



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

May 28, 2020 – 11:11 pm BST

PDB ID : 2LNL  
Title : Structure of human CXCR1 in phospholipid bilayers  
Authors : Park, S.; Das, B.B.; Casagrande, F.; Nothnagel, H.; Chu, M.; Kiefer, H.;  
Maier, K.; De Angelis, A.; Marassi, F.M.; Opella, S.J.  
Deposited on : 2011-12-31

This is a Full wwPDB NMR Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.

We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto: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 following versions of software and data (see [references ⓘ](#)) were used in the production of this report:

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)  
NmrClust : Kelley et al. (1996)  
MolProbity : 4.02b-467  
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)  
RCI : v\_1n\_11\_5\_13\_A (Berjanski et al., 2005)  
PANAV : Wang et al. (2010)  
ShiftChecker : 2.11  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.11

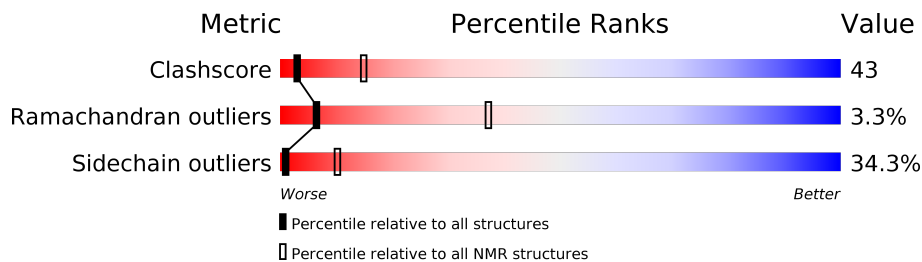
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLID-STATE NMR*

The overall completeness of chemical shifts assignment is 28%.

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	158937	12864
Ramachandran outliers	154571	11451
Sidechain outliers	154315	11428

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  $\geq 3$ , 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	309	

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 10 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:29-A:312 (284)	0.80	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 2 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	3, 5, 6
2	4, 8, 10
3	1, 9
Single-model clusters	2; 7

### 3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 4857 atoms, of which 2485 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called C-X-C chemokine receptor type 1.

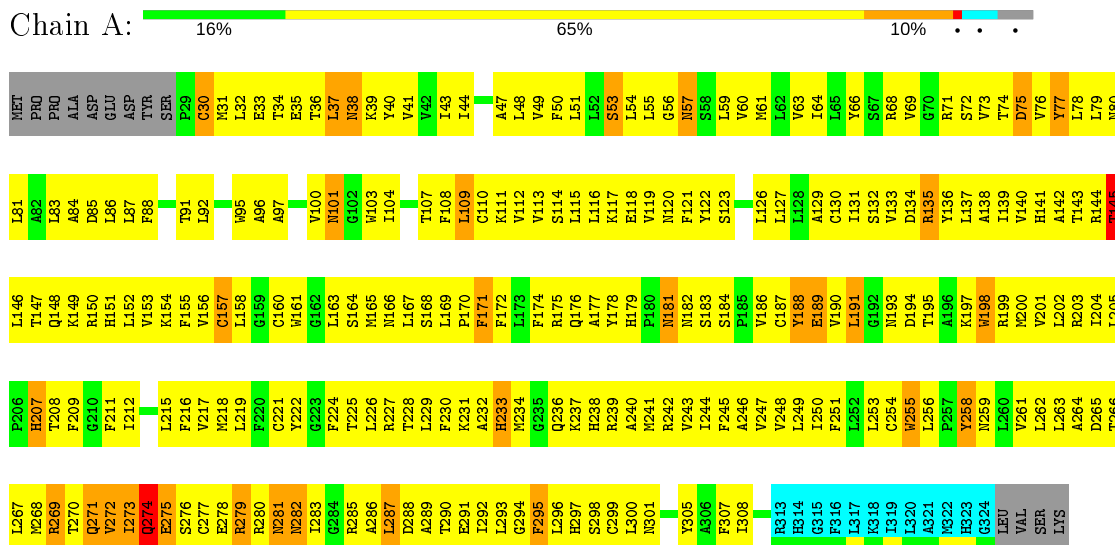
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	296	4857	1574	2485	397	382	19	0

## 4 Residue-property plots [i](#)

### 4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA and DNA 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: C-X-C chemokine receptor type 1

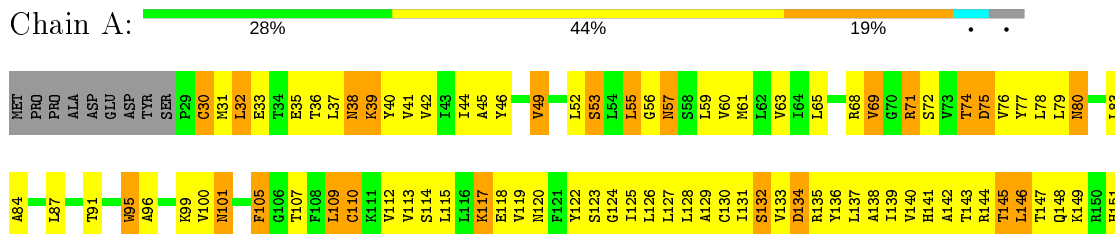


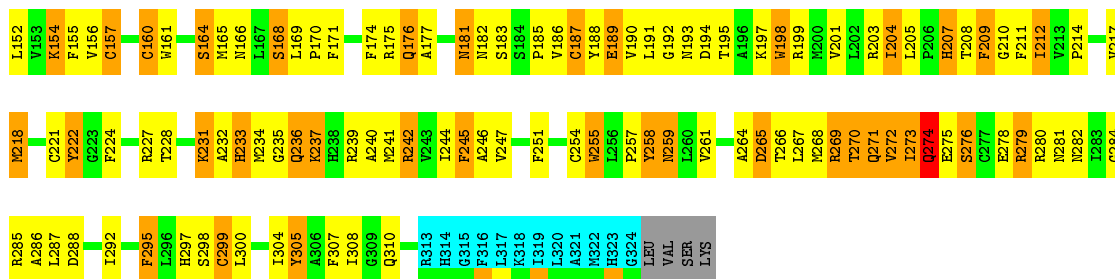
### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

#### 4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

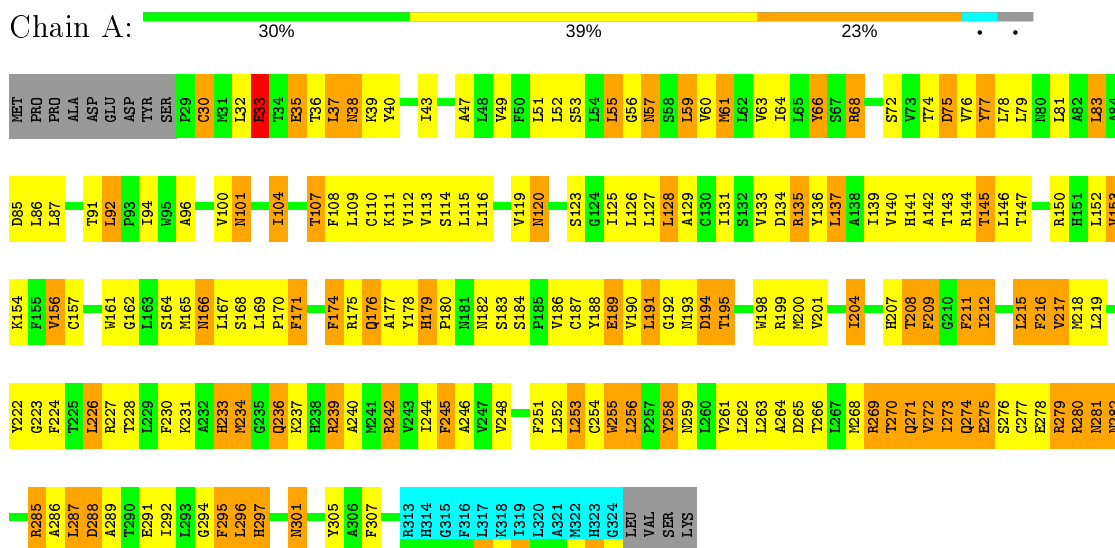
- Molecule 1: C-X-C chemokine receptor type 1





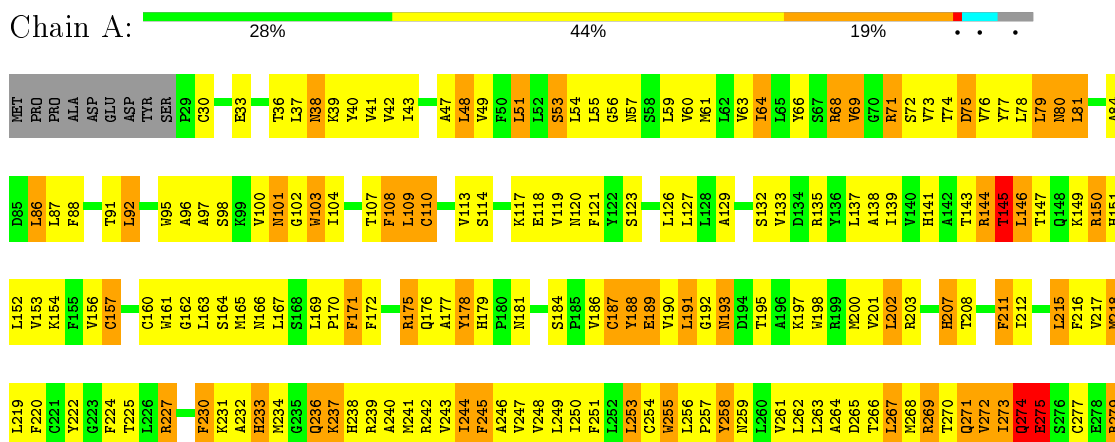
## 4.2.2 Score per residue for model 2

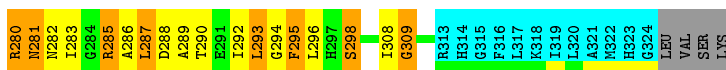
- Molecule 1: C-X-C chemokine receptor type 1



## 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: C-X-C chemokine receptor type 1

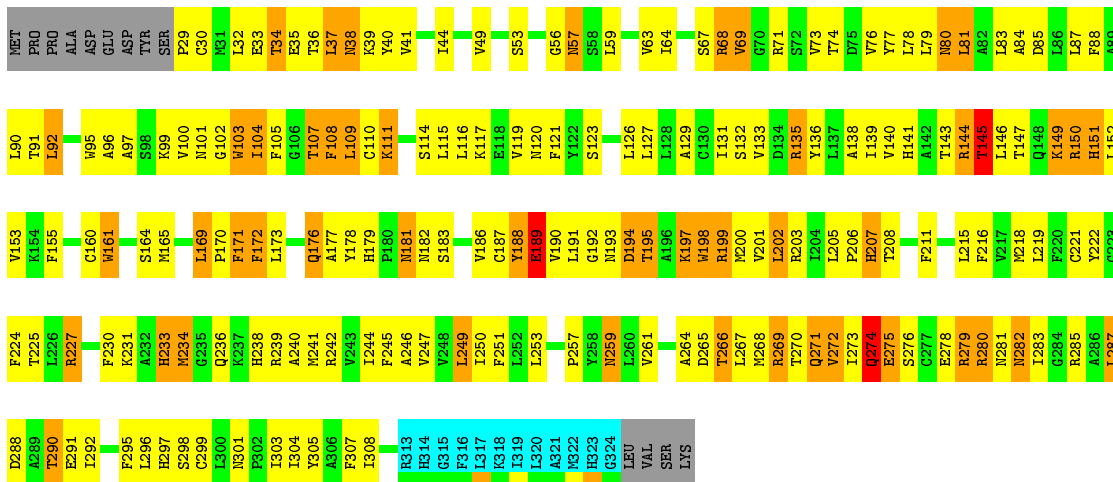




#### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: C-X-C chemokine receptor type 1

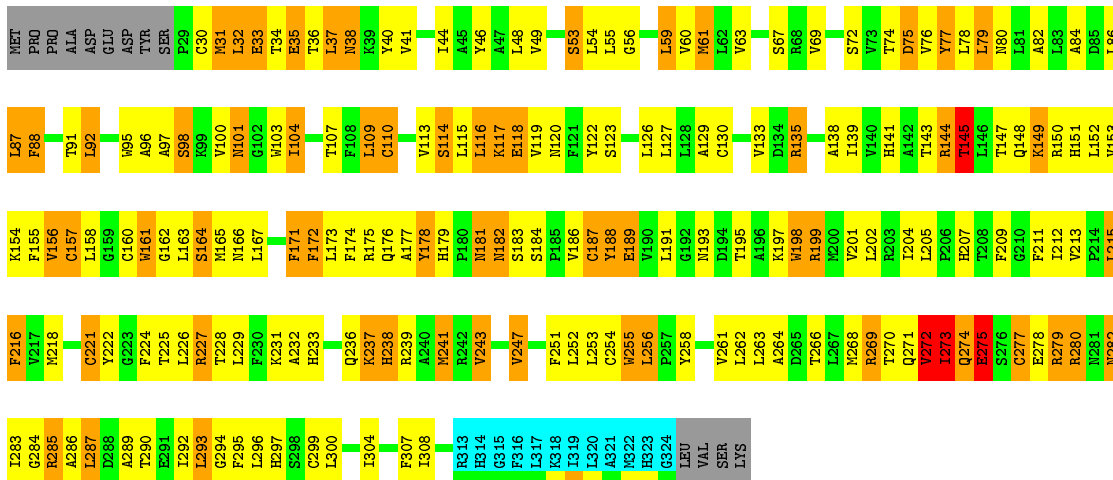
Chain A: 30% 45% 16%



#### 4.2.5 Score per residue for model 5

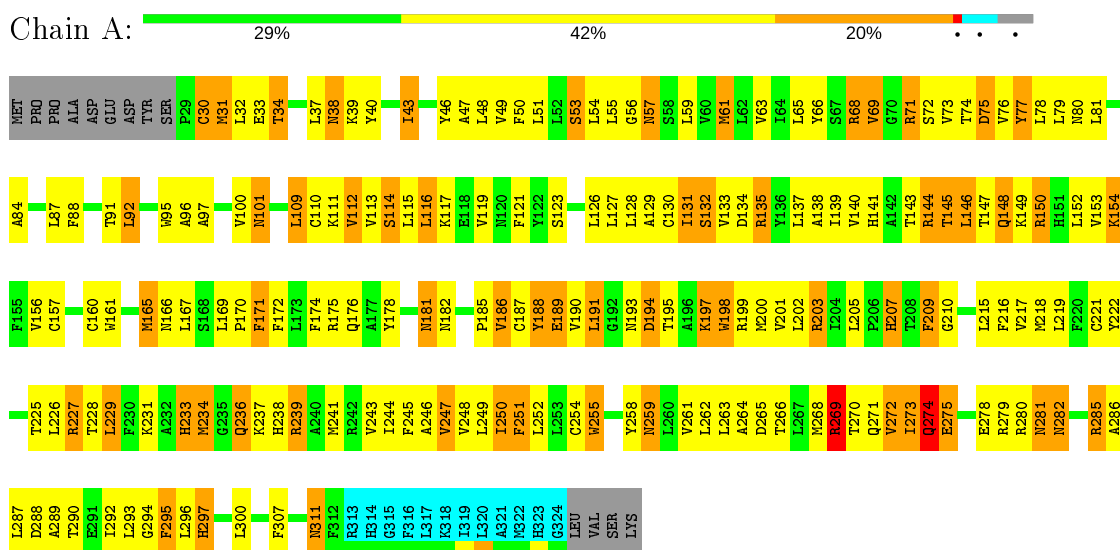
- Molecule 1: C-X-C chemokine receptor type 1

Chain A: 31% 40% 20%



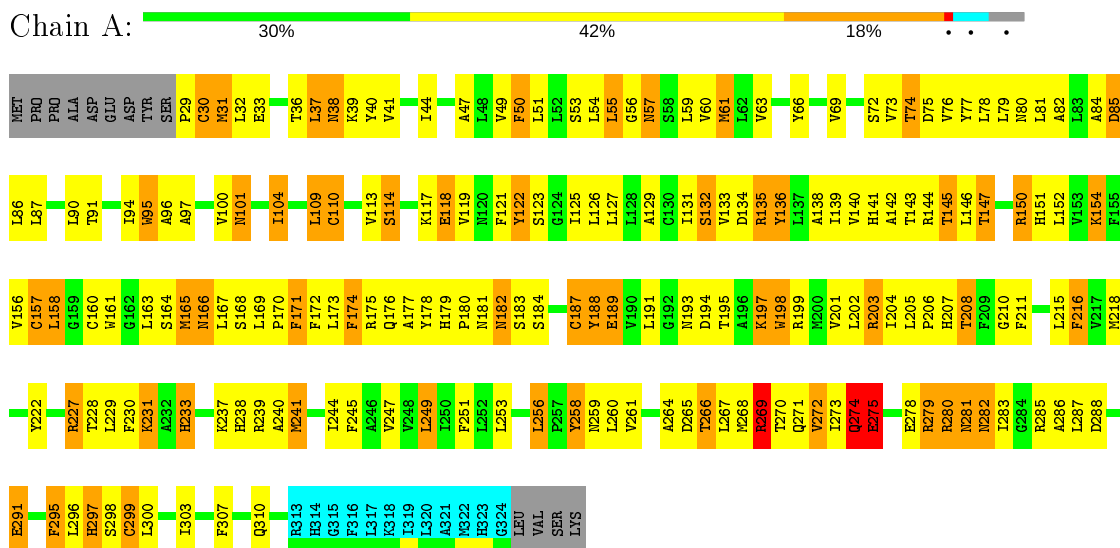
## 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: C-X-C chemokine receptor type 1



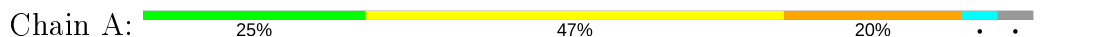
## 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: C-X-C chemokine receptor type 1

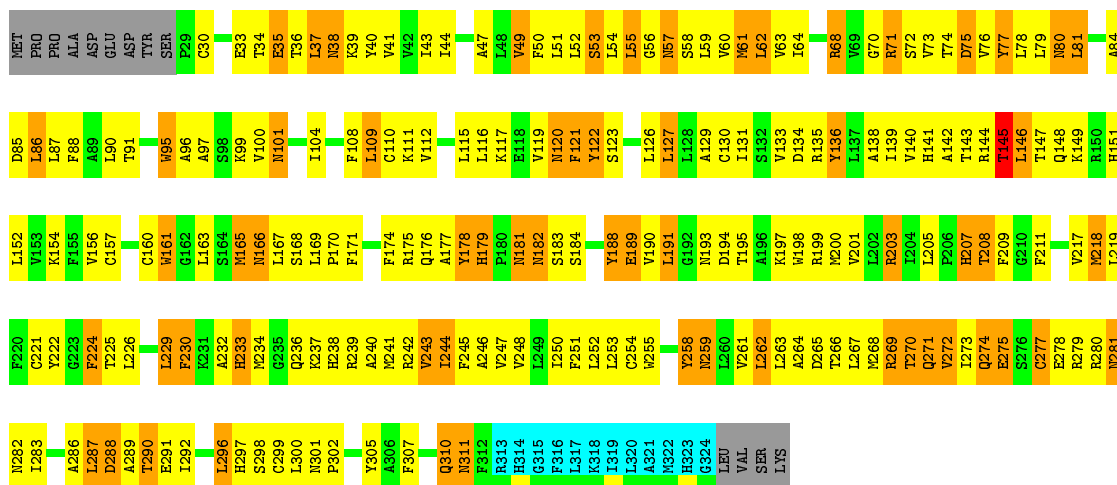


## 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: C-X-C chemokine receptor type 1

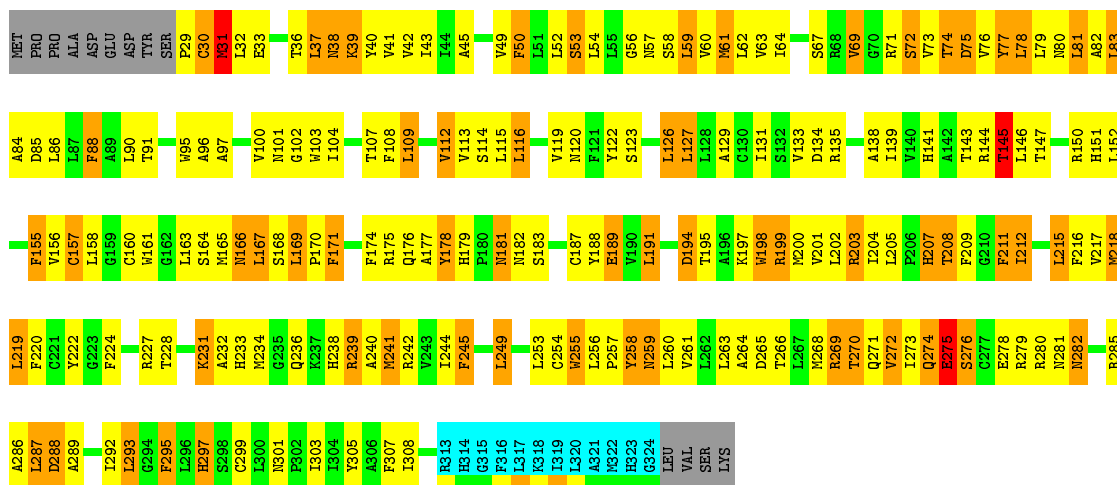
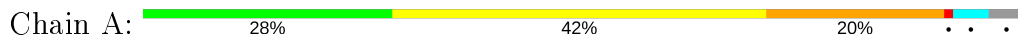






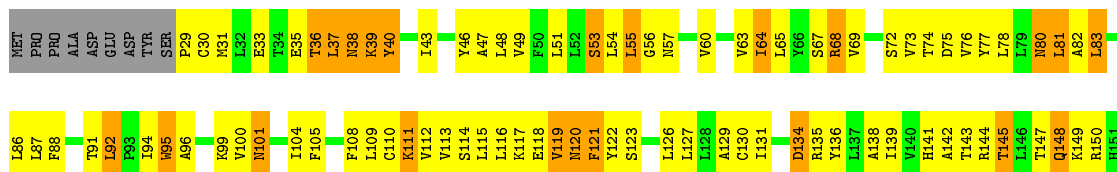
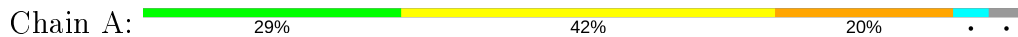
### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: C-X-C chemokine receptor type 1



### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: C-X-C chemokine receptor type 1



M281	M282	I283	G284	R285	A286	L287	D288	A289	T290	E291	I292	L293	G294	F295	L296	H297	S298	Y305	A306	F307	R313	H314	G315	F316	L317	R318	I319	L320	A321	M322	H323	G324	LEU	VAL	SER	LYS																				
M281	M282	I283	G284	R285	A286	L287	D288	A289	T290	E291	I292	L293	G294	F295	L296	H297	S298	Y305	A306	F307	R313	H314	G315	F316	L317	R318	I319	L320	A321	M322	H323	G324	LEU	VAL	SER	LYS																				
L219	F220	C221	Y222	G223	F224	T225	L226	R227	F230	K231	A232	H233	M234	G235	Q236	K237	H238	R239	A240	M241	R242	V243	I244	F245	A246	V247	V248	L249	I250	F251	C254	M255	L256	P257	Y258	M259	L260	V261	L262	A264	D265	T266	L267	M268	R269	T270	Q271	V272	I273	Q274	E275	S276	G277	E278	R279	R280
L152	V153	K154	F155	V156	C157	L158	G159	C160	L163	M166	L167	S168	P170	F171	F172	R175	Q176	A177	Y178	H179	P180	M181	M182	V186	C187	Y188	E189	V190	L191	G192	M193	D194	T195	A196	K197	R198	R199	M200	V201	L202	R203	L204	L205	P206	H207	T208	F211	I212	L215	F216	V217	M218				

## 5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

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

Of the 100 calculated structures, 10 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR NIH	refinement	

The following table shows chemical shift validation statistics as aggregates over all chemical shift files. Detailed validation can be found in section 6 of this report.

Chemical shift file(s)	input_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1120
Number of shifts mapped to atoms	1120
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	28%

Note: This is a solid-state NMR structure, where hydrogen atoms are typically not assigned a chemical shift value, which may lead to lower completeness of assignment measure.

No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.

COVALENT-GEOMETRY INFOmissingINFO

### 5.1 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	2276	2381	2374	202±12
All	All	22760	23810	23740	2017

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 43.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:LEU:HD13	1:A:78:LEU:H	0.93	1.24	9	1
1:A:287:LEU:HD13	1:A:288:ASP:N	0.90	1.82	8	1
1:A:191:LEU:HD13	1:A:192:GLY:N	0.89	1.82	3	1
1:A:293:LEU:HD13	1:A:294:GLY:N	0.89	1.82	5	1
1:A:293:LEU:HD23	1:A:294:GLY:N	0.89	1.82	3	1
1:A:109:LEU:HD22	1:A:110:CYS:N	0.89	1.82	8	7
1:A:175:ARG:HH21	1:A:202:LEU:HD23	0.86	1.31	3	1
1:A:128:LEU:HD12	1:A:129:ALA:N	0.83	1.89	1	2
1:A:126:LEU:HD21	1:A:160:CYS:SG	0.82	2.14	9	2
1:A:88:PHE:CE1	1:A:116:LEU:HD22	0.82	2.09	5	1
1:A:126:LEU:HD11	1:A:160:CYS:SG	0.81	2.15	9	2
1:A:109:LEU:HD22	1:A:110:CYS:H	0.81	1.35	3	7
1:A:38:ASN:O	1:A:41:VAL:HG22	0.80	1.77	3	1
1:A:219:LEU:HD13	1:A:219:LEU:H	0.80	1.35	9	1
1:A:215:LEU:HD23	1:A:216:PHE:N	0.80	1.90	2	1
1:A:226:LEU:HD12	1:A:226:LEU:O	0.80	1.76	2	1
1:A:129:ALA:O	1:A:133:VAL:HG23	0.80	1.77	8	7
1:A:207:HIS:NE2	1:A:260:LEU:HD11	0.80	1.91	7	2
1:A:146:LEU:HD13	1:A:146:LEU:N	0.79	1.92	3	1
1:A:198:TRP:O	1:A:201:VAL:HG22	0.79	1.78	7	10
1:A:143:THR:OG1	1:A:152:LEU:HD22	0.78	1.78	3	2
1:A:87:LEU:O	1:A:91:THR:HG23	0.78	1.79	8	7
1:A:146:LEU:O	1:A:146:LEU:HD22	0.77	1.79	6	1
1:A:59:LEU:O	1:A:63:VAL:HG23	0.77	1.79	7	5
1:A:40:TYR:CE2	1:A:44:ILE:HD11	0.77	2.15	1	3
1:A:229:LEU:HD22	1:A:229:LEU:O	0.77	1.78	8	1
1:A:88:PHE:CZ	1:A:116:LEU:HD22	0.76	2.14	6	1
1:A:267:LEU:O	1:A:267:LEU:HD12	0.76	1.79	3	1
1:A:287:LEU:HD23	1:A:288:ASP:N	0.76	1.94	3	1
1:A:76:VAL:HG21	1:A:130:CYS:SG	0.76	2.21	1	3
1:A:36:THR:O	1:A:37:LEU:HD12	0.76	1.79	7	3
1:A:191:LEU:HD13	1:A:191:LEU:N	0.76	1.96	8	1
1:A:96:ALA:O	1:A:100:VAL:HG23	0.75	1.81	7	10
1:A:43:ILE:HD13	1:A:282:ASN:OD1	0.75	1.81	6	1
1:A:146:LEU:N	1:A:146:LEU:HD13	0.74	1.95	1	1
1:A:263:LEU:HD12	1:A:264:ALA:N	0.74	1.96	9	2
1:A:95:TRP:CZ3	1:A:96:ALA:HB2	0.73	2.17	10	3
1:A:152:LEU:O	1:A:156:VAL:HG23	0.73	1.83	1	6
1:A:88:PHE:CE1	1:A:116:LEU:HD13	0.72	2.19	4	2
1:A:190:VAL:HG21	1:A:199:ARG:O	0.72	1.82	2	2
1:A:56:GLY:O	1:A:60:VAL:HG23	0.72	1.84	10	6
1:A:262:LEU:HD22	1:A:282:ASN:HD21	0.72	1.43	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:LEU:O	1:A:92:LEU:HD12	0.71	1.85	4	4
1:A:245:PHE:CE2	1:A:249:LEU:HD23	0.71	2.20	9	1
1:A:246:ALA:O	1:A:250:ILE:HG22	0.71	1.85	6	1
1:A:191:LEU:HD13	1:A:192:GLY:H	0.71	1.42	3	1
1:A:215:LEU:HD21	1:A:249:LEU:HD21	0.71	1.61	3	1
1:A:83:LEU:HD23	1:A:83:LEU:N	0.70	2.02	10	2
1:A:286:ALA:O	1:A:289:ALA:HB3	0.69	1.88	5	6
1:A:287:LEU:HD12	1:A:287:LEU:O	0.69	1.87	4	1
1:A:109:LEU:HD13	1:A:109:LEU:H	0.69	1.48	3	4
1:A:190:VAL:HG13	1:A:203:ARG:HH21	0.69	1.46	6	1
1:A:78:LEU:HD13	1:A:78:LEU:N	0.68	2.02	9	1
1:A:79:LEU:HD13	1:A:80:ASN:H	0.68	1.47	5	1
1:A:54:LEU:HD13	1:A:288:ASP:OD1	0.68	1.89	7	1
1:A:37:LEU:HD23	1:A:182:ASN:HD22	0.67	1.49	6	1
1:A:252:LEU:HD23	1:A:256:LEU:HD12	0.67	1.63	2	1
1:A:264:ALA:HB1	1:A:268:MET:SD	0.67	2.30	1	3
1:A:91:THR:CG2	1:A:112:VAL:HG11	0.67	2.20	2	1
1:A:61:MET:CE	1:A:82:ALA:HB2	0.67	2.20	7	2
1:A:103:TRP:C	1:A:104:ILE:HD13	0.67	2.11	4	1
1:A:51:LEU:O	1:A:51:LEU:HD23	0.67	1.90	7	2
1:A:190:VAL:HG13	1:A:203:ARG:NH2	0.66	2.04	6	1
1:A:69:VAL:O	1:A:69:VAL:HG22	0.66	1.90	9	3
1:A:83:LEU:O	1:A:83:LEU:HD12	0.66	1.91	9	1
1:A:191:LEU:HD13	1:A:191:LEU:H	0.66	1.48	8	1
1:A:34:THR:O	1:A:37:LEU:HD13	0.66	1.90	6	1
1:A:109:LEU:CD1	1:A:109:LEU:H	0.65	2.04	7	4
1:A:190:VAL:HG22	1:A:203:ARG:HE	0.65	1.51	6	1
1:A:258:TYR:CD1	1:A:259:ASN:N	0.65	2.65	10	4
1:A:79:LEU:C	1:A:79:LEU:HD22	0.65	2.12	5	1
1:A:69:VAL:HG22	1:A:69:VAL:O	0.65	1.91	6	2
1:A:135:ARG:O	1:A:138:ALA:HB3	0.65	1.91	7	7
1:A:244:ILE:O	1:A:248:VAL:HG23	0.65	1.91	3	3
1:A:272:VAL:O	1:A:272:VAL:HG13	0.65	1.92	9	2
1:A:40:TYR:CD1	1:A:281:ASN:ND2	0.65	2.65	9	3
1:A:151:HIS:ND1	1:A:152:LEU:N	0.64	2.46	7	2
1:A:203:ARG:N	1:A:203:ARG:HH11	0.64	1.90	6	1
1:A:262:LEU:HD22	1:A:282:ASN:ND2	0.64	2.08	10	1
1:A:191:LEU:HD22	1:A:191:LEU:C	0.63	2.13	3	1
1:A:40:TYR:CG	1:A:281:ASN:ND2	0.63	2.66	4	2
1:A:127:LEU:C	1:A:127:LEU:HD13	0.63	2.14	5	1
1:A:203:ARG:NH1	1:A:203:ARG:N	0.63	2.45	6	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:171:PHE:CD1	1:A:172:PHE:N	0.63	2.67	4	1
1:A:104:ILE:HD13	1:A:104:ILE:N	0.63	2.07	2	2
1:A:188:TYR:CD2	1:A:189:GLU:N	0.63	2.66	3	2
1:A:247:VAL:HG12	1:A:300:LEU:HD23	0.63	1.69	1	1
1:A:95:TRP:CE3	1:A:96:ALA:N	0.63	2.67	10	3
1:A:63:VAL:HG13	1:A:64:ILE:N	0.63	2.08	2	4
1:A:295:PHE:CD1	1:A:296:LEU:N	0.63	2.67	7	3
1:A:262:LEU:O	1:A:266:THR:HG23	0.63	1.93	8	4
1:A:62:LEU:HD23	1:A:63:VAL:H	0.63	1.53	8	1
1:A:258:TYR:OH	1:A:286:ALA:HB1	0.63	1.92	7	2
1:A:79:LEU:HD13	1:A:80:ASN:N	0.63	2.08	5	1
1:A:38:ASN:ND2	1:A:39:LYS:N	0.63	2.47	10	7
1:A:34:THR:O	1:A:34:THR:HG23	0.63	1.93	5	1
1:A:281:ASN:HD21	1:A:282:ASN:ND2	0.62	1.91	6	1
1:A:163:LEU:C	1:A:163:LEU:HD13	0.62	2.15	9	4
1:A:211:PHE:CD1	1:A:212:ILE:N	0.62	2.67	1	2
1:A:243:VAL:O	1:A:247:VAL:HG13	0.62	1.95	10	4
1:A:190:VAL:HG22	1:A:203:ARG:NE	0.62	2.09	6	1
1:A:79:LEU:C	1:A:79:LEU:HD13	0.62	2.14	4	5
1:A:91:THR:HG21	1:A:116:LEU:CD2	0.62	2.24	4	2
1:A:101:ASN:N	1:A:101:ASN:ND2	0.62	2.48	1	2
1:A:40:TYR:CD2	1:A:182:ASN:ND2	0.62	2.68	1	1
1:A:255:TRP:CH2	1:A:259:ASN:ND2	0.62	2.67	1	2
1:A:182:ASN:HD22	1:A:182:ASN:N	0.62	1.92	5	1
1:A:116:LEU:HD12	1:A:116:LEU:O	0.62	1.95	6	2
1:A:293:LEU:HD22	1:A:293:LEU:C	0.62	2.14	5	1
1:A:50:PHE:CD1	1:A:285:ARG:NH2	0.62	2.67	7	1
1:A:116:LEU:HD12	1:A:117:LYS:N	0.62	2.09	8	2
1:A:191:LEU:H	1:A:191:LEU:HD22	0.62	1.55	8	1
1:A:175:ARG:NH2	1:A:202:LEU:HD23	0.62	2.04	3	1
1:A:279:ARG:NE	1:A:280:ARG:NH2	0.62	2.47	6	2
1:A:104:ILE:HD13	1:A:104:ILE:H	0.62	1.55	2	2
1:A:143:THR:HG22	1:A:144:ARG:H	0.62	1.52	10	6
1:A:178:TYR:N	1:A:178:TYR:CD1	0.62	2.68	3	1
1:A:228:THR:HG23	1:A:229:LEU:N	0.62	2.10	6	2
1:A:101:ASN:ND2	1:A:103:TRP:H	0.62	1.93	9	1
1:A:48:LEU:HD13	1:A:48:LEU:C	0.62	2.15	5	1
1:A:280:ARG:O	1:A:283:ILE:HG22	0.62	1.93	7	1
1:A:219:LEU:HD13	1:A:219:LEU:C	0.62	2.15	8	1
1:A:257:PRO:O	1:A:261:VAL:HG23	0.62	1.95	9	1
1:A:203:ARG:NH1	1:A:207:HIS:CE1	0.62	2.68	10	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:103:TRP:CG	1:A:104:ILE:N	0.62	2.67	3	2
1:A:166:ASN:HD22	1:A:167:LEU:N	0.62	1.93	7	1
1:A:287:LEU:HD22	1:A:287:LEU:C	0.62	2.14	8	1
1:A:207:HIS:ND1	1:A:208:THR:N	0.62	2.48	9	4
1:A:268:MET:O	1:A:269:ARG:O	0.62	2.18	7	10
1:A:163:LEU:HD13	1:A:163:LEU:C	0.62	2.15	10	1
1:A:255:TRP:CZ2	1:A:259:ASN:ND2	0.61	2.68	1	2
1:A:115:LEU:C	1:A:115:LEU:HD23	0.61	2.16	6	1
1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:HD23	0.61	2.10	9	1
1:A:274:GLN:N	1:A:274:GLN:NE2	0.61	2.47	6	3
1:A:242:ARG:NH2	1:A:245:PHE:CE1	0.61	2.67	2	1
1:A:245:PHE:CZ	1:A:249:LEU:HD23	0.61	2.30	7	1
1:A:77:TYR:CE2	1:A:127:LEU:HD13	0.61	2.30	4	1
1:A:152:LEU:HD23	1:A:153:VAL:N	0.61	2.10	4	1
1:A:166:ASN:ND2	1:A:167:LEU:N	0.61	2.48	9	2
1:A:242:ARG:NH2	1:A:245:PHE:CD1	0.61	2.68	2	1
1:A:255:TRP:NE1	1:A:259:ASN:ND2	0.61	2.48	6	1
1:A:36:THR:O	1:A:37:LEU:HD22	0.61	1.95	4	2
1:A:101:ASN:ND2	1:A:102:GLY:H	0.61	1.93	3	1
1:A:166:ASN:ND2	1:A:166:ASN:N	0.61	2.47	2	1
1:A:117:LYS:NZ	1:A:121:PHE:CZ	0.61	2.67	6	3
1:A:207:HIS:HD1	1:A:208:THR:HG1	0.61	1.37	8	1
1:A:236:GLN:NE2	1:A:237:LYS:N	0.61	2.49	10	1
1:A:152:LEU:C	1:A:152:LEU:HD13	0.61	2.16	5	2
1:A:149:LYS:NZ	1:A:150:ARG:NH2	0.61	2.49	6	2
1:A:236:GLN:NE2	1:A:237:LYS:NZ	0.61	2.48	3	1
1:A:54:LEU:O	1:A:54:LEU:HD13	0.61	1.96	3	1
1:A:212:ILE:N	1:A:212:ILE:HD12	0.61	2.11	10	1
1:A:279:ARG:NH1	1:A:280:ARG:NH1	0.61	2.47	1	1
1:A:175:ARG:NH1	1:A:176:GLN:H	0.61	1.92	3	1
1:A:46:TYR:CE2	1:A:285:ARG:NH1	0.61	2.68	5	1
1:A:248:VAL:HG12	1:A:252:LEU:CD1	0.61	2.26	6	1
1:A:193:ASN:H	1:A:193:ASN:ND2	0.60	1.93	3	1
1:A:57:ASN:ND2	1:A:58:SER:N	0.60	2.49	8	1
1:A:101:ASN:ND2	1:A:101:ASN:N	0.60	2.47	10	1
1:A:123:SER:O	1:A:127:LEU:N	0.60	2.34	8	10
1:A:119:VAL:O	1:A:123:SER:N	0.60	2.34	4	10
1:A:182:ASN:ND2	1:A:183:SER:N	0.60	2.49	7	1
1:A:287:LEU:C	1:A:287:LEU:HD13	0.60	2.16	1	3
1:A:191:LEU:N	1:A:191:LEU:HD12	0.60	2.10	5	2
1:A:126:LEU:HD11	1:A:164:SER:OG	0.60	1.96	5	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:VAL:N	1:A:150:ARG:HH21	0.60	1.94	7	1
1:A:207:HIS:CG	1:A:208:THR:N	0.60	2.70	8	7
1:A:78:LEU:C	1:A:78:LEU:HD13	0.60	2.17	3	2
1:A:171:PHE:CE1	1:A:178:TYR:CE1	0.60	2.90	7	1
1:A:143:THR:HG22	1:A:144:ARG:N	0.60	2.11	10	6
1:A:182:ASN:HD22	1:A:183:SER:N	0.60	1.93	7	1
1:A:54:LEU:HD23	1:A:54:LEU:O	0.60	1.97	6	2
1:A:50:PHE:CG	1:A:285:ARG:NH2	0.60	2.70	7	1
1:A:62:LEU:HD23	1:A:63:VAL:N	0.60	2.12	8	1
1:A:31:MET:N	1:A:31:MET:SD	0.60	2.75	6	1
1:A:115:LEU:C	1:A:115:LEU:HD13	0.60	2.17	9	2
1:A:176:GLN:N	1:A:199:ARG:NH1	0.60	2.50	9	1
1:A:255:TRP:HE1	1:A:259:ASN:ND2	0.60	1.95	9	1
1:A:142:ALA:O	1:A:143:THR:HG22	0.60	1.96	1	1
1:A:126:LEU:O	1:A:129:ALA:HB3	0.60	1.96	3	8
1:A:131:ILE:C	1:A:131:ILE:HD12	0.60	2.16	6	1
1:A:179:HIS:CE1	1:A:280:ARG:NH1	0.60	2.70	8	1
1:A:222:TYR:O	1:A:226:LEU:HD13	0.59	1.97	5	2
1:A:176:GLN:NE2	1:A:199:ARG:HH21	0.59	1.95	2	1
1:A:207:HIS:HE2	1:A:260:LEU:HD11	0.59	1.58	7	1
1:A:287:LEU:HD22	1:A:287:LEU:O	0.59	1.97	8	1
1:A:295:PHE:CE2	1:A:299:CYS:SG	0.59	2.95	9	1
1:A:104:ILE:HG22	1:A:105:PHE:N	0.59	2.12	10	1
1:A:30:CYS:SG	1:A:182:ASN:N	0.59	2.75	9	4
1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:C	0.59	2.16	8	2
1:A:234:MET:SD	1:A:234:MET:N	0.59	2.75	6	3
1:A:108:PHE:N	1:A:108:PHE:CD1	0.59	2.67	4	1
1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:HD13	0.59	2.12	3	4
1:A:241:MET:SD	1:A:242:ARG:N	0.59	2.75	9	1
1:A:257:PRO:O	1:A:261:VAL:HG12	0.59	1.98	1	3
1:A:92:LEU:HD12	1:A:92:LEU:O	0.59	1.97	2	1
1:A:222:TYR:CZ	1:A:241:MET:SD	0.59	2.95	3	1
1:A:269:ARG:HH22	1:A:279:ARG:HH21	0.59	1.39	5	1
1:A:218:MET:SD	1:A:219:LEU:N	0.59	2.75	3	1
1:A:36:THR:HG23	1:A:37:LEU:N	0.59	2.12	1	3
1:A:218:MET:SD	1:A:245:PHE:CD2	0.59	2.95	8	1
1:A:95:TRP:CH2	1:A:99:LYS:NZ	0.59	2.68	1	1
1:A:200:MET:O	1:A:204:ILE:HG22	0.59	1.98	2	1
1:A:101:ASN:HD22	1:A:102:GLY:H	0.59	1.39	3	1
1:A:218:MET:SD	1:A:245:PHE:CE2	0.59	2.95	8	2
1:A:211:PHE:CG	1:A:212:ILE:N	0.59	2.70	9	4

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:ARG:CD	1:A:68:ARG:H	0.59	2.11	4	3
1:A:135:ARG:O	1:A:139:ILE:N	0.58	2.36	8	10
1:A:113:VAL:HG11	1:A:187:CYS:H	0.58	1.57	5	6
1:A:176:GLN:NE2	1:A:199:ARG:NH2	0.58	2.50	2	1
1:A:255:TRP:CE2	1:A:259:ASN:ND2	0.58	2.71	6	1
1:A:240:ALA:O	1:A:244:ILE:HG23	0.58	1.98	10	1
1:A:236:GLN:O	1:A:240:ALA:HB2	0.58	1.99	2	1
1:A:152:LEU:HD23	1:A:152:LEU:C	0.58	2.18	4	1
1:A:219:LEU:HD13	1:A:219:LEU:N	0.58	2.12	9	1
1:A:188:TYR:CZ	1:A:280:ARG:CZ	0.58	2.86	7	2
1:A:109:LEU:H	1:A:109:LEU:CD1	0.58	2.12	6	3
1:A:256:LEU:CD2	1:A:260:LEU:HD13	0.58	2.28	7	1
1:A:283:ILE:O	1:A:286:ALA:HB3	0.58	1.98	10	1
1:A:222:TYR:CE1	1:A:226:LEU:HD11	0.58	2.33	5	1
1:A:203:ARG:HE	1:A:204:ILE:N	0.58	1.97	7	1
1:A:219:LEU:CD1	1:A:219:LEU:H	0.58	2.11	9	1
1:A:203:ARG:HH21	1:A:264:ALA:HB2	0.58	1.59	8	1
1:A:175:ARG:HH12	1:A:202:LEU:HD13	0.58	1.58	9	1
1:A:283:ILE:HD12	1:A:283:ILE:C	0.58	2.18	10	1
1:A:188:TYR:CG	1:A:189:GLU:N	0.58	2.72	3	2
1:A:269:ARG:HH22	1:A:279:ARG:NH2	0.58	1.96	5	1
1:A:149:LYS:HZ2	1:A:150:ARG:NH2	0.58	1.96	6	1
1:A:151:HIS:HD1	1:A:152:LEU:N	0.58	1.97	4	2
1:A:272:VAL:HG23	1:A:279:ARG:NH1	0.57	2.13	7	1
1:A:40:TYR:CG	1:A:182:ASN:ND2	0.57	2.72	1	2
1:A:55:LEU:HD12	1:A:55:LEU:C	0.57	2.20	8	4
1:A:171:PHE:CE1	1:A:178:TYR:CZ	0.57	2.91	6	2
1:A:222:TYR:CE2	1:A:241:MET:SD	0.57	2.97	3	1
1:A:51:LEU:O	1:A:51:LEU:HD13	0.57	2.00	8	1
1:A:92:LEU:C	1:A:92:LEU:HD12	0.57	2.20	4	4
1:A:279:ARG:HE	1:A:280:ARG:NH2	0.57	1.97	7	2
1:A:282:ASN:N	1:A:282:ASN:ND2	0.57	2.50	7	2
1:A:287:LEU:C	1:A:287:LEU:HD12	0.57	2.20	2	3
1:A:279:ARG:NH2	1:A:280:ARG:HH21	0.57	1.97	6	1
1:A:179:HIS:NE2	1:A:181:ASN:ND2	0.57	2.53	8	1
1:A:167:LEU:HD23	1:A:167:LEU:O	0.57	2.00	3	1
1:A:188:TYR:CE1	1:A:189:GLU:O	0.57	2.58	10	5
1:A:78:LEU:HD13	1:A:78:LEU:C	0.57	2.19	8	1
1:A:83:LEU:C	1:A:83:LEU:HD12	0.57	2.20	9	1
1:A:283:ILE:HD12	1:A:284:GLY:N	0.57	2.15	10	1
1:A:69:VAL:CG2	1:A:305:TYR:CE2	0.57	2.87	10	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:274:GLN:HE21	1:A:275:GLU:N	0.57	1.98	1	1
1:A:116:LEU:HD12	1:A:116:LEU:C	0.57	2.20	5	3
1:A:271:GLN:O	1:A:273:ILE:N	0.57	2.37	8	4
1:A:55:LEU:O	1:A:55:LEU:HD12	0.57	1.99	8	3
1:A:141:HIS:N	1:A:141:HIS:ND1	0.56	2.52	2	1
1:A:173:LEU:HD23	1:A:174:PHE:CZ	0.56	2.35	7	1
1:A:104:ILE:N	1:A:104:ILE:CD1	0.56	2.68	2	2
1:A:40:TYR:CZ	1:A:44:ILE:HD11	0.56	2.35	1	2
1:A:128:LEU:HD12	1:A:128:LEU:C	0.56	2.21	2	1
1:A:149:LYS:CB	1:A:149:LYS:NZ	0.56	2.67	5	2
1:A:282:ASN:ND2	1:A:282:ASN:H	0.56	1.98	7	2
1:A:188:TYR:CE1	1:A:280:ARG:CZ	0.56	2.89	8	1
1:A:95:TRP:CZ2	1:A:99:LYS:NZ	0.56	2.71	1	1
1:A:72:SER:CB	1:A:301:ASN:ND2	0.56	2.68	8	2
1:A:269:ARG:HH21	1:A:279:ARG:HH21	0.56	1.44	6	1
1:A:179:HIS:NE2	1:A:280:ARG:NH1	0.56	2.53	8	1
1:A:230:PHE:CD2	1:A:231:LYS:N	0.56	2.73	2	2
1:A:203:ARG:NH2	1:A:264:ALA:HB2	0.56	2.14	10	2
1:A:191:LEU:HD12	1:A:191:LEU:H	0.56	1.61	9	1
1:A:176:GLN:HE21	1:A:199:ARG:HH21	0.56	1.44	2	1
1:A:288:ASP:O	1:A:292:ILE:HG23	0.56	2.01	2	4
1:A:177:ALA:HB1	1:A:179:HIS:CD2	0.56	2.36	3	2
1:A:182:ASN:HD22	1:A:183:SER:H	0.56	1.44	1	1
1:A:113:VAL:HG21	1:A:185:PRO:O	0.56	1.99	6	2
1:A:191:LEU:HD21	1:A:280:ARG:NH2	0.56	2.15	2	2
1:A:74:THR:O	1:A:78:LEU:N	0.56	2.39	2	8
1:A:274:GLN:NE2	1:A:274:GLN:H	0.56	1.98	3	1
1:A:77:TYR:CD2	1:A:297:HIS:CE1	0.56	2.94	1	1
1:A:71:ARG:NE	1:A:71:ARG:CA	0.56	2.69	1	1
1:A:157:CYS:O	1:A:161:TRP:N	0.56	2.38	5	1
1:A:207:HIS:CE1	1:A:208:THR:HG1	0.56	2.19	8	2
1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CD2	0.56	2.69	9	1
1:A:64:ILE:CD1	1:A:297:HIS:NE2	0.56	2.69	10	1
1:A:146:LEU:H	1:A:146:LEU:CD1	0.56	2.14	6	1
1:A:73:VAL:HG13	1:A:131:ILE:HD11	0.56	1.76	7	1
1:A:216:PHE:CD1	1:A:216:PHE:N	0.56	2.68	7	1
1:A:279:ARG:NH1	1:A:280:ARG:HH11	0.55	1.98	1	1
1:A:97:ALA:O	1:A:101:ASN:ND2	0.55	2.39	3	5
1:A:76:VAL:HG13	1:A:77:TYR:N	0.55	2.16	7	5
1:A:205:LEU:O	1:A:210:GLY:N	0.55	2.39	7	2
1:A:144:ARG:C	1:A:145:THR:HG22	0.55	2.22	8	3

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:269:ARG:C	1:A:270:THR:HG23	0.55	2.22	7	4
1:A:269:ARG:NH2	1:A:279:ARG:HH21	0.55	1.98	5	2
1:A:146:LEU:N	1:A:146:LEU:CD1	0.55	2.69	1	3
1:A:293:LEU:HD23	1:A:294:GLY:H	0.55	1.60	3	1
1:A:182:ASN:OD1	1:A:183:SER:N	0.55	2.40	9	2
1:A:267:LEU:HD12	1:A:267:LEU:C	0.55	2.21	3	1
1:A:109:LEU:CD2	1:A:109:LEU:H	0.55	2.13	9	1
1:A:149:LYS:NZ	1:A:150:ARG:HH22	0.55	2.00	6	1
1:A:211:PHE:CE2	1:A:215:LEU:HD12	0.55	2.37	7	1
1:A:71:ARG:HH21	1:A:149:LYS:NZ	0.55	1.99	4	1
1:A:165:MET:O	1:A:169:LEU:N	0.55	2.40	6	6
1:A:107:THR:OG1	1:A:178:TYR:CE1	0.55	2.60	2	2
1:A:55:LEU:C	1:A:55:LEU:HD12	0.55	2.21	2	1
1:A:218:MET:O	1:A:222:TYR:CD1	0.55	2.60	6	7
1:A:148:GLN:NE2	1:A:150:ARG:H	0.55	1.98	6	1
1:A:207:HIS:O	1:A:211:PHE:CE2	0.55	2.60	1	1
1:A:71:ARG:CD	1:A:71:ARG:H	0.55	2.15	1	1
1:A:30:CYS:O	1:A:30:CYS:SG	0.55	2.65	9	6
1:A:293:LEU:HD13	1:A:294:GLY:H	0.55	1.56	5	1
1:A:294:GLY:O	1:A:297:HIS:CD2	0.55	2.60	10	1
1:A:118:GLU:O	1:A:122:TYR:CG	0.55	2.60	1	3
1:A:279:ARG:HH11	1:A:280:ARG:NH1	0.55	2.00	1	1
1:A:161:TRP:O	1:A:165:MET:N	0.55	2.40	6	9
1:A:202:LEU:O	1:A:202:LEU:HD23	0.55	2.02	5	1
1:A:84:ALA:O	1:A:88:PHE:CG	0.55	2.60	6	3
1:A:72:SER:CB	1:A:301:ASN:HD21	0.55	2.14	8	1
1:A:297:HIS:CG	1:A:297:HIS:O	0.55	2.60	7	1
1:A:218:MET:SD	1:A:245:PHE:CZ	0.54	3.00	10	2
1:A:109:LEU:CD1	1:A:109:LEU:N	0.54	2.70	6	3
1:A:279:ARG:HE	1:A:280:ARG:CZ	0.54	2.15	7	1
1:A:132:SER:O	1:A:136:TYR:CD1	0.54	2.60	1	2
1:A:279:ARG:NE	1:A:279:ARG:O	0.54	2.41	1	1
1:A:79:LEU:HD23	1:A:154:LYS:NZ	0.54	2.17	1	1
1:A:59:LEU:O	1:A:63:VAL:HG12	0.54	2.03	2	4
1:A:178:TYR:CD1	1:A:178:TYR:N	0.54	2.74	10	2
1:A:264:ALA:O	1:A:268:MET:N	0.54	2.41	5	9
1:A:88:PHE:N	1:A:88:PHE:CD1	0.54	2.75	5	1
1:A:203:ARG:CA	1:A:203:ARG:HH11	0.54	2.16	6	1
1:A:143:THR:OG1	1:A:144:ARG:N	0.54	2.40	9	3
1:A:191:LEU:HD11	1:A:280:ARG:HH21	0.54	1.62	4	1
1:A:53:SER:O	1:A:56:GLY:N	0.54	2.40	8	10

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:209:PHE:O	1:A:209:PHE:CG	0.54	2.60	5	4
1:A:167:LEU:O	1:A:175:ARG:NH2	0.54	2.41	2	4
1:A:103:TRP:CD1	1:A:104:ILE:O	0.54	2.61	3	1
1:A:287:LEU:HD23	1:A:287:LEU:C	0.54	2.21	3	1
1:A:154:LYS:NZ	1:A:157:CYS:SG	0.54	2.80	5	1
1:A:84:ALA:O	1:A:88:PHE:CD1	0.54	2.60	8	5
1:A:174:PHE:O	1:A:199:ARG:NH2	0.54	2.41	7	1
1:A:271:GLN:OE1	1:A:271:GLN:N	0.54	2.40	8	1
1:A:234:MET:SD	1:A:235:GLY:N	0.54	2.81	1	1
1:A:113:VAL:CG1	1:A:187:CYS:H	0.54	2.16	5	5
1:A:266:THR:O	1:A:279:ARG:NH2	0.54	2.40	7	2
1:A:255:TRP:CD2	1:A:259:ASN:OD1	0.54	2.61	6	1
1:A:94:ILE:N	1:A:94:ILE:HD12	0.54	2.17	7	1
1:A:179:HIS:CE1	1:A:181:ASN:HD22	0.54	2.19	8	1
1:A:181:ASN:O	1:A:182:ASN:ND2	0.54	2.41	4	2
1:A:294:GLY:O	1:A:297:HIS:ND1	0.54	2.41	2	2
1:A:147:THR:HG22	1:A:148:GLN:N	0.54	2.18	5	3
1:A:50:PHE:CE1	1:A:292:ILE:HG22	0.54	2.37	8	1
1:A:278:GLU:O	1:A:281:ASN:ND2	0.54	2.41	10	1
1:A:104:ILE:O	1:A:104:ILE:HD13	0.54	2.03	5	1
1:A:136:TYR:CG	1:A:140:VAL:O	0.54	2.61	1	2
1:A:236:GLN:H	1:A:236:GLN:CD	0.54	2.06	1	2
1:A:272:VAL:HG23	1:A:272:VAL:O	0.54	2.03	6	2
1:A:50:PHE:O	1:A:50:PHE:CD1	0.54	2.61	6	1
1:A:182:ASN:OD1	1:A:281:ASN:ND2	0.54	2.41	4	3
1:A:188:TYR:CE2	1:A:189:GLU:O	0.54	2.61	9	3
1:A:149:LYS:CB	1:A:149:LYS:HZ2	0.54	2.16	5	1
1:A:188:TYR:CZ	1:A:189:GLU:O	0.53	2.61	6	5
1:A:116:LEU:HD13	1:A:116:LEU:O	0.53	2.03	2	1
1:A:146:LEU:N	1:A:146:LEU:CD2	0.53	2.71	8	1
1:A:258:TYR:CD1	1:A:286:ALA:HB1	0.53	2.38	9	1
1:A:212:ILE:N	1:A:212:ILE:CD1	0.53	2.71	10	1
1:A:251:PHE:N	1:A:251:PHE:CD1	0.53	2.74	10	1
1:A:200:MET:SD	1:A:201:VAL:N	0.53	2.82	4	1
1:A:301:ASN:O	1:A:305:TYR:CG	0.53	2.61	4	1
1:A:245:PHE:CD1	1:A:246:ALA:N	0.53	2.76	1	2
1:A:224:PHE:O	1:A:227:ARG:NE	0.53	2.41	5	5
1:A:281:ASN:OD1	1:A:282:ASN:N	0.53	2.41	3	2
1:A:146:LEU:H	1:A:146:LEU:CD2	0.53	2.16	8	1
1:A:130:CYS:SG	1:A:131:ILE:N	0.53	2.81	1	1
1:A:135:ARG:NE	1:A:237:LYS:O	0.53	2.41	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:242:ARG:CZ	1:A:245:PHE:CD1	0.53	2.91	2	1
1:A:81:LEU:O	1:A:81:LEU:HD13	0.53	2.03	3	1
1:A:191:LEU:N	1:A:191:LEU:HD22	0.53	2.18	8	1
1:A:74:THR:OG1	1:A:297:HIS:NE2	0.53	2.42	2	1
1:A:301:ASN:ND2	1:A:305:TYR:OH	0.53	2.42	9	2
1:A:218:MET:O	1:A:222:TYR:N	0.53	2.42	1	6
1:A:71:ARG:NH1	1:A:305:TYR:OH	0.53	2.42	1	1
1:A:197:LYS:O	1:A:198:TRP:CE3	0.53	2.61	7	7
1:A:273:ILE:O	1:A:275:GLU:N	0.53	2.42	2	9
1:A:141:HIS:O	1:A:141:HIS:CG	0.53	2.61	3	5
1:A:227:ARG:NE	1:A:228:THR:OG1	0.53	2.42	7	1
1:A:175:ARG:NH1	1:A:202:LEU:HD13	0.53	2.19	9	1
1:A:209:PHE:O	1:A:209:PHE:CD1	0.53	2.62	1	2
1:A:224:PHE:O	1:A:227:ARG:NH1	0.53	2.42	1	1
1:A:128:LEU:HD12	1:A:128:LEU:O	0.53	2.03	2	1
1:A:191:LEU:H	1:A:191:LEU:HD12	0.53	1.62	6	2
1:A:40:TYR:CG	1:A:182:ASN:OD1	0.53	2.62	6	1
1:A:74:THR:O	1:A:77:TYR:N	0.53	2.41	7	2
1:A:176:GLN:NE2	1:A:188:TYR:O	0.53	2.42	1	1
1:A:201:VAL:O	1:A:205:LEU:N	0.53	2.42	5	4
1:A:293:LEU:HD22	1:A:293:LEU:O	0.53	2.03	5	1
1:A:279:ARG:NH2	1:A:280:ARG:CZ	0.53	2.71	9	1
1:A:37:LEU:HD13	1:A:182:ASN:OD1	0.53	2.04	1	1
1:A:40:TYR:CD1	1:A:40:TYR:O	0.53	2.62	9	3
1:A:166:ASN:HD22	1:A:166:ASN:N	0.53	2.00	2	1
1:A:198:TRP:O	1:A:201:VAL:HG13	0.53	2.03	3	3
1:A:71:ARG:NH1	1:A:149:LYS:CE	0.53	2.72	3	1
1:A:181:ASN:ND2	1:A:186:VAL:O	0.53	2.42	4	3
1:A:255:TRP:CH2	1:A:290:THR:OG1	0.53	2.62	10	2
1:A:40:TYR:CD2	1:A:182:ASN:OD1	0.53	2.62	6	1
1:A:74:THR:OG1	1:A:297:HIS:CD2	0.53	2.61	6	1
1:A:30:CYS:C	1:A:32:LEU:H	0.53	2.07	1	6
1:A:40:TYR:CE2	1:A:183:SER:OG	0.53	2.62	2	3
1:A:176:GLN:OE1	1:A:177:ALA:N	0.53	2.42	2	1
1:A:272:VAL:O	1:A:279:ARG:NH1	0.53	2.42	2	2
1:A:179:HIS:O	1:A:280:ARG:NH2	0.53	2.42	3	1
1:A:249:LEU:O	1:A:253:LEU:N	0.53	2.42	4	3
1:A:155:PHE:N	1:A:155:PHE:CD1	0.53	2.75	9	1
1:A:143:THR:OG1	1:A:144:ARG:NE	0.53	2.42	4	1
1:A:135:ARG:O	1:A:138:ALA:N	0.53	2.42	4	7
1:A:231:LYS:O	1:A:233:HIS:CD2	0.53	2.62	9	3

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:84:ALA:N	0.53	2.41	8	8
1:A:233:HIS:O	1:A:233:HIS:ND1	0.53	2.42	2	2
1:A:236:GLN:N	1:A:236:GLN:OE1	0.53	2.41	5	2
1:A:247:VAL:O	1:A:251:PHE:CD2	0.53	2.62	4	2
1:A:157:CYS:SG	1:A:158:LEU:N	0.53	2.81	7	3
1:A:40:TYR:OH	1:A:95:TRP:CZ3	0.53	2.62	7	1
1:A:103:TRP:O	1:A:104:ILE:HD13	0.53	2.04	4	1
1:A:135:ARG:NH2	1:A:236:GLN:O	0.52	2.43	1	2
1:A:203:ARG:O	1:A:207:HIS:ND1	0.52	2.42	3	5
1:A:275:GLU:OE1	1:A:275:GLU:N	0.52	2.42	5	1
1:A:285:ARG:O	1:A:285:ARG:NE	0.52	2.42	10	1
1:A:194:ASP:OD1	1:A:194:ASP:N	0.52	2.42	2	1
1:A:232:ALA:O	1:A:233:HIS:CG	0.52	2.62	9	2
1:A:188:TYR:CE2	1:A:189:GLU:OE2	0.52	2.62	6	1
1:A:141:HIS:CE1	1:A:143:THR:O	0.52	2.62	7	2
1:A:211:PHE:O	1:A:215:LEU:N	0.52	2.42	7	1
1:A:215:LEU:O	1:A:215:LEU:HD23	0.52	2.05	7	1
1:A:176:GLN:O	1:A:199:ARG:NH1	0.52	2.43	10	2
1:A:204:ILE:C	1:A:204:ILE:HD12	0.52	2.24	1	1
1:A:175:ARG:NH1	1:A:201:VAL:CG2	0.52	2.72	2	1
1:A:195:THR:O	1:A:198:TRP:CE2	0.52	2.62	2	1
1:A:101:ASN:OD1	1:A:103:TRP:CZ3	0.52	2.62	3	1
1:A:66:TYR:O	1:A:68:ARG:NH2	0.52	2.42	3	1
1:A:66:TYR:O	1:A:68:ARG:NH1	0.52	2.42	6	2
1:A:176:GLN:O	1:A:199:ARG:NH2	0.52	2.42	5	1
1:A:46:TYR:CD2	1:A:285:ARG:NH1	0.52	2.78	5	1
1:A:132:SER:O	1:A:136:TYR:CE1	0.52	2.62	7	1
1:A:71:ARG:O	1:A:236:GLN:NE2	0.52	2.42	8	2
1:A:263:LEU:CD1	1:A:264:ALA:N	0.52	2.72	9	1
1:A:288:ASP:N	1:A:288:ASP:OD1	0.52	2.42	9	1
1:A:191:LEU:O	1:A:269:ARG:NH2	0.52	2.42	10	1
1:A:188:TYR:HB2	1:A:283:ILE:HG21	0.52	1.79	4	1
1:A:265:ASP:OD2	1:A:271:GLN:NE2	0.52	2.42	6	4
1:A:116:LEU:HD13	1:A:116:LEU:C	0.52	2.24	2	1
1:A:72:SER:OG	1:A:301:ASN:ND2	0.52	2.43	8	2
1:A:281:ASN:OD1	1:A:282:ASN:ND2	0.52	2.42	3	1
1:A:141:HIS:NE2	1:A:143:THR:O	0.52	2.42	7	2
1:A:233:HIS:CG	1:A:233:HIS:O	0.52	2.62	1	3
1:A:109:LEU:HD13	1:A:109:LEU:N	0.52	2.19	5	3
1:A:236:GLN:O	1:A:238:HIS:N	0.52	2.42	6	1
1:A:88:PHE:CD1	1:A:88:PHE:N	0.52	2.76	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:265:ASP:O	1:A:271:GLN:NE2	0.52	2.42	7	1
1:A:279:ARG:NH2	1:A:280:ARG:NH2	0.52	2.57	9	1
1:A:301:ASN:ND2	1:A:305:TYR:CZ	0.52	2.77	9	1
1:A:181:ASN:ND2	1:A:181:ASN:N	0.52	2.57	1	1
1:A:179:HIS:CE1	1:A:180:PRO:O	0.52	2.63	2	1
1:A:279:ARG:HH21	1:A:280:ARG:HH21	0.52	1.46	6	1
1:A:301:ASN:O	1:A:305:TYR:CD2	0.52	2.62	4	1
1:A:175:ARG:CG	1:A:176:GLN:N	0.52	2.72	1	1
1:A:211:PHE:CD2	1:A:212:ILE:N	0.52	2.78	2	3
1:A:133:VAL:HG21	1:A:156:VAL:HG11	0.52	1.80	5	4
1:A:233:HIS:O	1:A:233:HIS:CD2	0.52	2.62	3	2
1:A:42:VAL:HG13	1:A:43:ILE:N	0.52	2.20	3	1
1:A:209:PHE:CD1	1:A:209:PHE:O	0.52	2.62	5	1
1:A:108:PHE:CD2	1:A:112:VAL:HG21	0.52	2.39	8	1
1:A:120:ASN:ND2	1:A:121:PHE:N	0.52	2.58	8	1
1:A:233:HIS:CD2	1:A:233:HIS:O	0.52	2.63	1	2
1:A:266:THR:O	1:A:269:ARG:NH1	0.52	2.42	9	2
1:A:294:GLY:O	1:A:297:HIS:CG	0.52	2.62	6	3
1:A:101:ASN:OD1	1:A:103:TRP:CE3	0.52	2.62	3	1
1:A:143:THR:HG23	1:A:152:LEU:HD23	0.52	1.82	5	1
1:A:73:VAL:HG12	1:A:127:LEU:HD11	0.52	1.82	6	1
1:A:172:PHE:CD1	1:A:178:TYR:OH	0.52	2.62	7	1
1:A:266:THR:OG1	1:A:279:ARG:NE	0.52	2.43	7	2
1:A:39:LYS:N	1:A:278:GLU:OE2	0.52	2.42	8	1
1:A:266:THR:OG1	1:A:279:ARG:NH1	0.52	2.42	1	2
1:A:57:ASN:O	1:A:61:MET:SD	0.52	2.68	8	4
1:A:101:ASN:N	1:A:101:ASN:OD1	0.52	2.43	2	1
1:A:103:TRP:NE1	1:A:104:ILE:O	0.52	2.43	3	1
1:A:236:GLN:NE2	1:A:237:LYS:HZ2	0.52	2.03	3	1
1:A:57:ASN:O	1:A:61:MET:N	0.52	2.39	7	1
1:A:275:GLU:OE2	1:A:279:ARG:NH1	0.52	2.43	8	1
1:A:255:TRP:CZ3	1:A:290:THR:OG1	0.52	2.62	10	1
1:A:144:ARG:NH2	1:A:155:PHE:CD1	0.51	2.78	1	1
1:A:141:HIS:O	1:A:143:THR:N	0.51	2.42	2	3
1:A:118:GLU:O	1:A:122:TYR:CD2	0.51	2.63	7	1
1:A:274:GLN:O	1:A:274:GLN:NE2	0.51	2.42	10	1
1:A:189:GLU:OE2	1:A:267:LEU:HD13	0.51	2.04	4	1
1:A:91:THR:HG21	1:A:112:VAL:HG11	0.51	1.81	2	2
1:A:143:THR:CG2	1:A:144:ARG:H	0.51	2.17	5	5
1:A:77:TYR:O	1:A:81:LEU:N	0.51	2.43	6	2
1:A:112:VAL:CG1	1:A:113:VAL:N	0.51	2.73	9	2

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:188:TYR:C	1:A:188:TYR:CD1	0.51	2.83	8	2
1:A:246:ALA:O	1:A:250:ILE:HD13	0.51	2.05	4	1
1:A:299:CYS:SG	1:A:300:LEU:N	0.51	2.83	1	1
1:A:239:ARG:HH12	1:A:304:ILE:CG2	0.51	2.19	1	1
1:A:233:HIS:O	1:A:233:HIS:CG	0.51	2.62	8	4
1:A:274:GLN:NE2	1:A:274:GLN:O	0.51	2.42	5	1
1:A:118:GLU:O	1:A:122:TYR:CD1	0.51	2.64	1	1
1:A:295:PHE:CD1	1:A:295:PHE:O	0.51	2.64	1	2
1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CD1	0.51	2.74	5	4
1:A:137:LEU:HD23	1:A:137:LEU:C	0.51	2.26	2	1
1:A:79:LEU:HD23	1:A:150:ARG:NH2	0.51	2.20	3	1
1:A:141:HIS:CG	1:A:141:HIS:O	0.51	2.63	4	3
1:A:191:LEU:H	1:A:191:LEU:CD1	0.51	2.10	8	2
1:A:276:SER:OG	1:A:280:ARG:NH1	0.51	2.43	9	1
1:A:174:PHE:CD1	1:A:174:PHE:O	0.51	2.63	5	2
1:A:131:ILE:CD1	1:A:244:ILE:HD13	0.51	2.35	2	1
1:A:311:ASN:HD22	1:A:311:ASN:N	0.51	2.04	6	1
1:A:68:ARG:NE	1:A:68:ARG:H	0.51	2.04	6	2
1:A:229:LEU:CD2	1:A:229:LEU:N	0.51	2.73	7	1
1:A:39:LYS:CG	1:A:281:ASN:HD21	0.51	2.18	10	1
1:A:296:LEU:HD12	1:A:296:LEU:N	0.51	2.20	4	1
1:A:169:LEU:N	1:A:170:PRO:CD	0.51	2.74	8	9
1:A:281:ASN:ND2	1:A:282:ASN:ND2	0.51	2.58	6	1
1:A:175:ARG:CG	1:A:199:ARG:NH1	0.51	2.74	8	1
1:A:229:LEU:H	1:A:229:LEU:CD1	0.51	2.18	8	1
1:A:255:TRP:CD1	1:A:255:TRP:O	0.51	2.63	9	1
1:A:75:ASP:OD1	1:A:76:VAL:N	0.51	2.43	9	1
1:A:242:ARG:NH2	1:A:246:ALA:HB2	0.51	2.20	1	1
1:A:255:TRP:C	1:A:255:TRP:CD1	0.51	2.84	1	3
1:A:109:LEU:H	1:A:109:LEU:HD13	0.51	1.65	8	2
1:A:297:HIS:CD2	1:A:297:HIS:O	0.51	2.64	5	1
1:A:73:VAL:HG12	1:A:134:ASP:OD2	0.51	2.06	10	1
1:A:195:THR:O	1:A:198:TRP:CD1	0.51	2.63	4	1
1:A:207:HIS:O	1:A:211:PHE:CD2	0.51	2.64	1	1
1:A:258:TYR:CG	1:A:259:ASN:N	0.51	2.77	1	4
1:A:278:GLU:CG	1:A:279:ARG:N	0.51	2.74	7	2
1:A:162:GLY:O	1:A:166:ASN:ND2	0.51	2.44	5	3
1:A:222:TYR:OH	1:A:241:MET:SD	0.51	2.68	6	2
1:A:81:LEU:HD13	1:A:81:LEU:O	0.51	2.06	10	3
1:A:118:GLU:OE2	1:A:122:TYR:CD1	0.51	2.64	10	1
1:A:120:ASN:ND2	1:A:290:THR:OG1	0.51	2.43	4	1

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:255:TRP:O	1:A:259:ASN:ND2	0.51	2.43	6	1
1:A:215:LEU:C	1:A:215:LEU:HD23	0.50	2.26	2	1
1:A:271:GLN:H	1:A:271:GLN:CD	0.50	2.08	2	1
1:A:259:ASN:ND2	1:A:263:LEU:HD11	0.50	2.21	3	1
1:A:188:TYR:CD1	1:A:188:TYR:C	0.50	2.84	6	1
1:A:39:LYS:NZ	1:A:282:ASN:OD1	0.50	2.45	8	1
1:A:40:TYR:CZ	1:A:44:ILE:CG1	0.50	2.94	1	3
1:A:104:ILE:C	1:A:104:ILE:HD13	0.50	2.26	5	1
1:A:84:ALA:O	1:A:88:PHE:CD2	0.50	2.64	5	2
1:A:30:CYS:O	1:A:32:LEU:N	0.50	2.44	1	4
1:A:152:LEU:HD13	1:A:152:LEU:C	0.50	2.27	2	1
1:A:64:ILE:N	1:A:64:ILE:HD13	0.50	2.20	3	1
1:A:238:HIS:O	1:A:241:MET:SD	0.50	2.70	5	2
1:A:281:ASN:CG	1:A:282:ASN:N	0.50	2.64	10	2
1:A:157:CYS:SG	1:A:161:TRP:CZ3	0.50	2.98	8	1
1:A:269:ARG:CA	1:A:271:GLN:HE22	0.50	2.20	2	1
1:A:110:CYS:SG	1:A:176:GLN:OE1	0.50	2.69	3	1
1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:HD22	0.50	2.03	5	2
1:A:101:ASN:HD22	1:A:101:ASN:N	0.50	2.03	1	3
1:A:134:ASP:OD2	1:A:135:ARG:NH1	0.50	2.45	1	1
1:A:118:GLU:CG	1:A:119:VAL:N	0.50	2.73	3	1
1:A:249:LEU:O	1:A:249:LEU:HD23	0.50	2.06	6	1
1:A:203:ARG:HE	1:A:263:LEU:CD2	0.50	2.18	8	1
1:A:68:ARG:H	1:A:68:ARG:HH11	0.50	1.47	10	1
1:A:77:TYR:CE1	1:A:123:SER:OG	0.50	2.65	10	1
1:A:269:ARG:O	1:A:270:THR:CB	0.50	2.59	8	7
1:A:182:ASN:ND2	1:A:182:ASN:N	0.50	2.58	2	2
1:A:75:ASP:O	1:A:150:ARG:NH1	0.50	2.43	5	1
1:A:275:GLU:N	1:A:275:GLU:CD	0.50	2.65	5	1
1:A:211:PHE:CZ	1:A:256:LEU:CD2	0.50	2.94	9	1
1:A:59:LEU:CD2	1:A:59:LEU:N	0.50	2.75	1	1
1:A:197:LYS:O	1:A:198:TRP:CD2	0.50	2.65	9	5
1:A:191:LEU:H	1:A:191:LEU:CD2	0.50	2.15	8	1
1:A:258:TYR:C	1:A:258:TYR:CD1	0.50	2.84	9	1
1:A:188:TYR:CB	1:A:283:ILE:HG21	0.50	2.37	4	1
1:A:191:LEU:N	1:A:191:LEU:CD1	0.50	2.74	1	2
1:A:197:LYS:C	1:A:198:TRP:CG	0.50	2.85	6	7
1:A:197:LYS:NZ	1:A:199:ARG:HH21	0.50	2.04	5	1
1:A:234:MET:SD	1:A:234:MET:O	0.50	2.70	6	1
1:A:251:PHE:CD1	1:A:293:LEU:HD13	0.50	2.42	6	1
1:A:258:TYR:CZ	1:A:262:LEU:CD1	0.50	2.94	6	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:233:HIS:ND1	1:A:233:HIS:O	0.50	2.44	10	2
1:A:234:MET:O	1:A:234:MET:SD	0.50	2.70	10	2
1:A:88:PHE:CZ	1:A:92:LEU:CD2	0.50	2.95	10	1
1:A:239:ARG:CD	1:A:240:ALA:N	0.50	2.75	2	1
1:A:30:CYS:SG	1:A:30:CYS:O	0.50	2.67	7	1
1:A:151:HIS:C	1:A:151:HIS:ND1	0.50	2.65	4	1
1:A:287:LEU:HD12	1:A:287:LEU:C	0.50	2.28	4	1
1:A:228:THR:CG2	1:A:229:LEU:N	0.49	2.75	6	2
1:A:188:TYR:CD1	1:A:188:TYR:N	0.49	2.78	2	1
1:A:274:GLN:HE21	1:A:274:GLN:H	0.49	1.50	7	1
1:A:50:PHE:CD1	1:A:50:PHE:O	0.49	2.65	9	1
1:A:47:ALA:O	1:A:51:LEU:N	0.49	2.44	3	6
1:A:148:GLN:HE21	1:A:150:ARG:H	0.49	1.50	6	1
1:A:219:LEU:HD12	1:A:219:LEU:N	0.49	2.22	6	2
1:A:176:GLN:NE2	1:A:202:LEU:HD22	0.49	2.22	10	1
1:A:255:TRP:CD1	1:A:255:TRP:C	0.49	2.86	10	1
1:A:305:TYR:CD1	1:A:305:TYR:N	0.49	2.78	4	1
1:A:274:GLN:CD	1:A:274:GLN:N	0.49	2.66	1	3
1:A:81:LEU:O	1:A:85:ASP:N	0.49	2.40	4	3
1:A:272:VAL:O	1:A:273:ILE:HG23	0.49	2.08	5	1
1:A:166:ASN:ND2	1:A:166:ASN:H	0.49	2.04	2	1
1:A:35:GLU:CD	1:A:35:GLU:H	0.49	2.09	2	1
1:A:182:ASN:HD21	1:A:277:CYS:C	0.49	2.10	5	2
1:A:78:LEU:O	1:A:78:LEU:HD13	0.49	2.07	8	1
1:A:128:LEU:HD12	1:A:129:ALA:H	0.49	1.61	1	1
1:A:252:LEU:CD1	1:A:255:TRP:HE1	0.49	2.19	2	3
1:A:114:SER:OG	1:A:187:CYS:SG	0.49	2.70	6	3
1:A:166:ASN:O	1:A:166:ASN:ND2	0.49	2.45	8	1
1:A:188:TYR:OH	1:A:280:ARG:NH2	0.49	2.46	8	1
1:A:182:ASN:CG	1:A:281:ASN:ND2	0.49	2.66	9	2
1:A:193:ASN:ND2	1:A:200:MET:SD	0.49	2.86	10	1
1:A:287:LEU:O	1:A:287:LEU:HD13	0.49	2.07	10	1
1:A:259:ASN:ND2	1:A:259:ASN:C	0.49	2.66	4	1
1:A:59:LEU:HD22	1:A:59:LEU:N	0.49	2.22	1	1
1:A:209:PHE:CG	1:A:209:PHE:O	0.49	2.66	2	1
1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:ND2	0.49	2.58	3	2
1:A:143:THR:HB	1:A:152:LEU:HD22	0.49	1.84	9	1
1:A:297:HIS:ND1	1:A:297:HIS:O	0.49	2.45	9	1
1:A:209:PHE:C	1:A:209:PHE:CD1	0.49	2.86	1	1
1:A:74:THR:OG1	1:A:78:LEU:HD23	0.49	2.07	1	1
1:A:176:GLN:CD	1:A:177:ALA:N	0.49	2.66	4	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:266:THR:OG1	1:A:280:ARG:NH2	0.49	2.45	6	1
1:A:154:LYS:O	1:A:157:CYS:SG	0.49	2.70	7	1
1:A:131:ILE:HD12	1:A:244:ILE:HD13	0.49	1.85	2	1
1:A:218:MET:SD	1:A:222:TYR:OH	0.49	2.70	6	2
1:A:48:LEU:O	1:A:48:LEU:HD23	0.49	2.08	3	1
1:A:222:TYR:CZ	1:A:226:LEU:HD11	0.49	2.42	5	1
1:A:227:ARG:C	1:A:227:ARG:NE	0.49	2.66	6	1
1:A:125:ILE:HD11	1:A:206:PRO:O	0.49	2.08	7	1
1:A:146:LEU:H	1:A:146:LEU:HD23	0.49	1.68	8	1
1:A:226:LEU:O	1:A:230:PHE:CD2	0.49	2.66	8	1
1:A:157:CYS:O	1:A:161:TRP:CD1	0.49	2.66	1	3
1:A:176:GLN:CG	1:A:177:ALA:H	0.49	2.20	1	2
1:A:273:ILE:C	1:A:275:GLU:H	0.49	2.11	5	9
1:A:258:TYR:OH	1:A:286:ALA:CB	0.49	2.61	7	2
1:A:285:ARG:O	1:A:285:ARG:CZ	0.49	2.61	6	1
1:A:117:LYS:NZ	1:A:121:PHE:CE1	0.49	2.74	7	1
1:A:59:LEU:O	1:A:62:LEU:HD23	0.49	2.08	8	1
1:A:267:LEU:O	1:A:269:ARG:NH1	0.48	2.46	3	1
1:A:63:VAL:O	1:A:67:SER:N	0.48	2.46	9	3
1:A:171:PHE:CG	1:A:172:PHE:N	0.48	2.78	10	2
1:A:139:ILE:HG22	1:A:140:VAL:HG13	0.48	1.85	6	1
1:A:218:MET:O	1:A:222:TYR:CG	0.48	2.65	6	1
1:A:287:LEU:HD13	1:A:288:ASP:H	0.48	1.64	8	1
1:A:180:PRO:C	1:A:181:ASN:ND2	0.48	2.66	10	1
1:A:91:THR:HG21	1:A:116:LEU:HD21	0.48	1.84	4	1
1:A:151:HIS:C	1:A:151:HIS:HD1	0.48	2.12	4	1
1:A:147:THR:CG2	1:A:148:GLN:N	0.48	2.76	8	2
1:A:189:GLU:CG	1:A:263:LEU:HD22	0.48	2.38	6	1
1:A:194:ASP:N	1:A:194:ASP:OD1	0.48	2.45	6	2
1:A:281:ASN:ND2	1:A:282:ASN:HD22	0.48	2.06	6	1
1:A:46:TYR:CE1	1:A:285:ARG:NH2	0.48	2.80	6	1
1:A:39:LYS:NZ	1:A:282:ASN:CG	0.48	2.67	9	1
1:A:295:PHE:CZ	1:A:299:CYS:SG	0.48	3.06	4	1
1:A:276:SER:O	1:A:280:ARG:CG	0.48	2.61	1	1
1:A:71:ARG:NE	1:A:71:ARG:C	0.48	2.66	1	1
1:A:279:ARG:O	1:A:283:ILE:CG2	0.48	2.62	3	1
1:A:249:LEU:O	1:A:249:LEU:HD13	0.48	2.09	7	2
1:A:280:ARG:O	1:A:283:ILE:CG2	0.48	2.60	7	1
1:A:71:ARG:NE	1:A:71:ARG:O	0.48	2.46	1	1
1:A:209:PHE:CD1	1:A:209:PHE:C	0.48	2.87	2	1
1:A:216:PHE:CG	1:A:217:VAL:N	0.48	2.81	2	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:182:ASN:ND2	1:A:277:CYS:C	0.48	2.67	5	2
1:A:84:ALA:O	1:A:88:PHE:CE1	0.48	2.67	5	2
1:A:148:GLN:NE2	1:A:149:LYS:N	0.48	2.61	6	1
1:A:229:LEU:CB	1:A:238:HIS:CD2	0.48	2.96	7	1
1:A:107:THR:HG22	1:A:178:TYR:CE1	0.48	2.43	9	1
1:A:122:TYR:CD1	1:A:122:TYR:N	0.48	2.78	7	3
1:A:86:LEU:HD13	1:A:86:LEU:O	0.48	2.09	3	2
1:A:76:VAL:CG1	1:A:77:TYR:N	0.48	2.77	6	3
1:A:126:LEU:O	1:A:129:ALA:N	0.48	2.46	8	4
1:A:95:TRP:C	1:A:95:TRP:CD2	0.48	2.87	7	1
1:A:75:ASP:OD2	1:A:150:ARG:NH1	0.48	2.46	9	1
1:A:40:TYR:CD1	1:A:281:ASN:CG	0.48	2.87	4	1
1:A:72:SER:C	1:A:74:THR:N	0.48	2.67	9	2
1:A:95:TRP:CD1	1:A:95:TRP:C	0.48	2.87	9	3
1:A:229:LEU:N	1:A:229:LEU:HD22	0.48	2.23	7	1
1:A:237:LYS:CD	1:A:237:LYS:N	0.48	2.77	7	1
1:A:75:ASP:OD2	1:A:150:ARG:NE	0.48	2.47	7	2
1:A:249:LEU:HD23	1:A:249:LEU:O	0.48	2.08	4	1
1:A:92:LEU:HD12	1:A:92:LEU:C	0.48	2.29	2	1
1:A:35:GLU:OE2	1:A:103:TRP:CH2	0.48	2.67	5	1
1:A:194:ASP:CG	1:A:199:ARG:NE	0.48	2.67	6	1
1:A:40:TYR:C	1:A:40:TYR:CD1	0.48	2.87	8	1
1:A:207:HIS:C	1:A:207:HIS:CD2	0.48	2.87	7	1
1:A:179:HIS:O	1:A:179:HIS:CD2	0.48	2.67	8	1
1:A:215:LEU:O	1:A:219:LEU:CD1	0.48	2.62	9	1
1:A:40:TYR:OH	1:A:186:VAL:HG21	0.48	2.09	10	1
1:A:101:ASN:OD1	1:A:102:GLY:N	0.48	2.47	4	1
1:A:75:ASP:CG	1:A:76:VAL:N	0.48	2.67	5	6
1:A:72:SER:OG	1:A:305:TYR:CZ	0.48	2.64	2	1
1:A:63:VAL:CG1	1:A:64:ILE:N	0.48	2.77	2	2
1:A:59:LEU:N	1:A:59:LEU:CD2	0.48	2.76	7	1
1:A:126:LEU:O	1:A:129:ALA:CB	0.47	2.62	3	2
1:A:123:SER:O	1:A:127:LEU:CB	0.47	2.62	7	3
1:A:75:ASP:CG	1:A:150:ARG:NH2	0.47	2.66	6	1
1:A:29:PRO:O	1:A:32:LEU:HD13	0.47	2.08	7	2
1:A:59:LEU:N	1:A:59:LEU:HD22	0.47	2.22	7	1
1:A:109:LEU:CD2	1:A:110:CYS:SG	0.47	3.02	8	2
1:A:35:GLU:O	1:A:37:LEU:CD2	0.47	2.62	8	1
1:A:88:PHE:CZ	1:A:92:LEU:HD21	0.47	2.44	10	1
1:A:77:TYR:CZ	1:A:127:LEU:HD13	0.47	2.44	4	1
1:A:269:ARG:HH12	1:A:279:ARG:NH2	0.47	2.07	4	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:176:GLN:NE2	1:A:189:GLU:C	0.47	2.67	1	1
1:A:83:LEU:O	1:A:87:LEU:N	0.47	2.42	10	3
1:A:271:GLN:CD	1:A:279:ARG:NH2	0.47	2.68	2	1
1:A:255:TRP:CH2	1:A:259:ASN:CG	0.47	2.87	3	1
1:A:255:TRP:CE2	1:A:259:ASN:CG	0.47	2.87	6	1
1:A:51:LEU:C	1:A:51:LEU:HD13	0.47	2.30	8	1
1:A:285:ARG:C	1:A:285:ARG:NE	0.47	2.67	10	1
1:A:38:ASN:ND2	1:A:38:ASN:C	0.47	2.68	6	6
1:A:35:GLU:N	1:A:35:GLU:CD	0.47	2.68	2	1
1:A:191:LEU:HD11	1:A:280:ARG:NE	0.47	2.24	5	1
1:A:143:THR:HG22	1:A:144:ARG:HE	0.47	1.69	7	1
1:A:57:ASN:ND2	1:A:291:GLU:CD	0.47	2.68	7	1
1:A:107:THR:HG22	1:A:107:THR:O	0.47	2.09	9	1
1:A:71:ARG:CZ	1:A:71:ARG:O	0.47	2.62	9	1
1:A:301:ASN:ND2	1:A:301:ASN:C	0.47	2.68	2	1
1:A:171:PHE:C	1:A:171:PHE:CD1	0.47	2.88	4	4
1:A:257:PRO:O	1:A:261:VAL:CG2	0.47	2.61	9	1
1:A:72:SER:C	1:A:74:THR:H	0.47	2.13	9	1
1:A:192:GLY:O	1:A:199:ARG:CG	0.47	2.63	2	2
1:A:120:ASN:ND2	1:A:120:ASN:O	0.47	2.46	2	1
1:A:236:GLN:CD	1:A:237:LYS:N	0.47	2.68	2	2
1:A:282:ASN:C	1:A:282:ASN:ND2	0.47	2.68	2	2
1:A:79:LEU:HD23	1:A:150:ARG:CZ	0.47	2.39	3	2
1:A:295:PHE:C	1:A:295:PHE:CD1	0.47	2.86	3	2
1:A:78:LEU:HD13	1:A:78:LEU:O	0.47	2.10	3	2
1:A:95:TRP:C	1:A:95:TRP:CD1	0.47	2.86	5	1
1:A:69:VAL:CG2	1:A:69:VAL:O	0.47	2.63	6	4
1:A:181:ASN:N	1:A:181:ASN:ND2	0.47	2.60	6	1
1:A:266:THR:OG1	1:A:279:ARG:CZ	0.47	2.62	7	1
1:A:104:ILE:CG2	1:A:105:PHE:N	0.47	2.78	10	1
1:A:131:ILE:O	1:A:135:ARG:CG	0.47	2.63	10	1
1:A:176:GLN:HE22	1:A:189:GLU:C	0.47	2.12	1	1
1:A:35:GLU:CD	1:A:35:GLU:N	0.47	2.68	8	1
1:A:73:VAL:HG12	1:A:240:ALA:HB1	0.47	1.85	8	1
1:A:101:ASN:CG	1:A:102:GLY:N	0.47	2.67	9	1
1:A:105:PHE:CG	1:A:105:PHE:O	0.47	2.66	1	1
1:A:246:ALA:O	1:A:250:ILE:N	0.47	2.44	8	2
1:A:175:ARG:NH2	1:A:201:VAL:HG23	0.47	2.25	5	1
1:A:264:ALA:O	1:A:268:MET:CG	0.47	2.63	5	1
1:A:95:TRP:O	1:A:95:TRP:CD1	0.47	2.68	5	1
1:A:222:TYR:OH	1:A:241:MET:CE	0.47	2.62	6	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:37:LEU:CB	1:A:182:ASN:HD21	0.47	2.22	8	1
1:A:57:ASN:C	1:A:57:ASN:ND2	0.47	2.67	8	1
1:A:166:ASN:C	1:A:166:ASN:ND2	0.47	2.67	10	3
1:A:244:ILE:HD12	1:A:245:PHE:N	0.47	2.24	10	1
1:A:125:ILE:HD12	1:A:125:ILE:N	0.47	2.24	1	1
1:A:216:PHE:C	1:A:216:PHE:CD1	0.47	2.87	2	1
1:A:207:HIS:CD2	1:A:207:HIS:C	0.47	2.87	3	2
1:A:77:TYR:CD2	1:A:297:HIS:CD2	0.47	3.03	2	1
1:A:77:TYR:O	1:A:81:LEU:CB	0.47	2.63	2	1
1:A:79:LEU:HD22	1:A:154:LYS:HD3	0.47	1.87	2	1
1:A:215:LEU:HD21	1:A:249:LEU:HG	0.47	1.87	6	1
1:A:121:PHE:CD1	1:A:121:PHE:C	0.47	2.87	8	1
1:A:73:VAL:O	1:A:76:VAL:HG12	0.47	2.10	9	1
1:A:148:GLN:CD	1:A:148:GLN:N	0.47	2.68	10	1
1:A:216:PHE:CD1	1:A:216:PHE:C	0.47	2.87	10	1
1:A:274:GLN:OE1	1:A:274:GLN:N	0.47	2.48	4	1
1:A:245:PHE:C	1:A:245:PHE:CD1	0.47	2.87	1	2
1:A:299:CYS:SG	1:A:300:LEU:HD12	0.47	2.50	7	2
1:A:110:CYS:SG	1:A:177:ALA:O	0.47	2.73	2	1
1:A:108:PHE:CD1	1:A:108:PHE:N	0.47	2.82	3	1
1:A:228:THR:HG23	1:A:229:LEU:H	0.47	1.69	6	2
1:A:225:THR:O	1:A:229:LEU:CD1	0.47	2.63	8	1
1:A:276:SER:OG	1:A:280:ARG:CZ	0.47	2.63	4	1
1:A:135:ARG:CZ	1:A:237:LYS:O	0.46	2.63	1	2
1:A:242:ARG:CZ	1:A:245:PHE:CE1	0.46	2.98	2	1
1:A:101:ASN:ND2	1:A:102:GLY:N	0.46	2.62	3	1
1:A:79:LEU:HD22	1:A:80:ASN:N	0.46	2.24	5	1
1:A:191:LEU:CD1	1:A:191:LEU:H	0.46	2.21	6	1
1:A:147:THR:CG2	1:A:151:HIS:NE2	0.46	2.78	7	1
1:A:126:LEU:CD2	1:A:160:CYS:SG	0.46	3.03	8	2
1:A:50:PHE:CE2	1:A:54:LEU:HD12	0.46	2.46	8	1
1:A:177:ALA:HB3	1:A:179:HIS:ND1	0.46	2.25	9	1
1:A:203:ARG:O	1:A:203:ARG:NE	0.46	2.48	9	1
1:A:29:PRO:O	1:A:32:LEU:CD1	0.46	2.63	9	1
1:A:182:ASN:ND2	1:A:183:SER:H	0.46	2.07	1	1
1:A:38:ASN:C	1:A:38:ASN:ND2	0.46	2.68	2	3
1:A:238:HIS:ND1	1:A:238:HIS:O	0.46	2.48	3	1
1:A:252:LEU:HD23	1:A:255:TRP:CD1	0.46	2.44	6	1
1:A:244:ILE:O	1:A:247:VAL:HG22	0.46	2.10	7	1
1:A:52:LEU:C	1:A:52:LEU:HD23	0.46	2.31	9	1
1:A:68:ARG:HH11	1:A:68:ARG:CG	0.46	2.23	4	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:310:GLN:OE1	1:A:310:GLN:N	0.46	2.47	1	1
1:A:37:LEU:HD23	1:A:182:ASN:ND2	0.46	2.24	6	1
1:A:171:PHE:CZ	1:A:178:TYR:CZ	0.46	3.04	2	2
1:A:219:LEU:N	1:A:219:LEU:HD22	0.46	2.26	2	1
1:A:285:ARG:NE	1:A:285:ARG:C	0.46	2.69	2	1
1:A:236:GLN:OE1	1:A:236:GLN:N	0.46	2.47	3	1
1:A:66:TYR:O	1:A:68:ARG:CZ	0.46	2.64	6	1
1:A:239:ARG:NH2	1:A:305:TYR:CE1	0.46	2.84	8	1
1:A:152:LEU:O	1:A:152:LEU:HD13	0.46	2.11	2	1
1:A:274:GLN:CD	1:A:274:GLN:H	0.46	2.12	3	1
1:A:130:CYS:SG	1:A:153:VAL:CG2	0.46	3.03	5	1
1:A:229:LEU:O	1:A:229:LEU:CD2	0.46	2.59	8	1
1:A:34:THR:O	1:A:34:THR:CG2	0.46	2.62	5	1
1:A:79:LEU:HD13	1:A:79:LEU:O	0.46	2.09	7	2
1:A:147:THR:HG22	1:A:151:HIS:NE2	0.46	2.26	7	1
1:A:211:PHE:CZ	1:A:256:LEU:HD23	0.46	2.46	9	1
1:A:44:ILE:HD13	1:A:99:LYS:NZ	0.46	2.26	4	1
1:A:219:LEU:N	1:A:219:LEU:CD2	0.46	2.78	2	1
1:A:189:GLU:OE2	1:A:207:HIS:CG	0.46	2.69	5	1
1:A:171:PHE:CD2	1:A:172:PHE:N	0.46	2.84	10	2
1:A:219:LEU:N	1:A:219:LEU:CD1	0.46	2.79	10	2
1:A:66:TYR:O	1:A:66:TYR:CG	0.46	2.69	7	1
1:A:40:TYR:CE2	1:A:183:SER:O	0.46	2.69	8	1
1:A:126:LEU:CD1	1:A:160:CYS:SG	0.46	2.98	9	1
1:A:71:ARG:CZ	1:A:236:GLN:OE1	0.46	2.64	9	1
1:A:169:LEU:HD12	1:A:173:LEU:HD13	0.46	1.88	4	1
1:A:182:ASN:N	1:A:182:ASN:HD22	0.46	2.07	2	1
1:A:57:ASN:O	1:A:61:MET:CB	0.46	2.64	7	2
1:A:218:MET:N	1:A:218:MET:SD	0.46	2.89	5	1
1:A:129:ALA:O	1:A:133:VAL:CG2	0.46	2.62	6	1
1:A:121:PHE:CE2	1:A:207:HIS:CE1	0.46	3.03	6	1
1:A:176:GLN:H	1:A:199:ARG:NE	0.46	2.09	8	1
1:A:202:LEU:HD23	1:A:206:PRO:HG2	0.46	1.88	4	1
1:A:257:PRO:O	1:A:261:VAL:CG1	0.46	2.64	1	1
1:A:101:ASN:HD22	1:A:102:GLY:N	0.46	2.09	3	1
1:A:143:THR:CG2	1:A:144:ARG:N	0.46	2.74	5	3
1:A:297:HIS:C	1:A:297:HIS:ND1	0.46	2.68	6	2
1:A:176:GLN:N	1:A:199:ARG:HH11	0.46	2.07	9	1
1:A:91:THR:O	1:A:91:THR:HG22	0.46	2.11	9	1
1:A:146:LEU:CD2	1:A:146:LEU:O	0.45	2.60	6	1
1:A:286:ALA:O	1:A:289:ALA:CB	0.45	2.64	6	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:221:CYS:O	1:A:224:PHE:CB	0.45	2.64	8	1
1:A:191:LEU:HD23	1:A:280:ARG:HH21	0.45	1.70	9	1
1:A:224:PHE:O	1:A:227:ARG:CZ	0.45	2.65	2	1
1:A:69:VAL:O	1:A:69:VAL:HG13	0.45	2.11	3	1
1:A:216:PHE:N	1:A:216:PHE:CD1	0.45	2.82	5	1
1:A:76:VAL:CA	1:A:150:ARG:HH21	0.45	2.24	7	1
1:A:297:HIS:ND1	1:A:297:HIS:N	0.45	2.64	8	1
1:A:71:ARG:NH2	1:A:236:GLN:OE1	0.45	2.49	9	1
1:A:43:ILE:CG1	1:A:281:ASN:OD1	0.45	2.64	10	1
1:A:171:PHE:CZ	1:A:178:TYR:OH	0.45	2.63	4	1
1:A:68:ARG:NH1	1:A:68:ARG:CG	0.45	2.78	4	1
1:A:137:LEU:HD22	1:A:137:LEU:N	0.45	2.27	1	1
1:A:239:ARG:NH1	1:A:304:ILE:CG2	0.45	2.79	1	1
1:A:36:THR:CG2	1:A:37:LEU:N	0.45	2.79	1	3
1:A:120:ASN:C	1:A:120:ASN:ND2	0.45	2.70	2	1
1:A:170:PRO:O	1:A:174:PHE:N	0.45	2.46	9	4
1:A:244:ILE:CG2	1:A:245:PHE:N	0.45	2.79	3	1
1:A:274:GLN:N	1:A:274:GLN:HE21	0.45	2.08	3	2
1:A:149:LYS:HB2	1:A:149:LYS:HZ2	0.45	1.70	5	1
1:A:186:VAL:HG21	1:A:281:ASN:O	0.45	2.11	6	1
1:A:218:MET:SD	1:A:245:PHE:CG	0.45	3.09	8	1
1:A:57:ASN:HD21	1:A:85:ASP:CG	0.45	2.14	8	1
1:A:80:ASN:OD1	1:A:81:LEU:N	0.45	2.50	10	1
1:A:82:ALA:O	1:A:86:LEU:CB	0.45	2.64	10	1
1:A:160:CYS:O	1:A:164:SER:OG	0.45	2.35	1	1
1:A:137:LEU:O	1:A:137:LEU:HD23	0.45	2.10	3	1
1:A:227:ARG:HH11	1:A:228:THR:HG22	0.45	1.71	5	1
1:A:61:MET:HE1	1:A:82:ALA:HB2	0.45	1.87	7	1
1:A:92:LEU:O	1:A:95:TRP:N	0.45	2.47	10	2
1:A:227:ARG:C	1:A:227:ARG:HE	0.45	2.15	6	1
1:A:273:ILE:H	1:A:274:GLN:HE21	0.45	1.54	7	1
1:A:240:ALA:O	1:A:244:ILE:HD13	0.45	2.11	4	1
1:A:34:THR:O	1:A:37:LEU:CD1	0.45	2.64	4	1
1:A:124:GLY:HA2	1:A:127:LEU:HD12	0.45	1.86	1	1
1:A:77:TYR:CE2	1:A:81:LEU:HD23	0.45	2.45	3	1
1:A:40:TYR:CD1	1:A:281:ASN:OD1	0.45	2.70	4	1
1:A:127:LEU:O	1:A:130:CYS:SG	0.45	2.68	1	1
1:A:204:ILE:HD12	1:A:208:THR:OG1	0.45	2.12	2	1
1:A:226:LEU:HD12	1:A:226:LEU:C	0.45	2.31	2	1
1:A:57:ASN:CG	1:A:61:MET:SD	0.45	2.95	2	1
1:A:287:LEU:O	1:A:287:LEU:HD12	0.45	2.12	9	2

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:72:SER:OG	1:A:73:VAL:N	0.45	2.49	10	2
1:A:188:TYR:OH	1:A:280:ARG:NH1	0.45	2.50	7	1
1:A:256:LEU:HD23	1:A:260:LEU:HD13	0.45	1.87	7	1
1:A:211:PHE:C	1:A:211:PHE:CD1	0.45	2.87	9	1
1:A:103:TRP:C	1:A:103:TRP:CD1	0.45	2.87	4	1
1:A:39:LYS:NZ	1:A:272:VAL:CG1	0.45	2.80	1	1
1:A:190:VAL:CG2	1:A:192:GLY:O	0.45	2.64	3	1
1:A:50:PHE:CZ	1:A:292:ILE:HG22	0.45	2.47	8	1
1:A:151:HIS:O	1:A:155:PHE:CD2	0.45	2.70	9	1
1:A:282:ASN:ND2	1:A:282:ASN:C	0.45	2.70	10	2
1:A:148:GLN:N	1:A:148:GLN:OE1	0.45	2.50	10	1
1:A:36:THR:HG23	1:A:37:LEU:H	0.45	1.70	1	2
1:A:179:HIS:CD2	1:A:179:HIS:C	0.45	2.87	2	1
1:A:234:MET:N	1:A:234:MET:CE	0.45	2.80	2	1
1:A:33:GLU:CD	1:A:33:GLU:N	0.45	2.70	2	1
1:A:171:PHE:CD1	1:A:171:PHE:C	0.45	2.86	5	3
1:A:166:ASN:HD22	1:A:166:ASN:C	0.45	2.16	7	1
1:A:277:CYS:O	1:A:281:ASN:OD1	0.45	2.35	8	1
1:A:125:ILE:HD11	1:A:210:GLY:CA	0.45	2.42	1	1
1:A:194:ASP:O	1:A:198:TRP:N	0.45	2.48	2	3
1:A:245:PHE:CD1	1:A:245:PHE:C	0.45	2.88	2	1
1:A:71:ARG:NH1	1:A:236:GLN:OE1	0.45	2.50	6	2
1:A:135:ARG:O	1:A:138:ALA:CB	0.45	2.62	7	2
1:A:266:THR:O	1:A:271:GLN:NE2	0.45	2.49	8	1
1:A:111:LYS:O	1:A:111:LYS:CD	0.45	2.65	10	1
1:A:118:GLU:OE2	1:A:122:TYR:CG	0.45	2.69	10	1
1:A:236:GLN:N	1:A:236:GLN:CD	0.45	2.70	10	1
1:A:207:HIS:NE2	1:A:260:LEU:CD1	0.45	2.80	10	1
1:A:264:ALA:C	1:A:268:MET:SD	0.44	2.96	1	1
1:A:57:ASN:C	1:A:61:MET:SD	0.44	2.95	1	1
1:A:69:VAL:HG13	1:A:69:VAL:O	0.44	2.11	1	1
1:A:84:ALA:O	1:A:88:PHE:CE2	0.44	2.70	5	1
1:A:68:ARG:N	1:A:68:ARG:HH11	0.44	2.10	10	1
1:A:166:ASN:HD22	1:A:169:LEU:HD12	0.44	1.72	1	1
1:A:236:GLN:HE22	1:A:237:LYS:NZ	0.44	2.08	3	1
1:A:98:SER:OG	1:A:104:ILE:HG22	0.44	2.12	3	1
1:A:236:GLN:OE1	1:A:237:LYS:N	0.44	2.48	5	1
1:A:221:CYS:O	1:A:225:THR:HG23	0.44	2.12	6	2
1:A:174:PHE:CD1	1:A:174:PHE:N	0.44	2.80	7	1
1:A:40:TYR:CE1	1:A:281:ASN:ND2	0.44	2.83	7	1
1:A:76:VAL:N	1:A:150:ARG:NH2	0.44	2.63	7	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:THR:OG1	1:A:297:HIS:O	0.44	2.35	8	1
1:A:295:PHE:O	1:A:299:CYS:SG	0.44	2.75	9	1
1:A:61:MET:SD	1:A:61:MET:C	0.44	2.95	9	1
1:A:127:LEU:O	1:A:131:ILE:HD13	0.44	2.11	4	1
1:A:95:TRP:CD1	1:A:95:TRP:O	0.44	2.70	4	1
1:A:71:ARG:CD	1:A:71:ARG:N	0.44	2.80	1	1
1:A:255:TRP:O	1:A:259:ASN:OD1	0.44	2.36	6	1
1:A:179:HIS:N	1:A:179:HIS:ND1	0.44	2.65	7	1
1:A:94:ILE:N	1:A:94:ILE:CD1	0.44	2.80	7	1
1:A:68:ARG:CD	1:A:68:ARG:N	0.44	2.80	8	2
1:A:181:ASN:C	1:A:182:ASN:ND2	0.44	2.71	4	1
1:A:40:TYR:CE2	1:A:44:ILE:CD1	0.44	2.98	4	1
1:A:271:GLN:OE1	1:A:271:GLN:O	0.44	2.34	8	2
1:A:202:LEU:HD23	1:A:202:LEU:C	0.44	2.32	5	1
1:A:132:SER:OG	1:A:135:ARG:CZ	0.44	2.64	6	1
1:A:121:PHE:CG	1:A:122:TYR:N	0.44	2.85	8	1
1:A:295:PHE:C	1:A:297:HIS:N	0.44	2.71	6	1
1:A:207:HIS:CE1	1:A:208:THR:OG1	0.44	2.71	8	1
1:A:31:MET:SD	1:A:103:TRP:CD1	0.44	3.11	9	1
1:A:29:PRO:CB	1:A:31:MET:SD	0.44	3.06	9	1
1:A:287:LEU:HD13	1:A:287:LEU:O	0.44	2.12	1	1
1:A:273:ILE:C	1:A:275:GLU:N	0.44	2.70	5	8
1:A:49:VAL:O	1:A:52:LEU:CD2	0.44	2.66	8	2
1:A:285:ARG:CZ	1:A:285:ARG:O	0.44	2.66	2	1
1:A:285:ARG:O	1:A:285:ARG:NH2	0.44	2.50	2	1
1:A:101:ASN:OD1	1:A:101:ASN:N	0.44	2.51	5	3
1:A:290:THR:O	1:A:293:LEU:HD12	0.44	2.13	5	1
1:A:131:ILE:HD12	1:A:132:SER:N	0.44	2.27	6	1
1:A:258:TYR:CZ	1:A:262:LEU:HD11	0.44	2.47	6	1
1:A:189:GLU:OE2	1:A:267:LEU:HD11	0.44	2.12	7	1
1:A:282:ASN:HD22	1:A:282:ASN:N	0.44	2.09	7	1
1:A:131:ILE:CG2	1:A:135:ARG:NH1	0.44	2.80	9	1
1:A:97:ALA:O	1:A:101:ASN:OD1	0.44	2.36	4	2
1:A:238:HIS:C	1:A:238:HIS:ND1	0.44	2.71	4	1
1:A:223:GLY:HA2	1:A:226:LEU:HD23	0.44	1.88	2	1
1:A:127:LEU:C	1:A:127:LEU:CD1	0.44	2.85	5	1
1:A:279:ARG:C	1:A:279:ARG:CD	0.44	2.86	5	1
1:A:293:LEU:CD2	1:A:293:LEU:C	0.44	2.85	5	1
1:A:215:LEU:HD23	1:A:215:LEU:C	0.44	2.33	7	1
1:A:86:LEU:O	1:A:90:LEU:CB	0.44	2.66	9	2
1:A:50:PHE:CD1	1:A:292:ILE:CG2	0.44	3.01	9	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:155:PHE:CD1	1:A:155:PHE:C	0.44	2.88	10	1
1:A:121:PHE:O	1:A:211:PHE:CE2	0.44	2.71	10	1
1:A:83:LEU:CD2	1:A:83:LEU:N	0.44	2.69	10	1
1:A:131:ILE:HG22	1:A:135:ARG:NH1	0.44	2.28	4	1
1:A:153:VAL:O	1:A:157:CYS:SG	0.44	2.71	2	1
1:A:63:VAL:HG13	1:A:64:ILE:H	0.44	1.69	2	2
1:A:285:ARG:CD	1:A:285:ARG:C	0.44	2.86	3	2
1:A:114:SER:O	1:A:118:GLU:OE1	0.44	2.36	5	1
1:A:134:ASP:OD1	1:A:134:ASP:O	0.44	2.36	7	1
1:A:61:MET:SD	1:A:82:ALA:HB2	0.44	2.53	9	1
1:A:57:ASN:O	1:A:61:MET:CG	0.44	2.66	1	1
1:A:308:ILE:O	1:A:309:GLY:O	0.44	2.36	3	1
1:A:84:ALA:O	1:A:88:PHE:CZ	0.44	2.70	5	1
1:A:109:LEU:HD21	1:A:178:TYR:O	0.44	2.13	7	1
1:A:130:CYS:O	1:A:134:ASP:OD1	0.44	2.35	8	1
1:A:297:HIS:HD1	1:A:297:HIS:N	0.44	2.11	8	1
1:A:64:ILE:HD11	1:A:297:HIS:NE2	0.44	2.28	10	1
1:A:236:GLN:CD	1:A:237:LYS:H	0.43	2.16	2	1
1:A:163:LEU:C	1:A:163:LEU:CD1	0.43	2.86	10	5
1:A:61:MET:C	1:A:61:MET:SD	0.43	2.95	5	1
1:A:76:VAL:O	1:A:80:ASN:OD1	0.43	2.36	5	1
1:A:50:PHE:CE1	1:A:292:ILE:HD13	0.43	2.48	6	1
1:A:241:MET:HA	1:A:244:ILE:HD12	0.43	1.90	7	1
1:A:275:GLU:OE2	1:A:278:GLU:CB	0.43	2.66	9	1
1:A:35:GLU:O	1:A:37:LEU:HD13	0.43	2.13	10	1
1:A:57:ASN:OD1	1:A:57:ASN:N	0.43	2.49	4	1
1:A:79:LEU:HD23	1:A:154:LYS:HZ3	0.43	1.72	1	1
1:A:152:LEU:O	1:A:156:VAL:N	0.43	2.46	8	2
1:A:176:GLN:H	1:A:199:ARG:CZ	0.43	2.26	8	1
1:A:207:HIS:ND1	1:A:208:THR:OG1	0.43	2.42	8	1
1:A:101:ASN:CG	1:A:103:TRP:H	0.43	2.17	9	1
1:A:226:LEU:CD1	1:A:230:PHE:O	0.43	2.66	10	1
1:A:279:ARG:HH11	1:A:279:ARG:CG	0.43	2.26	4	1
1:A:36:THR:C	1:A:37:LEU:HD22	0.43	2.33	4	1
1:A:174:PHE:CG	1:A:174:PHE:O	0.43	2.72	5	2
1:A:68:ARG:H	1:A:68:ARG:NE	0.43	2.11	4	2
1:A:212:ILE:CG2	1:A:213:VAL:N	0.43	2.81	5	1
1:A:256:LEU:HD13	1:A:256:LEU:O	0.43	2.12	5	1
1:A:114:SER:O	1:A:118:GLU:OE2	0.43	2.37	7	1
1:A:163:LEU:O	1:A:166:ASN:OD1	0.43	2.37	7	1
1:A:200:MET:C	1:A:200:MET:SD	0.43	2.95	9	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:79:LEU:O	1:A:79:LEU:HD13	0.43	2.13	9	1
1:A:112:VAL:HG12	1:A:113:VAL:N	0.43	2.27	10	1
1:A:142:ALA:O	1:A:143:THR:CG2	0.43	2.65	1	1
1:A:94:ILE:HD12	1:A:94:ILE:N	0.43	2.28	2	1
1:A:230:PHE:CG	1:A:231:LYS:N	0.43	2.87	7	2
1:A:211:PHE:CD1	1:A:211:PHE:C	0.43	2.87	3	1
1:A:40:TYR:OH	1:A:44:ILE:HD11	0.43	2.13	5	1
1:A:188:TYR:CD1	1:A:188:TYR:O	0.43	2.71	6	1
1:A:189:GLU:HG2	1:A:263:LEU:HD22	0.43	1.90	6	1
1:A:72:SER:OG	1:A:74:THR:OG1	0.43	2.37	7	1
1:A:50:PHE:CD1	1:A:50:PHE:C	0.43	2.91	9	1
1:A:244:ILE:HG22	1:A:245:PHE:N	0.43	2.29	4	2
1:A:271:GLN:N	1:A:271:GLN:CD	0.43	2.72	2	1
1:A:52:LEU:HD23	1:A:52:LEU:O	0.43	2.13	2	1
1:A:272:VAL:C	1:A:274:GLN:HE21	0.43	2.17	6	1
1:A:204:ILE:CG2	1:A:205:LEU:N	0.43	2.81	7	1
1:A:217:VAL:O	1:A:221:CYS:SG	0.43	2.76	8	1
1:A:239:ARG:CD	1:A:239:ARG:C	0.43	2.86	9	1
1:A:130:CYS:O	1:A:134:ASP:OD2	0.43	2.36	10	1
1:A:29:PRO:C	1:A:31:MET:H	0.43	2.17	10	1
1:A:271:GLN:O	1:A:272:VAL:C	0.43	2.57	9	9
1:A:236:GLN:HE22	1:A:237:LYS:HZ3	0.43	1.57	3	1
1:A:42:VAL:CG1	1:A:43:ILE:N	0.43	2.81	3	1
1:A:95:TRP:CD1	1:A:184:SER:OG	0.43	2.64	3	1
1:A:116:LEU:C	1:A:116:LEU:CD1	0.43	2.86	6	2
1:A:190:VAL:H	1:A:203:ARG:HH21	0.43	1.55	6	1
1:A:279:ARG:CZ	1:A:280:ARG:NH2	0.43	2.81	6	1
1:A:79:LEU:C	1:A:79:LEU:CD1	0.43	2.86	4	4
1:A:136:TYR:O	1:A:140:VAL:O	0.43	2.36	7	2
1:A:265:ASP:OD2	1:A:271:GLN:OE1	0.43	2.37	7	2
1:A:182:ASN:CB	1:A:281:ASN:ND2	0.43	2.82	8	1
1:A:219:LEU:HD13	1:A:219:LEU:O	0.43	2.13	8	1
1:A:61:MET:SD	1:A:81:LEU:HD12	0.43	2.53	8	1
1:A:69:VAL:O	1:A:69:VAL:CG2	0.43	2.65	10	1
1:A:239:ARG:O	1:A:240:ALA:C	0.43	2.57	7	6
1:A:183:SER:OG	1:A:183:SER:O	0.43	2.36	2	1
1:A:271:GLN:N	1:A:271:GLN:OE1	0.43	2.51	2	1
1:A:288:ASP:O	1:A:292:ILE:CG1	0.43	2.67	2	3
1:A:230:PHE:N	1:A:230:PHE:CD1	0.43	2.83	3	1
1:A:190:VAL:HG12	1:A:199:ARG:NH2	0.43	2.29	8	1
1:A:120:ASN:OD1	1:A:291:GLU:OE1	0.43	2.36	8	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:296:LEU:HD22	1:A:300:LEU:HD12	0.43	1.90	8	1
1:A:101:ASN:H	1:A:101:ASN:ND2	0.43	2.09	10	1
1:A:121:PHE:O	1:A:211:PHE:CZ	0.43	2.72	10	1
1:A:284:GLY:C	1:A:286:ALA:N	0.43	2.68	5	2
1:A:182:ASN:ND2	1:A:277:CYS:O	0.43	2.52	5	1
1:A:115:LEU:CD2	1:A:115:LEU:C	0.43	2.87	6	1
1:A:236:GLN:C	1:A:238:HIS:H	0.43	2.16	6	1
1:A:164:SER:O	1:A:168:SER:OG	0.43	2.37	1	1
1:A:247:VAL:HG12	1:A:300:LEU:CD2	0.43	2.43	1	1
1:A:188:TYR:CD2	1:A:189:GLU:O	0.43	2.72	2	1
1:A:37:LEU:O	1:A:40:TYR:N	0.43	2.52	3	1
1:A:113:VAL:HG11	1:A:187:CYS:N	0.43	2.28	5	1
1:A:79:LEU:HD11	1:A:154:LYS:HE2	0.43	1.91	5	1
1:A:228:THR:CG2	1:A:229:LEU:H	0.43	2.27	6	1
1:A:251:PHE:CZ	1:A:293:LEU:HD22	0.43	2.49	6	1
1:A:190:VAL:CG1	1:A:199:ARG:NH2	0.43	2.81	8	1
1:A:116:LEU:O	1:A:116:LEU:HD12	0.43	2.13	9	1
1:A:256:LEU:HD21	1:A:260:LEU:HD13	0.43	1.90	9	1
1:A:296:LEU:CD1	1:A:296:LEU:N	0.43	2.82	4	1
1:A:43:ILE:HD13	1:A:43:ILE:N	0.43	2.29	2	1
1:A:254:CYS:SG	1:A:255:TRP:N	0.43	2.91	3	2
1:A:176:GLN:OE1	1:A:177:ALA:O	0.43	2.37	8	2
1:A:109:LEU:HD22	1:A:110:CYS:SG	0.43	2.54	8	2
1:A:139:ILE:HG22	1:A:140:VAL:N	0.43	2.29	8	1
1:A:57:ASN:HD22	1:A:58:SER:N	0.43	2.11	8	1
1:A:129:ALA:O	1:A:133:VAL:N	0.42	2.46	2	1
1:A:274:GLN:H	1:A:274:GLN:CD	0.42	2.17	2	1
1:A:261:VAL:O	1:A:265:ASP:CB	0.42	2.67	9	7
1:A:163:LEU:HD13	1:A:163:LEU:O	0.42	2.13	3	2
1:A:77:TYR:O	1:A:80:ASN:OD1	0.42	2.37	5	1
1:A:108:PHE:CE1	1:A:111:LYS:NZ	0.42	2.68	8	1
1:A:219:LEU:CD1	1:A:219:LEU:C	0.42	2.87	8	1
1:A:35:GLU:H	1:A:35:GLU:CD	0.42	2.16	8	1
1:A:62:LEU:HD12	1:A:63:VAL:N	0.42	2.29	9	1
1:A:30:CYS:C	1:A:32:LEU:N	0.42	2.72	5	3
1:A:152:LEU:C	1:A:152:LEU:CD1	0.42	2.87	10	2
1:A:181:ASN:OD1	1:A:186:VAL:O	0.42	2.37	6	1
1:A:243:VAL:CG1	1:A:244:ILE:N	0.42	2.82	8	1
1:A:272:VAL:O	1:A:279:ARG:CZ	0.42	2.68	10	1
1:A:72:SER:O	1:A:75:ASP:OD2	0.42	2.37	3	1
1:A:239:ARG:HH21	1:A:243:VAL:CG1	0.42	2.28	6	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:79:LEU:HD12	1:A:154:LYS:NZ	0.42	2.29	6	1
1:A:269:ARG:O	1:A:271:GLN:OE1	0.42	2.37	9	1
1:A:268:MET:O	1:A:271:GLN:OE1	0.42	2.37	9	1
1:A:279:ARG:NH1	1:A:279:ARG:CG	0.42	2.81	4	1
1:A:166:ASN:HA	1:A:169:LEU:HD12	0.42	1.90	1	1
1:A:208:THR:O	1:A:212:ILE:N	0.42	2.52	2	1
1:A:30:CYS:O	1:A:33:GLU:OE1	0.42	2.37	5	1
1:A:248:VAL:HG12	1:A:252:LEU:HD11	0.42	1.90	6	1
1:A:50:PHE:CD2	1:A:285:ARG:CZ	0.42	3.02	7	1
1:A:194:ASP:CG	1:A:199:ARG:HE	0.42	2.17	9	1
1:A:57:ASN:ND2	1:A:61:MET:CE	0.42	2.82	6	1
1:A:88:PHE:O	1:A:91:THR:N	0.42	2.52	6	2
1:A:188:TYR:CZ	1:A:280:ARG:NH1	0.42	2.87	7	1
1:A:38:ASN:CG	1:A:39:LYS:N	0.42	2.73	8	1
1:A:151:HIS:O	1:A:155:PHE:CG	0.42	2.72	9	1
1:A:103:TRP:CD2	1:A:104:ILE:O	0.42	2.73	4	1
1:A:110:CYS:N	1:A:187:CYS:SG	0.42	2.92	2	1
1:A:33:GLU:OE1	1:A:33:GLU:N	0.42	2.53	2	1
1:A:143:THR:O	1:A:144:ARG:NH2	0.42	2.53	3	1
1:A:92:LEU:C	1:A:92:LEU:CD1	0.42	2.87	3	2
1:A:197:LYS:HZ3	1:A:199:ARG:HH21	0.42	1.55	5	1
1:A:189:GLU:OE1	1:A:263:LEU:HD13	0.42	2.14	5	1
1:A:274:GLN:NE2	1:A:275:GLU:CD	0.42	2.72	10	1
1:A:55:LEU:CD1	1:A:55:LEU:C	0.42	2.87	10	1
1:A:176:GLN:NE2	1:A:190:VAL:N	0.42	2.67	1	1
1:A:236:GLN:CD	1:A:236:GLN:N	0.42	2.72	1	1
1:A:211:PHE:CZ	1:A:256:LEU:CD1	0.42	3.03	2	1
1:A:98:SER:OG	1:A:183:SER:O	0.42	2.37	5	1
1:A:281:ASN:C	1:A:283:ILE:N	0.42	2.72	7	1
1:A:120:ASN:OD1	1:A:290:THR:OG1	0.42	2.37	8	1
1:A:248:VAL:CG2	1:A:249:LEU:N	0.42	2.82	10	1
1:A:203:ARG:HH22	1:A:264:ALA:HB2	0.42	1.74	10	1
1:A:258:TYR:OH	1:A:259:ASN:ND2	0.42	2.52	1	1
1:A:285:ARG:O	1:A:288:ASP:OD2	0.42	2.38	1	1
1:A:189:GLU:OE1	1:A:190:VAL:O	0.42	2.38	2	1
1:A:135:ARG:NH1	1:A:237:LYS:O	0.42	2.52	3	1
1:A:135:ARG:HH22	1:A:237:LYS:CD	0.42	2.27	5	1
1:A:311:ASN:ND2	1:A:311:ASN:O	0.42	2.51	8	1
1:A:149:LYS:CE	1:A:150:ARG:CZ	0.42	2.98	10	1
1:A:42:VAL:O	1:A:45:ALA:HB3	0.42	2.15	1	2
1:A:55:LEU:C	1:A:55:LEU:CD1	0.42	2.86	8	2

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:215:LEU:O	1:A:215:LEU:HD13	0.42	2.14	5	1
1:A:95:TRP:CG	1:A:96:ALA:N	0.42	2.84	7	1
1:A:166:ASN:ND2	1:A:169:LEU:HD12	0.42	2.30	1	1
1:A:265:ASP:OD1	1:A:271:GLN:OE1	0.42	2.38	3	1
1:A:274:GLN:CG	1:A:274:GLN:O	0.42	2.68	5	2
1:A:48:LEU:HD13	1:A:48:LEU:O	0.42	2.14	5	1
1:A:148:GLN:NE2	1:A:149:LYS:H	0.42	2.13	6	1
1:A:203:ARG:NE	1:A:263:LEU:CD2	0.42	2.83	8	1
1:A:248:VAL:HG22	1:A:297:HIS:NE2	0.42	2.30	8	1
1:A:171:PHE:O	1:A:171:PHE:CD1	0.42	2.73	9	1
1:A:176:GLN:CG	1:A:177:ALA:N	0.41	2.82	1	1
1:A:182:ASN:ND2	1:A:183:SER:OG	0.41	2.52	1	1
1:A:275:GLU:OE2	1:A:278:GLU:OE1	0.41	2.38	2	1
1:A:295:PHE:CD1	1:A:295:PHE:C	0.41	2.91	10	3
1:A:293:LEU:HD12	1:A:293:LEU:O	0.41	2.15	9	1
1:A:266:THR:OG1	1:A:279:ARG:CD	0.41	2.68	10	1
1:A:88:PHE:CD1	1:A:116:LEU:HD13	0.41	2.49	4	1
1:A:239:ARG:HH22	1:A:304:ILE:CG2	0.41	2.28	4	1
1:A:73:VAL:HG22	1:A:305:TYR:OH	0.41	2.15	4	1
1:A:98:SER:CB	1:A:183:SER:O	0.41	2.67	5	1
1:A:87:LEU:O	1:A:91:THR:OG1	0.41	2.36	7	1
1:A:136:TYR:C	1:A:138:ALA:N	0.41	2.72	4	1
1:A:137:LEU:CD2	1:A:137:LEU:N	0.41	2.84	1	1
1:A:271:GLN:OE1	1:A:279:ARG:NH2	0.41	2.50	2	1
1:A:269:ARG:O	1:A:271:GLN:N	0.41	2.52	5	1
1:A:204:ILE:HG23	1:A:205:LEU:N	0.41	2.30	7	1
1:A:269:ARG:O	1:A:270:THR:HG23	0.41	2.16	7	1
1:A:272:VAL:CG2	1:A:278:GLU:OE1	0.41	2.68	9	1
1:A:117:LYS:O	1:A:120:ASN:N	0.41	2.54	1	1
1:A:146:LEU:O	1:A:146:LEU:CD2	0.41	2.68	1	1
1:A:282:ASN:O	1:A:285:ARG:CG	0.41	2.68	2	1
1:A:297:HIS:O	1:A:297:HIS:CG	0.41	2.70	5	1
1:A:181:ASN:O	1:A:182:ASN:CG	0.41	2.59	9	1
1:A:191:LEU:HD23	1:A:280:ARG:NH2	0.41	2.31	9	1
1:A:54:LEU:HD11	1:A:85:ASP:OD2	0.41	2.15	9	1
1:A:205:LEU:CB	1:A:206:PRO:CD	0.41	2.98	10	1
1:A:274:GLN:C	1:A:274:GLN:HE21	0.41	2.18	10	1
1:A:107:THR:O	1:A:111:LYS:CB	0.41	2.69	4	1
1:A:179:HIS:CD2	1:A:179:HIS:O	0.41	2.74	2	1
1:A:54:LEU:HD13	1:A:54:LEU:C	0.41	2.35	3	1
1:A:143:THR:HG21	1:A:147:THR:HB	0.41	1.91	6	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:180:PRO:O	1:A:181:ASN:OD1	0.41	2.38	7	1
1:A:70:GLY:O	1:A:75:ASP:OD1	0.41	2.38	8	1
1:A:278:GLU:O	1:A:282:ASN:ND2	0.41	2.53	4	1
1:A:264:ALA:CB	1:A:268:MET:SD	0.41	3.05	1	1
1:A:117:LYS:NZ	1:A:121:PHE:CE2	0.41	2.89	3	2
1:A:267:LEU:CD1	1:A:267:LEU:C	0.41	2.87	3	1
1:A:296:LEU:C	1:A:298:SER:H	0.41	2.19	3	1
1:A:46:TYR:CE2	1:A:285:ARG:CZ	0.41	3.03	5	1
1:A:163:LEU:O	1:A:163:LEU:HD13	0.41	2.15	7	2
1:A:52:LEU:O	1:A:52:LEU:HD23	0.41	2.15	9	1
1:A:87:LEU:HD23	1:A:116:LEU:HD11	0.41	1.92	10	1
1:A:211:PHE:O	1:A:215:LEU:HD12	0.41	2.16	10	1
1:A:73:VAL:HG21	1:A:244:ILE:HD13	0.41	1.93	10	1
1:A:95:TRP:CD2	1:A:96:ALA:N	0.41	2.89	10	1
1:A:171:PHE:CE2	1:A:178:TYR:CE1	0.41	3.08	4	1
1:A:192:GLY:O	1:A:194:ASP:OD1	0.41	2.39	4	1
1:A:139:ILE:HG22	1:A:140:VAL:HG23	0.41	1.92	1	1
1:A:255:TRP:CD1	1:A:256:LEU:N	0.41	2.89	3	1
1:A:86:LEU:O	1:A:90:LEU:N	0.41	2.45	7	1
1:A:131:ILE:HG23	1:A:135:ARG:CZ	0.41	2.46	8	1
1:A:188:TYR:CE1	1:A:280:ARG:NH1	0.41	2.88	8	1
1:A:186:VAL:HG23	1:A:186:VAL:O	0.41	2.16	10	1
1:A:109:LEU:CD2	1:A:110:CYS:H	0.41	2.23	4	1
1:A:269:ARG:CD	1:A:269:ARG:H	0.41	2.28	4	1
1:A:272:VAL:HG22	1:A:272:VAL:O	0.41	2.16	4	1
1:A:115:LEU:CD1	1:A:115:LEU:C	0.41	2.87	2	2
1:A:141:HIS:CE1	1:A:144:ARG:NH2	0.41	2.88	3	1
1:A:41:VAL:O	1:A:42:VAL:C	0.41	2.58	3	1
1:A:273:ILE:HD12	1:A:279:ARG:CZ	0.41	2.46	6	1
1:A:76:VAL:HG21	1:A:131:ILE:HG12	0.41	1.93	8	1
1:A:280:ARG:HE	1:A:283:ILE:HD12	0.41	1.76	8	1
1:A:115:LEU:C	1:A:115:LEU:CD1	0.41	2.88	10	2
1:A:60:VAL:O	1:A:64:ILE:CG1	0.41	2.69	10	1
1:A:214:PRO:O	1:A:218:MET:CG	0.41	2.69	1	1
1:A:251:PHE:CE2	1:A:297:HIS:NE2	0.41	2.89	1	1
1:A:40:TYR:CZ	1:A:183:SER:OG	0.41	2.74	2	1
1:A:253:LEU:HD13	1:A:253:LEU:O	0.41	2.16	2	1
1:A:86:LEU:O	1:A:87:LEU:C	0.41	2.59	5	2
1:A:221:CYS:SG	1:A:222:TYR:N	0.41	2.93	5	1
1:A:171:PHE:CE1	1:A:178:TYR:CE2	0.41	3.09	5	1
1:A:50:PHE:CZ	1:A:292:ILE:HG21	0.41	2.50	6	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:202:LEU:C	1:A:203:ARG:NH1	0.41	2.74	6	1
1:A:73:VAL:O	1:A:73:VAL:HG12	0.41	2.15	7	1
1:A:310:GLN:HE21	1:A:310:GLN:N	0.41	2.14	8	1
1:A:36:THR:O	1:A:37:LEU:C	0.41	2.60	8	3
1:A:101:ASN:HD21	1:A:103:TRP:C	0.41	2.20	9	1
1:A:117:LYS:O	1:A:120:ASN:ND2	0.41	2.54	10	1
1:A:287:LEU:C	1:A:287:LEU:CD1	0.41	2.87	1	1
1:A:91:THR:HG21	1:A:112:VAL:CG1	0.41	2.46	1	1
1:A:128:LEU:CD1	1:A:128:LEU:C	0.41	2.87	2	1
1:A:141:HIS:O	1:A:141:HIS:ND1	0.41	2.54	3	1
1:A:203:ARG:C	1:A:203:ARG:HE	0.41	2.18	7	1
1:A:204:ILE:O	1:A:208:THR:OG1	0.41	2.39	7	1
1:A:272:VAL:O	1:A:272:VAL:CG1	0.41	2.63	9	1
1:A:254:CYS:HB2	1:A:293:LEU:HD22	0.41	1.92	9	1
1:A:39:LYS:CG	1:A:281:ASN:ND2	0.41	2.84	10	1
1:A:74:THR:HG1	1:A:297:HIS:CD2	0.40	2.33	2	1
1:A:179:HIS:CD2	1:A:179:HIS:N	0.40	2.89	3	1
1:A:211:PHE:CZ	1:A:256:LEU:HD22	0.40	2.50	3	1
1:A:154:LYS:NZ	1:A:157:CYS:CB	0.40	2.84	5	1
1:A:146:LEU:H	1:A:146:LEU:HD13	0.40	1.76	6	1
1:A:135:ARG:O	1:A:138:ALA:CA	0.40	2.68	7	1
1:A:50:PHE:CD2	1:A:285:ARG:NH1	0.40	2.89	7	1
1:A:191:LEU:N	1:A:191:LEU:CD2	0.40	2.84	8	1
1:A:40:TYR:CZ	1:A:44:ILE:CD1	0.40	3.03	1	1
1:A:126:LEU:HD22	1:A:160:CYS:SG	0.40	2.56	3	1
1:A:117:LYS:NZ	1:A:188:TYR:CE1	0.40	2.88	5	1
1:A:48:LEU:CD1	1:A:48:LEU:C	0.40	2.87	5	1
1:A:40:TYR:CG	1:A:182:ASN:CG	0.40	2.94	6	1
1:A:240:ALA:O	1:A:244:ILE:N	0.40	2.47	7	1
1:A:35:GLU:OE2	1:A:36:THR:N	0.40	2.54	8	1
1:A:190:VAL:HG11	1:A:199:ARG:O	0.40	2.16	10	1
1:A:71:ARG:CB	1:A:71:ARG:CZ	0.40	2.99	3	1
1:A:116:LEU:CD1	1:A:116:LEU:C	0.40	2.87	5	1
1:A:144:ARG:C	1:A:145:THR:OG1	0.40	2.60	5	1
1:A:40:TYR:CZ	1:A:281:ASN:ND2	0.40	2.90	7	1
1:A:54:LEU:HD11	1:A:291:GLU:OE2	0.40	2.17	7	1
1:A:51:LEU:HD23	1:A:51:LEU:C	0.40	2.35	7	1
1:A:298:SER:O	1:A:302:PRO:CD	0.40	2.70	8	1
1:A:275:GLU:OE1	1:A:278:GLU:OE2	0.40	2.38	1	1
1:A:67:SER:OG	1:A:67:SER:O	0.40	2.39	5	1
1:A:189:GLU:OE2	1:A:189:GLU:O	0.40	2.39	6	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:229:LEU:N	1:A:229:LEU:CD1	0.40	2.85	8	1
1:A:188:TYR:OH	1:A:267:LEU:HD21	0.40	2.16	8	1
1:A:64:ILE:CD1	1:A:297:HIS:CE1	0.40	3.05	10	1
1:A:64:ILE:O	1:A:67:SER:OG	0.40	2.39	4	1
1:A:184:SER:OG	1:A:281:ASN:ND2	0.40	2.55	2	1
1:A:144:ARG:O	1:A:145:THR:OG1	0.40	2.37	3	1
1:A:189:GLU:CD	1:A:189:GLU:N	0.40	2.75	9	1
1:A:61:MET:SD	1:A:62:LEU:N	0.40	2.95	9	1

## 5.2 Torsion angles [i](#)

### 5.2.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	283/309 (92%)	249±2 (88±1%)	25±1 (9±0%)	9±1 (3±0%)	6	37
All	All	2830/3090 (92%)	2488 (88%)	249 (9%)	93 (3%)	6	37

All 15 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	33	GLU	10
1	A	274	GLN	10
1	A	269	ARG	10
1	A	145	THR	10
1	A	272	VAL	10
1	A	189	GLU	9
1	A	275	GLU	9
1	A	69	VAL	5
1	A	232	ALA	4
1	A	273	ILE	4
1	A	142	ALA	4
1	A	31	MET	4
1	A	237	LYS	2
1	A	309	GLY	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	35	GLU	1

## 5.2.2 Protein sidechains [i](#)

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	251/272 (92%)	165±5 (66±2%)	86±5 (34±2%)	1	10
All	All	2510/2720 (92%)	1650 (66%)	860 (34%)	1	10

All 222 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	109	LEU	10
1	A	49	VAL	10
1	A	38	ASN	10
1	A	195	THR	10
1	A	145	THR	10
1	A	171	PHE	9
1	A	307	PHE	9
1	A	193	ASN	9
1	A	55	LEU	8
1	A	258	TYR	8
1	A	233	HIS	8
1	A	57	ASN	8
1	A	146	LEU	8
1	A	101	ASN	8
1	A	282	ASN	8
1	A	216	PHE	8
1	A	287	LEU	8
1	A	114	SER	7
1	A	157	CYS	7
1	A	274	GLN	7
1	A	285	ARG	7
1	A	255	TRP	7
1	A	181	ASN	7
1	A	68	ARG	7

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	188	TYR	7
1	A	53	SER	7
1	A	198	TRP	7
1	A	207	HIS	7
1	A	37	LEU	7
1	A	295	PHE	7
1	A	164	SER	7
1	A	234	MET	7
1	A	279	ARG	7
1	A	75	ASP	7
1	A	231	LYS	7
1	A	147	THR	7
1	A	217	VAL	6
1	A	120	ASN	6
1	A	242	ARG	6
1	A	197	LYS	6
1	A	281	ASN	6
1	A	41	VAL	6
1	A	227	ARG	6
1	A	166	ASN	6
1	A	104	ILE	6
1	A	30	CYS	6
1	A	92	LEU	6
1	A	154	LYS	6
1	A	270	THR	6
1	A	61	MET	6
1	A	251	PHE	6
1	A	194	ASP	6
1	A	191	LEU	6
1	A	297	HIS	6
1	A	160	CYS	5
1	A	253	LEU	5
1	A	134	ASP	5
1	A	81	LEU	5
1	A	150	ARG	5
1	A	80	ASN	5
1	A	208	THR	5
1	A	280	ARG	5
1	A	168	SER	5
1	A	245	PHE	5
1	A	203	ARG	5
1	A	298	SER	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	215	LEU	5
1	A	239	ARG	5
1	A	241	MET	5
1	A	110	CYS	5
1	A	236	GLN	5
1	A	178	TYR	5
1	A	271	GLN	5
1	A	211	PHE	5
1	A	254	CYS	5
1	A	259	ASN	5
1	A	77	TYR	5
1	A	132	SER	5
1	A	151	HIS	5
1	A	108	PHE	5
1	A	275	GLU	5
1	A	135	ARG	5
1	A	111	LYS	4
1	A	218	MET	4
1	A	95	TRP	4
1	A	209	PHE	4
1	A	144	ARG	4
1	A	221	CYS	4
1	A	256	LEU	4
1	A	71	ARG	4
1	A	299	CYS	4
1	A	276	SER	4
1	A	288	ASP	4
1	A	107	THR	4
1	A	244	ILE	4
1	A	237	LYS	4
1	A	176	GLN	4
1	A	31	MET	4
1	A	39	LYS	4
1	A	204	ILE	4
1	A	35	GLU	4
1	A	187	CYS	4
1	A	308	ILE	4
1	A	155	PHE	4
1	A	116	LEU	3
1	A	48	LEU	3
1	A	43	ILE	3
1	A	186	VAL	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	225	THR	3
1	A	153	VAL	3
1	A	249	LEU	3
1	A	184	SER	3
1	A	296	LEU	3
1	A	148	GLN	3
1	A	72	SER	3
1	A	88	PHE	3
1	A	182	ASN	3
1	A	74	THR	3
1	A	59	LEU	3
1	A	290	THR	3
1	A	293	LEU	3
1	A	122	TYR	3
1	A	172	PHE	3
1	A	161	TRP	3
1	A	149	LYS	3
1	A	277	CYS	3
1	A	243	VAL	3
1	A	169	LEU	3
1	A	34	THR	3
1	A	165	MET	3
1	A	230	PHE	3
1	A	136	TYR	3
1	A	179	HIS	3
1	A	200	MET	3
1	A	247	VAL	3
1	A	202	LEU	3
1	A	167	LEU	3
1	A	199	ARG	3
1	A	115	LEU	3
1	A	175	ARG	3
1	A	65	LEU	3
1	A	212	ILE	3
1	A	83	LEU	3
1	A	121	PHE	3
1	A	291	GLU	3
1	A	228	THR	3
1	A	303	ILE	3
1	A	137	LEU	2
1	A	64	ILE	2
1	A	86	LEU	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	190	VAL	2
1	A	127	LEU	2
1	A	220	PHE	2
1	A	50	PHE	2
1	A	158	LEU	2
1	A	219	LEU	2
1	A	32	LEU	2
1	A	156	VAL	2
1	A	174	PHE	2
1	A	117	LYS	2
1	A	261	VAL	2
1	A	46	TYR	2
1	A	90	LEU	2
1	A	269	ARG	2
1	A	266	THR	2
1	A	300	LEU	2
1	A	112	VAL	2
1	A	311	ASN	2
1	A	133	VAL	2
1	A	79	LEU	2
1	A	60	VAL	2
1	A	189	GLU	2
1	A	224	PHE	2
1	A	267	LEU	2
1	A	292	ILE	2
1	A	118	GLU	2
1	A	238	HIS	2
1	A	310	GLN	2
1	A	54	LEU	2
1	A	103	TRP	2
1	A	278	GLU	2
1	A	105	PHE	2
1	A	229	LEU	2
1	A	273	ILE	2
1	A	99	LYS	2
1	A	205	LEU	1
1	A	69	VAL	1
1	A	87	LEU	1
1	A	272	VAL	1
1	A	98	SER	1
1	A	119	VAL	1
1	A	40	TYR	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	62	LEU	1
1	A	265	ASP	1
1	A	226	LEU	1
1	A	85	ASP	1
1	A	36	THR	1
1	A	222	TYR	1
1	A	268	MET	1
1	A	250	ILE	1
1	A	76	VAL	1
1	A	58	SER	1
1	A	126	LEU	1
1	A	128	LEU	1
1	A	141	HIS	1
1	A	94	ILE	1
1	A	33	GLU	1
1	A	283	ILE	1
1	A	262	LEU	1
1	A	66	TYR	1
1	A	173	LEU	1
1	A	248	VAL	1
1	A	163	LEU	1
1	A	44	ILE	1
1	A	304	ILE	1
1	A	131	ILE	1
1	A	125	ILE	1
1	A	51	LEU	1
1	A	301	ASN	1
1	A	140	VAL	1
1	A	78	LEU	1
1	A	305	TYR	1

### 5.2.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

### 5.3 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains ⓘ

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



## 5.4 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

## 5.5 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

## 5.6 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

## 5.7 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

## 6 Chemical shift validation [i](#)

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 28% for the well-defined parts and 28% for the entire structure.

### 6.1 Chemical shift list 1

File name: input\_cs.cif

Chemical shift list name: *assigned\_chem\_shift\_list\_2*

#### 6.1.1 Bookkeeping [i](#)

The following table shows the results of parsing the chemical shift list and reports the number of nuclei with statistically unusual chemical shifts.

Total number of shifts	1120
Number of shifts mapped to atoms	1120
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	0

#### 6.1.2 Chemical shift referencing [i](#)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction $\pm$ precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	299	$-0.41 \pm 0.22$	None needed ( $< 0.5$ ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	234	$1.65 \pm 0.14$	Should be applied
$^{13}\text{C}'$	289	$0.40 \pm 0.14$	None needed ( $< 0.5$ ppm)
$^{15}\text{N}$	298	$-0.67 \pm 0.20$	Should be applied

#### 6.1.3 Completeness of resonance assignments [i](#)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 28%, i.e. 1033 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 3625. 0 out of 77 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	$^1\text{H}$	$^{13}\text{C}$	$^{15}\text{N}$
Backbone	815/1402 (58%)	0/559 (0%)	543/568 (96%)	272/275 (99%)
Sidechain	218/1839 (12%)	0/1069 (0%)	218/696 (31%)	0/74 (0%)

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

	<b>Total</b>	<b><sup>1</sup>H</b>	<b><sup>13</sup>C</b>	<b><sup>15</sup>N</b>
Aromatic	0/384 (0%)	0/202 (0%)	0/163 (0%)	0/19 (0%)
Overall	1033/3625 (28%)	0/1830 (0%)	761/1427 (53%)	272/368 (74%)

Note: This is a solid-state NMR structure, where hydrogen atoms are typically not assigned a chemical shift value, which may lead to lower completeness of assignment measure.

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 28%, i.e. 1077 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 3787. 0 out of 79 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	<b>Total</b>	<b><sup>1</sup>H</b>	<b><sup>13</sup>C</b>	<b><sup>15</sup>N</b>
Backbone	851/1462 (58%)	0/583 (0%)	567/592 (96%)	284/287 (99%)
Sidechain	226/1916 (12%)	0/1115 (0%)	226/723 (31%)	0/78 (0%)
Aromatic	0/409 (0%)	0/215 (0%)	0/171 (0%)	0/23 (0%)
Overall	1077/3787 (28%)	0/1913 (0%)	793/1486 (53%)	284/388 (73%)

Note: This is a solid-state NMR structure, where hydrogen atoms are typically not assigned a chemical shift value, which may lead to lower completeness of assignment measure.

#### 6.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

There are no statistically unusual chemical shifts.

#### 6.1.5 Random Coil Index (RCI) plots [i](#)

The image below reports *random coil index* values for the protein chains in the structure. The height of each bar gives a probability of a given residue to be disordered, as predicted from the available chemical shifts and the amino acid sequence. A value above 0.2 is an indication of significant predicted disorder. The colour of the bar shows whether the residue is in the well-defined core (black) or in the ill-defined residue ranges (cyan), as described in section 2 on ensemble composition.

Random coil index (RCI) for chain A:

