



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 02:07 PM UTC

PDB ID : 1AEL / pdb_00001ael
Title : NMR STRUCTURE OF APO INTESTINAL FATTY ACID-BINDING PROTEIN, 20 STRUCTURES
Authors : Hodsdon, M.E.; Cistola, D.P.
Deposited on : 1996-07-30

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

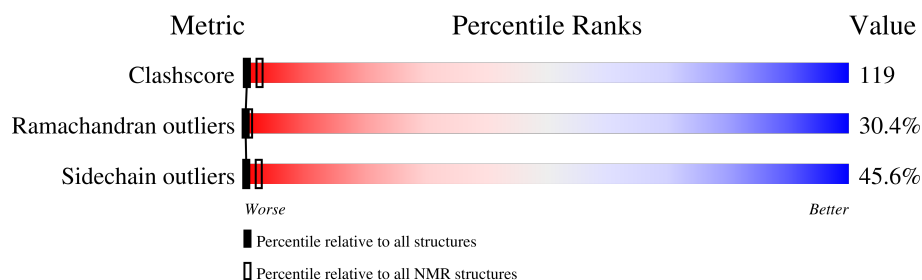
1 Overall quality at a glance

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	131	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 7 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:1-A:27, A:37-A:131 (122)	0.86	7

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 3 clusters and 8 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2114 atoms, of which 1057 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called FATTY ACID-BINDING PROTEIN.

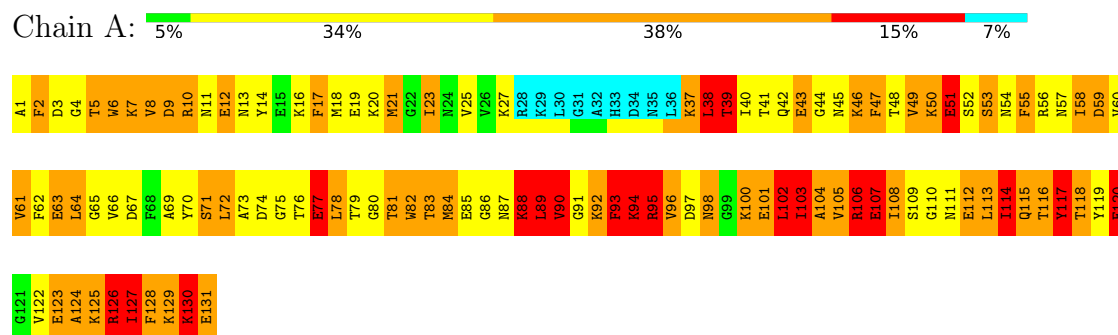
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	131	Total	C	H	N	O	S	0
			2114	670	1057	180	204	3	

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: FATTY ACID-BINDING PROTEIN

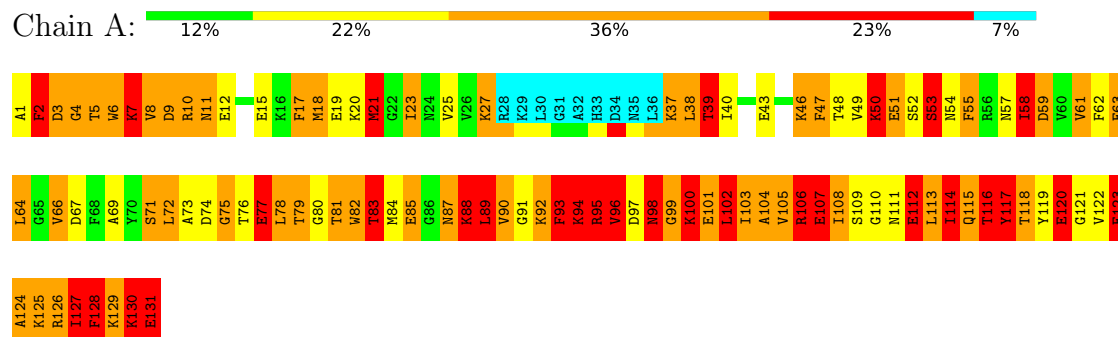


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

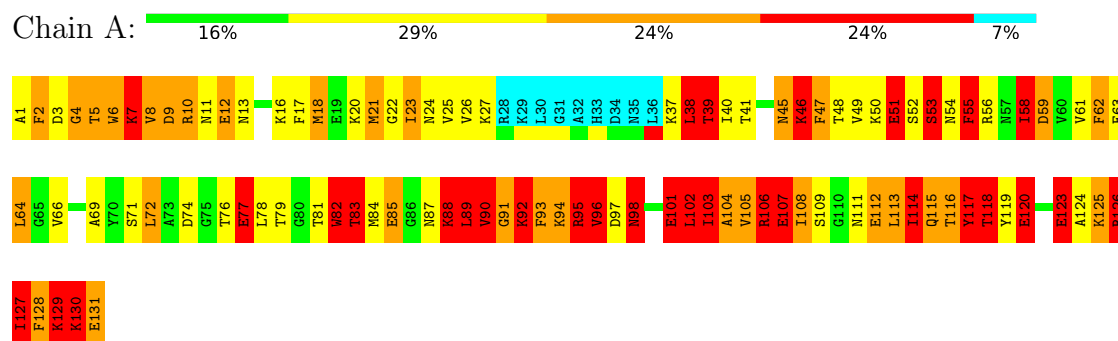
4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: FATTY ACID-BINDING PROTEIN



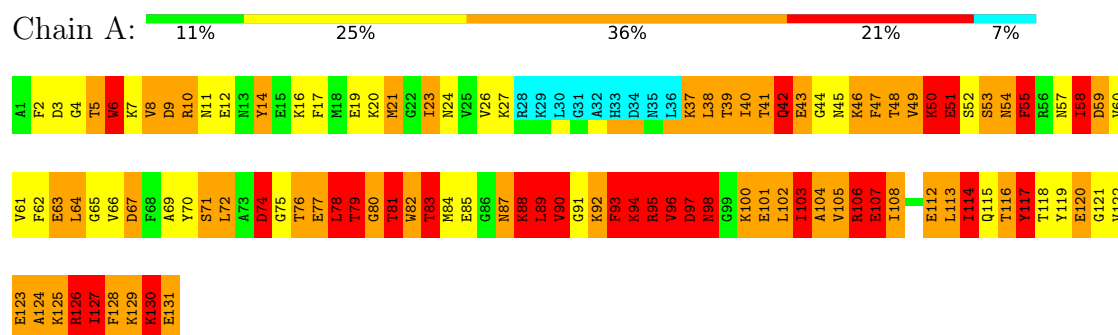
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: FATTY ACID-BINDING PROTEIN



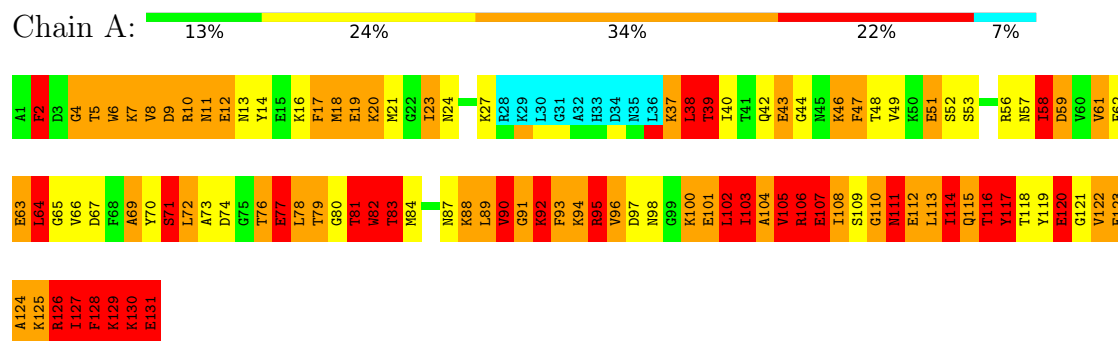
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: FATTY ACID-BINDING PROTEIN



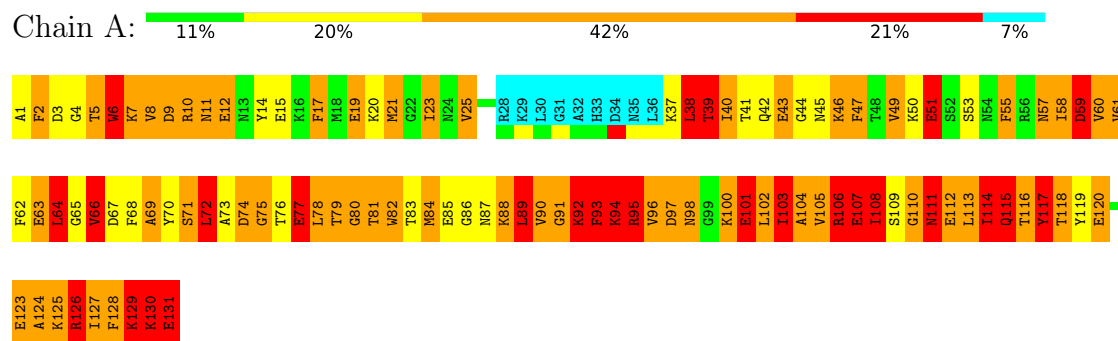
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: FATTY ACID-BINDING PROTEIN



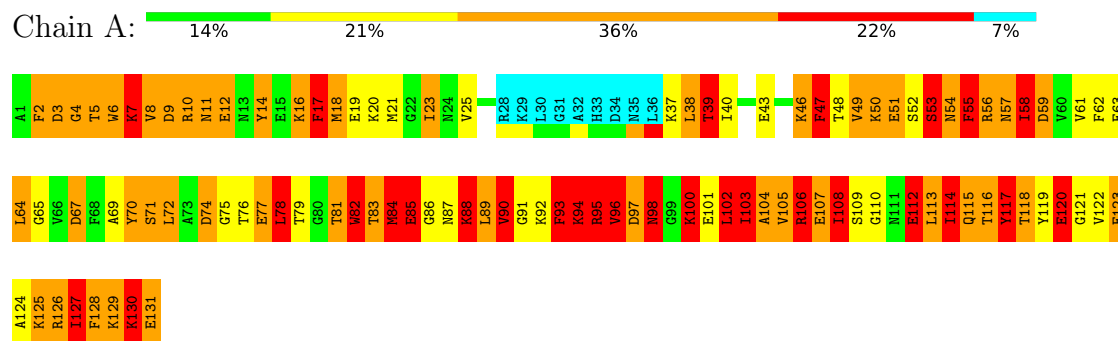
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: FATTY ACID-BINDING PROTEIN



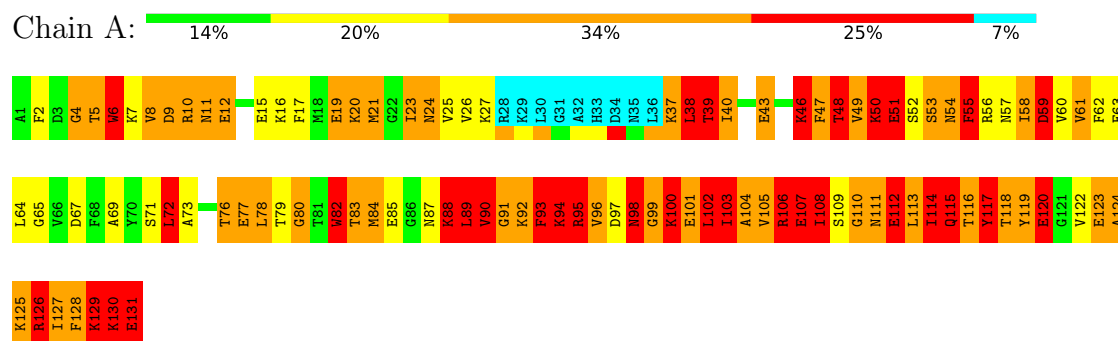
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: FATTY ACID-BINDING PROTEIN



4.2.7 Score per residue for model 7 (medoid)

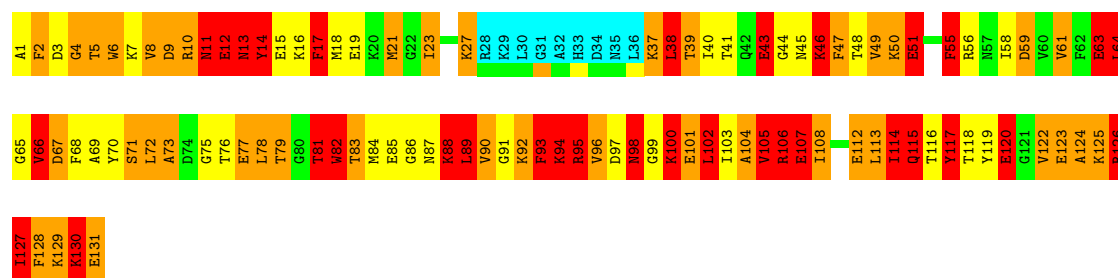
- Molecule 1: FATTY ACID-BINDING PROTEIN



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: FATTY ACID-BINDING PROTEIN

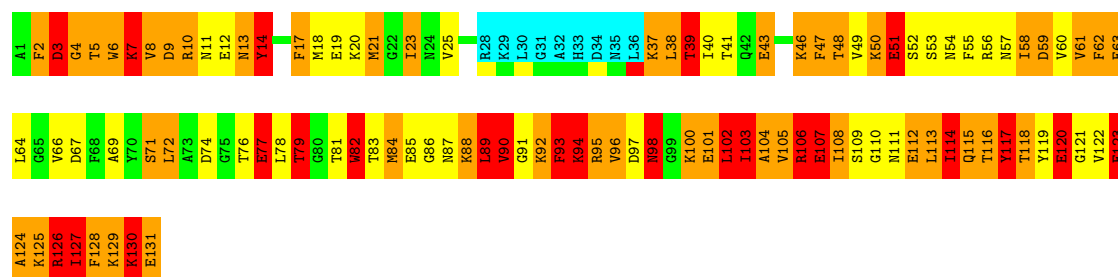




4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: FATTY ACID-BINDING PROTEIN

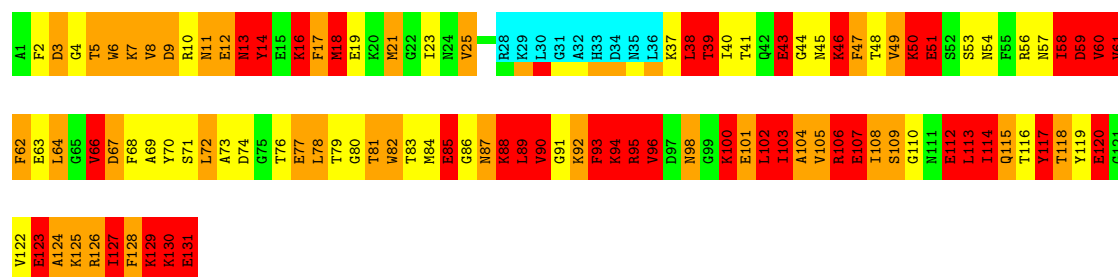
Chain A: 13% 27% 34% 18% 7%



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: FATTY ACID-BINDING PROTEIN

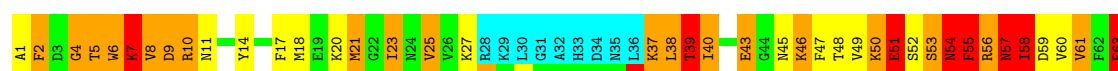
Chain A: 12% 25% 27% 29% 7%

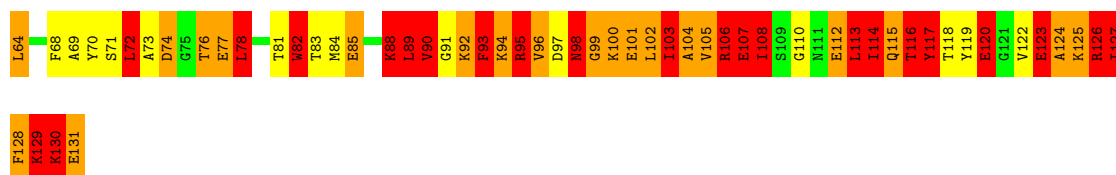


4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: FATTY ACID-BINDING PROTEIN

Chain A: 18% 21% 30% 24% 7%

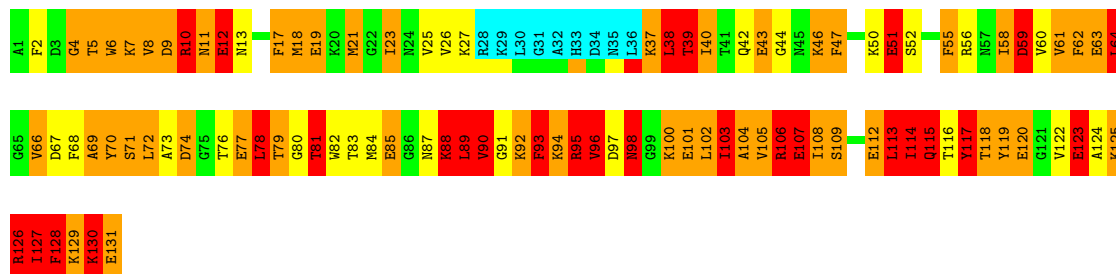




4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: FATTY ACID-BINDING PROTEIN

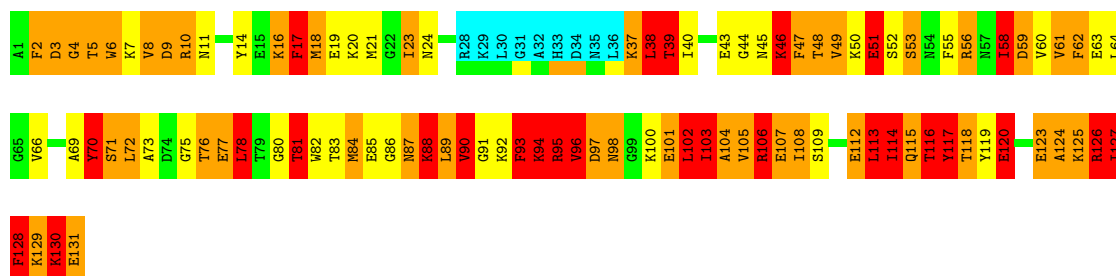
Chain A: 17% 19% 36% 21% 7%



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: FATTY ACID-BINDING PROTEIN

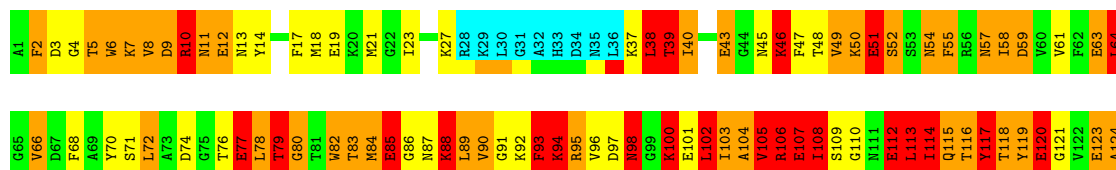
Chain A: 17% 24% 32% 21% 7%



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: FATTY ACID-BINDING PROTEIN

Chain A: 18% 23% 31% 21% 7%



K125
R126
I127
F128
K129
K130
E131

4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: FATTY ACID-BINDING PROTEIN

Chain A: 17% 27% 30% 19% 7%

A1 F2 D3 G4 T5 W6 K7 V8 D9 R10 N11 N12 E13 Y14 E15 K16 F17 M18 N21 G22 I23 K27 R28 K29 L30 G31 A32 H33 D34 N35 L36 K37 L38 T39 I40 T41 Q42 E43 G44 N45 K46 F47 T48 V49 K50 E51 E52 S53 N54 F55 R56 N57 I58 D59 V60 V61 F62 E63

L64 G65 V66 A69 Y70 S71 L72 T76 E77 L78 T79 G80 T81 W82 K83 M84 F85 G86 K87 K88 L89 V90 G91 K92 F93 K94 R95 A96 D97 N98 G99 K100 E101 L102 I103 T104 A105 V106 E107 I108 S109 E112 L113 I114 Q115 E116 T116 Y117 T118 Y119 E120 G121 V122 E123 A124 K125 R126 I127

F128
K129
K130
E131

4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: FATTY ACID-BINDING PROTEIN

Chain A: 10% 27% 32% 24% 7%

A1 F2 D3 G4 T5 W6 K7 V8 D9 R10 N11 N12 E13 Y14 E15 K16 F17 M18 N19 E20 K21 G22 I23 K27 R28 K29 L30 G31 A32 H33 D34 N35 L36 K37 L38 T39 I40 T41 Q42 E43 G44 N45 K46 F47 T48 V49 K50 E51 E52 S53 N54 F55 R56 N57 I58 D59 V60 V61 F62

E63 L64 G65 V66 D67 F68 A69 Y70 S71 L72 T76 E77 L78 T79 G80 T81 W82 K83 M84 F85 G86 K87 K88 L89 V90 G91 K92 F93 K94 R95 A96 D97 N98 G99 K100 E101 L102 I103 T104 A105 V106 E107 I108 S109 E112 L113 I114 Q115 E116 T116 Y117 T118 Y119 E120 G121 V122

E123
A124
K125
R126
I127
F128
K129
K130
E131

4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: FATTY ACID-BINDING PROTEIN

Chain A: 14% 30% 28% 21% 7%

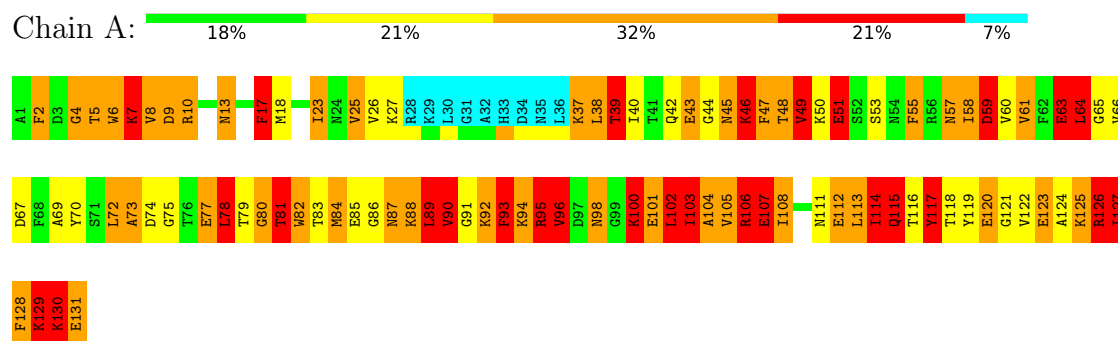
A1 F2 D3 G4 T5 W6 K7 V8 D9 R10 N11 N12 E13 Y14 E15 K16 F17 M18 N19 E20 K21 G22 I23 K27 R28 K29 L30 G31 A32 H33 D34 N35 L36 K37 L38 T39 I40 T41 Q42 E43 G44 N45 K46 F47 T48 V49 K50 E51 E52 S53 N54 F55 R56 N57 I58 D59 V60 V61 F62

E63 L64 G65 V66 D67 F68 S71 L72 T76 E77 L78 T79 G80 T81 W82 K83 M84 F85 G86 K87 K88 L89 V90 G91 K92 F93 K94 R95 A96 D97 N98 G99 K100 E101 L102 I103 T104 A105 V106 E107 I108 S109 E112 L113 I114 Q115 E116 T116 Y117 T118 Y119 E120 G121 V122 A124

K125
R126
I127
F128
K129
K130
E131

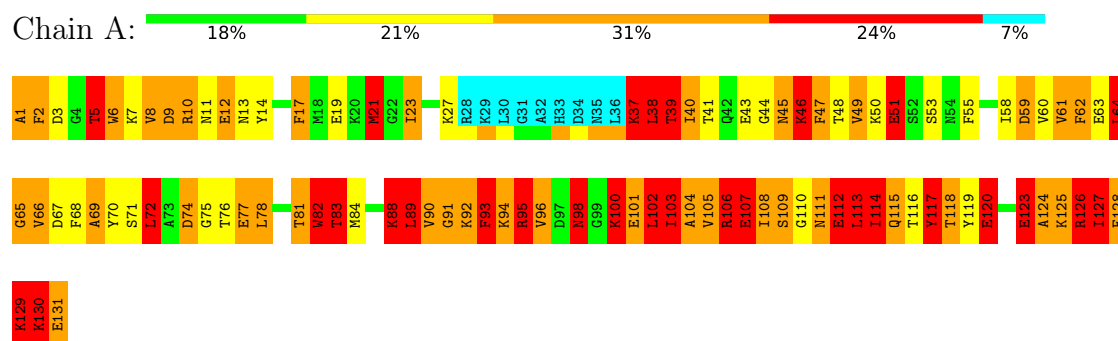
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: FATTY ACID-BINDING PROTEIN



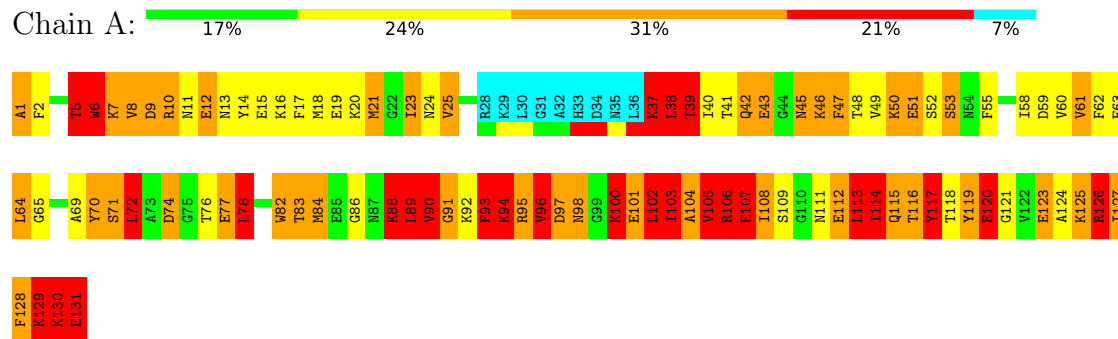
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: FATTY ACID-BINDING PROTEIN



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: FATTY ACID-BINDING PROTEIN



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *SIMULATED ANNEALING REFINEMENT*.

Of the 21 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *FINAL PENALTY FUNCTION VALUES LESS THAN 10.0*.

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

Software name	Classification	Version
Tinker	refinement	
Tinker	structure solution	

No chemical shift data was provided.

6 Model quality i

6.1 Standard geometry i

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.48±0.02	4±1/1001 (0.3± 0.1%)	2.47±0.05	64±7/1340 (4.7± 0.5%)
All	All	1.48	70/20020 (0.3%)	2.47	1271/26800 (4.7%)

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	0.1±0.2
All	All	0	1

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	131	GLU	C-OXT	16.64	1.56	1.23	18	20
1	A	55	PHE	CA-C	-10.80	1.47	1.52	9	2
1	A	84	MET	N-CA	-6.83	1.37	1.45	6	1
1	A	51	GLU	CD-OE2	6.81	1.38	1.25	20	11
1	A	95	ARG	C-N	-6.65	1.27	1.33	4	3
1	A	51	GLU	CD-OE1	6.58	1.37	1.25	15	9
1	A	85	GLU	CA-C	-6.30	1.44	1.52	6	2
1	A	128	PHE	N-CA	-6.25	1.38	1.46	1	19
1	A	84	MET	CA-C	-5.85	1.45	1.52	6	1
1	A	127	ILE	CA-C	-5.07	1.46	1.52	12	1
1	A	109	SER	CA-C	-5.04	1.48	1.53	15	1

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	84	MET	N-CA-C	14.54	131.17	109.07	6	1
1	A	38	LEU	N-CA-C	-12.24	97.98	111.07	16	20
1	A	38	LEU	O-C-N	11.14	133.93	122.12	6	20
1	A	88	LYS	O-C-N	10.10	133.46	123.46	6	12
1	A	6	TRP	N-CA-CB	-9.77	95.71	111.24	16	20
1	A	93	PHE	CA-CB-CG	-9.69	104.11	113.80	8	4
1	A	128	PHE	O-C-N	9.65	135.43	122.59	14	19
1	A	93	PHE	O-C-N	9.61	135.38	122.59	16	18
1	A	129	LYS	O-C-N	9.27	133.28	122.25	10	18
1	A	95	ARG	NE-CZ-NH2	9.21	127.49	119.20	2	5
1	A	100	LYS	O-C-N	9.07	133.04	121.79	17	8
1	A	5	THR	O-C-N	9.03	132.75	123.26	9	20
1	A	117	TYR	CA-CB-CG	8.96	130.02	113.90	11	19
1	A	6	TRP	CA-C-O	-8.89	111.20	121.06	12	18
1	A	106	ARG	O-C-N	8.88	134.39	122.59	16	20
1	A	129	LYS	N-CA-CB	8.84	123.65	110.65	13	19
1	A	94	LYS	CA-CB-CG	-8.77	96.56	114.10	6	20
1	A	93	PHE	N-CA-CB	-8.61	95.94	110.49	8	15
1	A	13	ASN	OD1-CG-ND2	8.51	131.10	122.60	8	1
1	A	131	GLU	CB-CA-C	8.48	126.22	110.10	20	20
1	A	5	THR	CA-CB-OG1	-8.46	96.92	109.60	9	20
1	A	14	TYR	N-CA-CB	-8.44	96.24	110.49	8	2
1	A	120	GLU	N-CA-CB	-8.43	99.10	111.91	12	6
1	A	106	ARG	N-CA-C	-8.39	102.30	112.54	19	10
1	A	4	GLY	O-C-N	8.35	131.28	123.35	4	15
1	A	101	GLU	O-C-N	8.15	132.87	122.28	8	15
1	A	83	THR	CB-CA-C	-8.02	100.91	111.42	6	1
1	A	82	TRP	N-CA-CB	7.93	121.81	109.83	6	11
1	A	131	GLU	CA-CB-CG	7.91	129.93	114.10	18	20
1	A	113	LEU	N-CA-C	-7.88	94.01	110.80	14	2
1	A	6	TRP	O-C-N	7.88	130.50	123.41	19	4
1	A	13	ASN	N-CA-C	-7.81	94.16	110.80	10	1
1	A	87	ASN	CA-CB-CG	-7.69	104.91	112.60	10	11
1	A	102	LEU	O-C-N	7.65	131.45	122.20	8	20
1	A	102	LEU	N-CA-C	-7.61	98.81	111.37	5	12
1	A	63	GLU	N-CA-C	-7.58	102.54	112.24	11	2
1	A	96	VAL	N-CA-C	-7.57	105.77	111.90	18	6
1	A	88	LYS	CB-CA-C	-7.56	97.56	109.72	5	19
1	A	101	GLU	N-CA-C	7.54	119.86	109.54	18	3
1	A	68	PHE	O-C-N	7.52	129.08	120.58	11	1
1	A	86	GLY	N-CA-C	-7.51	104.37	113.99	16	11
1	A	112	GLU	O-C-N	7.50	132.56	122.59	14	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	79	THR	N-CA-CB	7.48	121.35	110.58	17	6
1	A	14	TYR	N-CA-C	7.44	119.08	110.97	15	8
1	A	76	THR	O-C-N	7.42	130.80	123.46	17	1
1	A	95	ARG	NH1-CZ-NH2	7.38	128.89	119.30	7	5
1	A	112	GLU	CB-CG-CD	7.33	125.06	112.60	7	6
1	A	112	GLU	N-CA-CB	-7.30	100.18	111.35	5	4
1	A	59	ASP	CA-CB-CG	7.25	119.85	112.60	16	10
1	A	114	ILE	CA-CB-CG1	7.24	122.71	110.40	18	9
1	A	100	LYS	CA-C-O	-7.24	113.81	121.98	16	6
1	A	38	LEU	CB-CA-C	-7.23	99.25	110.81	1	20
1	A	53	SER	O-C-N	7.16	132.11	122.59	6	3
1	A	55	PHE	CA-C-O	-7.15	115.69	119.77	9	1
1	A	108	ILE	CA-CB-CG1	-7.14	98.27	110.40	6	4
1	A	124	ALA	CA-C-O	7.13	127.93	120.30	19	11
1	A	4	GLY	CA-C-O	-7.13	115.79	122.13	4	1
1	A	91	GLY	O-C-N	7.12	129.52	122.19	4	4
1	A	10	ARG	N-CA-CB	-7.09	98.50	110.49	12	1
1	A	52	SER	N-CA-C	-7.09	101.84	111.55	20	3
1	A	123	GLU	CB-CA-C	-7.06	99.26	109.84	16	12
1	A	126	ARG	N-CA-CB	7.05	122.40	110.49	15	12
1	A	17	PHE	CA-C-O	7.04	128.01	119.49	8	7
1	A	96	VAL	O-C-N	7.02	129.37	122.07	16	6
1	A	81	THR	CA-C-O	7.00	129.92	120.47	8	4
1	A	128	PHE	CA-CB-CG	-6.97	106.83	113.80	16	1
1	A	115	GLN	CB-CG-CD	-6.97	100.75	112.60	6	5
1	A	9	ASP	CA-CB-CG	6.96	119.56	112.60	12	20
1	A	90	VAL	CA-C-O	-6.95	112.10	120.78	20	2
1	A	16	LYS	CA-C-N	6.94	129.89	120.38	2	6
1	A	16	LYS	C-N-CA	6.94	129.89	120.38	2	6
1	A	80	GLY	O-C-N	6.90	131.67	122.70	18	5
1	A	123	GLU	CG-CD-OE2	6.88	134.21	118.40	16	12
1	A	72	LEU	CA-C-O	6.87	128.92	121.02	17	3
1	A	102	LEU	CA-C-O	-6.86	112.99	121.02	8	4
1	A	47	PHE	CA-C-O	6.85	128.49	120.14	16	3
1	A	82	TRP	CB-CA-C	-6.83	100.26	110.24	5	6
1	A	24	ASN	N-CA-C	6.82	119.11	110.24	17	1
1	A	112	GLU	N-CA-C	6.82	116.87	107.73	5	2
1	A	127	ILE	CA-C-O	6.80	129.28	120.78	12	1
1	A	13	ASN	CA-C-O	-6.78	110.81	120.51	10	1
1	A	112	GLU	CB-CA-C	-6.78	98.01	112.78	4	5
1	A	19	GLU	CB-CA-C	-6.76	100.00	110.81	20	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	114	ILE	CA-C-O	-6.75	112.34	120.78	18	9
1	A	98	ASN	N-CA-C	6.72	125.11	110.80	1	7
1	A	91	GLY	N-CA-C	-6.69	104.38	113.27	4	2
1	A	127	ILE	O-C-N	6.67	130.91	122.57	10	4
1	A	89	LEU	N-CA-C	-6.66	101.74	110.33	5	2
1	A	43	GLU	CB-CG-CD	-6.62	101.34	112.60	9	7
1	A	109	SER	CA-C-O	6.62	126.77	120.09	15	3
1	A	123	GLU	O-C-N	6.61	131.38	122.59	10	3
1	A	94	LYS	O-C-N	6.59	131.35	122.59	1	14
1	A	127	ILE	CA-C-N	6.54	131.77	122.09	16	13
1	A	127	ILE	C-N-CA	6.54	131.77	122.09	16	13
1	A	78	LEU	CB-CA-C	-6.54	103.32	111.43	18	2
1	A	6	TRP	CE2-CD2-CG	6.50	115.00	107.20	16	1
1	A	56	ARG	NE-CZ-NH2	6.50	125.05	119.20	2	2
1	A	60	VAL	O-C-N	6.49	130.68	122.57	10	2
1	A	120	GLU	CA-C-O	6.47	126.71	119.78	18	13
1	A	98	ASN	N-CA-CB	-6.44	99.60	110.49	7	1
1	A	98	ASN	CA-CB-CG	6.42	119.02	112.60	12	13
1	A	79	THR	CA-C-O	6.40	128.41	120.15	16	2
1	A	55	PHE	CB-CA-C	-6.40	100.63	111.26	13	9
1	A	95	ARG	CA-C-O	-6.39	111.37	120.51	5	2
1	A	58	ILE	CB-CA-C	-6.39	104.65	110.91	19	1
1	A	77	GLU	CB-CA-C	-6.39	99.70	110.43	9	6
1	A	115	GLN	OE1-CD-NE2	6.38	128.98	122.60	1	3
1	A	85	GLU	CA-C-O	6.35	129.59	120.51	6	1
1	A	56	ARG	O-C-N	6.34	131.03	122.59	6	7
1	A	6	TRP	CB-CG-CD2	6.32	135.65	126.80	16	5
1	A	82	TRP	CE2-CD2-CE3	-6.32	112.48	118.80	9	3
1	A	93	PHE	CB-CA-C	-6.30	97.89	110.42	16	15
1	A	93	PHE	CA-C-N	6.26	133.50	121.54	5	18
1	A	93	PHE	C-N-CA	6.26	133.50	121.54	5	18
1	A	43	GLU	CA-C-O	-6.26	114.45	121.40	10	1
1	A	49	VAL	N-CA-C	-6.26	100.91	109.55	16	8
1	A	114	ILE	O-C-N	6.25	130.38	122.57	12	3
1	A	38	LEU	CA-C-O	-6.24	113.94	120.55	6	15
1	A	5	THR	N-CA-CB	6.23	118.77	110.29	15	4
1	A	50	LYS	O-C-N	6.23	130.87	122.59	1	5
1	A	114	ILE	CB-CA-C	-6.22	101.08	111.29	5	5
1	A	107	GLU	N-CA-CB	-6.21	100.00	110.49	8	5
1	A	117	TYR	CB-CA-C	-6.19	100.87	110.78	6	12
1	A	131	GLU	N-CA-CB	-6.18	99.98	110.50	16	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	47	PHE	N-CA-CB	6.18	120.54	110.90	1	2
1	A	126	ARG	O-C-N	6.17	130.80	122.59	7	8
1	A	11	ASN	CA-CB-CG	6.16	118.76	112.60	10	2
1	A	18	MET	O-C-N	6.16	129.25	122.11	6	8
1	A	87	ASN	N-CA-CB	6.15	119.54	110.56	17	6
1	A	77	GLU	CA-C-O	6.12	129.27	120.51	17	1
1	A	106	ARG	NE-CZ-NH2	-6.11	113.70	119.20	10	1
1	A	3	ASP	CA-CB-CG	-6.11	106.49	112.60	19	3
1	A	25	VAL	N-CA-C	6.10	120.58	112.04	10	8
1	A	113	LEU	N-CA-CB	6.09	120.78	110.49	19	4
1	A	115	GLN	N-CA-CB	-6.09	100.20	110.49	8	5
1	A	97	ASP	CA-CB-CG	6.03	118.63	112.60	14	3
1	A	105	VAL	CA-C-O	-6.03	113.24	120.78	20	4
1	A	41	THR	O-C-N	6.02	128.88	122.38	3	1
1	A	40	ILE	N-CA-C	6.01	116.73	107.78	7	7
1	A	6	TRP	CB-CA-C	-5.99	100.35	109.99	16	2
1	A	95	ARG	CB-CA-C	-5.96	98.57	110.42	7	4
1	A	10	ARG	NE-CZ-NH2	5.95	124.56	119.20	14	1
1	A	74	ASP	N-CA-CB	5.92	119.88	110.65	2	6
1	A	103	ILE	CA-C-O	-5.92	113.38	120.78	16	7
1	A	117	TYR	CB-CG-CD1	5.91	129.67	120.80	6	4
1	A	111	ASN	N-CA-C	-5.90	101.54	110.28	19	1
1	A	1	ALA	N-CA-CB	-5.90	101.55	110.40	11	3
1	A	100	LYS	N-CA-C	5.89	118.13	110.53	18	2
1	A	37	LYS	CA-C-O	-5.88	114.81	120.92	13	1
1	A	93	PHE	CB-CG-CD2	5.87	130.67	120.70	9	5
1	A	43	GLU	N-CA-C	-5.84	101.55	110.14	7	5
1	A	55	PHE	N-CA-C	5.84	117.41	108.30	9	1
1	A	3	ASP	CA-C-N	-5.82	113.00	121.44	15	1
1	A	3	ASP	C-N-CA	-5.82	113.00	121.44	15	1
1	A	113	LEU	O-C-N	5.82	130.32	122.59	10	3
1	A	124	ALA	O-C-N	5.82	129.97	123.05	10	1
1	A	57	ASN	CA-CB-CG	-5.81	106.79	112.60	15	1
1	A	7	LYS	CB-CG-CD	5.80	124.65	111.30	6	7
1	A	127	ILE	N-CA-C	5.79	121.39	109.34	12	1
1	A	115	GLN	O-C-N	5.78	130.28	122.59	15	6
1	A	96	VAL	CA-C-O	-5.78	115.08	120.34	19	4
1	A	90	VAL	O-C-N	5.73	129.73	122.57	12	3
1	A	3	ASP	CA-C-O	-5.72	114.94	121.40	10	3
1	A	95	ARG	O-C-N	5.70	130.17	122.59	13	3
1	A	55	PHE	CA-CB-CG	-5.69	108.11	113.80	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	107	GLU	O-C-N	5.68	130.15	122.59	11	4
1	A	128	PHE	CB-CA-C	-5.68	99.11	110.42	4	3
1	A	70	TYR	O-C-N	5.68	128.85	122.32	20	3
1	A	88	LYS	CA-C-O	-5.67	114.86	121.10	6	1
1	A	103	ILE	O-C-N	5.67	129.66	122.57	18	2
1	A	64	LEU	O-C-N	5.67	130.13	122.59	12	1
1	A	12	GLU	CA-C-O	-5.67	114.48	121.11	8	2
1	A	10	ARG	NE-CZ-NH1	-5.66	115.84	121.50	12	1
1	A	9	ASP	O-C-N	5.66	128.62	122.11	7	5
1	A	67	ASP	N-CA-C	5.65	118.84	110.48	9	2
1	A	116	THR	CA-C-N	-5.65	115.50	122.84	11	3
1	A	116	THR	C-N-CA	-5.65	115.50	122.84	11	3
1	A	120	GLU	CG-CD-OE2	5.62	131.33	118.40	12	2
1	A	120	GLU	N-CA-C	5.62	119.39	111.52	12	1
1	A	70	TYR	CA-C-O	-5.61	114.64	120.70	13	1
1	A	21	MET	O-C-N	5.60	130.37	122.41	1	2
1	A	82	TRP	O-C-N	5.59	130.02	122.59	19	1
1	A	107	GLU	CB-CG-CD	5.58	122.09	112.60	17	3
1	A	111	ASN	N-CA-CB	5.58	117.49	110.45	17	3
1	A	61	VAL	CA-C-O	-5.58	113.80	120.78	11	2
1	A	37	LYS	O-C-N	5.58	128.63	123.50	11	1
1	A	97	ASP	CA-C-O	5.57	126.23	119.49	6	1
1	A	83	THR	N-CA-CB	5.55	119.88	110.49	19	3
1	A	106	ARG	CB-CA-C	-5.52	102.07	111.02	7	2
1	A	48	THR	N-CA-C	-5.51	98.94	108.52	19	5
1	A	107	GLU	CA-C-O	5.49	128.37	120.51	4	3
1	A	82	TRP	N-CA-C	-5.49	101.52	109.59	8	6
1	A	1	ALA	CA-C-O	-5.49	111.47	120.80	19	3
1	A	20	LYS	CA-C-O	5.47	126.11	119.49	17	1
1	A	2	PHE	O-C-N	-5.46	115.33	122.59	9	1
1	A	48	THR	N-CA-CB	5.46	118.44	110.58	17	3
1	A	111	ASN	CA-C-O	-5.45	115.05	121.16	19	1
1	A	64	LEU	CB-CA-C	-5.44	109.83	117.23	8	1
1	A	129	LYS	CA-C-O	-5.42	113.39	119.95	12	2
1	A	130	LYS	CA-C-O	5.41	128.25	120.51	20	6
1	A	117	TYR	O-C-N	5.41	129.49	123.05	3	2
1	A	7	LYS	N-CA-C	5.40	116.25	107.23	16	1
1	A	120	GLU	CG-CD-OE1	5.38	130.77	118.40	14	1
1	A	58	ILE	O-C-N	5.37	129.28	122.57	1	4
1	A	50	LYS	CA-C-O	-5.36	112.84	120.51	10	3
1	A	87	ASN	CB-CA-C	5.36	119.85	110.64	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	6	TRP	CD1-CG-CD2	-5.36	97.73	106.30	16	1
1	A	8	VAL	CA-C-N	5.33	127.69	120.44	16	1
1	A	8	VAL	C-N-CA	5.33	127.69	120.44	16	1
1	A	112	GLU	CA-C-O	5.33	128.13	120.51	7	1
1	A	111	ASN	CA-CB-CG	5.33	117.93	112.60	18	1
1	A	39	THR	N-CA-C	-5.32	100.22	108.31	5	1
1	A	83	THR	N-CA-C	5.32	116.12	107.23	6	1
1	A	22	GLY	CA-C-O	5.30	124.25	118.95	2	1
1	A	3	ASP	N-CA-C	5.30	116.46	108.46	9	1
1	A	126	ARG	N-CA-C	-5.30	99.51	110.80	19	1
1	A	56	ARG	CB-CA-C	-5.30	103.86	111.91	16	1
1	A	122	VAL	CA-C-O	-5.30	116.20	120.70	1	1
1	A	47	PHE	CB-CA-C	-5.27	102.92	110.62	1	1
1	A	95	ARG	CD-NE-CZ	-5.24	117.06	124.40	17	1
1	A	49	VAL	CA-C-O	-5.23	114.83	121.48	10	3
1	A	62	PHE	CA-CB-CG	5.23	119.03	113.80	16	1
1	A	42	GLN	N-CA-CB	-5.22	101.98	110.59	20	1
1	A	107	GLU	CB-CA-C	-5.21	100.05	110.42	16	1
1	A	6	TRP	CG-CD2-CE3	5.21	139.11	133.90	3	1
1	A	118	THR	N-CA-CB	5.18	116.30	110.35	2	1
1	A	81	THR	CB-CA-C	-5.16	104.44	112.07	11	1
1	A	82	TRP	CA-CB-CG	5.14	123.36	113.60	6	1
1	A	90	VAL	CG1-CB-CG2	-5.10	99.58	110.80	6	1
1	A	79	THR	CA-CB-CG2	5.09	119.16	110.50	14	1
1	A	129	LYS	CB-CA-C	5.08	118.08	109.55	4	1
1	A	55	PHE	O-C-N	5.07	129.34	122.59	11	1
1	A	95	ARG	NE-CZ-NH1	5.05	126.55	121.50	3	1
1	A	11	ASN	O-C-N	5.05	129.44	123.33	8	1
1	A	57	ASN	N-CA-C	-5.05	102.17	109.59	14	1
1	A	42	GLN	CG-CD-NE2	-5.04	108.83	116.40	4	1
1	A	116	THR	CA-C-O	-5.04	116.42	122.27	17	1
1	A	67	ASP	CB-CA-C	5.04	117.76	109.90	5	2
1	A	18	MET	CA-C-O	5.04	126.09	120.80	8	1
1	A	120	GLU	CA-CB-CG	-5.03	104.04	114.10	12	1
1	A	100	LYS	CA-C-N	-5.01	115.30	122.67	10	1
1	A	100	LYS	C-N-CA	-5.01	115.30	122.67	10	1
1	A	16	LYS	CA-C-O	5.01	125.53	119.31	17	1
1	A	12	GLU	CB-CG-CD	5.00	121.10	112.60	10	1

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	14	TYR	Sidechain	1

6.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	986	983	983	234±21
All	All	19720	19660	19660	4672

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 119.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:TRP:CG	1:A:113:LEU:HD11	1.18	1.71	13	18
1:A:6:TRP:CD2	1:A:113:LEU:HD21	1.12	1.78	16	3
1:A:78:LEU:HD21	1:A:102:LEU:HD13	1.07	1.19	7	14
1:A:95:ARG:CZ	1:A:102:LEU:HD11	1.04	1.83	3	4
1:A:1:ALA:HB1	1:A:108:ILE:CG2	1.01	1.84	5	3
1:A:6:TRP:CZ2	1:A:108:ILE:HD11	1.01	1.91	5	19
1:A:90:VAL:HG12	1:A:103:ILE:HD12	1.00	1.24	19	13
1:A:5:THR:OG1	1:A:131:GLU:N	0.98	1.95	20	20
1:A:8:VAL:HG22	1:A:10:ARG:NH2	0.95	1.77	12	1
1:A:78:LEU:HD23	1:A:93:PHE:CD2	0.95	1.97	4	2
1:A:90:VAL:CG1	1:A:103:ILE:HD12	0.95	1.91	19	11
1:A:6:TRP:CG	1:A:113:LEU:HD21	0.95	1.97	16	4
1:A:6:TRP:HB3	1:A:113:LEU:HD11	0.94	1.38	7	10
1:A:78:LEU:CD2	1:A:102:LEU:HD13	0.94	1.93	7	8
1:A:17:PHE:CE2	1:A:102:LEU:HD23	0.94	1.97	16	4
1:A:7:LYS:HG3	1:A:129:LYS:C	0.93	1.89	16	19
1:A:21:MET:HE2	1:A:23:ILE:HD12	0.93	1.41	15	1
1:A:116:THR:HG23	1:A:123:GLU:CD	0.92	1.90	14	19
1:A:13:ASN:C	1:A:14:TYR:CD2	0.92	2.48	10	1
1:A:7:LYS:HG3	1:A:130:LYS:N	0.91	1.80	4	19
1:A:13:ASN:O	1:A:14:TYR:HB3	0.91	1.64	10	1
1:A:6:TRP:CB	1:A:113:LEU:HD11	0.90	1.95	3	16
1:A:6:TRP:CD1	1:A:40:ILE:HD12	0.90	2.02	19	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:LEU:O	1:A:105:VAL:HG13	0.89	1.65	6	10
1:A:105:VAL:CG2	1:A:116:THR:HB	0.89	1.97	16	2
1:A:78:LEU:HD23	1:A:93:PHE:CE2	0.89	2.02	4	2
1:A:6:TRP:CD2	1:A:113:LEU:HD11	0.89	2.02	15	16
1:A:6:TRP:CZ3	1:A:113:LEU:HD11	0.89	2.03	16	1
1:A:84:MET:CG	1:A:90:VAL:HG23	0.89	1.96	6	1
1:A:17:PHE:CE1	1:A:102:LEU:HD23	0.88	2.03	15	7
1:A:95:ARG:NH2	1:A:99:GLY:N	0.88	2.21	11	3
1:A:6:TRP:CE3	1:A:113:LEU:HD11	0.88	2.03	16	1
1:A:95:ARG:CD	1:A:102:LEU:HD11	0.88	1.98	12	2
1:A:89:LEU:HD13	1:A:106:ARG:HB2	0.88	1.44	12	3
1:A:90:VAL:HA	1:A:105:VAL:HG12	0.87	1.45	16	1
1:A:90:VAL:O	1:A:92:LYS:N	0.87	2.06	7	2
1:A:78:LEU:HD21	1:A:102:LEU:CD1	0.87	1.98	15	11
1:A:7:LYS:HD3	1:A:129:LYS:CB	0.86	2.01	6	10
1:A:117:TYR:HB2	1:A:124:ALA:HB3	0.85	1.46	8	1
1:A:84:MET:HB3	1:A:89:LEU:HD12	0.85	1.46	11	4
1:A:14:TYR:CZ	1:A:122:VAL:HG11	0.85	2.06	10	1
1:A:89:LEU:HD13	1:A:106:ARG:CB	0.85	2.01	2	3
1:A:2:PHE:HA	1:A:108:ILE:HD13	0.84	1.48	1	2
1:A:113:LEU:HD22	1:A:128:PHE:CB	0.84	2.01	16	1
1:A:21:MET:HE1	1:A:102:LEU:HD21	0.83	1.47	14	2
1:A:7:LYS:HB2	1:A:129:LYS:CB	0.83	2.03	10	20
1:A:21:MET:HE3	1:A:95:ARG:HG3	0.83	1.51	8	1
1:A:107:GLU:O	1:A:108:ILE:HG22	0.83	1.73	10	15
1:A:10:ARG:HD2	1:A:10:ARG:C	0.83	1.96	12	1
1:A:78:LEU:HD11	1:A:102:LEU:HD12	0.83	1.51	17	1
1:A:6:TRP:CE2	1:A:108:ILE:HD11	0.82	2.08	7	3
1:A:113:LEU:HD12	1:A:128:PHE:HB3	0.82	1.52	6	16
1:A:18:MET:HE2	1:A:72:LEU:HD21	0.82	1.48	4	1
1:A:95:ARG:NH2	1:A:102:LEU:HD11	0.81	1.88	17	1
1:A:21:MET:HE2	1:A:119:TYR:CD2	0.81	2.11	7	2
1:A:105:VAL:HG12	1:A:107:GLU:H	0.81	1.32	18	10
1:A:106:ARG:HG2	1:A:113:LEU:HD22	0.81	1.51	18	19
1:A:78:LEU:HD11	1:A:102:LEU:HD22	0.80	1.54	1	3
1:A:126:ARG:C	1:A:127:ILE:HD13	0.80	2.02	3	17
1:A:10:ARG:HG2	1:A:126:ARG:C	0.80	2.02	12	1
1:A:101:GLU:C	1:A:119:TYR:HA	0.80	2.02	1	20
1:A:113:LEU:HD22	1:A:128:PHE:HB2	0.80	1.53	16	1
1:A:72:LEU:C	1:A:72:LEU:HD22	0.80	2.02	4	5
1:A:93:PHE:CD2	1:A:101:GLU:N	0.80	2.50	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:114:ILE:O	1:A:116:THR:N	0.79	2.15	17	9
1:A:104:ALA:HB2	1:A:117:TYR:CD2	0.79	2.13	19	9
1:A:17:PHE:CZ	1:A:102:LEU:HD23	0.79	2.12	16	9
1:A:93:PHE:CE2	1:A:101:GLU:HG2	0.79	2.12	12	8
1:A:93:PHE:CD2	1:A:101:GLU:HA	0.79	2.13	18	16
1:A:64:LEU:HD12	1:A:83:THR:HG22	0.78	1.55	14	2
1:A:5:THR:HA	1:A:39:THR:HG23	0.78	1.56	19	20
1:A:7:LYS:O	1:A:9:ASP:N	0.78	2.15	16	2
1:A:5:THR:HG23	1:A:131:GLU:C	0.78	2.03	15	4
1:A:6:TRP:CG	1:A:113:LEU:CD1	0.78	2.67	10	6
1:A:7:LYS:HD3	1:A:129:LYS:C	0.78	2.04	9	10
1:A:105:VAL:HG12	1:A:107:GLU:N	0.77	1.94	20	9
1:A:95:ARG:NH1	1:A:102:LEU:HD11	0.77	1.93	3	2
1:A:14:TYR:OH	1:A:122:VAL:HG11	0.77	1.80	10	1
1:A:113:LEU:HD12	1:A:128:PHE:CB	0.77	2.10	1	10
1:A:2:PHE:CZ	1:A:89:LEU:HD12	0.77	2.15	2	1
1:A:112:GLU:HB3	1:A:114:ILE:HD13	0.77	1.57	6	1
1:A:89:LEU:C	1:A:105:VAL:HG13	0.77	2.04	8	9
1:A:116:THR:HG22	1:A:116:THR:O	0.77	1.78	12	19
1:A:5:THR:OG1	1:A:131:GLU:C	0.76	2.28	2	16
1:A:48:THR:HA	1:A:61:VAL:HG13	0.76	1.57	7	6
1:A:95:ARG:HH12	1:A:98:ASN:N	0.76	1.79	7	3
1:A:105:VAL:HG22	1:A:116:THR:HB	0.76	1.55	7	3
1:A:13:ASN:O	1:A:14:TYR:CB	0.76	2.31	10	1
1:A:7:LYS:CB	1:A:129:LYS:HB2	0.76	2.10	13	9
1:A:76:THR:HG21	1:A:97:ASP:CB	0.76	2.10	5	4
1:A:13:ASN:HB3	1:A:124:ALA:HB2	0.76	1.58	8	1
1:A:106:ARG:O	1:A:108:ILE:N	0.75	2.18	5	19
1:A:130:LYS:HG2	1:A:131:GLU:N	0.75	1.94	14	20
1:A:64:LEU:HB3	1:A:83:THR:HG22	0.75	1.57	19	6
1:A:38:LEU:HD13	1:A:106:ARG:CZ	0.75	2.12	6	1
1:A:76:THR:HG21	1:A:97:ASP:HB2	0.75	1.59	5	5
1:A:85:GLU:N	1:A:88:LYS:O	0.75	2.20	6	5
1:A:102:LEU:O	1:A:117:TYR:CA	0.75	2.35	8	15
1:A:46:LYS:HG3	1:A:61:VAL:HG12	0.75	1.59	7	4
1:A:84:MET:CB	1:A:89:LEU:HA	0.75	2.11	16	20
1:A:92:LYS:HA	1:A:103:ILE:HD13	0.75	1.56	13	13
1:A:105:VAL:HG13	1:A:116:THR:HB	0.75	1.59	12	6
1:A:116:THR:HG23	1:A:123:GLU:OE2	0.75	1.82	8	5
1:A:7:LYS:CD	1:A:129:LYS:C	0.75	2.60	14	17
1:A:7:LYS:CD	1:A:129:LYS:HB2	0.75	2.10	3	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:105:VAL:HG23	1:A:106:ARG:N	0.75	1.97	5	2
1:A:89:LEU:HD22	1:A:106:ARG:HB2	0.74	1.59	5	1
1:A:6:TRP:CE3	1:A:113:LEU:HD21	0.74	2.17	16	1
1:A:112:GLU:CD	1:A:112:GLU:N	0.74	2.45	7	4
1:A:103:ILE:HG22	1:A:103:ILE:O	0.74	1.80	8	3
1:A:95:ARG:NE	1:A:102:LEU:HD11	0.74	1.96	15	5
1:A:8:VAL:HG13	1:A:115:GLN:NE2	0.74	1.97	16	1
1:A:109:SER:N	1:A:112:GLU:HG3	0.74	1.97	4	3
1:A:38:LEU:HD12	1:A:40:ILE:CG1	0.74	2.13	3	3
1:A:90:VAL:HG12	1:A:103:ILE:CD1	0.74	2.11	11	8
1:A:105:VAL:HG21	1:A:116:THR:HB	0.74	1.59	5	1
1:A:116:THR:HG23	1:A:123:GLU:OE1	0.73	1.83	3	9
1:A:69:ALA:HB1	1:A:77:GLU:HG2	0.73	1.59	9	1
1:A:7:LYS:HB2	1:A:129:LYS:CA	0.73	2.14	12	20
1:A:7:LYS:O	1:A:129:LYS:N	0.73	2.22	12	2
1:A:115:GLN:HG2	1:A:128:PHE:CE1	0.73	2.17	16	1
1:A:93:PHE:CE2	1:A:101:GLU:C	0.73	2.67	20	3
1:A:93:PHE:CE2	1:A:101:GLU:HB3	0.73	2.18	14	12
1:A:102:LEU:O	1:A:118:THR:N	0.73	2.22	17	19
1:A:89:LEU:HD23	1:A:106:ARG:HB2	0.73	1.60	18	4
1:A:6:TRP:HB3	1:A:113:LEU:CD1	0.73	2.13	4	16
1:A:92:LYS:C	1:A:93:PHE:CD2	0.72	2.66	15	4
1:A:93:PHE:C	1:A:93:PHE:CD1	0.72	2.67	8	14
1:A:48:THR:CA	1:A:61:VAL:HG13	0.72	2.14	18	5
1:A:10:ARG:HG2	1:A:126:ARG:CB	0.72	2.13	12	1
1:A:93:PHE:CE1	1:A:101:GLU:HG2	0.72	2.19	5	12
1:A:113:LEU:C	1:A:114:ILE:HG12	0.72	2.10	17	6
1:A:84:MET:HB3	1:A:89:LEU:HD23	0.72	1.61	8	4
1:A:38:LEU:HD12	1:A:40:ILE:HG13	0.72	1.61	3	1
1:A:69:ALA:HB1	1:A:77:GLU:CD	0.72	2.10	1	2
1:A:103:ILE:O	1:A:105:VAL:N	0.72	2.22	10	20
1:A:14:TYR:CD1	1:A:16:LYS:CB	0.71	2.73	10	1
1:A:72:LEU:HD22	1:A:72:LEU:O	0.71	1.84	18	6
1:A:89:LEU:HD13	1:A:106:ARG:HB3	0.71	1.62	2	1
1:A:78:LEU:HD11	1:A:102:LEU:HD13	0.71	1.61	3	6
1:A:7:LYS:HB2	1:A:129:LYS:N	0.71	2.00	1	19
1:A:78:LEU:CG	1:A:102:LEU:HD13	0.71	2.15	11	7
1:A:17:PHE:CD1	1:A:17:PHE:C	0.71	2.69	10	7
1:A:72:LEU:HD13	1:A:73:ALA:N	0.71	2.01	18	3
1:A:95:ARG:N	1:A:95:ARG:NE	0.71	2.39	7	3
1:A:108:ILE:HD12	1:A:113:LEU:HD23	0.71	1.62	19	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:LYS:CD	1:A:129:LYS:HB3	0.71	2.15	4	5
1:A:46:LYS:CG	1:A:47:PHE:N	0.71	2.53	14	19
1:A:17:PHE:O	1:A:21:MET:HE3	0.71	1.86	4	1
1:A:8:VAL:HG13	1:A:115:GLN:OE1	0.71	1.84	15	1
1:A:77:GLU:HB2	1:A:95:ARG:O	0.71	1.86	7	2
1:A:79:THR:HG22	1:A:94:LYS:O	0.70	1.86	7	4
1:A:21:MET:C	1:A:21:MET:HE3	0.70	2.10	15	1
1:A:5:THR:CB	1:A:131:GLU:C	0.70	2.65	5	10
1:A:38:LEU:HD21	1:A:106:ARG:NH1	0.70	2.01	16	5
1:A:17:PHE:CD1	1:A:102:LEU:HD21	0.70	2.22	8	1
1:A:82:TRP:O	1:A:83:THR:HG23	0.70	1.87	4	3
1:A:93:PHE:CG	1:A:94:LYS:N	0.70	2.48	5	1
1:A:93:PHE:CZ	1:A:101:GLU:CG	0.70	2.75	5	5
1:A:93:PHE:CE2	1:A:101:GLU:CG	0.70	2.74	3	9
1:A:13:ASN:N	1:A:14:TYR:CE2	0.70	2.60	8	1
1:A:93:PHE:CD2	1:A:101:GLU:CB	0.69	2.75	1	11
1:A:80:GLY:O	1:A:81:THR:HG23	0.69	1.87	5	3
1:A:84:MET:HG3	1:A:90:VAL:HG23	0.69	1.63	6	1
1:A:5:THR:HG21	1:A:131:GLU:O	0.69	1.87	5	12
1:A:7:LYS:HD3	1:A:129:LYS:HB2	0.69	1.63	6	3
1:A:106:ARG:HG2	1:A:113:LEU:HD13	0.69	1.61	12	3
1:A:5:THR:OG1	1:A:131:GLU:CA	0.69	2.40	14	19
1:A:129:LYS:O	1:A:130:LYS:O	0.69	2.10	19	20
1:A:128:PHE:CD1	1:A:128:PHE:C	0.69	2.69	14	18
1:A:6:TRP:CG	1:A:113:LEU:CD2	0.69	2.76	16	1
1:A:6:TRP:C	1:A:7:LYS:CG	0.69	2.66	15	20
1:A:93:PHE:CD2	1:A:101:GLU:HG2	0.69	2.23	13	8
1:A:95:ARG:HD2	1:A:100:LYS:HB2	0.69	1.62	11	3
1:A:46:LYS:HG2	1:A:47:PHE:N	0.69	2.03	10	9
1:A:17:PHE:HZ	1:A:102:LEU:HD23	0.69	1.48	14	2
1:A:6:TRP:CE3	1:A:130:LYS:HB2	0.69	2.22	16	8
1:A:91:GLY:HA3	1:A:104:ALA:HB3	0.69	1.65	19	12
1:A:108:ILE:CD1	1:A:113:LEU:HD23	0.69	2.18	19	3
1:A:7:LYS:CD	1:A:129:LYS:CB	0.69	2.71	15	6
1:A:13:ASN:C	1:A:14:TYR:CD1	0.68	2.71	8	1
1:A:14:TYR:HA	1:A:17:PHE:CE2	0.68	2.23	8	1
1:A:9:ASP:HB2	1:A:128:PHE:O	0.68	1.87	1	19
1:A:21:MET:HE1	1:A:72:LEU:HG	0.68	1.66	14	2
1:A:6:TRP:O	1:A:7:LYS:HG2	0.68	1.89	20	19
1:A:93:PHE:CE1	1:A:101:GLU:CG	0.68	2.76	19	4
1:A:12:GLU:C	1:A:14:TYR:CD2	0.68	2.71	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:GLU:O	1:A:113:LEU:HD12	0.68	1.88	16	1
1:A:21:MET:CE	1:A:102:LEU:HD21	0.68	2.18	14	1
1:A:107:GLU:HB2	1:A:114:ILE:CG1	0.68	2.18	6	5
1:A:40:ILE:HD11	1:A:106:ARG:CD	0.68	2.18	6	1
1:A:21:MET:HE1	1:A:102:LEU:HG	0.68	1.64	13	3
1:A:72:LEU:HD13	1:A:72:LEU:O	0.68	1.88	17	9
1:A:78:LEU:HA	1:A:95:ARG:CB	0.68	2.19	11	1
1:A:7:LYS:HB2	1:A:129:LYS:HB2	0.68	1.65	16	12
1:A:93:PHE:CE2	1:A:103:ILE:HD11	0.68	2.24	10	10
1:A:93:PHE:CZ	1:A:101:GLU:HB3	0.68	2.24	19	3
1:A:104:ALA:HA	1:A:117:TYR:CD1	0.68	2.24	8	4
1:A:46:LYS:HD2	1:A:61:VAL:HG12	0.68	1.65	18	1
1:A:93:PHE:CE2	1:A:101:GLU:HA	0.68	2.24	19	2
1:A:13:ASN:CB	1:A:124:ALA:HB2	0.67	2.19	8	1
1:A:126:ARG:C	1:A:127:ILE:CD1	0.67	2.67	13	19
1:A:10:ARG:NE	1:A:127:ILE:C	0.67	2.52	12	1
1:A:90:VAL:HA	1:A:105:VAL:HG22	0.67	1.64	1	3
1:A:104:ALA:HB1	1:A:106:ARG:NH2	0.67	2.04	19	2
1:A:9:ASP:HA	1:A:129:LYS:CG	0.67	2.20	1	9
1:A:6:TRP:CD1	1:A:113:LEU:HD11	0.67	2.23	12	4
1:A:14:TYR:CE1	1:A:17:PHE:CE1	0.67	2.83	13	2
1:A:93:PHE:CZ	1:A:101:GLU:HG2	0.67	2.25	5	11
1:A:46:LYS:HD3	1:A:61:VAL:HG12	0.67	1.66	9	1
1:A:14:TYR:CD1	1:A:16:LYS:HB3	0.67	2.24	10	1
1:A:17:PHE:CZ	1:A:117:TYR:CE2	0.67	2.83	8	3
1:A:14:TYR:CE1	1:A:17:PHE:N	0.67	2.62	10	1
1:A:7:LYS:HD3	1:A:129:LYS:HB3	0.67	1.66	5	16
1:A:117:TYR:CB	1:A:124:ALA:HB3	0.67	2.19	8	1
1:A:5:THR:HG21	1:A:131:GLU:HB3	0.67	1.67	20	4
1:A:112:GLU:CG	1:A:114:ILE:HD13	0.67	2.20	20	11
1:A:116:THR:HG23	1:A:123:GLU:HG3	0.67	1.67	5	3
1:A:103:ILE:O	1:A:103:ILE:CG2	0.66	2.43	1	18
1:A:113:LEU:O	1:A:115:GLN:N	0.66	2.27	13	14
1:A:84:MET:HB3	1:A:89:LEU:CA	0.66	2.19	6	1
1:A:7:LYS:CG	1:A:129:LYS:C	0.66	2.69	10	16
1:A:127:ILE:HG23	1:A:128:PHE:CD2	0.66	2.25	19	17
1:A:64:LEU:CB	1:A:83:THR:HG22	0.66	2.21	19	2
1:A:8:VAL:HG22	1:A:10:ARG:CZ	0.66	2.20	12	1
1:A:6:TRP:C	1:A:7:LYS:HG2	0.66	2.16	19	18
1:A:6:TRP:CD1	1:A:113:LEU:HD21	0.66	2.26	7	3
1:A:127:ILE:CG2	1:A:128:PHE:N	0.66	2.59	4	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:TRP:CH2	1:A:108:ILE:HD11	0.66	2.25	16	10
1:A:66:VAL:C	1:A:81:THR:HG21	0.66	2.16	19	1
1:A:93:PHE:CZ	1:A:101:GLU:CB	0.66	2.79	19	3
1:A:10:ARG:CG	1:A:126:ARG:CB	0.66	2.73	12	1
1:A:117:TYR:CD1	1:A:124:ALA:HB3	0.66	2.26	9	7
1:A:53:SER:O	1:A:55:PHE:N	0.66	2.28	6	4
1:A:93:PHE:CD2	1:A:101:GLU:HB3	0.66	2.26	1	11
1:A:58:ILE:HG23	1:A:59:ASP:N	0.66	2.06	17	12
1:A:72:LEU:HB2	1:A:78:LEU:HD11	0.66	1.66	2	5
1:A:48:THR:HA	1:A:61:VAL:HG22	0.66	1.66	10	3
1:A:17:PHE:CD2	1:A:119:TYR:CD1	0.66	2.83	12	1
1:A:95:ARG:CZ	1:A:102:LEU:HG	0.66	2.21	18	1
1:A:95:ARG:HH22	1:A:99:GLY:N	0.65	1.88	11	2
1:A:46:LYS:HD2	1:A:61:VAL:HG23	0.65	1.68	20	2
1:A:40:ILE:HD11	1:A:106:ARG:HD2	0.65	1.66	6	1
1:A:105:VAL:HG23	1:A:107:GLU:H	0.65	1.49	7	3
1:A:7:LYS:O	1:A:8:VAL:C	0.65	2.38	16	2
1:A:5:THR:CG2	1:A:131:GLU:C	0.65	2.69	15	12
1:A:5:THR:O	1:A:6:TRP:CD2	0.65	2.50	16	15
1:A:18:MET:O	1:A:23:ILE:HD13	0.65	1.90	17	3
1:A:108:ILE:HD12	1:A:113:LEU:CD2	0.65	2.22	1	8
1:A:17:PHE:CZ	1:A:117:TYR:CD2	0.64	2.85	8	10
1:A:64:LEU:C	1:A:83:THR:HG22	0.64	2.17	6	1
1:A:84:MET:CB	1:A:90:VAL:HG23	0.64	2.21	6	1
1:A:95:ARG:NH2	1:A:102:LEU:HG	0.64	2.06	18	1
1:A:82:TRP:CE3	1:A:91:GLY:HA2	0.64	2.27	12	18
1:A:17:PHE:CE2	1:A:102:LEU:HD22	0.64	2.27	17	1
1:A:113:LEU:HB3	1:A:128:PHE:CD1	0.64	2.27	16	1
1:A:78:LEU:HD11	1:A:102:LEU:CD1	0.64	2.21	17	1
1:A:6:TRP:HA	1:A:130:LYS:HA	0.64	1.70	16	17
1:A:72:LEU:HD13	1:A:72:LEU:C	0.64	2.17	8	11
1:A:102:LEU:O	1:A:117:TYR:HA	0.64	1.92	8	1
1:A:7:LYS:H	1:A:129:LYS:N	0.64	1.89	16	1
1:A:2:PHE:N	1:A:108:ILE:HD13	0.64	2.07	2	4
1:A:5:THR:CB	1:A:131:GLU:HB3	0.64	2.23	19	5
1:A:13:ASN:C	1:A:14:TYR:CG	0.64	2.76	8	2
1:A:95:ARG:CD	1:A:100:LYS:HB2	0.64	2.22	11	9
1:A:109:SER:N	1:A:112:GLU:CG	0.64	2.60	7	5
1:A:43:GLU:CB	1:A:46:LYS:CD	0.64	2.75	17	4
1:A:129:LYS:O	1:A:130:LYS:C	0.64	2.41	8	6
1:A:2:PHE:H	1:A:108:ILE:HD13	0.64	1.53	14	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:LEU:HB3	1:A:83:THR:HG23	0.64	1.70	8	1
1:A:2:PHE:HB2	1:A:40:ILE:HG21	0.63	1.68	5	1
1:A:77:GLU:O	1:A:95:ARG:NE	0.63	2.32	2	6
1:A:93:PHE:CG	1:A:101:GLU:HA	0.63	2.28	14	18
1:A:117:TYR:CE2	1:A:124:ALA:HB3	0.63	2.28	20	2
1:A:14:TYR:CE1	1:A:117:TYR:CZ	0.63	2.86	13	2
1:A:7:LYS:N	1:A:128:PHE:HB3	0.63	2.08	16	1
1:A:84:MET:HG3	1:A:90:VAL:CG2	0.63	2.23	6	1
1:A:6:TRP:CZ2	1:A:108:ILE:CD1	0.63	2.81	2	14
1:A:78:LEU:HD23	1:A:93:PHE:CZ	0.63	2.28	2	1
1:A:78:LEU:HG	1:A:102:LEU:HD13	0.63	1.70	11	1
1:A:108:ILE:CG1	1:A:112:GLU:HG2	0.63	2.24	19	4
1:A:78:LEU:HD21	1:A:102:LEU:HD12	0.63	1.71	3	5
1:A:8:VAL:HG23	1:A:128:PHE:CE2	0.63	2.29	16	1
1:A:5:THR:HA	1:A:39:THR:CG2	0.63	2.23	19	20
1:A:93:PHE:CZ	1:A:94:LYS:CG	0.63	2.82	5	1
1:A:23:ILE:HG23	1:A:74:ASP:OD2	0.63	1.94	10	1
1:A:5:THR:CG2	1:A:131:GLU:HB3	0.62	2.24	20	4
1:A:89:LEU:CD2	1:A:106:ARG:HB2	0.62	2.24	5	1
1:A:10:ARG:HG2	1:A:126:ARG:HB3	0.62	1.70	12	1
1:A:2:PHE:CG	1:A:108:ILE:HG21	0.62	2.29	1	2
1:A:21:MET:HE1	1:A:119:TYR:HB3	0.62	1.71	19	5
1:A:17:PHE:CE1	1:A:102:LEU:CD2	0.62	2.82	10	3
1:A:93:PHE:CD2	1:A:102:LEU:N	0.62	2.68	20	3
1:A:2:PHE:CE1	1:A:89:LEU:HD12	0.62	2.29	2	1
1:A:17:PHE:O	1:A:21:MET:HE2	0.62	1.94	9	1
1:A:93:PHE:CE2	1:A:101:GLU:CA	0.62	2.82	19	3
1:A:93:PHE:CZ	1:A:103:ILE:CD1	0.62	2.82	20	1
1:A:103:ILE:O	1:A:105:VAL:HG23	0.62	1.94	1	3
1:A:78:LEU:HD12	1:A:95:ARG:HE	0.62	1.53	2	1
1:A:2:PHE:CD2	1:A:108:ILE:HG21	0.62	2.30	19	2
1:A:95:ARG:NH2	1:A:102:LEU:HD21	0.62	2.09	15	1
1:A:106:ARG:NE	1:A:128:PHE:CZ	0.62	2.68	16	1
1:A:93:PHE:CD2	1:A:101:GLU:C	0.62	2.78	20	3
1:A:114:ILE:O	1:A:125:LYS:HB3	0.62	1.95	7	7
1:A:17:PHE:CE2	1:A:117:TYR:CE2	0.62	2.88	10	1
1:A:60:VAL:C	1:A:61:VAL:HG23	0.62	2.20	10	1
1:A:95:ARG:NE	1:A:95:ARG:H	0.62	1.92	7	3
1:A:96:VAL:HG12	1:A:97:ASP:N	0.62	2.10	12	1
1:A:93:PHE:CE2	1:A:103:ILE:CD1	0.61	2.83	10	11
1:A:93:PHE:CE2	1:A:103:ILE:HD13	0.61	2.30	20	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:127:ILE:CG2	1:A:128:PHE:CD2	0.61	2.83	19	12
1:A:116:THR:HG23	1:A:123:GLU:CG	0.61	2.25	5	3
1:A:7:LYS:O	1:A:128:PHE:C	0.61	2.43	12	1
1:A:79:THR:HG22	1:A:80:GLY:N	0.61	2.10	3	2
1:A:103:ILE:CG2	1:A:105:VAL:HG23	0.61	2.26	20	6
1:A:95:ARG:O	1:A:97:ASP:N	0.61	2.33	7	4
1:A:84:MET:CG	1:A:90:VAL:CG2	0.61	2.77	6	1
1:A:17:PHE:CE2	1:A:117:TYR:CD2	0.61	2.88	20	3
1:A:6:TRP:CE3	1:A:113:LEU:CD1	0.61	2.83	16	2
1:A:78:LEU:CD2	1:A:93:PHE:CD2	0.61	2.83	2	2
1:A:90:VAL:HG12	1:A:103:ILE:HD13	0.61	1.73	2	3
1:A:95:ARG:CZ	1:A:100:LYS:HB2	0.61	2.26	8	1
1:A:88:LYS:CB	1:A:107:GLU:HA	0.61	2.25	19	17
1:A:40:ILE:HG23	1:A:47:PHE:CD2	0.61	2.30	16	2
1:A:119:TYR:CE1	1:A:122:VAL:HB	0.61	2.31	16	7
1:A:84:MET:CB	1:A:89:LEU:C	0.61	2.74	6	1
1:A:10:ARG:CD	1:A:127:ILE:N	0.61	2.63	12	1
1:A:95:ARG:CZ	1:A:102:LEU:HD21	0.61	2.26	15	1
1:A:7:LYS:C	1:A:128:PHE:HA	0.61	2.21	16	12
1:A:18:MET:HE2	1:A:72:LEU:CD2	0.61	2.23	4	1
1:A:93:PHE:CE1	1:A:94:LYS:HG3	0.61	2.31	5	1
1:A:95:ARG:NH1	1:A:100:LYS:HB3	0.61	2.10	18	1
1:A:65:GLY:C	1:A:66:VAL:HG23	0.61	2.19	19	2
1:A:93:PHE:CZ	1:A:94:LYS:HG3	0.61	2.31	5	1
1:A:14:TYR:CD1	1:A:17:PHE:N	0.61	2.69	10	1
1:A:10:ARG:NE	1:A:127:ILE:N	0.61	2.48	12	1
1:A:93:PHE:CE2	1:A:103:ILE:HG12	0.61	2.31	18	14
1:A:66:VAL:O	1:A:81:THR:HG21	0.61	1.94	19	1
1:A:21:MET:HE2	1:A:100:LYS:HE3	0.60	1.73	1	2
1:A:92:LYS:C	1:A:93:PHE:CG	0.60	2.78	20	10
1:A:93:PHE:HE2	1:A:103:ILE:HD11	0.60	1.56	8	3
1:A:13:ASN:O	1:A:14:TYR:CD1	0.60	2.54	8	1
1:A:7:LYS:O	1:A:128:PHE:HA	0.60	1.95	12	2
1:A:18:MET:C	1:A:23:ILE:HD13	0.60	2.20	17	2
1:A:7:LYS:HB2	1:A:129:LYS:H	0.60	1.56	8	17
1:A:93:PHE:CD1	1:A:101:GLU:HG3	0.60	2.30	16	8
1:A:103:ILE:HG23	1:A:105:VAL:HG23	0.60	1.73	20	3
