



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 06:10 AM UTC

PDB ID : 1MZK / pdb_00001mzk
Title : NMR structure of kinase-interacting FHA domain of kinase associated protein phosphatase, KAPP in Arabidopsis
Authors : Lee, G.; Ding, Z.; Walker, J.C.; Van Doren, S.R.
Deposited on : 2002-10-08

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

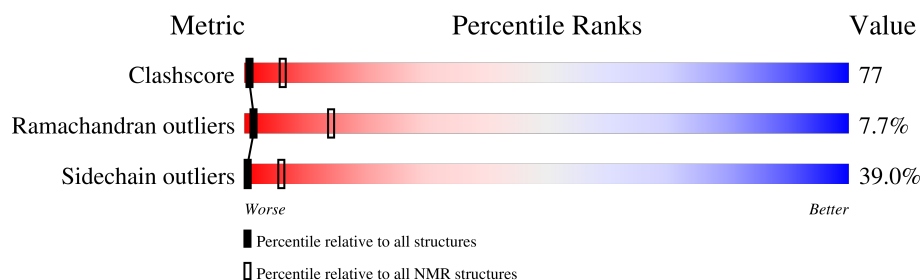
1 Overall quality at a glance

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	139	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 30 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:180-A:260, A:268-A:296 (110)	0.67	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 3 clusters and 3 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1854 atoms, of which 930 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	122	Total	C	H	N	O	S	0
			1854	582	930	160	181	1	

There are 5 discrepancies between the modelled and reference sequences:

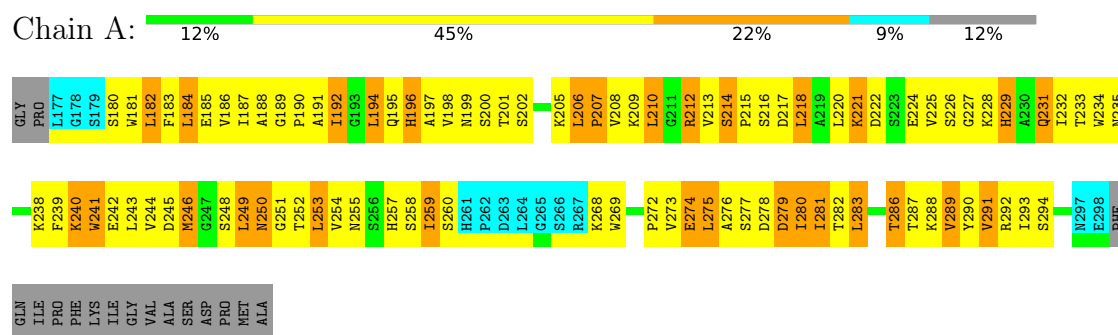
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	175	GLY	-	expression tag	UNP P46014
A	176	PRO	-	expression tag	UNP P46014
A	177	LEU	-	expression tag	UNP P46014
A	178	GLY	-	expression tag	UNP P46014
A	179	SER	-	expression tag	UNP P46014

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: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE

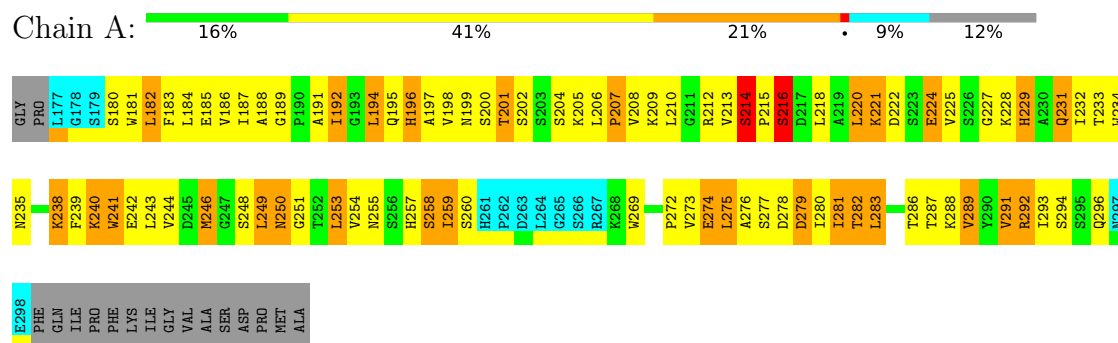


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

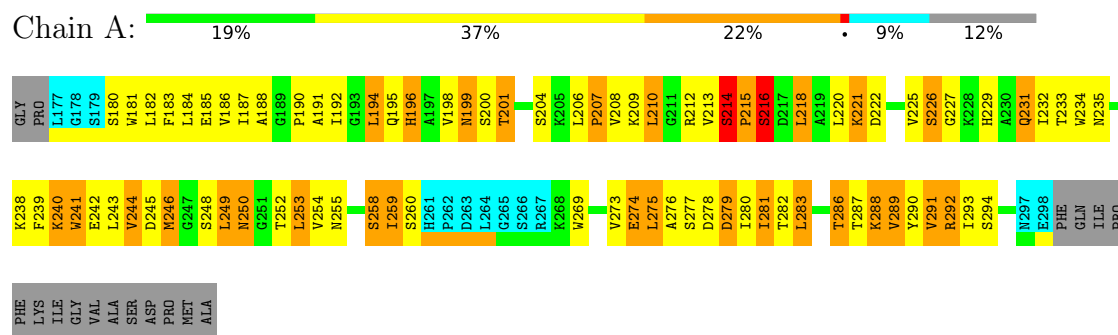
4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE



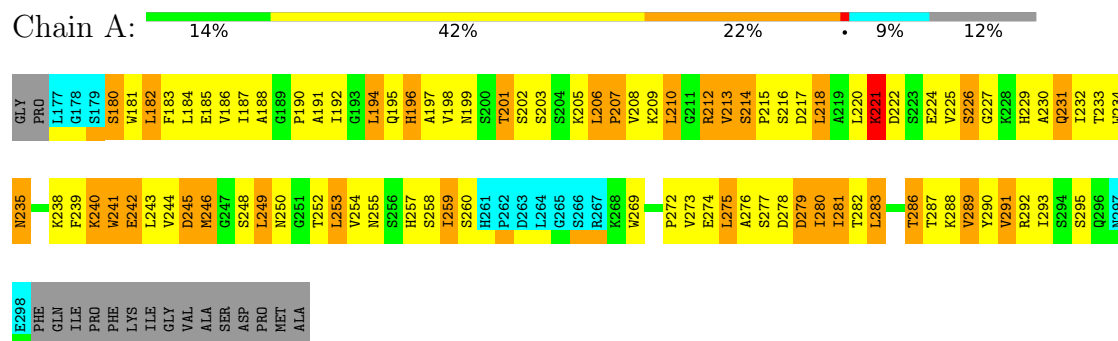
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE



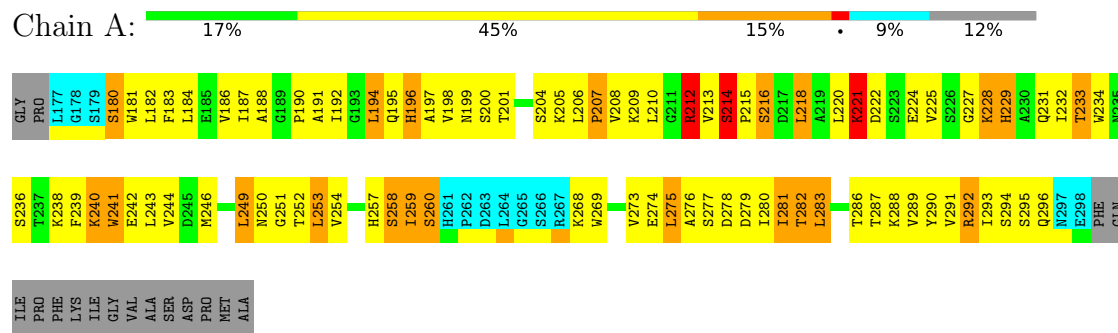
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE



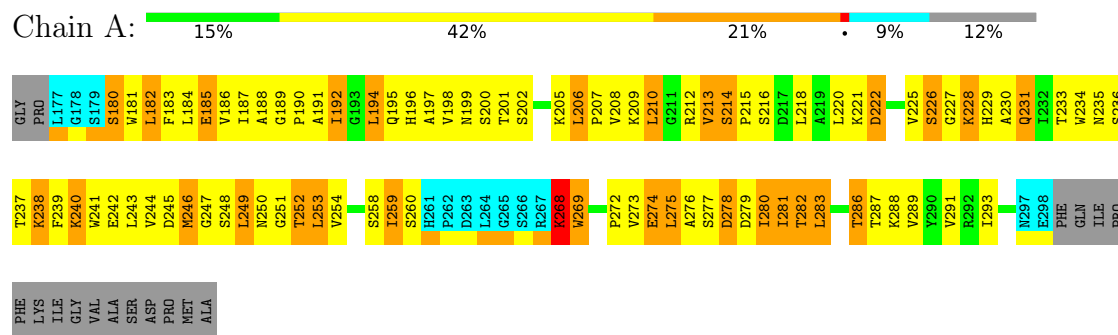
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE



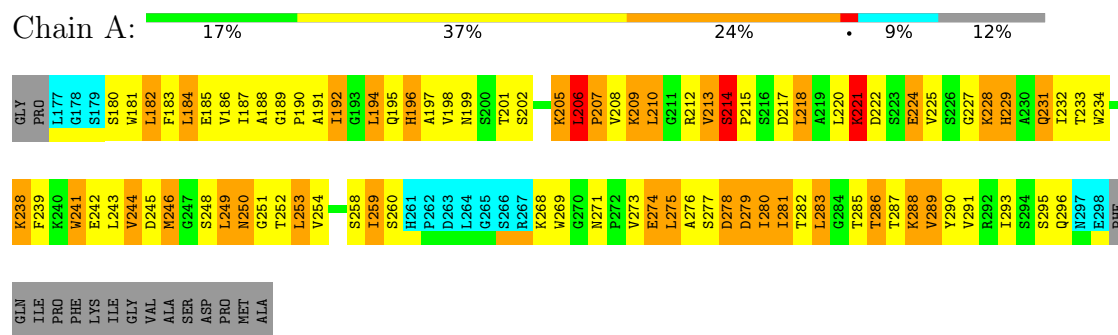
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE



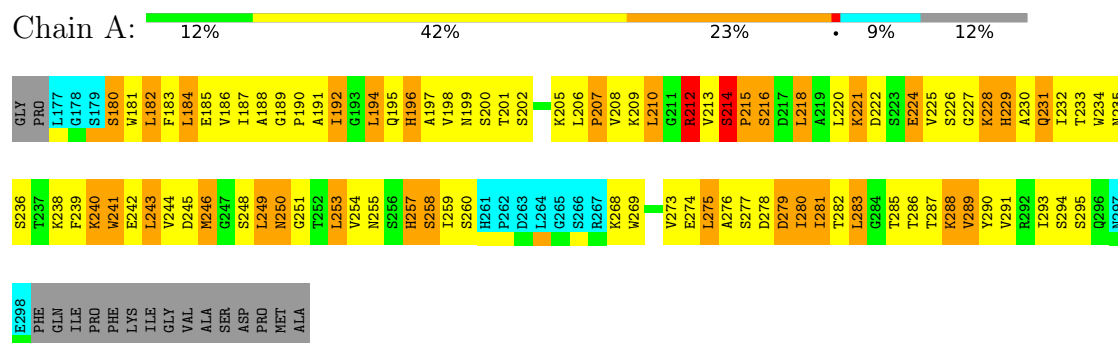
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE



4.2.7 Score per residue for model 7

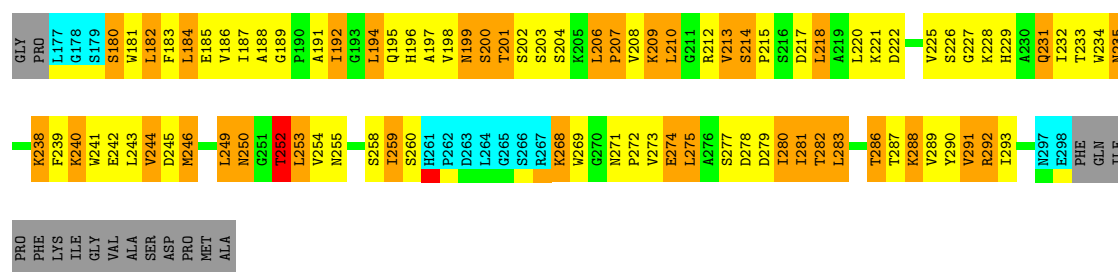
- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE



4.2.8 Score per residue for model 8

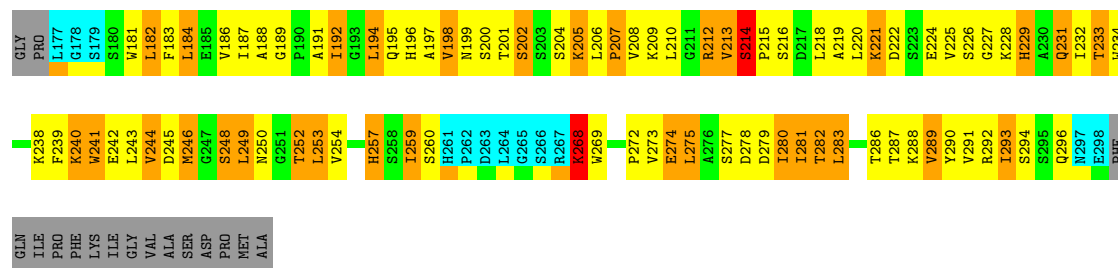
- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE





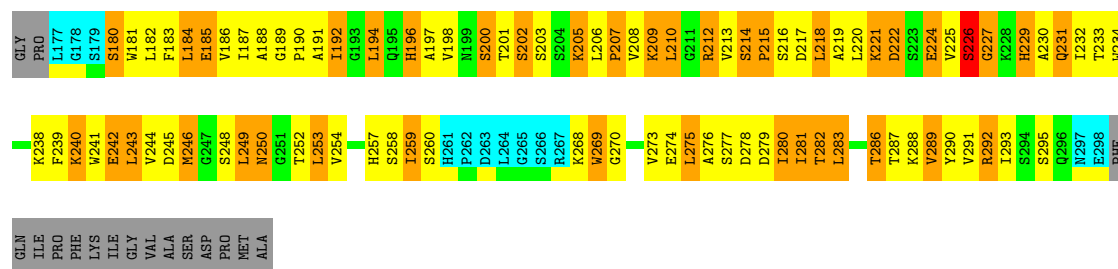
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE



4.2.10 Score per residue for model 10

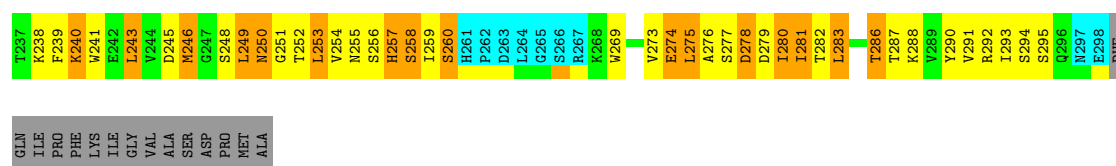
- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE

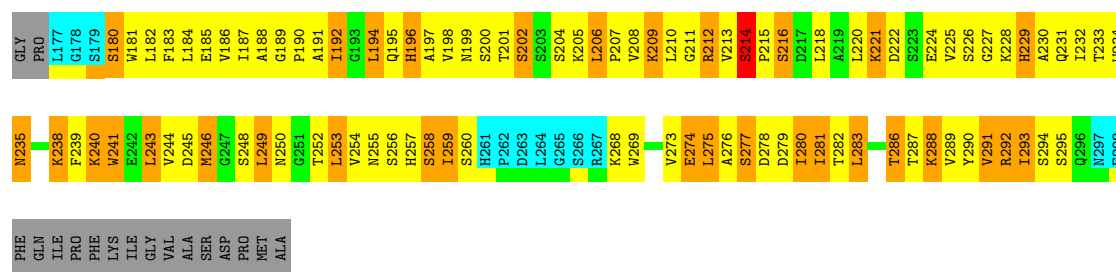




4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE

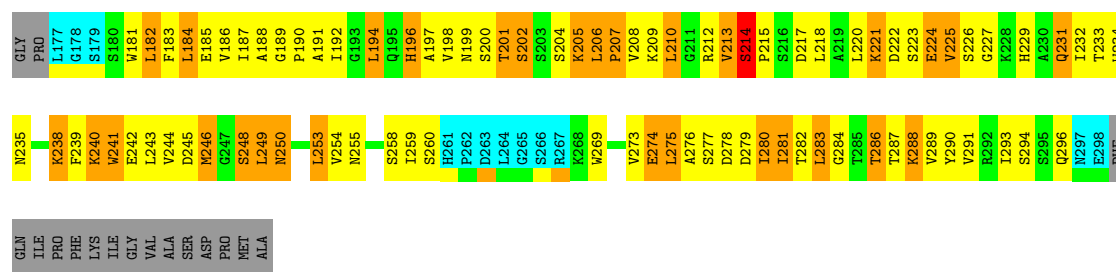
Chain A: 12% 44% 23% 9% 12%



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE

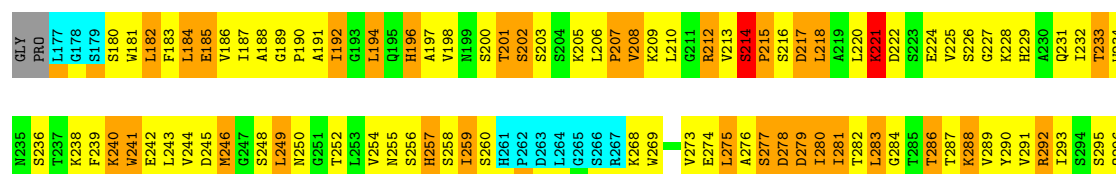
Chain A: 17% 40% 22% 9% 12%

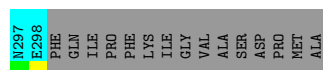


4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE

Chain A: 13% 42% 22% 9% 12%

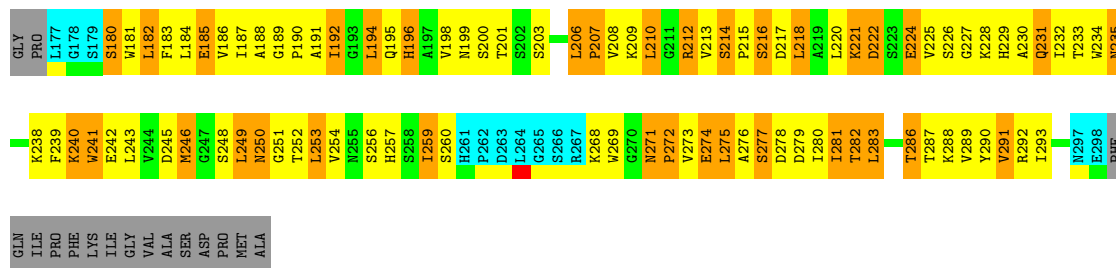




4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE

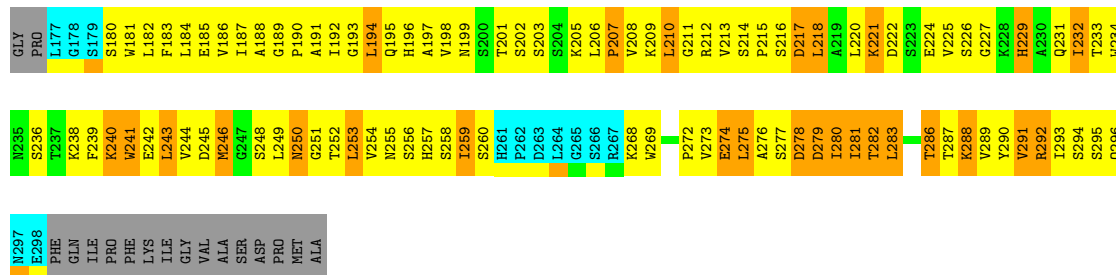
Chain A: 14% 40% 25% 9% 12%



4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE

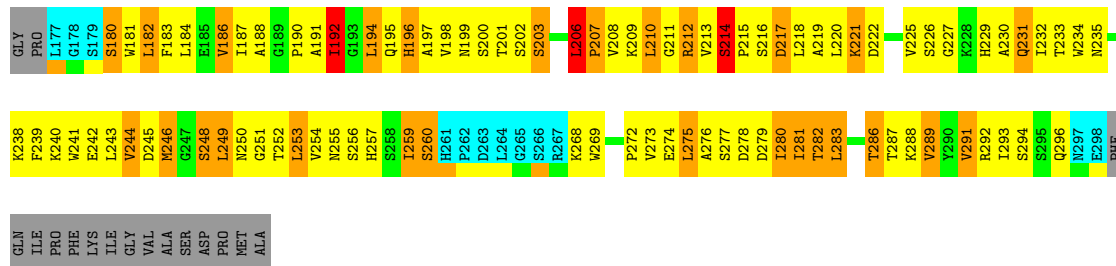
Chain A: 9% 50% 19% 9% 12%



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE

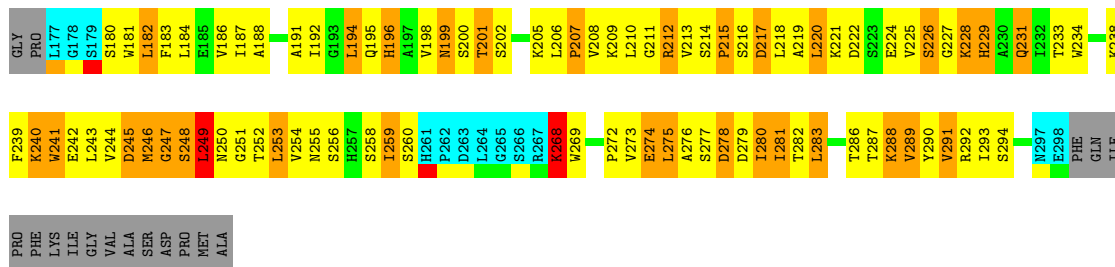
Chain A: 13% 45% 19% 9% 12%



4.2.18 Score per residue for model 18

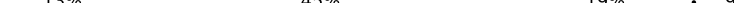
- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE

Chain A: 14% 41% 22% 9% 12%



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE

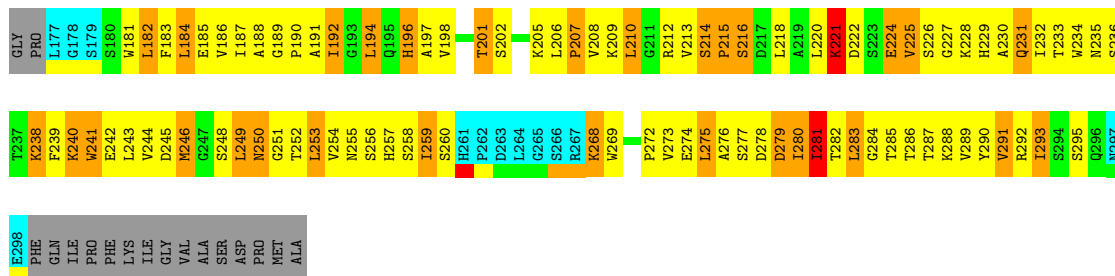
Chain A:  13% 45% 19% 9% 12%



4.2.20 Score per residue for model 20

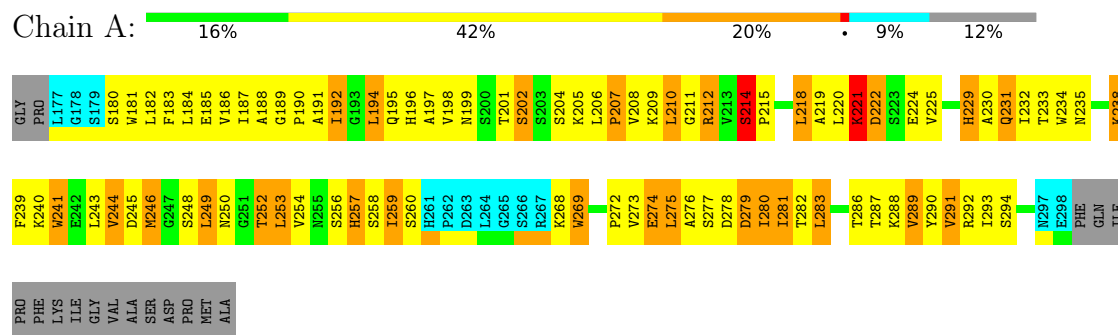
- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE

Chain A: 12% 45% 21% 9% 12%



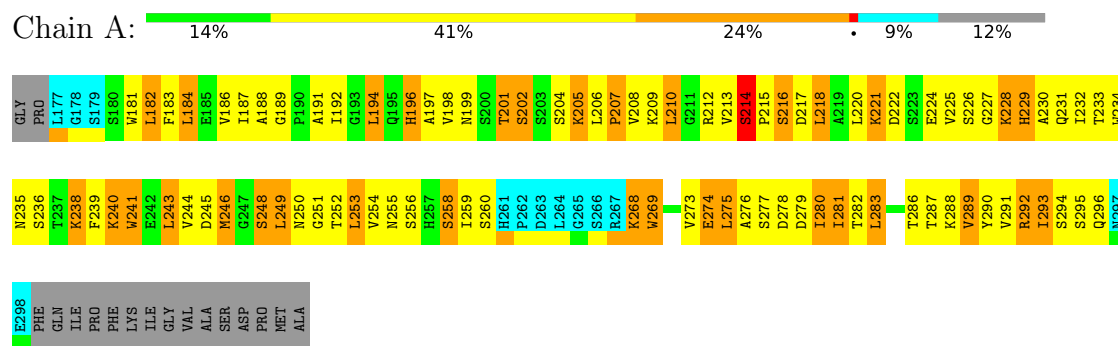
4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE



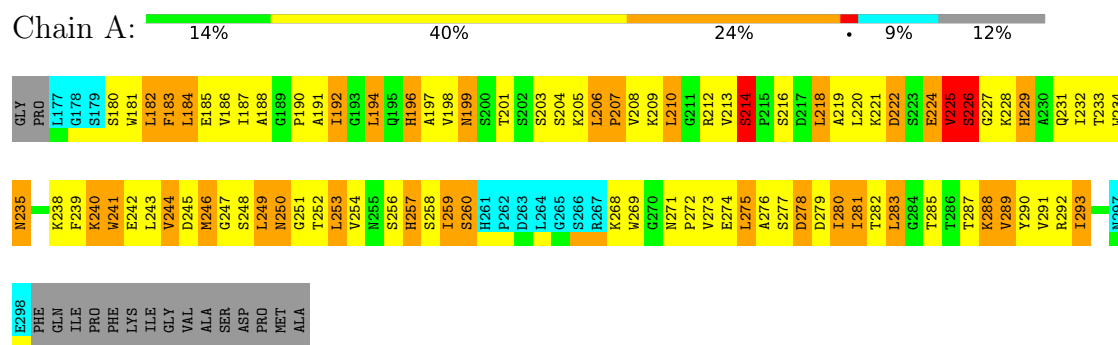
4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE



4.2.23 Score per residue for model 23

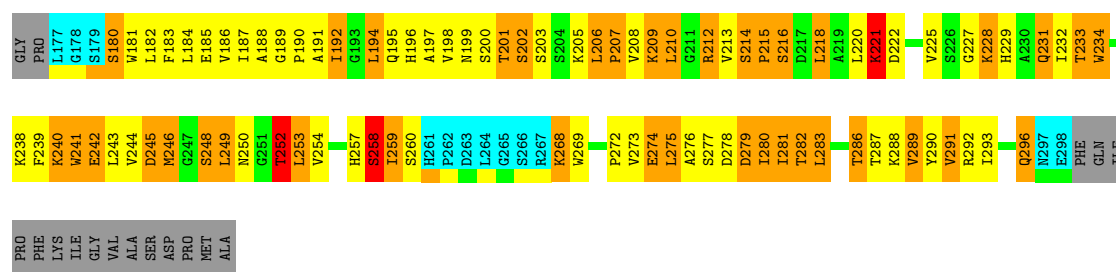
- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE



4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE





4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE

Chain A: 14% 40% 24% 9% 12%



4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE

Chain A: 10% 42% 27% 9% 12%



4.2.27 Score per residue for model 27

- Molecule 1: KINASE ASSOCIATED PROTEIN PHOSPHATASE

Chain A: 16% 38% 24% 9% 12%



0296	M297	
	E298	
PHE	GLN	
	ILE	
PRO		
PHE	LYS	
ILE		
GLY	VAL	
ALA		
SER	ASP	
PRO		
MET		
ALA		

5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

The models were refined using the following method: *torsion angle dynamics and simulated annealing in cartesian space and residual dipolar couplings*.

Of the 100 calculated structures, 30 were deposited, based on the following criterion: *structures with favorable non-bond energy, structures with the least restraint violations, structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
CNS	structure solution	1.0
CNS	refinement	1.0

No chemical shift data was provided.

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	0.38±0.02	0±0/853 (0.0± 0.0%)	0.73±0.01	0±0/1162 (0.0± 0.0%)
All	All	0.38	0/25590 (0.0%)	0.73	1/34860 (0.0%)

There are no bond-length outliers.

All unique angle outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	281	ILE	N-CA-C	5.33	114.04	106.53	20	1

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	835	850	847	130±12
All	All	25050	25500	25410	3905

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 77.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:254:VAL:HG23	1:A:259:ILE:HD12	1.02	1.28	2	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:186:VAL:HG21	1:A:194:LEU:HD12	0.99	1.27	15	21
1:A:210:LEU:HD23	1:A:218:LEU:HD12	0.99	1.32	10	26
1:A:281:ILE:HG22	1:A:289:VAL:HG12	0.95	1.34	8	6
1:A:212:ARG:HB2	1:A:225:VAL:HG13	0.94	1.39	28	20
1:A:206:LEU:H	1:A:207:PRO:HD2	0.92	1.24	17	4
1:A:241:TRP:CE3	1:A:293:ILE:HD12	0.92	1.99	23	7
1:A:249:LEU:HD22	1:A:250:ASN:N	0.92	1.80	14	19
1:A:184:LEU:HD13	1:A:196:HIS:CD2	0.91	2.00	24	3
1:A:241:TRP:CZ3	1:A:293:ILE:HG23	0.90	2.02	24	5
1:A:198:VAL:HG21	1:A:206:LEU:HA	0.90	1.44	30	19
1:A:252:THR:HG23	1:A:283:LEU:HD23	0.90	1.44	20	4
1:A:206:LEU:O	1:A:206:LEU:HD22	0.90	1.66	5	6
1:A:196:HIS:CE1	1:A:218:LEU:HD11	0.90	2.02	17	7
1:A:196:HIS:ND1	1:A:218:LEU:HD21	0.89	1.82	17	1
1:A:184:LEU:HD23	1:A:196:HIS:CD2	0.89	2.01	29	5
1:A:212:ARG:HA	1:A:220:LEU:O	0.89	1.68	10	27
1:A:184:LEU:HD13	1:A:196:HIS:CE1	0.88	2.03	6	3
1:A:231:GLN:CG	1:A:246:MET:HE1	0.87	1.99	15	2
1:A:275:LEU:HD22	1:A:291:VAL:HG11	0.87	1.47	9	2
1:A:244:VAL:HG22	1:A:269:TRP:HB2	0.86	1.46	21	1
1:A:244:VAL:HG22	1:A:269:TRP:HB3	0.86	1.46	19	1
1:A:231:GLN:O	1:A:243:LEU:HD13	0.86	1.71	10	6
1:A:207:PRO:HA	1:A:232:ILE:O	0.86	1.71	23	28
1:A:182:LEU:HD11	1:A:184:LEU:CD2	0.86	1.99	15	8
1:A:184:LEU:HD22	1:A:184:LEU:N	0.86	1.86	14	8
1:A:200:SER:HA	1:A:234:TRP:CZ2	0.85	2.06	26	18
1:A:259:ILE:CG1	1:A:273:VAL:HG21	0.85	2.01	14	13
1:A:186:VAL:HG21	1:A:220:LEU:HD11	0.85	1.45	30	9
1:A:198:VAL:HG13	1:A:234:TRP:CH2	0.85	2.05	28	18
1:A:182:LEU:HD12	1:A:183:PHE:N	0.84	1.87	22	23
1:A:254:VAL:HG23	1:A:259:ILE:CD1	0.84	2.02	29	19
1:A:254:VAL:HG22	1:A:281:ILE:HG13	0.84	1.50	29	5
1:A:280:ILE:HD13	1:A:280:ILE:N	0.84	1.88	17	1
1:A:281:ILE:CG2	1:A:289:VAL:HG12	0.84	2.00	8	6
1:A:206:LEU:HD13	1:A:207:PRO:HD3	0.84	1.45	26	5
1:A:279:ASP:O	1:A:291:VAL:HG23	0.83	1.74	15	6
1:A:191:ALA:CB	1:A:194:LEU:HD11	0.83	2.02	5	22
1:A:234:TRP:HB2	1:A:240:LYS:O	0.83	1.74	1	20
1:A:196:HIS:CD2	1:A:208:VAL:HG21	0.83	2.09	1	1
1:A:208:VAL:O	1:A:231:GLN:HB3	0.83	1.74	16	4
1:A:206:LEU:C	1:A:206:LEU:HD22	0.82	2.00	25	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:214:SER:HB2	1:A:215:PRO:HD3	0.82	1.50	29	2
1:A:275:LEU:HB2	1:A:291:VAL:HG11	0.82	1.48	20	21
1:A:254:VAL:HG22	1:A:281:ILE:HD11	0.82	1.52	11	1
1:A:206:LEU:HD22	1:A:206:LEU:C	0.82	1.99	5	6
1:A:196:HIS:ND1	1:A:208:VAL:HG21	0.82	1.90	12	2
1:A:244:VAL:HG13	1:A:269:TRP:CZ3	0.81	2.09	29	4
1:A:187:ILE:HG22	1:A:288:LYS:O	0.81	1.74	23	29
1:A:191:ALA:HB3	1:A:220:LEU:HD13	0.81	1.51	17	8
1:A:243:LEU:HD11	1:A:259:ILE:HD11	0.81	1.51	13	1
1:A:224:GLU:O	1:A:225:VAL:HG23	0.81	1.74	23	1
1:A:184:LEU:HD13	1:A:196:HIS:ND1	0.81	1.91	4	3
1:A:255:ASN:HA	1:A:280:ILE:HD12	0.81	1.49	11	6
1:A:196:HIS:CD2	1:A:208:VAL:HG11	0.81	2.11	15	8
1:A:246:MET:O	1:A:246:MET:HE2	0.81	1.76	11	2
1:A:184:LEU:HD22	1:A:196:HIS:CE1	0.80	2.11	1	1
1:A:206:LEU:HD13	1:A:207:PRO:CD	0.80	2.07	17	6
1:A:283:LEU:HD22	1:A:287:THR:O	0.80	1.77	14	2
1:A:188:ALA:O	1:A:287:THR:HA	0.79	1.77	20	30
1:A:206:LEU:HD11	1:A:234:TRP:CE3	0.79	2.13	23	6
1:A:213:VAL:HG13	1:A:215:PRO:HG2	0.79	1.54	19	2
1:A:191:ALA:HB1	1:A:194:LEU:CD1	0.79	2.08	9	7
1:A:202:SER:O	1:A:206:LEU:HD12	0.79	1.78	26	2
1:A:206:LEU:HD21	1:A:234:TRP:CE3	0.79	2.13	9	10
1:A:206:LEU:HD11	1:A:234:TRP:CZ2	0.78	2.13	10	3
1:A:230:ALA:HA	1:A:246:MET:HE3	0.78	1.53	15	2
1:A:182:LEU:HD11	1:A:184:LEU:CD1	0.78	2.08	20	9
1:A:186:VAL:HG23	1:A:194:LEU:O	0.78	1.77	9	11
1:A:281:ILE:HG22	1:A:289:VAL:HG23	0.78	1.53	26	5
1:A:281:ILE:CG2	1:A:289:VAL:HG23	0.78	2.08	26	4
1:A:212:ARG:HB3	1:A:226:SER:O	0.78	1.79	23	1
1:A:275:LEU:HD23	1:A:293:ILE:HD11	0.77	1.56	4	18
1:A:246:MET:HE2	1:A:269:TRP:CZ3	0.77	2.14	18	5
1:A:210:LEU:HD21	1:A:230:ALA:HB3	0.77	1.54	28	2
1:A:254:VAL:CG2	1:A:259:ILE:HD13	0.77	2.09	13	1
1:A:196:HIS:CG	1:A:208:VAL:HG11	0.77	2.14	25	5
1:A:246:MET:HB2	1:A:269:TRP:CZ3	0.77	2.15	26	4
1:A:259:ILE:HB	1:A:273:VAL:HG21	0.77	1.56	11	19
1:A:244:VAL:HG11	1:A:269:TRP:NE1	0.77	1.94	8	15
1:A:186:VAL:HG11	1:A:220:LEU:HD11	0.77	1.56	28	7
1:A:184:LEU:HD23	1:A:196:HIS:CG	0.77	2.14	10	6
1:A:184:LEU:HD22	1:A:184:LEU:H	0.77	1.40	10	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:254:VAL:HG22	1:A:281:ILE:CG2	0.77	2.10	10	4
1:A:218:LEU:HD13	1:A:220:LEU:HD21	0.76	1.57	3	16
1:A:182:LEU:HD13	1:A:293:ILE:CD1	0.76	2.11	23	1
1:A:212:ARG:HB2	1:A:225:VAL:HG12	0.76	1.56	23	1
1:A:182:LEU:HD23	1:A:234:TRP:CZ3	0.76	2.14	29	11
1:A:243:LEU:HD23	1:A:281:ILE:CD1	0.76	2.11	16	1
1:A:254:VAL:HG22	1:A:281:ILE:HG12	0.75	1.56	27	6
1:A:184:LEU:HD23	1:A:196:HIS:ND1	0.75	1.95	26	1
1:A:244:VAL:HG21	1:A:269:TRP:CD1	0.75	2.16	24	15
1:A:232:ILE:HG12	1:A:243:LEU:HD22	0.75	1.54	10	2
1:A:224:GLU:O	1:A:249:LEU:HD11	0.75	1.80	6	5
1:A:222:ASP:OD2	1:A:287:THR:HG21	0.75	1.81	30	2
1:A:281:ILE:HD12	1:A:289:VAL:CG2	0.75	2.12	7	6
1:A:222:ASP:HB3	1:A:225:VAL:HG12	0.75	1.55	21	5
1:A:206:LEU:HD11	1:A:234:TRP:CE2	0.75	2.17	4	14
1:A:275:LEU:H	1:A:275:LEU:HD13	0.75	1.42	17	26
1:A:244:VAL:HG22	1:A:269:TRP:O	0.75	1.80	9	14
1:A:218:LEU:HD23	1:A:220:LEU:HD21	0.75	1.59	11	1
1:A:191:ALA:HB1	1:A:194:LEU:HD21	0.74	1.57	3	6
1:A:191:ALA:HB3	1:A:194:LEU:HD11	0.74	1.59	21	21
1:A:246:MET:HG2	1:A:269:TRP:CH2	0.74	2.18	5	10
1:A:241:TRP:CH2	1:A:293:ILE:HG23	0.74	2.16	10	2
1:A:259:ILE:HG21	1:A:273:VAL:HG11	0.74	1.57	6	7
1:A:212:ARG:HD3	1:A:213:VAL:HG12	0.74	1.60	29	8
1:A:196:HIS:CE1	1:A:208:VAL:HG21	0.74	2.18	12	2
1:A:232:ILE:HG12	1:A:243:LEU:HD11	0.74	1.59	16	1
1:A:281:ILE:HD12	1:A:289:VAL:HG23	0.73	1.56	18	6
1:A:184:LEU:HB3	1:A:196:HIS:CE1	0.73	2.18	15	5
1:A:259:ILE:HG12	1:A:273:VAL:HG21	0.73	1.58	28	9
1:A:218:LEU:HB3	1:A:220:LEU:CD2	0.73	2.13	16	30
1:A:230:ALA:HB2	1:A:252:THR:HG21	0.73	1.61	28	3
1:A:202:SER:HA	1:A:205:LYS:HE3	0.73	1.60	6	3
1:A:220:LEU:O	1:A:222:ASP:N	0.73	2.21	3	29
1:A:244:VAL:HG21	1:A:269:TRP:NE1	0.73	1.99	4	9
1:A:259:ILE:HD12	1:A:273:VAL:HB	0.73	1.59	13	1
1:A:206:LEU:H	1:A:207:PRO:CD	0.73	1.96	6	2
1:A:259:ILE:HD12	1:A:273:VAL:CB	0.73	2.14	13	1
1:A:243:LEU:HD12	1:A:243:LEU:O	0.72	1.83	19	19
1:A:249:LEU:HD13	1:A:250:ASN:H	0.72	1.44	22	19
1:A:230:ALA:HB3	1:A:283:LEU:HD22	0.72	1.60	20	1
1:A:229:HIS:CE1	1:A:248:SER:HB3	0.72	2.20	25	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:231:GLN:HG3	1:A:246:MET:HE1	0.72	1.60	15	1
1:A:281:ILE:CG2	1:A:281:ILE:O	0.72	2.38	20	3
1:A:282:THR:C	1:A:283:LEU:HD13	0.71	2.10	11	3
1:A:252:THR:C	1:A:253:LEU:HD23	0.71	2.11	21	24
1:A:246:MET:O	1:A:246:MET:HG3	0.71	1.85	26	4
1:A:243:LEU:HD22	1:A:281:ILE:HD12	0.71	1.62	3	4
1:A:259:ILE:HG12	1:A:273:VAL:HG11	0.71	1.61	18	7
1:A:212:ARG:HG2	1:A:221:LYS:HA	0.71	1.63	14	12
1:A:222:ASP:HB2	1:A:225:VAL:HG12	0.71	1.62	30	7
1:A:182:LEU:HD12	1:A:292:ARG:O	0.70	1.86	4	9
1:A:231:GLN:HG2	1:A:246:MET:HE1	0.70	1.63	15	2
1:A:198:VAL:HG21	1:A:206:LEU:CB	0.70	2.15	8	3
1:A:225:VAL:HG13	1:A:229:HIS:CG	0.70	2.22	11	1
1:A:196:HIS:NE2	1:A:210:LEU:HD21	0.70	2.02	15	6
1:A:241:TRP:O	1:A:274:GLU:HA	0.69	1.87	14	29
1:A:283:LEU:HD13	1:A:283:LEU:N	0.69	2.02	23	24
1:A:244:VAL:HG11	1:A:269:TRP:CZ2	0.69	2.22	10	4
1:A:254:VAL:HG22	1:A:281:ILE:HG23	0.69	1.64	14	8
1:A:184:LEU:HD12	1:A:196:HIS:O	0.69	1.88	19	7
1:A:244:VAL:HG22	1:A:269:TRP:CB	0.69	2.16	19	2
1:A:191:ALA:HB1	1:A:194:LEU:HD11	0.69	1.62	18	18
1:A:234:TRP:CE3	1:A:241:TRP:CE3	0.69	2.81	5	6
1:A:275:LEU:CD2	1:A:293:ILE:HD11	0.69	2.17	17	20
1:A:208:VAL:HG12	1:A:208:VAL:O	0.69	1.87	14	2
1:A:252:THR:CG2	1:A:283:LEU:HD23	0.69	2.18	20	2
1:A:196:HIS:ND1	1:A:208:VAL:HG11	0.69	2.02	4	4
1:A:210:LEU:HD12	1:A:231:GLN:HA	0.69	1.65	22	22
1:A:183:PHE:O	1:A:184:LEU:HD12	0.68	1.87	1	1
1:A:259:ILE:HG13	1:A:273:VAL:HG11	0.68	1.64	20	6
1:A:246:MET:HA	1:A:246:MET:HE3	0.68	1.64	27	1
1:A:214:SER:CB	1:A:215:PRO:HD3	0.68	2.18	21	3
1:A:199:ASN:ND2	1:A:201:THR:HG22	0.68	2.02	18	1
1:A:224:GLU:O	1:A:249:LEU:HD21	0.68	1.87	30	1
1:A:234:TRP:CB	1:A:241:TRP:HA	0.68	2.17	14	19
1:A:213:VAL:HG22	1:A:214:SER:H	0.67	1.47	3	11
1:A:246:MET:O	1:A:248:SER:N	0.67	2.24	25	2
1:A:184:LEU:O	1:A:195:GLN:HG2	0.67	1.90	16	18
1:A:206:LEU:HD13	1:A:207:PRO:N	0.67	2.04	27	4
1:A:182:LEU:HD11	1:A:184:LEU:HD13	0.67	1.66	1	9
1:A:208:VAL:O	1:A:231:GLN:HB2	0.67	1.90	5	14
1:A:228:LYS:HB2	1:A:246:MET:HG3	0.67	1.66	29	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:228:LYS:O	1:A:246:MET:HB3	0.67	1.90	29	6
1:A:253:LEU:N	1:A:253:LEU:HD23	0.66	2.06	27	21
1:A:241:TRP:CE3	1:A:293:ILE:HD13	0.66	2.25	4	5
1:A:246:MET:HE2	1:A:269:TRP:HZ3	0.66	1.49	18	5
1:A:202:SER:OG	1:A:206:LEU:HB3	0.66	1.91	8	2
1:A:196:HIS:CE1	1:A:218:LEU:HD21	0.66	2.25	17	2
1:A:243:LEU:O	1:A:272:PRO:HA	0.66	1.90	29	16
1:A:218:LEU:CD2	1:A:220:LEU:HD21	0.66	2.19	11	1
1:A:206:LEU:HG	1:A:234:TRP:CZ2	0.66	2.26	25	3
1:A:212:ARG:HD2	1:A:225:VAL:HB	0.66	1.66	27	1
1:A:245:ASP:HB2	1:A:260:SER:HB3	0.66	1.67	5	6
1:A:243:LEU:HD12	1:A:244:VAL:N	0.66	2.05	30	1
1:A:234:TRP:HB3	1:A:241:TRP:HA	0.66	1.68	25	14
1:A:243:LEU:HG	1:A:281:ILE:HG13	0.66	1.67	11	2
1:A:209:LYS:O	1:A:217:ASP:HB2	0.66	1.90	28	1
1:A:184:LEU:HD22	1:A:196:HIS:O	0.65	1.92	20	8
1:A:191:ALA:O	1:A:194:LEU:HD12	0.65	1.92	23	7
1:A:182:LEU:O	1:A:197:ALA:HA	0.65	1.90	9	23
1:A:182:LEU:HD23	1:A:234:TRP:HZ3	0.65	1.51	7	15
1:A:249:LEU:C	1:A:249:LEU:HD22	0.65	2.16	4	5
1:A:198:VAL:HG21	1:A:206:LEU:HG	0.65	1.69	3	4
1:A:181:TRP:HB3	1:A:183:PHE:CZ	0.65	2.27	8	29
1:A:206:LEU:HD22	1:A:207:PRO:N	0.65	2.07	17	2
1:A:246:MET:HE3	1:A:269:TRP:CZ3	0.65	2.27	14	11
1:A:228:LYS:O	1:A:246:MET:O	0.64	2.15	23	1
1:A:243:LEU:HD21	1:A:281:ILE:HG21	0.64	1.66	30	1
1:A:206:LEU:N	1:A:207:PRO:HD2	0.64	2.08	8	13
1:A:206:LEU:HD22	1:A:233:THR:HA	0.64	1.69	9	5
1:A:249:LEU:C	1:A:249:LEU:HD13	0.64	2.17	18	3
1:A:184:LEU:N	1:A:184:LEU:CD2	0.64	2.61	14	9
1:A:253:LEU:O	1:A:281:ILE:HD13	0.64	1.92	11	3
1:A:280:ILE:N	1:A:280:ILE:CD1	0.64	2.60	17	1
1:A:231:GLN:NE2	1:A:244:VAL:HG12	0.64	2.08	24	1
1:A:242:GLU:HG2	1:A:274:GLU:HG3	0.64	1.70	7	1
1:A:213:VAL:HG13	1:A:215:PRO:CG	0.64	2.22	19	2
1:A:196:HIS:CE1	1:A:210:LEU:HD21	0.64	2.27	6	4
1:A:220:LEU:HD22	1:A:220:LEU:N	0.64	2.08	18	12
1:A:253:LEU:HG	1:A:282:THR:HB	0.64	1.69	2	18
1:A:229:HIS:CD2	1:A:283:LEU:HB3	0.64	2.28	14	3
1:A:252:THR:HG23	1:A:283:LEU:HD12	0.64	1.69	14	1
1:A:212:ARG:HB2	1:A:225:VAL:O	0.63	1.92	12	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:206:LEU:N	1:A:207:PRO:CD	0.63	2.60	12	9
1:A:206:LEU:HD22	1:A:206:LEU:O	0.63	1.93	25	1
1:A:206:LEU:HD23	1:A:234:TRP:CH2	0.63	2.28	30	1
1:A:196:HIS:NE2	1:A:208:VAL:HG21	0.63	2.08	1	1
1:A:259:ILE:CB	1:A:273:VAL:HG21	0.63	2.23	4	2
1:A:232:ILE:CG1	1:A:243:LEU:HD11	0.63	2.23	16	1
1:A:210:LEU:HB2	1:A:230:ALA:O	0.63	1.92	25	3
1:A:243:LEU:O	1:A:243:LEU:HD12	0.62	1.94	29	4
1:A:190:PRO:HB2	1:A:221:LYS:HG3	0.62	1.72	29	6
1:A:212:ARG:CD	1:A:225:VAL:HB	0.62	2.23	27	1
1:A:243:LEU:HD12	1:A:243:LEU:C	0.62	2.19	2	18
1:A:191:ALA:HB1	1:A:194:LEU:HD13	0.62	1.70	9	4
1:A:275:LEU:HD22	1:A:291:VAL:CG1	0.62	2.22	23	2
1:A:214:SER:HB3	1:A:215:PRO:HD2	0.62	1.71	27	6
1:A:253:LEU:HG	1:A:282:THR:O	0.62	1.93	16	4
1:A:243:LEU:HD11	1:A:259:ILE:CD1	0.62	2.22	13	1
1:A:231:GLN:O	1:A:243:LEU:HB2	0.62	1.92	5	23
1:A:281:ILE:O	1:A:288:LYS:HA	0.62	1.94	17	19
1:A:184:LEU:HD23	1:A:196:HIS:CE1	0.62	2.29	26	1
1:A:210:LEU:HD13	1:A:210:LEU:N	0.62	2.10	17	2
1:A:243:LEU:C	1:A:243:LEU:HD12	0.62	2.20	13	6
1:A:181:TRP:HB3	1:A:183:PHE:CE1	0.62	2.29	13	4
1:A:277:SER:O	1:A:278:ASP:HB2	0.62	1.93	22	25
1:A:182:LEU:HD23	1:A:234:TRP:CE3	0.62	2.29	29	2
1:A:257:HIS:O	1:A:259:ILE:HG23	0.62	1.95	17	8
1:A:282:THR:HG23	1:A:288:LYS:CG	0.62	2.24	17	7
1:A:198:VAL:HG13	1:A:234:TRP:HH2	0.61	1.51	22	10
1:A:206:LEU:HD23	1:A:234:TRP:CZ3	0.61	2.29	5	5
1:A:246:MET:HA	1:A:269:TRP:CE3	0.61	2.30	10	5
1:A:184:LEU:HD11	1:A:232:ILE:HD12	0.61	1.71	11	1
1:A:281:ILE:HD12	1:A:289:VAL:CG1	0.61	2.24	30	1
1:A:276:ALA:O	1:A:279:ASP:HB2	0.61	1.95	6	26
1:A:196:HIS:CD2	1:A:196:HIS:N	0.61	2.67	29	8
1:A:246:MET:HE3	1:A:269:TRP:HZ3	0.61	1.56	7	6
1:A:241:TRP:CD1	1:A:241:TRP:N	0.61	2.68	21	13
1:A:198:VAL:HG21	1:A:206:LEU:HB2	0.61	1.73	8	2
1:A:188:ALA:O	1:A:286:THR:O	0.61	2.18	6	28
1:A:206:LEU:C	1:A:206:LEU:HD23	0.61	2.21	18	16
1:A:184:LEU:CD2	1:A:196:HIS:O	0.61	2.48	22	12
1:A:180:SER:O	1:A:199:ASN:HA	0.61	1.94	11	16
1:A:196:HIS:CD2	1:A:217:ASP:HB3	0.60	2.31	28	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:229:HIS:CG	1:A:283:LEU:HB2	0.60	2.32	26	19
1:A:185:GLU:C	1:A:289:VAL:HG23	0.60	2.21	30	5
1:A:206:LEU:CD2	1:A:233:THR:HA	0.60	2.25	14	2
1:A:231:GLN:OE1	1:A:233:THR:HG22	0.60	1.95	9	2
1:A:242:GLU:HA	1:A:273:VAL:O	0.60	1.96	1	23
1:A:218:LEU:HB3	1:A:220:LEU:HD23	0.60	1.74	18	1
1:A:208:VAL:O	1:A:231:GLN:CB	0.60	2.49	18	11
1:A:249:LEU:HD12	1:A:249:LEU:N	0.60	2.12	1	1
1:A:222:ASP:CG	1:A:287:THR:HG1	0.60	2.05	29	1
1:A:208:VAL:O	1:A:231:GLN:HG3	0.60	1.96	13	1
1:A:229:HIS:C	1:A:246:MET:HG2	0.60	2.22	30	1
1:A:230:ALA:HB1	1:A:243:LEU:HD11	0.60	1.73	30	1
1:A:229:HIS:O	1:A:246:MET:N	0.60	2.35	5	16
1:A:182:LEU:C	1:A:182:LEU:HD12	0.60	2.21	29	3
1:A:254:VAL:HG21	1:A:259:ILE:HD13	0.60	1.73	13	1
1:A:210:LEU:HD23	1:A:218:LEU:CD1	0.59	2.21	23	8
1:A:202:SER:O	1:A:206:LEU:HB2	0.59	1.97	14	3
1:A:252:THR:N	1:A:260:SER:HB3	0.59	2.11	9	2
1:A:218:LEU:HD23	1:A:220:LEU:CD2	0.59	2.27	11	1
1:A:184:LEU:CD2	1:A:291:VAL:HG13	0.59	2.27	21	3
1:A:275:LEU:CB	1:A:291:VAL:HG11	0.59	2.25	20	9
1:A:279:ASP:O	1:A:280:ILE:HG23	0.59	1.97	6	10
1:A:190:PRO:HG3	1:A:222:ASP:CB	0.59	2.27	14	9
1:A:182:LEU:HB3	1:A:234:TRP:CZ3	0.59	2.32	29	4
1:A:254:VAL:HG23	1:A:259:ILE:HD11	0.59	1.74	26	14
1:A:194:LEU:HD22	1:A:219:ALA:HB3	0.59	1.74	21	1
1:A:230:ALA:CA	1:A:246:MET:HE3	0.59	2.24	15	1
1:A:212:ARG:HD3	1:A:222:ASP:CB	0.59	2.27	27	1
1:A:218:LEU:HB3	1:A:220:LEU:HD21	0.59	1.74	1	3
1:A:182:LEU:HD11	1:A:184:LEU:HD22	0.59	1.74	5	6
1:A:184:LEU:HD23	1:A:291:VAL:HG13	0.59	1.73	21	3
1:A:212:ARG:CB	1:A:225:VAL:HG12	0.59	2.25	23	1
1:A:282:THR:OG1	1:A:288:LYS:HG3	0.59	1.97	9	5
1:A:254:VAL:HG22	1:A:281:ILE:CG1	0.59	2.28	15	5
1:A:200:SER:HB2	1:A:241:TRP:CZ2	0.58	2.33	25	1
1:A:254:VAL:HG23	1:A:259:ILE:CG1	0.58	2.28	24	9
1:A:231:GLN:CD	1:A:244:VAL:HG12	0.58	2.24	24	2
1:A:184:LEU:HB2	1:A:196:HIS:CE1	0.58	2.33	21	4
1:A:213:VAL:HG22	1:A:215:PRO:HD2	0.58	1.75	18	3
1:A:214:SER:CB	1:A:215:PRO:CD	0.58	2.81	15	15
1:A:246:MET:HG2	1:A:269:TRP:CZ3	0.58	2.32	5	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:249:LEU:HD13	1:A:250:ASN:N	0.58	2.13	12	10
1:A:259:ILE:HD13	1:A:259:ILE:H	0.58	1.57	29	14
1:A:189:GLY:H	1:A:192:ILE:HG12	0.58	1.58	19	23
1:A:184:LEU:HD13	1:A:290:TYR:O	0.58	1.99	25	3
1:A:212:ARG:HD3	1:A:222:ASP:CA	0.58	2.27	27	1
1:A:281:ILE:HG22	1:A:289:VAL:CG1	0.58	2.29	9	1
1:A:259:ILE:HD12	1:A:260:SER:N	0.58	2.13	3	6
1:A:230:ALA:HB3	1:A:283:LEU:CD2	0.58	2.29	10	3
1:A:188:ALA:N	1:A:192:ILE:HD11	0.58	2.13	11	1
1:A:229:HIS:CE1	1:A:283:LEU:O	0.57	2.57	25	4
1:A:181:TRP:CB	1:A:183:PHE:CZ	0.57	2.87	26	3
1:A:249:LEU:HD12	1:A:250:ASN:N	0.57	2.13	30	3
1:A:253:LEU:HD23	1:A:253:LEU:N	0.57	2.14	21	5
1:A:245:ASP:HB2	1:A:270:GLY:CA	0.57	2.28	30	1
1:A:196:HIS:CD2	1:A:196:HIS:C	0.57	2.81	1	1
1:A:232:ILE:HD13	1:A:275:LEU:CD1	0.57	2.29	23	1
1:A:249:LEU:O	1:A:249:LEU:HG	0.57	1.99	25	1
1:A:182:LEU:HD12	1:A:182:LEU:C	0.57	2.24	28	13
1:A:259:ILE:CG2	1:A:273:VAL:HG11	0.57	2.30	22	4
1:A:212:ARG:HA	1:A:212:ARG:HE	0.57	1.58	27	1
1:A:212:ARG:HB2	1:A:225:VAL:HB	0.57	1.77	11	2
1:A:202:SER:HB3	1:A:206:LEU:HB2	0.57	1.76	24	3
1:A:246:MET:HB3	1:A:269:TRP:CH2	0.57	2.35	15	1
1:A:202:SER:OG	1:A:205:LYS:HG2	0.57	2.00	26	1
1:A:212:ARG:NE	1:A:225:VAL:HB	0.57	2.15	27	1
1:A:245:ASP:O	1:A:269:TRP:CE3	0.57	2.57	28	1
1:A:234:TRP:CH2	1:A:241:TRP:CE3	0.57	2.92	21	3
1:A:196:HIS:HE1	1:A:289:VAL:HG21	0.57	1.59	16	1
1:A:283:LEU:HD22	1:A:283:LEU:H	0.57	1.59	6	17
1:A:196:HIS:HE1	1:A:289:VAL:HG11	0.57	1.60	18	2
1:A:282:THR:HG23	1:A:288:LYS:HG3	0.57	1.76	17	5
1:A:243:LEU:HD23	1:A:281:ILE:HD12	0.57	1.75	16	1
1:A:209:LYS:HB2	1:A:217:ASP:HB2	0.57	1.76	17	1
1:A:249:LEU:HD22	1:A:249:LEU:C	0.56	2.25	20	9
1:A:254:VAL:HG23	1:A:259:ILE:HD13	0.56	1.76	13	1
1:A:184:LEU:HD12	1:A:289:VAL:HG13	0.56	1.77	17	1
1:A:245:ASP:O	1:A:269:TRP:HA	0.56	2.00	23	6
1:A:196:HIS:CE1	1:A:218:LEU:CD2	0.56	2.88	18	1
1:A:214:SER:HB2	1:A:215:PRO:CD	0.56	2.31	10	4
1:A:186:VAL:N	1:A:289:VAL:HG23	0.56	2.15	16	4
1:A:283:LEU:O	1:A:287:THR:HB	0.56	2.01	11	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:184:LEU:CD2	1:A:196:HIS:CE1	0.56	2.88	1	1
1:A:206:LEU:HD11	1:A:234:TRP:CH2	0.56	2.35	10	1
1:A:254:VAL:HG22	1:A:281:ILE:CD1	0.56	2.30	11	1
1:A:225:VAL:HG22	1:A:229:HIS:ND1	0.56	2.14	22	2
1:A:212:ARG:HD3	1:A:222:ASP:C	0.56	2.25	27	1
1:A:220:LEU:C	1:A:222:ASP:H	0.56	2.07	19	7
1:A:281:ILE:O	1:A:281:ILE:HG22	0.56	2.00	20	3
1:A:212:ARG:CG	1:A:221:LYS:HA	0.56	2.30	26	7
1:A:184:LEU:HA	1:A:290:TYR:O	0.56	2.01	27	18
1:A:206:LEU:HG	1:A:234:TRP:CE2	0.56	2.35	26	3
1:A:206:LEU:C	1:A:206:LEU:CD2	0.56	2.77	26	12
1:A:196:HIS:CG	1:A:218:LEU:HD21	0.56	2.36	17	1
1:A:246:MET:HA	1:A:269:TRP:CZ3	0.56	2.35	18	1
1:A:214:SER:CB	1:A:215:PRO:HD2	0.56	2.31	2	11
1:A:229:HIS:CE1	1:A:250:ASN:HB3	0.56	2.35	4	4
1:A:196:HIS:NE2	1:A:208:VAL:HG22	0.56	2.15	5	1
1:A:280:ILE:HG22	1:A:290:TYR:HA	0.56	1.77	9	1
1:A:224:GLU:CD	1:A:284:GLY:HA3	0.56	2.26	14	2
1:A:198:VAL:HG11	1:A:206:LEU:HD23	0.56	1.78	6	1
1:A:238:LYS:O	1:A:240:LYS:HD3	0.56	2.01	29	6
1:A:206:LEU:HD11	1:A:234:TRP:CZ3	0.56	2.36	15	1
1:A:245:ASP:CG	1:A:260:SER:HB3	0.56	2.26	28	1
1:A:243:LEU:HB2	1:A:275:LEU:HD12	0.55	1.77	10	1
1:A:234:TRP:CH2	1:A:241:TRP:CZ3	0.55	2.94	6	5
1:A:225:VAL:HG23	1:A:228:LYS:C	0.55	2.26	29	5
1:A:253:LEU:O	1:A:281:ILE:HA	0.55	2.00	24	4
1:A:230:ALA:CB	1:A:252:THR:HG21	0.55	2.32	11	3
1:A:275:LEU:CD2	1:A:275:LEU:C	0.55	2.80	4	21
1:A:182:LEU:HD11	1:A:184:LEU:HD21	0.55	1.78	2	4
1:A:186:VAL:HG11	1:A:220:LEU:CD1	0.55	2.32	11	5
1:A:229:HIS:CD2	1:A:283:LEU:HB2	0.55	2.37	17	14
1:A:211:GLY:O	1:A:218:LEU:O	0.55	2.24	18	6
1:A:186:VAL:HA	1:A:289:VAL:HG13	0.55	1.79	24	9
1:A:222:ASP:OD2	1:A:287:THR:OG1	0.55	2.25	27	2
1:A:182:LEU:HB2	1:A:241:TRP:CZ3	0.55	2.35	10	10
1:A:220:LEU:N	1:A:220:LEU:CD2	0.55	2.70	18	4
1:A:186:VAL:CG2	1:A:220:LEU:HD11	0.55	2.32	20	7
1:A:184:LEU:CD2	1:A:184:LEU:N	0.55	2.70	23	3
1:A:252:THR:HA	1:A:282:THR:O	0.55	2.02	30	3
1:A:206:LEU:HB3	1:A:207:PRO:CD	0.54	2.32	7	16
1:A:198:VAL:HG13	1:A:234:TRP:CZ3	0.54	2.36	9	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:229:HIS:CE1	1:A:250:ASN:OD1	0.54	2.61	17	1
1:A:206:LEU:HD21	1:A:233:THR:HA	0.54	1.80	25	1
1:A:241:TRP:CE3	1:A:293:ILE:CD1	0.54	2.89	9	11
1:A:259:ILE:O	1:A:273:VAL:HG21	0.54	2.01	24	3
1:A:184:LEU:HB2	1:A:196:HIS:CD2	0.54	2.37	6	6
1:A:244:VAL:CG1	1:A:269:TRP:CZ3	0.54	2.90	29	3
1:A:199:ASN:HB3	1:A:201:THR:HG22	0.54	1.79	17	2
1:A:230:ALA:HB2	1:A:245:ASP:OD2	0.54	2.03	21	1
1:A:279:ASP:O	1:A:291:VAL:CG2	0.54	2.56	30	1
1:A:252:THR:HG22	1:A:281:ILE:CD1	0.54	2.33	15	4
1:A:241:TRP:CD2	1:A:293:ILE:HD12	0.54	2.38	30	3
1:A:225:VAL:O	1:A:225:VAL:HG13	0.54	2.03	15	3
1:A:208:VAL:O	1:A:208:VAL:CG1	0.54	2.56	14	2
1:A:208:VAL:HG12	1:A:209:LYS:N	0.54	2.17	1	14
1:A:246:MET:HE2	1:A:269:TRP:CH2	0.54	2.37	30	1
1:A:196:HIS:CD2	1:A:208:VAL:HG13	0.54	2.38	5	1
1:A:255:ASN:HA	1:A:280:ILE:HG13	0.54	1.79	20	3
1:A:182:LEU:HD13	1:A:293:ILE:HD13	0.54	1.79	23	1
1:A:246:MET:HB3	1:A:269:TRP:CZ3	0.54	2.38	30	2
1:A:213:VAL:HG13	1:A:213:VAL:O	0.54	2.02	1	5
1:A:229:HIS:NE2	1:A:251:GLY:O	0.54	2.41	4	2
1:A:210:LEU:HD23	1:A:218:LEU:HD22	0.54	1.78	11	1
1:A:255:ASN:N	1:A:280:ILE:O	0.53	2.36	16	7
1:A:222:ASP:CB	1:A:225:VAL:HG12	0.53	2.32	21	3
1:A:210:LEU:HD22	1:A:230:ALA:O	0.53	2.03	17	2
1:A:231:GLN:HG2	1:A:246:MET:HE3	0.53	1.79	19	2
1:A:210:LEU:HD11	1:A:232:ILE:HG13	0.53	1.80	29	1
1:A:244:VAL:CG2	1:A:269:TRP:CD1	0.53	2.91	3	9
1:A:210:LEU:HD12	1:A:231:GLN:CA	0.53	2.33	12	8
1:A:199:ASN:O	1:A:206:LEU:HD12	0.53	2.02	24	1
1:A:252:THR:HB	1:A:260:SER:OG	0.53	2.03	21	2
1:A:245:ASP:C	1:A:269:TRP:HB3	0.53	2.28	21	1
1:A:214:SER:C	1:A:216:SER:H	0.53	2.12	10	11
1:A:259:ILE:HD12	1:A:273:VAL:CG2	0.53	2.34	13	1
1:A:229:HIS:CB	1:A:283:LEU:HB2	0.53	2.34	22	9
1:A:243:LEU:CD2	1:A:281:ILE:HD12	0.53	2.34	25	4
1:A:206:LEU:HD21	1:A:234:TRP:CZ3	0.53	2.39	4	2
1:A:280:ILE:HG23	1:A:290:TYR:HD1	0.53	1.64	8	7
1:A:187:ILE:HG22	1:A:288:LYS:HB3	0.53	1.81	13	3
1:A:190:PRO:O	1:A:221:LYS:HG2	0.53	2.04	7	4
1:A:194:LEU:CD2	1:A:219:ALA:HB3	0.53	2.34	21	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:282:THR:HA	1:A:287:THR:O	0.53	2.03	10	3
1:A:196:HIS:ND1	1:A:196:HIS:C	0.53	2.67	12	2
1:A:181:TRP:CZ2	1:A:199:ASN:OD1	0.53	2.62	30	6
1:A:280:ILE:HG22	1:A:290:TYR:HD1	0.52	1.63	20	4
1:A:221:LYS:O	1:A:221:LYS:HG3	0.52	2.04	7	1
1:A:255:ASN:HA	1:A:280:ILE:CD1	0.52	2.34	14	5
1:A:191:ALA:HB3	1:A:220:LEU:CD1	0.52	2.33	11	6
1:A:254:VAL:HG12	1:A:255:ASN:HD22	0.52	1.64	26	1
1:A:245:ASP:O	1:A:269:TRP:O	0.52	2.27	6	7
1:A:235:ASN:O	1:A:239:PHE:N	0.52	2.42	23	7
1:A:212:ARG:CZ	1:A:222:ASP:HB2	0.52	2.35	27	1
1:A:213:VAL:HG22	1:A:214:SER:N	0.52	2.19	28	8
1:A:241:TRP:CZ3	1:A:293:ILE:CG2	0.52	2.93	8	4
1:A:231:GLN:OE1	1:A:269:TRP:CZ2	0.52	2.63	11	1
1:A:275:LEU:HD22	1:A:275:LEU:O	0.52	2.03	18	18
1:A:275:LEU:HD13	1:A:275:LEU:N	0.52	2.16	3	2
1:A:186:VAL:CG1	1:A:220:LEU:HD11	0.52	2.31	28	3
1:A:259:ILE:HG13	1:A:273:VAL:HG21	0.52	1.78	14	2
1:A:210:LEU:CD2	1:A:218:LEU:HD12	0.52	2.35	25	6
1:A:206:LEU:O	1:A:208:VAL:N	0.52	2.43	9	4
1:A:208:VAL:O	1:A:231:GLN:HA	0.52	2.04	11	4
1:A:198:VAL:HG22	1:A:234:TRP:CH2	0.52	2.38	14	1
1:A:184:LEU:HD21	1:A:196:HIS:HB3	0.52	1.81	23	1
1:A:212:ARG:CZ	1:A:225:VAL:HB	0.52	2.35	27	1
1:A:184:LEU:CB	1:A:196:HIS:CE1	0.52	2.92	24	5
1:A:196:HIS:CE1	1:A:289:VAL:HG11	0.52	2.40	15	3
1:A:206:LEU:HD11	1:A:234:TRP:CD2	0.52	2.39	20	5
1:A:213:VAL:HG13	1:A:214:SER:N	0.52	2.20	6	11
1:A:280:ILE:HG23	1:A:290:TYR:CD1	0.52	2.40	11	12
1:A:245:ASP:HB3	1:A:260:SER:HB3	0.52	1.82	29	1
1:A:212:ARG:HG3	1:A:222:ASP:O	0.52	2.05	17	3
1:A:229:HIS:HA	1:A:248:SER:HB3	0.52	1.81	10	1
1:A:214:SER:HB3	1:A:215:PRO:HD3	0.52	1.79	21	2
1:A:252:THR:O	1:A:258:SER:HA	0.52	2.04	29	3
1:A:199:ASN:HD22	1:A:201:THR:HG22	0.52	1.65	18	1
1:A:200:SER:HA	1:A:234:TRP:CE2	0.52	2.40	24	2
1:A:281:ILE:O	1:A:288:LYS:HG2	0.52	2.05	26	6
1:A:210:LEU:HA	1:A:218:LEU:HB2	0.52	1.81	28	7
1:A:212:ARG:NE	1:A:220:LEU:O	0.52	2.43	27	1
1:A:276:ALA:HB3	1:A:279:ASP:OD2	0.51	2.05	4	1
1:A:241:TRP:O	1:A:275:LEU:N	0.51	2.37	30	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:210:LEU:HD23	1:A:218:LEU:CD2	0.51	2.34	11	1
1:A:182:LEU:HD13	1:A:293:ILE:HG12	0.51	1.81	16	3
1:A:209:LYS:HA	1:A:231:GLN:HB3	0.51	1.83	25	10
1:A:186:VAL:N	1:A:289:VAL:HG13	0.51	2.20	12	1
1:A:181:TRP:CH2	1:A:199:ASN:OD1	0.51	2.64	13	1
1:A:244:VAL:HG11	1:A:269:TRP:HE1	0.51	1.64	6	6
1:A:184:LEU:CB	1:A:196:HIS:CD2	0.51	2.93	17	6
1:A:218:LEU:CD1	1:A:220:LEU:HD21	0.51	2.34	15	2
1:A:198:VAL:HG22	1:A:199:ASN:N	0.51	2.21	16	8
1:A:208:VAL:CG1	1:A:209:LYS:N	0.51	2.74	10	9
1:A:276:ALA:HB3	1:A:279:ASP:OD1	0.51	2.06	3	2
1:A:275:LEU:CD2	1:A:291:VAL:HG11	0.51	2.31	9	2
1:A:246:MET:CE	1:A:269:TRP:CZ2	0.51	2.93	30	1
1:A:234:TRP:CE3	1:A:241:TRP:CZ3	0.51	2.99	17	2
1:A:182:LEU:HD23	1:A:198:VAL:CG1	0.51	2.35	15	2
1:A:231:GLN:HG3	1:A:244:VAL:HG12	0.51	1.82	26	3
1:A:243:LEU:HD22	1:A:281:ILE:CD1	0.51	2.35	9	5
1:A:229:HIS:HB3	1:A:283:LEU:HB2	0.51	1.83	5	3
1:A:241:TRP:CZ3	1:A:293:ILE:HD12	0.51	2.41	19	5
1:A:246:MET:HG3	1:A:269:TRP:CH2	0.51	2.40	28	1
1:A:191:ALA:O	1:A:194:LEU:HG	0.51	2.06	27	13
1:A:196:HIS:CE1	1:A:218:LEU:CD1	0.51	2.86	17	2
1:A:280:ILE:HG22	1:A:290:TYR:CD1	0.51	2.41	27	4
1:A:212:ARG:N	1:A:225:VAL:HG12	0.51	2.20	23	1
1:A:243:LEU:CD2	1:A:281:ILE:HG13	0.51	2.36	20	2
1:A:214:SER:HB2	1:A:215:PRO:HD2	0.50	1.83	30	3
1:A:212:ARG:HG3	1:A:222:ASP:N	0.50	2.22	23	2
1:A:194:LEU:HD22	1:A:219:ALA:H	0.50	1.66	11	5
1:A:185:GLU:C	1:A:289:VAL:HG12	0.50	2.32	24	5
1:A:244:VAL:HG21	1:A:269:TRP:HD1	0.50	1.63	9	3
1:A:182:LEU:CD1	1:A:184:LEU:HD13	0.50	2.37	26	6
1:A:280:ILE:HD13	1:A:288:LYS:HZ2	0.50	1.66	11	1
1:A:185:GLU:C	1:A:289:VAL:HG13	0.50	2.32	12	2
1:A:209:LYS:O	1:A:217:ASP:CB	0.50	2.59	17	2
1:A:219:ALA:C	1:A:220:LEU:HD22	0.50	2.31	18	1
1:A:222:ASP:HB3	1:A:224:GLU:CG	0.50	2.37	14	2
1:A:180:SER:HB2	1:A:200:SER:OG	0.50	2.06	8	1
1:A:198:VAL:CG2	1:A:206:LEU:HD23	0.50	2.36	13	1
1:A:224:GLU:HG2	1:A:285:THR:HG22	0.50	1.83	20	1
1:A:243:LEU:HD22	1:A:281:ILE:HD11	0.50	1.83	5	1
1:A:249:LEU:HD21	1:A:250:ASN:OD1	0.50	2.05	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:259:ILE:HG12	1:A:260:SER:N	0.50	2.22	10	5
1:A:230:ALA:HB2	1:A:252:THR:CG2	0.50	2.36	11	1
1:A:212:ARG:CA	1:A:225:VAL:HG12	0.50	2.36	23	1
1:A:198:VAL:HG21	1:A:206:LEU:CA	0.50	2.36	25	4
1:A:180:SER:N	1:A:296:GLN:HB3	0.50	2.22	17	1
1:A:196:HIS:ND1	1:A:196:HIS:N	0.50	2.59	17	3
1:A:213:VAL:O	1:A:214:SER:CB	0.50	2.60	29	2
1:A:229:HIS:CD2	1:A:251:GLY:O	0.50	2.65	23	1
1:A:196:HIS:CE1	1:A:218:LEU:HG	0.50	2.42	29	1
1:A:229:HIS:CD2	1:A:283:LEU:O	0.50	2.64	29	2
1:A:182:LEU:O	1:A:197:ALA:CA	0.50	2.60	24	5
1:A:214:SER:HB3	1:A:215:PRO:CD	0.50	2.36	3	1
1:A:281:ILE:HG22	1:A:289:VAL:CG2	0.50	2.35	19	1
1:A:224:GLU:O	1:A:225:VAL:CG2	0.50	2.56	23	1
1:A:242:GLU:OE1	1:A:272:PRO:HB3	0.50	2.07	24	1
1:A:228:LYS:HB2	1:A:246:MET:SD	0.49	2.47	6	2
1:A:218:LEU:CG	1:A:220:LEU:HD21	0.49	2.37	11	2
1:A:187:ILE:CG2	1:A:288:LYS:HG3	0.49	2.37	14	4
1:A:245:ASP:CG	1:A:260:SER:HA	0.49	2.32	22	1
1:A:206:LEU:HD21	1:A:234:TRP:HE3	0.49	1.67	24	2
1:A:246:MET:CE	1:A:269:TRP:CH2	0.49	2.95	30	1
1:A:198:VAL:CG2	1:A:199:ASN:N	0.49	2.74	18	6
1:A:241:TRP:CH2	1:A:293:ILE:CG2	0.49	2.96	24	3
1:A:246:MET:HE3	1:A:269:TRP:CE3	0.49	2.42	14	1
1:A:231:GLN:HG2	1:A:246:MET:CE	0.49	2.36	28	3
1:A:252:THR:HG22	1:A:253:LEU:N	0.49	2.22	18	2
1:A:181:TRP:O	1:A:293:ILE:HG23	0.49	2.08	19	1
1:A:184:LEU:HD11	1:A:291:VAL:HG13	0.49	1.84	15	3
1:A:275:LEU:HD22	1:A:275:LEU:C	0.49	2.33	22	11
1:A:229:HIS:NE2	1:A:250:ASN:HB3	0.49	2.22	11	1
1:A:288:LYS:O	1:A:289:VAL:HG22	0.49	2.08	19	1
1:A:242:GLU:OE1	1:A:242:GLU:O	0.49	2.30	24	1
1:A:190:PRO:HB2	1:A:221:LYS:CG	0.49	2.36	29	1
1:A:279:ASP:O	1:A:291:VAL:HB	0.49	2.08	30	1
1:A:282:THR:OG1	1:A:288:LYS:HG2	0.49	2.07	30	1
1:A:243:LEU:C	1:A:243:LEU:CD1	0.49	2.86	1	20
1:A:246:MET:CE	1:A:246:MET:HA	0.49	2.38	5	1
1:A:288:LYS:C	1:A:289:VAL:CG2	0.49	2.86	19	1
1:A:190:PRO:HB2	1:A:221:LYS:HD2	0.49	1.84	19	2
1:A:278:ASP:N	1:A:291:VAL:O	0.49	2.44	15	3
1:A:186:VAL:HG21	1:A:194:LEU:CD1	0.49	2.38	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:202:SER:CB	1:A:205:LYS:HG2	0.49	2.37	26	2
1:A:243:LEU:HG	1:A:281:ILE:HG21	0.49	1.83	7	2
1:A:254:VAL:N	1:A:259:ILE:HD12	0.49	2.23	28	5
1:A:225:VAL:CG1	1:A:229:HIS:HB2	0.49	2.37	20	1
1:A:212:ARG:NH1	1:A:225:VAL:HG23	0.49	2.22	27	1
1:A:229:HIS:CE1	1:A:249:LEU:CD1	0.49	2.95	1	1
1:A:199:ASN:OD1	1:A:201:THR:HG23	0.49	2.08	28	1
1:A:229:HIS:CD2	1:A:283:LEU:CB	0.48	2.96	17	6
1:A:275:LEU:C	1:A:275:LEU:HD22	0.48	2.33	2	9
1:A:224:GLU:HG3	1:A:285:THR:HG22	0.48	1.85	6	2
1:A:224:GLU:OE1	1:A:285:THR:HG22	0.48	2.07	7	2
1:A:232:ILE:HD13	1:A:275:LEU:HD13	0.48	1.83	23	1
1:A:229:HIS:CE1	1:A:250:ASN:HB2	0.48	2.43	25	3
1:A:259:ILE:HG13	1:A:260:SER:N	0.48	2.23	13	1
1:A:214:SER:HB3	1:A:228:LYS:HE2	0.48	1.85	6	3
1:A:224:GLU:HG2	1:A:284:GLY:HA2	0.48	1.85	13	1
1:A:246:MET:HA	1:A:246:MET:CE	0.48	2.38	27	1
1:A:246:MET:HE3	1:A:246:MET:CA	0.48	2.36	27	1
1:A:269:TRP:HD1	1:A:270:GLY:O	0.48	1.92	10	1
1:A:192:ILE:O	1:A:192:ILE:HG22	0.48	2.07	17	2
1:A:268:LYS:HD3	1:A:269:TRP:CD1	0.48	2.44	21	1
1:A:282:THR:OG1	1:A:288:LYS:HB3	0.48	2.08	2	2
1:A:196:HIS:N	1:A:196:HIS:ND1	0.48	2.61	3	2
1:A:198:VAL:CG2	1:A:206:LEU:HG	0.48	2.38	20	2
1:A:212:ARG:CB	1:A:225:VAL:HG13	0.48	2.38	4	1
1:A:184:LEU:HB3	1:A:196:HIS:NE2	0.48	2.24	3	5
1:A:280:ILE:CG2	1:A:290:TYR:CD1	0.48	2.97	9	7
1:A:241:TRP:CZ3	1:A:293:ILE:CD1	0.48	2.97	9	1
1:A:198:VAL:CG2	1:A:206:LEU:HA	0.48	2.37	13	2
1:A:228:LYS:CB	1:A:246:MET:HG2	0.48	2.39	4	1
1:A:212:ARG:CB	1:A:225:VAL:HB	0.48	2.38	11	1
1:A:228:LYS:O	1:A:246:MET:HG3	0.48	2.08	18	2
1:A:196:HIS:CE1	1:A:218:LEU:HD22	0.48	2.42	18	1
1:A:224:GLU:CD	1:A:225:VAL:HG22	0.48	2.33	20	1
1:A:252:THR:CG2	1:A:281:ILE:CD1	0.48	2.92	20	1
1:A:229:HIS:HE2	1:A:250:ASN:ND2	0.48	2.06	29	1
1:A:245:ASP:HB2	1:A:260:SER:CB	0.48	2.39	10	2
1:A:190:PRO:HG3	1:A:222:ASP:CA	0.48	2.39	20	1
1:A:209:LYS:O	1:A:218:LEU:N	0.48	2.47	28	1
1:A:279:ASP:O	1:A:291:VAL:CB	0.48	2.62	30	1
1:A:238:LYS:C	1:A:239:PHE:CG	0.48	2.92	11	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:244:VAL:HG11	1:A:269:TRP:CE2	0.48	2.44	4	2
1:A:254:VAL:CG2	1:A:281:ILE:HD11	0.48	2.34	11	1
1:A:259:ILE:HD13	1:A:273:VAL:HG21	0.48	1.85	18	2
1:A:245:ASP:OD2	1:A:260:SER:O	0.48	2.32	29	1
1:A:259:ILE:CB	1:A:273:VAL:HG11	0.48	2.38	24	1
1:A:269:TRP:CD1	1:A:269:TRP:O	0.48	2.67	30	1
1:A:225:VAL:O	1:A:225:VAL:HG22	0.47	2.09	21	1
1:A:238:LYS:O	1:A:239:PHE:C	0.47	2.55	14	22
1:A:210:LEU:HD12	1:A:230:ALA:C	0.47	2.34	3	2
1:A:211:GLY:HA3	1:A:228:LYS:HA	0.47	1.86	25	1
1:A:225:VAL:HB	1:A:229:HIS:ND1	0.47	2.24	29	1
1:A:283:LEU:N	1:A:283:LEU:CD1	0.47	2.78	24	7
1:A:245:ASP:OD2	1:A:260:SER:HB3	0.47	2.09	20	2
1:A:251:GLY:O	1:A:253:LEU:HD23	0.47	2.09	6	1
1:A:282:THR:HG23	1:A:287:THR:O	0.47	2.09	12	1
1:A:212:ARG:NH1	1:A:225:VAL:CG2	0.47	2.78	27	1
1:A:246:MET:O	1:A:246:MET:CG	0.47	2.61	1	1
1:A:182:LEU:HD12	1:A:183:PHE:H	0.47	1.67	12	4
1:A:182:LEU:O	1:A:197:ALA:CB	0.47	2.63	1	2
1:A:281:ILE:HD13	1:A:282:THR:H	0.47	1.68	2	1
1:A:225:VAL:HG13	1:A:225:VAL:O	0.47	2.08	12	4
1:A:259:ILE:HD12	1:A:260:SER:H	0.47	1.68	3	1
1:A:244:VAL:CG1	1:A:269:TRP:CZ2	0.47	2.96	10	3
1:A:252:THR:HG22	1:A:259:ILE:HD11	0.47	1.85	10	1
1:A:189:GLY:HA3	1:A:287:THR:HG23	0.47	1.87	15	1
1:A:245:ASP:N	1:A:269:TRP:HB3	0.47	2.23	21	1
1:A:280:ILE:HB	1:A:288:LYS:HD3	0.47	1.86	26	1
1:A:182:LEU:HB2	1:A:241:TRP:HZ3	0.47	1.68	8	2
1:A:184:LEU:HD21	1:A:232:ILE:CD1	0.47	2.39	11	1
1:A:206:LEU:CD1	1:A:234:TRP:CE3	0.47	2.97	15	2
1:A:190:PRO:HD3	1:A:222:ASP:OD2	0.47	2.10	27	1
1:A:229:HIS:NE2	1:A:250:ASN:ND2	0.47	2.63	29	1
1:A:181:TRP:CZ3	1:A:198:VAL:N	0.47	2.83	13	14
1:A:234:TRP:CD2	1:A:241:TRP:CE3	0.47	3.03	1	3
1:A:241:TRP:O	1:A:274:GLU:HG2	0.47	2.09	1	1
1:A:254:VAL:O	1:A:255:ASN:CG	0.47	2.58	16	10
1:A:246:MET:HE2	1:A:269:TRP:CD2	0.47	2.45	29	2
1:A:229:HIS:CG	1:A:248:SER:CB	0.47	2.98	25	1
1:A:278:ASP:HA	1:A:290:TYR:CZ	0.47	2.45	2	5
1:A:209:LYS:N	1:A:217:ASP:HB2	0.47	2.25	11	1
1:A:208:VAL:C	1:A:231:GLN:HG3	0.47	2.34	12	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:202:SER:OG	1:A:206:LEU:N	0.47	2.47	26	1
1:A:212:ARG:NH1	1:A:222:ASP:HB2	0.47	2.25	27	1
1:A:252:THR:HG23	1:A:283:LEU:HB3	0.47	1.86	27	1
1:A:228:LYS:HB3	1:A:246:MET:HG3	0.47	1.85	30	1
1:A:243:LEU:CB	1:A:275:LEU:HD12	0.47	2.40	30	1
1:A:202:SER:O	1:A:206:LEU:HB3	0.47	2.10	6	1
1:A:282:THR:HG23	1:A:288:LYS:HG2	0.47	1.87	29	2
1:A:246:MET:CA	1:A:269:TRP:CZ3	0.47	2.98	27	1
1:A:184:LEU:N	1:A:196:HIS:O	0.46	2.47	15	5
1:A:277:SER:O	1:A:278:ASP:CB	0.46	2.63	14	12
1:A:281:ILE:O	1:A:289:VAL:N	0.46	2.48	23	3
1:A:231:GLN:O	1:A:243:LEU:CD1	0.46	2.62	30	3
1:A:281:ILE:CD1	1:A:289:VAL:CG1	0.46	2.94	14	2
1:A:242:GLU:HB2	1:A:272:PRO:HB2	0.46	1.86	16	1
1:A:245:ASP:CG	1:A:260:SER:HB2	0.46	2.35	2	3
1:A:230:ALA:HB2	1:A:252:THR:OG1	0.46	2.10	11	1
1:A:206:LEU:HB2	1:A:234:TRP:CH2	0.46	2.46	25	3
1:A:259:ILE:CD1	1:A:259:ILE:H	0.46	2.22	29	7
1:A:249:LEU:C	1:A:249:LEU:CD2	0.46	2.88	4	2
1:A:259:ILE:C	1:A:259:ILE:CD1	0.46	2.88	5	2
1:A:245:ASP:O	1:A:269:TRP:CD2	0.46	2.68	12	4
1:A:231:GLN:HG2	1:A:232:ILE:N	0.46	2.25	29	2
1:A:196:HIS:HE2	1:A:210:LEU:HD21	0.46	1.69	3	1
1:A:185:GLU:HA	1:A:195:GLN:HG2	0.46	1.87	21	4
1:A:220:LEU:C	1:A:222:ASP:N	0.46	2.73	19	4
1:A:271:ASN:O	1:A:272:PRO:C	0.46	2.58	19	4
1:A:249:LEU:C	1:A:249:LEU:CD1	0.46	2.88	18	1
1:A:240:LYS:HE2	1:A:242:GLU:HG2	0.46	1.88	24	1
1:A:194:LEU:CD1	1:A:220:LEU:HD13	0.46	2.41	12	3
1:A:212:ARG:N	1:A:225:VAL:CG1	0.46	2.79	23	1
1:A:196:HIS:CE1	1:A:208:VAL:HG11	0.46	2.46	1	3
1:A:243:LEU:HD21	1:A:254:VAL:CG2	0.46	2.41	5	2
1:A:225:VAL:HA	1:A:229:HIS:CE1	0.46	2.46	11	1
1:A:271:ASN:O	1:A:273:VAL:HG23	0.46	2.11	19	1
1:A:189:GLY:C	1:A:191:ALA:H	0.46	2.18	30	1
1:A:184:LEU:CD1	1:A:291:VAL:HA	0.46	2.41	1	1
1:A:225:VAL:O	1:A:226:SER:C	0.46	2.59	8	14
1:A:240:LYS:C	1:A:241:TRP:CD1	0.46	2.93	8	6
1:A:198:VAL:CG1	1:A:206:LEU:HD23	0.46	2.40	6	1
1:A:230:ALA:HB1	1:A:244:VAL:O	0.46	2.11	7	2
1:A:190:PRO:HD3	1:A:287:THR:OG1	0.46	2.11	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:190:PRO:HG3	1:A:222:ASP:HB3	0.46	1.88	23	1
1:A:242:GLU:CB	1:A:273:VAL:O	0.46	2.63	30	1
1:A:196:HIS:CB	1:A:208:VAL:HG11	0.46	2.40	4	1
1:A:181:TRP:CE3	1:A:198:VAL:N	0.46	2.84	26	3
1:A:241:TRP:O	1:A:274:GLU:CA	0.46	2.62	14	1
1:A:224:GLU:OE1	1:A:229:HIS:CE1	0.46	2.68	16	1
1:A:185:GLU:HG3	1:A:195:GLN:HG3	0.46	1.88	7	3
1:A:275:LEU:C	1:A:275:LEU:CD2	0.46	2.89	27	4
1:A:245:ASP:HB3	1:A:260:SER:OG	0.46	2.11	9	1
1:A:238:LYS:O	1:A:239:PHE:CG	0.46	2.69	11	7
1:A:243:LEU:O	1:A:273:VAL:N	0.46	2.47	8	4
1:A:249:LEU:CD2	1:A:250:ASN:N	0.46	2.72	20	3
1:A:282:THR:HA	1:A:288:LYS:HA	0.46	1.87	15	4
1:A:259:ILE:HG13	1:A:273:VAL:CG1	0.46	2.40	20	1
1:A:246:MET:SD	1:A:269:TRP:CZ2	0.46	3.09	27	1
1:A:181:TRP:CE2	1:A:199:ASN:OD1	0.45	2.69	23	4
1:A:196:HIS:NE2	1:A:217:ASP:HB3	0.45	2.25	8	2
1:A:238:LYS:O	1:A:238:LYS:HG3	0.45	2.11	11	2
1:A:196:HIS:NE2	1:A:218:LEU:HD11	0.45	2.23	17	1
1:A:190:PRO:HD2	1:A:222:ASP:OD1	0.45	2.11	23	1
1:A:229:HIS:CE1	1:A:249:LEU:HD13	0.45	2.46	3	1
1:A:181:TRP:CZ3	1:A:198:VAL:CA	0.45	3.00	13	5
1:A:229:HIS:CG	1:A:283:LEU:HB3	0.45	2.46	10	1
1:A:200:SER:HA	1:A:234:TRP:NE1	0.45	2.27	30	3
1:A:229:HIS:HA	1:A:248:SER:HB2	0.45	1.87	16	1
1:A:218:LEU:HG	1:A:220:LEU:HD21	0.45	1.88	18	1
1:A:249:LEU:HD13	1:A:249:LEU:C	0.45	2.36	28	1
1:A:234:TRP:HB2	1:A:241:TRP:HA	0.45	1.89	4	4
1:A:253:LEU:HB3	1:A:258:SER:HA	0.45	1.88	7	1
1:A:202:SER:OG	1:A:205:LYS:HG3	0.45	2.11	30	4
1:A:187:ILE:HG22	1:A:288:LYS:CB	0.45	2.41	19	1
1:A:229:HIS:CD2	1:A:283:LEU:C	0.45	2.94	20	1
1:A:260:SER:O	1:A:270:GLY:HA2	0.45	2.12	30	1
1:A:206:LEU:CD2	1:A:234:TRP:CE3	0.45	2.99	8	2
1:A:253:LEU:HA	1:A:258:SER:HA	0.45	1.89	4	6
1:A:200:SER:HB2	1:A:234:TRP:NE1	0.45	2.27	13	1
1:A:224:GLU:CG	1:A:250:ASN:HB2	0.45	2.41	21	1
1:A:281:ILE:O	1:A:288:LYS:CA	0.45	2.65	22	1
1:A:247:GLY:O	1:A:249:LEU:N	0.45	2.49	25	1
1:A:282:THR:CG2	1:A:288:LYS:HG2	0.45	2.41	25	3
1:A:190:PRO:CG	1:A:222:ASP:OD1	0.45	2.64	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:208:VAL:O	1:A:231:GLN:CG	0.45	2.65	13	1
1:A:245:ASP:CB	1:A:260:SER:HB3	0.45	2.42	29	2
1:A:209:LYS:O	1:A:216:SER:HB3	0.45	2.11	12	2
1:A:181:TRP:CE3	1:A:183:PHE:CE2	0.45	3.05	17	1
1:A:191:ALA:CB	1:A:219:ALA:O	0.45	2.64	28	3
1:A:249:LEU:C	1:A:251:GLY:H	0.45	2.19	25	1
1:A:229:HIS:O	1:A:246:MET:HG2	0.45	2.10	30	1
1:A:205:LYS:O	1:A:205:LYS:HG3	0.45	2.11	3	2
1:A:186:VAL:CA	1:A:289:VAL:HG23	0.45	2.42	8	1
1:A:245:ASP:O	1:A:269:TRP:CG	0.45	2.69	30	2
1:A:232:ILE:HG12	1:A:243:LEU:CD1	0.45	2.42	11	2
1:A:245:ASP:O	1:A:269:TRP:CA	0.45	2.64	21	1
1:A:186:VAL:CA	1:A:289:VAL:HG13	0.45	2.41	24	1
1:A:259:ILE:H	1:A:259:ILE:HD12	0.45	1.71	24	1
1:A:209:LYS:HG3	1:A:216:SER:HA	0.45	1.88	25	1
1:A:259:ILE:CD1	1:A:260:SER:N	0.45	2.79	3	4
1:A:235:ASN:N	1:A:240:LYS:O	0.45	2.43	7	2
1:A:244:VAL:CG2	1:A:269:TRP:NE1	0.45	2.80	12	1
1:A:184:LEU:HD13	1:A:196:HIS:NE2	0.45	2.26	24	1
1:A:234:TRP:C	1:A:234:TRP:CD1	0.45	2.95	30	1
1:A:241:TRP:CZ3	1:A:293:ILE:HD13	0.45	2.47	2	2
1:A:200:SER:OG	1:A:241:TRP:CH2	0.45	2.71	14	1
1:A:200:SER:OG	1:A:234:TRP:NE1	0.45	2.50	15	2
1:A:231:GLN:O	1:A:243:LEU:CB	0.44	2.65	28	10
1:A:196:HIS:CD2	1:A:218:LEU:HD11	0.44	2.47	6	1
1:A:181:TRP:HZ3	1:A:197:ALA:C	0.44	2.20	7	2
1:A:243:LEU:HD23	1:A:275:LEU:HD11	0.44	1.88	9	1
1:A:182:LEU:CD1	1:A:184:LEU:CD1	0.44	2.94	29	3
1:A:246:MET:CG	1:A:246:MET:O	0.44	2.65	10	1
1:A:229:HIS:HD2	1:A:283:LEU:HB2	0.44	1.72	11	1
1:A:184:LEU:HD12	1:A:289:VAL:CG1	0.44	2.40	17	1
1:A:255:ASN:HA	1:A:280:ILE:HD11	0.44	1.89	17	1
1:A:209:LYS:HD2	1:A:216:SER:HA	0.44	1.87	30	1
1:A:209:LYS:O	1:A:217:ASP:N	0.44	2.50	28	4
1:A:241:TRP:HB2	1:A:275:LEU:CD2	0.44	2.42	1	3
1:A:210:LEU:HD13	1:A:210:LEU:H	0.44	1.72	28	1
1:A:181:TRP:CZ3	1:A:198:VAL:HA	0.44	2.48	26	2
1:A:280:ILE:HD13	1:A:288:LYS:NZ	0.44	2.27	11	1
1:A:259:ILE:CG1	1:A:260:SER:N	0.44	2.81	13	1
1:A:246:MET:C	1:A:248:SER:H	0.44	2.20	18	2
1:A:268:LYS:HE3	1:A:269:TRP:HB2	0.44	1.88	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:238:LYS:HG2	1:A:240:LYS:HG2	0.44	1.89	24	1
1:A:212:ARG:HB2	1:A:225:VAL:CG1	0.44	2.27	16	1
1:A:277:SER:HA	1:A:292:ARG:HA	0.44	1.88	25	1
1:A:245:ASP:OD1	1:A:245:ASP:N	0.44	2.51	29	1
1:A:184:LEU:HG	1:A:196:HIS:CD2	0.44	2.47	18	2
1:A:252:THR:HB	1:A:259:ILE:HD11	0.44	1.88	4	1
1:A:251:GLY:CA	1:A:260:SER:OG	0.44	2.65	22	1
1:A:259:ILE:HD12	1:A:259:ILE:C	0.44	2.38	11	1
1:A:273:VAL:HG12	1:A:274:GLU:N	0.44	2.28	30	1
1:A:259:ILE:O	1:A:260:SER:C	0.44	2.60	13	2
1:A:234:TRP:CZ3	1:A:241:TRP:CZ3	0.44	3.05	10	1
1:A:196:HIS:CG	1:A:208:VAL:HG21	0.44	2.47	12	1
1:A:253:LEU:N	1:A:253:LEU:CD2	0.44	2.81	26	4
1:A:182:LEU:O	1:A:197:ALA:HB1	0.44	2.12	1	1
1:A:180:SER:O	1:A:199:ASN:OD1	0.44	2.35	11	1
1:A:209:LYS:HB2	1:A:217:ASP:N	0.44	2.28	22	1
1:A:205:LYS:O	1:A:205:LYS:CG	0.44	2.66	23	2
1:A:238:LYS:CG	1:A:240:LYS:HG2	0.44	2.43	24	1
1:A:211:GLY:HA3	1:A:216:SER:OG	0.44	2.13	27	1
1:A:238:LYS:HD2	1:A:240:LYS:HE2	0.43	1.89	8	1
1:A:230:ALA:C	1:A:231:GLN:HG3	0.43	2.38	11	1
1:A:245:ASP:OD2	1:A:260:SER:HA	0.43	2.13	13	1
1:A:247:GLY:HA2	1:A:268:LYS:C	0.43	2.38	18	1
1:A:199:ASN:O	1:A:202:SER:HB2	0.43	2.13	30	2
1:A:240:LYS:CD	1:A:242:GLU:HG3	0.43	2.43	24	1
1:A:212:ARG:HD3	1:A:222:ASP:O	0.43	2.12	27	1
1:A:210:LEU:HD13	1:A:231:GLN:HA	0.43	1.89	28	1
1:A:234:TRP:CZ2	1:A:241:TRP:CZ3	0.43	3.06	1	1
1:A:184:LEU:CB	1:A:196:HIS:NE2	0.43	2.80	18	3
1:A:198:VAL:HG11	1:A:206:LEU:HG	0.43	1.90	3	3
1:A:280:ILE:HD13	1:A:288:LYS:HD3	0.43	1.89	9	1
1:A:245:ASP:HB3	1:A:269:TRP:O	0.43	2.13	10	1
1:A:275:LEU:H	1:A:275:LEU:CD1	0.43	2.22	17	2
1:A:186:VAL:HA	1:A:289:VAL:CG1	0.43	2.44	18	1
1:A:206:LEU:C	1:A:206:LEU:HD13	0.43	2.37	27	1
1:A:234:TRP:CZ3	1:A:241:TRP:CH2	0.43	3.06	10	1
1:A:229:HIS:HB3	1:A:283:LEU:HD22	0.43	1.90	16	1
1:A:249:LEU:HD22	1:A:249:LEU:O	0.43	2.12	18	1
1:A:208:VAL:O	1:A:210:LEU:HD12	0.43	2.13	25	1
1:A:246:MET:HE3	1:A:247:GLY:N	0.43	2.28	27	1
1:A:232:ILE:HG12	1:A:243:LEU:HB3	0.43	1.90	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:222:ASP:HB3	1:A:224:GLU:HG3	0.43	1.90	20	1
1:A:194:LEU:HD13	1:A:219:ALA:O	0.43	2.13	26	1
1:A:245:ASP:C	1:A:246:MET:HE3	0.43	2.39	30	1
1:A:191:ALA:O	1:A:192:ILE:C	0.43	2.60	17	5
1:A:259:ILE:CG1	1:A:273:VAL:HG11	0.43	2.39	20	1
1:A:184:LEU:CD2	1:A:196:HIS:CG	0.43	2.97	26	1
1:A:229:HIS:CG	1:A:283:LEU:O	0.43	2.72	20	2
1:A:229:HIS:CE1	1:A:250:ASN:CB	0.43	3.02	11	1
1:A:232:ILE:HG12	1:A:243:LEU:CD2	0.43	2.44	12	1
1:A:218:LEU:CB	1:A:220:LEU:HD21	0.43	2.44	25	1
1:A:229:HIS:CG	1:A:248:SER:HB3	0.43	2.49	25	1
1:A:229:HIS:ND1	1:A:248:SER:HB3	0.43	2.28	25	1
1:A:235:ASN:HB2	1:A:240:LYS:HD2	0.43	1.91	27	1
1:A:180:SER:O	1:A:199:ASN:ND2	0.43	2.51	2	1
1:A:235:ASN:CB	1:A:240:LYS:CD	0.43	2.96	3	1
1:A:231:GLN:CG	1:A:246:MET:HG3	0.43	2.43	7	1
1:A:244:VAL:HG21	1:A:269:TRP:HE1	0.43	1.74	14	3
1:A:190:PRO:HG3	1:A:222:ASP:HB2	0.43	1.90	14	2
1:A:212:ARG:CZ	1:A:225:VAL:CG2	0.43	2.97	27	1
1:A:212:ARG:NH1	1:A:222:ASP:CB	0.43	2.81	27	1
1:A:206:LEU:CD2	1:A:234:TRP:CZ3	0.43	3.02	30	1
1:A:269:TRP:CD1	1:A:270:GLY:O	0.43	2.71	10	1
1:A:212:ARG:HB2	1:A:225:VAL:CB	0.43	2.44	20	2
1:A:206:LEU:O	1:A:206:LEU:CD2	0.43	2.57	12	1
1:A:180:SER:OG	1:A:200:SER:HB3	0.43	2.13	15	1
1:A:283:LEU:N	1:A:283:LEU:HD22	0.43	2.27	15	1
1:A:232:ILE:CD1	1:A:243:LEU:HD11	0.43	2.44	16	1
1:A:281:ILE:CD1	1:A:289:VAL:HG23	0.43	2.40	6	1
1:A:280:ILE:CG2	1:A:290:TYR:HD1	0.43	2.27	11	4
1:A:191:ALA:HB2	1:A:219:ALA:O	0.43	2.14	17	1
1:A:233:THR:O	1:A:242:GLU:OE2	0.43	2.37	24	1
1:A:212:ARG:HG3	1:A:220:LEU:O	0.43	2.14	27	1
1:A:281:ILE:HD12	1:A:289:VAL:HG21	0.43	1.88	6	1
1:A:229:HIS:CB	1:A:283:LEU:HB3	0.43	2.44	10	1
1:A:281:ILE:O	1:A:283:LEU:HD13	0.43	2.13	15	1
1:A:255:ASN:O	1:A:255:ASN:OD1	0.43	2.37	19	1
1:A:254:VAL:N	1:A:257:HIS:O	0.42	2.48	9	1
1:A:279:ASP:OD2	1:A:291:VAL:HB	0.42	2.14	27	2
1:A:210:LEU:HD22	1:A:289:VAL:HG21	0.42	1.91	10	1
1:A:254:VAL:HG12	1:A:279:ASP:OD1	0.42	2.13	13	1
1:A:193:GLY:O	1:A:194:LEU:C	0.42	2.61	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:245:ASP:H	1:A:269:TRP:CB	0.42	2.27	21	1
1:A:245:ASP:OD1	1:A:252:THR:CB	0.42	2.67	26	1
1:A:246:MET:HE2	1:A:269:TRP:CZ2	0.42	2.48	30	1
1:A:190:PRO:HG3	1:A:222:ASP:CG	0.42	2.39	2	1
1:A:213:VAL:HG22	1:A:213:VAL:O	0.42	2.14	4	3
1:A:206:LEU:N	1:A:207:PRO:HD3	0.42	2.28	12	1
1:A:283:LEU:N	1:A:287:THR:O	0.42	2.48	13	1
1:A:246:MET:CE	1:A:269:TRP:HZ3	0.42	2.26	15	1
1:A:281:ILE:O	1:A:283:LEU:CD1	0.42	2.67	15	2
1:A:190:PRO:CG	1:A:222:ASP:HB2	0.42	2.44	26	1
1:A:278:ASP:O	1:A:290:TYR:CE1	0.42	2.71	15	2
1:A:281:ILE:O	1:A:288:LYS:CG	0.42	2.68	4	1
1:A:180:SER:OG	1:A:295:SER:HA	0.42	2.15	10	1
1:A:200:SER:CB	1:A:234:TRP:HZ2	0.42	2.27	10	1
1:A:196:HIS:CE1	1:A:208:VAL:CG2	0.42	2.98	12	1
1:A:182:LEU:C	1:A:182:LEU:CD1	0.42	2.92	28	2
1:A:210:LEU:N	1:A:210:LEU:CD1	0.42	2.81	17	1
1:A:185:GLU:HB2	1:A:195:GLN:HG2	0.42	1.91	28	1
1:A:224:GLU:OE1	1:A:225:VAL:N	0.42	2.52	10	2
1:A:199:ASN:OD1	1:A:201:THR:HG22	0.42	2.14	3	1
1:A:253:LEU:CG	1:A:282:THR:HB	0.42	2.44	15	2
1:A:254:VAL:CG2	1:A:259:ILE:HG12	0.42	2.44	22	2
1:A:196:HIS:CE1	1:A:289:VAL:HG21	0.42	2.49	17	1
1:A:248:SER:HB3	1:A:260:SER:OG	0.42	2.13	24	1
1:A:254:VAL:CG2	1:A:259:ILE:CG1	0.42	2.98	1	2
1:A:240:LYS:C	1:A:241:TRP:HD1	0.42	2.23	10	1
1:A:181:TRP:CE3	1:A:198:VAL:C	0.42	2.97	14	1
1:A:259:ILE:C	1:A:259:ILE:HD12	0.42	2.40	22	1
1:A:182:LEU:HA	1:A:293:ILE:HG23	0.42	1.90	23	1
1:A:206:LEU:HD23	1:A:207:PRO:N	0.42	2.30	24	1
1:A:181:TRP:NE1	1:A:199:ASN:OD1	0.42	2.53	2	1
1:A:181:TRP:HZ3	1:A:198:VAL:N	0.42	2.11	13	3
1:A:190:PRO:HG3	1:A:222:ASP:HA	0.42	1.91	10	1
1:A:218:LEU:CG	1:A:220:LEU:CD2	0.42	2.97	11	1
1:A:182:LEU:N	1:A:198:VAL:O	0.42	2.52	20	2
1:A:209:LYS:CB	1:A:216:SER:HA	0.42	2.44	30	1
1:A:213:VAL:C	1:A:214:SER:OG	0.42	2.63	1	2
1:A:183:PHE:O	1:A:292:ARG:HG3	0.42	2.14	22	1
1:A:242:GLU:CA	1:A:273:VAL:O	0.42	2.68	4	2
1:A:214:SER:O	1:A:216:SER:N	0.42	2.51	10	2
1:A:220:LEU:HB3	1:A:222:ASP:OD1	0.42	2.14	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:183:PHE:N	1:A:183:PHE:CD1	0.42	2.88	13	1
1:A:213:VAL:O	1:A:214:SER:HB2	0.42	2.14	29	1
1:A:187:ILE:CG2	1:A:288:LYS:HB3	0.42	2.44	13	2
1:A:210:LEU:HD21	1:A:230:ALA:CB	0.42	2.37	28	1
1:A:250:ASN:CG	1:A:284:GLY:HA2	0.42	2.40	28	1
1:A:212:ARG:CB	1:A:225:VAL:O	0.42	2.68	2	7
1:A:180:SER:O	1:A:199:ASN:CG	0.42	2.62	2	2
1:A:196:HIS:CD2	1:A:208:VAL:CG1	0.42	3.02	5	1
1:A:232:ILE:HA	1:A:243:LEU:HD12	0.42	1.91	16	1
1:A:245:ASP:CG	1:A:260:SER:CB	0.42	2.93	18	1
1:A:189:GLY:O	1:A:192:ILE:HG13	0.42	2.15	26	1
1:A:212:ARG:HD3	1:A:222:ASP:N	0.42	2.30	27	1
1:A:257:HIS:O	1:A:259:ILE:N	0.41	2.53	11	3
1:A:283:LEU:HD13	1:A:283:LEU:H	0.41	1.73	9	1
1:A:202:SER:HG	1:A:206:LEU:HB3	0.41	1.75	12	1
1:A:220:LEU:HG	1:A:287:THR:HG21	0.41	1.91	17	1
1:A:214:SER:N	1:A:215:PRO:HD2	0.41	2.30	19	1
1:A:183:PHE:N	1:A:292:ARG:O	0.41	2.53	26	2
1:A:281:ILE:O	1:A:281:ILE:HG23	0.41	2.13	27	1
1:A:241:TRP:CE3	1:A:275:LEU:O	0.41	2.73	28	1
1:A:241:TRP:O	1:A:275:LEU:HD13	0.41	2.14	1	1
1:A:242:GLU:HB3	1:A:272:PRO:C	0.41	2.41	1	2
1:A:286:THR:O	1:A:288:LYS:HD2	0.41	2.15	6	2
1:A:199:ASN:OD1	1:A:199:ASN:N	0.41	2.52	22	1
1:A:187:ILE:CG2	1:A:288:LYS:CG	0.41	2.97	23	2
1:A:190:PRO:HG2	1:A:222:ASP:OD1	0.41	2.15	23	1
1:A:229:HIS:CD2	1:A:248:SER:OG	0.41	2.73	23	1
1:A:184:LEU:CD1	1:A:196:HIS:CD2	0.41	2.90	24	1
1:A:200:SER:CB	1:A:234:TRP:NE1	0.41	2.83	24	1
1:A:234:TRP:CD1	1:A:234:TRP:C	0.41	2.98	26	1
1:A:221:LYS:HG3	1:A:221:LYS:O	0.41	2.14	29	1
1:A:182:LEU:CD2	1:A:234:TRP:HZ3	0.41	2.27	30	1
1:A:209:LYS:HB3	1:A:216:SER:HA	0.41	1.92	1	2
1:A:206:LEU:O	1:A:208:VAL:HG23	0.41	2.15	9	1
1:A:249:LEU:CD1	1:A:249:LEU:H	0.41	2.29	11	1
1:A:248:SER:CB	1:A:260:SER:OG	0.41	2.68	24	1
1:A:203:SER:O	1:A:206:LEU:CD1	0.41	2.69	26	1
1:A:231:GLN:OE1	1:A:269:TRP:CH2	0.41	2.73	7	1
1:A:231:GLN:HG2	1:A:246:MET:HG3	0.41	1.93	7	1
1:A:246:MET:HE2	1:A:246:MET:HB3	0.41	1.80	17	2
1:A:200:SER:OG	1:A:241:TRP:CZ2	0.41	2.73	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:245:ASP:OD2	1:A:252:THR:HB	0.41	2.15	28	2
1:A:209:LYS:HD2	1:A:228:LYS:CD	0.41	2.45	15	1
1:A:259:ILE:HD13	1:A:259:ILE:N	0.41	2.31	27	3
1:A:180:SER:O	1:A:181:TRP:CG	0.41	2.74	26	1
1:A:200:SER:CA	1:A:234:TRP:CZ2	0.41	2.94	26	1
1:A:212:ARG:HE	1:A:212:ARG:CA	0.41	2.28	27	1
1:A:181:TRP:CD1	1:A:199:ASN:OD1	0.41	2.73	1	1
1:A:198:VAL:CG1	1:A:234:TRP:CH2	0.41	2.97	9	1
1:A:194:LEU:HD21	1:A:219:ALA:HB3	0.41	1.92	10	1
1:A:225:VAL:CG1	1:A:229:HIS:CG	0.41	3.00	11	1
1:A:187:ILE:CG2	1:A:288:LYS:CB	0.41	2.98	19	1
1:A:229:HIS:O	1:A:245:ASP:HA	0.41	2.15	21	1
1:A:235:ASN:CB	1:A:240:LYS:HD2	0.41	2.46	28	1
1:A:183:PHE:CD2	1:A:197:ALA:CB	0.41	3.03	13	1
1:A:200:SER:HA	1:A:234:TRP:HE1	0.41	1.74	14	2
1:A:238:LYS:HG3	1:A:238:LYS:O	0.41	2.16	24	1
1:A:185:GLU:C	1:A:289:VAL:HG22	0.41	2.41	28	1
1:A:184:LEU:HB2	1:A:196:HIS:NE2	0.41	2.30	4	1
1:A:196:HIS:CD2	1:A:208:VAL:HG22	0.41	2.51	5	1
1:A:202:SER:OG	1:A:205:LYS:CG	0.41	2.69	9	1
1:A:254:VAL:CG2	1:A:259:ILE:HD12	0.41	2.35	14	1
1:A:220:LEU:N	1:A:220:LEU:HD22	0.41	2.30	22	1
1:A:225:VAL:CG1	1:A:225:VAL:O	0.41	2.68	23	1
1:A:229:HIS:HE2	1:A:250:ASN:CG	0.41	2.24	29	1
1:A:229:HIS:NE2	1:A:283:LEU:O	0.41	2.54	29	1
1:A:212:ARG:HA	1:A:220:LEU:C	0.41	2.40	6	1
1:A:214:SER:C	1:A:216:SER:N	0.41	2.79	27	2
1:A:222:ASP:N	1:A:222:ASP:OD1	0.41	2.53	10	2
1:A:238:LYS:C	1:A:239:PHE:CD1	0.41	2.99	22	3
1:A:239:PHE:O	1:A:239:PHE:CD2	0.41	2.74	13	1
1:A:243:LEU:HD12	1:A:243:LEU:HA	0.41	1.74	16	1
1:A:229:HIS:CD2	1:A:283:LEU:CA	0.41	3.04	20	1
1:A:230:ALA:HA	1:A:244:VAL:O	0.41	2.16	21	1
1:A:208:VAL:N	1:A:232:ILE:O	0.41	2.53	22	2
1:A:240:LYS:HD3	1:A:242:GLU:HG3	0.41	1.92	24	1
1:A:222:ASP:HB3	1:A:224:GLU:HG2	0.41	1.93	25	1
1:A:229:HIS:CD2	1:A:248:SER:HB3	0.41	2.51	25	1
1:A:184:LEU:H	1:A:184:LEU:CD2	0.41	2.22	26	1
1:A:182:LEU:CB	1:A:234:TRP:CZ3	0.41	3.04	27	1
1:A:186:VAL:CG2	1:A:194:LEU:HD12	0.41	2.31	27	1
1:A:244:VAL:CG2	1:A:269:TRP:O	0.41	2.63	27	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:246:MET:HE2	1:A:246:MET:N	0.41	2.30	28	1
1:A:268:LYS:CG	1:A:269:TRP:N	0.41	2.84	30	1
1:A:235:ASN:HB3	1:A:240:LYS:HD2	0.41	1.92	8	1
1:A:220:LEU:C	1:A:222:ASP:OD1	0.41	2.64	23	1
1:A:213:VAL:O	1:A:213:VAL:CG1	0.40	2.69	1	1
1:A:245:ASP:HB3	1:A:248:SER:HB2	0.40	1.93	6	1
1:A:225:VAL:O	1:A:227:GLY:N	0.40	2.53	10	1
1:A:234:TRP:HB2	1:A:241:TRP:CD1	0.40	2.51	10	1
1:A:245:ASP:OD2	1:A:252:THR:CB	0.40	2.69	14	1
1:A:246:MET:CB	1:A:269:TRP:CZ3	0.40	3.04	27	1
1:A:250:ASN:HD22	1:A:251:GLY:N	0.40	2.14	29	1
1:A:233:THR:O	1:A:242:GLU:O	0.40	2.39	14	1
1:A:224:GLU:O	1:A:249:LEU:CD1	0.40	2.64	19	1
1:A:238:LYS:HE3	1:A:239:PHE:CE1	0.40	2.51	21	1
1:A:199:ASN:HB2	1:A:201:THR:HG22	0.40	1.94	25	1
1:A:246:MET:SD	1:A:269:TRP:CZ3	0.40	3.15	25	2
1:A:192:ILE:HD12	1:A:192:ILE:HA	0.40	1.75	11	1
1:A:235:ASN:ND2	1:A:235:ASN:O	0.40	2.54	11	1
1:A:184:LEU:CD2	1:A:196:HIS:HB3	0.40	2.46	13	1
1:A:235:ASN:HB3	1:A:240:LYS:HB2	0.40	1.92	13	1
1:A:208:VAL:HG13	1:A:217:ASP:HB3	0.40	1.92	25	1
1:A:206:LEU:HD13	1:A:206:LEU:C	0.40	2.41	6	1
1:A:238:LYS:O	1:A:238:LYS:HD3	0.40	2.16	20	1
1:A:259:ILE:HD12	1:A:259:ILE:N	0.40	2.31	24	1
1:A:235:ASN:O	1:A:239:PHE:HA	0.40	2.16	25	1
1:A:184:LEU:CD2	1:A:184:LEU:H	0.40	2.30	30	1
1:A:241:TRP:HB2	1:A:275:LEU:HD21	0.40	1.93	4	1
1:A:269:TRP:HA	1:A:269:TRP:CE3	0.40	2.51	5	1
1:A:246:MET:SD	1:A:269:TRP:CH2	0.40	3.15	17	1
1:A:182:LEU:HG	1:A:198:VAL:HG12	0.40	1.92	20	1
1:A:211:GLY:HA2	1:A:225:VAL:HG21	0.40	1.93	25	1
1:A:246:MET:C	1:A:248:SER:N	0.40	2.77	25	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	110/139 (79%)	82±3 (74±3%)	20±3 (18±3%)	8±2 (8±2%)	1	14
All	All	3300/4170 (79%)	2447 (74%)	598 (18%)	255 (8%)	1	14

All 26 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	221	LYS	30
1	A	227	GLY	28
1	A	207	PRO	27
1	A	214	SER	25
1	A	258	SER	25
1	A	192	ILE	24
1	A	215	PRO	11
1	A	216	SER	10
1	A	203	SER	10
1	A	213	VAL	10
1	A	268	LYS	10
1	A	248	SER	9
1	A	212	ARG	8
1	A	206	LEU	6
1	A	252	THR	5
1	A	272	PRO	3
1	A	226	SER	2
1	A	247	GLY	2
1	A	249	LEU	2
1	A	251	GLY	2
1	A	223	SER	1
1	A	186	VAL	1
1	A	194	LEU	1
1	A	225	VAL	1
1	A	279	ASP	1
1	A	270	GLY	1

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	96/119 (81%)	59±3 (61±3%)	37±3 (39±3%)	0	6
All	All	2880/3570 (81%)	1758 (61%)	1122 (39%)	0	6

All 81 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	194	LEU	30
1	A	233	THR	30
1	A	275	LEU	30
1	A	280	ILE	30
1	A	281	ILE	30
1	A	283	LEU	30
1	A	253	LEU	29
1	A	246	MET	28
1	A	249	LEU	28
1	A	240	LYS	26
1	A	259	ILE	26
1	A	241	TRP	24
1	A	292	ARG	24
1	A	196	HIS	23
1	A	182	LEU	22
1	A	231	GLN	22
1	A	205	LYS	21
1	A	291	VAL	21
1	A	180	SER	20
1	A	289	VAL	20
1	A	210	LEU	20
1	A	202	SER	19
1	A	214	SER	19
1	A	229	HIS	18
1	A	257	HIS	18
1	A	274	GLU	18
1	A	286	THR	18
1	A	279	ASP	17
1	A	216	SER	16
1	A	224	GLU	16
1	A	228	LYS	16
1	A	294	SER	16
1	A	218	LEU	16
1	A	226	SER	16
1	A	248	SER	15
1	A	250	ASN	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	184	LEU	15
1	A	256	SER	15
1	A	221	LYS	14
1	A	209	LYS	14
1	A	185	GLU	13
1	A	201	THR	13
1	A	235	ASN	13
1	A	288	LYS	13
1	A	212	ARG	13
1	A	295	SER	13
1	A	204	SER	12
1	A	282	THR	12
1	A	217	ASP	12
1	A	268	LYS	12
1	A	238	LYS	11
1	A	236	SER	10
1	A	206	LEU	10
1	A	278	ASP	10
1	A	244	VAL	9
1	A	242	GLU	7
1	A	222	ASP	7
1	A	269	TRP	7
1	A	271	ASN	7
1	A	243	LEU	7
1	A	245	ASP	6
1	A	293	ILE	6
1	A	296	GLN	5
1	A	199	ASN	5
1	A	260	SER	5
1	A	252	THR	5
1	A	255	ASN	4
1	A	203	SER	4
1	A	225	VAL	4
1	A	277	SER	4
1	A	220	LEU	3
1	A	200	SER	3
1	A	192	ILE	2
1	A	208	VAL	2
1	A	183	PHE	2
1	A	237	THR	1
1	A	198	VAL	1
1	A	232	ILE	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	234	TRP	1
1	A	258	SER	1
1	A	272	PRO	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