



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 6, 2026 – 09:10 PM UTC

PDB ID : 1DNY / pdb_00001dny
Title : SOLUTION STRUCTURE OF PCP, A PROTOTYPE FOR THE PEP-
TIDYL CARRIER DOMAINS OF MODULAR PEPTIDE SYNTHETASES
Authors : Weber, T.; Baumgartner, R.; Renner, C.; Marahiel, M.A.; Holak, T.A.
Deposited on : 1999-12-17

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

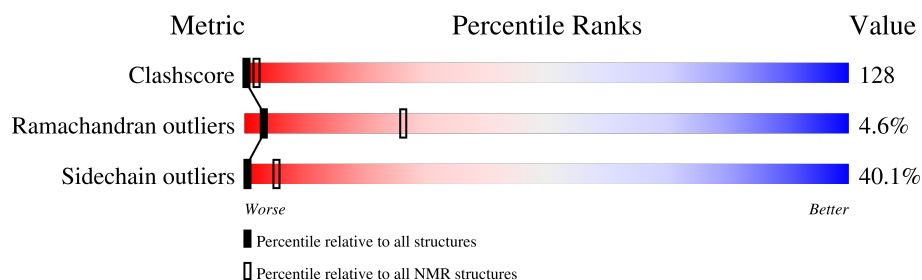
1 Overall quality at a glance

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	91	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 21 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:14-A:38, A:45-A:83 (64)	0.51	1

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

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

The models can be grouped into 2 clusters. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 3, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 21
2	4, 12, 19, 20

3 Entry composition

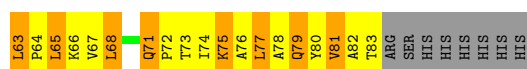
There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1187 atoms, of which 602 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called NON-RIBOSOMAL PEPTIDE SYNTHETASE PEPTIDYL CARRIER PROTEIN.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	76	Total	C	H	N	O	S	0
			1187	382	602	98	104	1	

There are 9 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1	MET	-	initiating methionine	UNP O30409
A	84	ARG	-	expression tag	UNP O30409
A	85	SER	-	expression tag	UNP O30409
A	86	HIS	-	expression tag	UNP O30409
A	87	HIS	-	expression tag	UNP O30409
A	88	HIS	-	expression tag	UNP O30409
A	89	HIS	-	expression tag	UNP O30409
A	90	HIS	-	expression tag	UNP O30409
A	91	HIS	-	expression tag	UNP O30409



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: NON-RIBOSOMAL PEPTIDE SYNTHETASE PEPTIDYL CARRIER PROTEIN

Chain A: 9% 43% 19% 13% 16%



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: NON-RIBOSOMAL PEPTIDE SYNTHETASE PEPTIDYL CARRIER PROTEIN

Chain A: 8% 40% 22% 13% 16%



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: NON-RIBOSOMAL PEPTIDE SYNTHETASE PEPTIDYL CARRIER PROTEIN

Chain A: 12% 38% 19% 13% 16%



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: NON-RIBOSOMAL PEPTIDE SYNTHETASE PEPTIDYL CARRIER PROTEIN

Chain A: 8% 40% 23% 13% 16%





4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: NON-RIBOSOMAL PEPTIDE SYNTHETASE PEPTIDYL CARRIER PROTEIN

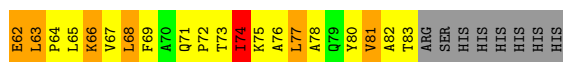
Chain A: 7% 35% 27% • 13% 16%



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: NON-RIBOSOMAL PEPTIDE SYNTHETASE PEPTIDYL CARRIER PROTEIN

Chain A: 5% 42% 22% • 13% 16%



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: NON-RIBOSOMAL PEPTIDE SYNTHETASE PEPTIDYL CARRIER PROTEIN

Chain A: • 45% 21% 13% 16%



4.2.10 Score per residue for model 10

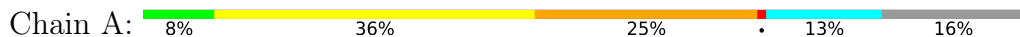
- Molecule 1: NON-RIBOSOMAL PEPTIDE SYNTHETASE PEPTIDYL CARRIER PROTEIN

Chain A: 7% 40% 24% 13% 16%



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: NON-RIBOSOMAL PEPTIDE SYNTHETASE PEPTIDYL CARRIER PROTEIN



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: NON-RIBOSOMAL PEPTIDE SYNTHETASE PEPTIDYL CARRIER PROTEIN



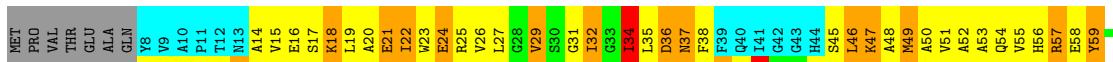
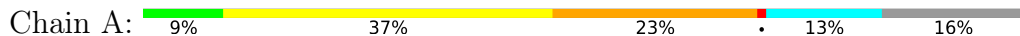
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: NON-RIBOSOMAL PEPTIDE SYNTHETASE PEPTIDYL CARRIER PROTEIN



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: NON-RIBOSOMAL PEPTIDE SYNTHETASE PEPTIDYL CARRIER PROTEIN







4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: NON-RIBOSOMAL PEPTIDE SYNTHETASE PEPTIDYL CARRIER PROTEIN

Chain A: 7% 38% 25% 13% 16%



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: NON-RIBOSOMAL PEPTIDE SYNTHETASE PEPTIDYL CARRIER PROTEIN

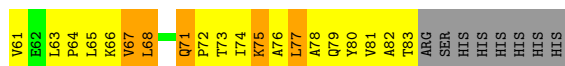
Chain A: 8% 40% 21% 13% 16%



4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: NON-RIBOSOMAL PEPTIDE SYNTHETASE PEPTIDYL CARRIER PROTEIN

Chain A: 7% 45% 18% 13% 16%



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 100 calculated structures, 21 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
CC-NMR	refinement	
X-PLOR	structure solution	3.1

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	1.42±0.01	0±0/501 (0.0± 0.0%)	1.24±0.01	0±0/680 (0.0± 0.0%)
All	All	1.42	1/10521 (0.0%)	1.24	2/14280 (0.0%)

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	1.9±0.3
All	All	0	40

All unique bond outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	33	GLY	N-CA	5.99	1.49	1.45	20	1

All unique angle outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	60	GLN	N-CA-C	-5.20	106.70	112.57	21	2

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	57	ARG	Sidechain	21
1	A	25	ARG	Sidechain	19

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	493	518	518	130±11
All	All	10353	10878	10878	2725

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 128.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:ALA:HB1	1:A:68:LEU:HD21	1.09	1.25	9	20
1:A:23:TRP:CE3	1:A:32:ILE:HG21	1.05	1.85	18	15
1:A:32:ILE:HG22	1:A:74:ILE:HD11	1.05	1.28	20	7
1:A:22:ILE:HD12	1:A:51:VAL:HG13	1.05	1.10	15	1
1:A:15:VAL:HG11	1:A:82:ALA:HB2	1.04	1.17	11	21
1:A:61:VAL:HG11	1:A:81:VAL:HG13	1.04	1.29	4	12
1:A:63:LEU:HD21	1:A:77:LEU:HD13	1.04	1.24	15	4
1:A:26:VAL:HG11	1:A:50:ALA:HB3	1.04	1.27	1	21
1:A:52:ALA:HB2	1:A:68:LEU:HD23	1.02	1.22	3	1
1:A:15:VAL:HG21	1:A:82:ALA:HB2	1.01	1.29	1	18
1:A:22:ILE:HD11	1:A:51:VAL:HG13	1.00	1.31	4	5
1:A:52:ALA:HB2	1:A:68:LEU:HD13	0.99	1.26	14	20
1:A:22:ILE:CD1	1:A:51:VAL:HG13	0.98	1.88	4	6
1:A:15:VAL:CG1	1:A:82:ALA:HB2	0.98	1.88	11	21
1:A:26:VAL:HG11	1:A:50:ALA:CB	0.97	1.89	5	10
1:A:48:ALA:HB1	1:A:68:LEU:HD11	0.97	1.35	3	1
1:A:15:VAL:HG21	1:A:82:ALA:CB	0.95	1.91	1	21
1:A:15:VAL:HG12	1:A:78:ALA:HB1	0.95	1.37	19	4
1:A:19:LEU:HD21	1:A:77:LEU:HD12	0.93	1.36	13	3
1:A:61:VAL:HG11	1:A:81:VAL:CG1	0.91	1.93	19	10
1:A:33:GLY:O	1:A:74:ILE:HD12	0.90	1.65	18	9
1:A:15:VAL:HG11	1:A:82:ALA:CB	0.90	1.96	11	10
1:A:22:ILE:HD11	1:A:51:VAL:CG1	0.89	1.98	16	5
1:A:52:ALA:HB2	1:A:68:LEU:CD2	0.88	1.98	3	1
1:A:63:LEU:CD2	1:A:67:VAL:HG11	0.87	1.99	3	2
1:A:22:ILE:HD12	1:A:51:VAL:CG1	0.87	1.97	15	1
1:A:35:LEU:HD23	1:A:73:THR:HG21	0.87	1.47	5	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:LEU:HD12	1:A:77:LEU:HD11	0.86	1.47	5	8
1:A:49:MET:SD	1:A:65:LEU:HD21	0.86	2.11	10	19
1:A:67:VAL:HG13	1:A:71:GLN:NE2	0.85	1.87	2	1
1:A:63:LEU:HD21	1:A:77:LEU:CD1	0.85	2.01	15	5
1:A:16:GLU:OE1	1:A:20:ALA:HB2	0.84	1.73	9	2
1:A:52:ALA:HB2	1:A:68:LEU:CD1	0.84	2.02	14	9
1:A:49:MET:SD	1:A:65:LEU:HD13	0.84	2.13	6	1
1:A:36:ASP:O	1:A:73:THR:HG23	0.83	1.73	13	6
1:A:48:ALA:HB1	1:A:68:LEU:CD2	0.83	2.01	19	20
1:A:55:VAL:HG11	1:A:63:LEU:HD12	0.82	1.48	9	3
1:A:63:LEU:CD1	1:A:67:VAL:HG11	0.82	2.05	15	1
1:A:34:ILE:HA	1:A:74:ILE:HD12	0.82	1.52	5	4
1:A:15:VAL:CG2	1:A:82:ALA:HB2	0.82	2.05	1	18
1:A:33:GLY:C	1:A:34:ILE:HD12	0.82	2.00	19	1
1:A:22:ILE:CG1	1:A:51:VAL:HG13	0.81	2.04	9	17
1:A:55:VAL:HG11	1:A:63:LEU:HD13	0.81	1.53	16	2
1:A:48:ALA:CB	1:A:68:LEU:HD21	0.80	2.07	9	9
1:A:22:ILE:HD11	1:A:51:VAL:HG22	0.80	1.54	7	8
1:A:68:LEU:CD1	1:A:77:LEU:HD11	0.79	2.07	5	2
1:A:59:TYR:CD1	1:A:81:VAL:HG11	0.79	2.13	11	12
1:A:22:ILE:HG12	1:A:51:VAL:HG13	0.79	1.54	14	9
1:A:35:LEU:C	1:A:73:THR:HG22	0.78	2.04	20	1
1:A:26:VAL:CG1	1:A:50:ALA:HB3	0.78	2.07	1	5
1:A:15:VAL:CB	1:A:82:ALA:HB2	0.77	2.09	15	18
1:A:61:VAL:CG1	1:A:81:VAL:HG13	0.77	2.07	4	1
1:A:18:LYS:O	1:A:22:ILE:HG22	0.77	1.79	10	13
1:A:55:VAL:HG21	1:A:63:LEU:HD22	0.77	1.56	18	7
1:A:22:ILE:HG23	1:A:51:VAL:HG13	0.77	1.57	20	1
1:A:35:LEU:O	1:A:35:LEU:HD23	0.76	1.80	3	6
1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:HD13	0.76	1.94	7	1
1:A:63:LEU:CD2	1:A:77:LEU:HD13	0.76	2.09	15	3
1:A:32:ILE:CG2	1:A:74:ILE:HD11	0.76	2.10	1	9
1:A:19:LEU:HA	1:A:22:ILE:CG2	0.76	2.11	5	15
1:A:26:VAL:HG11	1:A:50:ALA:HB1	0.76	1.55	5	2
1:A:34:ILE:HG22	1:A:75:LYS:HB2	0.75	1.57	1	2
1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:LYS:HB2	0.75	1.59	18	1
1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:LYS:HG3	0.75	1.58	7	1
1:A:22:ILE:HG21	1:A:54:GLN:HG2	0.75	1.56	15	3
1:A:22:ILE:HD12	1:A:22:ILE:C	0.75	2.06	4	5
1:A:63:LEU:HD23	1:A:81:VAL:HG22	0.75	1.59	4	1
1:A:23:TRP:CZ2	1:A:38:PHE:CE1	0.74	2.76	8	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:ILE:HD12	1:A:22:ILE:O	0.74	1.82	7	4
1:A:23:TRP:CE2	1:A:38:PHE:CE1	0.74	2.76	11	16
1:A:19:LEU:HA	1:A:22:ILE:HG22	0.74	1.59	20	1
1:A:50:ALA:O	1:A:53:ALA:HB3	0.74	1.83	4	8
1:A:35:LEU:HD12	1:A:73:THR:CG2	0.73	2.12	18	3
1:A:16:GLU:OE2	1:A:34:ILE:HG22	0.73	1.83	4	1
1:A:59:TYR:HB2	1:A:61:VAL:HG12	0.73	1.60	5	11
1:A:22:ILE:CD1	1:A:51:VAL:HG22	0.72	2.14	4	2
1:A:15:VAL:HG11	1:A:82:ALA:N	0.72	1.99	15	3
1:A:49:MET:HG2	1:A:65:LEU:HD11	0.72	1.61	15	19
1:A:18:LYS:NZ	1:A:19:LEU:HD12	0.72	1.98	16	1
1:A:55:VAL:HG11	1:A:63:LEU:HD23	0.72	1.59	8	3
1:A:55:VAL:HG13	1:A:81:VAL:CG1	0.72	2.15	14	4
1:A:18:LYS:O	1:A:22:ILE:HG23	0.72	1.84	16	5
1:A:22:ILE:HG13	1:A:51:VAL:HG13	0.71	1.60	13	14
1:A:49:MET:CG	1:A:65:LEU:HD21	0.71	2.15	10	19
1:A:47:LYS:O	1:A:50:ALA:HB3	0.71	1.86	18	14
1:A:71:GLN:O	1:A:77:LEU:HD23	0.71	1.86	18	9
1:A:23:TRP:CH2	1:A:38:PHE:CE1	0.71	2.78	6	1
1:A:49:MET:SD	1:A:52:ALA:HB3	0.71	2.26	11	8
1:A:22:ILE:CG2	1:A:51:VAL:HG13	0.71	2.14	20	1
1:A:23:TRP:HB3	1:A:32:ILE:HD13	0.71	1.62	14	12
1:A:35:LEU:HA	1:A:73:THR:HG22	0.70	1.62	13	4
1:A:35:LEU:HA	1:A:73:THR:CG2	0.70	2.17	5	6
1:A:38:PHE:CE1	1:A:72:PRO:C	0.70	2.69	5	5
1:A:49:MET:HG2	1:A:65:LEU:HD21	0.70	1.62	18	17
1:A:55:VAL:HG21	1:A:63:LEU:CD2	0.70	2.16	12	2
1:A:59:TYR:CD2	1:A:81:VAL:HG11	0.69	2.22	17	5
1:A:59:TYR:HB2	1:A:61:VAL:HG23	0.69	1.63	20	7
1:A:23:TRP:CZ2	1:A:38:PHE:CZ	0.69	2.80	19	11
1:A:15:VAL:HG11	1:A:82:ALA:H	0.69	1.47	15	4
1:A:48:ALA:HB1	1:A:68:LEU:CD1	0.69	2.16	3	1
1:A:24:GLU:CA	1:A:32:ILE:HD11	0.68	2.18	2	14
1:A:35:LEU:CD2	1:A:73:THR:HG21	0.68	2.18	2	5
1:A:77:LEU:O	1:A:81:VAL:HG23	0.68	1.88	2	8
1:A:22:ILE:HD11	1:A:51:VAL:CG2	0.68	2.18	4	3
1:A:15:VAL:HG12	1:A:78:ALA:CB	0.68	2.17	19	2
1:A:73:THR:CG2	1:A:76:ALA:HB3	0.68	2.17	4	5
1:A:55:VAL:CG1	1:A:81:VAL:HG13	0.68	2.18	8	3
1:A:23:TRP:CZ3	1:A:32:ILE:HG21	0.68	2.24	18	1
1:A:19:LEU:HA	1:A:22:ILE:HG23	0.67	1.64	7	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:ILE:HG21	1:A:54:GLN:CG	0.67	2.19	15	1
1:A:49:MET:HE1	1:A:53:ALA:HB2	0.67	1.64	16	2
1:A:78:ALA:O	1:A:82:ALA:HB3	0.66	1.90	7	9
1:A:15:VAL:HG21	1:A:82:ALA:HA	0.66	1.66	16	2
1:A:59:TYR:CE1	1:A:81:VAL:HG11	0.66	2.26	14	9
1:A:49:MET:CB	1:A:65:LEU:HD11	0.66	2.21	20	11
1:A:15:VAL:O	1:A:19:LEU:HD12	0.66	1.91	3	2
1:A:34:ILE:HG22	1:A:34:ILE:O	0.66	1.90	8	2
1:A:23:TRP:CE3	1:A:32:ILE:CG2	0.65	2.79	14	7
1:A:22:ILE:CD1	1:A:51:VAL:CG1	0.65	2.73	17	5
1:A:38:PHE:CD2	1:A:72:PRO:C	0.65	2.75	8	16
1:A:23:TRP:CE2	1:A:74:ILE:CD1	0.65	2.80	6	1
1:A:35:LEU:CD1	1:A:73:THR:HG21	0.65	2.21	6	3
1:A:15:VAL:HG21	1:A:82:ALA:CA	0.64	2.22	16	2
1:A:63:LEU:HD12	1:A:67:VAL:HG11	0.64	1.68	15	2
1:A:34:ILE:O	1:A:75:LYS:N	0.64	2.30	10	6
1:A:59:TYR:N	1:A:59:TYR:CD1	0.64	2.66	6	2
1:A:61:VAL:HG21	1:A:81:VAL:HG12	0.64	1.70	9	4
1:A:34:ILE:HG22	1:A:75:LYS:CB	0.64	2.23	19	2
1:A:22:ILE:HD13	1:A:22:ILE:O	0.64	1.93	20	1
1:A:23:TRP:CB	1:A:32:ILE:HG21	0.64	2.23	4	2
1:A:29:VAL:HB	1:A:32:ILE:HD11	0.64	1.70	15	2
1:A:63:LEU:HD21	1:A:80:TYR:CD1	0.64	2.27	9	1
1:A:22:ILE:HD11	1:A:26:VAL:HG21	0.64	1.69	20	1
1:A:23:TRP:CE2	1:A:74:ILE:CG1	0.63	2.82	14	6
1:A:24:GLU:HA	1:A:32:ILE:HD11	0.63	1.70	2	15
1:A:23:TRP:HE3	1:A:32:ILE:HG21	0.63	1.51	3	6
1:A:23:TRP:CH2	1:A:74:ILE:CG1	0.63	2.82	5	2
1:A:32:ILE:HG22	1:A:74:ILE:CD1	0.63	2.15	20	4
1:A:18:LYS:HZ3	1:A:19:LEU:HD12	0.63	1.52	16	1
1:A:34:ILE:O	1:A:35:LEU:CB	0.63	2.45	4	2
1:A:16:GLU:CD	1:A:34:ILE:HG22	0.63	2.18	4	1
1:A:15:VAL:HG11	1:A:78:ALA:O	0.63	1.93	18	6
1:A:22:ILE:HD12	1:A:26:VAL:HG23	0.63	1.71	6	3
1:A:38:PHE:CE2	1:A:72:PRO:C	0.63	2.76	13	16
1:A:59:TYR:CD1	1:A:81:VAL:CG1	0.63	2.82	14	4
1:A:22:ILE:HD12	1:A:51:VAL:HA	0.63	1.70	20	1
1:A:49:MET:CG	1:A:65:LEU:HD11	0.63	2.24	13	13
1:A:27:LEU:HD23	1:A:47:LYS:HG3	0.63	1.70	15	1
1:A:63:LEU:HD11	1:A:77:LEU:HD11	0.63	1.71	2	2
1:A:19:LEU:HD13	1:A:78:ALA:HA	0.62	1.70	8	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:67:VAL:CG2	1:A:80:TYR:CZ	0.62	2.82	13	2
1:A:22:ILE:HD12	1:A:26:VAL:CG2	0.62	2.24	6	5
1:A:49:MET:HA	1:A:65:LEU:HD11	0.62	1.71	6	1
1:A:38:PHE:CE1	1:A:73:THR:N	0.62	2.67	9	4
1:A:63:LEU:HD21	1:A:77:LEU:HD11	0.62	1.70	1	2
1:A:38:PHE:CZ	1:A:72:PRO:HA	0.62	2.29	5	2
1:A:67:VAL:HG21	1:A:80:TYR:CZ	0.62	2.29	13	3
1:A:31:GLY:O	1:A:32:ILE:C	0.62	2.43	12	4
1:A:33:GLY:O	1:A:74:ILE:HD13	0.62	1.95	13	1
1:A:35:LEU:HD12	1:A:75:LYS:HB3	0.61	1.71	8	1
1:A:63:LEU:CD2	1:A:81:VAL:HG22	0.61	2.24	4	1
1:A:55:VAL:HG11	1:A:63:LEU:CD1	0.61	2.25	19	2
1:A:38:PHE:HB3	1:A:48:ALA:HB2	0.61	1.73	10	3
1:A:73:THR:HG22	1:A:76:ALA:HB3	0.61	1.70	8	6
1:A:23:TRP:CZ3	1:A:74:ILE:CG1	0.61	2.83	5	2
1:A:80:TYR:O	1:A:83:THR:HG22	0.61	1.96	5	1
1:A:55:VAL:HG11	1:A:63:LEU:CD2	0.61	2.25	8	2
1:A:35:LEU:C	1:A:73:THR:OG1	0.61	2.44	9	15
1:A:23:TRP:CZ2	1:A:38:PHE:CD1	0.61	2.89	9	5
1:A:55:VAL:CG1	1:A:81:VAL:CG1	0.61	2.79	8	6
1:A:68:LEU:HD12	1:A:77:LEU:CD1	0.60	2.27	4	2
1:A:23:TRP:CE3	1:A:27:LEU:CD1	0.60	2.84	20	1
1:A:22:ILE:HD11	1:A:51:VAL:HG12	0.60	1.71	16	4
1:A:16:GLU:OE1	1:A:34:ILE:HD11	0.60	1.96	18	1
1:A:48:ALA:CB	1:A:68:LEU:CD2	0.60	2.80	7	14
1:A:34:ILE:O	1:A:34:ILE:HD12	0.60	1.97	4	1
1:A:24:GLU:N	1:A:32:ILE:HD13	0.60	2.11	4	1
1:A:35:LEU:HD13	1:A:75:LYS:HB3	0.60	1.73	18	2
1:A:22:ILE:CD1	1:A:26:VAL:CG2	0.60	2.80	21	14
1:A:54:GLN:O	1:A:58:GLU:CB	0.60	2.49	13	3
1:A:52:ALA:HB1	1:A:63:LEU:HD23	0.60	1.72	7	1
1:A:55:VAL:HG13	1:A:81:VAL:HG11	0.60	1.72	14	5
1:A:16:GLU:CG	1:A:78:ALA:CB	0.60	2.80	12	3
1:A:33:GLY:O	1:A:34:ILE:HG23	0.60	1.96	4	1
1:A:38:PHE:CD1	1:A:72:PRO:O	0.60	2.55	9	3
1:A:74:ILE:HG22	1:A:75:LYS:N	0.59	2.11	6	2
1:A:23:TRP:CH2	1:A:74:ILE:HG12	0.59	2.32	5	3
1:A:19:LEU:HD21	1:A:77:LEU:HB3	0.59	1.72	5	2
1:A:63:LEU:HD11	1:A:67:VAL:HG11	0.59	1.73	15	1
1:A:23:TRP:NE1	1:A:38:PHE:CE1	0.59	2.71	3	6
1:A:34:ILE:CA	1:A:74:ILE:HD12	0.59	2.25	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:MET:CE	1:A:53:ALA:HB2	0.59	2.27	3	1
1:A:63:LEU:HD11	1:A:67:VAL:CG1	0.59	2.28	15	1
1:A:23:TRP:CE2	1:A:74:ILE:HG12	0.59	2.32	18	17
1:A:19:LEU:CD2	1:A:78:ALA:N	0.59	2.65	5	1
1:A:35:LEU:C	1:A:73:THR:HG23	0.59	2.22	18	5
1:A:23:TRP:CZ3	1:A:74:ILE:HG12	0.59	2.33	5	2
1:A:23:TRP:CG	1:A:74:ILE:HD11	0.59	2.33	16	2
1:A:19:LEU:CA	1:A:22:ILE:HG23	0.58	2.26	7	8
1:A:38:PHE:CD2	1:A:72:PRO:CA	0.58	2.86	17	15
1:A:38:PHE:CD1	1:A:72:PRO:C	0.58	2.81	9	3
1:A:19:LEU:O	1:A:23:TRP:CD1	0.58	2.55	5	8
1:A:63:LEU:HD12	1:A:80:TYR:CD2	0.58	2.32	1	2
1:A:63:LEU:CD2	1:A:67:VAL:CG1	0.58	2.79	3	3
1:A:23:TRP:CE2	1:A:74:ILE:HG13	0.58	2.34	14	2
1:A:38:PHE:CE1	1:A:73:THR:CA	0.58	2.85	9	1
1:A:34:ILE:N	1:A:34:ILE:CD1	0.58	2.64	7	1
1:A:23:TRP:CZ2	1:A:74:ILE:HG12	0.58	2.34	2	5
1:A:24:GLU:N	1:A:32:ILE:CD1	0.58	2.67	4	2
1:A:61:VAL:HG11	1:A:81:VAL:HG12	0.58	1.72	17	2
1:A:23:TRP:CZ3	1:A:36:ASP:HB3	0.58	2.34	20	2
1:A:23:TRP:HB3	1:A:32:ILE:HD12	0.58	1.75	10	1
1:A:35:LEU:HD12	1:A:73:THR:HG21	0.58	1.74	18	3
1:A:19:LEU:CD2	1:A:77:LEU:CB	0.58	2.81	12	1
1:A:14:ALA:HA	1:A:17:SER:CB	0.58	2.29	8	21
1:A:34:ILE:HG23	1:A:35:LEU:N	0.58	2.12	14	3
1:A:35:LEU:HG	1:A:73:THR:HG21	0.57	1.75	13	2
1:A:73:THR:O	1:A:77:LEU:HB2	0.57	1.99	8	15
1:A:68:LEU:O	1:A:72:PRO:CA	0.57	2.53	2	14
1:A:63:LEU:CD1	1:A:67:VAL:CG1	0.57	2.80	15	1
1:A:34:ILE:O	1:A:74:ILE:HB	0.57	1.99	10	10
1:A:36:ASP:N	1:A:73:THR:OG1	0.57	2.37	21	5
1:A:73:THR:O	1:A:77:LEU:CB	0.57	2.53	21	4
1:A:34:ILE:H	1:A:74:ILE:HD12	0.57	1.59	12	1
1:A:22:ILE:CD1	1:A:22:ILE:C	0.57	2.75	4	1
1:A:26:VAL:HG21	1:A:51:VAL:HG22	0.57	1.75	11	1
1:A:24:GLU:HB2	1:A:32:ILE:HD12	0.56	1.77	4	1
1:A:67:VAL:CG1	1:A:71:GLN:NE2	0.56	2.68	14	1
1:A:36:ASP:O	1:A:73:THR:CB	0.56	2.53	15	9
1:A:54:GLN:CG	1:A:58:GLU:OE2	0.56	2.53	11	1
1:A:19:LEU:HD22	1:A:77:LEU:CB	0.56	2.30	1	2
1:A:38:PHE:CE2	1:A:72:PRO:HA	0.56	2.35	17	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:ILE:HD12	1:A:26:VAL:HG22	0.56	1.76	11	2
1:A:35:LEU:C	1:A:73:THR:CG2	0.56	2.79	13	6
1:A:23:TRP:CZ2	1:A:73:THR:HA	0.56	2.36	19	4
1:A:23:TRP:CD2	1:A:74:ILE:HG12	0.56	2.36	11	6
1:A:22:ILE:HD12	1:A:54:GLN:HB3	0.56	1.76	16	3
1:A:23:TRP:CZ2	1:A:74:ILE:N	0.56	2.73	2	4
1:A:22:ILE:C	1:A:22:ILE:CD1	0.56	2.79	7	2
1:A:37:ASN:O	1:A:37:ASN:CG	0.56	2.48	14	2
1:A:19:LEU:HB3	1:A:74:ILE:HG23	0.56	1.77	14	2
1:A:19:LEU:HD23	1:A:51:VAL:HG12	0.56	1.78	20	1
1:A:23:TRP:CH2	1:A:36:ASP:HB2	0.56	2.36	18	3
1:A:24:GLU:CA	1:A:32:ILE:CD1	0.55	2.83	4	7
1:A:33:GLY:O	1:A:74:ILE:CD1	0.55	2.54	2	6
1:A:23:TRP:CH2	1:A:36:ASP:HB3	0.55	2.36	9	1
1:A:16:GLU:HG3	1:A:78:ALA:HB1	0.55	1.77	12	2
1:A:16:GLU:OE2	1:A:34:ILE:HD12	0.55	2.01	2	1
1:A:14:ALA:HA	1:A:17:SER:HB3	0.55	1.78	6	5
1:A:55:VAL:HG21	1:A:63:LEU:HD23	0.55	1.78	12	1
1:A:34:ILE:N	1:A:74:ILE:HD12	0.55	2.15	12	1
1:A:19:LEU:HA	1:A:22:ILE:HD11	0.55	1.78	15	1
1:A:22:ILE:HD11	1:A:26:VAL:CG2	0.55	2.31	20	1
1:A:16:GLU:HG3	1:A:34:ILE:HG22	0.55	1.77	7	1
1:A:34:ILE:HA	1:A:74:ILE:HG21	0.55	1.77	6	3
1:A:68:LEU:HD12	1:A:77:LEU:HD21	0.55	1.77	20	1
1:A:49:MET:SD	1:A:65:LEU:CD2	0.55	2.95	1	14
1:A:23:TRP:CZ2	1:A:74:ILE:HG13	0.55	2.37	4	2
1:A:37:ASN:O	1:A:38:PHE:C	0.55	2.50	16	11
1:A:29:VAL:CG2	1:A:32:ILE:HD11	0.55	2.32	19	2
1:A:73:THR:HG23	1:A:76:ALA:HB3	0.55	1.78	4	2
1:A:23:TRP:CD2	1:A:74:ILE:HD11	0.55	2.37	6	2
1:A:35:LEU:HD12	1:A:73:THR:HG22	0.55	1.76	18	2
1:A:19:LEU:HD11	1:A:81:VAL:HG21	0.55	1.78	8	1
1:A:71:GLN:O	1:A:77:LEU:CD2	0.55	2.55	1	7
1:A:49:MET:SD	1:A:49:MET:C	0.54	2.90	16	19
1:A:78:ALA:O	1:A:82:ALA:CB	0.54	2.55	7	8
1:A:32:ILE:HG22	1:A:36:ASP:CB	0.54	2.32	12	1
1:A:22:ILE:CD1	1:A:26:VAL:HG21	0.54	2.33	6	7
1:A:19:LEU:HD21	1:A:77:LEU:CB	0.54	2.32	12	1
1:A:35:LEU:O	1:A:35:LEU:CD2	0.54	2.55	1	2
1:A:14:ALA:HA	1:A:17:SER:HB2	0.54	1.79	8	16
1:A:34:ILE:O	1:A:34:ILE:CD1	0.54	2.56	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:LEU:CA	1:A:73:THR:CG2	0.54	2.86	5	6
1:A:63:LEU:HD21	1:A:80:TYR:CG	0.54	2.38	9	1
1:A:63:LEU:HD12	1:A:80:TYR:CD1	0.54	2.38	5	2
1:A:58:GLU:HG3	1:A:59:TYR:CE1	0.54	2.38	17	2
1:A:22:ILE:HD13	1:A:22:ILE:C	0.54	2.27	20	1
1:A:19:LEU:CB	1:A:74:ILE:CD1	0.54	2.86	10	1
1:A:52:ALA:CB	1:A:63:LEU:HD23	0.54	2.33	7	2
1:A:34:ILE:O	1:A:74:ILE:CB	0.54	2.56	10	5
1:A:66:LYS:O	1:A:70:ALA:N	0.54	2.39	14	3
1:A:80:TYR:C	1:A:83:THR:HG22	0.54	2.28	5	1
1:A:35:LEU:CG	1:A:73:THR:HG21	0.54	2.32	13	3
1:A:61:VAL:HG21	1:A:81:VAL:CG1	0.54	2.31	9	1
1:A:18:LYS:O	1:A:22:ILE:CG2	0.54	2.56	2	6
1:A:24:GLU:CB	1:A:29:VAL:O	0.53	2.56	7	2
1:A:22:ILE:CG2	1:A:54:GLN:HG2	0.53	2.34	8	12
1:A:34:ILE:CG2	1:A:35:LEU:N	0.53	2.70	14	3
1:A:77:LEU:O	1:A:81:VAL:CG2	0.53	2.56	17	3
1:A:55:VAL:HA	1:A:59:TYR:CD2	0.53	2.38	13	1
1:A:55:VAL:HG12	1:A:61:VAL:HG11	0.53	1.79	19	2
1:A:67:VAL:HG21	1:A:80:TYR:CE2	0.53	2.38	8	1
1:A:67:VAL:O	1:A:71:GLN:NE2	0.53	2.42	14	1
1:A:63:LEU:CD2	1:A:77:LEU:CD1	0.53	2.80	15	2
1:A:34:ILE:CG2	1:A:34:ILE:O	0.53	2.56	12	1
1:A:32:ILE:HG21	1:A:74:ILE:HD11	0.53	1.80	1	2
1:A:23:TRP:CZ3	1:A:36:ASP:HB2	0.53	2.38	17	4
1:A:36:ASP:O	1:A:73:THR:HB	0.53	2.03	21	5
1:A:74:ILE:O	1:A:78:ALA:CB	0.53	2.56	4	3
1:A:66:LYS:O	1:A:69:PHE:N	0.53	2.42	3	7
1:A:38:PHE:CE2	1:A:73:THR:N	0.53	2.77	13	5
1:A:24:GLU:O	1:A:28:GLY:N	0.53	2.41	16	4
1:A:51:VAL:O	1:A:54:GLN:N	0.53	2.42	12	14
1:A:24:GLU:CB	1:A:32:ILE:HD12	0.53	2.34	4	1
1:A:19:LEU:HD22	1:A:78:ALA:CA	0.53	2.34	5	1
1:A:48:ALA:O	1:A:51:VAL:N	0.53	2.42	18	15
1:A:19:LEU:CD2	1:A:77:LEU:HD12	0.53	2.24	13	1
1:A:23:TRP:CZ3	1:A:32:ILE:CG2	0.53	2.91	18	1
1:A:24:GLU:CB	1:A:32:ILE:HD11	0.52	2.33	12	2
1:A:26:VAL:O	1:A:47:LYS:CD	0.52	2.57	13	3
1:A:22:ILE:CG1	1:A:23:TRP:N	0.52	2.73	8	5
1:A:23:TRP:CE3	1:A:74:ILE:HG12	0.52	2.39	5	2
1:A:59:TYR:CE2	1:A:81:VAL:HG11	0.52	2.39	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:52:ALA:O	1:A:55:VAL:N	0.52	2.42	8	6
1:A:37:ASN:ND2	1:A:37:ASN:C	0.52	2.67	14	1
1:A:67:VAL:HG12	1:A:71:GLN:NE2	0.52	2.18	14	1
1:A:53:ALA:O	1:A:56:HIS:N	0.52	2.42	3	6
1:A:55:VAL:HG12	1:A:61:VAL:CG1	0.52	2.33	21	4
1:A:16:GLU:OE2	1:A:34:ILE:CG2	0.52	2.56	4	1
1:A:49:MET:HG2	1:A:65:LEU:HD22	0.52	1.81	6	1
1:A:19:LEU:CD1	1:A:78:ALA:CA	0.52	2.87	10	1
1:A:18:LYS:O	1:A:19:LEU:C	0.52	2.52	17	9
1:A:62:GLU:O	1:A:64:PRO:HD3	0.52	2.04	6	1
1:A:74:ILE:O	1:A:75:LYS:C	0.52	2.51	9	13
1:A:36:ASP:O	1:A:73:THR:CG2	0.52	2.57	20	5
1:A:54:GLN:O	1:A:58:GLU:CG	0.52	2.58	11	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:77:LEU:HB3	0.52	2.35	12	6
1:A:36:ASP:N	1:A:73:THR:HG1	0.52	2.02	3	3
1:A:54:GLN:O	1:A:58:GLU:HB2	0.52	2.05	18	11
1:A:55:VAL:CG1	1:A:63:LEU:HD12	0.52	2.29	9	1
1:A:38:PHE:CD2	1:A:72:PRO:O	0.52	2.62	19	4
1:A:23:TRP:CD1	1:A:51:VAL:HG11	0.52	2.40	11	2
1:A:79:GLN:O	1:A:83:THR:HG22	0.52	2.05	5	1
1:A:34:ILE:HG22	1:A:75:LYS:CA	0.52	2.35	19	1
1:A:48:ALA:O	1:A:49:MET:C	0.51	2.53	19	21
1:A:63:LEU:CD1	1:A:80:TYR:CD1	0.51	2.93	12	2
1:A:26:VAL:HG11	1:A:47:LYS:O	0.51	2.05	3	3
1:A:33:GLY:C	1:A:34:ILE:CD1	0.51	2.80	19	1
1:A:47:LYS:O	1:A:50:ALA:N	0.51	2.44	13	5
1:A:45:SER:OG	1:A:46:LEU:N	0.51	2.42	3	2
1:A:20:ALA:O	1:A:24:GLU:CG	0.51	2.59	10	1
1:A:32:ILE:C	1:A:74:ILE:CD1	0.51	2.84	12	1
1:A:21:GLU:O	1:A:22:ILE:C	0.51	2.54	7	16
1:A:14:ALA:O	1:A:15:VAL:C	0.51	2.54	18	16
1:A:65:LEU:O	1:A:69:PHE:N	0.51	2.41	12	2
1:A:47:LYS:O	1:A:50:ALA:CB	0.51	2.59	13	3
1:A:80:TYR:O	1:A:83:THR:CG2	0.51	2.57	5	1
1:A:76:ALA:O	1:A:79:GLN:N	0.51	2.43	6	2
1:A:38:PHE:CD2	1:A:72:PRO:HA	0.51	2.40	17	4
1:A:31:GLY:O	1:A:32:ILE:O	0.51	2.28	20	15
1:A:35:LEU:HA	1:A:73:THR:OG1	0.51	2.05	15	11
1:A:58:GLU:HB3	1:A:59:TYR:CE1	0.51	2.40	21	3
1:A:15:VAL:CG1	1:A:78:ALA:HB1	0.51	2.35	8	2
1:A:15:VAL:HG23	1:A:78:ALA:HB1	0.51	1.83	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:73:THR:CG2	1:A:76:ALA:CB	0.51	2.89	3	4
1:A:59:TYR:CD1	1:A:59:TYR:N	0.51	2.79	10	8
1:A:79:GLN:HG2	1:A:80:TYR:N	0.51	2.21	2	1
1:A:16:GLU:HG3	1:A:74:ILE:CG2	0.51	2.36	6	2
1:A:22:ILE:O	1:A:23:TRP:C	0.50	2.54	11	9
1:A:23:TRP:O	1:A:27:LEU:CG	0.50	2.59	15	11
1:A:49:MET:O	1:A:50:ALA:C	0.50	2.53	1	19
1:A:71:GLN:HB3	1:A:76:ALA:HB1	0.50	1.82	16	4
1:A:68:LEU:O	1:A:72:PRO:CB	0.50	2.58	2	10
1:A:49:MET:HG2	1:A:65:LEU:CD2	0.50	2.36	10	13
1:A:74:ILE:O	1:A:78:ALA:HB3	0.50	2.05	20	3
1:A:38:PHE:CZ	1:A:72:PRO:CA	0.50	2.94	18	2
1:A:19:LEU:HB2	1:A:74:ILE:CD1	0.50	2.37	10	1
1:A:27:LEU:HD23	1:A:47:LYS:CG	0.50	2.35	15	1
1:A:16:GLU:OE1	1:A:34:ILE:CD1	0.50	2.59	17	1
1:A:56:HIS:O	1:A:59:TYR:O	0.50	2.30	15	21
1:A:49:MET:HB2	1:A:65:LEU:HD11	0.50	1.82	5	5
1:A:15:VAL:HG11	1:A:82:ALA:CA	0.50	2.36	11	4
1:A:16:GLU:OE1	1:A:16:GLU:C	0.50	2.54	10	2
1:A:34:ILE:HA	1:A:74:ILE:CD1	0.50	2.36	14	1
1:A:15:VAL:HB	1:A:78:ALA:HB1	0.50	1.82	1	1
1:A:22:ILE:HG13	1:A:23:TRP:N	0.50	2.21	4	4
1:A:79:GLN:O	1:A:83:THR:C	0.50	2.55	2	4
1:A:22:ILE:HG13	1:A:54:GLN:CG	0.50	2.36	20	1
1:A:68:LEU:CD2	1:A:77:LEU:HD11	0.50	2.36	3	1
1:A:37:ASN:HA	1:A:72:PRO:O	0.50	2.06	13	1
1:A:37:ASN:O	1:A:37:ASN:ND2	0.50	2.45	14	1
1:A:15:VAL:O	1:A:19:LEU:CD1	0.50	2.59	3	1
1:A:18:LYS:CE	1:A:58:GLU:CG	0.50	2.90	7	1
1:A:31:GLY:O	1:A:32:ILE:HD12	0.50	2.07	12	1
1:A:19:LEU:CD1	1:A:19:LEU:N	0.50	2.75	19	1
1:A:66:LYS:HG3	1:A:67:VAL:N	0.50	2.21	6	2
1:A:75:LYS:O	1:A:79:GLN:HG2	0.50	2.07	21	5
1:A:71:GLN:CB	1:A:76:ALA:HB1	0.49	2.37	1	2
1:A:58:GLU:CD	1:A:58:GLU:C	0.49	2.79	18	1
1:A:14:ALA:HA	1:A:17:SER:OG	0.49	2.06	8	17
1:A:46:LEU:O	1:A:47:LYS:C	0.49	2.55	10	5
1:A:23:TRP:NE1	1:A:74:ILE:HG12	0.49	2.22	9	3
1:A:23:TRP:CH2	1:A:73:THR:HA	0.49	2.42	19	2
1:A:25:ARG:O	1:A:25:ARG:NE	0.49	2.45	13	1
1:A:51:VAL:O	1:A:52:ALA:C	0.49	2.55	2	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:LYS:O	1:A:21:GLU:N	0.49	2.45	17	4
1:A:19:LEU:O	1:A:20:ALA:C	0.49	2.54	20	4
1:A:81:VAL:O	1:A:83:THR:N	0.49	2.46	1	3
1:A:23:TRP:HB3	1:A:32:ILE:HG21	0.49	1.84	4	2
1:A:59:TYR:CB	1:A:61:VAL:HG23	0.49	2.36	7	1
1:A:23:TRP:O	1:A:27:LEU:CB	0.49	2.61	15	15
1:A:38:PHE:CE2	1:A:68:LEU:HG	0.49	2.43	17	3
1:A:32:ILE:O	1:A:33:GLY:O	0.49	2.31	18	1
1:A:46:LEU:CD1	1:A:46:LEU:C	0.49	2.85	19	1
1:A:77:LEU:O	1:A:78:ALA:C	0.49	2.55	12	18
1:A:24:GLU:CB	1:A:32:ILE:CD1	0.49	2.90	13	4
1:A:18:LYS:HD3	1:A:58:GLU:CG	0.49	2.38	7	1
1:A:22:ILE:CD1	1:A:26:VAL:HG22	0.49	2.38	11	2
1:A:32:ILE:HG23	1:A:36:ASP:OD2	0.49	2.07	7	2
1:A:77:LEU:O	1:A:80:TYR:N	0.49	2.46	19	3
1:A:34:ILE:O	1:A:34:ILE:HG23	0.49	2.06	12	1
1:A:78:ALA:O	1:A:81:VAL:N	0.49	2.46	13	1
1:A:49:MET:SD	1:A:49:MET:O	0.49	2.71	8	20
1:A:34:ILE:HG23	1:A:35:LEU:H	0.49	1.67	5	2
1:A:76:ALA:O	1:A:77:LEU:C	0.49	2.56	13	11
1:A:49:MET:SD	1:A:65:LEU:CD1	0.49	2.97	6	1
1:A:19:LEU:HD13	1:A:78:ALA:CA	0.49	2.38	8	1
1:A:21:GLU:OE1	1:A:25:ARG:NH1	0.49	2.46	8	2
1:A:50:ALA:O	1:A:51:VAL:C	0.49	2.56	16	4
1:A:22:ILE:CD1	1:A:51:VAL:HA	0.48	2.38	3	7
1:A:68:LEU:O	1:A:72:PRO:HB3	0.48	2.08	21	14
1:A:63:LEU:HD13	1:A:77:LEU:HD13	0.48	1.84	3	1
1:A:23:TRP:CH2	1:A:74:ILE:HG13	0.48	2.43	5	2
1:A:18:LYS:CE	1:A:58:GLU:HB2	0.48	2.38	16	1
1:A:15:VAL:HB	1:A:82:ALA:HB2	0.48	1.85	16	3
1:A:19:LEU:HD22	1:A:77:LEU:HB3	0.48	1.84	1	3
1:A:64:PRO:HG2	1:A:67:VAL:HG23	0.48	1.85	2	4
1:A:22:ILE:HD11	1:A:51:VAL:CB	0.48	2.38	4	1
1:A:19:LEU:C	1:A:74:ILE:HD11	0.48	2.33	10	1
1:A:55:VAL:HG12	1:A:61:VAL:HG13	0.48	1.86	18	1
1:A:35:LEU:HD12	1:A:75:LYS:HB2	0.48	1.83	21	1
1:A:54:GLN:OE1	1:A:58:GLU:OE1	0.48	2.31	8	2
1:A:24:GLU:HA	1:A:29:VAL:HG23	0.48	1.85	9	4
1:A:55:VAL:HG11	1:A:63:LEU:HG	0.48	1.84	4	1
1:A:45:SER:O	1:A:46:LEU:C	0.48	2.57	18	6
1:A:22:ILE:HD13	1:A:54:GLN:CD	0.48	2.33	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:LEU:CA	1:A:73:THR:HG22	0.48	2.37	20	1
1:A:26:VAL:CG1	1:A:50:ALA:CB	0.48	2.80	5	4
1:A:18:LYS:NZ	1:A:54:GLN:HG2	0.48	2.23	7	1
1:A:18:LYS:HE3	1:A:58:GLU:CG	0.48	2.38	7	1
1:A:67:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	0.48	1.68	14	1
1:A:36:ASP:O	1:A:73:THR:OG1	0.48	2.32	21	9
1:A:22:ILE:O	1:A:26:VAL:CG2	0.48	2.61	11	2
1:A:18:LYS:NZ	1:A:58:GLU:OE2	0.48	2.41	14	1
1:A:54:GLN:O	1:A:58:GLU:OE1	0.48	2.32	3	3
1:A:64:PRO:HG2	1:A:67:VAL:CG2	0.48	2.38	21	3
1:A:22:ILE:O	1:A:26:VAL:HG22	0.48	2.08	11	1
1:A:55:VAL:HA	1:A:59:TYR:CE2	0.48	2.43	13	1
1:A:24:GLU:CG	1:A:29:VAL:O	0.48	2.62	20	1
1:A:73:THR:O	1:A:77:LEU:N	0.48	2.45	20	1
1:A:58:GLU:N	1:A:58:GLU:CD	0.48	2.71	6	2
1:A:26:VAL:O	1:A:47:LYS:HD2	0.48	2.08	13	4
1:A:35:LEU:HA	1:A:73:THR:HG21	0.48	1.86	5	2
1:A:23:TRP:O	1:A:27:LEU:HG	0.48	2.09	18	14
1:A:55:VAL:CG1	1:A:81:VAL:HG21	0.48	2.39	4	1
1:A:19:LEU:CD1	1:A:78:ALA:HA	0.48	2.39	8	2
1:A:15:VAL:CG1	1:A:78:ALA:HA	0.48	2.39	17	2
1:A:47:LYS:O	1:A:48:ALA:C	0.47	2.56	20	15
1:A:22:ILE:CG1	1:A:51:VAL:HA	0.47	2.39	6	4
1:A:63:LEU:CD1	1:A:80:TYR:CG	0.47	2.97	12	1
1:A:26:VAL:O	1:A:47:LYS:CE	0.47	2.62	19	2
1:A:18:LYS:HE2	1:A:58:GLU:CD	0.47	2.33	20	2
1:A:46:LEU:HD13	1:A:46:LEU:O	0.47	2.09	19	1
1:A:23:TRP:CE3	1:A:27:LEU:HD12	0.47	2.44	20	1
1:A:38:PHE:N	1:A:38:PHE:CD1	0.47	2.82	18	2
1:A:58:GLU:OE1	1:A:59:TYR:CE1	0.47	2.67	11	1
1:A:34:ILE:O	1:A:35:LEU:C	0.47	2.57	12	1
1:A:23:TRP:CE3	1:A:32:ILE:HG23	0.47	2.44	17	1
1:A:16:GLU:HG2	1:A:34:ILE:HG23	0.47	1.85	3	1
1:A:53:ALA:O	1:A:54:GLN:C	0.47	2.57	6	11
1:A:63:LEU:HD22	1:A:67:VAL:CG1	0.47	2.39	3	2
1:A:66:LYS:HD3	1:A:66:LYS:N	0.47	2.24	3	1
1:A:19:LEU:CA	1:A:22:ILE:CG2	0.47	2.89	5	3
1:A:79:GLN:O	1:A:83:THR:CG2	0.47	2.63	5	1
1:A:75:LYS:O	1:A:79:GLN:HB3	0.47	2.09	16	6
1:A:79:GLN:OE1	1:A:83:THR:CB	0.47	2.63	20	2
1:A:61:VAL:HG22	1:A:62:GLU:N	0.47	2.25	4	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:52:ALA:O	1:A:53:ALA:C	0.47	2.57	8	4
1:A:22:ILE:HG12	1:A:23:TRP:N	0.47	2.25	8	3
1:A:78:ALA:O	1:A:79:GLN:C	0.47	2.58	13	1
1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:LYS:HB3	0.47	1.84	3	1
1:A:38:PHE:CZ	1:A:72:PRO:C	0.47	2.92	5	2
1:A:73:THR:HG22	1:A:74:ILE:N	0.47	2.24	18	3
1:A:36:ASP:N	1:A:73:THR:HG23	0.47	2.25	13	3
1:A:65:LEU:O	1:A:68:LEU:N	0.47	2.48	6	2
1:A:20:ALA:O	1:A:24:GLU:HG2	0.47	2.10	10	2
1:A:18:LYS:HG3	1:A:58:GLU:OE2	0.47	2.10	11	1
1:A:54:GLN:HG2	1:A:58:GLU:OE2	0.47	2.10	11	1
1:A:67:VAL:HG13	1:A:80:TYR:CD2	0.47	2.44	13	1
1:A:34:ILE:HD12	1:A:34:ILE:N	0.47	2.23	19	1
1:A:24:GLU:HB3	1:A:32:ILE:CD1	0.47	2.40	7	5
1:A:18:LYS:HE2	1:A:58:GLU:CG	0.47	2.40	21	4
1:A:62:GLU:O	1:A:62:GLU:HG3	0.47	2.10	6	1
1:A:32:ILE:C	1:A:74:ILE:HD11	0.47	2.35	12	1
1:A:64:PRO:HD2	1:A:67:VAL:CG2	0.47	2.40	6	5
1:A:54:GLN:O	1:A:58:GLU:OE2	0.47	2.33	7	3
1:A:16:GLU:OE1	1:A:16:GLU:O	0.47	2.33	9	2
1:A:19:LEU:HA	1:A:22:ILE:CD1	0.47	2.40	15	1
1:A:24:GLU:O	1:A:29:VAL:N	0.47	2.41	15	1
1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:LYS:CB	0.47	2.37	18	1
1:A:73:THR:HG22	1:A:76:ALA:CB	0.47	2.39	3	2
1:A:18:LYS:NZ	1:A:54:GLN:CG	0.47	2.78	7	1
1:A:18:LYS:HG2	1:A:58:GLU:CD	0.47	2.35	11	1
1:A:79:GLN:O	1:A:80:TYR:C	0.47	2.56	12	2
1:A:16:GLU:HG2	1:A:78:ALA:CB	0.46	2.40	12	2
1:A:56:HIS:CD2	1:A:56:HIS:C	0.46	2.93	14	1
1:A:26:VAL:O	1:A:47:LYS:CG	0.46	2.64	5	2
1:A:18:LYS:CG	1:A:58:GLU:CD	0.46	2.89	11	1
1:A:30:SER:O	1:A:30:SER:OG	0.46	2.33	11	1
1:A:24:GLU:HB3	1:A:32:ILE:HD12	0.46	1.88	21	3
1:A:34:ILE:CG1	1:A:75:LYS:HB2	0.46	2.40	2	1
1:A:65:LEU:O	1:A:66:LYS:C	0.46	2.56	11	5
1:A:22:ILE:HB	1:A:54:GLN:CD	0.46	2.35	12	2
1:A:57:ARG:HG3	1:A:58:GLU:N	0.46	2.25	8	1
1:A:19:LEU:HA	1:A:22:ILE:CG1	0.46	2.40	15	1
1:A:15:VAL:CG1	1:A:78:ALA:CA	0.46	2.94	18	1
1:A:49:MET:HG2	1:A:65:LEU:CD1	0.46	2.40	19	12
1:A:19:LEU:O	1:A:22:ILE:HG23	0.46	2.10	11	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:ALA:O	1:A:17:SER:HB2	0.46	2.11	13	8
1:A:67:VAL:O	1:A:70:ALA:HB3	0.46	2.10	14	1
1:A:47:LYS:HG2	1:A:48:ALA:N	0.46	2.24	15	1
1:A:18:LYS:HD3	1:A:59:TYR:CE2	0.46	2.46	16	1
1:A:38:PHE:HB3	1:A:48:ALA:CB	0.46	2.41	20	1
1:A:55:VAL:HG11	1:A:81:VAL:HG21	0.46	1.86	4	1
1:A:38:PHE:CD1	1:A:38:PHE:N	0.46	2.84	6	3
1:A:61:VAL:HG12	1:A:62:GLU:N	0.46	2.26	6	1
1:A:15:VAL:HG12	1:A:78:ALA:CA	0.46	2.41	18	1
1:A:19:LEU:O	1:A:23:TRP:HB2	0.46	2.11	21	5
1:A:34:ILE:HG12	1:A:75:LYS:CG	0.46	2.41	15	1
1:A:70:ALA:C	1:A:71:GLN:HG2	0.46	2.36	10	11
1:A:79:GLN:OE1	1:A:79:GLN:CA	0.46	2.64	1	2
1:A:55:VAL:CG1	1:A:81:VAL:HG11	0.46	2.40	15	3
1:A:23:TRP:O	1:A:27:LEU:HB2	0.46	2.11	13	14
1:A:22:ILE:HG12	1:A:51:VAL:HA	0.46	1.88	11	4
1:A:81:VAL:O	1:A:82:ALA:C	0.45	2.58	5	3
1:A:63:LEU:CD1	1:A:80:TYR:HB3	0.45	2.41	6	1
1:A:15:VAL:HG12	1:A:16:GLU:N	0.45	2.26	8	1
1:A:55:VAL:HG13	1:A:59:TYR:CE1	0.45	2.46	15	1
1:A:48:ALA:O	1:A:51:VAL:HB	0.45	2.11	8	5
1:A:46:LEU:O	1:A:49:MET:N	0.45	2.49	14	2
1:A:77:LEU:C	1:A:77:LEU:CD1	0.45	2.89	20	1
1:A:61:VAL:HG11	1:A:81:VAL:HA	0.45	1.87	2	1
1:A:14:ALA:O	1:A:17:SER:N	0.45	2.50	18	3
1:A:22:ILE:HD11	1:A:51:VAL:HA	0.45	1.88	6	2
1:A:49:MET:HA	1:A:65:LEU:CD1	0.45	2.40	6	1
1:A:31:GLY:C	1:A:32:ILE:HD12	0.45	2.37	12	1
1:A:26:VAL:O	1:A:47:LYS:HG2	0.45	2.12	1	1
1:A:76:ALA:O	1:A:79:GLN:HG2	0.45	2.12	18	6
1:A:16:GLU:O	1:A:17:SER:C	0.45	2.59	16	4
1:A:19:LEU:HD11	1:A:78:ALA:HA	0.45	1.89	10	1
1:A:77:LEU:C	1:A:77:LEU:HD13	0.45	2.37	20	1
1:A:33:GLY:C	1:A:34:ILE:HD13	0.45	2.36	7	1
1:A:63:LEU:CD2	1:A:80:TYR:CD1	0.45	2.99	9	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:77:LEU:HB2	0.45	2.42	12	1
1:A:23:TRP:CD1	1:A:74:ILE:HG12	0.45	2.46	14	1
1:A:35:LEU:HD23	1:A:73:THR:CG2	0.45	2.41	14	1
1:A:54:GLN:O	1:A:58:GLU:HG2	0.45	2.12	20	1
1:A:67:VAL:HG11	1:A:80:TYR:CD2	0.45	2.47	2	2
1:A:78:ALA:O	1:A:82:ALA:N	0.45	2.43	4	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:LYS:O	1:A:67:VAL:C	0.45	2.59	3	7
1:A:63:LEU:HD11	1:A:77:LEU:HD21	0.45	1.88	8	1
1:A:29:VAL:HB	1:A:32:ILE:CD1	0.45	2.41	15	2
1:A:23:TRP:CD2	1:A:74:ILE:CG1	0.45	2.99	11	1
1:A:16:GLU:O	1:A:20:ALA:N	0.45	2.45	21	2
1:A:22:ILE:HG12	1:A:54:GLN:CB	0.45	2.41	5	1
1:A:63:LEU:HD21	1:A:77:LEU:HD21	0.45	1.88	6	1
1:A:22:ILE:HB	1:A:54:GLN:HG2	0.45	1.88	17	4
1:A:52:ALA:O	1:A:55:VAL:HB	0.45	2.12	8	5
1:A:63:LEU:HD22	1:A:67:VAL:HG11	0.45	1.85	9	1
1:A:79:GLN:O	1:A:83:THR:O	0.45	2.33	14	1
1:A:27:LEU:HB2	1:A:29:VAL:CG2	0.45	2.42	2	4
1:A:24:GLU:HB2	1:A:29:VAL:O	0.45	2.10	7	4
1:A:18:LYS:CD	1:A:59:TYR:CE2	0.45	3.00	16	1
1:A:58:GLU:CD	1:A:58:GLU:O	0.45	2.60	18	1
1:A:34:ILE:O	1:A:74:ILE:HG13	0.44	2.12	7	1
1:A:29:VAL:HG11	1:A:32:ILE:CG1	0.44	2.42	15	1
1:A:58:GLU:O	1:A:58:GLU:OE1	0.44	2.35	18	1
1:A:73:THR:HG23	1:A:76:ALA:H	0.44	1.72	1	1
1:A:19:LEU:CB	1:A:74:ILE:HD13	0.44	2.42	10	1
1:A:79:GLN:OE1	1:A:83:THR:OG1	0.44	2.33	20	1
1:A:71:GLN:NE2	1:A:80:TYR:CE1	0.44	2.86	7	2
1:A:81:VAL:C	1:A:83:THR:N	0.44	2.74	1	3
1:A:46:LEU:HD22	1:A:46:LEU:N	0.44	2.27	4	2
1:A:19:LEU:HD12	1:A:78:ALA:HB2	0.44	1.89	10	1
1:A:32:ILE:CG2	1:A:36:ASP:OD2	0.44	2.66	15	1
1:A:19:LEU:HD22	1:A:78:ALA:N	0.44	2.26	5	1
1:A:32:ILE:HG22	1:A:33:GLY:N	0.44	2.27	8	1
1:A:35:LEU:CA	1:A:73:THR:OG1	0.44	2.65	15	3
1:A:34:ILE:O	1:A:75:LYS:HB2	0.44	2.12	3	2
1:A:32:ILE:HG23	1:A:74:ILE:HD11	0.44	1.89	4	1
1:A:51:VAL:C	1:A:53:ALA:N	0.44	2.70	4	1
1:A:19:LEU:CA	1:A:22:ILE:HG22	0.44	2.38	20	1
1:A:21:GLU:O	1:A:24:GLU:HG2	0.44	2.13	1	3
1:A:52:ALA:CB	1:A:68:LEU:HD23	0.44	2.16	3	1
1:A:25:ARG:HG3	1:A:26:VAL:N	0.44	2.26	13	1
1:A:51:VAL:O	1:A:54:GLN:HB3	0.44	2.12	10	6
1:A:16:GLU:HG3	1:A:78:ALA:CB	0.44	2.42	3	1
1:A:16:GLU:CD	1:A:16:GLU:C	0.44	2.86	6	1
1:A:34:ILE:O	1:A:34:ILE:CG2	0.44	2.62	8	1
1:A:36:ASP:N	1:A:73:THR:HG22	0.44	2.26	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:VAL:HG11	1:A:81:VAL:CG2	0.44	2.42	4	1
1:A:80:TYR:CD1	1:A:80:TYR:C	0.44	2.96	9	1
1:A:55:VAL:O	1:A:56:HIS:C	0.44	2.60	15	1
1:A:18:LYS:NZ	1:A:19:LEU:CD1	0.44	2.76	16	1
1:A:18:LYS:HE3	1:A:58:GLU:OE2	0.44	2.12	20	1
1:A:24:GLU:HB3	1:A:32:ILE:HD11	0.44	1.89	12	1
1:A:22:ILE:HG13	1:A:54:GLN:HB2	0.44	1.90	20	1
1:A:58:GLU:OE1	1:A:59:TYR:CD2	0.43	2.71	18	1
1:A:18:LYS:HG3	1:A:22:ILE:CG2	0.43	2.42	4	1
1:A:29:VAL:HG23	1:A:32:ILE:HD11	0.43	1.90	4	1
1:A:23:TRP:CZ2	1:A:38:PHE:HE1	0.43	2.31	5	2
1:A:23:TRP:CE2	1:A:74:ILE:HD13	0.43	2.48	6	1
1:A:15:VAL:HG23	1:A:16:GLU:H	0.43	1.73	7	1
1:A:22:ILE:HG13	1:A:54:GLN:CB	0.43	2.43	20	1
1:A:22:ILE:HG12	1:A:51:VAL:CG1	0.43	2.36	14	2
1:A:19:LEU:HD21	1:A:77:LEU:CD2	0.43	2.43	16	1
1:A:14:ALA:O	1:A:17:SER:HB3	0.43	2.12	2	1
1:A:63:LEU:HD11	1:A:77:LEU:CD1	0.43	2.43	2	1
1:A:16:GLU:CG	1:A:74:ILE:CG2	0.43	2.96	6	2
1:A:51:VAL:O	1:A:54:GLN:CB	0.43	2.67	14	3
1:A:63:LEU:HG	1:A:67:VAL:HG11	0.43	1.90	6	1
1:A:18:LYS:CE	1:A:58:GLU:CD	0.43	2.92	20	1
1:A:71:GLN:N	1:A:72:PRO:HD3	0.43	2.28	20	4
1:A:23:TRP:CE2	1:A:74:ILE:HD11	0.43	2.48	6	1
1:A:54:GLN:O	1:A:58:GLU:HG3	0.43	2.14	11	1
1:A:22:ILE:CD1	1:A:26:VAL:HG23	0.43	2.44	18	3
1:A:49:MET:O	1:A:53:ALA:CB	0.43	2.66	15	1
1:A:34:ILE:C	1:A:74:ILE:HB	0.43	2.39	16	3
1:A:18:LYS:HG2	1:A:58:GLU:HG2	0.43	1.89	13	1
1:A:23:TRP:CH2	1:A:74:ILE:N	0.43	2.87	5	2
1:A:26:VAL:HG12	1:A:47:LYS:CG	0.43	2.44	21	1
1:A:58:GLU:OE1	1:A:58:GLU:N	0.43	2.51	3	1
1:A:63:LEU:HD21	1:A:67:VAL:CG1	0.43	2.44	19	1
1:A:35:LEU:HG	1:A:35:LEU:O	0.43	2.13	13	1
1:A:26:VAL:CG1	1:A:47:LYS:HB2	0.43	2.38	18	1
1:A:55:VAL:HG21	1:A:63:LEU:HG	0.42	1.90	2	3
1:A:38:PHE:CE2	1:A:72:PRO:CA	0.42	3.01	13	2
1:A:35:LEU:N	1:A:74:ILE:HB	0.42	2.29	12	1
1:A:67:VAL:CG2	1:A:80:TYR:OH	0.42	2.68	13	1
1:A:16:GLU:HA	1:A:78:ALA:HB2	0.42	1.90	12	1
1:A:18:LYS:CE	1:A:58:GLU:OE2	0.42	2.67	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:LYS:HD3	1:A:59:TYR:OH	0.42	2.14	16	1
1:A:18:LYS:HE3	1:A:58:GLU:HB2	0.42	1.91	16	1
1:A:69:PHE:O	1:A:72:PRO:HD3	0.42	2.15	5	3
1:A:16:GLU:O	1:A:20:ALA:HB2	0.42	2.15	8	1
1:A:79:GLN:OE1	1:A:83:THR:HB	0.42	2.15	1	3
1:A:16:GLU:CG	1:A:74:ILE:HG23	0.42	2.44	10	1
1:A:16:GLU:OE1	1:A:34:ILE:HD12	0.42	2.15	17	1
1:A:54:GLN:OE1	1:A:57:ARG:CD	0.42	2.67	8	1
1:A:29:VAL:CB	1:A:32:ILE:HD11	0.42	2.43	9	1
1:A:38:PHE:CZ	1:A:77:LEU:HG	0.42	2.49	20	1
1:A:67:VAL:O	1:A:68:LEU:C	0.42	2.61	3	1
1:A:74:ILE:O	1:A:78:ALA:N	0.42	2.52	19	3
1:A:79:GLN:O	1:A:83:THR:CB	0.42	2.67	5	1
1:A:70:ALA:C	1:A:71:GLN:CG	0.42	2.91	16	1
1:A:34:ILE:O	1:A:35:LEU:HB2	0.42	2.14	20	1
1:A:63:LEU:HD23	1:A:63:LEU:HA	0.42	1.70	3	1
1:A:79:GLN:O	1:A:83:THR:OG1	0.42	2.38	3	1
1:A:35:LEU:O	1:A:35:LEU:HG	0.42	2.13	6	1
1:A:24:GLU:N	1:A:32:ILE:HG13	0.42	2.30	10	1
1:A:51:VAL:O	1:A:55:VAL:HG23	0.42	2.14	1	2
1:A:23:TRP:CE2	1:A:38:PHE:CZ	0.42	3.08	1	1
1:A:16:GLU:O	1:A:20:ALA:CB	0.42	2.68	8	1
1:A:54:GLN:OE1	1:A:57:ARG:HD2	0.42	2.14	8	1
1:A:66:LYS:CG	1:A:67:VAL:N	0.42	2.82	11	1
1:A:65:LEU:CD2	1:A:65:LEU:N	0.41	2.82	13	3
1:A:38:PHE:CE2	1:A:68:LEU:HD21	0.41	2.50	6	1
1:A:21:GLU:O	1:A:24:GLU:HG3	0.41	2.14	7	1
1:A:22:ILE:HB	1:A:54:GLN:CG	0.41	2.45	12	1
1:A:16:GLU:OE1	1:A:34:ILE:CG1	0.41	2.68	13	1
1:A:23:TRP:CH2	1:A:36:ASP:CB	0.41	3.03	14	1
1:A:64:PRO:HD2	1:A:67:VAL:HB	0.41	1.92	14	1
1:A:35:LEU:CD1	1:A:73:THR:CG2	0.41	2.88	18	1
1:A:18:LYS:C	1:A:22:ILE:HG23	0.41	2.40	4	1
1:A:34:ILE:O	1:A:74:ILE:CG1	0.41	2.69	7	1
1:A:79:GLN:HG3	1:A:80:TYR:N	0.41	2.30	10	1
1:A:20:ALA:O	1:A:23:TRP:HB2	0.41	2.15	19	2
1:A:55:VAL:HG11	1:A:81:VAL:HG22	0.41	1.92	21	1
1:A:77:LEU:HD13	1:A:77:LEU:C	0.41	2.40	21	1
1:A:38:PHE:CE1	1:A:73:THR:HA	0.41	2.50	9	1
1:A:19:LEU:HD11	1:A:55:VAL:HG22	0.41	1.91	16	1
1:A:26:VAL:CG2	1:A:51:VAL:HG22	0.41	2.44	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:GLU:O	1:A:80:TYR:CE2	0.41	2.74	10	2
1:A:19:LEU:HD13	1:A:78:ALA:N	0.41	2.30	11	1
1:A:34:ILE:O	1:A:34:ILE:HG12	0.41	2.15	13	1
1:A:23:TRP:NE1	1:A:74:ILE:CG1	0.41	2.84	14	1
1:A:55:VAL:O	1:A:59:TYR:O	0.41	2.38	13	1
1:A:67:VAL:HG21	1:A:80:TYR:OH	0.41	2.16	21	1
1:A:35:LEU:HD12	1:A:75:LYS:HE2	0.41	1.92	7	1
1:A:49:MET:O	1:A:53:ALA:N	0.41	2.51	13	1
1:A:46:LEU:C	1:A:46:LEU:HD13	0.41	2.40	19	1
1:A:16:GLU:CD	1:A:34:ILE:HD12	0.41	2.41	2	1
1:A:22:ILE:HG12	1:A:54:GLN:HB2	0.41	1.93	5	1
1:A:63:LEU:HD12	1:A:80:TYR:HD2	0.41	1.75	11	1
1:A:73:THR:HB	1:A:76:ALA:HB3	0.41	1.93	13	1
1:A:71:GLN:OE1	1:A:80:TYR:CD1	0.41	2.74	14	1
1:A:60:GLN:HG3	1:A:60:GLN:O	0.41	2.16	16	1
1:A:79:GLN:HA	1:A:79:GLN:OE1	0.41	2.14	21	1
1:A:48:ALA:CB	1:A:68:LEU:HD11	0.41	2.25	3	1
1:A:14:ALA:C	1:A:17:SER:HG	0.41	2.17	5	1
1:A:79:GLN:O	1:A:83:THR:HB	0.41	2.16	5	1
1:A:58:GLU:CB	1:A:59:TYR:CE1	0.41	3.04	6	2
1:A:16:GLU:OE1	1:A:17:SER:N	0.41	2.54	10	1
1:A:67:VAL:HG11	1:A:80:TYR:CE2	0.41	2.51	11	1
1:A:16:GLU:OE1	1:A:34:ILE:HG12	0.41	2.15	13	1
1:A:33:GLY:N	1:A:36:ASP:OD2	0.41	2.54	19	1
1:A:18:LYS:HG2	1:A:58:GLU:HG3	0.41	1.92	21	1
1:A:79:GLN:OE1	1:A:79:GLN:HA	0.41	2.16	1	1
1:A:66:LYS:O	1:A:69:PHE:HB2	0.41	2.16	10	1
1:A:57:ARG:NE	1:A:57:ARG:HA	0.41	2.31	12	1
1:A:38:PHE:CE1	1:A:51:VAL:HG11	0.41	2.51	19	1
1:A:38:PHE:N	1:A:38:PHE:HD1	0.40	2.14	6	1
1:A:19:LEU:O	1:A:22:ILE:HG13	0.40	2.16	15	1
1:A:65:LEU:O	1:A:69:PHE:CD2	0.40	2.74	17	1
1:A:19:LEU:C	1:A:22:ILE:HG23	0.40	2.42	3	1
1:A:35:LEU:CD1	1:A:75:LYS:HB3	0.40	2.46	6	1
1:A:79:GLN:O	1:A:83:THR:N	0.40	2.52	7	1
1:A:54:GLN:HG3	1:A:58:GLU:OE2	0.40	2.16	10	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:51:VAL:CG1	0.40	2.44	20	1
1:A:15:VAL:HG21	1:A:82:ALA:HB1	0.40	1.85	1	1
1:A:34:ILE:HA	1:A:74:ILE:CG2	0.40	2.47	10	1
1:A:73:THR:OG1	1:A:74:ILE:N	0.40	2.54	15	1
1:A:34:ILE:HG12	1:A:34:ILE:O	0.40	2.16	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:GLU:HG2	1:A:78:ALA:HB1	0.40	1.92	18	1
1:A:34:ILE:O	1:A:35:LEU:HB3	0.40	2.13	4	1
1:A:22:ILE:CB	1:A:54:GLN:HG2	0.40	2.47	5	1
1:A:31:GLY:O	1:A:32:ILE:HB	0.40	2.17	5	1
1:A:49:MET:HG2	1:A:65:LEU:CG	0.40	2.47	10	2
1:A:78:ALA:HA	1:A:81:VAL:HG23	0.40	1.92	14	1
1:A:32:ILE:C	1:A:33:GLY:O	0.40	2.64	18	1
1:A:71:GLN:NE2	1:A:80:TYR:CD2	0.40	2.90	18	1
1:A:53:ALA:O	1:A:57:ARG:HG3	0.40	2.15	9	1
1:A:34:ILE:O	1:A:74:ILE:CG2	0.40	2.69	10	1
1:A:27:LEU:CD2	1:A:47:LYS:CG	0.40	2.99	15	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	63/91 (69%)	47±2 (75±3%)	13±2 (21±4%)	3±1 (5±1%)	3	26
All	All	1323/1911 (69%)	986 (75%)	276 (21%)	61 (5%)	3	26

All 11 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	32	ILE	16
1	A	38	PHE	11
1	A	36	ASP	7
1	A	74	ILE	5
1	A	34	ILE	5
1	A	33	GLY	4
1	A	31	GLY	4
1	A	82	ALA	3
1	A	35	LEU	3
1	A	45	SER	2
1	A	64	PRO	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	51/74 (69%)	31±3 (60±5%)	20±3 (40±5%)	0 5
All	All	1071/1554 (69%)	641 (60%)	430 (40%)	0 5

All 43 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	22	ILE	21
1	A	29	VAL	21
1	A	49	MET	21
1	A	68	LEU	21
1	A	71	GLN	21
1	A	77	LEU	21
1	A	81	VAL	18
1	A	47	LYS	16
1	A	59	TYR	15
1	A	46	LEU	14
1	A	63	LEU	14
1	A	66	LYS	14
1	A	58	GLU	13
1	A	75	LYS	13
1	A	83	THR	13
1	A	36	ASP	12
1	A	21	GLU	12
1	A	34	ILE	12
1	A	57	ARG	12
1	A	35	LEU	11
1	A	19	LEU	10
1	A	18	LYS	10
1	A	37	ASN	10
1	A	24	GLU	10
1	A	16	GLU	9
1	A	45	SER	7
1	A	79	GLN	7
1	A	54	GLN	7
1	A	60	GLN	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	15	VAL	5
1	A	74	ILE	5
1	A	62	GLU	5
1	A	25	ARG	4
1	A	30	SER	4
1	A	67	VAL	4
1	A	65	LEU	3
1	A	26	VAL	2
1	A	32	ILE	2
1	A	55	VAL	1
1	A	61	VAL	1
1	A	56	HIS	1
1	A	17	SER	1
1	A	73	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 [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided