



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 28, 2026 – 06:18 AM UTC

PDB ID : 1RK7 / pdb_00001rk7
Title : Solution structure of apo Cu,Zn Superoxide Dismutase: role of metal ions in protein folding
Authors : Banci, L.; Bertini, I.; Cramaro, F.; Del Conte, R.; Viezzoli, M.S.
Deposited on : 2003-11-21

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

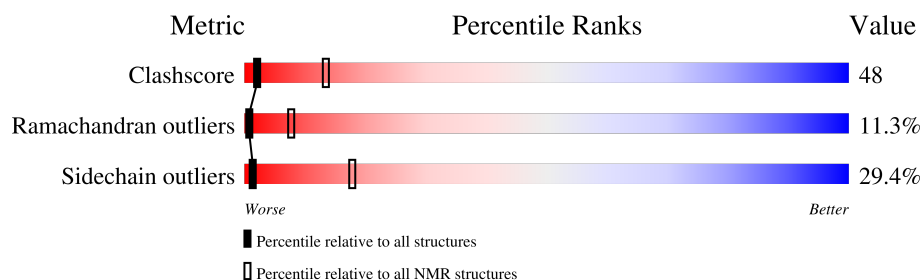
1 Overall quality at a glance

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	153	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 30 models. Model 25 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:2-A:48, A:82-A:153 (119)	1.52	25

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 1 single-model cluster was found.

Cluster number	Models
1	6, 7, 9, 10, 11, 12, 14, 17, 22, 23, 24, 26, 29
2	3, 4, 5, 8, 19, 25, 30
3	1, 2, 15, 20, 21
4	16, 18, 27, 28
Single-model clusters	13

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2188 atoms, of which 1077 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Superoxide dismutase [Cu-Zn].

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	153	Total	C	H	N	O	S	0
			2188	678	1077	204	227	2	

There are 5 discrepancies between the modelled and reference sequences:

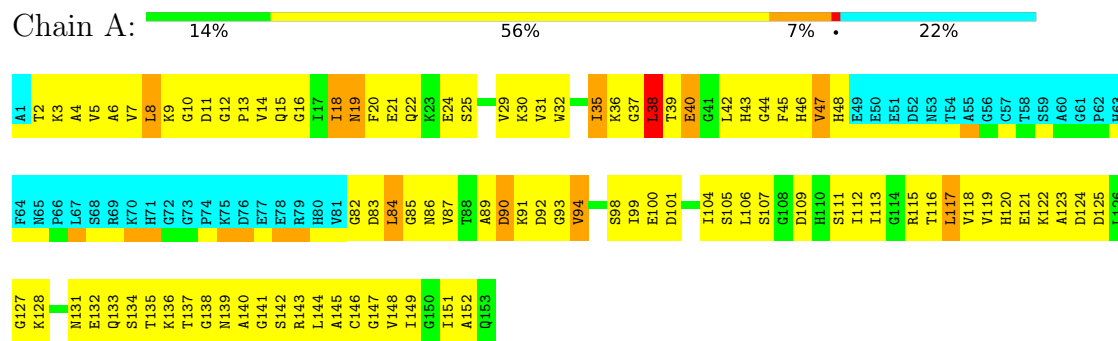
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	6	ALA	CYS	engineered mutation	UNP P00441
A	50	GLU	PHE	engineered mutation	UNP P00441
A	51	GLU	GLY	engineered mutation	UNP P00441
A	111	SER	CYS	engineered mutation	UNP P00441
A	133	GLN	GLU	engineered mutation	UNP P00441

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: Superoxide dismutase [Cu-Zn]

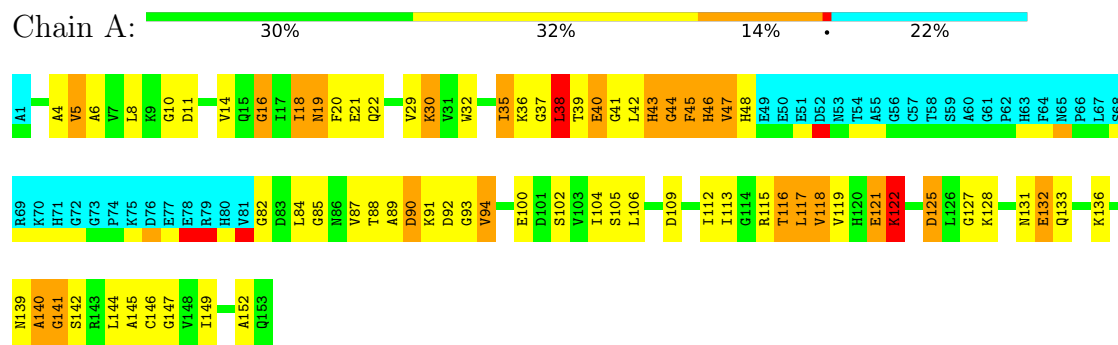


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

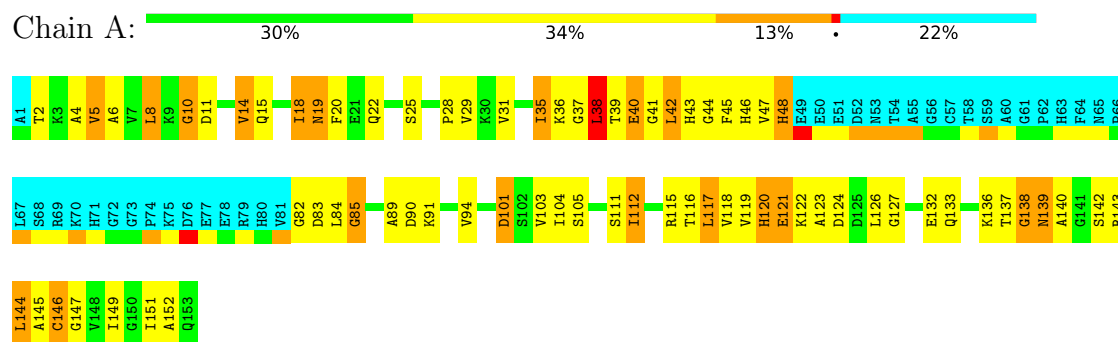
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



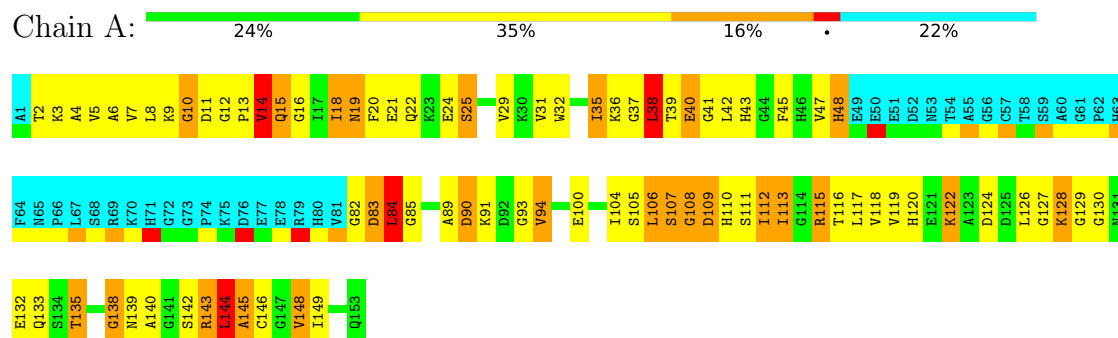
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



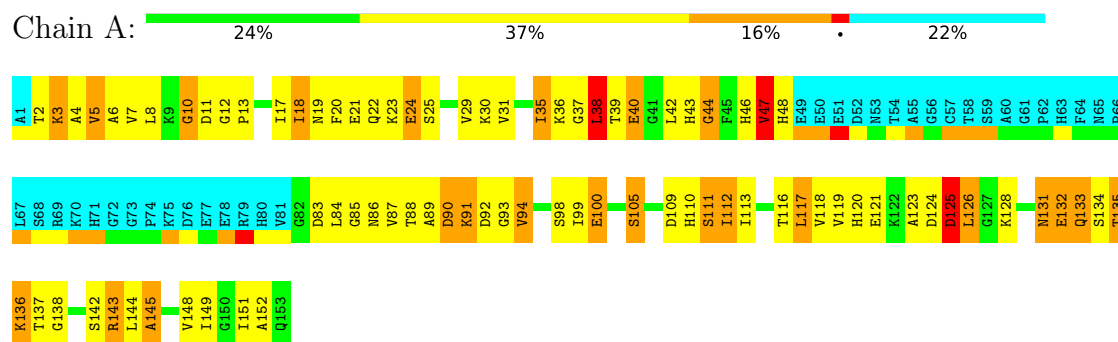
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



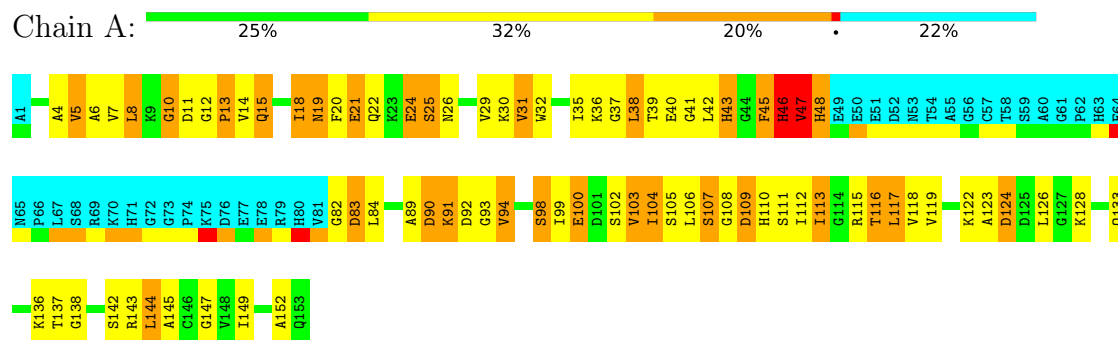
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



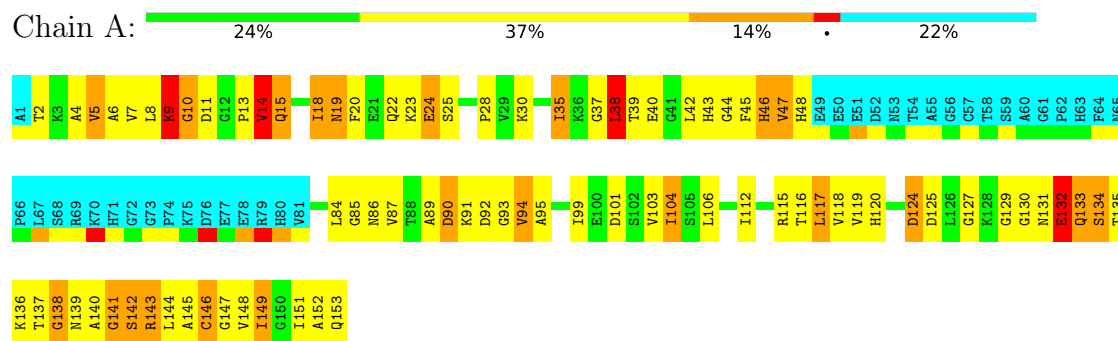
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



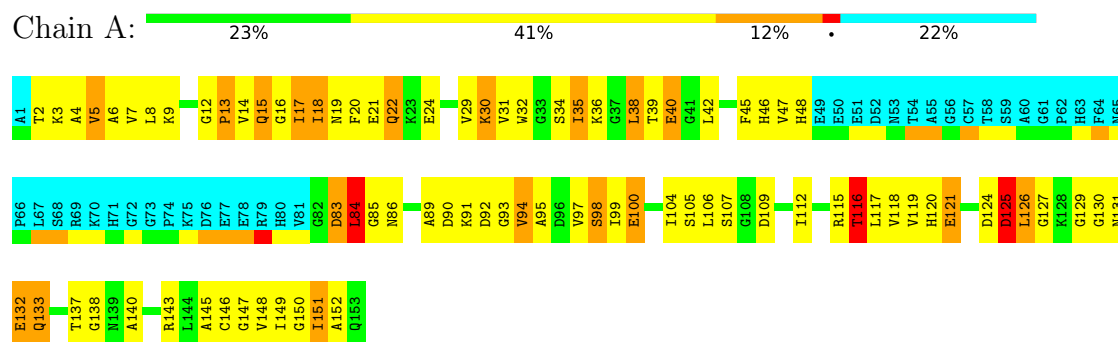
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



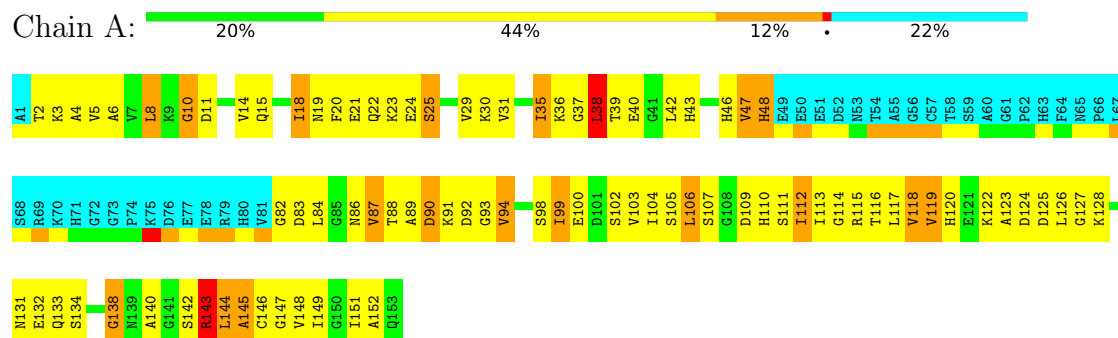
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



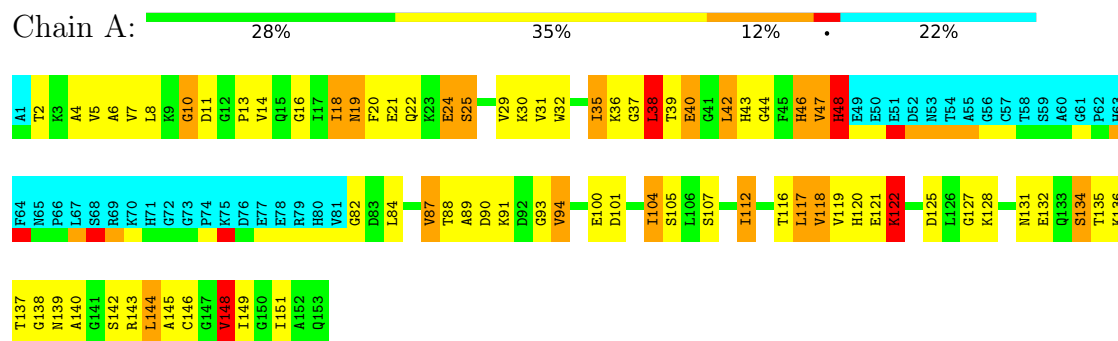
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



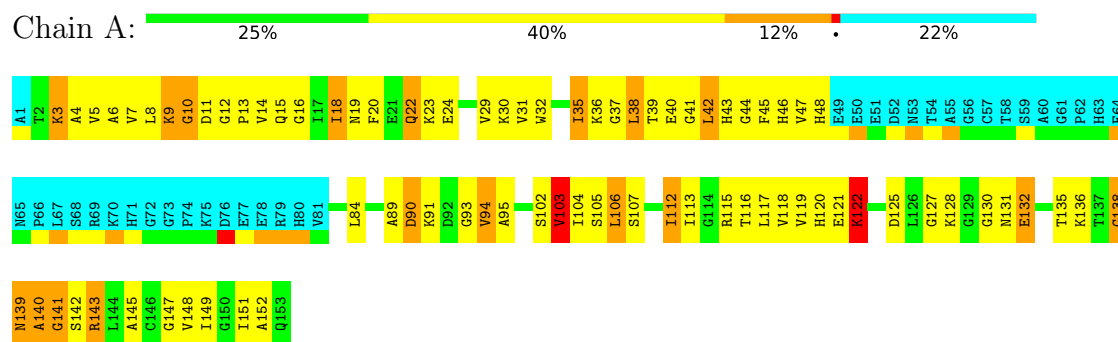
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



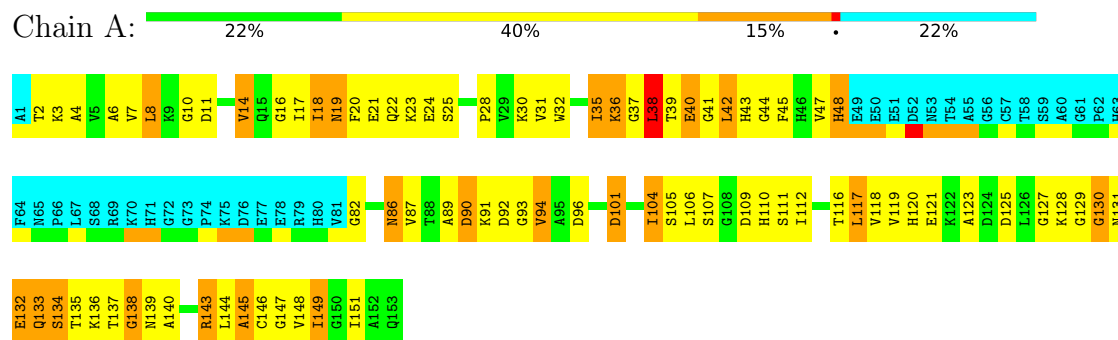
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



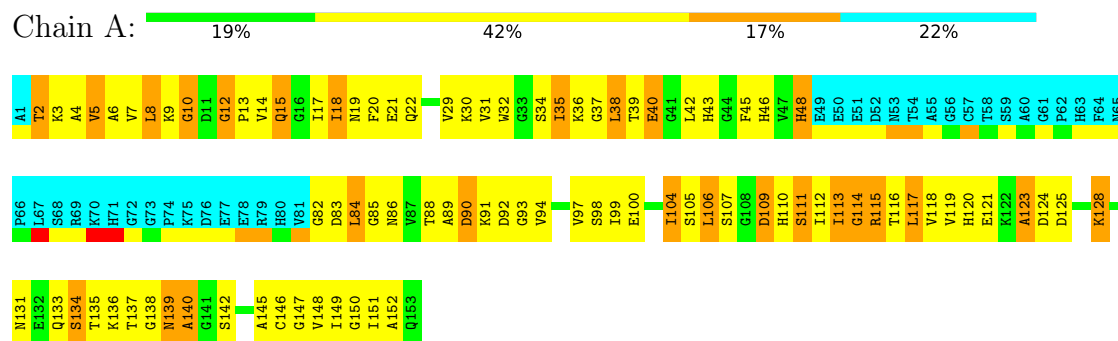
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



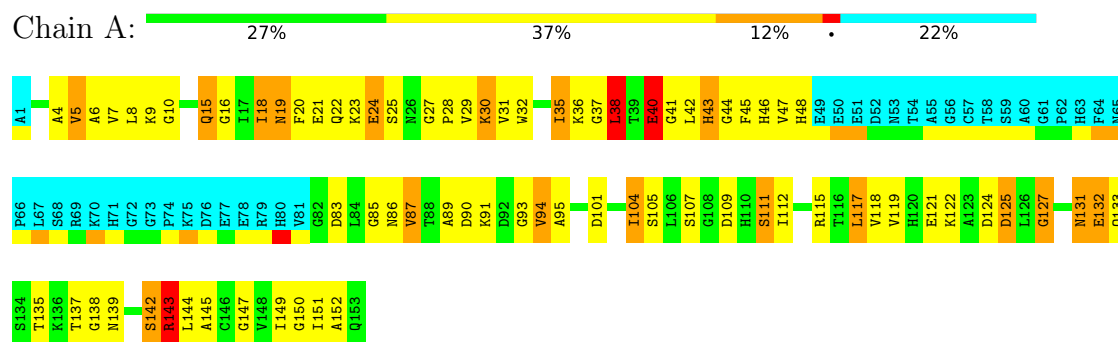
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



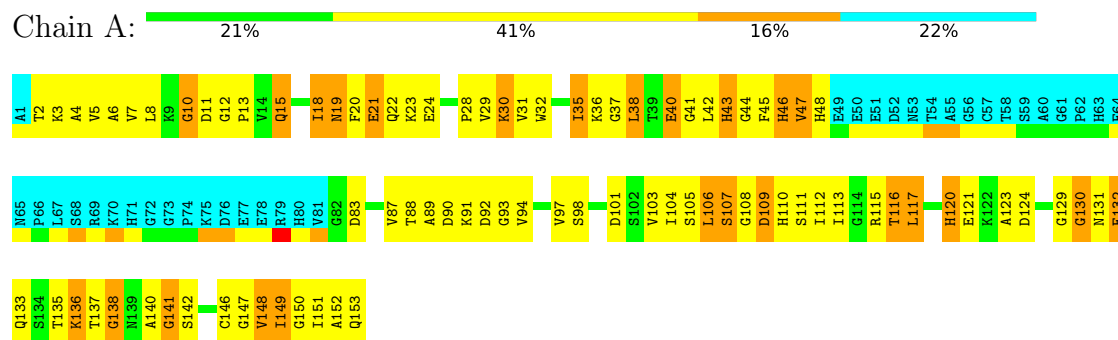
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



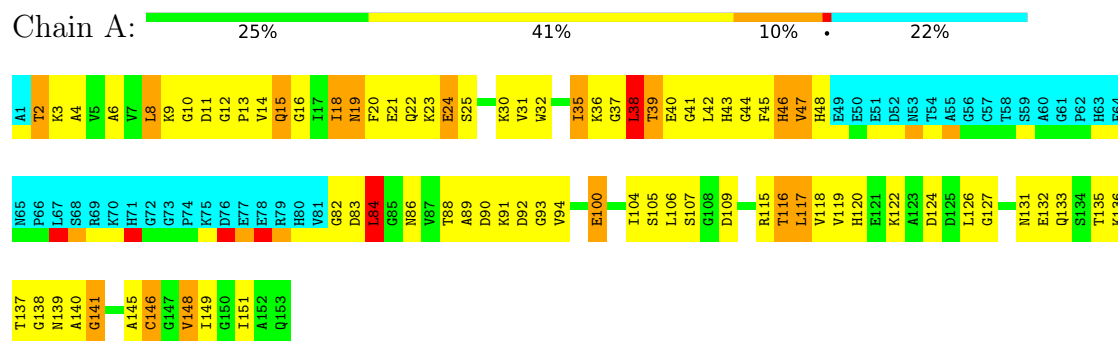
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



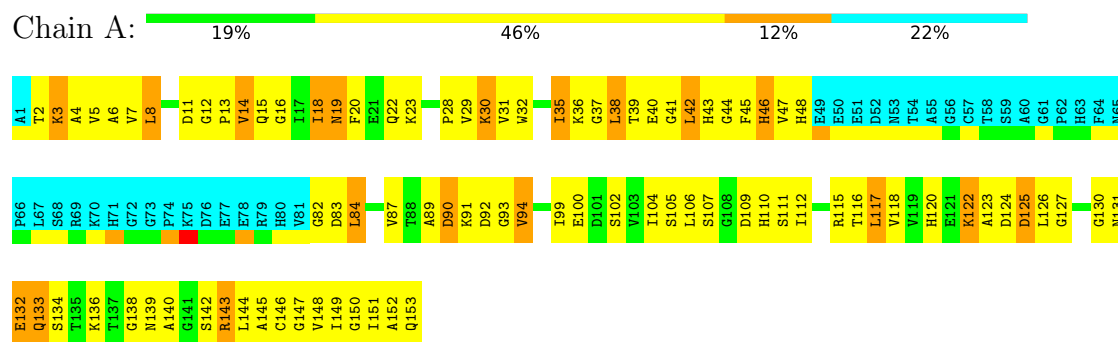
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



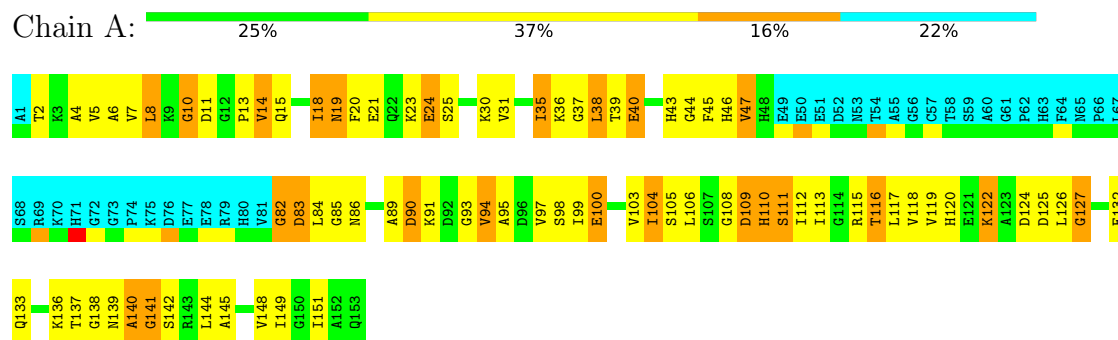
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



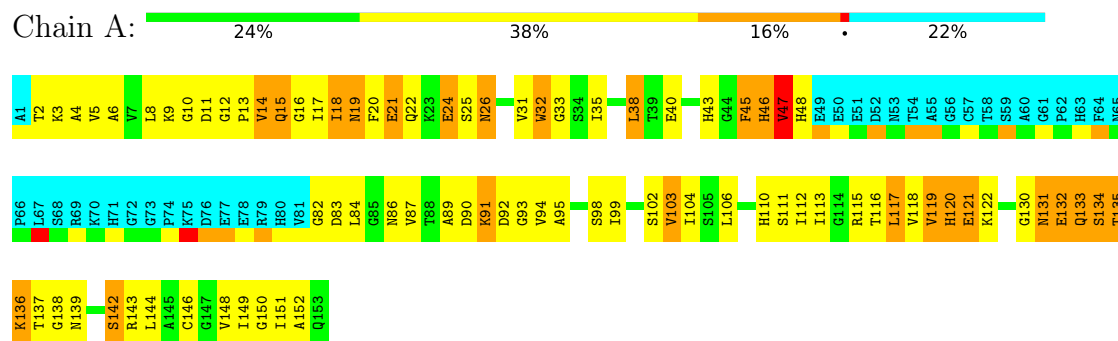
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



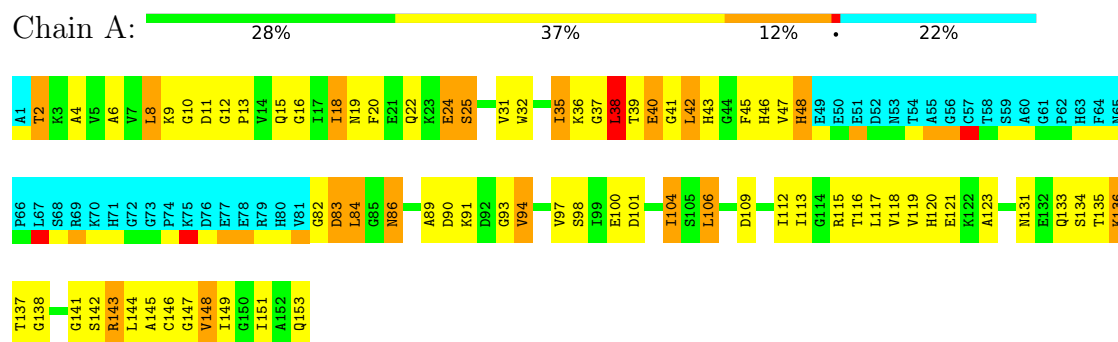
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



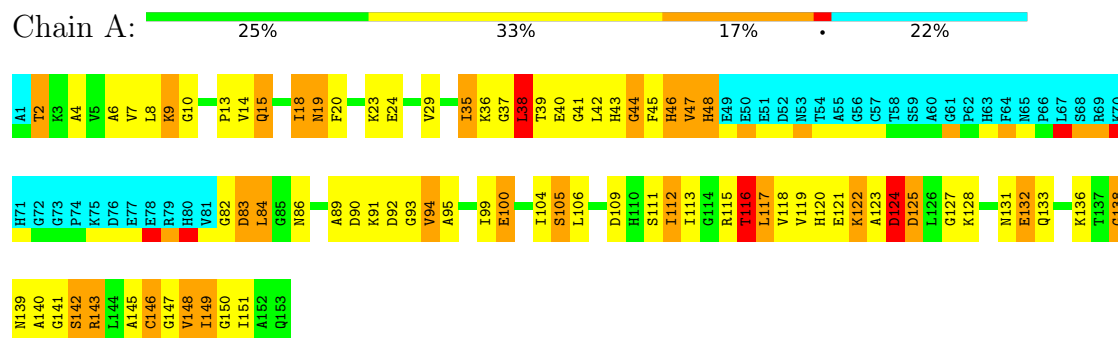
4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



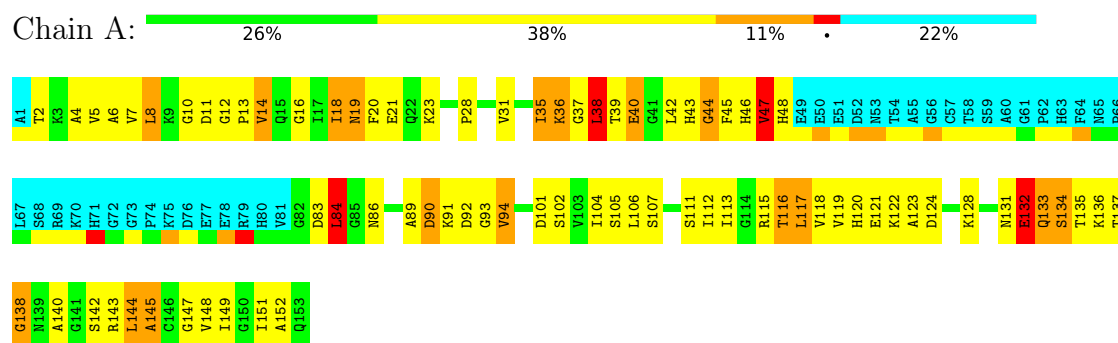
4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



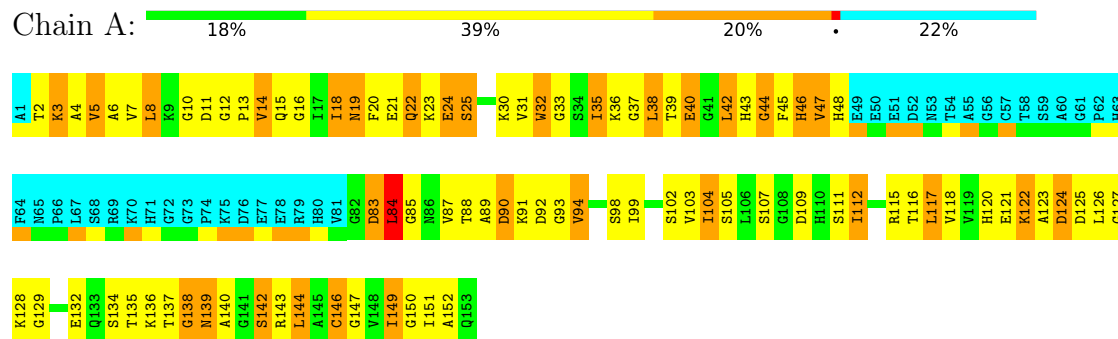
4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



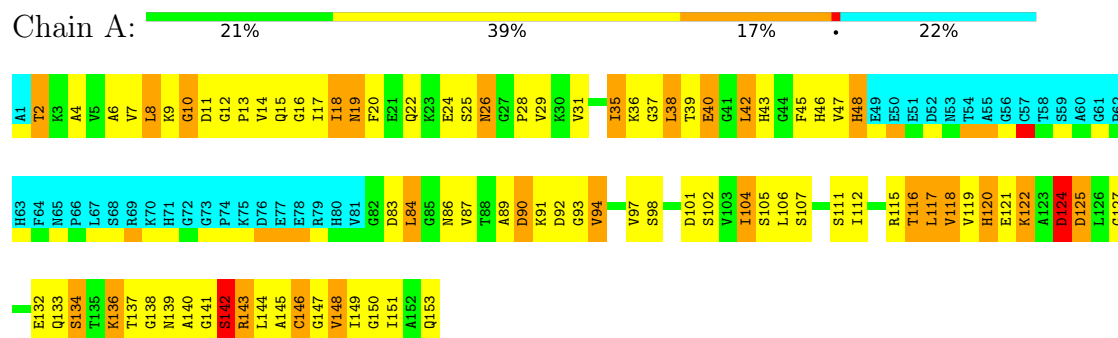
4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



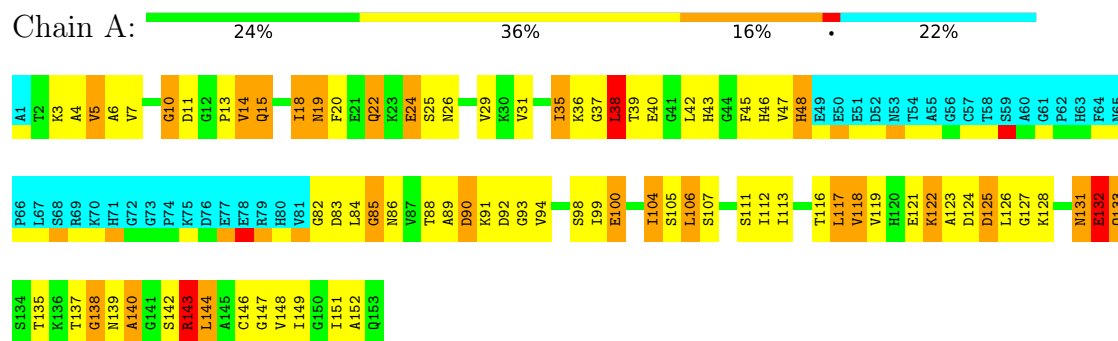
4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



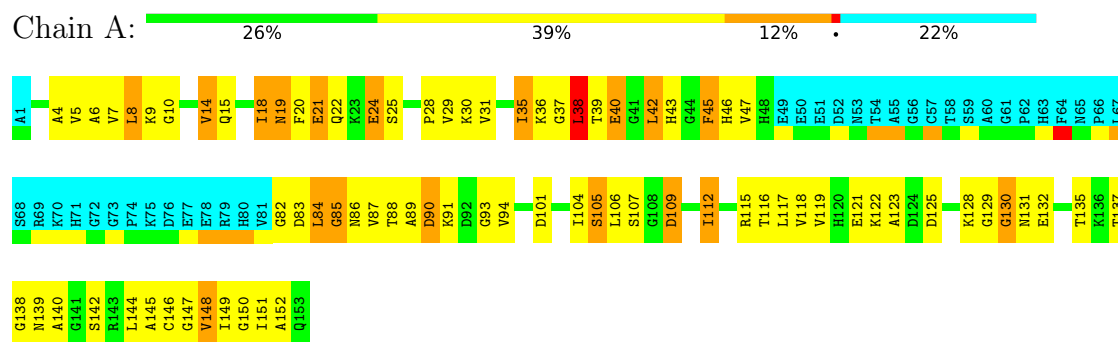
4.2.25 Score per residue for model 25 (medoid)

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



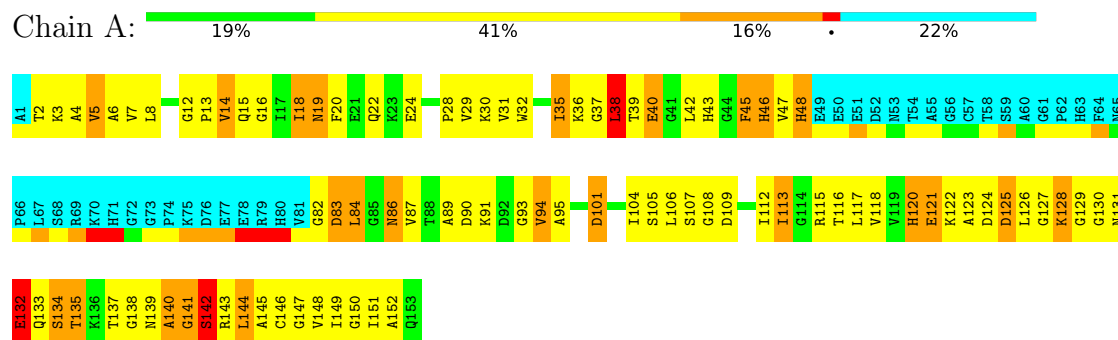
4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



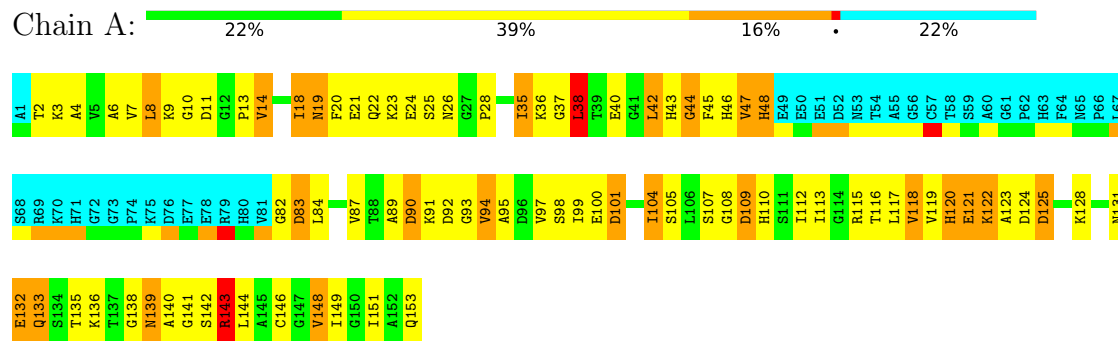
4.2.27 Score per residue for model 27

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



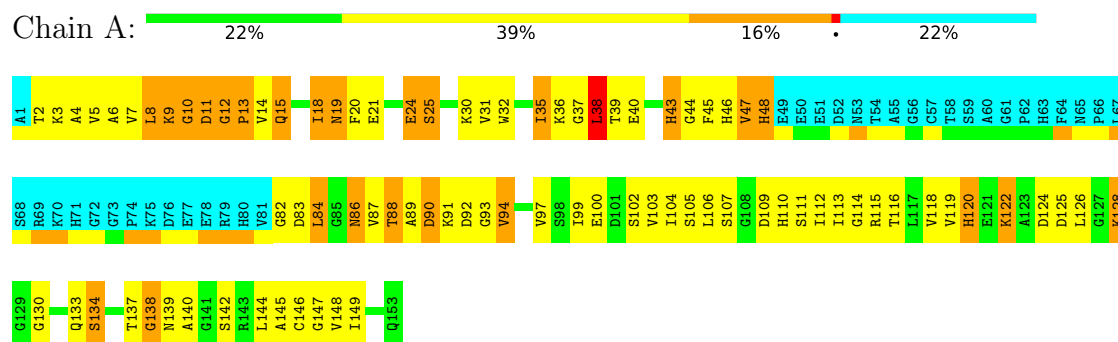
4.2.28 Score per residue for model 28

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



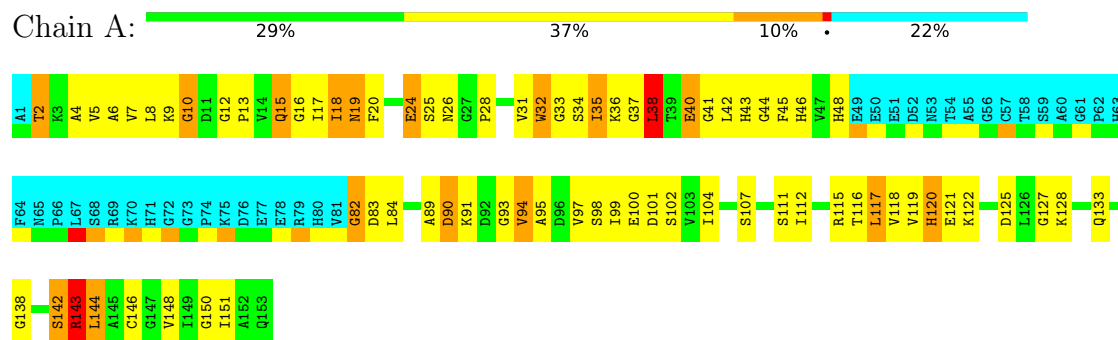
4.2.29 Score per residue for model 29

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



4.2.30 Score per residue for model 30

- Molecule 1: Superoxide dismutase [Cu-Zn]



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *simulated annealing and restrained energy minimization in vacuum*.

Of the 400 calculated structures, 30 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy, target function*.

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

Software name	Classification	Version
CALIBA	structure solution	
GLOMSA	structure solution	
DYANA	structure solution	
Amber	refinement	

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	0.70±0.00	0±0/864 (0.0± 0.0%)	1.06±0.02	0±0/1165 (0.0± 0.0%)
All	All	0.70	0/25920 (0.0%)	1.06	1/34950 (0.0%)

There are no bond-length outliers.

All unique angle outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	137	THR	O-C-N	5.03	124.55	120.83	26	1

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	854	849	850	81±10
All	All	25620	25470	25482	2433

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 48.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:38:LEU:HD22	1:A:43:HIS:CE1	0.99	1.92	28	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:ILE:CG2	1:A:38:LEU:HD21	0.98	1.87	22	1
1:A:8:LEU:HD12	1:A:145:ALA:HB1	0.96	1.33	17	2
1:A:42:LEU:HD23	1:A:86:ASN:CG	0.96	1.85	21	2
1:A:18:ILE:HD12	1:A:19:ASN:N	0.96	1.75	1	17
1:A:4:ALA:HB1	1:A:149:ILE:HG23	0.95	1.34	16	12
1:A:118:VAL:HG12	1:A:145:ALA:O	0.94	1.62	6	6
1:A:116:THR:OG1	1:A:148:VAL:HG22	0.94	1.62	24	3
1:A:6:ALA:HB2	1:A:149:ILE:HD13	0.93	1.41	18	4
1:A:118:VAL:HG13	1:A:145:ALA:O	0.91	1.65	2	8
1:A:38:LEU:HD11	1:A:119:VAL:HG21	0.90	1.42	14	9
1:A:118:VAL:HG22	1:A:145:ALA:O	0.90	1.67	27	2
1:A:116:THR:HG23	1:A:118:VAL:HG23	0.90	1.44	11	3
1:A:117:LEU:HD22	1:A:117:LEU:O	0.89	1.66	10	1
1:A:20:PHE:CE1	1:A:31:VAL:HG13	0.88	2.03	13	17
1:A:3:LYS:O	1:A:152:ALA:HB3	0.87	1.69	5	5
1:A:48:HIS:CD2	1:A:118:VAL:HG21	0.87	2.04	7	1
1:A:2:THR:HG21	1:A:151:ILE:HD12	0.86	1.47	15	6
1:A:106:LEU:HD23	1:A:113:ILE:HD11	0.86	1.43	29	5
1:A:119:VAL:HG23	1:A:144:LEU:HD12	0.86	1.44	24	4
1:A:106:LEU:HD12	1:A:151:ILE:HD11	0.85	1.47	8	1
1:A:6:ALA:HB3	1:A:18:ILE:CG1	0.85	2.02	4	6
1:A:35:ILE:HG22	1:A:38:LEU:HD21	0.85	1.49	19	2
1:A:14:VAL:HG22	1:A:38:LEU:CD1	0.84	2.01	19	1
1:A:42:LEU:HD22	1:A:86:ASN:ND2	0.84	1.86	24	1
1:A:22:GLN:CD	1:A:29:VAL:HG22	0.84	1.98	14	2
1:A:2:THR:CG2	1:A:151:ILE:HD12	0.84	2.03	10	8
1:A:35:ILE:O	1:A:94:VAL:HG13	0.83	1.72	16	5
1:A:35:ILE:HG21	1:A:38:LEU:HD13	0.83	1.50	4	15
1:A:115:ARG:O	1:A:149:ILE:HD12	0.83	1.74	2	5
1:A:143:ARG:O	1:A:144:LEU:HD22	0.83	1.74	23	2
1:A:14:VAL:HG21	1:A:144:LEU:HD13	0.83	1.50	10	2
1:A:38:LEU:HD23	1:A:43:HIS:CG	0.83	2.09	16	4
1:A:6:ALA:CB	1:A:149:ILE:HD13	0.83	2.04	18	1
1:A:4:ALA:HB3	1:A:20:PHE:HB2	0.82	1.51	21	25
1:A:42:LEU:C	1:A:123:ALA:HB2	0.82	2.00	23	6
1:A:2:THR:HG22	1:A:151:ILE:HD12	0.81	1.51	13	7
1:A:104:ILE:HD13	1:A:112:ILE:HG21	0.81	1.52	17	5
1:A:118:VAL:HG11	1:A:143:ARG:HG2	0.81	1.51	27	2
1:A:143:ARG:O	1:A:144:LEU:HD23	0.81	1.76	19	4
1:A:38:LEU:HD22	1:A:43:HIS:ND1	0.81	1.90	20	4
1:A:18:ILE:C	1:A:18:ILE:HD13	0.81	2.00	25	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:ILE:HD11	1:A:149:ILE:HD11	0.81	1.51	27	1
1:A:6:ALA:HB3	1:A:18:ILE:HG13	0.80	1.53	27	5
1:A:38:LEU:HD22	1:A:43:HIS:CD2	0.80	2.11	14	7
1:A:104:ILE:HD13	1:A:112:ILE:HD13	0.80	1.50	30	4
1:A:8:LEU:HD12	1:A:147:GLY:HA3	0.80	1.49	21	1
1:A:11:ASP:CB	1:A:144:LEU:HD12	0.80	2.06	23	2
1:A:116:THR:HG23	1:A:148:VAL:HG22	0.80	1.54	21	1
1:A:116:THR:HG23	1:A:148:VAL:HG23	0.80	1.53	26	5
1:A:6:ALA:HB3	1:A:18:ILE:HG23	0.80	1.53	10	11
1:A:42:LEU:O	1:A:123:ALA:HB2	0.79	1.75	26	5
1:A:105:SER:C	1:A:106:LEU:HD23	0.79	2.01	9	3
1:A:36:LYS:CB	1:A:94:VAL:HG22	0.79	2.07	8	1
1:A:5:VAL:HG23	1:A:152:ALA:CB	0.79	2.07	17	7
1:A:20:PHE:CD1	1:A:31:VAL:HG22	0.79	2.13	29	3
1:A:35:ILE:HG21	1:A:119:VAL:HG11	0.79	1.55	8	1
1:A:38:LEU:N	1:A:38:LEU:HD13	0.78	1.91	19	1
1:A:14:VAL:HG11	1:A:145:ALA:HB2	0.78	1.56	13	5
1:A:29:VAL:O	1:A:31:VAL:HG23	0.78	1.79	17	4
1:A:104:ILE:HG22	1:A:110:HIS:CD2	0.77	2.15	13	2
1:A:115:ARG:HB2	1:A:149:ILE:HD13	0.77	1.56	9	4
1:A:104:ILE:C	1:A:104:ILE:HD12	0.76	2.05	1	18
1:A:106:LEU:HD23	1:A:106:LEU:N	0.76	1.95	9	4
1:A:22:GLN:CG	1:A:29:VAL:HG22	0.76	2.10	11	5
1:A:18:ILE:HD13	1:A:20:PHE:CE1	0.76	2.15	19	3
1:A:36:LYS:HB3	1:A:94:VAL:HG22	0.76	1.57	8	1
1:A:20:PHE:CE2	1:A:31:VAL:HG22	0.76	2.16	11	4
1:A:42:LEU:HD23	1:A:88:THR:OG1	0.76	1.80	4	3
1:A:20:PHE:CD1	1:A:149:ILE:HD12	0.76	2.16	5	1
1:A:146:CYS:O	1:A:148:VAL:HG23	0.75	1.81	20	2
1:A:104:ILE:CG1	1:A:112:ILE:HG21	0.74	2.12	25	6
1:A:40:GLU:HA	1:A:89:ALA:HB3	0.74	1.59	16	28
1:A:116:THR:HG23	1:A:148:VAL:CG2	0.74	2.13	21	4
1:A:142:SER:O	1:A:144:LEU:HD23	0.73	1.82	22	3
1:A:20:PHE:CE1	1:A:149:ILE:HD11	0.73	2.18	24	3
1:A:122:LYS:HB3	1:A:140:ALA:HB1	0.73	1.59	23	4
1:A:105:SER:O	1:A:112:ILE:HG23	0.73	1.83	11	6
1:A:42:LEU:HD23	1:A:86:ASN:ND2	0.73	1.98	27	3
1:A:35:ILE:HG21	1:A:38:LEU:HD12	0.73	1.60	15	2
1:A:48:HIS:CG	1:A:116:THR:HG22	0.73	2.19	10	2
1:A:6:ALA:HB1	1:A:147:GLY:O	0.72	1.83	7	15
1:A:116:THR:HG23	1:A:118:VAL:HG13	0.72	1.58	28	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:144:LEU:HD13	1:A:144:LEU:N	0.72	1.99	25	1
1:A:11:ASP:HB2	1:A:144:LEU:HD12	0.72	1.59	7	2
1:A:38:LEU:N	1:A:38:LEU:HD22	0.72	2.00	22	1
1:A:8:LEU:CD1	1:A:145:ALA:HB1	0.72	2.14	17	3
1:A:38:LEU:HD13	1:A:43:HIS:CD2	0.72	2.20	13	1
1:A:11:ASP:CA	1:A:144:LEU:HD12	0.72	2.15	23	1
1:A:18:ILE:HG21	1:A:117:LEU:HD13	0.71	1.62	8	1
1:A:116:THR:HG23	1:A:146:CYS:SG	0.71	2.25	1	1
1:A:46:HIS:C	1:A:47:VAL:HG23	0.71	2.10	23	9
1:A:38:LEU:HD22	1:A:43:HIS:CG	0.71	2.20	14	11
1:A:20:PHE:CZ	1:A:31:VAL:HG11	0.71	2.20	6	3
1:A:35:ILE:CD1	1:A:45:PHE:CE2	0.71	2.74	26	2
1:A:6:ALA:HB2	1:A:149:ILE:HA	0.71	1.62	20	4
1:A:83:ASP:O	1:A:84:LEU:HD12	0.71	1.84	3	1
1:A:47:VAL:HG12	1:A:47:VAL:O	0.71	1.85	24	4
1:A:35:ILE:HD13	1:A:45:PHE:CZ	0.71	2.21	20	1
1:A:46:HIS:CE1	1:A:117:LEU:CD1	0.71	2.74	13	2
1:A:11:ASP:HB2	1:A:144:LEU:HD22	0.71	1.61	12	2
1:A:106:LEU:HD13	1:A:113:ILE:HD11	0.70	1.61	13	1
1:A:38:LEU:HD22	1:A:43:HIS:NE2	0.70	2.01	29	2
1:A:20:PHE:CE2	1:A:112:ILE:HD13	0.70	2.21	2	2
1:A:42:LEU:HD23	1:A:87:VAL:O	0.70	1.85	24	2
1:A:18:ILE:CD1	1:A:20:PHE:CD1	0.70	2.75	23	6
1:A:20:PHE:CE1	1:A:149:ILE:CG1	0.70	2.74	24	3
1:A:106:LEU:HD23	1:A:113:ILE:HG12	0.70	1.62	6	1
1:A:35:ILE:HD13	1:A:119:VAL:CG1	0.70	2.17	8	1
1:A:118:VAL:O	1:A:118:VAL:HG23	0.70	1.84	13	1
1:A:84:LEU:HD13	1:A:87:VAL:HG12	0.70	1.63	27	1
1:A:22:GLN:HB2	1:A:29:VAL:HG13	0.69	1.65	10	2
1:A:20:PHE:CE1	1:A:31:VAL:HG22	0.69	2.22	27	3
1:A:117:LEU:HD12	1:A:119:VAL:HG13	0.69	1.64	7	1
1:A:149:ILE:HD12	1:A:149:ILE:N	0.69	2.02	15	1
1:A:46:HIS:O	1:A:47:VAL:HG23	0.69	1.88	10	7
1:A:42:LEU:HD13	1:A:42:LEU:N	0.69	2.01	11	2
1:A:2:THR:HG23	1:A:151:ILE:CD1	0.69	2.18	12	7
1:A:118:VAL:HG12	1:A:146:CYS:HA	0.68	1.65	13	3
1:A:116:THR:O	1:A:118:VAL:HG23	0.68	1.89	23	3
1:A:4:ALA:HB1	1:A:149:ILE:CG2	0.68	2.16	16	7
1:A:20:PHE:CD2	1:A:112:ILE:HD12	0.68	2.23	5	3
1:A:104:ILE:HG13	1:A:112:ILE:HG21	0.68	1.65	14	6
1:A:5:VAL:HG23	1:A:152:ALA:HB2	0.68	1.64	11	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:GLN:HG3	1:A:29:VAL:HG22	0.68	1.65	26	9
1:A:20:PHE:CE1	1:A:31:VAL:CG1	0.68	2.76	13	11
1:A:20:PHE:CD2	1:A:31:VAL:HG22	0.68	2.23	12	6
1:A:6:ALA:HB1	1:A:147:GLY:C	0.68	2.14	25	15
1:A:2:THR:HG21	1:A:151:ILE:HG23	0.67	1.66	19	2
1:A:35:ILE:HG21	1:A:38:LEU:HD21	0.67	1.64	22	1
1:A:45:PHE:CZ	1:A:84:LEU:HD22	0.67	2.24	11	1
1:A:104:ILE:CD1	1:A:112:ILE:HD13	0.67	2.18	15	2
1:A:38:LEU:HD13	1:A:43:HIS:CE1	0.67	2.24	29	1
1:A:38:LEU:HD11	1:A:119:VAL:HG11	0.67	1.65	9	4
1:A:122:LYS:CB	1:A:140:ALA:HB1	0.67	2.19	23	4
1:A:118:VAL:HG21	1:A:143:ARG:CB	0.67	2.19	12	1
1:A:18:ILE:HD11	1:A:20:PHE:CE1	0.67	2.25	9	8
1:A:106:LEU:HD22	1:A:112:ILE:HD11	0.67	1.66	18	1
1:A:46:HIS:CE1	1:A:117:LEU:HD13	0.66	2.24	6	1
1:A:20:PHE:CE2	1:A:31:VAL:CG1	0.66	2.78	12	2
1:A:14:VAL:HG12	1:A:14:VAL:O	0.66	1.90	3	3
1:A:116:THR:HG1	1:A:148:VAL:HG22	0.66	1.51	24	1
1:A:38:LEU:HD12	1:A:43:HIS:CG	0.66	2.25	21	2
1:A:18:ILE:HD12	1:A:19:ASN:H	0.66	1.51	17	6
1:A:136:LYS:HG3	1:A:137:THR:HG23	0.66	1.66	6	2
1:A:44:GLY:C	1:A:45:PHE:CD1	0.66	2.74	12	2
1:A:5:VAL:HG23	1:A:152:ALA:HB3	0.66	1.67	17	5
1:A:2:THR:HG22	1:A:2:THR:O	0.65	1.90	24	1
1:A:38:LEU:CD2	1:A:43:HIS:CG	0.65	2.80	14	7
1:A:4:ALA:CB	1:A:149:ILE:HG23	0.65	2.21	26	9
1:A:106:LEU:CD2	1:A:112:ILE:HD11	0.65	2.20	18	1
1:A:143:ARG:C	1:A:144:LEU:HD23	0.65	2.16	19	1
1:A:45:PHE:HB3	1:A:117:LEU:HD12	0.65	1.68	20	1
1:A:126:LEU:HD23	1:A:135:THR:HA	0.65	1.65	27	1
1:A:45:PHE:CE1	1:A:46:HIS:NE2	0.65	2.65	16	1
1:A:131:ASN:N	1:A:135:THR:HG23	0.65	2.06	12	4
1:A:20:PHE:CE2	1:A:31:VAL:HG11	0.65	2.27	12	1
1:A:20:PHE:CD1	1:A:149:ILE:CD1	0.65	2.80	5	1
1:A:20:PHE:CZ	1:A:31:VAL:HG22	0.65	2.27	11	3
1:A:117:LEU:HD12	1:A:149:ILE:HD11	0.65	1.67	22	1
1:A:18:ILE:HD12	1:A:18:ILE:C	0.64	2.15	1	8
1:A:123:ALA:O	1:A:140:ALA:HB2	0.64	1.91	13	1
1:A:18:ILE:HD11	1:A:149:ILE:CD1	0.64	2.22	27	2
1:A:45:PHE:CZ	1:A:46:HIS:CD2	0.64	2.86	16	1
1:A:143:ARG:C	1:A:144:LEU:HD12	0.64	2.18	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:2:THR:HG22	1:A:151:ILE:HG23	0.64	1.69	20	2
1:A:20:PHE:CG	1:A:31:VAL:HG22	0.64	2.27	29	1
1:A:45:PHE:CZ	1:A:117:LEU:CB	0.64	2.81	2	2
1:A:144:LEU:O	1:A:145:ALA:HB2	0.64	1.92	22	3
1:A:110:HIS:O	1:A:112:ILE:HG23	0.64	1.93	9	1
1:A:116:THR:CG2	1:A:118:VAL:HG23	0.64	2.18	11	1
1:A:45:PHE:CE1	1:A:86:ASN:CG	0.64	2.75	25	2
1:A:46:HIS:NE2	1:A:120:HIS:CD2	0.63	2.66	24	3
1:A:6:ALA:HB3	1:A:18:ILE:HG12	0.63	1.68	3	5
1:A:18:ILE:HD13	1:A:18:ILE:O	0.63	1.94	11	1
1:A:119:VAL:CG2	1:A:144:LEU:HD12	0.63	2.23	20	1
1:A:20:PHE:CE2	1:A:31:VAL:CG2	0.63	2.82	11	2
1:A:116:THR:HG23	1:A:118:VAL:CG2	0.62	2.24	7	5
1:A:7:VAL:HG22	1:A:15:GLN:OE1	0.62	1.94	14	1
1:A:7:VAL:O	1:A:7:VAL:HG23	0.62	1.94	21	7
1:A:8:LEU:HD11	1:A:117:LEU:O	0.62	1.94	17	4
1:A:144:LEU:O	1:A:145:ALA:HB3	0.62	1.93	6	3
1:A:35:ILE:HG21	1:A:38:LEU:CD1	0.62	2.24	17	8
1:A:119:VAL:HG23	1:A:144:LEU:HD21	0.61	1.72	25	1
1:A:115:ARG:HB3	1:A:149:ILE:HD13	0.61	1.72	3	1
1:A:97:VAL:CG1	1:A:99:ILE:HD12	0.61	2.25	8	4
1:A:41:GLY:O	1:A:43:HIS:CE1	0.61	2.54	14	2
1:A:45:PHE:O	1:A:48:HIS:CD2	0.61	2.53	14	1
1:A:7:VAL:O	1:A:7:VAL:HG13	0.61	1.95	30	9
1:A:115:ARG:CB	1:A:149:ILE:HD13	0.61	2.25	9	2
1:A:48:HIS:CE1	1:A:120:HIS:NE2	0.61	2.68	15	2
1:A:120:HIS:CD2	1:A:140:ALA:HB1	0.61	2.30	29	1
1:A:118:VAL:HG23	1:A:144:LEU:O	0.61	1.96	25	1
1:A:48:HIS:ND1	1:A:116:THR:HG22	0.61	2.11	10	2
1:A:7:VAL:HG23	1:A:17:ILE:HG12	0.61	1.72	13	3
1:A:108:GLY:O	1:A:109:ASP:CB	0.61	2.49	28	2
1:A:19:ASN:CG	1:A:32:TRP:CE2	0.61	2.79	23	1
1:A:29:VAL:HG21	1:A:106:LEU:CD1	0.61	2.26	27	1
1:A:43:HIS:NE2	1:A:87:VAL:HG23	0.61	2.10	1	1
1:A:20:PHE:CZ	1:A:31:VAL:CG2	0.61	2.84	20	3
1:A:45:PHE:CD1	1:A:86:ASN:OD1	0.61	2.53	14	2
1:A:45:PHE:CD2	1:A:83:ASP:O	0.61	2.54	22	2
1:A:8:LEU:HD12	1:A:145:ALA:CB	0.60	2.21	17	2
1:A:20:PHE:CE1	1:A:149:ILE:CD1	0.60	2.84	24	3
1:A:2:THR:CG2	1:A:151:ILE:CD1	0.60	2.79	17	5
1:A:20:PHE:CG	1:A:149:ILE:HG21	0.60	2.31	20	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:120:HIS:CD2	1:A:122:LYS:O	0.60	2.54	10	1
1:A:48:HIS:CD2	1:A:142:SER:O	0.60	2.53	2	1
1:A:8:LEU:HD21	1:A:117:LEU:HD22	0.60	1.73	8	1
1:A:20:PHE:CE2	1:A:112:ILE:HD12	0.60	2.30	22	2
1:A:106:LEU:HD12	1:A:151:ILE:CD1	0.60	2.24	8	1
1:A:2:THR:HB	1:A:106:LEU:HD22	0.60	1.73	3	1
1:A:18:ILE:HD11	1:A:20:PHE:CZ	0.60	2.32	24	1
1:A:8:LEU:N	1:A:8:LEU:HD23	0.60	2.11	28	3
1:A:11:ASP:OD2	1:A:144:LEU:HD22	0.60	1.97	28	1
1:A:5:VAL:HG22	1:A:152:ALA:HB2	0.60	1.72	8	5
1:A:45:PHE:CE2	1:A:86:ASN:OD1	0.60	2.54	7	2
1:A:5:VAL:CG2	1:A:152:ALA:HB2	0.60	2.27	14	4
1:A:30:LYS:O	1:A:32:TRP:CE3	0.60	2.54	14	4
1:A:44:GLY:O	1:A:119:VAL:HG12	0.60	1.97	10	1
1:A:2:THR:HG22	1:A:151:ILE:CD1	0.60	2.26	28	2
1:A:20:PHE:CD1	1:A:149:ILE:HG21	0.59	2.31	8	2
1:A:120:HIS:CE1	1:A:121:GLU:O	0.59	2.55	28	1
1:A:18:ILE:C	1:A:18:ILE:CD1	0.59	2.75	25	7
1:A:104:ILE:C	1:A:104:ILE:CD1	0.59	2.76	13	15
1:A:43:HIS:NE2	1:A:89:ALA:HB2	0.59	2.12	18	1
1:A:46:HIS:ND1	1:A:117:LEU:HD13	0.59	2.12	6	2
1:A:45:PHE:CE1	1:A:86:ASN:OD1	0.59	2.55	18	3
1:A:11:ASP:HA	1:A:144:LEU:HD12	0.59	1.74	23	1
1:A:43:HIS:CG	1:A:120:HIS:ND1	0.59	2.71	19	1
1:A:43:HIS:CD2	1:A:89:ALA:HB2	0.59	2.32	10	2
1:A:117:LEU:O	1:A:117:LEU:HD13	0.59	1.98	12	1
1:A:128:LYS:HB2	1:A:135:THR:HG22	0.59	1.73	23	1
1:A:46:HIS:CE1	1:A:47:VAL:HG23	0.59	2.33	1	1
1:A:20:PHE:CD1	1:A:31:VAL:CG2	0.59	2.86	29	1
1:A:14:VAL:CG1	1:A:145:ALA:HB2	0.58	2.27	27	2
1:A:113:ILE:HD11	1:A:151:ILE:HD11	0.58	1.76	25	1
1:A:118:VAL:HG13	1:A:144:LEU:O	0.58	1.99	27	2
1:A:45:PHE:CE1	1:A:117:LEU:O	0.58	2.56	2	1
1:A:20:PHE:CD2	1:A:31:VAL:CG2	0.58	2.86	12	2
1:A:5:VAL:HG13	1:A:19:ASN:HD22	0.58	1.58	25	2
1:A:45:PHE:CZ	1:A:86:ASN:OD1	0.58	2.56	18	2
1:A:120:HIS:CD2	1:A:140:ALA:O	0.58	2.56	13	2
1:A:43:HIS:CG	1:A:120:HIS:CE1	0.58	2.90	19	1
1:A:2:THR:HG23	1:A:151:ILE:HD12	0.58	1.74	2	2
1:A:87:VAL:HG23	1:A:88:THR:N	0.58	2.14	10	2
1:A:8:LEU:HD13	1:A:147:GLY:H	0.58	1.59	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:102:SER:O	1:A:103:VAL:HG23	0.58	1.99	19	1
1:A:42:LEU:HB2	1:A:123:ALA:HB1	0.58	1.75	22	2
1:A:8:LEU:HD22	1:A:147:GLY:HA3	0.57	1.74	8	5
1:A:42:LEU:N	1:A:42:LEU:CD1	0.57	2.67	11	2
1:A:131:ASN:C	1:A:135:THR:HG23	0.57	2.24	7	2
1:A:20:PHE:HE2	1:A:112:ILE:HD12	0.57	1.59	15	1
1:A:45:PHE:CE1	1:A:46:HIS:CD2	0.57	2.92	16	1
1:A:106:LEU:HD12	1:A:106:LEU:N	0.57	2.15	3	2
1:A:4:ALA:CB	1:A:149:ILE:HG22	0.57	2.29	6	3
1:A:38:LEU:CD2	1:A:43:HIS:CB	0.57	2.82	16	2
1:A:45:PHE:CE2	1:A:117:LEU:CB	0.57	2.88	2	1
1:A:47:VAL:HG22	1:A:116:THR:C	0.57	2.24	3	1
1:A:89:ALA:HB1	1:A:93:GLY:C	0.57	2.24	17	18
1:A:22:GLN:HB2	1:A:29:VAL:HG22	0.57	1.76	9	2
1:A:102:SER:O	1:A:103:VAL:HG13	0.57	1.99	11	1
1:A:35:ILE:CD1	1:A:45:PHE:CZ	0.57	2.88	26	2
1:A:22:GLN:OE1	1:A:29:VAL:HG22	0.57	2.00	5	2
1:A:104:ILE:HG22	1:A:110:HIS:HD2	0.57	1.58	13	1
1:A:45:PHE:CD1	1:A:45:PHE:N	0.57	2.72	4	2
1:A:47:VAL:C	1:A:48:HIS:CG	0.57	2.81	6	1
1:A:46:HIS:HA	1:A:117:LEU:HD13	0.57	1.77	26	1
1:A:38:LEU:CD1	1:A:43:HIS:CG	0.56	2.88	3	1
1:A:131:ASN:O	1:A:135:THR:N	0.56	2.37	19	5
1:A:89:ALA:HB1	1:A:93:GLY:CA	0.56	2.30	5	23
1:A:106:LEU:HD23	1:A:151:ILE:HD11	0.56	1.77	20	1
1:A:122:LYS:HB2	1:A:140:ALA:HB1	0.56	1.76	25	2
1:A:8:LEU:HD11	1:A:117:LEU:CD2	0.56	2.30	24	2
1:A:29:VAL:HB	1:A:104:ILE:HD11	0.56	1.77	8	1
1:A:20:PHE:CE1	1:A:149:ILE:HD12	0.56	2.34	28	1
1:A:46:HIS:CG	1:A:117:LEU:HD22	0.56	2.35	5	1
1:A:39:THR:O	1:A:43:HIS:CE1	0.56	2.58	10	4
1:A:146:CYS:SG	1:A:148:VAL:HG23	0.56	2.40	4	1
1:A:30:LYS:O	1:A:32:TRP:CZ3	0.56	2.59	14	6
1:A:35:ILE:HD13	1:A:45:PHE:CE2	0.56	2.36	26	1
1:A:117:LEU:HD22	1:A:117:LEU:C	0.56	2.26	10	1
1:A:38:LEU:HD13	1:A:43:HIS:HE1	0.56	1.55	29	1
1:A:47:VAL:O	1:A:48:HIS:CG	0.56	2.58	6	1
1:A:118:VAL:HG11	1:A:143:ARG:CD	0.56	2.30	17	1
1:A:38:LEU:CD2	1:A:43:HIS:CD2	0.56	2.89	5	4
1:A:6:ALA:HB2	1:A:149:ILE:HG13	0.56	1.76	17	2
1:A:38:LEU:H	1:A:38:LEU:HD22	0.56	1.60	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:PHE:CZ	1:A:117:LEU:HB2	0.56	2.36	2	1
1:A:18:ILE:HD11	1:A:20:PHE:CD1	0.56	2.36	11	4
1:A:46:HIS:CE1	1:A:117:LEU:HD12	0.56	2.36	13	3
1:A:4:ALA:HB3	1:A:20:PHE:CB	0.55	2.32	7	5
1:A:20:PHE:CE2	1:A:112:ILE:CD1	0.55	2.89	2	3
1:A:20:PHE:CE1	1:A:31:VAL:HG11	0.55	2.35	6	3
1:A:38:LEU:O	1:A:39:THR:HG23	0.55	2.01	8	1
1:A:14:VAL:CG2	1:A:38:LEU:HD12	0.55	2.30	25	1
1:A:128:LYS:CG	1:A:128:LYS:O	0.55	2.54	13	1
1:A:42:LEU:CD2	1:A:86:ASN:ND2	0.55	2.70	21	1
1:A:47:VAL:O	1:A:48:HIS:CB	0.55	2.55	6	1
1:A:118:VAL:O	1:A:118:VAL:CG2	0.55	2.55	13	1
1:A:19:ASN:OD1	1:A:32:TRP:CD2	0.55	2.59	19	2
1:A:45:PHE:CG	1:A:83:ASP:O	0.55	2.59	23	1
1:A:137:THR:OG1	1:A:138:GLY:N	0.55	2.37	29	12
1:A:46:HIS:C	1:A:47:VAL:CG2	0.55	2.79	6	6
1:A:20:PHE:HE1	1:A:31:VAL:HG13	0.55	1.56	27	2
1:A:46:HIS:CD2	1:A:47:VAL:HG23	0.55	2.37	1	1
1:A:48:HIS:CG	1:A:48:HIS:O	0.55	2.60	4	3
1:A:116:THR:HG22	1:A:116:THR:O	0.55	2.02	8	1
1:A:11:ASP:CB	1:A:144:LEU:HD22	0.55	2.31	17	2
1:A:48:HIS:ND1	1:A:118:VAL:CG1	0.55	2.70	30	1
1:A:120:HIS:CG	1:A:124:ASP:OD2	0.55	2.59	8	1
1:A:112:ILE:C	1:A:112:ILE:HD12	0.55	2.27	11	2
1:A:14:VAL:HG22	1:A:38:LEU:HD13	0.54	1.76	19	2
1:A:19:ASN:OD1	1:A:32:TRP:CE2	0.54	2.60	19	2
1:A:38:LEU:CD2	1:A:43:HIS:CE1	0.54	2.88	29	1
1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CD2	0.54	2.70	11	3
1:A:46:HIS:NE2	1:A:87:VAL:CG1	0.54	2.71	7	1
1:A:106:LEU:CD2	1:A:151:ILE:HD11	0.54	2.32	20	1
1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CD2	0.54	2.70	2	1
1:A:6:ALA:HB3	1:A:18:ILE:CG2	0.54	2.32	8	1
1:A:46:HIS:CE1	1:A:120:HIS:NE2	0.54	2.76	20	1
1:A:20:PHE:CE2	1:A:112:ILE:HD11	0.54	2.38	21	1
1:A:136:LYS:HG2	1:A:137:THR:HG23	0.54	1.78	12	3
1:A:120:HIS:CE1	1:A:122:LYS:O	0.54	2.61	29	1
1:A:121:GLU:O	1:A:122:LYS:CB	0.54	2.56	11	3
1:A:46:HIS:O	1:A:48:HIS:CE1	0.54	2.61	6	1
1:A:120:HIS:CG	1:A:140:ALA:O	0.54	2.60	13	1
1:A:38:LEU:HD23	1:A:43:HIS:CD2	0.54	2.37	26	1
1:A:118:VAL:HG23	1:A:145:ALA:O	0.54	2.02	14	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:VAL:HG21	1:A:119:VAL:HG12	0.54	1.80	7	1
1:A:106:LEU:HD13	1:A:112:ILE:CG1	0.54	2.33	24	1
1:A:106:LEU:HG	1:A:112:ILE:HD11	0.54	1.80	7	2
1:A:48:HIS:HB3	1:A:118:VAL:HG21	0.54	1.80	20	1
1:A:20:PHE:CZ	1:A:149:ILE:HD11	0.53	2.38	12	1
1:A:121:GLU:CG	1:A:142:SER:CB	0.53	2.86	27	1
1:A:45:PHE:HD2	1:A:119:VAL:HG12	0.53	1.63	12	1
1:A:41:GLY:O	1:A:43:HIS:CD2	0.53	2.61	20	2
1:A:46:HIS:CG	1:A:47:VAL:HG23	0.53	2.38	1	2
1:A:22:GLN:CB	1:A:29:VAL:HG22	0.53	2.32	9	2
1:A:116:THR:O	1:A:118:VAL:HG13	0.53	2.02	12	1
1:A:18:ILE:HD13	1:A:20:PHE:CD1	0.53	2.37	19	1
1:A:32:TRP:CD1	1:A:33:GLY:N	0.53	2.77	19	4
1:A:4:ALA:HB1	1:A:149:ILE:HG22	0.53	1.78	6	3
1:A:82:GLY:O	1:A:83:ASP:C	0.53	2.52	30	6
1:A:120:HIS:ND1	1:A:120:HIS:C	0.53	2.67	28	1
1:A:118:VAL:HG21	1:A:143:ARG:HB2	0.53	1.79	12	2
1:A:116:THR:HB	1:A:148:VAL:HG22	0.53	1.80	29	3
1:A:14:VAL:CG1	1:A:14:VAL:O	0.53	2.57	25	2
1:A:120:HIS:HD2	1:A:140:ALA:HB1	0.53	1.63	29	1
1:A:120:HIS:CE1	1:A:141:GLY:CA	0.53	2.92	7	2
1:A:45:PHE:CE1	1:A:119:VAL:HG12	0.53	2.39	20	1
1:A:131:ASN:O	1:A:132:GLU:CB	0.53	2.56	1	12
1:A:45:PHE:CZ	1:A:117:LEU:HB3	0.53	2.38	2	2
1:A:104:ILE:HB	1:A:112:ILE:HG21	0.53	1.80	9	2
1:A:38:LEU:O	1:A:89:ALA:HB2	0.53	2.04	16	1
1:A:45:PHE:O	1:A:120:HIS:CE1	0.53	2.62	18	1
1:A:45:PHE:CE1	1:A:117:LEU:HD12	0.53	2.39	24	1
1:A:45:PHE:CE2	1:A:117:LEU:HB3	0.53	2.39	2	1
1:A:47:VAL:O	1:A:47:VAL:CG1	0.53	2.56	24	3
1:A:149:ILE:N	1:A:149:ILE:CD1	0.53	2.72	15	1
1:A:8:LEU:HD11	1:A:117:LEU:HD21	0.53	1.81	24	1
1:A:35:ILE:HG21	1:A:43:HIS:CE1	0.53	2.38	29	1
1:A:20:PHE:CE1	1:A:149:ILE:HG12	0.52	2.38	26	9
1:A:42:LEU:HD12	1:A:42:LEU:N	0.52	2.19	14	1
1:A:45:PHE:CZ	1:A:84:LEU:HB2	0.52	2.39	16	1
1:A:118:VAL:HG11	1:A:143:ARG:CG	0.52	2.35	19	3
1:A:35:ILE:O	1:A:36:LYS:CG	0.52	2.57	17	18
1:A:118:VAL:HG21	1:A:143:ARG:HB3	0.52	1.80	12	1
1:A:37:GLY:O	1:A:39:THR:N	0.52	2.42	16	1
1:A:20:PHE:CD1	1:A:31:VAL:HG13	0.52	2.40	10	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:124:ASP:O	1:A:125:ASP:CB	0.52	2.57	21	2
1:A:18:ILE:CD1	1:A:20:PHE:CE1	0.52	2.92	23	2
1:A:43:HIS:CE1	1:A:87:VAL:CG2	0.52	2.92	1	1
1:A:118:VAL:CG1	1:A:145:ALA:O	0.52	2.58	12	3
1:A:139:ASN:O	1:A:140:ALA:HB2	0.52	2.03	13	1
1:A:43:HIS:CE1	1:A:89:ALA:HB2	0.52	2.40	20	1
1:A:35:ILE:CG2	1:A:38:LEU:HD13	0.52	2.30	4	1
1:A:43:HIS:HB3	1:A:45:PHE:CZ	0.52	2.40	12	1
1:A:104:ILE:CD1	1:A:112:ILE:HG21	0.52	2.33	15	1
1:A:38:LEU:HB3	1:A:43:HIS:CE1	0.52	2.40	20	2
1:A:38:LEU:HD22	1:A:38:LEU:H	0.52	1.64	22	1
1:A:24:GLU:O	1:A:25:SER:CB	0.52	2.58	5	17
1:A:5:VAL:CG2	1:A:152:ALA:CB	0.52	2.88	27	5
1:A:116:THR:CG2	1:A:148:VAL:HG22	0.52	2.32	21	1
1:A:14:VAL:HG11	1:A:119:VAL:CG2	0.52	2.34	22	1
1:A:45:PHE:CD1	1:A:85:GLY:O	0.52	2.63	23	1
1:A:106:LEU:HD12	1:A:113:ILE:HD11	0.52	1.81	1	1
1:A:12:GLY:N	1:A:13:PRO:CD	0.52	2.72	15	14
1:A:16:GLY:C	1:A:17:ILE:CG1	0.52	2.81	8	1
1:A:38:LEU:CD1	1:A:119:VAL:HG11	0.52	2.35	28	3
1:A:45:PHE:CE1	1:A:117:LEU:CD1	0.52	2.92	24	1
1:A:46:HIS:CE1	1:A:120:HIS:CD2	0.52	2.97	24	1
1:A:104:ILE:HD13	1:A:112:ILE:CG2	0.52	2.34	8	2
1:A:117:LEU:O	1:A:117:LEU:CD1	0.52	2.58	12	1
1:A:20:PHE:CD2	1:A:149:ILE:HG21	0.52	2.40	17	3
1:A:144:LEU:O	1:A:145:ALA:CB	0.51	2.58	22	4
1:A:105:SER:C	1:A:112:ILE:HG23	0.51	2.30	5	1
1:A:116:THR:O	1:A:116:THR:CG2	0.51	2.58	8	1
1:A:91:LYS:CG	1:A:91:LYS:O	0.51	2.57	3	4
1:A:116:THR:OG1	1:A:148:VAL:N	0.51	2.43	10	2
1:A:38:LEU:CD2	1:A:93:GLY:O	0.51	2.58	19	1
1:A:43:HIS:HB3	1:A:120:HIS:CE1	0.51	2.40	19	1
1:A:18:ILE:HD13	1:A:19:ASN:N	0.51	2.21	2	4
1:A:42:LEU:C	1:A:43:HIS:CG	0.51	2.88	6	3
1:A:115:ARG:O	1:A:117:LEU:CD2	0.51	2.58	6	2
1:A:110:HIS:O	1:A:111:SER:C	0.51	2.52	3	7
1:A:8:LEU:HD21	1:A:18:ILE:CG2	0.51	2.36	12	4
1:A:38:LEU:HD23	1:A:43:HIS:CB	0.51	2.35	16	1
1:A:116:THR:CG2	1:A:146:CYS:CB	0.51	2.88	24	2
1:A:144:LEU:N	1:A:144:LEU:CD1	0.51	2.71	25	1
1:A:38:LEU:HD12	1:A:43:HIS:CB	0.51	2.35	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:106:LEU:HD23	1:A:151:ILE:CD1	0.51	2.36	20	1
1:A:38:LEU:HD21	1:A:119:VAL:HG21	0.51	1.81	21	1
1:A:117:LEU:O	1:A:147:GLY:N	0.51	2.43	22	2
1:A:14:VAL:HG13	1:A:14:VAL:O	0.51	2.04	12	2
1:A:120:HIS:C	1:A:122:LYS:N	0.51	2.68	2	2
1:A:117:LEU:C	1:A:117:LEU:HD23	0.51	2.30	8	1
1:A:138:GLY:O	1:A:139:ASN:CB	0.51	2.57	10	3
1:A:132:GLU:N	1:A:135:THR:OG1	0.51	2.44	22	1
1:A:43:HIS:NE2	1:A:87:VAL:CG2	0.51	2.74	1	1
1:A:118:VAL:CG2	1:A:145:ALA:O	0.51	2.58	4	3
1:A:8:LEU:C	1:A:9:LYS:CG	0.51	2.81	7	1
1:A:117:LEU:HD13	1:A:117:LEU:C	0.51	2.31	12	1
1:A:116:THR:HG23	1:A:146:CYS:HB3	0.51	1.80	30	2
1:A:131:ASN:O	1:A:135:THR:HG23	0.51	2.06	7	2
1:A:7:VAL:HG23	1:A:17:ILE:CG1	0.51	2.36	13	2
1:A:118:VAL:HG11	1:A:143:ARG:NE	0.51	2.20	17	1
1:A:2:THR:HG23	1:A:151:ILE:HD11	0.51	1.81	24	1
1:A:93:GLY:O	1:A:94:VAL:C	0.51	2.54	22	20
1:A:89:ALA:HB1	1:A:93:GLY:O	0.51	2.06	22	1
1:A:44:GLY:N	1:A:120:HIS:CE1	0.51	2.78	29	1
1:A:121:GLU:O	1:A:122:LYS:CG	0.51	2.59	11	2
1:A:35:ILE:O	1:A:94:VAL:HA	0.50	2.06	12	8
1:A:122:LYS:C	1:A:140:ALA:HB1	0.50	2.31	4	2
1:A:116:THR:OG1	1:A:148:VAL:CG2	0.50	2.59	8	1
1:A:21:GLU:CD	1:A:22:GLN:N	0.50	2.69	15	1
1:A:46:HIS:O	1:A:47:VAL:CG2	0.50	2.59	10	3
1:A:117:LEU:CD1	1:A:119:VAL:HG13	0.50	2.35	7	1
1:A:147:GLY:O	1:A:148:VAL:HB	0.50	2.06	20	1
1:A:147:GLY:C	1:A:148:VAL:HG23	0.50	2.30	20	1
1:A:115:ARG:O	1:A:117:LEU:HD23	0.50	2.06	30	1
1:A:10:GLY:O	1:A:11:ASP:C	0.50	2.54	28	20
1:A:117:LEU:O	1:A:117:LEU:CD2	0.50	2.51	10	1
1:A:102:SER:O	1:A:103:VAL:CG2	0.50	2.59	19	1
1:A:138:GLY:O	1:A:139:ASN:C	0.50	2.54	23	10
1:A:45:PHE:CD2	1:A:119:VAL:HG12	0.50	2.41	12	1
1:A:2:THR:O	1:A:2:THR:CG2	0.50	2.59	24	1
1:A:28:PRO:CB	1:A:101:ASP:O	0.50	2.59	30	7
1:A:14:VAL:O	1:A:14:VAL:CG1	0.50	2.60	26	4
1:A:20:PHE:CZ	1:A:117:LEU:HD21	0.50	2.41	19	1
1:A:115:ARG:O	1:A:117:LEU:HD22	0.50	2.07	23	2
1:A:35:ILE:CG2	1:A:36:LYS:N	0.50	2.74	28	21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:ASP:CG	1:A:91:LYS:N	0.50	2.70	29	30
1:A:44:GLY:HA3	1:A:120:HIS:CD2	0.50	2.41	28	3
1:A:38:LEU:N	1:A:38:LEU:CD2	0.50	2.71	22	1
1:A:9:LYS:N	1:A:145:ALA:HB1	0.50	2.22	24	1
1:A:120:HIS:O	1:A:121:GLU:C	0.50	2.53	27	5
1:A:14:VAL:HG22	1:A:38:LEU:CD2	0.50	2.37	7	1
1:A:45:PHE:CD1	1:A:124:ASP:OD2	0.50	2.64	18	1
1:A:102:SER:C	1:A:104:ILE:N	0.50	2.70	9	2
1:A:48:HIS:CD2	1:A:143:ARG:HG3	0.50	2.42	12	2
1:A:45:PHE:CD2	1:A:83:ASP:HA	0.50	2.41	15	1
1:A:2:THR:CG2	1:A:2:THR:O	0.50	2.60	30	1
1:A:8:LEU:CD2	1:A:18:ILE:CG2	0.50	2.90	27	2
1:A:133:GLN:CB	1:A:139:ASN:OD1	0.50	2.60	28	1
1:A:3:LYS:O	1:A:152:ALA:CB	0.49	2.59	19	2
1:A:89:ALA:HB1	1:A:93:GLY:HA2	0.49	1.84	30	7
1:A:115:ARG:O	1:A:149:ILE:CD1	0.49	2.60	15	4
1:A:18:ILE:CD1	1:A:149:ILE:HD11	0.49	2.30	27	1
1:A:8:LEU:O	1:A:9:LYS:CB	0.49	2.59	7	1
1:A:22:GLN:HG2	1:A:29:VAL:HG22	0.49	1.83	11	1
1:A:35:ILE:CG2	1:A:38:LEU:CD1	0.49	2.89	17	1
1:A:83:ASP:O	1:A:84:LEU:CB	0.49	2.60	24	3
1:A:87:VAL:HG12	1:A:88:THR:H	0.49	1.66	23	3
1:A:46:HIS:CE1	1:A:87:VAL:HG11	0.49	2.42	4	1
1:A:116:THR:OG1	1:A:148:VAL:HG23	0.49	2.07	8	1
1:A:2:THR:CG2	1:A:151:ILE:HG23	0.49	2.35	19	4
1:A:44:GLY:C	1:A:45:PHE:CG	0.49	2.90	12	1
1:A:20:PHE:CD1	1:A:149:ILE:HG12	0.49	2.43	21	4
1:A:43:HIS:O	1:A:44:GLY:C	0.49	2.54	16	6
1:A:8:LEU:CD2	1:A:8:LEU:N	0.49	2.75	9	5
1:A:8:LEU:CD1	1:A:117:LEU:O	0.49	2.61	23	3
1:A:131:ASN:C	1:A:133:GLN:N	0.49	2.69	7	9
1:A:45:PHE:HB3	1:A:46:HIS:CD2	0.49	2.43	6	1
1:A:48:HIS:O	1:A:48:HIS:CD2	0.49	2.65	11	2
1:A:118:VAL:HG22	1:A:119:VAL:N	0.49	2.22	4	3
1:A:9:LYS:H	1:A:145:ALA:HB1	0.49	1.67	11	1
1:A:116:THR:HA	1:A:148:VAL:HG22	0.49	1.85	21	1
1:A:47:VAL:O	1:A:48:HIS:C	0.49	2.55	24	2
1:A:48:HIS:CE1	1:A:143:ARG:HG2	0.49	2.43	2	1
1:A:93:GLY:O	1:A:95:ALA:N	0.49	2.46	19	10
1:A:134:SER:O	1:A:135:THR:C	0.49	2.56	7	2
1:A:45:PHE:CE1	1:A:87:VAL:CG2	0.49	2.95	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:GLY:HA2	1:A:145:ALA:HB2	0.49	1.84	21	1
1:A:38:LEU:HD23	1:A:93:GLY:C	0.49	2.32	22	1
1:A:131:ASN:O	1:A:132:GLU:CG	0.49	2.61	28	3
1:A:144:LEU:HD13	1:A:144:LEU:H	0.49	1.63	25	1
1:A:14:VAL:HG22	1:A:38:LEU:HD23	0.49	1.84	3	1
1:A:47:VAL:HG12	1:A:48:HIS:N	0.49	2.23	27	3
1:A:147:GLY:O	1:A:148:VAL:CB	0.49	2.60	20	1
1:A:138:GLY:C	1:A:140:ALA:N	0.49	2.70	2	13
1:A:99:ILE:HG22	1:A:100:GLU:N	0.49	2.23	8	8
1:A:4:ALA:CB	1:A:149:ILE:CG2	0.49	2.90	6	3
1:A:149:ILE:H	1:A:149:ILE:HD12	0.49	1.68	6	1
1:A:14:VAL:CG2	1:A:38:LEU:CD1	0.49	2.84	19	1
1:A:29:VAL:HG21	1:A:106:LEU:CD2	0.49	2.37	24	2
1:A:113:ILE:O	1:A:113:ILE:HG22	0.49	2.07	9	1
1:A:8:LEU:HD12	1:A:145:ALA:HB3	0.49	1.85	10	2
1:A:10:GLY:C	1:A:12:GLY:N	0.48	2.69	29	5
1:A:35:ILE:CG2	1:A:38:LEU:HD11	0.48	2.38	19	1
1:A:20:PHE:CZ	1:A:31:VAL:CG1	0.48	2.95	6	3
1:A:116:THR:O	1:A:116:THR:HG23	0.48	2.08	23	1
1:A:83:ASP:OD1	1:A:84:LEU:N	0.48	2.46	29	2
1:A:125:ASP:C	1:A:127:GLY:N	0.48	2.69	17	8
1:A:46:HIS:CG	1:A:117:LEU:HD13	0.48	2.43	23	2
1:A:20:PHE:CD1	1:A:149:ILE:CG1	0.48	2.95	24	1
1:A:105:SER:C	1:A:106:LEU:HD12	0.48	2.34	26	1
1:A:35:ILE:HG23	1:A:36:LYS:N	0.48	2.22	4	22
1:A:39:THR:O	1:A:40:GLU:C	0.48	2.56	5	18
1:A:143:ARG:CD	1:A:143:ARG:C	0.48	2.86	27	1
1:A:13:PRO:O	1:A:15:GLN:N	0.48	2.47	16	6
1:A:119:VAL:HG12	1:A:120:HIS:N	0.48	2.23	19	2
1:A:124:ASP:O	1:A:125:ASP:CG	0.48	2.56	17	1
1:A:38:LEU:H	1:A:38:LEU:HD13	0.48	1.68	22	1
1:A:6:ALA:CB	1:A:147:GLY:O	0.48	2.61	14	5
1:A:120:HIS:O	1:A:122:LYS:N	0.48	2.47	2	1
1:A:150:GLY:O	1:A:151:ILE:C	0.48	2.56	13	13
1:A:131:ASN:O	1:A:133:GLN:N	0.48	2.46	12	6
1:A:134:SER:C	1:A:136:LYS:N	0.48	2.71	19	5
1:A:35:ILE:HB	1:A:95:ALA:HB3	0.48	1.85	7	3
1:A:46:HIS:O	1:A:47:VAL:CB	0.48	2.61	7	3
1:A:48:HIS:O	1:A:48:HIS:CG	0.48	2.67	20	4
1:A:20:PHE:CD2	1:A:112:ILE:HD13	0.48	2.43	20	1
1:A:45:PHE:CD1	1:A:84:LEU:O	0.48	2.66	25	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:PHE:CZ	1:A:124:ASP:HB2	0.48	2.44	28	1
1:A:7:VAL:O	1:A:8:LEU:C	0.48	2.56	17	12
1:A:47:VAL:CG1	1:A:48:HIS:N	0.48	2.77	12	2
1:A:86:ASN:ND2	1:A:124:ASP:CB	0.48	2.76	18	1
1:A:42:LEU:HD12	1:A:42:LEU:H	0.48	1.67	21	1
1:A:104:ILE:HD12	1:A:104:ILE:O	0.48	2.08	26	6
1:A:134:SER:HA	1:A:138:GLY:CA	0.48	2.38	24	4
1:A:8:LEU:HD12	1:A:147:GLY:CA	0.48	2.32	21	1
1:A:6:ALA:O	1:A:18:ILE:CG2	0.48	2.62	28	1
1:A:40:GLU:O	1:A:40:GLU:CG	0.48	2.62	4	5
1:A:43:HIS:CB	1:A:45:PHE:CZ	0.48	2.96	12	1
1:A:48:HIS:NE2	1:A:143:ARG:CZ	0.48	2.76	23	1
1:A:140:ALA:O	1:A:141:GLY:C	0.48	2.57	1	6
1:A:45:PHE:CD2	1:A:117:LEU:HD12	0.48	2.44	2	1
1:A:47:VAL:HG21	1:A:115:ARG:HG3	0.48	1.86	3	1
1:A:45:PHE:CE2	1:A:85:GLY:HA2	0.48	2.44	14	2
1:A:84:LEU:HD23	1:A:85:GLY:H	0.48	1.69	23	1
1:A:18:ILE:C	1:A:19:ASN:OD1	0.47	2.57	28	3
1:A:13:PRO:C	1:A:14:VAL:HG23	0.47	2.34	28	1
1:A:142:SER:O	1:A:143:ARG:CG	0.47	2.63	2	1
1:A:8:LEU:N	1:A:16:GLY:O	0.47	2.47	27	7
1:A:45:PHE:CZ	1:A:86:ASN:CG	0.47	2.92	4	1
1:A:119:VAL:O	1:A:144:LEU:N	0.47	2.47	5	2
1:A:45:PHE:CE1	1:A:119:VAL:HG22	0.47	2.45	6	1
1:A:120:HIS:CE1	1:A:141:GLY:HA3	0.47	2.44	7	1
1:A:13:PRO:O	1:A:14:VAL:C	0.47	2.55	29	3
1:A:119:VAL:HG23	1:A:144:LEU:CD1	0.47	2.39	10	1
1:A:116:THR:O	1:A:118:VAL:N	0.47	2.47	12	1
1:A:120:HIS:CE1	1:A:141:GLY:HA2	0.47	2.45	24	4
1:A:108:GLY:O	1:A:111:SER:CB	0.47	2.61	3	1
1:A:128:LYS:O	1:A:129:GLY:C	0.47	2.57	3	1
1:A:43:HIS:CB	1:A:45:PHE:CE1	0.47	2.98	12	1
1:A:89:ALA:CB	1:A:93:GLY:O	0.47	2.62	22	1
1:A:37:GLY:O	1:A:38:LEU:O	0.47	2.32	4	27
1:A:41:GLY:C	1:A:42:LEU:HD13	0.47	2.34	11	4
1:A:99:ILE:HG22	1:A:100:GLU:H	0.47	1.69	25	2
1:A:125:ASP:O	1:A:126:LEU:C	0.47	2.58	5	4
1:A:131:ASN:O	1:A:132:GLU:C	0.47	2.57	12	6
1:A:48:HIS:CE1	1:A:120:HIS:CD2	0.47	3.03	16	1
1:A:115:ARG:O	1:A:117:LEU:N	0.47	2.48	22	7
1:A:11:ASP:OD1	1:A:11:ASP:C	0.47	2.58	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:PHE:CZ	1:A:119:VAL:HG22	0.47	2.44	6	1
1:A:2:THR:HG21	1:A:22:GLN:OE1	0.47	2.10	7	1
1:A:7:VAL:O	1:A:7:VAL:CG2	0.47	2.61	27	3
1:A:83:ASP:OD1	1:A:83:ASP:C	0.47	2.57	26	1
1:A:8:LEU:HD21	1:A:117:LEU:O	0.47	2.09	21	1
1:A:87:VAL:HG11	1:A:117:LEU:HD11	0.47	1.85	14	1
1:A:5:VAL:HG13	1:A:19:ASN:ND2	0.47	2.24	25	1
1:A:122:LYS:CB	1:A:140:ALA:O	0.47	2.62	29	1
1:A:85:GLY:C	1:A:86:ASN:OD1	0.47	2.58	8	2
1:A:126:LEU:HD23	1:A:134:SER:O	0.47	2.10	9	1
1:A:142:SER:O	1:A:143:ARG:C	0.47	2.57	25	5
1:A:8:LEU:HD11	1:A:117:LEU:HB3	0.47	1.86	16	1
1:A:124:ASP:OD1	1:A:124:ASP:C	0.47	2.57	17	1
1:A:146:CYS:O	1:A:147:GLY:C	0.47	2.58	27	2
1:A:10:GLY:O	1:A:12:GLY:N	0.47	2.48	29	1
1:A:8:LEU:CD2	1:A:18:ILE:HG23	0.47	2.40	27	2
1:A:116:THR:OG1	1:A:147:GLY:C	0.47	2.58	11	1
1:A:125:ASP:O	1:A:127:GLY:N	0.47	2.44	14	3
1:A:43:HIS:C	1:A:123:ALA:HB2	0.47	2.35	15	1
1:A:118:VAL:HG12	1:A:119:VAL:N	0.47	2.25	18	1
1:A:47:VAL:O	1:A:48:HIS:ND1	0.47	2.48	14	2
1:A:45:PHE:CE1	1:A:117:LEU:HB3	0.47	2.45	27	2
1:A:107:SER:O	1:A:109:ASP:N	0.47	2.47	3	3
1:A:22:GLN:NE2	1:A:29:VAL:HG22	0.47	2.25	14	2
1:A:118:VAL:HG21	1:A:143:ARG:HG2	0.47	1.86	14	1
1:A:5:VAL:CG2	1:A:152:ALA:HB3	0.46	2.41	26	3
1:A:146:CYS:SG	1:A:146:CYS:O	0.46	2.72	4	1
1:A:124:ASP:OD1	1:A:125:ASP:N	0.46	2.47	17	1
1:A:42:LEU:CG	1:A:86:ASN:ND2	0.46	2.78	21	1
1:A:48:HIS:NE2	1:A:143:ARG:NH2	0.46	2.63	23	1
1:A:86:ASN:ND2	1:A:86:ASN:C	0.46	2.73	27	1
1:A:46:HIS:O	1:A:47:VAL:O	0.46	2.33	6	2
1:A:131:ASN:O	1:A:134:SER:N	0.46	2.48	7	3
1:A:47:VAL:N	1:A:82:GLY:O	0.46	2.48	10	1
1:A:83:ASP:O	1:A:84:LEU:CD2	0.46	2.63	16	1
1:A:38:LEU:CD1	1:A:43:HIS:CB	0.46	2.94	3	1
1:A:36:LYS:HB2	1:A:94:VAL:HG22	0.46	1.84	8	1
1:A:97:VAL:HG12	1:A:99:ILE:HD12	0.46	1.88	8	1
1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:OD1	0.46	2.48	14	2
1:A:3:LYS:CG	1:A:20:PHE:O	0.46	2.64	17	3
1:A:106:LEU:HD22	1:A:113:ILE:HD11	0.46	1.86	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:PHE:O	1:A:120:HIS:NE2	0.46	2.48	23	1
1:A:117:LEU:HD21	1:A:149:ILE:HD11	0.46	1.86	23	1
1:A:116:THR:CG2	1:A:146:CYS:SG	0.46	3.04	30	1
1:A:39:THR:O	1:A:41:GLY:N	0.46	2.49	1	3
1:A:124:ASP:CG	1:A:124:ASP:O	0.46	2.58	3	2
1:A:97:VAL:HG12	1:A:98:SER:N	0.46	2.26	24	6
1:A:134:SER:O	1:A:136:LYS:N	0.46	2.48	19	2
1:A:46:HIS:ND1	1:A:118:VAL:O	0.46	2.49	28	2
1:A:45:PHE:O	1:A:83:ASP:CG	0.46	2.58	24	1
1:A:118:VAL:HG23	1:A:144:LEU:N	0.46	2.25	25	1
1:A:125:ASP:CB	1:A:128:LYS:CG	0.46	2.94	28	1
1:A:46:HIS:CD2	1:A:117:LEU:HD13	0.46	2.46	30	1
1:A:35:ILE:C	1:A:36:LYS:CG	0.46	2.89	17	7
1:A:21:GLU:O	1:A:30:LYS:N	0.46	2.49	6	10
1:A:18:ILE:HD12	1:A:32:TRP:O	0.46	2.10	12	1
1:A:43:HIS:N	1:A:123:ALA:HB2	0.46	2.24	12	1
1:A:127:GLY:O	1:A:130:GLY:N	0.46	2.48	12	2
1:A:6:ALA:HB2	1:A:149:ILE:CA	0.46	2.38	20	1
1:A:48:HIS:O	1:A:48:HIS:ND1	0.46	2.48	3	3
1:A:45:PHE:O	1:A:143:ARG:NH2	0.46	2.49	17	1
1:A:40:GLU:OE1	1:A:40:GLU:C	0.46	2.59	28	1
1:A:123:ALA:O	1:A:140:ALA:CB	0.46	2.61	13	1
1:A:38:LEU:O	1:A:39:THR:C	0.46	2.59	16	1
1:A:43:HIS:CE1	1:A:87:VAL:HB	0.46	2.45	23	1
1:A:46:HIS:NE2	1:A:87:VAL:HG11	0.46	2.26	28	1
1:A:46:HIS:CE1	1:A:47:VAL:CG2	0.46	2.98	1	1
1:A:98:SER:C	1:A:99:ILE:CG1	0.46	2.89	9	1
1:A:22:GLN:OE1	1:A:28:PRO:C	0.46	2.59	14	2
1:A:116:THR:HG23	1:A:146:CYS:HA	0.46	1.88	19	1
1:A:42:LEU:O	1:A:43:HIS:ND1	0.46	2.48	2	5
1:A:118:VAL:CB	1:A:145:ALA:O	0.46	2.63	12	2
1:A:134:SER:O	1:A:138:GLY:N	0.46	2.49	13	1
1:A:7:VAL:O	1:A:7:VAL:CG1	0.46	2.64	30	3
1:A:13:PRO:O	1:A:14:VAL:CG2	0.46	2.64	28	1
1:A:138:GLY:O	1:A:140:ALA:N	0.46	2.49	23	3
1:A:112:ILE:O	1:A:113:ILE:C	0.46	2.59	3	7
1:A:22:GLN:O	1:A:22:GLN:CG	0.46	2.63	7	1
1:A:117:LEU:H	1:A:117:LEU:HD13	0.46	1.71	10	1
1:A:48:HIS:NE2	1:A:143:ARG:NE	0.46	2.60	11	1
1:A:35:ILE:O	1:A:94:VAL:CG1	0.46	2.57	16	1
1:A:42:LEU:HD22	1:A:86:ASN:CG	0.46	2.36	24	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:140:ALA:O	1:A:141:GLY:O	0.45	2.34	27	3
1:A:134:SER:O	1:A:137:THR:N	0.45	2.49	20	2
1:A:116:THR:HG22	1:A:118:VAL:CG1	0.45	2.41	21	2
1:A:41:GLY:O	1:A:43:HIS:NE2	0.45	2.50	15	3
1:A:83:ASP:OD1	1:A:85:GLY:N	0.45	2.49	26	1
1:A:6:ALA:O	1:A:18:ILE:HG22	0.45	2.11	28	1
1:A:20:PHE:CG	1:A:149:ILE:HG12	0.45	2.47	1	1
1:A:121:GLU:HA	1:A:144:LEU:HD11	0.45	1.88	2	1
1:A:124:ASP:CG	1:A:127:GLY:O	0.45	2.59	2	1
1:A:86:ASN:OD1	1:A:86:ASN:N	0.45	2.50	20	4
1:A:84:LEU:HD13	1:A:85:GLY:N	0.45	2.27	7	1
1:A:118:VAL:HG12	1:A:144:LEU:H	0.45	1.70	10	1
1:A:8:LEU:CD2	1:A:18:ILE:HG22	0.45	2.42	11	4
1:A:21:GLU:OE1	1:A:21:GLU:C	0.45	2.59	19	1
1:A:86:ASN:ND2	1:A:87:VAL:O	0.45	2.49	27	1
1:A:7:VAL:CG2	1:A:15:GLN:OE1	0.45	2.65	14	1
1:A:42:LEU:O	1:A:43:HIS:CD2	0.45	2.70	21	1
1:A:128:LYS:O	1:A:130:GLY:N	0.45	2.46	29	1
1:A:6:ALA:N	1:A:18:ILE:O	0.45	2.49	16	8
1:A:39:THR:O	1:A:43:HIS:NE2	0.45	2.49	10	5
1:A:113:ILE:HD11	1:A:151:ILE:HG12	0.45	1.87	11	2
1:A:18:ILE:CG1	1:A:19:ASN:N	0.45	2.79	24	1
1:A:44:GLY:CA	1:A:120:HIS:CE1	0.45	2.99	29	1
1:A:140:ALA:O	1:A:142:SER:N	0.45	2.49	7	2
1:A:118:VAL:HG11	1:A:143:ARG:HD3	0.45	1.87	17	1
1:A:43:HIS:CD2	1:A:120:HIS:CE1	0.45	3.04	19	1
1:A:20:PHE:CZ	1:A:31:VAL:HG21	0.45	2.46	20	1
1:A:118:VAL:CG2	1:A:119:VAL:N	0.45	2.79	1	1
1:A:120:HIS:ND1	1:A:141:GLY:CA	0.45	2.80	7	1
1:A:131:ASN:O	1:A:132:GLU:CD	0.45	2.59	22	1
1:A:84:LEU:O	1:A:85:GLY:O	0.45	2.35	25	2
1:A:87:VAL:HG12	1:A:88:THR:N	0.45	2.27	29	1
1:A:8:LEU:HD13	1:A:117:LEU:O	0.45	2.12	4	1
1:A:44:GLY:HA3	1:A:120:HIS:CG	0.45	2.47	28	2
1:A:115:ARG:O	1:A:116:THR:C	0.45	2.59	6	4
1:A:45:PHE:CE2	1:A:87:VAL:CG1	0.45	3.00	19	1
1:A:13:PRO:O	1:A:15:GLN:NE2	0.45	2.50	25	1
1:A:137:THR:CG2	1:A:138:GLY:N	0.45	2.79	13	1
1:A:8:LEU:N	1:A:8:LEU:CD2	0.45	2.80	24	3
1:A:46:HIS:HB2	1:A:117:LEU:HD13	0.45	1.88	4	1
1:A:152:ALA:O	1:A:153:GLN:C	0.45	2.60	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:GLU:CD	1:A:21:GLU:C	0.45	2.85	15	1
1:A:108:GLY:O	1:A:109:ASP:CG	0.45	2.60	18	1
1:A:43:HIS:O	1:A:86:ASN:ND2	0.45	2.50	19	1
1:A:139:ASN:CG	1:A:139:ASN:O	0.45	2.60	25	1
1:A:29:VAL:O	1:A:31:VAL:N	0.44	2.51	4	1
1:A:22:GLN:OE1	1:A:22:GLN:C	0.44	2.60	11	1
1:A:45:PHE:CZ	1:A:84:LEU:CB	0.44	3.00	16	1
1:A:118:VAL:HG12	1:A:119:VAL:H	0.44	1.72	18	1
1:A:102:SER:C	1:A:103:VAL:HG23	0.44	2.37	19	1
1:A:20:PHE:CE1	1:A:31:VAL:CG2	0.44	2.97	27	2
1:A:128:LYS:O	1:A:134:SER:CB	0.44	2.65	29	1
1:A:22:GLN:OE1	1:A:105:SER:CB	0.44	2.65	25	2
1:A:106:LEU:CG	1:A:151:ILE:HD11	0.44	2.43	20	1
1:A:133:GLN:O	1:A:136:LYS:CG	0.44	2.66	22	1
1:A:45:PHE:C	1:A:83:ASP:OD2	0.44	2.61	24	1
1:A:21:GLU:HB2	1:A:32:TRP:CH2	0.44	2.47	15	3
1:A:120:HIS:NE2	1:A:143:ARG:CZ	0.44	2.81	17	1
1:A:139:ASN:O	1:A:139:ASN:ND2	0.44	2.50	27	2
1:A:48:HIS:ND1	1:A:114:GLY:O	0.44	2.49	29	1
1:A:106:LEU:CD2	1:A:113:ILE:HD11	0.44	2.31	29	1
1:A:20:PHE:CD2	1:A:112:ILE:HG13	0.44	2.47	10	1
1:A:127:GLY:C	1:A:129:GLY:N	0.44	2.75	3	4
1:A:22:GLN:OE1	1:A:106:LEU:HD13	0.44	2.13	6	2
1:A:45:PHE:CZ	1:A:46:HIS:NE2	0.44	2.86	16	1
1:A:84:LEU:HD23	1:A:85:GLY:N	0.44	2.27	23	1
1:A:45:PHE:CZ	1:A:117:LEU:HG	0.44	2.48	27	1
1:A:13:PRO:C	1:A:14:VAL:CG2	0.44	2.90	28	1
1:A:29:VAL:HG12	1:A:31:VAL:HG22	0.44	1.88	6	1
1:A:42:LEU:HD23	1:A:126:LEU:HD11	0.44	1.89	8	1
1:A:120:HIS:NE2	1:A:122:LYS:O	0.44	2.51	10	1
1:A:148:VAL:CG1	1:A:149:ILE:N	0.44	2.81	13	1
1:A:46:HIS:NE2	1:A:120:HIS:NE2	0.44	2.66	20	1
1:A:45:PHE:CD2	1:A:85:GLY:C	0.44	2.96	4	1
1:A:102:SER:O	1:A:103:VAL:C	0.44	2.61	9	3
1:A:44:GLY:N	1:A:120:HIS:NE2	0.44	2.62	10	1
1:A:129:GLY:O	1:A:130:GLY:C	0.44	2.60	15	1
1:A:48:HIS:ND1	1:A:48:HIS:C	0.44	2.76	28	1
1:A:90:ASP:C	1:A:90:ASP:OD1	0.44	2.60	4	2
1:A:115:ARG:C	1:A:149:ILE:HD12	0.44	2.37	7	1
1:A:22:GLN:OE1	1:A:22:GLN:CA	0.44	2.66	11	1
1:A:104:ILE:HD12	1:A:105:SER:N	0.44	2.28	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:PHE:O	1:A:48:HIS:ND1	0.44	2.51	1	1
1:A:105:SER:O	1:A:110:HIS:C	0.44	2.61	3	1
1:A:104:ILE:HD13	1:A:104:ILE:H	0.44	1.72	7	1
1:A:145:ALA:C	1:A:146:CYS:SG	0.44	3.01	17	1
1:A:46:HIS:CE1	1:A:120:HIS:CG	0.44	3.06	24	1
1:A:38:LEU:HD11	1:A:119:VAL:CG2	0.44	2.34	25	1
1:A:121:GLU:HB2	1:A:144:LEU:HD11	0.43	1.89	1	1
1:A:46:HIS:HD1	1:A:117:LEU:HD13	0.43	1.73	6	1
1:A:38:LEU:O	1:A:39:THR:CG2	0.43	2.65	8	1
1:A:99:ILE:CG2	1:A:100:GLU:N	0.43	2.81	30	3
1:A:14:VAL:O	1:A:14:VAL:HG12	0.43	2.13	19	4
1:A:118:VAL:CG2	1:A:143:ARG:CB	0.43	2.95	12	1
1:A:20:PHE:CD2	1:A:112:ILE:CD1	0.43	3.02	18	2
1:A:43:HIS:CB	1:A:120:HIS:CE1	0.43	3.01	19	1
1:A:39:THR:O	1:A:43:HIS:CD2	0.43	2.70	27	2
1:A:121:GLU:O	1:A:140:ALA:HB3	0.43	2.13	28	1
1:A:20:PHE:CZ	1:A:112:ILE:HD13	0.43	2.48	2	1
1:A:105:SER:O	1:A:112:ILE:N	0.43	2.51	2	2
1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:ND2	0.43	2.66	30	2
1:A:118:VAL:HG11	1:A:143:ARG:HB3	0.43	1.90	24	1
1:A:45:PHE:CE1	1:A:124:ASP:OD2	0.43	2.71	7	1
1:A:4:ALA:HB3	1:A:149:ILE:CG2	0.43	2.44	11	1
1:A:16:GLY:C	1:A:17:ILE:HG13	0.43	2.39	19	2
1:A:112:ILE:O	1:A:114:GLY:N	0.43	2.50	13	1
1:A:106:LEU:HD22	1:A:112:ILE:CD1	0.43	2.42	18	1
1:A:124:ASP:OD1	1:A:124:ASP:N	0.43	2.51	24	2
1:A:127:GLY:O	1:A:128:LYS:C	0.43	2.60	27	2
1:A:125:ASP:OD1	1:A:134:SER:CB	0.43	2.67	24	1
1:A:37:GLY:C	1:A:38:LEU:O	0.43	2.61	30	23
1:A:44:GLY:CA	1:A:120:HIS:HB2	0.43	2.43	2	2
1:A:35:ILE:C	1:A:36:LYS:HG3	0.43	2.37	17	4
1:A:40:GLU:C	1:A:40:GLU:OE1	0.43	2.61	5	1
1:A:23:LYS:O	1:A:24:GLU:CD	0.43	2.62	12	1
1:A:107:SER:O	1:A:111:SER:N	0.43	2.51	15	1
1:A:121:GLU:CA	1:A:144:LEU:HD11	0.43	2.43	2	1
1:A:7:VAL:HG12	1:A:17:ILE:HG23	0.43	1.89	5	1
1:A:104:ILE:HB	1:A:112:ILE:HG22	0.43	1.90	8	1
1:A:142:SER:HB3	1:A:144:LEU:HD12	0.43	1.89	25	1
1:A:18:ILE:HD11	1:A:31:VAL:HG13	0.43	1.89	29	1
1:A:46:HIS:ND1	1:A:117:LEU:HD12	0.43	2.27	13	1
1:A:103:VAL:O	1:A:110:HIS:CE1	0.43	2.71	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:ILE:CD1	1:A:119:VAL:HG11	0.43	2.44	22	1
1:A:8:LEU:HD12	1:A:35:ILE:CG1	0.43	2.42	28	1
1:A:116:THR:O	1:A:117:LEU:C	0.43	2.62	30	1
1:A:38:LEU:C	1:A:93:GLY:HA3	0.43	2.39	12	5
1:A:25:SER:O	1:A:26:ASN:CB	0.43	2.65	19	1
1:A:14:VAL:HG23	1:A:38:LEU:HD12	0.43	1.91	2	1
1:A:146:CYS:O	1:A:148:VAL:N	0.43	2.48	9	2
1:A:104:ILE:HG21	1:A:115:ARG:HH22	0.43	1.74	21	1
1:A:106:LEU:HD23	1:A:113:ILE:CD1	0.43	2.41	22	1
1:A:124:ASP:C	1:A:126:LEU:N	0.43	2.73	3	3
1:A:22:GLN:NE2	1:A:27:GLY:O	0.43	2.50	14	1
1:A:29:VAL:HG11	1:A:106:LEU:HD11	0.43	1.90	21	1
1:A:119:VAL:HG22	1:A:145:ALA:HB3	0.43	1.91	26	1
1:A:90:ASP:OD1	1:A:90:ASP:C	0.43	2.62	28	1
1:A:2:THR:HG23	1:A:151:ILE:HG23	0.43	1.91	10	1
1:A:112:ILE:O	1:A:115:ARG:CG	0.43	2.67	19	2
1:A:38:LEU:HD12	1:A:43:HIS:CD2	0.43	2.49	21	1
1:A:4:ALA:N	1:A:20:PHE:O	0.42	2.50	1	2
1:A:122:LYS:CB	1:A:140:ALA:CB	0.42	2.97	25	2
1:A:116:THR:CG2	1:A:146:CYS:HB3	0.42	2.44	30	2
1:A:2:THR:O	1:A:20:PHE:O	0.42	2.37	12	1
1:A:36:LYS:HA	1:A:94:VAL:HG22	0.42	1.90	12	1
1:A:18:ILE:HG21	1:A:117:LEU:CD2	0.42	2.44	25	1
1:A:38:LEU:HD22	1:A:43:HIS:CB	0.42	2.44	26	1
1:A:39:THR:OG1	1:A:43:HIS:NE2	0.42	2.50	27	1
1:A:43:HIS:O	1:A:86:ASN:CG	0.42	2.62	19	1
1:A:116:THR:HG23	1:A:146:CYS:HB2	0.42	1.91	24	3
1:A:22:GLN:O	1:A:22:GLN:NE2	0.42	2.51	25	1
1:A:97:VAL:HG13	1:A:99:ILE:HD12	0.42	1.90	28	1
1:A:132:GLU:CA	1:A:135:THR:OG1	0.42	2.66	28	1
1:A:149:ILE:HG23	1:A:149:ILE:O	0.42	2.13	1	1
1:A:42:LEU:HD22	1:A:126:LEU:HD11	0.42	1.90	5	1
1:A:45:PHE:O	1:A:46:HIS:O	0.42	2.37	6	2
1:A:126:LEU:N	1:A:126:LEU:HD13	0.42	2.29	8	1
1:A:43:HIS:O	1:A:86:ASN:CB	0.42	2.67	19	1
1:A:43:HIS:CD2	1:A:43:HIS:N	0.42	2.86	1	1
1:A:45:PHE:CE2	1:A:87:VAL:HG12	0.42	2.49	1	1
1:A:118:VAL:O	1:A:119:VAL:C	0.42	2.62	2	2
1:A:83:ASP:O	1:A:84:LEU:CD1	0.42	2.63	3	1
1:A:46:HIS:C	1:A:47:VAL:O	0.42	2.61	6	1
1:A:115:ARG:O	1:A:149:ILE:HD11	0.42	2.14	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:GLN:C	1:A:22:GLN:CD	0.42	2.86	11	1
1:A:46:HIS:CG	1:A:117:LEU:CD1	0.42	3.02	23	1
1:A:118:VAL:HG11	1:A:143:ARG:CB	0.42	2.44	24	1
1:A:120:HIS:ND1	1:A:140:ALA:O	0.42	2.51	10	1
1:A:38:LEU:O	1:A:93:GLY:HA2	0.42	2.14	16	1
1:A:116:THR:HG23	1:A:118:VAL:CG1	0.42	2.37	28	1
1:A:139:ASN:O	1:A:139:ASN:CG	0.42	2.60	1	4
1:A:13:PRO:O	1:A:36:LYS:O	0.42	2.38	6	8
1:A:20:PHE:CD1	1:A:149:ILE:CG2	0.42	3.03	8	1
1:A:45:PHE:O	1:A:45:PHE:CD2	0.42	2.72	27	1
1:A:106:LEU:HD23	1:A:106:LEU:H	0.42	1.72	4	1
1:A:43:HIS:N	1:A:87:VAL:O	0.42	2.53	29	2
1:A:116:THR:CG2	1:A:146:CYS:HB2	0.42	2.44	16	2
1:A:84:LEU:O	1:A:85:GLY:C	0.42	2.61	2	1
1:A:14:VAL:CG2	1:A:38:LEU:CD2	0.42	2.98	3	1
1:A:20:PHE:CE2	1:A:112:ILE:HG13	0.42	2.49	10	1
1:A:45:PHE:CD2	1:A:47:VAL:HG23	0.42	2.50	15	1
1:A:22:GLN:CD	1:A:24:GLU:O	0.42	2.63	28	1
1:A:48:HIS:NE2	1:A:143:ARG:CG	0.42	2.83	2	1
1:A:20:PHE:CE2	1:A:31:VAL:HG13	0.42	2.50	12	1
1:A:82:GLY:O	1:A:83:ASP:CB	0.42	2.68	27	2
1:A:43:HIS:HB3	1:A:120:HIS:CD2	0.42	2.49	19	1
1:A:45:PHE:CD2	1:A:117:LEU:HB3	0.42	2.50	2	1
1:A:47:VAL:HG22	1:A:116:THR:O	0.42	2.15	2	1
1:A:21:GLU:C	1:A:21:GLU:CD	0.42	2.88	3	1
1:A:97:VAL:HG13	1:A:99:ILE:CD1	0.42	2.45	13	1
1:A:105:SER:O	1:A:111:SER:N	0.42	2.53	14	1
1:A:38:LEU:CD1	1:A:38:LEU:N	0.42	2.63	19	1
1:A:116:THR:HG23	1:A:146:CYS:CB	0.42	2.44	24	1
1:A:122:LYS:HB3	1:A:140:ALA:HB2	0.42	1.90	24	1
1:A:139:ASN:O	1:A:140:ALA:C	0.42	2.62	29	1
1:A:35:ILE:O	1:A:36:LYS:HG2	0.41	2.14	17	9
1:A:144:LEU:O	1:A:145:ALA:O	0.41	2.38	5	1
1:A:119:VAL:N	1:A:144:LEU:O	0.41	2.49	6	1
1:A:42:LEU:O	1:A:43:HIS:CG	0.41	2.73	11	1
1:A:38:LEU:O	1:A:93:GLY:O	0.41	2.38	16	1
1:A:86:ASN:ND2	1:A:123:ALA:HB1	0.41	2.31	12	1
1:A:97:VAL:CG1	1:A:98:SER:N	0.41	2.83	24	1
1:A:105:SER:OG	1:A:106:LEU:N	0.41	2.53	26	1
1:A:29:VAL:CG2	1:A:106:LEU:CD1	0.41	2.96	27	1
1:A:120:HIS:ND1	1:A:122:LYS:O	0.41	2.53	29	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:8:LEU:HB2	1:A:16:GLY:CA	0.41	2.45	1	2
1:A:22:GLN:OE1	1:A:106:LEU:CD1	0.41	2.68	6	1
1:A:119:VAL:HG12	1:A:120:HIS:H	0.41	1.75	19	2
1:A:28:PRO:HA	1:A:101:ASP:O	0.41	2.15	12	3
1:A:46:HIS:ND1	1:A:117:LEU:HD22	0.41	2.30	14	1
1:A:116:THR:HG22	1:A:146:CYS:CB	0.41	2.45	16	1
1:A:42:LEU:O	1:A:123:ALA:CB	0.41	2.59	26	1
1:A:46:HIS:CD2	1:A:86:ASN:OD1	0.41	2.73	26	1
1:A:109:ASP:O	1:A:110:HIS:ND1	0.41	2.53	28	1
1:A:87:VAL:C	1:A:88:THR:OG1	0.41	2.63	5	1
1:A:42:LEU:CD2	1:A:88:THR:OG1	0.41	2.62	15	1
1:A:46:HIS:ND1	1:A:47:VAL:HG23	0.41	2.30	18	2
1:A:82:GLY:O	1:A:83:ASP:O	0.41	2.39	18	1
1:A:6:ALA:CB	1:A:18:ILE:HG13	0.41	2.43	19	1
1:A:82:GLY:C	1:A:84:LEU:N	0.41	2.77	25	1
1:A:121:GLU:CG	1:A:142:SER:HB2	0.41	2.45	27	1
1:A:121:GLU:HG2	1:A:142:SER:CB	0.41	2.45	27	1
1:A:119:VAL:O	1:A:144:LEU:CD1	0.41	2.68	29	1
1:A:110:HIS:O	1:A:111:SER:O	0.41	2.39	18	2
1:A:102:SER:O	1:A:104:ILE:N	0.41	2.53	9	1
1:A:8:LEU:HB2	1:A:16:GLY:N	0.41	2.30	17	5
1:A:133:GLN:O	1:A:137:THR:OG1	0.41	2.39	14	2
1:A:20:PHE:CZ	1:A:31:VAL:HG13	0.41	2.50	16	1
1:A:45:PHE:O	1:A:83:ASP:OD1	0.41	2.39	29	1
1:A:41:GLY:C	1:A:42:LEU:HD12	0.41	2.40	1	1
1:A:119:VAL:O	1:A:143:ARG:O	0.41	2.39	9	1
1:A:144:LEU:O	1:A:145:ALA:C	0.41	2.64	12	1
1:A:43:HIS:O	1:A:86:ASN:OD1	0.41	2.39	14	1
1:A:39:THR:CA	1:A:93:GLY:CA	0.41	2.98	17	1
1:A:104:ILE:HB	1:A:112:ILE:CG2	0.41	2.45	23	2
1:A:106:LEU:HG	1:A:151:ILE:HD11	0.41	1.93	20	1
1:A:45:PHE:C	1:A:46:HIS:O	0.41	2.64	21	1
1:A:142:SER:O	1:A:143:ARG:O	0.41	2.38	3	2
1:A:45:PHE:C	1:A:46:HIS:CG	0.41	2.97	6	1
1:A:2:THR:HG22	1:A:3:LYS:N	0.41	2.31	9	1
1:A:48:HIS:NE2	1:A:120:HIS:CE1	0.41	2.89	15	1
1:A:24:GLU:O	1:A:26:ASN:N	0.41	2.49	19	1
1:A:38:LEU:HD13	1:A:38:LEU:H	0.41	1.68	19	1
1:A:20:PHE:CE1	1:A:149:ILE:HG13	0.41	2.49	26	1
1:A:116:THR:OG1	1:A:146:CYS:C	0.41	2.64	2	1
1:A:14:VAL:CG2	1:A:144:LEU:HD13	0.41	2.35	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:ILE:C	1:A:36:LYS:HG2	0.41	2.41	12	1
1:A:129:GLY:O	1:A:130:GLY:O	0.41	2.39	12	2
1:A:122:LYS:HB2	1:A:140:ALA:CB	0.41	2.46	18	1
1:A:121:GLU:HB2	1:A:142:SER:CB	0.41	2.46	19	1
1:A:46:HIS:CB	1:A:117:LEU:HA	0.41	2.46	5	1
1:A:146:CYS:O	1:A:146:CYS:SG	0.41	2.78	8	2
1:A:84:LEU:O	1:A:84:LEU:HD23	0.41	2.15	10	1
1:A:45:PHE:CE1	1:A:87:VAL:HG22	0.41	2.49	12	1
1:A:105:SER:O	1:A:110:HIS:O	0.41	2.39	12	1
1:A:46:HIS:O	1:A:116:THR:O	0.41	2.39	13	1
1:A:104:ILE:H	1:A:104:ILE:HD13	0.41	1.76	14	1
1:A:100:GLU:O	1:A:100:GLU:CG	0.41	2.68	16	1
1:A:20:PHE:HD2	1:A:112:ILE:HD12	0.41	1.75	19	1
1:A:118:VAL:CG1	1:A:143:ARG:HA	0.41	2.46	19	1
1:A:38:LEU:H	1:A:38:LEU:CD2	0.41	2.27	22	1
1:A:83:ASP:O	1:A:85:GLY:N	0.41	2.54	23	1
1:A:28:PRO:CA	1:A:101:ASP:O	0.41	2.69	30	1
1:A:46:HIS:CD2	1:A:117:LEU:CD1	0.41	3.04	30	1
1:A:118:VAL:HG23	1:A:145:ALA:N	0.41	2.31	22	2
1:A:85:GLY:O	1:A:86:ASN:OD1	0.41	2.39	5	1
1:A:86:ASN:ND2	1:A:124:ASP:OD2	0.41	2.54	16	1
1:A:118:VAL:HG13	1:A:118:VAL:O	0.41	2.16	16	1
1:A:141:GLY:O	1:A:142:SER:CB	0.41	2.68	24	1
1:A:109:ASP:O	1:A:110:HIS:CG	0.41	2.74	28	1
1:A:48:HIS:ND1	1:A:118:VAL:HG11	0.41	2.30	30	1
1:A:8:LEU:HD23	1:A:18:ILE:HG22	0.40	1.92	1	1
1:A:118:VAL:O	1:A:119:VAL:O	0.40	2.39	9	1
1:A:143:ARG:O	1:A:144:LEU:O	0.40	2.39	9	1
1:A:46:HIS:ND1	1:A:117:LEU:CD1	0.40	2.83	13	1
1:A:36:LYS:HG2	1:A:94:VAL:HG22	0.40	1.91	16	1
1:A:82:GLY:C	1:A:83:ASP:O	0.40	2.63	18	1
1:A:110:HIS:ND1	1:A:110:HIS:C	0.40	2.77	18	1
1:A:103:VAL:O	1:A:110:HIS:NE2	0.40	2.54	19	1
1:A:45:PHE:CE2	1:A:46:HIS:CD2	0.40	3.08	22	1
1:A:124:ASP:OD1	1:A:126:LEU:CA	0.40	2.69	25	1
1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:HD22	0.40	2.31	2	1
1:A:117:LEU:CD2	1:A:117:LEU:N	0.40	2.85	6	1
1:A:12:GLY:N	1:A:13:PRO:HD2	0.40	2.30	15	1
1:A:46:HIS:H	1:A:46:HIS:CD2	0.40	2.35	15	1
1:A:35:ILE:CG2	1:A:38:LEU:CD2	0.40	2.80	22	1
1:A:47:VAL:CG2	1:A:115:ARG:HD3	0.40	2.47	26	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:PHE:CE2	1:A:46:HIS:O	0.40	2.75	17	1
1:A:117:LEU:CD1	1:A:149:ILE:HD11	0.40	2.43	22	1
1:A:127:GLY:O	1:A:129:GLY:N	0.40	2.54	23	1
1:A:123:ALA:O	1:A:138:GLY:O	0.40	2.40	25	1
1:A:22:GLN:O	1:A:22:GLN:OE1	0.40	2.40	8	1
1:A:43:HIS:O	1:A:87:VAL:N	0.40	2.52	10	1
1:A:106:LEU:CD2	1:A:151:ILE:CD1	0.40	3.00	20	1
1:A:120:HIS:O	1:A:122:LYS:O	0.40	2.39	28	1
1:A:130:GLY:O	1:A:135:THR:HG23	0.40	2.17	3	1
1:A:118:VAL:HG22	1:A:119:VAL:H	0.40	1.76	4	1
1:A:4:ALA:C	1:A:5:VAL:CG2	0.40	2.93	7	1
1:A:8:LEU:O	1:A:9:LYS:CG	0.40	2.69	7	1
1:A:120:HIS:ND1	1:A:141:GLY:C	0.40	2.79	11	1
1:A:139:ASN:O	1:A:140:ALA:CB	0.40	2.69	13	1
1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:ALA:N	0.40	2.32	17	1
1:A:143:ARG:O	1:A:144:LEU:CD2	0.40	2.60	23	1
1:A:124:ASP:OD1	1:A:126:LEU:N	0.40	2.55	25	1
1:A:9:LYS:O	1:A:10:GLY:O	0.40	2.39	29	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	118/153 (77%)	70±4 (60±3%)	34±4 (29±3%)	13±3 (11±3%)	1	8
All	All	3540/4590 (77%)	2109 (60%)	1032 (29%)	399 (11%)	1	8

All 58 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	38	LEU	29
1	A	94	VAL	27
1	A	90	ASP	20
1	A	47	VAL	19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	10	GLY	18
1	A	138	GLY	17
1	A	148	VAL	14
1	A	132	GLU	13
1	A	111	SER	13
1	A	14	VAL	12
1	A	44	GLY	12
1	A	84	LEU	11
1	A	98	SER	10
1	A	109	ASP	10
1	A	143	ARG	9
1	A	130	GLY	9
1	A	116	THR	8
1	A	141	GLY	7
1	A	82	GLY	7
1	A	40	GLU	6
1	A	140	ALA	6
1	A	144	LEU	6
1	A	113	ILE	6
1	A	30	LYS	6
1	A	103	VAL	6
1	A	15	GLN	6
1	A	85	GLY	5
1	A	123	ALA	5
1	A	83	ASP	5
1	A	145	ALA	5
1	A	125	ASP	5
1	A	127	GLY	5
1	A	139	ASN	4
1	A	108	GLY	4
1	A	13	PRO	4
1	A	46	HIS	4
1	A	48	HIS	4
1	A	122	LYS	3
1	A	124	ASP	3
1	A	104	ILE	3
1	A	9	LYS	3
1	A	12	GLY	3
1	A	117	LEU	3
1	A	16	GLY	2
1	A	87	VAL	2
1	A	114	GLY	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	119	VAL	2
1	A	8	LEU	2
1	A	133	GLN	2
1	A	26	ASN	2
1	A	142	SER	2
1	A	45	PHE	2
1	A	121	GLU	1
1	A	129	GLY	1
1	A	151	ILE	1
1	A	39	THR	1
1	A	135	THR	1
1	A	11	ASP	1

6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	91/118 (77%)	64±4 (71±4%)	27±4 (29±4%)	1	18
All	All	2730/3540 (77%)	1928 (71%)	802 (29%)	1	18

All 80 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	18	ILE	30
1	A	19	ASN	30
1	A	35	ILE	29
1	A	15	GLN	23
1	A	133	GLN	22
1	A	38	LEU	21
1	A	122	LYS	21
1	A	107	SER	21
1	A	24	GLU	21
1	A	84	LEU	20
1	A	92	ASP	20
1	A	142	SER	19
1	A	5	VAL	18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	117	LEU	18
1	A	121	GLU	17
1	A	128	LYS	17
1	A	100	GLU	15
1	A	8	LEU	15
1	A	136	LYS	14
1	A	40	GLU	14
1	A	42	LEU	14
1	A	143	ARG	14
1	A	105	SER	13
1	A	109	ASP	13
1	A	125	ASP	13
1	A	48	HIS	13
1	A	132	GLU	13
1	A	9	LYS	13
1	A	104	ILE	12
1	A	3	LYS	12
1	A	124	ASP	12
1	A	46	HIS	11
1	A	112	ILE	11
1	A	32	TRP	11
1	A	134	SER	11
1	A	25	SER	10
1	A	106	LEU	10
1	A	21	GLU	9
1	A	120	HIS	9
1	A	146	CYS	8
1	A	144	LEU	8
1	A	23	LYS	8
1	A	83	ASP	8
1	A	118	VAL	7
1	A	101	ASP	7
1	A	14	VAL	7
1	A	115	ARG	7
1	A	2	THR	7
1	A	135	THR	6
1	A	43	HIS	5
1	A	102	SER	5
1	A	148	VAL	5
1	A	131	ASN	5
1	A	26	ASN	5
1	A	99	ILE	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	149	ILE	5
1	A	139	ASN	5
1	A	86	ASN	5
1	A	30	LYS	4
1	A	45	PHE	4
1	A	88	THR	4
1	A	47	VAL	4
1	A	22	GLN	4
1	A	116	THR	4
1	A	153	GLN	4
1	A	103	VAL	3
1	A	91	LYS	3
1	A	34	SER	3
1	A	87	VAL	3
1	A	119	VAL	2
1	A	126	LEU	2
1	A	36	LYS	2
1	A	111	SER	2
1	A	31	VAL	1
1	A	98	SER	1
1	A	17	ILE	1
1	A	96	ASP	1
1	A	11	ASP	1
1	A	110	HIS	1
1	A	97	VAL	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