



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 8, 2026 – 03:40 PM UTC

PDB ID : 1JSA / pdb_00001jsa
Title : MYRISTOYLATED RECOVERIN WITH TWO CALCIUMS BOUND,
NMR, 24 STRUCTURES
Authors : Ames, J.B.; Ishima, R.; Tanaka, T.; Gordon, J.I.; Stryer, L.; Ikura, M.
Deposited on : 1997-06-04

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)
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

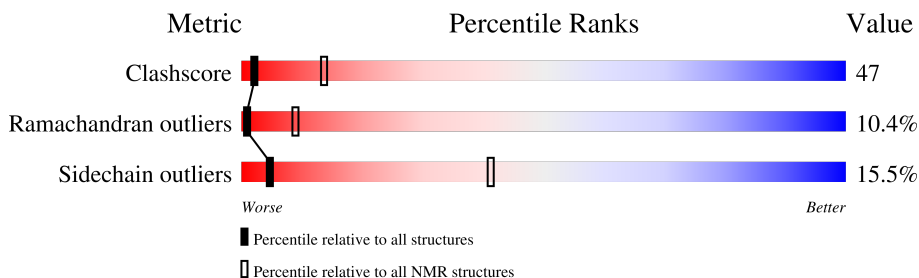
1 Overall quality at a glance

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	201	

2 Ensemble composition and analysis i

This entry contains 24 models. Model 10 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:7-A:94, A:100-A:160, A:164-A:188 (174)	1.33	10

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 1 single-model cluster was found.

Cluster number	Models
1	1, 3, 5, 6, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 17, 18, 19, 21, 23, 24
2	2, 4, 7, 16, 22
Single-model clusters	20

3 Entry composition [i](#)

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 3055 atoms, of which 1511 are hydrogens and 0 are deuteriums.

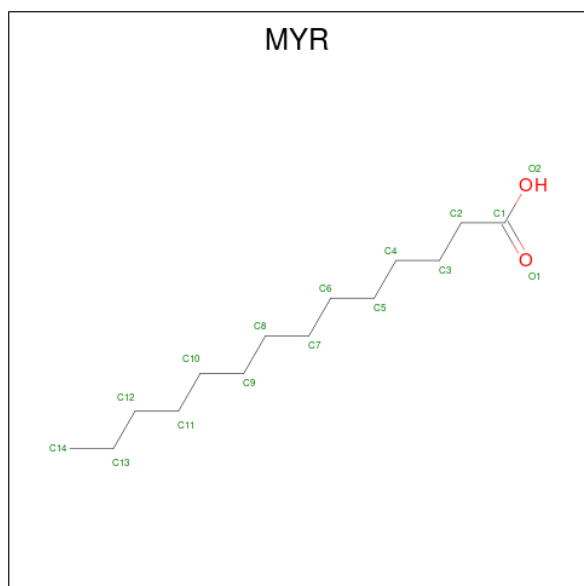
- Molecule 1 is a protein called RECOVERIN.

Mol	Chain	Residues	Atoms					Trace	
			Total	C	H	N	O		S
1	A	188	3011	975	1484	246	303	3	0

- Molecule 2 is CALCIUM ION (CCD ID: CA) (formula: Ca).

Mol	Chain	Residues	Atoms	
			Total	Ca
2	A	2	2	2

- Molecule 3 is MYRISTIC ACID (CCD ID: MYR) (formula: C₁₄H₂₈O₂).



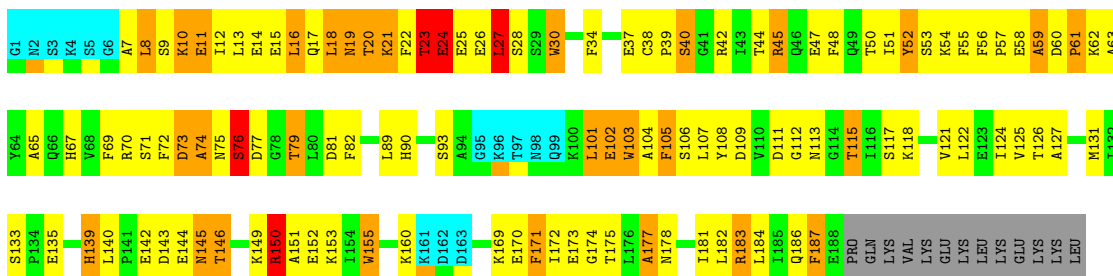
Mol	Chain	Residues	Atoms			
			Total	C	H	O
3	A	1	42	14	27	1

LYS
LEU

4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: RECOVERIN

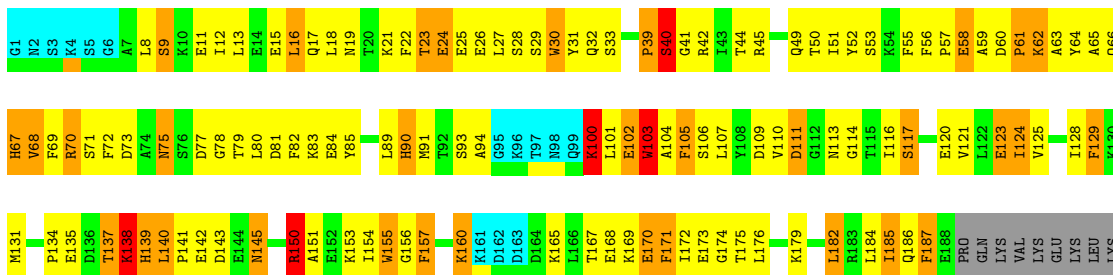
Chain A: 28% 41% 15% 7% 6%



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: RECOVERIN

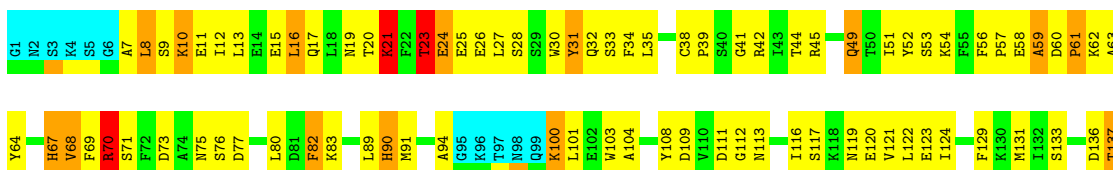
Chain A: 24% 44% 16% 7% 6%

GLU
LYS
LYS
LEU

4.2.10 Score per residue for model 10 (medoid)

- Molecule 1: RECOVERIN

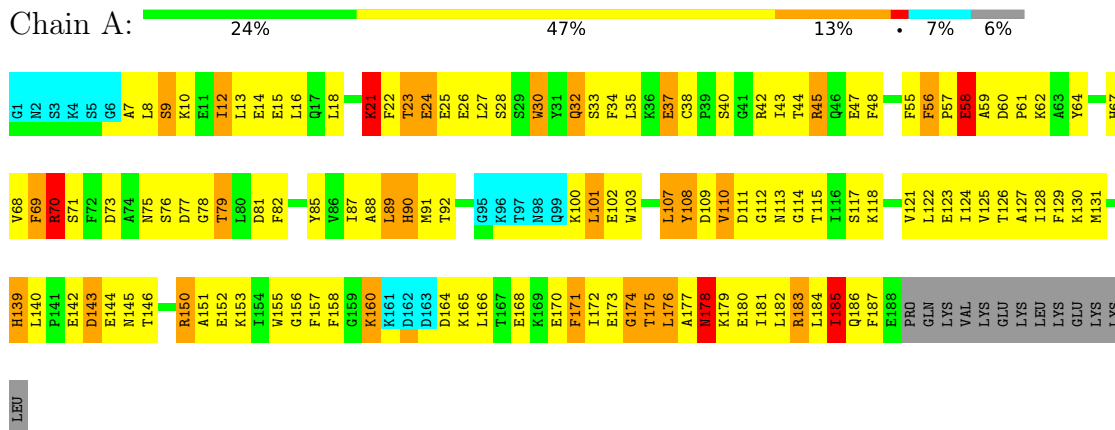
Chain A: 27% 45% 12% 7% 6%



LYS
LEU
LYS
GLU
LYS
LYS
LEU

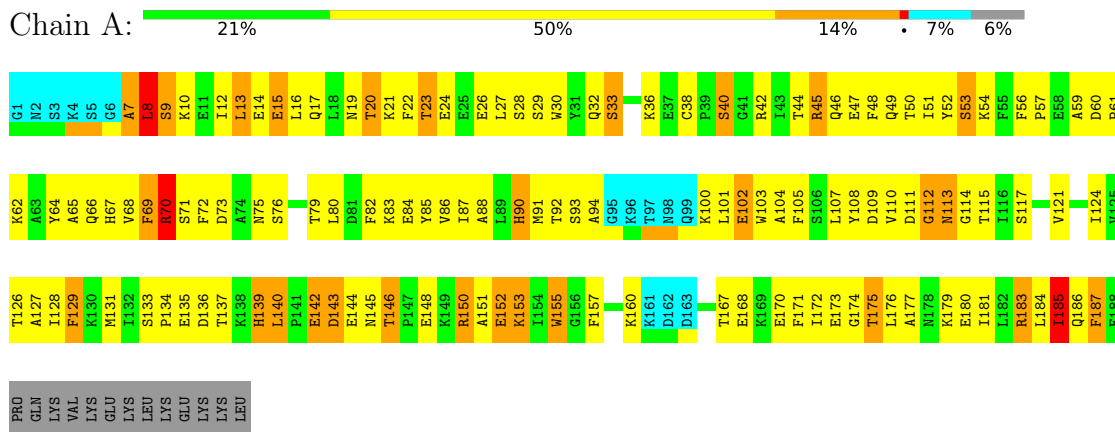
4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: RECOVERIN



4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: RECOVERIN



5 Refinement protocol and experimental data overview

Of the ? calculated structures, 24 were deposited, based on the following criterion: ?.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	

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: MYR, 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±0/1461 (0.6± 0.0%)	1.47±0.01	15±1/1970 (0.8± 0.1%)
All	All	1.45	217/35064 (0.6%)	1.47	368/47280 (0.8%)

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	4.8±0.4
All	All	0	115

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	90	HIS	CG-ND1	-12.40	1.24	1.38	21	24
1	A	139	HIS	CG-ND1	-12.03	1.25	1.38	22	24
1	A	67	HIS	CG-ND1	-11.88	1.25	1.38	18	24
1	A	155	TRP	CG-CD2	-7.23	1.30	1.43	3	24
1	A	30	TRP	CG-CD2	-7.14	1.30	1.43	11	24
1	A	103	TRP	CG-CD2	-7.12	1.30	1.43	13	24
1	A	90	HIS	ND1-CE1	-5.52	1.27	1.32	24	24
1	A	67	HIS	ND1-CE1	-5.45	1.27	1.32	14	24
1	A	139	HIS	ND1-CE1	-5.42	1.27	1.32	3	24
1	A	146	THR	N-CA	5.31	1.50	1.45	21	1

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	90	HIS	CE1-NE2-CD2	-7.59	101.41	109.00	24	24
1	A	67	HIS	CE1-NE2-CD2	-7.55	101.44	109.00	14	24
1	A	139	HIS	CE1-NE2-CD2	-7.53	101.47	109.00	23	24
1	A	8	LEU	CB-CA-C	-7.12	108.35	116.54	10	1
1	A	30	TRP	NE1-CE2-CZ2	7.00	140.60	130.10	8	24
1	A	103	TRP	NE1-CE2-CZ2	6.94	140.50	130.10	20	24
1	A	155	TRP	NE1-CE2-CZ2	6.93	140.50	130.10	3	24
1	A	40	SER	CB-CA-C	-6.40	109.17	116.54	18	1
1	A	82	PHE	CA-CB-CG	-6.21	107.59	113.80	21	13
1	A	103	TRP	NE1-CE2-CD2	-6.03	99.56	107.40	20	24
1	A	30	TRP	CG-CD2-CE3	-5.98	127.92	133.90	11	24
1	A	155	TRP	NE1-CE2-CD2	-5.98	99.62	107.40	3	24
1	A	30	TRP	NE1-CE2-CD2	-5.98	99.63	107.40	8	24
1	A	155	TRP	CG-CD2-CE3	-5.70	128.20	133.90	3	18
1	A	56	PHE	CA-CB-CG	-5.61	108.19	113.80	7	6
1	A	156	GLY	N-CA-C	-5.58	107.41	114.16	10	1
1	A	171	PHE	CA-CB-CG	-5.50	108.30	113.80	3	1
1	A	103	TRP	CG-CD2-CE3	-5.45	128.45	133.90	20	14
1	A	129	PHE	CA-CB-CG	-5.36	108.44	113.80	19	7
1	A	13	LEU	N-CA-C	-5.29	105.97	112.90	4	1
1	A	30	TRP	CG-CD1-NE1	-5.26	103.36	110.20	1	24
1	A	103	TRP	CG-CD1-NE1	-5.14	103.52	110.20	9	14
1	A	155	TRP	CG-CD1-NE1	-5.13	103.53	110.20	3	19
1	A	72	PHE	CA-CB-CG	-5.09	108.71	113.80	9	2
1	A	22	PHE	CA-CB-CG	-5.08	108.72	113.80	18	3
1	A	105	PHE	CA-CB-CG	-5.06	108.74	113.80	6	1
1	A	78	GLY	N-CA-C	-5.04	108.75	115.40	14	1
1	A	139	HIS	CA-CB-CG	-5.03	108.78	113.80	6	1

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	42	ARG	Sidechain	23
1	A	45	ARG	Sidechain	23
1	A	70	ARG	Sidechain	23
1	A	150	ARG	Sidechain	23
1	A	183	ARG	Sidechain	23

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	1428	1391	1391	135±12
All	All	34680	34032	34032	3234

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 47.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:8:LEU:HD12	1:A:9:SER:N	0.99	1.73	17	7
1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:HD22	0.91	1.80	7	5
1:A:8:LEU:HD12	1:A:9:SER:H	0.91	1.23	21	5
1:A:107:LEU:C	1:A:107:LEU:HD13	0.89	1.92	1	18
1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD13	0.86	1.28	10	3
1:A:69:PHE:CZ	1:A:80:LEU:HD21	0.84	2.07	17	2
1:A:16:LEU:HD23	1:A:17:GLN:H	0.83	1.33	18	5
1:A:176:LEU:HD13	1:A:176:LEU:C	0.83	1.99	11	2
1:A:13:LEU:HD12	1:A:13:LEU:O	0.82	1.74	17	5
1:A:52:TYR:OH	1:A:68:VAL:HG21	0.82	1.74	17	1
1:A:140:LEU:HD11	1:A:145:ASN:HD22	0.82	1.33	21	1
1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:HD13	0.81	1.87	3	4
1:A:157:PHE:CD1	1:A:158:PHE:N	0.81	2.49	2	2
1:A:157:PHE:CE2	1:A:158:PHE:CE2	0.81	2.68	2	2
1:A:140:LEU:HD13	1:A:140:LEU:N	0.81	1.90	10	1
1:A:175:THR:HG23	1:A:181:ILE:CG2	0.81	2.06	18	1
1:A:140:LEU:HD13	1:A:140:LEU:H	0.80	1.34	3	2
1:A:27:LEU:HD12	1:A:27:LEU:C	0.80	2.02	8	2
1:A:107:LEU:HD22	1:A:107:LEU:C	0.80	2.02	7	1
1:A:160:LYS:NZ	1:A:166:LEU:HD13	0.79	1.93	23	2
1:A:90:HIS:CD2	1:A:91:MET:N	0.79	2.51	21	2
1:A:34:PHE:CZ	1:A:38:CYS:SG	0.78	2.75	12	3
1:A:75:ASN:ND2	1:A:76:SER:N	0.78	2.31	14	2
1:A:107:LEU:HD22	1:A:107:LEU:O	0.78	1.78	12	6
1:A:90:HIS:CG	1:A:91:MET:N	0.78	2.52	21	5
1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:CD1	0.77	1.92	19	5
1:A:182:LEU:C	1:A:182:LEU:HD13	0.77	2.05	23	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:HIS:ND1	1:A:91:MET:N	0.76	2.34	9	5
1:A:19:ASN:HD21	1:A:90:HIS:CE1	0.75	2.00	18	1
1:A:140:LEU:HD12	1:A:140:LEU:O	0.75	1.82	8	7
1:A:90:HIS:HD1	1:A:91:MET:N	0.75	1.79	13	2
1:A:182:LEU:HD12	1:A:183:ARG:N	0.75	1.97	1	1
1:A:144:GLU:CD	1:A:144:GLU:N	0.75	2.45	21	1
1:A:8:LEU:N	1:A:8:LEU:HD23	0.74	1.96	4	4
1:A:107:LEU:HD13	1:A:108:TYR:N	0.74	1.97	1	15
1:A:111:ASP:CG	1:A:112:GLY:H	0.74	1.90	7	8
1:A:8:LEU:C	1:A:8:LEU:HD12	0.73	2.08	11	7
1:A:140:LEU:HD22	1:A:140:LEU:H	0.73	1.43	19	4
1:A:160:LYS:NZ	1:A:160:LYS:H	0.73	1.81	10	1
1:A:85:TYR:CE1	1:A:89:LEU:HD23	0.73	2.19	2	10
1:A:72:PHE:CZ	1:A:87:ILE:HG21	0.72	2.20	5	2
1:A:31:TYR:CD2	1:A:32:GLN:N	0.72	2.57	11	1
1:A:75:ASN:H	1:A:75:ASN:ND2	0.72	1.83	13	1
1:A:75:ASN:ND2	1:A:77:ASP:H	0.72	1.83	13	1
1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:CD2	0.72	1.98	3	5
1:A:108:TYR:CE1	1:A:124:ILE:HG21	0.72	2.19	23	2
1:A:69:PHE:CE1	1:A:80:LEU:HD21	0.72	2.20	17	2
1:A:82:PHE:CG	1:A:83:LYS:N	0.72	2.57	4	1
1:A:13:LEU:HD11	1:A:24:GLU:CD	0.71	2.10	15	1
1:A:160:LYS:H	1:A:160:LYS:HZ3	0.71	1.28	10	1
1:A:145:ASN:H	1:A:145:ASN:HD22	0.71	1.28	17	5
1:A:27:LEU:HD12	1:A:27:LEU:O	0.70	1.86	4	2
1:A:157:PHE:CZ	1:A:158:PHE:CE2	0.70	2.79	2	2
1:A:11:GLU:CD	1:A:11:GLU:N	0.70	2.48	8	2
1:A:8:LEU:CD1	1:A:9:SER:H	0.70	1.99	21	5
1:A:184:LEU:C	1:A:184:LEU:HD13	0.70	2.10	3	5
1:A:113:ASN:ND2	1:A:113:ASN:H	0.70	1.82	4	1
1:A:82:PHE:CD1	1:A:83:LYS:N	0.70	2.60	4	1
1:A:140:LEU:HD11	1:A:145:ASN:ND2	0.69	2.02	21	1
1:A:18:LEU:HD23	1:A:18:LEU:N	0.69	2.01	1	1
1:A:137:THR:O	1:A:140:LEU:HD11	0.69	1.88	11	4
1:A:75:ASN:ND2	1:A:76:SER:H	0.69	1.84	14	1
1:A:69:PHE:CZ	1:A:80:LEU:CD2	0.69	2.75	17	1
1:A:111:ASP:CG	1:A:112:GLY:N	0.69	2.50	19	11
1:A:187:PHE:CD1	1:A:188:GLU:N	0.69	2.60	19	1
1:A:8:LEU:HD13	1:A:12:ILE:CD1	0.69	2.17	17	11
1:A:56:PHE:CD1	1:A:56:PHE:N	0.69	2.59	11	1
1:A:75:ASN:ND2	1:A:77:ASP:CG	0.69	2.50	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:THR:HG23	1:A:20:THR:O	0.69	1.87	15	1
1:A:90:HIS:CD2	1:A:90:HIS:C	0.69	2.70	4	2
1:A:13:LEU:HD12	1:A:13:LEU:C	0.69	2.12	6	4
1:A:49:GLN:NE2	1:A:66:GLN:CD	0.69	2.51	19	2
1:A:170:GLU:N	1:A:170:GLU:CD	0.69	2.50	2	3
1:A:22:PHE:C	1:A:23:THR:HG22	0.69	2.13	18	2
1:A:142:GLU:H	1:A:142:GLU:CD	0.68	1.95	17	2
1:A:16:LEU:CD2	1:A:17:GLN:H	0.68	2.01	18	3
1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CD2	0.68	2.53	3	8
1:A:145:ASN:ND2	1:A:146:THR:HG22	0.68	2.03	24	1
1:A:168:GLU:CD	1:A:168:GLU:H	0.68	1.97	20	2
1:A:27:LEU:N	1:A:27:LEU:HD12	0.68	2.03	18	7
1:A:69:PHE:CE2	1:A:80:LEU:HD21	0.68	2.24	7	1
1:A:9:SER:OG	1:A:10:LYS:N	0.67	2.27	3	10
1:A:157:PHE:CD1	1:A:181:ILE:HD11	0.67	2.24	5	1
1:A:24:GLU:H	1:A:24:GLU:CD	0.67	1.97	8	1
1:A:100:LYS:NZ	1:A:187:PHE:CZ	0.67	2.60	24	1
1:A:113:ASN:ND2	1:A:113:ASN:N	0.67	2.42	4	1
1:A:178:ASN:HD22	1:A:178:ASN:N	0.67	1.88	17	1
1:A:19:ASN:ND2	1:A:19:ASN:N	0.67	2.41	7	1
1:A:178:ASN:ND2	1:A:178:ASN:H	0.67	1.85	23	1
1:A:102:GLU:H	1:A:102:GLU:CD	0.66	1.98	21	1
1:A:8:LEU:HD12	1:A:8:LEU:O	0.66	1.90	2	6
1:A:109:ASP:OD1	1:A:112:GLY:N	0.66	2.29	19	6
1:A:18:LEU:N	1:A:18:LEU:HD22	0.66	2.05	23	1
1:A:82:PHE:O	1:A:86:VAL:HG23	0.65	1.91	2	8
1:A:22:PHE:O	1:A:23:THR:HG23	0.65	1.91	19	5
1:A:22:PHE:C	1:A:23:THR:HG23	0.65	2.15	6	2
1:A:69:PHE:CE2	1:A:73:ASP:OD2	0.65	2.50	4	21
1:A:187:PHE:CD1	1:A:187:PHE:N	0.65	2.64	17	8
1:A:69:PHE:CZ	1:A:73:ASP:OD2	0.65	2.49	12	14
1:A:16:LEU:CD2	1:A:16:LEU:N	0.65	2.59	12	1
1:A:149:LYS:CB	1:A:149:LYS:NZ	0.65	2.60	1	1
1:A:19:ASN:HD22	1:A:100:LYS:NZ	0.65	1.90	21	1
1:A:13:LEU:C	1:A:15:GLU:N	0.65	2.53	22	24
1:A:107:LEU:C	1:A:107:LEU:CD1	0.65	2.68	23	18
1:A:31:TYR:CG	1:A:32:GLN:N	0.65	2.65	11	2
1:A:90:HIS:NE2	1:A:91:MET:SD	0.65	2.70	21	1
1:A:31:TYR:C	1:A:31:TYR:CD1	0.65	2.75	4	3
1:A:18:LEU:HD12	1:A:18:LEU:H	0.64	1.52	17	2
1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CD1	0.64	2.55	3	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:LYS:NZ	1:A:90:HIS:CG	0.64	2.65	14	1
1:A:19:ASN:ND2	1:A:90:HIS:CE1	0.64	2.65	18	1
1:A:160:LYS:HZ1	1:A:166:LEU:HD13	0.64	1.50	1	1
1:A:180:GLU:H	1:A:180:GLU:CD	0.64	1.99	15	2
1:A:56:PHE:CE1	1:A:131:MET:CE	0.64	2.80	20	3
1:A:72:PHE:CE1	1:A:87:ILE:HG21	0.64	2.27	5	1
1:A:109:ASP:OD2	1:A:113:ASN:N	0.64	2.31	21	6
1:A:110:VAL:CG2	1:A:124:ILE:HD11	0.64	2.23	24	3
1:A:56:PHE:CD1	1:A:131:MET:HE1	0.64	2.28	22	1
1:A:15:GLU:OE2	1:A:16:LEU:N	0.64	2.31	24	1
1:A:122:LEU:HD13	1:A:122:LEU:C	0.64	2.17	6	3
1:A:24:GLU:OE1	1:A:24:GLU:N	0.64	2.31	11	3
1:A:16:LEU:HD23	1:A:17:GLN:N	0.63	2.08	3	4
1:A:52:TYR:CG	1:A:65:ALA:HB2	0.63	2.28	3	1
1:A:109:ASP:OD2	1:A:112:GLY:N	0.63	2.32	20	3
1:A:21:LYS:CE	1:A:23:THR:H	0.63	2.06	22	1
1:A:111:ASP:OD1	1:A:112:GLY:N	0.63	2.31	7	7
1:A:27:LEU:CD1	1:A:27:LEU:N	0.63	2.61	11	1
1:A:69:PHE:CE1	1:A:73:ASP:OD2	0.63	2.52	8	1
1:A:75:ASN:HD21	1:A:77:ASP:CG	0.63	2.01	15	3
1:A:16:LEU:CG	1:A:17:GLN:H	0.63	2.05	12	1
1:A:157:PHE:CZ	1:A:158:PHE:CD2	0.62	2.87	2	2
1:A:182:LEU:HD23	1:A:183:ARG:HH12	0.62	1.53	2	2
1:A:24:GLU:CD	1:A:25:GLU:N	0.62	2.57	20	1
1:A:8:LEU:CD1	1:A:9:SER:N	0.62	2.62	8	3
1:A:135:GLU:H	1:A:135:GLU:CD	0.62	2.02	8	1
1:A:175:THR:HG23	1:A:181:ILE:HG21	0.62	1.71	18	1
1:A:137:THR:CG2	1:A:145:ASN:HD21	0.62	2.06	10	1
1:A:64:TYR:CD2	1:A:131:MET:SD	0.62	2.92	18	1
1:A:140:LEU:N	1:A:141:PRO:CD	0.62	2.61	20	1
1:A:49:GLN:HE21	1:A:66:GLN:CD	0.62	2.03	9	1
1:A:81:ASP:OD1	1:A:82:PHE:N	0.62	2.33	23	3
1:A:165:LYS:H	1:A:165:LYS:CD	0.62	2.07	17	1
1:A:137:THR:HA	1:A:140:LEU:HD21	0.62	1.70	7	5
1:A:60:ASP:C	1:A:62:LYS:H	0.61	2.03	1	21
1:A:168:GLU:CD	1:A:168:GLU:N	0.61	2.56	20	2
1:A:102:GLU:CD	1:A:103:TRP:N	0.61	2.58	6	2
1:A:137:THR:C	1:A:139:HIS:H	0.61	2.03	15	2
1:A:75:ASN:ND2	1:A:77:ASP:OD2	0.61	2.32	22	3
1:A:119:ASN:CG	1:A:120:GLU:N	0.61	2.58	14	1
1:A:8:LEU:HD13	1:A:12:ILE:HD12	0.61	1.72	15	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:111:ASP:N	1:A:111:ASP:OD1	0.61	2.33	11	6
1:A:125:VAL:HG13	1:A:150:ARG:HH21	0.61	1.54	6	1
1:A:15:GLU:O	1:A:17:GLN:N	0.61	2.33	13	20
1:A:21:LYS:O	1:A:22:PHE:C	0.61	2.42	11	7
1:A:64:TYR:CD1	1:A:64:TYR:C	0.61	2.78	9	8
1:A:142:GLU:C	1:A:143:ASP:CG	0.61	2.69	4	2
1:A:51:ILE:CG2	1:A:52:TYR:N	0.61	2.63	18	3
1:A:8:LEU:HD11	1:A:82:PHE:CD1	0.61	2.30	18	2
1:A:123:GLU:OE1	1:A:123:GLU:N	0.61	2.33	1	3
1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:CD	0.61	2.58	3	3
1:A:69:PHE:CE1	1:A:80:LEU:HD12	0.61	2.30	18	6
1:A:77:ASP:C	1:A:79:THR:H	0.61	2.04	9	4
1:A:117:SER:N	1:A:120:GLU:OE2	0.61	2.33	4	2
1:A:54:LYS:NZ	1:A:55:PHE:CE2	0.61	2.69	22	1
1:A:58:GLU:CD	1:A:58:GLU:C	0.61	2.68	23	1
1:A:142:GLU:C	1:A:144:GLU:H	0.61	2.02	23	12
1:A:157:PHE:CE2	1:A:158:PHE:CZ	0.61	2.89	2	2
1:A:113:ASN:N	1:A:113:ASN:HD22	0.61	1.92	4	1
1:A:148:GLU:N	1:A:148:GLU:OE1	0.61	2.33	22	1
1:A:80:LEU:HD23	1:A:84:GLU:OE1	0.60	1.96	24	3
1:A:81:ASP:OD1	1:A:83:LYS:N	0.60	2.34	13	2
1:A:18:LEU:C	1:A:20:THR:H	0.60	2.04	8	1
1:A:8:LEU:HD22	1:A:82:PHE:CD1	0.60	2.31	4	1
1:A:28:SER:OG	1:A:29:SER:N	0.60	2.31	24	6
1:A:182:LEU:C	1:A:182:LEU:CD1	0.60	2.75	23	3
1:A:135:GLU:CD	1:A:135:GLU:N	0.60	2.60	8	1
1:A:26:GLU:C	1:A:28:SER:H	0.60	2.04	10	10
1:A:180:GLU:CD	1:A:180:GLU:N	0.60	2.59	15	1
1:A:32:GLN:CG	1:A:33:SER:N	0.60	2.65	3	2
1:A:24:GLU:CD	1:A:24:GLU:C	0.60	2.70	10	2
1:A:34:PHE:C	1:A:34:PHE:CD1	0.60	2.80	18	4
1:A:19:ASN:HD22	1:A:90:HIS:CD2	0.60	2.14	9	1
1:A:38:CYS:SG	1:A:40:SER:OG	0.60	2.60	17	2
1:A:178:ASN:H	1:A:178:ASN:HD22	0.60	1.39	23	1
1:A:184:LEU:C	1:A:186:GLN:H	0.59	2.05	7	10
1:A:32:GLN:C	1:A:34:PHE:N	0.59	2.59	22	14
1:A:111:ASP:OD1	1:A:111:ASP:N	0.59	2.33	9	5
1:A:113:ASN:ND2	1:A:115:THR:OG1	0.59	2.35	20	3
1:A:139:HIS:O	1:A:139:HIS:CG	0.59	2.55	17	2
1:A:34:PHE:CE2	1:A:38:CYS:SG	0.59	2.95	3	3
1:A:27:LEU:N	1:A:27:LEU:CD1	0.59	2.65	18	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:SER:N	1:A:11:GLU:OE1	0.59	2.33	9	1
1:A:19:ASN:ND2	1:A:90:HIS:ND1	0.59	2.50	18	2
1:A:38:CYS:C	1:A:40:SER:H	0.59	2.05	12	9
1:A:49:GLN:CD	1:A:49:GLN:C	0.59	2.70	13	4
1:A:19:ASN:ND2	1:A:90:HIS:CD2	0.59	2.71	9	1
1:A:16:LEU:N	1:A:16:LEU:HD23	0.59	2.12	8	13
1:A:40:SER:OG	1:A:41:GLY:N	0.59	2.32	18	2
1:A:8:LEU:C	1:A:10:LYS:H	0.59	2.05	4	1
1:A:72:PHE:CD1	1:A:73:ASP:N	0.59	2.70	4	2
1:A:182:LEU:C	1:A:184:LEU:H	0.59	2.05	8	2
1:A:102:GLU:CD	1:A:102:GLU:C	0.59	2.70	22	2
1:A:104:ALA:O	1:A:106:SER:N	0.59	2.36	7	7
1:A:118:LYS:HZ2	1:A:155:TRP:CD1	0.59	2.16	4	1
1:A:140:LEU:HD12	1:A:141:PRO:O	0.59	1.98	12	1
1:A:179:LYS:H	1:A:179:LYS:CD	0.59	2.09	13	1
1:A:18:LEU:HD12	1:A:18:LEU:N	0.59	2.12	17	1
1:A:77:ASP:CG	1:A:78:GLY:H	0.59	2.05	1	2
1:A:19:ASN:ND2	1:A:94:ALA:HB1	0.59	2.13	4	1
1:A:158:PHE:N	1:A:158:PHE:CD1	0.59	2.65	2	2
1:A:34:PHE:CZ	1:A:38:CYS:CB	0.59	2.86	7	1
1:A:144:GLU:N	1:A:144:GLU:OE1	0.59	2.36	18	1
1:A:178:ASN:N	1:A:178:ASN:ND2	0.59	2.51	17	1
1:A:158:PHE:CZ	1:A:181:ILE:HD13	0.59	2.32	23	1
1:A:184:LEU:C	1:A:184:LEU:HD23	0.59	2.23	23	1
1:A:73:ASP:CG	1:A:74:ALA:N	0.59	2.60	21	2
1:A:186:GLN:C	1:A:187:PHE:CG	0.58	2.81	10	2
1:A:142:GLU:C	1:A:144:GLU:N	0.58	2.59	19	15
1:A:143:ASP:N	1:A:143:ASP:OD1	0.58	2.35	14	2
1:A:109:ASP:CG	1:A:113:ASN:H	0.58	2.05	9	3
1:A:69:PHE:C	1:A:71:SER:N	0.58	2.60	13	22
1:A:170:GLU:C	1:A:172:ILE:N	0.58	2.59	8	22
1:A:136:ASP:C	1:A:138:LYS:N	0.58	2.61	10	9
1:A:154:ILE:O	1:A:157:PHE:CD1	0.58	2.55	2	2
1:A:21:LYS:CD	1:A:22:PHE:H	0.58	2.11	8	1
1:A:122:LEU:HD13	1:A:122:LEU:O	0.58	1.98	6	3
1:A:75:ASN:C	1:A:77:ASP:H	0.58	2.07	7	2
1:A:105:PHE:CG	1:A:168:GLU:OE1	0.58	2.57	19	1
1:A:24:GLU:C	1:A:26:GLU:N	0.58	2.59	14	8
1:A:124:ILE:H	1:A:124:ILE:HD12	0.58	1.58	18	1
1:A:117:SER:OG	1:A:118:LYS:N	0.58	2.36	23	1
1:A:23:THR:C	1:A:25:GLU:N	0.58	2.60	11	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:TYR:CG	1:A:131:MET:SD	0.58	2.96	18	2
1:A:77:ASP:OD1	1:A:78:GLY:N	0.58	2.37	21	1
1:A:113:ASN:C	1:A:113:ASN:HD22	0.58	2.06	24	1
1:A:18:LEU:N	1:A:18:LEU:CD2	0.58	2.67	1	2
1:A:60:ASP:N	1:A:60:ASP:OD1	0.58	2.33	3	1
1:A:90:HIS:ND1	1:A:90:HIS:C	0.58	2.62	13	4
1:A:24:GLU:OE2	1:A:25:GLU:N	0.58	2.37	20	4
1:A:58:GLU:CG	1:A:59:ALA:N	0.58	2.66	19	2
1:A:73:ASP:O	1:A:75:ASN:N	0.57	2.38	12	4
1:A:8:LEU:HD13	1:A:12:ILE:HD11	0.57	1.76	9	4
1:A:8:LEU:N	1:A:8:LEU:CD2	0.57	2.68	4	1
1:A:116:ILE:HG22	1:A:117:SER:N	0.57	2.14	10	3
1:A:16:LEU:HG	1:A:17:GLN:H	0.57	1.60	12	1
1:A:105:PHE:CD1	1:A:168:GLU:OE1	0.57	2.57	19	1
1:A:113:ASN:ND2	1:A:114:GLY:N	0.57	2.53	24	1
1:A:16:LEU:HG	1:A:17:GLN:N	0.57	2.14	21	15
1:A:25:GLU:CD	1:A:25:GLU:C	0.57	2.73	7	1
1:A:121:VAL:O	1:A:125:VAL:HG23	0.57	2.00	17	5
1:A:145:ASN:HD22	1:A:145:ASN:N	0.57	1.97	2	4
1:A:173:GLU:C	1:A:175:THR:N	0.57	2.60	4	22
1:A:34:PHE:CE1	1:A:38:CYS:SG	0.57	2.97	4	2
1:A:124:ILE:HD13	1:A:124:ILE:N	0.57	2.14	15	6
1:A:9:SER:O	1:A:13:LEU:N	0.57	2.38	10	7
1:A:40:SER:C	1:A:42:ARG:H	0.57	2.08	22	1
1:A:23:THR:O	1:A:25:GLU:N	0.57	2.38	10	13
1:A:31:TYR:CD1	1:A:32:GLN:N	0.57	2.73	6	2
1:A:179:LYS:C	1:A:181:ILE:N	0.57	2.63	13	6
1:A:28:SER:C	1:A:30:TRP:H	0.57	2.07	14	2
1:A:18:LEU:C	1:A:20:THR:N	0.57	2.61	8	1
1:A:140:LEU:N	1:A:141:PRO:HD3	0.57	2.14	20	1
1:A:8:LEU:HD22	1:A:82:PHE:CE1	0.56	2.35	4	1
1:A:72:PHE:CD1	1:A:72:PHE:C	0.56	2.79	4	1
1:A:18:LEU:O	1:A:20:THR:N	0.56	2.38	8	1
1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD22	0.56	1.55	10	1
1:A:157:PHE:CE1	1:A:178:ASN:ND2	0.56	2.74	7	1
1:A:104:ALA:C	1:A:106:SER:N	0.56	2.62	7	12
1:A:90:HIS:CD2	1:A:94:ALA:CB	0.56	2.88	3	2
1:A:104:ALA:C	1:A:106:SER:H	0.56	2.08	7	6
1:A:62:LYS:N	1:A:62:LYS:CD	0.56	2.68	15	1
1:A:150:ARG:O	1:A:153:LYS:N	0.56	2.38	18	23
1:A:136:ASP:C	1:A:138:LYS:H	0.56	2.07	22	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:188:GLU:CD	1:A:188:GLU:C	0.56	2.72	20	4
1:A:73:ASP:O	1:A:74:ALA:C	0.56	2.48	13	4
1:A:45:ARG:HH12	1:A:70:ARG:HH22	0.56	1.44	24	1
1:A:123:GLU:N	1:A:123:GLU:CD	0.56	2.63	1	2
1:A:8:LEU:O	1:A:10:LYS:N	0.56	2.38	3	7
1:A:184:LEU:C	1:A:184:LEU:CD1	0.56	2.79	12	5
1:A:107:LEU:HD13	1:A:107:LEU:O	0.56	2.00	20	5
1:A:72:PHE:C	1:A:74:ALA:H	0.56	2.08	17	3
1:A:107:LEU:C	1:A:107:LEU:CD2	0.56	2.77	7	3
1:A:67:HIS:C	1:A:69:PHE:N	0.56	2.61	9	7
1:A:91:MET:C	1:A:93:SER:H	0.56	2.09	13	4
1:A:113:ASN:C	1:A:115:THR:H	0.56	2.09	7	2
1:A:19:ASN:CG	1:A:21:LYS:H	0.56	2.09	18	1
1:A:11:GLU:OE1	1:A:11:GLU:N	0.56	2.33	9	1
1:A:113:ASN:CG	1:A:114:GLY:N	0.56	2.64	13	5
1:A:90:HIS:HD1	1:A:91:MET:H	0.56	1.44	13	1
1:A:183:ARG:CD	1:A:183:ARG:C	0.56	2.78	20	1
1:A:160:LYS:HZ3	1:A:166:LEU:HD13	0.56	1.56	23	1
1:A:12:ILE:HG21	1:A:27:LEU:HD23	0.56	1.78	18	2
1:A:16:LEU:C	1:A:18:LEU:N	0.56	2.62	18	3
1:A:184:LEU:N	1:A:184:LEU:CD2	0.56	2.68	13	1
1:A:150:ARG:C	1:A:152:GLU:N	0.55	2.62	6	14
1:A:77:ASP:C	1:A:79:THR:N	0.55	2.63	8	4
1:A:147:PRO:C	1:A:149:LYS:N	0.55	2.63	10	2
1:A:141:PRO:C	1:A:143:ASP:H	0.55	2.09	2	3
1:A:7:ALA:O	1:A:8:LEU:C	0.55	2.50	3	7
1:A:140:LEU:HD12	1:A:140:LEU:C	0.55	2.25	20	6
1:A:108:TYR:CE2	1:A:124:ILE:HG21	0.55	2.36	11	3
1:A:13:LEU:C	1:A:13:LEU:CD1	0.55	2.76	6	4
1:A:75:ASN:C	1:A:77:ASP:N	0.55	2.63	7	3
1:A:13:LEU:O	1:A:16:LEU:HD22	0.55	2.00	3	3
1:A:107:LEU:O	1:A:107:LEU:HD23	0.55	2.00	9	1
1:A:8:LEU:CD1	1:A:82:PHE:CD1	0.55	2.90	12	1
1:A:160:LYS:HZ2	1:A:166:LEU:HD13	0.55	1.62	23	1
1:A:8:LEU:C	1:A:8:LEU:CD1	0.55	2.78	11	3
1:A:155:TRP:NE1	1:A:160:LYS:O	0.55	2.39	14	5
1:A:22:PHE:C	1:A:23:THR:OG1	0.55	2.50	8	4
1:A:60:ASP:N	1:A:61:PRO:HD3	0.55	2.16	21	12
1:A:182:LEU:HD12	1:A:182:LEU:C	0.55	2.26	1	1
1:A:56:PHE:N	1:A:57:PRO:HD3	0.55	2.16	19	17
1:A:69:PHE:O	1:A:71:SER:N	0.55	2.40	11	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:181:ILE:O	1:A:183:ARG:N	0.55	2.40	21	6
1:A:67:HIS:C	1:A:69:PHE:H	0.55	2.09	9	7
1:A:186:GLN:O	1:A:187:PHE:CG	0.55	2.60	10	2
1:A:116:ILE:CG2	1:A:117:SER:N	0.55	2.70	10	4
1:A:26:GLU:C	1:A:28:SER:N	0.55	2.64	8	17
1:A:142:GLU:O	1:A:144:GLU:N	0.55	2.40	21	11
1:A:63:ALA:O	1:A:67:HIS:CD2	0.55	2.60	4	10
1:A:184:LEU:C	1:A:186:GLN:N	0.55	2.65	15	12
1:A:15:GLU:O	1:A:18:LEU:N	0.55	2.38	18	8
1:A:16:LEU:CG	1:A:17:GLN:N	0.55	2.70	21	4
1:A:105:PHE:CD1	1:A:168:GLU:CG	0.55	2.90	7	1
1:A:157:PHE:CE1	1:A:158:PHE:CD2	0.55	2.95	2	2
1:A:72:PHE:O	1:A:74:ALA:N	0.55	2.40	7	2
1:A:24:GLU:C	1:A:26:GLU:H	0.55	2.09	14	4
1:A:75:ASN:CG	1:A:76:SER:N	0.55	2.65	14	1
1:A:179:LYS:C	1:A:181:ILE:H	0.54	2.08	13	4
1:A:90:HIS:CD2	1:A:91:MET:HE2	0.54	2.37	15	2
1:A:24:GLU:CD	1:A:25:GLU:H	0.54	2.09	20	1
1:A:136:ASP:O	1:A:138:LYS:N	0.54	2.40	22	6
1:A:16:LEU:CD2	1:A:17:GLN:N	0.54	2.71	18	2
1:A:110:VAL:HG23	1:A:124:ILE:HD11	0.54	1.79	18	1
1:A:173:GLU:O	1:A:175:THR:N	0.54	2.40	23	17
1:A:154:ILE:O	1:A:157:PHE:CG	0.54	2.61	2	2
1:A:29:SER:C	1:A:31:TYR:N	0.54	2.64	3	3
1:A:61:PRO:C	1:A:63:ALA:N	0.54	2.64	6	2
1:A:17:GLN:O	1:A:19:ASN:N	0.54	2.41	21	3
1:A:105:PHE:CD1	1:A:105:PHE:O	0.54	2.61	14	8
1:A:51:ILE:C	1:A:53:SER:N	0.54	2.65	9	9
1:A:91:MET:C	1:A:93:SER:N	0.54	2.64	13	6
1:A:170:GLU:O	1:A:173:GLU:N	0.54	2.41	3	12
1:A:55:PHE:C	1:A:56:PHE:CD2	0.54	2.85	18	2
1:A:75:ASN:ND2	1:A:75:ASN:H	0.54	1.99	20	1
1:A:132:ILE:HG22	1:A:137:THR:OG1	0.54	2.02	20	1
1:A:86:VAL:O	1:A:90:HIS:CD2	0.54	2.61	2	2
1:A:186:GLN:O	1:A:187:PHE:CD1	0.54	2.61	8	2
1:A:170:GLU:O	1:A:172:ILE:N	0.54	2.40	8	15
1:A:90:HIS:C	1:A:92:THR:N	0.54	2.65	7	6
1:A:27:LEU:C	1:A:27:LEU:CD1	0.54	2.74	8	2
1:A:160:LYS:NZ	1:A:160:LYS:N	0.54	2.54	10	1
1:A:73:ASP:OD2	1:A:74:ALA:N	0.54	2.40	21	1
1:A:55:PHE:O	1:A:56:PHE:CD1	0.54	2.61	1	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:PHE:C	1:A:71:SER:H	0.54	2.10	13	10
1:A:140:LEU:H	1:A:140:LEU:HD23	0.54	1.63	4	3
1:A:102:GLU:OE1	1:A:168:GLU:CG	0.54	2.55	23	2
1:A:129:PHE:CE1	1:A:145:ASN:O	0.54	2.61	7	3
1:A:13:LEU:C	1:A:15:GLU:H	0.54	2.09	4	19
1:A:137:THR:O	1:A:140:LEU:CD2	0.54	2.56	22	5
1:A:80:LEU:HD23	1:A:80:LEU:N	0.54	2.18	7	2
1:A:32:GLN:O	1:A:34:PHE:N	0.54	2.40	22	10
1:A:142:GLU:C	1:A:143:ASP:OD1	0.54	2.51	9	1
1:A:28:SER:O	1:A:31:TYR:CD2	0.54	2.61	14	1
1:A:178:ASN:HD22	1:A:178:ASN:H	0.54	1.45	17	1
1:A:129:PHE:CZ	1:A:145:ASN:O	0.54	2.61	7	6
1:A:61:PRO:O	1:A:65:ALA:N	0.54	2.38	18	7
1:A:113:ASN:CG	1:A:115:THR:OG1	0.54	2.51	15	3
1:A:128:ILE:O	1:A:131:MET:N	0.54	2.41	9	7
1:A:20:THR:H	1:A:90:HIS:CE1	0.54	2.22	10	1
1:A:16:LEU:N	1:A:16:LEU:HD22	0.54	2.18	12	1
1:A:81:ASP:OD1	1:A:81:ASP:C	0.53	2.51	4	5
1:A:61:PRO:O	1:A:63:ALA:N	0.53	2.41	6	1
1:A:100:LYS:CB	1:A:100:LYS:NZ	0.53	2.69	9	1
1:A:139:HIS:C	1:A:141:PRO:CD	0.53	2.82	20	1
1:A:12:ILE:C	1:A:14:GLU:N	0.53	2.65	24	5
1:A:77:ASP:CG	1:A:78:GLY:N	0.53	2.65	1	2
1:A:181:ILE:C	1:A:183:ARG:N	0.53	2.66	1	8
1:A:55:PHE:O	1:A:56:PHE:CG	0.53	2.61	5	4
1:A:145:ASN:N	1:A:145:ASN:OD1	0.53	2.41	9	1
1:A:16:LEU:O	1:A:18:LEU:N	0.53	2.41	13	3
1:A:73:ASP:CG	1:A:80:LEU:CD2	0.53	2.81	17	1
1:A:144:GLU:O	1:A:146:THR:N	0.53	2.42	21	1
1:A:60:ASP:N	1:A:61:PRO:CD	0.53	2.71	21	8
1:A:23:THR:C	1:A:25:GLU:H	0.53	2.12	8	6
1:A:46:GLN:CD	1:A:46:GLN:N	0.53	2.66	4	1
1:A:107:LEU:HD23	1:A:107:LEU:C	0.53	2.29	9	1
1:A:137:THR:C	1:A:139:HIS:N	0.53	2.65	15	2
1:A:102:GLU:OE1	1:A:168:GLU:CD	0.53	2.52	5	2
1:A:43:ILE:HG22	1:A:44:THR:N	0.53	2.18	22	3
1:A:18:LEU:C	1:A:19:ASN:CG	0.53	2.76	7	1
1:A:81:ASP:OD2	1:A:84:GLU:CD	0.53	2.52	9	1
1:A:111:ASP:OD1	1:A:120:GLU:CD	0.53	2.52	9	1
1:A:20:THR:CB	1:A:94:ALA:HB1	0.53	2.34	13	1
1:A:81:ASP:H	1:A:84:GLU:CD	0.53	2.11	22	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:173:GLU:O	1:A:176:LEU:N	0.53	2.41	21	23
1:A:145:ASN:H	1:A:145:ASN:ND2	0.53	2.02	2	5
1:A:157:PHE:CD2	1:A:158:PHE:CZ	0.53	2.97	2	2
1:A:184:LEU:O	1:A:186:GLN:N	0.53	2.42	23	12
1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:OE1	0.53	2.41	5	1
1:A:53:SER:C	1:A:55:PHE:N	0.53	2.67	6	1
1:A:75:ASN:O	1:A:77:ASP:N	0.53	2.39	9	3
1:A:8:LEU:O	1:A:11:GLU:N	0.53	2.42	17	1
1:A:109:ASP:OD2	1:A:112:GLY:CA	0.53	2.57	20	2
1:A:108:TYR:CZ	1:A:124:ILE:HG21	0.53	2.38	23	1
1:A:51:ILE:O	1:A:53:SER:N	0.53	2.42	22	7
1:A:73:ASP:OD1	1:A:79:THR:C	0.53	2.51	23	3
1:A:48:PHE:CD1	1:A:65:ALA:O	0.53	2.62	24	3
1:A:69:PHE:CD1	1:A:80:LEU:HD12	0.53	2.39	9	2
1:A:77:ASP:O	1:A:79:THR:N	0.53	2.42	6	3
1:A:146:THR:O	1:A:150:ARG:N	0.53	2.41	8	2
1:A:38:CYS:O	1:A:40:SER:N	0.53	2.41	1	4
1:A:30:TRP:CD1	1:A:30:TRP:O	0.53	2.61	23	6
1:A:42:ARG:NE	1:A:79:THR:OG1	0.53	2.41	6	1
1:A:170:GLU:N	1:A:170:GLU:OE1	0.53	2.42	9	1
1:A:145:ASN:HD22	1:A:145:ASN:C	0.53	2.12	11	1
1:A:176:LEU:C	1:A:176:LEU:CD1	0.53	2.79	14	3
1:A:75:ASN:CG	1:A:76:SER:H	0.53	2.11	14	1
1:A:105:PHE:CD2	1:A:105:PHE:O	0.53	2.61	1	2
1:A:113:ASN:N	1:A:113:ASN:OD1	0.53	2.42	11	3
1:A:26:GLU:O	1:A:28:SER:N	0.53	2.42	10	8
1:A:168:GLU:CG	1:A:169:LYS:N	0.53	2.71	9	1
1:A:175:THR:HG23	1:A:181:ILE:HG22	0.53	1.77	18	1
1:A:21:LYS:CD	1:A:21:LYS:N	0.53	2.72	19	1
1:A:75:ASN:O	1:A:75:ASN:ND2	0.53	2.42	17	7
1:A:106:SER:OG	1:A:107:LEU:N	0.53	2.41	3	2
1:A:19:ASN:O	1:A:21:LYS:N	0.53	2.41	18	1
1:A:10:LYS:CD	1:A:10:LYS:N	0.53	2.71	19	1
1:A:182:LEU:O	1:A:184:LEU:N	0.53	2.42	8	2
1:A:141:PRO:O	1:A:145:ASN:ND2	0.53	2.42	9	1
1:A:152:GLU:O	1:A:156:GLY:N	0.53	2.41	10	2
1:A:117:SER:C	1:A:119:ASN:N	0.53	2.67	14	1
1:A:91:MET:SD	1:A:103:TRP:CE2	0.52	3.03	3	1
1:A:52:TYR:O	1:A:54:LYS:N	0.52	2.42	5	1
1:A:17:GLN:C	1:A:19:ASN:N	0.52	2.66	7	3
1:A:137:THR:O	1:A:139:HIS:N	0.52	2.41	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:LEU:C	1:A:18:LEU:H	0.52	2.11	18	2
1:A:178:ASN:C	1:A:180:GLU:N	0.52	2.65	1	2
1:A:29:SER:O	1:A:31:TYR:N	0.52	2.42	3	3
1:A:117:SER:O	1:A:119:ASN:N	0.52	2.42	14	1
1:A:77:ASP:OD1	1:A:77:ASP:N	0.52	2.41	21	1
1:A:15:GLU:O	1:A:16:LEU:C	0.52	2.53	18	22
1:A:181:ILE:C	1:A:183:ARG:H	0.52	2.11	17	2
1:A:67:HIS:O	1:A:69:PHE:N	0.52	2.42	9	6
1:A:28:SER:O	1:A:30:TRP:N	0.52	2.42	14	2
1:A:147:PRO:O	1:A:149:LYS:N	0.52	2.43	10	2
1:A:32:GLN:C	1:A:34:PHE:H	0.52	2.13	22	4
1:A:179:LYS:CD	1:A:179:LYS:N	0.52	2.72	13	1
1:A:56:PHE:N	1:A:57:PRO:CD	0.52	2.72	17	14
1:A:21:LYS:CG	1:A:22:PHE:H	0.52	2.16	5	1
1:A:32:GLN:O	1:A:35:LEU:N	0.52	2.42	6	12
1:A:119:ASN:HD22	1:A:119:ASN:H	0.52	1.47	5	1
1:A:179:LYS:O	1:A:181:ILE:N	0.52	2.42	6	5
1:A:75:ASN:C	1:A:76:SER:OG	0.52	2.51	8	3
1:A:8:LEU:HD12	1:A:8:LEU:C	0.52	2.29	17	3
1:A:21:LYS:O	1:A:23:THR:N	0.52	2.42	8	3
1:A:182:LEU:C	1:A:184:LEU:N	0.52	2.65	7	2
1:A:153:LYS:O	1:A:157:PHE:CD1	0.52	2.62	23	1
1:A:9:SER:O	1:A:12:ILE:N	0.52	2.43	24	4
1:A:23:THR:HG23	1:A:26:GLU:HB2	0.52	1.81	18	2
1:A:49:GLN:NE2	1:A:62:LYS:CB	0.52	2.72	21	1
1:A:144:GLU:C	1:A:146:THR:H	0.52	2.12	21	1
1:A:144:GLU:O	1:A:150:ARG:NH2	0.52	2.42	22	1
1:A:12:ILE:O	1:A:14:GLU:N	0.52	2.42	24	1
1:A:23:THR:O	1:A:26:GLU:N	0.52	2.38	12	10
1:A:111:ASP:OD2	1:A:120:GLU:CD	0.52	2.52	1	1
1:A:154:ILE:C	1:A:156:GLY:N	0.52	2.67	22	6
1:A:147:PRO:C	1:A:149:LYS:H	0.52	2.12	10	2
1:A:59:ALA:C	1:A:60:ASP:OD1	0.52	2.53	15	2
1:A:15:GLU:C	1:A:17:GLN:N	0.52	2.68	3	12
1:A:30:TRP:O	1:A:32:GLN:N	0.52	2.42	4	1
1:A:109:ASP:O	1:A:111:ASP:N	0.52	2.42	4	2
1:A:170:GLU:O	1:A:174:GLY:N	0.52	2.43	10	5
1:A:8:LEU:O	1:A:9:SER:CB	0.52	2.58	22	11
1:A:109:ASP:OD1	1:A:120:GLU:OE1	0.52	2.28	7	2
1:A:18:LEU:O	1:A:19:ASN:C	0.52	2.52	18	2
1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:CD	0.52	2.73	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:144:GLU:N	1:A:144:GLU:OE2	0.52	2.42	21	1
1:A:49:GLN:NE2	1:A:66:GLN:NE2	0.52	2.58	24	1
1:A:19:ASN:HD21	1:A:94:ALA:HB1	0.52	1.64	4	1
1:A:27:LEU:O	1:A:27:LEU:CD1	0.52	2.56	4	1
1:A:109:ASP:CG	1:A:120:GLU:OE1	0.52	2.52	7	1
1:A:51:ILE:O	1:A:54:LYS:N	0.52	2.43	8	2
1:A:102:GLU:O	1:A:104:ALA:N	0.52	2.43	9	2
1:A:21:LYS:NZ	1:A:90:HIS:CB	0.52	2.73	14	1
1:A:8:LEU:O	1:A:9:SER:C	0.52	2.53	17	2
1:A:109:ASP:C	1:A:111:ASP:N	0.51	2.64	13	2
1:A:52:TYR:C	1:A:54:LYS:N	0.51	2.67	5	1
1:A:90:HIS:CE1	1:A:94:ALA:CB	0.51	2.93	7	2
1:A:37:GLU:N	1:A:37:GLU:OE1	0.51	2.44	23	1
1:A:82:PHE:O	1:A:85:TYR:N	0.51	2.42	11	3
1:A:75:ASN:H	1:A:75:ASN:HD22	0.51	1.45	13	1
1:A:10:LYS:CD	1:A:10:LYS:H	0.51	2.18	19	1
1:A:47:GLU:O	1:A:50:THR:N	0.51	2.44	2	8
1:A:113:ASN:OD1	1:A:114:GLY:N	0.51	2.43	9	2
1:A:9:SER:O	1:A:11:GLU:N	0.51	2.43	21	3
1:A:101:LEU:O	1:A:104:ALA:HB3	0.51	2.05	10	3
1:A:19:ASN:C	1:A:21:LYS:N	0.51	2.67	18	1
1:A:160:LYS:NZ	1:A:166:LEU:CD1	0.51	2.72	1	1
1:A:91:MET:SD	1:A:103:TRP:CD2	0.51	3.03	3	2
1:A:75:ASN:HD21	1:A:84:GLU:CD	0.51	2.13	5	1
1:A:18:LEU:HD11	1:A:103:TRP:CZ2	0.51	2.39	7	1
1:A:29:SER:O	1:A:32:GLN:N	0.51	2.43	9	1
1:A:26:GLU:O	1:A:27:LEU:C	0.51	2.54	21	6
1:A:48:PHE:CE1	1:A:65:ALA:O	0.51	2.64	24	2
1:A:86:VAL:O	1:A:90:HIS:N	0.51	2.41	3	5
1:A:88:ALA:O	1:A:90:HIS:N	0.51	2.44	11	2
1:A:18:LEU:HG	1:A:19:ASN:N	0.51	2.20	18	3
1:A:18:LEU:O	1:A:19:ASN:CB	0.51	2.59	4	2
1:A:60:ASP:C	1:A:62:LYS:N	0.51	2.69	1	21
1:A:131:MET:O	1:A:131:MET:SD	0.51	2.69	22	2
1:A:51:ILE:C	1:A:53:SER:H	0.51	2.14	9	5
1:A:142:GLU:CD	1:A:142:GLU:N	0.51	2.64	17	2
1:A:178:ASN:O	1:A:180:GLU:N	0.51	2.44	1	2
1:A:42:ARG:HE	1:A:79:THR:CB	0.51	2.17	6	1
1:A:24:GLU:O	1:A:26:GLU:N	0.51	2.43	14	3
1:A:60:ASP:O	1:A:62:LYS:N	0.51	2.42	4	12
1:A:134:PRO:C	1:A:136:ASP:N	0.51	2.69	24	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:88:ALA:C	1:A:90:HIS:N	0.51	2.67	11	5
1:A:22:PHE:C	1:A:23:THR:CG2	0.51	2.84	6	3
1:A:62:LYS:CG	1:A:63:ALA:N	0.51	2.73	8	1
1:A:170:GLU:C	1:A:172:ILE:H	0.51	2.13	8	6
1:A:77:ASP:C	1:A:77:ASP:OD1	0.51	2.52	11	2
1:A:23:THR:O	1:A:24:GLU:C	0.50	2.54	23	16
1:A:28:SER:C	1:A:30:TRP:N	0.50	2.66	7	2
1:A:107:LEU:C	1:A:107:LEU:HD23	0.50	2.31	24	2
1:A:137:THR:O	1:A:140:LEU:CD1	0.50	2.60	18	4
1:A:186:GLN:O	1:A:188:GLU:N	0.50	2.43	10	1
1:A:87:ILE:O	1:A:90:HIS:ND1	0.50	2.44	13	3
1:A:82:PHE:CD1	1:A:82:PHE:C	0.50	2.89	11	2
1:A:118:LYS:CD	1:A:118:LYS:H	0.50	2.19	17	1
1:A:184:LEU:HD23	1:A:184:LEU:O	0.50	2.07	23	1
1:A:141:PRO:C	1:A:143:ASP:N	0.50	2.66	2	3
1:A:167:THR:O	1:A:171:PHE:N	0.50	2.38	3	1
1:A:171:PHE:C	1:A:171:PHE:CD1	0.50	2.89	15	2
1:A:146:THR:OG1	1:A:149:LYS:NZ	0.50	2.40	8	1
1:A:111:ASP:OD2	1:A:120:GLU:CG	0.50	2.59	1	1
1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:HD23	0.50	2.20	2	3
1:A:73:ASP:OD1	1:A:73:ASP:C	0.50	2.54	8	1
1:A:45:ARG:NE	1:A:69:PHE:CD2	0.50	2.79	15	1
1:A:49:GLN:NE2	1:A:66:GLN:HE21	0.50	2.04	17	1
1:A:188:GLU:OE1	1:A:188:GLU:C	0.50	2.54	19	1
1:A:22:PHE:CB	1:A:90:HIS:NE2	0.50	2.74	22	1
1:A:37:GLU:O	1:A:38:CYS:SG	0.50	2.68	23	5
1:A:117:SER:O	1:A:121:VAL:HG23	0.50	2.06	1	2
1:A:123:GLU:OE1	1:A:123:GLU:CA	0.50	2.59	3	2
1:A:61:PRO:O	1:A:64:TYR:N	0.50	2.45	22	4
1:A:24:GLU:HA	1:A:27:LEU:HD13	0.50	1.82	15	2
1:A:75:ASN:ND2	1:A:84:GLU:OE2	0.50	2.42	19	1
1:A:176:LEU:C	1:A:176:LEU:HD13	0.50	2.32	22	1
1:A:59:ALA:CB	1:A:131:MET:O	0.50	2.60	4	21
1:A:113:ASN:C	1:A:115:THR:N	0.50	2.67	1	4
1:A:81:ASP:OD1	1:A:84:GLU:N	0.50	2.36	9	2
1:A:75:ASN:N	1:A:75:ASN:OD1	0.50	2.45	12	2
1:A:45:ARG:NH1	1:A:66:GLN:OE1	0.50	2.45	21	1
1:A:87:ILE:O	1:A:90:HIS:CE1	0.50	2.65	21	4
1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:OE2	0.50	2.45	3	1
1:A:20:THR:O	1:A:20:THR:CG2	0.50	2.58	15	2
1:A:153:LYS:O	1:A:157:PHE:N	0.50	2.43	23	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:MET:O	1:A:93:SER:N	0.49	2.45	13	3
1:A:52:TYR:O	1:A:55:PHE:N	0.49	2.42	2	2
1:A:90:HIS:NE2	1:A:94:ALA:CB	0.49	2.75	11	3
1:A:137:THR:CA	1:A:140:LEU:HD21	0.49	2.36	7	5
1:A:24:GLU:CD	1:A:24:GLU:N	0.49	2.70	20	2
1:A:31:TYR:CZ	1:A:35:LEU:CD1	0.49	2.95	11	1
1:A:46:GLN:CD	1:A:46:GLN:C	0.49	2.80	12	1
1:A:178:ASN:C	1:A:180:GLU:H	0.49	2.15	12	2
1:A:134:PRO:O	1:A:137:THR:N	0.49	2.45	4	1
1:A:90:HIS:O	1:A:93:SER:N	0.49	2.43	6	4
1:A:72:PHE:O	1:A:73:ASP:C	0.49	2.55	8	1
1:A:121:VAL:HG21	1:A:155:TRP:CE2	0.49	2.41	10	1
1:A:49:GLN:HE22	1:A:65:ALA:CB	0.49	2.21	20	2
1:A:180:GLU:N	1:A:180:GLU:OE2	0.49	2.45	15	1
1:A:32:GLN:HG3	1:A:33:SER:N	0.49	2.22	3	2
1:A:142:GLU:OE1	1:A:142:GLU:N	0.49	2.44	3	1
1:A:118:LYS:CD	1:A:118:LYS:C	0.49	2.85	6	1
1:A:103:TRP:O	1:A:103:TRP:CE3	0.49	2.65	3	2
1:A:101:LEU:O	1:A:103:TRP:N	0.49	2.45	8	2
1:A:113:ASN:CG	1:A:114:GLY:H	0.49	2.14	13	4
1:A:107:LEU:C	1:A:107:LEU:HD22	0.49	2.33	12	2
1:A:86:VAL:O	1:A:87:ILE:C	0.49	2.56	22	9
1:A:64:TYR:CD1	1:A:64:TYR:O	0.49	2.65	21	6
1:A:160:LYS:HZ3	1:A:160:LYS:N	0.49	2.03	10	1
1:A:34:PHE:CE1	1:A:43:ILE:HD11	0.49	2.43	21	1
1:A:12:ILE:O	1:A:13:LEU:C	0.49	2.55	24	18
1:A:13:LEU:O	1:A:15:GLU:N	0.49	2.45	6	18
1:A:158:PHE:CD1	1:A:158:PHE:N	0.49	2.80	3	1
1:A:27:LEU:CD1	1:A:27:LEU:H	0.49	2.19	18	3
1:A:21:LYS:CE	1:A:21:LYS:O	0.49	2.61	10	2
1:A:119:ASN:OD1	1:A:120:GLU:N	0.49	2.44	14	2
1:A:108:TYR:CD1	1:A:124:ILE:HG21	0.49	2.43	23	1
1:A:113:ASN:C	1:A:113:ASN:ND2	0.49	2.71	24	1
1:A:101:LEU:O	1:A:104:ALA:N	0.49	2.44	7	10
1:A:105:PHE:O	1:A:109:ASP:N	0.49	2.45	4	1
1:A:39:PRO:O	1:A:40:SER:CB	0.49	2.60	9	2
1:A:133:SER:O	1:A:137:THR:N	0.49	2.43	18	3
1:A:155:TRP:CZ2	1:A:160:LYS:CB	0.49	2.96	15	2
1:A:144:GLU:C	1:A:146:THR:N	0.49	2.70	21	1
1:A:150:ARG:O	1:A:152:GLU:N	0.49	2.45	23	6
1:A:58:GLU:CG	1:A:59:ALA:H	0.49	2.21	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:PHE:O	1:A:23:THR:CB	0.49	2.61	18	2
1:A:37:GLU:OE1	1:A:37:GLU:CA	0.49	2.61	23	1
1:A:38:CYS:C	1:A:40:SER:N	0.49	2.71	12	9
1:A:176:LEU:HD13	1:A:176:LEU:O	0.49	2.06	14	2
1:A:8:LEU:HD12	1:A:27:LEU:O	0.49	2.07	19	1
1:A:187:PHE:O	1:A:188:GLU:CB	0.49	2.61	1	1
1:A:34:PHE:CE1	1:A:38:CYS:CB	0.49	2.96	7	1
1:A:105:PHE:CG	1:A:168:GLU:CG	0.49	2.95	7	1
1:A:109:ASP:CG	1:A:111:ASP:OD1	0.49	2.55	8	1
1:A:82:PHE:O	1:A:83:LYS:C	0.48	2.56	24	8
1:A:52:TYR:CD2	1:A:56:PHE:CE2	0.48	3.01	22	1
1:A:109:ASP:OD1	1:A:120:GLU:CD	0.48	2.56	7	1
1:A:101:LEU:C	1:A:103:TRP:N	0.48	2.70	15	4
1:A:183:ARG:C	1:A:184:LEU:HD22	0.48	2.33	13	1
1:A:15:GLU:O	1:A:19:ASN:ND2	0.48	2.45	14	1
1:A:46:GLN:CG	1:A:47:GLU:N	0.48	2.75	14	1
1:A:185:ILE:O	1:A:187:PHE:N	0.48	2.45	18	1
1:A:121:VAL:O	1:A:125:VAL:CG2	0.48	2.61	1	1
1:A:141:PRO:O	1:A:143:ASP:N	0.48	2.47	2	2
1:A:75:ASN:ND2	1:A:75:ASN:N	0.48	2.47	13	2
1:A:143:ASP:C	1:A:144:GLU:CD	0.48	2.81	23	1
1:A:186:GLN:C	1:A:186:GLN:CD	0.48	2.81	1	1
1:A:21:LYS:CD	1:A:23:THR:H	0.48	2.22	22	1
1:A:43:ILE:CG2	1:A:44:THR:N	0.48	2.75	22	1
1:A:109:ASP:O	1:A:112:GLY:N	0.48	2.46	23	1
1:A:108:TYR:CZ	1:A:187:PHE:CE2	0.48	3.01	4	1
1:A:122:LEU:C	1:A:122:LEU:CD1	0.48	2.86	5	3
1:A:53:SER:C	1:A:55:PHE:H	0.48	2.17	6	1
1:A:186:GLN:C	1:A:187:PHE:CD2	0.48	2.92	10	1
1:A:140:LEU:C	1:A:142:GLU:H	0.48	2.17	20	1
1:A:22:PHE:O	1:A:23:THR:C	0.48	2.54	15	8
1:A:129:PHE:CE2	1:A:145:ASN:O	0.48	2.67	5	1
1:A:16:LEU:N	1:A:16:LEU:CD2	0.48	2.76	8	4
1:A:105:PHE:CE1	1:A:168:GLU:CA	0.48	2.97	18	1
1:A:18:LEU:HD22	1:A:18:LEU:H	0.48	1.66	23	1
1:A:173:GLU:C	1:A:175:THR:H	0.48	2.16	4	10
1:A:109:ASP:CG	1:A:112:GLY:H	0.48	2.17	4	1
1:A:49:GLN:NE2	1:A:65:ALA:CB	0.48	2.77	20	1
1:A:56:PHE:CE1	1:A:131:MET:HE2	0.48	2.44	2	3
1:A:144:GLU:CD	1:A:144:GLU:C	0.48	2.82	4	1
1:A:90:HIS:O	1:A:92:THR:N	0.48	2.46	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:109:ASP:CG	1:A:113:ASN:OD1	0.48	2.57	7	1
1:A:11:GLU:H	1:A:11:GLU:CD	0.48	2.14	9	1
1:A:9:SER:O	1:A:10:LYS:C	0.48	2.56	10	6
1:A:19:ASN:HD22	1:A:91:MET:HE2	0.48	1.68	22	1
1:A:107:LEU:HD23	1:A:107:LEU:O	0.48	2.09	24	1
1:A:176:LEU:O	1:A:176:LEU:HD13	0.48	2.08	1	1
1:A:91:MET:SD	1:A:91:MET:N	0.48	2.87	17	1
1:A:51:ILE:HG23	1:A:52:TYR:N	0.48	2.24	18	2
1:A:8:LEU:CD2	1:A:82:PHE:CD1	0.48	2.97	4	1
1:A:102:GLU:C	1:A:104:ALA:N	0.48	2.71	9	2
1:A:49:GLN:NE2	1:A:65:ALA:HB3	0.48	2.24	20	1
1:A:19:ASN:ND2	1:A:91:MET:HE2	0.48	2.24	22	1
1:A:90:HIS:O	1:A:94:ALA:HB2	0.48	2.09	24	1
1:A:184:LEU:HD13	1:A:184:LEU:O	0.47	2.08	3	1
1:A:111:ASP:OD2	1:A:120:GLU:OE2	0.47	2.32	7	2
1:A:55:PHE:C	1:A:56:PHE:CG	0.47	2.92	18	8
1:A:154:ILE:O	1:A:156:GLY:N	0.47	2.47	22	4
1:A:93:SER:OG	1:A:94:ALA:N	0.47	2.47	4	1
1:A:158:PHE:CB	1:A:160:LYS:NZ	0.47	2.77	5	2
1:A:181:ILE:O	1:A:184:LEU:N	0.47	2.42	21	2
1:A:45:ARG:CG	1:A:46:GLN:N	0.47	2.78	22	1
1:A:22:PHE:O	1:A:24:GLU:N	0.47	2.48	14	5
1:A:188:GLU:CD	1:A:188:GLU:O	0.47	2.56	4	1
1:A:125:VAL:HG12	1:A:126:THR:N	0.47	2.24	7	1
1:A:52:TYR:CE2	1:A:56:PHE:CE2	0.47	3.02	18	1
1:A:29:SER:C	1:A:31:TYR:H	0.47	2.16	3	2
1:A:85:TYR:CE1	1:A:89:LEU:CD2	0.47	2.96	9	1
1:A:61:PRO:C	1:A:63:ALA:H	0.47	2.16	6	1
1:A:108:TYR:O	1:A:110:VAL:N	0.47	2.41	17	2
1:A:185:ILE:CG2	1:A:186:GLN:N	0.47	2.76	20	1
1:A:181:ILE:HG22	1:A:182:LEU:N	0.47	2.24	14	3
1:A:142:GLU:O	1:A:143:ASP:CB	0.47	2.63	6	3
1:A:157:PHE:CE2	1:A:184:LEU:CD1	0.47	2.97	1	1
1:A:16:LEU:O	1:A:17:GLN:C	0.47	2.56	15	3
1:A:154:ILE:O	1:A:155:TRP:C	0.47	2.58	2	6
1:A:82:PHE:CE1	1:A:83:LYS:HB2	0.47	2.45	4	1
1:A:167:THR:C	1:A:169:LYS:N	0.47	2.71	22	2
1:A:8:LEU:O	1:A:11:GLU:CB	0.47	2.63	17	1
1:A:72:PHE:C	1:A:74:ALA:N	0.47	2.72	17	1
1:A:165:LYS:CD	1:A:165:LYS:H	0.47	2.22	20	2
1:A:17:GLN:C	1:A:19:ASN:H	0.47	2.15	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:8:LEU:C	1:A:10:LYS:N	0.47	2.70	4	1
1:A:185:ILE:O	1:A:187:PHE:CD1	0.47	2.68	4	1
1:A:72:PHE:CE1	1:A:87:ILE:CG2	0.47	2.98	5	1
1:A:109:ASP:OD1	1:A:111:ASP:OD1	0.47	2.33	7	1
1:A:9:SER:C	1:A:11:GLU:N	0.47	2.71	21	5
1:A:18:LEU:HG	1:A:19:ASN:H	0.47	1.69	8	1
1:A:109:ASP:OD2	1:A:111:ASP:OD1	0.47	2.33	18	1
1:A:145:ASN:OD1	1:A:145:ASN:N	0.47	2.44	18	2
1:A:49:GLN:OE1	1:A:66:GLN:NE2	0.47	2.44	21	1
1:A:40:SER:C	1:A:42:ARG:N	0.47	2.72	22	1
1:A:47:GLU:O	1:A:48:PHE:C	0.47	2.58	8	18
1:A:137:THR:C	1:A:140:LEU:HD21	0.47	2.35	10	3
1:A:105:PHE:CD1	1:A:168:GLU:HG3	0.47	2.45	7	1
1:A:75:ASN:O	1:A:76:SER:CB	0.47	2.61	8	2
1:A:102:GLU:O	1:A:103:TRP:C	0.47	2.58	9	2
1:A:186:GLN:C	1:A:188:GLU:N	0.47	2.71	10	1
1:A:90:HIS:CE1	1:A:94:ALA:HB1	0.47	2.45	20	1
1:A:56:PHE:CZ	1:A:188:GLU:CD	0.47	2.93	1	1
1:A:173:GLU:O	1:A:174:GLY:C	0.47	2.58	5	24
1:A:13:LEU:O	1:A:16:LEU:N	0.47	2.30	7	3
1:A:34:PHE:CD1	1:A:34:PHE:C	0.47	2.93	17	3
1:A:109:ASP:OD1	1:A:109:ASP:C	0.47	2.57	19	3
1:A:22:PHE:HB2	1:A:90:HIS:NE2	0.47	2.25	22	1
1:A:101:LEU:O	1:A:102:GLU:C	0.46	2.57	9	14
1:A:8:LEU:HD23	1:A:8:LEU:H	0.46	1.67	4	2
1:A:81:ASP:C	1:A:83:LYS:H	0.46	2.18	13	1
1:A:165:LYS:CD	1:A:165:LYS:N	0.46	2.77	17	1
1:A:109:ASP:O	1:A:110:VAL:C	0.46	2.57	2	16
1:A:26:GLU:O	1:A:30:TRP:N	0.46	2.46	21	3
1:A:137:THR:HG23	1:A:140:LEU:HD21	0.46	1.86	12	1
1:A:160:LYS:HZ1	1:A:166:LEU:CD1	0.46	2.22	1	1
1:A:81:ASP:O	1:A:82:PHE:C	0.46	2.59	18	11
1:A:34:PHE:O	1:A:38:CYS:N	0.46	2.48	3	2
1:A:145:ASN:O	1:A:145:ASN:ND2	0.46	2.48	3	1
1:A:179:LYS:O	1:A:182:LEU:N	0.46	2.47	11	2
1:A:55:PHE:C	1:A:56:PHE:CD1	0.46	2.93	9	1
1:A:152:GLU:CD	1:A:152:GLU:C	0.46	2.83	18	2
1:A:81:ASP:OD2	1:A:84:GLU:OE1	0.46	2.33	4	2
1:A:53:SER:O	1:A:55:PHE:N	0.46	2.48	6	1
1:A:19:ASN:O	1:A:20:THR:C	0.46	2.58	24	3
1:A:171:PHE:CD1	1:A:171:PHE:O	0.46	2.69	22	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:186:GLN:OE1	1:A:187:PHE:N	0.46	2.48	17	1
1:A:186:GLN:O	1:A:187:PHE:C	0.46	2.58	10	3
1:A:188:GLU:OE1	1:A:188:GLU:O	0.46	2.34	19	1
1:A:47:GLU:O	1:A:49:GLN:N	0.46	2.49	24	1
1:A:32:GLN:O	1:A:33:SER:C	0.46	2.59	17	16
1:A:69:PHE:CZ	1:A:73:ASP:CG	0.46	2.94	1	2
1:A:13:LEU:O	1:A:14:GLU:C	0.46	2.58	3	12
1:A:90:HIS:C	1:A:92:THR:H	0.46	2.17	7	1
1:A:73:ASP:HB2	1:A:80:LEU:HD21	0.46	1.87	14	1
1:A:154:ILE:O	1:A:157:PHE:N	0.46	2.49	7	7
1:A:68:VAL:HG12	1:A:68:VAL:O	0.46	2.10	9	3
1:A:111:ASP:CG	1:A:120:GLU:OE2	0.46	2.59	7	1
1:A:165:LYS:H	1:A:165:LYS:HD3	0.46	1.70	17	1
1:A:184:LEU:C	1:A:184:LEU:CD2	0.46	2.89	23	1
1:A:128:ILE:HD13	1:A:150:ARG:HH22	0.46	1.70	24	1
1:A:61:PRO:O	1:A:62:LYS:C	0.46	2.59	22	7
1:A:159:GLY:O	1:A:160:LYS:C	0.46	2.57	22	5
1:A:111:ASP:OD1	1:A:111:ASP:C	0.46	2.59	19	1
1:A:37:GLU:CD	1:A:37:GLU:C	0.46	2.84	1	1
1:A:8:LEU:CD1	1:A:82:PHE:CE1	0.46	2.99	10	1
1:A:21:LYS:CE	1:A:21:LYS:H	0.46	2.24	17	1
1:A:102:GLU:CD	1:A:102:GLU:N	0.46	2.73	21	1
1:A:157:PHE:CD1	1:A:157:PHE:N	0.46	2.82	2	2
1:A:139:HIS:O	1:A:140:LEU:C	0.46	2.58	23	9
1:A:30:TRP:C	1:A:32:GLN:N	0.46	2.74	4	1
1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:HD22	0.46	2.04	7	1
1:A:56:PHE:CE1	1:A:131:MET:HE1	0.46	2.46	20	2
1:A:56:PHE:CD2	1:A:61:PRO:HG2	0.46	2.46	23	1
1:A:111:ASP:CG	1:A:120:GLU:CD	0.45	2.84	1	1
1:A:113:ASN:O	1:A:115:THR:N	0.45	2.49	1	3
1:A:170:GLU:O	1:A:171:PHE:C	0.45	2.60	23	19
1:A:134:PRO:O	1:A:136:ASP:N	0.45	2.50	21	3
1:A:155:TRP:CZ2	1:A:160:LYS:CD	0.45	2.98	4	1
1:A:13:LEU:HD21	1:A:24:GLU:HB3	0.45	1.86	5	1
1:A:24:GLU:CG	1:A:25:GLU:N	0.45	2.79	7	1
1:A:109:ASP:C	1:A:111:ASP:H	0.45	2.18	13	1
1:A:52:TYR:O	1:A:53:SER:C	0.45	2.60	2	2
1:A:109:ASP:CB	1:A:113:ASN:OD1	0.45	2.64	7	1
1:A:73:ASP:O	1:A:75:ASN:CG	0.45	2.60	8	1
1:A:20:THR:O	1:A:21:LYS:C	0.45	2.57	11	2
1:A:112:GLY:O	1:A:113:ASN:ND2	0.45	2.49	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:ASP:C	1:A:83:LYS:N	0.45	2.72	13	1
1:A:75:ASN:ND2	1:A:77:ASP:N	0.45	2.63	14	1
1:A:19:ASN:C	1:A:21:LYS:H	0.45	2.19	18	1
1:A:186:GLN:NE2	1:A:187:PHE:O	0.45	2.49	22	1
1:A:30:TRP:C	1:A:30:TRP:CD1	0.45	2.93	4	1
1:A:117:SER:O	1:A:118:LYS:C	0.45	2.59	8	4
1:A:23:THR:O	1:A:23:THR:HG23	0.45	2.12	10	1
1:A:27:LEU:HD12	1:A:27:LEU:H	0.45	1.71	20	2
1:A:73:ASP:CB	1:A:80:LEU:CD2	0.45	2.94	17	1
1:A:11:GLU:N	1:A:11:GLU:OE1	0.45	2.50	3	1
1:A:8:LEU:O	1:A:10:LYS:NZ	0.45	2.49	5	1
1:A:22:PHE:C	1:A:23:THR:HG1	0.45	2.20	22	2
1:A:40:SER:O	1:A:41:GLY:C	0.45	2.60	3	1
1:A:177:ALA:O	1:A:178:ASN:C	0.45	2.59	21	4
1:A:89:LEU:O	1:A:90:HIS:C	0.45	2.59	12	2
1:A:19:ASN:CG	1:A:20:THR:N	0.45	2.74	19	1
1:A:135:GLU:OE2	1:A:135:GLU:C	0.45	2.59	20	1
1:A:160:LYS:HZ3	1:A:166:LEU:CD1	0.45	2.24	20	1
1:A:45:ARG:N	1:A:69:PHE:CE1	0.45	2.85	23	1
1:A:165:LYS:H	1:A:165:LYS:HD2	0.45	1.72	20	2
1:A:179:LYS:N	1:A:179:LYS:HD3	0.45	2.27	13	1
1:A:155:TRP:CZ2	1:A:160:LYS:HB2	0.45	2.46	24	2
1:A:14:GLU:OE1	1:A:14:GLU:C	0.45	2.60	24	1
1:A:68:VAL:O	1:A:68:VAL:HG12	0.45	2.10	1	9
1:A:74:ALA:O	1:A:76:SER:N	0.45	2.48	1	1
1:A:104:ALA:O	1:A:105:PHE:C	0.45	2.60	21	8
1:A:91:MET:O	1:A:92:THR:C	0.45	2.59	3	4
1:A:167:THR:OG1	1:A:170:GLU:OE2	0.45	2.34	9	1
1:A:49:GLN:OE1	1:A:66:GLN:CD	0.45	2.60	11	1
1:A:140:LEU:CD1	1:A:145:ASN:HD22	0.45	2.17	21	1
1:A:127:ALA:O	1:A:128:ILE:C	0.45	2.60	15	4
1:A:105:PHE:CD1	1:A:105:PHE:C	0.45	2.95	12	1
1:A:21:LYS:NZ	1:A:90:HIS:ND1	0.45	2.58	14	1
1:A:184:LEU:O	1:A:185:ILE:C	0.45	2.59	20	5
1:A:142:GLU:O	1:A:143:ASP:CG	0.45	2.59	24	2
1:A:157:PHE:CE1	1:A:181:ILE:CG1	0.45	3.00	20	1
1:A:142:GLU:O	1:A:142:GLU:CD	0.45	2.60	21	1
1:A:24:GLU:O	1:A:25:GLU:C	0.45	2.60	22	1
1:A:21:LYS:CG	1:A:22:PHE:N	0.45	2.80	5	1
1:A:136:ASP:N	1:A:136:ASP:OD1	0.45	2.50	13	1
1:A:69:PHE:O	1:A:70:ARG:C	0.45	2.60	18	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:ASN:O	1:A:76:SER:C	0.45	2.60	11	13
1:A:150:ARG:O	1:A:151:ALA:C	0.45	2.60	6	24
1:A:30:TRP:O	1:A:31:TYR:C	0.45	2.59	4	2
1:A:23:THR:O	1:A:23:THR:OG1	0.45	2.35	5	2
1:A:119:ASN:ND2	1:A:119:ASN:N	0.45	2.64	5	1
1:A:44:THR:C	1:A:46:GLN:N	0.45	2.74	6	1
1:A:75:ASN:OD1	1:A:75:ASN:N	0.45	2.49	19	2
1:A:12:ILE:O	1:A:15:GLU:CB	0.45	2.65	13	1
1:A:49:GLN:HE22	1:A:65:ALA:HB3	0.45	1.72	20	1
1:A:40:SER:O	1:A:42:ARG:N	0.45	2.50	22	1
1:A:146:THR:OG1	1:A:149:LYS:CG	0.44	2.66	22	3
1:A:155:TRP:CZ2	1:A:160:LYS:HD2	0.44	2.47	4	1
1:A:22:PHE:O	1:A:23:THR:HG22	0.44	2.11	18	1
1:A:131:MET:SD	1:A:131:MET:C	0.44	3.00	22	1
1:A:75:ASN:O	1:A:75:ASN:CG	0.44	2.61	22	8
1:A:88:ALA:O	1:A:89:LEU:C	0.44	2.60	2	6
1:A:176:LEU:O	1:A:177:ALA:C	0.44	2.60	11	2
1:A:52:TYR:C	1:A:54:LYS:H	0.44	2.19	5	1
1:A:62:LYS:HG3	1:A:63:ALA:N	0.44	2.27	8	1
1:A:15:GLU:OE2	1:A:21:LYS:CE	0.44	2.66	23	1
1:A:75:ASN:CG	1:A:77:ASP:OD1	0.44	2.59	23	1
1:A:68:VAL:O	1:A:68:VAL:CG1	0.44	2.65	22	15
1:A:145:ASN:N	1:A:145:ASN:ND2	0.44	2.64	17	3
1:A:126:THR:O	1:A:127:ALA:C	0.44	2.59	11	4
1:A:179:LYS:N	1:A:179:LYS:CD	0.44	2.80	10	2
1:A:17:GLN:O	1:A:18:LEU:C	0.44	2.60	7	4
1:A:128:ILE:O	1:A:129:PHE:C	0.44	2.61	7	10
1:A:12:ILE:HG21	1:A:27:LEU:CD2	0.44	2.43	12	1
1:A:72:PHE:CD2	1:A:72:PHE:O	0.44	2.70	14	1
1:A:117:SER:OG	1:A:120:GLU:OE2	0.44	2.36	14	1
1:A:92:THR:O	1:A:93:SER:CB	0.44	2.65	24	1
1:A:100:LYS:NZ	1:A:187:PHE:CE1	0.44	2.85	24	1
1:A:49:GLN:C	1:A:49:GLN:OE1	0.44	2.61	2	2
1:A:144:GLU:CD	1:A:144:GLU:O	0.44	2.61	4	1
1:A:90:HIS:O	1:A:91:MET:C	0.44	2.60	9	9
1:A:168:GLU:O	1:A:169:LYS:C	0.44	2.61	5	2
1:A:11:GLU:OE1	1:A:83:LYS:NZ	0.44	2.50	7	1
1:A:69:PHE:CE2	1:A:80:LEU:HD11	0.44	2.47	17	2
1:A:20:THR:HB	1:A:94:ALA:HB1	0.44	1.88	13	1
1:A:187:PHE:O	1:A:187:PHE:CD2	0.44	2.70	3	2
1:A:89:LEU:CD2	1:A:89:LEU:N	0.44	2.80	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:SER:O	1:A:54:LYS:C	0.44	2.61	21	4
1:A:90:HIS:ND1	1:A:94:ALA:HB3	0.44	2.27	15	1
1:A:54:LYS:O	1:A:55:PHE:CD1	0.44	2.71	6	1
1:A:142:GLU:CG	1:A:143:ASP:N	0.44	2.81	19	1
1:A:49:GLN:O	1:A:49:GLN:CD	0.44	2.61	22	1
1:A:45:ARG:O	1:A:46:GLN:C	0.44	2.61	24	1
1:A:90:HIS:O	1:A:94:ALA:N	0.44	2.41	2	2
1:A:170:GLU:N	1:A:170:GLU:OE2	0.44	2.50	2	2
1:A:28:SER:O	1:A:31:TYR:N	0.44	2.50	7	1
1:A:53:SER:OG	1:A:54:LYS:N	0.44	2.51	19	1
1:A:51:ILE:HG21	1:A:85:TYR:OH	0.44	2.13	24	1
1:A:86:VAL:O	1:A:90:HIS:CB	0.44	2.66	24	1
1:A:100:LYS:C	1:A:102:GLU:H	0.44	2.21	1	1
1:A:181:ILE:O	1:A:182:LEU:C	0.44	2.61	5	6
1:A:123:GLU:O	1:A:124:ILE:C	0.44	2.61	19	7
1:A:64:TYR:OH	1:A:188:GLU:CB	0.44	2.66	4	1
1:A:156:GLY:O	1:A:157:PHE:C	0.44	2.61	9	1
1:A:48:PHE:CZ	1:A:68:VAL:HG11	0.44	2.48	13	1
1:A:119:ASN:OD1	1:A:119:ASN:C	0.44	2.61	14	1
1:A:73:ASP:C	1:A:75:ASN:H	0.44	2.21	17	1
1:A:45:ARG:NH1	1:A:70:ARG:HH22	0.44	2.09	24	1
1:A:113:ASN:OD1	1:A:113:ASN:N	0.44	2.51	1	1
1:A:185:ILE:O	1:A:186:GLN:C	0.44	2.59	3	5
1:A:19:ASN:HD21	1:A:94:ALA:CB	0.44	2.25	4	1
1:A:31:TYR:CZ	1:A:32:GLN:HG3	0.44	2.48	4	1
1:A:160:LYS:CB	1:A:160:LYS:HZ2	0.44	2.25	4	1
1:A:105:PHE:CG	1:A:168:GLU:HG2	0.44	2.47	7	2
1:A:70:ARG:HD2	1:A:70:ARG:N	0.44	2.28	17	1
1:A:74:ALA:C	1:A:76:SER:H	0.44	2.20	20	1
1:A:64:TYR:C	1:A:66:GLN:N	0.43	2.76	3	1
1:A:90:HIS:NE2	1:A:94:ALA:HB1	0.43	2.28	20	3
1:A:110:VAL:HG22	1:A:124:ILE:HD11	0.43	1.90	5	1
1:A:93:SER:O	1:A:94:ALA:C	0.43	2.60	9	4
1:A:110:VAL:O	1:A:111:ASP:C	0.43	2.61	9	4
1:A:75:ASN:N	1:A:75:ASN:HD22	0.43	2.06	13	1
1:A:184:LEU:N	1:A:184:LEU:HD22	0.43	2.27	13	1
1:A:45:ARG:O	1:A:48:PHE:N	0.43	2.51	24	1
1:A:113:ASN:OD1	1:A:113:ASN:C	0.43	2.60	15	4
1:A:85:TYR:O	1:A:86:VAL:C	0.43	2.59	3	3
1:A:57:PRO:O	1:A:58:GLU:C	0.43	2.61	14	3
1:A:26:GLU:O	1:A:26:GLU:CD	0.43	2.61	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:SER:O	1:A:29:SER:C	0.43	2.61	7	3
1:A:26:GLU:C	1:A:26:GLU:CD	0.43	2.86	12	2
1:A:130:LYS:C	1:A:132:ILE:N	0.43	2.76	2	3
1:A:134:PRO:O	1:A:135:GLU:C	0.43	2.59	4	9
1:A:34:PHE:CZ	1:A:38:CYS:HB3	0.43	2.48	7	1
1:A:85:TYR:CZ	1:A:89:LEU:HG	0.43	2.48	12	4
1:A:186:GLN:O	1:A:186:GLN:CD	0.43	2.61	21	2
1:A:18:LEU:O	1:A:19:ASN:CG	0.43	2.62	11	1
1:A:55:PHE:O	1:A:56:PHE:C	0.43	2.60	21	1
1:A:167:THR:O	1:A:169:LYS:N	0.43	2.51	22	1
1:A:61:PRO:HB3	1:A:131:MET:HE3	0.43	1.90	5	1
1:A:150:ARG:C	1:A:152:GLU:H	0.43	2.20	23	3
1:A:125:VAL:O	1:A:126:THR:C	0.43	2.61	23	3
1:A:18:LEU:H	1:A:18:LEU:CD1	0.43	2.25	17	1
1:A:73:ASP:CG	1:A:80:LEU:HD23	0.43	2.39	17	1
1:A:140:LEU:HD12	1:A:140:LEU:N	0.43	2.27	17	1
1:A:39:PRO:O	1:A:41:GLY:N	0.43	2.51	6	1
1:A:180:GLU:O	1:A:181:ILE:C	0.43	2.61	7	1
1:A:29:SER:O	1:A:30:TRP:C	0.43	2.60	19	2
1:A:90:HIS:CG	1:A:91:MET:H	0.43	2.27	21	1
1:A:72:PHE:CE2	1:A:87:ILE:HB	0.43	2.48	24	1
1:A:64:TYR:O	1:A:64:TYR:CG	0.43	2.69	1	2
1:A:157:PHE:CG	1:A:158:PHE:N	0.43	2.78	2	2
1:A:103:TRP:CE3	1:A:103:TRP:C	0.43	2.97	3	1
1:A:109:ASP:CG	1:A:109:ASP:O	0.43	2.61	3	1
1:A:171:PHE:O	1:A:171:PHE:CD2	0.43	2.72	3	1
1:A:188:GLU:C	1:A:188:GLU:OE2	0.43	2.60	4	2
1:A:73:ASP:CG	1:A:73:ASP:O	0.43	2.61	23	4
1:A:138:LYS:C	1:A:139:HIS:ND1	0.43	2.76	9	1
1:A:182:LEU:O	1:A:183:ARG:C	0.43	2.62	23	1
1:A:145:ASN:O	1:A:145:ASN:CG	0.43	2.61	7	2
1:A:142:GLU:O	1:A:143:ASP:C	0.43	2.61	24	4
1:A:100:LYS:HB2	1:A:100:LYS:HZ2	0.43	1.72	10	1
1:A:46:GLN:C	1:A:46:GLN:OE1	0.43	2.62	12	1
1:A:37:GLU:O	1:A:37:GLU:CD	0.43	2.62	20	1
1:A:15:GLU:C	1:A:17:GLN:H	0.43	2.22	2	2
1:A:119:ASN:O	1:A:120:GLU:C	0.43	2.62	3	2
1:A:71:SER:OG	1:A:107:LEU:CA	0.43	2.66	4	1
1:A:31:TYR:CD1	1:A:31:TYR:O	0.43	2.71	7	1
1:A:158:PHE:O	1:A:159:GLY:C	0.43	2.62	11	1
1:A:25:GLU:CD	1:A:25:GLU:O	0.43	2.62	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:105:PHE:CE2	1:A:168:GLU:HG3	0.43	2.49	1	1
1:A:45:ARG:HD3	1:A:69:PHE:CD2	0.43	2.49	2	2
1:A:47:GLU:C	1:A:49:GLN:N	0.43	2.72	24	3
1:A:51:ILE:HG22	1:A:51:ILE:O	0.43	2.14	21	1
1:A:87:ILE:O	1:A:91:MET:N	0.43	2.41	23	1
1:A:177:ALA:O	1:A:179:LYS:N	0.43	2.51	23	1
1:A:27:LEU:H	1:A:27:LEU:HD12	0.43	1.74	24	1
1:A:109:ASP:OD1	1:A:113:ASN:ND2	0.43	2.51	24	1
1:A:100:LYS:O	1:A:101:LEU:CB	0.42	2.66	1	1
1:A:118:LYS:O	1:A:119:ASN:C	0.42	2.61	4	1
1:A:44:THR:HG22	1:A:45:ARG:H	0.42	1.73	22	2
1:A:19:ASN:O	1:A:19:ASN:CG	0.42	2.62	12	1
1:A:150:ARG:HH12	1:A:184:LEU:CD1	0.42	2.27	13	1
1:A:21:LYS:HZ2	1:A:90:HIS:CG	0.42	2.30	14	1
1:A:45:ARG:HD3	1:A:69:PHE:CG	0.42	2.48	10	1
1:A:127:ALA:O	1:A:130:LYS:N	0.42	2.52	23	3
1:A:21:LYS:N	1:A:21:LYS:HD3	0.42	2.29	19	1
1:A:45:ARG:C	1:A:47:GLU:N	0.42	2.77	24	1
1:A:8:LEU:C	1:A:9:SER:OG	0.42	2.59	1	1
1:A:51:ILE:O	1:A:52:TYR:C	0.42	2.60	8	4
1:A:158:PHE:CB	1:A:160:LYS:HZ2	0.42	2.27	5	1
1:A:111:ASP:OD2	1:A:113:ASN:CG	0.42	2.62	8	1
1:A:178:ASN:OD1	1:A:179:LYS:N	0.42	2.52	10	1
1:A:124:ILE:N	1:A:124:ILE:HD13	0.42	2.30	12	1
1:A:147:PRO:O	1:A:148:GLU:C	0.42	2.62	13	1
1:A:130:LYS:O	1:A:131:MET:C	0.42	2.62	2	2
1:A:52:TYR:CG	1:A:65:ALA:CB	0.42	3.02	3	1
1:A:50:THR:O	1:A:50:THR:CG2	0.42	2.66	5	1
1:A:56:PHE:C	1:A:58:GLU:H	0.42	2.20	9	2
1:A:143:ASP:OD1	1:A:143:ASP:N	0.42	2.51	9	1
1:A:15:GLU:O	1:A:18:LEU:HD23	0.42	2.14	15	1
1:A:165:LYS:N	1:A:165:LYS:HD3	0.42	2.30	15	1
1:A:119:ASN:OD1	1:A:119:ASN:N	0.42	2.52	21	1
1:A:27:LEU:HD12	1:A:27:LEU:N	0.42	2.30	24	1
1:A:91:MET:SD	1:A:103:TRP:CG	0.42	3.13	3	1
1:A:100:LYS:NZ	1:A:100:LYS:HB3	0.42	2.29	9	1
1:A:105:PHE:CB	1:A:168:GLU:CD	0.42	2.93	19	1
1:A:181:ILE:O	1:A:181:ILE:CG2	0.42	2.66	19	1
1:A:55:PHE:CD1	1:A:55:PHE:N	0.42	2.86	1	3
1:A:136:ASP:O	1:A:139:HIS:N	0.42	2.47	10	2
1:A:31:TYR:CZ	1:A:32:GLN:CG	0.42	3.02	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:ASP:O	1:A:84:GLU:N	0.42	2.51	4	1
1:A:160:LYS:HZ2	1:A:160:LYS:HB3	0.42	1.75	4	1
1:A:103:TRP:C	1:A:103:TRP:CE3	0.42	2.97	9	1
1:A:19:ASN:HD22	1:A:90:HIS:CE1	0.42	2.33	11	1
1:A:118:LYS:N	1:A:118:LYS:HD3	0.42	2.30	17	1
1:A:178:ASN:N	1:A:178:ASN:OD1	0.42	2.52	19	1
1:A:105:PHE:CD1	1:A:168:GLU:HG2	0.42	2.50	24	1
1:A:13:LEU:HD21	1:A:24:GLU:CB	0.42	2.45	5	1
1:A:110:VAL:CG2	1:A:124:ILE:CD1	0.42	2.98	17	2
1:A:114:GLY:C	1:A:115:THR:HG23	0.42	2.40	7	2
1:A:155:TRP:CE2	1:A:160:LYS:HB2	0.42	2.49	12	2
1:A:179:LYS:O	1:A:180:GLU:C	0.42	2.62	22	3
1:A:49:GLN:HE21	1:A:66:GLN:NE2	0.42	2.12	24	1
1:A:31:TYR:CZ	1:A:35:LEU:HD12	0.42	2.49	11	1
1:A:16:LEU:O	1:A:18:LEU:HD23	0.42	2.15	13	1
1:A:182:LEU:HD13	1:A:182:LEU:O	0.42	2.15	23	2
1:A:13:LEU:HD11	1:A:24:GLU:HB2	0.42	1.91	24	1
1:A:8:LEU:O	1:A:8:LEU:CD1	0.42	2.67	1	1
1:A:183:ARG:NH2	1:A:186:GLN:HE22	0.42	2.12	2	2
1:A:55:PHE:O	1:A:56:PHE:CD2	0.42	2.73	5	1
1:A:105:PHE:CD1	1:A:168:GLU:HB3	0.42	2.49	18	1
1:A:10:LYS:N	1:A:10:LYS:HD2	0.42	2.28	19	1
1:A:132:ILE:O	1:A:133:SER:C	0.42	2.61	22	1
1:A:71:SER:OG	1:A:72:PHE:N	0.41	2.53	1	1
1:A:155:TRP:HA	1:A:157:PHE:CE1	0.41	2.50	2	2
1:A:139:HIS:C	1:A:141:PRO:HD2	0.41	2.40	20	1
1:A:140:LEU:C	1:A:140:LEU:CD1	0.41	2.93	20	1
1:A:178:ASN:ND2	1:A:178:ASN:N	0.41	2.61	23	1
1:A:56:PHE:CZ	1:A:188:GLU:CG	0.41	3.03	1	1
1:A:105:PHE:CZ	1:A:168:GLU:N	0.41	2.88	2	2
1:A:75:ASN:C	1:A:76:SER:HG	0.41	2.24	8	1
1:A:19:ASN:OD1	1:A:19:ASN:C	0.41	2.63	10	1
1:A:142:GLU:O	1:A:149:LYS:NZ	0.41	2.54	13	1
1:A:142:GLU:OE2	1:A:145:ASN:ND2	0.41	2.53	23	1
1:A:174:GLY:O	1:A:181:ILE:HD12	0.41	2.15	23	1
1:A:19:ASN:OD1	1:A:20:THR:N	0.41	2.54	6	1
1:A:54:LYS:O	1:A:55:PHE:C	0.41	2.61	7	1
1:A:100:LYS:HB3	1:A:100:LYS:HZ2	0.41	1.73	9	1
1:A:49:GLN:OE1	1:A:49:GLN:C	0.41	2.63	10	1
1:A:92:THR:O	1:A:92:THR:HG22	0.41	2.14	13	1
1:A:42:ARG:CZ	1:A:42:ARG:CB	0.41	2.97	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:LYS:HD2	1:A:23:THR:H	0.41	1.74	22	1
1:A:111:ASP:OD2	1:A:112:GLY:N	0.41	2.53	2	2
1:A:22:PHE:O	1:A:23:THR:CG2	0.41	2.67	3	1
1:A:34:PHE:C	1:A:36:LYS:N	0.41	2.77	14	1
1:A:61:PRO:O	1:A:65:ALA:HB2	0.41	2.16	15	1
1:A:105:PHE:CB	1:A:168:GLU:OE2	0.41	2.68	19	1
1:A:131:MET:O	1:A:132:ILE:C	0.41	2.63	20	1
1:A:169:LYS:HZ2	1:A:169:LYS:HB3	0.41	1.75	21	1
1:A:185:ILE:O	1:A:187:PHE:CE1	0.41	2.74	4	1
1:A:155:TRP:CZ2	1:A:160:LYS:HG3	0.41	2.49	15	1
1:A:64:TYR:C	1:A:64:TYR:CD1	0.41	2.98	3	1
1:A:75:ASN:ND2	1:A:84:GLU:CD	0.41	2.78	5	1
1:A:132:ILE:HG22	1:A:133:SER:N	0.41	2.31	5	1
1:A:181:ILE:HG22	1:A:181:ILE:O	0.41	2.16	8	1
1:A:91:MET:SD	1:A:100:LYS:HD3	0.41	2.55	9	1
1:A:58:GLU:HG3	1:A:59:ALA:N	0.41	2.30	13	1
1:A:139:HIS:C	1:A:141:PRO:HD3	0.41	2.41	20	1
1:A:185:ILE:HG23	1:A:186:GLN:N	0.41	2.29	21	2
1:A:49:GLN:OE1	1:A:50:THR:N	0.41	2.54	2	2
1:A:19:ASN:ND2	1:A:94:ALA:CB	0.41	2.82	4	1
1:A:31:TYR:CD2	1:A:31:TYR:C	0.41	2.98	17	1
1:A:113:ASN:O	1:A:114:GLY:C	0.41	2.61	17	1
1:A:72:PHE:CE2	1:A:84:GLU:HG2	0.41	2.51	24	1
1:A:71:SER:OG	1:A:107:LEU:N	0.41	2.54	4	1
1:A:69:PHE:CE2	1:A:80:LEU:CD2	0.41	3.03	7	1
1:A:80:LEU:N	1:A:80:LEU:CD2	0.41	2.82	7	1
1:A:119:ASN:ND2	1:A:120:GLU:HG3	0.41	2.31	10	1
1:A:101:LEU:O	1:A:104:ALA:CB	0.41	2.69	12	1
1:A:147:PRO:O	1:A:150:ARG:N	0.41	2.53	13	1
1:A:13:LEU:HD11	1:A:24:GLU:CB	0.41	2.46	18	1
1:A:154:ILE:C	1:A:156:GLY:H	0.41	2.24	22	1
1:A:77:ASP:OD2	1:A:78:GLY:N	0.41	2.53	23	1
1:A:62:LYS:NZ	1:A:62:LYS:CB	0.41	2.84	2	2
1:A:170:GLU:OE2	1:A:173:GLU:CD	0.41	2.64	3	1
1:A:137:THR:O	1:A:137:THR:CG2	0.41	2.69	5	1
1:A:111:ASP:O	1:A:111:ASP:CG	0.41	2.64	6	1
1:A:85:TYR:CE1	1:A:89:LEU:HD21	0.41	2.51	9	1
1:A:124:ILE:N	1:A:124:ILE:CD1	0.41	2.84	9	2
1:A:19:ASN:HB2	1:A:90:HIS:CD2	0.41	2.51	10	1
1:A:27:LEU:H	1:A:27:LEU:HD13	0.41	1.76	11	1
1:A:179:LYS:H	1:A:179:LYS:HD3	0.41	1.76	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:165:LYS:HD2	1:A:165:LYS:N	0.41	2.31	20	1
1:A:56:PHE:CD2	1:A:61:PRO:CG	0.41	3.04	23	1
1:A:110:VAL:C	1:A:112:GLY:N	0.41	2.75	23	1
1:A:181:ILE:O	1:A:185:ILE:N	0.41	2.40	23	1
1:A:16:LEU:HD23	1:A:16:LEU:N	0.41	2.31	15	1
1:A:62:LYS:N	1:A:62:LYS:HD2	0.41	2.31	15	1
1:A:34:PHE:CE2	1:A:38:CYS:HB3	0.40	2.51	3	1
1:A:48:PHE:C	1:A:48:PHE:CD1	0.40	2.98	13	1
1:A:102:GLU:C	1:A:102:GLU:OE1	0.40	2.64	15	1
1:A:10:LYS:H	1:A:10:LYS:HD3	0.40	1.76	19	1
1:A:24:GLU:CD	1:A:24:GLU:H	0.40	2.22	3	1
1:A:140:LEU:CD2	1:A:140:LEU:H	0.40	2.21	4	1
1:A:171:PHE:CZ	1:A:185:ILE:HD13	0.40	2.50	4	1
1:A:70:ARG:N	1:A:70:ARG:CD	0.40	2.84	17	1
1:A:69:PHE:CD1	1:A:80:LEU:CD1	0.40	3.05	1	1
1:A:87:ILE:O	1:A:91:MET:CG	0.40	2.69	1	1
1:A:153:LYS:O	1:A:154:ILE:C	0.40	2.62	2	2
1:A:84:GLU:O	1:A:85:TYR:C	0.40	2.64	6	1
1:A:18:LEU:CG	1:A:19:ASN:N	0.40	2.85	8	1
1:A:169:LYS:C	1:A:170:GLU:OE1	0.40	2.64	9	1
1:A:45:ARG:CD	1:A:69:PHE:CG	0.40	3.03	10	1
1:A:58:GLU:HG3	1:A:59:ALA:H	0.40	1.76	13	1
1:A:152:GLU:CD	1:A:152:GLU:O	0.40	2.64	18	1
1:A:120:GLU:C	1:A:122:LEU:N	0.40	2.78	19	1
1:A:107:LEU:HD13	1:A:108:TYR:CA	0.40	2.46	1	1
1:A:187:PHE:O	1:A:187:PHE:CG	0.40	2.74	3	1
1:A:72:PHE:C	1:A:72:PHE:CD1	0.40	2.99	17	1
1:A:89:LEU:C	1:A:89:LEU:CD1	0.40	2.94	18	1
1:A:143:ASP:O	1:A:144:GLU:CG	0.40	2.69	24	1
1:A:123:GLU:CD	1:A:123:GLU:H	0.40	2.25	1	1
1:A:155:TRP:CE2	1:A:160:LYS:HG3	0.40	2.52	4	1
1:A:107:LEU:CD1	1:A:108:TYR:N	0.40	2.82	5	1
1:A:139:HIS:ND1	1:A:139:HIS:N	0.40	2.68	13	1
1:A:140:LEU:CD1	1:A:140:LEU:N	0.40	2.85	17	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	173/201 (86%)	119±6 (69±4%)	36±6 (21±4%)	18±3 (10±2%)	1	9
All	All	4152/4824 (86%)	2852 (69%)	869 (21%)	431 (10%)	1	9

All 80 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	16	LEU	20
1	A	9	SER	17
1	A	61	PRO	15
1	A	23	THR	15
1	A	185	ILE	15
1	A	70	ARG	14
1	A	100	LYS	14
1	A	143	ASP	14
1	A	177	ALA	13
1	A	24	GLU	13
1	A	39	PRO	10
1	A	59	ALA	10
1	A	58	GLU	10
1	A	8	LEU	10
1	A	41	GLY	9
1	A	160	LYS	9
1	A	171	PHE	9
1	A	93	SER	8
1	A	110	VAL	8
1	A	21	LYS	8
1	A	40	SER	8
1	A	182	LEU	7
1	A	57	PRO	7
1	A	105	PHE	7
1	A	27	LEU	7
1	A	7	ALA	7
1	A	52	TYR	6
1	A	164	ASP	6
1	A	69	PHE	6
1	A	137	THR	6
1	A	19	ASN	5
1	A	154	ILE	5
1	A	68	VAL	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	76	SER	5
1	A	92	THR	4
1	A	186	GLN	4
1	A	142	GLU	4
1	A	147	PRO	4
1	A	94	ALA	4
1	A	180	GLU	4
1	A	18	LEU	4
1	A	74	ALA	4
1	A	33	SER	4
1	A	144	GLU	3
1	A	159	GLY	3
1	A	174	GLY	3
1	A	73	ASP	3
1	A	20	THR	3
1	A	187	PHE	3
1	A	10	LYS	3
1	A	55	PHE	3
1	A	157	PHE	2
1	A	30	TRP	2
1	A	86	VAL	2
1	A	112	GLY	2
1	A	53	SER	2
1	A	78	GLY	2
1	A	29	SER	2
1	A	183	ARG	2
1	A	101	LEU	2
1	A	102	GLU	2
1	A	103	TRP	2
1	A	138	LYS	2
1	A	22	PHE	2
1	A	17	GLN	2
1	A	114	GLY	1
1	A	179	LYS	1
1	A	31	TYR	1
1	A	38	CYS	1
1	A	62	LYS	1
1	A	113	ASN	1
1	A	148	GLU	1
1	A	89	LEU	1
1	A	118	LYS	1
1	A	134	PRO	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	145	ASN	1
1	A	54	LYS	1
1	A	56	PHE	1
1	A	178	ASN	1
1	A	13	LEU	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	156/180 (87%)	132±5 (84±3%)	24±5 (16±3%)	5 41
All	All	3744/4320 (87%)	3163 (84%)	581 (16%)	5 41

All 111 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	146	THR	23
1	A	23	THR	18
1	A	165	LYS	18
1	A	175	THR	18
1	A	140	LEU	17
1	A	79	THR	16
1	A	122	LEU	16
1	A	89	LEU	15
1	A	44	THR	14
1	A	185	ILE	14
1	A	21	LYS	14
1	A	10	LYS	11
1	A	129	PHE	11
1	A	90	HIS	10
1	A	157	PHE	9
1	A	8	LEU	9
1	A	133	SER	9
1	A	12	ILE	8
1	A	24	GLU	8
1	A	107	LEU	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	62	LYS	8
1	A	184	LEU	8
1	A	182	LEU	8
1	A	9	SER	7
1	A	123	GLU	7
1	A	108	TYR	7
1	A	145	ASN	7
1	A	13	LEU	7
1	A	45	ARG	6
1	A	92	THR	6
1	A	101	LEU	6
1	A	111	ASP	6
1	A	160	LYS	6
1	A	187	PHE	6
1	A	58	GLU	6
1	A	137	THR	6
1	A	167	THR	6
1	A	71	SER	6
1	A	18	LEU	5
1	A	19	ASN	5
1	A	27	LEU	5
1	A	176	LEU	5
1	A	138	LYS	5
1	A	183	ARG	5
1	A	20	THR	5
1	A	50	THR	5
1	A	153	LYS	5
1	A	37	GLU	4
1	A	100	LYS	4
1	A	149	LYS	4
1	A	29	SER	4
1	A	170	GLU	4
1	A	70	ARG	4
1	A	117	SER	4
1	A	130	LYS	4
1	A	186	GLN	4
1	A	179	LYS	4
1	A	178	ASN	4
1	A	25	GLU	3
1	A	143	ASP	3
1	A	168	GLU	3
1	A	142	GLU	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	152	GLU	3
1	A	22	PHE	3
1	A	102	GLU	3
1	A	119	ASN	3
1	A	68	VAL	3
1	A	118	LYS	3
1	A	11	GLU	3
1	A	76	SER	3
1	A	115	THR	3
1	A	75	ASN	3
1	A	36	LYS	3
1	A	188	GLU	2
1	A	15	GLU	2
1	A	49	GLN	2
1	A	72	PHE	2
1	A	87	ILE	2
1	A	26	GLU	2
1	A	38	CYS	2
1	A	106	SER	2
1	A	113	ASN	2
1	A	144	GLU	2
1	A	93	SER	2
1	A	53	SER	2
1	A	42	ARG	2
1	A	150	ARG	2
1	A	169	LYS	2
1	A	40	SER	2
1	A	124	ILE	2
1	A	103	TRP	2
1	A	14	GLU	2
1	A	32	GLN	2
1	A	135	GLU	2
1	A	131	MET	2
1	A	180	GLU	2
1	A	148	GLU	2
1	A	17	GLN	1
1	A	47	GLU	1
1	A	80	LEU	1
1	A	109	ASP	1
1	A	31	TYR	1
1	A	56	PHE	1
1	A	16	LEU	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	28	SER	1
1	A	77	ASP	1
1	A	52	TYR	1
1	A	139	HIS	1
1	A	43	ILE	1
1	A	126	THR	1
1	A	33	SER	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 3 ligands modelled in this entry, 2 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
3	MYR	A	502	1	13,14,15	0.35±0.01	0±0 (0±0%)

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
3	MYR	A	502	1	12,13,15	0.94±0.01	0±0 (0±0%)

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
3	MYR	A	502	1	-	0±0,12,12,13	-

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

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