



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 20, 2022 – 12:59 AM EST

PDB ID : 1T0V
Title : NMR Solution Structure of the Engineered Lipocalin FluA(R95K) Northeast Structural Genomics Target OR17
Authors : Mills, J.L.; Liu, G.; Skerra, A.; Szyperski, T.; Northeast Structural Genomics Consortium (NESG)
Deposited on : 2004-04-13

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

MolProbity : 4.02b-467
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
ShiftChecker : 2.26
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.26

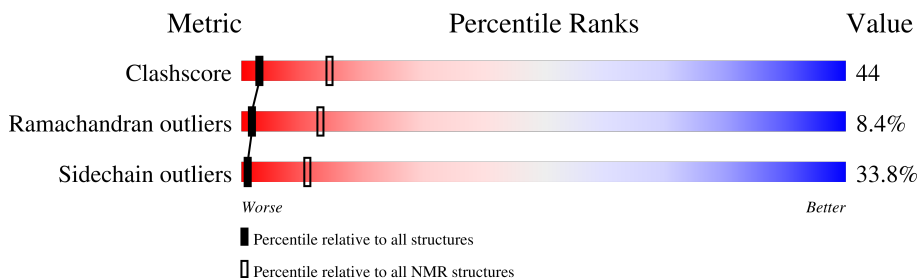
1 Overall quality at a glance

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	158937	12864
Ramachandran outliers	154571	11451
Sidechain outliers	154315	11428

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	184	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 10 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:2-A:172 (171)	0.60	10

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

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

The models can be grouped into 3 clusters. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 3, 5, 7, 8, 10, 12, 13, 14, 18, 20
2	4, 6, 9, 11, 15, 17
3	16, 19

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2908 atoms, of which 1423 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called BILIN-BINDING PROTEIN.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	184	2908	950	1423	248	281	6	0

There are 30 discrepancies between the modelled and reference sequences:

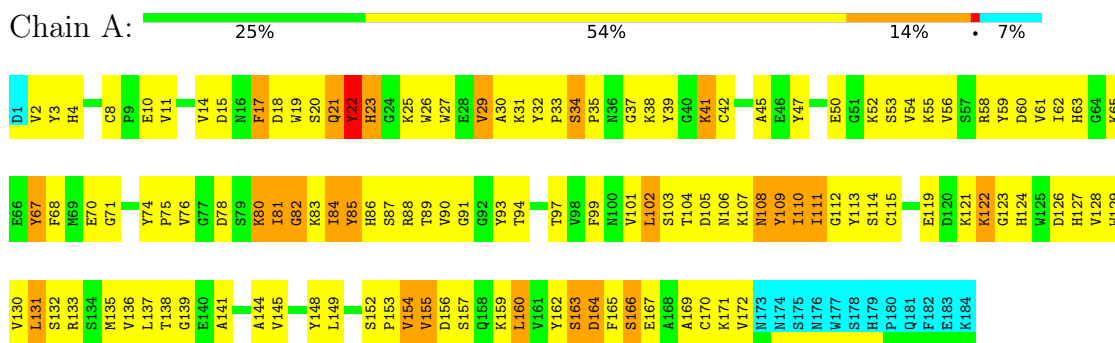
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1	ASP	ASN	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	21	GLN	ASN	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	34	SER	ASN	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	35	PRO	SER	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	36	ASN	VAL	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	37	GLY	GLU	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	58	ARG	ASN	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	60	ASP	HIS	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	69	MET	ILE	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	87	SER	LYS	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	88	ARG	LEU	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	90	VAL	TYR	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	93	TYR	VAL	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	96	LYS	GLU	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	97	THR	ASN	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	114	SER	TYR	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	116	ARG	LYS	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	125	TRP	GLN	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	127	HIS	PHE	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	135	MET	LYS	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	175	SER	-	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	176	ASN	-	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	177	TRP	-	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	178	SER	-	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	179	HIS	-	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	180	PRO	-	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	181	GLN	-	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	182	PHE	-	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	183	GLU	-	SEE REMARK 999	UNP P09464
A	184	LYS	-	SEE REMARK 999	UNP P09464

4 Residue-property plots i

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN

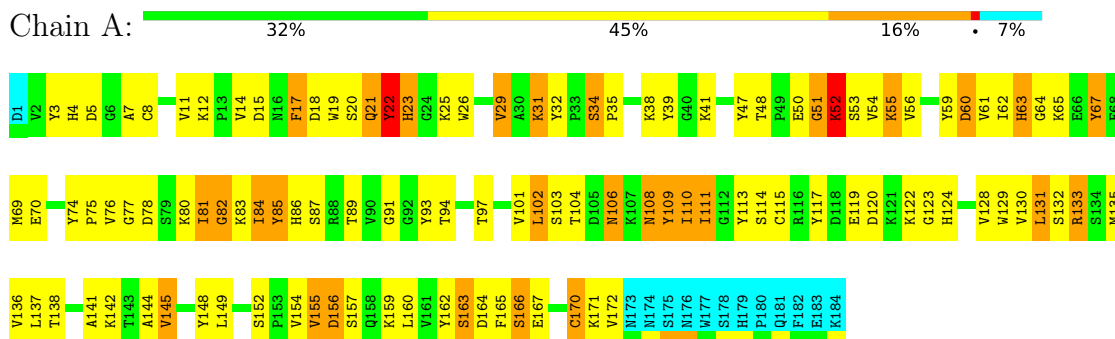


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



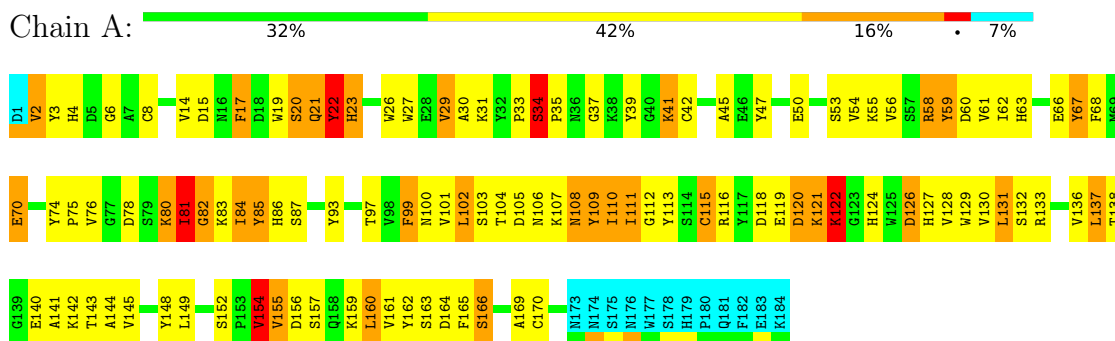
4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



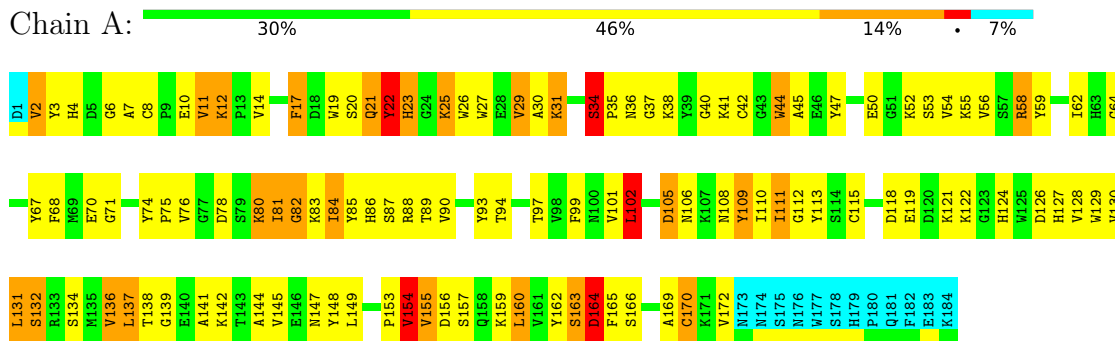
4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



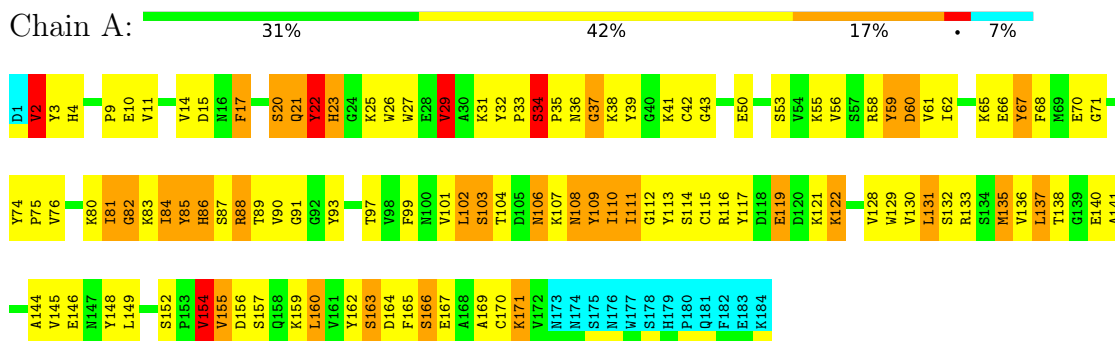
4.2.4 Score per residue for model 4

• Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



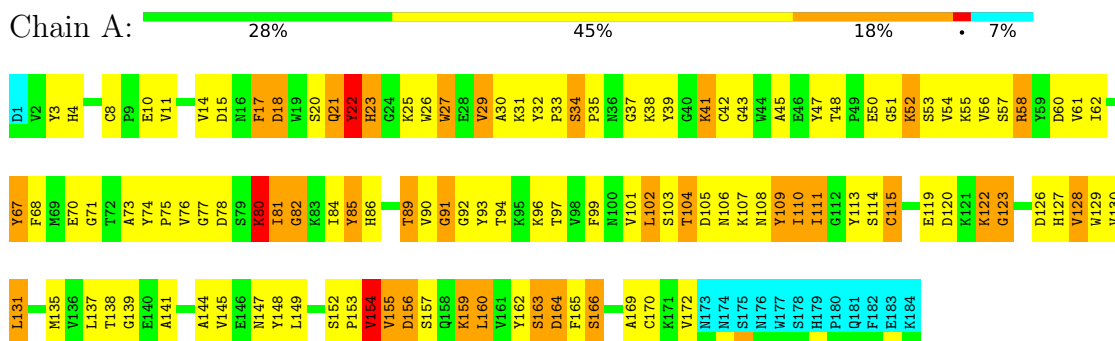
4.2.5 Score per residue for model 5

• Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



4.2.6 Score per residue for model 6

• Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



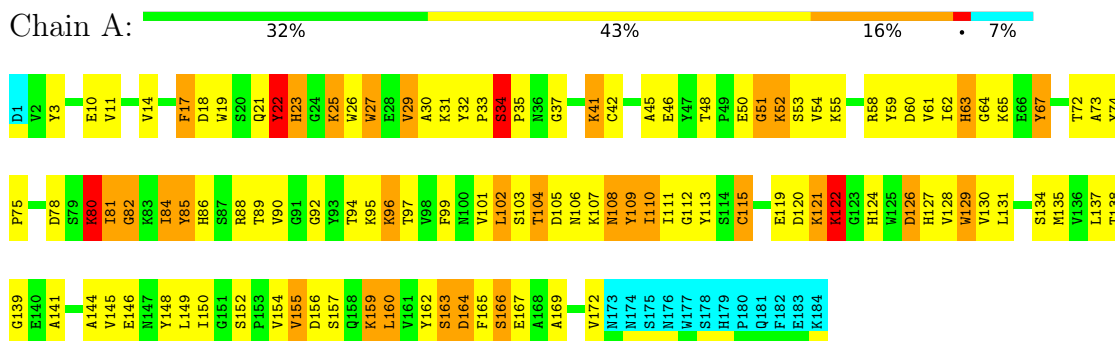
4.2.7 Score per residue for model 7

• Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



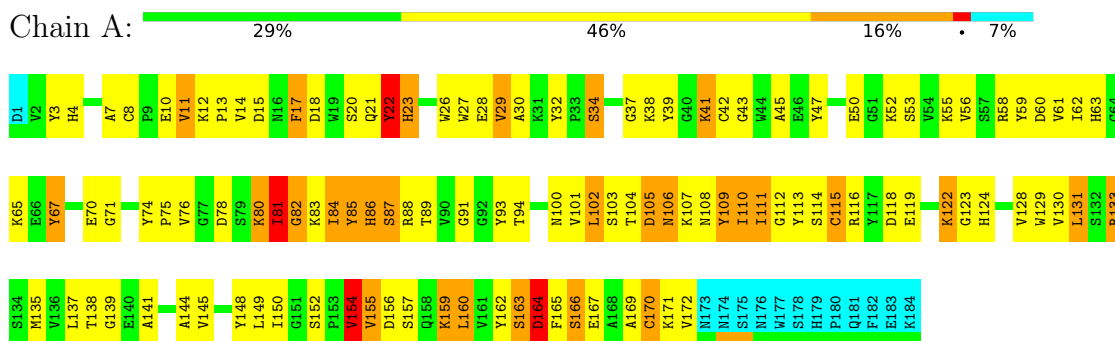
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



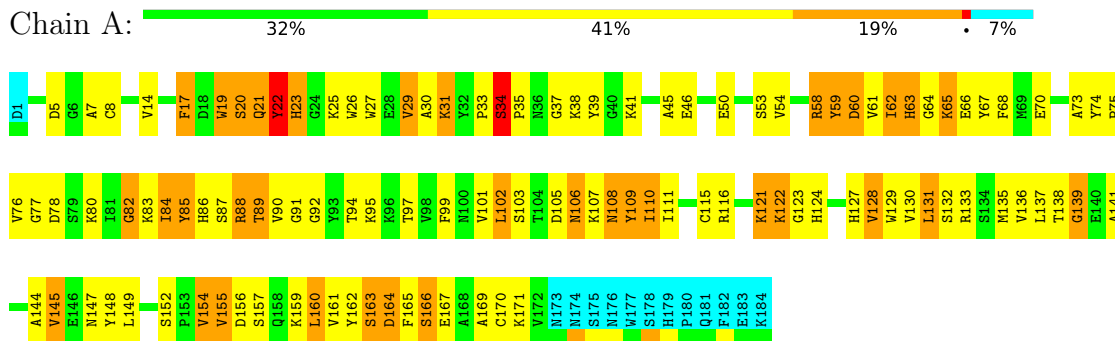
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



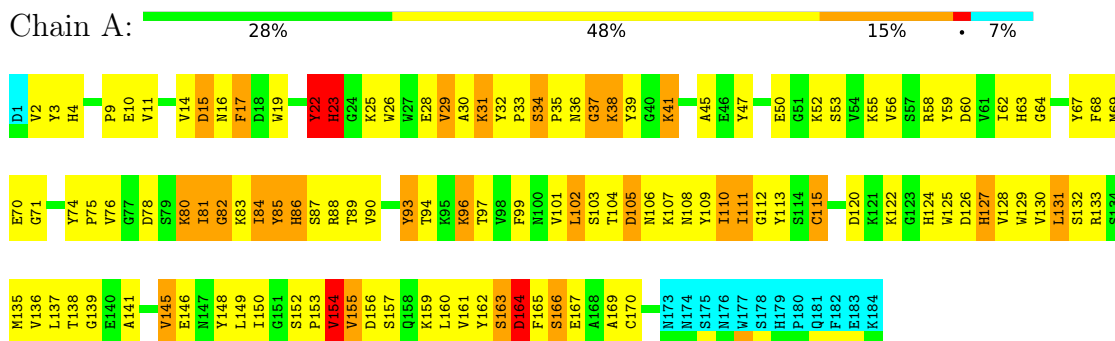
4.2.10 Score per residue for model 10 (medoid)

- Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



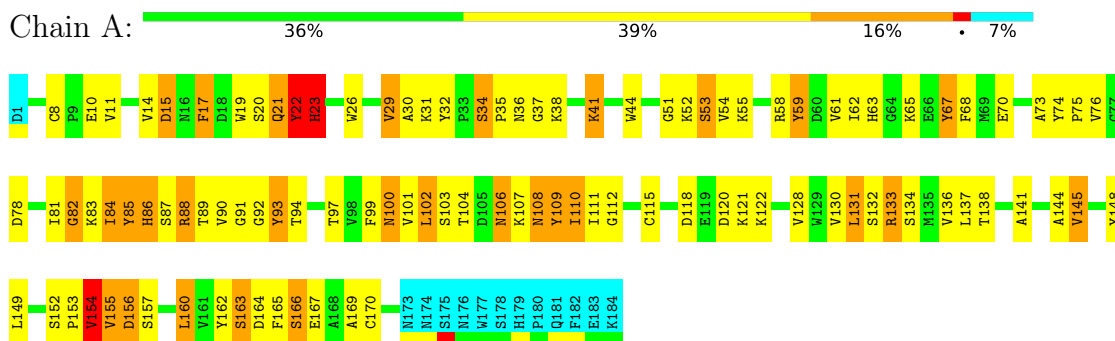
4.2.11 Score per residue for model 11

• Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



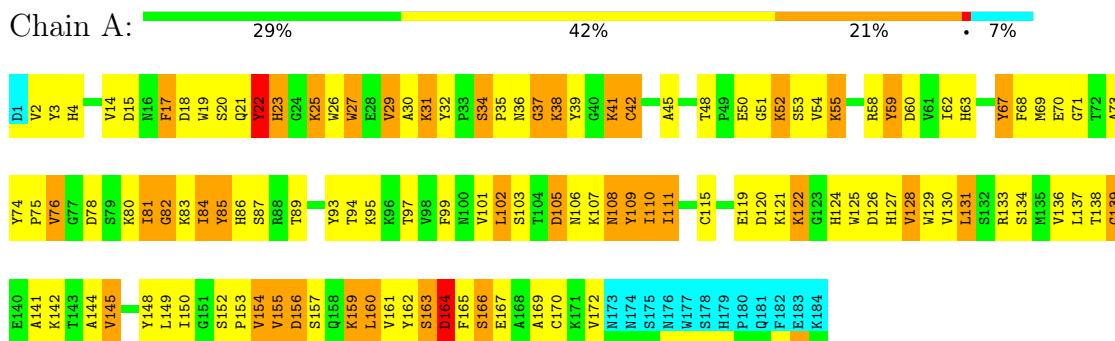
4.2.12 Score per residue for model 12

• Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



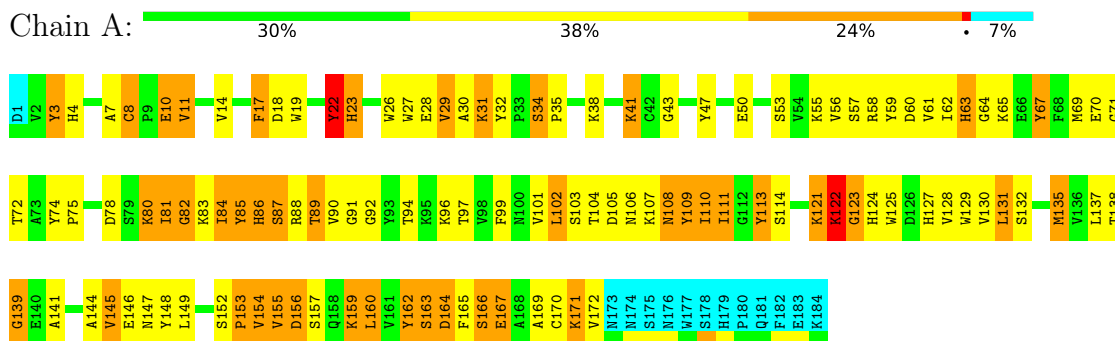
4.2.13 Score per residue for model 13

• Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



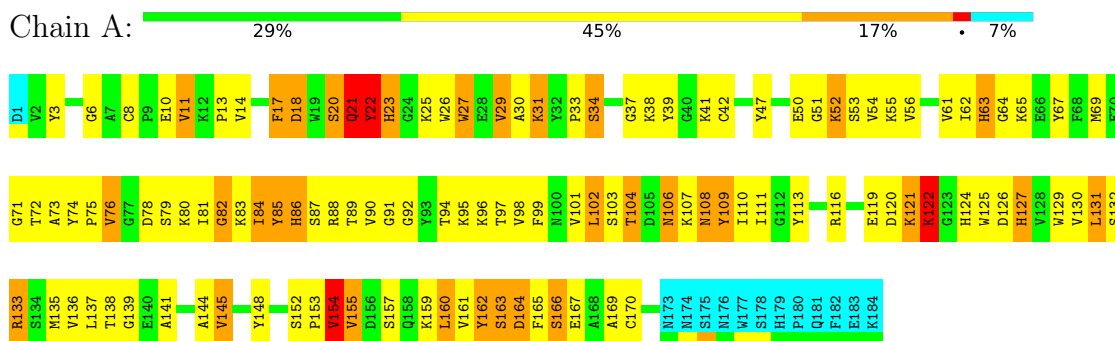
4.2.14 Score per residue for model 14

• Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



4.2.15 Score per residue for model 15

• Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



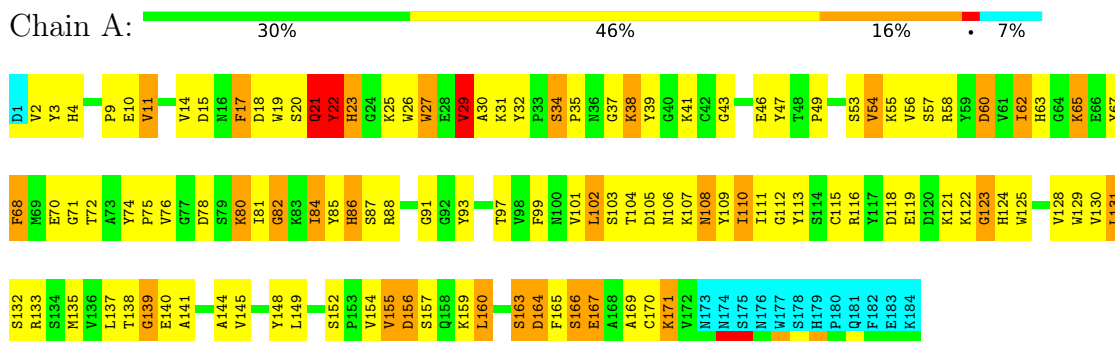
4.2.16 Score per residue for model 16

• Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



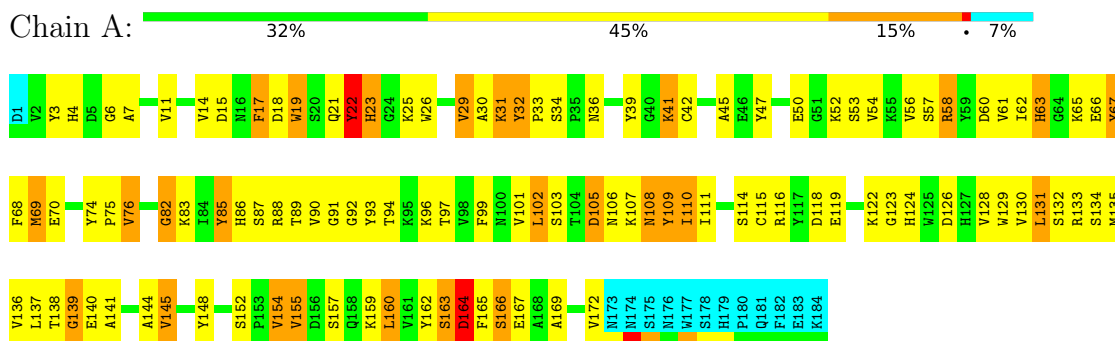
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



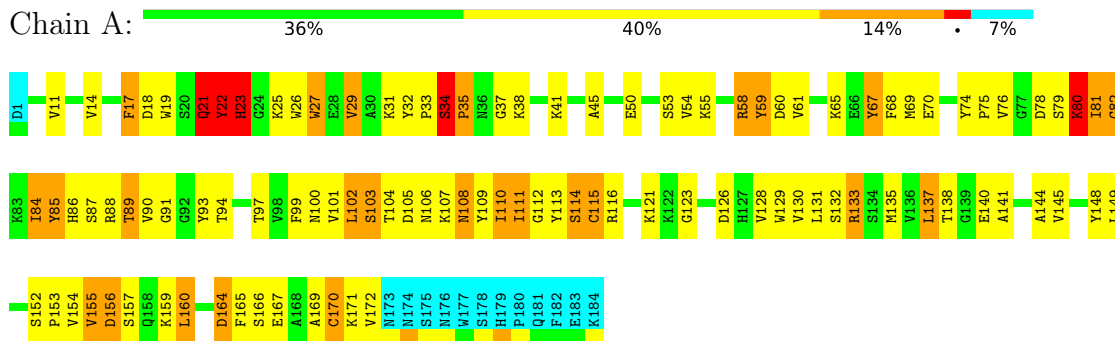
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



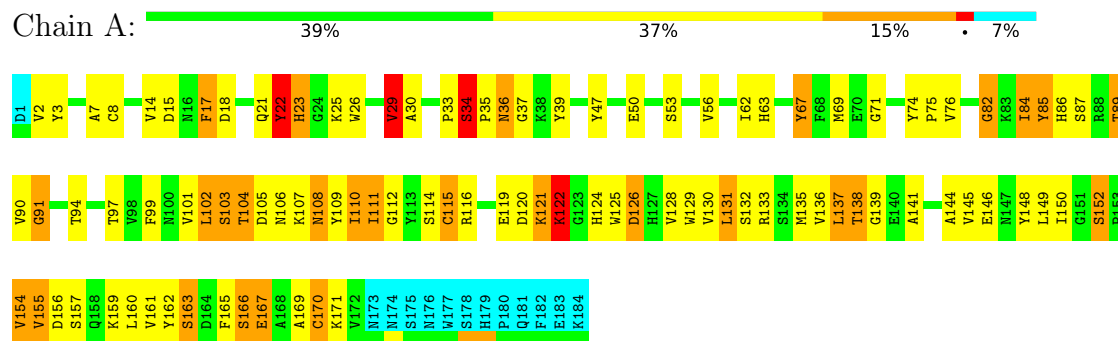
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



4.2.20 Score per residue for model 20

● Molecule 1: BILIN-BINDING PROTEIN



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *torsion angle dynamics and simulated annealing (DYANA)*.

Of the 100 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *target function*.

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

Software name	Classification	Version
DYANA	structure solution	1.5
DYANA	refinement	1.5

No chemical shift data was provided.

6 Model quality

6.1 Standard geometry

There are no covalent bond-length or bond-angle outliers.

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in each chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen atoms added and optimized by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes averaged over the ensemble.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1372	1329	1304	118±10
All	All	27440	26580	26080	2354

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 44.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:109:TYR:CE2	1:A:145:VAL:HG23	1.06	1.85	11	2
1:A:62:ILE:HD12	1:A:67:TYR:CD1	1.02	1.90	10	6
1:A:148:TYR:CZ	1:A:155:VAL:HG11	1.00	1.92	1	12
1:A:62:ILE:HD12	1:A:67:TYR:CG	0.97	1.94	17	18
1:A:14:VAL:HG21	1:A:17:PHE:CD2	0.97	1.95	7	6
1:A:29:VAL:HG23	1:A:130:VAL:HG12	0.95	1.39	1	17
1:A:130:VAL:C	1:A:131:LEU:HD23	0.94	1.83	20	19
1:A:109:TYR:CE1	1:A:144:ALA:HB1	0.94	1.96	16	18
1:A:14:VAL:HG21	1:A:17:PHE:CD1	0.94	1.97	5	2
1:A:155:VAL:HG22	1:A:160:LEU:HD11	0.93	1.41	1	15
1:A:155:VAL:CG2	1:A:160:LEU:HD11	0.92	1.94	3	19
1:A:89:THR:HG22	1:A:94:THR:OG1	0.90	1.65	8	13
1:A:26:TRP:CZ3	1:A:110:ILE:HD12	0.90	2.02	17	18
1:A:112:GLY:O	1:A:128:VAL:HG23	0.89	1.67	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:PHE:CZ	1:A:104:THR:HG21	0.88	2.04	17	3
1:A:39:TYR:O	1:A:62:ILE:HG23	0.88	1.67	7	4
1:A:109:TYR:CE1	1:A:130:VAL:HG13	0.87	2.04	11	1
1:A:86:HIS:O	1:A:97:THR:HG22	0.86	1.70	6	4
1:A:149:LEU:CD2	1:A:155:VAL:HG11	0.86	2.01	19	1
1:A:11:VAL:HG21	1:A:113:TYR:CE1	0.86	2.06	14	1
1:A:131:LEU:HD23	1:A:131:LEU:N	0.85	1.86	9	17
1:A:29:VAL:HG11	1:A:137:LEU:HG	0.85	1.48	13	11
1:A:17:PHE:CE1	1:A:104:THR:HG21	0.84	2.07	11	7
1:A:137:LEU:HD11	1:A:145:VAL:HG21	0.84	1.48	9	6
1:A:17:PHE:CZ	1:A:22:TYR:CE2	0.83	2.66	11	13
1:A:149:LEU:HD22	1:A:157:SER:HB3	0.82	1.50	9	9
1:A:17:PHE:CZ	1:A:22:TYR:CD2	0.81	2.69	17	9
1:A:148:TYR:CE1	1:A:155:VAL:HG11	0.80	2.11	6	2
1:A:154:VAL:O	1:A:155:VAL:HG23	0.80	1.77	19	1
1:A:148:TYR:OH	1:A:155:VAL:HG11	0.80	1.75	3	8
1:A:109:TYR:CD2	1:A:145:VAL:HG23	0.80	2.11	8	13
1:A:99:PHE:CD1	1:A:129:TRP:CZ2	0.80	2.69	19	7
1:A:109:TYR:CD2	1:A:145:VAL:HG22	0.80	2.12	9	2
1:A:112:GLY:C	1:A:128:VAL:HG21	0.80	1.95	9	2
1:A:99:PHE:CE2	1:A:129:TRP:CZ2	0.80	2.69	16	3
1:A:59:TYR:CD2	1:A:68:PHE:CD1	0.79	2.70	16	7
1:A:54:VAL:HG22	1:A:73:ALA:HB3	0.79	1.55	15	3
1:A:99:PHE:CZ	1:A:101:VAL:HG22	0.79	2.13	12	3
1:A:29:VAL:CG2	1:A:130:VAL:HG12	0.79	2.08	11	13
1:A:99:PHE:CE2	1:A:129:TRP:CE2	0.78	2.71	3	2
1:A:26:TRP:CH2	1:A:110:ILE:HD12	0.78	2.14	13	16
1:A:109:TYR:CE2	1:A:145:VAL:CG2	0.78	2.67	20	2
1:A:10:GLU:O	1:A:11:VAL:HG13	0.77	1.79	17	12
1:A:47:TYR:CD2	1:A:56:VAL:HG22	0.77	2.13	14	11
1:A:109:TYR:CZ	1:A:145:VAL:HG23	0.77	2.14	11	1
1:A:17:PHE:CE1	1:A:22:TYR:CD2	0.77	2.73	20	14
1:A:99:PHE:CZ	1:A:129:TRP:CD2	0.77	2.73	3	2
1:A:99:PHE:CZ	1:A:129:TRP:CE2	0.76	2.73	8	7
1:A:108:ASN:CG	1:A:141:ALA:HB2	0.76	1.99	15	3
1:A:157:SER:HA	1:A:160:LEU:HD12	0.76	1.58	6	19
1:A:109:TYR:HB2	1:A:137:LEU:HD21	0.76	1.57	20	7
1:A:109:TYR:CD2	1:A:137:LEU:HD11	0.76	2.15	20	1
1:A:99:PHE:CZ	1:A:129:TRP:CZ2	0.76	2.74	8	2
1:A:111:ILE:HD11	1:A:148:TYR:CE2	0.75	2.16	18	13
1:A:61:VAL:HG21	1:A:172:VAL:HG22	0.75	1.58	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:108:ASN:OD1	1:A:141:ALA:HB2	0.74	1.82	3	1
1:A:111:ILE:HD11	1:A:148:TYR:CD2	0.74	2.17	3	11
1:A:99:PHE:CE1	1:A:129:TRP:CE2	0.74	2.76	17	7
1:A:153:PRO:O	1:A:154:VAL:HG13	0.73	1.83	4	8
1:A:99:PHE:CD1	1:A:129:TRP:CH2	0.73	2.77	11	6
1:A:138:THR:O	1:A:141:ALA:HB3	0.73	1.83	19	19
1:A:26:TRP:CH2	1:A:110:ILE:CD1	0.72	2.73	10	3
1:A:113:TYR:HA	1:A:128:VAL:HG22	0.72	1.61	8	2
1:A:26:TRP:CZ3	1:A:110:ILE:CD1	0.72	2.73	11	6
1:A:109:TYR:CE2	1:A:111:ILE:HD12	0.71	2.19	11	1
1:A:112:GLY:O	1:A:128:VAL:HG21	0.71	1.84	9	4
1:A:14:VAL:HG13	1:A:101:VAL:O	0.71	1.84	5	4
1:A:99:PHE:CG	1:A:129:TRP:CZ2	0.71	2.78	11	4
1:A:155:VAL:HG13	1:A:160:LEU:HD11	0.71	1.62	19	1
1:A:47:TYR:CD2	1:A:56:VAL:CG2	0.70	2.74	11	5
1:A:17:PHE:CE2	1:A:101:VAL:HG11	0.70	2.21	6	7
1:A:54:VAL:CG2	1:A:73:ALA:HB3	0.70	2.16	8	5
1:A:99:PHE:CZ	1:A:129:TRP:CE3	0.70	2.80	3	1
1:A:62:ILE:CD1	1:A:67:TYR:CD1	0.69	2.74	10	3
1:A:111:ILE:CD1	1:A:148:TYR:CD2	0.69	2.76	3	6
1:A:61:VAL:HG13	1:A:66:GLU:OE1	0.69	1.87	10	1
1:A:109:TYR:CE1	1:A:111:ILE:HD12	0.68	2.23	20	1
1:A:155:VAL:O	1:A:155:VAL:HG13	0.68	1.87	12	7
1:A:99:PHE:CE1	1:A:129:TRP:CZ2	0.68	2.81	14	5
1:A:26:TRP:CE3	1:A:110:ILE:HD12	0.68	2.24	15	3
1:A:137:LEU:HD23	1:A:141:ALA:HB1	0.68	1.64	13	1
1:A:145:VAL:HG12	1:A:149:LEU:CD1	0.67	2.20	9	3
1:A:22:TYR:CD1	1:A:110:ILE:HD11	0.67	2.25	1	7
1:A:170:CYS:O	1:A:172:VAL:HG23	0.67	1.90	4	5
1:A:62:ILE:HD12	1:A:67:TYR:CE1	0.67	2.25	18	1
1:A:47:TYR:CE2	1:A:56:VAL:HG21	0.67	2.24	11	5
1:A:109:TYR:CD2	1:A:145:VAL:CG2	0.67	2.77	2	9
1:A:89:THR:HG22	1:A:94:THR:HG23	0.66	1.66	19	4
1:A:104:THR:HG23	1:A:106:ASN:OD1	0.66	1.90	11	6
1:A:22:TYR:CD1	1:A:110:ILE:CD1	0.66	2.78	1	8
1:A:76:VAL:HG23	1:A:85:TYR:HB3	0.66	1.66	12	13
1:A:11:VAL:HG21	1:A:113:TYR:CD1	0.66	2.26	14	1
1:A:54:VAL:HG23	1:A:73:ALA:HB3	0.66	1.68	2	2
1:A:109:TYR:CE1	1:A:144:ALA:CB	0.66	2.78	5	13
1:A:112:GLY:O	1:A:128:VAL:HG13	0.66	1.90	12	5
1:A:23:HIS:O	1:A:26:TRP:CD1	0.66	2.49	11	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:ILE:O	1:A:64:GLY:N	0.66	2.29	16	2
1:A:109:TYR:CE2	1:A:111:ILE:HD13	0.66	2.25	12	7
1:A:137:LEU:CD1	1:A:145:VAL:HG21	0.65	2.20	11	4
1:A:22:TYR:CG	1:A:22:TYR:O	0.65	2.49	4	20
1:A:108:ASN:HB2	1:A:141:ALA:HB2	0.65	1.67	10	12
1:A:61:VAL:HG12	1:A:66:GLU:OE2	0.65	1.91	16	1
1:A:149:LEU:HD23	1:A:155:VAL:HG11	0.65	1.68	19	1
1:A:19:TRP:CE3	1:A:54:VAL:HG21	0.65	2.26	10	10
1:A:55:LYS:HG2	1:A:72:THR:HG22	0.65	1.65	8	1
1:A:109:TYR:HE1	1:A:130:VAL:HG13	0.65	1.50	11	1
1:A:14:VAL:HG13	1:A:101:VAL:HG12	0.65	1.69	19	10
1:A:11:VAL:HG21	1:A:113:TYR:CD2	0.65	2.26	17	1
1:A:74:TYR:CE1	1:A:75:PRO:O	0.65	2.50	14	19
1:A:99:PHE:CE1	1:A:129:TRP:CZ3	0.65	2.84	16	2
1:A:22:TYR:C	1:A:22:TYR:CD1	0.65	2.69	5	12
1:A:30:ALA:HB2	1:A:162:TYR:CD1	0.65	2.26	4	4
1:A:149:LEU:HD22	1:A:155:VAL:HG11	0.65	1.69	19	1
1:A:109:TYR:HE2	1:A:111:ILE:HD13	0.64	1.53	12	8
1:A:99:PHE:CE2	1:A:101:VAL:CG2	0.64	2.80	12	4
1:A:149:LEU:HD22	1:A:157:SER:CB	0.64	2.22	9	7
1:A:11:VAL:HG11	1:A:113:TYR:CD2	0.64	2.27	17	2
1:A:19:TRP:CZ3	1:A:54:VAL:HG21	0.64	2.28	2	3
1:A:31:LYS:O	1:A:161:VAL:HG12	0.63	1.93	2	3
1:A:39:TYR:CA	1:A:62:ILE:HG23	0.63	2.24	5	1
1:A:14:VAL:HG11	1:A:17:PHE:CD1	0.63	2.28	18	2
1:A:137:LEU:CD2	1:A:141:ALA:HB1	0.63	2.23	2	4
1:A:38:LYS:O	1:A:39:TYR:CD1	0.63	2.51	10	4
1:A:61:VAL:HG21	1:A:172:VAL:HG21	0.63	1.70	6	1
1:A:8:CYS:N	1:A:124:HIS:CE1	0.63	2.67	14	1
1:A:15:ASP:HA	1:A:81:ILE:HD13	0.63	1.70	2	8
1:A:39:TYR:N	1:A:62:ILE:HG23	0.63	2.08	5	2
1:A:126:ASP:OD2	1:A:128:VAL:HG23	0.62	1.94	19	1
1:A:17:PHE:CE1	1:A:104:THR:CG2	0.62	2.83	17	4
1:A:7:ALA:C	1:A:124:HIS:CE1	0.62	2.72	14	2
1:A:62:ILE:HD12	1:A:67:TYR:CD2	0.62	2.29	11	7
1:A:6:GLY:O	1:A:124:HIS:CD2	0.62	2.53	4	5
1:A:17:PHE:CE2	1:A:101:VAL:HG21	0.62	2.30	14	7
1:A:131:LEU:N	1:A:131:LEU:CD2	0.62	2.63	1	15
1:A:99:PHE:CD2	1:A:129:TRP:CZ2	0.62	2.88	11	4
1:A:32:TYR:CD1	1:A:160:LEU:HD23	0.62	2.30	17	2
1:A:99:PHE:CE2	1:A:101:VAL:HG22	0.61	2.30	12	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:109:TYR:CE1	1:A:110:ILE:O	0.61	2.53	11	1
1:A:115:CYS:SG	1:A:124:HIS:CD2	0.61	2.93	11	2
1:A:84:ILE:H	1:A:84:ILE:HD12	0.61	1.54	11	16
1:A:113:TYR:CE1	1:A:154:VAL:HG23	0.61	2.30	2	5
1:A:137:LEU:HD12	1:A:137:LEU:O	0.61	1.96	16	2
1:A:109:TYR:C	1:A:109:TYR:CD1	0.61	2.73	7	4
1:A:149:LEU:HD22	1:A:155:VAL:CG1	0.61	2.25	19	1
1:A:104:THR:HG23	1:A:106:ASN:HD21	0.61	1.56	20	1
1:A:85:TYR:C	1:A:85:TYR:CD1	0.61	2.73	14	12
1:A:29:VAL:HG11	1:A:137:LEU:CG	0.61	2.25	13	3
1:A:31:LYS:C	1:A:160:LEU:HD23	0.61	2.16	14	3
1:A:99:PHE:CZ	1:A:129:TRP:NE1	0.60	2.69	14	5
1:A:118:ASP:OD1	1:A:125:TRP:CD1	0.60	2.54	7	1
1:A:7:ALA:O	1:A:124:HIS:CE1	0.60	2.53	4	5
1:A:109:TYR:CE2	1:A:145:VAL:HG22	0.60	2.30	9	2
1:A:109:TYR:HB2	1:A:137:LEU:HD23	0.60	1.72	16	1
1:A:32:TYR:CD1	1:A:160:LEU:CD2	0.60	2.85	17	2
1:A:17:PHE:CZ	1:A:101:VAL:HG11	0.60	2.31	15	5
1:A:49:PRO:HA	1:A:54:VAL:HG13	0.60	1.74	7	1
1:A:3:TYR:O	1:A:4:HIS:CD2	0.60	2.55	4	7
1:A:64:GLY:HA2	1:A:172:VAL:HG13	0.60	1.72	8	2
1:A:3:TYR:CG	1:A:3:TYR:O	0.60	2.55	8	1
1:A:109:TYR:CE2	1:A:130:VAL:CG1	0.60	2.84	20	1
1:A:109:TYR:CZ	1:A:145:VAL:CG2	0.60	2.85	20	1
1:A:109:TYR:CD1	1:A:109:TYR:O	0.60	2.55	10	5
1:A:165:PHE:CD1	1:A:166:SER:N	0.60	2.69	5	1
1:A:99:PHE:CE1	1:A:129:TRP:CD2	0.60	2.90	11	1
1:A:3:TYR:C	1:A:4:HIS:CD2	0.60	2.76	16	11
1:A:86:HIS:CD2	1:A:88:ARG:NH1	0.60	2.70	5	1
1:A:27:TRP:CZ2	1:A:43:GLY:O	0.60	2.55	14	3
1:A:41:LYS:CB	1:A:165:PHE:CD1	0.60	2.85	18	1
1:A:108:ASN:CB	1:A:141:ALA:HB2	0.60	2.26	4	9
1:A:113:TYR:CZ	1:A:154:VAL:CG2	0.60	2.85	19	4
1:A:109:TYR:HB3	1:A:141:ALA:HB1	0.60	1.74	4	3
1:A:85:TYR:CD1	1:A:85:TYR:O	0.59	2.55	4	9
1:A:26:TRP:CZ3	1:A:108:ASN:O	0.59	2.55	10	7
1:A:145:VAL:O	1:A:149:LEU:HD12	0.59	1.98	12	1
1:A:152:SER:HB2	1:A:155:VAL:HG12	0.59	1.72	12	1
1:A:33:PRO:HA	1:A:39:TYR:CE1	0.59	2.32	16	3
1:A:74:TYR:CD1	1:A:75:PRO:O	0.59	2.55	3	14
1:A:62:ILE:HD12	1:A:67:TYR:CB	0.59	2.26	6	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:PHE:CG	1:A:129:TRP:CH2	0.59	2.90	11	2
1:A:33:PRO:HB3	1:A:161:VAL:HG11	0.59	1.74	3	1
1:A:45:ALA:HB2	1:A:58:ARG:HG3	0.59	1.73	3	7
1:A:11:VAL:HB	1:A:102:LEU:HD22	0.59	1.75	4	1
1:A:165:PHE:CG	1:A:166:SER:N	0.59	2.70	8	17
1:A:38:LYS:C	1:A:39:TYR:CD1	0.59	2.76	6	1
1:A:59:TYR:CD1	1:A:67:TYR:O	0.58	2.56	19	1
1:A:22:TYR:CD1	1:A:22:TYR:C	0.58	2.76	1	6
1:A:165:PHE:CD2	1:A:166:SER:N	0.58	2.71	16	6
1:A:21:GLN:HE22	1:A:106:ASN:ND2	0.58	1.96	15	2
1:A:38:LYS:O	1:A:39:TYR:CG	0.58	2.56	13	8
1:A:14:VAL:HG11	1:A:17:PHE:CE1	0.58	2.34	5	2
1:A:154:VAL:O	1:A:155:VAL:C	0.58	2.40	15	4
1:A:102:LEU:HD13	1:A:148:TYR:HE1	0.58	1.59	10	4
1:A:21:GLN:O	1:A:23:HIS:CD2	0.58	2.56	4	3
1:A:61:VAL:HG23	1:A:61:VAL:O	0.58	1.99	8	5
1:A:111:ILE:CD1	1:A:148:TYR:CE2	0.58	2.87	18	6
1:A:17:PHE:HE2	1:A:101:VAL:HG21	0.57	1.56	2	11
1:A:148:TYR:O	1:A:152:SER:N	0.57	2.37	19	5
1:A:148:TYR:CE2	1:A:155:VAL:HG11	0.57	2.35	5	7
1:A:89:THR:HG22	1:A:94:THR:CG2	0.57	2.30	15	4
1:A:25:LYS:O	1:A:26:TRP:CD1	0.57	2.57	15	2
1:A:26:TRP:CZ3	1:A:110:ILE:HD13	0.57	2.35	10	1
1:A:129:TRP:CD1	1:A:129:TRP:O	0.57	2.58	19	7
1:A:58:ARG:O	1:A:68:PHE:CD2	0.57	2.57	4	2
1:A:47:TYR:CE2	1:A:56:VAL:HG22	0.57	2.35	18	2
1:A:19:TRP:CZ3	1:A:22:TYR:CE2	0.57	2.93	2	9
1:A:129:TRP:CD1	1:A:131:LEU:HD21	0.57	2.35	1	5
1:A:152:SER:HB2	1:A:155:VAL:HG13	0.57	1.76	2	2
1:A:64:GLY:HA2	1:A:172:VAL:HG22	0.57	1.76	4	1
1:A:61:VAL:CG2	1:A:172:VAL:HG22	0.57	2.30	18	1
1:A:109:TYR:CE2	1:A:130:VAL:HG11	0.57	2.35	20	1
1:A:73:ALA:HB2	1:A:86:HIS:NE2	0.56	2.15	2	1
1:A:155:VAL:CG1	1:A:155:VAL:O	0.56	2.54	20	2
1:A:17:PHE:CE1	1:A:101:VAL:HG11	0.56	2.36	5	1
1:A:3:TYR:C	1:A:3:TYR:CD1	0.56	2.77	14	1
1:A:20:SER:O	1:A:23:HIS:CE1	0.56	2.59	15	3
1:A:30:ALA:O	1:A:130:VAL:HG21	0.56	2.00	3	2
1:A:129:TRP:HD1	1:A:131:LEU:HD21	0.56	1.61	1	6
1:A:14:VAL:HG21	1:A:17:PHE:CG	0.56	2.36	18	8
1:A:49:PRO:HA	1:A:54:VAL:HG12	0.56	1.78	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:4:HIS:CD2	1:A:126:ASP:OD1	0.56	2.59	4	1
1:A:102:LEU:HD21	1:A:113:TYR:HB2	0.56	1.78	4	1
1:A:62:ILE:CD1	1:A:67:TYR:CG	0.56	2.83	17	4
1:A:113:TYR:CD2	1:A:128:VAL:HG21	0.56	2.36	8	1
1:A:3:TYR:O	1:A:3:TYR:CD2	0.56	2.58	20	1
1:A:30:ALA:HB1	1:A:161:VAL:O	0.55	2.00	11	1
1:A:111:ILE:CG1	1:A:148:TYR:CZ	0.55	2.89	18	3
1:A:27:TRP:CD1	1:A:27:TRP:N	0.55	2.74	13	1
1:A:33:PRO:CA	1:A:39:TYR:CE1	0.55	2.89	16	1
1:A:19:TRP:CE3	1:A:22:TYR:CE2	0.55	2.95	12	3
1:A:47:TYR:CE2	1:A:56:VAL:CG2	0.55	2.90	2	6
1:A:45:ALA:HB2	1:A:58:ARG:HA	0.55	1.78	9	1
1:A:165:PHE:O	1:A:169:ALA:HB2	0.55	2.01	7	5
1:A:29:VAL:HG22	1:A:132:SER:CB	0.55	2.31	7	2
1:A:55:LYS:CG	1:A:72:THR:HG22	0.55	2.32	8	1
1:A:29:VAL:HG13	1:A:132:SER:OG	0.55	2.02	11	4
1:A:68:PHE:O	1:A:68:PHE:CD2	0.55	2.60	16	2
1:A:155:VAL:HG23	1:A:160:LEU:HD11	0.55	1.78	13	4
1:A:15:ASP:O	1:A:81:ILE:HD12	0.54	2.02	6	1
1:A:128:VAL:HG22	1:A:129:TRP:H	0.54	1.62	7	2
1:A:30:ALA:O	1:A:130:VAL:CG2	0.54	2.55	20	13
1:A:61:VAL:HG21	1:A:170:CYS:O	0.54	2.01	5	3
1:A:115:CYS:SG	1:A:124:HIS:CE1	0.54	3.01	3	1
1:A:47:TYR:CG	1:A:56:VAL:HG22	0.54	2.38	11	2
1:A:126:ASP:O	1:A:127:HIS:CG	0.54	2.60	16	2
1:A:109:TYR:HD2	1:A:145:VAL:HG23	0.54	1.63	15	3
1:A:32:TYR:CE2	1:A:156:ASP:OD2	0.54	2.61	14	2
1:A:89:THR:CG2	1:A:94:THR:HG23	0.54	2.32	2	3
1:A:105:ASP:CG	1:A:144:ALA:HB2	0.53	2.23	20	1
1:A:9:PRO:CG	1:A:113:TYR:OH	0.53	2.57	17	1
1:A:14:VAL:O	1:A:82:GLY:N	0.53	2.41	13	20
1:A:34:SER:CB	1:A:35:PRO:CD	0.53	2.86	3	13
1:A:68:PHE:O	1:A:68:PHE:CG	0.53	2.61	17	2
1:A:155:VAL:O	1:A:155:VAL:CG1	0.53	2.57	12	3
1:A:148:TYR:OH	1:A:155:VAL:CG1	0.53	2.56	14	4
1:A:61:VAL:HG12	1:A:66:GLU:HG2	0.53	1.79	7	1
1:A:145:VAL:HG12	1:A:149:LEU:HD12	0.53	1.78	9	4
1:A:135:MET:O	1:A:136:VAL:HG23	0.53	2.03	5	1
1:A:109:TYR:CE2	1:A:145:VAL:HG21	0.53	2.39	20	1
1:A:86:HIS:N	1:A:97:THR:O	0.53	2.42	3	19
1:A:17:PHE:CE1	1:A:22:TYR:CE2	0.53	2.96	20	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:VAL:CG2	1:A:113:TYR:CE1	0.53	2.88	14	1
1:A:32:TYR:CZ	1:A:156:ASP:OD1	0.53	2.62	19	1
1:A:165:PHE:N	1:A:165:PHE:CD1	0.53	2.77	9	1
1:A:59:TYR:CG	1:A:59:TYR:O	0.53	2.62	3	1
1:A:108:ASN:O	1:A:133:ARG:N	0.53	2.42	19	7
1:A:137:LEU:HD12	1:A:141:ALA:HB1	0.53	1.81	5	1
1:A:99:PHE:CE1	1:A:129:TRP:CH2	0.53	2.96	16	2
1:A:137:LEU:HD11	1:A:145:VAL:CG2	0.53	2.31	6	4
1:A:101:VAL:O	1:A:102:LEU:C	0.52	2.48	11	20
1:A:17:PHE:CZ	1:A:104:THR:CG2	0.52	2.89	17	1
1:A:137:LEU:HD11	1:A:141:ALA:HB1	0.52	1.81	1	1
1:A:113:TYR:CE2	1:A:154:VAL:HG23	0.52	2.40	9	2
1:A:41:LYS:HB2	1:A:165:PHE:CD1	0.52	2.38	18	3
1:A:88:ARG:HD3	1:A:90:VAL:HG23	0.52	1.81	12	1
1:A:138:THR:O	1:A:141:ALA:CB	0.52	2.57	19	1
1:A:30:ALA:HB2	1:A:162:TYR:CG	0.52	2.39	13	1
1:A:29:VAL:HG11	1:A:137:LEU:CD2	0.52	2.34	5	1
1:A:102:LEU:HD13	1:A:148:TYR:CE1	0.52	2.40	10	3
1:A:2:VAL:O	1:A:2:VAL:HG23	0.52	2.05	20	2
1:A:62:ILE:HG13	1:A:67:TYR:CE1	0.52	2.39	10	3
1:A:51:GLY:O	1:A:52:LYS:CB	0.52	2.58	2	7
1:A:137:LEU:C	1:A:138:THR:CG2	0.52	2.77	13	15
1:A:127:HIS:CG	1:A:127:HIS:O	0.52	2.62	10	1
1:A:84:ILE:O	1:A:99:PHE:CB	0.52	2.58	3	1
1:A:14:VAL:HG21	1:A:17:PHE:HB2	0.52	1.82	17	4
1:A:152:SER:CB	1:A:155:VAL:HG13	0.52	2.35	5	3
1:A:165:PHE:CE2	1:A:170:CYS:SG	0.52	3.03	3	1
1:A:113:TYR:CE1	1:A:126:ASP:OD1	0.52	2.63	8	1
1:A:19:TRP:CG	1:A:54:VAL:HG11	0.52	2.40	12	2
1:A:31:LYS:O	1:A:160:LEU:HD23	0.52	2.05	19	1
1:A:41:LYS:O	1:A:42:CYS:CB	0.52	2.58	13	1
1:A:102:LEU:HD23	1:A:102:LEU:N	0.52	2.20	4	1
1:A:61:VAL:HG21	1:A:172:VAL:CG2	0.52	2.35	7	3
1:A:29:VAL:CG1	1:A:137:LEU:N	0.52	2.73	13	2
1:A:84:ILE:HD12	1:A:84:ILE:N	0.51	2.21	11	6
1:A:111:ILE:CG1	1:A:148:TYR:CE2	0.51	2.94	19	4
1:A:44:TRP:CD1	1:A:44:TRP:O	0.51	2.63	16	1
1:A:153:PRO:HD2	1:A:155:VAL:HG12	0.51	1.83	14	2
1:A:101:VAL:HG22	1:A:129:TRP:HZ2	0.51	1.65	3	1
1:A:104:THR:CG2	1:A:106:ASN:OD1	0.51	2.57	11	2
1:A:111:ILE:HG12	1:A:148:TYR:CZ	0.51	2.41	18	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:113:TYR:CE2	1:A:126:ASP:OD1	0.51	2.64	2	1
1:A:137:LEU:HD21	1:A:145:VAL:HB	0.51	1.80	7	4
1:A:61:VAL:CG1	1:A:169:ALA:O	0.51	2.59	19	1
1:A:113:TYR:CZ	1:A:154:VAL:HG21	0.51	2.40	1	3
1:A:30:ALA:HB2	1:A:162:TYR:CE1	0.51	2.40	4	1
1:A:61:VAL:HG11	1:A:172:VAL:CG2	0.51	2.36	19	2
1:A:58:ARG:O	1:A:68:PHE:CD1	0.51	2.64	7	2
1:A:154:VAL:O	1:A:155:VAL:CG2	0.51	2.55	19	1
1:A:23:HIS:O	1:A:26:TRP:NE1	0.51	2.44	1	19
1:A:10:GLU:O	1:A:11:VAL:CG1	0.51	2.59	9	6
1:A:137:LEU:HD23	1:A:145:VAL:HG11	0.51	1.83	12	3
1:A:121:LYS:O	1:A:122:LYS:CB	0.51	2.58	14	6
1:A:145:VAL:CG1	1:A:149:LEU:HD11	0.51	2.35	4	1
1:A:29:VAL:CG2	1:A:131:LEU:C	0.51	2.79	7	2
1:A:29:VAL:HG11	1:A:137:LEU:HD22	0.50	1.83	5	1
1:A:117:TYR:CE1	1:A:119:GLU:OE1	0.50	2.64	5	1
1:A:71:GLY:HA3	1:A:86:HIS:CE1	0.50	2.41	13	4
1:A:99:PHE:CD1	1:A:114:SER:HB2	0.50	2.41	16	2
1:A:21:GLN:O	1:A:22:TYR:C	0.50	2.50	5	4
1:A:109:TYR:CD1	1:A:109:TYR:C	0.50	2.83	10	3
1:A:115:CYS:HB2	1:A:124:HIS:CD2	0.50	2.42	20	2
1:A:22:TYR:O	1:A:22:TYR:CD1	0.50	2.65	14	4
1:A:33:PRO:O	1:A:39:TYR:CD1	0.50	2.64	16	1
1:A:49:PRO:CA	1:A:54:VAL:HG12	0.50	2.36	2	1
1:A:112:GLY:O	1:A:128:VAL:CG2	0.50	2.60	11	2
1:A:63:HIS:CE1	1:A:169:ALA:HB2	0.50	2.42	16	1
1:A:90:VAL:O	1:A:93:TYR:CB	0.50	2.59	4	1
1:A:99:PHE:CZ	1:A:129:TRP:CH2	0.50	3.00	16	1
1:A:74:TYR:CG	1:A:75:PRO:HD2	0.50	2.42	10	19
1:A:165:PHE:CD1	1:A:165:PHE:N	0.50	2.80	18	1
1:A:154:VAL:O	1:A:154:VAL:HG23	0.50	2.06	19	1
1:A:41:LYS:HB3	1:A:165:PHE:CD1	0.50	2.42	13	11
1:A:136:VAL:HG12	1:A:138:THR:CG2	0.49	2.37	1	2
1:A:85:TYR:CD1	1:A:85:TYR:C	0.49	2.84	5	7
1:A:90:VAL:HG12	1:A:90:VAL:O	0.49	2.06	11	1
1:A:31:LYS:HE3	1:A:39:TYR:CE1	0.49	2.42	13	1
1:A:74:TYR:CD1	1:A:85:TYR:CE2	0.49	2.99	3	5
1:A:149:LEU:O	1:A:152:SER:N	0.49	2.45	17	14
1:A:109:TYR:CD1	1:A:110:ILE:N	0.49	2.80	11	1
1:A:20:SER:CB	1:A:21:GLN:OE1	0.49	2.60	3	5
1:A:4:HIS:O	1:A:121:LYS:CE	0.49	2.59	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:PRO:O	1:A:11:VAL:HG22	0.49	2.07	17	1
1:A:21:GLN:NE2	1:A:106:ASN:ND2	0.49	2.60	17	1
1:A:128:VAL:CG2	1:A:129:TRP:N	0.49	2.74	6	3
1:A:81:ILE:CG2	1:A:82:GLY:N	0.49	2.75	12	4
1:A:85:TYR:O	1:A:85:TYR:CG	0.49	2.66	7	6
1:A:148:TYR:CE1	1:A:152:SER:OG	0.49	2.65	18	1
1:A:22:TYR:CD1	1:A:22:TYR:O	0.49	2.65	3	6
1:A:31:LYS:O	1:A:32:TYR:C	0.49	2.51	11	4
1:A:14:VAL:CG1	1:A:101:VAL:HG12	0.49	2.38	19	4
1:A:30:ALA:CB	1:A:161:VAL:O	0.49	2.60	11	1
1:A:128:VAL:HG23	1:A:129:TRP:N	0.49	2.22	13	2
1:A:29:VAL:HG21	1:A:132:SER:HB2	0.49	1.83	2	2
1:A:153:PRO:O	1:A:154:VAL:CG1	0.49	2.59	13	3
1:A:163:SER:O	1:A:164:ASP:CB	0.49	2.60	9	11
1:A:38:LYS:O	1:A:39:TYR:CD2	0.49	2.66	17	1
1:A:39:TYR:C	1:A:62:ILE:HG23	0.49	2.28	7	1
1:A:56:VAL:N	1:A:71:GLY:O	0.49	2.46	14	9
1:A:102:LEU:HD21	1:A:113:TYR:CB	0.49	2.37	4	1
1:A:62:ILE:O	1:A:65:LYS:N	0.49	2.45	16	3
1:A:113:TYR:CD1	1:A:113:TYR:C	0.49	2.86	14	1
1:A:105:ASP:OD1	1:A:144:ALA:HB2	0.49	2.07	20	1
1:A:111:ILE:HG12	1:A:148:TYR:CE1	0.48	2.42	1	8
1:A:128:VAL:HG22	1:A:129:TRP:N	0.48	2.23	1	5
1:A:113:TYR:CZ	1:A:126:ASP:CG	0.48	2.86	16	1
1:A:154:VAL:O	1:A:154:VAL:CG2	0.48	2.60	19	1
1:A:38:LYS:C	1:A:39:TYR:CG	0.48	2.87	6	1
1:A:86:HIS:CD2	1:A:86:HIS:C	0.48	2.86	11	5
1:A:27:TRP:O	1:A:132:SER:N	0.48	2.46	16	4
1:A:68:PHE:CZ	1:A:70:GLU:HG2	0.48	2.43	2	3
1:A:7:ALA:O	1:A:8:CYS:C	0.48	2.50	14	3
1:A:108:ASN:OD1	1:A:133:ARG:CB	0.48	2.61	9	1
1:A:165:PHE:HB2	1:A:169:ALA:HB3	0.48	1.83	18	2
1:A:137:LEU:HB2	1:A:141:ALA:HB1	0.48	1.85	19	1
1:A:90:VAL:HG12	1:A:91:GLY:N	0.48	2.23	7	5
1:A:68:PHE:CZ	1:A:70:GLU:HG3	0.48	2.43	18	3
1:A:31:LYS:O	1:A:161:VAL:CG1	0.48	2.61	10	1
1:A:3:TYR:HB2	1:A:125:TRP:CZ3	0.48	2.44	14	4
1:A:59:TYR:CD2	1:A:68:PHE:HB2	0.48	2.43	19	1
1:A:29:VAL:O	1:A:163:SER:N	0.48	2.46	7	10
1:A:154:VAL:O	1:A:156:ASP:N	0.48	2.46	5	7
1:A:25:LYS:CG	1:A:45:ALA:O	0.48	2.62	4	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:PHE:CE1	1:A:129:TRP:CE3	0.48	3.02	3	1
1:A:30:ALA:HA	1:A:161:VAL:O	0.48	2.09	20	4
1:A:145:VAL:O	1:A:149:LEU:CD1	0.48	2.61	12	1
1:A:109:TYR:HB2	1:A:137:LEU:HD11	0.48	1.86	7	1
1:A:88:ARG:CG	1:A:88:ARG:O	0.48	2.62	18	1
1:A:32:TYR:CE2	1:A:159:LYS:HG2	0.48	2.44	16	1
1:A:112:GLY:C	1:A:128:VAL:HG23	0.48	2.26	16	1
1:A:74:TYR:CD2	1:A:75:PRO:HD2	0.48	2.44	2	8
1:A:74:TYR:CD1	1:A:75:PRO:HD2	0.48	2.43	10	2
1:A:165:PHE:O	1:A:169:ALA:CB	0.48	2.61	19	5
1:A:116:ARG:O	1:A:116:ARG:CG	0.48	2.62	17	2
1:A:30:ALA:CA	1:A:161:VAL:O	0.48	2.61	11	2
1:A:29:VAL:HG13	1:A:132:SER:CB	0.48	2.39	12	3
1:A:21:GLN:CD	1:A:22:TYR:N	0.48	2.68	13	1
1:A:104:THR:OG1	1:A:110:ILE:CG1	0.47	2.62	14	1
1:A:23:HIS:C	1:A:23:HIS:CD2	0.47	2.87	14	6
1:A:105:ASP:O	1:A:106:ASN:ND2	0.47	2.46	3	3
1:A:27:TRP:CZ3	1:A:40:GLY:O	0.47	2.68	4	1
1:A:103:SER:O	1:A:111:ILE:HG22	0.47	2.09	5	2
1:A:61:VAL:O	1:A:61:VAL:HG13	0.47	2.08	6	2
1:A:14:VAL:N	1:A:101:VAL:O	0.47	2.47	19	8
1:A:17:PHE:CZ	1:A:101:VAL:HG21	0.47	2.44	5	1
1:A:2:VAL:O	1:A:125:TRP:CE3	0.47	2.67	17	1
1:A:155:VAL:HG22	1:A:160:LEU:CD1	0.47	2.32	5	4
1:A:44:TRP:N	1:A:44:TRP:CE3	0.47	2.82	4	2
1:A:165:PHE:O	1:A:166:SER:CB	0.47	2.62	6	5
1:A:21:GLN:O	1:A:23:HIS:N	0.47	2.48	7	8
1:A:76:VAL:HG12	1:A:77:GLY:N	0.47	2.24	10	3
1:A:112:GLY:HA3	1:A:129:TRP:CZ2	0.47	2.44	3	1
1:A:29:VAL:CG2	1:A:132:SER:N	0.47	2.78	7	1
1:A:41:LYS:HD3	1:A:165:PHE:CE1	0.47	2.44	8	1
1:A:9:PRO:CD	1:A:113:TYR:OH	0.47	2.62	11	2
1:A:45:ALA:CB	1:A:57:SER:O	0.47	2.63	16	1
1:A:115:CYS:HB3	1:A:124:HIS:CD2	0.47	2.44	17	1
1:A:113:TYR:OH	1:A:154:VAL:CG2	0.47	2.62	19	1
1:A:62:ILE:O	1:A:63:HIS:C	0.47	2.53	17	10
1:A:101:VAL:HG13	1:A:111:ILE:O	0.47	2.10	7	4
1:A:113:TYR:CZ	1:A:126:ASP:OD1	0.47	2.67	2	1
1:A:74:TYR:HB3	1:A:85:TYR:CE2	0.47	2.45	17	8
1:A:109:TYR:CZ	1:A:144:ALA:HB1	0.47	2.44	10	3
1:A:111:ILE:HG12	1:A:148:TYR:CD1	0.47	2.45	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:3:TYR:CD2	1:A:121:LYS:HE2	0.47	2.45	14	1
1:A:41:LYS:NZ	1:A:163:SER:CB	0.47	2.78	14	1
1:A:127:HIS:O	1:A:127:HIS:CG	0.47	2.68	15	1
1:A:60:ASP:OD1	1:A:67:TYR:CZ	0.47	2.67	17	1
1:A:99:PHE:CZ	1:A:128:VAL:HG23	0.47	2.45	20	1
1:A:109:TYR:HB2	1:A:137:LEU:HD13	0.47	1.87	5	1
1:A:110:ILE:N	1:A:131:LEU:O	0.47	2.48	8	1
1:A:111:ILE:CG2	1:A:111:ILE:O	0.47	2.61	12	1
1:A:113:TYR:CE1	1:A:154:VAL:CG2	0.47	2.97	19	1
1:A:4:HIS:HB2	1:A:124:HIS:CE1	0.47	2.45	1	2
1:A:33:PRO:O	1:A:34:SER:O	0.47	2.33	19	5
1:A:137:LEU:O	1:A:138:THR:HG22	0.47	2.10	10	4
1:A:149:LEU:HD21	1:A:160:LEU:CD1	0.47	2.40	2	1
1:A:85:TYR:CD1	1:A:96:LYS:HB2	0.47	2.44	8	1
1:A:129:TRP:CD1	1:A:129:TRP:C	0.47	2.88	8	2
1:A:74:TYR:C	1:A:84:ILE:HG23	0.47	2.30	10	1
1:A:45:ALA:HB2	1:A:58:ARG:CG	0.47	2.40	11	1
1:A:19:TRP:CH2	1:A:84:ILE:HG21	0.47	2.45	17	1
1:A:62:ILE:O	1:A:62:ILE:HG22	0.47	2.10	17	1
1:A:105:ASP:C	1:A:106:ASN:ND2	0.46	2.68	3	5
1:A:62:ILE:CD1	1:A:67:TYR:CD2	0.46	2.98	11	2
1:A:4:HIS:NE2	1:A:126:ASP:OD2	0.46	2.48	4	2
1:A:27:TRP:NE1	1:A:43:GLY:O	0.46	2.47	9	2
1:A:26:TRP:O	1:A:27:TRP:CD1	0.46	2.67	10	1
1:A:2:VAL:HG21	1:A:126:ASP:HB3	0.46	1.86	20	1
1:A:54:VAL:O	1:A:54:VAL:HG23	0.46	2.10	12	2
1:A:39:TYR:N	1:A:39:TYR:CD1	0.46	2.83	20	1
1:A:29:VAL:CG2	1:A:132:SER:HB3	0.46	2.40	7	6
1:A:90:VAL:O	1:A:92:GLY:N	0.46	2.49	15	7
1:A:166:SER:O	1:A:169:ALA:N	0.46	2.48	19	14
1:A:31:LYS:HE2	1:A:39:TYR:CE1	0.46	2.45	10	1
1:A:17:PHE:HE1	1:A:104:THR:HG21	0.46	1.71	12	1
1:A:117:TYR:CZ	1:A:122:LYS:O	0.46	2.68	1	1
1:A:29:VAL:HG23	1:A:130:VAL:O	0.46	2.10	4	1
1:A:41:LYS:HG2	1:A:165:PHE:CE1	0.46	2.45	13	1
1:A:33:PRO:HA	1:A:39:TYR:CZ	0.46	2.45	20	2
1:A:149:LEU:O	1:A:152:SER:OG	0.46	2.33	16	1
1:A:19:TRP:O	1:A:23:HIS:ND1	0.46	2.49	17	1
1:A:60:ASP:OD1	1:A:61:VAL:N	0.46	2.49	2	2
1:A:21:GLN:NE2	1:A:106:ASN:CG	0.46	2.69	17	1
1:A:118:ASP:OD2	1:A:125:TRP:NE1	0.46	2.48	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:155:VAL:HG12	1:A:155:VAL:O	0.46	2.11	19	1
1:A:167:GLU:O	1:A:171:LYS:N	0.46	2.49	5	5
1:A:90:VAL:CG1	1:A:91:GLY:N	0.46	2.79	6	1
1:A:85:TYR:CA	1:A:97:THR:O	0.45	2.63	7	15
1:A:8:CYS:N	1:A:115:CYS:SG	0.45	2.89	3	3
1:A:3:TYR:O	1:A:4:HIS:CG	0.45	2.69	18	2
1:A:27:TRP:CZ2	1:A:41:LYS:HG2	0.45	2.47	8	1
1:A:111:ILE:HD11	1:A:148:TYR:CG	0.45	2.47	11	1
1:A:60:ASP:OD1	1:A:60:ASP:C	0.45	2.55	14	1
1:A:9:PRO:HD2	1:A:113:TYR:CE2	0.45	2.46	17	1
1:A:48:THR:O	1:A:55:LYS:N	0.45	2.48	8	4
1:A:60:ASP:OD1	1:A:60:ASP:N	0.45	2.48	17	1
1:A:11:VAL:CB	1:A:102:LEU:HD21	0.45	2.42	15	4
1:A:80:LYS:CG	1:A:81:ILE:N	0.45	2.80	7	1
1:A:73:ALA:HB2	1:A:86:HIS:CE1	0.45	2.46	10	1
1:A:71:GLY:CA	1:A:87:SER:O	0.45	2.65	9	4
1:A:56:VAL:O	1:A:71:GLY:N	0.45	2.46	5	1
1:A:99:PHE:CD1	1:A:129:TRP:CZ3	0.45	3.04	11	2
1:A:28:GLU:HA	1:A:130:VAL:O	0.45	2.11	9	1
1:A:3:TYR:CE1	1:A:4:HIS:O	0.45	2.70	13	1
1:A:113:TYR:CD1	1:A:128:VAL:CG2	0.45	3.00	3	1
1:A:124:HIS:CD2	1:A:124:HIS:C	0.45	2.90	17	3
1:A:155:VAL:HG13	1:A:160:LEU:CD1	0.45	2.37	19	1
1:A:74:TYR:O	1:A:85:TYR:N	0.45	2.48	3	2
1:A:149:LEU:CD2	1:A:155:VAL:CG1	0.45	2.83	19	1
1:A:34:SER:CB	1:A:35:PRO:HD2	0.45	2.41	3	6
1:A:14:VAL:CG2	1:A:82:GLY:HA2	0.45	2.42	18	2
1:A:85:TYR:CD1	1:A:96:LYS:HB3	0.45	2.47	6	4
1:A:102:LEU:HD12	1:A:148:TYR:CE1	0.45	2.46	4	1
1:A:60:ASP:N	1:A:60:ASP:OD1	0.45	2.50	10	1
1:A:132:SER:HB2	1:A:137:LEU:HD13	0.45	1.89	18	2
1:A:33:PRO:CB	1:A:39:TYR:CE1	0.45	3.00	16	1
1:A:118:ASP:O	1:A:122:LYS:N	0.45	2.49	2	2
1:A:100:ASN:N	1:A:100:ASN:OD1	0.45	2.49	12	1
1:A:162:TYR:O	1:A:163:SER:C	0.45	2.56	13	8
1:A:32:TYR:O	1:A:39:TYR:OH	0.45	2.35	13	2
1:A:104:THR:HG23	1:A:106:ASN:ND2	0.45	2.24	20	1
1:A:113:TYR:CD1	1:A:128:VAL:HG22	0.44	2.47	3	1
1:A:145:VAL:CG1	1:A:149:LEU:CD1	0.44	2.95	4	3
1:A:60:ASP:OD2	1:A:61:VAL:N	0.44	2.50	5	1
1:A:155:VAL:HG13	1:A:155:VAL:O	0.44	2.11	17	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:TRP:CH2	1:A:108:ASN:O	0.44	2.70	13	1
1:A:60:ASP:O	1:A:67:TYR:N	0.44	2.47	18	2
1:A:138:THR:O	1:A:139:GLY:C	0.44	2.55	10	3
1:A:30:ALA:O	1:A:160:LEU:HD22	0.44	2.12	12	1
1:A:29:VAL:HG11	1:A:137:LEU:HB2	0.44	1.88	15	1
1:A:110:ILE:O	1:A:130:VAL:HG13	0.44	2.13	4	2
1:A:32:TYR:CE1	1:A:128:VAL:CG1	0.44	3.01	5	1
1:A:137:LEU:CD1	1:A:145:VAL:CG2	0.44	2.95	11	1
1:A:27:TRP:CE3	1:A:135:MET:HG2	0.44	2.47	14	1
1:A:14:VAL:HG12	1:A:103:SER:HA	0.44	1.90	20	1
1:A:129:TRP:O	1:A:129:TRP:CG	0.44	2.70	3	1
1:A:99:PHE:CE1	1:A:112:GLY:HA3	0.44	2.48	4	1
1:A:137:LEU:O	1:A:137:LEU:CD1	0.44	2.65	16	2
1:A:5:ASP:O	1:A:124:HIS:NE2	0.44	2.51	7	1
1:A:68:PHE:CD1	1:A:68:PHE:C	0.44	2.91	17	2
1:A:86:HIS:NE2	1:A:88:ARG:NH1	0.44	2.65	5	1
1:A:2:VAL:HG21	1:A:32:TYR:CE2	0.44	2.48	13	1
1:A:124:HIS:CD2	1:A:125:TRP:N	0.44	2.86	13	1
1:A:111:ILE:O	1:A:111:ILE:CG2	0.44	2.65	15	1
1:A:117:TYR:CE1	1:A:122:LYS:O	0.44	2.70	16	1
1:A:90:VAL:O	1:A:93:TYR:N	0.44	2.49	18	4
1:A:118:ASP:O	1:A:120:ASP:N	0.44	2.48	3	1
1:A:44:TRP:N	1:A:44:TRP:CD2	0.44	2.85	4	1
1:A:99:PHE:HE2	1:A:101:VAL:HG22	0.44	1.72	8	2
1:A:20:SER:O	1:A:23:HIS:CD2	0.44	2.71	17	1
1:A:152:SER:HB3	1:A:155:VAL:CG1	0.44	2.42	18	1
1:A:137:LEU:CD2	1:A:141:ALA:CB	0.44	2.95	2	1
1:A:60:ASP:OD2	1:A:60:ASP:N	0.44	2.50	16	2
1:A:149:LEU:O	1:A:150:ILE:C	0.44	2.56	9	6
1:A:81:ILE:HG22	1:A:82:GLY:N	0.44	2.28	12	1
1:A:15:ASP:HA	1:A:81:ILE:CD1	0.44	2.41	11	1
1:A:114:SER:C	1:A:115:CYS:SG	0.44	2.97	19	2
1:A:60:ASP:HB2	1:A:67:TYR:CE1	0.44	2.48	17	1
1:A:108:ASN:CB	1:A:141:ALA:CB	0.43	2.96	4	1
1:A:156:ASP:OD1	1:A:156:ASP:N	0.43	2.51	6	2
1:A:127:HIS:CD2	1:A:127:HIS:C	0.43	2.91	11	1
1:A:11:VAL:HG12	1:A:102:LEU:HD21	0.43	1.89	15	1
1:A:152:SER:HB2	1:A:155:VAL:CG1	0.43	2.43	15	2
1:A:99:PHE:CE1	1:A:114:SER:HB2	0.43	2.48	16	1
1:A:132:SER:O	1:A:133:ARG:C	0.43	2.56	15	2
1:A:80:LYS:O	1:A:81:ILE:O	0.43	2.36	16	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:PHE:CD1	1:A:114:SER:HB3	0.43	2.48	6	2
1:A:122:LYS:O	1:A:123:GLY:O	0.43	2.36	17	3
1:A:36:ASN:O	1:A:37:GLY:C	0.43	2.55	20	5
1:A:162:TYR:O	1:A:163:SER:O	0.43	2.36	10	10
1:A:11:VAL:HG21	1:A:113:TYR:HD2	0.43	1.70	17	1
1:A:138:THR:O	1:A:139:GLY:O	0.43	2.36	17	3
1:A:74:TYR:HB3	1:A:85:TYR:CZ	0.43	2.49	4	1
1:A:99:PHE:CZ	1:A:112:GLY:HA3	0.43	2.48	4	1
1:A:104:THR:OG1	1:A:105:ASP:N	0.43	2.51	6	1
1:A:111:ILE:HG12	1:A:148:TYR:CE2	0.43	2.48	9	2
1:A:152:SER:CB	1:A:155:VAL:HG12	0.43	2.44	12	1
1:A:33:PRO:O	1:A:34:SER:CB	0.43	2.66	16	1
1:A:109:TYR:CZ	1:A:145:VAL:HG22	0.43	2.49	20	1
1:A:101:VAL:O	1:A:102:LEU:O	0.43	2.37	20	7
1:A:31:LYS:O	1:A:161:VAL:N	0.43	2.50	2	1
1:A:80:LYS:O	1:A:81:ILE:C	0.43	2.57	3	8
1:A:126:ASP:OD1	1:A:127:HIS:N	0.43	2.52	3	2
1:A:159:LYS:O	1:A:160:LEU:O	0.43	2.37	16	6
1:A:81:ILE:HG23	1:A:82:GLY:N	0.43	2.29	9	1
1:A:17:PHE:CE2	1:A:22:TYR:CD2	0.43	3.06	17	1
1:A:137:LEU:HD12	1:A:141:ALA:CB	0.43	2.44	5	1
1:A:154:VAL:O	1:A:155:VAL:O	0.43	2.37	15	3
1:A:47:TYR:CZ	1:A:56:VAL:HG21	0.43	2.49	6	1
1:A:51:GLY:O	1:A:52:LYS:HB2	0.43	2.13	12	1
1:A:41:LYS:O	1:A:42:CYS:C	0.43	2.57	16	1
1:A:11:VAL:HB	1:A:102:LEU:CD2	0.43	2.44	15	5
1:A:105:ASP:O	1:A:106:ASN:C	0.43	2.57	7	6
1:A:15:ASP:HA	1:A:81:ILE:HD12	0.43	1.91	9	1
1:A:3:TYR:C	1:A:4:HIS:CG	0.43	2.91	18	1
1:A:19:TRP:CZ3	1:A:54:VAL:CG2	0.42	3.02	2	1
1:A:27:TRP:CE3	1:A:135:MET:HB3	0.42	2.49	15	1
1:A:85:TYR:HA	1:A:97:THR:O	0.42	2.14	15	12
1:A:21:GLN:O	1:A:23:HIS:CG	0.42	2.71	5	1
1:A:152:SER:HB3	1:A:155:VAL:HG13	0.42	1.90	6	2
1:A:170:CYS:O	1:A:171:LYS:C	0.42	2.57	5	2
1:A:61:VAL:O	1:A:61:VAL:CG2	0.42	2.67	8	1
1:A:33:PRO:HG3	1:A:161:VAL:HG21	0.42	1.91	15	1
1:A:31:LYS:O	1:A:32:TYR:O	0.42	2.37	18	1
1:A:154:VAL:HG23	1:A:155:VAL:N	0.42	2.29	18	1
1:A:61:VAL:O	1:A:61:VAL:HG23	0.42	2.14	7	1
1:A:145:VAL:HG11	1:A:162:TYR:OH	0.42	2.14	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:41:LYS:HB3	1:A:165:PHE:CG	0.42	2.50	13	4
1:A:29:VAL:CG2	1:A:132:SER:CB	0.42	2.97	7	1
1:A:41:LYS:CE	1:A:163:SER:HB2	0.42	2.44	14	1
1:A:61:VAL:HG11	1:A:172:VAL:HG22	0.42	1.89	14	1
1:A:11:VAL:CG1	1:A:102:LEU:HD21	0.42	2.45	15	1
1:A:68:PHE:CE1	1:A:70:GLU:HG3	0.42	2.50	18	1
1:A:153:PRO:C	1:A:154:VAL:CG1	0.42	2.87	19	1
1:A:99:PHE:CZ	1:A:129:TRP:CZ3	0.42	3.08	3	1
1:A:134:SER:C	1:A:136:VAL:N	0.42	2.73	4	1
1:A:137:LEU:HD23	1:A:141:ALA:CB	0.42	2.41	13	1
1:A:47:TYR:CD1	1:A:47:TYR:N	0.42	2.88	14	1
1:A:4:HIS:CD2	1:A:4:HIS:N	0.42	2.87	16	1
1:A:113:TYR:CD1	1:A:128:VAL:HG21	0.42	2.49	19	1
1:A:81:ILE:O	1:A:82:GLY:O	0.42	2.37	8	2
1:A:27:TRP:CZ3	1:A:42:CYS:HA	0.42	2.50	16	1
1:A:59:TYR:CG	1:A:68:PHE:HB2	0.42	2.50	16	1
1:A:60:ASP:CG	1:A:67:TYR:OH	0.42	2.58	17	1
1:A:3:TYR:CZ	1:A:122:LYS:O	0.42	2.73	4	1
1:A:33:PRO:C	1:A:39:TYR:OH	0.42	2.58	6	1
1:A:141:ALA:O	1:A:145:VAL:HG23	0.42	2.15	9	1
1:A:30:ALA:CB	1:A:162:TYR:CD1	0.42	3.03	10	1
1:A:21:GLN:OE1	1:A:106:ASN:CG	0.42	2.58	15	1
1:A:29:VAL:CG1	1:A:132:SER:HB3	0.42	2.45	14	2
1:A:113:TYR:CE2	1:A:154:VAL:CG2	0.42	3.02	9	1
1:A:170:CYS:O	1:A:172:VAL:N	0.42	2.53	16	1
1:A:68:PHE:CD1	1:A:69:MET:N	0.42	2.88	18	1
1:A:29:VAL:HG11	1:A:137:LEU:H	0.42	1.75	19	1
1:A:78:ASP:O	1:A:79:SER:C	0.42	2.58	2	4
1:A:90:VAL:O	1:A:91:GLY:C	0.42	2.58	2	2
1:A:88:ARG:NH1	1:A:97:THR:HG21	0.42	2.30	10	1
1:A:109:TYR:CB	1:A:137:LEU:HD21	0.42	2.44	10	1
1:A:29:VAL:HG13	1:A:132:SER:HB3	0.41	1.91	3	2
1:A:63:HIS:O	1:A:64:GLY:C	0.41	2.59	14	5
1:A:84:ILE:N	1:A:84:ILE:CD1	0.41	2.83	1	1
1:A:121:LYS:O	1:A:122:LYS:CD	0.41	2.67	3	1
1:A:26:TRP:CH2	1:A:110:ILE:HD13	0.41	2.49	10	1
1:A:3:TYR:CD1	1:A:125:TRP:CE3	0.41	3.08	15	1
1:A:126:ASP:O	1:A:127:HIS:ND1	0.41	2.53	16	1
1:A:20:SER:O	1:A:23:HIS:NE2	0.41	2.53	17	1
1:A:149:LEU:O	1:A:152:SER:CB	0.41	2.67	17	1
1:A:21:GLN:HG3	1:A:106:ASN:CB	0.41	2.45	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:TYR:CG	1:A:110:ILE:HD11	0.41	2.50	1	1
1:A:6:GLY:O	1:A:124:HIS:ND1	0.41	2.53	2	1
1:A:3:TYR:CE1	1:A:122:LYS:O	0.41	2.73	4	2
1:A:12:LYS:O	1:A:102:LEU:O	0.41	2.38	4	1
1:A:29:VAL:O	1:A:31:LYS:NZ	0.41	2.53	4	1
1:A:109:TYR:CE2	1:A:111:ILE:CD1	0.41	2.99	11	1
1:A:31:LYS:HE3	1:A:39:TYR:CZ	0.41	2.50	15	1
1:A:9:PRO:HG2	1:A:113:TYR:CE1	0.41	2.50	5	1
1:A:51:GLY:C	1:A:53:SER:H	0.41	2.19	12	1
1:A:137:LEU:HD22	1:A:141:ALA:C	0.41	2.36	13	1
1:A:13:PRO:HA	1:A:101:VAL:O	0.41	2.15	15	2
1:A:165:PHE:O	1:A:169:ALA:HB3	0.41	2.15	19	1
1:A:89:THR:C	1:A:90:VAL:CG2	0.41	2.88	20	1
1:A:13:PRO:C	1:A:102:LEU:O	0.41	2.59	9	1
1:A:16:ASN:CG	1:A:16:ASN:O	0.41	2.59	11	1
1:A:137:LEU:CD2	1:A:145:VAL:HB	0.41	2.46	18	1
1:A:21:GLN:O	1:A:22:TYR:CB	0.41	2.68	20	1
1:A:27:TRP:CH2	1:A:41:LYS:HA	0.41	2.51	8	1
1:A:54:VAL:O	1:A:54:VAL:CG2	0.41	2.68	12	1
1:A:18:ASP:CB	1:A:21:GLN:CG	0.41	2.98	15	1
1:A:99:PHE:CD1	1:A:129:TRP:CE2	0.41	3.08	15	1
1:A:22:TYR:HB2	1:A:110:ILE:HD11	0.41	1.91	5	2
1:A:31:LYS:HA	1:A:160:LEU:CD2	0.41	2.45	4	2
1:A:23:HIS:CD2	1:A:23:HIS:C	0.41	2.93	11	3
1:A:33:PRO:HD3	1:A:161:VAL:CG1	0.41	2.46	11	1
1:A:29:VAL:CG1	1:A:132:SER:HB2	0.41	2.45	12	1
1:A:29:VAL:CG1	1:A:132:SER:CB	0.41	2.99	1	1
1:A:113:TYR:CZ	1:A:154:VAL:HG23	0.41	2.51	2	1
1:A:88:ARG:CG	1:A:95:LYS:O	0.41	2.69	8	1
1:A:90:VAL:N	1:A:93:TYR:O	0.41	2.53	11	1
1:A:109:TYR:CD1	1:A:144:ALA:CB	0.41	3.04	13	1
1:A:2:VAL:HG23	1:A:4:HIS:NE2	0.41	2.29	16	1
1:A:3:TYR:OH	1:A:122:LYS:O	0.41	2.38	4	1
1:A:26:TRP:CZ3	1:A:132:SER:HA	0.41	2.51	4	1
1:A:85:TYR:CB	1:A:98:VAL:HA	0.41	2.46	15	1
1:A:118:ASP:O	1:A:118:ASP:CG	0.41	2.59	17	1
1:A:113:TYR:OH	1:A:154:VAL:HG21	0.41	2.15	19	1
1:A:41:LYS:O	1:A:41:LYS:CG	0.41	2.68	2	1
1:A:90:VAL:O	1:A:90:VAL:HG12	0.41	2.16	18	2
1:A:74:TYR:O	1:A:84:ILE:HA	0.41	2.15	7	1
1:A:45:ALA:CB	1:A:58:ARG:HG3	0.41	2.46	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:163:SER:O	1:A:164:ASP:OD2	0.41	2.39	9	1
1:A:84:ILE:HD13	1:A:101:VAL:CG2	0.41	2.46	11	1
1:A:19:TRP:CD2	1:A:54:VAL:HG11	0.41	2.51	12	1
1:A:21:GLN:NE2	1:A:106:ASN:HA	0.41	2.31	13	1
1:A:41:LYS:C	1:A:42:CYS:SG	0.41	2.99	13	1
1:A:139:GLY:C	1:A:141:ALA:N	0.41	2.74	14	1
1:A:33:PRO:O	1:A:37:GLY:HA2	0.41	2.16	19	1
1:A:29:VAL:CG2	1:A:132:SER:HB2	0.41	2.46	20	1
1:A:30:ALA:O	1:A:130:VAL:HB	0.41	2.15	20	1
1:A:41:LYS:O	1:A:42:CYS:SG	0.41	2.79	15	2
1:A:105:ASP:O	1:A:106:ASN:CG	0.41	2.59	14	2
1:A:18:ASP:O	1:A:21:GLN:OE1	0.40	2.39	6	1
1:A:21:GLN:CG	1:A:106:ASN:HB3	0.40	2.46	8	1
1:A:113:TYR:CD2	1:A:128:VAL:CG2	0.40	3.04	8	1
1:A:32:TYR:CE1	1:A:156:ASP:OD2	0.40	2.74	13	1
1:A:11:VAL:HB	1:A:102:LEU:HD21	0.40	1.93	6	2
1:A:42:CYS:O	1:A:42:CYS:SG	0.40	2.79	4	1
1:A:165:PHE:HD2	1:A:169:ALA:HB3	0.40	1.75	6	2
1:A:115:CYS:SG	1:A:124:HIS:CG	0.40	3.14	8	1
1:A:152:SER:CB	1:A:155:VAL:O	0.40	2.70	9	1
1:A:44:TRP:O	1:A:44:TRP:CD1	0.40	2.75	12	1
1:A:61:VAL:HG12	1:A:169:ALA:O	0.40	2.16	19	1
1:A:80:LYS:HG3	1:A:81:ILE:N	0.40	2.31	7	1
1:A:31:LYS:HE2	1:A:39:TYR:CZ	0.40	2.51	10	1
1:A:137:LEU:HD22	1:A:141:ALA:O	0.40	2.17	13	1
1:A:59:TYR:CE2	1:A:68:PHE:HB2	0.40	2.51	19	1
1:A:137:LEU:CD1	1:A:141:ALA:HB1	0.40	2.45	1	1
1:A:99:PHE:CE2	1:A:129:TRP:NE1	0.40	2.90	14	1
1:A:164:ASP:O	1:A:165:PHE:C	0.40	2.60	19	1
1:A:32:TYR:O	1:A:39:TYR:CE2	0.40	2.74	1	1
1:A:148:TYR:CD1	1:A:148:TYR:C	0.40	2.94	2	1
1:A:74:TYR:C	1:A:84:ILE:CG2	0.40	2.90	10	1
1:A:149:LEU:HD13	1:A:157:SER:HB2	0.40	1.94	17	1
1:A:167:GLU:O	1:A:171:LYS:CB	0.40	2.70	17	1

6.3 Torsion angles

6.3.1 Protein backbone

In the following table, the Percentiles column shows the percent Ramachandran outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all NMR

entries. The Analysed column shows the number of residues for which the backbone conformation was analysed and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	171/184 (93%)	128±3 (75±2%)	29±4 (17±2%)	14±2 (8±1%)	2	13
All	All	3420/3680 (93%)	2561 (75%)	572 (17%)	287 (8%)	2	13

All 34 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	22	TYR	20
1	A	82	GLY	20
1	A	102	LEU	20
1	A	164	ASP	19
1	A	155	VAL	18
1	A	160	LEU	17
1	A	163	SER	16
1	A	80	LYS	14
1	A	81	ILE	14
1	A	37	GLY	14
1	A	154	VAL	14
1	A	139	GLY	13
1	A	34	SER	12
1	A	91	GLY	11
1	A	123	GLY	10
1	A	122	LYS	8
1	A	63	HIS	7
1	A	29	VAL	5
1	A	11	VAL	5
1	A	52	LYS	4
1	A	21	GLN	4
1	A	42	CYS	3
1	A	23	HIS	3
1	A	35	PRO	2
1	A	51	GLY	2
1	A	153	PRO	2
1	A	2	VAL	2
1	A	170	CYS	2
1	A	127	HIS	1
1	A	28	GLU	1
1	A	166	SER	1
1	A	171	LYS	1
1	A	32	TYR	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	108	ASN	1

6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	147/160 (92%)	97±3 (66±2%)	50±3 (34±2%)	1 11
All	All	2940/3200 (92%)	1945 (66%)	995 (34%)	1 11

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

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	17	PHE	20
1	A	22	TYR	20
1	A	23	HIS	20
1	A	34	SER	20
1	A	53	SER	20
1	A	29	VAL	19
1	A	84	ILE	19
1	A	159	LYS	19
1	A	103	SER	18
1	A	110	ILE	18
1	A	166	SER	18
1	A	107	LYS	18
1	A	85	TYR	17
1	A	87	SER	17
1	A	131	LEU	17
1	A	50	GLU	16
1	A	108	ASN	16
1	A	109	TYR	16
1	A	67	TYR	15
1	A	115	CYS	15
1	A	167	GLU	15
1	A	121	LYS	15
1	A	122	LYS	15
1	A	25	LYS	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	31	LYS	14
1	A	59	TYR	14
1	A	65	LYS	14
1	A	78	ASP	14
1	A	83	LYS	14
1	A	111	ILE	14
1	A	135	MET	14
1	A	156	ASP	14
1	A	170	CYS	14
1	A	41	LYS	14
1	A	21	GLN	13
1	A	55	LYS	13
1	A	119	GLU	13
1	A	154	VAL	13
1	A	18	ASP	12
1	A	93	TYR	12
1	A	133	ARG	12
1	A	58	ARG	12
1	A	88	ARG	12
1	A	52	LYS	11
1	A	60	ASP	11
1	A	20	SER	11
1	A	70	GLU	10
1	A	69	MET	9
1	A	106	ASN	9
1	A	120	ASP	9
1	A	145	VAL	9
1	A	38	LYS	9
1	A	114	SER	8
1	A	76	VAL	8
1	A	80	LYS	8
1	A	105	ASP	8
1	A	116	ARG	8
1	A	136	VAL	8
1	A	86	HIS	8
1	A	127	HIS	7
1	A	164	ASP	7
1	A	15	ASP	7
1	A	27	TRP	7
1	A	126	ASP	7
1	A	89	THR	7
1	A	8	CYS	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	171	LYS	6
1	A	137	LEU	6
1	A	140	GLU	6
1	A	104	THR	6
1	A	36	ASN	5
1	A	42	CYS	5
1	A	147	ASN	5
1	A	146	GLU	5
1	A	96	LYS	5
1	A	12	LYS	4
1	A	142	LYS	4
1	A	63	HIS	4
1	A	66	GLU	4
1	A	72	THR	4
1	A	95	LYS	4
1	A	118	ASP	4
1	A	100	ASN	4
1	A	57	SER	4
1	A	128	VAL	4
1	A	134	SER	4
1	A	54	VAL	3
1	A	28	GLU	3
1	A	46	GLU	3
1	A	62	ILE	3
1	A	5	ASP	2
1	A	2	VAL	2
1	A	81	ILE	2
1	A	155	VAL	2
1	A	129	TRP	2
1	A	19	TRP	2
1	A	162	TYR	2
1	A	68	PHE	2
1	A	79	SER	1
1	A	39	TYR	1
1	A	99	PHE	1
1	A	143	THR	1
1	A	44	TRP	1
1	A	102	LEU	1
1	A	132	SER	1
1	A	163	SER	1
1	A	3	TYR	1
1	A	10	GLU	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	113	TYR	1
1	A	138	THR	1
1	A	152	SER	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

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