



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 3, 2022 – 10:58 AM EST

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

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

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org
A user guide is available at
<https://www.wwpdb.org/validation/2017/NMRValidationReportHelp>
with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The 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 : 2.27
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.27

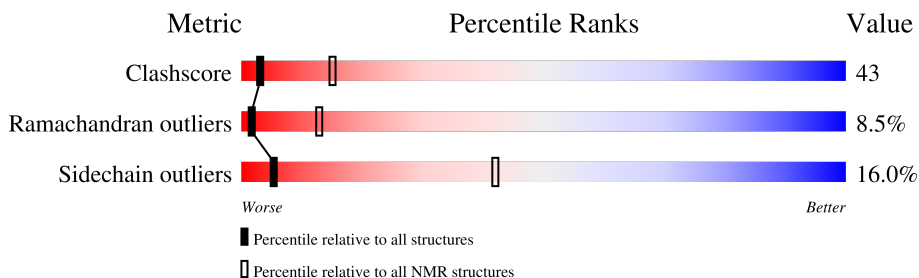
1 Overall quality at a glance

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	202	
2	B	25	

2 Ensemble composition and analysis

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

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:8-A:188, B:4-B:16 (194)	0.82	7

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

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

The models can be grouped into 2 clusters and 2 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

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

- Molecule 1 is a protein called Recoverin.

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

- Molecule 2 is a protein called Rhodopsin kinase.

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

- Molecule 3 is CALCIUM ION (three-letter code: CA) (formula: Ca).

Mol	Chain	Residues	Atoms	
			Total	Ca
3	A	2	2	2

4 Residue-property plots i

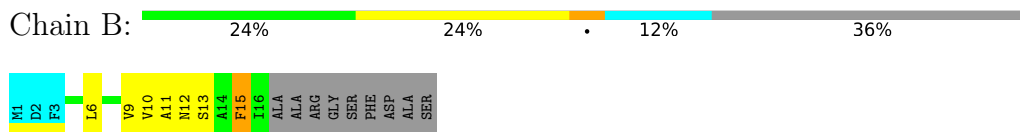
4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: Recoverin



- Molecule 2: Rhodopsin kinase

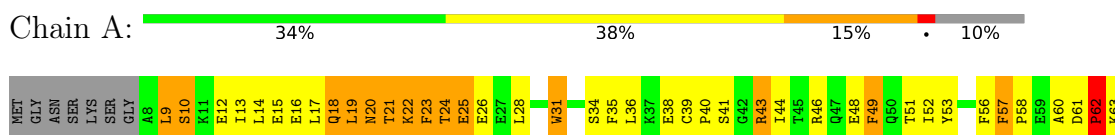


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

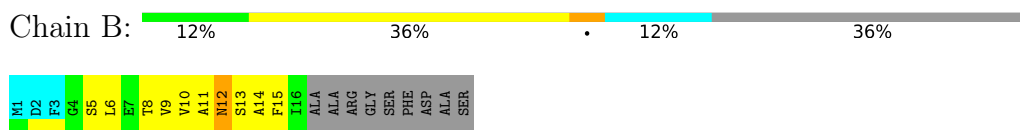
Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Recoverin

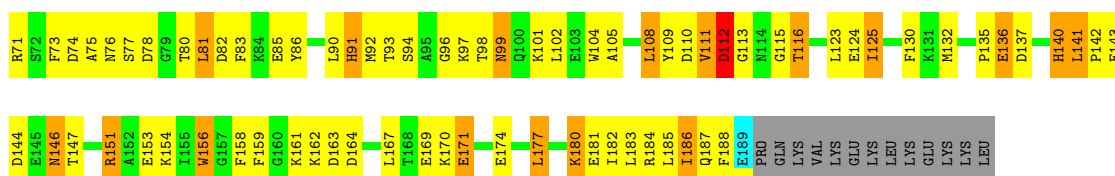
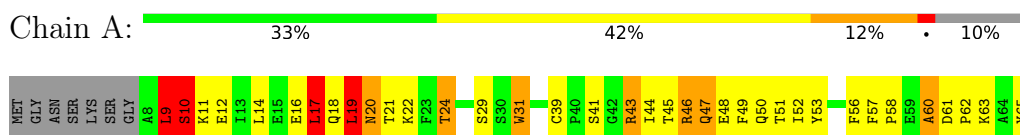


- Molecule 2: Rhodopsin kinase

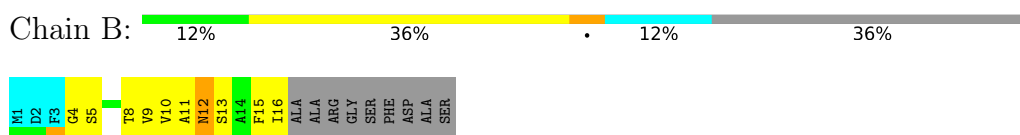


4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Recoverin

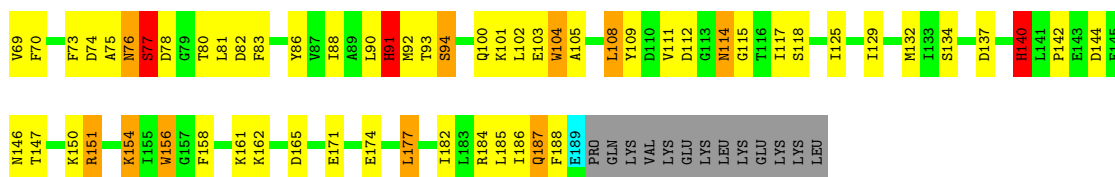
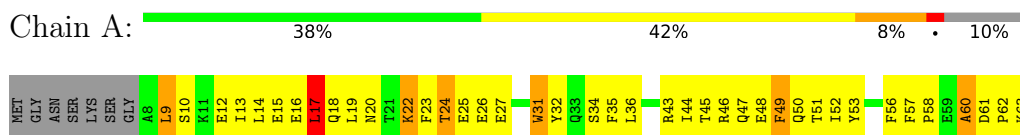


- Molecule 2: Rhodopsin kinase



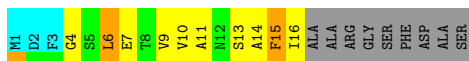
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Recoverin



- Molecule 2: Rhodopsin kinase

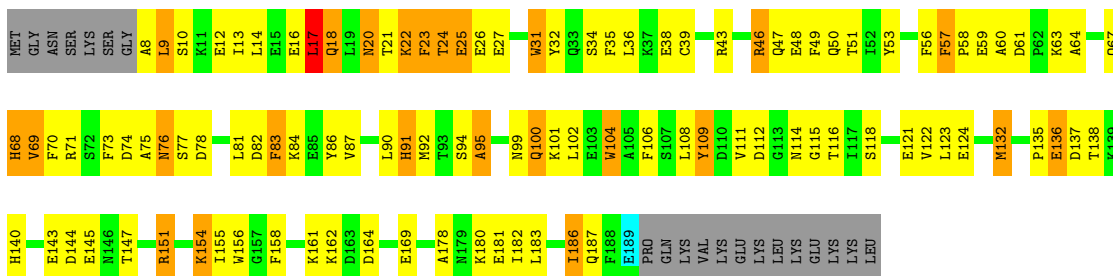




4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Recoverin

Chain A: 37% 40% 12% 10%



- Molecule 2: Rhodopsin kinase

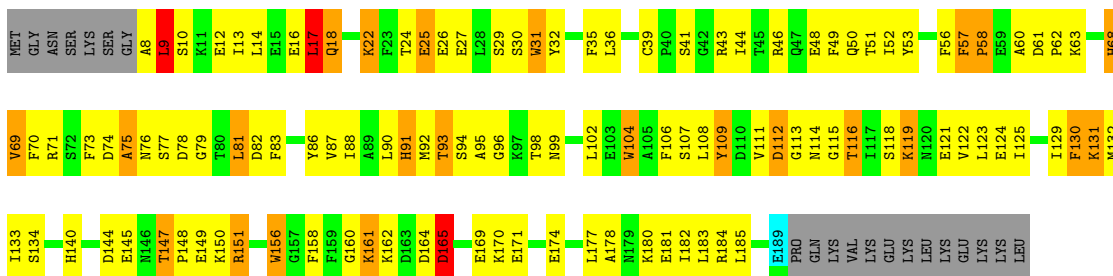
Chain B: 16% 28% 8% 12% 36%



4.2.7 Score per residue for model 7 (medoid)

- Molecule 1: Recoverin

Chain A: 32% 45% 11% 10%



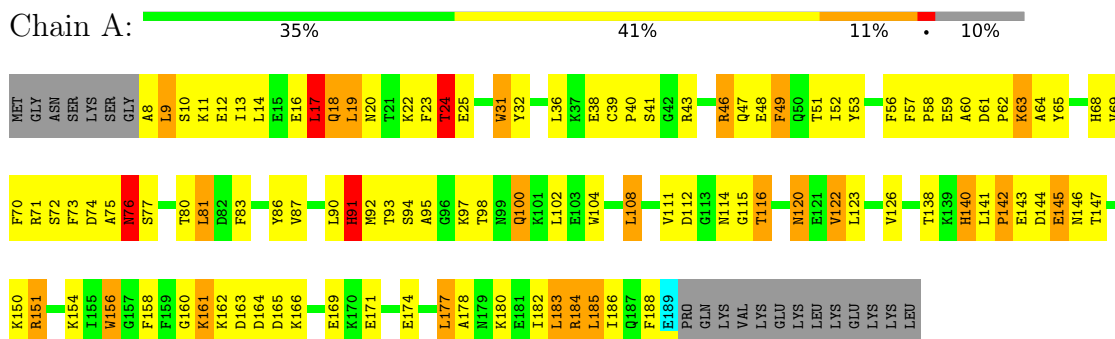
- Molecule 2: Rhodopsin kinase

Chain B: 24% 28% 12% 36%

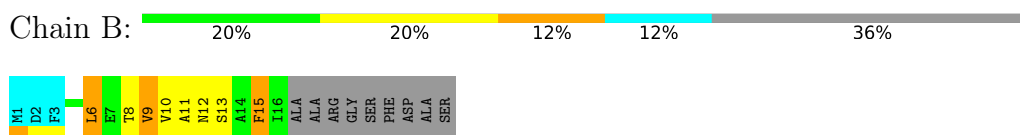


4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Recoverin

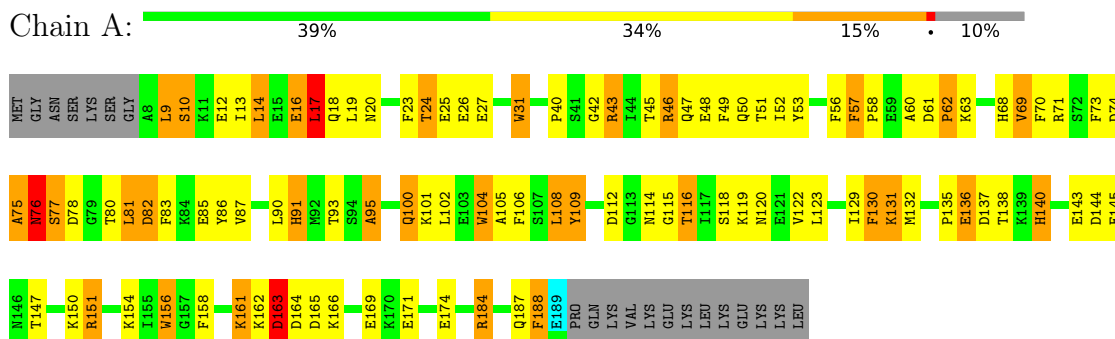


- Molecule 2: Rhodopsin kinase

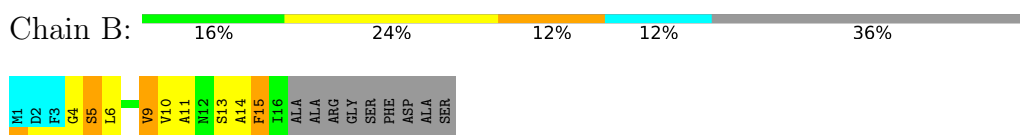


4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Recoverin



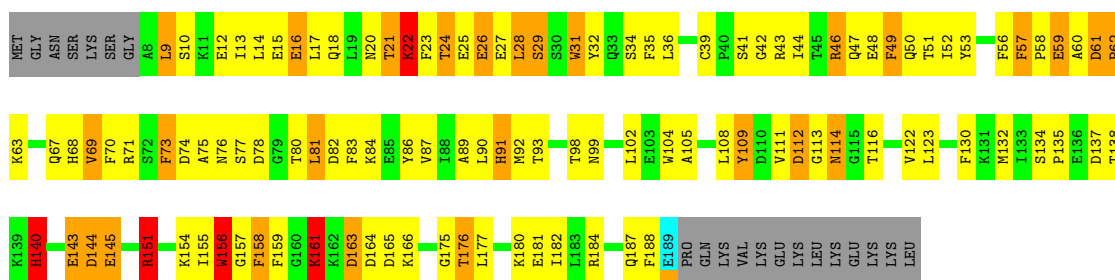
- Molecule 2: Rhodopsin kinase



4.2.10 Score per residue for model 10

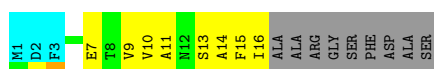
- Molecule 1: Recoverin





- Molecule 2: Rhodopsin kinase

Chain B: 20% 32% 12% 36%



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 20 calculated structures, 10 were deposited, based on the following criterion: *structures with the least restraint violations*.

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

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

No chemical shift data was provided.

6 Model quality i

6.1 Standard geometry i

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

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.09±0.00	6±0/1515 (0.4± 0.0%)	1.27±0.00	17±1/2043 (0.8± 0.1%)
2	B	1.01±0.03	0±0/91 (0.0± 0.0%)	1.04±0.01	0±0/123 (0.0± 0.0%)
All	All	1.08	60/16060 (0.4%)	1.26	173/21660 (0.8%)

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

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

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	156	TRP	CG-CD2	-7.47	1.30	1.43	10	10
1	A	104	TRP	CG-CD2	-7.36	1.31	1.43	6	10
1	A	31	TRP	CG-CD2	-7.23	1.31	1.43	2	10
1	A	91	HIS	CG-ND1	-6.27	1.25	1.38	1	10
1	A	68	HIS	CG-ND1	-6.18	1.25	1.38	4	10
1	A	140	HIS	CG-ND1	-6.18	1.25	1.38	10	10

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	104	TRP	NE1-CE2-CZ2	8.99	140.29	130.40	5	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	156	TRP	NE1-CE2-CZ2	8.99	140.29	130.40	10	10
1	A	31	TRP	NE1-CE2-CZ2	8.78	140.06	130.40	4	10
1	A	104	TRP	NE1-CE2-CD2	-7.59	99.71	107.30	5	10
1	A	156	TRP	NE1-CE2-CD2	-7.59	99.71	107.30	3	10
1	A	31	TRP	NE1-CE2-CD2	-7.44	99.86	107.30	4	10
1	A	156	TRP	CG-CD1-NE1	-6.54	103.56	110.10	10	10
1	A	104	TRP	CG-CD1-NE1	-6.53	103.57	110.10	6	10
1	A	31	TRP	CG-CD1-NE1	-6.42	103.68	110.10	10	10
1	A	104	TRP	CD1-CG-CD2	6.17	111.23	106.30	6	10
1	A	156	TRP	CD1-CG-CD2	6.15	111.22	106.30	8	10
1	A	31	TRP	CD1-NE1-CE2	6.09	114.48	109.00	7	10
1	A	156	TRP	CG-CD2-CE3	-5.91	128.58	133.90	10	7
1	A	104	TRP	CD1-NE1-CE2	5.88	114.29	109.00	4	10
1	A	104	TRP	CG-CD2-CE3	-5.82	128.66	133.90	1	5
1	A	156	TRP	CD1-NE1-CE2	5.81	114.23	109.00	5	10
1	A	31	TRP	CG-CD2-CE3	-5.79	128.69	133.90	2	2
1	A	31	TRP	CD1-CG-CD2	5.64	110.81	106.30	4	9
1	A	31	TRP	CE2-CD2-CG	5.41	111.63	107.30	2	1
1	A	104	TRP	CE2-CD2-CG	5.25	111.50	107.30	5	4
1	A	156	TRP	CE2-CD2-CG	5.12	111.40	107.30	10	5

There are no chirality outliers.

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

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

6.2 Too-close contacts

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1481	1443	1442	127±12
2	B	91	91	91	15±2
All	All	15740	15340	15330	1332

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:17:LEU:HD22	1:A:18:GLN:N	1.09	1.62	8	1
1:A:17:LEU:HD13	1:A:18:GLN:N	1.08	1.64	9	3
1:A:81:LEU:HD23	1:A:81:LEU:H	0.92	1.25	9	2
1:A:81:LEU:N	1:A:81:LEU:HD22	0.90	1.80	2	3
1:A:108:LEU:HD13	1:A:109:TYR:N	0.87	1.85	5	7
1:A:158:PHE:CE1	1:A:159:PHE:CD2	0.86	2.64	10	1
1:A:90:LEU:HD21	2:B:10:VAL:HG11	0.85	1.46	8	5
1:A:81:LEU:HD22	1:A:81:LEU:H	0.85	1.26	2	1
1:A:81:LEU:HD23	1:A:81:LEU:N	0.84	1.87	9	2
1:A:108:LEU:HD13	1:A:108:LEU:C	0.83	1.93	1	7
1:A:76:ASN:ND2	1:A:77:SER:N	0.83	2.26	2	1
1:A:158:PHE:CZ	1:A:159:PHE:CE2	0.81	2.69	10	1
2:B:16:ILE:HD12	2:B:16:ILE:C	0.80	1.97	10	2
1:A:108:LEU:HD22	1:A:108:LEU:O	0.79	1.76	5	2
1:A:183:LEU:C	1:A:183:LEU:HD13	0.79	1.98	4	2
1:A:32:TYR:CZ	1:A:36:LEU:HD11	0.79	2.13	7	6
1:A:17:LEU:HD13	1:A:17:LEU:C	0.78	1.96	7	3
1:A:66:ALA:O	1:A:69:VAL:HG12	0.77	1.80	5	2
1:A:83:PHE:CZ	1:A:87:VAL:CG2	0.77	2.68	9	6
1:A:57:PHE:CE1	2:B:9:VAL:HG11	0.76	2.14	2	5
1:A:17:LEU:C	1:A:17:LEU:HD22	0.76	2.00	9	1
1:A:73:PHE:CE2	1:A:81:LEU:HD21	0.76	2.15	8	2
1:A:123:LEU:C	1:A:123:LEU:HD13	0.76	2.02	9	3
1:A:9:LEU:HD13	1:A:10:SER:N	0.75	1.94	8	1
1:A:20:ASN:O	1:A:21:THR:HG22	0.75	1.80	10	1
1:A:112:ASP:CG	1:A:113:GLY:N	0.75	2.40	1	2
1:A:17:LEU:HD22	1:A:17:LEU:O	0.74	1.83	9	1
1:A:146:ASN:ND2	1:A:146:ASN:H	0.74	1.80	3	1
1:A:13:ILE:HG21	1:A:28:LEU:HD23	0.74	1.59	3	1
1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:CD	0.73	1.96	3	2
1:A:65:TYR:CD2	1:A:132:MET:SD	0.73	2.81	5	1
1:A:183:LEU:HD12	1:A:184:ARG:H	0.73	1.42	1	1
1:A:90:LEU:HD21	2:B:10:VAL:CG1	0.72	2.14	8	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:LEU:C	1:A:36:LEU:HD13	0.72	2.05	1	1
1:A:17:LEU:HD13	1:A:18:GLN:H	0.71	1.40	9	2
1:A:91:HIS:ND1	1:A:91:HIS:C	0.71	2.44	5	2
1:A:70:PHE:CD2	1:A:81:LEU:HD12	0.71	2.19	10	3
1:A:53:TYR:CD2	1:A:57:PHE:CE1	0.71	2.79	4	2
1:A:90:LEU:HD11	2:B:10:VAL:HB	0.71	1.61	5	7
1:A:114:ASN:HD22	1:A:114:ASN:N	0.71	1.84	10	1
1:A:31:TRP:CD1	1:A:83:PHE:CE1	0.70	2.79	6	5
1:A:57:PHE:CZ	2:B:9:VAL:HG11	0.70	2.20	6	5
1:A:17:LEU:CD2	1:A:18:GLN:N	0.70	2.51	8	1
2:B:6:LEU:HD12	2:B:6:LEU:N	0.70	2.02	7	1
1:A:91:HIS:HD1	1:A:92:MET:N	0.69	1.84	8	1
1:A:53:TYR:CE2	1:A:57:PHE:CZ	0.69	2.80	1	3
2:B:12:ASN:HD22	2:B:12:ASN:N	0.69	1.85	4	2
1:A:31:TRP:CD1	1:A:83:PHE:CZ	0.68	2.81	8	6
1:A:57:PHE:O	1:A:59:GLU:N	0.68	2.26	8	1
1:A:31:TRP:CG	1:A:83:PHE:CZ	0.68	2.82	6	3
1:A:81:LEU:H	1:A:81:LEU:CD2	0.68	2.02	2	1
1:A:73:PHE:CE2	1:A:89:ALA:HB2	0.68	2.24	10	1
1:A:20:ASN:ND2	1:A:99:ASN:HD21	0.67	1.87	3	1
1:A:17:LEU:HD22	1:A:18:GLN:H	0.67	1.44	8	1
1:A:17:LEU:HD12	1:A:18:GLN:H	0.67	1.49	2	3
1:A:17:LEU:CD1	1:A:18:GLN:H	0.67	2.02	6	2
1:A:183:LEU:O	1:A:183:LEU:HD12	0.67	1.90	3	1
1:A:52:ILE:HG23	2:B:13:SER:OG	0.67	1.90	9	2
1:A:70:PHE:CZ	1:A:74:ASP:OD2	0.67	2.48	3	5
1:A:86:TYR:OH	2:B:14:ALA:HB2	0.67	1.89	10	2
1:A:177:LEU:C	1:A:177:LEU:HD13	0.66	2.10	2	4
1:A:70:PHE:CE1	1:A:74:ASP:OD2	0.66	2.48	10	3
1:A:70:PHE:CE2	1:A:81:LEU:HD12	0.66	2.24	10	2
2:B:6:LEU:N	2:B:6:LEU:CD2	0.66	2.58	6	3
1:A:171:GLU:N	1:A:171:GLU:CD	0.66	2.49	9	3
1:A:146:ASN:HD22	1:A:146:ASN:N	0.66	1.89	3	2
1:A:81:LEU:N	1:A:81:LEU:CD2	0.66	2.58	6	5
1:A:32:TYR:CE1	1:A:36:LEU:HD11	0.66	2.26	5	3
1:A:12:GLU:CD	1:A:12:GLU:N	0.66	2.50	2	1
1:A:19:LEU:HD22	1:A:19:LEU:N	0.65	2.07	8	1
1:A:52:ILE:HG23	2:B:13:SER:CB	0.65	2.22	4	8
1:A:186:ILE:HG23	1:A:188:PHE:H	0.65	1.51	5	1
1:A:70:PHE:CE2	1:A:74:ASP:OD2	0.65	2.50	4	5
1:A:18:GLN:NE2	1:A:19:LEU:N	0.64	2.45	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:155:ILE:O	1:A:158:PHE:CD1	0.64	2.50	10	1
1:A:35:PHE:CZ	1:A:44:ILE:HD11	0.64	2.28	1	1
1:A:53:TYR:CD2	1:A:57:PHE:CZ	0.64	2.86	9	2
1:A:91:HIS:ND1	1:A:92:MET:N	0.64	2.45	8	1
1:A:16:GLU:CG	1:A:20:ASN:HD21	0.64	2.06	1	1
1:A:74:ASP:C	1:A:76:ASN:H	0.64	1.96	4	8
1:A:91:HIS:C	1:A:91:HIS:HD1	0.64	1.96	5	1
1:A:57:PHE:N	1:A:58:PRO:CD	0.63	2.60	2	4
1:A:70:PHE:CE1	1:A:81:LEU:HD12	0.63	2.28	4	2
1:A:20:ASN:HD22	1:A:20:ASN:N	0.63	1.92	2	1
1:A:114:ASN:HD22	1:A:114:ASN:H	0.63	1.35	10	1
1:A:115:GLY:O	1:A:116:THR:HG23	0.63	1.93	8	4
1:A:161:LYS:HZ2	1:A:167:LEU:HD13	0.63	1.53	4	1
1:A:156:TRP:CD2	1:A:161:LYS:NZ	0.63	2.67	10	1
1:A:53:TYR:CE1	2:B:10:VAL:HG22	0.63	2.29	3	5
1:A:171:GLU:OE1	1:A:171:GLU:N	0.63	2.32	2	1
1:A:103:GLU:CD	1:A:104:TRP:N	0.63	2.52	5	1
1:A:186:ILE:HG23	1:A:187:GLN:N	0.62	2.08	2	3
1:A:76:ASN:HD22	1:A:77:SER:H	0.62	1.36	2	1
1:A:9:LEU:HD22	1:A:13:ILE:HD11	0.62	1.69	5	2
1:A:90:LEU:N	1:A:90:LEU:CD2	0.62	2.62	9	6
1:A:158:PHE:CG	1:A:182:ILE:HD11	0.62	2.29	3	1
1:A:111:VAL:HG23	1:A:112:ASP:N	0.62	2.08	5	4
1:A:108:LEU:C	1:A:108:LEU:CD1	0.62	2.68	1	7
1:A:17:LEU:C	1:A:17:LEU:CD1	0.62	2.68	7	3
1:A:28:LEU:HD12	1:A:28:LEU:N	0.62	2.10	1	3
1:A:140:HIS:ND1	1:A:140:HIS:C	0.62	2.53	3	2
1:A:144:ASP:N	1:A:144:ASP:OD1	0.62	2.33	5	2
1:A:70:PHE:CE1	1:A:81:LEU:CD2	0.62	2.83	6	2
1:A:165:ASP:N	1:A:165:ASP:OD1	0.62	2.30	7	1
1:A:19:LEU:H	1:A:19:LEU:CD2	0.62	2.08	8	1
1:A:69:VAL:CG1	1:A:70:PHE:N	0.61	2.63	9	5
1:A:122:VAL:CG2	1:A:123:LEU:N	0.61	2.62	9	6
1:A:76:ASN:HD22	1:A:77:SER:N	0.61	1.90	2	1
1:A:107:SER:OG	1:A:108:LEU:N	0.61	2.32	7	2
1:A:112:ASP:OD1	1:A:112:ASP:N	0.61	2.33	3	2
1:A:186:ILE:CG2	1:A:187:GLN:N	0.61	2.63	2	2
1:A:109:TYR:CE2	1:A:122:VAL:HG12	0.61	2.31	6	1
1:A:24:THR:HG23	1:A:24:THR:O	0.61	1.95	3	1
1:A:146:ASN:ND2	1:A:146:ASN:N	0.61	2.44	3	1
1:A:41:SER:OG	1:A:42:GLY:N	0.61	2.31	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:LEU:HD12	1:A:18:GLN:N	0.61	2.10	6	2
1:A:82:ASP:N	1:A:82:ASP:OD1	0.61	2.33	9	3
1:A:61:ASP:N	1:A:61:ASP:OD1	0.61	2.33	10	1
1:A:49:PHE:CE2	1:A:86:TYR:CE2	0.61	2.89	1	5
1:A:49:PHE:CZ	1:A:86:TYR:CE2	0.60	2.88	1	1
1:A:16:GLU:O	1:A:18:GLN:N	0.60	2.34	5	5
1:A:73:PHE:C	1:A:73:PHE:CD1	0.60	2.73	2	1
2:B:9:VAL:CG1	2:B:10:VAL:N	0.60	2.64	8	3
1:A:65:TYR:O	1:A:69:VAL:HG23	0.60	1.96	3	1
1:A:109:TYR:OH	1:A:155:ILE:HD13	0.60	1.97	6	1
2:B:11:ALA:O	2:B:15:PHE:N	0.60	2.33	6	1
1:A:17:LEU:CD1	1:A:17:LEU:N	0.60	2.65	8	1
1:A:28:LEU:N	1:A:28:LEU:CD1	0.60	2.64	1	2
1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CD1	0.60	2.69	6	5
1:A:29:SER:OG	1:A:30:SER:N	0.60	2.32	7	2
1:A:61:ASP:N	1:A:62:PRO:HD3	0.59	2.12	8	6
2:B:13:SER:OG	2:B:14:ALA:N	0.59	2.33	6	3
1:A:70:PHE:CD2	1:A:81:LEU:CD1	0.59	2.85	1	1
1:A:25:GLU:H	1:A:25:GLU:CD	0.59	1.99	8	2
2:B:16:ILE:C	2:B:16:ILE:CD1	0.59	2.71	10	2
1:A:9:LEU:HD21	1:A:13:ILE:HD12	0.59	1.74	7	1
2:B:9:VAL:HG12	2:B:10:VAL:N	0.59	2.11	10	4
1:A:28:LEU:HD12	1:A:29:SER:N	0.59	2.13	10	1
1:A:187:GLN:C	1:A:188:PHE:CD1	0.58	2.77	2	1
1:A:73:PHE:CE2	1:A:81:LEU:HD12	0.58	2.32	5	2
1:A:149:GLU:H	1:A:149:GLU:CD	0.58	2.01	7	1
1:A:52:ILE:CD1	1:A:86:TYR:OH	0.58	2.51	8	3
1:A:98:THR:OG1	1:A:99:ASN:N	0.58	2.33	3	2
2:B:6:LEU:HD22	2:B:6:LEU:N	0.58	2.14	3	1
1:A:65:TYR:O	1:A:68:HIS:N	0.58	2.37	4	1
1:A:156:TRP:CE2	1:A:161:LYS:NZ	0.58	2.71	10	1
1:A:177:LEU:C	1:A:177:LEU:HD23	0.58	2.19	10	1
1:A:177:LEU:HD23	1:A:177:LEU:O	0.58	1.98	10	1
1:A:53:TYR:CE2	2:B:10:VAL:HG22	0.58	2.34	6	1
1:A:31:TRP:CD2	2:B:15:PHE:CE2	0.58	2.91	2	1
1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CD2	0.58	2.66	2	6
1:A:166:LYS:CD	1:A:166:LYS:N	0.58	2.67	3	1
1:A:19:LEU:HD22	1:A:19:LEU:H	0.58	1.57	8	1
1:A:9:LEU:O	1:A:12:GLU:N	0.57	2.36	4	10
1:A:31:TRP:NE1	2:B:15:PHE:CE1	0.57	2.71	7	1
2:B:11:ALA:O	2:B:15:PHE:CD1	0.57	2.58	7	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:61:ASP:N	1:A:62:PRO:CD	0.57	2.67	8	4
1:A:47:GLN:CG	1:A:48:GLU:N	0.57	2.66	9	2
1:A:151:ARG:NH2	1:A:187:GLN:NE2	0.57	2.51	5	1
1:A:73:PHE:C	1:A:75:ALA:N	0.57	2.56	6	1
2:B:6:LEU:N	2:B:6:LEU:CD1	0.57	2.67	7	1
1:A:122:VAL:HG23	1:A:123:LEU:N	0.57	2.14	7	4
1:A:129:ILE:HD11	1:A:188:PHE:CD1	0.57	2.34	5	1
1:A:34:SER:OG	1:A:35:PHE:N	0.57	2.36	1	1
1:A:102:LEU:HD22	1:A:102:LEU:N	0.57	2.14	10	3
1:A:183:LEU:C	1:A:183:LEU:CD1	0.57	2.72	4	2
1:A:183:LEU:N	1:A:183:LEU:CD2	0.57	2.68	7	1
1:A:73:PHE:C	1:A:75:ALA:H	0.56	2.02	6	1
2:B:6:LEU:N	2:B:6:LEU:HD22	0.56	2.14	9	2
1:A:53:TYR:OH	2:B:10:VAL:CG2	0.56	2.54	8	2
1:A:48:GLU:O	1:A:51:THR:N	0.56	2.38	8	10
1:A:182:ILE:O	1:A:185:LEU:N	0.56	2.39	8	2
1:A:76:ASN:O	1:A:78:ASP:N	0.56	2.36	2	2
1:A:57:PHE:CE2	2:B:9:VAL:HG11	0.56	2.36	3	2
1:A:25:GLU:N	1:A:25:GLU:CD	0.56	2.59	1	1
1:A:31:TRP:O	1:A:34:SER:N	0.56	2.38	2	4
1:A:70:PHE:CE2	1:A:81:LEU:HD21	0.56	2.35	2	1
2:B:16:ILE:CD1	2:B:16:ILE:C	0.56	2.74	2	1
1:A:31:TRP:NE1	1:A:83:PHE:CE1	0.56	2.74	8	4
1:A:8:ALA:O	1:A:10:SER:N	0.56	2.38	7	4
1:A:110:ASP:OD2	1:A:116:THR:N	0.56	2.39	4	1
1:A:188:PHE:O	1:A:188:PHE:CG	0.56	2.59	10	1
1:A:61:ASP:C	1:A:63:LYS:H	0.56	2.04	9	9
1:A:156:TRP:NE1	1:A:161:LYS:O	0.56	2.38	1	3
1:A:158:PHE:CD2	1:A:182:ILE:HD11	0.56	2.36	3	1
1:A:92:MET:C	1:A:94:SER:H	0.56	2.03	8	7
1:A:106:PHE:CZ	1:A:115:GLY:O	0.56	2.59	9	3
1:A:172:PHE:O	1:A:176:THR:HG23	0.55	2.00	2	2
1:A:19:LEU:HD21	1:A:100:GLN:CG	0.55	2.31	5	1
1:A:49:PHE:CZ	1:A:86:TYR:CE1	0.55	2.94	5	2
1:A:114:ASN:N	1:A:114:ASN:ND2	0.55	2.54	10	1
1:A:187:GLN:O	1:A:188:PHE:CG	0.55	2.60	2	1
1:A:112:ASP:CG	1:A:113:GLY:H	0.55	2.03	1	1
1:A:25:GLU:CD	1:A:25:GLU:N	0.55	2.58	8	2
1:A:17:LEU:CD1	1:A:18:GLN:N	0.55	2.65	7	3
1:A:9:LEU:CD1	1:A:10:SER:N	0.55	2.69	8	1
1:A:90:LEU:HD11	2:B:10:VAL:HG13	0.55	1.77	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:106:PHE:CE2	1:A:115:GLY:O	0.55	2.60	6	2
1:A:69:VAL:O	1:A:73:PHE:CE1	0.55	2.60	4	1
1:A:9:LEU:HD23	1:A:10:SER:N	0.55	2.17	10	3
1:A:18:GLN:O	1:A:20:ASN:N	0.55	2.40	1	4
1:A:187:GLN:C	1:A:188:PHE:CG	0.55	2.80	2	1
1:A:70:PHE:CD1	1:A:81:LEU:HD12	0.55	2.37	8	2
1:A:16:GLU:C	1:A:17:LEU:HD13	0.55	2.22	8	1
1:A:17:LEU:C	1:A:17:LEU:CD2	0.55	2.72	9	1
1:A:155:ILE:O	1:A:157:GLY:N	0.55	2.40	10	1
1:A:14:LEU:O	1:A:17:LEU:N	0.54	2.40	2	9
1:A:92:MET:N	1:A:92:MET:SD	0.54	2.80	1	1
1:A:86:TYR:CZ	2:B:10:VAL:HG12	0.54	2.37	10	3
1:A:91:HIS:O	1:A:95:ALA:N	0.54	2.40	8	3
2:B:4:GLY:O	2:B:6:LEU:N	0.54	2.40	9	1
1:A:13:ILE:O	1:A:16:GLU:N	0.54	2.41	8	3
1:A:24:THR:O	1:A:26:GLU:N	0.54	2.41	6	6
2:B:11:ALA:O	2:B:13:SER:N	0.54	2.41	6	1
1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:CD2	0.54	2.69	8	1
1:A:138:THR:C	1:A:140:HIS:H	0.54	2.06	10	3
1:A:74:ASP:C	1:A:76:ASN:N	0.54	2.60	4	8
1:A:9:LEU:O	1:A:11:LYS:N	0.54	2.41	3	3
1:A:90:LEU:N	1:A:90:LEU:HD22	0.54	2.17	4	3
1:A:73:PHE:CE2	1:A:81:LEU:CD1	0.54	2.90	5	1
1:A:143:GLU:CD	1:A:143:GLU:H	0.54	2.06	10	2
2:B:12:ASN:N	2:B:12:ASN:ND2	0.54	2.56	4	1
1:A:162:LYS:N	1:A:165:ASP:OD2	0.54	2.32	5	1
1:A:17:LEU:N	1:A:17:LEU:HD13	0.54	2.17	8	1
1:A:151:ARG:O	1:A:154:LYS:N	0.54	2.41	6	8
1:A:18:GLN:C	1:A:20:ASN:H	0.54	2.07	2	2
1:A:162:LYS:O	1:A:164:ASP:N	0.54	2.40	9	2
1:A:112:ASP:OD1	1:A:113:GLY:N	0.53	2.40	4	1
1:A:103:GLU:OE1	1:A:104:TRP:N	0.53	2.40	5	1
1:A:43:ARG:NE	1:A:80:THR:OG1	0.53	2.38	9	1
1:A:109:TYR:CE1	1:A:125:ILE:HG21	0.53	2.39	3	1
1:A:52:ILE:HG23	2:B:13:SER:HB3	0.53	1.80	4	3
1:A:18:GLN:C	1:A:20:ASN:N	0.53	2.62	1	4
1:A:143:GLU:CD	1:A:144:ASP:H	0.53	2.06	1	2
1:A:76:ASN:C	1:A:78:ASP:N	0.53	2.60	5	2
1:A:114:ASN:N	1:A:114:ASN:OD1	0.53	2.41	5	2
1:A:100:GLN:C	1:A:102:LEU:H	0.53	2.06	5	1
1:A:23:PHE:O	1:A:25:GLU:N	0.53	2.41	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:114:ASN:ND2	1:A:116:THR:H	0.53	2.01	2	1
1:A:177:LEU:C	1:A:177:LEU:CD1	0.53	2.77	2	4
1:A:23:PHE:O	1:A:24:THR:HG23	0.53	2.02	5	1
1:A:32:TYR:CE1	1:A:36:LEU:CD1	0.53	2.91	5	3
1:A:111:VAL:CG2	1:A:112:ASP:N	0.53	2.71	5	3
1:A:32:TYR:CZ	1:A:36:LEU:CD1	0.53	2.91	7	2
1:A:35:PHE:C	1:A:35:PHE:CD1	0.53	2.81	7	2
1:A:73:PHE:O	1:A:75:ALA:N	0.53	2.42	6	1
1:A:102:LEU:CD2	1:A:102:LEU:H	0.53	2.16	10	3
1:A:135:PRO:O	1:A:137:ASP:N	0.53	2.42	6	4
1:A:18:GLN:HE22	1:A:92:MET:CE	0.53	2.17	10	1
1:A:36:LEU:C	1:A:36:LEU:CD1	0.53	2.76	1	1
1:A:156:TRP:CH2	1:A:161:LYS:NZ	0.53	2.77	9	1
1:A:82:ASP:OD1	1:A:83:PHE:N	0.53	2.42	10	1
1:A:23:PHE:C	1:A:24:THR:HG23	0.53	2.24	2	1
1:A:92:MET:O	1:A:94:SER:N	0.53	2.42	8	5
1:A:56:PHE:O	1:A:58:PRO:N	0.53	2.42	7	3
1:A:25:GLU:OE1	1:A:25:GLU:N	0.53	2.40	3	1
1:A:179:ASN:OD1	1:A:180:LYS:N	0.53	2.42	3	1
1:A:100:GLN:O	1:A:102:LEU:N	0.53	2.42	5	1
1:A:101:LYS:HZ3	1:A:101:LYS:HB2	0.53	1.63	6	1
1:A:75:ALA:C	1:A:77:SER:H	0.53	2.08	9	6
1:A:143:GLU:O	1:A:145:GLU:N	0.53	2.42	8	4
1:A:64:ALA:O	1:A:68:HIS:CD2	0.53	2.62	5	2
1:A:137:ASP:O	1:A:140:HIS:CD2	0.53	2.61	5	1
1:A:22:LYS:O	1:A:24:THR:N	0.53	2.42	6	1
1:A:143:GLU:OE2	1:A:144:ASP:N	0.53	2.42	9	1
1:A:56:PHE:O	1:A:57:PHE:C	0.52	2.48	9	5
1:A:57:PHE:N	1:A:58:PRO:HD3	0.52	2.18	3	4
1:A:108:LEU:CD1	1:A:109:TYR:N	0.52	2.69	9	3
1:A:9:LEU:O	1:A:10:SER:C	0.52	2.48	3	10
1:A:132:MET:SD	1:A:132:MET:O	0.52	2.67	2	2
1:A:78:ASP:O	1:A:80:THR:N	0.52	2.42	3	1
1:A:68:HIS:CE1	1:A:111:VAL:HG11	0.52	2.39	7	1
1:A:143:GLU:C	1:A:145:GLU:H	0.52	2.08	2	3
1:A:180:LYS:C	1:A:182:ILE:H	0.52	2.05	6	3
1:A:19:LEU:O	1:A:19:LEU:HD23	0.52	2.03	5	1
1:A:14:LEU:O	1:A:14:LEU:HD13	0.52	2.03	9	1
1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:HD22	0.52	2.18	2	3
1:A:136:GLU:O	1:A:140:HIS:NE2	0.52	2.42	4	1
1:A:164:ASP:N	1:A:164:ASP:OD1	0.52	2.42	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:180:LYS:O	1:A:182:ILE:N	0.52	2.42	6	2
1:A:73:PHE:O	1:A:73:PHE:CG	0.52	2.63	10	2
1:A:20:ASN:N	1:A:20:ASN:ND2	0.52	2.56	2	1
1:A:92:MET:C	1:A:94:SER:N	0.52	2.61	8	5
1:A:151:ARG:NH2	1:A:187:GLN:CD	0.52	2.63	5	1
1:A:151:ARG:HH22	1:A:187:GLN:NE2	0.52	2.03	5	1
1:A:83:PHE:CE1	1:A:87:VAL:CG2	0.52	2.92	6	2
1:A:112:ASP:OD2	1:A:114:ASN:ND2	0.52	2.42	8	1
1:A:74:ASP:OD1	1:A:81:LEU:N	0.52	2.43	10	1
1:A:86:TYR:OH	2:B:10:VAL:HG12	0.52	2.04	9	2
1:A:50:GLN:NE2	1:A:67:GLN:OE1	0.52	2.42	6	2
1:A:9:LEU:CD2	1:A:13:ILE:HD12	0.52	2.33	7	1
1:A:143:GLU:C	1:A:145:GLU:N	0.52	2.63	6	4
1:A:140:HIS:O	1:A:141:LEU:C	0.52	2.48	4	1
1:A:24:THR:O	1:A:27:GLU:N	0.52	2.42	7	4
1:A:155:ILE:O	1:A:158:PHE:N	0.52	2.40	10	1
1:A:18:GLN:O	1:A:20:ASN:ND2	0.52	2.43	2	1
1:A:135:PRO:C	1:A:137:ASP:N	0.52	2.63	9	4
1:A:114:ASN:OD1	1:A:115:GLY:N	0.52	2.43	9	3
2:B:7:GLU:C	2:B:7:GLU:CD	0.52	2.69	7	1
1:A:25:GLU:CD	1:A:25:GLU:H	0.51	2.08	1	1
1:A:38:GLU:O	1:A:39:CYS:SG	0.51	2.68	2	4
1:A:108:LEU:C	1:A:108:LEU:HD22	0.51	2.25	5	1
1:A:9:LEU:HD21	1:A:13:ILE:CD1	0.51	2.35	10	3
1:A:16:GLU:C	1:A:18:GLN:N	0.51	2.64	5	3
1:A:70:PHE:CE1	1:A:81:LEU:HD23	0.51	2.40	6	1
1:A:20:ASN:OD1	1:A:100:GLN:NE2	0.51	2.43	8	1
1:A:57:PHE:C	1:A:59:GLU:H	0.51	2.08	8	1
1:A:100:GLN:C	1:A:102:LEU:N	0.51	2.62	5	1
1:A:73:PHE:CE1	1:A:81:LEU:HD11	0.51	2.41	10	2
1:A:16:GLU:C	1:A:18:GLN:H	0.51	2.08	5	2
1:A:20:ASN:O	1:A:22:LYS:N	0.51	2.41	10	1
1:A:39:CYS:C	1:A:41:SER:H	0.51	2.09	8	6
1:A:88:ILE:O	1:A:92:MET:SD	0.51	2.69	1	1
1:A:107:SER:O	1:A:110:ASP:N	0.51	2.43	1	1
1:A:76:ASN:HD21	1:A:85:GLU:CD	0.51	2.09	4	1
2:B:6:LEU:HD23	2:B:6:LEU:N	0.51	2.21	8	1
1:A:138:THR:O	1:A:140:HIS:N	0.51	2.43	3	3
1:A:161:LYS:NZ	1:A:167:LEU:HD13	0.51	2.19	4	1
1:A:151:ARG:NH2	1:A:187:GLN:OE1	0.51	2.43	5	1
1:A:188:PHE:O	1:A:188:PHE:CD2	0.51	2.64	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:125:ILE:HD13	1:A:125:ILE:N	0.51	2.20	4	3
1:A:171:GLU:O	1:A:174:GLU:N	0.51	2.44	9	7
2:B:8:THR:O	2:B:12:ASN:ND2	0.51	2.44	3	2
1:A:47:GLN:NE2	1:A:48:GLU:CA	0.51	2.74	5	1
1:A:61:ASP:O	1:A:63:LYS:N	0.51	2.43	1	4
1:A:118:SER:O	1:A:121:GLU:N	0.51	2.42	6	3
1:A:177:LEU:HD13	1:A:177:LEU:O	0.51	2.06	3	3
1:A:135:PRO:C	1:A:137:ASP:H	0.51	2.09	9	2
1:A:183:LEU:N	1:A:183:LEU:HD22	0.51	2.21	7	1
2:B:15:PHE:CD1	2:B:15:PHE:N	0.51	2.77	10	2
1:A:62:PRO:O	1:A:65:TYR:N	0.51	2.44	8	1
1:A:21:THR:C	1:A:23:PHE:H	0.50	2.08	6	1
1:A:17:LEU:O	1:A:18:GLN:CB	0.50	2.59	10	3
1:A:108:LEU:CD2	1:A:108:LEU:C	0.50	2.79	4	2
1:A:183:LEU:HD13	1:A:183:LEU:O	0.50	2.06	2	2
1:A:169:GLU:OE1	1:A:170:LYS:N	0.50	2.44	4	1
1:A:12:GLU:O	1:A:15:GLU:N	0.50	2.45	5	1
1:A:25:GLU:CD	1:A:25:GLU:C	0.50	2.70	7	1
1:A:125:ILE:H	1:A:125:ILE:HD12	0.50	1.64	7	1
1:A:142:PRO:O	1:A:146:ASN:ND2	0.50	2.43	8	1
1:A:20:ASN:C	1:A:22:LYS:H	0.50	2.09	10	1
1:A:114:ASN:CG	1:A:115:GLY:N	0.50	2.64	2	2
1:A:21:THR:O	1:A:91:HIS:NE2	0.50	2.44	4	1
1:A:123:LEU:HD13	1:A:123:LEU:O	0.50	2.06	7	3
1:A:73:PHE:CD1	1:A:74:ASP:N	0.50	2.79	2	1
1:A:74:ASP:CG	1:A:81:LEU:HD13	0.50	2.27	2	1
1:A:66:ALA:O	1:A:69:VAL:HG22	0.50	2.05	4	1
1:A:73:PHE:CZ	1:A:81:LEU:CD1	0.50	2.95	9	2
1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HZ3	0.50	1.50	8	1
1:A:171:GLU:CD	1:A:171:GLU:H	0.50	2.10	2	3
1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HD2	0.50	1.67	3	1
1:A:46:ARG:CG	1:A:70:PHE:CE2	0.50	2.94	6	1
1:A:60:ALA:CB	1:A:132:MET:O	0.50	2.60	2	9
1:A:144:ASP:C	1:A:146:ASN:H	0.50	2.10	4	2
1:A:91:HIS:O	1:A:95:ALA:HB3	0.50	2.06	1	1
1:A:180:LYS:C	1:A:182:ILE:N	0.50	2.66	6	2
1:A:23:PHE:C	1:A:24:THR:OG1	0.50	2.50	10	3
1:A:47:GLN:NE2	1:A:48:GLU:N	0.49	2.59	5	1
1:A:20:ASN:N	1:A:20:ASN:OD1	0.49	2.45	6	1
1:A:53:TYR:OH	2:B:10:VAL:HG21	0.49	2.07	8	1
1:A:78:ASP:OD1	1:A:78:ASP:C	0.49	2.51	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:183:LEU:CD1	1:A:184:ARG:H	0.49	2.19	1	1
2:B:15:PHE:O	2:B:16:ILE:C	0.49	2.51	5	2
1:A:40:PRO:O	1:A:41:SER:CB	0.49	2.60	2	1
1:A:111:VAL:C	1:A:112:ASP:CG	0.49	2.70	4	3
1:A:185:LEU:O	1:A:185:LEU:HD23	0.49	2.07	5	1
1:A:143:GLU:CD	1:A:144:ASP:N	0.49	2.66	1	2
1:A:147:THR:OG1	1:A:150:LYS:CG	0.49	2.61	7	2
1:A:131:LYS:C	1:A:133:ILE:N	0.49	2.65	7	1
1:A:14:LEU:C	1:A:16:GLU:N	0.49	2.63	9	6
1:A:118:SER:O	1:A:120:ASN:N	0.49	2.45	9	2
1:A:76:ASN:O	1:A:76:ASN:CG	0.49	2.51	5	5
1:A:103:GLU:OE1	1:A:103:GLU:C	0.49	2.51	5	1
1:A:17:LEU:O	1:A:19:LEU:N	0.49	2.44	1	2
1:A:114:ASN:O	1:A:116:THR:N	0.49	2.45	3	2
2:B:6:LEU:CD1	2:B:6:LEU:H	0.49	2.21	7	1
1:A:111:VAL:C	1:A:112:ASP:OD1	0.49	2.50	3	1
1:A:102:LEU:H	1:A:102:LEU:CD2	0.49	2.21	7	2
1:A:183:LEU:HD12	1:A:184:ARG:N	0.49	2.17	1	1
1:A:163:ASP:N	1:A:163:ASP:OD1	0.49	2.44	9	3
1:A:82:ASP:O	1:A:84:LYS:N	0.49	2.45	6	1
1:A:188:PHE:CD1	1:A:188:PHE:N	0.49	2.78	9	1
1:A:158:PHE:CZ	1:A:159:PHE:CD2	0.49	2.98	10	1
1:A:110:ASP:OD1	1:A:112:ASP:OD2	0.49	2.30	1	1
1:A:76:ASN:C	1:A:78:ASP:H	0.49	2.11	2	2
1:A:140:HIS:ND1	1:A:140:HIS:O	0.49	2.46	3	1
1:A:151:ARG:HH22	1:A:187:GLN:CD	0.49	2.12	5	1
1:A:21:THR:C	1:A:23:PHE:N	0.49	2.67	6	1
1:A:138:THR:C	1:A:140:HIS:N	0.49	2.64	8	2
1:A:14:LEU:HD13	1:A:14:LEU:C	0.49	2.29	9	1
1:A:27:GLU:O	1:A:29:SER:N	0.49	2.46	10	1
1:A:111:VAL:O	1:A:112:ASP:CB	0.49	2.61	2	3
1:A:14:LEU:O	1:A:17:LEU:HD12	0.49	2.07	7	3
1:A:13:ILE:O	1:A:16:GLU:CB	0.49	2.61	10	3
1:A:117:ILE:CG2	1:A:118:SER:N	0.48	2.76	5	2
1:A:17:LEU:CD2	1:A:18:GLN:H	0.48	2.16	8	1
1:A:76:ASN:O	1:A:77:SER:CB	0.48	2.60	9	2
1:A:44:ILE:HG23	1:A:48:GLU:OE1	0.48	2.08	4	1
1:A:73:PHE:CZ	1:A:89:ALA:CB	0.48	2.96	1	1
1:A:179:ASN:C	1:A:181:GLU:H	0.48	2.10	1	1
1:A:20:ASN:ND2	1:A:20:ASN:O	0.48	2.47	2	1
1:A:118:SER:C	1:A:120:ASN:N	0.48	2.66	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:ILE:HG21	1:A:28:LEU:CD2	0.48	2.32	3	1
1:A:169:GLU:CD	1:A:169:GLU:C	0.48	2.72	4	1
1:A:24:THR:C	1:A:26:GLU:N	0.48	2.65	6	7
1:A:169:GLU:OE1	1:A:169:GLU:C	0.48	2.52	4	1
1:A:44:ILE:HD12	1:A:86:TYR:CD1	0.48	2.43	5	1
1:A:143:GLU:O	1:A:144:ASP:CB	0.48	2.61	9	2
1:A:143:GLU:C	1:A:144:ASP:CG	0.48	2.70	10	1
1:A:186:ILE:O	1:A:188:PHE:N	0.48	2.47	3	2
1:A:78:ASP:OD2	1:A:80:THR:N	0.48	2.46	1	1
1:A:108:LEU:C	1:A:108:LEU:HD23	0.48	2.28	2	1
1:A:52:ILE:HD13	1:A:86:TYR:OH	0.48	2.09	8	2
1:A:31:TRP:CE2	2:B:15:PHE:CE1	0.48	3.01	7	1
1:A:39:CYS:C	1:A:41:SER:N	0.48	2.67	10	4
1:A:146:ASN:O	1:A:146:ASN:ND2	0.48	2.47	2	1
1:A:22:LYS:CE	1:A:22:LYS:N	0.48	2.76	5	1
1:A:9:LEU:HD22	1:A:13:ILE:CD1	0.48	2.39	6	1
1:A:31:TRP:CE2	2:B:15:PHE:CZ	0.48	3.01	7	1
1:A:145:GLU:O	1:A:151:ARG:NE	0.48	2.46	10	2
1:A:70:PHE:CD1	1:A:74:ASP:HB3	0.48	2.43	3	1
1:A:9:LEU:CD2	1:A:9:LEU:C	0.48	2.82	5	2
1:A:140:HIS:CG	1:A:140:HIS:O	0.48	2.66	8	1
1:A:102:LEU:O	1:A:105:ALA:N	0.48	2.47	9	5
1:A:112:ASP:OD2	1:A:121:GLU:CD	0.48	2.51	2	1
1:A:27:GLU:C	1:A:29:SER:N	0.48	2.64	10	1
2:B:11:ALA:O	2:B:15:PHE:CG	0.48	2.66	10	1
1:A:94:SER:OG	1:A:95:ALA:N	0.47	2.47	2	1
1:A:163:ASP:O	1:A:165:ASP:N	0.47	2.43	10	2
1:A:65:TYR:CG	1:A:132:MET:SD	0.47	3.07	5	1
1:A:129:ILE:O	1:A:132:MET:N	0.47	2.47	9	1
1:A:16:GLU:O	1:A:17:LEU:C	0.47	2.53	6	3
1:A:111:VAL:HG11	1:A:125:ILE:CD1	0.47	2.38	3	1
1:A:183:LEU:HD12	1:A:183:LEU:C	0.47	2.28	3	1
1:A:49:PHE:CE2	1:A:86:TYR:CE1	0.47	3.02	8	1
1:A:93:THR:O	1:A:94:SER:CB	0.47	2.62	3	1
1:A:20:ASN:O	1:A:21:THR:CG2	0.47	2.61	10	1
1:A:179:ASN:O	1:A:180:LYS:CB	0.47	2.62	3	1
2:B:6:LEU:O	2:B:6:LEU:HD13	0.47	2.09	5	1
1:A:112:ASP:OD2	1:A:121:GLU:OE2	0.47	2.32	1	1
1:A:101:LYS:O	1:A:104:TRP:N	0.47	2.47	9	2
1:A:63:LYS:CG	1:A:64:ALA:N	0.47	2.77	8	1
1:A:141:LEU:O	1:A:146:ASN:ND2	0.47	2.48	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:LEU:C	1:A:19:LEU:N	0.47	2.66	9	1
1:A:57:PHE:CE2	1:A:132:MET:CE	0.47	2.98	4	1
1:A:47:GLN:CD	1:A:48:GLU:N	0.47	2.68	5	1
1:A:49:PHE:CD1	1:A:52:ILE:HD12	0.47	2.45	1	1
1:A:52:ILE:CG2	2:B:13:SER:OG	0.47	2.63	1	2
1:A:35:PHE:CE1	1:A:44:ILE:HD11	0.47	2.45	10	2
1:A:76:ASN:C	1:A:77:SER:OG	0.47	2.53	3	2
1:A:73:PHE:O	1:A:73:PHE:CD2	0.47	2.68	5	1
1:A:99:ASN:O	1:A:100:GLN:CB	0.47	2.62	6	1
2:B:11:ALA:C	2:B:13:SER:N	0.47	2.66	6	1
1:A:108:LEU:HD13	1:A:109:TYR:CA	0.46	2.40	5	2
1:A:15:GLU:O	1:A:17:LEU:HD12	0.46	2.10	1	2
1:A:75:ALA:O	1:A:77:SER:N	0.46	2.44	10	7
1:A:48:GLU:O	1:A:51:THR:CB	0.46	2.63	10	5
1:A:70:PHE:O	1:A:74:ASP:N	0.46	2.46	3	3
1:A:21:THR:O	1:A:23:PHE:N	0.46	2.48	6	1
1:A:160:GLY:O	1:A:161:LYS:C	0.46	2.53	7	2
2:B:4:GLY:C	2:B:6:LEU:N	0.46	2.67	9	1
1:A:56:PHE:CE1	2:B:13:SER:OG	0.46	2.67	10	1
1:A:110:ASP:OD2	1:A:113:GLY:O	0.46	2.34	1	1
1:A:140:HIS:O	1:A:142:PRO:N	0.46	2.48	4	1
1:A:20:ASN:H	1:A:20:ASN:ND2	0.46	2.08	2	1
1:A:158:PHE:C	1:A:158:PHE:CD1	0.46	2.88	3	1
1:A:50:GLN:OE1	1:A:67:GLN:NE2	0.46	2.49	10	1
1:A:182:ILE:O	1:A:183:LEU:C	0.46	2.54	8	4
2:B:11:ALA:O	2:B:15:PHE:CB	0.46	2.64	6	1
1:A:17:LEU:HD22	1:A:18:GLN:CA	0.46	2.38	8	1
1:A:76:ASN:O	1:A:76:ASN:ND2	0.46	2.48	8	1
1:A:39:CYS:O	1:A:41:SER:N	0.46	2.49	10	1
1:A:73:PHE:CZ	1:A:81:LEU:HD21	0.46	2.45	10	1
1:A:110:ASP:OD1	1:A:110:ASP:C	0.46	2.52	1	1
1:A:83:PHE:O	1:A:86:TYR:N	0.46	2.48	10	3
1:A:19:LEU:HD21	1:A:100:GLN:HG2	0.46	1.88	5	1
1:A:158:PHE:CE1	1:A:182:ILE:CG1	0.46	2.99	5	1
1:A:24:THR:HG23	1:A:27:GLU:H	0.46	1.70	6	1
1:A:46:ARG:HG2	1:A:70:PHE:CD2	0.46	2.45	6	2
1:A:131:LYS:O	1:A:133:ILE:N	0.46	2.48	7	1
1:A:83:PHE:CZ	1:A:87:VAL:HG23	0.46	2.45	7	2
1:A:53:TYR:CZ	2:B:10:VAL:CG2	0.46	2.99	8	1
1:A:143:GLU:CD	1:A:143:GLU:N	0.46	2.69	8	1
1:A:56:PHE:C	1:A:58:PRO:CD	0.46	2.83	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:114:ASN:CG	1:A:115:GLY:H	0.46	2.12	2	1
1:A:159:PHE:CE1	1:A:175:GLY:HA3	0.46	2.46	10	1
1:A:146:ASN:H	1:A:146:ASN:HD22	0.46	1.38	3	1
1:A:82:ASP:C	1:A:84:LYS:N	0.46	2.69	6	1
1:A:70:PHE:CE2	1:A:81:LEU:CD2	0.46	2.99	7	1
1:A:123:LEU:C	1:A:123:LEU:CD1	0.46	2.75	9	3
1:A:9:LEU:HD21	1:A:13:ILE:HD11	0.46	1.87	10	1
1:A:69:VAL:HG22	1:A:73:PHE:CZ	0.45	2.46	1	1
1:A:122:VAL:O	1:A:126:VAL:HG23	0.45	2.11	1	3
1:A:83:PHE:CZ	1:A:87:VAL:HG21	0.45	2.45	9	1
1:A:109:TYR:O	1:A:111:VAL:N	0.45	2.48	5	1
1:A:184:ARG:CG	1:A:185:LEU:N	0.45	2.80	1	2
1:A:86:TYR:CZ	2:B:10:VAL:CG1	0.45	2.99	5	1
1:A:32:TYR:CE2	1:A:36:LEU:CD1	0.45	2.99	10	1
1:A:46:ARG:NH1	1:A:70:PHE:HB2	0.45	2.26	3	1
1:A:46:ARG:NH1	1:A:71:ARG:NH2	0.45	2.65	1	1
1:A:182:ILE:O	1:A:184:ARG:N	0.45	2.49	1	1
1:A:78:ASP:C	1:A:80:THR:N	0.45	2.70	3	1
1:A:111:VAL:O	1:A:113:GLY:N	0.45	2.49	7	1
1:A:136:GLU:OE1	1:A:136:GLU:N	0.45	2.46	9	1
1:A:140:HIS:CD2	1:A:140:HIS:N	0.45	2.84	4	1
1:A:73:PHE:CD1	1:A:73:PHE:C	0.45	2.89	7	1
1:A:10:SER:O	1:A:14:LEU:N	0.45	2.42	2	2
1:A:88:ILE:O	1:A:92:MET:CG	0.45	2.64	5	2
1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HD3	0.45	1.70	3	1
1:A:180:LYS:O	1:A:181:GLU:CB	0.45	2.64	4	1
1:A:185:LEU:O	1:A:187:GLN:N	0.45	2.49	4	1
1:A:74:ASP:CG	1:A:81:LEU:CD1	0.45	2.85	2	1
1:A:57:PHE:CZ	2:B:9:VAL:HG21	0.45	2.47	3	1
1:A:70:PHE:CD1	1:A:81:LEU:CD1	0.45	3.00	4	1
1:A:162:LYS:C	1:A:164:ASP:N	0.45	2.70	8	1
1:A:184:ARG:HG3	1:A:185:LEU:N	0.45	2.27	8	2
1:A:151:ARG:C	1:A:153:GLU:N	0.45	2.69	4	1
2:B:4:GLY:O	2:B:7:GLU:N	0.45	2.47	5	1
1:A:17:LEU:O	1:A:20:ASN:N	0.44	2.49	9	2
1:A:108:LEU:C	1:A:110:ASP:H	0.44	2.15	3	1
1:A:27:GLU:C	1:A:29:SER:H	0.44	2.16	10	1
1:A:58:PRO:O	1:A:59:GLU:C	0.44	2.56	3	3
1:A:74:ASP:OD2	1:A:81:LEU:CB	0.44	2.65	3	1
1:A:46:ARG:CG	1:A:47:GLN:N	0.44	2.80	10	1
1:A:61:ASP:C	1:A:63:LYS:N	0.44	2.71	10	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:THR:O	1:A:24:THR:OG1	0.44	2.35	2	1
1:A:172:PHE:CD1	1:A:172:PHE:C	0.44	2.91	2	2
1:A:78:ASP:OD2	1:A:85:GLU:OE2	0.44	2.35	4	1
1:A:70:PHE:CZ	1:A:81:LEU:HD23	0.44	2.47	6	1
1:A:76:ASN:ND2	1:A:78:ASP:OD2	0.44	2.49	6	1
1:A:91:HIS:CE1	1:A:95:ALA:CB	0.44	3.00	7	1
1:A:83:PHE:CE1	1:A:87:VAL:HG23	0.44	2.47	9	2
1:A:83:PHE:CD1	1:A:83:PHE:O	0.44	2.71	6	1
1:A:176:THR:O	1:A:179:ASN:ND2	0.44	2.43	3	1
1:A:163:ASP:OD1	1:A:164:ASP:N	0.44	2.50	4	1
1:A:18:GLN:O	1:A:19:LEU:CB	0.44	2.65	5	1
1:A:113:GLY:C	1:A:114:ASN:HD22	0.44	2.16	3	1
1:A:176:THR:O	1:A:180:LYS:N	0.44	2.44	10	1
1:A:156:TRP:CZ2	1:A:161:LYS:CB	0.44	3.01	3	1
1:A:56:PHE:CG	2:B:9:VAL:HG13	0.44	2.48	6	1
1:A:9:LEU:C	1:A:9:LEU:HD23	0.44	2.32	5	2
1:A:57:PHE:CD1	1:A:57:PHE:N	0.44	2.86	9	1
1:A:52:ILE:HG23	2:B:13:SER:HB2	0.44	1.88	1	1
1:A:49:PHE:O	1:A:52:ILE:N	0.44	2.50	3	1
1:A:114:ASN:O	1:A:115:GLY:C	0.44	2.56	3	1
1:A:24:THR:O	1:A:24:THR:HG23	0.44	2.13	6	1
1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:HD23	0.43	2.28	4	2
1:A:120:ASN:OD1	1:A:120:ASN:N	0.43	2.50	8	1
1:A:24:THR:O	1:A:24:THR:CG2	0.43	2.65	3	1
1:A:53:TYR:CD2	1:A:57:PHE:CE2	0.43	3.06	3	1
1:A:108:LEU:O	1:A:108:LEU:HD23	0.43	2.13	8	1
1:A:155:ILE:O	1:A:156:TRP:C	0.43	2.56	10	1
1:A:78:ASP:OD2	1:A:79:GLY:N	0.43	2.51	1	1
1:A:158:PHE:CD1	1:A:182:ILE:HD11	0.43	2.47	3	1
1:A:111:VAL:O	1:A:111:VAL:HG22	0.43	2.12	4	1
1:A:164:ASP:CG	1:A:165:ASP:H	0.43	2.17	7	1
1:A:156:TRP:CZ2	1:A:161:LYS:HB2	0.43	2.48	3	2
1:A:91:HIS:CD2	1:A:91:HIS:O	0.43	2.71	4	1
1:A:149:GLU:CD	1:A:149:GLU:N	0.43	2.71	7	1
1:A:70:PHE:O	1:A:74:ASP:CB	0.43	2.67	3	1
1:A:188:PHE:N	1:A:188:PHE:CD1	0.43	2.85	3	1
2:B:8:THR:O	2:B:12:ASN:CG	0.43	2.57	4	2
1:A:164:ASP:CG	1:A:165:ASP:N	0.43	2.71	7	1
1:A:56:PHE:CE1	2:B:13:SER:CB	0.43	3.01	8	1
1:A:21:THR:HG22	1:A:22:LYS:O	0.43	2.14	1	1
1:A:122:VAL:HG22	1:A:123:LEU:N	0.43	2.27	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:ASN:HB3	1:A:91:HIS:NE2	0.43	2.29	8	1
1:A:87:VAL:O	1:A:91:HIS:N	0.43	2.51	10	1
1:A:46:ARG:O	1:A:47:GLN:C	0.43	2.57	4	4
1:A:35:PHE:CD1	1:A:35:PHE:C	0.43	2.92	5	1
1:A:158:PHE:CE1	1:A:182:ILE:HG13	0.43	2.48	5	1
1:A:10:SER:OG	1:A:11:LYS:N	0.43	2.52	8	1
1:A:114:ASN:ND2	1:A:116:THR:OG1	0.43	2.51	9	1
1:A:20:ASN:HB3	1:A:91:HIS:CE1	0.43	2.47	10	1
1:A:15:GLU:O	1:A:17:LEU:CD1	0.43	2.67	1	2
1:A:74:ASP:CB	1:A:81:LEU:CD1	0.43	2.97	2	1
1:A:156:TRP:NE1	1:A:161:LYS:HB2	0.43	2.28	4	1
2:B:13:SER:O	2:B:16:ILE:HG23	0.43	2.14	5	1
1:A:35:PHE:CE2	1:A:44:ILE:HD11	0.43	2.49	7	1
1:A:14:LEU:C	1:A:14:LEU:CD1	0.43	2.87	9	1
1:A:31:TRP:CD1	1:A:31:TRP:C	0.43	2.92	7	2
1:A:57:PHE:CD2	1:A:62:PRO:HG2	0.43	2.49	1	2
1:A:19:LEU:O	1:A:19:LEU:HD13	0.43	2.14	3	1
1:A:65:TYR:CB	1:A:132:MET:SD	0.43	3.07	5	1
1:A:73:PHE:O	1:A:76:ASN:N	0.43	2.47	6	1
1:A:83:PHE:O	1:A:86:TYR:CB	0.43	2.67	8	2
1:A:73:PHE:CG	1:A:74:ASP:N	0.43	2.86	2	1
1:A:117:ILE:HG22	1:A:118:SER:N	0.43	2.29	3	1
1:A:74:ASP:O	1:A:76:ASN:N	0.43	2.52	9	2
1:A:46:ARG:HH11	1:A:71:ARG:NH2	0.42	2.12	1	1
1:A:90:LEU:CD1	2:B:10:VAL:HG13	0.42	2.43	2	1
1:A:90:LEU:HD12	2:B:7:GLU:HG3	0.42	1.91	5	1
1:A:62:PRO:O	1:A:63:LYS:C	0.42	2.56	8	3
1:A:69:VAL:O	1:A:73:PHE:CD1	0.42	2.72	4	1
1:A:86:TYR:OH	2:B:14:ALA:CB	0.42	2.66	5	1
1:A:106:PHE:CZ	1:A:169:GLU:HA	0.42	2.49	6	2
1:A:70:PHE:C	1:A:70:PHE:CD1	0.42	2.93	7	1
1:A:74:ASP:OD1	1:A:80:THR:C	0.42	2.57	9	1
1:A:68:HIS:C	1:A:70:PHE:N	0.42	2.71	2	1
1:A:46:ARG:HG3	1:A:70:PHE:CE2	0.42	2.48	6	1
1:A:53:TYR:HA	1:A:57:PHE:CD1	0.42	2.49	2	2
1:A:161:LYS:NZ	1:A:165:ASP:OD1	0.42	2.35	2	1
1:A:70:PHE:CE1	1:A:81:LEU:CD1	0.42	3.02	4	1
1:A:22:LYS:N	1:A:22:LYS:CD	0.42	2.83	5	2
1:A:22:LYS:NZ	1:A:91:HIS:ND1	0.42	2.60	7	1
1:A:143:GLU:CG	1:A:144:ASP:H	0.42	2.27	9	1
1:A:23:PHE:O	1:A:24:THR:C	0.42	2.56	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:161:LYS:NZ	1:A:165:ASP:O	0.42	2.42	9	1
1:A:186:ILE:O	1:A:187:GLN:C	0.42	2.58	5	2
1:A:141:LEU:C	1:A:143:GLU:H	0.42	2.18	4	1
1:A:111:VAL:C	1:A:113:GLY:N	0.42	2.73	7	1
1:A:53:TYR:CZ	1:A:57:PHE:CZ	0.42	3.08	1	1
1:A:49:PHE:C	1:A:51:THR:N	0.42	2.72	3	2
1:A:111:VAL:HG11	1:A:125:ILE:HD11	0.42	1.90	3	1
1:A:19:LEU:HD12	1:A:19:LEU:N	0.42	2.29	4	1
1:A:75:ALA:C	1:A:77:SER:N	0.42	2.73	9	3
2:B:11:ALA:O	2:B:12:ASN:C	0.42	2.58	6	1
1:A:73:PHE:CE2	1:A:81:LEU:CD2	0.42	2.99	8	1
1:A:131:LYS:NZ	1:A:131:LYS:CB	0.42	2.83	9	1
1:A:32:TYR:HA	1:A:83:PHE:CZ	0.42	2.50	2	1
1:A:111:VAL:O	1:A:112:ASP:CG	0.42	2.58	4	2
1:A:57:PHE:CE1	2:B:9:VAL:HG21	0.42	2.50	3	1
1:A:47:GLN:HG3	1:A:48:GLU:N	0.42	2.28	9	1
1:A:50:GLN:O	1:A:54:SER:CB	0.42	2.68	2	1
1:A:38:GLU:CD	2:B:15:PHE:O	0.41	2.59	1	1
1:A:86:TYR:OH	2:B:10:VAL:O	0.41	2.37	4	1
1:A:109:TYR:CD1	1:A:125:ILE:HG13	0.41	2.50	5	1
1:A:108:LEU:C	1:A:108:LEU:CD2	0.41	2.88	8	1
1:A:86:TYR:CE1	2:B:10:VAL:CG1	0.41	3.03	9	1
1:A:18:GLN:O	1:A:19:LEU:C	0.41	2.59	8	2
1:A:135:PRO:O	1:A:136:GLU:C	0.41	2.59	3	2
1:A:82:ASP:CB	1:A:85:GLU:OE1	0.41	2.68	2	1
1:A:16:GLU:O	1:A:16:GLU:CD	0.41	2.59	6	1
1:A:73:PHE:CZ	1:A:81:LEU:HD13	0.41	2.51	7	1
1:A:151:ARG:NH1	1:A:151:ARG:CG	0.41	2.79	10	1
1:A:155:ILE:C	1:A:157:GLY:N	0.41	2.72	10	1
2:B:9:VAL:O	2:B:10:VAL:C	0.41	2.59	2	1
1:A:106:PHE:CE1	1:A:169:GLU:HA	0.41	2.50	3	1
1:A:56:PHE:HB2	1:A:57:PHE:CE1	0.41	2.50	6	1
1:A:46:ARG:HA	1:A:70:PHE:CD2	0.41	2.50	1	1
1:A:31:TRP:CG	2:B:15:PHE:CE2	0.41	3.08	2	1
1:A:122:VAL:O	1:A:123:LEU:C	0.41	2.59	2	1
1:A:83:PHE:CE2	1:A:87:VAL:CG2	0.41	3.03	3	1
1:A:17:LEU:O	1:A:18:GLN:C	0.41	2.58	1	1
1:A:82:ASP:O	1:A:83:PHE:C	0.41	2.58	2	2
1:A:90:LEU:HD12	2:B:11:ALA:HB2	0.41	1.91	2	1
1:A:13:ILE:CG2	1:A:28:LEU:HD23	0.41	2.38	3	1
1:A:83:PHE:O	1:A:83:PHE:CG	0.41	2.73	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:136:GLU:N	1:A:136:GLU:CD	0.41	2.74	6	1
1:A:89:ALA:C	1:A:91:HIS:N	0.41	2.72	10	1
2:B:7:GLU:C	2:B:9:VAL:N	0.41	2.73	10	1
1:A:35:PHE:CE2	1:A:83:PHE:HB2	0.41	2.51	1	1
1:A:76:ASN:ND2	1:A:76:ASN:C	0.41	2.74	2	1
1:A:20:ASN:ND2	1:A:99:ASN:HD22	0.41	2.13	4	1
1:A:18:GLN:NE2	1:A:19:LEU:H	0.41	2.10	5	1
1:A:78:ASP:O	1:A:79:GLY:C	0.41	2.57	7	1
1:A:69:VAL:O	1:A:72:SER:N	0.41	2.53	8	1
1:A:156:TRP:CE2	1:A:161:LYS:O	0.41	2.73	2	1
1:A:46:ARG:O	1:A:46:ARG:CZ	0.41	2.69	3	1
1:A:109:TYR:CD1	1:A:125:ILE:HG21	0.41	2.51	3	1
2:B:5:SER:O	2:B:9:VAL:HG23	0.41	2.16	6	1
1:A:24:THR:O	1:A:25:GLU:C	0.41	2.58	3	3
1:A:46:ARG:NH1	1:A:49:PHE:HB3	0.41	2.30	3	1
1:A:111:VAL:CG1	1:A:125:ILE:CD1	0.41	2.98	3	1
2:B:15:PHE:O	2:B:16:ILE:HG23	0.41	2.15	4	1
1:A:80:THR:C	1:A:81:LEU:HD22	0.41	2.35	5	1
1:A:125:ILE:HD12	1:A:125:ILE:N	0.41	2.31	7	1
1:A:143:GLU:CG	1:A:144:ASP:N	0.41	2.84	9	1
1:A:115:GLY:O	1:A:116:THR:CG2	0.41	2.69	1	1
1:A:24:THR:C	1:A:26:GLU:H	0.41	2.18	2	1
1:A:31:TRP:O	1:A:32:TYR:C	0.41	2.56	2	3
1:A:182:ILE:O	1:A:186:ILE:N	0.41	2.42	2	1
1:A:123:LEU:O	1:A:124:GLU:C	0.41	2.59	4	1
1:A:171:GLU:N	1:A:171:GLU:OE1	0.41	2.54	4	1
1:A:76:ASN:O	1:A:77:SER:C	0.41	2.58	5	1
1:A:35:PHE:CG	1:A:83:PHE:HB2	0.41	2.51	6	1
1:A:106:PHE:CE2	1:A:169:GLU:HB2	0.41	2.51	6	1
1:A:90:LEU:HD11	2:B:10:VAL:CG1	0.41	2.43	7	1
1:A:56:PHE:CE1	2:B:13:SER:HB2	0.41	2.50	8	1
1:A:72:SER:OG	1:A:73:PHE:N	0.41	2.54	8	1
1:A:14:LEU:O	1:A:16:GLU:N	0.41	2.54	9	1
1:A:50:GLN:CD	1:A:50:GLN:O	0.41	2.59	9	1
1:A:91:HIS:NE2	1:A:95:ALA:HB1	0.41	2.31	9	1
2:B:4:GLY:O	2:B:5:SER:C	0.41	2.59	9	1
1:A:109:TYR:CE1	1:A:122:VAL:HG12	0.41	2.51	10	1
1:A:114:ASN:C	1:A:116:THR:N	0.41	2.74	10	1
1:A:159:PHE:CZ	1:A:175:GLY:HA3	0.41	2.50	10	1
1:A:129:ILE:O	1:A:130:PHE:C	0.41	2.59	7	3
1:A:146:ASN:O	1:A:146:ASN:CG	0.41	2.60	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:73:PHE:O	1:A:76:ASN:CG	0.41	2.60	4	1
1:A:129:ILE:CD1	1:A:188:PHE:CD1	0.41	3.03	5	1
2:B:13:SER:C	2:B:15:PHE:N	0.40	2.75	1	1
1:A:86:TYR:O	1:A:90:LEU:HD23	0.40	2.17	2	1
1:A:76:ASN:CG	1:A:76:ASN:O	0.40	2.59	4	1
1:A:9:LEU:HD11	1:A:83:PHE:CD2	0.40	2.51	5	1
1:A:111:VAL:O	1:A:112:ASP:C	0.40	2.58	7	2
1:A:119:LYS:HD2	1:A:119:LYS:N	0.40	2.30	7	1
1:A:100:GLN:HG3	1:A:101:LYS:N	0.40	2.32	9	1
1:A:73:PHE:CE1	1:A:74:ASP:HB2	0.40	2.52	2	1
1:A:143:GLU:N	1:A:143:GLU:CD	0.40	2.74	6	1
1:A:106:PHE:CD2	1:A:169:GLU:HB2	0.40	2.51	7	1
1:A:46:ARG:HA	1:A:70:PHE:CE2	0.40	2.51	9	1
1:A:48:GLU:O	1:A:49:PHE:C	0.40	2.59	2	1
1:A:97:LYS:O	1:A:98:THR:C	0.40	2.60	4	1
1:A:63:LYS:HG3	1:A:64:ALA:N	0.40	2.31	5	1
1:A:56:PHE:HB3	2:B:9:VAL:CG2	0.40	2.47	8	1
1:A:185:LEU:C	1:A:187:GLN:N	0.40	2.75	4	1
1:A:124:GLU:OE2	1:A:124:GLU:N	0.40	2.55	6	1
1:A:112:ASP:OD2	1:A:121:GLU:CG	0.40	2.69	7	1
1:A:112:ASP:OD2	1:A:114:ASN:CG	0.40	2.59	9	1
1:A:118:SER:C	1:A:120:ASN:H	0.40	2.20	9	1
1:A:22:LYS:HD2	1:A:91:HIS:CE1	0.40	2.52	10	1
1:A:157:GLY:O	1:A:159:PHE:N	0.40	2.55	10	1
1:A:180:LYS:NZ	1:A:180:LYS:HB3	0.40	2.32	1	1
1:A:22:LYS:O	1:A:22:LYS:CG	0.40	2.69	2	1
1:A:94:SER:CB	2:B:7:GLU:OE1	0.40	2.70	2	1
1:A:70:PHE:CD1	1:A:74:ASP:CB	0.40	3.04	3	1
1:A:108:LEU:C	1:A:110:ASP:N	0.40	2.74	3	1
1:A:46:ARG:HB2	1:A:70:PHE:CE2	0.40	2.52	4	1
1:A:159:PHE:HB3	1:A:161:LYS:HZ3	0.40	1.75	4	1
1:A:159:PHE:HB3	1:A:161:LYS:NZ	0.40	2.32	4	1
1:A:156:TRP:CE2	1:A:161:LYS:HB2	0.40	2.52	5	1
1:A:106:PHE:CD2	1:A:169:GLU:HG3	0.40	2.52	6	1
1:A:53:TYR:CE1	2:B:10:VAL:CG2	0.40	3.02	8	1
1:A:16:GLU:CD	1:A:16:GLU:O	0.40	2.60	10	1
1:A:26:GLU:CD	1:A:26:GLU:C	0.40	2.80	10	1
1:A:83:PHE:O	1:A:84:LYS:C	0.40	2.58	10	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	180/202 (89%)	129±4 (72±2%)	35±6 (19±3%)	16±4 (9±2%)	1	12
2	B	12/25 (48%)	10±1 (82±12%)	2±1 (17±11%)	0±0 (2±3%)	13	56
All	All	1920/2270 (85%)	1390 (72%)	367 (19%)	163 (8%)	2	13

All 62 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	17	LEU	7
1	A	25	GLU	6
1	A	24	THR	5
1	A	76	ASN	5
1	A	145	GLU	5
1	A	9	LEU	5
1	A	161	LYS	5
1	A	10	SER	4
1	A	19	LEU	4
1	A	40	PRO	4
1	A	62	PRO	4
1	A	94	SER	4
1	A	95	ALA	4
1	A	93	THR	4
1	A	112	ASP	4
1	A	187	GLN	4
1	A	144	ASP	4
1	A	58	PRO	4
1	A	18	GLN	3
1	A	57	PHE	3
1	A	142	PRO	3
1	A	162	LYS	3
1	A	101	LYS	3
1	A	98	THR	3
1	A	99	ASN	3
1	A	163	ASP	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	181	GLU	3
1	A	60	ALA	3
1	A	136	GLU	3
1	A	178	ALA	3
1	A	23	PHE	2
1	A	78	ASP	2
1	A	97	LYS	2
1	A	180	LYS	2
1	A	183	LEU	2
1	A	42	GLY	2
1	A	77	SER	2
1	A	119	LYS	2
1	A	115	GLY	2
1	A	143	GLU	2
1	A	96	GLY	2
1	A	75	ALA	2
1	A	100	GLN	2
1	A	20	ASN	1
1	A	41	SER	1
1	A	79	GLY	1
1	A	113	GLY	1
1	A	139	LYS	1
1	A	140	HIS	1
1	A	179	ASN	1
1	A	141	LEU	1
1	A	186	ILE	1
1	A	114	ASN	1
1	A	83	PHE	1
2	B	12	ASN	1
1	A	148	PRO	1
1	A	165	ASP	1
2	B	5	SER	1
1	A	21	THR	1
1	A	22	LYS	1
1	A	59	GLU	1
1	A	156	TRP	1

6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	162/181 (90%)	136±6 (84±3%)	26±6 (16±3%)	5	42
2	B	10/18 (56%)	8±1 (85±9%)	2±1 (15±9%)	6	44
All	All	1720/1990 (86%)	1444 (84%)	276 (16%)	5	42

All 106 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	9	LEU	9
1	A	81	LEU	8
1	A	109	TYR	8
1	A	22	LYS	7
1	A	158	PHE	7
1	A	17	LEU	7
1	A	49	PHE	6
1	A	69	VAL	6
1	A	108	LEU	6
1	A	130	PHE	6
1	A	147	THR	6
1	A	24	THR	6
1	A	45	THR	5
2	B	15	PHE	5
1	A	116	THR	5
1	A	43	ARG	4
1	A	80	THR	4
1	A	112	ASP	4
1	A	134	SER	4
1	A	166	LYS	4
1	A	170	LYS	4
1	A	186	ILE	4
1	A	16	GLU	4
1	A	77	SER	4
1	A	123	LEU	4
1	A	93	THR	4
1	A	177	LEU	4
1	A	71	ARG	3
1	A	73	PHE	3
1	A	180	LYS	3
1	A	188	PHE	3
2	B	9	VAL	3
1	A	20	ASN	3
1	A	76	ASN	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	91	HIS	3
1	A	111	VAL	3
1	A	120	ASN	3
1	A	50	GLN	3
1	A	131	LYS	3
1	A	140	HIS	3
1	A	90	LEU	2
1	A	183	LEU	2
1	A	25	GLU	2
1	A	132	MET	2
1	A	171	GLU	2
1	A	14	LEU	2
1	A	19	LEU	2
1	A	63	LYS	2
1	A	114	ASN	2
1	A	118	SER	2
1	A	122	VAL	2
1	A	146	ASN	2
2	B	5	SER	2
2	B	12	ASN	2
1	A	10	SER	2
1	A	29	SER	2
1	A	82	ASP	2
1	A	154	LYS	2
2	B	6	LEU	2
1	A	57	PHE	2
1	A	104	TRP	2
1	A	18	GLN	2
1	A	165	ASP	2
1	A	185	LEU	2
1	A	150	LYS	2
1	A	161	LYS	2
1	A	21	THR	1
1	A	62	PRO	1
1	A	78	ASP	1
1	A	92	MET	1
1	A	12	GLU	1
1	A	13	ILE	1
1	A	37	LYS	1
1	A	41	SER	1
1	A	67	GLN	1
1	A	74	ASP	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	141	LEU	1
2	B	16	ILE	1
1	A	46	ARG	1
1	A	58	PRO	1
1	A	59	GLU	1
1	A	94	SER	1
1	A	98	THR	1
1	A	143	GLU	1
1	A	47	GLN	1
1	A	125	ILE	1
1	A	162	LYS	1
1	A	23	PHE	1
1	A	100	GLN	1
1	A	138	THR	1
1	A	88	ILE	1
1	A	119	LYS	1
1	A	124	GLU	1
1	A	169	GLU	1
1	A	85	GLU	1
1	A	163	ASP	1
1	A	184	ARG	1
1	A	187	GLN	1
1	A	26	GLU	1
1	A	28	LEU	1
1	A	61	ASP	1
1	A	144	ASP	1
1	A	151	ARG	1
1	A	176	THR	1
1	A	181	GLU	1
1	A	182	ILE	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](#)

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

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided