



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 03:24 PM BST

PDB ID : 1JSA  
Title : MYRISTOYLATED RECOVERIN WITH TWO CALCIUMS BOUND,  
NMR, 24 STRUCTURES  
Authors : Ames, J.B.; Ishima, R.; Tanaka, T.; Gordon, J.I.; Stryer, L.; Ikura, M.  
Deposited on : 1997-06-04

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  
<http://wwpdb.org/validation/2016/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  
Mogul : 1.7.1 (RC1), CSD as537be (2016)  
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)  
RCI : v\_1n\_11\_5\_13\_A (Berjanski et al., 2005)  
PANAV : Wang et al. (2010)  
ShiftChecker : rb-20027457  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : rb-20027457

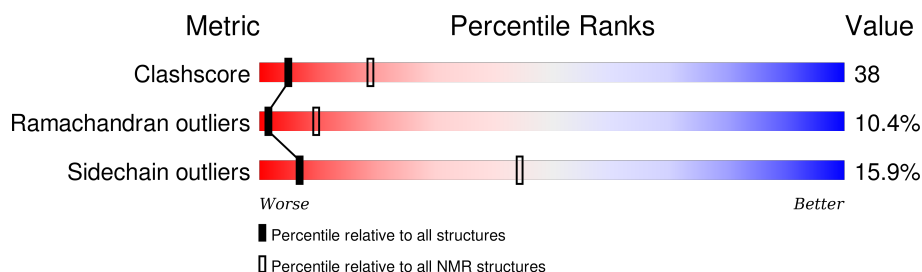
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

The overall completeness of chemical shifts assignment is 52%.

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	114402	11133
Ramachandran outliers	111179	9975
Sidechain outliers	111093	9958

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	201	

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 24 models. Model 10 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:7-A:94, A:100-A:160, A:164-A:188 (174)	0.77	10

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

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

The models can be grouped into 2 clusters and 1 single-model cluster was found.

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

### 3 Entry composition [i](#)

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 3055 atoms, of which 1511 are hydrogens and 0 are deuteriums.

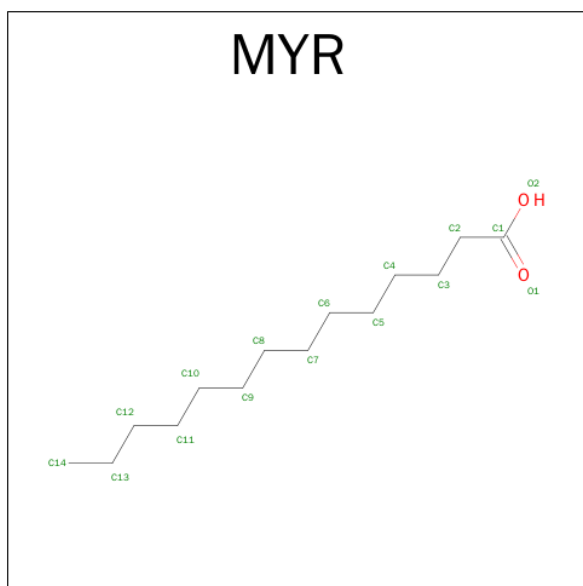
- Molecule 1 is a protein called RECOVERIN.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	188	Total	C	H	N	O	S	0
			3011	975	1484	246	303	3	

- Molecule 2 is CALCIUM ION (three-letter code: CA) (formula: Ca).

Mol	Chain	Residues	Atoms	
2	A	2	Total	Ca
			2	2

- Molecule 3 is MYRISTIC ACID (three-letter code: MYR) (formula: C<sub>14</sub>H<sub>28</sub>O<sub>2</sub>).



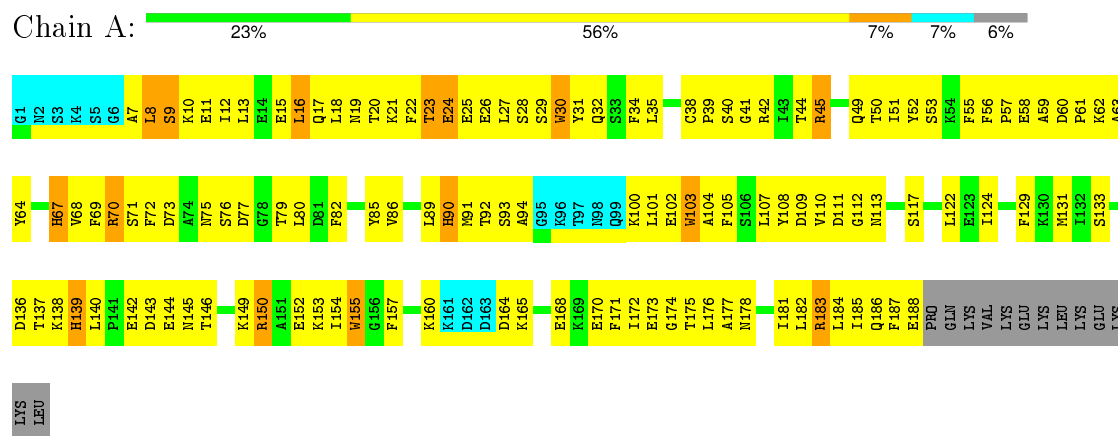
Mol	Chain	Residues	Atoms			
3	A	1	Total	C	H	O
			42	14	27	1

## 4 Residue-property plots

### 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: RECOVERIN

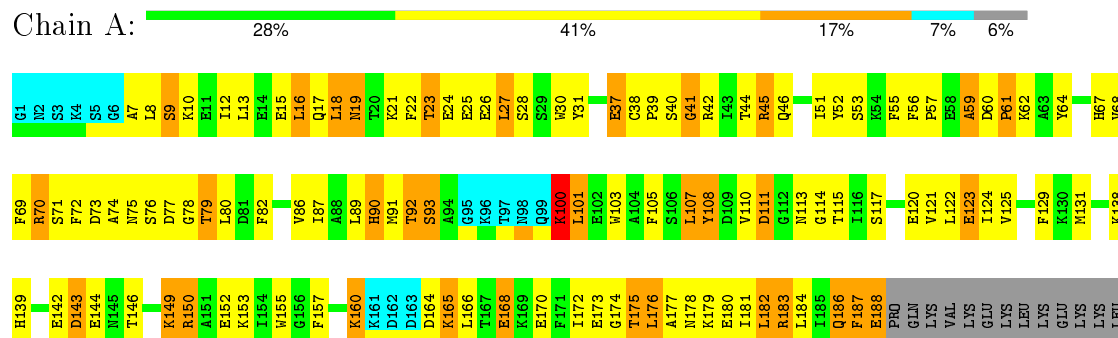


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

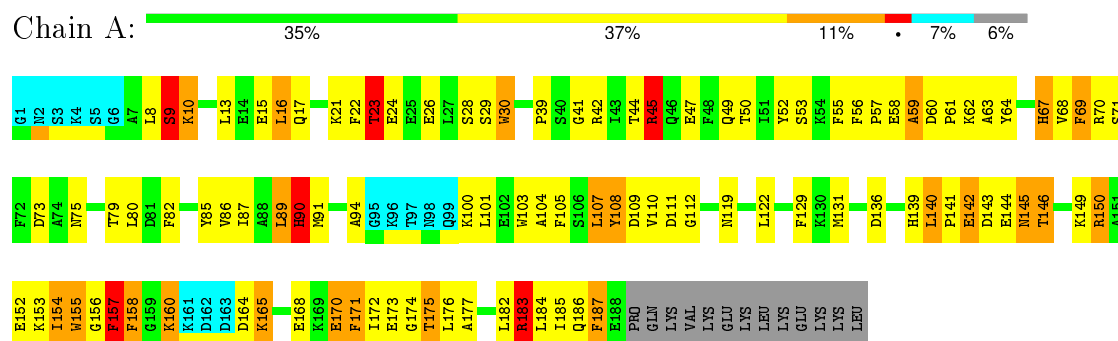
#### 4.2.1 Score per residue for model 1

#### • Molecule 1: RECOVERIN



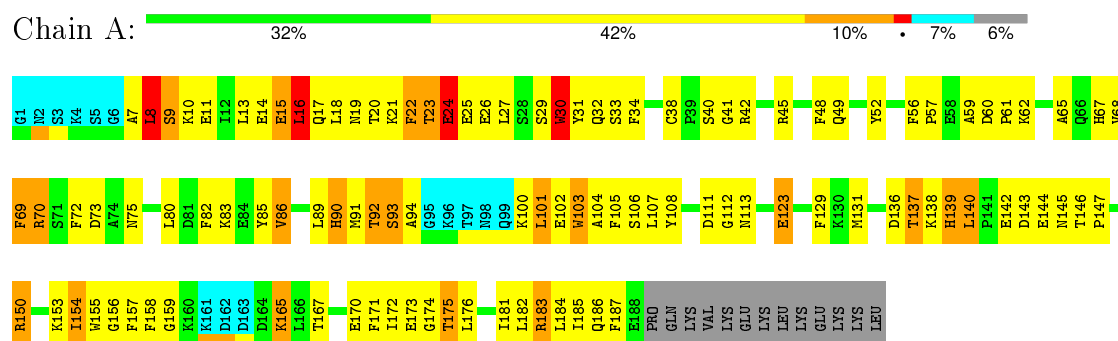
## 4.2.2 Score per residue for model 2

### • Molecule 1: RECOVERIN



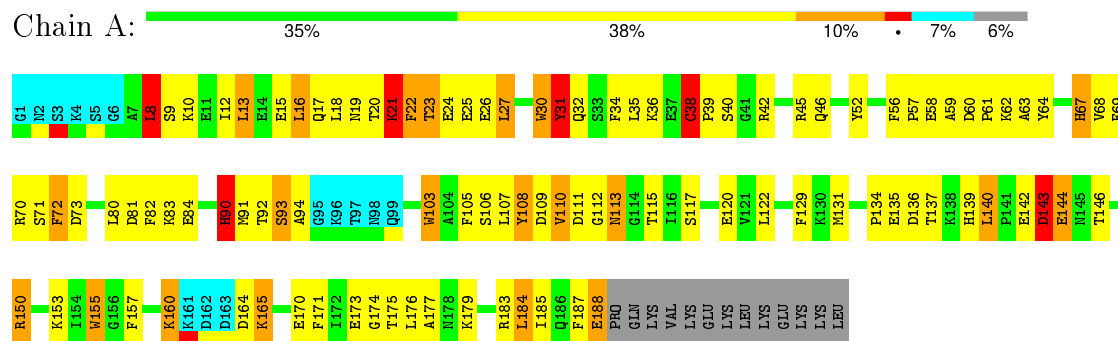
## 4.2.3 Score per residue for model 3

### • Molecule 1: RECOVERIN



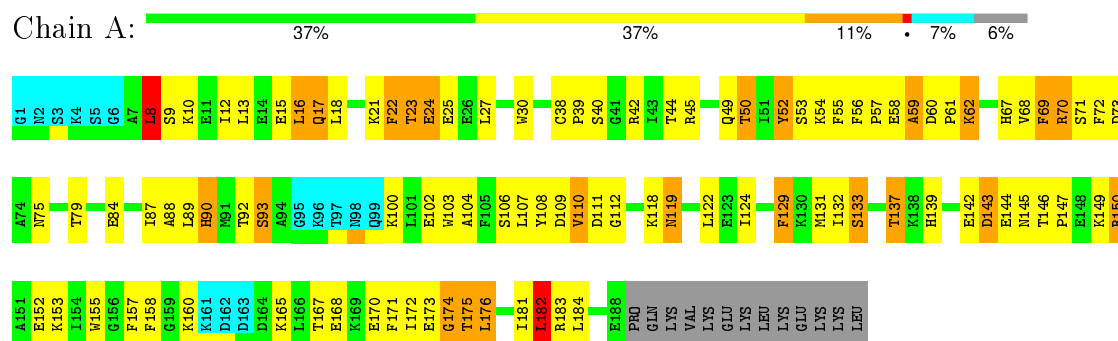
## 4.2.4 Score per residue for model 4

### • Molecule 1: RECOVERIN



### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: RECOVERIN

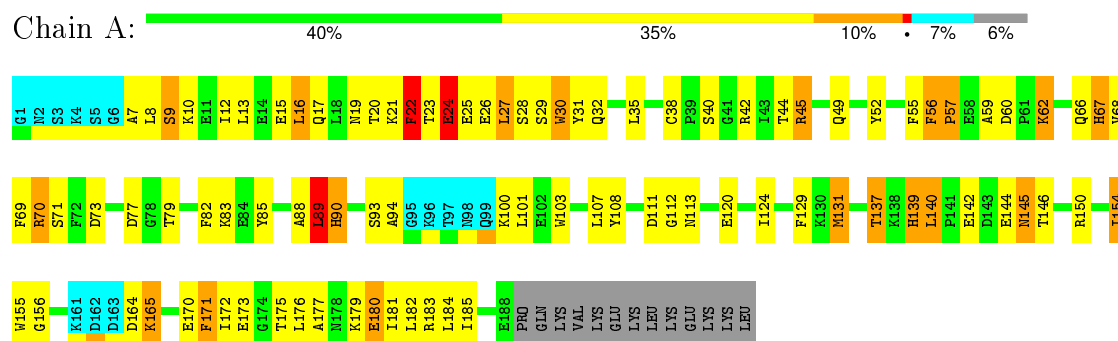






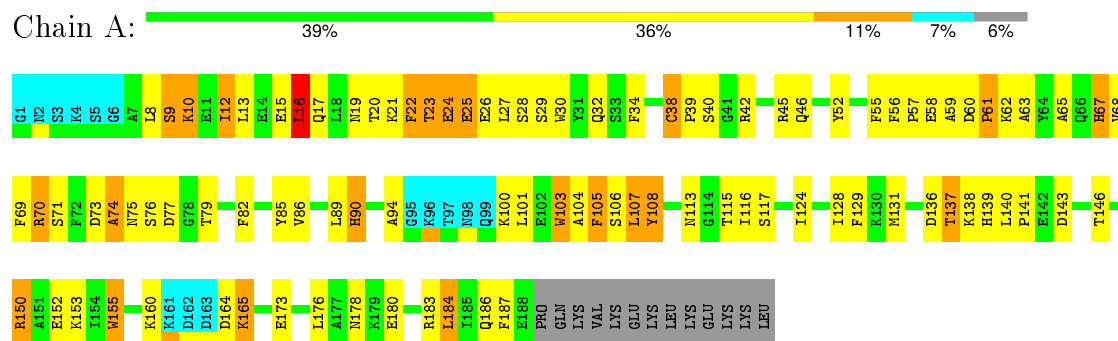
#### 4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: RECOVERIN



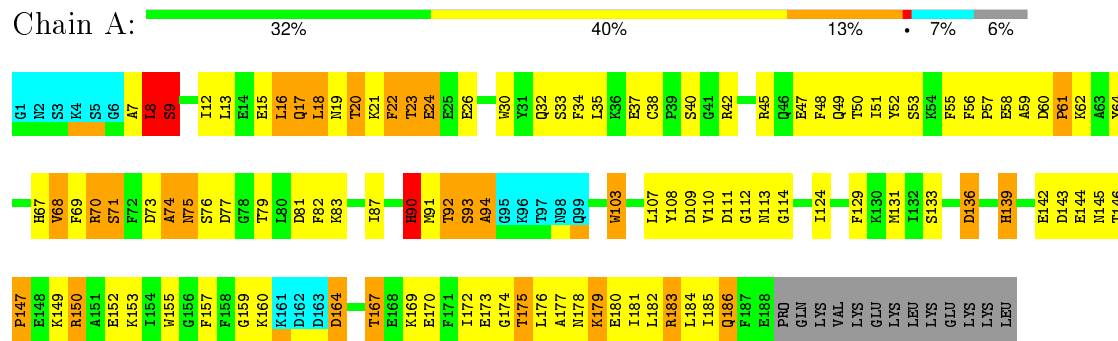
#### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: RECOVERIN



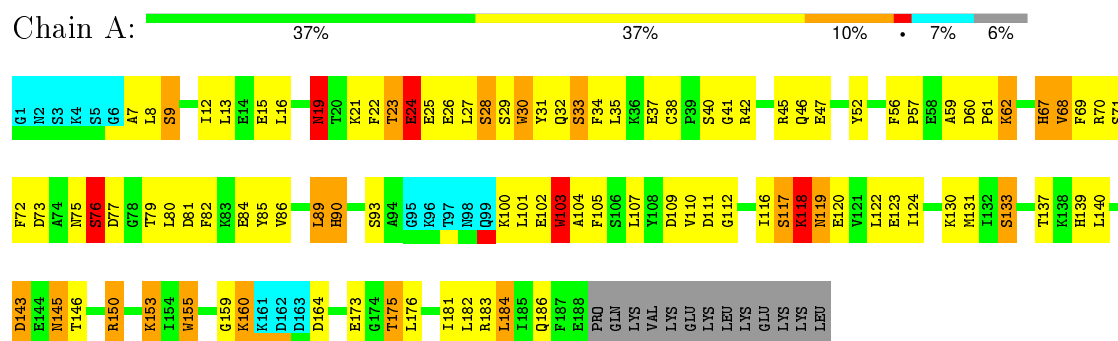
#### 4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: RECOVERIN



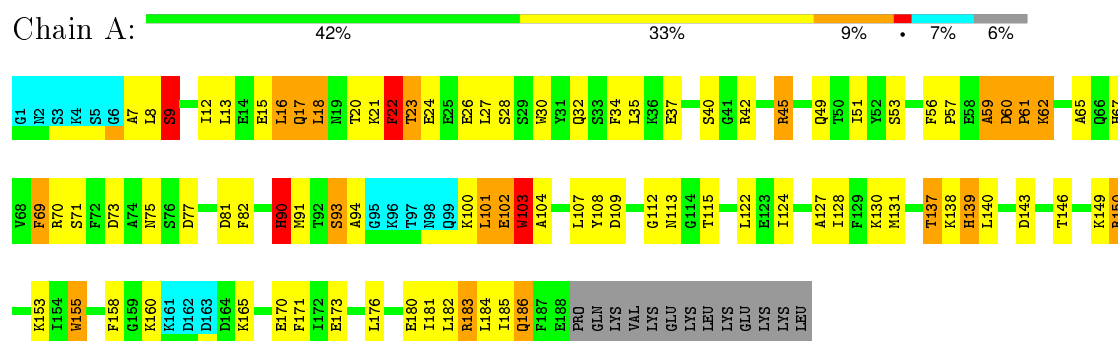
#### 4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: RECOVERIN



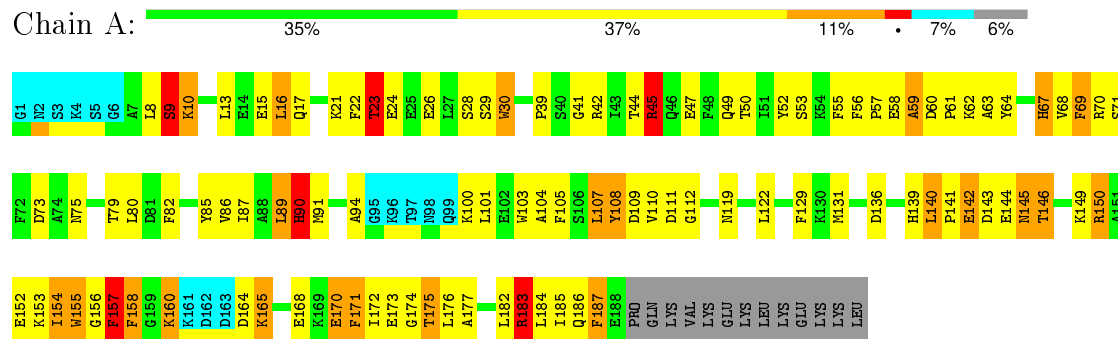
#### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: RECOVERIN



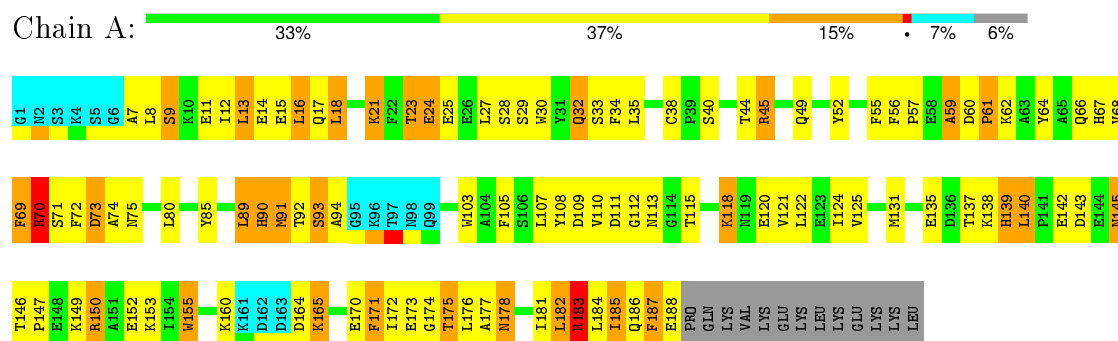
#### 4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: RECOVERIN



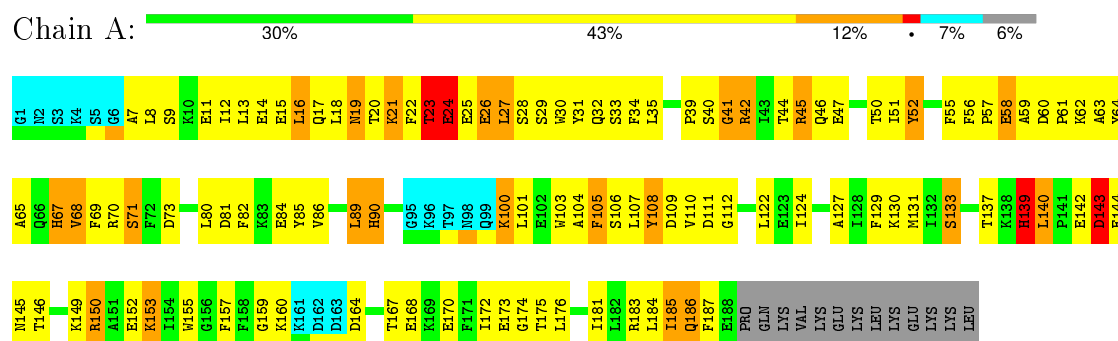
## 4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: RECOVERIN



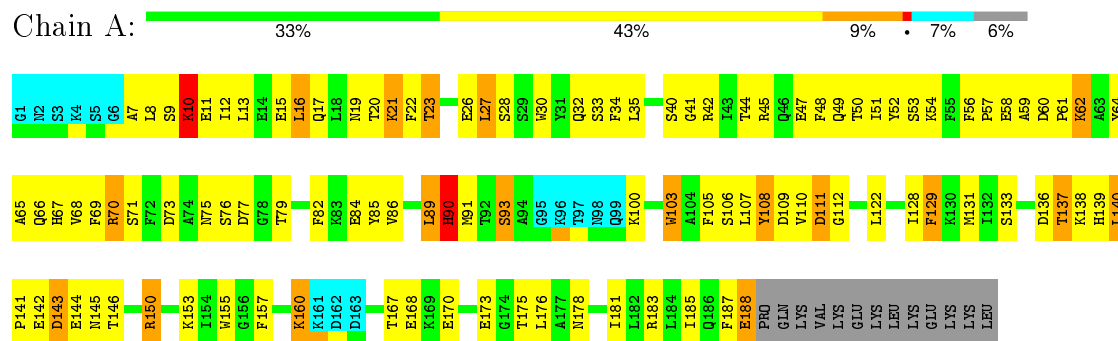
## 4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: RECOVERIN



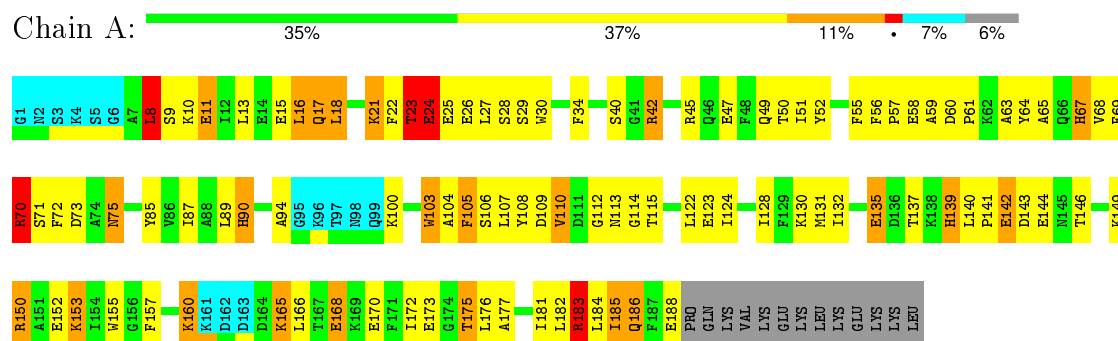
## 4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: RECOVERIN



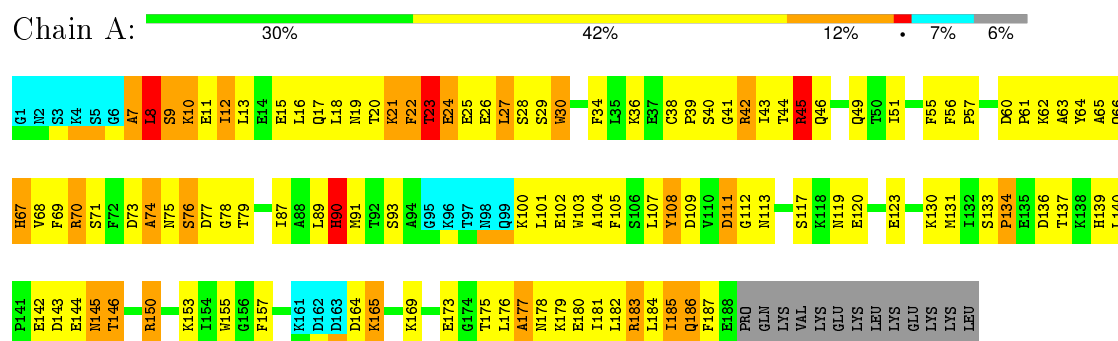
## 4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: RECOVERIN



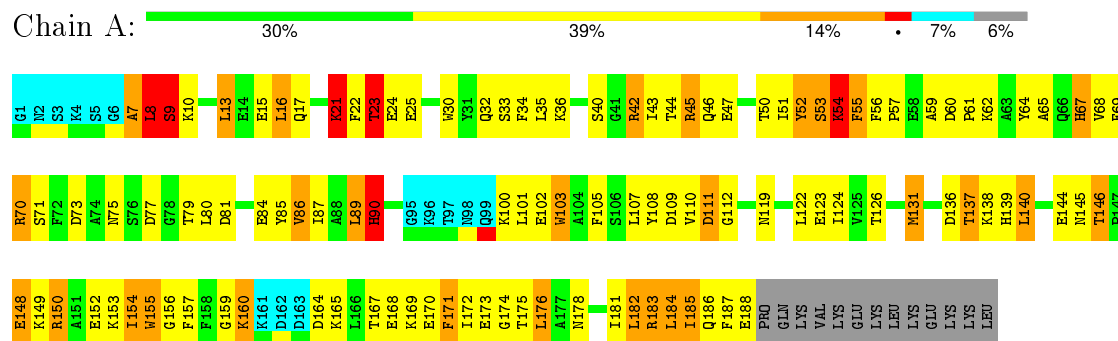
## 4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: RECOVERIN



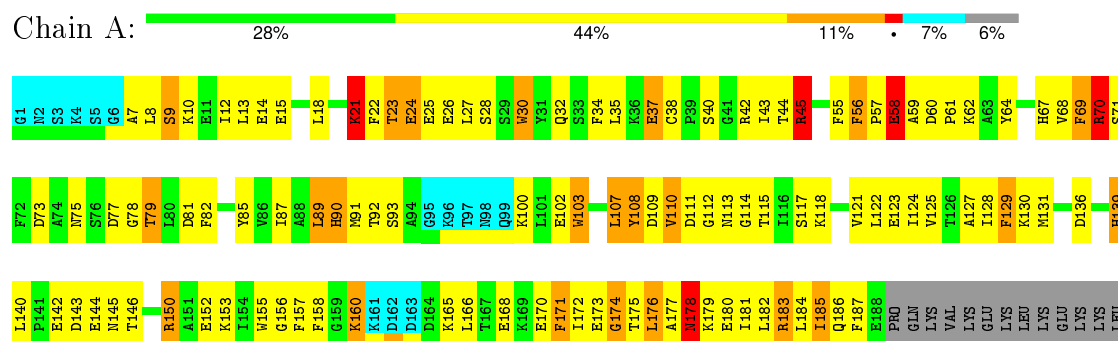
## 4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: RECOVERIN



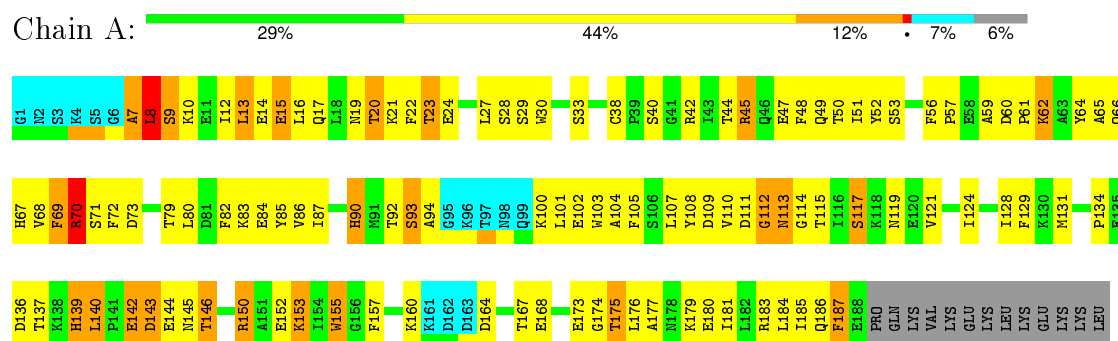
#### 4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: RECOVERIN



#### 4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: RECOVERIN



## 5 Refinement protocol and experimental data overview

Of the ? calculated structures, 24 were deposited, based on the following criterion: ?.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	

The following table shows chemical shift validation statistics as aggregates over all chemical shift files. Detailed validation can be found in section 7 of this report.

Chemical shift file(s)	BMRB entry 5332
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1233
Number of shifts mapped to atoms	1233
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	52%

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

## 6 Model quality

### 6.1 Standard geometry

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: CA, MYR

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.10±0.00	6±0/1461 (0.4±0.0%)	1.29±0.01	20±1/1970 (1.0±0.1%)
All	All	1.10	144/35064 (0.4%)	1.29	478/47280 (1.0%)

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	4.8±0.4
All	All	0	115

All unique bond outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	155	TRP	CG-CD2	-7.60	1.30	1.43	3	24
1	A	30	TRP	CG-CD2	-7.50	1.30	1.43	11	24
1	A	103	TRP	CG-CD2	-7.47	1.30	1.43	13	24
1	A	90	HIS	CG-ND1	-6.43	1.24	1.38	21	24
1	A	139	HIS	CG-ND1	-6.24	1.25	1.38	22	24
1	A	67	HIS	CG-ND1	-6.17	1.25	1.38	18	24

All unique angle outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	30	TRP	NE1-CE2-CZ2	9.27	140.60	130.40	8	24
1	A	103	TRP	NE1-CE2-CZ2	9.19	140.50	130.40	20	24

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	155	TRP	NE1-CE2-CZ2	9.18	140.50	130.40	3	24
1	A	103	TRP	NE1-CE2-CD2	-7.74	99.56	107.30	20	24
1	A	155	TRP	NE1-CE2-CD2	-7.68	99.62	107.30	3	24
1	A	30	TRP	NE1-CE2-CD2	-7.67	99.63	107.30	8	24
1	A	30	TRP	CG-CD1-NE1	-6.74	103.36	110.10	1	24
1	A	30	TRP	CG-CD2-CE3	-6.65	127.92	133.90	11	24
1	A	103	TRP	CG-CD1-NE1	-6.58	103.52	110.10	9	24
1	A	155	TRP	CG-CD1-NE1	-6.57	103.53	110.10	3	24
1	A	155	TRP	CG-CD2-CE3	-6.33	128.20	133.90	3	22
1	A	155	TRP	CD1-CG-CD2	6.25	111.30	106.30	10	24
1	A	103	TRP	CD1-CG-CD2	6.23	111.28	106.30	4	24
1	A	103	TRP	CG-CD2-CE3	-6.06	128.45	133.90	20	18
1	A	30	TRP	CD1-CG-CD2	5.89	111.01	106.30	11	24
1	A	30	TRP	CD1-NE1-CE2	5.85	114.27	109.00	4	24
1	A	103	TRP	CD1-NE1-CE2	5.84	114.26	109.00	1	24
1	A	155	TRP	CD1-NE1-CE2	5.83	114.25	109.00	6	24
1	A	30	TRP	CE2-CD2-CG	5.73	111.88	107.30	8	24
1	A	155	TRP	CE2-CD2-CG	5.43	111.65	107.30	3	16
1	A	103	TRP	CE2-CD2-CG	5.27	111.52	107.30	20	14

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	150	ARG	Sidechain	23
1	A	45	ARG	Sidechain	23
1	A	70	ARG	Sidechain	23
1	A	42	ARG	Sidechain	23
1	A	183	ARG	Sidechain	23

## 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	1428	1391	1391	109±13

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
All	All	34680	34032	34032	2607

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 38.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:8:LEU:HD12	1:A:9:SER:N	0.99	1.73	17	7
1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:HD22	0.91	1.80	7	2
1:A:8:LEU:HD12	1:A:9:SER:H	0.91	1.23	21	5
1:A:140:LEU:HD22	1:A:140:LEU:N	0.90	1.81	22	3
1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD13	0.86	1.28	10	4
1:A:107:LEU:C	1:A:107:LEU:HD13	0.85	1.92	1	10
1:A:69:PHE:CZ	1:A:80:LEU:HD21	0.84	2.07	17	2
1:A:107:LEU:HD13	1:A:107:LEU:C	0.83	1.93	12	8
1:A:16:LEU:HD23	1:A:17:GLN:H	0.83	1.33	18	5
1:A:13:LEU:HD12	1:A:13:LEU:O	0.82	1.74	17	3
1:A:52:TYR:OH	1:A:68:VAL:HG21	0.82	1.74	17	1
1:A:140:LEU:HD11	1:A:145:ASN:HD22	0.82	1.33	21	1
1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:HD13	0.81	1.87	3	3
1:A:157:PHE:CD1	1:A:158:PHE:N	0.81	2.49	2	2
1:A:157:PHE:CE2	1:A:158:PHE:CE2	0.81	2.68	2	2
1:A:13:LEU:O	1:A:13:LEU:HD12	0.81	1.75	22	2
1:A:175:THR:HG23	1:A:181:ILE:CG2	0.81	2.06	18	1
1:A:140:LEU:HD13	1:A:140:LEU:N	0.81	1.90	10	2
1:A:160:LYS:NZ	1:A:166:LEU:HD13	0.79	1.93	23	2
1:A:90:HIS:CD2	1:A:91:MET:N	0.79	2.51	21	2
1:A:34:PHE:CZ	1:A:38:CYS:SG	0.78	2.75	12	3
1:A:75:ASN:ND2	1:A:76:SER:N	0.78	2.31	14	2
1:A:176:LEU:C	1:A:176:LEU:HD13	0.78	1.99	11	3
1:A:107:LEU:O	1:A:107:LEU:HD22	0.78	1.78	12	1
1:A:90:HIS:CG	1:A:91:MET:N	0.78	2.52	21	5
1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:CD1	0.77	1.92	19	5
1:A:107:LEU:HD22	1:A:107:LEU:O	0.77	1.78	1	5
1:A:140:LEU:HD13	1:A:140:LEU:H	0.77	1.39	22	1
1:A:90:HIS:ND1	1:A:91:MET:N	0.76	2.34	9	5
1:A:19:ASN:HD21	1:A:90:HIS:CE1	0.75	2.00	18	1
1:A:27:LEU:HD12	1:A:27:LEU:C	0.75	2.02	8	2
1:A:140:LEU:HD12	1:A:140:LEU:O	0.75	1.82	8	6
1:A:90:HIS:HD1	1:A:91:MET:N	0.75	1.79	13	2
1:A:182:LEU:HD12	1:A:183:ARG:N	0.75	1.97	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:107:LEU:HD22	1:A:107:LEU:C	0.75	2.02	7	1
1:A:8:LEU:HD23	1:A:8:LEU:N	0.74	1.96	4	4
1:A:107:LEU:HD13	1:A:108:TYR:N	0.74	1.97	1	16
1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD22	0.73	1.43	19	3
1:A:160:LYS:NZ	1:A:160:LYS:H	0.73	1.81	10	1
1:A:85:TYR:CE1	1:A:89:LEU:HD23	0.73	2.19	2	10
1:A:72:PHE:CZ	1:A:87:ILE:HG21	0.72	2.20	5	2
1:A:31:TYR:CD2	1:A:32:GLN:N	0.72	2.57	11	1
1:A:182:LEU:HD13	1:A:182:LEU:C	0.72	2.05	23	3
1:A:75:ASN:ND2	1:A:75:ASN:H	0.72	1.83	13	1
1:A:75:ASN:ND2	1:A:77:ASP:H	0.72	1.83	13	1
1:A:140:LEU:CD2	1:A:140:LEU:H	0.72	1.96	22	1
1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:CD2	0.72	1.98	3	5
1:A:69:PHE:CE1	1:A:80:LEU:HD21	0.72	2.20	17	2
1:A:108:TYR:CE1	1:A:124:ILE:HG21	0.72	2.19	23	2
1:A:82:PHE:CG	1:A:83:LYS:N	0.72	2.57	4	1
1:A:140:LEU:HD22	1:A:140:LEU:H	0.72	1.44	3	2
1:A:160:LYS:HZ3	1:A:160:LYS:H	0.71	1.28	10	1
1:A:145:ASN:HD22	1:A:145:ASN:H	0.71	1.28	17	5
1:A:27:LEU:O	1:A:27:LEU:HD12	0.70	1.86	4	1
1:A:157:PHE:CZ	1:A:158:PHE:CE2	0.70	2.79	2	2
1:A:144:GLU:N	1:A:144:GLU:CD	0.70	2.45	21	1
1:A:8:LEU:CD1	1:A:9:SER:H	0.70	1.99	21	5
1:A:113:ASN:H	1:A:113:ASN:ND2	0.70	1.82	4	1
1:A:82:PHE:CD1	1:A:83:LYS:N	0.70	2.60	4	1
1:A:140:LEU:HD11	1:A:145:ASN:ND2	0.69	2.02	21	1
1:A:69:PHE:CZ	1:A:80:LEU:CD2	0.69	2.75	17	1
1:A:137:THR:O	1:A:140:LEU:HD11	0.69	1.88	11	4
1:A:18:LEU:HD23	1:A:18:LEU:N	0.69	2.01	1	1
1:A:75:ASN:ND2	1:A:76:SER:H	0.69	1.84	14	1
1:A:140:LEU:O	1:A:140:LEU:HD12	0.69	1.87	18	1
1:A:187:PHE:CD1	1:A:188:GLU:N	0.69	2.60	19	1
1:A:8:LEU:HD13	1:A:12:ILE:CD1	0.69	2.17	17	11
1:A:56:PHE:N	1:A:56:PHE:CD1	0.69	2.59	11	1
1:A:20:THR:O	1:A:20:THR:HG23	0.69	1.87	15	1
1:A:111:ASP:CG	1:A:112:GLY:H	0.69	1.90	7	7
1:A:100:LYS:NZ	1:A:187:PHE:CZ	0.69	2.60	24	1
1:A:8:LEU:C	1:A:8:LEU:HD12	0.69	2.08	11	6
1:A:178:ASN:H	1:A:178:ASN:ND2	0.69	1.85	23	1
1:A:16:LEU:CD2	1:A:17:GLN:H	0.68	2.01	18	3
1:A:140:LEU:CD2	1:A:140:LEU:N	0.68	2.53	3	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:145:ASN:ND2	1:A:146:THR:HG22	0.68	2.03	24	1
1:A:9:SER:OG	1:A:10:LYS:N	0.68	2.26	12	10
1:A:27:LEU:HD12	1:A:27:LEU:N	0.68	2.03	18	4
1:A:69:PHE:CE2	1:A:80:LEU:HD21	0.68	2.24	7	1
1:A:157:PHE:CD1	1:A:181:ILE:HD11	0.67	2.24	5	1
1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CD2	0.67	2.50	7	5
1:A:27:LEU:HD12	1:A:27:LEU:O	0.67	1.88	8	1
1:A:113:ASN:N	1:A:113:ASN:ND2	0.67	2.42	4	1
1:A:178:ASN:HD22	1:A:178:ASN:N	0.67	1.88	17	1
1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:ND2	0.67	2.41	7	1
1:A:13:LEU:HD11	1:A:24:GLU:CD	0.66	2.10	15	1
1:A:8:LEU:O	1:A:8:LEU:HD12	0.66	1.90	16	4
1:A:8:LEU:HD12	1:A:8:LEU:O	0.66	1.90	2	2
1:A:109:ASP:OD1	1:A:112:GLY:N	0.66	2.29	19	6
1:A:18:LEU:HD22	1:A:18:LEU:N	0.66	2.05	23	1
1:A:22:PHE:O	1:A:23:THR:HG23	0.65	1.91	19	5
1:A:82:PHE:O	1:A:86:VAL:HG23	0.65	1.91	2	8
1:A:69:PHE:CE2	1:A:73:ASP:OD2	0.65	2.50	4	21
1:A:187:PHE:CD1	1:A:187:PHE:N	0.65	2.64	17	5
1:A:11:GLU:CD	1:A:11:GLU:N	0.65	2.48	8	2
1:A:16:LEU:CD2	1:A:16:LEU:N	0.65	2.59	12	2
1:A:69:PHE:CZ	1:A:73:ASP:OD2	0.65	2.49	12	14
1:A:184:LEU:C	1:A:184:LEU:HD13	0.65	2.10	3	4
1:A:149:LYS:NZ	1:A:149:LYS:CB	0.65	2.60	1	1
1:A:19:ASN:HD22	1:A:100:LYS:NZ	0.65	1.90	21	1
1:A:111:ASP:CG	1:A:112:GLY:N	0.65	2.50	19	8
1:A:31:TYR:CG	1:A:32:GLN:N	0.65	2.65	11	2
1:A:90:HIS:NE2	1:A:91:MET:SD	0.65	2.70	21	1
1:A:49:GLN:NE2	1:A:66:GLN:CD	0.65	2.51	19	1
1:A:18:LEU:HD12	1:A:18:LEU:H	0.64	1.52	17	2
1:A:19:ASN:ND2	1:A:90:HIS:CE1	0.64	2.65	18	1
1:A:21:LYS:NZ	1:A:90:HIS:CG	0.64	2.65	14	1
1:A:75:ASN:ND2	1:A:77:ASP:CG	0.64	2.50	10	2
1:A:140:LEU:CD1	1:A:140:LEU:N	0.64	2.55	3	1
1:A:13:LEU:HD12	1:A:13:LEU:C	0.64	2.12	6	1
1:A:170:GLU:N	1:A:170:GLU:CD	0.64	2.50	2	2
1:A:56:PHE:CE1	1:A:131:MET:CE	0.64	2.80	20	3
1:A:170:GLU:CD	1:A:170:GLU:N	0.64	2.50	16	1
1:A:90:HIS:CD2	1:A:90:HIS:C	0.64	2.70	4	2
1:A:142:GLU:H	1:A:142:GLU:CD	0.64	1.95	17	1
1:A:109:ASP:OD2	1:A:113:ASN:N	0.64	2.31	21	6

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:VAL:CG2	1:A:124:ILE:HD11	0.64	2.23	24	3
1:A:72:PHE:CE1	1:A:87:ILE:HG21	0.64	2.27	5	1
1:A:22:PHE:C	1:A:23:THR:HG22	0.64	2.13	18	2
1:A:15:GLU:OE2	1:A:16:LEU:N	0.64	2.31	24	1
1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:OE1	0.64	2.31	11	2
1:A:16:LEU:HD23	1:A:17:GLN:N	0.63	2.08	3	4
1:A:109:ASP:OD2	1:A:112:GLY:N	0.63	2.32	20	3
1:A:21:LYS:CE	1:A:23:THR:H	0.63	2.06	22	1
1:A:52:TYR:CG	1:A:65:ALA:HB2	0.63	2.28	3	1
1:A:168:GLU:CD	1:A:168:GLU:H	0.63	1.97	20	2
1:A:111:ASP:OD1	1:A:112:GLY:N	0.63	2.31	7	7
1:A:27:LEU:N	1:A:27:LEU:CD1	0.63	2.61	11	1
1:A:16:LEU:CG	1:A:17:GLN:H	0.63	2.05	12	1
1:A:69:PHE:CE1	1:A:73:ASP:OD2	0.63	2.52	8	1
1:A:13:LEU:C	1:A:13:LEU:HD12	0.63	2.13	7	3
1:A:24:GLU:H	1:A:24:GLU:CD	0.62	1.97	8	1
1:A:157:PHE:CZ	1:A:158:PHE:CD2	0.62	2.87	2	2
1:A:40:SER:OG	1:A:41:GLY:N	0.62	2.32	18	2
1:A:182:LEU:HD23	1:A:183:ARG:HH12	0.62	1.53	2	2
1:A:8:LEU:CD1	1:A:9:SER:N	0.62	2.62	8	3
1:A:175:THR:HG23	1:A:181:ILE:HG21	0.62	1.71	18	1
1:A:64:TYR:CD2	1:A:131:MET:SD	0.62	2.92	18	1
1:A:140:LEU:N	1:A:141:PRO:CD	0.62	2.61	20	1
1:A:137:THR:CG2	1:A:145:ASN:HD21	0.62	2.06	10	1
1:A:81:ASP:OD1	1:A:82:PHE:N	0.62	2.33	23	3
1:A:165:LYS:CD	1:A:165:LYS:H	0.62	2.07	17	3
1:A:102:GLU:H	1:A:102:GLU:CD	0.62	1.98	21	1
1:A:137:THR:HA	1:A:140:LEU:HD21	0.62	1.70	7	5
1:A:75:ASN:ND2	1:A:77:ASP:OD2	0.61	2.32	22	3
1:A:160:LYS:HZ3	1:A:166:LEU:HD13	0.61	1.54	23	1
1:A:8:LEU:HD13	1:A:12:ILE:HD12	0.61	1.72	15	6
1:A:111:ASP:N	1:A:111:ASP:OD1	0.61	2.33	11	7
1:A:125:VAL:HG13	1:A:150:ARG:HH21	0.61	1.54	6	1
1:A:15:GLU:O	1:A:17:GLN:N	0.61	2.33	13	20
1:A:51:ILE:CG2	1:A:52:TYR:N	0.61	2.63	18	3
1:A:8:LEU:HD11	1:A:82:PHE:CD1	0.61	2.30	18	2
1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:OE1	0.61	2.34	3	2
1:A:123:GLU:OE1	1:A:123:GLU:N	0.61	2.33	1	1
1:A:69:PHE:CE1	1:A:80:LEU:HD12	0.61	2.30	18	6
1:A:180:GLU:CD	1:A:180:GLU:H	0.61	1.99	15	2
1:A:54:LYS:NZ	1:A:55:PHE:CE2	0.61	2.69	22	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:PHE:C	1:A:23:THR:HG23	0.61	2.15	6	2
1:A:117:SER:N	1:A:120:GLU:OE2	0.61	2.33	4	2
1:A:13:LEU:C	1:A:15:GLU:N	0.61	2.53	22	23
1:A:157:PHE:CE2	1:A:158:PHE:CZ	0.61	2.89	2	2
1:A:148:GLU:OE1	1:A:148:GLU:N	0.61	2.33	22	1
1:A:113:ASN:HD22	1:A:113:ASN:N	0.61	1.92	4	1
1:A:80:LEU:HD23	1:A:84:GLU:OE1	0.60	1.96	24	3
1:A:81:ASP:OD1	1:A:83:LYS:N	0.60	2.34	13	2
1:A:28:SER:OG	1:A:29:SER:N	0.60	2.31	24	6
1:A:8:LEU:HD22	1:A:82:PHE:CD1	0.60	2.31	4	1
1:A:107:LEU:C	1:A:107:LEU:CD1	0.60	2.68	23	6
1:A:56:PHE:CE1	1:A:131:MET:HE1	0.60	2.31	20	2
1:A:31:TYR:CD1	1:A:31:TYR:C	0.60	2.75	4	3
1:A:32:GLN:CG	1:A:33:SER:N	0.60	2.65	3	2
1:A:19:ASN:HD22	1:A:90:HIS:CD2	0.60	2.14	9	1
1:A:38:CYS:SG	1:A:40:SER:OG	0.60	2.60	17	2
1:A:178:ASN:H	1:A:178:ASN:HD22	0.60	1.39	23	1
1:A:113:ASN:ND2	1:A:115:THR:OG1	0.59	2.35	20	3
1:A:139:HIS:CG	1:A:139:HIS:O	0.59	2.55	17	2
1:A:34:PHE:CE2	1:A:38:CYS:SG	0.59	2.95	3	3
1:A:9:SER:N	1:A:11:GLU:OE1	0.59	2.33	9	1
1:A:27:LEU:CD1	1:A:27:LEU:N	0.59	2.65	18	3
1:A:19:ASN:ND2	1:A:90:HIS:ND1	0.59	2.50	18	2
1:A:19:ASN:ND2	1:A:90:HIS:CD2	0.59	2.71	9	1
1:A:16:LEU:N	1:A:16:LEU:HD23	0.59	2.12	8	9
1:A:72:PHE:CD1	1:A:73:ASP:N	0.59	2.70	4	2
1:A:104:ALA:O	1:A:106:SER:N	0.59	2.36	7	7
1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PRO:O	0.59	1.98	12	1
1:A:18:LEU:N	1:A:18:LEU:HD12	0.59	2.12	17	1
1:A:168:GLU:CD	1:A:168:GLU:N	0.59	2.56	20	2
1:A:122:LEU:HD13	1:A:122:LEU:C	0.59	2.17	6	2
1:A:179:LYS:H	1:A:179:LYS:CD	0.59	2.09	13	1
1:A:19:ASN:ND2	1:A:94:ALA:HB1	0.59	2.13	4	1
1:A:158:PHE:CD1	1:A:158:PHE:N	0.59	2.65	2	2
1:A:144:GLU:N	1:A:144:GLU:OE1	0.59	2.36	18	1
1:A:34:PHE:CZ	1:A:38:CYS:CB	0.59	2.86	7	1
1:A:16:LEU:HD23	1:A:16:LEU:N	0.59	2.13	13	5
1:A:178:ASN:N	1:A:178:ASN:ND2	0.59	2.51	17	2
1:A:187:PHE:N	1:A:187:PHE:CD1	0.59	2.71	3	3
1:A:158:PHE:CZ	1:A:181:ILE:HD13	0.59	2.32	23	1
1:A:143:ASP:OD1	1:A:143:ASP:N	0.58	2.35	14	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:LYS:CD	1:A:22:PHE:H	0.58	2.11	8	1
1:A:154:ILE:O	1:A:157:PHE:CD1	0.58	2.55	2	2
1:A:122:LEU:HD13	1:A:122:LEU:O	0.58	1.98	6	2
1:A:58:GLU:CG	1:A:59:ALA:N	0.58	2.66	19	2
1:A:105:PHE:CG	1:A:168:GLU:OE1	0.58	2.57	19	1
1:A:107:LEU:CD1	1:A:107:LEU:C	0.58	2.72	15	11
1:A:124:ILE:H	1:A:124:ILE:HD12	0.58	1.58	18	1
1:A:75:ASN:HD21	1:A:77:ASP:CG	0.58	2.01	15	3
1:A:117:SER:OG	1:A:118:LYS:N	0.58	2.36	23	1
1:A:64:TYR:CG	1:A:131:MET:SD	0.58	2.96	18	2
1:A:77:ASP:OD1	1:A:78:GLY:N	0.58	2.37	21	1
1:A:18:LEU:CD2	1:A:18:LEU:N	0.58	2.67	1	2
1:A:60:ASP:N	1:A:60:ASP:OD1	0.58	2.33	3	1
1:A:135:GLU:CD	1:A:135:GLU:H	0.58	2.02	8	1
1:A:24:GLU:CD	1:A:25:GLU:N	0.58	2.57	20	1
1:A:24:GLU:OE2	1:A:25:GLU:N	0.58	2.37	20	4
1:A:73:ASP:O	1:A:75:ASN:N	0.57	2.38	12	4
1:A:8:LEU:HD13	1:A:12:ILE:HD11	0.57	1.76	9	4
1:A:8:LEU:CD2	1:A:8:LEU:N	0.57	2.68	4	1
1:A:16:LEU:HG	1:A:17:GLN:H	0.57	1.60	12	1
1:A:116:ILE:HG22	1:A:117:SER:N	0.57	2.14	10	3
1:A:105:PHE:CD1	1:A:168:GLU:OE1	0.57	2.57	19	1
1:A:113:ASN:ND2	1:A:114:GLY:N	0.57	2.53	24	1
1:A:16:LEU:HG	1:A:17:GLN:N	0.57	2.14	21	15
1:A:49:GLN:HE21	1:A:66:GLN:CD	0.57	2.03	9	1
1:A:121:VAL:O	1:A:125:VAL:HG23	0.57	2.00	17	5
1:A:145:ASN:N	1:A:145:ASN:HD22	0.57	1.97	2	3
1:A:145:ASN:HD22	1:A:145:ASN:N	0.57	1.97	16	1
1:A:34:PHE:CE1	1:A:38:CYS:SG	0.57	2.97	4	2
1:A:124:ILE:HD13	1:A:124:ILE:N	0.57	2.14	15	4
1:A:9:SER:O	1:A:13:LEU:N	0.57	2.38	10	7
1:A:60:ASP:C	1:A:62:LYS:H	0.57	2.03	1	20
1:A:137:THR:C	1:A:139:HIS:H	0.57	2.03	15	2
1:A:119:ASN:CG	1:A:120:GLU:N	0.57	2.58	14	1
1:A:23:THR:O	1:A:25:GLU:N	0.57	2.38	10	13
1:A:21:LYS:O	1:A:22:PHE:C	0.57	2.42	11	5
1:A:140:LEU:N	1:A:141:PRO:HD3	0.57	2.14	20	1
1:A:31:TYR:CD1	1:A:32:GLN:N	0.57	2.73	6	2
1:A:18:LEU:O	1:A:20:THR:N	0.56	2.38	8	1
1:A:8:LEU:HD22	1:A:82:PHE:CE1	0.56	2.35	4	1
1:A:64:TYR:CD1	1:A:64:TYR:C	0.56	2.78	9	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:102:GLU:CD	1:A:103:TRP:N	0.56	2.58	6	2
1:A:157:PHE:CE1	1:A:178:ASN:ND2	0.56	2.74	7	1
1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CD	0.56	2.58	3	2
1:A:180:GLU:N	1:A:180:GLU:CD	0.56	2.59	15	1
1:A:62:LYS:N	1:A:62:LYS:CD	0.56	2.68	15	1
1:A:90:HIS:CD2	1:A:94:ALA:CB	0.56	2.88	3	2
1:A:150:ARG:O	1:A:153:LYS:N	0.56	2.38	18	23
1:A:45:ARG:HH12	1:A:70:ARG:HH22	0.56	1.44	24	1
1:A:8:LEU:O	1:A:10:LYS:N	0.56	2.38	3	7
1:A:107:LEU:HD13	1:A:107:LEU:O	0.56	2.00	20	3
1:A:18:LEU:C	1:A:20:THR:H	0.56	2.04	8	1
1:A:122:LEU:C	1:A:122:LEU:HD13	0.56	2.21	5	1
1:A:11:GLU:N	1:A:11:GLU:OE1	0.56	2.33	9	2
1:A:90:HIS:HD1	1:A:91:MET:H	0.56	1.44	13	1
1:A:12:ILE:HG21	1:A:27:LEU:HD23	0.56	1.78	18	2
1:A:184:LEU:CD2	1:A:184:LEU:N	0.56	2.68	13	1
1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CD	0.55	2.60	8	1
1:A:108:TYR:CE2	1:A:124:ILE:HG21	0.55	2.36	11	3
1:A:26:GLU:C	1:A:28:SER:H	0.55	2.04	10	7
1:A:8:LEU:CD1	1:A:82:PHE:CD1	0.55	2.90	12	1
1:A:107:LEU:HD23	1:A:107:LEU:O	0.55	2.00	9	2
1:A:13:LEU:O	1:A:16:LEU:HD22	0.55	2.00	3	3
1:A:155:TRP:NE1	1:A:160:LYS:O	0.55	2.39	14	5
1:A:142:GLU:C	1:A:144:GLU:H	0.55	2.05	10	11
1:A:60:ASP:N	1:A:61:PRO:HD3	0.55	2.16	21	12
1:A:34:PHE:CD1	1:A:34:PHE:C	0.55	2.80	18	1
1:A:32:GLN:C	1:A:34:PHE:N	0.55	2.59	22	11
1:A:69:PHE:O	1:A:71:SER:N	0.55	2.40	11	20
1:A:56:PHE:N	1:A:57:PRO:HD3	0.55	2.16	19	17
1:A:116:ILE:CG2	1:A:117:SER:N	0.55	2.70	10	4
1:A:111:ASP:OD1	1:A:111:ASP:N	0.55	2.39	17	4
1:A:186:GLN:O	1:A:187:PHE:CG	0.55	2.60	10	2
1:A:181:ILE:O	1:A:183:ARG:N	0.55	2.40	21	6
1:A:38:CYS:C	1:A:40:SER:H	0.55	2.05	12	8
1:A:63:ALA:O	1:A:67:HIS:CD2	0.55	2.60	4	10
1:A:142:GLU:O	1:A:144:GLU:N	0.55	2.40	21	11
1:A:16:LEU:CG	1:A:17:GLN:N	0.55	2.70	21	4
1:A:77:ASP:C	1:A:79:THR:H	0.55	2.04	9	4
1:A:15:GLU:O	1:A:18:LEU:N	0.55	2.38	18	8
1:A:186:GLN:C	1:A:187:PHE:CG	0.55	2.81	10	2
1:A:107:LEU:O	1:A:107:LEU:HD13	0.55	2.01	6	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:105:PHE:CD1	1:A:168:GLU:CG	0.55	2.90	7	1
1:A:18:LEU:C	1:A:20:THR:N	0.55	2.61	8	1
1:A:72:PHE:O	1:A:74:ALA:N	0.55	2.40	7	2
1:A:157:PHE:CE1	1:A:158:PHE:CD2	0.55	2.95	2	2
1:A:69:PHE:C	1:A:71:SER:N	0.54	2.59	11	20
1:A:182:LEU:C	1:A:184:LEU:H	0.54	2.05	8	2
1:A:16:LEU:CD2	1:A:17:GLN:N	0.54	2.71	18	2
1:A:136:ASP:O	1:A:138:LYS:N	0.54	2.40	22	6
1:A:184:LEU:C	1:A:186:GLN:H	0.54	2.05	7	9
1:A:110:VAL:HG23	1:A:124:ILE:HD11	0.54	1.79	18	1
1:A:77:ASP:CG	1:A:78:GLY:H	0.54	2.05	1	2
1:A:182:LEU:CD1	1:A:182:LEU:C	0.54	2.75	23	2
1:A:8:LEU:C	1:A:10:LYS:H	0.54	2.05	4	1
1:A:173:GLU:O	1:A:175:THR:N	0.54	2.40	23	17
1:A:105:PHE:O	1:A:105:PHE:CD1	0.54	2.61	14	7
1:A:154:ILE:O	1:A:157:PHE:CG	0.54	2.61	2	2
1:A:17:GLN:O	1:A:19:ASN:N	0.54	2.41	21	3
1:A:67:HIS:C	1:A:69:PHE:N	0.54	2.61	9	7
1:A:170:GLU:O	1:A:173:GLU:N	0.54	2.41	3	12
1:A:75:ASN:H	1:A:75:ASN:ND2	0.54	1.99	20	1
1:A:132:ILE:HG22	1:A:137:THR:OG1	0.54	2.02	20	1
1:A:176:LEU:C	1:A:176:LEU:CD1	0.54	2.72	11	2
1:A:186:GLN:O	1:A:187:PHE:CD1	0.54	2.61	8	2
1:A:86:VAL:O	1:A:90:HIS:CD2	0.54	2.61	2	2
1:A:184:LEU:HD23	1:A:184:LEU:C	0.54	2.23	23	1
1:A:73:ASP:CG	1:A:74:ALA:N	0.54	2.60	21	1
1:A:170:GLU:O	1:A:172:ILE:N	0.54	2.40	8	15
1:A:160:LYS:N	1:A:160:LYS:NZ	0.54	2.54	10	1
1:A:73:ASP:OD2	1:A:74:ALA:N	0.54	2.40	21	1
1:A:55:PHE:O	1:A:56:PHE:CD1	0.54	2.61	1	6
1:A:102:GLU:OE1	1:A:168:GLU:CG	0.54	2.55	23	2
1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD23	0.54	1.63	4	3
1:A:129:PHE:CE1	1:A:145:ASN:O	0.54	2.61	7	3
1:A:137:THR:O	1:A:140:LEU:CD2	0.54	2.56	22	5
1:A:80:LEU:HD23	1:A:80:LEU:N	0.54	2.18	7	1
1:A:170:GLU:C	1:A:172:ILE:N	0.54	2.59	8	15
1:A:142:GLU:C	1:A:144:GLU:N	0.54	2.59	19	14
1:A:178:ASN:HD22	1:A:178:ASN:H	0.54	1.45	17	1
1:A:32:GLN:O	1:A:34:PHE:N	0.54	2.40	22	10
1:A:24:GLU:C	1:A:26:GLU:N	0.54	2.59	14	5
1:A:28:SER:O	1:A:31:TYR:CD2	0.54	2.61	14	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:LEU:HD22	1:A:16:LEU:N	0.54	2.18	12	1
1:A:128:ILE:O	1:A:131:MET:N	0.54	2.41	9	7
1:A:61:PRO:O	1:A:65:ALA:N	0.54	2.38	18	7
1:A:24:GLU:CD	1:A:24:GLU:N	0.54	2.61	14	2
1:A:129:PHE:CZ	1:A:145:ASN:O	0.54	2.61	7	6
1:A:75:ASN:C	1:A:77:ASP:H	0.54	2.07	7	2
1:A:20:THR:H	1:A:90:HIS:CE1	0.54	2.22	10	1
1:A:136:ASP:C	1:A:138:LYS:N	0.53	2.61	10	6
1:A:100:LYS:NZ	1:A:100:LYS:CB	0.53	2.69	9	1
1:A:61:PRO:O	1:A:63:ALA:N	0.53	2.41	6	1
1:A:55:PHE:O	1:A:56:PHE:CG	0.53	2.61	5	4
1:A:23:THR:C	1:A:25:GLU:N	0.53	2.62	8	13
1:A:145:ASN:OD1	1:A:145:ASN:N	0.53	2.41	9	2
1:A:16:LEU:O	1:A:18:LEU:N	0.53	2.41	13	3
1:A:113:ASN:C	1:A:113:ASN:HD22	0.53	2.06	24	1
1:A:144:GLU:O	1:A:146:THR:N	0.53	2.42	21	1
1:A:109:ASP:CG	1:A:113:ASN:H	0.53	2.05	9	2
1:A:60:ASP:N	1:A:61:PRO:CD	0.53	2.71	21	8
1:A:182:LEU:C	1:A:182:LEU:CD1	0.53	2.77	5	1
1:A:43:ILE:HG22	1:A:44:THR:N	0.53	2.18	22	3
1:A:20:THR:CB	1:A:94:ALA:HB1	0.53	2.34	13	1
1:A:173:GLU:O	1:A:176:LEU:N	0.53	2.41	21	23
1:A:75:ASN:O	1:A:77:ASP:N	0.53	2.39	9	3
1:A:184:LEU:O	1:A:186:GLN:N	0.53	2.42	23	12
1:A:145:ASN:ND2	1:A:145:ASN:H	0.53	2.02	16	3
1:A:8:LEU:O	1:A:11:GLU:N	0.53	2.42	17	1
1:A:145:ASN:H	1:A:145:ASN:ND2	0.53	2.02	2	2
1:A:24:GLU:OE1	1:A:24:GLU:N	0.53	2.41	5	2
1:A:157:PHE:CD2	1:A:158:PHE:CZ	0.53	2.97	2	2
1:A:109:ASP:OD2	1:A:112:GLY:CA	0.53	2.57	20	2
1:A:90:HIS:C	1:A:90:HIS:ND1	0.53	2.62	13	2
1:A:108:TYR:CZ	1:A:124:ILE:HG21	0.53	2.38	23	1
1:A:69:PHE:CD1	1:A:80:LEU:HD12	0.53	2.39	9	2
1:A:77:ASP:O	1:A:79:THR:N	0.53	2.42	6	3
1:A:51:ILE:O	1:A:53:SER:N	0.53	2.42	22	7
1:A:146:THR:O	1:A:150:ARG:N	0.53	2.41	8	2
1:A:48:PHE:CD1	1:A:65:ALA:O	0.53	2.62	24	3
1:A:38:CYS:O	1:A:40:SER:N	0.53	2.41	1	4
1:A:170:GLU:OE1	1:A:170:GLU:N	0.53	2.42	9	1
1:A:30:TRP:O	1:A:30:TRP:CD1	0.53	2.61	23	5
1:A:16:LEU:C	1:A:18:LEU:N	0.53	2.62	18	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:42:ARG:NE	1:A:79:THR:OG1	0.53	2.41	6	1
1:A:168:GLU:CG	1:A:169:LYS:N	0.53	2.71	9	1
1:A:26:GLU:O	1:A:28:SER:N	0.53	2.42	10	8
1:A:113:ASN:OD1	1:A:113:ASN:N	0.53	2.42	11	3
1:A:175:THR:HG23	1:A:181:ILE:HG22	0.53	1.77	18	1
1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:CD	0.53	2.72	19	1
1:A:105:PHE:CD2	1:A:105:PHE:O	0.53	2.61	1	1
1:A:160:LYS:HZ2	1:A:166:LEU:HD13	0.53	1.64	23	1
1:A:106:SER:OG	1:A:107:LEU:N	0.53	2.41	12	2
1:A:150:ARG:C	1:A:152:GLU:N	0.53	2.62	23	12
1:A:173:GLU:C	1:A:175:THR:N	0.53	2.61	24	17
1:A:75:ASN:ND2	1:A:75:ASN:O	0.53	2.42	17	5
1:A:19:ASN:O	1:A:21:LYS:N	0.53	2.41	18	1
1:A:10:LYS:CD	1:A:10:LYS:N	0.53	2.71	19	1
1:A:141:PRO:O	1:A:145:ASN:ND2	0.53	2.42	9	1
1:A:182:LEU:O	1:A:184:LEU:N	0.53	2.42	8	2
1:A:152:GLU:O	1:A:156:GLY:N	0.53	2.41	10	2
1:A:137:THR:O	1:A:139:HIS:N	0.52	2.41	15	2
1:A:52:TYR:O	1:A:54:LYS:N	0.52	2.42	5	1
1:A:28:SER:C	1:A:30:TRP:H	0.52	2.07	14	1
1:A:91:MET:SD	1:A:103:TRP:CE2	0.52	3.03	3	1
1:A:29:SER:O	1:A:31:TYR:N	0.52	2.42	3	3
1:A:117:SER:O	1:A:119:ASN:N	0.52	2.42	14	1
1:A:77:ASP:OD1	1:A:77:ASP:N	0.52	2.41	21	1
1:A:67:HIS:O	1:A:69:PHE:N	0.52	2.42	9	6
1:A:147:PRO:O	1:A:149:LYS:N	0.52	2.43	10	2
1:A:28:SER:O	1:A:30:TRP:N	0.52	2.42	14	2
1:A:179:LYS:N	1:A:179:LYS:CD	0.52	2.72	13	2
1:A:56:PHE:N	1:A:57:PRO:CD	0.52	2.72	17	14
1:A:21:LYS:CG	1:A:22:PHE:H	0.52	2.16	5	1
1:A:40:SER:C	1:A:42:ARG:H	0.52	2.08	22	1
1:A:32:GLN:O	1:A:35:LEU:N	0.52	2.42	6	12
1:A:119:ASN:H	1:A:119:ASN:HD22	0.52	1.47	5	1
1:A:179:LYS:O	1:A:181:ILE:N	0.52	2.42	6	5
1:A:105:PHE:CD1	1:A:105:PHE:O	0.52	2.62	12	1
1:A:21:LYS:O	1:A:23:THR:N	0.52	2.42	8	3
1:A:179:LYS:C	1:A:181:ILE:N	0.52	2.63	13	5
1:A:153:LYS:O	1:A:157:PHE:CD1	0.52	2.62	23	1
1:A:104:ALA:C	1:A:106:SER:N	0.52	2.62	7	8
1:A:136:ASP:C	1:A:138:LYS:H	0.52	2.07	22	6
1:A:9:SER:O	1:A:12:ILE:N	0.52	2.43	24	4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:THR:HG23	1:A:26:GLU:HB2	0.52	1.81	18	2
1:A:144:GLU:O	1:A:150:ARG:NH2	0.52	2.42	22	1
1:A:12:ILE:O	1:A:14:GLU:N	0.52	2.42	24	1
1:A:49:GLN:NE2	1:A:62:LYS:CB	0.52	2.72	21	1
1:A:72:PHE:C	1:A:72:PHE:CD1	0.52	2.79	4	1
1:A:23:THR:O	1:A:26:GLU:N	0.52	2.38	12	10
1:A:8:LEU:O	1:A:9:SER:CB	0.52	2.58	22	11
1:A:77:ASP:C	1:A:79:THR:N	0.52	2.64	6	4
1:A:170:GLU:O	1:A:174:GLY:N	0.52	2.43	10	5
1:A:118:LYS:CD	1:A:118:LYS:N	0.52	2.73	17	1
1:A:49:GLN:NE2	1:A:66:GLN:NE2	0.52	2.58	24	1
1:A:109:ASP:OD1	1:A:120:GLU:OE1	0.52	2.28	7	2
1:A:75:ASN:O	1:A:75:ASN:ND2	0.52	2.43	3	2
1:A:109:ASP:O	1:A:111:ASP:N	0.52	2.42	4	2
1:A:144:GLU:N	1:A:144:GLU:OE2	0.52	2.42	21	1
1:A:30:TRP:O	1:A:32:GLN:N	0.52	2.42	4	1
1:A:102:GLU:O	1:A:104:ALA:N	0.52	2.43	9	2
1:A:51:ILE:O	1:A:54:LYS:N	0.52	2.43	8	2
1:A:21:LYS:NZ	1:A:90:HIS:CB	0.52	2.73	14	1
1:A:58:GLU:C	1:A:58:GLU:CD	0.52	2.68	23	1
1:A:27:LEU:O	1:A:27:LEU:CD1	0.52	2.56	4	1
1:A:19:ASN:HD21	1:A:94:ALA:HB1	0.52	1.64	4	1
1:A:73:ASP:O	1:A:74:ALA:C	0.51	2.48	13	4
1:A:183:ARG:C	1:A:183:ARG:CD	0.51	2.78	20	1
1:A:90:HIS:CE1	1:A:94:ALA:CB	0.51	2.93	7	2
1:A:91:MET:C	1:A:93:SER:H	0.51	2.09	13	4
1:A:37:GLU:N	1:A:37:GLU:OE1	0.51	2.44	23	1
1:A:184:LEU:C	1:A:184:LEU:CD1	0.51	2.79	12	3
1:A:113:ASN:CG	1:A:114:GLY:N	0.51	2.64	13	5
1:A:72:PHE:C	1:A:74:ALA:H	0.51	2.08	17	2
1:A:10:LYS:CD	1:A:10:LYS:H	0.51	2.18	19	1
1:A:82:PHE:O	1:A:85:TYR:N	0.51	2.42	11	3
1:A:75:ASN:H	1:A:75:ASN:HD22	0.51	1.45	13	1
1:A:34:PHE:C	1:A:34:PHE:CD1	0.51	2.83	12	4
1:A:104:ALA:C	1:A:106:SER:H	0.51	2.08	7	2
1:A:113:ASN:OD1	1:A:114:GLY:N	0.51	2.43	9	2
1:A:47:GLU:O	1:A:50:THR:N	0.51	2.44	2	8
1:A:9:SER:O	1:A:11:GLU:N	0.51	2.43	21	3
1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CD	0.51	2.63	1	1
1:A:101:LEU:O	1:A:104:ALA:HB3	0.51	2.05	10	3
1:A:91:MET:SD	1:A:103:TRP:CD2	0.51	3.03	3	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:SER:O	1:A:32:GLN:N	0.51	2.43	9	1
1:A:75:ASN:C	1:A:77:ASP:N	0.51	2.63	7	2
1:A:160:LYS:NZ	1:A:166:LEU:CD1	0.51	2.72	1	1
1:A:18:LEU:HD11	1:A:103:TRP:CZ2	0.51	2.39	7	1
1:A:184:LEU:C	1:A:186:GLN:N	0.51	2.64	7	11
1:A:64:TYR:C	1:A:64:TYR:CD1	0.51	2.84	13	4
1:A:113:ASN:C	1:A:115:THR:H	0.51	2.09	7	2
1:A:86:VAL:O	1:A:90:HIS:N	0.51	2.41	3	5
1:A:18:LEU:HG	1:A:19:ASN:N	0.51	2.20	18	3
1:A:88:ALA:O	1:A:90:HIS:N	0.51	2.44	11	2
1:A:19:ASN:CG	1:A:21:LYS:H	0.51	2.09	18	1
1:A:160:LYS:HZ1	1:A:166:LEU:HD13	0.51	1.63	1	1
1:A:48:PHE:CE1	1:A:65:ALA:O	0.51	2.64	24	2
1:A:147:PRO:C	1:A:149:LYS:N	0.51	2.63	10	2
1:A:131:MET:SD	1:A:131:MET:O	0.51	2.69	22	1
1:A:18:LEU:O	1:A:19:ASN:CB	0.51	2.59	4	1
1:A:178:ASN:O	1:A:180:GLU:N	0.51	2.44	1	2
1:A:91:MET:C	1:A:93:SER:N	0.51	2.64	13	4
1:A:24:GLU:O	1:A:26:GLU:N	0.51	2.43	14	3
1:A:42:ARG:HE	1:A:79:THR:CB	0.51	2.17	6	1
1:A:60:ASP:O	1:A:62:LYS:N	0.51	2.42	4	12
1:A:141:PRO:C	1:A:143:ASP:H	0.51	2.09	2	3
1:A:62:LYS:CG	1:A:63:ALA:N	0.51	2.73	8	1
1:A:140:LEU:HD12	1:A:140:LEU:C	0.51	2.25	20	3
1:A:26:GLU:C	1:A:28:SER:N	0.51	2.63	11	12
1:A:7:ALA:O	1:A:8:LEU:C	0.51	2.50	3	4
1:A:142:GLU:C	1:A:143:ASP:CG	0.51	2.69	4	2
1:A:107:LEU:C	1:A:107:LEU:CD2	0.51	2.77	7	2
1:A:13:LEU:CD1	1:A:13:LEU:C	0.51	2.76	6	2
1:A:131:MET:O	1:A:131:MET:SD	0.50	2.69	14	1
1:A:24:GLU:CD	1:A:24:GLU:C	0.50	2.70	10	1
1:A:51:ILE:C	1:A:53:SER:N	0.50	2.65	22	7
1:A:137:THR:O	1:A:140:LEU:CD1	0.50	2.60	18	4
1:A:49:GLN:CD	1:A:49:GLN:C	0.50	2.70	13	2
1:A:8:LEU:CD1	1:A:8:LEU:C	0.50	2.78	11	2
1:A:186:GLN:O	1:A:188:GLU:N	0.50	2.43	10	1
1:A:22:PHE:C	1:A:23:THR:OG1	0.50	2.50	8	4
1:A:118:LYS:CD	1:A:118:LYS:H	0.50	2.19	17	1
1:A:182:LEU:HD12	1:A:182:LEU:C	0.50	2.26	1	1
1:A:87:ILE:O	1:A:90:HIS:ND1	0.50	2.44	13	3
1:A:184:LEU:HD23	1:A:184:LEU:O	0.50	2.07	23	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:67:HIS:C	1:A:69:PHE:H	0.50	2.09	9	5
1:A:146:THR:OG1	1:A:149:LYS:NZ	0.50	2.40	8	1
1:A:142:GLU:CD	1:A:142:GLU:N	0.50	2.64	17	1
1:A:167:THR:O	1:A:171:PHE:N	0.50	2.38	3	1
1:A:184:LEU:CD1	1:A:184:LEU:C	0.50	2.79	4	1
1:A:49:GLN:NE2	1:A:66:GLN:HE21	0.50	2.04	17	1
1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:HD23	0.50	2.20	2	2
1:A:22:PHE:CB	1:A:90:HIS:NE2	0.50	2.74	22	1
1:A:102:GLU:C	1:A:102:GLU:CD	0.50	2.70	15	2
1:A:140:LEU:HD23	1:A:140:LEU:N	0.50	2.20	16	1
1:A:111:ASP:OD2	1:A:120:GLU:CG	0.50	2.59	1	1
1:A:45:ARG:NE	1:A:69:PHE:CD2	0.50	2.79	15	1
1:A:37:GLU:O	1:A:38:CYS:SG	0.50	2.68	23	5
1:A:61:PRO:O	1:A:64:TYR:N	0.50	2.45	22	4
1:A:75:ASN:ND2	1:A:84:GLU:OE2	0.50	2.42	19	1
1:A:123:GLU:OE1	1:A:123:GLU:CA	0.50	2.59	3	2
1:A:117:SER:O	1:A:121:VAL:HG23	0.50	2.06	1	2
1:A:179:LYS:C	1:A:181:ILE:H	0.50	2.08	13	4
1:A:24:GLU:HA	1:A:27:LEU:HD13	0.50	1.82	15	2
1:A:59:ALA:CB	1:A:131:MET:O	0.50	2.60	4	21
1:A:29:SER:C	1:A:31:TYR:N	0.50	2.64	9	3
1:A:81:ASP:OD1	1:A:84:GLU:N	0.50	2.36	9	2
1:A:55:PHE:C	1:A:56:PHE:CD2	0.50	2.85	18	2
1:A:75:ASN:CG	1:A:76:SER:N	0.50	2.65	14	1
1:A:75:ASN:N	1:A:75:ASN:OD1	0.50	2.45	12	2
1:A:24:GLU:CD	1:A:25:GLU:H	0.50	2.09	20	1
1:A:45:ARG:NH1	1:A:66:GLN:OE1	0.50	2.45	21	1
1:A:87:ILE:O	1:A:90:HIS:CE1	0.50	2.65	21	4
1:A:20:THR:O	1:A:20:THR:CG2	0.50	2.58	15	1
1:A:61:PRO:C	1:A:63:ALA:N	0.50	2.64	6	1
1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:OE2	0.50	2.45	3	1
1:A:153:LYS:O	1:A:157:PHE:N	0.50	2.43	23	1
1:A:52:TYR:O	1:A:55:PHE:N	0.49	2.42	2	2
1:A:90:HIS:NE2	1:A:94:ALA:CB	0.49	2.75	11	3
1:A:137:THR:CA	1:A:140:LEU:HD21	0.49	2.36	7	5
1:A:91:MET:O	1:A:93:SER:N	0.49	2.45	13	3
1:A:119:ASN:OD1	1:A:120:GLU:N	0.49	2.44	14	2
1:A:31:TYR:CZ	1:A:35:LEU:CD1	0.49	2.95	11	1
1:A:181:ILE:C	1:A:183:ARG:H	0.49	2.11	17	1
1:A:49:GLN:HE22	1:A:65:ALA:CB	0.49	2.21	20	2
1:A:77:ASP:CG	1:A:78:GLY:N	0.49	2.65	1	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:HIS:O	1:A:93:SER:N	0.49	2.43	6	4
1:A:121:VAL:HG21	1:A:155:TRP:CE2	0.49	2.41	10	1
1:A:180:GLU:N	1:A:180:GLU:OE2	0.49	2.45	15	1
1:A:134:PRO:O	1:A:137:THR:N	0.49	2.45	4	1
1:A:90:HIS:C	1:A:92:THR:N	0.49	2.65	7	4
1:A:32:GLN:HG3	1:A:33:SER:N	0.49	2.22	3	2
1:A:142:GLU:N	1:A:142:GLU:OE1	0.49	2.44	3	1
1:A:103:TRP:CE3	1:A:103:TRP:O	0.49	2.65	3	2
1:A:27:LEU:C	1:A:27:LEU:CD1	0.49	2.74	8	1
1:A:101:LEU:O	1:A:103:TRP:N	0.49	2.45	8	2
1:A:24:GLU:C	1:A:26:GLU:H	0.49	2.09	14	2
1:A:178:ASN:C	1:A:180:GLU:N	0.49	2.65	12	2
1:A:64:TYR:O	1:A:64:TYR:CD1	0.49	2.65	21	5
1:A:13:LEU:C	1:A:15:GLU:H	0.49	2.09	4	14
1:A:160:LYS:N	1:A:160:LYS:HZ3	0.49	2.03	10	1
1:A:34:PHE:CE1	1:A:43:ILE:HD11	0.49	2.43	21	1
1:A:13:LEU:O	1:A:15:GLU:N	0.49	2.45	6	18
1:A:27:LEU:H	1:A:27:LEU:CD1	0.49	2.19	18	1
1:A:21:LYS:O	1:A:21:LYS:CE	0.49	2.61	10	1
1:A:158:PHE:N	1:A:158:PHE:CD1	0.49	2.80	3	1
1:A:108:TYR:CD1	1:A:124:ILE:HG21	0.49	2.43	23	1
1:A:101:LEU:O	1:A:104:ALA:N	0.49	2.44	7	10
1:A:142:GLU:C	1:A:143:ASP:OD1	0.49	2.51	9	1
1:A:39:PRO:O	1:A:40:SER:CB	0.49	2.60	9	2
1:A:133:SER:O	1:A:137:THR:N	0.49	2.43	18	3
1:A:22:PHE:C	1:A:23:THR:CG2	0.49	2.81	18	1
1:A:12:ILE:C	1:A:14:GLU:N	0.49	2.65	24	2
1:A:155:TRP:CZ2	1:A:160:LYS:CB	0.49	2.96	15	2
1:A:105:PHE:O	1:A:109:ASP:N	0.49	2.45	4	1
1:A:150:ARG:O	1:A:152:GLU:N	0.49	2.45	23	6
1:A:113:ASN:CG	1:A:115:THR:OG1	0.49	2.51	15	3
1:A:137:THR:C	1:A:139:HIS:N	0.49	2.65	15	2
1:A:111:ASP:CG	1:A:120:GLU:OE2	0.49	2.50	17	2
1:A:27:LEU:N	1:A:27:LEU:HD12	0.49	2.21	11	4
1:A:141:PRO:C	1:A:143:ASP:N	0.49	2.66	2	2
1:A:22:PHE:O	1:A:23:THR:CB	0.49	2.61	18	2
1:A:58:GLU:CG	1:A:59:ALA:H	0.49	2.21	13	2
1:A:149:LYS:HZ2	1:A:149:LYS:CB	0.49	2.21	1	1
1:A:37:GLU:CA	1:A:37:GLU:OE1	0.49	2.61	23	1
1:A:69:PHE:C	1:A:71:SER:H	0.49	2.10	13	8
1:A:81:ASP:OD1	1:A:81:ASP:C	0.49	2.51	4	4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:139:HIS:C	1:A:141:PRO:CD	0.49	2.82	20	1
1:A:8:LEU:HD12	1:A:27:LEU:O	0.49	2.07	19	1
1:A:176:LEU:HD13	1:A:176:LEU:O	0.49	2.06	14	2
1:A:75:ASN:OD1	1:A:75:ASN:N	0.49	2.46	8	2
1:A:73:ASP:CG	1:A:80:LEU:CD2	0.49	2.81	17	1
1:A:181:ILE:C	1:A:183:ARG:N	0.49	2.66	1	5
1:A:187:PHE:O	1:A:188:GLU:CB	0.49	2.61	1	1
1:A:113:ASN:N	1:A:113:ASN:OD1	0.49	2.45	3	1
1:A:34:PHE:CE1	1:A:38:CYS:CB	0.49	2.96	7	1
1:A:105:PHE:CG	1:A:168:GLU:CG	0.49	2.95	7	1
1:A:23:THR:C	1:A:25:GLU:H	0.48	2.12	8	3
1:A:13:LEU:C	1:A:13:LEU:CD1	0.48	2.81	17	2
1:A:52:TYR:CD2	1:A:56:PHE:CE2	0.48	3.01	22	1
1:A:111:ASP:OD1	1:A:120:GLU:CD	0.48	2.52	9	1
1:A:185:ILE:O	1:A:187:PHE:N	0.48	2.45	18	1
1:A:15:GLU:O	1:A:19:ASN:ND2	0.48	2.45	14	1
1:A:46:GLN:CG	1:A:47:GLU:N	0.48	2.75	14	1
1:A:46:GLN:N	1:A:46:GLN:CD	0.48	2.66	4	1
1:A:52:TYR:C	1:A:54:LYS:N	0.48	2.67	5	1
1:A:102:GLU:OE1	1:A:168:GLU:CD	0.48	2.52	5	2
1:A:141:PRO:O	1:A:143:ASP:N	0.48	2.47	2	2
1:A:121:VAL:O	1:A:125:VAL:CG2	0.48	2.61	1	1
1:A:176:LEU:CD1	1:A:176:LEU:C	0.48	2.79	14	1
1:A:53:SER:C	1:A:55:PHE:N	0.48	2.67	6	1
1:A:75:ASN:N	1:A:75:ASN:ND2	0.48	2.47	13	1
1:A:105:PHE:O	1:A:105:PHE:CD2	0.48	2.67	9	1
1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CD1	0.48	2.59	10	3
1:A:73:ASP:OD1	1:A:79:THR:C	0.48	2.51	23	3
1:A:21:LYS:CD	1:A:23:THR:H	0.48	2.22	22	1
1:A:43:ILE:CG2	1:A:44:THR:N	0.48	2.75	22	1
1:A:109:ASP:O	1:A:112:GLY:N	0.48	2.46	23	1
1:A:145:ASN:C	1:A:145:ASN:HD22	0.48	2.12	11	1
1:A:75:ASN:CG	1:A:76:SER:H	0.48	2.11	14	1
1:A:184:LEU:O	1:A:184:LEU:HD13	0.48	2.08	3	1
1:A:108:TYR:CZ	1:A:187:PHE:CE2	0.48	3.01	4	1
1:A:16:LEU:N	1:A:16:LEU:CD2	0.48	2.76	8	3
1:A:129:PHE:CE2	1:A:145:ASN:O	0.48	2.67	5	1
1:A:105:PHE:CE1	1:A:168:GLU:CA	0.48	2.97	18	1
1:A:109:ASP:C	1:A:111:ASP:N	0.48	2.64	13	2
1:A:18:LEU:HD22	1:A:18:LEU:H	0.48	1.66	23	1
1:A:182:LEU:C	1:A:184:LEU:N	0.48	2.65	7	2

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:113:ASN:C	1:A:115:THR:N	0.48	2.67	1	4
1:A:88:ALA:C	1:A:90:HIS:N	0.48	2.67	11	2
1:A:49:GLN:NE2	1:A:65:ALA:CB	0.48	2.77	20	1
1:A:90:HIS:O	1:A:92:THR:N	0.48	2.46	7	2
1:A:117:SER:C	1:A:119:ASN:N	0.48	2.67	14	1
1:A:91:MET:N	1:A:91:MET:SD	0.48	2.87	17	1
1:A:16:LEU:C	1:A:18:LEU:H	0.48	2.11	18	2
1:A:51:ILE:HG23	1:A:52:TYR:N	0.48	2.24	18	2
1:A:176:LEU:O	1:A:176:LEU:HD13	0.48	2.08	1	1
1:A:77:ASP:OD1	1:A:77:ASP:C	0.48	2.52	11	1
1:A:17:GLN:C	1:A:19:ASN:N	0.48	2.65	21	2
1:A:144:GLU:C	1:A:146:THR:H	0.48	2.12	21	1
1:A:25:GLU:C	1:A:25:GLU:CD	0.48	2.73	7	1
1:A:107:LEU:C	1:A:107:LEU:HD23	0.48	2.29	9	3
1:A:49:GLN:NE2	1:A:65:ALA:HB3	0.48	2.24	20	1
1:A:90:HIS:O	1:A:94:ALA:HB2	0.48	2.09	24	1
1:A:21:LYS:CE	1:A:21:LYS:O	0.48	2.62	21	1
1:A:8:LEU:CD2	1:A:82:PHE:CD1	0.48	2.97	4	1
1:A:15:GLU:O	1:A:16:LEU:C	0.47	2.53	18	19
1:A:32:GLN:C	1:A:34:PHE:H	0.47	2.13	22	1
1:A:111:ASP:OD2	1:A:120:GLU:OE2	0.47	2.32	7	2
1:A:145:ASN:N	1:A:145:ASN:ND2	0.47	2.62	2	3
1:A:158:PHE:CB	1:A:160:LYS:NZ	0.47	2.77	5	2
1:A:154:ILE:O	1:A:156:GLY:N	0.47	2.47	22	4
1:A:45:ARG:CG	1:A:46:GLN:N	0.47	2.78	22	1
1:A:181:ILE:O	1:A:184:LEU:N	0.47	2.42	21	2
1:A:28:SER:C	1:A:30:TRP:N	0.47	2.66	7	2
1:A:93:SER:OG	1:A:94:ALA:N	0.47	2.47	4	1
1:A:81:ASP:OD2	1:A:84:GLU:CD	0.47	2.52	9	1
1:A:22:PHE:O	1:A:24:GLU:N	0.47	2.48	14	5
1:A:52:TYR:CE2	1:A:56:PHE:CE2	0.47	3.02	18	1
1:A:125:VAL:HG12	1:A:126:THR:N	0.47	2.24	7	1
1:A:85:TYR:CE1	1:A:89:LEU:CD2	0.47	2.96	9	1
1:A:75:ASN:C	1:A:76:SER:OG	0.47	2.51	8	2
1:A:8:LEU:HD12	1:A:8:LEU:C	0.47	2.29	17	3
1:A:147:PRO:C	1:A:149:LYS:H	0.47	2.12	10	2
1:A:108:TYR:O	1:A:110:VAL:N	0.47	2.41	17	2
1:A:154:ILE:C	1:A:156:GLY:N	0.47	2.67	22	5
1:A:185:ILE:CG2	1:A:186:GLN:N	0.47	2.76	20	1
1:A:111:ASP:OD2	1:A:120:GLU:CD	0.47	2.52	1	1
1:A:109:ASP:CG	1:A:120:GLU:OE1	0.47	2.52	7	1

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:142:GLU:O	1:A:143:ASP:CB	0.47	2.63	6	3
1:A:59:ALA:C	1:A:60:ASP:OD1	0.47	2.53	15	2
1:A:181:ILE:HG22	1:A:182:LEU:N	0.47	2.24	14	3
1:A:8:LEU:O	1:A:11:GLU:CB	0.47	2.63	17	1
1:A:8:LEU:O	1:A:9:SER:C	0.47	2.53	17	1
1:A:15:GLU:C	1:A:17:GLN:N	0.47	2.68	3	6
1:A:18:LEU:O	1:A:19:ASN:C	0.47	2.52	18	1
1:A:19:ASN:C	1:A:21:LYS:N	0.47	2.67	18	1
1:A:157:PHE:CE2	1:A:184:LEU:CD1	0.47	2.97	1	1
1:A:24:GLU:C	1:A:24:GLU:CD	0.47	2.73	6	1
1:A:82:PHE:CE1	1:A:83:LYS:HB2	0.47	2.45	4	1
1:A:124:ILE:N	1:A:124:ILE:HD13	0.47	2.23	20	3
1:A:18:LEU:HG	1:A:19:ASN:H	0.47	1.69	8	1
1:A:72:PHE:CE1	1:A:87:ILE:CG2	0.47	2.98	5	1
1:A:109:ASP:OD2	1:A:111:ASP:OD1	0.47	2.33	18	1
1:A:145:ASN:N	1:A:145:ASN:OD1	0.47	2.44	18	1
1:A:188:GLU:CD	1:A:188:GLU:C	0.47	2.72	20	3
1:A:49:GLN:OE1	1:A:66:GLN:NE2	0.47	2.44	21	1
1:A:109:ASP:OD1	1:A:111:ASP:OD1	0.47	2.33	7	1
1:A:185:ILE:O	1:A:187:PHE:CD1	0.47	2.68	4	1
1:A:75:ASN:O	1:A:76:SER:CB	0.47	2.61	8	2
1:A:90:HIS:CE1	1:A:94:ALA:HB1	0.47	2.45	20	1
1:A:105:PHE:CD1	1:A:168:GLU:HG3	0.47	2.45	7	1
1:A:140:LEU:C	1:A:140:LEU:HD12	0.47	2.31	8	2
1:A:13:LEU:O	1:A:16:LEU:N	0.47	2.30	7	3
1:A:22:PHE:HB2	1:A:90:HIS:NE2	0.47	2.25	22	1
1:A:60:ASP:C	1:A:62:LYS:N	0.46	2.69	1	19
1:A:165:LYS:N	1:A:165:LYS:CD	0.46	2.77	17	1
1:A:75:ASN:HD21	1:A:84:GLU:CD	0.46	2.13	5	1
1:A:188:GLU:OE1	1:A:188:GLU:C	0.46	2.54	19	1
1:A:8:LEU:HD23	1:A:8:LEU:H	0.46	1.67	4	1
1:A:137:THR:HG23	1:A:140:LEU:HD21	0.46	1.86	12	1
1:A:27:LEU:CD1	1:A:27:LEU:H	0.46	2.23	5	2
1:A:26:GLU:O	1:A:30:TRP:N	0.46	2.46	21	3
1:A:26:GLU:O	1:A:27:LEU:C	0.46	2.54	21	3
1:A:34:PHE:O	1:A:38:CYS:N	0.46	2.48	3	2
1:A:179:LYS:O	1:A:182:LEU:N	0.46	2.47	11	2
1:A:145:ASN:O	1:A:145:ASN:ND2	0.46	2.48	3	1
1:A:186:GLN:OE1	1:A:187:PHE:N	0.46	2.48	17	1
1:A:171:PHE:CD1	1:A:171:PHE:O	0.46	2.69	22	3
1:A:81:ASP:OD2	1:A:84:GLU:OE1	0.46	2.33	4	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:SER:O	1:A:55:PHE:N	0.46	2.48	6	1
1:A:113:ASN:CG	1:A:114:GLY:H	0.46	2.14	13	4
1:A:51:ILE:C	1:A:53:SER:H	0.46	2.14	9	3
1:A:170:GLU:C	1:A:172:ILE:H	0.46	2.13	8	3
1:A:81:ASP:H	1:A:84:GLU:CD	0.46	2.11	22	2
1:A:188:GLU:OE1	1:A:188:GLU:O	0.46	2.34	19	1
1:A:47:GLU:O	1:A:49:GLN:N	0.46	2.49	24	1
1:A:30:TRP:CD1	1:A:30:TRP:O	0.46	2.69	3	1
1:A:80:LEU:N	1:A:80:LEU:HD23	0.46	2.25	4	1
1:A:134:PRO:C	1:A:136:ASP:N	0.46	2.69	24	3
1:A:73:ASP:HB2	1:A:80:LEU:HD21	0.46	1.87	14	1
1:A:68:VAL:HG12	1:A:68:VAL:O	0.46	2.10	9	7
1:A:154:ILE:O	1:A:157:PHE:N	0.46	2.49	7	7
1:A:165:LYS:HD3	1:A:165:LYS:H	0.46	1.70	17	1
1:A:128:ILE:HD13	1:A:150:ARG:HH22	0.46	1.70	24	1
1:A:23:THR:O	1:A:24:GLU:C	0.46	2.54	23	8
1:A:21:LYS:CE	1:A:21:LYS:H	0.46	2.24	17	1
1:A:8:LEU:CD1	1:A:82:PHE:CE1	0.46	2.99	10	1
1:A:122:LEU:O	1:A:122:LEU:HD13	0.46	2.11	5	1
1:A:157:PHE:CD1	1:A:157:PHE:N	0.46	2.82	2	1
1:A:90:HIS:ND1	1:A:90:HIS:C	0.46	2.69	2	2
1:A:157:PHE:N	1:A:157:PHE:CD1	0.46	2.82	16	1
1:A:56:PHE:CD2	1:A:61:PRO:HG2	0.46	2.46	23	1
1:A:82:PHE:CD1	1:A:82:PHE:C	0.46	2.89	11	1
1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:HD22	0.46	2.04	7	1
1:A:113:ASN:O	1:A:115:THR:N	0.45	2.49	1	3
1:A:13:LEU:HD21	1:A:24:GLU:HB3	0.45	1.86	5	1
1:A:134:PRO:O	1:A:136:ASP:N	0.45	2.50	21	3
1:A:171:PHE:C	1:A:171:PHE:CD1	0.45	2.89	15	1
1:A:24:GLU:CG	1:A:25:GLU:N	0.45	2.79	7	1
1:A:155:TRP:CZ2	1:A:160:LYS:CD	0.45	2.98	4	1
1:A:186:GLN:NE2	1:A:187:PHE:O	0.45	2.49	22	1
1:A:75:ASN:ND2	1:A:77:ASP:N	0.45	2.63	14	1
1:A:112:GLY:O	1:A:113:ASN:ND2	0.45	2.49	10	1
1:A:109:ASP:CB	1:A:113:ASN:OD1	0.45	2.64	7	1
1:A:20:THR:CG2	1:A:20:THR:O	0.45	2.64	7	1
1:A:73:ASP:CB	1:A:80:LEU:CD2	0.45	2.94	17	1
1:A:27:LEU:HD12	1:A:27:LEU:H	0.45	1.71	20	2
1:A:23:THR:HG23	1:A:23:THR:O	0.45	2.12	10	1
1:A:68:VAL:O	1:A:68:VAL:HG12	0.45	2.10	1	5
1:A:160:LYS:HZ3	1:A:166:LEU:CD1	0.45	2.24	20	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:ARG:N	1:A:69:PHE:CE1	0.45	2.85	23	1
1:A:165:LYS:HD2	1:A:165:LYS:H	0.45	1.72	20	2
1:A:155:TRP:CZ2	1:A:160:LYS:HB2	0.45	2.46	24	2
1:A:64:TYR:O	1:A:64:TYR:CG	0.45	2.69	6	2
1:A:179:LYS:HD3	1:A:179:LYS:N	0.45	2.27	13	1
1:A:167:THR:OG1	1:A:170:GLU:OE2	0.45	2.34	9	1
1:A:74:ALA:O	1:A:76:SER:N	0.45	2.48	1	1
1:A:64:TYR:CD1	1:A:64:TYR:O	0.45	2.70	23	1
1:A:140:LEU:CD1	1:A:145:ASN:HD22	0.45	2.17	21	1
1:A:157:PHE:CE1	1:A:181:ILE:CG1	0.45	3.00	20	1
1:A:21:LYS:NZ	1:A:90:HIS:ND1	0.45	2.58	14	1
1:A:178:ASN:C	1:A:180:GLU:H	0.45	2.15	12	2
1:A:72:PHE:O	1:A:73:ASP:C	0.45	2.55	8	1
1:A:21:LYS:CG	1:A:22:PHE:N	0.45	2.80	5	1
1:A:118:LYS:C	1:A:118:LYS:CD	0.45	2.85	6	1
1:A:136:ASP:OD1	1:A:136:ASP:N	0.45	2.50	13	1
1:A:23:THR:O	1:A:23:THR:OG1	0.45	2.35	5	2
1:A:119:ASN:ND2	1:A:119:ASN:N	0.45	2.64	5	1
1:A:49:GLN:HE22	1:A:65:ALA:HB3	0.45	1.72	20	1
1:A:40:SER:O	1:A:42:ARG:N	0.45	2.50	22	1
1:A:12:ILE:O	1:A:15:GLU:CB	0.45	2.65	13	1
1:A:8:LEU:C	1:A:10:LYS:N	0.45	2.70	4	1
1:A:107:LEU:C	1:A:107:LEU:HD22	0.44	2.33	12	1
1:A:146:THR:OG1	1:A:149:LYS:CG	0.44	2.66	22	3
1:A:22:PHE:O	1:A:23:THR:HG22	0.44	2.11	18	1
1:A:86:VAL:O	1:A:87:ILE:C	0.44	2.56	22	2
1:A:155:TRP:CZ2	1:A:160:LYS:HD2	0.44	2.47	4	1
1:A:12:ILE:O	1:A:13:LEU:C	0.44	2.55	24	10
1:A:62:LYS:HG3	1:A:63:ALA:N	0.44	2.27	8	1
1:A:15:GLU:OE2	1:A:21:LYS:CE	0.44	2.66	23	1
1:A:12:ILE:HG21	1:A:27:LEU:CD2	0.44	2.43	12	1
1:A:68:VAL:O	1:A:68:VAL:CG1	0.44	2.65	22	7
1:A:92:THR:O	1:A:93:SER:CB	0.44	2.65	24	1
1:A:117:SER:OG	1:A:120:GLU:OE2	0.44	2.36	14	1
1:A:72:PHE:O	1:A:72:PHE:CD2	0.44	2.70	14	1
1:A:179:LYS:CD	1:A:179:LYS:N	0.44	2.80	10	1
1:A:69:PHE:CE2	1:A:80:LEU:HD11	0.44	2.47	17	2
1:A:20:THR:HB	1:A:94:ALA:HB1	0.44	1.88	13	1
1:A:144:GLU:C	1:A:146:THR:N	0.44	2.70	21	1
1:A:11:GLU:OE1	1:A:83:LYS:NZ	0.44	2.50	7	1
1:A:38:CYS:C	1:A:40:SER:N	0.44	2.71	12	7

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:LEU:N	1:A:89:LEU:CD2	0.44	2.80	10	1
1:A:90:HIS:ND1	1:A:94:ALA:HB3	0.44	2.27	15	1
1:A:187:PHE:O	1:A:187:PHE:CD2	0.44	2.70	3	1
1:A:109:ASP:CG	1:A:111:ASP:OD1	0.44	2.55	8	1
1:A:68:VAL:CG1	1:A:68:VAL:O	0.44	2.66	5	8
1:A:22:PHE:O	1:A:23:THR:C	0.44	2.54	15	4
1:A:142:GLU:CG	1:A:143:ASP:N	0.44	2.81	19	1
1:A:54:LYS:O	1:A:55:PHE:CD1	0.44	2.71	6	1
1:A:109:ASP:OD1	1:A:120:GLU:CD	0.44	2.56	7	1
1:A:171:PHE:O	1:A:171:PHE:CD1	0.44	2.71	7	1
1:A:90:HIS:O	1:A:94:ALA:N	0.44	2.41	2	2
1:A:170:GLU:N	1:A:170:GLU:OE2	0.44	2.50	2	2
1:A:53:SER:OG	1:A:54:LYS:N	0.44	2.51	19	1
1:A:86:VAL:O	1:A:90:HIS:CB	0.44	2.66	24	1
1:A:113:ASN:C	1:A:113:ASN:ND2	0.44	2.71	24	1
1:A:51:ILE:HG21	1:A:85:TYR:OH	0.44	2.13	24	1
1:A:28:SER:O	1:A:31:TYR:N	0.44	2.50	7	1
1:A:102:GLU:C	1:A:104:ALA:N	0.44	2.71	9	1
1:A:27:LEU:CD1	1:A:27:LEU:C	0.44	2.84	9	1
1:A:82:PHE:O	1:A:83:LYS:C	0.44	2.56	24	4
1:A:101:LEU:C	1:A:103:TRP:N	0.44	2.70	15	2
1:A:45:ARG:NH1	1:A:70:ARG:HH22	0.44	2.09	24	1
1:A:183:ARG:C	1:A:184:LEU:HD22	0.44	2.33	13	1
1:A:48:PHE:CZ	1:A:68:VAL:HG11	0.44	2.48	13	1
1:A:64:TYR:OH	1:A:188:GLU:CB	0.44	2.66	4	1
1:A:70:ARG:N	1:A:70:ARG:HD2	0.44	2.28	17	1
1:A:105:PHE:CG	1:A:168:GLU:HG2	0.44	2.47	7	2
1:A:8:LEU:C	1:A:8:LEU:CD1	0.44	2.83	6	1
1:A:19:ASN:HD21	1:A:94:ALA:CB	0.44	2.25	4	1
1:A:31:TYR:CZ	1:A:32:GLN:HG3	0.44	2.48	4	1
1:A:188:GLU:C	1:A:188:GLU:CD	0.43	2.75	17	1
1:A:110:VAL:HG22	1:A:124:ILE:HD11	0.43	1.90	5	1
1:A:90:HIS:NE2	1:A:94:ALA:HB1	0.43	2.28	20	3
1:A:45:ARG:O	1:A:48:PHE:N	0.43	2.51	24	1
1:A:75:ASN:N	1:A:75:ASN:HD22	0.43	2.06	13	1
1:A:184:LEU:HD22	1:A:184:LEU:N	0.43	2.27	13	1
1:A:122:LEU:CD1	1:A:122:LEU:C	0.43	2.86	5	2
1:A:167:THR:C	1:A:169:LYS:N	0.43	2.71	22	2
1:A:186:GLN:C	1:A:187:PHE:CD2	0.43	2.92	10	1
1:A:18:LEU:C	1:A:19:ASN:CG	0.43	2.76	7	1
1:A:140:LEU:C	1:A:142:GLU:H	0.43	2.17	20	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:ASN:ND2	1:A:75:ASN:N	0.43	2.66	20	1
1:A:142:GLU:CD	1:A:142:GLU:H	0.43	2.16	1	1
1:A:53:SER:C	1:A:55:PHE:H	0.43	2.17	6	1
1:A:85:TYR:CZ	1:A:89:LEU:HG	0.43	2.48	12	4
1:A:89:LEU:CD2	1:A:89:LEU:N	0.43	2.80	8	1
1:A:167:THR:O	1:A:169:LYS:N	0.43	2.51	22	1
1:A:34:PHE:CZ	1:A:38:CYS:HB3	0.43	2.48	7	1
1:A:11:GLU:CD	1:A:11:GLU:H	0.43	2.14	9	1
1:A:18:LEU:CD1	1:A:18:LEU:H	0.43	2.25	17	1
1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:HD12	0.43	2.27	17	1
1:A:9:SER:O	1:A:10:LYS:C	0.43	2.56	10	3
1:A:109:ASP:CG	1:A:112:GLY:H	0.43	2.17	4	1
1:A:145:ASN:ND2	1:A:145:ASN:N	0.43	2.66	8	1
1:A:72:PHE:CE2	1:A:87:ILE:HB	0.43	2.48	24	1
1:A:39:PRO:O	1:A:41:GLY:N	0.43	2.51	6	1
1:A:90:HIS:CG	1:A:91:MET:H	0.43	2.27	21	1
1:A:157:PHE:CG	1:A:158:PHE:N	0.43	2.78	2	2
1:A:171:PHE:CD2	1:A:171:PHE:O	0.43	2.72	3	1
1:A:55:PHE:C	1:A:56:PHE:CG	0.43	2.92	18	4
1:A:47:GLU:C	1:A:49:GLN:N	0.43	2.72	24	1
1:A:100:LYS:HZ2	1:A:100:LYS:HB2	0.43	1.72	10	1
1:A:9:SER:C	1:A:11:GLU:N	0.43	2.71	21	1
1:A:29:SER:C	1:A:31:TYR:H	0.43	2.16	3	1
1:A:31:TYR:CD1	1:A:31:TYR:O	0.43	2.71	7	1
1:A:71:SER:OG	1:A:107:LEU:CA	0.43	2.66	4	1
1:A:45:ARG:HD3	1:A:69:PHE:CD2	0.43	2.49	2	2
1:A:105:PHE:CE2	1:A:168:GLU:HG3	0.43	2.49	1	1
1:A:109:ASP:OD1	1:A:113:ASN:ND2	0.43	2.51	24	1
1:A:61:PRO:C	1:A:63:ALA:H	0.43	2.16	6	1
1:A:177:ALA:O	1:A:179:LYS:N	0.43	2.51	23	1
1:A:87:ILE:O	1:A:91:MET:N	0.43	2.41	23	1
1:A:51:ILE:HG22	1:A:51:ILE:O	0.43	2.14	21	1
1:A:188:GLU:O	1:A:188:GLU:CD	0.43	2.56	4	1
1:A:73:ASP:C	1:A:73:ASP:OD1	0.42	2.54	8	1
1:A:44:THR:HG22	1:A:45:ARG:H	0.42	1.73	22	2
1:A:49:GLN:C	1:A:49:GLN:CD	0.42	2.77	2	2
1:A:100:LYS:O	1:A:101:LEU:CB	0.42	2.66	1	1
1:A:21:LYS:HZ2	1:A:90:HIS:CG	0.42	2.30	14	1
1:A:150:ARG:HH12	1:A:184:LEU:CD1	0.42	2.27	13	1
1:A:92:THR:HG22	1:A:92:THR:O	0.42	2.14	13	1
1:A:17:GLN:C	1:A:19:ASN:H	0.42	2.15	21	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:127:ALA:O	1:A:130:LYS:N	0.42	2.52	23	3
1:A:21:LYS:HD3	1:A:21:LYS:N	0.42	2.29	19	1
1:A:45:ARG:HD3	1:A:69:PHE:CG	0.42	2.48	10	1
1:A:109:ASP:CG	1:A:113:ASN:OD1	0.42	2.57	7	1
1:A:158:PHE:CB	1:A:160:LYS:HZ2	0.42	2.27	5	1
1:A:109:ASP:OD1	1:A:109:ASP:C	0.42	2.57	19	1
1:A:178:ASN:OD1	1:A:179:LYS:N	0.42	2.52	10	1
1:A:81:ASP:C	1:A:83:LYS:N	0.42	2.72	13	1
1:A:143:ASP:N	1:A:143:ASP:OD1	0.42	2.51	9	1
1:A:72:PHE:C	1:A:74:ALA:N	0.42	2.72	17	2
1:A:50:THR:O	1:A:50:THR:CG2	0.42	2.66	5	1
1:A:15:GLU:O	1:A:18:LEU:HD23	0.42	2.14	15	1
1:A:165:LYS:HD3	1:A:165:LYS:N	0.42	2.30	15	1
1:A:52:TYR:CG	1:A:65:ALA:CB	0.42	3.02	3	1
1:A:119:ASN:OD1	1:A:119:ASN:N	0.42	2.52	21	1
1:A:100:LYS:NZ	1:A:100:LYS:HB3	0.42	2.29	9	1
1:A:154:ILE:O	1:A:155:TRP:C	0.42	2.58	2	3
1:A:16:LEU:O	1:A:17:GLN:C	0.42	2.56	15	3
1:A:40:SER:C	1:A:42:ARG:N	0.42	2.72	22	1
1:A:186:GLN:C	1:A:188:GLU:N	0.42	2.71	10	1
1:A:91:MET:SD	1:A:103:TRP:CG	0.42	3.13	3	1
1:A:81:ASP:C	1:A:83:LYS:H	0.42	2.18	13	1
1:A:101:LEU:O	1:A:102:GLU:C	0.42	2.57	9	1
1:A:181:ILE:CG2	1:A:181:ILE:O	0.42	2.66	19	1
1:A:20:THR:O	1:A:21:LYS:C	0.42	2.57	11	1
1:A:102:GLU:O	1:A:103:TRP:C	0.42	2.58	9	1
1:A:47:GLU:O	1:A:48:PHE:C	0.42	2.58	8	1
1:A:118:LYS:HD3	1:A:118:LYS:N	0.42	2.30	17	1
1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CD1	0.42	2.86	1	2
1:A:178:ASN:N	1:A:178:ASN:OD1	0.42	2.52	19	1
1:A:105:PHE:CD1	1:A:168:GLU:HG2	0.42	2.50	24	1
1:A:137:THR:C	1:A:140:LEU:HD21	0.42	2.35	10	2
1:A:136:ASP:O	1:A:139:HIS:N	0.42	2.47	10	2
1:A:81:ASP:C	1:A:81:ASP:OD1	0.42	2.58	13	1
1:A:19:ASN:HD22	1:A:90:HIS:CE1	0.42	2.33	11	1
1:A:81:ASP:O	1:A:84:GLU:N	0.42	2.51	4	1
1:A:31:TYR:CZ	1:A:32:GLN:CG	0.42	3.02	4	1
1:A:155:TRP:CE2	1:A:160:LYS:HB2	0.42	2.49	12	2
1:A:173:GLU:O	1:A:174:GLY:C	0.42	2.58	5	9
1:A:110:VAL:CG2	1:A:124:ILE:CD1	0.42	2.98	17	2
1:A:13:LEU:HD21	1:A:24:GLU:CB	0.42	2.45	5	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:160:LYS:HZ3	1:A:160:LYS:HB2	0.42	1.74	2	2
1:A:49:GLN:HE21	1:A:66:GLN:NE2	0.42	2.12	24	1
1:A:56:PHE:CZ	1:A:188:GLU:CD	0.42	2.93	1	1
1:A:13:LEU:HD11	1:A:24:GLU:HB2	0.42	1.91	24	1
1:A:16:LEU:O	1:A:18:LEU:HD23	0.42	2.15	13	1
1:A:182:LEU:HD13	1:A:182:LEU:O	0.42	2.15	23	1
1:A:31:TYR:CZ	1:A:35:LEU:HD12	0.42	2.49	11	1
1:A:173:GLU:C	1:A:175:THR:H	0.42	2.19	20	4
1:A:55:PHE:O	1:A:56:PHE:CD2	0.42	2.73	5	1
1:A:183:ARG:NH2	1:A:186:GLN:HE22	0.42	2.12	2	2
1:A:109:ASP:O	1:A:110:VAL:C	0.42	2.57	2	7
1:A:105:PHE:CD1	1:A:168:GLU:HB3	0.42	2.49	18	1
1:A:10:LYS:HD2	1:A:10:LYS:N	0.42	2.28	19	1
1:A:8:LEU:CD1	1:A:8:LEU:O	0.42	2.67	1	1
1:A:55:PHE:C	1:A:56:PHE:CD1	0.41	2.93	9	1
1:A:155:TRP:HA	1:A:157:PHE:CE1	0.41	2.50	2	2
1:A:81:ASP:O	1:A:82:PHE:C	0.41	2.59	18	3
1:A:159:GLY:O	1:A:160:LYS:C	0.41	2.57	22	2
1:A:71:SER:OG	1:A:72:PHE:N	0.41	2.53	1	1
1:A:137:THR:HG1	1:A:137:THR:H	0.41	1.52	8	1
1:A:105:PHE:CZ	1:A:168:GLU:N	0.41	2.88	2	2
1:A:56:PHE:CZ	1:A:188:GLU:CG	0.41	3.03	1	1
1:A:142:GLU:O	1:A:149:LYS:NZ	0.41	2.54	13	1
1:A:174:GLY:O	1:A:181:ILE:HD12	0.41	2.15	23	1
1:A:142:GLU:OE2	1:A:145:ASN:ND2	0.41	2.53	23	1
1:A:100:LYS:HZ2	1:A:100:LYS:HB3	0.41	1.73	9	1
1:A:42:ARG:CB	1:A:42:ARG:CZ	0.41	2.97	20	1
1:A:21:LYS:HD2	1:A:23:THR:H	0.41	1.74	22	1
1:A:8:LEU:H	1:A:8:LEU:HD23	0.41	1.75	19	1
1:A:69:PHE:CZ	1:A:73:ASP:CG	0.41	2.93	21	2
1:A:19:ASN:O	1:A:20:THR:C	0.41	2.58	24	1
1:A:186:GLN:O	1:A:187:PHE:C	0.41	2.58	10	1
1:A:19:ASN:OD1	1:A:20:THR:N	0.41	2.54	6	1
1:A:111:ASP:OD2	1:A:112:GLY:N	0.41	2.53	2	2
1:A:105:PHE:CB	1:A:168:GLU:OE2	0.41	2.68	19	1
1:A:61:PRO:O	1:A:65:ALA:HB2	0.41	2.16	15	1
1:A:13:LEU:O	1:A:14:GLU:C	0.41	2.58	3	1
1:A:22:PHE:O	1:A:23:THR:CG2	0.41	2.67	3	1
1:A:169:LYS:HB3	1:A:169:LYS:HZ2	0.41	1.75	21	1
1:A:90:HIS:C	1:A:92:THR:H	0.41	2.17	7	1
1:A:32:GLN:O	1:A:33:SER:C	0.41	2.59	17	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:139:HIS:O	1:A:140:LEU:C	0.41	2.58	23	3
1:A:100:LYS:NZ	1:A:187:PHE:CE1	0.41	2.85	24	1
1:A:155:TRP:CZ2	1:A:160:LYS:HG3	0.41	2.49	15	1
1:A:184:LEU:CD2	1:A:184:LEU:C	0.41	2.89	23	1
1:A:137:THR:O	1:A:137:THR:CG2	0.41	2.68	11	1
1:A:185:ILE:O	1:A:187:PHE:CE1	0.41	2.74	4	1
1:A:91:MET:SD	1:A:100:LYS:HD3	0.41	2.55	9	1
1:A:181:ILE:O	1:A:181:ILE:HG22	0.41	2.16	8	1
1:A:132:ILE:HG22	1:A:133:SER:N	0.41	2.31	5	1
1:A:185:ILE:HG23	1:A:186:GLN:N	0.41	2.29	21	2
1:A:61:PRO:O	1:A:62:LYS:C	0.41	2.59	22	1
1:A:111:ASP:C	1:A:111:ASP:OD1	0.41	2.59	19	1
1:A:58:GLU:HG3	1:A:59:ALA:N	0.41	2.30	13	1
1:A:102:GLU:CD	1:A:102:GLU:N	0.41	2.73	21	1
1:A:49:GLN:OE1	1:A:50:THR:N	0.41	2.54	2	2
1:A:72:PHE:CE2	1:A:84:GLU:HG2	0.41	2.51	24	1
1:A:187:PHE:O	1:A:187:PHE:CG	0.41	2.74	3	1
1:A:19:ASN:ND2	1:A:94:ALA:CB	0.41	2.82	4	1
1:A:101:LEU:O	1:A:104:ALA:CB	0.41	2.69	12	1
1:A:13:LEU:HD11	1:A:24:GLU:CB	0.41	2.46	18	1
1:A:119:ASN:ND2	1:A:120:GLU:HG3	0.41	2.31	10	1
1:A:109:ASP:C	1:A:111:ASP:H	0.41	2.18	13	1
1:A:147:PRO:O	1:A:150:ARG:N	0.41	2.53	13	1
1:A:77:ASP:OD2	1:A:78:GLY:N	0.41	2.53	23	1
1:A:69:PHE:CE2	1:A:80:LEU:CD2	0.41	3.03	7	1
1:A:80:LEU:CD2	1:A:80:LEU:N	0.41	2.82	7	1
1:A:71:SER:OG	1:A:107:LEU:N	0.41	2.54	4	1
1:A:124:ILE:CD1	1:A:124:ILE:N	0.41	2.84	9	2
1:A:85:TYR:CE1	1:A:89:LEU:HD21	0.41	2.51	9	1
1:A:73:ASP:O	1:A:75:ASN:CG	0.41	2.60	8	1
1:A:27:LEU:H	1:A:27:LEU:HD12	0.41	1.76	17	1
1:A:137:THR:CG2	1:A:137:THR:O	0.41	2.69	5	1
1:A:170:GLU:O	1:A:171:PHE:C	0.41	2.60	23	3
1:A:62:LYS:NZ	1:A:62:LYS:CB	0.41	2.84	2	1
1:A:19:ASN:C	1:A:21:LYS:H	0.41	2.19	18	1
1:A:165:LYS:HD2	1:A:165:LYS:N	0.41	2.31	20	1
1:A:62:LYS:CB	1:A:62:LYS:NZ	0.41	2.84	16	1
1:A:19:ASN:HB2	1:A:90:HIS:CD2	0.41	2.51	10	1
1:A:179:LYS:HD3	1:A:179:LYS:H	0.41	1.76	13	1
1:A:181:ILE:O	1:A:185:ILE:N	0.41	2.40	23	1
1:A:56:PHE:CD2	1:A:61:PRO:CG	0.41	3.04	23	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:LEU:HD13	1:A:27:LEU:H	0.41	1.76	11	1
1:A:56:PHE:CD1	1:A:131:MET:HE2	0.41	2.51	21	1
1:A:30:TRP:C	1:A:32:GLN:N	0.41	2.74	4	1
1:A:117:SER:O	1:A:118:LYS:C	0.41	2.59	8	2
1:A:52:TYR:O	1:A:53:SER:C	0.41	2.60	2	2
1:A:182:LEU:O	1:A:182:LEU:HD13	0.41	2.15	22	1
1:A:62:LYS:N	1:A:62:LYS:HD2	0.41	2.31	15	1
1:A:22:PHE:C	1:A:23:THR:HG1	0.40	2.20	22	1
1:A:10:LYS:HD3	1:A:10:LYS:H	0.40	1.76	19	1
1:A:34:PHE:CE2	1:A:38:CYS:HB3	0.40	2.51	3	1
1:A:89:LEU:O	1:A:90:HIS:C	0.40	2.59	12	1
1:A:70:ARG:N	1:A:70:ARG:CD	0.40	2.84	17	1
1:A:135:GLU:C	1:A:135:GLU:OE2	0.40	2.59	20	1
1:A:19:ASN:CG	1:A:20:THR:N	0.40	2.74	19	1
1:A:127:ALA:O	1:A:128:ILE:C	0.40	2.59	23	2
1:A:40:SER:O	1:A:41:GLY:C	0.40	2.60	3	1
1:A:55:PHE:CD1	1:A:55:PHE:N	0.40	2.83	11	1
1:A:177:ALA:O	1:A:178:ASN:C	0.40	2.59	21	1
1:A:171:PHE:CZ	1:A:185:ILE:HD13	0.40	2.50	4	1
1:A:30:TRP:C	1:A:30:TRP:CD1	0.40	2.93	4	1
1:A:134:PRO:O	1:A:135:GLU:C	0.40	2.59	4	1
1:A:18:LEU:CG	1:A:19:ASN:N	0.40	2.85	8	1
1:A:69:PHE:CD1	1:A:80:LEU:CD1	0.40	3.05	1	1
1:A:87:ILE:O	1:A:91:MET:CG	0.40	2.69	1	1
1:A:14:GLU:OE1	1:A:14:GLU:C	0.40	2.60	24	1
1:A:45:ARG:CD	1:A:69:PHE:CG	0.40	3.03	10	1
1:A:58:GLU:HG3	1:A:59:ALA:H	0.40	1.76	13	1
1:A:46:GLN:C	1:A:46:GLN:CD	0.40	2.80	12	1
1:A:107:LEU:HD13	1:A:108:TYR:CA	0.40	2.46	1	1
1:A:143:ASP:O	1:A:144:GLU:CG	0.40	2.69	24	1
1:A:91:MET:O	1:A:92:THR:C	0.40	2.59	3	1
1:A:92:THR:CG2	1:A:93:SER:N	0.40	2.84	23	1
1:A:49:GLN:OE1	1:A:66:GLN:CD	0.40	2.60	11	1
1:A:104:ALA:O	1:A:105:PHE:C	0.40	2.60	21	1
1:A:187:PHE:CD2	1:A:187:PHE:O	0.40	2.75	12	1
1:A:107:LEU:CD1	1:A:108:TYR:N	0.40	2.82	5	1
1:A:184:LEU:O	1:A:185:ILE:C	0.40	2.59	20	1
1:A:24:GLU:O	1:A:25:GLU:C	0.40	2.60	22	1
1:A:142:GLU:O	1:A:143:ASP:CG	0.40	2.59	24	1
1:A:122:LEU:C	1:A:122:LEU:CD1	0.40	2.89	6	1
1:A:139:HIS:ND1	1:A:139:HIS:N	0.40	2.68	13	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:123:GLU:CD	1:A:123:GLU:N	0.40	2.71	23	1
1:A:142:GLU:O	1:A:142:GLU:CD	0.40	2.60	21	1
1:A:155:TRP:CE2	1:A:160:LYS:HG3	0.40	2.52	4	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	173/201 (86%)	119±6 (69±4%)	36±6 (21±4%)	18±3 (10±2%)	<b>1</b>	<b>10</b>
All	All	4152/4824 (86%)	2852 (69%)	869 (21%)	431 (10%)	<b>1</b>	<b>10</b>

All 80 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	16	LEU	20
1	A	9	SER	17
1	A	61	PRO	15
1	A	23	THR	15
1	A	185	ILE	15
1	A	143	ASP	14
1	A	100	LYS	14
1	A	70	ARG	14
1	A	24	GLU	13
1	A	177	ALA	13
1	A	59	ALA	10
1	A	58	GLU	10
1	A	8	LEU	10
1	A	39	PRO	10
1	A	41	GLY	9
1	A	160	LYS	9
1	A	171	PHE	9
1	A	110	VAL	8
1	A	93	SER	8

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	40	SER	8
1	A	21	LYS	8
1	A	105	PHE	7
1	A	7	ALA	7
1	A	27	LEU	7
1	A	57	PRO	7
1	A	182	LEU	7
1	A	137	THR	6
1	A	164	ASP	6
1	A	69	PHE	6
1	A	52	TYR	6
1	A	19	ASN	5
1	A	68	VAL	5
1	A	154	ILE	5
1	A	76	SER	5
1	A	18	LEU	4
1	A	180	GLU	4
1	A	186	GLN	4
1	A	142	GLU	4
1	A	94	ALA	4
1	A	92	THR	4
1	A	147	PRO	4
1	A	33	SER	4
1	A	74	ALA	4
1	A	144	GLU	3
1	A	187	PHE	3
1	A	55	PHE	3
1	A	10	LYS	3
1	A	174	GLY	3
1	A	20	THR	3
1	A	73	ASP	3
1	A	159	GLY	3
1	A	138	LYS	2
1	A	30	TRP	2
1	A	53	SER	2
1	A	157	PHE	2
1	A	17	GLN	2
1	A	78	GLY	2
1	A	183	ARG	2
1	A	112	GLY	2
1	A	101	LEU	2
1	A	86	VAL	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	22	PHE	2
1	A	29	SER	2
1	A	103	TRP	2
1	A	102	GLU	2
1	A	62	LYS	1
1	A	118	LYS	1
1	A	54	LYS	1
1	A	148	GLU	1
1	A	178	ASN	1
1	A	56	PHE	1
1	A	31	TYR	1
1	A	13	LEU	1
1	A	179	LYS	1
1	A	134	PRO	1
1	A	114	GLY	1
1	A	113	ASN	1
1	A	89	LEU	1
1	A	145	ASN	1
1	A	38	CYS	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	156/180 (87%)	131±4 (84±2%)	25±4 (16±2%)	7	44
All	All	3744/4320 (87%)	3147 (84%)	597 (16%)	7	44

All 117 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	146	THR	23
1	A	175	THR	17
1	A	23	THR	16
1	A	165	LYS	15
1	A	129	PHE	15
1	A	89	LEU	14

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	140	LEU	13
1	A	44	THR	13
1	A	79	THR	13
1	A	90	HIS	13
1	A	122	LEU	13
1	A	21	LYS	12
1	A	108	TYR	11
1	A	157	PHE	11
1	A	103	TRP	10
1	A	10	LYS	9
1	A	22	PHE	9
1	A	8	LEU	9
1	A	45	ARG	8
1	A	62	LYS	8
1	A	52	TYR	8
1	A	24	GLU	8
1	A	184	LEU	8
1	A	9	SER	8
1	A	133	SER	8
1	A	187	PHE	8
1	A	145	ASN	7
1	A	123	GLU	7
1	A	183	ARG	7
1	A	119	ASN	7
1	A	182	LEU	7
1	A	143	ASP	6
1	A	71	SER	6
1	A	149	LYS	6
1	A	19	ASN	6
1	A	167	THR	6
1	A	111	ASP	6
1	A	107	LEU	6
1	A	185	ILE	6
1	A	27	LEU	5
1	A	117	SER	5
1	A	188	GLU	5
1	A	18	LEU	5
1	A	186	GLN	5
1	A	137	THR	5
1	A	13	LEU	5
1	A	136	ASP	5
1	A	118	LYS	4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	170	GLU	4
1	A	58	GLU	4
1	A	138	LYS	4
1	A	101	LEU	4
1	A	178	ASN	4
1	A	36	LYS	4
1	A	92	THR	4
1	A	130	LYS	4
1	A	160	LYS	4
1	A	20	THR	4
1	A	93	SER	4
1	A	100	LYS	4
1	A	176	LEU	4
1	A	29	SER	4
1	A	70	ARG	4
1	A	153	LYS	4
1	A	102	GLU	3
1	A	31	TYR	3
1	A	25	GLU	3
1	A	115	THR	3
1	A	69	PHE	3
1	A	37	GLU	3
1	A	42	ARG	3
1	A	142	GLU	3
1	A	113	ASN	3
1	A	75	ASN	3
1	A	179	LYS	3
1	A	76	SER	3
1	A	38	CYS	3
1	A	46	GLN	3
1	A	40	SER	3
1	A	106	SER	3
1	A	11	GLU	3
1	A	50	THR	3
1	A	72	PHE	3
1	A	12	ILE	3
1	A	28	SER	2
1	A	15	GLU	2
1	A	49	GLN	2
1	A	158	PHE	2
1	A	131	MET	2
1	A	68	VAL	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	180	GLU	2
1	A	168	GLU	2
1	A	14	GLU	2
1	A	17	GLN	2
1	A	152	GLU	2
1	A	16	LEU	2
1	A	135	GLU	2
1	A	141	PRO	1
1	A	126	THR	1
1	A	26	GLU	1
1	A	32	GLN	1
1	A	164	ASP	1
1	A	56	PHE	1
1	A	54	LYS	1
1	A	139	HIS	1
1	A	109	ASP	1
1	A	124	ILE	1
1	A	148	GLU	1
1	A	60	ASP	1
1	A	144	GLU	1
1	A	77	ASP	1
1	A	53	SER	1
1	A	91	MET	1
1	A	150	ARG	1
1	A	61	PRO	1
1	A	57	PRO	1
1	A	33	SER	1

### 6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

### 6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no carbohydrates in this entry.

## 6.6 Ligand geometry

Of 3 ligands modelled in this entry, 2 are monoatomic - leaving 1 for Mogul analysis.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds that are observed in the model and the number of bonds that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond length is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length with  $|Z| > 2$  is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the average root-mean-square of all Z scores of the bond lengths.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths		
					Counts	RMSZ	#Z>2
3	MYR	A	502	1	14,14,15	0.48±0.01	0±0 (0±0%)

In the following table, the Counts columns list the number of angles for which Mogul statistics could be retrieved, the number of angles that are observed in the model and the number of angles that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond angle is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond angle with  $|Z| > 2$  is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the average root-mean-square of all Z scores of the bond angles.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond angles		
					Counts	RMSZ	#Z>2
3	MYR	A	502	1	13,13,15	1.04±0.01	0±0 (0±0%)

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the chemical component dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
3	MYR	A	502	1	-	0±0,11,12,13	0±0,0,0,0

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.



## 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

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 52% for the well-defined parts and 52% for the entire structure.

### 7.1 Chemical shift list 1

File name: BMRB entry 5332

Chemical shift list name: *assigned\_chem\_shift\_list\_1*

#### 7.1.1 Bookkeeping

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	1233
Number of shifts mapped to atoms	1233
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

#### 7.1.2 Chemical shift referencing

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction $\pm$ precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	185	$-0.21 \pm 0.05$	None needed ( $< 0.5$ ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	170	$0.22 \pm 0.07$	None needed ( $< 0.5$ ppm)
$^{13}\text{C}'$	168	$-0.21 \pm 0.06$	None needed ( $< 0.5$ ppm)
$^{15}\text{N}$	170	$0.64 \pm 0.20$	Should be applied

#### 7.1.3 Completeness of resonance assignments

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 52%, i.e. 1162 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2214. 0 out of 21 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	$^1\text{H}$	$^{13}\text{C}$	$^{15}\text{N}$
Backbone	783/858 (91%)	314/342 (92%)	316/348 (91%)	153/168 (91%)
Sidechain	379/1133 (33%)	225/665 (34%)	154/425 (36%)	0/43 (0%)

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

	Total	$^1\text{H}$	$^{13}\text{C}$	$^{15}\text{N}$
Aromatic	0/223 (0%)	0/120 (0%)	0/97 (0%)	0/6 (0%)
Overall	1162/2214 (52%)	539/1127 (48%)	470/870 (54%)	153/217 (71%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 52%, i.e. 1226 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2365. 0 out of 21 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	$^1\text{H}$	$^{13}\text{C}$	$^{15}\text{N}$
Backbone	831/928 (90%)	334/370 (90%)	335/376 (89%)	162/182 (89%)
Sidechain	395/1214 (33%)	235/713 (33%)	160/452 (35%)	0/49 (0%)
Aromatic	0/223 (0%)	0/120 (0%)	0/97 (0%)	0/6 (0%)
Overall	1226/2365 (52%)	569/1203 (47%)	495/925 (54%)	162/237 (68%)

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

There are no statistically unusual chemical shifts.

#### 7.1.5 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:

