



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 12, 2017 – 06:31 pm GMT

PDB ID : 1JBA  
Title : UNMYRISTOYLATED GCAP-2 WITH THREE CALCIUM IONS BOUND  
Authors : Ames, J.B.; Dizhoor, A.M.; Ikura, M.; Palczewski, K.; Stryer, L.  
Deposited on : 1999-04-03

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  
Percentile statistics : 20161228.v01 (using entries in the PDB archive December 28th 2016)  
RCI : v\_1n\_11\_5\_13\_A (Berjanski et al., 2005)  
PANAV : Wang et al. (2010)  
ShiftChecker : trunk28760  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : recalc28949

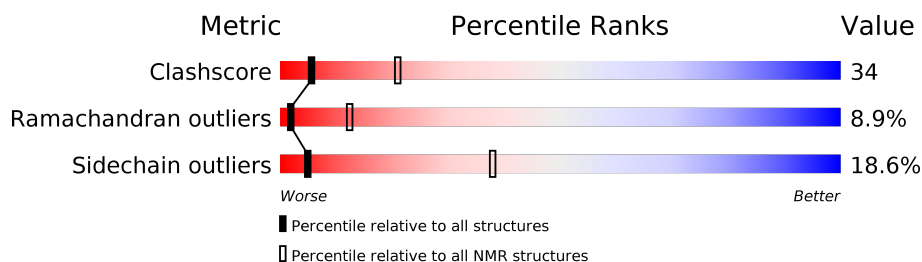
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

The overall completeness of chemical shifts assignment is 53%.

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	125131	11601
Ramachandran outliers	121729	10391
Sidechain outliers	121581	10367

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	204	

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 22 models. The atoms present in the NMR models are not consistent. Some calculations may have failed as a result. All residues are included in the validation scores. Model 19 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:19-A:131, A:144-A:186 (156)	0.85	19

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 5 clusters and 2 single-model clusters were found.

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

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

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 3033 atoms, of which 1489 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called PROTEIN (GUANYLATE CYCLASE ACTIVATING PROTEIN 2).

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	189	Total	C	H	N	O	S	0
			3030	980	1489	254	299	8	

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

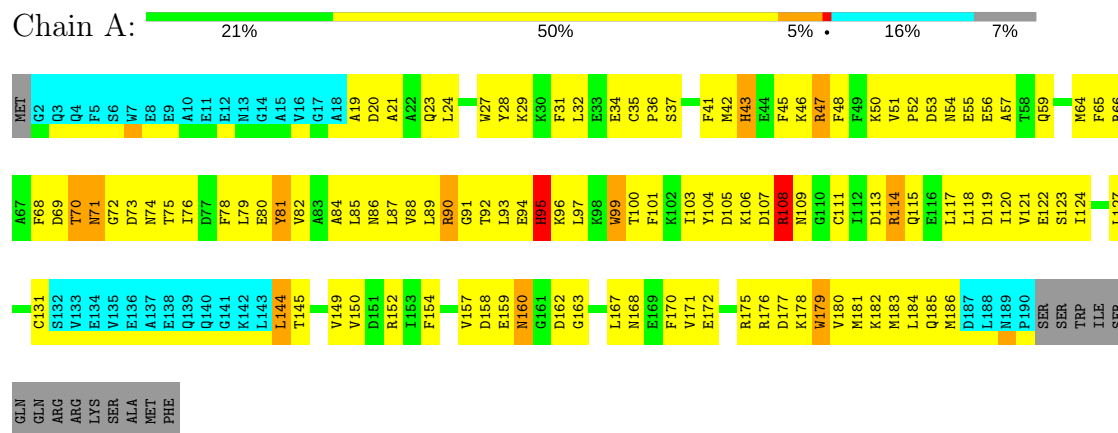
Mol	Chain	Residues	Atoms	
2	A	3	Total	Ca
			3	3

## 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: PROTEIN (GUANYLATE CYCLASE ACTIVATING PROTEIN 2)

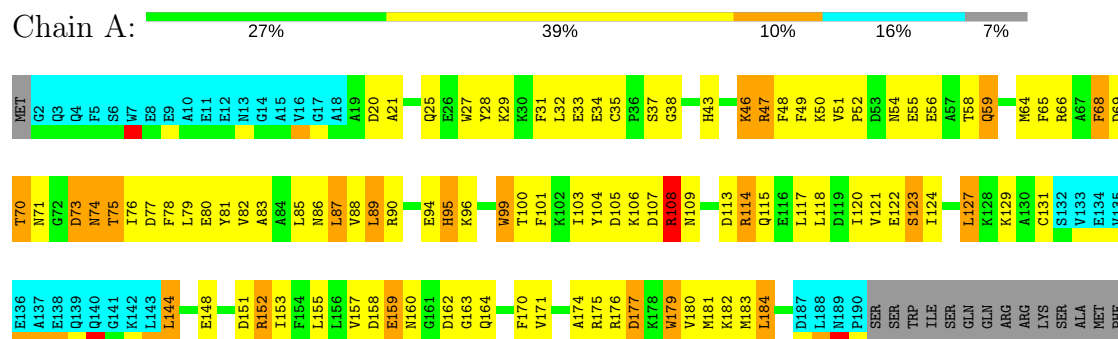


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

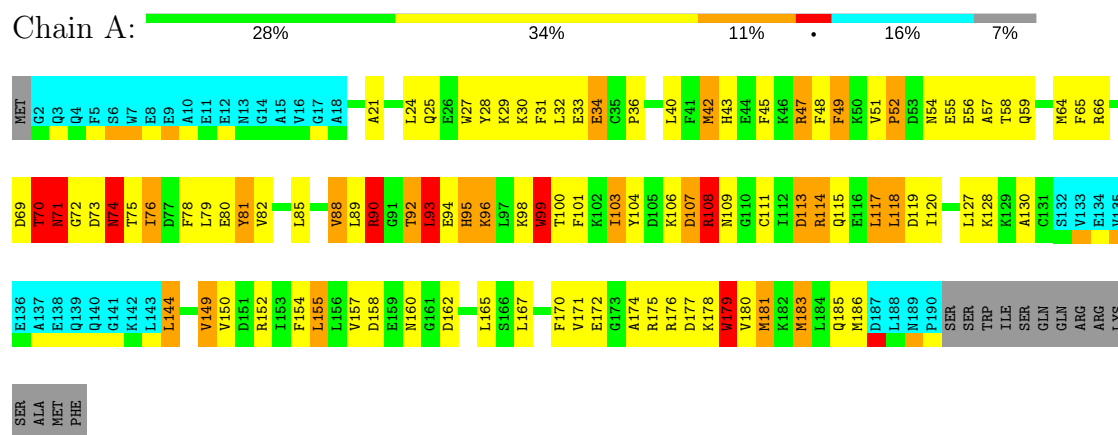
#### 4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: PROTEIN (GUANYLATE CYCLASE ACTIVATING PROTEIN 2)



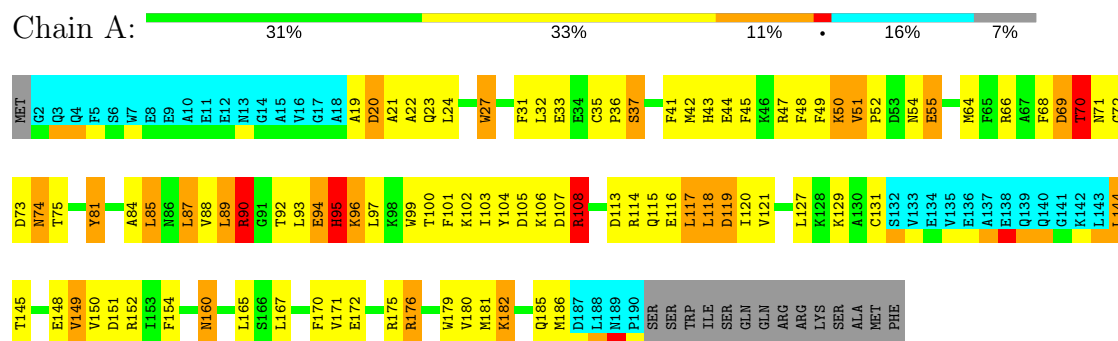
### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: PROTEIN (GUANYLATE CYCLASE ACTIVATING PROTEIN 2)



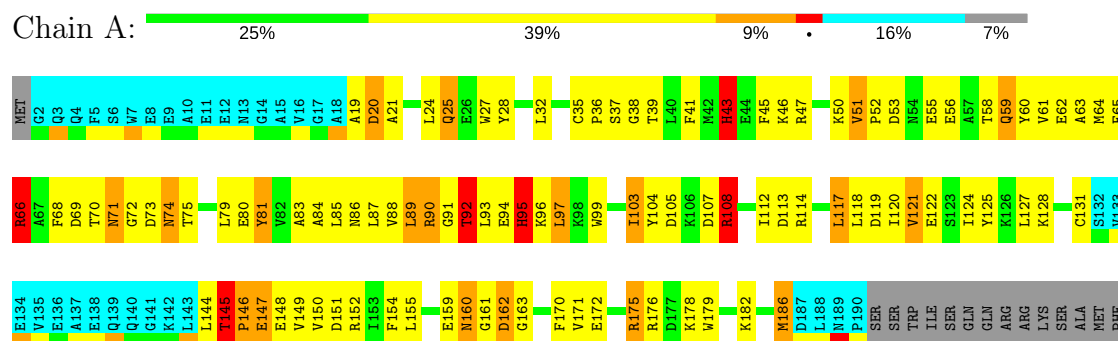
### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: PROTEIN (GUANYLATE CYCLASE ACTIVATING PROTEIN 2)



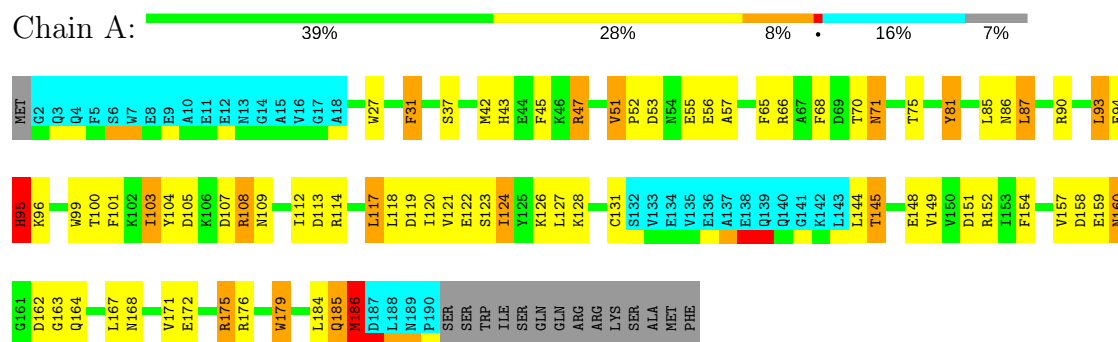
### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: PROTEIN (GUANYLATE CYCLASE ACTIVATING PROTEIN 2)



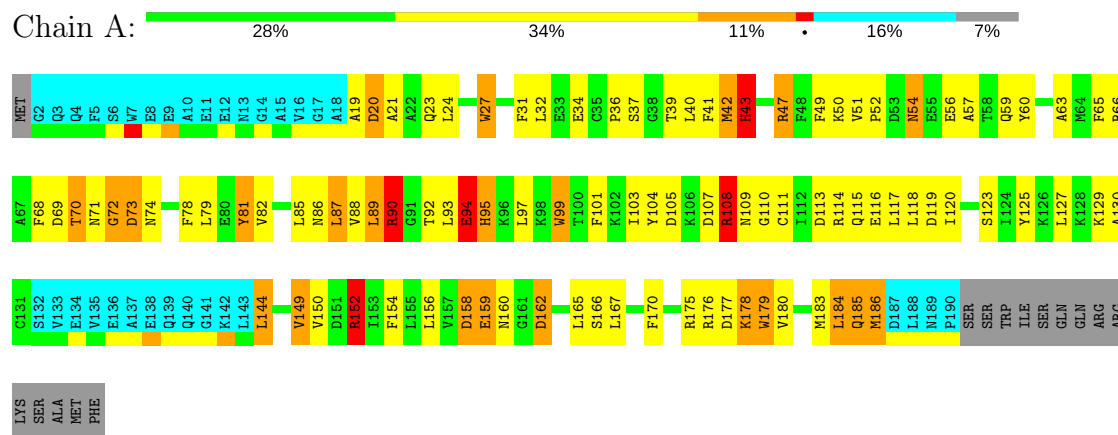
### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: PROTEIN (GUANYLATE CYCLASE ACTIVATING PROTEIN 2)



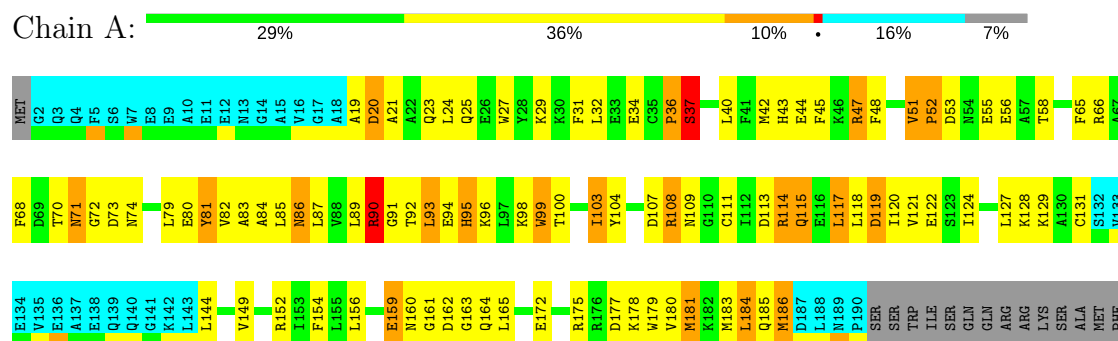
### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: PROTEIN (GUANYLATE CYCLASE ACTIVATING PROTEIN 2)



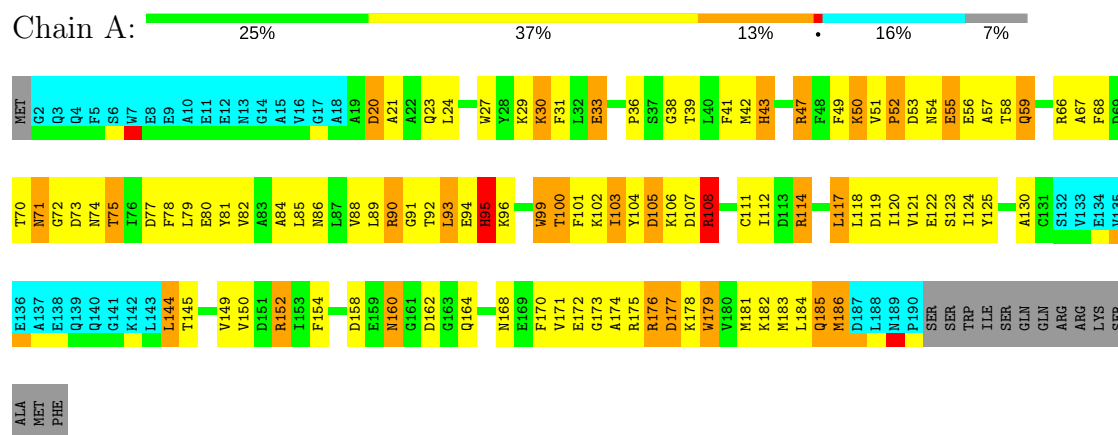
### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: PROTEIN (GUANYLATE CYCLASE ACTIVATING PROTEIN 2)



### 4.2.8 Score per residue for model 8

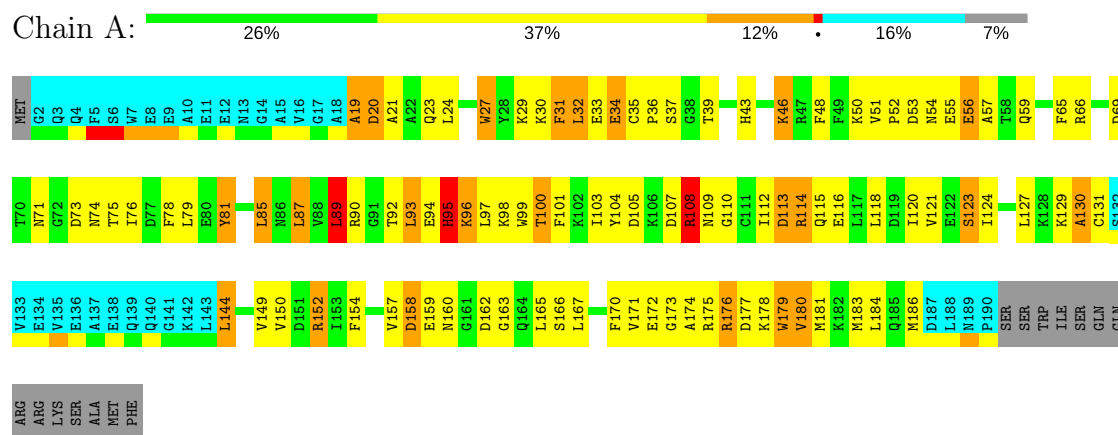
- Molecule 1: PROTEIN (GUANYLATE CYCLASE ACTIVATING PROTEIN 2)

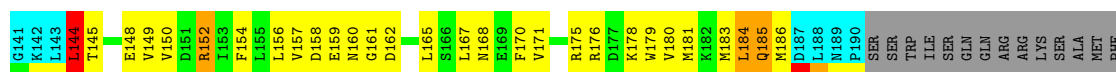




### 4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: PROTEIN (GUANYLATE CYCLASE ACTIVATING PROTEIN 2)

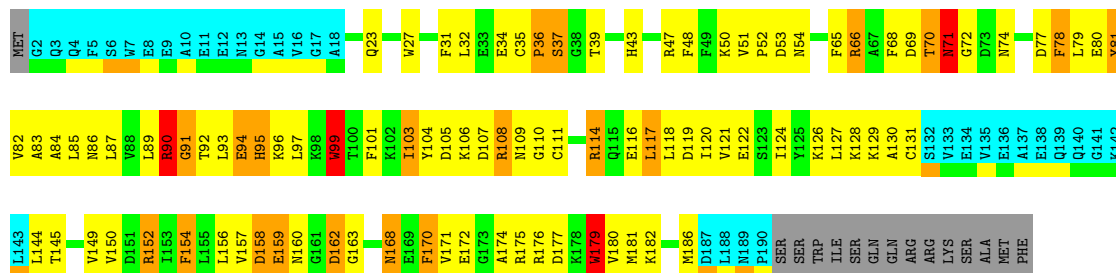




#### 4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: PROTEIN (GUANYLATE CYCLASE ACTIVATING PROTEIN 2)

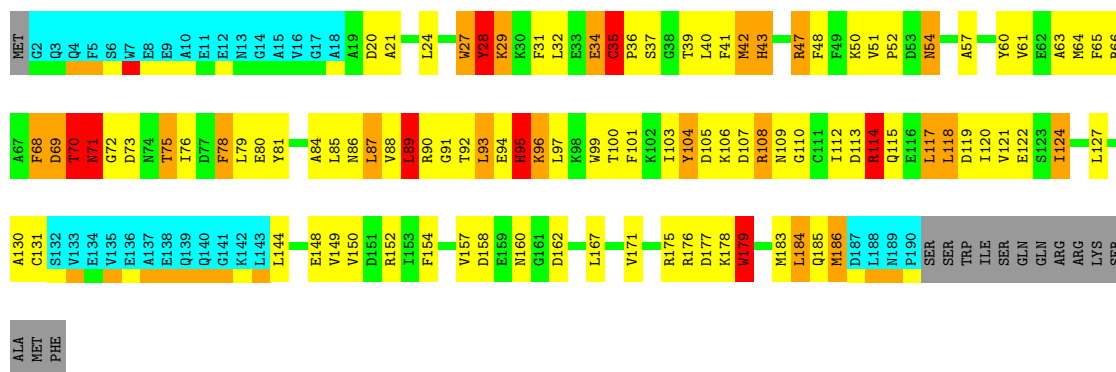
Chain A: 29% 36% 10% 16% 7%



#### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: PROTEIN (GUANYLATE CYCLASE ACTIVATING PROTEIN 2)

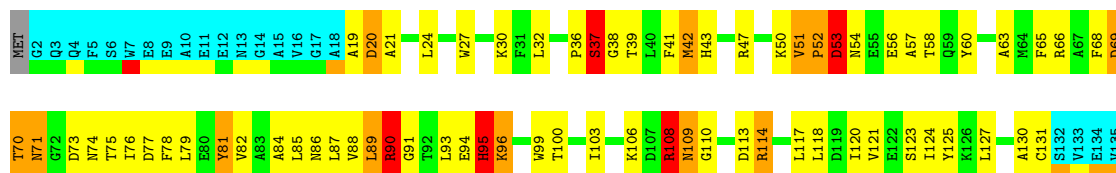
Chain A: 26% 36% 10% 16% 7%

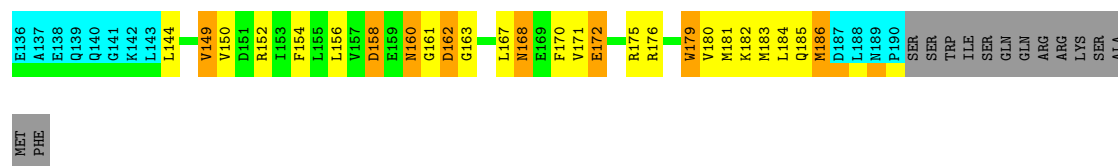


#### 4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: PROTEIN (GUANYLATE CYCLASE ACTIVATING PROTEIN 2)

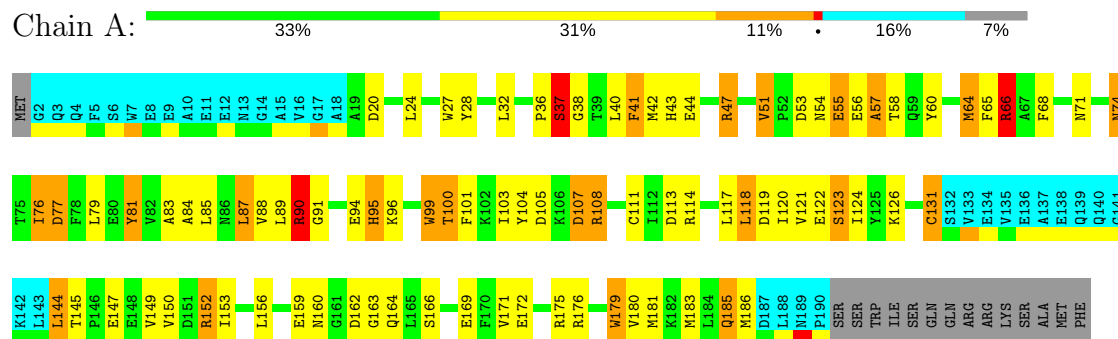
Chain A: 29% 35% 10% 16% 7%





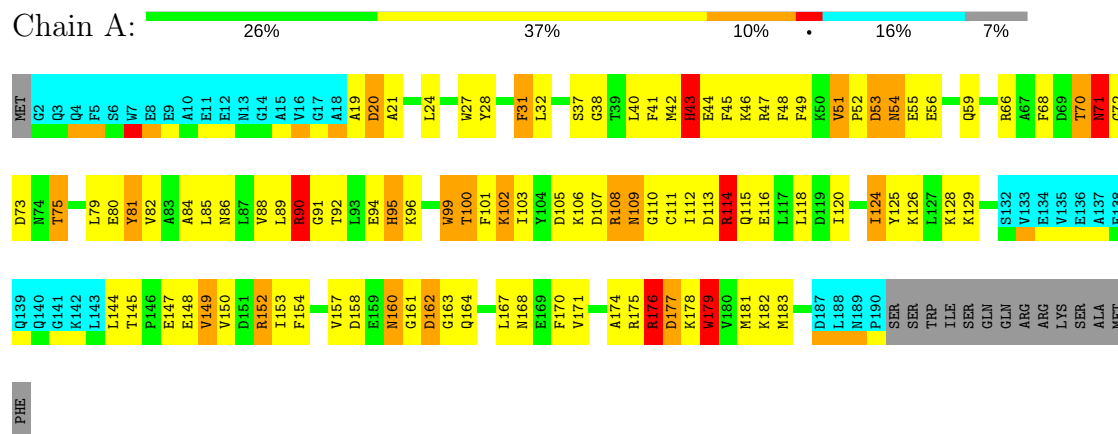
#### 4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: PROTEIN (GUANYLATE CYCLASE ACTIVATING PROTEIN 2)



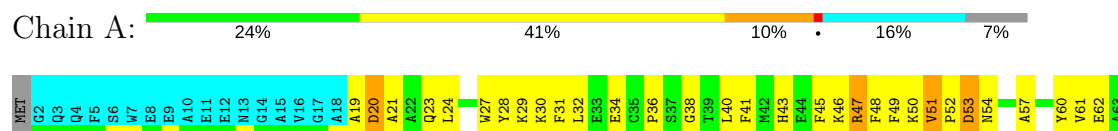
#### 4.2.18 Score per residue for model 18

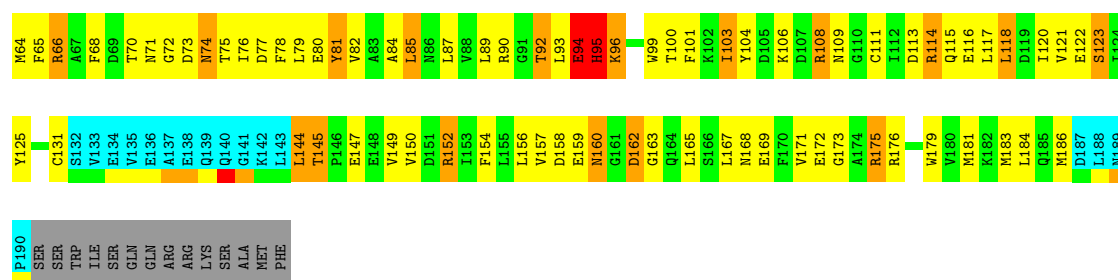
- Molecule 1: PROTEIN (GUANYLATE CYCLASE ACTIVATING PROTEIN 2)



#### 4.2.19 Score per residue for model 19 (medoid)

- Molecule 1: PROTEIN (GUANYLATE CYCLASE ACTIVATING PROTEIN 2)

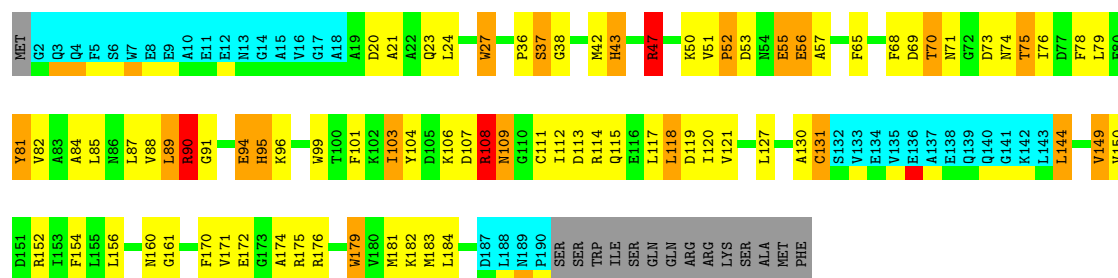




#### 4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: PROTEIN (GUANYLATE CYCLASE ACTIVATING PROTEIN 2)

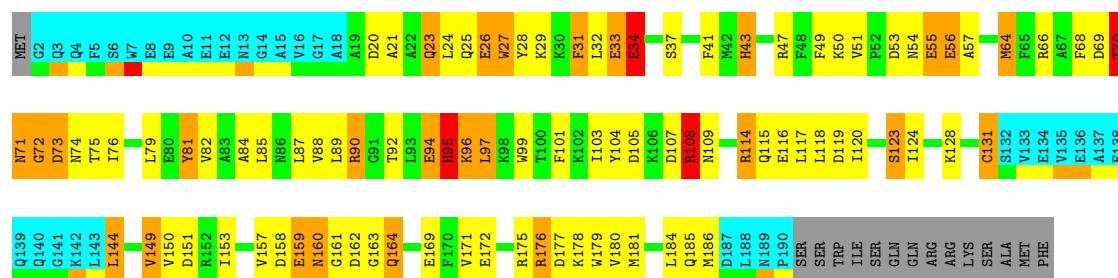
Chain A: 37% 29% 9% 16% 7%



#### 4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: PROTEIN (GUANYLATE CYCLASE ACTIVATING PROTEIN 2)

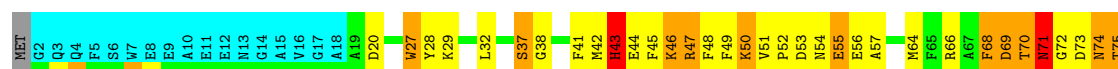
Chain A: 30% 32% 13% 16% 7%

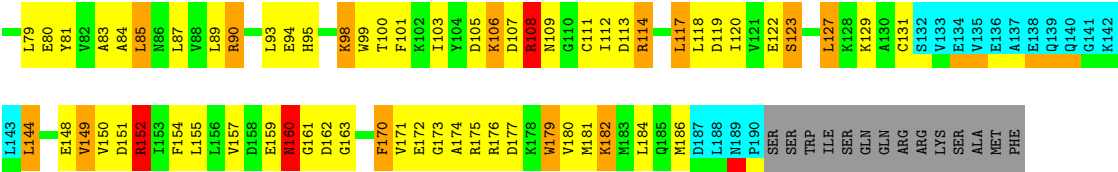


#### 4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: PROTEIN (GUANYLATE CYCLASE ACTIVATING PROTEIN 2)

Chain A: 29% 33% 12% 16% 7%





## 5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *DISTANCE GEOMETRY*.

Of the 50 calculated structures, 22 were deposited, based on the following criterion: *LEAST RESTRAINT VIOLATION*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	3.1

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 4492
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1418
Number of shifts mapped to atoms	1418
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	53%

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

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	1.08±0.01	5±0/1319 (0.4±0.0%)	1.32±0.01	18±1/1777 (1.0±0.0%)
All	All	1.08	111/29018 (0.4%)	1.32	402/39094 (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	7.4±0.9
All	All	0	162

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	27	TRP	CG-CD2	-7.80	1.30	1.43	15	22
1	A	99	TRP	CG-CD2	-7.53	1.30	1.43	12	22
1	A	179	TRP	CG-CD2	-7.20	1.31	1.43	14	22
1	A	95	HIS	CG-ND1	-6.37	1.24	1.38	21	22
1	A	43	HIS	CG-ND1	-6.20	1.25	1.38	7	22
1	A	146	PRO	N-CA	-5.70	1.37	1.47	4	1

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	27	TRP	NE1-CE2-CZ2	10.10	141.51	130.40	22	22
1	A	99	TRP	NE1-CE2-CZ2	9.19	140.51	130.40	12	22

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	179	TRP	NE1-CE2-CZ2	8.99	140.29	130.40	14	22
1	A	27	TRP	NE1-CE2-CD2	-8.04	99.25	107.30	22	22
1	A	99	TRP	NE1-CE2-CD2	-7.62	99.68	107.30	20	22
1	A	27	TRP	CG-CD2-CE3	-7.59	127.07	133.90	22	22
1	A	179	TRP	NE1-CE2-CD2	-7.50	99.80	107.30	14	22
1	A	27	TRP	CG-CD1-NE1	-6.82	103.28	110.10	1	22
1	A	99	TRP	CG-CD1-NE1	-6.54	103.56	110.10	12	22
1	A	179	TRP	CG-CD1-NE1	-6.49	103.61	110.10	14	22
1	A	27	TRP	CE2-CD2-CG	6.28	112.32	107.30	22	22
1	A	27	TRP	CD1-CG-CD2	6.26	111.31	106.30	1	22
1	A	99	TRP	CD1-CG-CD2	6.23	111.29	106.30	21	22
1	A	179	TRP	CD1-CG-CD2	6.22	111.28	106.30	22	22
1	A	99	TRP	CG-CD2-CE3	-6.03	128.47	133.90	12	17
1	A	179	TRP	CG-CD2-CE3	-5.92	128.57	133.90	14	5
1	A	27	TRP	CD1-NE1-CE2	5.91	114.32	109.00	2	22
1	A	179	TRP	CD1-NE1-CE2	5.88	114.30	109.00	6	22
1	A	99	TRP	CD1-NE1-CE2	5.75	114.17	109.00	22	22
1	A	99	TRP	CE2-CD2-CG	5.27	111.51	107.30	5	5
1	A	179	TRP	CE2-CD2-CG	5.07	111.36	107.30	14	1

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	175	ARG	Sidechain	22
1	A	108	ARG	Sidechain	21
1	A	176	ARG	Sidechain	21
1	A	114	ARG	Sidechain	21
1	A	66	ARG	Sidechain	20
1	A	152	ARG	Sidechain	20
1	A	90	ARG	Sidechain	20
1	A	47	ARG	Sidechain	17

## 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	1292	1269	1269	88±12
All	All	28489	27918	27917	1925

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 34.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:117:LEU:HD13	1:A:118:LEU:N	1.06	1.65	12	1
1:A:93:LEU:HD23	1:A:93:LEU:H	0.97	1.19	12	2
1:A:89:LEU:HD12	1:A:90:ARG:N	0.95	1.74	3	3
1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	0.92	1.19	9	5
1:A:68:PHE:CZ	1:A:84:ALA:HB2	0.90	2.01	9	9
1:A:70:THR:HG23	1:A:71:ASN:H	0.90	1.25	2	2
1:A:81:TYR:CE1	1:A:85:LEU:HD21	0.88	2.04	1	11
1:A:180:VAL:HG12	1:A:184:LEU:HD11	0.87	1.45	11	1
1:A:88:VAL:HG23	1:A:89:LEU:H	0.86	1.28	18	2
1:A:146:PRO:O	1:A:148:GLU:N	0.85	2.09	4	1
1:A:32:LEU:HD21	1:A:38:GLY:N	0.81	1.90	22	3
1:A:93:LEU:N	1:A:93:LEU:HD23	0.81	1.90	12	2
1:A:127:LEU:HD13	1:A:127:LEU:C	0.81	1.95	13	2
1:A:78:PHE:CG	1:A:79:LEU:N	0.80	2.49	15	1
1:A:127:LEU:O	1:A:127:LEU:HD22	0.80	1.76	13	1
1:A:88:VAL:HG23	1:A:89:LEU:N	0.79	1.93	3	2
1:A:117:LEU:O	1:A:117:LEU:HD22	0.79	1.76	12	1
1:A:81:TYR:CZ	1:A:85:LEU:HD21	0.79	2.13	15	2
1:A:93:LEU:H	1:A:93:LEU:HD23	0.79	1.37	3	1
1:A:117:LEU:HD22	1:A:117:LEU:C	0.79	1.97	12	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:99:TRP:NE1	0.78	2.51	10	2
1:A:127:LEU:C	1:A:127:LEU:HD13	0.78	1.99	11	8
1:A:71:ASN:ND2	1:A:73:ASP:N	0.77	2.31	22	1
1:A:65:PHE:CE2	1:A:76:ILE:HD13	0.77	2.14	17	3
1:A:127:LEU:HD13	1:A:128:LYS:N	0.77	1.94	13	3
1:A:51:VAL:N	1:A:52:PRO:CD	0.76	2.49	18	12
1:A:79:LEU:HD22	1:A:79:LEU:H	0.76	1.41	8	5
1:A:181:MET:SD	1:A:182:LYS:N	0.76	2.59	16	1
1:A:31:PHE:CD2	1:A:32:LEU:CD1	0.76	2.68	7	3
1:A:111:CYS:SG	1:A:164:GLN:NE2	0.76	2.59	7	2
1:A:180:VAL:HG23	1:A:181:MET:N	0.75	1.96	12	6
1:A:121:VAL:HG21	1:A:150:VAL:HG22	0.75	1.59	3	1
1:A:79:LEU:HD22	1:A:79:LEU:N	0.74	1.97	12	5
1:A:86:ASN:ND2	1:A:90:ARG:CZ	0.74	2.50	10	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:TYR:CZ	1:A:184:LEU:HD11	0.74	2.17	21	4
1:A:160:ASN:H	1:A:160:ASN:ND2	0.74	1.81	8	2
1:A:79:LEU:N	1:A:79:LEU:HD22	0.74	1.96	7	7
1:A:28:TYR:CE1	1:A:32:LEU:CD1	0.74	2.71	1	2
1:A:68:PHE:CE2	1:A:99:TRP:NE1	0.73	2.56	10	1
1:A:71:ASN:ND2	1:A:73:ASP:H	0.73	1.80	22	1
1:A:92:THR:HG22	1:A:93:LEU:N	0.73	1.98	11	1
1:A:144:LEU:C	1:A:144:LEU:HD12	0.71	2.05	5	7
1:A:78:PHE:CE1	1:A:82:VAL:HG21	0.71	2.20	6	3
1:A:171:VAL:HG23	1:A:172:GLU:H	0.71	1.46	19	4
1:A:153:ILE:O	1:A:157:VAL:HG22	0.71	1.86	12	1
1:A:54:ASN:ND2	1:A:56:GLU:H	0.71	1.81	6	1
1:A:144:LEU:HD12	1:A:144:LEU:C	0.71	2.05	9	5
1:A:71:ASN:HD21	1:A:73:ASP:N	0.71	1.83	22	1
1:A:32:LEU:HD21	1:A:38:GLY:CA	0.70	2.16	18	5
1:A:93:LEU:H	1:A:93:LEU:CD2	0.70	1.98	3	2
1:A:93:LEU:CD2	1:A:93:LEU:H	0.70	1.98	19	2
1:A:68:PHE:CE2	1:A:84:ALA:HB2	0.70	2.21	9	2
1:A:171:VAL:HG23	1:A:172:GLU:N	0.70	2.02	19	13
1:A:157:VAL:HG13	1:A:157:VAL:O	0.70	1.86	9	2
1:A:160:ASN:ND2	1:A:160:ASN:H	0.70	1.81	5	3
1:A:160:ASN:HD22	1:A:160:ASN:N	0.70	1.84	18	1
1:A:92:THR:HG22	1:A:93:LEU:H	0.70	1.46	11	1
1:A:51:VAL:HG13	1:A:51:VAL:O	0.69	1.87	1	1
1:A:149:VAL:HG23	1:A:150:VAL:N	0.69	2.03	17	9
1:A:51:VAL:O	1:A:51:VAL:HG22	0.69	1.86	14	2
1:A:114:ARG:NE	1:A:115:GLN:HE22	0.69	1.85	21	1
1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:CD2	0.69	2.01	1	6
1:A:104:TYR:CE1	1:A:120:ILE:HG21	0.69	2.23	6	6
1:A:86:ASN:HD21	1:A:90:ARG:CZ	0.69	2.01	10	1
1:A:86:ASN:HD22	1:A:86:ASN:N	0.68	1.85	7	1
1:A:121:VAL:HG23	1:A:122:GLU:N	0.68	2.03	13	9
1:A:96:LYS:O	1:A:100:THR:HG23	0.68	1.89	16	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:84:ALA:CB	0.67	2.77	21	6
1:A:43:HIS:CD2	1:A:44:GLU:H	0.67	2.07	22	1
1:A:81:TYR:CZ	1:A:82:VAL:HG23	0.67	2.24	10	1
1:A:86:ASN:HD21	1:A:90:ARG:NH1	0.67	1.88	10	1
1:A:69:ASP:O	1:A:70:THR:HG23	0.67	1.90	15	2
1:A:93:LEU:HD23	1:A:93:LEU:N	0.67	2.04	3	2
1:A:51:VAL:HG22	1:A:51:VAL:O	0.66	1.87	22	1
1:A:55:GLU:O	1:A:57:ALA:N	0.66	2.28	11	7

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:180:VAL:HG12	1:A:184:LEU:CD1	0.66	2.19	11	1
1:A:157:VAL:HG23	1:A:158:ASP:N	0.66	2.06	13	5
1:A:107:ASP:OD1	1:A:108:ARG:N	0.66	2.29	22	7
1:A:71:ASN:ND2	1:A:71:ASN:N	0.66	2.44	12	3
1:A:93:LEU:CD2	1:A:93:LEU:N	0.66	2.59	2	2
1:A:125:TYR:CD1	1:A:145:THR:OG1	0.66	2.49	4	1
1:A:78:PHE:O	1:A:82:VAL:HG23	0.65	1.91	16	2
1:A:24:LEU:CD2	1:A:24:LEU:N	0.65	2.59	6	5
1:A:149:VAL:CG2	1:A:150:VAL:N	0.65	2.60	4	9
1:A:89:LEU:HD12	1:A:89:LEU:N	0.65	2.06	17	2
1:A:65:PHE:CD1	1:A:65:PHE:C	0.65	2.70	10	2
1:A:92:THR:OG1	1:A:93:LEU:N	0.65	2.28	4	1
1:A:86:ASN:ND2	1:A:86:ASN:N	0.65	2.44	7	1
1:A:101:PHE:CE1	1:A:105:ASP:OD2	0.65	2.50	14	1
1:A:94:GLU:N	1:A:94:GLU:CD	0.65	2.50	7	3
1:A:73:ASP:OD1	1:A:74:ASN:N	0.64	2.30	16	6
1:A:86:ASN:ND2	1:A:86:ASN:H	0.64	1.91	7	1
1:A:45:PHE:CZ	1:A:49:PHE:CD2	0.64	2.85	19	1
1:A:117:LEU:O	1:A:121:VAL:HG13	0.64	1.92	1	1
1:A:88:VAL:CG1	1:A:89:LEU:N	0.64	2.61	16	3
1:A:145:THR:N	1:A:146:PRO:HD2	0.64	2.07	4	1
1:A:51:VAL:HG12	1:A:52:PRO:HD3	0.64	1.70	7	2
1:A:109:ASN:HD22	1:A:109:ASN:H	0.64	1.35	16	1
1:A:168:ASN:ND2	1:A:168:ASN:H	0.64	1.91	14	1
1:A:94:GLU:CD	1:A:94:GLU:N	0.64	2.51	22	3
1:A:146:PRO:C	1:A:148:GLU:H	0.64	1.96	4	1
1:A:154:PHE:CE2	1:A:158:ASP:OD2	0.63	2.51	15	2
1:A:109:ASN:ND2	1:A:109:ASN:N	0.63	2.42	16	1
1:A:88:VAL:CG2	1:A:89:LEU:H	0.63	2.05	3	2
1:A:28:TYR:C	1:A:28:TYR:CD1	0.63	2.71	13	1
1:A:95:HIS:ND1	1:A:96:LYS:N	0.63	2.47	19	3
1:A:31:PHE:CE2	1:A:32:LEU:CD1	0.63	2.82	21	5
1:A:180:VAL:HG12	1:A:184:LEU:CD2	0.63	2.24	22	1
1:A:180:VAL:HG23	1:A:181:MET:H	0.63	1.52	12	1
1:A:28:TYR:CZ	1:A:32:LEU:CD1	0.63	2.81	1	3
1:A:69:ASP:CG	1:A:70:THR:N	0.63	2.52	15	1
1:A:76:ILE:HG23	1:A:76:ILE:O	0.63	1.94	1	2
1:A:24:LEU:N	1:A:24:LEU:CD2	0.63	2.61	18	8
1:A:162:ASP:CG	1:A:163:GLY:N	0.63	2.52	11	3
1:A:144:LEU:HD13	1:A:144:LEU:O	0.63	1.94	16	1
1:A:50:LYS:C	1:A:51:VAL:HG13	0.63	2.14	13	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:144:LEU:HD12	1:A:144:LEU:O	0.63	1.93	15	2
1:A:46:LYS:CB	1:A:46:LYS:NZ	0.63	2.61	4	2
1:A:179:TRP:CH2	1:A:183:MET:SD	0.62	2.92	2	3
1:A:35:CYS:SG	1:A:44:GLU:CD	0.62	2.78	3	1
1:A:89:LEU:C	1:A:89:LEU:HD12	0.62	2.13	3	1
1:A:65:PHE:CZ	1:A:69:ASP:OD2	0.62	2.52	1	2
1:A:113:ASP:N	1:A:116:GLU:OE1	0.62	2.33	19	1
1:A:106:LYS:N	1:A:116:GLU:OE1	0.62	2.31	18	1
1:A:100:THR:CG2	1:A:101:PHE:N	0.62	2.62	3	9
1:A:70:THR:OG1	1:A:71:ASN:N	0.62	2.32	12	2
1:A:55:GLU:OE1	1:A:55:GLU:N	0.62	2.33	13	1
1:A:56:GLU:CG	1:A:57:ALA:N	0.62	2.63	9	1
1:A:60:TYR:O	1:A:63:ALA:HB3	0.62	1.94	9	5
1:A:121:VAL:HG13	1:A:122:GLU:N	0.62	2.09	17	1
1:A:179:TRP:CZ3	1:A:183:MET:SD	0.62	2.93	20	2
1:A:31:PHE:CD2	1:A:32:LEU:CD2	0.62	2.83	14	3
1:A:160:ASN:ND2	1:A:161:GLY:N	0.62	2.48	18	1
1:A:160:ASN:ND2	1:A:161:GLY:H	0.62	1.92	18	1
1:A:58:THR:CG2	1:A:59:GLN:N	0.62	2.62	4	2
1:A:71:ASN:ND2	1:A:72:GLY:N	0.62	2.48	22	1
1:A:144:LEU:O	1:A:144:LEU:HD12	0.61	1.94	10	5
1:A:50:LYS:O	1:A:51:VAL:HG23	0.61	1.95	3	1
1:A:70:THR:O	1:A:72:GLY:N	0.61	2.32	2	11
1:A:162:ASP:OD1	1:A:163:GLY:N	0.61	2.33	7	6
1:A:162:ASP:N	1:A:162:ASP:OD1	0.61	2.33	6	6
1:A:115:GLN:CG	1:A:116:GLU:N	0.61	2.63	6	2
1:A:121:VAL:CG2	1:A:122:GLU:N	0.61	2.63	1	9
1:A:71:ASN:HD22	1:A:72:GLY:N	0.61	1.93	4	2
1:A:81:TYR:C	1:A:81:TYR:CD1	0.61	2.72	10	2
1:A:144:LEU:CG	1:A:145:THR:H	0.61	2.08	4	1
1:A:112:ILE:HG22	1:A:113:ASP:N	0.61	2.11	9	5
1:A:162:ASP:OD1	1:A:162:ASP:N	0.61	2.33	4	5
1:A:41:PHE:N	1:A:41:PHE:CD1	0.61	2.69	21	4
1:A:80:GLU:O	1:A:83:ALA:HB3	0.61	1.95	7	4
1:A:122:GLU:OE1	1:A:123:SER:N	0.61	2.34	17	1
1:A:71:ASN:HD21	1:A:73:ASP:CB	0.61	2.07	22	2
1:A:117:LEU:HD13	1:A:118:LEU:H	0.61	1.51	12	1
1:A:107:ASP:OD1	1:A:107:ASP:N	0.60	2.31	18	5
1:A:144:LEU:CD1	1:A:145:THR:N	0.60	2.64	19	1
1:A:106:LYS:N	1:A:116:GLU:OE2	0.60	2.34	14	1
1:A:56:GLU:H	1:A:56:GLU:CD	0.60	1.99	20	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:LEU:N	1:A:32:LEU:CD2	0.60	2.64	15	1
1:A:31:PHE:CD1	1:A:31:PHE:C	0.60	2.70	11	5
1:A:73:ASP:OD1	1:A:73:ASP:N	0.60	2.31	9	2
1:A:88:VAL:CG2	1:A:89:LEU:N	0.60	2.62	3	1
1:A:105:ASP:OD2	1:A:110:GLY:N	0.60	2.34	15	1
1:A:73:ASP:C	1:A:75:THR:H	0.60	2.00	15	4
1:A:94:GLU:H	1:A:94:GLU:CD	0.60	1.99	20	4
1:A:70:THR:CG2	1:A:71:ASN:H	0.60	2.07	2	2
1:A:47:ARG:HG3	1:A:51:VAL:HG23	0.60	1.73	8	1
1:A:160:ASN:HD22	1:A:161:GLY:H	0.60	1.38	18	1
1:A:120:ILE:HG22	1:A:124:ILE:CD1	0.60	2.27	18	7
1:A:79:LEU:CD2	1:A:79:LEU:H	0.60	2.09	6	4
1:A:109:ASN:HD22	1:A:109:ASN:N	0.60	1.91	16	1
1:A:177:ASP:OD1	1:A:178:LYS:N	0.60	2.34	9	4
1:A:180:VAL:CG2	1:A:181:MET:N	0.60	2.64	12	4
1:A:71:ASN:O	1:A:73:ASP:N	0.60	2.35	6	1
1:A:27:TRP:CE3	1:A:81:TYR:OH	0.60	2.51	3	1
1:A:157:VAL:CG2	1:A:158:ASP:N	0.59	2.64	13	5
1:A:92:THR:CG2	1:A:93:LEU:N	0.59	2.65	11	1
1:A:31:PHE:CE2	1:A:32:LEU:HD21	0.59	2.31	13	1
1:A:153:ILE:O	1:A:157:VAL:HG12	0.59	1.98	21	2
1:A:171:VAL:CG2	1:A:172:GLU:N	0.59	2.65	4	9
1:A:69:ASP:OD1	1:A:70:THR:N	0.59	2.36	3	3
1:A:76:ILE:O	1:A:76:ILE:HG23	0.59	1.97	2	1
1:A:160:ASN:ND2	1:A:169:GLU:OE2	0.59	2.35	12	1
1:A:42:MET:SD	1:A:42:MET:C	0.59	2.81	13	2
1:A:70:THR:HG23	1:A:71:ASN:N	0.59	2.06	2	2
1:A:109:ASN:ND2	1:A:111:CYS:SG	0.59	2.76	6	1
1:A:94:GLU:CD	1:A:94:GLU:H	0.59	2.01	19	2
1:A:121:VAL:CG1	1:A:122:GLU:N	0.58	2.65	17	2
1:A:20:ASP:N	1:A:20:ASP:OD1	0.58	2.35	6	1
1:A:54:ASN:ND2	1:A:54:ASN:C	0.58	2.54	15	1
1:A:77:ASP:OD1	1:A:78:PHE:N	0.58	2.35	14	3
1:A:144:LEU:CD1	1:A:144:LEU:C	0.58	2.72	5	3
1:A:71:ASN:H	1:A:71:ASN:ND2	0.58	1.95	5	1
1:A:53:ASP:OD1	1:A:54:ASN:N	0.58	2.36	14	2
1:A:77:ASP:OD1	1:A:77:ASP:N	0.58	2.33	17	1
1:A:158:ASP:OD2	1:A:161:GLY:N	0.58	2.35	13	1
1:A:31:PHE:C	1:A:31:PHE:CD1	0.58	2.76	18	6
1:A:144:LEU:C	1:A:144:LEU:HD13	0.58	2.19	14	2
1:A:94:GLU:O	1:A:96:LYS:N	0.57	2.37	4	18

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:THR:CG2	1:A:93:LEU:H	0.57	2.11	11	1
1:A:79:LEU:N	1:A:79:LEU:CD2	0.57	2.67	7	3
1:A:89:LEU:CD1	1:A:89:LEU:N	0.57	2.66	17	2
1:A:105:ASP:O	1:A:107:ASP:N	0.57	2.37	22	1
1:A:179:TRP:CD1	1:A:179:TRP:N	0.57	2.73	12	1
1:A:117:LEU:C	1:A:119:ASP:N	0.57	2.56	15	14
1:A:94:GLU:N	1:A:94:GLU:OE1	0.57	2.38	19	1
1:A:160:ASN:N	1:A:160:ASN:ND2	0.57	2.49	22	2
1:A:27:TRP:CD1	1:A:27:TRP:N	0.57	2.70	15	1
1:A:78:PHE:CD1	1:A:79:LEU:N	0.57	2.72	15	1
1:A:160:ASN:ND2	1:A:160:ASN:N	0.57	2.51	18	3
1:A:87:LEU:HD13	1:A:87:LEU:C	0.57	2.20	15	1
1:A:81:TYR:CZ	1:A:85:LEU:HD11	0.57	2.34	13	13
1:A:112:ILE:CG2	1:A:113:ASP:N	0.57	2.68	9	3
1:A:160:ASN:HD22	1:A:161:GLY:N	0.57	1.98	22	2
1:A:47:ARG:O	1:A:51:VAL:N	0.57	2.37	3	11
1:A:71:ASN:N	1:A:71:ASN:ND2	0.57	2.53	13	1
1:A:144:LEU:HD11	1:A:149:VAL:CG1	0.57	2.29	14	2
1:A:121:VAL:HG21	1:A:150:VAL:CG2	0.57	2.29	11	1
1:A:71:ASN:HD21	1:A:73:ASP:CG	0.57	2.03	2	3
1:A:180:VAL:HG13	1:A:181:MET:N	0.57	2.14	16	2
1:A:144:LEU:C	1:A:144:LEU:CD1	0.56	2.73	9	8
1:A:55:GLU:C	1:A:57:ALA:H	0.56	2.03	22	5
1:A:71:ASN:C	1:A:71:ASN:HD22	0.56	2.03	22	2
1:A:94:GLU:OE1	1:A:95:HIS:N	0.56	2.38	3	1
1:A:156:LEU:HD22	1:A:179:TRP:CZ2	0.56	2.35	12	1
1:A:101:PHE:CD1	1:A:101:PHE:C	0.56	2.78	1	6
1:A:103:ILE:C	1:A:105:ASP:H	0.56	2.03	12	5
1:A:70:THR:C	1:A:72:GLY:H	0.56	2.03	13	5
1:A:158:ASP:CG	1:A:159:GLU:N	0.56	2.58	10	4
1:A:90:ARG:CG	1:A:91:GLY:H	0.56	2.14	8	1
1:A:170:PHE:CZ	1:A:174:ALA:CB	0.56	2.88	18	1
1:A:144:LEU:HD21	1:A:149:VAL:HG12	0.56	1.77	14	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:99:TRP:CD1	0.56	2.94	10	1
1:A:41:PHE:CZ	1:A:75:THR:HG22	0.56	2.35	18	1
1:A:78:PHE:CD1	1:A:78:PHE:C	0.56	2.79	15	1
1:A:103:ILE:HG22	1:A:104:TYR:N	0.56	2.15	2	8
1:A:93:LEU:HD12	1:A:93:LEU:N	0.56	2.15	22	2
1:A:73:ASP:CG	1:A:74:ASN:H	0.56	2.03	2	2
1:A:117:LEU:HD11	1:A:150:VAL:HG13	0.56	1.77	12	1
1:A:117:LEU:CD2	1:A:117:LEU:C	0.56	2.70	12	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:154:PHE:CZ	1:A:158:ASP:OD2	0.56	2.59	15	1
1:A:127:LEU:C	1:A:127:LEU:CD1	0.56	2.74	5	7
1:A:26:GLU:OE1	1:A:27:TRP:N	0.56	2.39	21	1
1:A:46:LYS:O	1:A:50:LYS:N	0.56	2.39	12	3
1:A:79:LEU:CD2	1:A:79:LEU:N	0.56	2.68	12	4
1:A:54:ASN:HD22	1:A:56:GLU:N	0.55	1.99	6	1
1:A:78:PHE:CE1	1:A:82:VAL:CG2	0.55	2.89	6	2
1:A:146:PRO:C	1:A:148:GLU:N	0.55	2.52	4	1
1:A:90:ARG:N	1:A:90:ARG:CD	0.55	2.68	12	1
1:A:170:PHE:C	1:A:170:PHE:CD1	0.55	2.80	16	3
1:A:81:TYR:CD1	1:A:81:TYR:C	0.55	2.79	3	3
1:A:54:ASN:O	1:A:56:GLU:N	0.55	2.39	8	3
1:A:65:PHE:CE1	1:A:69:ASP:OD2	0.55	2.58	4	1
1:A:85:LEU:O	1:A:89:LEU:N	0.55	2.40	14	13
1:A:162:ASP:CG	1:A:163:GLY:H	0.55	2.05	21	4
1:A:68:PHE:CD2	1:A:99:TRP:CZ2	0.55	2.95	1	1
1:A:168:ASN:ND2	1:A:169:GLU:N	0.55	2.54	12	1
1:A:114:ARG:NH1	1:A:163:GLY:O	0.55	2.39	14	1
1:A:71:ASN:C	1:A:71:ASN:ND2	0.55	2.60	22	2
1:A:71:ASN:N	1:A:71:ASN:HD22	0.55	1.99	4	1
1:A:160:ASN:N	1:A:160:ASN:HD22	0.55	1.97	22	1
1:A:113:ASP:OD1	1:A:115:GLN:N	0.55	2.33	13	2
1:A:93:LEU:H	1:A:93:LEU:HD12	0.55	1.61	5	1
1:A:127:LEU:C	1:A:127:LEU:HD23	0.55	2.20	20	1
1:A:109:ASN:ND2	1:A:111:CYS:N	0.55	2.55	6	1
1:A:170:PHE:O	1:A:174:ALA:N	0.55	2.40	14	7
1:A:84:ALA:O	1:A:88:VAL:HG22	0.55	2.00	10	1
1:A:51:VAL:O	1:A:53:ASP:N	0.55	2.40	4	2
1:A:45:PHE:CD1	1:A:45:PHE:C	0.55	2.79	19	2
1:A:73:ASP:C	1:A:75:THR:N	0.55	2.61	15	5
1:A:127:LEU:CD1	1:A:127:LEU:C	0.55	2.68	13	3
1:A:55:GLU:N	1:A:55:GLU:CD	0.55	2.59	7	1
1:A:68:PHE:O	1:A:70:THR:N	0.55	2.39	9	2
1:A:93:LEU:N	1:A:93:LEU:CD2	0.55	2.68	19	1
1:A:168:ASN:C	1:A:168:ASN:ND2	0.55	2.60	12	1
1:A:103:ILE:O	1:A:105:ASP:N	0.54	2.40	15	2
1:A:89:LEU:HD23	1:A:89:LEU:O	0.54	2.03	10	1
1:A:47:ARG:O	1:A:49:PHE:N	0.54	2.40	1	1
1:A:107:ASP:OD2	1:A:109:ASN:ND2	0.54	2.40	18	2
1:A:127:LEU:O	1:A:127:LEU:HD23	0.54	2.02	20	2
1:A:69:ASP:C	1:A:70:THR:HG23	0.54	2.22	16	1

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:79:LEU:N	1:A:79:LEU:HD12	0.54	2.17	19	2
1:A:87:LEU:HD21	1:A:95:HIS:ND1	0.54	2.17	3	1
1:A:65:PHE:O	1:A:65:PHE:CD1	0.54	2.61	6	4
1:A:104:TYR:OH	1:A:184:LEU:CD1	0.54	2.55	8	4
1:A:125:TYR:CE1	1:A:144:LEU:C	0.54	2.81	4	1
1:A:117:LEU:C	1:A:117:LEU:HD13	0.54	2.20	12	1
1:A:40:LEU:HD23	1:A:41:PHE:N	0.54	2.18	17	2
1:A:101:PHE:CE2	1:A:112:ILE:HD12	0.54	2.37	8	3
1:A:71:ASN:HD22	1:A:72:GLY:H	0.54	1.45	4	1
1:A:180:VAL:CG2	1:A:181:MET:H	0.54	2.15	12	2
1:A:158:ASP:CG	1:A:160:ASN:HD21	0.54	2.05	18	1
1:A:109:ASN:C	1:A:111:CYS:H	0.54	2.05	7	4
1:A:56:GLU:C	1:A:58:THR:H	0.54	2.04	2	8
1:A:55:GLU:O	1:A:58:THR:HG22	0.54	2.02	8	1
1:A:52:PRO:C	1:A:54:ASN:H	0.54	2.05	9	1
1:A:20:ASP:O	1:A:23:GLN:N	0.54	2.41	21	9
1:A:88:VAL:HG13	1:A:89:LEU:N	0.54	2.17	16	2
1:A:144:LEU:CG	1:A:145:THR:N	0.54	2.70	4	1
1:A:113:ASP:OD1	1:A:114:ARG:N	0.54	2.41	13	4
1:A:24:LEU:N	1:A:24:LEU:HD22	0.54	2.17	3	3
1:A:144:LEU:CD1	1:A:145:THR:H	0.54	2.15	4	2
1:A:117:LEU:O	1:A:119:ASP:N	0.54	2.41	15	13
1:A:108:ARG:C	1:A:110:GLY:H	0.54	2.06	14	3
1:A:154:PHE:CE1	1:A:158:ASP:CG	0.54	2.81	19	1
1:A:43:HIS:CD2	1:A:44:GLU:N	0.54	2.74	22	1
1:A:48:PHE:O	1:A:48:PHE:CD1	0.54	2.61	22	1
1:A:117:LEU:O	1:A:120:ILE:N	0.54	2.41	13	16
1:A:109:ASN:C	1:A:111:CYS:N	0.54	2.61	7	5
1:A:125:TYR:OH	1:A:144:LEU:CD1	0.54	2.55	16	1
1:A:24:LEU:HD22	1:A:24:LEU:N	0.54	2.17	6	6
1:A:28:TYR:CE2	1:A:32:LEU:HD11	0.54	2.38	17	1
1:A:73:ASP:O	1:A:74:ASN:CB	0.54	2.56	2	4
1:A:109:ASN:N	1:A:109:ASN:OD1	0.54	2.41	12	1
1:A:31:PHE:CE2	1:A:32:LEU:HD11	0.54	2.38	21	2
1:A:51:VAL:HG23	1:A:52:PRO:HD2	0.54	1.79	20	1
1:A:71:ASN:O	1:A:71:ASN:ND2	0.53	2.41	9	2
1:A:113:ASP:O	1:A:115:GLN:N	0.53	2.41	7	8
1:A:44:GLU:O	1:A:48:PHE:CG	0.53	2.61	7	1
1:A:74:ASN:N	1:A:74:ASN:OD1	0.53	2.41	1	3
1:A:95:HIS:O	1:A:95:HIS:CD2	0.53	2.61	8	1
1:A:72:GLY:O	1:A:74:ASN:N	0.53	2.41	6	1

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:154:PHE:O	1:A:158:ASP:N	0.53	2.41	5	8
1:A:166:SER:N	1:A:169:GLU:OE2	0.53	2.34	17	1
1:A:51:VAL:N	1:A:52:PRO:HD3	0.53	2.18	2	10
1:A:65:PHE:O	1:A:69:ASP:N	0.53	2.41	4	4
1:A:32:LEU:O	1:A:34:GLU:N	0.53	2.39	7	4
1:A:81:TYR:CG	1:A:82:VAL:N	0.53	2.76	12	10
1:A:99:TRP:O	1:A:99:TRP:CE3	0.53	2.62	14	1
1:A:127:LEU:O	1:A:127:LEU:HD13	0.53	2.03	6	4
1:A:65:PHE:CZ	1:A:76:ILE:HD13	0.53	2.38	19	1
1:A:35:CYS:O	1:A:37:SER:N	0.53	2.42	15	5
1:A:21:ALA:O	1:A:25:GLN:N	0.53	2.41	2	2
1:A:73:ASP:N	1:A:73:ASP:OD1	0.53	2.41	2	1
1:A:56:GLU:CD	1:A:56:GLU:N	0.53	2.61	20	1
1:A:109:ASN:ND2	1:A:111:CYS:O	0.53	2.42	19	2
1:A:144:LEU:HG	1:A:145:THR:H	0.53	1.63	4	1
1:A:158:ASP:CG	1:A:159:GLU:H	0.53	2.07	14	6
1:A:109:ASN:O	1:A:111:CYS:N	0.53	2.42	22	3
1:A:32:LEU:C	1:A:34:GLU:H	0.53	2.07	2	4
1:A:171:VAL:O	1:A:175:ARG:N	0.53	2.42	12	3
1:A:101:PHE:CD1	1:A:101:PHE:O	0.53	2.60	18	2
1:A:93:LEU:C	1:A:95:HIS:N	0.53	2.62	6	3
1:A:68:PHE:CD2	1:A:99:TRP:NE1	0.53	2.76	6	1
1:A:181:MET:CG	1:A:182:LYS:N	0.53	2.71	3	1
1:A:86:ASN:O	1:A:91:GLY:N	0.53	2.42	18	1
1:A:93:LEU:O	1:A:95:HIS:N	0.53	2.42	6	2
1:A:147:GLU:O	1:A:150:VAL:N	0.53	2.41	4	1
1:A:181:MET:O	1:A:185:GLN:N	0.53	2.40	3	2
1:A:35:CYS:C	1:A:37:SER:H	0.53	2.07	11	4
1:A:56:GLU:O	1:A:58:THR:N	0.53	2.42	2	4
1:A:29:LYS:O	1:A:33:GLU:N	0.53	2.40	1	2
1:A:121:VAL:HG12	1:A:122:GLU:N	0.53	2.19	4	1
1:A:161:GLY:O	1:A:163:GLY:N	0.53	2.42	4	1
1:A:101:PHE:O	1:A:101:PHE:CD1	0.53	2.62	17	2
1:A:158:ASP:OD1	1:A:159:GLU:N	0.53	2.41	1	1
1:A:84:ALA:O	1:A:87:LEU:N	0.53	2.42	3	1
1:A:103:ILE:C	1:A:105:ASP:N	0.53	2.62	12	3
1:A:108:ARG:O	1:A:110:GLY:N	0.53	2.41	14	3
1:A:161:GLY:C	1:A:163:GLY:H	0.53	2.07	4	2
1:A:89:LEU:O	1:A:91:GLY:N	0.52	2.42	17	1
1:A:65:PHE:CD2	1:A:76:ILE:HD12	0.52	2.39	16	1
1:A:72:GLY:O	1:A:74:ASN:ND2	0.52	2.42	19	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:GLY:O	1:A:93:LEU:N	0.52	2.42	14	3
1:A:20:ASP:OD1	1:A:20:ASP:N	0.52	2.40	8	1
1:A:31:PHE:CD2	1:A:32:LEU:HD12	0.52	2.39	21	3
1:A:161:GLY:C	1:A:163:GLY:N	0.52	2.63	4	2
1:A:53:ASP:O	1:A:54:ASN:ND2	0.52	2.42	18	1
1:A:158:ASP:OD2	1:A:159:GLU:N	0.52	2.43	13	1
1:A:74:ASN:ND2	1:A:74:ASN:O	0.52	2.42	12	2
1:A:185:GLN:C	1:A:186:MET:SD	0.52	2.87	5	1
1:A:69:ASP:O	1:A:71:ASN:N	0.52	2.42	6	1
1:A:93:LEU:HD13	1:A:94:GLU:H	0.52	1.64	5	1
1:A:24:LEU:HD12	1:A:24:LEU:N	0.52	2.19	2	1
1:A:51:VAL:HG22	1:A:52:PRO:HD2	0.52	1.80	19	1
1:A:34:GLU:O	1:A:35:CYS:SG	0.52	2.68	1	4
1:A:170:PHE:O	1:A:173:GLY:N	0.52	2.42	11	4
1:A:90:ARG:CG	1:A:91:GLY:N	0.52	2.72	8	1
1:A:115:GLN:CD	1:A:115:GLN:N	0.52	2.62	19	1
1:A:175:ARG:O	1:A:175:ARG:NE	0.52	2.43	19	1
1:A:73:ASP:O	1:A:75:THR:N	0.52	2.43	10	3
1:A:54:ASN:ND2	1:A:54:ASN:O	0.52	2.42	10	1
1:A:60:TYR:C	1:A:60:TYR:CD1	0.52	2.83	17	1
1:A:185:GLN:O	1:A:186:MET:SD	0.52	2.68	21	4
1:A:42:MET:O	1:A:45:PHE:N	0.52	2.42	5	3
1:A:56:GLU:OE1	1:A:130:ALA:HB2	0.52	2.04	6	2
1:A:180:VAL:CG1	1:A:181:MET:N	0.52	2.73	16	1
1:A:94:GLU:C	1:A:96:LYS:N	0.52	2.63	7	18
1:A:95:HIS:CD2	1:A:96:LYS:N	0.52	2.77	14	1
1:A:51:VAL:N	1:A:52:PRO:HD2	0.52	2.21	7	8
1:A:93:LEU:CD1	1:A:93:LEU:C	0.52	2.79	11	1
1:A:29:LYS:O	1:A:31:PHE:N	0.52	2.43	8	1
1:A:35:CYS:SG	1:A:39:THR:O	0.52	2.68	4	1
1:A:91:GLY:C	1:A:93:LEU:H	0.51	2.09	9	2
1:A:73:ASP:C	1:A:74:ASN:CG	0.51	2.69	3	3
1:A:70:THR:C	1:A:72:GLY:N	0.51	2.64	8	8
1:A:32:LEU:O	1:A:35:CYS:SG	0.51	2.68	11	1
1:A:92:THR:H	1:A:95:HIS:CE1	0.51	2.23	19	1
1:A:48:PHE:O	1:A:49:PHE:C	0.51	2.49	3	1
1:A:170:PHE:CE2	1:A:174:ALA:CB	0.51	2.94	18	2
1:A:31:PHE:CE2	1:A:32:LEU:CD2	0.51	2.94	13	1
1:A:70:THR:C	1:A:71:ASN:CG	0.51	2.69	14	4
1:A:19:ALA:O	1:A:22:ALA:HB3	0.51	2.05	3	2
1:A:78:PHE:O	1:A:81:TYR:CD2	0.51	2.63	10	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:GLU:OE2	1:A:130:ALA:CB	0.51	2.59	11	1
1:A:104:TYR:O	1:A:106:LYS:N	0.51	2.43	1	5
1:A:108:ARG:C	1:A:109:ASN:CG	0.51	2.69	10	1
1:A:107:ASP:O	1:A:108:ARG:CB	0.51	2.59	20	3
1:A:158:ASP:O	1:A:159:GLU:CB	0.51	2.58	11	3
1:A:28:TYR:CD1	1:A:28:TYR:C	0.51	2.84	17	1
1:A:107:ASP:CG	1:A:109:ASN:ND2	0.51	2.64	1	3
1:A:104:TYR:OH	1:A:184:LEU:CB	0.51	2.59	15	2
1:A:69:ASP:O	1:A:71:ASN:ND2	0.51	2.43	13	2
1:A:120:ILE:O	1:A:123:SER:N	0.51	2.44	16	8
1:A:58:THR:HG23	1:A:59:GLN:N	0.51	2.20	4	1
1:A:64:MET:O	1:A:68:PHE:N	0.51	2.44	21	2
1:A:44:GLU:OE1	1:A:44:GLU:N	0.51	2.44	12	1
1:A:28:TYR:CE2	1:A:32:LEU:CD1	0.51	2.93	17	2
1:A:50:LYS:O	1:A:51:VAL:C	0.51	2.48	1	6
1:A:28:TYR:CZ	1:A:32:LEU:HD13	0.51	2.40	1	1
1:A:90:ARG:O	1:A:92:THR:N	0.51	2.42	4	1
1:A:50:LYS:O	1:A:51:VAL:CB	0.51	2.59	3	1
1:A:27:TRP:O	1:A:29:LYS:N	0.51	2.43	15	1
1:A:51:VAL:O	1:A:51:VAL:CG2	0.51	2.59	14	2
1:A:93:LEU:CD1	1:A:94:GLU:H	0.51	2.18	5	1
1:A:40:LEU:HD11	1:A:76:ILE:CG2	0.51	2.36	2	1
1:A:93:LEU:O	1:A:95:HIS:ND1	0.51	2.44	19	1
1:A:41:PHE:O	1:A:43:HIS:N	0.50	2.44	15	2
1:A:81:TYR:CD1	1:A:82:VAL:N	0.50	2.79	10	1
1:A:31:PHE:CZ	1:A:38:GLY:O	0.50	2.64	1	1
1:A:88:VAL:O	1:A:90:ARG:N	0.50	2.42	6	2
1:A:107:ASP:CG	1:A:108:ARG:H	0.50	2.08	11	4
1:A:128:LYS:O	1:A:131:CYS:SG	0.50	2.69	5	2
1:A:166:SER:OG	1:A:167:LEU:N	0.50	2.45	6	2
1:A:28:TYR:CE1	1:A:32:LEU:CD2	0.50	2.94	2	1
1:A:20:ASP:CG	1:A:21:ALA:N	0.50	2.63	16	1
1:A:33:GLU:C	1:A:33:GLU:CD	0.50	2.70	10	1
1:A:85:LEU:HD23	1:A:85:LEU:N	0.50	2.21	11	1
1:A:145:THR:N	1:A:146:PRO:CD	0.50	2.74	4	1
1:A:96:LYS:HB2	1:A:96:LYS:HZ2	0.50	1.67	21	2
1:A:50:LYS:HZ3	1:A:50:LYS:HB3	0.50	1.66	21	1
1:A:130:ALA:O	1:A:131:CYS:SG	0.50	2.69	20	2
1:A:100:THR:HG23	1:A:101:PHE:N	0.50	2.20	2	2
1:A:96:LYS:NZ	1:A:96:LYS:CB	0.50	2.75	2	1
1:A:102:LYS:O	1:A:105:ASP:N	0.50	2.45	8	3

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:109:ASN:HD21	1:A:111:CYS:N	0.50	2.04	6	1
1:A:101:PHE:CE1	1:A:167:LEU:HD21	0.50	2.42	18	1
1:A:145:THR:C	1:A:147:GLU:H	0.50	2.10	12	1
1:A:170:PHE:CD1	1:A:171:VAL:N	0.50	2.79	1	2
1:A:91:GLY:C	1:A:93:LEU:N	0.50	2.65	14	2
1:A:86:ASN:OD1	1:A:87:LEU:N	0.50	2.45	1	1
1:A:72:GLY:C	1:A:74:ASN:N	0.50	2.65	6	1
1:A:66:ARG:O	1:A:69:ASP:N	0.50	2.42	10	1
1:A:52:PRO:C	1:A:54:ASN:N	0.50	2.64	9	1
1:A:71:ASN:C	1:A:73:ASP:H	0.50	2.10	6	1
1:A:50:LYS:C	1:A:51:VAL:CG1	0.50	2.80	13	1
1:A:90:ARG:NE	1:A:91:GLY:N	0.50	2.60	20	1
1:A:93:LEU:CD1	1:A:93:LEU:N	0.50	2.75	22	1
1:A:68:PHE:CD1	1:A:99:TRP:NE1	0.50	2.80	12	1
1:A:107:ASP:CG	1:A:116:GLU:OE2	0.49	2.50	11	1
1:A:127:LEU:O	1:A:130:ALA:N	0.49	2.45	16	2
1:A:68:PHE:CE1	1:A:84:ALA:HB2	0.49	2.42	18	2
1:A:144:LEU:O	1:A:145:THR:CB	0.49	2.59	4	1
1:A:145:THR:HB	1:A:146:PRO:CD	0.49	2.37	4	1
1:A:81:TYR:CE1	1:A:85:LEU:HD23	0.49	2.41	22	1
1:A:61:VAL:O	1:A:64:MET:N	0.49	2.45	15	3
1:A:31:PHE:CG	1:A:32:LEU:HD12	0.49	2.41	7	2
1:A:159:GLU:O	1:A:161:GLY:N	0.49	2.45	22	2
1:A:68:PHE:CZ	1:A:84:ALA:CA	0.49	2.95	4	6
1:A:145:THR:O	1:A:146:PRO:C	0.49	2.48	4	1
1:A:124:ILE:CG2	1:A:186:MET:SD	0.49	3.00	7	1
1:A:53:ASP:OD1	1:A:53:ASP:N	0.49	2.32	22	2
1:A:171:VAL:HG12	1:A:172:GLU:N	0.49	2.20	20	2
1:A:104:TYR:OH	1:A:184:LEU:HD11	0.49	2.07	20	1
1:A:73:ASP:O	1:A:75:THR:HG22	0.49	2.07	20	2
1:A:177:ASP:OD1	1:A:177:ASP:N	0.49	2.43	6	1
1:A:90:ARG:HE	1:A:90:ARG:CA	0.49	2.20	21	1
1:A:65:PHE:C	1:A:65:PHE:CD1	0.49	2.86	1	3
1:A:88:VAL:HG12	1:A:89:LEU:N	0.49	2.22	9	1
1:A:171:VAL:CG2	1:A:172:GLU:H	0.49	2.18	19	3
1:A:35:CYS:SG	1:A:44:GLU:OE2	0.49	2.71	3	1
1:A:50:LYS:O	1:A:51:VAL:CG2	0.49	2.60	3	1
1:A:159:GLU:C	1:A:161:GLY:N	0.49	2.65	22	3
1:A:157:VAL:O	1:A:159:GLU:N	0.49	2.42	5	1
1:A:149:VAL:HG22	1:A:150:VAL:N	0.49	2.22	3	7
1:A:45:PHE:C	1:A:45:PHE:CD1	0.49	2.85	9	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:145:THR:CB	1:A:146:PRO:CD	0.49	2.90	4	1
1:A:54:ASN:O	1:A:54:ASN:ND2	0.49	2.46	15	1
1:A:56:GLU:C	1:A:56:GLU:OE1	0.49	2.50	11	1
1:A:153:ILE:O	1:A:157:VAL:HG23	0.49	2.08	1	2
1:A:55:GLU:O	1:A:58:THR:CG2	0.49	2.61	8	1
1:A:180:VAL:HG22	1:A:184:LEU:HD23	0.49	1.85	16	1
1:A:41:PHE:CG	1:A:42:MET:N	0.49	2.81	15	1
1:A:69:ASP:OD2	1:A:80:GLU:OE2	0.49	2.31	15	1
1:A:93:LEU:CD1	1:A:94:GLU:N	0.49	2.75	5	1
1:A:65:PHE:CE2	1:A:76:ILE:CG1	0.49	2.95	11	1
1:A:65:PHE:CE1	1:A:69:ASP:CB	0.49	2.96	20	1
1:A:76:ILE:HG22	1:A:76:ILE:O	0.49	2.08	16	2
1:A:94:GLU:CD	1:A:95:HIS:N	0.49	2.66	9	1
1:A:54:ASN:ND2	1:A:57:ALA:H	0.49	2.06	6	1
1:A:71:ASN:ND2	1:A:71:ASN:O	0.49	2.46	21	1
1:A:81:TYR:O	1:A:84:ALA:HB3	0.49	2.08	12	1
1:A:36:PRO:O	1:A:37:SER:CB	0.49	2.60	14	3
1:A:53:ASP:OD1	1:A:54:ASN:CG	0.49	2.51	16	1
1:A:182:LYS:O	1:A:186:MET:N	0.49	2.45	4	1
1:A:105:ASP:OD1	1:A:107:ASP:OD1	0.49	2.30	21	2
1:A:54:ASN:OD1	1:A:57:ALA:HB3	0.49	2.08	15	1
1:A:113:ASP:C	1:A:115:GLN:N	0.49	2.66	1	8
1:A:72:GLY:C	1:A:74:ASN:H	0.49	2.12	10	1
1:A:43:HIS:O	1:A:45:PHE:N	0.49	2.46	18	3
1:A:51:VAL:CG1	1:A:51:VAL:O	0.49	2.59	1	2
1:A:76:ILE:CG2	1:A:76:ILE:O	0.49	2.61	1	1
1:A:149:VAL:O	1:A:152:ARG:N	0.49	2.43	22	4
1:A:162:ASP:OD2	1:A:164:GLN:N	0.49	2.46	21	1
1:A:177:ASP:OD2	1:A:180:VAL:HG13	0.48	2.08	7	1
1:A:56:GLU:C	1:A:58:THR:N	0.48	2.65	2	2
1:A:127:LEU:HD23	1:A:127:LEU:O	0.48	2.07	15	1
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:LEU:HD12	0.48	1.85	10	2
1:A:148:GLU:O	1:A:151:ASP:N	0.48	2.46	5	3
1:A:129:LYS:C	1:A:131:CYS:H	0.48	2.12	11	1
1:A:99:TRP:O	1:A:102:LYS:N	0.48	2.45	8	2
1:A:55:GLU:C	1:A:56:GLU:CG	0.48	2.82	17	1
1:A:179:TRP:CD1	1:A:182:LYS:NZ	0.48	2.82	10	1
1:A:96:LYS:O	1:A:100:THR:N	0.48	2.44	10	1
1:A:118:LEU:O	1:A:122:GLU:CG	0.48	2.62	9	2
1:A:125:TYR:CE1	1:A:144:LEU:O	0.48	2.66	4	1
1:A:26:GLU:C	1:A:26:GLU:OE1	0.48	2.52	21	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:65:PHE:O	1:A:69:ASP:CB	0.48	2.61	4	3
1:A:94:GLU:OE2	1:A:94:GLU:N	0.48	2.47	9	1
1:A:104:TYR:CZ	1:A:184:LEU:CD1	0.48	2.94	21	2
1:A:32:LEU:CD2	1:A:37:SER:H	0.48	2.21	22	1
1:A:32:LEU:CD2	1:A:32:LEU:N	0.48	2.76	14	2
1:A:109:ASN:OD1	1:A:109:ASN:N	0.48	2.46	19	4
1:A:73:ASP:C	1:A:73:ASP:OD1	0.48	2.51	11	1
1:A:28:TYR:CE1	1:A:32:LEU:HD23	0.48	2.42	2	1
1:A:36:PRO:C	1:A:38:GLY:N	0.48	2.67	8	1
1:A:125:TYR:CG	1:A:145:THR:OG1	0.48	2.66	4	1
1:A:28:TYR:CZ	1:A:32:LEU:HD12	0.48	2.44	18	3
1:A:41:PHE:CD1	1:A:42:MET:N	0.48	2.81	15	1
1:A:109:ASN:HD22	1:A:111:CYS:H	0.48	1.51	20	1
1:A:109:ASN:ND2	1:A:109:ASN:H	0.48	1.98	16	1
1:A:105:ASP:OD1	1:A:116:GLU:OE1	0.48	2.31	21	1
1:A:127:LEU:HD22	1:A:127:LEU:C	0.48	2.29	13	1
1:A:69:ASP:O	1:A:70:THR:CB	0.48	2.60	3	2
1:A:145:THR:C	1:A:147:GLU:N	0.48	2.67	12	4
1:A:144:LEU:HG	1:A:145:THR:N	0.48	2.23	4	1
1:A:108:ARG:C	1:A:110:GLY:N	0.48	2.66	11	3
1:A:27:TRP:C	1:A:29:LYS:N	0.48	2.67	15	1
1:A:25:GLN:C	1:A:27:TRP:N	0.48	2.68	13	1
1:A:107:ASP:OD1	1:A:116:GLU:OE2	0.48	2.32	11	2
1:A:95:HIS:CD2	1:A:95:HIS:C	0.48	2.87	8	2
1:A:54:ASN:OD1	1:A:55:GLU:N	0.48	2.47	2	2
1:A:125:TYR:O	1:A:129:LYS:N	0.48	2.46	6	1
1:A:88:VAL:HG12	1:A:88:VAL:O	0.48	2.09	21	1
1:A:44:GLU:CD	1:A:44:GLU:N	0.48	2.66	12	1
1:A:104:TYR:CD1	1:A:117:LEU:CD2	0.47	2.97	17	1
1:A:122:GLU:OE1	1:A:122:GLU:C	0.47	2.52	17	1
1:A:56:GLU:HG3	1:A:57:ALA:N	0.47	2.24	9	1
1:A:43:HIS:CG	1:A:44:GLU:N	0.47	2.82	22	1
1:A:71:ASN:ND2	1:A:80:GLU:OE1	0.47	2.43	18	1
1:A:64:MET:SD	1:A:99:TRP:CZ2	0.47	3.07	12	1
1:A:167:LEU:O	1:A:171:VAL:HG22	0.47	2.09	15	1
1:A:87:LEU:C	1:A:87:LEU:CD1	0.47	2.82	15	3
1:A:98:LYS:CG	1:A:99:TRP:N	0.47	2.76	7	1
1:A:81:TYR:CD2	1:A:82:VAL:HG23	0.47	2.44	14	1
1:A:95:HIS:ND1	1:A:95:HIS:O	0.47	2.42	5	1
1:A:55:GLU:C	1:A:57:ALA:N	0.47	2.67	20	4
1:A:106:LYS:C	1:A:108:ARG:H	0.47	2.13	16	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:LEU:N	1:A:93:LEU:CD1	0.47	2.77	14	1
1:A:31:PHE:CE2	1:A:38:GLY:O	0.47	2.67	1	1
1:A:71:ASN:C	1:A:73:ASP:N	0.47	2.68	6	1
1:A:69:ASP:C	1:A:70:THR:OG1	0.47	2.52	13	4
1:A:117:LEU:O	1:A:118:LEU:C	0.47	2.53	7	16
1:A:83:ALA:O	1:A:86:ASN:ND2	0.47	2.48	1	1
1:A:32:LEU:N	1:A:32:LEU:HD22	0.47	2.24	2	2
1:A:99:TRP:CG	1:A:100:THR:N	0.47	2.81	2	1
1:A:101:PHE:CE2	1:A:112:ILE:CD1	0.47	2.98	20	3
1:A:105:ASP:O	1:A:107:ASP:CG	0.47	2.53	22	1
1:A:86:ASN:ND2	1:A:90:ARG:NH1	0.47	2.61	10	1
1:A:31:PHE:CD1	1:A:31:PHE:O	0.47	2.68	5	3
1:A:93:LEU:H	1:A:93:LEU:HD22	0.47	1.70	8	1
1:A:93:LEU:HD13	1:A:93:LEU:N	0.47	2.24	8	1
1:A:89:LEU:O	1:A:90:ARG:C	0.47	2.53	3	2
1:A:117:LEU:CD1	1:A:118:LEU:N	0.47	2.59	12	1
1:A:160:ASN:CG	1:A:162:ASP:OD2	0.47	2.53	12	1
1:A:92:THR:H	1:A:93:LEU:HD23	0.47	1.68	12	1
1:A:20:ASP:OD1	1:A:20:ASP:C	0.47	2.53	11	1
1:A:155:LEU:C	1:A:155:LEU:HD13	0.47	2.30	2	1
1:A:46:LYS:HB3	1:A:46:LYS:NZ	0.47	2.24	4	1
1:A:152:ARG:O	1:A:156:LEU:N	0.47	2.41	17	2
1:A:27:TRP:CZ3	1:A:85:LEU:HD12	0.47	2.45	10	1
1:A:160:ASN:C	1:A:162:ASP:N	0.47	2.69	9	3
1:A:77:ASP:O	1:A:79:LEU:N	0.47	2.47	14	1
1:A:54:ASN:C	1:A:56:GLU:H	0.47	2.13	1	1
1:A:181:MET:O	1:A:182:LYS:C	0.47	2.54	22	3
1:A:99:TRP:CE3	1:A:100:THR:N	0.47	2.83	8	1
1:A:68:PHE:CE1	1:A:84:ALA:CB	0.47	2.97	8	1
1:A:108:ARG:O	1:A:109:ASN:ND2	0.47	2.47	22	1
1:A:104:TYR:CE2	1:A:117:LEU:HD21	0.46	2.45	15	1
1:A:122:GLU:C	1:A:122:GLU:OE1	0.46	2.54	10	1
1:A:107:ASP:OD1	1:A:109:ASN:ND2	0.46	2.48	1	1
1:A:170:PHE:CE1	1:A:174:ALA:HB2	0.46	2.45	20	2
1:A:160:ASN:ND2	1:A:169:GLU:OE1	0.46	2.47	19	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:84:ALA:HA	0.46	2.45	16	4
1:A:64:MET:O	1:A:66:ARG:N	0.46	2.48	17	1
1:A:93:LEU:H	1:A:93:LEU:CD1	0.46	2.20	5	1
1:A:156:LEU:HD23	1:A:156:LEU:C	0.46	2.30	16	1
1:A:79:LEU:N	1:A:79:LEU:CD1	0.46	2.79	19	1
1:A:51:VAL:HG12	1:A:52:PRO:CD	0.46	2.39	7	1

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:122:GLU:CD	1:A:126:LYS:HZ1	0.46	2.13	17	1
1:A:87:LEU:C	1:A:87:LEU:HD13	0.46	2.31	17	2
1:A:172:GLU:O	1:A:176:ARG:NE	0.46	2.48	11	1
1:A:47:ARG:C	1:A:49:PHE:N	0.46	2.68	1	1
1:A:177:ASP:C	1:A:177:ASP:OD1	0.46	2.53	9	1
1:A:23:GLN:O	1:A:27:TRP:CD1	0.46	2.68	6	1
1:A:179:TRP:CH2	1:A:183:MET:CE	0.46	2.99	15	1
1:A:61:VAL:C	1:A:63:ALA:N	0.46	2.66	15	1
1:A:57:ALA:CB	1:A:127:LEU:HD23	0.46	2.40	13	1
1:A:99:TRP:CE3	1:A:99:TRP:O	0.46	2.68	17	1
1:A:33:GLU:C	1:A:34:GLU:CG	0.46	2.84	11	1
1:A:71:ASN:ND2	1:A:71:ASN:C	0.46	2.69	2	1
1:A:67:ALA:HB2	1:A:103:ILE:HA	0.46	1.87	8	1
1:A:53:ASP:C	1:A:54:ASN:ND2	0.46	2.69	18	1
1:A:145:THR:O	1:A:147:GLU:N	0.46	2.49	12	2
1:A:163:GLY:C	1:A:164:GLN:CD	0.46	2.74	5	1
1:A:81:TYR:O	1:A:85:LEU:HD23	0.46	2.11	19	1
1:A:109:ASN:ND2	1:A:110:GLY:N	0.46	2.64	6	1
1:A:88:VAL:C	1:A:90:ARG:H	0.46	2.12	6	1
1:A:159:GLU:C	1:A:161:GLY:H	0.46	2.14	22	1
1:A:122:GLU:C	1:A:122:GLU:CD	0.46	2.73	10	1
1:A:109:ASN:ND2	1:A:111:CYS:H	0.46	2.09	6	2
1:A:163:GLY:O	1:A:164:GLN:NE2	0.46	2.48	18	2
1:A:117:LEU:HB3	1:A:150:VAL:HG13	0.46	1.88	19	1
1:A:94:GLU:C	1:A:94:GLU:OE1	0.46	2.54	3	1
1:A:50:LYS:C	1:A:52:PRO:HD2	0.46	2.31	11	4
1:A:180:VAL:O	1:A:184:LEU:N	0.46	2.46	9	1
1:A:92:THR:OG1	1:A:95:HIS:CD2	0.46	2.68	19	1
1:A:93:LEU:C	1:A:95:HIS:H	0.46	2.13	6	1
1:A:93:LEU:HD13	1:A:93:LEU:C	0.46	2.30	11	1
1:A:78:PHE:CZ	1:A:82:VAL:HG21	0.46	2.45	2	1
1:A:147:GLU:O	1:A:148:GLU:C	0.46	2.53	4	1
1:A:94:GLU:C	1:A:96:LYS:H	0.45	2.13	13	5
1:A:100:THR:HG22	1:A:101:PHE:N	0.45	2.27	11	2
1:A:113:ASP:O	1:A:116:GLU:N	0.45	2.49	11	1
1:A:41:PHE:O	1:A:42:MET:C	0.45	2.54	8	2
1:A:20:ASP:CG	1:A:21:ALA:H	0.45	2.14	6	1
1:A:65:PHE:CE2	1:A:69:ASP:OD2	0.45	2.68	1	1
1:A:70:THR:O	1:A:71:ASN:CG	0.45	2.54	2	1
1:A:69:ASP:OD1	1:A:80:GLU:OE2	0.45	2.33	2	1
1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:THR:H	0.45	1.71	4	1

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:54:ASN:ND2	1:A:55:GLU:O	0.45	2.49	21	1
1:A:90:ARG:HH11	1:A:91:GLY:C	0.45	2.13	20	1
1:A:54:ASN:ND2	1:A:56:GLU:N	0.45	2.56	6	1
1:A:41:PHE:HB3	1:A:43:HIS:NE2	0.45	2.26	18	1
1:A:50:LYS:O	1:A:51:VAL:HG13	0.45	2.10	13	1
1:A:20:ASP:O	1:A:21:ALA:C	0.45	2.54	7	12
1:A:43:HIS:CD2	1:A:43:HIS:N	0.45	2.84	22	1
1:A:177:ASP:CG	1:A:178:LYS:N	0.45	2.69	10	2
1:A:117:LEU:O	1:A:121:VAL:N	0.45	2.47	20	2
1:A:144:LEU:N	1:A:144:LEU:HD12	0.45	2.27	6	1
1:A:25:GLN:O	1:A:28:TYR:N	0.45	2.49	21	1
1:A:168:ASN:CG	1:A:169:GLU:N	0.45	2.69	12	1
1:A:32:LEU:HD21	1:A:38:GLY:HA2	0.45	1.88	17	2
1:A:44:GLU:OE2	1:A:47:ARG:NH2	0.45	2.49	17	1
1:A:37:SER:C	1:A:39:THR:N	0.45	2.70	11	1
1:A:115:GLN:HG3	1:A:116:GLU:N	0.45	2.25	6	1
1:A:114:ARG:NE	1:A:115:GLN:NE2	0.45	2.62	21	1
1:A:117:LEU:C	1:A:119:ASP:H	0.45	2.15	15	1
1:A:85:LEU:O	1:A:86:ASN:C	0.45	2.55	15	6
1:A:25:GLN:CA	1:A:25:GLN:NE2	0.45	2.80	4	1
1:A:70:THR:O	1:A:71:ASN:C	0.45	2.55	6	4
1:A:167:LEU:O	1:A:170:PHE:N	0.45	2.50	2	3
1:A:176:ARG:O	1:A:177:ASP:CG	0.45	2.56	8	1
1:A:104:TYR:CE1	1:A:117:LEU:HD21	0.45	2.47	13	1
1:A:36:PRO:C	1:A:37:SER:OG	0.45	2.55	17	2
1:A:96:LYS:HZ2	1:A:96:LYS:CB	0.45	2.25	2	1
1:A:107:ASP:O	1:A:108:ARG:C	0.45	2.55	8	3
1:A:42:MET:CG	1:A:43:HIS:N	0.45	2.79	9	2
1:A:147:GLU:O	1:A:149:VAL:N	0.45	2.50	4	1
1:A:162:ASP:C	1:A:162:ASP:OD1	0.45	2.53	22	1
1:A:89:LEU:CD1	1:A:89:LEU:C	0.45	2.78	3	1
1:A:20:ASP:OD2	1:A:21:ALA:N	0.45	2.50	15	1
1:A:93:LEU:CB	1:A:95:HIS:CD2	0.45	2.99	15	1
1:A:107:ASP:C	1:A:108:ARG:CG	0.45	2.84	13	1
1:A:91:GLY:O	1:A:92:THR:C	0.45	2.55	4	2
1:A:40:LEU:CD1	1:A:76:ILE:CG2	0.45	2.95	2	1
1:A:160:ASN:ND2	1:A:162:ASP:OD2	0.45	2.45	19	1
1:A:185:GLN:O	1:A:186:MET:CB	0.44	2.66	7	2
1:A:155:LEU:O	1:A:158:ASP:N	0.44	2.47	10	1
1:A:43:HIS:C	1:A:45:PHE:N	0.44	2.70	10	3
1:A:127:LEU:HD13	1:A:127:LEU:O	0.44	2.12	5	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:109:ASN:CG	1:A:110:GLY:N	0.44	2.71	6	1
1:A:93:LEU:N	1:A:93:LEU:HD12	0.44	2.27	16	2
1:A:81:TYR:CE1	1:A:85:LEU:HD11	0.44	2.47	17	1
1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:THR:H	0.44	1.72	19	1
1:A:105:ASP:OD1	1:A:105:ASP:C	0.44	2.55	18	1
1:A:64:MET:C	1:A:66:ARG:N	0.44	2.68	17	1
1:A:87:LEU:O	1:A:87:LEU:HD13	0.44	2.12	6	2
1:A:76:ILE:O	1:A:76:ILE:CG2	0.44	2.66	2	1
1:A:73:ASP:CG	1:A:74:ASN:N	0.44	2.71	9	2
1:A:47:ARG:HD3	1:A:47:ARG:N	0.44	2.27	20	1
1:A:34:GLU:OE1	1:A:48:PHE:CZ	0.44	2.71	19	1
1:A:181:MET:HG3	1:A:182:LYS:N	0.44	2.27	3	1
1:A:81:TYR:O	1:A:84:ALA:N	0.44	2.50	12	2
1:A:52:PRO:O	1:A:54:ASN:N	0.44	2.50	9	1
1:A:77:ASP:O	1:A:78:PHE:C	0.44	2.56	13	4
1:A:168:ASN:ND2	1:A:168:ASN:N	0.44	2.64	14	1
1:A:46:LYS:NZ	1:A:46:LYS:HB3	0.44	2.28	1	1
1:A:104:TYR:CE1	1:A:120:ILE:CG2	0.44	2.99	6	1
1:A:71:ASN:HD21	1:A:73:ASP:H	0.44	1.40	22	1
1:A:185:GLN:HG2	1:A:186:MET:N	0.44	2.28	15	2
1:A:117:LEU:HD23	1:A:121:VAL:HG13	0.44	1.90	13	1
1:A:144:LEU:HD22	1:A:149:VAL:CG1	0.44	2.42	5	1
1:A:23:GLN:O	1:A:27:TRP:N	0.44	2.45	11	1
1:A:28:TYR:CD1	1:A:32:LEU:HD12	0.44	2.48	1	1
1:A:90:ARG:CD	1:A:91:GLY:H	0.44	2.25	20	1
1:A:147:GLU:C	1:A:149:VAL:N	0.44	2.68	4	1
1:A:167:LEU:O	1:A:171:VAL:N	0.44	2.41	18	1
1:A:41:PHE:CB	1:A:43:HIS:NE2	0.44	2.81	18	1
1:A:53:ASP:CG	1:A:54:ASN:N	0.44	2.70	12	1
1:A:154:PHE:CZ	1:A:165:LEU:HB2	0.44	2.48	6	4
1:A:101:PHE:CD2	1:A:112:ILE:CD1	0.44	3.01	11	1
1:A:159:GLU:CD	1:A:159:GLU:C	0.44	2.77	6	1
1:A:46:LYS:HG2	1:A:47:ARG:N	0.44	2.28	18	2
1:A:85:LEU:O	1:A:87:LEU:N	0.44	2.51	10	3
1:A:69:ASP:OD2	1:A:76:ILE:HD13	0.44	2.13	13	1
1:A:68:PHE:CE2	1:A:84:ALA:CB	0.44	3.01	20	1
1:A:36:PRO:O	1:A:38:GLY:N	0.44	2.44	19	2
1:A:73:ASP:OD2	1:A:75:THR:HG23	0.44	2.12	22	1
1:A:170:PHE:CZ	1:A:174:ALA:HB1	0.44	2.47	18	1
1:A:69:ASP:C	1:A:69:ASP:OD1	0.44	2.56	15	3
1:A:40:LEU:HD11	1:A:76:ILE:HG21	0.44	1.90	2	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:TYR:CE1	1:A:32:LEU:HD11	0.44	2.47	19	1
1:A:54:ASN:OD1	1:A:57:ALA:N	0.44	2.51	19	1
1:A:23:GLN:O	1:A:27:TRP:CG	0.44	2.71	6	1
1:A:101:PHE:CD1	1:A:167:LEU:HD21	0.44	2.47	18	1
1:A:149:VAL:CG2	1:A:150:VAL:H	0.43	2.26	17	1
1:A:160:ASN:OD1	1:A:160:ASN:N	0.43	2.51	19	1
1:A:181:MET:CG	1:A:182:LYS:H	0.43	2.26	3	1
1:A:41:PHE:C	1:A:43:HIS:N	0.43	2.71	15	1
1:A:94:GLU:O	1:A:95:HIS:C	0.43	2.55	21	4
1:A:105:ASP:OD1	1:A:112:ILE:CG1	0.43	2.66	11	1
1:A:155:LEU:O	1:A:155:LEU:HD13	0.43	2.14	9	1
1:A:33:GLU:CD	1:A:33:GLU:C	0.43	2.76	3	1
1:A:69:ASP:O	1:A:70:THR:OG1	0.43	2.32	16	1
1:A:55:GLU:O	1:A:56:GLU:CB	0.43	2.65	12	1
1:A:121:VAL:CG2	1:A:122:GLU:H	0.43	2.25	13	2
1:A:93:LEU:HB2	1:A:95:HIS:CE1	0.43	2.48	14	2
1:A:180:VAL:O	1:A:184:LEU:CD2	0.43	2.67	13	1
1:A:65:PHE:CD1	1:A:69:ASP:HB3	0.43	2.48	13	1
1:A:104:TYR:OH	1:A:184:LEU:CA	0.43	2.67	7	1
1:A:81:TYR:CE1	1:A:82:VAL:HG23	0.43	2.48	10	1
1:A:85:LEU:CD2	1:A:85:LEU:N	0.43	2.81	11	1
1:A:107:ASP:CG	1:A:109:ASN:HD21	0.43	2.16	9	1
1:A:29:LYS:CG	1:A:30:LYS:N	0.43	2.81	19	1
1:A:179:TRP:O	1:A:181:MET:N	0.43	2.52	18	1
1:A:46:LYS:CG	1:A:47:ARG:N	0.43	2.81	18	1
1:A:78:PHE:C	1:A:78:PHE:CD1	0.43	2.91	10	1
1:A:155:LEU:C	1:A:155:LEU:CD1	0.43	2.87	2	1
1:A:168:ASN:N	1:A:168:ASN:OD1	0.43	2.50	8	2
1:A:105:ASP:O	1:A:108:ARG:N	0.43	2.49	6	3
1:A:104:TYR:CE1	1:A:117:LEU:CD2	0.43	3.02	13	1
1:A:88:VAL:C	1:A:89:LEU:HD12	0.43	2.34	17	1
1:A:103:ILE:CG2	1:A:104:TYR:N	0.43	2.82	2	1
1:A:79:LEU:O	1:A:80:GLU:C	0.43	2.57	15	8
1:A:177:ASP:OD2	1:A:178:LYS:N	0.43	2.52	10	1
1:A:68:PHE:CE1	1:A:99:TRP:CD1	0.43	3.07	10	1
1:A:122:GLU:CD	1:A:122:GLU:C	0.43	2.77	17	1
1:A:101:PHE:CD2	1:A:112:ILE:HD11	0.43	2.48	11	1
1:A:153:ILE:O	1:A:157:VAL:CG2	0.43	2.67	1	2
1:A:97:LEU:O	1:A:99:TRP:N	0.43	2.52	12	1
1:A:109:ASN:HD21	1:A:111:CYS:CB	0.43	2.26	6	1
1:A:32:LEU:O	1:A:33:GLU:CB	0.43	2.66	21	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:149:VAL:CG2	1:A:183:MET:SD	0.43	3.07	12	1
1:A:47:ARG:O	1:A:48:PHE:C	0.43	2.57	10	6
1:A:127:LEU:C	1:A:129:LYS:N	0.43	2.72	1	1
1:A:144:LEU:H	1:A:144:LEU:HD12	0.43	1.74	1	2
1:A:32:LEU:HD22	1:A:32:LEU:N	0.42	2.29	15	1
1:A:94:GLU:O	1:A:97:LEU:N	0.42	2.52	6	3
1:A:84:ALA:O	1:A:85:LEU:C	0.42	2.58	3	2
1:A:170:PHE:CE1	1:A:174:ALA:CB	0.42	3.02	14	2
1:A:47:ARG:C	1:A:49:PHE:H	0.42	2.17	1	1
1:A:160:ASN:O	1:A:162:ASP:N	0.42	2.52	8	3
1:A:47:ARG:O	1:A:51:VAL:CA	0.42	2.67	16	1
1:A:171:VAL:C	1:A:173:GLY:N	0.42	2.72	19	2
1:A:157:VAL:O	1:A:157:VAL:HG23	0.42	2.13	12	1
1:A:81:TYR:CD2	1:A:82:VAL:N	0.42	2.87	12	1
1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:THR:N	0.42	2.28	19	1
1:A:125:TYR:CD1	1:A:144:LEU:O	0.42	2.72	4	1
1:A:107:ASP:OD1	1:A:107:ASP:C	0.42	2.57	3	1
1:A:90:ARG:NE	1:A:90:ARG:CA	0.42	2.82	21	1
1:A:60:TYR:CD1	1:A:60:TYR:C	0.42	2.93	12	1
1:A:101:PHE:CE2	1:A:112:ILE:HD11	0.42	2.49	20	1
1:A:52:PRO:O	1:A:53:ASP:CG	0.42	2.57	16	1
1:A:104:TYR:CE2	1:A:184:LEU:HD11	0.42	2.49	21	1
1:A:87:LEU:HD13	1:A:87:LEU:O	0.42	2.15	15	1
1:A:93:LEU:HB2	1:A:95:HIS:CD2	0.42	2.49	15	1
1:A:55:GLU:CD	1:A:55:GLU:N	0.42	2.73	13	1
1:A:81:TYR:CD1	1:A:85:LEU:HD21	0.42	2.48	11	1
1:A:28:TYR:CE1	1:A:32:LEU:HD12	0.42	2.47	1	1
1:A:23:GLN:HG3	1:A:27:TRP:CE2	0.42	2.49	9	1
1:A:108:ARG:HA	1:A:108:ARG:NE	0.42	2.30	21	1
1:A:157:VAL:CG2	1:A:169:GLU:O	0.42	2.67	21	1
1:A:20:ASP:O	1:A:23:GLN:CB	0.42	2.67	21	1
1:A:54:ASN:O	1:A:55:GLU:CB	0.42	2.67	1	1
1:A:32:LEU:C	1:A:34:GLU:N	0.42	2.71	2	2
1:A:65:PHE:CD1	1:A:65:PHE:O	0.42	2.72	20	2
1:A:48:PHE:CG	1:A:48:PHE:O	0.42	2.72	22	1
1:A:90:ARG:N	1:A:90:ARG:HD2	0.42	2.28	12	1
1:A:148:GLU:CD	1:A:148:GLU:C	0.42	2.78	15	1
1:A:40:LEU:HG	1:A:41:PHE:N	0.42	2.30	15	1
1:A:73:ASP:O	1:A:74:ASN:C	0.42	2.58	10	1
1:A:180:VAL:O	1:A:181:MET:C	0.42	2.58	11	1
1:A:117:LEU:CD2	1:A:117:LEU:N	0.42	2.82	19	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:LEU:O	1:A:88:VAL:N	0.42	2.53	21	2
1:A:171:VAL:O	1:A:175:ARG:CB	0.42	2.68	12	1
1:A:35:CYS:C	1:A:37:SER:N	0.42	2.72	11	2
1:A:93:LEU:N	1:A:93:LEU:HD22	0.42	2.28	8	1
1:A:84:ALA:O	1:A:88:VAL:N	0.42	2.46	3	1
1:A:167:LEU:O	1:A:171:VAL:HG23	0.42	2.15	18	1
1:A:124:ILE:HG21	1:A:186:MET:SD	0.42	2.55	7	1
1:A:34:GLU:O	1:A:34:GLU:CG	0.42	2.68	7	1
1:A:81:TYR:CE2	1:A:82:VAL:HG23	0.42	2.49	14	1
1:A:96:LYS:HG3	1:A:97:LEU:N	0.42	2.30	14	1
1:A:180:VAL:HG12	1:A:181:MET:N	0.42	2.29	2	1
1:A:183:MET:O	1:A:184:LEU:C	0.42	2.58	19	1
1:A:60:TYR:CZ	1:A:64:MET:SD	0.42	3.13	19	1
1:A:147:GLU:HG2	1:A:148:GLU:N	0.42	2.29	18	1
1:A:179:TRP:C	1:A:181:MET:N	0.42	2.72	18	1
1:A:97:LEU:O	1:A:98:LYS:C	0.42	2.56	12	1
1:A:127:LEU:HD13	1:A:128:LYS:CA	0.42	2.45	13	1
1:A:167:LEU:O	1:A:168:ASN:C	0.42	2.58	9	7
1:A:27:TRP:O	1:A:27:TRP:CD1	0.42	2.73	22	1
1:A:127:LEU:HD23	1:A:127:LEU:C	0.41	2.36	15	1
1:A:99:TRP:C	1:A:99:TRP:CD2	0.41	2.91	14	1
1:A:65:PHE:CE2	1:A:76:ILE:HG12	0.41	2.50	10	1
1:A:56:GLU:C	1:A:56:GLU:CD	0.41	2.78	11	1
1:A:180:VAL:O	1:A:184:LEU:CD1	0.41	2.68	6	1
1:A:127:LEU:C	1:A:127:LEU:CD2	0.41	2.87	22	1
1:A:96:LYS:HB2	1:A:96:LYS:NZ	0.41	2.30	3	1
1:A:170:PHE:CZ	1:A:174:ALA:HB2	0.41	2.50	18	1
1:A:88:VAL:O	1:A:89:LEU:C	0.41	2.58	4	3
1:A:86:ASN:OD1	1:A:86:ASN:C	0.41	2.59	1	1
1:A:149:VAL:HG23	1:A:150:VAL:H	0.41	1.74	8	1
1:A:154:PHE:CE2	1:A:165:LEU:HB2	0.41	2.50	3	2
1:A:65:PHE:CG	1:A:65:PHE:O	0.41	2.73	6	1
1:A:54:ASN:C	1:A:55:GLU:CD	0.41	2.79	13	1
1:A:37:SER:O	1:A:39:THR:N	0.41	2.53	11	1
1:A:113:ASP:C	1:A:115:GLN:H	0.41	2.18	1	1
1:A:92:THR:O	1:A:92:THR:CG2	0.41	2.68	2	1
1:A:99:TRP:CD2	1:A:99:TRP:C	0.41	2.91	2	1
1:A:109:ASN:HD22	1:A:111:CYS:N	0.41	2.13	20	1
1:A:29:LYS:O	1:A:30:LYS:C	0.41	2.57	8	1
1:A:32:LEU:H	1:A:32:LEU:HD22	0.41	1.74	9	1
1:A:97:LEU:O	1:A:97:LEU:HD23	0.41	2.15	6	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:172:GLU:CG	1:A:172:GLU:O	0.41	2.68	3	1
1:A:101:PHE:CE1	1:A:167:LEU:CD2	0.41	3.02	18	1
1:A:127:LEU:HD11	1:A:131:CYS:SG	0.41	2.54	4	1
1:A:182:LYS:O	1:A:183:MET:C	0.41	2.59	18	1
1:A:145:THR:OG1	1:A:148:GLU:CB	0.41	2.69	13	1
1:A:55:GLU:N	1:A:55:GLU:OE2	0.41	2.54	17	1
1:A:105:ASP:OD1	1:A:108:ARG:N	0.41	2.53	5	1
1:A:52:PRO:O	1:A:53:ASP:C	0.41	2.58	11	1
1:A:59:GLN:NE2	1:A:59:GLN:N	0.41	2.68	1	1
1:A:95:HIS:O	1:A:96:LYS:C	0.41	2.59	4	1
1:A:129:LYS:C	1:A:129:LYS:CD	0.41	2.88	18	1
1:A:35:CYS:N	1:A:36:PRO:HD3	0.41	2.30	12	1
1:A:99:TRP:CZ3	1:A:103:ILE:HG13	0.41	2.51	12	1
1:A:70:THR:O	1:A:71:ASN:CB	0.41	2.67	7	1
1:A:107:ASP:N	1:A:107:ASP:OD1	0.41	2.54	8	1
1:A:37:SER:C	1:A:39:THR:H	0.41	2.19	16	1
1:A:42:MET:SD	1:A:43:HIS:N	0.41	2.93	6	1
1:A:105:ASP:OD1	1:A:108:ARG:CA	0.41	2.67	4	1
1:A:41:PHE:O	1:A:45:PHE:N	0.41	2.53	3	1
1:A:162:ASP:CG	1:A:164:GLN:H	0.41	2.18	1	1
1:A:127:LEU:O	1:A:128:LYS:C	0.41	2.59	2	2
1:A:109:ASN:HD22	1:A:110:GLY:N	0.41	2.14	16	1
1:A:144:LEU:CD1	1:A:144:LEU:O	0.41	2.68	16	1
1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:HD22	0.41	2.31	19	1
1:A:79:LEU:O	1:A:82:VAL:N	0.41	2.54	19	1
1:A:107:ASP:C	1:A:107:ASP:OD1	0.41	2.59	21	2
1:A:118:LEU:O	1:A:119:ASP:C	0.41	2.59	12	1
1:A:71:ASN:O	1:A:72:GLY:C	0.41	2.58	15	1
1:A:78:PHE:CD2	1:A:79:LEU:HD12	0.41	2.50	11	1
1:A:28:TYR:CD1	1:A:32:LEU:CD1	0.41	3.04	1	1
1:A:29:LYS:O	1:A:33:GLU:CD	0.41	2.59	2	1
1:A:127:LEU:CD2	1:A:127:LEU:C	0.41	2.89	20	1
1:A:90:ARG:NE	1:A:91:GLY:H	0.41	2.14	20	1
1:A:77:ASP:N	1:A:77:ASP:OD1	0.41	2.54	8	1
1:A:178:LYS:C	1:A:178:LYS:CD	0.41	2.89	6	1
1:A:27:TRP:O	1:A:28:TYR:C	0.41	2.58	15	1
1:A:54:ASN:HD22	1:A:54:ASN:C	0.41	2.18	15	1
1:A:93:LEU:HB2	1:A:95:HIS:NE2	0.41	2.31	15	1
1:A:86:ASN:ND2	1:A:90:ARG:NH2	0.41	2.68	10	1
1:A:177:ASP:OD2	1:A:180:VAL:HG23	0.41	2.15	1	1
1:A:29:LYS:C	1:A:31:PHE:N	0.41	2.75	8	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:88:VAL:C	1:A:90:ARG:N	0.41	2.73	18	1
1:A:55:GLU:CG	1:A:56:GLU:H	0.41	2.29	21	1
1:A:31:PHE:O	1:A:31:PHE:CD1	0.41	2.74	13	1
1:A:28:TYR:HB2	1:A:78:PHE:CE1	0.41	2.51	13	1
1:A:85:LEU:C	1:A:87:LEU:N	0.41	2.74	10	1
1:A:79:LEU:O	1:A:83:ALA:N	0.41	2.50	17	1
1:A:52:PRO:O	1:A:54:ASN:ND2	0.41	2.54	11	1
1:A:23:GLN:HG2	1:A:27:TRP:CE2	0.41	2.51	20	1
1:A:106:LYS:C	1:A:108:ARG:N	0.41	2.74	16	2
1:A:101:PHE:CG	1:A:167:LEU:HD12	0.41	2.51	6	1
1:A:95:HIS:O	1:A:97:LEU:N	0.41	2.54	4	1
1:A:125:TYR:O	1:A:126:LYS:C	0.41	2.59	18	1
1:A:117:LEU:C	1:A:117:LEU:CD1	0.41	2.88	12	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:24:LEU:H	0.41	2.27	12	1
1:A:81:TYR:OH	1:A:85:LEU:HD21	0.40	2.16	15	1
1:A:152:ARG:O	1:A:153:ILE:C	0.40	2.60	17	1
1:A:170:PHE:O	1:A:171:VAL:C	0.40	2.60	1	1
1:A:101:PHE:C	1:A:101:PHE:CD1	0.40	2.95	14	1
1:A:120:ILE:O	1:A:121:VAL:C	0.40	2.59	16	4
1:A:73:ASP:O	1:A:74:ASN:CG	0.40	2.60	10	1
1:A:154:PHE:CE1	1:A:165:LEU:HB2	0.40	2.51	2	2
1:A:157:VAL:HG12	1:A:165:LEU:HD11	0.40	1.94	11	1
1:A:31:PHE:CG	1:A:32:LEU:N	0.40	2.89	11	1
1:A:62:GLU:OE2	1:A:66:ARG:NH1	0.40	2.54	4	1
1:A:25:GLN:O	1:A:27:TRP:N	0.40	2.54	13	1
1:A:145:THR:H	1:A:148:GLU:HB2	0.40	1.76	5	1
1:A:182:LYS:C	1:A:184:LEU:N	0.40	2.75	20	1
1:A:65:PHE:CE2	1:A:76:ILE:HD11	0.40	2.51	20	1
1:A:68:PHE:CG	1:A:69:ASP:N	0.40	2.83	22	1
1:A:98:LYS:CB	1:A:98:LYS:NZ	0.40	2.84	22	1
1:A:158:ASP:OD2	1:A:162:ASP:OD1	0.40	2.40	18	1
1:A:69:ASP:OD1	1:A:73:ASP:OD1	0.40	2.40	10	1
1:A:31:PHE:CE2	1:A:32:LEU:HD12	0.40	2.52	11	1
1:A:107:ASP:CB	1:A:109:ASN:HD21	0.40	2.30	9	1
1:A:121:VAL:O	1:A:122:GLU:C	0.40	2.60	9	1
1:A:157:VAL:CG1	1:A:157:VAL:O	0.40	2.58	9	1
1:A:113:ASP:H	1:A:116:GLU:CD	0.40	2.20	12	1
1:A:89:LEU:HD22	1:A:90:ARG:N	0.40	2.31	14	1
1:A:28:TYR:CD1	1:A:32:LEU:HD23	0.40	2.52	2	1
1:A:43:HIS:CE1	1:A:47:ARG:HE	0.40	2.34	20	1
1:A:45:PHE:O	1:A:49:PHE:CB	0.40	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:148:GLU:O	1:A:149:VAL:C	0.40	2.60	18	1
1:A:154:PHE:O	1:A:155:LEU:C	0.40	2.60	12	1
1:A:97:LEU:N	1:A:97:LEU:HD23	0.40	2.32	12	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	156/204 (76%)	107±5 (69±3%)	35±5 (22±3%)	14±3 (9±2%)	2	12
All	All	3432/4488 (76%)	2360 (69%)	766 (22%)	306 (9%)	2	12

All 65 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	95	HIS	18
1	A	20	ASP	16
1	A	108	ARG	16
1	A	90	ARG	12
1	A	186	MET	12
1	A	36	PRO	10
1	A	71	ASN	10
1	A	37	SER	10
1	A	52	PRO	9
1	A	131	CYS	9
1	A	55	GLU	8
1	A	53	ASP	7
1	A	92	THR	7
1	A	159	GLU	7
1	A	114	ARG	7
1	A	185	GLN	7
1	A	162	ASP	7
1	A	177	ASP	7
1	A	89	LEU	7

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	70	THR	7
1	A	179	TRP	7
1	A	56	GLU	6
1	A	57	ALA	5
1	A	178	LYS	5
1	A	54	ASN	5
1	A	105	ASP	5
1	A	158	ASP	4
1	A	109	ASN	4
1	A	51	VAL	4
1	A	19	ALA	4
1	A	69	ASP	4
1	A	106	LYS	3
1	A	118	LEU	3
1	A	93	LEU	3
1	A	74	ASN	3
1	A	170	PHE	3
1	A	73	ASP	3
1	A	104	TYR	3
1	A	94	GLU	2
1	A	48	PHE	2
1	A	72	GLY	2
1	A	91	GLY	2
1	A	107	ASP	2
1	A	160	ASN	2
1	A	183	MET	2
1	A	161	GLY	2
1	A	34	GLU	2
1	A	157	VAL	2
1	A	42	MET	2
1	A	49	PHE	2
1	A	145	THR	1
1	A	147	GLU	1
1	A	68	PHE	1
1	A	144	LEU	1
1	A	176	ARG	1
1	A	35	CYS	1
1	A	130	ALA	1
1	A	88	VAL	1
1	A	30	LYS	1
1	A	38	GLY	1
1	A	184	LEU	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	44	GLU	1
1	A	28	TYR	1
1	A	97	LEU	1
1	A	78	PHE	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	139/178 (78%)	113±4 (81±3%)	26±4 (19±3%)	5	38
All	All	3058/3916 (78%)	2489 (81%)	569 (19%)	5	38

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	160	ASN	21
1	A	103	ILE	19
1	A	87	LEU	18
1	A	71	ASN	18
1	A	144	LEU	16
1	A	81	TYR	16
1	A	75	THR	15
1	A	70	THR	14
1	A	74	ASN	12
1	A	117	LEU	12
1	A	123	SER	11
1	A	149	VAL	11
1	A	59	GLN	10
1	A	118	LEU	9
1	A	124	ILE	9
1	A	37	SER	9
1	A	42	MET	8
1	A	96	LYS	8
1	A	145	THR	8
1	A	94	GLU	8
1	A	108	ARG	7

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	113	ASP	7
1	A	152	ARG	7
1	A	51	VAL	7
1	A	93	LEU	7
1	A	64	MET	7
1	A	179	TRP	7
1	A	66	ARG	7
1	A	95	HIS	6
1	A	92	THR	6
1	A	29	LYS	6
1	A	100	THR	6
1	A	178	LYS	6
1	A	89	LEU	6
1	A	155	LEU	6
1	A	183	MET	6
1	A	40	LEU	5
1	A	31	PHE	5
1	A	131	CYS	5
1	A	156	LEU	5
1	A	111	CYS	5
1	A	53	ASP	5
1	A	43	HIS	5
1	A	181	MET	5
1	A	107	ASP	5
1	A	39	THR	5
1	A	46	LYS	5
1	A	109	ASN	5
1	A	50	LYS	5
1	A	177	ASP	4
1	A	49	PHE	4
1	A	106	LYS	4
1	A	90	ARG	4
1	A	184	LEU	4
1	A	154	PHE	4
1	A	98	LYS	4
1	A	186	MET	4
1	A	97	LEU	4
1	A	151	ASP	4
1	A	34	GLU	4
1	A	85	LEU	4
1	A	182	LYS	3
1	A	114	ARG	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	41	PHE	3
1	A	129	LYS	3
1	A	127	LEU	3
1	A	164	GLN	3
1	A	25	GLN	3
1	A	125	TYR	3
1	A	68	PHE	3
1	A	115	GLN	3
1	A	102	LYS	3
1	A	168	ASN	3
1	A	176	ARG	3
1	A	30	LYS	3
1	A	119	ASP	3
1	A	23	GLN	2
1	A	76	ILE	2
1	A	126	LYS	2
1	A	54	ASN	2
1	A	86	ASN	2
1	A	148	GLU	2
1	A	73	ASP	2
1	A	128	LYS	2
1	A	48	PHE	2
1	A	69	ASP	2
1	A	47	ARG	2
1	A	28	TYR	2
1	A	65	PHE	2
1	A	77	ASP	2
1	A	162	ASP	2
1	A	180	VAL	2
1	A	33	GLU	2
1	A	99	TRP	2
1	A	78	PHE	2
1	A	172	GLU	2
1	A	159	GLU	1
1	A	32	LEU	1
1	A	45	PHE	1
1	A	175	ARG	1
1	A	35	CYS	1
1	A	88	VAL	1
1	A	58	THR	1
1	A	56	GLU	1
1	A	121	VAL	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	55	GLU	1
1	A	26	GLU	1
1	A	62	GLU	1
1	A	44	GLU	1
1	A	27	TRP	1
1	A	185	GLN	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](#)

Of 3 ligands modelled in this entry, 3 are monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

### 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 53% for the well-defined parts and 54% for the entire structure.

### 7.1 Chemical shift list 1

File name: BMRB entry 4492

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	1418
Number of shifts mapped to atoms	1418
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
$^{13}\text{C}_\alpha$	196	$-0.54 \pm 0.07$	Should be applied
$^{13}\text{C}_\beta$	183	$-0.04 \pm 0.05$	None needed ( $< 0.5$ ppm)
$^{13}\text{C}'$	179	$-0.29 \pm 0.06$	None needed ( $< 0.5$ ppm)
$^{15}\text{N}$	185	$0.03 \pm 0.22$	None needed ( $< 0.5$ ppm)

#### 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 53%, i.e. 1079 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2021. 0 out of 28 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	$^1\text{H}$	$^{13}\text{C}$	$^{15}\text{N}$
Backbone	732/774 (95%)	294/309 (95%)	293/312 (94%)	145/153 (95%)
Sidechain	347/1058 (33%)	203/617 (33%)	144/391 (37%)	0/50 (0%)

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

	Total	$^1\text{H}$	$^{13}\text{C}$	$^{15}\text{N}$
Aromatic	0/189 (0%)	0/101 (0%)	0/83 (0%)	0/5 (0%)
Overall	1079/2021 (53%)	497/1027 (48%)	437/786 (56%)	145/208 (70%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 54%, i.e. 1291 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2390. 0 out of 33 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	$^1\text{H}$	$^{13}\text{C}$	$^{15}\text{N}$
Backbone	879/937 (94%)	352/374 (94%)	352/378 (93%)	175/185 (95%)
Sidechain	412/1243 (33%)	242/724 (33%)	170/462 (37%)	0/57 (0%)
Aromatic	0/210 (0%)	0/112 (0%)	0/92 (0%)	0/6 (0%)
Overall	1291/2390 (54%)	594/1210 (49%)	522/932 (56%)	175/248 (71%)

#### 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:

