



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 27, 2026 – 11:05 PM UTC

PDB ID : 1QRJ / pdb_00001qrj
Title : Solution structure of htlv-i capsid protein
Authors : Khorasanizadeh, S.; Campos-Olivas, R.; Clark, C.A.; Summers, M.F.
Deposited on : 1999-06-14

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

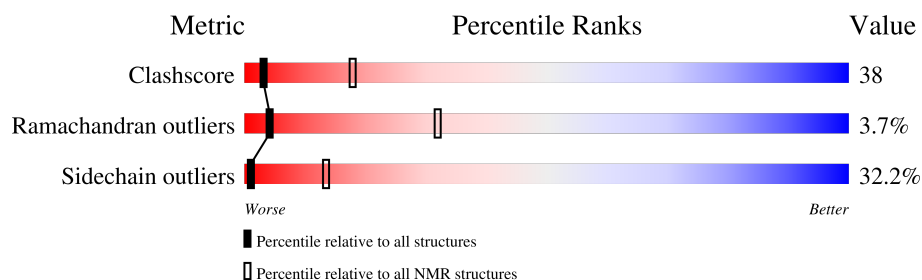
1 Overall quality at a glance

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	214	29% 45% 10% 15%

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 1 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:15-A:92, A:96-A:125 (108)	0.65	1
2	A:131-A:204 (74)	0.60	18

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 4 clusters and 5 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3061 atoms, of which 1385 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called HTLV-I CAPSID PROTEIN.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	214	Total	C	H	N	O	S	0
			3061	1047	1385	309	313	7	

There are 15 discrepancies between the modelled and reference sequences:

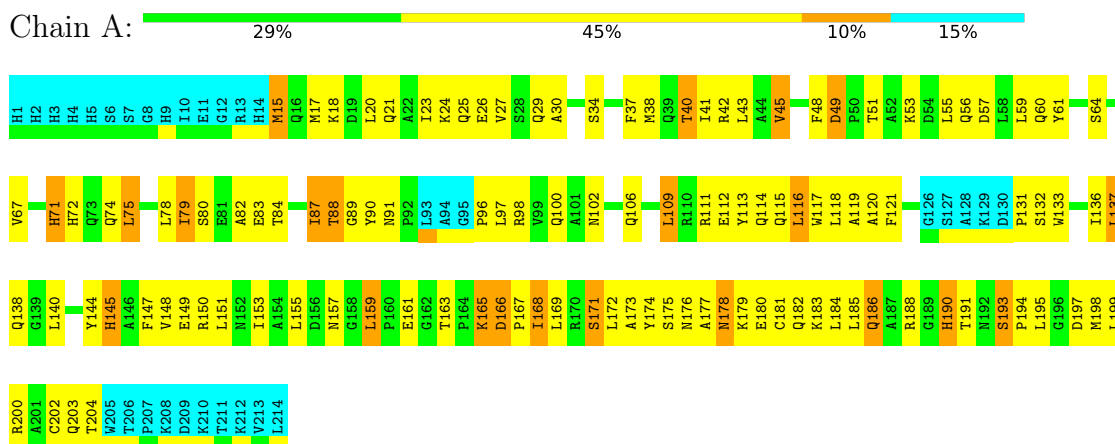
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1	HIS	-	expression tag	UNP P03345
A	2	HIS	-	expression tag	UNP P03345
A	3	HIS	-	expression tag	UNP P03345
A	4	HIS	-	expression tag	UNP P03345
A	5	HIS	-	expression tag	UNP P03345
A	6	SER	-	expression tag	UNP P03345
A	7	SER	-	expression tag	UNP P03345
A	8	GLY	-	expression tag	UNP P03345
A	9	HIS	-	expression tag	UNP P03345
A	10	ILE	-	expression tag	UNP P03345
A	11	GLU	-	expression tag	UNP P03345
A	12	GLY	-	expression tag	UNP P03345
A	13	ARG	-	expression tag	UNP P03345
A	14	HIS	-	expression tag	UNP P03345
A	15	MET	-	expression tag	UNP P03345

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: HTLV-I CAPSID PROTEIN

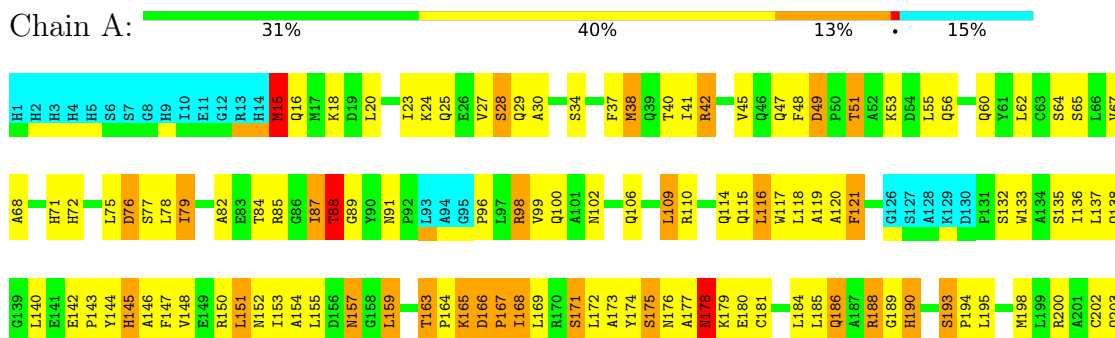


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

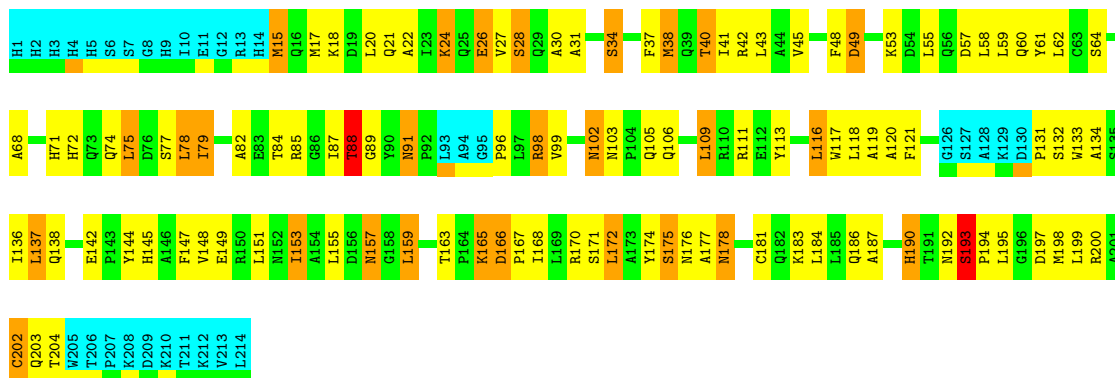
• Molecule 1: HTLV-I CAPSID PROTEIN





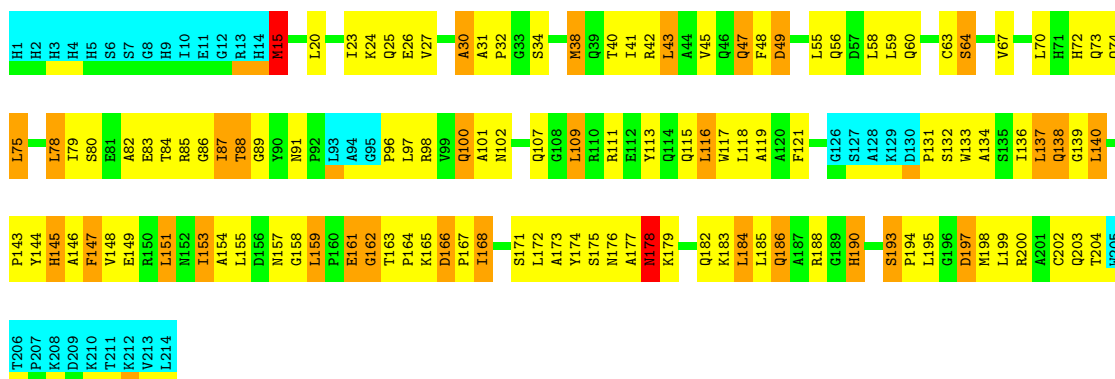
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: HTLV-I CAPSID PROTEIN



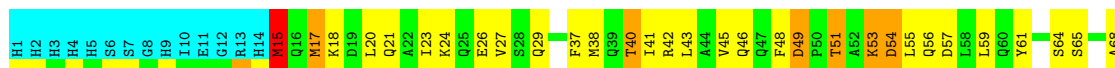
4.2.3 Score per residue for model 3

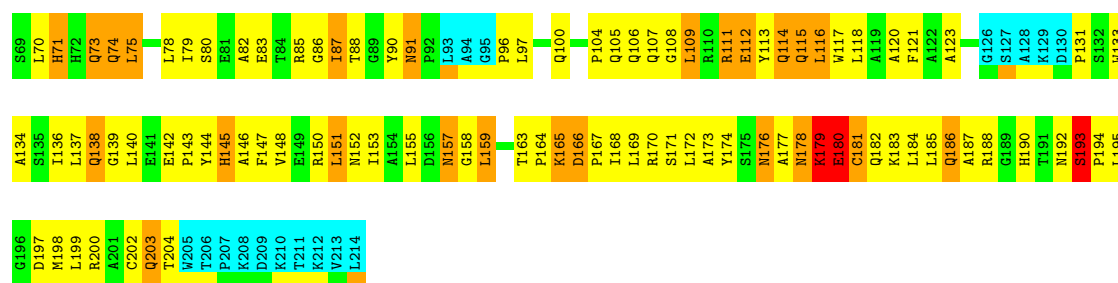
- Molecule 1: HTLV-I CAPSID PROTEIN



4.2.4 Score per residue for model 4

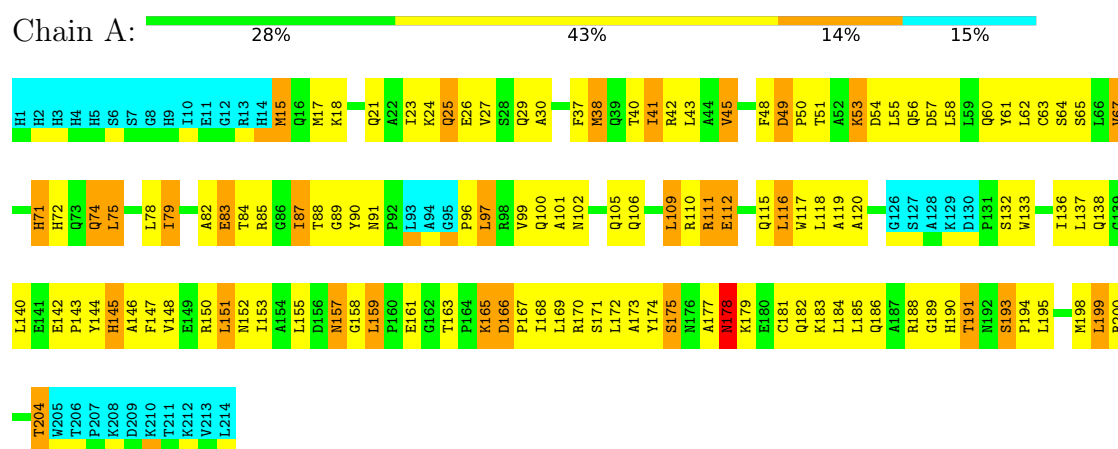
- Molecule 1: HTLV-I CAPSID PROTEIN





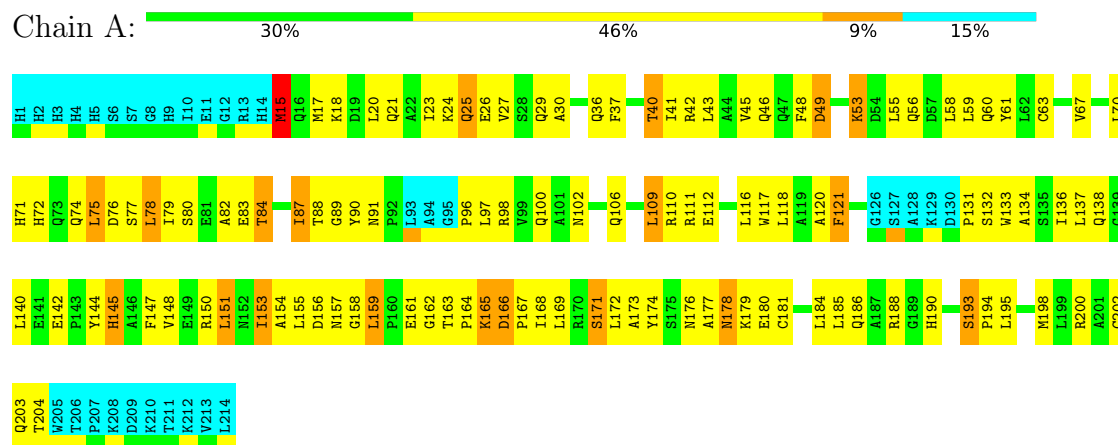
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: HTLV-I CAPSID PROTEIN



