



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 27, 2026 – 06:45 AM UTC

PDB ID : 1NYO / pdb_00001nyo
Title : Solution structure of the antigenic TB protein MPT70/MPB70
Authors : Bloemink, M.J.; Dentten, E.; Hewinson, R.G.; Williamson, R.A.; Carr, M.D.;
TB Structural Genomics Consortium (TBSGC)
Deposited on : 2003-02-13

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

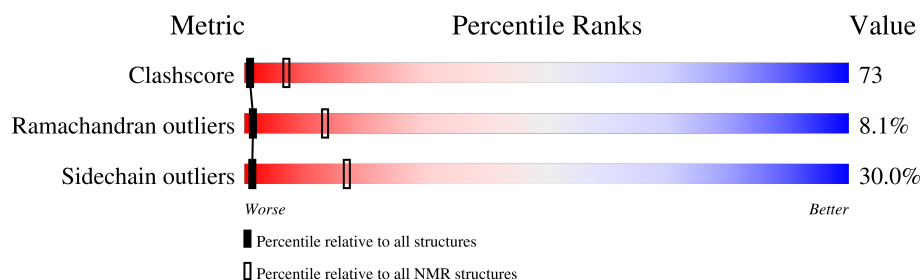
1 Overall quality at a glance

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	163	17% 61% 18% .

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 38 models. Model 27 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 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:128, A:133-A:162 (156)	0.53	27

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 6 clusters. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 3, 4, 7, 12, 13, 14, 16, 17, 18, 24, 25, 27, 28, 29, 32, 35
2	10, 11, 20, 21, 26, 33, 37, 38
3	9, 15, 22, 34, 36
4	6, 8, 19, 31
5	2, 23
6	5, 30

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2277 atoms, of which 1136 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Immunogenic protein MPT70.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	163	Total	C	H	N	O	S	0
			2277	705	1136	192	239	5	

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic is the same as shown in the summary in section 1 of this report. The second graphic shows the sequence where residues are colour-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. Stretches of 2 or more consecutive residues without any outliers are shown as green connectors. Residues which are classified as ill-defined in the NMR ensemble, are shown in cyan with an underline colour-coded according to the previous scheme. Residues which were present in the experimental sample, but not modelled in the final structure are shown in grey.

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70

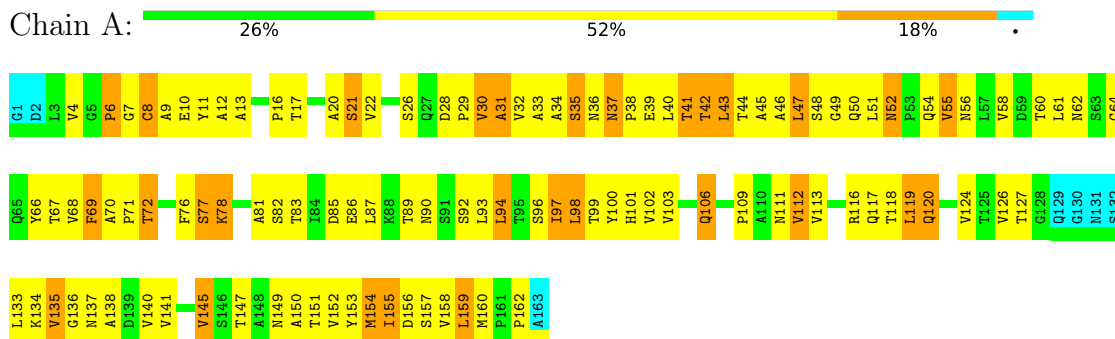


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



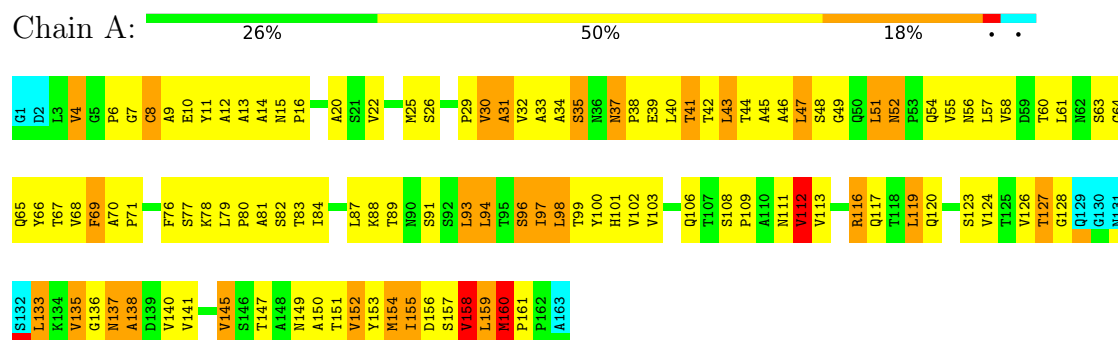
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



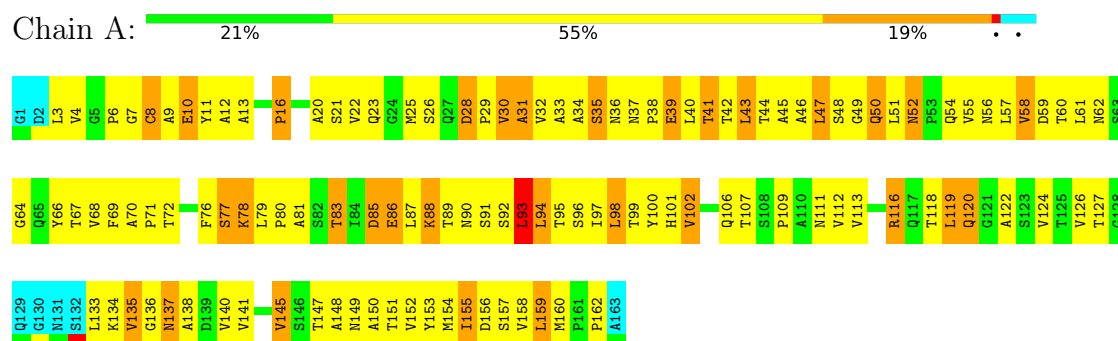
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



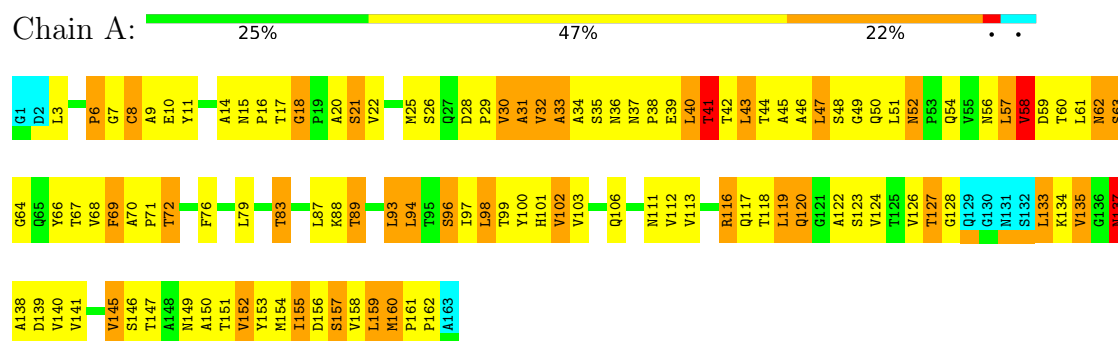
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



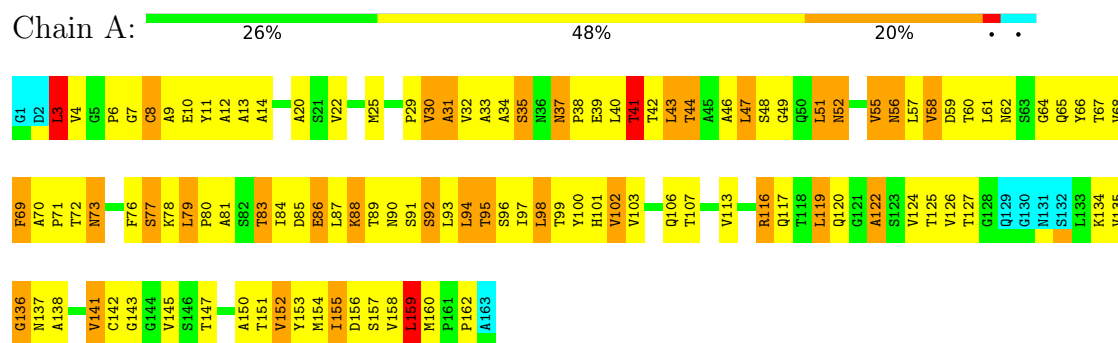
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



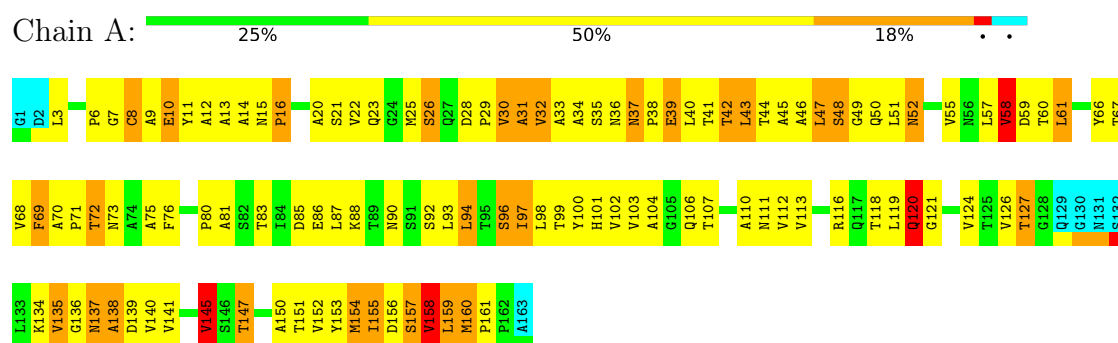
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



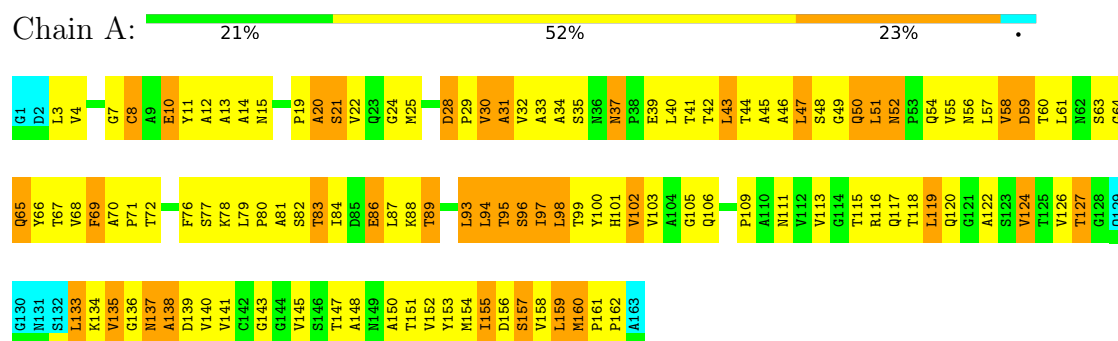
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



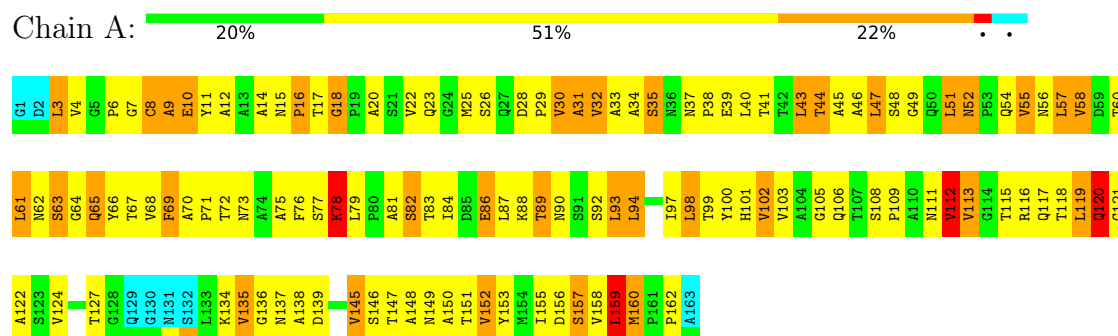
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



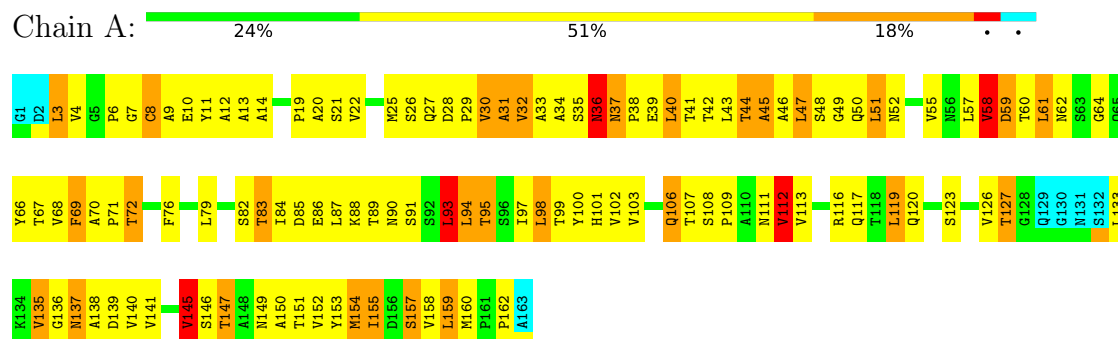
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



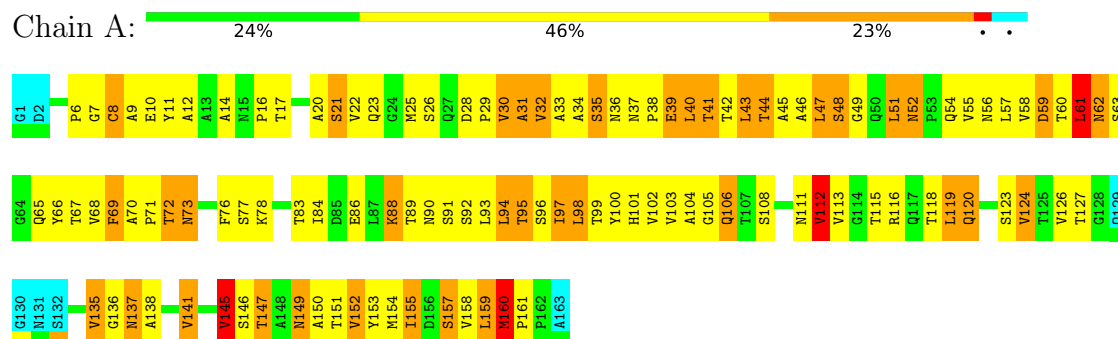
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



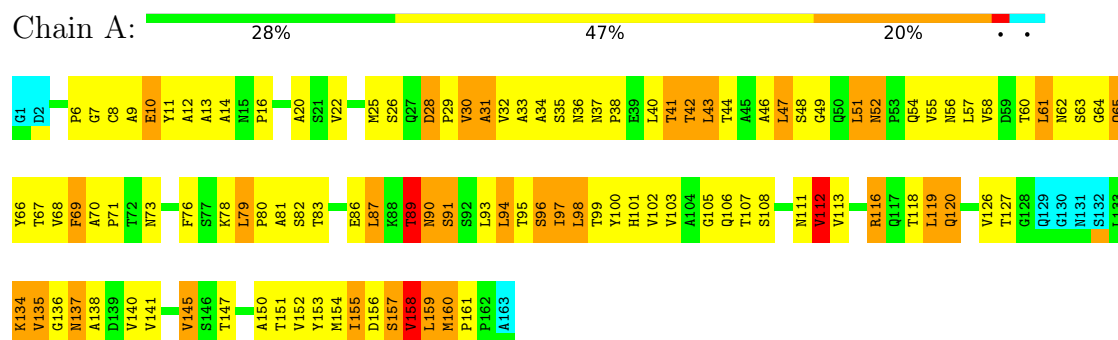
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



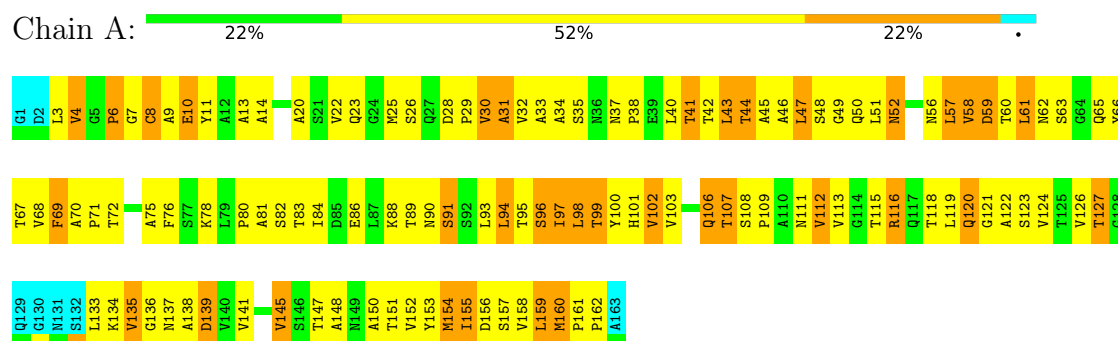
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



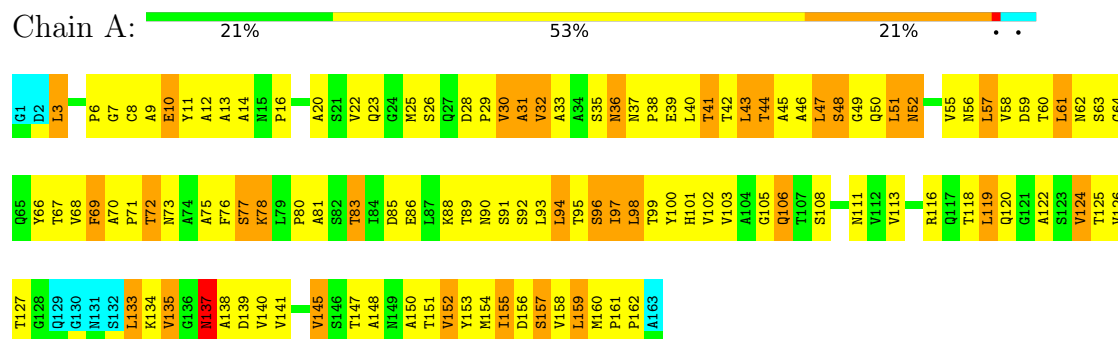
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



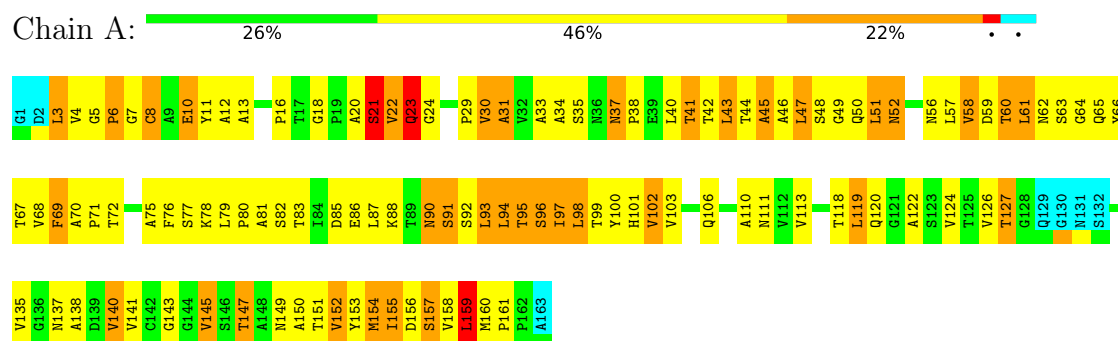
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



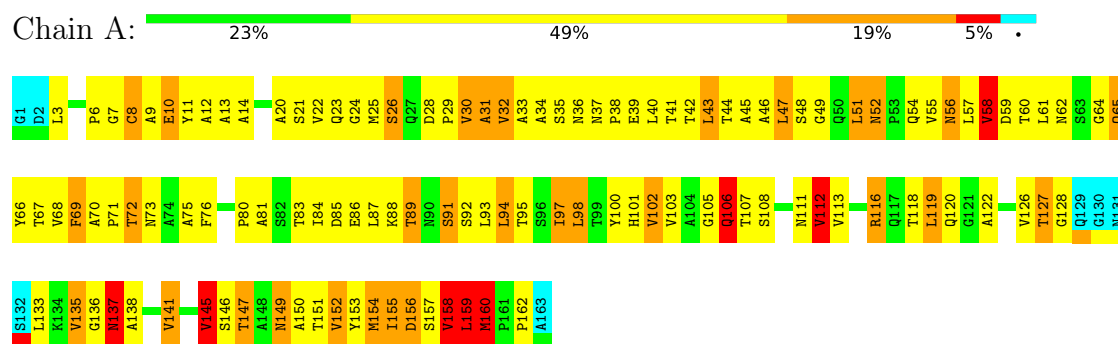
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



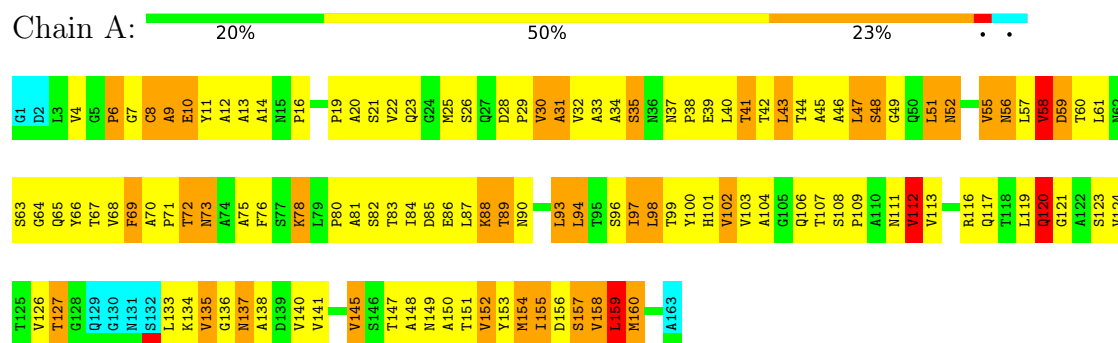
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



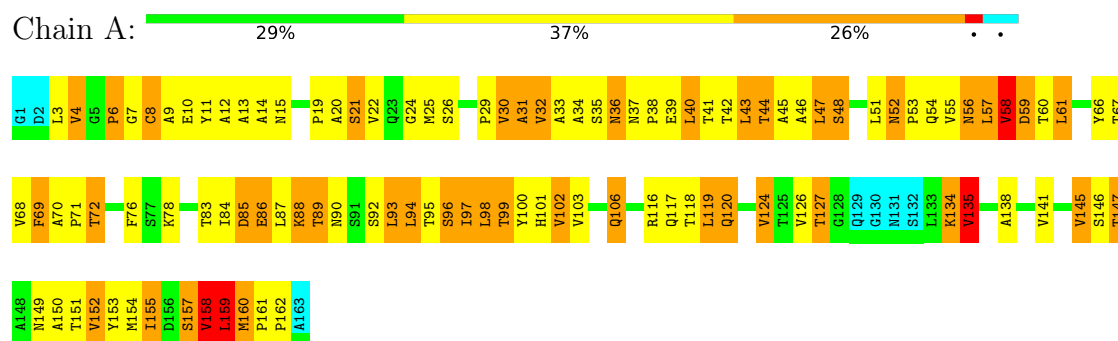
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



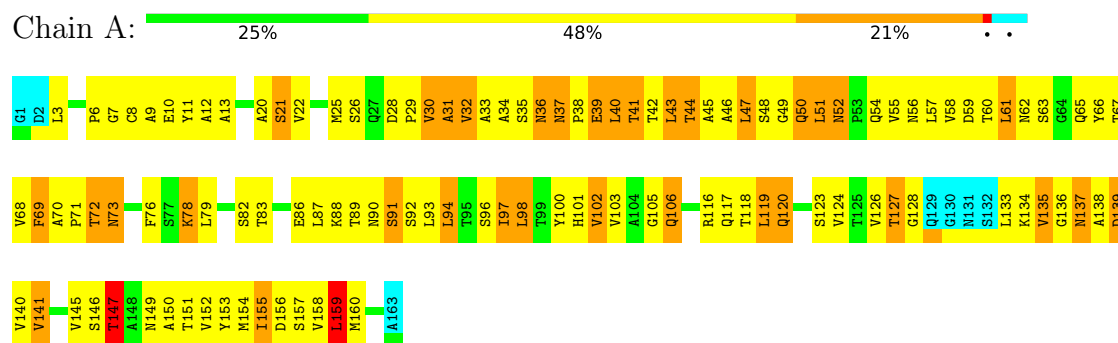
4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



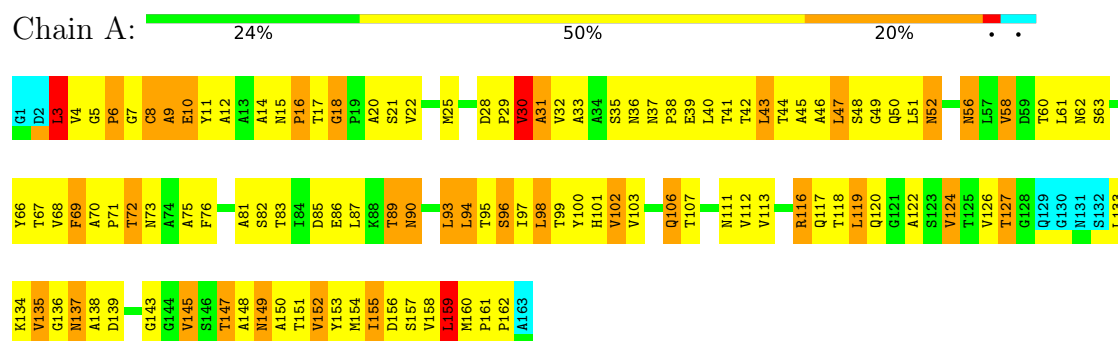
4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



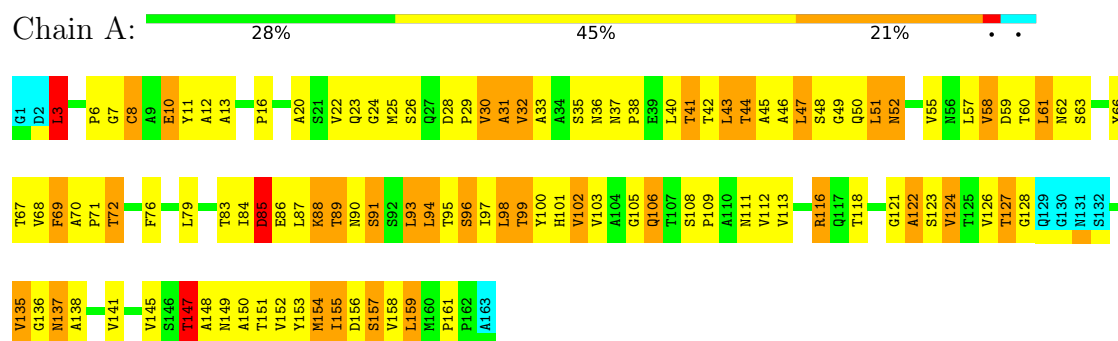
4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



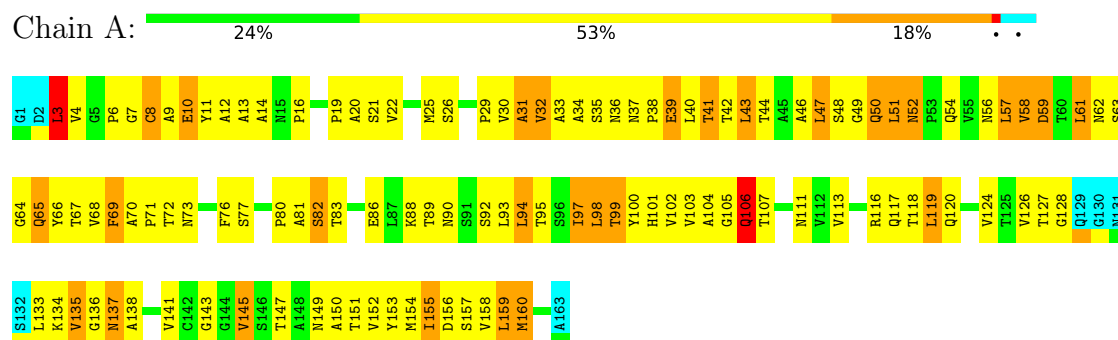
4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



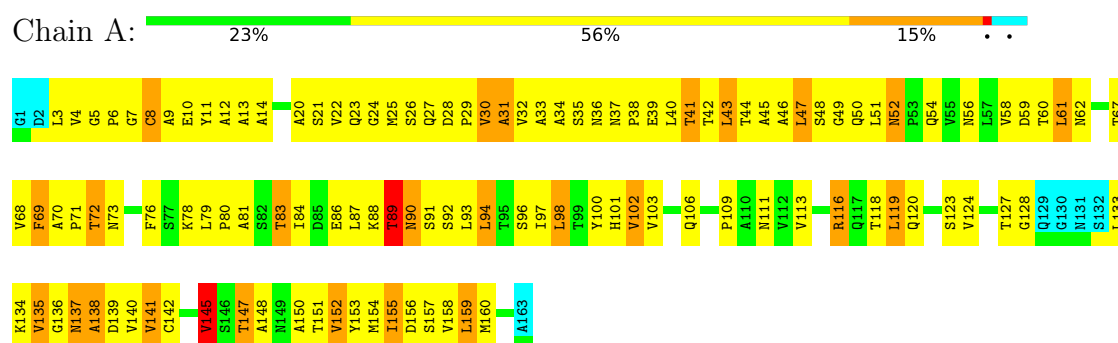
4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



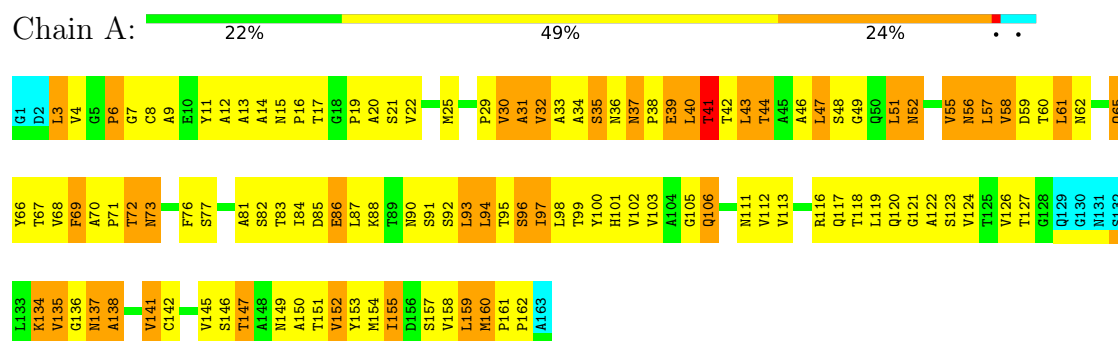
4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



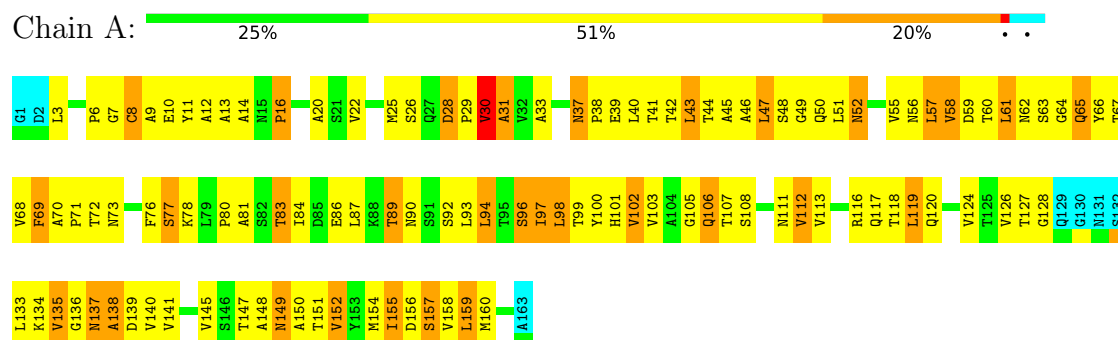
4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



4.2.27 Score per residue for model 27 (medoid)

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



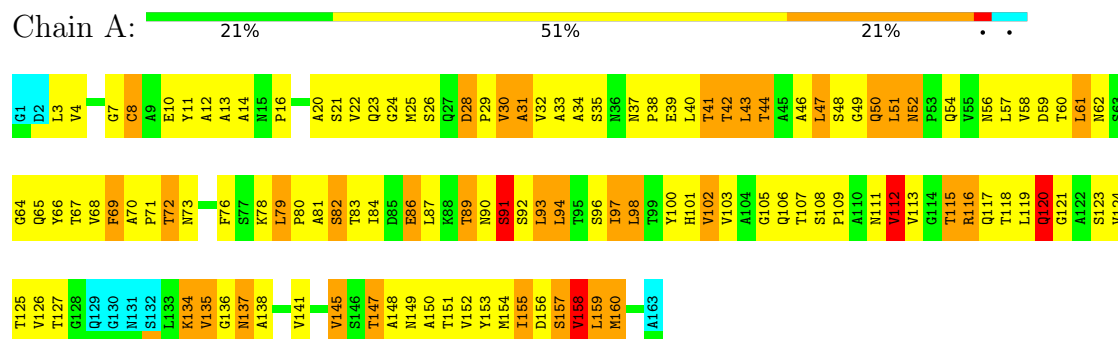
4.2.28 Score per residue for model 28

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



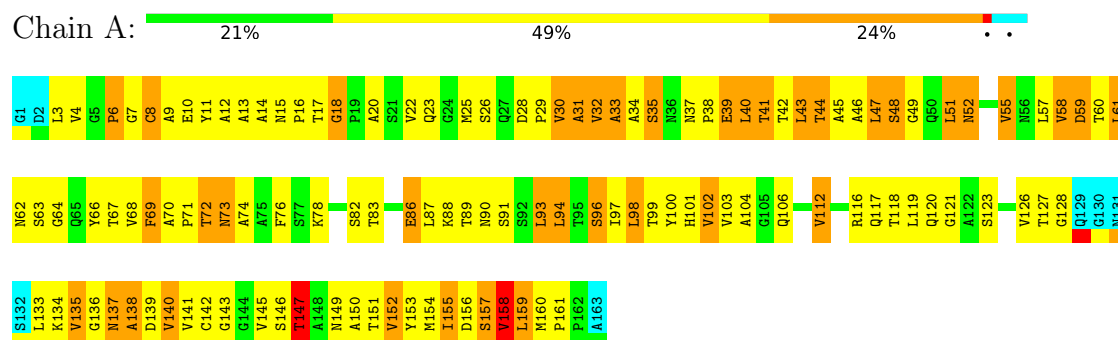
4.2.29 Score per residue for model 29

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



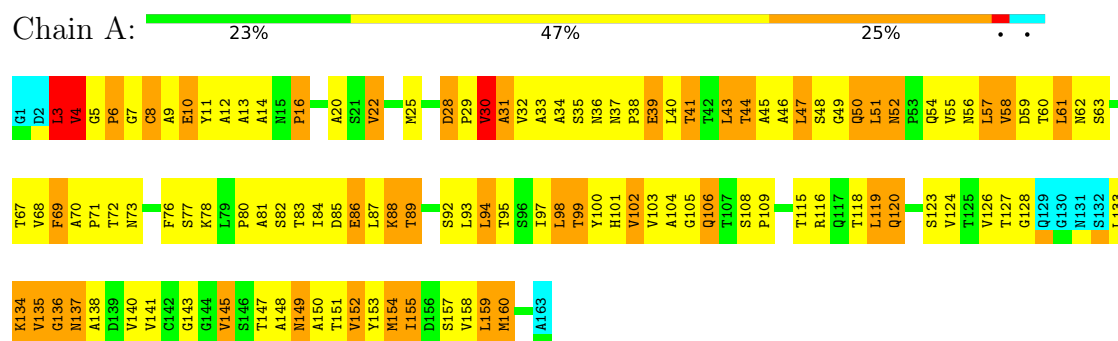
4.2.30 Score per residue for model 30

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



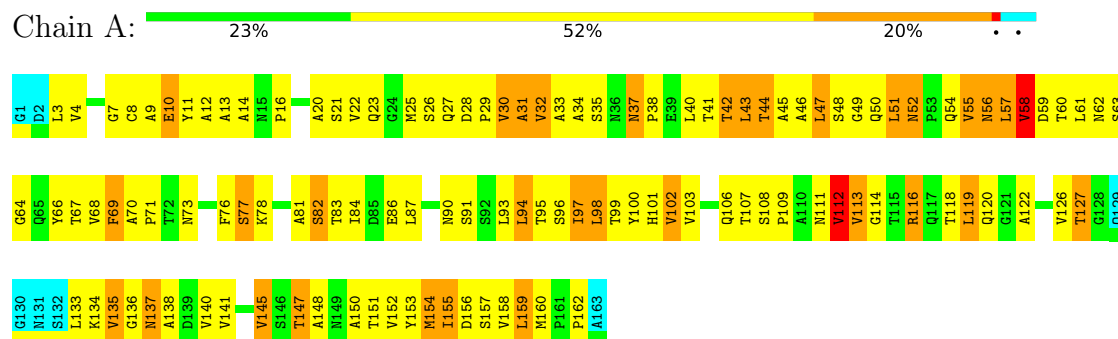
4.2.31 Score per residue for model 31

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



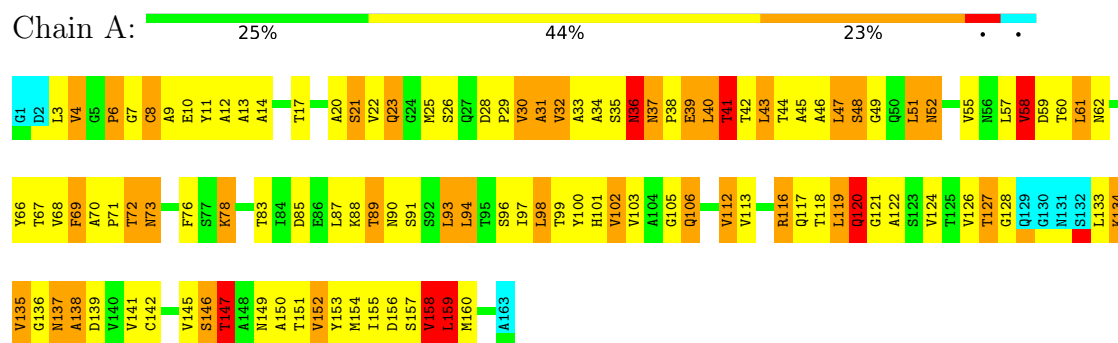
4.2.32 Score per residue for model 32

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



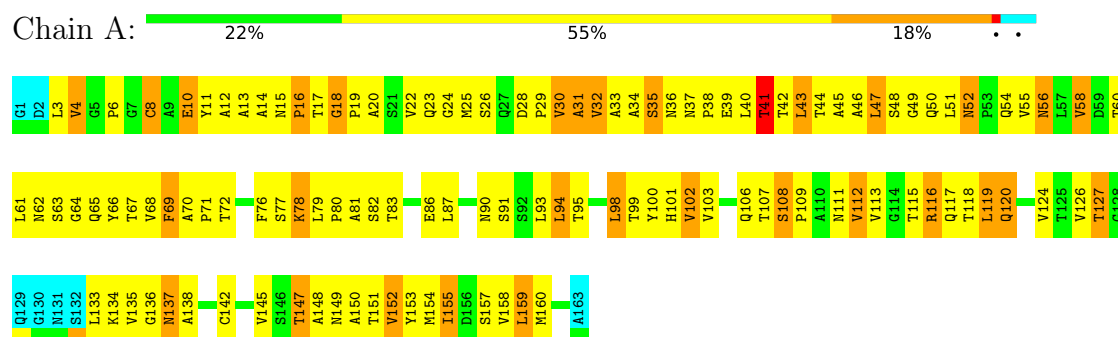
4.2.33 Score per residue for model 33

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



4.2.34 Score per residue for model 34

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



4.2.35 Score per residue for model 35

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



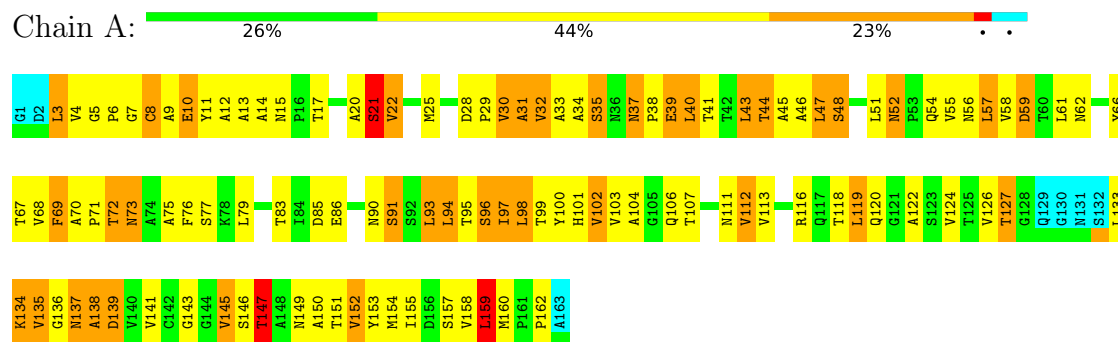
4.2.36 Score per residue for model 36

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



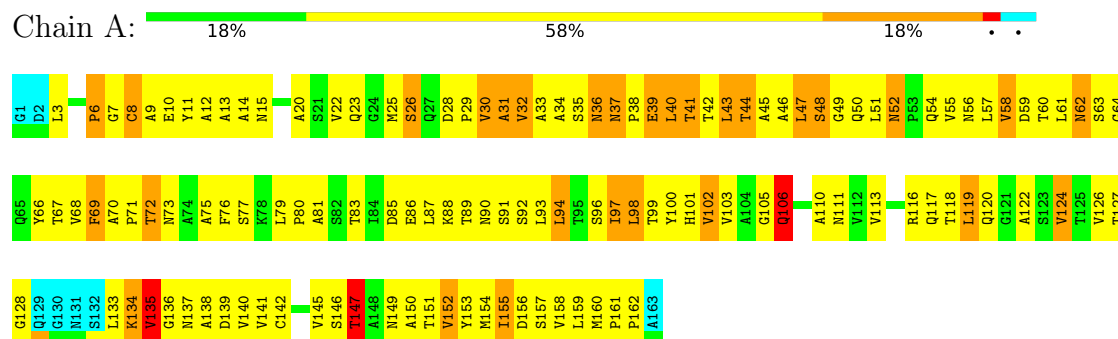
4.2.37 Score per residue for model 37

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



4.2.38 Score per residue for model 38

- Molecule 1: Immunogenic protein MPT70



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 100 calculated structures, 38 were deposited, based on the following criterion: *structures with the least restraint violations*.

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

Software name	Classification	Version
CYANA	structure solution	1.0.3
CYANA	refinement	1.0.3

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	0.64±0.00	0±0/1115 (0.0± 0.0%)	1.17±0.01	0±0/1537 (0.0± 0.0%)
All	All	0.64	0/42370 (0.0%)	1.17	1/58406 (0.0%)

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	1.2±0.4
All	All	0	44

There are no bond-length outliers.

All unique angle outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	90	ASN	CB-CA-C	-5.17	107.94	114.40	16	1

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	69	PHE	Peptide	38
1	A	36	ASN	Peptide	5
1	A	4	VAL	Peptide	1

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	1097	1101	1097	161±16
All	All	41686	41838	41686	6117

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 73.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:VAL:HG22	1:A:145:VAL:HG13	1.07	1.20	17	15
1:A:22:VAL:HG12	1:A:145:VAL:HG13	1.06	1.19	7	8
1:A:99:THR:HG22	1:A:119:LEU:HD11	1.05	1.27	20	7
1:A:22:VAL:HG13	1:A:145:VAL:HG13	1.02	1.23	30	17
1:A:40:LEU:N	1:A:40:LEU:HD23	1.02	1.69	5	10
1:A:35:SER:N	1:A:44:THR:HG21	1.00	1.70	33	6
1:A:126:VAL:HG22	1:A:135:VAL:HG22	0.99	1.33	38	15
1:A:94:LEU:HD12	1:A:98:LEU:HD21	0.98	1.32	14	33
1:A:119:LEU:HD23	1:A:120:GLN:N	0.97	1.75	28	10
1:A:40:LEU:N	1:A:40:LEU:CD2	0.94	2.29	5	10
1:A:37:ASN:O	1:A:41:THR:HG23	0.94	1.62	1	34
1:A:135:VAL:HG12	1:A:159:LEU:HD21	0.93	1.41	3	9
1:A:135:VAL:O	1:A:159:LEU:HD11	0.92	1.65	17	7
1:A:155:ILE:HD13	1:A:157:SER:O	0.92	1.65	29	9
1:A:55:VAL:HG11	1:A:94:LEU:HD21	0.92	1.37	28	9
1:A:79:LEU:HD12	1:A:84:ILE:HD11	0.92	1.39	3	1
1:A:103:VAL:HG13	1:A:117:GLN:O	0.91	1.64	33	22
1:A:31:ALA:HB1	1:A:58:VAL:HG23	0.91	1.42	16	4
1:A:100:TYR:CE1	1:A:124:VAL:HG13	0.91	2.01	11	8
1:A:56:ASN:C	1:A:57:LEU:HD23	0.91	1.90	9	6
1:A:48:SER:HA	1:A:58:VAL:HG23	0.90	1.42	24	15
1:A:99:THR:HG22	1:A:119:LEU:HD22	0.89	1.42	13	4
1:A:119:LEU:HD23	1:A:119:LEU:C	0.89	1.91	14	10
1:A:22:VAL:HG12	1:A:145:VAL:CG1	0.89	1.97	7	4
1:A:86:GLU:O	1:A:89:THR:HG22	0.89	1.67	23	14
1:A:135:VAL:CG1	1:A:159:LEU:HD11	0.88	1.97	14	12
1:A:22:VAL:HG22	1:A:145:VAL:CG1	0.87	1.99	17	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:SER:HB2	1:A:44:THR:HG21	0.87	1.45	11	8
1:A:79:LEU:HD12	1:A:83:THR:HG21	0.86	1.46	6	1
1:A:158:VAL:HG23	1:A:158:VAL:O	0.86	1.71	33	7
1:A:22:VAL:CG1	1:A:145:VAL:HG13	0.85	1.99	7	14
1:A:135:VAL:CG1	1:A:159:LEU:HD21	0.85	2.02	20	6
1:A:35:SER:CB	1:A:44:THR:HG21	0.84	2.01	37	25
1:A:57:LEU:HD23	1:A:57:LEU:N	0.84	1.87	20	6
1:A:61:LEU:HD22	1:A:102:VAL:HG21	0.84	1.47	37	4
1:A:52:ASN:HB2	1:A:55:VAL:HG12	0.84	1.47	19	7
1:A:67:THR:HG23	1:A:151:THR:HB	0.83	1.51	12	38
1:A:116:ARG:O	1:A:124:VAL:HG12	0.83	1.72	21	12
1:A:68:VAL:HG12	1:A:70:ALA:HB2	0.83	1.51	29	37
1:A:22:VAL:HB	1:A:145:VAL:HG13	0.82	1.51	18	8
1:A:34:ALA:C	1:A:44:THR:HG21	0.82	2.00	34	6
1:A:39:GLU:C	1:A:40:LEU:HD23	0.81	2.00	38	14
1:A:30:VAL:HG11	1:A:61:LEU:O	0.81	1.75	33	15
1:A:35:SER:O	1:A:41:THR:HG22	0.81	1.75	2	3
1:A:103:VAL:HG11	1:A:116:ARG:CD	0.81	2.04	18	7
1:A:100:TYR:CD1	1:A:118:THR:HG21	0.81	2.09	11	16
1:A:101:HIS:NE2	1:A:158:VAL:C	0.81	2.38	12	13
1:A:35:SER:OG	1:A:44:THR:HG21	0.80	1.76	9	9
1:A:22:VAL:HG13	1:A:145:VAL:CG1	0.80	2.07	6	10
1:A:158:VAL:HG21	1:A:160:MET:HE3	0.80	1.53	29	1
1:A:61:LEU:CD2	1:A:102:VAL:HG21	0.80	2.07	17	5
1:A:158:VAL:HG23	1:A:160:MET:CG	0.80	2.07	18	4
1:A:99:THR:HA	1:A:119:LEU:HD21	0.79	1.53	16	1
1:A:35:SER:HB3	1:A:44:THR:HG21	0.79	1.53	30	5
1:A:118:THR:HG23	1:A:124:VAL:HG22	0.79	1.55	14	8
1:A:97:ILE:HD11	1:A:160:MET:HE2	0.79	1.52	29	3
1:A:43:LEU:HD13	1:A:71:PRO:HD2	0.78	1.53	11	36
1:A:158:VAL:O	1:A:158:VAL:CG2	0.78	2.31	7	7
1:A:22:VAL:CG2	1:A:145:VAL:HG13	0.78	2.05	17	7
1:A:7:GLY:HA3	1:A:141:VAL:HG12	0.78	1.55	6	24
1:A:97:ILE:HG22	1:A:98:LEU:HD23	0.78	1.54	17	17
1:A:102:VAL:HB	1:A:119:LEU:HD23	0.78	1.56	3	6
1:A:15:ASN:OD1	1:A:20:ALA:HB3	0.77	1.78	5	6
1:A:31:ALA:CB	1:A:58:VAL:HG23	0.77	2.08	15	5
1:A:79:LEU:HD12	1:A:84:ILE:CD1	0.77	2.09	3	1
1:A:31:ALA:HB1	1:A:58:VAL:CG2	0.77	2.09	16	1
1:A:93:LEU:HD12	1:A:93:LEU:O	0.77	1.78	3	11
1:A:71:PRO:HG2	1:A:76:PHE:CE2	0.76	2.15	3	24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:TYR:CE2	1:A:160:MET:O	0.76	2.39	11	35
1:A:103:VAL:HG22	1:A:118:THR:HA	0.76	1.58	36	21
1:A:30:VAL:O	1:A:33:ALA:HB3	0.76	1.80	36	13
1:A:30:VAL:O	1:A:31:ALA:C	0.76	2.29	23	26
1:A:43:LEU:HG	1:A:47:LEU:HD21	0.75	1.58	31	38
1:A:126:VAL:HG13	1:A:135:VAL:CG2	0.75	2.11	19	18
1:A:94:LEU:CD1	1:A:98:LEU:HD21	0.75	2.10	14	30
1:A:127:THR:O	1:A:133:LEU:HD23	0.75	1.80	38	5
1:A:99:THR:CG2	1:A:119:LEU:HD11	0.75	2.12	8	5
1:A:30:VAL:HG13	1:A:31:ALA:H	0.75	1.41	13	25
1:A:4:VAL:HG13	1:A:5:GLY:N	0.75	1.97	31	1
1:A:55:VAL:HG21	1:A:94:LEU:CD2	0.75	2.12	30	7
1:A:135:VAL:HG12	1:A:159:LEU:HD11	0.74	1.59	10	12
1:A:35:SER:CA	1:A:44:THR:HG21	0.74	2.10	5	13
1:A:158:VAL:HG23	1:A:160:MET:HG2	0.74	1.59	18	2
1:A:30:VAL:O	1:A:33:ALA:N	0.74	2.20	4	25
1:A:84:ILE:HG22	1:A:88:LYS:HD2	0.74	1.60	19	2
1:A:101:HIS:NE2	1:A:159:LEU:N	0.74	2.35	7	24
1:A:101:HIS:CE1	1:A:155:ILE:HD11	0.74	2.18	9	14
1:A:118:THR:CG2	1:A:124:VAL:CG2	0.74	2.66	8	2
1:A:135:VAL:O	1:A:138:ALA:HB3	0.74	1.82	31	16
1:A:118:THR:CG2	1:A:124:VAL:HG22	0.74	2.12	2	3
1:A:138:ALA:HB2	1:A:157:SER:HB2	0.74	1.59	26	24
1:A:118:THR:HG23	1:A:124:VAL:CG2	0.74	2.12	22	6
1:A:4:VAL:HG12	1:A:143:GLY:O	0.74	1.82	37	3
1:A:133:LEU:N	1:A:133:LEU:HD23	0.74	1.98	5	5
1:A:103:VAL:HG11	1:A:116:ARG:NE	0.74	1.98	18	2
1:A:52:ASN:HB2	1:A:55:VAL:HG22	0.73	1.58	18	7
1:A:40:LEU:HD11	1:A:154:MET:CG	0.73	2.12	30	1
1:A:25:MET:HB2	1:A:33:ALA:HB1	0.73	1.61	14	27
1:A:34:ALA:HB1	1:A:40:LEU:CB	0.73	2.14	26	9
1:A:72:THR:HG23	1:A:155:ILE:O	0.73	1.84	36	18
1:A:107:THR:HG21	1:A:116:ARG:NH2	0.72	1.99	12	3
1:A:39:GLU:C	1:A:40:LEU:CD2	0.72	2.62	38	10
1:A:10:GLU:O	1:A:13:ALA:HB3	0.72	1.83	33	27
1:A:20:ALA:HB1	1:A:38:PRO:HD3	0.72	1.62	38	34
1:A:151:THR:CG2	1:A:153:TYR:CE2	0.72	2.73	10	33
1:A:58:VAL:HG22	1:A:59:ASP:N	0.72	2.00	28	6
1:A:139:ASP:O	1:A:155:ILE:HG22	0.72	1.83	33	1
1:A:52:ASN:HB3	1:A:55:VAL:HG13	0.72	1.61	20	11
1:A:99:THR:HG22	1:A:119:LEU:CD2	0.72	2.14	13	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:142:CYS:SG	1:A:145:VAL:HG21	0.71	2.25	6	6
1:A:57:LEU:O	1:A:58:VAL:C	0.71	2.33	28	28
1:A:52:ASN:CG	1:A:94:LEU:HD21	0.71	2.10	32	5
1:A:72:THR:HG22	1:A:154:MET:SD	0.71	2.25	29	2
1:A:158:VAL:CG2	1:A:160:MET:HE3	0.71	2.16	29	1
1:A:55:VAL:HG21	1:A:94:LEU:HD21	0.71	1.63	4	6
1:A:57:LEU:O	1:A:61:LEU:HD22	0.71	1.86	9	1
1:A:113:VAL:HG13	1:A:127:THR:HA	0.71	1.61	36	7
1:A:52:ASN:CB	1:A:55:VAL:HG13	0.71	2.15	6	6
1:A:30:VAL:HB	1:A:150:ALA:HB3	0.71	1.62	18	14
1:A:113:VAL:HG23	1:A:127:THR:HA	0.71	1.61	29	13
1:A:126:VAL:HG13	1:A:135:VAL:HG23	0.71	1.63	11	9
1:A:97:ILE:CD1	1:A:160:MET:HE2	0.71	2.15	29	1
1:A:102:VAL:HG13	1:A:119:LEU:HD23	0.70	1.60	35	8
1:A:79:LEU:HD12	1:A:83:THR:CG2	0.70	2.16	6	1
1:A:42:THR:CG2	1:A:76:PHE:CD2	0.70	2.75	35	7
1:A:122:ALA:HB1	1:A:162:PRO:HD2	0.70	1.64	6	8
1:A:126:VAL:HG22	1:A:135:VAL:CG2	0.69	2.15	38	5
1:A:84:ILE:HG22	1:A:88:LYS:HE3	0.69	1.64	23	3
1:A:159:LEU:O	1:A:160:MET:HE3	0.69	1.87	3	2
1:A:158:VAL:O	1:A:160:MET:N	0.69	2.26	36	10
1:A:43:LEU:HD22	1:A:70:ALA:HB1	0.69	1.64	10	9
1:A:87:LEU:HD23	1:A:90:ASN:ND2	0.69	2.02	6	17
1:A:134:LYS:O	1:A:135:VAL:HG23	0.69	1.88	31	12
1:A:104:ALA:HB2	1:A:119:LEU:CD2	0.69	2.18	36	5
1:A:88:LYS:O	1:A:89:THR:HG23	0.69	1.88	33	3
1:A:104:ALA:HB2	1:A:119:LEU:HD21	0.69	1.64	36	4
1:A:4:VAL:CG1	1:A:5:GLY:N	0.68	2.55	31	1
1:A:52:ASN:OD1	1:A:94:LEU:HD11	0.68	1.87	6	7
1:A:55:VAL:HG11	1:A:94:LEU:HD23	0.68	1.65	18	3
1:A:33:ALA:HB1	1:A:147:THR:CG2	0.68	2.19	31	14
1:A:68:VAL:CG1	1:A:70:ALA:HB2	0.68	2.17	6	29
1:A:55:VAL:HG21	1:A:94:LEU:HD23	0.68	1.66	30	1
1:A:30:VAL:CG2	1:A:68:VAL:CG2	0.68	2.72	26	24
1:A:48:SER:CA	1:A:58:VAL:HG23	0.68	2.19	24	8
1:A:28:ASP:O	1:A:148:ALA:HB2	0.68	1.89	27	15
1:A:29:PRO:O	1:A:30:VAL:C	0.68	2.36	15	38
1:A:158:VAL:O	1:A:159:LEU:C	0.68	2.37	33	30
1:A:55:VAL:HG11	1:A:94:LEU:CD2	0.67	2.19	2	7
1:A:75:ALA:O	1:A:158:VAL:HG23	0.67	1.88	28	6
1:A:40:LEU:HD22	1:A:70:ALA:HB1	0.67	1.65	25	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:119:LEU:C	1:A:119:LEU:HD12	0.67	2.14	19	12
1:A:30:VAL:HG13	1:A:31:ALA:N	0.67	2.04	11	28
1:A:101:HIS:NE2	1:A:158:VAL:O	0.67	2.27	3	12
1:A:57:LEU:O	1:A:60:THR:N	0.67	2.27	5	27
1:A:147:THR:HG23	1:A:152:VAL:CG2	0.67	2.20	38	4
1:A:151:THR:HG21	1:A:153:TYR:CE2	0.67	2.24	11	28
1:A:4:VAL:CG1	1:A:133:LEU:HD22	0.67	2.20	33	2
1:A:71:PRO:HD3	1:A:101:HIS:ND1	0.66	2.05	2	38
1:A:99:THR:O	1:A:119:LEU:HD22	0.66	1.90	16	8
1:A:76:PHE:CD1	1:A:158:VAL:HG11	0.66	2.25	23	2
1:A:119:LEU:C	1:A:119:LEU:CD2	0.66	2.66	14	9
1:A:25:MET:SD	1:A:147:THR:HG22	0.66	2.31	14	27
1:A:71:PRO:HG2	1:A:76:PHE:CE1	0.66	2.26	28	14
1:A:71:PRO:HA	1:A:155:ILE:HD12	0.66	1.67	35	13
1:A:147:THR:HG23	1:A:152:VAL:HG21	0.65	1.66	38	2
1:A:47:LEU:HD12	1:A:58:VAL:CG2	0.65	2.21	37	1
1:A:87:LEU:HB3	1:A:94:LEU:HD13	0.65	1.66	32	7
1:A:30:VAL:HG23	1:A:68:VAL:CG2	0.65	2.21	5	16
1:A:57:LEU:N	1:A:57:LEU:CD2	0.65	2.60	9	5
1:A:138:ALA:HB1	1:A:155:ILE:HB	0.65	1.66	2	29
1:A:30:VAL:HG22	1:A:31:ALA:N	0.65	2.06	32	29
1:A:47:LEU:HD13	1:A:61:LEU:CD2	0.65	2.22	19	1
1:A:71:PRO:HG3	1:A:101:HIS:CE1	0.64	2.27	18	37
1:A:108:SER:O	1:A:112:VAL:CG2	0.64	2.45	11	11
1:A:31:ALA:HB2	1:A:61:LEU:HB2	0.64	1.68	9	2
1:A:64:GLY:O	1:A:66:TYR:CD1	0.64	2.51	28	21
1:A:22:VAL:CB	1:A:145:VAL:HG13	0.64	2.23	18	9
1:A:103:VAL:HG11	1:A:116:ARG:HD2	0.64	1.69	27	4
1:A:99:THR:O	1:A:119:LEU:CD2	0.64	2.46	16	1
1:A:57:LEU:C	1:A:61:LEU:HD22	0.64	2.17	9	1
1:A:3:LEU:HD13	1:A:8:CYS:SG	0.64	2.32	34	1
1:A:69:PHE:CD2	1:A:103:VAL:HG23	0.64	2.28	29	13
1:A:71:PRO:HG2	1:A:76:PHE:CZ	0.64	2.28	20	27
1:A:40:LEU:HD22	1:A:70:ALA:CB	0.64	2.23	14	7
1:A:44:THR:HA	1:A:47:LEU:HD11	0.64	1.70	19	34
1:A:126:VAL:HG13	1:A:135:VAL:HG22	0.64	1.69	5	15
1:A:103:VAL:HG13	1:A:116:ARG:HH21	0.64	1.53	11	1
1:A:84:ILE:HG22	1:A:88:LYS:CE	0.63	2.21	17	7
1:A:4:VAL:HG21	1:A:109:PRO:HB2	0.63	1.69	34	4
1:A:69:PHE:CE2	1:A:103:VAL:CG2	0.63	2.82	12	19
1:A:158:VAL:O	1:A:159:LEU:O	0.63	2.16	26	19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:61:LEU:HD21	1:A:102:VAL:HG21	0.63	1.70	8	2
1:A:128:GLY:HA3	1:A:133:LEU:HD23	0.63	1.69	27	2
1:A:116:ARG:O	1:A:124:VAL:HG23	0.63	1.92	8	2
1:A:28:ASP:CG	1:A:32:VAL:HG12	0.63	2.18	5	14
1:A:159:LEU:O	1:A:160:MET:CB	0.62	2.45	29	10
1:A:25:MET:HG3	1:A:147:THR:HG22	0.62	1.71	14	22
1:A:135:VAL:O	1:A:135:VAL:HG12	0.62	1.93	20	2
1:A:6:PRO:O	1:A:9:ALA:HB3	0.62	1.93	31	10
1:A:3:LEU:HD22	1:A:3:LEU:N	0.62	2.09	15	4
1:A:158:VAL:CG2	1:A:160:MET:CG	0.62	2.78	3	3
1:A:95:THR:O	1:A:99:THR:HG23	0.62	1.93	34	3
1:A:32:VAL:HG12	1:A:36:ASN:ND2	0.62	2.08	15	1
1:A:4:VAL:HG21	1:A:109:PRO:CB	0.62	2.25	29	8
1:A:128:GLY:CA	1:A:133:LEU:HD23	0.62	2.25	30	2
1:A:158:VAL:O	1:A:158:VAL:HG12	0.62	1.94	11	21
1:A:32:VAL:O	1:A:35:SER:N	0.62	2.32	11	31
1:A:135:VAL:HG12	1:A:135:VAL:O	0.62	1.95	10	4
1:A:60:THR:O	1:A:66:TYR:CE2	0.61	2.53	6	2
1:A:133:LEU:CB	1:A:140:VAL:HB	0.61	2.25	14	9
1:A:100:TYR:CE2	1:A:160:MET:C	0.61	2.78	37	23
1:A:155:ILE:CD1	1:A:157:SER:O	0.61	2.48	35	9
1:A:47:LEU:HD13	1:A:61:LEU:HD23	0.61	1.71	19	2
1:A:111:ASN:O	1:A:112:VAL:C	0.61	2.43	17	18
1:A:159:LEU:C	1:A:160:MET:CG	0.61	2.72	17	11
1:A:119:LEU:O	1:A:119:LEU:HD12	0.61	1.96	25	2
1:A:57:LEU:C	1:A:61:LEU:CD2	0.61	2.73	9	1
1:A:147:THR:CG2	1:A:152:VAL:HG21	0.61	2.26	38	3
1:A:69:PHE:O	1:A:101:HIS:ND1	0.61	2.32	23	21
1:A:118:THR:HG22	1:A:124:VAL:CG2	0.61	2.25	8	2
1:A:25:MET:CG	1:A:147:THR:HG22	0.61	2.26	14	24
1:A:11:TYR:CE1	1:A:37:ASN:OD1	0.61	2.54	38	2
1:A:112:VAL:HG13	1:A:126:VAL:HG11	0.61	1.72	37	10
1:A:101:HIS:CE1	1:A:159:LEU:HB2	0.61	2.31	19	26
1:A:66:TYR:HB3	1:A:102:VAL:HG23	0.61	1.73	17	1
1:A:99:THR:CG2	1:A:119:LEU:HD22	0.60	2.24	13	3
1:A:67:THR:HG21	1:A:116:ARG:NH2	0.60	2.11	6	4
1:A:42:THR:HG23	1:A:76:PHE:CD2	0.60	2.31	35	6
1:A:37:ASN:CB	1:A:40:LEU:HD12	0.60	2.26	31	2
1:A:31:ALA:HB2	1:A:62:ASN:OD1	0.60	1.96	15	1
1:A:30:VAL:HG22	1:A:31:ALA:H	0.60	1.56	21	19
1:A:97:ILE:HG22	1:A:98:LEU:N	0.60	2.12	12	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:156:ASP:O	1:A:156:ASP:CG	0.60	2.45	7	26
1:A:135:VAL:O	1:A:136:GLY:C	0.60	2.43	19	9
1:A:142:CYS:SG	1:A:145:VAL:CG2	0.60	2.89	6	5
1:A:100:TYR:CD2	1:A:160:MET:C	0.60	2.80	11	35
1:A:99:THR:CA	1:A:119:LEU:HD21	0.60	2.24	16	1
1:A:34:ALA:HB1	1:A:40:LEU:HB3	0.60	1.74	11	7
1:A:51:LEU:HD21	1:A:87:LEU:O	0.60	1.97	16	2
1:A:3:LEU:CD2	1:A:145:VAL:HG22	0.60	2.26	34	1
1:A:22:VAL:HG13	1:A:145:VAL:HA	0.60	1.74	3	3
1:A:47:LEU:HA	1:A:98:LEU:HD13	0.60	1.73	35	6
1:A:25:MET:SD	1:A:145:VAL:HG12	0.59	2.37	12	4
1:A:71:PRO:HA	1:A:155:ILE:CD1	0.59	2.27	13	7
1:A:30:VAL:CG1	1:A:150:ALA:HB3	0.59	2.27	27	4
1:A:72:THR:HG21	1:A:141:VAL:HG21	0.59	1.74	31	9
1:A:34:ALA:HB1	1:A:43:LEU:CD2	0.59	2.27	38	1
1:A:29:PRO:O	1:A:31:ALA:N	0.59	2.36	15	13
1:A:157:SER:C	1:A:159:LEU:H	0.59	2.05	12	13
1:A:107:THR:CB	1:A:116:ARG:HH21	0.59	2.10	13	2
1:A:124:VAL:CG2	1:A:159:LEU:HD21	0.59	2.28	27	2
1:A:136:GLY:O	1:A:137:ASN:CB	0.59	2.51	33	23
1:A:90:ASN:ND2	1:A:93:LEU:HD23	0.59	2.11	20	7
1:A:128:GLY:HA2	1:A:133:LEU:HD23	0.59	1.74	30	1
1:A:32:VAL:O	1:A:33:ALA:C	0.59	2.46	20	27
1:A:159:LEU:O	1:A:160:MET:HB2	0.59	1.98	29	8
1:A:99:THR:HG22	1:A:119:LEU:CD1	0.59	2.18	20	1
1:A:126:VAL:C	1:A:127:THR:HG22	0.59	2.23	5	16
1:A:158:VAL:O	1:A:158:VAL:HG23	0.59	1.98	17	4
1:A:133:LEU:HB2	1:A:140:VAL:HG21	0.59	1.73	3	5
1:A:159:LEU:C	1:A:160:MET:HG3	0.59	2.22	3	9
1:A:103:VAL:HG11	1:A:116:ARG:CZ	0.58	2.28	23	2
1:A:31:ALA:O	1:A:32:VAL:C	0.58	2.45	28	33
1:A:103:VAL:HG22	1:A:118:THR:CA	0.58	2.26	36	7
1:A:69:PHE:CE2	1:A:103:VAL:HG23	0.58	2.33	29	11
1:A:43:LEU:O	1:A:46:ALA:HB3	0.58	1.97	17	38
1:A:4:VAL:HG13	1:A:4:VAL:O	0.58	1.98	33	2
1:A:60:THR:O	1:A:61:LEU:C	0.58	2.46	16	28
1:A:69:PHE:O	1:A:155:ILE:CD1	0.58	2.51	26	14
1:A:87:LEU:O	1:A:94:LEU:HD22	0.58	1.97	31	5
1:A:52:ASN:CB	1:A:55:VAL:CG1	0.58	2.81	6	5
1:A:34:ALA:HB1	1:A:40:LEU:HB2	0.58	1.76	26	7
1:A:3:LEU:CD1	1:A:22:VAL:HG21	0.58	2.28	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:SER:O	1:A:25:MET:HE3	0.58	1.99	17	10
1:A:57:LEU:O	1:A:61:LEU:N	0.58	2.37	6	3
1:A:47:LEU:HD13	1:A:61:LEU:HD12	0.58	1.75	27	4
1:A:103:VAL:HG11	1:A:116:ARG:CG	0.58	2.29	27	4
1:A:61:LEU:HA	1:A:66:TYR:CE2	0.57	2.34	17	4
1:A:101:HIS:HE1	1:A:155:ILE:HD11	0.57	1.58	9	5
1:A:64:GLY:O	1:A:66:TYR:CD2	0.57	2.57	17	1
1:A:69:PHE:O	1:A:155:ILE:HD11	0.57	1.99	14	7
1:A:30:VAL:O	1:A:33:ALA:CB	0.57	2.51	36	5
1:A:58:VAL:HG13	1:A:59:ASP:H	0.57	1.60	33	11
1:A:46:ALA:HB1	1:A:94:LEU:HD11	0.57	1.75	20	3
1:A:59:ASP:O	1:A:62:ASN:OD1	0.57	2.23	6	4
1:A:37:ASN:HB2	1:A:40:LEU:HD12	0.57	1.77	31	1
1:A:47:LEU:HD13	1:A:61:LEU:CD1	0.57	2.29	34	1
1:A:40:LEU:HD21	1:A:154:MET:HG3	0.57	1.75	3	2
1:A:79:LEU:HD11	1:A:158:VAL:HB	0.57	1.75	37	5
1:A:141:VAL:HG23	1:A:155:ILE:CA	0.57	2.30	20	7
1:A:103:VAL:CG1	1:A:116:ARG:NE	0.57	2.68	18	1
1:A:57:LEU:HD21	1:A:99:THR:HG22	0.57	1.75	32	3
1:A:119:LEU:HD12	1:A:119:LEU:O	0.57	1.98	19	4
1:A:73:ASN:ND2	1:A:73:ASN:H	0.57	1.98	30	1
1:A:62:ASN:O	1:A:62:ASN:CG	0.57	2.46	6	19
1:A:133:LEU:HB2	1:A:140:VAL:CG2	0.57	2.30	3	4
1:A:101:HIS:CE1	1:A:158:VAL:C	0.56	2.83	3	4
1:A:43:LEU:CD1	1:A:47:LEU:CD2	0.56	2.83	14	1
1:A:126:VAL:C	1:A:127:THR:CG2	0.56	2.78	34	21
1:A:107:THR:CB	1:A:116:ARG:NH2	0.56	2.68	13	2
1:A:79:LEU:HD22	1:A:79:LEU:H	0.56	1.60	12	3
1:A:32:VAL:HG12	1:A:36:ASN:OD1	0.56	2.00	19	2
1:A:115:THR:HG23	1:A:123:SER:HB2	0.56	1.76	11	2
1:A:75:ALA:HB1	1:A:157:SER:N	0.56	2.16	17	3
1:A:101:HIS:CE1	1:A:159:LEU:N	0.56	2.74	33	5
1:A:33:ALA:HB1	1:A:147:THR:HG21	0.56	1.78	22	3
1:A:67:THR:CG2	1:A:153:TYR:CE2	0.56	2.89	37	24
1:A:103:VAL:CG1	1:A:116:ARG:NH2	0.56	2.69	11	1
1:A:52:ASN:OD1	1:A:87:LEU:O	0.56	2.23	9	5
1:A:58:VAL:O	1:A:59:ASP:C	0.56	2.49	20	18
1:A:58:VAL:O	1:A:61:LEU:N	0.56	2.38	5	5
1:A:135:VAL:HG11	1:A:159:LEU:HD11	0.56	1.77	14	2
1:A:44:THR:O	1:A:45:ALA:C	0.56	2.48	10	30
1:A:147:THR:OG1	1:A:150:ALA:O	0.56	2.24	13	38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:4:VAL:HG11	1:A:109:PRO:CG	0.56	2.31	4	2
1:A:39:GLU:O	1:A:40:LEU:HD23	0.56	2.01	19	4
1:A:61:LEU:CD2	1:A:102:VAL:HG11	0.56	2.31	8	1
1:A:98:LEU:O	1:A:102:VAL:HG12	0.55	2.00	34	6
1:A:124:VAL:CG2	1:A:135:VAL:HG13	0.55	2.31	18	3
1:A:119:LEU:HD12	1:A:119:LEU:C	0.55	2.25	25	3
1:A:52:ASN:OD1	1:A:94:LEU:CD2	0.55	2.54	9	1
1:A:101:HIS:C	1:A:102:VAL:CG2	0.55	2.80	23	8
1:A:52:ASN:O	1:A:55:VAL:HG22	0.55	2.01	20	2
1:A:101:HIS:CE1	1:A:158:VAL:HA	0.55	2.35	30	3
1:A:79:LEU:HD21	1:A:158:VAL:CG2	0.55	2.30	35	1
1:A:99:THR:CG2	1:A:119:LEU:CD2	0.55	2.84	26	2
1:A:52:ASN:CB	1:A:55:VAL:HG22	0.55	2.31	2	3
1:A:97:ILE:HG23	1:A:101:HIS:CD2	0.55	2.37	26	12
1:A:136:GLY:HA3	1:A:159:LEU:HD22	0.55	1.77	8	2
1:A:103:VAL:CG1	1:A:116:ARG:HH21	0.55	2.14	11	1
1:A:111:ASN:O	1:A:113:VAL:N	0.55	2.40	15	16
1:A:30:VAL:O	1:A:32:VAL:N	0.55	2.40	21	16
1:A:133:LEU:N	1:A:133:LEU:CD2	0.55	2.70	5	2
1:A:44:THR:HA	1:A:47:LEU:CD1	0.55	2.32	26	36
1:A:124:VAL:O	1:A:126:VAL:HG23	0.55	2.01	14	12
1:A:31:ALA:HB1	1:A:58:VAL:HG13	0.55	1.78	3	1
1:A:124:VAL:HG12	1:A:135:VAL:HG13	0.55	1.79	8	1
1:A:66:TYR:HB2	1:A:150:ALA:HB2	0.55	1.77	9	2
1:A:29:PRO:HA	1:A:148:ALA:HB3	0.55	1.76	19	2
1:A:11:TYR:CZ	1:A:37:ASN:OD1	0.55	2.60	26	2
1:A:84:ILE:O	1:A:87:LEU:N	0.55	2.39	20	4
1:A:69:PHE:CE1	1:A:135:VAL:HG21	0.55	2.37	17	5
1:A:60:THR:O	1:A:63:SER:CB	0.55	2.55	5	6
1:A:100:TYR:CZ	1:A:124:VAL:HG13	0.55	2.36	8	2
1:A:99:THR:OG1	1:A:120:GLN:CG	0.55	2.55	34	3
1:A:42:THR:HG23	1:A:76:PHE:CE2	0.55	2.37	24	4
1:A:3:LEU:CD1	1:A:22:VAL:HG11	0.55	2.32	22	1
1:A:44:THR:HG22	1:A:45:ALA:N	0.55	2.17	38	1
1:A:90:ASN:O	1:A:91:SER:CB	0.55	2.55	15	8
1:A:46:ALA:O	1:A:55:VAL:HG23	0.55	2.02	21	2
1:A:40:LEU:HD11	1:A:154:MET:HG3	0.55	1.77	30	1
1:A:42:THR:CG2	1:A:43:LEU:N	0.54	2.71	1	5
1:A:107:THR:HB	1:A:116:ARG:HH21	0.54	1.62	13	1
1:A:52:ASN:HB2	1:A:55:VAL:HG13	0.54	1.78	6	4
1:A:84:ILE:HG22	1:A:88:LYS:HE2	0.54	1.78	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:PRO:O	1:A:9:ALA:CB	0.54	2.55	31	3
1:A:134:LYS:CE	1:A:137:ASN:O	0.54	2.55	14	4
1:A:112:VAL:HG23	1:A:116:ARG:NH2	0.54	2.16	19	1
1:A:40:LEU:O	1:A:43:LEU:HD23	0.54	2.01	23	1
1:A:57:LEU:HD11	1:A:99:THR:HG22	0.54	1.80	28	1
1:A:40:LEU:HB3	1:A:43:LEU:HD22	0.54	1.78	38	1
1:A:4:VAL:HG22	1:A:143:GLY:O	0.54	2.02	30	2
1:A:7:GLY:O	1:A:11:TYR:CB	0.54	2.56	25	5
1:A:70:ALA:C	1:A:155:ILE:HD13	0.54	2.27	23	10
1:A:64:GLY:O	1:A:65:GLN:O	0.54	2.26	9	1
1:A:58:VAL:HG13	1:A:59:ASP:N	0.54	2.18	30	7
1:A:87:LEU:HD23	1:A:90:ASN:HD22	0.54	1.62	6	1
1:A:48:SER:O	1:A:56:ASN:CG	0.54	2.50	19	2
1:A:3:LEU:HD22	1:A:8:CYS:SG	0.54	2.42	34	1
1:A:33:ALA:CB	1:A:147:THR:CG2	0.54	2.86	17	16
1:A:96:SER:CB	1:A:161:PRO:HG3	0.54	2.33	22	18
1:A:141:VAL:HG23	1:A:155:ILE:HA	0.54	1.80	20	2
1:A:90:ASN:O	1:A:94:LEU:HD23	0.54	2.02	2	2
1:A:98:LEU:O	1:A:101:HIS:N	0.54	2.38	7	12
1:A:99:THR:O	1:A:102:VAL:HG13	0.54	2.03	27	15
1:A:99:THR:HB	1:A:119:LEU:CD2	0.54	2.33	37	5
1:A:120:GLN:CD	1:A:120:GLN:C	0.54	2.75	20	2
1:A:103:VAL:CG1	1:A:104:ALA:N	0.54	2.71	15	7
1:A:97:ILE:HD11	1:A:160:MET:HE3	0.54	1.79	8	1
1:A:52:ASN:HB3	1:A:55:VAL:HG22	0.54	1.79	2	2
1:A:25:MET:O	1:A:33:ALA:CB	0.54	2.56	12	2
1:A:52:ASN:OD1	1:A:94:LEU:HD21	0.53	2.03	34	7
1:A:33:ALA:CB	1:A:147:THR:HG21	0.53	2.33	37	16
1:A:52:ASN:N	1:A:52:ASN:ND2	0.53	2.55	12	8
1:A:58:VAL:HG12	1:A:59:ASP:N	0.53	2.18	6	2
1:A:135:VAL:O	1:A:138:ALA:N	0.53	2.41	3	21
1:A:90:ASN:CG	1:A:93:LEU:HD23	0.53	2.28	4	4
1:A:39:GLU:O	1:A:73:ASN:ND2	0.53	2.41	21	6
1:A:116:ARG:NE	1:A:117:GLN:H	0.53	2.01	2	2
1:A:116:ARG:HH21	1:A:117:GLN:HB3	0.53	1.63	30	2
1:A:39:GLU:HB2	1:A:40:LEU:CD2	0.53	2.32	38	10
1:A:101:HIS:CE1	1:A:159:LEU:CB	0.53	2.91	34	7
1:A:69:PHE:C	1:A:155:ILE:CD1	0.53	2.81	11	3
1:A:40:LEU:HD21	1:A:154:MET:CG	0.53	2.34	3	3
1:A:72:THR:CG2	1:A:154:MET:HB3	0.53	2.33	10	11
1:A:67:THR:HG23	1:A:153:TYR:CE2	0.53	2.38	24	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:158:VAL:CG2	1:A:158:VAL:O	0.53	2.56	29	1
1:A:75:ALA:CB	1:A:157:SER:N	0.53	2.71	7	3
1:A:101:HIS:NE2	1:A:158:VAL:HA	0.53	2.18	30	3
1:A:4:VAL:CG2	1:A:4:VAL:O	0.53	2.56	20	1
1:A:100:TYR:HD1	1:A:118:THR:HG21	0.53	1.63	38	1
1:A:141:VAL:HG23	1:A:154:MET:O	0.53	2.04	29	3
1:A:31:ALA:HB3	1:A:58:VAL:HG23	0.53	1.80	4	1
1:A:40:LEU:O	1:A:41:THR:C	0.53	2.52	13	35
1:A:67:THR:OG1	1:A:106:GLN:HA	0.53	2.04	28	5
1:A:25:MET:SD	1:A:147:THR:CG2	0.53	2.96	32	20
1:A:28:ASP:HB3	1:A:32:VAL:HG12	0.53	1.81	4	1
1:A:138:ALA:HB2	1:A:157:SER:CB	0.53	2.34	20	9
1:A:57:LEU:HD11	1:A:99:THR:HG23	0.53	1.81	33	3
1:A:47:LEU:CA	1:A:98:LEU:HD13	0.53	2.34	33	3
1:A:70:ALA:O	1:A:154:MET:HA	0.53	2.03	3	12
1:A:58:VAL:CG2	1:A:59:ASP:N	0.53	2.72	17	6
1:A:120:GLN:O	1:A:120:GLN:OE1	0.53	2.27	15	12
1:A:108:SER:O	1:A:112:VAL:HG22	0.53	2.04	10	11
1:A:3:LEU:N	1:A:3:LEU:CD2	0.53	2.71	15	2
1:A:37:ASN:CB	1:A:40:LEU:HG	0.53	2.34	30	8
1:A:125:THR:HG22	1:A:125:THR:O	0.53	2.03	14	1
1:A:103:VAL:CG2	1:A:118:THR:HG22	0.53	2.34	38	3
1:A:40:LEU:HD13	1:A:70:ALA:CB	0.53	2.34	38	1
1:A:135:VAL:O	1:A:138:ALA:CB	0.52	2.56	19	4
1:A:52:ASN:ND2	1:A:88:LYS:C	0.52	2.67	2	8
1:A:35:SER:HA	1:A:44:THR:HG21	0.52	1.81	24	6
1:A:70:ALA:O	1:A:155:ILE:HD13	0.52	2.05	31	10
1:A:70:ALA:C	1:A:155:ILE:CD1	0.52	2.83	26	10
1:A:128:GLY:HA3	1:A:133:LEU:HD22	0.52	1.80	2	1
1:A:4:VAL:HG11	1:A:133:LEU:HD22	0.52	1.80	13	2
1:A:113:VAL:HG23	1:A:127:THR:CA	0.52	2.34	34	3
1:A:100:TYR:HE1	1:A:124:VAL:HG13	0.52	1.64	23	2
1:A:102:VAL:HG13	1:A:119:LEU:CD2	0.52	2.33	35	1
1:A:79:LEU:HD11	1:A:158:VAL:CB	0.52	2.35	38	2
1:A:151:THR:HG22	1:A:153:TYR:CE2	0.52	2.39	19	12
1:A:75:ALA:HB1	1:A:157:SER:CA	0.52	2.34	18	2
1:A:141:VAL:N	1:A:154:MET:O	0.52	2.43	16	13
1:A:33:ALA:O	1:A:37:ASN:N	0.52	2.42	10	5
1:A:38:PRO:HA	1:A:41:THR:CG2	0.52	2.34	20	3
1:A:23:GLN:O	1:A:26:SER:CB	0.52	2.57	33	5
1:A:29:PRO:CB	1:A:62:ASN:OD1	0.52	2.58	29	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:GLY:C	1:A:9:ALA:N	0.52	2.67	33	24
1:A:71:PRO:CG	1:A:101:HIS:CE1	0.52	2.92	23	8
1:A:63:SER:O	1:A:66:TYR:CZ	0.52	2.62	2	2
1:A:39:GLU:C	1:A:73:ASN:ND2	0.52	2.68	18	6
1:A:40:LEU:HD21	1:A:154:MET:SD	0.52	2.44	24	7
1:A:72:THR:O	1:A:75:ALA:HB3	0.52	2.05	9	4
1:A:57:LEU:HB2	1:A:61:LEU:HD21	0.52	1.81	9	1
1:A:158:VAL:HG23	1:A:160:MET:HG3	0.52	1.82	20	2
1:A:90:ASN:ND2	1:A:93:LEU:CD2	0.52	2.73	29	2
1:A:135:VAL:O	1:A:137:ASN:N	0.52	2.40	29	10
1:A:30:VAL:CG1	1:A:31:ALA:H	0.52	2.15	23	11
1:A:42:THR:CG2	1:A:76:PHE:CD1	0.52	2.92	1	3
1:A:84:ILE:O	1:A:88:LYS:CD	0.52	2.58	23	4
1:A:48:SER:OG	1:A:49:GLY:N	0.52	2.42	18	4
1:A:79:LEU:N	1:A:79:LEU:HD13	0.52	2.18	35	1
1:A:7:GLY:O	1:A:8:CYS:C	0.52	2.52	33	32
1:A:80:PRO:O	1:A:81:ALA:HB3	0.52	2.04	6	2
1:A:3:LEU:HD11	1:A:22:VAL:HG11	0.52	1.81	22	1
1:A:120:GLN:O	1:A:120:GLN:CD	0.51	2.54	13	19
1:A:52:ASN:HB2	1:A:55:VAL:CG2	0.51	2.35	32	7
1:A:105:GLY:O	1:A:106:GLN:C	0.51	2.52	14	5
1:A:22:VAL:HG23	1:A:23:GLN:HG2	0.51	1.81	35	1
1:A:42:THR:HG21	1:A:76:PHE:CG	0.51	2.40	10	1
1:A:57:LEU:HB3	1:A:61:LEU:HD13	0.51	1.82	19	1
1:A:30:VAL:HG22	1:A:68:VAL:CG2	0.51	2.36	19	4
1:A:151:THR:HG22	1:A:152:VAL:H	0.51	1.65	15	10
1:A:34:ALA:CB	1:A:44:THR:CG2	0.51	2.88	15	2
1:A:8:CYS:N	1:A:142:CYS:HB2	0.51	2.21	25	1
1:A:31:ALA:O	1:A:34:ALA:HB3	0.51	2.05	2	1
1:A:52:ASN:OD1	1:A:87:LEU:C	0.51	2.54	4	1
1:A:21:SER:O	1:A:25:MET:CE	0.51	2.58	32	6
1:A:94:LEU:O	1:A:97:ILE:N	0.51	2.44	6	4
1:A:36:ASN:ND2	1:A:36:ASN:N	0.51	2.59	10	1
1:A:56:ASN:O	1:A:56:ASN:CG	0.51	2.53	21	22
1:A:120:GLN:C	1:A:120:GLN:OE1	0.51	2.54	34	3
1:A:101:HIS:NE2	1:A:159:LEU:O	0.51	2.44	33	2
1:A:30:VAL:CG2	1:A:31:ALA:N	0.51	2.74	15	11
1:A:136:GLY:O	1:A:159:LEU:CD1	0.51	2.59	19	1
1:A:96:SER:CB	1:A:161:PRO:CG	0.51	2.89	2	11
1:A:97:ILE:CG2	1:A:98:LEU:N	0.51	2.73	12	2
1:A:159:LEU:O	1:A:160:MET:HG3	0.51	2.05	29	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:54:GLN:N	1:A:54:GLN:CD	0.51	2.68	20	1
1:A:119:LEU:C	1:A:121:GLY:N	0.51	2.67	13	9
1:A:158:VAL:O	1:A:158:VAL:CG1	0.51	2.59	11	9
1:A:11:TYR:CD2	1:A:12:ALA:N	0.51	2.79	36	1
1:A:47:LEU:O	1:A:48:SER:C	0.51	2.54	37	19
1:A:45:ALA:HB1	1:A:50:GLN:HB2	0.51	1.82	5	5
1:A:79:LEU:HD21	1:A:158:VAL:CG1	0.51	2.35	12	2
1:A:89:THR:O	1:A:90:ASN:C	0.51	2.54	12	4
1:A:91:SER:O	1:A:95:THR:CB	0.51	2.59	13	2
1:A:158:VAL:O	1:A:160:MET:CG	0.51	2.59	18	4
1:A:111:ASN:C	1:A:113:VAL:N	0.50	2.68	34	32
1:A:4:VAL:HG11	1:A:109:PRO:CB	0.50	2.36	3	4
1:A:79:LEU:HB3	1:A:83:THR:HG21	0.50	1.82	5	3
1:A:124:VAL:HG23	1:A:159:LEU:HD21	0.50	1.82	27	2
1:A:11:TYR:OH	1:A:37:ASN:CG	0.50	2.53	26	18
1:A:31:ALA:O	1:A:34:ALA:N	0.50	2.44	4	14
1:A:72:THR:CG2	1:A:155:ILE:O	0.50	2.58	36	12
1:A:98:LEU:N	1:A:98:LEU:HD23	0.50	2.21	2	12
1:A:135:VAL:HG12	1:A:159:LEU:CD2	0.50	2.28	3	2
1:A:40:LEU:HD21	1:A:154:MET:HG2	0.50	1.82	23	3
1:A:158:VAL:C	1:A:159:LEU:O	0.50	2.54	26	4
1:A:84:ILE:C	1:A:86:GLU:N	0.50	2.69	31	16
1:A:93:LEU:HD12	1:A:93:LEU:C	0.50	2.32	4	1
1:A:107:THR:O	1:A:153:TYR:OH	0.50	2.26	15	9
1:A:134:LYS:CE	1:A:139:ASP:OD1	0.50	2.60	27	1
1:A:52:ASN:CG	1:A:94:LEU:CD2	0.50	2.83	32	3
1:A:151:THR:HG22	1:A:152:VAL:N	0.50	2.22	2	15
1:A:100:TYR:CE2	1:A:159:LEU:HB3	0.50	2.42	8	1
1:A:57:LEU:CD1	1:A:98:LEU:HB2	0.50	2.37	26	2
1:A:122:ALA:CB	1:A:162:PRO:HD2	0.50	2.37	22	11
1:A:68:VAL:HB	1:A:152:VAL:HG22	0.50	1.83	3	4
1:A:40:LEU:HB3	1:A:43:LEU:HD23	0.50	1.82	14	4
1:A:135:VAL:O	1:A:135:VAL:CG1	0.50	2.59	20	2
1:A:35:SER:CA	1:A:44:THR:OG1	0.50	2.60	20	1
1:A:107:THR:CG2	1:A:116:ARG:NH2	0.50	2.74	17	3
1:A:66:TYR:O	1:A:150:ALA:HA	0.50	2.07	3	30
1:A:43:LEU:HD13	1:A:71:PRO:CD	0.50	2.32	11	7
1:A:157:SER:C	1:A:159:LEU:N	0.50	2.70	12	4
1:A:63:SER:HB2	1:A:66:TYR:CZ	0.50	2.41	9	1
1:A:73:ASN:ND2	1:A:73:ASN:N	0.50	2.59	30	1
1:A:4:VAL:HG13	1:A:133:LEU:CD1	0.50	2.37	34	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:67:THR:O	1:A:69:PHE:CD2	0.50	2.65	29	27
1:A:88:LYS:O	1:A:89:THR:CG2	0.50	2.60	5	3
1:A:44:THR:O	1:A:48:SER:N	0.50	2.44	37	8
1:A:103:VAL:HG21	1:A:116:ARG:HG2	0.50	1.82	24	1
1:A:95:THR:O	1:A:99:THR:OG1	0.49	2.30	13	11
1:A:62:ASN:OD1	1:A:62:ASN:C	0.49	2.55	6	4
1:A:29:PRO:C	1:A:31:ALA:N	0.49	2.70	8	8
1:A:46:ALA:O	1:A:55:VAL:CG2	0.49	2.60	21	2
1:A:49:GLY:C	1:A:51:LEU:N	0.49	2.69	21	21
1:A:34:ALA:HB1	1:A:43:LEU:HD23	0.49	1.83	10	1
1:A:133:LEU:N	1:A:133:LEU:CD1	0.49	2.75	33	3
1:A:34:ALA:CB	1:A:43:LEU:CD2	0.49	2.90	38	1
1:A:156:ASP:O	1:A:157:SER:OG	0.49	2.29	22	9
1:A:15:ASN:CG	1:A:20:ALA:HB3	0.49	2.32	15	3
1:A:28:ASP:CG	1:A:32:VAL:CG1	0.49	2.85	14	8
1:A:155:ILE:HD12	1:A:159:LEU:HG	0.49	1.84	14	1
1:A:79:LEU:HD11	1:A:158:VAL:CG2	0.49	2.38	23	1
1:A:139:ASP:N	1:A:156:ASP:OD1	0.49	2.45	8	2
1:A:52:ASN:OD1	1:A:94:LEU:HD22	0.49	2.07	9	1
1:A:78:LYS:O	1:A:79:LEU:C	0.49	2.56	29	6
1:A:3:LEU:CD1	1:A:8:CYS:SG	0.49	3.00	13	1
1:A:3:LEU:CB	1:A:8:CYS:SG	0.49	3.01	26	6
1:A:139:ASP:O	1:A:155:ILE:HA	0.49	2.08	33	1
1:A:11:TYR:O	1:A:12:ALA:C	0.49	2.55	34	18
1:A:20:ALA:CB	1:A:38:PRO:HD3	0.49	2.38	20	8
1:A:46:ALA:HA	1:A:51:LEU:HD22	0.49	1.82	10	1
1:A:57:LEU:O	1:A:59:ASP:N	0.49	2.46	23	2
1:A:77:SER:O	1:A:78:LYS:C	0.49	2.55	14	10
1:A:86:GLU:O	1:A:90:ASN:CG	0.49	2.55	27	19
1:A:60:THR:O	1:A:63:SER:N	0.49	2.46	9	12
1:A:12:ALA:C	1:A:14:ALA:N	0.49	2.70	38	7
1:A:28:ASP:OD1	1:A:32:VAL:HG12	0.49	2.08	10	2
1:A:135:VAL:CG1	1:A:159:LEU:CD1	0.49	2.82	14	1
1:A:61:LEU:HD22	1:A:102:VAL:HG11	0.49	1.84	16	1
1:A:40:LEU:C	1:A:42:THR:N	0.49	2.70	5	22
1:A:49:GLY:O	1:A:52:ASN:C	0.49	2.56	4	5
1:A:52:ASN:HB2	1:A:55:VAL:CG1	0.49	2.38	6	4
1:A:118:THR:CG2	1:A:124:VAL:CG1	0.49	2.90	7	2
1:A:133:LEU:HB3	1:A:140:VAL:HG21	0.49	1.84	18	2
1:A:94:LEU:HD11	1:A:98:LEU:HD21	0.49	1.82	18	1
1:A:31:ALA:HB1	1:A:58:VAL:HG22	0.49	1.83	31	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:4:VAL:CG1	1:A:4:VAL:O	0.49	2.59	33	1
1:A:31:ALA:HB2	1:A:61:LEU:HD12	0.49	1.85	38	1
1:A:52:ASN:CG	1:A:90:ASN:O	0.49	2.55	2	1
1:A:23:GLN:O	1:A:26:SER:N	0.49	2.44	7	11
1:A:102:VAL:HG22	1:A:119:LEU:HD23	0.49	1.84	21	1
1:A:40:LEU:O	1:A:43:LEU:N	0.49	2.46	6	32
1:A:80:PRO:C	1:A:82:SER:N	0.49	2.70	2	1
1:A:120:GLN:O	1:A:120:GLN:NE2	0.49	2.46	16	9
1:A:39:GLU:O	1:A:72:THR:C	0.49	2.56	26	5
1:A:57:LEU:C	1:A:59:ASP:N	0.49	2.67	23	3
1:A:103:VAL:CG1	1:A:117:GLN:O	0.49	2.58	18	4
1:A:49:GLY:O	1:A:52:ASN:N	0.48	2.46	23	7
1:A:60:THR:C	1:A:62:ASN:N	0.48	2.68	31	18
1:A:133:LEU:HB2	1:A:140:VAL:CB	0.48	2.39	3	5
1:A:43:LEU:CG	1:A:47:LEU:HD21	0.48	2.36	14	1
1:A:54:GLN:CB	1:A:91:SER:CB	0.48	2.92	19	1
1:A:105:GLY:O	1:A:116:ARG:NH1	0.48	2.46	29	1
1:A:79:LEU:CD1	1:A:83:THR:HG21	0.48	2.29	6	1
1:A:7:GLY:O	1:A:9:ALA:N	0.48	2.46	33	11
1:A:36:ASN:N	1:A:36:ASN:HD22	0.48	2.06	10	1
1:A:46:ALA:C	1:A:52:ASN:OD1	0.48	2.56	32	3
1:A:136:GLY:O	1:A:159:LEU:HD11	0.48	2.08	19	1
1:A:67:THR:CB	1:A:116:ARG:NH2	0.48	2.76	29	2
1:A:40:LEU:O	1:A:42:THR:N	0.48	2.46	34	18
1:A:33:ALA:C	1:A:35:SER:N	0.48	2.71	9	5
1:A:118:THR:C	1:A:120:GLN:N	0.48	2.70	12	8
1:A:7:GLY:O	1:A:11:TYR:N	0.48	2.46	24	14
1:A:32:VAL:O	1:A:35:SER:CB	0.48	2.60	9	6
1:A:87:LEU:C	1:A:89:THR:H	0.48	2.16	9	4
1:A:119:LEU:O	1:A:120:GLN:C	0.48	2.56	33	6
1:A:103:VAL:HG21	1:A:116:ARG:CG	0.48	2.38	24	3
1:A:135:VAL:O	1:A:159:LEU:HD21	0.48	2.08	35	4
1:A:10:GLU:O	1:A:13:ALA:CB	0.48	2.58	33	2
1:A:11:TYR:OH	1:A:37:ASN:ND2	0.48	2.46	9	17
1:A:30:VAL:CG1	1:A:31:ALA:N	0.48	2.76	16	12
1:A:42:THR:CG2	1:A:76:PHE:CG	0.48	2.96	10	1
1:A:159:LEU:N	1:A:160:MET:HE3	0.48	2.24	11	1
1:A:32:VAL:HG12	1:A:36:ASN:HD21	0.48	1.67	15	1
1:A:86:GLU:O	1:A:89:THR:CG2	0.48	2.61	25	3
1:A:39:GLU:O	1:A:73:ASN:N	0.48	2.46	21	2
1:A:115:THR:HG23	1:A:123:SER:HB3	0.48	1.84	29	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:THR:CG2	1:A:45:ALA:N	0.48	2.77	38	1
1:A:67:THR:HG23	1:A:153:TYR:HE2	0.48	1.68	28	3
1:A:86:GLU:C	1:A:90:ASN:ND2	0.48	2.72	1	6
1:A:49:GLY:O	1:A:51:LEU:N	0.48	2.46	2	9
1:A:11:TYR:CE1	1:A:15:ASN:ND2	0.48	2.82	3	1
1:A:145:VAL:O	1:A:146:SER:C	0.48	2.56	30	13
1:A:51:LEU:HD21	1:A:88:LYS:NZ	0.48	2.24	19	1
1:A:17:THR:C	1:A:21:SER:OG	0.48	2.57	33	4
1:A:49:GLY:HA2	1:A:52:ASN:O	0.48	2.09	15	3
1:A:30:VAL:CG1	1:A:149:ASN:ND2	0.48	2.77	27	4
1:A:52:ASN:ND2	1:A:88:LYS:O	0.48	2.47	24	2
1:A:10:GLU:O	1:A:11:TYR:C	0.48	2.56	34	22
1:A:26:SER:C	1:A:28:ASP:N	0.48	2.71	19	10
1:A:98:LEU:HD23	1:A:98:LEU:N	0.48	2.24	16	12
1:A:100:TYR:CE1	1:A:118:THR:HG21	0.48	2.44	2	3
1:A:60:THR:O	1:A:62:ASN:N	0.48	2.46	25	13
1:A:133:LEU:N	1:A:133:LEU:HD12	0.48	2.24	33	2
1:A:106:GLN:CD	1:A:151:THR:OG1	0.48	2.57	26	4
1:A:106:GLN:HE21	1:A:151:THR:N	0.48	2.06	13	1
1:A:119:LEU:C	1:A:119:LEU:CD1	0.48	2.86	19	2
1:A:102:VAL:O	1:A:119:LEU:HB2	0.48	2.09	13	1
1:A:99:THR:CA	1:A:119:LEU:CD2	0.48	2.92	16	1
1:A:76:PHE:CD1	1:A:158:VAL:CG1	0.48	2.96	18	1
1:A:56:ASN:O	1:A:56:ASN:ND2	0.48	2.46	36	2
1:A:11:TYR:CE1	1:A:37:ASN:ND2	0.48	2.82	36	1
1:A:52:ASN:ND2	1:A:87:LEU:O	0.48	2.47	18	11
1:A:17:THR:O	1:A:18:GLY:O	0.48	2.32	30	7
1:A:20:ALA:HA	1:A:36:ASN:O	0.48	2.09	33	4
1:A:116:ARG:HB3	1:A:124:VAL:HG23	0.48	1.85	22	4
1:A:103:VAL:HG11	1:A:116:ARG:NH1	0.48	2.24	23	1
1:A:16:PRO:C	1:A:17:THR:HG23	0.48	2.34	26	1
1:A:57:LEU:CD2	1:A:99:THR:HG22	0.48	2.37	37	1
1:A:32:VAL:C	1:A:34:ALA:N	0.47	2.71	31	4
1:A:99:THR:OG1	1:A:120:GLN:HB2	0.47	2.09	2	4
1:A:30:VAL:HG23	1:A:68:VAL:HG23	0.47	1.85	5	3
1:A:55:VAL:HG23	1:A:56:ASN:N	0.47	2.24	6	2
1:A:34:ALA:HA	1:A:40:LEU:HD12	0.47	1.85	17	2
1:A:119:LEU:O	1:A:121:GLY:N	0.47	2.47	33	7
1:A:57:LEU:HD12	1:A:98:LEU:HB2	0.47	1.86	14	2
1:A:107:THR:CG2	1:A:116:ARG:HH21	0.47	2.21	17	1
1:A:120:GLN:CD	1:A:120:GLN:O	0.47	2.57	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:124:VAL:O	1:A:124:VAL:HG13	0.47	2.09	25	3
1:A:139:ASP:O	1:A:155:ILE:CG2	0.47	2.61	33	1
1:A:11:TYR:O	1:A:14:ALA:N	0.47	2.47	34	26
1:A:112:VAL:O	1:A:113:VAL:C	0.47	2.56	18	8
1:A:44:THR:C	1:A:46:ALA:N	0.47	2.72	17	11
1:A:84:ILE:O	1:A:85:ASP:C	0.47	2.56	23	4
1:A:139:ASP:OD2	1:A:156:ASP:CG	0.47	2.57	14	1
1:A:48:SER:HA	1:A:58:VAL:CG2	0.47	2.39	6	9
1:A:94:LEU:HD11	1:A:98:LEU:HD11	0.47	1.86	14	6
1:A:46:ALA:HA	1:A:52:ASN:ND2	0.47	2.24	9	2
1:A:47:LEU:O	1:A:56:ASN:HA	0.47	2.09	37	4
1:A:48:SER:O	1:A:56:ASN:ND2	0.47	2.48	34	5
1:A:127:THR:HG23	1:A:134:LYS:HB3	0.47	1.86	19	1
1:A:20:ALA:HB2	1:A:36:ASN:O	0.47	2.10	20	2
1:A:109:PRO:HA	1:A:112:VAL:HG12	0.47	1.86	23	1
1:A:29:PRO:O	1:A:33:ALA:CB	0.47	2.63	19	4
1:A:151:THR:HG21	1:A:153:TYR:CZ	0.47	2.44	12	7
1:A:9:ALA:O	1:A:10:GLU:C	0.47	2.57	5	6
1:A:116:ARG:HB2	1:A:124:VAL:HG13	0.47	1.86	6	3
1:A:61:LEU:HA	1:A:66:TYR:CD2	0.47	2.45	8	3
1:A:69:PHE:HE1	1:A:135:VAL:HG21	0.47	1.68	22	4
1:A:34:ALA:O	1:A:37:ASN:N	0.47	2.48	25	1
1:A:12:ALA:O	1:A:16:PRO:N	0.47	2.47	1	20
1:A:86:GLU:CG	1:A:90:ASN:OD1	0.47	2.62	6	2
1:A:127:THR:HG23	1:A:134:LYS:CB	0.47	2.40	8	2
1:A:147:THR:CG2	1:A:152:VAL:CG2	0.47	2.90	38	2
1:A:90:ASN:C	1:A:91:SER:OG	0.47	2.58	37	2
1:A:4:VAL:HG22	1:A:5:GLY:N	0.47	2.24	25	3
1:A:19:PRO:O	1:A:25:MET:N	0.47	2.48	10	1
1:A:51:LEU:HD12	1:A:88:LYS:CG	0.47	2.39	10	1
1:A:35:SER:O	1:A:36:ASN:ND2	0.47	2.47	14	2
1:A:99:THR:HA	1:A:119:LEU:CD2	0.47	2.34	16	1
1:A:51:LEU:HD21	1:A:88:LYS:HZ2	0.47	1.70	19	1
1:A:84:ILE:O	1:A:86:GLU:N	0.47	2.48	23	3
1:A:40:LEU:HD11	1:A:154:MET:HG2	0.47	1.85	37	3
1:A:4:VAL:HG13	1:A:133:LEU:HD22	0.47	1.85	33	1
1:A:4:VAL:HG22	1:A:133:LEU:HD12	0.47	1.87	35	1
1:A:49:GLY:O	1:A:50:GLN:C	0.47	2.57	1	20
1:A:34:ALA:C	1:A:36:ASN:N	0.47	2.70	38	9
1:A:47:LEU:O	1:A:57:LEU:N	0.47	2.48	2	2
1:A:52:ASN:HD21	1:A:89:THR:N	0.47	2.07	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:80:PRO:O	1:A:81:ALA:C	0.47	2.57	31	19
1:A:39:GLU:C	1:A:40:LEU:HD22	0.47	2.35	5	3
1:A:30:VAL:CG2	1:A:68:VAL:HG23	0.47	2.39	6	2
1:A:61:LEU:HD23	1:A:66:TYR:CD2	0.47	2.44	6	1
1:A:65:GLN:O	1:A:105:GLY:N	0.47	2.47	11	7
1:A:42:THR:HG21	1:A:76:PHE:CD2	0.47	2.43	32	5
1:A:95:THR:CG2	1:A:96:SER:N	0.47	2.77	37	4
1:A:26:SER:OG	1:A:27:GLN:N	0.47	2.47	28	1
1:A:15:ASN:CB	1:A:20:ALA:O	0.47	2.61	36	2
1:A:40:LEU:CD1	1:A:70:ALA:CB	0.47	2.93	38	1
1:A:29:PRO:HD2	1:A:32:VAL:HB	0.47	1.85	4	9
1:A:33:ALA:HB1	1:A:147:THR:HG22	0.47	1.87	8	6
1:A:105:GLY:O	1:A:116:ARG:NH2	0.47	2.47	29	2
1:A:52:ASN:ND2	1:A:52:ASN:N	0.47	2.63	29	4
1:A:3:LEU:HD12	1:A:142:CYS:SG	0.47	2.49	33	1
1:A:81:ALA:O	1:A:82:SER:C	0.47	2.58	15	13
1:A:48:SER:HA	1:A:58:VAL:HG12	0.47	1.87	5	1
1:A:40:LEU:CD1	1:A:70:ALA:HB3	0.47	2.40	38	1
1:A:52:ASN:CB	1:A:55:VAL:HG12	0.47	2.38	7	1
1:A:55:VAL:HG22	1:A:95:THR:OG1	0.47	2.10	17	1
1:A:156:ASP:C	1:A:157:SER:HG	0.47	2.18	23	2
1:A:97:ILE:HD13	1:A:158:VAL:CG1	0.47	2.40	31	1
1:A:107:THR:CG2	1:A:111:ASN:CB	0.47	2.93	37	1
1:A:90:ASN:C	1:A:92:SER:N	0.46	2.70	29	2
1:A:19:PRO:O	1:A:24:GLY:C	0.46	2.58	8	5
1:A:124:VAL:CG1	1:A:135:VAL:HG13	0.46	2.39	8	1
1:A:22:VAL:C	1:A:24:GLY:N	0.46	2.70	16	1
1:A:69:PHE:N	1:A:101:HIS:O	0.46	2.48	30	3
1:A:121:GLY:O	1:A:122:ALA:C	0.46	2.57	23	1
1:A:4:VAL:CG1	1:A:143:GLY:O	0.46	2.64	6	3
1:A:46:ALA:CA	1:A:52:ASN:OD1	0.46	2.63	32	2
1:A:139:ASP:N	1:A:139:ASP:OD1	0.46	2.48	21	2
1:A:57:LEU:HB3	1:A:61:LEU:HD22	0.46	1.85	29	1
1:A:96:SER:HB3	1:A:161:PRO:CG	0.46	2.40	23	4
1:A:55:VAL:HG23	1:A:55:VAL:O	0.46	2.10	8	1
1:A:106:GLN:NE2	1:A:151:THR:OG1	0.46	2.49	13	4
1:A:96:SER:O	1:A:100:TYR:HB2	0.46	2.09	37	3
1:A:47:LEU:O	1:A:55:VAL:HG12	0.46	2.11	38	1
1:A:156:ASP:C	1:A:157:SER:OG	0.46	2.59	29	12
1:A:44:THR:O	1:A:46:ALA:N	0.46	2.48	16	3
1:A:37:ASN:OD1	1:A:39:GLU:N	0.46	2.48	24	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:GLU:HB3	1:A:73:ASN:ND2	0.46	2.26	38	1
1:A:52:ASN:C	1:A:54:GLN:H	0.46	2.19	3	9
1:A:79:LEU:HD13	1:A:83:THR:HG21	0.46	1.88	10	2
1:A:11:TYR:OH	1:A:37:ASN:OD1	0.46	2.32	33	3
1:A:79:LEU:HD21	1:A:158:VAL:HG13	0.46	1.87	12	2
1:A:139:ASP:OD2	1:A:139:ASP:N	0.46	2.48	35	2
1:A:55:VAL:HG22	1:A:57:LEU:HD21	0.46	1.87	36	1
1:A:51:LEU:CD1	1:A:88:LYS:HG2	0.46	2.40	16	2
1:A:100:TYR:CD2	1:A:160:MET:O	0.46	2.68	11	1
1:A:139:ASP:N	1:A:156:ASP:OD2	0.46	2.49	28	2
1:A:42:THR:HG23	1:A:76:PHE:CD1	0.46	2.45	16	2
1:A:7:GLY:N	1:A:141:VAL:O	0.46	2.48	25	1
1:A:136:GLY:O	1:A:137:ASN:C	0.46	2.59	31	1
1:A:31:ALA:HB2	1:A:61:LEU:CB	0.46	2.41	34	1
1:A:29:PRO:CB	1:A:62:ASN:ND2	0.46	2.79	4	5
1:A:22:VAL:HA	1:A:145:VAL:CG1	0.46	2.41	11	17
1:A:126:VAL:C	1:A:127:THR:OG1	0.46	2.59	26	5
1:A:29:PRO:HD2	1:A:32:VAL:CB	0.46	2.40	30	13
1:A:12:ALA:O	1:A:15:ASN:C	0.46	2.59	34	4
1:A:116:ARG:CB	1:A:124:VAL:HG23	0.46	2.41	11	5
1:A:26:SER:O	1:A:27:GLN:C	0.46	2.59	19	2
1:A:118:THR:O	1:A:119:LEU:C	0.46	2.59	1	5
1:A:86:GLU:O	1:A:89:THR:N	0.46	2.46	2	9
1:A:52:ASN:HB3	1:A:55:VAL:CG1	0.46	2.39	6	7
1:A:47:LEU:HD12	1:A:58:VAL:HG23	0.46	1.88	37	1
1:A:159:LEU:O	1:A:160:MET:CG	0.46	2.64	3	3
1:A:102:VAL:CG1	1:A:119:LEU:HD23	0.46	2.40	4	5
1:A:99:THR:CB	1:A:120:GLN:HB2	0.46	2.41	14	5
1:A:64:GLY:O	1:A:65:GLN:C	0.46	2.58	9	1
1:A:42:THR:HG22	1:A:76:PHE:CD1	0.46	2.46	10	1
1:A:32:VAL:CG1	1:A:36:ASN:OD1	0.46	2.64	20	1
1:A:47:LEU:HD12	1:A:58:VAL:HG22	0.46	1.85	37	1
1:A:76:PHE:C	1:A:78:LYS:N	0.46	2.73	19	3
1:A:103:VAL:HG11	1:A:116:ARG:HD3	0.46	1.87	18	1
1:A:26:SER:O	1:A:28:ASP:N	0.46	2.49	28	2
1:A:12:ALA:O	1:A:15:ASN:N	0.46	2.48	20	4
1:A:115:THR:HG23	1:A:123:SER:CB	0.46	2.40	29	1
1:A:67:THR:N	1:A:103:VAL:O	0.45	2.49	22	5
1:A:6:PRO:O	1:A:7:GLY:C	0.45	2.58	38	7
1:A:35:SER:O	1:A:41:THR:CG2	0.45	2.64	25	1
1:A:69:PHE:CE2	1:A:103:VAL:HG21	0.45	2.46	3	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:MET:HB2	1:A:33:ALA:CB	0.45	2.39	37	10
1:A:97:ILE:O	1:A:98:LEU:C	0.45	2.58	9	5
1:A:78:LYS:NZ	1:A:157:SER:OG	0.45	2.49	13	1
1:A:84:ILE:O	1:A:88:LYS:HD2	0.45	2.12	23	3
1:A:58:VAL:O	1:A:62:ASN:N	0.45	2.44	33	1
1:A:96:SER:O	1:A:100:TYR:CB	0.45	2.64	37	1
1:A:78:LYS:NZ	1:A:156:ASP:O	0.45	2.48	29	4
1:A:34:ALA:CB	1:A:43:LEU:HD23	0.45	2.42	10	2
1:A:22:VAL:HG23	1:A:22:VAL:O	0.45	2.09	18	1
1:A:47:LEU:CB	1:A:57:LEU:HD12	0.45	2.42	19	1
1:A:20:ALA:CA	1:A:36:ASN:O	0.45	2.64	21	2
1:A:103:VAL:HG22	1:A:118:THR:HG22	0.45	1.88	33	2
1:A:42:THR:HG22	1:A:43:LEU:N	0.45	2.26	1	1
1:A:21:SER:OG	1:A:24:GLY:N	0.45	2.48	2	4
1:A:118:THR:HG22	1:A:124:VAL:HG21	0.45	1.88	2	1
1:A:158:VAL:HG22	1:A:160:MET:HE2	0.45	1.87	3	2
1:A:35:SER:CB	1:A:44:THR:CG2	0.45	2.95	20	3
1:A:107:THR:OG1	1:A:116:ARG:NH2	0.45	2.50	13	3
1:A:118:THR:OG1	1:A:122:ALA:O	0.45	2.35	13	4
1:A:89:THR:O	1:A:90:ASN:O	0.45	2.35	15	3
1:A:22:VAL:O	1:A:24:GLY:N	0.45	2.49	16	1
1:A:28:ASP:O	1:A:148:ALA:CB	0.45	2.62	27	1
1:A:49:GLY:CA	1:A:55:VAL:O	0.45	2.65	2	1
1:A:138:ALA:CB	1:A:155:ILE:HB	0.45	2.42	10	3
1:A:71:PRO:CA	1:A:155:ILE:CD1	0.45	2.94	12	1
1:A:100:TYR:OH	1:A:123:SER:O	0.45	2.32	23	1
1:A:79:LEU:HD21	1:A:160:MET:CE	0.45	2.42	25	1
1:A:87:LEU:HD23	1:A:87:LEU:N	0.45	2.26	38	11
1:A:158:VAL:CG2	1:A:160:MET:HG3	0.45	2.41	3	2
1:A:62:ASN:OD1	1:A:62:ASN:O	0.45	2.35	6	2
1:A:71:PRO:O	1:A:72:THR:O	0.45	2.34	30	8
1:A:34:ALA:CA	1:A:40:LEU:HB2	0.45	2.42	11	1
1:A:107:THR:O	1:A:108:SER:CB	0.45	2.63	19	1
1:A:97:ILE:HG23	1:A:101:HIS:HD2	0.45	1.72	21	1
1:A:48:SER:CB	1:A:58:VAL:HG23	0.45	2.41	24	1
1:A:39:GLU:CD	1:A:73:ASN:OD1	0.45	2.59	30	1
1:A:12:ALA:O	1:A:13:ALA:C	0.45	2.58	16	16
1:A:32:VAL:O	1:A:36:ASN:ND2	0.45	2.50	31	3
1:A:8:CYS:O	1:A:9:ALA:C	0.45	2.59	6	2
1:A:90:ASN:O	1:A:91:SER:C	0.45	2.60	29	2
1:A:87:LEU:C	1:A:89:THR:N	0.45	2.72	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:ALA:O	1:A:21:SER:C	0.45	2.60	21	4
1:A:25:MET:CE	1:A:145:VAL:HG11	0.45	2.42	8	2
1:A:25:MET:CE	1:A:145:VAL:CG1	0.45	2.95	19	2
1:A:37:ASN:HB3	1:A:40:LEU:CG	0.45	2.42	9	2
1:A:120:GLN:HA	1:A:120:GLN:OE1	0.45	2.10	9	1
1:A:107:THR:CG2	1:A:111:ASN:HB2	0.45	2.42	28	4
1:A:8:CYS:SG	1:A:22:VAL:CG2	0.45	3.05	33	1
1:A:80:PRO:O	1:A:83:THR:N	0.45	2.48	14	5
1:A:102:VAL:O	1:A:119:LEU:CB	0.45	2.65	13	1
1:A:116:ARG:O	1:A:123:SER:HA	0.45	2.11	13	2
1:A:118:THR:CG2	1:A:124:VAL:HB	0.45	2.42	13	1
1:A:10:GLU:O	1:A:13:ALA:N	0.45	2.50	15	2
1:A:22:VAL:O	1:A:23:GLN:C	0.45	2.60	16	1
1:A:103:VAL:HG13	1:A:118:THR:HA	0.45	1.87	29	1
1:A:90:ASN:O	1:A:94:LEU:CD2	0.45	2.65	2	2
1:A:101:HIS:O	1:A:102:VAL:HG22	0.45	2.11	23	3
1:A:99:THR:OG1	1:A:120:GLN:HG2	0.44	2.12	28	5
1:A:58:VAL:O	1:A:62:ASN:CG	0.44	2.60	23	1
1:A:75:ALA:O	1:A:158:VAL:CG2	0.44	2.64	28	1
1:A:99:THR:HB	1:A:119:LEU:HD21	0.44	1.88	28	2
1:A:72:THR:OG1	1:A:155:ILE:O	0.44	2.34	16	3
1:A:94:LEU:O	1:A:95:THR:C	0.44	2.61	28	3
1:A:3:LEU:HD22	1:A:22:VAL:HG11	0.44	1.88	25	1
1:A:73:ASN:HD22	1:A:74:ALA:N	0.44	2.10	30	1
1:A:23:GLN:C	1:A:25:MET:N	0.44	2.75	9	3
1:A:101:HIS:NE2	1:A:158:VAL:CA	0.44	2.80	12	2
1:A:79:LEU:HD21	1:A:158:VAL:HG21	0.44	1.88	35	1
1:A:67:THR:HG21	1:A:116:ARG:HH22	0.44	1.72	6	1
1:A:35:SER:HB2	1:A:44:THR:CG2	0.44	2.43	10	1
1:A:76:PHE:HA	1:A:79:LEU:CD2	0.44	2.43	29	2
1:A:76:PHE:HA	1:A:79:LEU:HD23	0.44	1.88	29	2
1:A:11:TYR:CE1	1:A:154:MET:CE	0.44	3.00	15	1
1:A:18:GLY:C	1:A:21:SER:HG	0.44	2.20	15	1
1:A:105:GLY:O	1:A:106:GLN:CB	0.44	2.66	17	5
1:A:116:ARG:O	1:A:124:VAL:CG1	0.44	2.65	24	1
1:A:106:GLN:C	1:A:116:ARG:NH2	0.44	2.75	28	1
1:A:79:LEU:N	1:A:79:LEU:HD23	0.44	2.27	36	1
1:A:3:LEU:HD11	1:A:22:VAL:HG21	0.44	1.90	16	1
1:A:37:ASN:O	1:A:41:THR:CG2	0.44	2.66	37	2
1:A:37:ASN:CB	1:A:40:LEU:CD1	0.44	2.95	31	1
1:A:23:GLN:CG	1:A:24:GLY:N	0.44	2.81	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:PRO:C	1:A:17:THR:CG2	0.44	2.91	26	1
1:A:55:VAL:CG1	1:A:56:ASN:N	0.44	2.80	1	1
1:A:96:SER:HB2	1:A:161:PRO:CG	0.44	2.43	2	4
1:A:96:SER:OG	1:A:161:PRO:CG	0.44	2.65	13	2
1:A:102:VAL:HB	1:A:119:LEU:HD13	0.44	1.90	16	1
1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:OD1	0.44	2.50	38	1
1:A:88:LYS:C	1:A:89:THR:HG23	0.44	2.38	3	1
1:A:33:ALA:O	1:A:36:ASN:N	0.44	2.42	5	2
1:A:20:ALA:O	1:A:21:SER:O	0.44	2.35	19	2
1:A:55:VAL:HG11	1:A:98:LEU:CD1	0.44	2.42	17	2
1:A:109:PRO:HA	1:A:112:VAL:CG1	0.44	2.43	23	1
1:A:27:GLN:C	1:A:28:ASP:OD2	0.44	2.60	25	1
1:A:33:ALA:O	1:A:34:ALA:C	0.44	2.61	35	3
1:A:6:PRO:O	1:A:9:ALA:N	0.44	2.45	33	5
1:A:47:LEU:HB3	1:A:57:LEU:HD12	0.44	1.89	19	1
1:A:29:PRO:HG2	1:A:32:VAL:HG21	0.44	1.89	20	2
1:A:48:SER:HA	1:A:58:VAL:CG1	0.43	2.43	5	6
1:A:156:ASP:C	1:A:156:ASP:OD2	0.43	2.61	5	1
1:A:86:GLU:C	1:A:88:LYS:N	0.43	2.76	8	5
1:A:110:ALA:O	1:A:113:VAL:HG12	0.43	2.13	38	3
1:A:124:VAL:O	1:A:126:VAL:N	0.43	2.49	14	3
1:A:51:LEU:CD1	1:A:88:LYS:HG3	0.43	2.42	17	1
1:A:26:SER:HA	1:A:147:THR:C	0.43	2.38	3	3
1:A:120:GLN:O	1:A:120:GLN:CG	0.43	2.66	6	1
1:A:51:LEU:CD1	1:A:88:LYS:CG	0.43	2.96	17	2
1:A:149:ASN:O	1:A:150:ALA:HB2	0.43	2.12	11	1
1:A:15:ASN:O	1:A:21:SER:CB	0.43	2.66	15	1
1:A:120:GLN:OE1	1:A:120:GLN:HA	0.43	2.13	29	4
1:A:74:ALA:O	1:A:78:LYS:NZ	0.43	2.50	30	1
1:A:133:LEU:HB3	1:A:140:VAL:CB	0.43	2.42	8	2
1:A:39:GLU:CD	1:A:73:ASN:ND2	0.43	2.76	14	1
1:A:53:PRO:C	1:A:54:GLN:OE1	0.43	2.61	20	1
1:A:159:LEU:C	1:A:160:MET:HG2	0.43	2.38	26	1
1:A:127:THR:HG22	1:A:128:GLY:H	0.43	1.72	38	1
1:A:90:ASN:O	1:A:92:SER:N	0.43	2.51	29	2
1:A:51:LEU:HD12	1:A:88:LYS:HG2	0.43	1.89	10	2
1:A:35:SER:O	1:A:35:SER:OG	0.43	2.35	32	3
1:A:108:SER:C	1:A:153:TYR:OH	0.43	2.62	14	2
1:A:99:THR:CB	1:A:119:LEU:HD21	0.43	2.44	28	1
1:A:133:LEU:CB	1:A:140:VAL:CB	0.43	2.97	8	2
1:A:58:VAL:CG1	1:A:59:ASP:N	0.43	2.81	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:135:VAL:HB	1:A:155:ILE:HG21	0.43	1.90	13	1
1:A:51:LEU:HD21	1:A:88:LYS:HE2	0.43	1.89	15	1
1:A:3:LEU:HD13	1:A:22:VAL:HG21	0.43	1.91	16	1
1:A:4:VAL:CG2	1:A:109:PRO:HB2	0.43	2.43	31	1
1:A:134:LYS:CE	1:A:138:ALA:O	0.43	2.66	35	1
1:A:151:THR:CG2	1:A:153:TYR:CE1	0.43	3.01	35	1
1:A:145:VAL:HB	1:A:152:VAL:CG1	0.43	2.43	11	5
1:A:65:GLN:HA	1:A:149:ASN:O	0.43	2.14	34	3
1:A:70:ALA:N	1:A:155:ILE:CD1	0.43	2.81	11	1
1:A:49:GLY:O	1:A:52:ASN:O	0.43	2.35	34	3
1:A:4:VAL:O	1:A:4:VAL:HG23	0.43	2.13	20	1
1:A:101:HIS:CE1	1:A:159:LEU:H	0.43	2.31	30	3
1:A:4:VAL:O	1:A:4:VAL:CG1	0.43	2.65	13	1
1:A:120:GLN:C	1:A:120:GLN:CD	0.43	2.87	22	1
1:A:57:LEU:HD11	1:A:99:THR:CG2	0.43	2.43	28	1
1:A:46:ALA:HB1	1:A:94:LEU:CD1	0.43	2.43	33	1
1:A:116:ARG:CB	1:A:124:VAL:HG13	0.43	2.43	34	4
1:A:80:PRO:O	1:A:82:SER:N	0.43	2.52	2	1
1:A:116:ARG:NE	1:A:117:GLN:N	0.43	2.67	2	1
1:A:28:ASP:HB3	1:A:32:VAL:CG1	0.43	2.44	14	7
1:A:57:LEU:O	1:A:60:THR:HB	0.43	2.14	17	1
1:A:28:ASP:OD2	1:A:32:VAL:HG12	0.43	2.12	34	2
1:A:79:LEU:HD13	1:A:79:LEU:H	0.43	1.74	35	1
1:A:90:ASN:O	1:A:91:SER:OG	0.43	2.35	37	1
1:A:86:GLU:O	1:A:90:ASN:OD1	0.43	2.36	11	5
1:A:158:VAL:CG2	1:A:160:MET:HG2	0.43	2.44	3	1
1:A:28:ASP:OD2	1:A:36:ASN:OD1	0.43	2.37	4	1
1:A:56:ASN:O	1:A:56:ASN:OD1	0.43	2.36	6	2
1:A:35:SER:HA	1:A:44:THR:CB	0.43	2.43	20	2
1:A:91:SER:O	1:A:95:THR:OG1	0.43	2.35	16	1
1:A:42:THR:HG22	1:A:76:PHE:CD2	0.43	2.49	29	1
1:A:33:ALA:HB3	1:A:147:THR:HG21	0.42	1.91	2	3
1:A:49:GLY:HA2	1:A:55:VAL:HG23	0.42	1.92	2	1
1:A:119:LEU:CD2	1:A:120:GLN:N	0.42	2.69	27	4
1:A:19:PRO:O	1:A:21:SER:N	0.42	2.50	26	2
1:A:118:THR:O	1:A:120:GLN:N	0.42	2.52	1	2
1:A:126:VAL:O	1:A:127:THR:HG22	0.42	2.14	24	5
1:A:151:THR:CG2	1:A:152:VAL:N	0.42	2.82	2	2
1:A:139:ASP:O	1:A:141:VAL:N	0.42	2.52	30	3
1:A:61:LEU:O	1:A:66:TYR:CD2	0.42	2.73	17	1
1:A:16:PRO:O	1:A:17:THR:CG2	0.42	2.67	26	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:SER:O	1:A:28:ASP:O	0.42	2.37	19	2
1:A:20:ALA:CB	1:A:36:ASN:O	0.42	2.67	21	1
1:A:57:LEU:HD11	1:A:98:LEU:HB2	0.42	1.92	26	1
1:A:51:LEU:O	1:A:88:LYS:CG	0.42	2.67	30	1
1:A:31:ALA:CB	1:A:58:VAL:HG13	0.42	2.44	3	1
1:A:40:LEU:O	1:A:44:THR:OG1	0.42	2.37	6	1
1:A:73:ASN:C	1:A:75:ALA:N	0.42	2.77	9	1
1:A:120:GLN:OE1	1:A:120:GLN:O	0.42	2.37	29	2
1:A:34:ALA:CB	1:A:40:LEU:HB2	0.42	2.43	21	2
1:A:78:LYS:O	1:A:79:LEU:O	0.42	2.38	12	1
1:A:12:ALA:O	1:A:14:ALA:N	0.42	2.53	38	1
1:A:34:ALA:O	1:A:36:ASN:N	0.42	2.53	38	1
1:A:18:GLY:O	1:A:21:SER:OG	0.42	2.37	16	1
1:A:102:VAL:HB	1:A:119:LEU:HD22	0.42	1.90	16	1
1:A:37:ASN:HB3	1:A:40:LEU:HG	0.42	1.90	23	1
1:A:113:VAL:HG23	1:A:127:THR:C	0.42	2.39	24	1
1:A:52:ASN:OD1	1:A:90:ASN:O	0.42	2.38	13	3
1:A:76:PHE:O	1:A:77:SER:C	0.42	2.63	4	1
1:A:44:THR:HA	1:A:47:LEU:CG	0.42	2.45	21	5
1:A:61:LEU:HD22	1:A:61:LEU:H	0.42	1.73	9	1
1:A:61:LEU:HD12	1:A:102:VAL:HG21	0.42	1.90	9	1
1:A:29:PRO:HB2	1:A:62:ASN:ND2	0.42	2.29	12	1
1:A:159:LEU:O	1:A:160:MET:HG2	0.42	2.15	17	2
1:A:25:MET:O	1:A:28:ASP:O	0.42	2.38	19	1
1:A:51:LEU:HG	1:A:88:LYS:CG	0.42	2.45	21	1
1:A:106:GLN:C	1:A:107:THR:OG1	0.42	2.63	27	2
1:A:99:THR:CB	1:A:120:GLN:HG2	0.42	2.44	31	1
1:A:113:VAL:CG1	1:A:114:GLY:N	0.42	2.82	32	1
1:A:120:GLN:OE1	1:A:120:GLN:C	0.42	2.63	12	1
1:A:51:LEU:CD2	1:A:88:LYS:HG3	0.42	2.45	23	2
1:A:66:TYR:C	1:A:67:THR:HG1	0.42	2.23	2	1
1:A:29:PRO:HD2	1:A:32:VAL:HG21	0.42	1.92	5	2
1:A:7:GLY:O	1:A:10:GLU:N	0.42	2.53	31	2
1:A:156:ASP:OD1	1:A:156:ASP:C	0.42	2.62	3	1
1:A:85:ASP:HA	1:A:88:LYS:CD	0.42	2.45	4	1
1:A:52:ASN:OD1	1:A:91:SER:CB	0.42	2.68	17	1
1:A:139:ASP:OD2	1:A:156:ASP:OD1	0.42	2.38	25	2
1:A:100:TYR:CD1	1:A:100:TYR:O	0.41	2.73	2	1
1:A:31:ALA:CB	1:A:58:VAL:HA	0.41	2.45	18	4
1:A:137:ASN:O	1:A:138:ALA:O	0.41	2.38	8	1
1:A:105:GLY:O	1:A:106:GLN:HB2	0.41	2.15	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CD1	0.41	2.83	20	1
1:A:127:THR:O	1:A:134:LYS:O	0.41	2.38	27	2
1:A:57:LEU:CB	1:A:61:LEU:HD22	0.41	2.45	29	1
1:A:32:VAL:O	1:A:34:ALA:N	0.41	2.53	2	1
1:A:68:VAL:N	1:A:151:THR:O	0.41	2.54	23	3
1:A:55:VAL:O	1:A:55:VAL:CG2	0.41	2.67	8	1
1:A:34:ALA:O	1:A:35:SER:C	0.41	2.62	38	2
1:A:101:HIS:CE1	1:A:159:LEU:HG	0.41	2.50	31	1
1:A:127:THR:HG22	1:A:128:GLY:N	0.41	2.31	38	1
1:A:31:ALA:C	1:A:33:ALA:N	0.41	2.73	1	1
1:A:57:LEU:HB2	1:A:61:LEU:CD2	0.41	2.44	9	1
1:A:43:LEU:HA	1:A:76:PHE:CZ	0.41	2.51	35	2
1:A:22:VAL:HB	1:A:145:VAL:CG1	0.41	2.44	21	1
1:A:36:ASN:N	1:A:36:ASN:ND2	0.41	2.68	33	1
1:A:11:TYR:OH	1:A:20:ALA:O	0.41	2.38	34	3
1:A:35:SER:C	1:A:36:ASN:ND2	0.41	2.78	38	4
1:A:34:ALA:HB3	1:A:44:THR:CG2	0.41	2.46	15	1
1:A:107:THR:HG22	1:A:111:ASN:HB2	0.41	1.92	15	1
1:A:100:TYR:CD2	1:A:159:LEU:HB3	0.41	2.51	36	2
1:A:112:VAL:O	1:A:113:VAL:O	0.41	2.38	32	1
1:A:55:VAL:CG2	1:A:91:SER:HA	0.41	2.45	33	1
1:A:67:THR:CG2	1:A:153:TYR:CE1	0.41	3.03	35	1
1:A:156:ASP:C	1:A:156:ASP:OD1	0.41	2.63	35	1
1:A:25:MET:HE1	1:A:37:ASN:OD1	0.41	2.15	3	1
1:A:116:ARG:HB3	1:A:124:VAL:CG1	0.41	2.46	4	1
1:A:159:LEU:O	1:A:160:MET:SD	0.41	2.77	11	1
1:A:45:ALA:O	1:A:50:GLN:N	0.41	2.54	22	1
1:A:30:VAL:CG1	1:A:150:ALA:CB	0.41	2.97	27	1
1:A:10:GLU:O	1:A:14:ALA:N	0.41	2.50	28	1
1:A:157:SER:O	1:A:159:LEU:N	0.41	2.53	30	1
1:A:79:LEU:HD11	1:A:158:VAL:HG21	0.41	1.92	23	2
1:A:71:PRO:HG3	1:A:101:HIS:NE2	0.41	2.31	3	1
1:A:125:THR:O	1:A:136:GLY:N	0.41	2.49	6	1
1:A:133:LEU:HB3	1:A:140:VAL:CG2	0.41	2.45	8	1
1:A:66:TYR:HB2	1:A:150:ALA:CB	0.41	2.45	10	2
1:A:66:TYR:HA	1:A:103:VAL:O	0.41	2.16	24	2
1:A:32:VAL:O	1:A:35:SER:OG	0.41	2.36	14	1
1:A:103:VAL:HG13	1:A:117:GLN:C	0.41	2.39	29	1
1:A:35:SER:OG	1:A:44:THR:CG2	0.41	2.66	1	1
1:A:43:LEU:HG	1:A:47:LEU:CD2	0.41	2.42	28	3
1:A:126:VAL:HG12	1:A:127:THR:N	0.41	2.30	29	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:GLU:HA	1:A:89:THR:HG22	0.41	1.93	30	1
1:A:156:ASP:O	1:A:156:ASP:OD1	0.41	2.39	38	2
1:A:6:PRO:C	1:A:8:CYS:N	0.41	2.74	5	2
1:A:30:VAL:HG13	1:A:61:LEU:HB3	0.41	1.91	12	1
1:A:30:VAL:CG2	1:A:150:ALA:HB3	0.41	2.46	19	2
1:A:103:VAL:HG22	1:A:118:THR:CB	0.41	2.46	29	1
1:A:47:LEU:HD13	1:A:61:LEU:HD11	0.41	1.93	34	1
1:A:91:SER:O	1:A:91:SER:OG	0.41	2.37	12	1
1:A:43:LEU:HD11	1:A:47:LEU:CD2	0.41	2.46	14	1
1:A:42:THR:HG23	1:A:43:LEU:N	0.41	2.30	16	1
1:A:86:GLU:O	1:A:90:ASN:ND2	0.41	2.54	18	1
1:A:25:MET:HE3	1:A:145:VAL:CG1	0.41	2.46	19	1
1:A:160:MET:O	1:A:162:PRO:HD3	0.41	2.16	20	1
1:A:99:THR:O	1:A:119:LEU:HB3	0.41	2.15	26	1
1:A:17:THR:C	1:A:18:GLY:O	0.41	2.64	30	1
1:A:57:LEU:CD2	1:A:98:LEU:HB2	0.41	2.46	35	1
1:A:95:THR:HG23	1:A:96:SER:N	0.41	2.30	37	1
1:A:30:VAL:HG11	1:A:61:LEU:C	0.41	2.40	4	1
1:A:19:PRO:O	1:A:24:GLY:O	0.41	2.38	8	1
1:A:70:ALA:N	1:A:155:ILE:HD13	0.41	2.31	11	1
1:A:54:GLN:HB3	1:A:91:SER:CB	0.41	2.46	19	1
1:A:139:ASP:OD1	1:A:156:ASP:OD1	0.41	2.39	22	1
1:A:59:ASP:C	1:A:61:LEU:N	0.41	2.78	24	1
1:A:7:GLY:CA	1:A:141:VAL:HG12	0.41	2.40	25	1
1:A:17:THR:O	1:A:21:SER:OG	0.41	2.39	26	1
1:A:37:ASN:HB2	1:A:40:LEU:HG	0.41	1.93	30	1
1:A:11:TYR:CZ	1:A:37:ASN:ND2	0.40	2.90	6	1
1:A:44:THR:O	1:A:48:SER:OG	0.40	2.39	10	1
1:A:79:LEU:HD11	1:A:158:VAL:HG11	0.40	1.92	16	1
1:A:106:GLN:OE1	1:A:151:THR:OG1	0.40	2.39	21	1
1:A:19:PRO:C	1:A:21:SER:N	0.40	2.78	18	1
1:A:23:GLN:O	1:A:24:GLY:C	0.40	2.63	23	1
1:A:143:GLY:HA3	1:A:153:TYR:CD1	0.40	2.51	31	1
1:A:122:ALA:HB2	1:A:162:PRO:HD2	0.40	1.93	38	1
1:A:29:PRO:HB3	1:A:62:ASN:ND2	0.40	2.31	4	1
1:A:137:ASN:C	1:A:138:ALA:O	0.40	2.63	8	1
1:A:4:VAL:HG22	1:A:5:GLY:H	0.40	1.75	16	1
1:A:46:ALA:CB	1:A:94:LEU:HD11	0.40	2.43	20	1
1:A:40:LEU:HB3	1:A:43:LEU:CD2	0.40	2.47	24	2
1:A:30:VAL:HG11	1:A:150:ALA:CB	0.40	2.47	27	2
1:A:35:SER:N	1:A:44:THR:OG1	0.40	2.54	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:HD23	0.40	2.30	21	1
1:A:67:THR:OG1	1:A:105:GLY:O	0.40	2.38	27	1
1:A:108:SER:O	1:A:112:VAL:HB	0.40	2.16	34	1
1:A:75:ALA:C	1:A:77:SER:N	0.40	2.79	37	1
1:A:30:VAL:CG2	1:A:31:ALA:H	0.40	2.28	38	1
1:A:44:THR:O	1:A:47:LEU:N	0.40	2.55	10	1
1:A:135:VAL:HG23	1:A:140:VAL:CG2	0.40	2.47	16	1
1:A:46:ALA:O	1:A:52:ASN:OD1	0.40	2.39	18	1
1:A:119:LEU:HD23	1:A:120:GLN:CA	0.40	2.46	27	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	156/163 (96%)	103±5 (66±3%)	41±4 (26±3%)	13±3 (8±2%)	1	13
All	All	5928/6194 (96%)	3902 (66%)	1546 (26%)	480 (8%)	1	13

All 51 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	31	ALA	38
1	A	30	VAL	37
1	A	159	LEU	33
1	A	6	PRO	30
1	A	137	ASN	24
1	A	58	VAL	24
1	A	32	VAL	21
1	A	72	THR	19
1	A	89	THR	19
1	A	3	LEU	15
1	A	16	PRO	14
1	A	147	THR	13
1	A	41	THR	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	112	VAL	11
1	A	160	MET	11
1	A	140	VAL	10
1	A	138	ALA	10
1	A	158	VAL	10
1	A	136	GLY	10
1	A	91	SER	9
1	A	21	SER	8
1	A	61	LEU	8
1	A	18	GLY	7
1	A	36	ASN	7
1	A	120	GLN	7
1	A	50	GLN	6
1	A	56	ASN	6
1	A	145	VAL	6
1	A	90	ASN	6
1	A	106	GLN	5
1	A	93	LEU	4
1	A	122	ALA	4
1	A	9	ALA	4
1	A	63	SER	3
1	A	113	VAL	3
1	A	102	VAL	2
1	A	33	ALA	2
1	A	65	GLN	2
1	A	78	LYS	2
1	A	45	ALA	2
1	A	22	VAL	2
1	A	23	GLN	2
1	A	27	GLN	2
1	A	85	ASP	2
1	A	135	VAL	2
1	A	133	LEU	1
1	A	20	ALA	1
1	A	105	GLY	1
1	A	108	SER	1
1	A	149	ASN	1
1	A	125	THR	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	123/127 (97%)	86±3 (70±3%)	37±3 (30±3%)	1	17
All	All	4674/4826 (97%)	3273 (70%)	1401 (30%)	1	17

All 87 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	47	LEU	38
1	A	51	LEU	38
1	A	83	THR	38
1	A	93	LEU	38
1	A	94	LEU	38
1	A	43	LEU	37
1	A	52	ASN	37
1	A	152	VAL	37
1	A	98	LEU	36
1	A	8	CYS	35
1	A	106	GLN	35
1	A	155	ILE	34
1	A	102	VAL	34
1	A	97	ILE	33
1	A	135	VAL	33
1	A	119	LEU	29
1	A	96	SER	28
1	A	145	VAL	28
1	A	149	ASN	28
1	A	157	SER	25
1	A	127	THR	24
1	A	112	VAL	23
1	A	116	ARG	22
1	A	154	MET	21
1	A	134	LYS	21
1	A	10	GLU	21
1	A	41	THR	21
1	A	39	GLU	20
1	A	86	GLU	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	85	ASP	18
1	A	92	SER	18
1	A	73	ASN	18
1	A	120	GLN	17
1	A	159	LEU	17
1	A	44	THR	17
1	A	78	LYS	16
1	A	35	SER	15
1	A	37	ASN	15
1	A	65	GLN	15
1	A	147	THR	15
1	A	58	VAL	15
1	A	61	LEU	15
1	A	77	SER	14
1	A	82	SER	14
1	A	57	LEU	13
1	A	3	LEU	13
1	A	54	GLN	12
1	A	95	THR	12
1	A	160	MET	12
1	A	55	VAL	11
1	A	26	SER	11
1	A	91	SER	11
1	A	59	ASP	11
1	A	124	VAL	10
1	A	123	SER	10
1	A	40	LEU	10
1	A	158	VAL	9
1	A	88	LYS	9
1	A	48	SER	9
1	A	42	THR	8
1	A	137	ASN	8
1	A	23	GLN	8
1	A	56	ASN	8
1	A	63	SER	7
1	A	108	SER	7
1	A	4	VAL	7
1	A	99	THR	7
1	A	141	VAL	7
1	A	21	SER	6
1	A	28	ASP	6
1	A	139	ASP	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	115	THR	6
1	A	133	LEU	5
1	A	89	THR	5
1	A	79	LEU	4
1	A	30	VAL	4
1	A	50	GLN	3
1	A	62	ASN	3
1	A	27	GLN	2
1	A	36	ASN	2
1	A	22	VAL	2
1	A	90	ASN	1
1	A	87	LEU	1
1	A	107	THR	1
1	A	60	THR	1
1	A	156	ASP	1
1	A	146	SER	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 ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided