



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

May 28, 2020 – 11:04 pm BST

PDB ID : 2LCP
Title : NMR structure of calcium loaded, un-myristoylated human NCS-1
Authors : Heidarsson, P.O.; Bjerrum-Bohr, I.J.; Bellucci, L.; Gitte, J.; Corni, S.; Poulsen, F.M.; Finn, B.E.; Di Felice, R.; Kragelund, B.
Deposited on : 2011-05-05

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

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

A user guide is available at

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/NMRValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The following versions of software and data (see [references ⓘ](#)) were used in the production of this report:

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)
NmrClust : Kelley et al. (1996)
MolProbity : 4.02b-467
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
ShiftChecker : 2.11
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.11

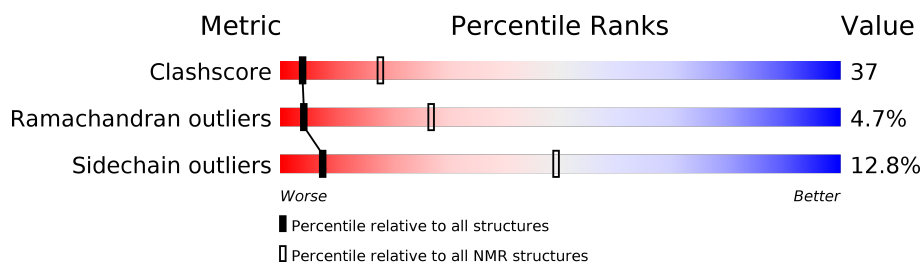
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 58%.

Percentile scores (ranging between 0-100) for global validation metrics of the entry are shown in the following graphic. The table shows the number of entries on which the scores are based.



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	158937	12864
Ramachandran outliers	154571	11451
Sidechain outliers	154315	11428

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the experimental data. The red, orange, yellow and green segments indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 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	190	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 2 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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:9-A:184 (176)	1.06	2

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

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

The models can be grouped into 4 clusters and 1 single-model cluster was found.

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

3 Entry composition [i](#)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 3051 atoms, of which 1505 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Neuronal calcium sensor 1.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	190	Total	C	H	N	O	S	0
			3048	987	1505	248	302	6	

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

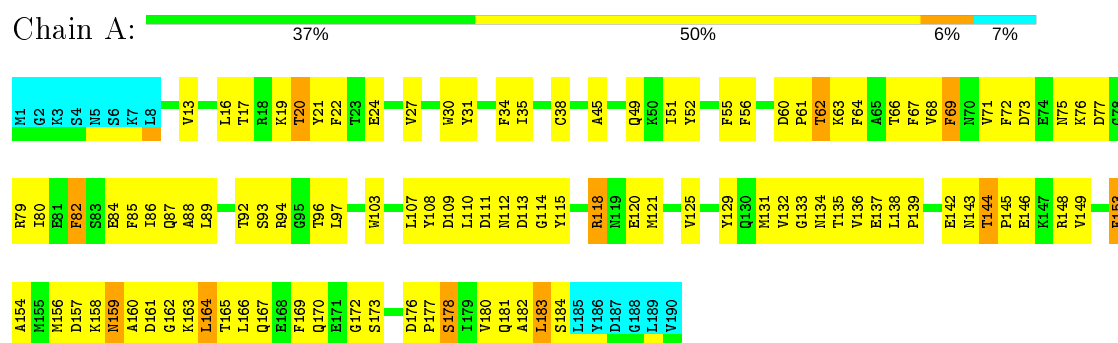
Mol	Chain	Residues	Atoms	
2	A	3	Total	Ca
			3	3

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: Neuronal calcium sensor 1

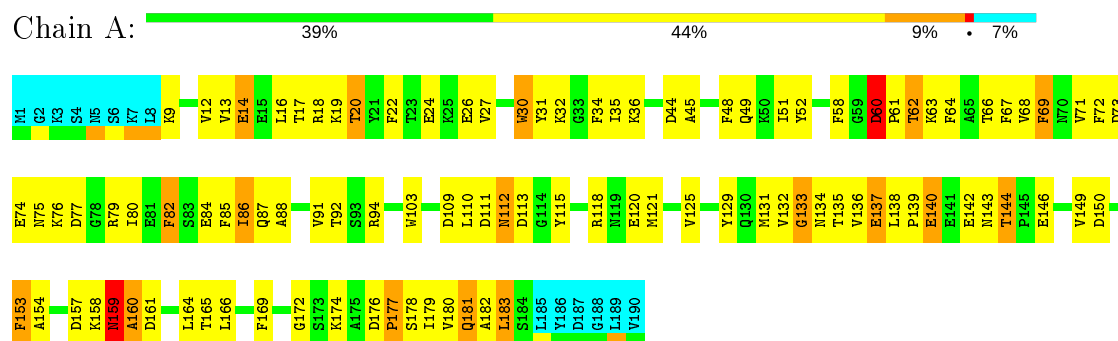


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

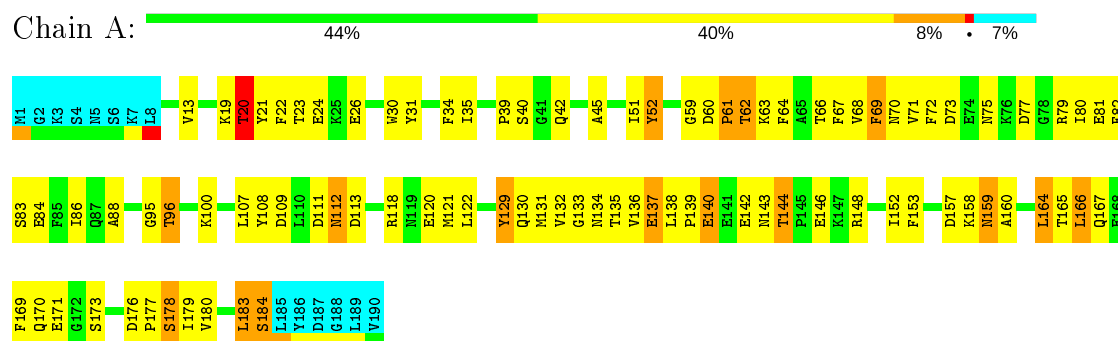
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Neuronal calcium sensor 1



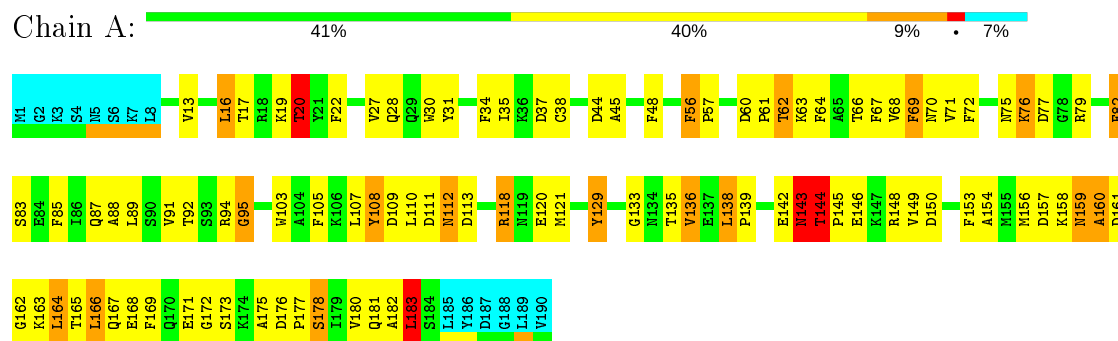
4.2.2 Score per residue for model 2 (medoid)

- Molecule 1: Neuronal calcium sensor 1



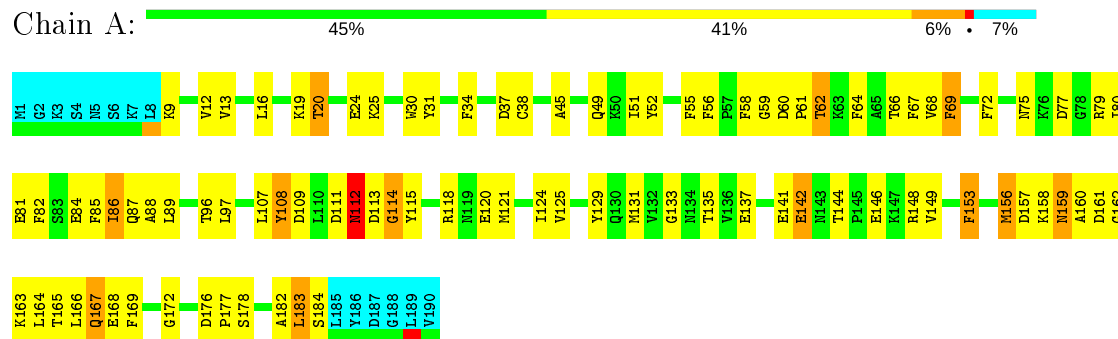
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Neuronal calcium sensor 1



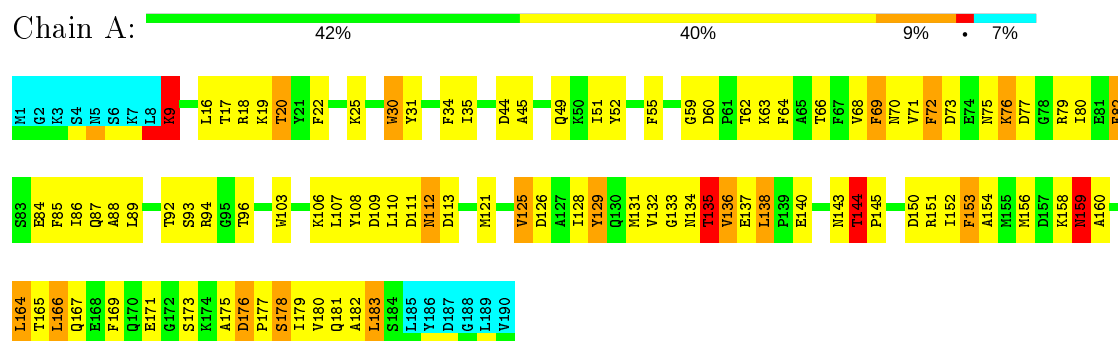
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Neuronal calcium sensor 1



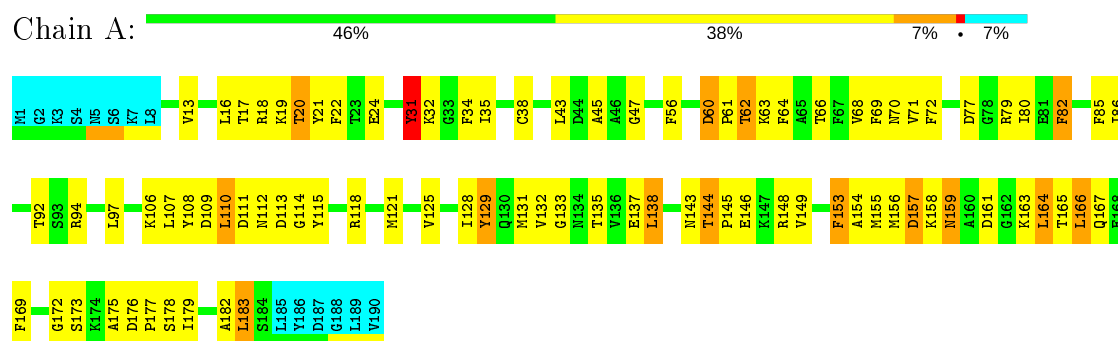
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Neuronal calcium sensor 1



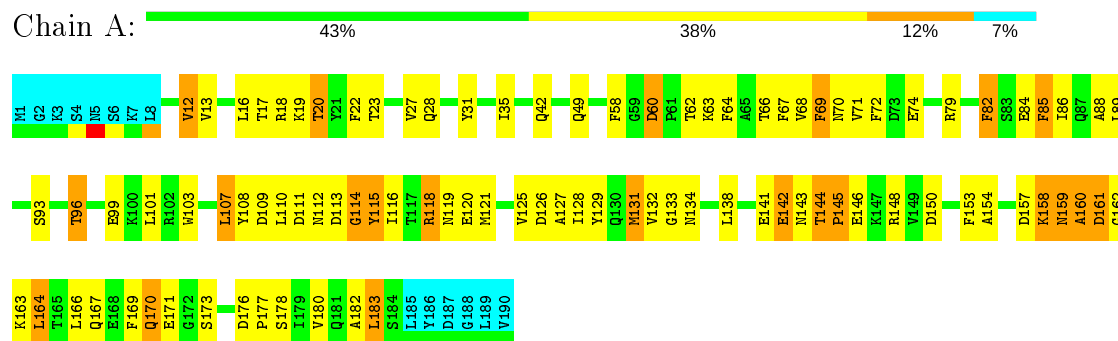
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Neuronal calcium sensor 1



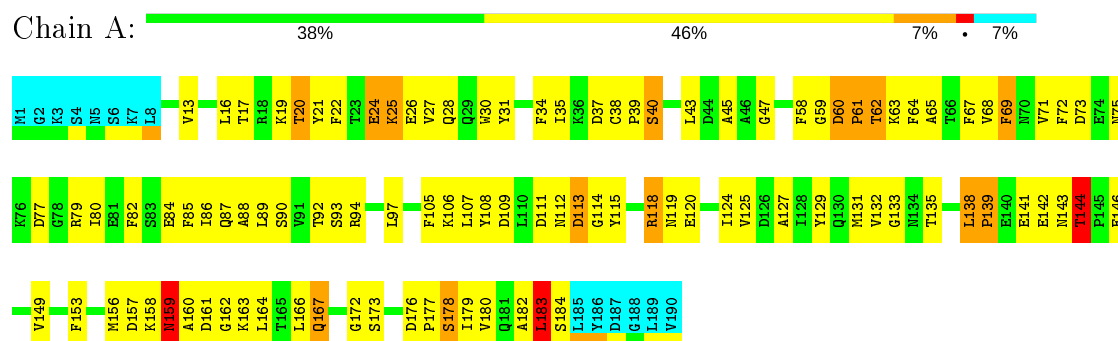
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Neuronal calcium sensor 1



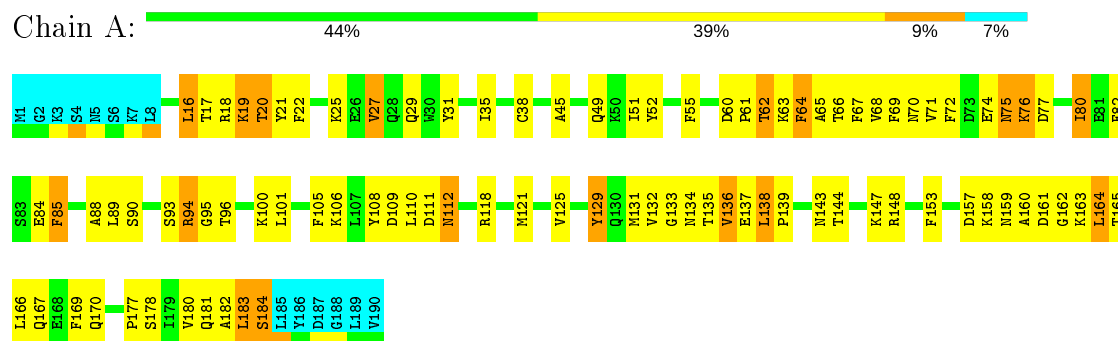
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Neuronal calcium sensor 1



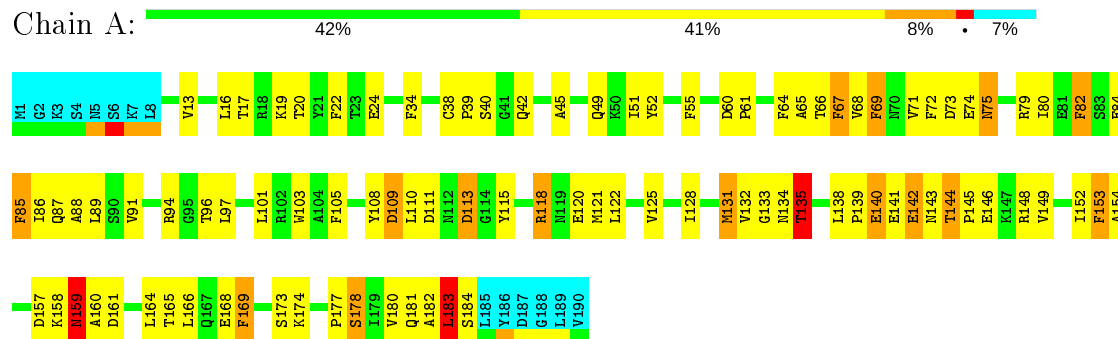
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Neuronal calcium sensor 1



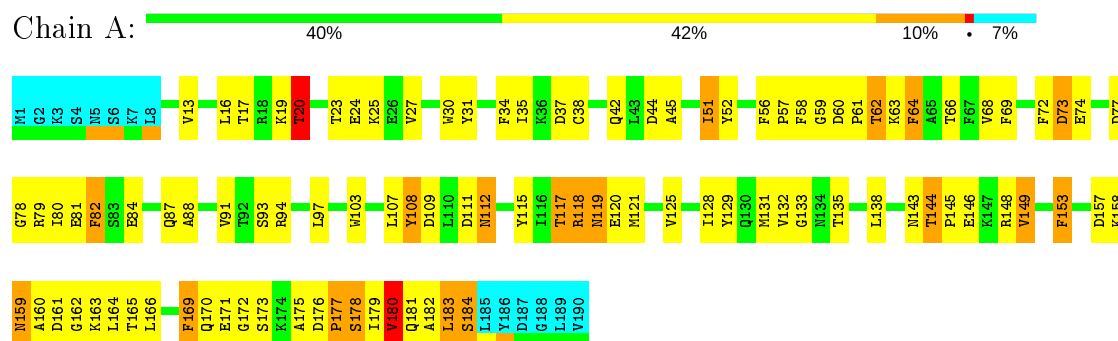
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Neuronal calcium sensor 1



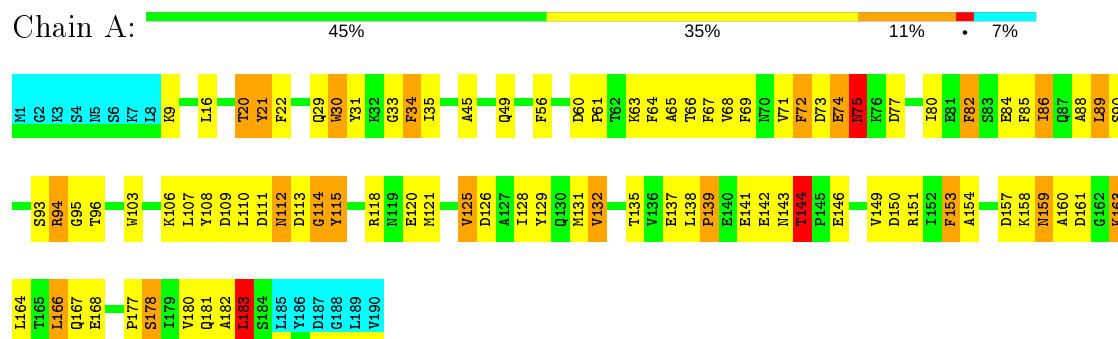
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Neuronal calcium sensor 1



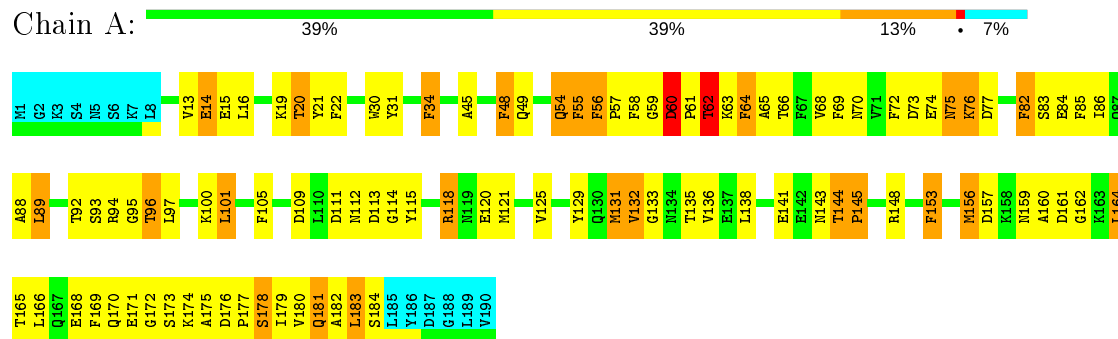
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Neuronal calcium sensor 1



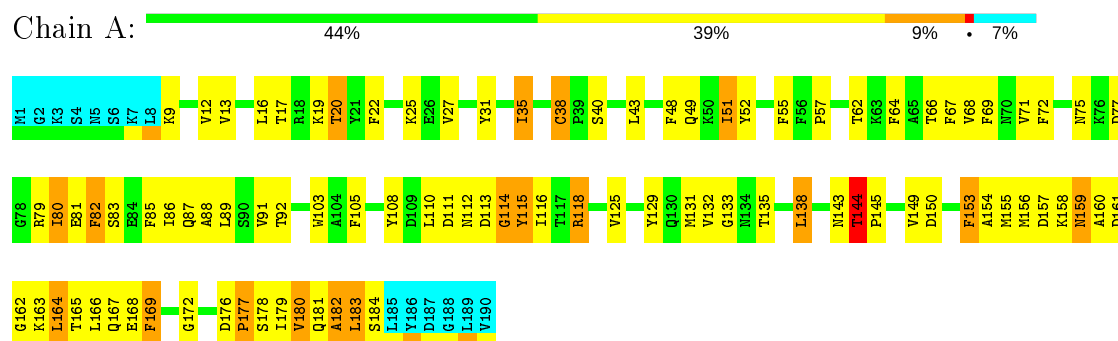
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Neuronal calcium sensor 1



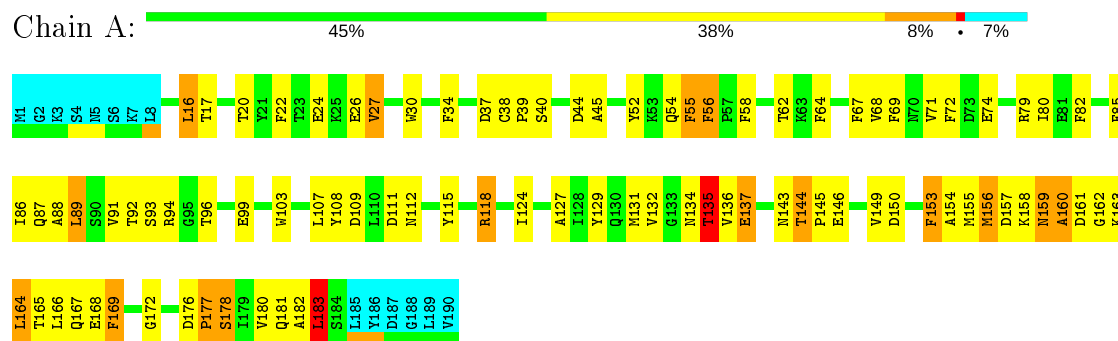
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Neuronal calcium sensor 1



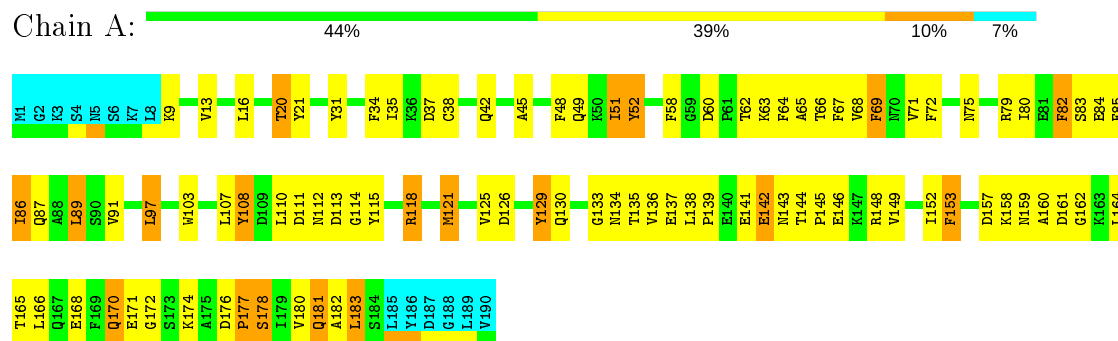
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Neuronal calcium sensor 1



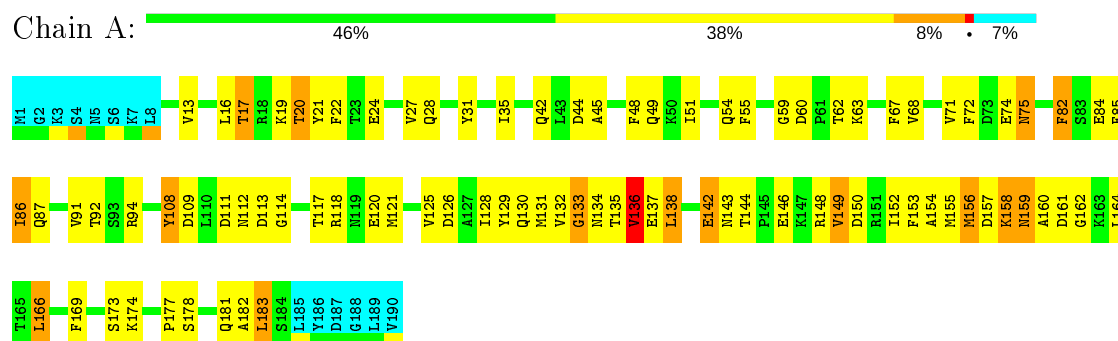
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Neuronal calcium sensor 1



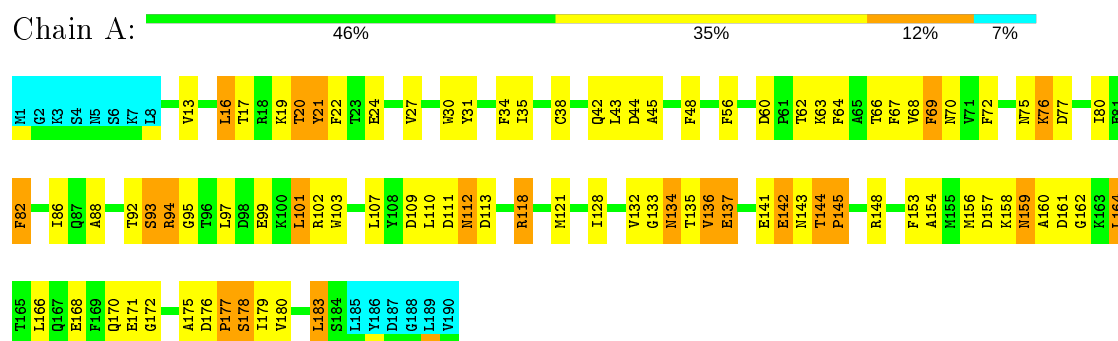
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Neuronal calcium sensor 1



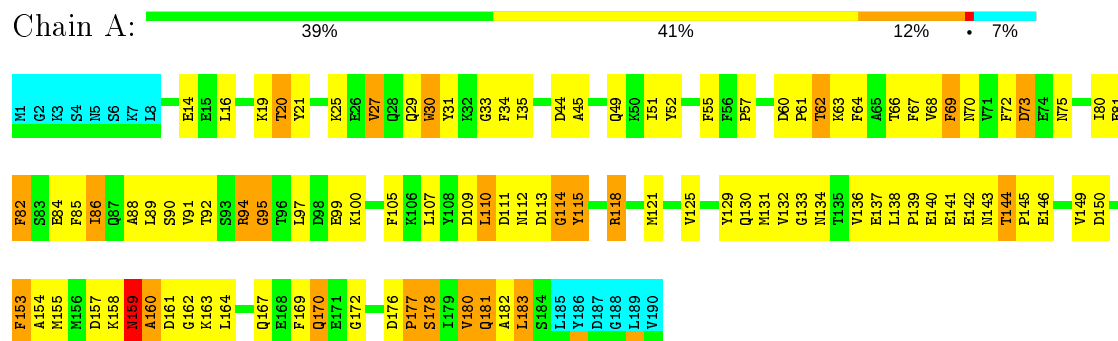
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Neuronal calcium sensor 1



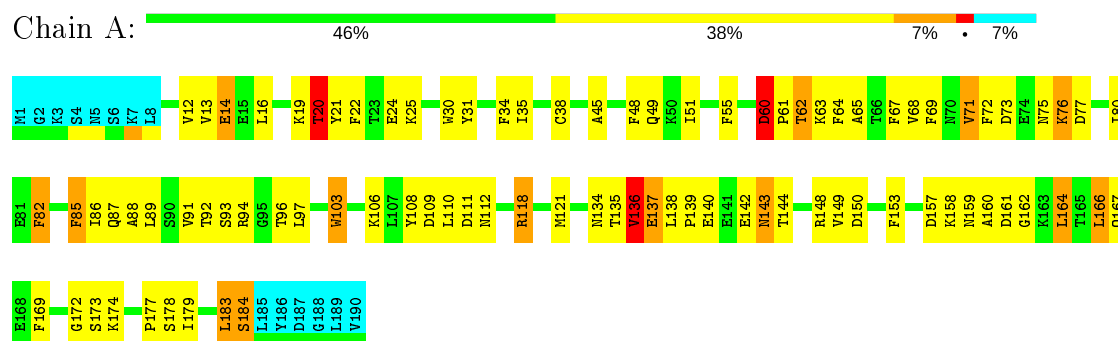
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Neuronal calcium sensor 1



4.2.20 Score per residue for model 20

• Molecule 1: Neuronal calcium sensor 1



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 100 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR NIH	structure solution	
X-PLOR NIH	refinement	

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

Chemical shift file(s)	input_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1477
Number of shifts mapped to atoms	1477
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	58%

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

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	1437	1391	1391	105±12
All	All	28800	27820	27820	2096

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 37.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:72:PHE:CZ	1:A:88:ALA:HB2	0.96	1.96	7	10
1:A:153:PHE:CZ	1:A:164:LEU:HD12	0.95	1.96	4	1
1:A:183:LEU:HD22	1:A:183:LEU:H	0.93	1.24	9	4
1:A:49:GLN:NE2	1:A:66:THR:HG22	0.91	1.80	7	1
1:A:183:LEU:H	1:A:183:LEU:HD22	0.89	1.28	2	5
1:A:183:LEU:N	1:A:183:LEU:HD13	0.88	1.83	5	4
1:A:166:LEU:H	1:A:166:LEU:HD13	0.88	1.29	12	1
1:A:166:LEU:HD23	1:A:166:LEU:H	0.87	1.28	9	4
1:A:183:LEU:N	1:A:183:LEU:HD23	0.85	1.86	20	3
1:A:153:PHE:CE2	1:A:164:LEU:HD13	0.84	2.08	20	1
1:A:97:LEU:HD22	1:A:97:LEU:H	0.83	1.32	6	1
1:A:85:PHE:CE1	1:A:89:LEU:HD11	0.83	2.08	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:88:ALA:O	1:A:92:THR:HG23	0.83	1.74	19	1
1:A:67:PHE:O	1:A:71:VAL:HG22	0.83	1.73	3	2
1:A:183:LEU:N	1:A:183:LEU:HD22	0.81	1.90	13	5
1:A:67:PHE:CZ	1:A:124:ILE:HD11	0.80	2.11	8	1
1:A:128:ILE:O	1:A:132:VAL:HG22	0.80	1.76	10	3
1:A:64:PHE:O	1:A:68:VAL:HG23	0.79	1.77	15	12
1:A:156:MET:SD	1:A:179:ILE:HD11	0.78	2.18	5	2
1:A:62:THR:O	1:A:66:THR:HG23	0.78	1.79	18	6
1:A:183:LEU:HD13	1:A:183:LEU:N	0.78	1.93	2	4
1:A:13:VAL:O	1:A:17:THR:HG23	0.77	1.79	10	9
1:A:153:PHE:CD1	1:A:164:LEU:HD11	0.76	2.14	1	1
1:A:121:MET:O	1:A:125:VAL:HG23	0.74	1.83	11	7
1:A:144:THR:HG23	1:A:144:THR:O	0.74	1.81	4	1
1:A:182:ALA:C	1:A:183:LEU:HD13	0.74	2.03	13	2
1:A:183:LEU:HD23	1:A:183:LEU:N	0.74	1.97	18	2
1:A:153:PHE:CZ	1:A:164:LEU:HD11	0.73	2.19	16	1
1:A:72:PHE:CE2	1:A:88:ALA:HB2	0.73	2.19	18	4
1:A:136:VAL:HG13	1:A:136:VAL:O	0.73	1.82	5	2
1:A:183:LEU:HD22	1:A:183:LEU:N	0.73	1.99	9	4
1:A:107:LEU:HD23	1:A:107:LEU:O	0.73	1.84	11	2
1:A:144:THR:O	1:A:144:THR:HG23	0.73	1.81	17	1
1:A:172:GLY:O	1:A:176:ASP:N	0.72	2.22	6	9
1:A:85:PHE:CZ	1:A:89:LEU:HD11	0.72	2.18	8	1
1:A:153:PHE:CE1	1:A:164:LEU:HD21	0.72	2.19	19	6
1:A:31:TYR:CD1	1:A:82:PHE:CE2	0.72	2.78	12	1
1:A:60:ASP:N	1:A:61:PRO:CD	0.72	2.53	11	2
1:A:62:THR:O	1:A:66:THR:HG22	0.71	1.84	2	1
1:A:128:ILE:O	1:A:132:VAL:HG12	0.71	1.85	18	2
1:A:45:ALA:HB2	1:A:69:PHE:CZ	0.71	2.21	8	11
1:A:107:LEU:O	1:A:107:LEU:HD23	0.71	1.84	16	3
1:A:166:LEU:HD23	1:A:166:LEU:N	0.71	1.99	9	3
1:A:110:LEU:C	1:A:110:LEU:HD13	0.71	2.06	9	2
1:A:166:LEU:H	1:A:166:LEU:HD23	0.70	1.45	5	2
1:A:97:LEU:HD22	1:A:97:LEU:N	0.70	2.00	6	3
1:A:138:LEU:HD23	1:A:138:LEU:N	0.70	2.02	11	2
1:A:182:ALA:C	1:A:183:LEU:HD12	0.70	2.07	10	1
1:A:97:LEU:N	1:A:97:LEU:HD23	0.69	2.02	13	1
1:A:159:ASN:ND2	1:A:161:ASP:N	0.69	2.40	1	1
1:A:45:ALA:HB2	1:A:69:PHE:CD1	0.69	2.21	3	1
1:A:64:PHE:N	1:A:64:PHE:CD1	0.69	2.59	11	1
1:A:20:THR:HG23	1:A:22:PHE:H	0.69	1.48	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:118:ARG:NE	1:A:153:PHE:CD1	0.69	2.60	4	2
1:A:69:PHE:CD2	1:A:70:ASN:N	0.69	2.61	5	1
1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HD23	0.69	1.48	11	4
1:A:113:ASP:N	1:A:113:ASP:OD1	0.69	2.23	10	4
1:A:119:ASN:ND2	1:A:120:GLU:N	0.68	2.41	11	1
1:A:121:MET:SD	1:A:153:PHE:CE2	0.68	2.87	10	4
1:A:64:PHE:CD1	1:A:65:ALA:N	0.68	2.61	9	4
1:A:31:TYR:CG	1:A:32:LYS:N	0.68	2.62	6	1
1:A:131:MET:SD	1:A:131:MET:N	0.68	2.67	10	1
1:A:143:ASN:ND2	1:A:181:GLN:NE2	0.68	2.41	10	1
1:A:159:ASN:O	1:A:160:ALA:HB3	0.68	1.89	10	14
1:A:159:ASN:H	1:A:159:ASN:ND2	0.68	1.86	5	1
1:A:21:TYR:N	1:A:21:TYR:CD1	0.68	2.60	18	1
1:A:97:LEU:HD23	1:A:97:LEU:N	0.68	2.04	4	1
1:A:183:LEU:HD12	1:A:183:LEU:N	0.68	2.04	10	4
1:A:85:PHE:CZ	1:A:89:LEU:HD23	0.68	2.24	16	1
1:A:89:LEU:HD13	1:A:89:LEU:C	0.68	2.09	4	1
1:A:108:TYR:CD1	1:A:121:MET:SD	0.67	2.87	16	3
1:A:183:LEU:H	1:A:183:LEU:HD13	0.67	1.47	1	1
1:A:64:PHE:CE1	1:A:131:MET:SD	0.67	2.88	8	1
1:A:148:ARG:O	1:A:152:ILE:HD13	0.67	1.89	16	2
1:A:19:LYS:NZ	1:A:87:GLN:NE2	0.67	2.41	20	1
1:A:64:PHE:CD1	1:A:131:MET:SD	0.67	2.86	2	1
1:A:153:PHE:CD1	1:A:164:LEU:HD21	0.67	2.24	17	4
1:A:183:LEU:H	1:A:183:LEU:CD2	0.67	2.03	19	5
1:A:108:TYR:CE1	1:A:121:MET:SD	0.67	2.87	3	4
1:A:61:PRO:O	1:A:63:LYS:N	0.67	2.28	13	4
1:A:183:LEU:HD12	1:A:183:LEU:H	0.66	1.51	17	2
1:A:54:GLN:NE2	1:A:55:PHE:CE2	0.66	2.64	13	1
1:A:183:LEU:CD2	1:A:183:LEU:H	0.66	2.03	1	3
1:A:129:TYR:CE1	1:A:144:THR:HG21	0.65	2.26	7	1
1:A:121:MET:SD	1:A:153:PHE:CD2	0.65	2.89	2	3
1:A:181:GLN:O	1:A:182:ALA:HB3	0.65	1.91	9	1
1:A:110:LEU:C	1:A:110:LEU:HD23	0.65	2.12	20	1
1:A:37:ASP:OD1	1:A:38:CYS:N	0.65	2.30	8	4
1:A:42:GLN:HE22	1:A:79:ARG:NH2	0.65	1.89	2	2
1:A:108:TYR:CE1	1:A:121:MET:CE	0.65	2.80	4	3
1:A:97:LEU:CD2	1:A:97:LEU:H	0.64	2.04	6	3
1:A:158:LYS:O	1:A:160:ALA:N	0.64	2.30	19	16
1:A:118:ARG:CD	1:A:118:ARG:H	0.64	2.05	11	2
1:A:97:LEU:H	1:A:97:LEU:HD12	0.64	1.51	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:42:GLN:NE2	1:A:79:ARG:CZ	0.64	2.61	16	3
1:A:166:LEU:H	1:A:166:LEU:CD2	0.64	2.04	9	4
1:A:155:MET:SD	1:A:156:MET:SD	0.64	2.96	14	1
1:A:161:ASP:OD1	1:A:162:GLY:N	0.64	2.31	8	12
1:A:111:ASP:OD1	1:A:112:ASN:N	0.64	2.30	7	12
1:A:97:LEU:N	1:A:97:LEU:HD12	0.64	2.07	8	1
1:A:16:LEU:HD23	1:A:16:LEU:O	0.64	1.93	5	2
1:A:159:ASN:HD22	1:A:159:ASN:N	0.64	1.90	6	2
1:A:183:LEU:N	1:A:183:LEU:CD1	0.63	2.55	5	3
1:A:183:LEU:CD1	1:A:183:LEU:H	0.63	2.04	17	2
1:A:75:ASN:O	1:A:77:ASP:N	0.63	2.31	13	6
1:A:111:ASP:O	1:A:113:ASP:N	0.63	2.30	4	7
1:A:129:TYR:O	1:A:133:GLY:N	0.63	2.31	19	15
1:A:118:ARG:H	1:A:118:ARG:NE	0.63	1.91	10	3
1:A:52:TYR:CD2	1:A:131:MET:SD	0.63	2.91	15	1
1:A:48:PHE:CE2	1:A:85:PHE:CD2	0.63	2.87	13	1
1:A:72:PHE:CZ	1:A:88:ALA:CB	0.63	2.80	18	7
1:A:64:PHE:CZ	1:A:107:LEU:HD11	0.63	2.29	4	5
1:A:183:LEU:N	1:A:183:LEU:CD2	0.63	2.60	20	9
1:A:166:LEU:H	1:A:166:LEU:HD12	0.63	1.51	8	3
1:A:48:PHE:CE2	1:A:85:PHE:CE2	0.63	2.87	13	1
1:A:110:LEU:O	1:A:110:LEU:HD13	0.63	1.93	10	2
1:A:89:LEU:C	1:A:89:LEU:HD13	0.63	2.14	14	3
1:A:143:ASN:N	1:A:143:ASN:HD22	0.63	1.91	3	1
1:A:135:THR:O	1:A:137:GLU:N	0.62	2.32	9	4
1:A:164:LEU:HD13	1:A:165:THR:N	0.62	2.09	9	7
1:A:159:ASN:HD22	1:A:160:ALA:N	0.62	1.93	8	2
1:A:63:LYS:O	1:A:67:PHE:CD1	0.62	2.52	2	9
1:A:141:GLU:O	1:A:142:GLU:CB	0.62	2.47	10	3
1:A:16:LEU:O	1:A:20:THR:HG22	0.62	1.94	13	3
1:A:51:ILE:HD12	1:A:52:TYR:N	0.62	2.09	1	2
1:A:118:ARG:NH2	1:A:157:ASP:CB	0.62	2.62	9	4
1:A:97:LEU:HD23	1:A:97:LEU:H	0.62	1.53	16	2
1:A:42:GLN:NE2	1:A:79:ARG:NH2	0.62	2.47	2	1
1:A:61:PRO:O	1:A:65:ALA:HB3	0.62	1.95	12	2
1:A:153:PHE:CZ	1:A:164:LEU:HD21	0.62	2.29	11	1
1:A:64:PHE:CD2	1:A:131:MET:SD	0.62	2.93	5	3
1:A:146:GLU:O	1:A:149:VAL:HG22	0.62	1.95	8	7
1:A:118:ARG:NE	1:A:118:ARG:H	0.61	1.91	14	3
1:A:21:TYR:OH	1:A:96:THR:HG23	0.61	1.95	20	1
1:A:159:ASN:HD21	1:A:161:ASP:N	0.61	1.92	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:121:MET:CE	1:A:153:PHE:CE2	0.61	2.83	20	1
1:A:153:PHE:CE1	1:A:164:LEU:HD11	0.61	2.30	1	1
1:A:159:ASN:H	1:A:159:ASN:HD22	0.61	1.39	6	2
1:A:69:PHE:CG	1:A:70:ASN:N	0.61	2.67	5	2
1:A:110:LEU:HD23	1:A:111:ASP:H	0.61	1.55	6	1
1:A:115:TYR:CD1	1:A:115:TYR:N	0.61	2.68	19	3
1:A:49:GLN:OE1	1:A:66:THR:HG22	0.61	1.94	9	1
1:A:110:LEU:N	1:A:110:LEU:HD23	0.61	2.10	5	1
1:A:109:ASP:OD2	1:A:112:ASN:N	0.61	2.33	8	1
1:A:112:ASN:OD1	1:A:113:ASP:N	0.61	2.34	13	1
1:A:110:LEU:HD23	1:A:110:LEU:O	0.61	1.96	18	2
1:A:38:CYS:O	1:A:40:SER:N	0.61	2.34	10	1
1:A:129:TYR:CE1	1:A:146:GLU:OE2	0.61	2.54	15	1
1:A:159:ASN:ND2	1:A:161:ASP:H	0.61	1.94	11	2
1:A:109:ASP:OD1	1:A:112:ASN:N	0.60	2.34	13	4
1:A:166:LEU:N	1:A:166:LEU:HD22	0.60	2.11	14	1
1:A:183:LEU:HD13	1:A:183:LEU:H	0.60	1.56	14	1
1:A:21:TYR:CD2	1:A:93:SER:OG	0.60	2.54	9	1
1:A:14:GLU:OE2	1:A:18:ARG:NE	0.60	2.35	1	1
1:A:118:ARG:HE	1:A:118:ARG:H	0.60	1.39	14	1
1:A:143:ASN:ND2	1:A:183:LEU:O	0.60	2.34	20	2
1:A:135:THR:O	1:A:138:LEU:HD23	0.60	1.96	13	1
1:A:30:TRP:O	1:A:34:PHE:CE2	0.60	2.55	15	6
1:A:182:ALA:O	1:A:184:SER:N	0.60	2.35	10	1
1:A:42:GLN:NE2	1:A:79:ARG:NH1	0.60	2.49	10	1
1:A:158:LYS:CG	1:A:159:ASN:H	0.60	2.10	19	2
1:A:19:LYS:NZ	1:A:87:GLN:HE22	0.60	1.92	20	1
1:A:49:GLN:NE2	1:A:66:THR:OG1	0.60	2.35	5	7
1:A:71:VAL:O	1:A:106:LYS:NZ	0.60	2.34	5	1
1:A:16:LEU:HD22	1:A:20:THR:OG1	0.60	1.97	6	1
1:A:75:ASN:CG	1:A:75:ASN:O	0.60	2.40	12	1
1:A:22:PHE:CD2	1:A:26:GLU:OE1	0.60	2.55	1	3
1:A:44:ASP:OD1	1:A:79:ARG:NE	0.60	2.35	15	2
1:A:75:ASN:ND2	1:A:77:ASP:OD2	0.60	2.35	5	2
1:A:118:ARG:NH2	1:A:157:ASP:OD2	0.60	2.35	20	2
1:A:69:PHE:CE2	1:A:70:ASN:OD1	0.60	2.55	7	2
1:A:56:PHE:N	1:A:56:PHE:CD1	0.60	2.69	3	2
1:A:111:ASP:O	1:A:112:ASN:ND2	0.59	2.35	6	2
1:A:71:VAL:HG13	1:A:72:PHE:N	0.59	2.10	9	7
1:A:139:PRO:O	1:A:143:ASN:N	0.59	2.35	3	4
1:A:105:PHE:CZ	1:A:166:LEU:CD1	0.59	2.85	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:153:PHE:CZ	1:A:164:LEU:CD1	0.59	2.84	16	1
1:A:44:ASP:OD1	1:A:79:ARG:NH1	0.59	2.35	5	1
1:A:138:LEU:CD2	1:A:138:LEU:N	0.59	2.65	11	2
1:A:21:TYR:CD1	1:A:21:TYR:N	0.59	2.69	12	1
1:A:75:ASN:ND2	1:A:75:ASN:O	0.59	2.35	12	1
1:A:63:LYS:O	1:A:67:PHE:CG	0.59	2.56	19	4
1:A:20:THR:O	1:A:21:TYR:CG	0.59	2.56	12	2
1:A:157:ASP:OD1	1:A:163:LYS:N	0.59	2.36	19	1
1:A:64:PHE:CG	1:A:131:MET:SD	0.59	2.95	2	2
1:A:30:TRP:O	1:A:34:PHE:CD1	0.59	2.55	20	4
1:A:115:TYR:CD2	1:A:165:THR:HG22	0.59	2.32	4	2
1:A:56:PHE:CD1	1:A:56:PHE:N	0.59	2.69	13	2
1:A:150:ASP:O	1:A:154:ALA:HB2	0.59	1.98	19	8
1:A:110:LEU:H	1:A:110:LEU:HD23	0.59	1.57	5	1
1:A:20:THR:O	1:A:21:TYR:CD2	0.59	2.56	13	3
1:A:27:VAL:HG13	1:A:86:ILE:HD11	0.59	1.74	14	3
1:A:51:ILE:O	1:A:55:PHE:CD2	0.59	2.56	17	7
1:A:118:ARG:H	1:A:118:ARG:CD	0.59	2.11	20	1
1:A:66:THR:O	1:A:70:ASN:ND2	0.59	2.36	3	1
1:A:159:ASN:ND2	1:A:161:ASP:OD1	0.59	2.35	1	2
1:A:113:ASP:OD1	1:A:114:GLY:N	0.59	2.36	12	5
1:A:97:LEU:HD12	1:A:97:LEU:N	0.59	2.12	19	1
1:A:91:VAL:O	1:A:95:GLY:N	0.59	2.35	3	1
1:A:180:VAL:O	1:A:182:ALA:N	0.59	2.36	13	7
1:A:82:PHE:C	1:A:82:PHE:CD1	0.59	2.77	13	7
1:A:73:ASP:OD2	1:A:78:GLY:N	0.59	2.36	11	1
1:A:55:PHE:N	1:A:55:PHE:CD1	0.59	2.71	15	3
1:A:142:GLU:OE2	1:A:148:ARG:NH2	0.59	2.35	20	2
1:A:159:ASN:O	1:A:160:ALA:CB	0.59	2.51	4	11
1:A:30:TRP:O	1:A:34:PHE:CD2	0.59	2.56	15	4
1:A:16:LEU:O	1:A:20:THR:OG1	0.59	2.21	15	12
1:A:73:ASP:OD2	1:A:76:LYS:N	0.59	2.36	5	1
1:A:60:ASP:N	1:A:131:MET:O	0.59	2.36	7	2
1:A:166:LEU:HD12	1:A:166:LEU:N	0.59	2.12	8	3
1:A:118:ARG:NH1	1:A:157:ASP:OD2	0.59	2.36	15	3
1:A:111:ASP:O	1:A:112:ASN:C	0.58	2.41	1	13
1:A:45:ALA:HB2	1:A:69:PHE:CE2	0.58	2.33	11	10
1:A:19:LYS:O	1:A:21:TYR:N	0.58	2.36	6	2
1:A:157:ASP:O	1:A:159:ASN:ND2	0.58	2.36	8	2
1:A:13:VAL:HG13	1:A:24:GLU:CD	0.58	2.18	18	1
1:A:68:VAL:O	1:A:72:PHE:N	0.58	2.36	1	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:LEU:O	1:A:19:LYS:N	0.58	2.36	11	3
1:A:112:ASN:O	1:A:115:TYR:N	0.58	2.35	13	1
1:A:145:PRO:O	1:A:149:VAL:HG22	0.58	1.98	16	1
1:A:142:GLU:O	1:A:144:THR:N	0.58	2.36	3	4
1:A:72:PHE:O	1:A:72:PHE:CG	0.58	2.56	3	1
1:A:19:LYS:O	1:A:20:THR:CB	0.58	2.51	2	2
1:A:30:TRP:O	1:A:34:PHE:CE1	0.58	2.55	4	4
1:A:79:ARG:NH1	1:A:81:GLU:OE2	0.58	2.36	4	1
1:A:157:ASP:OD1	1:A:159:ASN:ND2	0.58	2.36	6	1
1:A:159:ASN:ND2	1:A:168:GLU:OE2	0.58	2.36	12	2
1:A:86:ILE:O	1:A:86:ILE:HD13	0.58	1.97	12	2
1:A:178:SER:OG	1:A:181:GLN:NE2	0.58	2.36	5	1
1:A:22:PHE:CZ	1:A:93:SER:OG	0.58	2.55	18	2
1:A:118:ARG:H	1:A:118:ARG:HE	0.58	1.40	10	3
1:A:159:ASN:OD1	1:A:160:ALA:N	0.58	2.35	13	1
1:A:99:GLU:OE1	1:A:102:ARG:NH2	0.58	2.36	18	1
1:A:31:TYR:O	1:A:35:ILE:CG1	0.58	2.51	14	14
1:A:56:PHE:CD1	1:A:137:GLU:OE2	0.58	2.56	6	1
1:A:74:GLU:N	1:A:84:GLU:OE2	0.58	2.37	11	2
1:A:109:ASP:OD1	1:A:113:ASP:N	0.58	2.36	10	1
1:A:115:TYR:CE1	1:A:165:THR:OG1	0.58	2.55	11	1
1:A:159:ASN:O	1:A:161:ASP:N	0.58	2.36	19	3
1:A:118:ARG:NE	1:A:157:ASP:OD2	0.58	2.36	3	1
1:A:67:PHE:CE2	1:A:124:ILE:HD12	0.58	2.34	4	1
1:A:132:VAL:O	1:A:138:LEU:HD21	0.58	1.98	13	1
1:A:114:GLY:O	1:A:115:TYR:CD1	0.58	2.56	13	1
1:A:156:MET:O	1:A:159:ASN:ND2	0.58	2.36	5	1
1:A:73:ASP:OD2	1:A:77:ASP:N	0.58	2.36	11	1
1:A:128:ILE:HD12	1:A:183:LEU:HD11	0.58	1.76	11	1
1:A:112:ASN:O	1:A:112:ASN:ND2	0.58	2.36	4	2
1:A:96:THR:N	1:A:99:GLU:OE1	0.58	2.36	7	1
1:A:85:PHE:CE1	1:A:89:LEU:HD23	0.58	2.33	13	4
1:A:58:PHE:O	1:A:135:THR:HG22	0.58	1.98	13	1
1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:HD23	0.57	2.14	1	2
1:A:164:LEU:HD12	1:A:169:PHE:CE2	0.57	2.34	7	1
1:A:143:ASN:O	1:A:145:PRO:N	0.57	2.36	15	1
1:A:125:VAL:HG11	1:A:146:GLU:OE1	0.57	1.99	11	2
1:A:22:PHE:CE2	1:A:93:SER:OG	0.57	2.55	12	2
1:A:126:ASP:OD2	1:A:130:GLN:NE2	0.57	2.36	16	1
1:A:91:VAL:HG11	1:A:103:TRP:HE1	0.57	1.58	1	2
1:A:183:LEU:O	1:A:184:SER:CB	0.57	2.52	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:LYS:O	1:A:36:LYS:NZ	0.57	2.37	1	1
1:A:129:TYR:CD1	1:A:129:TYR:C	0.57	2.78	2	2
1:A:31:TYR:CD1	1:A:82:PHE:CZ	0.57	2.92	4	3
1:A:177:PRO:O	1:A:178:SER:CB	0.57	2.51	14	19
1:A:176:ASP:OD1	1:A:176:ASP:N	0.57	2.37	5	1
1:A:20:THR:HG21	1:A:27:VAL:HG11	0.57	1.74	8	2
1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HD12	0.57	1.59	17	1
1:A:159:ASN:HD21	1:A:161:ASP:CG	0.57	2.03	1	3
1:A:166:LEU:HD22	1:A:167:GLN:N	0.57	2.15	12	1
1:A:110:LEU:HD23	1:A:110:LEU:C	0.57	2.20	18	1
1:A:89:LEU:O	1:A:89:LEU:HD13	0.56	2.00	3	2
1:A:84:GLU:O	1:A:88:ALA:HB3	0.56	2.00	5	3
1:A:42:GLN:NE2	1:A:79:ARG:NE	0.56	2.53	11	3
1:A:153:PHE:CZ	1:A:164:LEU:CD2	0.56	2.87	11	1
1:A:67:PHE:CE2	1:A:110:LEU:HD22	0.56	2.35	14	1
1:A:156:MET:O	1:A:156:MET:SD	0.56	2.63	17	2
1:A:158:LYS:C	1:A:159:ASN:ND2	0.56	2.58	19	1
1:A:166:LEU:N	1:A:166:LEU:HD12	0.56	2.16	4	5
1:A:79:ARG:NH2	1:A:81:GLU:OE2	0.56	2.38	4	1
1:A:110:LEU:HD23	1:A:111:ASP:N	0.56	2.16	6	1
1:A:131:MET:SD	1:A:131:MET:O	0.56	2.63	12	1
1:A:145:PRO:CD	1:A:182:ALA:O	0.56	2.54	15	1
1:A:159:ASN:ND2	1:A:159:ASN:C	0.56	2.58	1	1
1:A:127:ALA:O	1:A:131:MET:SD	0.56	2.63	7	1
1:A:153:PHE:O	1:A:157:ASP:N	0.56	2.39	13	3
1:A:37:ASP:O	1:A:38:CYS:SG	0.56	2.63	15	3
1:A:159:ASN:ND2	1:A:161:ASP:OD2	0.56	2.39	12	1
1:A:136:VAL:O	1:A:136:VAL:CG1	0.56	2.54	5	1
1:A:109:ASP:OD1	1:A:109:ASP:O	0.56	2.24	10	1
1:A:108:TYR:OH	1:A:182:ALA:HB2	0.56	2.00	14	1
1:A:183:LEU:H	1:A:183:LEU:CD1	0.56	2.05	1	1
1:A:143:ASN:O	1:A:144:THR:C	0.56	2.44	15	9
1:A:142:GLU:CG	1:A:143:ASN:N	0.56	2.69	18	2
1:A:121:MET:O	1:A:125:VAL:HG13	0.56	1.99	5	2
1:A:135:THR:O	1:A:138:LEU:CD1	0.56	2.54	12	2
1:A:17:THR:CG2	1:A:24:GLU:OE1	0.56	2.54	18	1
1:A:155:MET:C	1:A:155:MET:SD	0.56	2.84	19	3
1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:CD1	0.56	2.14	17	1
1:A:27:VAL:HG23	1:A:86:ILE:HD11	0.56	1.78	17	1
1:A:19:LYS:O	1:A:20:THR:OG1	0.55	2.24	11	11
1:A:118:ARG:HH21	1:A:157:ASP:CB	0.55	2.14	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:144:THR:CG2	1:A:144:THR:O	0.55	2.53	4	1
1:A:159:ASN:C	1:A:161:ASP:H	0.55	2.05	3	2
1:A:132:VAL:O	1:A:132:VAL:HG12	0.55	2.01	1	4
1:A:131:MET:O	1:A:135:THR:HG21	0.55	2.01	6	1
1:A:118:ARG:HH22	1:A:157:ASP:CB	0.55	2.15	1	2
1:A:96:THR:CB	1:A:99:GLU:OE1	0.55	2.55	7	1
1:A:149:VAL:HG12	1:A:153:PHE:CD2	0.55	2.37	10	1
1:A:182:ALA:C	1:A:184:SER:N	0.55	2.60	10	1
1:A:16:LEU:O	1:A:20:THR:CG2	0.55	2.54	12	3
1:A:31:TYR:CD1	1:A:82:PHE:CD2	0.55	2.94	12	1
1:A:171:GLU:CG	1:A:172:GLY:N	0.55	2.70	16	1
1:A:21:TYR:CE2	1:A:95:GLY:CA	0.55	2.90	18	1
1:A:97:LEU:HD12	1:A:97:LEU:H	0.55	1.62	19	1
1:A:158:LYS:O	1:A:159:ASN:C	0.55	2.44	19	15
1:A:101:LEU:O	1:A:105:PHE:CG	0.55	2.60	10	1
1:A:158:LYS:CG	1:A:159:ASN:N	0.55	2.69	19	2
1:A:118:ARG:CZ	1:A:157:ASP:OD2	0.55	2.54	15	2
1:A:97:LEU:H	1:A:97:LEU:CD1	0.55	2.15	8	1
1:A:118:ARG:NH2	1:A:157:ASP:CG	0.55	2.60	12	2
1:A:181:GLN:O	1:A:182:ALA:CB	0.55	2.55	9	1
1:A:128:ILE:O	1:A:132:VAL:CG1	0.55	2.55	18	1
1:A:71:VAL:CG2	1:A:110:LEU:O	0.55	2.55	12	1
1:A:61:PRO:O	1:A:62:THR:CB	0.55	2.55	4	1
1:A:129:TYR:CD1	1:A:144:THR:HG21	0.55	2.37	7	1
1:A:173:SER:OG	1:A:180:VAL:CG2	0.55	2.54	13	2
1:A:72:PHE:C	1:A:72:PHE:CD1	0.55	2.80	5	1
1:A:82:PHE:CD1	1:A:82:PHE:C	0.54	2.79	3	5
1:A:97:LEU:N	1:A:97:LEU:CD2	0.54	2.70	20	4
1:A:170:GLN:NE2	1:A:170:GLN:C	0.54	2.61	19	1
1:A:85:PHE:CE1	1:A:89:LEU:HD22	0.54	2.37	7	4
1:A:45:ALA:N	1:A:69:PHE:CZ	0.54	2.75	11	1
1:A:61:PRO:O	1:A:65:ALA:CB	0.54	2.56	12	1
1:A:105:PHE:CD1	1:A:169:PHE:CE2	0.54	2.95	19	1
1:A:45:ALA:HB2	1:A:69:PHE:CE1	0.54	2.37	1	2
1:A:183:LEU:CD2	1:A:183:LEU:N	0.54	2.65	11	4
1:A:24:GLU:H	1:A:24:GLU:CD	0.54	2.04	8	3
1:A:97:LEU:CD2	1:A:97:LEU:N	0.54	2.71	10	2
1:A:31:TYR:CE1	1:A:82:PHE:CD2	0.54	2.95	12	1
1:A:42:GLN:NE2	1:A:43:LEU:C	0.54	2.60	18	1
1:A:142:GLU:C	1:A:144:THR:H	0.54	2.06	19	3
1:A:19:LYS:HZ2	1:A:87:GLN:HE22	0.54	1.44	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:LEU:HD13	1:A:110:LEU:O	0.54	2.02	1	1
1:A:51:ILE:O	1:A:55:PHE:CE2	0.54	2.60	9	4
1:A:157:ASP:C	1:A:159:ASN:ND2	0.54	2.61	6	1
1:A:118:ARG:NH1	1:A:162:GLY:C	0.54	2.61	8	1
1:A:93:SER:O	1:A:94:ARG:CB	0.54	2.56	12	2
1:A:125:VAL:HG22	1:A:145:PRO:HG2	0.54	1.79	16	1
1:A:142:GLU:CG	1:A:143:ASN:H	0.54	2.14	18	1
1:A:139:PRO:O	1:A:140:GLU:C	0.54	2.46	10	5
1:A:20:THR:C	1:A:21:TYR:CG	0.54	2.80	13	5
1:A:136:VAL:O	1:A:136:VAL:HG23	0.54	2.03	9	1
1:A:96:THR:C	1:A:100:LYS:NZ	0.54	2.61	2	1
1:A:89:LEU:HD13	1:A:89:LEU:O	0.54	2.02	14	4
1:A:159:ASN:ND2	1:A:159:ASN:N	0.54	2.55	6	1
1:A:129:TYR:O	1:A:133:GLY:CA	0.54	2.55	7	1
1:A:20:THR:O	1:A:21:TYR:CB	0.54	2.55	12	4
1:A:139:PRO:O	1:A:142:GLU:N	0.54	2.41	10	1
1:A:119:ASN:C	1:A:119:ASN:ND2	0.54	2.61	11	1
1:A:136:VAL:O	1:A:137:GLU:C	0.54	2.46	18	2
1:A:136:VAL:O	1:A:136:VAL:HG12	0.54	2.02	18	1
1:A:143:ASN:C	1:A:144:THR:HG22	0.54	2.23	3	1
1:A:128:ILE:O	1:A:132:VAL:N	0.54	2.41	12	2
1:A:58:PHE:CD2	1:A:135:THR:HG23	0.54	2.37	8	1
1:A:67:PHE:CD2	1:A:110:LEU:HD13	0.54	2.37	14	2
1:A:144:THR:O	1:A:144:THR:CG2	0.54	2.54	17	1
1:A:181:GLN:CG	1:A:181:GLN:O	0.54	2.56	5	1
1:A:139:PRO:CG	1:A:142:GLU:O	0.54	2.56	16	1
1:A:91:VAL:HG11	1:A:103:TRP:NE1	0.53	2.18	1	4
1:A:68:VAL:O	1:A:72:PHE:CB	0.53	2.56	2	9
1:A:19:LYS:C	1:A:20:THR:HG1	0.53	2.06	19	2
1:A:112:ASN:O	1:A:112:ASN:CG	0.53	2.46	12	5
1:A:97:LEU:N	1:A:97:LEU:HD22	0.53	2.17	20	1
1:A:39:PRO:O	1:A:40:SER:CB	0.53	2.55	2	1
1:A:61:PRO:O	1:A:65:ALA:N	0.53	2.38	12	1
1:A:59:GLY:O	1:A:131:MET:CE	0.53	2.56	8	1
1:A:143:ASN:O	1:A:144:THR:OG1	0.53	2.27	8	1
1:A:141:GLU:OE2	1:A:148:ARG:NH2	0.53	2.41	10	1
1:A:143:ASN:HB3	1:A:183:LEU:HD22	0.53	1.81	18	1
1:A:71:VAL:HG21	1:A:107:LEU:HA	0.53	1.80	3	1
1:A:27:VAL:HG13	1:A:86:ILE:CD1	0.53	2.33	18	3
1:A:106:LYS:NZ	1:A:112:ASN:ND2	0.53	2.56	5	1
1:A:16:LEU:O	1:A:19:LYS:O	0.53	2.26	6	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:135:THR:O	1:A:138:LEU:HD22	0.53	2.03	11	2
1:A:72:PHE:CE1	1:A:88:ALA:HB2	0.53	2.38	13	4
1:A:166:LEU:H	1:A:166:LEU:HD22	0.53	1.64	14	1
1:A:31:TYR:CE1	1:A:35:ILE:HD11	0.53	2.38	1	2
1:A:74:GLU:CA	1:A:77:ASP:OD1	0.53	2.56	12	1
1:A:64:PHE:CE2	1:A:107:LEU:HD21	0.53	2.38	3	1
1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HZ3	0.53	1.63	5	1
1:A:72:PHE:CE2	1:A:80:ILE:HD11	0.53	2.39	9	2
1:A:75:ASN:C	1:A:77:ASP:N	0.53	2.62	9	4
1:A:135:THR:O	1:A:135:THR:OG1	0.53	2.27	15	1
1:A:179:ILE:HG22	1:A:180:VAL:N	0.53	2.18	18	1
1:A:133:GLY:O	1:A:134:ASN:ND2	0.53	2.41	19	1
1:A:135:THR:O	1:A:136:VAL:C	0.53	2.46	20	7
1:A:135:THR:C	1:A:137:GLU:N	0.53	2.62	9	2
1:A:129:TYR:CE1	1:A:143:ASN:O	0.53	2.62	17	1
1:A:145:PRO:CG	1:A:183:LEU:HD12	0.53	2.34	19	1
1:A:67:PHE:CD1	1:A:110:LEU:HD13	0.53	2.39	3	1
1:A:172:GLY:O	1:A:176:ASP:O	0.52	2.27	13	5
1:A:69:PHE:C	1:A:69:PHE:CD1	0.52	2.81	19	1
1:A:20:THR:HG22	1:A:22:PHE:H	0.52	1.64	2	1
1:A:145:PRO:CG	1:A:182:ALA:O	0.52	2.56	15	2
1:A:142:GLU:CD	1:A:148:ARG:NH1	0.52	2.62	3	1
1:A:51:ILE:HG22	1:A:52:TYR:N	0.52	2.19	16	2
1:A:118:ARG:NE	1:A:153:PHE:CE1	0.52	2.77	16	2
1:A:20:THR:HG23	1:A:21:TYR:N	0.52	2.18	12	1
1:A:136:VAL:HG13	1:A:137:GLU:N	0.52	2.19	1	2
1:A:42:GLN:HE22	1:A:79:ARG:NH1	0.52	2.02	10	1
1:A:115:TYR:CE1	1:A:165:THR:HG22	0.52	2.39	16	2
1:A:141:GLU:CG	1:A:142:GLU:N	0.52	2.71	16	1
1:A:159:ASN:N	1:A:159:ASN:ND2	0.52	2.56	5	3
1:A:118:ARG:NH2	1:A:162:GLY:O	0.52	2.43	7	1
1:A:109:ASP:OD1	1:A:113:ASP:OD1	0.52	2.27	10	1
1:A:122:LEU:HD22	1:A:146:GLU:OE2	0.52	2.05	2	1
1:A:143:ASN:OD1	1:A:148:ARG:NH2	0.52	2.42	11	1
1:A:105:PHE:CZ	1:A:166:LEU:HD11	0.52	2.39	13	1
1:A:121:MET:SD	1:A:121:MET:C	0.52	2.88	19	1
1:A:72:PHE:O	1:A:72:PHE:CD1	0.52	2.62	3	1
1:A:75:ASN:OD1	1:A:84:GLU:OE2	0.52	2.28	16	7
1:A:85:PHE:C	1:A:85:PHE:CD1	0.52	2.82	9	3
1:A:61:PRO:C	1:A:63:LYS:N	0.52	2.62	13	4
1:A:170:GLN:CG	1:A:171:GLU:N	0.52	2.73	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:THR:C	1:A:22:PHE:H	0.52	2.06	1	10
1:A:177:PRO:O	1:A:179:ILE:N	0.52	2.42	6	1
1:A:131:MET:SD	1:A:131:MET:C	0.52	2.88	13	1
1:A:158:LYS:C	1:A:160:ALA:N	0.52	2.63	3	13
1:A:61:PRO:C	1:A:63:LYS:H	0.52	2.07	8	4
1:A:62:THR:O	1:A:66:THR:CG2	0.52	2.58	2	3
1:A:156:MET:SD	1:A:164:LEU:HD21	0.52	2.45	4	1
1:A:170:GLN:NE2	1:A:170:GLN:O	0.52	2.43	19	1
1:A:20:THR:C	1:A:22:PHE:N	0.51	2.64	3	8
1:A:141:GLU:O	1:A:183:LEU:O	0.51	2.29	4	1
1:A:72:PHE:CZ	1:A:88:ALA:HB1	0.51	2.40	10	3
1:A:180:VAL:O	1:A:180:VAL:HG22	0.51	2.04	9	1
1:A:166:LEU:HD22	1:A:166:LEU:N	0.51	2.20	16	2
1:A:158:LYS:HG3	1:A:159:ASN:H	0.51	1.65	15	2
1:A:159:ASN:OD1	1:A:161:ASP:OD2	0.51	2.29	10	4
1:A:96:THR:C	1:A:100:LYS:HZ3	0.51	2.09	2	1
1:A:82:PHE:CG	1:A:83:SER:N	0.51	2.77	14	5
1:A:86:ILE:HG23	1:A:87:GLN:N	0.51	2.20	5	3
1:A:169:PHE:O	1:A:173:SER:N	0.51	2.42	6	1
1:A:110:LEU:CD1	1:A:110:LEU:C	0.51	2.78	9	2
1:A:74:GLU:O	1:A:75:ASN:CB	0.51	2.59	12	4
1:A:121:MET:O	1:A:125:VAL:CG2	0.51	2.55	11	1
1:A:19:LYS:HZ2	1:A:87:GLN:NE2	0.51	2.02	20	1
1:A:67:PHE:C	1:A:67:PHE:CD1	0.51	2.82	10	2
1:A:166:LEU:H	1:A:166:LEU:CD1	0.51	2.18	8	1
1:A:157:ASP:O	1:A:158:LYS:C	0.51	2.49	20	7
1:A:110:LEU:CD2	1:A:110:LEU:H	0.51	2.19	5	1
1:A:135:THR:O	1:A:138:LEU:CD2	0.51	2.59	6	1
1:A:131:MET:O	1:A:135:THR:OG1	0.51	2.26	11	3
1:A:159:ASN:OD1	1:A:168:GLU:OE2	0.51	2.29	16	3
1:A:157:ASP:CG	1:A:162:GLY:H	0.51	2.08	11	1
1:A:72:PHE:CD1	1:A:72:PHE:C	0.51	2.82	12	1
1:A:42:GLN:HE21	1:A:43:LEU:C	0.51	2.09	18	1
1:A:85:PHE:CE1	1:A:89:LEU:HD13	0.51	2.40	19	1
1:A:110:LEU:HD13	1:A:110:LEU:C	0.51	2.26	1	2
1:A:183:LEU:CD1	1:A:183:LEU:N	0.51	2.63	2	3
1:A:109:ASP:OD2	1:A:120:GLU:OE1	0.51	2.29	8	5
1:A:62:THR:HG23	1:A:63:LYS:H	0.51	1.64	5	1
1:A:166:LEU:O	1:A:169:PHE:N	0.51	2.43	20	5
1:A:112:ASN:O	1:A:115:TYR:O	0.51	2.28	8	1
1:A:138:LEU:HD12	1:A:138:LEU:O	0.51	2.06	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:ILE:CG2	1:A:52:TYR:N	0.51	2.74	16	2
1:A:107:LEU:HD13	1:A:107:LEU:O	0.51	2.05	7	1
1:A:109:ASP:OD1	1:A:111:ASP:OD1	0.51	2.28	13	10
1:A:111:ASP:OD2	1:A:113:ASP:OD2	0.51	2.29	6	2
1:A:125:VAL:O	1:A:129:TYR:CB	0.51	2.59	14	3
1:A:143:ASN:CG	1:A:181:GLN:NE2	0.51	2.65	10	1
1:A:109:ASP:OD2	1:A:111:ASP:OD1	0.51	2.29	3	3
1:A:129:TYR:CZ	1:A:143:ASN:O	0.51	2.64	17	1
1:A:139:PRO:O	1:A:140:GLU:O	0.51	2.29	2	2
1:A:158:LYS:O	1:A:159:ASN:OD1	0.51	2.28	7	1
1:A:183:LEU:HD23	1:A:183:LEU:H	0.50	1.65	4	1
1:A:161:ASP:OD2	1:A:163:LYS:O	0.50	2.29	7	6
1:A:71:VAL:CG1	1:A:72:PHE:N	0.50	2.74	9	8
1:A:73:ASP:O	1:A:77:ASP:OD2	0.50	2.29	12	1
1:A:77:ASP:OD2	1:A:81:GLU:OE2	0.50	2.28	14	1
1:A:166:LEU:O	1:A:167:GLN:C	0.50	2.49	15	11
1:A:107:LEU:HD23	1:A:107:LEU:C	0.50	2.25	12	1
1:A:133:GLY:O	1:A:134:ASN:O	0.50	2.28	18	1
1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:CD2	0.50	2.17	9	2
1:A:103:TRP:CZ3	1:A:107:LEU:HD22	0.50	2.41	18	2
1:A:110:LEU:N	1:A:120:GLU:OE2	0.50	2.44	10	1
1:A:75:ASN:OD1	1:A:77:ASP:N	0.50	2.42	14	1
1:A:75:ASN:HD21	1:A:77:ASP:CG	0.50	2.09	18	2
1:A:60:ASP:N	1:A:60:ASP:OD1	0.50	2.41	3	2
1:A:166:LEU:O	1:A:170:GLN:CG	0.50	2.59	11	3
1:A:94:ARG:CG	1:A:95:GLY:N	0.50	2.74	9	2
1:A:31:TYR:O	1:A:34:PHE:CE1	0.50	2.64	13	1
1:A:171:GLU:O	1:A:175:ALA:HB3	0.50	2.06	18	1
1:A:73:ASP:OD1	1:A:84:GLU:OE1	0.50	2.28	12	3
1:A:20:THR:CG2	1:A:22:PHE:H	0.50	2.19	6	2
1:A:156:MET:O	1:A:168:GLU:OE1	0.50	2.29	3	2
1:A:89:LEU:O	1:A:92:THR:OG1	0.50	2.29	19	2
1:A:60:ASP:CB	1:A:61:PRO:CD	0.50	2.90	20	3
1:A:111:ASP:OD2	1:A:120:GLU:OE2	0.50	2.30	3	2
1:A:72:PHE:CE2	1:A:88:ALA:HB1	0.50	2.41	5	1
1:A:157:ASP:C	1:A:159:ASN:HD22	0.50	2.10	6	1
1:A:93:SER:O	1:A:94:ARG:HB2	0.50	2.06	12	1
1:A:132:VAL:O	1:A:133:GLY:O	0.50	2.29	17	2
1:A:62:THR:HG23	1:A:63:LYS:N	0.50	2.21	5	1
1:A:167:GLN:O	1:A:171:GLU:OE1	0.50	2.30	7	1
1:A:111:ASP:O	1:A:112:ASN:OD1	0.50	2.30	16	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:153:PHE:CE2	1:A:164:LEU:HD21	0.50	2.41	11	1
1:A:142:GLU:C	1:A:144:THR:N	0.50	2.65	3	2
1:A:115:TYR:CE2	1:A:165:THR:OG1	0.50	2.64	1	1
1:A:19:LYS:C	1:A:21:TYR:H	0.50	2.10	17	2
1:A:118:ARG:HH22	1:A:157:ASP:CG	0.50	2.09	12	3
1:A:20:THR:HG21	1:A:27:VAL:CG1	0.50	2.36	19	4
1:A:128:ILE:O	1:A:132:VAL:HG23	0.50	2.06	17	1
1:A:159:ASN:ND2	1:A:161:ASP:CG	0.50	2.65	1	1
1:A:157:ASP:OD1	1:A:161:ASP:OD1	0.50	2.29	4	4
1:A:144:THR:O	1:A:145:PRO:C	0.50	2.50	7	2
1:A:170:GLN:OE1	1:A:171:GLU:OE2	0.50	2.30	7	1
1:A:118:ARG:CD	1:A:118:ARG:N	0.50	2.74	16	7
1:A:42:GLN:HE22	1:A:79:ARG:CZ	0.50	2.20	16	2
1:A:15:GLU:O	1:A:19:LYS:N	0.50	2.45	13	1
1:A:16:LEU:O	1:A:20:THR:CB	0.50	2.60	15	1
1:A:143:ASN:CB	1:A:183:LEU:HD22	0.50	2.36	18	1
1:A:58:PHE:O	1:A:134:ASN:OD1	0.49	2.30	16	3
1:A:142:GLU:OE1	1:A:183:LEU:O	0.49	2.30	2	1
1:A:61:PRO:O	1:A:62:THR:OG1	0.49	2.30	9	5
1:A:159:ASN:OD1	1:A:161:ASP:OD1	0.49	2.29	7	1
1:A:59:GLY:O	1:A:131:MET:SD	0.49	2.70	8	1
1:A:157:ASP:OD2	1:A:161:ASP:OD1	0.49	2.30	8	1
1:A:21:TYR:CD2	1:A:95:GLY:N	0.49	2.79	12	1
1:A:62:THR:O	1:A:62:THR:OG1	0.49	2.30	13	1
1:A:64:PHE:CE1	1:A:107:LEU:HD11	0.49	2.41	15	1
1:A:148:ARG:HG2	1:A:152:ILE:HD12	0.49	1.84	17	1
1:A:157:ASP:O	1:A:157:ASP:OD1	0.49	2.30	6	4
1:A:157:ASP:OD1	1:A:163:LYS:O	0.49	2.30	4	3
1:A:68:VAL:O	1:A:70:ASN:N	0.49	2.45	6	1
1:A:85:PHE:CD1	1:A:85:PHE:C	0.49	2.84	20	4
1:A:106:LYS:O	1:A:109:ASP:O	0.49	2.30	8	3
1:A:142:GLU:OE1	1:A:182:ALA:O	0.49	2.30	8	2
1:A:82:PHE:CD1	1:A:82:PHE:O	0.49	2.65	10	1
1:A:48:PHE:CZ	1:A:72:PHE:CE2	0.49	3.01	16	1
1:A:75:ASN:O	1:A:76:LYS:C	0.49	2.51	20	7
1:A:52:TYR:CE2	1:A:131:MET:HE3	0.49	2.43	4	1
1:A:34:PHE:O	1:A:37:ASP:OD1	0.49	2.29	8	2
1:A:107:LEU:C	1:A:109:ASP:N	0.49	2.66	12	1
1:A:109:ASP:OD1	1:A:120:GLU:OE1	0.49	2.31	8	3
1:A:112:ASN:O	1:A:112:ASN:OD1	0.49	2.31	12	4
1:A:16:LEU:HD13	1:A:20:THR:OG1	0.49	2.07	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:159:ASN:HD22	1:A:161:ASP:H	0.49	1.50	11	1
1:A:145:PRO:HD3	1:A:183:LEU:HD22	0.49	1.84	11	1
1:A:112:ASN:O	1:A:113:ASP:OD1	0.49	2.31	13	1
1:A:126:ASP:OD1	1:A:146:GLU:OE2	0.49	2.29	7	1
1:A:60:ASP:O	1:A:64:PHE:CD2	0.49	2.66	11	1
1:A:158:LYS:O	1:A:161:ASP:OD1	0.49	2.31	17	2
1:A:94:ARG:O	1:A:95:GLY:O	0.49	2.31	19	1
1:A:60:ASP:O	1:A:62:THR:N	0.49	2.45	2	2
1:A:169:PHE:O	1:A:173:SER:OG	0.49	2.29	17	7
1:A:35:ILE:O	1:A:38:CYS:O	0.49	2.31	14	3
1:A:21:TYR:OH	1:A:99:GLU:OE1	0.49	2.31	19	1
1:A:42:GLN:CD	1:A:79:ARG:NE	0.49	2.66	11	2
1:A:115:TYR:CG	1:A:165:THR:HG22	0.49	2.43	4	1
1:A:159:ASN:OD1	1:A:168:GLU:OE1	0.49	2.30	4	2
1:A:59:GLY:O	1:A:131:MET:O	0.49	2.30	4	1
1:A:134:ASN:O	1:A:135:THR:O	0.49	2.30	10	1
1:A:60:ASP:O	1:A:64:PHE:CE2	0.49	2.65	11	1
1:A:144:THR:O	1:A:144:THR:OG1	0.49	2.30	15	1
1:A:109:ASP:OD1	1:A:120:GLU:OE2	0.49	2.30	17	1
1:A:156:MET:O	1:A:168:GLU:OE2	0.49	2.31	18	1
1:A:136:VAL:CG1	1:A:136:VAL:O	0.49	2.59	20	1
1:A:116:ILE:O	1:A:164:LEU:CB	0.49	2.61	14	2
1:A:16:LEU:HD13	1:A:16:LEU:O	0.49	2.08	9	1
1:A:169:PHE:CE1	1:A:179:ILE:HG22	0.49	2.43	14	1
1:A:60:ASP:OD2	1:A:130:GLN:OE1	0.49	2.30	16	1
1:A:136:VAL:CG1	1:A:137:GLU:N	0.49	2.76	1	2
1:A:73:ASP:OD1	1:A:84:GLU:OE2	0.49	2.30	2	2
1:A:77:ASP:OD1	1:A:79:ARG:O	0.49	2.30	8	5
1:A:74:GLU:N	1:A:77:ASP:OD1	0.49	2.46	12	1
1:A:16:LEU:C	1:A:20:THR:HG1	0.49	2.11	15	1
1:A:157:ASP:OD2	1:A:162:GLY:O	0.49	2.30	19	1
1:A:143:ASN:ND2	1:A:184:SER:O	0.49	2.45	20	1
1:A:157:ASP:OD1	1:A:157:ASP:O	0.49	2.31	14	3
1:A:182:ALA:C	1:A:183:LEU:HD23	0.49	2.26	11	1
1:A:156:MET:O	1:A:159:ASN:OD1	0.49	2.31	17	1
1:A:42:GLN:CG	1:A:42:GLN:O	0.49	2.61	17	1
1:A:176:ASP:O	1:A:177:PRO:O	0.48	2.30	19	7
1:A:112:ASN:OD1	1:A:112:ASN:O	0.48	2.30	6	3
1:A:69:PHE:CD2	1:A:70:ASN:OD1	0.48	2.65	13	2
1:A:40:SER:OG	1:A:40:SER:O	0.48	2.30	10	1
1:A:153:PHE:CE1	1:A:164:LEU:CD2	0.48	2.95	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:LEU:CD2	1:A:110:LEU:C	0.48	2.81	20	1
1:A:135:THR:O	1:A:138:LEU:HD12	0.48	2.08	20	1
1:A:142:GLU:OE1	1:A:181:GLN:O	0.48	2.31	3	1
1:A:111:ASP:N	1:A:111:ASP:OD1	0.48	2.46	1	2
1:A:178:SER:O	1:A:181:GLN:OE1	0.48	2.30	1	1
1:A:109:ASP:CG	1:A:112:ASN:H	0.48	2.10	6	4
1:A:12:VAL:O	1:A:16:LEU:CB	0.48	2.61	14	2
1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:CD2	0.48	2.76	1	1
1:A:118:ARG:N	1:A:118:ARG:CD	0.48	2.76	14	4
1:A:109:ASP:O	1:A:112:ASN:OD1	0.48	2.30	9	1
1:A:180:VAL:C	1:A:182:ALA:N	0.48	2.62	13	1
1:A:181:GLN:O	1:A:182:ALA:O	0.48	2.30	14	1
1:A:73:ASP:OD2	1:A:77:ASP:OD1	0.48	2.31	20	4
1:A:75:ASN:C	1:A:77:ASP:H	0.48	2.12	12	2
1:A:181:GLN:O	1:A:183:LEU:N	0.48	2.46	17	1
1:A:143:ASN:O	1:A:143:ASN:OD1	0.48	2.31	20	1
1:A:112:ASN:ND2	1:A:112:ASN:C	0.48	2.65	4	1
1:A:25:LYS:O	1:A:29:GLN:OE1	0.48	2.30	9	1
1:A:112:ASN:O	1:A:113:ASP:CG	0.48	2.52	13	1
1:A:181:GLN:O	1:A:182:ALA:C	0.48	2.50	14	1
1:A:166:LEU:CD2	1:A:166:LEU:H	0.48	2.16	17	1
1:A:19:LYS:HZ1	1:A:87:GLN:NE2	0.48	2.05	20	1
1:A:177:PRO:O	1:A:178:SER:OG	0.48	2.31	4	7
1:A:71:VAL:HG23	1:A:72:PHE:N	0.48	2.23	2	1
1:A:23:THR:O	1:A:27:VAL:HG13	0.48	2.08	7	2
1:A:159:ASN:HD22	1:A:160:ALA:H	0.48	1.51	8	1
1:A:129:TYR:CD2	1:A:144:THR:OG1	0.48	2.66	9	1
1:A:166:LEU:HD13	1:A:166:LEU:N	0.48	2.12	12	1
1:A:124:ILE:O	1:A:127:ALA:HB3	0.48	2.09	15	1
1:A:16:LEU:CD2	1:A:20:THR:OG1	0.48	2.61	17	1
1:A:34:PHE:O	1:A:37:ASP:OD2	0.48	2.31	3	1
1:A:89:LEU:C	1:A:89:LEU:CD1	0.48	2.81	4	2
1:A:164:LEU:HD13	1:A:168:GLU:OE1	0.48	2.09	18	1
1:A:183:LEU:O	1:A:184:SER:O	0.48	2.31	20	1
1:A:61:PRO:O	1:A:62:THR:HG22	0.48	2.08	20	1
1:A:115:TYR:CE2	1:A:165:THR:HG22	0.48	2.44	15	4
1:A:134:ASN:C	1:A:135:THR:HG22	0.48	2.29	15	2
1:A:143:ASN:O	1:A:144:THR:O	0.48	2.32	11	2
1:A:134:ASN:OD1	1:A:134:ASN:O	0.48	2.31	19	1
1:A:171:GLU:O	1:A:175:ALA:CB	0.48	2.62	13	5
1:A:21:TYR:CE2	1:A:95:GLY:N	0.48	2.82	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:149:VAL:HG22	1:A:153:PHE:CD2	0.48	2.44	17	1
1:A:144:THR:O	1:A:146:GLU:OE2	0.48	2.31	19	1
1:A:143:ASN:C	1:A:144:THR:OG1	0.48	2.52	12	3
1:A:166:LEU:N	1:A:166:LEU:CD2	0.48	2.77	16	3
1:A:118:ARG:N	1:A:118:ARG:NE	0.48	2.61	14	2
1:A:142:GLU:O	1:A:143:ASN:C	0.48	2.51	17	1
1:A:139:PRO:CG	1:A:143:ASN:OD1	0.48	2.61	20	1
1:A:118:ARG:HE	1:A:157:ASP:CG	0.48	2.12	3	1
1:A:54:GLN:O	1:A:54:GLN:OE1	0.47	2.32	13	1
1:A:132:VAL:O	1:A:136:VAL:HG12	0.47	2.09	15	1
1:A:137:GLU:CG	1:A:137:GLU:O	0.47	2.62	15	1
1:A:181:GLN:O	1:A:183:LEU:HD12	0.47	2.08	17	1
1:A:110:LEU:O	1:A:112:ASN:ND2	0.47	2.47	19	1
1:A:84:GLU:O	1:A:88:ALA:CB	0.47	2.61	5	4
1:A:129:TYR:OH	1:A:143:ASN:O	0.47	2.30	17	1
1:A:182:ALA:C	1:A:184:SER:H	0.47	2.12	10	1
1:A:166:LEU:HD23	1:A:170:GLN:NE2	0.47	2.24	13	1
1:A:107:LEU:C	1:A:107:LEU:HD23	0.47	2.29	19	1
1:A:61:PRO:O	1:A:62:THR:CG2	0.47	2.62	20	1
1:A:143:ASN:N	1:A:143:ASN:ND2	0.47	2.60	3	1
1:A:13:VAL:HG11	1:A:24:GLU:OE2	0.47	2.10	1	1
1:A:151:ARG:CG	1:A:152:ILE:N	0.47	2.77	5	1
1:A:141:GLU:CD	1:A:143:ASN:HD21	0.47	2.12	13	1
1:A:159:ASN:C	1:A:161:ASP:N	0.47	2.67	3	3
1:A:141:GLU:CG	1:A:142:GLU:H	0.47	2.23	16	1
1:A:169:PHE:O	1:A:173:SER:CB	0.47	2.63	5	8
1:A:93:SER:O	1:A:94:ARG:CG	0.47	2.63	15	5
1:A:67:PHE:CG	1:A:110:LEU:HD13	0.47	2.44	3	2
1:A:143:ASN:ND2	1:A:181:GLN:CD	0.47	2.68	10	1
1:A:129:TYR:CD1	1:A:144:THR:OG1	0.47	2.64	14	1
1:A:158:LYS:HG3	1:A:159:ASN:N	0.47	2.25	19	1
1:A:157:ASP:OD2	1:A:162:GLY:CA	0.47	2.63	4	1
1:A:118:ARG:CD	1:A:153:PHE:CE1	0.47	2.97	16	1
1:A:148:ARG:O	1:A:152:ILE:CG1	0.47	2.63	2	1
1:A:183:LEU:O	1:A:184:SER:C	0.47	2.52	2	2
1:A:13:VAL:CG1	1:A:24:GLU:OE1	0.47	2.62	2	1
1:A:97:LEU:CD1	1:A:97:LEU:N	0.47	2.76	8	2
1:A:16:LEU:O	1:A:19:LYS:C	0.47	2.53	19	2
1:A:134:ASN:O	1:A:135:THR:HG23	0.47	2.09	9	2
1:A:72:PHE:CD1	1:A:72:PHE:O	0.47	2.67	12	1
1:A:125:VAL:CG1	1:A:146:GLU:OE2	0.47	2.63	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:126:ASP:O	1:A:130:GLN:CB	0.47	2.63	17	1
1:A:172:GLY:C	1:A:179:ILE:HD12	0.47	2.30	13	4
1:A:159:ASN:O	1:A:160:ALA:C	0.47	2.52	19	2
1:A:9:LYS:N	1:A:9:LYS:CD	0.47	2.78	12	1
1:A:69:PHE:O	1:A:73:ASP:CB	0.47	2.63	13	1
1:A:48:PHE:CZ	1:A:85:PHE:CE2	0.47	3.03	13	1
1:A:96:THR:HG22	1:A:97:LEU:HD23	0.47	1.85	13	1
1:A:99:GLU:O	1:A:103:TRP:CD1	0.47	2.67	15	1
1:A:16:LEU:HD23	1:A:20:THR:OG1	0.47	2.10	17	1
1:A:19:LYS:O	1:A:19:LYS:CG	0.47	2.63	20	1
1:A:108:TYR:OH	1:A:149:VAL:HG11	0.47	2.10	4	1
1:A:60:ASP:O	1:A:64:PHE:CD1	0.47	2.68	9	1
1:A:157:ASP:C	1:A:159:ASN:N	0.47	2.68	10	1
1:A:19:LYS:C	1:A:20:THR:OG1	0.47	2.53	20	3
1:A:79:ARG:O	1:A:81:GLU:OE2	0.47	2.32	14	1
1:A:87:GLN:O	1:A:91:VAL:HG23	0.47	2.09	11	5
1:A:20:THR:CG2	1:A:21:TYR:N	0.47	2.77	12	1
1:A:115:TYR:CE2	1:A:165:THR:CG2	0.47	2.98	15	1
1:A:177:PRO:C	1:A:179:ILE:N	0.46	2.68	6	1
1:A:159:ASN:ND2	1:A:160:ALA:N	0.46	2.61	8	1
1:A:73:ASP:C	1:A:77:ASP:OD1	0.46	2.53	12	1
1:A:134:ASN:O	1:A:135:THR:CG2	0.46	2.64	9	2
1:A:157:ASP:O	1:A:160:ALA:N	0.46	2.47	11	1
1:A:74:GLU:O	1:A:84:GLU:OE2	0.46	2.33	12	1
1:A:101:LEU:C	1:A:101:LEU:CD1	0.46	2.84	18	2
1:A:158:LYS:C	1:A:159:ASN:HD22	0.46	2.12	19	1
1:A:168:GLU:H	1:A:168:GLU:CD	0.46	2.14	4	1
1:A:85:PHE:O	1:A:89:LEU:CB	0.46	2.63	4	4
1:A:42:GLN:NE2	1:A:79:ARG:CD	0.46	2.79	7	1
1:A:111:ASP:C	1:A:111:ASP:OD1	0.46	2.53	18	5
1:A:82:PHE:O	1:A:86:ILE:HG22	0.46	2.10	14	2
1:A:60:ASP:O	1:A:64:PHE:CE1	0.46	2.68	9	1
1:A:60:ASP:CG	1:A:60:ASP:O	0.46	2.54	12	1
1:A:89:LEU:CD1	1:A:89:LEU:C	0.46	2.83	14	1
1:A:111:ASP:O	1:A:112:ASN:CG	0.46	2.54	19	3
1:A:67:PHE:CD2	1:A:110:LEU:HD23	0.46	2.45	1	2
1:A:94:ARG:O	1:A:100:LYS:NZ	0.46	2.48	9	1
1:A:180:VAL:O	1:A:180:VAL:CG2	0.46	2.64	9	1
1:A:143:ASN:O	1:A:183:LEU:HD12	0.46	2.11	16	1
1:A:51:ILE:O	1:A:55:PHE:CD1	0.46	2.69	20	1
1:A:180:VAL:O	1:A:181:GLN:C	0.46	2.54	13	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:ILE:CG2	1:A:87:GLN:N	0.46	2.78	4	5
1:A:155:MET:SD	1:A:155:MET:C	0.46	2.94	14	1
1:A:52:TYR:CE2	1:A:131:MET:CE	0.46	2.98	4	1
1:A:58:PHE:O	1:A:134:ASN:CG	0.46	2.54	16	2
1:A:37:ASP:OD1	1:A:37:ASP:C	0.46	2.54	8	3
1:A:25:LYS:O	1:A:29:GLN:CD	0.46	2.54	9	1
1:A:111:ASP:OD1	1:A:111:ASP:C	0.46	2.55	5	4
1:A:101:LEU:O	1:A:105:PHE:CB	0.46	2.64	9	1
1:A:166:LEU:HD12	1:A:166:LEU:H	0.46	1.70	11	3
1:A:142:GLU:O	1:A:183:LEU:CB	0.46	2.64	4	1
1:A:44:ASP:CG	1:A:45:ALA:H	0.46	2.14	19	2
1:A:112:ASN:CG	1:A:112:ASN:O	0.46	2.54	1	3
1:A:62:THR:O	1:A:66:THR:OG1	0.46	2.31	5	2
1:A:38:CYS:O	1:A:38:CYS:SG	0.46	2.74	9	2
1:A:184:SER:OG	1:A:184:SER:O	0.46	2.33	13	1
1:A:183:LEU:O	1:A:184:SER:OG	0.46	2.35	14	1
1:A:67:PHE:CE2	1:A:107:LEU:HD12	0.46	2.46	15	1
1:A:43:LEU:HD21	1:A:47:GLY:C	0.45	2.31	6	2
1:A:158:LYS:C	1:A:159:ASN:OD1	0.45	2.55	7	1
1:A:16:LEU:C	1:A:20:THR:OG1	0.45	2.54	8	3
1:A:16:LEU:CA	1:A:20:THR:OG1	0.45	2.64	8	2
1:A:64:PHE:H	1:A:131:MET:CG	0.45	2.24	10	1
1:A:103:TRP:CH2	1:A:107:LEU:CD1	0.45	2.99	11	1
1:A:108:TYR:CZ	1:A:121:MET:CE	0.45	3.00	11	1
1:A:107:LEU:O	1:A:109:ASP:N	0.45	2.49	12	1
1:A:156:MET:CE	1:A:179:ILE:HD11	0.45	2.40	13	1
1:A:35:ILE:HG22	1:A:40:SER:O	0.45	2.12	14	1
1:A:71:VAL:CG1	1:A:110:LEU:O	0.45	2.65	1	1
1:A:145:PRO:HD3	1:A:183:LEU:HD12	0.45	1.87	5	1
1:A:139:PRO:O	1:A:143:ASN:CA	0.45	2.64	3	2
1:A:90:SER:O	1:A:93:SER:OG	0.45	2.30	9	1
1:A:20:THR:O	1:A:22:PHE:CD2	0.45	2.69	10	1
1:A:97:LEU:H	1:A:97:LEU:CD2	0.45	2.24	13	1
1:A:27:VAL:CG1	1:A:28:GLN:N	0.45	2.79	17	1
1:A:75:ASN:OD1	1:A:77:ASP:OD1	0.45	2.34	18	1
1:A:13:VAL:O	1:A:16:LEU:N	0.45	2.49	20	1
1:A:23:THR:OG1	1:A:26:GLU:OE1	0.45	2.29	2	1
1:A:59:GLY:O	1:A:60:ASP:C	0.45	2.55	5	2
1:A:149:VAL:O	1:A:153:PHE:N	0.45	2.50	11	1
1:A:67:PHE:CD1	1:A:67:PHE:N	0.45	2.82	18	2
1:A:141:GLU:O	1:A:144:THR:OG1	0.45	2.30	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:133:GLY:O	1:A:134:ASN:C	0.45	2.55	19	3
1:A:142:GLU:OE2	1:A:183:LEU:C	0.45	2.54	2	1
1:A:75:ASN:OD1	1:A:75:ASN:C	0.45	2.55	18	3
1:A:161:ASP:OD1	1:A:163:LYS:O	0.45	2.35	6	1
1:A:138:LEU:HD23	1:A:142:GLU:CD	0.45	2.32	10	1
1:A:72:PHE:O	1:A:74:GLU:N	0.45	2.49	11	1
1:A:112:ASN:O	1:A:113:ASP:C	0.45	2.55	13	1
1:A:97:LEU:H	1:A:97:LEU:HD23	0.45	1.69	13	1
1:A:144:THR:CB	1:A:145:PRO:CD	0.45	2.94	18	2
1:A:45:ALA:HB2	1:A:69:PHE:CD2	0.45	2.47	15	1
1:A:27:VAL:O	1:A:31:TYR:CB	0.45	2.64	18	1
1:A:34:PHE:O	1:A:37:ASP:CG	0.45	2.55	3	1
1:A:39:PRO:O	1:A:40:SER:OG	0.45	2.31	2	2
1:A:165:THR:O	1:A:168:GLU:OE2	0.45	2.34	4	1
1:A:75:ASN:C	1:A:75:ASN:OD1	0.45	2.55	4	2
1:A:13:VAL:O	1:A:17:THR:CG2	0.45	2.64	7	1
1:A:139:PRO:CB	1:A:142:GLU:O	0.45	2.64	16	1
1:A:159:ASN:OD1	1:A:161:ASP:CG	0.45	2.54	8	3
1:A:21:TYR:OH	1:A:95:GLY:C	0.45	2.55	2	1
1:A:111:ASP:OD1	1:A:120:GLU:CD	0.45	2.55	4	1
1:A:111:ASP:CG	1:A:113:ASP:OD1	0.45	2.54	8	1
1:A:159:ASN:HD22	1:A:159:ASN:C	0.45	2.14	11	1
1:A:68:VAL:HG23	1:A:69:PHE:N	0.45	2.26	18	2
1:A:71:VAL:HG21	1:A:109:ASP:O	0.45	2.12	12	1
1:A:49:GLN:CD	1:A:62:THR:HG1	0.45	2.15	16	1
1:A:31:TYR:CE1	1:A:35:ILE:CD1	0.45	3.00	1	2
1:A:111:ASP:OD1	1:A:120:GLU:OE2	0.45	2.35	4	1
1:A:45:ALA:CB	1:A:69:PHE:CE2	0.45	3.00	10	2
1:A:109:ASP:CG	1:A:111:ASP:OD1	0.45	2.55	11	4
1:A:57:PRO:C	1:A:59:GLY:H	0.45	2.15	11	1
1:A:69:PHE:CZ	1:A:77:ASP:O	0.45	2.70	12	1
1:A:133:GLY:O	1:A:134:ASN:CG	0.45	2.55	19	1
1:A:111:ASP:C	1:A:112:ASN:OD1	0.45	2.55	20	1
1:A:164:LEU:HD13	1:A:164:LEU:C	0.45	2.31	6	1
1:A:109:ASP:CG	1:A:109:ASP:O	0.45	2.54	10	1
1:A:121:MET:SD	1:A:125:VAL:CG2	0.45	3.05	13	1
1:A:113:ASP:OD1	1:A:113:ASP:C	0.45	2.55	18	1
1:A:132:VAL:CG2	1:A:137:GLU:O	0.45	2.65	12	1
1:A:17:THR:O	1:A:18:ARG:C	0.45	2.56	5	3
1:A:42:GLN:CD	1:A:79:ARG:CZ	0.45	2.86	2	1
1:A:79:ARG:CZ	1:A:81:GLU:OE2	0.45	2.64	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:THR:O	1:A:70:ASN:CG	0.45	2.55	9	3
1:A:180:VAL:C	1:A:182:ALA:H	0.45	2.16	7	2
1:A:158:LYS:C	1:A:160:ALA:H	0.45	2.15	8	3
1:A:60:ASP:O	1:A:61:PRO:C	0.45	2.55	8	1
1:A:64:PHE:CG	1:A:65:ALA:N	0.45	2.85	8	4
1:A:74:GLU:C	1:A:76:LYS:N	0.45	2.70	9	1
1:A:133:GLY:O	1:A:135:THR:HG23	0.45	2.12	13	1
1:A:159:ASN:OD1	1:A:168:GLU:CD	0.45	2.55	15	2
1:A:81:GLU:O	1:A:82:PHE:C	0.44	2.55	19	3
1:A:114:GLY:O	1:A:166:LEU:CD1	0.44	2.64	8	1
1:A:39:PRO:O	1:A:40:SER:C	0.44	2.54	15	1
1:A:146:GLU:C	1:A:146:GLU:OE1	0.44	2.56	3	1
1:A:75:ASN:O	1:A:76:LYS:CG	0.44	2.65	3	1
1:A:9:LYS:O	1:A:13:VAL:HG23	0.44	2.12	1	1
1:A:109:ASP:CG	1:A:120:GLU:OE1	0.44	2.56	7	3
1:A:85:PHE:CE1	1:A:89:LEU:CD1	0.44	2.92	8	1
1:A:75:ASN:ND2	1:A:77:ASP:CG	0.44	2.71	18	1
1:A:60:ASP:CG	1:A:130:GLN:OE1	0.44	2.56	19	1
1:A:132:VAL:O	1:A:132:VAL:CG1	0.44	2.64	8	2
1:A:166:LEU:N	1:A:166:LEU:HD23	0.44	2.22	5	2
1:A:111:ASP:CG	1:A:113:ASP:OD2	0.44	2.56	16	2
1:A:112:ASN:C	1:A:114:GLY:H	0.44	2.16	16	3
1:A:135:THR:C	1:A:137:GLU:H	0.44	2.16	9	1
1:A:117:THR:OG1	1:A:119:ASN:OD1	0.44	2.30	11	1
1:A:159:ASN:CG	1:A:168:GLU:OE2	0.44	2.55	13	1
1:A:138:LEU:HD12	1:A:138:LEU:N	0.44	2.26	17	1
1:A:64:PHE:CD2	1:A:65:ALA:N	0.44	2.86	20	1
1:A:75:ASN:OD1	1:A:77:ASP:CG	0.44	2.55	5	1
1:A:166:LEU:CD2	1:A:167:GLN:N	0.44	2.80	12	1
1:A:94:ARG:O	1:A:95:GLY:C	0.44	2.56	3	2
1:A:64:PHE:CE2	1:A:131:MET:SD	0.44	3.10	13	2
1:A:42:GLN:NE2	1:A:79:ARG:HH11	0.44	2.10	10	1
1:A:115:TYR:N	1:A:115:TYR:CD1	0.44	2.84	14	1
1:A:72:PHE:O	1:A:74:GLU:CD	0.44	2.55	15	1
1:A:56:PHE:O	1:A:60:ASP:CG	0.44	2.55	4	1
1:A:113:ASP:C	1:A:113:ASP:OD1	0.44	2.56	3	2
1:A:124:ILE:O	1:A:127:ALA:N	0.44	2.50	8	2
1:A:128:ILE:O	1:A:132:VAL:HG13	0.44	2.13	10	1
1:A:112:ASN:C	1:A:112:ASN:OD1	0.44	2.56	12	2
1:A:86:ILE:CD1	1:A:90:SER:OG	0.44	2.65	12	1
1:A:121:MET:SD	1:A:153:PHE:CZ	0.44	3.10	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:THR:CG2	1:A:27:VAL:HG11	0.44	2.43	3	1
1:A:24:GLU:C	1:A:24:GLU:OE1	0.44	2.56	4	1
1:A:75:ASN:CG	1:A:77:ASP:OD1	0.44	2.56	5	1
1:A:143:ASN:HD22	1:A:148:ARG:NH1	0.44	2.10	7	1
1:A:27:VAL:CG2	1:A:28:GLN:N	0.44	2.81	7	2
1:A:96:THR:HG22	1:A:97:LEU:CD2	0.44	2.43	13	1
1:A:62:THR:OG1	1:A:65:ALA:HB3	0.44	2.11	8	1
1:A:54:GLN:C	1:A:54:GLN:OE1	0.44	2.55	13	1
1:A:157:ASP:OD2	1:A:162:GLY:C	0.44	2.55	19	1
1:A:129:TYR:CG	1:A:130:GLN:N	0.44	2.86	2	1
1:A:132:VAL:C	1:A:134:ASN:H	0.44	2.17	7	1
1:A:16:LEU:O	1:A:17:THR:C	0.44	2.54	11	2
1:A:143:ASN:CG	1:A:181:GLN:HE22	0.44	2.14	10	1
1:A:20:THR:C	1:A:21:TYR:CD1	0.44	2.92	12	1
1:A:132:VAL:O	1:A:135:THR:OG1	0.44	2.31	13	1
1:A:45:ALA:CB	1:A:69:PHE:CD2	0.44	3.01	13	1
1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:HD12	0.44	2.28	14	1
1:A:136:VAL:O	1:A:137:GLU:CB	0.43	2.66	1	2
1:A:110:LEU:N	1:A:110:LEU:CD2	0.43	2.78	5	1
1:A:16:LEU:HD23	1:A:16:LEU:C	0.43	2.32	5	1
1:A:134:ASN:O	1:A:138:LEU:HD13	0.43	2.13	7	1
1:A:105:PHE:CZ	1:A:112:ASN:OD1	0.43	2.71	8	1
1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CD	0.43	2.71	8	1
1:A:132:VAL:O	1:A:138:LEU:CB	0.43	2.66	11	1
1:A:129:TYR:CG	1:A:144:THR:OG1	0.43	2.71	14	1
1:A:101:LEU:HD13	1:A:101:LEU:C	0.43	2.33	18	1
1:A:164:LEU:C	1:A:164:LEU:CD1	0.43	2.87	3	3
1:A:103:TRP:CH2	1:A:107:LEU:HD13	0.43	2.49	11	1
1:A:21:TYR:OH	1:A:99:GLU:CD	0.43	2.57	19	1
1:A:128:ILE:O	1:A:132:VAL:CG2	0.43	2.60	10	1
1:A:73:ASP:OD2	1:A:79:ARG:N	0.43	2.50	10	1
1:A:77:ASP:C	1:A:77:ASP:OD1	0.43	2.56	14	1
1:A:44:ASP:OD1	1:A:79:ARG:CD	0.43	2.67	3	2
1:A:72:PHE:CZ	1:A:88:ALA:CA	0.43	3.01	18	1
1:A:132:VAL:O	1:A:133:GLY:C	0.43	2.55	2	2
1:A:125:VAL:CG2	1:A:126:ASP:N	0.43	2.81	5	2
1:A:71:VAL:HG21	1:A:106:LYS:O	0.43	2.13	6	1
1:A:118:ARG:H	1:A:118:ARG:CZ	0.43	2.26	7	1
1:A:159:ASN:CG	1:A:161:ASP:OD2	0.43	2.56	11	1
1:A:42:GLN:OE1	1:A:79:ARG:CZ	0.43	2.66	11	1
1:A:42:GLN:NE2	1:A:44:ASP:OD1	0.43	2.46	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:PHE:HB2	1:A:135:THR:HG23	0.43	1.91	4	1
1:A:52:TYR:O	1:A:56:PHE:N	0.43	2.51	11	1
1:A:153:PHE:CE2	1:A:164:LEU:HD22	0.43	2.49	20	1
1:A:110:LEU:C	1:A:110:LEU:CD1	0.43	2.87	1	1
1:A:21:TYR:OH	1:A:95:GLY:CA	0.43	2.67	2	1
1:A:173:SER:OG	1:A:180:VAL:HG13	0.43	2.14	7	1
1:A:118:ARG:CD	1:A:162:GLY:O	0.43	2.67	11	1
1:A:142:GLU:CD	1:A:183:LEU:O	0.43	2.57	2	1
1:A:68:VAL:O	1:A:69:PHE:C	0.43	2.54	6	2
1:A:135:THR:OG1	1:A:138:LEU:CD2	0.43	2.67	13	1
1:A:157:ASP:O	1:A:161:ASP:OD1	0.43	2.37	17	1
1:A:59:GLY:CA	1:A:131:MET:O	0.43	2.67	17	1
1:A:145:PRO:O	1:A:149:VAL:HG12	0.43	2.13	3	1
1:A:183:LEU:CD1	1:A:183:LEU:C	0.43	2.88	8	2
1:A:20:THR:O	1:A:22:PHE:N	0.43	2.51	15	1
1:A:19:LYS:C	1:A:21:TYR:N	0.43	2.72	17	1
1:A:21:TYR:CZ	1:A:95:GLY:CA	0.43	3.01	18	1
1:A:49:GLN:OE1	1:A:66:THR:OG1	0.42	2.37	1	1
1:A:44:ASP:OD1	1:A:45:ALA:N	0.42	2.50	17	2
1:A:109:ASP:OD1	1:A:110:LEU:N	0.42	2.52	19	1
1:A:51:ILE:O	1:A:55:PHE:CE1	0.42	2.72	20	1
1:A:153:PHE:O	1:A:154:ALA:C	0.42	2.57	10	3
1:A:101:LEU:O	1:A:101:LEU:HD13	0.42	2.14	13	1
1:A:121:MET:SD	1:A:125:VAL:HG23	0.42	2.54	13	1
1:A:134:ASN:O	1:A:138:LEU:HD21	0.42	2.13	17	1
1:A:24:GLU:OE1	1:A:24:GLU:N	0.42	2.47	17	1
1:A:14:GLU:CD	1:A:14:GLU:C	0.42	2.78	20	1
1:A:166:LEU:CD1	1:A:166:LEU:H	0.42	2.27	4	1
1:A:51:ILE:HG13	1:A:52:TYR:N	0.42	2.29	4	2
1:A:143:ASN:O	1:A:144:THR:CB	0.42	2.68	5	3
1:A:132:VAL:HG23	1:A:137:GLU:O	0.42	2.14	12	1
1:A:157:ASP:O	1:A:159:ASN:N	0.42	2.52	10	2
1:A:45:ALA:CB	1:A:69:PHE:CG	0.42	3.02	13	1
1:A:166:LEU:N	1:A:166:LEU:CD1	0.42	2.81	8	1
1:A:25:LYS:CB	1:A:25:LYS:NZ	0.42	2.82	8	1
1:A:129:TYR:CE2	1:A:144:THR:OG1	0.42	2.67	9	1
1:A:153:PHE:CE2	1:A:164:LEU:HD11	0.42	2.50	11	1
1:A:20:THR:HG21	1:A:27:VAL:HG12	0.42	1.92	19	1
1:A:14:GLU:C	1:A:14:GLU:CD	0.42	2.78	13	2
1:A:157:ASP:CG	1:A:161:ASP:OD1	0.42	2.58	8	1
1:A:77:ASP:OD1	1:A:79:ARG:N	0.42	2.50	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:GLN:O	1:A:33:GLY:N	0.42	2.53	12	2
1:A:64:PHE:CE2	1:A:107:LEU:HD11	0.42	2.50	4	1
1:A:147:LYS:CG	1:A:148:ARG:N	0.42	2.83	9	1
1:A:74:GLU:O	1:A:76:LYS:N	0.42	2.52	9	1
1:A:107:LEU:C	1:A:109:ASP:H	0.42	2.17	12	1
1:A:113:ASP:OD1	1:A:113:ASP:N	0.42	2.53	14	1
1:A:105:PHE:CE1	1:A:166:LEU:HD11	0.42	2.49	14	1
1:A:60:ASP:CG	1:A:64:PHE:H	0.42	2.18	18	1
1:A:67:PHE:CD1	1:A:110:LEU:HD12	0.42	2.50	18	1
1:A:58:PHE:O	1:A:60:ASP:OD1	0.42	2.37	8	1
1:A:59:GLY:O	1:A:60:ASP:CB	0.42	2.65	8	1
1:A:132:VAL:HG12	1:A:132:VAL:O	0.42	2.15	9	2
1:A:108:TYR:CE1	1:A:121:MET:HE3	0.42	2.50	11	2
1:A:65:ALA:O	1:A:68:VAL:CG2	0.42	2.68	12	2
1:A:109:ASP:OD1	1:A:109:ASP:C	0.41	2.57	2	1
1:A:179:ILE:CG2	1:A:180:VAL:N	0.41	2.83	2	1
1:A:31:TYR:CD1	1:A:31:TYR:C	0.41	2.92	6	1
1:A:71:VAL:HG22	1:A:110:LEU:O	0.41	2.15	7	1
1:A:184:SER:O	1:A:184:SER:OG	0.41	2.38	14	1
1:A:164:LEU:CD1	1:A:169:PHE:CE2	0.41	3.03	7	1
1:A:87:GLN:O	1:A:90:SER:OG	0.41	2.29	8	1
1:A:57:PRO:C	1:A:59:GLY:N	0.41	2.74	11	2
1:A:86:ILE:O	1:A:86:ILE:CD1	0.41	2.68	12	1
1:A:48:PHE:CE2	1:A:52:TYR:CE1	0.41	3.07	14	1
1:A:145:PRO:O	1:A:149:VAL:CG2	0.41	2.67	16	2
1:A:101:LEU:CD1	1:A:170:GLN:NE2	0.41	2.83	18	1
1:A:156:MET:C	1:A:158:LYS:H	0.41	2.19	6	1
1:A:114:GLY:C	1:A:115:TYR:CD1	0.41	2.94	7	1
1:A:150:ASP:O	1:A:154:ALA:CB	0.41	2.69	7	5
1:A:131:MET:O	1:A:136:VAL:HG11	0.41	2.16	9	1
1:A:182:ALA:O	1:A:183:LEU:C	0.41	2.58	10	1
1:A:115:TYR:CD1	1:A:163:LYS:CB	0.41	3.03	12	1
1:A:183:LEU:H	1:A:183:LEU:HD23	0.41	1.65	20	1
1:A:149:VAL:HG13	1:A:150:ASP:N	0.41	2.31	3	1
1:A:145:PRO:O	1:A:149:VAL:CG1	0.41	2.68	3	1
1:A:166:LEU:CD1	1:A:166:LEU:N	0.41	2.82	11	4
1:A:157:ASP:OD2	1:A:162:GLY:N	0.41	2.53	4	1
1:A:68:VAL:C	1:A:70:ASN:N	0.41	2.72	6	1
1:A:119:ASN:CG	1:A:120:GLU:N	0.41	2.74	8	1
1:A:149:VAL:O	1:A:150:ASP:C	0.41	2.56	20	3
1:A:131:MET:O	1:A:131:MET:SD	0.41	2.78	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:GLU:C	1:A:75:ASN:CG	0.41	2.79	13	2
1:A:48:PHE:O	1:A:51:ILE:CG1	0.41	2.68	20	2
1:A:170:GLN:OE1	1:A:171:GLU:OE1	0.41	2.38	7	1
1:A:118:ARG:HH12	1:A:162:GLY:C	0.41	2.19	8	1
1:A:148:ARG:O	1:A:152:ILE:CD1	0.41	2.68	10	1
1:A:44:ASP:C	1:A:69:PHE:CE1	0.41	2.94	11	1
1:A:20:THR:HG23	1:A:22:PHE:N	0.41	2.29	13	1
1:A:99:GLU:CG	1:A:100:LYS:N	0.41	2.84	19	1
1:A:140:GLU:N	1:A:140:GLU:OE1	0.41	2.54	2	1
1:A:172:GLY:O	1:A:176:ASP:CA	0.41	2.69	6	1
1:A:37:ASP:C	1:A:37:ASP:OD1	0.41	2.59	11	1
1:A:97:LEU:HD11	1:A:180:VAL:HG21	0.41	1.91	18	1
1:A:97:LEU:CD1	1:A:97:LEU:H	0.41	2.26	19	1
1:A:24:GLU:OE2	1:A:25:LYS:NZ	0.41	2.50	20	1
1:A:136:VAL:CG2	1:A:136:VAL:O	0.41	2.68	9	1
1:A:129:TYR:CE2	1:A:144:THR:HG21	0.41	2.50	1	1
1:A:142:GLU:OE2	1:A:148:ARG:CD	0.41	2.69	4	1
1:A:137:GLU:N	1:A:137:GLU:OE1	0.41	2.53	4	1
1:A:107:LEU:CD1	1:A:107:LEU:O	0.41	2.69	7	1
1:A:119:ASN:C	1:A:119:ASN:HD22	0.41	2.17	11	1
1:A:136:VAL:C	1:A:138:LEU:H	0.41	2.19	13	1
1:A:144:THR:O	1:A:146:GLU:CD	0.41	2.59	19	1
1:A:170:GLN:C	1:A:170:GLN:CD	0.41	2.79	19	1
1:A:153:PHE:CD2	1:A:164:LEU:HD13	0.41	2.49	20	1
1:A:175:ALA:C	1:A:176:ASP:OD1	0.41	2.59	6	1
1:A:60:ASP:C	1:A:60:ASP:OD1	0.41	2.60	6	1
1:A:58:PHE:O	1:A:134:ASN:CB	0.41	2.68	7	1
1:A:143:ASN:CB	1:A:181:GLN:NE2	0.41	2.84	10	1
1:A:74:GLU:C	1:A:77:ASP:OD1	0.41	2.59	12	1
1:A:30:TRP:O	1:A:31:TYR:C	0.41	2.58	13	1
1:A:156:MET:CE	1:A:159:ASN:HD21	0.41	2.29	17	1
1:A:75:ASN:CG	1:A:84:GLU:OE2	0.41	2.59	19	1
1:A:48:PHE:CE1	1:A:72:PHE:CE2	0.40	3.09	1	1
1:A:112:ASN:HD22	1:A:112:ASN:C	0.40	2.18	4	1
1:A:63:LYS:O	1:A:66:THR:OG1	0.40	2.31	11	1
1:A:143:ASN:O	1:A:145:PRO:CD	0.40	2.70	15	1
1:A:17:THR:CG2	1:A:24:GLU:CG	0.40	2.99	15	1
1:A:27:VAL:CG2	1:A:86:ILE:HD11	0.40	2.45	17	1
1:A:118:ARG:CG	1:A:118:ARG:NH1	0.40	2.82	20	1
1:A:157:ASP:OD1	1:A:162:GLY:N	0.40	2.55	11	1
1:A:101:LEU:HD13	1:A:101:LEU:O	0.40	2.17	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:GLU:OE2	1:A:103:TRP:CH2	0.40	2.74	1	1
1:A:182:ALA:HB3	1:A:183:LEU:CD2	0.40	2.46	4	1
1:A:144:THR:N	1:A:145:PRO:HD2	0.40	2.31	7	1
1:A:101:LEU:HD11	1:A:180:VAL:HG11	0.40	1.92	7	1
1:A:171:GLU:O	1:A:175:ALA:N	0.40	2.48	13	1
1:A:49:GLN:HA	1:A:65:ALA:HB1	0.40	1.92	13	1
1:A:142:GLU:HG3	1:A:143:ASN:N	0.40	2.31	18	1
1:A:24:GLU:OE1	1:A:25:LYS:CD	0.40	2.70	8	1
1:A:59:GLY:C	1:A:60:ASP:CG	0.40	2.80	8	1
1:A:71:VAL:HG11	1:A:106:LYS:O	0.40	2.16	12	1
1:A:73:ASP:O	1:A:77:ASP:CG	0.40	2.60	12	1
1:A:61:PRO:C	1:A:62:THR:CG2	0.40	2.89	13	1
1:A:58:PHE:CE1	1:A:136:VAL:HG23	0.40	2.51	15	1
1:A:141:GLU:HG3	1:A:142:GLU:N	0.40	2.30	16	1
1:A:71:VAL:CG2	1:A:72:PHE:N	0.40	2.84	2	1
1:A:72:PHE:CG	1:A:72:PHE:O	0.40	2.75	5	1
1:A:155:MET:O	1:A:158:LYS:CG	0.40	2.69	6	1
1:A:60:ASP:H	1:A:61:PRO:HD3	0.40	1.76	11	1
1:A:21:TYR:CD2	1:A:90:SER:O	0.40	2.75	19	1
1:A:92:THR:O	1:A:93:SER:C	0.40	2.60	20	1

6.3 Torsion angles ⓘ

6.3.1 Protein backbone ⓘ

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	176/190 (93%)	151±3 (86±2%)	17±3 (10±2%)	8±2 (5±1%)	4	27
All	All	3520/3800 (93%)	3010 (86%)	346 (10%)	164 (5%)	4	27

All 40 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	20	THR	16
1	A	159	ASN	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	62	THR	11
1	A	94	ARG	9
1	A	142	GLU	7
1	A	177	PRO	7
1	A	112	ASN	7
1	A	137	GLU	7
1	A	144	THR	7
1	A	76	LYS	6
1	A	183	LEU	5
1	A	160	ALA	5
1	A	114	GLY	5
1	A	136	VAL	5
1	A	181	GLN	5
1	A	145	PRO	4
1	A	140	GLU	4
1	A	60	ASP	3
1	A	135	THR	3
1	A	143	ASN	3
1	A	167	GLN	3
1	A	158	LYS	2
1	A	182	ALA	2
1	A	139	PRO	2
1	A	73	ASP	2
1	A	184	SER	2
1	A	61	PRO	2
1	A	134	ASN	2
1	A	95	GLY	2
1	A	133	GLY	2
1	A	39	PRO	1
1	A	178	SER	1
1	A	31	TYR	1
1	A	57	PRO	1
1	A	40	SER	1
1	A	157	ASP	1
1	A	9	LYS	1
1	A	58	PHE	1
1	A	75	ASN	1
1	A	180	VAL	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	156/168 (93%)	136±4 (87±2%)	20±4 (13±2%)	7	49
All	All	3120/3360 (93%)	2721 (87%)	399 (13%)	7	49

All 89 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	183	LEU	20
1	A	82	PHE	17
1	A	80	ILE	16
1	A	153	PHE	15
1	A	108	TYR	14
1	A	144	THR	13
1	A	118	ARG	13
1	A	164	LEU	13
1	A	178	SER	12
1	A	69	PHE	12
1	A	86	ILE	11
1	A	138	LEU	10
1	A	96	THR	9
1	A	92	THR	9
1	A	60	ASP	7
1	A	166	LEU	7
1	A	129	TYR	7
1	A	159	ASN	7
1	A	169	PHE	7
1	A	20	THR	6
1	A	174	LYS	6
1	A	25	LYS	6
1	A	30	TRP	5
1	A	52	TYR	5
1	A	103	TRP	5
1	A	75	ASN	5
1	A	14	GLU	4
1	A	89	LEU	4
1	A	115	TYR	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	56	PHE	4
1	A	180	VAL	4
1	A	170	GLN	4
1	A	34	PHE	4
1	A	156	MET	4
1	A	16	LEU	4
1	A	85	PHE	4
1	A	62	THR	4
1	A	131	MET	3
1	A	184	SER	3
1	A	27	VAL	3
1	A	136	VAL	3
1	A	176	ASP	3
1	A	12	VAL	3
1	A	125	VAL	3
1	A	135	THR	3
1	A	24	GLU	3
1	A	148	ARG	3
1	A	51	ILE	3
1	A	64	PHE	3
1	A	112	ASN	3
1	A	48	PHE	3
1	A	54	GLN	3
1	A	49	GLN	3
1	A	119	ASN	2
1	A	21	TYR	2
1	A	132	VAL	2
1	A	113	ASP	2
1	A	72	PHE	2
1	A	163	LYS	2
1	A	57	PRO	2
1	A	149	VAL	2
1	A	18	ARG	2
1	A	101	LEU	2
1	A	117	THR	2
1	A	70	ASN	2
1	A	110	LEU	2
1	A	55	PHE	2
1	A	93	SER	1
1	A	63	LYS	1
1	A	74	GLU	1
1	A	19	LYS	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	22	PHE	1
1	A	143	ASN	1
1	A	67	PHE	1
1	A	91	VAL	1
1	A	35	ILE	1
1	A	121	MET	1
1	A	71	VAL	1
1	A	17	THR	1
1	A	146	GLU	1
1	A	107	LEU	1
1	A	151	ARG	1
1	A	109	ASP	1
1	A	161	ASP	1
1	A	31	TYR	1
1	A	38	CYS	1
1	A	9	LYS	1
1	A	97	LEU	1
1	A	122	LEU	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 ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 58% for the well-defined parts and 57% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: input_cs.cif

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	1477
Number of shifts mapped to atoms	1477
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	0

7.1.2 Chemical shift referencing

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction \pm precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	185	-0.80 ± 0.14	Should be applied
$^{13}\text{C}_\beta$	172	0.08 ± 0.10	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	183	-0.80 ± 0.13	Should be applied
^{15}N	178	0.15 ± 0.18	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 58%, i.e. 1301 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2229. 0 out of 23 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	863/866 (100%)	344/345 (100%)	350/352 (99%)	169/169 (100%)
Sidechain	350/1156 (30%)	84/677 (12%)	264/426 (62%)	2/53 (4%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Aromatic	88/207 (43%)	85/111 (77%)	1/94 (1%)	2/2 (100%)
Overall	1301/2229 (58%)	513/1133 (45%)	615/872 (71%)	173/224 (77%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 57%, i.e. 1364 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2394. 0 out of 27 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	908/936 (97%)	362/373 (97%)	368/380 (97%)	178/183 (97%)
Sidechain	364/1243 (29%)	87/728 (12%)	275/459 (60%)	2/56 (4%)
Aromatic	92/215 (43%)	89/115 (77%)	1/98 (1%)	2/2 (100%)
Overall	1364/2394 (57%)	538/1216 (44%)	644/937 (69%)	182/241 (76%)

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:

