



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 26, 2026 – 07:42 AM UTC

PDB ID : 1LA3 / pdb_00001la3
Title : Solution structure of recoverin mutant, E85Q
Authors : Ames, J.B.; Hamasaki, N.; Molchanova, T.
Deposited on : 2002-03-27

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

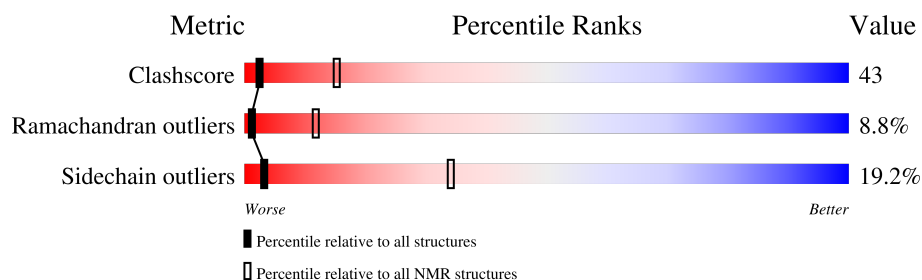
1 Overall quality at a glance

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

This entry contains 14 models. Model 14 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:2-A:75, A:79-A:96, A:101-A:161, A:165-A:189 (178)	1.27	14

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 3 clusters. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	4, 5, 7, 10, 11, 14
2	2, 3, 6, 8, 9, 12
3	1, 13

3 Entry composition [i](#)

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 3054 atoms, of which 1511 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Recoverin.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	188	Total	C	H	N	O	S	0
			3011	975	1484	247	302	3	

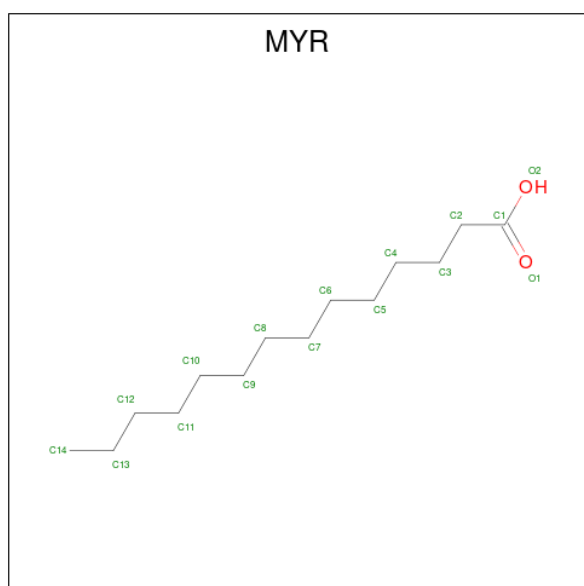
There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	85	GLN	GLU	engineered mutation	UNP P21457

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

Mol	Chain	Residues	Atoms	
2	A	1	Total	Ca
			1	1

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



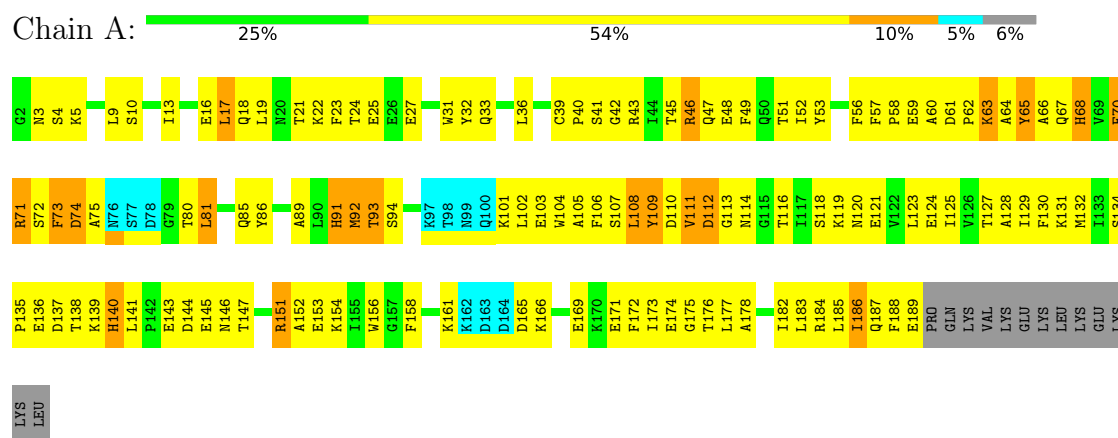
Mol	Chain	Residues	Atoms			
3	A	1	Total	C	H	O
			42	14	27	1

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic is the same as shown in the summary in section 1 of this report. The second graphic shows the sequence where residues are colour-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. Stretches of 2 or more consecutive residues without any outliers are shown as green connectors. Residues which are classified as ill-defined in the NMR ensemble, are shown in cyan with an underline colour-coded according to the previous scheme. Residues which were present in the experimental sample, but not modelled in the final structure are shown in grey.

- Molecule 1: Recoverin

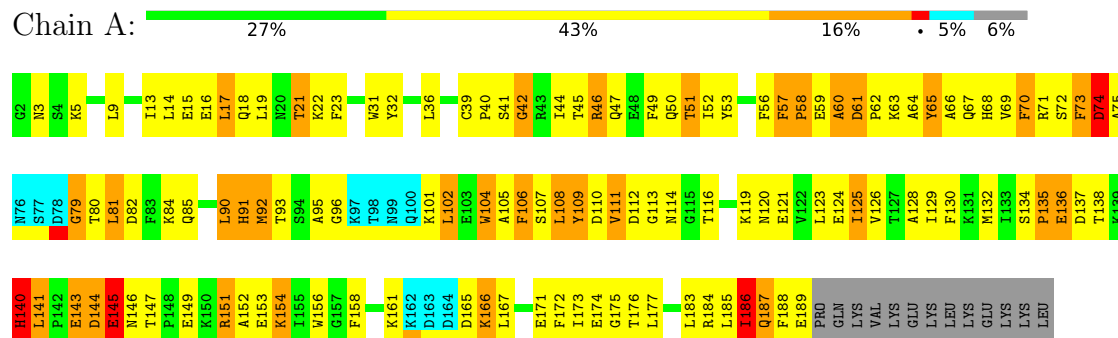


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

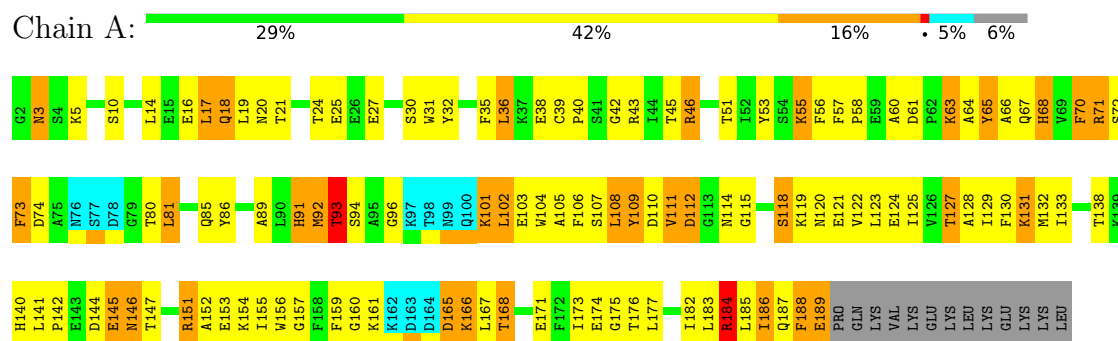
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Recoverin



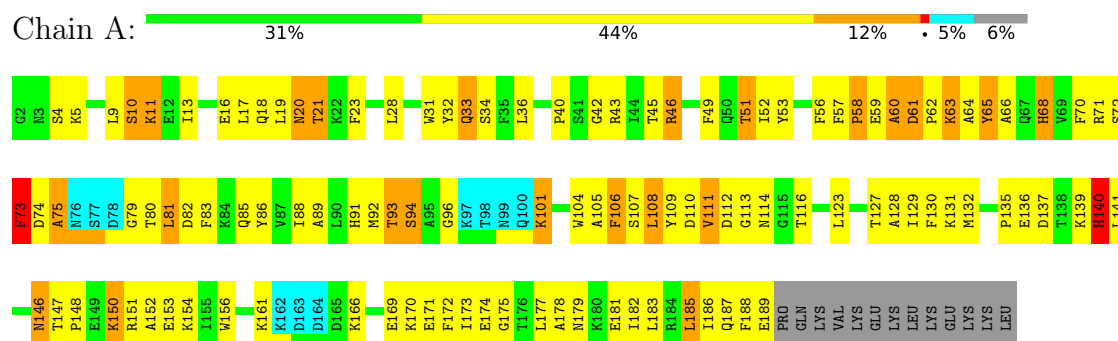
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Recoverin



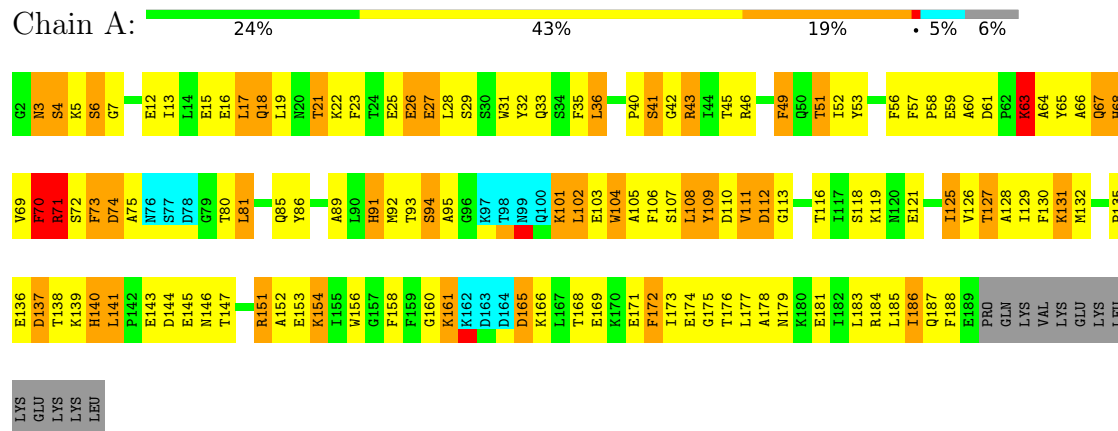
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Recoverin



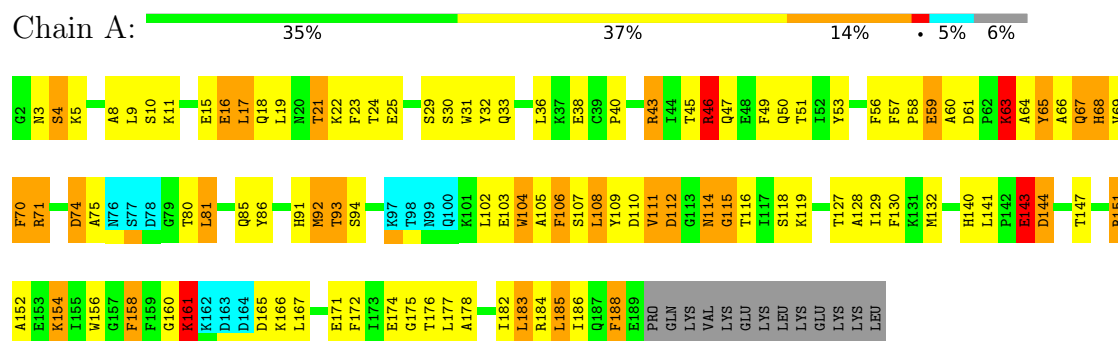
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Recoverin



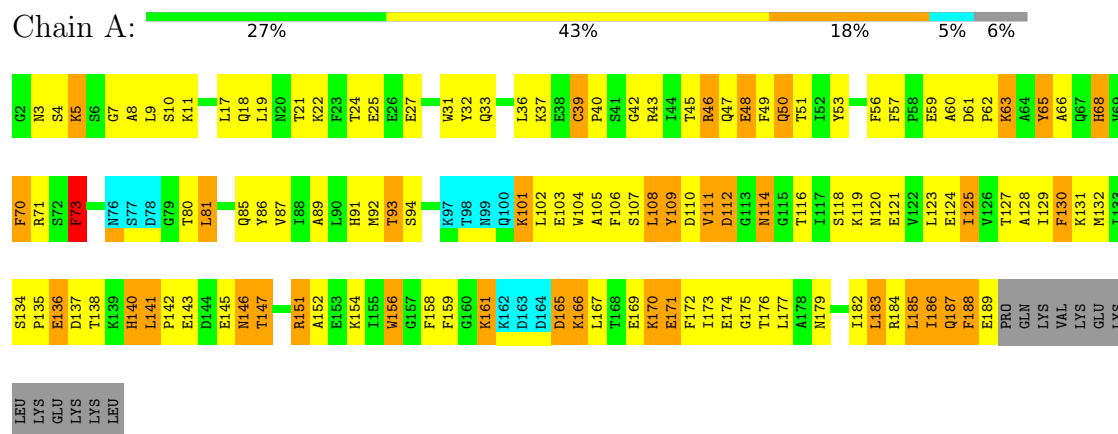
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Recoverin



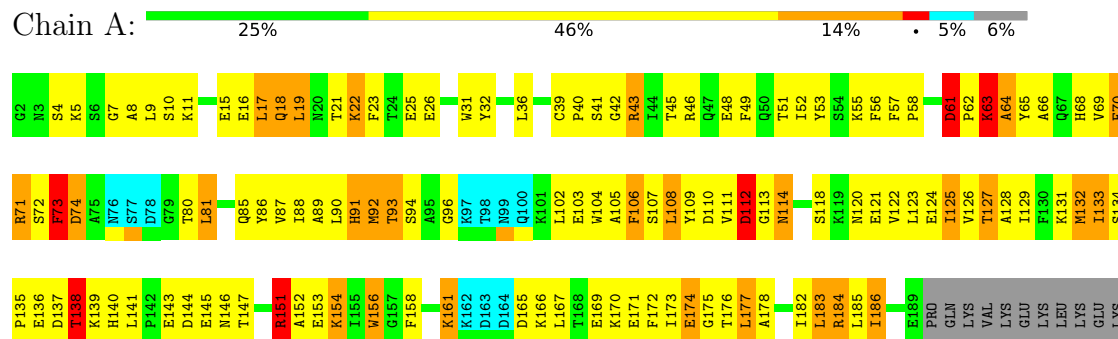
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Recoverin



4.2.13 Score per residue for model 13

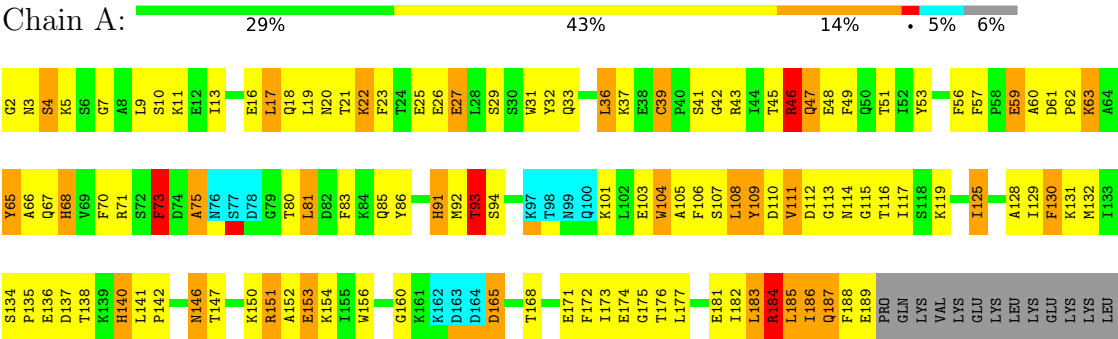
- Molecule 1: Recoverin



LYS
LEU

4.2.14 Score per residue for model 14 (medoid)

● Molecule 1: Recoverin



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 20 calculated structures, 14 were deposited, based on the following criterion: *The submitted conformer models are the 14 structures with lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	structure solution	3.1
X-PLOR	refinement	3.1

No chemical shift data was provided.

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

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	1.47±0.01	10±0/1480 (0.7± 0.0%)	1.46±0.01	14±1/1993 (0.7± 0.1%)
All	All	1.47	141/20720 (0.7%)	1.46	193/27902 (0.7%)

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	4.4±0.8
All	All	0	62

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	140	HIS	CG-ND1	-11.93	1.25	1.38	10	14
1	A	68	HIS	CG-ND1	-11.91	1.25	1.38	2	14
1	A	91	HIS	CG-ND1	-11.90	1.25	1.38	12	14
1	A	156	TRP	CG-CD2	-7.14	1.30	1.43	6	14
1	A	104	TRP	CG-CD2	-7.12	1.30	1.43	10	14
1	A	31	TRP	CG-CD2	-6.90	1.31	1.43	8	14
1	A	68	HIS	ND1-CE1	-5.86	1.26	1.32	2	14
1	A	91	HIS	ND1-CE1	-5.44	1.27	1.32	4	14
1	A	140	HIS	ND1-CE1	-5.43	1.27	1.32	4	14
1	A	79	GLY	N-CA	5.21	1.50	1.44	6	1
1	A	85	GLN	CD-NE2	-5.17	1.22	1.33	7	14

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	140	HIS	CE1-NE2-CD2	-7.56	101.44	109.00	13	14
1	A	68	HIS	CE1-NE2-CD2	-7.55	101.45	109.00	13	14
1	A	91	HIS	CE1-NE2-CD2	-7.53	101.47	109.00	4	14
1	A	156	TRP	NE1-CE2-CZ2	6.96	140.54	130.10	1	14
1	A	104	TRP	NE1-CE2-CZ2	6.80	140.31	130.10	13	14
1	A	31	TRP	NE1-CE2-CZ2	6.67	140.11	130.10	8	14
1	A	63	LYS	N-CA-C	-6.13	103.03	110.88	13	1
1	A	156	TRP	NE1-CE2-CD2	-5.95	99.66	107.40	6	14
1	A	104	TRP	NE1-CE2-CD2	-5.90	99.73	107.40	5	14
1	A	31	TRP	NE1-CE2-CD2	-5.82	99.83	107.40	8	14
1	A	73	PHE	CA-CB-CG	-5.74	108.06	113.80	9	3
1	A	114	ASN	CB-CA-C	-5.66	108.28	116.54	12	2
1	A	156	TRP	CG-CD2-CE3	-5.62	128.28	133.90	1	6
1	A	130	PHE	CA-CB-CG	-5.39	108.41	113.80	2	4
1	A	104	TRP	CG-CD2-CE3	-5.35	128.55	133.90	13	11
1	A	49	PHE	CA-CB-CG	-5.34	108.46	113.80	14	5
1	A	104	TRP	CG-CD1-NE1	-5.16	103.50	110.20	13	13
1	A	64	ALA	N-CA-C	5.15	117.36	109.95	13	1
1	A	156	TRP	CG-CD1-NE1	-5.13	103.53	110.20	11	11
1	A	75	ALA	CB-CA-C	-5.10	109.16	115.89	9	1
1	A	57	PHE	CA-CB-CG	-5.08	108.72	113.80	1	1
1	A	31	TRP	CG-CD1-NE1	-5.04	103.65	110.20	10	7
1	A	31	TRP	CG-CD2-CE3	-5.02	128.88	133.90	8	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	46	ARG	Sidechain	13
1	A	71	ARG	Sidechain	13
1	A	151	ARG	Sidechain	13
1	A	43	ARG	Sidechain	12
1	A	184	ARG	Sidechain	11

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	1447	1414	1415	126±15
3	A	15	27	27	0±0
All	All	20482	20174	20188	1758

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 43.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:ALA:HB1	1:A:132:MET:HE2	1.13	1.16	2	5
1:A:108:LEU:HD13	1:A:109:TYR:N	1.03	1.68	7	11
1:A:81:LEU:HD13	1:A:81:LEU:N	1.00	1.72	9	13
1:A:185:LEU:HD12	1:A:186:ILE:N	0.99	1.71	10	2
1:A:141:LEU:H	1:A:141:LEU:HD13	0.99	1.17	2	2
1:A:108:LEU:HD13	1:A:108:LEU:C	0.94	1.88	12	11
1:A:186:ILE:HG23	1:A:187:GLN:H	0.92	1.24	12	1
1:A:141:LEU:N	1:A:141:LEU:HD13	0.92	1.80	10	1
1:A:14:LEU:HD21	1:A:91:HIS:CE1	0.89	2.02	2	2
1:A:141:LEU:HD13	1:A:141:LEU:H	0.88	1.28	10	1
1:A:45:THR:HG22	1:A:80:THR:HG22	0.88	1.45	1	14
1:A:108:LEU:HD22	1:A:108:LEU:O	0.85	1.72	5	11
1:A:141:LEU:HD13	1:A:141:LEU:N	0.84	1.85	3	2
1:A:132:MET:N	1:A:132:MET:SD	0.83	2.50	13	1
1:A:158:PHE:CZ	1:A:159:PHE:CE2	0.82	2.67	3	1
1:A:53:TYR:CZ	1:A:66:ALA:HB3	0.81	2.09	1	12
1:A:177:LEU:C	1:A:177:LEU:HD13	0.81	2.01	9	2
1:A:183:LEU:HD12	1:A:183:LEU:C	0.80	2.00	11	1
1:A:141:LEU:N	1:A:142:PRO:CD	0.80	2.45	6	1
1:A:158:PHE:CE2	1:A:159:PHE:CE2	0.79	2.71	3	1
1:A:126:VAL:HG21	1:A:151:ARG:CZ	0.79	2.07	4	1
1:A:108:LEU:HD13	1:A:108:LEU:O	0.79	1.76	10	2
1:A:141:LEU:H	1:A:141:LEU:CD1	0.79	1.90	2	3
1:A:146:ASN:ND2	1:A:146:ASN:H	0.79	1.75	9	2
1:A:158:PHE:CE1	1:A:179:ASN:ND2	0.78	2.51	10	1
1:A:70:PHE:CE2	1:A:81:LEU:HD11	0.78	2.13	10	7
1:A:24:THR:HG22	1:A:25:GLU:H	0.77	1.38	3	2
1:A:140:HIS:ND1	1:A:141:LEU:N	0.77	2.33	9	1
1:A:53:TYR:CE1	1:A:66:ALA:CB	0.76	2.68	5	5
1:A:81:LEU:N	1:A:81:LEU:CD1	0.76	2.49	8	13
1:A:68:HIS:NE2	1:A:108:LEU:CD2	0.76	2.49	5	5
1:A:39:CYS:SG	1:A:42:GLY:N	0.76	2.59	4	3
1:A:53:TYR:OH	1:A:66:ALA:HB3	0.75	1.80	6	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:ALA:CB	1:A:132:MET:SD	0.75	2.75	13	1
1:A:146:ASN:HD22	1:A:146:ASN:N	0.75	1.80	12	1
1:A:188:PHE:CD1	1:A:188:PHE:N	0.74	2.53	7	6
1:A:161:LYS:HZ1	1:A:167:LEU:N	0.74	1.80	12	3
1:A:186:ILE:HG23	1:A:187:GLN:N	0.74	1.93	12	2
1:A:177:LEU:O	1:A:177:LEU:HD23	0.74	1.83	1	3
1:A:92:MET:SD	1:A:104:TRP:CD1	0.74	2.80	14	1
1:A:158:PHE:CD1	1:A:182:ILE:HD11	0.73	2.18	12	2
1:A:114:ASN:HD22	1:A:115:GLY:N	0.73	1.81	5	1
1:A:69:VAL:HG11	1:A:90:LEU:CD2	0.73	2.12	1	2
1:A:146:ASN:ND2	1:A:146:ASN:N	0.73	2.34	9	1
1:A:64:ALA:HB1	1:A:132:MET:N	0.72	1.97	4	9
1:A:161:LYS:NZ	1:A:167:LEU:N	0.72	2.36	12	2
1:A:70:PHE:C	1:A:70:PHE:CD1	0.72	2.67	5	13
1:A:49:PHE:CZ	1:A:86:TYR:CZ	0.72	2.77	10	1
1:A:151:ARG:NE	1:A:155:ILE:HD12	0.72	1.99	4	1
1:A:69:VAL:HG11	1:A:90:LEU:HD22	0.72	1.62	1	2
1:A:146:ASN:ND2	1:A:147:THR:HG23	0.71	2.00	12	1
1:A:36:LEU:N	1:A:36:LEU:CD1	0.71	2.53	13	13
1:A:53:TYR:CD2	1:A:67:GLN:NE2	0.71	2.59	6	1
1:A:161:LYS:NZ	1:A:166:LYS:C	0.71	2.49	7	2
1:A:114:ASN:ND2	1:A:116:THR:H	0.71	1.84	5	1
1:A:161:LYS:HZ1	1:A:167:LEU:CA	0.70	1.98	12	1
1:A:25:GLU:CD	1:A:26:GLU:N	0.70	2.50	3	2
1:A:53:TYR:OH	1:A:132:MET:HE1	0.70	1.87	2	3
1:A:118:SER:O	1:A:122:VAL:HG23	0.70	1.86	3	4
1:A:81:LEU:HD13	1:A:81:LEU:H	0.70	1.47	11	13
1:A:32:TYR:CZ	1:A:36:LEU:HD21	0.70	2.22	9	10
1:A:141:LEU:HD12	1:A:141:LEU:O	0.70	1.86	9	2
1:A:60:ALA:CB	1:A:132:MET:HE2	0.69	2.09	2	1
1:A:19:LEU:CD1	1:A:19:LEU:N	0.69	2.55	14	2
1:A:48:GLU:OE2	1:A:52:ILE:HD11	0.69	1.87	5	1
1:A:155:ILE:O	1:A:158:PHE:CD1	0.69	2.45	3	1
1:A:108:LEU:C	1:A:108:LEU:CD1	0.69	2.66	9	11
1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CD	0.69	2.50	8	1
1:A:50:GLN:HE22	1:A:63:LYS:NZ	0.68	1.85	2	1
1:A:21:THR:O	1:A:21:THR:HG23	0.68	1.89	13	3
1:A:120:ASN:ND2	1:A:121:GLU:H	0.68	1.86	3	1
1:A:109:TYR:CZ	1:A:187:GLN:NE2	0.68	2.61	12	1
1:A:158:PHE:CD1	1:A:159:PHE:N	0.68	2.62	3	1
1:A:32:TYR:CZ	1:A:36:LEU:CD2	0.68	2.77	13	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:103:GLU:N	1:A:103:GLU:CD	0.68	2.51	5	1
1:A:158:PHE:CE1	1:A:182:ILE:HD11	0.67	2.24	11	1
1:A:158:PHE:CE1	1:A:159:PHE:CD2	0.67	2.82	3	1
1:A:177:LEU:C	1:A:177:LEU:HD23	0.67	2.13	8	1
1:A:114:ASN:ND2	1:A:115:GLY:N	0.67	2.41	5	1
1:A:146:ASN:N	1:A:146:ASN:HD22	0.67	1.87	9	1
1:A:53:TYR:CE2	1:A:66:ALA:HB3	0.67	2.24	9	3
1:A:101:LYS:O	1:A:103:GLU:N	0.67	2.28	10	2
1:A:81:LEU:HD22	1:A:81:LEU:O	0.67	1.90	5	13
1:A:92:MET:C	1:A:93:THR:HG23	0.67	2.14	13	1
1:A:25:GLU:H	1:A:25:GLU:CD	0.66	1.97	12	3
1:A:183:LEU:HD22	1:A:183:LEU:N	0.65	2.05	1	1
1:A:112:ASP:CG	1:A:113:GLY:N	0.65	2.53	2	6
1:A:123:LEU:HD13	1:A:123:LEU:O	0.65	1.91	1	2
1:A:70:PHE:CZ	1:A:81:LEU:HD11	0.65	2.27	9	2
1:A:89:ALA:O	1:A:93:THR:HG23	0.65	1.91	7	5
1:A:19:LEU:HD12	1:A:19:LEU:N	0.65	2.07	8	1
1:A:67:GLN:NE2	1:A:67:GLN:C	0.65	2.55	11	2
1:A:183:LEU:O	1:A:183:LEU:HD12	0.65	1.92	14	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:57:PHE:CE1	0.64	2.27	6	4
1:A:61:ASP:C	1:A:63:LYS:H	0.64	2.00	7	8
1:A:169:GLU:H	1:A:169:GLU:CD	0.64	2.01	7	1
1:A:145:GLU:OE1	1:A:147:THR:N	0.64	2.31	8	1
1:A:32:TYR:CE2	1:A:36:LEU:HD21	0.64	2.27	14	4
1:A:64:ALA:O	1:A:128:ALA:HB1	0.64	1.92	10	5
1:A:138:THR:HA	1:A:141:LEU:HD11	0.64	1.67	10	1
1:A:141:LEU:CD1	1:A:141:LEU:N	0.64	2.59	13	1
1:A:102:LEU:O	1:A:105:ALA:HB3	0.64	1.93	7	3
1:A:140:HIS:ND1	1:A:140:HIS:C	0.64	2.55	9	2
1:A:72:SER:C	1:A:74:ASP:H	0.64	2.01	2	5
1:A:126:VAL:HG21	1:A:151:ARG:NH2	0.64	2.07	4	1
1:A:110:ASP:OD2	1:A:114:ASN:ND2	0.64	2.30	5	1
1:A:19:LEU:HD21	1:A:57:PHE:CE2	0.64	2.27	9	1
1:A:125:ILE:HD13	1:A:125:ILE:N	0.64	2.08	4	8
1:A:3:ASN:ND2	1:A:4:SER:H	0.64	1.91	7	1
1:A:19:LEU:HD21	1:A:57:PHE:CG	0.63	2.27	1	1
1:A:10:SER:OG	1:A:11:LYS:N	0.63	2.30	6	3
1:A:64:ALA:HB2	1:A:132:MET:HE2	0.63	1.68	13	1
1:A:110:ASP:OD2	1:A:114:ASN:N	0.63	2.32	13	7
1:A:53:TYR:CD2	1:A:67:GLN:CD	0.63	2.77	14	1
1:A:138:THR:O	1:A:141:LEU:HD11	0.63	1.94	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:ASP:OD1	1:A:112:ASP:N	0.63	2.31	11	2
1:A:19:LEU:HD21	1:A:57:PHE:CD2	0.63	2.29	1	2
1:A:3:ASN:ND2	1:A:6:SER:OG	0.63	2.32	10	1
1:A:183:LEU:C	1:A:183:LEU:CD1	0.63	2.70	11	1
1:A:9:LEU:O	1:A:13:ILE:HD12	0.63	1.94	14	4
1:A:53:TYR:OH	1:A:132:MET:HE3	0.63	1.94	9	2
1:A:88:ILE:CG2	1:A:92:MET:SD	0.63	2.87	4	2
1:A:69:VAL:HG22	1:A:108:LEU:HD21	0.63	1.71	13	1
1:A:3:ASN:ND2	1:A:3:ASN:N	0.62	2.45	8	2
1:A:123:LEU:C	1:A:123:LEU:HD13	0.62	2.19	8	1
1:A:169:GLU:N	1:A:169:GLU:OE1	0.62	2.32	9	2
1:A:86:TYR:C	1:A:86:TYR:CD1	0.62	2.77	14	6
1:A:146:ASN:HD22	1:A:146:ASN:H	0.62	1.28	12	1
1:A:127:THR:HG22	1:A:128:ALA:N	0.62	2.08	13	1
1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:CD1	0.62	2.62	8	1
1:A:67:GLN:C	1:A:67:GLN:HE21	0.62	2.01	11	3
1:A:46:ARG:NH2	1:A:50:GLN:NE2	0.62	2.47	7	1
1:A:112:ASP:OD1	1:A:113:GLY:N	0.62	2.32	1	5
1:A:21:THR:C	1:A:23:PHE:H	0.62	2.03	14	5
1:A:53:TYR:OH	1:A:132:MET:CE	0.62	2.48	6	10
1:A:3:ASN:HD22	1:A:3:ASN:N	0.62	1.93	10	1
1:A:27:GLU:CD	1:A:27:GLU:C	0.62	2.67	10	1
1:A:32:TYR:CE2	1:A:36:LEU:CD2	0.62	2.82	2	8
1:A:16:GLU:N	1:A:16:GLU:OE1	0.62	2.33	5	1
1:A:23:PHE:N	1:A:23:PHE:CD1	0.61	2.62	5	6
1:A:73:PHE:C	1:A:74:ASP:CG	0.61	2.68	1	3
1:A:89:ALA:O	1:A:93:THR:HG22	0.61	1.95	2	1
1:A:112:ASP:OD2	1:A:114:ASN:ND2	0.61	2.33	11	3
1:A:137:ASP:C	1:A:139:LYS:H	0.61	2.03	2	4
1:A:114:ASN:HD22	1:A:114:ASN:C	0.61	2.03	5	1
1:A:25:GLU:CD	1:A:25:GLU:H	0.61	2.00	8	1
1:A:35:PHE:CD2	1:A:36:LEU:CD1	0.61	2.83	3	1
1:A:158:PHE:CZ	1:A:159:PHE:CD2	0.61	2.89	3	1
1:A:10:SER:OG	1:A:91:HIS:NE2	0.61	2.33	8	1
1:A:49:PHE:CZ	1:A:86:TYR:CE1	0.61	2.89	10	1
1:A:186:ILE:CG2	1:A:187:GLN:H	0.61	2.04	12	1
1:A:120:ASN:CG	1:A:121:GLU:N	0.61	2.59	3	3
1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:HD12	0.61	2.09	12	2
1:A:107:SER:OG	1:A:108:LEU:N	0.61	2.34	10	3
1:A:32:TYR:CE1	1:A:36:LEU:CD2	0.61	2.84	11	1
1:A:46:ARG:NH1	1:A:71:ARG:HH21	0.60	1.93	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:102:LEU:HD23	1:A:173:ILE:HG23	0.60	1.73	13	1
1:A:16:GLU:C	1:A:18:GLN:H	0.60	2.04	1	10
1:A:141:LEU:N	1:A:141:LEU:CD1	0.60	2.54	10	3
1:A:19:LEU:CD2	1:A:57:PHE:CG	0.60	2.85	1	1
1:A:46:ARG:CZ	1:A:71:ARG:HH21	0.59	2.10	9	1
1:A:61:ASP:O	1:A:63:LYS:N	0.59	2.35	14	14
1:A:141:LEU:N	1:A:141:LEU:HD22	0.59	2.12	2	5
1:A:80:THR:C	1:A:81:LEU:HD13	0.59	2.21	1	12
1:A:186:ILE:CG2	1:A:187:GLN:N	0.59	2.65	12	3
1:A:101:LYS:H	1:A:101:LYS:CD	0.59	2.10	8	1
1:A:143:GLU:C	1:A:144:ASP:CG	0.59	2.70	11	1
1:A:92:MET:C	1:A:94:SER:H	0.59	2.06	12	7
1:A:92:MET:O	1:A:94:SER:N	0.59	2.35	11	9
1:A:123:LEU:HD13	1:A:123:LEU:C	0.59	2.22	1	1
1:A:143:GLU:C	1:A:145:GLU:H	0.59	2.06	10	3
1:A:53:TYR:CZ	1:A:66:ALA:CB	0.58	2.86	10	4
1:A:114:ASN:ND2	1:A:116:THR:OG1	0.58	2.37	1	3
1:A:147:THR:HG22	1:A:148:PRO:HD2	0.58	1.74	3	1
1:A:143:GLU:N	1:A:143:GLU:OE1	0.58	2.33	11	1
1:A:108:LEU:C	1:A:108:LEU:HD22	0.58	2.22	5	12
1:A:53:TYR:CE2	1:A:66:ALA:CB	0.58	2.85	2	1
1:A:74:ASP:O	1:A:75:ALA:HB3	0.58	1.98	6	3
1:A:16:GLU:C	1:A:18:GLN:N	0.58	2.60	11	11
1:A:151:ARG:HH12	1:A:185:LEU:CD1	0.58	2.11	12	1
1:A:17:LEU:C	1:A:19:LEU:H	0.58	2.06	13	1
1:A:110:ASP:OD1	1:A:113:GLY:N	0.58	2.33	4	2
1:A:17:LEU:HD23	1:A:17:LEU:O	0.58	1.99	2	2
1:A:65:TYR:CZ	1:A:69:VAL:CG2	0.58	2.87	13	1
1:A:36:LEU:N	1:A:36:LEU:HD12	0.57	2.13	13	3
1:A:141:LEU:HD23	1:A:146:ASN:ND2	0.57	2.14	3	1
1:A:88:ILE:HG22	1:A:92:MET:SD	0.57	2.39	13	2
1:A:40:PRO:C	1:A:42:GLY:H	0.57	2.08	10	2
1:A:23:PHE:CD2	1:A:27:GLU:OE2	0.57	2.58	14	1
1:A:25:GLU:OE1	1:A:26:GLU:N	0.57	2.37	3	2
1:A:161:LYS:HZ1	1:A:166:LYS:C	0.57	2.07	12	2
1:A:24:THR:HG22	1:A:25:GLU:N	0.57	2.14	11	2
1:A:138:THR:O	1:A:141:LEU:HD21	0.57	1.99	10	2
1:A:59:GLU:C	1:A:61:ASP:H	0.57	2.07	14	1
1:A:46:ARG:CG	1:A:47:GLN:N	0.57	2.68	2	1
1:A:185:LEU:C	1:A:187:GLN:H	0.57	2.08	5	3
1:A:36:LEU:CD1	1:A:36:LEU:N	0.57	2.67	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:ASP:CG	1:A:114:ASN:H	0.57	2.07	13	4
1:A:177:LEU:C	1:A:177:LEU:CD1	0.57	2.77	6	2
1:A:151:ARG:O	1:A:154:LYS:N	0.56	2.38	12	14
1:A:174:GLU:C	1:A:176:THR:N	0.56	2.62	13	13
1:A:141:LEU:H	1:A:142:PRO:HD3	0.56	1.60	6	1
1:A:59:GLU:C	1:A:61:ASP:N	0.56	2.62	14	1
1:A:137:ASP:C	1:A:139:LYS:N	0.56	2.62	13	5
1:A:82:ASP:N	1:A:82:ASP:OD1	0.56	2.36	9	2
1:A:141:LEU:H	1:A:142:PRO:CD	0.56	2.13	6	1
1:A:8:ALA:HB2	1:A:25:GLU:OE1	0.56	2.01	13	1
1:A:25:GLU:CD	1:A:25:GLU:N	0.56	2.64	12	1
1:A:145:GLU:OE1	1:A:145:GLU:C	0.56	2.48	8	1
1:A:50:GLN:C	1:A:50:GLN:HE21	0.56	2.08	12	1
1:A:144:ASP:N	1:A:144:ASP:OD1	0.56	2.38	11	1
1:A:92:MET:C	1:A:94:SER:N	0.56	2.63	14	7
1:A:161:LYS:HZ2	1:A:166:LYS:N	0.56	1.97	7	1
1:A:104:TRP:CE3	1:A:104:TRP:C	0.56	2.84	1	2
1:A:141:LEU:N	1:A:141:LEU:CD2	0.56	2.69	8	4
1:A:24:THR:HG23	1:A:27:GLU:H	0.55	1.61	12	1
1:A:50:GLN:C	1:A:50:GLN:NE2	0.55	2.64	12	1
1:A:127:THR:O	1:A:131:LYS:N	0.55	2.39	13	1
1:A:168:THR:OG1	1:A:171:GLU:CG	0.55	2.54	14	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:57:PHE:CD2	0.55	2.90	1	1
1:A:125:ILE:H	1:A:125:ILE:HD12	0.55	1.59	2	1
1:A:105:ALA:O	1:A:107:SER:N	0.55	2.39	3	13
1:A:50:GLN:NE2	1:A:63:LYS:NZ	0.55	2.53	2	1
1:A:185:LEU:CD1	1:A:186:ILE:N	0.55	2.61	10	1
1:A:56:PHE:O	1:A:57:PHE:CD1	0.55	2.58	13	9
1:A:50:GLN:CG	1:A:51:THR:N	0.55	2.68	3	1
1:A:53:TYR:CE1	1:A:57:PHE:CD2	0.55	2.94	10	1
1:A:93:THR:OG1	1:A:94:SER:N	0.55	2.39	11	3
1:A:21:THR:OG1	1:A:23:PHE:CD2	0.55	2.60	10	2
1:A:101:LYS:CG	1:A:102:LEU:H	0.55	2.14	10	1
1:A:106:PHE:CZ	1:A:115:GLY:O	0.55	2.60	11	1
1:A:91:HIS:C	1:A:93:THR:H	0.55	2.09	10	3
1:A:110:ASP:O	1:A:111:VAL:C	0.55	2.50	10	12
1:A:143:GLU:O	1:A:145:GLU:N	0.55	2.39	1	3
1:A:17:LEU:C	1:A:19:LEU:N	0.55	2.63	13	1
1:A:64:ALA:CA	1:A:132:MET:SD	0.55	2.95	13	1
1:A:105:ALA:C	1:A:107:SER:N	0.55	2.64	3	13
1:A:114:ASN:CG	1:A:116:THR:OG1	0.55	2.49	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:TYR:CE1	1:A:36:LEU:HD21	0.55	2.36	13	2
1:A:46:ARG:CZ	1:A:71:ARG:NH2	0.55	2.70	9	1
1:A:23:PHE:CG	1:A:27:GLU:OE2	0.55	2.60	14	1
1:A:24:THR:OG1	1:A:25:GLU:N	0.55	2.36	12	2
1:A:66:ALA:HB1	1:A:86:TYR:OH	0.55	2.02	6	2
1:A:101:LYS:CG	1:A:102:LEU:N	0.55	2.70	10	1
1:A:46:ARG:CD	1:A:47:GLN:N	0.55	2.70	11	1
1:A:183:LEU:N	1:A:183:LEU:CD2	0.55	2.69	1	1
1:A:65:TYR:CE1	1:A:69:VAL:CG2	0.55	2.90	13	1
1:A:68:HIS:NE2	1:A:125:ILE:CD1	0.54	2.70	6	2
1:A:187:GLN:C	1:A:189:GLU:N	0.54	2.63	3	2
1:A:101:LYS:CD	1:A:101:LYS:C	0.54	2.80	6	1
1:A:128:ALA:O	1:A:132:MET:SD	0.54	2.66	13	1
1:A:64:ALA:HB1	1:A:132:MET:CA	0.54	2.33	4	3
1:A:103:GLU:CD	1:A:104:TRP:H	0.54	2.09	5	1
1:A:3:ASN:HD22	1:A:4:SER:N	0.54	1.99	11	1
1:A:137:ASP:O	1:A:140:HIS:CD2	0.54	2.60	10	2
1:A:17:LEU:O	1:A:19:LEU:N	0.54	2.40	13	1
1:A:65:TYR:O	1:A:69:VAL:N	0.54	2.39	13	1
1:A:143:GLU:C	1:A:145:GLU:N	0.54	2.64	1	3
1:A:65:TYR:O	1:A:68:HIS:N	0.54	2.40	14	12
1:A:106:PHE:O	1:A:106:PHE:CD1	0.54	2.60	13	2
1:A:53:TYR:CD2	1:A:67:GLN:OE1	0.54	2.60	14	1
1:A:112:ASP:OD2	1:A:114:ASN:CG	0.54	2.51	4	2
1:A:156:TRP:CD1	1:A:161:LYS:O	0.54	2.61	5	1
1:A:182:ILE:C	1:A:184:ARG:N	0.54	2.65	6	5
1:A:161:LYS:HZ2	1:A:166:LYS:C	0.54	2.09	7	1
1:A:111:VAL:CG2	1:A:125:ILE:CD1	0.54	2.86	10	1
1:A:48:GLU:CG	1:A:49:PHE:N	0.54	2.71	12	1
1:A:8:ALA:HB2	1:A:25:GLU:CD	0.54	2.28	13	1
1:A:145:GLU:O	1:A:147:THR:N	0.54	2.41	6	1
1:A:2:GLY:C	1:A:3:ASN:HD22	0.54	2.11	14	1
1:A:174:GLU:O	1:A:176:THR:N	0.54	2.41	5	12
1:A:59:GLU:O	1:A:61:ASP:N	0.54	2.41	14	2
1:A:35:PHE:CE1	1:A:52:ILE:HD11	0.54	2.38	10	1
1:A:64:ALA:HA	1:A:132:MET:SD	0.54	2.43	13	1
1:A:155:ILE:HG23	1:A:186:ILE:HG22	0.53	1.79	5	1
1:A:69:VAL:C	1:A:71:ARG:N	0.53	2.65	10	4
1:A:92:MET:SD	1:A:92:MET:O	0.53	2.67	6	1
1:A:182:ILE:O	1:A:184:ARG:N	0.53	2.42	8	4
1:A:137:ASP:OD1	1:A:137:ASP:N	0.53	2.39	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:LEU:HD23	1:A:57:PHE:CD2	0.53	2.38	12	2
1:A:177:LEU:C	1:A:177:LEU:CD2	0.53	2.81	8	1
1:A:35:PHE:CZ	1:A:52:ILE:HD11	0.53	2.38	10	1
1:A:125:ILE:CD1	1:A:125:ILE:H	0.53	2.16	13	3
1:A:72:SER:C	1:A:74:ASP:N	0.53	2.65	2	5
1:A:40:PRO:O	1:A:42:GLY:N	0.53	2.41	1	3
1:A:73:PHE:O	1:A:74:ASP:CB	0.53	2.56	6	4
1:A:155:ILE:O	1:A:157:GLY:N	0.53	2.42	3	1
1:A:64:ALA:O	1:A:68:HIS:N	0.53	2.41	8	1
1:A:137:ASP:O	1:A:139:LYS:N	0.53	2.40	13	3
1:A:141:LEU:H	1:A:141:LEU:HD22	0.53	1.63	10	2
1:A:60:ALA:HB1	1:A:132:MET:CE	0.53	2.10	2	1
1:A:112:ASP:OD2	1:A:121:GLU:CD	0.53	2.52	10	2
1:A:25:GLU:OE1	1:A:25:GLU:C	0.53	2.52	14	1
1:A:91:HIS:O	1:A:93:THR:N	0.53	2.42	7	5
1:A:171:GLU:O	1:A:174:GLU:N	0.53	2.42	10	10
1:A:185:LEU:O	1:A:187:GLN:N	0.53	2.42	1	3
1:A:72:SER:O	1:A:74:ASP:N	0.53	2.42	5	4
1:A:91:HIS:C	1:A:93:THR:N	0.53	2.66	7	5
1:A:86:TYR:CD1	1:A:86:TYR:C	0.53	2.86	12	1
1:A:135:PRO:O	1:A:137:ASP:N	0.53	2.42	1	3
1:A:159:PHE:CE2	1:A:167:LEU:HD21	0.53	2.38	3	1
1:A:48:GLU:CD	1:A:48:GLU:C	0.53	2.77	5	1
1:A:33:GLN:HE21	3:A:1:MYR:C1	0.53	2.17	11	1
1:A:51:THR:HG22	1:A:52:ILE:N	0.52	2.17	7	7
1:A:189:GLU:CD	1:A:189:GLU:C	0.52	2.77	1	2
1:A:42:GLY:O	1:A:83:PHE:N	0.52	2.42	9	3
1:A:136:GLU:CG	1:A:137:ASP:N	0.52	2.72	13	1
1:A:61:ASP:C	1:A:63:LYS:N	0.52	2.68	1	8
1:A:60:ALA:O	1:A:61:ASP:C	0.52	2.51	5	10
1:A:141:LEU:N	1:A:142:PRO:HD2	0.52	2.15	6	1
1:A:40:PRO:C	1:A:42:GLY:N	0.52	2.64	10	2
1:A:24:THR:OG1	1:A:25:GLU:CD	0.52	2.53	12	1
1:A:110:ASP:O	1:A:112:ASP:N	0.52	2.43	10	2
1:A:187:GLN:O	1:A:189:GLU:N	0.52	2.42	3	3
1:A:5:LYS:C	1:A:7:GLY:N	0.52	2.66	7	5
1:A:138:THR:CG2	1:A:146:ASN:ND2	0.52	2.72	14	1
1:A:50:GLN:HE22	1:A:63:LYS:HZ1	0.52	1.43	2	1
1:A:9:LEU:HD12	1:A:9:LEU:N	0.52	2.19	3	1
1:A:141:LEU:N	1:A:141:LEU:HD12	0.52	2.19	13	1
1:A:21:THR:C	1:A:23:PHE:N	0.52	2.66	14	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:171:GLU:O	1:A:175:GLY:N	0.52	2.41	11	2
1:A:102:LEU:O	1:A:105:ALA:N	0.52	2.41	13	2
1:A:50:GLN:HE21	1:A:51:THR:N	0.52	2.03	12	1
1:A:92:MET:SD	1:A:104:TRP:NE1	0.52	2.82	14	1
1:A:67:GLN:O	1:A:67:GLN:NE2	0.52	2.43	4	1
1:A:141:LEU:HD12	1:A:141:LEU:C	0.52	2.30	9	2
1:A:144:ASP:C	1:A:145:GLU:CG	0.52	2.83	5	1
1:A:120:ASN:N	1:A:120:ASN:OD1	0.52	2.43	6	1
1:A:185:LEU:C	1:A:187:GLN:N	0.52	2.65	1	3
1:A:171:GLU:O	1:A:173:ILE:N	0.52	2.42	10	5
1:A:21:THR:OG1	1:A:23:PHE:CG	0.52	2.62	10	1
1:A:181:GLU:N	1:A:181:GLU:CD	0.52	2.67	14	1
1:A:174:GLU:O	1:A:177:LEU:N	0.52	2.42	3	13
1:A:105:ALA:C	1:A:107:SER:H	0.52	2.13	3	11
1:A:143:GLU:O	1:A:144:ASP:CB	0.52	2.57	2	3
1:A:58:PRO:C	1:A:60:ALA:H	0.52	2.11	8	2
1:A:140:HIS:CG	1:A:141:LEU:N	0.52	2.78	9	1
1:A:39:CYS:SG	1:A:43:ARG:O	0.52	2.68	13	1
1:A:2:GLY:O	1:A:3:ASN:ND2	0.52	2.43	14	1
1:A:182:ILE:C	1:A:184:ARG:H	0.52	2.13	6	2
1:A:21:THR:O	1:A:23:PHE:N	0.52	2.43	14	6
1:A:171:GLU:C	1:A:173:ILE:N	0.52	2.63	4	11
1:A:17:LEU:O	1:A:18:GLN:CB	0.51	2.57	4	6
1:A:3:ASN:CG	1:A:4:SER:N	0.51	2.68	7	1
1:A:73:PHE:CE1	1:A:89:ALA:HB2	0.51	2.41	12	1
1:A:125:ILE:HG21	1:A:187:GLN:NE2	0.51	2.21	12	1
1:A:70:PHE:CE1	1:A:81:LEU:HD11	0.51	2.40	14	1
1:A:151:ARG:C	1:A:153:GLU:N	0.51	2.65	9	7
1:A:12:GLU:CD	1:A:12:GLU:C	0.51	2.78	5	1
1:A:58:PRO:C	1:A:60:ALA:N	0.51	2.67	6	2
1:A:188:PHE:O	1:A:188:PHE:CD2	0.51	2.64	1	1
1:A:159:PHE:C	1:A:161:LYS:H	0.51	2.14	7	1
1:A:16:GLU:O	1:A:18:GLN:N	0.51	2.44	11	7
1:A:186:ILE:C	1:A:188:PHE:H	0.51	2.13	9	1
1:A:64:ALA:HB2	1:A:132:MET:CE	0.51	2.34	13	1
1:A:35:PHE:CD1	1:A:35:PHE:O	0.51	2.64	3	3
1:A:130:PHE:CZ	1:A:138:THR:CG2	0.51	2.94	8	1
1:A:81:LEU:HD22	1:A:81:LEU:C	0.51	2.31	3	9
1:A:145:GLU:C	1:A:147:THR:H	0.51	2.13	6	1
1:A:151:ARG:NH1	1:A:185:LEU:CD1	0.51	2.74	12	1
1:A:141:LEU:H	1:A:141:LEU:CD2	0.51	2.19	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:169:GLU:CD	1:A:169:GLU:N	0.51	2.68	7	1
1:A:143:GLU:CD	1:A:143:GLU:N	0.51	2.69	1	1
1:A:169:GLU:O	1:A:173:ILE:CD1	0.51	2.59	2	1
1:A:32:TYR:CD1	3:A:1:MYR:C6	0.51	2.94	3	1
1:A:115:GLY:O	1:A:168:THR:HG22	0.51	2.06	8	1
1:A:11:LYS:O	1:A:15:GLU:N	0.51	2.43	13	2
1:A:134:SER:O	1:A:138:THR:N	0.50	2.44	1	2
1:A:161:LYS:NZ	1:A:167:LEU:HD13	0.50	2.22	1	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:57:PHE:CD1	0.50	2.42	8	2
1:A:158:PHE:CZ	1:A:179:ASN:CG	0.50	2.89	10	1
1:A:133:ILE:HG22	1:A:138:THR:OG1	0.50	2.07	3	1
1:A:21:THR:O	1:A:23:PHE:CD1	0.50	2.64	10	2
1:A:49:PHE:CD2	1:A:70:PHE:CD2	0.50	3.00	5	3
1:A:70:PHE:CD1	1:A:70:PHE:O	0.50	2.64	4	4
1:A:172:PHE:C	1:A:172:PHE:CD1	0.50	2.89	7	1
1:A:175:GLY:O	1:A:182:ILE:HD12	0.50	2.07	9	1
1:A:106:PHE:CE2	1:A:110:ASP:CG	0.50	2.89	10	1
1:A:179:ASN:HD22	1:A:179:ASN:N	0.50	2.04	12	1
1:A:155:ILE:O	1:A:158:PHE:N	0.50	2.39	3	1
1:A:103:GLU:CD	1:A:103:GLU:H	0.50	2.14	5	1
1:A:5:LYS:O	1:A:7:GLY:N	0.50	2.45	7	3
1:A:186:ILE:O	1:A:188:PHE:N	0.50	2.44	10	1
1:A:56:PHE:C	1:A:57:PHE:CG	0.50	2.90	10	5
1:A:127:THR:O	1:A:128:ALA:C	0.50	2.55	13	3
1:A:140:HIS:CD2	1:A:140:HIS:N	0.50	2.79	6	1
1:A:20:ASN:HD22	1:A:20:ASN:N	0.50	2.05	9	1
1:A:14:LEU:HD11	1:A:91:HIS:NE2	0.50	2.22	1	2
1:A:68:HIS:CE1	1:A:125:ILE:CD1	0.50	2.95	5	1
1:A:65:TYR:CD2	1:A:66:ALA:N	0.50	2.80	9	1
1:A:161:LYS:HZ2	1:A:166:LYS:CA	0.50	2.19	7	1
1:A:177:LEU:HD23	1:A:177:LEU:O	0.50	2.07	8	1
1:A:35:PHE:CZ	1:A:52:ILE:CD1	0.50	2.95	10	1
1:A:92:MET:C	1:A:93:THR:CG2	0.50	2.83	13	1
1:A:187:GLN:C	1:A:189:GLU:H	0.50	2.15	3	2
1:A:70:PHE:CE1	1:A:75:ALA:CB	0.50	2.94	11	1
1:A:141:LEU:HD23	1:A:146:ASN:HD22	0.49	1.66	3	1
1:A:161:LYS:HD3	1:A:167:LEU:HD13	0.49	1.84	8	1
1:A:183:LEU:HD12	1:A:183:LEU:O	0.49	2.06	11	1
1:A:65:TYR:O	1:A:66:ALA:C	0.49	2.55	7	13
1:A:135:PRO:C	1:A:137:ASP:N	0.49	2.67	12	4
1:A:108:LEU:C	1:A:110:ASP:N	0.49	2.68	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:172:PHE:O	1:A:176:THR:HG23	0.49	2.08	2	1
1:A:107:SER:C	1:A:109:TYR:H	0.49	2.16	10	1
1:A:128:ALA:O	1:A:129:ILE:C	0.49	2.56	2	14
1:A:19:LEU:HD23	1:A:57:PHE:CZ	0.49	2.42	6	3
1:A:89:ALA:O	1:A:93:THR:CG2	0.49	2.60	2	2
1:A:183:LEU:O	1:A:183:LEU:CD1	0.49	2.60	14	1
1:A:58:PRO:O	1:A:60:ALA:N	0.49	2.43	5	4
1:A:53:TYR:CE1	1:A:66:ALA:HB3	0.49	2.43	14	7
1:A:35:PHE:CZ	1:A:52:ILE:HD13	0.49	2.43	6	1
1:A:175:GLY:O	1:A:179:ASN:ND2	0.49	2.46	10	1
1:A:106:PHE:CD1	1:A:106:PHE:C	0.49	2.90	13	1
1:A:4:SER:O	1:A:7:GLY:N	0.49	2.45	10	2
1:A:14:LEU:CG	1:A:91:HIS:NE2	0.49	2.76	2	1
1:A:74:ASP:O	1:A:74:ASP:CG	0.49	2.56	5	1
1:A:132:MET:O	1:A:134:SER:N	0.49	2.45	13	2
1:A:188:PHE:O	1:A:189:GLU:CB	0.49	2.61	8	1
1:A:35:PHE:CD1	1:A:35:PHE:C	0.48	2.87	3	3
1:A:125:ILE:CG2	1:A:187:GLN:NE2	0.48	2.76	12	1
1:A:125:ILE:H	1:A:125:ILE:HD13	0.48	1.68	13	1
1:A:103:GLU:CG	1:A:104:TRP:N	0.48	2.76	5	1
1:A:110:ASP:O	1:A:113:GLY:N	0.48	2.46	10	2
1:A:46:ARG:CG	1:A:47:GLN:H	0.48	2.21	2	1
1:A:155:ILE:C	1:A:157:GLY:N	0.48	2.71	3	3
1:A:187:GLN:C	1:A:188:PHE:CG	0.48	2.88	7	1
1:A:29:SER:OG	1:A:30:SER:N	0.48	2.45	4	2
1:A:101:LYS:CD	1:A:101:LYS:N	0.48	2.76	8	1
1:A:106:PHE:O	1:A:110:ASP:N	0.48	2.46	10	1
1:A:32:TYR:CE1	1:A:36:LEU:HD22	0.48	2.43	11	1
1:A:138:THR:O	1:A:141:LEU:CD1	0.48	2.60	5	1
1:A:74:ASP:OD2	1:A:75:ALA:N	0.48	2.47	7	1
1:A:118:SER:OG	1:A:119:LYS:N	0.48	2.45	11	2
1:A:21:THR:O	1:A:21:THR:CG2	0.48	2.60	7	3
1:A:69:VAL:O	1:A:71:ARG:N	0.48	2.46	10	1
1:A:65:TYR:HA	1:A:128:ALA:HB1	0.48	1.86	13	1
1:A:158:PHE:CE2	1:A:185:LEU:CD2	0.48	2.96	5	1
1:A:60:ALA:HB1	1:A:132:MET:SD	0.48	2.49	5	1
1:A:28:LEU:CD2	1:A:56:PHE:CE2	0.48	2.97	9	1
1:A:146:ASN:O	1:A:146:ASN:ND2	0.48	2.46	13	1
1:A:159:PHE:CD1	1:A:159:PHE:N	0.48	2.81	4	1
1:A:184:ARG:C	1:A:184:ARG:CD	0.48	2.87	8	1
1:A:48:GLU:HG2	1:A:49:PHE:N	0.48	2.23	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:126:VAL:HA	1:A:129:ILE:HD12	0.48	1.85	4	1
1:A:132:MET:HE3	1:A:132:MET:HA	0.48	1.86	13	1
1:A:5:LYS:C	1:A:7:GLY:H	0.47	2.17	14	3
1:A:174:GLU:C	1:A:176:THR:H	0.47	2.17	4	8
1:A:68:HIS:NE2	1:A:125:ILE:HD13	0.47	2.25	6	2
1:A:58:PRO:O	1:A:59:GLU:C	0.47	2.57	9	5
1:A:145:GLU:C	1:A:147:THR:N	0.47	2.71	6	1
1:A:145:GLU:O	1:A:146:ASN:CB	0.47	2.61	8	1
1:A:65:TYR:OH	1:A:93:THR:HG21	0.47	2.09	13	2
1:A:185:LEU:HD12	1:A:185:LEU:N	0.47	2.25	1	1
1:A:103:GLU:OE2	1:A:104:TRP:N	0.47	2.36	5	1
1:A:46:ARG:CD	1:A:71:ARG:NH2	0.47	2.77	9	1
1:A:185:LEU:HD12	1:A:185:LEU:C	0.47	2.30	10	1
1:A:110:ASP:C	1:A:112:ASP:N	0.47	2.72	2	1
1:A:187:GLN:HG2	1:A:188:PHE:N	0.47	2.25	12	1
1:A:132:MET:N	1:A:132:MET:CE	0.47	2.77	13	1
1:A:2:GLY:C	1:A:3:ASN:ND2	0.47	2.73	14	1
1:A:183:LEU:C	1:A:185:LEU:N	0.47	2.71	2	2
1:A:179:ASN:HB2	1:A:182:ILE:HD12	0.47	1.85	3	1
1:A:3:ASN:H	3:A:1:MYR:C1	0.47	2.22	6	3
1:A:47:GLN:CG	1:A:48:GLU:N	0.47	2.77	6	1
1:A:111:VAL:C	1:A:113:GLY:N	0.47	2.73	13	1
1:A:146:ASN:O	1:A:146:ASN:CG	0.47	2.58	14	4
1:A:21:THR:O	1:A:22:LYS:CB	0.47	2.62	11	2
1:A:41:SER:O	1:A:43:ARG:N	0.47	2.48	6	1
1:A:118:SER:N	1:A:121:GLU:OE2	0.47	2.48	13	1
1:A:69:VAL:CG1	1:A:90:LEU:CD2	0.47	2.89	1	1
1:A:53:TYR:CE2	1:A:67:GLN:NE2	0.47	2.83	6	1
1:A:145:GLU:O	1:A:151:ARG:NH2	0.47	2.48	13	1
1:A:130:PHE:CE2	1:A:146:ASN:O	0.47	2.68	14	1
1:A:105:ALA:O	1:A:106:PHE:C	0.47	2.58	10	4
1:A:108:LEU:O	1:A:108:LEU:CD1	0.47	2.59	10	2
1:A:23:PHE:CD1	1:A:23:PHE:N	0.46	2.80	10	1
1:A:182:ILE:O	1:A:186:ILE:N	0.46	2.48	12	1
1:A:177:LEU:HD13	1:A:177:LEU:O	0.46	2.09	6	1
1:A:64:ALA:HB1	1:A:132:MET:HB2	0.46	1.87	8	1
1:A:110:ASP:OD2	1:A:112:ASP:OD1	0.46	2.33	11	1
1:A:65:TYR:CG	1:A:66:ALA:N	0.46	2.80	2	2
1:A:35:PHE:CE1	1:A:39:CYS:SG	0.46	3.01	3	1
1:A:155:ILE:O	1:A:156:TRP:C	0.46	2.58	3	1
1:A:24:THR:CG2	1:A:27:GLU:H	0.46	2.23	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:4:SER:OG	1:A:26:GLU:OE1	0.46	2.34	10	1
1:A:24:THR:OG1	1:A:25:GLU:OE1	0.46	2.33	12	1
1:A:123:LEU:C	1:A:123:LEU:CD1	0.46	2.88	8	2
1:A:174:GLU:O	1:A:175:GLY:C	0.46	2.58	9	14
1:A:183:LEU:CD2	1:A:183:LEU:H	0.46	2.23	1	1
1:A:159:PHE:CE2	1:A:167:LEU:CD2	0.46	2.98	3	1
1:A:18:GLN:NE2	1:A:132:MET:SD	0.46	2.88	8	1
1:A:148:PRO:C	1:A:150:LYS:N	0.46	2.73	9	1
1:A:125:ILE:HD13	1:A:125:ILE:H	0.46	1.70	1	1
1:A:119:LYS:O	1:A:120:ASN:C	0.46	2.59	2	5
1:A:59:GLU:H	1:A:59:GLU:CD	0.46	2.15	3	1
1:A:101:LYS:O	1:A:102:LEU:C	0.46	2.58	8	1
1:A:125:ILE:CD1	1:A:125:ILE:N	0.46	2.79	13	1
1:A:115:GLY:C	1:A:116:THR:CG2	0.46	2.89	14	1
1:A:132:MET:HE3	1:A:132:MET:CA	0.46	2.40	13	1
1:A:89:ALA:O	1:A:90:LEU:C	0.46	2.59	13	2
1:A:22:LYS:O	1:A:24:THR:N	0.46	2.48	4	1
1:A:27:GLU:CG	1:A:28:LEU:N	0.46	2.79	10	1
1:A:135:PRO:O	1:A:138:THR:N	0.46	2.47	12	2
1:A:146:ASN:ND2	1:A:147:THR:CG2	0.46	2.77	12	1
1:A:151:ARG:HH12	1:A:185:LEU:HD11	0.46	1.70	12	1
1:A:143:GLU:O	1:A:144:ASP:CG	0.46	2.59	1	1
1:A:110:ASP:C	1:A:110:ASP:OD1	0.46	2.59	5	1
1:A:9:LEU:O	1:A:13:ILE:CD1	0.46	2.63	14	2
1:A:151:ARG:O	1:A:152:ALA:C	0.46	2.59	8	13
1:A:46:ARG:HG3	1:A:47:GLN:N	0.46	2.26	2	1
1:A:182:ILE:O	1:A:183:LEU:C	0.46	2.59	12	3
1:A:19:LEU:HD23	1:A:57:PHE:CG	0.46	2.45	8	2
1:A:187:GLN:CG	1:A:188:PHE:N	0.46	2.73	12	1
1:A:171:GLU:O	1:A:172:PHE:C	0.45	2.59	5	12
1:A:69:VAL:O	1:A:72:SER:N	0.45	2.49	6	2
1:A:168:THR:HG22	1:A:169:GLU:N	0.45	2.26	10	1
1:A:185:LEU:O	1:A:186:ILE:C	0.45	2.59	12	5
1:A:25:GLU:CD	1:A:26:GLU:H	0.45	2.16	3	1
1:A:151:ARG:NE	1:A:155:ILE:CD1	0.45	2.78	4	1
1:A:172:PHE:CD1	1:A:172:PHE:C	0.45	2.93	6	1
1:A:68:HIS:NE2	1:A:108:LEU:HD22	0.45	2.24	8	1
1:A:112:ASP:OD2	1:A:113:GLY:N	0.45	2.50	9	1
1:A:111:VAL:O	1:A:113:GLY:N	0.45	2.48	13	1
1:A:32:TYR:CE1	1:A:83:PHE:CE2	0.45	3.05	14	1
1:A:125:ILE:N	1:A:125:ILE:CD1	0.45	2.75	12	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:LEU:C	1:A:81:LEU:CD2	0.45	2.89	3	5
1:A:126:VAL:O	1:A:127:THR:C	0.45	2.59	4	2
1:A:166:LYS:NZ	1:A:166:LYS:CB	0.45	2.80	7	1
1:A:172:PHE:CD1	1:A:172:PHE:O	0.45	2.70	7	1
1:A:141:LEU:C	1:A:141:LEU:HD12	0.45	2.36	11	1
1:A:65:TYR:O	1:A:69:VAL:HG23	0.45	2.11	13	1
1:A:19:LEU:O	1:A:20:ASN:C	0.45	2.58	4	1
1:A:24:THR:CG2	1:A:25:GLU:H	0.45	2.19	3	1
1:A:3:ASN:C	1:A:3:ASN:ND2	0.45	2.74	4	2
1:A:46:ARG:NH2	1:A:50:GLN:HE21	0.45	2.07	7	1
1:A:135:PRO:O	1:A:136:GLU:C	0.45	2.58	13	8
1:A:68:HIS:NE2	1:A:108:LEU:HD21	0.45	2.27	11	3
1:A:156:TRP:NE1	1:A:161:LYS:O	0.45	2.49	5	1
1:A:169:GLU:O	1:A:170:LYS:C	0.45	2.58	12	1
1:A:130:PHE:CZ	1:A:146:ASN:O	0.45	2.70	14	1
1:A:46:ARG:O	1:A:47:GLN:C	0.45	2.60	14	4
1:A:141:LEU:O	1:A:143:GLU:N	0.45	2.43	6	1
1:A:16:GLU:O	1:A:17:LEU:C	0.45	2.60	14	2
1:A:92:MET:HE3	1:A:101:LYS:CD	0.45	2.41	12	1
1:A:64:ALA:HB2	1:A:132:MET:SD	0.45	2.49	13	1
1:A:131:LYS:HG2	1:A:132:MET:HE1	0.45	1.87	13	1
1:A:138:THR:HG22	1:A:146:ASN:ND2	0.45	2.27	14	1
1:A:186:ILE:O	1:A:187:GLN:C	0.45	2.60	8	3
1:A:70:PHE:CE2	1:A:81:LEU:CD2	0.45	3.00	4	1
1:A:177:LEU:O	1:A:178:ALA:C	0.45	2.60	6	1
1:A:102:LEU:O	1:A:103:GLU:C	0.45	2.60	13	2
1:A:65:TYR:CZ	1:A:69:VAL:HG21	0.45	2.46	13	1
1:A:108:LEU:C	1:A:108:LEU:CD2	0.45	2.88	5	4
1:A:48:GLU:O	1:A:49:PHE:C	0.45	2.60	7	4
1:A:109:TYR:HB3	1:A:117:ILE:HD11	0.45	1.88	2	2
1:A:70:PHE:CE2	1:A:81:LEU:HD22	0.45	2.47	4	1
1:A:101:LYS:H	1:A:101:LYS:HD3	0.45	1.70	8	1
1:A:46:ARG:O	1:A:48:GLU:N	0.45	2.50	14	1
1:A:143:GLU:O	1:A:144:ASP:C	0.44	2.60	1	1
1:A:138:THR:O	1:A:141:LEU:CD2	0.44	2.65	2	1
1:A:48:GLU:HG3	1:A:49:PHE:N	0.44	2.27	5	1
1:A:112:ASP:CG	1:A:113:GLY:H	0.44	2.20	9	2
1:A:3:ASN:CG	1:A:4:SER:H	0.44	2.19	7	1
1:A:27:GLU:HG3	1:A:28:LEU:N	0.44	2.27	10	1
1:A:124:GLU:O	1:A:125:ILE:C	0.44	2.60	5	7
1:A:111:VAL:HG23	1:A:125:ILE:HD11	0.44	1.88	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:ALA:CB	1:A:132:MET:CA	0.44	2.95	4	2
1:A:114:ASN:ND2	1:A:114:ASN:C	0.44	2.73	5	1
1:A:118:SER:OG	1:A:121:GLU:OE2	0.44	2.33	8	2
1:A:136:GLU:HG2	1:A:137:ASP:N	0.44	2.27	13	1
1:A:156:TRP:NE1	1:A:161:LYS:HB2	0.44	2.27	13	1
1:A:39:CYS:SG	1:A:41:SER:C	0.44	3.00	14	1
1:A:41:SER:C	1:A:43:ARG:N	0.44	2.71	6	2
1:A:114:ASN:OD1	1:A:114:ASN:N	0.44	2.50	2	1
1:A:120:ASN:ND2	1:A:121:GLU:N	0.44	2.58	3	1
1:A:156:TRP:CE2	1:A:161:LYS:HB2	0.44	2.47	5	1
1:A:158:PHE:CZ	1:A:182:ILE:HG12	0.44	2.47	11	1
1:A:114:ASN:ND2	1:A:116:THR:CG2	0.44	2.80	14	1
1:A:104:TRP:O	1:A:105:ALA:C	0.44	2.60	2	1
1:A:130:PHE:O	1:A:131:LYS:C	0.44	2.60	2	9
1:A:45:THR:O	1:A:46:ARG:C	0.44	2.61	6	1
1:A:20:ASN:N	1:A:20:ASN:OD1	0.44	2.50	8	1
1:A:9:LEU:C	1:A:9:LEU:HD23	0.44	2.37	13	1
1:A:64:ALA:HB1	1:A:132:MET:SD	0.44	2.51	13	1
1:A:146:ASN:ND2	1:A:146:ASN:O	0.44	2.50	14	1
1:A:74:ASP:O	1:A:75:ALA:C	0.44	2.59	10	3
1:A:132:MET:O	1:A:133:ILE:C	0.44	2.60	3	3
1:A:21:THR:O	1:A:22:LYS:C	0.44	2.59	13	2
1:A:53:TYR:HH	1:A:66:ALA:HB3	0.44	1.72	7	1
1:A:72:SER:O	1:A:73:PHE:C	0.44	2.59	9	5
1:A:14:LEU:HD21	1:A:91:HIS:NE2	0.44	2.26	2	1
1:A:108:LEU:HD13	1:A:109:TYR:CA	0.44	2.41	5	7
1:A:9:LEU:N	1:A:9:LEU:CD1	0.44	2.80	3	1
1:A:12:GLU:O	1:A:13:ILE:C	0.44	2.61	10	5
1:A:157:GLY:O	1:A:158:PHE:C	0.44	2.61	3	2
1:A:106:PHE:CE2	1:A:115:GLY:O	0.44	2.70	11	1
1:A:108:LEU:O	1:A:110:ASP:N	0.44	2.51	13	1
1:A:73:PHE:O	1:A:74:ASP:CG	0.44	2.61	1	2
1:A:50:GLN:HG2	1:A:51:THR:N	0.44	2.27	3	1
1:A:120:ASN:CG	1:A:121:GLU:H	0.44	2.21	6	1
1:A:67:GLN:C	1:A:67:GLN:NE2	0.44	2.75	4	1
1:A:91:HIS:O	1:A:92:MET:C	0.44	2.61	14	3
1:A:18:GLN:O	1:A:18:GLN:CG	0.44	2.64	13	1
1:A:188:PHE:O	1:A:189:GLU:C	0.44	2.61	5	3
1:A:160:GLY:O	1:A:161:LYS:C	0.44	2.59	11	2
1:A:24:THR:CG2	1:A:25:GLU:N	0.43	2.81	11	1
1:A:111:VAL:O	1:A:112:ASP:C	0.43	2.60	13	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:103:GLU:H	1:A:103:GLU:CD	0.43	2.21	4	1
1:A:41:SER:O	1:A:42:GLY:C	0.43	2.59	6	1
1:A:186:ILE:C	1:A:188:PHE:N	0.43	2.75	9	1
1:A:158:PHE:CE1	1:A:182:ILE:CD1	0.43	2.99	11	1
1:A:169:GLU:CG	1:A:170:LYS:N	0.43	2.81	13	1
1:A:154:LYS:CB	1:A:154:LYS:NZ	0.43	2.81	5	1
1:A:179:ASN:C	1:A:181:GLU:N	0.43	2.75	9	1
1:A:158:PHE:CZ	1:A:179:ASN:ND2	0.43	2.87	10	1
1:A:3:ASN:HD22	1:A:3:ASN:C	0.43	2.19	11	1
1:A:103:GLU:HG3	1:A:104:TRP:N	0.43	2.29	14	1
1:A:88:ILE:O	1:A:92:MET:N	0.43	2.49	2	1
1:A:158:PHE:CD1	1:A:158:PHE:N	0.43	2.86	3	1
1:A:168:THR:C	1:A:170:LYS:N	0.43	2.76	7	1
1:A:33:GLN:OE1	1:A:33:GLN:C	0.43	2.61	9	1
1:A:101:LYS:HG3	1:A:102:LEU:N	0.43	2.28	10	1
1:A:46:ARG:HD3	1:A:47:GLN:N	0.43	2.27	11	1
1:A:39:CYS:SG	1:A:42:GLY:CA	0.43	3.06	12	1
1:A:112:ASP:OD1	1:A:112:ASP:C	0.43	2.62	2	1
1:A:161:LYS:CE	1:A:167:LEU:HD13	0.43	2.43	3	1
1:A:106:PHE:CD1	1:A:169:GLU:CD	0.43	2.96	5	1
1:A:118:SER:O	1:A:119:LYS:C	0.43	2.61	10	3
1:A:103:GLU:C	1:A:105:ALA:N	0.43	2.76	7	1
1:A:151:ARG:CG	1:A:151:ARG:HH11	0.43	2.26	4	1
1:A:187:GLN:C	1:A:188:PHE:CD1	0.43	2.97	4	1
1:A:63:LYS:CG	1:A:63:LYS:O	0.43	2.64	5	1
1:A:12:GLU:O	1:A:15:GLU:N	0.43	2.52	6	1
1:A:159:PHE:O	1:A:160:GLY:C	0.43	2.61	8	1
1:A:169:GLU:CD	1:A:169:GLU:C	0.43	2.86	9	1
1:A:169:GLU:O	1:A:173:ILE:HD12	0.43	2.13	10	1
1:A:120:ASN:O	1:A:121:GLU:C	0.43	2.61	1	1
1:A:47:GLN:HG3	1:A:48:GLU:N	0.43	2.27	6	1
1:A:53:TYR:CD1	1:A:57:PHE:CD2	0.43	3.06	10	1
1:A:133:ILE:O	1:A:134:SER:C	0.43	2.62	13	1
1:A:141:LEU:HD12	1:A:142:PRO:O	0.43	2.14	14	1
1:A:136:GLU:O	1:A:136:GLU:CD	0.43	2.62	1	1
1:A:183:LEU:C	1:A:185:LEU:H	0.43	2.22	2	1
1:A:158:PHE:CE2	1:A:159:PHE:CZ	0.43	3.07	3	1
1:A:31:TRP:O	1:A:32:TYR:C	0.43	2.61	5	1
1:A:4:SER:O	1:A:5:LYS:C	0.43	2.61	10	5
1:A:181:GLU:O	1:A:184:ARG:CG	0.43	2.67	14	1
1:A:19:LEU:HG	1:A:57:PHE:CD1	0.43	2.49	4	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:LEU:O	1:A:17:LEU:HD23	0.43	2.14	7	2
1:A:138:THR:C	1:A:140:HIS:H	0.43	2.22	12	1
1:A:88:ILE:O	1:A:92:MET:SD	0.43	2.77	13	1
1:A:108:LEU:CD1	1:A:109:TYR:N	0.43	2.62	14	1
1:A:114:ASN:ND2	1:A:116:THR:HG23	0.43	2.28	14	1
1:A:140:HIS:O	1:A:141:LEU:C	0.43	2.62	14	4
1:A:101:LYS:O	1:A:101:LYS:CG	0.43	2.66	3	2
1:A:19:LEU:HD23	1:A:57:PHE:CE2	0.43	2.49	12	3
1:A:64:ALA:CB	1:A:132:MET:N	0.43	2.80	9	1
1:A:178:ALA:O	1:A:179:ASN:C	0.43	2.62	10	1
1:A:3:ASN:O	1:A:4:SER:C	0.42	2.61	4	2
1:A:81:LEU:H	1:A:81:LEU:HD22	0.42	1.74	10	1
1:A:69:VAL:HG22	1:A:108:LEU:CD2	0.42	2.44	13	1
1:A:73:PHE:C	1:A:75:ALA:H	0.42	2.21	2	1
1:A:27:GLU:C	1:A:27:GLU:CD	0.42	2.87	3	1
1:A:83:PHE:O	1:A:84:LYS:C	0.42	2.61	3	1
1:A:22:LYS:O	1:A:23:PHE:C	0.42	2.62	13	3
1:A:31:TRP:O	1:A:35:PHE:N	0.42	2.52	5	1
1:A:40:PRO:O	1:A:41:SER:C	0.42	2.61	6	1
1:A:102:LEU:C	1:A:104:TRP:N	0.42	2.76	11	1
1:A:106:PHE:O	1:A:106:PHE:CG	0.42	2.71	13	1
1:A:108:LEU:O	1:A:109:TYR:C	0.42	2.61	13	1
1:A:14:LEU:O	1:A:15:GLU:C	0.42	2.62	2	2
1:A:159:PHE:O	1:A:161:LYS:N	0.42	2.52	7	1
1:A:145:GLU:OE1	1:A:147:THR:O	0.42	2.38	8	1
1:A:158:PHE:O	1:A:159:PHE:C	0.42	2.62	12	1
1:A:14:LEU:HG	1:A:91:HIS:NE2	0.42	2.29	2	1
1:A:115:GLY:C	1:A:116:THR:HG23	0.42	2.40	4	1
1:A:55:LYS:CB	1:A:55:LYS:NZ	0.42	2.81	8	1
1:A:69:VAL:O	1:A:70:PHE:C	0.42	2.61	10	1
1:A:65:TYR:H	1:A:132:MET:HE3	0.42	1.75	11	1
1:A:23:PHE:O	1:A:24:THR:C	0.42	2.62	7	1
1:A:159:PHE:C	1:A:161:LYS:N	0.42	2.77	7	1
1:A:49:PHE:CE1	1:A:86:TYR:CZ	0.42	3.08	13	1
1:A:146:ASN:ND2	1:A:146:ASN:C	0.42	2.77	13	1
1:A:68:HIS:NE2	1:A:125:ILE:HG13	0.42	2.29	2	1
1:A:182:ILE:O	1:A:182:ILE:HG22	0.42	2.14	3	1
1:A:8:ALA:O	1:A:9:LEU:C	0.42	2.63	12	3
1:A:89:ALA:C	1:A:91:HIS:N	0.42	2.77	13	1
1:A:161:LYS:CE	1:A:167:LEU:CD1	0.42	2.98	8	1
1:A:18:GLN:O	1:A:18:GLN:CD	0.42	2.63	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:TYR:CG	3:A:1:MYR:H62	0.42	2.49	1	1
1:A:102:LEU:HD13	1:A:102:LEU:C	0.42	2.39	1	1
1:A:103:GLU:CD	1:A:104:TRP:N	0.42	2.78	5	1
1:A:169:GLU:CD	1:A:170:LYS:N	0.42	2.77	9	1
1:A:56:PHE:HB3	1:A:57:PHE:CE2	0.42	2.49	11	2
1:A:171:GLU:C	1:A:173:ILE:H	0.42	2.22	4	2
1:A:74:ASP:O	1:A:75:ALA:CB	0.42	2.65	6	2
1:A:168:THR:C	1:A:170:LYS:H	0.42	2.23	7	1
1:A:4:SER:OG	1:A:5:LYS:N	0.42	2.52	9	1
1:A:87:VAL:HG13	1:A:91:HIS:CE1	0.42	2.49	13	1
1:A:86:TYR:CE1	1:A:90:LEU:CD2	0.42	3.03	7	1
1:A:43:ARG:NH1	1:A:43:ARG:CG	0.42	2.83	10	1
1:A:49:PHE:CE1	1:A:86:TYR:CE1	0.42	3.08	10	1
1:A:9:LEU:O	1:A:10:SER:C	0.42	2.63	11	1
1:A:18:GLN:O	1:A:19:LEU:HD12	0.41	2.14	2	1
1:A:12:GLU:O	1:A:15:GLU:CB	0.41	2.68	7	3
1:A:29:SER:OG	1:A:33:GLN:NE2	0.41	2.53	10	1
1:A:56:PHE:C	1:A:57:PHE:CD1	0.41	2.98	1	2
1:A:125:ILE:O	1:A:126:VAL:C	0.41	2.63	1	1
1:A:39:CYS:SG	1:A:40:PRO:HD2	0.41	2.55	4	1
1:A:43:ARG:C	1:A:44:ILE:HG23	0.41	2.40	5	1
1:A:134:SER:C	1:A:136:GLU:N	0.41	2.76	6	1
1:A:70:PHE:CE1	1:A:75:ALA:HB2	0.41	2.50	11	1
1:A:101:LYS:C	1:A:103:GLU:N	0.41	2.78	12	1
1:A:25:GLU:CD	1:A:25:GLU:C	0.41	2.88	14	1
1:A:46:ARG:C	1:A:48:GLU:N	0.41	2.77	14	1
1:A:48:GLU:O	1:A:51:THR:N	0.41	2.53	12	1
1:A:66:ALA:O	1:A:67:GLN:C	0.41	2.61	1	1
1:A:188:PHE:O	1:A:188:PHE:CG	0.41	2.74	1	1
1:A:138:THR:HA	1:A:141:LEU:HD23	0.41	1.90	6	1
1:A:10:SER:O	1:A:11:LYS:C	0.41	2.61	9	1
1:A:65:TYR:HB3	1:A:132:MET:SD	0.41	2.55	2	1
1:A:166:LYS:N	1:A:166:LYS:HD3	0.41	2.31	4	1
1:A:158:PHE:CZ	1:A:182:ILE:CG1	0.41	3.04	7	1
1:A:2:GLY:C	1:A:3:ASN:OD1	0.41	2.63	2	1
1:A:73:PHE:C	1:A:74:ASP:OD2	0.41	2.64	2	1
1:A:126:VAL:HG11	1:A:151:ARG:NH1	0.41	2.31	4	1
1:A:103:GLU:O	1:A:104:TRP:C	0.41	2.63	7	2
1:A:70:PHE:CE2	1:A:81:LEU:HD21	0.41	2.51	10	1
1:A:52:ILE:O	1:A:53:TYR:C	0.41	2.63	13	1
1:A:70:PHE:O	1:A:70:PHE:CG	0.41	2.72	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:122:VAL:O	1:A:126:VAL:HG23	0.41	2.15	13	1
1:A:144:ASP:OD1	1:A:145:GLU:N	0.41	2.53	8	1
1:A:56:PHE:HB3	1:A:57:PHE:CZ	0.41	2.50	10	1
1:A:68:HIS:CD2	1:A:108:LEU:HD21	0.41	2.50	11	1
1:A:102:LEU:O	1:A:104:TRP:N	0.41	2.53	11	1
1:A:177:LEU:HD23	1:A:177:LEU:C	0.41	2.38	1	1
1:A:39:CYS:SG	1:A:42:GLY:HA2	0.41	2.55	8	1
1:A:3:ASN:N	1:A:3:ASN:HD22	0.41	2.14	1	1
1:A:114:ASN:CG	1:A:116:THR:HG1	0.41	2.24	1	1
1:A:123:LEU:O	1:A:127:THR:N	0.41	2.43	9	1
1:A:22:LYS:N	1:A:22:LYS:CD	0.41	2.83	12	1
1:A:65:TYR:CE1	1:A:69:VAL:HG23	0.41	2.51	13	1
1:A:132:MET:N	1:A:132:MET:HE3	0.41	2.31	13	1
1:A:138:THR:HG22	1:A:141:LEU:CD2	0.41	2.45	13	1
1:A:102:LEU:C	1:A:102:LEU:CD1	0.41	2.93	1	1
1:A:70:PHE:CD1	1:A:71:ARG:N	0.41	2.89	7	3
1:A:179:ASN:C	1:A:181:GLU:H	0.41	2.23	9	1
1:A:46:ARG:CD	1:A:46:ARG:H	0.41	2.29	14	1
1:A:130:PHE:CE1	1:A:146:ASN:O	0.40	2.74	2	1
1:A:114:ASN:N	1:A:114:ASN:OD1	0.40	2.53	7	1
1:A:68:HIS:O	1:A:69:VAL:C	0.40	2.63	11	1
1:A:25:GLU:O	1:A:26:GLU:C	0.40	2.61	13	1
1:A:135:PRO:C	1:A:137:ASP:H	0.40	2.23	1	1
1:A:93:THR:O	1:A:93:THR:OG1	0.40	2.37	6	1
1:A:165:ASP:OD1	1:A:165:ASP:N	0.40	2.55	8	1
1:A:168:THR:HG22	1:A:169:GLU:H	0.40	1.76	10	1
1:A:161:LYS:NZ	1:A:167:LEU:CA	0.40	2.76	12	1
1:A:124:GLU:CD	1:A:124:GLU:N	0.40	2.79	6	1
1:A:86:TYR:CE1	1:A:90:LEU:HD21	0.40	2.51	7	1
1:A:101:LYS:N	1:A:101:LYS:HD3	0.40	2.31	7	1
1:A:92:MET:O	1:A:93:THR:HG23	0.40	2.16	13	1
1:A:20:ASN:OD1	1:A:20:ASN:C	0.40	2.62	14	1
1:A:35:PHE:CD2	1:A:36:LEU:HD12	0.40	2.50	3	1
1:A:33:GLN:HG3	1:A:34:SER:N	0.40	2.31	9	1
1:A:151:ARG:O	1:A:153:GLU:N	0.40	2.54	9	1
1:A:185:LEU:O	1:A:185:LEU:HD23	0.40	2.16	9	1
1:A:65:TYR:N	1:A:132:MET:HE3	0.40	2.30	11	1
1:A:156:TRP:CZ2	1:A:161:LYS:HG3	0.40	2.52	12	1
1:A:110:ASP:OD1	1:A:110:ASP:C	0.40	2.64	4	1
1:A:53:TYR:O	1:A:57:PHE:N	0.40	2.52	5	1
1:A:73:PHE:O	1:A:74:ASP:OD2	0.40	2.40	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:138:THR:C	1:A:140:HIS:N	0.40	2.80	6	1
1:A:5:LYS:O	1:A:6:SER:C	0.40	2.65	7	1
1:A:107:SER:C	1:A:109:TYR:N	0.40	2.79	10	1
1:A:182:ILE:O	1:A:185:LEU:N	0.40	2.43	11	1

6.3 Torsion angles

6.3.1 Protein backbone

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	176/201 (88%)	126±6 (72±3%)	34±5 (19±3%)	15±4 (9±2%)	1	12
All	All	2464/2814 (88%)	1768 (72%)	480 (19%)	216 (9%)	1	12

All 59 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	106	PHE	13
1	A	111	VAL	11
1	A	62	PRO	10
1	A	17	LEU	9
1	A	73	PHE	9
1	A	65	TYR	8
1	A	165	ASP	7
1	A	93	THR	7
1	A	161	LYS	7
1	A	92	MET	6
1	A	63	LYS	6
1	A	178	ALA	6
1	A	58	PRO	5
1	A	74	ASP	5
1	A	96	GLY	5
1	A	101	LYS	5
1	A	187	GLN	5
1	A	40	PRO	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	60	ALA	4
1	A	186	ILE	4
1	A	94	SER	4
1	A	188	PHE	4
1	A	183	LEU	4
1	A	18	GLN	4
1	A	22	LYS	3
1	A	59	GLU	3
1	A	61	ASP	3
1	A	143	GLU	3
1	A	144	ASP	3
1	A	145	GLU	3
1	A	138	THR	3
1	A	133	ILE	3
1	A	42	GLY	2
1	A	95	ALA	2
1	A	136	GLU	2
1	A	24	THR	2
1	A	23	PHE	2
1	A	75	ALA	2
1	A	172	PHE	2
1	A	160	GLY	2
1	A	102	LEU	2
1	A	142	PRO	2
1	A	21	THR	2
1	A	41	SER	2
1	A	79	GLY	1
1	A	135	PRO	1
1	A	155	ILE	1
1	A	156	TRP	1
1	A	158	PHE	1
1	A	20	ASN	1
1	A	175	GLY	1
1	A	5	LYS	1
1	A	146	ASN	1
1	A	6	SER	1
1	A	70	PHE	1
1	A	114	ASN	1
1	A	115	GLY	1
1	A	112	ASP	1
1	A	47	GLN	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	157/180 (87%)	127±4 (81±3%)	30±4 (19±3%)	3	34
All	All	2198/2520 (87%)	1775 (81%)	423 (19%)	3	34

All 107 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	81	LEU	14
1	A	108	LEU	14
1	A	51	THR	13
1	A	147	THR	12
1	A	166	LYS	12
1	A	70	PHE	11
1	A	109	TYR	11
1	A	186	ILE	11
1	A	112	ASP	10
1	A	73	PHE	8
1	A	125	ILE	8
1	A	127	THR	8
1	A	63	LYS	8
1	A	17	LEU	7
1	A	74	ASP	7
1	A	141	LEU	7
1	A	123	LEU	7
1	A	134	SER	7
1	A	46	ARG	7
1	A	21	THR	6
1	A	39	CYS	6
1	A	158	PHE	6
1	A	25	GLU	6
1	A	183	LEU	6
1	A	33	GLN	6
1	A	67	GLN	6
1	A	5	LYS	5
1	A	102	LEU	5
1	A	154	LYS	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	10	SER	5
1	A	101	LYS	5
1	A	185	LEU	5
1	A	19	LEU	5
1	A	146	ASN	5
1	A	92	MET	4
1	A	140	HIS	4
1	A	22	LYS	4
1	A	4	SER	4
1	A	177	LEU	4
1	A	138	THR	4
1	A	188	PHE	4
1	A	93	THR	4
1	A	116	THR	4
1	A	41	SER	3
1	A	50	GLN	3
1	A	145	GLU	3
1	A	132	MET	3
1	A	43	ARG	3
1	A	59	GLU	3
1	A	120	ASN	3
1	A	139	LYS	3
1	A	143	GLU	3
1	A	103	GLU	3
1	A	151	ARG	3
1	A	3	ASN	3
1	A	61	ASP	3
1	A	131	LYS	3
1	A	165	ASP	3
1	A	27	GLU	3
1	A	150	LYS	3
1	A	161	LYS	3
1	A	36	LEU	3
1	A	82	ASP	2
1	A	84	LYS	2
1	A	130	PHE	2
1	A	71	ARG	2
1	A	54	SER	2
1	A	88	ILE	2
1	A	118	SER	2
1	A	153	GLU	2
1	A	168	THR	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	170	LYS	2
1	A	16	GLU	2
1	A	20	ASN	2
1	A	48	GLU	2
1	A	94	SER	2
1	A	144	ASP	2
1	A	187	GLN	2
1	A	169	GLU	2
1	A	38	GLU	2
1	A	55	LYS	2
1	A	184	ARG	2
1	A	37	LYS	2
1	A	44	ILE	1
1	A	90	LEU	1
1	A	149	GLU	1
1	A	24	THR	1
1	A	47	GLN	1
1	A	180	LYS	1
1	A	114	ASN	1
1	A	179	ASN	1
1	A	72	SER	1
1	A	30	SER	1
1	A	189	GLU	1
1	A	11	LYS	1
1	A	6	SER	1
1	A	18	GLN	1
1	A	26	GLU	1
1	A	137	ASP	1
1	A	181	GLU	1
1	A	167	LEU	1
1	A	87	VAL	1
1	A	124	GLU	1
1	A	171	GLU	1
1	A	174	GLU	1
1	A	29	SER	1
1	A	119	LYS	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

Of 2 ligands modelled in this entry, 1 is 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	1	1	14,14,15	1.11±0.01	1±0 (7±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	1	1	13,13,15	1.00±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	1	1	-	0±0,12,12,13	-

All unique bond outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
3	A	1	MYR	O2-C1	3.97	1.21	1.42	14	14

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