



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 05:13 PM BST

PDB ID : 1T0V  
Title : NMR Solution Structure of the Engineered Lipocalin FluA(R95K) Northeast Structural Genomics Target OR17  
Authors : Mills, J.L.; Liu, G.; Skerra, A.; Szyperski, T.; Northeast Structural Genomics Consortium (NESG)  
Deposited on : 2004-04-13

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 : unknown  
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

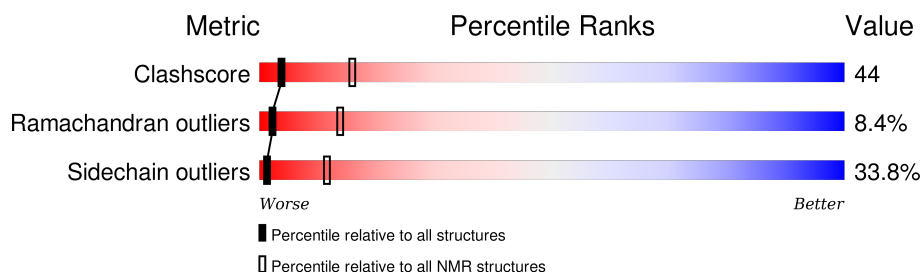
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

The overall completeness of chemical shifts assignment 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	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	184	

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 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:2-A:172 (171)	0.60	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 3 clusters. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 3, 5, 7, 8, 10, 12, 13, 14, 18, 20
2	4, 6, 9, 11, 15, 17
3	16, 19

### 3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2908 atoms, of which 1423 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called BILIN-BINDING PROTEIN.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	184	Total	C	H	N	O	S	0
			2908	950	1423	248	281	6	

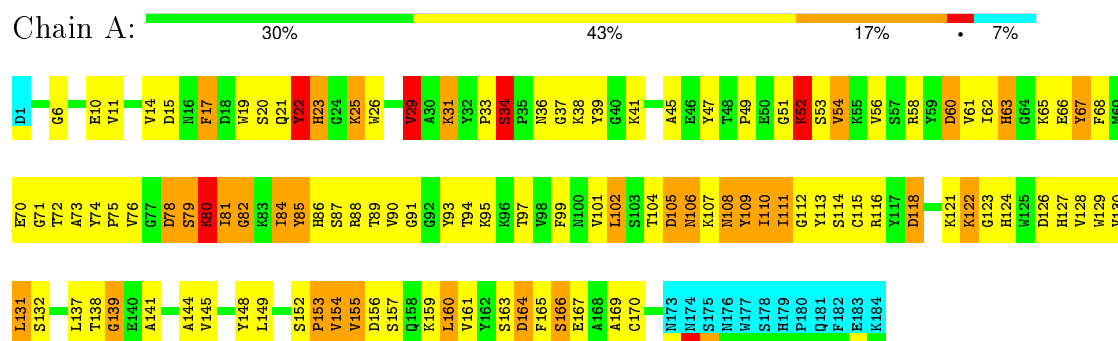
There are 30 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1	ASP	ASN	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	21	GLN	ASN	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	34	SER	ASN	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	35	PRO	SER	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	36	ASN	VAL	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	37	GLY	GLU	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	58	ARG	ASN	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	60	ASP	HIS	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	69	MET	ILE	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	87	SER	LYS	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	88	ARG	LEU	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	90	VAL	TYR	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	93	TYR	VAL	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	96	LYS	GLU	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	97	THR	ASN	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	114	SER	TYR	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	116	ARG	LYS	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	125	TRP	GLN	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	127	HIS	PHE	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	135	MET	LYS	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	175	SER	-	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	176	ASN	-	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	177	TRP	-	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	178	SER	-	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	179	HIS	-	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	180	PRO	-	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	181	GLN	-	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	182	PHE	-	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	183	GLU	-	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	184	LYS	-	SEE REMARK 999	UNP P09464



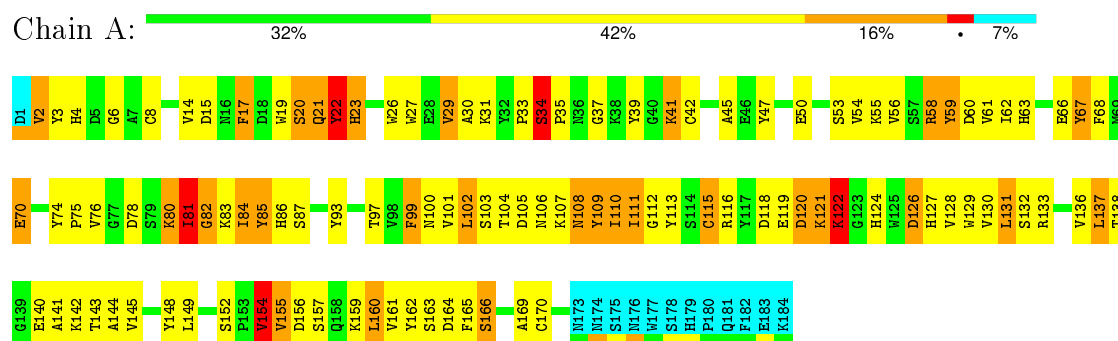
## 4.2.2 Score per residue for model 2

### • Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



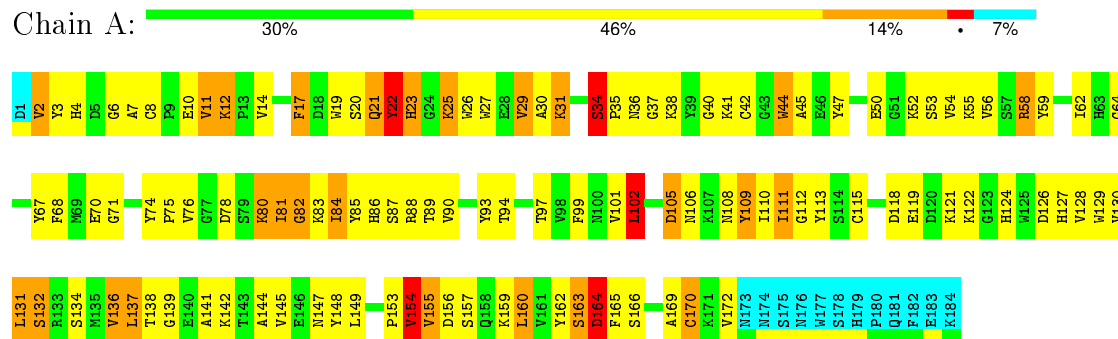
## 4.2.3 Score per residue for model 3

### • Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



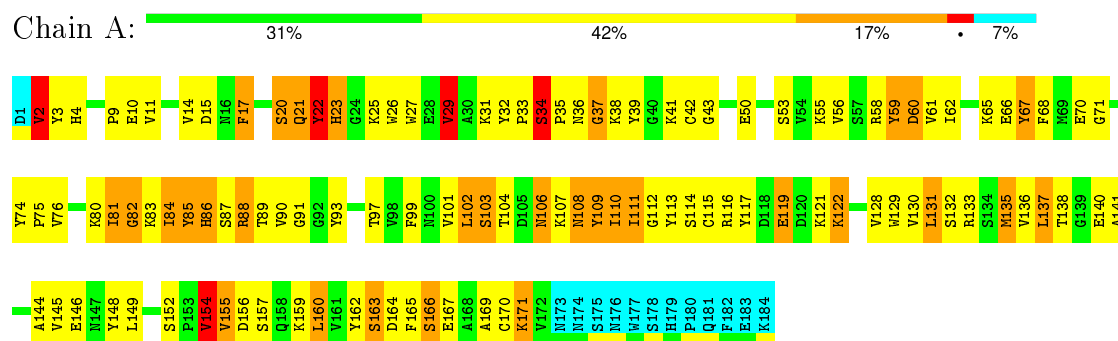
## 4.2.4 Score per residue for model 4

### • Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



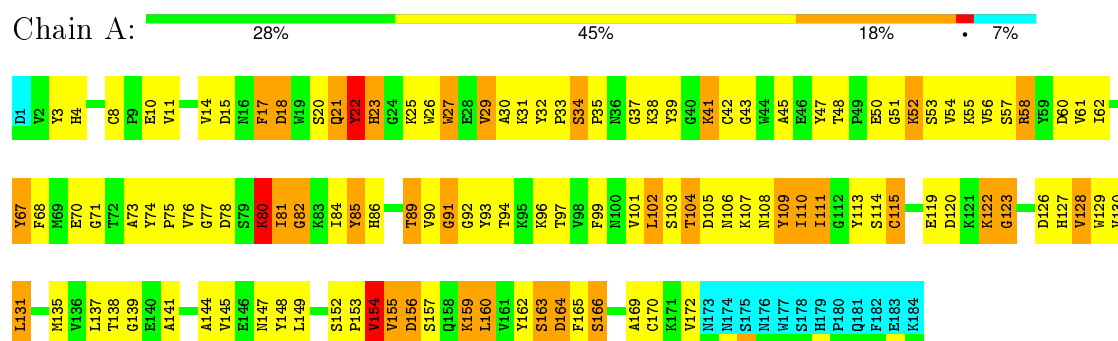
#### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



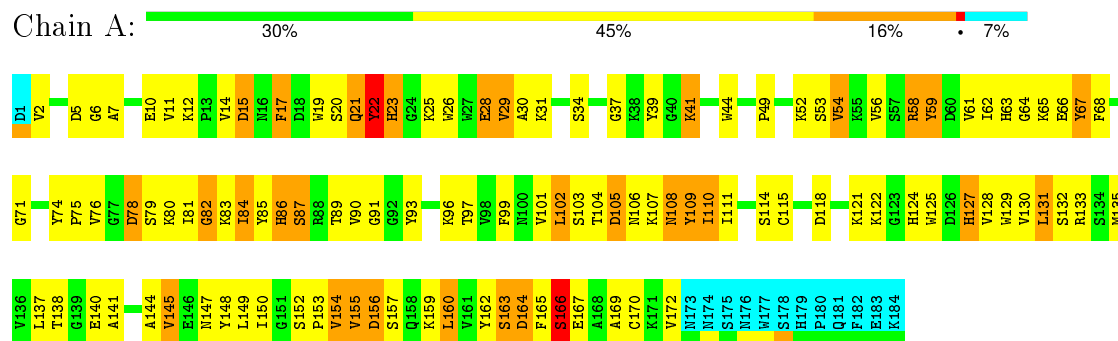
#### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



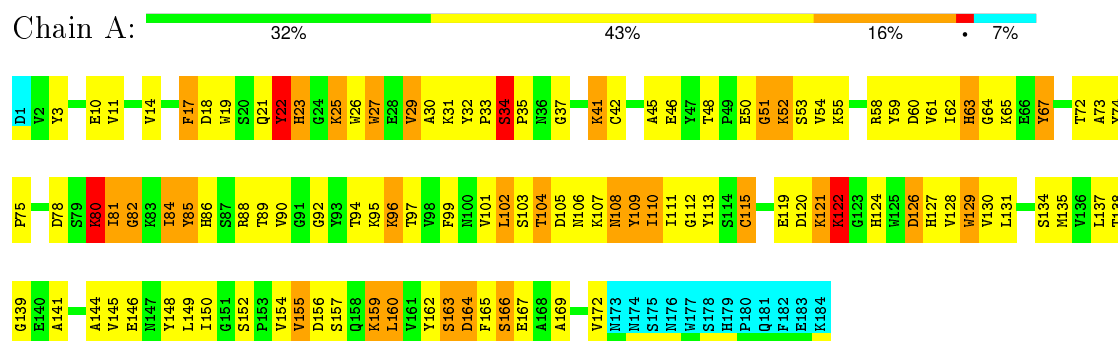
#### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



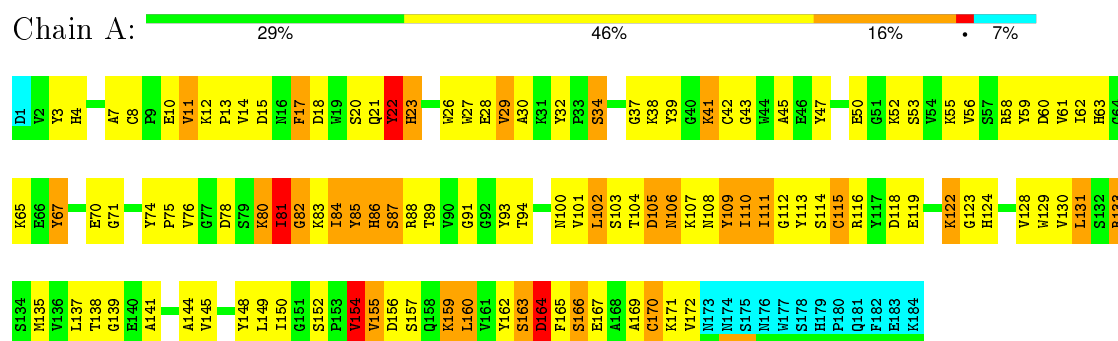
#### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



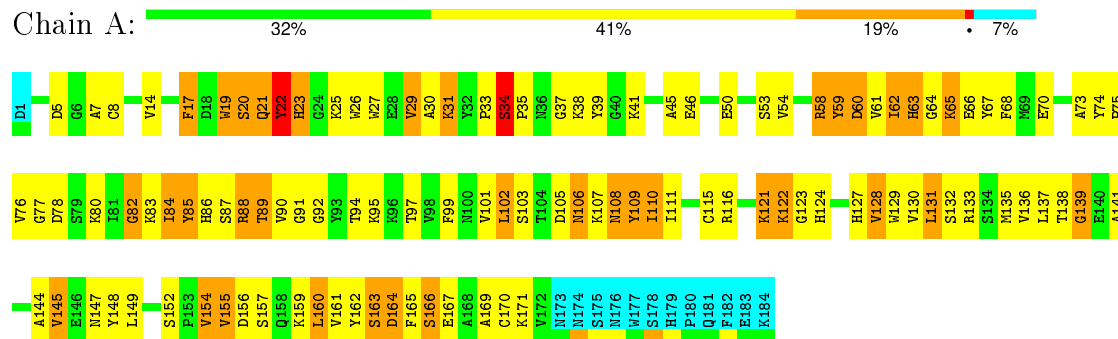
#### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



#### 4.2.10 Score per residue for model 10 (medoid)

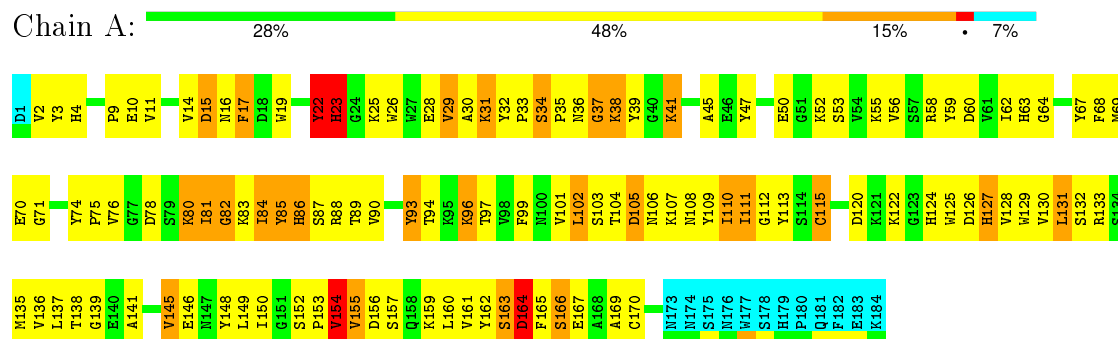
- Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN





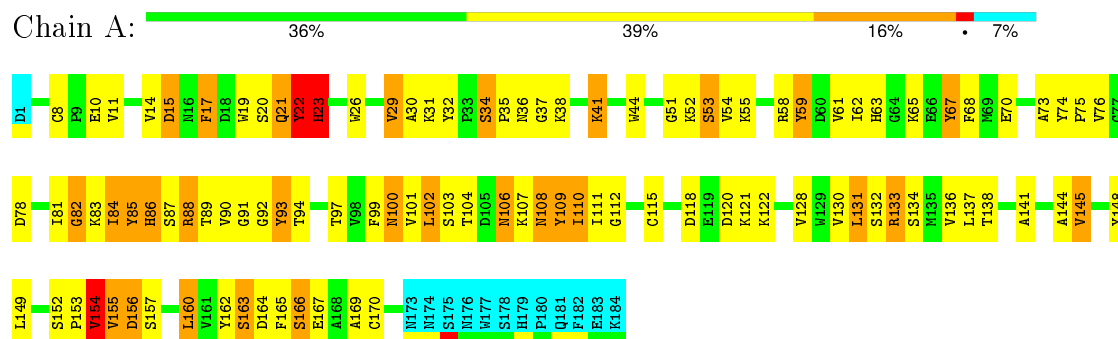
#### 4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



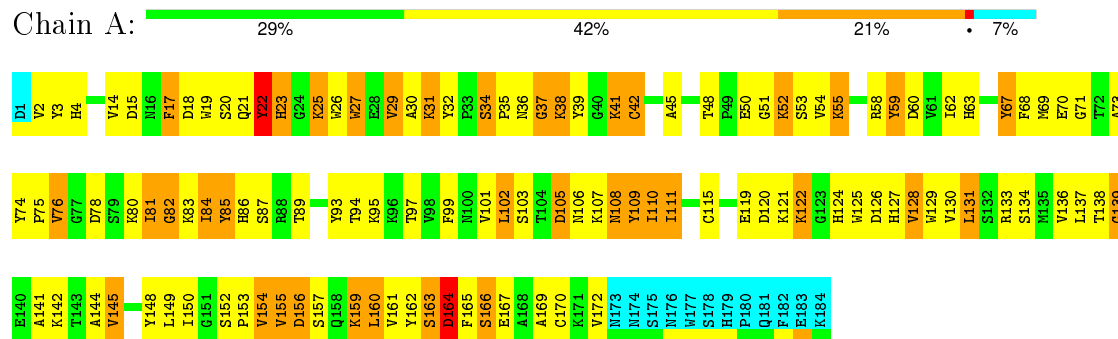
#### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



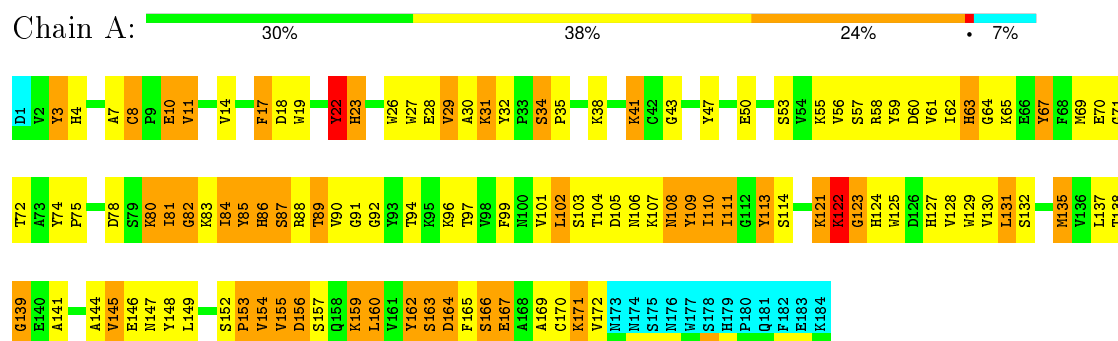
#### 4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



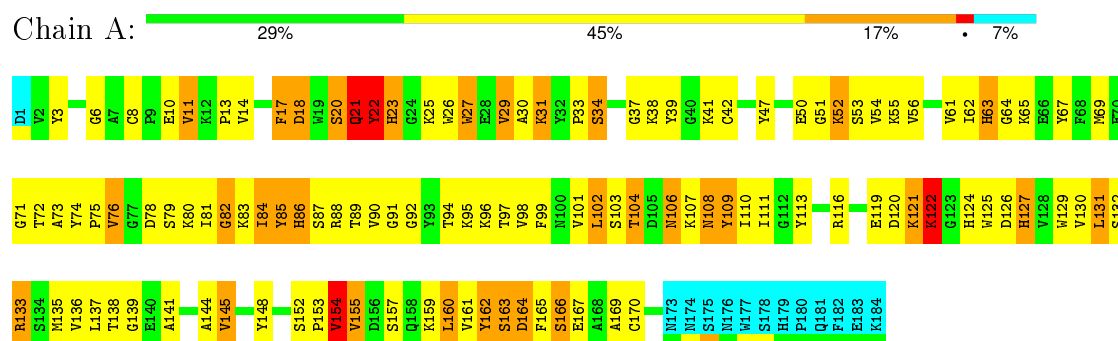
### 4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



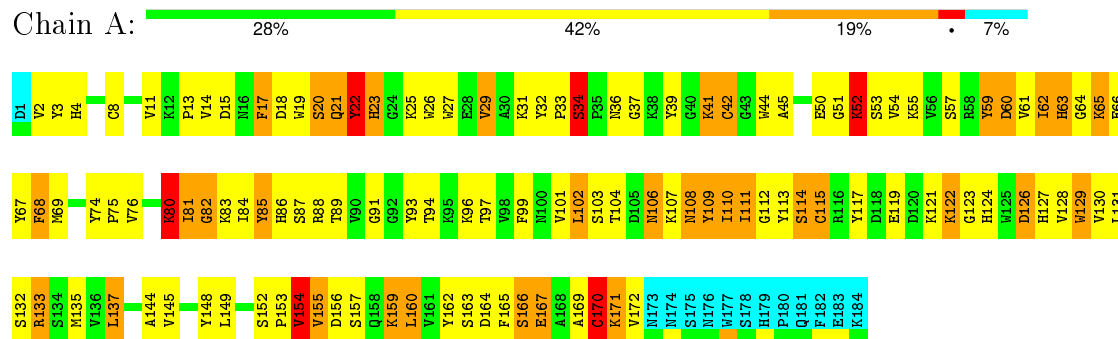
### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



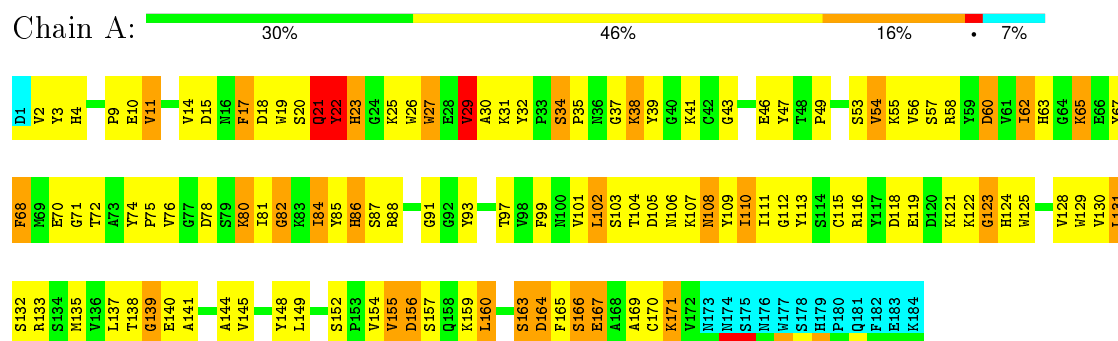
### 4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



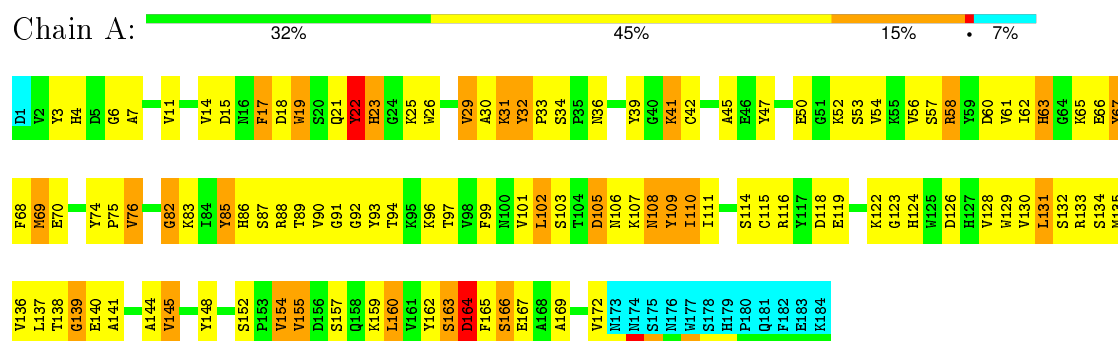
### 4.2.17 Score per residue for model 17

#### • Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



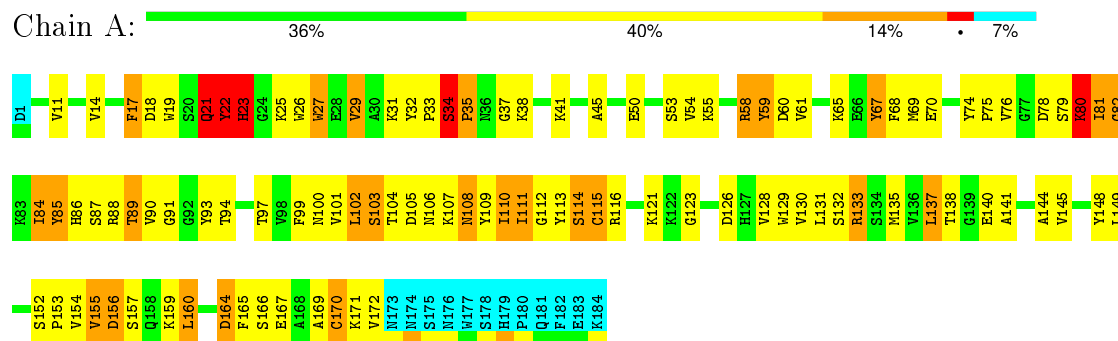
### 4.2.18 Score per residue for model 18

#### • Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



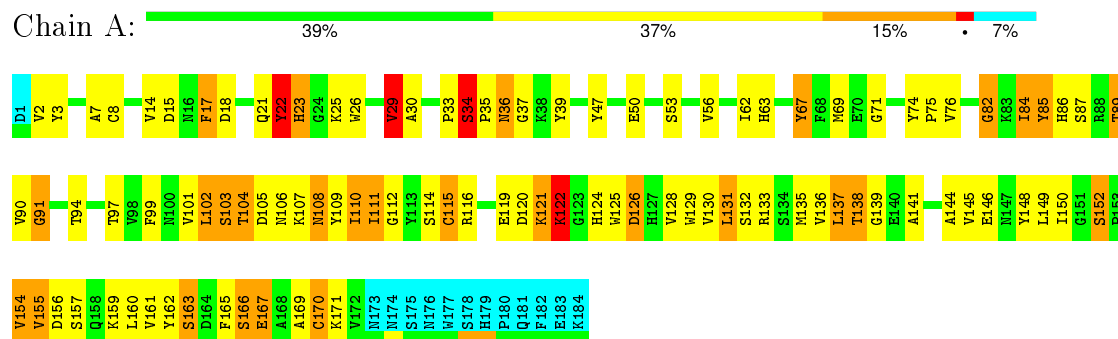
### 4.2.19 Score per residue for model 19

#### • Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



## 4.2.20 Score per residue for model 20

### • Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



## 5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *torsion angle dynamics and simulated annealing (DYANA)*.

Of the 100 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *target function*.

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

Software name	Classification	Version
DYANA	structure solution	1.5
DYANA	refinement	1.5

No chemical shift data was provided. No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.

## 6 Model quality ⓘ

### 6.1 Standard geometry ⓘ

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

### 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	1372	1329	1304	118±10
All	All	27440	26580	26080	2354

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 44.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:109:TYR:CE2	1:A:145:VAL:HG23	1.06	1.85	11	2
1:A:62:ILE:HD12	1:A:67:TYR:CD1	1.02	1.90	10	6
1:A:148:TYR:CZ	1:A:155:VAL:HG11	1.00	1.92	1	12
1:A:62:ILE:HD12	1:A:67:TYR:CG	0.97	1.94	17	18
1:A:14:VAL:HG21	1:A:17:PHE:CD2	0.97	1.95	7	6
1:A:29:VAL:HG23	1:A:130:VAL:HG12	0.95	1.39	1	17
1:A:130:VAL:C	1:A:131:LEU:HD23	0.94	1.83	20	19
1:A:109:TYR:CE1	1:A:144:ALA:HB1	0.94	1.96	16	18
1:A:14:VAL:HG21	1:A:17:PHE:CD1	0.94	1.97	5	2
1:A:155:VAL:HG22	1:A:160:LEU:HD11	0.93	1.41	1	15
1:A:155:VAL:CG2	1:A:160:LEU:HD11	0.92	1.94	3	19
1:A:89:THR:HG22	1:A:94:THR:OG1	0.90	1.65	8	13
1:A:26:TRP:CZ3	1:A:110:ILE:HD12	0.90	2.02	17	18
1:A:112:GLY:O	1:A:128:VAL:HG23	0.89	1.67	16	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:PHE:CZ	1:A:104:THR:HG21	0.88	2.04	17	3
1:A:39:TYR:O	1:A:62:ILE:HG23	0.88	1.67	7	4
1:A:109:TYR:CE1	1:A:130:VAL:HG13	0.87	2.04	11	1
1:A:86:HIS:O	1:A:97:THR:HG22	0.86	1.70	6	4
1:A:149:LEU:CD2	1:A:155:VAL:HG11	0.86	2.01	19	1
1:A:11:VAL:HG21	1:A:113:TYR:CE1	0.86	2.06	14	1
1:A:131:LEU:HD23	1:A:131:LEU:N	0.85	1.86	9	5
1:A:29:VAL:HG11	1:A:137:LEU:HG	0.85	1.48	13	11
1:A:17:PHE:CE1	1:A:104:THR:HG21	0.84	2.07	11	7
1:A:137:LEU:HD11	1:A:145:VAL:HG21	0.84	1.48	9	6
1:A:17:PHE:CZ	1:A:22:TYR:CE2	0.83	2.66	11	13
1:A:149:LEU:HD22	1:A:157:SER:HB3	0.82	1.50	9	9
1:A:17:PHE:CZ	1:A:22:TYR:CD2	0.81	2.69	17	9
1:A:148:TYR:CE1	1:A:155:VAL:HG11	0.80	2.11	6	2
1:A:154:VAL:O	1:A:155:VAL:HG23	0.80	1.77	19	1
1:A:148:TYR:OH	1:A:155:VAL:HG11	0.80	1.75	3	8
1:A:109:TYR:CD2	1:A:145:VAL:HG23	0.80	2.11	8	13
1:A:99:PHE:CD1	1:A:129:TRP:CZ2	0.80	2.69	19	7
1:A:112:GLY:C	1:A:128:VAL:HG21	0.80	1.95	9	2
1:A:109:TYR:CD2	1:A:145:VAL:HG22	0.80	2.12	9	2
1:A:99:PHE:CE2	1:A:129:TRP:CZ2	0.80	2.69	16	3
1:A:59:TYR:CD2	1:A:68:PHE:CD1	0.79	2.70	16	7
1:A:54:VAL:HG22	1:A:73:ALA:HB3	0.79	1.55	15	3
1:A:99:PHE:CZ	1:A:101:VAL:HG22	0.79	2.13	12	3
1:A:131:LEU:N	1:A:131:LEU:HD23	0.79	1.91	20	12
1:A:29:VAL:CG2	1:A:130:VAL:HG12	0.79	2.08	11	13
1:A:99:PHE:CE2	1:A:129:TRP:CE2	0.78	2.71	3	2
1:A:26:TRP:CH2	1:A:110:ILE:HD12	0.78	2.14	13	16
1:A:109:TYR:CE2	1:A:145:VAL:CG2	0.78	2.67	20	2
1:A:10:GLU:O	1:A:11:VAL:HG13	0.77	1.79	17	12
1:A:47:TYR:CD2	1:A:56:VAL:HG22	0.77	2.13	14	11
1:A:109:TYR:CZ	1:A:145:VAL:HG23	0.77	2.14	11	1
1:A:17:PHE:CE1	1:A:22:TYR:CD2	0.77	2.73	20	14
1:A:99:PHE:CZ	1:A:129:TRP:CD2	0.77	2.73	3	2
1:A:99:PHE:CZ	1:A:129:TRP:CE2	0.76	2.73	8	7
1:A:108:ASN:CG	1:A:141:ALA:HB2	0.76	1.99	15	3
1:A:157:SER:HA	1:A:160:LEU:HD12	0.76	1.58	6	19
1:A:109:TYR:HB2	1:A:137:LEU:HD21	0.76	1.57	20	7
1:A:109:TYR:CD2	1:A:137:LEU:HD11	0.76	2.15	20	1
1:A:99:PHE:CZ	1:A:129:TRP:CZ2	0.76	2.74	8	2
1:A:111:ILE:HD11	1:A:148:TYR:CE2	0.75	2.16	18	13

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:61:VAL:HG21	1:A:172:VAL:HG22	0.75	1.58	18	1
1:A:111:ILE:HD11	1:A:148:TYR:CD2	0.74	2.17	3	11
1:A:108:ASN:OD1	1:A:141:ALA:HB2	0.74	1.82	3	1
1:A:99:PHE:CE1	1:A:129:TRP:CE2	0.74	2.76	17	7
1:A:153:PRO:O	1:A:154:VAL:HG13	0.73	1.83	4	8
1:A:99:PHE:CD1	1:A:129:TRP:CH2	0.73	2.77	11	6
1:A:138:THR:O	1:A:141:ALA:HB3	0.73	1.83	19	19
1:A:26:TRP:CH2	1:A:110:ILE:CD1	0.72	2.73	10	3
1:A:113:TYR:HA	1:A:128:VAL:HG22	0.72	1.61	8	2
1:A:26:TRP:CZ3	1:A:110:ILE:CD1	0.72	2.73	11	6
1:A:109:TYR:CE2	1:A:111:ILE:HD12	0.71	2.19	11	1
1:A:112:GLY:O	1:A:128:VAL:HG21	0.71	1.84	9	4
1:A:14:VAL:HG13	1:A:101:VAL:O	0.71	1.84	5	4
1:A:99:PHE:CG	1:A:129:TRP:CZ2	0.71	2.78	11	4
1:A:155:VAL:HG13	1:A:160:LEU:HD11	0.71	1.62	19	1
1:A:47:TYR:CD2	1:A:56:VAL:CG2	0.70	2.74	11	5
1:A:17:PHE:CE2	1:A:101:VAL:HG11	0.70	2.21	6	7
1:A:54:VAL:CG2	1:A:73:ALA:HB3	0.70	2.16	8	5
1:A:99:PHE:CZ	1:A:129:TRP:CE3	0.70	2.80	3	1
1:A:62:ILE:CD1	1:A:67:TYR:CD1	0.69	2.74	10	3
1:A:111:ILE:CD1	1:A:148:TYR:CD2	0.69	2.76	3	6
1:A:61:VAL:HG13	1:A:66:GLU:OE1	0.69	1.87	10	1
1:A:109:TYR:CE1	1:A:111:ILE:HD12	0.68	2.23	20	1
1:A:155:VAL:O	1:A:155:VAL:HG13	0.68	1.87	12	3
1:A:99:PHE:CE1	1:A:129:TRP:CZ2	0.68	2.81	14	5
1:A:26:TRP:CE3	1:A:110:ILE:HD12	0.68	2.24	15	3
1:A:137:LEU:HD23	1:A:141:ALA:HB1	0.68	1.64	13	1
1:A:145:VAL:HG12	1:A:149:LEU:CD1	0.67	2.20	9	3
1:A:22:TYR:CD1	1:A:110:ILE:HD11	0.67	2.25	1	7
1:A:170:CYS:O	1:A:172:VAL:HG23	0.67	1.90	4	5
1:A:62:ILE:HD12	1:A:67:TYR:CE1	0.67	2.25	18	1
1:A:47:TYR:CE2	1:A:56:VAL:HG21	0.67	2.24	11	5
1:A:109:TYR:CD2	1:A:145:VAL:CG2	0.67	2.77	2	9
1:A:104:THR:HG23	1:A:106:ASN:OD1	0.66	1.90	11	6
1:A:89:THR:HG22	1:A:94:THR:HG23	0.66	1.66	19	4
1:A:22:TYR:CD1	1:A:110:ILE:CD1	0.66	2.78	1	8
1:A:76:VAL:HG23	1:A:85:TYR:HB3	0.66	1.66	12	13
1:A:11:VAL:HG21	1:A:113:TYR:CD1	0.66	2.26	14	1
1:A:109:TYR:CE1	1:A:144:ALA:CB	0.66	2.78	5	13
1:A:54:VAL:HG23	1:A:73:ALA:HB3	0.66	1.68	2	2
1:A:23:HIS:O	1:A:26:TRP:CD1	0.66	2.49	11	14

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:GLY:O	1:A:128:VAL:HG13	0.66	1.90	12	5
1:A:62:ILE:O	1:A:64:GLY:N	0.66	2.29	16	2
1:A:109:TYR:CE2	1:A:111:ILE:HD13	0.66	2.25	12	7
1:A:137:LEU:CD1	1:A:145:VAL:HG21	0.65	2.20	11	4
1:A:22:TYR:O	1:A:22:TYR:CG	0.65	2.49	4	11
1:A:108:ASN:HB2	1:A:141:ALA:HB2	0.65	1.67	10	12
1:A:61:VAL:HG12	1:A:66:GLU:OE2	0.65	1.91	16	1
1:A:149:LEU:HD23	1:A:155:VAL:HG11	0.65	1.68	19	1
1:A:19:TRP:CE3	1:A:54:VAL:HG21	0.65	2.26	10	10
1:A:55:LYS:HG2	1:A:72:THR:HG22	0.65	1.65	8	1
1:A:109:TYR:HE1	1:A:130:VAL:HG13	0.65	1.50	11	1
1:A:14:VAL:HG13	1:A:101:VAL:HG12	0.65	1.69	19	10
1:A:11:VAL:HG21	1:A:113:TYR:CD2	0.65	2.26	17	1
1:A:74:TYR:CE1	1:A:75:PRO:O	0.65	2.50	14	19
1:A:99:PHE:CE1	1:A:129:TRP:CZ3	0.65	2.84	16	2
1:A:22:TYR:CD1	1:A:22:TYR:C	0.65	2.69	5	9
1:A:30:ALA:HB2	1:A:162:TYR:CD1	0.65	2.26	4	4
1:A:149:LEU:HD22	1:A:155:VAL:HG11	0.65	1.69	19	1
1:A:22:TYR:C	1:A:22:TYR:CD1	0.64	2.68	18	9
1:A:99:PHE:CE2	1:A:101:VAL:CG2	0.64	2.80	12	4
1:A:109:TYR:HE2	1:A:111:ILE:HD13	0.64	1.53	12	8
1:A:149:LEU:HD22	1:A:157:SER:CB	0.64	2.22	9	7
1:A:11:VAL:HG11	1:A:113:TYR:CD2	0.64	2.27	17	2
1:A:19:TRP:CZ3	1:A:54:VAL:HG21	0.64	2.28	2	3
1:A:39:TYR:CA	1:A:62:ILE:HG23	0.63	2.24	5	1
1:A:31:LYS:O	1:A:161:VAL:HG12	0.63	1.93	2	3
1:A:14:VAL:HG11	1:A:17:PHE:CD1	0.63	2.28	18	2
1:A:8:CYS:N	1:A:124:HIS:CE1	0.63	2.67	14	1
1:A:137:LEU:CD2	1:A:141:ALA:HB1	0.63	2.23	2	4
1:A:38:LYS:O	1:A:39:TYR:CD1	0.63	2.51	10	4
1:A:61:VAL:HG21	1:A:172:VAL:HG21	0.63	1.70	6	1
1:A:15:ASP:HA	1:A:81:ILE:HD13	0.63	1.70	2	8
1:A:39:TYR:N	1:A:62:ILE:HG23	0.63	2.08	5	2
1:A:22:TYR:CG	1:A:22:TYR:O	0.62	2.52	5	9
1:A:126:ASP:OD2	1:A:128:VAL:HG23	0.62	1.94	19	1
1:A:17:PHE:CE1	1:A:104:THR:CG2	0.62	2.83	17	4
1:A:7:ALA:C	1:A:124:HIS:CE1	0.62	2.72	14	2
1:A:62:ILE:HD12	1:A:67:TYR:CD2	0.62	2.29	11	7
1:A:6:GLY:O	1:A:124:HIS:CD2	0.62	2.53	4	5
1:A:131:LEU:N	1:A:131:LEU:CD2	0.62	2.63	1	12
1:A:17:PHE:CE2	1:A:101:VAL:HG21	0.62	2.30	14	7

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:PHE:CD2	1:A:129:TRP:CZ2	0.62	2.88	11	4
1:A:32:TYR:CD1	1:A:160:LEU:HD23	0.62	2.30	17	2
1:A:99:PHE:CE2	1:A:101:VAL:HG22	0.61	2.30	12	9
1:A:109:TYR:CE1	1:A:110:ILE:O	0.61	2.53	11	1
1:A:115:CYS:SG	1:A:124:HIS:CD2	0.61	2.93	11	2
1:A:84:ILE:HD12	1:A:84:ILE:H	0.61	1.54	11	9
1:A:113:TYR:CE1	1:A:154:VAL:HG23	0.61	2.30	2	5
1:A:137:LEU:O	1:A:137:LEU:HD12	0.61	1.96	16	2
1:A:109:TYR:C	1:A:109:TYR:CD1	0.61	2.73	7	3
1:A:149:LEU:HD22	1:A:155:VAL:CG1	0.61	2.25	19	1
1:A:104:THR:HG23	1:A:106:ASN:HD21	0.61	1.56	20	1
1:A:85:TYR:CD1	1:A:85:TYR:C	0.61	2.73	14	10
1:A:29:VAL:HG11	1:A:137:LEU:CG	0.61	2.25	13	3
1:A:31:LYS:C	1:A:160:LEU:HD23	0.61	2.16	14	3
1:A:99:PHE:CZ	1:A:129:TRP:NE1	0.60	2.69	14	5
1:A:118:ASP:OD1	1:A:125:TRP:CD1	0.60	2.54	7	1
1:A:7:ALA:O	1:A:124:HIS:CE1	0.60	2.53	4	5
1:A:109:TYR:HB2	1:A:137:LEU:HD23	0.60	1.72	16	1
1:A:109:TYR:CE2	1:A:145:VAL:HG22	0.60	2.30	9	2
1:A:32:TYR:CD1	1:A:160:LEU:CD2	0.60	2.85	17	2
1:A:17:PHE:CZ	1:A:101:VAL:HG11	0.60	2.31	15	5
1:A:49:PRO:HA	1:A:54:VAL:HG13	0.60	1.74	7	1
1:A:109:TYR:CD1	1:A:109:TYR:C	0.60	2.75	1	4
1:A:3:TYR:O	1:A:4:HIS:CD2	0.60	2.55	4	7
1:A:64:GLY:HA2	1:A:172:VAL:HG13	0.60	1.72	8	2
1:A:3:TYR:CG	1:A:3:TYR:O	0.60	2.55	8	1
1:A:131:LEU:CD2	1:A:131:LEU:N	0.60	2.60	9	3
1:A:109:TYR:CE2	1:A:130:VAL:CG1	0.60	2.84	20	1
1:A:109:TYR:CZ	1:A:145:VAL:CG2	0.60	2.85	20	1
1:A:109:TYR:O	1:A:109:TYR:CD1	0.60	2.55	10	4
1:A:165:PHE:CD1	1:A:166:SER:N	0.60	2.69	5	1
1:A:99:PHE:CE1	1:A:129:TRP:CD2	0.60	2.90	11	1
1:A:3:TYR:C	1:A:4:HIS:CD2	0.60	2.76	16	11
1:A:27:TRP:CZ2	1:A:43:GLY:O	0.60	2.55	14	3
1:A:86:HIS:CD2	1:A:88:ARG:NH1	0.60	2.70	5	1
1:A:41:LYS:CB	1:A:165:PHE:CD1	0.60	2.85	18	1
1:A:108:ASN:CB	1:A:141:ALA:HB2	0.60	2.26	4	9
1:A:113:TYR:CZ	1:A:154:VAL:CG2	0.60	2.85	19	4
1:A:109:TYR:HB3	1:A:141:ALA:HB1	0.60	1.74	4	3
1:A:26:TRP:CZ3	1:A:108:ASN:O	0.59	2.55	10	7
1:A:85:TYR:O	1:A:85:TYR:CD1	0.59	2.55	4	4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:145:VAL:O	1:A:149:LEU:HD12	0.59	1.98	12	1
1:A:152:SER:HB2	1:A:155:VAL:HG12	0.59	1.72	12	1
1:A:155:VAL:HG13	1:A:155:VAL:O	0.59	1.97	8	7
1:A:33:PRO:HA	1:A:39:TYR:CE1	0.59	2.32	16	3
1:A:62:ILE:HD12	1:A:67:TYR:CB	0.59	2.26	6	9
1:A:74:TYR:CD1	1:A:75:PRO:O	0.59	2.55	3	14
1:A:99:PHE:CG	1:A:129:TRP:CH2	0.59	2.90	11	2
1:A:33:PRO:HB3	1:A:161:VAL:HG11	0.59	1.74	3	1
1:A:45:ALA:HB2	1:A:58:ARG:HG3	0.59	1.73	3	7
1:A:11:VAL:HB	1:A:102:LEU:HD22	0.59	1.75	4	1
1:A:165:PHE:CG	1:A:166:SER:N	0.59	2.70	8	17
1:A:38:LYS:C	1:A:39:TYR:CD1	0.59	2.76	6	1
1:A:59:TYR:CD1	1:A:67:TYR:O	0.58	2.56	19	1
1:A:165:PHE:CD2	1:A:166:SER:N	0.58	2.71	16	6
1:A:21:GLN:HE22	1:A:106:ASN:ND2	0.58	1.96	15	2
1:A:38:LYS:O	1:A:39:TYR:CG	0.58	2.56	13	8
1:A:85:TYR:C	1:A:85:TYR:CD1	0.58	2.77	12	9
1:A:154:VAL:O	1:A:155:VAL:C	0.58	2.40	15	4
1:A:14:VAL:HG11	1:A:17:PHE:CE1	0.58	2.34	5	2
1:A:102:LEU:HD13	1:A:148:TYR:HE1	0.58	1.59	10	4
1:A:61:VAL:O	1:A:61:VAL:HG23	0.58	1.99	8	4
1:A:111:ILE:CD1	1:A:148:TYR:CE2	0.58	2.87	18	6
1:A:21:GLN:O	1:A:23:HIS:CD2	0.58	2.56	4	3
1:A:148:TYR:O	1:A:152:SER:N	0.57	2.37	19	5
1:A:17:PHE:HE2	1:A:101:VAL:HG21	0.57	1.56	2	11
1:A:148:TYR:CE2	1:A:155:VAL:HG11	0.57	2.35	5	7
1:A:89:THR:HG22	1:A:94:THR:CG2	0.57	2.30	15	4
1:A:25:LYS:O	1:A:26:TRP:CD1	0.57	2.57	15	2
1:A:26:TRP:CZ3	1:A:110:ILE:HD13	0.57	2.35	10	1
1:A:47:TYR:CE2	1:A:56:VAL:HG22	0.57	2.35	18	2
1:A:129:TRP:CD1	1:A:129:TRP:O	0.57	2.58	19	5
1:A:58:ARG:O	1:A:68:PHE:CD2	0.57	2.57	4	2
1:A:19:TRP:CZ3	1:A:22:TYR:CE2	0.57	2.93	2	9
1:A:129:TRP:CD1	1:A:131:LEU:HD21	0.57	2.35	1	5
1:A:152:SER:HB2	1:A:155:VAL:HG13	0.57	1.76	2	2
1:A:64:GLY:HA2	1:A:172:VAL:HG22	0.57	1.76	4	1
1:A:61:VAL:CG2	1:A:172:VAL:HG22	0.57	2.30	18	1
1:A:109:TYR:CE2	1:A:130:VAL:HG11	0.57	2.35	20	1
1:A:155:VAL:O	1:A:155:VAL:CG1	0.56	2.54	20	3
1:A:20:SER:O	1:A:23:HIS:CE1	0.56	2.59	15	3
1:A:3:TYR:C	1:A:3:TYR:CD1	0.56	2.77	14	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:PHE:CE1	1:A:101:VAL:HG11	0.56	2.36	5	1
1:A:73:ALA:HB2	1:A:86:HIS:NE2	0.56	2.15	2	1
1:A:30:ALA:O	1:A:130:VAL:HG21	0.56	2.00	3	2
1:A:129:TRP:HD1	1:A:131:LEU:HD21	0.56	1.61	1	6
1:A:14:VAL:HG21	1:A:17:PHE:CG	0.56	2.36	18	8
1:A:62:ILE:CD1	1:A:67:TYR:CG	0.56	2.83	17	4
1:A:49:PRO:HA	1:A:54:VAL:HG12	0.56	1.78	17	2
1:A:113:TYR:CD2	1:A:128:VAL:HG21	0.56	2.36	8	1
1:A:61:VAL:HG23	1:A:61:VAL:O	0.56	2.01	5	2
1:A:3:TYR:O	1:A:3:TYR:CD2	0.56	2.58	20	1
1:A:102:LEU:HD21	1:A:113:TYR:HB2	0.56	1.78	4	1
1:A:4:HIS:CD2	1:A:126:ASP:OD1	0.56	2.59	4	1
1:A:30:ALA:HB1	1:A:161:VAL:O	0.55	2.00	11	1
1:A:111:ILE:CG1	1:A:148:TYR:CZ	0.55	2.89	18	3
1:A:33:PRO:CA	1:A:39:TYR:CE1	0.55	2.89	16	1
1:A:27:TRP:CD1	1:A:27:TRP:N	0.55	2.74	13	1
1:A:19:TRP:CE3	1:A:22:TYR:CE2	0.55	2.95	12	3
1:A:47:TYR:CE2	1:A:56:VAL:CG2	0.55	2.90	2	6
1:A:45:ALA:HB2	1:A:58:ARG:HA	0.55	1.78	9	1
1:A:165:PHE:O	1:A:169:ALA:HB2	0.55	2.01	7	5
1:A:84:ILE:H	1:A:84:ILE:HD12	0.55	1.61	2	7
1:A:29:VAL:HG22	1:A:132:SER:CB	0.55	2.31	7	2
1:A:55:LYS:CG	1:A:72:THR:HG22	0.55	2.32	8	1
1:A:155:VAL:HG23	1:A:160:LEU:HD11	0.55	1.78	13	4
1:A:29:VAL:HG13	1:A:132:SER:OG	0.55	2.02	11	4
1:A:68:PHE:CD2	1:A:68:PHE:O	0.55	2.60	16	2
1:A:128:VAL:HG22	1:A:129:TRP:H	0.54	1.62	7	2
1:A:15:ASP:O	1:A:81:ILE:HD12	0.54	2.02	6	1
1:A:30:ALA:O	1:A:130:VAL:CG2	0.54	2.55	20	13
1:A:61:VAL:HG21	1:A:170:CYS:O	0.54	2.01	5	3
1:A:115:CYS:SG	1:A:124:HIS:CE1	0.54	3.01	3	1
1:A:47:TYR:CG	1:A:56:VAL:HG22	0.54	2.38	11	2
1:A:126:ASP:O	1:A:127:HIS:CG	0.54	2.60	16	2
1:A:109:TYR:HD2	1:A:145:VAL:HG23	0.54	1.63	15	3
1:A:32:TYR:CE2	1:A:156:ASP:OD2	0.54	2.61	14	2
1:A:89:THR:CG2	1:A:94:THR:HG23	0.54	2.32	2	3
1:A:105:ASP:CG	1:A:144:ALA:HB2	0.53	2.23	20	1
1:A:9:PRO:CG	1:A:113:TYR:OH	0.53	2.57	17	1
1:A:14:VAL:O	1:A:82:GLY:N	0.53	2.41	13	20
1:A:34:SER:CB	1:A:35:PRO:CD	0.53	2.86	3	13
1:A:68:PHE:CG	1:A:68:PHE:O	0.53	2.61	17	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:148:TYR:OH	1:A:155:VAL:CG1	0.53	2.56	14	4
1:A:61:VAL:HG12	1:A:66:GLU:HG2	0.53	1.79	7	1
1:A:145:VAL:HG12	1:A:149:LEU:HD12	0.53	1.78	9	4
1:A:135:MET:O	1:A:136:VAL:HG23	0.53	2.03	5	1
1:A:109:TYR:CE2	1:A:145:VAL:HG21	0.53	2.39	20	1
1:A:86:HIS:N	1:A:97:THR:O	0.53	2.42	3	19
1:A:11:VAL:CG2	1:A:113:TYR:CE1	0.53	2.88	14	1
1:A:17:PHE:CE1	1:A:22:TYR:CE2	0.53	2.96	20	3
1:A:32:TYR:CZ	1:A:156:ASP:OD1	0.53	2.62	19	1
1:A:85:TYR:CD1	1:A:85:TYR:O	0.53	2.62	9	5
1:A:165:PHE:CD1	1:A:165:PHE:N	0.53	2.77	9	2
1:A:108:ASN:O	1:A:133:ARG:N	0.53	2.42	19	7
1:A:99:PHE:CE1	1:A:129:TRP:CH2	0.53	2.96	16	2
1:A:137:LEU:HD12	1:A:141:ALA:HB1	0.53	1.81	5	1
1:A:59:TYR:O	1:A:59:TYR:CG	0.53	2.62	3	1
1:A:137:LEU:HD11	1:A:145:VAL:CG2	0.53	2.31	6	4
1:A:101:VAL:O	1:A:102:LEU:C	0.52	2.48	11	20
1:A:17:PHE:CZ	1:A:104:THR:CG2	0.52	2.89	17	1
1:A:88:ARG:HD3	1:A:90:VAL:HG23	0.52	1.81	12	1
1:A:137:LEU:HD11	1:A:141:ALA:HB1	0.52	1.81	1	1
1:A:138:THR:O	1:A:141:ALA:CB	0.52	2.57	19	1
1:A:41:LYS:HB2	1:A:165:PHE:CD1	0.52	2.38	18	3
1:A:113:TYR:CE2	1:A:154:VAL:HG23	0.52	2.40	9	2
1:A:30:ALA:HB2	1:A:162:TYR:CG	0.52	2.39	13	1
1:A:102:LEU:HD13	1:A:148:TYR:CE1	0.52	2.40	10	3
1:A:29:VAL:HG11	1:A:137:LEU:CD2	0.52	2.34	5	1
1:A:2:VAL:O	1:A:2:VAL:HG23	0.52	2.05	20	2
1:A:62:ILE:HG13	1:A:67:TYR:CE1	0.52	2.39	10	3
1:A:137:LEU:C	1:A:138:THR:CG2	0.52	2.77	13	15
1:A:51:GLY:O	1:A:52:LYS:CB	0.52	2.58	2	7
1:A:127:HIS:CG	1:A:127:HIS:O	0.52	2.62	10	2
1:A:84:ILE:O	1:A:99:PHE:CB	0.52	2.58	3	1
1:A:19:TRP:CG	1:A:54:VAL:HG11	0.52	2.40	12	2
1:A:14:VAL:HG21	1:A:17:PHE:HB2	0.52	1.82	17	4
1:A:152:SER:CB	1:A:155:VAL:HG13	0.52	2.35	5	3
1:A:113:TYR:CE1	1:A:126:ASP:OD1	0.52	2.63	8	1
1:A:31:LYS:O	1:A:160:LEU:HD23	0.52	2.05	19	1
1:A:165:PHE:CE2	1:A:170:CYS:SG	0.52	3.03	3	1
1:A:41:LYS:O	1:A:42:CYS:CB	0.52	2.58	13	1
1:A:61:VAL:HG21	1:A:172:VAL:CG2	0.52	2.35	7	3
1:A:29:VAL:CG1	1:A:137:LEU:N	0.52	2.73	13	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:HD23	0.52	2.20	4	1
1:A:84:ILE:HD12	1:A:84:ILE:N	0.51	2.21	11	3
1:A:111:ILE:CG1	1:A:148:TYR:CE2	0.51	2.94	19	4
1:A:44:TRP:O	1:A:44:TRP:CD1	0.51	2.63	16	2
1:A:104:THR:CG2	1:A:106:ASN:OD1	0.51	2.57	11	2
1:A:153:PRO:HD2	1:A:155:VAL:HG12	0.51	1.83	14	2
1:A:129:TRP:O	1:A:129:TRP:CD1	0.51	2.63	8	2
1:A:101:VAL:HG22	1:A:129:TRP:HZ2	0.51	1.65	3	1
1:A:111:ILE:HG12	1:A:148:TYR:CZ	0.51	2.41	18	7
1:A:137:LEU:HD21	1:A:145:VAL:HB	0.51	1.80	7	4
1:A:61:VAL:CG1	1:A:169:ALA:O	0.51	2.59	19	1
1:A:113:TYR:CE2	1:A:126:ASP:OD1	0.51	2.64	2	1
1:A:113:TYR:CZ	1:A:154:VAL:HG21	0.51	2.40	1	3
1:A:30:ALA:HB2	1:A:162:TYR:CE1	0.51	2.40	4	1
1:A:58:ARG:O	1:A:68:PHE:CD1	0.51	2.64	7	2
1:A:61:VAL:HG11	1:A:172:VAL:CG2	0.51	2.36	19	2
1:A:154:VAL:O	1:A:155:VAL:CG2	0.51	2.55	19	1
1:A:137:LEU:HD23	1:A:145:VAL:HG11	0.51	1.83	12	3
1:A:23:HIS:O	1:A:26:TRP:NE1	0.51	2.44	1	19
1:A:10:GLU:O	1:A:11:VAL:CG1	0.51	2.59	9	6
1:A:29:VAL:CG2	1:A:131:LEU:C	0.51	2.79	7	2
1:A:121:LYS:O	1:A:122:LYS:CB	0.51	2.58	14	6
1:A:145:VAL:CG1	1:A:149:LEU:HD11	0.51	2.35	4	1
1:A:29:VAL:HG11	1:A:137:LEU:HD22	0.50	1.83	5	1
1:A:117:TYR:CE1	1:A:119:GLU:OE1	0.50	2.64	5	1
1:A:99:PHE:CD1	1:A:114:SER:HB2	0.50	2.41	16	2
1:A:71:GLY:HA3	1:A:86:HIS:CE1	0.50	2.41	13	4
1:A:21:GLN:O	1:A:22:TYR:C	0.50	2.50	5	4
1:A:115:CYS:HB2	1:A:124:HIS:CD2	0.50	2.42	20	2
1:A:22:TYR:O	1:A:22:TYR:CD1	0.50	2.65	14	7
1:A:33:PRO:O	1:A:39:TYR:CD1	0.50	2.64	16	1
1:A:112:GLY:O	1:A:128:VAL:CG2	0.50	2.60	11	2
1:A:63:HIS:CE1	1:A:169:ALA:HB2	0.50	2.42	16	1
1:A:49:PRO:CA	1:A:54:VAL:HG12	0.50	2.36	2	1
1:A:99:PHE:CZ	1:A:129:TRP:CH2	0.50	3.00	16	1
1:A:90:VAL:O	1:A:93:TYR:CB	0.50	2.59	4	1
1:A:74:TYR:CG	1:A:75:PRO:HD2	0.50	2.42	10	19
1:A:154:VAL:O	1:A:154:VAL:HG23	0.50	2.06	19	1
1:A:41:LYS:HB3	1:A:165:PHE:CD1	0.50	2.42	13	11
1:A:136:VAL:HG12	1:A:138:THR:CG2	0.49	2.37	1	2
1:A:31:LYS:HE3	1:A:39:TYR:CE1	0.49	2.42	13	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:VAL:O	1:A:90:VAL:HG12	0.49	2.06	11	1
1:A:74:TYR:CD1	1:A:85:TYR:CE2	0.49	2.99	3	5
1:A:149:LEU:O	1:A:152:SER:N	0.49	2.45	17	14
1:A:109:TYR:CD1	1:A:110:ILE:N	0.49	2.80	11	1
1:A:20:SER:CB	1:A:21:GLN:OE1	0.49	2.60	3	5
1:A:21:GLN:NE2	1:A:106:ASN:ND2	0.49	2.60	17	1
1:A:9:PRO:O	1:A:11:VAL:HG22	0.49	2.07	17	1
1:A:4:HIS:O	1:A:121:LYS:CE	0.49	2.59	14	1
1:A:81:ILE:CG2	1:A:82:GLY:N	0.49	2.75	12	4
1:A:84:ILE:N	1:A:84:ILE:HD12	0.49	2.22	1	3
1:A:128:VAL:CG2	1:A:129:TRP:N	0.49	2.74	6	3
1:A:85:TYR:CG	1:A:85:TYR:O	0.49	2.66	7	3
1:A:148:TYR:CE1	1:A:152:SER:OG	0.49	2.65	18	1
1:A:31:LYS:O	1:A:32:TYR:C	0.49	2.51	11	4
1:A:14:VAL:CG1	1:A:101:VAL:HG12	0.49	2.38	19	4
1:A:30:ALA:CB	1:A:161:VAL:O	0.49	2.60	11	1
1:A:128:VAL:HG23	1:A:129:TRP:N	0.49	2.22	13	2
1:A:163:SER:O	1:A:164:ASP:CB	0.49	2.60	9	11
1:A:38:LYS:O	1:A:39:TYR:CD2	0.49	2.66	17	1
1:A:153:PRO:O	1:A:154:VAL:CG1	0.49	2.59	13	3
1:A:29:VAL:HG21	1:A:132:SER:HB2	0.49	1.83	2	2
1:A:39:TYR:C	1:A:62:ILE:HG23	0.49	2.28	7	1
1:A:62:ILE:O	1:A:65:LYS:N	0.49	2.45	16	3
1:A:56:VAL:N	1:A:71:GLY:O	0.49	2.46	14	9
1:A:113:TYR:C	1:A:113:TYR:CD1	0.49	2.86	14	1
1:A:105:ASP:OD1	1:A:144:ALA:HB2	0.49	2.07	20	1
1:A:102:LEU:HD21	1:A:113:TYR:CB	0.49	2.37	4	1
1:A:111:ILE:HG12	1:A:148:TYR:CE1	0.48	2.42	1	8
1:A:128:VAL:HG22	1:A:129:TRP:N	0.48	2.23	1	5
1:A:113:TYR:CZ	1:A:126:ASP:CG	0.48	2.86	16	1
1:A:154:VAL:CG2	1:A:154:VAL:O	0.48	2.60	19	1
1:A:27:TRP:O	1:A:132:SER:N	0.48	2.46	16	4
1:A:86:HIS:CD2	1:A:86:HIS:C	0.48	2.86	11	3
1:A:38:LYS:C	1:A:39:TYR:CG	0.48	2.87	6	1
1:A:7:ALA:O	1:A:8:CYS:C	0.48	2.50	14	3
1:A:68:PHE:CZ	1:A:70:GLU:HG2	0.48	2.43	2	3
1:A:137:LEU:HB2	1:A:141:ALA:HB1	0.48	1.85	19	1
1:A:108:ASN:OD1	1:A:133:ARG:CB	0.48	2.61	9	1
1:A:165:PHE:HB2	1:A:169:ALA:HB3	0.48	1.83	18	2
1:A:3:TYR:HB2	1:A:125:TRP:CZ3	0.48	2.44	14	4
1:A:90:VAL:HG12	1:A:91:GLY:N	0.48	2.23	7	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:59:TYR:CD2	1:A:68:PHE:HB2	0.48	2.43	19	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:70:GLU:HG3	0.48	2.43	18	3
1:A:31:LYS:O	1:A:161:VAL:CG1	0.48	2.61	10	1
1:A:29:VAL:O	1:A:163:SER:N	0.48	2.46	7	10
1:A:145:VAL:O	1:A:149:LEU:CD1	0.48	2.61	12	1
1:A:154:VAL:O	1:A:156:ASP:N	0.48	2.46	5	7
1:A:25:LYS:CG	1:A:45:ALA:O	0.48	2.62	4	5
1:A:30:ALA:HA	1:A:161:VAL:O	0.48	2.09	20	4
1:A:99:PHE:CE1	1:A:129:TRP:CE3	0.48	3.02	3	1
1:A:155:VAL:CG1	1:A:155:VAL:O	0.48	2.61	8	2
1:A:109:TYR:HB2	1:A:137:LEU:HD11	0.48	1.86	7	1
1:A:88:ARG:CG	1:A:88:ARG:O	0.48	2.62	18	1
1:A:112:GLY:C	1:A:128:VAL:HG23	0.48	2.26	16	1
1:A:32:TYR:CE2	1:A:159:LYS:HG2	0.48	2.44	16	1
1:A:29:VAL:HG13	1:A:132:SER:CB	0.48	2.39	12	3
1:A:165:PHE:O	1:A:169:ALA:CB	0.48	2.61	19	5
1:A:74:TYR:CD2	1:A:75:PRO:HD2	0.48	2.44	2	8
1:A:116:ARG:CG	1:A:116:ARG:O	0.48	2.62	17	2
1:A:30:ALA:CA	1:A:161:VAL:O	0.48	2.61	11	2
1:A:21:GLN:CD	1:A:22:TYR:N	0.48	2.68	13	1
1:A:74:TYR:CD1	1:A:75:PRO:HD2	0.48	2.43	10	2
1:A:109:TYR:CD1	1:A:109:TYR:O	0.47	2.66	1	1
1:A:104:THR:OG1	1:A:110:ILE:CG1	0.47	2.62	14	1
1:A:23:HIS:CD2	1:A:23:HIS:C	0.47	2.87	14	7
1:A:103:SER:O	1:A:111:ILE:HG22	0.47	2.09	5	2
1:A:105:ASP:O	1:A:106:ASN:ND2	0.47	2.46	3	3
1:A:61:VAL:O	1:A:61:VAL:HG13	0.47	2.08	6	1
1:A:27:TRP:CZ3	1:A:40:GLY:O	0.47	2.68	4	1
1:A:14:VAL:N	1:A:101:VAL:O	0.47	2.47	19	8
1:A:2:VAL:O	1:A:125:TRP:CE3	0.47	2.67	17	1
1:A:17:PHE:CZ	1:A:101:VAL:HG21	0.47	2.44	5	1
1:A:155:VAL:HG22	1:A:160:LEU:CD1	0.47	2.32	5	4
1:A:22:TYR:CD1	1:A:22:TYR:O	0.47	2.68	5	3
1:A:165:PHE:O	1:A:166:SER:CB	0.47	2.62	6	5
1:A:44:TRP:N	1:A:44:TRP:CE3	0.47	2.82	4	2
1:A:21:GLN:O	1:A:23:HIS:N	0.47	2.48	7	8
1:A:76:VAL:HG12	1:A:77:GLY:N	0.47	2.24	10	3
1:A:9:PRO:CD	1:A:113:TYR:OH	0.47	2.62	11	2
1:A:115:CYS:HB3	1:A:124:HIS:CD2	0.47	2.44	17	1
1:A:41:LYS:HD3	1:A:165:PHE:CE1	0.47	2.44	8	1
1:A:45:ALA:CB	1:A:57:SER:O	0.47	2.63	16	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:113:TYR:OH	1:A:154:VAL:CG2	0.47	2.62	19	1
1:A:29:VAL:CG2	1:A:132:SER:N	0.47	2.78	7	1
1:A:112:GLY:HA3	1:A:129:TRP:CZ2	0.47	2.44	3	1
1:A:111:ILE:HG12	1:A:148:TYR:CD1	0.47	2.45	12	1
1:A:62:ILE:O	1:A:63:HIS:C	0.47	2.53	17	10
1:A:60:ASP:OD1	1:A:67:TYR:CZ	0.47	2.67	17	1
1:A:109:TYR:CZ	1:A:144:ALA:HB1	0.47	2.44	10	3
1:A:74:TYR:HB3	1:A:85:TYR:CE2	0.47	2.45	17	8
1:A:41:LYS:NZ	1:A:163:SER:CB	0.47	2.78	14	1
1:A:3:TYR:CD2	1:A:121:LYS:HE2	0.47	2.45	14	1
1:A:99:PHE:CZ	1:A:128:VAL:HG23	0.47	2.45	20	1
1:A:101:VAL:HG13	1:A:111:ILE:O	0.47	2.10	7	4
1:A:113:TYR:CZ	1:A:126:ASP:OD1	0.47	2.67	2	1
1:A:111:ILE:CG2	1:A:111:ILE:O	0.47	2.61	12	1
1:A:110:ILE:N	1:A:131:LEU:O	0.47	2.48	8	1
1:A:109:TYR:HB2	1:A:137:LEU:HD13	0.47	1.87	5	1
1:A:113:TYR:CE1	1:A:154:VAL:CG2	0.47	2.97	19	1
1:A:4:HIS:HB2	1:A:124:HIS:CE1	0.47	2.45	1	2
1:A:62:ILE:HG22	1:A:62:ILE:O	0.47	2.10	17	1
1:A:19:TRP:CH2	1:A:84:ILE:HG21	0.47	2.45	17	1
1:A:129:TRP:C	1:A:129:TRP:CD1	0.47	2.88	8	1
1:A:85:TYR:CD1	1:A:96:LYS:HB2	0.47	2.44	8	1
1:A:33:PRO:O	1:A:34:SER:O	0.47	2.33	19	5
1:A:149:LEU:HD21	1:A:160:LEU:CD1	0.47	2.40	2	1
1:A:137:LEU:O	1:A:138:THR:HG22	0.47	2.10	10	4
1:A:45:ALA:HB2	1:A:58:ARG:CG	0.47	2.40	11	1
1:A:74:TYR:C	1:A:84:ILE:HG23	0.47	2.30	10	1
1:A:62:ILE:CD1	1:A:67:TYR:CD2	0.46	2.98	11	2
1:A:105:ASP:C	1:A:106:ASN:ND2	0.46	2.68	3	5
1:A:27:TRP:NE1	1:A:43:GLY:O	0.46	2.47	9	2
1:A:2:VAL:HG21	1:A:126:ASP:HB3	0.46	1.86	20	1
1:A:4:HIS:NE2	1:A:126:ASP:OD2	0.46	2.48	4	2
1:A:26:TRP:O	1:A:27:TRP:CD1	0.46	2.67	10	1
1:A:54:VAL:O	1:A:54:VAL:HG23	0.46	2.10	12	2
1:A:39:TYR:CD1	1:A:39:TYR:N	0.46	2.83	20	1
1:A:90:VAL:O	1:A:92:GLY:N	0.46	2.49	15	7
1:A:29:VAL:CG2	1:A:132:SER:HB3	0.46	2.40	7	6
1:A:17:PHE:HE1	1:A:104:THR:HG21	0.46	1.71	12	1
1:A:166:SER:O	1:A:169:ALA:N	0.46	2.48	19	14
1:A:31:LYS:HE2	1:A:39:TYR:CE1	0.46	2.45	10	1
1:A:117:TYR:CZ	1:A:122:LYS:O	0.46	2.68	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:VAL:HG23	1:A:130:VAL:O	0.46	2.10	4	1
1:A:33:PRO:HA	1:A:39:TYR:CZ	0.46	2.45	20	2
1:A:41:LYS:HG2	1:A:165:PHE:CE1	0.46	2.45	13	1
1:A:19:TRP:O	1:A:23:HIS:ND1	0.46	2.49	17	1
1:A:149:LEU:O	1:A:152:SER:OG	0.46	2.33	16	1
1:A:60:ASP:OD1	1:A:61:VAL:N	0.46	2.49	2	2
1:A:21:GLN:NE2	1:A:106:ASN:CG	0.46	2.69	17	1
1:A:118:ASP:OD2	1:A:125:TRP:NE1	0.46	2.48	17	1
1:A:155:VAL:HG12	1:A:155:VAL:O	0.46	2.11	19	1
1:A:167:GLU:O	1:A:171:LYS:N	0.46	2.49	5	5
1:A:90:VAL:CG1	1:A:91:GLY:N	0.46	2.79	6	1
1:A:85:TYR:CA	1:A:97:THR:O	0.45	2.63	7	15
1:A:9:PRO:HD2	1:A:113:TYR:CE2	0.45	2.46	17	1
1:A:60:ASP:C	1:A:60:ASP:OD1	0.45	2.55	14	1
1:A:27:TRP:CZ2	1:A:41:LYS:HG2	0.45	2.47	8	1
1:A:111:ILE:HD11	1:A:148:TYR:CG	0.45	2.47	11	1
1:A:8:CYS:N	1:A:115:CYS:SG	0.45	2.89	3	3
1:A:3:TYR:O	1:A:4:HIS:CG	0.45	2.69	18	2
1:A:48:THR:O	1:A:55:LYS:N	0.45	2.48	8	4
1:A:60:ASP:N	1:A:60:ASP:OD1	0.45	2.48	17	2
1:A:11:VAL:CB	1:A:102:LEU:HD21	0.45	2.42	15	4
1:A:80:LYS:CG	1:A:81:ILE:N	0.45	2.80	7	1
1:A:73:ALA:HB2	1:A:86:HIS:CE1	0.45	2.46	10	1
1:A:71:GLY:CA	1:A:87:SER:O	0.45	2.65	9	4
1:A:99:PHE:CD1	1:A:129:TRP:CZ3	0.45	3.04	11	2
1:A:56:VAL:O	1:A:71:GLY:N	0.45	2.46	5	1
1:A:3:TYR:CE1	1:A:4:HIS:O	0.45	2.70	13	1
1:A:28:GLU:HA	1:A:130:VAL:O	0.45	2.11	9	1
1:A:124:HIS:C	1:A:124:HIS:CD2	0.45	2.90	17	1
1:A:155:VAL:HG13	1:A:160:LEU:CD1	0.45	2.37	19	1
1:A:113:TYR:CD1	1:A:128:VAL:CG2	0.45	3.00	3	1
1:A:74:TYR:O	1:A:85:TYR:N	0.45	2.48	3	2
1:A:149:LEU:CD2	1:A:155:VAL:CG1	0.45	2.83	19	1
1:A:34:SER:CB	1:A:35:PRO:HD2	0.45	2.41	3	6
1:A:85:TYR:CD1	1:A:96:LYS:HB3	0.45	2.47	6	4
1:A:14:VAL:CG2	1:A:82:GLY:HA2	0.45	2.42	18	2
1:A:132:SER:HB2	1:A:137:LEU:HD13	0.45	1.89	18	2
1:A:33:PRO:CB	1:A:39:TYR:CE1	0.45	3.00	16	1
1:A:102:LEU:HD12	1:A:148:TYR:CE1	0.45	2.46	4	1
1:A:100:ASN:N	1:A:100:ASN:OD1	0.45	2.49	12	1
1:A:118:ASP:O	1:A:122:LYS:N	0.45	2.49	2	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:162:TYR:O	1:A:163:SER:C	0.45	2.56	13	8
1:A:104:THR:HG23	1:A:106:ASN:ND2	0.45	2.24	20	1
1:A:32:TYR:O	1:A:39:TYR:OH	0.45	2.35	13	2
1:A:145:VAL:CG1	1:A:149:LEU:CD1	0.44	2.95	4	3
1:A:60:ASP:OD2	1:A:61:VAL:N	0.44	2.50	5	1
1:A:26:TRP:CH2	1:A:108:ASN:O	0.44	2.70	13	1
1:A:113:TYR:CD1	1:A:128:VAL:HG22	0.44	2.47	3	1
1:A:30:ALA:O	1:A:160:LEU:HD22	0.44	2.12	12	1
1:A:29:VAL:HG11	1:A:137:LEU:HB2	0.44	1.88	15	1
1:A:138:THR:O	1:A:139:GLY:C	0.44	2.55	10	3
1:A:60:ASP:O	1:A:67:TYR:N	0.44	2.47	18	2
1:A:27:TRP:CE3	1:A:135:MET:HG2	0.44	2.47	14	1
1:A:32:TYR:CE1	1:A:128:VAL:CG1	0.44	3.01	5	1
1:A:129:TRP:CD1	1:A:129:TRP:C	0.44	2.90	16	1
1:A:14:VAL:HG12	1:A:103:SER:HA	0.44	1.90	20	1
1:A:110:ILE:O	1:A:130:VAL:HG13	0.44	2.13	4	2
1:A:137:LEU:CD1	1:A:145:VAL:CG2	0.44	2.95	11	1
1:A:137:LEU:O	1:A:137:LEU:CD1	0.44	2.65	16	2
1:A:129:TRP:O	1:A:129:TRP:CG	0.44	2.70	3	1
1:A:99:PHE:CE1	1:A:112:GLY:HA3	0.44	2.48	4	1
1:A:68:PHE:CD1	1:A:68:PHE:C	0.44	2.91	17	1
1:A:5:ASP:O	1:A:124:HIS:NE2	0.44	2.51	7	1
1:A:86:HIS:NE2	1:A:88:ARG:NH1	0.44	2.65	5	1
1:A:117:TYR:CE1	1:A:122:LYS:O	0.44	2.70	16	1
1:A:111:ILE:O	1:A:111:ILE:CG2	0.44	2.65	15	1
1:A:2:VAL:HG21	1:A:32:TYR:CE2	0.44	2.48	13	1
1:A:124:HIS:CD2	1:A:125:TRP:N	0.44	2.86	13	1
1:A:86:HIS:C	1:A:86:HIS:CD2	0.44	2.90	12	2
1:A:90:VAL:O	1:A:93:TYR:N	0.44	2.49	18	4
1:A:20:SER:O	1:A:23:HIS:CD2	0.44	2.71	17	1
1:A:99:PHE:HE2	1:A:101:VAL:HG22	0.44	1.72	8	2
1:A:118:ASP:O	1:A:120:ASP:N	0.44	2.48	3	1
1:A:152:SER:HB3	1:A:155:VAL:CG1	0.44	2.42	18	1
1:A:44:TRP:N	1:A:44:TRP:CD2	0.44	2.85	4	1
1:A:81:ILE:HG22	1:A:82:GLY:N	0.44	2.28	12	1
1:A:149:LEU:O	1:A:150:ILE:C	0.44	2.56	9	6
1:A:60:ASP:OD2	1:A:60:ASP:N	0.44	2.50	16	2
1:A:137:LEU:CD2	1:A:141:ALA:CB	0.44	2.95	2	1
1:A:60:ASP:HB2	1:A:67:TYR:CE1	0.44	2.48	17	1
1:A:114:SER:C	1:A:115:CYS:SG	0.44	2.97	19	2
1:A:15:ASP:HA	1:A:81:ILE:CD1	0.44	2.41	11	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:PHE:CE1	1:A:114:SER:HB2	0.43	2.48	16	1
1:A:152:SER:HB2	1:A:155:VAL:CG1	0.43	2.43	15	2
1:A:156:ASP:OD1	1:A:156:ASP:N	0.43	2.51	6	2
1:A:11:VAL:HG12	1:A:102:LEU:HD21	0.43	1.89	15	1
1:A:127:HIS:C	1:A:127:HIS:CD2	0.43	2.91	11	1
1:A:108:ASN:CB	1:A:141:ALA:CB	0.43	2.96	4	1
1:A:132:SER:O	1:A:133:ARG:C	0.43	2.56	15	2
1:A:122:LYS:O	1:A:123:GLY:O	0.43	2.36	17	3
1:A:80:LYS:O	1:A:81:ILE:O	0.43	2.36	16	5
1:A:99:PHE:CD1	1:A:114:SER:HB3	0.43	2.48	6	2
1:A:162:TYR:O	1:A:163:SER:O	0.43	2.36	10	10
1:A:85:TYR:O	1:A:85:TYR:CG	0.43	2.70	12	3
1:A:11:VAL:HG21	1:A:113:TYR:HD2	0.43	1.70	17	1
1:A:36:ASN:O	1:A:37:GLY:C	0.43	2.55	20	5
1:A:68:PHE:C	1:A:68:PHE:CD1	0.43	2.90	18	1
1:A:138:THR:O	1:A:139:GLY:O	0.43	2.36	17	3
1:A:99:PHE:CZ	1:A:112:GLY:HA3	0.43	2.48	4	1
1:A:74:TYR:HB3	1:A:85:TYR:CZ	0.43	2.49	4	1
1:A:152:SER:CB	1:A:155:VAL:HG12	0.43	2.44	12	1
1:A:33:PRO:O	1:A:34:SER:CB	0.43	2.66	16	1
1:A:111:ILE:HG12	1:A:148:TYR:CE2	0.43	2.48	9	2
1:A:104:THR:OG1	1:A:105:ASP:N	0.43	2.51	6	1
1:A:109:TYR:CZ	1:A:145:VAL:HG22	0.43	2.49	20	1
1:A:101:VAL:O	1:A:102:LEU:O	0.43	2.37	20	7
1:A:17:PHE:CE2	1:A:22:TYR:CD2	0.43	3.06	17	1
1:A:159:LYS:O	1:A:160:LEU:O	0.43	2.37	16	6
1:A:80:LYS:O	1:A:81:ILE:C	0.43	2.57	3	8
1:A:126:ASP:OD1	1:A:127:HIS:N	0.43	2.52	3	2
1:A:31:LYS:O	1:A:161:VAL:N	0.43	2.50	2	1
1:A:81:ILE:HG23	1:A:82:GLY:N	0.43	2.29	9	1
1:A:154:VAL:O	1:A:155:VAL:O	0.43	2.37	15	3
1:A:124:HIS:CD2	1:A:124:HIS:C	0.43	2.91	8	2
1:A:137:LEU:HD12	1:A:141:ALA:CB	0.43	2.44	5	1
1:A:51:GLY:O	1:A:52:LYS:HB2	0.43	2.13	12	1
1:A:41:LYS:O	1:A:42:CYS:C	0.43	2.57	16	1
1:A:47:TYR:CZ	1:A:56:VAL:HG21	0.43	2.49	6	1
1:A:11:VAL:HB	1:A:102:LEU:CD2	0.43	2.44	15	5
1:A:105:ASP:O	1:A:106:ASN:C	0.43	2.57	7	6
1:A:15:ASP:HA	1:A:81:ILE:HD12	0.43	1.91	9	1
1:A:3:TYR:C	1:A:4:HIS:CG	0.43	2.91	18	1
1:A:19:TRP:CZ3	1:A:54:VAL:CG2	0.42	3.02	2	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:TRP:CE3	1:A:135:MET:HB3	0.42	2.49	15	1
1:A:85:TYR:HA	1:A:97:THR:O	0.42	2.14	15	12
1:A:61:VAL:CG2	1:A:61:VAL:O	0.42	2.67	8	1
1:A:152:SER:HB3	1:A:155:VAL:HG13	0.42	1.90	6	2
1:A:21:GLN:O	1:A:23:HIS:CG	0.42	2.71	5	1
1:A:170:CYS:O	1:A:171:LYS:C	0.42	2.57	5	2
1:A:33:PRO:HG3	1:A:161:VAL:HG21	0.42	1.91	15	1
1:A:154:VAL:HG23	1:A:155:VAL:N	0.42	2.29	18	1
1:A:31:LYS:O	1:A:32:TYR:O	0.42	2.37	18	1
1:A:145:VAL:HG11	1:A:162:TYR:OH	0.42	2.14	20	1
1:A:41:LYS:HB3	1:A:165:PHE:CG	0.42	2.50	13	4
1:A:41:LYS:CE	1:A:163:SER:HB2	0.42	2.44	14	1
1:A:61:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG22	0.42	1.89	14	1
1:A:153:PRO:C	1:A:154:VAL:CG1	0.42	2.87	19	1
1:A:11:VAL:CG1	1:A:102:LEU:HD21	0.42	2.45	15	1
1:A:29:VAL:CG2	1:A:132:SER:CB	0.42	2.97	7	1
1:A:68:PHE:CE1	1:A:70:GLU:HG3	0.42	2.50	18	1
1:A:23:HIS:C	1:A:23:HIS:CD2	0.42	2.93	16	2
1:A:99:PHE:CZ	1:A:129:TRP:CZ3	0.42	3.08	3	1
1:A:47:TYR:N	1:A:47:TYR:CD1	0.42	2.88	14	1
1:A:4:HIS:CD2	1:A:4:HIS:N	0.42	2.87	16	1
1:A:113:TYR:CD1	1:A:128:VAL:HG21	0.42	2.49	19	1
1:A:137:LEU:HD23	1:A:141:ALA:CB	0.42	2.41	13	1
1:A:134:SER:C	1:A:136:VAL:N	0.42	2.73	4	1
1:A:60:ASP:CG	1:A:67:TYR:OH	0.42	2.58	17	1
1:A:81:ILE:O	1:A:82:GLY:O	0.42	2.37	8	2
1:A:27:TRP:CZ3	1:A:42:CYS:HA	0.42	2.50	16	1
1:A:59:TYR:CG	1:A:68:PHE:HB2	0.42	2.50	16	1
1:A:21:GLN:OE1	1:A:106:ASN:CG	0.42	2.58	15	1
1:A:141:ALA:O	1:A:145:VAL:HG23	0.42	2.15	9	1
1:A:30:ALA:CB	1:A:162:TYR:CD1	0.42	3.03	10	1
1:A:33:PRO:C	1:A:39:TYR:OH	0.42	2.58	6	1
1:A:3:TYR:CZ	1:A:122:LYS:O	0.42	2.73	4	1
1:A:29:VAL:CG1	1:A:132:SER:HB3	0.42	2.45	14	2
1:A:170:CYS:O	1:A:172:VAL:N	0.42	2.53	16	1
1:A:29:VAL:HG11	1:A:137:LEU:H	0.42	1.75	19	1
1:A:113:TYR:CE2	1:A:154:VAL:CG2	0.42	3.02	9	1
1:A:68:PHE:CD1	1:A:69:MET:N	0.42	2.88	18	1
1:A:90:VAL:O	1:A:91:GLY:C	0.42	2.58	2	2
1:A:78:ASP:O	1:A:79:SER:C	0.42	2.58	2	4
1:A:109:TYR:CB	1:A:137:LEU:HD21	0.42	2.44	10	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:88:ARG:NH1	1:A:97:THR:HG21	0.42	2.30	10	1
1:A:29:VAL:HG13	1:A:132:SER:HB3	0.41	1.91	3	2
1:A:63:HIS:O	1:A:64:GLY:C	0.41	2.59	14	5
1:A:84:ILE:N	1:A:84:ILE:CD1	0.41	2.83	1	1
1:A:20:SER:O	1:A:23:HIS:NE2	0.41	2.53	17	1
1:A:149:LEU:O	1:A:152:SER:CB	0.41	2.67	17	1
1:A:126:ASP:O	1:A:127:HIS:ND1	0.41	2.53	16	1
1:A:3:TYR:CD1	1:A:125:TRP:CE3	0.41	3.08	15	1
1:A:121:LYS:O	1:A:122:LYS:CD	0.41	2.67	3	1
1:A:26:TRP:CH2	1:A:110:ILE:HD13	0.41	2.49	10	1
1:A:22:TYR:CG	1:A:110:ILE:HD11	0.41	2.50	1	1
1:A:21:GLN:HG3	1:A:106:ASN:CB	0.41	2.45	9	2
1:A:3:TYR:CE1	1:A:122:LYS:O	0.41	2.73	4	2
1:A:6:GLY:O	1:A:124:HIS:ND1	0.41	2.53	2	1
1:A:31:LYS:HE3	1:A:39:TYR:CZ	0.41	2.50	15	1
1:A:109:TYR:CE2	1:A:111:ILE:CD1	0.41	2.99	11	1
1:A:12:LYS:O	1:A:102:LEU:O	0.41	2.38	4	1
1:A:29:VAL:O	1:A:31:LYS:NZ	0.41	2.53	4	1
1:A:51:GLY:C	1:A:53:SER:H	0.41	2.19	12	1
1:A:9:PRO:HG2	1:A:113:TYR:CE1	0.41	2.50	5	1
1:A:13:PRO:HA	1:A:101:VAL:O	0.41	2.15	15	2
1:A:165:PHE:O	1:A:169:ALA:HB3	0.41	2.15	19	1
1:A:89:THR:C	1:A:90:VAL:CG2	0.41	2.88	20	1
1:A:137:LEU:HD22	1:A:141:ALA:C	0.41	2.36	13	1
1:A:21:GLN:O	1:A:22:TYR:CB	0.41	2.68	20	1
1:A:16:ASN:O	1:A:16:ASN:CG	0.41	2.59	11	1
1:A:13:PRO:C	1:A:102:LEU:O	0.41	2.59	9	1
1:A:137:LEU:CD2	1:A:145:VAL:HB	0.41	2.46	18	1
1:A:54:VAL:CG2	1:A:54:VAL:O	0.41	2.68	12	1
1:A:27:TRP:CH2	1:A:41:LYS:HA	0.41	2.51	8	1
1:A:18:ASP:CB	1:A:21:GLN:CG	0.41	2.98	15	1
1:A:99:PHE:CD1	1:A:129:TRP:CE2	0.41	3.08	15	1
1:A:29:VAL:CG1	1:A:132:SER:HB2	0.41	2.45	12	1
1:A:31:LYS:HA	1:A:160:LEU:CD2	0.41	2.45	4	2
1:A:22:TYR:HB2	1:A:110:ILE:HD11	0.41	1.91	5	2
1:A:33:PRO:HD3	1:A:161:VAL:CG1	0.41	2.46	11	1
1:A:29:VAL:CG1	1:A:132:SER:CB	0.41	2.99	1	1
1:A:88:ARG:CG	1:A:95:LYS:O	0.41	2.69	8	1
1:A:2:VAL:HG23	1:A:4:HIS:NE2	0.41	2.29	16	1
1:A:113:TYR:CZ	1:A:154:VAL:HG23	0.41	2.51	2	1
1:A:109:TYR:CD1	1:A:144:ALA:CB	0.41	3.04	13	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:VAL:N	1:A:93:TYR:O	0.41	2.53	11	1
1:A:118:ASP:CG	1:A:118:ASP:O	0.41	2.59	17	1
1:A:113:TYR:OH	1:A:154:VAL:HG21	0.41	2.15	19	1
1:A:85:TYR:CB	1:A:98:VAL:HA	0.41	2.46	15	1
1:A:26:TRP:CZ3	1:A:132:SER:HA	0.41	2.51	4	1
1:A:3:TYR:OH	1:A:122:LYS:O	0.41	2.38	4	1
1:A:19:TRP:CD2	1:A:54:VAL:HG11	0.41	2.51	12	1
1:A:139:GLY:C	1:A:141:ALA:N	0.41	2.74	14	1
1:A:33:PRO:O	1:A:37:GLY:HA2	0.41	2.16	19	1
1:A:29:VAL:CG2	1:A:132:SER:HB2	0.41	2.46	20	1
1:A:30:ALA:O	1:A:130:VAL:HB	0.41	2.15	20	1
1:A:41:LYS:O	1:A:41:LYS:CG	0.41	2.68	2	1
1:A:90:VAL:HG12	1:A:90:VAL:O	0.41	2.16	18	2
1:A:21:GLN:NE2	1:A:106:ASN:HA	0.41	2.31	13	1
1:A:41:LYS:C	1:A:42:CYS:SG	0.41	2.99	13	1
1:A:84:ILE:HD13	1:A:101:VAL:CG2	0.41	2.46	11	1
1:A:45:ALA:CB	1:A:58:ARG:HG3	0.41	2.46	11	2
1:A:74:TYR:O	1:A:84:ILE:HA	0.41	2.15	7	1
1:A:163:SER:O	1:A:164:ASP:OD2	0.41	2.39	9	1
1:A:105:ASP:O	1:A:106:ASN:CG	0.41	2.59	14	2
1:A:41:LYS:O	1:A:42:CYS:SG	0.41	2.79	15	2
1:A:113:TYR:CD2	1:A:128:VAL:CG2	0.40	3.04	8	1
1:A:21:GLN:CG	1:A:106:ASN:HB3	0.40	2.46	8	1
1:A:61:VAL:HG13	1:A:61:VAL:O	0.40	2.15	15	1
1:A:32:TYR:CE1	1:A:156:ASP:OD2	0.40	2.74	13	1
1:A:18:ASP:O	1:A:21:GLN:OE1	0.40	2.39	6	1
1:A:11:VAL:HB	1:A:102:LEU:HD21	0.40	1.93	6	2
1:A:165:PHE:HD2	1:A:169:ALA:HB3	0.40	1.75	6	2
1:A:115:CYS:SG	1:A:124:HIS:CG	0.40	3.14	8	1
1:A:61:VAL:HG12	1:A:169:ALA:O	0.40	2.16	19	1
1:A:152:SER:CB	1:A:155:VAL:O	0.40	2.70	9	1
1:A:42:CYS:SG	1:A:42:CYS:O	0.40	2.79	4	1
1:A:59:TYR:CE2	1:A:68:PHE:HB2	0.40	2.51	19	1
1:A:137:LEU:HD22	1:A:141:ALA:O	0.40	2.17	13	1
1:A:80:LYS:HG3	1:A:81:ILE:N	0.40	2.31	7	1
1:A:31:LYS:HE2	1:A:39:TYR:CZ	0.40	2.51	10	1
1:A:137:LEU:CD1	1:A:141:ALA:HB1	0.40	2.45	1	1
1:A:99:PHE:CE2	1:A:129:TRP:NE1	0.40	2.90	14	1
1:A:164:ASP:O	1:A:165:PHE:C	0.40	2.60	19	1
1:A:32:TYR:O	1:A:39:TYR:CE2	0.40	2.74	1	1
1:A:149:LEU:HD13	1:A:157:SER:HB2	0.40	1.94	17	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:167:GLU:O	1:A:171:LYS:CB	0.40	2.70	17	1
1:A:148:TYR:C	1:A:148:TYR:CD1	0.40	2.94	2	1
1:A:74:TYR:C	1:A:84:ILE:CG2	0.40	2.90	10	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	171/184 (93%)	128±3 (75±2%)	29±4 (17±2%)	14±2 (8±1%)	<b>2</b>	<b>14</b>
All	All	3420/3680 (93%)	2561 (75%)	572 (17%)	287 (8%)	<b>2</b>	<b>14</b>

All 34 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	22	TYR	20
1	A	82	GLY	20
1	A	102	LEU	20
1	A	164	ASP	19
1	A	155	VAL	18
1	A	160	LEU	17
1	A	163	SER	16
1	A	154	VAL	14
1	A	81	ILE	14
1	A	37	GLY	14
1	A	80	LYS	14
1	A	139	GLY	13
1	A	34	SER	12
1	A	91	GLY	11
1	A	123	GLY	10
1	A	122	LYS	8
1	A	63	HIS	7
1	A	29	VAL	5
1	A	11	VAL	5

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	21	GLN	4
1	A	52	LYS	4
1	A	23	HIS	3
1	A	42	CYS	3
1	A	2	VAL	2
1	A	153	PRO	2
1	A	170	CYS	2
1	A	51	GLY	2
1	A	35	PRO	2
1	A	171	LYS	1
1	A	28	GLU	1
1	A	127	HIS	1
1	A	108	ASN	1
1	A	166	SER	1
1	A	32	TYR	1

### 6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	147/160 (92%)	97±3 (66±2%)	50±3 (34±2%)	1	11
All	All	2940/3200 (92%)	1945 (66%)	995 (34%)	1	11

All 111 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	34	SER	20
1	A	53	SER	20
1	A	17	PHE	20
1	A	22	TYR	20
1	A	23	HIS	20
1	A	29	VAL	19
1	A	84	ILE	19
1	A	159	LYS	19
1	A	103	SER	18
1	A	110	ILE	18

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	166	SER	18
1	A	107	LYS	18
1	A	131	LEU	17
1	A	85	TYR	17
1	A	87	SER	17
1	A	108	ASN	16
1	A	50	GLU	16
1	A	109	TYR	16
1	A	167	GLU	15
1	A	67	TYR	15
1	A	115	CYS	15
1	A	122	LYS	15
1	A	121	LYS	15
1	A	135	MET	14
1	A	111	ILE	14
1	A	170	CYS	14
1	A	31	LYS	14
1	A	83	LYS	14
1	A	65	LYS	14
1	A	59	TYR	14
1	A	156	ASP	14
1	A	41	LYS	14
1	A	78	ASP	14
1	A	25	LYS	14
1	A	21	GLN	13
1	A	55	LYS	13
1	A	154	VAL	13
1	A	119	GLU	13
1	A	93	TYR	12
1	A	58	ARG	12
1	A	133	ARG	12
1	A	18	ASP	12
1	A	88	ARG	12
1	A	20	SER	11
1	A	60	ASP	11
1	A	52	LYS	11
1	A	70	GLU	10
1	A	69	MET	9
1	A	106	ASN	9
1	A	38	LYS	9
1	A	120	ASP	9
1	A	145	VAL	9

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	76	VAL	8
1	A	116	ARG	8
1	A	105	ASP	8
1	A	80	LYS	8
1	A	136	VAL	8
1	A	86	HIS	8
1	A	114	SER	8
1	A	164	ASP	7
1	A	27	TRP	7
1	A	89	THR	7
1	A	126	ASP	7
1	A	127	HIS	7
1	A	15	ASP	7
1	A	171	LYS	6
1	A	104	THR	6
1	A	137	LEU	6
1	A	8	CYS	6
1	A	140	GLU	6
1	A	96	LYS	5
1	A	147	ASN	5
1	A	146	GLU	5
1	A	42	CYS	5
1	A	36	ASN	5
1	A	95	LYS	4
1	A	63	HIS	4
1	A	142	LYS	4
1	A	128	VAL	4
1	A	12	LYS	4
1	A	72	THR	4
1	A	66	GLU	4
1	A	57	SER	4
1	A	118	ASP	4
1	A	134	SER	4
1	A	100	ASN	4
1	A	28	GLU	3
1	A	62	ILE	3
1	A	54	VAL	3
1	A	46	GLU	3
1	A	81	ILE	2
1	A	155	VAL	2
1	A	19	TRP	2
1	A	162	TYR	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	68	PHE	2
1	A	5	ASP	2
1	A	2	VAL	2
1	A	129	TRP	2
1	A	143	THR	1
1	A	113	TYR	1
1	A	79	SER	1
1	A	152	SER	1
1	A	132	SER	1
1	A	44	TRP	1
1	A	138	THR	1
1	A	163	SER	1
1	A	3	TYR	1
1	A	102	LEU	1
1	A	99	PHE	1
1	A	39	TYR	1
1	A	10	GLU	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 carbohydrates 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 ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

## 7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided