



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 7, 2026 – 01:39 AM UTC

PDB ID : 2I94 / pdb_00002i94
Title : NMR Structure of recoverin bound to rhodopsin kinase
Authors : Ames, J.B.
Deposited on : 2006-09-05

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The 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
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

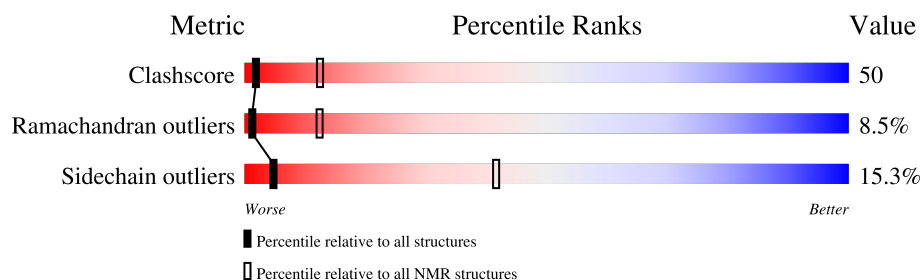
1 Overall quality at a glance

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	202	
2	B	25	

2 Ensemble composition and analysis ⓘ

This entry contains 10 models. Model 7 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *fewest violations*.

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:8-A:188, B:4-B:16 (194)	1.42	7

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

3 Entry composition [i](#)

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 3174 atoms, of which 1564 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Recoverin.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	182	Total	C	H	N	O	S	0
			2939	955	1449	238	294	3	

- Molecule 2 is a protein called Rhodopsin kinase.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
2	B	16	Total	C	H	N	O	S	0
			233	76	115	17	24	1	

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

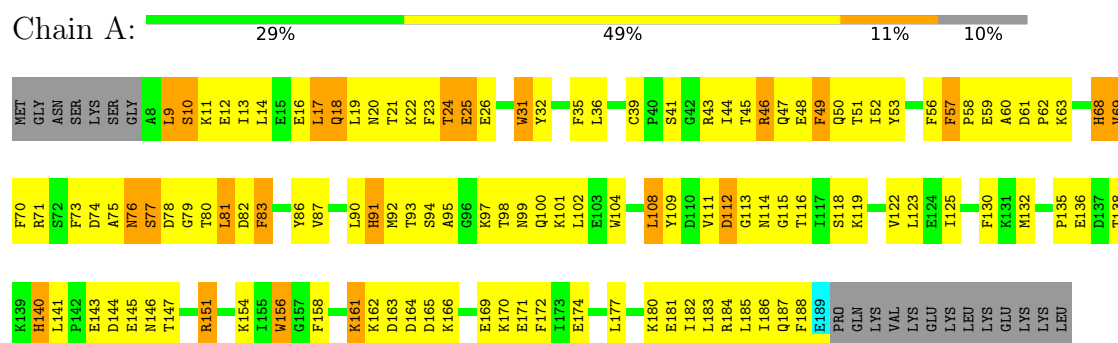
Mol	Chain	Residues	Atoms	
3	A	2	Total	Ca
			2	2

4 Residue-property plots [i](#)

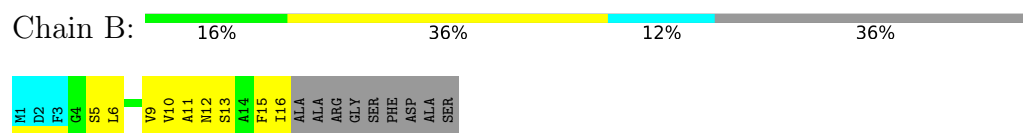
4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

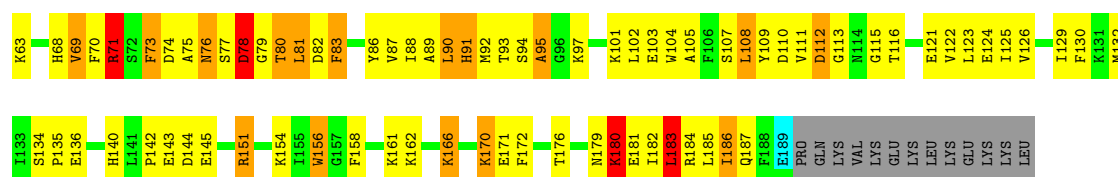
These plots are provided for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic is the same as shown in the summary in section 1 of this report. The second graphic shows the sequence where residues are colour-coded according to the number of geometric quality criteria for 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: Recoverin

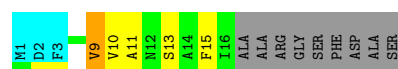
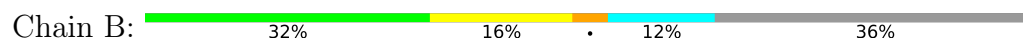


• Molecule 2: Rhodopsin kinase



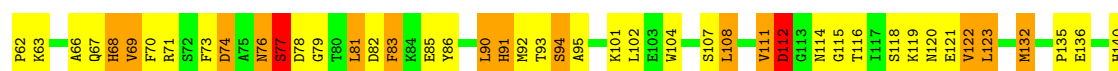
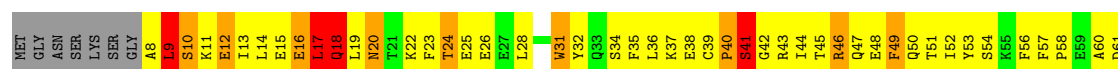


• Molecule 2: Rhodopsin kinase



4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: Recoverin

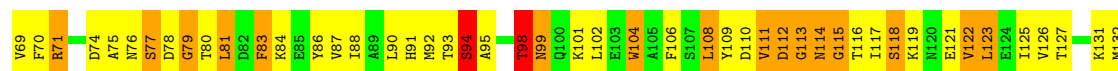


• Molecule 2: Rhodopsin kinase



4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: Recoverin



LYS
LEU

- Molecule 2: Rhodopsin kinase

Chain B: 12% 32% 8% 12% 36%

W1 D2 F3 G4 S5 L6 E7 T8 V9 V10 A11 A12 S13 A14 F15 I16 ALA ALA ARG GLY SER PHE ASP ALA SER

4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Recoverin

Chain A: 31% 40% 15% 10%

MET GLY ASN SER LYS SER GLY A8 L9 S10 K11 E12 I13 L14 E15 E16 L17 Q18 L19 N20 T21 K22 F23 T24 S29 S30 W31 F35 C39 P40 S41 G42 R43 I44 T45 R46 Q47 E48 F49 Q50 T51 I52 Y53 F56 F57 P58 E59 A60 D61 P62 K63 A64 Y65 A66 H68

V69 F70 S71 S72 D74 A75 W76 S77 D78 G79 T80 L81 D82 F83 R84 E85 Y86 L90 H91 N92 T93 S94 A95 G96 R97 T98 N99 Q100 K101 L102 W104 A105 L108 Y109 D110 Y111 D112 G113 N114 G115 T116 L123 E124 I125 F130 K131 M132 P135 E136 D137 H140 L141

P142 E143 D144 E145 T147 R151 A152 E153 K154 T155 W156 F159 G160 K161 K162 D163 D164 L167 T168 E169 K170 E171 F172 I173 E174 L177 K180 E181 I182 L183 R184 L185 I186 F187 F188 E189 PRO GLN LYS VAL LYS LYS LYS LEU LYS GLU LYS LYS

- Molecule 2: Rhodopsin kinase

Chain B: 8% 36% 8% 12% 36%

W1 D2 F3 G4 S5 L6 E7 T8 V9 V10 A11 A12 S13 A14 F15 I16 ALA ALA ARG GLY SER PHE ASP ALA SER

4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Recoverin

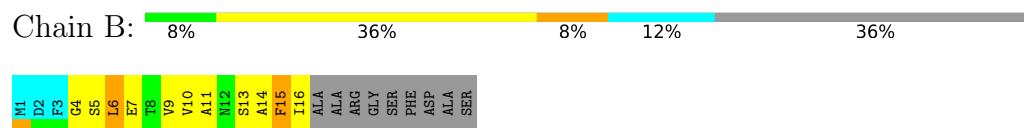
Chain A: 34% 42% 13% 10%

MET GLY ASN SER LYS SER GLY A8 L9 S10 K11 E12 I13 L14 E15 E16 L17 Q18 L19 N20 T21 K22 F23 T24 E25 E26 E27 W31 A35 Y32 G33 S34 F35 L36 C39 P40 S41 G42 R43 I44 T45 R46 Q47 E48 F49 Q50 T51 I52 Y53 F56 F57 P58 E59 A60 D61 P62 K63 A64

Y65 A66 H68 V69 F70 F73 D74 A75 W76 S77 D78 G79 T80 L81 D82 F83 Y86 V87 T88 A89 L90 H91 N92 T93 S94 A95 G96 R97 Q99 K101 L102 W104 A105 L108 Y109 D110 Y111 D112 G113 N114 G115 T116 L117 S118 I125 I129 M132 T133 S134

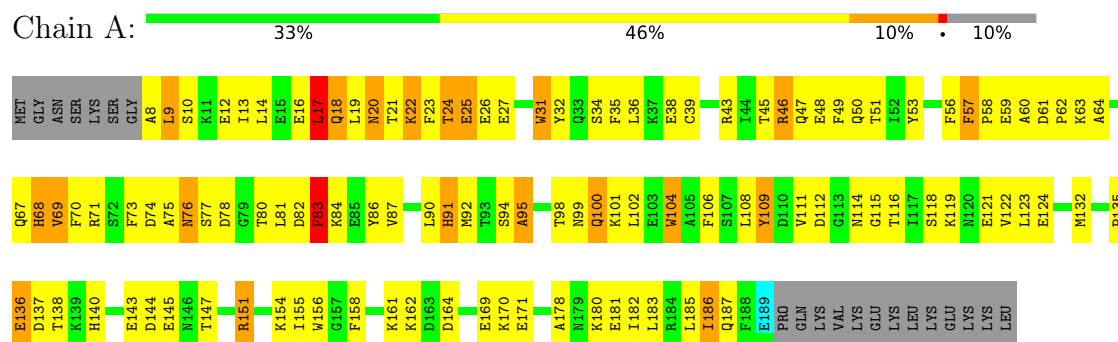
D137 T138 K139 H140 L141 P142 E143 D144 E145 T147 K150 R151 K154 T155 W156 G157 F158 K161 K162 D165 E171 E174 L177 L182 L183 R184 L185 I186 Q187 F188 E189 PRO GLN LYS VAL LYS LYS LYS LEU LYS GLU LYS LYS

- Molecule 2: Rhodopsin kinase

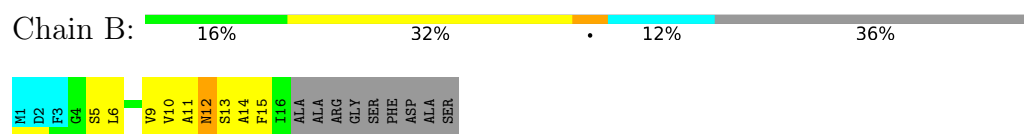


4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Recoverin

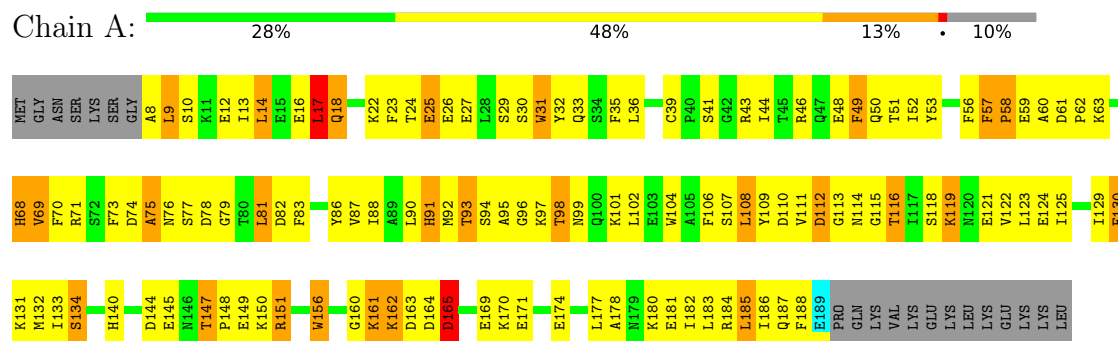


- Molecule 2: Rhodopsin kinase

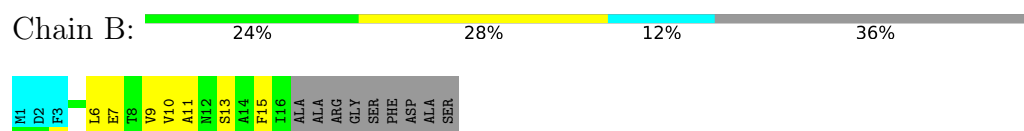


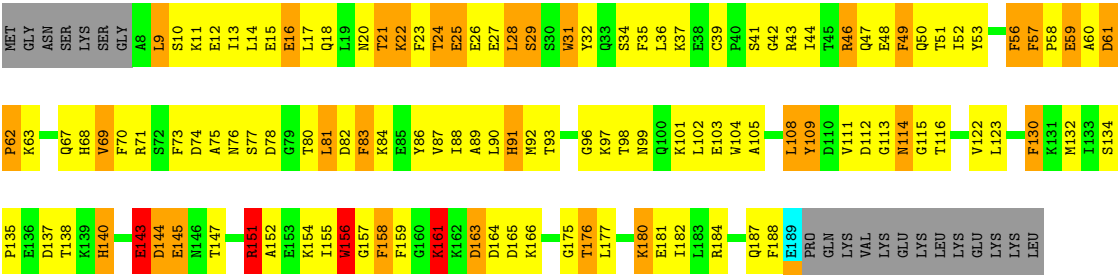
4.2.7 Score per residue for model 7 (medoid)

- Molecule 1: Recoverin

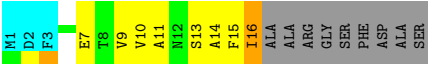


- Molecule 2: Rhodopsin kinase





● Molecule 2: Rhodopsin kinase



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 20 calculated structures, 10 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	structure solution	3.1
X-PLOR	refinement	3.1

No chemical shift data was provided.

6 Model quality i

6.1 Standard geometry i

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

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.45±0.01	9±1/1515 (0.6± 0.0%)	1.47±0.01	14±1/2043 (0.7± 0.0%)
2	B	1.40±0.03	0±0/91 (0.0± 0.0%)	1.34±0.04	0±0/123 (0.0± 0.0%)
All	All	1.45	89/16060 (0.6%)	1.47	143/21660 (0.7%)

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	4.5±0.7
All	All	0	45

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	91	HIS	CG-ND1	-12.09	1.25	1.38	1	10
1	A	68	HIS	CG-ND1	-11.90	1.25	1.38	4	10
1	A	140	HIS	CG-ND1	-11.90	1.25	1.38	10	10
1	A	156	TRP	CG-CD2	-7.11	1.30	1.43	10	10
1	A	104	TRP	CG-CD2	-7.01	1.31	1.43	6	10
1	A	31	TRP	CG-CD2	-6.88	1.31	1.43	2	10
1	A	91	HIS	ND1-CE1	-5.96	1.26	1.32	10	10
1	A	18	GLN	N-CA	5.74	1.53	1.46	2	1
1	A	68	HIS	ND1-CE1	-5.48	1.27	1.32	2	8
1	A	140	HIS	ND1-CE1	-5.33	1.27	1.32	2	10

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	91	HIS	CE1-NE2-CD2	-7.60	101.40	109.00	9	10
1	A	68	HIS	CE1-NE2-CD2	-7.59	101.41	109.00	10	10
1	A	140	HIS	CE1-NE2-CD2	-7.52	101.48	109.00	8	10
1	A	98	THR	CB-CA-C	-6.82	108.72	116.63	6	1
1	A	104	TRP	NE1-CE2-CZ2	6.80	140.29	130.10	5	10
1	A	156	TRP	NE1-CE2-CZ2	6.79	140.29	130.10	10	10
1	A	31	TRP	NE1-CE2-CZ2	6.64	140.06	130.10	4	10
1	A	57	PHE	CA-CB-CG	-6.61	107.19	113.80	4	4
1	A	83	PHE	CA-CB-CG	-6.28	107.52	113.80	4	9
1	A	41	SER	CB-CA-C	-6.20	108.80	117.23	9	1
1	A	104	TRP	NE1-CE2-CD2	-5.92	99.71	107.40	5	10
1	A	156	TRP	NE1-CE2-CD2	-5.91	99.71	107.40	3	10
1	A	163	ASP	CB-CA-C	-5.86	109.26	117.23	4	1
1	A	31	TRP	NE1-CE2-CD2	-5.80	99.86	107.40	4	10
1	A	56	PHE	CA-CB-CG	-5.71	108.09	113.80	4	3
1	A	74	ASP	CA-CB-CG	-5.60	107.00	112.60	4	2
1	A	97	LYS	CB-CA-C	-5.36	109.42	115.79	4	1
1	A	156	TRP	CG-CD2-CE3	-5.32	128.58	133.90	10	5
1	A	79	GLY	N-CA-C	-5.32	107.20	114.64	9	2
1	A	130	PHE	CA-CB-CG	-5.25	108.55	113.80	10	2
1	A	104	TRP	CG-CD2-CE3	-5.24	128.66	133.90	1	5
1	A	49	PHE	CA-CB-CG	-5.23	108.57	113.80	2	3
1	A	31	TRP	CG-CD2-CE3	-5.21	128.69	133.90	2	1
1	A	156	TRP	CG-CD1-NE1	-5.11	103.56	110.20	10	5
1	A	104	TRP	CG-CD1-NE1	-5.10	103.57	110.20	6	5
1	A	35	PHE	CA-CB-CG	-5.06	108.74	113.80	8	1
1	A	31	TRP	CG-CD1-NE1	-5.02	103.68	110.20	10	2

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	151	ARG	Sidechain	10
1	A	43	ARG	Sidechain	9
1	A	71	ARG	Sidechain	9
1	A	46	ARG	Sidechain	9
1	A	184	ARG	Sidechain	8

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	1481	1443	1442	149±13
2	B	91	91	91	16±2
All	All	15740	15340	15330	1554

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 50.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:LEU:HD22	1:A:18:GLN:N	1.09	1.62	8	1
1:A:17:LEU:HD13	1:A:18:GLN:N	1.08	1.64	9	3
1:A:81:LEU:HD23	1:A:81:LEU:H	0.92	1.25	9	2
1:A:81:LEU:N	1:A:81:LEU:HD22	0.90	1.80	2	3
1:A:108:LEU:HD13	1:A:108:LEU:C	0.88	1.93	1	7
1:A:108:LEU:HD13	1:A:109:TYR:N	0.87	1.85	5	7
1:A:158:PHE:CE1	1:A:159:PHE:CD2	0.86	2.64	10	1
1:A:90:LEU:HD21	2:B:10:VAL:HG11	0.85	1.46	8	5
1:A:81:LEU:HD22	1:A:81:LEU:H	0.85	1.26	2	1
2:B:16:ILE:HD12	2:B:16:ILE:C	0.84	1.97	10	2
1:A:81:LEU:HD23	1:A:81:LEU:N	0.84	1.87	9	2
1:A:183:LEU:C	1:A:183:LEU:HD13	0.83	1.98	4	2
1:A:76:ASN:ND2	1:A:77:SER:N	0.83	2.26	2	1
1:A:17:LEU:HD13	1:A:17:LEU:C	0.83	1.96	7	3
1:A:17:LEU:C	1:A:17:LEU:HD22	0.81	2.00	9	1
1:A:158:PHE:CZ	1:A:159:PHE:CE2	0.81	2.69	10	1
1:A:123:LEU:C	1:A:123:LEU:HD13	0.80	2.02	9	3
1:A:112:ASP:CG	1:A:113:GLY:N	0.79	2.40	1	2
1:A:108:LEU:HD22	1:A:108:LEU:O	0.79	1.76	5	2
1:A:32:TYR:CZ	1:A:36:LEU:HD11	0.79	2.13	7	6
1:A:66:ALA:O	1:A:69:VAL:HG12	0.77	1.80	5	2
1:A:83:PHE:CZ	1:A:87:VAL:CG2	0.77	2.68	9	6
1:A:36:LEU:C	1:A:36:LEU:HD13	0.76	2.05	1	1
1:A:57:PHE:CE1	2:B:9:VAL:HG11	0.76	2.14	2	5
1:A:91:HIS:ND1	1:A:91:HIS:C	0.76	2.44	5	2
1:A:73:PHE:CE2	1:A:81:LEU:HD21	0.76	2.15	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:LEU:HD13	1:A:10:SER:N	0.75	1.94	8	1
1:A:20:ASN:O	1:A:21:THR:HG22	0.75	1.80	10	1
1:A:17:LEU:HD22	1:A:17:LEU:O	0.74	1.83	9	1
1:A:146:ASN:ND2	1:A:146:ASN:H	0.74	1.80	3	1
1:A:13:ILE:HG21	1:A:28:LEU:HD23	0.74	1.59	3	1
1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:CD	0.73	1.96	3	2
1:A:65:TYR:CD2	1:A:132:MET:SD	0.73	2.81	5	1
1:A:183:LEU:HD12	1:A:184:ARG:H	0.73	1.42	1	1
1:A:90:LEU:HD21	2:B:10:VAL:CG1	0.72	2.14	8	5
1:A:17:LEU:HD13	1:A:18:GLN:H	0.71	1.40	9	2
1:A:177:LEU:C	1:A:177:LEU:HD13	0.71	2.10	2	4
1:A:70:PHE:CD2	1:A:81:LEU:HD12	0.71	2.19	10	3
1:A:53:TYR:CD2	1:A:57:PHE:CE1	0.71	2.79	4	2
1:A:171:GLU:N	1:A:171:GLU:CD	0.71	2.49	9	3
1:A:90:LEU:HD11	2:B:10:VAL:HB	0.71	1.61	5	7
1:A:114:ASN:HD22	1:A:114:ASN:N	0.71	1.84	10	1
1:A:12:GLU:CD	1:A:12:GLU:N	0.70	2.50	2	1
1:A:161:LYS:HZ2	1:A:167:LEU:HD13	0.70	1.44	4	1
1:A:31:TRP:CD1	1:A:83:PHE:CE1	0.70	2.79	6	5
1:A:57:PHE:CZ	2:B:9:VAL:HG11	0.70	2.20	6	5
1:A:17:LEU:CD2	1:A:18:GLN:N	0.70	2.51	8	1
2:B:6:LEU:HD12	2:B:6:LEU:N	0.70	2.02	7	1
1:A:91:HIS:HD1	1:A:92:MET:N	0.69	1.84	8	1
1:A:53:TYR:CE2	1:A:57:PHE:CZ	0.69	2.80	1	3
2:B:12:ASN:HD22	2:B:12:ASN:N	0.69	1.85	4	2
1:A:91:HIS:C	1:A:91:HIS:HD1	0.68	1.96	5	1
1:A:74:ASP:C	1:A:76:ASN:H	0.68	1.96	4	9
1:A:31:TRP:CD1	1:A:83:PHE:CZ	0.68	2.81	8	6
1:A:57:PHE:O	1:A:59:GLU:N	0.68	2.26	8	1
1:A:31:TRP:CG	1:A:83:PHE:CZ	0.68	2.82	6	3
1:A:81:LEU:H	1:A:81:LEU:CD2	0.68	2.02	2	1
1:A:73:PHE:CE2	1:A:89:ALA:HB2	0.68	2.24	10	1
1:A:103:GLU:CD	1:A:104:TRP:N	0.67	2.52	5	1
1:A:20:ASN:ND2	1:A:99:ASN:HD21	0.67	1.87	3	1
1:A:17:LEU:HD22	1:A:18:GLN:H	0.67	1.44	8	1
1:A:17:LEU:HD12	1:A:18:GLN:H	0.67	1.49	2	3
1:A:17:LEU:CD1	1:A:18:GLN:H	0.67	2.02	6	2
1:A:183:LEU:O	1:A:183:LEU:HD12	0.67	1.90	3	1
1:A:140:HIS:ND1	1:A:140:HIS:C	0.67	2.53	3	2
1:A:52:ILE:HG23	2:B:13:SER:OG	0.67	1.90	9	2
1:A:70:PHE:CZ	1:A:74:ASP:OD2	0.67	2.48	3	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:TYR:OH	2:B:14:ALA:HB2	0.67	1.89	10	2
1:A:70:PHE:CE1	1:A:74:ASP:OD2	0.66	2.48	10	3
1:A:70:PHE:CE2	1:A:81:LEU:HD12	0.66	2.24	10	2
2:B:6:LEU:N	2:B:6:LEU:CD2	0.66	2.58	6	3
1:A:17:LEU:C	1:A:17:LEU:CD1	0.66	2.68	7	3
1:A:146:ASN:HD22	1:A:146:ASN:N	0.66	1.89	3	2
1:A:81:LEU:N	1:A:81:LEU:CD2	0.66	2.58	6	5
1:A:32:TYR:CE1	1:A:36:LEU:HD11	0.66	2.26	5	3
1:A:19:LEU:HD22	1:A:19:LEU:N	0.65	2.07	8	1
1:A:73:PHE:C	1:A:73:PHE:CD1	0.65	2.73	2	2
1:A:52:ILE:HG23	2:B:13:SER:CB	0.65	2.22	4	8
1:A:186:ILE:HG23	1:A:188:PHE:H	0.65	1.51	5	1
1:A:70:PHE:CE2	1:A:74:ASP:OD2	0.65	2.50	4	5
1:A:18:GLN:NE2	1:A:19:LEU:N	0.64	2.45	5	1
1:A:155:ILE:O	1:A:158:PHE:CD1	0.64	2.50	10	1
1:A:35:PHE:CZ	1:A:44:ILE:HD11	0.64	2.28	1	1
1:A:53:TYR:CD2	1:A:57:PHE:CZ	0.64	2.86	9	2
1:A:25:GLU:H	1:A:25:GLU:CD	0.64	1.99	8	2
1:A:108:LEU:C	1:A:108:LEU:CD1	0.64	2.70	7	7
1:A:91:HIS:ND1	1:A:92:MET:N	0.64	2.45	8	1
1:A:16:GLU:CG	1:A:20:ASN:HD21	0.64	2.06	1	1
1:A:57:PHE:N	1:A:58:PRO:CD	0.63	2.60	2	4
1:A:187:GLN:C	1:A:188:PHE:CD1	0.63	2.77	2	1
1:A:70:PHE:CE1	1:A:81:LEU:HD12	0.63	2.28	4	2
1:A:20:ASN:HD22	1:A:20:ASN:N	0.63	1.92	2	1
1:A:114:ASN:HD22	1:A:114:ASN:H	0.63	1.35	10	1
1:A:115:GLY:O	1:A:116:THR:HG23	0.63	1.93	8	4
1:A:149:GLU:H	1:A:149:GLU:CD	0.63	2.01	7	1
1:A:156:TRP:CD2	1:A:161:LYS:NZ	0.63	2.67	10	1
1:A:53:TYR:CE1	2:B:10:VAL:HG22	0.63	2.29	3	5
1:A:171:GLU:OE1	1:A:171:GLU:N	0.63	2.32	2	1
1:A:177:LEU:C	1:A:177:LEU:HD23	0.62	2.19	10	1
1:A:186:ILE:HG23	1:A:187:GLN:N	0.62	2.08	2	3
1:A:76:ASN:HD22	1:A:77:SER:H	0.62	1.36	2	1
1:A:9:LEU:HD22	1:A:13:ILE:HD11	0.62	1.69	5	2
1:A:90:LEU:N	1:A:90:LEU:CD2	0.62	2.62	9	6
1:A:158:PHE:CG	1:A:182:ILE:HD11	0.62	2.29	3	1
1:A:111:VAL:HG23	1:A:112:ASP:N	0.62	2.08	5	4
1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HZ3	0.62	1.35	8	1
1:A:28:LEU:HD12	1:A:28:LEU:N	0.62	2.10	1	3
1:A:144:ASP:N	1:A:144:ASP:OD1	0.62	2.33	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:70:PHE:CE1	1:A:81:LEU:CD2	0.62	2.83	6	2
1:A:19:LEU:H	1:A:19:LEU:CD2	0.62	2.08	8	1
1:A:69:VAL:CG1	1:A:70:PHE:N	0.61	2.63	9	5
1:A:122:VAL:CG2	1:A:123:LEU:N	0.61	2.62	9	6
1:A:112:ASP:CG	1:A:113:GLY:H	0.61	2.03	1	2
1:A:76:ASN:HD22	1:A:77:SER:N	0.61	1.90	2	1
1:A:107:SER:OG	1:A:108:LEU:N	0.61	2.32	7	2
1:A:112:ASP:OD1	1:A:112:ASP:N	0.61	2.33	3	2
1:A:186:ILE:CG2	1:A:187:GLN:N	0.61	2.63	2	2
1:A:109:TYR:CE2	1:A:122:VAL:HG12	0.61	2.31	6	1
1:A:24:THR:HG23	1:A:24:THR:O	0.61	1.95	3	1
1:A:146:ASN:ND2	1:A:146:ASN:N	0.61	2.44	3	1
1:A:165:ASP:N	1:A:165:ASP:OD1	0.61	2.30	7	1
2:B:7:GLU:C	2:B:7:GLU:CD	0.61	2.69	7	1
1:A:73:PHE:C	1:A:75:ALA:H	0.61	2.02	6	1
1:A:17:LEU:HD12	1:A:18:GLN:N	0.61	2.10	6	2
1:A:82:ASP:N	1:A:82:ASP:OD1	0.61	2.33	9	3
1:A:73:PHE:C	1:A:75:ALA:N	0.61	2.56	6	1
1:A:61:ASP:N	1:A:61:ASP:OD1	0.61	2.33	10	1
1:A:49:PHE:CE2	1:A:86:TYR:CE2	0.61	2.89	1	5
1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CD	0.60	2.59	1	1
1:A:49:PHE:CZ	1:A:86:TYR:CE2	0.60	2.88	1	1
1:A:16:GLU:O	1:A:18:GLN:N	0.60	2.34	5	5
1:A:61:ASP:C	1:A:63:LYS:H	0.60	2.04	9	9
2:B:9:VAL:CG1	2:B:10:VAL:N	0.60	2.64	8	3
1:A:25:GLU:CD	1:A:25:GLU:N	0.60	2.58	8	2
1:A:65:TYR:O	1:A:69:VAL:HG23	0.60	1.96	3	1
1:A:183:LEU:C	1:A:183:LEU:CD1	0.60	2.72	4	2
1:A:41:SER:OG	1:A:42:GLY:N	0.60	2.31	10	1
1:A:109:TYR:OH	1:A:155:ILE:HD13	0.60	1.97	6	1
2:B:11:ALA:O	2:B:15:PHE:N	0.60	2.33	6	1
1:A:17:LEU:CD1	1:A:17:LEU:N	0.60	2.65	8	1
1:A:28:LEU:N	1:A:28:LEU:CD1	0.60	2.64	1	2
1:A:25:GLU:CD	1:A:25:GLU:C	0.60	2.70	7	1
1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CD1	0.60	2.69	6	5
1:A:29:SER:OG	1:A:30:SER:N	0.60	2.32	7	2
1:A:61:ASP:N	1:A:62:PRO:HD3	0.59	2.12	8	6
2:B:13:SER:OG	2:B:14:ALA:N	0.59	2.33	6	3
2:B:16:ILE:CD1	2:B:16:ILE:C	0.59	2.74	2	1
1:A:16:GLU:C	1:A:17:LEU:HD13	0.59	2.22	8	1
1:A:70:PHE:CD2	1:A:81:LEU:CD1	0.59	2.85	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:187:GLN:C	1:A:188:PHE:CG	0.59	2.80	2	1
1:A:17:LEU:C	1:A:17:LEU:CD2	0.59	2.72	9	1
1:A:138:THR:C	1:A:140:HIS:H	0.59	2.06	10	3
1:A:9:LEU:HD21	1:A:13:ILE:HD12	0.59	1.74	7	1
1:A:123:LEU:C	1:A:123:LEU:CD1	0.59	2.75	9	3
1:A:111:VAL:C	1:A:112:ASP:CG	0.59	2.70	4	3
2:B:9:VAL:HG12	2:B:10:VAL:N	0.59	2.11	10	4
1:A:180:LYS:C	1:A:182:ILE:H	0.59	2.05	6	3
1:A:28:LEU:HD12	1:A:29:SER:N	0.59	2.13	10	1
1:A:73:PHE:CE2	1:A:81:LEU:HD12	0.58	2.32	5	2
1:A:100:GLN:C	1:A:102:LEU:H	0.58	2.06	5	1
1:A:92:MET:C	1:A:94:SER:H	0.58	2.06	2	7
1:A:18:GLN:C	1:A:20:ASN:H	0.58	2.07	2	3
1:A:52:ILE:CD1	1:A:86:TYR:OH	0.58	2.51	8	3
1:A:98:THR:OG1	1:A:99:ASN:N	0.58	2.33	3	2
2:B:6:LEU:HD22	2:B:6:LEU:N	0.58	2.14	3	1
1:A:65:TYR:O	1:A:68:HIS:N	0.58	2.37	4	1
1:A:156:TRP:CE2	1:A:161:LYS:NZ	0.58	2.71	10	1
1:A:18:GLN:C	1:A:20:ASN:N	0.58	2.62	1	4
1:A:143:GLU:CD	1:A:143:GLU:H	0.58	2.06	10	2
1:A:177:LEU:HD23	1:A:177:LEU:O	0.58	1.98	10	1
1:A:177:LEU:C	1:A:177:LEU:CD1	0.58	2.77	2	4
1:A:169:GLU:CD	1:A:169:GLU:C	0.58	2.72	4	2
1:A:53:TYR:CE2	2:B:10:VAL:HG22	0.58	2.34	6	1
1:A:143:GLU:C	1:A:144:ASP:CG	0.58	2.70	10	1
1:A:31:TRP:CD2	2:B:15:PHE:CE2	0.58	2.91	2	1
1:A:35:PHE:C	1:A:35:PHE:CD1	0.58	2.81	7	2
1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CD2	0.58	2.66	2	6
1:A:166:LYS:CD	1:A:166:LYS:N	0.58	2.67	3	1
1:A:19:LEU:HD22	1:A:19:LEU:H	0.58	1.57	8	1
1:A:36:LEU:C	1:A:36:LEU:CD1	0.57	2.76	1	1
1:A:74:ASP:C	1:A:76:ASN:N	0.57	2.60	4	8
1:A:9:LEU:O	1:A:12:GLU:N	0.57	2.36	4	10
1:A:31:TRP:NE1	2:B:15:PHE:CE1	0.57	2.71	7	1
2:B:11:ALA:O	2:B:15:PHE:CD1	0.57	2.58	7	8
1:A:61:ASP:N	1:A:62:PRO:CD	0.57	2.67	8	4
1:A:47:GLN:CG	1:A:48:GLU:N	0.57	2.66	9	2
1:A:151:ARG:NH2	1:A:187:GLN:NE2	0.57	2.51	5	1
1:A:75:ALA:C	1:A:77:SER:H	0.57	2.08	9	7
1:A:143:GLU:CD	1:A:144:ASP:H	0.57	2.06	1	2
1:A:9:LEU:O	1:A:10:SER:C	0.57	2.48	3	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:PHE:O	1:A:57:PHE:C	0.57	2.48	9	5
2:B:6:LEU:N	2:B:6:LEU:CD1	0.57	2.67	7	1
1:A:122:VAL:HG23	1:A:123:LEU:N	0.57	2.14	7	4
1:A:129:ILE:HD11	1:A:188:PHE:CD1	0.57	2.34	5	1
1:A:34:SER:OG	1:A:35:PHE:N	0.57	2.36	1	1
1:A:92:MET:C	1:A:94:SER:N	0.57	2.61	8	6
1:A:151:ARG:NH2	1:A:187:GLN:CD	0.57	2.63	5	1
1:A:102:LEU:HD22	1:A:102:LEU:N	0.57	2.14	10	3
1:A:143:GLU:C	1:A:145:GLU:H	0.57	2.08	2	3
1:A:183:LEU:N	1:A:183:LEU:CD2	0.57	2.68	7	1
1:A:76:ASN:C	1:A:78:ASP:N	0.56	2.60	5	2
1:A:140:HIS:O	1:A:141:LEU:C	0.56	2.48	4	2
2:B:6:LEU:N	2:B:6:LEU:HD22	0.56	2.14	9	2
1:A:135:PRO:C	1:A:137:ASP:N	0.56	2.63	9	4
1:A:53:TYR:OH	2:B:10:VAL:CG2	0.56	2.54	8	2
1:A:25:GLU:CD	1:A:25:GLU:H	0.56	2.08	1	1
1:A:48:GLU:O	1:A:51:THR:N	0.56	2.38	8	10
1:A:182:ILE:O	1:A:185:LEU:N	0.56	2.39	8	2
1:A:76:ASN:O	1:A:78:ASP:N	0.56	2.36	2	2
1:A:108:LEU:C	1:A:108:LEU:HD22	0.56	2.25	5	2
1:A:57:PHE:CE2	2:B:9:VAL:HG11	0.56	2.36	3	2
1:A:57:PHE:C	1:A:59:GLU:H	0.56	2.08	8	1
1:A:31:TRP:O	1:A:34:SER:N	0.56	2.38	2	4
1:A:70:PHE:CE2	1:A:81:LEU:HD21	0.56	2.35	2	1
1:A:31:TRP:NE1	1:A:83:PHE:CE1	0.56	2.74	8	4
1:A:8:ALA:O	1:A:10:SER:N	0.56	2.38	7	4
1:A:23:PHE:C	1:A:24:THR:HG23	0.56	2.24	2	1
1:A:76:ASN:HD21	1:A:85:GLU:CD	0.56	2.09	4	1
1:A:110:ASP:OD2	1:A:116:THR:N	0.56	2.39	4	1
1:A:16:GLU:C	1:A:18:GLN:H	0.56	2.08	5	2
1:A:188:PHE:O	1:A:188:PHE:CG	0.56	2.59	10	1
1:A:39:CYS:C	1:A:41:SER:H	0.56	2.09	8	7
1:A:156:TRP:NE1	1:A:161:LYS:O	0.56	2.38	1	3
1:A:108:LEU:CD2	1:A:108:LEU:C	0.56	2.79	4	3
1:A:158:PHE:CD2	1:A:182:ILE:HD11	0.56	2.36	3	1
1:A:106:PHE:CZ	1:A:115:GLY:O	0.56	2.59	9	3
1:A:172:PHE:O	1:A:176:THR:HG23	0.55	2.00	2	2
1:A:19:LEU:HD21	1:A:100:GLN:CG	0.55	2.31	5	1
1:A:49:PHE:CZ	1:A:86:TYR:CE1	0.55	2.94	5	2
1:A:135:PRO:C	1:A:137:ASP:H	0.55	2.09	9	3
1:A:187:GLN:O	1:A:188:PHE:CG	0.55	2.60	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:143:GLU:C	1:A:145:GLU:N	0.55	2.63	6	4
1:A:21:THR:C	1:A:23:PHE:H	0.55	2.08	6	1
1:A:17:LEU:CD1	1:A:18:GLN:N	0.55	2.65	7	3
1:A:9:LEU:CD1	1:A:10:SER:N	0.55	2.69	8	1
1:A:20:ASN:C	1:A:22:LYS:H	0.55	2.09	10	1
1:A:100:GLN:C	1:A:102:LEU:N	0.55	2.62	5	1
1:A:90:LEU:HD11	2:B:10:VAL:HG13	0.55	1.77	7	2
1:A:106:PHE:CE2	1:A:115:GLY:O	0.55	2.60	6	2
1:A:69:VAL:O	1:A:73:PHE:CE1	0.55	2.60	4	1
1:A:9:LEU:HD23	1:A:10:SER:N	0.55	2.17	10	3
1:A:18:GLN:O	1:A:20:ASN:N	0.55	2.40	1	4
1:A:70:PHE:CD1	1:A:81:LEU:HD12	0.55	2.37	8	2
1:A:155:ILE:O	1:A:157:GLY:N	0.55	2.40	10	1
1:A:14:LEU:O	1:A:17:LEU:N	0.54	2.40	2	9
1:A:74:ASP:CG	1:A:81:LEU:HD13	0.54	2.27	2	1
1:A:92:MET:N	1:A:92:MET:SD	0.54	2.80	1	1
1:A:180:LYS:C	1:A:182:ILE:N	0.54	2.65	7	3
1:A:114:ASN:CG	1:A:115:GLY:N	0.54	2.64	2	2
1:A:86:TYR:CZ	2:B:10:VAL:HG12	0.54	2.37	10	3
1:A:91:HIS:O	1:A:95:ALA:N	0.54	2.40	8	3
1:A:23:PHE:C	1:A:24:THR:OG1	0.54	2.50	10	3
2:B:4:GLY:O	2:B:6:LEU:N	0.54	2.40	9	1
1:A:78:ASP:OD1	1:A:78:ASP:C	0.54	2.51	10	1
2:B:15:PHE:O	2:B:16:ILE:C	0.54	2.51	5	2
1:A:13:ILE:O	1:A:16:GLU:N	0.54	2.41	8	3
1:A:24:THR:O	1:A:26:GLU:N	0.54	2.41	6	6
1:A:171:GLU:CD	1:A:171:GLU:H	0.54	2.10	2	3
1:A:16:GLU:C	1:A:18:GLN:N	0.54	2.64	5	3
1:A:143:GLU:CD	1:A:144:ASP:N	0.54	2.66	1	2
2:B:11:ALA:O	2:B:13:SER:N	0.54	2.41	6	1
1:A:131:LYS:C	1:A:133:ILE:N	0.54	2.65	7	1
1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:CD2	0.54	2.69	8	1
1:A:76:ASN:O	1:A:76:ASN:CG	0.54	2.51	5	8
1:A:9:LEU:O	1:A:11:LYS:N	0.54	2.41	3	3
1:A:90:LEU:N	1:A:90:LEU:HD22	0.54	2.17	4	3
1:A:73:PHE:CE2	1:A:81:LEU:CD1	0.54	2.90	5	1
2:B:12:ASN:N	2:B:12:ASN:ND2	0.54	2.56	4	1
1:A:103:GLU:OE1	1:A:103:GLU:C	0.54	2.51	5	1
1:A:162:LYS:N	1:A:165:ASP:OD2	0.54	2.32	5	1
1:A:17:LEU:N	1:A:17:LEU:HD13	0.54	2.17	8	1
1:A:14:LEU:C	1:A:16:GLU:N	0.54	2.63	9	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:111:VAL:C	1:A:112:ASP:OD1	0.54	2.50	3	2
1:A:151:ARG:O	1:A:154:LYS:N	0.54	2.41	6	8
1:A:179:ASN:C	1:A:181:GLU:H	0.54	2.10	1	1
1:A:162:LYS:O	1:A:164:ASP:N	0.54	2.40	9	2
1:A:76:ASN:C	1:A:78:ASP:H	0.53	2.11	2	2
1:A:112:ASP:OD1	1:A:113:GLY:N	0.53	2.40	4	1
1:A:103:GLU:OE1	1:A:104:TRP:N	0.53	2.40	5	1
1:A:151:ARG:HH22	1:A:187:GLN:CD	0.53	2.12	5	1
1:A:138:THR:C	1:A:140:HIS:N	0.53	2.65	10	2
1:A:14:LEU:C	1:A:14:LEU:HD13	0.53	2.29	9	1
1:A:43:ARG:NE	1:A:80:THR:OG1	0.53	2.38	9	1
1:A:109:TYR:CE1	1:A:125:ILE:HG21	0.53	2.39	3	1
1:A:52:ILE:HG23	2:B:13:SER:HB3	0.53	1.80	4	3
1:A:114:ASN:N	1:A:114:ASN:OD1	0.53	2.41	5	2
2:B:16:ILE:C	2:B:16:ILE:CD1	0.53	2.71	5	2
1:A:23:PHE:O	1:A:25:GLU:N	0.53	2.41	1	2
1:A:108:LEU:C	1:A:108:LEU:HD23	0.53	2.28	2	3
1:A:114:ASN:ND2	1:A:116:THR:H	0.53	2.01	2	1
1:A:23:PHE:O	1:A:24:THR:HG23	0.53	2.02	5	1
1:A:32:TYR:CE1	1:A:36:LEU:CD1	0.53	2.91	5	3
1:A:111:VAL:CG2	1:A:112:ASP:N	0.53	2.71	5	3
1:A:32:TYR:CZ	1:A:36:LEU:CD1	0.53	2.91	7	2
1:A:73:PHE:O	1:A:75:ALA:N	0.53	2.42	6	1
1:A:24:THR:C	1:A:26:GLU:N	0.53	2.65	6	8
1:A:102:LEU:CD2	1:A:102:LEU:H	0.53	2.16	10	3
1:A:135:PRO:O	1:A:137:ASP:N	0.53	2.42	6	4
1:A:169:GLU:C	1:A:169:GLU:OE1	0.53	2.52	4	1
1:A:18:GLN:HE22	1:A:92:MET:CE	0.53	2.17	10	1
1:A:112:ASP:OD2	1:A:121:GLU:CD	0.53	2.51	2	1
1:A:156:TRP:CH2	1:A:161:LYS:NZ	0.53	2.77	9	1
1:A:82:ASP:OD1	1:A:83:PHE:N	0.53	2.42	10	1
1:A:92:MET:O	1:A:94:SER:N	0.53	2.42	8	5
1:A:56:PHE:O	1:A:58:PRO:N	0.53	2.42	7	3
1:A:25:GLU:OE1	1:A:25:GLU:N	0.53	2.40	3	1
1:A:179:ASN:OD1	1:A:180:LYS:N	0.53	2.42	3	1
1:A:144:ASP:C	1:A:146:ASN:H	0.53	2.10	4	2
1:A:100:GLN:O	1:A:102:LEU:N	0.53	2.42	5	1
1:A:21:THR:C	1:A:23:PHE:N	0.53	2.67	6	1
1:A:143:GLU:O	1:A:145:GLU:N	0.53	2.42	8	4
1:A:183:LEU:HD12	1:A:183:LEU:C	0.53	2.28	3	1
1:A:9:LEU:CD2	1:A:9:LEU:C	0.53	2.82	6	2

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:68:HIS:CD2	0.53	2.62	5	2
1:A:137:ASP:O	1:A:140:HIS:CD2	0.53	2.61	5	1
1:A:22:LYS:O	1:A:24:THR:N	0.53	2.42	6	1
1:A:143:GLU:OE2	1:A:144:ASP:N	0.53	2.42	9	1
1:A:57:PHE:N	1:A:58:PRO:HD3	0.52	2.18	3	4
1:A:108:LEU:CD1	1:A:109:TYR:N	0.52	2.69	9	3
1:A:118:SER:C	1:A:120:ASN:N	0.52	2.66	9	2
1:A:132:MET:SD	1:A:132:MET:O	0.52	2.67	2	2
1:A:78:ASP:O	1:A:80:THR:N	0.52	2.42	3	1
1:A:68:HIS:CE1	1:A:111:VAL:HG11	0.52	2.39	7	1
1:A:19:LEU:O	1:A:19:LEU:HD23	0.52	2.03	5	1
1:A:14:LEU:HD13	1:A:14:LEU:O	0.52	2.03	9	1
1:A:16:GLU:O	1:A:17:LEU:C	0.52	2.53	6	5
1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:HD22	0.52	2.18	2	3
1:A:136:GLU:O	1:A:140:HIS:NE2	0.52	2.42	4	1
1:A:164:ASP:N	1:A:164:ASP:OD1	0.52	2.42	6	2
1:A:180:LYS:O	1:A:182:ILE:N	0.52	2.42	6	2
1:A:73:PHE:O	1:A:73:PHE:CG	0.52	2.63	10	2
1:A:27:GLU:C	1:A:29:SER:N	0.52	2.64	10	1
1:A:20:ASN:N	1:A:20:ASN:ND2	0.52	2.56	2	1
1:A:151:ARG:HH22	1:A:187:GLN:NE2	0.52	2.03	5	1
1:A:83:PHE:CE1	1:A:87:VAL:CG2	0.52	2.92	6	2
1:A:112:ASP:OD2	1:A:114:ASN:ND2	0.52	2.42	8	1
1:A:74:ASP:OD1	1:A:81:LEU:N	0.52	2.43	10	1
1:A:86:TYR:OH	2:B:10:VAL:HG12	0.52	2.04	9	2
1:A:50:GLN:NE2	1:A:67:GLN:OE1	0.52	2.42	6	2
1:A:9:LEU:CD2	1:A:13:ILE:HD12	0.52	2.33	7	1
1:A:17:LEU:C	1:A:19:LEU:N	0.52	2.66	9	1
1:A:24:THR:O	1:A:27:GLU:N	0.52	2.42	7	4
1:A:155:ILE:O	1:A:158:PHE:N	0.52	2.40	10	1
1:A:18:GLN:O	1:A:20:ASN:ND2	0.52	2.43	2	1
1:A:114:ASN:OD1	1:A:115:GLY:N	0.52	2.43	9	3
1:A:38:GLU:O	1:A:39:CYS:SG	0.51	2.68	2	4
1:A:47:GLN:CD	1:A:48:GLU:N	0.51	2.68	5	1
1:A:9:LEU:HD21	1:A:13:ILE:CD1	0.51	2.35	10	3
1:A:70:PHE:CE1	1:A:81:LEU:HD23	0.51	2.40	6	1
1:A:20:ASN:OD1	1:A:100:GLN:NE2	0.51	2.43	8	1
1:A:73:PHE:CE1	1:A:81:LEU:HD11	0.51	2.41	10	2
1:A:160:GLY:O	1:A:161:LYS:C	0.51	2.53	7	2
2:B:4:GLY:C	2:B:6:LEU:N	0.51	2.67	9	2
1:A:20:ASN:O	1:A:22:LYS:N	0.51	2.41	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:88:ILE:O	1:A:92:MET:SD	0.51	2.69	1	1
1:A:107:SER:O	1:A:110:ASP:N	0.51	2.43	1	1
1:A:114:ASN:CG	1:A:115:GLY:H	0.51	2.12	2	2
2:B:11:ALA:C	2:B:13:SER:N	0.51	2.66	6	2
1:A:101:LYS:HZ3	1:A:101:LYS:HB2	0.51	1.65	6	1
2:B:6:LEU:HD23	2:B:6:LEU:N	0.51	2.21	8	1
1:A:138:THR:O	1:A:140:HIS:N	0.51	2.43	3	3
1:A:158:PHE:C	1:A:158:PHE:CD1	0.51	2.88	3	1
1:A:161:LYS:NZ	1:A:167:LEU:HD13	0.51	2.19	4	1
1:A:151:ARG:NH2	1:A:187:GLN:OE1	0.51	2.43	5	1
1:A:188:PHE:O	1:A:188:PHE:CD2	0.51	2.64	10	1
1:A:125:ILE:HD13	1:A:125:ILE:N	0.51	2.20	4	3
1:A:171:GLU:O	1:A:174:GLU:N	0.51	2.44	9	7
2:B:8:THR:O	2:B:12:ASN:ND2	0.51	2.44	3	2
1:A:47:GLN:NE2	1:A:48:GLU:CA	0.51	2.74	5	1
1:A:61:ASP:O	1:A:63:LYS:N	0.51	2.43	1	4
1:A:110:ASP:C	1:A:110:ASP:OD1	0.51	2.52	1	1
1:A:182:ILE:O	1:A:183:LEU:C	0.51	2.54	8	5
1:A:118:SER:O	1:A:121:GLU:N	0.51	2.42	6	3
1:A:177:LEU:HD13	1:A:177:LEU:O	0.51	2.06	3	3
1:A:183:LEU:N	1:A:183:LEU:HD22	0.51	2.21	7	1
2:B:15:PHE:CD1	2:B:15:PHE:N	0.51	2.77	10	2
1:A:62:PRO:O	1:A:65:TYR:N	0.51	2.44	8	1
1:A:56:PHE:C	1:A:58:PRO:CD	0.50	2.83	2	2
1:A:143:GLU:CD	1:A:143:GLU:N	0.50	2.69	8	3
1:A:17:LEU:O	1:A:18:GLN:CB	0.50	2.59	10	3
1:A:183:LEU:HD13	1:A:183:LEU:O	0.50	2.06	2	2
1:A:169:GLU:OE1	1:A:170:LYS:N	0.50	2.44	4	1
1:A:12:GLU:O	1:A:15:GLU:N	0.50	2.45	5	1
1:A:125:ILE:H	1:A:125:ILE:HD12	0.50	1.64	7	1
1:A:142:PRO:O	1:A:146:ASN:ND2	0.50	2.43	8	1
1:A:21:THR:O	1:A:91:HIS:NE2	0.50	2.44	4	1
1:A:82:ASP:C	1:A:84:LYS:N	0.50	2.69	6	1
1:A:123:LEU:HD13	1:A:123:LEU:O	0.50	2.06	7	3
1:A:73:PHE:CD1	1:A:74:ASP:N	0.50	2.79	2	1
1:A:66:ALA:O	1:A:69:VAL:HG22	0.50	2.05	4	1
1:A:73:PHE:CZ	1:A:81:LEU:CD1	0.50	2.95	9	2
1:A:39:CYS:C	1:A:41:SER:N	0.50	2.67	10	7
1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HD2	0.50	1.67	3	1
1:A:46:ARG:CG	1:A:70:PHE:CE2	0.50	2.94	6	1
1:A:60:ALA:CB	1:A:132:MET:O	0.50	2.60	2	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:HIS:O	1:A:95:ALA:HB3	0.50	2.06	1	1
1:A:78:ASP:C	1:A:80:THR:N	0.50	2.70	3	1
1:A:47:GLN:NE2	1:A:48:GLU:N	0.49	2.59	5	1
1:A:20:ASN:N	1:A:20:ASN:OD1	0.49	2.45	6	1
1:A:53:TYR:OH	2:B:10:VAL:HG21	0.49	2.07	8	1
1:A:183:LEU:CD1	1:A:184:ARG:H	0.49	2.19	1	1
1:A:26:GLU:CD	1:A:26:GLU:C	0.49	2.80	10	2
1:A:40:PRO:O	1:A:41:SER:CB	0.49	2.60	2	1
1:A:74:ASP:CG	1:A:81:LEU:CD1	0.49	2.85	2	1
1:A:185:LEU:O	1:A:185:LEU:HD23	0.49	2.07	5	1
1:A:27:GLU:C	1:A:29:SER:H	0.49	2.16	10	1
1:A:147:THR:OG1	1:A:150:LYS:CG	0.49	2.61	7	2
1:A:118:SER:O	1:A:120:ASN:N	0.49	2.45	9	2
1:A:151:ARG:C	1:A:153:GLU:N	0.49	2.69	4	1
1:A:17:LEU:O	1:A:19:LEU:N	0.49	2.44	1	2
1:A:58:PRO:O	1:A:59:GLU:C	0.49	2.56	3	4
1:A:114:ASN:O	1:A:116:THR:N	0.49	2.45	3	2
2:B:6:LEU:CD1	2:B:6:LEU:H	0.49	2.21	7	1
1:A:61:ASP:C	1:A:63:LYS:N	0.49	2.71	9	9
1:A:172:PHE:C	1:A:172:PHE:CD1	0.49	2.91	2	2
1:A:102:LEU:H	1:A:102:LEU:CD2	0.49	2.21	7	2
1:A:183:LEU:HD12	1:A:184:ARG:N	0.49	2.17	1	1
1:A:163:ASP:N	1:A:163:ASP:OD1	0.49	2.44	9	3
1:A:82:ASP:O	1:A:84:LYS:N	0.49	2.45	6	1
1:A:162:LYS:C	1:A:164:ASP:N	0.49	2.70	8	1
1:A:188:PHE:CD1	1:A:188:PHE:N	0.49	2.78	9	1
1:A:158:PHE:CZ	1:A:159:PHE:CD2	0.49	2.98	10	1
1:A:110:ASP:OD1	1:A:112:ASP:OD2	0.49	2.30	1	1
1:A:140:HIS:ND1	1:A:140:HIS:O	0.49	2.46	3	1
1:A:27:GLU:O	1:A:29:SER:N	0.49	2.46	10	1
1:A:111:VAL:O	1:A:112:ASP:CB	0.49	2.61	2	3
1:A:9:LEU:C	1:A:9:LEU:HD23	0.49	2.32	5	2
1:A:14:LEU:O	1:A:17:LEU:HD12	0.49	2.07	7	3
1:A:13:ILE:O	1:A:16:GLU:CB	0.49	2.61	10	3
1:A:108:LEU:C	1:A:110:ASP:H	0.48	2.15	3	3
1:A:113:GLY:C	1:A:114:ASN:HD22	0.48	2.16	3	1
1:A:117:ILE:CG2	1:A:118:SER:N	0.48	2.76	5	2
1:A:17:LEU:CD2	1:A:18:GLN:H	0.48	2.16	8	1
1:A:76:ASN:O	1:A:77:SER:CB	0.48	2.60	9	2
1:A:44:ILE:HG23	1:A:48:GLU:OE1	0.48	2.08	4	1
1:A:73:PHE:CZ	1:A:89:ALA:CB	0.48	2.96	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:ASN:ND2	1:A:20:ASN:O	0.48	2.47	2	1
1:A:13:ILE:HG21	1:A:28:LEU:CD2	0.48	2.32	3	1
1:A:114:ASN:O	1:A:115:GLY:C	0.48	2.56	3	3
1:A:44:ILE:HD12	1:A:86:TYR:CD1	0.48	2.43	5	1
1:A:143:GLU:O	1:A:144:ASP:CB	0.48	2.61	9	2
1:A:186:ILE:O	1:A:188:PHE:N	0.48	2.47	3	2
1:A:155:ILE:O	1:A:156:TRP:C	0.48	2.56	10	1
1:A:78:ASP:OD2	1:A:80:THR:N	0.48	2.46	1	1
1:A:52:ILE:HD13	1:A:86:TYR:OH	0.48	2.09	8	2
1:A:31:TRP:CE2	2:B:15:PHE:CE1	0.48	3.01	7	1
1:A:146:ASN:O	1:A:146:ASN:ND2	0.48	2.47	2	1
1:A:22:LYS:CE	1:A:22:LYS:N	0.48	2.76	5	1
1:A:9:LEU:HD22	1:A:13:ILE:CD1	0.48	2.39	6	1
1:A:31:TRP:CE2	2:B:15:PHE:CZ	0.48	3.01	7	1
1:A:145:GLU:O	1:A:151:ARG:NE	0.48	2.46	10	2
1:A:164:ASP:CG	1:A:165:ASP:H	0.48	2.17	7	1
1:A:70:PHE:CD1	1:A:74:ASP:HB3	0.48	2.43	3	1
2:B:8:THR:O	2:B:12:ASN:CG	0.48	2.57	4	2
1:A:140:HIS:CG	1:A:140:HIS:O	0.48	2.66	8	1
1:A:102:LEU:O	1:A:105:ALA:N	0.48	2.47	9	5
1:A:114:ASN:N	1:A:114:ASN:ND2	0.48	2.54	10	1
1:A:46:ARG:O	1:A:47:GLN:C	0.48	2.57	4	6
1:A:76:ASN:C	1:A:77:SER:OG	0.48	2.52	9	2
1:A:35:PHE:CD1	1:A:35:PHE:C	0.48	2.92	5	1
2:B:11:ALA:O	2:B:15:PHE:CG	0.48	2.66	10	1
1:A:94:SER:OG	1:A:95:ALA:N	0.47	2.47	2	1
1:A:163:ASP:O	1:A:165:ASP:N	0.47	2.43	10	2
1:A:65:TYR:CG	1:A:132:MET:SD	0.47	3.07	5	1
1:A:14:LEU:C	1:A:14:LEU:CD1	0.47	2.87	9	1
1:A:129:ILE:O	1:A:132:MET:N	0.47	2.47	9	1
1:A:31:TRP:CD1	1:A:31:TRP:C	0.47	2.92	7	3
1:A:111:VAL:HG11	1:A:125:ILE:CD1	0.47	2.38	3	1
1:A:57:PHE:CE2	1:A:132:MET:HE2	0.47	2.43	4	1
1:A:149:GLU:CD	1:A:149:GLU:N	0.47	2.71	7	1
1:A:49:PHE:CE2	1:A:86:TYR:CE1	0.47	3.02	8	1
1:A:93:THR:O	1:A:94:SER:CB	0.47	2.62	3	1
1:A:20:ASN:O	1:A:21:THR:CG2	0.47	2.61	10	1
1:A:62:PRO:O	1:A:63:LYS:C	0.47	2.56	8	6
1:A:111:VAL:O	1:A:112:ASP:CG	0.47	2.58	4	3
1:A:70:PHE:C	1:A:70:PHE:CD1	0.47	2.93	7	1
1:A:74:ASP:OD1	1:A:80:THR:C	0.47	2.57	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:179:ASN:O	1:A:180:LYS:CB	0.47	2.62	3	1
2:B:6:LEU:O	2:B:6:LEU:HD13	0.47	2.09	5	1
1:A:112:ASP:OD2	1:A:121:GLU:OE2	0.47	2.32	1	1
1:A:101:LYS:O	1:A:104:TRP:N	0.47	2.47	9	2
1:A:63:LYS:CG	1:A:64:ALA:N	0.47	2.77	8	1
1:A:141:LEU:O	1:A:146:ASN:ND2	0.47	2.48	8	1
1:A:186:ILE:O	1:A:187:GLN:C	0.47	2.58	5	4
1:A:57:PHE:CE2	1:A:132:MET:CE	0.47	2.98	4	1
1:A:141:LEU:C	1:A:143:GLU:H	0.47	2.18	4	1
2:B:11:ALA:O	2:B:12:ASN:C	0.47	2.58	6	1
1:A:49:PHE:CD1	1:A:52:ILE:HD12	0.47	2.45	1	1
1:A:52:ILE:CG2	2:B:13:SER:OG	0.47	2.63	1	2
1:A:75:ALA:C	1:A:77:SER:N	0.47	2.73	9	7
1:A:35:PHE:CE1	1:A:44:ILE:HD11	0.47	2.45	10	2
1:A:73:PHE:O	1:A:73:PHE:CD2	0.47	2.68	5	1
1:A:99:ASN:O	1:A:100:GLN:CB	0.47	2.62	6	1
1:A:108:LEU:HD13	1:A:109:TYR:CA	0.46	2.40	5	2
1:A:15:GLU:O	1:A:17:LEU:HD12	0.46	2.10	1	2
1:A:75:ALA:O	1:A:77:SER:N	0.46	2.44	10	7
1:A:48:GLU:O	1:A:51:THR:CB	0.46	2.63	10	5
1:A:70:PHE:O	1:A:74:ASP:N	0.46	2.46	3	3
1:A:21:THR:O	1:A:23:PHE:N	0.46	2.48	6	1
1:A:56:PHE:CE1	2:B:13:SER:OG	0.46	2.67	10	1
1:A:38:GLU:CD	2:B:15:PHE:O	0.46	2.59	1	1
1:A:110:ASP:OD2	1:A:113:GLY:O	0.46	2.34	1	1
1:A:135:PRO:O	1:A:136:GLU:C	0.46	2.59	3	4
1:A:140:HIS:O	1:A:142:PRO:N	0.46	2.48	4	1
1:A:164:ASP:CG	1:A:165:ASP:N	0.46	2.71	7	1
1:A:18:GLN:O	1:A:19:LEU:C	0.46	2.59	8	2
1:A:20:ASN:H	1:A:20:ASN:ND2	0.46	2.08	2	1
1:A:16:GLU:O	1:A:16:GLU:CD	0.46	2.59	6	1
1:A:136:GLU:N	1:A:136:GLU:CD	0.46	2.74	6	2
1:A:50:GLN:OE1	1:A:67:GLN:NE2	0.46	2.49	10	1
2:B:9:VAL:O	2:B:10:VAL:C	0.46	2.59	2	2
1:A:89:ALA:C	1:A:91:HIS:N	0.46	2.72	10	1
1:A:155:ILE:C	1:A:157:GLY:N	0.46	2.72	10	1
1:A:82:ASP:O	1:A:83:PHE:C	0.46	2.58	2	5
1:A:122:VAL:O	1:A:123:LEU:C	0.46	2.59	2	4
2:B:11:ALA:O	2:B:15:PHE:CB	0.46	2.64	6	1
1:A:17:LEU:HD22	1:A:18:GLN:CA	0.46	2.38	8	1
1:A:76:ASN:O	1:A:76:ASN:ND2	0.46	2.48	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:CYS:O	1:A:41:SER:N	0.46	2.49	10	1
1:A:73:PHE:CZ	1:A:81:LEU:HD21	0.46	2.45	10	1
1:A:17:LEU:O	1:A:18:GLN:C	0.46	2.58	1	3
1:A:78:ASP:O	1:A:79:GLY:C	0.46	2.57	7	2
1:A:83:PHE:O	1:A:86:TYR:N	0.46	2.48	10	3
1:A:19:LEU:HD21	1:A:100:GLN:HG2	0.46	1.88	5	1
1:A:158:PHE:CE1	1:A:182:ILE:CG1	0.46	2.99	5	1
1:A:24:THR:HG23	1:A:27:GLU:H	0.46	1.70	6	1
1:A:46:ARG:HG2	1:A:70:PHE:CD2	0.46	2.45	6	2
1:A:131:LYS:O	1:A:133:ILE:N	0.46	2.48	7	1
1:A:23:PHE:O	1:A:24:THR:C	0.46	2.56	3	3
1:A:76:ASN:ND2	1:A:76:ASN:C	0.46	2.74	2	1
1:A:83:PHE:CZ	1:A:87:VAL:HG23	0.46	2.45	7	2
1:A:53:TYR:CZ	2:B:10:VAL:CG2	0.46	2.99	8	1
1:A:111:VAL:C	1:A:113:GLY:N	0.46	2.73	7	1
1:A:159:PHE:CE1	1:A:175:GLY:HA3	0.46	2.46	10	1
1:A:49:PHE:C	1:A:51:THR:N	0.46	2.72	3	4
1:A:146:ASN:H	1:A:146:ASN:HD22	0.46	1.38	3	1
1:A:80:THR:C	1:A:81:LEU:HD22	0.46	2.35	5	2
1:A:70:PHE:CE2	1:A:81:LEU:CD2	0.46	2.99	7	1
1:A:9:LEU:HD21	1:A:13:ILE:HD11	0.46	1.87	10	1
1:A:24:THR:O	1:A:25:GLU:C	0.45	2.58	3	8
1:A:69:VAL:HG22	1:A:73:PHE:CZ	0.45	2.46	1	1
1:A:76:ASN:O	1:A:77:SER:C	0.45	2.58	5	2
2:B:4:GLY:O	2:B:5:SER:C	0.45	2.59	9	2
1:A:31:TRP:O	1:A:32:TYR:C	0.45	2.56	2	9
1:A:122:VAL:O	1:A:126:VAL:HG23	0.45	2.11	1	3
1:A:123:LEU:O	1:A:124:GLU:C	0.45	2.59	4	1
1:A:50:GLN:CD	1:A:50:GLN:O	0.45	2.59	9	1
1:A:83:PHE:CZ	1:A:87:VAL:HG21	0.45	2.45	9	1
1:A:16:GLU:CD	1:A:16:GLU:O	0.45	2.60	10	1
2:B:13:SER:C	2:B:15:PHE:N	0.45	2.75	1	1
1:A:146:ASN:O	1:A:146:ASN:CG	0.45	2.60	2	2
1:A:73:PHE:O	1:A:76:ASN:CG	0.45	2.60	4	1
1:A:109:TYR:O	1:A:111:VAL:N	0.45	2.48	5	1
1:A:111:VAL:O	1:A:112:ASP:C	0.45	2.58	7	5
1:A:129:ILE:O	1:A:130:PHE:C	0.45	2.60	9	3
1:A:184:ARG:CG	1:A:185:LEU:N	0.45	2.80	1	2
1:A:24:THR:C	1:A:26:GLU:H	0.45	2.18	2	2
1:A:76:ASN:CG	1:A:76:ASN:O	0.45	2.59	4	1
1:A:86:TYR:CZ	2:B:10:VAL:CG1	0.45	2.99	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:TYR:CE2	1:A:36:LEU:CD1	0.45	2.99	10	1
1:A:46:ARG:NH1	1:A:70:PHE:HB2	0.45	2.26	3	1
1:A:46:ARG:NH1	1:A:71:ARG:NH2	0.45	2.65	1	1
1:A:48:GLU:O	1:A:49:PHE:C	0.45	2.59	2	10
1:A:182:ILE:O	1:A:184:ARG:N	0.45	2.49	1	1
1:A:172:PHE:CD1	1:A:172:PHE:C	0.45	2.94	3	1
1:A:97:LYS:O	1:A:98:THR:C	0.45	2.60	4	3
1:A:111:VAL:O	1:A:113:GLY:N	0.45	2.49	7	1
1:A:136:GLU:OE1	1:A:136:GLU:N	0.45	2.46	9	1
1:A:140:HIS:CD2	1:A:140:HIS:N	0.45	2.84	4	1
1:A:185:LEU:C	1:A:187:GLN:N	0.45	2.75	4	1
1:A:118:SER:C	1:A:120:ASN:H	0.45	2.20	9	1
1:A:20:ASN:C	1:A:22:LYS:N	0.45	2.75	10	1
1:A:10:SER:O	1:A:14:LEU:N	0.45	2.42	2	2
1:A:83:PHE:O	1:A:84:LYS:C	0.45	2.58	10	3
1:A:88:ILE:O	1:A:92:MET:CG	0.45	2.64	5	2
1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HD3	0.45	1.70	3	1
1:A:180:LYS:O	1:A:181:GLU:CB	0.45	2.64	4	1
1:A:185:LEU:O	1:A:187:GLN:N	0.45	2.49	4	1
1:A:57:PHE:CZ	2:B:9:VAL:HG21	0.45	2.47	3	1
1:A:108:LEU:C	1:A:110:ASP:N	0.45	2.74	3	2
1:A:70:PHE:CD1	1:A:81:LEU:CD1	0.45	3.00	4	1
1:A:115:GLY:C	1:A:116:THR:HG23	0.45	2.37	1	2
1:A:184:ARG:HG3	1:A:185:LEU:N	0.45	2.27	8	2
1:A:171:GLU:O	1:A:172:PHE:C	0.45	2.60	2	4
1:A:114:ASN:C	1:A:116:THR:N	0.45	2.74	3	2
1:A:144:ASP:C	1:A:146:ASN:N	0.45	2.75	4	2
1:A:139:LYS:C	1:A:141:LEU:H	0.45	2.20	5	1
2:B:4:GLY:O	2:B:7:GLU:N	0.45	2.47	5	1
1:A:101:LYS:O	1:A:102:LEU:C	0.44	2.61	7	6
1:A:17:LEU:O	1:A:20:ASN:N	0.44	2.49	9	2
1:A:136:GLU:CD	1:A:136:GLU:H	0.44	2.20	6	1
1:A:177:LEU:C	1:A:177:LEU:CD2	0.44	2.90	10	1
1:A:20:ASN:O	1:A:21:THR:C	0.44	2.60	1	1
1:A:185:LEU:O	1:A:186:ILE:C	0.44	2.60	6	3
1:A:68:HIS:C	1:A:70:PHE:N	0.44	2.71	2	1
1:A:94:SER:O	1:A:95:ALA:C	0.44	2.61	2	2
1:A:74:ASP:OD2	1:A:81:LEU:CB	0.44	2.65	3	1
1:A:118:SER:O	1:A:119:LYS:C	0.44	2.60	6	2
1:A:46:ARG:CG	1:A:47:GLN:N	0.44	2.80	10	1
1:A:92:MET:O	1:A:93:THR:C	0.44	2.61	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:ASP:OD2	1:A:85:GLU:OE2	0.44	2.35	4	1
1:A:70:PHE:CZ	1:A:81:LEU:HD23	0.44	2.47	6	1
1:A:76:ASN:ND2	1:A:78:ASP:OD2	0.44	2.49	6	1
1:A:91:HIS:CE1	1:A:95:ALA:CB	0.44	3.00	7	1
1:A:144:ASP:OD1	1:A:144:ASP:N	0.44	2.48	10	1
1:A:42:GLY:O	1:A:43:ARG:C	0.44	2.61	4	1
1:A:22:LYS:O	1:A:23:PHE:C	0.44	2.60	10	3
1:A:83:PHE:CE1	1:A:87:VAL:HG23	0.44	2.47	9	2
1:A:83:PHE:CD1	1:A:83:PHE:O	0.44	2.71	6	1
1:A:78:ASP:CG	1:A:79:GLY:N	0.44	2.75	1	1
1:A:102:LEU:O	1:A:103:GLU:C	0.44	2.61	10	4
2:B:16:ILE:C	2:B:16:ILE:HD13	0.44	2.36	2	1
1:A:176:THR:O	1:A:179:ASN:ND2	0.44	2.43	3	1
1:A:163:ASP:OD1	1:A:164:ASP:N	0.44	2.50	4	1
1:A:18:GLN:O	1:A:19:LEU:CB	0.44	2.65	5	1
1:A:179:ASN:C	1:A:181:GLU:N	0.44	2.75	1	1
1:A:163:ASP:C	1:A:165:ASP:H	0.44	2.20	3	1
1:A:143:GLU:O	1:A:144:ASP:CG	0.44	2.61	8	2
1:A:176:THR:O	1:A:180:LYS:N	0.44	2.44	10	1
1:A:13:ILE:O	1:A:14:LEU:C	0.44	2.59	1	2
1:A:156:TRP:CZ2	1:A:161:LYS:CB	0.44	3.01	3	1
1:A:139:LYS:C	1:A:141:LEU:N	0.44	2.75	5	1
1:A:56:PHE:CG	2:B:9:VAL:HG13	0.44	2.48	6	1
1:A:76:ASN:OD1	1:A:78:ASP:CG	0.44	2.61	2	1
1:A:162:LYS:C	1:A:164:ASP:H	0.44	2.20	8	1
1:A:169:GLU:O	1:A:170:LYS:C	0.44	2.61	9	2
1:A:57:PHE:CD1	1:A:57:PHE:N	0.44	2.86	9	1
1:A:52:ILE:HG23	2:B:13:SER:HB2	0.44	1.88	1	1
1:A:49:PHE:O	1:A:52:ILE:N	0.44	2.50	3	1
1:A:24:THR:O	1:A:24:THR:HG23	0.44	2.13	6	1
1:A:133:ILE:O	1:A:134:SER:C	0.44	2.60	7	1
2:B:7:GLU:C	2:B:9:VAL:N	0.44	2.73	10	1
1:A:70:PHE:CZ	1:A:74:ASP:CG	0.43	2.96	3	1
1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:HD23	0.43	2.28	4	2
1:A:35:PHE:CD2	1:A:35:PHE:C	0.43	2.96	4	1
1:A:95:ALA:O	1:A:96:GLY:C	0.43	2.61	5	1
1:A:120:ASN:OD1	1:A:120:ASN:N	0.43	2.50	8	1
1:A:24:THR:O	1:A:24:THR:CG2	0.43	2.65	3	1
1:A:53:TYR:CD2	1:A:57:PHE:CE2	0.43	3.06	3	1
1:A:38:GLU:CD	1:A:38:GLU:C	0.43	2.86	8	1
1:A:108:LEU:O	1:A:108:LEU:HD23	0.43	2.13	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:ASP:OD2	1:A:79:GLY:N	0.43	2.51	1	1
1:A:162:LYS:O	1:A:163:ASP:C	0.43	2.61	7	2
1:A:113:GLY:C	1:A:114:ASN:ND2	0.43	2.76	3	1
1:A:158:PHE:CD1	1:A:182:ILE:HD11	0.43	2.47	3	1
1:A:111:VAL:O	1:A:111:VAL:HG22	0.43	2.12	4	1
1:A:9:LEU:HD13	1:A:9:LEU:C	0.43	2.38	8	1
1:A:96:GLY:O	1:A:97:LYS:C	0.43	2.62	10	1
1:A:157:GLY:C	1:A:159:PHE:N	0.43	2.75	10	1
1:A:156:TRP:CZ2	1:A:161:LYS:HB2	0.43	2.48	3	2
1:A:91:HIS:CD2	1:A:91:HIS:O	0.43	2.71	4	1
1:A:37:LYS:O	1:A:38:GLU:C	0.43	2.61	8	1
1:A:139:LYS:C	1:A:140:HIS:CG	0.43	2.96	9	1
1:A:70:PHE:O	1:A:74:ASP:CB	0.43	2.67	3	1
1:A:177:LEU:C	1:A:179:ASN:H	0.43	2.21	3	1
1:A:188:PHE:N	1:A:188:PHE:CD1	0.43	2.85	3	1
1:A:56:PHE:CE1	2:B:13:SER:CB	0.43	3.01	8	1
1:A:21:THR:HG22	1:A:22:LYS:O	0.43	2.14	1	1
1:A:122:VAL:HG22	1:A:123:LEU:N	0.43	2.27	3	1
1:A:143:GLU:O	1:A:144:ASP:C	0.43	2.61	8	2
1:A:20:ASN:HB3	1:A:91:HIS:NE2	0.43	2.29	8	1
1:A:87:VAL:O	1:A:91:HIS:N	0.43	2.51	10	1
1:A:158:PHE:CE1	1:A:182:ILE:HG13	0.43	2.48	5	1
1:A:10:SER:OG	1:A:11:LYS:N	0.43	2.52	8	1
1:A:57:PHE:C	1:A:59:GLU:N	0.43	2.73	8	1
1:A:114:ASN:ND2	1:A:116:THR:OG1	0.43	2.51	9	1
1:A:20:ASN:HB3	1:A:91:HIS:CE1	0.43	2.47	10	1
1:A:87:VAL:O	1:A:88:ILE:C	0.43	2.60	10	1
1:A:151:ARG:O	1:A:152:ALA:C	0.43	2.60	10	1
1:A:15:GLU:O	1:A:17:LEU:CD1	0.43	2.67	1	2
1:A:74:ASP:CB	1:A:81:LEU:CD1	0.43	2.97	2	1
1:A:156:TRP:NE1	1:A:161:LYS:HB2	0.43	2.28	4	1
2:B:13:SER:O	2:B:16:ILE:HG23	0.43	2.14	5	1
1:A:35:PHE:CE2	1:A:44:ILE:HD11	0.43	2.49	7	1
1:A:57:PHE:CD2	1:A:62:PRO:HG2	0.43	2.49	1	2
1:A:24:THR:O	1:A:24:THR:OG1	0.43	2.35	2	1
1:A:19:LEU:O	1:A:19:LEU:HD13	0.43	2.14	3	1
1:A:65:TYR:CB	1:A:132:MET:SD	0.43	3.07	5	1
1:A:73:PHE:O	1:A:76:ASN:N	0.43	2.47	6	1
1:A:61:ASP:O	1:A:61:ASP:CG	0.43	2.62	8	1
1:A:69:VAL:O	1:A:70:PHE:C	0.43	2.61	8	2
1:A:83:PHE:O	1:A:86:TYR:CB	0.43	2.67	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:170:LYS:O	1:A:171:GLU:C	0.43	2.61	3	3
1:A:23:PHE:C	1:A:24:THR:CG2	0.43	2.92	2	1
1:A:73:PHE:CG	1:A:74:ASP:N	0.43	2.86	2	1
1:A:117:ILE:HG22	1:A:118:SER:N	0.43	2.29	3	1
1:A:74:ASP:O	1:A:76:ASN:N	0.43	2.52	9	2
1:A:50:GLN:OE1	1:A:67:GLN:CD	0.43	2.61	5	1
1:A:46:ARG:HH11	1:A:71:ARG:NH2	0.42	2.12	1	1
1:A:90:LEU:CD1	2:B:10:VAL:HG13	0.42	2.43	2	1
1:A:90:LEU:HD12	2:B:7:GLU:HG3	0.42	1.91	5	1
1:A:114:ASN:OD1	1:A:114:ASN:C	0.42	2.62	9	2
1:A:49:PHE:O	1:A:50:GLN:C	0.42	2.61	10	3
1:A:69:VAL:O	1:A:73:PHE:CD1	0.42	2.72	4	1
1:A:86:TYR:OH	2:B:14:ALA:CB	0.42	2.66	5	1
1:A:106:PHE:CZ	1:A:169:GLU:HA	0.42	2.49	6	2
1:A:45:THR:O	1:A:46:ARG:C	0.42	2.61	6	1
1:A:46:ARG:HG3	1:A:70:PHE:CE2	0.42	2.48	6	1
1:A:53:TYR:HA	1:A:57:PHE:CD1	0.42	2.49	2	2
1:A:161:LYS:NZ	1:A:165:ASP:OD1	0.42	2.35	2	1
1:A:76:ASN:C	1:A:77:SER:HG	0.42	2.22	3	2
1:A:70:PHE:CE1	1:A:81:LEU:CD1	0.42	3.02	4	1
1:A:110:ASP:CG	1:A:116:THR:O	0.42	2.62	4	1
1:A:22:LYS:N	1:A:22:LYS:CD	0.42	2.83	5	2
1:A:22:LYS:NZ	1:A:91:HIS:ND1	0.42	2.60	7	1
1:A:36:LEU:O	1:A:37:LYS:C	0.42	2.62	10	1
1:A:19:LEU:O	1:A:20:ASN:CG	0.42	2.62	4	1
1:A:143:GLU:CG	1:A:144:ASP:H	0.42	2.27	9	1
1:A:56:PHE:C	1:A:58:PRO:HD3	0.42	2.39	2	2
1:A:187:GLN:O	1:A:188:PHE:C	0.42	2.61	3	1
1:A:161:LYS:NZ	1:A:165:ASP:O	0.42	2.42	9	1
1:A:63:LYS:O	1:A:64:ALA:C	0.42	2.61	3	1
1:A:53:TYR:CZ	1:A:57:PHE:CZ	0.42	3.08	1	1
1:A:111:VAL:HG11	1:A:125:ILE:HD11	0.42	1.90	3	1
1:A:19:LEU:HD12	1:A:19:LEU:N	0.42	2.29	4	1
1:A:73:PHE:CE2	1:A:81:LEU:CD2	0.42	2.99	8	1
1:A:131:LYS:NZ	1:A:131:LYS:CB	0.42	2.83	9	1
1:A:31:TRP:C	1:A:31:TRP:CD1	0.42	2.98	2	1
1:A:32:TYR:HA	1:A:83:PHE:CZ	0.42	2.50	2	1
1:A:57:PHE:CE1	2:B:9:VAL:HG21	0.42	2.50	3	1
1:A:65:TYR:O	1:A:66:ALA:C	0.42	2.61	4	1
1:A:185:LEU:C	1:A:185:LEU:HD13	0.42	2.40	7	1
1:A:47:GLN:HG3	1:A:48:GLU:N	0.42	2.28	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:GLN:O	1:A:54:SER:CB	0.42	2.68	2	1
1:A:143:GLU:C	1:A:143:GLU:CD	0.41	2.88	3	1
1:A:86:TYR:OH	2:B:10:VAL:O	0.41	2.37	4	1
1:A:109:TYR:CD1	1:A:125:ILE:HG13	0.41	2.50	5	1
1:A:100:GLN:O	1:A:100:GLN:CD	0.41	2.63	6	1
1:A:86:TYR:CE1	2:B:10:VAL:CG1	0.41	3.03	9	1
1:A:82:ASP:CB	1:A:85:GLU:OE1	0.41	2.68	2	1
1:A:73:PHE:CZ	1:A:81:LEU:HD13	0.41	2.51	7	1
1:A:151:ARG:NH1	1:A:151:ARG:CG	0.41	2.79	10	1
1:A:106:PHE:CE1	1:A:169:GLU:HA	0.41	2.50	3	1
1:A:103:GLU:CD	1:A:103:GLU:C	0.41	2.88	5	1
1:A:56:PHE:HB2	1:A:57:PHE:CE1	0.41	2.50	6	1
1:A:131:LYS:C	1:A:133:ILE:H	0.41	2.20	7	1
1:A:10:SER:O	1:A:11:LYS:C	0.41	2.61	9	1
1:A:158:PHE:CD1	1:A:158:PHE:C	0.41	2.98	10	1
1:A:46:ARG:HA	1:A:70:PHE:CD2	0.41	2.50	1	1
1:A:16:GLU:C	1:A:17:LEU:HG	0.41	2.41	2	2
1:A:31:TRP:CG	2:B:15:PHE:CE2	0.41	3.08	2	1
1:A:83:PHE:CE2	1:A:87:VAL:CG2	0.41	3.03	3	1
1:A:38:GLU:O	1:A:38:GLU:CD	0.41	2.63	8	1
1:A:14:LEU:O	1:A:15:GLU:C	0.41	2.64	2	1
1:A:90:LEU:HD12	2:B:11:ALA:HB2	0.41	1.91	2	1
1:A:13:ILE:CG2	1:A:28:LEU:HD23	0.41	2.38	3	1
1:A:70:PHE:CE1	1:A:74:ASP:CG	0.41	2.98	3	1
1:A:28:LEU:HD12	1:A:28:LEU:C	0.41	2.40	10	1
1:A:35:PHE:CE2	1:A:83:PHE:HB2	0.41	2.51	1	1
1:A:20:ASN:ND2	1:A:99:ASN:HD22	0.41	2.13	4	1
1:A:18:GLN:NE2	1:A:19:LEU:H	0.41	2.10	5	1
1:A:185:LEU:C	1:A:185:LEU:CD1	0.41	2.94	7	1
1:A:69:VAL:O	1:A:72:SER:N	0.41	2.53	8	1
1:A:156:TRP:CE2	1:A:161:LYS:O	0.41	2.73	2	1
1:A:46:ARG:O	1:A:46:ARG:CZ	0.41	2.69	3	1
1:A:109:TYR:CD1	1:A:125:ILE:HG21	0.41	2.51	3	1
2:B:5:SER:O	2:B:9:VAL:HG23	0.41	2.16	6	1
1:A:46:ARG:NH1	1:A:49:PHE:HB3	0.41	2.30	3	1
1:A:111:VAL:CG1	1:A:125:ILE:CD1	0.41	2.98	3	1
2:B:15:PHE:O	2:B:16:ILE:HG23	0.41	2.15	4	1
1:A:83:PHE:O	1:A:83:PHE:CG	0.41	2.73	6	1
1:A:125:ILE:HD12	1:A:125:ILE:N	0.41	2.31	7	1
1:A:143:GLU:CG	1:A:144:ASP:N	0.41	2.84	9	1
1:A:115:GLY:O	1:A:116:THR:CG2	0.41	2.69	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:LEU:C	1:A:11:LYS:N	0.41	2.77	2	1
1:A:182:ILE:O	1:A:186:ILE:N	0.41	2.42	2	1
1:A:98:THR:O	1:A:99:ASN:C	0.41	2.63	4	1
1:A:103:GLU:C	1:A:103:GLU:CD	0.41	2.89	4	1
1:A:171:GLU:N	1:A:171:GLU:OE1	0.41	2.54	4	1
1:A:35:PHE:CG	1:A:83:PHE:HB2	0.41	2.51	6	1
1:A:106:PHE:CE2	1:A:169:GLU:HB2	0.41	2.51	6	1
1:A:29:SER:O	1:A:30:SER:C	0.41	2.64	7	1
1:A:90:LEU:HD11	2:B:10:VAL:CG1	0.41	2.43	7	1
1:A:12:GLU:O	1:A:13:ILE:C	0.41	2.64	8	1
1:A:56:PHE:CE1	2:B:13:SER:HB2	0.41	2.50	8	1
1:A:72:SER:OG	1:A:73:PHE:N	0.41	2.54	8	1
1:A:14:LEU:O	1:A:16:GLU:N	0.41	2.54	9	1
1:A:91:HIS:NE2	1:A:95:ALA:HB1	0.41	2.31	9	1
1:A:109:TYR:CE1	1:A:122:VAL:HG12	0.41	2.51	10	1
1:A:159:PHE:CZ	1:A:175:GLY:HA3	0.41	2.50	10	1
1:A:12:GLU:CD	1:A:12:GLU:H	0.41	2.22	2	1
1:A:68:HIS:O	1:A:69:VAL:C	0.41	2.64	9	2
1:A:129:ILE:CD1	1:A:188:PHE:CD1	0.41	3.03	5	1
1:A:31:TRP:C	1:A:33:GLN:N	0.41	2.79	7	1
1:A:77:SER:O	1:A:78:ASP:CG	0.41	2.63	9	1
1:A:86:TYR:O	1:A:90:LEU:HD23	0.40	2.17	2	1
1:A:9:LEU:HD11	1:A:83:PHE:CD2	0.40	2.51	5	1
1:A:14:LEU:C	1:A:17:LEU:H	0.40	2.24	5	1
1:A:47:GLN:CD	1:A:47:GLN:C	0.40	2.89	5	1
1:A:112:ASP:OD1	1:A:114:ASN:CG	0.40	2.63	5	1
1:A:119:LYS:HD2	1:A:119:LYS:N	0.40	2.30	7	1
1:A:18:GLN:HE22	1:A:92:MET:HE1	0.40	1.76	10	1
1:A:73:PHE:CE1	1:A:74:ASP:HB2	0.40	2.52	2	1
1:A:70:PHE:CD1	1:A:70:PHE:C	0.40	2.99	3	1
1:A:106:PHE:CD2	1:A:169:GLU:HB2	0.40	2.51	7	1
1:A:46:ARG:HA	1:A:70:PHE:CE2	0.40	2.51	9	1
1:A:63:LYS:HG3	1:A:64:ALA:N	0.40	2.31	5	1
1:A:56:PHE:HB3	2:B:9:VAL:CG2	0.40	2.47	8	1
1:A:17:LEU:C	1:A:19:LEU:H	0.40	2.24	9	1
2:B:9:VAL:O	2:B:13:SER:OG	0.40	2.39	1	1
1:A:124:GLU:OE2	1:A:124:GLU:N	0.40	2.55	6	1
1:A:112:ASP:OD2	1:A:121:GLU:CG	0.40	2.69	7	1
1:A:22:LYS:HD2	1:A:91:HIS:CE1	0.40	2.52	10	1
1:A:157:GLY:O	1:A:159:PHE:N	0.40	2.55	10	1
1:A:180:LYS:NZ	1:A:180:LYS:HB3	0.40	2.32	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:LYS:O	1:A:22:LYS:CG	0.40	2.69	2	1
1:A:94:SER:CB	2:B:7:GLU:OE1	0.40	2.70	2	1
1:A:70:PHE:CD1	1:A:74:ASP:CB	0.40	3.04	3	1
1:A:20:ASN:CG	1:A:95:ALA:O	0.40	2.64	4	1
1:A:46:ARG:HB2	1:A:70:PHE:CE2	0.40	2.52	4	1
1:A:159:PHE:HB3	1:A:161:LYS:NZ	0.40	2.32	4	1
1:A:156:TRP:CE2	1:A:161:LYS:HB2	0.40	2.52	5	1
1:A:106:PHE:CD2	1:A:169:GLU:HG3	0.40	2.52	6	1
1:A:53:TYR:CE1	2:B:10:VAL:CG2	0.40	3.02	8	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	180/202 (89%)	129±4 (72±2%)	35±6 (19±3%)	16±4 (9±2%)	1	11
2	B	12/25 (48%)	10±1 (82±12%)	2±1 (17±11%)	0±0 (2±3%)	9	53
All	All	1920/2270 (85%)	1390 (72%)	367 (19%)	163 (8%)	1	12

All 62 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	17	LEU	7
1	A	25	GLU	6
1	A	24	THR	5
1	A	76	ASN	5
1	A	145	GLU	5
1	A	9	LEU	5
1	A	161	LYS	5
1	A	10	SER	4
1	A	19	LEU	4
1	A	40	PRO	4
1	A	62	PRO	4
1	A	94	SER	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	95	ALA	4
1	A	93	THR	4
1	A	112	ASP	4
1	A	187	GLN	4
1	A	144	ASP	4
1	A	58	PRO	4
1	A	18	GLN	3
1	A	57	PHE	3
1	A	142	PRO	3
1	A	162	LYS	3
1	A	101	LYS	3
1	A	98	THR	3
1	A	99	ASN	3
1	A	163	ASP	3
1	A	181	GLU	3
1	A	60	ALA	3
1	A	136	GLU	3
1	A	178	ALA	3
1	A	23	PHE	2
1	A	78	ASP	2
1	A	97	LYS	2
1	A	180	LYS	2
1	A	183	LEU	2
1	A	42	GLY	2
1	A	77	SER	2
1	A	119	LYS	2
1	A	115	GLY	2
1	A	143	GLU	2
1	A	96	GLY	2
1	A	75	ALA	2
1	A	100	GLN	2
1	A	20	ASN	1
1	A	41	SER	1
1	A	79	GLY	1
1	A	113	GLY	1
1	A	139	LYS	1
1	A	140	HIS	1
1	A	179	ASN	1
1	A	141	LEU	1
1	A	186	ILE	1
1	A	114	ASN	1
1	A	83	PHE	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
2	B	12	ASN	1
1	A	148	PRO	1
1	A	165	ASP	1
2	B	5	SER	1
1	A	21	THR	1
1	A	22	LYS	1
1	A	59	GLU	1
1	A	156	TRP	1

6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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	162/181 (90%)	138±5 (85±3%)	24±5 (15±3%)	5	42
2	B	10/18 (56%)	8±1 (82±12%)	2±1 (18±12%)	4	36
All	All	1720/1990 (86%)	1457 (85%)	263 (15%)	5	41

All 102 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	108	LEU	9
1	A	9	LEU	8
1	A	69	VAL	8
1	A	81	LEU	8
1	A	17	LEU	7
1	A	147	THR	7
1	A	186	ILE	6
1	A	45	THR	6
1	A	24	THR	6
1	A	22	LYS	5
1	A	166	LYS	5
1	A	16	GLU	5
1	A	116	THR	5
1	A	13	ILE	4
1	A	20	ASN	4
1	A	80	THR	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	134	SER	4
1	A	170	LYS	4
1	A	180	LYS	4
2	B	9	VAL	4
1	A	122	VAL	4
1	A	123	LEU	4
1	A	50	GLN	4
1	A	93	THR	4
1	A	130	PHE	4
1	A	177	LEU	4
1	A	112	ASP	3
1	A	158	PHE	3
1	A	76	ASN	3
1	A	77	SER	3
1	A	91	HIS	3
1	A	111	VAL	3
2	B	5	SER	3
2	B	15	PHE	3
1	A	14	LEU	3
1	A	19	LEU	3
1	A	143	GLU	3
1	A	49	PHE	3
1	A	43	ARG	2
1	A	71	ARG	2
1	A	90	LEU	2
1	A	124	GLU	2
1	A	183	LEU	2
2	B	16	ILE	2
1	A	63	LYS	2
1	A	114	ASN	2
1	A	118	SER	2
1	A	127	THR	2
1	A	131	LYS	2
1	A	146	ASN	2
2	B	12	ASN	2
1	A	10	SER	2
1	A	29	SER	2
1	A	182	ILE	2
2	B	6	LEU	2
1	A	57	PHE	2
1	A	109	TYR	2
1	A	138	THR	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	18	GLN	2
1	A	185	LEU	2
1	A	120	ASN	2
1	A	188	PHE	2
1	A	11	LYS	2
1	A	161	LYS	2
1	A	21	THR	1
1	A	73	PHE	1
1	A	78	ASP	1
1	A	12	GLU	1
1	A	37	LYS	1
1	A	41	SER	1
1	A	67	GLN	1
1	A	74	ASP	1
1	A	132	MET	1
1	A	141	LEU	1
1	A	171	GLU	1
1	A	46	ARG	1
1	A	94	SER	1
1	A	98	THR	1
1	A	140	HIS	1
2	B	8	THR	1
1	A	125	ILE	1
1	A	162	LYS	1
2	B	7	GLU	1
1	A	82	ASP	1
1	A	154	LYS	1
1	A	100	GLN	1
1	A	104	TRP	1
1	A	88	ILE	1
1	A	119	LYS	1
1	A	165	ASP	1
1	A	15	GLU	1
1	A	169	GLU	1
1	A	85	GLU	1
1	A	150	LYS	1
1	A	168	THR	1
1	A	25	GLU	1
1	A	28	LEU	1
1	A	61	ASP	1
1	A	144	ASP	1
1	A	151	ARG	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	176	THR	1
1	A	181	GLU	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

Of 2 ligands modelled in this entry, 2 are monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided