



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

May 29, 2020 – 12:04 am BST

PDB ID : 2MYI
Title : Solution Structure of Crc from *P. syringae* Lz4W
Authors : Deshmukh, M.V.; Sharma, R.
Deposited on : 2015-01-25

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

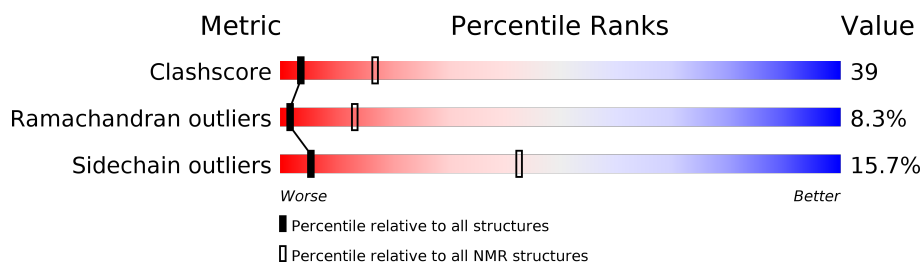
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 42%.

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	259	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 10 models. Model 6 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *closest to the average*.

The following residues are included in the computation of the global validation metrics.

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:2-A:166, A:170-A:259 (255)	0.96	6

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

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

The models can be grouped into 2 clusters and 2 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	5, 6, 7, 8, 10
2	1, 2, 3
Single-model clusters	4; 9

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 4161 atoms, of which 2050 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Exodeoxyribonuclease III.

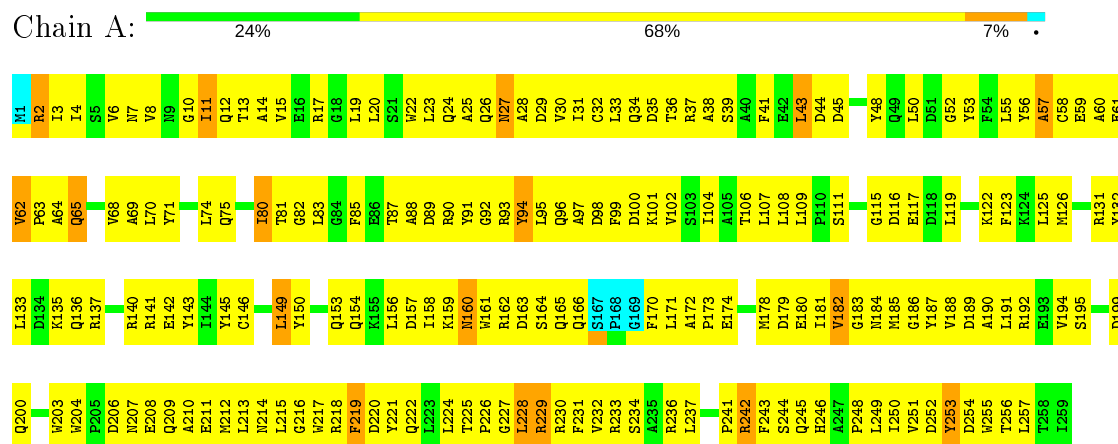
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	259	Total	C	H	N	O	S	0
			4161	1338	2050	371	394	8	

4 Residue-property plots [i](#)

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: Exodeoxyribonuclease III

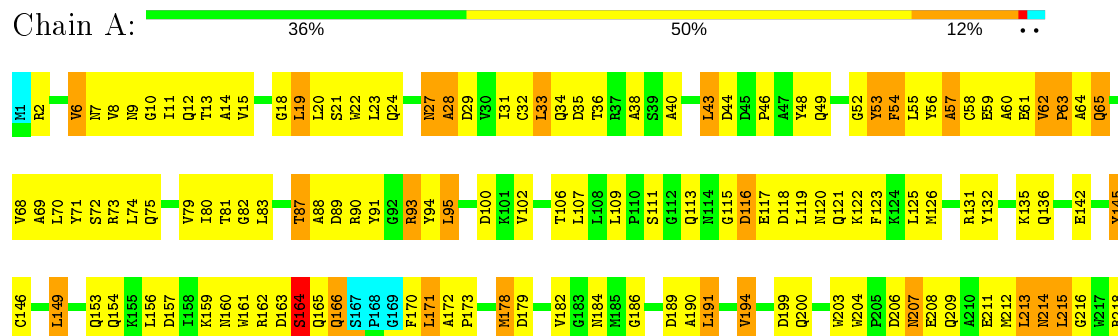


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

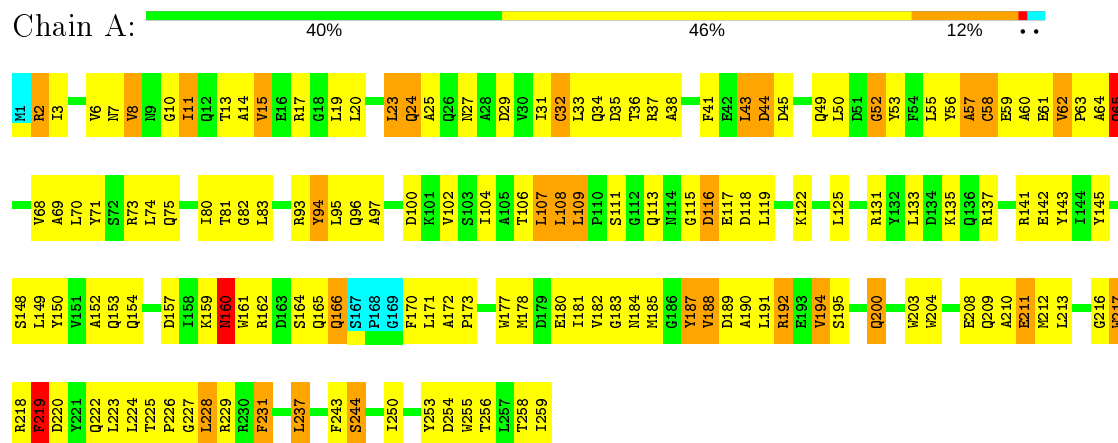
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Exodeoxyribonuclease III



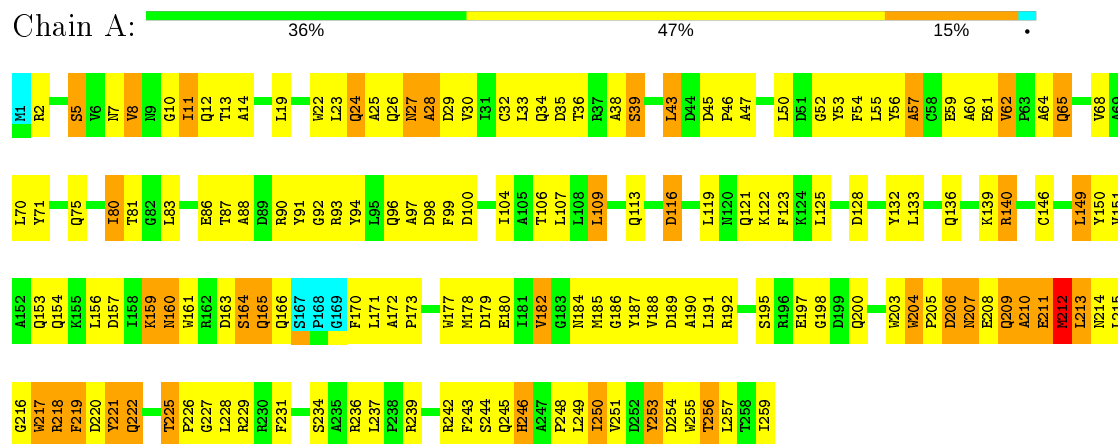
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Exodeoxyribonuclease III



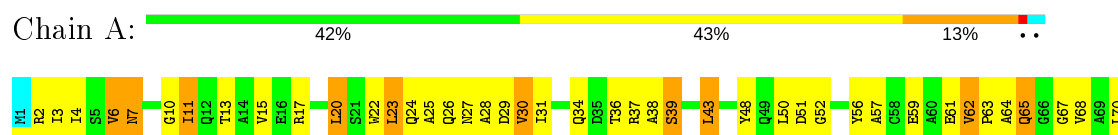
4.2.3 Score per residue for model 3

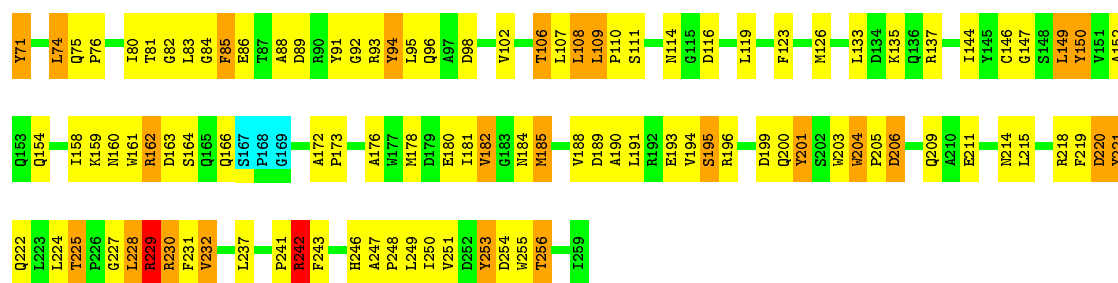
- Molecule 1: Exodeoxyribonuclease III



4.2.4 Score per residue for model 4

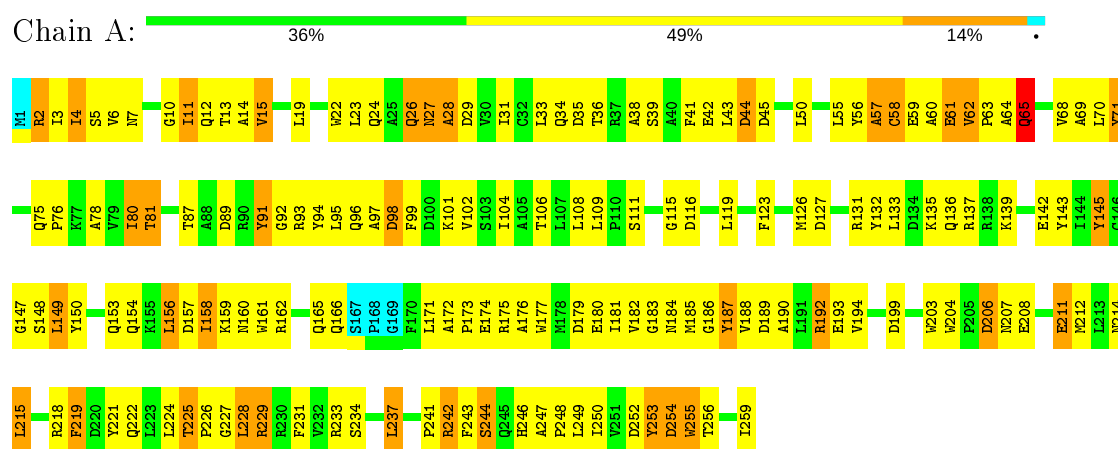
- Molecule 1: Exodeoxyribonuclease III





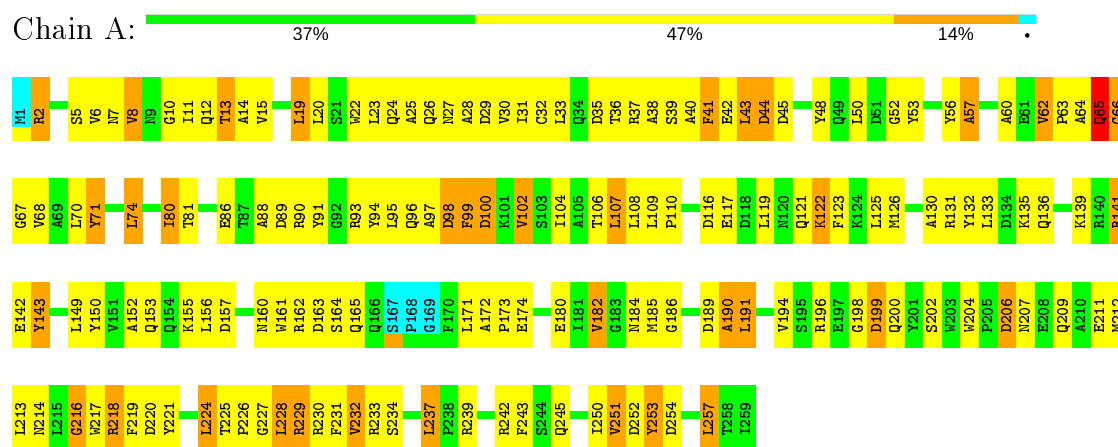
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Exodeoxyribonuclease III



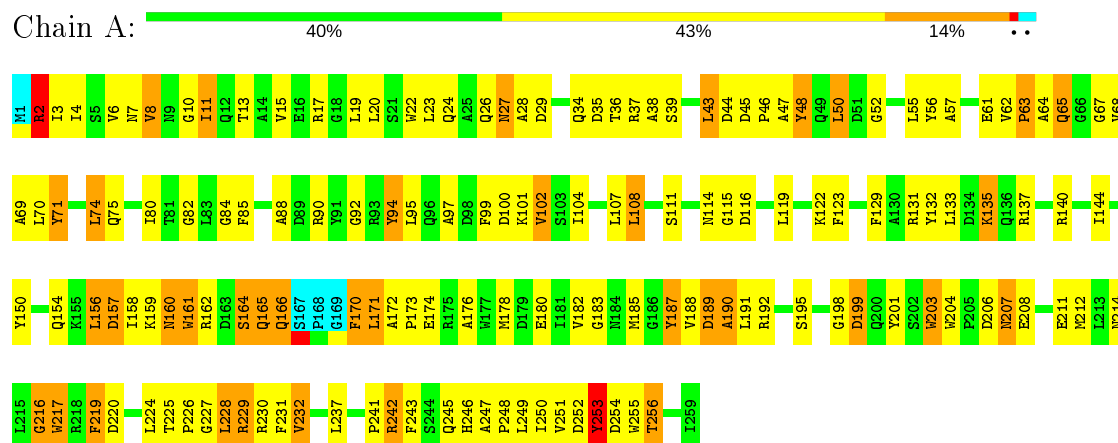
4.2.6 Score per residue for model 6 (medoid)

- Molecule 1: Exodeoxyribonuclease III



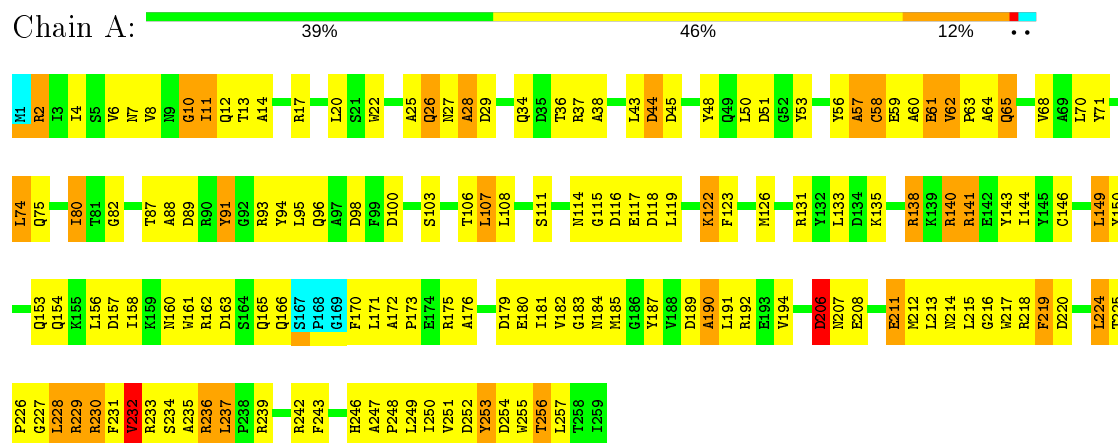
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Exodeoxyribonuclease III



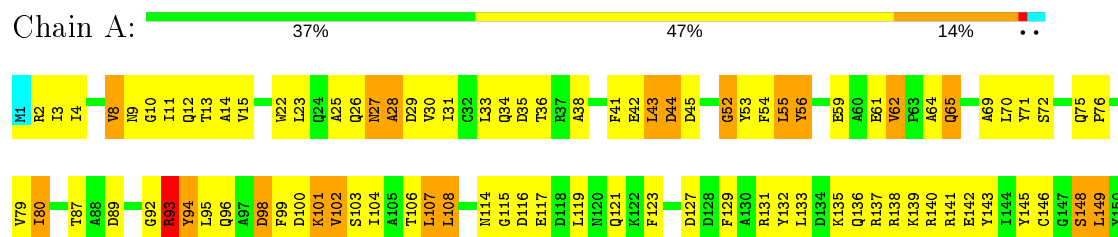
4.2.8 Score per residue for model 8

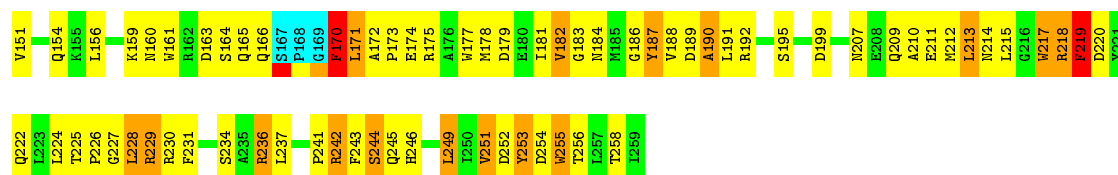
- Molecule 1: Exodeoxyribonuclease III



4.2.9 Score per residue for model 9

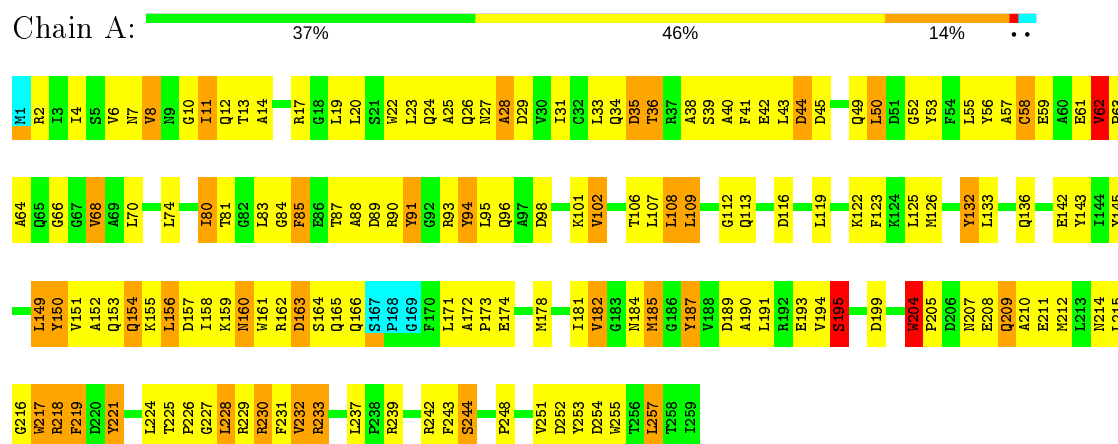
- Molecule 1: Exodeoxyribonuclease III





4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Exodeoxyribonuclease III



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 100 calculated structures, 10 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	1546
Number of shifts mapped to atoms	1546
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	42%

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

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	2086	2024	2024	160±11
All	All	20860	20240	20240	1595

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 39.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:80:ILE:HD12	1:A:80:ILE:H	0.94	1.21	9	2
1:A:108:LEU:HD22	1:A:108:LEU:H	0.92	1.23	9	1
1:A:237:LEU:HD12	1:A:237:LEU:H	0.92	1.24	5	1
1:A:80:ILE:H	1:A:80:ILE:HD12	0.91	1.26	6	4
1:A:80:ILE:N	1:A:80:ILE:HD12	0.90	1.81	5	3
1:A:107:LEU:HD22	1:A:107:LEU:H	0.90	1.22	2	2
1:A:149:LEU:H	1:A:149:LEU:HD12	0.86	1.30	4	2
1:A:80:ILE:HD12	1:A:80:ILE:N	0.85	1.87	9	3
1:A:74:LEU:HD22	1:A:75:GLN:N	0.85	1.87	8	1
1:A:4:ILE:HD12	1:A:5:SER:N	0.84	1.87	5	1
1:A:215:LEU:HD22	1:A:215:LEU:O	0.83	1.73	1	1
1:A:60:ALA:O	1:A:62:VAL:N	0.83	2.11	5	2
1:A:108:LEU:HD13	1:A:108:LEU:N	0.83	1.89	4	2
1:A:237:LEU:HD13	1:A:237:LEU:N	0.83	1.88	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:237:LEU:N	1:A:237:LEU:HD13	0.83	1.89	6	2
1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:LEU:HD12	0.82	1.51	3	2
1:A:94:TYR:CZ	1:A:107:LEU:HD11	0.82	2.10	7	1
1:A:108:LEU:HD22	1:A:108:LEU:N	0.81	1.90	9	1
1:A:80:ILE:O	1:A:95:LEU:HA	0.81	1.76	1	4
1:A:107:LEU:N	1:A:107:LEU:HD22	0.81	1.89	6	2
1:A:108:LEU:N	1:A:108:LEU:HD22	0.80	1.91	2	1
1:A:80:ILE:O	1:A:95:LEU:HD12	0.80	1.76	4	3
1:A:107:LEU:HD22	1:A:107:LEU:N	0.79	1.92	2	2
1:A:149:LEU:HD12	1:A:149:LEU:H	0.79	1.38	5	3
1:A:237:LEU:HD22	1:A:237:LEU:H	0.79	1.35	6	1
1:A:119:LEU:HD21	1:A:166:GLN:NE2	0.79	1.92	9	1
1:A:57:ALA:HB1	1:A:68:VAL:O	0.79	1.75	7	9
1:A:11:ILE:O	1:A:15:VAL:HG12	0.78	1.78	5	1
1:A:228:LEU:O	1:A:230:ARG:N	0.78	2.15	6	6
1:A:171:LEU:HD22	1:A:171:LEU:N	0.78	1.94	7	1
1:A:108:LEU:H	1:A:108:LEU:HD22	0.77	1.39	2	1
1:A:165:GLN:O	1:A:171:LEU:HD21	0.77	1.78	10	5
1:A:97:ALA:HB3	1:A:104:ILE:O	0.77	1.80	7	3
1:A:149:LEU:N	1:A:149:LEU:HD13	0.75	1.97	3	1
1:A:2:ARG:O	1:A:28:ALA:HB1	0.75	1.81	9	3
1:A:119:LEU:HD21	1:A:150:TYR:CZ	0.75	2.16	10	1
1:A:248:PRO:O	1:A:250:ILE:HG23	0.75	1.80	8	3
1:A:107:LEU:C	1:A:108:LEU:HD13	0.74	2.02	9	1
1:A:38:ALA:HB1	1:A:43:LEU:HD21	0.73	1.57	2	1
1:A:26:GLN:C	1:A:28:ALA:H	0.73	1.87	9	5
1:A:171:LEU:N	1:A:171:LEU:HD13	0.73	1.98	7	1
1:A:228:LEU:N	1:A:228:LEU:HD23	0.72	1.99	4	5
1:A:106:THR:C	1:A:107:LEU:HD13	0.72	2.03	2	1
1:A:237:LEU:N	1:A:237:LEU:HD22	0.72	2.00	7	1
1:A:119:LEU:HD21	1:A:150:TYR:OH	0.72	1.83	10	1
1:A:68:VAL:N	1:A:92:GLY:O	0.72	2.23	7	1
1:A:219:PHE:CD1	1:A:219:PHE:O	0.71	2.43	9	1
1:A:171:LEU:HD13	1:A:171:LEU:H	0.71	1.46	7	1
1:A:80:ILE:C	1:A:95:LEU:HD12	0.70	2.06	1	3
1:A:151:VAL:HG21	1:A:177:TRP:CE3	0.70	2.21	3	1
1:A:156:LEU:HD23	1:A:192:ARG:HE	0.70	1.45	5	2
1:A:81:THR:O	1:A:88:ALA:HB1	0.70	1.87	6	3
1:A:70:LEU:HD11	1:A:106:THR:OG1	0.70	1.87	8	2
1:A:237:LEU:HD13	1:A:237:LEU:H	0.70	1.46	2	1
1:A:83:LEU:HD21	1:A:94:TYR:CE1	0.70	2.21	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:107:LEU:HD13	1:A:107:LEU:N	0.70	2.01	2	1
1:A:215:LEU:C	1:A:215:LEU:HD13	0.69	2.07	1	1
1:A:237:LEU:HD12	1:A:237:LEU:N	0.69	1.99	5	3
1:A:40:ALA:O	1:A:42:GLU:N	0.69	2.25	6	2
1:A:171:LEU:HD22	1:A:171:LEU:H	0.69	1.42	7	1
1:A:93:ARG:NH2	1:A:125:LEU:HD12	0.69	2.02	1	1
1:A:61:GLU:O	1:A:64:ALA:HB3	0.69	1.88	1	6
1:A:228:LEU:O	1:A:231:PHE:N	0.69	2.26	6	10
1:A:43:LEU:HD23	1:A:43:LEU:N	0.68	2.03	2	1
1:A:149:LEU:N	1:A:149:LEU:HD12	0.68	2.04	8	3
1:A:227:GLY:C	1:A:228:LEU:HD23	0.67	2.09	5	3
1:A:220:ASP:OD2	1:A:249:LEU:HD22	0.67	1.90	8	2
1:A:149:LEU:HD12	1:A:149:LEU:N	0.67	2.04	1	2
1:A:253:TYR:CG	1:A:254:ASP:N	0.67	2.62	5	6
1:A:38:ALA:CB	1:A:43:LEU:HD11	0.67	2.19	5	1
1:A:178:MET:O	1:A:182:VAL:HG13	0.67	1.90	9	1
1:A:171:LEU:HD23	1:A:171:LEU:H	0.67	1.50	9	1
1:A:11:ILE:HD13	1:A:11:ILE:O	0.66	1.91	5	3
1:A:107:LEU:H	1:A:107:LEU:HD22	0.66	1.50	8	1
1:A:129:PHE:CZ	1:A:133:LEU:HD11	0.65	2.26	9	1
1:A:23:LEU:HD22	1:A:31:ILE:CD1	0.65	2.21	2	1
1:A:93:ARG:NE	1:A:109:LEU:HD21	0.65	2.05	2	1
1:A:69:ALA:C	1:A:70:LEU:HD12	0.65	2.11	2	1
1:A:23:LEU:O	1:A:23:LEU:HD12	0.65	1.91	4	1
1:A:177:TRP:O	1:A:181:ILE:HG22	0.65	1.91	9	1
1:A:218:ARG:H	1:A:218:ARG:NE	0.65	1.89	10	1
1:A:60:ALA:HB1	1:A:90:ARG:CA	0.65	2.22	1	1
1:A:159:LYS:NZ	1:A:199:ASP:H	0.65	1.90	10	1
1:A:92:GLY:C	1:A:94:TYR:H	0.65	1.95	9	1
1:A:40:ALA:HB2	1:A:59:GLU:OE1	0.64	1.91	1	1
1:A:3:ILE:C	1:A:4:ILE:HD12	0.64	2.13	9	1
1:A:94:TYR:CD2	1:A:107:LEU:HD11	0.64	2.27	3	1
1:A:171:LEU:CD2	1:A:171:LEU:H	0.64	2.04	7	2
1:A:23:LEU:HD12	1:A:23:LEU:C	0.64	2.13	2	1
1:A:6:VAL:HG11	1:A:19:LEU:CD1	0.64	2.22	7	2
1:A:23:LEU:HD13	1:A:31:ILE:HD11	0.64	1.68	4	2
1:A:217:TRP:CD1	1:A:217:TRP:N	0.63	2.65	7	1
1:A:99:PHE:CG	1:A:99:PHE:O	0.63	2.50	5	1
1:A:34:GLN:NE2	1:A:109:LEU:N	0.63	2.47	4	1
1:A:56:TYR:O	1:A:57:ALA:HB2	0.63	1.94	1	9
1:A:203:TRP:CD1	1:A:204:TRP:N	0.63	2.66	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:TYR:CD1	1:A:95:LEU:N	0.63	2.67	10	2
1:A:160:ASN:N	1:A:160:ASN:HD22	0.63	1.91	2	1
1:A:57:ALA:HB2	1:A:70:LEU:H	0.63	1.54	4	4
1:A:7:ASN:ND2	1:A:219:PHE:CD1	0.63	2.67	4	1
1:A:96:GLN:NE2	1:A:132:TYR:CE1	0.63	2.67	6	1
1:A:182:VAL:O	1:A:185:MET:N	0.63	2.32	8	5
1:A:215:LEU:O	1:A:215:LEU:HD23	0.62	1.94	8	2
1:A:69:ALA:HB1	1:A:71:TYR:CZ	0.62	2.30	9	2
1:A:225:THR:O	1:A:227:GLY:N	0.62	2.33	8	8
1:A:17:ARG:NH1	1:A:218:ARG:NH2	0.62	2.48	2	1
1:A:195:SER:OG	1:A:237:LEU:HD13	0.62	1.93	10	1
1:A:209:GLN:NE2	1:A:242:ARG:NH2	0.62	2.47	6	1
1:A:214:ASN:ND2	1:A:217:TRP:CH2	0.62	2.68	10	1
1:A:10:GLY:O	1:A:13:THR:N	0.62	2.33	8	10
1:A:231:PHE:O	1:A:232:VAL:HG13	0.62	1.94	6	2
1:A:92:GLY:O	1:A:94:TYR:N	0.62	2.33	9	1
1:A:62:VAL:O	1:A:64:ALA:N	0.62	2.33	6	8
1:A:181:ILE:HG23	1:A:182:VAL:HG22	0.61	1.70	4	1
1:A:191:LEU:C	1:A:191:LEU:HD13	0.61	2.13	2	1
1:A:27:ASN:H	1:A:27:ASN:ND2	0.61	1.92	3	1
1:A:196:ARG:NE	1:A:200:GLN:NE2	0.61	2.48	6	1
1:A:143:TYR:CE1	1:A:145:TYR:CE2	0.61	2.88	2	1
1:A:221:TYR:N	1:A:221:TYR:CD1	0.61	2.67	10	1
1:A:7:ASN:ND2	1:A:218:ARG:NH2	0.61	2.47	1	1
1:A:159:LYS:NZ	1:A:201:TYR:H	0.61	1.93	4	1
1:A:121:GLN:NE2	1:A:125:LEU:HD12	0.61	2.11	6	1
1:A:217:TRP:CZ3	1:A:239:ARG:NE	0.61	2.67	8	1
1:A:27:ASN:ND2	1:A:27:ASN:N	0.61	2.48	3	1
1:A:26:GLN:O	1:A:28:ALA:N	0.61	2.34	9	4
1:A:218:ARG:HE	1:A:218:ARG:N	0.61	1.93	10	1
1:A:160:ASN:HD22	1:A:160:ASN:H	0.61	1.35	2	1
1:A:212:MET:O	1:A:214:ASN:N	0.60	2.34	9	6
1:A:107:LEU:N	1:A:107:LEU:CD2	0.60	2.63	6	3
1:A:151:VAL:N	1:A:166:GLN:HE22	0.60	1.94	3	1
1:A:237:LEU:HD22	1:A:237:LEU:N	0.60	2.10	6	1
1:A:244:SER:OG	1:A:245:GLN:N	0.60	2.34	9	2
1:A:253:TYR:CD2	1:A:254:ASP:N	0.60	2.69	6	4
1:A:11:ILE:O	1:A:11:ILE:HD13	0.60	1.97	7	4
1:A:187:TYR:O	1:A:187:TYR:CD1	0.60	2.55	7	2
1:A:119:LEU:HD11	1:A:150:TYR:CG	0.60	2.31	6	2
1:A:112:GLY:H	1:A:166:GLN:NE2	0.60	1.95	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:125:LEU:HD23	1:A:125:LEU:O	0.60	1.97	3	1
1:A:28:ALA:O	1:A:53:TYR:CZ	0.60	2.55	1	1
1:A:80:ILE:N	1:A:80:ILE:CD1	0.60	2.58	5	4
1:A:30:VAL:HG21	1:A:104:ILE:CD1	0.60	2.27	6	2
1:A:2:ARG:CZ	1:A:26:GLN:NE2	0.60	2.65	6	1
1:A:152:ALA:HB1	1:A:157:ASP:OD2	0.59	1.97	6	2
1:A:34:GLN:HE21	1:A:109:LEU:N	0.59	1.95	4	1
1:A:8:VAL:HG21	1:A:14:ALA:HB2	0.59	1.74	8	1
1:A:218:ARG:NH2	1:A:249:LEU:N	0.59	2.50	9	1
1:A:153:GLN:NE2	1:A:178:MET:SD	0.59	2.75	1	1
1:A:171:LEU:CD1	1:A:171:LEU:H	0.59	2.07	7	1
1:A:243:PHE:H	1:A:246:HIS:CD2	0.59	2.14	1	1
1:A:182:VAL:HG12	1:A:183:GLY:N	0.59	2.13	7	4
1:A:237:LEU:N	1:A:237:LEU:CD1	0.59	2.61	8	5
1:A:133:LEU:C	1:A:133:LEU:HD23	0.59	2.17	6	3
1:A:26:GLN:C	1:A:28:ALA:N	0.59	2.54	9	4
1:A:4:ILE:HD12	1:A:28:ALA:HB2	0.59	1.73	10	1
1:A:154:GLN:NE2	1:A:161:TRP:CZ3	0.59	2.70	2	1
1:A:38:ALA:CB	1:A:43:LEU:HD21	0.59	2.26	2	1
1:A:236:ARG:C	1:A:237:LEU:HD12	0.59	2.17	3	2
1:A:54:PHE:CD1	1:A:75:GLN:NE2	0.59	2.71	1	1
1:A:126:MET:SD	1:A:177:TRP:CE3	0.59	2.96	5	1
1:A:23:LEU:HD13	1:A:31:ILE:HG21	0.59	1.74	10	1
1:A:201:TYR:CZ	1:A:214:ASN:ND2	0.59	2.71	4	1
1:A:62:VAL:C	1:A:64:ALA:H	0.59	2.00	1	9
1:A:156:LEU:O	1:A:156:LEU:HD13	0.59	1.97	7	1
1:A:119:LEU:HD12	1:A:122:LYS:NZ	0.59	2.13	8	1
1:A:50:LEU:N	1:A:50:LEU:HD12	0.58	2.13	7	1
1:A:219:PHE:CD1	1:A:221:TYR:CE2	0.58	2.91	10	1
1:A:68:VAL:HG13	1:A:68:VAL:O	0.58	1.98	7	3
1:A:23:LEU:C	1:A:23:LEU:HD12	0.58	2.17	4	1
1:A:107:LEU:CD2	1:A:107:LEU:N	0.58	2.66	10	1
1:A:7:ASN:ND2	1:A:218:ARG:HH12	0.58	1.97	10	1
1:A:163:ASP:O	1:A:165:GLN:N	0.58	2.36	1	2
1:A:150:TYR:CE2	1:A:219:PHE:CE1	0.58	2.91	2	1
1:A:58:CYS:SG	1:A:59:GLU:N	0.58	2.76	2	1
1:A:218:ARG:NE	1:A:218:ARG:N	0.58	2.51	10	1
1:A:80:ILE:HG22	1:A:82:GLY:O	0.58	1.99	7	3
1:A:29:ASP:OD1	1:A:30:VAL:N	0.58	2.37	4	1
1:A:22:TRP:O	1:A:25:ALA:N	0.58	2.37	9	3
1:A:7:ASN:ND2	1:A:218:ARG:CB	0.58	2.67	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:71:TYR:CD1	1:A:71:TYR:O	0.58	2.56	4	1
1:A:80:ILE:CD1	1:A:80:ILE:N	0.58	2.61	3	2
1:A:55:LEU:HD12	1:A:55:LEU:O	0.58	1.98	10	1
1:A:67:GLY:O	1:A:108:LEU:HD22	0.57	1.99	7	1
1:A:214:ASN:ND2	1:A:217:TRP:CZ2	0.57	2.72	10	1
1:A:172:ALA:N	1:A:173:PRO:CD	0.57	2.68	7	4
1:A:34:GLN:NE2	1:A:109:LEU:H	0.57	1.97	4	1
1:A:211:GLU:O	1:A:216:GLY:N	0.57	2.37	7	4
1:A:81:THR:OG1	1:A:81:THR:O	0.57	2.21	5	1
1:A:36:THR:O	1:A:38:ALA:N	0.57	2.37	8	5
1:A:26:GLN:N	1:A:26:GLN:NE2	0.57	2.52	8	1
1:A:22:TRP:CE2	1:A:247:ALA:HB2	0.57	2.35	4	1
1:A:91:TYR:CE2	1:A:93:ARG:CZ	0.57	2.87	10	1
1:A:108:LEU:N	1:A:108:LEU:CD2	0.57	2.65	2	1
1:A:2:ARG:HH12	1:A:27:ASN:ND2	0.57	1.98	4	1
1:A:228:LEU:N	1:A:228:LEU:CD2	0.57	2.68	5	4
1:A:237:LEU:N	1:A:237:LEU:CD2	0.57	2.66	7	1
1:A:4:ILE:C	1:A:4:ILE:HD12	0.57	2.20	5	1
1:A:31:ILE:HG22	1:A:33:LEU:HD13	0.57	1.75	6	2
1:A:242:ARG:CD	1:A:242:ARG:H	0.57	2.11	4	1
1:A:145:TYR:N	1:A:145:TYR:CD1	0.57	2.72	5	1
1:A:92:GLY:C	1:A:94:TYR:N	0.57	2.58	9	1
1:A:121:GLN:HE21	1:A:125:LEU:HD12	0.56	1.59	6	1
1:A:150:TYR:CD2	1:A:150:TYR:O	0.56	2.58	7	1
1:A:91:TYR:O	1:A:91:TYR:CD2	0.56	2.58	10	1
1:A:27:ASN:OD1	1:A:53:TYR:CD1	0.56	2.57	3	1
1:A:160:ASN:OD1	1:A:216:GLY:N	0.56	2.38	10	1
1:A:32:CYS:SG	1:A:146:CYS:SG	0.56	3.03	1	1
1:A:50:LEU:H	1:A:50:LEU:HD12	0.56	1.60	7	1
1:A:236:ARG:HE	1:A:236:ARG:CA	0.56	2.13	8	1
1:A:233:ARG:N	1:A:252:ASP:O	0.56	2.38	6	1
1:A:230:ARG:O	1:A:253:TYR:CE2	0.56	2.58	7	1
1:A:26:GLN:NE2	1:A:252:ASP:OD1	0.56	2.39	7	1
1:A:160:ASN:O	1:A:164:SER:N	0.56	2.39	3	4
1:A:64:ALA:O	1:A:65:GLN:CG	0.56	2.54	8	1
1:A:189:ASP:O	1:A:191:LEU:N	0.56	2.39	4	8
1:A:150:TYR:O	1:A:150:TYR:CD2	0.56	2.58	8	2
1:A:81:THR:O	1:A:88:ALA:HB2	0.56	2.00	4	1
1:A:237:LEU:CD1	1:A:237:LEU:H	0.56	2.07	5	1
1:A:218:ARG:O	1:A:219:PHE:CD1	0.56	2.59	9	1
1:A:224:LEU:HD22	1:A:224:LEU:N	0.56	2.16	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:ALA:O	1:A:65:GLN:CB	0.56	2.53	9	6
1:A:146:CYS:SG	1:A:222:GLN:NE2	0.56	2.78	3	2
1:A:159:LYS:NZ	1:A:201:TYR:N	0.56	2.54	4	1
1:A:59:GLU:N	1:A:59:GLU:OE1	0.56	2.38	1	3
1:A:70:LEU:HD13	1:A:106:THR:HG21	0.56	1.77	4	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:19:LEU:O	0.56	2.00	2	1
1:A:241:PRO:O	1:A:246:HIS:CD2	0.56	2.59	1	1
1:A:228:LEU:CD2	1:A:228:LEU:N	0.56	2.69	2	1
1:A:180:GLU:O	1:A:184:ASN:ND2	0.56	2.39	3	3
1:A:190:ALA:HB1	1:A:232:VAL:HG11	0.56	1.77	6	2
1:A:40:ALA:C	1:A:42:GLU:N	0.56	2.57	6	2
1:A:71:TYR:CD1	1:A:71:TYR:N	0.55	2.74	5	3
1:A:201:TYR:CE1	1:A:214:ASN:ND2	0.55	2.74	7	1
1:A:74:LEU:HD22	1:A:257:LEU:O	0.55	2.01	10	1
1:A:61:GLU:O	1:A:64:ALA:N	0.55	2.39	3	3
1:A:27:ASN:ND2	1:A:53:TYR:CZ	0.55	2.74	3	1
1:A:2:ARG:C	1:A:3:ILE:HD12	0.55	2.20	7	1
1:A:116:ASP:O	1:A:120:ASN:ND2	0.55	2.39	1	1
1:A:123:PHE:O	1:A:126:MET:N	0.55	2.40	1	1
1:A:143:TYR:CD1	1:A:145:TYR:CE2	0.55	2.95	2	1
1:A:158:ILE:HG21	1:A:166:GLN:O	0.55	2.01	4	1
1:A:209:GLN:HE22	1:A:242:ARG:NE	0.55	1.99	6	1
1:A:106:THR:C	1:A:107:LEU:HD12	0.55	2.22	1	1
1:A:187:TYR:CD1	1:A:187:TYR:C	0.55	2.80	2	1
1:A:156:LEU:HD23	1:A:192:ARG:NE	0.55	2.16	7	1
1:A:109:LEU:HD13	1:A:122:LYS:HD3	0.55	1.79	3	1
1:A:27:ASN:O	1:A:53:TYR:CD2	0.55	2.59	3	1
1:A:29:ASP:OD1	1:A:256:THR:N	0.55	2.39	5	1
1:A:23:LEU:C	1:A:23:LEU:HD23	0.55	2.22	7	1
1:A:220:ASP:CG	1:A:249:LEU:HD22	0.55	2.21	9	1
1:A:58:CYS:SG	1:A:81:THR:OG1	0.55	2.64	1	1
1:A:225:THR:C	1:A:227:GLY:H	0.55	2.04	8	10
1:A:209:GLN:O	1:A:211:GLU:N	0.55	2.40	3	3
1:A:108:LEU:CD1	1:A:108:LEU:N	0.55	2.63	4	1
1:A:94:TYR:CD1	1:A:94:TYR:C	0.55	2.80	9	3
1:A:30:VAL:HG21	1:A:104:ILE:HD13	0.55	1.76	6	1
1:A:119:LEU:HD21	1:A:150:TYR:CE2	0.55	2.37	7	1
1:A:136:GLN:NE2	1:A:143:TYR:CD1	0.55	2.75	9	1
1:A:58:CYS:SG	1:A:58:CYS:O	0.55	2.64	10	1
1:A:241:PRO:O	1:A:246:HIS:ND1	0.55	2.40	9	2
1:A:160:ASN:ND2	1:A:214:ASN:O	0.55	2.39	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:166:GLN:HB3	1:A:171:LEU:HD11	0.55	1.78	1	1
1:A:250:ILE:HD12	1:A:250:ILE:C	0.55	2.22	1	1
1:A:2:ARG:O	1:A:29:ASP:N	0.55	2.40	10	2
1:A:159:LYS:HZ2	1:A:201:TYR:H	0.55	1.44	4	1
1:A:133:LEU:O	1:A:133:LEU:HD23	0.55	2.02	7	3
1:A:132:TYR:O	1:A:136:GLN:N	0.54	2.40	1	5
1:A:113:GLN:NE2	1:A:218:ARG:CZ	0.54	2.70	3	1
1:A:59:GLU:OE1	1:A:59:GLU:N	0.54	2.41	8	1
1:A:154:GLN:O	1:A:158:ILE:N	0.54	2.40	10	2
1:A:27:ASN:OD1	1:A:53:TYR:CE1	0.54	2.60	3	1
1:A:45:ASP:O	1:A:47:ALA:N	0.54	2.40	3	2
1:A:31:ILE:HG22	1:A:33:LEU:CD1	0.54	2.32	5	1
1:A:80:ILE:HD13	1:A:96:GLN:HB2	0.54	1.79	6	3
1:A:93:ARG:CD	1:A:93:ARG:H	0.54	2.15	9	1
1:A:43:LEU:CD2	1:A:43:LEU:N	0.54	2.67	2	1
1:A:6:VAL:HG11	1:A:19:LEU:HD11	0.54	1.80	6	2
1:A:207:ASN:N	1:A:209:GLN:OE1	0.54	2.40	3	1
1:A:108:LEU:HD22	1:A:108:LEU:O	0.54	2.02	4	1
1:A:241:PRO:O	1:A:243:PHE:N	0.54	2.40	5	4
1:A:109:LEU:HD13	1:A:122:LYS:CG	0.54	2.32	10	1
1:A:253:TYR:CD1	1:A:254:ASP:N	0.54	2.75	3	2
1:A:116:ASP:O	1:A:119:LEU:N	0.54	2.40	4	7
1:A:93:ARG:HH12	1:A:121:GLN:NE2	0.54	2.00	6	1
1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:HD23	0.54	2.18	5	1
1:A:230:ARG:O	1:A:253:TYR:CE1	0.54	2.61	6	1
1:A:91:TYR:CD2	1:A:91:TYR:O	0.54	2.61	8	1
1:A:161:TRP:O	1:A:165:GLN:NE2	0.54	2.41	10	1
1:A:54:PHE:CE1	1:A:75:GLN:OE1	0.54	2.61	9	2
1:A:178:MET:O	1:A:182:VAL:HG23	0.54	2.02	2	2
1:A:65:GLN:CG	1:A:65:GLN:O	0.54	2.55	9	1
1:A:205:PRO:O	1:A:209:GLN:NE2	0.54	2.41	3	1
1:A:154:GLN:N	1:A:157:ASP:OD1	0.54	2.41	3	1
1:A:231:PHE:O	1:A:253:TYR:CG	0.54	2.61	5	1
1:A:23:LEU:N	1:A:23:LEU:HD23	0.54	2.18	5	1
1:A:142:GLU:O	1:A:143:TYR:CD1	0.54	2.61	6	1
1:A:91:TYR:OH	1:A:121:GLN:NE2	0.54	2.41	1	2
1:A:243:PHE:O	1:A:244:SER:CB	0.54	2.56	5	5
1:A:208:GLU:O	1:A:210:ALA:N	0.54	2.40	3	2
1:A:43:LEU:O	1:A:45:ASP:N	0.54	2.41	8	7
1:A:2:ARG:HE	1:A:255:TRP:N	0.54	2.00	8	1
1:A:253:TYR:O	1:A:255:TRP:CD2	0.54	2.61	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:125:LEU:O	1:A:125:LEU:HD23	0.54	2.02	1	1
1:A:212:MET:C	1:A:214:ASN:H	0.54	2.06	3	1
1:A:94:TYR:CD2	1:A:107:LEU:HD12	0.54	2.38	6	1
1:A:200:GLN:NE2	1:A:214:ASN:O	0.53	2.41	1	1
1:A:253:TYR:CZ	1:A:254:ASP:OD2	0.53	2.61	6	1
1:A:70:LEU:HD11	1:A:106:THR:HG21	0.53	1.80	6	1
1:A:152:ALA:CB	1:A:158:ILE:HG23	0.53	2.34	4	1
1:A:165:GLN:NE2	1:A:170:PHE:CD2	0.53	2.76	8	1
1:A:117:GLU:O	1:A:121:GLN:NE2	0.53	2.41	9	1
1:A:174:GLU:N	1:A:174:GLU:OE1	0.53	2.41	5	1
1:A:231:PHE:CD2	1:A:254:ASP:OD1	0.53	2.61	9	1
1:A:93:ARG:HH21	1:A:125:LEU:HD12	0.53	1.64	1	1
1:A:65:GLN:O	1:A:93:ARG:NH2	0.53	2.41	5	1
1:A:93:ARG:NH2	1:A:121:GLN:OE1	0.53	2.41	6	1
1:A:209:GLN:OE1	1:A:242:ARG:NE	0.53	2.42	4	1
1:A:115:GLY:O	1:A:117:GLU:N	0.53	2.41	1	2
1:A:172:ALA:HB3	1:A:173:PRO:HD3	0.53	1.80	8	10
1:A:35:ASP:OD2	1:A:93:ARG:NH2	0.53	2.42	5	1
1:A:170:PHE:CG	1:A:170:PHE:O	0.53	2.61	7	1
1:A:164:SER:OG	1:A:165:GLN:NE2	0.53	2.42	9	1
1:A:253:TYR:O	1:A:255:TRP:CZ3	0.53	2.62	10	1
1:A:160:ASN:ND2	1:A:163:ASP:OD1	0.53	2.42	1	1
1:A:34:GLN:NE2	1:A:148:SER:OG	0.53	2.42	2	1
1:A:49:GLN:OE1	1:A:50:LEU:N	0.53	2.42	2	1
1:A:70:LEU:HD13	1:A:95:LEU:HD23	0.53	1.81	2	1
1:A:187:TYR:C	1:A:187:TYR:CD1	0.53	2.80	5	3
1:A:156:LEU:O	1:A:157:ASP:CB	0.53	2.57	7	1
1:A:129:PHE:CZ	1:A:145:TYR:CD1	0.53	2.96	9	1
1:A:156:LEU:HD13	1:A:156:LEU:O	0.53	2.04	10	1
1:A:253:TYR:O	1:A:255:TRP:CD1	0.53	2.62	1	1
1:A:54:PHE:CZ	1:A:75:GLN:OE1	0.53	2.62	1	1
1:A:23:LEU:O	1:A:27:ASN:N	0.53	2.41	4	2
1:A:161:TRP:CZ3	1:A:211:GLU:OE2	0.53	2.62	4	1
1:A:12:GLN:NE2	1:A:13:THR:OG1	0.53	2.41	6	1
1:A:199:ASP:OD1	1:A:200:GLN:N	0.53	2.42	6	1
1:A:22:TRP:NE1	1:A:26:GLN:OE1	0.53	2.42	7	1
1:A:206:ASP:OD1	1:A:206:ASP:N	0.53	2.41	1	1
1:A:253:TYR:CE2	1:A:254:ASP:O	0.53	2.62	3	2
1:A:51:ASP:OD1	1:A:52:GLY:N	0.53	2.42	4	1
1:A:123:PHE:CE2	1:A:127:ASP:OD2	0.53	2.62	5	1
1:A:74:LEU:HD23	1:A:257:LEU:O	0.53	2.04	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:38:ALA:CB	1:A:43:LEU:CD1	0.53	2.87	8	1
1:A:231:PHE:O	1:A:231:PHE:CD2	0.53	2.62	1	1
1:A:119:LEU:O	1:A:123:PHE:CD1	0.53	2.62	3	1
1:A:81:THR:O	1:A:81:THR:HG23	0.53	2.03	3	1
1:A:252:ASP:OD1	1:A:253:TYR:N	0.53	2.42	5	2
1:A:209:GLN:NE2	1:A:242:ARG:HH21	0.53	2.02	6	1
1:A:127:ASP:OD1	1:A:131:ARG:NH1	0.53	2.41	9	1
1:A:253:TYR:O	1:A:255:TRP:CE3	0.53	2.63	9	2
1:A:34:GLN:NE2	1:A:113:GLN:OE1	0.53	2.42	10	1
1:A:157:ASP:OD2	1:A:219:PHE:CE2	0.53	2.63	10	1
1:A:241:PRO:O	1:A:246:HIS:CG	0.52	2.63	1	1
1:A:54:PHE:CE2	1:A:75:GLN:OE1	0.52	2.62	1	1
1:A:211:GLU:O	1:A:213:LEU:N	0.52	2.42	3	2
1:A:20:LEU:HD21	1:A:48:TYR:CE1	0.52	2.39	8	1
1:A:136:GLN:NE2	1:A:143:TYR:CE1	0.52	2.77	9	1
1:A:115:GLY:O	1:A:118:ASP:N	0.52	2.39	2	2
1:A:151:VAL:N	1:A:166:GLN:NE2	0.52	2.57	3	1
1:A:201:TYR:CE2	1:A:214:ASN:ND2	0.52	2.78	4	1
1:A:84:GLY:O	1:A:86:GLU:N	0.52	2.41	4	1
1:A:22:TRP:O	1:A:26:GLN:NE2	0.52	2.42	8	1
1:A:29:ASP:CG	1:A:256:THR:H	0.52	2.08	1	1
1:A:83:LEU:HD11	1:A:94:TYR:CZ	0.52	2.39	2	1
1:A:22:TRP:CE2	1:A:246:HIS:O	0.52	2.62	5	1
1:A:116:ASP:OD1	1:A:117:GLU:N	0.52	2.42	8	2
1:A:48:TYR:O	1:A:48:TYR:CG	0.52	2.61	7	1
1:A:27:ASN:ND2	1:A:53:TYR:OH	0.52	2.42	8	2
1:A:150:TYR:CE2	1:A:171:LEU:HD13	0.52	2.39	10	1
1:A:165:GLN:O	1:A:166:GLN:CB	0.52	2.57	2	1
1:A:165:GLN:O	1:A:171:LEU:HD23	0.52	2.04	2	1
1:A:149:LEU:CD1	1:A:149:LEU:N	0.52	2.68	3	2
1:A:157:ASP:OD1	1:A:201:TYR:CD2	0.52	2.62	7	1
1:A:98:ASP:OD1	1:A:141:ARG:NH1	0.52	2.42	9	1
1:A:195:SER:OG	1:A:196:ARG:N	0.52	2.41	4	1
1:A:54:PHE:CD1	1:A:75:GLN:OE1	0.52	2.63	1	1
1:A:195:SER:OG	1:A:237:LEU:HD11	0.52	2.04	2	1
1:A:160:ASN:O	1:A:162:ARG:N	0.52	2.42	7	3
1:A:187:TYR:CE1	1:A:189:ASP:OD1	0.52	2.62	7	1
1:A:230:ARG:NE	1:A:253:TYR:OH	0.52	2.42	8	1
1:A:199:ASP:OD1	1:A:214:ASN:ND2	0.52	2.42	9	1
1:A:43:LEU:O	1:A:48:TYR:CD1	0.52	2.63	1	2
1:A:109:LEU:HD13	1:A:122:LYS:CD	0.52	2.35	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:ASN:HD22	1:A:27:ASN:N	0.52	2.00	3	1
1:A:252:ASP:O	1:A:253:TYR:CB	0.52	2.57	9	3
1:A:44:ASP:OD1	1:A:49:GLN:NE2	0.52	2.43	10	1
1:A:53:TYR:CE2	1:A:73:ARG:N	0.52	2.78	1	1
1:A:111:SER:OG	1:A:150:TYR:CG	0.52	2.61	4	1
1:A:2:ARG:N	1:A:29:ASP:OD2	0.52	2.42	4	1
1:A:184:ASN:O	1:A:185:MET:CB	0.52	2.56	10	3
1:A:10:GLY:O	1:A:14:ALA:N	0.52	2.42	5	2
1:A:211:GLU:CG	1:A:212:MET:H	0.52	2.18	3	1
1:A:255:TRP:CD2	1:A:256:THR:OG1	0.52	2.62	3	1
1:A:91:TYR:CG	1:A:91:TYR:O	0.52	2.62	8	1
1:A:81:THR:O	1:A:88:ALA:CB	0.51	2.57	6	3
1:A:160:ASN:ND2	1:A:211:GLU:OE1	0.51	2.42	5	1
1:A:94:TYR:OH	1:A:96:GLN:NE2	0.51	2.43	6	1
1:A:217:TRP:CZ3	1:A:219:PHE:CE1	0.51	2.98	7	1
1:A:93:ARG:HH21	1:A:125:LEU:HD23	0.51	1.63	2	1
1:A:178:MET:O	1:A:182:VAL:CG2	0.51	2.58	2	2
1:A:11:ILE:O	1:A:14:ALA:N	0.51	2.43	9	5
1:A:161:TRP:CZ2	1:A:218:ARG:CD	0.51	2.93	4	1
1:A:90:ARG:O	1:A:91:TYR:CB	0.51	2.58	10	1
1:A:54:PHE:CG	1:A:75:GLN:OE1	0.51	2.63	1	1
1:A:160:ASN:N	1:A:160:ASN:ND2	0.51	2.58	2	1
1:A:43:LEU:C	1:A:45:ASP:N	0.51	2.62	6	7
1:A:38:ALA:O	1:A:59:GLU:OE1	0.51	2.28	4	1
1:A:74:LEU:HG	1:A:75:GLN:N	0.51	2.21	7	1
1:A:143:TYR:CD2	1:A:225:THR:OG1	0.51	2.62	8	1
1:A:163:ASP:O	1:A:164:SER:CB	0.51	2.58	4	1
1:A:147:GLY:O	1:A:220:ASP:C	0.51	2.49	4	1
1:A:189:ASP:O	1:A:193:GLU:N	0.51	2.43	10	3
1:A:150:TYR:CZ	1:A:166:GLN:OE1	0.51	2.63	5	1
1:A:161:TRP:CZ2	1:A:166:GLN:OE1	0.51	2.63	7	1
1:A:114:ASN:OD1	1:A:115:GLY:N	0.51	2.42	9	2
1:A:143:TYR:CD1	1:A:145:TYR:OH	0.51	2.62	10	1
1:A:153:GLN:NE2	1:A:189:ASP:OD1	0.51	2.43	10	1
1:A:161:TRP:CG	1:A:162:ARG:N	0.51	2.78	10	1
1:A:24:GLN:HB2	1:A:50:LEU:HD22	0.51	1.81	5	1
1:A:68:VAL:HG21	1:A:95:LEU:CB	0.51	2.36	6	1
1:A:98:ASP:O	1:A:99:PHE:CB	0.51	2.57	6	2
1:A:54:PHE:CD2	1:A:75:GLN:OE1	0.51	2.63	1	1
1:A:65:GLN:O	1:A:65:GLN:CG	0.51	2.59	1	1
1:A:152:ALA:O	1:A:178:MET:SD	0.51	2.69	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:191:LEU:N	1:A:191:LEU:CD1	0.51	2.73	9	2
1:A:11:ILE:HG23	1:A:12:GLN:N	0.51	2.19	9	1
1:A:2:ARG:CZ	1:A:253:TYR:O	0.51	2.59	8	2
1:A:189:ASP:N	1:A:189:ASP:OD1	0.51	2.44	7	1
1:A:58:CYS:O	1:A:66:GLY:O	0.51	2.29	10	1
1:A:94:TYR:CE2	1:A:107:LEU:HD11	0.51	2.41	3	1
1:A:215:LEU:HD23	1:A:215:LEU:O	0.51	2.05	5	1
1:A:218:ARG:C	1:A:219:PHE:CG	0.51	2.84	1	1
1:A:23:LEU:HD23	1:A:23:LEU:N	0.51	2.20	1	2
1:A:60:ALA:HB1	1:A:90:ARG:C	0.51	2.26	6	2
1:A:217:TRP:O	1:A:219:PHE:CE1	0.51	2.64	2	1
1:A:166:GLN:OE1	1:A:219:PHE:CD2	0.51	2.63	3	1
1:A:188:VAL:HG12	1:A:190:ALA:H	0.51	1.66	7	3
1:A:74:LEU:C	1:A:74:LEU:HD12	0.51	2.27	6	1
1:A:190:ALA:HB2	1:A:224:LEU:HD21	0.51	1.82	8	2
1:A:203:TRP:CG	1:A:204:TRP:N	0.50	2.79	1	1
1:A:109:LEU:HD13	1:A:122:LYS:HG3	0.50	1.82	10	1
1:A:19:LEU:HD12	1:A:23:LEU:HD11	0.50	1.83	10	1
1:A:189:ASP:C	1:A:191:LEU:N	0.50	2.65	10	9
1:A:184:ASN:O	1:A:185:MET:CG	0.50	2.59	4	1
1:A:149:LEU:N	1:A:149:LEU:CD1	0.50	2.75	10	2
1:A:207:ASN:HD22	1:A:208:GLU:H	0.50	1.49	7	1
1:A:181:ILE:HG22	1:A:187:TYR:CG	0.50	2.41	8	1
1:A:91:TYR:O	1:A:91:TYR:CG	0.50	2.64	10	1
1:A:122:LYS:O	1:A:126:MET:N	0.50	2.45	1	1
1:A:182:VAL:C	1:A:184:ASN:N	0.50	2.64	9	5
1:A:11:ILE:CG2	1:A:12:GLN:N	0.50	2.74	8	5
1:A:153:GLN:O	1:A:155:LYS:N	0.50	2.43	10	1
1:A:159:LYS:NZ	1:A:199:ASP:N	0.50	2.58	10	1
1:A:43:LEU:HB2	1:A:55:LEU:HD22	0.50	1.83	2	1
1:A:25:ALA:HB1	1:A:26:GLN:NE2	0.50	2.21	3	1
1:A:138:ARG:HE	1:A:138:ARG:CA	0.50	2.19	8	1
1:A:254:ASP:OD1	1:A:255:TRP:CE2	0.50	2.64	8	1
1:A:2:ARG:H	1:A:28:ALA:CB	0.50	2.19	8	1
1:A:132:TYR:O	1:A:135:LYS:N	0.50	2.45	1	1
1:A:87:THR:O	1:A:91:TYR:N	0.50	2.45	5	3
1:A:171:LEU:N	1:A:171:LEU:HD23	0.50	2.17	9	1
1:A:75:GLN:NE2	1:A:76:PRO:O	0.50	2.45	9	1
1:A:178:MET:SD	1:A:179:ASP:OD1	0.50	2.70	1	1
1:A:11:ILE:HD12	1:A:14:ALA:HB3	0.50	1.83	6	1
1:A:189:ASP:OD1	1:A:189:ASP:N	0.50	2.40	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:54:PHE:CG	1:A:75:GLN:NE2	0.50	2.80	3	1
1:A:58:CYS:SG	1:A:68:VAL:HG12	0.50	2.47	5	2
1:A:7:ASN:OD1	1:A:212:MET:SD	0.50	2.70	7	1
1:A:19:LEU:O	1:A:23:LEU:N	0.50	2.44	7	1
1:A:204:TRP:N	1:A:205:PRO:CD	0.50	2.74	10	1
1:A:132:TYR:CD1	1:A:145:TYR:OH	0.50	2.62	1	1
1:A:93:ARG:NH2	1:A:109:LEU:HD11	0.50	2.22	2	1
1:A:11:ILE:HG23	1:A:12:GLN:H	0.50	1.67	9	1
1:A:60:ALA:HB1	1:A:90:ARG:HA	0.49	1.84	1	1
1:A:27:ASN:O	1:A:28:ALA:O	0.49	2.30	9	4
1:A:56:TYR:O	1:A:70:LEU:O	0.49	2.30	4	6
1:A:24:GLN:HB3	1:A:50:LEU:HD22	0.49	1.84	3	2
1:A:157:ASP:N	1:A:157:ASP:OD1	0.49	2.44	6	2
1:A:71:TYR:CD1	1:A:71:TYR:C	0.49	2.83	4	1
1:A:218:ARG:O	1:A:219:PHE:CB	0.49	2.60	9	2
1:A:151:VAL:C	1:A:166:GLN:NE2	0.49	2.66	3	1
1:A:159:LYS:NZ	1:A:200:GLN:HE22	0.49	2.05	3	1
1:A:248:PRO:O	1:A:250:ILE:HD12	0.49	2.08	4	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:11:ILE:N	0.49	2.75	9	1
1:A:17:ARG:HH12	1:A:218:ARG:NH2	0.49	2.05	2	1
1:A:178:MET:O	1:A:182:VAL:HG22	0.49	2.08	9	2
1:A:203:TRP:O	1:A:204:TRP:C	0.49	2.51	3	1
1:A:23:LEU:N	1:A:23:LEU:CD2	0.49	2.75	3	1
1:A:218:ARG:H	1:A:218:ARG:CD	0.49	2.18	6	2
1:A:200:GLN:CD	1:A:200:GLN:H	0.49	2.09	2	2
1:A:108:LEU:H	1:A:108:LEU:HD13	0.49	1.66	4	1
1:A:93:ARG:O	1:A:108:LEU:O	0.49	2.28	10	3
1:A:4:ILE:HG13	1:A:250:ILE:HG22	0.49	1.83	8	1
1:A:68:VAL:HG11	1:A:94:TYR:N	0.49	2.22	10	1
1:A:163:ASP:C	1:A:165:GLN:N	0.49	2.66	3	2
1:A:107:LEU:CD1	1:A:107:LEU:N	0.49	2.70	2	1
1:A:209:GLN:C	1:A:211:GLU:N	0.49	2.66	3	2
1:A:243:PHE:O	1:A:243:PHE:CD2	0.49	2.65	3	3
1:A:220:ASP:C	1:A:221:TYR:CD1	0.49	2.86	4	1
1:A:147:GLY:N	1:A:221:TYR:O	0.49	2.46	5	1
1:A:22:TRP:CD1	1:A:26:GLN:OE1	0.49	2.66	9	1
1:A:6:VAL:HG13	1:A:33:LEU:HD23	0.49	1.84	10	1
1:A:166:GLN:CB	1:A:171:LEU:HD11	0.49	2.38	1	1
1:A:200:GLN:H	1:A:200:GLN:NE2	0.49	2.06	2	1
1:A:206:ASP:OD2	1:A:207:ASN:N	0.49	2.46	8	1
1:A:218:ARG:HE	1:A:218:ARG:CA	0.49	2.21	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:GLY:O	1:A:21:SER:N	0.49	2.46	1	1
1:A:62:VAL:C	1:A:64:ALA:N	0.49	2.66	6	9
1:A:6:VAL:O	1:A:34:GLN:N	0.49	2.46	1	1
1:A:190:ALA:O	1:A:194:VAL:CG1	0.49	2.60	2	2
1:A:172:ALA:HB3	1:A:173:PRO:CD	0.49	2.38	5	3
1:A:206:ASP:OD1	1:A:207:ASN:N	0.49	2.46	6	2
1:A:99:PHE:O	1:A:100:ASP:CB	0.49	2.60	7	1
1:A:174:GLU:CG	1:A:175:ARG:N	0.49	2.76	9	1
1:A:159:LYS:HZ1	1:A:199:ASP:N	0.49	2.05	10	1
1:A:55:LEU:HD13	1:A:71:TYR:CE2	0.49	2.43	5	1
1:A:173:PRO:O	1:A:177:TRP:CD1	0.49	2.66	9	1
1:A:153:GLN:O	1:A:154:GLN:CB	0.48	2.61	2	3
1:A:203:TRP:O	1:A:205:PRO:N	0.48	2.45	3	1
1:A:91:TYR:C	1:A:93:ARG:N	0.48	2.67	6	3
1:A:111:SER:O	1:A:115:GLY:N	0.48	2.45	5	2
1:A:22:TRP:CZ2	1:A:246:HIS:O	0.48	2.66	8	2
1:A:253:TYR:CE2	1:A:254:ASP:OD2	0.48	2.66	6	1
1:A:7:ASN:HD21	1:A:113:GLN:NE2	0.48	2.06	2	1
1:A:187:TYR:CD1	1:A:187:TYR:O	0.48	2.66	2	1
1:A:214:ASN:OD1	1:A:217:TRP:CZ3	0.48	2.66	3	1
1:A:126:MET:CE	1:A:130:ALA:HB2	0.48	2.38	6	1
1:A:152:ALA:N	1:A:174:GLU:OE2	0.48	2.45	6	1
1:A:157:ASP:O	1:A:157:ASP:CG	0.48	2.51	7	1
1:A:131:ARG:O	1:A:135:LYS:CG	0.48	2.62	2	4
1:A:177:TRP:CZ3	1:A:221:TYR:OH	0.48	2.66	3	1
1:A:171:LEU:CD2	1:A:171:LEU:N	0.48	2.74	9	2
1:A:160:ASN:C	1:A:162:ARG:N	0.48	2.67	6	4
1:A:80:ILE:O	1:A:95:LEU:CA	0.48	2.57	1	1
1:A:29:ASP:CG	1:A:256:THR:N	0.48	2.66	5	2
1:A:29:ASP:CB	1:A:256:THR:OG1	0.48	2.61	2	1
1:A:161:TRP:CE2	1:A:211:GLU:CD	0.48	2.87	4	1
1:A:34:GLN:OE1	1:A:148:SER:CB	0.48	2.62	5	1
1:A:61:GLU:N	1:A:90:ARG:O	0.48	2.45	7	1
1:A:217:TRP:CD1	1:A:220:ASP:OD1	0.48	2.67	9	1
1:A:40:ALA:HB2	1:A:55:LEU:HD11	0.48	1.86	10	1
1:A:224:LEU:HD12	1:A:228:LEU:CD1	0.48	2.38	1	1
1:A:243:PHE:O	1:A:245:GLN:N	0.48	2.46	7	2
1:A:181:ILE:O	1:A:187:TYR:N	0.48	2.46	5	1
1:A:54:PHE:CB	1:A:72:SER:O	0.48	2.62	9	2
1:A:219:PHE:CG	1:A:219:PHE:O	0.48	2.66	9	1
1:A:150:TYR:OH	1:A:219:PHE:CZ	0.48	2.62	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:150:TYR:CD2	1:A:166:GLN:NE2	0.48	2.82	4	1
1:A:165:GLN:NE2	1:A:170:PHE:CE2	0.48	2.82	8	1
1:A:27:ASN:CG	1:A:53:TYR:CE1	0.48	2.87	3	1
1:A:249:LEU:HD23	1:A:249:LEU:C	0.48	2.29	4	1
1:A:140:ARG:O	1:A:141:ARG:CB	0.48	2.61	9	1
1:A:159:LYS:HZ2	1:A:199:ASP:H	0.48	1.51	10	1
1:A:157:ASP:CG	1:A:219:PHE:CE2	0.48	2.87	10	1
1:A:55:LEU:HD13	1:A:71:TYR:CZ	0.48	2.44	3	2
1:A:184:ASN:C	1:A:186:GLY:N	0.48	2.67	3	4
1:A:237:LEU:HD22	1:A:237:LEU:O	0.48	2.08	2	1
1:A:255:TRP:CE3	1:A:256:THR:OG1	0.48	2.61	3	1
1:A:80:ILE:HD13	1:A:96:GLN:HB3	0.48	1.85	10	2
1:A:119:LEU:O	1:A:123:PHE:N	0.48	2.47	6	6
1:A:36:THR:HG22	1:A:67:GLY:O	0.48	2.09	6	1
1:A:144:ILE:HD11	1:A:228:LEU:CD1	0.48	2.38	7	1
1:A:85:PHE:O	1:A:88:ALA:HB3	0.48	2.09	7	1
1:A:165:GLN:O	1:A:171:LEU:HD22	0.48	2.09	9	1
1:A:253:TYR:CD1	1:A:253:TYR:N	0.48	2.80	1	1
1:A:218:ARG:NE	1:A:219:PHE:CZ	0.48	2.81	4	1
1:A:225:THR:HG23	1:A:228:LEU:HD21	0.48	1.86	4	1
1:A:68:VAL:O	1:A:68:VAL:CG1	0.48	2.62	7	1
1:A:217:TRP:NE1	1:A:220:ASP:OD1	0.48	2.47	9	1
1:A:84:GLY:C	1:A:85:PHE:CD1	0.48	2.87	10	1
1:A:160:ASN:ND2	1:A:215:LEU:C	0.47	2.67	3	1
1:A:2:ARG:CB	1:A:251:VAL:O	0.47	2.61	6	2
1:A:7:ASN:OD1	1:A:8:VAL:N	0.47	2.47	6	1
1:A:122:LYS:NZ	1:A:149:LEU:HD23	0.47	2.23	1	1
1:A:154:GLN:CD	1:A:161:TRP:CZ3	0.47	2.88	2	1
1:A:36:THR:C	1:A:38:ALA:H	0.47	2.12	4	7
1:A:36:THR:C	1:A:38:ALA:N	0.47	2.68	8	6
1:A:133:LEU:HD21	1:A:187:TYR:OH	0.47	2.09	3	1
1:A:152:ALA:O	1:A:178:MET:CE	0.47	2.62	4	1
1:A:74:LEU:CD2	1:A:75:GLN:N	0.47	2.71	8	1
1:A:12:GLN:CG	1:A:13:THR:N	0.47	2.77	10	2
1:A:75:GLN:O	1:A:259:ILE:HD11	0.47	2.10	1	1
1:A:159:LYS:C	1:A:161:TRP:H	0.47	2.11	2	4
1:A:159:LYS:NZ	1:A:200:GLN:NE2	0.47	2.62	3	1
1:A:192:ARG:O	1:A:192:ARG:CG	0.47	2.61	3	1
1:A:19:LEU:O	1:A:22:TRP:N	0.47	2.47	3	3
1:A:160:ASN:OD1	1:A:214:ASN:O	0.47	2.32	3	1
1:A:209:GLN:HE22	1:A:242:ARG:CZ	0.47	2.22	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:231:PHE:CZ	1:A:254:ASP:CG	0.47	2.87	7	1
1:A:54:PHE:N	1:A:72:SER:O	0.47	2.46	9	1
1:A:257:LEU:CD2	1:A:257:LEU:H	0.47	2.22	10	1
1:A:225:THR:C	1:A:227:GLY:N	0.47	2.68	8	7
1:A:80:ILE:CD1	1:A:96:GLN:O	0.47	2.63	6	3
1:A:68:VAL:HG21	1:A:95:LEU:HB2	0.47	1.86	6	1
1:A:69:ALA:HB1	1:A:71:TYR:OH	0.47	2.09	7	1
1:A:22:TRP:CZ2	1:A:246:HIS:C	0.47	2.88	8	1
1:A:10:GLY:O	1:A:13:THR:CB	0.47	2.62	6	1
1:A:46:PRO:O	1:A:49:GLN:CG	0.47	2.62	1	1
1:A:160:ASN:O	1:A:161:TRP:C	0.47	2.53	3	4
1:A:229:ARG:C	1:A:231:PHE:H	0.47	2.12	8	2
1:A:208:GLU:O	1:A:211:GLU:N	0.47	2.43	10	1
1:A:22:TRP:C	1:A:24:GLN:N	0.47	2.68	10	1
1:A:171:LEU:HD23	1:A:171:LEU:N	0.47	2.25	1	1
1:A:79:VAL:CG1	1:A:95:LEU:HD11	0.47	2.39	1	1
1:A:163:ASP:C	1:A:165:GLN:H	0.47	2.13	3	1
1:A:32:CYS:C	1:A:33:LEU:HD12	0.47	2.30	3	2
1:A:161:TRP:C	1:A:163:ASP:H	0.47	2.13	4	1
1:A:7:ASN:CG	1:A:219:PHE:CE1	0.47	2.88	4	1
1:A:243:PHE:CD2	1:A:243:PHE:O	0.47	2.68	5	2
1:A:111:SER:OG	1:A:150:TYR:CD1	0.47	2.68	7	1
1:A:100:ASP:O	1:A:101:LYS:O	0.47	2.32	9	1
1:A:61:GLU:CG	1:A:90:ARG:O	0.47	2.63	10	1
1:A:80:ILE:HD12	1:A:96:GLN:O	0.47	2.09	3	4
1:A:56:TYR:CE1	1:A:79:VAL:HG11	0.47	2.44	9	1
1:A:7:ASN:ND2	1:A:218:ARG:NH1	0.47	2.63	10	1
1:A:228:LEU:O	1:A:229:ARG:C	0.47	2.53	5	9
1:A:152:ALA:HB3	1:A:164:SER:OG	0.47	2.09	2	1
1:A:8:VAL:O	1:A:34:GLN:O	0.47	2.33	10	3
1:A:208:GLU:C	1:A:210:ALA:N	0.47	2.68	3	3
1:A:160:ASN:C	1:A:162:ARG:H	0.47	2.13	4	1
1:A:147:GLY:O	1:A:221:TYR:N	0.47	2.48	4	1
1:A:247:ALA:HB1	1:A:248:PRO:HD2	0.47	1.87	7	3
1:A:206:ASP:CG	1:A:207:ASN:N	0.47	2.68	6	1
1:A:74:LEU:HD23	1:A:74:LEU:C	0.47	2.30	7	1
1:A:61:GLU:O	1:A:64:ALA:CB	0.47	2.63	3	3
1:A:32:CYS:O	1:A:33:LEU:HD12	0.47	2.10	3	2
1:A:160:ASN:O	1:A:164:SER:CB	0.47	2.63	10	1
1:A:181:ILE:CG2	1:A:187:TYR:CD1	0.47	2.98	10	1
1:A:93:ARG:CZ	1:A:109:LEU:HD11	0.46	2.40	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:LEU:CD1	1:A:23:LEU:C	0.46	2.82	4	2
1:A:156:LEU:HD22	1:A:192:ARG:HD2	0.46	1.87	3	1
1:A:23:LEU:CD2	1:A:50:LEU:CD1	0.46	2.93	4	1
1:A:7:ASN:CG	1:A:219:PHE:CD1	0.46	2.89	4	1
1:A:2:ARG:HE	1:A:254:ASP:C	0.46	2.12	8	1
1:A:218:ARG:NH1	1:A:242:ARG:HE	0.46	2.07	9	1
1:A:160:ASN:OD1	1:A:215:LEU:N	0.46	2.48	10	1
1:A:60:ALA:O	1:A:61:GLU:C	0.46	2.53	5	2
1:A:81:THR:HG23	1:A:88:ALA:HB1	0.46	1.87	6	1
1:A:108:LEU:CD2	1:A:108:LEU:N	0.46	2.62	9	1
1:A:14:ALA:HB1	1:A:19:LEU:HG	0.46	1.87	10	1
1:A:170:PHE:C	1:A:171:LEU:HD23	0.46	2.31	1	1
1:A:149:LEU:HD11	1:A:221:TYR:CZ	0.46	2.46	3	1
1:A:190:ALA:HB1	1:A:232:VAL:CG1	0.46	2.41	8	1
1:A:235:ALA:H	1:A:236:ARG:HH21	0.46	1.52	8	1
1:A:125:LEU:N	1:A:125:LEU:HD12	0.46	2.24	10	1
1:A:243:PHE:C	1:A:245:GLN:H	0.46	2.14	6	2
1:A:126:MET:C	1:A:126:MET:SD	0.46	2.94	4	2
1:A:34:GLN:HB3	1:A:108:LEU:HD11	0.46	1.88	8	1
1:A:218:ARG:O	1:A:219:PHE:CG	0.46	2.68	9	1
1:A:52:GLY:O	1:A:53:TYR:CD1	0.46	2.68	10	2
1:A:151:VAL:O	1:A:221:TYR:OH	0.46	2.34	10	1
1:A:215:LEU:HD13	1:A:216:GLY:N	0.46	2.25	1	1
1:A:133:LEU:O	1:A:137:ARG:N	0.46	2.48	7	4
1:A:32:CYS:HB3	1:A:106:THR:HG21	0.46	1.87	3	1
1:A:161:TRP:CH2	1:A:211:GLU:OE2	0.46	2.68	4	1
1:A:224:LEU:CB	1:A:228:LEU:HD12	0.46	2.40	6	1
1:A:55:LEU:HD13	1:A:56:TYR:N	0.46	2.26	9	1
1:A:250:ILE:HD12	1:A:251:VAL:N	0.46	2.25	1	1
1:A:15:VAL:HB	1:A:20:LEU:HD22	0.46	1.86	2	5
1:A:218:ARG:O	1:A:219:PHE:O	0.46	2.34	2	1
1:A:243:PHE:O	1:A:244:SER:OG	0.46	2.29	5	2
1:A:237:LEU:N	1:A:237:LEU:HD12	0.46	2.26	4	1
1:A:188:VAL:O	1:A:223:LEU:HD23	0.46	2.09	2	1
1:A:8:VAL:O	1:A:35:ASP:O	0.46	2.33	2	5
1:A:237:LEU:H	1:A:237:LEU:CD2	0.46	2.06	6	1
1:A:231:PHE:CE2	1:A:254:ASP:OD2	0.46	2.69	7	1
1:A:211:GLU:CB	1:A:216:GLY:O	0.46	2.64	10	1
1:A:215:LEU:CD1	1:A:215:LEU:C	0.46	2.80	1	1
1:A:32:CYS:SG	1:A:32:CYS:O	0.46	2.73	2	1
1:A:151:VAL:C	1:A:166:GLN:HE22	0.46	2.14	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:59:GLU:CD	1:A:59:GLU:N	0.46	2.67	5	1
1:A:217:TRP:C	1:A:219:PHE:H	0.46	2.14	6	2
1:A:7:ASN:CG	1:A:212:MET:SD	0.46	2.94	7	1
1:A:211:GLU:C	1:A:213:LEU:N	0.46	2.70	2	2
1:A:22:TRP:O	1:A:26:GLN:N	0.46	2.49	5	1
1:A:200:GLN:CD	1:A:200:GLN:N	0.46	2.68	2	1
1:A:27:ASN:OD1	1:A:53:TYR:OH	0.46	2.34	6	2
1:A:23:LEU:HD23	1:A:50:LEU:CD1	0.46	2.41	4	1
1:A:102:VAL:HG22	1:A:142:GLU:OE1	0.46	2.10	5	1
1:A:142:GLU:C	1:A:143:TYR:CD1	0.46	2.90	6	1
1:A:163:ASP:OD1	1:A:164:SER:N	0.46	2.49	6	1
1:A:74:LEU:CD1	1:A:74:LEU:C	0.46	2.84	6	1
1:A:101:LYS:O	1:A:102:VAL:O	0.46	2.34	9	3
1:A:73:ARG:HH22	1:A:258:THR:CG2	0.45	2.24	2	1
1:A:33:LEU:HB2	1:A:69:ALA:HB3	0.45	1.88	2	1
1:A:93:ARG:CZ	1:A:109:LEU:HD21	0.45	2.41	2	1
1:A:39:SER:O	1:A:59:GLU:OE1	0.45	2.34	4	2
1:A:22:TRP:NE1	1:A:246:HIS:O	0.45	2.49	5	1
1:A:131:ARG:O	1:A:135:LYS:CB	0.45	2.64	6	2
1:A:119:LEU:O	1:A:122:LYS:N	0.45	2.49	7	2
1:A:54:PHE:CD1	1:A:55:LEU:N	0.45	2.84	9	1
1:A:7:ASN:HD21	1:A:218:ARG:HH12	0.45	1.54	10	1
1:A:160:ASN:HD21	1:A:163:ASP:CG	0.45	2.15	1	1
1:A:91:TYR:O	1:A:93:ARG:NE	0.45	2.47	3	1
1:A:86:GLU:O	1:A:89:ASP:N	0.45	2.49	6	1
1:A:34:GLN:NE2	1:A:113:GLN:NE2	0.45	2.65	10	1
1:A:20:LEU:O	1:A:24:GLN:CG	0.45	2.64	10	1
1:A:118:ASP:O	1:A:122:LYS:CB	0.45	2.64	1	2
1:A:41:PHE:O	1:A:44:ASP:OD2	0.45	2.34	2	1
1:A:56:TYR:O	1:A:57:ALA:CB	0.45	2.64	8	5
1:A:184:ASN:OD1	1:A:186:GLY:N	0.45	2.46	5	1
1:A:203:TRP:CD1	1:A:204:TRP:O	0.45	2.69	5	2
1:A:149:LEU:H	1:A:149:LEU:HD22	0.45	1.72	3	1
1:A:143:TYR:CE2	1:A:145:TYR:CD1	0.45	3.04	5	1
1:A:24:GLN:HB3	1:A:50:LEU:HD13	0.45	1.88	6	1
1:A:158:ILE:C	1:A:160:ASN:H	0.45	2.15	7	1
1:A:191:LEU:HD12	1:A:191:LEU:N	0.45	2.26	7	1
1:A:231:PHE:CZ	1:A:254:ASP:OD2	0.45	2.69	7	1
1:A:119:LEU:HD11	1:A:150:TYR:CD2	0.45	2.47	8	1
1:A:181:ILE:HG22	1:A:187:TYR:CB	0.45	2.41	8	1
1:A:179:ASP:O	1:A:183:GLY:N	0.45	2.50	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:143:TYR:CE1	1:A:225:THR:HG22	0.45	2.47	10	1
1:A:9:ASN:ND2	1:A:113:GLN:HE22	0.45	2.09	1	1
1:A:198:GLY:O	1:A:200:GLN:N	0.45	2.49	3	1
1:A:80:ILE:HD13	1:A:96:GLN:CB	0.45	2.42	6	1
1:A:119:LEU:HD12	1:A:122:LYS:HZ3	0.45	1.71	8	1
1:A:31:ILE:O	1:A:69:ALA:O	0.45	2.35	9	1
1:A:160:ASN:ND2	1:A:160:ASN:H	0.45	2.09	2	1
1:A:43:LEU:HD23	1:A:48:TYR:CG	0.45	2.46	6	1
1:A:217:TRP:C	1:A:219:PHE:N	0.45	2.70	9	3
1:A:150:TYR:CG	1:A:150:TYR:O	0.45	2.69	7	1
1:A:146:CYS:O	1:A:146:CYS:SG	0.45	2.74	8	1
1:A:2:ARG:O	1:A:29:ASP:OD1	0.45	2.35	4	3
1:A:178:MET:CG	1:A:179:ASP:N	0.45	2.80	3	1
1:A:17:ARG:O	1:A:242:ARG:O	0.45	2.35	8	2
1:A:59:GLU:O	1:A:89:ASP:O	0.45	2.35	10	1
1:A:157:ASP:OD1	1:A:157:ASP:N	0.45	2.50	1	1
1:A:150:TYR:CZ	1:A:219:PHE:CZ	0.45	3.05	2	1
1:A:90:ARG:O	1:A:93:ARG:NH2	0.45	2.48	3	1
1:A:100:ASP:OD1	1:A:102:VAL:O	0.45	2.35	6	1
1:A:11:ILE:HD13	1:A:33:LEU:HD23	0.45	1.88	6	1
1:A:174:GLU:OE2	1:A:174:GLU:O	0.45	2.35	10	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:10:GLY:O	0.45	2.65	6	3
1:A:196:ARG:CZ	1:A:200:GLN:NE2	0.45	2.80	6	1
1:A:224:LEU:HB3	1:A:228:LEU:HD12	0.45	1.87	6	1
1:A:22:TRP:CD1	1:A:248:PRO:CG	0.45	3.00	10	1
1:A:218:ARG:O	1:A:219:PHE:CD2	0.45	2.70	1	1
1:A:28:ALA:O	1:A:53:TYR:OH	0.45	2.33	1	1
1:A:111:SER:C	1:A:166:GLN:HE21	0.45	2.16	2	1
1:A:5:SER:CB	1:A:220:ASP:OD2	0.45	2.65	6	1
1:A:171:LEU:N	1:A:171:LEU:CD1	0.45	2.68	7	1
1:A:44:ASP:O	1:A:44:ASP:OD1	0.45	2.35	8	2
1:A:34:GLN:NE2	1:A:113:GLN:CD	0.45	2.70	10	1
1:A:126:MET:SD	1:A:126:MET:C	0.45	2.95	10	1
1:A:34:GLN:O	1:A:35:ASP:O	0.45	2.34	10	1
1:A:85:PHE:O	1:A:88:ALA:N	0.44	2.50	4	1
1:A:181:ILE:O	1:A:184:ASN:OD1	0.44	2.34	5	1
1:A:180:GLU:O	1:A:184:ASN:OD1	0.44	2.34	8	1
1:A:29:ASP:OD2	1:A:256:THR:HG23	0.44	2.12	2	1
1:A:142:GLU:N	1:A:142:GLU:OE1	0.44	2.51	9	2
1:A:139:LYS:O	1:A:143:TYR:OH	0.44	2.35	6	1
1:A:207:ASN:C	1:A:209:GLN:N	0.44	2.71	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:ASP:OD1	1:A:44:ASP:O	0.44	2.35	1	1
1:A:157:ASP:C	1:A:159:LYS:N	0.44	2.70	3	3
1:A:7:ASN:HD21	1:A:113:GLN:HE21	0.44	1.54	2	1
1:A:149:LEU:HD23	1:A:151:VAL:HG23	0.44	1.89	3	1
1:A:92:GLY:O	1:A:94:TYR:CD2	0.44	2.70	5	1
1:A:111:SER:O	1:A:115:GLY:O	0.44	2.36	8	1
1:A:82:GLY:HA3	1:A:88:ALA:HB1	0.44	1.89	8	1
1:A:108:LEU:N	1:A:108:LEU:CD1	0.44	2.72	9	1
1:A:257:LEU:N	1:A:257:LEU:HD23	0.44	2.26	10	1
1:A:242:ARG:O	1:A:243:PHE:CD1	0.44	2.70	1	1
1:A:52:GLY:C	1:A:53:TYR:CG	0.44	2.90	2	1
1:A:24:GLN:CG	1:A:25:ALA:N	0.44	2.80	6	3
1:A:212:MET:C	1:A:214:ASN:N	0.44	2.70	3	1
1:A:7:ASN:N	1:A:7:ASN:ND2	0.44	2.65	4	1
1:A:184:ASN:OD1	1:A:185:MET:N	0.44	2.50	5	1
1:A:24:GLN:CD	1:A:25:ALA:N	0.44	2.71	6	1
1:A:144:ILE:O	1:A:144:ILE:HG23	0.44	2.12	8	1
1:A:136:GLN:CD	1:A:143:TYR:CD1	0.44	2.90	9	1
1:A:55:LEU:CD1	1:A:55:LEU:O	0.44	2.65	10	1
1:A:108:LEU:CD2	1:A:108:LEU:H	0.44	2.18	2	1
1:A:109:LEU:HD12	1:A:118:ASP:OD1	0.44	2.12	2	1
1:A:189:ASP:OD2	1:A:192:ARG:CG	0.44	2.65	2	1
1:A:170:PHE:O	1:A:170:PHE:CD2	0.44	2.70	3	1
1:A:248:PRO:O	1:A:250:ILE:HG22	0.44	2.12	3	1
1:A:163:ASP:O	1:A:164:SER:OG	0.44	2.36	4	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:10:GLY:C	0.44	2.85	6	1
1:A:198:GLY:O	1:A:199:ASP:OD1	0.44	2.36	7	1
1:A:199:ASP:OD1	1:A:214:ASN:OD1	0.44	2.35	9	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:23:LEU:HD21	0.44	2.42	1	1
1:A:81:THR:N	1:A:95:LEU:HD12	0.44	2.28	1	1
1:A:75:GLN:O	1:A:259:ILE:CD1	0.44	2.66	5	2
1:A:142:GLU:OE1	1:A:142:GLU:N	0.44	2.51	10	2
1:A:153:GLN:HE22	1:A:192:ARG:HH21	0.44	1.55	8	1
1:A:181:ILE:CG2	1:A:187:TYR:CG	0.44	2.99	8	2
1:A:74:LEU:HD13	1:A:74:LEU:C	0.44	2.33	8	1
1:A:217:TRP:O	1:A:219:PHE:N	0.44	2.51	9	1
1:A:22:TRP:O	1:A:24:GLN:N	0.44	2.50	10	1
1:A:90:ARG:O	1:A:91:TYR:HB2	0.44	2.13	10	1
1:A:33:LEU:C	1:A:34:GLN:HE21	0.44	2.16	5	1
1:A:89:ASP:O	1:A:89:ASP:OD1	0.44	2.35	8	2
1:A:208:GLU:O	1:A:211:GLU:OE1	0.44	2.36	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:33:LEU:O	1:A:69:ALA:HB3	0.44	2.13	1	1
1:A:23:LEU:HD11	1:A:71:TYR:CE2	0.44	2.47	4	1
1:A:45:ASP:C	1:A:47:ALA:N	0.44	2.71	7	2
1:A:163:ASP:OD1	1:A:163:ASP:O	0.44	2.36	8	2
1:A:97:ALA:O	1:A:104:ILE:O	0.44	2.35	5	1
1:A:234:SER:O	1:A:251:VAL:HG13	0.44	2.11	8	1
1:A:256:THR:HG22	1:A:257:LEU:N	0.44	2.28	8	1
1:A:2:ARG:NH1	1:A:253:TYR:H	0.44	2.11	8	1
1:A:10:GLY:O	1:A:13:THR:OG1	0.43	2.30	1	2
1:A:3:ILE:HG21	1:A:222:GLN:NE2	0.43	2.28	2	2
1:A:136:GLN:O	1:A:139:LYS:O	0.43	2.35	3	1
1:A:150:TYR:C	1:A:166:GLN:NE2	0.43	2.71	3	1
1:A:203:TRP:CZ2	1:A:204:TRP:CH2	0.43	3.06	4	1
1:A:26:GLN:O	1:A:27:ASN:C	0.43	2.56	4	2
1:A:202:SER:OG	1:A:204:TRP:NE1	0.43	2.49	6	1
1:A:156:LEU:CD2	1:A:192:ARG:HE	0.43	2.26	7	1
1:A:94:TYR:C	1:A:94:TYR:CD1	0.43	2.89	8	1
1:A:163:ASP:OD2	1:A:211:GLU:OE2	0.43	2.36	9	1
1:A:212:MET:CE	1:A:218:ARG:NE	0.43	2.81	2	1
1:A:191:LEU:HD23	1:A:191:LEU:C	0.43	2.33	3	1
1:A:205:PRO:O	1:A:206:ASP:O	0.43	2.36	3	1
1:A:255:TRP:O	1:A:256:THR:O	0.43	2.36	4	2
1:A:153:GLN:C	1:A:155:LYS:H	0.43	2.17	6	1
1:A:43:LEU:CB	1:A:55:LEU:HD22	0.43	2.42	7	1
1:A:148:SER:OG	1:A:148:SER:O	0.43	2.34	9	1
1:A:243:PHE:C	1:A:245:GLN:N	0.43	2.70	3	2
1:A:110:PRO:O	1:A:114:ASN:OD1	0.43	2.36	4	1
1:A:160:ASN:O	1:A:160:ASN:OD1	0.43	2.36	4	1
1:A:205:PRO:O	1:A:206:ASP:OD1	0.43	2.36	4	1
1:A:78:ALA:HB3	1:A:98:ASP:N	0.43	2.28	5	1
1:A:114:ASN:OD1	1:A:114:ASN:O	0.43	2.36	8	1
1:A:212:MET:SD	1:A:212:MET:C	0.43	2.96	9	1
1:A:81:THR:O	1:A:88:ALA:O	0.43	2.36	10	1
1:A:165:GLN:O	1:A:171:LEU:CD2	0.43	2.65	5	2
1:A:177:TRP:CH2	1:A:221:TYR:OH	0.43	2.69	3	1
1:A:188:VAL:O	1:A:189:ASP:OD1	0.43	2.36	4	1
1:A:98:ASP:OD1	1:A:102:VAL:O	0.43	2.34	4	1
1:A:119:LEU:HD11	1:A:150:TYR:CB	0.43	2.42	6	1
1:A:152:ALA:H	1:A:174:GLU:CD	0.43	2.17	6	1
1:A:150:TYR:O	1:A:174:GLU:OE2	0.43	2.36	7	1
1:A:6:VAL:HG23	1:A:242:ARG:NE	0.43	2.29	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:ALA:C	1:A:26:GLN:NE2	0.43	2.72	8	1
1:A:74:LEU:HD12	1:A:257:LEU:O	0.43	2.14	1	1
1:A:206:ASP:C	1:A:209:GLN:HE22	0.43	2.16	3	1
1:A:78:ALA:HB3	1:A:98:ASP:H	0.43	1.71	5	1
1:A:140:ARG:O	1:A:141:ARG:O	0.43	2.36	8	1
1:A:31:ILE:HD12	1:A:71:TYR:HB2	0.43	1.91	9	1
1:A:143:TYR:CD1	1:A:225:THR:HG22	0.43	2.48	10	1
1:A:231:PHE:CE1	1:A:254:ASP:OD2	0.43	2.72	2	1
1:A:152:ALA:O	1:A:174:GLU:OE1	0.43	2.36	6	1
1:A:237:LEU:H	1:A:237:LEU:HD13	0.43	1.71	6	1
1:A:228:LEU:C	1:A:230:ARG:N	0.43	2.71	10	3
1:A:212:MET:O	1:A:212:MET:SD	0.43	2.77	9	1
1:A:220:ASP:OD1	1:A:220:ASP:O	0.43	2.36	9	1
1:A:9:ASN:OD1	1:A:9:ASN:O	0.43	2.37	9	1
1:A:23:LEU:HB2	1:A:50:LEU:HD11	0.43	1.89	10	1
1:A:43:LEU:C	1:A:45:ASP:H	0.43	2.16	6	6
1:A:199:ASP:OD1	1:A:199:ASP:O	0.43	2.37	5	1
1:A:29:ASP:OD2	1:A:255:TRP:CB	0.43	2.67	8	1
1:A:100:ASP:OD1	1:A:258:THR:O	0.43	2.36	9	1
1:A:210:ALA:C	1:A:212:MET:N	0.43	2.72	10	1
1:A:23:LEU:HD13	1:A:31:ILE:HD13	0.43	1.91	1	1
1:A:23:LEU:HD12	1:A:23:LEU:O	0.43	2.14	2	1
1:A:242:ARG:NH1	1:A:246:HIS:NE2	0.43	2.67	3	1
1:A:68:VAL:HG23	1:A:108:LEU:HD11	0.43	1.90	4	1
1:A:85:PHE:O	1:A:89:ASP:OD2	0.43	2.36	4	1
1:A:100:ASP:OD1	1:A:100:ASP:O	0.43	2.37	1	1
1:A:7:ASN:O	1:A:218:ARG:NH2	0.43	2.52	1	1
1:A:83:LEU:HD11	1:A:94:TYR:CE2	0.43	2.48	2	1
1:A:197:GLU:OE1	1:A:239:ARG:NH2	0.43	2.50	3	1
1:A:5:SER:O	1:A:249:LEU:CB	0.43	2.67	3	1
1:A:65:GLN:O	1:A:66:GLY:O	0.43	2.36	6	1
1:A:230:ARG:O	1:A:253:TYR:CD2	0.43	2.72	7	1
1:A:27:ASN:O	1:A:27:ASN:OD1	0.43	2.37	7	1
1:A:161:TRP:CZ2	1:A:211:GLU:CD	0.43	2.92	4	1
1:A:175:ARG:O	1:A:179:ASP:CB	0.43	2.67	5	2
1:A:236:ARG:NE	1:A:236:ARG:CA	0.43	2.79	8	1
1:A:119:LEU:HD11	1:A:166:GLN:OE1	0.43	2.13	9	1
1:A:112:GLY:H	1:A:166:GLN:HE21	0.43	1.55	10	1
1:A:257:LEU:CD2	1:A:257:LEU:N	0.43	2.82	10	1
1:A:87:THR:O	1:A:91:TYR:C	0.43	2.58	10	1
1:A:79:VAL:HG13	1:A:95:LEU:HD11	0.42	1.91	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:ASP:OD1	1:A:89:ASP:O	0.42	2.37	1	1
1:A:205:PRO:C	1:A:209:GLN:HE22	0.42	2.17	3	1
1:A:191:LEU:C	1:A:191:LEU:HD23	0.42	2.35	4	1
1:A:157:ASP:O	1:A:161:TRP:N	0.42	2.50	5	1
1:A:97:ALA:O	1:A:98:ASP:OD1	0.42	2.37	5	1
1:A:40:ALA:O	1:A:44:ASP:OD1	0.42	2.37	6	1
1:A:214:ASN:OD1	1:A:238:PRO:O	0.42	2.37	1	1
1:A:200:GLN:OE1	1:A:200:GLN:O	0.42	2.36	2	1
1:A:209:GLN:O	1:A:210:ALA:C	0.42	2.57	3	1
1:A:86:GLU:OE2	1:A:90:ARG:NE	0.42	2.50	3	1
1:A:27:ASN:ND2	1:A:51:ASP:OD2	0.42	2.52	8	1
1:A:7:ASN:CG	1:A:8:VAL:N	0.42	2.72	8	1
1:A:3:ILE:HG21	1:A:222:GLN:CG	0.42	2.44	4	1
1:A:108:LEU:O	1:A:109:LEU:HD23	0.42	2.14	6	1
1:A:214:ASN:OD1	1:A:214:ASN:O	0.42	2.37	6	1
1:A:35:ASP:OD1	1:A:65:GLN:OE1	0.42	2.37	6	1
1:A:183:GLY:C	1:A:185:MET:N	0.42	2.70	8	1
1:A:82:GLY:N	1:A:94:TYR:O	0.42	2.51	1	1
1:A:27:ASN:O	1:A:53:TYR:CE2	0.42	2.73	3	1
1:A:86:GLU:CD	1:A:90:ARG:HE	0.42	2.17	3	1
1:A:60:ALA:HB2	1:A:92:GLY:N	0.42	2.30	3	1
1:A:2:ARG:NH1	1:A:27:ASN:ND2	0.42	2.67	4	1
1:A:92:GLY:O	1:A:94:TYR:CE2	0.42	2.72	5	1
1:A:206:ASP:CG	1:A:207:ASN:H	0.42	2.17	6	1
1:A:212:MET:CG	1:A:218:ARG:HH21	0.42	2.28	6	1
1:A:44:ASP:OD1	1:A:45:ASP:N	0.42	2.53	6	1
1:A:233:ARG:H	1:A:253:TYR:HB2	0.42	1.74	8	1
1:A:2:ARG:HH11	1:A:253:TYR:H	0.42	1.55	8	1
1:A:122:LYS:O	1:A:126:MET:CB	0.42	2.67	10	1
1:A:59:GLU:H	1:A:59:GLU:CD	0.42	2.16	10	1
1:A:115:GLY:O	1:A:116:ASP:C	0.42	2.57	1	2
1:A:60:ALA:C	1:A:62:VAL:H	0.42	2.18	2	1
1:A:191:LEU:O	1:A:195:SER:O	0.42	2.36	3	1
1:A:222:GLN:OE1	1:A:249:LEU:HD21	0.42	2.15	3	1
1:A:159:LYS:O	1:A:161:TRP:N	0.42	2.49	9	2
1:A:203:TRP:CZ2	1:A:204:TRP:CZ2	0.42	3.07	4	1
1:A:219:PHE:CD1	1:A:219:PHE:N	0.42	2.85	5	1
1:A:249:LEU:C	1:A:249:LEU:HD23	0.42	2.34	5	1
1:A:230:ARG:O	1:A:253:TYR:CD1	0.42	2.72	6	1
1:A:220:ASP:HB3	1:A:249:LEU:HD13	0.42	1.90	7	1
1:A:118:ASP:O	1:A:118:ASP:OD1	0.42	2.37	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:98:ASP:OD2	1:A:103:SER:OG	0.42	2.36	8	2
1:A:23:LEU:O	1:A:23:LEU:HD23	0.42	2.15	9	1
1:A:75:GLN:O	1:A:259:ILE:HD12	0.42	2.13	2	1
1:A:253:TYR:CZ	1:A:254:ASP:O	0.42	2.72	3	1
1:A:176:ALA:O	1:A:180:GLU:CB	0.42	2.68	4	3
1:A:158:ILE:O	1:A:161:TRP:CD1	0.42	2.72	5	1
1:A:254:ASP:OD1	1:A:255:TRP:N	0.42	2.52	5	1
1:A:29:ASP:OD1	1:A:256:THR:OG1	0.42	2.37	7	1
1:A:206:ASP:OD2	1:A:209:GLN:NE2	0.42	2.52	1	1
1:A:109:LEU:CD1	1:A:118:ASP:OD1	0.42	2.68	2	1
1:A:53:TYR:N	1:A:53:TYR:CD1	0.42	2.87	2	1
1:A:222:GLN:N	1:A:222:GLN:CD	0.42	2.70	3	1
1:A:25:ALA:CB	1:A:26:GLN:NE2	0.42	2.83	3	1
1:A:231:PHE:O	1:A:232:VAL:CG1	0.42	2.67	6	1
1:A:158:ILE:C	1:A:160:ASN:N	0.42	2.73	7	1
1:A:163:ASP:O	1:A:166:GLN:N	0.42	2.40	10	1
1:A:39:SER:O	1:A:43:LEU:N	0.42	2.41	10	1
1:A:143:TYR:CE1	1:A:145:TYR:CZ	0.42	3.08	2	1
1:A:7:ASN:OD1	1:A:34:GLN:OE1	0.42	2.37	3	1
1:A:191:LEU:CD2	1:A:191:LEU:C	0.42	2.88	4	2
1:A:58:CYS:SG	1:A:68:VAL:CG1	0.42	3.08	5	2
1:A:231:PHE:C	1:A:232:VAL:HG22	0.42	2.34	8	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:19:LEU:C	0.42	2.35	2	1
1:A:40:ALA:C	1:A:42:GLU:H	0.42	2.18	10	2
1:A:50:LEU:N	1:A:50:LEU:CD1	0.42	2.79	7	1
1:A:62:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HD3	0.42	1.91	8	1
1:A:149:LEU:O	1:A:151:VAL:N	0.42	2.48	9	1
1:A:91:TYR:CZ	1:A:93:ARG:CZ	0.42	3.03	10	1
1:A:253:TYR:O	1:A:254:ASP:C	0.42	2.58	3	1
1:A:137:ARG:C	1:A:139:LYS:N	0.42	2.74	5	1
1:A:6:VAL:HG22	1:A:7:ASN:N	0.42	2.30	5	2
1:A:34:GLN:OE1	1:A:35:ASP:OD2	0.42	2.38	9	1
1:A:112:GLY:N	1:A:166:GLN:NE2	0.42	2.66	10	1
1:A:38:ALA:O	1:A:43:LEU:HD12	0.42	2.15	10	1
1:A:142:GLU:CB	1:A:225:THR:HG21	0.41	2.44	1	1
1:A:2:ARG:HD3	1:A:250:ILE:HD13	0.41	1.91	1	1
1:A:91:TYR:C	1:A:93:ARG:H	0.41	2.17	6	2
1:A:191:LEU:HD12	1:A:221:TYR:CE1	0.41	2.50	4	1
1:A:157:ASP:O	1:A:159:LYS:N	0.41	2.53	5	1
1:A:42:GLU:O	1:A:45:ASP:CG	0.41	2.59	9	3
1:A:189:ASP:O	1:A:190:ALA:C	0.41	2.58	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:111:SER:OG	1:A:118:ASP:OD2	0.41	2.37	1	1
1:A:56:TYR:CG	1:A:56:TYR:O	0.41	2.73	2	1
1:A:205:PRO:C	1:A:209:GLN:NE2	0.41	2.74	3	1
1:A:149:LEU:H	1:A:149:LEU:CD1	0.41	2.08	4	1
1:A:218:ARG:CZ	1:A:219:PHE:CZ	0.41	3.03	4	1
1:A:93:ARG:HH22	1:A:121:GLN:HE22	0.41	1.57	6	1
1:A:150:TYR:O	1:A:150:TYR:CG	0.41	2.73	8	1
1:A:208:GLU:OE1	1:A:211:GLU:OE2	0.41	2.38	8	1
1:A:26:GLN:NE2	1:A:26:GLN:CA	0.41	2.83	8	1
1:A:58:CYS:CB	1:A:81:THR:HG1	0.41	2.29	1	1
1:A:159:LYS:C	1:A:161:TRP:N	0.41	2.73	3	2
1:A:164:SER:OG	1:A:165:GLN:N	0.41	2.53	7	1
1:A:80:ILE:HD13	1:A:80:ILE:N	0.41	2.30	7	1
1:A:80:ILE:CD1	1:A:80:ILE:H	0.41	2.08	9	1
1:A:182:VAL:C	1:A:184:ASN:H	0.41	2.18	10	1
1:A:152:ALA:CB	1:A:157:ASP:OD2	0.41	2.69	2	1
1:A:23:LEU:HD23	1:A:50:LEU:HD11	0.41	1.91	4	1
1:A:19:LEU:HD21	1:A:33:LEU:HD21	0.41	1.92	5	1
1:A:36:THR:HG21	1:A:69:ALA:CB	0.41	2.45	5	1
1:A:209:GLN:NE2	1:A:242:ARG:CZ	0.41	2.83	6	1
1:A:36:THR:HG22	1:A:38:ALA:HB3	0.41	1.92	9	1
1:A:64:ALA:O	1:A:65:GLN:HB2	0.41	2.15	9	1
1:A:109:LEU:HD23	1:A:109:LEU:C	0.41	2.36	1	1
1:A:131:ARG:O	1:A:135:LYS:N	0.41	2.53	1	1
1:A:220:ASP:O	1:A:220:ASP:OD1	0.41	2.39	1	1
1:A:250:ILE:C	1:A:250:ILE:CD1	0.41	2.87	1	1
1:A:133:LEU:C	1:A:133:LEU:CD2	0.41	2.88	6	1
1:A:153:GLN:C	1:A:155:LYS:N	0.41	2.74	6	1
1:A:22:TRP:HE1	1:A:250:ILE:HG21	0.41	1.74	6	1
1:A:2:ARG:CZ	1:A:253:TYR:C	0.41	2.89	8	1
1:A:126:MET:CG	1:A:177:TRP:CZ3	0.41	3.03	5	1
1:A:80:ILE:H	1:A:80:ILE:CD1	0.41	2.08	8	1
1:A:25:ALA:O	1:A:27:ASN:N	0.41	2.50	9	1
1:A:93:ARG:NH1	1:A:109:LEU:HD11	0.41	2.30	1	1
1:A:171:LEU:N	1:A:171:LEU:HD22	0.41	2.29	3	1
1:A:166:GLN:CD	1:A:219:PHE:CD2	0.41	2.94	3	1
1:A:74:LEU:HG	1:A:75:GLN:H	0.41	1.76	4	1
1:A:6:VAL:CG2	1:A:7:ASN:N	0.41	2.83	4	1
1:A:208:GLU:CD	1:A:218:ARG:HH12	0.41	2.17	5	1
1:A:52:GLY:C	1:A:53:TYR:CD1	0.41	2.94	2	1
1:A:153:GLN:CD	1:A:153:GLN:N	0.41	2.74	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:156:LEU:O	1:A:159:LYS:NZ	0.41	2.50	5	1
1:A:74:LEU:HD22	1:A:75:GLN:C	0.41	2.36	8	1
1:A:10:GLY:C	1:A:12:GLN:N	0.41	2.75	1	1
1:A:58:CYS:CB	1:A:81:THR:OG1	0.41	2.69	1	1
1:A:224:LEU:N	1:A:224:LEU:CD2	0.41	2.84	1	1
1:A:62:VAL:N	1:A:63:PRO:HD2	0.41	2.31	1	1
1:A:177:TRP:CE2	1:A:181:ILE:CD1	0.41	3.04	2	1
1:A:236:ARG:CB	1:A:250:ILE:HG23	0.41	2.46	3	1
1:A:248:PRO:O	1:A:250:ILE:CD1	0.41	2.69	4	1
1:A:176:ALA:O	1:A:180:GLU:CG	0.41	2.68	5	1
1:A:97:ALA:HB3	1:A:104:ILE:HG23	0.41	1.92	6	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:20:LEU:HD12	0.41	1.93	7	1
1:A:158:ILE:O	1:A:160:ASN:N	0.41	2.54	7	1
1:A:256:THR:HG22	1:A:257:LEU:H	0.41	1.76	8	1
1:A:100:ASP:C	1:A:100:ASP:OD1	0.41	2.60	8	1
1:A:22:TRP:C	1:A:26:GLN:OE1	0.41	2.59	8	1
1:A:60:ALA:C	1:A:62:VAL:N	0.41	2.72	8	1
1:A:233:ARG:NE	1:A:233:ARG:O	0.41	2.54	10	1
1:A:163:ASP:OD1	1:A:163:ASP:N	0.41	2.53	1	1
1:A:213:LEU:O	1:A:214:ASN:C	0.41	2.60	1	1
1:A:128:ASP:O	1:A:132:TYR:N	0.41	2.54	3	1
1:A:40:ALA:O	1:A:41:PHE:C	0.41	2.58	6	1
1:A:184:ASN:C	1:A:186:GLY:H	0.41	2.19	9	1
1:A:189:ASP:O	1:A:192:ARG:N	0.41	2.54	9	1
1:A:203:TRP:O	1:A:213:LEU:CD2	0.40	2.69	1	1
1:A:95:LEU:O	1:A:106:THR:OG1	0.40	2.35	1	1
1:A:157:ASP:C	1:A:159:LYS:H	0.40	2.18	5	1
1:A:2:ARG:HH21	1:A:255:TRP:C	0.40	2.19	7	1
1:A:191:LEU:O	1:A:195:SER:OG	0.40	2.34	9	1
1:A:41:PHE:O	1:A:41:PHE:CD2	0.40	2.74	9	1
1:A:55:LEU:CG	1:A:55:LEU:O	0.40	2.68	10	1
1:A:14:ALA:CB	1:A:19:LEU:HD12	0.40	2.34	3	1
1:A:39:SER:O	1:A:59:GLU:OE2	0.40	2.38	3	1
1:A:98:ASP:OD2	1:A:140:ARG:NH2	0.40	2.53	3	1
1:A:99:PHE:CD1	1:A:257:LEU:HD23	0.40	2.50	3	1
1:A:39:SER:O	1:A:40:ALA:C	0.40	2.60	10	1
1:A:65:GLN:OE1	1:A:65:GLN:O	0.40	2.39	1	1
1:A:7:ASN:N	1:A:7:ASN:OD1	0.40	2.55	1	1
1:A:147:GLY:O	1:A:220:ASP:CB	0.40	2.69	4	1
1:A:81:THR:OG1	1:A:89:ASP:OD1	0.40	2.36	5	1
1:A:107:LEU:H	1:A:107:LEU:CD2	0.40	2.25	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:204:TRP:H	1:A:205:PRO:CD	0.40	2.28	10	1
1:A:116:ASP:HA	1:A:119:LEU:HD12	0.40	1.93	1	1
1:A:223:LEU:C	1:A:224:LEU:HD22	0.40	2.37	1	1
1:A:211:GLU:C	1:A:213:LEU:H	0.40	2.18	2	1
1:A:189:ASP:C	1:A:191:LEU:H	0.40	2.20	3	1
1:A:242:ARG:C	1:A:243:PHE:CD1	0.40	2.95	6	1
1:A:117:GLU:OE2	1:A:121:GLN:NE2	0.40	2.54	9	1
1:A:8:VAL:O	1:A:9:ASN:CG	0.40	2.59	9	1
1:A:233:ARG:CZ	1:A:233:ARG:O	0.40	2.69	10	1
1:A:27:ASN:O	1:A:28:ALA:C	0.40	2.60	1	1
1:A:67:GLY:C	1:A:92:GLY:O	0.40	2.60	4	1
1:A:99:PHE:O	1:A:101:LYS:N	0.40	2.49	5	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	254/259 (98%)	188±6 (74±3%)	45±6 (18±2%)	21±4 (8±1%)	2	13
All	All	2540/2590 (98%)	1875 (74%)	454 (18%)	211 (8%)	2	13

All 73 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	226	PRO	9
1	A	65	GLN	9
1	A	190	ALA	7
1	A	63	PRO	7
1	A	229	ARG	7
1	A	28	ALA	7
1	A	253	TYR	7
1	A	52	GLY	6
1	A	44	ASP	6
1	A	206	ASP	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	57	ALA	6
1	A	244	SER	5
1	A	213	LEU	5
1	A	232	VAL	5
1	A	166	GLN	4
1	A	219	PHE	4
1	A	242	ARG	4
1	A	102	VAL	4
1	A	37	ARG	4
1	A	256	THR	4
1	A	160	ASN	4
1	A	161	TRP	3
1	A	199	ASP	3
1	A	207	ASN	3
1	A	154	GLN	3
1	A	100	ASP	3
1	A	27	ASN	3
1	A	216	GLY	3
1	A	141	ARG	3
1	A	211	GLU	3
1	A	2	ARG	3
1	A	195	SER	3
1	A	41	PHE	3
1	A	91	TYR	3
1	A	46	PRO	2
1	A	204	TRP	2
1	A	239	ARG	2
1	A	61	GLU	2
1	A	170	PHE	2
1	A	35	ASP	2
1	A	209	GLN	2
1	A	157	ASP	2
1	A	185	MET	2
1	A	76	PRO	2
1	A	164	SER	2
1	A	116	ASP	2
1	A	210	ALA	2
1	A	249	LEU	1
1	A	140	ARG	1
1	A	158	ILE	1
1	A	212	MET	1
1	A	85	PHE	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	66	GLY	1
1	A	159	LYS	1
1	A	254	ASP	1
1	A	10	GLY	1
1	A	162	ARG	1
1	A	230	ARG	1
1	A	93	ARG	1
1	A	29	ASP	1
1	A	6	VAL	1
1	A	110	PRO	1
1	A	33	LEU	1
1	A	214	ASN	1
1	A	101	LYS	1
1	A	62	VAL	1
1	A	182	VAL	1
1	A	139	LYS	1
1	A	99	PHE	1
1	A	198	GLY	1
1	A	255	TRP	1
1	A	84	GLY	1
1	A	220	ASP	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	217/220 (99%)	183±5 (84±2%)	34±5 (16±2%)	5	42
All	All	2170/2200 (99%)	1830 (84%)	340 (16%)	5	42

All 131 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	62	VAL	10
1	A	149	LEU	9
1	A	228	LEU	9
1	A	224	LEU	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	11	ILE	8
1	A	194	VAL	7
1	A	156	LEU	7
1	A	43	LEU	7
1	A	8	VAL	7
1	A	251	VAL	6
1	A	80	ILE	6
1	A	71	TYR	6
1	A	219	PHE	5
1	A	217	TRP	5
1	A	74	LEU	5
1	A	218	ARG	5
1	A	108	LEU	5
1	A	187	TYR	5
1	A	94	TYR	5
1	A	107	LEU	5
1	A	109	LEU	5
1	A	221	TYR	5
1	A	242	ARG	4
1	A	182	VAL	4
1	A	24	GLN	4
1	A	39	SER	4
1	A	65	GLN	4
1	A	234	SER	4
1	A	237	LEU	4
1	A	98	ASP	4
1	A	250	ILE	4
1	A	83	LEU	4
1	A	2	ARG	4
1	A	58	CYS	4
1	A	4	ILE	3
1	A	15	VAL	3
1	A	50	LEU	3
1	A	253	TYR	3
1	A	106	THR	3
1	A	171	LEU	3
1	A	225	THR	3
1	A	87	THR	3
1	A	232	VAL	3
1	A	215	LEU	3
1	A	95	LEU	3
1	A	132	TYR	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	233	ARG	2
1	A	19	LEU	2
1	A	30	VAL	2
1	A	102	VAL	2
1	A	44	ASP	2
1	A	191	LEU	2
1	A	170	PHE	2
1	A	192	ARG	2
1	A	204	TRP	2
1	A	188	VAL	2
1	A	165	GLN	2
1	A	96	GLN	2
1	A	145	TYR	2
1	A	135	LYS	2
1	A	140	ARG	2
1	A	81	THR	2
1	A	23	LEU	2
1	A	246	HIS	2
1	A	257	LEU	2
1	A	230	ARG	2
1	A	138	ARG	2
1	A	256	THR	2
1	A	17	ARG	2
1	A	255	TRP	2
1	A	164	SER	2
1	A	26	GLN	2
1	A	160	ASN	2
1	A	236	ARG	2
1	A	93	ARG	2
1	A	27	ASN	2
1	A	150	TYR	2
1	A	122	LYS	2
1	A	20	LEU	1
1	A	199	ASP	1
1	A	45	ASP	1
1	A	162	ARG	1
1	A	33	LEU	1
1	A	154	GLN	1
1	A	195	SER	1
1	A	70	LEU	1
1	A	37	ARG	1
1	A	211	GLU	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	137	ARG	1
1	A	36	THR	1
1	A	116	ASP	1
1	A	201	TYR	1
1	A	249	LEU	1
1	A	159	LYS	1
1	A	244	SER	1
1	A	6	VAL	1
1	A	129	PHE	1
1	A	252	ASP	1
1	A	222	GLN	1
1	A	29	ASP	1
1	A	13	THR	1
1	A	119	LEU	1
1	A	53	TYR	1
1	A	148	SER	1
1	A	56	TYR	1
1	A	178	MET	1
1	A	206	ASP	1
1	A	68	VAL	1
1	A	85	PHE	1
1	A	54	PHE	1
1	A	146	CYS	1
1	A	55	LEU	1
1	A	63	PRO	1
1	A	231	PHE	1
1	A	22	TRP	1
1	A	143	TYR	1
1	A	32	CYS	1
1	A	7	ASN	1
1	A	207	ASN	1
1	A	200	GLN	1
1	A	213	LEU	1
1	A	189	ASP	1
1	A	212	MET	1
1	A	48	TYR	1
1	A	5	SER	1
1	A	203	TRP	1
1	A	141	ARG	1
1	A	185	MET	1
1	A	229	ARG	1
1	A	163	ASP	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	220	ASP	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

6.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains [i](#)

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [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 42% for the well-defined parts and 42% 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	1546
Number of shifts mapped to atoms	1546
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
$^{13}\text{C}_\alpha$	255	0.53 ± 0.08	Should be applied
$^{13}\text{C}_\beta$	237	1.15 ± 0.10	Should be applied
$^{13}\text{C}'$	253	-0.47 ± 0.10	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	235	-0.76 ± 0.23	Should be applied

7.1.3 Completeness of resonance assignments

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 42%, i.e. 1372 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 3273. 33 out of 43 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	972/1255 (77%)	234/500 (47%)	504/510 (99%)	234/245 (96%)
Sidechain	400/1725 (23%)	83/1012 (8%)	317/610 (52%)	0/103 (0%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Aromatic	0/293 (0%)	0/152 (0%)	0/133 (0%)	0/8 (0%)
Overall	1372/3273 (42%)	317/1664 (19%)	821/1253 (66%)	234/356 (66%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 42%, i.e. 1380 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 3311. 33 out of 43 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	978/1273 (77%)	235/507 (46%)	508/518 (98%)	235/248 (95%)
Sidechain	402/1745 (23%)	83/1025 (8%)	319/617 (52%)	0/103 (0%)
Aromatic	0/293 (0%)	0/152 (0%)	0/133 (0%)	0/8 (0%)
Overall	1380/3311 (42%)	318/1684 (19%)	827/1268 (65%)	235/359 (65%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts ⓘ

There are no statistically unusual chemical shifts.

7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots ⓘ

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:

