



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 28, 2026 – 11:43 PM UTC

PDB ID : 1QU5 / pdb_00001qu5
Title : NMR STRUCTURE OF A NEW PHOSPHOTYROSINE BINDING DOMAIN CONTAINING THE FHA2 DOMAIN OF RAD 53
Authors : Byeon, I.-J.L.; Liao, H.; Tsai, M.-D.
Deposited on : 1999-07-06

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

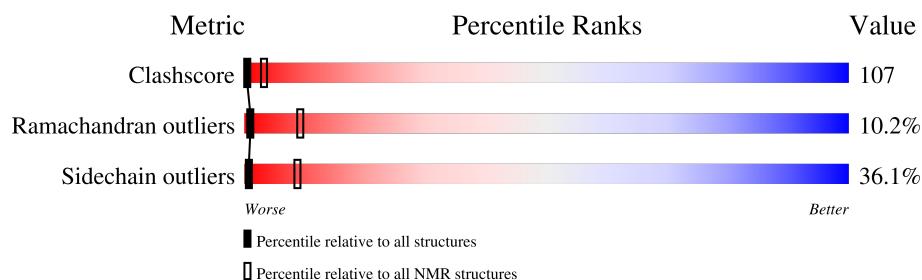
1 Overall quality at a glance

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	182	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 16 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:575-A:630, A:643-A:705, A:713-A:730 (137)	0.56	1

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

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

The models can be grouped into 1 clusters. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2945 atoms, of which 1476 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called PROTEIN KINASE SPK1.

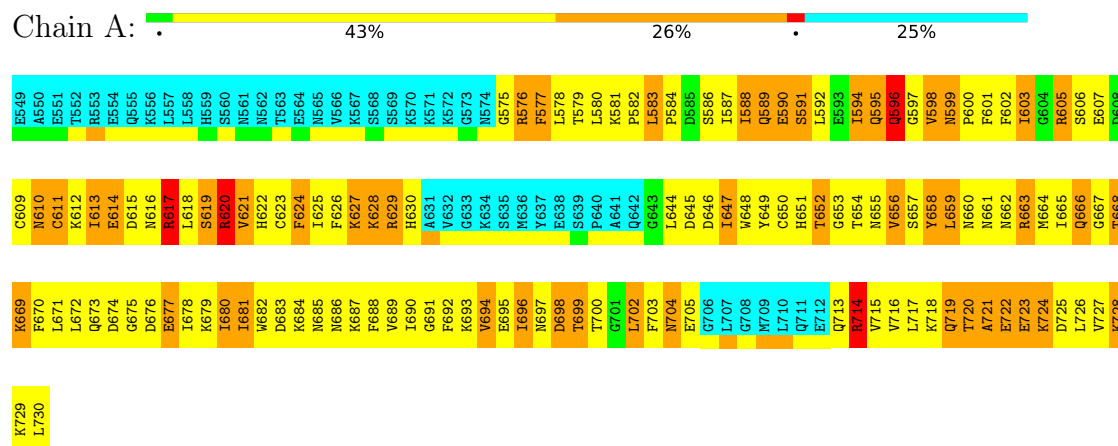
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	182	Total	C	H	N	O	S	0
			2945	922	1476	260	280	7	

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: PROTEIN KINASE SPK1

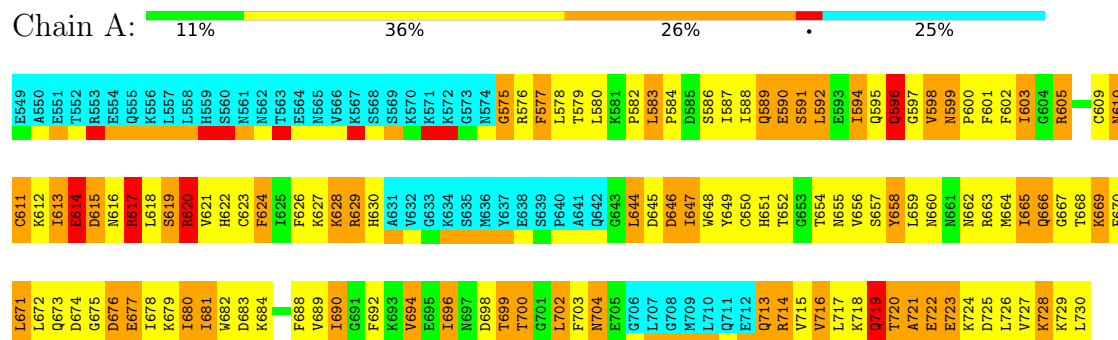


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

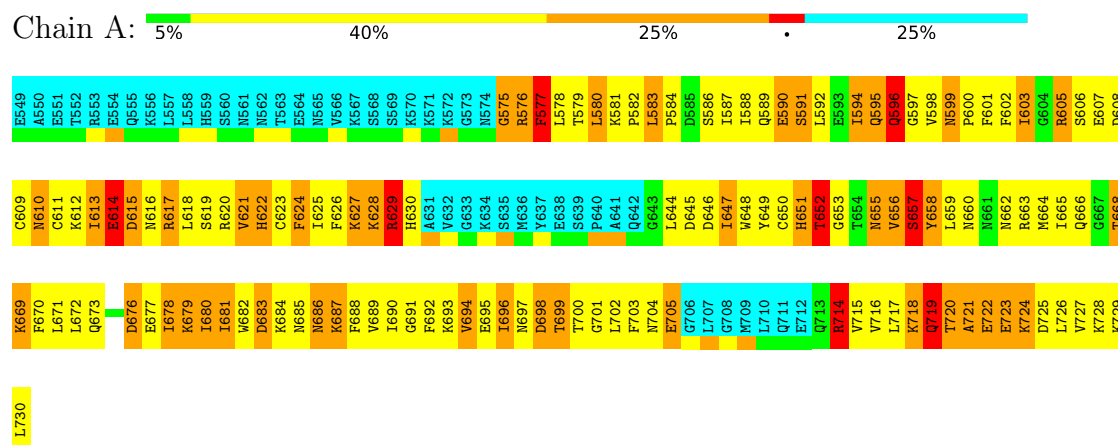
4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

• Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1



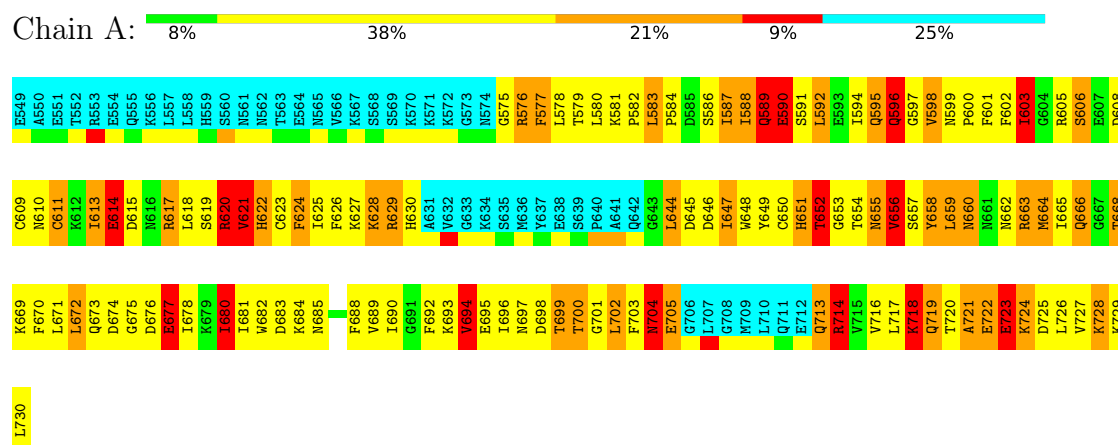
4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1



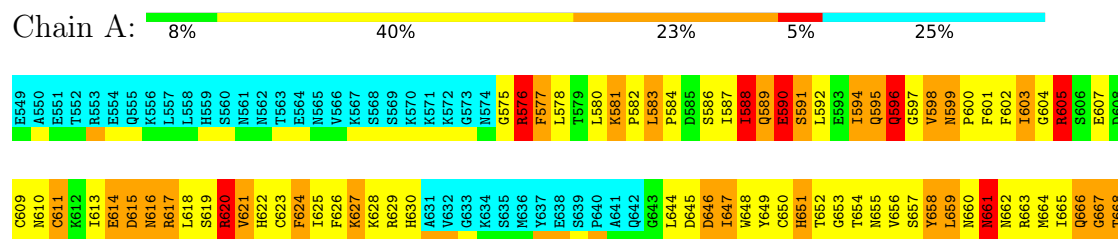
4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1



4.2.4 Score per residue for model 4

• Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1

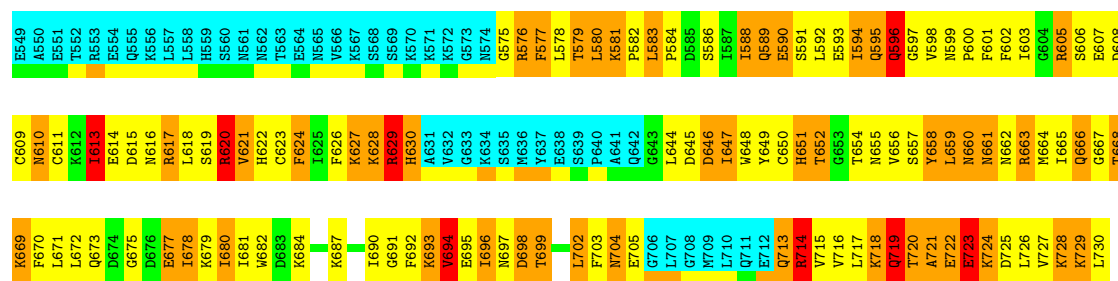




4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1

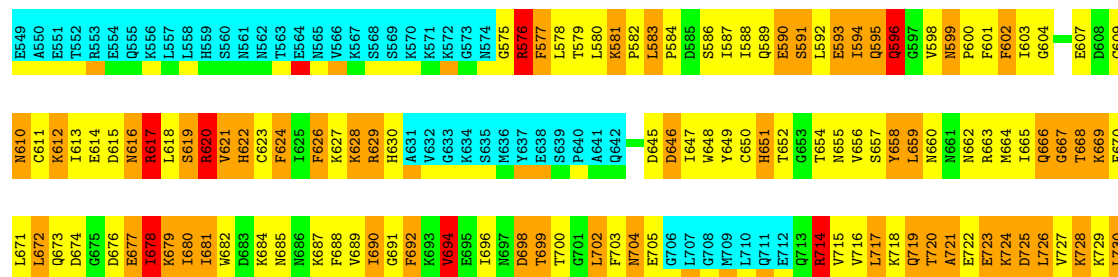
Chain A: 9% 36% 26% • 25%



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1

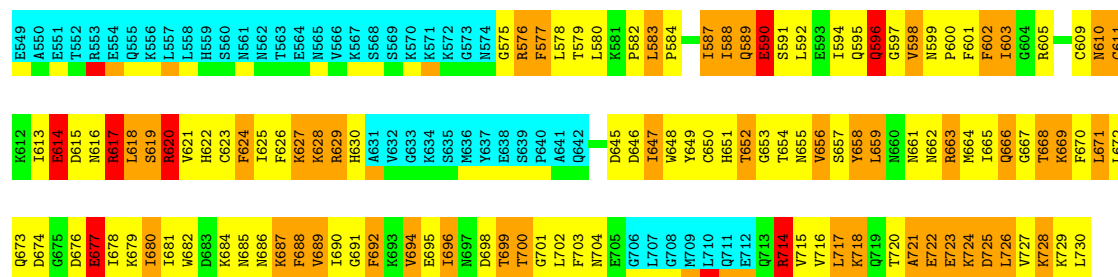
Chain A: 10% 35% 27% • 25%



4.2.7 Score per residue for model 7

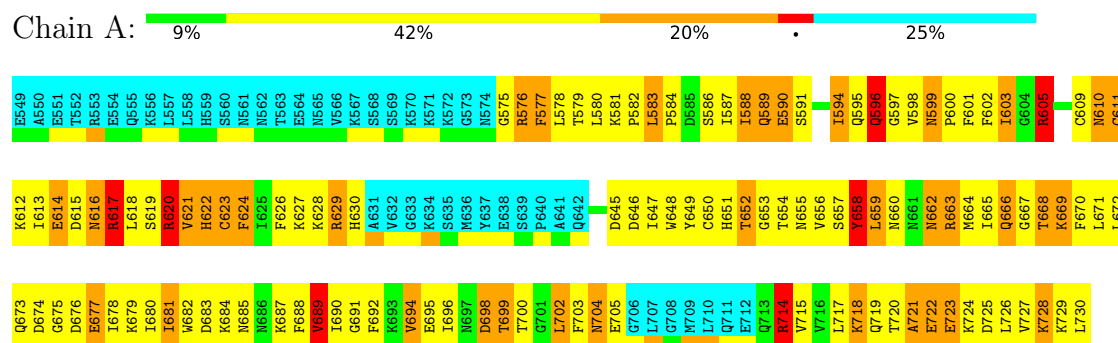
- Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1

Chain A: 10% 36% 25% • 25%



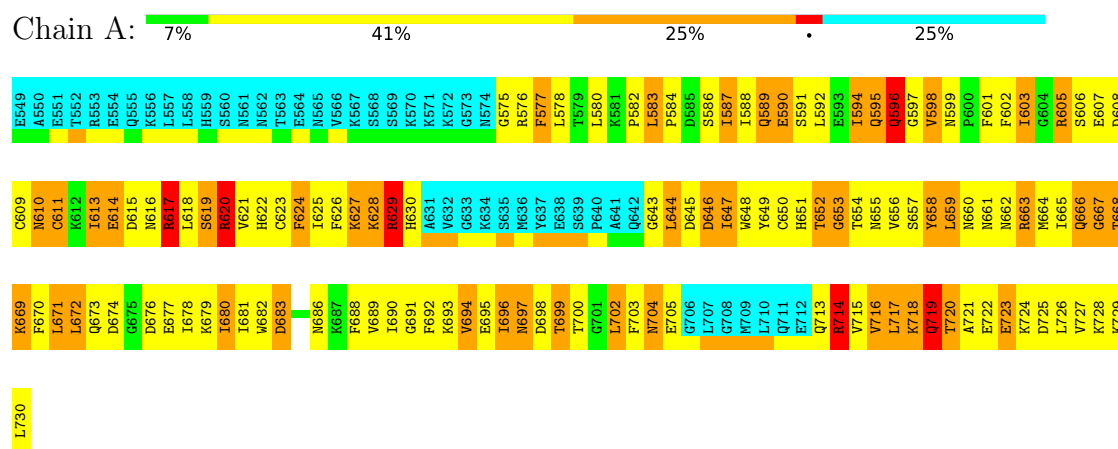
4.2.8 Score per residue for model 8

• Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1



4.2.9 Score per residue for model 9

• Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1



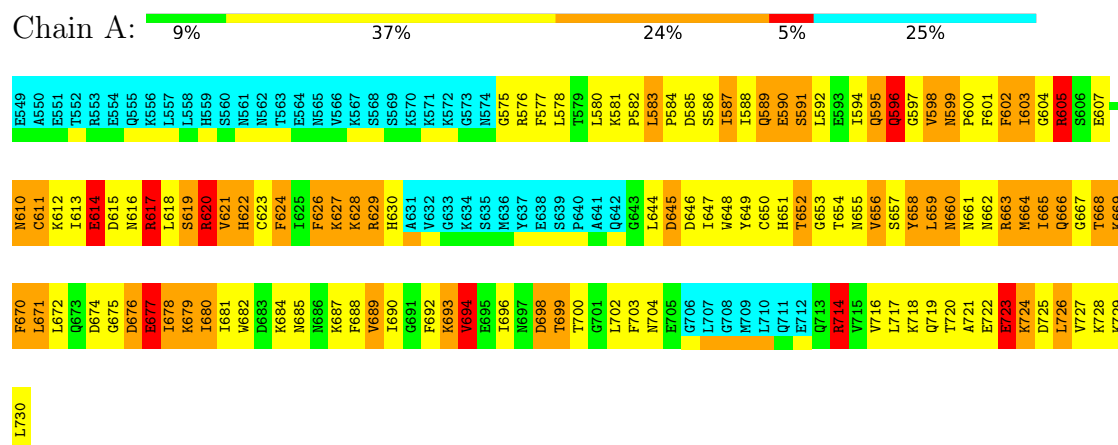
4.2.10 Score per residue for model 10

• Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1



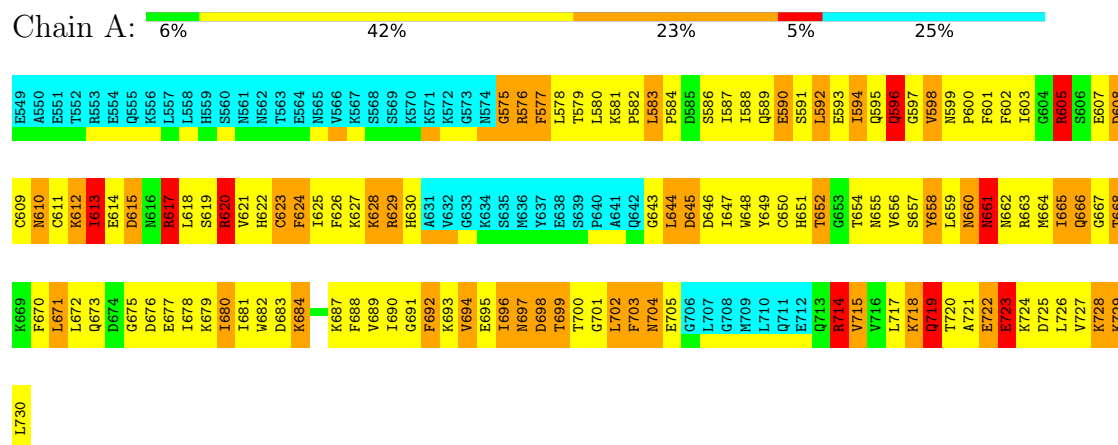
4.2.11 Score per residue for model 11

• Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1



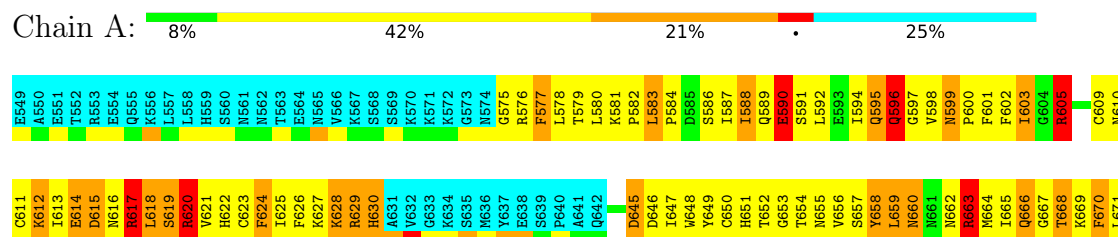
4.2.12 Score per residue for model 12

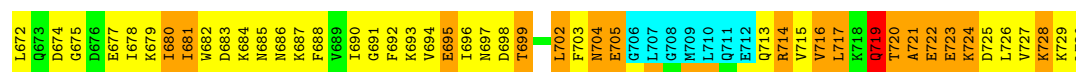
• Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1



4.2.13 Score per residue for model 13

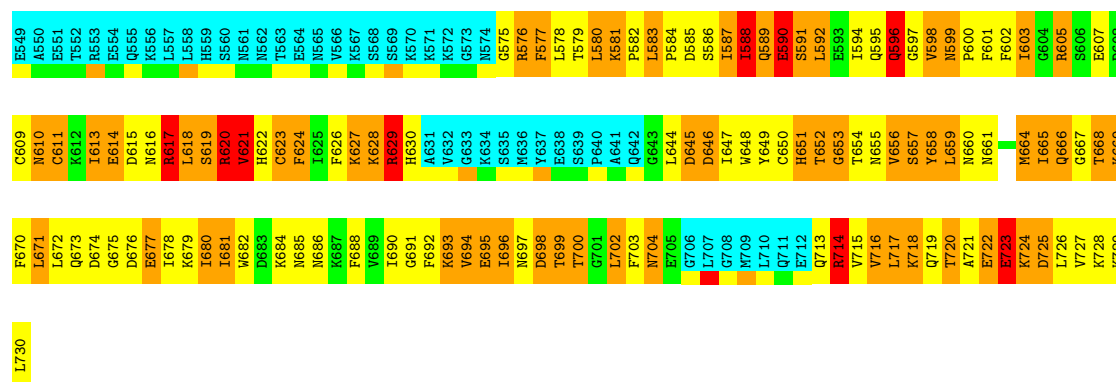
• Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1





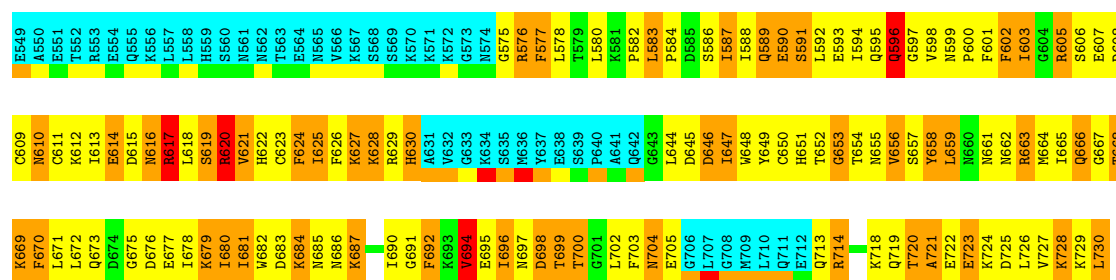
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1



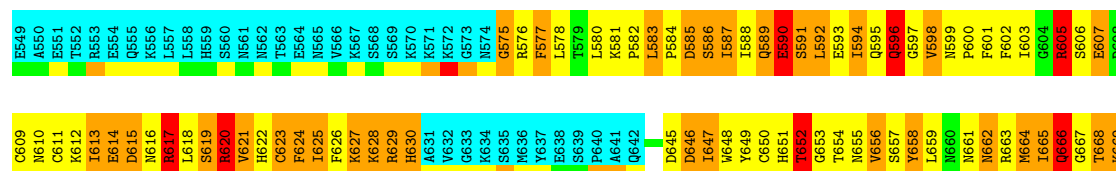
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1



4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: PROTEIN KINASE SPK1



F670	L671	L672	Q673	D674	Q675	D676	E677	L678	K679	I680	T681	K682	D683	K684	K685	K686	K687	F688	V689	I690	Q691	F692	K693	K694	E695	I696	K697	D698	T699	L702	F703	N704	E705	G706	L707	G708	N709	L710	Q711	E712	Q713	K714	V715	V716	L717	T720	A721	E722	E723	K724	D725	L726	V727	K728	K729	L730
------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------

5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *SIMULATED ANNEALING, MOLECULAR DYNAMICS*.

Of the 32 calculated structures, 16 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	3.1
XwinNMR	structure solution	2.1
Felix	structure solution	98

No chemical shift data was provided.

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.43±0.01	0±0/1145 (0.0± 0.0%)	1.58±0.01	7±2/1538 (0.4± 0.1%)
All	All	1.43	1/18320 (0.0%)	1.58	107/24608 (0.4%)

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	6.5±0.7
All	All	0	104

All unique bond outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	657	SER	N-CA	5.63	1.53	1.46	2	1

All unique angle outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	613	ILE	N-CA-CB	-7.94	104.71	112.65	12	6
1	A	594	ILE	N-CA-CB	-6.94	104.40	111.90	16	10
1	A	694	VAL	N-CA-CB	-6.89	104.09	111.46	4	7
1	A	715	VAL	N-CA-CB	-6.61	104.80	112.34	12	1
1	A	588	ILE	N-CA-CB	-6.14	105.34	112.34	5	7
1	A	678	ILE	N-CA-CB	-5.94	104.94	112.60	10	3
1	A	665	ILE	N-CA-CB	-5.91	105.61	112.34	10	1
1	A	651	HIS	CA-CB-CG	-5.87	107.93	113.80	4	6
1	A	713	GLN	N-CA-CB	-5.87	104.75	111.79	1	1
1	A	696	ILE	N-CA-CB	-5.87	105.18	111.46	16	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	723	GLU	N-CA-C	-5.85	104.18	111.90	14	14
1	A	704	ASN	N-CA-CB	-5.80	103.91	112.78	14	8
1	A	622	HIS	CA-CB-CG	-5.80	108.00	113.80	6	4
1	A	670	PHE	CA-CB-CG	-5.79	108.01	113.80	15	2
1	A	689	VAL	N-CA-CB	-5.68	104.57	112.52	7	3
1	A	721	ALA	N-CA-CB	-5.42	103.89	112.08	6	10
1	A	626	PHE	N-CA-CB	-5.37	102.34	111.31	6	2
1	A	622	HIS	N-CA-CB	-5.32	101.50	110.49	2	2
1	A	656	VAL	N-CA-CB	-5.23	102.78	111.36	15	3
1	A	725	ASP	N-CA-CB	-5.22	104.20	112.08	7	3
1	A	670	PHE	N-CA-CB	-5.18	103.53	111.56	13	1
1	A	658	TYR	N-CA-CB	-5.10	103.51	111.56	8	1
1	A	576	ARG	N-CA-CB	-5.08	102.95	110.37	5	1
1	A	577	PHE	N-CA-CB	-5.05	103.07	110.40	2	1
1	A	716	VAL	N-CA-CB	-5.04	105.30	110.95	10	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	576	ARG	Sidechain	16
1	A	617	ARG	Sidechain	16
1	A	714	ARG	Sidechain	16
1	A	605	ARG	Sidechain	15
1	A	663	ARG	Sidechain	15
1	A	620	ARG	Sidechain	13
1	A	629	ARG	Sidechain	13

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	1125	1130	1130	241±24
All	All	18000	18080	18080	3853

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 107.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:603:ILE:HG21	1:A:613:ILE:HD12	1.06	1.24	6	1
1:A:696:ILE:HG22	1:A:699:THR:HG22	1.05	1.14	14	14
1:A:652:THR:HG21	1:A:727:VAL:HG11	1.02	1.23	16	1
1:A:578:LEU:HD11	1:A:694:VAL:HG22	1.01	1.32	7	14
1:A:624:PHE:CE1	1:A:727:VAL:HG21	0.97	1.94	11	15
1:A:624:PHE:CE2	1:A:727:VAL:HG11	0.96	1.95	14	15
1:A:624:PHE:CD2	1:A:727:VAL:HG11	0.95	1.94	7	15
1:A:726:LEU:CD1	1:A:727:VAL:HG23	0.95	1.91	5	16
1:A:726:LEU:HD12	1:A:727:VAL:N	0.94	1.77	9	16
1:A:602:PHE:CE1	1:A:727:VAL:HG22	0.94	1.97	15	9
1:A:580:LEU:HD12	1:A:692:PHE:CD1	0.94	1.98	5	3
1:A:618:LEU:HD22	1:A:622:HIS:CD2	0.93	1.99	7	8
1:A:618:LEU:HD23	1:A:622:HIS:CD2	0.93	1.97	16	4
1:A:726:LEU:HD12	1:A:727:VAL:HG23	0.92	1.37	11	16
1:A:603:ILE:HG23	1:A:611:CYS:HB3	0.91	1.42	12	5
1:A:623:CYS:SG	1:A:680:ILE:HD12	0.91	2.06	14	12
1:A:578:LEU:HD22	1:A:594:ILE:HD12	0.90	1.43	15	5
1:A:624:PHE:CG	1:A:727:VAL:HG21	0.90	2.01	16	1
1:A:583:LEU:HD13	1:A:583:LEU:N	0.90	1.82	6	1
1:A:602:PHE:CE2	1:A:727:VAL:HG22	0.88	2.03	5	6
1:A:598:VAL:HG11	1:A:610:ASN:ND2	0.88	1.83	16	6
1:A:624:PHE:CZ	1:A:726:LEU:HD11	0.87	2.04	16	1
1:A:659:LEU:HD23	1:A:670:PHE:CE2	0.87	2.03	2	2
1:A:618:LEU:HA	1:A:622:HIS:ND1	0.87	1.83	2	16
1:A:649:TYR:CE2	1:A:678:ILE:HG21	0.87	2.03	15	4
1:A:587:ILE:CG2	1:A:690:ILE:HD12	0.87	2.00	6	1
1:A:681:ILE:HD13	1:A:682:TRP:N	0.86	1.85	4	4
1:A:620:ARG:O	1:A:621:VAL:HG12	0.85	1.72	5	7
1:A:649:TYR:OH	1:A:680:ILE:HD13	0.84	1.73	14	10
1:A:598:VAL:HG11	1:A:610:ASN:OD1	0.84	1.72	7	7
1:A:659:LEU:HD11	1:A:672:LEU:CD2	0.83	2.01	13	9
1:A:598:VAL:HG21	1:A:601:PHE:CD1	0.83	2.08	15	11
1:A:689:VAL:C	1:A:690:ILE:HD12	0.83	1.99	11	2
1:A:656:VAL:O	1:A:657:SER:O	0.83	1.96	2	2
1:A:647:ILE:HD12	1:A:672:LEU:HB3	0.82	1.49	15	7
1:A:696:ILE:CG2	1:A:699:THR:HG22	0.82	2.01	14	9
1:A:652:THR:HG21	1:A:727:VAL:CG1	0.81	2.03	16	2
1:A:721:ALA:HB3	1:A:724:LYS:HA	0.81	1.53	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:656:VAL:HG23	1:A:658:TYR:OH	0.81	1.77	4	10
1:A:602:PHE:CZ	1:A:727:VAL:HG22	0.80	2.11	9	10
1:A:689:VAL:C	1:A:690:ILE:HD13	0.80	2.01	6	1
1:A:603:ILE:HG21	1:A:613:ILE:CD1	0.80	2.06	6	1
1:A:605:ARG:HG2	1:A:618:LEU:HD12	0.80	1.54	16	2
1:A:659:LEU:HD13	1:A:678:ILE:HG22	0.79	1.54	16	1
1:A:602:PHE:CE2	1:A:730:LEU:HD12	0.79	2.12	8	6
1:A:676:ASP:O	1:A:678:ILE:HG23	0.79	1.78	3	8
1:A:622:HIS:CE1	1:A:655:ASN:CB	0.78	2.67	10	16
1:A:674:ASP:CA	1:A:696:ILE:HD12	0.78	2.09	9	1
1:A:657:SER:C	1:A:658:TYR:CG	0.78	2.61	10	16
1:A:578:LEU:HD11	1:A:694:VAL:CG2	0.78	2.09	7	9
1:A:603:ILE:HG22	1:A:611:CYS:HB3	0.78	1.54	14	7
1:A:624:PHE:CZ	1:A:727:VAL:HG21	0.77	2.13	12	13
1:A:618:LEU:CD1	1:A:681:ILE:HD11	0.77	2.09	6	1
1:A:582:PRO:C	1:A:583:LEU:HD13	0.77	2.04	6	1
1:A:598:VAL:HG21	1:A:610:ASN:ND2	0.77	1.94	14	1
1:A:623:CYS:SG	1:A:680:ILE:HG23	0.77	2.19	2	11
1:A:656:VAL:HG12	1:A:665:ILE:HA	0.76	1.57	12	11
1:A:658:TYR:CD1	1:A:658:TYR:N	0.76	2.53	2	13
1:A:615:ASP:CG	1:A:690:ILE:HD11	0.76	2.05	12	5
1:A:577:PHE:CZ	1:A:647:ILE:HG21	0.76	2.15	16	8
1:A:621:VAL:HG21	1:A:730:LEU:HB3	0.76	1.57	10	7
1:A:688:PHE:CE1	1:A:690:ILE:HD11	0.76	2.16	6	2
1:A:698:ASP:C	1:A:699:THR:HG23	0.75	2.07	5	15
1:A:578:LEU:HD11	1:A:694:VAL:HG13	0.74	1.59	5	3
1:A:649:TYR:CD1	1:A:664:MET:HE1	0.74	2.17	1	4
1:A:577:PHE:CE2	1:A:647:ILE:HG21	0.74	2.16	13	12
1:A:602:PHE:CE1	1:A:727:VAL:HG23	0.74	2.17	16	1
1:A:681:ILE:HG22	1:A:690:ILE:CG1	0.74	2.13	3	6
1:A:613:ILE:O	1:A:618:LEU:HD22	0.74	1.83	6	1
1:A:665:ILE:O	1:A:665:ILE:CG1	0.74	2.36	1	2
1:A:618:LEU:HD23	1:A:618:LEU:N	0.73	1.97	13	4
1:A:702:LEU:HD13	1:A:703:PHE:N	0.73	1.98	3	5
1:A:622:HIS:O	1:A:651:HIS:CE1	0.73	2.41	8	16
1:A:577:PHE:CZ	1:A:647:ILE:HD12	0.73	2.19	2	2
1:A:690:ILE:O	1:A:690:ILE:HG22	0.73	1.82	16	8
1:A:602:PHE:CE1	1:A:730:LEU:HD12	0.72	2.20	13	3
1:A:602:PHE:HE2	1:A:727:VAL:HG22	0.72	1.42	10	2
1:A:620:ARG:O	1:A:621:VAL:HG22	0.72	1.84	12	1
1:A:651:HIS:CD2	1:A:656:VAL:HA	0.72	2.19	3	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:583:LEU:HD22	1:A:583:LEU:H	0.72	1.43	6	1
1:A:600:PRO:HG3	1:A:726:LEU:HD13	0.72	1.61	7	2
1:A:659:LEU:HD21	1:A:676:ASP:OD2	0.72	1.85	11	2
1:A:624:PHE:CD1	1:A:727:VAL:HG21	0.71	2.20	16	2
1:A:589:GLN:O	1:A:590:GLU:CG	0.71	2.38	2	11
1:A:624:PHE:CG	1:A:727:VAL:HG11	0.71	2.21	11	14
1:A:588:ILE:CG1	1:A:613:ILE:HG23	0.71	2.16	5	3
1:A:624:PHE:CZ	1:A:727:VAL:HG11	0.71	2.20	9	11
1:A:618:LEU:HD13	1:A:680:ILE:HG21	0.71	1.61	2	1
1:A:577:PHE:HZ	1:A:647:ILE:HD13	0.70	1.45	9	6
1:A:622:HIS:CE1	1:A:655:ASN:HB2	0.70	2.19	2	16
1:A:615:ASP:HB2	1:A:618:LEU:HD22	0.70	1.62	15	2
1:A:583:LEU:CB	1:A:584:PRO:HD2	0.70	2.17	15	15
1:A:659:LEU:HD11	1:A:672:LEU:HD23	0.70	1.62	12	7
1:A:615:ASP:OD2	1:A:681:ILE:HG21	0.70	1.87	16	2
1:A:681:ILE:HG22	1:A:690:ILE:HG12	0.70	1.64	3	3
1:A:605:ARG:HD2	1:A:618:LEU:HD12	0.69	1.64	10	1
1:A:592:LEU:HD12	1:A:611:CYS:SG	0.69	2.27	1	2
1:A:719:GLN:O	1:A:720:THR:HG23	0.69	1.87	9	6
1:A:729:LYS:O	1:A:730:LEU:HD23	0.69	1.88	5	3
1:A:580:LEU:HD11	1:A:678:ILE:HD11	0.69	1.64	2	1
1:A:578:LEU:CD1	1:A:694:VAL:HG22	0.69	2.15	7	2
1:A:646:ASP:OD1	1:A:671:LEU:HD11	0.69	1.88	15	1
1:A:587:ILE:HG22	1:A:690:ILE:HD12	0.69	1.64	6	1
1:A:622:HIS:CD2	1:A:680:ILE:HG22	0.69	2.23	2	4
1:A:589:GLN:O	1:A:590:GLU:HB2	0.68	1.86	11	4
1:A:618:LEU:CD2	1:A:681:ILE:HD11	0.68	2.18	5	3
1:A:588:ILE:HD11	1:A:613:ILE:HG23	0.68	1.64	6	1
1:A:602:PHE:CZ	1:A:730:LEU:HD23	0.68	2.23	15	1
1:A:647:ILE:HD12	1:A:672:LEU:CB	0.68	2.18	16	7
1:A:617:ARG:HB3	1:A:681:ILE:HG21	0.68	1.65	10	3
1:A:604:GLY:HA2	1:A:618:LEU:HD23	0.68	1.66	6	1
1:A:656:VAL:O	1:A:658:TYR:CD2	0.68	2.46	2	1
1:A:623:CYS:SG	1:A:680:ILE:HD11	0.67	2.29	11	3
1:A:592:LEU:HD23	1:A:611:CYS:SG	0.67	2.29	6	3
1:A:674:ASP:HA	1:A:696:ILE:HD12	0.67	1.66	9	1
1:A:580:LEU:HD11	1:A:678:ILE:HD12	0.67	1.66	5	1
1:A:681:ILE:CG2	1:A:690:ILE:HD13	0.67	2.19	11	1
1:A:681:ILE:HG21	1:A:688:PHE:CE2	0.67	2.24	3	2
1:A:672:LEU:HD21	1:A:678:ILE:HG21	0.67	1.65	3	1
1:A:577:PHE:CE1	1:A:702:LEU:HD13	0.67	2.24	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:578:LEU:HD23	1:A:578:LEU:C	0.67	2.15	9	14
1:A:649:TYR:CE2	1:A:678:ILE:HD13	0.67	2.25	13	3
1:A:603:ILE:CG2	1:A:613:ILE:HD12	0.67	2.11	6	1
1:A:580:LEU:HD22	1:A:692:PHE:CD1	0.66	2.24	8	8
1:A:617:ARG:CB	1:A:681:ILE:HD13	0.66	2.20	12	1
1:A:723:GLU:HG2	1:A:727:VAL:HG12	0.66	1.64	15	10
1:A:589:GLN:O	1:A:590:GLU:CB	0.66	2.43	6	16
1:A:603:ILE:HD11	1:A:625:ILE:HD12	0.66	1.66	16	2
1:A:598:VAL:HG11	1:A:610:ASN:CG	0.66	2.15	3	7
1:A:602:PHE:CD2	1:A:730:LEU:HD12	0.66	2.25	12	3
1:A:577:PHE:CE2	1:A:578:LEU:HB2	0.66	2.25	2	16
1:A:578:LEU:HD23	1:A:579:THR:N	0.66	2.04	10	9
1:A:644:LEU:N	1:A:644:LEU:HD23	0.66	2.06	3	2
1:A:656:VAL:O	1:A:658:TYR:CZ	0.66	2.48	12	14
1:A:602:PHE:CE1	1:A:727:VAL:CG2	0.66	2.78	16	3
1:A:622:HIS:HE1	1:A:655:ASN:CB	0.66	2.02	4	16
1:A:648:TRP:CH2	1:A:671:LEU:HD13	0.66	2.26	10	7
1:A:624:PHE:CD1	1:A:624:PHE:C	0.65	2.74	7	16
1:A:621:VAL:HG11	1:A:730:LEU:CD1	0.65	2.21	15	1
1:A:602:PHE:CZ	1:A:730:LEU:HD12	0.65	2.27	9	2
1:A:724:LYS:CB	1:A:726:LEU:HD21	0.65	2.20	16	10
1:A:587:ILE:HG21	1:A:615:ASP:OD1	0.65	1.92	15	4
1:A:656:VAL:HG22	1:A:658:TYR:CE1	0.65	2.27	16	2
1:A:602:PHE:O	1:A:603:ILE:HG23	0.64	1.91	14	5
1:A:681:ILE:HB	1:A:690:ILE:HD13	0.64	1.70	11	2
1:A:665:ILE:HG22	1:A:668:THR:HG21	0.64	1.70	3	4
1:A:658:TYR:CD2	1:A:679:LYS:O	0.64	2.50	16	2
1:A:601:PHE:CD1	1:A:610:ASN:HB3	0.64	2.28	3	15
1:A:664:MET:HE3	1:A:670:PHE:HB2	0.64	1.68	11	5
1:A:622:HIS:CE1	1:A:655:ASN:HB3	0.64	2.28	4	14
1:A:624:PHE:O	1:A:650:CYS:N	0.64	2.30	6	16
1:A:656:VAL:HG13	1:A:665:ILE:HA	0.64	1.69	2	1
1:A:721:ALA:O	1:A:725:ASP:N	0.63	2.31	16	16
1:A:656:VAL:HG22	1:A:658:TYR:CE2	0.63	2.29	14	2
1:A:577:PHE:CB	1:A:596:GLN:HA	0.63	2.23	13	16
1:A:592:LEU:HD11	1:A:613:ILE:HD11	0.63	1.69	10	1
1:A:682:TRP:CD1	1:A:689:VAL:HG12	0.63	2.29	6	6
1:A:658:TYR:HB3	1:A:663:ARG:HA	0.63	1.70	7	2
1:A:690:ILE:HG22	1:A:690:ILE:O	0.63	1.92	8	2
1:A:723:GLU:O	1:A:726:LEU:HG	0.63	1.94	16	16
1:A:624:PHE:CD2	1:A:650:CYS:HB2	0.63	2.29	3	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:613:ILE:CG2	1:A:690:ILE:HD13	0.63	2.23	4	1
1:A:588:ILE:HG13	1:A:613:ILE:HG23	0.63	1.69	5	3
1:A:702:LEU:HD23	1:A:703:PHE:N	0.63	2.08	9	1
1:A:603:ILE:HD12	1:A:623:CYS:SG	0.63	2.33	15	9
1:A:619:SER:O	1:A:620:ARG:CB	0.63	2.46	16	12
1:A:588:ILE:C	1:A:589:GLN:CG	0.62	2.72	9	1
1:A:578:LEU:HD22	1:A:580:LEU:HD22	0.62	1.71	14	1
1:A:622:HIS:HD2	1:A:680:ILE:HG22	0.62	1.53	9	4
1:A:681:ILE:HG13	1:A:690:ILE:HD12	0.62	1.71	12	1
1:A:602:PHE:CD1	1:A:730:LEU:HD12	0.62	2.29	14	3
1:A:656:VAL:O	1:A:658:TYR:CE2	0.62	2.52	2	2
1:A:681:ILE:CB	1:A:690:ILE:HD13	0.62	2.24	11	2
1:A:621:VAL:HG11	1:A:730:LEU:HB3	0.62	1.70	1	7
1:A:690:ILE:HG22	1:A:692:PHE:CD2	0.62	2.29	14	5
1:A:630:HIS:ND1	1:A:703:PHE:CE2	0.62	2.68	2	5
1:A:578:LEU:HD22	1:A:580:LEU:CD2	0.62	2.24	14	1
1:A:595:GLN:O	1:A:596:GLN:C	0.62	2.43	8	16
1:A:665:ILE:HG22	1:A:668:THR:CG2	0.62	2.25	3	2
1:A:680:ILE:HB	1:A:690:ILE:HG21	0.62	1.72	15	2
1:A:613:ILE:O	1:A:614:GLU:C	0.61	2.42	8	11
1:A:618:LEU:CD2	1:A:622:HIS:CD2	0.61	2.82	16	6
1:A:602:PHE:CD1	1:A:727:VAL:HG22	0.61	2.30	6	1
1:A:605:ARG:HB2	1:A:618:LEU:HB2	0.61	1.72	5	8
1:A:681:ILE:HD13	1:A:682:TRP:H	0.61	1.55	2	3
1:A:664:MET:O	1:A:665:ILE:HG23	0.61	1.95	16	2
1:A:722:GLU:O	1:A:725:ASP:N	0.61	2.33	16	16
1:A:659:LEU:HD23	1:A:670:PHE:CD2	0.61	2.30	2	2
1:A:624:PHE:HB3	1:A:650:CYS:O	0.61	1.95	4	16
1:A:677:GLU:HA	1:A:692:PHE:O	0.61	1.95	6	16
1:A:657:SER:C	1:A:658:TYR:CD1	0.61	2.78	3	4
1:A:582:PRO:CG	1:A:588:ILE:HG22	0.61	2.25	10	13
1:A:658:TYR:CD1	1:A:679:LYS:O	0.61	2.53	14	13
1:A:664:MET:HE3	1:A:670:PHE:CB	0.61	2.26	11	5
1:A:621:VAL:O	1:A:621:VAL:HG13	0.61	1.96	3	7
1:A:659:LEU:HD21	1:A:676:ASP:HB3	0.61	1.72	7	3
1:A:575:GLY:O	1:A:595:GLN:NE2	0.60	2.34	8	3
1:A:578:LEU:CD2	1:A:580:LEU:HD22	0.60	2.27	5	3
1:A:670:PHE:CZ	1:A:714:ARG:HD2	0.60	2.32	2	13
1:A:578:LEU:C	1:A:578:LEU:HD23	0.60	2.21	8	1
1:A:665:ILE:HG12	1:A:668:THR:HG21	0.60	1.74	9	2
1:A:615:ASP:HB2	1:A:618:LEU:HD11	0.60	1.73	5	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:649:TYR:HE2	1:A:678:ILE:HD13	0.60	1.54	6	2
1:A:587:ILE:HG22	1:A:690:ILE:HD13	0.60	1.72	15	2
1:A:649:TYR:HD2	1:A:672:LEU:HD11	0.60	1.56	6	2
1:A:578:LEU:HD21	1:A:694:VAL:HA	0.60	1.72	14	2
1:A:583:LEU:HB3	1:A:584:PRO:HD2	0.60	1.71	14	16
1:A:578:LEU:CD1	1:A:694:VAL:HG13	0.60	2.26	12	3
1:A:602:PHE:CE1	1:A:730:LEU:HD23	0.60	2.32	15	1
1:A:649:TYR:HD1	1:A:664:MET:HE1	0.60	1.57	15	5
1:A:618:LEU:HD21	1:A:681:ILE:HD11	0.60	1.72	5	1
1:A:618:LEU:HD21	1:A:680:ILE:HG21	0.60	1.73	15	2
1:A:578:LEU:HD21	1:A:580:LEU:HG	0.60	1.74	16	1
1:A:618:LEU:HD22	1:A:622:HIS:CG	0.60	2.32	1	4
1:A:578:LEU:HD11	1:A:694:VAL:CG1	0.60	2.26	12	3
1:A:618:LEU:HG	1:A:681:ILE:HD11	0.60	1.72	10	2
1:A:690:ILE:HD12	1:A:690:ILE:N	0.60	2.12	10	2
1:A:613:ILE:O	1:A:613:ILE:HG22	0.60	1.97	5	3
1:A:575:GLY:O	1:A:596:GLN:N	0.59	2.35	11	11
1:A:582:PRO:HG3	1:A:588:ILE:HG22	0.59	1.73	10	6
1:A:619:SER:O	1:A:620:ARG:HB2	0.59	1.97	16	10
1:A:656:VAL:O	1:A:657:SER:C	0.59	2.45	2	1
1:A:651:HIS:CE1	1:A:655:ASN:O	0.59	2.55	3	1
1:A:592:LEU:HD23	1:A:592:LEU:N	0.59	2.13	1	1
1:A:580:LEU:HD21	1:A:678:ILE:HD11	0.59	1.73	16	4
1:A:615:ASP:OD2	1:A:690:ILE:CG1	0.59	2.51	9	4
1:A:681:ILE:HG22	1:A:690:ILE:CD1	0.59	2.27	14	2
1:A:648:TRP:CZ2	1:A:671:LEU:HD13	0.59	2.31	10	5
1:A:582:PRO:CB	1:A:588:ILE:HG22	0.59	2.27	12	10
1:A:615:ASP:CB	1:A:618:LEU:HD11	0.59	2.27	16	1
1:A:647:ILE:O	1:A:671:LEU:HD12	0.59	1.97	3	3
1:A:618:LEU:HB3	1:A:622:HIS:HB2	0.59	1.75	14	3
1:A:673:GLN:O	1:A:694:VAL:HG11	0.59	1.98	8	7
1:A:665:ILE:O	1:A:666:GLN:C	0.59	2.45	3	1
1:A:657:SER:C	1:A:658:TYR:CD2	0.59	2.81	9	11
1:A:723:GLU:CB	1:A:728:LYS:N	0.59	2.66	12	10
1:A:659:LEU:HD23	1:A:660:ASN:H	0.59	1.58	4	1
1:A:615:ASP:OD2	1:A:690:ILE:HD11	0.58	1.98	4	3
1:A:618:LEU:N	1:A:618:LEU:CD2	0.58	2.66	13	2
1:A:615:ASP:OD1	1:A:690:ILE:HD11	0.58	1.98	11	1
1:A:600:PRO:HB2	1:A:602:PHE:CE1	0.58	2.33	16	1
1:A:577:PHE:CE2	1:A:578:LEU:CB	0.58	2.87	2	1
1:A:588:ILE:CG2	1:A:589:GLN:N	0.58	2.66	14	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:621:VAL:O	1:A:621:VAL:CG1	0.58	2.51	11	5
1:A:659:LEU:HD11	1:A:672:LEU:HA	0.58	1.74	3	3
1:A:617:ARG:HB2	1:A:681:ILE:HD13	0.58	1.73	5	2
1:A:674:ASP:HB2	1:A:696:ILE:HD12	0.58	1.75	14	1
1:A:594:ILE:HG12	1:A:601:PHE:CE2	0.58	2.33	10	14
1:A:617:ARG:CG	1:A:688:PHE:CE2	0.58	2.87	14	4
1:A:580:LEU:HD21	1:A:678:ILE:HD12	0.58	1.74	13	1
1:A:583:LEU:N	1:A:583:LEU:CD1	0.58	2.54	6	1
1:A:583:LEU:CB	1:A:584:PRO:CD	0.58	2.82	15	15
1:A:651:HIS:O	1:A:652:THR:HG23	0.58	1.99	16	3
1:A:601:PHE:CZ	1:A:611:CYS:HB2	0.58	2.34	9	3
1:A:577:PHE:O	1:A:696:ILE:HG23	0.58	1.99	13	4
1:A:603:ILE:HG22	1:A:611:CYS:CB	0.58	2.28	14	1
1:A:618:LEU:HA	1:A:622:HIS:CG	0.58	2.33	16	12
1:A:598:VAL:HG12	1:A:599:ASN:N	0.58	2.13	4	1
1:A:625:ILE:HD11	1:A:649:TYR:CE2	0.57	2.34	7	3
1:A:582:PRO:HG2	1:A:590:GLU:N	0.57	2.15	10	16
1:A:582:PRO:HB3	1:A:692:PHE:CE1	0.57	2.35	2	6
1:A:649:TYR:CE2	1:A:678:ILE:HG23	0.57	2.34	5	1
1:A:688:PHE:O	1:A:688:PHE:CD2	0.57	2.57	14	3
1:A:656:VAL:HG21	1:A:664:MET:O	0.57	1.99	16	2
1:A:624:PHE:N	1:A:650:CYS:O	0.57	2.37	2	16
1:A:664:MET:SD	1:A:716:VAL:HG22	0.57	2.40	9	1
1:A:649:TYR:O	1:A:664:MET:HE1	0.57	2.00	10	2
1:A:620:ARG:O	1:A:621:VAL:CG2	0.57	2.51	12	1
1:A:681:ILE:HB	1:A:690:ILE:HD12	0.57	1.77	13	1
1:A:669:LYS:CB	1:A:720:THR:HG22	0.57	2.30	16	1
1:A:662:ASN:CG	1:A:670:PHE:CZ	0.57	2.83	9	10
1:A:702:LEU:HD13	1:A:703:PHE:H	0.57	1.60	3	1
1:A:601:PHE:CE2	1:A:611:CYS:HB2	0.57	2.35	4	12
1:A:630:HIS:CE1	1:A:703:PHE:CZ	0.57	2.92	3	3
1:A:679:LYS:O	1:A:680:ILE:C	0.57	2.46	2	15
1:A:577:PHE:HB3	1:A:596:GLN:CA	0.57	2.30	4	14
1:A:589:GLN:O	1:A:590:GLU:HB3	0.57	2.00	4	9
1:A:578:LEU:HD21	1:A:580:LEU:HD22	0.57	1.77	2	1
1:A:698:ASP:C	1:A:699:THR:CG2	0.57	2.77	6	10
1:A:656:VAL:HG21	1:A:663:ARG:NH2	0.57	2.14	7	1
1:A:587:ILE:HD12	1:A:689:VAL:O	0.57	2.00	12	1
1:A:649:TYR:O	1:A:670:PHE:N	0.56	2.38	13	15
1:A:600:PRO:HG2	1:A:602:PHE:CE2	0.56	2.34	14	1
1:A:665:ILE:O	1:A:665:ILE:HG13	0.56	1.97	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:621:VAL:HG11	1:A:730:LEU:HD12	0.56	1.75	15	1
1:A:603:ILE:O	1:A:623:CYS:SG	0.56	2.62	2	9
1:A:657:SER:O	1:A:658:TYR:CD2	0.56	2.58	9	11
1:A:615:ASP:CB	1:A:618:LEU:HD22	0.56	2.31	4	2
1:A:615:ASP:O	1:A:617:ARG:N	0.56	2.38	11	5
1:A:598:VAL:HG21	1:A:610:ASN:HD21	0.56	1.60	14	1
1:A:670:PHE:CD1	1:A:716:VAL:HA	0.56	2.35	16	11
1:A:592:LEU:N	1:A:592:LEU:CD2	0.56	2.68	1	1
1:A:659:LEU:O	1:A:660:ASN:C	0.56	2.48	6	3
1:A:651:HIS:CG	1:A:656:VAL:O	0.56	2.59	10	1
1:A:702:LEU:HD13	1:A:702:LEU:C	0.56	2.25	15	9
1:A:723:GLU:HB3	1:A:727:VAL:HB	0.56	1.77	8	16
1:A:613:ILE:HD12	1:A:692:PHE:CE2	0.56	2.35	7	2
1:A:690:ILE:O	1:A:690:ILE:CG2	0.56	2.54	16	7
1:A:670:PHE:CE1	1:A:715:VAL:C	0.56	2.83	14	10
1:A:659:LEU:HD22	1:A:670:PHE:CE2	0.56	2.36	12	1
1:A:726:LEU:HD12	1:A:727:VAL:CG2	0.56	2.31	8	15
1:A:656:VAL:HG13	1:A:665:ILE:CA	0.56	2.30	2	1
1:A:613:ILE:O	1:A:615:ASP:N	0.56	2.39	14	10
1:A:603:ILE:CG2	1:A:611:CYS:HB3	0.56	2.31	11	8
1:A:677:GLU:CB	1:A:692:PHE:O	0.56	2.54	5	7
1:A:575:GLY:O	1:A:595:GLN:HA	0.55	2.01	16	7
1:A:587:ILE:HG21	1:A:615:ASP:CG	0.55	2.26	14	2
1:A:595:GLN:O	1:A:597:GLY:N	0.55	2.39	8	10
1:A:651:HIS:ND1	1:A:657:SER:CB	0.55	2.70	5	11
1:A:624:PHE:O	1:A:650:CYS:HB3	0.55	2.01	6	1
1:A:649:TYR:OH	1:A:680:ILE:CG1	0.55	2.54	16	1
1:A:628:LYS:O	1:A:646:ASP:N	0.55	2.39	14	12
1:A:630:HIS:CE1	1:A:703:PHE:CE2	0.55	2.94	3	5
1:A:620:ARG:O	1:A:621:VAL:CG1	0.55	2.52	5	4
1:A:594:ILE:HG23	1:A:598:VAL:HG23	0.55	1.77	15	5
1:A:649:TYR:OH	1:A:657:SER:HB2	0.55	2.01	5	3
1:A:651:HIS:H	1:A:664:MET:HE2	0.55	1.62	2	1
1:A:615:ASP:O	1:A:615:ASP:CG	0.55	2.48	11	1
1:A:648:TRP:CZ3	1:A:671:LEU:HG	0.55	2.37	1	8
1:A:594:ILE:HG12	1:A:601:PHE:CD2	0.55	2.37	15	9
1:A:598:VAL:CG1	1:A:599:ASN:N	0.55	2.69	4	2
1:A:649:TYR:OH	1:A:680:ILE:CD1	0.55	2.55	12	3
1:A:681:ILE:CG2	1:A:690:ILE:HD12	0.55	2.32	13	1
1:A:615:ASP:O	1:A:688:PHE:CZ	0.55	2.60	14	1
1:A:602:PHE:C	1:A:603:ILE:CG1	0.55	2.80	3	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:615:ASP:CB	1:A:690:ILE:HD11	0.55	2.32	4	3
1:A:664:MET:HG2	1:A:716:VAL:CG2	0.55	2.31	16	2
1:A:626:PHE:CZ	1:A:724:LYS:HD2	0.55	2.37	12	5
1:A:626:PHE:N	1:A:648:TRP:O	0.55	2.40	15	11
1:A:595:GLN:O	1:A:598:VAL:N	0.55	2.39	4	2
1:A:659:LEU:HD11	1:A:672:LEU:HG	0.55	1.79	4	2
1:A:599:ASN:ND2	1:A:626:PHE:CE1	0.55	2.75	4	4
1:A:615:ASP:O	1:A:616:ASN:C	0.55	2.50	15	6
1:A:588:ILE:HG22	1:A:589:GLN:N	0.55	2.15	6	11
1:A:618:LEU:HG	1:A:622:HIS:CG	0.55	2.37	15	4
1:A:622:HIS:NE2	1:A:655:ASN:O	0.55	2.39	3	1
1:A:659:LEU:HD11	1:A:672:LEU:CG	0.55	2.31	4	3
1:A:663:ARG:O	1:A:716:VAL:HG21	0.55	2.02	9	1
1:A:577:PHE:HB3	1:A:596:GLN:HA	0.54	1.79	9	15
1:A:681:ILE:HG22	1:A:690:ILE:HG13	0.54	1.79	9	5
1:A:662:ASN:CB	1:A:670:PHE:CE2	0.54	2.90	12	10
1:A:624:PHE:CE1	1:A:626:PHE:HB2	0.54	2.37	6	7
1:A:586:SER:O	1:A:589:GLN:NE2	0.54	2.40	8	8
1:A:649:TYR:N	1:A:670:PHE:O	0.54	2.40	3	15
1:A:617:ARG:HG3	1:A:688:PHE:CE2	0.54	2.37	7	2
1:A:724:LYS:HB2	1:A:726:LEU:HD21	0.54	1.77	16	9
1:A:651:HIS:CG	1:A:657:SER:HG	0.54	2.20	10	1
1:A:624:PHE:CB	1:A:650:CYS:O	0.54	2.56	10	15
1:A:651:HIS:ND1	1:A:657:SER:OG	0.54	2.39	13	14
1:A:580:LEU:HB3	1:A:592:LEU:HD12	0.54	1.80	2	2
1:A:582:PRO:CD	1:A:590:GLU:O	0.54	2.56	12	8
1:A:686:ASN:O	1:A:687:LYS:C	0.54	2.50	16	2
1:A:583:LEU:O	1:A:589:GLN:HG3	0.54	2.03	8	2
1:A:587:ILE:HG22	1:A:690:ILE:HG13	0.54	1.78	11	1
1:A:681:ILE:CB	1:A:690:ILE:HD12	0.54	2.32	13	1
1:A:602:PHE:HE2	1:A:727:VAL:HG13	0.54	1.61	9	3
1:A:598:VAL:HG21	1:A:601:PHE:CE1	0.54	2.37	11	1
1:A:666:GLN:O	1:A:667:GLY:C	0.54	2.50	16	13
1:A:617:ARG:HG2	1:A:688:PHE:CE2	0.54	2.36	2	1
1:A:648:TRP:CD2	1:A:669:LYS:HE3	0.54	2.38	9	6
1:A:618:LEU:CG	1:A:681:ILE:HD11	0.54	2.33	10	2
1:A:587:ILE:CD1	1:A:688:PHE:CE1	0.54	2.90	2	1
1:A:650:CYS:CA	1:A:668:THR:O	0.54	2.56	3	9
1:A:587:ILE:HG21	1:A:615:ASP:OD2	0.54	2.03	2	1
1:A:621:VAL:HG21	1:A:730:LEU:CB	0.54	2.31	10	2
1:A:587:ILE:HB	1:A:690:ILE:CD1	0.54	2.33	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:630:HIS:CD2	1:A:703:PHE:CE2	0.54	2.96	8	2
1:A:724:LYS:CB	1:A:726:LEU:CD2	0.53	2.86	16	7
1:A:648:TRP:CH2	1:A:671:LEU:CD1	0.53	2.91	16	1
1:A:592:LEU:HD13	1:A:611:CYS:SG	0.53	2.42	10	2
1:A:651:HIS:N	1:A:664:MET:HE2	0.53	2.18	2	1
1:A:624:PHE:CD2	1:A:727:VAL:CG1	0.53	2.89	4	7
1:A:681:ILE:HG21	1:A:688:PHE:CZ	0.53	2.37	3	1
1:A:648:TRP:CZ3	1:A:671:LEU:HD13	0.53	2.38	5	1
1:A:598:VAL:HG21	1:A:601:PHE:HD1	0.53	1.61	2	8
1:A:682:TRP:CD1	1:A:682:TRP:C	0.53	2.85	6	10
1:A:665:ILE:CG1	1:A:668:THR:HG21	0.53	2.34	14	2
1:A:723:GLU:HB3	1:A:728:LYS:N	0.53	2.19	12	10
1:A:723:GLU:HB2	1:A:728:LYS:N	0.53	2.18	8	6
1:A:613:ILE:O	1:A:618:LEU:CD1	0.53	2.57	12	4
1:A:622:HIS:CD2	1:A:680:ILE:O	0.53	2.62	2	3
1:A:651:HIS:CD2	1:A:666:GLN:HA	0.53	2.38	3	3
1:A:721:ALA:HB1	1:A:724:LYS:HA	0.53	1.80	10	12
1:A:587:ILE:HG22	1:A:690:ILE:CD1	0.53	2.33	15	2
1:A:680:ILE:CG1	1:A:690:ILE:HG21	0.53	2.33	15	1
1:A:682:TRP:CG	1:A:683:ASP:N	0.53	2.75	16	1
1:A:615:ASP:HB2	1:A:618:LEU:CD1	0.53	2.33	6	2
1:A:646:ASP:OD1	1:A:703:PHE:CD2	0.53	2.62	4	2
1:A:677:GLU:CG	1:A:692:PHE:O	0.53	2.56	6	3
1:A:663:ARG:O	1:A:716:VAL:HG11	0.53	2.04	13	1
1:A:682:TRP:O	1:A:689:VAL:HG12	0.53	2.04	16	1
1:A:623:CYS:HB2	1:A:649:TYR:CE1	0.53	2.39	3	1
1:A:681:ILE:HD12	1:A:690:ILE:HD11	0.53	1.79	5	1
1:A:694:VAL:HG12	1:A:694:VAL:O	0.53	2.03	6	3
1:A:630:HIS:CG	1:A:703:PHE:CE2	0.53	2.97	7	1
1:A:659:LEU:HD22	1:A:714:ARG:NH1	0.53	2.18	15	1
1:A:587:ILE:HD13	1:A:688:PHE:CZ	0.53	2.38	2	1
1:A:615:ASP:CG	1:A:688:PHE:CZ	0.53	2.87	14	4
1:A:603:ILE:HD12	1:A:680:ILE:CD1	0.53	2.33	14	2
1:A:617:ARG:HB3	1:A:681:ILE:HD13	0.53	1.81	12	1
1:A:594:ILE:HG12	1:A:601:PHE:CZ	0.53	2.39	14	8
1:A:647:ILE:N	1:A:647:ILE:HD13	0.53	2.19	5	1
1:A:622:HIS:CD2	1:A:651:HIS:HE1	0.52	2.21	1	4
1:A:624:PHE:CZ	1:A:626:PHE:HB2	0.52	2.40	12	12
1:A:618:LEU:HD23	1:A:622:HIS:CG	0.52	2.38	10	3
1:A:673:GLN:O	1:A:676:ASP:CB	0.52	2.57	12	1
1:A:582:PRO:CG	1:A:590:GLU:O	0.52	2.58	6	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:645:ASP:O	1:A:702:LEU:HG	0.52	2.04	4	1
1:A:647:ILE:O	1:A:671:LEU:HD23	0.52	2.04	4	2
1:A:664:MET:O	1:A:665:ILE:CG2	0.52	2.57	16	2
1:A:577:PHE:CZ	1:A:647:ILE:HD13	0.52	2.36	16	2
1:A:626:PHE:CD2	1:A:724:LYS:CD	0.52	2.92	16	1
1:A:658:TYR:CE1	1:A:679:LYS:O	0.52	2.62	2	10
1:A:602:PHE:N	1:A:602:PHE:CD1	0.52	2.77	11	3
1:A:615:ASP:CG	1:A:615:ASP:O	0.52	2.52	7	1
1:A:676:ASP:O	1:A:678:ILE:N	0.52	2.42	7	3
1:A:581:LYS:HB3	1:A:693:LYS:HB3	0.52	1.81	14	2
1:A:617:ARG:CG	1:A:688:PHE:CE1	0.52	2.92	4	1
1:A:669:LYS:O	1:A:717:LEU:N	0.52	2.42	13	7
1:A:675:GLY:N	1:A:694:VAL:O	0.52	2.43	12	12
1:A:580:LEU:O	1:A:591:SER:HA	0.52	2.04	14	7
1:A:603:ILE:C	1:A:623:CYS:HG	0.52	2.09	14	2
1:A:588:ILE:CD1	1:A:613:ILE:HG23	0.52	2.35	6	2
1:A:626:PHE:CE2	1:A:628:LYS:HB2	0.52	2.39	7	7
1:A:651:HIS:ND1	1:A:657:SER:N	0.52	2.57	11	8
1:A:599:ASN:CB	1:A:627:LYS:HB3	0.52	2.35	6	5
1:A:602:PHE:CE2	1:A:730:LEU:CD1	0.52	2.93	11	2
1:A:659:LEU:CD1	1:A:671:LEU:O	0.52	2.58	3	1
1:A:630:HIS:CG	1:A:703:PHE:CD2	0.52	2.97	7	1
1:A:669:LYS:N	1:A:717:LEU:O	0.52	2.37	9	6
1:A:586:SER:CB	1:A:691:GLY:N	0.52	2.72	5	6
1:A:602:PHE:HB2	1:A:609:CYS:HA	0.52	1.82	15	12
1:A:618:LEU:HG	1:A:622:HIS:CD2	0.52	2.40	6	4
1:A:648:TRP:HZ3	1:A:717:LEU:HD13	0.52	1.64	9	1
1:A:657:SER:O	1:A:658:TYR:CD1	0.52	2.62	16	2
1:A:659:LEU:HD22	1:A:670:PHE:CD2	0.52	2.40	12	1
1:A:622:HIS:CD2	1:A:680:ILE:HG23	0.51	2.40	3	2
1:A:688:PHE:CD1	1:A:688:PHE:C	0.51	2.84	3	1
1:A:724:LYS:HB3	1:A:726:LEU:CD2	0.51	2.35	14	4
1:A:621:VAL:HG11	1:A:730:LEU:CG	0.51	2.35	15	1
1:A:600:PRO:CB	1:A:602:PHE:CE1	0.51	2.93	16	1
1:A:575:GLY:O	1:A:595:GLN:HG3	0.51	2.05	6	3
1:A:666:GLN:CG	1:A:667:GLY:N	0.51	2.74	15	11
1:A:703:PHE:CD2	1:A:704:ASN:HB3	0.51	2.40	16	1
1:A:597:GLY:O	1:A:598:VAL:C	0.51	2.53	7	14
1:A:724:LYS:HB2	1:A:726:LEU:CG	0.51	2.34	10	9
1:A:724:LYS:HB2	1:A:726:LEU:CD2	0.51	2.35	3	9
1:A:648:TRP:HA	1:A:670:PHE:O	0.51	2.05	3	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:587:ILE:HD13	1:A:615:ASP:OD1	0.51	2.06	14	1
1:A:695:GLU:O	1:A:697:ASN:ND2	0.51	2.43	5	5
1:A:598:VAL:CG1	1:A:600:PRO:C	0.51	2.83	4	1
1:A:702:LEU:CG	1:A:702:LEU:O	0.51	2.59	4	1
1:A:599:ASN:ND2	1:A:627:LYS:O	0.51	2.44	7	6
1:A:678:ILE:HG13	1:A:692:PHE:CB	0.51	2.34	6	1
1:A:615:ASP:OD1	1:A:688:PHE:CE1	0.51	2.63	7	5
1:A:669:LYS:HB3	1:A:720:THR:HG22	0.51	1.83	16	1
1:A:582:PRO:HG2	1:A:590:GLU:H	0.51	1.65	10	5
1:A:617:ARG:CB	1:A:681:ILE:HG21	0.51	2.33	10	3
1:A:717:LEU:N	1:A:717:LEU:HD12	0.51	2.20	12	1
1:A:680:ILE:CB	1:A:690:ILE:HG21	0.51	2.35	15	1
1:A:656:VAL:O	1:A:656:VAL:HG12	0.51	2.05	2	1
1:A:717:LEU:O	1:A:718:LYS:C	0.51	2.53	14	4
1:A:723:GLU:HB3	1:A:727:VAL:C	0.51	2.31	12	7
1:A:626:PHE:CZ	1:A:724:LYS:CD	0.51	2.94	7	4
1:A:703:PHE:O	1:A:704:ASN:ND2	0.51	2.43	3	2
1:A:649:TYR:CD2	1:A:672:LEU:HD11	0.51	2.39	6	2
1:A:684:LYS:O	1:A:685:ASN:C	0.51	2.54	14	2
1:A:678:ILE:O	1:A:679:LYS:CG	0.51	2.58	14	1
1:A:681:ILE:HD11	1:A:683:ASP:OD2	0.51	2.06	2	1
1:A:577:PHE:HE2	1:A:647:ILE:HG21	0.51	1.65	10	5
1:A:697:ASN:N	1:A:697:ASN:ND2	0.51	2.58	12	3
1:A:618:LEU:CD2	1:A:622:HIS:CG	0.51	2.94	1	1
1:A:724:LYS:HB3	1:A:726:LEU:HD21	0.51	1.82	14	8
1:A:623:CYS:SG	1:A:680:ILE:CG1	0.51	2.99	3	3
1:A:681:ILE:HG22	1:A:690:ILE:HD12	0.51	1.83	4	3
1:A:600:PRO:CG	1:A:602:PHE:CE1	0.51	2.93	16	1
1:A:679:LYS:O	1:A:681:ILE:N	0.50	2.44	10	6
1:A:702:LEU:HD13	1:A:703:PHE:O	0.50	2.05	15	2
1:A:670:PHE:CD1	1:A:671:LEU:N	0.50	2.79	11	2
1:A:580:LEU:O	1:A:592:LEU:N	0.50	2.43	16	8
1:A:587:ILE:CG2	1:A:688:PHE:CE1	0.50	2.95	3	1
1:A:656:VAL:HB	1:A:665:ILE:HA	0.50	1.83	3	1
1:A:618:LEU:CD1	1:A:681:ILE:HG13	0.50	2.36	15	1
1:A:654:THR:HA	1:A:666:GLN:NE2	0.50	2.22	13	13
1:A:583:LEU:HD11	1:A:677:GLU:OE2	0.50	2.05	3	1
1:A:600:PRO:HG2	1:A:602:PHE:CE1	0.50	2.41	7	4
1:A:651:HIS:O	1:A:667:GLY:N	0.50	2.45	6	4
1:A:600:PRO:HG2	1:A:602:PHE:CZ	0.50	2.42	15	13
1:A:615:ASP:CB	1:A:618:LEU:HG	0.50	2.37	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:723:GLU:HB3	1:A:727:VAL:CB	0.50	2.37	15	12
1:A:613:ILE:HG22	1:A:690:ILE:HD13	0.50	1.83	4	1
1:A:615:ASP:HB3	1:A:618:LEU:HD13	0.50	1.82	9	2
1:A:622:HIS:O	1:A:651:HIS:NE2	0.50	2.44	8	3
1:A:617:ARG:CG	1:A:688:PHE:CD1	0.50	2.94	10	1
1:A:617:ARG:HB2	1:A:688:PHE:CE2	0.50	2.41	16	1
1:A:650:CYS:HA	1:A:668:THR:O	0.50	2.06	4	6
1:A:681:ILE:CG2	1:A:688:PHE:CE1	0.50	2.95	2	1
1:A:623:CYS:HA	1:A:651:HIS:HA	0.50	1.84	11	9
1:A:605:ARG:CB	1:A:618:LEU:HB2	0.50	2.37	12	3
1:A:659:LEU:CD2	1:A:670:PHE:CE2	0.50	2.95	12	1
1:A:656:VAL:HG22	1:A:658:TYR:CD1	0.50	2.41	16	1
1:A:647:ILE:CD1	1:A:672:LEU:HB3	0.50	2.37	6	6
1:A:615:ASP:OD2	1:A:688:PHE:CZ	0.50	2.64	4	4
1:A:622:HIS:HE1	1:A:655:ASN:HB2	0.50	1.67	3	1
1:A:618:LEU:N	1:A:618:LEU:CD1	0.50	2.75	4	2
1:A:586:SER:HB2	1:A:691:GLY:O	0.50	2.07	13	2
1:A:613:ILE:CG2	1:A:690:ILE:HG21	0.50	2.37	14	1
1:A:648:TRP:CH2	1:A:671:LEU:HG	0.49	2.42	7	6
1:A:624:PHE:HB3	1:A:652:THR:OG1	0.49	2.07	3	5
1:A:626:PHE:CG	1:A:627:LYS:N	0.49	2.79	2	15
1:A:622:HIS:CD2	1:A:681:ILE:HG12	0.49	2.41	6	1
1:A:623:CYS:SG	1:A:680:ILE:CD1	0.49	3.00	15	4
1:A:655:ASN:O	1:A:666:GLN:HB2	0.49	2.07	11	6
1:A:606:SER:CB	1:A:620:ARG:CG	0.49	2.89	9	1
1:A:704:ASN:C	1:A:704:ASN:OD1	0.49	2.54	16	2
1:A:617:ARG:HG2	1:A:688:PHE:CZ	0.49	2.42	14	1
1:A:618:LEU:HD22	1:A:680:ILE:HG22	0.49	1.83	2	1
1:A:702:LEU:O	1:A:703:PHE:O	0.49	2.30	4	1
1:A:678:ILE:N	1:A:692:PHE:O	0.49	2.45	7	1
1:A:651:HIS:CG	1:A:656:VAL:HA	0.49	2.42	16	3
1:A:627:LYS:HZ3	1:A:647:ILE:HG23	0.49	1.67	13	1
1:A:656:VAL:HG22	1:A:658:TYR:CD2	0.49	2.41	14	1
1:A:591:SER:C	1:A:592:LEU:HD23	0.49	2.31	1	1
1:A:651:HIS:NE2	1:A:655:ASN:C	0.49	2.70	2	9
1:A:589:GLN:O	1:A:590:GLU:HG3	0.49	2.06	14	3
1:A:703:PHE:O	1:A:704:ASN:C	0.49	2.55	3	3
1:A:587:ILE:CG2	1:A:615:ASP:CG	0.49	2.85	6	1
1:A:626:PHE:O	1:A:648:TRP:N	0.49	2.44	6	1
1:A:615:ASP:CG	1:A:688:PHE:CE1	0.49	2.89	14	2
1:A:662:ASN:OD1	1:A:716:VAL:N	0.49	2.45	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:725:ASP:CG	1:A:725:ASP:O	0.49	2.55	2	6
1:A:586:SER:OG	1:A:588:ILE:O	0.49	2.31	3	1
1:A:613:ILE:CG2	1:A:690:ILE:HD12	0.49	2.37	3	1
1:A:680:ILE:HG22	1:A:690:ILE:HG13	0.49	1.85	3	1
1:A:589:GLN:O	1:A:590:GLU:HG2	0.49	2.06	8	2
1:A:670:PHE:CD2	1:A:716:VAL:HG22	0.49	2.43	11	1
1:A:646:ASP:OD1	1:A:703:PHE:CD1	0.49	2.66	11	2
1:A:588:ILE:O	1:A:589:GLN:HG2	0.49	2.07	9	1
1:A:649:TYR:CZ	1:A:657:SER:HB2	0.49	2.42	16	2
1:A:659:LEU:HB3	1:A:670:PHE:CD2	0.49	2.43	2	1
1:A:723:GLU:CB	1:A:727:VAL:HB	0.49	2.37	14	5
1:A:606:SER:OG	1:A:621:VAL:N	0.49	2.46	5	1
1:A:662:ASN:CG	1:A:670:PHE:CE2	0.49	2.91	9	4
1:A:681:ILE:CG2	1:A:690:ILE:CD1	0.49	2.90	13	1
1:A:617:ARG:CG	1:A:688:PHE:CZ	0.49	2.95	14	1
1:A:577:PHE:CE1	1:A:647:ILE:HD12	0.49	2.43	2	1
1:A:580:LEU:HD23	1:A:592:LEU:HD12	0.49	1.84	11	1
1:A:615:ASP:OD1	1:A:688:PHE:CZ	0.49	2.66	12	6
1:A:621:VAL:HG11	1:A:730:LEU:CB	0.49	2.37	7	2
1:A:575:GLY:CA	1:A:595:GLN:NE2	0.49	2.75	5	3
1:A:586:SER:CB	1:A:689:VAL:O	0.49	2.61	3	1
1:A:659:LEU:C	1:A:659:LEU:CD2	0.49	2.85	3	2
1:A:582:PRO:HD2	1:A:590:GLU:C	0.49	2.32	5	5
1:A:577:PHE:HB2	1:A:596:GLN:HA	0.49	1.84	13	8
1:A:615:ASP:HB2	1:A:618:LEU:HD13	0.49	1.85	6	1
1:A:681:ILE:CG2	1:A:690:ILE:CG1	0.49	2.90	9	1
1:A:624:PHE:CE1	1:A:625:ILE:O	0.49	2.66	15	2
1:A:651:HIS:CE1	1:A:656:VAL:C	0.49	2.91	16	1
1:A:575:GLY:O	1:A:595:GLN:CA	0.49	2.61	1	5
1:A:602:PHE:HE1	1:A:727:VAL:HG13	0.49	1.68	3	3
1:A:617:ARG:O	1:A:655:ASN:ND2	0.49	2.46	3	1
1:A:698:ASP:O	1:A:699:THR:HG23	0.49	2.07	5	4
1:A:664:MET:C	1:A:665:ILE:HG23	0.49	2.33	16	2
1:A:723:GLU:CG	1:A:728:LYS:HB2	0.49	2.38	14	1
1:A:615:ASP:O	1:A:618:LEU:N	0.49	2.40	4	1
1:A:727:VAL:CG1	1:A:727:VAL:O	0.49	2.61	16	2
1:A:622:HIS:O	1:A:651:HIS:CD2	0.49	2.66	16	3
1:A:720:THR:O	1:A:722:GLU:N	0.49	2.46	12	1
1:A:624:PHE:CG	1:A:624:PHE:O	0.48	2.66	3	4
1:A:594:ILE:CD1	1:A:601:PHE:CD2	0.48	2.95	5	1
1:A:669:LYS:CG	1:A:670:PHE:N	0.48	2.75	9	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:681:ILE:CG2	1:A:682:TRP:N	0.48	2.75	15	2
1:A:615:ASP:O	1:A:688:PHE:CE1	0.48	2.66	14	1
1:A:588:ILE:O	1:A:589:GLN:HG3	0.48	2.08	4	6
1:A:662:ASN:HB2	1:A:670:PHE:CE2	0.48	2.42	2	4
1:A:583:LEU:H	1:A:583:LEU:HD12	0.48	1.68	9	4
1:A:601:PHE:CD2	1:A:601:PHE:O	0.48	2.66	9	3
1:A:672:LEU:HD22	1:A:694:VAL:HG21	0.48	1.85	6	3
1:A:680:ILE:C	1:A:681:ILE:CG1	0.48	2.86	6	2
1:A:656:VAL:HG13	1:A:658:TYR:HE1	0.48	1.68	16	2
1:A:703:PHE:CG	1:A:704:ASN:N	0.48	2.81	11	1
1:A:726:LEU:HD12	1:A:726:LEU:C	0.48	2.32	13	4
1:A:620:ARG:C	1:A:621:VAL:HG23	0.48	2.33	15	2
1:A:602:PHE:CE2	1:A:730:LEU:HD11	0.48	2.43	11	1
1:A:659:LEU:O	1:A:660:ASN:CB	0.48	2.61	3	7
1:A:694:VAL:O	1:A:694:VAL:HG12	0.48	2.08	7	6
1:A:659:LEU:HG	1:A:678:ILE:HG22	0.48	1.84	4	3
1:A:703:PHE:O	1:A:704:ASN:HB3	0.48	2.08	6	6
1:A:721:ALA:O	1:A:724:LYS:CA	0.48	2.61	12	14
1:A:625:ILE:HG12	1:A:649:TYR:CD1	0.48	2.44	3	1
1:A:726:LEU:CD1	1:A:727:VAL:N	0.48	2.69	4	6
1:A:621:VAL:O	1:A:622:HIS:C	0.48	2.56	4	5
1:A:724:LYS:HB3	1:A:726:LEU:CG	0.48	2.38	6	6
1:A:724:LYS:HG2	1:A:726:LEU:HD21	0.48	1.84	6	2
1:A:619:SER:O	1:A:620:ARG:CG	0.48	2.62	8	2
1:A:602:PHE:HE1	1:A:727:VAL:HG22	0.48	1.60	2	3
1:A:613:ILE:O	1:A:618:LEU:HD11	0.48	2.09	5	3
1:A:703:PHE:CE2	1:A:704:ASN:HB2	0.48	2.43	5	2
1:A:620:ARG:C	1:A:622:HIS:N	0.48	2.70	12	1
1:A:583:LEU:HB2	1:A:584:PRO:HD2	0.48	1.86	15	1
1:A:601:PHE:HB3	1:A:625:ILE:CG2	0.48	2.39	16	1
1:A:615:ASP:O	1:A:618:LEU:HG	0.48	2.08	1	5
1:A:651:HIS:CD2	1:A:655:ASN:O	0.48	2.67	11	9
1:A:681:ILE:HG22	1:A:690:ILE:HD13	0.48	1.82	11	1
1:A:577:PHE:HZ	1:A:647:ILE:HG21	0.48	1.62	16	1
1:A:597:GLY:O	1:A:599:ASN:N	0.48	2.44	4	8
1:A:721:ALA:CB	1:A:724:LYS:HA	0.48	2.38	6	9
1:A:655:ASN:C	1:A:656:VAL:CG2	0.48	2.87	2	1
1:A:655:ASN:C	1:A:656:VAL:HG23	0.48	2.33	2	1
1:A:577:PHE:CZ	1:A:647:ILE:CG2	0.48	2.97	4	5
1:A:656:VAL:CG1	1:A:665:ILE:HA	0.48	2.38	15	6
1:A:658:TYR:HB3	1:A:662:ASN:O	0.48	2.09	7	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:618:LEU:HD11	1:A:681:ILE:HD11	0.48	1.83	6	1
1:A:703:PHE:CD1	1:A:703:PHE:C	0.48	2.91	7	2
1:A:615:ASP:OD2	1:A:688:PHE:CE1	0.48	2.67	9	1
1:A:676:ASP:OD2	1:A:714:ARG:NH1	0.48	2.45	10	1
1:A:649:TYR:C	1:A:664:MET:HE1	0.48	2.34	13	5
1:A:577:PHE:CZ	1:A:578:LEU:HB2	0.48	2.44	2	1
1:A:615:ASP:OD1	1:A:688:PHE:CE2	0.48	2.66	12	2
1:A:681:ILE:CG2	1:A:688:PHE:CZ	0.48	2.97	3	1
1:A:690:ILE:HD13	1:A:690:ILE:N	0.48	2.17	6	1
1:A:606:SER:HB3	1:A:620:ARG:CA	0.48	2.38	10	2
1:A:588:ILE:HG23	1:A:590:GLU:OE2	0.48	2.08	10	1
1:A:622:HIS:HE2	1:A:681:ILE:HG23	0.48	1.69	10	1
1:A:598:VAL:CG2	1:A:601:PHE:CD1	0.48	2.96	11	2
1:A:617:ARG:HG3	1:A:688:PHE:CD1	0.48	2.44	13	3
1:A:722:GLU:O	1:A:723:GLU:C	0.48	2.57	9	15
1:A:718:LYS:O	1:A:719:GLN:O	0.48	2.31	2	3
1:A:604:GLY:HA2	1:A:618:LEU:HD13	0.48	1.86	11	1
1:A:664:MET:HG2	1:A:716:VAL:HG21	0.48	1.86	16	1
1:A:662:ASN:ND2	1:A:670:PHE:CZ	0.47	2.82	2	1
1:A:587:ILE:CB	1:A:615:ASP:OD1	0.47	2.62	4	1
1:A:630:HIS:C	1:A:630:HIS:CD2	0.47	2.92	4	1
1:A:630:HIS:HB2	1:A:646:ASP:OD1	0.47	2.09	4	1
1:A:580:LEU:HD21	1:A:678:ILE:CD1	0.47	2.39	15	2
1:A:578:LEU:C	1:A:578:LEU:CD2	0.47	2.86	9	8
1:A:655:ASN:O	1:A:656:VAL:C	0.47	2.57	3	1
1:A:581:LYS:O	1:A:583:LEU:CD1	0.47	2.62	6	1
1:A:615:ASP:OD2	1:A:690:ILE:HG12	0.47	2.09	9	1
1:A:577:PHE:HE1	1:A:702:LEU:HD11	0.47	1.68	11	1
1:A:617:ARG:C	1:A:618:LEU:HD23	0.47	2.34	13	1
1:A:592:LEU:C	1:A:593:GLU:CG	0.47	2.87	15	2
1:A:585:ASP:O	1:A:689:VAL:CG2	0.47	2.62	16	1
1:A:678:ILE:C	1:A:679:LYS:CG	0.47	2.88	16	1
1:A:580:LEU:O	1:A:582:PRO:HD3	0.47	2.08	14	8
1:A:664:MET:C	1:A:668:THR:OG1	0.47	2.57	2	1
1:A:702:LEU:O	1:A:703:PHE:C	0.47	2.56	12	5
1:A:577:PHE:O	1:A:696:ILE:HA	0.47	2.09	4	6
1:A:723:GLU:HB2	1:A:728:LYS:HB2	0.47	1.87	9	2
1:A:615:ASP:HB3	1:A:618:LEU:HD11	0.47	1.87	16	1
1:A:665:ILE:O	1:A:666:GLN:O	0.47	2.33	1	9
1:A:589:GLN:C	1:A:590:GLU:CG	0.47	2.86	16	7
1:A:603:ILE:HB	1:A:623:CYS:SG	0.47	2.50	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:615:ASP:OD2	1:A:690:ILE:CD1	0.47	2.62	4	1
1:A:659:LEU:HD23	1:A:660:ASN:N	0.47	2.24	4	1
1:A:689:VAL:O	1:A:690:ILE:HD13	0.47	2.09	6	1
1:A:682:TRP:HA	1:A:689:VAL:HG12	0.47	1.87	7	1
1:A:617:ARG:HB2	1:A:681:ILE:CD1	0.47	2.39	12	1
1:A:586:SER:OG	1:A:690:ILE:HA	0.47	2.10	15	6
1:A:651:HIS:ND1	1:A:657:SER:HB3	0.47	2.25	5	4
1:A:659:LEU:O	1:A:661:ASN:N	0.47	2.48	10	7
1:A:619:SER:O	1:A:620:ARG:HB3	0.47	2.10	10	1
1:A:714:ARG:CG	1:A:714:ARG:O	0.47	2.62	12	3
1:A:688:PHE:CD1	1:A:690:ILE:HD11	0.47	2.44	10	1
1:A:649:TYR:OH	1:A:680:ILE:HG12	0.47	2.09	16	1
1:A:649:TYR:O	1:A:664:MET:CE	0.47	2.63	15	2
1:A:586:SER:HB2	1:A:691:GLY:N	0.47	2.24	15	5
1:A:680:ILE:HB	1:A:690:ILE:CG2	0.47	2.39	3	2
1:A:577:PHE:CD2	1:A:578:LEU:HB2	0.47	2.44	7	3
1:A:618:LEU:CD1	1:A:622:HIS:CD2	0.47	2.98	9	2
1:A:678:ILE:HG12	1:A:692:PHE:CB	0.47	2.39	4	2
1:A:580:LEU:CB	1:A:592:LEU:HB2	0.47	2.39	12	6
1:A:602:PHE:O	1:A:603:ILE:HG12	0.47	2.09	12	2
1:A:659:LEU:HD12	1:A:670:PHE:CD2	0.47	2.45	5	1
1:A:624:PHE:CD2	1:A:650:CYS:HB3	0.47	2.45	6	1
1:A:699:THR:O	1:A:699:THR:OG1	0.47	2.32	11	1
1:A:656:VAL:HG13	1:A:658:TYR:HE2	0.47	1.70	14	1
1:A:618:LEU:CD1	1:A:681:ILE:CG1	0.47	2.92	15	1
1:A:626:PHE:CD2	1:A:724:LYS:HD3	0.47	2.45	16	1
1:A:653:GLY:O	1:A:666:GLN:CB	0.47	2.63	2	2
1:A:655:ASN:C	1:A:656:VAL:HG13	0.47	2.34	7	3
1:A:702:LEU:HD23	1:A:703:PHE:O	0.47	2.10	7	1
1:A:627:LYS:HE3	1:A:647:ILE:HG23	0.47	1.87	11	1
1:A:598:VAL:HG13	1:A:600:PRO:C	0.47	2.35	14	1
1:A:722:GLU:N	1:A:722:GLU:OE1	0.47	2.48	14	1
1:A:582:PRO:HD2	1:A:590:GLU:O	0.47	2.10	15	5
1:A:678:ILE:HG12	1:A:692:PHE:HB3	0.47	1.87	10	1
1:A:653:GLY:O	1:A:666:GLN:NE2	0.47	2.48	15	1
1:A:651:HIS:HB2	1:A:657:SER:OG	0.47	2.10	16	6
1:A:577:PHE:CE1	1:A:702:LEU:CD1	0.47	2.98	9	1
1:A:630:HIS:CE1	1:A:703:PHE:CD2	0.47	3.03	11	1
1:A:599:ASN:HB2	1:A:627:LYS:CB	0.47	2.40	15	3
1:A:629:ARG:HD2	1:A:644:LEU:O	0.47	2.10	14	1
1:A:664:MET:CG	1:A:716:VAL:HG21	0.47	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:579:THR:HA	1:A:592:LEU:O	0.46	2.10	5	1
1:A:629:ARG:O	1:A:630:HIS:C	0.46	2.58	14	3
1:A:724:LYS:CG	1:A:726:LEU:HD21	0.46	2.40	6	2
1:A:681:ILE:HG21	1:A:688:PHE:CD2	0.46	2.44	8	1
1:A:670:PHE:CD2	1:A:716:VAL:HA	0.46	2.46	11	1
1:A:616:ASN:OD1	1:A:617:ARG:NH2	0.46	2.47	14	1
1:A:626:PHE:CE1	1:A:726:LEU:CD2	0.46	2.98	16	1
1:A:626:PHE:CE2	1:A:724:LYS:HD3	0.46	2.45	16	1
1:A:588:ILE:O	1:A:589:GLN:CG	0.46	2.64	12	9
1:A:589:GLN:C	1:A:590:GLU:HG2	0.46	2.35	1	1
1:A:666:GLN:O	1:A:668:THR:N	0.46	2.47	9	8
1:A:583:LEU:N	1:A:583:LEU:HD22	0.46	2.21	6	1
1:A:657:SER:O	1:A:664:MET:SD	0.46	2.73	16	2
1:A:682:TRP:HD1	1:A:689:VAL:HG12	0.46	1.70	1	2
1:A:580:LEU:CD1	1:A:692:PHE:CD1	0.46	2.87	2	1
1:A:605:ARG:HD2	1:A:615:ASP:N	0.46	2.25	2	1
1:A:656:VAL:HA	1:A:664:MET:O	0.46	2.10	2	1
1:A:615:ASP:HB3	1:A:618:LEU:CD1	0.46	2.40	16	2
1:A:688:PHE:CD1	1:A:689:VAL:N	0.46	2.83	3	1
1:A:724:LYS:O	1:A:726:LEU:HG	0.46	2.11	11	5
1:A:603:ILE:CG2	1:A:613:ILE:CD1	0.46	2.93	5	2
1:A:618:LEU:HG	1:A:622:HIS:CB	0.46	2.40	9	2
1:A:621:VAL:HG11	1:A:730:LEU:HG	0.46	1.86	15	1
1:A:622:HIS:NE2	1:A:681:ILE:HG12	0.46	2.24	1	2
1:A:656:VAL:CG2	1:A:664:MET:C	0.46	2.89	16	3
1:A:681:ILE:CG2	1:A:690:ILE:HG12	0.46	2.40	7	2
1:A:596:GLN:NE2	1:A:698:ASP:OD2	0.46	2.49	4	2
1:A:598:VAL:HG11	1:A:601:PHE:CB	0.46	2.41	4	1
1:A:605:ARG:HG2	1:A:618:LEU:HB2	0.46	1.88	4	4
1:A:615:ASP:HB2	1:A:690:ILE:HD11	0.46	1.88	7	1
1:A:716:VAL:HG13	1:A:716:VAL:O	0.46	2.10	10	1
1:A:581:LYS:O	1:A:693:LYS:N	0.46	2.48	2	2
1:A:722:GLU:C	1:A:723:GLU:HG2	0.46	2.35	14	4
1:A:588:ILE:C	1:A:589:GLN:HG3	0.46	2.36	11	1
1:A:615:ASP:HB3	1:A:618:LEU:HD21	0.46	1.87	14	1
1:A:622:HIS:NE2	1:A:680:ILE:O	0.46	2.49	2	1
1:A:682:TRP:O	1:A:688:PHE:O	0.46	2.34	2	2
1:A:587:ILE:O	1:A:589:GLN:OE1	0.46	2.33	3	1
1:A:594:ILE:HG12	1:A:601:PHE:CE1	0.46	2.45	3	3
1:A:626:PHE:CD2	1:A:627:LYS:N	0.46	2.84	4	1
1:A:588:ILE:HG12	1:A:615:ASP:OD2	0.46	2.10	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:678:ILE:HG22	1:A:679:LYS:H	0.46	1.71	7	1
1:A:617:ARG:CG	1:A:688:PHE:CG	0.46	2.98	10	1
1:A:620:ARG:C	1:A:621:VAL:HG22	0.46	2.36	12	1
1:A:602:PHE:CE1	1:A:730:LEU:HG	0.46	2.46	4	1
1:A:603:ILE:CG2	1:A:611:CYS:CB	0.46	2.93	14	3
1:A:586:SER:O	1:A:587:ILE:C	0.46	2.59	9	4
1:A:670:PHE:CE1	1:A:714:ARG:HD2	0.46	2.46	11	1
1:A:618:LEU:CD1	1:A:618:LEU:N	0.46	2.79	15	1
1:A:623:CYS:SG	1:A:680:ILE:CG2	0.46	3.04	16	1
1:A:702:LEU:CD1	1:A:703:PHE:O	0.46	2.64	2	3
1:A:723:GLU:N	1:A:723:GLU:OE1	0.46	2.48	3	2
1:A:609:CYS:SG	1:A:621:VAL:HA	0.46	2.51	4	3
1:A:615:ASP:O	1:A:618:LEU:HB2	0.46	2.10	9	2
1:A:684:LYS:O	1:A:685:ASN:CB	0.46	2.62	15	1
1:A:602:PHE:CD1	1:A:730:LEU:HG	0.46	2.46	4	1
1:A:705:GLU:O	1:A:705:GLU:CG	0.46	2.64	4	1
1:A:603:ILE:HG12	1:A:611:CYS:CB	0.46	2.40	5	1
1:A:605:ARG:HB2	1:A:618:LEU:HD12	0.46	1.86	5	1
1:A:648:TRP:CE3	1:A:669:LYS:HE3	0.46	2.46	7	1
1:A:664:MET:HG2	1:A:716:VAL:HG13	0.46	1.86	7	1
1:A:617:ARG:HB2	1:A:688:PHE:CE1	0.46	2.45	9	1
1:A:587:ILE:CD1	1:A:688:PHE:CD1	0.46	2.99	2	1
1:A:607:GLU:O	1:A:608:ASP:C	0.46	2.58	12	3
1:A:624:PHE:CB	1:A:652:THR:OG1	0.46	2.64	5	8
1:A:653:GLY:O	1:A:666:GLN:HB2	0.46	2.11	2	2
1:A:618:LEU:HA	1:A:622:HIS:CE1	0.46	2.46	7	8
1:A:623:CYS:HB3	1:A:657:SER:CB	0.46	2.40	15	4
1:A:675:GLY:CA	1:A:694:VAL:O	0.46	2.64	4	1
1:A:681:ILE:CG2	1:A:690:ILE:HG13	0.46	2.40	9	1
1:A:599:ASN:HB2	1:A:627:LYS:HB3	0.45	1.88	4	10
1:A:659:LEU:CD2	1:A:671:LEU:O	0.45	2.64	2	1
1:A:624:PHE:CE2	1:A:727:VAL:CG1	0.45	2.89	13	3
1:A:727:VAL:O	1:A:727:VAL:HG12	0.45	2.10	16	2
1:A:594:ILE:CG1	1:A:601:PHE:CE2	0.45	2.99	10	2
1:A:599:ASN:HB2	1:A:627:LYS:CG	0.45	2.40	16	1
1:A:624:PHE:O	1:A:650:CYS:O	0.45	2.33	12	5
1:A:603:ILE:HD12	1:A:680:ILE:HD11	0.45	1.89	3	1
1:A:659:LEU:C	1:A:659:LEU:HD23	0.45	2.36	3	1
1:A:586:SER:OG	1:A:690:ILE:C	0.45	2.60	12	2
1:A:690:ILE:HG22	1:A:692:PHE:HD2	0.45	1.70	7	3
1:A:715:VAL:O	1:A:716:VAL:C	0.45	2.58	9	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:618:LEU:HD21	1:A:680:ILE:CG2	0.45	2.41	11	3
1:A:605:ARG:HB3	1:A:605:ARG:CZ	0.45	2.40	12	1
1:A:703:PHE:C	1:A:704:ASN:CG	0.45	2.84	3	2
1:A:718:LYS:O	1:A:719:GLN:C	0.45	2.58	3	3
1:A:604:GLY:CA	1:A:618:LEU:HD23	0.45	2.40	6	1
1:A:652:THR:O	1:A:653:GLY:O	0.45	2.34	14	2
1:A:587:ILE:CG1	1:A:615:ASP:OD1	0.45	2.65	14	1
1:A:645:ASP:O	1:A:702:LEU:HD22	0.45	2.12	2	2
1:A:644:LEU:N	1:A:644:LEU:CD2	0.45	2.74	3	1
1:A:713:GLN:OE1	1:A:713:GLN:CA	0.45	2.65	3	1
1:A:617:ARG:HG3	1:A:688:PHE:CE1	0.45	2.45	4	1
1:A:674:ASP:HB3	1:A:696:ILE:HD12	0.45	1.88	4	3
1:A:678:ILE:HG22	1:A:679:LYS:N	0.45	2.27	5	2
1:A:587:ILE:HD11	1:A:688:PHE:HA	0.45	1.89	9	1
1:A:674:ASP:HA	1:A:696:ILE:HG13	0.45	1.88	10	1
1:A:603:ILE:HD11	1:A:625:ILE:HG13	0.45	1.88	15	4
1:A:682:TRP:O	1:A:683:ASP:C	0.45	2.60	2	1
1:A:604:GLY:C	1:A:618:LEU:HD23	0.45	2.36	4	1
1:A:630:HIS:ND1	1:A:703:PHE:CD1	0.45	2.84	4	1
1:A:620:ARG:HG3	1:A:621:VAL:HG23	0.45	1.88	7	1
1:A:601:PHE:O	1:A:625:ILE:HB	0.45	2.12	15	3
1:A:670:PHE:CD1	1:A:715:VAL:O	0.45	2.70	10	1
1:A:665:ILE:CG2	1:A:668:THR:HG21	0.45	2.42	12	1
1:A:686:ASN:OD1	1:A:686:ASN:O	0.45	2.35	15	1
1:A:575:GLY:C	1:A:595:GLN:NE2	0.45	2.74	1	1
1:A:651:HIS:HE2	1:A:655:ASN:C	0.45	2.19	1	2
1:A:677:GLU:CA	1:A:692:PHE:O	0.45	2.64	15	8
1:A:581:LYS:O	1:A:693:LYS:CB	0.45	2.65	3	3
1:A:651:HIS:CG	1:A:652:THR:N	0.45	2.85	3	1
1:A:678:ILE:O	1:A:692:PHE:N	0.45	2.47	3	1
1:A:659:LEU:HD21	1:A:676:ASP:CB	0.45	2.41	7	1
1:A:592:LEU:CD1	1:A:613:ILE:HD11	0.45	2.41	10	1
1:A:625:ILE:CG1	1:A:649:TYR:CD2	0.45	2.99	12	1
1:A:720:THR:O	1:A:721:ALA:C	0.45	2.60	14	6
1:A:618:LEU:CD2	1:A:681:ILE:HB	0.45	2.42	2	1
1:A:658:TYR:CE1	1:A:682:TRP:CB	0.45	3.00	5	2
1:A:586:SER:O	1:A:589:GLN:CG	0.45	2.65	11	1
1:A:602:PHE:C	1:A:609:CYS:HB2	0.45	2.37	10	3
1:A:598:VAL:O	1:A:599:ASN:C	0.45	2.60	7	7
1:A:626:PHE:CZ	1:A:628:LYS:HG2	0.45	2.47	2	1
1:A:704:ASN:O	1:A:705:GLU:C	0.45	2.60	2	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:624:PHE:CD2	1:A:650:CYS:SG	0.45	3.10	6	1
1:A:690:ILE:N	1:A:690:ILE:CD1	0.45	2.80	11	1
1:A:587:ILE:CB	1:A:615:ASP:OD2	0.45	2.65	13	1
1:A:587:ILE:CG1	1:A:615:ASP:OD2	0.45	2.65	13	1
1:A:613:ILE:HG21	1:A:690:ILE:HG21	0.45	1.89	14	1
1:A:627:LYS:NZ	1:A:647:ILE:HG23	0.45	2.26	3	1
1:A:649:TYR:HB2	1:A:672:LEU:CD1	0.45	2.41	5	4
1:A:598:VAL:HG13	1:A:599:ASN:N	0.45	2.27	14	1
1:A:681:ILE:HB	1:A:690:ILE:CG1	0.45	2.41	15	1
1:A:714:ARG:O	1:A:714:ARG:HG3	0.45	2.12	3	3
1:A:700:THR:OG1	1:A:701:GLY:N	0.45	2.49	2	1
1:A:579:THR:OG1	1:A:697:ASN:ND2	0.45	2.50	5	2
1:A:594:ILE:HG12	1:A:601:PHE:CD1	0.45	2.46	9	3
1:A:650:CYS:SG	1:A:668:THR:O	0.45	2.74	6	2
1:A:619:SER:H	1:A:622:HIS:HD1	0.45	1.55	6	1
1:A:600:PRO:O	1:A:610:ASN:ND2	0.45	2.50	7	3
1:A:620:ARG:O	1:A:621:VAL:C	0.45	2.58	12	1
1:A:602:PHE:C	1:A:603:ILE:HG12	0.44	2.37	2	8
1:A:587:ILE:HD13	1:A:615:ASP:OD2	0.44	2.12	2	1
1:A:649:TYR:CD1	1:A:649:TYR:C	0.44	2.95	5	3
1:A:598:VAL:CG1	1:A:601:PHE:HB2	0.44	2.42	4	2
1:A:684:LYS:O	1:A:686:ASN:N	0.44	2.50	4	1
1:A:628:LYS:O	1:A:629:ARG:C	0.44	2.60	9	2
1:A:663:ARG:NH2	1:A:665:ILE:CG2	0.44	2.80	5	1
1:A:685:ASN:OD1	1:A:685:ASN:N	0.44	2.50	8	1
1:A:659:LEU:CD2	1:A:678:ILE:HG22	0.44	2.42	9	1
1:A:658:TYR:CE2	1:A:679:LYS:O	0.44	2.70	11	1
1:A:629:ARG:CD	1:A:644:LEU:O	0.44	2.65	14	1
1:A:673:GLN:O	1:A:694:VAL:CG1	0.44	2.65	14	2
1:A:602:PHE:C	1:A:603:ILE:HG13	0.44	2.37	16	1
1:A:670:PHE:HA	1:A:717:LEU:HD12	0.44	1.89	1	1
1:A:649:TYR:HB2	1:A:672:LEU:CG	0.44	2.42	2	2
1:A:658:TYR:CZ	1:A:682:TRP:HB3	0.44	2.47	5	1
1:A:619:SER:O	1:A:620:ARG:O	0.44	2.36	9	1
1:A:606:SER:O	1:A:606:SER:OG	0.44	2.36	10	1
1:A:653:GLY:O	1:A:666:GLN:HG3	0.44	2.12	10	2
1:A:656:VAL:HG23	1:A:658:TYR:CZ	0.44	2.45	15	1
1:A:703:PHE:CD2	1:A:704:ASN:HB2	0.44	2.48	2	2
1:A:654:THR:C	1:A:655:ASN:OD1	0.44	2.61	3	1
1:A:714:ARG:CD	1:A:714:ARG:O	0.44	2.66	14	1
1:A:647:ILE:CG1	1:A:672:LEU:HB2	0.44	2.41	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:681:ILE:CG2	1:A:688:PHE:CE2	0.44	2.99	3	1
1:A:576:ARG:NH1	1:A:576:ARG:CB	0.44	2.80	4	1
1:A:659:LEU:CD1	1:A:672:LEU:HG	0.44	2.42	4	1
1:A:683:ASP:O	1:A:684:LYS:C	0.44	2.60	4	2
1:A:589:GLN:O	1:A:590:GLU:CD	0.44	2.60	12	2
1:A:597:GLY:HA3	1:A:627:LYS:CE	0.44	2.42	8	1
1:A:662:ASN:OD1	1:A:715:VAL:HA	0.44	2.12	8	1
1:A:645:ASP:O	1:A:702:LEU:CD2	0.44	2.65	9	2
1:A:582:PRO:HG3	1:A:588:ILE:CG2	0.44	2.41	10	1
1:A:656:VAL:CB	1:A:664:MET:O	0.44	2.65	10	1
1:A:681:ILE:HG21	1:A:688:PHE:CD1	0.44	2.47	1	1
1:A:659:LEU:HD11	1:A:676:ASP:OD2	0.44	2.11	2	1
1:A:606:SER:CB	1:A:620:ARG:HB3	0.44	2.43	3	1
1:A:651:HIS:CD2	1:A:656:VAL:CA	0.44	2.99	16	2
1:A:592:LEU:O	1:A:593:GLU:CG	0.44	2.65	16	2
1:A:630:HIS:CD2	1:A:703:PHE:CZ	0.44	3.06	10	1
1:A:656:VAL:HB	1:A:664:MET:O	0.44	2.13	15	2
1:A:670:PHE:HA	1:A:717:LEU:CD1	0.44	2.43	12	1
1:A:626:PHE:CE2	1:A:628:LYS:CG	0.44	3.00	14	1
1:A:623:CYS:SG	1:A:680:ILE:HD13	0.44	2.53	16	1
1:A:617:ARG:CG	1:A:688:PHE:CD2	0.44	3.00	2	1
1:A:598:VAL:HG11	1:A:601:PHE:HB2	0.44	1.90	4	1
1:A:650:CYS:CB	1:A:669:LYS:HA	0.44	2.43	7	5
1:A:616:ASN:O	1:A:617:ARG:C	0.44	2.60	8	5
1:A:677:GLU:HG3	1:A:692:PHE:O	0.44	2.13	6	1
1:A:657:SER:O	1:A:664:MET:CG	0.44	2.66	9	1
1:A:609:CYS:SG	1:A:611:CYS:O	0.44	2.75	1	4
1:A:613:ILE:HD12	1:A:692:PHE:CZ	0.44	2.47	3	1
1:A:724:LYS:O	1:A:725:ASP:CG	0.44	2.61	12	2
1:A:583:LEU:HD12	1:A:583:LEU:H	0.44	1.71	8	1
1:A:626:PHE:CZ	1:A:628:LYS:CG	0.44	3.01	12	1
1:A:647:ILE:CD1	1:A:672:LEU:CB	0.44	2.96	13	1
1:A:699:THR:O	1:A:701:GLY:N	0.44	2.50	3	3
1:A:605:ARG:CG	1:A:618:LEU:HB2	0.44	2.42	12	2
1:A:630:HIS:CD2	1:A:630:HIS:C	0.44	2.96	12	1
1:A:659:LEU:HB3	1:A:670:PHE:CE2	0.44	2.48	2	1
1:A:681:ILE:HG21	1:A:688:PHE:CE1	0.44	2.48	2	2
1:A:644:LEU:HA	1:A:701:GLY:O	0.44	2.12	4	1
1:A:588:ILE:HG13	1:A:613:ILE:CG1	0.44	2.43	5	1
1:A:624:PHE:CZ	1:A:727:VAL:CG2	0.44	2.97	12	1
1:A:644:LEU:O	1:A:645:ASP:OD2	0.44	2.35	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:686:ASN:O	1:A:687:LYS:CB	0.44	2.66	15	1
1:A:724:LYS:O	1:A:725:ASP:C	0.43	2.61	16	7
1:A:613:ILE:O	1:A:613:ILE:CG2	0.43	2.66	10	3
1:A:693:LYS:HE3	1:A:695:GLU:CG	0.43	2.44	9	1
1:A:582:PRO:HB3	1:A:692:PHE:CZ	0.43	2.47	10	1
1:A:630:HIS:CG	1:A:703:PHE:CZ	0.43	3.06	10	1
1:A:670:PHE:CE1	1:A:715:VAL:O	0.43	2.71	10	1
1:A:602:PHE:C	1:A:609:CYS:HB3	0.43	2.38	14	1
1:A:652:THR:HG22	1:A:723:GLU:OE1	0.43	2.13	16	1
1:A:617:ARG:HB2	1:A:688:PHE:CZ	0.43	2.48	2	3
1:A:592:LEU:C	1:A:593:GLU:HG3	0.43	2.38	5	1
1:A:680:ILE:HG22	1:A:681:ILE:CG1	0.43	2.43	6	1
1:A:607:GLU:C	1:A:609:CYS:N	0.43	2.76	16	3
1:A:615:ASP:O	1:A:616:ASN:CB	0.43	2.66	14	1
1:A:624:PHE:CD1	1:A:727:VAL:CG2	0.43	2.96	16	1
1:A:587:ILE:HD13	1:A:688:PHE:CE1	0.43	2.48	2	1
1:A:629:ARG:N	1:A:645:ASP:OD1	0.43	2.50	2	1
1:A:648:TRP:CE3	1:A:669:LYS:CE	0.43	3.01	15	2
1:A:575:GLY:HA3	1:A:595:GLN:NE2	0.43	2.29	14	3
1:A:658:TYR:CB	1:A:663:ARG:HA	0.43	2.42	7	1
1:A:690:ILE:O	1:A:691:GLY:C	0.43	2.61	7	3
1:A:659:LEU:HG	1:A:676:ASP:OD1	0.43	2.12	12	1
1:A:664:MET:CB	1:A:716:VAL:HG21	0.43	2.44	14	1
1:A:699:THR:O	1:A:700:THR:C	0.43	2.62	14	1
1:A:603:ILE:CG1	1:A:623:CYS:SG	0.43	3.06	2	1
1:A:726:LEU:CD1	1:A:727:VAL:CG2	0.43	2.84	13	2
1:A:615:ASP:HB3	1:A:618:LEU:CG	0.43	2.44	7	1
1:A:659:LEU:CD2	1:A:676:ASP:CG	0.43	2.92	7	1
1:A:662:ASN:HB3	1:A:670:PHE:CE2	0.43	2.48	11	1
1:A:698:ASP:O	1:A:699:THR:C	0.43	2.60	11	1
1:A:704:ASN:CG	1:A:704:ASN:O	0.43	2.61	14	1
1:A:619:SER:C	1:A:620:ARG:CG	0.43	2.89	16	2
1:A:702:LEU:C	1:A:702:LEU:CD1	0.43	2.91	16	7
1:A:622:HIS:HA	1:A:653:GLY:HA3	0.43	1.91	3	1
1:A:586:SER:HB3	1:A:691:GLY:N	0.43	2.27	8	2
1:A:673:GLN:O	1:A:676:ASP:HB2	0.43	2.14	15	5
1:A:583:LEU:HD12	1:A:691:GLY:O	0.43	2.14	9	1
1:A:606:SER:O	1:A:607:GLU:HB3	0.43	2.13	9	1
1:A:669:LYS:HG3	1:A:670:PHE:N	0.43	2.29	13	2
1:A:587:ILE:CD1	1:A:615:ASP:OD1	0.43	2.67	14	1
1:A:624:PHE:CD1	1:A:625:ILE:O	0.43	2.71	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:648:TRP:CH2	1:A:671:LEU:HD12	0.43	2.46	16	1
1:A:587:ILE:CG2	1:A:615:ASP:OD2	0.43	2.67	15	2
1:A:613:ILE:HB	1:A:618:LEU:HD12	0.43	1.91	2	1
1:A:650:CYS:HB3	1:A:668:THR:O	0.43	2.13	2	2
1:A:622:HIS:C	1:A:651:HIS:CE1	0.43	2.97	4	4
1:A:649:TYR:CD1	1:A:650:CYS:N	0.43	2.87	4	1
1:A:702:LEU:HG	1:A:702:LEU:O	0.43	2.13	4	1
1:A:576:ARG:NE	1:A:593:GLU:HG2	0.43	2.28	6	1
1:A:683:ASP:OD2	1:A:686:ASN:CB	0.43	2.66	15	1
1:A:599:ASN:CG	1:A:627:LYS:O	0.43	2.61	16	1
1:A:678:ILE:HG13	1:A:692:PHE:HB2	0.43	1.90	2	3
1:A:664:MET:HB3	1:A:668:THR:OG1	0.43	2.14	2	1
1:A:681:ILE:HD13	1:A:681:ILE:C	0.43	2.36	4	1
1:A:648:TRP:CG	1:A:669:LYS:HE3	0.43	2.47	5	1
1:A:615:ASP:CB	1:A:618:LEU:CD1	0.43	2.97	16	2
1:A:648:TRP:CZ3	1:A:717:LEU:HD21	0.43	2.49	6	1
1:A:681:ILE:HG13	1:A:690:ILE:HG13	0.43	1.89	6	1
1:A:673:GLN:N	1:A:676:ASP:OD2	0.43	2.52	7	2
1:A:587:ILE:HB	1:A:690:ILE:HD11	0.43	1.90	8	1
1:A:602:PHE:CD2	1:A:730:LEU:CD1	0.43	3.02	16	2
1:A:703:PHE:O	1:A:705:GLU:N	0.43	2.52	13	1
1:A:728:LYS:O	1:A:728:LYS:HG2	0.43	2.13	14	1
1:A:626:PHE:CE2	1:A:724:LYS:CD	0.43	3.01	16	1
1:A:613:ILE:HB	1:A:618:LEU:CD1	0.43	2.44	7	2
1:A:615:ASP:HB2	1:A:618:LEU:CD2	0.43	2.44	4	1
1:A:705:GLU:O	1:A:705:GLU:HG3	0.43	2.13	4	1
1:A:647:ILE:N	1:A:647:ILE:CD1	0.43	2.82	5	1
1:A:597:GLY:HA3	1:A:627:LYS:CD	0.43	2.44	12	3
1:A:658:TYR:O	1:A:679:LYS:N	0.43	2.50	16	2
1:A:659:LEU:CD2	1:A:676:ASP:OD2	0.43	2.66	7	1
1:A:696:ILE:HG21	1:A:699:THR:HB	0.43	1.89	11	1
1:A:624:PHE:CE1	1:A:727:VAL:CG2	0.43	2.86	12	1
1:A:603:ILE:N	1:A:609:CYS:HB2	0.43	2.29	2	1
1:A:655:ASN:HB2	1:A:681:ILE:CD1	0.43	2.43	3	1
1:A:602:PHE:CE1	1:A:727:VAL:HG13	0.43	2.49	4	1
1:A:666:GLN:C	1:A:668:THR:N	0.43	2.77	9	6
1:A:580:LEU:HD12	1:A:692:PHE:CG	0.43	2.45	5	1
1:A:690:ILE:HG22	1:A:692:PHE:CE2	0.43	2.48	5	1
1:A:678:ILE:HD11	1:A:694:VAL:HG23	0.43	1.91	15	1
1:A:652:THR:CG2	1:A:727:VAL:HG11	0.43	2.16	16	1
1:A:606:SER:N	1:A:620:ARG:HA	0.43	2.29	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:584:PRO:HA	1:A:589:GLN:NE2	0.43	2.28	5	2
1:A:586:SER:CB	1:A:691:GLY:O	0.43	2.67	12	3
1:A:672:LEU:C	1:A:673:GLN:CG	0.43	2.92	6	2
1:A:683:ASP:N	1:A:688:PHE:O	0.43	2.51	9	1
1:A:724:LYS:HB2	1:A:726:LEU:HG	0.43	1.91	10	1
1:A:699:THR:HA	1:A:702:LEU:CB	0.43	2.43	16	1
1:A:665:ILE:O	1:A:665:ILE:HG12	0.42	2.13	1	1
1:A:615:ASP:O	1:A:618:LEU:CG	0.42	2.66	5	1
1:A:722:GLU:CG	1:A:728:LYS:HD2	0.42	2.44	7	1
1:A:645:ASP:O	1:A:646:ASP:OD1	0.42	2.37	12	1
1:A:615:ASP:CG	1:A:690:ILE:CD1	0.42	2.92	2	3
1:A:677:GLU:HG2	1:A:692:PHE:O	0.42	2.14	9	2
1:A:586:SER:HB2	1:A:689:VAL:O	0.42	2.14	3	1
1:A:703:PHE:CD2	1:A:704:ASN:OD1	0.42	2.71	3	2
1:A:729:LYS:C	1:A:730:LEU:HD23	0.42	2.38	5	1
1:A:703:PHE:O	1:A:704:ASN:CB	0.42	2.67	9	1
1:A:601:PHE:HA	1:A:610:ASN:CB	0.42	2.44	16	2
1:A:605:ARG:HD2	1:A:614:GLU:HA	0.42	1.91	14	1
1:A:598:VAL:CG1	1:A:610:ASN:ND2	0.42	2.72	16	1
1:A:626:PHE:CE2	1:A:724:LYS:CE	0.42	3.02	16	1
1:A:603:ILE:HG23	1:A:611:CYS:CB	0.42	2.44	11	2
1:A:580:LEU:HD23	1:A:594:ILE:CD1	0.42	2.45	2	2
1:A:609:CYS:SG	1:A:621:VAL:HG23	0.42	2.54	3	1
1:A:599:ASN:CG	1:A:627:LYS:HB3	0.42	2.39	15	2
1:A:606:SER:O	1:A:607:GLU:C	0.42	2.62	10	2
1:A:649:TYR:HB2	1:A:672:LEU:HD11	0.42	1.90	5	1
1:A:669:LYS:NZ	1:A:717:LEU:HD11	0.42	2.28	6	1
1:A:579:THR:O	1:A:695:GLU:HB2	0.42	2.14	7	1
1:A:605:ARG:O	1:A:605:ARG:NE	0.42	2.52	13	1
1:A:714:ARG:O	1:A:714:ARG:CG	0.42	2.67	5	3
1:A:674:ASP:CG	1:A:674:ASP:O	0.42	2.61	6	1
1:A:649:TYR:C	1:A:650:CYS:SG	0.42	3.02	7	1
1:A:702:LEU:CD2	1:A:702:LEU:C	0.42	2.92	9	1
1:A:625:ILE:HG12	1:A:649:TYR:CD2	0.42	2.49	12	1
1:A:722:GLU:C	1:A:724:LYS:N	0.42	2.71	16	2
1:A:723:GLU:HG3	1:A:728:LYS:CA	0.42	2.44	3	1
1:A:679:LYS:C	1:A:681:ILE:N	0.42	2.78	8	1
1:A:682:TRP:HA	1:A:689:VAL:HG23	0.42	1.91	8	1
1:A:649:TYR:CE2	1:A:678:ILE:CG2	0.42	2.92	15	1
1:A:644:LEU:O	1:A:645:ASP:CG	0.42	2.63	2	2
1:A:588:ILE:HG21	1:A:692:PHE:CZ	0.42	2.49	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:606:SER:HB3	1:A:620:ARG:HA	0.42	1.91	10	1
1:A:587:ILE:HD12	1:A:689:VAL:C	0.42	2.40	12	1
1:A:705:GLU:HG2	1:A:705:GLU:O	0.42	2.15	15	1
1:A:626:PHE:HB3	1:A:648:TRP:HB2	0.42	1.92	1	1
1:A:624:PHE:CA	1:A:650:CYS:O	0.42	2.68	3	4
1:A:655:ASN:OD1	1:A:655:ASN:N	0.42	2.53	3	1
1:A:674:ASP:HB3	1:A:705:GLU:O	0.42	2.14	3	1
1:A:598:VAL:O	1:A:599:ASN:O	0.42	2.37	6	1
1:A:650:CYS:HA	1:A:669:LYS:HA	0.42	1.92	6	1
1:A:703:PHE:O	1:A:704:ASN:OD1	0.42	2.38	9	1
1:A:662:ASN:OD1	1:A:670:PHE:CZ	0.42	2.73	10	1
1:A:643:GLY:O	1:A:644:LEU:C	0.42	2.61	12	1
1:A:605:ARG:HG2	1:A:615:ASP:O	0.42	2.15	13	1
1:A:723:GLU:HG2	1:A:728:LYS:HG2	0.42	1.91	13	1
1:A:713:GLN:O	1:A:713:GLN:CG	0.42	2.68	14	1
1:A:580:LEU:O	1:A:591:SER:CA	0.42	2.67	15	1
1:A:602:PHE:HB2	1:A:609:CYS:CA	0.42	2.45	13	3
1:A:621:VAL:CG2	1:A:730:LEU:HD12	0.42	2.45	4	1
1:A:603:ILE:HG12	1:A:611:CYS:HB2	0.42	1.91	5	1
1:A:582:PRO:HA	1:A:692:PHE:HA	0.42	1.92	11	2
1:A:616:ASN:O	1:A:618:LEU:N	0.42	2.53	6	1
1:A:618:LEU:HD12	1:A:681:ILE:HD11	0.42	1.86	6	1
1:A:601:PHE:CZ	1:A:611:CYS:SG	0.42	3.12	8	1
1:A:588:ILE:C	1:A:589:GLN:HG2	0.42	2.40	9	1
1:A:669:LYS:HG2	1:A:670:PHE:N	0.42	2.29	9	1
1:A:601:PHE:CE2	1:A:611:CYS:SG	0.42	3.12	16	1
1:A:659:LEU:CD1	1:A:678:ILE:HG22	0.42	2.37	16	1
1:A:601:PHE:CZ	1:A:611:CYS:CB	0.42	3.02	3	2
1:A:615:ASP:CG	1:A:690:ILE:CG1	0.42	2.92	8	1
1:A:580:LEU:HB2	1:A:592:LEU:CB	0.42	2.44	9	2
1:A:604:GLY:C	1:A:618:LEU:HD13	0.42	2.39	10	1
1:A:617:ARG:CB	1:A:681:ILE:HG13	0.42	2.45	13	1
1:A:649:TYR:HB2	1:A:672:LEU:HG	0.42	1.90	16	2
1:A:616:ASN:C	1:A:618:LEU:N	0.42	2.77	2	2
1:A:674:ASP:CB	1:A:696:ILE:HD12	0.42	2.45	4	2
1:A:606:SER:C	1:A:608:ASP:N	0.42	2.76	10	3
1:A:663:ARG:CD	1:A:663:ARG:C	0.42	2.93	10	1
1:A:678:ILE:CG1	1:A:692:PHE:HB3	0.42	2.44	11	2
1:A:690:ILE:CG2	1:A:692:PHE:CE2	0.42	3.03	14	2
1:A:618:LEU:HB3	1:A:622:HIS:CB	0.42	2.43	14	1
1:A:615:ASP:OD2	1:A:690:ILE:HD12	0.42	2.14	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:730:LEU:CD1	1:A:730:LEU:C	0.42	2.93	15	1
1:A:627:LYS:HD3	1:A:646:ASP:O	0.41	2.15	1	1
1:A:657:SER:O	1:A:658:TYR:CG	0.41	2.72	3	1
1:A:608:ASP:OD2	1:A:730:LEU:HD22	0.41	2.15	5	1
1:A:597:GLY:HA3	1:A:627:LYS:HE2	0.41	1.91	8	1
1:A:624:PHE:CD1	1:A:727:VAL:HG11	0.41	2.48	10	1
1:A:662:ASN:OD1	1:A:670:PHE:CE1	0.41	2.73	10	1
1:A:606:SER:HB3	1:A:620:ARG:HB3	0.41	1.91	16	1
1:A:656:VAL:O	1:A:658:TYR:CE1	0.41	2.73	16	1
1:A:666:GLN:HG2	1:A:667:GLY:N	0.41	2.30	16	1
1:A:697:ASN:ND2	1:A:697:ASN:N	0.41	2.66	16	1
1:A:607:GLU:O	1:A:609:CYS:O	0.41	2.38	2	1
1:A:581:LYS:O	1:A:693:LYS:HB3	0.41	2.15	3	2
1:A:674:ASP:CB	1:A:696:ILE:HG13	0.41	2.45	3	1
1:A:583:LEU:O	1:A:588:ILE:O	0.41	2.37	7	1
1:A:576:ARG:O	1:A:698:ASP:CG	0.41	2.63	15	1
1:A:723:GLU:HB2	1:A:728:LYS:CB	0.41	2.45	15	1
1:A:721:ALA:O	1:A:722:GLU:HB2	0.41	2.15	16	1
1:A:577:PHE:CD2	1:A:597:GLY:HA2	0.41	2.51	4	1
1:A:587:ILE:N	1:A:587:ILE:HD13	0.41	2.30	4	1
1:A:649:TYR:HE2	1:A:678:ILE:HD12	0.41	1.75	10	1
1:A:644:LEU:HD13	1:A:703:PHE:HA	0.41	1.92	11	1
1:A:605:ARG:CB	1:A:605:ARG:CZ	0.41	2.98	12	1
1:A:720:THR:C	1:A:722:GLU:N	0.41	2.77	14	1
1:A:587:ILE:HG22	1:A:690:ILE:HD11	0.41	1.92	16	1
1:A:621:VAL:HG11	1:A:730:LEU:HD13	0.41	1.91	16	1
1:A:587:ILE:HG22	1:A:688:PHE:CE1	0.41	2.50	3	1
1:A:606:SER:O	1:A:608:ASP:N	0.41	2.53	5	2
1:A:649:TYR:CD2	1:A:678:ILE:HD13	0.41	2.49	12	1
1:A:647:ILE:HD12	1:A:672:LEU:HD13	0.41	1.90	13	1
1:A:596:GLN:O	1:A:597:GLY:C	0.41	2.64	14	1
1:A:603:ILE:CD1	1:A:623:CYS:SG	0.41	3.07	15	1
1:A:678:ILE:CG1	1:A:692:PHE:CB	0.41	2.99	11	2
1:A:620:ARG:O	1:A:621:VAL:CB	0.41	2.69	3	2
1:A:583:LEU:N	1:A:583:LEU:CD2	0.41	2.83	6	1
1:A:703:PHE:CE1	1:A:704:ASN:HB2	0.41	2.51	7	1
1:A:680:ILE:HB	1:A:690:ILE:CD1	0.41	2.46	13	1
1:A:703:PHE:O	1:A:704:ASN:CG	0.41	2.64	13	1
1:A:649:TYR:C	1:A:649:TYR:CD1	0.41	2.97	16	1
1:A:666:GLN:O	1:A:668:THR:HG23	0.41	2.16	16	1
1:A:651:HIS:HD1	1:A:657:SER:CB	0.41	2.29	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:578:LEU:HA	1:A:695:GLU:O	0.41	2.15	3	1
1:A:630:HIS:CE1	1:A:703:PHE:CD1	0.41	3.09	4	1
1:A:615:ASP:OD2	1:A:681:ILE:CB	0.41	2.68	8	1
1:A:587:ILE:CG2	1:A:690:ILE:CD1	0.41	2.98	15	1
1:A:617:ARG:O	1:A:622:HIS:CE1	0.41	2.73	16	1
1:A:581:LYS:CB	1:A:693:LYS:HB3	0.41	2.45	14	2
1:A:588:ILE:HG13	1:A:613:ILE:CG2	0.41	2.45	5	1
1:A:724:LYS:HG2	1:A:726:LEU:CD2	0.41	2.46	6	2
1:A:658:TYR:CD2	1:A:663:ARG:CG	0.41	3.03	7	1
1:A:606:SER:C	1:A:608:ASP:H	0.41	2.24	9	1
1:A:620:ARG:O	1:A:620:ARG:HD3	0.41	2.15	10	1
1:A:696:ILE:HD13	1:A:696:ILE:N	0.41	2.31	11	1
1:A:582:PRO:HA	1:A:691:GLY:O	0.41	2.15	14	1
1:A:724:LYS:O	1:A:725:ASP:OD1	0.41	2.38	14	1
1:A:586:SER:HA	1:A:689:VAL:O	0.41	2.16	2	2
1:A:649:TYR:CE2	1:A:678:ILE:HD12	0.41	2.50	4	1
1:A:577:PHE:HB3	1:A:597:GLY:N	0.41	2.31	7	1
1:A:580:LEU:CD2	1:A:678:ILE:HD11	0.41	2.45	8	1
1:A:650:CYS:HA	1:A:664:MET:CE	0.41	2.46	9	1
1:A:698:ASP:O	1:A:700:THR:N	0.41	2.54	11	1
1:A:702:LEU:HD22	1:A:702:LEU:HA	0.41	1.78	14	1
1:A:724:LYS:HB3	1:A:726:LEU:HG	0.41	1.92	15	1
1:A:592:LEU:CD2	1:A:611:CYS:SG	0.41	3.08	16	1
1:A:722:GLU:O	1:A:728:LYS:HB2	0.41	2.15	2	1
1:A:624:PHE:O	1:A:650:CYS:HB2	0.41	2.15	3	1
1:A:725:ASP:OD1	1:A:725:ASP:O	0.41	2.39	3	1
1:A:587:ILE:CG2	1:A:615:ASP:OD1	0.41	2.69	4	1
1:A:721:ALA:O	1:A:724:LYS:N	0.41	2.54	12	4
1:A:617:ARG:HB3	1:A:681:ILE:CD1	0.41	2.45	8	1
1:A:615:ASP:CG	1:A:690:ILE:HG12	0.41	2.40	11	1
1:A:669:LYS:HB3	1:A:717:LEU:O	0.41	2.16	11	1
1:A:582:PRO:CB	1:A:588:ILE:CG2	0.41	2.99	12	1
1:A:594:ILE:HG23	1:A:601:PHE:CD1	0.41	2.51	14	1
1:A:656:VAL:HG13	1:A:658:TYR:CE2	0.41	2.50	14	1
1:A:606:SER:HB3	1:A:620:ARG:CB	0.41	2.46	15	1
1:A:626:PHE:CE2	1:A:724:LYS:HE2	0.41	2.50	16	1
1:A:652:THR:HA	1:A:667:GLY:H	0.41	1.76	16	1
1:A:725:ASP:O	1:A:725:ASP:CG	0.41	2.63	16	1
1:A:606:SER:O	1:A:609:CYS:SG	0.41	2.79	3	1
1:A:717:LEU:O	1:A:717:LEU:HG	0.41	2.16	6	1
1:A:724:LYS:C	1:A:726:LEU:HG	0.41	2.41	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:662:ASN:ND2	1:A:715:VAL:HA	0.41	2.31	7	1
1:A:627:LYS:O	1:A:628:LYS:CB	0.41	2.68	9	1
1:A:645:ASP:O	1:A:702:LEU:HD21	0.41	2.16	9	1
1:A:690:ILE:CG2	1:A:692:PHE:CD2	0.41	3.04	9	1
1:A:618:LEU:CD2	1:A:680:ILE:CG2	0.41	2.99	12	1
1:A:724:LYS:O	1:A:726:LEU:N	0.41	2.54	14	1
1:A:580:LEU:HB2	1:A:592:LEU:HB2	0.41	1.92	15	1
1:A:586:SER:HA	1:A:689:VAL:HG23	0.41	1.92	16	1
1:A:592:LEU:O	1:A:593:GLU:HG2	0.41	2.16	16	1
1:A:704:ASN:O	1:A:704:ASN:CG	0.40	2.64	1	1
1:A:651:HIS:CB	1:A:657:SER:OG	0.40	2.69	14	2
1:A:656:VAL:C	1:A:664:MET:O	0.40	2.64	2	1
1:A:613:ILE:HG21	1:A:690:ILE:HD13	0.40	1.90	4	1
1:A:649:TYR:CZ	1:A:664:MET:SD	0.40	3.14	5	1
1:A:656:VAL:CA	1:A:664:MET:O	0.40	2.68	10	1
1:A:719:GLN:O	1:A:720:THR:CG2	0.40	2.65	10	1
1:A:659:LEU:C	1:A:661:ASN:N	0.40	2.79	12	1
1:A:575:GLY:O	1:A:595:GLN:CD	0.40	2.64	13	1
1:A:664:MET:HA	1:A:716:VAL:HG21	0.40	1.92	13	1
1:A:583:LEU:O	1:A:589:GLN:HB3	0.40	2.16	16	1
1:A:601:PHE:O	1:A:603:ILE:HG13	0.40	2.16	16	1
1:A:723:GLU:O	1:A:726:LEU:CG	0.40	2.69	16	1
1:A:682:TRP:CD1	1:A:689:VAL:CG1	0.40	3.04	3	1
1:A:585:ASP:OD1	1:A:585:ASP:N	0.40	2.53	11	1
1:A:659:LEU:HD11	1:A:672:LEU:HD21	0.40	1.90	11	1
1:A:626:PHE:CZ	1:A:628:LYS:HG3	0.40	2.51	15	1
1:A:650:CYS:SG	1:A:669:LYS:HA	0.40	2.56	5	1
1:A:657:SER:O	1:A:664:MET:CB	0.40	2.69	9	1
1:A:659:LEU:HD23	1:A:678:ILE:HG22	0.40	1.94	9	1
1:A:617:ARG:HG3	1:A:688:PHE:CG	0.40	2.51	10	1
1:A:657:SER:CB	1:A:680:ILE:O	0.40	2.69	10	1
1:A:680:ILE:HB	1:A:690:ILE:HD13	0.40	1.92	13	1
1:A:723:GLU:CG	1:A:727:VAL:HG12	0.40	2.41	15	1
1:A:624:PHE:CE1	1:A:727:VAL:HG11	0.40	2.52	3	1
1:A:675:GLY:HA2	1:A:694:VAL:O	0.40	2.16	4	1
1:A:602:PHE:CE2	1:A:730:LEU:HD21	0.40	2.51	6	1
1:A:618:LEU:HD12	1:A:681:ILE:CD1	0.40	2.47	6	1
1:A:618:LEU:HD12	1:A:622:HIS:CD2	0.40	2.51	9	1
1:A:629:ARG:HG3	1:A:643:GLY:O	0.40	2.16	9	1
1:A:644:LEU:CB	1:A:703:PHE:HB2	0.40	2.46	15	1
1:A:606:SER:HB3	1:A:620:ARG:CD	0.40	2.46	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:663:ARG:HD2	1:A:663:ARG:C	0.40	2.42	3	1
1:A:618:LEU:N	1:A:618:LEU:HD12	0.40	2.32	6	1
1:A:582:PRO:HG3	1:A:692:PHE:CE1	0.40	2.52	7	1
1:A:603:ILE:HB	1:A:613:ILE:CG1	0.40	2.47	7	1
1:A:648:TRP:CZ3	1:A:717:LEU:HD13	0.40	2.49	9	1
1:A:656:VAL:HB	1:A:658:TYR:CE2	0.40	2.51	10	1
1:A:670:PHE:HD2	1:A:716:VAL:HG22	0.40	1.76	11	1
1:A:599:ASN:CB	1:A:627:LYS:CB	0.40	3.00	15	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	136/182 (75%)	85±4 (62±3%)	37±3 (27±2%)	14±2 (10±2%)	1	9
All	All	2176/2912 (75%)	1357 (62%)	597 (27%)	222 (10%)	1	9

All 48 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	590	GLU	16
1	A	596	GLN	16
1	A	614	GLU	15
1	A	620	ARG	15
1	A	666	GLN	14
1	A	680	ILE	11
1	A	653	GLY	10
1	A	599	ASN	9
1	A	719	GLN	9
1	A	598	VAL	8
1	A	700	THR	7
1	A	718	LYS	7
1	A	687	LYS	7
1	A	616	ASN	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	677	GLU	5
1	A	575	GLY	4
1	A	683	ASP	4
1	A	589	GLN	4
1	A	661	ASN	4
1	A	665	ILE	4
1	A	652	THR	3
1	A	667	GLY	3
1	A	630	HIS	3
1	A	612	LYS	3
1	A	644	LEU	2
1	A	657	SER	2
1	A	686	ASN	2
1	A	621	VAL	2
1	A	704	ASN	2
1	A	685	ASN	2
1	A	703	PHE	2
1	A	660	ASN	2
1	A	713	GLN	2
1	A	678	ILE	2
1	A	682	TRP	2
1	A	603	ILE	1
1	A	656	VAL	1
1	A	684	LYS	1
1	A	701	GLY	1
1	A	613	ILE	1
1	A	694	VAL	1
1	A	617	ARG	1
1	A	688	PHE	1
1	A	629	ARG	1
1	A	716	VAL	1
1	A	645	ASP	1
1	A	725	ASP	1
1	A	602	PHE	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	127/165 (77%)	81±5 (64±4%)	46±5 (36±4%)	1	9
All	All	2032/2640 (77%)	1299 (64%)	733 (36%)	1	9

All 104 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	583	LEU	16
1	A	591	SER	16
1	A	596	GLN	16
1	A	624	PHE	16
1	A	652	THR	16
1	A	658	TYR	16
1	A	699	THR	16
1	A	729	LYS	16
1	A	577	PHE	15
1	A	628	LYS	15
1	A	629	ARG	15
1	A	668	THR	15
1	A	694	VAL	15
1	A	720	THR	14
1	A	669	LYS	13
1	A	684	LYS	13
1	A	610	ASN	12
1	A	659	LEU	12
1	A	603	ILE	11
1	A	617	ARG	11
1	A	645	ASP	11
1	A	621	VAL	11
1	A	698	ASP	11
1	A	714	ARG	11
1	A	620	ARG	11
1	A	612	LYS	10
1	A	681	ILE	10
1	A	702	LEU	10
1	A	722	GLU	10
1	A	728	LYS	10
1	A	724	LYS	10
1	A	587	ILE	9
1	A	605	ARG	9
1	A	611	CYS	9
1	A	619	SER	9
1	A	646	ASP	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	647	ILE	9
1	A	719	GLN	9
1	A	595	GLN	9
1	A	627	LYS	9
1	A	589	GLN	8
1	A	713	GLN	8
1	A	576	ARG	8
1	A	717	LEU	8
1	A	614	GLU	7
1	A	671	LEU	7
1	A	677	GLU	7
1	A	700	THR	7
1	A	590	GLU	7
1	A	687	LYS	7
1	A	695	GLU	7
1	A	615	ASP	6
1	A	676	ASP	6
1	A	723	GLU	6
1	A	718	LYS	6
1	A	581	LYS	6
1	A	592	LEU	5
1	A	679	LYS	5
1	A	656	VAL	5
1	A	664	MET	5
1	A	607	GLU	5
1	A	683	ASP	4
1	A	716	VAL	4
1	A	660	ASN	4
1	A	685	ASN	4
1	A	672	LEU	4
1	A	704	ASN	4
1	A	661	ASN	4
1	A	662	ASN	4
1	A	730	LEU	4
1	A	613	ILE	4
1	A	693	LYS	4
1	A	602	PHE	4
1	A	692	PHE	4
1	A	686	ASN	4
1	A	623	CYS	4
1	A	663	ARG	4
1	A	580	LEU	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	705	GLU	3
1	A	680	ILE	3
1	A	726	LEU	3
1	A	618	LEU	3
1	A	690	ILE	2
1	A	579	THR	2
1	A	655	ASN	2
1	A	606	SER	2
1	A	608	ASP	2
1	A	644	LEU	2
1	A	588	ILE	2
1	A	593	GLU	2
1	A	697	ASN	2
1	A	585	ASP	2
1	A	625	ILE	2
1	A	665	ILE	1
1	A	598	VAL	1
1	A	703	PHE	1
1	A	609	CYS	1
1	A	678	ILE	1
1	A	689	VAL	1
1	A	630	HIS	1
1	A	657	SER	1
1	A	586	SER	1
1	A	616	ASN	1
1	A	666	GLN	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