



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 04:23 PM UTC

PDB ID : 2JU0 / pdb_00002ju0
Title : Structure of Yeast Frequenin bound to PdtIns 4-kinase
Authors : Ames, J.
Deposited on : 2007-08-11

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

MolProbity : 4-5-2 with Phenix2.0
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

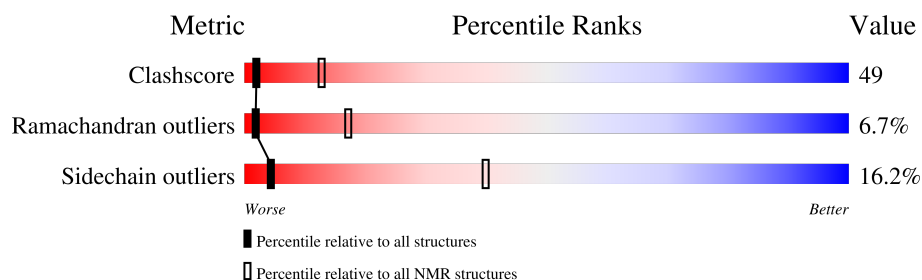
1 Overall quality at a glance

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	190	
2	B	52	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 15 models. Model 8 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *closest to the average*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:9-A:14, A:21-A:175, B:125-B:137, B:154-B:169 (190)	1.10	8

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

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

The models can be grouped into 2 clusters and 1 single-model cluster was found.

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

3 Entry composition [i](#)

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 3629 atoms, of which 1789 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Calcium-binding protein NCS-1.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	175	Total	C	H	N	O	S	0
			2831	924	1389	232	278	8	

- Molecule 2 is a protein called Phosphatidylinositol 4-kinase PIK1.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
2	B	52	Total	C	H	N	O	S	0
			795	248	400	70	75	2	

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

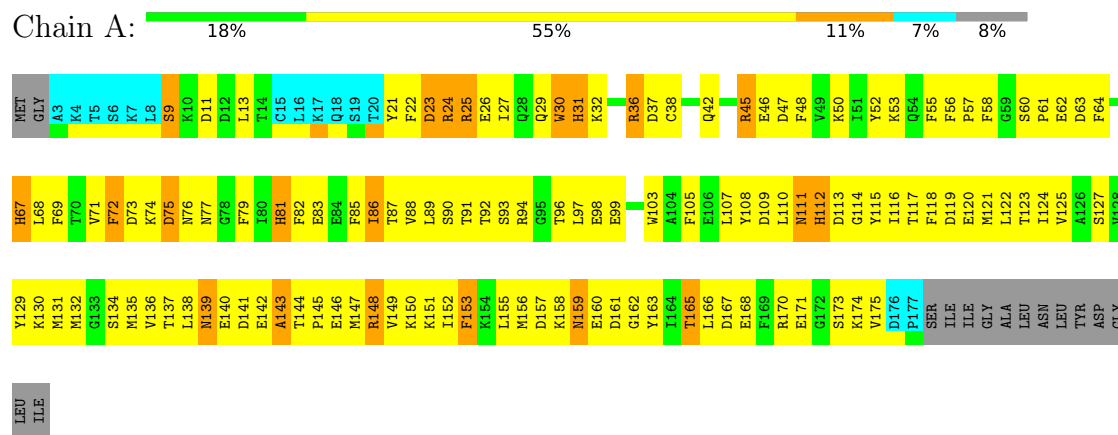
Mol	Chain	Residues	Atoms	
3	A	3	Total	Ca
			3	3

4 Residue-property plots

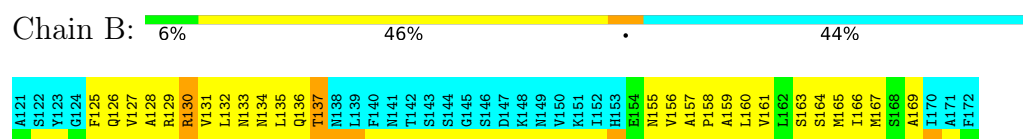
4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA, 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: Calcium-binding protein NCS-1



- Molecule 2: Phosphatidylinositol 4-kinase PIK1



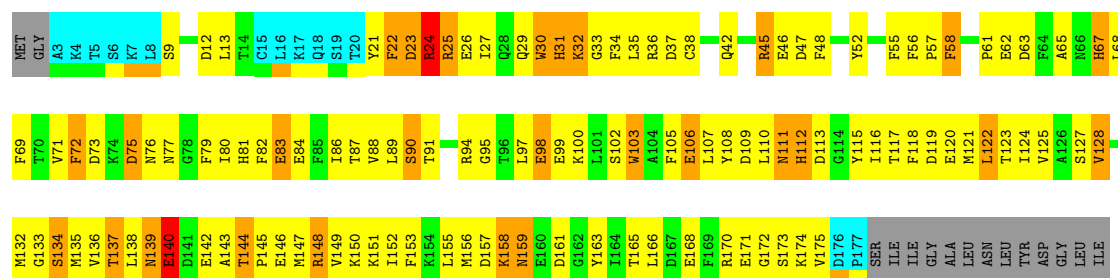
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

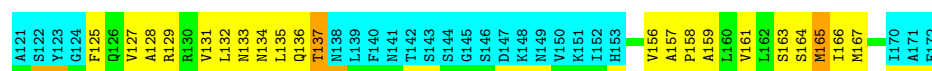
- Molecule 1: Calcium-binding protein NCS-1





- Molecule 2: Phosphatidylinositol 4-kinase PIK1

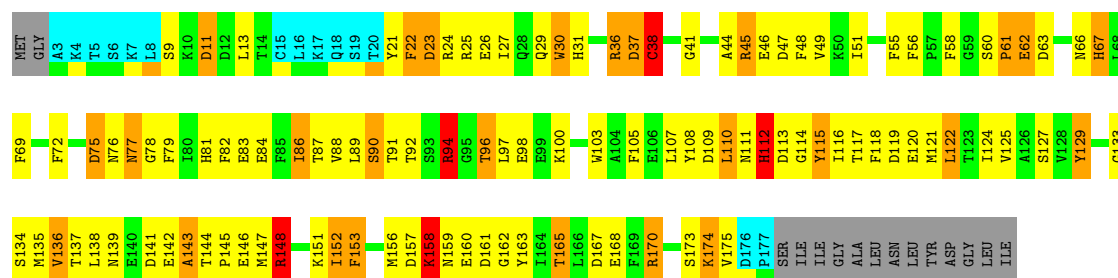
Chain B: 15% 37% 0% 44%



4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Calcium-binding protein NCS-1

Chain A: 26% 42% 14% 7% 8%



- Molecule 2: Phosphatidylinositol 4-kinase PIK1

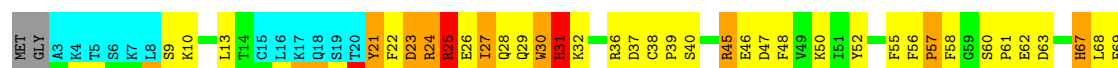
Chain B: 8% 38% 8% 44%

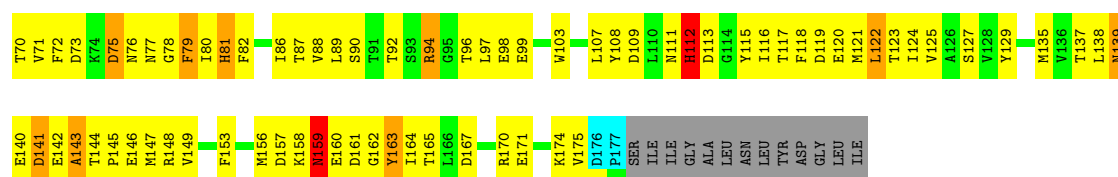


4.2.3 Score per residue for model 3

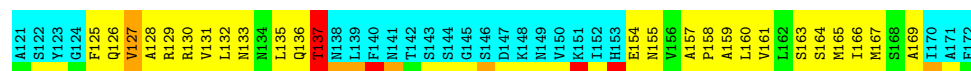
- Molecule 1: Calcium-binding protein NCS-1

Chain A: 27% 47% 9% 7% 8%





• Molecule 2: Phosphatidylinositol 4-kinase PIK1



4.2.4 Score per residue for model 4

• Molecule 1: Calcium-binding protein NCS-1

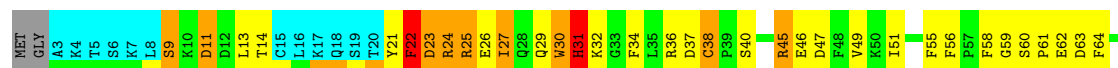
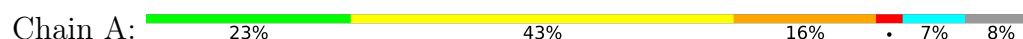


• Molecule 2: Phosphatidylinositol 4-kinase PIK1



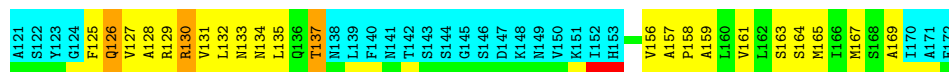
4.2.5 Score per residue for model 5

• Molecule 1: Calcium-binding protein NCS-1



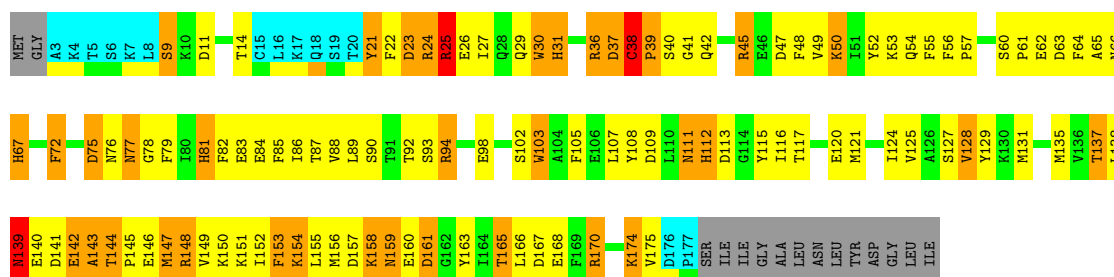
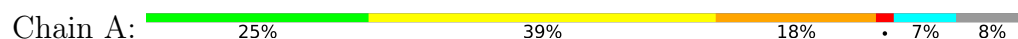


- Molecule 2: Phosphatidylinositol 4-kinase PIK1

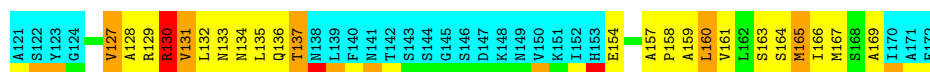


4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Calcium-binding protein NCS-1

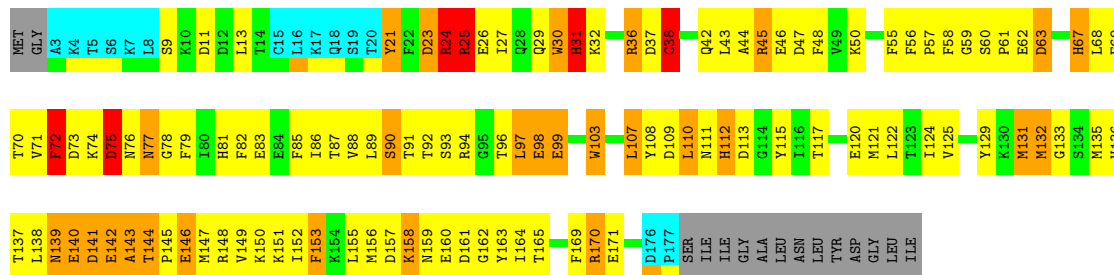
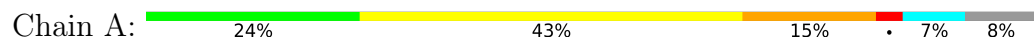


- Molecule 2: Phosphatidylinositol 4-kinase PIK1

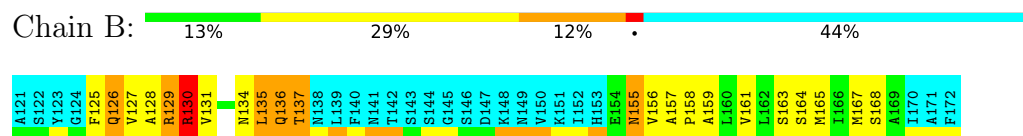


4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Calcium-binding protein NCS-1

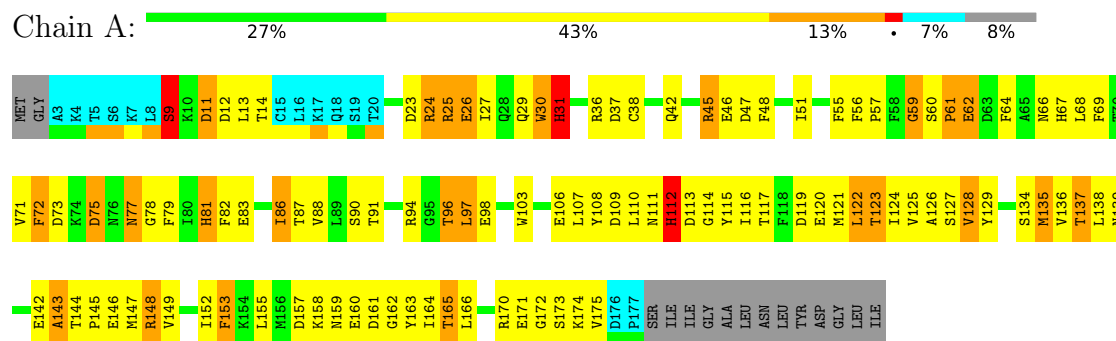


- Molecule 2: Phosphatidylinositol 4-kinase PIK1

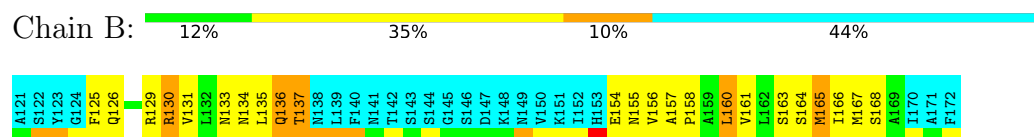


4.2.8 Score per residue for model 8 (medoid)

- Molecule 1: Calcium-binding protein NCS-1

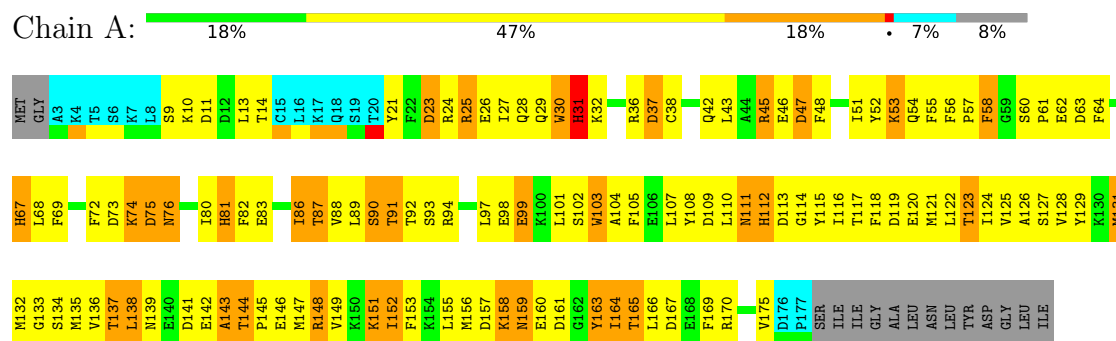


- Molecule 2: Phosphatidylinositol 4-kinase PIK1

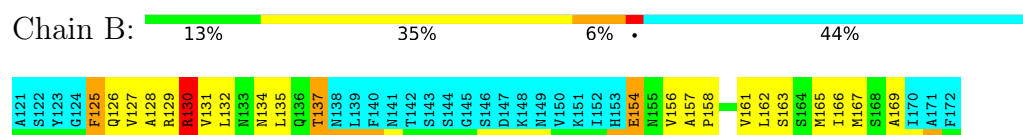


4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Calcium-binding protein NCS-1



- Molecule 2: Phosphatidylinositol 4-kinase PIK1



- Molecule 1: Calcium-binding protein NCS-1

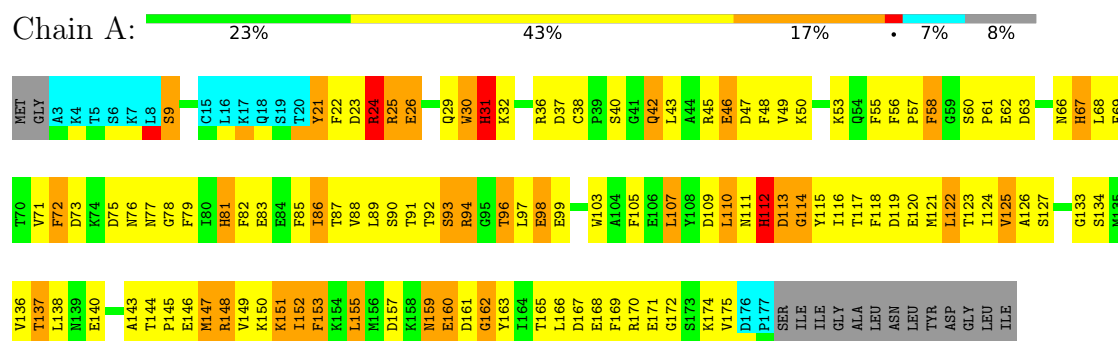
- Molecule 2: Phosphatidylinositol 4-kinase PIK1

- Molecule 1: Calcium-binding protein NCS-1

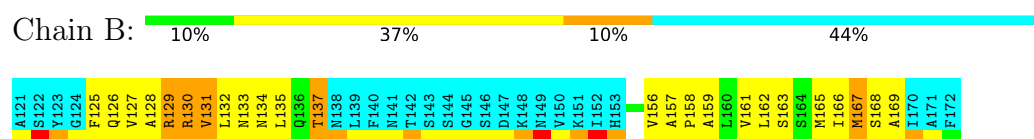
- Molecule 2: Phosphatidylinositol 4-kinase PIK1

4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Calcium-binding protein NCS-1

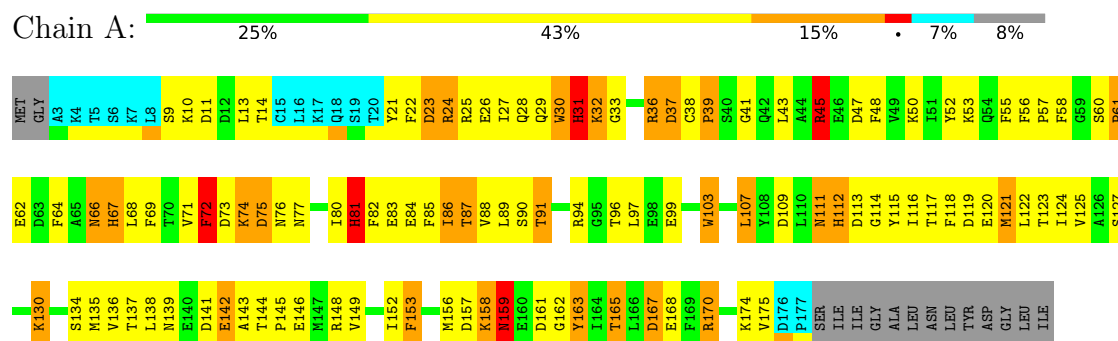


- Molecule 2: Phosphatidylinositol 4-kinase PIK1

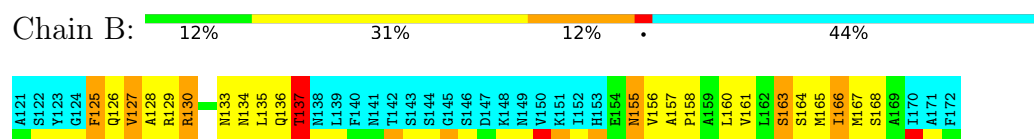


4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Calcium-binding protein NCS-1



- Molecule 2: Phosphatidylinositol 4-kinase PIK1



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Calcium-binding protein NCS-1



5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

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

Of the 50 calculated structures, 15 were deposited, based on the following criterion: *structures with the least restraint violations*.

The authors did not provide any information on software used for structure solution, optimization or 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:
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	1.52±0.01	10±0/1372 (0.7± 0.0%)	1.45±0.01	10±1/1848 (0.6± 0.1%)
2	B	1.45±0.03	0±0/222 (0.0± 0.0%)	1.39±0.03	0±0/302 (0.0± 0.2%)
All	All	1.51	151/23910 (0.6%)	1.45	159/32250 (0.5%)

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	6.5±0.6
2	B	0.0±0.0	1.8±0.4
All	All	0	124

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	67	HIS	CG-ND1	-12.87	1.24	1.38	11	15
1	A	31	HIS	CG-ND1	-12.01	1.25	1.38	14	15
1	A	112	HIS	CG-ND1	-11.95	1.25	1.38	11	15
1	A	81	HIS	CG-ND1	-11.86	1.25	1.38	11	15
1	A	103	TRP	CG-CD2	-7.13	1.30	1.43	5	15
1	A	30	TRP	CG-CD2	-6.94	1.31	1.43	4	15
1	A	59	GLY	N-CA	6.08	1.50	1.44	8	1
1	A	67	HIS	ND1-CE1	-5.82	1.26	1.32	11	15
1	A	31	HIS	ND1-CE1	-5.47	1.27	1.32	3	15
1	A	112	HIS	ND1-CE1	-5.41	1.27	1.32	15	15
1	A	81	HIS	ND1-CE1	-5.41	1.27	1.32	10	15

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	143	ALA	CB-CA-C	-8.16	107.15	116.54	3	1
1	A	67	HIS	CE1-NE2-CD2	-7.63	101.37	109.00	11	15
1	A	81	HIS	CE1-NE2-CD2	-7.57	101.43	109.00	13	15
1	A	31	HIS	CE1-NE2-CD2	-7.55	101.45	109.00	9	15
1	A	112	HIS	CE1-NE2-CD2	-7.55	101.45	109.00	14	15
1	A	139	ASN	CB-CA-C	-7.00	108.49	116.54	14	2
1	A	103	TRP	NE1-CE2-CZ2	6.81	140.31	130.10	6	15
1	A	30	TRP	NE1-CE2-CZ2	6.70	140.14	130.10	12	15
1	A	103	TRP	NE1-CE2-CD2	-5.89	99.74	107.40	6	15
1	A	30	TRP	NE1-CE2-CD2	-5.82	99.84	107.40	12	15
1	A	93	SER	CB-CA-C	-5.79	108.73	117.07	12	1
1	A	114	GLY	N-CA-C	-5.42	108.17	115.21	12	1
2	B	136	GLN	N-CA-C	-5.38	106.57	113.02	7	1
1	A	112	HIS	CA-CB-CG	-5.34	108.46	113.80	6	1
1	A	103	TRP	CG-CD2-CE3	-5.30	128.60	133.90	6	11
1	A	113	ASP	CA-CB-CG	-5.24	107.36	112.60	12	1
1	A	103	TRP	CG-CD1-NE1	-5.13	103.53	110.20	6	13
2	B	135	LEU	N-CA-C	-5.10	105.16	111.33	7	1
1	A	93	SER	CA-C-O	5.09	120.89	117.94	12	1
1	A	30	TRP	CG-CD1-NE1	-5.06	103.62	110.20	13	4
1	A	30	TRP	CG-CD2-CE3	-5.00	128.90	133.90	4	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	25	ARG	Sidechain	15
1	A	36	ARG	Sidechain	15
2	B	129	ARG	Sidechain	15
1	A	45	ARG	Sidechain	14
1	A	94	ARG	Sidechain	14
1	A	24	ARG	Sidechain	13
1	A	148	ARG	Sidechain	13
1	A	170	ARG	Sidechain	13
2	B	130	ARG	Sidechain	12

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	1338	1275	1275	128±10
2	B	220	233	233	28±3
All	All	23415	22620	22612	2271

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 49.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:138:LEU:HD23	1:A:139:ASN:H	0.98	1.15	10	1
1:A:55:PHE:CD2	2:B:161:VAL:HG11	0.93	1.97	6	4
2:B:135:LEU:C	2:B:135:LEU:HD13	0.85	1.96	6	6
1:A:72:PHE:CZ	1:A:88:VAL:HG11	0.83	2.09	7	13
1:A:138:LEU:HD23	1:A:139:ASN:N	0.83	1.88	10	1
2:B:161:VAL:HG13	2:B:165:MET:SD	0.81	2.15	12	3
1:A:111:ASN:ND2	1:A:112:HIS:H	0.80	1.74	12	1
1:A:77:ASN:ND2	1:A:79:PHE:CE2	0.80	2.50	3	1
1:A:31:HIS:CG	1:A:32:LYS:N	0.79	2.50	13	6
1:A:77:ASN:ND2	1:A:79:PHE:CE1	0.79	2.51	14	1
2:B:165:MET:N	2:B:165:MET:SD	0.78	2.56	8	4
1:A:129:TYR:CE1	1:A:135:MET:SD	0.78	2.77	6	3
1:A:97:LEU:H	1:A:97:LEU:HD22	0.77	1.36	10	1
1:A:64:PHE:CZ	1:A:68:LEU:HD11	0.77	2.14	9	2
1:A:97:LEU:HD22	1:A:97:LEU:N	0.77	1.94	10	1
1:A:111:ASN:ND2	1:A:112:HIS:N	0.76	2.33	11	2
1:A:108:TYR:CD1	1:A:121:MET:SD	0.76	2.78	6	7
1:A:159:ASN:HD22	1:A:159:ASN:N	0.75	1.79	12	1
1:A:131:MET:SD	1:A:132:MET:SD	0.75	2.84	10	1
1:A:111:ASN:HD22	1:A:112:HIS:H	0.75	1.25	12	1
1:A:30:TRP:CZ3	2:B:159:ALA:HB1	0.74	2.17	11	10
2:B:157:ALA:HB3	2:B:158:PRO:HD3	0.74	1.59	13	15
1:A:24:ARG:H	1:A:24:ARG:CD	0.73	1.97	11	1
2:B:125:PHE:CG	2:B:126:GLN:N	0.73	2.56	15	2
1:A:77:ASN:ND2	1:A:77:ASN:H	0.73	1.82	8	3
1:A:55:PHE:CG	2:B:161:VAL:HG11	0.72	2.19	8	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:PHE:CD1	2:B:161:VAL:HG11	0.72	2.20	10	2
1:A:161:ASP:CG	1:A:162:GLY:N	0.71	2.46	5	2
1:A:44:ALA:HB2	1:A:79:PHE:CE2	0.71	2.21	7	1
1:A:111:ASN:ND2	1:A:113:ASP:H	0.71	1.83	13	1
1:A:31:HIS:CD2	1:A:32:LYS:N	0.71	2.58	13	3
2:B:155:ASN:ND2	2:B:155:ASN:H	0.71	1.78	11	1
2:B:125:PHE:N	2:B:125:PHE:CD1	0.70	2.59	13	2
1:A:72:PHE:CE1	1:A:88:VAL:HG11	0.70	2.21	5	12
1:A:111:ASN:ND2	1:A:113:ASP:CG	0.70	2.50	13	6
1:A:31:HIS:CD2	1:A:31:HIS:C	0.70	2.70	13	1
1:A:31:HIS:C	1:A:31:HIS:CD2	0.69	2.69	5	8
1:A:139:ASN:ND2	1:A:139:ASN:C	0.69	2.49	3	1
1:A:111:ASN:ND2	1:A:113:ASP:OD1	0.69	2.26	14	6
1:A:99:GLU:N	1:A:99:GLU:CD	0.69	2.51	7	1
1:A:114:GLY:C	1:A:115:TYR:CD1	0.69	2.71	10	4
2:B:157:ALA:HB3	2:B:158:PRO:CD	0.69	2.17	4	14
2:B:135:LEU:C	2:B:135:LEU:HD12	0.69	2.12	2	1
1:A:114:GLY:O	1:A:165:THR:HG23	0.68	1.88	12	1
2:B:126:GLN:HE21	2:B:130:ARG:NH1	0.68	1.87	14	1
1:A:111:ASN:HD22	1:A:112:HIS:N	0.68	1.86	13	2
1:A:159:ASN:H	1:A:159:ASN:ND2	0.68	1.87	12	1
1:A:84:GLU:O	1:A:88:VAL:HG23	0.68	1.88	2	5
2:B:127:VAL:HG13	2:B:128:ALA:N	0.68	2.02	10	11
1:A:86:ILE:HG23	1:A:87:THR:N	0.68	2.03	7	5
1:A:55:PHE:C	1:A:56:PHE:CD1	0.68	2.72	14	4
2:B:162:LEU:C	2:B:162:LEU:HD13	0.68	2.14	9	1
1:A:159:ASN:ND2	1:A:160:GLU:H	0.68	1.86	12	1
1:A:30:TRP:CD1	1:A:86:ILE:HD11	0.67	2.24	8	2
1:A:159:ASN:HD22	1:A:159:ASN:H	0.67	1.30	12	1
1:A:142:GLU:H	1:A:142:GLU:CD	0.67	1.97	4	3
1:A:142:GLU:N	1:A:142:GLU:CD	0.67	2.51	11	2
1:A:30:TRP:CH2	1:A:89:LEU:HD11	0.67	2.25	11	1
1:A:30:TRP:CZ3	1:A:89:LEU:HD11	0.67	2.25	11	1
1:A:121:MET:O	1:A:125:VAL:HG23	0.66	1.90	12	4
1:A:111:ASN:HD21	1:A:113:ASP:CG	0.66	1.97	6	5
1:A:69:PHE:CD1	1:A:69:PHE:C	0.66	2.72	15	3
1:A:108:TYR:CD2	1:A:121:MET:SD	0.66	2.89	9	2
1:A:138:LEU:CD2	1:A:139:ASN:N	0.66	2.58	10	1
1:A:138:LEU:HD23	1:A:142:GLU:HB3	0.66	1.67	3	1
1:A:148:ARG:NH2	2:B:131:VAL:CG2	0.66	2.57	5	1
1:A:69:PHE:CD1	1:A:80:ILE:HD12	0.66	2.26	1	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:129:TYR:CD1	1:A:135:MET:SD	0.66	2.89	4	2
1:A:32:LYS:C	1:A:32:LYS:CD	0.66	2.68	1	1
1:A:111:ASN:ND2	1:A:113:ASP:OD2	0.66	2.28	2	2
2:B:136:GLN:C	2:B:137:THR:HG23	0.66	2.14	1	5
2:B:125:PHE:CD1	2:B:126:GLN:N	0.66	2.63	9	3
1:A:97:LEU:HD12	1:A:98:GLU:N	0.66	2.06	8	1
2:B:134:ASN:C	2:B:137:THR:H	0.65	1.99	7	6
1:A:67:HIS:HB2	1:A:110:LEU:HD11	0.65	1.68	11	1
1:A:113:ASP:N	1:A:113:ASP:OD1	0.65	2.25	6	2
1:A:21:TYR:CD1	1:A:21:TYR:N	0.65	2.61	7	1
1:A:115:TYR:CD2	1:A:165:THR:OG1	0.65	2.50	12	3
1:A:30:TRP:CZ3	1:A:89:LEU:HD13	0.65	2.27	12	6
2:B:154:GLU:N	2:B:154:GLU:CD	0.65	2.55	4	1
1:A:111:ASN:HD22	1:A:111:ASN:C	0.65	1.99	13	2
1:A:159:ASN:N	1:A:159:ASN:ND2	0.65	2.45	4	3
1:A:30:TRP:CE3	1:A:89:LEU:HD13	0.65	2.27	14	8
2:B:161:VAL:HG13	2:B:165:MET:HE3	0.65	1.69	13	2
1:A:90:SER:OG	1:A:91:THR:N	0.65	2.30	10	4
1:A:109:ASP:OD1	1:A:111:ASN:ND2	0.65	2.27	13	2
1:A:88:VAL:HG13	1:A:103:TRP:NE1	0.64	2.08	11	2
2:B:135:LEU:C	2:B:135:LEU:CD1	0.64	2.71	6	7
1:A:64:PHE:CE2	1:A:68:LEU:HD11	0.64	2.27	5	3
1:A:58:PHE:CD2	1:A:132:MET:SD	0.64	2.90	9	1
1:A:111:ASN:ND2	1:A:111:ASN:C	0.64	2.55	10	3
1:A:142:GLU:O	1:A:143:ALA:HB3	0.64	1.92	13	1
2:B:127:VAL:CG1	2:B:128:ALA:N	0.64	2.60	1	12
2:B:166:ILE:CD1	2:B:166:ILE:N	0.64	2.60	14	9
1:A:77:ASN:ND2	1:A:77:ASN:N	0.64	2.44	8	2
1:A:118:PHE:C	1:A:118:PHE:CD1	0.64	2.75	1	3
1:A:77:ASN:ND2	1:A:79:PHE:H	0.64	1.91	2	3
1:A:142:GLU:CD	1:A:142:GLU:C	0.64	2.66	6	1
1:A:26:GLU:OE2	1:A:29:GLN:NE2	0.64	2.31	8	1
2:B:125:PHE:CD2	2:B:126:GLN:N	0.64	2.66	7	1
1:A:75:ASP:OD2	1:A:77:ASN:ND2	0.64	2.31	14	1
1:A:86:ILE:CG2	1:A:87:THR:N	0.64	2.61	14	11
2:B:161:VAL:HG13	2:B:165:MET:CE	0.64	2.22	13	2
1:A:135:MET:O	1:A:138:LEU:HD22	0.64	1.92	10	1
1:A:111:ASN:ND2	1:A:120:GLU:OE2	0.63	2.31	3	5
1:A:135:MET:SD	1:A:135:MET:N	0.63	2.70	14	4
1:A:142:GLU:OE1	1:A:143:ALA:N	0.63	2.31	7	1
1:A:111:ASN:HD21	1:A:120:GLU:CD	0.63	2.02	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:135:LEU:C	2:B:135:LEU:HD23	0.63	2.17	8	2
1:A:108:TYR:CE1	1:A:121:MET:SD	0.63	2.92	3	3
1:A:108:TYR:O	1:A:116:ILE:HG23	0.63	1.94	1	4
1:A:167:ASP:OD1	1:A:168:GLU:N	0.63	2.32	2	3
1:A:130:LYS:O	1:A:132:MET:N	0.63	2.32	11	1
2:B:157:ALA:O	2:B:161:VAL:HG23	0.63	1.93	4	6
2:B:127:VAL:HG12	2:B:128:ALA:N	0.63	2.07	6	2
1:A:125:VAL:HG21	1:A:149:VAL:HG12	0.62	1.70	12	3
1:A:81:HIS:ND1	1:A:81:HIS:N	0.62	2.46	13	2
1:A:142:GLU:O	1:A:143:ALA:HB2	0.62	1.93	2	1
1:A:129:TYR:CZ	1:A:135:MET:SD	0.62	2.93	2	1
1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:HD22	0.62	2.07	7	2
1:A:37:ASP:OD2	2:B:155:ASN:N	0.62	2.32	8	1
1:A:45:ARG:O	1:A:49:VAL:HG23	0.62	1.94	6	2
1:A:115:TYR:CE2	1:A:165:THR:HG23	0.62	2.29	10	2
1:A:73:ASP:OD1	1:A:74:LYS:N	0.62	2.32	13	2
2:B:163:SER:OG	2:B:164:SER:N	0.62	2.32	8	2
1:A:73:ASP:OD2	1:A:75:ASP:N	0.62	2.33	7	1
1:A:83:GLU:O	1:A:87:THR:HG23	0.62	1.95	14	2
1:A:83:GLU:CG	1:A:84:GLU:N	0.62	2.62	11	2
1:A:161:ASP:CG	1:A:162:GLY:H	0.62	2.02	5	2
1:A:161:ASP:OD1	1:A:161:ASP:N	0.61	2.30	9	7
1:A:157:ASP:C	1:A:159:ASN:H	0.61	2.03	15	3
1:A:157:ASP:OD1	1:A:159:ASN:ND2	0.61	2.33	11	2
2:B:163:SER:OG	2:B:167:MET:HE2	0.61	1.95	5	3
1:A:142:GLU:CG	1:A:143:ALA:H	0.61	2.08	3	1
1:A:108:TYR:CE1	1:A:124:ILE:HG21	0.61	2.29	5	1
1:A:88:VAL:HG12	1:A:92:THR:OG1	0.61	1.95	6	3
1:A:115:TYR:CE2	1:A:165:THR:OG1	0.61	2.52	9	4
1:A:56:PHE:CE1	2:B:165:MET:SD	0.61	2.94	2	1
1:A:9:SER:OG	1:A:10:LYS:N	0.61	2.31	14	1
1:A:72:PHE:CE2	1:A:88:VAL:HG11	0.61	2.30	3	5
1:A:118:PHE:CZ	1:A:119:ASP:OD2	0.61	2.53	2	2
1:A:161:ASP:C	1:A:163:TYR:H	0.61	2.04	4	7
1:A:140:GLU:CD	1:A:141:ASP:H	0.61	2.04	7	1
1:A:111:ASN:HD22	1:A:113:ASP:H	0.61	1.37	13	1
1:A:79:PHE:CD1	1:A:79:PHE:N	0.61	2.69	12	4
1:A:127:SER:OG	1:A:128:VAL:N	0.61	2.33	6	3
1:A:117:THR:N	1:A:120:GLU:OE1	0.61	2.32	10	1
1:A:23:ASP:C	1:A:25:ARG:H	0.61	2.04	5	3
1:A:37:ASP:OD1	1:A:38:CYS:SG	0.61	2.59	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:118:PHE:CD1	1:A:119:ASP:N	0.60	2.69	1	3
1:A:118:PHE:CE1	1:A:119:ASP:OD1	0.60	2.54	2	1
1:A:76:ASN:C	1:A:76:ASN:HD22	0.60	2.04	9	1
1:A:62:GLU:CD	1:A:62:GLU:C	0.60	2.69	12	1
2:B:164:SER:OG	2:B:165:MET:N	0.60	2.31	13	4
1:A:69:PHE:CE1	1:A:80:ILE:HD12	0.60	2.31	1	4
1:A:152:ILE:HG22	1:A:153:PHE:N	0.60	2.11	11	5
1:A:77:ASN:N	1:A:77:ASN:HD22	0.60	1.91	6	2
1:A:161:ASP:OD1	1:A:162:GLY:N	0.60	2.34	12	1
1:A:72:PHE:CZ	1:A:88:VAL:CG1	0.60	2.84	4	13
1:A:73:ASP:OD1	1:A:76:ASN:N	0.60	2.34	1	2
1:A:27:ILE:CG2	1:A:28:GLN:N	0.60	2.64	15	1
1:A:136:VAL:CG1	1:A:137:THR:N	0.60	2.64	8	4
1:A:113:ASP:OD1	1:A:114:GLY:N	0.60	2.33	11	3
1:A:113:ASP:C	1:A:115:TYR:H	0.60	2.04	9	7
1:A:157:ASP:CG	1:A:159:ASN:HD21	0.60	2.05	3	1
1:A:99:GLU:CD	1:A:99:GLU:H	0.60	2.03	7	1
1:A:23:ASP:OD2	1:A:26:GLU:N	0.60	2.33	9	1
1:A:140:GLU:C	1:A:141:ASP:CG	0.60	2.69	14	1
2:B:126:GLN:NE2	2:B:130:ARG:NH1	0.60	2.50	14	1
1:A:109:ASP:C	1:A:111:ASN:N	0.60	2.58	10	5
1:A:140:GLU:OE1	1:A:141:ASP:N	0.60	2.35	7	2
1:A:142:GLU:CG	1:A:143:ALA:N	0.60	2.65	3	1
1:A:109:ASP:CG	1:A:111:ASN:HD21	0.60	2.03	13	2
2:B:166:ILE:N	2:B:166:ILE:HD12	0.59	2.12	14	9
2:B:135:LEU:HD12	2:B:135:LEU:O	0.59	1.97	2	1
1:A:158:LYS:CD	1:A:158:LYS:H	0.59	2.10	1	1
1:A:36:ARG:C	1:A:38:CYS:H	0.59	2.05	6	3
1:A:46:GLU:CG	1:A:47:ASP:N	0.59	2.65	5	2
1:A:45:ARG:N	1:A:69:PHE:CE1	0.59	2.70	2	3
1:A:159:ASN:HD21	1:A:161:ASP:CG	0.59	2.05	8	1
1:A:117:THR:HG22	1:A:118:PHE:CD1	0.59	2.33	12	1
1:A:97:LEU:C	1:A:99:GLU:H	0.59	2.04	9	3
1:A:139:ASN:HD22	1:A:140:GLU:N	0.59	1.95	5	1
1:A:21:TYR:CE1	1:A:90:SER:CB	0.59	2.85	7	1
1:A:138:LEU:HD21	1:A:142:GLU:HG2	0.59	1.75	7	1
1:A:159:ASN:ND2	1:A:168:GLU:OE1	0.59	2.33	10	1
1:A:13:LEU:HD12	1:A:13:LEU:N	0.59	2.11	13	1
1:A:162:GLY:C	1:A:163:TYR:CD1	0.59	2.80	10	4
1:A:113:ASP:OD1	1:A:115:TYR:N	0.59	2.33	12	2
1:A:159:ASN:ND2	1:A:168:GLU:OE2	0.59	2.33	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:109:ASP:C	1:A:111:ASN:H	0.59	2.03	10	1
1:A:60:SER:C	1:A:62:GLU:H	0.59	2.06	8	11
1:A:140:GLU:CD	1:A:141:ASP:N	0.59	2.61	7	1
2:B:155:ASN:ND2	2:B:155:ASN:N	0.59	2.43	11	1
1:A:24:ARG:CD	1:A:24:ARG:C	0.59	2.76	12	1
1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CD2	0.58	2.66	7	2
1:A:156:MET:N	1:A:156:MET:SD	0.58	2.75	9	4
1:A:23:ASP:O	1:A:26:GLU:N	0.58	2.35	10	2
1:A:64:PHE:C	1:A:66:ASN:N	0.58	2.60	11	2
1:A:96:THR:O	1:A:96:THR:HG23	0.58	1.97	7	1
1:A:46:GLU:OE2	1:A:47:ASP:N	0.58	2.36	12	1
1:A:39:PRO:C	1:A:41:GLY:H	0.58	2.07	6	2
1:A:21:TYR:C	1:A:23:ASP:H	0.58	2.05	13	1
1:A:89:LEU:HD13	1:A:89:LEU:O	0.58	1.99	10	2
1:A:118:PHE:CE2	1:A:119:ASP:CG	0.58	2.82	12	1
1:A:138:LEU:C	1:A:140:GLU:H	0.58	2.07	3	1
1:A:161:ASP:OD1	1:A:163:TYR:CD2	0.58	2.57	5	1
1:A:97:LEU:N	1:A:97:LEU:CD2	0.58	2.67	10	2
1:A:75:ASP:N	1:A:75:ASP:OD1	0.58	2.37	12	2
1:A:159:ASN:ND2	1:A:161:ASP:OD2	0.57	2.36	2	2
1:A:167:ASP:CG	1:A:168:GLU:N	0.57	2.61	12	2
2:B:134:ASN:HD22	2:B:134:ASN:C	0.57	2.06	4	1
1:A:30:TRP:CE3	1:A:89:LEU:CD1	0.57	2.87	6	6
1:A:45:ARG:CG	1:A:46:GLU:N	0.57	2.67	7	5
1:A:138:LEU:O	1:A:139:ASN:C	0.57	2.48	1	6
2:B:134:ASN:O	2:B:137:THR:N	0.57	2.37	7	12
1:A:111:ASN:CG	1:A:112:HIS:H	0.57	2.07	11	1
2:B:162:LEU:C	2:B:162:LEU:HD23	0.57	2.24	2	1
1:A:38:CYS:C	1:A:40:SER:H	0.57	2.07	3	3
1:A:157:ASP:O	1:A:159:ASN:ND2	0.57	2.38	6	3
2:B:163:SER:HB3	2:B:167:MET:HE2	0.57	1.77	3	2
1:A:9:SER:C	1:A:11:ASP:H	0.57	2.06	7	1
1:A:128:VAL:CG2	1:A:129:TYR:N	0.57	2.67	8	2
1:A:142:GLU:CD	1:A:142:GLU:N	0.57	2.63	4	3
1:A:69:PHE:CE2	1:A:75:ASP:OD2	0.57	2.57	7	1
1:A:97:LEU:HD12	1:A:97:LEU:C	0.57	2.24	8	1
1:A:128:VAL:HG23	1:A:129:TYR:N	0.57	2.14	9	1
1:A:153:PHE:CE2	1:A:162:GLY:O	0.57	2.57	15	2
1:A:118:PHE:CZ	1:A:119:ASP:CG	0.57	2.82	2	1
1:A:78:GLY:C	1:A:79:PHE:CD1	0.57	2.83	12	4
2:B:125:PHE:C	2:B:127:VAL:N	0.57	2.60	11	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:PHE:N	1:A:127:SER:OG	0.57	2.38	4	3
1:A:175:VAL:HG12	1:A:175:VAL:O	0.57	1.99	11	3
1:A:72:PHE:CE2	1:A:88:VAL:CG1	0.57	2.88	3	1
2:B:136:GLN:C	2:B:137:THR:OG1	0.57	2.47	7	1
1:A:117:THR:HG23	1:A:120:GLU:OE2	0.56	1.99	5	2
1:A:135:MET:SD	1:A:148:ARG:NH1	0.56	2.78	6	1
1:A:136:VAL:HG13	1:A:137:THR:N	0.56	2.13	8	2
1:A:21:TYR:O	1:A:22:PHE:CG	0.56	2.58	2	3
1:A:112:HIS:O	1:A:112:HIS:CG	0.56	2.57	12	6
1:A:149:VAL:HG23	1:A:150:LYS:N	0.56	2.15	11	7
1:A:159:ASN:ND2	1:A:159:ASN:H	0.56	1.97	1	1
1:A:93:SER:OG	1:A:94:ARG:N	0.56	2.35	6	2
1:A:43:LEU:HD21	1:A:48:PHE:CD2	0.56	2.35	9	5
1:A:64:PHE:CD1	1:A:67:HIS:NE2	0.56	2.74	11	1
1:A:75:ASP:C	1:A:76:ASN:ND2	0.56	2.63	12	1
1:A:68:LEU:HD21	1:A:72:PHE:CD1	0.56	2.36	15	1
2:B:132:LEU:HD23	2:B:132:LEU:C	0.56	2.26	5	1
1:A:97:LEU:HD12	1:A:97:LEU:N	0.56	2.15	2	1
1:A:118:PHE:CE2	1:A:119:ASP:OD1	0.56	2.57	12	1
1:A:71:VAL:C	1:A:73:ASP:N	0.56	2.63	7	7
1:A:45:ARG:N	1:A:69:PHE:CZ	0.56	2.73	2	1
1:A:98:GLU:H	1:A:98:GLU:CD	0.56	2.08	5	1
1:A:158:LYS:C	1:A:159:ASN:CG	0.56	2.73	7	3
1:A:128:VAL:HG23	1:A:129:TYR:H	0.56	1.60	9	1
1:A:138:LEU:CD2	1:A:142:GLU:OE1	0.56	2.54	8	1
1:A:159:ASN:ND2	1:A:160:GLU:N	0.56	2.54	12	1
1:A:157:ASP:O	1:A:159:ASN:N	0.56	2.38	13	6
1:A:161:ASP:O	1:A:163:TYR:CD2	0.56	2.59	8	5
1:A:96:THR:OG1	1:A:97:LEU:N	0.56	2.33	10	1
2:B:155:ASN:N	2:B:155:ASN:HD22	0.56	1.96	11	1
1:A:26:GLU:O	1:A:29:GLN:N	0.56	2.38	7	13
1:A:77:ASN:HD22	1:A:79:PHE:H	0.56	1.44	2	1
1:A:130:LYS:C	1:A:132:MET:N	0.56	2.64	11	2
1:A:73:ASP:CG	1:A:74:LYS:H	0.56	2.09	9	1
1:A:97:LEU:H	1:A:97:LEU:CD2	0.56	2.13	10	1
1:A:115:TYR:CD2	1:A:165:THR:HG22	0.56	2.36	11	1
2:B:162:LEU:C	2:B:162:LEU:CD1	0.55	2.79	9	1
1:A:110:LEU:N	1:A:110:LEU:CD2	0.55	2.69	9	2
1:A:111:ASN:CG	1:A:113:ASP:OD1	0.55	2.50	8	3
1:A:161:ASP:O	1:A:163:TYR:CE1	0.55	2.59	11	4
1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CD1	0.55	2.68	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:63:ASP:CG	1:A:67:HIS:NE2	0.55	2.64	2	1
1:A:77:ASN:ND2	1:A:79:PHE:CD2	0.55	2.73	3	1
1:A:161:ASP:O	1:A:163:TYR:CZ	0.55	2.60	11	3
1:A:58:PHE:CD2	1:A:59:GLY:N	0.55	2.74	5	1
1:A:98:GLU:CG	1:A:99:GLU:N	0.55	2.69	12	1
1:A:36:ARG:C	1:A:38:CYS:N	0.55	2.62	6	4
1:A:113:ASP:C	1:A:115:TYR:N	0.55	2.64	9	5
2:B:135:LEU:O	2:B:135:LEU:HD23	0.55	2.02	1	1
1:A:77:ASN:HD22	1:A:78:GLY:N	0.55	1.99	2	3
2:B:135:LEU:O	2:B:135:LEU:HD13	0.55	2.02	5	1
1:A:161:ASP:O	1:A:163:TYR:CE2	0.55	2.60	10	6
1:A:64:PHE:CE1	1:A:68:LEU:HD11	0.55	2.36	9	1
1:A:111:ASN:CG	1:A:112:HIS:N	0.55	2.62	12	2
1:A:115:TYR:CE2	1:A:165:THR:HG22	0.54	2.38	2	2
1:A:23:ASP:O	1:A:25:ARG:N	0.54	2.40	8	5
2:B:162:LEU:CD2	2:B:162:LEU:N	0.54	2.71	4	1
1:A:97:LEU:C	1:A:97:LEU:CD1	0.54	2.79	8	1
1:A:161:ASP:O	1:A:163:TYR:CD1	0.54	2.60	13	2
1:A:30:TRP:CD1	1:A:30:TRP:H	0.54	2.16	14	8
1:A:76:ASN:O	1:A:76:ASN:ND2	0.54	2.40	2	1
1:A:115:TYR:CE1	1:A:165:THR:HG23	0.54	2.38	7	3
1:A:157:ASP:CG	1:A:158:LYS:N	0.54	2.63	5	2
1:A:115:TYR:CZ	1:A:165:THR:OG1	0.54	2.59	6	1
1:A:115:TYR:CE1	1:A:165:THR:OG1	0.54	2.61	6	1
1:A:88:VAL:O	1:A:92:THR:HG23	0.54	2.02	10	1
1:A:63:ASP:O	1:A:67:HIS:CD2	0.54	2.61	5	6
1:A:115:TYR:CE2	1:A:165:THR:CG2	0.54	2.90	13	3
1:A:9:SER:O	1:A:11:ASP:N	0.54	2.41	15	3
1:A:111:ASN:C	1:A:112:HIS:CG	0.54	2.85	14	1
1:A:55:PHE:O	1:A:56:PHE:CD1	0.54	2.61	13	7
1:A:113:ASP:O	1:A:115:TYR:CD2	0.54	2.60	5	1
1:A:140:GLU:O	1:A:142:GLU:N	0.54	2.41	3	2
1:A:153:PHE:O	1:A:157:ASP:N	0.54	2.41	4	3
1:A:171:GLU:O	1:A:173:SER:N	0.54	2.40	15	4
1:A:98:GLU:OE1	1:A:170:ARG:NH2	0.54	2.41	7	1
2:B:164:SER:O	2:B:168:SER:N	0.54	2.36	13	1
1:A:118:PHE:CE1	1:A:119:ASP:CG	0.54	2.86	2	1
1:A:97:LEU:O	1:A:99:GLU:N	0.54	2.36	13	5
2:B:157:ALA:CB	2:B:158:PRO:CD	0.54	2.85	4	9
1:A:55:PHE:O	1:A:56:PHE:CG	0.54	2.61	5	8
1:A:115:TYR:CZ	1:A:165:THR:CG2	0.54	2.91	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:ASP:O	1:A:50:LYS:N	0.54	2.41	3	7
1:A:170:ARG:O	1:A:174:LYS:N	0.54	2.40	5	3
1:A:23:ASP:O	1:A:24:ARG:C	0.53	2.51	10	6
1:A:86:ILE:HG22	1:A:87:THR:N	0.53	2.17	13	9
1:A:98:GLU:OE2	1:A:174:LYS:NZ	0.53	2.37	3	1
2:B:163:SER:O	2:B:167:MET:N	0.53	2.41	3	6
1:A:63:ASP:OD1	1:A:67:HIS:NE2	0.53	2.41	14	1
2:B:160:LEU:HD23	2:B:161:VAL:N	0.53	2.18	15	2
1:A:111:ASN:O	1:A:112:HIS:CD2	0.53	2.61	1	1
1:A:109:ASP:O	1:A:111:ASN:N	0.53	2.41	12	5
1:A:37:ASP:OD2	2:B:156:VAL:N	0.53	2.33	8	1
1:A:129:TYR:CE2	1:A:148:ARG:NH1	0.53	2.76	11	1
1:A:22:PHE:O	1:A:23:ASP:C	0.53	2.51	10	8
1:A:23:ASP:C	1:A:25:ARG:N	0.53	2.64	8	4
1:A:55:PHE:O	1:A:56:PHE:CD2	0.53	2.62	9	2
1:A:139:ASN:HD22	1:A:140:GLU:H	0.53	1.46	5	1
1:A:157:ASP:CG	1:A:168:GLU:CD	0.53	2.76	5	1
1:A:79:PHE:CD1	1:A:79:PHE:O	0.53	2.61	11	1
2:B:133:ASN:O	2:B:137:THR:N	0.53	2.42	1	5
2:B:162:LEU:HD23	2:B:163:SER:N	0.53	2.17	2	1
1:A:161:ASP:OD1	1:A:161:ASP:C	0.53	2.50	15	3
1:A:156:MET:CE	2:B:128:ALA:HB2	0.53	2.33	11	1
1:A:139:ASN:ND2	1:A:140:GLU:H	0.53	2.02	5	1
1:A:142:GLU:OE1	1:A:142:GLU:N	0.53	2.41	13	2
1:A:60:SER:N	1:A:61:PRO:HD3	0.53	2.19	7	12
1:A:115:TYR:CD1	1:A:115:TYR:N	0.53	2.76	13	5
1:A:31:HIS:CE1	1:A:32:LYS:CG	0.53	2.92	5	1
1:A:117:THR:OG1	1:A:120:GLU:CD	0.53	2.52	5	2
1:A:130:LYS:O	1:A:131:MET:SD	0.53	2.67	11	1
1:A:58:PHE:CG	1:A:59:GLY:N	0.53	2.77	5	1
1:A:87:THR:HG22	1:A:88:VAL:N	0.53	2.18	10	1
2:B:155:ASN:HD22	2:B:155:ASN:H	0.53	1.46	13	1
1:A:24:ARG:O	1:A:26:GLU:N	0.53	2.42	1	2
1:A:111:ASN:CG	1:A:113:ASP:OD2	0.53	2.52	3	1
1:A:171:GLU:C	1:A:173:SER:N	0.53	2.67	15	5
1:A:68:LEU:O	1:A:71:VAL:N	0.53	2.42	7	2
1:A:115:TYR:CD1	1:A:165:THR:OG1	0.53	2.62	6	1
1:A:111:ASN:ND2	1:A:111:ASN:O	0.53	2.41	10	1
1:A:139:ASN:ND2	1:A:141:ASP:OD2	0.53	2.42	13	1
1:A:115:TYR:CD1	1:A:165:THR:HG22	0.53	2.39	3	2
1:A:117:THR:CG2	1:A:120:GLU:OE2	0.53	2.57	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:77:ASN:HD21	1:A:81:HIS:CE1	0.53	2.22	13	1
1:A:159:ASN:HD21	1:A:168:GLU:CD	0.53	2.11	13	1
1:A:97:LEU:CD1	1:A:98:GLU:N	0.53	2.72	14	1
1:A:77:ASN:OD1	1:A:77:ASN:N	0.52	2.40	5	8
1:A:149:VAL:HG23	1:A:150:LYS:H	0.52	1.64	1	3
1:A:152:ILE:O	1:A:155:LEU:N	0.52	2.42	11	5
1:A:36:ARG:HE	1:A:36:ARG:CA	0.52	2.17	10	1
1:A:112:HIS:O	1:A:112:HIS:ND1	0.52	2.42	1	2
1:A:138:LEU:O	1:A:140:GLU:N	0.52	2.40	3	2
1:A:157:ASP:OD1	1:A:157:ASP:C	0.52	2.51	7	2
1:A:116:ILE:HG22	1:A:117:THR:N	0.52	2.20	5	14
1:A:161:ASP:O	1:A:163:TYR:N	0.52	2.42	4	4
1:A:56:PHE:C	1:A:58:PHE:H	0.52	2.11	9	1
1:A:100:LYS:C	1:A:102:SER:N	0.52	2.66	11	1
1:A:71:VAL:O	1:A:73:ASP:N	0.52	2.42	7	5
1:A:98:GLU:CD	1:A:98:GLU:N	0.52	2.65	5	1
1:A:131:MET:O	1:A:132:MET:CB	0.52	2.57	7	1
1:A:113:ASP:O	1:A:115:TYR:N	0.52	2.42	9	1
1:A:96:THR:C	1:A:97:LEU:HD22	0.52	2.29	11	1
2:B:125:PHE:O	2:B:127:VAL:N	0.52	2.43	12	2
1:A:159:ASN:ND2	1:A:159:ASN:O	0.52	2.42	15	1
1:A:143:ALA:O	1:A:144:THR:C	0.52	2.53	10	14
1:A:52:TYR:O	1:A:54:GLN:N	0.52	2.43	4	5
1:A:39:PRO:C	1:A:41:GLY:N	0.52	2.65	6	2
1:A:64:PHE:O	1:A:66:ASN:N	0.52	2.43	11	2
1:A:148:ARG:HE	2:B:131:VAL:CG2	0.52	2.17	12	1
2:B:161:VAL:CG1	2:B:165:MET:SD	0.52	2.96	12	1
1:A:21:TYR:C	1:A:23:ASP:N	0.52	2.68	13	1
1:A:109:ASP:O	1:A:112:HIS:N	0.52	2.43	1	5
1:A:156:MET:O	1:A:158:LYS:N	0.52	2.42	2	3
1:A:90:SER:O	1:A:92:THR:N	0.52	2.43	5	3
1:A:67:HIS:CE1	1:A:123:THR:CG2	0.52	2.92	14	3
1:A:115:TYR:CZ	1:A:165:THR:HG23	0.52	2.40	9	1
1:A:109:ASP:O	1:A:110:LEU:C	0.52	2.53	2	6
1:A:124:ILE:O	1:A:127:SER:N	0.52	2.42	2	10
1:A:36:ARG:O	1:A:38:CYS:N	0.52	2.43	6	2
1:A:145:PRO:O	1:A:147:MET:N	0.52	2.43	5	2
1:A:151:LYS:O	1:A:155:LEU:N	0.52	2.43	9	3
1:A:158:LYS:C	1:A:159:ASN:HD22	0.52	2.12	11	1
1:A:30:TRP:CZ3	1:A:89:LEU:CD1	0.52	2.92	15	1
1:A:111:ASN:CG	1:A:120:GLU:OE2	0.52	2.52	7	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:37:ASP:O	1:A:38:CYS:SG	0.52	2.67	4	7
1:A:62:GLU:O	1:A:65:ALA:N	0.52	2.43	1	1
1:A:173:SER:C	1:A:175:VAL:N	0.52	2.67	4	4
1:A:75:ASP:OD1	1:A:75:ASP:C	0.52	2.53	4	1
1:A:161:ASP:O	1:A:163:TYR:CG	0.52	2.63	11	2
1:A:105:PHE:CE2	1:A:166:LEU:N	0.51	2.78	4	4
1:A:134:SER:C	1:A:136:VAL:N	0.51	2.67	11	8
1:A:145:PRO:O	1:A:146:GLU:C	0.51	2.53	9	14
1:A:51:ILE:HD11	2:B:156:VAL:HG12	0.51	1.82	5	5
1:A:153:PHE:O	1:A:158:LYS:N	0.51	2.43	9	1
1:A:115:TYR:CG	1:A:165:THR:OG1	0.51	2.63	6	1
1:A:90:SER:O	1:A:93:SER:N	0.51	2.43	15	3
1:A:81:HIS:ND1	1:A:82:PHE:N	0.51	2.58	11	2
1:A:151:LYS:NZ	1:A:151:LYS:CB	0.51	2.72	11	1
1:A:139:ASN:CG	1:A:140:GLU:H	0.51	2.12	15	2
1:A:118:PHE:CG	1:A:119:ASP:N	0.51	2.77	12	4
2:B:136:GLN:C	2:B:137:THR:CG2	0.51	2.84	13	8
1:A:56:PHE:CZ	2:B:165:MET:SD	0.51	3.03	2	1
1:A:67:HIS:O	1:A:71:VAL:HG23	0.51	2.06	13	4
2:B:135:LEU:HD13	2:B:135:LEU:C	0.51	2.30	5	1
1:A:165:THR:CG2	1:A:166:LEU:N	0.51	2.73	6	1
1:A:119:ASP:O	1:A:123:THR:N	0.51	2.41	9	1
1:A:173:SER:O	1:A:175:VAL:N	0.51	2.43	4	4
1:A:153:PHE:CE1	1:A:162:GLY:O	0.51	2.63	3	1
2:B:163:SER:OG	2:B:167:MET:CE	0.51	2.58	13	4
1:A:98:GLU:OE1	1:A:170:ARG:CZ	0.51	2.59	7	1
1:A:144:THR:C	1:A:146:GLU:N	0.51	2.68	10	1
1:A:111:ASN:HD21	1:A:120:GLU:CG	0.51	2.18	4	2
1:A:68:LEU:O	1:A:72:PHE:N	0.51	2.41	14	2
1:A:153:PHE:C	1:A:155:LEU:N	0.51	2.68	7	2
1:A:138:LEU:CD2	1:A:148:ARG:NH2	0.51	2.73	2	2
1:A:103:TRP:CZ3	1:A:107:LEU:HD12	0.51	2.40	11	1
1:A:173:SER:OG	1:A:174:LYS:N	0.51	2.44	2	1
1:A:52:TYR:C	1:A:54:GLN:N	0.51	2.68	11	7
1:A:130:LYS:C	1:A:132:MET:H	0.51	2.14	11	1
1:A:68:LEU:HD21	1:A:72:PHE:CE1	0.51	2.41	15	1
1:A:11:ASP:OD1	1:A:11:ASP:C	0.51	2.53	2	2
1:A:131:MET:O	1:A:131:MET:SD	0.51	2.69	9	2
1:A:12:ASP:C	1:A:12:ASP:OD1	0.51	2.54	10	1
1:A:46:GLU:OE2	1:A:47:ASP:CA	0.51	2.58	12	1
1:A:90:SER:C	1:A:92:THR:N	0.51	2.68	15	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:88:VAL:C	1:A:90:SER:N	0.51	2.66	5	3
1:A:159:ASN:C	1:A:159:ASN:ND2	0.51	2.69	9	1
1:A:46:GLU:O	1:A:49:VAL:HG22	0.51	2.06	14	2
1:A:31:HIS:O	1:A:34:PHE:N	0.50	2.42	1	2
2:B:135:LEU:HD13	2:B:135:LEU:O	0.50	2.05	3	4
1:A:113:ASP:OD1	1:A:113:ASP:C	0.50	2.53	12	3
2:B:157:ALA:O	2:B:161:VAL:CG2	0.50	2.59	4	4
1:A:71:VAL:HG21	1:A:107:LEU:HA	0.50	1.83	10	1
1:A:138:LEU:CG	1:A:139:ASN:N	0.50	2.74	10	1
1:A:98:GLU:O	1:A:100:LYS:N	0.50	2.44	11	2
1:A:132:MET:CG	1:A:133:GLY:H	0.50	2.19	1	1
1:A:157:ASP:C	1:A:159:ASN:N	0.50	2.69	15	3
1:A:137:THR:C	1:A:139:ASN:N	0.50	2.68	6	2
1:A:158:LYS:O	1:A:159:ASN:ND2	0.50	2.44	13	2
1:A:75:ASP:O	1:A:76:ASN:ND2	0.50	2.44	12	1
2:B:126:GLN:O	2:B:130:ARG:N	0.50	2.38	13	1
1:A:162:GLY:O	1:A:163:TYR:CD1	0.50	2.64	7	1
1:A:107:LEU:O	1:A:107:LEU:HD23	0.50	2.06	12	2
1:A:62:GLU:C	1:A:62:GLU:OE1	0.50	2.54	12	1
1:A:111:ASN:HD21	1:A:113:ASP:CB	0.50	2.20	6	1
1:A:98:GLU:CD	1:A:170:ARG:CZ	0.50	2.84	7	1
1:A:63:ASP:CG	1:A:67:HIS:HE2	0.50	2.15	2	1
1:A:141:ASP:OD1	1:A:141:ASP:N	0.50	2.44	5	3
1:A:69:PHE:CD1	1:A:80:ILE:CD1	0.50	2.95	9	3
1:A:137:THR:O	1:A:139:ASN:ND2	0.50	2.44	4	2
1:A:39:PRO:O	1:A:41:GLY:N	0.50	2.44	6	1
1:A:165:THR:O	1:A:169:PHE:N	0.50	2.41	7	3
1:A:56:PHE:N	1:A:57:PRO:HD3	0.50	2.22	11	10
1:A:167:ASP:OD1	1:A:167:ASP:C	0.50	2.54	15	2
2:B:125:PHE:CD1	2:B:125:PHE:C	0.50	2.89	8	5
2:B:127:VAL:O	2:B:131:VAL:HG23	0.50	2.07	14	4
1:A:139:ASN:C	1:A:139:ASN:HD22	0.50	2.15	3	1
1:A:13:LEU:CD1	1:A:13:LEU:N	0.50	2.74	14	1
1:A:135:MET:SD	2:B:134:ASN:ND2	0.50	2.84	15	1
1:A:142:GLU:O	1:A:143:ALA:CB	0.50	2.60	2	2
1:A:76:ASN:OD1	1:A:77:ASN:ND2	0.50	2.45	7	1
1:A:57:PRO:C	1:A:59:GLY:H	0.50	2.13	8	1
1:A:64:PHE:CD1	1:A:67:HIS:CE1	0.50	3.00	11	1
1:A:97:LEU:C	1:A:99:GLU:N	0.50	2.70	1	4
1:A:81:HIS:CG	1:A:82:PHE:N	0.50	2.80	12	1
1:A:116:ILE:O	1:A:163:TYR:CB	0.49	2.60	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:157:ASP:C	1:A:159:ASN:ND2	0.49	2.70	14	3
1:A:103:TRP:CH2	1:A:107:LEU:HD12	0.49	2.42	7	2
1:A:108:TYR:O	1:A:110:LEU:N	0.49	2.43	7	1
1:A:110:LEU:N	1:A:110:LEU:HD22	0.49	2.22	9	1
1:A:38:CYS:SG	1:A:42:GLN:O	0.49	2.67	1	3
1:A:114:GLY:O	1:A:115:TYR:CD1	0.49	2.65	8	1
1:A:36:ARG:CA	1:A:36:ARG:NE	0.49	2.73	10	1
1:A:111:ASN:OD1	1:A:120:GLU:CD	0.49	2.56	12	5
1:A:54:GLN:CD	1:A:54:GLN:C	0.49	2.79	4	2
1:A:125:VAL:HG21	1:A:149:VAL:CG1	0.49	2.37	6	2
1:A:102:SER:OG	1:A:103:TRP:N	0.49	2.44	1	2
1:A:137:THR:C	1:A:139:ASN:H	0.49	2.16	6	1
1:A:135:MET:O	1:A:138:LEU:CD2	0.49	2.61	9	1
1:A:79:PHE:CD1	1:A:79:PHE:C	0.49	2.91	11	1
1:A:98:GLU:C	1:A:100:LYS:N	0.49	2.69	15	3
1:A:161:ASP:C	1:A:163:TYR:N	0.49	2.70	4	3
1:A:23:ASP:OD2	1:A:25:ARG:N	0.49	2.45	9	1
1:A:144:THR:C	1:A:146:GLU:H	0.49	2.16	10	1
1:A:118:PHE:N	1:A:153:PHE:CZ	0.49	2.80	15	1
1:A:38:CYS:C	1:A:40:SER:N	0.49	2.71	11	2
1:A:9:SER:C	1:A:11:ASP:N	0.49	2.71	7	1
1:A:108:TYR:CE2	1:A:121:MET:SD	0.49	3.06	5	2
1:A:141:ASP:O	1:A:143:ALA:N	0.49	2.46	9	1
1:A:88:VAL:O	1:A:89:LEU:C	0.49	2.56	6	12
1:A:132:MET:CG	1:A:133:GLY:N	0.49	2.76	1	1
1:A:159:ASN:N	1:A:159:ASN:HD22	0.49	2.05	4	2
2:B:161:VAL:O	2:B:165:MET:SD	0.49	2.70	7	3
1:A:134:SER:O	1:A:136:VAL:N	0.49	2.46	11	6
2:B:127:VAL:O	2:B:131:VAL:CG2	0.49	2.61	1	1
1:A:57:PRO:O	1:A:59:GLY:N	0.49	2.41	7	2
1:A:55:PHE:C	1:A:56:PHE:CG	0.49	2.91	1	5
1:A:134:SER:O	1:A:137:THR:N	0.49	2.43	2	1
1:A:13:LEU:O	1:A:13:LEU:HD23	0.49	2.08	4	2
1:A:145:PRO:C	1:A:147:MET:N	0.48	2.71	5	3
2:B:161:VAL:HG13	2:B:165:MET:HE2	0.48	1.85	7	1
1:A:122:LEU:HA	1:A:149:VAL:HG21	0.48	1.85	8	3
1:A:134:SER:C	1:A:136:VAL:H	0.48	2.16	8	3
1:A:60:SER:C	1:A:62:GLU:N	0.48	2.70	10	8
1:A:21:TYR:O	1:A:22:PHE:CD2	0.48	2.66	1	3
1:A:133:GLY:O	1:A:136:VAL:HG12	0.48	2.08	7	1
2:B:125:PHE:C	2:B:127:VAL:H	0.48	2.16	12	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:GLU:OE1	1:A:29:GLN:NE2	0.48	2.46	14	1
1:A:97:LEU:HD13	1:A:98:GLU:H	0.48	1.68	14	1
1:A:24:ARG:C	1:A:26:GLU:N	0.48	2.71	1	2
1:A:52:TYR:OH	1:A:68:LEU:HD22	0.48	2.08	3	1
1:A:159:ASN:O	1:A:160:GLU:CB	0.48	2.62	9	4
1:A:159:ASN:ND2	1:A:159:ASN:N	0.48	2.61	11	2
1:A:21:TYR:CE1	1:A:90:SER:HB2	0.48	2.44	7	1
1:A:166:LEU:O	1:A:169:PHE:N	0.48	2.47	9	1
1:A:64:PHE:C	1:A:66:ASN:H	0.48	2.16	11	1
1:A:152:ILE:O	1:A:156:MET:N	0.48	2.40	5	5
1:A:85:PHE:CZ	2:B:160:LEU:HD13	0.48	2.44	13	2
1:A:137:THR:O	1:A:138:LEU:C	0.48	2.55	11	11
1:A:157:ASP:OD1	1:A:168:GLU:OE2	0.48	2.32	5	1
2:B:162:LEU:O	2:B:166:ILE:CG1	0.48	2.61	12	1
1:A:117:THR:O	1:A:120:GLU:N	0.48	2.46	1	2
1:A:146:GLU:CG	1:A:147:MET:N	0.48	2.77	1	3
1:A:117:THR:OG1	1:A:120:GLU:OE2	0.48	2.32	6	4
2:B:127:VAL:HG13	2:B:128:ALA:H	0.48	1.69	10	2
1:A:173:SER:C	1:A:175:VAL:H	0.48	2.17	4	4
2:B:126:GLN:O	2:B:127:VAL:C	0.48	2.55	13	2
1:A:138:LEU:C	1:A:140:GLU:N	0.48	2.72	3	1
1:A:132:MET:O	1:A:134:SER:N	0.48	2.42	4	1
2:B:162:LEU:N	2:B:162:LEU:HD22	0.48	2.24	4	1
1:A:140:GLU:OE1	1:A:140:GLU:C	0.48	2.57	7	1
2:B:161:VAL:HA	2:B:165:MET:HE3	0.48	1.85	10	1
1:A:24:ARG:CD	1:A:24:ARG:N	0.48	2.73	11	1
1:A:165:THR:HG23	1:A:168:GLU:OE2	0.47	2.09	1	1
1:A:112:HIS:O	1:A:112:HIS:CD2	0.47	2.67	2	1
2:B:154:GLU:N	2:B:154:GLU:OE2	0.47	2.47	4	1
1:A:113:ASP:OD1	1:A:115:TYR:O	0.47	2.32	14	9
1:A:73:ASP:OD2	1:A:77:ASN:ND2	0.47	2.47	8	1
2:B:163:SER:O	2:B:164:SER:C	0.47	2.58	3	8
1:A:27:ILE:N	1:A:27:ILE:HD12	0.47	2.25	4	1
1:A:109:ASP:OD1	1:A:120:GLU:OE1	0.47	2.32	9	2
1:A:158:LYS:C	1:A:159:ASN:ND2	0.47	2.72	11	2
1:A:37:ASP:CG	1:A:38:CYS:N	0.47	2.72	13	1
2:B:157:ALA:N	2:B:158:PRO:HD2	0.47	2.24	11	14
1:A:13:LEU:O	1:A:14:THR:C	0.47	2.58	5	1
1:A:62:GLU:CG	1:A:63:ASP:N	0.47	2.78	12	2
1:A:100:LYS:O	1:A:102:SER:N	0.47	2.46	11	1
1:A:135:MET:HE1	2:B:134:ASN:ND2	0.47	2.23	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:37:ASP:CG	2:B:155:ASN:H	0.47	2.17	8	1
1:A:110:LEU:CD2	1:A:110:LEU:H	0.47	2.21	9	1
1:A:97:LEU:CD1	1:A:98:GLU:H	0.47	2.22	14	1
1:A:23:ASP:N	1:A:23:ASP:OD1	0.47	2.47	15	1
2:B:130:ARG:O	2:B:131:VAL:C	0.47	2.57	6	9
1:A:165:THR:O	1:A:166:LEU:C	0.47	2.56	4	9
2:B:132:LEU:C	2:B:132:LEU:CD2	0.47	2.88	5	1
1:A:75:ASP:CG	1:A:77:ASN:OD1	0.47	2.58	11	1
1:A:45:ARG:O	1:A:46:GLU:C	0.47	2.58	5	11
1:A:163:TYR:CD1	1:A:163:TYR:N	0.47	2.78	10	3
2:B:160:LEU:HD12	2:B:164:SER:OG	0.47	2.10	2	1
1:A:171:GLU:O	1:A:175:VAL:N	0.47	2.43	12	1
1:A:124:ILE:O	1:A:125:VAL:C	0.47	2.58	11	14
2:B:135:LEU:HD23	2:B:135:LEU:C	0.47	2.35	1	1
1:A:38:CYS:O	1:A:40:SER:N	0.47	2.46	3	1
2:B:160:LEU:O	2:B:164:SER:N	0.47	2.47	6	2
1:A:52:TYR:O	1:A:53:LYS:C	0.47	2.58	10	7
1:A:68:LEU:O	1:A:69:PHE:C	0.47	2.57	5	5
2:B:126:GLN:O	2:B:130:ARG:CG	0.47	2.63	5	1
2:B:158:PRO:O	2:B:159:ALA:C	0.47	2.58	6	1
1:A:28:GLN:O	1:A:31:HIS:ND1	0.47	2.48	9	2
1:A:141:ASP:O	1:A:142:GLU:C	0.47	2.58	11	1
1:A:75:ASP:OD2	1:A:77:ASN:CG	0.47	2.58	15	1
1:A:175:VAL:O	1:A:175:VAL:CG1	0.47	2.63	4	4
1:A:138:LEU:HD23	1:A:142:GLU:CB	0.47	2.40	3	1
2:B:161:VAL:O	2:B:165:MET:CG	0.47	2.63	11	2
1:A:129:TYR:CE2	1:A:135:MET:SD	0.47	3.08	5	1
1:A:142:GLU:OE1	1:A:142:GLU:C	0.47	2.58	7	1
1:A:152:ILE:HG23	1:A:156:MET:SD	0.47	2.49	7	1
1:A:57:PRO:C	1:A:59:GLY:N	0.47	2.72	8	1
2:B:157:ALA:N	2:B:158:PRO:CD	0.47	2.77	8	3
1:A:33:GLY:CA	2:B:155:ASN:HD21	0.47	2.23	11	1
1:A:96:THR:C	1:A:98:GLU:H	0.47	2.17	2	2
1:A:111:ASN:C	1:A:113:ASP:N	0.47	2.72	13	3
1:A:109:ASP:OD2	1:A:113:ASP:OD1	0.47	2.32	6	2
2:B:160:LEU:C	2:B:160:LEU:CD2	0.47	2.87	8	1
1:A:40:SER:OG	1:A:42:GLN:CG	0.47	2.63	12	1
1:A:159:ASN:HD22	1:A:160:GLU:H	0.47	1.48	12	1
1:A:27:ILE:HG23	1:A:28:GLN:N	0.47	2.25	15	1
1:A:47:ASP:O	1:A:48:PHE:C	0.47	2.56	9	13
1:A:152:ILE:O	1:A:153:PHE:C	0.47	2.58	4	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:HD12	0.47	2.23	14	2
1:A:121:MET:O	1:A:122:LEU:C	0.47	2.58	5	5
1:A:157:ASP:O	1:A:158:LYS:CB	0.47	2.62	6	1
2:B:161:VAL:O	2:B:162:LEU:C	0.47	2.57	14	1
2:B:163:SER:O	2:B:167:MET:CB	0.46	2.63	3	4
1:A:26:GLU:O	1:A:29:GLN:CB	0.46	2.63	15	6
2:B:135:LEU:C	2:B:135:LEU:CD2	0.46	2.89	8	2
1:A:74:LYS:O	1:A:75:ASP:C	0.46	2.56	7	1
1:A:153:PHE:CZ	1:A:164:ILE:CG2	0.46	2.98	9	1
1:A:111:ASN:CB	1:A:120:GLU:OE2	0.46	2.63	10	1
1:A:159:ASN:N	1:A:159:ASN:OD1	0.46	2.48	10	1
1:A:94:ARG:HH11	1:A:94:ARG:CG	0.46	2.23	1	1
1:A:144:THR:O	1:A:146:GLU:N	0.46	2.49	10	1
1:A:45:ARG:N	1:A:69:PHE:CE2	0.46	2.84	15	2
1:A:147:MET:C	1:A:149:VAL:N	0.46	2.70	4	2
2:B:134:ASN:ND2	2:B:134:ASN:N	0.46	2.62	7	1
1:A:37:ASP:OD1	1:A:37:ASP:C	0.46	2.59	9	2
1:A:60:SER:N	1:A:61:PRO:CD	0.46	2.78	7	7
2:B:136:GLN:O	2:B:137:THR:C	0.46	2.57	10	3
1:A:46:GLU:HG3	1:A:47:ASP:N	0.46	2.24	5	2
1:A:73:ASP:OD1	1:A:73:ASP:C	0.46	2.57	13	1
1:A:109:ASP:CG	1:A:111:ASN:ND2	0.46	2.72	13	1
1:A:111:ASN:O	1:A:112:HIS:C	0.46	2.57	1	6
1:A:27:ILE:HG22	1:A:28:GLN:N	0.46	2.26	3	1
1:A:118:PHE:O	1:A:119:ASP:C	0.46	2.58	3	3
1:A:142:GLU:C	1:A:142:GLU:CD	0.46	2.84	7	1
1:A:73:ASP:OD2	1:A:75:ASP:OD1	0.46	2.33	12	2
1:A:82:PHE:O	1:A:83:GLU:C	0.46	2.59	4	11
1:A:139:ASN:O	1:A:140:GLU:C	0.46	2.58	11	3
1:A:75:ASP:O	1:A:76:ASN:CG	0.46	2.59	2	2
1:A:37:ASP:O	1:A:38:CYS:CB	0.46	2.64	6	1
1:A:153:PHE:O	1:A:155:LEU:N	0.46	2.49	7	1
2:B:155:ASN:HD22	2:B:155:ASN:C	0.46	2.19	7	1
1:A:111:ASN:O	1:A:112:HIS:CG	0.46	2.69	14	2
1:A:31:HIS:CA	1:A:82:PHE:CZ	0.46	2.98	4	4
1:A:148:ARG:NH2	2:B:131:VAL:HG22	0.46	2.26	5	1
1:A:161:ASP:OD1	1:A:163:TYR:N	0.46	2.43	6	1
1:A:71:VAL:C	1:A:73:ASP:H	0.46	2.19	7	1
1:A:153:PHE:C	1:A:155:LEU:H	0.46	2.19	7	1
2:B:164:SER:O	2:B:165:MET:C	0.46	2.59	13	1
1:A:165:THR:H	1:A:168:GLU:CG	0.46	2.24	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:138:LEU:O	1:A:139:ASN:CG	0.46	2.59	3	2
1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:OD1	0.46	2.47	8	2
1:A:73:ASP:CG	1:A:74:LYS:N	0.46	2.74	9	1
2:B:134:ASN:O	2:B:135:LEU:C	0.46	2.59	8	10
1:A:73:ASP:OD1	1:A:84:GLU:OE2	0.46	2.34	13	1
1:A:115:TYR:CD2	1:A:165:THR:CG2	0.46	2.99	13	1
1:A:109:ASP:OD1	1:A:113:ASP:OD1	0.46	2.34	15	1
1:A:110:LEU:HD22	1:A:110:LEU:N	0.45	2.26	1	1
1:A:98:GLU:HG3	1:A:99:GLU:N	0.45	2.26	12	1
1:A:86:ILE:O	1:A:87:THR:C	0.45	2.59	13	10
1:A:124:ILE:HD13	1:A:124:ILE:N	0.45	2.25	3	1
1:A:105:PHE:C	1:A:105:PHE:CD1	0.45	2.93	4	1
1:A:157:ASP:OD2	1:A:162:GLY:C	0.45	2.59	12	1
1:A:13:LEU:CD1	1:A:13:LEU:H	0.45	2.21	13	1
1:A:45:ARG:CG	1:A:46:GLU:H	0.45	2.24	3	3
1:A:116:ILE:CG2	1:A:117:THR:N	0.45	2.78	12	11
1:A:22:PHE:O	1:A:23:ASP:CB	0.45	2.63	14	2
1:A:72:PHE:HB3	1:A:80:ILE:HD11	0.45	1.88	5	1
1:A:105:PHE:CE1	1:A:166:LEU:N	0.45	2.85	12	1
1:A:140:GLU:O	1:A:141:ASP:CB	0.45	2.63	14	1
1:A:29:GLN:HE21	1:A:29:GLN:C	0.45	2.19	15	1
1:A:57:PRO:O	1:A:58:PHE:C	0.45	2.60	13	6
1:A:159:ASN:HD22	1:A:160:GLU:N	0.45	2.10	3	1
1:A:69:PHE:CE1	1:A:80:ILE:CD1	0.45	3.00	9	1
1:A:142:GLU:CD	1:A:148:ARG:NH2	0.45	2.75	10	1
1:A:85:PHE:CZ	2:B:156:VAL:CG1	0.45	3.00	13	1
1:A:38:CYS:SG	1:A:42:GLN:N	0.45	2.89	14	1
1:A:61:PRO:O	1:A:62:GLU:C	0.45	2.60	7	10
1:A:90:SER:O	1:A:91:THR:C	0.45	2.59	7	8
1:A:75:ASP:O	1:A:76:ASN:C	0.45	2.59	12	6
1:A:82:PHE:CE2	1:A:86:ILE:HG13	0.45	2.46	6	1
1:A:141:ASP:O	1:A:142:GLU:CD	0.45	2.60	7	1
2:B:130:ARG:NH1	2:B:134:ASN:HD21	0.45	2.09	7	1
1:A:122:LEU:O	1:A:123:THR:C	0.45	2.60	12	7
1:A:148:ARG:HE	2:B:127:VAL:CG2	0.45	2.25	1	1
1:A:111:ASN:O	1:A:113:ASP:N	0.45	2.50	3	1
1:A:21:TYR:O	1:A:22:PHE:CB	0.45	2.63	5	1
1:A:113:ASP:OD1	1:A:113:ASP:N	0.45	2.49	15	3
1:A:119:ASP:N	1:A:119:ASP:OD1	0.45	2.49	5	1
1:A:157:ASP:CG	1:A:158:LYS:H	0.45	2.19	5	1
1:A:85:PHE:CZ	2:B:156:VAL:HG13	0.45	2.46	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:ARG:C	1:A:45:ARG:CD	0.45	2.90	14	1
1:A:43:LEU:HD12	1:A:47:ASP:CB	0.45	2.42	15	1
1:A:162:GLY:C	1:A:163:TYR:CG	0.45	2.94	13	2
1:A:73:ASP:OD1	1:A:75:ASP:CG	0.45	2.59	7	1
1:A:78:GLY:C	1:A:79:PHE:CG	0.45	2.94	12	2
1:A:111:ASN:CG	1:A:113:ASP:CG	0.45	2.84	13	1
1:A:45:ARG:HD2	1:A:46:GLU:N	0.45	2.27	14	1
1:A:147:MET:O	1:A:148:ARG:C	0.45	2.60	6	8
1:A:13:LEU:CD2	1:A:13:LEU:H	0.45	2.25	3	2
1:A:104:ALA:O	1:A:105:PHE:C	0.45	2.59	9	5
1:A:31:HIS:CE1	1:A:32:LYS:HG3	0.45	2.47	5	1
1:A:44:ALA:HB2	1:A:79:PHE:CD2	0.45	2.46	7	1
1:A:73:ASP:OD2	1:A:76:ASN:N	0.45	2.49	9	1
1:A:120:GLU:O	1:A:121:MET:C	0.45	2.60	8	4
1:A:149:VAL:O	1:A:150:LYS:C	0.45	2.60	7	6
1:A:169:PHE:O	1:A:170:ARG:C	0.45	2.60	4	1
1:A:88:VAL:O	1:A:90:SER:N	0.45	2.49	5	2
1:A:159:ASN:CG	1:A:160:GLU:N	0.45	2.74	5	1
1:A:12:ASP:OD1	1:A:13:LEU:N	0.45	2.50	8	1
1:A:159:ASN:ND2	1:A:161:ASP:CG	0.45	2.75	8	1
2:B:163:SER:OG	2:B:167:MET:HE3	0.45	2.12	9	1
1:A:21:TYR:O	1:A:23:ASP:N	0.45	2.50	13	1
1:A:26:GLU:O	1:A:27:ILE:C	0.45	2.59	5	13
1:A:27:ILE:N	1:A:27:ILE:CD1	0.45	2.80	4	1
1:A:60:SER:O	1:A:62:GLU:N	0.45	2.49	8	3
1:A:71:VAL:O	1:A:72:PHE:C	0.44	2.59	1	7
1:A:75:ASP:OD1	1:A:75:ASP:N	0.44	2.50	10	5
1:A:92:THR:HG22	1:A:92:THR:O	0.44	2.11	3	1
1:A:137:THR:O	1:A:139:ASN:CG	0.44	2.60	6	1
1:A:137:THR:O	1:A:139:ASN:N	0.44	2.50	6	1
2:B:127:VAL:CG1	2:B:128:ALA:H	0.44	2.24	10	3
1:A:62:GLU:O	1:A:63:ASP:C	0.44	2.59	7	5
1:A:171:GLU:O	1:A:172:GLY:C	0.44	2.60	12	5
1:A:51:ILE:CG2	2:B:161:VAL:HG23	0.44	2.42	2	1
1:A:85:PHE:CE2	2:B:156:VAL:HG13	0.44	2.47	12	4
1:A:146:GLU:CD	1:A:146:GLU:C	0.44	2.85	4	1
1:A:140:GLU:OE1	1:A:140:GLU:CA	0.44	2.64	7	1
1:A:56:PHE:C	1:A:58:PHE:N	0.44	2.76	9	1
2:B:135:LEU:HD23	2:B:135:LEU:O	0.44	2.11	10	1
2:B:131:VAL:O	2:B:132:LEU:C	0.44	2.60	6	4
1:A:81:HIS:O	1:A:82:PHE:C	0.44	2.59	6	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:THR:O	1:A:96:THR:CG2	0.44	2.65	7	1
1:A:134:SER:O	1:A:135:MET:C	0.44	2.61	10	3
1:A:151:LYS:O	1:A:152:ILE:C	0.44	2.61	11	5
1:A:86:ILE:HA	1:A:89:LEU:HD12	0.44	1.88	4	1
1:A:160:GLU:O	1:A:160:GLU:CD	0.44	2.61	5	2
1:A:66:ASN:ND2	1:A:66:ASN:C	0.44	2.75	13	1
1:A:117:THR:O	1:A:118:PHE:C	0.44	2.61	3	5
2:B:135:LEU:HG	2:B:136:GLN:N	0.44	2.27	2	1
1:A:73:ASP:OD1	1:A:80:ILE:CG1	0.44	2.66	5	1
1:A:148:ARG:CZ	2:B:131:VAL:CG2	0.44	2.95	5	1
1:A:111:ASN:OD1	1:A:111:ASN:N	0.44	2.50	8	1
1:A:26:GLU:CD	1:A:29:GLN:NE2	0.44	2.76	9	1
1:A:54:GLN:CD	1:A:54:GLN:O	0.44	2.61	10	1
1:A:55:PHE:C	1:A:56:PHE:CD2	0.44	2.95	3	3
1:A:170:ARG:O	1:A:171:GLU:C	0.44	2.61	4	1
1:A:106:GLU:O	1:A:109:ASP:N	0.44	2.50	11	2
1:A:47:ASP:O	1:A:50:LYS:CB	0.44	2.66	15	1
1:A:31:HIS:CE1	1:A:32:LYS:HG2	0.44	2.47	5	1
1:A:85:PHE:O	1:A:86:ILE:C	0.44	2.59	10	3
1:A:119:ASP:OD1	1:A:119:ASP:C	0.44	2.61	8	1
1:A:124:ILE:C	1:A:126:ALA:N	0.44	2.74	9	3
2:B:167:MET:O	2:B:168:SER:C	0.44	2.61	13	2
1:A:129:TYR:CD2	1:A:148:ARG:NH1	0.44	2.86	11	1
1:A:117:THR:H	1:A:120:GLU:CD	0.44	2.19	12	2
1:A:68:LEU:CD2	1:A:72:PHE:CD1	0.44	3.01	15	1
2:B:162:LEU:O	2:B:163:SER:C	0.44	2.60	2	1
1:A:129:TYR:CZ	1:A:143:ALA:O	0.44	2.71	3	1
1:A:67:HIS:CE1	1:A:123:THR:HG22	0.44	2.48	5	2
1:A:165:THR:HG22	1:A:166:LEU:N	0.44	2.28	6	1
1:A:11:ASP:N	1:A:11:ASP:OD1	0.44	2.46	8	1
1:A:64:PHE:CE2	1:A:68:LEU:CD1	0.44	3.00	8	1
1:A:131:MET:SD	1:A:131:MET:C	0.44	3.01	9	1
1:A:75:ASP:CG	1:A:77:ASN:CG	0.44	2.85	11	1
1:A:30:TRP:O	1:A:31:HIS:C	0.43	2.60	9	5
1:A:31:HIS:HA	1:A:82:PHE:CZ	0.43	2.48	4	1
1:A:174:LYS:O	1:A:175:VAL:C	0.43	2.61	6	5
1:A:10:LYS:O	1:A:11:ASP:C	0.43	2.61	9	1
1:A:142:GLU:OE1	1:A:142:GLU:CA	0.43	2.66	9	1
1:A:83:GLU:HG3	1:A:84:GLU:N	0.43	2.28	11	1
1:A:97:LEU:N	1:A:97:LEU:HD22	0.43	2.26	11	1
1:A:13:LEU:HD23	1:A:24:ARG:CG	0.43	2.43	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:ASP:O	1:A:13:LEU:C	0.43	2.61	8	2
1:A:119:ASP:O	1:A:120:GLU:C	0.43	2.61	3	2
1:A:161:ASP:CG	1:A:163:TYR:H	0.43	2.21	5	1
1:A:113:ASP:CG	1:A:115:TYR:O	0.43	2.61	6	2
2:B:163:SER:O	2:B:167:MET:CG	0.43	2.66	8	1
1:A:21:TYR:CE1	1:A:94:ARG:HB3	0.43	2.48	11	1
1:A:56:PHE:N	1:A:57:PRO:CD	0.43	2.82	11	1
1:A:82:PHE:CZ	1:A:86:ILE:HG13	0.43	2.48	11	1
1:A:32:LYS:HG3	1:A:33:GLY:N	0.43	2.28	1	1
1:A:105:PHE:CD1	1:A:105:PHE:C	0.43	2.95	2	1
1:A:98:GLU:O	1:A:99:GLU:C	0.43	2.61	5	4
1:A:117:THR:HG1	1:A:120:GLU:CD	0.43	2.20	7	2
2:B:126:GLN:OE1	2:B:126:GLN:C	0.43	2.61	9	1
1:A:35:LEU:N	1:A:35:LEU:HD23	0.43	2.29	11	2
1:A:34:PHE:O	1:A:35:LEU:C	0.43	2.62	1	1
2:B:160:LEU:HD12	2:B:160:LEU:C	0.43	2.39	2	1
2:B:160:LEU:O	2:B:164:SER:CB	0.43	2.66	4	1
2:B:166:ILE:O	2:B:167:MET:C	0.43	2.61	9	1
1:A:36:ARG:HE	1:A:36:ARG:N	0.43	2.11	10	1
1:A:140:GLU:O	1:A:142:GLU:CD	0.43	2.62	10	1
1:A:41:GLY:O	1:A:42:GLN:NE2	0.43	2.51	11	1
1:A:32:LYS:HG2	1:A:33:GLY:N	0.43	2.29	13	1
1:A:133:GLY:O	1:A:134:SER:C	0.43	2.61	1	5
2:B:166:ILE:C	2:B:168:SER:N	0.43	2.75	12	2
1:A:159:ASN:CG	1:A:160:GLU:H	0.43	2.21	5	1
1:A:166:LEU:O	1:A:167:ASP:C	0.43	2.61	6	3
2:B:127:VAL:O	2:B:128:ALA:C	0.43	2.61	7	2
1:A:73:ASP:OD1	1:A:75:ASP:OD1	0.43	2.36	11	1
1:A:146:GLU:OE1	1:A:150:LYS:NZ	0.43	2.50	15	1
1:A:165:THR:O	1:A:168:GLU:N	0.43	2.52	4	1
2:B:166:ILE:N	2:B:166:ILE:HD13	0.43	2.27	4	1
1:A:45:ARG:CD	1:A:46:GLU:N	0.43	2.82	14	1
1:A:44:ALA:O	1:A:45:ARG:C	0.43	2.61	15	3
1:A:105:PHE:CD2	1:A:116:ILE:HD11	0.43	2.49	2	1
2:B:134:ASN:OD1	2:B:134:ASN:C	0.43	2.61	2	1
1:A:73:ASP:OD2	1:A:75:ASP:CA	0.43	2.66	7	1
1:A:157:ASP:O	1:A:157:ASP:CG	0.43	2.60	11	1
1:A:157:ASP:CG	1:A:159:ASN:ND2	0.43	2.77	14	1
1:A:30:TRP:CD2	1:A:89:LEU:HD13	0.43	2.48	6	1
1:A:37:ASP:CG	2:B:155:ASN:N	0.43	2.76	8	1
1:A:41:GLY:O	1:A:42:GLN:CD	0.43	2.62	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:PHE:CZ	2:B:160:LEU:CD1	0.43	3.01	13	1
1:A:98:GLU:N	1:A:98:GLU:CD	0.43	2.74	15	1
1:A:30:TRP:CH2	2:B:159:ALA:HB1	0.43	2.49	7	3
1:A:115:TYR:N	1:A:115:TYR:CD1	0.43	2.87	4	1
2:B:134:ASN:O	2:B:137:THR:HG22	0.43	2.14	5	1
1:A:73:ASP:C	1:A:75:ASP:N	0.43	2.73	7	1
2:B:160:LEU:O	2:B:161:VAL:C	0.43	2.61	10	1
1:A:9:SER:HB2	1:A:31:HIS:CE1	0.43	2.48	11	1
1:A:148:ARG:CZ	2:B:127:VAL:CG2	0.43	2.97	12	1
1:A:140:GLU:O	1:A:141:ASP:CG	0.43	2.62	14	1
1:A:106:GLU:N	1:A:106:GLU:OE1	0.43	2.52	1	1
1:A:97:LEU:N	1:A:97:LEU:CD1	0.43	2.81	2	1
1:A:121:MET:O	1:A:123:THR:N	0.43	2.52	5	1
1:A:138:LEU:O	1:A:139:ASN:ND2	0.43	2.51	9	1
1:A:105:PHE:CZ	1:A:166:LEU:N	0.43	2.87	12	1
1:A:41:GLY:O	1:A:81:HIS:CD2	0.43	2.72	14	1
1:A:77:ASN:ND2	1:A:79:PHE:O	0.42	2.50	2	1
1:A:113:ASP:OD2	1:A:115:TYR:O	0.42	2.37	2	3
1:A:121:MET:HE2	1:A:152:ILE:HG21	0.42	1.90	8	1
1:A:55:PHE:CE1	2:B:161:VAL:HG11	0.42	2.48	10	1
1:A:76:ASN:O	1:A:76:ASN:CG	0.42	2.61	14	1
1:A:55:PHE:CD1	2:B:161:VAL:HG21	0.42	2.49	1	1
1:A:111:ASN:ND2	1:A:120:GLU:CD	0.42	2.77	1	2
1:A:44:ALA:C	1:A:69:PHE:CE1	0.42	2.97	2	1
1:A:51:ILE:HD11	2:B:156:VAL:CG1	0.42	2.44	15	2
1:A:141:ASP:OD1	1:A:141:ASP:C	0.42	2.62	4	1
1:A:125:VAL:HG21	1:A:149:VAL:HG22	0.42	1.90	5	1
2:B:134:ASN:N	2:B:134:ASN:HD22	0.42	2.12	7	1
1:A:9:SER:C	1:A:10:LYS:CG	0.42	2.92	15	1
1:A:159:ASN:O	1:A:160:GLU:C	0.42	2.60	4	2
2:B:159:ALA:O	2:B:163:SER:CB	0.42	2.67	5	1
1:A:77:ASN:HB2	1:A:79:PHE:CZ	0.42	2.50	14	1
1:A:24:ARG:C	1:A:26:GLU:H	0.42	2.21	1	1
1:A:97:LEU:HG	1:A:98:GLU:N	0.42	2.29	15	2
1:A:48:PHE:O	1:A:49:VAL:C	0.42	2.62	15	2
1:A:96:THR:O	1:A:97:LEU:C	0.42	2.62	5	1
1:A:64:PHE:O	1:A:65:ALA:C	0.42	2.61	6	2
1:A:128:VAL:O	1:A:129:TYR:C	0.42	2.62	9	1
1:A:89:LEU:CD2	2:B:160:LEU:HD12	0.42	2.44	10	1
1:A:97:LEU:O	1:A:98:GLU:C	0.42	2.61	15	1
1:A:153:PHE:CG	1:A:157:ASP:OD2	0.42	2.72	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:109:ASP:OD1	1:A:115:TYR:O	0.42	2.37	11	4
1:A:142:GLU:HG3	1:A:143:ALA:N	0.42	2.28	3	1
1:A:73:ASP:CG	1:A:75:ASP:OD1	0.42	2.63	7	1
2:B:130:ARG:NH1	2:B:134:ASN:ND2	0.42	2.67	7	1
1:A:149:VAL:CG2	1:A:150:LYS:N	0.42	2.82	11	1
1:A:22:PHE:O	1:A:23:ASP:CG	0.42	2.62	14	1
1:A:51:ILE:CG2	2:B:161:VAL:CG2	0.42	2.98	8	2
1:A:70:THR:O	1:A:76:ASN:ND2	0.42	2.52	5	1
1:A:14:THR:O	1:A:14:THR:HG22	0.42	2.14	6	1
1:A:171:GLU:C	1:A:173:SER:H	0.42	2.23	15	2
1:A:31:HIS:O	1:A:32:LYS:C	0.42	2.63	1	1
1:A:62:GLU:OE2	1:A:66:ASN:ND2	0.42	2.53	2	1
1:A:161:ASP:O	1:A:161:ASP:CG	0.42	2.62	4	1
1:A:30:TRP:O	1:A:34:PHE:N	0.42	2.52	5	2
2:B:125:PHE:O	2:B:126:GLN:C	0.42	2.61	12	3
1:A:44:ALA:HB2	1:A:79:PHE:CD1	0.42	2.50	2	1
2:B:134:ASN:C	2:B:134:ASN:ND2	0.42	2.76	4	1
1:A:111:ASN:OD1	1:A:113:ASP:OD2	0.42	2.38	10	1
1:A:31:HIS:N	1:A:82:PHE:CZ	0.42	2.88	4	1
1:A:25:ARG:NH1	1:A:25:ARG:CG	0.42	2.82	7	1
1:A:101:LEU:O	1:A:102:SER:C	0.42	2.61	10	3
2:B:154:GLU:CD	2:B:154:GLU:N	0.42	2.78	9	1
1:A:55:PHE:HB3	1:A:56:PHE:CE1	0.42	2.50	14	1
1:A:43:LEU:C	1:A:43:LEU:HD12	0.42	2.40	4	2
1:A:66:ASN:C	1:A:66:ASN:HD22	0.42	2.22	13	1
2:B:160:LEU:O	2:B:164:SER:OG	0.42	2.37	13	1
1:A:31:HIS:HA	1:A:82:PHE:CE1	0.41	2.50	6	1
1:A:62:GLU:HG3	1:A:63:ASP:N	0.41	2.30	9	2
1:A:142:GLU:CD	1:A:142:GLU:H	0.41	2.19	11	1
2:B:131:VAL:CG1	2:B:132:LEU:N	0.41	2.79	12	1
1:A:45:ARG:HG3	1:A:46:GLU:N	0.41	2.30	7	1
1:A:135:MET:SD	1:A:138:LEU:HD23	0.41	2.55	5	1
1:A:76:ASN:C	1:A:76:ASN:ND2	0.41	2.70	9	1
1:A:164:ILE:HG22	1:A:165:THR:N	0.41	2.29	10	1
1:A:100:LYS:C	1:A:102:SER:H	0.41	2.22	11	1
1:A:102:SER:O	1:A:103:TRP:C	0.41	2.63	11	1
2:B:129:ARG:O	2:B:133:ASN:CG	0.41	2.63	12	1
2:B:162:LEU:O	2:B:166:ILE:N	0.41	2.51	15	1
1:A:94:ARG:CG	1:A:94:ARG:NH1	0.41	2.83	1	1
2:B:132:LEU:O	2:B:133:ASN:C	0.41	2.63	5	1
1:A:30:TRP:CD1	1:A:30:TRP:N	0.41	2.88	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:129:TYR:CD1	1:A:135:MET:HE3	0.41	2.50	2	1
2:B:136:GLN:O	2:B:137:THR:CG2	0.41	2.69	6	1
1:A:43:LEU:HD12	1:A:47:ASP:HB2	0.41	1.91	7	1
1:A:24:ARG:H	1:A:24:ARG:HD3	0.41	1.71	11	1
1:A:46:GLU:O	1:A:47:ASP:C	0.41	2.61	2	1
1:A:105:PHE:CE2	1:A:116:ILE:CD1	0.41	3.04	6	2
1:A:107:LEU:C	1:A:109:ASP:N	0.41	2.76	2	1
1:A:96:THR:C	1:A:98:GLU:N	0.41	2.79	8	1
1:A:45:ARG:N	1:A:45:ARG:HD2	0.41	2.30	13	1
1:A:100:LYS:O	1:A:101:LEU:C	0.41	2.62	14	1
1:A:76:ASN:OD1	1:A:76:ASN:N	0.41	2.53	5	1
1:A:158:LYS:O	1:A:159:ASN:CG	0.41	2.64	7	1
1:A:24:ARG:O	1:A:25:ARG:C	0.41	2.62	11	1
1:A:83:GLU:O	1:A:87:THR:CG2	0.41	2.66	14	1
1:A:52:TYR:OH	1:A:68:LEU:CD2	0.41	2.69	1	1
1:A:138:LEU:HD21	1:A:148:ARG:NH2	0.41	2.31	2	1
2:B:125:PHE:CE1	2:B:126:GLN:HG2	0.41	2.51	3	1
1:A:147:MET:O	1:A:149:VAL:N	0.41	2.53	4	1
1:A:165:THR:OG1	1:A:166:LEU:N	0.41	2.53	4	1
1:A:68:LEU:C	1:A:70:THR:N	0.41	2.79	5	1
1:A:84:GLU:O	1:A:85:PHE:C	0.41	2.61	6	1
1:A:111:ASN:HD21	1:A:113:ASP:HB3	0.41	1.74	6	1
1:A:64:PHE:CE1	1:A:68:LEU:CD1	0.41	3.03	9	1
1:A:67:HIS:NE2	1:A:123:THR:HG22	0.41	2.31	12	1
1:A:118:PHE:HB3	1:A:153:PHE:CE2	0.41	2.50	15	1
1:A:44:ALA:HB2	1:A:79:PHE:CE1	0.41	2.51	2	1
1:A:72:PHE:CE2	1:A:88:VAL:HB	0.41	2.50	5	1
1:A:14:THR:O	1:A:14:THR:CG2	0.41	2.68	6	1
1:A:111:ASN:OD1	1:A:113:ASP:OD1	0.41	2.38	6	1
1:A:138:LEU:CD2	1:A:148:ARG:HH11	0.41	2.28	6	1
1:A:128:VAL:HG22	1:A:129:TYR:N	0.41	2.31	8	1
1:A:138:LEU:HG	1:A:139:ASN:N	0.41	2.31	9	1
1:A:157:ASP:OD2	1:A:158:LYS:N	0.41	2.54	9	1
1:A:52:TYR:C	1:A:54:GLN:H	0.41	2.24	11	1
1:A:88:VAL:CG1	1:A:103:TRP:NE1	0.41	2.83	11	1
2:B:155:ASN:H	2:B:155:ASN:ND2	0.41	2.11	13	1
1:A:165:THR:H	1:A:168:GLU:HG3	0.41	1.76	14	1
1:A:69:PHE:CD1	1:A:80:ILE:HD11	0.41	2.51	3	1
1:A:129:TYR:CG	1:A:135:MET:HG3	0.41	2.51	3	1
1:A:26:GLU:OE2	1:A:30:TRP:NE1	0.41	2.53	4	1
1:A:37:ASP:OD2	2:B:154:GLU:C	0.41	2.64	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:160:LEU:HG	2:B:161:VAL:N	0.40	2.31	2	1
1:A:46:GLU:O	1:A:49:VAL:HG12	0.40	2.16	5	1
2:B:136:GLN:C	2:B:137:THR:HG22	0.40	2.41	6	1
1:A:9:SER:O	1:A:10:LYS:CB	0.40	2.68	13	1
1:A:98:GLU:CD	1:A:170:ARG:NH1	0.40	2.79	2	1
1:A:153:PHE:O	1:A:154:LYS:C	0.40	2.64	4	1
1:A:54:GLN:O	1:A:54:GLN:NE2	0.40	2.54	6	1
1:A:153:PHE:CZ	1:A:164:ILE:HG22	0.40	2.51	9	1
1:A:158:LYS:H	1:A:158:LYS:HD2	0.40	1.75	1	1
2:B:133:ASN:O	2:B:134:ASN:C	0.40	2.64	1	1
1:A:46:GLU:CG	1:A:47:ASP:H	0.40	2.27	5	1
1:A:109:ASP:CG	1:A:113:ASP:OD1	0.40	2.64	6	1
1:A:152:ILE:C	1:A:154:LYS:N	0.40	2.77	6	1
2:B:136:GLN:C	2:B:137:THR:HG1	0.40	2.23	7	1
1:A:130:LYS:NZ	1:A:130:LYS:CB	0.40	2.85	14	1
2:B:126:GLN:NE2	2:B:130:ARG:HH12	0.40	2.14	14	1
1:A:52:TYR:O	1:A:56:PHE:N	0.40	2.53	15	1
1:A:118:PHE:CE2	1:A:119:ASP:OD2	0.40	2.74	2	1
1:A:117:THR:CB	1:A:120:GLU:OE2	0.40	2.70	4	1
1:A:132:MET:C	1:A:134:SER:N	0.40	2.79	4	1
1:A:73:ASP:O	1:A:74:LYS:C	0.40	2.63	7	1
2:B:160:LEU:O	2:B:160:LEU:HD23	0.40	2.16	8	1
1:A:97:LEU:N	1:A:97:LEU:HD13	0.40	2.31	10	1
1:A:86:ILE:HG22	1:A:87:THR:H	0.40	1.76	13	1
1:A:130:LYS:CB	1:A:130:LYS:NZ	0.40	2.84	13	1
1:A:140:GLU:CG	1:A:141:ASP:N	0.40	2.84	3	1
1:A:132:MET:C	1:A:134:SER:H	0.40	2.21	4	1
1:A:86:ILE:CG2	1:A:87:THR:H	0.40	2.27	7	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	161/190 (85%)	114±6 (71±4%)	36±5 (22±3%)	11±3 (7±2%)	2	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
2	B	29/52 (56%)	20±2 (69±7%)	8±2 (27±6%)	1±1 (5±4%)	3	25
All	All	2850/3630 (79%)	2009 (70%)	650 (23%)	191 (7%)	2	17

All 58 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
2	B	137	THR	12
1	A	143	ALA	10
1	A	23	ASP	9
1	A	24	ARG	7
1	A	9	SER	7
1	A	98	GLU	6
1	A	139	ASN	6
1	A	140	GLU	6
1	A	158	LYS	6
1	A	160	GLU	6
2	B	169	ALA	6
1	A	141	ASP	6
1	A	22	PHE	5
1	A	58	PHE	5
1	A	61	PRO	5
1	A	112	HIS	5
1	A	162	GLY	5
1	A	110	LEU	4
1	A	159	ASN	4
1	A	53	LYS	4
1	A	142	GLU	4
1	A	152	ILE	4
1	A	38	CYS	3
1	A	62	GLU	3
1	A	21	TYR	3
1	A	39	PRO	3
1	A	132	MET	3
1	A	72	PHE	3
1	A	25	ARG	2
1	A	95	GLY	2
1	A	41	GLY	2
1	A	76	ASN	2
1	A	174	LYS	2
1	A	91	THR	2
1	A	135	MET	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	146	GLU	2
1	A	93	SER	2
1	A	96	THR	2
1	A	161	ASP	2
1	A	94	ARG	1
1	A	57	PRO	1
1	A	122	LEU	1
1	A	175	VAL	1
1	A	37	ASP	1
1	A	40	SER	1
2	B	127	VAL	1
2	B	130	ARG	1
2	B	131	VAL	1
1	A	75	ASP	1
1	A	97	LEU	1
1	A	114	GLY	1
1	A	99	GLU	1
1	A	111	ASN	1
1	A	130	LYS	1
1	A	131	MET	1
1	A	133	GLY	1
1	A	74	LYS	1
1	A	172	GLY	1

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

In the following table, the Percentiles column shows the percent sidechain outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all NMR entries. The Analysed column shows the number of residues for which the sidechain conformation was analysed and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	147/171 (86%)	123±3 (84±2%)	24±3 (16±2%)	4	40
2	B	25/44 (57%)	21±2 (83±7%)	4±2 (17±7%)	4	39
All	All	2580/3225 (80%)	2161 (84%)	419 (16%)	4	40

All 124 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	107	LEU	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
2	B	137	THR	11
1	A	153	PHE	11
1	A	72	PHE	9
1	A	75	ASP	9
1	A	159	ASN	9
1	A	86	ILE	9
1	A	144	THR	8
1	A	165	THR	8
1	A	163	TYR	8
1	A	111	ASN	7
1	A	158	LYS	7
1	A	96	THR	7
1	A	31	HIS	7
1	A	90	SER	6
1	A	122	LEU	6
1	A	137	THR	6
1	A	142	GLU	6
1	A	174	LYS	6
1	A	37	ASP	6
1	A	97	LEU	6
1	A	134	SER	5
1	A	91	THR	5
2	B	130	ARG	5
2	B	167	MET	5
1	A	139	ASN	5
1	A	9	SER	5
1	A	151	LYS	5
1	A	110	LEU	5
1	A	24	ARG	4
1	A	32	LYS	4
1	A	38	CYS	4
1	A	77	ASN	4
2	B	160	LEU	4
1	A	25	ARG	4
1	A	70	THR	4
1	A	164	ILE	4
2	B	155	ASN	4
1	A	53	LYS	4
1	A	74	LYS	4
1	A	147	MET	4
1	A	135	MET	4
1	A	128	VAL	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	140	GLU	3
2	B	156	VAL	3
2	B	165	MET	3
1	A	11	ASP	3
1	A	94	ARG	3
1	A	148	ARG	3
1	A	152	ILE	3
2	B	135	LEU	3
1	A	149	VAL	3
2	B	132	LEU	3
2	B	154	GLU	3
1	A	36	ARG	3
1	A	47	ASP	3
1	A	127	SER	3
1	A	22	PHE	3
2	B	126	GLN	3
1	A	50	LYS	3
1	A	112	HIS	3
1	A	131	MET	3
1	A	42	GLN	3
1	A	66	ASN	3
1	A	123	THR	3
1	A	87	THR	3
1	A	138	LEU	3
1	A	130	LYS	3
1	A	23	ASP	2
1	A	58	PHE	2
1	A	129	TYR	2
1	A	136	VAL	2
2	B	166	ILE	2
1	A	27	ILE	2
1	A	79	PHE	2
1	A	156	MET	2
1	A	167	ASP	2
1	A	171	GLU	2
2	B	127	VAL	2
2	B	134	ASN	2
1	A	98	GLU	2
1	A	132	MET	2
1	A	141	ASP	2
1	A	154	LYS	2
1	A	99	GLU	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
2	B	129	ARG	2
1	A	26	GLU	2
1	A	13	LEU	2
2	B	125	PHE	2
1	A	55	PHE	2
1	A	89	LEU	2
1	A	45	ARG	2
1	A	81	HIS	2
2	B	163	SER	2
1	A	150	LYS	2
1	A	83	GLU	1
1	A	106	GLU	1
1	A	100	LYS	1
1	A	115	TYR	1
2	B	133	ASN	1
1	A	48	PHE	1
1	A	80	ILE	1
1	A	118	PHE	1
1	A	102	SER	1
1	A	161	ASP	1
1	A	21	TYR	1
1	A	63	ASP	1
1	A	92	THR	1
2	B	136	GLN	1
1	A	113	ASP	1
1	A	73	ASP	1
1	A	157	ASP	1
1	A	46	GLU	1
1	A	125	VAL	1
1	A	155	LEU	1
2	B	131	VAL	1
1	A	121	MET	1
1	A	35	LEU	1
1	A	160	GLU	1
1	A	168	GLU	1
1	A	10	LYS	1
1	A	29	GLN	1
1	A	69	PHE	1
1	A	146	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 3 ligands modelled in this entry, 3 are monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided