Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Feb 17, 2022 – 08:21 AM EST

PDB ID	:	1NKU
Title	:	NMR Solution Structure of Zinc-binding protein 3-methyladenine DNA glycosylase I (TAG)
Authors	:	Kwon, K.; Cao, C.; Stivers, J.T.
Deposited on	:	2003-01-03

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 (i) symbol.

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

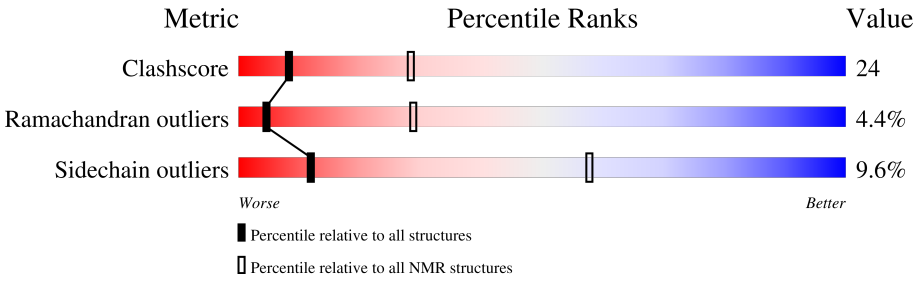
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
ShiftChecker	:	2.26
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)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

1 Overall quality at a glance (i)

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 <=5%

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	187	

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 25 models. Model 22 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 17 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	**Residue range (total)**	**Backbone RMSD (Å)**	**Medoid model**
1	A:3-A:182 (180)	0.57	22

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 4 clusters and 1 single-model cluster was found.

Cluster number	Models
1	1, 4, 5, 6, 8, 10, 11, 12, 13, 15, 16, 19, 22, 25
2	7, 20, 21
3	3, 14, 23, 24
4	9, 17, 18
Single-model clusters	2

3 Entry composition (i)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2920 atoms, of which 1439 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called 3-Methyladenine Dna Glycosylase I (TAG).

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	187	2919	936	1439	256	274	14	0

- Molecule 2 is ZINC ION (three-letter code: ZN) (formula: Zn).

Mol	Chain	Residues	Atoms	
			Total	Zn
2	A	1	1	1

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: 3-Methyladenine Dna Glycosylase I (TAG)

Chain A: 57% 36%

M1 E2 R3 C4 G5 W6 V7 S8 Q9 D10 Y13 I14 H17 E20 W21 G22 V23 L31 F32 C36 L37 E38 Q41 A42 G43 L44 S45 W46 I47 T48 V49 R53 Y56 R57 F60 H61 Q62 F63 D64 K67 V68 M71 V76 L79 V80 Q81 D82

A83 G84 I85 I86 R87 H88 R89 N98 M105 F115 N121 H122 Q123 A129 L132 S133 E134 T137 S138 T139 R152 V157 G158 C162 F165 C169 G170 L171 D174 H175 V176 V177 G178 C179 C180 C181 Y182 P183 G184 N185 K186 P187

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: 3-Methyladenine Dna Glycosylase I (TAG)

Chain A: 58% 32% 6%

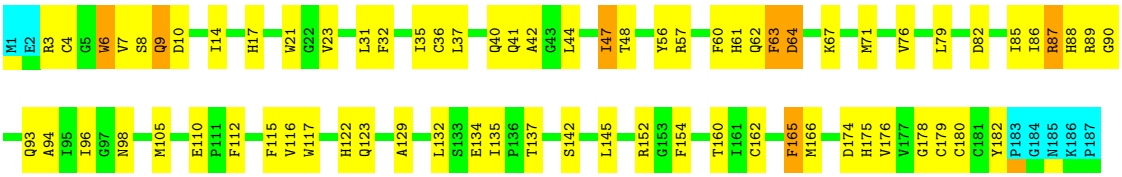
M1 E2 R3 C4 G5 W6 V7 S8 Q9 D10 I14 H17 E20 W21 S28 K29 K30 L31 F32 L37 Q40 Q41 A42 G43 L44 N55 Y56 C59 F60 D64 P65 V66 K67 V68 V76 E77 R78 L79 V80 A83 G84 I85 I86 R87 H88 I92 I96

G97 N98 A99 Y102 F112 A113 D114 F115 V116 F119 V120 N121 H122 Q123 P124 Q125 M126 T127 Q128 A129 T130 L145 R152 G153 F154 V157 G158 F165 M166 Q167 A168 C169 V172 H175 V176 C179 C180 C181 Y182 P183 G184 N185 K186 P187

4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: 3-Methyladenine Dna Glycosylase I (TAG)

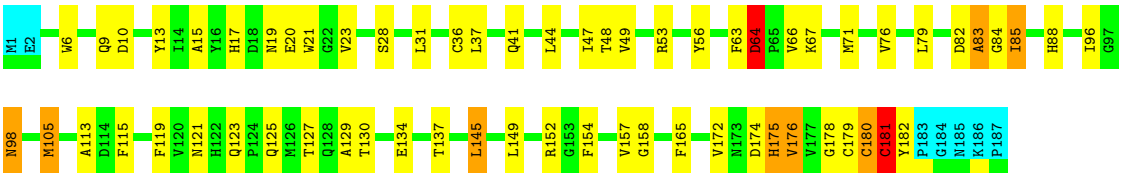
Chain A: 58% 35%



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: 3-Methyladenine Dna Glycosylase I (TAG)

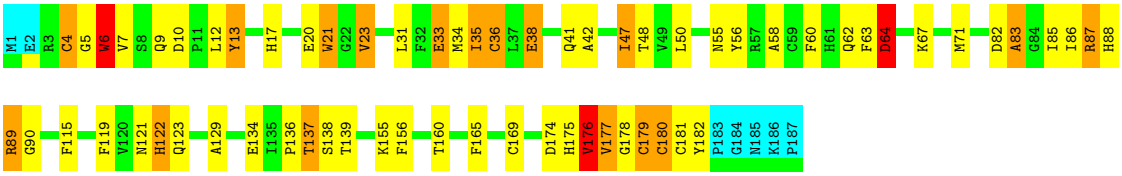
Chain A: 63% 28%



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: 3-Methyladenine Dna Glycosylase I (TAG)

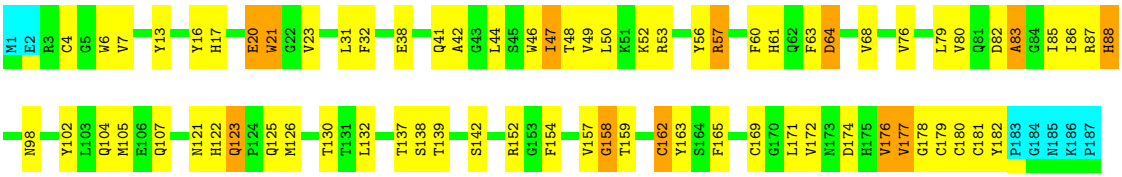
Chain A: 61% 24% 9%



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: 3-Methyladenine Dna Glycosylase I (TAG)

Chain A: 57% 33% 6%



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: 3-Methyladenine Dna Glycosylase I (TAG)

Chain A: 56% 33% 7% •

M1 E2 R3 C4 G5 W6 V7 S8 I14 H17 E20 W21 G22 V23 L31 F32 E33 M34 I35 C36 L37 Q41 A42 G43 L44 S45 W46 I47 T48 V49 R53 Y56 R57 F60 H61 Q62 F63 D64 K67 V68 M71 V76 E77 R78 L79 V80 Q81 D82 A83

G84 I85 I86 R87 H88 I95 I96 G97 N98 A99 R100 A101 N121 H122 Q123 T130 T131 L132 S133 E134 I135 P136 T137 S138 S142 S146 L149 F154 K155 F156 V157 C162 M166 Q167 A168 C169 G170 L171 H175 V176 V177 G178 C179 C180 P183 G184 N185 K186 P187

4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: 3-Methyladenine Dna Glycosylase I (TAG)

Chain A: 54% 36% 6% •

M1 E2 R3 C4 G5 W6 V7 S8 Q9 D10 Y13 I14 H17 E20 W21 G22 F32 I35 C36 L37 E38 G39 Q40 Q41 A42 G43 L44 S45 W46 I47 T48 V49 L50 R53 Y56 R57 A58 C59 F60 H61 Q62 F63 D64 K67 M71 Q72 E73 V76 E77 R78

L79 V80 Q81 D82 A83 G84 I85 I86 R87 H88 R89 G90 N98 Y102 F115 N121 H122 Q123 T127 Q128 A129 T130 T131 L132 S133 E134 T137 S138 T139 S142 R152 K155 F156 V157 G158 T159 T160 I161 C162 Y163 Q167 N173 D174 H175 C180 P183 G184

N185 K186 P187

4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: 3-Methyladenine Dna Glycosylase I (TAG)

Chain A: 57% 32% 5% • •

M1 E2 R3 C4 G5 W6 V7 S8 Q9 D10 P11 L12 Y13 I14 H17 E20 W21 G22 V23 P24 E25 F32 E33 C36 Q41 A42 G43 L44 I47 T48 V49 Y56 R57 A58 C59 F60 H61 Q62 F63 D64 P65 V68 A69 A70 M71 V76 L79 D82 A83

G84 I85 I86 R87 H88 Q93 A94 N98 A99 Y102 W117 S118 F119 A129 T130 T131 L132 S133 E134 I135 T139 A148 R152 K155 F156 T159 C162 M166 Q167 A168 C169 G170 L171 V172 N173 D174 H175 V176 V177 G178 C179 C180 C181 Y182 P183 G184 N185 K186

P187

4.2.9 Score per residue for model 9

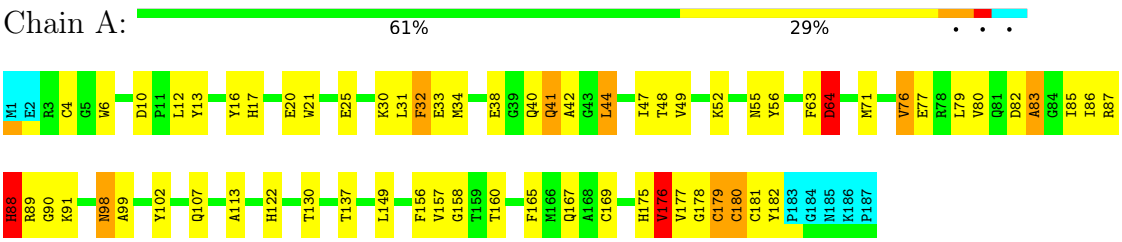
- Molecule 1: 3-Methyladenine Dna Glycosylase I (TAG)

Chain A: 52% 34% 8% • •

M1 E2 R3 C4 V7 S8 Q9 D10 Y13 I14 H17 W21 L31 F32 C36 Q40 Q41 A42 G43 L44 S45 W46 I47 T48 V49 R53 Y56 R57 F60 H61 Q62 F63 D64 V68 A69 A70 M71 D75 V76 L79 V80 Q81 D82 A83 G84 I85 I86

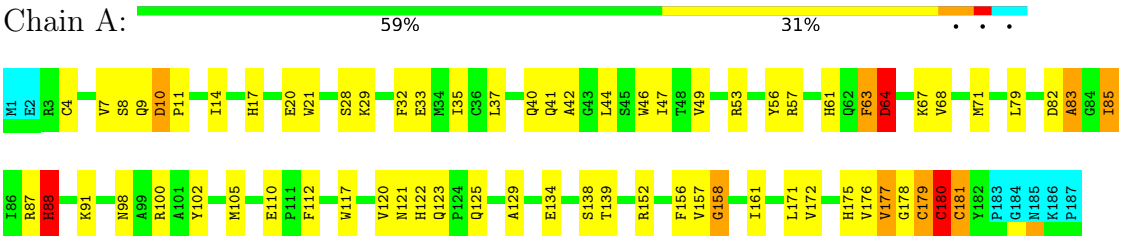
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: 3-Methyladenine Dna Glycosylase I (TAG)



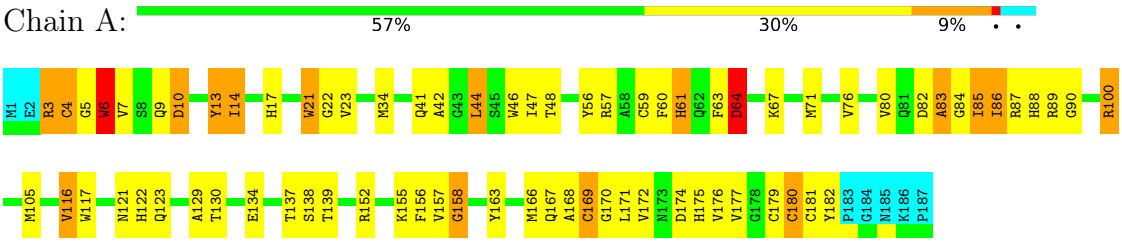
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: 3-Methyladenine Dna Glycosylase I (TAG)



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: 3-Methyladenine Dna Glycosylase I (TAG)



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: 3-Methyladenine Dna Glycosylase I (TAG)

Chain A: 61% 29% 6%

M1 E2 R3 C4 V7 S8 Q9 D10 P11 L12 H17 W21 F32 E33 M34 L37 E38 G39 Q40 Q41 A42 G43 L44 I47 T48 V49 L50 E54 N55 Y56 R57 A58 C59 F60 H61 D64 V68 M71 E74 D75 V76 E77 R78 L79 V80 Q81 D82 A83 G84

I85 I86 R87 H88 N98 L103 E110 W117 S118 F119 V120 N121 H122 Q123 T130 S146 K147 A148 L149 K150 V157 G158 C162 A168 L171 V172 N173 D174 H175 V176 V177 G178 C179 C180 C181 Y182 P183 G184 N185 K186 P187

4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: 3-Methyladenine Dna Glycosylase I (TAG)

Chain A: 63% 28%

M1 E2 W6 Q9 D10 Y13 I14 A15 Y16 H17 D18 N19 E20 W21 G22 V23 S28 L31 C36 L37 Q41 L44 I47 T48 V49 R53 Y56 F63 D64 P65 V66 K67 M71 V76 L79 D82 A83 G84 I85 H88 I96 G97

N98 M105 A113 D114 F115 F119 V120 N121 H122 Q123 P124 Q125 M126 T127 Q128 A129 T130 E134 T137 L145 L149 R152 G153 F154 V157 G158 F165 V172 N173 D174 H175 V176 V177 G178 C179 C180 C181 Y182 P183 G184 N185 K186 P187

4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: 3-Methyladenine Dna Glycosylase I (TAG)

Chain A: 60% 28% 8%

M1 E2 R3 C4 G5 W6 V7 S8 Q9 D10 Y13 I14 A15 Y16 H17 D18 N19 E20 W21 L31 F32 I35 C36 Q41 A42 G43 L44 S45 W46 I47 T48 V49 L50 K51 K52 R53 Y56 R57 A58 C59 F60 H61 D62 F63 D64 K67 V68 A69 A70 M71 L79 D82

I85 I86 R87 H88 R89 G90 K91 N98 A99 A129 T130 T131 L132 I135 R152 V157 G158 I161 C162 Y163 A168 C169 H175 V176 V177 G178 C179 C180 C181 Y182 P183 G184 N185 K186 P187

4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: 3-Methyladenine Dna Glycosylase I (TAG)

Chain A: 64% 25% 7%

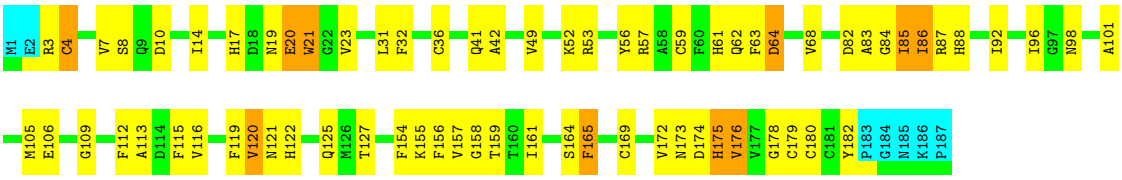
M1 E2 R3 C4 G5 W6 V7 S8 Q9 D10 H17 D18 N19 E20 W21 L31 M34 I35 C36 L37 E38 Q41 A42 G43 L44 S45 W46 V49 L50 R53 Y56 F60 F63 D64 P65 V66 K67 M71 L79 D82 A83 G84 I85 I86 R87 H88 R89 G90

K91 M105 H122 Q123 A129 L132 S133 E134 R152 V157 G158 S164 F165 M166 Q167 A168 C169 G170 L171 D174 H175 V176 C179 C180 C181 Y182 P183 G184 N185 K186 P187

4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: 3-Methyladenine Dna Glycosylase I (TAG)

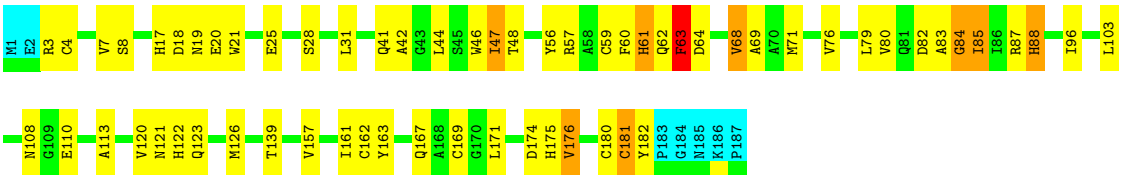
Chain A: 59% 32% 5%



4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: 3-Methyladenine Dna Glycosylase I (TAG)

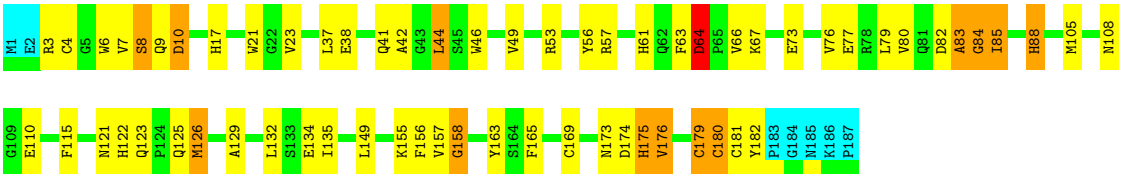
Chain A: 63% 28%



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: 3-Methyladenine Dna Glycosylase I (TAG)

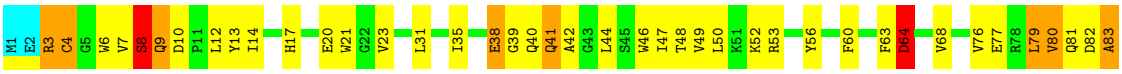
Chain A: 62% 27% 7%

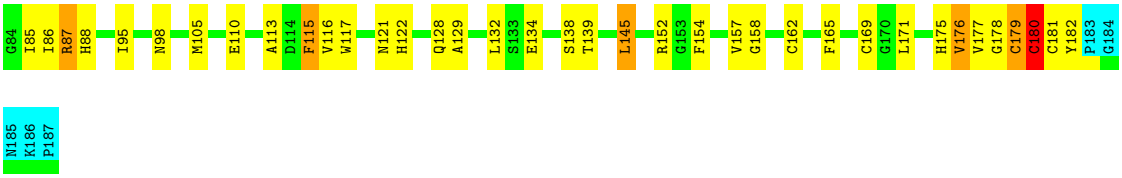


4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: 3-Methyladenine Dna Glycosylase I (TAG)

Chain A: 55% 33% 7%





4.2.21 Score per residue for model 21

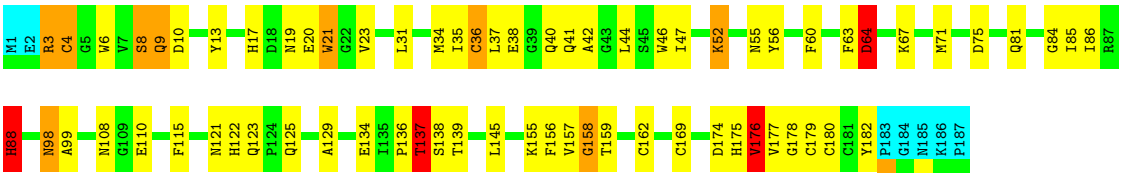
- Molecule 1: 3-Methyladenine Dna Glycosylase I (TAG)

Chain A: 55% 32% 8%

4.2.22 Score per residue for model 22 (medoid)

- Molecule 1: 3-Methyladenine Dna Glycosylase I (TAG)

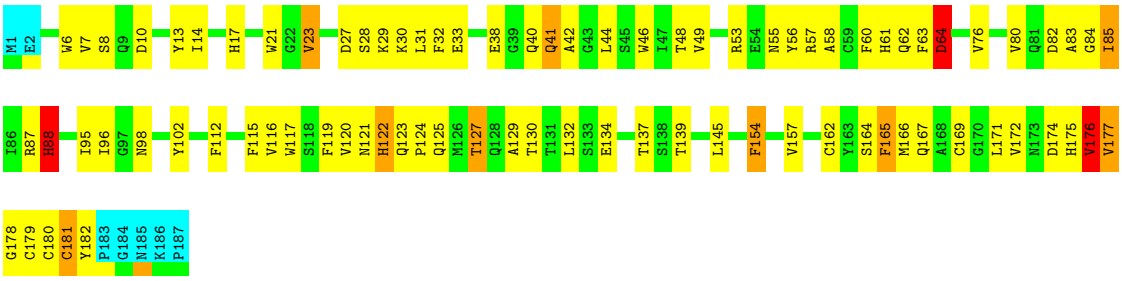
Chain A: 59% 30% 5%



4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: 3-Methyladenine Dna Glycosylase I (TAG)

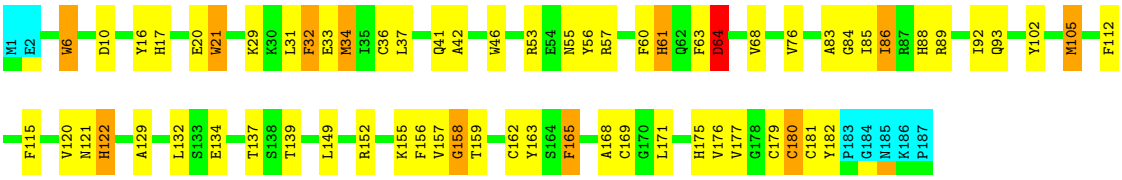
Chain A: 51% 39% 5%



4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: 3-Methyladenine Dna Glycosylase I (TAG)

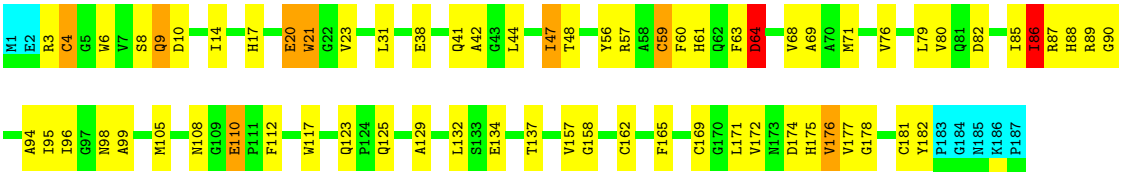
Chain A:



4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: 3-Methyladenine Dna Glycosylase I (TAG)

Chain A:



5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

The models were refined using the following method: *torsion angle dynamics*.

Of the 100 calculated structures, 25 were deposited, based on the following criterion: *structures with acceptable covalent geometry, structures with favorable non-bond energy, structures with the least restraint violations, structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
CNS	structure solution	1.1
X-PLOR	refinement	NIH 2.2

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: ZN

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 (i)

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	1427	1386	1385	69±10
All	All	35700	34650	34625	1718

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 24.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:LEU:HD23	1:A:47:ILE:HD11	0.85	1.48	8	1
1:A:175:HIS:O	1:A:176:VAL:HG13	0.85	1.71	23	1
1:A:79:LEU:HD12	1:A:79:LEU:O	0.84	1.71	20	3
1:A:3:ARG:NH2	1:A:14:ILE:HD13	0.80	1.92	7	2
1:A:56:TYR:OH	1:A:95:ILE:HG21	0.79	1.76	6	1
1:A:21:TRP:CE3	1:A:168:ALA:HB2	0.78	2.14	15	1
1:A:31:LEU:HD21	1:A:169:CYS:SG	0.77	2.19	25	2
1:A:169:CYS:SG	1:A:171:LEU:HD13	0.76	2.21	16	2
1:A:6:TRP:CD1	1:A:6:TRP:N	0.75	2.54	12	6
1:A:7:VAL:HG13	1:A:8:SER:N	0.74	1.97	6	1
1:A:177:VAL:HG13	1:A:177:VAL:O	0.73	1.83	11	3
1:A:4:CYS:O	1:A:7:VAL:HG22	0.73	1.82	20	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:TYR:CZ	1:A:46:TRP:NE1	0.73	2.57	21	1
1:A:76:VAL:O	1:A:80:VAL:HG23	0.73	1.84	19	10
1:A:166:MET:SD	1:A:171:LEU:HD12	0.72	2.24	12	2
1:A:57:ARG:NH1	1:A:61:HIS:CD2	0.72	2.58	15	4
1:A:176:VAL:HG22	1:A:177:VAL:N	0.72	1.99	5	1
1:A:40:GLN:NE2	1:A:95:ILE:HD11	0.71	2.00	23	1
1:A:21:TRP:CE3	1:A:175:HIS:NE2	0.71	2.59	9	13
1:A:176:VAL:HG22	1:A:177:VAL:H	0.71	1.45	5	1
1:A:145:LEU:C	1:A:145:LEU:HD13	0.71	2.06	22	2
1:A:56:TYR:CE1	1:A:60:PHE:CD1	0.71	2.78	13	4
1:A:4:CYS:SG	1:A:5:GLY:N	0.71	2.64	4	2
1:A:3:ARG:HH21	1:A:14:ILE:HD13	0.71	1.45	7	1
1:A:176:VAL:HG13	1:A:177:VAL:N	0.70	2.01	5	4
1:A:165:PHE:CE1	1:A:169:CYS:SG	0.70	2.85	1	4
1:A:56:TYR:CE1	1:A:60:PHE:CD2	0.70	2.80	18	9
1:A:86:ILE:HG23	1:A:87:ARG:N	0.70	2.02	25	2
1:A:56:TYR:CE2	1:A:60:PHE:CD1	0.70	2.80	8	2
1:A:56:TYR:CZ	1:A:60:PHE:CE1	0.69	2.79	9	1
1:A:98:ASN:ND2	1:A:154:PHE:CD2	0.69	2.60	5	3
1:A:56:TYR:CE2	1:A:60:PHE:CD2	0.69	2.80	12	4
1:A:56:TYR:CE2	1:A:60:PHE:CE1	0.69	2.80	8	1
1:A:56:TYR:CZ	1:A:60:PHE:CG	0.69	2.81	8	9
1:A:56:TYR:CE1	1:A:60:PHE:CE2	0.69	2.79	6	6
1:A:5:GLY:C	1:A:132:LEU:HD11	0.69	2.08	15	1
1:A:84:GLY:N	1:A:87:ARG:HH21	0.69	1.86	21	1
1:A:82:ASP:O	1:A:83:ALA:HB3	0.69	1.88	6	8
1:A:52:LYS:NZ	1:A:87:ARG:NH1	0.69	2.41	20	1
1:A:64:ASP:O	1:A:68:VAL:HG23	0.68	1.87	17	5
1:A:56:TYR:CE2	1:A:60:PHE:CE2	0.68	2.80	1	2
1:A:32:PHE:N	1:A:32:PHE:CD1	0.68	2.57	21	3
1:A:165:PHE:CZ	1:A:169:CYS:SG	0.68	2.86	21	4
1:A:46:TRP:NE1	1:A:50:LEU:HD21	0.68	2.04	5	3
1:A:88:HIS:N	1:A:88:HIS:ND1	0.68	2.40	22	3
1:A:105:MET:SD	1:A:152:ARG:NH1	0.67	2.68	20	3
1:A:165:PHE:CE2	1:A:169:CYS:SG	0.67	2.87	19	3
1:A:56:TYR:CZ	1:A:60:PHE:CD2	0.67	2.82	1	6
1:A:98:ASN:ND2	1:A:154:PHE:CE2	0.67	2.62	5	4
1:A:62:GLN:NE2	1:A:63:PHE:CE2	0.67	2.62	23	1
1:A:162:CYS:SG	1:A:163:TYR:N	0.67	2.68	7	3
1:A:56:TYR:CE1	1:A:60:PHE:CE1	0.67	2.82	9	4
1:A:84:GLY:N	1:A:87:ARG:NH2	0.67	2.42	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:105:MET:SD	1:A:112:PHE:CE2	0.67	2.88	21	3
1:A:21:TRP:CZ3	1:A:175:HIS:NE2	0.67	2.63	12	13
1:A:86:ILE:HG22	1:A:86:ILE:O	0.67	1.90	7	1
1:A:55:ASN:CG	1:A:85:ILE:HG22	0.66	2.10	24	3
1:A:126:MET:SD	1:A:126:MET:N	0.66	2.68	19	1
1:A:105:MET:SD	1:A:112:PHE:CZ	0.66	2.89	24	4
1:A:7:VAL:HG11	1:A:13:TYR:CD1	0.66	2.26	5	1
1:A:7:VAL:HG12	1:A:9:GLN:H	0.66	1.51	7	1
1:A:88:HIS:O	1:A:90:GLY:N	0.66	2.29	4	8
1:A:40:GLN:O	1:A:44:LEU:HD12	0.65	1.90	1	1
1:A:175:HIS:O	1:A:176:VAL:HG12	0.65	1.91	16	2
1:A:105:MET:SD	1:A:112:PHE:CD2	0.65	2.89	21	3
1:A:23:VAL:O	1:A:23:VAL:HG13	0.65	1.91	19	3
1:A:21:TRP:CZ3	1:A:175:HIS:CE1	0.65	2.84	6	20
1:A:82:ASP:O	1:A:83:ALA:HB2	0.65	1.91	3	2
1:A:176:VAL:HG13	1:A:178:GLY:H	0.65	1.50	25	2
1:A:145:LEU:C	1:A:145:LEU:HD23	0.65	2.11	2	4
1:A:174:ASP:O	1:A:175:HIS:CG	0.65	2.50	3	6
1:A:98:ASN:ND2	1:A:99:ALA:N	0.65	2.44	22	2
1:A:87:ARG:HE	1:A:95:ILE:HD11	0.64	1.52	20	1
1:A:7:VAL:HG13	1:A:8:SER:H	0.64	1.51	6	1
1:A:85:ILE:HD12	1:A:85:ILE:N	0.64	2.07	9	1
1:A:35:ILE:HD13	1:A:165:PHE:CE2	0.64	2.28	20	1
1:A:79:LEU:HD12	1:A:79:LEU:C	0.64	2.13	20	2
1:A:34:MET:SD	1:A:168:ALA:CB	0.64	2.86	21	5
1:A:65:PRO:O	1:A:68:VAL:HG22	0.64	1.93	1	1
1:A:76:VAL:HG21	1:A:93:GLN:NE2	0.64	2.07	2	2
1:A:157:VAL:HG22	1:A:157:VAL:O	0.64	1.93	15	6
1:A:41:GLN:O	1:A:44:LEU:N	0.63	2.30	16	18
1:A:174:ASP:O	1:A:175:HIS:CD2	0.63	2.49	19	7
1:A:63:PHE:CG	1:A:71:MET:SD	0.63	2.92	10	1
1:A:57:ARG:HH22	1:A:61:HIS:CE1	0.63	2.10	13	2
1:A:179:CYS:O	1:A:181:CYS:N	0.63	2.31	11	17
1:A:40:GLN:OE1	1:A:41:GLN:N	0.63	2.31	13	1
1:A:40:GLN:HE21	1:A:95:ILE:HD11	0.63	1.52	23	1
1:A:21:TRP:CE3	1:A:175:HIS:CE1	0.62	2.87	6	16
1:A:44:LEU:CD2	1:A:44:LEU:N	0.62	2.62	12	3
1:A:155:LYS:O	1:A:156:PHE:CG	0.62	2.52	4	9
1:A:3:ARG:NH2	1:A:14:ILE:HG23	0.62	2.09	9	1
1:A:56:TYR:CD2	1:A:60:PHE:CD1	0.62	2.87	8	2
1:A:63:PHE:O	1:A:63:PHE:CG	0.62	2.52	18	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:176:VAL:O	1:A:178:GLY:N	0.62	2.33	11	3
1:A:7:VAL:O	1:A:9:GLN:N	0.62	2.33	19	2
1:A:28:SER:O	1:A:32:PHE:CE2	0.62	2.53	11	2
1:A:6:TRP:CZ3	1:A:167:GLN:NE2	0.62	2.67	1	1
1:A:179:CYS:SG	1:A:179:CYS:O	0.62	2.58	22	6
1:A:46:TRP:CZ2	1:A:167:GLN:NE2	0.62	2.68	23	1
1:A:3:ARG:NH1	1:A:14:ILE:HD13	0.62	2.09	25	2
1:A:115:PHE:CD2	1:A:152:ARG:NH2	0.62	2.68	24	1
1:A:182:TYR:O	1:A:182:TYR:CG	0.61	2.53	18	13
1:A:21:TRP:HE1	1:A:167:GLN:NE2	0.61	1.93	10	1
1:A:52:LYS:HZ1	1:A:87:ARG:NH1	0.61	1.92	20	1
1:A:105:MET:SD	1:A:152:ARG:CZ	0.61	2.88	9	5
1:A:169:CYS:SG	1:A:171:LEU:CD2	0.61	2.88	5	1
1:A:169:CYS:SG	1:A:170:GLY:N	0.61	2.73	12	2
1:A:165:PHE:CD1	1:A:169:CYS:SG	0.61	2.93	1	1
1:A:170:GLY:O	1:A:172:VAL:N	0.61	2.32	12	1
1:A:115:PHE:CE2	1:A:152:ARG:NH2	0.61	2.69	1	2
1:A:7:VAL:HG13	1:A:14:ILE:CG1	0.61	2.26	11	1
1:A:28:SER:O	1:A:32:PHE:CZ	0.61	2.54	11	2
1:A:12:LEU:HD23	1:A:12:LEU:O	0.61	1.96	13	1
1:A:175:HIS:O	1:A:176:VAL:HG22	0.61	1.96	17	1
1:A:165:PHE:O	1:A:169:CYS:N	0.61	2.34	20	1
1:A:63:PHE:O	1:A:63:PHE:CD2	0.61	2.54	2	3
1:A:178:GLY:O	1:A:180:CYS:N	0.61	2.32	11	8
1:A:136:PRO:O	1:A:138:SER:N	0.61	2.33	22	3
1:A:176:VAL:HG13	1:A:177:VAL:H	0.61	1.56	5	1
1:A:108:ASN:OD1	1:A:110:GLU:N	0.60	2.34	19	1
1:A:175:HIS:O	1:A:176:VAL:O	0.60	2.19	8	4
1:A:67:LYS:O	1:A:71:MET:N	0.60	2.35	11	8
1:A:87:ARG:O	1:A:88:HIS:CG	0.60	2.54	6	4
1:A:123:GLN:O	1:A:125:GLN:NE2	0.60	2.35	19	2
1:A:180:CYS:SG	1:A:181:CYS:N	0.60	2.73	3	3
1:A:56:TYR:CD1	1:A:60:PHE:CD1	0.60	2.89	13	1
1:A:76:VAL:HG12	1:A:92:ILE:HG22	0.60	1.73	1	1
1:A:13:TYR:CE1	1:A:46:TRP:CD1	0.60	2.89	12	2
1:A:71:MET:SD	1:A:96:ILE:HD11	0.60	2.37	25	2
1:A:62:GLN:O	1:A:64:ASP:N	0.60	2.33	2	3
1:A:98:ASN:OD1	1:A:154:PHE:CE2	0.60	2.55	1	1
1:A:121:ASN:O	1:A:123:GLN:N	0.60	2.35	13	7
1:A:46:TRP:CE2	1:A:50:LEU:HD21	0.60	2.32	16	3
1:A:84:GLY:O	1:A:86:ILE:N	0.60	2.35	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:LEU:HD23	1:A:47:ILE:CD1	0.60	2.26	8	1
1:A:13:TYR:CZ	1:A:46:TRP:CD1	0.60	2.89	12	1
1:A:122:HIS:O	1:A:122:HIS:CD2	0.60	2.54	24	1
1:A:57:ARG:HH12	1:A:61:HIS:CD2	0.60	2.13	5	1
1:A:28:SER:O	1:A:32:PHE:CD2	0.60	2.55	21	2
1:A:7:VAL:HG11	1:A:14:ILE:CG1	0.60	2.27	1	3
1:A:6:TRP:CE2	1:A:132:LEU:HD22	0.59	2.32	23	9
1:A:57:ARG:HE	1:A:61:HIS:CE1	0.59	2.15	8	1
1:A:89:ARG:HH11	1:A:89:ARG:CG	0.59	2.10	9	2
1:A:38:GLU:OE2	1:A:41:GLN:NE2	0.59	2.35	16	1
1:A:5:GLY:O	1:A:7:VAL:N	0.59	2.35	4	2
1:A:155:LYS:O	1:A:157:VAL:HG13	0.59	1.97	24	3
1:A:82:ASP:O	1:A:84:GLY:N	0.59	2.35	9	3
1:A:38:GLU:N	1:A:38:GLU:OE1	0.59	2.35	22	2
1:A:63:PHE:O	1:A:68:VAL:HG23	0.59	1.96	24	1
1:A:122:HIS:O	1:A:122:HIS:CG	0.59	2.55	6	10
1:A:38:GLU:OE2	1:A:46:TRP:CZ3	0.59	2.55	5	1
1:A:56:TYR:CD2	1:A:60:PHE:CD2	0.59	2.90	12	2
1:A:3:ARG:HH11	1:A:3:ARG:CG	0.59	2.11	15	3
1:A:40:GLN:OE1	1:A:52:LYS:NZ	0.59	2.35	20	1
1:A:38:GLU:OE1	1:A:41:GLN:NE2	0.59	2.35	23	1
1:A:179:CYS:O	1:A:179:CYS:SG	0.59	2.60	20	7
1:A:16:TYR:CE1	1:A:53:ARG:NH2	0.59	2.71	24	2
1:A:35:ILE:HD13	1:A:165:PHE:CZ	0.59	2.33	20	1
1:A:82:ASP:O	1:A:83:ALA:CB	0.59	2.51	7	9
1:A:121:ASN:O	1:A:122:HIS:CB	0.59	2.50	24	1
1:A:53:ARG:CG	1:A:53:ARG:HH11	0.59	2.11	16	1
1:A:57:ARG:O	1:A:61:HIS:N	0.58	2.36	18	5
1:A:152:ARG:HH11	1:A:152:ARG:CG	0.58	2.11	2	1
1:A:31:LEU:HD11	1:A:169:CYS:SG	0.58	2.38	15	2
1:A:3:ARG:NH1	1:A:18:ASP:OD2	0.58	2.36	18	1
1:A:17:HIS:ND1	1:A:17:HIS:C	0.58	2.56	15	19
1:A:12:LEU:CD2	1:A:47:ILE:HD11	0.58	2.27	8	1
1:A:87:ARG:O	1:A:88:HIS:ND1	0.58	2.36	11	1
1:A:31:LEU:HD11	1:A:165:PHE:CE1	0.58	2.33	16	2
1:A:174:ASP:O	1:A:175:HIS:CB	0.58	2.51	17	6
1:A:123:GLN:NE2	1:A:124:PRO:O	0.58	2.35	23	1
1:A:89:ARG:CG	1:A:89:ARG:NH1	0.58	2.66	9	2
1:A:87:ARG:O	1:A:88:HIS:CD2	0.58	2.56	18	1
1:A:87:ARG:CG	1:A:87:ARG:HH11	0.58	2.09	20	3
1:A:148:ALA:HB1	1:A:152:ARG:HH12	0.58	1.57	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:PHE:CE1	1:A:98:ASN:ND2	0.58	2.72	6	4
1:A:3:ARG:NH1	1:A:3:ARG:CG	0.58	2.66	12	4
1:A:85:ILE:O	1:A:87:ARG:N	0.58	2.36	21	1
1:A:33:GLU:N	1:A:33:GLU:OE1	0.58	2.36	24	1
1:A:8:SER:O	1:A:10:ASP:N	0.58	2.35	25	1
1:A:87:ARG:NH1	1:A:87:ARG:CG	0.58	2.65	20	5
1:A:7:VAL:HG22	1:A:8:SER:N	0.58	2.14	6	1
1:A:86:ILE:CG1	1:A:87:ARG:H	0.58	2.11	9	4
1:A:105:MET:SD	1:A:152:ARG:NE	0.58	2.77	3	2
1:A:57:ARG:NH1	1:A:61:HIS:CE1	0.58	2.72	24	1
1:A:21:TRP:CZ3	1:A:175:HIS:CD2	0.57	2.91	10	10
1:A:7:VAL:HG22	1:A:8:SER:H	0.57	1.58	6	1
1:A:181:CYS:SG	1:A:181:CYS:O	0.57	2.62	8	1
1:A:9:GLN:O	1:A:10:ASP:CB	0.57	2.52	12	5
1:A:57:ARG:HH11	1:A:61:HIS:CD2	0.57	2.17	15	3
1:A:3:ARG:CG	1:A:3:ARG:HH11	0.57	2.11	12	2
1:A:53:ARG:CG	1:A:53:ARG:NH1	0.57	2.66	16	1
1:A:13:TYR:OH	1:A:46:TRP:NE1	0.57	2.37	21	1
1:A:78:ARG:CG	1:A:78:ARG:HH11	0.57	2.13	13	2
1:A:87:ARG:CB	1:A:87:ARG:HH11	0.57	2.13	2	1
1:A:5:GLY:C	1:A:6:TRP:CG	0.57	2.78	12	2
1:A:167:GLN:NE2	1:A:174:ASP:OD2	0.57	2.36	7	2
1:A:175:HIS:O	1:A:176:VAL:CB	0.57	2.53	16	3
1:A:55:ASN:ND2	1:A:85:ILE:HG22	0.57	2.14	24	1
1:A:87:ARG:HH11	1:A:87:ARG:CG	0.57	2.13	2	1
1:A:56:TYR:CE2	1:A:60:PHE:CG	0.57	2.92	9	3
1:A:165:PHE:O	1:A:169:CYS:SG	0.57	2.62	21	4
1:A:55:ASN:ND2	1:A:85:ILE:HG23	0.57	2.13	1	1
1:A:82:ASP:OD1	1:A:83:ALA:N	0.57	2.35	18	2
1:A:161:ILE:HD12	1:A:161:ILE:N	0.57	2.15	11	1
1:A:122:HIS:CD2	1:A:122:HIS:C	0.57	2.79	24	1
1:A:9:GLN:N	1:A:9:GLN:CD	0.57	2.58	3	2
1:A:4:CYS:SG	1:A:175:HIS:O	0.57	2.63	16	4
1:A:85:ILE:H	1:A:85:ILE:CD1	0.57	2.13	9	1
1:A:79:LEU:CD1	1:A:87:ARG:HH11	0.56	2.12	21	1
1:A:165:PHE:CD1	1:A:165:PHE:C	0.56	2.79	23	7
1:A:71:MET:SD	1:A:75:ASP:OD2	0.56	2.63	22	1
1:A:149:LEU:HD12	1:A:149:LEU:N	0.56	2.15	3	4
1:A:155:LYS:C	1:A:156:PHE:CD1	0.56	2.78	7	9
1:A:40:GLN:OE1	1:A:87:ARG:CZ	0.56	2.53	7	1
1:A:175:HIS:O	1:A:176:VAL:CG1	0.56	2.53	16	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:3:ARG:CG	1:A:3:ARG:NH1	0.56	2.67	20	2
1:A:180:CYS:O	1:A:181:CYS:SG	0.56	2.62	18	3
1:A:40:GLN:NE2	1:A:86:ILE:O	0.56	2.39	21	1
1:A:6:TRP:CZ2	1:A:132:LEU:HD22	0.56	2.35	20	4
1:A:32:PHE:C	1:A:32:PHE:CD1	0.56	2.77	10	2
1:A:129:ALA:HB1	1:A:134:GLU:HB2	0.56	1.77	9	16
1:A:100:ARG:NH1	1:A:100:ARG:CG	0.56	2.69	6	2
1:A:66:VAL:CG1	1:A:67:LYS:N	0.56	2.69	19	5
1:A:122:HIS:O	1:A:122:HIS:ND1	0.56	2.39	21	7
1:A:64:ASP:OD1	1:A:64:ASP:N	0.56	2.37	3	4
1:A:7:VAL:O	1:A:8:SER:CB	0.56	2.53	6	3
1:A:12:LEU:HD23	1:A:12:LEU:C	0.56	2.21	13	1
1:A:31:LEU:CD1	1:A:169:CYS:SG	0.56	2.94	6	4
1:A:136:PRO:C	1:A:138:SER:H	0.56	2.04	6	3
1:A:3:ARG:NH1	1:A:7:VAL:HG11	0.56	2.16	9	1
1:A:170:GLY:C	1:A:172:VAL:H	0.56	2.03	12	1
1:A:146:SER:OG	1:A:162:CYS:SG	0.56	2.64	13	1
1:A:31:LEU:HD12	1:A:169:CYS:SG	0.56	2.41	4	1
1:A:155:LYS:C	1:A:156:PHE:CG	0.56	2.79	22	8
1:A:7:VAL:CG1	1:A:8:SER:N	0.56	2.67	6	1
1:A:117:TRP:CH2	1:A:171:LEU:HD23	0.56	2.36	9	6
1:A:78:ARG:CG	1:A:78:ARG:NH1	0.56	2.68	13	2
1:A:56:TYR:OH	1:A:95:ILE:CD1	0.56	2.53	9	1
1:A:21:TRP:HE1	1:A:167:GLN:HE21	0.56	1.42	23	3
1:A:142:SER:OG	1:A:162:CYS:SG	0.55	2.64	5	3
1:A:56:TYR:CD2	1:A:60:PHE:CE1	0.55	2.93	8	1
1:A:85:ILE:HD12	1:A:85:ILE:H	0.55	1.62	9	1
1:A:182:TYR:C	1:A:182:TYR:CD1	0.55	2.79	9	1
1:A:73:GLU:O	1:A:77:GLU:OE1	0.55	2.25	7	2
1:A:115:PHE:CZ	1:A:119:PHE:CE1	0.55	2.93	17	6
1:A:82:ASP:O	1:A:87:ARG:CZ	0.55	2.54	21	1
1:A:86:ILE:O	1:A:88:HIS:CE1	0.55	2.59	22	1
1:A:155:LYS:O	1:A:156:PHE:CD2	0.55	2.60	22	2
1:A:130:THR:N	1:A:134:GLU:OE1	0.55	2.34	3	3
1:A:174:ASP:OD1	1:A:175:HIS:N	0.55	2.36	8	1
1:A:112:PHE:O	1:A:116:VAL:HG23	0.55	2.02	17	1
1:A:159:THR:O	1:A:162:CYS:SG	0.55	2.63	24	1
1:A:47:ILE:HD13	1:A:47:ILE:O	0.55	2.02	4	8
1:A:50:LEU:CD2	1:A:50:LEU:N	0.55	2.70	4	1
1:A:36:CYS:SG	1:A:37:LEU:N	0.55	2.80	7	2
1:A:49:VAL:O	1:A:53:ARG:N	0.54	2.38	11	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:GLN:NE2	1:A:52:LYS:NZ	0.54	2.54	22	1
1:A:31:LEU:CD2	1:A:169:CYS:SG	0.54	2.94	25	1
1:A:32:PHE:CZ	1:A:36:CYS:SG	0.54	3.00	2	2
1:A:57:ARG:NH2	1:A:61:HIS:CE1	0.54	2.75	13	1
1:A:41:GLN:OE1	1:A:46:TRP:CE3	0.54	2.60	19	2
1:A:55:ASN:ND2	1:A:84:GLY:O	0.54	2.39	22	2
1:A:7:VAL:HG11	1:A:14:ILE:HG13	0.54	1.80	1	1
1:A:78:ARG:O	1:A:78:ARG:NE	0.54	2.40	1	1
1:A:98:ASN:HD22	1:A:99:ALA:N	0.54	2.00	10	2
1:A:63:PHE:O	1:A:64:ASP:O	0.54	2.26	3	16
1:A:7:VAL:O	1:A:7:VAL:HG23	0.54	2.00	4	3
1:A:38:GLU:OE2	1:A:46:TRP:CE3	0.54	2.61	5	1
1:A:8:SER:O	1:A:9:GLN:CB	0.54	2.52	7	1
1:A:4:CYS:SG	1:A:175:HIS:C	0.54	2.86	15	1
1:A:46:TRP:O	1:A:49:VAL:N	0.54	2.40	15	1
1:A:165:PHE:CE2	1:A:166:MET:SD	0.54	3.01	16	2
1:A:102:TYR:CD1	1:A:102:TYR:C	0.54	2.81	10	3
1:A:71:MET:SD	1:A:75:ASP:CG	0.54	2.86	13	3
1:A:152:ARG:CG	1:A:152:ARG:NH1	0.54	2.66	2	1
1:A:76:VAL:HG21	1:A:93:GLN:OE1	0.54	2.01	8	1
1:A:5:GLY:C	1:A:7:VAL:N	0.54	2.61	4	2
1:A:100:ARG:CG	1:A:100:ARG:HH11	0.54	2.14	6	1
1:A:179:CYS:O	1:A:182:TYR:N	0.54	2.36	19	1
1:A:41:GLN:HB3	1:A:49:VAL:HG21	0.54	1.80	10	2
1:A:28:SER:O	1:A:32:PHE:CE1	0.53	2.61	23	2
1:A:34:MET:SD	1:A:168:ALA:HB3	0.53	2.43	16	1
1:A:120:VAL:O	1:A:121:ASN:CB	0.53	2.56	24	2
1:A:66:VAL:HG13	1:A:67:LYS:N	0.53	2.18	16	4
1:A:119:PHE:CZ	1:A:148:ALA:HB2	0.53	2.38	13	2
1:A:63:PHE:CD1	1:A:71:MET:SD	0.53	3.01	10	1
1:A:98:ASN:ND2	1:A:98:ASN:C	0.53	2.61	10	3
1:A:105:MET:SD	1:A:112:PHE:CE1	0.53	3.01	24	2
1:A:104:GLN:NE2	1:A:107:GLN:OE1	0.53	2.40	5	1
1:A:31:LEU:HD12	1:A:113:ALA:HB2	0.53	1.80	20	4
1:A:79:LEU:O	1:A:82:ASP:O	0.53	2.25	13	15
1:A:46:TRP:CZ3	1:A:49:VAL:HG11	0.53	2.38	5	1
1:A:20:GLU:CG	1:A:20:GLU:O	0.53	2.57	11	1
1:A:182:TYR:O	1:A:182:TYR:CD2	0.53	2.61	18	6
1:A:60:PHE:O	1:A:63:PHE:CD1	0.53	2.61	18	1
1:A:6:TRP:CE3	1:A:132:LEU:HD13	0.53	2.38	24	1
1:A:179:CYS:O	1:A:180:CYS:C	0.53	2.47	4	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:120:VAL:O	1:A:120:VAL:HG13	0.53	2.03	17	2
1:A:112:PHE:O	1:A:116:VAL:HG13	0.53	2.04	23	2
1:A:56:TYR:CZ	1:A:60:PHE:CZ	0.53	2.97	9	1
1:A:84:GLY:O	1:A:85:ILE:C	0.53	2.47	17	2
1:A:56:TYR:CD1	1:A:60:PHE:CD2	0.53	2.97	24	7
1:A:46:TRP:HE1	1:A:50:LEU:HD21	0.53	1.64	5	1
1:A:85:ILE:O	1:A:86:ILE:O	0.53	2.26	15	7
1:A:40:GLN:NE2	1:A:52:LYS:CE	0.53	2.72	22	1
1:A:105:MET:SD	1:A:152:ARG:NH2	0.52	2.81	3	2
1:A:7:VAL:HG11	1:A:13:TYR:CG	0.52	2.38	5	1
1:A:121:ASN:O	1:A:123:GLN:NE2	0.52	2.42	11	1
1:A:180:CYS:O	1:A:181:CYS:CB	0.52	2.56	18	1
1:A:33:GLU:O	1:A:36:CYS:SG	0.52	2.63	6	1
1:A:177:VAL:HG22	1:A:177:VAL:O	0.52	2.04	6	1
1:A:68:VAL:CG2	1:A:69:ALA:N	0.52	2.71	25	2
1:A:32:PHE:CD1	1:A:32:PHE:C	0.52	2.80	13	2
1:A:84:GLY:H	1:A:87:ARG:NH2	0.52	2.00	21	1
1:A:127:THR:O	1:A:182:TYR:CZ	0.52	2.63	1	1
1:A:37:LEU:HD11	1:A:56:TYR:CG	0.52	2.39	1	1
1:A:178:GLY:C	1:A:180:CYS:H	0.52	2.08	21	6
1:A:29:LYS:O	1:A:33:GLU:OE1	0.52	2.27	23	3
1:A:165:PHE:CD2	1:A:169:CYS:SG	0.52	3.03	19	2
1:A:87:ARG:CG	1:A:87:ARG:NH1	0.52	2.70	2	1
1:A:85:ILE:N	1:A:85:ILE:CD1	0.52	2.71	9	1
1:A:27:ASP:OD2	1:A:30:LYS:NZ	0.52	2.43	23	1
1:A:47:ILE:HG23	1:A:48:THR:N	0.52	2.20	10	6
1:A:60:PHE:CZ	1:A:79:LEU:HD13	0.52	2.40	18	2
1:A:57:ARG:HH11	1:A:61:HIS:CE1	0.52	2.22	24	1
1:A:121:ASN:C	1:A:123:GLN:N	0.52	2.63	13	8
1:A:76:VAL:CG2	1:A:77:GLU:N	0.52	2.73	6	3
1:A:115:PHE:CZ	1:A:152:ARG:NH2	0.52	2.78	7	1
1:A:155:LYS:O	1:A:156:PHE:CD1	0.52	2.63	7	2
1:A:47:ILE:CG2	1:A:48:THR:N	0.52	2.72	18	16
1:A:44:LEU:HD12	1:A:48:THR:HG21	0.52	1.82	12	1
1:A:34:MET:O	1:A:38:GLU:OE1	0.52	2.27	22	2
1:A:9:GLN:N	1:A:9:GLN:OE1	0.52	2.43	3	2
1:A:57:ARG:O	1:A:61:HIS:ND1	0.52	2.42	9	1
1:A:176:VAL:CG1	1:A:177:VAL:N	0.52	2.70	5	2
1:A:68:VAL:O	1:A:96:ILE:HG23	0.52	2.05	6	1
1:A:76:VAL:HG22	1:A:92:ILE:CG2	0.52	2.34	9	2
1:A:136:PRO:C	1:A:137:THR:HG23	0.52	2.25	22	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:41:GLN:O	1:A:44:LEU:O	0.51	2.29	15	10
1:A:36:CYS:SG	1:A:98:ASN:ND2	0.51	2.83	3	2
1:A:23:VAL:O	1:A:169:CYS:O	0.51	2.28	12	5
1:A:59:CYS:O	1:A:63:PHE:CD1	0.51	2.63	7	1
1:A:82:ASP:C	1:A:84:GLY:H	0.51	2.08	17	4
1:A:50:LEU:O	1:A:54:GLU:OE1	0.51	2.28	13	1
1:A:34:MET:SD	1:A:169:CYS:N	0.51	2.83	16	1
1:A:148:ALA:C	1:A:152:ARG:NH1	0.51	2.63	21	1
1:A:64:ASP:OD2	1:A:67:LYS:N	0.51	2.41	2	1
1:A:20:GLU:OE1	1:A:23:VAL:HG21	0.51	2.04	3	2
1:A:136:PRO:C	1:A:138:SER:N	0.51	2.62	22	3
1:A:25:GLU:OE1	1:A:169:CYS:O	0.51	2.28	8	1
1:A:179:CYS:C	1:A:181:CYS:H	0.51	2.09	15	3
1:A:76:VAL:HG13	1:A:92:ILE:HG21	0.51	1.83	21	1
1:A:125:GLN:HB2	1:A:172:VAL:HG12	0.51	1.82	11	7
1:A:17:HIS:CD2	1:A:21:TRP:CZ3	0.51	2.99	5	20
1:A:180:CYS:O	1:A:182:TYR:N	0.51	2.44	3	2
1:A:69:ALA:HB2	1:A:99:ALA:CB	0.51	2.36	8	3
1:A:179:CYS:C	1:A:180:CYS:SG	0.51	2.89	13	3
1:A:57:ARG:O	1:A:61:HIS:CA	0.51	2.59	17	1
1:A:88:HIS:HD1	1:A:92:ILE:HG13	0.51	1.66	17	1
1:A:174:ASP:O	1:A:174:ASP:OD1	0.51	2.29	18	6
1:A:16:TYR:CD1	1:A:50:LEU:CD2	0.51	2.94	15	1
1:A:169:CYS:SG	1:A:171:LEU:CD1	0.51	2.99	18	2
1:A:105:MET:CE	1:A:152:ARG:NH2	0.51	2.74	16	3
1:A:175:HIS:O	1:A:176:VAL:CG2	0.51	2.58	17	1
1:A:84:GLY:O	1:A:85:ILE:O	0.51	2.27	13	8
1:A:68:VAL:CG1	1:A:69:ALA:N	0.50	2.73	9	2
1:A:178:GLY:C	1:A:180:CYS:N	0.50	2.63	15	6
1:A:103:LEU:CD2	1:A:103:LEU:N	0.50	2.74	21	1
1:A:62:GLN:C	1:A:64:ASP:H	0.50	2.09	2	2
1:A:129:ALA:O	1:A:176:VAL:O	0.50	2.29	4	1
1:A:56:TYR:CE1	1:A:60:PHE:CG	0.50	2.99	13	2
1:A:64:ASP:O	1:A:68:VAL:CG2	0.50	2.58	17	1
1:A:32:PHE:O	1:A:32:PHE:CD1	0.50	2.64	24	1
1:A:6:TRP:CZ2	1:A:174:ASP:OD2	0.50	2.65	25	1
1:A:37:LEU:N	1:A:37:LEU:CD2	0.50	2.74	1	4
1:A:179:CYS:SG	1:A:180:CYS:N	0.50	2.84	2	1
1:A:44:LEU:N	1:A:44:LEU:HD22	0.50	2.21	12	3
1:A:105:MET:O	1:A:108:ASN:OD1	0.50	2.30	19	1
1:A:35:ILE:O	1:A:38:GLU:OE1	0.50	2.29	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:PHE:CE2	1:A:102:TYR:OH	0.50	2.59	23	1
1:A:56:TYR:CZ	1:A:60:PHE:CD1	0.50	3.00	5	2
1:A:98:ASN:OD1	1:A:154:PHE:CZ	0.50	2.65	1	1
1:A:34:MET:O	1:A:38:GLU:OE2	0.50	2.30	4	1
1:A:13:TYR:CE1	1:A:46:TRP:NE1	0.50	2.79	9	2
1:A:165:PHE:CG	1:A:169:CYS:SG	0.50	3.05	1	1
1:A:22:GLY:O	1:A:173:ASN:OD1	0.50	2.30	7	1
1:A:40:GLN:OE1	1:A:87:ARG:NH2	0.50	2.45	7	1
1:A:16:TYR:CZ	1:A:20:GLU:O	0.50	2.65	10	1
1:A:80:VAL:O	1:A:87:ARG:NH1	0.50	2.45	13	2
1:A:23:VAL:O	1:A:23:VAL:CG1	0.50	2.60	20	3
1:A:5:GLY:C	1:A:7:VAL:H	0.49	2.10	12	2
1:A:101:ALA:HB3	1:A:154:PHE:CE1	0.49	2.42	17	2
1:A:176:VAL:C	1:A:178:GLY:H	0.49	2.10	6	2
1:A:167:GLN:OE1	1:A:174:ASP:OD2	0.49	2.30	7	1
1:A:40:GLN:HE21	1:A:91:LYS:NZ	0.49	2.04	9	1
1:A:20:GLU:O	1:A:21:TRP:O	0.49	2.30	1	5
1:A:56:TYR:C	1:A:56:TYR:CD1	0.49	2.86	3	2
1:A:46:TRP:CD1	1:A:47:ILE:N	0.49	2.81	22	3
1:A:8:SER:O	1:A:9:GLN:O	0.49	2.30	22	2
1:A:8:SER:O	1:A:8:SER:OG	0.49	2.31	21	2
1:A:38:GLU:OE2	1:A:41:GLN:OE1	0.49	2.29	19	1
1:A:57:ARG:O	1:A:61:HIS:CB	0.49	2.60	5	9
1:A:163:TYR:OH	1:A:174:ASP:OD2	0.49	2.31	5	2
1:A:34:MET:SD	1:A:168:ALA:HB1	0.49	2.47	6	4
1:A:76:VAL:HG22	1:A:92:ILE:HG22	0.49	1.83	9	1
1:A:57:ARG:HH21	1:A:61:HIS:CD2	0.49	2.25	19	2
1:A:32:PHE:CE1	1:A:36:CYS:SG	0.49	3.05	9	1
1:A:108:ASN:O	1:A:110:GLU:OE1	0.49	2.31	18	2
1:A:32:PHE:CZ	1:A:98:ASN:ND2	0.49	2.79	7	2
1:A:79:LEU:C	1:A:79:LEU:CD1	0.49	2.79	20	2
1:A:23:VAL:O	1:A:23:VAL:HG23	0.49	2.08	12	1
1:A:50:LEU:N	1:A:50:LEU:CD1	0.49	2.75	15	1
1:A:96:ILE:N	1:A:96:ILE:HD12	0.49	2.23	17	3
1:A:9:GLN:O	1:A:10:ASP:C	0.49	2.51	11	3
1:A:63:PHE:CD1	1:A:63:PHE:C	0.49	2.86	18	1
1:A:84:GLY:CA	1:A:87:ARG:HH21	0.49	2.21	21	1
1:A:176:VAL:CG2	1:A:177:VAL:H	0.49	2.13	5	1
1:A:41:GLN:HG2	1:A:49:VAL:HG21	0.49	1.85	19	1
1:A:60:PHE:O	1:A:63:PHE:N	0.48	2.45	9	2
1:A:13:TYR:CE2	1:A:47:ILE:HD13	0.48	2.44	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:TYR:OH	1:A:46:TRP:CE2	0.48	2.56	21	1
1:A:37:LEU:N	1:A:37:LEU:HD12	0.48	2.24	2	2
1:A:14:ILE:HD12	1:A:14:ILE:N	0.48	2.23	20	1
1:A:120:VAL:HG22	1:A:120:VAL:O	0.48	2.08	23	1
1:A:157:VAL:O	1:A:158:GLY:C	0.48	2.52	15	18
1:A:57:ARG:NH1	1:A:61:HIS:ND1	0.48	2.61	13	1
1:A:127:THR:O	1:A:182:TYR:OH	0.48	2.30	1	4
1:A:145:LEU:HD23	1:A:145:LEU:O	0.48	2.08	2	1
1:A:21:TRP:C	1:A:21:TRP:CD1	0.48	2.87	15	1
1:A:5:GLY:C	1:A:6:TRP:CD1	0.48	2.87	12	2
1:A:63:PHE:O	1:A:64:ASP:OD1	0.48	2.32	5	1
1:A:37:LEU:HD13	1:A:53:ARG:HG3	0.48	1.84	19	2
1:A:82:ASP:C	1:A:84:GLY:N	0.48	2.66	9	3
1:A:142:SER:OG	1:A:166:MET:SD	0.48	2.65	2	1
1:A:165:PHE:CD1	1:A:166:MET:N	0.48	2.81	2	1
1:A:63:PHE:O	1:A:64:ASP:C	0.48	2.52	10	9
1:A:145:LEU:O	1:A:145:LEU:HD13	0.48	2.09	20	3
1:A:17:HIS:HD1	1:A:18:ASP:N	0.48	2.07	15	1
1:A:83:ALA:O	1:A:85:ILE:N	0.48	2.47	1	3
1:A:85:ILE:O	1:A:86:ILE:C	0.48	2.51	9	6
1:A:32:PHE:CE2	1:A:33:GLU:OE2	0.48	2.67	10	1
1:A:135:ILE:CG2	1:A:163:TYR:OH	0.48	2.62	19	2
1:A:78:ARG:CD	1:A:78:ARG:C	0.48	2.82	1	1
1:A:83:ALA:C	1:A:85:ILE:H	0.48	2.12	19	5
1:A:59:CYS:O	1:A:59:CYS:SG	0.48	2.72	7	2
1:A:25:GLU:OE1	1:A:168:ALA:O	0.48	2.31	8	1
1:A:179:CYS:C	1:A:181:CYS:N	0.48	2.67	10	3
1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:HD22	0.48	2.23	21	1
1:A:8:SER:O	1:A:9:GLN:C	0.48	2.51	2	3
1:A:145:LEU:C	1:A:145:LEU:CD1	0.48	2.78	22	4
1:A:56:TYR:O	1:A:60:PHE:N	0.48	2.35	9	2
1:A:34:MET:O	1:A:38:GLU:CB	0.48	2.62	10	1
1:A:179:CYS:SG	1:A:180:CYS:SG	0.48	3.04	16	1
1:A:17:HIS:C	1:A:17:HIS:HD1	0.47	2.12	12	8
1:A:83:ALA:C	1:A:85:ILE:N	0.47	2.66	1	4
1:A:82:ASP:OD1	1:A:82:ASP:O	0.47	2.31	11	1
1:A:129:ALA:O	1:A:177:VAL:CG2	0.47	2.62	15	1
1:A:83:ALA:HB1	1:A:85:ILE:HG12	0.47	1.86	20	3
1:A:37:LEU:O	1:A:40:GLN:NE2	0.47	2.47	13	1
1:A:112:PHE:CD1	1:A:112:PHE:N	0.47	2.82	21	1
1:A:121:ASN:C	1:A:123:GLN:H	0.47	2.12	5	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:ILE:O	1:A:86:ILE:CG2	0.47	2.61	7	1
1:A:56:TYR:CE2	1:A:60:PHE:CB	0.47	2.97	18	1
1:A:176:VAL:C	1:A:178:GLY:N	0.47	2.67	25	2
1:A:84:GLY:C	1:A:86:ILE:H	0.47	2.13	7	1
1:A:176:VAL:O	1:A:177:VAL:C	0.47	2.52	8	1
1:A:145:LEU:HD13	1:A:145:LEU:O	0.47	2.08	9	2
1:A:170:GLY:C	1:A:172:VAL:N	0.47	2.67	12	1
1:A:173:ASN:OD1	1:A:182:TYR:CD2	0.47	2.67	19	1
1:A:60:PHE:CZ	1:A:95:ILE:HD13	0.47	2.44	21	1
1:A:60:PHE:CE1	1:A:95:ILE:HG21	0.47	2.44	25	1
1:A:50:LEU:CD2	1:A:53:ARG:NH2	0.47	2.77	5	1
1:A:171:LEU:HD22	1:A:171:LEU:N	0.47	2.25	5	1
1:A:6:TRP:CZ2	1:A:13:TYR:OH	0.47	2.68	10	1
1:A:38:GLU:OE1	1:A:164:SER:OG	0.47	2.31	23	1
1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:HD12	0.47	2.25	25	1
1:A:41:GLN:O	1:A:42:ALA:C	0.47	2.51	16	22
1:A:56:TYR:CE1	1:A:85:ILE:HD12	0.47	2.45	2	1
1:A:28:SER:C	1:A:32:PHE:CE2	0.47	2.88	11	1
1:A:76:VAL:HG23	1:A:77:GLU:N	0.47	2.23	20	1
1:A:9:GLN:O	1:A:10:ASP:OD1	0.47	2.33	25	1
1:A:69:ALA:HB2	1:A:99:ALA:HB1	0.47	1.86	15	1
1:A:173:ASN:OD1	1:A:182:TYR:CE2	0.47	2.67	19	1
1:A:137:THR:O	1:A:137:THR:CG2	0.47	2.62	2	2
1:A:71:MET:SD	1:A:75:ASP:CB	0.47	3.02	13	1
1:A:32:PHE:CE2	1:A:98:ASN:ND2	0.47	2.83	17	1
1:A:83:ALA:O	1:A:84:GLY:C	0.46	2.54	9	3
1:A:122:HIS:N	1:A:122:HIS:CD2	0.46	2.83	2	1
1:A:86:ILE:CG1	1:A:87:ARG:N	0.46	2.77	9	4
1:A:171:LEU:CD2	1:A:171:LEU:N	0.46	2.79	5	1
1:A:177:VAL:O	1:A:177:VAL:CG1	0.46	2.56	11	1
1:A:37:LEU:HD21	1:A:56:TYR:CG	0.46	2.45	21	1
1:A:37:LEU:N	1:A:37:LEU:HD22	0.46	2.26	1	1
1:A:7:VAL:O	1:A:8:SER:OG	0.46	2.33	6	1
1:A:135:ILE:HD13	1:A:174:ASP:OD2	0.46	2.09	8	1
1:A:3:ARG:O	1:A:4:CYS:C	0.46	2.53	25	4
1:A:60:PHE:CZ	1:A:95:ILE:CD1	0.46	2.98	21	1
1:A:19:ASN:O	1:A:20:GLU:CD	0.46	2.54	22	1
1:A:123:GLN:CD	1:A:124:PRO:O	0.46	2.54	23	1
1:A:94:ALA:O	1:A:98:ASN:OD1	0.46	2.34	8	2
1:A:23:VAL:O	1:A:25:GLU:OE2	0.46	2.32	8	1
1:A:17:HIS:CD2	1:A:21:TRP:CE3	0.46	3.03	23	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:GLN:O	1:A:10:ASP:O	0.46	2.33	8	1
1:A:7:VAL:HG23	1:A:8:SER:N	0.46	2.25	19	1
1:A:4:CYS:O	1:A:7:VAL:HG12	0.46	2.10	6	1
1:A:91:LYS:NZ	1:A:156:PHE:CZ	0.46	2.83	11	1
1:A:57:ARG:NH2	1:A:61:HIS:CD2	0.46	2.83	13	1
1:A:121:ASN:HD22	1:A:123:GLN:NE2	0.46	2.09	1	1
1:A:116:VAL:HG23	1:A:117:TRP:N	0.46	2.25	23	4
1:A:63:PHE:O	1:A:64:ASP:CB	0.46	2.63	6	2
1:A:40:GLN:O	1:A:44:LEU:HD13	0.46	2.11	23	2
1:A:80:VAL:CG1	1:A:81:GLN:N	0.46	2.79	20	2
1:A:87:ARG:O	1:A:88:HIS:CB	0.46	2.63	23	2
1:A:125:GLN:HB2	1:A:172:VAL:HG23	0.46	1.88	5	1
1:A:98:ASN:OD1	1:A:154:PHE:CD1	0.46	2.69	17	2
1:A:68:VAL:HG23	1:A:99:ALA:CB	0.46	2.41	1	1
1:A:31:LEU:HD11	1:A:165:PHE:CE2	0.46	2.45	2	1
1:A:145:LEU:C	1:A:145:LEU:CD2	0.46	2.83	2	2
1:A:7:VAL:O	1:A:7:VAL:CG2	0.46	2.63	4	2
1:A:7:VAL:O	1:A:8:SER:C	0.46	2.53	11	3
1:A:7:VAL:CG2	1:A:8:SER:N	0.46	2.79	19	2
1:A:3:ARG:HH11	1:A:7:VAL:HG11	0.46	1.69	9	1
1:A:106:GLU:O	1:A:109:GLY:N	0.46	2.46	9	3
1:A:96:ILE:N	1:A:96:ILE:CD1	0.45	2.79	2	2
1:A:7:VAL:HG12	1:A:13:TYR:CD1	0.45	2.46	4	1
1:A:135:ILE:CD1	1:A:174:ASP:OD2	0.45	2.64	8	1
1:A:117:TRP:O	1:A:122:HIS:N	0.45	2.48	23	1
1:A:174:ASP:O	1:A:174:ASP:CG	0.45	2.54	2	4
1:A:98:ASN:OD1	1:A:98:ASN:C	0.45	2.55	3	2
1:A:89:ARG:NH1	1:A:89:ARG:CG	0.45	2.79	4	1
1:A:13:TYR:OH	1:A:21:TRP:CZ2	0.45	2.67	7	2
1:A:80:VAL:HG22	1:A:88:HIS:HB2	0.45	1.89	12	1
1:A:158:GLY:N	1:A:161:ILE:HD12	0.45	2.27	15	1
1:A:84:GLY:O	1:A:86:ILE:O	0.45	2.34	17	1
1:A:59:CYS:SG	1:A:82:ASP:OD1	0.45	2.63	18	1
1:A:46:TRP:O	1:A:47:ILE:C	0.45	2.54	15	2
1:A:176:VAL:HG12	1:A:179:CYS:N	0.45	2.27	15	1
1:A:38:GLU:O	1:A:41:GLN:N	0.45	2.48	20	2
1:A:38:GLU:CD	1:A:46:TRP:CZ3	0.45	2.90	5	1
1:A:116:VAL:CG1	1:A:117:TRP:N	0.45	2.79	12	1
1:A:75:ASP:CG	1:A:78:ARG:HH21	0.45	2.14	21	1
1:A:32:PHE:CD2	1:A:102:TYR:CE1	0.45	3.04	24	1
1:A:16:TYR:CD1	1:A:16:TYR:C	0.45	2.89	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:GLN:O	1:A:63:PHE:C	0.45	2.55	17	1
1:A:86:ILE:HG22	1:A:87:ARG:N	0.45	2.27	17	1
1:A:108:ASN:OD1	1:A:108:ASN:C	0.45	2.54	19	1
1:A:115:PHE:CD1	1:A:115:PHE:C	0.45	2.86	20	1
1:A:51:LYS:CG	1:A:52:LYS:N	0.45	2.79	21	1
1:A:121:ASN:O	1:A:122:HIS:C	0.45	2.55	20	9
1:A:177:VAL:O	1:A:182:TYR:O	0.45	2.35	23	1
1:A:108:ASN:OD1	1:A:110:GLU:OE1	0.45	2.35	25	1
1:A:180:CYS:O	1:A:181:CYS:C	0.45	2.55	3	2
1:A:29:LYS:O	1:A:33:GLU:CD	0.45	2.55	11	1
1:A:161:ILE:N	1:A:161:ILE:CD1	0.45	2.80	11	1
1:A:22:GLY:C	1:A:169:CYS:O	0.45	2.55	12	1
1:A:120:VAL:O	1:A:121:ASN:ND2	0.45	2.50	23	1
1:A:32:PHE:CD1	1:A:102:TYR:CD1	0.45	3.04	8	2
1:A:167:GLN:CD	1:A:174:ASP:OD2	0.45	2.56	7	1
1:A:178:GLY:O	1:A:179:CYS:C	0.45	2.53	10	2
1:A:14:ILE:HG22	1:A:18:ASP:OD2	0.45	2.11	15	1
1:A:180:CYS:C	1:A:182:TYR:N	0.45	2.70	3	2
1:A:149:LEU:HB2	1:A:157:VAL:HG21	0.45	1.88	6	2
1:A:68:VAL:HG13	1:A:69:ALA:N	0.45	2.27	9	1
1:A:91:LYS:NZ	1:A:156:PHE:CG	0.45	2.85	10	1
1:A:82:ASP:O	1:A:82:ASP:CG	0.45	2.55	25	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:8:SER:H	0.44	2.19	6	1
1:A:157:VAL:O	1:A:157:VAL:CG2	0.44	2.65	15	2
1:A:23:VAL:O	1:A:25:GLU:CD	0.44	2.56	8	1
1:A:175:HIS:O	1:A:176:VAL:C	0.44	2.55	1	2
1:A:174:ASP:CG	1:A:175:HIS:N	0.44	2.70	8	1
1:A:14:ILE:O	1:A:18:ASP:CG	0.44	2.55	15	1
1:A:58:ALA:O	1:A:62:GLN:CD	0.44	2.56	4	1
1:A:32:PHE:CD2	1:A:102:TYR:CE2	0.44	3.06	11	1
1:A:17:HIS:CE1	1:A:18:ASP:OD1	0.44	2.71	15	1
1:A:161:ILE:CD1	1:A:161:ILE:N	0.44	2.80	18	1
1:A:161:ILE:N	1:A:161:ILE:HD12	0.44	2.27	18	1
1:A:9:GLN:NE2	1:A:13:TYR:CD1	0.44	2.85	20	1
1:A:38:GLU:O	1:A:39:GLY:C	0.44	2.55	20	1
1:A:148:ALA:HB1	1:A:152:ARG:NH1	0.44	2.26	21	1
1:A:136:PRO:C	1:A:137:THR:CG2	0.44	2.86	22	1
1:A:7:VAL:HG22	1:A:13:TYR:CD1	0.44	2.47	23	1
1:A:62:GLN:C	1:A:64:ASP:N	0.44	2.71	9	1
1:A:155:LYS:O	1:A:156:PHE:C	0.44	2.55	8	7
1:A:63:PHE:O	1:A:68:VAL:CG1	0.44	2.66	25	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:TRP:NE1	1:A:21:TRP:CH2	0.44	2.86	3	2
1:A:87:ARG:HH11	1:A:87:ARG:HG2	0.44	1.72	10	5
1:A:74:GLU:CG	1:A:75:ASP:N	0.44	2.81	13	2
1:A:50:LEU:N	1:A:50:LEU:HD12	0.44	2.27	15	1
1:A:28:SER:HA	1:A:113:ALA:HB2	0.44	1.89	18	3
1:A:46:TRP:CZ2	1:A:50:LEU:HD21	0.44	2.47	7	1
1:A:16:TYR:CE1	1:A:21:TRP:CB	0.44	3.00	15	1
1:A:8:SER:O	1:A:10:ASP:OD2	0.44	2.35	23	1
1:A:56:TYR:CE1	1:A:95:ILE:HD13	0.44	2.48	6	1
1:A:25:GLU:CB	1:A:31:LEU:HD11	0.44	2.43	18	1
1:A:165:PHE:CZ	1:A:166:MET:SD	0.44	3.11	23	1
1:A:175:HIS:C	1:A:176:VAL:HG22	0.44	2.33	23	1
1:A:3:ARG:HH11	1:A:14:ILE:HD13	0.44	1.70	25	1
1:A:87:ARG:NH1	1:A:87:ARG:HG2	0.43	2.28	2	1
1:A:56:TYR:CE2	1:A:60:PHE:CZ	0.43	3.05	8	1
1:A:174:ASP:O	1:A:175:HIS:HB2	0.43	2.13	17	3
1:A:9:GLN:O	1:A:11:PRO:N	0.43	2.51	11	1
1:A:38:GLU:OE2	1:A:41:GLN:CD	0.43	2.56	19	1
1:A:44:LEU:HD23	1:A:48:THR:HG21	0.43	1.87	23	1
1:A:7:VAL:HG21	1:A:14:ILE:HG13	0.43	1.89	12	1
1:A:98:ASN:OD1	1:A:154:PHE:CE1	0.43	2.71	17	1
1:A:94:ALA:O	1:A:98:ASN:ND2	0.43	2.52	25	1
1:A:88:HIS:O	1:A:88:HIS:CG	0.43	2.72	2	1
1:A:134:GLU:CD	1:A:134:GLU:C	0.43	2.77	6	1
1:A:71:MET:SD	1:A:96:ILE:CD1	0.43	3.06	18	1
1:A:16:TYR:CE2	1:A:20:GLU:O	0.43	2.71	21	1
1:A:6:TRP:CH2	1:A:132:LEU:HD22	0.43	2.48	24	1
1:A:152:ARG:NH1	1:A:152:ARG:CG	0.43	2.79	1	2
1:A:40:GLN:OE1	1:A:56:TYR:CZ	0.43	2.71	11	1
1:A:127:THR:HG22	1:A:173:ASN:O	0.43	2.14	17	1
1:A:76:VAL:HG11	1:A:93:GLN:HE21	0.43	1.73	2	1
1:A:59:CYS:O	1:A:63:PHE:CE1	0.43	2.71	7	1
1:A:35:ILE:CD1	1:A:165:PHE:CE2	0.43	3.01	20	1
1:A:98:ASN:CG	1:A:154:PHE:CE2	0.43	2.92	23	1
1:A:41:GLN:CD	1:A:41:GLN:C	0.43	2.78	3	4
1:A:171:LEU:HD12	1:A:171:LEU:N	0.43	2.29	18	1
1:A:58:ALA:O	1:A:62:GLN:OE1	0.43	2.37	23	1
1:A:38:GLU:OE1	1:A:41:GLN:OE1	0.43	2.36	25	1
1:A:152:ARG:HH11	1:A:152:ARG:HG2	0.43	1.74	15	3
1:A:33:GLU:CD	1:A:33:GLU:C	0.43	2.78	4	1
1:A:56:TYR:CZ	1:A:85:ILE:HD12	0.43	2.49	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:VAL:HG13	1:A:92:ILE:CG2	0.43	2.43	21	1
1:A:129:ALA:O	1:A:177:VAL:HG23	0.43	2.14	12	1
1:A:38:GLU:OE2	1:A:164:SER:OG	0.43	2.29	16	1
1:A:38:GLU:CD	1:A:164:SER:OG	0.43	2.56	23	1
1:A:9:GLN:O	1:A:10:ASP:CG	0.43	2.56	25	1
1:A:5:GLY:O	1:A:6:TRP:C	0.43	2.57	4	1
1:A:37:LEU:HD13	1:A:53:ARG:NE	0.43	2.28	6	1
1:A:142:SER:CB	1:A:162:CYS:SG	0.43	3.07	7	1
1:A:117:TRP:CZ2	1:A:171:LEU:CD2	0.43	3.02	12	2
1:A:82:ASP:O	1:A:87:ARG:NE	0.43	2.45	16	1
1:A:12:LEU:HB3	1:A:47:ILE:HD11	0.43	1.90	20	1
1:A:38:GLU:CD	1:A:38:GLU:C	0.43	2.78	20	1
1:A:44:LEU:HD13	1:A:86:ILE:HD13	0.43	1.90	20	1
1:A:78:ARG:O	1:A:78:ARG:CD	0.43	2.67	1	1
1:A:174:ASP:CG	1:A:175:HIS:H	0.43	2.14	8	1
1:A:105:MET:HE1	1:A:152:ARG:NH2	0.43	2.29	12	1
1:A:165:PHE:O	1:A:165:PHE:CD1	0.42	2.72	9	1
1:A:79:LEU:O	1:A:82:ASP:N	0.42	2.52	18	1
1:A:76:VAL:CG2	1:A:96:ILE:HD11	0.42	2.44	23	3
1:A:138:SER:OG	1:A:159:THR:HG21	0.42	2.13	5	1
1:A:25:GLU:OE2	1:A:30:LYS:CD	0.42	2.68	10	1
1:A:32:PHE:CD1	1:A:32:PHE:O	0.42	2.71	10	1
1:A:7:VAL:HG11	1:A:13:TYR:HB3	0.42	1.90	15	1
1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:HD12	0.42	2.30	4	1
1:A:179:CYS:O	1:A:180:CYS:CB	0.42	2.65	22	2
1:A:50:LEU:HD22	1:A:53:ARG:NH2	0.42	2.29	5	1
1:A:173:ASN:O	1:A:182:TYR:OH	0.42	2.36	8	1
1:A:40:GLN:OE1	1:A:56:TYR:OH	0.42	2.35	10	1
1:A:175:HIS:O	1:A:176:VAL:HB	0.42	2.14	16	2
1:A:157:VAL:O	1:A:157:VAL:HG22	0.42	2.14	16	1
1:A:9:GLN:NE2	1:A:13:TYR:CG	0.42	2.87	20	1
1:A:98:ASN:C	1:A:98:ASN:OD1	0.42	2.57	21	1
1:A:40:GLN:O	1:A:41:GLN:C	0.42	2.57	23	1
1:A:7:VAL:HG13	1:A:14:ILE:HG12	0.42	1.90	2	1
1:A:52:LYS:NZ	1:A:86:ILE:CG1	0.42	2.82	10	1
1:A:105:MET:CE	1:A:110:GLU:O	0.42	2.68	20	1
1:A:89:ARG:HH11	1:A:89:ARG:HG2	0.42	1.74	4	1
1:A:89:ARG:CG	1:A:90:GLY:N	0.42	2.83	7	1
1:A:156:PHE:O	1:A:156:PHE:CD2	0.42	2.73	7	1
1:A:87:ARG:C	1:A:88:HIS:CG	0.42	2.92	10	1
1:A:41:GLN:CG	1:A:42:ALA:N	0.42	2.82	23	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:ALA:O	1:A:19:ASN:CG	0.42	2.58	3	2
1:A:56:TYR:OH	1:A:95:ILE:HD13	0.42	2.15	6	1
1:A:62:GLN:CG	1:A:63:PHE:N	0.42	2.83	6	1
1:A:176:VAL:CG1	1:A:179:CYS:H	0.42	2.27	15	1
1:A:113:ALA:O	1:A:116:VAL:CG1	0.42	2.67	1	1
1:A:157:VAL:O	1:A:158:GLY:O	0.42	2.38	12	2
1:A:161:ILE:O	1:A:164:SER:OG	0.42	2.31	17	1
1:A:68:VAL:HG23	1:A:69:ALA:N	0.42	2.30	25	1
1:A:149:LEU:N	1:A:149:LEU:CD1	0.42	2.83	3	2
1:A:3:ARG:HH11	1:A:3:ARG:HG2	0.42	1.74	9	3
1:A:69:ALA:HB2	1:A:99:ALA:HB3	0.42	1.91	9	1
1:A:116:VAL:CG2	1:A:117:TRP:N	0.42	2.82	23	1
1:A:76:VAL:HG12	1:A:92:ILE:CG2	0.42	2.43	1	1
1:A:79:LEU:O	1:A:80:VAL:C	0.42	2.58	18	1
1:A:123:GLN:OE1	1:A:124:PRO:O	0.42	2.38	23	1
1:A:40:GLN:O	1:A:42:ALA:N	0.41	2.53	2	1
1:A:13:TYR:CD2	1:A:47:ILE:HD13	0.41	2.50	3	2
1:A:29:LYS:CG	1:A:30:LYS:N	0.41	2.83	1	1
1:A:115:PHE:CE2	1:A:119:PHE:CE1	0.41	3.08	1	4
1:A:176:VAL:CG2	1:A:177:VAL:N	0.41	2.68	5	1
1:A:8:SER:OG	1:A:9:GLN:N	0.41	2.53	11	1
1:A:165:PHE:O	1:A:169:CYS:CB	0.41	2.69	20	1
1:A:129:ALA:O	1:A:176:VAL:C	0.41	2.58	4	1
1:A:32:PHE:CD1	1:A:102:TYR:CD2	0.41	3.08	5	1
1:A:166:MET:SD	1:A:171:LEU:HD22	0.41	2.55	23	1
1:A:10:ASP:OD1	1:A:10:ASP:N	0.41	2.50	2	1
1:A:52:LYS:O	1:A:53:ARG:C	0.41	2.56	15	1
1:A:19:ASN:O	1:A:20:GLU:CG	0.41	2.69	17	2
1:A:35:ILE:HG22	1:A:36:CYS:N	0.41	2.31	4	1
1:A:38:GLU:CD	1:A:39:GLY:N	0.41	2.74	20	1
1:A:128:GLN:NE2	1:A:182:TYR:OH	0.41	2.52	20	1
1:A:148:ALA:O	1:A:152:ARG:NH1	0.41	2.53	21	1
1:A:176:VAL:CG1	1:A:177:VAL:H	0.41	2.21	5	1
1:A:38:GLU:HB3	1:A:161:ILE:HG23	0.41	1.91	7	1
1:A:80:VAL:CG1	1:A:87:ARG:CZ	0.41	2.99	13	1
1:A:56:TYR:OH	1:A:63:PHE:CE1	0.41	2.74	17	1
1:A:86:ILE:O	1:A:87:ARG:C	0.41	2.57	17	1
1:A:6:TRP:O	1:A:7:VAL:C	0.41	2.59	4	1
1:A:86:ILE:HG21	1:A:91:LYS:HZ3	0.41	1.76	9	1
1:A:9:GLN:CD	1:A:9:GLN:H	0.41	2.19	3	2
1:A:176:VAL:HG12	1:A:178:GLY:H	0.41	1.76	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:146:SER:OG	1:A:157:VAL:O	0.41	2.32	6	1
1:A:53:ARG:HG2	1:A:53:ARG:HH11	0.41	1.75	7	1
1:A:166:MET:SD	1:A:172:VAL:HG11	0.41	2.56	8	1
1:A:9:GLN:C	1:A:10:ASP:CG	0.41	2.79	9	1
1:A:40:GLN:HE21	1:A:91:LYS:HZ3	0.41	1.59	9	1
1:A:60:PHE:CE2	1:A:79:LEU:HD13	0.41	2.50	9	1
1:A:56:TYR:CD1	1:A:56:TYR:C	0.41	2.94	16	1
1:A:82:ASP:OD2	1:A:87:ARG:NH2	0.41	2.54	21	1
1:A:131:THR:HG22	1:A:132:LEU:N	0.41	2.31	9	1
1:A:41:GLN:CB	1:A:49:VAL:HG21	0.41	2.45	10	1
1:A:36:CYS:SG	1:A:37:LEU:HD12	0.40	2.56	22	1
1:A:10:ASP:N	1:A:10:ASP:OD1	0.40	2.54	24	1
1:A:53:ARG:HH11	1:A:53:ARG:HG2	0.40	1.76	16	1
1:A:176:VAL:HG13	1:A:178:GLY:N	0.40	2.31	2	1
1:A:55:ASN:ND2	1:A:85:ILE:CG2	0.40	2.85	1	1
1:A:31:LEU:HD22	1:A:165:PHE:CZ	0.40	2.52	3	2
1:A:182:TYR:CD1	1:A:182:TYR:C	0.40	2.92	16	1
1:A:163:TYR:CE2	1:A:167:GLN:NE2	0.40	2.90	18	1
1:A:53:ARG:HG2	1:A:53:ARG:NH1	0.40	2.32	19	1
1:A:31:LEU:HD12	1:A:31:LEU:N	0.40	2.31	5	1
1:A:8:SER:OG	1:A:8:SER:O	0.40	2.39	6	1
1:A:57:ARG:O	1:A:61:HIS:CG	0.40	2.74	9	1
1:A:100:ARG:HG3	1:A:100:ARG:NH1	0.40	2.31	11	1
1:A:56:TYR:CD1	1:A:60:PHE:CE1	0.40	3.09	13	1
1:A:37:LEU:N	1:A:37:LEU:CD1	0.40	2.85	16	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	180/187 (96%)	162±3 (90±2%)	10±3 (6±2%)	8±2 (4±1%)	4	29
All	All	4500/4675 (96%)	4044 (90%)	257 (6%)	199 (4%)	4	29

All 26 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	176	VAL	17
1	A	64	ASP	16
1	A	83	ALA	15
1	A	88	HIS	13
1	A	85	ILE	13
1	A	20	GLU	11
1	A	21	TRP	11
1	A	86	ILE	10
1	A	180	CYS	9
1	A	179	CYS	9
1	A	158	GLY	9
1	A	9	GLN	8
1	A	89	ARG	8
1	A	10	ASP	7
1	A	122	HIS	7
1	A	175	HIS	6
1	A	181	CYS	6
1	A	177	VAL	5
1	A	8	SER	5
1	A	63	PHE	3
1	A	137	THR	3
1	A	65	PRO	2
1	A	6	TRP	2
1	A	84	GLY	2
1	A	130	THR	1
1	A	7	VAL	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	153/159 (96%)	138±3 (90±2%)	15±3 (10±2%)	12 58
All	All	3825/3975 (96%)	3458 (90%)	367 (10%)	12 58

All 91 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	64	ASP	24
1	A	176	VAL	16
1	A	4	CYS	15
1	A	139	THR	13
1	A	10	ASP	12
1	A	88	HIS	12
1	A	180	CYS	11
1	A	162	CYS	11
1	A	137	THR	11
1	A	98	ASN	9
1	A	47	ILE	9
1	A	59	CYS	8
1	A	130	THR	8
1	A	165	PHE	8
1	A	36	CYS	8
1	A	35	ILE	7
1	A	32	PHE	6
1	A	23	VAL	6
1	A	123	GLN	6
1	A	122	HIS	6
1	A	3	ARG	6
1	A	44	LEU	6
1	A	41	GLN	6
1	A	110	GLU	5
1	A	181	CYS	5
1	A	126	MET	4
1	A	6	TRP	4
1	A	71	MET	4
1	A	160	THR	4
1	A	61	HIS	4
1	A	79	LEU	3
1	A	87	ARG	3
1	A	135	ILE	3
1	A	105	MET	3
1	A	145	LEU	3
1	A	154	PHE	3
1	A	13	TYR	3
1	A	177	VAL	3
1	A	52	LYS	3
1	A	80	VAL	3
1	A	152	ARG	3
1	A	159	THR	3
1	A	31	LEU	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	138	SER	3
1	A	115	PHE	3
1	A	8	SER	3
1	A	28	SER	2
1	A	55	ASN	2
1	A	78	ARG	2
1	A	33	GLU	2
1	A	38	GLU	2
1	A	14	ILE	2
1	A	76	VAL	2
1	A	100	ARG	2
1	A	127	THR	2
1	A	68	VAL	2
1	A	179	CYS	2
1	A	89	ARG	2
1	A	157	VAL	2
1	A	182	TYR	2
1	A	63	PHE	2
1	A	120	VAL	2
1	A	169	CYS	2
1	A	103	LEU	2
1	A	91	LYS	2
1	A	46	TRP	2
1	A	112	PHE	1
1	A	128	GLN	1
1	A	166	MET	1
1	A	57	ARG	1
1	A	133	SER	1
1	A	134	GLU	1
1	A	142	SER	1
1	A	85	ILE	1
1	A	108	ASN	1
1	A	12	LEU	1
1	A	107	GLN	1
1	A	116	VAL	1
1	A	40	GLN	1
1	A	150	LYS	1
1	A	173	ASN	1
1	A	17	HIS	1
1	A	19	ASN	1
1	A	53	ARG	1
1	A	9	GLN	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	102	TYR	1
1	A	121	ASN	1
1	A	81	GLN	1
1	A	34	MET	1
1	A	171	LEU	1
1	A	86	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 1 ligands modelled in this entry, 1 is 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 (i)

No chemical shift data were provided