1:A:5:THR:HG21	1:A:131:GLU:C	0.60	2.22	5	9
1:A:43:GLU:HB2	1:A:46:LYS:CD	0.60	2.26	17	3
1:A:65:GLY:O	1:A:66:VAL:HG22	0.60	1.97	16	1
1:A:84:MET:HB3	1:A:89:LEU:HA	0.60	1.73	19	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:PHE:CD2	1:A:101:GLU:CA	0.60	2.85	14	14
1:A:71:SER:HA	1:A:77:GLU:HA	0.60	1.72	10	3
1:A:21:MET:HE1	1:A:119:TYR:CB	0.60	2.27	19	5
1:A:88:LYS:HA	1:A:107:GLU:O	0.60	1.96	6	4
1:A:102:LEU:O	1:A:103:ILE:HB	0.60	1.96	8	16
1:A:85:GLU:HB2	1:A:88:LYS:CG	0.60	2.26	6	1
1:A:93:PHE:HB3	1:A:102:LEU:HD12	0.60	1.72	19	1
1:A:6:TRP:O	1:A:37:LYS:HA	0.60	1.96	1	15
1:A:107:GLU:CB	1:A:114:ILE:HG13	0.60	2.26	10	17
1:A:78:LEU:HD12	1:A:95:ARG:NE	0.60	2.11	2	2
1:A:7:LYS:HD3	1:A:129:LYS:O	0.60	1.97	19	9
1:A:6:TRP:CD2	1:A:113:LEU:CD1	0.60	2.84	10	16
1:A:72:LEU:HD23	1:A:72:LEU:O	0.60	1.97	7	1
1:A:13:ASN:C	1:A:14:TYR:HD2	0.60	2.02	10	1
1:A:95:ARG:O	1:A:96:VAL:HG23	0.60	1.96	12	6
1:A:7:LYS:CD	1:A:129:LYS:O	0.60	2.49	18	12
1:A:10:ARG:HB2	1:A:126:ARG:HB3	0.60	1.74	4	14
1:A:95:ARG:NH2	1:A:99:GLY:CA	0.60	2.64	11	2
1:A:106:ARG:NE	1:A:115:GLN:NE2	0.60	2.49	2	3
1:A:103:ILE:HG23	1:A:105:VAL:CG2	0.60	2.27	20	5
1:A:2:PHE:CE1	1:A:40:ILE:CD1	0.60	2.85	8	3
1:A:10:ARG:CZ	1:A:127:ILE:H	0.60	2.09	12	1
1:A:72:LEU:O	1:A:72:LEU:HD13	0.60	1.95	20	3
1:A:14:TYR:HA	1:A:17:PHE:HB3	0.59	1.73	13	4
1:A:8:VAL:CG2	1:A:128:PHE:CE2	0.59	2.85	16	1
1:A:5:THR:C	1:A:6:TRP:CG	0.59	2.80	16	15
1:A:77:GLU:C	1:A:95:ARG:HB2	0.59	2.22	11	2
1:A:93:PHE:CZ	1:A:101:GLU:CD	0.59	2.79	15	3
1:A:104:ALA:CB	1:A:117:TYR:CD2	0.59	2.85	14	3
1:A:21:MET:HE3	1:A:95:ARG:CG	0.59	2.25	8	1
1:A:128:PHE:CD1	1:A:128:PHE:O	0.59	2.55	7	13
1:A:93:PHE:CB	1:A:101:GLU:HA	0.59	2.27	11	5
1:A:14:TYR:CE1	1:A:16:LYS:HB3	0.59	2.32	10	1
1:A:84:MET:HA	1:A:89:LEU:CA	0.59	2.27	1	15
1:A:43:GLU:HB2	1:A:46:LYS:HD3	0.59	1.75	17	3
1:A:47:PHE:CZ	1:A:89:LEU:HD21	0.59	2.31	8	1
1:A:124:ALA:C	1:A:125:LYS:HG3	0.59	2.22	5	19
1:A:13:ASN:N	1:A:14:TYR:CD2	0.59	2.70	8	1
1:A:12:GLU:CG	1:A:125:LYS:CE	0.59	2.80	10	1
1:A:95:ARG:CZ	1:A:102:LEU:CD1	0.59	2.80	18	2
1:A:126:ARG:O	1:A:127:ILE:HD13	0.59	1.98	4	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:TRP:CB	1:A:113:LEU:CD1	0.59	2.81	6	10
1:A:5:THR:CB	1:A:131:GLU:CA	0.59	2.80	9	10
1:A:6:TRP:CE2	1:A:113:LEU:HD21	0.59	2.32	13	5
1:A:45:ASN:O	1:A:64:LEU:HD23	0.59	1.97	18	2
1:A:5:THR:OG1	1:A:131:GLU:CB	0.59	2.51	20	4
1:A:128:PHE:O	1:A:128:PHE:CD1	0.59	2.56	19	6
1:A:7:LYS:CB	1:A:129:LYS:H	0.59	2.11	3	19
1:A:38:LEU:CD1	1:A:106:ARG:NE	0.58	2.66	6	1
1:A:5:THR:HB	1:A:131:GLU:HB3	0.58	1.76	9	12
1:A:71:SER:HA	1:A:77:GLU:CA	0.58	2.27	10	15
1:A:10:ARG:HE	1:A:127:ILE:C	0.58	2.06	12	1
1:A:8:VAL:O	1:A:8:VAL:HG12	0.58	1.96	1	16
1:A:9:ASP:CA	1:A:129:LYS:HG3	0.58	2.28	3	8
1:A:113:LEU:CD1	1:A:128:PHE:HB3	0.58	2.27	1	8
1:A:90:VAL:CG1	1:A:103:ILE:HD13	0.58	2.28	15	1
1:A:117:TYR:CD1	1:A:124:ALA:O	0.58	2.56	5	7
1:A:38:LEU:HD13	1:A:49:VAL:HG13	0.58	1.75	2	2
1:A:10:ARG:C	1:A:126:ARG:HB3	0.58	2.24	10	1
1:A:12:GLU:CD	1:A:125:LYS:CE	0.58	2.77	10	1
1:A:93:PHE:CD1	1:A:93:PHE:C	0.58	2.81	16	4
1:A:45:ASN:C	1:A:64:LEU:HD22	0.58	2.22	20	1
1:A:5:THR:HB	1:A:131:GLU:CA	0.58	2.28	5	7
1:A:116:THR:O	1:A:116:THR:CG2	0.58	2.50	19	9
1:A:72:LEU:CB	1:A:78:LEU:CD1	0.58	2.82	4	1
1:A:77:GLU:OE2	1:A:96:VAL:HG21	0.58	1.99	7	1
1:A:47:PHE:HZ	1:A:89:LEU:HD21	0.58	1.57	8	1
1:A:120:GLU:CG	1:A:120:GLU:O	0.58	2.51	11	3
1:A:77:GLU:O	1:A:95:ARG:NH2	0.58	2.36	10	6
1:A:17:PHE:CE1	1:A:102:LEU:HD21	0.58	2.34	8	3
1:A:109:SER:HB3	1:A:114:ILE:HD11	0.58	1.74	13	5
1:A:7:LYS:CG	1:A:129:LYS:HB2	0.58	2.27	3	6
1:A:5:THR:OG1	1:A:131:GLU:HB3	0.58	1.99	19	4
1:A:88:LYS:HA	1:A:107:GLU:HA	0.58	1.76	5	13
1:A:126:ARG:O	1:A:127:ILE:HB	0.58	1.97	12	17
1:A:93:PHE:CD2	1:A:103:ILE:HG12	0.58	2.34	8	11
1:A:2:PHE:CE1	1:A:108:ILE:HB	0.58	2.34	6	3
1:A:23:ILE:HD11	1:A:72:LEU:HD21	0.57	1.75	7	1
1:A:12:GLU:CA	1:A:14:TYR:CD2	0.57	2.86	8	1
1:A:106:ARG:CG	1:A:113:LEU:HD22	0.57	2.28	18	3
1:A:84:MET:CA	1:A:89:LEU:HA	0.57	2.28	1	18
1:A:103:ILE:O	1:A:105:VAL:HG12	0.57	1.98	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:MET:HB2	1:A:89:LEU:C	0.57	2.24	6	1
1:A:8:VAL:HG22	1:A:115:GLN:CD	0.57	2.24	18	11
1:A:17:PHE:CD1	1:A:102:LEU:CD2	0.57	2.87	8	1
1:A:21:MET:HE2	1:A:100:LYS:HG2	0.57	1.77	12	1
1:A:93:PHE:CE2	1:A:103:ILE:CG1	0.57	2.87	20	4
1:A:6:TRP:CA	1:A:130:LYS:HA	0.57	2.29	16	16
1:A:38:LEU:HD13	1:A:38:LEU:O	0.57	1.99	3	4
1:A:5:THR:CB	1:A:131:GLU:H	0.57	2.13	4	11
1:A:120:GLU:O	1:A:120:GLU:HG3	0.57	1.98	11	2
1:A:81:THR:HG23	1:A:81:THR:O	0.57	2.00	9	1
1:A:5:THR:OG1	1:A:6:TRP:N	0.57	2.35	15	4
1:A:126:ARG:C	1:A:127:ILE:HD12	0.57	2.23	15	1
1:A:95:ARG:CG	1:A:100:LYS:HB2	0.57	2.29	5	7
1:A:80:GLY:C	1:A:81:THR:HG23	0.57	2.25	5	1
1:A:103:ILE:CG2	1:A:103:ILE:O	0.57	2.52	11	2
1:A:7:LYS:HG3	1:A:129:LYS:O	0.57	1.99	16	1
1:A:60:VAL:CG1	1:A:62:PHE:CE2	0.57	2.87	16	2
1:A:10:ARG:CB	1:A:126:ARG:HB3	0.57	2.30	6	16
1:A:72:LEU:HD13	1:A:73:ALA:CB	0.57	2.30	10	2
1:A:78:LEU:HA	1:A:95:ARG:HB3	0.57	1.75	11	2
1:A:78:LEU:CG	1:A:102:LEU:CD1	0.57	2.83	3	2
1:A:2:PHE:CE2	1:A:108:ILE:CG2	0.57	2.87	19	2
1:A:5:THR:CB	1:A:131:GLU:N	0.56	2.68	9	9
1:A:103:ILE:HG23	1:A:105:VAL:CG1	0.56	2.30	7	2
1:A:84:MET:CB	1:A:89:LEU:CA	0.56	2.83	6	1
1:A:12:GLU:CG	1:A:125:LYS:HE3	0.56	2.30	10	1
1:A:43:GLU:CB	1:A:46:LYS:HD3	0.56	2.30	10	2
1:A:109:SER:C	1:A:112:GLU:HG3	0.56	2.25	7	2
1:A:12:GLU:HG3	1:A:125:LYS:HE3	0.56	1.75	10	1
1:A:8:VAL:HG22	1:A:115:GLN:NE2	0.56	2.15	18	3
1:A:83:THR:O	1:A:90:VAL:N	0.56	2.38	1	17
1:A:78:LEU:CD1	1:A:102:LEU:HD13	0.56	2.30	3	5
1:A:46:LYS:CG	1:A:61:VAL:HG12	0.56	2.29	7	4
1:A:64:LEU:HD21	1:A:84:MET:HG2	0.56	1.77	11	4
1:A:2:PHE:HA	1:A:6:TRP:CZ2	0.56	2.36	6	2
1:A:84:MET:C	1:A:88:LYS:O	0.56	2.47	6	1
1:A:14:TYR:CZ	1:A:122:VAL:CG1	0.56	2.86	10	1
1:A:106:ARG:O	1:A:114:ILE:N	0.56	2.39	19	3
1:A:6:TRP:CZ3	1:A:130:LYS:HB2	0.56	2.35	16	1
1:A:83:THR:O	1:A:90:VAL:HG23	0.56	2.00	7	3
1:A:112:GLU:O	1:A:128:PHE:CD2	0.56	2.58	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:LEU:CD2	1:A:93:PHE:CE2	0.56	2.89	2	1
1:A:105:VAL:CG2	1:A:107:GLU:HG3	0.56	2.30	2	2
1:A:106:ARG:O	1:A:113:LEU:O	0.56	2.24	18	6
1:A:107:GLU:CG	1:A:114:ILE:HG13	0.56	2.30	6	3
1:A:38:LEU:HB2	1:A:128:PHE:CE2	0.56	2.36	16	1
1:A:7:LYS:CB	1:A:129:LYS:CB	0.56	2.84	19	15
1:A:1:ALA:HB1	1:A:108:ILE:HG21	0.56	1.77	17	2
1:A:38:LEU:HD13	1:A:106:ARG:NE	0.56	2.15	6	1
1:A:10:ARG:HD3	1:A:126:ARG:HB2	0.56	1.76	12	1
1:A:88:LYS:CA	1:A:107:GLU:HA	0.56	2.30	8	19
1:A:116:THR:HA	1:A:123:GLU:CG	0.56	2.31	8	14
1:A:95:ARG:HD2	1:A:102:LEU:HD11	0.56	1.74	12	1
1:A:2:PHE:CZ	1:A:108:ILE:HB	0.56	2.36	19	2
1:A:95:ARG:HG2	1:A:100:LYS:HB2	0.56	1.78	16	7
1:A:17:PHE:CZ	1:A:102:LEU:HD21	0.56	2.35	10	1
1:A:48:THR:HG23	1:A:61:VAL:HG22	0.56	1.78	13	1
1:A:95:ARG:NH1	1:A:100:LYS:CB	0.56	2.69	18	1
1:A:93:PHE:CE2	1:A:101:GLU:CB	0.56	2.88	7	7
1:A:103:ILE:HG23	1:A:105:VAL:HG12	0.56	1.77	7	5
1:A:91:GLY:N	1:A:103:ILE:O	0.55	2.38	16	7
1:A:46:LYS:CD	1:A:46:LYS:C	0.55	2.79	8	4
1:A:113:LEU:O	1:A:114:ILE:C	0.55	2.48	15	8
1:A:118:THR:HG22	1:A:121:GLY:CA	0.55	2.31	18	4
1:A:17:PHE:CZ	1:A:102:LEU:CD2	0.55	2.89	10	2
1:A:108:ILE:O	1:A:108:ILE:CG2	0.55	2.54	7	4
1:A:89:LEU:HD12	1:A:106:ARG:HB2	0.55	1.78	17	3
1:A:10:ARG:CG	1:A:126:ARG:HB3	0.55	2.31	1	16
1:A:84:MET:HA	1:A:89:LEU:HA	0.55	1.78	10	14
1:A:7:LYS:HD2	1:A:130:LYS:C	0.55	2.27	6	4
1:A:60:VAL:HG12	1:A:62:PHE:CD1	0.55	2.36	7	2
1:A:93:PHE:CE1	1:A:101:GLU:HG3	0.55	2.36	8	3
1:A:95:ARG:NE	1:A:100:LYS:HB2	0.55	2.16	8	2
1:A:95:ARG:NH2	1:A:99:GLY:H	0.55	1.96	11	1
1:A:104:ALA:HB2	1:A:117:TYR:HD2	0.55	1.53	19	2
1:A:9:ASP:CA	1:A:129:LYS:CG	0.55	2.85	8	8
1:A:117:TYR:HD1	1:A:124:ALA:HB3	0.55	1.60	3	4
1:A:47:PHE:CD1	1:A:49:VAL:HG23	0.55	2.35	2	2
1:A:62:PHE:CE1	1:A:82:TRP:CE2	0.55	2.93	6	1
1:A:17:PHE:CZ	1:A:117:TYR:HD2	0.55	2.20	10	1
1:A:104:ALA:HB1	1:A:106:ARG:HH22	0.55	1.59	19	2
1:A:113:LEU:HD13	1:A:128:PHE:HB2	0.55	1.79	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:108:ILE:CG1	1:A:112:GLU:OE2	0.55	2.54	19	2
1:A:77:GLU:CB	1:A:95:ARG:O	0.55	2.53	7	1
1:A:10:ARG:CD	1:A:126:ARG:HB2	0.55	2.32	12	1
1:A:14:TYR:CD1	1:A:117:TYR:CE1	0.55	2.94	13	1
1:A:93:PHE:CD2	1:A:101:GLU:CG	0.55	2.90	9	6
1:A:84:MET:HA	1:A:89:LEU:C	0.55	2.26	9	5
1:A:13:ASN:OD1	1:A:122:VAL:HG13	0.55	2.02	10	1
1:A:95:ARG:CZ	1:A:95:ARG:HB3	0.55	2.32	12	2
1:A:72:LEU:HD22	1:A:72:LEU:C	0.55	2.27	18	2
1:A:93:PHE:CZ	1:A:103:ILE:HG12	0.55	2.37	18	3
1:A:6:TRP:CZ3	1:A:128:PHE:CD2	0.55	2.94	11	7
1:A:49:VAL:HG22	1:A:60:VAL:O	0.55	2.02	13	2
1:A:119:TYR:O	1:A:119:TYR:CG	0.55	2.60	16	4
1:A:23:ILE:N	1:A:23:ILE:CD1	0.54	2.70	5	15
1:A:119:TYR:CG	1:A:119:TYR:O	0.54	2.60	4	4
1:A:47:PHE:CZ	1:A:64:LEU:HG	0.54	2.37	15	2
1:A:106:ARG:CD	1:A:128:PHE:CZ	0.54	2.90	16	1
1:A:112:GLU:HG3	1:A:114:ILE:HD13	0.54	1.77	16	1
1:A:64:LEU:N	1:A:64:LEU:HD23	0.54	2.17	20	1
1:A:106:ARG:C	1:A:113:LEU:O	0.54	2.50	2	5
1:A:43:GLU:HB3	1:A:46:LYS:HD2	0.54	1.80	8	2
1:A:96:VAL:C	1:A:98:ASN:N	0.54	2.61	7	12
1:A:68:PHE:O	1:A:70:TYR:N	0.54	2.39	12	1
1:A:118:THR:HG22	1:A:121:GLY:H	0.54	1.60	1	4
1:A:12:GLU:CB	1:A:126:ARG:HG2	0.54	2.32	2	1
1:A:62:PHE:CE2	1:A:82:TRP:CD1	0.54	2.95	2	1
1:A:105:VAL:CG2	1:A:116:THR:N	0.54	2.71	5	1
1:A:101:GLU:O	1:A:102:LEU:C	0.54	2.50	5	7
1:A:12:GLU:CD	1:A:125:LYS:HE2	0.54	2.28	10	1
1:A:108:ILE:HD12	1:A:113:LEU:HD21	0.54	1.78	12	4
1:A:5:THR:O	1:A:6:TRP:CG	0.54	2.61	3	11
1:A:80:GLY:C	1:A:81:THR:CG2	0.54	2.80	1	2
1:A:43:GLU:HB3	1:A:46:LYS:CD	0.54	2.32	10	4
1:A:110:GLY:N	1:A:112:GLU:OE2	0.54	2.41	5	2
1:A:47:PHE:O	1:A:49:VAL:HG13	0.54	2.01	11	1
1:A:17:PHE:HE2	1:A:102:LEU:HD23	0.54	1.53	19	2
1:A:93:PHE:CZ	1:A:103:ILE:HD13	0.54	2.37	20	1
1:A:1:ALA:CB	1:A:108:ILE:CG2	0.54	2.74	5	1
1:A:38:LEU:HG	1:A:106:ARG:CZ	0.54	2.31	17	3
1:A:10:ARG:NE	1:A:127:ILE:H	0.54	2.00	12	1
1:A:10:ARG:HB2	1:A:126:ARG:CB	0.54	2.33	4	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:77:GLU:CD	1:A:96:VAL:HG21	0.54	2.28	2	1
1:A:105:VAL:HG23	1:A:107:GLU:N	0.54	2.17	7	3
1:A:112:GLU:HG2	1:A:114:ILE:HD13	0.54	1.80	2	6
1:A:8:VAL:HG11	1:A:11:ASN:ND2	0.54	2.17	13	1
1:A:7:LYS:N	1:A:129:LYS:N	0.54	2.56	16	1
1:A:6:TRP:CE2	1:A:108:ILE:CD1	0.54	2.88	7	2
1:A:9:ASP:HA	1:A:129:LYS:HG3	0.54	1.80	15	6
1:A:103:ILE:O	1:A:103:ILE:HG23	0.54	2.03	17	8
1:A:4:GLY:N	1:A:40:ILE:O	0.53	2.41	16	13
1:A:12:GLU:N	1:A:126:ARG:HG3	0.53	2.18	12	6
1:A:94:LYS:O	1:A:96:VAL:N	0.53	2.41	5	2
1:A:114:ILE:HA	1:A:127:ILE:HD11	0.53	1.80	15	6
1:A:117:TYR:CD2	1:A:124:ALA:HB3	0.53	2.38	20	2
1:A:93:PHE:CE2	1:A:94:LYS:CG	0.53	2.91	5	1
1:A:90:VAL:HA	1:A:105:VAL:HB	0.53	1.80	10	4
1:A:39:THR:HG1	1:A:50:LYS:HB2	0.53	1.63	2	2
1:A:105:VAL:O	1:A:116:THR:N	0.53	2.41	2	3
1:A:4:GLY:O	1:A:40:ILE:N	0.53	2.41	13	6
1:A:106:ARG:HD3	1:A:128:PHE:CZ	0.53	2.39	16	1
1:A:90:VAL:CG1	1:A:103:ILE:CD1	0.53	2.86	2	5
1:A:105:VAL:N	1:A:115:GLN:O	0.53	2.41	16	4
1:A:95:ARG:NH1	1:A:95:ARG:HG2	0.53	2.17	11	2
1:A:92:LYS:O	1:A:93:PHE:HB3	0.53	2.03	5	3
1:A:47:PHE:CZ	1:A:64:LEU:HB3	0.53	2.39	7	2
1:A:72:LEU:O	1:A:72:LEU:HD22	0.53	2.03	9	1
1:A:77:GLU:O	1:A:95:ARG:CZ	0.53	2.57	19	5
1:A:122:VAL:HG12	1:A:122:VAL:O	0.53	2.03	10	1
1:A:123:GLU:HG2	1:A:125:LYS:CG	0.53	2.33	8	14
1:A:116:THR:CG2	1:A:123:GLU:HG3	0.53	2.33	5	2
1:A:38:LEU:CD1	1:A:106:ARG:CZ	0.53	2.86	6	1
1:A:95:ARG:HD3	1:A:100:LYS:HB2	0.53	1.79	15	4
1:A:6:TRP:CD1	1:A:40:ILE:HB	0.53	2.39	6	5
1:A:38:LEU:CD1	1:A:106:ARG:HD3	0.53	2.34	6	1
1:A:105:VAL:HG21	1:A:107:GLU:HG3	0.53	1.80	7	1
1:A:7:LYS:C	1:A:129:LYS:H	0.53	2.12	16	1
1:A:12:GLU:N	1:A:126:ARG:CG	0.53	2.72	20	6
1:A:69:ALA:HB2	1:A:79:THR:OG1	0.53	2.03	4	2
1:A:95:ARG:CZ	1:A:100:LYS:CB	0.53	2.86	8	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:14:TYR:CE2	0.53	2.38	9	1
1:A:14:TYR:CE2	1:A:122:VAL:CG1	0.53	2.91	10	1
1:A:106:ARG:NH1	1:A:115:GLN:NE2	0.53	2.56	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:MET:SD	1:A:95:ARG:NH1	0.53	2.82	6	3
1:A:13:ASN:CG	1:A:122:VAL:CG1	0.53	2.82	9	2
1:A:11:ASN:HA	1:A:126:ARG:CG	0.53	2.33	10	1
1:A:2:PHE:CD1	1:A:40:ILE:HD13	0.53	2.39	1	3
1:A:104:ALA:HA	1:A:117:TYR:CG	0.53	2.39	14	4
1:A:17:PHE:HE1	1:A:102:LEU:HD23	0.52	1.63	6	2
1:A:47:PHE:HE1	1:A:64:LEU:HD23	0.52	1.62	11	1
1:A:7:LYS:O	1:A:128:PHE:CA	0.52	2.56	12	1
1:A:9:ASP:CG	1:A:129:LYS:HG2	0.52	2.29	16	2
1:A:128:PHE:CD1	1:A:130:LYS:HB3	0.52	2.39	19	4
1:A:105:VAL:O	1:A:106:ARG:CZ	0.52	2.57	20	1
1:A:95:ARG:HH22	1:A:98:ASN:C	0.52	2.12	1	2
1:A:108:ILE:CG2	1:A:108:ILE:O	0.52	2.57	19	2
1:A:39:THR:O	1:A:49:VAL:HG13	0.52	2.05	14	1
1:A:10:ARG:C	1:A:126:ARG:HB2	0.52	2.29	11	9
1:A:95:ARG:NH2	1:A:102:LEU:CG	0.52	2.73	18	1
1:A:46:LYS:HG3	1:A:47:PHE:N	0.52	2.19	19	9
1:A:112:GLU:N	1:A:112:GLU:OE1	0.52	2.42	19	3
1:A:92:LYS:N	1:A:103:ILE:HA	0.52	2.20	5	9
1:A:105:VAL:HG23	1:A:106:ARG:H	0.52	1.63	16	1
1:A:7:LYS:CE	1:A:129:LYS:HB3	0.52	2.34	4	1
1:A:37:LYS:O	1:A:38:LEU:C	0.52	2.52	15	9
1:A:65:GLY:O	1:A:66:VAL:HG13	0.52	2.04	8	1
1:A:10:ARG:CD	1:A:10:ARG:H	0.52	2.17	12	1
1:A:10:ARG:HG3	1:A:127:ILE:O	0.52	2.04	12	1
1:A:77:GLU:HG2	1:A:96:VAL:HB	0.52	1.80	17	1
1:A:105:VAL:HG21	1:A:116:THR:CB	0.52	2.33	5	1
1:A:95:ARG:NE	1:A:102:LEU:HD12	0.52	2.20	8	1
1:A:105:VAL:HG23	1:A:114:ILE:O	0.52	2.04	16	1
1:A:117:TYR:O	1:A:123:GLU:HA	0.52	2.05	1	15
1:A:117:TYR:C	1:A:123:GLU:HA	0.52	2.30	20	16
1:A:95:ARG:NH1	1:A:95:ARG:HB2	0.52	2.19	7	1
1:A:9:ASP:N	1:A:129:LYS:HG3	0.52	2.20	6	5
1:A:92:LYS:O	1:A:93:PHE:CD2	0.52	2.62	2	1
1:A:117:TYR:CG	1:A:124:ALA:HB3	0.52	2.40	8	1
1:A:47:PHE:CE1	1:A:49:VAL:CG1	0.52	2.93	16	1
1:A:93:PHE:CG	1:A:101:GLU:HG2	0.52	2.39	3	8
1:A:64:LEU:HB3	1:A:83:THR:CG2	0.52	2.34	8	2
1:A:118:THR:O	1:A:120:GLU:N	0.52	2.43	12	1
1:A:103:ILE:HG23	1:A:105:VAL:HG13	0.52	1.80	16	1
1:A:128:PHE:C	1:A:128:PHE:CD1	0.52	2.87	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:ASN:C	1:A:64:LEU:CD2	0.52	2.83	20	4
1:A:114:ILE:O	1:A:125:LYS:CB	0.52	2.58	15	5
1:A:112:GLU:OE1	1:A:112:GLU:N	0.52	2.43	4	2
1:A:2:PHE:HD1	1:A:40:ILE:HD13	0.52	1.64	19	2
1:A:12:GLU:O	1:A:13:ASN:O	0.52	2.28	10	1
1:A:80:GLY:O	1:A:81:THR:CG2	0.51	2.57	5	1
1:A:107:GLU:HB2	1:A:114:ILE:HG13	0.51	1.81	11	5
1:A:7:LYS:HE2	1:A:37:LYS:HG3	0.51	1.83	12	1
1:A:72:LEU:C	1:A:72:LEU:CD2	0.51	2.75	4	3
1:A:10:ARG:CG	1:A:126:ARG:C	0.51	2.81	12	1
1:A:91:GLY:HA3	1:A:104:ALA:N	0.51	2.20	14	7
1:A:71:SER:O	1:A:73:ALA:N	0.51	2.44	5	3
1:A:85:GLU:CA	1:A:88:LYS:O	0.51	2.58	6	1
1:A:92:LYS:HD3	1:A:103:ILE:CD1	0.51	2.36	20	5
1:A:13:ASN:ND2	1:A:122:VAL:C	0.51	2.69	8	1
1:A:55:PHE:CD1	1:A:55:PHE:C	0.51	2.87	8	1
1:A:21:MET:CE	1:A:119:TYR:CB	0.51	2.89	2	6
1:A:21:MET:CE	1:A:119:TYR:CG	0.51	2.93	10	3
1:A:95:ARG:HD3	1:A:102:LEU:HD12	0.51	1.81	7	1
1:A:17:PHE:CD2	1:A:124:ALA:CB	0.51	2.93	8	1
1:A:23:ILE:N	1:A:23:ILE:HD13	0.51	2.20	19	3
1:A:10:ARG:NE	1:A:127:ILE:O	0.51	2.42	12	1
1:A:7:LYS:HD2	1:A:131:GLU:HB2	0.51	1.82	12	6
1:A:38:LEU:CD1	1:A:49:VAL:CG1	0.51	2.87	4	2
1:A:108:ILE:CD1	1:A:113:LEU:CD2	0.51	2.88	19	2
1:A:46:LYS:CD	1:A:61:VAL:HG23	0.51	2.35	5	2
1:A:11:ASN:N	1:A:11:ASN:ND2	0.51	2.58	6	1
1:A:95:ARG:NH1	1:A:98:ASN:N	0.51	2.55	7	1
1:A:47:PHE:CE1	1:A:64:LEU:HG	0.51	2.41	15	2
1:A:90:VAL:C	1:A:92:LYS:N	0.51	2.65	5	5
1:A:103:ILE:O	1:A:104:ALA:C	0.51	2.53	16	14
1:A:95:ARG:NH1	1:A:102:LEU:CD1	0.51	2.73	3	1
1:A:46:LYS:CB	1:A:63:GLU:HA	0.51	2.36	4	3
1:A:105:VAL:HG12	1:A:106:ARG:N	0.51	2.21	6	1
1:A:60:VAL:HG11	1:A:62:PHE:CE2	0.51	2.41	16	1
1:A:17:PHE:HA	1:A:119:TYR:CE1	0.51	2.41	5	11
1:A:111:ASN:N	1:A:112:GLU:OE1	0.51	2.43	4	3
1:A:94:LYS:O	1:A:95:ARG:C	0.51	2.53	3	4
1:A:66:VAL:CG1	1:A:68:PHE:CE1	0.51	2.94	10	1
1:A:47:PHE:CE1	1:A:64:LEU:HD23	0.51	2.41	11	1
1:A:21:MET:HE3	1:A:22:GLY:CA	0.51	2.36	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:PHE:CD1	1:A:49:VAL:CG1	0.51	2.93	16	1
1:A:78:LEU:CA	1:A:95:ARG:HB3	0.51	2.36	1	1
1:A:72:LEU:HB2	1:A:78:LEU:CD1	0.51	2.36	4	3
1:A:78:LEU:CD2	1:A:102:LEU:CD1	0.51	2.88	6	5
1:A:82:TRP:CG	1:A:91:GLY:O	0.51	2.64	7	6
1:A:38:LEU:HD13	1:A:106:ARG:NH1	0.51	2.21	6	1
1:A:62:PHE:CZ	1:A:82:TRP:CE2	0.51	2.99	6	1
1:A:12:GLU:C	1:A:14:TYR:H	0.51	2.14	8	1
1:A:95:ARG:NH1	1:A:102:LEU:HG	0.51	2.19	18	2
1:A:103:ILE:CG2	1:A:105:VAL:HG12	0.51	2.36	15	1
1:A:119:TYR:C	1:A:119:TYR:CD1	0.51	2.89	20	1
1:A:11:ASN:N	1:A:126:ARG:HG3	0.50	2.21	14	6
1:A:102:LEU:O	1:A:117:TYR:C	0.50	2.54	8	16
1:A:119:TYR:C	1:A:120:GLU:CG	0.50	2.84	4	2
1:A:88:LYS:HE3	1:A:107:GLU:HG2	0.50	1.82	7	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:10:ARG:NH2	0.50	2.64	12	1
1:A:2:PHE:CD1	1:A:40:ILE:HD12	0.50	2.41	13	2
1:A:113:LEU:HD22	1:A:128:PHE:CG	0.50	2.40	16	1
1:A:9:ASP:HB3	1:A:10:ARG:CD	0.50	2.36	20	4
1:A:1:ALA:HB1	1:A:108:ILE:HG23	0.50	1.74	5	2
1:A:89:LEU:HD22	1:A:106:ARG:CB	0.50	2.32	5	1
1:A:84:MET:HB3	1:A:89:LEU:CD1	0.50	2.36	18	2
1:A:64:LEU:HD23	1:A:83:THR:HA	0.50	1.82	17	2
1:A:95:ARG:NH1	1:A:102:LEU:CG	0.50	2.74	15	1
1:A:7:LYS:HE3	1:A:131:GLU:HB2	0.50	1.83	11	2
1:A:105:VAL:CG2	1:A:107:GLU:CG	0.50	2.88	10	7
1:A:76:THR:HG22	1:A:77:GLU:N	0.50	2.20	11	4
1:A:6:TRP:CE3	1:A:113:LEU:CD2	0.50	2.93	16	1
1:A:88:LYS:CB	1:A:107:GLU:HG2	0.50	2.36	7	5
1:A:43:GLU:CB	1:A:46:LYS:HD2	0.50	2.36	8	3
1:A:72:LEU:HD23	1:A:78:LEU:CD1	0.50	2.36	3	1
1:A:88:LYS:HE3	1:A:107:GLU:CG	0.50	2.36	7	1
1:A:38:LEU:O	1:A:38:LEU:HD13	0.50	2.06	20	1
1:A:78:LEU:HG	1:A:102:LEU:CD1	0.50	2.37	3	2
1:A:93:PHE:CE2	1:A:101:GLU:HG3	0.50	2.42	5	1
1:A:46:LYS:HG3	1:A:61:VAL:CG1	0.50	2.37	8	1
1:A:46:LYS:CD	1:A:61:VAL:HG12	0.50	2.36	12	3
1:A:113:LEU:CB	1:A:128:PHE:CD1	0.50	2.94	16	1
1:A:21:MET:SD	1:A:102:LEU:HD11	0.50	2.45	1	2
1:A:23:ILE:CD1	1:A:75:GLY:CA	0.50	2.90	1	2
1:A:89:LEU:O	1:A:90:VAL:HG22	0.50	2.06	3	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:GLU:CG	1:A:20:LYS:N	0.50	2.74	4	1
1:A:93:PHE:CD2	1:A:93:PHE:N	0.50	2.77	8	1
1:A:105:VAL:HG13	1:A:116:THR:CB	0.50	2.35	13	1
1:A:45:ASN:O	1:A:64:LEU:HD22	0.50	2.07	20	1
1:A:81:THR:OG1	1:A:82:TRP:N	0.50	2.42	1	2
1:A:95:ARG:O	1:A:96:VAL:CG2	0.50	2.60	1	2
1:A:109:SER:N	1:A:112:GLU:HG2	0.50	2.21	1	3
1:A:70:TYR:CD1	1:A:70:TYR:C	0.50	2.90	12	4
1:A:78:LEU:CA	1:A:95:ARG:CB	0.50	2.90	11	1
1:A:93:PHE:CD2	1:A:103:ILE:N	0.50	2.80	20	2
1:A:2:PHE:HA	1:A:108:ILE:CD1	0.50	2.37	2	2
1:A:38:LEU:CD2	1:A:106:ARG:NH1	0.50	2.74	16	4
1:A:12:GLU:N	1:A:126:ARG:HG2	0.50	2.22	4	3
1:A:93:PHE:CZ	1:A:101:GLU:HG3	0.50	2.42	5	1
1:A:54:ASN:O	1:A:55:PHE:CG	0.50	2.65	6	2
1:A:122:VAL:HG12	1:A:123:GLU:N	0.50	2.22	12	2
1:A:93:PHE:CD1	1:A:101:GLU:HG2	0.50	2.42	15	8
1:A:114:ILE:HA	1:A:127:ILE:CD1	0.50	2.36	15	5
1:A:52:SER:CA	1:A:57:ASN:HB2	0.50	2.37	11	1
1:A:7:LYS:HD3	1:A:129:LYS:CA	0.49	2.37	9	2
1:A:95:ARG:N	1:A:95:ARG:HD2	0.49	2.22	17	2
1:A:78:LEU:HD23	1:A:93:PHE:CG	0.49	2.41	2	2
1:A:41:THR:O	1:A:42:GLN:CB	0.49	2.60	3	1
1:A:105:VAL:HG12	1:A:106:ARG:H	0.49	1.67	6	1
1:A:119:TYR:CD1	1:A:122:VAL:HB	0.49	2.41	16	1
1:A:20:LYS:HB2	1:A:119:TYR:CE2	0.49	2.43	9	4
1:A:84:MET:HB2	1:A:90:VAL:HG23	0.49	1.85	6	1
1:A:119:TYR:CE1	1:A:122:VAL:CB	0.49	2.94	16	1
1:A:62:PHE:O	1:A:64:LEU:N	0.49	2.45	4	12
1:A:8:VAL:CG2	1:A:115:GLN:NE2	0.49	2.75	6	4
1:A:84:MET:SD	1:A:90:VAL:CG2	0.49	3.01	6	1
1:A:9:ASP:CB	1:A:129:LYS:HG2	0.49	2.36	12	1
1:A:8:VAL:HG12	1:A:8:VAL:O	0.49	2.07	20	1
1:A:100:LYS:HG3	1:A:119:TYR:CD1	0.49	2.41	20	1
1:A:103:ILE:HG23	1:A:103:ILE:O	0.49	2.07	20	1
1:A:114:ILE:C	1:A:116:THR:N	0.49	2.69	14	5
1:A:77:GLU:HB3	1:A:95:ARG:O	0.49	2.06	3	1
1:A:78:LEU:CD2	1:A:93:PHE:HA	0.49	2.37	3	3
1:A:38:LEU:HD12	1:A:49:VAL:HG13	0.49	1.84	4	1
1:A:108:ILE:CG1	1:A:112:GLU:CG	0.49	2.91	4	2
1:A:11:ASN:N	1:A:11:ASN:HD22	0.49	2.05	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:105:VAL:HG11	1:A:107:GLU:HG2	0.49	1.83	20	2
1:A:17:PHE:O	1:A:95:ARG:NH2	0.49	2.45	8	1
1:A:95:ARG:CZ	1:A:102:LEU:CG	0.49	2.90	18	1
1:A:64:LEU:C	1:A:82:TRP:O	0.49	2.56	8	1
1:A:104:ALA:HB2	1:A:117:TYR:CG	0.49	2.43	12	1
1:A:2:PHE:CE2	1:A:108:ILE:HB	0.49	2.43	4	2
1:A:109:SER:H	1:A:112:GLU:CB	0.49	2.20	5	2
1:A:90:VAL:O	1:A:90:VAL:HG12	0.49	2.07	7	2
1:A:115:GLN:C	1:A:125:LYS:HB3	0.49	2.32	13	2
1:A:118:THR:CG2	1:A:121:GLY:HA2	0.49	2.37	16	3
1:A:21:MET:HE1	1:A:102:LEU:CD2	0.49	2.37	9	2
1:A:115:GLN:HB2	1:A:125:LYS:HB3	0.49	1.84	13	2
1:A:77:GLU:CD	1:A:96:VAL:HG11	0.49	2.33	10	2
1:A:47:PHE:CE1	1:A:84:MET:HE2	0.49	2.42	7	1
1:A:91:GLY:HA3	1:A:104:ALA:CB	0.49	2.38	15	3
1:A:7:LYS:HD2	1:A:129:LYS:C	0.49	2.33	2	3
1:A:107:GLU:O	1:A:108:ILE:CG2	0.49	2.60	6	4
1:A:81:THR:CG2	1:A:81:THR:O	0.49	2.61	4	1
1:A:60:VAL:C	1:A:61:VAL:CG2	0.49	2.86	10	1
1:A:102:LEU:HD12	1:A:102:LEU:H	0.49	1.67	12	1
1:A:63:GLU:O	1:A:64:LEU:HB2	0.49	2.08	19	1
1:A:19:GLU:CG	1:A:20:LYS:HG3	0.48	2.38	4	1
1:A:65:GLY:N	1:A:82:TRP:O	0.48	2.46	6	6
1:A:21:MET:CE	1:A:119:TYR:CD2	0.48	2.96	12	2
1:A:2:PHE:CD1	1:A:40:ILE:CD1	0.48	2.96	14	2
1:A:125:LYS:NZ	1:A:125:LYS:HB2	0.48	2.23	13	1
1:A:62:PHE:CD2	1:A:68:PHE:CZ	0.48	3.01	16	1
1:A:114:ILE:C	1:A:125:LYS:HB3	0.48	2.32	10	4
1:A:119:TYR:CD1	1:A:120:GLU:N	0.48	2.81	7	1
1:A:12:GLU:HA	1:A:14:TYR:CD2	0.48	2.43	8	1
1:A:7:LYS:CA	1:A:129:LYS:H	0.48	2.21	16	1
1:A:6:TRP:O	1:A:37:LYS:HG2	0.48	2.08	13	9
1:A:100:LYS:O	1:A:101:GLU:HG3	0.48	2.08	11	4
1:A:93:PHE:HE2	1:A:103:ILE:CG1	0.48	2.21	19	1
1:A:83:THR:O	1:A:84:MET:CB	0.48	2.59	6	1
1:A:119:TYR:CD1	1:A:120:GLU:HB3	0.48	2.42	20	2
1:A:108:ILE:HG13	1:A:112:GLU:O	0.48	2.08	15	5
1:A:38:LEU:CD1	1:A:106:ARG:CD	0.48	2.91	6	1
1:A:72:LEU:HD13	1:A:77:GLU:O	0.48	2.09	7	1
1:A:46:LYS:HB2	1:A:63:GLU:CA	0.48	2.39	8	1
1:A:14:TYR:CE1	1:A:16:LYS:C	0.48	2.92	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:MET:HE3	1:A:22:GLY:N	0.48	2.23	15	1
1:A:81:THR:C	1:A:82:TRP:CD1	0.48	2.91	19	1
1:A:95:ARG:CD	1:A:95:ARG:H	0.48	2.21	1	2
1:A:37:LYS:C	1:A:39:THR:N	0.48	2.70	5	3
1:A:122:VAL:O	1:A:124:ALA:N	0.48	2.46	10	1
1:A:125:LYS:O	1:A:126:ARG:HG3	0.48	2.09	10	1
1:A:5:THR:CA	1:A:39:THR:HG23	0.48	2.35	19	3
1:A:115:GLN:CG	1:A:128:PHE:CE1	0.48	2.95	16	1
1:A:77:GLU:HB2	1:A:96:VAL:HB	0.48	1.85	17	2
1:A:104:ALA:HA	1:A:117:TYR:CD2	0.48	2.44	7	3
1:A:45:ASN:C	1:A:64:LEU:HD21	0.48	2.32	8	2
1:A:8:VAL:HG22	1:A:10:ARG:HH22	0.48	1.63	12	1
1:A:77:GLU:CD	1:A:96:VAL:HB	0.48	2.33	14	1
1:A:127:ILE:CD1	1:A:127:ILE:N	0.48	2.77	13	4
1:A:93:PHE:CD1	1:A:93:PHE:N	0.48	2.78	20	2
1:A:85:GLU:CB	1:A:88:LYS:HG2	0.48	2.38	6	1
1:A:14:TYR:HE1	1:A:18:MET:HE3	0.48	1.68	11	1
1:A:72:LEU:HB3	1:A:78:LEU:HD12	0.48	1.85	11	1
1:A:9:ASP:N	1:A:127:ILE:O	0.48	2.44	16	1
1:A:47:PHE:CD1	1:A:49:VAL:CG2	0.48	2.97	2	1
1:A:112:GLU:N	1:A:112:GLU:CD	0.48	2.71	5	2
1:A:93:PHE:CD1	1:A:100:LYS:O	0.48	2.67	8	1
1:A:58:ILE:CG2	1:A:59:ASP:N	0.48	2.75	17	1
1:A:78:LEU:HD23	1:A:93:PHE:CE1	0.48	2.44	2	1
1:A:126:ARG:O	1:A:127:ILE:CB	0.48	2.61	12	4
1:A:9:ASP:CG	1:A:10:ARG:HD2	0.48	2.34	16	1
1:A:84:MET:HB2	1:A:89:LEU:HA	0.48	1.86	16	2
1:A:93:PHE:C	1:A:93:PHE:HD1	0.47	2.17	19	10
1:A:63:GLU:O	1:A:65:GLY:N	0.47	2.47	5	3
1:A:95:ARG:CG	1:A:100:LYS:HG2	0.47	2.39	4	1
1:A:65:GLY:CA	1:A:81:THR:HB	0.47	2.38	6	1
1:A:95:ARG:NH1	1:A:97:ASP:HB3	0.47	2.23	7	1
1:A:77:GLU:OE2	1:A:96:VAL:HG11	0.47	2.09	14	1
1:A:95:ARG:NH1	1:A:102:LEU:HD21	0.47	2.24	15	1
1:A:38:LEU:HG	1:A:106:ARG:CD	0.47	2.38	4	5
1:A:118:THR:CG2	1:A:121:GLY:CA	0.47	2.92	16	4
1:A:70:TYR:N	1:A:77:GLU:O	0.47	2.46	5	2
1:A:105:VAL:CG2	1:A:106:ARG:N	0.47	2.67	5	1
1:A:13:ASN:O	1:A:14:TYR:CE1	0.47	2.67	8	1
1:A:95:ARG:NE	1:A:102:LEU:CD1	0.47	2.77	10	2
1:A:113:LEU:CD2	1:A:128:PHE:HB2	0.47	2.34	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:108:ILE:HG12	1:A:112:GLU:OE2	0.47	2.09	19	1
1:A:43:GLU:HB3	1:A:46:LYS:HE3	0.47	1.86	3	1
1:A:38:LEU:HG	1:A:106:ARG:HD3	0.47	1.84	5	1
1:A:84:MET:SD	1:A:90:VAL:HG23	0.47	2.49	6	1
1:A:92:LYS:H	1:A:103:ILE:HA	0.47	1.69	7	2
1:A:95:ARG:HD3	1:A:102:LEU:CD1	0.47	2.40	7	1
1:A:2:PHE:CE1	1:A:106:ARG:HB3	0.47	2.43	8	2
1:A:13:ASN:OD1	1:A:122:VAL:HB	0.47	2.09	8	1
1:A:46:LYS:HB2	1:A:62:PHE:C	0.47	2.34	10	2
1:A:10:ARG:HB2	1:A:126:ARG:HD3	0.47	1.86	13	3
1:A:72:LEU:HD23	1:A:102:LEU:HD21	0.47	1.87	13	1
1:A:6:TRP:CD1	1:A:40:ILE:CD1	0.47	2.90	19	2
1:A:37:LYS:HD3	1:A:131:GLU:HB3	0.47	1.87	3	4
1:A:96:VAL:C	1:A:98:ASN:H	0.47	2.17	7	2
1:A:54:ASN:C	1:A:55:PHE:CG	0.47	2.91	7	2
1:A:95:ARG:CZ	1:A:95:ARG:CB	0.47	2.91	5	2
1:A:78:LEU:HA	1:A:95:ARG:HA	0.47	1.86	7	1
1:A:125:LYS:O	1:A:126:ARG:CG	0.47	2.62	15	2
1:A:64:LEU:O	1:A:83:THR:HG22	0.47	2.09	18	1
1:A:117:TYR:HB2	1:A:124:ALA:CB	0.47	2.31	8	1
1:A:71:SER:HA	1:A:77:GLU:C	0.47	2.35	20	1
1:A:88:LYS:HZ2	1:A:107:GLU:CD	0.47	2.18	1	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:115:GLN:CD	0.47	2.87	3	3
1:A:78:LEU:CA	1:A:95:ARG:HA	0.47	2.40	7	1
1:A:103:ILE:HG22	1:A:116:THR:O	0.47	2.09	18	2
1:A:46:LYS:HD3	1:A:61:VAL:HG23	0.47	1.87	1	1
1:A:82:TRP:CD2	1:A:91:GLY:HA2	0.47	2.45	3	3
1:A:93:PHE:CD2	1:A:100:LYS:C	0.47	2.93	5	1
1:A:93:PHE:CE2	1:A:94:LYS:HG2	0.47	2.45	5	1
1:A:108:ILE:HG13	1:A:112:GLU:CG	0.47	2.40	5	1
1:A:11:ASN:C	1:A:126:ARG:HG3	0.47	2.34	8	3
1:A:21:MET:HE1	1:A:72:LEU:CG	0.47	2.40	6	1
1:A:72:LEU:C	1:A:72:LEU:CD1	0.47	2.88	6	4
1:A:85:GLU:HB2	1:A:88:LYS:HG2	0.47	1.85	6	1
1:A:106:ARG:NH2	1:A:115:GLN:OE1	0.47	2.48	18	2
1:A:72:LEU:HB3	1:A:78:LEU:CD1	0.47	2.40	7	1
1:A:113:LEU:HD12	1:A:128:PHE:CA	0.47	2.40	7	1
1:A:12:GLU:O	1:A:124:ALA:HA	0.47	2.09	8	1
1:A:11:ASN:HA	1:A:126:ARG:HG3	0.47	1.86	10	1
1:A:11:ASN:HA	1:A:126:ARG:CB	0.47	2.40	10	1
1:A:100:LYS:O	1:A:101:GLU:CG	0.47	2.63	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:LYS:HB3	1:A:129:LYS:HE3	0.47	1.86	12	1
1:A:10:ARG:NE	1:A:127:ILE:CA	0.47	2.78	12	1
1:A:105:VAL:HG22	1:A:107:GLU:CG	0.47	2.39	12	2
1:A:106:ARG:CG	1:A:113:LEU:HD13	0.47	2.36	12	1
1:A:107:GLU:HB2	1:A:114:ILE:HB	0.47	1.85	12	1
1:A:127:ILE:HG22	1:A:128:PHE:N	0.47	2.24	13	2
1:A:64:LEU:HD12	1:A:83:THR:CG2	0.47	2.37	14	1
1:A:21:MET:CB	1:A:100:LYS:HE3	0.47	2.39	15	1
1:A:90:VAL:C	1:A:92:LYS:H	0.47	2.17	5	2
1:A:12:GLU:HB2	1:A:126:ARG:CG	0.47	2.40	2	1
1:A:114:ILE:O	1:A:125:LYS:HG2	0.47	2.10	2	1
1:A:11:ASN:CB	1:A:14:TYR:CD2	0.47	2.98	5	2
1:A:95:ARG:H	1:A:95:ARG:CD	0.47	2.22	7	1
1:A:12:GLU:N	1:A:125:LYS:O	0.47	2.48	8	3
1:A:126:ARG:HA	1:A:126:ARG:NE	0.47	2.24	16	1
1:A:14:TYR:CA	1:A:17:PHE:CE2	0.47	2.95	8	1
1:A:17:PHE:CD1	1:A:17:PHE:O	0.47	2.68	10	1
1:A:62:PHE:CB	1:A:66:VAL:CG2	0.47	2.93	1	1
1:A:43:GLU:O	1:A:45:ASN:N	0.47	2.48	10	4
1:A:125:LYS:HD3	1:A:125:LYS:N	0.47	2.24	15	6
1:A:13:ASN:ND2	1:A:122:VAL:HG12	0.47	2.24	8	1
1:A:127:ILE:CG2	1:A:128:PHE:CG	0.47	2.98	12	1
1:A:45:ASN:C	1:A:64:LEU:HD23	0.47	2.35	14	2
1:A:66:VAL:HG23	1:A:68:PHE:CE2	0.47	2.44	14	1
1:A:125:LYS:O	1:A:126:ARG:HG2	0.47	2.10	15	1
1:A:115:GLN:HB3	1:A:117:TYR:CE1	0.47	2.45	18	1
1:A:78:LEU:HD23	1:A:93:PHE:HA	0.47	1.86	19	1
1:A:108:ILE:HG12	1:A:112:GLU:HG2	0.47	1.86	19	1
1:A:19:GLU:HG2	1:A:20:LYS:HG3	0.46	1.87	4	2
1:A:65:GLY:HA2	1:A:81:THR:CB	0.46	2.39	6	1
1:A:65:GLY:HA2	1:A:81:THR:HB	0.46	1.86	17	2
1:A:62:PHE:CD1	1:A:62:PHE:N	0.46	2.83	13	4
1:A:39:THR:HG1	1:A:50:LYS:HB3	0.46	1.68	1	1
1:A:37:LYS:NZ	1:A:131:GLU:HG3	0.46	2.25	2	1
1:A:123:GLU:HG2	1:A:125:LYS:HD2	0.46	1.88	10	3
1:A:47:PHE:O	1:A:49:VAL:N	0.46	2.48	3	6
1:A:7:LYS:CB	1:A:129:LYS:HB3	0.46	2.40	14	5
1:A:123:GLU:CD	1:A:125:LYS:HD2	0.46	2.34	5	3
1:A:83:THR:O	1:A:84:MET:CG	0.46	2.63	6	1
1:A:12:GLU:C	1:A:14:TYR:N	0.46	2.73	8	1
1:A:10:ARG:C	1:A:10:ARG:CD	0.46	2.82	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:105:VAL:O	1:A:106:ARG:NH2	0.46	2.48	20	1
1:A:13:ASN:HD21	1:A:122:VAL:HG12	0.46	1.69	8	1
1:A:91:GLY:H	1:A:103:ILE:C	0.46	2.17	12	3
1:A:9:ASP:HB3	1:A:10:ARG:HD3	0.46	1.88	11	1
1:A:122:VAL:O	1:A:123:GLU:CB	0.46	2.64	12	3
1:A:10:ARG:CZ	1:A:127:ILE:N	0.46	2.77	12	1
1:A:10:ARG:CZ	1:A:127:ILE:CA	0.46	2.94	12	1
1:A:90:VAL:CG1	1:A:92:LYS:HE2	0.46	2.39	15	1
1:A:20:LYS:CB	1:A:119:TYR:CE2	0.46	2.98	17	1
1:A:78:LEU:CD1	1:A:102:LEU:HD12	0.46	2.35	17	1
1:A:69:ALA:HB1	1:A:77:GLU:OE2	0.46	2.09	18	1
1:A:6:TRP:CE3	1:A:113:LEU:HG	0.46	2.45	19	5
1:A:7:LYS:CE	1:A:129:LYS:HB2	0.46	2.40	9	2
1:A:21:MET:HE3	1:A:21:MET:O	0.46	2.11	3	2
1:A:95:ARG:NE	1:A:95:ARG:CA	0.46	2.77	5	1
1:A:2:PHE:CE1	1:A:40:ILE:HD13	0.46	2.45	8	1
1:A:72:LEU:CB	1:A:78:LEU:HD12	0.46	2.41	11	1
1:A:69:ALA:CB	1:A:79:THR:HG22	0.46	2.41	12	1
1:A:50:LYS:O	1:A:51:GLU:CB	0.46	2.63	11	12
1:A:20:LYS:CB	1:A:119:TYR:OH	0.46	2.64	16	1
1:A:23:ILE:HD11	1:A:75:GLY:HA2	0.46	1.86	16	1
1:A:109:SER:H	1:A:112:GLU:CG	0.46	2.22	1	3
1:A:64:LEU:HD13	1:A:84:MET:HG2	0.46	1.87	2	1
1:A:9:ASP:HB2	1:A:128:PHE:C	0.46	2.36	7	2
1:A:83:THR:N	1:A:90:VAL:O	0.46	2.48	5	1
1:A:105:VAL:HG22	1:A:116:THR:N	0.46	2.26	5	1
1:A:54:ASN:C	1:A:55:PHE:CD1	0.46	2.94	15	2
1:A:7:LYS:O	1:A:8:VAL:HG23	0.46	2.11	13	6
1:A:89:LEU:C	1:A:90:VAL:CG2	0.46	2.88	4	7
1:A:17:PHE:HB2	1:A:119:TYR:CE1	0.46	2.46	4	1
1:A:66:VAL:C	1:A:81:THR:HG22	0.46	2.35	5	2
1:A:100:LYS:O	1:A:101:GLU:CB	0.46	2.63	5	1
1:A:62:PHE:CE1	1:A:82:TRP:NE1	0.46	2.83	6	1
1:A:115:GLN:HB2	1:A:125:LYS:HA	0.46	1.86	8	4
1:A:102:LEU:HD23	1:A:119:TYR:HB3	0.46	1.85	17	1
1:A:82:TRP:HA	1:A:90:VAL:O	0.46	2.11	19	2
1:A:125:LYS:N	1:A:125:LYS:CD	0.46	2.79	15	3
1:A:93:PHE:CG	1:A:101:GLU:HG3	0.46	2.46	17	5
1:A:79:THR:HG23	1:A:79:THR:O	0.46	2.10	15	3
1:A:10:ARG:CG	1:A:126:ARG:HB2	0.46	2.40	12	1
1:A:49:VAL:HG22	1:A:60:VAL:HG12	0.46	1.87	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:LYS:CG	1:A:129:LYS:O	0.46	2.62	16	1
1:A:118:THR:HG23	1:A:122:VAL:N	0.46	2.26	17	1
1:A:65:GLY:HA2	1:A:81:THR:HG23	0.46	1.88	18	1
1:A:70:TYR:C	1:A:77:GLU:O	0.46	2.59	5	1
1:A:101:GLU:O	1:A:118:THR:C	0.46	2.59	5	2
1:A:88:LYS:CE	1:A:107:GLU:HG2	0.46	2.40	7	1
1:A:17:PHE:CE2	1:A:21:MET:HE1	0.46	2.46	9	1
1:A:107:GLU:CD	1:A:114:ILE:HG13	0.46	2.35	11	1
1:A:80:GLY:C	1:A:81:THR:HG22	0.46	2.36	13	1
1:A:78:LEU:N	1:A:95:ARG:CB	0.46	2.79	1	1
1:A:106:ARG:C	1:A:108:ILE:N	0.46	2.74	1	11
1:A:105:VAL:O	1:A:106:ARG:HB2	0.46	2.11	20	3
1:A:110:GLY:O	1:A:111:ASN:C	0.46	2.59	4	1
1:A:119:TYR:O	1:A:119:TYR:CD2	0.46	2.69	5	1
1:A:89:LEU:O	1:A:90:VAL:CG2	0.45	2.64	11	3
1:A:108:ILE:C	1:A:112:GLU:HG3	0.45	2.34	4	1
1:A:82:TRP:HA	1:A:91:GLY:O	0.45	2.11	7	1
1:A:111:ASN:N	1:A:112:GLU:OE2	0.45	2.49	7	1
1:A:47:PHE:CE2	1:A:89:LEU:HD11	0.45	2.45	11	1
1:A:43:GLU:N	1:A:46:LYS:O	0.45	2.49	13	2
1:A:119:TYR:CZ	1:A:122:VAL:HG21	0.45	2.47	17	1
1:A:72:LEU:HD23	1:A:78:LEU:HD12	0.45	1.88	3	1
1:A:72:LEU:CD1	1:A:72:LEU:C	0.45	2.88	14	2
1:A:72:LEU:CB	1:A:78:LEU:HD11	0.45	2.41	4	1
1:A:95:ARG:O	1:A:96:VAL:HB	0.45	2.11	5	2
1:A:60:VAL:HG12	1:A:62:PHE:HD1	0.45	1.68	7	1
1:A:113:LEU:CD1	1:A:128:PHE:CB	0.45	2.94	7	2
1:A:7:LYS:CB	1:A:129:LYS:N	0.45	2.78	2	6
1:A:10:ARG:HB2	1:A:126:ARG:CD	0.45	2.41	3	3
1:A:78:LEU:HD12	1:A:95:ARG:CZ	0.45	2.40	2	2
1:A:81:THR:O	1:A:93:PHE:CD1	0.45	2.68	2	1
1:A:108:ILE:HG12	1:A:112:GLU:CG	0.45	2.42	4	1
1:A:116:THR:HA	1:A:125:LYS:CG	0.45	2.42	12	3
1:A:78:LEU:N	1:A:95:ARG:HA	0.45	2.26	7	2
1:A:60:VAL:O	1:A:61:VAL:HG23	0.45	2.12	10	1
1:A:100:LYS:HG3	1:A:120:GLU:CD	0.45	2.36	15	1
1:A:110:GLY:O	1:A:112:GLU:OE1	0.45	2.34	19	1
1:A:21:MET:SD	1:A:102:LEU:HD21	0.45	2.50	1	2
1:A:2:PHE:O	1:A:6:TRP:NE1	0.45	2.49	2	1
1:A:69:ALA:CA	1:A:79:THR:HA	0.45	2.42	6	1
1:A:10:ARG:C	1:A:126:ARG:CB	0.45	2.90	16	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:MET:HA	1:A:90:VAL:HG23	0.45	1.87	16	1
1:A:71:SER:N	1:A:77:GLU:O	0.45	2.49	20	1
1:A:82:TRP:HA	1:A:91:GLY:C	0.45	2.37	2	1
1:A:108:ILE:HG13	1:A:112:GLU:HG2	0.45	1.88	5	2
1:A:6:TRP:C	1:A:7:LYS:HG3	0.45	2.34	15	4
1:A:7:LYS:HE3	1:A:37:LYS:HG3	0.45	1.87	7	2
1:A:119:TYR:CD1	1:A:119:TYR:C	0.45	2.92	7	1
1:A:38:LEU:C	1:A:39:THR:O	0.45	2.59	10	1
1:A:46:LYS:HA	1:A:63:GLU:CA	0.45	2.42	11	1
1:A:76:THR:CG2	1:A:77:GLU:N	0.45	2.79	17	5
1:A:10:ARG:HG2	1:A:126:ARG:CA	0.45	2.41	12	1
1:A:114:ILE:O	1:A:116:THR:OG1	0.45	2.33	12	1
1:A:127:ILE:HG23	1:A:128:PHE:H	0.45	1.71	16	1
1:A:61:VAL:O	1:A:61:VAL:HG22	0.45	2.12	19	1
1:A:64:LEU:N	1:A:64:LEU:CD2	0.45	2.79	2	1
1:A:78:LEU:HD23	1:A:93:PHE:CD1	0.45	2.47	2	1
1:A:123:GLU:CG	1:A:125:LYS:HD2	0.45	2.41	8	5
1:A:46:LYS:HB2	1:A:63:GLU:HA	0.45	1.88	8	7
1:A:79:THR:O	1:A:79:THR:HG23	0.45	2.11	5	1
1:A:77:GLU:CB	1:A:96:VAL:HG23	0.45	2.41	8	1
1:A:13:ASN:ND2	1:A:122:VAL:HG11	0.45	2.27	9	1
1:A:72:LEU:CB	1:A:95:ARG:NH2	0.45	2.79	15	3
1:A:97:ASP:O	1:A:98:ASN:HB2	0.45	2.11	1	1
1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CD1	0.45	2.83	5	1
1:A:82:TRP:CE3	1:A:89:LEU:CD2	0.45	2.99	6	1
1:A:106:ARG:N	1:A:114:ILE:O	0.45	2.50	6	2
1:A:91:GLY:HA3	1:A:104:ALA:CA	0.45	2.41	10	4
1:A:118:THR:HA	1:A:123:GLU:HA	0.45	1.89	8	1
1:A:124:ALA:C	1:A:125:LYS:CG	0.45	2.90	3	4
1:A:52:SER:O	1:A:53:SER:C	0.45	2.59	6	2
1:A:5:THR:HA	1:A:39:THR:HA	0.45	1.88	5	1
1:A:47:PHE:CE1	1:A:64:LEU:HB3	0.45	2.46	7	1
1:A:95:ARG:NE	1:A:100:LYS:CB	0.45	2.80	8	1
1:A:38:LEU:HG	1:A:106:ARG:NE	0.45	2.27	17	2
1:A:10:ARG:O	1:A:126:ARG:HB2	0.45	2.11	18	3
1:A:66:VAL:CG2	1:A:68:PHE:CZ	0.45	2.99	14	1
1:A:102:LEU:HA	1:A:119:TYR:HB3	0.45	1.88	15	1
1:A:95:ARG:HG2	1:A:100:LYS:CB	0.45	2.42	16	1
1:A:14:TYR:HA	1:A:124:ALA:HB1	0.45	1.89	19	1
1:A:5:THR:HB	1:A:131:GLU:N	0.45	2.27	5	2
1:A:93:PHE:CD2	1:A:94:LYS:N	0.45	2.83	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:127:ILE:HG23	1:A:128:PHE:N	0.45	2.27	7	4
1:A:14:TYR:O	1:A:17:PHE:CD2	0.45	2.70	8	1
1:A:8:VAL:HG22	1:A:128:PHE:CZ	0.45	2.47	16	1
1:A:23:ILE:CD1	1:A:75:GLY:HA2	0.45	2.42	6	2
1:A:88:LYS:HA	1:A:107:GLU:CA	0.45	2.42	6	1
1:A:95:ARG:CD	1:A:102:LEU:CD1	0.45	2.94	7	1
1:A:21:MET:SD	1:A:95:ARG:CZ	0.44	3.05	17	2
1:A:71:SER:N	1:A:77:GLU:HA	0.44	2.27	13	3
1:A:8:VAL:HG21	1:A:115:GLN:NE2	0.44	2.26	6	1
1:A:6:TRP:CH2	1:A:112:GLU:OE1	0.44	2.70	7	1
1:A:90:VAL:C	1:A:103:ILE:O	0.44	2.60	20	2
1:A:71:SER:OG	1:A:74:ASP:N	0.44	2.50	10	1
1:A:18:MET:HG2	1:A:72:LEU:HD11	0.44	1.89	17	1
1:A:91:GLY:CA	1:A:104:ALA:O	0.44	2.65	4	4
1:A:38:LEU:HD23	1:A:115:GLN:HE22	0.44	1.72	5	1
1:A:77:GLU:HG2	1:A:96:VAL:HG21	0.44	1.90	5	1
1:A:93:PHE:CD1	1:A:94:LYS:HG3	0.44	2.48	8	2
1:A:93:PHE:CD1	1:A:101:GLU:CG	0.44	3.00	11	1
1:A:112:GLU:C	1:A:127:ILE:HG13	0.44	2.38	14	1
1:A:126:ARG:NE	1:A:126:ARG:HA	0.44	2.28	19	1
1:A:93:PHE:CE2	1:A:103:ILE:N	0.44	2.86	20	1
1:A:80:GLY:O	1:A:81:THR:HG22	0.44	2.11	1	1
1:A:72:LEU:N	1:A:78:LEU:HD13	0.44	2.27	2	1
1:A:72:LEU:CA	1:A:78:LEU:HD13	0.44	2.42	4	2
1:A:84:MET:CA	1:A:90:VAL:HG23	0.44	2.42	9	2
1:A:130:LYS:CG	1:A:131:GLU:N	0.44	2.80	16	2
1:A:81:THR:O	1:A:82:TRP:CG	0.44	2.70	19	1
1:A:21:MET:C	1:A:21:MET:CE	0.44	2.91	3	1
1:A:45:ASN:C	1:A:64:LEU:HD12	0.44	2.38	3	1
1:A:13:ASN:HB2	1:A:123:GLU:C	0.44	2.37	8	1
1:A:114:ILE:O	1:A:115:GLN:HB2	0.44	2.13	10	1
1:A:70:TYR:CD1	1:A:71:SER:N	0.44	2.85	13	1
1:A:115:GLN:HG2	1:A:128:PHE:CZ	0.44	2.47	16	1
1:A:56:ARG:O	1:A:58:ILE:N	0.44	2.51	6	1
1:A:125:LYS:C	1:A:126:ARG:CD	0.44	2.90	10	1
1:A:38:LEU:O	1:A:51:GLU:N	0.44	2.50	12	1
1:A:2:PHE:CE2	1:A:84:MET:HE3	0.44	2.48	14	1
1:A:38:LEU:CD2	1:A:106:ARG:CZ	0.44	2.95	14	1
1:A:46:LYS:C	1:A:47:PHE:CG	0.44	2.96	19	1
1:A:95:ARG:HB2	1:A:95:ARG:CZ	0.44	2.43	7	1
1:A:95:ARG:C	1:A:97:ASP:N	0.44	2.75	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:ASN:HB2	1:A:124:ALA:CA	0.44	2.42	8	1
1:A:93:PHE:CD1	1:A:94:LYS:N	0.44	2.85	8	1
1:A:5:THR:HB	1:A:131:GLU:CB	0.44	2.42	9	1
1:A:46:LYS:C	1:A:46:LYS:HD2	0.44	2.37	10	1
1:A:118:THR:HA	1:A:123:GLU:N	0.44	2.27	17	2
1:A:94:LYS:C	1:A:95:ARG:O	0.44	2.61	14	4
1:A:106:ARG:HA	1:A:114:ILE:C	0.44	2.37	14	1
1:A:77:GLU:C	1:A:95:ARG:CB	0.44	2.90	1	1
1:A:12:GLU:HB2	1:A:126:ARG:HG2	0.44	1.90	2	1
1:A:106:ARG:O	1:A:113:LEU:C	0.44	2.60	9	2
1:A:38:LEU:HD12	1:A:106:ARG:HD3	0.44	1.88	6	1
1:A:95:ARG:HD3	1:A:100:LYS:CB	0.44	2.42	8	2
1:A:2:PHE:CE2	1:A:107:GLU:O	0.44	2.71	11	2
1:A:10:ARG:CG	1:A:127:ILE:N	0.44	2.81	12	1
1:A:13:ASN:O	1:A:124:ALA:HB2	0.44	2.13	12	1
1:A:105:VAL:CG2	1:A:107:GLU:HG2	0.44	2.43	17	2
1:A:20:LYS:HB3	1:A:119:TYR:CE2	0.44	2.48	17	1
1:A:79:THR:CG2	1:A:80:GLY:N	0.44	2.79	4	1
1:A:127:ILE:HG23	1:A:128:PHE:CG	0.44	2.48	11	3
1:A:57:ASN:O	1:A:58:ILE:HB	0.44	2.13	11	1
1:A:6:TRP:HA	1:A:130:LYS:CA	0.44	2.40	16	1
1:A:7:LYS:H	1:A:128:PHE:C	0.44	2.20	16	1
1:A:23:ILE:HG23	1:A:27:LYS:HG3	0.44	1.89	1	2
1:A:107:GLU:HB3	1:A:114:ILE:HG13	0.44	1.89	3	6
1:A:84:MET:CG	1:A:85:GLU:H	0.44	2.24	6	1
1:A:110:GLY:O	1:A:111:ASN:O	0.44	2.35	7	1
1:A:9:ASP:CG	1:A:10:ARG:HD3	0.44	2.38	13	1
1:A:45:ASN:O	1:A:64:LEU:HD12	0.44	2.13	15	1
1:A:9:ASP:CB	1:A:129:LYS:HG3	0.44	2.43	16	1
1:A:93:PHE:CZ	1:A:103:ILE:CG1	0.44	3.01	20	1
1:A:14:TYR:HD1	1:A:15:GLU:N	0.43	2.10	8	1
1:A:81:THR:C	1:A:92:LYS:HB2	0.43	2.38	8	1
1:A:119:TYR:CD2	1:A:120:GLU:HB3	0.43	2.47	9	4
1:A:38:LEU:CG	1:A:106:ARG:CZ	0.43	2.96	11	1
1:A:92:LYS:O	1:A:93:PHE:CB	0.43	2.65	18	1
1:A:95:ARG:HH11	1:A:100:LYS:CB	0.43	2.26	18	1
1:A:66:VAL:C	1:A:81:THR:CG2	0.43	2.90	19	1
1:A:18:MET:C	1:A:23:ILE:HB	0.43	2.39	6	2
1:A:7:LYS:CB	1:A:129:LYS:CA	0.43	2.94	12	7
1:A:82:TRP:CD1	1:A:91:GLY:O	0.43	2.71	10	3
1:A:10:ARG:HD3	1:A:126:ARG:CB	0.43	2.43	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:127:ILE:HD12	1:A:127:ILE:N	0.43	2.28	15	1
1:A:110:GLY:O	1:A:112:GLU:HG3	0.43	2.12	19	1
1:A:113:LEU:HD23	1:A:113:LEU:HA	0.43	1.60	2	1
1:A:43:GLU:HB3	1:A:46:LYS:CE	0.43	2.43	3	2
1:A:103:ILE:CG2	1:A:105:VAL:CG1	0.43	2.97	7	1
1:A:93:PHE:HB2	1:A:100:LYS:O	0.43	2.13	8	1
1:A:8:VAL:HG11	1:A:14:TYR:CZ	0.43	2.49	9	1
1:A:106:ARG:HG3	1:A:128:PHE:CE1	0.43	2.48	16	1
1:A:21:MET:HE1	1:A:76:THR:HG22	0.43	1.90	17	1
1:A:106:ARG:HG2	1:A:113:LEU:CD2	0.43	2.40	1	1
1:A:2:PHE:CE1	1:A:89:LEU:CD1	0.43	3.01	2	1
1:A:45:ASN:HB3	1:A:64:LEU:CD1	0.43	2.43	3	1
1:A:70:TYR:O	1:A:70:TYR:CG	0.43	2.70	5	1
1:A:72:LEU:HD22	1:A:72:LEU:N	0.43	2.29	7	1
1:A:12:GLU:HA	1:A:14:TYR:CE2	0.43	2.48	8	1
1:A:21:MET:HE1	1:A:77:GLU:O	0.43	2.12	8	1
1:A:72:LEU:HD13	1:A:73:ALA:HB3	0.43	1.90	8	1
1:A:78:LEU:O	1:A:80:GLY:N	0.43	2.51	14	1
1:A:118:THR:HG22	1:A:121:GLY:HA2	0.43	1.89	18	2
1:A:78:LEU:HG	1:A:95:ARG:NE	0.43	2.28	19	1
1:A:105:VAL:HG11	1:A:107:GLU:CG	0.43	2.43	20	1
1:A:106:ARG:NE	1:A:115:GLN:OE1	0.43	2.51	3	2
1:A:2:PHE:CZ	1:A:107:GLU:O	0.43	2.71	4	3
1:A:19:GLU:OE2	1:A:25:VAL:HG12	0.43	2.14	5	1
1:A:6:TRP:O	1:A:37:LYS:CG	0.43	2.66	6	3
1:A:84:MET:HA	1:A:88:LYS:O	0.43	2.14	19	3
1:A:100:LYS:C	1:A:101:GLU:CD	0.43	2.87	14	1
1:A:91:GLY:H	1:A:104:ALA:C	0.43	2.22	19	2
1:A:8:VAL:HG13	1:A:115:GLN:HE22	0.43	1.69	16	1
1:A:2:PHE:O	1:A:3:ASP:C	0.43	2.61	6	1
1:A:5:THR:HG1	1:A:131:GLU:C	0.43	2.21	6	2
1:A:80:GLY:CA	1:A:93:PHE:O	0.43	2.66	7	1
1:A:105:VAL:O	1:A:115:GLN:C	0.43	2.62	12	2
1:A:17:PHE:CE2	1:A:18:MET:HG2	0.43	2.48	10	1
1:A:100:LYS:HA	1:A:120:GLU:CD	0.43	2.38	12	1
1:A:69:ALA:N	1:A:78:LEU:O	0.43	2.51	20	1
1:A:46:LYS:HD3	1:A:61:VAL:CG2	0.43	2.44	1	1
1:A:94:LYS:O	1:A:95:ARG:O	0.43	2.37	9	2
1:A:7:LYS:HD2	1:A:129:LYS:O	0.43	2.14	2	2
1:A:46:LYS:CA	1:A:63:GLU:HA	0.43	2.44	3	1
1:A:78:LEU:N	1:A:95:ARG:HH21	0.43	2.12	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:SER:OG	1:A:54:ASN:N	0.43	2.49	10	2
1:A:10:ARG:HD2	1:A:11:ASN:N	0.43	2.27	12	1
1:A:18:MET:HE2	1:A:72:LEU:HD11	0.43	1.90	12	1
1:A:47:PHE:CD1	1:A:49:VAL:HG13	0.43	2.48	16	1
1:A:2:PHE:N	1:A:2:PHE:CD1	0.43	2.87	17	1
1:A:119:TYR:C	1:A:120:GLU:HG3	0.43	2.39	4	2
1:A:84:MET:HB3	1:A:88:LYS:C	0.43	2.39	6	1
1:A:38:LEU:CD1	1:A:38:LEU:C	0.43	2.91	7	1
1:A:38:LEU:O	1:A:50:LYS:N	0.43	2.51	13	4
1:A:117:TYR:O	1:A:124:ALA:N	0.43	2.51	8	1
1:A:93:PHE:CZ	1:A:101:GLU:CA	0.43	3.00	19	1
1:A:95:ARG:NH2	1:A:98:ASN:C	0.43	2.73	1	1
1:A:43:GLU:CB	1:A:46:LYS:CE	0.43	2.97	8	2
1:A:107:GLU:O	1:A:108:ILE:CB	0.43	2.67	6	1
1:A:66:VAL:O	1:A:68:PHE:N	0.43	2.51	8	1
1:A:3:ASP:OD1	1:A:3:ASP:N	0.43	2.52	9	1
1:A:8:VAL:HG13	1:A:126:ARG:CB	0.43	2.44	10	1
1:A:104:ALA:CB	1:A:117:TYR:CG	0.43	3.02	12	1
1:A:128:PHE:CD1	1:A:130:LYS:N	0.43	2.87	14	1
1:A:64:LEU:HD23	1:A:83:THR:CA	0.43	2.44	17	1
1:A:102:LEU:N	1:A:119:TYR:HA	0.42	2.27	1	1
1:A:93:PHE:CE2	1:A:94:LYS:HG3	0.42	2.47	5	1
1:A:38:LEU:HD12	1:A:40:ILE:HD11	0.42	1.91	8	1
1:A:5:THR:HG21	1:A:131:GLU:CB	0.42	2.43	19	2
1:A:78:LEU:HD12	1:A:95:ARG:NH2	0.42	2.29	2	1
1:A:118:THR:CG2	1:A:121:GLY:C	0.42	2.92	3	2
1:A:48:THR:N	1:A:61:VAL:HG13	0.42	2.29	16	3
1:A:64:LEU:CD2	1:A:64:LEU:N	0.42	2.81	8	1
1:A:48:THR:O	1:A:48:THR:HG22	0.42	2.14	10	1
1:A:128:PHE:C	1:A:128:PHE:HD1	0.42	2.21	14	2
1:A:114:ILE:C	1:A:115:GLN:O	0.42	2.59	13	1
1:A:18:MET:HB3	1:A:23:ILE:HG21	0.42	1.91	1	1
1:A:78:LEU:HG	1:A:95:ARG:CZ	0.42	2.44	3	1
1:A:11:ASN:HB3	1:A:14:TYR:CD2	0.42	2.49	5	1
1:A:10:ARG:O	1:A:11:ASN:CB	0.42	2.67	12	1
1:A:91:GLY:N	1:A:103:ILE:C	0.42	2.78	19	1
1:A:7:LYS:O	1:A:8:VAL:CG2	0.42	2.67	2	5
1:A:21:MET:HE3	1:A:119:TYR:CG	0.42	2.49	2	1
1:A:11:ASN:HB2	1:A:14:TYR:CB	0.42	2.44	3	2
1:A:114:ILE:HD13	1:A:114:ILE:H	0.42	1.74	6	1
1:A:7:LYS:HZ1	1:A:131:GLU:HG2	0.42	1.73	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:5:THR:HG23	1:A:131:GLU:OXT	0.42	2.15	15	1
1:A:7:LYS:CG	1:A:129:LYS:CA	0.42	2.97	15	4
1:A:23:ILE:HD12	1:A:75:GLY:CA	0.42	2.45	8	2
1:A:84:MET:HB2	1:A:90:VAL:N	0.42	2.28	6	1
1:A:38:LEU:CD1	1:A:49:VAL:HG13	0.42	2.44	7	1
1:A:113:LEU:CG	1:A:128:PHE:HB3	0.42	2.45	7	1
1:A:38:LEU:HD12	1:A:40:ILE:HG12	0.42	1.92	11	1
1:A:72:LEU:C	1:A:72:LEU:HD13	0.42	2.38	14	1
1:A:47:PHE:CE1	1:A:49:VAL:HG11	0.42	2.49	16	1
1:A:118:THR:CG2	1:A:122:VAL:N	0.42	2.82	17	1
1:A:18:MET:C	1:A:23:ILE:HG12	0.42	2.39	18	1
1:A:1:ALA:O	1:A:2:PHE:HB2	0.42	2.13	19	1
1:A:39:THR:HB	1:A:50:LYS:HB2	0.42	1.90	1	2
1:A:12:GLU:OE1	1:A:13:ASN:N	0.42	2.52	2	1
1:A:105:VAL:HB	1:A:115:GLN:O	0.42	2.15	8	1
1:A:13:ASN:ND2	1:A:122:VAL:CG1	0.42	2.82	9	1
1:A:77:GLU:CB	1:A:96:VAL:HB	0.42	2.44	10	2
1:A:7:LYS:O	1:A:129:LYS:HG3	0.42	2.13	12	1
1:A:23:ILE:O	1:A:26:VAL:HG22	0.42	2.15	12	1
1:A:14:TYR:CE2	1:A:18:MET:HE3	0.42	2.50	16	1
1:A:21:MET:CE	1:A:119:TYR:HB3	0.42	2.45	2	1
1:A:65:GLY:CA	1:A:81:THR:CB	0.42	2.98	6	1
1:A:19:GLU:HA	1:A:23:ILE:HB	0.42	1.92	7	2
1:A:120:GLU:O	1:A:120:GLU:CG	0.42	2.68	19	3
1:A:91:GLY:HA3	1:A:103:ILE:C	0.42	2.39	8	1
1:A:17:PHE:CE2	1:A:102:LEU:CD2	0.42	3.02	17	1
1:A:106:ARG:NH1	1:A:115:GLN:OE1	0.42	2.53	20	1
1:A:92:LYS:CA	1:A:103:ILE:HD13	0.42	2.41	1	2
1:A:18:MET:CE	1:A:72:LEU:HD21	0.42	2.34	4	1
1:A:39:THR:HG21	1:A:50:LYS:HD2	0.42	1.90	8	2
1:A:77:GLU:CG	1:A:96:VAL:CG2	0.42	2.97	8	1
1:A:119:TYR:O	1:A:120:GLU:CB	0.42	2.68	11	2
1:A:129:LYS:O	1:A:129:LYS:NZ	0.42	2.49	10	1
1:A:89:LEU:O	1:A:105:VAL:HG23	0.42	2.14	12	1
1:A:125:LYS:HB2	1:A:125:LYS:HZ1	0.42	1.75	13	1
1:A:38:LEU:HD21	1:A:106:ARG:CZ	0.42	2.45	14	1
1:A:121:GLY:C	1:A:122:VAL:HG23	0.42	2.40	4	1
1:A:113:LEU:C	1:A:115:GLN:H	0.42	2.23	5	1
1:A:107:GLU:CB	1:A:114:ILE:CG1	0.42	2.96	6	1
1:A:14:TYR:CD1	1:A:15:GLU:N	0.42	2.88	8	1
1:A:115:GLN:O	1:A:125:LYS:HB3	0.42	2.14	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:LEU:HB3	1:A:105:VAL:C	0.42	2.39	18	1
1:A:113:LEU:C	1:A:115:GLN:N	0.42	2.77	18	1
1:A:17:PHE:CD1	1:A:18:MET:N	0.42	2.88	13	2
1:A:88:LYS:HB3	1:A:107:GLU:HG2	0.42	1.92	7	1
1:A:2:PHE:CZ	1:A:106:ARG:HB3	0.42	2.49	9	3
1:A:21:MET:HE3	1:A:95:ARG:CB	0.42	2.45	8	1
1:A:21:MET:HG2	1:A:95:ARG:NH1	0.42	2.29	8	1
1:A:94:LYS:C	1:A:99:GLY:HA2	0.42	2.39	8	1
1:A:50:LYS:O	1:A:51:GLU:HB2	0.42	2.15	16	2
1:A:10:ARG:CD	1:A:127:ILE:H	0.42	2.23	12	1
1:A:127:ILE:CG2	1:A:128:PHE:H	0.42	2.26	16	1
1:A:80:GLY:O	1:A:81:THR:HB	0.42	2.13	18	1
1:A:100:LYS:HG3	1:A:119:TYR:CE1	0.42	2.50	20	1
1:A:47:PHE:C	1:A:61:VAL:HG13	0.41	2.40	4	1
1:A:58:ILE:O	1:A:59:ASP:CB	0.41	2.67	18	2
1:A:84:MET:HB3	1:A:89:LEU:C	0.41	2.38	6	1
1:A:108:ILE:CA	1:A:112:GLU:HG2	0.41	2.45	7	1
1:A:64:LEU:CB	1:A:83:THR:HG23	0.41	2.42	8	1
1:A:6:TRP:CD2	1:A:113:LEU:HG	0.41	2.50	12	1
1:A:2:PHE:CE1	1:A:40:ILE:HD12	0.41	2.50	13	1
1:A:113:LEU:CB	1:A:128:PHE:HD1	0.41	2.28	16	1
1:A:77:GLU:HG2	1:A:96:VAL:CB	0.41	2.44	17	1
1:A:95:ARG:HH11	1:A:100:LYS:HB3	0.41	1.75	18	1
1:A:5:THR:CB	1:A:39:THR:HG23	0.41	2.45	20	2
1:A:14:TYR:CA	1:A:124:ALA:HB1	0.41	2.45	19	1
1:A:2:PHE:N	1:A:108:ILE:CD1	0.41	2.83	2	1
1:A:95:ARG:O	1:A:96:VAL:CB	0.41	2.68	3	2
1:A:106:ARG:CA	1:A:113:LEU:O	0.41	2.68	7	1
1:A:62:PHE:HB2	1:A:66:VAL:CG1	0.41	2.45	9	1
1:A:47:PHE:CZ	1:A:64:LEU:CG	0.41	3.02	15	1
1:A:89:LEU:CD1	1:A:106:ARG:NH2	0.41	2.82	17	1
1:A:18:MET:HG2	1:A:72:LEU:CD1	0.41	2.45	20	1
1:A:90:VAL:CA	1:A:105:VAL:HG22	0.41	2.41	1	1
1:A:117:TYR:CD2	1:A:124:ALA:O	0.41	2.74	2	1
1:A:108:ILE:CA	1:A:112:GLU:HG3	0.41	2.45	4	1
1:A:119:TYR:CD2	1:A:120:GLU:HG3	0.41	2.50	4	1
1:A:39:THR:O	1:A:40:ILE:CB	0.41	2.68	5	1
1:A:13:ASN:CG	1:A:122:VAL:C	0.41	2.89	8	1
1:A:90:VAL:O	1:A:103:ILE:HD13	0.41	2.16	8	1
1:A:48:THR:HG23	1:A:61:VAL:CG2	0.41	2.46	9	1
1:A:90:VAL:CG1	1:A:92:LYS:HG2	0.41	2.45	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:ASP:CG	1:A:10:ARG:CD	0.41	2.92	11	1
1:A:78:LEU:HG	1:A:95:ARG:HE	0.41	1.75	19	1
1:A:78:LEU:HD11	1:A:102:LEU:HD11	0.41	1.92	2	2
1:A:66:VAL:C	1:A:67:ASP:CG	0.41	2.88	3	1
1:A:107:GLU:HB2	1:A:114:ILE:HG12	0.41	1.91	6	1
1:A:4:GLY:C	1:A:5:THR:HG23	0.41	2.40	9	1
1:A:89:LEU:C	1:A:105:VAL:HB	0.41	2.40	10	1
1:A:93:PHE:CG	1:A:101:GLU:CG	0.41	3.04	11	1
1:A:104:ALA:HB2	1:A:117:TYR:CE2	0.41	2.49	12	1
1:A:112:GLU:O	1:A:113:LEU:CD1	0.41	2.67	16	1
1:A:89:LEU:HD11	1:A:106:ARG:HH21	0.41	1.75	17	1
1:A:17:PHE:CE2	1:A:117:TYR:CG	0.41	3.09	19	1
1:A:90:VAL:O	1:A:103:ILE:HD12	0.41	2.15	20	1
1:A:88:LYS:HB2	1:A:107:GLU:HG2	0.41	1.92	2	1
1:A:78:LEU:CD2	1:A:102:LEU:HD12	0.41	2.43	3	1
1:A:7:LYS:CG	1:A:130:LYS:N	0.41	2.75	6	2
1:A:108:ILE:HG13	1:A:113:LEU:HD23	0.41	1.91	6	1
1:A:68:PHE:O	1:A:69:ALA:HB3	0.41	2.15	8	2
1:A:123:GLU:O	1:A:125:LYS:HD2	0.41	2.15	10	1
1:A:14:TYR:CE1	1:A:18:MET:HE3	0.41	2.50	11	1
1:A:2:PHE:CE2	1:A:84:MET:CE	0.41	3.04	14	1
1:A:76:THR:HG23	1:A:77:GLU:N	0.41	2.31	15	1
1:A:114:ILE:O	1:A:116:THR:CB	0.41	2.68	19	1
1:A:47:PHE:O	1:A:47:PHE:CD1	0.41	2.73	3	1
1:A:81:THR:O	1:A:81:THR:CG2	0.41	2.68	9	2
1:A:43:GLU:HB3	1:A:46:LYS:HD3	0.41	1.93	13	1
1:A:21:MET:HA	1:A:100:LYS:CE	0.41	2.45	15	1
1:A:78:LEU:CD1	1:A:95:ARG:NH2	0.41	2.84	2	1
1:A:114:ILE:O	1:A:115:GLN:C	0.41	2.63	2	1
1:A:74:ASP:OD1	1:A:74:ASP:N	0.41	2.53	5	2
1:A:94:LYS:C	1:A:96:VAL:N	0.41	2.77	5	2
1:A:69:ALA:N	1:A:79:THR:HA	0.41	2.30	7	1
1:A:95:ARG:HD3	1:A:100:LYS:CA	0.41	2.46	8	1
1:A:9:ASP:CB	1:A:129:LYS:CG	0.41	2.98	12	1
1:A:60:VAL:HG11	1:A:62:PHE:CD2	0.41	2.49	12	1
1:A:52:SER:HB3	1:A:57:ASN:HA	0.41	1.93	14	1
1:A:72:LEU:HB3	1:A:95:ARG:NH2	0.41	2.30	15	2
1:A:6:TRP:CE3	1:A:113:LEU:CG	0.41	3.03	19	1
1:A:38:LEU:O	1:A:39:THR:O	0.41	2.38	19	1
1:A:45:ASN:O	1:A:46:LYS:CB	0.41	2.68	19	1
1:A:93:PHE:CZ	1:A:101:GLU:HA	0.41	2.50	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:38:LEU:C	1:A:38:LEU:CD1	0.41	2.93	20	1
1:A:7:LYS:CG	1:A:129:LYS:CB	0.41	2.99	3	2
1:A:122:VAL:O	1:A:122:VAL:HG12	0.41	2.16	7	1
1:A:17:PHE:CE2	1:A:117:TYR:HB2	0.41	2.50	19	2
1:A:12:GLU:CD	1:A:125:LYS:HE3	0.41	2.40	10	1
1:A:14:TYR:CD1	1:A:16:LYS:CA	0.41	3.04	10	1
1:A:126:ARG:HD2	1:A:126:ARG:N	0.41	2.31	10	1
1:A:125:LYS:N	1:A:125:LYS:HD3	0.41	2.31	11	1
1:A:128:PHE:CE1	1:A:130:LYS:HB3	0.41	2.50	14	1
1:A:72:LEU:N	1:A:78:LEU:CD1	0.41	2.84	18	1
1:A:113:LEU:C	1:A:114:ILE:CG1	0.41	2.85	18	1
1:A:101:GLU:O	1:A:103:ILE:HB	0.41	2.16	2	2
1:A:117:TYR:CE2	1:A:124:ALA:O	0.41	2.74	2	1
1:A:45:ASN:C	1:A:64:LEU:CD1	0.41	2.94	3	1
1:A:92:LYS:HA	1:A:103:ILE:CD1	0.41	2.46	4	1
1:A:1:ALA:CB	1:A:108:ILE:HG21	0.41	2.40	5	1
1:A:37:LYS:CD	1:A:131:GLU:HB3	0.41	2.45	5	1
1:A:94:LYS:C	1:A:96:VAL:H	0.41	2.23	5	1
1:A:71:SER:HB2	1:A:76:THR:N	0.41	2.31	7	1
1:A:71:SER:CA	1:A:77:GLU:HA	0.41	2.43	10	1
1:A:52:SER:HA	1:A:57:ASN:HB2	0.41	1.91	11	1
1:A:5:THR:CG2	1:A:131:GLU:CA	0.41	2.99	15	1
1:A:78:LEU:HD23	1:A:78:LEU:HA	0.41	1.71	15	1
1:A:92:LYS:HA	1:A:93:PHE:CD2	0.41	2.51	15	1
1:A:77:GLU:HG2	1:A:96:VAL:CG2	0.41	2.45	17	1
1:A:103:ILE:O	1:A:105:VAL:CG2	0.41	2.69	18	1
1:A:2:PHE:CD2	1:A:108:ILE:CG2	0.41	3.04	19	1
1:A:105:VAL:CG2	1:A:107:GLU:N	0.41	2.84	19	1
1:A:88:LYS:C	1:A:89:LEU:O	0.41	2.63	20	1
1:A:95:ARG:HD3	1:A:102:LEU:HD11	0.41	1.92	20	1
1:A:96:VAL:O	1:A:97:ASP:C	0.41	2.64	20	1
1:A:115:GLN:O	1:A:117:TYR:CD1	0.41	2.73	2	2
1:A:78:LEU:HD22	1:A:93:PHE:HA	0.41	1.93	9	1
1:A:14:TYR:HD1	1:A:16:LYS:CA	0.41	2.29	10	1
1:A:129:LYS:O	1:A:129:LYS:HD3	0.41	2.16	10	1
1:A:82:TRP:HB3	1:A:90:VAL:O	0.41	2.16	15	1
1:A:7:LYS:H	1:A:128:PHE:HB3	0.41	1.74	16	1
1:A:113:LEU:HA	1:A:113:LEU:HD23	0.41	1.54	18	1
1:A:72:LEU:CD1	1:A:75:GLY:HA3	0.40	2.45	5	1
1:A:129:LYS:C	1:A:130:LYS:O	0.40	2.63	9	1
1:A:7:LYS:HE3	1:A:131:GLU:HG2	0.40	1.92	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:GLU:O	1:A:87:ASN:N	0.40	2.54	14	1
1:A:93:PHE:HE2	1:A:103:ILE:CD1	0.40	2.29	15	1
1:A:19:GLU:O	1:A:22:GLY:N	0.40	2.54	17	1
1:A:113:LEU:O	1:A:114:ILE:CB	0.40	2.68	2	1
1:A:40:ILE:HG23	1:A:49:VAL:HG22	0.40	1.93	4	1
1:A:106:ARG:HA	1:A:113:LEU:O	0.40	2.15	5	1
1:A:2:PHE:O	1:A:6:TRP:CZ2	0.40	2.73	6	1
1:A:81:THR:O	1:A:81:THR:OG1	0.40	2.37	6	1
1:A:104:ALA:CB	1:A:117:TYR:CE1	0.40	3.05	8	1
1:A:60:VAL:O	1:A:61:VAL:CB	0.40	2.68	10	1
1:A:82:TRP:HA	1:A:92:LYS:HB2	0.40	1.92	10	1
1:A:8:VAL:HA	1:A:10:ARG:NH2	0.40	2.32	12	1
1:A:10:ARG:CZ	1:A:127:ILE:C	0.40	2.94	12	1
1:A:79:THR:O	1:A:79:THR:CG2	0.40	2.69	14	1
1:A:38:LEU:HB2	1:A:128:PHE:CD2	0.40	2.51	16	1
1:A:60:VAL:HG12	1:A:62:PHE:CE2	0.40	2.51	19	1
1:A:39:THR:HB	1:A:50:LYS:CB	0.40	2.47	1	1
1:A:90:VAL:O	1:A:103:ILE:CA	0.40	2.70	1	1
1:A:3:ASP:C	1:A:40:ILE:O	0.40	2.64	3	1
1:A:38:LEU:HD13	1:A:106:ARG:CD	0.40	2.46	6	1
1:A:66:VAL:O	1:A:67:ASP:C	0.40	2.64	8	1
1:A:95:ARG:O	1:A:95:ARG:HG2	0.40	2.17	8	1
1:A:66:VAL:N	1:A:81:THR:OG1	0.40	2.55	9	1
1:A:14:TYR:CE1	1:A:17:PHE:CA	0.40	3.05	10	1
1:A:91:GLY:N	1:A:104:ALA:C	0.40	2.79	10	1
1:A:10:ARG:CD	1:A:126:ARG:CB	0.40	3.00	12	1
1:A:37:LYS:CG	1:A:39:THR:OG1	0.40	2.69	17	1
1:A:90:VAL:O	1:A:103:ILE:HA	0.40	2.15	1	1
1:A:80:GLY:O	1:A:81:THR:CB	0.40	2.68	5	1
1:A:95:ARG:NH1	1:A:95:ARG:HG3	0.40	2.31	6	1
1:A:115:GLN:NE2	1:A:125:LYS:HA	0.40	2.31	7	1
1:A:9:ASP:CA	1:A:129:LYS:HG2	0.40	2.47	8	1
1:A:105:VAL:HG22	1:A:107:GLU:N	0.40	2.31	12	1
1:A:11:ASN:CG	1:A:14:TYR:CG	0.40	3.00	13	1
1:A:52:SER:CB	1:A:57:ASN:HA	0.40	2.47	14	1
1:A:21:MET:SD	1:A:102:LEU:HG	0.40	2.56	16	1
1:A:115:GLN:O	1:A:116:THR:C	0.40	2.64	19	1
1:A:46:LYS:HB2	1:A:63:GLU:N	0.40	2.32	5	1
1:A:6:TRP:CE3	1:A:128:PHE:CG	0.40	3.10	10	1
1:A:13:ASN:O	1:A:14:TYR:CD2	0.40	2.72	10	1
1:A:13:ASN:O	1:A:17:PHE:HB2	0.40	2.17	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:LYS:CA	1:A:93:PHE:CD2	0.40	3.05	15	1
1:A:40:ILE:CG2	1:A:47:PHE:CD2	0.40	3.03	16	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	120/131 (92%)	51±4 (43±3%)	32±3 (27±2%)	36±4 (30±3%)	0	1
All	All	2400/2620 (92%)	1028 (43%)	643 (27%)	729 (30%)	0	1

All 87 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	8	VAL	20
1	A	51	GLU	20
1	A	90	VAL	20
1	A	98	ASN	20
1	A	104	ALA	20
1	A	108	ILE	20
1	A	113	LEU	20
1	A	126	ARG	20
1	A	127	ILE	20
1	A	130	LYS	20
1	A	39	THR	19
1	A	93	PHE	19
1	A	95	ARG	19
1	A	107	GLU	19
1	A	114	ILE	19
1	A	94	LYS	18
1	A	103	ILE	17
1	A	63	GLU	15
1	A	64	LEU	14
1	A	92	LYS	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	116	THR	13
1	A	78	LEU	12
1	A	89	LEU	12
1	A	105	VAL	12
1	A	106	ARG	12
1	A	58	ILE	11
1	A	96	VAL	11
1	A	120	GLU	11
1	A	69	ALA	11
1	A	115	GLN	11
1	A	44	GLY	11
1	A	74	ASP	11
1	A	2	PHE	10
1	A	50	LYS	10
1	A	110	GLY	10
1	A	123	GLU	10
1	A	55	PHE	9
1	A	37	LYS	8
1	A	53	SER	8
1	A	46	LYS	8
1	A	73	ALA	7
1	A	88	LYS	7
1	A	75	GLY	6
1	A	54	ASN	6
1	A	66	VAL	6
1	A	72	LEU	5
1	A	83	THR	5
1	A	128	PHE	5
1	A	3	ASP	5
1	A	85	GLU	5
1	A	81	THR	5
1	A	57	ASN	5
1	A	71	SER	5
1	A	77	GLU	4
1	A	99	GLY	4
1	A	45	ASN	4
1	A	82	TRP	4
1	A	14	TYR	4
1	A	109	SER	3
1	A	48	THR	3
1	A	111	ASN	3
1	A	59	ASP	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	67	ASP	3
1	A	12	GLU	3
1	A	7	LYS	3
1	A	100	LYS	3
1	A	102	LEU	3
1	A	79	THR	2
1	A	42	GLN	2
1	A	122	VAL	2
1	A	91	GLY	2
1	A	13	ASN	2
1	A	56	ARG	2
1	A	40	ILE	1
1	A	101	GLU	1
1	A	24	ASN	1
1	A	80	GLY	1
1	A	16	LYS	1
1	A	60	VAL	1
1	A	61	VAL	1
1	A	11	ASN	1
1	A	119	TYR	1
1	A	112	GLU	1
1	A	87	ASN	1
1	A	23	ILE	1
1	A	86	GLY	1
1	A	65	GLY	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	106/113 (94%)	58±4 (54±4%)	48±4 (46±4%)	0	2
All	All	2120/2260 (94%)	1153 (54%)	967 (46%)	0	2

All 101 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	46	LYS	20
1	A	89	LEU	20
1	A	114	ILE	20
1	A	117	TYR	20
1	A	125	LYS	20
1	A	130	LYS	20
1	A	10	ARG	19
1	A	77	GLU	19
1	A	103	ILE	19
1	A	106	ARG	19
1	A	120	GLU	19
1	A	72	LEU	19
1	A	23	ILE	18
1	A	39	THR	18
1	A	112	GLU	18
1	A	43	GLU	17
1	A	58	ILE	17
1	A	61	VAL	17
1	A	107	GLU	17
1	A	100	LYS	16
1	A	21	MET	15
1	A	59	ASP	15
1	A	88	LYS	15
1	A	47	PHE	15
1	A	127	ILE	14
1	A	2	PHE	13
1	A	17	PHE	13
1	A	66	VAL	13
1	A	38	LEU	13
1	A	12	GLU	12
1	A	64	LEU	12
1	A	76	THR	12
1	A	81	THR	12
1	A	85	GLU	12
1	A	102	LEU	12
1	A	90	VAL	12
1	A	96	VAL	12
1	A	78	LEU	12
1	A	11	ASN	11
1	A	71	SER	11
1	A	95	ARG	11
1	A	118	THR	11
1	A	7	LYS	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	27	LYS	10
1	A	129	LYS	10
1	A	84	MET	10
1	A	20	LYS	9
1	A	57	ASN	9
1	A	87	ASN	9
1	A	41	THR	9
1	A	49	VAL	9
1	A	70	TYR	9
1	A	13	ASN	9
1	A	19	GLU	8
1	A	62	PHE	8
1	A	79	THR	8
1	A	82	TRP	8
1	A	105	VAL	8
1	A	16	LYS	8
1	A	83	THR	7
1	A	111	ASN	7
1	A	67	ASP	7
1	A	63	GLU	6
1	A	131	GLU	6
1	A	24	ASN	6
1	A	48	THR	6
1	A	42	GLN	6
1	A	55	PHE	6
1	A	126	ARG	6
1	A	37	LYS	6
1	A	3	ASP	5
1	A	15	GLU	5
1	A	74	ASP	5
1	A	60	VAL	5
1	A	56	ARG	5
1	A	115	GLN	5
1	A	45	ASN	5
1	A	26	VAL	4
1	A	92	LYS	4
1	A	6	TRP	4
1	A	97	ASP	4
1	A	25	VAL	4
1	A	52	SER	4
1	A	5	THR	4
1	A	18	MET	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	53	SER	3
1	A	94	LYS	3
1	A	119	TYR	3
1	A	54	ASN	3
1	A	113	LEU	3
1	A	128	PHE	2
1	A	51	GLU	2
1	A	68	PHE	2
1	A	93	PHE	2
1	A	108	ILE	2
1	A	101	GLU	1
1	A	50	LYS	1
1	A	122	VAL	1
1	A	14	TYR	1
1	A	109	SER	1
1	A	116	THR	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided