1	0.53	2.32	19	5
1:A:83:ALA:HB2	1:A:101:TYR:HD2	0.53	1.56	11	3
1:A:23:LEU:CD2	1:A:23:LEU:HD13	0.52	1.09	1	1
1:A:109:ASP:O	1:A:113:ALA:HB2	0.52	2.03	6	22
1:A:55:ILE:HG23	1:A:55:ILE:O	0.52	2.04	26	8
1:A:43:LEU:HD22	1:A:73:HIS:CE1	0.52	2.39	3	1
1:A:50:VAL:HG11	1:A:115:VAL:HG22	0.52	1.81	20	1
1:A:13:SER:CB	1:A:13:SER:HG	0.52	1.24	1	1
1:A:60:MET:C	1:A:62:GLY:H	0.52	2.10	13	13
1:A:107:ASP:O	1:A:111:ALA:HB3	0.52	2.04	18	1
1:A:23:LEU:CD1	1:A:23:LEU:CD2	0.52	0.53	1	1
1:A:23:LEU:CD1	1:A:28:LEU:CD1	0.52	2.87	22	9
1:A:49:ASP:OD2	1:A:119:ILE:HG12	0.52	2.03	21	1
1:A:54:ASP:O	1:A:55:ILE:CG2	0.52	2.56	5	6
1:A:33:PHE:CD2	1:A:39:VAL:HG22	0.52	2.39	23	2
1:A:69:ILE:HA	1:A:73:HIS:CE1	0.52	2.39	17	1
1:A:53:SER:OG	1:A:65:LEU:HD22	0.52	2.04	20	1
1:A:16:ARG:HA	1:A:20:GLU:CG	0.52	2.35	7	2
1:A:87:LEU:O	1:A:90:ALA:HB3	0.52	2.05	8	6
1:A:19:LEU:HD13	1:A:108:ILE:HD11	0.52	1.81	15	2
1:A:11:ASP:OD2	1:A:11:ASP:OD1	0.52	0.54	1	1
1:A:55:ILE:HG22	1:A:81:MET:CG	0.52	2.34	2	2
1:A:34:GLU:HG2	1:A:38:GLU:HG3	0.52	1.81	16	1
1:A:37:ASN:ND2	1:A:40:LEU:HD12	0.52	2.20	6	2
1:A:43:LEU:CB	1:A:73:HIS:CE1	0.52	2.93	7	8
1:A:66:LEU:CD2	1:A:78:VAL:HG11	0.51	2.35	16	2
1:A:74:PRO:O	1:A:75:MET:HG2	0.51	2.05	20	2
1:A:20:GLU:HA	1:A:30:CYS:CB	0.51	2.35	21	2
1:A:83:ALA:CB	1:A:101:TYR:CD2	0.51	2.91	18	3
1:A:55:ILE:CG2	1:A:81:MET:HG3	0.51	2.35	19	1
1:A:9:VAL:HG13	1:A:33:PHE:CB	0.51	2.25	4	1
1:A:82:THR:HG22	1:A:84:HIS:H	0.51	1.65	9	2
1:A:21:ARG:HD2	1:A:21:ARG:H	0.51	1.64	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:ILE:CG2	1:A:76:LEU:HB3	0.51	2.35	3	1
1:A:33:PHE:CB	1:A:38:GLU:OE1	0.51	2.58	8	1
1:A:31:THR:HG23	1:A:33:PHE:HE1	0.51	1.66	25	3
1:A:75:MET:HB2	1:A:96:GLN:O	0.51	2.04	20	1
1:A:94:TYR:CG	1:A:94:TYR:HD1	0.51	1.26	1	1
1:A:93:ALA:O	1:A:97:GLY:N	0.51	2.42	25	5
1:A:12:ASP:O	1:A:16:ARG:N	0.51	2.44	18	2
1:A:69:ILE:CG1	1:A:73:HIS:CE1	0.51	2.93	20	1
1:A:9:VAL:HG22	1:A:52:LEU:O	0.51	2.06	21	1
1:A:50:VAL:HG22	1:A:51:LEU:N	0.51	2.21	24	10
1:A:43:LEU:HB2	1:A:73:HIS:CE1	0.51	2.41	8	3
1:A:102:LEU:HD21	1:A:106:PHE:HA	0.51	1.83	25	2
1:A:58:PRO:HB2	1:A:64:ALA:HB3	0.51	1.82	5	1
1:A:69:ILE:HG23	1:A:73:HIS:HD1	0.51	1.66	5	1
1:A:5:ILE:HG21	1:A:46:LYS:NZ	0.51	2.19	26	2
1:A:92:SER:HA	1:A:95:GLN:CG	0.51	2.35	11	1
1:A:83:ALA:HB1	1:A:87:LEU:HD22	0.51	1.83	14	1
1:A:69:ILE:HG22	1:A:96:GLN:OE1	0.51	2.06	19	2
1:A:33:PHE:N	1:A:33:PHE:CD1	0.51	2.79	26	5
1:A:70:LYS:HB3	1:A:96:GLN:HG3	0.51	1.82	8	2
1:A:58:PRO:HD2	1:A:62:GLY:N	0.51	2.21	17	9
1:A:17:TRP:O	1:A:21:ARG:HD2	0.51	2.05	17	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:112:VAL:HG22	0.51	2.35	25	1
1:A:16:ARG:O	1:A:20:GLU:HB2	0.51	2.06	7	2
1:A:19:LEU:HD22	1:A:108:ILE:HD11	0.51	1.83	26	1
1:A:26:ALA:CB	1:A:28:LEU:HD11	0.51	2.35	19	9
1:A:55:ILE:CG2	1:A:82:THR:H	0.51	2.19	24	2
1:A:43:LEU:HA	1:A:46:LYS:O	0.50	2.06	11	12
1:A:53:SER:HB3	1:A:80:ILE:HD12	0.50	1.80	24	1
1:A:95:GLN:NE2	1:A:96:GLN:HG3	0.50	2.20	25	1
1:A:66:LEU:O	1:A:69:ILE:HB	0.50	2.06	5	2
1:A:55:ILE:HG21	1:A:82:THR:HB	0.50	1.82	24	2
1:A:66:LEU:HG	1:A:93:ALA:HB2	0.50	1.82	25	1
1:A:36:GLY:CA	1:A:65:LEU:HD23	0.50	2.32	1	1
1:A:7:TRP:HB2	1:A:48:PRO:HG3	0.50	1.83	13	3
1:A:9:VAL:CG1	1:A:39:VAL:CG2	0.50	2.89	21	9
1:A:58:PRO:CG	1:A:62:GLY:HA2	0.50	2.36	12	4
1:A:70:LYS:CB	1:A:96:GLN:HG3	0.50	2.37	8	1
1:A:93:ALA:HA	1:A:96:GLN:OE1	0.50	2.07	10	1
1:A:106:PHE:CA	1:A:110:GLU:HB2	0.50	2.36	18	2
1:A:8:VAL:HA	1:A:52:LEU:O	0.50	2.07	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:MET:N	1:A:58:PRO:CD	0.50	2.75	6	15
1:A:79:ILE:HG23	1:A:114:LEU:CD2	0.50	2.35	5	2
1:A:8:VAL:HG11	1:A:19:LEU:HD23	0.50	1.82	20	4
1:A:76:LEU:HD23	1:A:77:PRO:HD2	0.50	1.82	6	3
1:A:5:ILE:HG23	1:A:29:THR:HB	0.50	1.83	7	1
1:A:4:GLY:O	1:A:28:LEU:HB3	0.50	2.07	13	6
1:A:80:ILE:HB	1:A:101:TYR:CZ	0.50	2.42	13	1
1:A:10:ASP:O	1:A:12:ASP:N	0.50	2.44	1	3
1:A:23:LEU:CD1	1:A:23:LEU:CG	0.50	0.50	1	1
1:A:39:VAL:HG12	1:A:43:LEU:CG	0.50	2.37	2	2
1:A:57:MET:CB	1:A:58:PRO:CD	0.50	2.90	8	3
1:A:63:LEU:HD12	1:A:63:LEU:H	0.50	1.66	1	17
1:A:94:TYR:CG	1:A:94:TYR:HD2	0.50	1.25	1	1
1:A:6:VAL:CG1	1:A:23:LEU:HD23	0.50	2.36	7	2
1:A:89:ALA:O	1:A:93:ALA:HB2	0.50	2.07	10	1
1:A:79:ILE:HG12	1:A:99:PHE:CD2	0.50	2.42	12	1
1:A:6:VAL:CG1	1:A:23:LEU:CD1	0.50	2.89	24	2
1:A:74:PRO:C	1:A:75:MET:HG3	0.49	2.23	1	2
1:A:20:GLU:CG	1:A:21:ARG:N	0.49	2.75	10	20
1:A:23:LEU:CD1	1:A:23:LEU:HD21	0.49	1.03	1	1
1:A:36:GLY:HA3	1:A:65:LEU:CD2	0.49	2.32	1	1
1:A:57:MET:HA	1:A:61:ASP:HA	0.49	1.84	4	5
1:A:43:LEU:HD22	1:A:73:HIS:CD2	0.49	2.42	14	1
1:A:94:TYR:CZ	1:A:94:TYR:HE2	0.49	1.25	1	1
1:A:80:ILE:HD12	1:A:80:ILE:H	0.49	1.67	15	3
1:A:16:ARG:HA	1:A:20:GLU:HG3	0.49	1.84	18	1
1:A:57:MET:HB3	1:A:58:PRO:HD3	0.49	1.84	2	4
1:A:76:LEU:HD22	1:A:77:PRO:HD2	0.49	1.84	12	2
1:A:70:LYS:HB3	1:A:96:GLN:CB	0.49	2.37	9	4
1:A:55:ILE:HG13	1:A:62:GLY:N	0.49	2.22	19	4
1:A:55:ILE:O	1:A:56:ARG:CG	0.49	2.61	8	1
1:A:90:ALA:CB	1:A:101:TYR:CE1	0.49	2.96	19	5
1:A:70:LYS:HA	1:A:73:HIS:CE1	0.49	2.42	23	1
1:A:33:PHE:CD1	1:A:33:PHE:N	0.49	2.81	14	17
1:A:60:MET:H	1:A:64:ALA:HB2	0.49	1.68	3	2
1:A:63:LEU:HD12	1:A:101:TYR:OH	0.49	2.08	13	1
1:A:19:LEU:HD21	1:A:112:VAL:HG22	0.49	1.83	25	1
1:A:19:LEU:HD12	1:A:19:LEU:HD21	0.49	1.43	1	1
1:A:99:PHE:CE1	1:A:118:ALA:HA	0.49	2.41	24	7
1:A:80:ILE:HG12	1:A:101:TYR:CZ	0.49	2.43	12	2
1:A:21:ARG:O	1:A:24:ALA:HB3	0.49	2.07	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:LEU:HD11	1:A:28:LEU:HD13	0.49	1.85	19	1
1:A:80:ILE:N	1:A:80:ILE:CD1	0.49	2.75	12	2
1:A:73:HIS:CE1	1:A:76:LEU:CB	0.49	2.95	24	1
1:A:99:PHE:CZ	1:A:118:ALA:HA	0.49	2.42	9	6
1:A:92:SER:O	1:A:95:GLN:HB3	0.49	2.07	10	2
1:A:108:ILE:HG23	1:A:109:ASP:H	0.49	1.68	22	1
1:A:117:ARG:CD	1:A:117:ARG:HE	0.49	1.29	1	1
1:A:81:MET:HB2	1:A:106:PHE:CE1	0.49	2.43	22	6
1:A:56:ARG:O	1:A:58:PRO:HD2	0.49	2.07	5	1
1:A:20:GLU:O	1:A:24:ALA:HB2	0.48	2.08	2	2
1:A:33:PHE:HB3	1:A:38:GLU:OE1	0.48	2.08	8	1
1:A:16:ARG:NH2	1:A:16:ARG:HH12	0.48	0.37	1	1
1:A:55:ILE:HG21	1:A:80:ILE:HG22	0.48	1.85	17	4
1:A:36:GLY:HA2	1:A:65:LEU:HD11	0.48	1.85	15	1
1:A:55:ILE:HG12	1:A:56:ARG:N	0.48	2.23	8	1
1:A:63:LEU:HG	1:A:89:ALA:HB3	0.48	1.84	13	1
1:A:48:PRO:CG	1:A:76:LEU:HD11	0.48	2.34	14	1
1:A:94:TYR:CZ	1:A:94:TYR:HE1	0.48	1.23	1	1
1:A:81:MET:HB3	1:A:106:PHE:CE1	0.48	2.43	14	6
1:A:97:GLY:O	1:A:98:ALA:C	0.48	2.55	10	1
1:A:15:ILE:HG22	1:A:19:LEU:HD12	0.48	1.85	14	1
1:A:36:GLY:HA3	1:A:65:LEU:HB3	0.48	1.85	26	1
1:A:50:VAL:HG23	1:A:79:ILE:HD11	0.48	1.85	3	3
1:A:81:MET:O	1:A:106:PHE:HE1	0.48	1.92	22	1
1:A:5:ILE:HD12	1:A:5:ILE:N	0.48	2.22	1	2
1:A:16:ARG:NH1	1:A:16:ARG:HH22	0.48	1.07	1	1
1:A:99:PHE:O	1:A:100:ASP:HB3	0.48	2.08	12	4
1:A:58:PRO:HD2	1:A:62:GLY:HA2	0.48	1.85	10	1
1:A:23:LEU:CD2	1:A:23:LEU:HD11	0.48	0.54	1	1
1:A:63:LEU:HB2	1:A:89:ALA:HB3	0.48	1.84	3	4
1:A:55:ILE:CG1	1:A:56:ARG:N	0.48	2.77	22	2
1:A:19:LEU:HD23	1:A:108:ILE:CD1	0.48	2.39	16	1
1:A:69:ILE:HA	1:A:73:HIS:CD2	0.48	2.43	22	5
1:A:9:VAL:HG11	1:A:36:GLY:N	0.48	2.24	9	2
1:A:63:LEU:O	1:A:66:LEU:HB2	0.48	2.09	9	1
1:A:9:VAL:HG11	1:A:39:VAL:HG23	0.48	1.85	11	1
1:A:30:CYS:SG	1:A:30:CYS:C	0.47	2.97	1	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:19:LEU:HD12	0.47	1.84	2	1
1:A:63:LEU:CD2	1:A:101:TYR:OH	0.47	2.62	9	1
1:A:83:ALA:O	1:A:87:LEU:HG	0.47	2.09	19	3
1:A:63:LEU:CD2	1:A:87:LEU:HA	0.47	2.39	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:PHE:CE2	1:A:118:ALA:HB2	0.47	2.44	13	5
1:A:73:HIS:CD2	1:A:73:HIS:N	0.47	2.81	13	1
1:A:102:LEU:HG	1:A:106:PHE:CB	0.47	2.39	21	1
1:A:50:VAL:CG2	1:A:115:VAL:HG23	0.47	2.40	24	1
1:A:73:HIS:ND1	1:A:76:LEU:HB2	0.47	2.24	24	1
1:A:9:VAL:HG22	1:A:39:VAL:CG2	0.47	2.39	4	3
1:A:99:PHE:CE1	1:A:118:ALA:CB	0.47	2.97	17	2
1:A:76:LEU:C	1:A:76:LEU:HD13	0.47	2.34	4	1
1:A:10:ASP:CB	1:A:15:ILE:HG21	0.47	2.37	7	3
1:A:82:THR:HA	1:A:102:LEU:O	0.47	2.10	8	2
1:A:70:LYS:HB2	1:A:96:GLN:HB2	0.47	1.86	26	2
1:A:55:ILE:CD1	1:A:84:HIS:CE1	0.47	2.98	23	2
1:A:87:LEU:HD13	1:A:87:LEU:C	0.47	2.34	11	2
1:A:81:MET:HB2	1:A:106:PHE:CD1	0.47	2.44	16	3
1:A:66:LEU:HD21	1:A:80:ILE:CG1	0.47	2.38	20	1
1:A:62:GLY:O	1:A:65:LEU:CD2	0.47	2.63	26	1
1:A:81:MET:O	1:A:102:LEU:HB3	0.47	2.10	19	4
1:A:114:LEU:HD12	1:A:117:ARG:HD2	0.47	1.85	15	2
1:A:40:LEU:CD1	1:A:68:GLN:CB	0.47	2.92	23	2
1:A:51:LEU:HB3	1:A:77:PRO:O	0.47	2.10	3	1
1:A:63:LEU:HD13	1:A:86:ASP:CB	0.47	2.37	6	2
1:A:43:LEU:HD12	1:A:73:HIS:NE2	0.47	2.25	8	1
1:A:93:ALA:O	1:A:96:GLN:HG2	0.47	2.10	11	1
1:A:40:LEU:CD1	1:A:68:GLN:HB3	0.47	2.40	16	2
1:A:99:PHE:CZ	1:A:118:ALA:HB1	0.47	2.45	12	1
1:A:81:MET:HB2	1:A:106:PHE:CG	0.47	2.45	18	1
1:A:104:LYS:O	1:A:106:PHE:CE1	0.47	2.67	18	1
1:A:55:ILE:CG2	1:A:81:MET:HG2	0.47	2.40	22	1
1:A:5:ILE:HD13	1:A:5:ILE:N	0.47	2.25	3	1
1:A:34:GLU:HG2	1:A:38:GLU:OE2	0.47	2.09	8	1
1:A:81:MET:HB3	1:A:106:PHE:CZ	0.47	2.45	12	1
1:A:33:PHE:CD1	1:A:39:VAL:CG2	0.47	2.98	21	2
1:A:116:GLU:OE2	1:A:116:GLU:OE1	0.47	0.47	1	1
1:A:63:LEU:CD2	1:A:90:ALA:HB2	0.47	2.40	14	4
1:A:13:SER:OG	1:A:14:SER:N	0.47	2.48	15	7
1:A:16:ARG:HA	1:A:32:THR:CG2	0.47	2.38	4	2
1:A:8:VAL:HG13	1:A:52:LEU:CB	0.47	2.39	5	3
1:A:74:PRO:O	1:A:96:GLN:O	0.47	2.33	12	1
1:A:55:ILE:HG23	1:A:82:THR:HB	0.47	1.85	16	1
1:A:65:LEU:CG	1:A:69:ILE:HD11	0.47	2.40	24	1
1:A:70:LYS:HB3	1:A:96:GLN:CG	0.47	2.40	25	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:ARG:HH12	1:A:16:ARG:HH22	0.46	0.56	1	1
1:A:53:SER:HB3	1:A:65:LEU:HD12	0.46	1.87	7	1
1:A:36:GLY:C	1:A:65:LEU:HD11	0.46	2.35	13	1
1:A:81:MET:CE	1:A:106:PHE:CD2	0.46	2.98	19	1
1:A:63:LEU:HG	1:A:101:TYR:OH	0.46	2.10	12	2
1:A:6:VAL:O	1:A:6:VAL:HG13	0.46	2.09	14	3
1:A:94:TYR:CA	1:A:98:ALA:HB3	0.46	2.39	11	3
1:A:66:LEU:HD11	1:A:80:ILE:CD1	0.46	2.39	17	1
1:A:16:ARG:CB	1:A:32:THR:HG21	0.46	2.39	22	2
1:A:33:PHE:HE2	1:A:42:ALA:HB3	0.46	1.71	26	1
1:A:61:ASP:OD2	1:A:63:LEU:CD1	0.46	2.64	3	1
1:A:104:LYS:O	1:A:106:PHE:CE2	0.46	2.67	22	1
1:A:99:PHE:O	1:A:100:ASP:HB2	0.46	2.10	2	3
1:A:36:GLY:CA	1:A:65:LEU:HD22	0.46	2.40	10	1
1:A:70:LYS:CA	1:A:73:HIS:CD2	0.46	2.98	10	1
1:A:56:ARG:CG	1:A:56:ARG:O	0.46	2.60	1	1
1:A:21:ARG:CD	1:A:21:ARG:NH1	0.46	1.83	1	1
1:A:73:HIS:CE1	1:A:76:LEU:H	0.46	2.28	23	1
1:A:16:ARG:HG3	1:A:32:THR:OG1	0.46	2.11	14	4
1:A:83:ALA:HA	1:A:101:TYR:CE2	0.46	2.45	21	2
1:A:54:ASP:HA	1:A:81:MET:HG2	0.46	1.88	12	1
1:A:58:PRO:CG	1:A:65:LEU:HD21	0.46	2.41	16	1
1:A:51:LEU:HD23	1:A:78:VAL:HG22	0.46	1.87	21	1
1:A:69:ILE:HG12	1:A:73:HIS:ND1	0.46	2.26	5	2
1:A:83:ALA:O	1:A:84:HIS:C	0.46	2.58	10	3
1:A:40:LEU:HD11	1:A:65:LEU:HG	0.46	1.87	25	1
1:A:80:ILE:HB	1:A:101:TYR:CE2	0.46	2.46	20	6
1:A:39:VAL:HG12	1:A:43:LEU:HD12	0.46	1.87	8	4
1:A:33:PHE:CB	1:A:38:GLU:HB3	0.46	2.41	11	1
1:A:33:PHE:CG	1:A:39:VAL:CG2	0.46	2.99	23	2
1:A:36:GLY:HA3	1:A:65:LEU:CB	0.46	2.41	26	1
1:A:9:VAL:HG12	1:A:35:ASN:C	0.45	2.35	12	3
1:A:6:VAL:HG13	1:A:30:CYS:CA	0.45	2.41	3	1
1:A:9:VAL:CG2	1:A:39:VAL:CG2	0.45	2.94	3	1
1:A:55:ILE:C	1:A:62:GLY:HA3	0.45	2.36	5	1
1:A:63:LEU:HD21	1:A:86:ASP:O	0.45	2.09	13	1
1:A:66:LEU:HD22	1:A:66:LEU:N	0.45	2.26	20	1
1:A:105:PRO:O	1:A:106:PHE:CD1	0.45	2.69	22	1
1:A:117:ARG:CG	1:A:117:ARG:N	0.45	2.78	1	1
1:A:54:ASP:C	1:A:55:ILE:HG22	0.45	2.36	5	6
1:A:7:TRP:CZ2	1:A:46:LYS:HG2	0.45	2.46	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:GLY:HA3	1:A:65:LEU:CG	0.45	2.41	21	1
1:A:12:ASP:O	1:A:13:SER:C	0.45	2.58	1	6
1:A:16:ARG:HA	1:A:20:GLU:HG2	0.45	1.88	7	2
1:A:93:ALA:HA	1:A:96:GLN:HG2	0.45	1.89	23	2
1:A:83:ALA:HB1	1:A:87:LEU:CG	0.45	2.40	7	1
1:A:53:SER:OG	1:A:65:LEU:HD13	0.45	2.11	12	1
1:A:65:LEU:HD21	1:A:78:VAL:CG1	0.45	2.40	24	1
1:A:43:LEU:CD2	1:A:76:LEU:HD11	0.45	2.40	26	1
1:A:104:LYS:HB2	1:A:105:PRO:CD	0.45	2.42	3	4
1:A:104:LYS:N	1:A:105:PRO:HD2	0.45	2.26	19	3
1:A:23:LEU:HB3	1:A:30:CYS:SG	0.45	2.51	19	1
1:A:50:VAL:O	1:A:50:VAL:CG1	0.45	2.64	18	2
1:A:36:GLY:CA	1:A:65:LEU:HD11	0.45	2.41	15	2
1:A:99:PHE:CD2	1:A:100:ASP:OD2	0.45	2.69	6	1
1:A:23:LEU:HG	1:A:28:LEU:HD13	0.45	1.88	7	1
1:A:115:VAL:HG13	1:A:116:GLU:N	0.45	2.27	12	3
1:A:66:LEU:CA	1:A:69:ILE:HD12	0.45	2.35	20	2
1:A:36:GLY:O	1:A:65:LEU:HD11	0.45	2.12	18	1
1:A:106:PHE:O	1:A:107:ASP:C	0.45	2.60	18	1
1:A:6:VAL:HG11	1:A:23:LEU:HD21	0.45	1.87	19	1
1:A:5:ILE:N	1:A:49:ASP:OD1	0.45	2.50	21	1
1:A:21:ARG:HD2	1:A:21:ARG:NH1	0.45	1.97	1	1
1:A:11:ASP:O	1:A:12:ASP:CB	0.45	2.64	7	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:108:ILE:CD1	0.45	2.95	16	3
1:A:69:ILE:CG2	1:A:73:HIS:CE1	0.45	2.92	13	2
1:A:8:VAL:O	1:A:33:PHE:HD1	0.45	1.93	15	2
1:A:66:LEU:CD2	1:A:80:ILE:HD11	0.45	2.39	14	1
1:A:40:LEU:HD21	1:A:65:LEU:HD23	0.45	1.88	20	1
1:A:83:ALA:HA	1:A:101:TYR:CD2	0.45	2.46	21	1
1:A:3:ARG:HG2	1:A:5:ILE:CD1	0.45	2.40	1	1
1:A:7:TRP:CG	1:A:31:THR:HG22	0.45	2.47	8	1
1:A:67:LYS:HA	1:A:70:LYS:CE	0.45	2.42	10	1
1:A:76:LEU:O	1:A:78:VAL:HG23	0.45	2.12	11	2
1:A:40:LEU:HD11	1:A:68:GLN:HE21	0.45	1.72	16	3
1:A:65:LEU:CD1	1:A:69:ILE:HD11	0.45	2.42	3	1
1:A:70:LYS:CB	1:A:96:GLN:CB	0.45	2.95	5	2
1:A:7:TRP:O	1:A:51:LEU:HA	0.45	2.12	7	3
1:A:108:ILE:O	1:A:112:VAL:HG23	0.45	2.12	23	3
1:A:33:PHE:HB3	1:A:38:GLU:CD	0.45	2.37	11	1
1:A:69:ILE:HG12	1:A:73:HIS:HE1	0.45	1.71	13	1
1:A:87:LEU:CD2	1:A:90:ALA:HB3	0.45	2.39	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:HIS:CD2	1:A:84:HIS:H	0.45	2.29	15	1
1:A:33:PHE:CD2	1:A:39:VAL:CG2	0.45	3.00	23	1
1:A:87:LEU:HD13	1:A:90:ALA:CB	0.45	2.42	25	1
1:A:17:TRP:HA	1:A:20:GLU:HG2	0.45	1.88	6	1
1:A:17:TRP:CD1	1:A:21:ARG:CZ	0.45	3.00	17	1
1:A:3:ARG:CD	1:A:5:ILE:HD11	0.45	2.41	26	1
1:A:60:MET:HE3	1:A:89:ALA:HB2	0.44	1.89	5	1
1:A:10:ASP:OD2	1:A:54:ASP:OD2	0.44	2.35	13	1
1:A:81:MET:O	1:A:102:LEU:CB	0.44	2.65	20	2
1:A:19:LEU:CD1	1:A:19:LEU:HD21	0.44	1.01	1	1
1:A:69:ILE:O	1:A:73:HIS:HD2	0.44	1.95	1	1
1:A:117:ARG:CZ	1:A:117:ARG:HE	0.44	1.29	1	1
1:A:65:LEU:HD11	1:A:80:ILE:HD11	0.44	1.89	6	1
1:A:17:TRP:HA	1:A:21:ARG:HG3	0.44	1.89	7	1
1:A:51:LEU:O	1:A:79:ILE:N	0.44	2.50	7	2
1:A:66:LEU:HD13	1:A:69:ILE:HD12	0.44	1.89	11	1
1:A:17:TRP:NE1	1:A:21:ARG:CZ	0.44	2.80	17	1
1:A:71:GLN:NE2	1:A:72:ARG:HG3	0.44	2.28	22	2
1:A:12:ASP:OD1	1:A:13:SER:N	0.44	2.50	25	1
1:A:50:VAL:HA	1:A:77:PRO:HG2	0.44	1.88	6	1
1:A:33:PHE:CE2	1:A:39:VAL:HG22	0.44	2.47	23	1
1:A:5:ILE:HG21	1:A:46:LYS:HZ2	0.44	1.72	26	1
1:A:23:LEU:CD2	1:A:28:LEU:CD1	0.44	2.92	17	3
1:A:19:LEU:CD1	1:A:112:VAL:HG22	0.44	2.41	9	2
1:A:60:MET:C	1:A:62:GLY:N	0.44	2.76	13	1
1:A:39:VAL:O	1:A:43:LEU:N	0.44	2.47	17	4
1:A:20:GLU:O	1:A:24:ALA:N	0.44	2.51	4	4
1:A:66:LEU:H	1:A:66:LEU:HD12	0.44	1.72	17	1
1:A:54:ASP:O	1:A:55:ILE:C	0.44	2.61	22	3
1:A:60:MET:O	1:A:61:ASP:CG	0.44	2.60	3	1
1:A:80:ILE:HB	1:A:101:TYR:CD2	0.44	2.48	22	5
1:A:63:LEU:HD23	1:A:101:TYR:OH	0.44	2.13	9	1
1:A:55:ILE:HG12	1:A:55:ILE:O	0.44	2.13	11	1
1:A:87:LEU:O	1:A:91:VAL:HG23	0.44	2.13	12	2
1:A:100:ASP:OD2	1:A:114:LEU:HD11	0.44	2.13	17	1
1:A:19:LEU:O	1:A:19:LEU:HD13	0.44	2.12	19	1
1:A:16:ARG:HB3	1:A:32:THR:OG1	0.44	2.12	22	1
1:A:40:LEU:HD11	1:A:68:GLN:OE1	0.44	2.12	4	1
1:A:37:ASN:HD22	1:A:40:LEU:HD12	0.44	1.71	8	3
1:A:80:ILE:CB	1:A:101:TYR:CZ	0.44	3.00	13	1
1:A:58:PRO:CB	1:A:65:LEU:HD21	0.44	2.43	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:LEU:CD1	1:A:23:LEU:CA	0.44	2.85	1	1
1:A:63:LEU:HD23	1:A:90:ALA:CB	0.44	2.43	3	1
1:A:7:TRP:CH2	1:A:46:LYS:HB3	0.44	2.48	4	1
1:A:65:LEU:O	1:A:69:ILE:CG1	0.44	2.66	4	1
1:A:105:PRO:O	1:A:106:PHE:CG	0.44	2.71	6	2
1:A:36:GLY:C	1:A:65:LEU:HD22	0.44	2.37	10	1
1:A:3:ARG:O	1:A:3:ARG:HG3	0.44	2.12	12	1
1:A:81:MET:HE2	1:A:106:PHE:CG	0.44	2.47	19	1
1:A:9:VAL:HG13	1:A:39:VAL:HG21	0.44	1.89	21	1
1:A:63:LEU:HD23	1:A:90:ALA:N	0.44	2.28	11	1
1:A:78:VAL:O	1:A:99:PHE:N	0.44	2.50	13	1
1:A:76:LEU:HD13	1:A:77:PRO:HD2	0.44	1.88	21	1
1:A:5:ILE:HB	1:A:48:PRO:HA	0.43	1.89	21	2
1:A:63:LEU:CD1	1:A:86:ASP:HB3	0.43	2.42	10	1
1:A:90:ALA:HA	1:A:101:TYR:CE1	0.43	2.48	11	1
1:A:16:ARG:HB2	1:A:32:THR:OG1	0.43	2.13	14	1
1:A:10:ASP:O	1:A:33:PHE:O	0.43	2.36	16	2
1:A:70:LYS:CB	1:A:96:GLN:OE1	0.43	2.58	1	1
1:A:67:LYS:O	1:A:70:LYS:CG	0.43	2.66	26	4
1:A:72:ARG:C	1:A:73:HIS:CG	0.43	2.96	6	1
1:A:90:ALA:CA	1:A:101:TYR:CE1	0.43	3.01	11	1
1:A:4:GLY:HA3	1:A:28:LEU:HD23	0.43	1.90	14	1
1:A:55:ILE:CG1	1:A:61:ASP:O	0.43	2.65	22	1
1:A:86:ASP:O	1:A:86:ASP:OD1	0.43	2.36	2	1
1:A:53:SER:CB	1:A:65:LEU:HD23	0.43	2.42	3	1
1:A:39:VAL:HG21	1:A:51:LEU:HD11	0.43	1.90	11	1
1:A:33:PHE:HD2	1:A:38:GLU:HB3	0.43	1.74	20	2
1:A:82:THR:HG23	1:A:84:HIS:CD2	0.43	2.40	24	1
1:A:55:ILE:HA	1:A:62:GLY:CA	0.43	2.42	2	1
1:A:34:GLU:CG	1:A:38:GLU:CD	0.43	2.89	8	1
1:A:102:LEU:CD2	1:A:106:PHE:HA	0.43	2.43	12	2
1:A:102:LEU:HG	1:A:106:PHE:HB3	0.43	1.90	21	1
1:A:33:PHE:CD2	1:A:38:GLU:OE2	0.43	2.71	24	1
1:A:114:LEU:O	1:A:118:ALA:HB2	0.43	2.13	12	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:19:LEU:HD22	0.43	1.90	15	1
1:A:17:TRP:HA	1:A:20:GLU:CG	0.43	2.44	6	2
1:A:55:ILE:HG12	1:A:61:ASP:O	0.43	2.13	25	2
1:A:78:VAL:N	1:A:98:ALA:HA	0.43	2.28	10	1
1:A:55:ILE:HD12	1:A:62:GLY:HA3	0.43	1.91	22	1
1:A:106:PHE:C	1:A:107:ASP:O	0.43	2.61	16	19
1:A:50:VAL:CG2	1:A:79:ILE:CD1	0.43	2.97	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:PHE:CE2	1:A:118:ALA:CB	0.43	3.02	12	1
1:A:52:LEU:HD23	1:A:53:SER:N	0.43	2.29	13	1
1:A:43:LEU:HD13	1:A:73:HIS:CG	0.43	2.49	20	1
1:A:116:GLU:HA	1:A:119:ILE:HD12	0.43	1.90	26	2
1:A:106:PHE:CG	1:A:107:ASP:N	0.43	2.85	21	5
1:A:73:HIS:ND1	1:A:73:HIS:C	0.43	2.76	10	2
1:A:26:ALA:CB	1:A:28:LEU:CD1	0.43	2.97	16	1
1:A:57:MET:N	1:A:58:PRO:HD3	0.43	2.29	17	1
1:A:66:LEU:HG	1:A:78:VAL:HG11	0.43	1.90	17	1
1:A:69:ILE:CG2	1:A:73:HIS:CD2	0.43	2.97	23	1
1:A:26:ALA:HB3	1:A:28:LEU:HD12	0.43	1.91	25	2
1:A:81:MET:HG3	1:A:82:THR:N	0.43	2.29	1	1
1:A:110:GLU:OE1	1:A:110:GLU:OE2	0.43	0.43	1	1
1:A:39:VAL:CG1	1:A:43:LEU:HD11	0.43	2.44	8	1
1:A:6:VAL:CG1	1:A:23:LEU:HD12	0.43	2.43	24	1
1:A:106:PHE:O	1:A:107:ASP:CG	0.42	2.62	6	1
1:A:34:GLU:CD	1:A:38:GLU:HG3	0.42	2.39	8	1
1:A:54:ASP:O	1:A:55:ILE:O	0.42	2.37	10	2
1:A:23:LEU:HD13	1:A:23:LEU:C	0.42	2.38	14	1
1:A:70:LYS:HB3	1:A:96:GLN:NE2	0.42	2.25	1	1
1:A:69:ILE:HG21	1:A:76:LEU:HB3	0.42	1.91	3	1
1:A:6:VAL:CG1	1:A:30:CYS:HA	0.42	2.44	13	2
1:A:104:LYS:O	1:A:106:PHE:CD2	0.42	2.72	6	2
1:A:107:ASP:OD1	1:A:109:ASP:HB2	0.42	2.14	18	3
1:A:112:VAL:C	1:A:115:VAL:HG12	0.42	2.39	21	3
1:A:10:ASP:OD1	1:A:15:ILE:HB	0.42	2.14	21	1
1:A:19:LEU:CD1	1:A:108:ILE:CD1	0.42	2.96	15	1
1:A:34:GLU:OE2	1:A:38:GLU:HB2	0.42	2.13	24	1
1:A:16:ARG:HG3	1:A:17:TRP:H	0.42	1.75	25	1
1:A:70:LYS:HB3	1:A:96:GLN:HB2	0.42	1.91	15	2
1:A:48:PRO:HD2	1:A:76:LEU:CD1	0.42	2.45	22	2
1:A:113:ALA:O	1:A:117:ARG:HG3	0.42	2.14	25	1
1:A:55:ILE:CG2	1:A:80:ILE:HG22	0.42	2.44	4	1
1:A:80:ILE:CD1	1:A:101:TYR:CE1	0.42	3.02	15	2
1:A:10:ASP:HA	1:A:54:ASP:HB3	0.42	1.89	16	1
1:A:80:ILE:CG2	1:A:101:TYR:CE2	0.42	3.01	25	2
1:A:73:HIS:HB3	1:A:76:LEU:HB2	0.42	1.90	22	1
1:A:13:SER:N	1:A:16:ARG:HG2	0.42	2.30	25	1
1:A:80:ILE:HG13	1:A:101:TYR:CE1	0.42	2.49	26	1
1:A:102:LEU:CD1	1:A:114:LEU:CD2	0.42	2.97	26	1
1:A:43:LEU:CD1	1:A:73:HIS:NE2	0.42	2.83	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:VAL:CG2	1:A:51:LEU:N	0.42	2.82	10	4
1:A:99:PHE:CZ	1:A:118:ALA:CB	0.42	3.02	9	2
1:A:92:SER:O	1:A:96:GLN:OE1	0.42	2.37	10	1
1:A:87:LEU:HD22	1:A:90:ALA:CB	0.42	2.42	11	1
1:A:77:PRO:HA	1:A:97:GLY:O	0.42	2.14	12	1
1:A:76:LEU:HG	1:A:77:PRO:HD2	0.42	1.92	16	1
1:A:99:PHE:CE2	1:A:114:LEU:O	0.42	2.72	18	2
1:A:16:ARG:CD	1:A:20:GLU:OE1	0.42	2.68	21	1
1:A:23:LEU:CD1	1:A:28:LEU:HB2	0.42	2.45	24	1
1:A:9:VAL:CG1	1:A:35:ASN:C	0.42	2.89	3	2
1:A:115:VAL:CG1	1:A:116:GLU:N	0.42	2.83	5	6
1:A:16:ARG:O	1:A:20:GLU:CB	0.42	2.68	7	1
1:A:66:LEU:HD11	1:A:101:TYR:HE1	0.42	1.72	13	1
1:A:61:ASP:OD1	1:A:84:HIS:CE1	0.42	2.73	17	1
1:A:58:PRO:HG3	1:A:65:LEU:CD1	0.42	2.44	19	1
1:A:55:ILE:CD1	1:A:62:GLY:HA3	0.42	2.44	22	2
1:A:87:LEU:HD23	1:A:90:ALA:HB2	0.42	1.90	21	1
1:A:73:HIS:CE1	1:A:76:LEU:CG	0.42	3.02	24	1
1:A:57:MET:HA	1:A:61:ASP:O	0.42	2.14	3	1
1:A:35:ASN:H	1:A:38:GLU:CD	0.42	2.22	8	1
1:A:54:ASP:OD1	1:A:54:ASP:C	0.42	2.62	10	1
1:A:53:SER:CB	1:A:80:ILE:HD13	0.42	2.45	17	1
1:A:55:ILE:CG2	1:A:80:ILE:CG2	0.42	2.97	17	1
1:A:75:MET:O	1:A:75:MET:CG	0.42	2.66	17	1
1:A:55:ILE:HD12	1:A:62:GLY:CA	0.42	2.45	2	1
1:A:93:ALA:O	1:A:98:ALA:N	0.42	2.53	2	1
1:A:23:LEU:CG	1:A:28:LEU:HD13	0.42	2.43	7	1
1:A:57:MET:HA	1:A:61:ASP:CA	0.42	2.45	11	2
1:A:49:ASP:CG	1:A:50:VAL:N	0.42	2.77	21	1
1:A:37:ASN:N	1:A:65:LEU:HD11	0.42	2.28	25	1
1:A:70:LYS:HB3	1:A:96:GLN:HG2	0.42	1.90	6	1
1:A:9:VAL:HG11	1:A:35:ASN:O	0.42	2.15	11	1
1:A:78:VAL:C	1:A:99:PHE:HB2	0.42	2.39	12	1
1:A:81:MET:HA	1:A:102:LEU:HB2	0.42	1.91	16	1
1:A:82:THR:OG1	1:A:106:PHE:CZ	0.42	2.73	22	1
1:A:63:LEU:HD11	1:A:85:SER:O	0.42	2.14	24	1
1:A:35:ASN:CG	1:A:35:ASN:ND2	0.41	0.52	1	1
1:A:39:VAL:CG1	1:A:43:LEU:CD1	0.41	2.94	8	1
1:A:63:LEU:H	1:A:63:LEU:HD12	0.41	1.75	9	1
1:A:107:ASP:OD2	1:A:109:ASP:HB2	0.41	2.15	10	1
1:A:108:ILE:CG2	1:A:109:ASP:N	0.41	2.83	22	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:70:LYS:CB	1:A:96:GLN:HB2	0.41	2.44	26	1
1:A:104:LYS:HB3	1:A:105:PRO:CD	0.41	2.45	4	1
1:A:55:ILE:HG13	1:A:61:ASP:HB3	0.41	1.91	7	1
1:A:60:MET:N	1:A:64:ALA:HB2	0.41	2.29	9	2
1:A:10:ASP:O	1:A:15:ILE:CG1	0.41	2.68	11	1
1:A:61:ASP:OD2	1:A:84:HIS:ND1	0.41	2.53	18	1
1:A:28:LEU:HD21	1:A:119:ILE:HD13	0.41	1.92	19	1
1:A:107:ASP:OD2	1:A:109:ASP:HB3	0.41	2.16	19	1
1:A:112:VAL:HA	1:A:115:VAL:CG1	0.41	2.45	21	1
1:A:93:ALA:C	1:A:98:ALA:CB	0.41	2.91	2	2
1:A:66:LEU:HD23	1:A:93:ALA:CB	0.41	2.46	5	1
1:A:65:LEU:HA	1:A:68:GLN:NE2	0.41	2.29	12	2
1:A:103:PRO:O	1:A:106:PHE:CZ	0.41	2.73	22	1
1:A:33:PHE:CG	1:A:39:VAL:HG23	0.41	2.51	25	1
1:A:65:LEU:CG	1:A:65:LEU:CD1	0.41	0.44	1	1
1:A:55:ILE:CG1	1:A:62:GLY:HA3	0.41	2.45	2	3
1:A:81:MET:C	1:A:106:PHE:HE1	0.41	2.22	6	1
1:A:69:ILE:C	1:A:73:HIS:CD2	0.41	2.98	10	1
1:A:62:GLY:O	1:A:65:LEU:HD23	0.41	2.16	14	1
1:A:3:ARG:HD3	1:A:5:ILE:HD11	0.41	1.93	17	1
1:A:66:LEU:HD11	1:A:80:ILE:CG1	0.41	2.44	2	1
1:A:9:VAL:CG2	1:A:39:VAL:HG23	0.41	2.44	3	1
1:A:83:ALA:O	1:A:85:SER:N	0.41	2.54	13	1
1:A:104:LYS:CB	1:A:105:PRO:HD3	0.41	2.45	14	1
1:A:69:ILE:O	1:A:73:HIS:CG	0.41	2.74	22	1
1:A:55:ILE:O	1:A:55:ILE:HG23	0.41	2.16	7	2
1:A:51:LEU:HB3	1:A:78:VAL:HG22	0.41	1.91	13	1
1:A:35:ASN:O	1:A:54:ASP:OD1	0.41	2.38	15	1
1:A:34:GLU:O	1:A:35:ASN:CG	0.41	2.64	20	1
1:A:51:LEU:HD22	1:A:73:HIS:HE1	0.41	1.75	22	1
1:A:75:MET:HA	1:A:97:GLY:CA	0.41	2.45	26	1
1:A:9:VAL:N	1:A:52:LEU:O	0.41	2.51	2	1
1:A:69:ILE:C	1:A:73:HIS:HD2	0.41	2.24	10	1
1:A:35:ASN:OD1	1:A:58:PRO:HD3	0.41	2.16	14	1
1:A:10:ASP:CG	1:A:54:ASP:HB3	0.41	2.41	17	1
1:A:79:ILE:CG2	1:A:114:LEU:CD2	0.41	2.97	19	2
1:A:112:VAL:CA	1:A:115:VAL:HG12	0.41	2.45	21	1
1:A:84:HIS:O	1:A:85:SER:OG	0.41	2.36	23	1
1:A:16:ARG:HG3	1:A:17:TRP:N	0.41	2.31	25	1
1:A:81:MET:HA	1:A:102:LEU:HB3	0.41	1.92	25	1
1:A:10:ASP:OD2	1:A:15:ILE:HG21	0.41	2.16	26	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:ILE:HG13	1:A:62:GLY:C	0.41	2.41	5	1
1:A:96:GLN:NE2	1:A:98:ALA:N	0.41	2.69	6	1
1:A:94:TYR:CE1	1:A:100:ASP:CA	0.41	3.03	13	1
1:A:55:ILE:O	1:A:56:ARG:HB3	0.41	2.16	14	1
1:A:103:PRO:C	1:A:104:LYS:HG3	0.41	2.41	18	1
1:A:56:ARG:N	1:A:61:ASP:O	0.40	2.54	8	1
1:A:92:SER:C	1:A:95:GLN:HG3	0.40	2.41	16	1
1:A:85:SER:O	1:A:86:ASP:HB2	0.40	2.17	2	1
1:A:17:TRP:O	1:A:20:GLU:HG3	0.40	2.16	6	1
1:A:90:ALA:HA	1:A:101:TYR:CZ	0.40	2.51	11	1
1:A:35:ASN:OD1	1:A:58:PRO:HB3	0.40	2.16	17	1
1:A:54:ASP:C	1:A:55:ILE:CG2	0.40	2.94	21	2
1:A:33:PHE:CD2	1:A:38:GLU:HB3	0.40	2.50	20	1
1:A:69:ILE:HA	1:A:73:HIS:CG	0.40	2.52	20	1
1:A:113:ALA:O	1:A:117:ARG:HG2	0.40	2.16	4	1
1:A:10:ASP:O	1:A:34:GLU:O	0.40	2.40	23	1
1:A:117:ARG:HD3	1:A:117:ARG:HB3	0.40	1.65	1	1
1:A:56:ARG:NE	1:A:81:MET:HE1	0.40	2.32	2	1
1:A:107:ASP:OD2	1:A:109:ASP:CB	0.40	2.70	3	1
1:A:94:TYR:HA	1:A:98:ALA:CB	0.40	2.45	11	1
1:A:78:VAL:O	1:A:99:PHE:HB2	0.40	2.16	12	1
1:A:10:ASP:OD1	1:A:54:ASP:CB	0.40	2.70	13	1
1:A:55:ILE:HG12	1:A:84:HIS:CD2	0.40	2.51	13	1
1:A:104:LYS:H	1:A:105:PRO:CD	0.40	2.30	20	1
1:A:73:HIS:ND1	1:A:76:LEU:HG	0.40	2.30	24	1
1:A:86:ASP:C	1:A:88:ASP:N	0.40	2.80	5	1
1:A:82:THR:HG22	1:A:83:ALA:N	0.40	2.32	8	1
1:A:48:PRO:O	1:A:76:LEU:CD1	0.40	2.68	9	1
1:A:69:ILE:HG23	1:A:73:HIS:HD2	0.40	1.76	15	1
1:A:34:GLU:OE2	1:A:38:GLU:CB	0.40	2.70	21	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	119/124 (96%)	94±3 (79±2%)	13±3 (11±2%)	12±3 (10±2%)	1	10
All	All	3094/3224 (96%)	2444 (79%)	344 (11%)	306 (10%)	1	10

All 26 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	106	PHE	26
1	A	107	ASP	26
1	A	13	SER	24
1	A	103	PRO	23
1	A	58	PRO	22
1	A	104	LYS	20
1	A	100	ASP	19
1	A	55	ILE	18
1	A	36	GLY	15
1	A	84	HIS	15
1	A	35	ASN	15
1	A	74	PRO	14
1	A	57	MET	9
1	A	61	ASP	8
1	A	85	SER	7
1	A	4	GLY	7
1	A	86	ASP	7
1	A	62	GLY	7
1	A	12	ASP	6
1	A	56	ARG	5
1	A	11	ASP	4
1	A	59	GLY	3
1	A	34	GLU	3
1	A	97	GLY	1
1	A	98	ALA	1
1	A	87	LEU	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	97/102 (95%)	74±3 (76±3%)	23±3 (24±3%)	2	26
All	All	2522/2652 (95%)	1913 (76%)	609 (24%)	2	26

All 65 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	28	LEU	26
1	A	108	ILE	26
1	A	8	VAL	25
1	A	46	LYS	23
1	A	9	VAL	21
1	A	38	GLU	20
1	A	61	ASP	20
1	A	52	LEU	18
1	A	95	GLN	18
1	A	60	MET	17
1	A	87	LEU	17
1	A	104	LYS	17
1	A	37	ASN	16
1	A	3	ARG	15
1	A	19	LEU	14
1	A	71	GLN	14
1	A	73	HIS	13
1	A	70	LYS	13
1	A	57	MET	13
1	A	76	LEU	13
1	A	34	GLU	13
1	A	86	ASP	12
1	A	53	SER	11
1	A	102	LEU	11
1	A	55	ILE	11
1	A	100	ASP	11
1	A	63	LEU	10
1	A	35	ASN	9
1	A	45	SER	9
1	A	85	SER	9
1	A	72	ARG	9
1	A	12	ASP	9
1	A	23	LEU	8
1	A	65	LEU	8
1	A	67	LYS	8
1	A	84	HIS	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	11	ASP	8
1	A	56	ARG	8
1	A	81	MET	7
1	A	79	ILE	7
1	A	117	ARG	5
1	A	96	GLN	5
1	A	18	VAL	5
1	A	75	MET	5
1	A	14	SER	4
1	A	109	ASP	4
1	A	21	ARG	4
1	A	54	ASP	4
1	A	88	ASP	3
1	A	33	PHE	3
1	A	68	GLN	3
1	A	80	ILE	3
1	A	5	ILE	2
1	A	120	SER	2
1	A	43	LEU	2
1	A	92	SER	1
1	A	16	ARG	1
1	A	20	GLU	1
1	A	94	TYR	1
1	A	39	VAL	1
1	A	13	SER	1
1	A	106	PHE	1
1	A	107	ASP	1
1	A	66	LEU	1
1	A	30	CYS	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [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](#)

The following chains have linkage breaks:

Mol	Chain	Number of breaks
1	1-A	17

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
1	A	61:ASP	C	62:GLY	N	1.19
1	A	103:PRO	C	104:LYS	N	1.18
1	A	59:GLY	C	60:MET	N	1.16
1	A	3:ARG	C	4:GLY	N	1.15
1	A	55:ILE	C	56:ARG	N	1.15
1	A	83:ALA	C	84:HIS	N	1.15
1	A	73:HIS	C	74:PRO	N	1.13
1	A	56:ARG	C	57:MET	N	1.12
1	A	10:ASP	C	11:ASP	N	1.07
1	A	35:ASN	C	36:GLY	N	1.07
1	A	97:GLY	C	98:ALA	N	1.02
1	A	74:PRO	C	75:MET	N	0.98
1	A	84:HIS	C	85:SER	N	0.98
1	A	2:GLN	C	3:ARG	N	0.87
1	A	85:SER	C	86:ASP	N	0.87
1	A	54:ASP	C	55:ILE	N	0.78
1	A	1:MET	C	2:GLN	N	0.59

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided