



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 17, 2022 – 07:44 AM EST

PDB ID : 1NWV  
Title : SOLUTION STRUCTURE OF A FUNCTIONALLY ACTIVE COMPONENT OF DECAY ACCELERATING FACTOR  
Authors : Uhrinova, S.; Lin, F.; Ball, G.; Bromek, K.; Uhrin, D.; Medof, M.E.; Barlow, P.N.  
Deposited on : 2003-02-07

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:

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 : 2.26  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.26

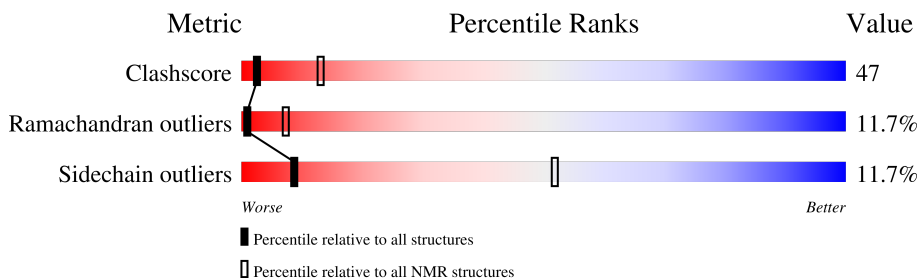
# 1 Overall quality at a glance

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	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	129	 30% 54% 13% •

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 42 models. Model 36 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *closest to the average*.

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:63-A:126 (64)	0.57	36
2	A:127-A:188 (62)	0.51	37

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 4 clusters and 2 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	2, 3, 5, 7, 13, 16, 20, 23, 26, 28, 32, 35, 38, 41, 42
2	1, 9, 10, 11, 12, 14, 29, 30, 33, 34, 37
3	6, 19, 21, 24, 27, 36, 39, 40
4	4, 8, 15, 17, 18, 31
Single-model clusters	22; 25

### 3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1987 atoms, of which 981 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Complement decay-accelerating factor.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	129	1987	636	981	172	190	8	0

There are 2 discrepancies between the modelled and reference sequences:

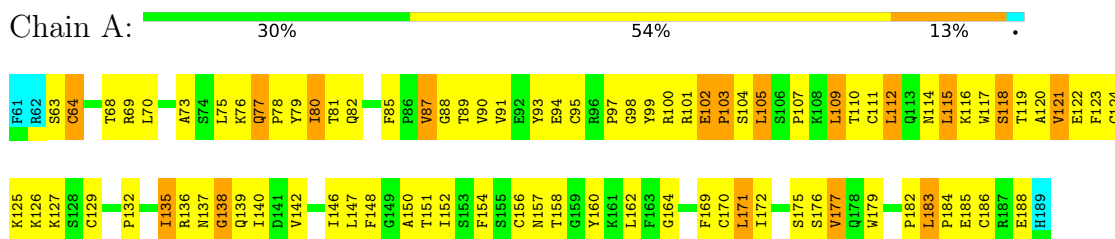
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	61	PHE	-	cloning artifact	UNP P08174
A	189	HIS	-	cloning artifact	UNP P08174

## 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: Complement decay-accelerating factor

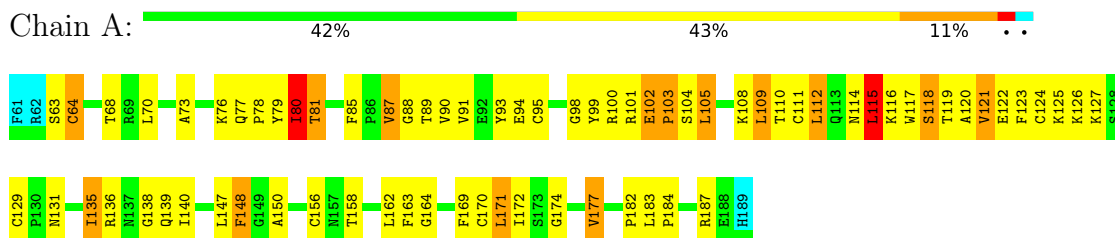


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

#### 4.2.1 Score per residue for model 1

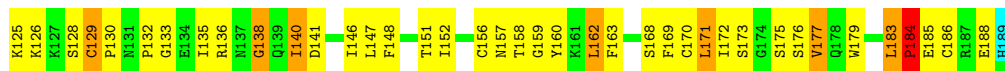
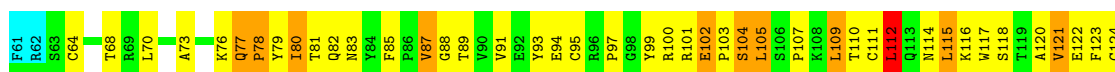
- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



#### 4.2.2 Score per residue for model 2

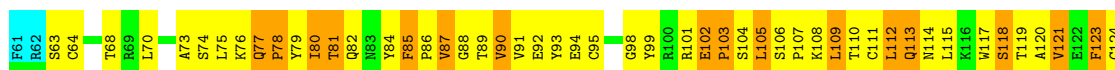
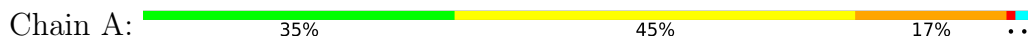
- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor





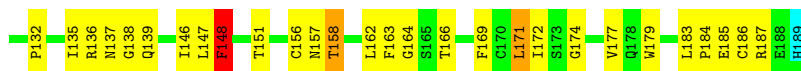
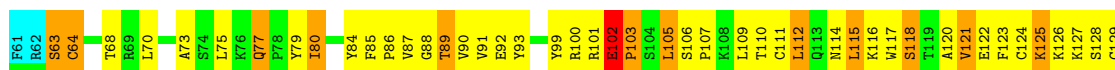
### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



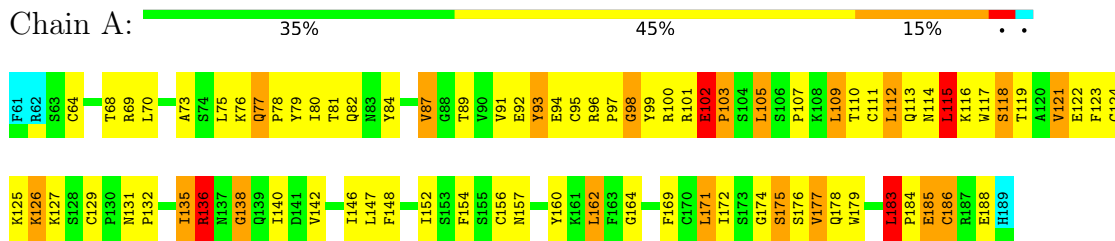
### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



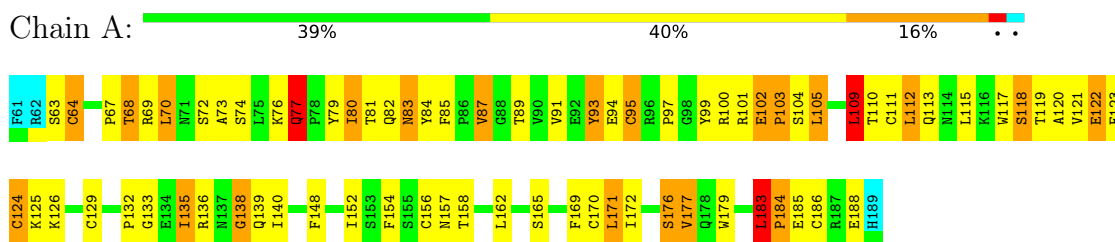
### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



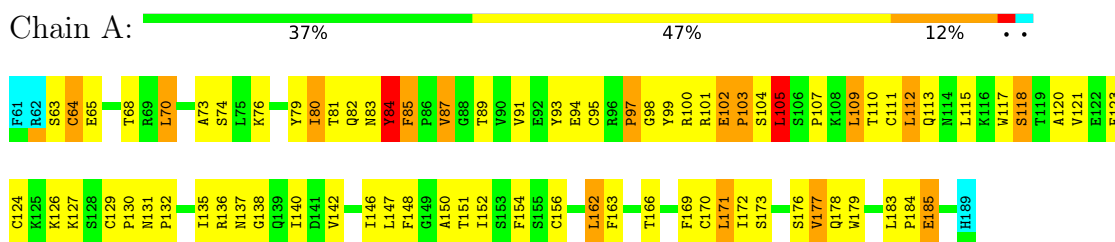
#### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



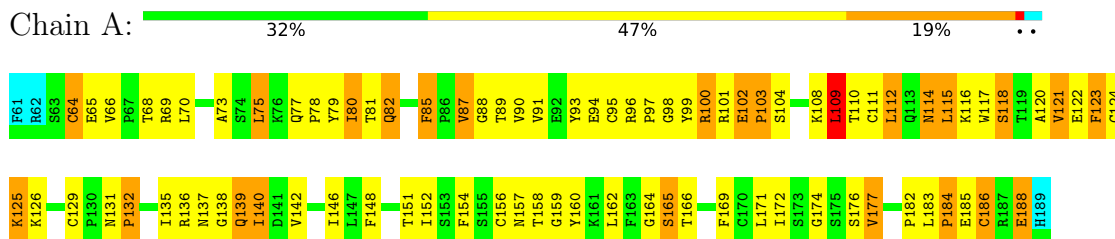
#### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



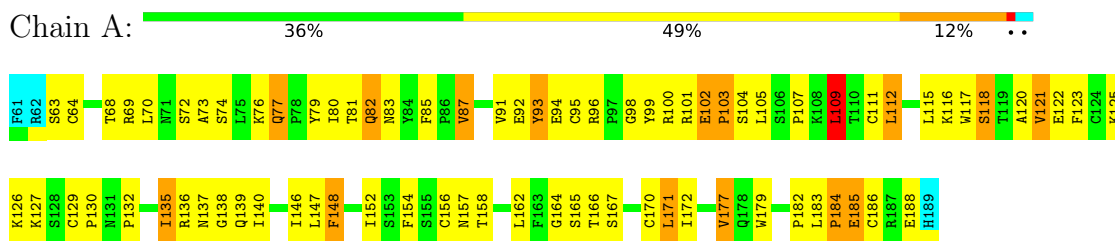
#### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



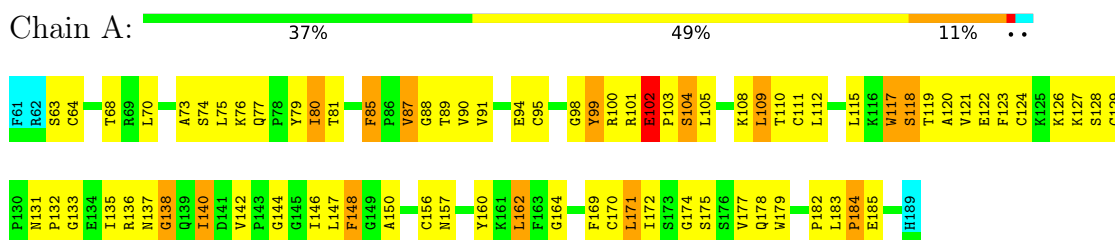
#### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



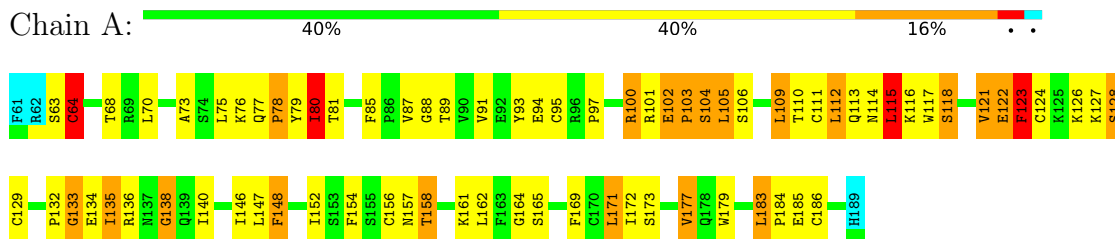
#### 4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



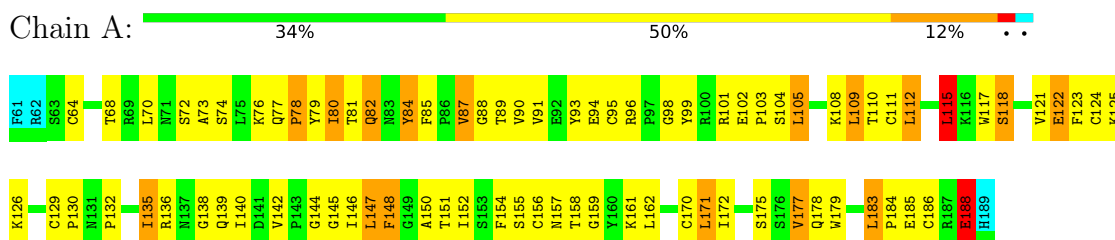
#### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



#### 4.2.13 Score per residue for model 13

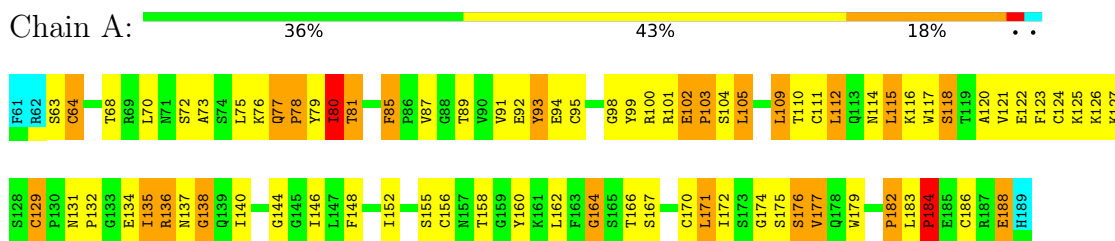
- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor





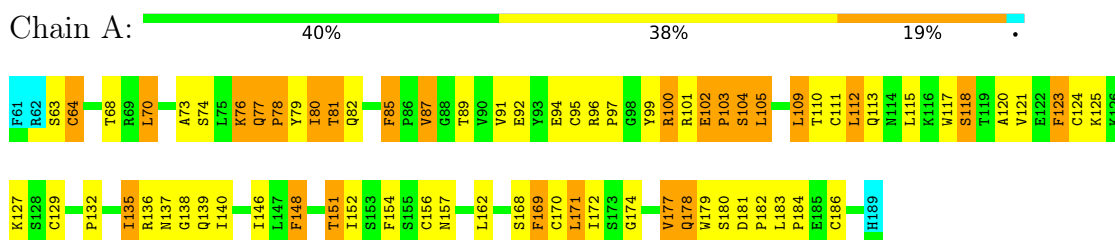
## 4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



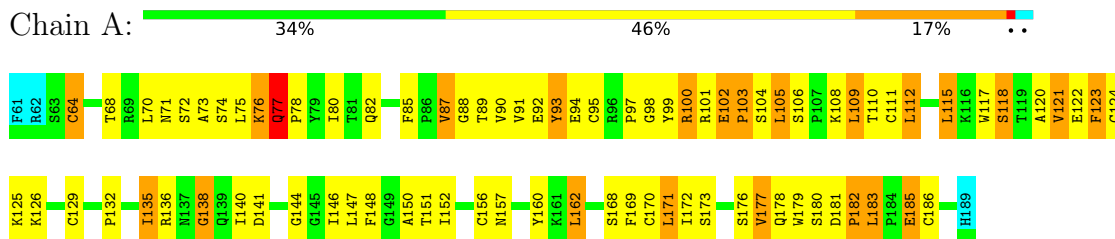
## 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



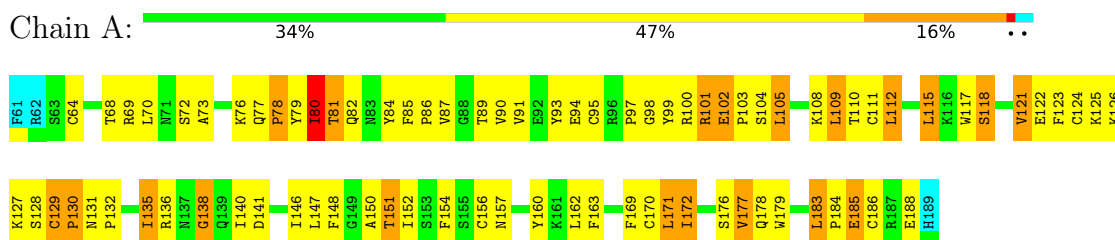
## 4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



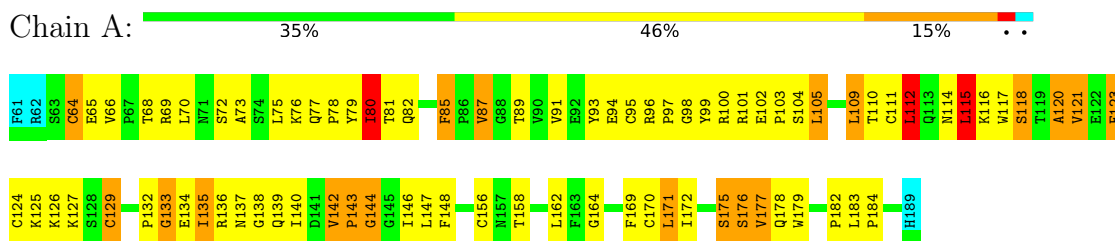
## 4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



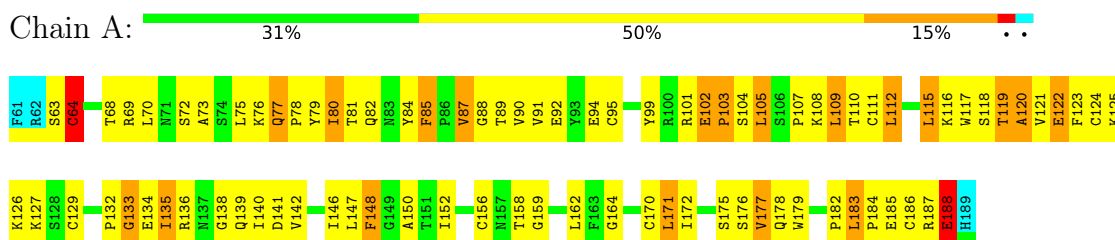
#### 4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



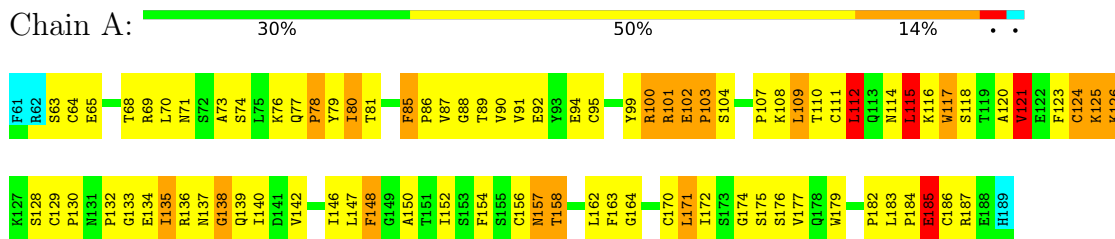
#### 4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



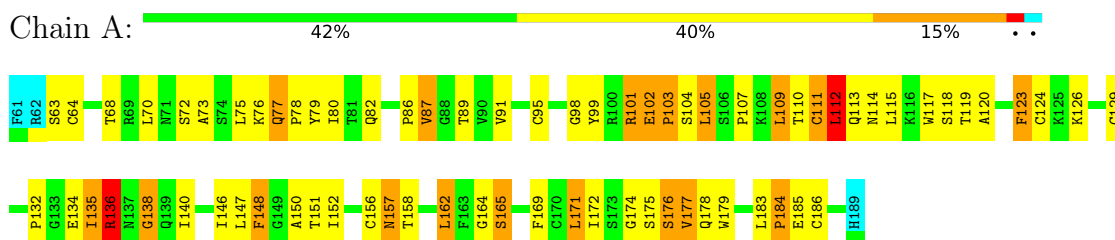
#### 4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



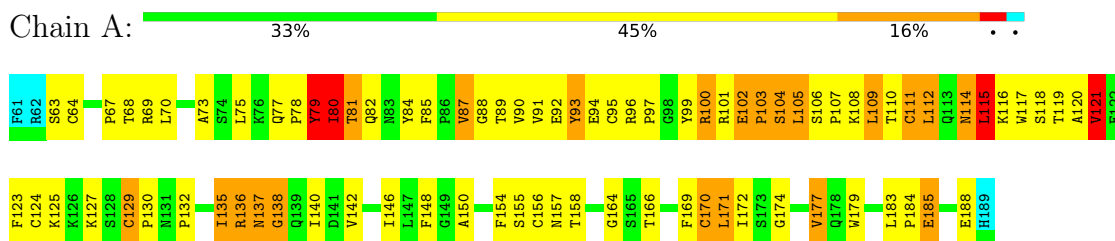
#### 4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



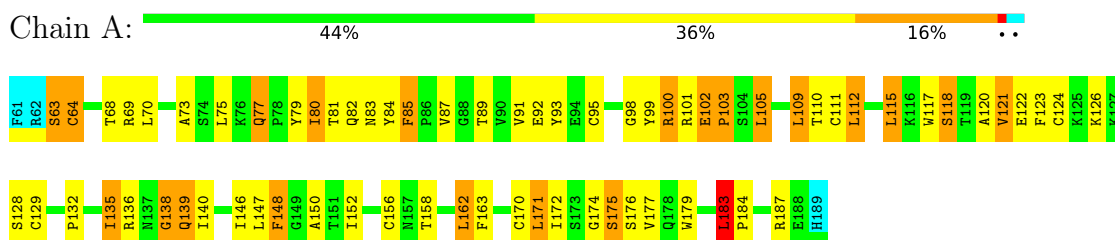
#### 4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



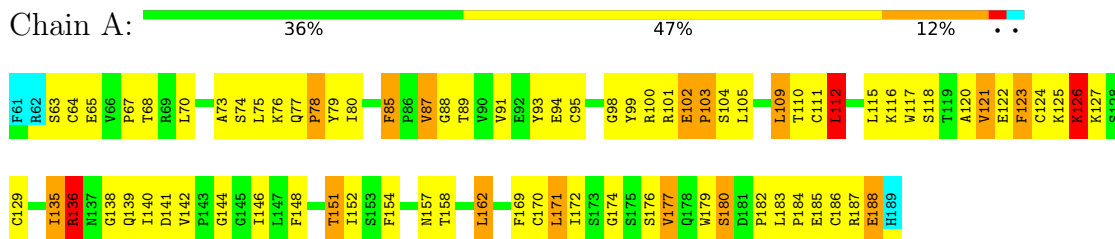
#### 4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



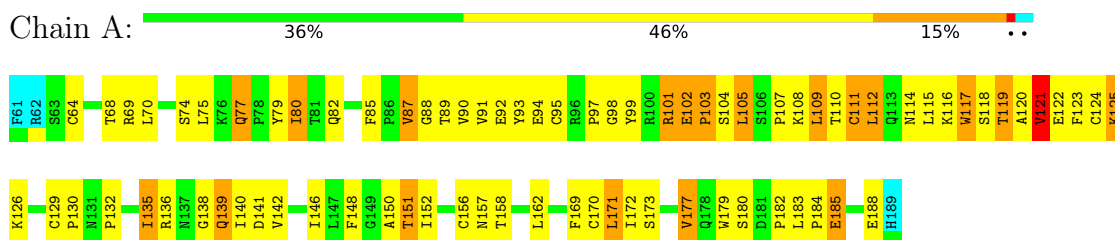
#### 4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



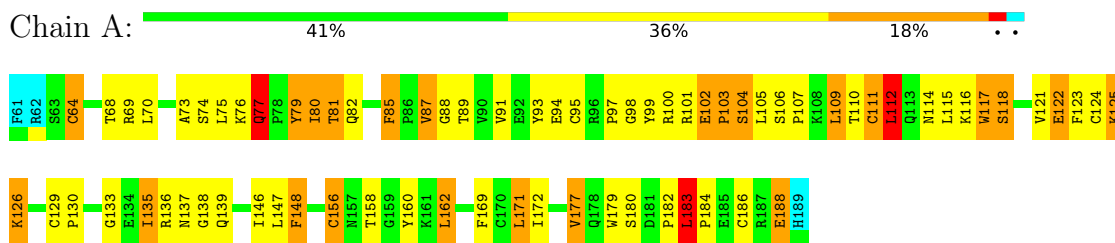
#### 4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



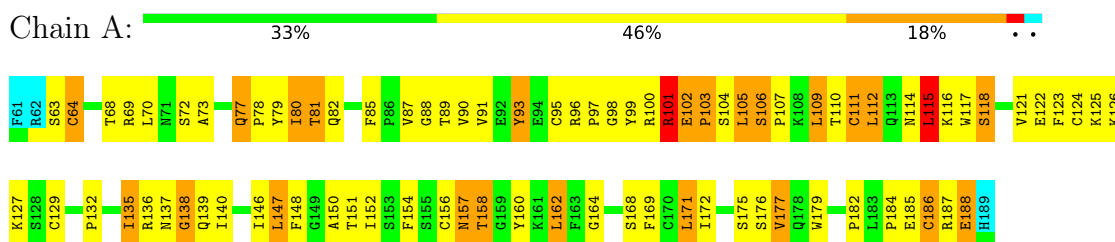
#### 4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



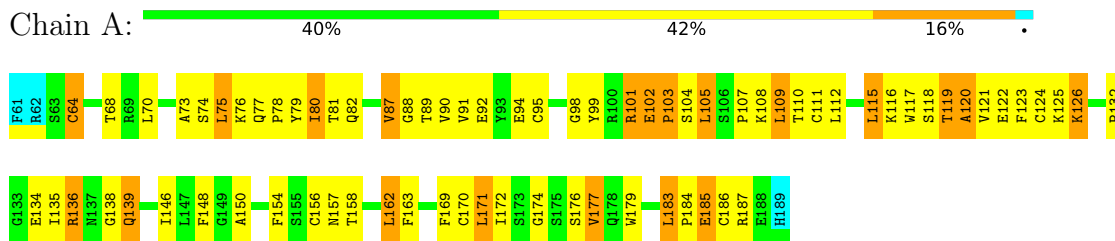
#### 4.2.27 Score per residue for model 27

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



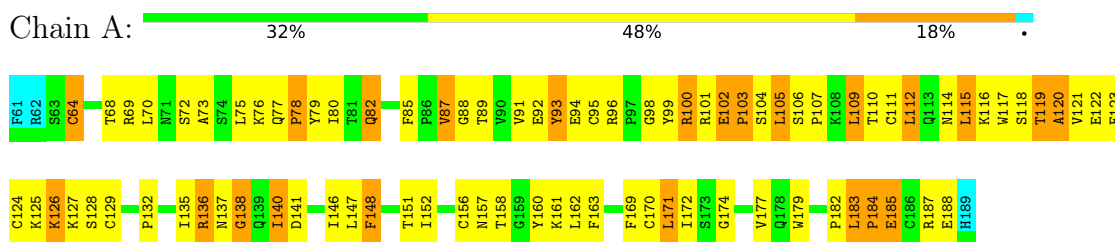
#### 4.2.28 Score per residue for model 28

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



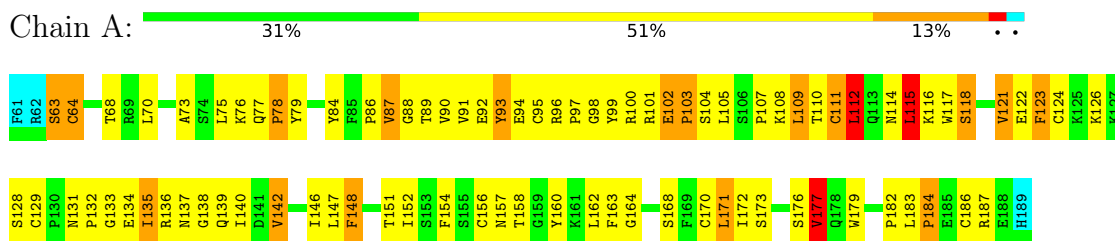
#### 4.2.29 Score per residue for model 29

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



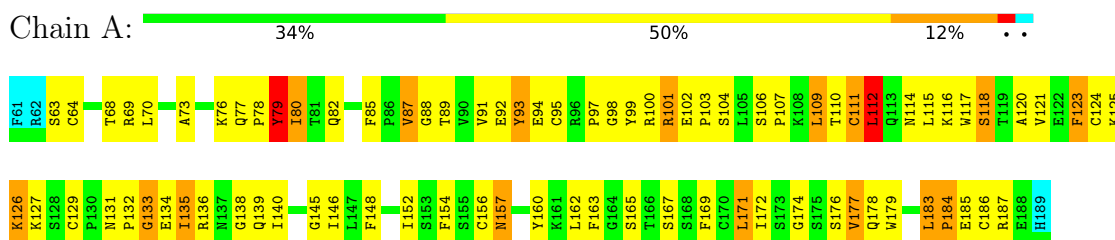
### 4.2.30 Score per residue for model 30

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



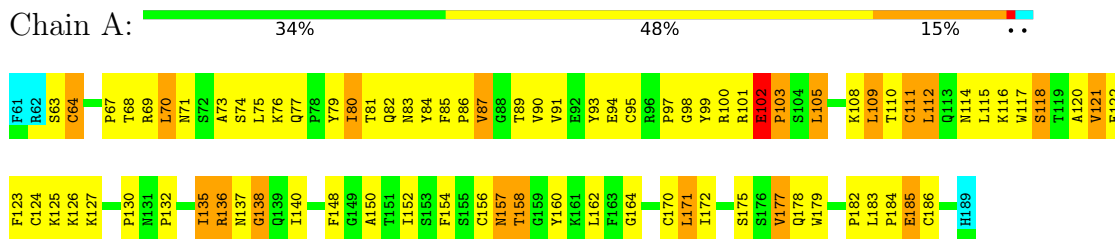
### 4.2.31 Score per residue for model 31

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



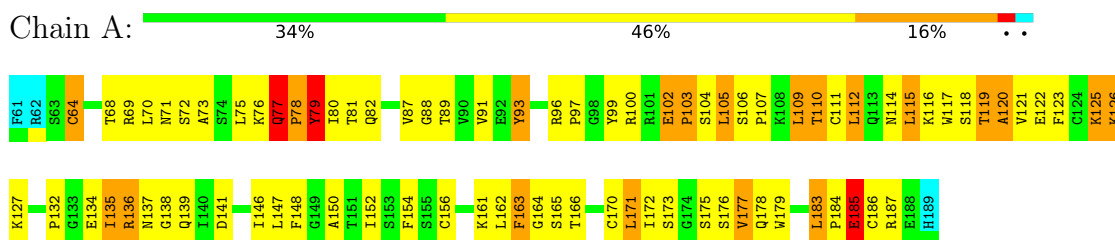
### 4.2.32 Score per residue for model 32

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



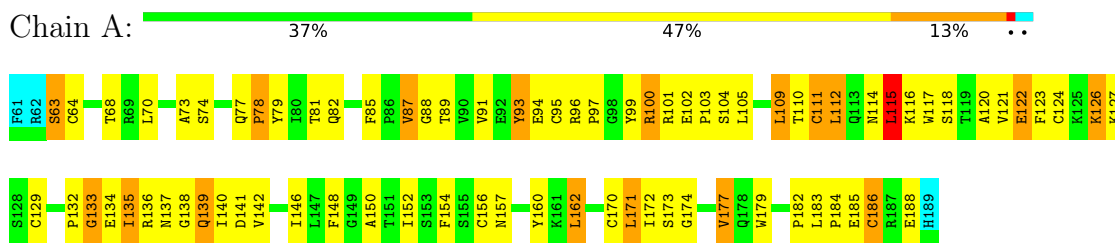
### 4.2.33 Score per residue for model 33

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



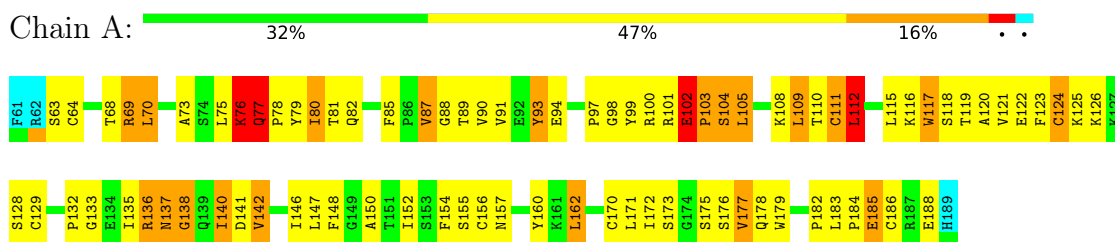
#### 4.2.34 Score per residue for model 34

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



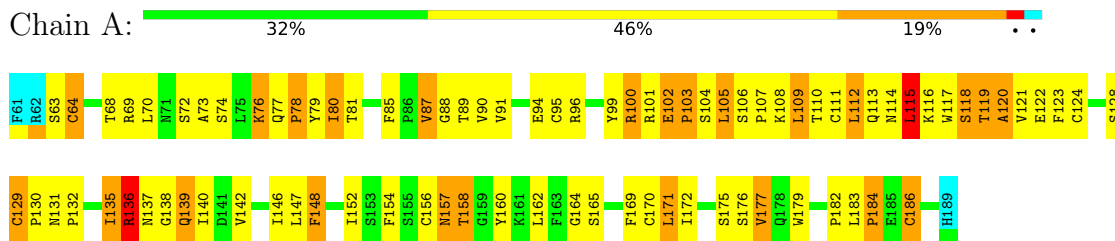
#### 4.2.35 Score per residue for model 35

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



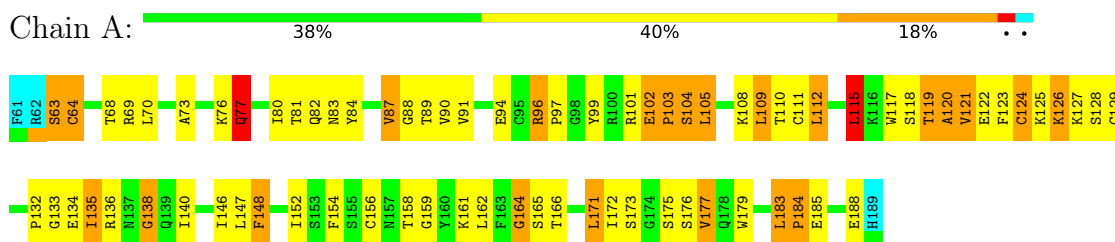
#### 4.2.36 Score per residue for model 36 (medoid)

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



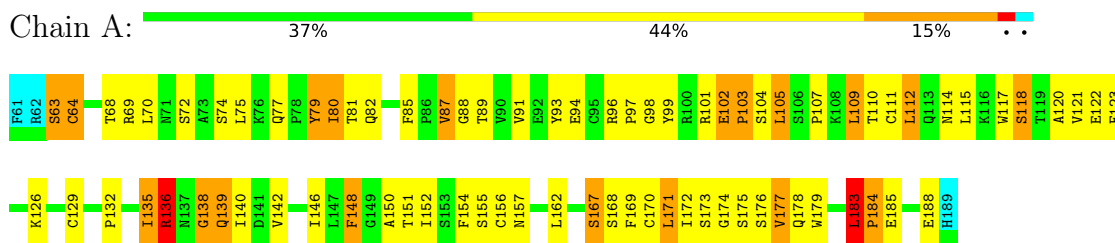
#### 4.2.37 Score per residue for model 37

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



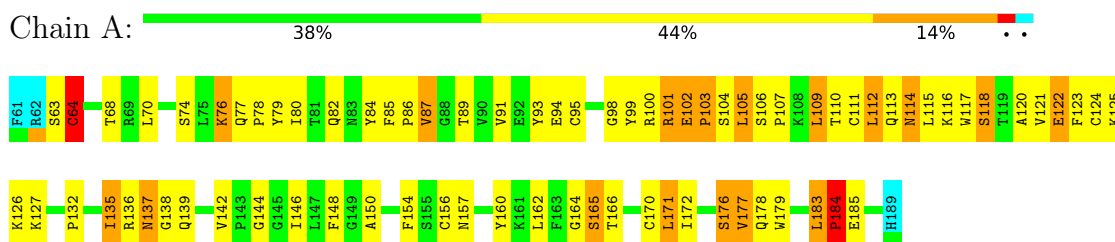
### 4.2.38 Score per residue for model 38

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



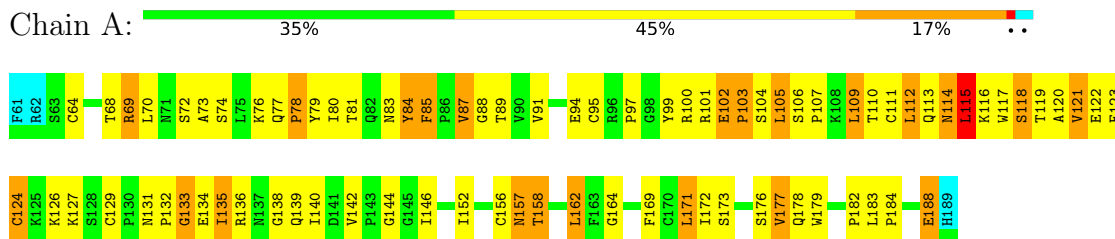
### 4.2.39 Score per residue for model 39

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



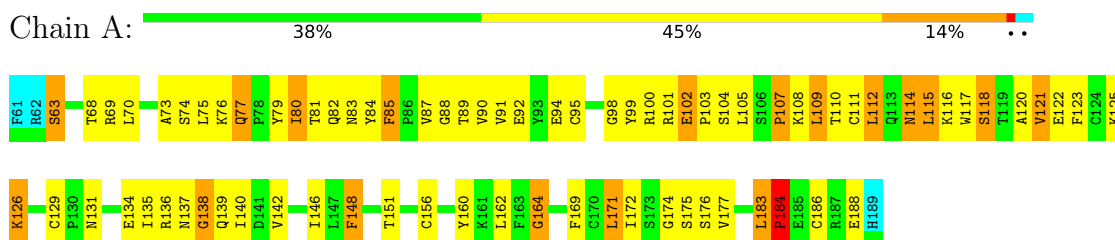
### 4.2.40 Score per residue for model 40

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor



### 4.2.41 Score per residue for model 41

- Molecule 1: Complement decay-accelerating factor







## 5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *molecular dynamics*.

Of the 190 calculated structures, 42 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
CNS	refinement	Parallhdg5.1

No chemical shift data was provided.

## 6 Model quality [i](#)

### 6.1 Standard geometry [i](#)

There are no covalent bond-length or bond-angle outliers.

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	1.7±1.2
All	All	0	71

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	77	GLN	Peptide	14
1	A	111	CYS	Peptide	10
1	A	184	PRO	Peptide	7
1	A	120	ALA	Peptide	7
1	A	102	GLU	Peptide	6
1	A	101	ARG	Peptide	6
1	A	114	ASN	Peptide	3
1	A	123	PHE	Peptide	3
1	A	76	LYS	Peptide	2
1	A	117	TRP	Peptide	2
1	A	110	THR	Peptide	2
1	A	80	ILE	Peptide	2
1	A	78	PRO	Peptide	1
1	A	98	GLY	Peptide	1
1	A	183	LEU	Peptide	1
1	A	105	LEU	Peptide	1
1	A	75	LEU	Peptide	1
1	A	122	GLU	Peptide	1
1	A	137	ASN	Peptide	1

## 6.2 Too-close contacts

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	973	949	949	91±7
All	All	40866	39858	39858	3826

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 47.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:172:ILE:HD12	1:A:177:VAL:HA	0.97	1.35	15	15
1:A:112:LEU:HG	1:A:118:SER:HB2	0.91	1.42	20	15
1:A:102:GLU:HB2	1:A:103:PRO:HD2	0.88	1.45	15	12
1:A:87:VAL:HA	1:A:111:CYS:SG	0.88	2.09	4	39
1:A:99:TYR:HA	1:A:126:LYS:HB2	0.86	1.46	28	15
1:A:171:LEU:H	1:A:171:LEU:HD23	0.85	1.32	5	1
1:A:76:LYS:HB3	1:A:94:GLU:HB2	0.85	1.49	3	10
1:A:135:ILE:HA	1:A:183:LEU:HD22	0.84	1.49	3	8
1:A:70:LEU:HD21	1:A:120:ALA:HB1	0.82	1.50	37	15
1:A:121:VAL:HG22	1:A:122:GLU:HG2	0.82	1.51	42	10
1:A:75:LEU:HB3	1:A:80:ILE:HD11	0.82	1.50	28	1
1:A:146:ILE:HG23	1:A:150:ALA:HB3	0.82	1.47	13	18
1:A:102:GLU:HB3	1:A:103:PRO:HD2	0.80	1.53	12	16
1:A:79:TYR:HB2	1:A:91:VAL:HG23	0.80	1.52	9	19
1:A:135:ILE:HG13	1:A:184:PRO:HD2	0.80	1.52	29	10
1:A:138:GLY:HA3	1:A:156:CYS:HA	0.79	1.51	19	37
1:A:162:LEU:HA	1:A:186:CYS:HA	0.79	1.54	6	17
1:A:70:LEU:HB2	1:A:73:ALA:HB3	0.79	1.52	17	29
1:A:136:ARG:HB3	1:A:183:LEU:HD13	0.79	1.53	35	3
1:A:129:CYS:HB2	1:A:146:ILE:HG22	0.78	1.53	9	13
1:A:100:ARG:HB2	1:A:127:LYS:HE3	0.77	1.56	12	2
1:A:135:ILE:O	1:A:136:ARG:HB2	0.77	1.77	21	3
1:A:121:VAL:HG13	1:A:122:GLU:H	0.77	1.40	29	18
1:A:102:GLU:HG2	1:A:123:PHE:HA	0.77	1.54	32	6
1:A:136:ARG:HG2	1:A:183:LEU:HD23	0.76	1.56	36	2
1:A:76:LYS:HB2	1:A:94:GLU:HB2	0.76	1.54	1	13
1:A:129:CYS:HB3	1:A:146:ILE:HG22	0.76	1.57	36	4

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:TYR:HB3	1:A:124:CYS:HB3	0.76	1.58	11	22
1:A:135:ILE:HA	1:A:183:LEU:HG	0.76	1.58	40	6
1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:PRO:HD3	0.76	1.56	18	1
1:A:156:CYS:SG	1:A:162:LEU:HB3	0.75	2.21	16	20
1:A:151:THR:HG23	1:A:168:SER:O	0.75	1.80	2	5
1:A:134:GLU:HA	1:A:140:ILE:HD12	0.74	1.57	5	9
1:A:172:ILE:HG13	1:A:177:VAL:HA	0.74	1.59	42	27
1:A:112:LEU:HD13	1:A:118:SER:HB2	0.74	1.56	38	4
1:A:100:ARG:HG3	1:A:127:LYS:HG2	0.74	1.59	31	2
1:A:95:CYS:SG	1:A:101:ARG:HG2	0.74	2.23	24	21
1:A:136:ARG:HD2	1:A:185:GLU:HA	0.74	1.57	28	7
1:A:115:LEU:H	1:A:115:LEU:HD13	0.74	1.40	6	10
1:A:135:ILE:HG12	1:A:136:ARG:HB2	0.74	1.60	38	2
1:A:135:ILE:HG12	1:A:136:ARG:N	0.73	1.97	30	28
1:A:172:ILE:HG23	1:A:176:SER:HA	0.73	1.60	42	16
1:A:77:GLN:NE2	1:A:77:GLN:H	0.73	1.82	5	3
1:A:77:GLN:HG3	1:A:79:TYR:H	0.72	1.43	22	14
1:A:101:ARG:HA	1:A:124:CYS:HA	0.72	1.60	40	15
1:A:80:ILE:HG22	1:A:81:THR:N	0.72	1.99	9	24
1:A:146:ILE:HG21	1:A:179:TRP:HZ2	0.71	1.45	13	21
1:A:97:PRO:HB3	1:A:173:SER:HB2	0.71	1.59	12	10
1:A:70:LEU:HD13	1:A:123:PHE:CD1	0.71	2.20	5	35
1:A:171:LEU:C	1:A:172:ILE:HD12	0.71	2.06	28	26
1:A:136:ARG:HB3	1:A:183:LEU:HD23	0.71	1.61	4	3
1:A:136:ARG:HD3	1:A:185:GLU:HA	0.71	1.63	34	7
1:A:94:GLU:HG2	1:A:95:CYS:H	0.71	1.44	8	10
1:A:109:LEU:HD13	1:A:117:TRP:HB3	0.70	1.63	36	38
1:A:105:LEU:H	1:A:105:LEU:HD13	0.70	1.45	2	1
1:A:135:ILE:H	1:A:140:ILE:HD12	0.70	1.46	14	3
1:A:105:LEU:HD21	1:A:123:PHE:HA	0.70	1.64	8	1
1:A:155:SER:HA	1:A:162:LEU:HD11	0.70	1.61	13	1
1:A:105:LEU:HD23	1:A:105:LEU:O	0.70	1.86	12	6
1:A:89:THR:O	1:A:110:THR:HA	0.69	1.87	8	39
1:A:68:THR:HG21	1:A:120:ALA:HB1	0.69	1.63	21	3
1:A:76:LYS:HE2	1:A:92:GLU:HB3	0.69	1.64	29	1
1:A:127:LYS:HD3	1:A:177:VAL:HB	0.69	1.64	8	1
1:A:109:LEU:CD1	1:A:117:TRP:HB3	0.69	2.18	28	28
1:A:70:LEU:HD22	1:A:123:PHE:CE1	0.69	2.23	12	4
1:A:77:GLN:HG2	1:A:80:ILE:HG13	0.69	1.63	7	2
1:A:64:CYS:HA	1:A:115:LEU:HD22	0.69	1.63	28	16
1:A:115:LEU:HD23	1:A:115:LEU:H	0.69	1.47	16	12

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:CYS:SG	1:A:117:TRP:NE1	0.69	2.66	28	28
1:A:91:VAL:HG12	1:A:109:LEU:HB3	0.69	1.62	20	38
1:A:135:ILE:HG12	1:A:136:ARG:H	0.69	1.48	10	22
1:A:98:GLY:N	1:A:172:ILE:HG21	0.69	2.03	10	3
1:A:79:TYR:HB3	1:A:91:VAL:HG23	0.69	1.65	17	5
1:A:68:THR:HB	1:A:109:LEU:HD11	0.68	1.65	7	14
1:A:110:THR:HB	1:A:118:SER:HB3	0.68	1.63	11	10
1:A:126:LYS:HG3	1:A:127:LYS:N	0.68	2.03	4	6
1:A:148:PHE:HA	1:A:170:CYS:SG	0.68	2.28	13	22
1:A:160:TYR:HA	1:A:188:GLU:HB2	0.68	1.63	41	1
1:A:102:GLU:O	1:A:104:SER:N	0.68	2.26	34	22
1:A:130:PRO:HD3	1:A:177:VAL:HB	0.68	1.65	25	4
1:A:135:ILE:HD12	1:A:184:PRO:HG2	0.68	1.65	19	7
1:A:110:THR:HB	1:A:118:SER:HB2	0.68	1.65	32	5
1:A:125:LYS:O	1:A:126:LYS:HB2	0.67	1.86	26	5
1:A:63:SER:O	1:A:115:LEU:HD13	0.67	1.89	32	6
1:A:75:LEU:HB3	1:A:77:GLN:HB3	0.67	1.67	16	1
1:A:136:ARG:HG3	1:A:183:LEU:HD13	0.67	1.66	30	3
1:A:77:GLN:HG2	1:A:79:TYR:CD2	0.67	2.24	23	8
1:A:112:LEU:HD13	1:A:118:SER:CB	0.67	2.20	38	14
1:A:94:GLU:HG3	1:A:95:CYS:H	0.67	1.49	10	6
1:A:105:LEU:HD22	1:A:106:SER:N	0.67	2.05	16	1
1:A:80:ILE:HG23	1:A:82:GLN:HG3	0.67	1.66	8	3
1:A:101:ARG:HG2	1:A:124:CYS:SG	0.67	2.30	42	7
1:A:115:LEU:HD23	1:A:115:LEU:N	0.66	2.04	7	16
1:A:101:ARG:HD3	1:A:103:PRO:HG2	0.66	1.65	25	1
1:A:129:CYS:H	1:A:147:LEU:HA	0.66	1.49	18	4
1:A:126:LYS:HD3	1:A:126:LYS:H	0.66	1.47	6	1
1:A:72:SER:HB2	1:A:124:CYS:HB2	0.66	1.68	17	4
1:A:171:LEU:HD12	1:A:171:LEU:H	0.66	1.48	14	29
1:A:93:TYR:HE2	1:A:109:LEU:HG	0.66	1.50	16	17
1:A:106:SER:N	1:A:107:PRO:HD3	0.66	2.06	27	10
1:A:171:LEU:HD23	1:A:171:LEU:N	0.66	2.06	5	1
1:A:109:LEU:HD23	1:A:120:ALA:HB3	0.66	1.68	22	4
1:A:136:ARG:HG3	1:A:183:LEU:HD12	0.66	1.67	2	1
1:A:68:THR:HG21	1:A:120:ALA:HB3	0.66	1.67	15	2
1:A:142:VAL:O	1:A:144:GLY:N	0.66	2.28	18	1
1:A:106:SER:N	1:A:107:PRO:CD	0.66	2.59	27	2
1:A:121:VAL:HG13	1:A:122:GLU:N	0.66	2.06	2	17
1:A:101:ARG:HA	1:A:123:PHE:O	0.66	1.91	7	17
1:A:156:CYS:SG	1:A:162:LEU:HG	0.65	2.32	41	10

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:135:ILE:HD13	1:A:184:PRO:HD2	0.65	1.67	36	2
1:A:99:TYR:HA	1:A:126:LYS:HB3	0.65	1.67	30	5
1:A:77:GLN:N	1:A:78:PRO:HD2	0.65	2.06	33	1
1:A:121:VAL:HG22	1:A:122:GLU:HG3	0.65	1.67	29	5
1:A:99:TYR:HA	1:A:126:LYS:CB	0.65	2.22	26	12
1:A:103:PRO:HD2	1:A:105:LEU:HD22	0.65	1.67	6	2
1:A:102:GLU:N	1:A:103:PRO:HD2	0.65	2.06	25	1
1:A:110:THR:O	1:A:117:TRP:HA	0.65	1.92	13	27
1:A:99:TYR:HB3	1:A:124:CYS:SG	0.65	2.32	37	4
1:A:77:GLN:HB3	1:A:92:GLU:HG2	0.64	1.68	4	1
1:A:77:GLN:NE2	1:A:80:ILE:HG12	0.64	2.07	11	1
1:A:80:ILE:HG23	1:A:82:GLN:HG2	0.64	1.67	17	1
1:A:165:SER:HB3	1:A:184:PRO:HB3	0.64	1.68	39	1
1:A:93:TYR:CE2	1:A:109:LEU:HG	0.64	2.28	3	14
1:A:70:LEU:HD22	1:A:123:PHE:CZ	0.64	2.28	2	4
1:A:142:VAL:HG12	1:A:146:ILE:HD11	0.64	1.69	6	7
1:A:75:LEU:HD22	1:A:80:ILE:HG13	0.64	1.69	22	1
1:A:98:GLY:HA2	1:A:127:LYS:HB2	0.64	1.69	17	3
1:A:92:GLU:HG2	1:A:107:PRO:HG2	0.64	1.69	28	6
1:A:75:LEU:HD22	1:A:91:VAL:HG22	0.64	1.70	9	6
1:A:79:TYR:CB	1:A:91:VAL:HG23	0.64	2.23	15	17
1:A:105:LEU:HD13	1:A:105:LEU:N	0.63	2.09	16	13
1:A:102:GLU:HB2	1:A:103:PRO:HD3	0.63	1.69	6	3
1:A:75:LEU:HG	1:A:91:VAL:HG11	0.63	1.71	3	1
1:A:94:GLU:HG2	1:A:95:CYS:N	0.63	2.09	34	6
1:A:100:ARG:HG3	1:A:127:LYS:HB3	0.63	1.70	8	1
1:A:102:GLU:HG3	1:A:105:LEU:H	0.63	1.53	8	1
1:A:100:ARG:HA	1:A:100:ARG:HE	0.63	1.53	34	6
1:A:96:ARG:HB3	1:A:97:PRO:HD2	0.63	1.69	9	5
1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:N	0.63	2.09	6	7
1:A:102:GLU:HG3	1:A:104:SER:H	0.63	1.54	38	2
1:A:99:TYR:HA	1:A:126:LYS:HA	0.63	1.70	1	12
1:A:102:GLU:N	1:A:123:PHE:O	0.62	2.32	16	12
1:A:70:LEU:HD13	1:A:123:PHE:HD1	0.62	1.54	1	5
1:A:70:LEU:HD13	1:A:123:PHE:CG	0.62	2.29	24	23
1:A:98:GLY:HA3	1:A:172:ILE:HG22	0.62	1.71	25	3
1:A:175:SER:HB3	1:A:178:GLN:HB3	0.62	1.69	13	2
1:A:77:GLN:NE2	1:A:80:ILE:HB	0.62	2.10	37	2
1:A:112:LEU:HG	1:A:118:SER:CB	0.62	2.22	20	4
1:A:126:LYS:HD3	1:A:127:LYS:N	0.62	2.09	1	1
1:A:172:ILE:CD1	1:A:177:VAL:HA	0.62	2.24	4	4

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:125:LYS:HA	1:A:125:LYS:HE2	0.62	1.72	10	1
1:A:126:LYS:HD2	1:A:127:LYS:N	0.62	2.09	34	2
1:A:102:GLU:H	1:A:103:PRO:HD2	0.62	1.54	25	1
1:A:102:GLU:HG3	1:A:105:LEU:HD13	0.62	1.71	37	2
1:A:135:ILE:CG1	1:A:136:ARG:N	0.61	2.63	15	26
1:A:64:CYS:SG	1:A:85:PHE:HB2	0.61	2.35	35	5
1:A:172:ILE:HA	1:A:176:SER:O	0.61	1.95	9	8
1:A:102:GLU:OE1	1:A:105:LEU:HD21	0.61	1.94	1	1
1:A:121:VAL:HG22	1:A:122:GLU:N	0.61	2.10	35	13
1:A:130:PRO:HD3	1:A:177:VAL:HG22	0.61	1.72	17	3
1:A:64:CYS:HA	1:A:115:LEU:HB3	0.61	1.72	21	5
1:A:129:CYS:SG	1:A:172:ILE:HD11	0.61	2.34	16	23
1:A:68:THR:HG21	1:A:120:ALA:HB2	0.61	1.71	42	6
1:A:89:THR:O	1:A:110:THR:HG23	0.61	1.96	11	5
1:A:63:SER:O	1:A:115:LEU:HG	0.61	1.96	20	6
1:A:160:TYR:HB3	1:A:186:CYS:SG	0.61	2.36	34	5
1:A:177:VAL:HG13	1:A:177:VAL:O	0.60	1.96	10	11
1:A:165:SER:H	1:A:184:PRO:HB3	0.60	1.55	7	1
1:A:77:GLN:NE2	1:A:80:ILE:HG13	0.60	2.11	4	1
1:A:82:GLN:HA	1:A:85:PHE:CE1	0.60	2.31	39	4
1:A:102:GLU:HG3	1:A:104:SER:N	0.60	2.11	38	1
1:A:135:ILE:N	1:A:140:ILE:HD12	0.60	2.11	9	6
1:A:135:ILE:HG23	1:A:136:ARG:H	0.60	1.55	38	23
1:A:102:GLU:HB3	1:A:103:PRO:CD	0.60	2.26	11	13
1:A:138:GLY:O	1:A:139:GLN:HB3	0.60	1.97	34	24
1:A:87:VAL:HG22	1:A:112:LEU:O	0.60	1.97	39	30
1:A:185:GLU:HG2	1:A:187:ARG:NE	0.60	2.11	31	1
1:A:171:LEU:C	1:A:172:ILE:HD13	0.60	2.17	26	15
1:A:77:GLN:NE2	1:A:80:ILE:HD12	0.60	2.12	6	1
1:A:75:LEU:HD22	1:A:91:VAL:HG21	0.60	1.72	30	2
1:A:63:SER:HB3	1:A:115:LEU:HD11	0.60	1.73	7	1
1:A:95:CYS:SG	1:A:99:TYR:HB2	0.60	2.37	7	1
1:A:160:TYR:HA	1:A:188:GLU:HB3	0.59	1.74	29	3
1:A:72:SER:HB3	1:A:124:CYS:HB2	0.59	1.74	40	3
1:A:93:TYR:HE1	1:A:109:LEU:HG	0.59	1.57	24	3
1:A:102:GLU:CB	1:A:103:PRO:CD	0.59	2.80	4	5
1:A:64:CYS:HA	1:A:115:LEU:HD13	0.59	1.74	16	4
1:A:77:GLN:HG2	1:A:79:TYR:N	0.59	2.12	31	1
1:A:63:SER:HA	1:A:86:PRO:HA	0.59	1.74	21	2
1:A:70:LEU:HD23	1:A:93:TYR:CE2	0.59	2.33	31	1
1:A:135:ILE:HG13	1:A:154:PHE:HB3	0.59	1.73	6	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:136:ARG:HG2	1:A:183:LEU:HD12	0.59	1.74	11	2
1:A:75:LEU:HB3	1:A:77:GLN:HE21	0.59	1.56	5	1
1:A:64:CYS:SG	1:A:115:LEU:HA	0.59	2.37	38	6
1:A:74:SER:O	1:A:75:LEU:HG	0.59	1.97	24	1
1:A:105:LEU:HD23	1:A:106:SER:N	0.59	2.13	4	1
1:A:63:SER:HB3	1:A:84:TYR:HB3	0.59	1.74	19	2
1:A:100:ARG:O	1:A:125:LYS:N	0.59	2.35	5	14
1:A:94:GLU:HA	1:A:101:ARG:HH21	0.59	1.58	13	8
1:A:136:ARG:HG3	1:A:183:LEU:HB3	0.59	1.74	36	4
1:A:135:ILE:HD12	1:A:184:PRO:HD2	0.59	1.74	22	2
1:A:81:THR:HG22	1:A:83:ASN:H	0.59	1.58	40	2
1:A:105:LEU:O	1:A:107:PRO:HD3	0.59	1.98	38	1
1:A:102:GLU:C	1:A:104:SER:H	0.59	2.01	36	31
1:A:132:PRO:HD3	1:A:146:ILE:HD12	0.59	1.74	42	1
1:A:148:PHE:HD1	1:A:172:ILE:HD13	0.58	1.58	36	18
1:A:129:CYS:SG	1:A:148:PHE:HA	0.58	2.38	29	9
1:A:80:ILE:HG22	1:A:82:GLN:N	0.58	2.13	26	4
1:A:132:PRO:HB3	1:A:179:TRP:CE2	0.58	2.34	14	25
1:A:77:GLN:HG2	1:A:79:TYR:H	0.58	1.57	31	1
1:A:125:LYS:O	1:A:126:LYS:HB3	0.58	1.98	33	1
1:A:90:VAL:HG13	1:A:108:LYS:HG3	0.58	1.74	19	11
1:A:105:LEU:C	1:A:105:LEU:HD22	0.58	2.19	2	1
1:A:178:GLN:HE21	1:A:178:GLN:HA	0.58	1.57	15	1
1:A:136:ARG:HD2	1:A:185:GLU:HG2	0.58	1.73	24	1
1:A:77:GLN:HG3	1:A:79:TYR:N	0.58	2.12	36	13
1:A:129:CYS:CB	1:A:146:ILE:HG22	0.58	2.25	9	7
1:A:135:ILE:O	1:A:184:PRO:HD2	0.58	1.99	6	3
1:A:64:CYS:HB2	1:A:85:PHE:O	0.58	1.99	19	9
1:A:76:LYS:O	1:A:78:PRO:HD3	0.58	1.97	35	3
1:A:77:GLN:HB2	1:A:80:ILE:H	0.58	1.58	37	3
1:A:67:PRO:HD3	1:A:83:ASN:HB2	0.58	1.75	7	1
1:A:136:ARG:HE	1:A:183:LEU:HD12	0.58	1.59	31	6
1:A:77:GLN:CD	1:A:80:ILE:HG13	0.58	2.19	5	1
1:A:135:ILE:HG23	1:A:136:ARG:N	0.58	2.13	6	16
1:A:171:LEU:N	1:A:171:LEU:HD23	0.58	2.14	9	2
1:A:160:TYR:CD1	1:A:188:GLU:HB3	0.58	2.34	9	5
1:A:156:CYS:SG	1:A:160:TYR:HB2	0.58	2.39	36	3
1:A:87:VAL:HG23	1:A:111:CYS:SG	0.57	2.39	2	22
1:A:172:ILE:HG13	1:A:177:VAL:CA	0.57	2.29	31	23
1:A:135:ILE:HD11	1:A:154:PHE:HB3	0.57	1.75	36	2
1:A:163:PHE:HB2	1:A:185:GLU:HG3	0.57	1.75	4	2

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:125:LYS:HE3	1:A:125:LYS:HA	0.57	1.73	9	1
1:A:105:LEU:HD13	1:A:105:LEU:H	0.57	1.57	16	4
1:A:114:ASN:HB3	1:A:116:LYS:HB2	0.57	1.75	4	6
1:A:137:ASN:O	1:A:156:CYS:SG	0.57	2.62	34	3
1:A:160:TYR:HD1	1:A:188:GLU:HB3	0.57	1.57	9	2
1:A:88:GLY:N	1:A:111:CYS:O	0.57	2.37	35	29
1:A:102:GLU:HB2	1:A:103:PRO:CD	0.57	2.27	15	12
1:A:77:GLN:NE2	1:A:78:PRO:HD2	0.57	2.14	3	5
1:A:98:GLY:HA3	1:A:172:ILE:HG21	0.57	1.75	23	3
1:A:121:VAL:H	1:A:123:PHE:HE1	0.57	1.43	33	11
1:A:72:SER:O	1:A:95:CYS:HB2	0.57	2.00	7	1
1:A:135:ILE:HA	1:A:183:LEU:HD13	0.57	1.77	1	8
1:A:109:LEU:HD23	1:A:120:ALA:CB	0.57	2.29	16	4
1:A:105:LEU:HD21	1:A:107:PRO:HB3	0.57	1.75	4	1
1:A:162:LEU:HB2	1:A:185:GLU:O	0.57	2.00	39	5
1:A:147:LEU:HD22	1:A:147:LEU:N	0.57	2.14	26	9
1:A:129:CYS:HB2	1:A:146:ILE:O	0.57	2.00	16	4
1:A:77:GLN:HB2	1:A:79:TYR:H	0.57	1.59	7	2
1:A:98:GLY:HA2	1:A:172:ILE:HG21	0.56	1.76	11	2
1:A:75:LEU:HD22	1:A:80:ILE:HG12	0.56	1.75	14	1
1:A:163:PHE:O	1:A:184:PRO:HB2	0.56	2.00	8	2
1:A:89:THR:HG22	1:A:90:VAL:N	0.56	2.15	19	4
1:A:85:PHE:HD1	1:A:86:PRO:HD2	0.56	1.60	32	2
1:A:68:THR:OG1	1:A:109:LEU:HD11	0.56	2.00	17	14
1:A:115:LEU:HD22	1:A:115:LEU:N	0.56	2.16	20	7
1:A:172:ILE:HD12	1:A:172:ILE:N	0.56	2.16	21	20
1:A:135:ILE:O	1:A:183:LEU:HD13	0.56	2.00	6	2
1:A:140:ILE:HG12	1:A:154:PHE:HD1	0.56	1.61	34	8
1:A:70:LEU:HD12	1:A:93:TYR:CZ	0.56	2.36	24	2
1:A:87:VAL:HG23	1:A:115:LEU:HD23	0.56	1.77	15	2
1:A:101:ARG:O	1:A:102:GLU:O	0.56	2.24	11	9
1:A:142:VAL:N	1:A:143:PRO:CD	0.56	2.68	18	1
1:A:118:SER:O	1:A:119:THR:O	0.56	2.22	36	7
1:A:97:PRO:HB3	1:A:173:SER:HA	0.56	1.76	34	1
1:A:101:ARG:O	1:A:102:GLU:C	0.56	2.44	4	2
1:A:67:PRO:HD3	1:A:83:ASN:HB3	0.56	1.77	32	1
1:A:121:VAL:HA	1:A:123:PHE:CE1	0.56	2.36	2	3
1:A:136:ARG:O	1:A:136:ARG:HG3	0.56	2.00	33	4
1:A:64:CYS:HB3	1:A:117:TRP:HE1	0.56	1.60	15	5
1:A:112:LEU:HG	1:A:118:SER:N	0.56	2.16	34	2
1:A:102:GLU:HG3	1:A:105:LEU:HD21	0.55	1.76	40	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:162:LEU:H	1:A:162:LEU:HD23	0.55	1.61	32	11
1:A:64:CYS:N	1:A:115:LEU:HD13	0.55	2.16	8	2
1:A:121:VAL:CG1	1:A:122:GLU:N	0.55	2.69	2	8
1:A:87:VAL:HG21	1:A:113:GLN:C	0.55	2.22	15	6
1:A:137:ASN:ND2	1:A:186:CYS:HB2	0.55	2.16	41	1
1:A:68:THR:HG21	1:A:120:ALA:CB	0.55	2.31	4	20
1:A:135:ILE:HD12	1:A:154:PHE:HB3	0.55	1.79	38	2
1:A:95:CYS:SG	1:A:123:PHE:O	0.55	2.64	5	7
1:A:135:ILE:HG22	1:A:140:ILE:HG13	0.55	1.79	40	15
1:A:112:LEU:O	1:A:114:ASN:N	0.55	2.39	3	1
1:A:68:THR:CB	1:A:109:LEU:HD11	0.55	2.32	9	24
1:A:102:GLU:HB2	1:A:105:LEU:HD22	0.55	1.77	7	3
1:A:99:TYR:HA	1:A:126:LYS:CA	0.55	2.30	18	5
1:A:100:ARG:HE	1:A:125:LYS:HE2	0.55	1.61	27	1
1:A:171:LEU:HD12	1:A:171:LEU:O	0.55	2.00	28	1
1:A:171:LEU:HD12	1:A:171:LEU:N	0.55	2.17	25	8
1:A:138:GLY:HA2	1:A:157:ASN:N	0.55	2.17	30	10
1:A:162:LEU:HD12	1:A:162:LEU:O	0.55	2.02	5	4
1:A:146:ILE:HG23	1:A:179:TRP:HZ2	0.55	1.62	6	4
1:A:64:CYS:HB3	1:A:85:PHE:CD1	0.55	2.37	9	1
1:A:162:LEU:HA	1:A:185:GLU:O	0.55	2.02	21	3
1:A:140:ILE:HD13	1:A:152:ILE:HD12	0.55	1.79	13	10
1:A:77:GLN:NE2	1:A:80:ILE:H	0.55	2.00	10	2
1:A:171:LEU:HD23	1:A:171:LEU:H	0.55	1.62	35	2
1:A:64:CYS:SG	1:A:85:PHE:HB3	0.55	2.42	11	2
1:A:154:PHE:HB2	1:A:162:LEU:HD13	0.55	1.79	28	4
1:A:135:ILE:O	1:A:135:ILE:HD13	0.55	2.01	36	1
1:A:135:ILE:O	1:A:135:ILE:HG23	0.54	2.01	32	2
1:A:175:SER:HB2	1:A:178:GLN:HG3	0.54	1.78	32	2
1:A:159:GLY:O	1:A:188:GLU:HG3	0.54	2.03	42	4
1:A:135:ILE:HB	1:A:140:ILE:HG13	0.54	1.78	29	4
1:A:64:CYS:HB2	1:A:85:PHE:HB2	0.54	1.79	22	6
1:A:90:VAL:HG22	1:A:108:LYS:HG3	0.54	1.79	11	7
1:A:134:GLU:HG2	1:A:135:ILE:H	0.54	1.61	21	1
1:A:137:ASN:HD21	1:A:156:CYS:HB3	0.54	1.61	22	1
1:A:91:VAL:HG23	1:A:109:LEU:O	0.54	2.03	3	1
1:A:77:GLN:HG3	1:A:79:TYR:HB2	0.54	1.80	4	1
1:A:102:GLU:HG3	1:A:105:LEU:HD11	0.54	1.78	24	3
1:A:100:ARG:HG3	1:A:101:ARG:O	0.54	2.02	32	1
1:A:98:GLY:O	1:A:126:LYS:HG3	0.54	2.02	39	4
1:A:77:GLN:HB2	1:A:80:ILE:HB	0.54	1.79	6	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:135:ILE:CG2	1:A:136:ARG:N	0.54	2.71	6	1
1:A:122:GLU:O	1:A:124:CYS:N	0.54	2.40	12	1
1:A:134:GLU:HB3	1:A:183:LEU:HD21	0.54	1.80	21	1
1:A:78:PRO:O	1:A:80:ILE:N	0.54	2.40	31	2
1:A:81:THR:O	1:A:82:GLN:HG2	0.54	2.03	2	6
1:A:77:GLN:HE21	1:A:80:ILE:HD12	0.54	1.61	6	1
1:A:129:CYS:HA	1:A:177:VAL:HG22	0.54	1.80	11	4
1:A:112:LEU:HD13	1:A:118:SER:HB3	0.54	1.80	29	6
1:A:132:PRO:O	1:A:133:GLY:C	0.54	2.45	19	6
1:A:136:ARG:NE	1:A:183:LEU:HD12	0.54	2.18	33	3
1:A:98:GLY:O	1:A:126:LYS:HB3	0.54	2.03	26	3
1:A:184:PRO:O	1:A:185:GLU:HG2	0.54	2.03	2	2
1:A:176:SER:O	1:A:178:GLN:N	0.54	2.41	16	9
1:A:103:PRO:HG2	1:A:105:LEU:HB3	0.54	1.80	23	1
1:A:74:SER:O	1:A:94:GLU:HB3	0.53	2.03	7	16
1:A:183:LEU:HD23	1:A:183:LEU:N	0.53	2.17	3	1
1:A:102:GLU:HG2	1:A:103:PRO:HD3	0.53	1.78	25	1
1:A:87:VAL:HG21	1:A:113:GLN:O	0.53	2.03	15	5
1:A:162:LEU:HB3	1:A:186:CYS:SG	0.53	2.43	5	1
1:A:64:CYS:H	1:A:115:LEU:CD2	0.53	2.17	33	1
1:A:138:GLY:HA3	1:A:156:CYS:CA	0.53	2.33	6	4
1:A:121:VAL:HG13	1:A:122:GLU:HG2	0.53	1.79	36	2
1:A:79:TYR:HE2	1:A:92:GLU:HG3	0.53	1.64	30	3
1:A:164:GLY:HA3	1:A:184:PRO:HB3	0.53	1.81	37	1
1:A:148:PHE:CD1	1:A:172:ILE:HG12	0.53	2.38	2	5
1:A:171:LEU:O	1:A:172:ILE:HD13	0.53	2.03	20	9
1:A:72:SER:O	1:A:96:ARG:HG3	0.53	2.04	10	5
1:A:164:GLY:O	1:A:184:PRO:HB3	0.53	2.04	19	3
1:A:68:THR:HG22	1:A:69:ARG:N	0.53	2.19	35	7
1:A:94:GLU:HG3	1:A:95:CYS:N	0.53	2.19	11	3
1:A:128:SER:HB3	1:A:147:LEU:HA	0.53	1.81	11	2
1:A:175:SER:HB2	1:A:178:GLN:NE2	0.53	2.18	38	1
1:A:126:LYS:HD3	1:A:127:LYS:H	0.53	1.64	42	1
1:A:137:ASN:HB2	1:A:186:CYS:HB2	0.53	1.80	15	2
1:A:129:CYS:HB3	1:A:179:TRP:HE1	0.53	1.64	11	2
1:A:178:GLN:HG3	1:A:179:TRP:N	0.53	2.19	15	2
1:A:97:PRO:HB2	1:A:173:SER:HA	0.53	1.80	8	1
1:A:105:LEU:HD21	1:A:122:GLU:O	0.53	2.04	2	1
1:A:120:ALA:O	1:A:121:VAL:O	0.53	2.26	16	1
1:A:137:ASN:ND2	1:A:156:CYS:HB3	0.53	2.19	22	1
1:A:146:ILE:HD12	1:A:179:TRP:CZ2	0.52	2.39	12	12

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:ARG:O	1:A:124:CYS:HA	0.52	2.04	6	5
1:A:73:ALA:HB1	1:A:94:GLU:O	0.52	2.04	11	2
1:A:75:LEU:HB3	1:A:77:GLN:HE22	0.52	1.63	11	1
1:A:75:LEU:HD11	1:A:91:VAL:CG1	0.52	2.34	28	1
1:A:99:TYR:CE2	1:A:126:LYS:HG2	0.52	2.39	29	1
1:A:177:VAL:O	1:A:177:VAL:HG12	0.52	2.04	32	1
1:A:77:GLN:HG3	1:A:78:PRO:N	0.52	2.18	14	10
1:A:112:LEU:HB2	1:A:116:LYS:O	0.52	2.04	10	12
1:A:171:LEU:HD13	1:A:171:LEU:O	0.52	2.04	14	1
1:A:70:LEU:HD13	1:A:123:PHE:CD2	0.52	2.39	24	2
1:A:160:TYR:HB3	1:A:186:CYS:HB3	0.52	1.80	31	2
1:A:141:ASP:O	1:A:152:ILE:HG22	0.52	2.04	17	9
1:A:80:ILE:CG2	1:A:81:THR:N	0.52	2.69	9	16
1:A:79:TYR:O	1:A:80:ILE:C	0.52	2.48	26	3
1:A:148:PHE:HB2	1:A:172:ILE:HG12	0.52	1.81	22	1
1:A:135:ILE:O	1:A:136:ARG:CB	0.52	2.57	36	2
1:A:135:ILE:O	1:A:136:ARG:C	0.52	2.48	32	2
1:A:93:TYR:CE1	1:A:109:LEU:HG	0.52	2.39	24	2
1:A:68:THR:CG2	1:A:120:ALA:HB3	0.52	2.35	15	1
1:A:104:SER:N	1:A:105:LEU:HD13	0.52	2.20	19	1
1:A:102:GLU:O	1:A:105:LEU:HD22	0.52	2.05	25	1
1:A:80:ILE:HD13	1:A:82:GLN:HE21	0.52	1.64	5	1
1:A:162:LEU:HD23	1:A:186:CYS:SG	0.52	2.43	24	2
1:A:157:ASN:O	1:A:160:TYR:HB2	0.52	2.04	2	7
1:A:129:CYS:HA	1:A:177:VAL:CG2	0.52	2.35	18	5
1:A:77:GLN:HE21	1:A:80:ILE:HG12	0.52	1.63	11	1
1:A:136:ARG:NE	1:A:136:ARG:HA	0.52	2.19	38	1
1:A:70:LEU:HD12	1:A:93:TYR:CE1	0.52	2.39	33	4
1:A:75:LEU:HB3	1:A:77:GLN:OE1	0.52	2.04	4	1
1:A:135:ILE:HG22	1:A:140:ILE:N	0.52	2.20	11	3
1:A:99:TYR:HA	1:A:125:LYS:O	0.52	2.05	39	3
1:A:132:PRO:HB3	1:A:179:TRP:CD2	0.52	2.40	14	2
1:A:70:LEU:HD21	1:A:120:ALA:CB	0.52	2.34	36	2
1:A:148:PHE:HD1	1:A:172:ILE:HG12	0.52	1.65	26	6
1:A:80:ILE:O	1:A:81:THR:HB	0.52	2.05	2	4
1:A:64:CYS:HA	1:A:115:LEU:HD12	0.52	1.81	6	2
1:A:135:ILE:O	1:A:136:ARG:HG2	0.52	2.05	38	3
1:A:148:PHE:CD1	1:A:172:ILE:HD13	0.52	2.40	7	5
1:A:126:LYS:HG3	1:A:127:LYS:H	0.52	1.65	32	1
1:A:80:ILE:HD13	1:A:82:GLN:NE2	0.51	2.20	8	2
1:A:80:ILE:HG23	1:A:82:GLN:HB3	0.51	1.82	15	3

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HE	0.51	1.65	38	1
1:A:99:TYR:CE1	1:A:126:LYS:HG2	0.51	2.41	18	1
1:A:80:ILE:O	1:A:81:THR:C	0.51	2.49	22	9
1:A:132:PRO:HG3	1:A:152:ILE:HG21	0.51	1.82	6	4
1:A:138:GLY:CA	1:A:156:CYS:HA	0.51	2.36	35	8
1:A:135:ILE:HD11	1:A:186:CYS:SG	0.51	2.46	33	1
1:A:73:ALA:HB2	1:A:124:CYS:SG	0.51	2.46	31	8
1:A:92:GLU:HG3	1:A:107:PRO:HB2	0.51	1.82	6	1
1:A:75:LEU:HD22	1:A:91:VAL:CG2	0.51	2.36	24	7
1:A:172:ILE:HG13	1:A:177:VAL:H	0.51	1.66	10	3
1:A:146:ILE:HG21	1:A:179:TRP:CZ2	0.51	2.41	8	8
1:A:65:GLU:HG2	1:A:115:LEU:O	0.51	2.06	8	1
1:A:76:LYS:HB2	1:A:76:LYS:NZ	0.51	2.20	15	1
1:A:98:GLY:O	1:A:126:LYS:HA	0.51	2.06	24	1
1:A:77:GLN:C	1:A:79:TYR:H	0.51	2.09	14	9
1:A:109:LEU:HD22	1:A:118:SER:O	0.51	2.05	39	7
1:A:180:SER:O	1:A:182:PRO:HD3	0.51	2.06	24	4
1:A:76:LYS:O	1:A:79:TYR:HB2	0.51	2.05	33	1
1:A:84:TYR:O	1:A:86:PRO:HD3	0.51	2.05	3	4
1:A:68:THR:CG2	1:A:69:ARG:N	0.51	2.74	6	12
1:A:76:LYS:HB3	1:A:94:GLU:CB	0.51	2.36	40	3
1:A:154:PHE:CD2	1:A:184:PRO:HG3	0.51	2.41	8	11
1:A:172:ILE:N	1:A:172:ILE:CD1	0.51	2.75	39	16
1:A:154:PHE:HB3	1:A:162:LEU:HD22	0.51	1.82	9	1
1:A:100:ARG:HG3	1:A:127:LYS:HD2	0.51	1.82	15	2
1:A:68:THR:H	1:A:109:LEU:HD11	0.51	1.65	22	4
1:A:114:ASN:C	1:A:116:LYS:N	0.50	2.62	40	13
1:A:77:GLN:HG2	1:A:79:TYR:CD1	0.50	2.41	14	2
1:A:102:GLU:HG3	1:A:105:LEU:HD12	0.50	1.83	2	1
1:A:99:TYR:HA	1:A:126:LYS:HG3	0.50	1.83	5	2
1:A:77:GLN:HG2	1:A:77:GLN:O	0.50	2.05	16	3
1:A:171:LEU:HD11	1:A:180:SER:N	0.50	2.21	25	1
1:A:63:SER:O	1:A:84:TYR:HA	0.50	2.06	8	1
1:A:128:SER:HB3	1:A:147:LEU:HD22	0.50	1.81	12	3
1:A:97:PRO:HB2	1:A:172:ILE:HG23	0.50	1.82	18	1
1:A:162:LEU:HD13	1:A:166:THR:HG23	0.50	1.84	37	1
1:A:110:THR:O	1:A:118:SER:N	0.50	2.45	25	8
1:A:132:PRO:CG	1:A:152:ILE:HD13	0.50	2.36	2	15
1:A:102:GLU:HB3	1:A:122:GLU:O	0.50	2.06	25	3
1:A:102:GLU:N	1:A:103:PRO:CD	0.50	2.73	25	1
1:A:121:VAL:HG23	1:A:123:PHE:CZ	0.50	2.42	1	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:136:ARG:NH1	1:A:185:GLU:HG3	0.50	2.21	25	2
1:A:75:LEU:CD1	1:A:80:ILE:HD11	0.50	2.37	41	6
1:A:156:CYS:SG	1:A:157:ASN:N	0.50	2.85	9	4
1:A:73:ALA:HA	1:A:95:CYS:HA	0.50	1.83	40	4
1:A:93:TYR:OH	1:A:109:LEU:HG	0.50	2.07	1	4
1:A:150:ALA:H	1:A:170:CYS:HB3	0.50	1.66	33	9
1:A:156:CYS:SG	1:A:160:TYR:CB	0.50	3.00	34	3
1:A:121:VAL:CG1	1:A:122:GLU:H	0.50	2.16	37	3
1:A:97:PRO:O	1:A:172:ILE:HB	0.50	2.07	25	1
1:A:63:SER:OG	1:A:84:TYR:HB2	0.50	2.07	30	1
1:A:171:LEU:HD11	1:A:180:SER:HB2	0.50	1.83	5	1
1:A:64:CYS:H	1:A:115:LEU:HD22	0.50	1.66	21	2
1:A:129:CYS:HB3	1:A:146:ILE:CG2	0.50	2.35	36	1
1:A:80:ILE:CG2	1:A:82:GLN:HB3	0.49	2.37	23	3
1:A:102:GLU:C	1:A:104:SER:N	0.49	2.65	9	14
1:A:132:PRO:HB3	1:A:179:TRP:CZ2	0.49	2.42	38	4
1:A:103:PRO:O	1:A:104:SER:HB3	0.49	2.07	42	6
1:A:69:ARG:N	1:A:69:ARG:HD3	0.49	2.22	35	1
1:A:77:GLN:HG2	1:A:79:TYR:CG	0.49	2.42	1	12
1:A:100:ARG:O	1:A:125:LYS:HB2	0.49	2.07	41	8
1:A:128:SER:OG	1:A:147:LEU:HA	0.49	2.06	17	2
1:A:146:ILE:HD12	1:A:179:TRP:HZ2	0.49	1.68	4	3
1:A:172:ILE:HG13	1:A:177:VAL:N	0.49	2.22	7	5
1:A:95:CYS:HB3	1:A:99:TYR:HB2	0.49	1.84	9	5
1:A:136:ARG:CG	1:A:183:LEU:HB3	0.49	2.38	21	2
1:A:63:SER:O	1:A:115:LEU:HD22	0.49	2.06	24	2
1:A:121:VAL:O	1:A:122:GLU:HB2	0.49	2.08	34	1
1:A:99:TYR:CD1	1:A:99:TYR:N	0.49	2.79	11	2
1:A:73:ALA:HB1	1:A:93:TYR:HD2	0.49	1.68	14	1
1:A:126:LYS:HG2	1:A:127:LYS:N	0.49	2.22	27	2
1:A:152:ILE:O	1:A:167:SER:HA	0.49	2.07	38	1
1:A:135:ILE:CG1	1:A:136:ARG:H	0.49	2.21	29	3
1:A:64:CYS:SG	1:A:117:TRP:CE2	0.49	3.05	7	7
1:A:115:LEU:N	1:A:115:LEU:CD2	0.49	2.76	7	2
1:A:94:GLU:O	1:A:95:CYS:SG	0.49	2.70	22	5
1:A:105:LEU:HD12	1:A:106:SER:N	0.49	2.22	26	1
1:A:81:THR:HG22	1:A:82:GLN:HG3	0.49	1.83	33	1
1:A:142:VAL:N	1:A:143:PRO:HD2	0.49	2.23	18	1
1:A:77:GLN:HG3	1:A:80:ILE:HG13	0.49	1.85	35	1
1:A:105:LEU:N	1:A:105:LEU:CD1	0.49	2.76	16	3
1:A:170:CYS:SG	1:A:172:ILE:HD11	0.49	2.48	15	4

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:PRO:O	1:A:79:TYR:C	0.49	2.51	22	2
1:A:171:LEU:HD12	1:A:178:GLN:O	0.49	2.08	31	3
1:A:109:LEU:HD11	1:A:117:TRP:HB3	0.49	1.84	33	3
1:A:126:LYS:HB3	1:A:126:LYS:NZ	0.49	2.23	24	1
1:A:137:ASN:HB3	1:A:157:ASN:ND2	0.49	2.23	11	1
1:A:97:PRO:HB2	1:A:148:PHE:CE1	0.49	2.43	12	1
1:A:109:LEU:CD2	1:A:120:ALA:HB2	0.49	2.37	15	1
1:A:172:ILE:HG23	1:A:177:VAL:H	0.49	1.68	39	2
1:A:135:ILE:CD1	1:A:154:PHE:HB3	0.49	2.38	36	2
1:A:112:LEU:HD12	1:A:116:LYS:O	0.48	2.08	34	2
1:A:92:GLU:HA	1:A:107:PRO:O	0.48	2.08	4	4
1:A:76:LYS:HB3	1:A:76:LYS:NZ	0.48	2.23	39	2
1:A:77:GLN:HB2	1:A:79:TYR:N	0.48	2.22	7	1
1:A:126:LYS:HG2	1:A:127:LYS:O	0.48	2.08	39	1
1:A:105:LEU:H	1:A:105:LEU:CD1	0.48	2.19	2	1
1:A:178:GLN:HG3	1:A:179:TRP:H	0.48	1.68	39	2
1:A:170:CYS:HB2	1:A:179:TRP:CE2	0.48	2.43	15	4
1:A:132:PRO:HD3	1:A:146:ILE:HG13	0.48	1.85	30	4
1:A:161:LYS:HB2	1:A:187:ARG:O	0.48	2.07	29	1
1:A:64:CYS:CA	1:A:115:LEU:HD13	0.48	2.38	9	6
1:A:116:LYS:HB3	1:A:116:LYS:NZ	0.48	2.24	9	2
1:A:92:GLU:HG2	1:A:93:TYR:H	0.48	1.68	22	1
1:A:90:VAL:HG22	1:A:110:THR:OG1	0.48	2.07	35	5
1:A:79:TYR:CD2	1:A:91:VAL:HA	0.48	2.44	30	1
1:A:91:VAL:HG12	1:A:109:LEU:O	0.48	2.08	26	5
1:A:82:GLN:HA	1:A:85:PHE:CZ	0.48	2.43	23	3
1:A:157:ASN:CG	1:A:158:THR:N	0.48	2.67	5	4
1:A:135:ILE:CG1	1:A:154:PHE:HB3	0.48	2.38	6	1
1:A:98:GLY:O	1:A:126:LYS:HG2	0.48	2.08	32	1
1:A:77:GLN:HG3	1:A:80:ILE:CG1	0.48	2.38	35	1
1:A:105:LEU:HD22	1:A:105:LEU:O	0.48	2.09	17	3
1:A:77:GLN:HE21	1:A:80:ILE:H	0.48	1.51	7	2
1:A:172:ILE:HD12	1:A:177:VAL:CA	0.48	2.34	14	2
1:A:164:GLY:O	1:A:165:SER:HB3	0.48	2.09	12	2
1:A:105:LEU:HD23	1:A:105:LEU:C	0.48	2.29	39	3
1:A:64:CYS:N	1:A:115:LEU:HD22	0.48	2.24	21	3
1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD23	0.48	1.69	27	1
1:A:80:ILE:O	1:A:81:THR:HG22	0.48	2.08	1	1
1:A:123:PHE:CD1	1:A:123:PHE:N	0.48	2.81	31	3
1:A:102:GLU:OE2	1:A:121:VAL:HB	0.48	2.09	32	1
1:A:174:GLY:O	1:A:175:SER:HB2	0.48	2.08	23	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:178:GLN:HG2	1:A:179:TRP:H	0.48	1.68	8	2
1:A:76:LYS:HG2	1:A:78:PRO:HD3	0.48	1.84	21	1
1:A:98:GLY:O	1:A:126:LYS:HB2	0.48	2.09	6	2
1:A:90:VAL:HG12	1:A:90:VAL:O	0.48	2.09	28	2
1:A:68:THR:O	1:A:69:ARG:HG2	0.48	2.09	40	1
1:A:112:LEU:O	1:A:113:GLN:C	0.48	2.52	3	1
1:A:121:VAL:CG2	1:A:122:GLU:N	0.48	2.77	7	3
1:A:64:CYS:H	1:A:115:LEU:HD13	0.47	1.68	8	1
1:A:101:ARG:C	1:A:102:GLU:O	0.47	2.52	20	11
1:A:77:GLN:OE1	1:A:78:PRO:HD2	0.47	2.08	27	5
1:A:134:GLU:O	1:A:183:LEU:HD11	0.47	2.09	42	2
1:A:183:LEU:N	1:A:183:LEU:HD12	0.47	2.24	41	3
1:A:87:VAL:HG22	1:A:111:CYS:O	0.47	2.09	3	1
1:A:171:LEU:N	1:A:171:LEU:CD2	0.47	2.77	5	2
1:A:63:SER:OG	1:A:84:TYR:HB3	0.47	2.08	23	2
1:A:70:LEU:HD13	1:A:123:PHE:CE1	0.47	2.45	2	3
1:A:100:ARG:HH11	1:A:127:LYS:HE3	0.47	1.67	6	1
1:A:126:LYS:NZ	1:A:148:PHE:HB3	0.47	2.24	12	3
1:A:98:GLY:O	1:A:126:LYS:HD3	0.47	2.10	18	3
1:A:121:VAL:HG22	1:A:122:GLU:H	0.47	1.69	27	1
1:A:137:ASN:OD1	1:A:186:CYS:HB2	0.47	2.08	35	1
1:A:138:GLY:O	1:A:139:GLN:CB	0.47	2.63	25	5
1:A:76:LYS:O	1:A:76:LYS:HD2	0.47	2.09	17	1
1:A:120:ALA:HB1	1:A:123:PHE:CE1	0.47	2.43	18	1
1:A:75:LEU:HD21	1:A:91:VAL:HG21	0.47	1.86	22	1
1:A:142:VAL:HG22	1:A:146:ILE:HD11	0.47	1.86	38	1
1:A:75:LEU:H	1:A:75:LEU:HD12	0.47	1.70	3	1
1:A:98:GLY:HA3	1:A:172:ILE:CG2	0.47	2.40	35	4
1:A:93:TYR:O	1:A:101:ARG:NH2	0.47	2.48	7	2
1:A:94:GLU:CG	1:A:95:CYS:N	0.47	2.77	34	2
1:A:135:ILE:CG2	1:A:140:ILE:HG13	0.47	2.39	1	4
1:A:80:ILE:CG2	1:A:82:GLN:HB2	0.47	2.40	28	2
1:A:91:VAL:HG12	1:A:92:GLU:N	0.47	2.24	3	1
1:A:77:GLN:N	1:A:78:PRO:CD	0.47	2.77	33	4
1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:HD23	0.47	2.25	6	1
1:A:148:PHE:HD2	1:A:172:ILE:HD13	0.47	1.69	11	1
1:A:138:GLY:HA3	1:A:155:SER:O	0.47	2.10	14	4
1:A:98:GLY:HA2	1:A:172:ILE:CG2	0.47	2.38	21	2
1:A:100:ARG:HG2	1:A:125:LYS:HB2	0.47	1.86	1	2
1:A:105:LEU:H	1:A:105:LEU:CD2	0.47	2.22	32	4
1:A:72:SER:HB3	1:A:124:CYS:CB	0.47	2.38	40	1

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:77:GLN:CG	1:A:79:TYR:HB2	0.47	2.40	11	2
1:A:70:LEU:CD1	1:A:123:PHE:CD1	0.47	2.96	5	2
1:A:105:LEU:O	1:A:106:SER:C	0.47	2.53	39	3
1:A:163:PHE:HB2	1:A:185:GLU:HB2	0.47	1.85	33	1
1:A:99:TYR:CB	1:A:124:CYS:SG	0.47	3.03	37	3
1:A:175:SER:O	1:A:176:SER:HB2	0.47	2.10	20	9
1:A:159:GLY:O	1:A:188:GLU:HG2	0.47	2.09	37	2
1:A:152:ILE:HG12	1:A:179:TRP:CZ3	0.47	2.45	13	14
1:A:75:LEU:CD2	1:A:91:VAL:HG21	0.47	2.40	22	2
1:A:111:CYS:HB2	1:A:117:TRP:CZ2	0.47	2.45	32	7
1:A:99:TYR:N	1:A:127:LYS:HG3	0.47	2.25	18	2
1:A:85:PHE:CE2	1:A:89:THR:HG21	0.47	2.45	26	3
1:A:90:VAL:HG21	1:A:108:LYS:HE3	0.47	1.87	32	1
1:A:100:ARG:HD3	1:A:127:LYS:HE2	0.46	1.86	11	1
1:A:75:LEU:HG	1:A:93:TYR:CE1	0.46	2.45	12	1
1:A:76:LYS:C	1:A:78:PRO:HD2	0.46	2.31	33	1
1:A:136:ARG:CG	1:A:183:LEU:HD12	0.46	2.38	2	1
1:A:75:LEU:HB3	1:A:77:GLN:NE2	0.46	2.24	5	1
1:A:102:GLU:CB	1:A:103:PRO:HD3	0.46	2.40	23	3
1:A:102:GLU:HB2	1:A:105:LEU:HD11	0.46	1.86	35	3
1:A:161:LYS:O	1:A:187:ARG:N	0.46	2.49	33	1
1:A:76:LYS:CB	1:A:94:GLU:HB2	0.46	2.40	29	7
1:A:70:LEU:HD11	1:A:93:TYR:CE2	0.46	2.45	2	1
1:A:129:CYS:HB2	1:A:147:LEU:O	0.46	2.11	2	2
1:A:102:GLU:CD	1:A:105:LEU:HA	0.46	2.31	8	1
1:A:89:THR:CG2	1:A:90:VAL:N	0.46	2.78	25	3
1:A:156:CYS:SG	1:A:162:LEU:CB	0.46	3.03	17	2
1:A:157:ASN:ND2	1:A:158:THR:H	0.46	2.08	5	2
1:A:68:THR:HB	1:A:109:LEU:CD1	0.46	2.41	6	1
1:A:98:GLY:C	1:A:127:LYS:HG2	0.46	2.31	8	1
1:A:171:LEU:O	1:A:171:LEU:CD1	0.46	2.63	14	1
1:A:123:PHE:HB2	1:A:124:CYS:SG	0.46	2.51	16	1
1:A:114:ASN:O	1:A:116:LYS:N	0.46	2.48	40	3
1:A:136:ARG:O	1:A:186:CYS:SG	0.46	2.73	16	3
1:A:102:GLU:CB	1:A:103:PRO:HD2	0.46	2.33	7	4
1:A:154:PHE:HB2	1:A:166:THR:HA	0.46	1.88	9	2
1:A:90:VAL:CG1	1:A:108:LYS:HG3	0.46	2.40	17	6
1:A:140:ILE:CG2	1:A:141:ASP:N	0.46	2.79	16	1
1:A:187:ARG:O	1:A:188:GLU:C	0.46	2.53	24	1
1:A:168:SER:HB2	1:A:181:ASP:HB2	0.46	1.86	15	1
1:A:129:CYS:O	1:A:146:ILE:O	0.46	2.34	20	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:136:ARG:HE	1:A:183:LEU:HD23	0.46	1.70	20	1
1:A:136:ARG:CG	1:A:183:LEU:HD23	0.46	2.35	36	2
1:A:128:SER:HB2	1:A:147:LEU:HA	0.46	1.88	23	3
1:A:90:VAL:HA	1:A:109:LEU:O	0.46	2.10	4	1
1:A:93:TYR:OH	1:A:109:LEU:HD22	0.46	2.11	4	1
1:A:99:TYR:C	1:A:124:CYS:SG	0.46	2.95	7	1
1:A:136:ARG:HB3	1:A:183:LEU:CD2	0.46	2.41	14	1
1:A:70:LEU:HB3	1:A:122:GLU:HA	0.46	1.88	16	1
1:A:101:ARG:HB3	1:A:123:PHE:HB3	0.46	1.88	21	2
1:A:75:LEU:HD11	1:A:91:VAL:HG11	0.46	1.86	28	1
1:A:183:LEU:N	1:A:183:LEU:CD2	0.46	2.78	38	7
1:A:109:LEU:HD23	1:A:117:TRP:CE3	0.46	2.46	4	1
1:A:77:GLN:NE2	1:A:80:ILE:N	0.46	2.64	10	1
1:A:177:VAL:O	1:A:177:VAL:CG1	0.46	2.64	30	6
1:A:163:PHE:HD1	1:A:187:ARG:HB2	0.46	1.69	23	1
1:A:100:ARG:HD3	1:A:101:ARG:H	0.46	1.71	32	1
1:A:136:ARG:O	1:A:137:ASN:HB2	0.46	2.10	32	3
1:A:64:CYS:CA	1:A:115:LEU:HD22	0.46	2.41	19	3
1:A:102:GLU:O	1:A:105:LEU:HD13	0.46	2.11	25	1
1:A:106:SER:HB3	1:A:121:VAL:HG11	0.45	1.88	12	1
1:A:74:SER:O	1:A:94:GLU:N	0.45	2.49	13	3
1:A:152:ILE:HD11	1:A:168:SER:HB3	0.45	1.88	3	1
1:A:76:LYS:HB2	1:A:94:GLU:CB	0.45	2.39	30	2
1:A:114:ASN:O	1:A:115:LEU:C	0.45	2.55	18	7
1:A:157:ASN:ND2	1:A:158:THR:N	0.45	2.65	5	1
1:A:70:LEU:HD11	1:A:120:ALA:HB1	0.45	1.87	24	3
1:A:135:ILE:HG13	1:A:183:LEU:HD13	0.45	1.87	11	1
1:A:97:PRO:CB	1:A:173:SER:HB2	0.45	2.41	30	1
1:A:108:LYS:NZ	1:A:108:LYS:HB3	0.45	2.26	37	1
1:A:146:ILE:HD13	1:A:179:TRP:CZ2	0.45	2.46	21	5
1:A:68:THR:OG1	1:A:117:TRP:HB2	0.45	2.12	40	2
1:A:77:GLN:HG2	1:A:80:ILE:H	0.45	1.70	10	1
1:A:151:THR:HB	1:A:169:PHE:HA	0.45	1.88	15	1
1:A:163:PHE:CD1	1:A:187:ARG:HB2	0.45	2.46	28	4
1:A:76:LYS:HG3	1:A:94:GLU:CD	0.45	2.32	24	1
1:A:164:GLY:O	1:A:166:THR:N	0.45	2.50	33	2
1:A:83:ASN:O	1:A:84:TYR:HB2	0.45	2.10	37	1
1:A:135:ILE:CD1	1:A:184:PRO:HG2	0.45	2.42	15	4
1:A:75:LEU:CB	1:A:80:ILE:HD11	0.45	2.40	23	2
1:A:90:VAL:HG22	1:A:108:LYS:CG	0.45	2.42	13	2
1:A:84:TYR:O	1:A:84:TYR:CG	0.45	2.69	8	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:161:LYS:O	1:A:186:CYS:HA	0.45	2.11	13	1
1:A:112:LEU:HG	1:A:118:SER:HB3	0.45	1.88	17	1
1:A:105:LEU:H	1:A:105:LEU:HD22	0.45	1.71	27	2
1:A:75:LEU:HD21	1:A:93:TYR:CD1	0.45	2.47	24	1
1:A:128:SER:HB3	1:A:147:LEU:HB3	0.45	1.88	35	1
1:A:101:ARG:HG2	1:A:123:PHE:O	0.45	2.12	37	1
1:A:63:SER:O	1:A:64:CYS:SG	0.45	2.75	3	2
1:A:93:TYR:HB2	1:A:107:PRO:HB2	0.45	1.89	4	1
1:A:97:PRO:HB3	1:A:172:ILE:O	0.45	2.12	31	2
1:A:64:CYS:CB	1:A:85:PHE:HB2	0.45	2.41	31	4
1:A:142:VAL:HG12	1:A:144:GLY:H	0.45	1.72	24	3
1:A:112:LEU:CG	1:A:118:SER:HB2	0.45	2.38	41	2
1:A:184:PRO:O	1:A:185:GLU:HB2	0.45	2.12	31	2
1:A:157:ASN:CG	1:A:158:THR:H	0.45	2.15	9	8
1:A:138:GLY:HA2	1:A:157:ASN:H	0.45	1.72	13	2
1:A:115:LEU:N	1:A:115:LEU:CD1	0.45	2.79	6	1
1:A:97:PRO:HB3	1:A:172:ILE:HG22	0.45	1.88	17	1
1:A:85:PHE:CD1	1:A:85:PHE:N	0.45	2.85	24	1
1:A:117:TRP:O	1:A:118:SER:O	0.45	2.35	17	1
1:A:97:PRO:HB2	1:A:172:ILE:CG2	0.45	2.42	18	1
1:A:75:LEU:HD12	1:A:80:ILE:HD11	0.45	1.89	26	2
1:A:96:ARG:HG2	1:A:99:TYR:CD1	0.45	2.46	22	1
1:A:100:ARG:HD2	1:A:127:LYS:HD2	0.45	1.87	24	1
1:A:135:ILE:HB	1:A:140:ILE:CD1	0.45	2.42	2	1
1:A:87:VAL:CG2	1:A:115:LEU:HD23	0.45	2.41	15	1
1:A:82:GLN:O	1:A:82:GLN:HG3	0.45	2.12	18	1
1:A:100:ARG:HB2	1:A:125:LYS:HE2	0.45	1.89	24	1
1:A:146:ILE:HG22	1:A:146:ILE:O	0.45	2.12	41	2
1:A:77:GLN:NE2	1:A:77:GLN:N	0.45	2.65	42	1
1:A:118:SER:OG	1:A:119:THR:N	0.44	2.50	7	5
1:A:135:ILE:CD1	1:A:136:ARG:HB2	0.44	2.42	6	1
1:A:100:ARG:HD3	1:A:101:ARG:N	0.44	2.27	36	3
1:A:80:ILE:C	1:A:82:GLN:H	0.44	2.15	13	2
1:A:140:ILE:HG12	1:A:154:PHE:CD1	0.44	2.44	34	3
1:A:77:GLN:HG3	1:A:78:PRO:HD2	0.44	1.89	31	1
1:A:129:CYS:O	1:A:146:ILE:HG22	0.44	2.12	31	1
1:A:103:PRO:HG2	1:A:105:LEU:HD12	0.44	1.88	16	1
1:A:168:SER:OG	1:A:181:ASP:HB2	0.44	2.12	16	1
1:A:125:LYS:O	1:A:126:LYS:CB	0.44	2.65	20	2
1:A:176:SER:O	1:A:178:GLN:HG2	0.44	2.12	38	2
1:A:73:ALA:HB1	1:A:93:TYR:CD1	0.44	2.48	30	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:CYS:HB2	1:A:85:PHE:CD1	0.44	2.47	3	1
1:A:135:ILE:HG22	1:A:139:GLN:C	0.44	2.33	41	2
1:A:132:PRO:HD2	1:A:142:VAL:HG11	0.44	1.89	25	2
1:A:142:VAL:HG22	1:A:144:GLY:H	0.44	1.71	13	1
1:A:91:VAL:HG22	1:A:92:GLU:H	0.44	1.72	16	3
1:A:172:ILE:HG23	1:A:176:SER:CA	0.44	2.40	24	2
1:A:120:ALA:HA	1:A:123:PHE:CE1	0.44	2.47	31	1
1:A:102:GLU:O	1:A:105:LEU:HG	0.44	2.13	34	1
1:A:163:PHE:CD2	1:A:187:ARG:HB2	0.44	2.47	1	1
1:A:64:CYS:SG	1:A:85:PHE:O	0.44	2.76	3	1
1:A:77:GLN:HE21	1:A:80:ILE:N	0.44	2.10	10	1
1:A:74:SER:O	1:A:94:GLU:O	0.44	2.36	26	1
1:A:81:THR:HG23	1:A:83:ASN:H	0.44	1.72	41	2
1:A:175:SER:O	1:A:176:SER:HB3	0.44	2.13	37	1
1:A:136:ARG:O	1:A:138:GLY:N	0.44	2.49	42	4
1:A:99:TYR:HA	1:A:126:LYS:CG	0.44	2.41	25	3
1:A:134:GLU:O	1:A:135:ILE:C	0.44	2.56	14	2
1:A:121:VAL:O	1:A:122:GLU:CB	0.44	2.65	34	1
1:A:142:VAL:HG23	1:A:146:ILE:HG13	0.44	1.90	35	1
1:A:96:ARG:HG2	1:A:99:TYR:CD2	0.44	2.47	37	1
1:A:183:LEU:HD22	1:A:183:LEU:N	0.44	2.27	2	3
1:A:77:GLN:C	1:A:79:TYR:N	0.44	2.70	17	3
1:A:64:CYS:N	1:A:85:PHE:O	0.44	2.51	40	2
1:A:103:PRO:HD2	1:A:105:LEU:HD11	0.44	1.89	27	1
1:A:64:CYS:HB3	1:A:85:PHE:HB2	0.44	1.89	31	1
1:A:81:THR:H	1:A:85:PHE:HE2	0.44	1.56	8	1
1:A:89:THR:H	1:A:111:CYS:HB3	0.44	1.71	11	1
1:A:79:TYR:HB3	1:A:91:VAL:CG2	0.44	2.39	14	1
1:A:135:ILE:CD1	1:A:184:PRO:HD2	0.44	2.43	22	2
1:A:102:GLU:CD	1:A:122:GLU:HB2	0.44	2.33	24	1
1:A:64:CYS:HB3	1:A:117:TRP:CZ2	0.44	2.48	36	2
1:A:162:LEU:HD13	1:A:166:THR:OG1	0.44	2.13	33	1
1:A:101:ARG:CA	1:A:123:PHE:O	0.44	2.63	7	1
1:A:100:ARG:HG2	1:A:127:LYS:HG2	0.44	1.90	29	1
1:A:161:LYS:NZ	1:A:161:LYS:HB3	0.44	2.28	37	1
1:A:81:THR:HG22	1:A:85:PHE:CE2	0.44	2.48	41	1
1:A:136:ARG:CZ	1:A:185:GLU:HG3	0.44	2.43	22	1
1:A:87:VAL:HG23	1:A:115:LEU:HD13	0.43	1.89	1	1
1:A:147:LEU:HD12	1:A:147:LEU:N	0.43	2.28	35	3
1:A:161:LYS:N	1:A:161:LYS:HD3	0.43	2.27	12	1
1:A:92:GLU:HG2	1:A:93:TYR:N	0.43	2.28	22	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:THR:HG22	1:A:70:LEU:HG	0.43	1.88	25	1
1:A:130:PRO:O	1:A:131:ASN:C	0.43	2.56	36	1
1:A:178:GLN:HG2	1:A:179:TRP:N	0.43	2.29	18	1
1:A:75:LEU:O	1:A:77:GLN:HG2	0.43	2.13	21	1
1:A:134:GLU:HG3	1:A:139:GLN:HA	0.43	1.90	28	1
1:A:75:LEU:CB	1:A:77:GLN:HB3	0.43	2.43	33	1
1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:CD2	0.43	2.81	26	4
1:A:91:VAL:CG1	1:A:109:LEU:HB3	0.43	2.43	12	5
1:A:184:PRO:O	1:A:185:GLU:C	0.43	2.56	32	3
1:A:102:GLU:H	1:A:123:PHE:HB3	0.43	1.73	21	1
1:A:114:ASN:O	1:A:115:LEU:CB	0.43	2.65	31	5
1:A:82:GLN:NE2	1:A:82:GLN:H	0.43	2.12	29	1
1:A:120:ALA:O	1:A:123:PHE:HD1	0.43	1.96	34	1
1:A:105:LEU:HD11	1:A:123:PHE:CD2	0.43	2.48	4	1
1:A:110:THR:HB	1:A:118:SER:CB	0.43	2.43	4	1
1:A:166:THR:O	1:A:167:SER:HB3	0.43	2.13	14	2
1:A:136:ARG:HG3	1:A:183:LEU:CD1	0.43	2.43	26	2
1:A:70:LEU:HD22	1:A:121:VAL:O	0.43	2.14	27	1
1:A:150:ALA:O	1:A:170:CYS:HB3	0.43	2.13	35	1
1:A:98:GLY:O	1:A:126:LYS:HD2	0.43	2.13	10	2
1:A:89:THR:HB	1:A:111:CYS:HB3	0.43	1.90	29	1
1:A:128:SER:HA	1:A:147:LEU:HD12	0.43	1.90	36	1
1:A:77:GLN:HB3	1:A:80:ILE:HD12	0.43	1.90	41	1
1:A:73:ALA:HB1	1:A:93:TYR:HB3	0.43	1.90	3	1
1:A:129:CYS:HA	1:A:177:VAL:CG1	0.43	2.44	13	1
1:A:76:LYS:HG3	1:A:94:GLU:OE2	0.43	2.14	19	1
1:A:105:LEU:C	1:A:107:PRO:HD3	0.43	2.34	26	1
1:A:137:ASN:HD22	1:A:137:ASN:N	0.43	2.11	39	1
1:A:91:VAL:HG12	1:A:109:LEU:CB	0.43	2.43	5	2
1:A:176:SER:O	1:A:178:GLN:HG3	0.43	2.14	5	1
1:A:82:GLN:C	1:A:84:TYR:N	0.43	2.72	7	1
1:A:76:LYS:HG2	1:A:76:LYS:O	0.43	2.14	13	1
1:A:182:PRO:O	1:A:183:LEU:C	0.43	2.57	14	1
1:A:135:ILE:O	1:A:136:ARG:HG3	0.43	2.14	23	1
1:A:69:ARG:O	1:A:69:ARG:HG3	0.43	2.13	40	1
1:A:105:LEU:C	1:A:105:LEU:CD2	0.43	2.87	2	1
1:A:109:LEU:HD23	1:A:120:ALA:HB2	0.43	1.91	18	2
1:A:140:ILE:CG2	1:A:152:ILE:HD12	0.43	2.44	17	1
1:A:97:PRO:HB2	1:A:148:PHE:CZ	0.43	2.49	27	1
1:A:135:ILE:H	1:A:140:ILE:HG13	0.43	1.73	32	1
1:A:156:CYS:SG	1:A:160:TYR:HD2	0.43	2.37	9	2

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:TYR:C	1:A:127:LYS:HG3	0.43	2.34	10	1
1:A:73:ALA:HB2	1:A:95:CYS:SG	0.43	2.54	11	1
1:A:102:GLU:HG2	1:A:123:PHE:CD2	0.43	2.49	11	1
1:A:100:ARG:CG	1:A:101:ARG:N	0.43	2.82	14	2
1:A:102:GLU:OE1	1:A:105:LEU:HD11	0.43	2.14	28	1
1:A:98:GLY:HA2	1:A:172:ILE:HB	0.43	1.89	39	1
1:A:87:VAL:HG22	1:A:112:LEU:C	0.43	2.34	28	3
1:A:125:LYS:O	1:A:126:LYS:HE2	0.43	2.14	13	1
1:A:125:LYS:HB3	1:A:125:LYS:NZ	0.43	2.29	29	2
1:A:121:VAL:HG22	1:A:123:PHE:CZ	0.43	2.49	39	1
1:A:76:LYS:HD2	1:A:101:ARG:NH2	0.42	2.28	13	1
1:A:87:VAL:HA	1:A:111:CYS:HB3	0.42	1.91	24	1
1:A:102:GLU:O	1:A:105:LEU:CD2	0.42	2.67	25	1
1:A:186:CYS:SG	1:A:186:CYS:O	0.42	2.76	27	1
1:A:102:GLU:OE1	1:A:105:LEU:HD23	0.42	2.14	8	1
1:A:105:LEU:CD2	1:A:105:LEU:N	0.42	2.81	13	1
1:A:76:LYS:O	1:A:76:LYS:HG2	0.42	2.14	16	1
1:A:142:VAL:H	1:A:143:PRO:CD	0.42	2.27	18	1
1:A:77:GLN:H	1:A:77:GLN:CD	0.42	2.16	35	1
1:A:135:ILE:HA	1:A:183:LEU:CD1	0.42	2.44	1	1
1:A:132:PRO:HG3	1:A:152:ILE:HD13	0.42	1.90	8	2
1:A:70:LEU:HD12	1:A:73:ALA:HB3	0.42	1.91	9	1
1:A:98:GLY:CA	1:A:172:ILE:HG21	0.42	2.45	11	2
1:A:94:GLU:CG	1:A:95:CYS:H	0.42	2.25	41	2
1:A:98:GLY:H	1:A:172:ILE:HG21	0.42	1.70	10	1
1:A:94:GLU:HA	1:A:101:ARG:NH2	0.42	2.29	11	1
1:A:172:ILE:HA	1:A:176:SER:C	0.42	2.34	16	1
1:A:75:LEU:HB2	1:A:77:GLN:NE2	0.42	2.30	35	1
1:A:115:LEU:N	1:A:115:LEU:HD23	0.42	2.28	35	1
1:A:77:GLN:CD	1:A:78:PRO:HD2	0.42	2.35	28	6
1:A:168:SER:O	1:A:179:TRP:HZ3	0.42	1.97	2	1
1:A:136:ARG:CB	1:A:183:LEU:HD23	0.42	2.41	4	1
1:A:105:LEU:C	1:A:105:LEU:HD23	0.42	2.35	13	1
1:A:100:ARG:CG	1:A:125:LYS:HB2	0.42	2.45	18	1
1:A:132:PRO:HG2	1:A:140:ILE:HG21	0.42	1.91	21	1
1:A:105:LEU:N	1:A:105:LEU:CD2	0.42	2.82	22	1
1:A:134:GLU:HA	1:A:140:ILE:HB	0.42	1.91	41	1
1:A:137:ASN:CG	1:A:138:GLY:H	0.42	2.17	22	1
1:A:73:ALA:HA	1:A:95:CYS:SG	0.42	2.55	6	2
1:A:99:TYR:CD2	1:A:126:LYS:HB3	0.42	2.49	6	1
1:A:112:LEU:HB3	1:A:113:GLN:H	0.42	1.56	12	2

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:LEU:O	1:A:76:LYS:HG2	0.42	2.15	19	1
1:A:88:GLY:H	1:A:111:CYS:HB3	0.42	1.74	20	1
1:A:115:LEU:N	1:A:115:LEU:HD22	0.42	2.30	37	1
1:A:164:GLY:HA3	1:A:184:PRO:HB2	0.42	1.91	41	1
1:A:63:SER:C	1:A:115:LEU:HG	0.42	2.34	1	3
1:A:151:THR:HG23	1:A:168:SER:C	0.42	2.34	2	1
1:A:87:VAL:CG2	1:A:112:LEU:O	0.42	2.68	3	1
1:A:136:ARG:HG3	1:A:186:CYS:SG	0.42	2.55	17	2
1:A:75:LEU:HD21	1:A:91:VAL:CG1	0.42	2.44	16	1
1:A:70:LEU:HD12	1:A:93:TYR:CE2	0.42	2.50	26	1
1:A:70:LEU:HD22	1:A:70:LEU:N	0.42	2.28	31	1
1:A:135:ILE:CG2	1:A:139:GLN:HA	0.42	2.45	38	1
1:A:105:LEU:HD21	1:A:122:GLU:CB	0.42	2.45	39	1
1:A:105:LEU:CD1	1:A:105:LEU:N	0.42	2.82	2	1
1:A:85:PHE:CE1	1:A:89:THR:HG21	0.42	2.49	4	1
1:A:136:ARG:HD3	1:A:185:GLU:HG2	0.42	1.91	9	1
1:A:116:LYS:O	1:A:117:TRP:C	0.42	2.57	42	7
1:A:151:THR:HA	1:A:179:TRP:CH2	0.42	2.50	25	2
1:A:96:ARG:NE	1:A:96:ARG:HA	0.42	2.30	36	1
1:A:63:SER:HB3	1:A:84:TYR:HB2	0.42	1.89	8	1
1:A:104:SER:O	1:A:105:LEU:O	0.42	2.38	8	1
1:A:77:GLN:HB2	1:A:80:ILE:CG1	0.42	2.45	9	1
1:A:131:ASN:HA	1:A:146:ILE:HG21	0.42	1.91	9	1
1:A:100:ARG:HG2	1:A:101:ARG:O	0.42	2.15	14	1
1:A:89:THR:O	1:A:90:VAL:HG23	0.42	2.14	28	1
1:A:109:LEU:HD12	1:A:117:TRP:CE3	0.42	2.50	29	1
1:A:102:GLU:HG3	1:A:103:PRO:CD	0.42	2.45	32	1
1:A:105:LEU:HD21	1:A:122:GLU:HB2	0.42	1.90	39	1
1:A:135:ILE:H	1:A:140:ILE:CD1	0.42	2.26	22	1
1:A:90:VAL:HG22	1:A:108:LYS:HG2	0.41	1.91	3	1
1:A:63:SER:O	1:A:64:CYS:O	0.41	2.37	36	2
1:A:151:THR:OG1	1:A:152:ILE:N	0.41	2.53	42	2
1:A:127:LYS:NZ	1:A:127:LYS:HB3	0.41	2.30	22	1
1:A:100:ARG:HD3	1:A:176:SER:OG	0.41	2.15	30	1
1:A:112:LEU:CD1	1:A:118:SER:HB2	0.41	2.37	38	1
1:A:113:GLN:C	1:A:114:ASN:HD22	0.41	2.18	40	1
1:A:63:SER:OG	1:A:84:TYR:HA	0.41	2.15	41	1
1:A:102:GLU:CD	1:A:105:LEU:HD11	0.41	2.35	41	1
1:A:142:VAL:HG23	1:A:142:VAL:O	0.41	2.15	6	2
1:A:176:SER:O	1:A:177:VAL:C	0.41	2.59	7	1
1:A:72:SER:OG	1:A:124:CYS:HB2	0.41	2.14	14	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:162:LEU:HD13	1:A:165:SER:O	0.41	2.15	21	1
1:A:75:LEU:HD22	1:A:80:ILE:CG1	0.41	2.44	22	1
1:A:136:ARG:HB3	1:A:183:LEU:CD1	0.41	2.44	32	2
1:A:162:LEU:CA	1:A:186:CYS:HA	0.41	2.42	36	1
1:A:99:TYR:CE1	1:A:126:LYS:HB2	0.41	2.50	37	1
1:A:111:CYS:HB2	1:A:117:TRP:CE2	0.41	2.50	37	1
1:A:164:GLY:HA3	1:A:184:PRO:CB	0.41	2.45	41	1
1:A:105:LEU:HD22	1:A:105:LEU:C	0.41	2.36	3	1
1:A:65:GLU:O	1:A:66:VAL:C	0.41	2.58	9	2
1:A:82:GLN:HA	1:A:85:PHE:CE2	0.41	2.50	9	1
1:A:68:THR:O	1:A:93:TYR:OH	0.41	2.38	10	1
1:A:76:LYS:N	1:A:77:GLN:OE1	0.41	2.53	11	1
1:A:147:LEU:HD23	1:A:147:LEU:N	0.41	2.29	27	1
1:A:100:ARG:HB2	1:A:127:LYS:HG3	0.41	1.90	33	1
1:A:126:LYS:H	1:A:126:LYS:HE2	0.41	1.74	8	1
1:A:64:CYS:HB3	1:A:85:PHE:HD1	0.41	1.74	9	1
1:A:64:CYS:C	1:A:115:LEU:HD13	0.41	2.36	9	1
1:A:136:ARG:C	1:A:138:GLY:H	0.41	2.19	19	1
1:A:121:VAL:HG23	1:A:123:PHE:CE1	0.41	2.49	20	1
1:A:137:ASN:HB3	1:A:160:TYR:CE2	0.41	2.50	5	1
1:A:171:LEU:HD21	1:A:180:SER:N	0.41	2.31	5	1
1:A:130:PRO:HD3	1:A:177:VAL:HG11	0.41	1.91	13	1
1:A:103:PRO:HG2	1:A:105:LEU:CD1	0.41	2.45	16	1
1:A:100:ARG:H	1:A:126:LYS:HB2	0.41	1.74	20	1
1:A:125:LYS:HD3	1:A:125:LYS:C	0.41	2.36	25	1
1:A:76:LYS:HD2	1:A:94:GLU:CD	0.41	2.35	28	1
1:A:99:TYR:O	1:A:127:LYS:HE3	0.41	2.14	31	1
1:A:156:CYS:HB2	1:A:186:CYS:HB2	0.41	1.67	36	1
1:A:99:TYR:CD1	1:A:125:LYS:O	0.41	2.74	37	1
1:A:172:ILE:CG1	1:A:177:VAL:HA	0.41	2.42	3	2
1:A:68:THR:HB	1:A:109:LEU:HD21	0.41	1.92	4	1
1:A:185:GLU:HB2	1:A:187:ARG:HG2	0.41	1.91	4	1
1:A:129:CYS:HA	1:A:130:PRO:HD3	0.41	1.79	17	2
1:A:177:VAL:O	1:A:177:VAL:HG13	0.41	2.16	11	1
1:A:116:LYS:O	1:A:117:TRP:O	0.41	2.37	25	1
1:A:121:VAL:HB	1:A:122:GLU:H	0.41	1.59	25	1
1:A:171:LEU:HD11	1:A:179:TRP:C	0.41	2.36	25	1
1:A:100:ARG:HG3	1:A:101:ARG:N	0.41	2.30	32	1
1:A:132:PRO:O	1:A:133:GLY:O	0.41	2.39	34	1
1:A:151:THR:CG2	1:A:168:SER:O	0.41	2.61	2	1
1:A:142:VAL:HG21	1:A:146:ILE:HG12	0.41	1.93	18	1

Continued on next page...



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:70:LEU:HD12	1:A:93:TYR:CD1	0.41	2.51	22	1
1:A:135:ILE:HG13	1:A:136:ARG:HG2	0.41	1.92	22	1
1:A:103:PRO:HD2	1:A:123:PHE:O	0.41	2.15	25	1
1:A:164:GLY:CA	1:A:184:PRO:HB3	0.41	2.46	37	1
1:A:160:TYR:CE1	1:A:188:GLU:HB2	0.41	2.51	5	1
1:A:96:ARG:C	1:A:98:GLY:H	0.41	2.19	18	1
1:A:102:GLU:OE2	1:A:105:LEU:HD21	0.41	2.15	24	1
1:A:77:GLN:O	1:A:77:GLN:HG2	0.41	2.16	26	1
1:A:70:LEU:HG	1:A:123:PHE:CD1	0.41	2.51	31	1
1:A:185:GLU:H	1:A:185:GLU:CD	0.41	2.19	34	1
1:A:126:LYS:HD3	1:A:127:LYS:C	0.41	2.36	1	1
1:A:121:VAL:HG12	1:A:122:GLU:HG3	0.41	1.93	2	1
1:A:89:THR:O	1:A:110:THR:CA	0.41	2.66	5	1
1:A:176:SER:C	1:A:178:GLN:N	0.41	2.74	5	1
1:A:121:VAL:O	1:A:123:PHE:HD1	0.41	1.98	7	1
1:A:105:LEU:HB2	1:A:107:PRO:HD3	0.41	1.93	8	1
1:A:157:ASN:OD1	1:A:157:ASN:C	0.41	2.58	11	1
1:A:140:ILE:HG23	1:A:152:ILE:HB	0.41	1.93	13	1
1:A:97:PRO:CB	1:A:176:SER:HA	0.41	2.46	18	1
1:A:162:LEU:HD12	1:A:184:PRO:HB2	0.41	1.93	19	1
1:A:64:CYS:HA	1:A:115:LEU:CB	0.41	2.43	21	1
1:A:100:ARG:HD3	1:A:125:LYS:HE2	0.41	1.93	24	1
1:A:99:TYR:CE1	1:A:126:LYS:HD3	0.41	2.51	27	1
1:A:76:LYS:HD3	1:A:93:TYR:O	0.41	2.16	29	1
1:A:136:ARG:HD3	1:A:184:PRO:O	0.41	2.16	30	1
1:A:187:ARG:HA	1:A:187:ARG:HD2	0.41	1.76	33	1
1:A:93:TYR:CE2	1:A:109:LEU:HB2	0.41	2.51	4	1
1:A:162:LEU:HD13	1:A:166:THR:HG22	0.41	1.93	4	1
1:A:109:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HA	0.41	1.77	12	3
1:A:154:PHE:CE2	1:A:184:PRO:HG3	0.41	2.51	12	1
1:A:183:LEU:HD12	1:A:183:LEU:H	0.41	1.75	21	1
1:A:97:PRO:HB2	1:A:172:ILE:O	0.41	2.16	22	1
1:A:171:LEU:O	1:A:172:ILE:HD12	0.41	2.16	28	1
1:A:121:VAL:C	1:A:122:GLU:HG3	0.40	2.36	2	1
1:A:68:THR:OG1	1:A:120:ALA:HB2	0.40	2.15	7	1
1:A:116:LYS:NZ	1:A:116:LYS:HB2	0.40	2.31	26	1
1:A:76:LYS:HD2	1:A:94:GLU:OE2	0.40	2.16	28	1
1:A:176:SER:O	1:A:177:VAL:HG12	0.40	2.16	30	1
1:A:70:LEU:O	1:A:71:ASN:C	0.40	2.60	33	1
1:A:72:SER:HA	1:A:96:ARG:HH21	0.40	1.76	33	1
1:A:132:PRO:HD2	1:A:142:VAL:HG21	0.40	1.92	39	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:140:ILE:HG21	1:A:152:ILE:HD12	0.40	1.93	5	1
1:A:76:LYS:HG3	1:A:78:PRO:HD3	0.40	1.94	6	1
1:A:87:VAL:O	1:A:87:VAL:CG1	0.40	2.68	26	2
1:A:152:ILE:HG12	1:A:179:TRP:HZ3	0.40	1.77	37	1
1:A:151:THR:HG22	1:A:152:ILE:N	0.40	2.31	2	1
1:A:169:PHE:O	1:A:179:TRP:HA	0.40	2.16	18	1
1:A:74:SER:O	1:A:94:GLU:CB	0.40	2.70	20	1
1:A:135:ILE:CG1	1:A:136:ARG:HG2	0.40	2.46	22	1
1:A:79:TYR:CE2	1:A:92:GLU:HG3	0.40	2.50	23	1
1:A:134:GLU:OE1	1:A:140:ILE:HB	0.40	2.15	34	1
1:A:98:GLY:C	1:A:127:LYS:H	0.40	2.19	1	1
1:A:68:THR:CG2	1:A:70:LEU:HG	0.40	2.47	7	1
1:A:76:LYS:HG3	1:A:94:GLU:OE1	0.40	2.17	7	1
1:A:172:ILE:HD13	1:A:172:ILE:N	0.40	2.30	15	1
1:A:75:LEU:HD23	1:A:92:GLU:O	0.40	2.16	16	1
1:A:101:ARG:HB3	1:A:123:PHE:HD2	0.40	1.76	16	1
1:A:178:GLN:HA	1:A:178:GLN:OE1	0.40	2.16	16	1
1:A:132:PRO:CB	1:A:152:ILE:HD13	0.40	2.46	17	1
1:A:76:LYS:HG3	1:A:77:GLN:N	0.40	2.31	20	1
1:A:100:ARG:N	1:A:126:LYS:HD2	0.40	2.32	26	1
1:A:127:LYS:NZ	1:A:177:VAL:HG11	0.40	2.32	32	1
1:A:70:LEU:O	1:A:72:SER:N	0.40	2.55	36	1
1:A:114:ASN:HD21	1:A:116:LYS:HB3	0.40	1.77	39	1
1:A:102:GLU:HG3	1:A:105:LEU:HB3	0.40	1.93	4	1
1:A:136:ARG:HA	1:A:183:LEU:CD1	0.40	2.45	6	1
1:A:136:ARG:CD	1:A:185:GLU:HA	0.40	2.47	6	1
1:A:80:ILE:HG23	1:A:82:GLN:CB	0.40	2.46	15	1
1:A:101:ARG:CB	1:A:123:PHE:HB3	0.40	2.47	16	1
1:A:85:PHE:CD2	1:A:89:THR:HG21	0.40	2.51	22	1
1:A:102:GLU:OE1	1:A:121:VAL:HB	0.40	2.16	25	1
1:A:97:PRO:O	1:A:172:ILE:HG22	0.40	2.16	26	1
1:A:91:VAL:HG22	1:A:92:GLU:N	0.40	2.31	30	1
1:A:130:PRO:HD3	1:A:177:VAL:HG13	0.40	1.92	32	1
1:A:157:ASN:HB3	1:A:160:TYR:CD2	0.40	2.51	32	2
1:A:135:ILE:HA	1:A:183:LEU:CD2	0.40	2.43	35	1

## 6.3 Torsion angles [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	126/129 (98%)	78±5 (62±4%)	33±4 (26±3%)	15±2 (12±2%)	1	7
All	All	5292/5418 (98%)	3292 (62%)	1381 (26%)	619 (12%)	1	7

All 64 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	103	PRO	41
1	A	112	LEU	38
1	A	177	VAL	36
1	A	102	GLU	32
1	A	135	ILE	28
1	A	115	LEU	26
1	A	118	SER	24
1	A	184	PRO	24
1	A	138	GLY	21
1	A	80	ILE	20
1	A	182	PRO	20
1	A	164	GLY	18
1	A	183	LEU	18
1	A	121	VAL	17
1	A	174	GLY	16
1	A	78	PRO	16
1	A	133	GLY	15
1	A	119	THR	11
1	A	136	ARG	11
1	A	122	GLU	10
1	A	131	ASN	10
1	A	157	ASN	10
1	A	185	GLU	10
1	A	104	SER	9
1	A	69	ARG	9
1	A	126	LYS	8
1	A	63	SER	7

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	79	TYR	7
1	A	64	CYS	7
1	A	165	SER	7
1	A	188	GLU	7
1	A	175	SER	6
1	A	81	THR	6
1	A	176	SER	6
1	A	139	GLN	6
1	A	137	ASN	5
1	A	123	PHE	4
1	A	132	PRO	4
1	A	117	TRP	4
1	A	144	GLY	4
1	A	101	ARG	4
1	A	107	PRO	3
1	A	130	PRO	3
1	A	109	LEU	3
1	A	84	TYR	3
1	A	148	PHE	2
1	A	97	PRO	2
1	A	145	GLY	2
1	A	71	ASN	2
1	A	67	PRO	2
1	A	167	SER	2
1	A	83	ASN	1
1	A	113	GLN	1
1	A	179	TRP	1
1	A	105	LEU	1
1	A	82	GLN	1
1	A	128	SER	1
1	A	147	LEU	1
1	A	143	PRO	1
1	A	180	SER	1
1	A	125	LYS	1
1	A	156	CYS	1
1	A	106	SER	1
1	A	77	GLN	1

### 6.3.2 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	113/116 (97%)	100±3 (88±3%)	13±3 (12±3%)	9	52
All	All	4746/4872 (97%)	4193 (88%)	553 (12%)	9	52

All 67 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	41
1	A	171	LEU	40
1	A	87	VAL	33
1	A	105	LEU	32
1	A	169	PHE	27
1	A	148	PHE	24
1	A	158	THR	22
1	A	64	CYS	21
1	A	85	PHE	19
1	A	80	ILE	18
1	A	121	VAL	16
1	A	77	GLN	16
1	A	162	LEU	15
1	A	115	LEU	13
1	A	151	THR	13
1	A	93	TYR	13
1	A	112	LEU	12
1	A	188	GLU	10
1	A	100	ARG	10
1	A	183	LEU	8
1	A	129	CYS	7
1	A	137	ASN	7
1	A	70	LEU	7
1	A	84	TYR	7
1	A	118	SER	7
1	A	82	GLN	7
1	A	140	ILE	6
1	A	125	LYS	6
1	A	136	ARG	6
1	A	124	CYS	6
1	A	185	GLU	6
1	A	157	ASN	5
1	A	102	GLU	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	186	CYS	5
1	A	123	PHE	5
1	A	142	VAL	5
1	A	126	LYS	4
1	A	135	ILE	4
1	A	76	LYS	4
1	A	83	ASN	3
1	A	163	PHE	3
1	A	79	TYR	3
1	A	114	ASN	3
1	A	81	THR	2
1	A	69	ARG	2
1	A	187	ARG	2
1	A	65	GLU	2
1	A	139	GLN	2
1	A	90	VAL	1
1	A	89	THR	1
1	A	68	THR	1
1	A	95	CYS	1
1	A	165	SER	1
1	A	99	TYR	1
1	A	92	GLU	1
1	A	178	GLN	1
1	A	71	ASN	1
1	A	172	ILE	1
1	A	166	THR	1
1	A	170	CYS	1
1	A	147	LEU	1
1	A	75	LEU	1
1	A	141	ASP	1
1	A	177	VAL	1
1	A	97	PRO	1
1	A	96	ARG	1
1	A	131	ASN	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 monosaccharides 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