



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 10:29 PM UTC

PDB ID : 2MOB / pdb_00002mob
Title : METHANE MONOOXYGENASE COMPONENT B
Authors : Chang, S.L.; Wallar, B.J.; Lipscomb, J.D.; Mayo, K.H.
Deposited on : 1999-03-10

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

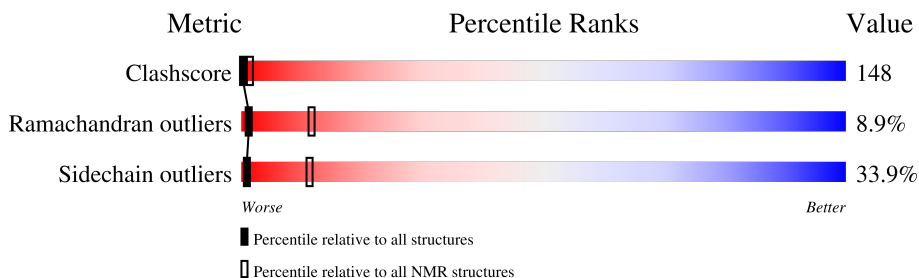
1 Overall quality at a glance

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	138	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 15 models. Model 7 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

The following residues are included in the computation of the global validation metrics.

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:36-A:126 (91)	1.24	7

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 5 clusters. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	7, 9, 12, 13, 15
2	2, 5, 6, 8
3	1, 10
4	3, 4
5	11, 14

3 Entry composition

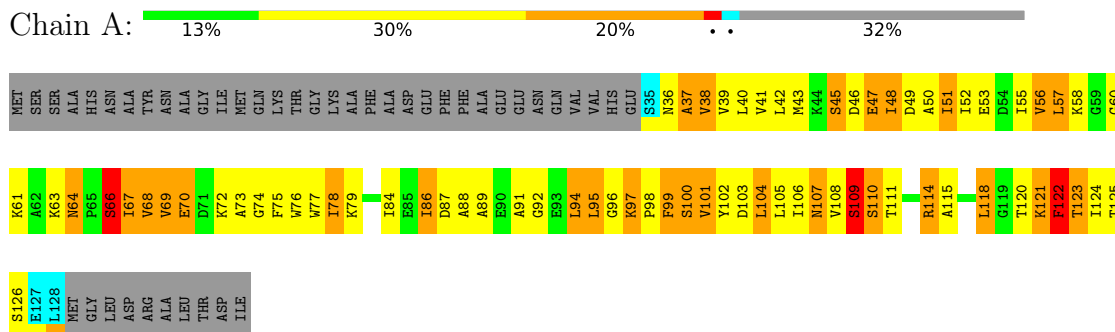
There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1434 atoms, of which 727 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called PROTEIN (METHANE MONOOXYGENASE REGULATORY PROTEIN B).

Mol	Chain	Residues	Atoms					Trace	
			Total	C	H	N	O		S
1	A	94	1434	457	727	110	139	1	0

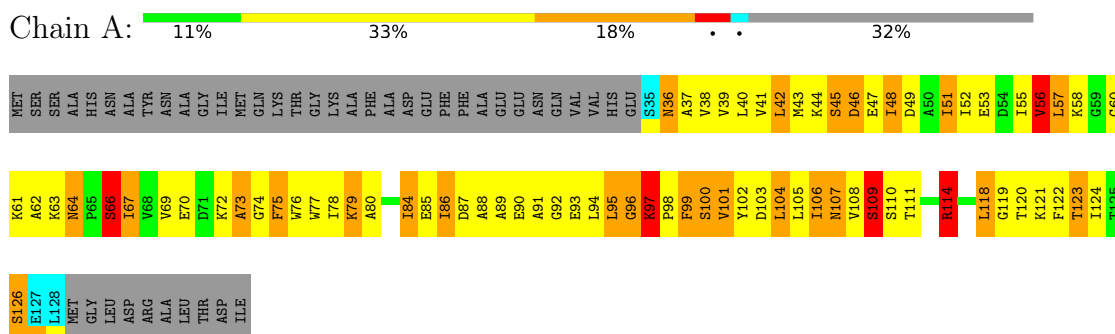
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: PROTEIN (METHANE MONOOXYGENASE REGULATORY PROTEIN B)



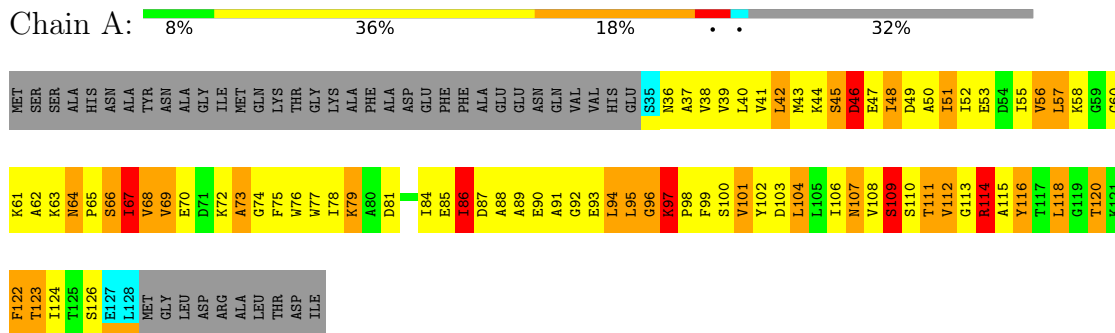
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: PROTEIN (METHANE MONOOXYGENASE REGULATORY PROTEIN B)



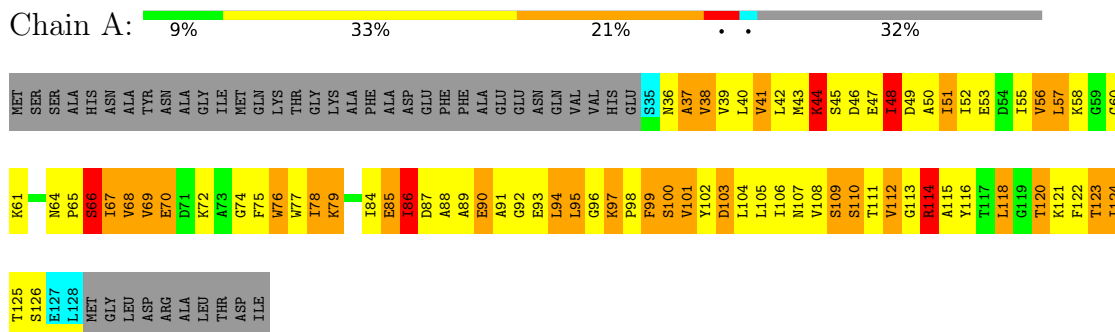
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: PROTEIN (METHANE MONOOXYGENASE REGULATORY PROTEIN B)



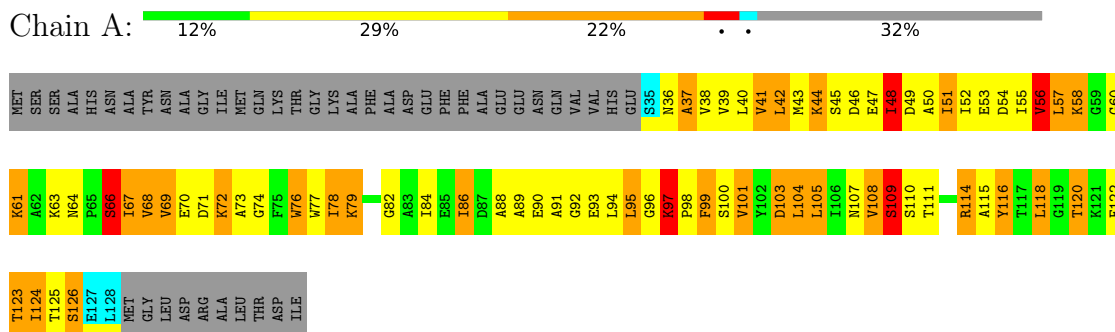
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: PROTEIN (METHANE MONOOXYGENASE REGULATORY PROTEIN B)



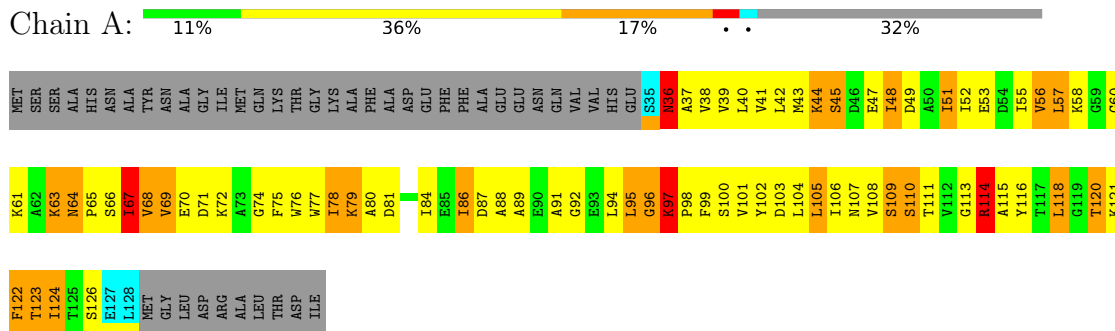
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: PROTEIN (METHANE MONOOXYGENASE REGULATORY PROTEIN B)



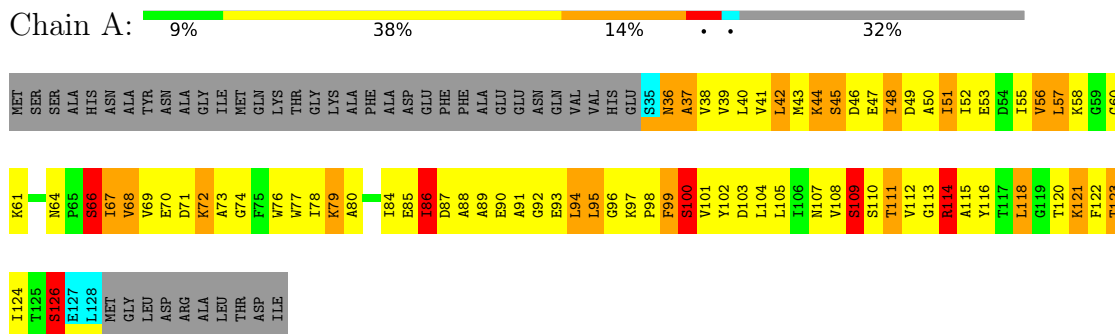
4.2.7 Score per residue for model 7 (medoid)

- Molecule 1: PROTEIN (METHANE MONOOXYGENASE REGULATORY PROTEIN B)



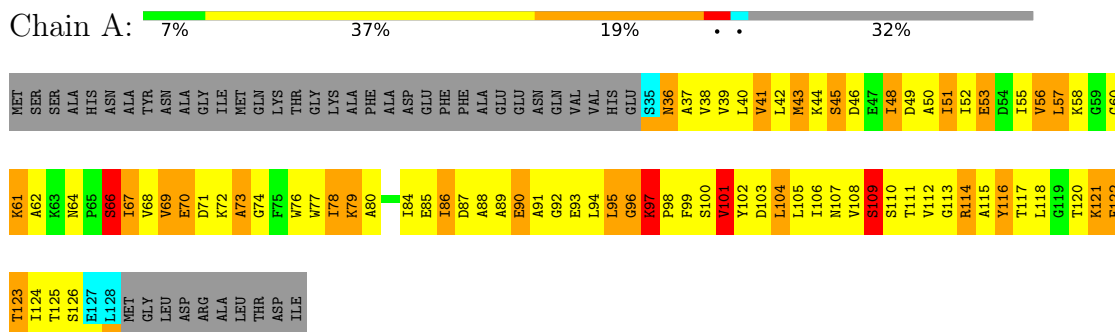
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: PROTEIN (METHANE MONOOXYGENASE REGULATORY PROTEIN B)



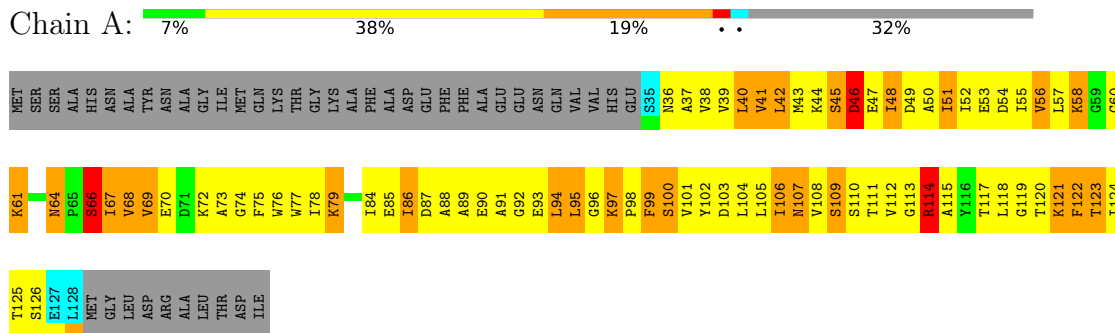
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: PROTEIN (METHANE MONOOXYGENASE REGULATORY PROTEIN B)



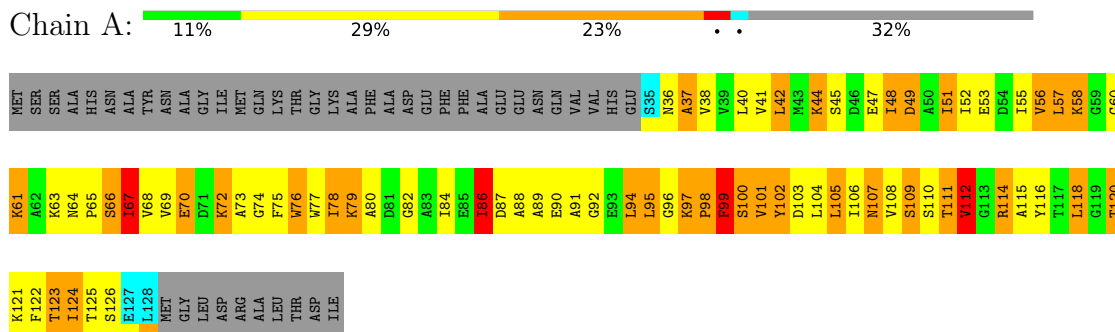
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: PROTEIN (METHANE MONOOXYGENASE REGULATORY PROTEIN B)



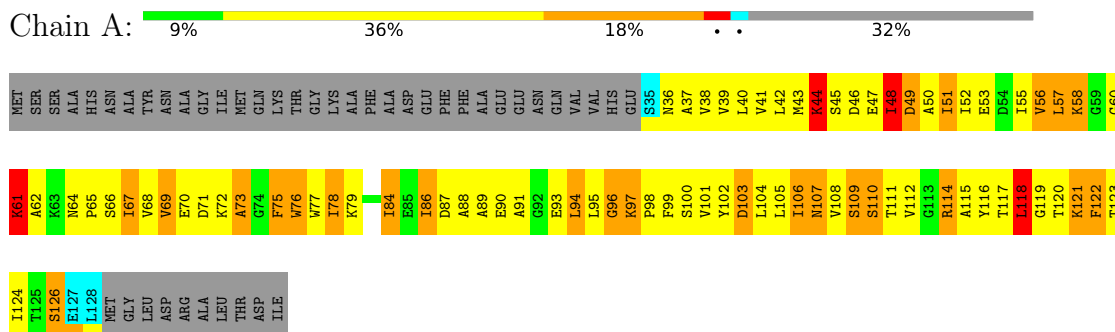
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: PROTEIN (METHANE MONOOXYGENASE REGULATORY PROTEIN B)



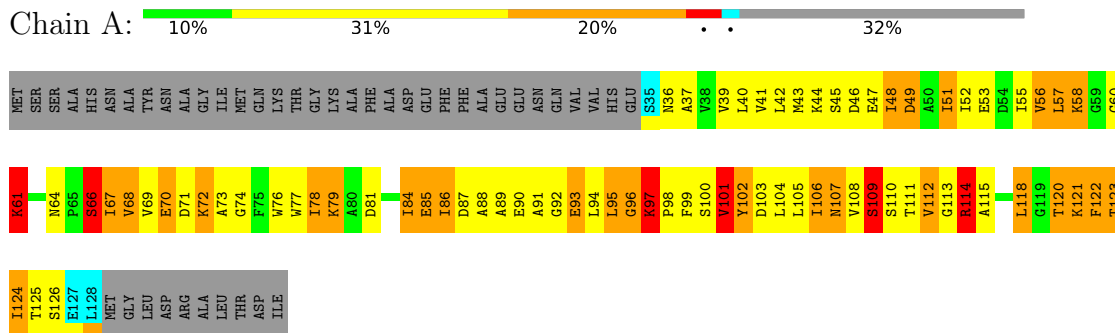
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: PROTEIN (METHANE MONOOXYGENASE REGULATORY PROTEIN B)



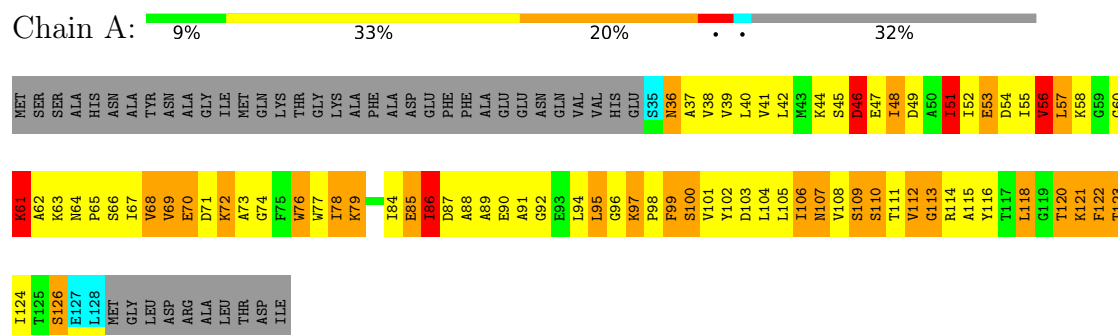
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: PROTEIN (METHANE MONOOXYGENASE REGULATORY PROTEIN B)



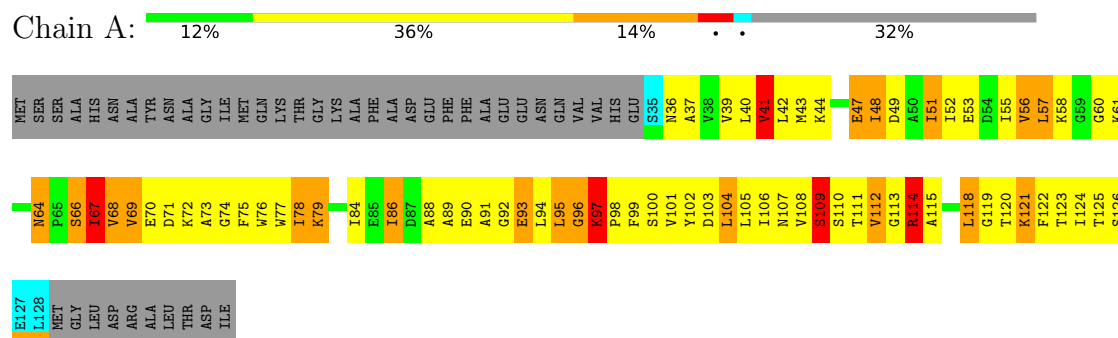
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: PROTEIN (METHANE MONOOXYGENASE REGULATORY PROTEIN B)



4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: PROTEIN (METHANE MONOOXYGENASE REGULATORY PROTEIN B)



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: ?.

Of the ? calculated structures, 15 were deposited, based on the following criterion: ?.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	3.851

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	1.48±0.01	0±0/695 (0.0± 0.1%)	1.61±0.03	6±1/944 (0.6± 0.1%)
All	All	1.48	5/10425 (0.0%)	1.61	87/14160 (0.6%)

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	1.0±0.0
All	All	0	15

All unique bond outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	101	VAL	CA-CB	-6.62	1.48	1.55	2	5

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	56	VAL	N-CA-CB	-10.47	103.05	111.64	5	15
1	A	67	ILE	N-CA-CB	-8.43	100.87	110.99	1	13
1	A	86	ILE	N-CA-CB	-8.33	102.74	112.32	5	5
1	A	99	PHE	CA-CB-CG	-6.98	106.82	113.80	8	1
1	A	36	ASN	N-CA-CB	-6.84	106.38	114.17	3	1
1	A	101	VAL	N-CA-CB	-6.70	103.08	110.65	5	8
1	A	69	VAL	N-CA-CB	-6.63	105.00	111.89	2	11
1	A	41	VAL	N-CA-CB	-6.49	102.99	111.82	1	5
1	A	38	VAL	N-CA-CB	-6.38	104.99	112.32	5	4
1	A	98	PRO	N-CA-C	-6.33	107.39	114.92	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	124	ILE	N-CA-CB	-5.90	104.99	112.60	6	3
1	A	84	ILE	N-CA-CB	-5.72	105.22	112.60	13	3
1	A	76	TRP	N-CA-CB	-5.68	102.90	110.57	11	5
1	A	63	LYS	N-CA-C	-5.36	106.91	113.50	3	4
1	A	108	VAL	N-CA-CB	-5.35	105.96	112.33	6	1
1	A	118	LEU	N-CA-CB	-5.33	105.39	111.79	12	1
1	A	122	PHE	N-CA-CB	-5.23	102.14	111.08	2	2
1	A	99	PHE	N-CA-CB	-5.21	101.68	110.49	11	1
1	A	51	ILE	N-CA-CB	-5.10	104.05	110.57	14	1
1	A	106	ILE	N-CA-CB	-5.08	104.35	112.07	3	1
1	A	114	ARG	N-CA-CB	-5.04	101.97	110.49	1	1

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	114	ARG	Sidechain	15

6.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	684	705	705	206±10
All	All	10260	10575	10575	3086

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 148.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:ILE:HG21	1:A:76:TRP:CE2	1.08	1.83	10	6
1:A:86:ILE:HD13	1:A:87:ASP:N	1.00	1.71	3	6
1:A:88:ALA:HB1	1:A:100:SER:CB	0.99	1.88	11	2
1:A:108:VAL:HG22	1:A:111:THR:CG2	0.98	1.88	9	4
1:A:95:LEU:HD11	1:A:99:PHE:CB	0.98	1.88	12	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:LEU:HD12	1:A:84:ILE:CG1	0.96	1.91	12	2
1:A:41:VAL:HG23	1:A:110:SER:OG	0.95	1.62	14	1
1:A:57:LEU:O	1:A:57:LEU:HD22	0.94	1.63	8	1
1:A:101:VAL:HG12	1:A:105:LEU:CD2	0.93	1.94	6	2
1:A:88:ALA:HB1	1:A:100:SER:CA	0.92	1.95	5	13
1:A:94:LEU:HD23	1:A:95:LEU:N	0.92	1.78	12	6
1:A:41:VAL:HG22	1:A:77:TRP:CD2	0.91	2.00	15	9
1:A:101:VAL:HG12	1:A:105:LEU:HD23	0.91	1.43	7	2
1:A:91:ALA:O	1:A:95:LEU:HD12	0.91	1.66	5	3
1:A:108:VAL:HG22	1:A:111:THR:HB	0.90	1.44	15	3
1:A:111:THR:HG22	1:A:124:ILE:CG1	0.90	1.96	12	2
1:A:101:VAL:HG12	1:A:105:LEU:HD11	0.90	1.43	3	7
1:A:52:ILE:CG2	1:A:69:VAL:HG22	0.90	1.97	13	6
1:A:77:TRP:O	1:A:78:ILE:HD13	0.90	1.65	3	4
1:A:42:LEU:HD13	1:A:76:TRP:CZ3	0.89	2.03	4	5
1:A:115:ALA:HB1	1:A:122:PHE:CZ	0.89	2.03	5	3
1:A:86:ILE:HG21	1:A:122:PHE:CE2	0.88	2.02	15	2
1:A:101:VAL:HG12	1:A:105:LEU:CD1	0.88	1.98	10	9
1:A:48:ILE:HG22	1:A:76:TRP:CE2	0.88	2.04	6	10
1:A:122:PHE:CD2	1:A:124:ILE:HD11	0.87	2.04	5	2
1:A:104:LEU:HD12	1:A:105:LEU:N	0.87	1.85	8	11
1:A:40:LEU:HD12	1:A:84:ILE:HG12	0.86	1.47	12	1
1:A:104:LEU:HD13	1:A:122:PHE:CZ	0.86	2.06	4	1
1:A:108:VAL:HG23	1:A:122:PHE:CE2	0.85	2.07	2	2
1:A:48:ILE:HG21	1:A:76:TRP:CD2	0.85	2.05	4	12
1:A:88:ALA:HB1	1:A:100:SER:HA	0.85	1.48	4	15
1:A:41:VAL:HG23	1:A:110:SER:CB	0.85	2.00	13	2
1:A:86:ILE:HG22	1:A:122:PHE:CG	0.85	2.07	2	4
1:A:41:VAL:O	1:A:42:LEU:HD22	0.84	1.72	15	4
1:A:108:VAL:O	1:A:111:THR:HG23	0.84	1.73	13	2
1:A:104:LEU:HD22	1:A:122:PHE:CZ	0.84	2.07	3	2
1:A:42:LEU:HD23	1:A:107:ASN:ND2	0.84	1.87	14	4
1:A:40:LEU:HD11	1:A:86:ILE:HG13	0.84	1.46	1	2
1:A:101:VAL:HA	1:A:104:LEU:HD23	0.84	1.49	4	7
1:A:123:THR:C	1:A:124:ILE:HD12	0.83	1.97	10	9
1:A:114:ARG:HB3	1:A:125:THR:HG22	0.83	1.49	11	4
1:A:40:LEU:HD22	1:A:84:ILE:CG1	0.83	2.04	6	3
1:A:88:ALA:HB1	1:A:100:SER:HB2	0.83	1.49	11	2
1:A:40:LEU:O	1:A:41:VAL:HG23	0.83	1.73	5	4
1:A:48:ILE:HA	1:A:51:ILE:CD1	0.82	2.04	10	15
1:A:42:LEU:HD23	1:A:107:ASN:CG	0.82	2.00	12	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:LEU:C	1:A:104:LEU:HD12	0.81	2.01	1	3
1:A:48:ILE:HG22	1:A:52:ILE:HG12	0.80	1.54	10	2
1:A:122:PHE:CE2	1:A:124:ILE:HD11	0.80	2.12	5	1
1:A:57:LEU:HD23	1:A:58:LYS:N	0.80	1.92	13	10
1:A:39:VAL:HG13	1:A:110:SER:HB2	0.80	1.53	9	6
1:A:99:PHE:CD1	1:A:100:SER:N	0.80	2.49	10	11
1:A:42:LEU:HD23	1:A:76:TRP:CZ3	0.80	2.11	2	1
1:A:122:PHE:CE1	1:A:124:ILE:HD13	0.79	2.11	2	1
1:A:114:ARG:CB	1:A:125:THR:HG22	0.79	2.08	11	4
1:A:123:THR:C	1:A:124:ILE:HD13	0.79	2.02	13	1
1:A:104:LEU:HD12	1:A:104:LEU:C	0.79	2.02	6	11
1:A:41:VAL:HG13	1:A:77:TRP:NE1	0.79	1.93	15	14
1:A:111:THR:HG22	1:A:124:ILE:HG12	0.79	1.51	5	1
1:A:52:ILE:HG21	1:A:69:VAL:HG13	0.78	1.53	2	6
1:A:124:ILE:HD12	1:A:124:ILE:N	0.78	1.93	12	6
1:A:41:VAL:HG13	1:A:77:TRP:CE2	0.78	2.13	5	12
1:A:95:LEU:HD12	1:A:96:GLY:N	0.78	1.94	12	3
1:A:40:LEU:HD11	1:A:86:ILE:HB	0.78	1.55	10	1
1:A:94:LEU:C	1:A:94:LEU:HD23	0.77	2.04	7	3
1:A:48:ILE:HG21	1:A:76:TRP:NE1	0.77	1.95	1	1
1:A:67:ILE:HG23	1:A:79:LYS:O	0.77	1.80	8	8
1:A:48:ILE:HG21	1:A:76:TRP:CG	0.77	2.14	4	14
1:A:68:VAL:HG13	1:A:79:LYS:HG3	0.77	1.55	13	1
1:A:110:SER:O	1:A:112:VAL:HG22	0.76	1.80	1	1
1:A:111:THR:CB	1:A:115:ALA:HB2	0.76	2.10	12	2
1:A:95:LEU:HD11	1:A:99:PHE:HB2	0.76	1.55	12	1
1:A:48:ILE:HA	1:A:51:ILE:CG1	0.76	2.10	3	15
1:A:55:ILE:HG23	1:A:56:VAL:HG23	0.76	1.58	11	14
1:A:68:VAL:HG13	1:A:79:LYS:CG	0.76	2.10	13	1
1:A:124:ILE:N	1:A:124:ILE:HD12	0.76	1.96	9	5
1:A:52:ILE:HD11	1:A:76:TRP:CZ2	0.75	2.15	1	8
1:A:92:GLY:N	1:A:99:PHE:CD1	0.75	2.54	14	6
1:A:48:ILE:HG21	1:A:76:TRP:CZ2	0.75	2.16	10	1
1:A:94:LEU:HD23	1:A:95:LEU:CD2	0.75	2.11	1	2
1:A:48:ILE:HG21	1:A:76:TRP:CD1	0.74	2.17	1	10
1:A:91:ALA:HB1	1:A:99:PHE:CE1	0.74	2.17	8	2
1:A:114:ARG:O	1:A:124:ILE:HG23	0.74	1.82	9	3
1:A:111:THR:HB	1:A:115:ALA:HB2	0.74	1.59	12	1
1:A:41:VAL:HG23	1:A:110:SER:HB2	0.74	1.57	13	1
1:A:52:ILE:HG21	1:A:69:VAL:HG22	0.73	1.60	13	6
1:A:68:VAL:HG12	1:A:79:LYS:CG	0.73	2.13	11	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:52:ILE:HG21	1:A:69:VAL:CG1	0.73	2.14	3	12
1:A:40:LEU:HD23	1:A:41:VAL:N	0.73	1.99	12	1
1:A:99:PHE:O	1:A:101:VAL:N	0.73	2.21	5	2
1:A:94:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HD23	0.73	1.61	2	2
1:A:94:LEU:HD23	1:A:94:LEU:C	0.73	2.08	9	5
1:A:88:ALA:O	1:A:91:ALA:HB3	0.73	1.82	11	2
1:A:40:LEU:HD22	1:A:84:ILE:HG12	0.72	1.60	6	2
1:A:84:ILE:HG23	1:A:124:ILE:CG1	0.72	2.14	11	1
1:A:41:VAL:HG22	1:A:77:TRP:CG	0.72	2.19	9	9
1:A:44:LYS:HB3	1:A:48:ILE:HD11	0.72	1.59	10	2
1:A:92:GLY:N	1:A:99:PHE:CD2	0.72	2.58	5	1
1:A:111:THR:OG1	1:A:115:ALA:HB2	0.72	1.84	2	3
1:A:48:ILE:HA	1:A:51:ILE:HG12	0.71	1.61	2	15
1:A:57:LEU:HD23	1:A:57:LEU:C	0.71	2.10	9	10
1:A:112:VAL:HG12	1:A:113:GLY:N	0.71	2.00	13	1
1:A:95:LEU:HD21	1:A:99:PHE:CD1	0.71	2.20	12	1
1:A:97:LYS:HB2	1:A:98:PRO:CD	0.71	2.16	6	3
1:A:122:PHE:N	1:A:122:PHE:CD1	0.71	2.59	7	4
1:A:51:ILE:O	1:A:55:ILE:N	0.70	2.24	4	15
1:A:99:PHE:CG	1:A:100:SER:N	0.70	2.59	6	8
1:A:41:VAL:C	1:A:42:LEU:HD22	0.70	2.10	5	3
1:A:122:PHE:CZ	1:A:124:ILE:HD13	0.70	2.20	2	1
1:A:68:VAL:HG12	1:A:79:LYS:HG2	0.70	1.64	11	6
1:A:53:GLU:HA	1:A:57:LEU:HB3	0.70	1.62	8	13
1:A:48:ILE:HG22	1:A:76:TRP:NE1	0.70	2.01	12	2
1:A:97:LYS:CB	1:A:98:PRO:CD	0.70	2.69	5	15
1:A:99:PHE:CD2	1:A:100:SER:N	0.70	2.60	5	1
1:A:48:ILE:CG2	1:A:76:TRP:CE2	0.69	2.72	10	15
1:A:67:ILE:CD1	1:A:67:ILE:N	0.69	2.55	7	15
1:A:42:LEU:HD21	1:A:86:ILE:HD11	0.69	1.63	1	2
1:A:48:ILE:HG22	1:A:52:ILE:CG1	0.69	2.17	10	2
1:A:84:ILE:HG23	1:A:124:ILE:HB	0.69	1.62	14	4
1:A:41:VAL:HG13	1:A:77:TRP:CD1	0.69	2.23	2	11
1:A:38:VAL:HG21	1:A:125:THR:C	0.68	2.13	2	1
1:A:108:VAL:HG21	1:A:122:PHE:CE2	0.68	2.22	6	1
1:A:57:LEU:HD22	1:A:57:LEU:C	0.68	2.12	8	1
1:A:52:ILE:HG22	1:A:69:VAL:HG22	0.68	1.64	13	1
1:A:52:ILE:HG21	1:A:69:VAL:CG2	0.68	2.19	11	11
1:A:86:ILE:HG21	1:A:122:PHE:CZ	0.68	2.22	15	1
1:A:70:GLU:HB3	1:A:77:TRP:HB2	0.68	1.66	2	2
1:A:86:ILE:CG2	1:A:122:PHE:CD2	0.67	2.77	1	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:GLY:CA	1:A:99:PHE:CG	0.67	2.78	1	7
1:A:118:LEU:O	1:A:120:THR:N	0.67	2.27	12	15
1:A:111:THR:O	1:A:112:VAL:HG12	0.67	1.90	11	1
1:A:94:LEU:HD23	1:A:95:LEU:HD23	0.67	1.66	1	2
1:A:104:LEU:HD13	1:A:122:PHE:CD2	0.67	2.25	15	2
1:A:91:ALA:CB	1:A:99:PHE:CE1	0.67	2.78	8	1
1:A:51:ILE:O	1:A:55:ILE:HG22	0.67	1.90	2	14
1:A:66:SER:C	1:A:67:ILE:HD12	0.67	2.16	2	14
1:A:104:LEU:O	1:A:108:VAL:HG12	0.67	1.90	13	13
1:A:76:TRP:NE1	1:A:78:ILE:HD11	0.67	2.05	13	7
1:A:117:THR:C	1:A:118:LEU:HD12	0.67	2.15	9	1
1:A:108:VAL:HG22	1:A:111:THR:HG23	0.66	1.62	9	3
1:A:40:LEU:HD22	1:A:84:ILE:CD1	0.66	2.20	6	1
1:A:84:ILE:HG23	1:A:124:ILE:HG12	0.66	1.66	11	1
1:A:52:ILE:CA	1:A:55:ILE:HG22	0.66	2.21	4	14
1:A:86:ILE:HG23	1:A:122:PHE:CE2	0.66	2.26	1	4
1:A:92:GLY:HA2	1:A:99:PHE:CD2	0.66	2.26	10	6
1:A:86:ILE:CG2	1:A:124:ILE:HD13	0.66	2.21	3	1
1:A:86:ILE:CG1	1:A:124:ILE:HD11	0.66	2.21	9	2
1:A:42:LEU:HD23	1:A:107:ASN:OD1	0.66	1.90	12	2
1:A:101:VAL:CG1	1:A:105:LEU:HD11	0.66	2.21	15	6
1:A:45:SER:N	1:A:48:ILE:HD11	0.66	2.06	3	2
1:A:92:GLY:CA	1:A:99:PHE:CD2	0.66	2.78	5	8
1:A:86:ILE:HD13	1:A:86:ILE:C	0.66	2.16	13	4
1:A:86:ILE:HB	1:A:122:PHE:HB3	0.66	1.66	14	7
1:A:104:LEU:CD1	1:A:122:PHE:CD2	0.66	2.79	9	1
1:A:57:LEU:C	1:A:57:LEU:HD13	0.65	2.17	1	2
1:A:86:ILE:CG2	1:A:122:PHE:CE2	0.65	2.79	12	5
1:A:108:VAL:CG2	1:A:122:PHE:CE2	0.65	2.79	5	1
1:A:99:PHE:CD2	1:A:100:SER:CB	0.65	2.80	5	1
1:A:75:PHE:CE2	1:A:77:TRP:CZ2	0.65	2.85	12	1
1:A:48:ILE:HD13	1:A:48:ILE:N	0.65	2.06	1	1
1:A:122:PHE:CD1	1:A:122:PHE:N	0.65	2.64	1	1
1:A:41:VAL:HG21	1:A:110:SER:OG	0.65	1.91	4	1
1:A:86:ILE:CG2	1:A:122:PHE:CD1	0.65	2.80	2	1
1:A:104:LEU:HD12	1:A:104:LEU:O	0.65	1.91	4	2
1:A:115:ALA:CB	1:A:122:PHE:CE2	0.65	2.80	8	1
1:A:124:ILE:HD13	1:A:124:ILE:N	0.65	2.06	11	2
1:A:86:ILE:HG23	1:A:122:PHE:HB2	0.65	1.69	3	1
1:A:42:LEU:HD13	1:A:107:ASN:CG	0.64	2.16	8	5
1:A:108:VAL:HG13	1:A:111:THR:HG23	0.64	1.69	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:52:ILE:HA	1:A:55:ILE:HG22	0.64	1.70	9	14
1:A:68:VAL:HG12	1:A:79:LYS:CB	0.64	2.22	11	6
1:A:115:ALA:HB1	1:A:122:PHE:HZ	0.64	1.50	5	2
1:A:42:LEU:HB3	1:A:76:TRP:CE3	0.64	2.28	15	11
1:A:86:ILE:HG22	1:A:122:PHE:CD1	0.63	2.27	2	1
1:A:115:ALA:HB1	1:A:122:PHE:CE1	0.63	2.28	11	2
1:A:88:ALA:CB	1:A:100:SER:HA	0.63	2.24	10	10
1:A:97:LYS:HB3	1:A:98:PRO:CD	0.63	2.23	1	4
1:A:70:GLU:HB3	1:A:77:TRP:CB	0.63	2.23	2	2
1:A:42:LEU:HD13	1:A:76:TRP:HZ3	0.63	1.49	4	1
1:A:104:LEU:CD2	1:A:122:PHE:CZ	0.63	2.82	7	1
1:A:86:ILE:HB	1:A:122:PHE:CD1	0.63	2.27	2	4
1:A:122:PHE:CD1	1:A:122:PHE:C	0.63	2.76	2	1
1:A:122:PHE:HD2	1:A:124:ILE:HD11	0.63	1.54	8	2
1:A:42:LEU:HB2	1:A:76:TRP:CE3	0.63	2.29	10	6
1:A:104:LEU:O	1:A:108:VAL:CG1	0.63	2.47	4	14
1:A:42:LEU:CB	1:A:76:TRP:CE3	0.63	2.82	14	11
1:A:92:GLY:N	1:A:99:PHE:HB2	0.63	2.09	11	1
1:A:98:PRO:O	1:A:99:PHE:O	0.62	2.17	5	2
1:A:104:LEU:HG	1:A:105:LEU:N	0.62	2.09	9	2
1:A:99:PHE:CD1	1:A:99:PHE:C	0.62	2.77	10	11
1:A:94:LEU:C	1:A:94:LEU:CD2	0.62	2.72	8	8
1:A:86:ILE:HB	1:A:122:PHE:CB	0.62	2.24	4	3
1:A:44:LYS:O	1:A:45:SER:CB	0.62	2.47	1	4
1:A:86:ILE:HG21	1:A:122:PHE:CD2	0.62	2.29	15	3
1:A:111:THR:HG22	1:A:124:ILE:CD1	0.62	2.24	12	1
1:A:104:LEU:HD13	1:A:122:PHE:HD2	0.62	1.54	15	1
1:A:123:THR:O	1:A:123:THR:HG22	0.62	1.94	3	5
1:A:86:ILE:HG23	1:A:122:PHE:CZ	0.62	2.29	10	1
1:A:118:LEU:HD13	1:A:121:LYS:HE3	0.62	1.70	12	1
1:A:108:VAL:O	1:A:111:THR:N	0.62	2.33	1	7
1:A:111:THR:O	1:A:112:VAL:C	0.62	2.43	1	2
1:A:124:ILE:N	1:A:124:ILE:CD1	0.62	2.63	12	8
1:A:76:TRP:CD1	1:A:78:ILE:HD11	0.62	2.30	3	4
1:A:95:LEU:HD23	1:A:95:LEU:N	0.61	2.10	2	3
1:A:40:LEU:HD22	1:A:85:GLU:O	0.61	1.95	3	1
1:A:48:ILE:O	1:A:49:ASP:C	0.61	2.44	2	15
1:A:95:LEU:HD12	1:A:96:GLY:H	0.61	1.55	13	4
1:A:86:ILE:CG2	1:A:122:PHE:CB	0.61	2.79	3	6
1:A:104:LEU:HD13	1:A:122:PHE:HZ	0.61	1.53	4	1
1:A:68:VAL:HG13	1:A:79:LYS:CB	0.61	2.25	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:41:VAL:N	1:A:110:SER:CB	0.61	2.63	2	7
1:A:76:TRP:NE1	1:A:78:ILE:CG1	0.61	2.64	10	4
1:A:36:ASN:O	1:A:38:VAL:HG13	0.61	1.95	5	1
1:A:41:VAL:HG23	1:A:110:SER:HG	0.61	1.52	14	1
1:A:88:ALA:HB1	1:A:100:SER:C	0.61	2.21	4	4
1:A:95:LEU:HD21	1:A:99:PHE:CG	0.61	2.30	12	1
1:A:86:ILE:CG2	1:A:122:PHE:CG	0.61	2.84	11	4
1:A:76:TRP:CD1	1:A:78:ILE:CD1	0.61	2.83	7	3
1:A:124:ILE:CD1	1:A:124:ILE:N	0.61	2.64	2	1
1:A:39:VAL:O	1:A:39:VAL:HG13	0.61	1.96	4	2
1:A:77:TRP:C	1:A:78:ILE:HD12	0.61	2.20	13	1
1:A:42:LEU:HD21	1:A:86:ILE:CD1	0.61	2.25	1	3
1:A:53:GLU:O	1:A:57:LEU:CB	0.61	2.49	1	2
1:A:97:LYS:CB	1:A:98:PRO:HD2	0.61	2.25	2	7
1:A:76:TRP:NE1	1:A:78:ILE:CD1	0.61	2.64	13	9
1:A:108:VAL:HG22	1:A:111:THR:HG21	0.61	1.73	7	2
1:A:72:LYS:O	1:A:73:ALA:C	0.60	2.44	1	8
1:A:86:ILE:HB	1:A:122:PHE:CE1	0.60	2.31	2	1
1:A:101:VAL:HG12	1:A:102:TYR:N	0.60	2.11	13	1
1:A:88:ALA:CB	1:A:100:SER:O	0.60	2.50	1	13
1:A:99:PHE:O	1:A:103:ASP:CB	0.60	2.50	2	10
1:A:86:ILE:HG13	1:A:124:ILE:HD13	0.60	1.73	5	1
1:A:53:GLU:HA	1:A:57:LEU:HB2	0.60	1.74	1	2
1:A:99:PHE:CD2	1:A:100:SER:OG	0.60	2.54	5	1
1:A:86:ILE:HD13	1:A:87:ASP:H	0.60	1.57	10	4
1:A:108:VAL:O	1:A:111:THR:HG22	0.60	1.96	11	3
1:A:88:ALA:HB1	1:A:100:SER:O	0.60	1.96	4	5
1:A:111:THR:HG22	1:A:124:ILE:HG13	0.60	1.70	12	1
1:A:123:THR:HG22	1:A:123:THR:O	0.60	1.97	4	1
1:A:41:VAL:CG1	1:A:77:TRP:CE2	0.59	2.85	5	13
1:A:41:VAL:HG11	1:A:77:TRP:CE2	0.59	2.32	3	2
1:A:41:VAL:CG2	1:A:77:TRP:CD2	0.59	2.85	11	8
1:A:97:LYS:HB3	1:A:98:PRO:HD2	0.59	1.74	3	2
1:A:41:VAL:CG2	1:A:110:SER:CB	0.59	2.80	13	3
1:A:104:LEU:CD1	1:A:105:LEU:N	0.59	2.64	11	9
1:A:48:ILE:HD12	1:A:48:ILE:H	0.59	1.58	10	1
1:A:99:PHE:C	1:A:99:PHE:CD1	0.59	2.80	15	2
1:A:99:PHE:CZ	1:A:100:SER:OG	0.59	2.56	11	1
1:A:70:GLU:CB	1:A:77:TRP:O	0.59	2.50	13	5
1:A:92:GLY:HA2	1:A:99:PHE:CG	0.59	2.31	1	7
1:A:108:VAL:CG1	1:A:111:THR:HG23	0.59	2.27	8	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:100:SER:HB3	0.59	2.32	5	1
1:A:99:PHE:CZ	1:A:103:ASP:CG	0.59	2.80	7	4
1:A:63:LYS:N	1:A:63:LYS:CE	0.59	2.65	14	1
1:A:39:VAL:HG12	1:A:112:VAL:HG21	0.59	1.74	12	2
1:A:104:LEU:C	1:A:104:LEU:CD1	0.58	2.75	6	11
1:A:42:LEU:HD21	1:A:86:ILE:HG23	0.58	1.75	6	1
1:A:38:VAL:HG11	1:A:124:ILE:HG22	0.58	1.73	7	1
1:A:74:GLY:O	1:A:75:PHE:CD2	0.58	2.56	11	1
1:A:42:LEU:HD12	1:A:107:ASN:CB	0.58	2.27	2	1
1:A:98:PRO:O	1:A:102:TYR:CB	0.58	2.52	11	2
1:A:42:LEU:CB	1:A:76:TRP:CZ3	0.58	2.86	8	1
1:A:104:LEU:HD12	1:A:108:VAL:HG11	0.58	1.74	13	1
1:A:53:GLU:O	1:A:57:LEU:HB3	0.58	1.97	10	15
1:A:113:GLY:O	1:A:114:ARG:C	0.58	2.46	4	2
1:A:97:LYS:CB	1:A:98:PRO:HD3	0.58	2.28	11	7
1:A:52:ILE:CG2	1:A:69:VAL:CG2	0.58	2.80	13	10
1:A:41:VAL:N	1:A:110:SER:OG	0.58	2.35	6	5
1:A:103:ASP:O	1:A:107:ASN:ND2	0.58	2.37	5	8
1:A:115:ALA:HB1	1:A:122:PHE:CE2	0.58	2.33	8	3
1:A:99:PHE:CE2	1:A:100:SER:CB	0.58	2.87	5	1
1:A:39:VAL:HG13	1:A:39:VAL:O	0.58	1.97	12	6
1:A:56:VAL:O	1:A:60:GLY:N	0.58	2.37	4	9
1:A:74:GLY:O	1:A:75:PHE:CG	0.58	2.57	7	4
1:A:99:PHE:CD2	1:A:103:ASP:OD1	0.58	2.57	12	1
1:A:48:ILE:CG2	1:A:76:TRP:NE1	0.58	2.66	1	7
1:A:99:PHE:CE2	1:A:103:ASP:OD2	0.58	2.56	12	2
1:A:108:VAL:O	1:A:110:SER:N	0.58	2.37	8	15
1:A:56:VAL:HG13	1:A:67:ILE:HG21	0.58	1.74	2	1
1:A:70:GLU:HB2	1:A:77:TRP:CB	0.58	2.29	3	5
1:A:122:PHE:CD2	1:A:124:ILE:CD1	0.58	2.85	5	1
1:A:104:LEU:HD22	1:A:122:PHE:CE1	0.58	2.33	13	1
1:A:86:ILE:HG23	1:A:122:PHE:CD2	0.58	2.34	7	2
1:A:118:LEU:N	1:A:121:LYS:O	0.58	2.37	10	7
1:A:86:ILE:HG22	1:A:122:PHE:CB	0.58	2.29	11	6
1:A:39:VAL:HG13	1:A:110:SER:HB3	0.58	1.75	4	1
1:A:40:LEU:O	1:A:41:VAL:CG2	0.58	2.50	5	3
1:A:95:LEU:HD13	1:A:99:PHE:CB	0.58	2.28	15	3
1:A:104:LEU:CD1	1:A:122:PHE:CE2	0.58	2.87	9	1
1:A:95:LEU:HD22	1:A:97:LYS:CE	0.58	2.29	10	1
1:A:48:ILE:O	1:A:52:ILE:N	0.57	2.36	4	15
1:A:86:ILE:CG2	1:A:122:PHE:HB3	0.57	2.29	5	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:ASN:O	1:A:37:ALA:C	0.57	2.47	6	15
1:A:73:ALA:O	1:A:75:PHE:CD2	0.57	2.56	4	2
1:A:103:ASP:OD1	1:A:104:LEU:N	0.57	2.37	6	1
1:A:122:PHE:C	1:A:122:PHE:CD1	0.57	2.81	15	1
1:A:76:TRP:CG	1:A:76:TRP:O	0.57	2.57	4	9
1:A:100:SER:O	1:A:104:LEU:N	0.57	2.37	5	1
1:A:112:VAL:CG1	1:A:113:GLY:N	0.57	2.67	15	1
1:A:86:ILE:HG22	1:A:124:ILE:HD13	0.57	1.76	3	1
1:A:40:LEU:HD22	1:A:84:ILE:HD11	0.57	1.77	6	2
1:A:107:ASN:C	1:A:107:ASN:OD1	0.57	2.47	5	5
1:A:86:ILE:CB	1:A:122:PHE:CB	0.57	2.82	4	3
1:A:40:LEU:N	1:A:78:ILE:O	0.57	2.38	2	5
1:A:42:LEU:HD23	1:A:76:TRP:HZ3	0.57	1.54	2	1
1:A:95:LEU:HD11	1:A:99:PHE:HB3	0.57	1.73	12	3
1:A:97:LYS:CG	1:A:98:PRO:HD2	0.57	2.28	10	4
1:A:99:PHE:CE1	1:A:100:SER:OG	0.57	2.57	11	2
1:A:122:PHE:CE1	1:A:124:ILE:CD1	0.57	2.88	15	1
1:A:39:VAL:HG23	1:A:78:ILE:O	0.57	1.99	10	2
1:A:104:LEU:HD22	1:A:122:PHE:HZ	0.57	1.58	3	1
1:A:42:LEU:HD12	1:A:107:ASN:HB2	0.57	1.77	2	1
1:A:76:TRP:HE1	1:A:78:ILE:HD11	0.57	1.59	13	4
1:A:51:ILE:O	1:A:55:ILE:CG2	0.57	2.52	2	14
1:A:92:GLY:O	1:A:96:GLY:N	0.57	2.38	1	10
1:A:40:LEU:HD13	1:A:84:ILE:HG12	0.57	1.77	11	1
1:A:62:ALA:C	1:A:63:LYS:CE	0.57	2.78	14	1
1:A:90:GLU:O	1:A:93:GLU:CG	0.57	2.52	5	7
1:A:70:GLU:N	1:A:77:TRP:O	0.57	2.38	14	12
1:A:91:ALA:O	1:A:95:LEU:CD1	0.56	2.52	15	7
1:A:96:GLY:O	1:A:97:LYS:CB	0.56	2.52	4	7
1:A:99:PHE:CE2	1:A:100:SER:OG	0.56	2.56	5	1
1:A:77:TRP:O	1:A:78:ILE:CD1	0.56	2.53	2	2
1:A:101:VAL:CA	1:A:104:LEU:HD23	0.56	2.29	9	1
1:A:41:VAL:O	1:A:107:ASN:O	0.56	2.24	15	14
1:A:51:ILE:O	1:A:52:ILE:C	0.56	2.49	4	15
1:A:101:VAL:HA	1:A:104:LEU:CD2	0.56	2.30	9	13
1:A:68:VAL:CG1	1:A:70:GLU:CD	0.56	2.79	12	2
1:A:101:VAL:O	1:A:104:LEU:HG	0.56	2.00	7	11
1:A:101:VAL:CG1	1:A:105:LEU:CD2	0.56	2.78	6	2
1:A:86:ILE:HG13	1:A:124:ILE:HD11	0.56	1.76	9	1
1:A:39:VAL:CG1	1:A:112:VAL:HG21	0.56	2.30	12	1
1:A:86:ILE:CB	1:A:122:PHE:CD1	0.56	2.89	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:ILE:HD13	1:A:76:TRP:CB	0.56	2.30	10	1
1:A:86:ILE:HD12	1:A:122:PHE:CZ	0.56	2.36	10	1
1:A:111:THR:O	1:A:112:VAL:CB	0.56	2.54	11	1
1:A:48:ILE:CA	1:A:51:ILE:HG12	0.56	2.31	14	14
1:A:99:PHE:O	1:A:100:SER:C	0.56	2.49	4	10
1:A:111:THR:HG23	1:A:111:THR:O	0.56	1.99	15	1
1:A:45:SER:O	1:A:46:ASP:CB	0.56	2.53	5	8
1:A:92:GLY:HA3	1:A:99:PHE:CE2	0.56	2.36	3	5
1:A:36:ASN:O	1:A:38:VAL:HG23	0.56	2.01	7	2
1:A:48:ILE:CG2	1:A:76:TRP:CD2	0.56	2.88	13	9
1:A:38:VAL:HG23	1:A:126:SER:HG	0.56	1.61	3	1
1:A:101:VAL:HA	1:A:104:LEU:HG	0.56	1.77	14	7
1:A:108:VAL:O	1:A:109:SER:C	0.56	2.49	1	15
1:A:52:ILE:HG21	1:A:69:VAL:HG11	0.56	1.78	6	2
1:A:86:ILE:CG2	1:A:87:ASP:N	0.56	2.69	5	5
1:A:42:LEU:HD21	1:A:86:ILE:CG1	0.55	2.31	1	1
1:A:52:ILE:O	1:A:57:LEU:N	0.55	2.38	11	15
1:A:104:LEU:O	1:A:108:VAL:HB	0.55	2.01	4	15
1:A:122:PHE:CZ	1:A:124:ILE:CD1	0.55	2.89	2	1
1:A:48:ILE:CG2	1:A:76:TRP:CD1	0.55	2.89	12	6
1:A:42:LEU:CD2	1:A:107:ASN:OD1	0.55	2.54	12	2
1:A:52:ILE:O	1:A:56:VAL:N	0.55	2.38	8	15
1:A:91:ALA:C	1:A:99:PHE:HB2	0.55	2.26	11	2
1:A:104:LEU:O	1:A:108:VAL:CB	0.55	2.54	12	15
1:A:104:LEU:O	1:A:108:VAL:N	0.55	2.34	12	12
1:A:43:MET:O	1:A:76:TRP:CB	0.55	2.55	13	2
1:A:98:PRO:O	1:A:100:SER:N	0.55	2.40	3	6
1:A:108:VAL:HG23	1:A:122:PHE:CD2	0.55	2.36	2	1
1:A:116:TYR:HB2	1:A:123:THR:HG22	0.55	1.79	9	2
1:A:47:GLU:C	1:A:51:ILE:HD13	0.55	2.26	5	12
1:A:86:ILE:HG23	1:A:122:PHE:CB	0.55	2.32	3	1
1:A:40:LEU:HD11	1:A:86:ILE:HD11	0.55	1.77	4	1
1:A:68:VAL:HG11	1:A:79:LYS:CE	0.55	2.31	6	1
1:A:104:LEU:HD11	1:A:122:PHE:CE2	0.55	2.36	9	1
1:A:52:ILE:O	1:A:56:VAL:HB	0.55	2.01	3	15
1:A:70:GLU:HB2	1:A:77:TRP:HB2	0.55	1.77	8	9
1:A:104:LEU:HB2	1:A:122:PHE:CE2	0.55	2.37	1	2
1:A:111:THR:O	1:A:113:GLY:N	0.55	2.40	8	6
1:A:45:SER:CA	1:A:48:ILE:HD11	0.55	2.31	4	1
1:A:104:LEU:HB3	1:A:122:PHE:CZ	0.55	2.36	10	1
1:A:51:ILE:O	1:A:55:ILE:CB	0.55	2.55	3	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:98:PRO:O	1:A:99:PHE:C	0.55	2.50	1	11
1:A:40:LEU:HD23	1:A:78:ILE:CG2	0.55	2.32	2	1
1:A:118:LEU:O	1:A:118:LEU:HD23	0.54	2.03	4	2
1:A:86:ILE:CB	1:A:122:PHE:HB3	0.54	2.32	6	6
1:A:41:VAL:N	1:A:110:SER:HB3	0.54	2.16	13	5
1:A:111:THR:OG1	1:A:115:ALA:CB	0.54	2.54	2	1
1:A:111:THR:O	1:A:112:VAL:CG1	0.54	2.55	11	1
1:A:41:VAL:CG2	1:A:110:SER:HB3	0.54	2.33	13	9
1:A:66:SER:C	1:A:67:ILE:CD1	0.54	2.81	11	14
1:A:97:LYS:HB3	1:A:98:PRO:HD3	0.54	1.80	5	6
1:A:86:ILE:HD12	1:A:108:VAL:HG23	0.54	1.78	9	1
1:A:97:LYS:HB2	1:A:98:PRO:HD2	0.54	1.80	10	6
1:A:72:LYS:O	1:A:74:GLY:N	0.54	2.41	2	8
1:A:77:TRP:C	1:A:78:ILE:HD13	0.54	2.27	3	3
1:A:61:LYS:HA	1:A:64:ASN:CB	0.54	2.32	12	9
1:A:86:ILE:HG22	1:A:122:PHE:HB2	0.54	1.77	4	3
1:A:47:GLU:O	1:A:51:ILE:HD13	0.54	2.02	5	10
1:A:48:ILE:HA	1:A:51:ILE:HD11	0.54	1.79	14	14
1:A:48:ILE:O	1:A:51:ILE:HG12	0.54	2.02	12	13
1:A:118:LEU:CB	1:A:121:LYS:O	0.54	2.56	1	2
1:A:88:ALA:C	1:A:100:SER:CB	0.54	2.81	9	4
1:A:92:GLY:O	1:A:93:GLU:C	0.54	2.50	5	2
1:A:87:ASP:OD2	1:A:121:LYS:CG	0.54	2.56	12	3
1:A:103:ASP:O	1:A:107:ASN:CG	0.54	2.51	2	2
1:A:41:VAL:CB	1:A:110:SER:HB3	0.54	2.33	13	5
1:A:52:ILE:HD11	1:A:76:TRP:HZ2	0.54	1.62	14	5
1:A:57:LEU:C	1:A:57:LEU:CD1	0.54	2.81	1	1
1:A:113:GLY:O	1:A:114:ARG:O	0.54	2.25	1	5
1:A:51:ILE:C	1:A:55:ILE:HG22	0.54	2.27	4	11
1:A:99:PHE:CZ	1:A:103:ASP:OD1	0.54	2.61	7	2
1:A:91:ALA:O	1:A:95:LEU:CD2	0.54	2.56	12	1
1:A:92:GLY:HA2	1:A:95:LEU:HD11	0.54	1.80	13	1
1:A:68:VAL:HG12	1:A:79:LYS:HB3	0.54	1.80	11	8
1:A:41:VAL:HB	1:A:110:SER:HB3	0.54	1.79	2	11
1:A:40:LEU:HD11	1:A:86:ILE:CG1	0.54	2.28	1	3
1:A:97:LYS:O	1:A:99:PHE:CD2	0.54	2.61	10	6
1:A:107:ASN:OD1	1:A:107:ASN:C	0.54	2.51	15	6
1:A:114:ARG:CG	1:A:115:ALA:N	0.54	2.70	10	3
1:A:92:GLY:HA3	1:A:99:PHE:CZ	0.54	2.38	2	3
1:A:95:LEU:HD11	1:A:99:PHE:CG	0.54	2.37	7	2
1:A:41:VAL:HG23	1:A:110:SER:HB3	0.54	1.78	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:107:ASN:OD1	1:A:108:VAL:N	0.54	2.40	15	2
1:A:58:LYS:O	1:A:61:LYS:CG	0.54	2.55	10	1
1:A:95:LEU:CD1	1:A:96:GLY:N	0.54	2.70	12	1
1:A:38:VAL:CG2	1:A:126:SER:CB	0.53	2.87	3	1
1:A:48:ILE:O	1:A:50:ALA:N	0.53	2.41	12	8
1:A:68:VAL:HG13	1:A:79:LYS:HB2	0.53	1.80	13	1
1:A:89:ALA:CB	1:A:120:THR:OG1	0.53	2.56	15	1
1:A:56:VAL:O	1:A:57:LEU:C	0.53	2.49	1	4
1:A:95:LEU:CD1	1:A:99:PHE:CB	0.53	2.86	7	2
1:A:42:LEU:O	1:A:76:TRP:N	0.53	2.41	4	1
1:A:49:ASP:O	1:A:53:GLU:CB	0.53	2.56	5	3
1:A:99:PHE:O	1:A:103:ASP:HB3	0.53	2.03	6	6
1:A:47:GLU:O	1:A:51:ILE:CG1	0.53	2.57	5	8
1:A:42:LEU:CD1	1:A:107:ASN:CG	0.53	2.82	5	2
1:A:51:ILE:O	1:A:55:ILE:HG12	0.53	2.04	8	1
1:A:47:GLU:C	1:A:51:ILE:CD1	0.53	2.81	3	8
1:A:41:VAL:HG21	1:A:77:TRP:CE3	0.53	2.38	3	2
1:A:111:THR:HG22	1:A:124:ILE:HD11	0.53	1.79	12	1
1:A:111:THR:CG2	1:A:124:ILE:HG13	0.53	2.34	12	1
1:A:92:GLY:O	1:A:96:GLY:CA	0.53	2.56	14	6
1:A:115:ALA:HA	1:A:123:THR:O	0.53	2.04	9	11
1:A:42:LEU:CD1	1:A:107:ASN:OD1	0.53	2.57	5	1
1:A:111:THR:CG2	1:A:124:ILE:CG1	0.52	2.81	12	1
1:A:89:ALA:N	1:A:100:SER:OG	0.52	2.42	15	1
1:A:57:LEU:C	1:A:57:LEU:CD2	0.52	2.82	4	9
1:A:101:VAL:O	1:A:104:LEU:N	0.52	2.41	4	3
1:A:38:VAL:HG12	1:A:126:SER:OG	0.52	2.04	6	1
1:A:86:ILE:CG2	1:A:122:PHE:HB2	0.52	2.35	3	1
1:A:85:GLU:CG	1:A:123:THR:OG1	0.52	2.58	13	1
1:A:87:ASP:OD1	1:A:121:LYS:CG	0.52	2.57	14	1
1:A:70:GLU:CB	1:A:77:TRP:HB2	0.52	2.35	4	1
1:A:70:GLU:N	1:A:70:GLU:OE1	0.52	2.43	5	2
1:A:94:LEU:HD13	1:A:95:LEU:HG	0.52	1.81	5	1
1:A:76:TRP:NE1	1:A:78:ILE:HD13	0.52	2.18	7	1
1:A:99:PHE:CZ	1:A:103:ASP:OD2	0.52	2.63	15	2
1:A:102:TYR:O	1:A:106:ILE:HD12	0.52	2.05	14	1
1:A:86:ILE:HG13	1:A:122:PHE:CE1	0.52	2.38	15	1
1:A:70:GLU:HB2	1:A:77:TRP:O	0.52	2.05	2	7
1:A:47:GLU:O	1:A:51:ILE:CD1	0.52	2.58	5	8
1:A:42:LEU:HD21	1:A:86:ILE:HD13	0.52	1.81	8	2
1:A:42:LEU:HD22	1:A:107:ASN:O	0.52	2.03	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:ASN:OD1	1:A:67:ILE:CG1	0.52	2.56	7	2
1:A:97:LYS:N	1:A:98:PRO:HD2	0.52	2.20	9	4
1:A:99:PHE:N	1:A:99:PHE:CD1	0.52	2.78	11	1
1:A:95:LEU:HD22	1:A:99:PHE:CD2	0.52	2.39	15	1
1:A:40:LEU:HB2	1:A:84:ILE:HG21	0.52	1.82	1	1
1:A:86:ILE:HG22	1:A:122:PHE:HB3	0.52	1.81	5	4
1:A:99:PHE:O	1:A:103:ASP:HB2	0.52	2.05	10	7
1:A:41:VAL:N	1:A:110:SER:HB2	0.52	2.19	5	4
1:A:84:ILE:HG23	1:A:84:ILE:O	0.52	2.05	7	2
1:A:99:PHE:C	1:A:103:ASP:CB	0.52	2.83	11	1
1:A:58:LYS:O	1:A:62:ALA:HB2	0.52	2.05	4	1
1:A:116:TYR:O	1:A:123:THR:N	0.52	2.43	4	4
1:A:108:VAL:CG2	1:A:111:THR:HG21	0.52	2.35	7	1
1:A:51:ILE:O	1:A:55:ILE:CG1	0.52	2.57	8	1
1:A:42:LEU:HD11	1:A:86:ILE:HD11	0.52	1.80	12	1
1:A:108:VAL:C	1:A:110:SER:N	0.52	2.67	12	12
1:A:115:ALA:HB1	1:A:122:PHE:CD2	0.52	2.39	14	2
1:A:51:ILE:C	1:A:55:ILE:CG2	0.51	2.83	4	8
1:A:61:LYS:HA	1:A:64:ASN:HB2	0.51	1.81	15	8
1:A:73:ALA:O	1:A:74:GLY:C	0.51	2.53	15	4
1:A:122:PHE:CE1	1:A:124:ILE:HD11	0.51	2.40	15	1
1:A:116:TYR:N	1:A:123:THR:O	0.51	2.43	6	4
1:A:53:GLU:O	1:A:57:LEU:HB2	0.51	2.05	1	1
1:A:108:VAL:HG23	1:A:122:PHE:HE2	0.51	1.57	2	1
1:A:92:GLY:O	1:A:96:GLY:C	0.51	2.54	7	2
1:A:40:LEU:CD1	1:A:86:ILE:CD1	0.51	2.89	9	2
1:A:86:ILE:O	1:A:122:PHE:CB	0.51	2.59	11	1
1:A:46:ASP:N	1:A:48:ILE:CD1	0.51	2.74	13	3
1:A:41:VAL:HG22	1:A:77:TRP:CE3	0.51	2.40	15	2
1:A:101:VAL:O	1:A:102:TYR:C	0.51	2.52	1	13
1:A:95:LEU:CD1	1:A:99:PHE:CG	0.51	2.94	7	2
1:A:86:ILE:C	1:A:122:PHE:HB3	0.51	2.30	11	1
1:A:95:LEU:CD1	1:A:99:PHE:HB2	0.51	2.34	12	1
1:A:40:LEU:CB	1:A:84:ILE:HD13	0.51	2.35	3	1
1:A:57:LEU:O	1:A:61:LYS:CB	0.51	2.59	5	6
1:A:46:ASP:N	1:A:48:ILE:HD13	0.51	2.21	13	3
1:A:108:VAL:HG21	1:A:122:PHE:CZ	0.51	2.40	11	1
1:A:41:VAL:HB	1:A:110:SER:CB	0.51	2.36	7	9
1:A:76:TRP:NE1	1:A:78:ILE:HG12	0.51	2.21	8	4
1:A:95:LEU:CD1	1:A:99:PHE:HB3	0.51	2.35	6	5
1:A:64:ASN:HB3	1:A:67:ILE:CD1	0.51	2.36	7	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:TRP:NE1	1:A:78:ILE:HG13	0.51	2.21	3	1
1:A:68:VAL:O	1:A:78:ILE:HG23	0.51	2.06	9	1
1:A:94:LEU:CD2	1:A:95:LEU:N	0.51	2.72	9	3
1:A:88:ALA:O	1:A:91:ALA:CB	0.51	2.56	11	1
1:A:98:PRO:O	1:A:102:TYR:HB2	0.51	2.05	11	1
1:A:109:SER:O	1:A:111:THR:N	0.51	2.44	12	1
1:A:72:LYS:CB	1:A:75:PHE:HB2	0.51	2.36	1	1
1:A:90:GLU:O	1:A:93:GLU:HG3	0.51	2.06	1	5
1:A:69:VAL:HA	1:A:78:ILE:CG1	0.51	2.36	12	6
1:A:48:ILE:C	1:A:50:ALA:N	0.51	2.69	8	8
1:A:67:ILE:HD12	1:A:67:ILE:N	0.51	2.21	1	3
1:A:100:SER:O	1:A:104:LEU:HD23	0.51	2.05	11	1
1:A:97:LYS:HG2	1:A:98:PRO:CD	0.50	2.36	3	1
1:A:39:VAL:HG22	1:A:110:SER:OG	0.50	2.06	14	1
1:A:88:ALA:O	1:A:99:PHE:CE1	0.50	2.65	6	5
1:A:101:VAL:O	1:A:105:LEU:CD2	0.50	2.60	6	1
1:A:88:ALA:CA	1:A:100:SER:HA	0.50	2.36	11	1
1:A:70:GLU:O	1:A:77:TRP:O	0.50	2.30	7	3
1:A:42:LEU:HB2	1:A:76:TRP:CZ3	0.50	2.42	8	1
1:A:45:SER:HB3	1:A:48:ILE:HG23	0.50	1.82	8	2
1:A:36:ASN:N	1:A:36:ASN:OD1	0.50	2.43	11	1
1:A:48:ILE:N	1:A:48:ILE:CD1	0.50	2.72	1	1
1:A:40:LEU:HA	1:A:110:SER:OG	0.50	2.05	13	2
1:A:47:GLU:O	1:A:51:ILE:HG12	0.50	2.06	12	11
1:A:74:GLY:O	1:A:75:PHE:CD1	0.50	2.65	2	1
1:A:95:LEU:N	1:A:95:LEU:CD2	0.50	2.75	2	1
1:A:67:ILE:N	1:A:67:ILE:HD12	0.50	2.22	3	10
1:A:86:ILE:C	1:A:86:ILE:CD1	0.50	2.84	13	3
1:A:92:GLY:O	1:A:97:LYS:N	0.50	2.45	4	5
1:A:96:GLY:C	1:A:97:LYS:CG	0.50	2.84	5	1
1:A:60:GLY:O	1:A:62:ALA:N	0.50	2.44	12	1
1:A:99:PHE:CE2	1:A:103:ASP:CG	0.50	2.89	12	1
1:A:94:LEU:HD23	1:A:95:LEU:HG	0.50	1.83	4	1
1:A:101:VAL:O	1:A:105:LEU:HD23	0.50	2.07	6	1
1:A:45:SER:C	1:A:48:ILE:HD13	0.50	2.32	8	1
1:A:101:VAL:HG12	1:A:105:LEU:HD12	0.50	1.80	11	1
1:A:39:VAL:HG12	1:A:112:VAL:CG2	0.50	2.36	13	2
1:A:70:GLU:CB	1:A:77:TRP:C	0.50	2.85	13	1
1:A:41:VAL:HG21	1:A:110:SER:HB3	0.50	1.84	1	1
1:A:86:ILE:O	1:A:87:ASP:OD1	0.50	2.29	14	3
1:A:41:VAL:CG2	1:A:77:TRP:CE3	0.50	2.95	6	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:ASP:N	1:A:46:ASP:OD1	0.50	2.44	12	1
1:A:123:THR:O	1:A:123:THR:CG2	0.50	2.59	3	3
1:A:96:GLY:C	1:A:97:LYS:HG3	0.50	2.32	5	2
1:A:44:LYS:CE	1:A:46:ASP:OD1	0.50	2.60	8	1
1:A:122:PHE:CD1	1:A:123:THR:N	0.50	2.80	9	1
1:A:40:LEU:HB2	1:A:84:ILE:HD11	0.50	1.83	14	1
1:A:98:PRO:O	1:A:101:VAL:N	0.50	2.45	1	4
1:A:40:LEU:CB	1:A:84:ILE:CD1	0.50	2.90	3	1
1:A:39:VAL:HG12	1:A:112:VAL:HG23	0.50	1.82	13	1
1:A:57:LEU:O	1:A:61:LYS:HB3	0.50	2.07	11	6
1:A:92:GLY:O	1:A:94:LEU:N	0.50	2.45	5	1
1:A:103:ASP:O	1:A:107:ASN:N	0.50	2.44	12	2
1:A:101:VAL:CG1	1:A:102:TYR:N	0.50	2.75	13	1
1:A:88:ALA:O	1:A:89:ALA:C	0.49	2.55	7	13
1:A:94:LEU:CD2	1:A:95:LEU:HD23	0.49	2.37	6	2
1:A:70:GLU:CB	1:A:77:TRP:CB	0.49	2.90	2	1
1:A:84:ILE:CG1	1:A:85:GLU:N	0.49	2.75	3	3
1:A:108:VAL:CG2	1:A:111:THR:CG2	0.49	2.88	7	1
1:A:40:LEU:O	1:A:78:ILE:N	0.49	2.44	8	1
1:A:68:VAL:CB	1:A:79:LYS:HB3	0.49	2.37	8	2
1:A:98:PRO:HB2	1:A:102:TYR:CD1	0.49	2.42	8	1
1:A:49:ASP:OD1	1:A:50:ALA:N	0.49	2.46	9	1
1:A:111:THR:OG1	1:A:112:VAL:N	0.49	2.44	11	1
1:A:60:GLY:O	1:A:64:ASN:HB3	0.49	2.08	10	5
1:A:68:VAL:CG1	1:A:79:LYS:HB3	0.49	2.37	1	8
1:A:38:VAL:CG2	1:A:125:THR:C	0.49	2.83	2	1
1:A:45:SER:HB2	1:A:72:LYS:O	0.49	2.07	3	1
1:A:68:VAL:CG1	1:A:79:LYS:HG3	0.49	2.37	12	2
1:A:69:VAL:HG12	1:A:70:GLU:H	0.49	1.68	13	1
1:A:39:VAL:HG13	1:A:110:SER:OG	0.49	2.07	14	1
1:A:87:ASP:N	1:A:87:ASP:OD1	0.49	2.45	7	2
1:A:77:TRP:O	1:A:78:ILE:HD12	0.49	2.08	2	2
1:A:60:GLY:O	1:A:64:ASN:HB2	0.49	2.07	15	10
1:A:111:THR:O	1:A:112:VAL:HB	0.49	2.05	14	3
1:A:122:PHE:CD1	1:A:124:ILE:HD11	0.49	2.42	6	1
1:A:40:LEU:HD23	1:A:78:ILE:HB	0.49	1.85	11	1
1:A:71:ASP:CG	1:A:71:ASP:O	0.49	2.55	12	1
1:A:122:PHE:CD1	1:A:124:ILE:CD1	0.49	2.95	15	1
1:A:103:ASP:O	1:A:107:ASN:OD1	0.49	2.30	10	4
1:A:44:LYS:CB	1:A:48:ILE:HD11	0.49	2.33	10	1
1:A:86:ILE:CG2	1:A:122:PHE:CZ	0.49	2.94	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:38:VAL:CG1	1:A:82:GLY:O	0.49	2.59	11	1
1:A:67:ILE:HA	1:A:79:LYS:O	0.49	2.07	10	2
1:A:88:ALA:O	1:A:99:PHE:CD1	0.49	2.66	6	4
1:A:41:VAL:O	1:A:107:ASN:OD1	0.49	2.30	4	1
1:A:120:THR:CG2	1:A:121:LYS:HG3	0.49	2.36	7	1
1:A:108:VAL:O	1:A:111:THR:CG2	0.49	2.61	11	1
1:A:68:VAL:CG1	1:A:79:LYS:CG	0.49	2.90	11	3
1:A:70:GLU:OE1	1:A:70:GLU:CA	0.49	2.61	9	7
1:A:40:LEU:O	1:A:78:ILE:O	0.49	2.30	8	2
1:A:114:ARG:HB3	1:A:125:THR:CG2	0.49	2.36	5	1
1:A:116:TYR:HB3	1:A:123:THR:CG2	0.49	2.38	5	2
1:A:52:ILE:HA	1:A:56:VAL:CG2	0.49	2.38	8	1
1:A:48:ILE:HG23	1:A:51:ILE:HD11	0.49	1.83	10	1
1:A:123:THR:C	1:A:124:ILE:CD1	0.49	2.81	10	1
1:A:89:ALA:N	1:A:100:SER:HB2	0.49	2.23	9	1
1:A:39:VAL:O	1:A:39:VAL:CG1	0.49	2.61	5	7
1:A:90:GLU:O	1:A:91:ALA:C	0.49	2.56	3	3
1:A:96:GLY:O	1:A:97:LYS:CG	0.49	2.60	5	2
1:A:112:VAL:HG12	1:A:112:VAL:O	0.49	2.07	5	1
1:A:100:SER:O	1:A:103:ASP:OD1	0.49	2.31	6	1
1:A:65:PRO:C	1:A:66:SER:OG	0.49	2.55	11	3
1:A:114:ARG:CB	1:A:125:THR:CG2	0.48	2.90	5	1
1:A:99:PHE:O	1:A:103:ASP:CG	0.48	2.56	6	1
1:A:99:PHE:O	1:A:103:ASP:N	0.48	2.41	13	3
1:A:114:ARG:HG2	1:A:115:ALA:N	0.48	2.21	10	2
1:A:101:VAL:HG12	1:A:105:LEU:CG	0.48	2.38	10	2
1:A:40:LEU:C	1:A:41:VAL:HG23	0.48	2.33	12	1
1:A:62:ALA:C	1:A:63:LYS:HE3	0.48	2.32	14	1
1:A:86:ILE:O	1:A:122:PHE:HB2	0.48	2.09	3	2
1:A:68:VAL:HG11	1:A:79:LYS:HE2	0.48	1.84	6	1
1:A:84:ILE:CG2	1:A:124:ILE:HG12	0.48	2.38	11	1
1:A:39:VAL:O	1:A:110:SER:HB2	0.48	2.09	7	4
1:A:98:PRO:O	1:A:103:ASP:N	0.48	2.46	11	1
1:A:93:GLU:HG3	1:A:94:LEU:N	0.48	2.23	5	6
1:A:39:VAL:O	1:A:110:SER:O	0.48	2.31	5	2
1:A:111:THR:HG22	1:A:115:ALA:HB2	0.48	1.84	8	1
1:A:44:LYS:O	1:A:45:SER:OG	0.48	2.30	10	1
1:A:40:LEU:HD21	1:A:42:LEU:HD12	0.48	1.85	12	1
1:A:39:VAL:CG2	1:A:78:ILE:O	0.48	2.61	1	1
1:A:49:ASP:O	1:A:53:GLU:HB2	0.48	2.08	5	5
1:A:86:ILE:C	1:A:87:ASP:OD1	0.48	2.56	3	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:88:ALA:CB	1:A:100:SER:C	0.48	2.86	13	3
1:A:90:GLU:O	1:A:93:GLU:HG2	0.48	2.09	12	6
1:A:55:ILE:CG2	1:A:56:VAL:HG23	0.48	2.35	11	3
1:A:57:LEU:O	1:A:61:LYS:CG	0.48	2.62	6	1
1:A:95:LEU:CD1	1:A:99:PHE:CA	0.48	2.92	11	1
1:A:43:MET:C	1:A:74:GLY:O	0.48	2.57	1	2
1:A:77:TRP:CD1	1:A:77:TRP:N	0.48	2.80	7	6
1:A:42:LEU:HD22	1:A:76:TRP:CE3	0.48	2.43	3	1
1:A:101:VAL:HG13	1:A:104:LEU:HD21	0.48	1.85	3	1
1:A:107:ASN:O	1:A:107:ASN:OD1	0.48	2.31	6	1
1:A:101:VAL:HG22	1:A:104:LEU:HD22	0.48	1.86	9	1
1:A:68:VAL:HG13	1:A:70:GLU:CD	0.48	2.34	10	1
1:A:74:GLY:C	1:A:75:PHE:CD2	0.48	2.92	11	1
1:A:107:ASN:OD1	1:A:107:ASN:O	0.48	2.32	12	1
1:A:40:LEU:HD13	1:A:85:GLU:O	0.48	2.09	14	1
1:A:41:VAL:HB	1:A:110:SER:HB2	0.48	1.85	14	1
1:A:89:ALA:HB2	1:A:120:THR:OG1	0.48	2.09	15	1
1:A:94:LEU:C	1:A:94:LEU:HD22	0.48	2.34	5	1
1:A:42:LEU:CD1	1:A:107:ASN:HB2	0.48	2.38	2	1
1:A:90:GLU:O	1:A:93:GLU:N	0.48	2.46	3	2
1:A:43:MET:O	1:A:45:SER:N	0.48	2.47	7	3
1:A:86:ILE:HG12	1:A:124:ILE:HD11	0.48	1.84	6	1
1:A:115:ALA:CB	1:A:122:PHE:CE1	0.48	2.97	6	1
1:A:48:ILE:CG1	1:A:71:ASP:OD2	0.48	2.61	8	1
1:A:68:VAL:HG12	1:A:70:GLU:OE1	0.48	2.08	2	1
1:A:36:ASN:O	1:A:126:SER:OG	0.48	2.31	14	4
1:A:42:LEU:CD1	1:A:76:TRP:CZ3	0.48	2.97	14	2
1:A:39:VAL:C	1:A:110:SER:OG	0.48	2.57	14	1
1:A:49:ASP:OD2	1:A:71:ASP:CG	0.47	2.56	1	1
1:A:99:PHE:CD2	1:A:100:SER:HB3	0.47	2.44	5	1
1:A:68:VAL:O	1:A:79:LYS:N	0.47	2.45	12	2
1:A:88:ALA:O	1:A:91:ALA:N	0.47	2.46	8	2
1:A:89:ALA:N	1:A:100:SER:HB3	0.47	2.24	12	2
1:A:89:ALA:HA	1:A:99:PHE:CE1	0.47	2.44	10	1
1:A:86:ILE:C	1:A:87:ASP:CG	0.47	2.81	9	3
1:A:43:MET:O	1:A:74:GLY:O	0.47	2.31	1	1
1:A:65:PRO:O	1:A:66:SER:OG	0.47	2.33	14	4
1:A:41:VAL:HB	1:A:110:SER:CA	0.47	2.39	11	2
1:A:94:LEU:CG	1:A:95:LEU:HD23	0.47	2.40	6	1
1:A:45:SER:O	1:A:46:ASP:OD1	0.47	2.33	10	1
1:A:48:ILE:HD13	1:A:76:TRP:HB2	0.47	1.85	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:VAL:O	1:A:110:SER:OG	0.47	2.33	14	1
1:A:60:GLY:O	1:A:64:ASN:CB	0.47	2.63	1	5
1:A:68:VAL:CG1	1:A:79:LYS:HG2	0.47	2.39	7	4
1:A:91:ALA:HB3	1:A:99:PHE:HD1	0.47	1.69	14	3
1:A:60:GLY:HA2	1:A:64:ASN:CB	0.47	2.40	5	2
1:A:45:SER:HB3	1:A:75:PHE:N	0.47	2.24	10	1
1:A:69:VAL:HG13	1:A:78:ILE:CG1	0.47	2.39	11	3
1:A:109:SER:C	1:A:111:THR:N	0.47	2.72	12	1
1:A:41:VAL:CG2	1:A:110:SER:OG	0.47	2.62	4	1
1:A:40:LEU:HD13	1:A:86:ILE:HG12	0.47	1.85	9	1
1:A:90:GLU:CG	1:A:91:ALA:N	0.47	2.78	9	1
1:A:42:LEU:CD2	1:A:107:ASN:CG	0.47	2.88	11	1
1:A:85:GLU:HG3	1:A:123:THR:OG1	0.47	2.10	13	1
1:A:38:VAL:HG21	1:A:126:SER:N	0.47	2.24	3	2
1:A:99:PHE:O	1:A:103:ASP:OD1	0.47	2.33	6	1
1:A:57:LEU:C	1:A:57:LEU:HD23	0.47	2.33	10	1
1:A:86:ILE:O	1:A:122:PHE:O	0.47	2.33	13	3
1:A:71:ASP:O	1:A:71:ASP:OD1	0.47	2.32	15	1
1:A:60:GLY:C	1:A:64:ASN:HB2	0.47	2.35	5	4
1:A:43:MET:O	1:A:76:TRP:HB3	0.47	2.10	13	3
1:A:69:VAL:C	1:A:70:GLU:OE1	0.47	2.58	5	2
1:A:38:VAL:HG11	1:A:125:THR:O	0.47	2.10	10	1
1:A:108:VAL:CG2	1:A:122:PHE:CZ	0.47	2.98	11	1
1:A:84:ILE:HG13	1:A:85:GLU:N	0.47	2.25	9	5
1:A:89:ALA:HA	1:A:100:SER:CB	0.47	2.39	9	2
1:A:68:VAL:HB	1:A:79:LYS:HB3	0.47	1.87	10	4
1:A:57:LEU:O	1:A:61:LYS:HB2	0.47	2.10	5	2
1:A:53:GLU:HA	1:A:57:LEU:CB	0.47	2.37	8	1
1:A:62:ALA:C	1:A:63:LYS:HE2	0.47	2.35	14	1
1:A:44:LYS:O	1:A:45:SER:HB2	0.46	2.10	4	1
1:A:67:ILE:N	1:A:67:ILE:HD13	0.46	2.25	7	3
1:A:68:VAL:HG12	1:A:68:VAL:O	0.46	2.09	10	1
1:A:68:VAL:HB	1:A:79:LYS:CG	0.46	2.40	2	3
1:A:44:LYS:HB3	1:A:48:ILE:CD1	0.46	2.41	3	1
1:A:68:VAL:O	1:A:78:ILE:HA	0.46	2.10	12	1
1:A:89:ALA:HA	1:A:100:SER:OG	0.46	2.11	8	3
1:A:45:SER:OG	1:A:45:SER:O	0.46	2.30	10	1
1:A:104:LEU:C	1:A:106:ILE:N	0.46	2.73	12	2
1:A:67:ILE:HG13	1:A:80:ALA:CB	0.46	2.40	3	3
1:A:40:LEU:HG	1:A:41:VAL:N	0.46	2.25	5	2
1:A:52:ILE:CD1	1:A:78:ILE:HD13	0.46	2.41	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:102:TYR:O	1:A:106:ILE:CD1	0.46	2.64	10	1
1:A:76:TRP:CD1	1:A:76:TRP:C	0.46	2.92	13	1
1:A:92:GLY:N	1:A:99:PHE:CG	0.46	2.83	14	5
1:A:92:GLY:C	1:A:94:LEU:N	0.46	2.72	10	2
1:A:123:THR:CA	1:A:124:ILE:HD12	0.46	2.41	10	1
1:A:86:ILE:HB	1:A:122:PHE:CG	0.46	2.46	11	1
1:A:57:LEU:HG	1:A:58:LYS:N	0.46	2.26	6	2
1:A:92:GLY:HA3	1:A:100:SER:CB	0.46	2.41	8	1
1:A:102:TYR:O	1:A:106:ILE:HD13	0.46	2.11	10	1
1:A:68:VAL:CG1	1:A:79:LYS:HB2	0.46	2.40	13	1
1:A:42:LEU:HD23	1:A:76:TRP:CE3	0.46	2.45	2	1
1:A:69:VAL:HA	1:A:78:ILE:HG13	0.46	1.88	15	7
1:A:89:ALA:CB	1:A:120:THR:O	0.46	2.64	9	1
1:A:104:LEU:HD12	1:A:108:VAL:CG1	0.46	2.40	13	1
1:A:44:LYS:O	1:A:44:LYS:HG3	0.46	2.11	15	1
1:A:45:SER:O	1:A:46:ASP:HB2	0.46	2.11	3	5
1:A:40:LEU:HB2	1:A:84:ILE:CD1	0.46	2.41	5	2
1:A:100:SER:O	1:A:104:LEU:CB	0.46	2.64	5	1
1:A:101:VAL:HA	1:A:104:LEU:CG	0.46	2.39	14	5
1:A:86:ILE:CA	1:A:122:PHE:HB3	0.46	2.41	11	1
1:A:111:THR:HB	1:A:124:ILE:CG2	0.46	2.41	11	1
1:A:36:ASN:O	1:A:126:SER:CB	0.46	2.64	12	1
1:A:52:ILE:HD11	1:A:76:TRP:CE2	0.46	2.45	1	4
1:A:104:LEU:HB2	1:A:122:PHE:CZ	0.46	2.46	1	1
1:A:40:LEU:C	1:A:110:SER:HB2	0.46	2.36	2	1
1:A:45:SER:CB	1:A:48:ILE:CD1	0.46	2.94	8	1
1:A:86:ILE:C	1:A:122:PHE:CB	0.46	2.89	11	1
1:A:43:MET:SD	1:A:103:ASP:OD2	0.46	2.73	12	1
1:A:47:GLU:O	1:A:51:ILE:N	0.46	2.40	14	1
1:A:63:LYS:N	1:A:63:LYS:HE3	0.46	2.26	14	1
1:A:46:ASP:H	1:A:48:ILE:HD12	0.45	1.71	10	1
1:A:38:VAL:HG21	1:A:124:ILE:CG2	0.45	2.41	8	1
1:A:48:ILE:HG12	1:A:71:ASP:OD2	0.45	2.12	8	1
1:A:101:VAL:CG1	1:A:105:LEU:CD1	0.45	2.94	8	1
1:A:45:SER:CB	1:A:72:LYS:O	0.45	2.64	3	1
1:A:40:LEU:CA	1:A:110:SER:HB2	0.45	2.42	8	1
1:A:55:ILE:CG2	1:A:56:VAL:N	0.45	2.79	1	14
1:A:89:ALA:O	1:A:90:GLU:C	0.45	2.57	11	3
1:A:53:GLU:O	1:A:57:LEU:HD23	0.45	2.11	6	1
1:A:46:ASP:N	1:A:48:ILE:HD11	0.45	2.26	8	1
1:A:117:THR:HG22	1:A:118:LEU:H	0.45	1.72	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:PHE:C	1:A:103:ASP:HB2	0.45	2.36	11	1
1:A:63:LYS:CE	1:A:63:LYS:CA	0.45	2.94	14	1
1:A:57:LEU:HD13	1:A:57:LEU:O	0.45	2.11	1	1
1:A:97:LYS:N	1:A:98:PRO:CD	0.45	2.79	9	3
1:A:108:VAL:CG1	1:A:108:VAL:O	0.45	2.65	8	1
1:A:86:ILE:CD1	1:A:108:VAL:HG23	0.45	2.42	9	1
1:A:70:GLU:HB3	1:A:77:TRP:C	0.45	2.37	13	1
1:A:51:ILE:O	1:A:55:ILE:HB	0.45	2.12	1	14
1:A:92:GLY:CA	1:A:99:PHE:CD1	0.45	2.99	1	4
1:A:75:PHE:HB3	1:A:77:TRP:CD1	0.45	2.47	2	1
1:A:41:VAL:CG2	1:A:110:SER:HB2	0.45	2.42	4	1
1:A:98:PRO:O	1:A:102:TYR:HB3	0.45	2.11	5	1
1:A:88:ALA:O	1:A:92:GLY:N	0.45	2.46	9	1
1:A:94:LEU:HD23	1:A:95:LEU:CA	0.45	2.40	12	1
1:A:104:LEU:C	1:A:108:VAL:HB	0.45	2.36	12	3
1:A:56:VAL:CG1	1:A:67:ILE:HG21	0.45	2.42	2	1
1:A:52:ILE:CG2	1:A:69:VAL:CG1	0.45	2.93	3	1
1:A:56:VAL:O	1:A:61:LYS:N	0.45	2.50	12	3
1:A:61:LYS:O	1:A:61:LYS:HG2	0.45	2.12	7	1
1:A:57:LEU:HD13	1:A:58:LYS:N	0.45	2.26	8	1
1:A:48:ILE:HG22	1:A:52:ILE:CD1	0.45	2.42	10	1
1:A:124:ILE:HD13	1:A:124:ILE:H	0.45	1.70	11	1
1:A:48:ILE:CA	1:A:51:ILE:HD11	0.45	2.42	14	1
1:A:86:ILE:CG1	1:A:122:PHE:HB3	0.45	2.42	6	1
1:A:111:THR:HA	1:A:124:ILE:HG21	0.45	1.89	13	1
1:A:41:VAL:CB	1:A:110:SER:HB2	0.45	2.42	14	1
1:A:62:ALA:CB	1:A:63:LYS:HE3	0.45	2.42	14	1
1:A:104:LEU:HA	1:A:107:ASN:ND2	0.45	2.27	6	4
1:A:95:LEU:HB2	1:A:97:LYS:CE	0.45	2.42	6	1
1:A:61:LYS:O	1:A:61:LYS:CG	0.45	2.65	7	1
1:A:91:ALA:O	1:A:94:LEU:HB3	0.45	2.12	10	4
1:A:86:ILE:HG23	1:A:122:PHE:CE1	0.45	2.47	10	1
1:A:118:LEU:HB3	1:A:121:LYS:CG	0.45	2.42	15	1
1:A:40:LEU:HB2	1:A:84:ILE:HD13	0.44	1.88	3	1
1:A:88:ALA:CB	1:A:100:SER:CA	0.44	2.93	7	4
1:A:76:TRP:CE2	1:A:78:ILE:HG12	0.44	2.47	8	1
1:A:114:ARG:HG2	1:A:125:THR:CG2	0.44	2.42	13	1
1:A:86:ILE:HG12	1:A:124:ILE:CD1	0.44	2.42	6	1
1:A:95:LEU:H	1:A:95:LEU:HD12	0.44	1.72	11	1
1:A:36:ASN:OD1	1:A:37:ALA:N	0.44	2.50	15	1
1:A:38:VAL:HG23	1:A:126:SER:CB	0.44	2.41	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:SER:O	1:A:45:SER:OG	0.44	2.32	3	1
1:A:86:ILE:CG2	1:A:124:ILE:CD1	0.44	2.95	3	1
1:A:42:LEU:HD11	1:A:107:ASN:OD1	0.44	2.12	5	1
1:A:45:SER:N	1:A:48:ILE:CD1	0.44	2.80	8	2
1:A:91:ALA:O	1:A:95:LEU:HG	0.44	2.12	12	1
1:A:40:LEU:HB2	1:A:84:ILE:CG1	0.44	2.42	14	1
1:A:41:VAL:CG1	1:A:77:TRP:NE1	0.44	2.81	8	4
1:A:97:LYS:HG2	1:A:98:PRO:HD2	0.44	1.90	3	1
1:A:84:ILE:CG2	1:A:124:ILE:HB	0.44	2.41	8	5
1:A:101:VAL:HG22	1:A:104:LEU:CD2	0.44	2.42	9	1
1:A:104:LEU:HD22	1:A:122:PHE:HE2	0.44	1.73	11	1
1:A:69:VAL:HG22	1:A:78:ILE:HG12	0.44	1.90	12	1
1:A:111:THR:CB	1:A:124:ILE:HG13	0.44	2.42	12	1
1:A:77:TRP:O	1:A:78:ILE:CG1	0.44	2.66	13	1
1:A:114:ARG:O	1:A:124:ILE:CG2	0.44	2.65	13	1
1:A:49:ASP:HA	1:A:69:VAL:HG11	0.44	1.89	4	1
1:A:45:SER:O	1:A:46:ASP:HB3	0.44	2.12	5	1
1:A:53:GLU:CA	1:A:57:LEU:HB3	0.44	2.40	8	1
1:A:38:VAL:HG11	1:A:82:GLY:O	0.44	2.13	11	1
1:A:40:LEU:HD11	1:A:42:LEU:HD23	0.44	1.88	15	1
1:A:44:LYS:CG	1:A:74:GLY:HA2	0.44	2.42	15	1
1:A:48:ILE:O	1:A:52:ILE:HG12	0.44	2.13	14	3
1:A:94:LEU:CD2	1:A:95:LEU:HG	0.44	2.43	4	2
1:A:77:TRP:N	1:A:77:TRP:CD1	0.44	2.86	5	4
1:A:36:ASN:O	1:A:37:ALA:O	0.44	2.36	8	1
1:A:42:LEU:HA	1:A:107:ASN:CG	0.44	2.38	14	1
1:A:95:LEU:HD12	1:A:95:LEU:H	0.44	1.72	10	1
1:A:42:LEU:CD2	1:A:86:ILE:HD11	0.44	2.38	15	1
1:A:74:GLY:C	1:A:75:PHE:CD1	0.44	2.95	1	1
1:A:104:LEU:CG	1:A:105:LEU:N	0.44	2.81	3	3
1:A:41:VAL:HB	1:A:110:SER:OG	0.44	2.12	7	4
1:A:98:PRO:CA	1:A:102:TYR:HB2	0.44	2.42	11	1
1:A:87:ASP:OD2	1:A:121:LYS:HG3	0.44	2.12	12	1
1:A:44:LYS:O	1:A:45:SER:HB3	0.44	2.13	1	2
1:A:92:GLY:HA2	1:A:95:LEU:CD1	0.44	2.42	13	4
1:A:96:GLY:O	1:A:97:LYS:HB2	0.44	2.11	9	6
1:A:89:ALA:O	1:A:93:GLU:HG3	0.44	2.13	8	1
1:A:69:VAL:HG12	1:A:70:GLU:N	0.43	2.27	13	1
1:A:48:ILE:CA	1:A:51:ILE:CD1	0.43	2.95	14	1
1:A:36:ASN:CG	1:A:37:ALA:N	0.43	2.76	15	1
1:A:96:GLY:O	1:A:97:LYS:HG2	0.43	2.12	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:ASN:CG	1:A:67:ILE:HD11	0.43	2.38	15	3
1:A:104:LEU:O	1:A:105:LEU:C	0.43	2.57	12	4
1:A:104:LEU:CB	1:A:122:PHE:CZ	0.43	3.01	1	2
1:A:109:SER:O	1:A:112:VAL:HG13	0.43	2.13	12	1
1:A:108:VAL:HG23	1:A:122:PHE:CZ	0.43	2.49	15	1
1:A:76:TRP:CD1	1:A:78:ILE:HD13	0.43	2.48	1	1
1:A:114:ARG:O	1:A:124:ILE:HG13	0.43	2.13	15	3
1:A:48:ILE:CB	1:A:76:TRP:CD1	0.43	3.02	8	1
1:A:118:LEU:HB2	1:A:121:LYS:CB	0.43	2.44	9	1
1:A:47:GLU:O	1:A:48:ILE:C	0.43	2.62	14	1
1:A:62:ALA:HB1	1:A:63:LYS:HE3	0.43	1.88	14	1
1:A:120:THR:HG22	1:A:121:LYS:HG3	0.43	1.90	7	1
1:A:87:ASP:OD2	1:A:121:LYS:HE2	0.43	2.14	8	1
1:A:45:SER:HB3	1:A:48:ILE:HD12	0.43	1.89	9	1
1:A:86:ILE:O	1:A:121:LYS:HB2	0.43	2.14	15	1
1:A:61:LYS:HG2	1:A:64:ASN:O	0.43	2.14	3	1
1:A:90:GLU:HA	1:A:93:GLU:HG2	0.43	1.89	12	3
1:A:48:ILE:O	1:A:51:ILE:N	0.43	2.51	12	2
1:A:42:LEU:HD22	1:A:107:ASN:ND2	0.43	2.29	10	1
1:A:45:SER:H	1:A:76:TRP:CB	0.43	2.26	10	1
1:A:86:ILE:O	1:A:122:PHE:HB3	0.43	2.14	11	1
1:A:60:GLY:HA2	1:A:64:ASN:HB2	0.43	1.91	1	2
1:A:125:THR:OG1	1:A:126:SER:N	0.43	2.50	1	1
1:A:120:THR:HG23	1:A:121:LYS:CG	0.43	2.44	7	1
1:A:87:ASP:OD1	1:A:121:LYS:HG3	0.43	2.14	14	1
1:A:92:GLY:O	1:A:96:GLY:HA2	0.43	2.14	8	1
1:A:52:ILE:HD12	1:A:78:ILE:HD13	0.43	1.90	12	1
1:A:101:VAL:HG22	1:A:104:LEU:HD21	0.43	1.91	13	1
1:A:46:ASP:OD1	1:A:46:ASP:N	0.43	2.50	14	1
1:A:92:GLY:HA3	1:A:99:PHE:CD2	0.43	2.46	3	1
1:A:86:ILE:C	1:A:122:PHE:HB2	0.43	2.39	14	2
1:A:113:GLY:O	1:A:124:ILE:HG23	0.43	2.14	4	1
1:A:86:ILE:CG2	1:A:86:ILE:O	0.43	2.67	7	1
1:A:88:ALA:O	1:A:100:SER:OG	0.43	2.32	12	1
1:A:117:THR:CG2	1:A:118:LEU:N	0.43	2.81	12	1
1:A:84:ILE:C	1:A:85:GLU:HG3	0.43	2.39	4	1
1:A:86:ILE:HB	1:A:122:PHE:CD2	0.43	2.49	4	1
1:A:40:LEU:HG	1:A:110:SER:OG	0.43	2.14	12	1
1:A:102:TYR:C	1:A:102:TYR:CD1	0.43	2.96	12	1
1:A:42:LEU:HA	1:A:107:ASN:HB2	0.42	1.91	6	4
1:A:56:VAL:HA	1:A:60:GLY:H	0.42	1.74	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:88:ALA:O	1:A:100:SER:HB3	0.42	2.14	9	1
1:A:52:ILE:HG21	1:A:69:VAL:HG21	0.42	1.91	11	1
1:A:99:PHE:HA	1:A:103:ASP:HB2	0.42	1.90	11	1
1:A:42:LEU:HD13	1:A:107:ASN:CB	0.42	2.44	1	1
1:A:75:PHE:CD2	1:A:77:TRP:NE1	0.42	2.87	3	1
1:A:39:VAL:O	1:A:110:SER:HB3	0.42	2.14	4	1
1:A:95:LEU:HD12	1:A:97:LYS:HG3	0.42	1.92	6	1
1:A:45:SER:CB	1:A:48:ILE:HG23	0.42	2.44	8	1
1:A:45:SER:HB3	1:A:48:ILE:CD1	0.42	2.44	9	1
1:A:92:GLY:HA2	1:A:99:PHE:CB	0.42	2.44	11	1
1:A:87:ASP:OD2	1:A:121:LYS:HD2	0.42	2.15	1	2
1:A:101:VAL:O	1:A:105:LEU:HG	0.42	2.14	8	4
1:A:38:VAL:CG2	1:A:126:SER:CA	0.42	2.96	3	1
1:A:72:LYS:O	1:A:75:PHE:N	0.42	2.50	3	1
1:A:67:ILE:HG13	1:A:80:ALA:HA	0.42	1.91	7	1
1:A:39:VAL:HG13	1:A:110:SER:CB	0.42	2.44	8	1
1:A:103:ASP:C	1:A:107:ASN:ND2	0.42	2.78	9	1
1:A:40:LEU:HD23	1:A:84:ILE:HD11	0.42	1.91	3	1
1:A:40:LEU:HD11	1:A:86:ILE:CD1	0.42	2.44	4	1
1:A:100:SER:O	1:A:104:LEU:CG	0.42	2.68	5	1
1:A:52:ILE:HD11	1:A:76:TRP:HE1	0.42	1.74	7	2
1:A:54:ASP:OD1	1:A:54:ASP:O	0.42	2.37	10	1
1:A:95:LEU:HD13	1:A:99:PHE:CG	0.42	2.50	15	1
1:A:95:LEU:HD13	1:A:99:PHE:HB3	0.42	1.91	15	1
1:A:124:ILE:CG2	1:A:125:THR:N	0.42	2.82	15	1
1:A:52:ILE:HA	1:A:55:ILE:CG2	0.42	2.44	7	3
1:A:43:MET:HA	1:A:74:GLY:O	0.42	2.15	3	1
1:A:43:MET:O	1:A:44:LYS:C	0.42	2.62	12	3
1:A:42:LEU:HD13	1:A:107:ASN:ND2	0.42	2.30	8	1
1:A:114:ARG:O	1:A:124:ILE:HG22	0.42	2.14	11	1
1:A:42:LEU:HD22	1:A:107:ASN:OD1	0.42	2.15	1	1
1:A:91:ALA:O	1:A:95:LEU:HD11	0.42	2.14	7	1
1:A:72:LYS:C	1:A:74:GLY:N	0.42	2.75	8	1
1:A:112:VAL:HG23	1:A:113:GLY:N	0.42	2.29	9	1
1:A:95:LEU:HD12	1:A:95:LEU:C	0.42	2.39	12	1
1:A:64:ASN:HB3	1:A:67:ILE:HD13	0.42	1.91	14	1
1:A:105:LEU:HD13	1:A:105:LEU:HA	0.42	1.70	6	1
1:A:88:ALA:C	1:A:100:SER:HB2	0.42	2.40	9	2
1:A:40:LEU:CG	1:A:84:ILE:HG12	0.42	2.45	10	1
1:A:63:LYS:HE2	1:A:63:LYS:CA	0.42	2.44	14	1
1:A:101:VAL:C	1:A:103:ASP:N	0.42	2.74	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:SER:H	1:A:76:TRP:HB2	0.42	1.74	4	1
1:A:42:LEU:HD13	1:A:107:ASN:HB2	0.42	1.92	6	1
1:A:86:ILE:CB	1:A:122:PHE:CE1	0.42	3.02	15	1
1:A:52:ILE:HD12	1:A:78:ILE:HG13	0.42	1.91	2	1
1:A:42:LEU:HD22	1:A:76:TRP:HE3	0.42	1.74	3	1
1:A:95:LEU:HD23	1:A:95:LEU:H	0.42	1.75	6	2
1:A:116:TYR:HB2	1:A:123:THR:CG2	0.42	2.45	6	1
1:A:48:ILE:HG13	1:A:71:ASP:CG	0.42	2.40	8	1
1:A:61:LYS:O	1:A:62:ALA:C	0.42	2.63	9	3
1:A:40:LEU:CD2	1:A:84:ILE:HG12	0.42	2.40	6	1
1:A:88:ALA:C	1:A:100:SER:HB3	0.42	2.39	7	1
1:A:38:VAL:HG12	1:A:80:ALA:O	0.42	2.15	9	1
1:A:42:LEU:HD13	1:A:42:LEU:HA	0.42	1.75	9	1
1:A:109:SER:O	1:A:110:SER:C	0.42	2.63	12	1
1:A:104:LEU:HD13	1:A:108:VAL:HG21	0.42	1.92	13	1
1:A:48:ILE:C	1:A:52:ILE:HG12	0.41	2.40	3	1
1:A:44:LYS:O	1:A:74:GLY:HA2	0.41	2.15	4	1
1:A:38:VAL:HG13	1:A:126:SER:HB2	0.41	1.92	10	1
1:A:89:ALA:O	1:A:92:GLY:N	0.41	2.53	11	1
1:A:95:LEU:CD1	1:A:99:PHE:HA	0.41	2.44	11	1
1:A:89:ALA:HB2	1:A:120:THR:HB	0.41	1.90	13	1
1:A:95:LEU:HD11	1:A:99:PHE:CD1	0.41	2.50	15	1
1:A:40:LEU:HB2	1:A:84:ILE:HG12	0.41	1.92	7	1
1:A:101:VAL:C	1:A:104:LEU:HD23	0.41	2.39	9	1
1:A:118:LEU:CB	1:A:121:LYS:HB2	0.41	2.45	2	1
1:A:40:LEU:HB3	1:A:84:ILE:CD1	0.41	2.44	3	1
1:A:82:GLY:O	1:A:126:SER:OG	0.41	2.36	6	1
1:A:40:LEU:CD1	1:A:86:ILE:HD11	0.41	2.45	9	1
1:A:58:LYS:O	1:A:61:LYS:HG3	0.41	2.15	10	1
1:A:75:PHE:CE2	1:A:77:TRP:CE2	0.41	3.08	12	1
1:A:116:TYR:HB3	1:A:123:THR:HG22	0.41	1.92	12	1
1:A:77:TRP:O	1:A:78:ILE:HG13	0.41	2.15	13	1
1:A:96:GLY:C	1:A:97:LYS:HG2	0.41	2.41	1	1
1:A:90:GLU:OE1	1:A:90:GLU:CA	0.41	2.69	3	1
1:A:95:LEU:CD2	1:A:95:LEU:H	0.41	2.29	6	1
1:A:38:VAL:O	1:A:80:ALA:O	0.41	2.38	8	1
1:A:39:VAL:HG22	1:A:40:LEU:N	0.41	2.30	8	1
1:A:95:LEU:HD12	1:A:97:LYS:HB2	0.41	1.91	14	1
1:A:63:LYS:CG	1:A:64:ASN:N	0.41	2.83	2	2
1:A:111:THR:C	1:A:113:GLY:N	0.41	2.76	4	1
1:A:42:LEU:CD1	1:A:107:ASN:ND2	0.41	2.83	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:SER:C	1:A:48:ILE:CD1	0.41	2.93	8	1
1:A:86:ILE:O	1:A:87:ASP:CG	0.41	2.64	8	1
1:A:95:LEU:HD22	1:A:97:LYS:HE3	0.41	1.92	10	1
1:A:88:ALA:CB	1:A:100:SER:CB	0.41	2.79	11	1
1:A:45:SER:OG	1:A:72:LYS:O	0.41	2.32	4	1
1:A:100:SER:O	1:A:104:LEU:HB3	0.41	2.14	5	1
1:A:92:GLY:HA3	1:A:100:SER:OG	0.41	2.15	7	1
1:A:117:THR:HG22	1:A:118:LEU:N	0.41	2.31	10	1
1:A:41:VAL:H	1:A:110:SER:CB	0.41	2.26	11	2
1:A:89:ALA:HB2	1:A:120:THR:O	0.41	2.15	9	1
1:A:65:PRO:O	1:A:66:SER:HB2	0.41	2.15	1	2
1:A:97:LYS:O	1:A:99:PHE:CD1	0.41	2.74	5	1
1:A:87:ASP:OD2	1:A:121:LYS:CE	0.41	2.69	8	1
1:A:101:VAL:O	1:A:105:LEU:HD12	0.41	2.15	11	1
1:A:71:ASP:O	1:A:71:ASP:CG	0.41	2.63	13	1
1:A:40:LEU:HB3	1:A:78:ILE:O	0.41	2.16	5	2
1:A:71:ASP:OD1	1:A:71:ASP:N	0.41	2.54	6	1
1:A:86:ILE:HD12	1:A:122:PHE:CE2	0.41	2.51	7	1
1:A:40:LEU:CA	1:A:110:SER:CB	0.41	2.99	8	1
1:A:101:VAL:HA	1:A:104:LEU:HB3	0.41	1.92	9	1
1:A:101:VAL:O	1:A:104:LEU:HD23	0.41	2.14	9	1
1:A:92:GLY:O	1:A:95:LEU:HD12	0.41	2.16	13	1
1:A:47:GLU:HB3	1:A:51:ILE:HD13	0.41	1.92	3	1
1:A:52:ILE:CG2	1:A:69:VAL:HG21	0.41	2.46	14	1
1:A:95:LEU:O	1:A:97:LYS:HG3	0.41	2.16	14	1
1:A:122:PHE:CD1	1:A:124:ILE:HD13	0.40	2.50	2	1
1:A:52:ILE:O	1:A:56:VAL:CB	0.40	2.69	3	2
1:A:61:LYS:HG2	1:A:61:LYS:O	0.40	2.16	4	1
1:A:103:ASP:O	1:A:107:ASN:HB3	0.40	2.16	4	1
1:A:40:LEU:CD2	1:A:85:GLU:O	0.40	2.67	3	1
1:A:95:LEU:HD11	1:A:99:PHE:HA	0.40	1.93	11	1
1:A:36:ASN:HA	1:A:126:SER:OG	0.40	2.16	15	1
1:A:42:LEU:CB	1:A:76:TRP:HB3	0.40	2.46	1	1
1:A:45:SER:O	1:A:47:GLU:N	0.40	2.55	8	1
1:A:91:ALA:O	1:A:92:GLY:C	0.40	2.63	8	1
1:A:104:LEU:HB2	1:A:108:VAL:HG23	0.40	1.93	8	1
1:A:99:PHE:N	1:A:99:PHE:HD1	0.40	2.13	11	1
1:A:40:LEU:CB	1:A:78:ILE:O	0.40	2.70	12	1
1:A:39:VAL:O	1:A:110:SER:CB	0.40	2.70	13	2
1:A:84:ILE:HG12	1:A:85:GLU:N	0.40	2.29	13	1
1:A:92:GLY:CA	1:A:99:PHE:CE2	0.40	3.04	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:ASN:C	1:A:126:SER:HG	0.40	2.23	3	1
1:A:36:ASN:O	1:A:126:SER:HB3	0.40	2.17	5	1
1:A:74:GLY:C	1:A:75:PHE:CG	0.40	3.00	7	1
1:A:45:SER:OG	1:A:46:ASP:N	0.40	2.55	9	1
1:A:111:THR:O	1:A:114:ARG:N	0.40	2.55	1	1
1:A:70:GLU:CB	1:A:77:TRP:HB3	0.40	2.46	2	1
1:A:40:LEU:CD1	1:A:86:ILE:CG1	0.40	2.99	4	1
1:A:41:VAL:O	1:A:110:SER:HB2	0.40	2.16	12	1
1:A:95:LEU:CD2	1:A:99:PHE:CG	0.40	3.04	12	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	91/138 (66%)	62±3 (68±3%)	21±3 (23±4%)	8±2 (9±2%)	1	11
All	All	1365/2070 (66%)	927 (68%)	316 (23%)	122 (9%)	1	11

All 22 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	109	SER	15
1	A	97	LYS	14
1	A	66	SER	10
1	A	73	ALA	9
1	A	99	PHE	8
1	A	96	GLY	7
1	A	45	SER	6
1	A	112	VAL	6
1	A	44	LYS	6
1	A	46	ASP	5
1	A	114	ARG	5
1	A	119	GLY	5
1	A	37	ALA	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	36	ASN	4
1	A	48	ILE	3
1	A	100	SER	3
1	A	61	LYS	3
1	A	110	SER	2
1	A	113	GLY	2
1	A	126	SER	2
1	A	41	VAL	1
1	A	49	ASP	1

6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	73/110 (66%)	48±4 (66±5%)	25±4 (34±5%)	1 11
All	All	1095/1650 (66%)	724 (66%)	371 (34%)	1 11

All 60 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	48	ILE	15
1	A	51	ILE	15
1	A	86	ILE	15
1	A	95	LEU	14
1	A	79	LYS	13
1	A	106	ILE	13
1	A	118	LEU	13
1	A	123	THR	13
1	A	57	LEU	13
1	A	68	VAL	11
1	A	78	ILE	11
1	A	66	SER	10
1	A	121	LYS	10
1	A	61	LYS	9
1	A	107	ASN	9
1	A	109	SER	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	120	THR	8
1	A	122	PHE	8
1	A	44	LYS	8
1	A	72	LYS	8
1	A	42	LEU	7
1	A	104	LEU	7
1	A	94	LEU	7
1	A	97	LYS	7
1	A	58	LYS	6
1	A	100	SER	6
1	A	64	ASN	6
1	A	70	GLU	6
1	A	114	ARG	6
1	A	126	SER	6
1	A	67	ILE	5
1	A	46	ASP	4
1	A	112	VAL	4
1	A	45	SER	4
1	A	116	TYR	4
1	A	47	GLU	3
1	A	63	LYS	3
1	A	93	GLU	3
1	A	110	SER	3
1	A	56	VAL	3
1	A	43	MET	3
1	A	81	ASP	3
1	A	111	THR	3
1	A	85	GLU	3
1	A	103	ASP	3
1	A	124	ILE	3
1	A	105	LEU	3
1	A	71	ASP	3
1	A	101	VAL	3
1	A	36	ASN	2
1	A	38	VAL	2
1	A	75	PHE	2
1	A	90	GLU	2
1	A	54	ASP	2
1	A	53	GLU	2
1	A	49	ASP	2
1	A	102	TYR	2
1	A	40	LEU	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	99	PHE	1
1	A	41	VAL	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided