



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 09:56 PM UTC

PDB ID : 1HOV / pdb_00001hov
Title : SOLUTION STRUCTURE OF A CATALYTIC DOMAIN OF MMP-2 COM-
PLEXED WITH SC-74020
Authors : Feng, Y.; Likos, J.J.; Zhu, L.; Woodward, H.; Munie, G.; McDonald, J.J.;
Stevens, A.M.; Howard, C.P.; De Crescenzo, G.A.; Welsch, D.; Shieh, H.-S.;
Stallings, W.C.
Deposited on : 2000-12-11

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 types of validation reports are described at

<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

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

MolProbity	:	4-5-2 with Phenix2.0
Mogul	:	2022.3.0, CSD as543be (2022)
Buster-report	:	wwPDB partial adaption of 1.1.7 (2018)
Percentile statistics	:	20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.49

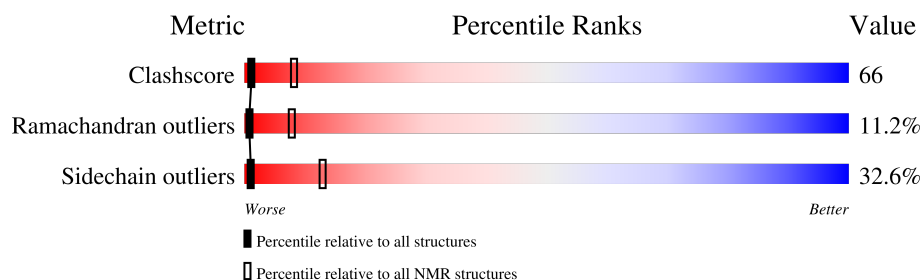
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	229148	14424
Ramachandran outliers	224038	12848
Sidechain outliers	223484	12823

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	163	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 11 models. Model 8 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 3 as representative, based on the following criterion: *reasonable inhibitor conformation*.

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:10-A:163 (154)	1.36	8

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. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 3, 4, 5, 6, 9, 11
2	2, 7, 8, 10

3 Entry composition [i](#)

There are 4 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2601 atoms, of which 1247 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called MATRIX METALLOPROTEINASE-2.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	163	Total	C	H	N	O	S	0
			2515	838	1205	219	249	4	

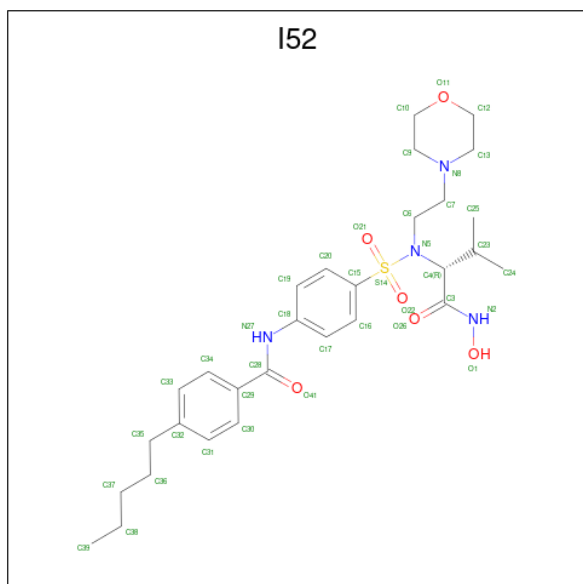
- Molecule 2 is ZINC ION (CCD ID: ZN) (formula: Zn).

Mol	Chain	Residues	Atoms	
2	A	2	Total	Zn
			2	2

- Molecule 3 is CALCIUM ION (CCD ID: CA) (formula: Ca).

Mol	Chain	Residues	Atoms	
3	A	2	Total	Ca
			2	2

- Molecule 4 is N-{4-[(1-HYDROXYCARBAMOYL-2-METHYL-PROPYL)-(2-MORPHOLIN-4-YL-ETHYL)-SULFAMOYL]-4-PENTYL-BENZAMIDE (CCD ID: I52) (formula: C₂₉H₄₂N₄O₆S).



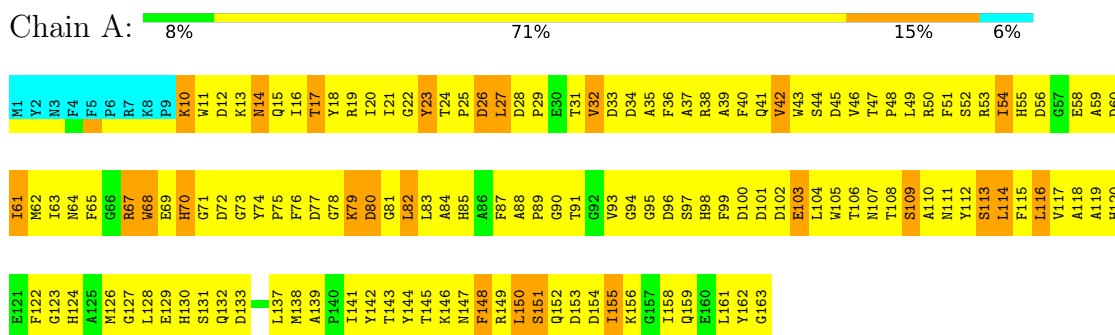
Mol	Chain	Residues	Atoms					
			Total	C	H	N	O	S
4	A	1	82	29	42	4	6	1

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide 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: MATRIX METALLOPROTEINASE-2

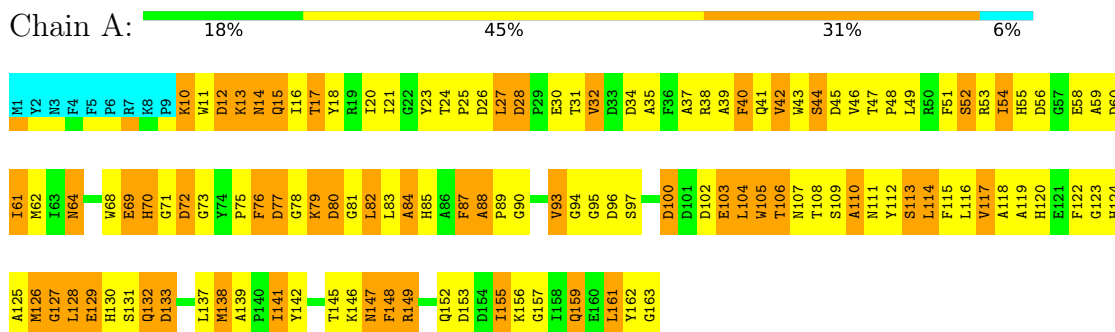


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

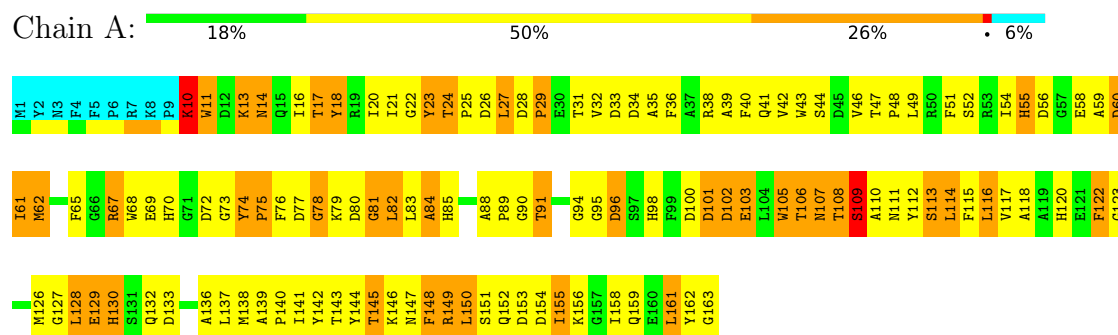
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: MATRIX METALLOPROTEINASE-2



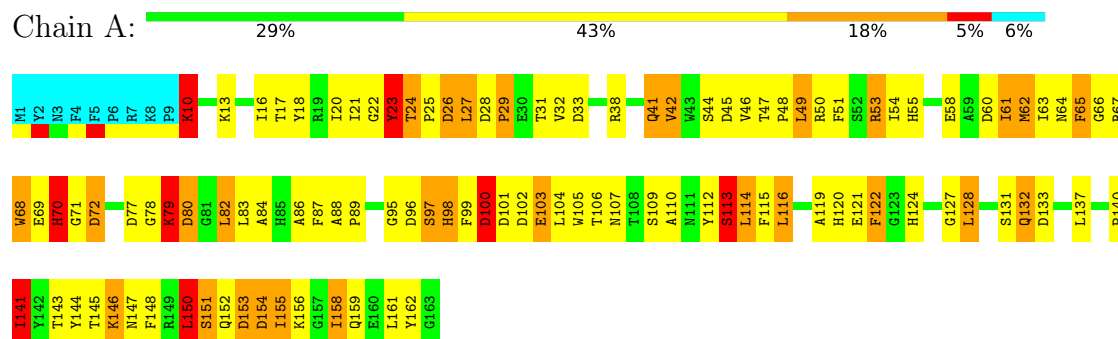
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: MATRIX METALLOPROTEINASE-2



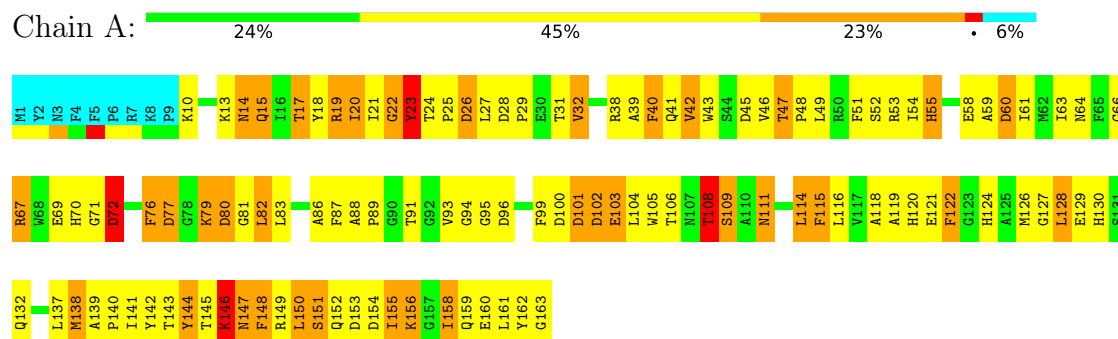
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: MATRIX METALLOPROTEINASE-2



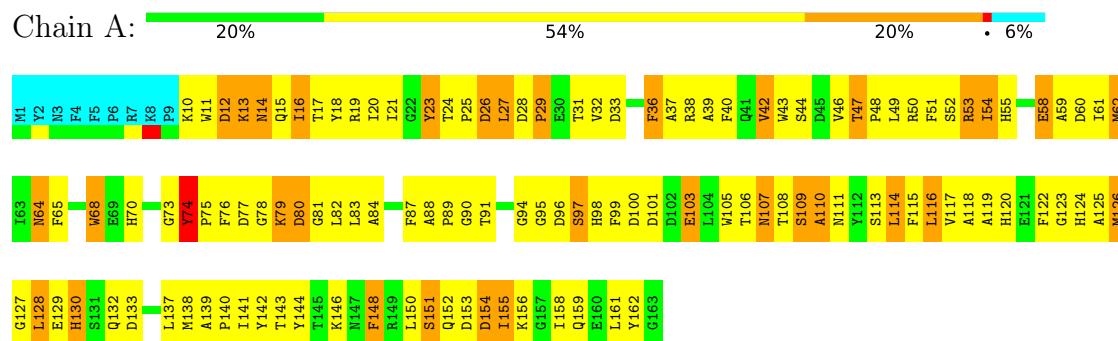
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: MATRIX METALLOPROTEINASE-2



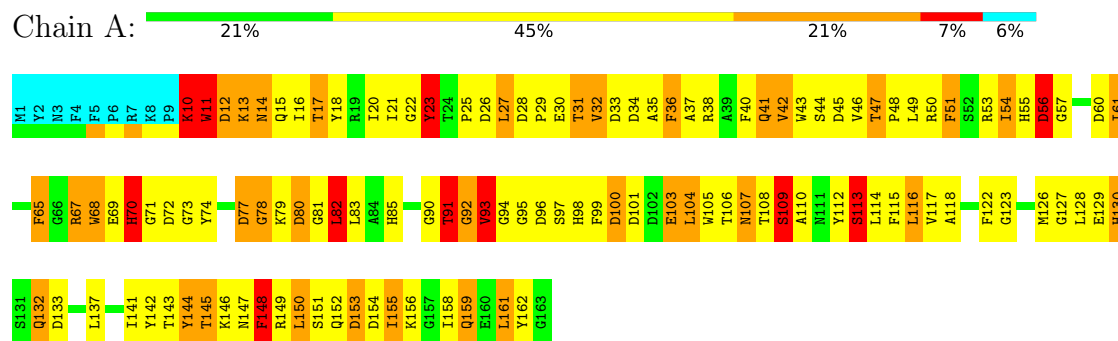
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: MATRIX METALLOPROTEINASE-2



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: MATRIX METALLOPROTEINASE-2



4.2.7 Score per residue for model 7

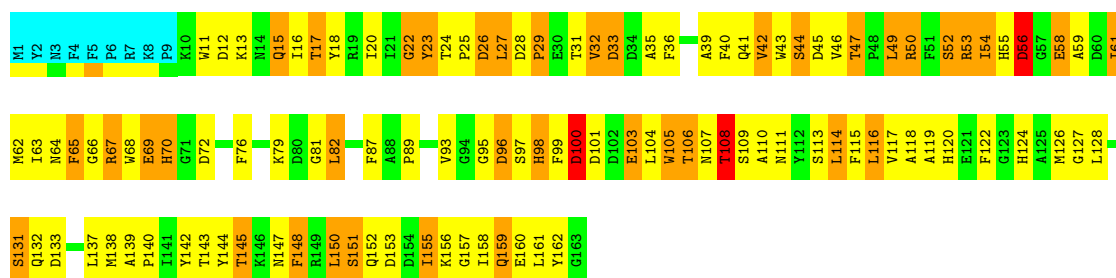
- Molecule 1: MATRIX METALLOPROTEINASE-2



4.2.8 Score per residue for model 8 (medoid)

- Molecule 1: MATRIX METALLOPROTEINASE-2

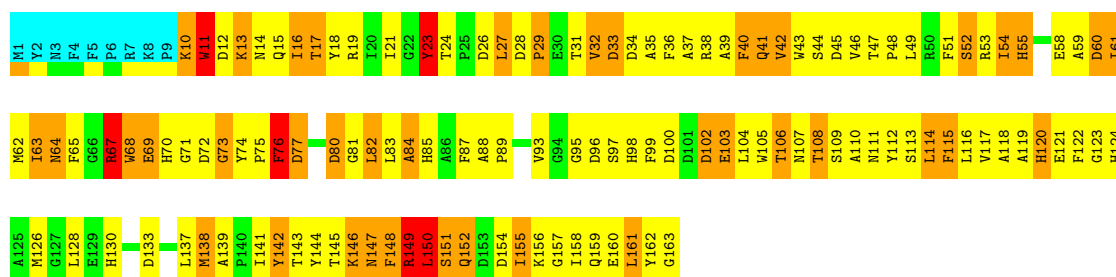




4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: MATRIX METALLOPROTEINASE-2

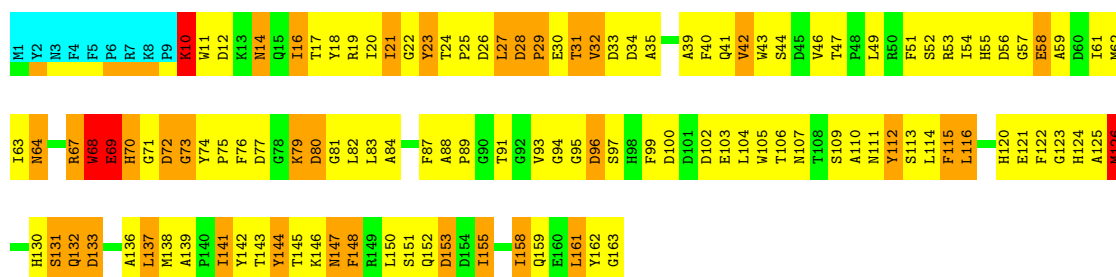
Chain A: 16% 50% 25% 6%



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: MATRIX METALLOPROTEINASE-2

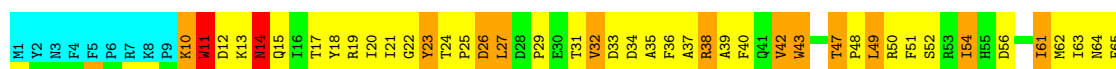
Chain A: 20% 51% 21% 6%



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: MATRIX METALLOPROTEINASE-2

Chain A: 15% 54% 22% 6%



[illegible]

5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *distance geometry, simulated annealing, molecular dynamics, torsion angle dynamics*.

Of the 14 calculated structures, 11 were deposited, based on the following criterion: *structures with the least restraint violations*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	98.1

No chemical shift data was provided.

6 Model quality

6.1 Standard geometry

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: I52, CA, ZN

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.42±0.01	0±0/1264 (0.0± 0.0%)	1.30±0.02	2±2/1717 (0.1± 0.1%)
All	All	1.42	0/13904 (0.0%)	1.30	27/18887 (0.1%)

There are no bond-length outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	109	SER	N-CA-C	-9.73	100.99	112.86	2	1
1	A	107	ASN	N-CA-C	-6.50	103.43	111.75	2	2
1	A	29	PRO	N-CA-C	-6.24	105.39	113.57	9	8
1	A	36	PHE	CA-CB-CG	-5.82	107.98	113.80	6	4
1	A	130	HIS	CA-CB-CG	-5.66	108.14	113.80	11	3
1	A	87	PHE	CA-CB-CG	-5.61	108.19	113.80	8	1
1	A	120	HIS	CA-CB-CG	-5.46	108.34	113.80	9	1
1	A	30	GLU	N-CA-C	-5.34	105.63	111.82	10	1
1	A	65	PHE	CA-CB-CG	-5.30	108.50	113.80	8	2
1	A	51	PHE	CA-CB-CG	-5.23	108.57	113.80	6	1
1	A	148	PHE	CA-CB-CG	-5.11	108.69	113.80	11	1
1	A	70	HIS	CA-CB-CG	-5.03	108.77	113.80	6	1
1	A	76	PHE	CA-CB-CG	-5.03	108.77	113.80	9	1

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	1226	1121	1121	158±24
4	A	40	42	41	10±4
All	All	13970	12793	12782	1767

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 66.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:THR:HG22	1:A:27:LEU:HD22	1.13	1.20	2	2
1:A:38:ARG:O	1:A:42:VAL:HG22	0.93	1.61	2	1
1:A:88:ALA:HB1	1:A:89:PRO:HD2	0.89	1.42	11	7
1:A:24:THR:CG2	1:A:27:LEU:HD22	0.88	1.96	2	2
1:A:137:LEU:HD13	4:A:800:I52:H382	0.88	1.43	5	3
1:A:20:ILE:HD13	1:A:23:TYR:CE1	0.87	2.05	10	4
4:A:800:I52:H251	4:A:800:I52:H61	0.87	1.43	4	2
1:A:137:LEU:HD13	4:A:800:I52:H381	0.86	1.48	3	1
1:A:27:LEU:HD21	1:A:32:VAL:HB	0.85	1.48	1	3
4:A:800:I52:H72	4:A:800:I52:H20	0.85	1.47	11	2
1:A:49:LEU:HD23	1:A:51:PHE:CE1	0.85	2.06	1	2
1:A:106:THR:HG23	1:A:108:THR:N	0.84	1.88	2	1
1:A:20:ILE:HD13	1:A:23:TYR:CZ	0.84	2.08	10	3
1:A:27:LEU:HD13	1:A:106:THR:HA	0.84	1.48	7	2
1:A:128:LEU:HD11	1:A:157:GLY:HA3	0.83	1.51	1	1
1:A:54:ILE:HD11	1:A:59:ALA:HB2	0.82	1.51	1	3
1:A:140:PRO:O	1:A:141:ILE:HD13	0.82	1.74	5	2
4:A:800:I52:H243	4:A:800:I52:H62	0.81	1.52	11	2
4:A:800:I52:H241	4:A:800:I52:H71	0.81	1.47	5	1
1:A:21:ILE:HD11	1:A:62:MET:HG2	0.81	1.53	5	3
1:A:23:TYR:CB	1:A:32:VAL:HG11	0.81	2.05	6	6
1:A:39:ALA:HB1	1:A:43:TRP:CZ2	0.81	2.11	8	5
1:A:61:ILE:HG23	1:A:95:GLY:O	0.80	1.76	10	3
1:A:116:LEU:HD11	4:A:800:I52:H33	0.80	1.52	9	1
1:A:61:ILE:HG22	1:A:95:GLY:O	0.80	1.76	11	7
1:A:20:ILE:HG21	1:A:23:TYR:CD1	0.79	2.13	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
4:A:800:I52:H241	4:A:800:I52:H72	0.79	1.52	1	1
1:A:106:THR:HG23	1:A:108:THR:H	0.78	1.39	2	1
1:A:137:LEU:HD13	4:A:800:I52:H362	0.78	1.55	8	4
1:A:137:LEU:CD1	4:A:800:I52:H351	0.77	2.10	6	1
1:A:123:GLY:C	1:A:138:MET:HE1	0.77	2.05	1	1
1:A:145:THR:HG21	4:A:800:I52:H392	0.77	1.55	10	2
1:A:43:TRP:CG	1:A:126:MET:HE1	0.77	2.14	4	1
1:A:88:ALA:HB1	1:A:89:PRO:CD	0.77	2.10	11	4
1:A:39:ALA:HB1	1:A:43:TRP:CH2	0.77	2.15	4	5
1:A:116:LEU:HD12	1:A:142:TYR:CE2	0.76	2.16	7	1
1:A:54:ILE:HD11	1:A:59:ALA:CB	0.76	2.10	7	6
1:A:113:SER:O	1:A:117:VAL:HG22	0.76	1.80	1	3
1:A:108:THR:HG21	1:A:112:TYR:O	0.76	1.81	2	1
1:A:145:THR:HG22	4:A:800:I52:H371	0.75	1.57	9	1
1:A:116:LEU:HD11	1:A:144:TYR:HA	0.75	1.59	11	4
1:A:148:PHE:CE1	1:A:150:LEU:HD23	0.74	2.17	4	2
1:A:154:ASP:O	1:A:158:ILE:HG22	0.74	1.83	3	4
1:A:63:ILE:HD12	1:A:63:ILE:N	0.74	1.97	10	2
1:A:13:LYS:O	1:A:49:LEU:HD21	0.73	1.82	8	1
1:A:23:TYR:CG	1:A:32:VAL:HG11	0.73	2.19	4	8
1:A:42:VAL:HG13	1:A:43:TRP:CD1	0.73	2.18	7	5
1:A:54:ILE:HD11	1:A:59:ALA:HA	0.73	1.59	10	4
1:A:46:VAL:HG23	1:A:47:THR:HG22	0.73	1.59	6	1
1:A:46:VAL:O	1:A:46:VAL:HG22	0.72	1.84	4	6
1:A:145:THR:HA	4:A:800:I52:H372	0.72	1.61	9	1
1:A:84:ALA:HB1	1:A:99:PHE:CD1	0.72	2.20	11	1
1:A:86:ALA:HB2	1:A:97:SER:OG	0.72	1.85	11	1
1:A:42:VAL:HG21	1:A:115:PHE:CE1	0.72	2.20	2	4
1:A:27:LEU:C	1:A:27:LEU:HD23	0.72	2.10	2	1
1:A:27:LEU:HD11	1:A:32:VAL:HG13	0.71	1.62	10	1
1:A:46:VAL:HG22	1:A:46:VAL:O	0.71	1.86	2	1
1:A:106:THR:HG23	1:A:108:THR:CA	0.71	2.16	2	1
1:A:47:THR:OG1	1:A:49:LEU:HD23	0.70	1.85	10	1
1:A:27:LEU:HD23	1:A:27:LEU:O	0.70	1.85	1	2
1:A:137:LEU:CD1	4:A:800:I52:H362	0.70	2.17	9	3
1:A:43:TRP:CH2	1:A:122:PHE:CD1	0.70	2.80	8	3
1:A:137:LEU:HD22	4:A:800:I52:H362	0.70	1.62	10	1
1:A:105:TRP:C	1:A:106:THR:HG22	0.70	2.10	9	1
1:A:49:LEU:HD21	1:A:162:TYR:HB3	0.70	1.63	10	1
1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:HD13	0.69	2.02	1	4
1:A:29:PRO:HA	1:A:32:VAL:HG23	0.69	1.65	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:ILE:HD13	1:A:23:TYR:OH	0.69	1.86	10	1
1:A:116:LEU:HD21	1:A:144:TYR:CE1	0.69	2.23	2	1
1:A:49:LEU:HD13	1:A:162:TYR:CE2	0.69	2.22	4	2
1:A:49:LEU:HD11	1:A:162:TYR:CE2	0.69	2.23	6	1
1:A:27:LEU:HD23	1:A:105:TRP:O	0.69	1.87	9	1
1:A:27:LEU:HD21	1:A:32:VAL:CG2	0.68	2.18	7	2
1:A:105:TRP:CD1	1:A:105:TRP:N	0.68	2.61	7	1
1:A:49:LEU:HD23	1:A:51:PHE:CZ	0.68	2.24	3	2
1:A:49:LEU:HD11	1:A:162:TYR:CD2	0.68	2.22	5	3
1:A:31:THR:HG21	1:A:107:ASN:HA	0.68	1.64	6	1
1:A:137:LEU:CD1	4:A:800:I52:H371	0.68	2.18	11	1
1:A:155:ILE:HD12	1:A:155:ILE:C	0.68	2.13	1	10
1:A:76:PHE:CE1	1:A:85:HIS:CE1	0.67	2.82	2	1
1:A:42:VAL:CG1	1:A:43:TRP:CD1	0.67	2.78	8	5
1:A:136:ALA:O	4:A:800:I52:H352	0.67	1.88	2	1
1:A:49:LEU:HD21	1:A:162:TYR:CB	0.67	2.19	10	1
1:A:13:LYS:O	1:A:15:GLN:N	0.67	2.27	6	3
1:A:28:ASP:O	1:A:32:VAL:HG22	0.67	1.90	10	2
1:A:23:TYR:CD2	1:A:32:VAL:CG1	0.67	2.77	1	2
1:A:65:PHE:CD2	1:A:105:TRP:CZ3	0.67	2.83	7	1
1:A:19:ARG:HB2	1:A:54:ILE:HG23	0.67	1.66	9	1
4:A:800:I52:H61	4:A:800:I52:H243	0.67	1.66	8	1
1:A:23:TYR:HB2	1:A:32:VAL:HG11	0.67	1.64	6	5
1:A:137:LEU:HD13	4:A:800:I52:H371	0.66	1.68	11	1
1:A:16:ILE:HD12	1:A:51:PHE:HE1	0.66	1.50	3	1
1:A:137:LEU:HB2	4:A:800:I52:H382	0.66	1.67	11	1
1:A:105:TRP:NE1	1:A:117:VAL:HG11	0.66	2.05	11	1
1:A:70:HIS:CE1	1:A:72:ASP:CB	0.66	2.77	3	1
1:A:42:VAL:HG21	1:A:115:PHE:CZ	0.65	2.26	11	6
1:A:23:TYR:HB3	1:A:32:VAL:HG21	0.65	1.67	2	2
1:A:114:LEU:HD13	1:A:114:LEU:O	0.65	1.91	4	2
1:A:45:ASP:OD1	1:A:150:LEU:HD11	0.65	1.91	3	1
1:A:137:LEU:HD12	4:A:800:I52:H351	0.65	1.66	6	1
1:A:108:THR:HG21	1:A:112:TYR:C	0.65	2.16	2	1
1:A:83:LEU:O	1:A:84:ALA:HB2	0.65	1.91	7	8
4:A:800:I52:H72	4:A:800:I52:H16	0.65	1.67	9	2
1:A:130:HIS:CE1	4:A:800:I52:H132	0.65	2.26	2	1
1:A:65:PHE:CD1	1:A:65:PHE:N	0.65	2.64	7	1
1:A:49:LEU:HD23	1:A:51:PHE:HZ	0.65	1.50	3	1
1:A:42:VAL:CG2	1:A:148:PHE:CE1	0.65	2.80	10	1
1:A:27:LEU:HD23	1:A:106:THR:HA	0.65	1.67	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:LEU:CD1	1:A:32:VAL:HG13	0.65	2.21	10	1
1:A:27:LEU:HD23	1:A:27:LEU:C	0.65	2.16	1	1
1:A:49:LEU:CD2	1:A:51:PHE:CZ	0.64	2.80	7	1
1:A:46:VAL:HG23	1:A:47:THR:HG23	0.64	1.68	10	1
1:A:43:TRP:O	1:A:46:VAL:HG12	0.64	1.92	1	1
1:A:16:ILE:HD12	1:A:51:PHE:CE1	0.64	2.26	3	1
1:A:145:THR:HB	4:A:800:I52:H371	0.64	1.69	4	1
1:A:126:MET:HE1	1:A:158:ILE:HD12	0.64	1.69	5	1
1:A:65:PHE:CE2	1:A:105:TRP:CZ3	0.64	2.86	7	1
1:A:32:VAL:HG12	1:A:114:LEU:CD2	0.64	2.23	10	1
1:A:106:THR:OG1	1:A:110:ALA:HB2	0.64	1.93	1	1
1:A:145:THR:CG2	4:A:800:I52:H382	0.63	2.23	6	2
1:A:49:LEU:HD22	1:A:51:PHE:CE2	0.63	2.28	4	1
1:A:49:LEU:HD23	1:A:51:PHE:HE1	0.63	1.53	5	1
1:A:53:ARG:NH1	1:A:55:HIS:CE1	0.63	2.66	5	1
1:A:144:TYR:CD1	1:A:145:THR:N	0.63	2.67	11	1
1:A:39:ALA:O	1:A:42:VAL:HG12	0.63	1.93	7	5
1:A:106:THR:HG23	1:A:108:THR:HA	0.63	1.70	2	1
1:A:162:TYR:O	1:A:162:TYR:CD2	0.63	2.52	4	1
1:A:42:VAL:CG1	1:A:43:TRP:NE1	0.63	2.62	10	5
1:A:43:TRP:CH2	1:A:122:PHE:CG	0.63	2.87	8	3
1:A:23:TYR:CD1	1:A:23:TYR:N	0.62	2.67	9	2
1:A:85:HIS:CB	4:A:800:I52:H241	0.62	2.24	2	1
1:A:19:ARG:HD2	1:A:21:ILE:HD13	0.62	1.71	4	1
1:A:65:PHE:CG	1:A:105:TRP:CH2	0.62	2.87	7	1
1:A:59:ALA:HB3	1:A:62:MET:SD	0.62	2.34	2	1
1:A:158:ILE:HD11	1:A:162:TYR:OH	0.62	1.93	4	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:122:PHE:CB	0.62	2.82	10	4
1:A:20:ILE:HD13	1:A:33:ASP:OD1	0.62	1.95	7	1
1:A:158:ILE:HD11	1:A:162:TYR:CE2	0.62	2.29	7	2
1:A:145:THR:OG1	1:A:148:PHE:N	0.62	2.32	9	1
1:A:144:TYR:CD2	1:A:145:THR:N	0.62	2.68	6	3
1:A:83:LEU:CD2	1:A:112:TYR:CE2	0.62	2.83	11	1
1:A:21:ILE:HD12	1:A:64:ASN:HB3	0.62	1.72	3	2
1:A:70:HIS:CE1	1:A:72:ASP:HB3	0.62	2.29	3	1
1:A:54:ILE:HD11	1:A:59:ALA:CA	0.61	2.24	10	4
1:A:137:LEU:HD13	4:A:800:I52:C37	0.61	2.25	11	1
1:A:97:SER:O	1:A:98:HIS:CD2	0.61	2.53	6	1
1:A:137:LEU:HD12	1:A:137:LEU:O	0.61	1.94	9	3
1:A:54:ILE:HD13	1:A:54:ILE:H	0.61	1.53	1	3
4:A:800:I52:H251	4:A:800:I52:H62	0.61	1.73	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:VAL:CG2	1:A:114:LEU:HD22	0.61	2.25	8	1
1:A:61:ILE:HD13	1:A:61:ILE:N	0.61	2.10	2	1
1:A:76:PHE:CD2	1:A:77:ASP:N	0.61	2.68	2	1
1:A:84:ALA:CB	1:A:99:PHE:CD1	0.61	2.83	11	1
1:A:55:HIS:O	1:A:57:GLY:N	0.61	2.34	6	1
1:A:116:LEU:HD12	4:A:800:I52:C38	0.61	2.26	2	1
1:A:106:THR:HG21	1:A:110:ALA:HB3	0.61	1.70	5	2
1:A:40:PHE:C	1:A:40:PHE:CD1	0.60	2.78	7	4
1:A:116:LEU:CD2	4:A:800:I52:H382	0.60	2.26	3	1
1:A:120:HIS:HB2	4:A:800:I52:H34	0.60	1.72	4	2
1:A:42:VAL:HG21	1:A:115:PHE:HZ	0.60	1.54	3	2
1:A:49:LEU:HD21	1:A:162:TYR:CE1	0.60	2.31	6	1
1:A:116:LEU:HD13	4:A:800:I52:H33	0.60	1.71	7	1
1:A:146:LYS:O	1:A:147:ASN:CB	0.60	2.49	9	2
1:A:43:TRP:HZ3	1:A:158:ILE:HD13	0.60	1.56	6	2
1:A:74:TYR:O	1:A:74:TYR:CG	0.60	2.54	6	1
1:A:43:TRP:CH2	1:A:123:GLY:CA	0.60	2.85	9	2
1:A:21:ILE:HG22	1:A:21:ILE:O	0.60	1.97	6	4
1:A:130:HIS:CD2	1:A:138:MET:O	0.60	2.55	9	3
1:A:120:HIS:CE1	1:A:124:HIS:CE1	0.60	2.90	5	1
1:A:10:LYS:O	1:A:11:TRP:CG	0.60	2.55	9	2
1:A:106:THR:OG1	1:A:110:ALA:HB3	0.60	1.97	8	1
1:A:88:ALA:CB	1:A:89:PRO:CD	0.59	2.80	11	2
1:A:17:THR:O	1:A:61:ILE:CG1	0.59	2.49	9	3
1:A:116:LEU:HD21	1:A:144:TYR:CD1	0.59	2.32	2	1
1:A:23:TYR:CE2	1:A:33:ASP:OD2	0.59	2.56	8	1
1:A:91:THR:HG22	1:A:92:GLY:N	0.59	2.12	11	1
1:A:42:VAL:HG11	1:A:115:PHE:CZ	0.59	2.33	2	1
1:A:117:VAL:HG23	1:A:118:ALA:N	0.59	2.13	6	7
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:123:GLY:CA	0.59	2.85	5	1
1:A:55:HIS:O	1:A:55:HIS:CG	0.59	2.54	10	1
1:A:49:LEU:HD22	1:A:162:TYR:CE2	0.59	2.33	9	1
1:A:75:PRO:O	1:A:76:PHE:CG	0.59	2.55	1	1
1:A:115:PHE:C	1:A:115:PHE:CD1	0.59	2.80	4	5
1:A:65:PHE:CE2	1:A:105:TRP:CE3	0.59	2.91	7	1
1:A:76:PHE:C	1:A:76:PHE:CD1	0.59	2.81	1	1
1:A:161:LEU:HD13	1:A:161:LEU:O	0.59	1.97	2	1
1:A:74:TYR:CE1	1:A:85:HIS:CE1	0.59	2.91	6	1
1:A:68:TRP:CE3	1:A:68:TRP:C	0.59	2.81	10	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:154:ASP:OD2	0.59	2.56	9	1
1:A:19:ARG:HG2	1:A:59:ALA:HB3	0.59	1.74	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:THR:HG23	1:A:26:ASP:OD1	0.58	1.98	3	2
1:A:23:TYR:CG	1:A:32:VAL:CG1	0.58	2.85	4	8
1:A:46:VAL:CG2	1:A:155:ILE:HB	0.58	2.27	9	1
1:A:144:TYR:CG	1:A:145:THR:N	0.58	2.70	8	4
1:A:43:TRP:HE1	1:A:137:LEU:HD21	0.58	1.57	5	1
1:A:63:ILE:N	1:A:63:ILE:CD1	0.58	2.67	10	1
1:A:83:LEU:CD2	1:A:112:TYR:CZ	0.58	2.86	11	1
1:A:130:HIS:CG	1:A:138:MET:O	0.58	2.57	10	1
1:A:11:TRP:CZ2	1:A:60:ASP:CG	0.58	2.81	1	1
1:A:142:TYR:OH	1:A:144:TYR:CD1	0.58	2.56	10	1
1:A:27:LEU:HD11	1:A:32:VAL:CA	0.58	2.29	1	1
1:A:113:SER:OG	1:A:116:LEU:HD22	0.58	1.98	2	1
1:A:101:ASP:O	1:A:102:ASP:C	0.58	2.45	4	3
1:A:29:PRO:HA	1:A:32:VAL:CG2	0.58	2.29	10	2
1:A:26:ASP:OD1	1:A:106:THR:HG22	0.58	1.99	7	1
1:A:61:ILE:CG2	1:A:95:GLY:O	0.58	2.51	11	6
1:A:31:THR:O	1:A:34:ASP:N	0.58	2.36	9	4
1:A:22:GLY:O	1:A:65:PHE:CD2	0.58	2.57	3	1
1:A:61:ILE:HG23	1:A:95:GLY:C	0.58	2.24	4	2
1:A:40:PHE:CE1	1:A:44:SER:HB2	0.58	2.34	9	1
1:A:103:GLU:CB	1:A:105:TRP:CZ2	0.58	2.87	1	1
1:A:140:PRO:C	1:A:141:ILE:HD13	0.58	2.23	5	1
1:A:62:MET:CB	1:A:96:ASP:CG	0.58	2.77	11	1
1:A:105:TRP:O	1:A:110:ALA:CB	0.58	2.52	6	1
1:A:105:TRP:CB	1:A:114:LEU:CD2	0.57	2.81	11	2
1:A:145:THR:O	1:A:145:THR:HG23	0.57	1.99	10	2
1:A:18:TYR:CD1	1:A:63:ILE:HD11	0.57	2.33	4	1
1:A:45:ASP:OD1	1:A:46:VAL:HG13	0.57	1.99	3	1
1:A:147:ASN:O	1:A:148:PHE:CB	0.57	2.50	8	3
1:A:148:PHE:C	1:A:148:PHE:CD1	0.57	2.82	5	3
1:A:152:GLN:HA	1:A:155:ILE:CG1	0.57	2.29	2	11
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:158:ILE:HD13	0.57	2.34	6	1
1:A:23:TYR:CD2	1:A:32:VAL:HG12	0.57	2.35	1	1
1:A:142:TYR:CD1	1:A:142:TYR:C	0.57	2.80	2	2
1:A:11:TRP:CH2	1:A:60:ASP:OD2	0.57	2.58	7	3
1:A:79:LYS:O	1:A:80:ASP:C	0.57	2.47	5	7
1:A:43:TRP:CH2	1:A:154:ASP:OD2	0.57	2.58	5	1
1:A:60:ASP:OD1	1:A:60:ASP:N	0.57	2.37	9	1
1:A:148:PHE:CG	1:A:149:ARG:N	0.57	2.73	9	1
1:A:145:THR:CG2	4:A:800:I52:H392	0.57	2.30	1	1
1:A:158:ILE:HG23	1:A:159:GLN:N	0.57	2.15	7	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:139:ALA:HB1	1:A:140:PRO:HD2	0.57	1.75	4	2
1:A:49:LEU:HD21	1:A:162:TYR:CZ	0.56	2.34	3	1
1:A:65:PHE:CE2	1:A:101:ASP:OD1	0.56	2.58	6	1
1:A:71:GLY:O	1:A:73:GLY:N	0.56	2.39	11	4
1:A:54:ILE:CD1	1:A:59:ALA:CB	0.56	2.83	8	1
1:A:17:THR:HB	1:A:54:ILE:HD13	0.56	1.77	2	1
1:A:102:ASP:O	1:A:103:GLU:CB	0.56	2.52	2	2
1:A:148:PHE:CD1	4:A:800:I52:H393	0.56	2.36	2	1
1:A:42:VAL:HG23	1:A:148:PHE:CE1	0.56	2.34	10	1
1:A:99:PHE:HB2	1:A:105:TRP:CZ2	0.56	2.36	10	1
1:A:105:TRP:CD1	1:A:112:TYR:HB3	0.56	2.36	11	1
1:A:43:TRP:CH2	1:A:123:GLY:HA2	0.56	2.35	9	2
1:A:65:PHE:CD2	1:A:99:PHE:HB2	0.56	2.35	7	1
1:A:49:LEU:CD2	1:A:51:PHE:CE2	0.56	2.89	4	2
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:123:GLY:HA3	0.56	2.35	5	2
1:A:118:ALA:O	1:A:122:PHE:N	0.56	2.38	1	7
1:A:18:TYR:CD1	1:A:18:TYR:C	0.56	2.83	2	2
1:A:42:VAL:CG1	1:A:43:TRP:CE2	0.56	2.88	10	4
1:A:116:LEU:HD12	1:A:142:TYR:OH	0.56	2.01	1	2
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:122:PHE:HB3	0.56	2.35	8	3
1:A:75:PRO:HB2	1:A:82:LEU:CD2	0.56	2.30	7	1
1:A:31:THR:CG2	1:A:107:ASN:HB3	0.56	2.31	3	4
1:A:16:ILE:HG22	1:A:17:THR:N	0.56	2.16	7	2
1:A:102:ASP:O	1:A:103:GLU:C	0.56	2.49	7	2
1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CD2	0.56	2.72	9	1
1:A:142:TYR:O	1:A:143:THR:CB	0.56	2.54	9	1
1:A:11:TRP:CE2	1:A:60:ASP:OD2	0.56	2.59	2	1
1:A:108:THR:CG2	1:A:112:TYR:O	0.56	2.52	2	1
1:A:151:SER:O	1:A:155:ILE:HG23	0.56	2.00	6	8
1:A:88:ALA:O	1:A:94:GLY:CA	0.56	2.54	11	4
1:A:145:THR:HG22	4:A:800:I52:C37	0.56	2.29	9	1
1:A:151:SER:CB	1:A:153:ASP:OD1	0.56	2.54	10	1
1:A:107:ASN:O	1:A:107:ASN:CG	0.55	2.49	11	4
1:A:74:TYR:O	1:A:74:TYR:CD2	0.55	2.59	6	1
1:A:105:TRP:C	1:A:106:THR:CG2	0.55	2.79	9	4
1:A:107:ASN:O	1:A:108:THR:OG1	0.55	2.21	2	1
4:A:800:I52:H251	4:A:800:I52:C6	0.55	2.31	2	2
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:154:ASP:OD1	0.55	2.59	2	1
1:A:116:LEU:HD12	4:A:800:I52:H381	0.55	1.78	2	1
1:A:116:LEU:CD1	1:A:144:TYR:CD2	0.55	2.89	5	1
1:A:155:ILE:HD12	1:A:155:ILE:O	0.55	2.00	8	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:PHE:O	1:A:44:SER:CB	0.55	2.54	2	4
1:A:152:GLN:O	1:A:155:ILE:N	0.55	2.39	3	1
1:A:12:ASP:N	1:A:12:ASP:OD1	0.55	2.40	11	3
1:A:116:LEU:HD12	1:A:142:TYR:CZ	0.55	2.36	8	3
1:A:158:ILE:HD11	1:A:162:TYR:CZ	0.55	2.37	4	1
1:A:35:ALA:HB3	1:A:114:LEU:HD23	0.55	1.78	6	1
1:A:47:THR:CB	1:A:49:LEU:HD23	0.55	2.31	10	1
1:A:96:ASP:OD1	1:A:96:ASP:N	0.55	2.39	10	1
1:A:106:THR:O	1:A:113:SER:HA	0.55	2.01	9	4
1:A:20:ILE:HD12	1:A:23:TYR:CD2	0.55	2.37	4	1
1:A:149:ARG:O	1:A:150:LEU:CB	0.55	2.54	7	3
1:A:80:ASP:O	1:A:81:GLY:C	0.55	2.47	11	5
1:A:42:VAL:HG12	1:A:43:TRP:CE2	0.55	2.37	10	4
1:A:54:ILE:HD11	1:A:59:ALA:HB1	0.55	1.78	5	1
1:A:34:ASP:O	1:A:35:ALA:C	0.55	2.49	9	4
1:A:28:ASP:O	1:A:32:VAL:CG2	0.55	2.54	10	2
1:A:40:PHE:CE1	1:A:51:PHE:CD2	0.55	2.94	2	1
1:A:131:SER:O	1:A:132:GLN:CB	0.55	2.55	1	3
1:A:106:THR:CG2	1:A:108:THR:HA	0.55	2.31	2	1
1:A:13:LYS:HD2	1:A:162:TYR:CD1	0.55	2.36	4	1
1:A:20:ILE:HG21	1:A:23:TYR:HD1	0.55	1.58	6	1
1:A:39:ALA:CB	1:A:43:TRP:CH2	0.55	2.89	4	3
1:A:18:TYR:O	1:A:54:ILE:HG22	0.55	2.02	9	1
1:A:137:LEU:HD13	4:A:800:I52:C36	0.54	2.31	1	1
1:A:54:ILE:CD1	1:A:58:GLU:O	0.54	2.56	4	1
1:A:106:THR:HG23	1:A:114:LEU:H	0.54	1.63	6	1
1:A:66:GLY:N	1:A:101:ASP:OD1	0.54	2.40	7	1
1:A:62:MET:C	1:A:63:ILE:HD12	0.54	2.27	10	1
1:A:114:LEU:O	1:A:118:ALA:CB	0.54	2.56	6	1
1:A:20:ILE:CD1	1:A:33:ASP:OD1	0.54	2.56	7	1
1:A:106:THR:CG2	1:A:110:ALA:O	0.54	2.56	11	1
1:A:39:ALA:HA	1:A:42:VAL:CG2	0.54	2.33	2	1
1:A:27:LEU:HD23	1:A:27:LEU:H	0.54	1.61	4	2
1:A:77:ASP:CG	1:A:78:GLY:N	0.54	2.66	7	1
1:A:148:PHE:CZ	1:A:150:LEU:HB2	0.54	2.36	8	1
1:A:128:LEU:CD2	1:A:128:LEU:N	0.54	2.70	11	1
1:A:40:PHE:O	1:A:44:SER:N	0.54	2.41	2	1
1:A:101:ASP:OD1	1:A:101:ASP:O	0.54	2.26	3	1
1:A:141:ILE:O	4:A:800:I52:N27	0.54	2.40	3	1
1:A:74:TYR:OH	1:A:85:HIS:CD2	0.54	2.60	6	1
1:A:99:PHE:CB	1:A:105:TRP:CZ2	0.54	2.91	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:67:ARG:O	1:A:76:PHE:CD2	0.54	2.60	11	1
1:A:38:ARG:O	1:A:41:GLN:N	0.54	2.41	9	2
1:A:115:PHE:CD1	1:A:115:PHE:C	0.54	2.81	2	2
1:A:41:GLN:O	1:A:45:ASP:CB	0.54	2.56	4	2
1:A:105:TRP:CB	1:A:114:LEU:HD22	0.54	2.33	11	2
1:A:116:LEU:C	1:A:116:LEU:HD13	0.54	2.28	9	1
1:A:23:TYR:CB	1:A:32:VAL:CG1	0.54	2.86	6	4
1:A:17:THR:HG23	1:A:52:SER:HB3	0.54	1.80	4	1
1:A:124:HIS:CD2	4:A:800:I52:O1	0.54	2.60	3	3
1:A:103:GLU:O	1:A:104:LEU:CB	0.54	2.54	6	1
1:A:42:VAL:HG23	1:A:148:PHE:CZ	0.54	2.37	10	1
1:A:54:ILE:CD1	1:A:59:ALA:HB2	0.53	2.33	8	2
1:A:49:LEU:HD11	1:A:162:TYR:CG	0.53	2.38	2	2
1:A:81:GLY:O	1:A:82:LEU:C	0.53	2.51	2	7
1:A:105:TRP:O	1:A:106:THR:HB	0.53	2.02	2	1
1:A:20:ILE:CD1	1:A:23:TYR:OH	0.53	2.56	10	2
1:A:23:TYR:CD2	1:A:32:VAL:HG11	0.53	2.38	11	3
1:A:152:GLN:O	1:A:153:ASP:C	0.53	2.51	1	9
1:A:17:THR:O	1:A:60:ASP:CB	0.53	2.56	3	1
1:A:113:SER:OG	1:A:144:TYR:CE1	0.53	2.58	3	1
1:A:116:LEU:HD22	4:A:800:I52:H382	0.53	1.78	3	1
1:A:75:PRO:HB2	1:A:82:LEU:HD22	0.53	1.80	7	1
1:A:28:ASP:CB	1:A:31:THR:OG1	0.53	2.56	1	1
1:A:18:TYR:CD1	1:A:63:ILE:CD1	0.53	2.91	4	1
1:A:104:LEU:O	1:A:111:ASN:ND2	0.53	2.41	9	1
1:A:93:VAL:HG12	1:A:94:GLY:N	0.53	2.19	11	1
1:A:137:LEU:HA	4:A:800:I52:H352	0.53	1.80	11	1
1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:OD1	0.53	2.39	8	2
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:122:PHE:CG	0.53	2.96	11	3
1:A:133:ASP:O	1:A:139:ALA:HB2	0.53	2.03	1	3
1:A:12:ASP:OD1	1:A:161:LEU:HD13	0.53	2.04	1	1
1:A:78:GLY:O	1:A:79:LYS:O	0.53	2.27	1	4
1:A:95:GLY:O	1:A:96:ASP:CG	0.53	2.51	4	2
1:A:16:ILE:CG2	1:A:17:THR:N	0.53	2.71	7	1
1:A:32:VAL:HG22	1:A:114:LEU:CD2	0.53	2.33	8	1
1:A:76:PHE:CZ	1:A:100:ASP:HA	0.53	2.38	11	1
1:A:152:GLN:O	1:A:155:ILE:HG13	0.53	2.03	7	9
1:A:13:LYS:O	1:A:14:ASN:C	0.53	2.50	2	2
1:A:25:PRO:O	1:A:26:ASP:C	0.53	2.51	3	9
1:A:27:LEU:HD13	1:A:32:VAL:HB	0.53	1.80	5	1
1:A:99:PHE:CD1	1:A:99:PHE:N	0.53	2.75	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:101:ASP:O	1:A:102:ASP:O	0.53	2.26	7	1
1:A:93:VAL:O	1:A:93:VAL:HG23	0.53	2.03	9	1
1:A:85:HIS:HB3	4:A:800:I52:H252	0.53	1.81	1	1
1:A:70:HIS:CE1	1:A:76:PHE:CD1	0.53	2.97	2	1
1:A:24:THR:CG2	1:A:26:ASP:OD1	0.53	2.57	1	2
1:A:24:THR:HG23	1:A:25:PRO:HD2	0.53	1.81	2	1
1:A:32:VAL:CG1	1:A:33:ASP:N	0.53	2.72	2	6
1:A:105:TRP:CE2	1:A:112:TYR:HB2	0.53	2.39	2	1
1:A:107:ASN:N	1:A:107:ASN:OD1	0.53	2.42	2	1
1:A:74:TYR:N	1:A:75:PRO:CD	0.53	2.72	5	1
1:A:21:ILE:O	1:A:21:ILE:CG2	0.52	2.56	6	2
1:A:62:MET:CG	1:A:96:ASP:OD1	0.52	2.57	3	1
1:A:70:HIS:CE1	1:A:72:ASP:HB2	0.52	2.39	3	1
1:A:17:THR:O	1:A:61:ILE:HG13	0.52	2.03	7	2
1:A:76:PHE:O	1:A:77:ASP:CB	0.52	2.56	9	2
1:A:68:TRP:O	1:A:70:HIS:N	0.52	2.43	11	2
1:A:40:PHE:CD1	1:A:40:PHE:O	0.52	2.63	6	2
1:A:155:ILE:C	1:A:155:ILE:CD1	0.52	2.82	4	7
1:A:49:LEU:HD21	1:A:162:TYR:CE2	0.52	2.40	3	1
1:A:43:TRP:CD1	1:A:126:MET:HE1	0.52	2.40	4	1
1:A:93:VAL:HG12	1:A:93:VAL:O	0.52	2.03	8	2
1:A:41:GLN:O	1:A:45:ASP:CG	0.52	2.52	9	2
1:A:133:ASP:N	1:A:133:ASP:OD1	0.52	2.43	8	1
1:A:99:PHE:CZ	1:A:118:ALA:HA	0.52	2.40	9	1
1:A:77:ASP:OD2	1:A:82:LEU:N	0.52	2.43	5	3
1:A:74:TYR:N	1:A:75:PRO:HD2	0.52	2.20	5	1
1:A:38:ARG:C	1:A:42:VAL:HG22	0.52	2.28	2	1
1:A:69:GLU:O	1:A:70:HIS:O	0.52	2.26	3	1
1:A:102:ASP:C	1:A:103:GLU:CG	0.52	2.83	3	1
1:A:15:GLN:CG	1:A:15:GLN:O	0.52	2.57	7	1
1:A:10:LYS:O	1:A:11:TRP:C	0.52	2.52	10	1
1:A:46:VAL:O	1:A:46:VAL:CG2	0.52	2.57	1	4
4:A:800:I52:H62	4:A:800:I52:H16	0.52	1.81	1	1
1:A:138:MET:HE1	1:A:154:ASP:OD1	0.52	2.05	11	2
1:A:43:TRP:NE1	1:A:137:LEU:HD21	0.52	2.20	5	1
1:A:55:HIS:N	1:A:55:HIS:CD2	0.52	2.77	8	2
1:A:137:LEU:HD23	1:A:154:ASP:OD2	0.52	2.05	9	1
1:A:148:PHE:CZ	1:A:150:LEU:HG	0.52	2.39	11	1
1:A:14:ASN:OD1	1:A:14:ASN:N	0.52	2.43	1	2
1:A:104:LEU:O	1:A:104:LEU:HD12	0.52	2.05	1	1
1:A:115:PHE:CD1	1:A:115:PHE:O	0.52	2.63	4	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:154:ASP:N	1:A:154:ASP:OD1	0.52	2.42	3	1
1:A:109:SER:O	1:A:111:ASN:N	0.52	2.42	7	2
1:A:20:ILE:HG22	1:A:22:GLY:H	0.52	1.64	3	3
1:A:40:PHE:HA	1:A:43:TRP:CZ3	0.52	2.39	7	3
1:A:14:ASN:ND2	1:A:48:PRO:O	0.52	2.42	5	1
1:A:46:VAL:HG21	1:A:155:ILE:CB	0.52	2.35	9	1
1:A:148:PHE:O	1:A:149:ARG:CB	0.52	2.57	9	1
1:A:57:GLY:O	1:A:58:GLU:CG	0.52	2.57	10	1
1:A:64:ASN:OD1	1:A:98:HIS:CD2	0.52	2.62	5	2
1:A:113:SER:O	1:A:114:LEU:C	0.52	2.52	6	4
1:A:116:LEU:HD21	4:A:800:I52:H352	0.52	1.82	6	1
1:A:105:TRP:HB2	1:A:114:LEU:CD1	0.52	2.35	8	1
1:A:24:THR:OG1	1:A:25:PRO:HD2	0.52	2.05	2	4
1:A:112:TYR:O	1:A:113:SER:CB	0.52	2.55	6	3
1:A:148:PHE:HE1	1:A:150:LEU:HD23	0.52	1.61	4	1
1:A:100:ASP:O	1:A:105:TRP:CZ3	0.52	2.63	5	1
1:A:124:HIS:O	1:A:125:ALA:C	0.51	2.52	5	5
1:A:77:ASP:O	1:A:78:GLY:O	0.51	2.29	6	2
1:A:11:TRP:CD1	1:A:89:PRO:HB3	0.51	2.39	8	1
1:A:130:HIS:ND1	1:A:138:MET:O	0.51	2.43	10	1
1:A:75:PRO:O	1:A:76:PHE:O	0.51	2.28	1	1
1:A:144:TYR:CE2	1:A:146:LYS:HG3	0.51	2.41	2	1
1:A:116:LEU:HD11	1:A:144:TYR:CG	0.51	2.41	5	1
1:A:104:LEU:O	1:A:104:LEU:CD1	0.51	2.58	1	1
1:A:65:PHE:HA	1:A:99:PHE:O	0.51	2.05	3	2
1:A:83:LEU:O	1:A:84:ALA:CB	0.51	2.58	9	3
1:A:91:THR:O	1:A:93:VAL:N	0.51	2.44	6	1
1:A:150:LEU:O	1:A:151:SER:O	0.51	2.28	7	1
1:A:155:ILE:HD13	1:A:159:GLN:NE2	0.51	2.20	10	1
1:A:124:HIS:HE2	1:A:130:HIS:CD2	0.51	2.20	1	1
1:A:97:SER:OG	1:A:99:PHE:CE1	0.51	2.63	5	1
1:A:68:TRP:O	1:A:69:GLU:C	0.51	2.53	10	3
1:A:18:TYR:CB	1:A:61:ILE:HG13	0.51	2.36	9	4
1:A:147:ASN:O	1:A:148:PHE:C	0.51	2.54	1	1
1:A:62:MET:HB2	1:A:96:ASP:CG	0.51	2.30	11	3
1:A:29:PRO:O	1:A:33:ASP:OD1	0.51	2.29	3	1
1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:OD1	0.51	2.43	6	1
1:A:28:ASP:CB	1:A:31:THR:HB	0.51	2.36	7	1
1:A:40:PHE:CE1	1:A:44:SER:CB	0.51	2.93	9	1
1:A:43:TRP:O	1:A:46:VAL:HG22	0.51	2.05	10	1
1:A:72:ASP:O	1:A:74:TYR:N	0.51	2.44	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:TRP:O	1:A:46:VAL:CG1	0.51	2.57	1	1
1:A:152:GLN:HA	1:A:155:ILE:CG2	0.51	2.35	11	8
1:A:16:ILE:CG2	1:A:61:ILE:HD11	0.51	2.36	2	1
1:A:106:THR:HG22	1:A:108:THR:CG2	0.51	2.36	2	1
1:A:26:ASP:OD1	1:A:26:ASP:N	0.51	2.40	3	1
1:A:61:ILE:HG22	1:A:95:GLY:CA	0.51	2.36	7	3
1:A:148:PHE:CZ	1:A:150:LEU:HD12	0.51	2.41	2	1
1:A:73:GLY:O	1:A:74:TYR:CB	0.51	2.56	5	1
1:A:109:SER:O	1:A:110:ALA:C	0.51	2.52	7	2
1:A:91:THR:O	1:A:92:GLY:C	0.51	2.53	7	2
1:A:88:ALA:O	1:A:94:GLY:HA2	0.51	2.06	7	5
1:A:114:LEU:HA	1:A:117:VAL:CG2	0.51	2.35	7	4
1:A:144:TYR:CE2	1:A:145:THR:O	0.51	2.63	4	1
1:A:16:ILE:O	1:A:52:SER:N	0.51	2.44	10	3
1:A:38:ARG:O	1:A:39:ALA:C	0.51	2.53	9	4
1:A:131:SER:O	1:A:132:GLN:HB2	0.51	2.06	8	4
1:A:65:PHE:CD1	1:A:65:PHE:C	0.51	2.89	2	2
4:A:800:I52:H393	4:A:800:I52:H351	0.51	1.82	5	1
1:A:97:SER:C	1:A:98:HIS:CD2	0.51	2.89	6	1
1:A:22:GLY:O	1:A:23:TYR:O	0.51	2.28	8	3
1:A:63:ILE:C	1:A:64:ASN:OD1	0.51	2.54	4	1
1:A:90:GLY:O	1:A:91:THR:OG1	0.51	2.28	6	1
1:A:105:TRP:C	1:A:110:ALA:CB	0.51	2.84	6	1
1:A:29:PRO:CA	1:A:32:VAL:HG23	0.51	2.36	9	2
1:A:127:GLY:O	1:A:128:LEU:C	0.50	2.53	2	6
1:A:116:LEU:HD12	1:A:144:TYR:CE2	0.50	2.41	5	1
1:A:138:MET:CE	1:A:154:ASP:OD2	0.50	2.59	7	1
1:A:136:ALA:O	4:A:800:I52:H33	0.50	2.06	11	1
1:A:35:ALA:CB	1:A:114:LEU:HB3	0.50	2.36	7	4
1:A:77:ASP:O	1:A:77:ASP:OD2	0.50	2.28	2	1
1:A:65:PHE:CE1	1:A:67:ARG:HG3	0.50	2.41	11	1
1:A:152:GLN:HA	1:A:155:ILE:HG23	0.50	1.83	3	8
4:A:800:I52:H61	4:A:800:I52:C25	0.50	2.25	4	1
1:A:145:THR:HG22	4:A:800:I52:H382	0.50	1.83	6	1
1:A:69:GLU:O	1:A:70:HIS:CB	0.50	2.57	1	2
1:A:27:LEU:HD11	1:A:32:VAL:CB	0.50	2.36	2	1
1:A:155:ILE:C	1:A:155:ILE:HD12	0.50	2.31	2	1
1:A:31:THR:O	1:A:32:VAL:C	0.50	2.55	9	4
1:A:119:ALA:HB1	1:A:137:LEU:HD21	0.50	1.83	3	1
4:A:800:I52:H16	4:A:800:I52:C7	0.50	2.37	6	2
1:A:23:TYR:CD1	1:A:32:VAL:HG11	0.50	2.42	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:HIS:O	1:A:56:ASP:HB2	0.50	2.07	8	1
1:A:27:LEU:HD11	1:A:32:VAL:HA	0.50	1.82	1	2
1:A:126:MET:SD	1:A:162:TYR:OH	0.50	2.70	4	2
1:A:108:THR:O	1:A:110:ALA:N	0.50	2.45	9	1
1:A:76:PHE:CZ	1:A:82:LEU:HD12	0.50	2.41	2	1
1:A:106:THR:O	1:A:114:LEU:N	0.50	2.41	10	7
1:A:154:ASP:O	1:A:158:ILE:CG2	0.50	2.57	3	2
1:A:77:ASP:OD2	1:A:80:ASP:O	0.50	2.30	5	1
1:A:100:ASP:O	1:A:105:TRP:CH2	0.50	2.65	5	1
1:A:77:ASP:OD2	1:A:100:ASP:OD2	0.50	2.30	6	1
1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:OD1	0.50	2.41	10	1
1:A:106:THR:C	1:A:108:THR:N	0.50	2.66	6	2
1:A:147:ASN:O	1:A:148:PHE:HB3	0.50	2.06	11	4
1:A:126:MET:SD	1:A:158:ILE:CD1	0.50	3.00	5	1
1:A:128:LEU:CD1	1:A:154:ASP:OD1	0.50	2.60	9	1
1:A:121:GLU:O	1:A:124:HIS:N	0.50	2.44	10	1
1:A:103:GLU:HB3	1:A:105:TRP:CZ2	0.50	2.42	1	1
1:A:11:TRP:CE3	1:A:11:TRP:HA	0.50	2.42	2	1
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:123:GLY:HA2	0.50	2.41	2	1
1:A:16:ILE:HD13	1:A:16:ILE:N	0.50	2.22	5	1
1:A:83:LEU:HD23	1:A:103:GLU:OE1	0.50	2.06	10	1
1:A:147:ASN:O	1:A:148:PHE:O	0.50	2.30	7	4
1:A:152:GLN:HA	1:A:155:ILE:HG12	0.50	1.83	2	4
1:A:18:TYR:CZ	1:A:53:ARG:HB3	0.50	2.40	5	3
1:A:74:TYR:CZ	1:A:85:HIS:CD2	0.50	3.00	6	1
1:A:26:ASP:OD1	1:A:26:ASP:C	0.50	2.55	7	1
1:A:66:GLY:O	1:A:68:TRP:N	0.50	2.45	11	1
1:A:25:PRO:O	1:A:27:LEU:N	0.49	2.45	4	8
1:A:106:THR:O	1:A:107:ASN:C	0.49	2.55	2	1
1:A:117:VAL:CG2	1:A:118:ALA:N	0.49	2.75	6	3
1:A:53:ARG:CZ	1:A:53:ARG:HB2	0.49	2.37	3	2
1:A:143:THR:O	1:A:144:TYR:C	0.49	2.55	10	4
1:A:23:TYR:HB2	1:A:32:VAL:HG21	0.49	1.82	4	1
1:A:162:TYR:O	1:A:162:TYR:CG	0.49	2.63	4	1
1:A:23:TYR:CD1	1:A:32:VAL:CG1	0.49	2.95	5	1
1:A:66:GLY:O	1:A:67:ARG:O	0.49	2.29	7	1
1:A:45:ASP:OD1	1:A:45:ASP:C	0.49	2.55	8	1
1:A:24:THR:CG2	1:A:27:LEU:HD11	0.49	2.36	10	2
1:A:114:LEU:O	1:A:115:PHE:C	0.49	2.55	10	1
1:A:47:THR:OG1	1:A:48:PRO:HD2	0.49	2.07	11	7
1:A:85:HIS:CB	4:A:800:I52:H252	0.49	2.36	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:144:TYR:CZ	1:A:146:LYS:HA	0.49	2.42	2	1
1:A:82:LEU:HD23	1:A:100:ASP:HB2	0.49	1.84	4	1
1:A:155:ILE:CD1	1:A:159:GLN:CD	0.49	2.85	10	1
1:A:83:LEU:HD22	1:A:112:TYR:CE2	0.49	2.41	11	1
1:A:95:GLY:C	1:A:96:ASP:CG	0.49	2.80	3	2
1:A:65:PHE:CD2	1:A:101:ASP:HA	0.49	2.42	6	1
1:A:106:THR:HG23	1:A:110:ALA:O	0.49	2.07	9	1
1:A:31:THR:HG23	1:A:107:ASN:HB3	0.49	1.84	11	2
1:A:39:ALA:O	1:A:40:PHE:C	0.49	2.53	8	4
1:A:77:ASP:O	1:A:78:GLY:C	0.49	2.54	6	2
1:A:128:LEU:HD13	1:A:138:MET:HE2	0.49	1.84	2	1
1:A:138:MET:O	1:A:139:ALA:C	0.49	2.55	5	3
1:A:17:THR:HB	1:A:54:ILE:CD1	0.49	2.37	3	1
1:A:86:ALA:HB2	1:A:97:SER:HB3	0.49	1.83	3	1
1:A:140:PRO:C	1:A:141:ILE:CG1	0.49	2.85	3	1
4:A:800:I52:H20	4:A:800:I52:H71	0.49	1.84	3	1
1:A:143:THR:O	1:A:144:TYR:CB	0.49	2.61	9	2
1:A:17:THR:CG2	1:A:54:ILE:HD13	0.49	2.38	7	1
1:A:150:LEU:O	1:A:151:SER:OG	0.49	2.27	7	1
1:A:64:ASN:OD1	1:A:65:PHE:N	0.49	2.45	11	1
1:A:129:GLU:O	1:A:130:HIS:C	0.49	2.56	6	4
1:A:76:PHE:CE1	1:A:85:HIS:ND1	0.49	2.80	2	1
1:A:149:ARG:O	1:A:150:LEU:HB2	0.49	2.07	7	5
1:A:155:ILE:HA	1:A:158:ILE:HG22	0.49	1.83	2	1
1:A:158:ILE:CG2	1:A:159:GLN:N	0.49	2.76	6	3
1:A:67:ARG:O	1:A:76:PHE:CE1	0.49	2.66	8	1
1:A:128:LEU:N	1:A:128:LEU:HD22	0.49	2.23	11	1
1:A:68:TRP:O	1:A:75:PRO:CB	0.49	2.60	1	1
1:A:118:ALA:O	1:A:119:ALA:C	0.49	2.56	9	2
1:A:108:THR:C	1:A:110:ALA:N	0.49	2.64	2	1
1:A:17:THR:O	1:A:60:ASP:OD2	0.49	2.31	4	1
1:A:19:ARG:NH1	1:A:19:ARG:HG2	0.49	2.23	4	1
1:A:18:TYR:CD1	1:A:18:TYR:N	0.49	2.80	5	1
1:A:76:PHE:O	1:A:77:ASP:CG	0.49	2.56	7	2
1:A:63:ILE:CG2	1:A:64:ASN:N	0.49	2.76	9	1
1:A:80:ASP:CG	1:A:112:TYR:OH	0.49	2.56	1	1
1:A:116:LEU:CD1	1:A:144:TYR:HA	0.49	2.38	3	1
1:A:128:LEU:O	1:A:138:MET:HE1	0.49	2.08	5	1
1:A:67:ARG:O	1:A:69:GLU:N	0.49	2.46	6	1
1:A:80:ASP:N	1:A:80:ASP:OD1	0.49	2.43	9	1
1:A:141:ILE:HD12	1:A:141:ILE:H	0.49	1.68	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:ALA:HB1	1:A:99:PHE:CE1	0.49	2.41	11	1
1:A:70:HIS:CE1	1:A:98:HIS:HB2	0.49	2.43	7	1
1:A:132:GLN:O	1:A:133:ASP:C	0.49	2.56	11	2
1:A:76:PHE:CG	1:A:77:ASP:N	0.49	2.81	2	2
1:A:41:GLN:O	1:A:45:ASP:HB3	0.49	2.08	4	2
1:A:143:THR:O	1:A:144:TYR:O	0.49	2.31	6	2
1:A:74:TYR:CD1	1:A:74:TYR:N	0.49	2.80	9	1
1:A:42:VAL:HG12	1:A:43:TRP:CD2	0.48	2.42	10	3
4:A:800:I52:H62	4:A:800:I52:C24	0.48	2.36	9	2
1:A:47:THR:HG21	1:A:158:ILE:HG12	0.48	1.83	10	1
1:A:105:TRP:HB3	1:A:114:LEU:CD2	0.48	2.37	11	1
4:A:800:I52:O22	4:A:800:I52:H72	0.48	2.07	10	2
1:A:27:LEU:HD12	1:A:27:LEU:C	0.48	2.33	5	2
1:A:105:TRP:O	1:A:113:SER:HA	0.48	2.08	6	1
1:A:24:THR:CG2	1:A:26:ASP:OD2	0.48	2.61	7	1
1:A:64:ASN:OD1	1:A:97:SER:O	0.48	2.31	8	1
1:A:116:LEU:HD21	4:A:800:I52:H371	0.48	1.85	9	1
1:A:159:GLN:O	1:A:163:GLY:N	0.48	2.45	10	3
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:122:PHE:HB2	0.48	2.43	10	1
1:A:11:TRP:CD2	1:A:60:ASP:OD2	0.48	2.66	6	2
1:A:102:ASP:O	1:A:103:GLU:HB2	0.48	2.09	2	1
1:A:100:ASP:CB	1:A:103:GLU:OE1	0.48	2.61	10	1
1:A:71:GLY:O	1:A:72:ASP:C	0.48	2.53	1	2
1:A:107:ASN:OD1	1:A:108:THR:N	0.48	2.46	2	1
1:A:83:LEU:HD22	1:A:112:TYR:CZ	0.48	2.43	11	1
1:A:44:SER:O	1:A:47:THR:O	0.48	2.31	1	6
1:A:82:LEU:O	1:A:82:LEU:HG	0.48	2.07	1	1
1:A:116:LEU:HD22	1:A:116:LEU:H	0.48	1.67	2	1
1:A:27:LEU:O	1:A:28:ASP:C	0.48	2.55	7	3
1:A:81:GLY:O	1:A:83:LEU:N	0.48	2.46	6	1
1:A:46:VAL:HG21	1:A:155:ILE:HB	0.48	1.85	9	2
1:A:68:TRP:C	1:A:68:TRP:CD2	0.48	2.92	10	1
1:A:11:TRP:HA	1:A:11:TRP:CE3	0.48	2.44	6	4
1:A:85:HIS:HB2	4:A:800:I52:H241	0.48	1.85	2	1
1:A:54:ILE:HD12	1:A:58:GLU:O	0.48	2.08	8	1
1:A:105:TRP:CD1	1:A:112:TYR:CB	0.48	2.96	11	1
1:A:23:TYR:CD1	1:A:32:VAL:HG13	0.48	2.43	2	1
1:A:129:GLU:O	1:A:130:HIS:O	0.48	2.31	5	2
1:A:32:VAL:HG23	1:A:114:LEU:HD22	0.48	1.86	8	1
4:A:800:I52:H61	4:A:800:I52:C24	0.48	2.36	8	1
1:A:120:HIS:CE1	1:A:138:MET:HE2	0.48	2.44	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:42:VAL:CG2	1:A:148:PHE:CZ	0.48	2.96	1	2
1:A:61:ILE:HA	1:A:95:GLY:O	0.48	2.09	4	3
1:A:72:ASP:OD1	1:A:72:ASP:C	0.48	2.56	2	1
1:A:102:ASP:OD1	1:A:102:ASP:N	0.48	2.46	3	2
1:A:101:ASP:O	1:A:103:GLU:N	0.48	2.47	11	2
1:A:93:VAL:CG2	1:A:94:GLY:N	0.48	2.76	6	1
1:A:93:VAL:O	1:A:96:ASP:CG	0.48	2.57	8	1
1:A:148:PHE:O	1:A:149:ARG:CD	0.48	2.62	9	1
1:A:24:THR:HG23	1:A:26:ASP:H	0.48	1.69	2	1
1:A:66:GLY:N	1:A:99:PHE:O	0.48	2.47	4	1
1:A:88:ALA:O	1:A:95:GLY:N	0.48	2.47	11	1
1:A:24:THR:HG23	1:A:25:PRO:CD	0.48	2.37	2	1
1:A:84:ALA:O	4:A:800:I52:H4	0.48	2.09	5	1
1:A:17:THR:HG22	1:A:54:ILE:CG2	0.48	2.39	7	1
1:A:133:ASP:HB3	1:A:136:ALA:HB2	0.48	1.84	7	2
1:A:114:LEU:O	1:A:116:LEU:N	0.48	2.47	10	1
1:A:62:MET:SD	1:A:96:ASP:OD1	0.47	2.72	1	2
1:A:71:GLY:O	1:A:72:ASP:O	0.47	2.30	4	3
1:A:83:LEU:HD22	1:A:105:TRP:CZ2	0.47	2.43	2	1
1:A:49:LEU:HD21	1:A:162:TYR:CG	0.47	2.43	10	1
1:A:83:LEU:HD21	1:A:112:TYR:CZ	0.47	2.43	11	1
1:A:14:ASN:O	1:A:15:GLN:O	0.47	2.32	1	1
1:A:73:GLY:O	1:A:74:TYR:O	0.47	2.32	2	1
1:A:79:LYS:O	1:A:80:ASP:O	0.47	2.32	3	3
1:A:85:HIS:CD2	1:A:85:HIS:C	0.47	2.92	1	1
1:A:40:PHE:CE1	1:A:51:PHE:CD1	0.47	3.02	11	1
1:A:130:HIS:HE1	4:A:800:I52:H132	0.47	1.65	2	1
1:A:142:TYR:CE2	1:A:144:TYR:HB2	0.47	2.44	6	1
1:A:119:ALA:O	1:A:120:HIS:C	0.47	2.57	9	7
1:A:28:ASP:HB2	1:A:31:THR:CB	0.47	2.39	7	5
1:A:31:THR:CG2	1:A:107:ASN:CB	0.47	2.92	11	2
1:A:74:TYR:N	1:A:74:TYR:CD1	0.47	2.82	10	1
1:A:116:LEU:O	1:A:117:VAL:C	0.47	2.57	11	3
1:A:11:TRP:CZ2	1:A:60:ASP:OD2	0.47	2.68	2	1
1:A:16:ILE:HD12	1:A:51:PHE:CE2	0.47	2.44	2	1
1:A:31:THR:CG2	1:A:107:ASN:HB2	0.47	2.39	5	1
1:A:116:LEU:CD1	4:A:800:I52:H31	0.47	2.40	10	1
1:A:147:ASN:OD1	1:A:147:ASN:C	0.47	2.57	11	1
1:A:27:LEU:C	1:A:27:LEU:CD2	0.47	2.77	2	2
1:A:124:HIS:O	1:A:126:MET:N	0.47	2.48	5	3
1:A:158:ILE:O	1:A:162:TYR:HB2	0.47	2.10	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:PHE:O	1:A:100:ASP:C	0.47	2.57	3	2
1:A:31:THR:HG23	1:A:107:ASN:CB	0.47	2.40	11	3
1:A:41:GLN:O	1:A:45:ASP:HB2	0.47	2.08	7	2
1:A:90:GLY:O	1:A:91:THR:HB	0.47	2.09	7	1
1:A:24:THR:HG23	1:A:27:LEU:HD11	0.47	1.85	9	1
1:A:116:LEU:HD11	1:A:144:TYR:CA	0.47	2.37	11	1
1:A:124:HIS:CE1	1:A:130:HIS:CD2	0.47	3.02	11	1
1:A:32:VAL:HG12	1:A:114:LEU:HD21	0.47	1.86	10	1
1:A:21:ILE:HB	1:A:64:ASN:ND2	0.47	2.25	1	1
1:A:27:LEU:HD11	1:A:32:VAL:HB	0.47	1.86	2	1
1:A:77:ASP:C	1:A:78:GLY:O	0.47	2.58	2	1
1:A:28:ASP:HB2	1:A:31:THR:OG1	0.47	2.10	7	3
1:A:92:GLY:O	1:A:93:VAL:C	0.47	2.57	6	2
1:A:20:ILE:HD13	1:A:23:TYR:HE1	0.47	1.62	1	2
1:A:103:GLU:HB3	1:A:105:TRP:CE2	0.47	2.45	1	1
1:A:123:GLY:HA3	1:A:138:MET:CE	0.47	2.40	1	1
1:A:138:MET:SD	1:A:138:MET:N	0.47	2.88	2	1
1:A:18:TYR:C	1:A:18:TYR:CD1	0.47	2.92	3	1
1:A:24:THR:OG1	1:A:26:ASP:CG	0.47	2.58	3	1
1:A:21:ILE:N	1:A:63:ILE:O	0.47	2.48	4	1
1:A:43:TRP:CE3	1:A:126:MET:SD	0.47	3.08	9	1
1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CD1	0.46	2.75	2	1
1:A:119:ALA:HA	1:A:122:PHE:HB2	0.46	1.86	3	2
1:A:27:LEU:HD23	1:A:27:LEU:N	0.46	2.23	4	1
1:A:40:PHE:HA	1:A:43:TRP:CE3	0.46	2.45	4	1
1:A:13:LYS:O	1:A:14:ASN:CB	0.46	2.61	5	1
1:A:31:THR:HG21	1:A:107:ASN:CA	0.46	2.38	6	1
1:A:61:ILE:HG22	1:A:95:GLY:C	0.46	2.34	1	2
1:A:102:ASP:O	1:A:103:GLU:OE1	0.46	2.34	9	2
1:A:29:PRO:O	1:A:33:ASP:HB3	0.46	2.10	2	1
1:A:77:ASP:O	1:A:77:ASP:CG	0.46	2.57	2	1
1:A:158:ILE:O	1:A:163:GLY:N	0.46	2.49	2	1
1:A:161:LEU:O	1:A:161:LEU:CD1	0.46	2.62	2	1
1:A:76:PHE:O	1:A:76:PHE:CD1	0.46	2.69	5	1
1:A:119:ALA:O	1:A:122:PHE:N	0.46	2.48	11	3
1:A:90:GLY:C	1:A:91:THR:OG1	0.46	2.58	6	1
1:A:116:LEU:CD2	4:A:800:I52:H381	0.46	2.40	6	1
1:A:70:HIS:N	1:A:70:HIS:ND1	0.46	2.63	3	1
1:A:97:SER:C	1:A:98:HIS:CG	0.46	2.94	6	1
1:A:18:TYR:CD1	1:A:18:TYR:O	0.46	2.68	2	1
1:A:108:THR:O	1:A:109:SER:C	0.46	2.58	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:PHE:O	1:A:37:ALA:C	0.46	2.58	9	3
1:A:76:PHE:O	1:A:77:ASP:OD2	0.46	2.32	7	2
1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CD1	0.46	2.75	1	4
1:A:69:GLU:O	1:A:70:HIS:HB3	0.46	2.11	1	1
1:A:78:GLY:O	1:A:79:LYS:C	0.46	2.59	3	5
1:A:82:LEU:O	1:A:100:ASP:OD1	0.46	2.34	1	1
1:A:149:ARG:O	4:A:800:I52:H381	0.46	2.10	1	1
1:A:105:TRP:O	1:A:106:THR:HG22	0.46	2.10	9	2
1:A:116:LEU:HG	1:A:144:TYR:CD1	0.46	2.46	4	1
1:A:23:TYR:CD1	1:A:32:VAL:CG2	0.46	2.98	5	1
1:A:99:PHE:HB3	1:A:105:TRP:CZ3	0.46	2.45	5	1
1:A:138:MET:HE3	1:A:154:ASP:OD2	0.46	2.10	7	1
1:A:151:SER:OG	1:A:153:ASP:OD1	0.46	2.34	7	1
1:A:31:THR:C	1:A:33:ASP:N	0.46	2.73	9	2
1:A:43:TRP:CH2	1:A:123:GLY:HA3	0.46	2.45	9	1
1:A:62:MET:O	1:A:96:ASP:HA	0.46	2.11	1	4
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:137:LEU:HD21	0.46	2.46	2	1
1:A:70:HIS:CD2	1:A:72:ASP:OD1	0.46	2.68	8	1
1:A:18:TYR:HB3	1:A:61:ILE:HG12	0.46	1.88	2	1
1:A:85:HIS:CE1	1:A:98:HIS:HB2	0.46	2.45	2	2
1:A:66:GLY:O	1:A:101:ASP:CB	0.46	2.63	3	1
1:A:158:ILE:CD1	1:A:162:TYR:OH	0.46	2.63	4	1
1:A:65:PHE:CD2	1:A:105:TRP:CH2	0.46	3.04	7	1
1:A:148:PHE:O	1:A:149:ARG:CG	0.46	2.63	9	1
1:A:82:LEU:C	1:A:82:LEU:HD12	0.46	2.35	1	1
1:A:109:SER:O	1:A:109:SER:OG	0.46	2.30	6	1
1:A:116:LEU:HD21	4:A:800:I52:H381	0.46	1.87	6	1
1:A:116:LEU:CD1	4:A:800:I52:H33	0.46	2.40	7	2
1:A:54:ILE:O	1:A:55:HIS:O	0.46	2.34	2	1
1:A:152:GLN:C	1:A:154:ASP:N	0.46	2.72	3	1
1:A:25:PRO:C	1:A:27:LEU:N	0.46	2.74	5	6
1:A:29:PRO:O	1:A:33:ASP:CB	0.46	2.65	2	1
1:A:75:PRO:O	1:A:76:PHE:HB2	0.46	2.11	2	1
1:A:24:THR:OG1	1:A:26:ASP:OD1	0.46	2.33	3	1
1:A:23:TYR:HB2	1:A:32:VAL:CG1	0.46	2.40	4	1
1:A:117:VAL:O	1:A:118:ALA:C	0.46	2.58	9	1
1:A:133:ASP:CB	1:A:136:ALA:HB2	0.46	2.41	10	1
1:A:93:VAL:O	1:A:96:ASP:OD2	0.45	2.34	1	1
1:A:108:THR:OG1	1:A:109:SER:N	0.45	2.49	9	3
1:A:127:GLY:O	1:A:128:LEU:O	0.45	2.34	3	1
4:A:800:I52:C24	4:A:800:I52:H121	0.45	2.40	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:70:HIS:CE1	1:A:72:ASP:CG	0.45	2.94	6	1
1:A:143:THR:O	4:A:800:I52:H352	0.45	2.11	7	1
1:A:55:HIS:O	1:A:55:HIS:ND1	0.45	2.49	10	1
1:A:11:TRP:CZ2	1:A:90:GLY:O	0.45	2.68	11	1
1:A:45:ASP:O	1:A:45:ASP:OD1	0.45	2.34	1	1
1:A:62:MET:HB2	1:A:96:ASP:OD1	0.45	2.12	11	2
1:A:40:PHE:O	1:A:44:SER:HB3	0.45	2.12	10	3
1:A:145:THR:O	1:A:146:LYS:C	0.45	2.59	3	3
1:A:59:ALA:C	1:A:60:ASP:OD1	0.45	2.59	4	1
1:A:15:GLN:HA	1:A:50:ARG:O	0.45	2.11	5	2
1:A:49:LEU:HB3	1:A:51:PHE:CE1	0.45	2.46	10	2
1:A:79:LYS:C	1:A:80:ASP:OD1	0.45	2.59	6	1
1:A:20:ILE:CD1	1:A:23:TYR:CE1	0.45	2.91	10	1
1:A:122:PHE:O	1:A:126:MET:SD	0.45	2.73	11	1
1:A:51:PHE:CD1	1:A:51:PHE:N	0.45	2.85	9	1
1:A:144:TYR:O	4:A:800:I52:H352	0.45	2.11	9	1
1:A:94:GLY:C	1:A:96:ASP:OD1	0.45	2.59	10	1
1:A:141:ILE:HD12	1:A:141:ILE:N	0.45	2.27	10	1
1:A:26:ASP:O	1:A:26:ASP:OD2	0.45	2.34	2	1
1:A:126:MET:HE2	1:A:162:TYR:CE2	0.45	2.47	2	1
1:A:82:LEU:O	1:A:100:ASP:CB	0.45	2.64	4	1
1:A:73:GLY:C	1:A:75:PRO:HD3	0.45	2.36	7	1
1:A:90:GLY:O	1:A:91:THR:HG23	0.45	2.11	2	1
1:A:18:TYR:CZ	1:A:53:ARG:HG2	0.45	2.47	4	1
1:A:22:GLY:O	1:A:23:TYR:C	0.45	2.60	4	3
1:A:48:PRO:CD	1:A:163:GLY:OXT	0.45	2.65	4	1
1:A:126:MET:CE	1:A:158:ILE:HD12	0.45	2.40	5	1
1:A:143:THR:HB	4:A:800:I52:H31	0.45	1.86	5	1
1:A:24:THR:HG23	1:A:27:LEU:CD2	0.45	2.42	7	1
1:A:43:TRP:O	1:A:47:THR:OG1	0.45	2.34	8	1
1:A:14:ASN:O	1:A:15:GLN:C	0.45	2.59	4	2
1:A:28:ASP:HB3	1:A:31:THR:OG1	0.45	2.11	1	1
4:A:800:I52:H241	4:A:800:I52:C7	0.45	2.33	1	1
1:A:67:ARG:O	1:A:68:TRP:C	0.45	2.58	2	2
1:A:155:ILE:HG13	1:A:156:LYS:N	0.45	2.26	4	3
1:A:137:LEU:HD13	4:A:800:I52:H351	0.45	1.85	6	1
1:A:26:ASP:OD1	1:A:27:LEU:N	0.45	2.50	7	1
1:A:45:ASP:OD1	1:A:45:ASP:O	0.45	2.35	8	1
4:A:800:I52:H252	4:A:800:I52:C7	0.45	2.42	8	1
1:A:26:ASP:OD1	1:A:105:TRP:O	0.45	2.35	1	1
1:A:42:VAL:C	1:A:45:ASP:OD2	0.45	2.60	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:107:ASN:O	1:A:107:ASN:ND2	0.45	2.49	3	1
1:A:17:THR:N	1:A:60:ASP:OD2	0.45	2.49	4	1
1:A:156:LYS:HD3	1:A:157:GLY:N	0.45	2.27	7	1
1:A:15:GLN:O	1:A:15:GLN:HG3	0.45	2.10	8	1
1:A:49:LEU:CD1	1:A:162:TYR:CG	0.45	3.00	8	1
1:A:142:TYR:O	1:A:143:THR:HB	0.45	2.11	9	1
1:A:142:TYR:CD1	1:A:143:THR:N	0.45	2.85	10	1
1:A:45:ASP:OD1	1:A:46:VAL:CG1	0.45	2.65	3	1
1:A:49:LEU:C	1:A:49:LEU:HD23	0.45	2.37	4	1
1:A:76:PHE:CZ	1:A:98:HIS:NE2	0.45	2.85	8	1
1:A:106:THR:OG1	1:A:112:TYR:O	0.45	2.33	10	1
1:A:13:LYS:O	1:A:14:ASN:O	0.45	2.34	1	2
1:A:113:SER:HB3	1:A:116:LEU:CD2	0.45	2.42	2	1
1:A:29:PRO:O	1:A:32:VAL:HG12	0.45	2.12	5	4
1:A:20:ILE:CG1	1:A:20:ILE:O	0.45	2.64	4	1
1:A:104:LEU:O	1:A:111:ASN:OD1	0.45	2.35	4	1
1:A:104:LEU:O	1:A:111:ASN:HB2	0.45	2.11	7	1
1:A:36:PHE:O	1:A:40:PHE:CD2	0.45	2.70	2	1
1:A:11:TRP:O	1:A:12:ASP:C	0.45	2.60	6	1
1:A:54:ILE:CD1	1:A:59:ALA:HA	0.45	2.42	8	1
1:A:31:THR:O	1:A:33:ASP:N	0.45	2.50	9	1
1:A:105:TRP:CG	1:A:114:LEU:HD22	0.45	2.47	11	1
1:A:67:ARG:HA	1:A:101:ASP:CB	0.44	2.42	3	1
1:A:11:TRP:O	1:A:12:ASP:CB	0.44	2.65	5	1
1:A:42:VAL:CG2	1:A:148:PHE:CE2	0.44	2.99	6	1
1:A:23:TYR:HB2	1:A:32:VAL:CG2	0.44	2.41	4	1
1:A:27:LEU:CD1	1:A:32:VAL:HB	0.44	2.42	5	1
1:A:20:ILE:HD13	1:A:23:TYR:CD1	0.44	2.47	11	1
1:A:116:LEU:HD13	1:A:116:LEU:N	0.44	2.27	2	1
1:A:42:VAL:O	1:A:45:ASP:OD2	0.44	2.35	3	1
1:A:46:VAL:HG11	1:A:158:ILE:HG21	0.44	1.87	7	1
1:A:100:ASP:O	1:A:105:TRP:CZ2	0.44	2.69	10	2
1:A:108:THR:O	1:A:108:THR:OG1	0.44	2.32	8	1
1:A:100:ASP:O	1:A:101:ASP:C	0.44	2.59	2	1
1:A:108:THR:OG1	1:A:113:SER:HA	0.44	2.12	2	1
1:A:63:ILE:HA	1:A:97:SER:O	0.44	2.12	3	1
1:A:101:ASP:OD1	1:A:101:ASP:C	0.44	2.58	3	1
1:A:27:LEU:HD21	1:A:32:VAL:CB	0.44	2.41	4	1
1:A:148:PHE:CD1	1:A:148:PHE:C	0.44	2.93	7	1
1:A:69:GLU:O	1:A:70:HIS:C	0.44	2.57	2	1
1:A:116:LEU:CD2	4:A:800:I52:C33	0.44	2.95	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:ASP:CB	1:A:31:THR:CB	0.44	2.95	7	1
1:A:116:LEU:CD1	4:A:800:I52:C33	0.44	2.96	7	1
1:A:122:PHE:O	1:A:126:MET:HG3	0.44	2.12	7	1
1:A:18:TYR:CB	1:A:61:ILE:HB	0.44	2.43	10	1
1:A:151:SER:HB2	1:A:153:ASP:OD1	0.44	2.13	10	1
1:A:17:THR:HA	1:A:52:SER:O	0.44	2.12	8	3
1:A:87:PHE:O	1:A:88:ALA:O	0.44	2.36	1	1
1:A:131:SER:C	1:A:132:GLN:CG	0.44	2.89	1	1
1:A:16:ILE:HG22	1:A:17:THR:H	0.44	1.72	6	1
1:A:56:ASP:O	1:A:57:GLY:C	0.44	2.60	6	1
1:A:49:LEU:HD23	1:A:51:PHE:CE2	0.44	2.48	7	1
1:A:65:PHE:CG	1:A:105:TRP:CZ3	0.44	3.05	7	1
1:A:70:HIS:CG	1:A:72:ASP:OD1	0.44	2.70	8	1
1:A:128:LEU:HD21	1:A:157:GLY:HA3	0.44	1.89	8	1
1:A:67:ARG:CZ	1:A:67:ARG:CB	0.44	2.96	2	1
1:A:106:THR:CG2	1:A:108:THR:CG2	0.44	2.96	2	1
1:A:148:PHE:CD2	4:A:800:I52:H391	0.44	2.48	2	1
1:A:121:GLU:OE1	1:A:121:GLU:HA	0.44	2.11	9	2
1:A:158:ILE:O	1:A:162:TYR:N	0.44	2.48	3	1
1:A:81:GLY:O	1:A:83:LEU:HD12	0.44	2.11	4	1
1:A:83:LEU:HD23	1:A:103:GLU:OE2	0.44	2.11	5	1
1:A:154:ASP:O	1:A:155:ILE:C	0.44	2.61	7	1
1:A:40:PHE:CD1	1:A:51:PHE:CD2	0.44	3.06	2	1
1:A:42:VAL:HG23	1:A:148:PHE:CD2	0.44	2.48	3	1
1:A:99:PHE:O	1:A:100:ASP:O	0.44	2.36	3	1
1:A:22:GLY:C	1:A:23:TYR:O	0.44	2.60	4	2
1:A:28:ASP:HB2	1:A:31:THR:HB	0.44	1.88	7	4
1:A:39:ALA:O	1:A:42:VAL:N	0.44	2.51	8	3
1:A:106:THR:OG1	1:A:108:THR:CG2	0.44	2.66	9	1
1:A:68:TRP:CE3	1:A:68:TRP:O	0.44	2.70	10	1
1:A:61:ILE:HA	1:A:95:GLY:C	0.44	2.38	5	1
1:A:68:TRP:O	1:A:74:TYR:O	0.44	2.36	5	1
1:A:105:TRP:HB3	1:A:114:LEU:HB2	0.44	1.90	6	1
1:A:112:TYR:C	1:A:113:SER:HG	0.44	2.21	7	1
1:A:118:ALA:O	1:A:122:PHE:HB2	0.44	2.13	7	1
1:A:137:LEU:HA	4:A:800:I52:H362	0.44	1.89	7	1
1:A:100:ASP:OD2	1:A:103:GLU:OE1	0.44	2.35	8	1
1:A:12:ASP:HB3	1:A:162:TYR:CE1	0.44	2.48	9	1
1:A:124:HIS:C	1:A:126:MET:N	0.43	2.75	5	3
1:A:106:THR:CG2	1:A:108:THR:HG23	0.43	2.43	2	1
1:A:17:THR:HG22	1:A:54:ILE:HD13	0.43	1.89	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:TYR:C	1:A:113:SER:OG	0.43	2.60	7	1
1:A:157:GLY:O	1:A:158:ILE:C	0.43	2.61	7	1
1:A:105:TRP:HB2	1:A:114:LEU:HD12	0.43	1.89	8	1
1:A:161:LEU:O	1:A:162:TYR:CD1	0.43	2.71	10	1
1:A:105:TRP:CZ2	1:A:112:TYR:CB	0.43	3.01	2	1
1:A:137:LEU:CD1	4:A:800:I52:H381	0.43	2.34	3	1
1:A:158:ILE:CD1	1:A:162:TYR:CZ	0.43	3.00	4	1
1:A:155:ILE:O	1:A:158:ILE:HG22	0.43	2.14	9	1
1:A:124:HIS:O	1:A:127:GLY:N	0.43	2.43	11	1
1:A:82:LEU:HG	1:A:100:ASP:OD1	0.43	2.12	1	1
1:A:13:LYS:HD2	1:A:16:ILE:HA	0.43	1.90	2	1
1:A:42:VAL:HG11	1:A:115:PHE:CE2	0.43	2.48	2	1
1:A:19:ARG:HD2	1:A:21:ILE:CD1	0.43	2.43	4	1
1:A:43:TRP:CD2	1:A:126:MET:HE1	0.43	2.47	4	1
1:A:27:LEU:CD2	1:A:107:ASN:HB2	0.43	2.43	6	1
1:A:151:SER:HB3	1:A:153:ASP:OD1	0.43	2.12	10	1
1:A:18:TYR:CB	1:A:61:ILE:HG12	0.43	2.43	2	1
1:A:155:ILE:O	1:A:159:GLN:HG2	0.43	2.13	2	1
1:A:62:MET:N	1:A:96:ASP:OD1	0.43	2.51	3	1
1:A:105:TRP:HB2	1:A:114:LEU:CD2	0.43	2.44	3	2
1:A:105:TRP:HB3	1:A:114:LEU:HD22	0.43	1.90	3	1
1:A:152:GLN:O	1:A:154:ASP:N	0.43	2.51	3	1
1:A:27:LEU:CD1	1:A:106:THR:HA	0.43	2.43	4	1
1:A:116:LEU:HD12	1:A:144:TYR:CD2	0.43	2.48	5	1
1:A:30:GLU:O	1:A:34:ASP:HB2	0.43	2.13	7	1
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:60:ASP:OD2	0.43	2.71	9	1
1:A:42:VAL:HG22	1:A:148:PHE:CE1	0.43	2.48	10	1
1:A:24:THR:CG2	1:A:25:PRO:HD2	0.43	2.42	2	1
1:A:120:HIS:ND1	4:A:800:I52:C28	0.43	2.82	4	1
1:A:123:GLY:O	1:A:126:MET:HB2	0.43	2.13	6	1
1:A:120:HIS:CD2	1:A:124:HIS:CD2	0.43	3.06	8	1
1:A:24:THR:HG23	1:A:27:LEU:CD1	0.43	2.43	9	1
1:A:63:ILE:HG22	1:A:64:ASN:N	0.43	2.27	9	1
1:A:18:TYR:HB3	1:A:61:ILE:HG13	0.43	1.90	11	1
1:A:27:LEU:HD21	1:A:105:TRP:O	0.43	2.13	11	1
1:A:137:LEU:CD1	4:A:800:I52:C36	0.43	2.97	2	1
1:A:18:TYR:CE1	1:A:51:PHE:HB3	0.43	2.49	5	1
1:A:12:ASP:OD1	1:A:161:LEU:HD11	0.43	2.14	7	1
1:A:112:TYR:O	1:A:116:LEU:CB	0.43	2.67	7	1
1:A:98:HIS:CD2	1:A:98:HIS:C	0.43	2.95	8	1
1:A:162:TYR:O	1:A:163:GLY:C	0.43	2.60	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:37:ALA:O	1:A:38:ARG:C	0.43	2.61	7	2
1:A:35:ALA:HB2	1:A:114:LEU:HB3	0.43	1.91	2	1
1:A:145:THR:CG2	4:A:800:I52:C38	0.43	2.96	2	1
1:A:34:ASP:O	1:A:37:ALA:HB3	0.43	2.14	6	1
1:A:116:LEU:CD2	4:A:800:I52:H352	0.43	2.42	6	1
1:A:70:HIS:CG	1:A:75:PRO:HG3	0.43	2.49	7	1
1:A:114:LEU:C	1:A:116:LEU:N	0.43	2.75	10	1
1:A:159:GLN:O	1:A:163:GLY:O	0.43	2.37	1	1
1:A:70:HIS:CE1	1:A:85:HIS:CE1	0.43	3.06	2	1
4:A:800:I52:C25	4:A:800:I52:H131	0.43	2.43	4	1
1:A:40:PHE:O	1:A:44:SER:HB2	0.43	2.14	1	1
1:A:40:PHE:CD1	1:A:51:PHE:CG	0.43	3.07	2	1
1:A:74:TYR:CB	1:A:75:PRO:HD3	0.43	2.44	5	1
1:A:74:TYR:OH	1:A:85:HIS:NE2	0.43	2.51	6	1
1:A:104:LEU:HD13	1:A:105:TRP:H	0.43	1.74	6	1
1:A:132:GLN:O	1:A:136:ALA:CB	0.43	2.67	7	1
1:A:141:ILE:HG22	1:A:142:TYR:N	0.43	2.29	7	1
1:A:137:LEU:CD1	4:A:800:I52:C31	0.43	2.96	8	1
1:A:83:LEU:HA	1:A:100:ASP:CG	0.43	2.38	9	1
1:A:16:ILE:HD12	1:A:49:LEU:HD21	0.43	1.91	7	1
1:A:147:ASN:O	1:A:148:PHE:CD2	0.43	2.72	7	1
1:A:18:TYR:CA	1:A:61:ILE:HG13	0.43	2.44	9	1
1:A:10:LYS:HE2	1:A:89:PRO:CG	0.43	2.44	10	1
1:A:131:SER:O	1:A:131:SER:OG	0.42	2.34	1	1
1:A:116:LEU:CD2	1:A:144:TYR:CD1	0.42	3.01	2	1
1:A:145:THR:OG1	1:A:148:PHE:HA	0.42	2.14	2	1
1:A:69:GLU:C	1:A:70:HIS:O	0.42	2.62	3	1
1:A:46:VAL:O	1:A:47:THR:HG23	0.42	2.14	5	1
1:A:69:GLU:O	1:A:70:HIS:HB2	0.42	2.14	6	1
1:A:27:LEU:HD13	1:A:106:THR:CA	0.42	2.33	7	1
1:A:85:HIS:HA	4:A:800:I52:H2	0.42	1.74	9	1
1:A:24:THR:HG23	1:A:25:PRO:N	0.42	2.28	2	1
1:A:147:ASN:OD1	1:A:147:ASN:N	0.42	2.51	2	1
1:A:159:GLN:O	1:A:160:GLU:C	0.42	2.62	7	1
1:A:12:ASP:OD1	1:A:12:ASP:N	0.42	2.52	9	2
1:A:93:VAL:O	1:A:93:VAL:CG1	0.42	2.67	8	1
1:A:147:ASN:O	1:A:148:PHE:HB2	0.42	2.13	8	1
1:A:27:LEU:CD2	1:A:105:TRP:O	0.42	2.63	9	1
1:A:33:ASP:OD1	1:A:33:ASP:O	0.42	2.36	10	1
1:A:83:LEU:HD21	1:A:112:TYR:CE2	0.42	2.49	11	1
1:A:13:LYS:C	1:A:14:ASN:O	0.42	2.62	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:116:LEU:HD12	1:A:142:TYR:CE1	0.42	2.49	4	2
1:A:141:ILE:O	4:A:800:I52:O41	0.42	2.37	1	1
1:A:105:TRP:CE2	1:A:112:TYR:CB	0.42	3.01	2	1
1:A:55:HIS:CD2	1:A:55:HIS:N	0.42	2.87	4	1
1:A:11:TRP:O	1:A:12:ASP:HB3	0.42	2.14	5	1
1:A:73:GLY:O	1:A:74:TYR:CG	0.42	2.72	5	1
1:A:12:ASP:HB2	1:A:16:ILE:HG23	0.42	1.90	6	1
1:A:85:HIS:HB2	4:A:800:I52:H252	0.42	1.91	6	1
1:A:24:THR:HG21	1:A:26:ASP:OD2	0.42	2.15	7	1
1:A:11:TRP:C	1:A:12:ASP:OD1	0.42	2.63	8	1
1:A:12:ASP:CB	1:A:162:TYR:CE1	0.42	3.02	9	1
1:A:121:GLU:HA	1:A:121:GLU:OE1	0.42	2.14	4	1
1:A:14:ASN:O	1:A:16:ILE:N	0.42	2.53	7	1
1:A:27:LEU:HD22	1:A:106:THR:HA	0.42	1.90	8	1
1:A:126:MET:HG2	1:A:162:TYR:OH	0.42	2.14	9	1
1:A:145:THR:HB	1:A:148:PHE:HA	0.42	1.91	9	1
1:A:21:ILE:HB	1:A:64:ASN:CG	0.42	2.39	1	1
1:A:145:THR:HG21	4:A:800:I52:H393	0.42	1.90	2	1
1:A:151:SER:O	1:A:152:GLN:C	0.42	2.59	4	1
1:A:162:TYR:CD1	1:A:162:TYR:N	0.42	2.87	4	1
4:A:800:I52:H251	4:A:800:I52:H131	0.42	1.91	4	1
1:A:19:ARG:CZ	1:A:55:HIS:O	0.42	2.68	7	1
1:A:106:THR:OG1	1:A:110:ALA:CB	0.42	2.67	8	1
1:A:81:GLY:O	1:A:83:LEU:HG	0.42	2.15	11	3
1:A:16:ILE:HG21	1:A:61:ILE:HD11	0.42	1.92	2	1
1:A:113:SER:HB3	1:A:116:LEU:HD23	0.42	1.90	2	1
1:A:71:GLY:C	1:A:72:ASP:O	0.42	2.62	3	1
1:A:71:GLY:C	1:A:73:GLY:N	0.42	2.74	6	1
1:A:12:ASP:OD1	1:A:161:LEU:HD21	0.42	2.14	7	1
1:A:67:ARG:HG3	1:A:68:TRP:N	0.42	2.30	10	1
1:A:121:GLU:C	1:A:123:GLY:N	0.42	2.76	10	1
1:A:13:LYS:C	1:A:14:ASN:CG	0.42	2.88	11	1
1:A:93:VAL:HG12	1:A:94:GLY:H	0.42	1.73	11	1
1:A:24:THR:HG21	1:A:27:LEU:HB3	0.42	1.91	2	1
1:A:39:ALA:CA	1:A:42:VAL:CG2	0.42	2.97	2	1
1:A:108:THR:O	1:A:109:SER:CB	0.42	2.66	2	2
1:A:63:ILE:O	1:A:64:ASN:HB2	0.42	2.15	11	1
1:A:120:HIS:NE2	1:A:124:HIS:CE1	0.42	2.88	5	1
1:A:27:LEU:HD21	1:A:32:VAL:HG23	0.42	1.89	7	1
1:A:24:THR:HG23	1:A:27:LEU:HD22	0.42	1.91	1	1
1:A:105:TRP:CZ2	1:A:112:TYR:HB2	0.42	2.49	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:THR:O	1:A:60:ASP:CG	0.42	2.62	4	1
1:A:27:LEU:HD22	1:A:106:THR:CB	0.42	2.44	8	1
1:A:76:PHE:CE1	1:A:102:ASP:OD2	0.42	2.73	9	1
1:A:115:PHE:CD1	1:A:116:LEU:N	0.42	2.88	9	1
1:A:76:PHE:CD1	1:A:76:PHE:C	0.42	2.98	10	1
1:A:34:ASP:O	1:A:37:ALA:N	0.42	2.53	11	1
1:A:105:TRP:HE1	1:A:117:VAL:HG11	0.42	1.75	11	1
1:A:109:SER:O	1:A:110:ALA:HB2	0.42	2.15	11	1
1:A:90:GLY:N	1:A:94:GLY:HA3	0.42	2.30	1	1
1:A:66:GLY:O	1:A:101:ASP:HB3	0.42	2.15	3	1
1:A:99:PHE:HB2	1:A:105:TRP:CH2	0.42	2.50	10	1
1:A:120:HIS:CE1	4:A:800:I52:C28	0.41	3.03	4	1
1:A:10:LYS:O	1:A:12:ASP:OD1	0.41	2.38	5	1
1:A:15:GLN:C	1:A:16:ILE:HD13	0.41	2.39	5	1
1:A:50:ARG:N	1:A:50:ARG:HD2	0.41	2.30	8	1
1:A:53:ARG:HG2	1:A:53:ARG:O	0.41	2.14	10	1
1:A:32:VAL:O	1:A:36:PHE:CD1	0.41	2.73	11	1
1:A:23:TYR:HB3	1:A:32:VAL:HG11	0.41	1.91	2	1
1:A:129:GLU:O	1:A:138:MET:HB3	0.41	2.15	2	1
1:A:156:LYS:HD3	1:A:156:LYS:C	0.41	2.39	4	1
1:A:13:LYS:O	1:A:13:LYS:HG2	0.41	2.15	6	1
1:A:69:GLU:O	1:A:69:GLU:CG	0.41	2.68	6	1
1:A:113:SER:O	1:A:116:LEU:N	0.41	2.54	9	3
1:A:101:ASP:HA	1:A:105:TRP:CZ2	0.41	2.49	8	1
1:A:17:THR:O	1:A:61:ILE:HG12	0.41	2.13	9	1
1:A:106:THR:OG1	1:A:108:THR:HG22	0.41	2.15	9	1
1:A:61:ILE:CA	1:A:95:GLY:O	0.41	2.69	1	1
1:A:93:VAL:HA	1:A:96:ASP:OD2	0.41	2.15	1	1
1:A:24:THR:CB	1:A:25:PRO:CD	0.41	2.97	2	1
1:A:139:ALA:O	4:A:800:I52:H34	0.41	2.15	2	1
1:A:46:VAL:C	1:A:47:THR:HG22	0.41	2.39	4	1
1:A:86:ALA:HA	1:A:96:ASP:O	0.41	2.15	11	2
1:A:90:GLY:O	1:A:91:THR:CB	0.41	2.67	7	1
1:A:27:LEU:HG	1:A:28:ASP:N	0.41	2.30	2	1
1:A:145:THR:OG1	1:A:145:THR:O	0.41	2.36	2	1
1:A:114:LEU:O	1:A:114:LEU:CD1	0.41	2.65	4	1
1:A:18:TYR:O	1:A:53:ARG:HA	0.41	2.15	5	1
1:A:20:ILE:HD13	1:A:23:TYR:CE2	0.41	2.50	5	1
1:A:76:PHE:CE2	1:A:98:HIS:NE2	0.41	2.88	8	1
1:A:123:GLY:O	1:A:128:LEU:HB2	0.41	2.15	11	1
1:A:87:PHE:C	1:A:88:ALA:O	0.41	2.64	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:ILE:HB	1:A:64:ASN:OD1	0.41	2.15	10	1
1:A:78:GLY:C	1:A:79:LYS:O	0.41	2.63	11	1
1:A:24:THR:CB	1:A:25:PRO:HD2	0.41	2.44	2	1
1:A:161:LEU:CD2	1:A:161:LEU:N	0.41	2.83	4	1
1:A:24:THR:HG22	1:A:105:TRP:CE3	0.41	2.50	7	1
1:A:105:TRP:CZ2	1:A:112:TYR:CG	0.41	3.09	2	1
1:A:18:TYR:O	1:A:54:ILE:HD13	0.41	2.15	6	1
1:A:27:LEU:HD13	1:A:106:THR:OG1	0.41	2.16	6	1
1:A:13:LYS:O	1:A:14:ASN:HB2	0.41	2.14	9	1
1:A:19:ARG:HB3	1:A:59:ALA:CB	0.41	2.46	9	1
1:A:157:GLY:O	1:A:161:LEU:HB2	0.41	2.16	9	1
1:A:57:GLY:O	1:A:58:GLU:CB	0.41	2.69	10	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:137:LEU:CD2	0.41	3.03	2	1
1:A:56:ASP:C	1:A:56:ASP:OD1	0.41	2.64	7	1
1:A:75:PRO:CB	1:A:82:LEU:HD22	0.41	2.45	7	1
1:A:121:GLU:O	1:A:122:PHE:C	0.41	2.62	10	1
1:A:82:LEU:O	1:A:100:ASP:OD2	0.41	2.39	2	1
1:A:22:GLY:O	1:A:65:PHE:CE2	0.41	2.74	3	1
1:A:23:TYR:CE1	1:A:32:VAL:HG13	0.41	2.51	5	1
1:A:35:ALA:CB	1:A:114:LEU:HD23	0.41	2.45	6	1
1:A:44:SER:OG	1:A:49:LEU:O	0.41	2.39	6	1
1:A:146:LYS:O	1:A:148:PHE:N	0.41	2.53	6	1
1:A:68:TRP:HB3	1:A:76:PHE:CD1	0.41	2.51	7	1
1:A:77:ASP:OD1	1:A:77:ASP:C	0.41	2.63	7	1
1:A:85:HIS:O	1:A:97:SER:HB3	0.41	2.15	7	1
1:A:101:ASP:C	1:A:102:ASP:O	0.41	2.64	7	1
1:A:75:PRO:O	1:A:76:PHE:HB3	0.41	2.16	9	1
1:A:49:LEU:CD2	1:A:162:TYR:HB3	0.41	2.39	10	1
1:A:62:MET:CB	1:A:96:ASP:HB3	0.41	2.46	10	1
1:A:112:TYR:CE1	1:A:142:TYR:CD2	0.41	3.09	10	1
1:A:155:ILE:CD1	1:A:159:GLN:NE2	0.41	2.84	10	1
1:A:82:LEU:CD1	1:A:100:ASP:OD1	0.41	2.69	1	1
1:A:19:ARG:HB2	1:A:59:ALA:CB	0.41	2.46	5	1
1:A:19:ARG:HG3	1:A:54:ILE:O	0.41	2.15	5	1
1:A:24:THR:HG22	1:A:27:LEU:HD11	0.41	1.92	5	1
1:A:90:GLY:O	1:A:91:THR:O	0.41	2.39	6	1
1:A:66:GLY:HA3	1:A:98:HIS:CD2	0.41	2.51	8	1
1:A:67:ARG:O	1:A:68:TRP:O	0.41	2.38	9	1
1:A:91:THR:CG2	1:A:92:GLY:N	0.41	2.79	11	1
4:A:800:I52:O41	4:A:800:I52:H17	0.40	2.16	1	1
1:A:108:THR:OG1	1:A:113:SER:CA	0.40	2.69	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:TYR:CB	1:A:32:VAL:HG21	0.40	2.46	3	1
1:A:119:ALA:CA	1:A:122:PHE:HB2	0.40	2.46	3	1
1:A:38:ARG:O	1:A:42:VAL:N	0.40	2.53	5	2
1:A:70:HIS:CE1	1:A:98:HIS:CB	0.40	3.04	7	1
1:A:85:HIS:NE2	1:A:98:HIS:HB2	0.40	2.31	7	1
1:A:111:ASN:O	1:A:112:TYR:CG	0.40	2.74	7	1
1:A:120:HIS:CD2	4:A:800:I52:O1	0.40	2.73	7	2
1:A:150:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HA	0.40	1.67	2	1
1:A:27:LEU:N	1:A:27:LEU:CD2	0.40	2.83	4	1
1:A:156:LYS:O	1:A:160:GLU:HG2	0.40	2.16	4	1
1:A:105:TRP:O	1:A:106:THR:CB	0.40	2.69	2	1
1:A:146:LYS:O	1:A:147:ASN:HB2	0.40	2.16	4	1
1:A:16:ILE:N	1:A:16:ILE:CD1	0.40	2.83	5	1
1:A:37:ALA:O	1:A:40:PHE:HB3	0.40	2.16	5	1
1:A:82:LEU:HD23	1:A:82:LEU:C	0.40	2.41	5	1
1:A:19:ARG:O	1:A:19:ARG:HG3	0.40	2.16	10	1
1:A:68:TRP:CE3	1:A:68:TRP:CA	0.40	3.04	10	1
1:A:88:ALA:O	1:A:94:GLY:HA3	0.40	2.16	10	1
1:A:62:MET:HB3	1:A:96:ASP:CG	0.40	2.41	11	1
1:A:19:ARG:NH2	1:A:58:GLU:N	0.40	2.69	5	1
1:A:29:PRO:O	1:A:33:ASP:HB2	0.40	2.16	5	1
1:A:67:ARG:HD3	1:A:69:GLU:HG3	0.40	1.94	8	1
1:A:120:HIS:HA	1:A:137:LEU:HD12	0.40	1.94	10	1
1:A:160:GLU:HA	1:A:160:GLU:OE1	0.40	2.15	11	1
1:A:76:PHE:O	1:A:77:ASP:HB3	0.40	2.17	1	1
1:A:103:GLU:HG2	1:A:105:TRP:CH2	0.40	2.52	2	1
1:A:107:ASN:C	1:A:108:THR:OG1	0.40	2.65	2	1
1:A:138:MET:HE1	1:A:154:ASP:HB2	0.40	1.92	2	1
1:A:144:TYR:CE2	1:A:146:LYS:CG	0.40	3.05	2	1
1:A:16:ILE:HB	1:A:51:PHE:CD1	0.40	2.52	3	1
1:A:95:GLY:O	1:A:96:ASP:OD1	0.40	2.40	3	1
1:A:116:LEU:HD13	1:A:116:LEU:C	0.40	2.41	4	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:123:GLY:HA2	0.40	2.51	5	1
1:A:65:PHE:HB2	1:A:99:PHE:O	0.40	2.16	6	1
1:A:155:ILE:O	1:A:159:GLN:HG3	0.40	2.17	10	1
1:A:137:LEU:HD13	4:A:800:I52:H393	0.40	1.93	11	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	153/163 (94%)	104±3 (68±2%)	31±4 (20±2%)	17±4 (11±2%)	1	8
All	All	1683/1793 (94%)	1149 (68%)	345 (20%)	189 (11%)	1	8

All 61 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	80	ASP	9
1	A	148	PHE	9
1	A	23	TYR	8
1	A	10	LYS	7
1	A	72	ASP	6
1	A	150	LEU	6
1	A	14	ASN	5
1	A	70	HIS	5
1	A	110	ALA	5
1	A	113	SER	5
1	A	102	ASP	5
1	A	26	ASP	5
1	A	68	TRP	5
1	A	69	GLU	4
1	A	73	GLY	4
1	A	79	LYS	4
1	A	84	ALA	4
1	A	109	SER	4
1	A	67	ARG	4
1	A	55	HIS	3
1	A	56	ASP	3
1	A	64	ASN	3
1	A	76	PHE	3
1	A	77	ASP	3
1	A	111	ASN	3
1	A	126	MET	3
1	A	127	GLY	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	75	PRO	3
1	A	101	ASP	3
1	A	108	THR	3
1	A	128	LEU	3
1	A	132	GLN	3
1	A	11	TRP	3
1	A	12	ASP	2
1	A	15	GLN	2
1	A	88	ALA	2
1	A	74	TYR	2
1	A	78	GLY	2
1	A	100	ASP	2
1	A	141	ILE	2
1	A	22	GLY	2
1	A	82	LEU	2
1	A	144	TYR	2
1	A	147	ASN	2
1	A	90	GLY	2
1	A	130	HIS	2
1	A	91	THR	2
1	A	92	GLY	2
1	A	81	GLY	1
1	A	106	THR	1
1	A	103	GLU	1
1	A	146	LYS	1
1	A	93	VAL	1
1	A	145	THR	1
1	A	133	ASP	1
1	A	151	SER	1
1	A	112	TYR	1
1	A	142	TYR	1
1	A	149	ARG	1
1	A	115	PHE	1
1	A	143	THR	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	125/134 (93%)	84±4 (67±3%)	41±4 (33±3%)	1	13
All	All	1375/1474 (93%)	927 (67%)	448 (33%)	1	13

All 106 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	155	ILE	11
1	A	42	VAL	10
1	A	17	THR	9
1	A	27	LEU	9
1	A	103	GLU	9
1	A	114	LEU	9
1	A	161	LEU	9
1	A	32	VAL	8
1	A	58	GLU	8
1	A	61	ILE	8
1	A	133	ASP	8
1	A	146	LYS	8
1	A	156	LYS	8
1	A	67	ARG	8
1	A	116	LEU	8
1	A	10	LYS	7
1	A	13	LYS	7
1	A	87	PHE	7
1	A	132	GLN	7
1	A	141	ILE	7
1	A	113	SER	7
1	A	151	SER	7
1	A	52	SER	6
1	A	53	ARG	6
1	A	54	ILE	6
1	A	82	LEU	6
1	A	97	SER	6
1	A	104	LEU	6
1	A	138	MET	6
1	A	91	THR	6
1	A	109	SER	6
1	A	23	TYR	6
1	A	79	LYS	6
1	A	153	ASP	6
1	A	16	ILE	5
1	A	41	GLN	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	159	GLN	5
1	A	24	THR	5
1	A	56	ASP	5
1	A	96	ASP	5
1	A	68	TRP	5
1	A	70	HIS	5
1	A	150	LEU	5
1	A	47	THR	5
1	A	108	THR	5
1	A	40	PHE	4
1	A	93	VAL	4
1	A	100	ASP	4
1	A	105	TRP	4
1	A	11	TRP	4
1	A	60	ASP	4
1	A	62	MET	4
1	A	38	ARG	4
1	A	49	LEU	4
1	A	65	PHE	4
1	A	158	ILE	4
1	A	69	GLU	4
1	A	106	THR	3
1	A	128	LEU	3
1	A	129	GLU	3
1	A	149	ARG	3
1	A	122	PHE	3
1	A	145	THR	3
1	A	50	ARG	3
1	A	77	ASP	3
1	A	111	ASN	3
1	A	14	ASN	3
1	A	33	ASP	3
1	A	28	ASP	2
1	A	30	GLU	2
1	A	44	SER	2
1	A	147	ASN	2
1	A	143	THR	2
1	A	55	HIS	2
1	A	98	HIS	2
1	A	154	ASP	2
1	A	15	GLN	2
1	A	19	ARG	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	20	ILE	2
1	A	72	ASP	2
1	A	76	PHE	2
1	A	115	PHE	2
1	A	74	TYR	2
1	A	107	ASN	2
1	A	31	THR	2
1	A	148	PHE	2
1	A	43	TRP	2
1	A	126	MET	2
1	A	131	SER	2
1	A	160	GLU	2
1	A	26	ASP	2
1	A	34	ASP	1
1	A	117	VAL	1
1	A	18	TYR	1
1	A	64	ASN	1
1	A	101	ASP	1
1	A	142	TYR	1
1	A	12	ASP	1
1	A	80	ASP	1
1	A	63	ILE	1
1	A	152	GLN	1
1	A	21	ILE	1
1	A	102	ASP	1
1	A	112	TYR	1
1	A	137	LEU	1
1	A	144	TYR	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry

Of 5 ligands modelled in this entry, 4 are monoatomic - leaving 1 for Mogul analysis.

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths		
					Counts	RMSZ	#Z>2
4	I52	A	800	2	40,42,42	2.03±0.05	14±0 (34±1%)

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond angles		
					Counts	RMSZ	#Z>2
4	I52	A	800	2	54,57,57	1.17±0.06	5±1 (8±1%)

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
4	I52	A	800	2	-	0±0,44,52,52	0±0,3,3,3

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
4	A	800	I52	S14-N5	5.29	1.71	1.63	10	11
4	A	800	I52	C17-C18	4.05	1.46	1.39	11	11
4	A	800	I52	C19-C20	3.61	1.44	1.38	1	11
4	A	800	I52	C34-C29	3.53	1.44	1.39	4	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
4	A	800	I52	C30-C29	3.47	1.44	1.39	11	11
4	A	800	I52	C16-C15	3.47	1.44	1.38	7	11
4	A	800	I52	C34-C33	3.42	1.44	1.38	4	11
4	A	800	I52	C30-C31	3.41	1.44	1.38	7	11
4	A	800	I52	C17-C16	3.35	1.44	1.38	4	11
4	A	800	I52	C31-C32	3.24	1.45	1.38	11	11
4	A	800	I52	C20-C15	3.22	1.43	1.38	11	11
4	A	800	I52	C19-C18	3.03	1.44	1.39	6	11
4	A	800	I52	C33-C32	2.91	1.44	1.38	8	11
4	A	800	I52	O21-S14	2.83	1.46	1.43	6	8

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

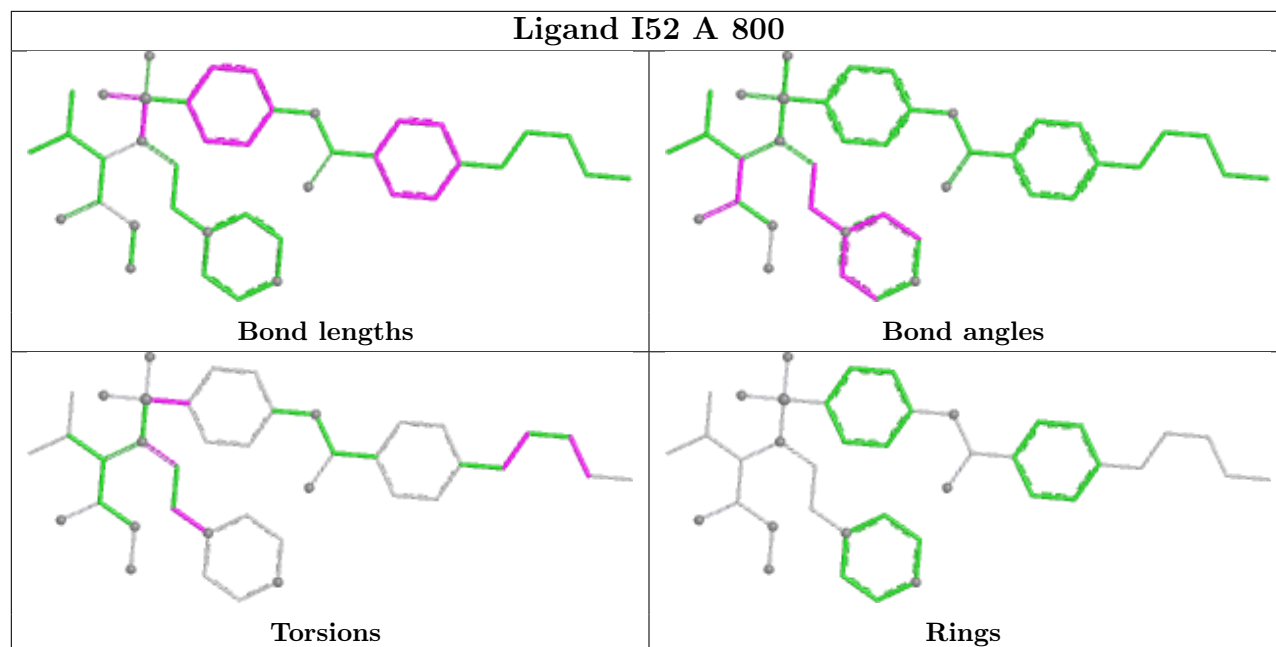
Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
4	A	800	I52	C12-C13-N8	4.38	116.78	110.12	3	11
4	A	800	I52	C10-C9-N8	4.04	116.26	110.12	10	11
4	A	800	I52	O26-C3-C4	3.06	125.98	120.95	7	11
4	A	800	I52	C6-C7-N8	2.94	119.96	112.98	3	11
4	A	800	I52	O22-S14-C15	2.27	105.28	108.10	3	5
4	A	800	I52	C7-C6-N5	2.22	116.26	112.44	9	1
4	A	800	I52	C4-N5-S14	2.05	122.56	118.39	3	1

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

The following is a two-dimensional graphical depiction of Mogul quality analysis of bond lengths, bond angles, torsion angles, and ring geometry for all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the validation Tables will also be included. For torsion angles, if less than 5% of the Mogul distribution of torsion angles is within 10 degrees of the torsion angle in question, then that torsion angle is considered an outlier. Any bond that is central to one or more torsion angles identified as an outlier by Mogul will be highlighted in the graph. For rings, the root-mean-square deviation (RMSD) between the ring in question and similar rings identified by Mogul is calculated over all ring torsion angles. If the average RMSD is greater than 60 degrees and the minimal RMSD between the ring in question and any Mogul-identified rings is also greater than 60 degrees, then that ring is considered an outlier. The outliers are highlighted in purple. The color gray indicates Mogul did not find sufficient equivalents in the CSD to analyse the geometry.



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

No chemical shift data were provided