



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 02:36 AM UTC

PDB ID : 2IL6 / pdb_00002il6
Title : HUMAN INTERLEUKIN-6, NMR, 32 STRUCTURES
Authors : Xu, G.Y.; Yu, H.A.; Hong, J.; Stahl, M.; Mcdonagh, T.; Kay, L.E.; Cumming, D.A.
Deposited on : 1997-01-31

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

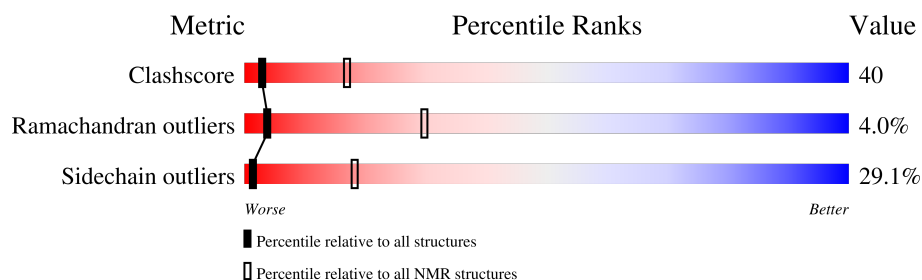
1 Overall quality at a glance

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	185	21% 49% 11% 8% 10%

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 32 models. Model 28 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:21-A:50, A:62-A:139, A:143-A:185 (151)	0.94	28

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 5 clusters and 5 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	2, 4, 5, 9, 12, 13, 14, 16, 18, 19, 20, 21, 22, 25, 29
2	3, 7, 23, 27, 28, 31
3	26, 30
4	1, 17
5	11, 24
Single-model clusters	6; 8; 10; 15; 32

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2680 atoms, of which 1349 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called INTERLEUKIN-6.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	166	Total	C	H	N	O	S	0
			2680	832	1349	229	261	9	

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: INTERLEUKIN-6

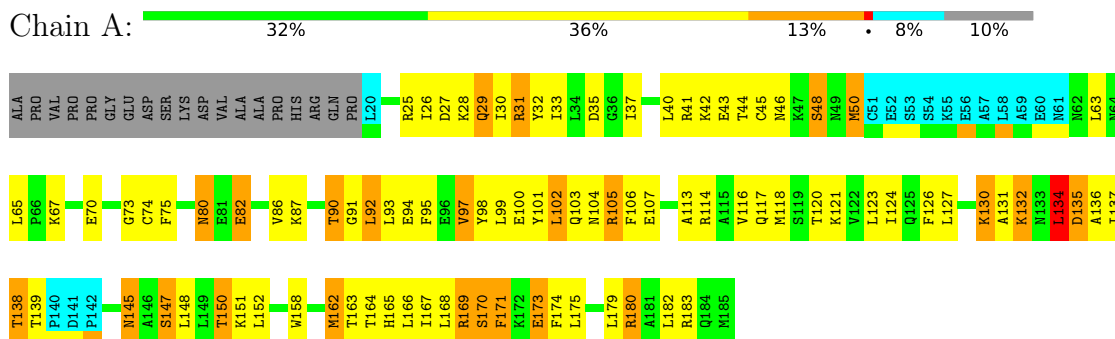


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

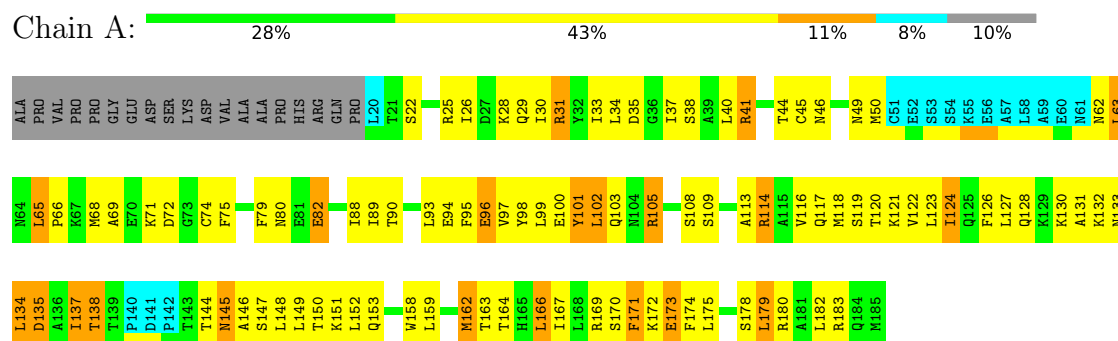
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: INTERLEUKIN-6



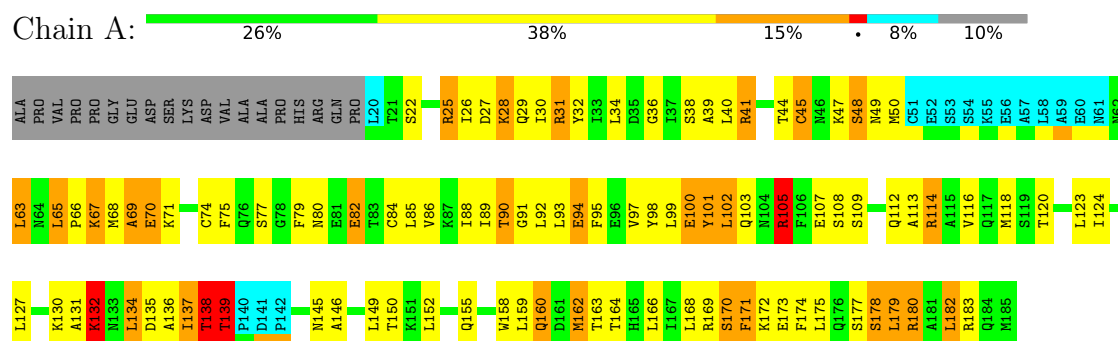
4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: INTERLEUKIN-6



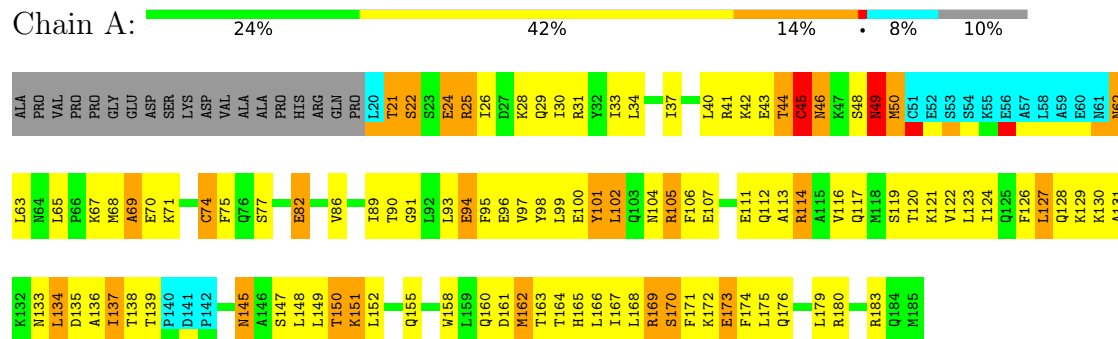
4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: INTERLEUKIN-6



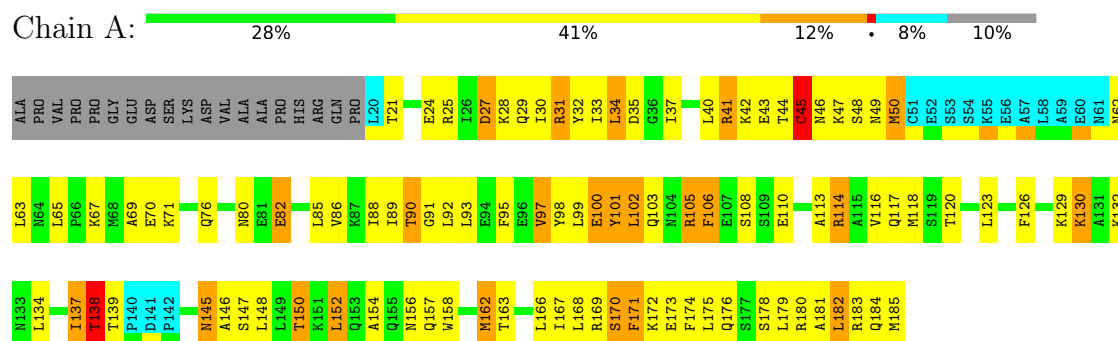
4.2.4 Score per residue for model 4

• Molecule 1: INTERLEUKIN-6



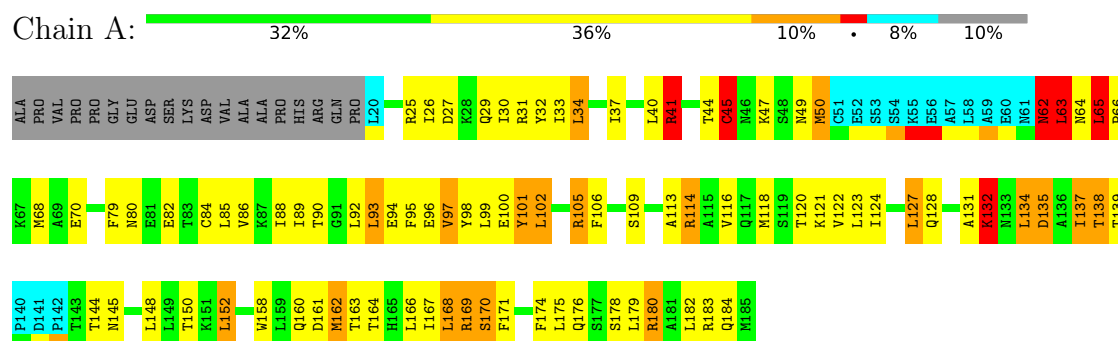
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: INTERLEUKIN-6



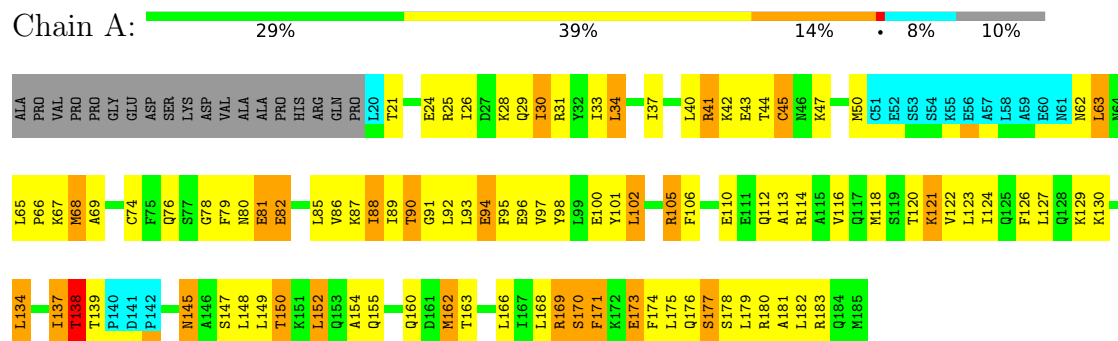
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: INTERLEUKIN-6



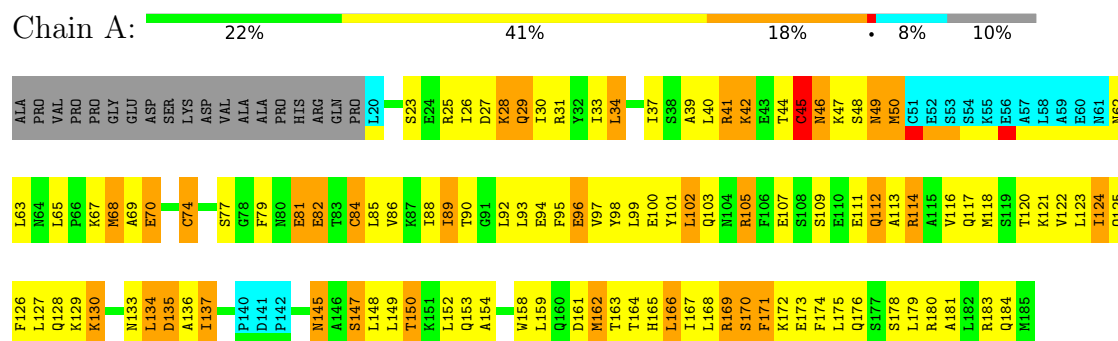
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: INTERLEUKIN-6



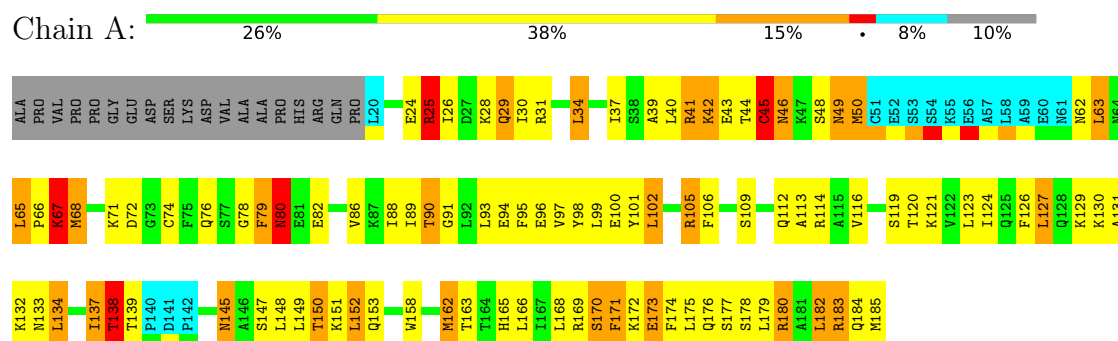
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: INTERLEUKIN-6



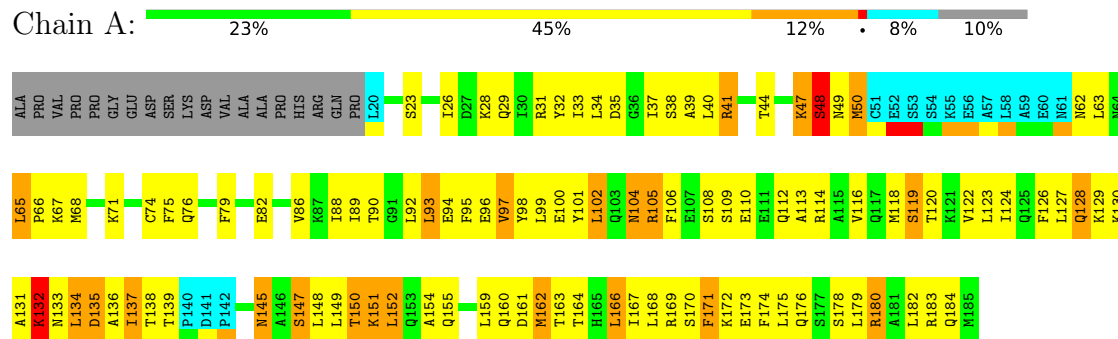
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: INTERLEUKIN-6



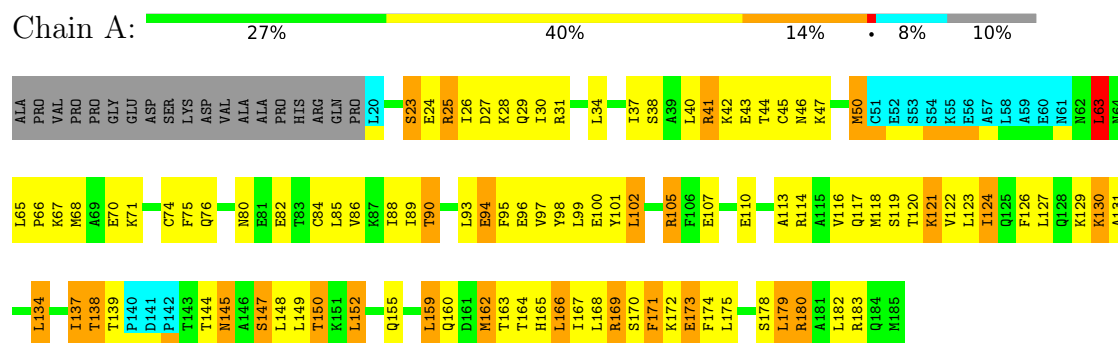
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: INTERLEUKIN-6



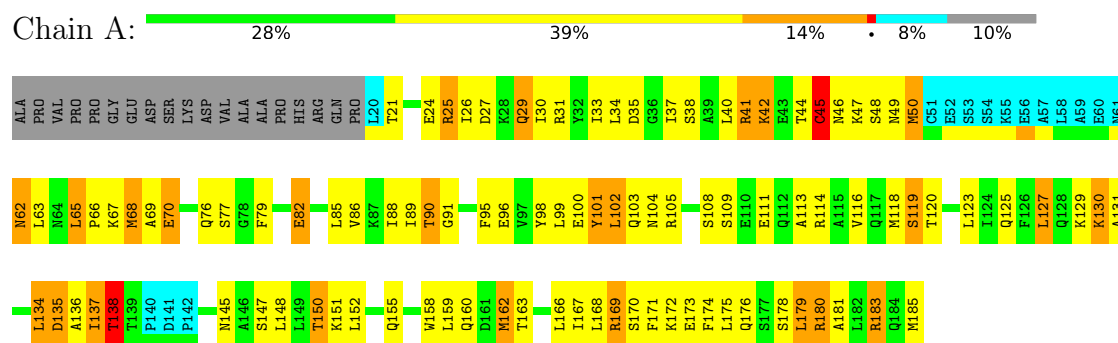
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: INTERLEUKIN-6



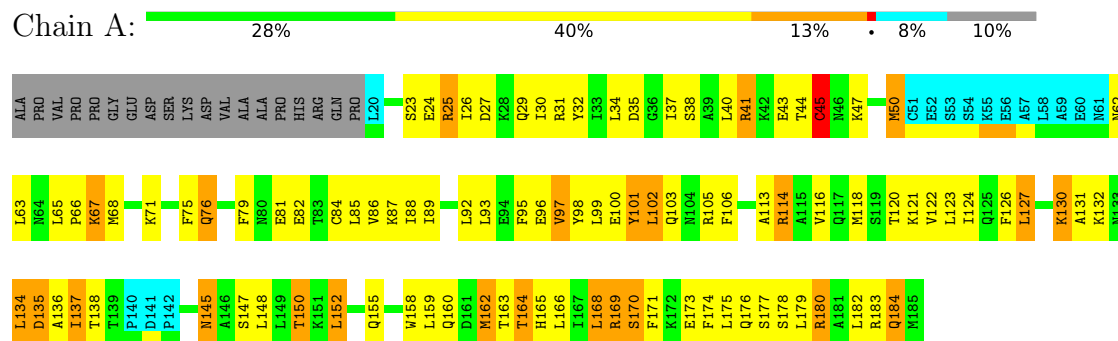
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: INTERLEUKIN-6



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: INTERLEUKIN-6



4.2.14 Score per residue for model 14

• Molecule 1: INTERLEUKIN-6



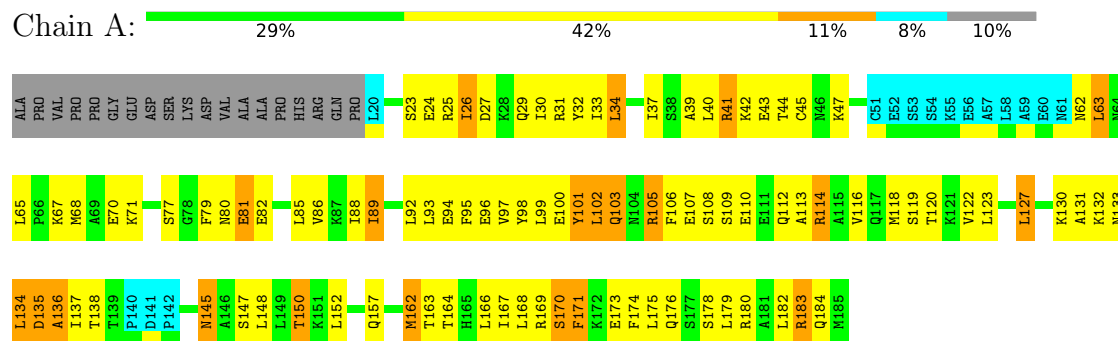
4.2.15 Score per residue for model 15

• Molecule 1: INTERLEUKIN-6



4.2.16 Score per residue for model 16

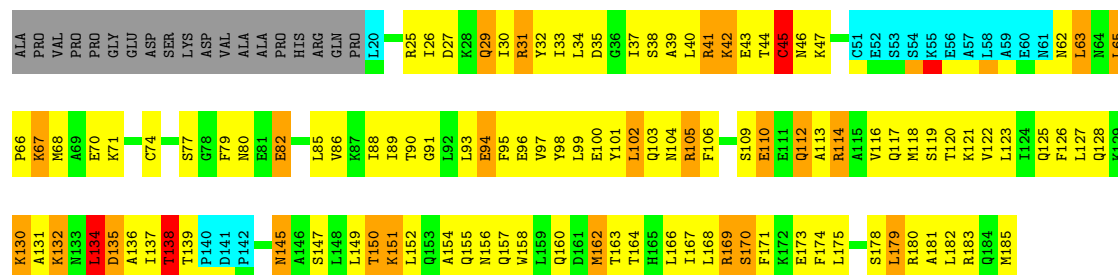
• Molecule 1: INTERLEUKIN-6



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: INTERLEUKIN-6

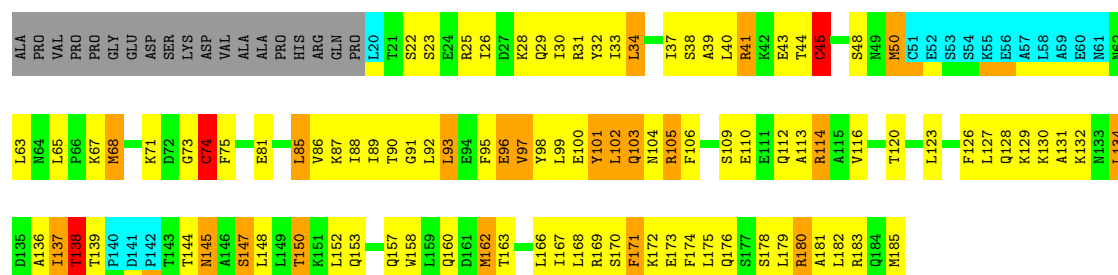
Chain A: 22% 45% 13% 8% 10%



4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: INTERLEUKIN-6

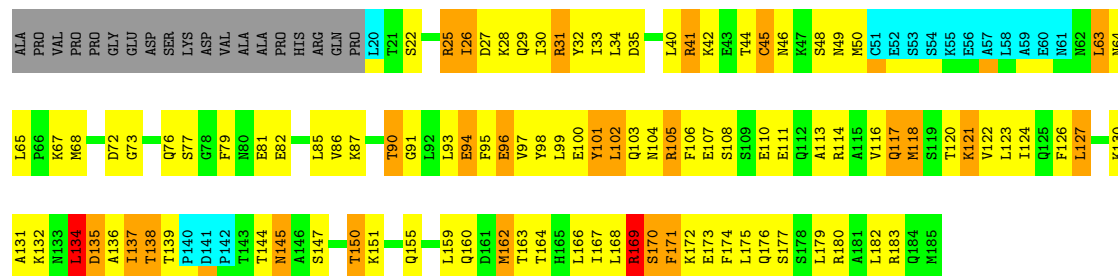
Chain A: 27% 42% 11% 8% 10%



4.2.19 Score per residue for model 19

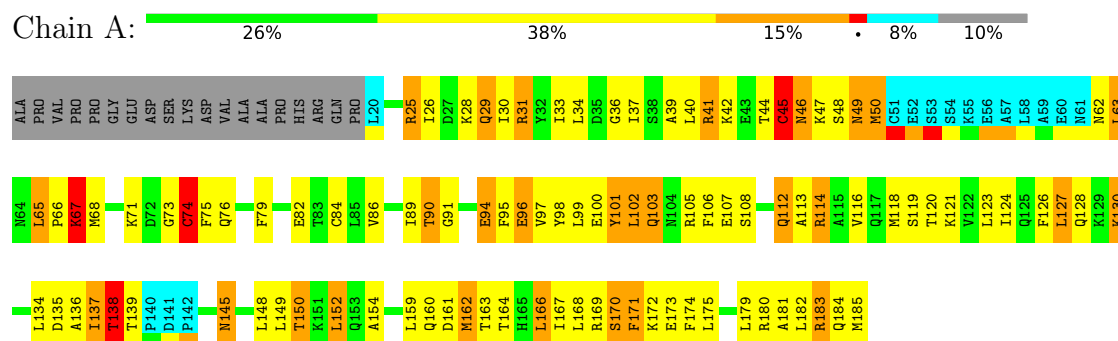
- Molecule 1: INTERLEUKIN-6

Chain A: 25% 42% 13% 8% 10%



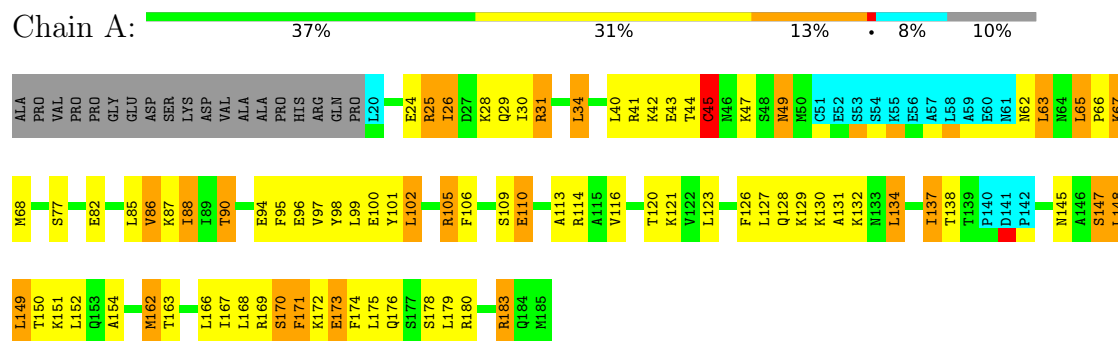
4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: INTERLEUKIN-6



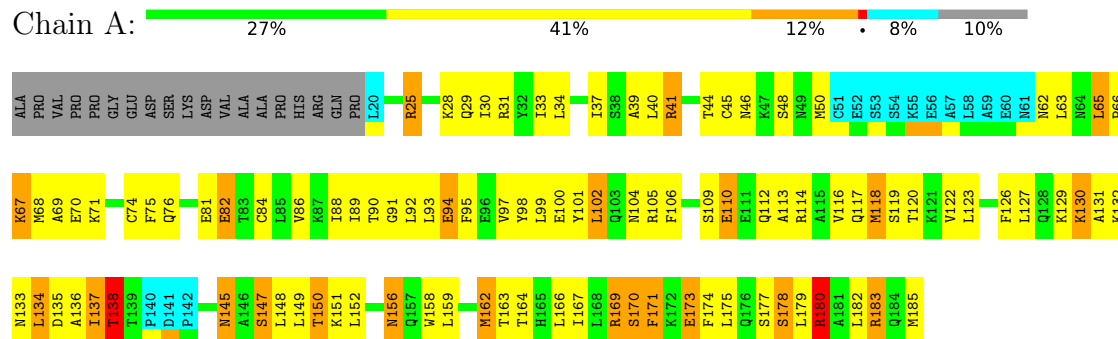
4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: INTERLEUKIN-6



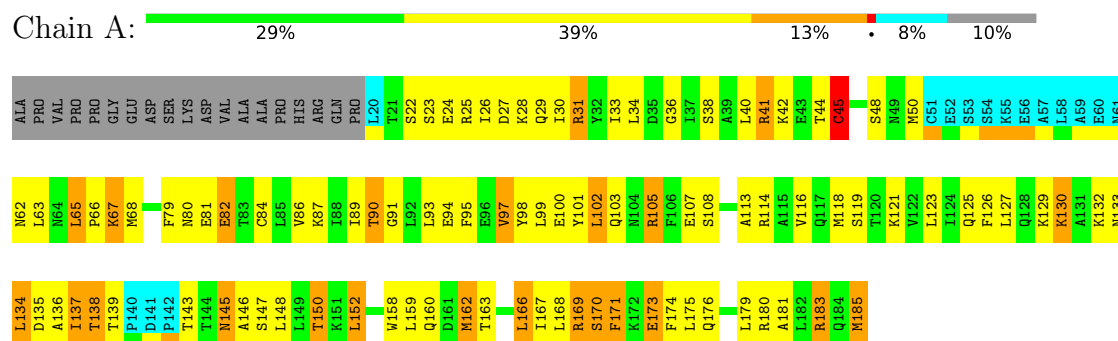
4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: INTERLEUKIN-6



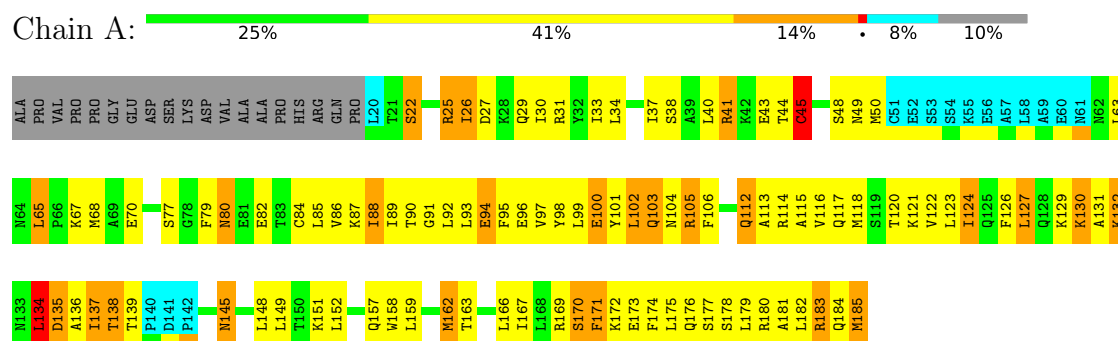
4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: INTERLEUKIN-6



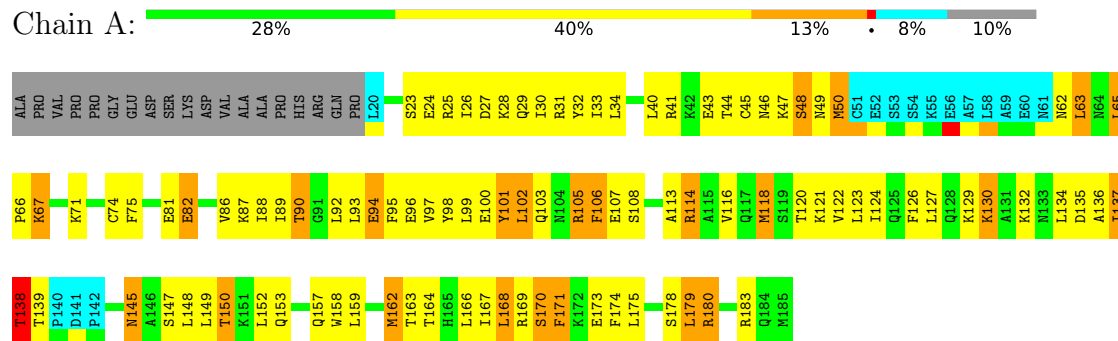
4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: INTERLEUKIN-6



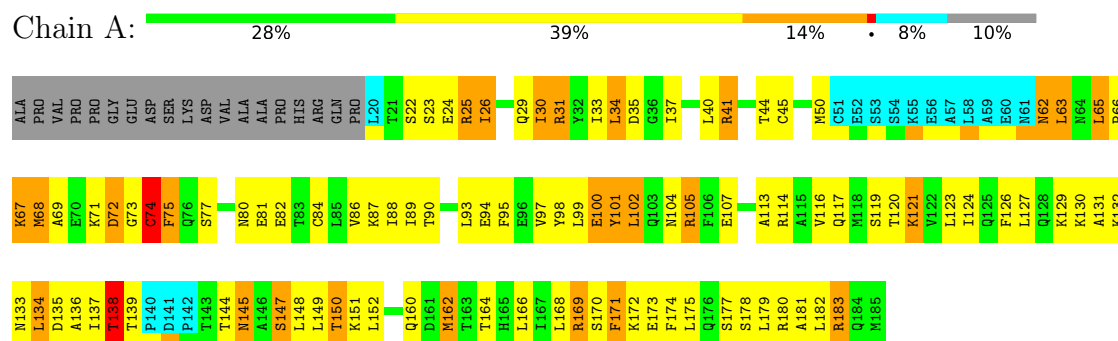
4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: INTERLEUKIN-6



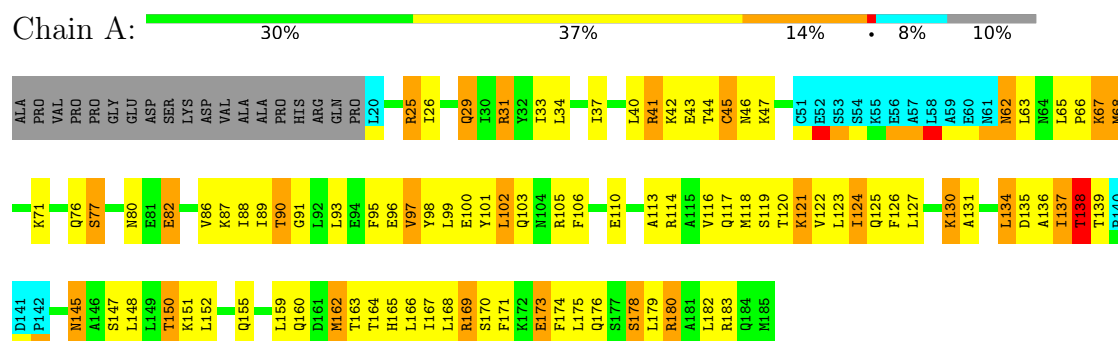
4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: INTERLEUKIN-6



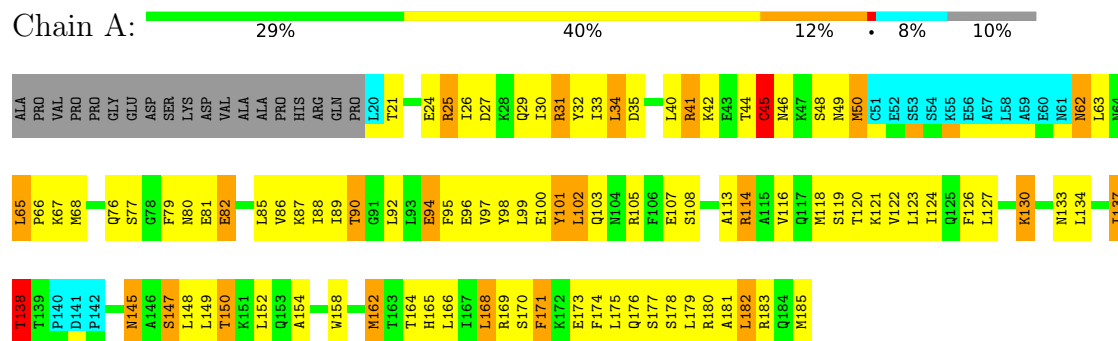
4.2.27 Score per residue for model 27

- Molecule 1: INTERLEUKIN-6



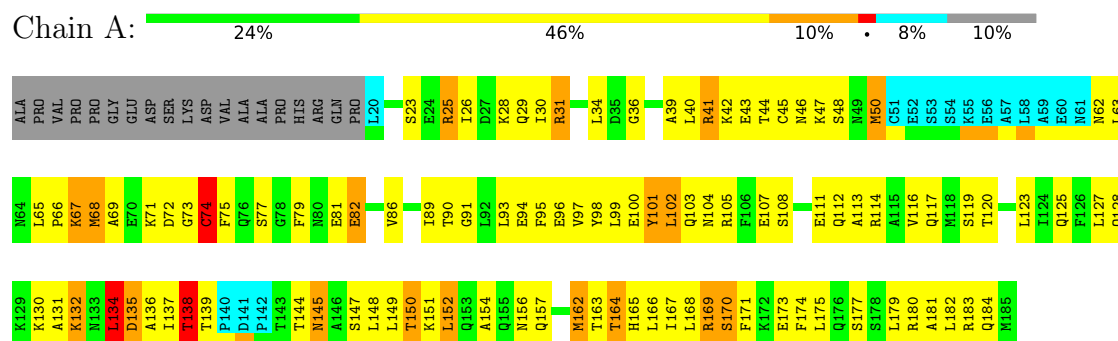
4.2.28 Score per residue for model 28 (medoid)

- Molecule 1: INTERLEUKIN-6



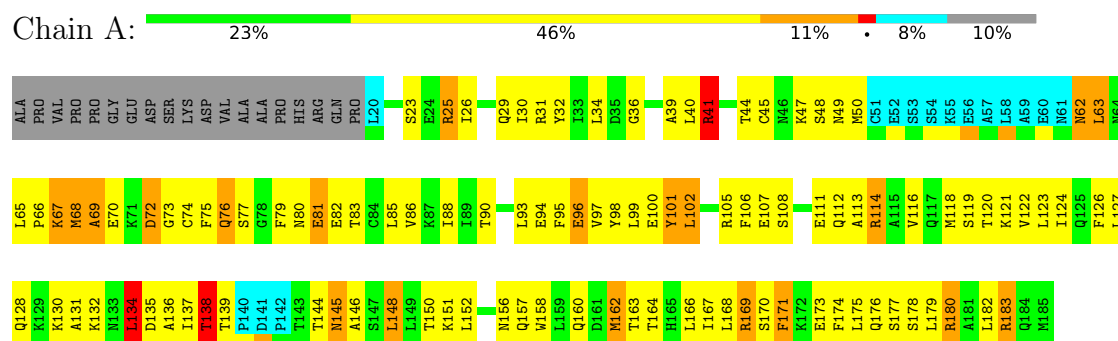
4.2.29 Score per residue for model 29

- Molecule 1: INTERLEUKIN-6



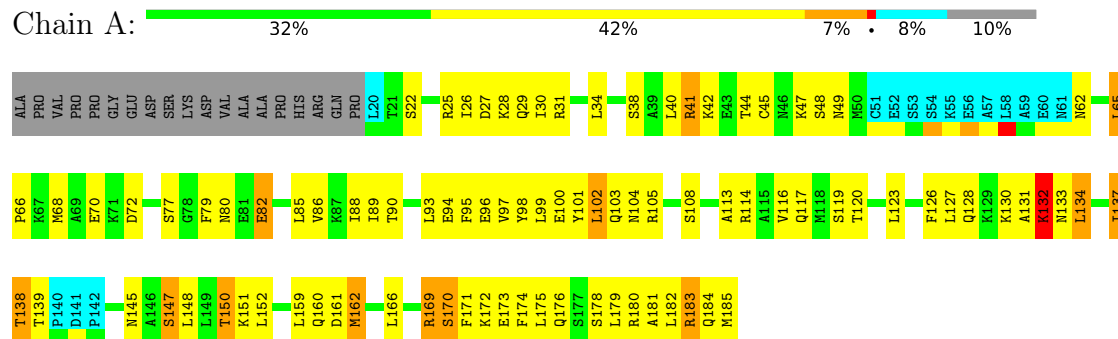
4.2.30 Score per residue for model 30

- Molecule 1: INTERLEUKIN-6



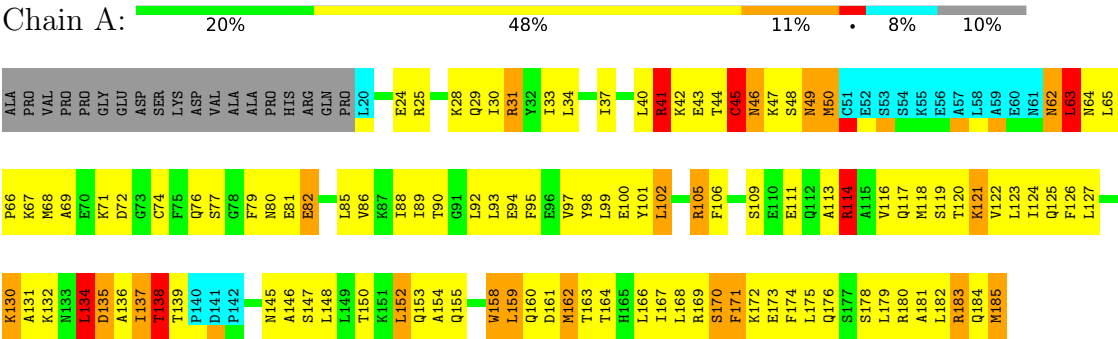
4.2.31 Score per residue for model 31

- Molecule 1: INTERLEUKIN-6



4.2.32 Score per residue for model 32

● Molecule 1: INTERLEUKIN-6



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *DISTANCE GEOMETRY AND SIMULATED ANNEALING*..

Of the 75 calculated structures, 32 were deposited, based on the following criterion: *LEAST RESTRAINT VIOLATION*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	3.1
X-PLOR	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	1.40±0.01	0±0/1234 (0.0± 0.0%)	1.26±0.01	2±1/1655 (0.1± 0.1%)
All	All	1.40	1/39488 (0.0%)	1.26	61/52960 (0.1%)

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	8.0±0.2
All	All	0	255

All unique bond outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	136	ALA	C-N	-5.14	1.28	1.33	16	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	46	ASN	N-CA-C	-6.61	104.15	111.36	9	5
1	A	171	PHE	CA-CB-CG	-6.21	107.59	113.80	1	23
1	A	100	GLU	N-CA-C	-6.13	104.66	111.71	8	29
1	A	138	THR	CB-CA-C	-5.33	109.45	115.79	28	4

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	31	ARG	Sidechain	32
1	A	41	ARG	Sidechain	32
1	A	105	ARG	Sidechain	32
1	A	114	ARG	Sidechain	32
1	A	169	ARG	Sidechain	32
1	A	180	ARG	Sidechain	32
1	A	183	ARG	Sidechain	32
1	A	25	ARG	Sidechain	31

6.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1221	1248	1248	98±10
All	All	39072	39936	39936	3131

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 40.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:ILE:HG23	1:A:123:LEU:HD12	1.08	1.22	14	16
1:A:63:LEU:HD11	1:A:65:LEU:HD23	1.07	1.25	11	2
1:A:63:LEU:HD21	1:A:163:THR:HG23	1.02	1.32	6	3
1:A:162:MET:HE3	1:A:166:LEU:HD23	0.97	1.31	3	3
1:A:63:LEU:HD23	1:A:152:LEU:HD22	0.95	1.37	6	1
1:A:101:TYR:CE1	1:A:152:LEU:HD12	0.95	1.97	15	4
1:A:99:LEU:HD11	1:A:120:THR:HG21	0.94	1.38	16	12
1:A:40:LEU:HD11	1:A:116:VAL:HG11	0.93	1.41	8	3
1:A:89:ILE:HG21	1:A:137:ILE:HD12	0.92	1.37	6	6
1:A:97:VAL:HG11	1:A:145:ASN:ND2	0.91	1.80	24	18
1:A:90:THR:HG23	1:A:137:ILE:CG2	0.90	1.96	7	14
1:A:102:LEU:CD2	1:A:164:THR:HG23	0.88	1.98	32	11
1:A:89:ILE:HD12	1:A:137:ILE:HD13	0.88	1.43	22	12
1:A:63:LEU:HD11	1:A:163:THR:HG23	0.88	1.45	16	7
1:A:162:MET:HE1	1:A:166:LEU:HB2	0.87	1.45	24	20
1:A:29:GLN:CB	1:A:123:LEU:HD21	0.87	1.98	8	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:ILE:HD13	1:A:123:LEU:HD23	0.87	1.46	2	1
1:A:63:LEU:CD1	1:A:166:LEU:HD22	0.86	2.00	32	1
1:A:102:LEU:O	1:A:113:ALA:HB1	0.86	1.70	8	32
1:A:94:GLU:O	1:A:97:VAL:HG12	0.86	1.71	2	21
1:A:30:ILE:HD13	1:A:123:LEU:HD13	0.86	1.46	32	2
1:A:40:LEU:CD1	1:A:116:VAL:HG11	0.85	2.01	2	17
1:A:39:ALA:HB1	1:A:112:GLN:OE1	0.85	1.71	15	3
1:A:74:CYS:SG	1:A:181:ALA:HB2	0.85	2.12	26	4
1:A:147:SER:O	1:A:150:THR:HG22	0.85	1.70	21	18
1:A:162:MET:HE2	1:A:162:MET:O	0.85	1.71	9	11
1:A:127:LEU:O	1:A:131:ALA:HB2	0.84	1.72	15	15
1:A:162:MET:HE1	1:A:166:LEU:CB	0.84	2.02	15	16
1:A:133:ASN:C	1:A:134:LEU:HD22	0.84	1.97	15	1
1:A:86:VAL:HG22	1:A:137:ILE:HD11	0.84	1.48	12	7
1:A:30:ILE:CD1	1:A:123:LEU:HD13	0.84	2.02	32	3
1:A:29:GLN:HB3	1:A:123:LEU:HD21	0.84	1.50	24	20
1:A:89:ILE:HG23	1:A:137:ILE:HG23	0.84	1.47	16	2
1:A:118:MET:O	1:A:122:VAL:HG23	0.83	1.74	27	16
1:A:65:LEU:HD21	1:A:166:LEU:CD2	0.83	2.02	8	5
1:A:63:LEU:CD1	1:A:65:LEU:HD23	0.83	2.03	11	2
1:A:63:LEU:CD2	1:A:163:THR:HG23	0.83	2.03	32	1
1:A:102:LEU:HD11	1:A:167:ILE:HG21	0.82	1.50	21	18
1:A:162:MET:HE1	1:A:166:LEU:HD23	0.82	1.50	16	3
1:A:85:LEU:O	1:A:88:ILE:HG22	0.82	1.75	7	3
1:A:178:SER:O	1:A:182:LEU:HD12	0.82	1.74	15	2
1:A:166:LEU:O	1:A:166:LEU:HD13	0.82	1.74	17	10
1:A:30:ILE:CD1	1:A:123:LEU:HD23	0.82	2.05	2	1
1:A:116:VAL:O	1:A:120:THR:HG23	0.82	1.75	19	14
1:A:161:ASP:O	1:A:164:THR:HG22	0.82	1.75	20	3
1:A:89:ILE:CG2	1:A:137:ILE:HG23	0.82	2.05	8	2
1:A:30:ILE:HG23	1:A:175:LEU:HD22	0.81	1.51	3	23
1:A:89:ILE:HD13	1:A:137:ILE:HD13	0.81	1.50	31	3
1:A:162:MET:O	1:A:162:MET:HE3	0.81	1.75	19	14
1:A:86:VAL:HG13	1:A:137:ILE:CG1	0.81	2.04	3	14
1:A:86:VAL:HG13	1:A:137:ILE:HG13	0.81	1.51	5	14
1:A:99:LEU:HD11	1:A:120:THR:CG2	0.81	2.05	24	10
1:A:89:ILE:HD13	1:A:137:ILE:CD1	0.81	2.05	24	3
1:A:29:GLN:HB2	1:A:123:LEU:HD21	0.81	1.51	32	9
1:A:29:GLN:CB	1:A:123:LEU:HD11	0.81	2.05	4	12
1:A:98:TYR:OH	1:A:148:LEU:HD21	0.80	1.76	1	21
1:A:62:ASN:O	1:A:63:LEU:HD12	0.80	1.76	32	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:LEU:HD22	1:A:139:THR:OG1	0.79	1.77	14	7
1:A:33:ILE:HD11	1:A:123:LEU:HD12	0.79	1.55	8	3
1:A:40:LEU:CD1	1:A:116:VAL:HG21	0.79	2.07	29	7
1:A:162:MET:SD	1:A:166:LEU:HD23	0.78	2.18	6	2
1:A:96:GLU:HA	1:A:99:LEU:HD12	0.78	1.55	29	20
1:A:93:LEU:HD13	1:A:139:THR:OG1	0.78	1.77	32	6
1:A:82:GLU:O	1:A:86:VAL:HG23	0.78	1.78	19	28
1:A:127:LEU:O	1:A:127:LEU:HD13	0.77	1.79	6	4
1:A:179:LEU:HD12	1:A:180:ARG:N	0.77	1.93	18	3
1:A:164:THR:O	1:A:168:LEU:HD12	0.77	1.80	13	10
1:A:40:LEU:HD11	1:A:116:VAL:HG21	0.77	1.54	23	7
1:A:90:THR:HA	1:A:93:LEU:HD12	0.77	1.54	4	16
1:A:97:VAL:HG23	1:A:145:ASN:ND2	0.76	1.96	21	1
1:A:102:LEU:HD21	1:A:164:THR:HG23	0.76	1.55	3	10
1:A:89:ILE:HD12	1:A:137:ILE:CD1	0.76	2.10	15	10
1:A:89:ILE:HD11	1:A:127:LEU:HD12	0.76	1.58	24	2
1:A:162:MET:HE3	1:A:166:LEU:CD2	0.76	2.11	3	2
1:A:63:LEU:HB2	1:A:166:LEU:HD22	0.75	1.57	5	3
1:A:90:THR:HG23	1:A:137:ILE:HG22	0.75	1.59	9	4
1:A:63:LEU:HD11	1:A:65:LEU:CD2	0.75	2.10	11	2
1:A:121:LYS:HA	1:A:124:ILE:HD12	0.75	1.57	26	8
1:A:65:LEU:HD21	1:A:166:LEU:HD22	0.75	1.58	24	1
1:A:85:LEU:HD21	1:A:127:LEU:HD21	0.74	1.54	6	2
1:A:89:ILE:HD11	1:A:127:LEU:CG	0.74	2.12	13	2
1:A:63:LEU:HD11	1:A:163:THR:CG2	0.74	2.11	16	3
1:A:86:VAL:HG22	1:A:134:LEU:HD21	0.74	1.57	16	2
1:A:148:LEU:CD1	1:A:152:LEU:HD21	0.74	2.12	21	11
1:A:137:ILE:HG22	1:A:137:ILE:O	0.74	1.82	32	20
1:A:162:MET:CE	1:A:166:LEU:HD23	0.74	2.11	6	5
1:A:37:ILE:CD1	1:A:116:VAL:HG21	0.74	2.13	8	16
1:A:26:ILE:CG2	1:A:123:LEU:HD12	0.74	2.10	14	4
1:A:89:ILE:HG21	1:A:137:ILE:CD1	0.73	2.13	6	6
1:A:149:LEU:HD12	1:A:152:LEU:HD12	0.73	1.57	21	9
1:A:89:ILE:CD1	1:A:137:ILE:HD13	0.73	2.13	11	12
1:A:92:LEU:HD22	1:A:120:THR:OG1	0.73	1.82	8	2
1:A:27:ASP:CG	1:A:179:LEU:HD23	0.73	2.08	28	5
1:A:175:LEU:O	1:A:179:LEU:HD12	0.73	1.82	20	11
1:A:99:LEU:HD13	1:A:120:THR:OG1	0.73	1.83	29	13
1:A:37:ILE:HD11	1:A:116:VAL:HG21	0.73	1.59	17	6
1:A:98:TYR:CZ	1:A:148:LEU:HD21	0.72	2.19	29	21
1:A:128:GLN:CD	1:A:137:ILE:HG21	0.72	2.09	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:ILE:HG23	1:A:123:LEU:CD1	0.72	2.12	27	6
1:A:148:LEU:HD13	1:A:152:LEU:HD21	0.72	1.58	30	1
1:A:29:GLN:HB3	1:A:123:LEU:HD11	0.72	1.58	23	13
1:A:88:ILE:HD12	1:A:178:SER:CB	0.72	2.14	22	8
1:A:93:LEU:HD13	1:A:139:THR:CB	0.72	2.14	19	6
1:A:30:ILE:HB	1:A:179:LEU:HD11	0.72	1.61	24	4
1:A:82:GLU:CG	1:A:134:LEU:HD11	0.72	2.15	1	4
1:A:89:ILE:HD13	1:A:137:ILE:HD11	0.71	1.61	24	1
1:A:162:MET:HE1	1:A:166:LEU:CD2	0.71	2.13	16	2
1:A:68:MET:HE1	1:A:88:ILE:HD11	0.71	1.63	12	4
1:A:26:ILE:HD11	1:A:126:PHE:C	0.71	2.09	7	4
1:A:63:LEU:HD23	1:A:162:MET:HE1	0.71	1.61	11	1
1:A:145:ASN:ND2	1:A:148:LEU:HD23	0.71	2.01	1	5
1:A:65:LEU:HD21	1:A:166:LEU:HD23	0.71	1.61	8	3
1:A:29:GLN:HB2	1:A:123:LEU:HD11	0.71	1.63	11	11
1:A:137:ILE:HD12	1:A:137:ILE:N	0.70	2.01	4	23
1:A:88:ILE:HD12	1:A:178:SER:OG	0.70	1.86	9	7
1:A:99:LEU:HD13	1:A:117:GLN:HA	0.70	1.62	22	7
1:A:89:ILE:HG13	1:A:127:LEU:HD23	0.70	1.62	16	1
1:A:101:TYR:CE2	1:A:163:THR:HG21	0.70	2.21	19	19
1:A:88:ILE:HD13	1:A:178:SER:HB2	0.70	1.64	6	4
1:A:68:MET:HE1	1:A:177:SER:HB2	0.70	1.61	7	1
1:A:26:ILE:HG23	1:A:123:LEU:HD11	0.70	1.61	28	1
1:A:85:LEU:HD23	1:A:134:LEU:HD13	0.69	1.63	17	4
1:A:69:ALA:HB3	1:A:74:CYS:SG	0.69	2.27	32	1
1:A:44:THR:HG23	1:A:44:THR:O	0.69	1.88	8	16
1:A:63:LEU:HD12	1:A:166:LEU:HB3	0.69	1.64	23	6
1:A:88:ILE:HD11	1:A:178:SER:HB3	0.69	1.64	21	1
1:A:65:LEU:N	1:A:66:PRO:CD	0.69	2.55	9	20
1:A:99:LEU:CD1	1:A:120:THR:HG21	0.69	2.18	8	5
1:A:113:ALA:O	1:A:116:VAL:HG12	0.69	1.87	9	4
1:A:88:ILE:HD11	1:A:178:SER:CB	0.69	2.17	7	3
1:A:63:LEU:HD22	1:A:152:LEU:CD2	0.69	2.18	27	2
1:A:23:SER:O	1:A:26:ILE:HG22	0.68	1.88	13	2
1:A:37:ILE:HG23	1:A:168:LEU:CD1	0.68	2.18	11	2
1:A:131:ALA:HB3	1:A:135:ASP:HB3	0.68	1.65	1	2
1:A:133:ASN:O	1:A:134:LEU:HD12	0.68	1.89	4	2
1:A:40:LEU:HD11	1:A:116:VAL:CG1	0.68	2.17	9	5
1:A:85:LEU:O	1:A:89:ILE:HD12	0.68	1.87	24	1
1:A:40:LEU:O	1:A:44:THR:HG22	0.68	1.89	4	18
1:A:65:LEU:HD21	1:A:166:LEU:HD12	0.67	1.64	30	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:97:VAL:HG11	1:A:145:ASN:HD21	0.67	1.48	26	15
1:A:162:MET:HE3	1:A:166:LEU:HB2	0.67	1.64	8	5
1:A:27:ASP:OD1	1:A:179:LEU:HD23	0.67	1.88	17	7
1:A:148:LEU:HD11	1:A:152:LEU:HD21	0.67	1.66	8	12
1:A:162:MET:HE3	1:A:163:THR:HA	0.67	1.66	15	10
1:A:30:ILE:CG2	1:A:179:LEU:HD11	0.67	2.19	1	9
1:A:137:ILE:HG22	1:A:138:THR:N	0.67	2.05	24	3
1:A:88:ILE:HD13	1:A:178:SER:CB	0.67	2.20	10	5
1:A:39:ALA:HB1	1:A:112:GLN:CD	0.67	2.15	10	3
1:A:162:MET:HE1	1:A:166:LEU:CG	0.67	2.20	16	5
1:A:155:GLN:HB3	1:A:159:LEU:HD23	0.67	1.65	12	1
1:A:50:MET:HE2	1:A:158:TRP:CD1	0.67	2.25	28	1
1:A:88:ILE:HD12	1:A:178:SER:HB3	0.66	1.67	31	6
1:A:85:LEU:HD13	1:A:182:LEU:HD11	0.66	1.65	3	2
1:A:89:ILE:HD11	1:A:127:LEU:HB3	0.66	1.67	13	3
1:A:50:MET:HE2	1:A:162:MET:HB3	0.66	1.67	10	1
1:A:89:ILE:HD11	1:A:127:LEU:CB	0.65	2.21	13	2
1:A:101:TYR:CZ	1:A:152:LEU:HD12	0.65	2.25	9	3
1:A:86:VAL:CG1	1:A:136:ALA:HB3	0.65	2.20	13	2
1:A:30:ILE:CB	1:A:179:LEU:HD11	0.65	2.21	24	2
1:A:127:LEU:HD22	1:A:130:LYS:HE3	0.65	1.69	4	1
1:A:26:ILE:HD13	1:A:127:LEU:HD13	0.65	1.68	16	1
1:A:163:THR:HG22	1:A:167:ILE:CD1	0.65	2.21	10	4
1:A:26:ILE:HD13	1:A:127:LEU:HG	0.65	1.67	7	6
1:A:106:PHE:CD2	1:A:113:ALA:HB2	0.65	2.27	9	2
1:A:50:MET:HE2	1:A:158:TRP:NE1	0.65	2.07	28	1
1:A:62:ASN:HA	1:A:166:LEU:HD13	0.65	1.67	2	1
1:A:40:LEU:HD11	1:A:116:VAL:CG2	0.65	2.22	23	7
1:A:131:ALA:HB1	1:A:134:LEU:HB2	0.65	1.68	15	2
1:A:63:LEU:HG	1:A:162:MET:HE1	0.64	1.69	18	2
1:A:93:LEU:HD13	1:A:138:THR:O	0.64	1.92	22	3
1:A:139:THR:O	1:A:139:THR:HG23	0.64	1.92	11	8
1:A:88:ILE:HD13	1:A:178:SER:OG	0.64	1.93	10	2
1:A:30:ILE:HD13	1:A:123:LEU:CD1	0.64	2.19	32	3
1:A:65:LEU:HD11	1:A:170:SER:CB	0.64	2.22	26	3
1:A:89:ILE:HG21	1:A:137:ILE:HD13	0.64	1.69	26	3
1:A:36:GLY:HA3	1:A:116:VAL:HG22	0.64	1.68	23	6
1:A:101:TYR:CD1	1:A:149:LEU:HD11	0.64	2.28	25	10
1:A:171:PHE:CD2	1:A:175:LEU:HD11	0.64	2.27	7	23
1:A:29:GLN:NE2	1:A:122:VAL:HG11	0.64	2.08	6	3
1:A:26:ILE:HD11	1:A:126:PHE:HB3	0.63	1.69	26	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:63:LEU:HD13	1:A:166:LEU:HD22	0.63	1.70	32	1
1:A:39:ALA:HB1	1:A:112:GLN:NE2	0.63	2.07	3	2
1:A:131:ALA:HB1	1:A:134:LEU:CB	0.63	2.23	31	3
1:A:90:THR:HG23	1:A:137:ILE:HG23	0.63	1.69	27	5
1:A:82:GLU:HG2	1:A:134:LEU:HD11	0.63	1.69	30	4
1:A:99:LEU:HD11	1:A:120:THR:OG1	0.63	1.94	27	2
1:A:86:VAL:HG13	1:A:137:ILE:HG12	0.62	1.70	7	5
1:A:63:LEU:HD12	1:A:166:LEU:CB	0.62	2.24	19	2
1:A:50:MET:HE3	1:A:158:TRP:CZ3	0.62	2.30	32	1
1:A:82:GLU:HG2	1:A:134:LEU:HD21	0.62	1.71	7	3
1:A:179:LEU:HD12	1:A:179:LEU:C	0.62	2.19	22	3
1:A:131:ALA:HB3	1:A:135:ASP:HB2	0.62	1.70	26	2
1:A:65:LEU:HD12	1:A:95:PHE:CE1	0.62	2.29	16	4
1:A:62:ASN:HA	1:A:166:LEU:HD22	0.62	1.69	26	2
1:A:171:PHE:O	1:A:175:LEU:HD12	0.62	1.93	2	5
1:A:34:LEU:HD11	1:A:175:LEU:HB2	0.62	1.71	10	7
1:A:33:ILE:O	1:A:116:VAL:HG23	0.62	1.93	19	9
1:A:63:LEU:HB3	1:A:65:LEU:HD23	0.62	1.70	23	12
1:A:93:LEU:HD22	1:A:139:THR:HB	0.62	1.71	7	4
1:A:40:LEU:CB	1:A:168:LEU:HD21	0.62	2.25	32	2
1:A:63:LEU:HD13	1:A:65:LEU:CD2	0.61	2.25	6	1
1:A:166:LEU:C	1:A:166:LEU:HD23	0.61	2.18	24	1
1:A:37:ILE:HD13	1:A:40:LEU:HD12	0.61	1.71	9	2
1:A:150:THR:O	1:A:154:ALA:HB2	0.61	1.96	20	10
1:A:86:VAL:HG22	1:A:134:LEU:CD2	0.61	2.26	16	2
1:A:148:LEU:HD12	1:A:152:LEU:HD11	0.61	1.73	21	1
1:A:40:LEU:HD13	1:A:116:VAL:HG11	0.61	1.72	7	14
1:A:123:LEU:O	1:A:127:LEU:HD12	0.61	1.96	29	3
1:A:166:LEU:HD13	1:A:166:LEU:C	0.61	2.21	27	8
1:A:139:THR:HG22	1:A:139:THR:O	0.61	1.95	6	3
1:A:162:MET:HE3	1:A:162:MET:C	0.61	2.21	16	14
1:A:34:LEU:HD11	1:A:171:PHE:O	0.61	1.96	9	4
1:A:127:LEU:HD22	1:A:130:LYS:CE	0.61	2.26	4	1
1:A:62:ASN:O	1:A:166:LEU:HD13	0.61	1.96	32	1
1:A:50:MET:HE3	1:A:158:TRP:CE3	0.61	2.31	32	1
1:A:37:ILE:HG23	1:A:168:LEU:HD23	0.60	1.74	16	2
1:A:62:ASN:HB3	1:A:162:MET:HE2	0.60	1.73	6	1
1:A:41:ARG:HB2	1:A:168:LEU:HD23	0.60	1.72	18	1
1:A:137:ILE:CD1	1:A:137:ILE:N	0.60	2.63	22	10
1:A:26:ILE:CG2	1:A:182:LEU:HD11	0.60	2.27	29	1
1:A:26:ILE:HG13	1:A:127:LEU:HD23	0.60	1.74	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:72:ASP:O	1:A:83:THR:HG22	0.60	1.95	30	1
1:A:30:ILE:HB	1:A:179:LEU:HD21	0.60	1.72	6	3
1:A:163:THR:HG22	1:A:167:ILE:HD11	0.60	1.72	10	2
1:A:85:LEU:HD23	1:A:134:LEU:HD22	0.60	1.73	11	3
1:A:164:THR:HG22	1:A:168:LEU:HD11	0.59	1.73	25	4
1:A:63:LEU:HG	1:A:162:MET:HE2	0.59	1.73	24	2
1:A:95:PHE:CD2	1:A:171:PHE:CZ	0.59	2.90	9	10
1:A:95:PHE:CD2	1:A:171:PHE:CE1	0.59	2.91	12	20
1:A:27:ASP:CA	1:A:182:LEU:HD13	0.59	2.27	16	2
1:A:135:ASP:O	1:A:136:ALA:HB3	0.59	1.98	4	15
1:A:99:LEU:HD21	1:A:171:PHE:CE2	0.59	2.33	18	5
1:A:29:GLN:CG	1:A:123:LEU:HD11	0.59	2.28	2	1
1:A:89:ILE:HD11	1:A:127:LEU:HG	0.59	1.73	13	1
1:A:65:LEU:HD11	1:A:170:SER:OG	0.59	1.98	30	2
1:A:137:ILE:N	1:A:137:ILE:HD13	0.59	2.13	6	5
1:A:33:ILE:HD13	1:A:120:THR:HG22	0.59	1.74	14	3
1:A:95:PHE:CD1	1:A:171:PHE:CZ	0.59	2.91	15	4
1:A:26:ILE:HD12	1:A:127:LEU:HG	0.59	1.74	29	4
1:A:93:LEU:HD11	1:A:137:ILE:CG2	0.59	2.28	10	1
1:A:131:ALA:HB1	1:A:134:LEU:HB3	0.58	1.75	13	7
1:A:95:PHE:CZ	1:A:174:PHE:CD2	0.58	2.90	31	3
1:A:37:ILE:HG23	1:A:168:LEU:HD22	0.58	1.74	20	2
1:A:68:MET:HE1	1:A:88:ILE:CD1	0.58	2.28	16	1
1:A:127:LEU:HD23	1:A:130:LYS:HE3	0.58	1.75	25	1
1:A:63:LEU:HD11	1:A:163:THR:HA	0.58	1.75	21	3
1:A:95:PHE:CG	1:A:171:PHE:CE1	0.58	2.92	15	3
1:A:26:ILE:HG12	1:A:123:LEU:HD13	0.58	1.76	16	3
1:A:49:ASN:O	1:A:50:MET:HE3	0.58	1.98	25	1
1:A:89:ILE:CG2	1:A:137:ILE:HD12	0.58	2.28	16	2
1:A:86:VAL:CG2	1:A:134:LEU:HD13	0.58	2.29	24	1
1:A:137:ILE:N	1:A:137:ILE:CD1	0.58	2.66	3	18
1:A:97:VAL:HG23	1:A:145:ASN:CG	0.58	2.24	21	1
1:A:26:ILE:HG13	1:A:123:LEU:HD13	0.58	1.74	13	1
1:A:162:MET:HE2	1:A:162:MET:C	0.58	2.24	8	7
1:A:149:LEU:HA	1:A:152:LEU:HD12	0.57	1.75	24	6
1:A:37:ILE:HD12	1:A:168:LEU:HD23	0.57	1.75	5	6
1:A:137:ILE:O	1:A:137:ILE:CG2	0.57	2.53	19	10
1:A:40:LEU:O	1:A:168:LEU:HD13	0.57	1.98	7	3
1:A:29:GLN:CD	1:A:122:VAL:HG11	0.57	2.25	10	1
1:A:171:PHE:CD1	1:A:175:LEU:HD11	0.57	2.34	17	7
1:A:33:ILE:HG23	1:A:120:THR:OG1	0.57	2.00	26	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:MET:CE	1:A:158:TRP:CE3	0.57	2.88	32	1
1:A:63:LEU:CG	1:A:65:LEU:HD23	0.57	2.30	26	2
1:A:37:ILE:HG23	1:A:168:LEU:HD12	0.57	1.74	11	1
1:A:37:ILE:HD13	1:A:116:VAL:HG21	0.56	1.77	8	1
1:A:155:GLN:NE2	1:A:159:LEU:HD12	0.56	2.14	10	1
1:A:97:VAL:HG21	1:A:145:ASN:ND2	0.56	2.15	19	2
1:A:145:ASN:HD21	1:A:149:LEU:HD22	0.56	1.58	21	1
1:A:99:LEU:HD22	1:A:117:GLN:HA	0.56	1.75	27	2
1:A:86:VAL:HG13	1:A:136:ALA:HB3	0.56	1.75	13	2
1:A:99:LEU:HD11	1:A:120:THR:HG22	0.56	1.74	24	1
1:A:69:ALA:HB1	1:A:72:ASP:HB3	0.56	1.77	32	1
1:A:101:TYR:CD1	1:A:152:LEU:HD12	0.56	2.36	9	4
1:A:123:LEU:HD22	1:A:123:LEU:N	0.56	2.16	9	15
1:A:155:GLN:OE1	1:A:159:LEU:HD13	0.56	2.01	27	3
1:A:93:LEU:HD13	1:A:139:THR:HB	0.56	1.78	17	3
1:A:162:MET:HE3	1:A:163:THR:CA	0.56	2.31	15	7
1:A:34:LEU:HD23	1:A:172:LYS:CE	0.56	2.30	21	1
1:A:148:LEU:HD12	1:A:148:LEU:O	0.56	2.00	27	6
1:A:85:LEU:HD23	1:A:134:LEU:CD2	0.56	2.30	18	2
1:A:68:MET:HE2	1:A:74:CYS:SG	0.55	2.41	9	1
1:A:63:LEU:HB2	1:A:166:LEU:HD12	0.55	1.78	27	1
1:A:96:GLU:OE1	1:A:124:ILE:HD11	0.55	2.01	4	1
1:A:89:ILE:HD11	1:A:127:LEU:CD1	0.55	2.30	24	2
1:A:119:SER:O	1:A:123:LEU:HD22	0.55	2.02	12	2
1:A:181:ALA:HB1	1:A:185:MET:HE3	0.55	1.77	12	2
1:A:131:ALA:HB3	1:A:135:ASP:CB	0.55	2.31	1	2
1:A:147:SER:HA	1:A:150:THR:HG22	0.55	1.77	1	4
1:A:88:ILE:HD12	1:A:178:SER:HB2	0.55	1.79	25	4
1:A:26:ILE:CD1	1:A:127:LEU:HD13	0.55	2.31	16	1
1:A:137:ILE:O	1:A:138:THR:HG23	0.55	2.02	24	1
1:A:101:TYR:HD1	1:A:149:LEU:HD11	0.55	1.61	17	8
1:A:65:LEU:CB	1:A:98:TYR:CE2	0.55	2.89	21	10
1:A:33:ILE:HG23	1:A:120:THR:CG2	0.55	2.31	7	2
1:A:149:LEU:CD1	1:A:152:LEU:HD12	0.55	2.31	28	5
1:A:63:LEU:CD1	1:A:163:THR:HG23	0.55	2.28	30	3
1:A:63:LEU:HD21	1:A:152:LEU:CD2	0.55	2.31	25	3
1:A:63:LEU:CB	1:A:65:LEU:HD23	0.55	2.31	22	4
1:A:21:THR:HG23	1:A:22:SER:N	0.55	2.15	4	2
1:A:26:ILE:HG22	1:A:182:LEU:HD11	0.55	1.79	29	1
1:A:65:LEU:HD11	1:A:170:SER:HB2	0.55	1.77	26	3
1:A:85:LEU:HD11	1:A:127:LEU:HD11	0.54	1.77	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:THR:O	1:A:44:THR:CG2	0.54	2.56	4	5
1:A:26:ILE:HD13	1:A:127:LEU:CD2	0.54	2.32	13	1
1:A:117:GLN:OE1	1:A:118:MET:HE2	0.54	2.03	1	1
1:A:37:ILE:HG23	1:A:168:LEU:CD2	0.54	2.33	4	4
1:A:63:LEU:HD13	1:A:65:LEU:HD23	0.54	1.79	6	2
1:A:101:TYR:CE2	1:A:163:THR:CG2	0.54	2.91	3	17
1:A:26:ILE:HG21	1:A:127:LEU:HD21	0.54	1.80	17	2
1:A:26:ILE:HD12	1:A:130:LYS:CE	0.54	2.33	21	1
1:A:133:ASN:O	1:A:134:LEU:HD22	0.54	2.03	31	2
1:A:90:THR:HG23	1:A:137:ILE:HG21	0.53	1.80	1	2
1:A:62:ASN:CB	1:A:162:MET:HE2	0.53	2.33	6	1
1:A:102:LEU:HD23	1:A:106:PHE:CE1	0.53	2.39	10	4
1:A:88:ILE:HG22	1:A:92:LEU:HD11	0.53	1.80	18	1
1:A:89:ILE:HG13	1:A:137:ILE:HD13	0.53	1.78	29	2
1:A:96:GLU:CG	1:A:124:ILE:HD11	0.53	2.34	13	2
1:A:98:TYR:CE1	1:A:148:LEU:HD21	0.53	2.38	10	2
1:A:30:ILE:HG21	1:A:179:LEU:HD11	0.53	1.80	1	1
1:A:33:ILE:CG2	1:A:175:LEU:HD13	0.53	2.33	22	22
1:A:162:MET:HE3	1:A:162:MET:O	0.53	2.03	5	4
1:A:120:THR:HG21	1:A:171:PHE:HE2	0.53	1.64	18	2
1:A:26:ILE:HD13	1:A:127:LEU:HD23	0.53	1.81	13	1
1:A:65:LEU:HD12	1:A:95:PHE:HE1	0.53	1.63	16	2
1:A:30:ILE:HG22	1:A:179:LEU:HD11	0.53	1.80	16	2
1:A:163:THR:CG2	1:A:167:ILE:HD11	0.53	2.33	10	1
1:A:134:LEU:O	1:A:135:ASP:CB	0.53	2.56	13	13
1:A:84:CYS:SG	1:A:181:ALA:HB1	0.53	2.44	8	1
1:A:85:LEU:HG	1:A:127:LEU:HD21	0.52	1.80	14	1
1:A:135:ASP:O	1:A:136:ALA:CB	0.52	2.57	27	11
1:A:65:LEU:CD1	1:A:95:PHE:CE1	0.52	2.92	24	2
1:A:27:ASP:HB2	1:A:182:LEU:HD13	0.52	1.80	13	1
1:A:97:VAL:HG11	1:A:148:LEU:HD23	0.52	1.81	5	4
1:A:26:ILE:HG23	1:A:123:LEU:HD22	0.52	1.81	17	2
1:A:102:LEU:HD11	1:A:167:ILE:CG2	0.52	2.30	21	4
1:A:37:ILE:HD12	1:A:168:LEU:HD13	0.52	1.81	11	1
1:A:63:LEU:HD21	1:A:152:LEU:HD22	0.52	1.79	18	3
1:A:50:MET:HE1	1:A:158:TRP:O	0.52	2.04	18	1
1:A:31:ARG:N	1:A:179:LEU:HD21	0.52	2.19	23	1
1:A:90:THR:HB	1:A:137:ILE:HG22	0.52	1.81	4	4
1:A:88:ILE:HD11	1:A:178:SER:HB2	0.52	1.82	7	1
1:A:27:ASP:OD2	1:A:179:LEU:HD23	0.52	2.04	28	3
1:A:34:LEU:HD11	1:A:175:LEU:CB	0.52	2.34	14	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:131:ALA:O	1:A:132:LYS:O	0.52	2.28	3	4
1:A:40:LEU:CD1	1:A:116:VAL:CG1	0.52	2.88	11	4
1:A:89:ILE:HD13	1:A:135:ASP:HA	0.52	1.81	17	1
1:A:97:VAL:CG2	1:A:145:ASN:ND2	0.52	2.72	21	1
1:A:62:ASN:CA	1:A:166:LEU:HD13	0.51	2.35	2	1
1:A:181:ALA:O	1:A:185:MET:HE3	0.51	2.05	31	4
1:A:134:LEU:HD22	1:A:134:LEU:N	0.51	2.20	15	1
1:A:63:LEU:CD2	1:A:162:MET:HE1	0.51	2.35	11	1
1:A:127:LEU:HD23	1:A:130:LYS:HE2	0.51	1.82	27	1
1:A:33:ILE:HG21	1:A:175:LEU:CD1	0.51	2.36	22	8
1:A:95:PHE:CD1	1:A:171:PHE:CE1	0.51	2.99	15	4
1:A:95:PHE:CE2	1:A:174:PHE:CD2	0.51	2.99	19	1
1:A:44:THR:O	1:A:48:SER:N	0.51	2.44	25	2
1:A:75:PHE:CD1	1:A:75:PHE:N	0.51	2.78	26	3
1:A:158:TRP:CD2	1:A:158:TRP:C	0.51	2.89	32	1
1:A:26:ILE:HD11	1:A:126:PHE:CB	0.51	2.36	26	2
1:A:74:CYS:O	1:A:75:PHE:CG	0.51	2.64	4	6
1:A:27:ASP:HB2	1:A:182:LEU:HD21	0.51	1.80	24	1
1:A:40:LEU:HB3	1:A:168:LEU:HD21	0.51	1.81	32	1
1:A:30:ILE:CD1	1:A:123:LEU:CD1	0.51	2.89	17	1
1:A:63:LEU:HB2	1:A:166:LEU:HD23	0.51	1.82	25	1
1:A:40:LEU:HD21	1:A:113:ALA:HA	0.51	1.81	17	1
1:A:89:ILE:HG22	1:A:90:THR:N	0.50	2.20	8	3
1:A:41:ARG:CD	1:A:168:LEU:HD13	0.50	2.35	10	1
1:A:99:LEU:CD1	1:A:120:THR:CG2	0.50	2.88	8	7
1:A:162:MET:HE1	1:A:166:LEU:HB3	0.50	1.79	15	1
1:A:68:MET:HE1	1:A:88:ILE:CG1	0.50	2.36	16	1
1:A:99:LEU:HD13	1:A:117:GLN:HG3	0.50	1.84	17	1
1:A:65:LEU:N	1:A:66:PRO:HD3	0.50	2.21	29	9
1:A:65:LEU:HD22	1:A:98:TYR:CZ	0.50	2.41	17	1
1:A:63:LEU:CD2	1:A:152:LEU:CD2	0.50	2.90	20	3
1:A:48:SER:O	1:A:50:MET:N	0.50	2.45	32	9
1:A:90:THR:N	1:A:137:ILE:HG21	0.50	2.21	15	5
1:A:85:LEU:CD1	1:A:182:LEU:HD11	0.50	2.36	28	1
1:A:106:PHE:HB2	1:A:113:ALA:HB2	0.50	1.83	20	5
1:A:74:CYS:C	1:A:75:PHE:CG	0.50	2.89	18	3
1:A:29:GLN:CG	1:A:123:LEU:HD21	0.50	2.36	30	2
1:A:30:ILE:CG2	1:A:175:LEU:HD22	0.50	2.32	3	2
1:A:127:LEU:HD13	1:A:127:LEU:C	0.50	2.29	6	1
1:A:30:ILE:HG12	1:A:33:ILE:HD12	0.50	1.82	19	2
1:A:50:MET:CE	1:A:158:TRP:CZ3	0.50	2.94	32	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:37:ILE:HG23	1:A:168:LEU:HB2	0.50	1.84	10	1
1:A:27:ASP:CB	1:A:182:LEU:HD13	0.50	2.37	13	1
1:A:88:ILE:HG22	1:A:92:LEU:CD1	0.50	2.37	18	2
1:A:131:ALA:O	1:A:132:LYS:C	0.50	2.55	24	4
1:A:170:SER:O	1:A:174:PHE:CB	0.50	2.60	24	32
1:A:89:ILE:HD11	1:A:134:LEU:CD2	0.50	2.36	3	1
1:A:91:GLY:O	1:A:95:PHE:CD2	0.50	2.65	5	9
1:A:27:ASP:O	1:A:179:LEU:HD23	0.49	2.07	23	1
1:A:136:ALA:O	1:A:138:THR:N	0.49	2.46	24	2
1:A:65:LEU:CD2	1:A:65:LEU:N	0.49	2.75	6	1
1:A:33:ILE:HD11	1:A:123:LEU:HD23	0.49	1.83	10	8
1:A:42:LYS:O	1:A:46:ASN:CB	0.49	2.60	32	11
1:A:65:LEU:HB3	1:A:98:TYR:CZ	0.49	2.43	9	16
1:A:122:VAL:O	1:A:126:PHE:CD1	0.49	2.66	8	11
1:A:128:GLN:OE1	1:A:137:ILE:HG21	0.49	2.07	2	1
1:A:37:ILE:HG23	1:A:168:LEU:HG	0.49	1.83	18	2
1:A:50:MET:CE	1:A:158:TRP:NE1	0.49	2.76	1	1
1:A:26:ILE:CG1	1:A:123:LEU:HD13	0.49	2.37	13	1
1:A:65:LEU:HD23	1:A:65:LEU:H	0.49	1.67	15	5
1:A:137:ILE:CG2	1:A:137:ILE:O	0.49	2.61	28	13
1:A:45:CYS:N	1:A:48:SER:OG	0.49	2.46	9	2
1:A:101:TYR:CE1	1:A:152:LEU:HB2	0.49	2.42	24	14
1:A:168:LEU:C	1:A:168:LEU:HD12	0.49	2.32	10	1
1:A:50:MET:HE3	1:A:158:TRP:CD1	0.49	2.43	12	1
1:A:86:VAL:HG23	1:A:134:LEU:HD21	0.49	1.83	21	1
1:A:88:ILE:HD11	1:A:178:SER:OG	0.49	2.07	7	1
1:A:152:LEU:N	1:A:152:LEU:HD23	0.49	2.21	5	2
1:A:27:ASP:HA	1:A:182:LEU:HD13	0.49	1.83	16	1
1:A:34:LEU:HD12	1:A:34:LEU:N	0.49	2.23	17	1
1:A:82:GLU:CG	1:A:134:LEU:HD21	0.48	2.38	2	3
1:A:85:LEU:CG	1:A:127:LEU:HD21	0.48	2.38	14	1
1:A:30:ILE:HG21	1:A:179:LEU:CD1	0.48	2.38	24	1
1:A:91:GLY:O	1:A:95:PHE:CD1	0.48	2.66	18	8
1:A:102:LEU:CD1	1:A:167:ILE:HG21	0.48	2.37	8	2
1:A:91:GLY:O	1:A:95:PHE:CG	0.48	2.66	14	4
1:A:94:GLU:O	1:A:98:TYR:CD2	0.48	2.66	10	7
1:A:76:GLN:O	1:A:77:SER:CB	0.48	2.60	15	2
1:A:33:ILE:HG21	1:A:175:LEU:HD13	0.48	1.84	22	2
1:A:33:ILE:CG2	1:A:175:LEU:CD1	0.48	2.92	17	13
1:A:48:SER:O	1:A:49:ASN:CB	0.48	2.61	28	1
1:A:158:TRP:CE3	1:A:158:TRP:C	0.48	2.91	32	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:LEU:HD22	1:A:124:ILE:CG1	0.48	2.39	1	1
1:A:112:GLN:O	1:A:115:ALA:HB3	0.48	2.08	24	1
1:A:29:GLN:CB	1:A:123:LEU:CD2	0.48	2.91	25	4
1:A:22:SER:CB	1:A:130:LYS:CD	0.48	2.92	24	1
1:A:40:LEU:O	1:A:168:LEU:HD22	0.48	2.09	16	1
1:A:171:PHE:CD2	1:A:175:LEU:CD1	0.48	2.95	23	3
1:A:34:LEU:HD23	1:A:172:LYS:HE2	0.48	1.84	21	1
1:A:30:ILE:HD13	1:A:33:ILE:HD12	0.48	1.86	14	3
1:A:65:LEU:HB2	1:A:98:TYR:CE2	0.48	2.44	11	7
1:A:155:GLN:CB	1:A:159:LEU:CB	0.48	2.92	10	1
1:A:26:ILE:CG1	1:A:123:LEU:CD1	0.48	2.92	13	1
1:A:63:LEU:HD12	1:A:166:LEU:HB2	0.48	1.84	19	1
1:A:86:VAL:HG23	1:A:134:LEU:HD13	0.48	1.85	24	1
1:A:146:ALA:O	1:A:150:THR:OG1	0.48	2.32	5	1
1:A:74:CYS:C	1:A:75:PHE:CD2	0.48	2.92	18	4
1:A:158:TRP:CD1	1:A:158:TRP:C	0.48	2.91	25	10
1:A:65:LEU:HD21	1:A:166:LEU:HD21	0.48	1.85	8	1
1:A:29:GLN:CG	1:A:123:LEU:CD2	0.48	2.92	18	3
1:A:30:ILE:CG2	1:A:179:LEU:CD1	0.48	2.92	24	2
1:A:30:ILE:CG2	1:A:175:LEU:HB3	0.47	2.39	2	21
1:A:26:ILE:HD12	1:A:127:LEU:HD23	0.47	1.85	4	1
1:A:90:THR:H	1:A:137:ILE:HG21	0.47	1.69	15	3
1:A:30:ILE:HA	1:A:33:ILE:HD12	0.47	1.85	20	3
1:A:99:LEU:HD21	1:A:171:PHE:CZ	0.47	2.44	5	1
1:A:156:ASN:O	1:A:157:GLN:CB	0.47	2.61	30	4
1:A:39:ALA:CB	1:A:112:GLN:NE2	0.47	2.77	8	2
1:A:155:GLN:CB	1:A:159:LEU:HD23	0.47	2.38	12	1
1:A:96:GLU:CG	1:A:124:ILE:CD1	0.47	2.92	13	1
1:A:74:CYS:O	1:A:75:PHE:CD2	0.47	2.67	22	1
1:A:50:MET:HE1	1:A:162:MET:HB2	0.47	1.85	28	1
1:A:117:GLN:O	1:A:120:THR:HG22	0.47	2.09	8	1
1:A:99:LEU:CD1	1:A:120:THR:HG22	0.47	2.39	24	1
1:A:89:ILE:CD1	1:A:137:ILE:CD1	0.47	2.92	31	1
1:A:37:ILE:HD12	1:A:168:LEU:HG	0.47	1.86	32	1
1:A:79:PHE:CE2	1:A:80:ASN:O	0.47	2.68	6	7
1:A:66:PRO:O	1:A:174:PHE:CE1	0.47	2.68	6	1
1:A:30:ILE:HD13	1:A:123:LEU:HG	0.47	1.86	21	4
1:A:89:ILE:HB	1:A:137:ILE:HG21	0.47	1.86	4	1
1:A:68:MET:HE2	1:A:177:SER:HB2	0.47	1.86	30	1
1:A:170:SER:O	1:A:174:PHE:N	0.47	2.48	5	31
1:A:137:ILE:O	1:A:138:THR:C	0.47	2.57	27	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:97:VAL:HG11	1:A:145:ASN:CG	0.47	2.34	24	1
1:A:93:LEU:HD21	1:A:124:ILE:HD11	0.47	1.85	27	1
1:A:97:VAL:CG1	1:A:98:TYR:N	0.47	2.77	10	9
1:A:69:ALA:O	1:A:70:GLU:CB	0.47	2.62	3	3
1:A:101:TYR:CZ	1:A:152:LEU:HB2	0.47	2.45	29	5
1:A:26:ILE:HG13	1:A:127:LEU:HD21	0.47	1.87	10	1
1:A:40:LEU:O	1:A:44:THR:CG2	0.47	2.63	23	29
1:A:162:MET:CE	1:A:166:LEU:HB2	0.47	2.40	9	15
1:A:26:ILE:HA	1:A:123:LEU:HD21	0.47	1.87	3	1
1:A:92:LEU:HD22	1:A:120:THR:HG23	0.47	1.87	5	1
1:A:62:ASN:O	1:A:63:LEU:O	0.47	2.32	6	1
1:A:92:LEU:CD1	1:A:127:LEU:CD1	0.47	2.93	28	4
1:A:93:LEU:HD22	1:A:139:THR:CB	0.47	2.40	11	2
1:A:65:LEU:N	1:A:66:PRO:HD2	0.47	2.24	9	13
1:A:148:LEU:CD1	1:A:152:LEU:CD2	0.47	2.93	11	3
1:A:73:GLY:O	1:A:79:PHE:CD1	0.47	2.67	19	2
1:A:93:LEU:CD2	1:A:124:ILE:HD11	0.47	2.40	27	1
1:A:63:LEU:CB	1:A:65:LEU:CD2	0.47	2.93	27	3
1:A:65:LEU:HB3	1:A:98:TYR:CE2	0.47	2.45	14	20
1:A:62:ASN:ND2	1:A:162:MET:CG	0.47	2.78	6	1
1:A:33:ILE:CG2	1:A:120:THR:HG22	0.47	2.38	27	2
1:A:63:LEU:HD12	1:A:163:THR:HG23	0.47	1.86	15	1
1:A:168:LEU:HD12	1:A:168:LEU:N	0.47	2.23	23	1
1:A:102:LEU:HD23	1:A:106:PHE:HE1	0.47	1.70	1	2
1:A:27:ASP:O	1:A:179:LEU:HD21	0.47	2.09	8	2
1:A:33:ILE:HG23	1:A:120:THR:HG23	0.47	1.86	10	1
1:A:65:LEU:HD22	1:A:167:ILE:HG12	0.47	1.86	11	1
1:A:86:VAL:CG2	1:A:134:LEU:CD1	0.47	2.92	24	1
1:A:137:ILE:N	1:A:137:ILE:HD12	0.47	2.25	30	1
1:A:158:TRP:CG	1:A:159:LEU:N	0.47	2.83	32	1
1:A:93:LEU:CD1	1:A:138:THR:O	0.46	2.63	24	3
1:A:65:LEU:CB	1:A:98:TYR:CZ	0.46	2.98	11	2
1:A:89:ILE:O	1:A:93:LEU:HD12	0.46	2.10	14	2
1:A:179:LEU:HD12	1:A:179:LEU:H	0.46	1.70	16	2
1:A:162:MET:CE	1:A:166:LEU:CB	0.46	2.93	25	3
1:A:82:GLU:O	1:A:86:VAL:CG2	0.46	2.63	30	15
1:A:86:VAL:CG2	1:A:134:LEU:HD21	0.46	2.38	16	1
1:A:89:ILE:CD1	1:A:134:LEU:CD2	0.46	2.93	16	1
1:A:41:ARG:O	1:A:45:CYS:CB	0.46	2.63	17	16
1:A:88:ILE:CD1	1:A:178:SER:CB	0.46	2.93	31	4
1:A:166:LEU:C	1:A:166:LEU:CD1	0.46	2.89	30	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:MET:HE3	1:A:162:MET:HB2	0.46	1.85	8	1
1:A:63:LEU:HD11	1:A:166:LEU:HB3	0.46	1.87	32	1
1:A:158:TRP:CE3	1:A:158:TRP:O	0.46	2.69	32	1
1:A:92:LEU:HD22	1:A:124:ILE:HG12	0.46	1.87	1	1
1:A:94:GLU:O	1:A:97:VAL:CG1	0.46	2.63	32	3
1:A:173:GLU:O	1:A:174:PHE:C	0.46	2.59	32	31
1:A:48:SER:O	1:A:49:ASN:C	0.46	2.59	8	8
1:A:131:ALA:O	1:A:132:LYS:CG	0.46	2.64	3	4
1:A:119:SER:O	1:A:123:LEU:CD2	0.46	2.64	9	9
1:A:127:LEU:O	1:A:131:ALA:CB	0.46	2.64	30	6
1:A:126:PHE:O	1:A:130:LYS:CB	0.46	2.63	17	7
1:A:39:ALA:HB1	1:A:112:GLN:HE22	0.46	1.70	9	1
1:A:26:ILE:HG22	1:A:182:LEU:CD1	0.46	2.40	29	1
1:A:44:THR:O	1:A:48:SER:CB	0.46	2.64	25	2
1:A:102:LEU:HD23	1:A:164:THR:HG23	0.46	1.88	27	3
1:A:134:LEU:O	1:A:135:ASP:HB2	0.46	2.10	8	1
1:A:74:CYS:C	1:A:75:PHE:CD1	0.46	2.94	25	4
1:A:122:VAL:O	1:A:126:PHE:CG	0.46	2.68	27	1
1:A:139:THR:O	1:A:139:THR:CG2	0.46	2.63	11	8
1:A:171:PHE:O	1:A:175:LEU:HB2	0.46	2.11	26	25
1:A:124:ILE:O	1:A:128:GLN:CB	0.46	2.64	6	2
1:A:148:LEU:O	1:A:152:LEU:CD2	0.46	2.64	32	3
1:A:37:ILE:HG23	1:A:168:LEU:HD13	0.46	1.88	11	2
1:A:132:LYS:O	1:A:133:ASN:CB	0.46	2.64	15	1
1:A:137:ILE:O	1:A:138:THR:O	0.46	2.33	17	5
1:A:122:VAL:HG13	1:A:126:PHE:CE1	0.46	2.45	19	1
1:A:159:LEU:HD23	1:A:162:MET:HG2	0.46	1.88	19	1
1:A:50:MET:CB	1:A:165:HIS:CE1	0.46	2.98	29	1
1:A:150:THR:O	1:A:154:ALA:CB	0.45	2.64	32	6
1:A:79:PHE:CE2	1:A:184:GLN:CB	0.45	2.99	29	2
1:A:97:VAL:CB	1:A:145:ASN:ND2	0.45	2.80	5	1
1:A:62:ASN:C	1:A:63:LEU:HG	0.45	2.36	6	1
1:A:86:VAL:O	1:A:90:THR:HG22	0.45	2.10	8	1
1:A:26:ILE:HG22	1:A:182:LEU:HD13	0.45	1.89	17	1
1:A:74:CYS:SG	1:A:181:ALA:CB	0.45	3.04	29	2
1:A:137:ILE:C	1:A:138:THR:OG1	0.45	2.59	22	6
1:A:99:LEU:O	1:A:103:GLN:N	0.45	2.50	3	20
1:A:26:ILE:HG22	1:A:182:LEU:CD2	0.45	2.42	19	1
1:A:93:LEU:HD13	1:A:139:THR:HA	0.45	1.88	25	2
1:A:29:GLN:C	1:A:123:LEU:HD11	0.45	2.36	32	2
1:A:164:THR:HA	1:A:167:ILE:HD12	0.45	1.87	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:63:LEU:HD21	1:A:163:THR:HA	0.45	1.88	32	1
1:A:121:LYS:O	1:A:124:ILE:CG2	0.45	2.65	2	1
1:A:127:LEU:O	1:A:131:ALA:N	0.45	2.50	4	5
1:A:26:ILE:CD1	1:A:127:LEU:HD23	0.45	2.41	4	1
1:A:127:LEU:C	1:A:127:LEU:CD1	0.45	2.90	13	4
1:A:80:ASN:O	1:A:81:GLU:CB	0.45	2.64	7	4
1:A:86:VAL:CG1	1:A:136:ALA:CB	0.45	2.94	13	1
1:A:156:ASN:N	1:A:156:ASN:OD1	0.45	2.49	22	1
1:A:65:LEU:HD13	1:A:98:TYR:CE2	0.45	2.47	32	2
1:A:178:SER:O	1:A:182:LEU:HD13	0.45	2.10	27	1
1:A:126:PHE:O	1:A:130:LYS:CG	0.45	2.65	27	7
1:A:68:MET:SD	1:A:174:PHE:CD2	0.45	3.10	8	1
1:A:131:ALA:C	1:A:134:LEU:HD23	0.45	2.36	15	1
1:A:85:LEU:HD13	1:A:182:LEU:HD21	0.45	1.89	31	1
1:A:127:LEU:HD22	1:A:130:LYS:HE2	0.44	1.88	12	1
1:A:65:LEU:HD21	1:A:166:LEU:CD1	0.44	2.37	30	1
1:A:68:MET:HE3	1:A:74:CYS:SG	0.44	2.51	30	1
1:A:101:TYR:CZ	1:A:152:LEU:HB3	0.44	2.47	17	1
1:A:88:ILE:HG22	1:A:92:LEU:HD12	0.44	1.90	25	1
1:A:41:ARG:O	1:A:45:CYS:HB2	0.44	2.12	24	8
1:A:102:LEU:O	1:A:113:ALA:CB	0.44	2.66	29	5
1:A:41:ARG:HG3	1:A:45:CYS:CB	0.44	2.42	32	3
1:A:34:LEU:HD21	1:A:176:GLN:HG3	0.44	1.90	15	1
1:A:86:VAL:O	1:A:137:ILE:HG21	0.44	2.12	17	1
1:A:41:ARG:CB	1:A:168:LEU:HD23	0.44	2.41	18	1
1:A:82:GLU:HG3	1:A:134:LEU:HD11	0.44	1.89	24	2
1:A:137:ILE:O	1:A:137:ILE:HG22	0.44	2.11	2	6
1:A:106:PHE:O	1:A:110:GLU:CA	0.44	2.66	7	7
1:A:99:LEU:CD1	1:A:120:THR:OG1	0.44	2.65	19	5
1:A:50:MET:HE3	1:A:158:TRP:CE2	0.44	2.47	13	1
1:A:131:ALA:O	1:A:134:LEU:CB	0.44	2.65	13	3
1:A:79:PHE:CZ	1:A:184:GLN:HB2	0.44	2.48	9	2
1:A:62:ASN:O	1:A:63:LEU:CD1	0.44	2.62	6	1
1:A:62:ASN:ND2	1:A:162:MET:HG2	0.44	2.28	6	1
1:A:98:TYR:OH	1:A:148:LEU:CD2	0.44	2.65	11	3
1:A:85:LEU:HD11	1:A:127:LEU:HD21	0.44	1.89	12	1
1:A:181:ALA:O	1:A:185:MET:CG	0.44	2.65	15	5
1:A:73:GLY:O	1:A:79:PHE:CG	0.44	2.71	15	1
1:A:74:CYS:SG	1:A:79:PHE:CE1	0.44	3.10	20	1
1:A:148:LEU:O	1:A:152:LEU:HG	0.44	2.13	20	2
1:A:79:PHE:CE2	1:A:184:GLN:CG	0.44	3.01	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:80:ASN:O	1:A:81:GLU:CG	0.44	2.65	15	3
1:A:99:LEU:HD13	1:A:117:GLN:HG2	0.44	1.89	15	1
1:A:123:LEU:N	1:A:123:LEU:CD2	0.44	2.81	21	1
1:A:34:LEU:HD21	1:A:172:LYS:HA	0.44	1.89	26	1
1:A:116:VAL:CG1	1:A:117:GLN:N	0.44	2.81	5	3
1:A:29:GLN:NE2	1:A:122:VAL:CG1	0.44	2.79	6	1
1:A:127:LEU:O	1:A:131:ALA:CA	0.44	2.65	6	2
1:A:33:ILE:CG2	1:A:120:THR:CG2	0.44	2.96	7	1
1:A:50:MET:O	1:A:165:HIS:CG	0.44	2.71	9	1
1:A:102:LEU:CD2	1:A:164:THR:HG22	0.44	2.43	14	1
1:A:79:PHE:CE2	1:A:81:GLU:CG	0.44	3.01	16	1
1:A:114:ARG:O	1:A:118:MET:CG	0.43	2.66	16	4
1:A:164:THR:O	1:A:168:LEU:CD1	0.43	2.66	14	3
1:A:27:ASP:OD1	1:A:179:LEU:CG	0.43	2.66	16	1
1:A:88:ILE:O	1:A:92:LEU:HD12	0.43	2.12	18	2
1:A:101:TYR:CZ	1:A:152:LEU:CB	0.43	3.01	29	1
1:A:79:PHE:CD1	1:A:80:ASN:N	0.43	2.86	30	1
1:A:162:MET:O	1:A:162:MET:CE	0.43	2.65	1	6
1:A:75:PHE:O	1:A:76:GLN:CB	0.43	2.66	13	1
1:A:50:MET:CE	1:A:158:TRP:CD1	0.43	3.02	1	1
1:A:63:LEU:HB2	1:A:65:LEU:CD2	0.43	2.43	19	4
1:A:130:LYS:O	1:A:130:LYS:CD	0.43	2.67	13	5
1:A:162:MET:HG3	1:A:163:THR:N	0.43	2.29	13	3
1:A:41:ARG:O	1:A:45:CYS:HB3	0.43	2.13	22	7
1:A:68:MET:O	1:A:69:ALA:HB2	0.43	2.13	2	6
1:A:101:TYR:O	1:A:105:ARG:CG	0.43	2.67	7	3
1:A:121:LYS:HA	1:A:124:ILE:HG22	0.43	1.89	8	4
1:A:130:LYS:CG	1:A:130:LYS:O	0.43	2.66	26	1
1:A:62:ASN:O	1:A:63:LEU:C	0.43	2.61	6	2
1:A:85:LEU:HB2	1:A:185:MET:HE1	0.43	1.89	14	1
1:A:63:LEU:HD12	1:A:167:ILE:HG13	0.43	1.90	30	1
1:A:119:SER:O	1:A:123:LEU:HD13	0.43	2.13	2	1
1:A:30:ILE:CG1	1:A:123:LEU:HD13	0.43	2.42	3	1
1:A:40:LEU:O	1:A:168:LEU:CD1	0.43	2.66	3	4
1:A:164:THR:O	1:A:168:LEU:CD2	0.43	2.67	10	1
1:A:79:PHE:CZ	1:A:184:GLN:HB3	0.43	2.48	14	2
1:A:106:PHE:CB	1:A:113:ALA:HB2	0.43	2.44	24	2
1:A:127:LEU:C	1:A:127:LEU:HD13	0.43	2.38	13	1
1:A:29:GLN:HB3	1:A:123:LEU:CD2	0.43	2.43	19	4
1:A:89:ILE:CD1	1:A:134:LEU:HD22	0.43	2.42	16	1
1:A:148:LEU:O	1:A:152:LEU:CD1	0.43	2.67	23	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:ASP:CB	1:A:182:LEU:HD21	0.43	2.44	24	1
1:A:166:LEU:HD23	1:A:166:LEU:O	0.43	2.12	24	1
1:A:146:ALA:O	1:A:150:THR:CB	0.43	2.67	32	5
1:A:151:LYS:O	1:A:155:GLN:CG	0.43	2.67	19	4
1:A:179:LEU:CD1	1:A:180:ARG:N	0.43	2.77	22	1
1:A:86:VAL:HG22	1:A:134:LEU:HD22	0.43	1.90	24	1
1:A:148:LEU:HD12	1:A:152:LEU:HD21	0.43	1.88	6	1
1:A:41:ARG:CG	1:A:45:CYS:CB	0.43	2.97	20	4
1:A:106:PHE:O	1:A:110:GLU:N	0.43	2.51	22	5
1:A:131:ALA:C	1:A:132:LYS:CG	0.43	2.92	10	2
1:A:176:GLN:HA	1:A:179:LEU:HD21	0.43	1.91	10	1
1:A:30:ILE:HG13	1:A:123:LEU:HD11	0.43	1.91	16	1
1:A:95:PHE:CZ	1:A:174:PHE:CG	0.43	3.07	18	1
1:A:168:LEU:N	1:A:168:LEU:CD1	0.43	2.81	23	1
1:A:92:LEU:CD1	1:A:127:LEU:HD11	0.43	2.43	28	1
1:A:27:ASP:O	1:A:179:LEU:CD2	0.43	2.67	14	2
1:A:130:LYS:O	1:A:130:LYS:CE	0.43	2.66	14	2
1:A:25:ARG:O	1:A:29:GLN:CG	0.43	2.67	15	2
1:A:88:ILE:CD1	1:A:178:SER:OG	0.43	2.67	24	3
1:A:96:GLU:OE2	1:A:124:ILE:HD13	0.43	2.14	7	1
1:A:89:ILE:O	1:A:93:LEU:CD1	0.43	2.67	18	2
1:A:132:LYS:O	1:A:134:LEU:CD2	0.43	2.67	15	1
1:A:39:ALA:CB	1:A:112:GLN:CD	0.43	2.92	18	3
1:A:40:LEU:O	1:A:168:LEU:CD2	0.43	2.67	23	3
1:A:134:LEU:O	1:A:135:ASP:HB3	0.43	2.13	30	1
1:A:24:GLU:HG3	1:A:25:ARG:N	0.42	2.28	4	2
1:A:26:ILE:CG2	1:A:182:LEU:CD2	0.42	2.97	19	1
1:A:22:SER:CB	1:A:130:LYS:HD3	0.42	2.44	24	1
1:A:34:LEU:HD11	1:A:175:LEU:HB3	0.42	1.89	31	1
1:A:63:LEU:HD11	1:A:166:LEU:HD22	0.42	1.87	32	1
1:A:121:LYS:HA	1:A:124:ILE:CG2	0.42	2.44	8	3
1:A:27:ASP:OD1	1:A:28:LYS:N	0.42	2.52	8	2
1:A:63:LEU:HD22	1:A:152:LEU:HD23	0.42	1.90	7	1
1:A:93:LEU:HG	1:A:124:ILE:HD11	0.42	1.91	8	1
1:A:66:PRO:O	1:A:67:LYS:CG	0.42	2.67	28	2
1:A:96:GLU:HG3	1:A:124:ILE:CD1	0.42	2.44	9	2
1:A:26:ILE:HG13	1:A:123:LEU:CD1	0.42	2.44	13	2
1:A:166:LEU:O	1:A:166:LEU:CD1	0.42	2.66	11	1
1:A:170:SER:O	1:A:174:PHE:HB2	0.42	2.14	25	2
1:A:109:SER:OG	1:A:112:GLN:CG	0.42	2.67	15	1
1:A:68:MET:CE	1:A:88:ILE:HD11	0.42	2.42	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:GLN:N	1:A:29:GLN:OE1	0.42	2.52	17	1
1:A:48:SER:C	1:A:50:MET:N	0.42	2.76	1	3
1:A:137:ILE:O	1:A:138:THR:CB	0.42	2.67	3	2
1:A:33:ILE:CD1	1:A:120:THR:N	0.42	2.82	2	1
1:A:49:ASN:OD1	1:A:49:ASN:N	0.42	2.52	2	2
1:A:74:CYS:O	1:A:75:PHE:CD1	0.42	2.72	2	1
1:A:93:LEU:O	1:A:96:GLU:CB	0.42	2.68	2	1
1:A:138:THR:O	1:A:139:THR:CB	0.42	2.67	3	1
1:A:79:PHE:CE2	1:A:184:GLN:HB3	0.42	2.49	9	3
1:A:41:ARG:CG	1:A:168:LEU:HD13	0.42	2.44	10	1
1:A:93:LEU:HD11	1:A:137:ILE:HG23	0.42	1.90	10	1
1:A:62:ASN:OD1	1:A:62:ASN:N	0.42	2.52	20	1
1:A:40:LEU:O	1:A:44:THR:HG21	0.42	2.14	1	2
1:A:85:LEU:HD13	1:A:182:LEU:CD1	0.42	2.44	5	1
1:A:155:GLN:CB	1:A:159:LEU:HB3	0.42	2.43	10	1
1:A:26:ILE:HD12	1:A:127:LEU:CD2	0.42	2.45	20	1
1:A:26:ILE:CG2	1:A:182:LEU:HD21	0.42	2.43	28	1
1:A:50:MET:SD	1:A:158:TRP:CZ2	0.42	3.12	6	1
1:A:162:MET:O	1:A:163:THR:C	0.42	2.63	16	3
1:A:123:LEU:HD22	1:A:123:LEU:H	0.42	1.74	12	1
1:A:34:LEU:HD23	1:A:172:LYS:NZ	0.42	2.30	15	1
1:A:181:ALA:C	1:A:185:MET:HE3	0.42	2.39	31	2
1:A:175:LEU:O	1:A:179:LEU:CD1	0.42	2.67	19	1
1:A:50:MET:HE1	1:A:158:TRP:NE1	0.42	2.29	23	1
1:A:182:LEU:C	1:A:182:LEU:HD12	0.42	2.39	24	1
1:A:40:LEU:CG	1:A:116:VAL:HG21	0.42	2.44	4	1
1:A:116:VAL:O	1:A:120:THR:CB	0.42	2.68	26	3
1:A:95:PHE:CE1	1:A:170:SER:HB3	0.42	2.50	4	1
1:A:98:TYR:O	1:A:101:TYR:CB	0.42	2.67	8	1
1:A:63:LEU:HD21	1:A:152:LEU:HD23	0.42	1.91	25	1
1:A:123:LEU:O	1:A:127:LEU:CG	0.42	2.67	1	3
1:A:128:GLN:OE1	1:A:137:ILE:CB	0.42	2.67	2	1
1:A:79:PHE:CG	1:A:80:ASN:N	0.42	2.87	3	3
1:A:137:ILE:HD12	1:A:137:ILE:H	0.42	1.72	3	2
1:A:136:ALA:C	1:A:137:ILE:HD13	0.42	2.40	8	1
1:A:39:ALA:CB	1:A:112:GLN:OE1	0.42	2.68	30	2
1:A:63:LEU:HD21	1:A:163:THR:CG2	0.42	2.41	32	1
1:A:44:THR:O	1:A:48:SER:CA	0.42	2.68	25	2
1:A:89:ILE:HD12	1:A:137:ILE:CG1	0.42	2.44	15	1
1:A:75:PHE:O	1:A:79:PHE:N	0.42	2.53	20	1
1:A:50:MET:HE2	1:A:158:TRP:HE1	0.42	1.71	28	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:33:ILE:CG2	1:A:120:THR:OG1	0.42	2.67	26	3
1:A:126:PHE:CD2	1:A:130:LYS:HE2	0.42	2.50	10	1
1:A:50:MET:O	1:A:165:HIS:CE1	0.42	2.73	11	1
1:A:65:LEU:HD13	1:A:98:TYR:CD2	0.42	2.50	15	1
1:A:84:CYS:HB2	1:A:185:MET:HE2	0.42	1.90	20	1
1:A:160:GLN:HG3	1:A:161:ASP:N	0.42	2.30	31	1
1:A:69:ALA:CB	1:A:72:ASP:HB3	0.42	2.45	32	1
1:A:85:LEU:HD11	1:A:127:LEU:HD22	0.41	1.92	8	1
1:A:145:ASN:ND2	1:A:145:ASN:O	0.41	2.52	21	1
1:A:123:LEU:O	1:A:127:LEU:CD1	0.41	2.67	29	1
1:A:84:CYS:SG	1:A:181:ALA:HB2	0.41	2.54	26	1
1:A:50:MET:HB3	1:A:165:HIS:CE1	0.41	2.50	29	1
1:A:116:VAL:O	1:A:120:THR:CG2	0.41	2.68	30	1
1:A:30:ILE:N	1:A:123:LEU:HD11	0.41	2.30	32	1
1:A:63:LEU:CD2	1:A:163:THR:CG2	0.41	2.90	32	1
1:A:30:ILE:HG23	1:A:175:LEU:CD2	0.41	2.38	2	1
1:A:103:GLN:OE1	1:A:117:GLN:NE2	0.41	2.54	2	1
1:A:82:GLU:CG	1:A:133:ASN:O	0.41	2.68	4	1
1:A:101:TYR:CZ	1:A:163:THR:HG21	0.41	2.50	7	1
1:A:40:LEU:HB2	1:A:168:LEU:HD11	0.41	1.92	11	2
1:A:62:ASN:ND2	1:A:62:ASN:N	0.41	2.67	32	2
1:A:138:THR:O	1:A:139:THR:HB	0.41	2.15	17	2
1:A:135:ASP:C	1:A:137:ILE:HD12	0.41	2.40	26	1
1:A:156:ASN:O	1:A:157:GLN:HB3	0.41	2.15	29	1
1:A:160:GLN:CG	1:A:161:ASP:N	0.41	2.83	31	1
1:A:63:LEU:HD12	1:A:166:LEU:HD13	0.41	1.93	32	1
1:A:101:TYR:OH	1:A:152:LEU:C	0.41	2.63	32	5
1:A:131:ALA:O	1:A:134:LEU:HB2	0.41	2.15	22	2
1:A:47:LYS:O	1:A:49:ASN:N	0.41	2.53	10	1
1:A:50:MET:HE3	1:A:158:TRP:CZ2	0.41	2.49	13	1
1:A:79:PHE:CD1	1:A:79:PHE:C	0.41	2.96	30	2
1:A:68:MET:HE1	1:A:88:ILE:HG12	0.41	1.92	16	1
1:A:136:ALA:O	1:A:137:ILE:HB	0.41	2.16	23	3
1:A:78:GLY:O	1:A:80:ASN:N	0.41	2.54	9	2
1:A:89:ILE:HD13	1:A:137:ILE:HD12	0.41	1.93	16	1
1:A:34:LEU:N	1:A:34:LEU:CD1	0.41	2.83	17	1
1:A:65:LEU:O	1:A:65:LEU:CG	0.41	2.68	2	1
1:A:40:LEU:HD11	1:A:116:VAL:CB	0.41	2.45	4	2
1:A:79:PHE:CZ	1:A:184:GLN:HG3	0.41	2.51	8	1
1:A:126:PHE:O	1:A:130:LYS:HG3	0.41	2.16	15	1
1:A:170:SER:O	1:A:174:PHE:HB3	0.41	2.16	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:PRO:O	1:A:67:LYS:CB	0.41	2.68	20	1
1:A:164:THR:O	1:A:165:HIS:C	0.41	2.63	4	1
1:A:90:THR:CG2	1:A:137:ILE:CG2	0.41	2.91	28	2
1:A:95:PHE:CZ	1:A:170:SER:HB3	0.41	2.50	5	3
1:A:29:GLN:HB3	1:A:123:LEU:CD1	0.41	2.45	14	1
1:A:126:PHE:O	1:A:130:LYS:HB3	0.41	2.15	22	1
1:A:21:THR:O	1:A:24:GLU:HG3	0.41	2.16	4	1
1:A:27:ASP:OD1	1:A:27:ASP:C	0.41	2.64	8	2
1:A:130:LYS:O	1:A:130:LYS:CG	0.41	2.69	9	1
1:A:29:GLN:HG2	1:A:123:LEU:CD2	0.41	2.46	16	1
1:A:40:LEU:O	1:A:168:LEU:HD21	0.41	2.16	18	1
1:A:63:LEU:HD11	1:A:167:ILE:HG13	0.41	1.92	18	1
1:A:88:ILE:O	1:A:92:LEU:CG	0.41	2.69	18	1
1:A:134:LEU:O	1:A:135:ASP:CG	0.41	2.64	19	1
1:A:179:LEU:C	1:A:179:LEU:CD1	0.41	2.91	22	1
1:A:89:ILE:CG1	1:A:137:ILE:HD13	0.41	2.45	24	1
1:A:105:ARG:CZ	1:A:160:GLN:OE1	0.41	2.69	3	1
1:A:106:PHE:O	1:A:110:GLU:CB	0.41	2.69	5	1
1:A:79:PHE:CD2	1:A:81:GLU:HG3	0.41	2.51	16	1
1:A:147:SER:O	1:A:148:LEU:C	0.41	2.64	21	1
1:A:22:SER:HB3	1:A:130:LYS:CD	0.41	2.46	24	1
1:A:131:ALA:O	1:A:134:LEU:O	0.41	2.39	24	1
1:A:137:ILE:HG22	1:A:138:THR:H	0.41	1.74	24	1
1:A:105:ARG:O	1:A:107:GLU:N	0.41	2.54	25	1
1:A:97:VAL:CG1	1:A:145:ASN:ND2	0.41	2.81	30	1
1:A:171:PHE:C	1:A:175:LEU:HD12	0.41	2.40	2	1
1:A:67:LYS:CD	1:A:170:SER:OG	0.41	2.69	19	1
1:A:168:LEU:O	1:A:172:LYS:CG	0.41	2.69	26	1
1:A:45:CYS:SG	1:A:165:HIS:CD2	0.41	3.14	28	1
1:A:73:GLY:O	1:A:80:ASN:N	0.40	2.53	1	1
1:A:92:LEU:HB3	1:A:124:ILE:CG1	0.40	2.45	3	1
1:A:26:ILE:HA	1:A:123:LEU:CD1	0.40	2.46	9	1
1:A:98:TYR:CD1	1:A:167:ILE:HG12	0.40	2.51	23	1
1:A:166:LEU:CD2	1:A:166:LEU:C	0.40	2.89	24	1
1:A:68:MET:SD	1:A:174:PHE:CZ	0.40	3.14	27	1
1:A:97:VAL:HG13	1:A:98:TYR:CD1	0.40	2.51	32	1
1:A:145:ASN:HD21	1:A:148:LEU:HD23	0.40	1.76	1	1
1:A:28:LYS:CD	1:A:28:LYS:C	0.40	2.94	3	1
1:A:64:ASN:O	1:A:65:LEU:O	0.40	2.39	6	1
1:A:96:GLU:HG3	1:A:97:VAL:N	0.40	2.31	8	1
1:A:40:LEU:HB2	1:A:168:LEU:CD2	0.40	2.46	25	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:GLN:HG3	1:A:123:LEU:HD11	0.40	1.91	2	1
1:A:50:MET:O	1:A:165:HIS:ND1	0.40	2.55	13	1
1:A:68:MET:HE3	1:A:74:CYS:HB2	0.40	1.92	26	1
1:A:162:MET:HE3	1:A:166:LEU:CG	0.40	2.46	3	1
1:A:69:ALA:O	1:A:75:PHE:CD2	0.40	2.75	4	1
1:A:86:VAL:HG13	1:A:136:ALA:O	0.40	2.17	16	2
1:A:88:ILE:CD1	1:A:178:SER:HA	0.40	2.47	8	1
1:A:41:ARG:HG2	1:A:45:CYS:CB	0.40	2.47	18	1
1:A:27:ASP:OD1	1:A:179:LEU:CD2	0.40	2.67	19	1
1:A:44:THR:O	1:A:45:CYS:CB	0.40	2.70	20	1
1:A:143:THR:O	1:A:146:ALA:HB3	0.40	2.16	23	1
1:A:162:MET:C	1:A:162:MET:CE	0.40	2.95	29	1
1:A:124:ILE:HG22	1:A:128:GLN:OE1	0.40	2.17	30	1
1:A:45:CYS:SG	1:A:50:MET:O	0.40	2.79	32	1
1:A:162:MET:HE3	1:A:166:LEU:CB	0.40	2.40	8	1
1:A:25:ARG:O	1:A:29:GLN:NE2	0.40	2.54	9	1
1:A:26:ILE:HA	1:A:123:LEU:HD12	0.40	1.92	12	1
1:A:162:MET:HA	1:A:165:HIS:CE1	0.40	2.52	13	1
1:A:27:ASP:HA	1:A:182:LEU:CD1	0.40	2.46	16	1
1:A:40:LEU:HD21	1:A:113:ALA:CA	0.40	2.47	17	1
1:A:74:CYS:SG	1:A:181:ALA:HB1	0.40	2.56	20	1
1:A:101:TYR:CE1	1:A:152:LEU:CB	0.40	3.05	21	1
1:A:96:GLU:HG2	1:A:97:VAL:N	0.40	2.31	24	1
1:A:92:LEU:HD13	1:A:127:LEU:CD1	0.40	2.45	25	1
1:A:44:THR:O	1:A:44:THR:HG23	0.40	2.16	30	1

6.3 Torsion angles ⓘ

6.3.1 Protein backbone ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	150/185 (81%)	123±4 (82±2%)	21±3 (14±2%)	6±2 (4±1%)	4	30
All	All	4800/5920 (81%)	3945 (82%)	663 (14%)	192 (4%)	4	30

All 31 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	137	ILE	21
1	A	138	THR	19
1	A	45	CYS	19
1	A	63	LEU	17
1	A	67	LYS	14
1	A	81	GLU	9
1	A	104	ASN	8
1	A	49	ASN	8
1	A	134	LEU	7
1	A	79	PHE	7
1	A	135	ASP	7
1	A	69	ALA	7
1	A	62	ASN	7
1	A	74	CYS	6
1	A	77	SER	6
1	A	132	LYS	4
1	A	73	GLY	4
1	A	70	GLU	3
1	A	76	GLN	3
1	A	46	ASN	2
1	A	165	HIS	2
1	A	156	ASN	2
1	A	72	ASP	2
1	A	139	THR	1
1	A	21	THR	1
1	A	65	LEU	1
1	A	80	ASN	1
1	A	48	SER	1
1	A	50	MET	1
1	A	155	GLN	1
1	A	106	PHE	1

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	138/166 (83%)	98±4 (71±3%)	40±4 (29±3%)	1	18
All	All	4416/5312 (83%)	3133 (71%)	1283 (29%)	1	18

All 115 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	102	LEU	32
1	A	162	MET	32
1	A	134	LEU	31
1	A	138	THR	31
1	A	145	ASN	30
1	A	34	LEU	28
1	A	67	LYS	25
1	A	130	LYS	25
1	A	150	THR	25
1	A	68	MET	25
1	A	132	LYS	23
1	A	50	MET	22
1	A	170	SER	22
1	A	82	GLU	20
1	A	28	LYS	19
1	A	101	TYR	19
1	A	47	LYS	19
1	A	176	GLN	19
1	A	45	CYS	18
1	A	105	ARG	18
1	A	169	ARG	18
1	A	71	LYS	18
1	A	43	GLU	17
1	A	160	GLN	17
1	A	90	THR	16
1	A	147	SER	16
1	A	182	LEU	16
1	A	65	LEU	16
1	A	172	LYS	16
1	A	129	LYS	16
1	A	151	LYS	15
1	A	108	SER	15
1	A	42	LYS	14
1	A	87	LYS	14
1	A	94	GLU	14
1	A	107	GLU	14
1	A	121	LYS	14
1	A	109	SER	14
1	A	24	GLU	14
1	A	31	ARG	13
1	A	32	TYR	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	180	ARG	13
1	A	114	ARG	13
1	A	25	ARG	13
1	A	76	GLN	13
1	A	152	LEU	13
1	A	70	GLU	12
1	A	38	SER	12
1	A	183	ARG	12
1	A	119	SER	12
1	A	173	GLU	11
1	A	77	SER	11
1	A	23	SER	11
1	A	35	ASP	10
1	A	96	GLU	10
1	A	179	LEU	10
1	A	177	SER	10
1	A	29	GLN	9
1	A	80	ASN	9
1	A	97	VAL	9
1	A	22	SER	9
1	A	118	MET	9
1	A	127	LEU	9
1	A	128	GLN	9
1	A	48	SER	8
1	A	135	ASP	8
1	A	133	ASN	8
1	A	84	CYS	8
1	A	104	ASN	8
1	A	111	GLU	8
1	A	184	GLN	8
1	A	100	GLU	7
1	A	153	GLN	7
1	A	159	LEU	7
1	A	62	ASN	7
1	A	74	CYS	7
1	A	125	GLN	7
1	A	185	MET	7
1	A	72	ASP	6
1	A	166	LEU	6
1	A	112	GLN	6
1	A	93	LEU	6
1	A	168	LEU	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	92	LEU	5
1	A	103	GLN	5
1	A	46	ASN	5
1	A	124	ILE	5
1	A	137	ILE	5
1	A	117	GLN	5
1	A	63	LEU	5
1	A	81	GLU	5
1	A	26	ILE	5
1	A	157	GLN	5
1	A	110	GLU	4
1	A	144	THR	3
1	A	178	SER	3
1	A	49	ASN	3
1	A	21	THR	3
1	A	41	ARG	3
1	A	88	ILE	3
1	A	164	THR	3
1	A	106	PHE	2
1	A	30	ILE	2
1	A	155	GLN	2
1	A	89	ILE	2
1	A	64	ASN	2
1	A	148	LEU	2
1	A	75	PHE	2
1	A	139	THR	1
1	A	44	THR	1
1	A	27	ASP	1
1	A	85	LEU	1
1	A	86	VAL	1
1	A	149	LEU	1
1	A	158	TRP	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

6.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains ⓘ

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

6.5 Carbohydrates [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