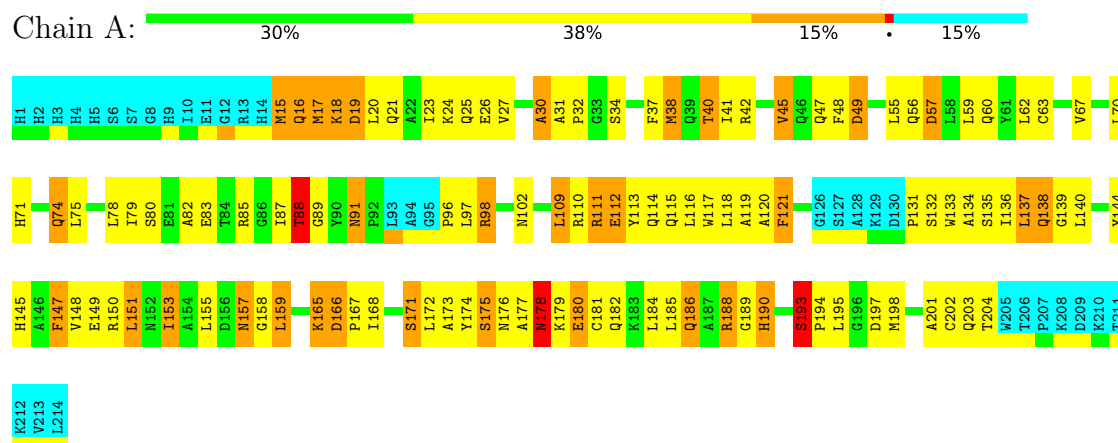
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: HTLV-I CAPSID PROTEIN



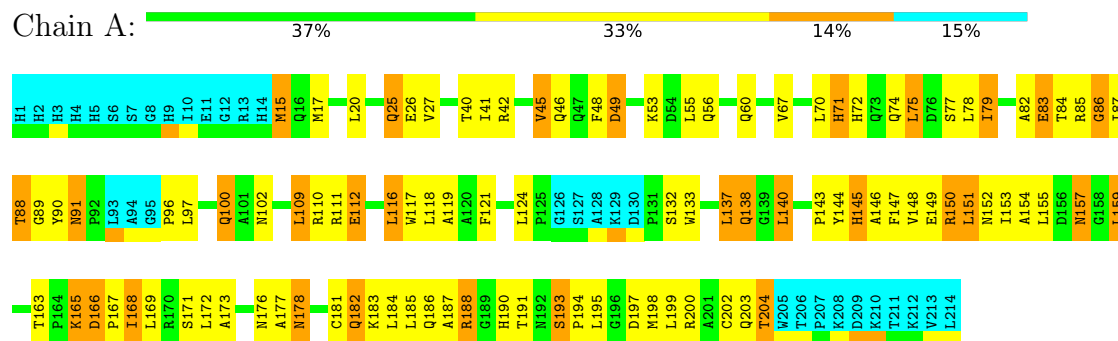
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: HTLV-I CAPSID PROTEIN



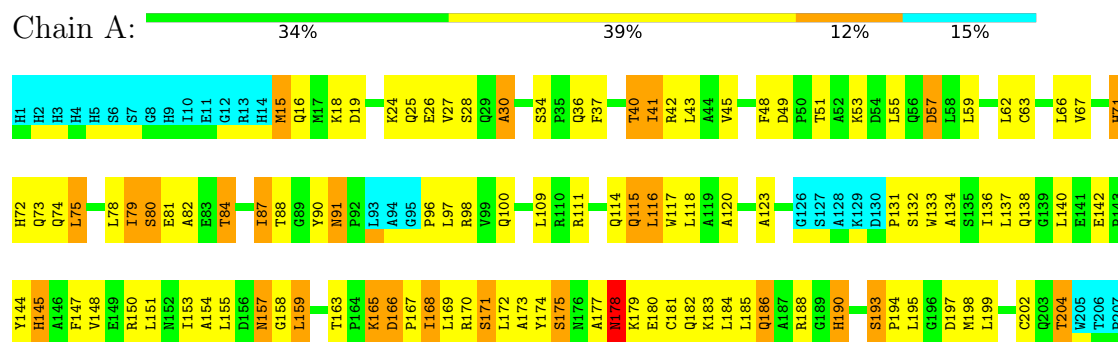
4.2.8 Score per residue for model 8

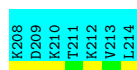
- Molecule 1: HTLV-I CAPSID PROTEIN



4.2.9 Score per residue for model 9

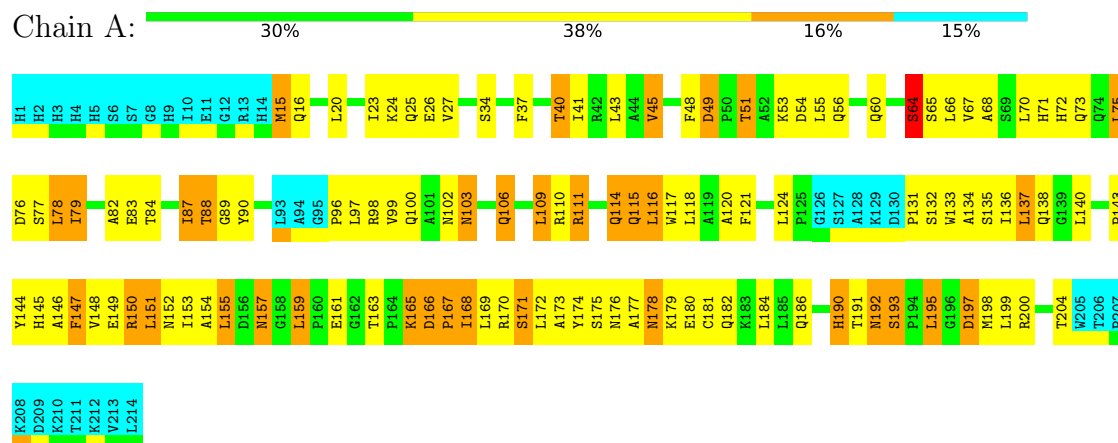
- Molecule 1: HTLV-I CAPSID PROTEIN





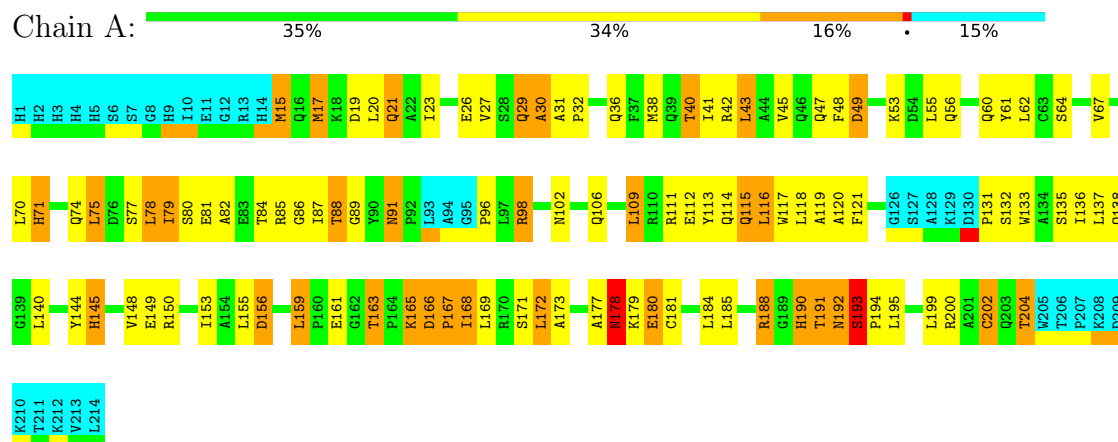
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: HTLV-I CAPSID PROTEIN



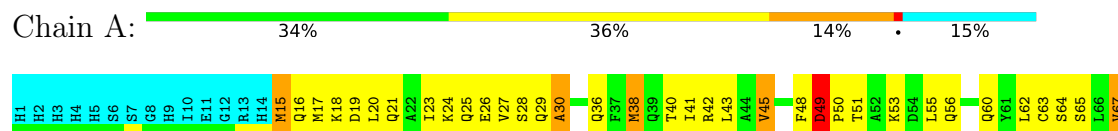
4.2.11 Score per residue for model 11

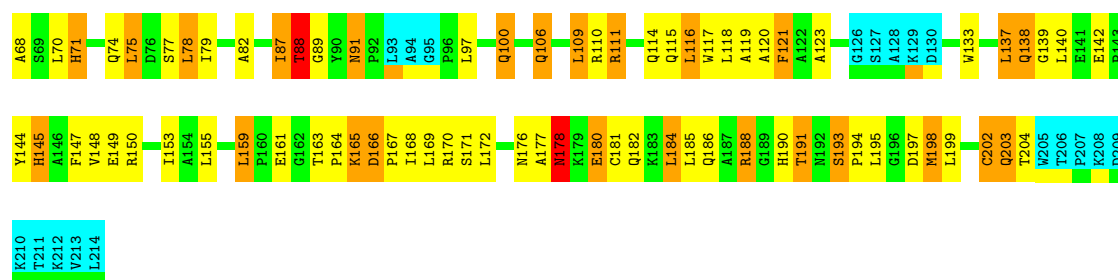
- Molecule 1: HTLV-I CAPSID PROTEIN



4.2.12 Score per residue for model 12

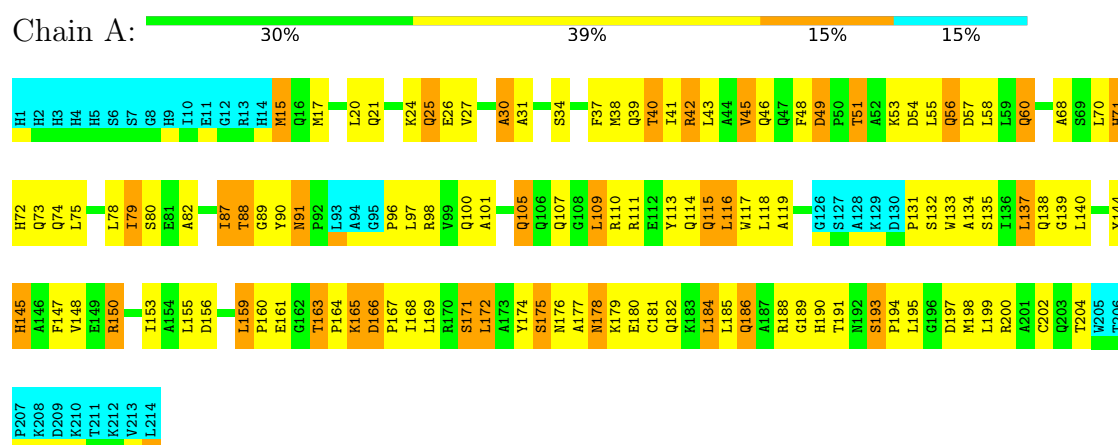
- Molecule 1: HTLV-I CAPSID PROTEIN





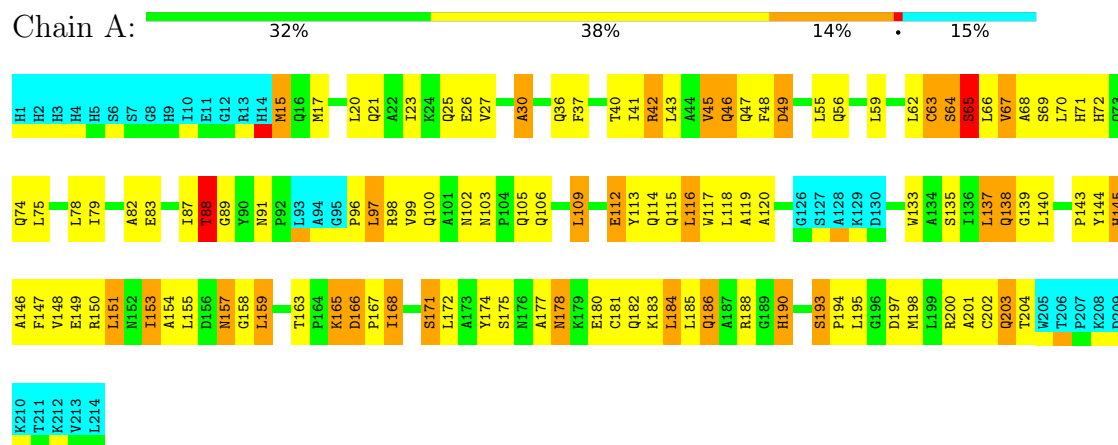
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: HTLV-I CAPSID PROTEIN



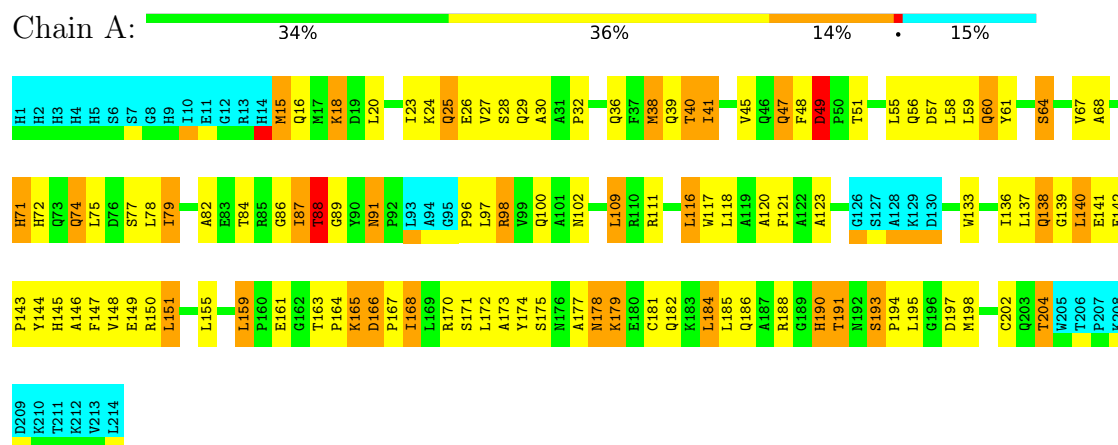
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: HTLV-I CAPSID PROTEIN



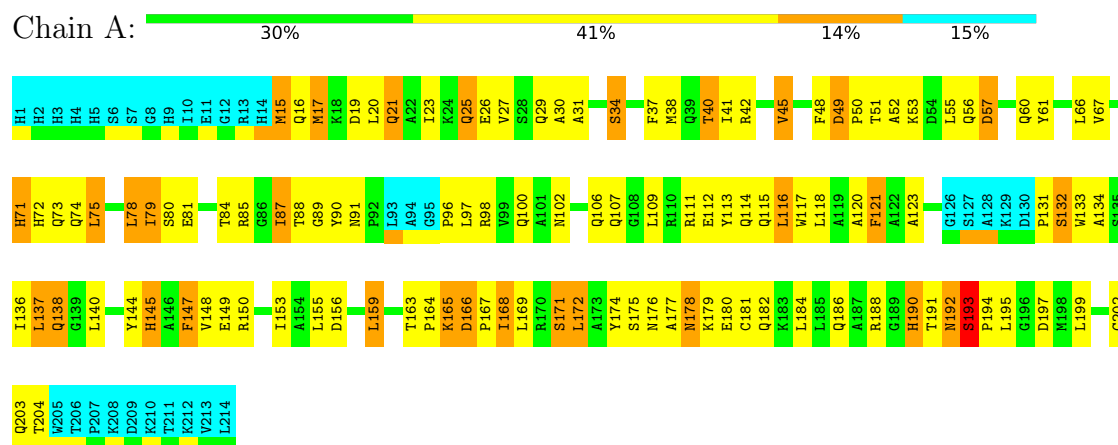
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: HTLV-I CAPSID PROTEIN



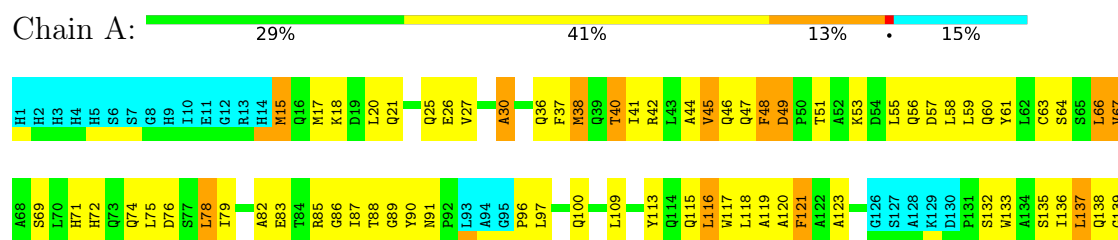
4.2.16 Score per residue for model 16

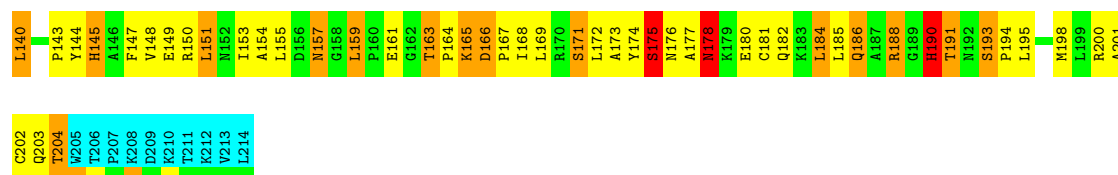
- Molecule 1: HTLV-I CAPSID PROTEIN



4.2.17 Score per residue for model 17

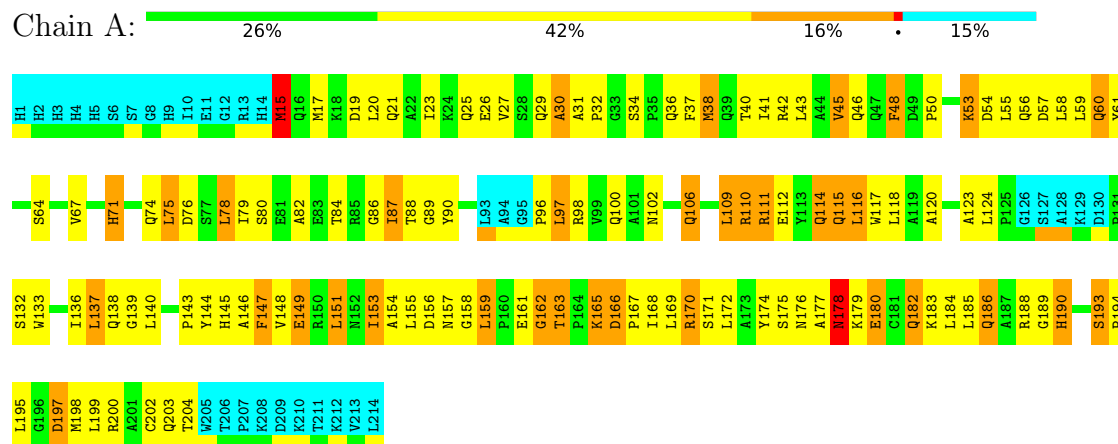
- Molecule 1: HTLV-I CAPSID PROTEIN





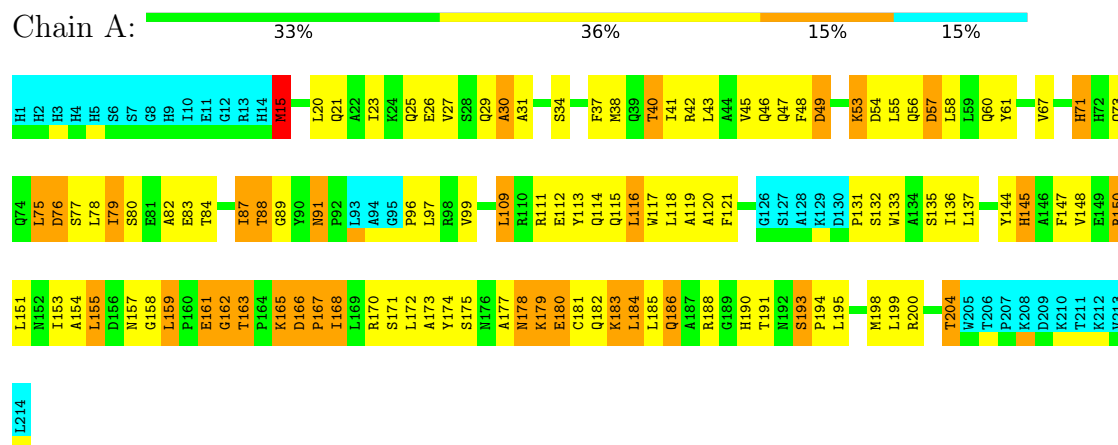
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: HTLV-I CAPSID PROTEIN



4.2.19 Score per residue for model 19

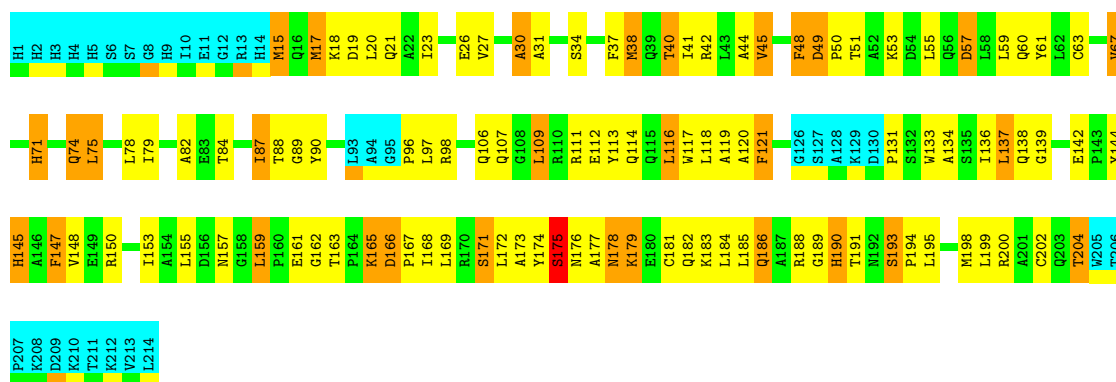
- Molecule 1: HTLV-I CAPSID PROTEIN



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: HTLV-I CAPSID PROTEIN





5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *TORSION ANGLE DYNAMICS AND SIMULATED ANNEALING*.

Of the 20 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *STRUCTURES WITH LOWEST DYANA TARGET FUNCTION: RANGE 0.37-0.74 ANGSTROM SQUARED*.

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

Software name	Classification	Version
DYANA	refinement	1.4
XwinNMR	structure solution	2.1
NMRPipe	structure solution	1.7
NMRView	structure solution	2.1

No chemical shift data was provided.

6 Model quality ⓘ

6.1 Standard geometry ⓘ

There are no covalent bond-length or bond-angle outliers.

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1424	1180	1415	108±11
All	All	28480	23600	28300	2163

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 38.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:LEU:HD13	1:A:117:TRP:CG	1.02	1.89	12	20
1:A:87:ILE:HD13	1:A:109:LEU:HD21	1.00	1.33	8	2
1:A:144:TYR:O	1:A:148:VAL:HG23	0.93	1.64	17	19
1:A:116:LEU:HD23	1:A:117:TRP:N	0.92	1.79	10	10
1:A:173:ALA:O	1:A:177:ALA:HB2	0.91	1.64	17	13
1:A:75:LEU:CD1	1:A:116:LEU:HD21	0.89	1.98	10	2
1:A:195:LEU:HD12	1:A:198:MET:SD	0.88	2.08	7	4
1:A:75:LEU:HD11	1:A:116:LEU:HD21	0.88	1.46	10	3
1:A:185:LEU:HD11	1:A:198:MET:SD	0.86	2.11	6	3
1:A:82:ALA:HB1	1:A:87:ILE:HD11	0.85	1.45	8	4
1:A:186:GLN:OE1	1:A:191:THR:HG21	0.84	1.71	8	3
1:A:87:ILE:HG21	1:A:109:LEU:HD11	0.84	1.50	20	12
1:A:45:VAL:HG11	1:A:118:LEU:HD11	0.83	1.49	14	10
1:A:26:GLU:OE1	1:A:40:THR:HG23	0.81	1.73	3	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:GLN:O	1:A:78:LEU:HD22	0.81	1.75	12	1
1:A:87:ILE:HG21	1:A:109:LEU:HG	0.80	1.52	8	2
1:A:79:ILE:HD12	1:A:97:LEU:CD2	0.80	2.05	4	4
1:A:117:TRP:CZ2	1:A:121:PHE:CE1	0.80	2.70	7	8
1:A:148:VAL:CG1	1:A:195:LEU:HD21	0.80	2.07	8	15
1:A:151:LEU:O	1:A:155:LEU:HD12	0.80	1.77	19	14
1:A:38:MET:HE1	1:A:118:LEU:HD22	0.79	1.52	18	8
1:A:37:PHE:CE1	1:A:41:ILE:HD11	0.78	2.13	6	8
1:A:116:LEU:HD23	1:A:116:LEU:C	0.77	2.05	10	2
1:A:27:VAL:HG23	1:A:40:THR:HG21	0.77	1.57	11	10
1:A:116:LEU:O	1:A:119:ALA:HB3	0.76	1.80	19	13
1:A:137:LEU:HD23	1:A:176:ASN:HB3	0.76	1.57	12	2
1:A:75:LEU:HD13	1:A:79:ILE:CD1	0.76	2.09	3	5
1:A:117:TRP:CH2	1:A:121:PHE:CZ	0.76	2.74	7	7
1:A:31:ALA:HB3	1:A:34:SER:OG	0.75	1.81	20	1
1:A:78:LEU:HD23	1:A:116:LEU:HG	0.75	1.56	8	14
1:A:82:ALA:CB	1:A:87:ILE:HD11	0.75	2.11	8	4
1:A:117:TRP:CH2	1:A:121:PHE:CE1	0.74	2.75	7	10
1:A:109:LEU:HD23	1:A:112:GLU:HG2	0.74	1.57	7	3
1:A:82:ALA:HB1	1:A:87:ILE:CD1	0.74	2.12	8	1
1:A:55:LEU:HD22	1:A:117:TRP:CE3	0.74	2.18	9	14
1:A:185:LEU:HD23	1:A:190:HIS:NE2	0.73	1.97	4	11
1:A:169:LEU:CD2	1:A:195:LEU:HD22	0.73	2.14	8	6
1:A:155:LEU:HD11	1:A:172:LEU:HD12	0.73	1.60	5	6
1:A:87:ILE:CD1	1:A:109:LEU:HD21	0.73	2.13	8	1
1:A:169:LEU:HD21	1:A:195:LEU:HD22	0.73	1.60	5	2
1:A:26:GLU:CD	1:A:40:THR:HG23	0.73	2.08	9	16
1:A:184:LEU:HD23	1:A:184:LEU:O	0.72	1.84	10	16
1:A:82:ALA:HB1	1:A:87:ILE:HG12	0.72	1.61	2	13
1:A:23:ILE:HG22	1:A:62:LEU:HD11	0.72	1.60	5	5
1:A:75:LEU:HD13	1:A:79:ILE:HD11	0.72	1.62	3	2
1:A:74:GLN:O	1:A:78:LEU:HD13	0.72	1.84	7	2
1:A:79:ILE:CG1	1:A:97:LEU:HD22	0.72	2.15	3	3
1:A:109:LEU:HD23	1:A:112:GLU:CG	0.71	2.15	7	3
1:A:117:TRP:CH2	1:A:121:PHE:CE2	0.71	2.78	10	4
1:A:159:LEU:HD21	1:A:168:ILE:CD1	0.71	2.15	19	4
1:A:97:LEU:HD11	1:A:109:LEU:HD22	0.71	1.61	14	3
1:A:184:LEU:C	1:A:184:LEU:HD23	0.70	2.11	17	12
1:A:185:LEU:HD21	1:A:198:MET:SD	0.70	2.26	14	8
1:A:137:LEU:HD23	1:A:176:ASN:CB	0.70	2.17	12	6
1:A:71:HIS:CE1	1:A:120:ALA:HB3	0.70	2.22	17	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:ILE:HG21	1:A:109:LEU:CD1	0.70	2.16	2	12
1:A:143:PRO:HB2	1:A:146:ALA:HB3	0.70	1.62	14	9
1:A:74:GLN:OE1	1:A:123:ALA:HB3	0.69	1.87	9	4
1:A:23:ILE:O	1:A:27:VAL:HG23	0.69	1.87	20	5
1:A:42:ARG:HD2	1:A:118:LEU:HD13	0.69	1.62	8	5
1:A:65:SER:O	1:A:68:ALA:HB3	0.69	1.87	14	3
1:A:79:ILE:HG12	1:A:97:LEU:HD22	0.69	1.63	8	5
1:A:116:LEU:C	1:A:116:LEU:HD23	0.69	2.13	5	2
1:A:55:LEU:HD13	1:A:117:TRP:CB	0.68	2.17	16	13
1:A:133:TRP:HA	1:A:136:ILE:HD12	0.68	1.65	18	15
1:A:155:LEU:HD11	1:A:172:LEU:CD1	0.68	2.18	19	7
1:A:75:LEU:HD13	1:A:79:ILE:HD12	0.68	1.64	13	5
1:A:71:HIS:NE2	1:A:120:ALA:HB3	0.67	2.04	1	2
1:A:78:LEU:HD23	1:A:116:LEU:CG	0.67	2.19	11	11
1:A:41:ILE:HG22	1:A:118:LEU:HD21	0.67	1.65	3	19
1:A:15:MET:HE2	1:A:48:PHE:CD2	0.67	2.24	18	1
1:A:140:LEU:O	1:A:140:LEU:HD13	0.66	1.91	6	5
1:A:78:LEU:HB3	1:A:116:LEU:HD11	0.66	1.68	6	2
1:A:15:MET:HE1	1:A:23:ILE:CD1	0.65	2.21	10	2
1:A:55:LEU:HD22	1:A:117:TRP:CD2	0.65	2.26	5	11
1:A:24:LYS:HA	1:A:62:LEU:HD21	0.65	1.68	5	4
1:A:55:LEU:HD22	1:A:117:TRP:CZ3	0.65	2.25	9	11
1:A:147:PHE:CZ	1:A:151:LEU:HD12	0.65	2.26	4	2
1:A:51:THR:HG21	1:A:102:ASN:HA	0.65	1.67	5	1
1:A:169:LEU:HD23	1:A:195:LEU:HD22	0.65	1.69	11	2
1:A:20:LEU:HA	1:A:23:ILE:HD12	0.65	1.69	4	9
1:A:75:LEU:HD13	1:A:79:ILE:HG12	0.65	1.68	17	1
1:A:133:TRP:CD1	1:A:155:LEU:HD23	0.65	2.27	13	12
1:A:41:ILE:HG22	1:A:118:LEU:CD2	0.64	2.22	17	15
1:A:75:LEU:CD1	1:A:79:ILE:HD11	0.64	2.22	3	3
1:A:131:PRO:HG2	1:A:134:ALA:HB2	0.64	1.70	4	9
1:A:147:PHE:CE2	1:A:151:LEU:HD12	0.64	2.28	6	1
1:A:148:VAL:HG11	1:A:199:LEU:HD21	0.63	1.67	9	13
1:A:185:LEU:HD21	1:A:198:MET:HG3	0.63	1.71	4	1
1:A:133:TRP:CE3	1:A:172:LEU:HD21	0.63	2.27	18	20
1:A:174:TYR:CD2	1:A:185:LEU:HD13	0.63	2.28	9	2
1:A:177:ALA:HB1	1:A:181:CYS:SG	0.63	2.33	8	2
1:A:147:PHE:CE1	1:A:151:LEU:HD12	0.62	2.28	19	2
1:A:15:MET:HE3	1:A:20:LEU:CD2	0.62	2.24	11	4
1:A:148:VAL:HG12	1:A:195:LEU:HD21	0.62	1.71	8	7
1:A:155:LEU:HD23	1:A:159:LEU:HD23	0.62	1.71	15	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:159:LEU:HD21	1:A:168:ILE:HD12	0.62	1.71	19	1
1:A:168:ILE:HG23	1:A:172:LEU:HD12	0.62	1.72	11	3
1:A:190:HIS:O	1:A:190:HIS:CG	0.62	2.53	2	17
1:A:75:LEU:HD13	1:A:75:LEU:O	0.62	1.95	15	1
1:A:78:LEU:N	1:A:78:LEU:HD13	0.62	2.10	12	1
1:A:87:ILE:HD12	1:A:90:TYR:CG	0.62	2.30	20	5
1:A:165:LYS:HZ1	1:A:169:LEU:HD22	0.61	1.54	4	1
1:A:144:TYR:CD2	1:A:202:CYS:SG	0.61	2.94	1	2
1:A:138:GLN:OE1	1:A:144:TYR:CD2	0.61	2.54	8	2
1:A:59:LEU:HD12	1:A:63:CYS:CB	0.61	2.26	3	2
1:A:64:SER:O	1:A:68:ALA:HB2	0.60	1.96	12	1
1:A:82:ALA:HB1	1:A:87:ILE:CG1	0.60	2.27	8	7
1:A:149:GLU:O	1:A:153:ILE:HD12	0.60	1.97	12	4
1:A:15:MET:HE3	1:A:48:PHE:CZ	0.60	2.30	6	2
1:A:147:PHE:CE1	1:A:151:LEU:CD1	0.60	2.85	19	1
1:A:55:LEU:HD13	1:A:117:TRP:CD2	0.60	2.32	4	20
1:A:137:LEU:O	1:A:147:PHE:CZ	0.60	2.55	16	6
1:A:159:LEU:HD21	1:A:168:ILE:HD13	0.60	1.74	3	2
1:A:15:MET:SD	1:A:48:PHE:CZ	0.60	2.95	11	5
1:A:144:TYR:CD1	1:A:202:CYS:CB	0.60	2.85	16	3
1:A:144:TYR:CD1	1:A:202:CYS:SG	0.60	2.95	16	2
1:A:20:LEU:O	1:A:61:TYR:CE1	0.59	2.55	11	1
1:A:15:MET:CE	1:A:20:LEU:CD2	0.59	2.79	16	5
1:A:15:MET:SD	1:A:48:PHE:CE1	0.59	2.94	17	5
1:A:79:ILE:HG23	1:A:97:LEU:HD22	0.59	1.73	4	3
1:A:137:LEU:O	1:A:147:PHE:CE1	0.59	2.55	18	3
1:A:144:TYR:CE2	1:A:181:CYS:SG	0.59	2.96	4	9
1:A:144:TYR:CE2	1:A:202:CYS:SG	0.59	2.95	1	1
1:A:71:HIS:CE1	1:A:117:TRP:CD1	0.59	2.91	14	7
1:A:79:ILE:HD13	1:A:116:LEU:HD11	0.59	1.73	20	3
1:A:42:ARG:CD	1:A:118:LEU:HD13	0.59	2.28	5	1
1:A:184:LEU:C	1:A:184:LEU:CD2	0.59	2.76	17	15
1:A:27:VAL:O	1:A:30:ALA:HB3	0.59	1.97	13	3
1:A:177:ALA:O	1:A:178:ASN:C	0.58	2.46	19	5
1:A:144:TYR:CE1	1:A:202:CYS:SG	0.58	2.95	13	2
1:A:155:LEU:HD21	1:A:172:LEU:CD1	0.58	2.27	17	3
1:A:137:LEU:HD23	1:A:176:ASN:OD1	0.58	1.99	7	2
1:A:75:LEU:CD1	1:A:79:ILE:HD12	0.58	2.28	13	2
1:A:79:ILE:HG12	1:A:97:LEU:HD21	0.58	1.74	19	2
1:A:15:MET:CB	1:A:48:PHE:CD1	0.58	2.86	20	1
1:A:159:LEU:CD1	1:A:163:THR:HG22	0.58	2.28	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:151:LEU:HD11	1:A:172:LEU:HB3	0.58	1.76	8	3
1:A:140:LEU:HD23	1:A:178:ASN:ND2	0.58	2.14	9	1
1:A:90:TYR:CG	1:A:91:ASN:N	0.58	2.71	16	3
1:A:144:TYR:CD2	1:A:181:CYS:SG	0.58	2.97	7	3
1:A:75:LEU:HD23	1:A:120:ALA:HB2	0.57	1.74	11	4
1:A:88:THR:HG23	1:A:89:GLY:H	0.57	1.59	3	10
1:A:31:ALA:HB3	1:A:34:SER:HB2	0.57	1.76	16	4
1:A:184:LEU:HD23	1:A:184:LEU:C	0.57	2.24	10	5
1:A:185:LEU:HD11	1:A:198:MET:CE	0.57	2.29	3	2
1:A:117:TRP:CZ2	1:A:121:PHE:CE2	0.57	2.93	10	2
1:A:101:ALA:HB2	1:A:113:TYR:CD2	0.57	2.34	3	2
1:A:155:LEU:O	1:A:158:GLY:N	0.57	2.35	14	9
1:A:138:GLN:OE1	1:A:144:TYR:CD1	0.57	2.57	6	1
1:A:87:ILE:HG21	1:A:109:LEU:CG	0.57	2.27	8	4
1:A:155:LEU:HD12	1:A:169:LEU:HD13	0.57	1.76	13	3
1:A:138:GLN:OE1	1:A:144:TYR:CG	0.57	2.57	15	2
1:A:163:THR:HG23	1:A:164:PRO:HD2	0.56	1.76	15	9
1:A:38:MET:HE1	1:A:121:PHE:HB3	0.56	1.74	16	1
1:A:74:GLN:OE1	1:A:123:ALA:HB1	0.56	1.99	12	1
1:A:20:LEU:HD21	1:A:58:LEU:HB2	0.56	1.78	17	3
1:A:159:LEU:HD12	1:A:165:LYS:HB2	0.56	1.78	2	7
1:A:133:TRP:CE2	1:A:159:LEU:HD23	0.56	2.36	16	2
1:A:55:LEU:HD12	1:A:113:TYR:HE1	0.56	1.61	14	1
1:A:71:HIS:CD2	1:A:71:HIS:C	0.56	2.83	11	5
1:A:71:HIS:CD2	1:A:120:ALA:C	0.56	2.84	1	1
1:A:177:ALA:HB1	1:A:181:CYS:HB3	0.56	1.78	4	1
1:A:169:LEU:HD21	1:A:195:LEU:CD2	0.56	2.30	5	2
1:A:30:ALA:HB1	1:A:36:GLN:HB3	0.56	1.78	14	4
1:A:166:ASP:N	1:A:167:PRO:CD	0.55	2.69	13	20
1:A:68:ALA:O	1:A:72:HIS:CD2	0.55	2.59	2	1
1:A:75:LEU:HD23	1:A:120:ALA:CB	0.55	2.30	11	7
1:A:90:TYR:CD1	1:A:100:GLN:OE1	0.55	2.60	4	4
1:A:140:LEU:HD22	1:A:178:ASN:OD1	0.55	2.01	15	1
1:A:27:VAL:HG13	1:A:37:PHE:CD1	0.55	2.35	20	4
1:A:159:LEU:HD11	1:A:163:THR:HG22	0.55	1.77	11	6
1:A:15:MET:CE	1:A:20:LEU:HD21	0.55	2.31	16	5
1:A:185:LEU:CD2	1:A:190:HIS:NE2	0.55	2.69	1	10
1:A:193:SER:CB	1:A:194:PRO:CD	0.55	2.85	16	19
1:A:165:LYS:CD	1:A:165:LYS:C	0.55	2.79	12	10
1:A:75:LEU:HD13	1:A:116:LEU:HD21	0.55	1.77	5	2
1:A:131:PRO:O	1:A:134:ALA:HB3	0.55	2.01	16	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:190:HIS:O	1:A:191:THR:C	0.55	2.50	16	2
1:A:71:HIS:ND1	1:A:120:ALA:HB3	0.55	2.16	15	6
1:A:145:HIS:CD2	1:A:145:HIS:C	0.55	2.84	3	20
1:A:59:LEU:HD12	1:A:63:CYS:HB2	0.55	1.79	3	1
1:A:30:ALA:HB1	1:A:36:GLN:HB2	0.55	1.78	9	1
1:A:31:ALA:HB1	1:A:32:PRO:HD2	0.54	1.77	7	4
1:A:78:LEU:HB3	1:A:116:LEU:HD12	0.54	1.78	9	2
1:A:137:LEU:C	1:A:147:PHE:CZ	0.54	2.85	17	1
1:A:19:ASP:CB	1:A:48:PHE:CE2	0.54	2.90	18	1
1:A:158:GLY:O	1:A:159:LEU:HD22	0.54	2.02	9	4
1:A:15:MET:HE3	1:A:50:PRO:HB3	0.54	1.78	20	1
1:A:185:LEU:CD1	1:A:198:MET:HE1	0.54	2.31	3	1
1:A:110:ARG:CD	1:A:110:ARG:C	0.54	2.80	18	1
1:A:190:HIS:O	1:A:190:HIS:ND1	0.54	2.40	1	14
1:A:185:LEU:CD2	1:A:190:HIS:CE1	0.54	2.90	4	2
1:A:26:GLU:CD	1:A:40:THR:CG2	0.54	2.81	5	9
1:A:133:TRP:CZ2	1:A:159:LEU:CD2	0.54	2.90	16	2
1:A:75:LEU:CD1	1:A:79:ILE:CD1	0.54	2.85	19	4
1:A:185:LEU:HD11	1:A:198:MET:HE1	0.54	1.78	3	1
1:A:140:LEU:HD13	1:A:140:LEU:C	0.54	2.28	10	2
1:A:137:LEU:HD23	1:A:176:ASN:CG	0.54	2.28	8	3
1:A:140:LEU:HD21	1:A:180:GLU:HB2	0.54	1.80	7	2
1:A:178:ASN:ND2	1:A:181:CYS:H	0.53	2.00	20	2
1:A:37:PHE:CD2	1:A:38:MET:N	0.53	2.77	1	2
1:A:75:LEU:HD22	1:A:116:LEU:CD2	0.53	2.34	1	2
1:A:59:LEU:HD23	1:A:72:HIS:CE1	0.53	2.39	6	2
1:A:38:MET:CE	1:A:118:LEU:HD22	0.53	2.32	20	6
1:A:133:TRP:NE1	1:A:159:LEU:HD23	0.53	2.19	12	4
1:A:133:TRP:NE1	1:A:155:LEU:HD23	0.53	2.18	13	2
1:A:19:ASP:CB	1:A:48:PHE:CZ	0.53	2.92	18	1
1:A:15:MET:HB3	1:A:48:PHE:CD1	0.53	2.38	20	1
1:A:75:LEU:HD23	1:A:120:ALA:HB3	0.53	1.81	2	1
1:A:155:LEU:O	1:A:159:LEU:CB	0.53	2.56	12	5
1:A:75:LEU:O	1:A:79:ILE:HD12	0.53	2.03	3	3
1:A:19:ASP:HB3	1:A:48:PHE:CE2	0.53	2.38	18	1
1:A:75:LEU:HD22	1:A:116:LEU:HD21	0.52	1.80	1	2
1:A:178:ASN:CG	1:A:179:LYS:N	0.52	2.66	19	2
1:A:171:SER:O	1:A:175:SER:CB	0.52	2.58	9	8
1:A:41:ILE:HD13	1:A:41:ILE:N	0.52	2.19	5	4
1:A:90:TYR:C	1:A:90:TYR:CD1	0.52	2.87	5	1
1:A:184:LEU:CD2	1:A:184:LEU:C	0.52	2.82	12	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:183:LYS:O	1:A:187:ALA:HB2	0.52	2.04	2	2
1:A:144:TYR:CE1	1:A:148:VAL:CG2	0.52	2.93	7	2
1:A:144:TYR:C	1:A:144:TYR:CD1	0.52	2.88	13	2
1:A:27:VAL:CG2	1:A:40:THR:HG21	0.52	2.33	11	5
1:A:79:ILE:HD12	1:A:97:LEU:HD21	0.52	1.81	17	4
1:A:116:LEU:C	1:A:116:LEU:CD2	0.52	2.78	10	3
1:A:68:ALA:O	1:A:72:HIS:CG	0.52	2.63	13	1
1:A:55:LEU:HD12	1:A:113:TYR:CE1	0.52	2.40	14	1
1:A:48:PHE:O	1:A:49:ASP:CB	0.51	2.58	16	9
1:A:87:ILE:HD12	1:A:90:TYR:CB	0.51	2.36	18	3
1:A:144:TYR:CD2	1:A:202:CYS:HB2	0.51	2.40	15	1
1:A:15:MET:HG3	1:A:48:PHE:CE1	0.51	2.40	4	6
1:A:140:LEU:CD2	1:A:178:ASN:OD1	0.51	2.59	10	1
1:A:133:TRP:CD1	1:A:155:LEU:CD2	0.51	2.94	13	3
1:A:140:LEU:N	1:A:178:ASN:ND2	0.51	2.59	10	4
1:A:44:ALA:O	1:A:48:PHE:CE1	0.51	2.64	17	1
1:A:78:LEU:HD23	1:A:116:LEU:CD1	0.51	2.36	19	3
1:A:78:LEU:CD2	1:A:116:LEU:O	0.51	2.59	3	3
1:A:117:TRP:CZ2	1:A:121:PHE:CZ	0.51	2.99	11	1
1:A:138:GLN:HG2	1:A:147:PHE:CD2	0.51	2.41	1	1
1:A:151:LEU:O	1:A:155:LEU:CD1	0.51	2.59	5	7
1:A:155:LEU:CD2	1:A:159:LEU:HD23	0.51	2.36	15	5
1:A:183:LYS:O	1:A:187:ALA:CB	0.50	2.60	2	3
1:A:37:PHE:HE1	1:A:62:LEU:HD13	0.50	1.66	9	2
1:A:15:MET:HE3	1:A:48:PHE:CE1	0.50	2.41	5	3
1:A:133:TRP:HE3	1:A:172:LEU:HD21	0.50	1.65	11	7
1:A:83:GLU:CD	1:A:90:TYR:CE2	0.50	2.90	5	1
1:A:177:ALA:O	1:A:178:ASN:O	0.50	2.29	19	11
1:A:140:LEU:HD23	1:A:178:ASN:HD22	0.50	1.64	9	1
1:A:63:CYS:SG	1:A:67:VAL:CG1	0.50	3.00	12	2
1:A:63:CYS:SG	1:A:121:PHE:CZ	0.50	3.01	3	1
1:A:155:LEU:HD21	1:A:172:LEU:HD11	0.50	1.82	5	2
1:A:170:ARG:CZ	1:A:191:THR:O	0.50	2.59	12	1
1:A:19:ASP:OD2	1:A:48:PHE:CE2	0.50	2.65	12	3
1:A:15:MET:HE1	1:A:58:LEU:HD22	0.50	1.83	3	2
1:A:116:LEU:O	1:A:119:ALA:CB	0.50	2.59	12	1
1:A:87:ILE:HD12	1:A:90:TYR:HB2	0.50	1.82	18	1
1:A:57:ASP:C	1:A:59:LEU:N	0.50	2.68	18	7
1:A:75:LEU:HD21	1:A:116:LEU:CD2	0.50	2.36	4	4
1:A:144:TYR:CD2	1:A:202:CYS:CB	0.50	2.95	11	2
1:A:97:LEU:HD11	1:A:109:LEU:CD2	0.50	2.33	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:143:PRO:O	1:A:147:PHE:CB	0.50	2.60	14	1
1:A:170:ARG:O	1:A:174:TYR:CB	0.49	2.60	19	4
1:A:74:GLN:OE1	1:A:123:ALA:CB	0.49	2.60	16	3
1:A:166:ASP:CG	1:A:170:ARG:NH2	0.49	2.70	5	1
1:A:133:TRP:CE3	1:A:172:LEU:HD11	0.49	2.42	8	3
1:A:15:MET:HE3	1:A:20:LEU:HD21	0.49	1.84	10	3
1:A:15:MET:HG2	1:A:48:PHE:CZ	0.49	2.42	4	2
1:A:71:HIS:ND1	1:A:120:ALA:CB	0.49	2.76	15	2
1:A:97:LEU:HD23	1:A:113:TYR:CE2	0.49	2.42	16	1
1:A:155:LEU:HD22	1:A:159:LEU:HG	0.49	1.83	3	5
1:A:27:VAL:HG21	1:A:62:LEU:HD13	0.49	1.84	11	1
1:A:23:ILE:O	1:A:27:VAL:CG2	0.49	2.60	19	3
1:A:15:MET:CE	1:A:48:PHE:CZ	0.49	2.95	5	1
1:A:181:CYS:O	1:A:184:LEU:N	0.49	2.45	19	14
1:A:155:LEU:O	1:A:159:LEU:N	0.49	2.45	11	7
1:A:17:MET:HE1	1:A:61:TYR:CE1	0.49	2.43	4	1
1:A:56:GLN:CD	1:A:56:GLN:C	0.49	2.80	4	7
1:A:51:THR:CG2	1:A:101:ALA:O	0.49	2.59	5	1
1:A:174:TYR:O	1:A:175:SER:C	0.49	2.55	16	6
1:A:79:ILE:HD12	1:A:116:LEU:HD11	0.49	1.84	9	1
1:A:97:LEU:HD12	1:A:100:GLN:CD	0.49	2.33	6	1
1:A:64:SER:O	1:A:68:ALA:CB	0.49	2.60	12	2
1:A:117:TRP:CH2	1:A:121:PHE:CD2	0.49	3.00	17	2
1:A:60:GLN:OE1	1:A:68:ALA:CB	0.49	2.61	15	1
1:A:131:PRO:HB3	1:A:133:TRP:CZ2	0.49	2.43	19	2
1:A:178:ASN:ND2	1:A:180:GLU:N	0.49	2.61	19	1
1:A:202:CYS:O	1:A:203:GLN:C	0.48	2.55	4	11
1:A:178:ASN:OD1	1:A:181:CYS:CB	0.48	2.61	19	3
1:A:27:VAL:O	1:A:30:ALA:CB	0.48	2.61	13	1
1:A:144:TYR:CG	1:A:202:CYS:SG	0.48	3.05	16	2
1:A:87:ILE:HG22	1:A:88:THR:N	0.48	2.22	17	6
1:A:166:ASP:CB	1:A:167:PRO:HD3	0.48	2.38	19	18
1:A:87:ILE:CG2	1:A:88:THR:N	0.48	2.76	4	4
1:A:37:PHE:CD1	1:A:38:MET:N	0.48	2.82	17	2
1:A:131:PRO:CB	1:A:133:TRP:CE2	0.48	2.97	13	4
1:A:178:ASN:ND2	1:A:181:CYS:N	0.48	2.61	20	2
1:A:57:ASP:O	1:A:61:TYR:CB	0.48	2.62	16	2
1:A:90:TYR:CZ	1:A:91:ASN:O	0.48	2.65	6	1
1:A:19:ASP:OD2	1:A:48:PHE:CD2	0.48	2.67	20	2
1:A:155:LEU:HD11	1:A:172:LEU:HD13	0.48	1.84	15	2
1:A:87:ILE:O	1:A:88:THR:C	0.48	2.55	14	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:140:LEU:HD23	1:A:178:ASN:OD1	0.48	2.09	10	3
1:A:100:GLN:OE1	1:A:109:LEU:HD13	0.48	2.09	18	1
1:A:174:TYR:C	1:A:176:ASN:N	0.48	2.70	20	9
1:A:144:TYR:CD1	1:A:144:TYR:C	0.48	2.91	16	2
1:A:192:ASN:CG	1:A:193:SER:N	0.48	2.71	16	1
1:A:136:ILE:HG23	1:A:150:ARG:HH21	0.48	1.69	19	1
1:A:106:GLN:NE2	1:A:109:LEU:HD12	0.48	2.24	20	1
1:A:153:ILE:C	1:A:155:LEU:N	0.48	2.70	1	14
1:A:131:PRO:HB2	1:A:133:TRP:CE2	0.48	2.44	2	3
1:A:112:GLU:CD	1:A:112:GLU:C	0.48	2.81	14	2
1:A:184:LEU:HD23	1:A:188:ARG:HG3	0.48	1.84	8	1
1:A:41:ILE:CG2	1:A:118:LEU:CD2	0.48	2.91	4	4
1:A:184:LEU:O	1:A:184:LEU:CD2	0.48	2.61	15	1
1:A:71:HIS:NE2	1:A:120:ALA:CB	0.48	2.76	1	1
1:A:131:PRO:CG	1:A:134:ALA:HB2	0.48	2.39	4	1
1:A:48:PHE:CD1	1:A:49:ASP:N	0.48	2.82	5	1
1:A:20:LEU:CD2	1:A:58:LEU:HD13	0.48	2.39	15	2
1:A:100:GLN:CG	1:A:106:GLN:OE1	0.47	2.62	1	1
1:A:202:CYS:C	1:A:204:THR:N	0.47	2.70	12	7
1:A:152:ASN:OD1	1:A:165:LYS:CE	0.47	2.62	5	1
1:A:190:HIS:ND1	1:A:190:HIS:C	0.47	2.72	10	3
1:A:138:GLN:OE1	1:A:138:GLN:CA	0.47	2.61	20	1
1:A:153:ILE:O	1:A:154:ALA:C	0.47	2.57	10	10
1:A:161:GLU:C	1:A:163:THR:N	0.47	2.72	3	4
1:A:48:PHE:C	1:A:49:ASP:CG	0.47	2.81	15	1
1:A:193:SER:CB	1:A:194:PRO:HD2	0.47	2.39	17	15
1:A:179:LYS:C	1:A:181:CYS:N	0.47	2.71	4	4
1:A:138:GLN:NE2	1:A:139:GLY:O	0.47	2.48	20	9
1:A:165:LYS:NZ	1:A:169:LEU:HD22	0.47	2.23	4	1
1:A:59:LEU:CD2	1:A:72:HIS:CE1	0.47	2.97	6	1
1:A:75:LEU:HD21	1:A:116:LEU:HG	0.47	1.87	17	4
1:A:144:TYR:CE1	1:A:202:CYS:HB2	0.47	2.43	16	2
1:A:15:MET:HG2	1:A:48:PHE:CE2	0.47	2.44	18	1
1:A:195:LEU:O	1:A:198:MET:N	0.47	2.47	7	16
1:A:179:LYS:O	1:A:180:GLU:C	0.47	2.57	4	2
1:A:185:LEU:HD23	1:A:190:HIS:CD2	0.47	2.44	1	1
1:A:67:VAL:HG13	1:A:124:LEU:HD13	0.47	1.86	10	2
1:A:78:LEU:HD23	1:A:116:LEU:HD12	0.47	1.85	17	3
1:A:27:VAL:HG13	1:A:37:PHE:CD2	0.47	2.44	18	1
1:A:144:TYR:CG	1:A:202:CYS:HB2	0.47	2.45	4	1
1:A:174:TYR:C	1:A:174:TYR:CD1	0.47	2.91	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:190:HIS:ND1	1:A:190:HIS:O	0.47	2.47	10	2
1:A:177:ALA:O	1:A:178:ASN:OD1	0.47	2.32	19	1
1:A:174:TYR:O	1:A:176:ASN:N	0.47	2.48	20	3
1:A:138:GLN:HG3	1:A:144:TYR:CD2	0.47	2.45	5	2
1:A:15:MET:CG	1:A:48:PHE:CE1	0.47	2.98	4	1
1:A:186:GLN:C	1:A:188:ARG:N	0.47	2.72	7	2
1:A:23:ILE:C	1:A:25:GLN:N	0.47	2.72	16	4
1:A:155:LEU:C	1:A:157:ASN:N	0.46	2.71	3	15
1:A:26:GLU:HG3	1:A:40:THR:HG21	0.46	1.88	10	2
1:A:88:THR:HG23	1:A:89:GLY:N	0.46	2.25	16	5
1:A:138:GLN:HB2	1:A:147:PHE:CE2	0.46	2.45	15	2
1:A:185:LEU:CD2	1:A:198:MET:SD	0.46	3.03	12	6
1:A:144:TYR:CE1	1:A:202:CYS:CB	0.46	2.98	16	2
1:A:15:MET:HA	1:A:48:PHE:CZ	0.46	2.45	18	1
1:A:111:ARG:C	1:A:113:TYR:N	0.46	2.72	4	5
1:A:178:ASN:OD1	1:A:178:ASN:C	0.46	2.57	4	2
1:A:200:ARG:O	1:A:203:GLN:CD	0.46	2.59	17	2
1:A:55:LEU:HD11	1:A:114:GLN:NE2	0.46	2.25	13	1
1:A:144:TYR:CZ	1:A:202:CYS:SG	0.46	3.08	17	2
1:A:59:LEU:HD12	1:A:63:CYS:SG	0.46	2.50	3	1
1:A:31:ALA:HB3	1:A:34:SER:HB3	0.46	1.88	13	1
1:A:15:MET:HG2	1:A:48:PHE:CE1	0.46	2.46	19	1
1:A:20:LEU:HB3	1:A:61:TYR:CE2	0.46	2.46	4	6
1:A:98:ARG:O	1:A:102:ASN:ND2	0.46	2.48	14	8
1:A:186:GLN:O	1:A:189:GLY:N	0.46	2.49	13	6
1:A:202:CYS:O	1:A:204:THR:N	0.46	2.49	12	4
1:A:113:TYR:HA	1:A:116:LEU:HD22	0.46	1.88	2	2
1:A:153:ILE:O	1:A:156:ASP:N	0.46	2.48	11	5
1:A:177:ALA:HB3	1:A:182:GLN:HG3	0.46	1.86	7	1
1:A:55:LEU:CD2	1:A:117:TRP:CE3	0.46	2.95	9	1
1:A:22:ALA:O	1:A:26:GLU:CD	0.46	2.59	2	1
1:A:192:ASN:O	1:A:193:SER:O	0.46	2.34	16	4
1:A:190:HIS:CE1	1:A:197:ASP:HB3	0.46	2.46	10	6
1:A:111:ARG:O	1:A:114:GLN:N	0.46	2.49	4	2
1:A:147:PHE:CE2	1:A:151:LEU:CD1	0.46	2.98	6	1
1:A:167:PRO:O	1:A:171:SER:N	0.46	2.49	7	1
1:A:67:VAL:CG1	1:A:124:LEU:HD13	0.46	2.41	8	1
1:A:27:VAL:HG23	1:A:40:THR:CG2	0.46	2.37	11	1
1:A:82:ALA:C	1:A:87:ILE:CG1	0.46	2.89	15	3
1:A:15:MET:HA	1:A:48:PHE:CE1	0.46	2.46	18	1
1:A:15:MET:HG3	1:A:48:PHE:CZ	0.46	2.46	1	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:138:GLN:CD	1:A:139:GLY:O	0.46	2.59	14	2
1:A:45:VAL:HG22	1:A:50:PRO:HD2	0.46	1.87	5	1
1:A:17:MET:O	1:A:20:LEU:N	0.46	2.49	20	1
1:A:143:PRO:O	1:A:144:TYR:C	0.46	2.59	1	2
1:A:138:GLN:OE1	1:A:139:GLY:N	0.46	2.49	4	3
1:A:179:LYS:O	1:A:181:CYS:N	0.46	2.49	4	1
1:A:31:ALA:HB1	1:A:32:PRO:CD	0.46	2.41	7	1
1:A:83:GLU:HB3	1:A:90:TYR:CZ	0.46	2.46	8	1
1:A:182:GLN:O	1:A:186:GLN:CG	0.46	2.64	8	1
1:A:75:LEU:O	1:A:79:ILE:CD1	0.46	2.63	11	1
1:A:137:LEU:CD2	1:A:176:ASN:OD1	0.46	2.64	17	1
1:A:73:GLN:O	1:A:76:ASP:N	0.46	2.49	19	1
1:A:140:LEU:N	1:A:178:ASN:OD1	0.45	2.49	1	3
1:A:165:LYS:O	1:A:166:ASP:C	0.45	2.59	5	13
1:A:98:ARG:O	1:A:102:ASN:CG	0.45	2.59	11	4
1:A:53:LYS:CD	1:A:54:ASP:OD1	0.45	2.64	4	1
1:A:185:LEU:HD11	1:A:198:MET:HE2	0.45	1.88	5	1
1:A:158:GLY:O	1:A:159:LEU:CD2	0.45	2.63	9	2
1:A:87:ILE:C	1:A:89:GLY:N	0.45	2.71	8	1
1:A:133:TRP:HA	1:A:136:ILE:CG1	0.45	2.41	11	1
1:A:25:GLN:O	1:A:28:SER:N	0.45	2.49	1	1
1:A:79:ILE:O	1:A:82:ALA:N	0.45	2.50	19	7
1:A:15:MET:HB2	1:A:48:PHE:CD1	0.45	2.45	20	1
1:A:138:GLN:CD	1:A:138:GLN:C	0.45	2.84	20	1
1:A:138:GLN:CD	1:A:178:ASN:OD1	0.45	2.59	6	2
1:A:70:LEU:O	1:A:74:GLN:NE2	0.45	2.50	14	5
1:A:161:GLU:O	1:A:163:THR:N	0.45	2.49	3	4
1:A:182:GLN:O	1:A:186:GLN:NE2	0.45	2.50	13	8
1:A:111:ARG:O	1:A:114:GLN:CG	0.45	2.64	10	2
1:A:53:LYS:O	1:A:56:GLN:N	0.45	2.49	18	5
1:A:87:ILE:O	1:A:89:GLY:N	0.45	2.49	8	1
1:A:67:VAL:HG13	1:A:124:LEU:CD1	0.45	2.41	10	2
1:A:55:LEU:HD22	1:A:117:TRP:CE2	0.45	2.46	3	6
1:A:80:SER:O	1:A:84:THR:CB	0.45	2.64	3	5
1:A:37:PHE:CZ	1:A:121:PHE:CE2	0.45	3.04	4	1
1:A:83:GLU:HG2	1:A:90:TYR:CE2	0.45	2.46	17	2
1:A:138:GLN:HG2	1:A:147:PHE:CD1	0.45	2.46	5	1
1:A:172:LEU:O	1:A:176:ASN:CG	0.45	2.60	12	2
1:A:57:ASP:O	1:A:58:LEU:C	0.45	2.59	18	4
1:A:178:ASN:OD1	1:A:179:LYS:N	0.45	2.49	15	1
1:A:66:LEU:O	1:A:69:SER:N	0.45	2.49	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:109:LEU:O	1:A:112:GLU:N	0.45	2.50	18	1
1:A:48:PHE:C	1:A:49:ASP:OD1	0.45	2.60	1	7
1:A:27:VAL:O	1:A:30:ALA:N	0.45	2.50	2	8
1:A:89:GLY:O	1:A:106:GLN:CD	0.45	2.60	2	1
1:A:161:GLU:O	1:A:162:GLY:C	0.45	2.60	3	5
1:A:169:LEU:O	1:A:172:LEU:N	0.45	2.50	5	2
1:A:67:VAL:O	1:A:70:LEU:N	0.45	2.50	8	1
1:A:167:PRO:O	1:A:168:ILE:C	0.45	2.59	19	3
1:A:88:THR:OG1	1:A:89:GLY:N	0.45	2.49	11	5
1:A:79:ILE:HG13	1:A:97:LEU:HD22	0.45	1.88	16	2
1:A:170:ARG:NH2	1:A:192:ASN:O	0.45	2.50	4	1
1:A:174:TYR:OH	1:A:186:GLN:NE2	0.45	2.50	14	2
1:A:155:LEU:CD1	1:A:169:LEU:HD13	0.45	2.41	13	2
1:A:99:VAL:O	1:A:103:ASN:CG	0.45	2.60	14	1
1:A:44:ALA:O	1:A:48:PHE:CD1	0.45	2.70	17	1
1:A:150:ARG:O	1:A:153:ILE:N	0.45	2.50	1	7
1:A:186:GLN:NE2	1:A:191:THR:HG21	0.45	2.25	5	1
1:A:57:ASP:O	1:A:59:LEU:N	0.45	2.50	18	1
1:A:150:ARG:O	1:A:151:LEU:C	0.45	2.59	10	5
1:A:178:ASN:OD1	1:A:178:ASN:N	0.45	2.49	6	3
1:A:17:MET:O	1:A:21:GLN:NE2	0.45	2.50	7	2
1:A:168:ILE:HG22	1:A:169:LEU:N	0.45	2.27	9	1
1:A:150:ARG:HA	1:A:153:ILE:HD12	0.45	1.89	16	1
1:A:75:LEU:CD2	1:A:116:LEU:CD2	0.45	2.95	1	1
1:A:78:LEU:HD21	1:A:119:ALA:HB3	0.45	1.87	3	1
1:A:148:VAL:HG13	1:A:195:LEU:HD11	0.45	1.87	5	2
1:A:115:GLN:O	1:A:116:LEU:C	0.45	2.60	9	4
1:A:78:LEU:HD23	1:A:116:LEU:O	0.45	2.11	10	1
1:A:65:SER:O	1:A:68:ALA:CB	0.45	2.63	14	1
1:A:25:GLN:C	1:A:27:VAL:N	0.45	2.74	1	9
1:A:150:ARG:C	1:A:152:ASN:N	0.45	2.73	8	3
1:A:100:GLN:O	1:A:106:GLN:CD	0.45	2.60	18	3
1:A:49:ASP:OD1	1:A:114:GLN:NE2	0.45	2.50	11	2
1:A:100:GLN:O	1:A:106:GLN:NE2	0.45	2.50	16	1
1:A:117:TRP:CH2	1:A:121:PHE:CD1	0.44	3.05	4	1
1:A:51:THR:N	1:A:54:ASP:OD2	0.44	2.49	10	1
1:A:166:ASP:N	1:A:167:PRO:HD2	0.44	2.28	13	9
1:A:47:GLN:OE1	1:A:47:GLN:CA	0.44	2.65	3	2
1:A:79:ILE:HG12	1:A:97:LEU:CD2	0.44	2.39	3	4
1:A:203:GLN:CG	1:A:204:THR:N	0.44	2.80	16	3
1:A:138:GLN:NE2	1:A:178:ASN:OD1	0.44	2.51	6	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:LEU:N	1:A:78:LEU:CD1	0.44	2.79	12	1
1:A:101:ALA:CB	1:A:113:TYR:CD2	0.44	3.01	13	1
1:A:43:LEU:O	1:A:43:LEU:HD13	0.44	2.12	3	1
1:A:151:LEU:O	1:A:155:LEU:CG	0.44	2.66	7	2
1:A:152:ASN:OD1	1:A:169:LEU:HD22	0.44	2.12	10	2
1:A:75:LEU:CD2	1:A:116:LEU:O	0.44	2.65	4	2
1:A:138:GLN:HG3	1:A:144:TYR:CD1	0.44	2.47	9	1
1:A:50:PRO:O	1:A:114:GLN:NE2	0.44	2.51	12	2
1:A:136:ILE:HG22	1:A:147:PHE:CE1	0.44	2.48	2	1
1:A:86:GLY:O	1:A:87:ILE:C	0.44	2.61	3	2
1:A:79:ILE:CG2	1:A:97:LEU:HD22	0.44	2.41	20	2
1:A:37:PHE:O	1:A:40:THR:N	0.44	2.50	6	1
1:A:188:ARG:HD2	1:A:201:ALA:HB1	0.44	1.88	7	1
1:A:66:LEU:HD12	1:A:66:LEU:C	0.44	2.37	17	2
1:A:64:SER:O	1:A:65:SER:C	0.44	2.60	14	1
1:A:155:LEU:CD2	1:A:168:ILE:CG2	0.44	2.96	14	1
1:A:138:GLN:HG3	1:A:147:PHE:CD2	0.44	2.48	15	1
1:A:51:THR:OG1	1:A:52:ALA:N	0.44	2.50	16	1
1:A:176:ASN:OD1	1:A:176:ASN:N	0.44	2.49	4	1
1:A:87:ILE:HG22	1:A:89:GLY:H	0.44	1.73	8	1
1:A:75:LEU:O	1:A:78:LEU:N	0.44	2.50	10	1
1:A:48:PHE:O	1:A:49:ASP:CG	0.44	2.60	15	1
1:A:78:LEU:O	1:A:81:GLU:N	0.44	2.49	16	1
1:A:181:CYS:C	1:A:183:LYS:N	0.44	2.75	19	1
1:A:75:LEU:O	1:A:76:ASP:C	0.44	2.60	1	3
1:A:147:PHE:CZ	1:A:151:LEU:CD1	0.44	3.01	1	1
1:A:56:GLN:OE1	1:A:56:GLN:CA	0.44	2.66	8	1
1:A:165:LYS:O	1:A:169:LEU:N	0.44	2.48	11	2
1:A:79:ILE:CG1	1:A:97:LEU:CD2	0.44	2.95	16	1
1:A:173:ALA:HB3	1:A:198:MET:SD	0.44	2.53	5	1
1:A:27:VAL:HG13	1:A:37:PHE:HD2	0.44	1.73	7	2
1:A:66:LEU:HD11	1:A:70:LEU:HD11	0.44	1.88	10	1
1:A:153:ILE:O	1:A:155:LEU:N	0.44	2.50	10	2
1:A:16:GLN:C	1:A:18:LYS:N	0.44	2.76	15	2
1:A:56:GLN:NE2	1:A:56:GLN:O	0.44	2.51	10	1
1:A:66:LEU:O	1:A:67:VAL:C	0.44	2.61	14	2
1:A:53:LYS:C	1:A:55:LEU:N	0.44	2.75	18	1
1:A:82:ALA:O	1:A:87:ILE:CG1	0.44	2.66	18	1
1:A:144:TYR:O	1:A:147:PHE:N	0.44	2.51	18	1
1:A:49:ASP:CG	1:A:114:GLN:OE1	0.44	2.60	19	1
1:A:174:TYR:O	1:A:177:ALA:N	0.43	2.51	2	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:LEU:O	1:A:47:GLN:CG	0.43	2.66	14	2
1:A:45:VAL:HG11	1:A:118:LEU:CD1	0.43	2.38	12	1
1:A:57:ASP:O	1:A:60:GLN:N	0.43	2.50	18	3
1:A:105:GLN:CG	1:A:106:GLN:N	0.43	2.81	14	1
1:A:186:GLN:N	1:A:186:GLN:OE1	0.43	2.51	14	1
1:A:169:LEU:C	1:A:171:SER:N	0.43	2.75	16	4
1:A:190:HIS:CG	1:A:197:ASP:CG	0.43	2.96	7	1
1:A:166:ASP:O	1:A:170:ARG:CD	0.43	2.66	15	1
1:A:31:ALA:HB3	1:A:34:SER:CB	0.43	2.43	16	1
1:A:151:LEU:HD22	1:A:172:LEU:HD13	0.43	1.88	18	1
1:A:21:GLN:NE2	1:A:61:TYR:OH	0.43	2.51	20	1
1:A:104:PRO:C	1:A:106:GLN:N	0.43	2.75	4	1
1:A:68:ALA:O	1:A:71:HIS:N	0.43	2.52	14	1
1:A:117:TRP:C	1:A:119:ALA:N	0.43	2.76	19	2
1:A:103:ASN:ND2	1:A:105:GLN:OE1	0.43	2.51	2	1
1:A:178:ASN:OD1	1:A:180:GLU:N	0.43	2.51	4	1
1:A:174:TYR:CG	1:A:175:SER:N	0.43	2.85	5	1
1:A:79:ILE:C	1:A:81:GLU:N	0.43	2.76	11	2
1:A:140:LEU:C	1:A:140:LEU:CD1	0.43	2.92	10	1
1:A:70:LEU:C	1:A:74:GLN:NE2	0.43	2.76	11	1
1:A:167:PRO:C	1:A:169:LEU:N	0.43	2.73	11	1
1:A:111:ARG:NH1	1:A:115:GLN:OE1	0.43	2.51	12	1
1:A:174:TYR:O	1:A:182:GLN:NE2	0.43	2.50	13	1
1:A:96:PRO:O	1:A:100:GLN:NE2	0.43	2.51	17	1
1:A:131:PRO:HB3	1:A:133:TRP:CE2	0.43	2.48	19	1
1:A:144:TYR:CE1	1:A:148:VAL:HG22	0.43	2.49	7	1
1:A:115:GLN:O	1:A:118:LEU:N	0.43	2.52	9	1
1:A:38:MET:HE3	1:A:118:LEU:HD22	0.43	1.90	13	1
1:A:16:GLN:O	1:A:19:ASP:N	0.43	2.52	16	3
1:A:45:VAL:HG23	1:A:50:PRO:HD2	0.43	1.89	16	1
1:A:20:LEU:C	1:A:61:TYR:OH	0.43	2.62	18	1
1:A:37:PHE:CD1	1:A:37:PHE:C	0.43	2.97	13	2
1:A:38:MET:C	1:A:38:MET:SD	0.43	3.01	15	1
1:A:174:TYR:O	1:A:182:GLN:CG	0.43	2.67	15	1
1:A:53:LYS:O	1:A:54:ASP:C	0.43	2.61	19	2
1:A:90:TYR:CE2	1:A:91:ASN:C	0.43	2.97	6	1
1:A:63:CYS:SG	1:A:67:VAL:HG12	0.43	2.54	9	2
1:A:15:MET:HE3	1:A:20:LEU:HG	0.43	1.90	11	1
1:A:16:GLN:OE1	1:A:16:GLN:N	0.43	2.52	12	1
1:A:137:LEU:HD12	1:A:137:LEU:N	0.43	2.28	13	2
1:A:181:CYS:O	1:A:182:GLN:C	0.43	2.61	19	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:117:TRP:O	1:A:120:ALA:N	0.43	2.52	17	1
1:A:144:TYR:CE1	1:A:202:CYS:HB3	0.42	2.49	4	1
1:A:59:LEU:HD23	1:A:72:HIS:HE1	0.42	1.71	6	1
1:A:186:GLN:CD	1:A:191:THR:HG21	0.42	2.39	12	1
1:A:117:TRP:O	1:A:118:LEU:C	0.42	2.61	17	1
1:A:75:LEU:HD22	1:A:116:LEU:CG	0.42	2.44	1	1
1:A:49:ASP:OD1	1:A:114:GLN:CD	0.42	2.62	7	1
1:A:170:ARG:HG3	1:A:195:LEU:HD13	0.42	1.90	10	1
1:A:116:LEU:CD2	1:A:117:TRP:N	0.42	2.74	12	1
1:A:87:ILE:CG2	1:A:109:LEU:HG	0.42	2.44	20	3
1:A:58:LEU:HD11	1:A:62:LEU:HD12	0.42	1.90	5	1
1:A:100:GLN:N	1:A:100:GLN:OE1	0.42	2.52	9	1
1:A:23:ILE:O	1:A:24:LYS:C	0.42	2.62	10	1
1:A:66:LEU:C	1:A:68:ALA:N	0.42	2.75	14	1
1:A:194:PRO:O	1:A:195:LEU:C	0.42	2.62	14	1
1:A:49:ASP:CG	1:A:114:GLN:NE2	0.42	2.77	19	1
1:A:151:LEU:CD2	1:A:172:LEU:HD13	0.42	2.43	5	2
1:A:144:TYR:CZ	1:A:202:CYS:HB3	0.42	2.49	4	1
1:A:173:ALA:CB	1:A:198:MET:SD	0.42	3.07	5	1
1:A:63:CYS:SG	1:A:67:VAL:HG11	0.42	2.55	7	1
1:A:170:ARG:CD	1:A:193:SER:O	0.42	2.67	19	2
1:A:174:TYR:CE1	1:A:182:GLN:HG2	0.42	2.49	3	1
1:A:110:ARG:CG	1:A:111:ARG:N	0.42	2.82	5	1
1:A:171:SER:C	1:A:173:ALA:N	0.42	2.75	6	1
1:A:91:ASN:OD1	1:A:91:ASN:N	0.42	2.53	12	1
1:A:190:HIS:CD2	1:A:197:ASP:HB3	0.42	2.49	14	1
1:A:38:MET:HE1	1:A:118:LEU:CD2	0.42	2.37	20	1
1:A:15:MET:HE1	1:A:20:LEU:HD21	0.42	1.91	1	3
1:A:15:MET:HE3	1:A:20:LEU:CG	0.42	2.43	11	1
1:A:27:VAL:C	1:A:29:GLN:N	0.42	2.77	11	2
1:A:88:THR:CG2	1:A:89:GLY:N	0.42	2.82	17	2
1:A:45:VAL:HG21	1:A:118:LEU:HD11	0.42	1.91	18	1
1:A:17:MET:HE3	1:A:20:LEU:HD12	0.42	1.91	20	1
1:A:27:VAL:O	1:A:28:SER:C	0.42	2.62	2	1
1:A:136:ILE:CG2	1:A:147:PHE:CE1	0.42	3.02	6	1
1:A:74:GLN:OE1	1:A:120:ALA:O	0.42	2.38	7	2
1:A:115:GLN:C	1:A:117:TRP:N	0.42	2.75	9	1
1:A:26:GLU:OE2	1:A:40:THR:HG23	0.42	2.15	12	1
1:A:96:PRO:HB2	1:A:99:VAL:CG2	0.42	2.44	10	4
1:A:75:LEU:HD21	1:A:117:TRP:HA	0.42	1.90	2	1
1:A:137:LEU:C	1:A:147:PHE:CE1	0.42	2.98	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:165:LYS:CE	1:A:165:LYS:C	0.42	2.93	6	1
1:A:49:ASP:OD1	1:A:49:ASP:C	0.42	2.63	4	1
1:A:102:ASN:OD1	1:A:102:ASN:C	0.42	2.63	6	1
1:A:103:ASN:OD1	1:A:103:ASN:N	0.42	2.53	10	1
1:A:138:GLN:OE1	1:A:181:CYS:CB	0.42	2.68	10	1
1:A:97:LEU:HD23	1:A:113:TYR:CD2	0.42	2.50	16	1
1:A:203:GLN:HG3	1:A:204:THR:N	0.42	2.30	17	1
1:A:15:MET:HB2	1:A:48:PHE:CE1	0.42	2.50	8	1
1:A:194:PRO:O	1:A:198:MET:CG	0.42	2.68	17	2
1:A:165:LYS:HE2	1:A:169:LEU:HD13	0.42	1.92	18	1
1:A:87:ILE:CG2	1:A:109:LEU:CG	0.42	2.98	20	1
1:A:51:THR:OG1	1:A:54:ASP:CG	0.41	2.63	4	1
1:A:168:ILE:CG2	1:A:169:LEU:N	0.41	2.83	9	1
1:A:155:LEU:O	1:A:159:LEU:HB2	0.41	2.15	14	1
1:A:42:ARG:HG3	1:A:118:LEU:HD13	0.41	1.92	1	1
1:A:177:ALA:C	1:A:178:ASN:O	0.41	2.64	2	7
1:A:91:ASN:O	1:A:100:GLN:NE2	0.41	2.52	4	2
1:A:55:LEU:HD22	1:A:117:TRP:CH2	0.41	2.50	9	1
1:A:184:LEU:O	1:A:185:LEU:C	0.41	2.63	9	1
1:A:75:LEU:C	1:A:77:SER:N	0.41	2.77	12	1
1:A:97:LEU:O	1:A:100:GLN:N	0.41	2.49	15	2
1:A:147:PHE:CD1	1:A:147:PHE:C	0.41	2.97	19	1
1:A:17:MET:O	1:A:17:MET:HE2	0.41	2.15	4	1
1:A:70:LEU:O	1:A:73:GLN:CB	0.41	2.68	4	1
1:A:114:GLN:HG3	1:A:115:GLN:N	0.41	2.30	4	2
1:A:138:GLN:N	1:A:147:PHE:CZ	0.41	2.87	5	1
1:A:79:ILE:CD1	1:A:97:LEU:HD21	0.41	2.46	7	1
1:A:75:LEU:HD22	1:A:75:LEU:HA	0.41	1.77	12	1
1:A:15:MET:SD	1:A:20:LEU:HD21	0.41	2.55	16	1
1:A:59:LEU:O	1:A:63:CYS:SG	0.41	2.78	17	1
1:A:138:GLN:OE1	1:A:138:GLN:HA	0.41	2.14	20	1
1:A:176:ASN:OD1	1:A:176:ASN:O	0.41	2.39	12	2
1:A:192:ASN:C	1:A:193:SER:O	0.41	2.63	11	2
1:A:42:ARG:O	1:A:45:VAL:N	0.41	2.53	18	1
1:A:15:MET:SD	1:A:19:ASP:CB	0.41	3.09	12	1
1:A:45:VAL:HG22	1:A:114:GLN:HG3	0.41	1.92	16	1
1:A:71:HIS:CD2	1:A:120:ALA:CB	0.41	3.03	6	1
1:A:172:LEU:C	1:A:174:TYR:N	0.41	2.78	10	1
1:A:185:LEU:O	1:A:188:ARG:N	0.41	2.54	11	1
1:A:42:ARG:O	1:A:46:GLN:CB	0.41	2.69	14	1
1:A:96:PRO:O	1:A:100:GLN:OE1	0.41	2.39	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:132:SER:C	1:A:134:ALA:N	0.41	2.77	16	1
1:A:59:LEU:CD1	1:A:63:CYS:CB	0.41	2.98	3	1
1:A:106:GLN:C	1:A:108:GLY:N	0.41	2.78	4	1
1:A:172:LEU:O	1:A:173:ALA:C	0.41	2.63	10	1
1:A:17:MET:O	1:A:21:GLN:N	0.41	2.53	11	1
1:A:16:GLN:N	1:A:19:ASP:OD2	0.41	2.51	16	1
1:A:138:GLN:OE1	1:A:147:PHE:CD2	0.41	2.73	3	1
1:A:79:ILE:HD13	1:A:116:LEU:CD1	0.41	2.45	4	1
1:A:199:LEU:HD22	1:A:199:LEU:N	0.41	2.31	4	1
1:A:138:GLN:O	1:A:178:ASN:OD1	0.41	2.39	5	1
1:A:174:TYR:CE1	1:A:182:GLN:HG3	0.41	2.50	5	1
1:A:112:GLU:O	1:A:116:LEU:CB	0.41	2.69	7	1
1:A:96:PRO:O	1:A:97:LEU:C	0.41	2.63	8	1
1:A:74:GLN:OE1	1:A:123:ALA:C	0.41	2.64	15	1
1:A:87:ILE:HB	1:A:90:TYR:CB	0.41	2.46	18	1
1:A:100:GLN:OE1	1:A:109:LEU:CD1	0.41	2.69	18	1
1:A:49:ASP:CG	1:A:114:GLN:CD	0.41	2.88	19	1
1:A:173:ALA:O	1:A:177:ALA:CB	0.41	2.69	19	1
1:A:178:ASN:OD1	1:A:181:CYS:N	0.41	2.49	4	1
1:A:30:ALA:CB	1:A:36:GLN:HB2	0.41	2.46	9	1
1:A:188:ARG:HD2	1:A:201:ALA:CB	0.41	2.46	14	1
1:A:49:ASP:OD2	1:A:114:GLN:NE2	0.41	2.53	19	1
1:A:178:ASN:OD1	1:A:181:CYS:SG	0.41	2.79	20	1
1:A:138:GLN:CG	1:A:144:TYR:HA	0.40	2.46	12	1
1:A:159:LEU:HD13	1:A:160:PRO:HD2	0.40	1.92	13	1
1:A:195:LEU:O	1:A:198:MET:CB	0.40	2.70	4	1
1:A:87:ILE:HD12	1:A:90:TYR:CD2	0.40	2.51	9	1
1:A:20:LEU:HD23	1:A:58:LEU:HD13	0.40	1.92	18	1
1:A:137:LEU:HD23	1:A:176:ASN:HA	0.40	1.94	18	1
1:A:151:LEU:CD1	1:A:172:LEU:HB3	0.40	2.46	4	2
1:A:96:PRO:HB2	1:A:99:VAL:HG23	0.40	1.92	5	1
1:A:96:PRO:C	1:A:98:ARG:N	0.40	2.78	6	1
1:A:192:ASN:O	1:A:193:SER:C	0.40	2.65	10	1
1:A:112:GLU:O	1:A:112:GLU:OE2	0.40	2.39	16	1
1:A:163:THR:CG2	1:A:164:PRO:HD2	0.40	2.46	16	1
1:A:20:LEU:O	1:A:61:TYR:OH	0.40	2.40	18	1
1:A:109:LEU:O	1:A:110:ARG:C	0.40	2.63	18	1
1:A:110:ARG:HG3	1:A:111:ARG:N	0.40	2.30	18	1
1:A:116:LEU:HD23	1:A:117:TRP:CA	0.40	2.47	12	1
1:A:184:LEU:CD2	1:A:188:ARG:HG3	0.40	2.47	12	1
1:A:86:GLY:O	1:A:87:ILE:O	0.40	2.40	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:PHE:O	1:A:49:ASP:OD2	0.40	2.40	3	1
1:A:104:PRO:O	1:A:105:GLN:C	0.40	2.64	4	1
1:A:63:CYS:HB3	1:A:67:VAL:CG1	0.40	2.47	5	1
1:A:45:VAL:HG13	1:A:114:GLN:OE1	0.40	2.16	10	1
1:A:106:GLN:O	1:A:106:GLN:OE1	0.40	2.40	10	1
1:A:174:TYR:HB2	1:A:198:MET:HE1	0.40	1.93	13	1
1:A:64:SER:O	1:A:68:ALA:N	0.40	2.52	14	1
1:A:68:ALA:O	1:A:69:SER:C	0.40	2.65	14	1
1:A:38:MET:SD	1:A:38:MET:O	0.40	2.79	17	1
1:A:188:ARG:HD3	1:A:201:ALA:CB	0.40	2.46	17	1
1:A:15:MET:HE1	1:A:20:LEU:CD2	0.40	2.46	19	1
1:A:166:ASP:CB	1:A:167:PRO:CD	0.40	2.99	19	1
1:A:44:ALA:HB1	1:A:48:PHE:CE1	0.40	2.52	20	1

6.3 Torsion angles

6.3.1 Protein backbone

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	182/214 (85%)	147±5 (81±3%)	28±5 (15±3%)	7±2 (4±1%)	4	32
All	All	3640/4280 (85%)	2944 (81%)	562 (15%)	134 (4%)	4	32

All 20 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	178	ASN	20
1	A	49	ASP	19
1	A	15	MET	16
1	A	30	ALA	14
1	A	87	ILE	14
1	A	88	THR	10
1	A	51	THR	8
1	A	193	SER	5
1	A	167	PRO	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	86	GLY	4
1	A	175	SER	3
1	A	64	SER	3
1	A	162	GLY	3
1	A	203	GLN	3
1	A	190	HIS	2
1	A	192	ASN	2
1	A	179	LYS	1
1	A	180	GLU	1
1	A	105	GLN	1
1	A	65	SER	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	154/180 (86%)	104±4 (68±3%)	50±4 (32±3%)	1	13
All	All	3080/3600 (86%)	2088 (68%)	992 (32%)	1	13

All 113 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	45	VAL	20
1	A	109	LEU	20
1	A	137	LEU	20
1	A	159	LEU	20
1	A	165	LYS	20
1	A	166	ASP	20
1	A	168	ILE	20
1	A	171	SER	20
1	A	193	SER	20
1	A	116	LEU	18
1	A	60	GLN	17
1	A	188	ARG	17
1	A	53	LYS	15
1	A	132	SER	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	145	HIS	15
1	A	75	LEU	15
1	A	40	THR	14
1	A	42	ARG	14
1	A	115	GLN	14
1	A	180	GLU	14
1	A	186	GLN	14
1	A	17	MET	14
1	A	71	HIS	14
1	A	111	ARG	14
1	A	179	LYS	14
1	A	151	LEU	13
1	A	163	THR	13
1	A	200	ARG	13
1	A	67	VAL	12
1	A	79	ILE	12
1	A	190	HIS	12
1	A	21	GLN	12
1	A	43	LEU	12
1	A	150	ARG	12
1	A	18	LYS	11
1	A	38	MET	11
1	A	64	SER	11
1	A	84	THR	11
1	A	91	ASN	11
1	A	25	GLN	11
1	A	15	MET	10
1	A	85	ARG	10
1	A	157	ASN	10
1	A	175	SER	10
1	A	204	THR	10
1	A	29	GLN	9
1	A	72	HIS	9
1	A	98	ARG	9
1	A	142	GLU	9
1	A	178	ASN	9
1	A	78	LEU	9
1	A	149	GLU	9
1	A	140	LEU	9
1	A	147	PHE	9
1	A	161	GLU	9
1	A	112	GLU	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	191	THR	9
1	A	24	LYS	8
1	A	77	SER	8
1	A	88	THR	8
1	A	110	ARG	8
1	A	121	PHE	8
1	A	135	SER	8
1	A	74	GLN	8
1	A	197	ASP	8
1	A	83	GLU	8
1	A	138	GLN	8
1	A	46	GLN	8
1	A	34	SER	7
1	A	183	LYS	7
1	A	184	LEU	7
1	A	47	GLN	6
1	A	56	GLN	6
1	A	114	GLN	6
1	A	153	ILE	6
1	A	73	GLN	6
1	A	80	SER	6
1	A	57	ASP	6
1	A	182	GLN	6
1	A	28	SER	5
1	A	107	GLN	5
1	A	106	GLN	5
1	A	76	ASP	4
1	A	172	LEU	4
1	A	65	SER	4
1	A	16	GLN	3
1	A	102	ASN	3
1	A	170	ARG	3
1	A	202	CYS	3
1	A	100	GLN	3
1	A	54	ASP	3
1	A	41	ILE	3
1	A	97	LEU	3
1	A	36	GLN	3
1	A	49	ASP	3
1	A	48	PHE	3
1	A	105	GLN	2
1	A	70	LEU	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	155	LEU	2
1	A	39	GLN	2
1	A	66	LEU	2
1	A	26	GLU	1
1	A	176	ASN	1
1	A	181	CYS	1
1	A	199	LEU	1
1	A	19	ASP	1
1	A	103	ASN	1
1	A	192	ASN	1
1	A	195	LEU	1
1	A	156	ASP	1
1	A	198	MET	1
1	A	63	CYS	1
1	A	141	GLU	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry ⓘ

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers ⓘ

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