



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 6, 2026 – 08:47 AM UTC

PDB ID : 1TR4 / pdb_00001tr4
Title : Solution structure of human oncogenic protein gankyrin
Authors : Yuan, C.; Li, J.; Mahajan, A.; Poi, M.J.; Byeon, I.J.; Tsai, M.D.
Deposited on : 2004-06-19

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

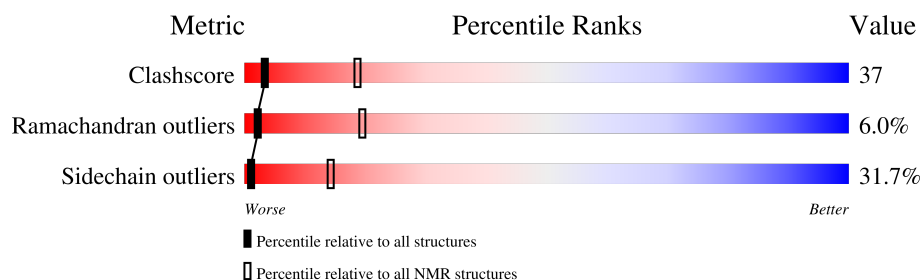
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

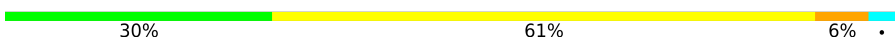
The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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	226	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:8-A:226 (219)	0.86	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 4 clusters and 7 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3427 atoms, of which 1717 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10.

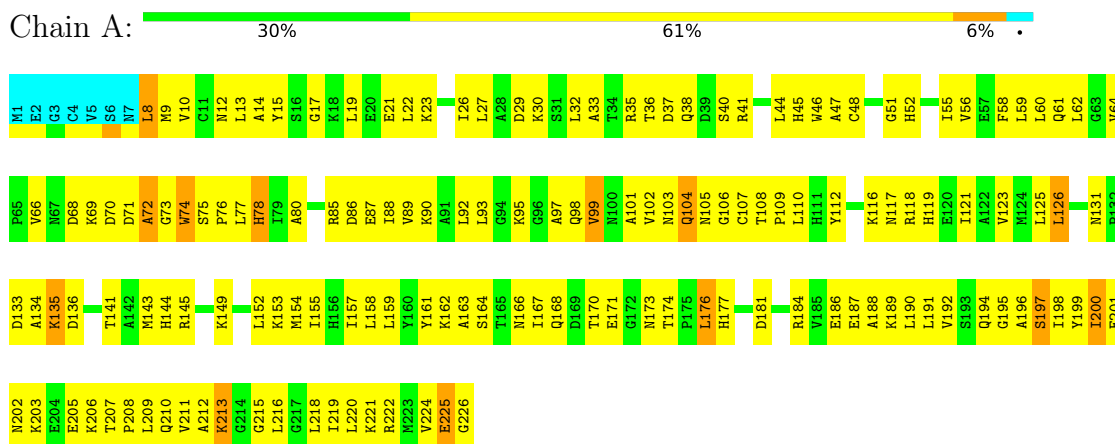
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	226	Total	C	H	N	O	S	0
			3427	1063	1717	302	334	11	

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: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10

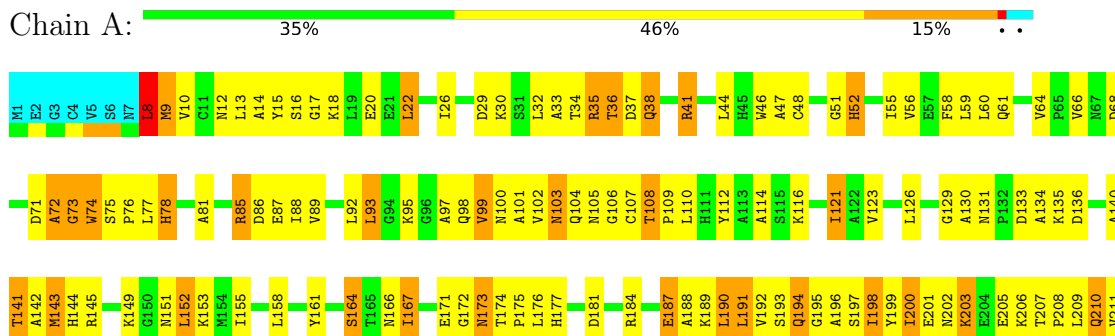


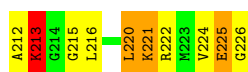
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

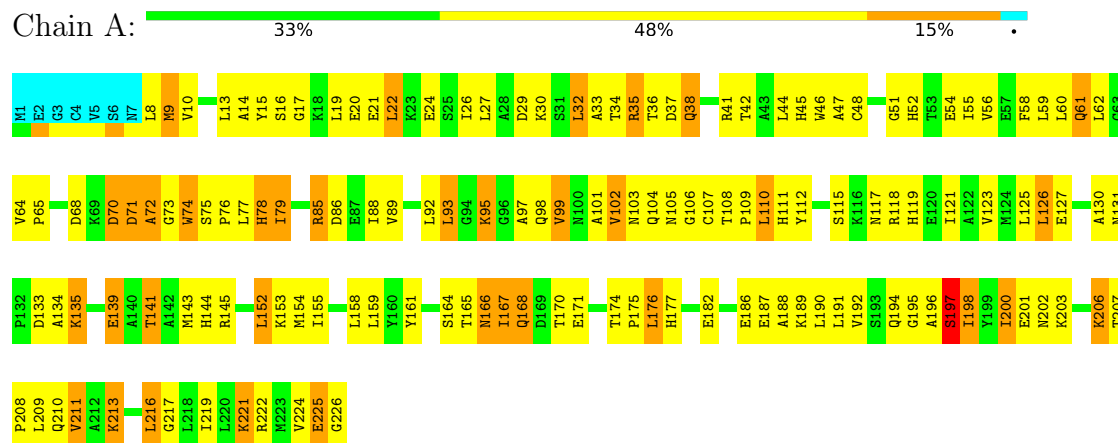
- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10





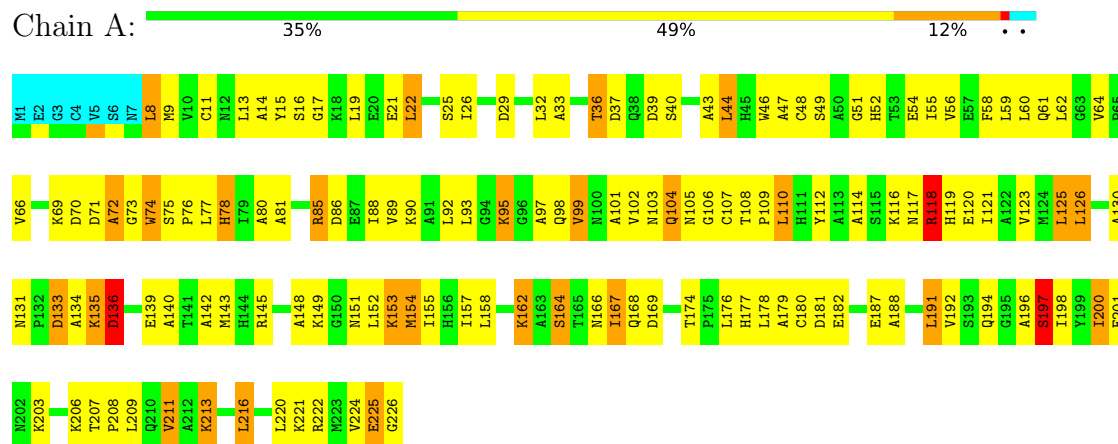
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10



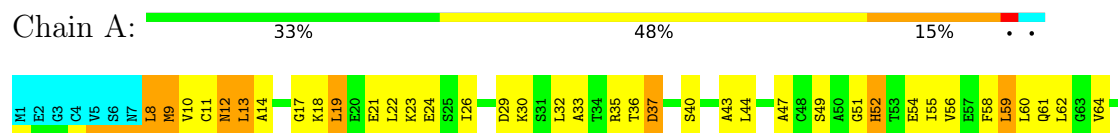
4.2.3 Score per residue for model 3

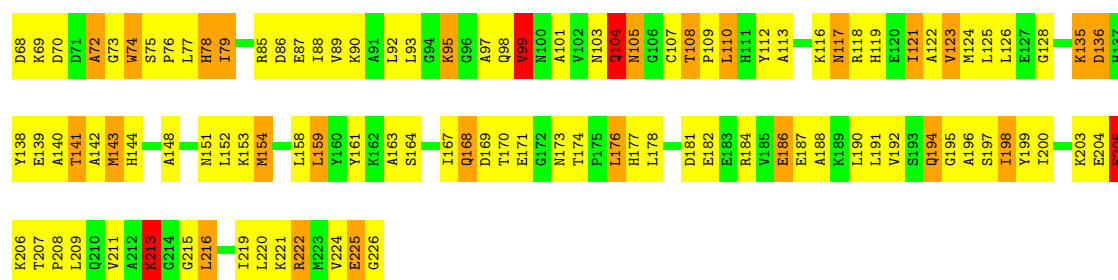
- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10



4.2.4 Score per residue for model 4

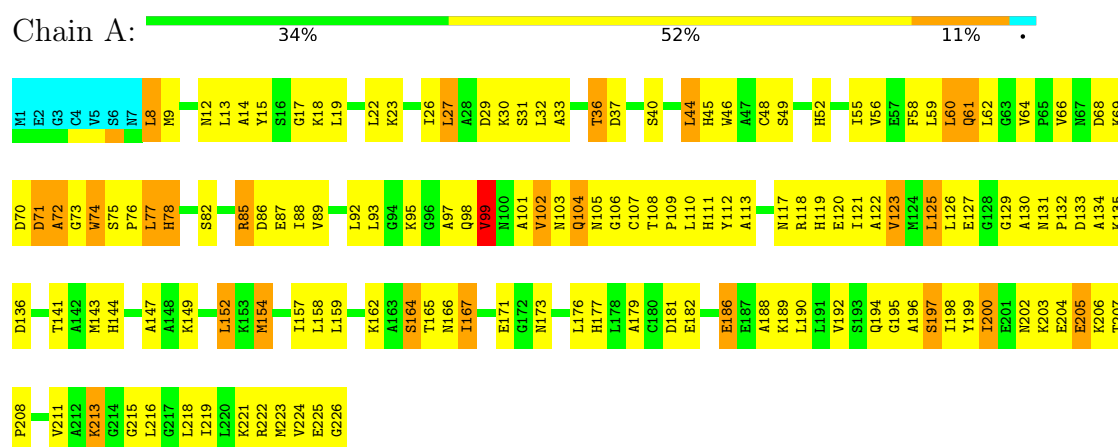
- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10





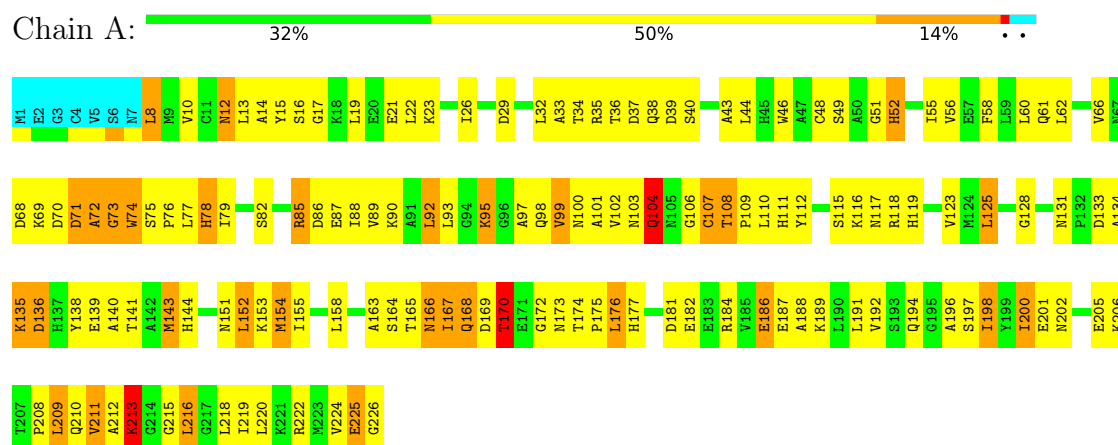
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10



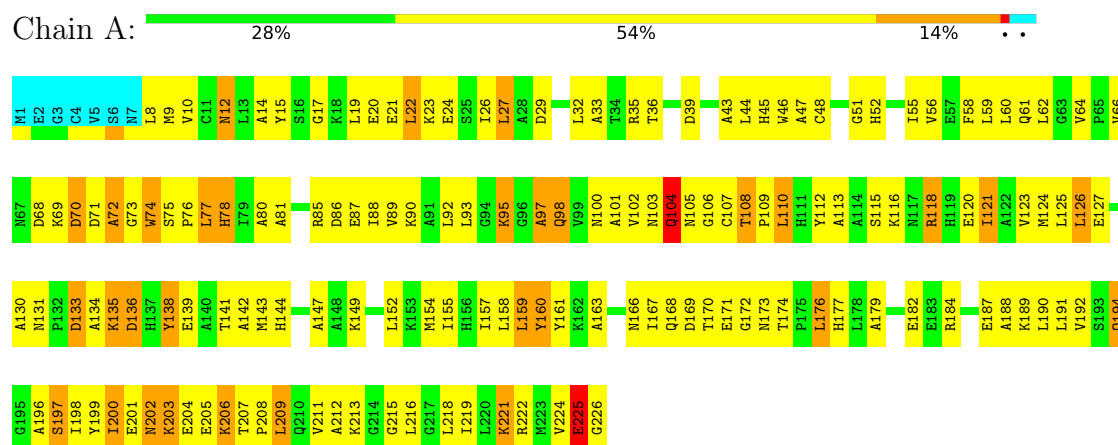
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10

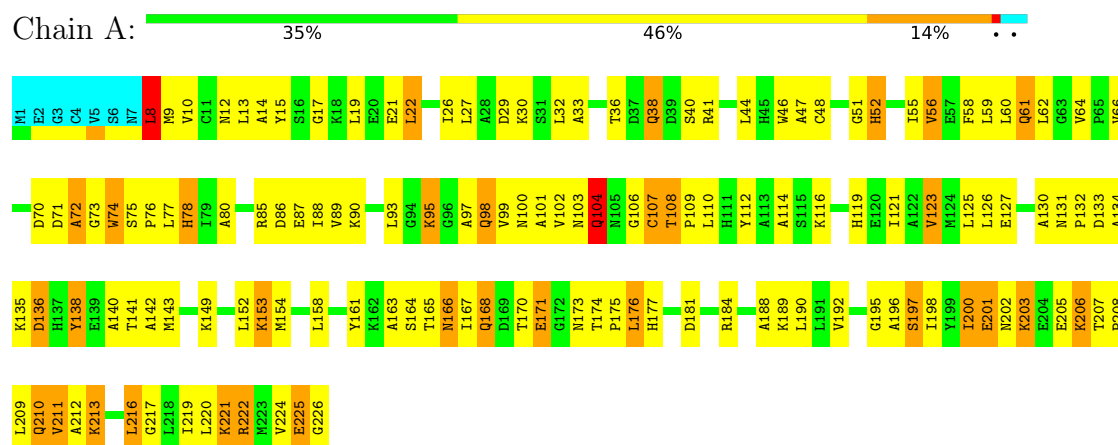


4.2.7 Score per residue for model 7

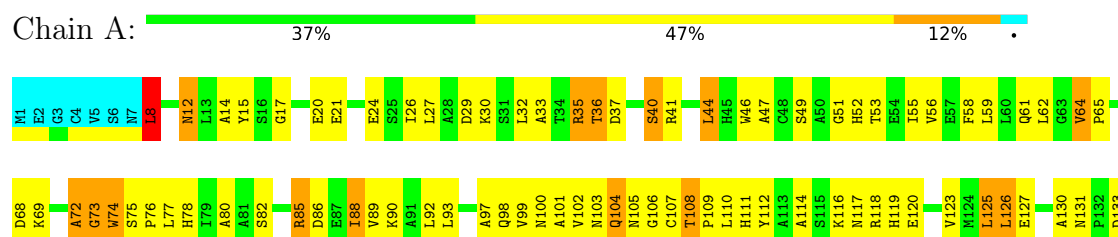
- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10

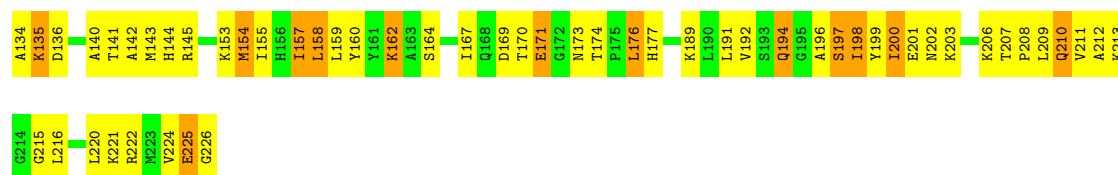


- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10



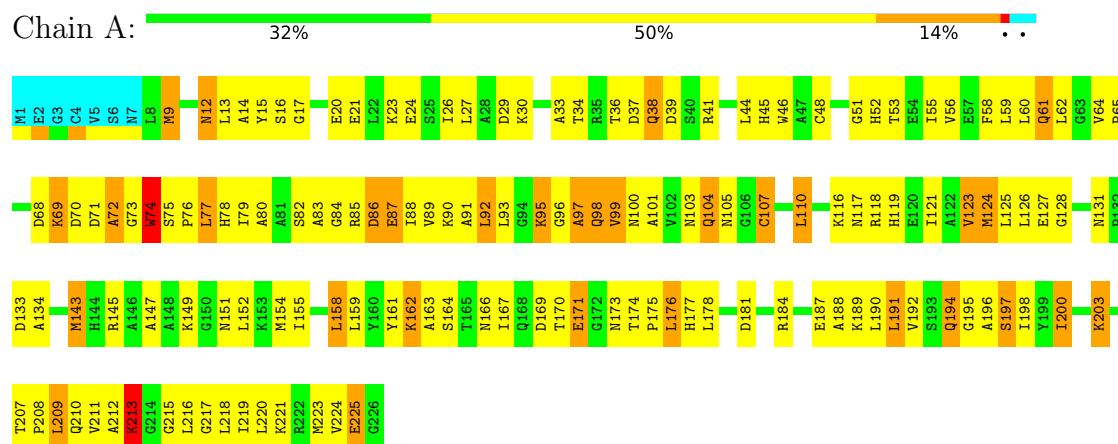
- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10





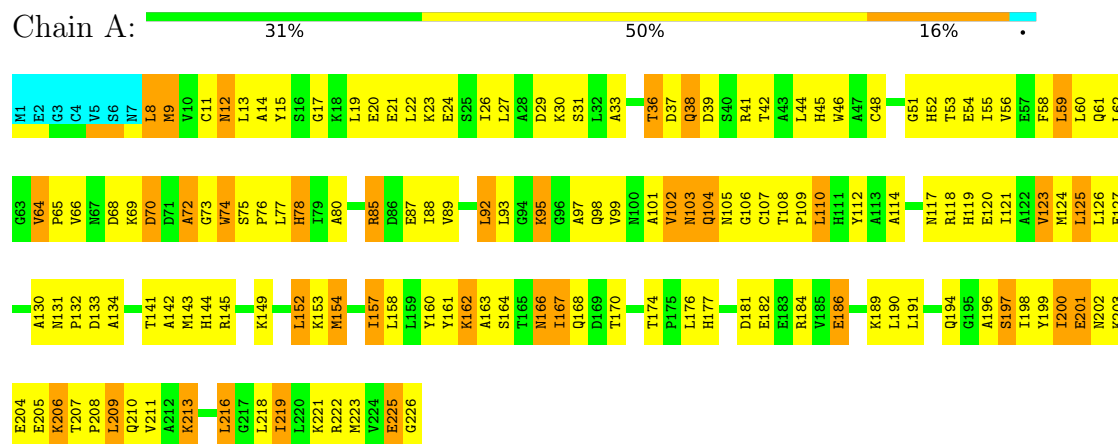
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10



4.2.11 Score per residue for model 11

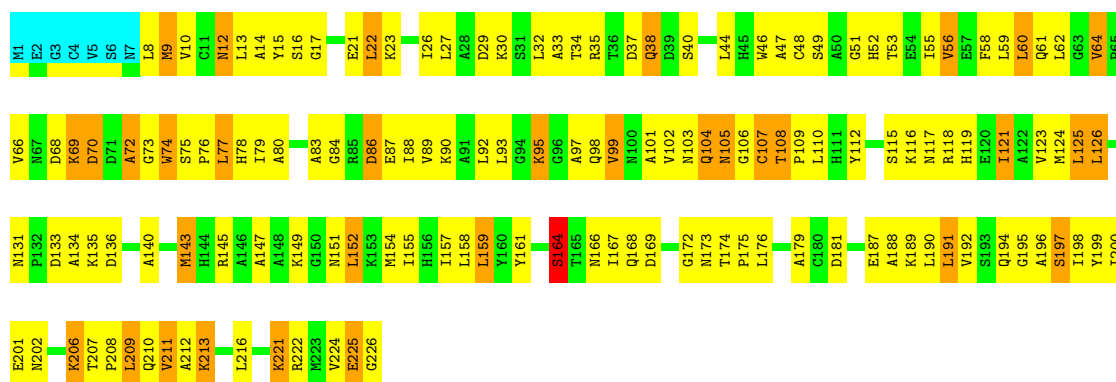
- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10



4.2.12 Score per residue for model 12

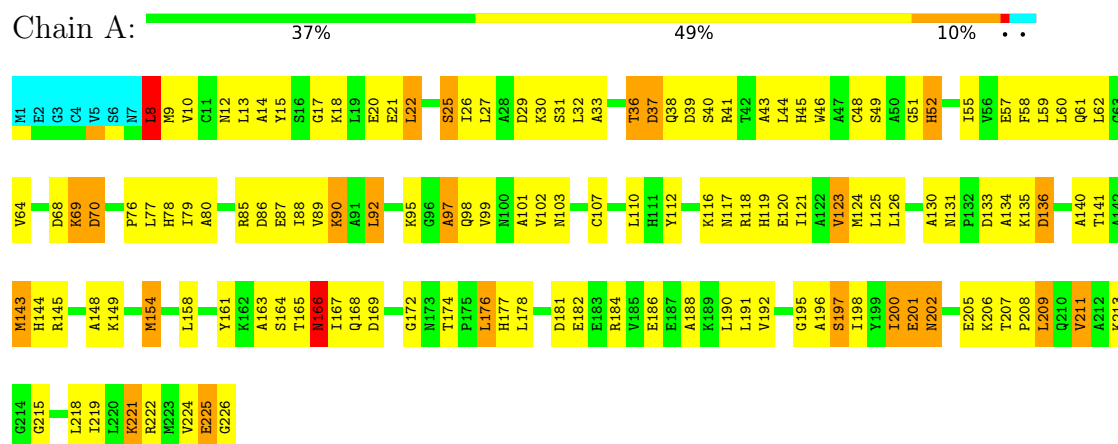
- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10





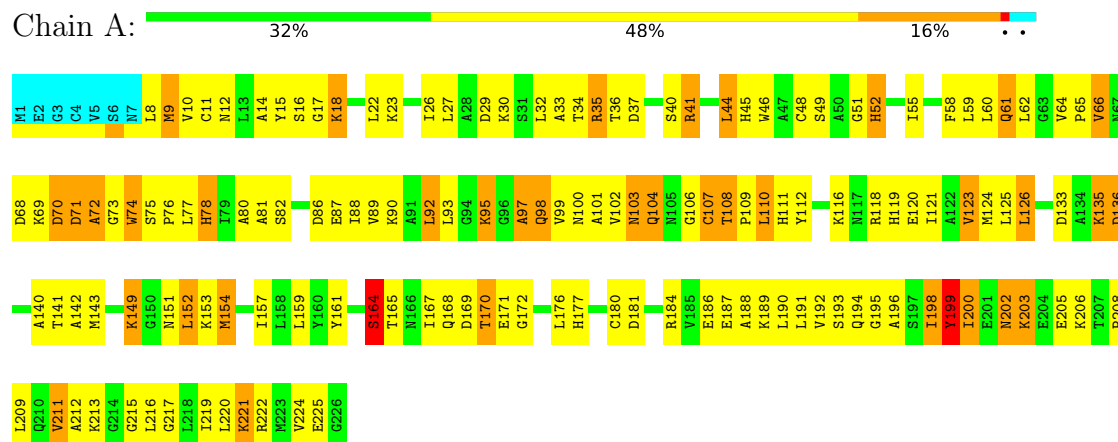
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10



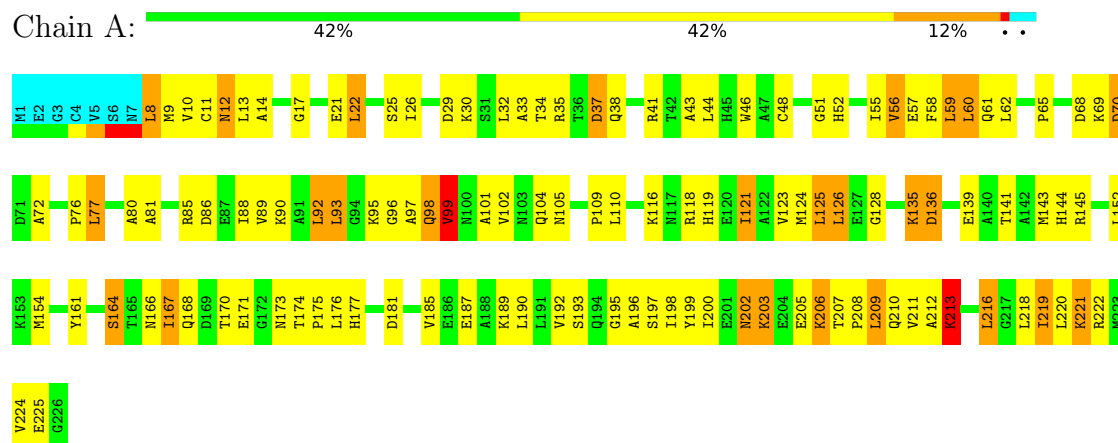
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10

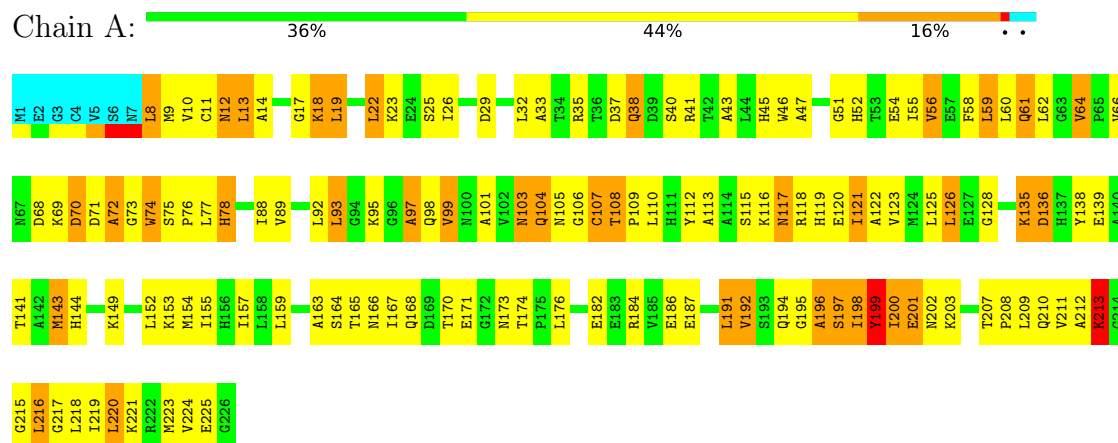


4.2.15 Score per residue for model 15

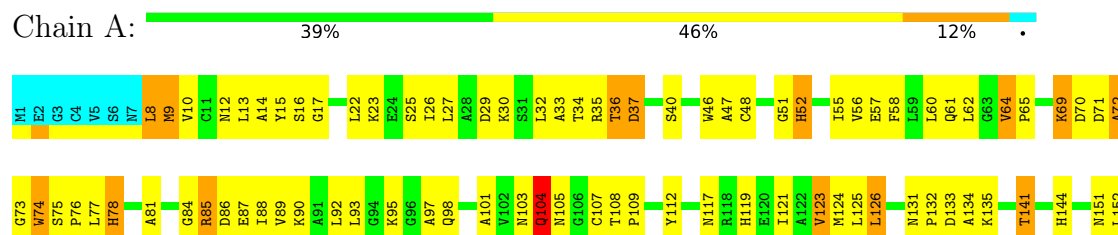
- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10

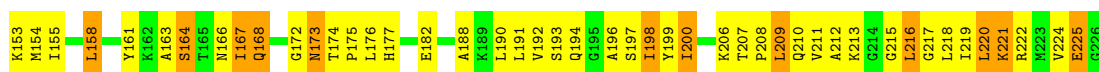


- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10



- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10

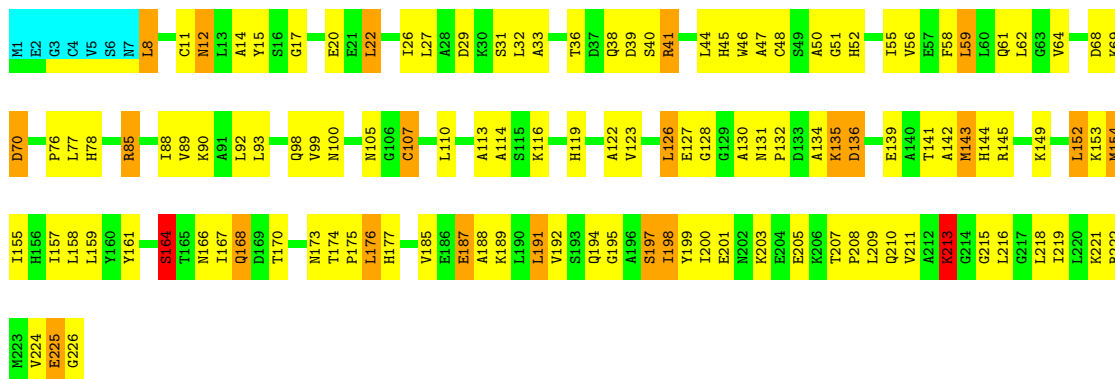




4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10

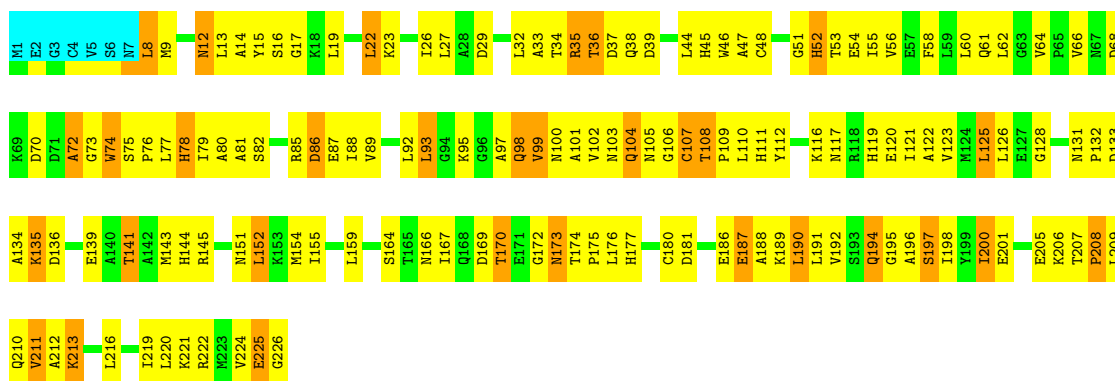
Chain A: 43% 44% 9%



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10

Chain A: 32% 51% 14%

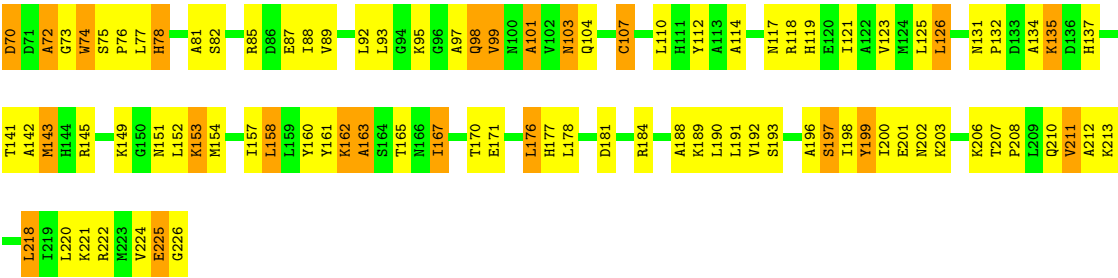


4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: 26S proteasome non-ATPase regulatory subunit 10

Chain A: 39% 45% 13%





5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *simulated annealing*.

Of the 80 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the least restraint violations, structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
CNS	structure solution	1.0
CNS	refinement	1.0

No chemical shift data was provided.

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1662	1672	1668	122±16
All	All	33240	33440	33360	2445

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 37.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:152:LEU:HD13	1:A:155:ILE:HD11	1.02	1.13	7	1
1:A:110:LEU:HD11	1:A:130:ALA:HB1	1.02	1.25	1	3
1:A:77:LEU:HD21	1:A:125:LEU:HD11	1.01	1.27	19	1
1:A:89:VAL:HG21	1:A:121:ILE:HG23	1.01	1.29	10	3
1:A:141:THR:HG21	1:A:167:ILE:HD13	0.93	1.39	14	6
1:A:77:LEU:HD11	1:A:89:VAL:HG13	0.91	1.42	7	1
1:A:174:THR:HG21	1:A:200:ILE:HG21	0.90	1.42	9	14
1:A:110:LEU:HD22	1:A:111:HIS:N	0.90	1.82	14	1
1:A:212:ALA:HB1	1:A:216:LEU:HD11	0.90	1.42	7	1
1:A:110:LEU:HD13	1:A:126:LEU:HD21	0.89	1.39	5	1
1:A:126:LEU:HD22	1:A:161:TYR:CG	0.88	2.02	20	2
1:A:209:LEU:HD22	1:A:210:GLN:N	0.87	1.84	17	1
1:A:200:ILE:O	1:A:207:THR:HG22	0.86	1.71	16	1
1:A:74:TRP:CD1	1:A:103:ASN:CB	0.86	2.58	11	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:ALA:HB2	1:A:43:ALA:HB1	0.86	1.47	4	8
1:A:176:LEU:HD21	1:A:196:ALA:HB1	0.86	1.47	19	2
1:A:126:LEU:HD13	1:A:161:TYR:CD2	0.85	2.07	12	4
1:A:114:ALA:HB2	1:A:142:ALA:HB1	0.84	1.48	11	7
1:A:131:ASN:CB	1:A:134:ALA:HB2	0.84	2.02	20	11
1:A:26:ILE:HG23	1:A:33:ALA:HB2	0.84	1.50	3	20
1:A:10:VAL:CG2	1:A:32:LEU:HD22	0.84	2.03	6	2
1:A:14:ALA:CB	1:A:43:ALA:HB1	0.84	2.02	4	6
1:A:36:THR:HG22	1:A:41:ARG:O	0.83	1.73	1	5
1:A:126:LEU:HD22	1:A:161:TYR:CD1	0.83	2.06	11	1
1:A:119:HIS:CD2	1:A:154:MET:HE3	0.83	2.08	9	7
1:A:52:HIS:O	1:A:56:VAL:HG23	0.83	1.72	3	6
1:A:176:LEU:HD22	1:A:177:HIS:N	0.83	1.88	9	1
1:A:74:TRP:N	1:A:74:TRP:CD1	0.82	2.46	4	15
1:A:52:HIS:HB3	1:A:55:ILE:HD12	0.82	1.52	6	8
1:A:176:LEU:HD12	1:A:177:HIS:N	0.82	1.89	14	2
1:A:141:THR:HG21	1:A:167:ILE:HD12	0.82	1.49	6	3
1:A:59:LEU:CD1	1:A:64:VAL:HG21	0.82	2.04	20	1
1:A:14:ALA:CB	1:A:55:ILE:HG21	0.81	2.05	18	17
1:A:176:LEU:HD21	1:A:196:ALA:CB	0.81	2.05	12	2
1:A:135:LYS:O	1:A:136:ASP:O	0.81	1.99	8	10
1:A:58:PHE:CE1	1:A:62:LEU:HD11	0.80	2.11	19	11
1:A:74:TRP:CD1	1:A:103:ASN:HB3	0.80	2.11	1	13
1:A:56:VAL:O	1:A:60:LEU:HD13	0.80	1.77	2	2
1:A:14:ALA:HA	1:A:55:ILE:HD13	0.79	1.54	17	16
1:A:64:VAL:HG22	1:A:65:PRO:HD2	0.79	1.51	11	3
1:A:76:PRO:C	1:A:92:LEU:HD23	0.78	2.02	14	3
1:A:52:HIS:CB	1:A:55:ILE:HD12	0.78	2.09	19	12
1:A:74:TRP:CD1	1:A:74:TRP:N	0.78	2.47	11	2
1:A:32:LEU:HD12	1:A:33:ALA:N	0.78	1.92	13	1
1:A:199:TYR:O	1:A:207:THR:HG22	0.78	1.77	15	10
1:A:221:LYS:O	1:A:224:VAL:HG12	0.78	1.78	14	1
1:A:176:LEU:HD11	1:A:196:ALA:HB1	0.77	1.54	17	2
1:A:19:LEU:HD23	1:A:55:ILE:HA	0.77	1.55	19	8
1:A:131:ASN:HB3	1:A:134:ALA:HB2	0.77	1.57	9	16
1:A:162:LYS:CD	1:A:162:LYS:N	0.77	2.48	10	5
1:A:109:PRO:CB	1:A:125:LEU:HD11	0.77	2.09	6	2
1:A:78:HIS:CE1	1:A:101:ALA:O	0.77	2.38	20	18
1:A:73:GLY:C	1:A:74:TRP:CD1	0.77	2.63	1	17
1:A:74:TRP:CD1	1:A:103:ASN:HB2	0.77	2.15	11	13
1:A:69:LYS:CD	1:A:101:ALA:HB1	0.76	2.10	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:77:LEU:HD21	1:A:125:LEU:CD1	0.76	2.10	19	1
1:A:89:VAL:HG11	1:A:121:ILE:HG13	0.76	1.55	7	2
1:A:174:THR:OG1	1:A:176:LEU:HD23	0.76	1.81	18	1
1:A:10:VAL:HG21	1:A:32:LEU:HD22	0.76	1.58	6	1
1:A:77:LEU:CD1	1:A:89:VAL:HG13	0.76	2.11	7	1
1:A:26:ILE:HD12	1:A:58:PHE:CE2	0.76	2.15	6	11
1:A:125:LEU:HD12	1:A:126:LEU:N	0.76	1.96	14	2
1:A:125:LEU:HD23	1:A:130:ALA:HB2	0.75	1.57	5	2
1:A:141:THR:CG2	1:A:167:ILE:HD12	0.75	2.11	13	2
1:A:197:SER:OG	1:A:200:ILE:HD11	0.75	1.80	11	2
1:A:29:ASP:CG	1:A:32:LEU:HD23	0.75	2.06	19	3
1:A:99:VAL:HG11	1:A:128:GLY:O	0.75	1.81	19	5
1:A:176:LEU:HD13	1:A:208:PRO:HB3	0.75	1.57	14	2
1:A:110:LEU:CD1	1:A:130:ALA:HB1	0.74	2.09	1	3
1:A:110:LEU:HD21	1:A:126:LEU:CD2	0.74	2.12	9	2
1:A:110:LEU:HD12	1:A:125:LEU:HD11	0.74	1.59	10	1
1:A:176:LEU:HD21	1:A:208:PRO:HG3	0.74	1.60	18	1
1:A:8:LEU:HD23	1:A:37:ASP:OD1	0.73	1.83	5	1
1:A:135:LYS:HG2	1:A:167:ILE:HG21	0.73	1.58	18	2
1:A:77:LEU:CD2	1:A:125:LEU:HD11	0.73	2.09	19	1
1:A:48:CYS:HA	1:A:88:ILE:HD13	0.73	1.60	1	14
1:A:51:GLY:HA2	1:A:88:ILE:HD11	0.73	1.60	11	17
1:A:73:GLY:C	1:A:74:TRP:CG	0.73	2.67	14	17
1:A:29:ASP:CG	1:A:32:LEU:HD13	0.73	2.08	4	4
1:A:22:LEU:CD2	1:A:55:ILE:HG23	0.73	2.13	5	1
1:A:9:MET:O	1:A:13:LEU:HD13	0.73	1.82	12	9
1:A:59:LEU:HD12	1:A:64:VAL:HG21	0.73	1.58	20	2
1:A:85:ARG:O	1:A:89:VAL:HG23	0.73	1.83	4	6
1:A:52:HIS:O	1:A:56:VAL:HG22	0.72	1.83	18	4
1:A:89:VAL:HG21	1:A:121:ILE:CG2	0.72	2.13	13	3
1:A:26:ILE:CG2	1:A:33:ALA:HB2	0.72	2.14	6	18
1:A:126:LEU:HD13	1:A:161:TYR:CE2	0.72	2.18	20	1
1:A:126:LEU:HD22	1:A:161:TYR:CD2	0.72	2.19	20	1
1:A:60:LEU:HD23	1:A:60:LEU:O	0.72	1.85	20	3
1:A:188:ALA:O	1:A:192:VAL:HG23	0.71	1.84	10	15
1:A:53:THR:HG21	1:A:87:GLU:HG2	0.71	1.62	10	1
1:A:152:LEU:HD12	1:A:187:GLU:OE1	0.71	1.83	14	1
1:A:152:LEU:HD13	1:A:155:ILE:CD1	0.71	2.07	7	1
1:A:143:MET:CG	1:A:158:LEU:HD23	0.71	2.15	5	1
1:A:119:HIS:CG	1:A:154:MET:HE3	0.71	2.20	9	6
1:A:198:ILE:HG23	1:A:224:VAL:HG21	0.71	1.61	8	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:197:SER:O	1:A:224:VAL:HG21	0.71	1.85	16	1
1:A:143:MET:HG3	1:A:158:LEU:HD23	0.71	1.62	5	1
1:A:143:MET:HE3	1:A:158:LEU:HB3	0.71	1.63	20	2
1:A:17:GLY:HA2	1:A:55:ILE:HD11	0.70	1.63	7	17
1:A:36:THR:CG2	1:A:42:THR:HG22	0.70	2.16	2	1
1:A:133:ASP:OD1	1:A:167:ILE:HD11	0.70	1.86	13	12
1:A:10:VAL:O	1:A:22:LEU:HD11	0.70	1.86	20	1
1:A:166:ASN:ND2	1:A:196:ALA:HB1	0.70	2.02	7	1
1:A:58:PHE:CZ	1:A:62:LEU:HD11	0.70	2.22	9	8
1:A:197:SER:HB2	1:A:200:ILE:HD11	0.70	1.63	12	8
1:A:143:MET:HE1	1:A:159:LEU:HD12	0.70	1.62	12	1
1:A:107:CYS:HB3	1:A:112:TYR:CZ	0.69	2.21	20	16
1:A:110:LEU:HD11	1:A:126:LEU:HG	0.69	1.63	20	1
1:A:60:LEU:HD21	1:A:66:VAL:HG11	0.69	1.64	1	1
1:A:60:LEU:HD21	1:A:66:VAL:CG1	0.69	2.17	1	1
1:A:198:ILE:HD13	1:A:221:LYS:CB	0.69	2.18	1	1
1:A:176:LEU:HD12	1:A:196:ALA:HB1	0.69	1.65	13	3
1:A:126:LEU:HD23	1:A:161:TYR:CG	0.69	2.23	7	2
1:A:60:LEU:HD21	1:A:95:LYS:HB2	0.69	1.64	5	2
1:A:198:ILE:HG23	1:A:199:TYR:CE1	0.69	2.23	14	1
1:A:209:LEU:HD12	1:A:210:GLN:N	0.69	2.03	18	2
1:A:76:PRO:HA	1:A:79:ILE:HD12	0.69	1.65	12	3
1:A:60:LEU:HD12	1:A:61:GLN:N	0.69	2.03	3	3
1:A:117:ASN:HA	1:A:154:MET:HE1	0.69	1.65	6	2
1:A:22:LEU:HD22	1:A:55:ILE:HG23	0.69	1.63	5	3
1:A:218:LEU:O	1:A:218:LEU:HD13	0.69	1.87	20	4
1:A:176:LEU:CD2	1:A:196:ALA:HB1	0.69	2.18	19	1
1:A:13:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HD12	0.69	1.65	3	3
1:A:74:TRP:CD1	1:A:103:ASN:HA	0.69	2.23	2	4
1:A:209:LEU:HD12	1:A:217:GLY:C	0.68	2.13	16	2
1:A:99:VAL:HG21	1:A:128:GLY:C	0.68	2.13	18	1
1:A:155:ILE:HD11	1:A:187:GLU:HG2	0.68	1.64	19	5
1:A:147:ALA:HB1	1:A:179:ALA:HB2	0.68	1.65	7	3
1:A:110:LEU:HD22	1:A:132:PRO:HA	0.68	1.64	8	3
1:A:59:LEU:O	1:A:64:VAL:HG13	0.68	1.89	14	6
1:A:148:ALA:HB2	1:A:178:LEU:HD22	0.68	1.65	3	2
1:A:29:ASP:CB	1:A:32:LEU:HD12	0.68	2.18	18	4
1:A:8:LEU:HD23	1:A:37:ASP:HB2	0.68	1.66	1	2
1:A:10:VAL:CG2	1:A:32:LEU:HD12	0.68	2.18	2	1
1:A:155:ILE:HD11	1:A:187:GLU:CG	0.68	2.19	19	4
1:A:192:VAL:HA	1:A:196:ALA:HB3	0.68	1.66	15	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:143:MET:HE3	1:A:163:ALA:HB3	0.68	1.65	10	4
1:A:15:TYR:CD1	1:A:50:ALA:HB2	0.68	2.24	18	1
1:A:209:LEU:HD23	1:A:210:GLN:N	0.67	2.04	12	3
1:A:176:LEU:HD22	1:A:196:ALA:HB1	0.67	1.65	8	1
1:A:209:LEU:HD21	1:A:221:LYS:HB3	0.67	1.63	19	1
1:A:198:ILE:HD13	1:A:221:LYS:HA	0.67	1.66	8	6
1:A:176:LEU:H	1:A:176:LEU:HD13	0.67	1.48	9	1
1:A:80:ALA:HB2	1:A:88:ILE:HG22	0.67	1.65	11	3
1:A:44:LEU:HD21	1:A:64:VAL:CG1	0.67	2.20	19	2
1:A:56:VAL:HG11	1:A:92:LEU:HD21	0.67	1.65	16	1
1:A:133:ASP:OD2	1:A:167:ILE:HD11	0.67	1.90	10	3
1:A:212:ALA:HB1	1:A:216:LEU:CD1	0.67	2.19	7	1
1:A:192:VAL:HG21	1:A:220:LEU:HD22	0.67	1.65	14	1
1:A:167:ILE:O	1:A:174:THR:HG22	0.66	1.91	16	2
1:A:135:LYS:HE2	1:A:167:ILE:HD13	0.66	1.68	13	3
1:A:143:MET:HE2	1:A:158:LEU:HB3	0.66	1.67	18	4
1:A:108:THR:HB	1:A:109:PRO:HD2	0.66	1.67	9	10
1:A:176:LEU:HD11	1:A:208:PRO:CB	0.66	2.21	18	1
1:A:14:ALA:HB1	1:A:55:ILE:HG21	0.66	1.66	18	9
1:A:85:ARG:O	1:A:89:VAL:HG22	0.66	1.91	5	3
1:A:168:GLN:NE2	1:A:174:THR:HG23	0.66	2.05	2	4
1:A:36:THR:HG22	1:A:40:SER:C	0.66	2.15	3	3
1:A:209:LEU:HD22	1:A:217:GLY:O	0.66	1.90	14	2
1:A:168:GLN:HG3	1:A:174:THR:HG22	0.66	1.66	11	2
1:A:209:LEU:H	1:A:209:LEU:HD13	0.66	1.50	17	1
1:A:118:ARG:CG	1:A:121:ILE:HD12	0.66	2.19	13	5
1:A:118:ARG:HG2	1:A:121:ILE:HD12	0.66	1.65	13	2
1:A:143:MET:HE3	1:A:163:ALA:CB	0.66	2.20	10	3
1:A:44:LEU:HD11	1:A:64:VAL:HG11	0.66	1.66	19	1
1:A:55:ILE:O	1:A:59:LEU:HD23	0.66	1.91	20	1
1:A:209:LEU:HD22	1:A:221:LYS:HG3	0.66	1.66	7	3
1:A:208:PRO:O	1:A:212:ALA:HB2	0.66	1.91	14	10
1:A:152:LEU:HD13	1:A:155:ILE:HD12	0.65	1.65	18	1
1:A:198:ILE:HG12	1:A:224:VAL:HG11	0.65	1.68	14	3
1:A:103:ASN:OD1	1:A:106:GLY:N	0.65	2.29	11	1
1:A:198:ILE:HD13	1:A:221:LYS:HG3	0.65	1.67	18	1
1:A:143:MET:HG3	1:A:158:LEU:HD22	0.65	1.69	20	1
1:A:140:ALA:HB2	1:A:169:ASP:OD2	0.65	1.90	3	5
1:A:69:LYS:HD2	1:A:101:ALA:HB1	0.65	1.66	17	2
1:A:72:ALA:O	1:A:74:TRP:HD1	0.65	1.75	1	15
1:A:98:GLN:CD	1:A:101:ALA:HB2	0.65	2.16	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:PRO:CB	1:A:92:LEU:HD11	0.65	2.22	13	1
1:A:213:LYS:CB	1:A:216:LEU:HD21	0.65	2.21	4	1
1:A:141:THR:HG21	1:A:167:ILE:HG21	0.65	1.67	7	1
1:A:190:LEU:HD12	1:A:191:LEU:N	0.65	2.07	2	1
1:A:126:LEU:HD12	1:A:161:TYR:CD1	0.65	2.27	18	1
1:A:188:ALA:HB1	1:A:220:LEU:CD2	0.65	2.22	3	3
1:A:198:ILE:HD13	1:A:221:LYS:CA	0.65	2.22	1	2
1:A:110:LEU:HD23	1:A:142:ALA:HB2	0.65	1.67	14	1
1:A:85:ARG:O	1:A:89:VAL:HG13	0.64	1.91	1	5
1:A:29:ASP:HB3	1:A:32:LEU:HD12	0.64	1.66	8	8
1:A:44:LEU:HD12	1:A:59:LEU:HB3	0.64	1.67	3	1
1:A:192:VAL:HG21	1:A:220:LEU:O	0.64	1.91	16	1
1:A:126:LEU:HD22	1:A:132:PRO:HB3	0.64	1.69	5	1
1:A:141:THR:HG21	1:A:167:ILE:CD1	0.64	2.22	9	4
1:A:143:MET:HE1	1:A:163:ALA:HB3	0.64	1.68	20	3
1:A:72:ALA:HB2	1:A:104:GLN:HG3	0.64	1.67	6	1
1:A:10:VAL:HG21	1:A:32:LEU:HB3	0.64	1.70	17	2
1:A:155:ILE:HD11	1:A:187:GLU:OE2	0.64	1.91	18	1
1:A:110:LEU:HD12	1:A:142:ALA:HB2	0.64	1.69	4	1
1:A:154:MET:O	1:A:158:LEU:HD12	0.64	1.92	20	4
1:A:110:LEU:HD11	1:A:130:ALA:CB	0.64	2.15	1	2
1:A:209:LEU:HD22	1:A:221:LYS:CG	0.64	2.23	13	2
1:A:176:LEU:HD22	1:A:196:ALA:O	0.64	1.93	2	1
1:A:220:LEU:O	1:A:224:VAL:HG23	0.64	1.91	20	2
1:A:209:LEU:C	1:A:209:LEU:HD13	0.64	2.17	6	1
1:A:92:LEU:HD23	1:A:97:ALA:CB	0.63	2.22	13	1
1:A:60:LEU:HD11	1:A:95:LYS:HB3	0.63	1.69	8	3
1:A:119:HIS:O	1:A:123:VAL:HG23	0.63	1.91	3	4
1:A:88:ILE:HG22	1:A:92:LEU:CD1	0.63	2.24	17	3
1:A:95:LYS:O	1:A:95:LYS:HD3	0.63	1.93	8	3
1:A:110:LEU:CD2	1:A:126:LEU:HD13	0.63	2.23	7	1
1:A:176:LEU:HD21	1:A:208:PRO:CG	0.63	2.24	18	1
1:A:162:LYS:O	1:A:163:ALA:O	0.63	2.16	20	1
1:A:66:VAL:HG13	1:A:95:LYS:HZ3	0.63	1.54	20	1
1:A:165:THR:OG1	1:A:196:ALA:HB2	0.63	1.93	20	1
1:A:110:LEU:HD13	1:A:131:ASN:O	0.63	1.94	19	1
1:A:74:TRP:HE3	1:A:78:HIS:HB3	0.63	1.53	2	17
1:A:59:LEU:CD1	1:A:64:VAL:HG11	0.62	2.24	8	3
1:A:152:LEU:HA	1:A:155:ILE:HD12	0.62	1.71	16	7
1:A:44:LEU:CD2	1:A:59:LEU:HD22	0.62	2.24	5	1
1:A:136:ASP:OD1	1:A:140:ALA:HB3	0.62	1.93	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:LEU:C	1:A:60:LEU:HD23	0.62	2.19	12	3
1:A:44:LEU:HD12	1:A:59:LEU:CD1	0.62	2.24	12	1
1:A:126:LEU:HD21	1:A:132:PRO:HB3	0.62	1.71	18	1
1:A:126:LEU:HA	1:A:130:ALA:HB3	0.62	1.72	1	5
1:A:165:THR:CB	1:A:196:ALA:HB2	0.62	2.24	20	1
1:A:59:LEU:O	1:A:64:VAL:HG22	0.62	1.94	18	3
1:A:114:ALA:HB3	1:A:145:ARG:HD2	0.62	1.70	1	1
1:A:88:ILE:HG22	1:A:92:LEU:HD11	0.62	1.70	17	2
1:A:66:VAL:HG13	1:A:95:LYS:NZ	0.62	2.09	20	1
1:A:99:VAL:HG21	1:A:128:GLY:O	0.62	1.95	15	2
1:A:77:LEU:HD23	1:A:77:LEU:O	0.61	1.95	2	1
1:A:44:LEU:HD11	1:A:92:LEU:HD11	0.61	1.70	5	1
1:A:155:ILE:HD13	1:A:187:GLU:OE1	0.61	1.94	7	1
1:A:143:MET:HG2	1:A:158:LEU:HD23	0.61	1.71	12	2
1:A:18:LYS:O	1:A:22:LEU:HD12	0.61	1.95	16	1
1:A:119:HIS:NE2	1:A:154:MET:HE2	0.61	2.10	12	3
1:A:60:LEU:HD21	1:A:95:LYS:CB	0.61	2.25	8	3
1:A:141:THR:CG2	1:A:167:ILE:HG21	0.61	2.26	7	3
1:A:66:VAL:HG12	1:A:76:PRO:HG3	0.61	1.70	20	1
1:A:80:ALA:CB	1:A:88:ILE:HG22	0.61	2.24	13	2
1:A:80:ALA:CB	1:A:88:ILE:HG23	0.61	2.25	9	1
1:A:110:LEU:HD21	1:A:126:LEU:CD1	0.61	2.26	1	1
1:A:109:PRO:HB3	1:A:125:LEU:HD11	0.61	1.71	6	1
1:A:185:VAL:CG2	1:A:216:LEU:HD21	0.61	2.26	18	1
1:A:176:LEU:HD21	1:A:200:ILE:HD12	0.61	1.72	14	1
1:A:72:ALA:O	1:A:74:TRP:CD1	0.61	2.54	12	15
1:A:196:ALA:O	1:A:197:SER:O	0.61	2.17	3	4
1:A:206:LYS:CE	1:A:211:VAL:HG23	0.61	2.24	2	1
1:A:26:ILE:HA	1:A:32:LEU:HD11	0.61	1.70	13	1
1:A:176:LEU:HD11	1:A:192:VAL:HG22	0.60	1.72	20	4
1:A:64:VAL:HG22	1:A:65:PRO:CD	0.60	2.26	11	2
1:A:198:ILE:HG12	1:A:224:VAL:HG21	0.60	1.73	5	6
1:A:84:GLY:O	1:A:86:ASP:N	0.60	2.34	17	1
1:A:117:ASN:C	1:A:154:MET:HE1	0.60	2.21	3	3
1:A:14:ALA:O	1:A:55:ILE:HD13	0.60	1.96	5	6
1:A:89:VAL:HG11	1:A:121:ILE:CG1	0.60	2.25	7	1
1:A:119:HIS:CE1	1:A:154:MET:HE2	0.60	2.31	10	5
1:A:76:PRO:HB2	1:A:92:LEU:HD22	0.60	1.72	20	5
1:A:188:ALA:HB1	1:A:220:LEU:HD21	0.60	1.74	19	3
1:A:72:ALA:O	1:A:103:ASN:OD1	0.60	2.19	17	3
1:A:77:LEU:HD23	1:A:125:LEU:CD2	0.60	2.27	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:103:ASN:C	1:A:104:GLN:HG3	0.60	2.21	4	6
1:A:110:LEU:HD21	1:A:126:LEU:HD21	0.60	1.72	9	2
1:A:176:LEU:HD23	1:A:208:PRO:HB3	0.60	1.71	9	2
1:A:98:GLN:OE1	1:A:101:ALA:HB2	0.60	1.95	20	3
1:A:192:VAL:CB	1:A:220:LEU:HD12	0.60	2.27	4	1
1:A:89:VAL:HG21	1:A:125:LEU:HD21	0.60	1.71	20	1
1:A:152:LEU:CD2	1:A:155:ILE:HD11	0.59	2.28	17	1
1:A:208:PRO:HA	1:A:211:VAL:HG12	0.59	1.75	19	6
1:A:131:ASN:HB2	1:A:134:ALA:HB2	0.59	1.72	20	3
1:A:152:LEU:HD21	1:A:186:GLU:HB3	0.59	1.73	11	1
1:A:209:LEU:HD21	1:A:221:LYS:HB2	0.59	1.75	2	1
1:A:88:ILE:HG22	1:A:92:LEU:HD12	0.59	1.75	4	1
1:A:17:GLY:C	1:A:55:ILE:HD11	0.59	2.22	4	1
1:A:99:VAL:HG11	1:A:128:GLY:C	0.59	2.21	15	2
1:A:80:ALA:CB	1:A:89:VAL:HG23	0.59	2.28	12	2
1:A:123:VAL:HG13	1:A:161:TYR:CE2	0.59	2.32	4	3
1:A:44:LEU:HD23	1:A:59:LEU:HD22	0.59	1.73	5	1
1:A:126:LEU:O	1:A:126:LEU:HD13	0.59	1.98	18	1
1:A:109:PRO:HB2	1:A:125:LEU:HD11	0.59	1.74	6	2
1:A:209:LEU:HD13	1:A:210:GLN:N	0.59	2.13	6	1
1:A:44:LEU:CD1	1:A:66:VAL:HG12	0.59	2.28	12	1
1:A:119:HIS:NE2	1:A:154:MET:HE3	0.58	2.13	6	3
1:A:168:GLN:CG	1:A:174:THR:HG22	0.58	2.28	12	2
1:A:59:LEU:HD23	1:A:64:VAL:HG21	0.58	1.72	18	1
1:A:198:ILE:CG2	1:A:224:VAL:HG21	0.58	2.28	19	10
1:A:60:LEU:HD12	1:A:60:LEU:C	0.58	2.23	3	4
1:A:59:LEU:HD23	1:A:64:VAL:HG11	0.58	1.75	5	3
1:A:154:MET:O	1:A:158:LEU:HD23	0.58	1.98	8	4
1:A:110:LEU:HD13	1:A:126:LEU:HD13	0.58	1.76	8	1
1:A:80:ALA:HB1	1:A:88:ILE:HG23	0.58	1.74	9	1
1:A:176:LEU:HD11	1:A:192:VAL:CG2	0.58	2.29	20	1
1:A:44:LEU:HD23	1:A:56:VAL:HG12	0.58	1.73	1	1
1:A:58:PHE:O	1:A:61:GLN:HG2	0.58	1.98	1	19
1:A:81:ALA:HB1	1:A:121:ILE:HG21	0.58	1.76	7	2
1:A:207:THR:HB	1:A:208:PRO:HD2	0.58	1.75	2	3
1:A:198:ILE:CG1	1:A:224:VAL:HG21	0.58	2.28	14	5
1:A:77:LEU:HD21	1:A:89:VAL:O	0.58	1.97	7	1
1:A:176:LEU:CD2	1:A:192:VAL:HG22	0.58	2.28	17	1
1:A:174:THR:HB	1:A:175:PRO:HD2	0.58	1.75	8	7
1:A:85:ARG:HG2	1:A:88:ILE:HD12	0.58	1.75	5	2
1:A:155:ILE:HD11	1:A:187:GLU:CD	0.58	2.24	2	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:THR:HG22	1:A:41:ARG:C	0.58	2.24	2	5
1:A:209:LEU:HD21	1:A:221:LYS:CB	0.58	2.28	19	2
1:A:109:PRO:CG	1:A:125:LEU:HD21	0.58	2.28	3	1
1:A:69:LYS:CE	1:A:101:ALA:HB1	0.58	2.28	6	2
1:A:89:VAL:CG2	1:A:125:LEU:HD21	0.58	2.29	20	1
1:A:123:VAL:HG13	1:A:161:TYR:CE1	0.57	2.34	8	1
1:A:60:LEU:HD22	1:A:95:LYS:HG3	0.57	1.74	1	2
1:A:192:VAL:HG11	1:A:220:LEU:HB3	0.57	1.75	14	1
1:A:171:GLU:O	1:A:203:LYS:HG2	0.57	2.00	1	3
1:A:72:ALA:HA	1:A:103:ASN:O	0.57	2.00	12	6
1:A:198:ILE:CG1	1:A:224:VAL:HG11	0.57	2.30	16	2
1:A:88:ILE:O	1:A:92:LEU:HD23	0.57	1.99	2	3
1:A:171:GLU:O	1:A:203:LYS:CG	0.57	2.51	8	4
1:A:10:VAL:HG23	1:A:32:LEU:HD22	0.57	1.77	1	3
1:A:47:ALA:CB	1:A:56:VAL:HG13	0.57	2.29	2	7
1:A:209:LEU:HD13	1:A:221:LYS:HD2	0.57	1.76	10	1
1:A:192:VAL:HA	1:A:196:ALA:HB2	0.57	1.77	14	1
1:A:99:VAL:CG2	1:A:130:ALA:HB2	0.57	2.29	3	1
1:A:103:ASN:OD1	1:A:107:CYS:N	0.57	2.37	11	1
1:A:44:LEU:HD12	1:A:76:PRO:HB3	0.57	1.76	20	1
1:A:117:ASN:CA	1:A:154:MET:HE1	0.56	2.30	3	2
1:A:60:LEU:HD21	1:A:91:ALA:O	0.56	2.00	10	1
1:A:77:LEU:HB2	1:A:92:LEU:HD13	0.56	1.77	19	1
1:A:114:ALA:CB	1:A:142:ALA:HB1	0.56	2.29	11	2
1:A:133:ASP:CG	1:A:167:ILE:HD11	0.56	2.25	10	10
1:A:10:VAL:HG22	1:A:32:LEU:HD12	0.56	1.78	2	1
1:A:176:LEU:HD12	1:A:208:PRO:HB3	0.56	1.77	2	1
1:A:8:LEU:HD11	1:A:35:ARG:HB3	0.56	1.77	9	1
1:A:197:SER:O	1:A:198:ILE:CG1	0.56	2.52	16	1
1:A:76:PRO:CB	1:A:92:LEU:HD13	0.56	2.30	18	1
1:A:107:CYS:HB3	1:A:112:TYR:CE1	0.56	2.36	8	10
1:A:77:LEU:HD12	1:A:109:PRO:HB3	0.56	1.77	15	1
1:A:59:LEU:HD12	1:A:64:VAL:HG11	0.56	1.76	1	3
1:A:174:THR:CG2	1:A:200:ILE:HG21	0.56	2.27	9	5
1:A:59:LEU:HD13	1:A:64:VAL:HG21	0.56	1.78	20	1
1:A:122:ALA:HA	1:A:125:LEU:HD12	0.56	1.77	4	2
1:A:216:LEU:O	1:A:219:ILE:HG22	0.56	2.01	11	5
1:A:22:LEU:HD21	1:A:59:LEU:HD21	0.56	1.78	13	2
1:A:176:LEU:HD21	1:A:196:ALA:HB3	0.56	1.76	12	1
1:A:13:LEU:HD13	1:A:21:GLU:HB3	0.56	1.76	15	1
1:A:26:ILE:HD12	1:A:58:PHE:CZ	0.56	2.35	10	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:123:VAL:HG21	1:A:157:ILE:CG2	0.56	2.30	11	2
1:A:69:LYS:HE2	1:A:101:ALA:HB1	0.56	1.77	6	2
1:A:126:LEU:HD13	1:A:161:TYR:CG	0.56	2.35	15	3
1:A:76:PRO:HB3	1:A:92:LEU:HD11	0.56	1.77	13	1
1:A:196:ALA:O	1:A:197:SER:HB2	0.56	2.00	16	1
1:A:8:LEU:HD12	1:A:37:ASP:HB2	0.56	1.78	3	1
1:A:109:PRO:HB2	1:A:125:LEU:HD13	0.56	1.78	4	2
1:A:80:ALA:HB1	1:A:89:VAL:HG23	0.56	1.77	10	1
1:A:44:LEU:HD12	1:A:59:LEU:HD13	0.56	1.76	12	1
1:A:93:LEU:HD12	1:A:97:ALA:HB3	0.56	1.78	15	1
1:A:44:LEU:HD11	1:A:64:VAL:CG1	0.56	2.31	19	1
1:A:198:ILE:HD13	1:A:221:LYS:HB2	0.55	1.76	1	1
1:A:110:LEU:HD12	1:A:142:ALA:CB	0.55	2.31	4	2
1:A:118:ARG:O	1:A:121:ILE:HG22	0.55	2.01	15	1
1:A:216:LEU:HD12	1:A:216:LEU:C	0.55	2.25	7	1
1:A:74:TRP:CE3	1:A:78:HIS:HB3	0.55	2.36	10	7
1:A:44:LEU:CD2	1:A:66:VAL:HG12	0.55	2.31	6	1
1:A:148:ALA:HB2	1:A:178:LEU:HD12	0.55	1.78	13	1
1:A:152:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD12	0.55	1.78	16	1
1:A:152:LEU:HD13	1:A:186:GLU:HG3	0.55	1.78	4	1
1:A:76:PRO:HB3	1:A:92:LEU:HD22	0.55	1.78	18	2
1:A:74:TRP:HB2	1:A:78:HIS:CB	0.55	2.31	2	13
1:A:198:ILE:O	1:A:208:PRO:HD2	0.55	2.01	8	5
1:A:159:LEU:HD21	1:A:194:GLN:HG2	0.55	1.79	4	2
1:A:57:GLU:HA	1:A:60:LEU:HD23	0.55	1.79	15	1
1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:HD3	0.55	2.16	11	5
1:A:19:LEU:HD21	1:A:58:PHE:CB	0.55	2.32	19	7
1:A:80:ALA:HB2	1:A:88:ILE:CG2	0.55	2.32	11	4
1:A:132:PRO:HB3	1:A:163:ALA:HB2	0.55	1.78	11	1
1:A:200:ILE:HG22	1:A:201:GLU:H	0.55	1.61	16	1
1:A:140:ALA:HB2	1:A:169:ASP:OD1	0.55	2.02	6	2
1:A:103:ASN:OD1	1:A:107:CYS:CB	0.55	2.55	16	2
1:A:125:LEU:HD12	1:A:125:LEU:C	0.54	2.28	8	1
1:A:74:TRP:CD1	1:A:103:ASN:ND2	0.54	2.75	16	2
1:A:141:THR:HG23	1:A:144:HIS:CE1	0.54	2.37	1	7
1:A:79:ILE:O	1:A:83:ALA:N	0.54	2.41	10	2
1:A:107:CYS:O	1:A:112:TYR:CE2	0.54	2.59	4	10
1:A:119:HIS:CD2	1:A:153:LYS:HB3	0.54	2.38	20	2
1:A:48:CYS:SG	1:A:92:LEU:HD21	0.54	2.42	14	3
1:A:160:TYR:C	1:A:160:TYR:CD1	0.54	2.85	7	1
1:A:44:LEU:HD12	1:A:59:LEU:CB	0.54	2.31	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:LEU:CD2	1:A:142:ALA:HB2	0.54	2.33	14	1
1:A:213:LYS:CB	1:A:216:LEU:HD13	0.54	2.33	16	1
1:A:60:LEU:HD13	1:A:95:LYS:HD2	0.54	1.79	3	1
1:A:159:LEU:HD11	1:A:194:GLN:HG2	0.54	1.79	4	1
1:A:152:LEU:HD11	1:A:186:GLU:HB3	0.54	1.77	6	1
1:A:154:MET:SD	1:A:157:ILE:HD11	0.54	2.43	16	3
1:A:52:HIS:HB2	1:A:55:ILE:HD12	0.54	1.78	19	4
1:A:166:ASN:O	1:A:167:ILE:C	0.54	2.51	5	10
1:A:219:ILE:HG23	1:A:220:LEU:HD22	0.54	1.80	4	1
1:A:77:LEU:HD11	1:A:125:LEU:HG	0.54	1.79	15	1
1:A:34:THR:HG22	1:A:65:PRO:HD2	0.54	1.79	15	3
1:A:118:ARG:HG3	1:A:121:ILE:HD12	0.54	1.78	5	3
1:A:152:LEU:HD11	1:A:186:GLU:HG2	0.54	1.79	5	1
1:A:19:LEU:C	1:A:19:LEU:HD13	0.54	2.27	5	3
1:A:23:LYS:O	1:A:27:LEU:HD12	0.54	2.03	19	5
1:A:8:LEU:HD11	1:A:36:THR:C	0.54	2.27	6	1
1:A:10:VAL:HG11	1:A:32:LEU:HB3	0.54	1.79	14	1
1:A:8:LEU:HD12	1:A:37:ASP:OD1	0.54	2.01	17	1
1:A:44:LEU:HD11	1:A:64:VAL:HG21	0.54	1.79	19	1
1:A:192:VAL:HB	1:A:220:LEU:HD12	0.54	1.78	4	1
1:A:74:TRP:CG	1:A:103:ASN:OD1	0.54	2.61	6	1
1:A:199:TYR:CD1	1:A:209:LEU:HD11	0.54	2.38	14	1
1:A:191:LEU:O	1:A:196:ALA:HB2	0.54	2.02	16	1
1:A:176:LEU:HD11	1:A:196:ALA:CB	0.54	2.33	19	2
1:A:106:GLY:O	1:A:108:THR:N	0.53	2.41	12	8
1:A:213:LYS:CB	1:A:216:LEU:HD12	0.53	2.33	10	2
1:A:14:ALA:HB1	1:A:47:ALA:HB2	0.53	1.79	18	6
1:A:75:SER:O	1:A:78:HIS:HB2	0.53	2.03	20	11
1:A:169:ASP:O	1:A:170:THR:C	0.53	2.51	19	3
1:A:220:LEU:HD12	1:A:221:LYS:N	0.53	2.18	10	1
1:A:74:TRP:HD1	1:A:103:ASN:HA	0.53	1.64	10	4
1:A:109:PRO:HB2	1:A:125:LEU:HD22	0.53	1.80	17	1
1:A:44:LEU:C	1:A:44:LEU:HD12	0.53	2.28	14	2
1:A:86:ASP:O	1:A:89:VAL:HG12	0.53	2.03	10	2
1:A:76:PRO:C	1:A:92:LEU:HD13	0.53	2.29	1	3
1:A:187:GLU:O	1:A:191:LEU:HD12	0.53	2.03	6	2
1:A:90:LYS:HD2	1:A:124:MET:HE2	0.53	1.79	4	1
1:A:59:LEU:O	1:A:64:VAL:HG23	0.53	2.04	20	6
1:A:8:LEU:HD12	1:A:10:VAL:CG2	0.53	2.33	8	2
1:A:132:PRO:CB	1:A:163:ALA:HB2	0.53	2.34	11	1
1:A:190:LEU:HD23	1:A:194:GLN:OE1	0.53	2.04	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:ASP:OD2	1:A:32:LEU:HD23	0.53	2.04	3	1
1:A:8:LEU:O	1:A:12:ASN:OD1	0.53	2.27	6	5
1:A:80:ALA:HB1	1:A:89:VAL:HB	0.53	1.80	12	1
1:A:198:ILE:HG22	1:A:199:TYR:CE2	0.53	2.38	16	1
1:A:159:LEU:HD22	1:A:194:GLN:HG2	0.53	1.81	19	1
1:A:110:LEU:HD23	1:A:142:ALA:CB	0.53	2.34	14	1
1:A:77:LEU:HD22	1:A:92:LEU:CD1	0.53	2.33	15	1
1:A:81:ALA:HB1	1:A:121:ILE:CG2	0.53	2.34	7	1
1:A:212:ALA:O	1:A:213:LYS:CB	0.53	2.57	15	1
1:A:135:LYS:HG3	1:A:141:THR:HG22	0.53	1.81	9	2
1:A:143:MET:HE3	1:A:164:SER:HB2	0.53	1.80	18	2
1:A:198:ILE:CG2	1:A:199:TYR:CE1	0.53	2.92	14	1
1:A:152:LEU:HD21	1:A:186:GLU:HG2	0.52	1.81	6	1
1:A:198:ILE:HD12	1:A:221:LYS:HD3	0.52	1.80	9	1
1:A:155:ILE:O	1:A:159:LEU:HD13	0.52	2.04	10	1
1:A:110:LEU:H	1:A:110:LEU:HD13	0.52	1.64	14	1
1:A:135:LYS:HB3	1:A:139:GLU:HA	0.52	1.80	16	1
1:A:15:TYR:CD1	1:A:46:TRP:CE3	0.52	2.97	2	4
1:A:93:LEU:HD13	1:A:93:LEU:O	0.52	2.04	2	1
1:A:216:LEU:HA	1:A:219:ILE:HD12	0.52	1.80	7	3
1:A:36:THR:HG22	1:A:40:SER:HA	0.52	1.80	9	1
1:A:197:SER:C	1:A:198:ILE:HG13	0.52	2.29	16	1
1:A:135:LYS:CE	1:A:167:ILE:HD13	0.52	2.33	6	1
1:A:80:ALA:O	1:A:84:GLY:N	0.52	2.38	12	2
1:A:74:TRP:CD2	1:A:112:TYR:CE2	0.52	2.97	19	8
1:A:26:ILE:HA	1:A:29:ASP:O	0.52	2.04	13	18
1:A:177:HIS:CE1	1:A:200:ILE:O	0.52	2.63	15	17
1:A:109:PRO:HB2	1:A:125:LEU:HD21	0.52	1.81	2	2
1:A:123:VAL:HG21	1:A:157:ILE:HG21	0.52	1.82	11	2
1:A:138:TYR:CE1	1:A:140:ALA:HB3	0.52	2.39	8	1
1:A:89:VAL:HG21	1:A:121:ILE:HG21	0.52	1.82	13	1
1:A:26:ILE:HD11	1:A:59:LEU:HD21	0.52	1.81	14	1
1:A:8:LEU:HD21	1:A:37:ASP:HB2	0.52	1.81	2	1
1:A:209:LEU:HD22	1:A:210:GLN:NE2	0.52	2.19	12	1
1:A:8:LEU:HD11	1:A:35:ARG:HD2	0.52	1.80	14	1
1:A:13:LEU:HD21	1:A:21:GLU:HB3	0.52	1.82	6	4
1:A:76:PRO:C	1:A:92:LEU:HD22	0.52	2.30	9	1
1:A:219:ILE:CG2	1:A:220:LEU:HD22	0.52	2.35	4	1
1:A:206:LYS:CE	1:A:206:LYS:HA	0.52	2.35	11	2
1:A:10:VAL:HG12	1:A:25:SER:OG	0.52	2.04	15	1
1:A:217:GLY:O	1:A:220:LEU:HG	0.52	2.05	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:THR:O	1:A:35:ARG:C	0.52	2.53	17	6
1:A:70:ASP:C	1:A:72:ALA:H	0.52	2.12	6	3
1:A:75:SER:CB	1:A:76:PRO:CD	0.52	2.88	12	6
1:A:160:TYR:O	1:A:162:LYS:HD3	0.52	2.05	20	3
1:A:42:THR:OG1	1:A:44:LEU:CD2	0.52	2.58	20	1
1:A:89:VAL:HG11	1:A:121:ILE:HD11	0.51	1.82	15	3
1:A:74:TRP:CG	1:A:103:ASN:ND2	0.51	2.78	14	2
1:A:8:LEU:HD21	1:A:35:ARG:CG	0.51	2.35	16	1
1:A:213:LYS:HB3	1:A:216:LEU:HD23	0.51	1.83	19	1
1:A:74:TRP:CG	1:A:103:ASN:HB3	0.51	2.41	1	1
1:A:74:TRP:CE2	1:A:112:TYR:OH	0.51	2.62	20	3
1:A:48:CYS:HB2	1:A:79:ILE:HD13	0.51	1.83	10	2
1:A:99:VAL:HG23	1:A:100:ASN:ND2	0.51	2.20	19	3
1:A:48:CYS:HA	1:A:88:ILE:HD12	0.51	1.83	10	1
1:A:126:LEU:HD21	1:A:132:PRO:HG3	0.51	1.82	11	1
1:A:60:LEU:HD11	1:A:95:LYS:HG2	0.51	1.83	14	1
1:A:143:MET:HE2	1:A:164:SER:CB	0.51	2.36	1	1
1:A:177:HIS:HE1	1:A:200:ILE:HG22	0.51	1.65	9	3
1:A:69:LYS:NZ	1:A:74:TRP:HA	0.51	2.19	11	1
1:A:10:VAL:HG12	1:A:25:SER:HB3	0.51	1.82	16	2
1:A:103:ASN:CG	1:A:104:GLN:HG3	0.51	2.31	17	2
1:A:176:LEU:CG	1:A:196:ALA:HB1	0.51	2.36	19	1
1:A:77:LEU:HD21	1:A:125:LEU:HD23	0.51	1.82	4	1
1:A:44:LEU:HD23	1:A:76:PRO:HG3	0.51	1.81	6	1
1:A:92:LEU:HD12	1:A:93:LEU:N	0.51	2.21	19	1
1:A:66:VAL:HG11	1:A:95:LYS:HG2	0.51	1.83	3	1
1:A:81:ALA:HB2	1:A:89:VAL:HG21	0.51	1.82	3	1
1:A:158:LEU:HD12	1:A:163:ALA:CB	0.51	2.35	8	2
1:A:42:THR:OG1	1:A:44:LEU:HD12	0.51	2.06	11	1
1:A:165:THR:HB	1:A:196:ALA:HB2	0.51	1.83	20	1
1:A:143:MET:HE2	1:A:164:SER:HB2	0.50	1.82	1	2
1:A:26:ILE:HD12	1:A:58:PHE:HE2	0.50	1.66	2	3
1:A:180:CYS:HB3	1:A:211:VAL:HG13	0.50	1.83	19	2
1:A:47:ALA:HB2	1:A:55:ILE:CG2	0.50	2.36	3	2
1:A:74:TRP:CE3	1:A:112:TYR:CE2	0.50	3.00	3	7
1:A:11:CYS:HA	1:A:43:ALA:HB2	0.50	1.83	16	4
1:A:103:ASN:ND2	1:A:112:TYR:OH	0.50	2.44	6	1
1:A:176:LEU:HD11	1:A:200:ILE:HD12	0.50	1.82	9	1
1:A:60:LEU:HD23	1:A:60:LEU:C	0.50	2.30	20	2
1:A:209:LEU:C	1:A:209:LEU:HD23	0.50	2.31	9	1
1:A:119:HIS:CD2	1:A:154:MET:HE2	0.50	2.42	20	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:LEU:HA	1:A:64:VAL:HG12	0.50	1.81	17	1
1:A:44:LEU:HD21	1:A:64:VAL:HG11	0.50	1.82	19	1
1:A:13:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HD23	0.50	1.84	1	2
1:A:110:LEU:HD23	1:A:130:ALA:HB1	0.50	1.82	2	1
1:A:155:ILE:HD11	1:A:187:GLU:OE1	0.50	2.07	2	2
1:A:107:CYS:CB	1:A:112:TYR:CZ	0.50	2.94	4	9
1:A:222:ARG:O	1:A:226:GLY:N	0.50	2.39	8	1
1:A:143:MET:HG2	1:A:158:LEU:HD22	0.50	1.83	10	1
1:A:26:ILE:CD1	1:A:59:LEU:HD21	0.50	2.37	14	2
1:A:216:LEU:O	1:A:220:LEU:HD12	0.50	2.06	1	2
1:A:22:LEU:HD23	1:A:58:PHE:CE2	0.50	2.42	15	2
1:A:219:ILE:O	1:A:223:MET:HG3	0.50	2.07	16	4
1:A:66:VAL:HG21	1:A:95:LYS:HE3	0.50	1.82	8	1
1:A:222:ARG:HA	1:A:226:GLY:CA	0.50	2.37	20	15
1:A:60:LEU:HD22	1:A:95:LYS:NZ	0.50	2.22	5	1
1:A:113:ALA:HB1	1:A:122:ALA:HB2	0.50	1.82	5	2
1:A:135:LYS:NZ	1:A:167:ILE:HD12	0.50	2.21	16	1
1:A:159:LEU:HD13	1:A:194:GLN:HG2	0.50	1.82	19	1
1:A:176:LEU:HD21	1:A:192:VAL:HG22	0.50	1.84	17	3
1:A:213:LYS:HB2	1:A:216:LEU:HD21	0.50	1.84	4	1
1:A:10:VAL:HG12	1:A:25:SER:CB	0.50	2.37	16	1
1:A:207:THR:HB	1:A:208:PRO:CD	0.49	2.37	13	5
1:A:99:VAL:HG11	1:A:128:GLY:HA3	0.49	1.83	15	2
1:A:85:ARG:HB3	1:A:88:ILE:HG22	0.49	1.84	9	1
1:A:70:ASP:C	1:A:72:ALA:N	0.49	2.71	6	5
1:A:59:LEU:HB3	1:A:64:VAL:HG21	0.49	1.83	4	2
1:A:51:GLY:HA2	1:A:88:ILE:HD13	0.49	1.84	9	1
1:A:192:VAL:HG21	1:A:220:LEU:HD23	0.49	1.84	3	1
1:A:99:VAL:HG11	1:A:128:GLY:CA	0.49	2.37	15	2
1:A:197:SER:C	1:A:198:ILE:CG1	0.49	2.85	16	1
1:A:107:CYS:CB	1:A:112:TYR:CE1	0.49	2.96	1	1
1:A:22:LEU:HD13	1:A:55:ILE:HG23	0.49	1.83	12	2
1:A:89:VAL:HG13	1:A:124:MET:HE1	0.49	1.83	15	1
1:A:172:GLY:O	1:A:173:ASN:CG	0.49	2.56	19	3
1:A:60:LEU:HG	1:A:95:LYS:CD	0.49	2.37	4	3
1:A:219:ILE:O	1:A:222:ARG:HG2	0.49	2.08	4	7
1:A:126:LEU:HD23	1:A:161:TYR:CD2	0.49	2.43	8	1
1:A:90:LYS:HB2	1:A:124:MET:HE1	0.49	1.84	13	1
1:A:71:ASP:O	1:A:72:ALA:HB2	0.49	2.07	2	3
1:A:78:HIS:CE1	1:A:109:PRO:HD3	0.49	2.42	9	8
1:A:53:THR:HA	1:A:56:VAL:CG2	0.49	2.38	12	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:59:LEU:HD12	1:A:60:LEU:N	0.49	2.23	12	1
1:A:69:LYS:O	1:A:70:ASP:O	0.49	2.31	13	2
1:A:141:THR:HG21	1:A:167:ILE:HG13	0.49	1.84	16	2
1:A:74:TRP:HB3	1:A:78:HIS:CG	0.49	2.42	9	3
1:A:74:TRP:CD1	1:A:103:ASN:CA	0.49	2.95	2	1
1:A:74:TRP:CB	1:A:78:HIS:CG	0.49	2.96	2	3
1:A:51:GLY:O	1:A:52:HIS:C	0.49	2.56	4	2
1:A:110:LEU:HD13	1:A:110:LEU:N	0.49	2.22	14	1
1:A:108:THR:HB	1:A:109:PRO:CD	0.48	2.38	1	5
1:A:216:LEU:HD13	1:A:219:ILE:CD1	0.48	2.37	2	1
1:A:159:LEU:CD2	1:A:165:THR:HG21	0.48	2.38	5	1
1:A:81:ALA:CB	1:A:121:ILE:HG21	0.48	2.37	14	2
1:A:69:LYS:HD3	1:A:101:ALA:HB1	0.48	1.84	16	2
1:A:8:LEU:O	1:A:12:ASN:ND2	0.48	2.46	14	7
1:A:90:LYS:HG3	1:A:124:MET:HE1	0.48	1.84	14	1
1:A:66:VAL:HG12	1:A:76:PRO:CG	0.48	2.38	20	1
1:A:199:TYR:HB2	1:A:207:THR:HG21	0.48	1.85	20	1
1:A:51:GLY:CA	1:A:88:ILE:HD11	0.48	2.38	1	6
1:A:180:CYS:CB	1:A:211:VAL:HG13	0.48	2.38	19	3
1:A:92:LEU:O	1:A:97:ALA:HB2	0.48	2.08	12	3
1:A:66:VAL:HG23	1:A:92:LEU:HD12	0.48	1.85	16	1
1:A:81:ALA:HB2	1:A:125:LEU:HD21	0.48	1.84	20	1
1:A:114:ALA:HB3	1:A:145:ARG:CD	0.48	2.38	1	1
1:A:74:TRP:CD1	1:A:103:ASN:CG	0.48	2.91	16	4
1:A:201:GLU:HA	1:A:206:LYS:O	0.48	2.09	12	2
1:A:60:LEU:HD13	1:A:95:LYS:HG3	0.48	1.85	11	1
1:A:168:GLN:HB3	1:A:174:THR:HG22	0.48	1.84	17	1
1:A:75:SER:HB2	1:A:76:PRO:HD2	0.48	1.84	17	7
1:A:58:PHE:CE1	1:A:62:LEU:CD1	0.48	2.97	7	4
1:A:66:VAL:O	1:A:66:VAL:HG22	0.48	2.08	5	1
1:A:66:VAL:HG21	1:A:95:LYS:CE	0.48	2.39	8	1
1:A:198:ILE:HB	1:A:209:LEU:HD21	0.48	1.85	8	1
1:A:209:LEU:HD23	1:A:209:LEU:C	0.48	2.33	12	1
1:A:73:GLY:CA	1:A:74:TRP:CD1	0.48	2.97	4	12
1:A:102:VAL:CG1	1:A:106:GLY:HA2	0.48	2.39	11	9
1:A:176:LEU:CD1	1:A:196:ALA:HB1	0.48	2.39	4	2
1:A:77:LEU:O	1:A:80:ALA:HB3	0.48	2.09	10	1
1:A:22:LEU:CD2	1:A:59:LEU:HD21	0.48	2.38	13	1
1:A:34:THR:HG22	1:A:65:PRO:CD	0.48	2.38	14	3
1:A:72:ALA:HB1	1:A:104:GLN:HG2	0.48	1.85	11	2
1:A:76:PRO:HG2	1:A:92:LEU:HD12	0.48	1.85	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:LEU:HD23	1:A:76:PRO:HB3	0.48	1.84	3	1
1:A:117:ASN:O	1:A:119:HIS:ND1	0.48	2.47	9	8
1:A:166:ASN:HB3	1:A:200:ILE:HD13	0.48	1.86	12	1
1:A:32:LEU:HD12	1:A:32:LEU:C	0.48	2.34	13	1
1:A:77:LEU:HD23	1:A:125:LEU:CD1	0.48	2.39	20	1
1:A:176:LEU:HD23	1:A:208:PRO:CB	0.48	2.39	3	1
1:A:44:LEU:HD23	1:A:59:LEU:CD2	0.48	2.38	5	1
1:A:141:THR:OG1	1:A:144:HIS:ND1	0.48	2.46	16	3
1:A:137:HIS:H	1:A:137:HIS:CD2	0.48	2.26	20	1
1:A:109:PRO:CB	1:A:125:LEU:HD22	0.47	2.38	17	2
1:A:198:ILE:HD13	1:A:224:VAL:HG21	0.47	1.86	6	1
1:A:202:ASN:OD1	1:A:206:LYS:CB	0.47	2.61	11	1
1:A:176:LEU:HD13	1:A:208:PRO:CB	0.47	2.34	14	2
1:A:197:SER:O	1:A:198:ILE:HG12	0.47	2.09	16	1
1:A:26:ILE:HG21	1:A:62:LEU:HD13	0.47	1.86	20	1
1:A:110:LEU:HD22	1:A:131:ASN:O	0.47	2.09	18	2
1:A:200:ILE:O	1:A:208:PRO:HD3	0.47	2.08	17	2
1:A:77:LEU:HD21	1:A:125:LEU:HD21	0.47	1.86	11	1
1:A:209:LEU:H	1:A:209:LEU:CD1	0.47	2.21	17	1
1:A:23:LYS:C	1:A:27:LEU:HD12	0.47	2.33	19	1
1:A:26:ILE:CD1	1:A:59:LEU:HD11	0.47	2.39	1	1
1:A:118:ARG:CB	1:A:121:ILE:HD12	0.47	2.40	2	1
1:A:22:LEU:HD23	1:A:58:PHE:HD2	0.47	1.69	5	1
1:A:14:ALA:HB2	1:A:55:ILE:HG21	0.47	1.84	9	2
1:A:198:ILE:C	1:A:199:TYR:CG	0.47	2.92	16	1
1:A:99:VAL:HG13	1:A:100:ASN:ND2	0.47	2.25	18	1
1:A:218:LEU:HD22	1:A:221:LYS:HD3	0.47	1.86	20	1
1:A:75:SER:CB	1:A:76:PRO:HD2	0.47	2.39	3	4
1:A:61:GLN:CG	1:A:62:LEU:N	0.47	2.77	16	14
1:A:201:GLU:HB3	1:A:205:GLU:HA	0.47	1.87	8	3
1:A:187:GLU:O	1:A:191:LEU:HD13	0.47	2.09	12	1
1:A:209:LEU:HD21	1:A:221:LYS:CG	0.47	2.39	19	1
1:A:17:GLY:HA3	1:A:52:HIS:CE1	0.47	2.45	19	8
1:A:144:HIS:NE2	1:A:173:ASN:O	0.47	2.48	7	6
1:A:60:LEU:HD11	1:A:95:LYS:CG	0.47	2.40	14	1
1:A:76:PRO:CB	1:A:92:LEU:HD22	0.47	2.39	15	1
1:A:110:LEU:CD1	1:A:126:LEU:HD21	0.47	2.39	16	1
1:A:166:ASN:ND2	1:A:196:ALA:O	0.47	2.47	16	1
1:A:166:ASN:O	1:A:174:THR:HG22	0.47	2.10	15	3
1:A:8:LEU:HD13	1:A:35:ARG:HB3	0.47	1.87	4	2
1:A:126:LEU:HD11	1:A:132:PRO:HG3	0.47	1.86	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:206:LYS:HE3	1:A:211:VAL:HG23	0.47	1.85	2	1
1:A:14:ALA:HB1	1:A:55:ILE:CG2	0.47	2.39	3	1
1:A:48:CYS:SG	1:A:56:VAL:HG11	0.47	2.50	6	2
1:A:45:HIS:CE1	1:A:70:ASP:OD1	0.47	2.68	14	3
1:A:19:LEU:HD13	1:A:54:GLU:O	0.47	2.09	3	1
1:A:212:ALA:O	1:A:213:LYS:HB2	0.47	2.10	15	1
1:A:207:THR:O	1:A:209:LEU:N	0.47	2.48	19	1
1:A:80:ALA:HB1	1:A:89:VAL:N	0.47	2.25	3	2
1:A:80:ALA:CB	1:A:89:VAL:CG2	0.47	2.93	12	1
1:A:185:VAL:HG21	1:A:216:LEU:HD21	0.47	1.86	18	1
1:A:71:ASP:O	1:A:104:GLN:CG	0.46	2.63	6	1
1:A:167:ILE:O	1:A:174:THR:HA	0.46	2.09	7	1
1:A:8:LEU:HD13	1:A:11:CYS:SG	0.46	2.50	11	2
1:A:166:ASN:OD1	1:A:200:ILE:HD13	0.46	2.09	13	1
1:A:200:ILE:O	1:A:208:PRO:CD	0.46	2.63	17	4
1:A:14:ALA:CA	1:A:55:ILE:HD13	0.46	2.38	13	5
1:A:76:PRO:HB2	1:A:92:LEU:HD11	0.46	1.88	13	1
1:A:197:SER:O	1:A:200:ILE:HD12	0.46	2.10	19	1
1:A:23:LYS:HA	1:A:58:PHE:CZ	0.46	2.45	11	7
1:A:152:LEU:CD1	1:A:155:ILE:HD11	0.46	2.09	7	1
1:A:174:THR:HG21	1:A:200:ILE:CG2	0.46	2.38	12	1
1:A:23:LYS:CD	1:A:58:PHE:CE1	0.46	2.99	14	1
1:A:126:LEU:HD23	1:A:161:TYR:CB	0.46	2.40	1	2
1:A:197:SER:CB	1:A:200:ILE:HD11	0.46	2.37	12	5
1:A:119:HIS:CD2	1:A:153:LYS:CG	0.46	2.99	9	1
1:A:143:MET:HE3	1:A:163:ALA:HB1	0.46	1.88	8	1
1:A:175:PRO:HB2	1:A:191:LEU:HD21	0.46	1.88	18	2
1:A:219:ILE:CG2	1:A:220:LEU:HD12	0.46	2.41	15	1
1:A:198:ILE:CG2	1:A:199:TYR:CE2	0.46	2.99	16	1
1:A:121:ILE:O	1:A:125:LEU:HD23	0.46	2.10	20	1
1:A:198:ILE:CG2	1:A:209:LEU:HD21	0.46	2.40	8	1
1:A:159:LEU:HD23	1:A:194:GLN:HG2	0.46	1.87	9	2
1:A:56:VAL:CG1	1:A:92:LEU:HD21	0.46	2.39	16	1
1:A:9:MET:O	1:A:12:ASN:OD1	0.46	2.34	8	4
1:A:89:VAL:O	1:A:93:LEU:HD13	0.46	2.11	1	1
1:A:190:LEU:HD12	1:A:194:GLN:OE1	0.46	2.11	1	1
1:A:53:THR:HG22	1:A:88:ILE:HA	0.46	1.87	9	1
1:A:89:VAL:O	1:A:93:LEU:HD12	0.46	2.11	19	2
1:A:118:ARG:HB3	1:A:121:ILE:HG22	0.46	1.85	12	2
1:A:66:VAL:HG21	1:A:95:LYS:CD	0.46	2.41	8	1
1:A:206:LYS:HA	1:A:206:LYS:HE3	0.46	1.88	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:191:LEU:HD23	1:A:196:ALA:CB	0.46	2.40	10	1
1:A:218:LEU:HD13	1:A:218:LEU:C	0.46	2.35	15	3
1:A:110:LEU:H	1:A:110:LEU:CD1	0.46	2.23	14	1
1:A:126:LEU:CD1	1:A:161:TYR:CD1	0.46	2.99	18	1
1:A:126:LEU:HD23	1:A:132:PRO:HG3	0.46	1.88	20	1
1:A:74:TRP:NE1	1:A:103:ASN:CB	0.46	2.79	2	1
1:A:191:LEU:HD12	1:A:196:ALA:HB3	0.46	1.87	2	1
1:A:158:LEU:HD12	1:A:163:ALA:HB1	0.46	1.88	8	1
1:A:10:VAL:CG1	1:A:32:LEU:HD23	0.46	2.41	16	1
1:A:110:LEU:HD21	1:A:126:LEU:HG	0.45	1.88	2	1
1:A:106:GLY:O	1:A:108:THR:HG23	0.45	2.10	12	5
1:A:66:VAL:HG13	1:A:76:PRO:HG2	0.45	1.86	8	1
1:A:154:MET:C	1:A:158:LEU:HD12	0.45	2.36	17	2
1:A:110:LEU:HD22	1:A:110:LEU:C	0.45	2.33	14	1
1:A:52:HIS:O	1:A:56:VAL:CG2	0.45	2.63	16	3
1:A:84:GLY:O	1:A:85:ARG:C	0.45	2.59	17	1
1:A:152:LEU:HD23	1:A:155:ILE:HD11	0.45	1.87	17	1
1:A:198:ILE:HG21	1:A:221:LYS:HA	0.45	1.88	8	2
1:A:208:PRO:O	1:A:212:ALA:N	0.45	2.50	19	3
1:A:14:ALA:HA	1:A:55:ILE:HD12	0.45	1.86	3	1
1:A:117:ASN:O	1:A:119:HIS:N	0.45	2.50	4	7
1:A:198:ILE:CD1	1:A:224:VAL:HB	0.45	2.42	6	1
1:A:202:ASN:ND2	1:A:206:LYS:HB2	0.45	2.27	7	1
1:A:155:ILE:HG21	1:A:191:LEU:HG	0.45	1.88	9	1
1:A:80:ALA:CB	1:A:88:ILE:CG2	0.45	2.94	13	1
1:A:103:ASN:CG	1:A:104:GLN:N	0.45	2.74	2	7
1:A:74:TRP:HE3	1:A:78:HIS:CB	0.45	2.24	10	1
1:A:58:PHE:CE1	1:A:62:LEU:HD12	0.45	2.46	15	1
1:A:80:ALA:CB	1:A:89:VAL:HG12	0.45	2.41	19	1
1:A:175:PRO:HB3	1:A:191:LEU:HD11	0.45	1.89	1	1
1:A:209:LEU:HA	1:A:217:GLY:HA3	0.45	1.89	2	2
1:A:113:ALA:HB1	1:A:121:ILE:HG22	0.45	1.88	4	2
1:A:198:ILE:CD1	1:A:199:TYR:CD2	0.45	2.99	4	1
1:A:191:LEU:O	1:A:195:GLY:N	0.45	2.48	14	1
1:A:77:LEU:O	1:A:81:ALA:HB3	0.45	2.11	15	1
1:A:93:LEU:O	1:A:96:GLY:N	0.45	2.37	15	1
1:A:192:VAL:CG1	1:A:224:VAL:HG22	0.45	2.42	17	1
1:A:81:ALA:HA	1:A:121:ILE:HG21	0.45	1.89	19	1
1:A:188:ALA:CB	1:A:220:LEU:HD21	0.45	2.42	3	2
1:A:108:THR:CB	1:A:109:PRO:HD2	0.45	2.41	16	2
1:A:80:ALA:HB1	1:A:89:VAL:CG2	0.45	2.41	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:59:LEU:HD13	1:A:64:VAL:HG11	0.45	1.88	12	1
1:A:8:LEU:HD21	1:A:35:ARG:HG2	0.45	1.88	20	1
1:A:66:VAL:CG1	1:A:95:LYS:HZ3	0.45	2.23	20	1
1:A:15:TYR:CD1	1:A:46:TRP:HE3	0.45	2.30	7	7
1:A:99:VAL:HG11	1:A:129:GLY:C	0.45	2.36	1	1
1:A:11:CYS:HB3	1:A:46:TRP:CD1	0.45	2.47	14	2
1:A:44:LEU:HD23	1:A:76:PRO:CG	0.45	2.42	4	1
1:A:22:LEU:HD23	1:A:58:PHE:CD2	0.45	2.47	5	1
1:A:39:ASP:O	1:A:70:ASP:CB	0.45	2.64	6	1
1:A:122:ALA:O	1:A:126:LEU:HD23	0.45	2.11	19	1
1:A:47:ALA:HB3	1:A:56:VAL:HG13	0.45	1.88	9	4
1:A:123:VAL:HG13	1:A:161:TYR:HE2	0.45	1.71	2	2
1:A:165:THR:C	1:A:166:ASN:CG	0.45	2.84	2	1
1:A:123:VAL:CG2	1:A:157:ILE:HG21	0.45	2.42	9	1
1:A:110:LEU:HD12	1:A:130:ALA:HB1	0.45	1.87	13	1
1:A:123:VAL:HG23	1:A:157:ILE:HG21	0.45	1.89	14	1
1:A:198:ILE:CG2	1:A:199:TYR:CZ	0.45	2.99	14	1
1:A:60:LEU:CD2	1:A:66:VAL:CG1	0.45	2.95	19	1
1:A:58:PHE:CZ	1:A:62:LEU:CD1	0.45	3.00	3	4
1:A:73:GLY:HA2	1:A:74:TRP:CD1	0.45	2.47	11	6
1:A:192:VAL:HG21	1:A:220:LEU:HD12	0.45	1.88	8	1
1:A:172:GLY:O	1:A:202:ASN:ND2	0.45	2.50	13	1
1:A:185:VAL:HG12	1:A:189:LYS:CG	0.45	2.41	15	1
1:A:10:VAL:O	1:A:22:LEU:CD1	0.45	2.63	20	1
1:A:17:GLY:O	1:A:19:LEU:N	0.45	2.50	2	2
1:A:192:VAL:HG13	1:A:198:ILE:CG2	0.45	2.42	2	1
1:A:192:VAL:HG13	1:A:198:ILE:HG23	0.45	1.86	2	1
1:A:77:LEU:N	1:A:92:LEU:HD23	0.45	2.27	5	1
1:A:119:HIS:CE1	1:A:154:MET:CE	0.45	2.99	10	1
1:A:199:TYR:CD1	1:A:199:TYR:N	0.45	2.84	14	1
1:A:44:LEU:HD11	1:A:64:VAL:CG2	0.45	2.42	19	1
1:A:155:ILE:CD1	1:A:187:GLU:CG	0.44	2.95	3	4
1:A:191:LEU:CD2	1:A:196:ALA:HB2	0.44	2.42	1	1
1:A:179:ALA:HB1	1:A:187:GLU:HB3	0.44	1.87	3	1
1:A:19:LEU:HD21	1:A:58:PHE:HB2	0.44	1.89	5	3
1:A:126:LEU:HD23	1:A:161:TYR:HB3	0.44	1.88	8	1
1:A:119:HIS:CG	1:A:154:MET:HE2	0.44	2.47	17	1
1:A:143:MET:SD	1:A:158:LEU:HD13	0.44	2.52	1	1
1:A:80:ALA:CB	1:A:92:LEU:HD21	0.44	2.41	15	3
1:A:13:LEU:HD21	1:A:21:GLU:CG	0.44	2.42	10	2
1:A:45:HIS:CG	1:A:70:ASP:OD2	0.44	2.71	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:138:TYR:O	1:A:170:THR:N	0.44	2.51	8	1
1:A:176:LEU:HD13	1:A:197:SER:O	0.44	2.13	2	1
1:A:14:ALA:CA	1:A:55:ILE:HG21	0.44	2.42	4	3
1:A:111:HIS:CE1	1:A:136:ASP:OD1	0.44	2.71	6	4
1:A:198:ILE:CD1	1:A:224:VAL:HG21	0.44	2.41	6	1
1:A:66:VAL:HG21	1:A:95:LYS:HD2	0.44	1.90	8	1
1:A:196:ALA:O	1:A:197:SER:CB	0.44	2.64	9	3
1:A:192:VAL:CG2	1:A:220:LEU:HD22	0.44	2.41	14	1
1:A:198:ILE:HD13	1:A:221:LYS:CG	0.44	2.38	18	1
1:A:152:LEU:HD11	1:A:186:GLU:CG	0.44	2.42	5	1
1:A:9:MET:HA	1:A:12:ASN:OD1	0.44	2.11	16	2
1:A:77:LEU:HD22	1:A:92:LEU:HD11	0.44	1.87	15	1
1:A:144:HIS:CD2	1:A:173:ASN:O	0.44	2.70	15	6
1:A:60:LEU:C	1:A:60:LEU:CD2	0.44	2.91	12	1
1:A:10:VAL:HG11	1:A:32:LEU:HD22	0.44	1.88	13	1
1:A:60:LEU:CD1	1:A:95:LYS:CG	0.44	2.96	14	1
1:A:199:TYR:CG	1:A:209:LEU:HD11	0.44	2.48	14	1
1:A:78:HIS:NE2	1:A:107:CYS:O	0.44	2.50	18	1
1:A:192:VAL:CG1	1:A:224:VAL:CG2	0.44	2.96	3	5
1:A:14:ALA:HA	1:A:55:ILE:HG21	0.44	1.90	4	1
1:A:49:SER:OG	1:A:79:ILE:HG21	0.44	2.12	4	1
1:A:143:MET:CE	1:A:163:ALA:HB3	0.44	2.43	8	1
1:A:80:ALA:C	1:A:89:VAL:HG22	0.44	2.38	9	1
1:A:198:ILE:HD12	1:A:221:LYS:HA	0.44	1.90	12	1
1:A:8:LEU:HD22	1:A:32:LEU:HD23	0.44	1.88	15	1
1:A:22:LEU:HD21	1:A:59:LEU:CD1	0.44	2.43	18	1
1:A:44:LEU:HD12	1:A:56:VAL:HA	0.44	1.90	6	1
1:A:110:LEU:HD21	1:A:126:LEU:HD13	0.44	1.90	7	1
1:A:162:LYS:N	1:A:162:LYS:HD2	0.44	2.25	10	2
1:A:66:VAL:CG2	1:A:92:LEU:HD13	0.44	2.43	11	1
1:A:192:VAL:HG13	1:A:193:SER:N	0.44	2.28	1	2
1:A:198:ILE:HG13	1:A:224:VAL:HG21	0.44	1.88	4	1
1:A:10:VAL:HG11	1:A:32:LEU:HB2	0.44	1.88	13	1
1:A:36:THR:HG22	1:A:40:SER:O	0.43	2.12	3	1
1:A:109:PRO:HG3	1:A:125:LEU:HD21	0.43	1.89	3	1
1:A:138:TYR:O	1:A:169:ASP:HB2	0.43	2.13	7	1
1:A:198:ILE:HD13	1:A:224:VAL:CG2	0.43	2.42	12	2
1:A:26:ILE:HG12	1:A:33:ALA:HB2	0.43	1.89	13	1
1:A:168:GLN:NE2	1:A:174:THR:CG2	0.43	2.81	2	2
1:A:80:ALA:CB	1:A:89:VAL:HG22	0.43	2.43	9	1
1:A:123:VAL:HG22	1:A:161:TYR:CE2	0.43	2.48	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:VAL:HG21	1:A:95:LYS:HB3	0.43	1.90	14	1
1:A:213:LYS:O	1:A:215:GLY:N	0.43	2.51	1	3
1:A:169:ASP:OD1	1:A:172:GLY:N	0.43	2.51	7	1
1:A:69:LYS:HG3	1:A:101:ALA:HB1	0.43	1.90	12	1
1:A:25:SER:O	1:A:32:LEU:HD21	0.43	2.13	13	1
1:A:26:ILE:CA	1:A:32:LEU:HD11	0.43	2.41	13	1
1:A:47:ALA:HB3	1:A:56:VAL:CG1	0.43	2.43	9	1
1:A:74:TRP:HD1	1:A:103:ASN:CB	0.43	2.25	12	1
1:A:17:GLY:CA	1:A:52:HIS:CE1	0.43	3.02	14	1
1:A:126:LEU:HD13	1:A:161:TYR:CB	0.43	2.43	15	1
1:A:80:ALA:HB1	1:A:89:VAL:CG1	0.43	2.43	19	1
1:A:77:LEU:CD2	1:A:125:LEU:HD13	0.43	2.43	20	1
1:A:74:TRP:HB2	1:A:78:HIS:CG	0.43	2.48	2	2
1:A:103:ASN:OD1	1:A:104:GLN:N	0.43	2.52	2	1
1:A:224:VAL:HG12	1:A:225:GLU:OE2	0.43	2.14	7	1
1:A:85:ARG:CB	1:A:88:ILE:HG22	0.43	2.43	9	1
1:A:209:LEU:HD13	1:A:221:LYS:HG3	0.43	1.90	12	1
1:A:42:THR:OG1	1:A:44:LEU:HG	0.43	2.13	20	1
1:A:113:ALA:HB1	1:A:121:ILE:CG2	0.43	2.44	4	2
1:A:10:VAL:HG22	1:A:25:SER:HB3	0.43	1.91	17	1
1:A:126:LEU:HD22	1:A:161:TYR:CB	0.43	2.44	20	1
1:A:136:ASP:OD2	1:A:140:ALA:HB3	0.43	2.13	1	1
1:A:220:LEU:HD22	1:A:220:LEU:N	0.43	2.29	9	1
1:A:177:HIS:CE1	1:A:201:GLU:O	0.43	2.72	8	3
1:A:168:GLN:HG3	1:A:172:GLY:HA2	0.43	1.89	6	1
1:A:171:GLU:HB3	1:A:203:LYS:CG	0.43	2.44	14	1
1:A:102:VAL:HB	1:A:106:GLY:HA2	0.43	1.91	3	5
1:A:75:SER:HB2	1:A:76:PRO:CD	0.43	2.44	12	4
1:A:159:LEU:HD21	1:A:165:THR:HG21	0.43	1.91	5	1
1:A:74:TRP:CD1	1:A:103:ASN:OD1	0.43	2.72	6	1
1:A:166:ASN:ND2	1:A:197:SER:N	0.43	2.67	7	1
1:A:207:THR:O	1:A:210:GLN:HG2	0.43	2.14	8	1
1:A:110:LEU:HD11	1:A:126:LEU:HD12	0.43	1.89	11	1
1:A:196:ALA:O	1:A:197:SER:C	0.43	2.61	12	1
1:A:152:LEU:O	1:A:155:ILE:CG1	0.43	2.67	17	1
1:A:110:LEU:HD13	1:A:126:LEU:CD2	0.43	2.28	5	1
1:A:169:ASP:CB	1:A:173:ASN:OD1	0.43	2.67	10	1
1:A:41:ARG:CG	1:A:45:HIS:CB	0.43	2.96	14	2
1:A:88:ILE:O	1:A:92:LEU:CD2	0.43	2.67	15	1
1:A:77:LEU:HA	1:A:92:LEU:CD2	0.43	2.44	19	1
1:A:76:PRO:HB2	1:A:92:LEU:HD13	0.42	1.90	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:174:THR:HB	1:A:175:PRO:CD	0.42	2.44	6	3
1:A:177:HIS:NE2	1:A:208:PRO:HD3	0.42	2.29	1	2
1:A:103:ASN:ND2	1:A:105:ASN:ND2	0.42	2.67	2	1
1:A:201:GLU:HG2	1:A:207:THR:HG22	0.42	1.91	3	1
1:A:126:LEU:CD2	1:A:161:TYR:CG	0.42	3.00	7	1
1:A:64:VAL:O	1:A:66:VAL:HG23	0.42	2.14	8	1
1:A:75:SER:HB3	1:A:101:ALA:HB3	0.42	1.90	12	1
1:A:8:LEU:CD2	1:A:35:ARG:CG	0.42	2.97	16	1
1:A:102:VAL:HG12	1:A:106:GLY:HA2	0.42	1.91	8	2
1:A:168:GLN:CG	1:A:172:GLY:HA2	0.42	2.44	6	1
1:A:203:LYS:C	1:A:204:GLU:HG3	0.42	2.39	7	1
1:A:80:ALA:HB2	1:A:92:LEU:CD2	0.42	2.44	9	1
1:A:103:ASN:HB3	1:A:107:CYS:HB2	0.42	1.91	10	1
1:A:66:VAL:CG2	1:A:97:ALA:HB2	0.42	2.44	16	1
1:A:219:ILE:O	1:A:222:ARG:CG	0.42	2.67	19	2
1:A:45:HIS:HD2	1:A:79:ILE:HD11	0.42	1.73	19	1
1:A:166:ASN:ND2	1:A:200:ILE:CD1	0.42	2.82	1	3
1:A:102:VAL:HG12	1:A:106:GLY:C	0.42	2.39	2	2
1:A:176:LEU:H	1:A:176:LEU:CD1	0.42	2.25	9	1
1:A:166:ASN:CG	1:A:200:ILE:HD13	0.42	2.39	11	1
1:A:76:PRO:O	1:A:92:LEU:HD23	0.42	2.13	14	1
1:A:198:ILE:HG22	1:A:199:TYR:CD2	0.42	2.48	16	1
1:A:166:ASN:ND2	1:A:200:ILE:HD11	0.42	2.29	19	1
1:A:178:LEU:HD22	1:A:178:LEU:N	0.42	2.29	20	1
1:A:66:VAL:O	1:A:76:PRO:CD	0.42	2.68	7	1
1:A:57:GLU:O	1:A:61:GLN:HB3	0.42	2.15	13	2
1:A:60:LEU:HD13	1:A:95:LYS:CG	0.42	2.44	13	1
1:A:74:TRP:NE1	1:A:103:ASN:HB2	0.42	2.29	2	2
1:A:136:ASP:OD1	1:A:138:TYR:CD2	0.42	2.73	7	1
1:A:138:TYR:CE1	1:A:140:ALA:CB	0.42	3.02	8	1
1:A:196:ALA:O	1:A:200:ILE:CD1	0.42	2.67	8	1
1:A:119:HIS:CD2	1:A:153:LYS:HG3	0.42	2.49	9	1
1:A:13:LEU:HD23	1:A:22:LEU:CA	0.42	2.44	13	1
1:A:22:LEU:O	1:A:22:LEU:HD13	0.42	2.14	1	1
1:A:204:GLU:O	1:A:205:GLU:CB	0.42	2.68	4	2
1:A:99:VAL:CG2	1:A:129:GLY:O	0.42	2.68	5	1
1:A:168:GLN:NE2	1:A:173:ASN:N	0.42	2.68	6	1
1:A:147:ALA:HB3	1:A:178:LEU:CB	0.42	2.45	10	1
1:A:111:HIS:CE1	1:A:134:ALA:O	0.42	2.73	2	1
1:A:157:ILE:HA	1:A:160:TYR:CD2	0.42	2.50	7	1
1:A:80:ALA:CB	1:A:92:LEU:CD2	0.42	2.97	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:VAL:HG12	1:A:124:MET:HE2	0.42	1.90	11	1
1:A:48:CYS:HA	1:A:88:ILE:HG21	0.42	1.91	17	1
1:A:198:ILE:HD12	1:A:199:TYR:CD2	0.42	2.49	18	1
1:A:107:CYS:O	1:A:108:THR:O	0.42	2.37	1	2
1:A:105:ASN:OD1	1:A:105:ASN:N	0.42	2.52	4	1
1:A:8:LEU:HD12	1:A:10:VAL:HG22	0.42	1.90	8	1
1:A:213:LYS:HG3	1:A:216:LEU:HD12	0.42	1.91	10	1
1:A:60:LEU:HG	1:A:95:LYS:CG	0.42	2.45	2	1
1:A:74:TRP:CZ2	1:A:112:TYR:CZ	0.42	3.08	4	1
1:A:213:LYS:CB	1:A:216:LEU:CD2	0.42	2.98	4	1
1:A:8:LEU:O	1:A:12:ASN:CG	0.42	2.63	9	1
1:A:105:ASN:CG	1:A:107:CYS:HG	0.42	2.23	9	1
1:A:10:VAL:HG13	1:A:32:LEU:HD23	0.42	1.92	12	1
1:A:76:PRO:CB	1:A:92:LEU:HD12	0.42	2.45	12	1
1:A:58:PHE:CD2	1:A:59:LEU:HD22	0.42	2.50	13	1
1:A:192:VAL:CG2	1:A:224:VAL:CG2	0.42	2.98	1	1
1:A:47:ALA:HB1	1:A:56:VAL:HG13	0.42	1.92	2	1
1:A:110:LEU:CD2	1:A:130:ALA:CB	0.42	2.97	2	1
1:A:152:LEU:HD12	1:A:187:GLU:HG2	0.42	1.92	4	1
1:A:123:VAL:CG2	1:A:157:ILE:CG2	0.42	2.98	11	2
1:A:209:LEU:HD22	1:A:221:LYS:HB2	0.42	1.92	11	1
1:A:52:HIS:CG	1:A:55:ILE:HD12	0.42	2.50	12	1
1:A:103:ASN:ND2	1:A:103:ASN:N	0.42	2.68	16	1
1:A:14:ALA:O	1:A:52:HIS:CD2	0.42	2.73	18	1
1:A:110:LEU:HD12	1:A:110:LEU:H	0.41	1.75	1	1
1:A:99:VAL:HG22	1:A:130:ALA:CB	0.41	2.45	3	1
1:A:166:ASN:CG	1:A:200:ILE:CD1	0.41	2.93	5	1
1:A:103:ASN:ND2	1:A:107:CYS:CB	0.41	2.83	6	1
1:A:135:LYS:HE3	1:A:167:ILE:HD13	0.41	1.90	6	1
1:A:23:LYS:O	1:A:27:LEU:HD23	0.41	2.14	7	1
1:A:202:ASN:O	1:A:204:GLU:N	0.41	2.52	11	1
1:A:13:LEU:HD21	1:A:21:GLU:CB	0.41	2.45	13	1
1:A:135:LYS:C	1:A:136:ASP:O	0.41	2.63	15	2
1:A:143:MET:HE3	1:A:163:ALA:O	0.41	2.15	16	1
1:A:44:LEU:CD1	1:A:76:PRO:HB3	0.41	2.44	20	1
1:A:72:ALA:HB1	1:A:104:GLN:HG3	0.41	1.92	20	1
1:A:178:LEU:N	1:A:178:LEU:CD2	0.41	2.83	20	1
1:A:135:LYS:CE	1:A:167:ILE:CD1	0.41	2.99	6	1
1:A:177:HIS:CE1	1:A:202:ASN:OD1	0.41	2.73	6	1
1:A:66:VAL:CG2	1:A:92:LEU:CD1	0.41	2.98	11	1
1:A:198:ILE:HD13	1:A:224:VAL:HB	0.41	1.91	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:202:ASN:O	1:A:202:ASN:CG	0.41	2.62	12	1
1:A:60:LEU:CD2	1:A:66:VAL:HG11	0.41	2.45	19	1
1:A:64:VAL:O	1:A:95:LYS:NZ	0.41	2.52	20	1
1:A:45:HIS:CD2	1:A:70:ASP:OD2	0.41	2.73	16	2
1:A:138:TYR:O	1:A:169:ASP:CG	0.41	2.62	6	1
1:A:198:ILE:CD1	1:A:224:VAL:CG2	0.41	2.98	6	1
1:A:124:MET:O	1:A:127:GLU:HG2	0.41	2.15	10	1
1:A:72:ALA:O	1:A:104:GLN:HG2	0.41	2.15	15	1
1:A:119:HIS:CD2	1:A:154:MET:CE	0.41	3.04	16	1
1:A:60:LEU:HD23	1:A:66:VAL:CG1	0.41	2.45	19	1
1:A:48:CYS:CA	1:A:88:ILE:HD13	0.41	2.42	13	1
1:A:86:ASP:HA	1:A:89:VAL:HG12	0.41	1.91	17	1
1:A:166:ASN:O	1:A:167:ILE:O	0.41	2.37	5	1
1:A:169:ASP:OD1	1:A:173:ASN:N	0.41	2.54	7	1
1:A:119:HIS:CD2	1:A:153:LYS:HG2	0.41	2.50	8	1
1:A:154:MET:O	1:A:158:LEU:HD13	0.41	2.15	11	1
1:A:56:VAL:HA	1:A:59:LEU:HD21	0.41	1.92	12	1
1:A:177:HIS:CD2	1:A:202:ASN:OD1	0.41	2.73	14	1
1:A:107:CYS:HB2	1:A:112:TYR:CZ	0.41	2.51	1	1
1:A:152:LEU:HA	1:A:155:ILE:HG22	0.41	1.91	10	1
1:A:202:ASN:O	1:A:203:LYS:HB2	0.41	2.16	15	1
1:A:176:LEU:HD11	1:A:208:PRO:CG	0.41	2.45	18	1
1:A:201:GLU:HG3	1:A:207:THR:HG22	0.41	1.92	19	1
1:A:107:CYS:SG	1:A:112:TYR:CE1	0.41	3.13	20	1
1:A:8:LEU:CD2	1:A:37:ASP:CB	0.41	2.98	2	1
1:A:45:HIS:CG	1:A:70:ASP:OD1	0.41	2.73	2	1
1:A:74:TRP:NE1	1:A:103:ASN:OD1	0.41	2.54	20	2
1:A:110:LEU:CD2	1:A:130:ALA:HB1	0.41	2.46	2	1
1:A:197:SER:CB	1:A:200:ILE:CD1	0.41	2.98	3	1
1:A:22:LEU:CD1	1:A:26:ILE:CD1	0.41	2.98	1	1
1:A:135:LYS:HB2	1:A:139:GLU:HA	0.41	1.92	7	2
1:A:177:HIS:CG	1:A:202:ASN:OD1	0.41	2.74	8	1
1:A:127:GLU:HG3	1:A:128:GLY:N	0.41	2.31	10	1
1:A:133:ASP:CG	1:A:133:ASP:O	0.41	2.64	10	1
1:A:45:HIS:CD2	1:A:70:ASP:OD1	0.41	2.73	14	1
1:A:195:GLY:O	1:A:197:SER:N	0.41	2.54	16	1
1:A:198:ILE:HD12	1:A:221:LYS:HG3	0.41	1.92	17	1
1:A:166:ASN:O	1:A:174:THR:CG2	0.41	2.69	2	1
1:A:99:VAL:HG22	1:A:130:ALA:HA	0.41	1.92	3	1
1:A:136:ASP:OD2	1:A:138:TYR:CE2	0.41	2.74	7	1
1:A:36:THR:OG1	1:A:40:SER:C	0.41	2.63	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:135:LYS:O	1:A:135:LYS:HG3	0.41	2.16	8	1
1:A:8:LEU:HD11	1:A:35:ARG:CB	0.41	2.44	9	1
1:A:171:GLU:O	1:A:203:LYS:HG3	0.41	2.16	9	1
1:A:198:ILE:HD12	1:A:221:LYS:CG	0.41	2.45	10	1
1:A:76:PRO:CB	1:A:92:LEU:CD1	0.41	2.99	12	1
1:A:77:LEU:HD23	1:A:125:LEU:HD21	0.41	1.91	12	1
1:A:45:HIS:CD2	1:A:79:ILE:HD11	0.41	2.50	13	1
1:A:208:PRO:O	1:A:212:ALA:CB	0.41	2.66	14	1
1:A:185:VAL:HG12	1:A:189:LYS:HG2	0.41	1.92	15	1
1:A:209:LEU:HD22	1:A:209:LEU:C	0.41	2.38	17	1
1:A:135:LYS:CG	1:A:141:THR:HG22	0.41	2.46	18	1
1:A:13:LEU:CB	1:A:22:LEU:CD2	0.41	2.99	19	1
1:A:126:LEU:HB3	1:A:161:TYR:CZ	0.41	2.51	20	1
1:A:77:LEU:HD23	1:A:77:LEU:C	0.41	2.40	2	1
1:A:78:HIS:HE1	1:A:101:ALA:O	0.41	1.96	4	1
1:A:133:ASP:OD1	1:A:164:SER:N	0.41	2.54	5	1
1:A:166:ASN:CB	1:A:200:ILE:HD13	0.41	2.45	8	1
1:A:26:ILE:CG1	1:A:33:ALA:HB2	0.41	2.46	13	1
1:A:22:LEU:HD23	1:A:58:PHE:HE2	0.41	1.75	15	1
1:A:202:ASN:HB3	1:A:206:LYS:HB2	0.41	1.93	15	1
1:A:126:LEU:CB	1:A:161:TYR:CZ	0.41	3.04	20	1
1:A:191:LEU:HD12	1:A:191:LEU:C	0.40	2.41	2	1
1:A:36:THR:OG1	1:A:40:SER:HA	0.40	2.15	4	1
1:A:64:VAL:HG13	1:A:65:PRO:HD2	0.40	1.94	10	2
1:A:206:LYS:HE2	1:A:211:VAL:HG23	0.40	1.92	13	1
1:A:23:LYS:HD2	1:A:58:PHE:CE1	0.40	2.52	14	1
1:A:77:LEU:CD1	1:A:97:ALA:HB3	0.40	2.45	14	1
1:A:44:LEU:HG	1:A:59:LEU:HD22	0.40	1.93	15	1
1:A:143:MET:HE2	1:A:158:LEU:CB	0.40	2.44	18	1
1:A:159:LEU:HD13	1:A:194:GLN:OE1	0.40	2.15	19	1
1:A:221:LYS:HG3	1:A:222:ARG:N	0.40	2.32	19	1
1:A:22:LEU:HD11	1:A:26:ILE:HD11	0.40	1.91	1	1
1:A:167:ILE:HG22	1:A:168:GLN:N	0.40	2.30	3	1
1:A:60:LEU:HD21	1:A:95:LYS:HB3	0.40	1.92	8	1
1:A:96:GLY:O	1:A:97:ALA:O	0.40	2.39	10	1
1:A:207:THR:OG1	1:A:209:LEU:HG	0.40	2.16	11	1
1:A:105:ASN:O	1:A:136:ASP:CB	0.40	2.70	12	1
1:A:197:SER:HB3	1:A:200:ILE:HG13	0.40	1.93	12	1
1:A:26:ILE:HG12	1:A:32:LEU:CD1	0.40	2.47	13	1
1:A:81:ALA:N	1:A:89:VAL:HG12	0.40	2.32	1	1
1:A:60:LEU:HB2	1:A:95:LYS:CD	0.40	2.47	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:VAL:CG2	1:A:32:LEU:HD23	0.40	2.45	4	1
1:A:77:LEU:CD2	1:A:125:LEU:HD23	0.40	2.46	4	1
1:A:220:LEU:N	1:A:220:LEU:CD2	0.40	2.84	9	1
1:A:12:ASN:OD1	1:A:12:ASN:N	0.40	2.55	10	1
1:A:185:VAL:CG2	1:A:216:LEU:CD2	0.40	2.99	15	1
1:A:192:VAL:CG1	1:A:193:SER:N	0.40	2.84	15	1
1:A:163:ALA:O	1:A:164:SER:O	0.40	2.39	17	1
1:A:59:LEU:O	1:A:64:VAL:CG2	0.40	2.69	18	1
1:A:8:LEU:HD11	1:A:36:THR:CA	0.40	2.46	6	1
1:A:202:ASN:CG	1:A:203:LYS:N	0.40	2.78	7	1
1:A:109:PRO:CG	1:A:125:LEU:HD22	0.40	2.46	9	1
1:A:35:ARG:O	1:A:36:THR:O	0.40	2.40	19	1
1:A:8:LEU:HD21	1:A:37:ASP:CB	0.40	2.45	2	1
1:A:224:VAL:O	1:A:225:GLU:HB2	0.40	2.17	13	1
1:A:118:ARG:CD	1:A:121:ILE:HD12	0.40	2.47	14	1
1:A:77:LEU:HD12	1:A:109:PRO:CB	0.40	2.45	15	1
1:A:213:LYS:HB2	1:A:216:LEU:HD13	0.40	1.93	16	1
1:A:158:LEU:O	1:A:163:ALA:HB2	0.40	2.16	17	1
1:A:86:ASP:HA	1:A:89:VAL:CG2	0.40	2.47	19	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	218/226 (96%)	183±4 (84±2%)	22±4 (10±2%)	13±3 (6±1%)	2	19
All	All	4360/4520 (96%)	3654 (84%)	445 (10%)	261 (6%)	2	19

All 43 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	213	LYS	20
1	A	225	GLU	20
1	A	72	ALA	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	164	SER	17
1	A	97	ALA	16
1	A	200	ILE	14
1	A	104	GLN	12
1	A	195	GLY	11
1	A	8	LEU	10
1	A	38	GLN	10
1	A	99	VAL	10
1	A	108	THR	10
1	A	136	ASP	10
1	A	52	HIS	9
1	A	215	GLY	9
1	A	167	ILE	8
1	A	197	SER	6
1	A	118	ARG	6
1	A	73	GLY	3
1	A	103	ASN	3
1	A	173	ASN	3
1	A	205	GLU	3
1	A	170	THR	3
1	A	196	ALA	3
1	A	107	CYS	3
1	A	70	ASP	3
1	A	18	LYS	2
1	A	172	GLY	2
1	A	198	ILE	2
1	A	199	TYR	2
1	A	37	ASP	2
1	A	151	ASN	1
1	A	203	LYS	1
1	A	74	TRP	1
1	A	166	ASN	1
1	A	66	VAL	1
1	A	98	GLN	1
1	A	149	LYS	1
1	A	85	ARG	1
1	A	36	THR	1
1	A	208	PRO	1
1	A	101	ALA	1
1	A	163	ALA	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	174/180 (97%)	119±6 (68±3%)	55±6 (32±3%)	1	14
All	All	3480/3600 (97%)	2378 (68%)	1102 (32%)	1	14

All 127 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	98	GLN	20
1	A	211	VAL	20
1	A	93	LEU	19
1	A	74	TRP	17
1	A	68	ASP	16
1	A	194	GLN	16
1	A	206	LYS	16
1	A	22	LEU	15
1	A	86	ASP	15
1	A	116	LYS	15
1	A	123	VAL	15
1	A	135	LYS	15
1	A	225	GLU	15
1	A	77	LEU	14
1	A	78	HIS	14
1	A	87	GLU	14
1	A	176	LEU	14
1	A	181	ASP	14
1	A	189	LYS	14
1	A	190	LEU	14
1	A	95	LYS	14
1	A	126	LEU	14
1	A	12	ASN	14
1	A	9	MET	13
1	A	30	LYS	13
1	A	105	ASN	13
1	A	143	MET	13
1	A	149	LYS	13
1	A	152	LEU	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	191	LEU	13
1	A	197	SER	13
1	A	85	ARG	12
1	A	153	LYS	12
1	A	213	LYS	12
1	A	70	ASP	12
1	A	99	VAL	12
1	A	216	LEU	12
1	A	69	LYS	12
1	A	36	THR	11
1	A	71	ASP	11
1	A	104	GLN	11
1	A	184	ARG	11
1	A	203	LYS	11
1	A	221	LYS	11
1	A	44	LEU	11
1	A	145	ARG	11
1	A	168	GLN	11
1	A	170	THR	11
1	A	90	LYS	11
1	A	8	LEU	10
1	A	202	ASN	10
1	A	110	LEU	10
1	A	182	GLU	10
1	A	125	LEU	10
1	A	154	MET	10
1	A	209	LEU	10
1	A	37	ASP	10
1	A	16	SER	9
1	A	38	GLN	9
1	A	151	ASN	9
1	A	201	GLU	9
1	A	210	GLN	9
1	A	27	LEU	9
1	A	186	GLU	9
1	A	120	GLU	9
1	A	20	GLU	8
1	A	171	GLU	8
1	A	39	ASP	8
1	A	218	LEU	8
1	A	35	ARG	7
1	A	41	ARG	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	121	ILE	7
1	A	198	ILE	7
1	A	205	GLU	7
1	A	61	GLN	7
1	A	127	GLU	7
1	A	139	GLU	7
1	A	159	LEU	7
1	A	49	SER	7
1	A	117	ASN	7
1	A	82	SER	7
1	A	40	SER	7
1	A	24	GLU	6
1	A	54	GLU	6
1	A	166	ASN	6
1	A	162	LYS	6
1	A	164	SER	6
1	A	59	LEU	6
1	A	92	LEU	6
1	A	107	CYS	6
1	A	18	LYS	5
1	A	100	ASN	5
1	A	141	THR	5
1	A	187	GLU	5
1	A	102	VAL	5
1	A	115	SER	5
1	A	158	LEU	5
1	A	31	SER	5
1	A	165	THR	5
1	A	56	VAL	5
1	A	64	VAL	5
1	A	157	ILE	4
1	A	13	LEU	4
1	A	138	TYR	4
1	A	21	GLU	4
1	A	124	MET	4
1	A	220	LEU	3
1	A	79	ILE	3
1	A	60	LEU	3
1	A	173	ASN	3
1	A	103	ASN	3
1	A	193	SER	3
1	A	199	TYR	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	25	SER	2
1	A	118	ARG	2
1	A	133	ASP	2
1	A	19	LEU	2
1	A	222	ARG	2
1	A	219	ILE	2
1	A	32	LEU	1
1	A	136	ASP	1
1	A	160	TYR	1
1	A	88	ILE	1
1	A	200	ILE	1
1	A	192	VAL	1
1	A	66	VAL	1
1	A	167	ILE	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided