Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Dec 13, 2023 – 06:38 PM EST

PDB ID	:	2JNX
Title	:	NMR derived solution structure of an EF-hand Calcium Binding Protein from Entamoeba Histolytica
Authors	:	Mustafi, S.M.; Mutalik, R.B.; Chary, K.V.
Deposited on	:	2007-02-11

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

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

The types of validation reports are described at
http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types.

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

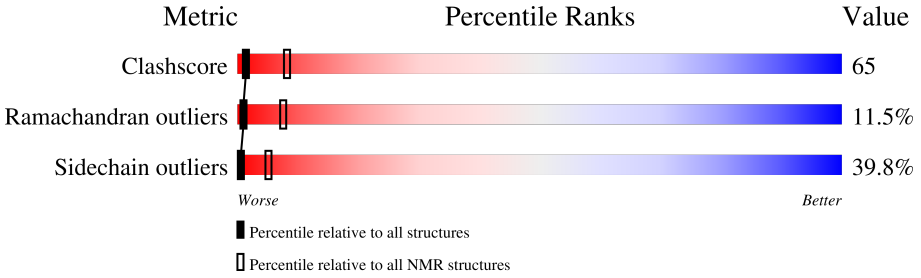
Cyrange	:	Kirchner and Güntert (2011)
NmrClust	:	Kelley et al. (1996)
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.36

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	134	12% 58% 21% • 7%

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 20 models. Model 9 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest target function*.

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:5-A:65 (61)	1.08	12
2	A:72-A:134 (63)	0.82	9

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 5 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition (i)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 1961 atoms, of which 905 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Calcium binding protein 2.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	134	1957	676	905	163	210	3	0

- Molecule 2 is CALCIUM ION (three-letter code: CA) (formula: Ca).

Mol	Chain	Residues	Atoms	
			Total	Ca
2	A	4	4	4

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: Calcium binding protein 2

Chain A: 12% 58% 21% • 7%

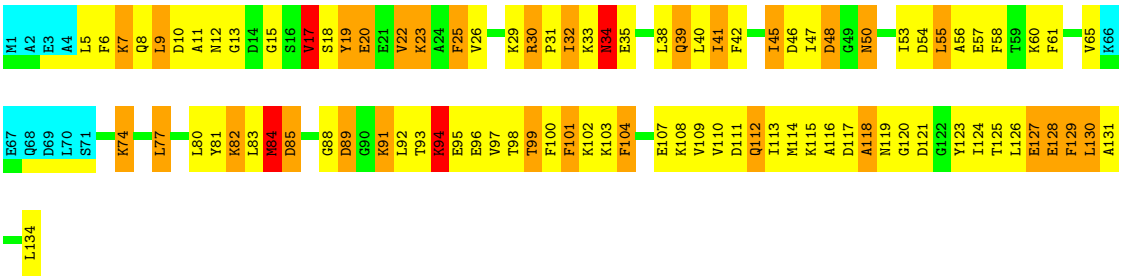
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: Calcium binding protein 2

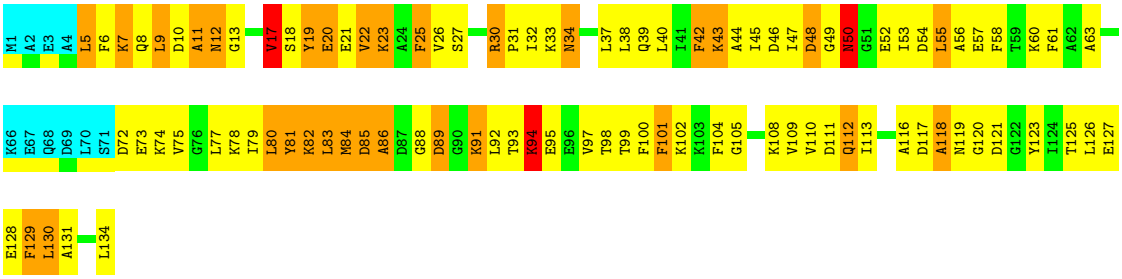
Chain A: 23% 44% 22% • 7%



4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: Calcium binding protein 2

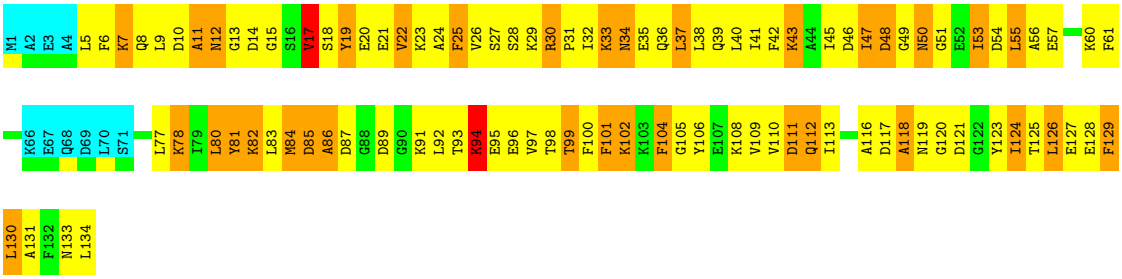
Chain A: 20% 48% 22% • 7%



4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: Calcium binding protein 2

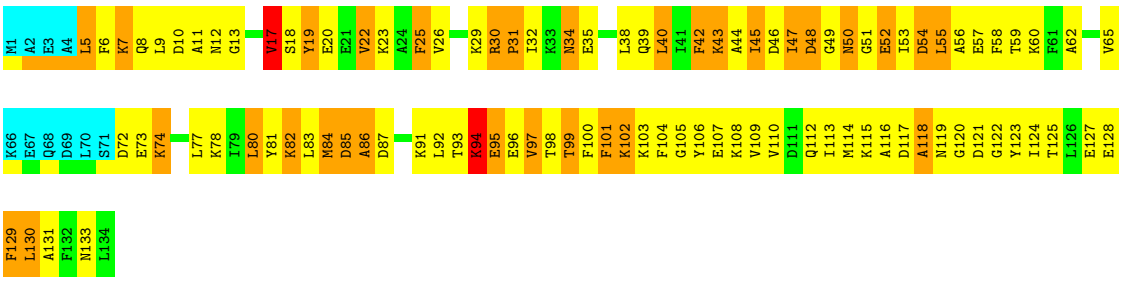
Chain A: 17% 49% 25% • 7%



4.2.4 Score per residue for model 4

• Molecule 1: Calcium binding protein 2

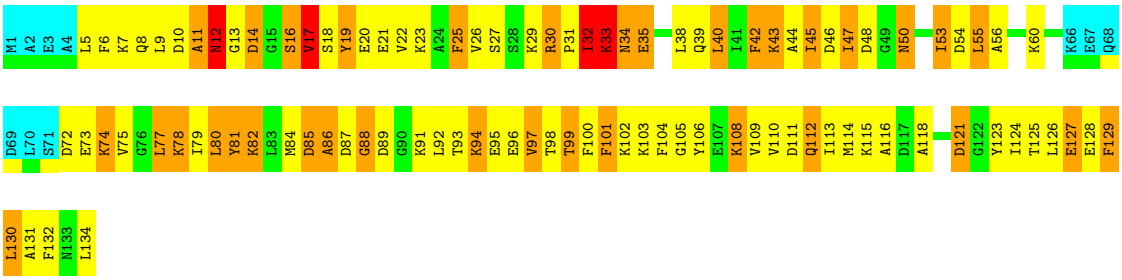
Chain A: 18% 49% 24% • 7%



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Calcium binding protein 2

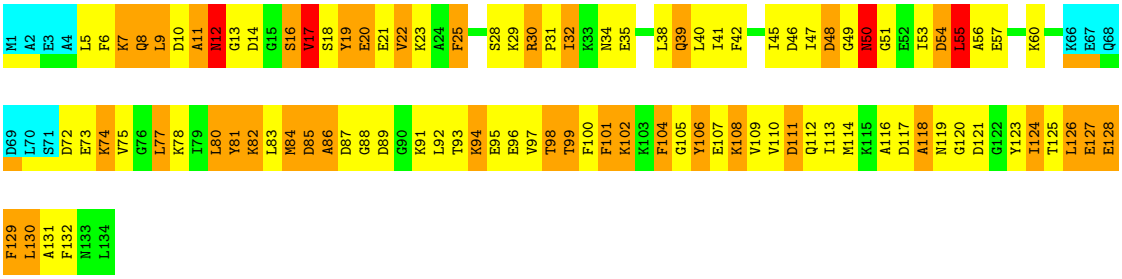
Chain A: 19% 44% 26% • 7%



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Calcium binding protein 2

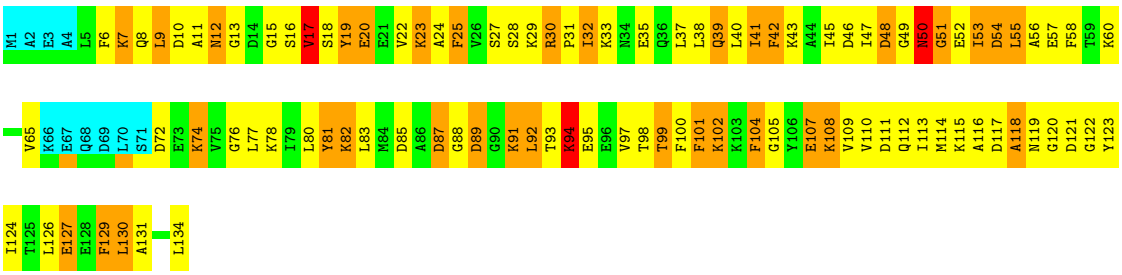
Chain A: 19% 43% 28% • 7%



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Calcium binding protein 2

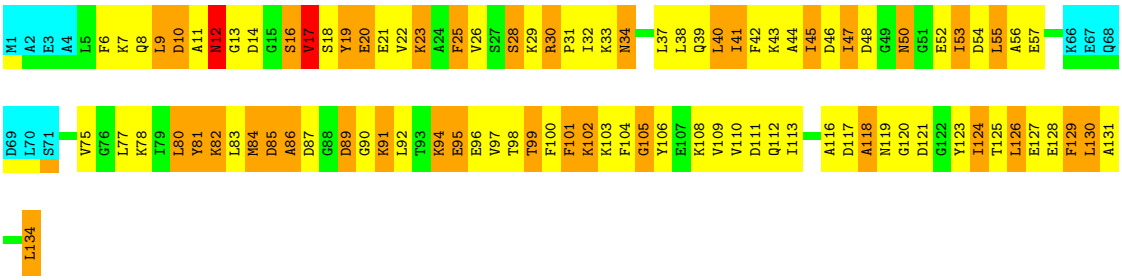
Chain A: 19% 46% 25% • 7%



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Calcium binding protein 2

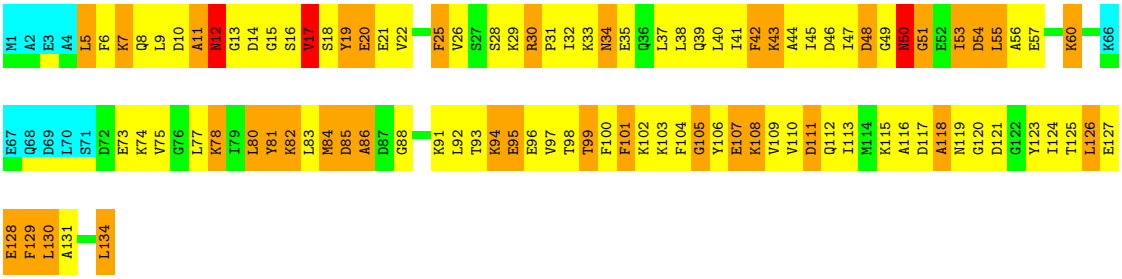
Chain A: 22% 42% 28% • 7%



4.2.9 Score per residue for model 9 (medoid)

- Molecule 1: Calcium binding protein 2

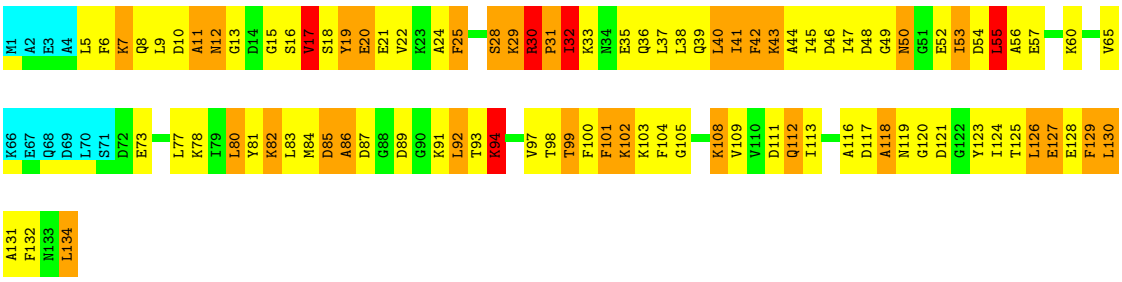
Chain A: 16% 46% 28% • 7%



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Calcium binding protein 2

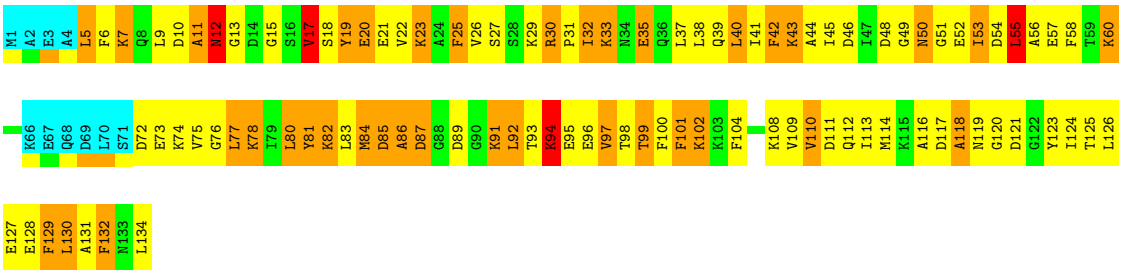
Chain A: 21% 45% 23% • 7%



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Calcium binding protein 2

Chain A: 18% 44% 28% • 7%



4.2.12 Score per residue for model 12

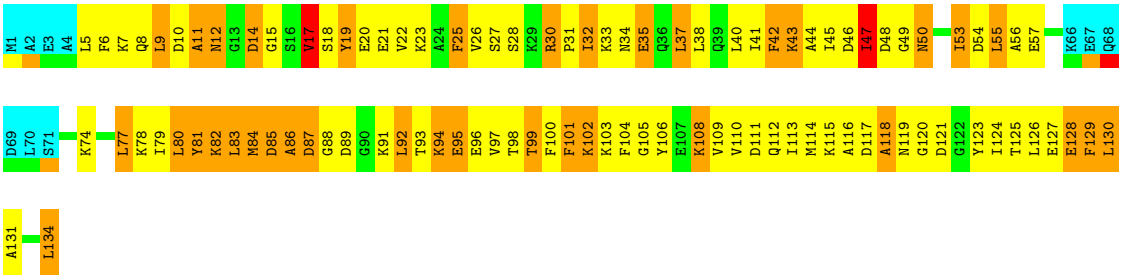
- Molecule 1: Calcium binding protein 2

Chain A: 22% 49% 20% • 7%

4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Calcium binding protein 2

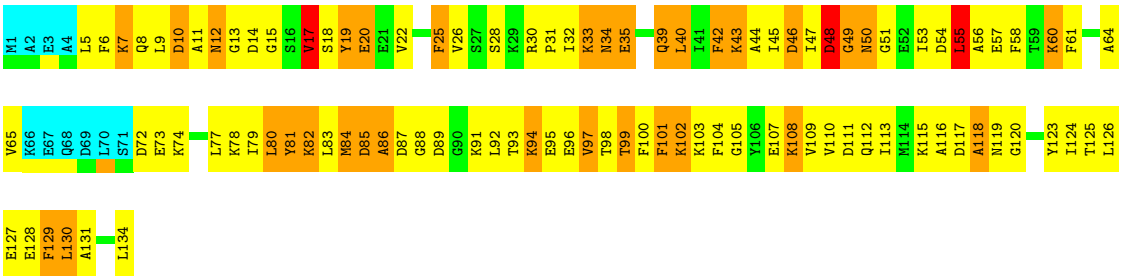
Chain A: 19% 46% 27% • 7%



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Calcium binding protein 2

Chain A: 17% 49% 24% • 7%



4.2.15 Score per residue for model 15

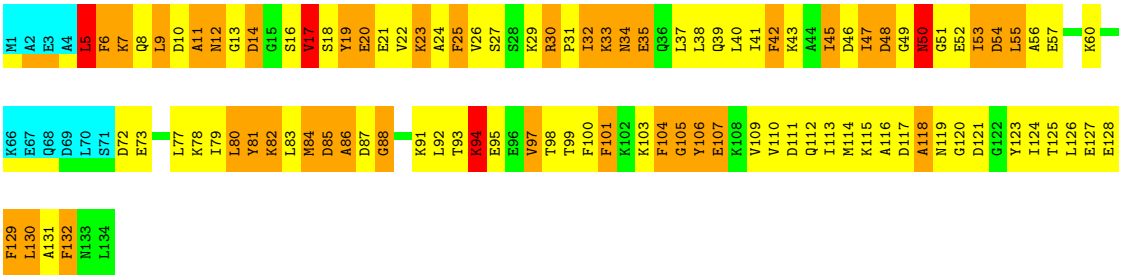
- Molecule 1: Calcium binding protein 2

Chain A: 17% 46% 28% • 7%

4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Calcium binding protein 2

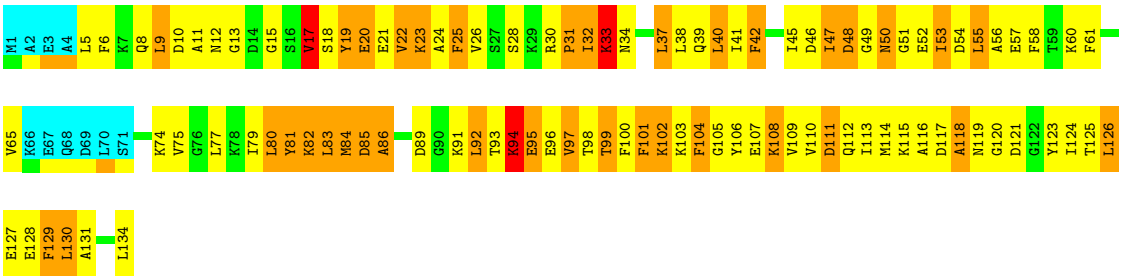
Chain A: 16% 44% 29% • 7%



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Calcium binding protein 2

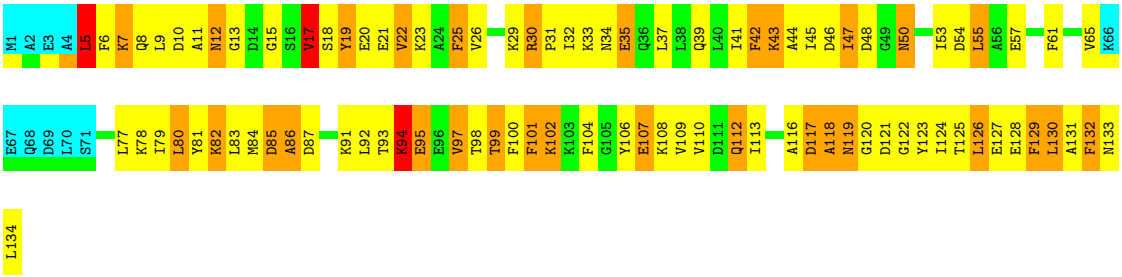
Chain A: 17% 46% 27% • 7%



4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Calcium binding protein 2

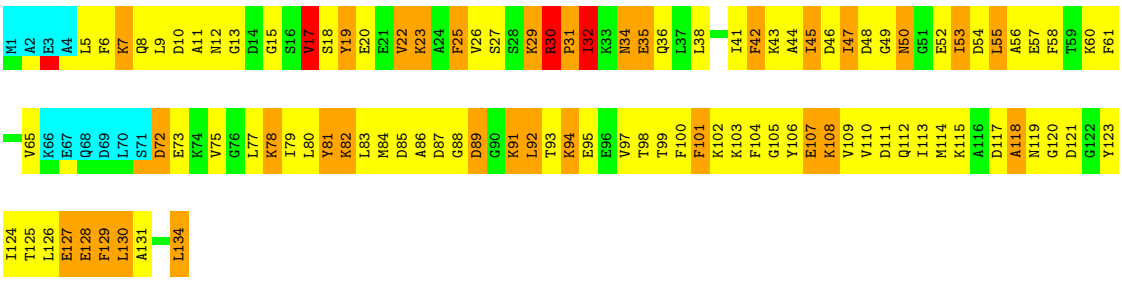
Chain A: 24% 44% 22% • 7%



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Calcium binding protein 2

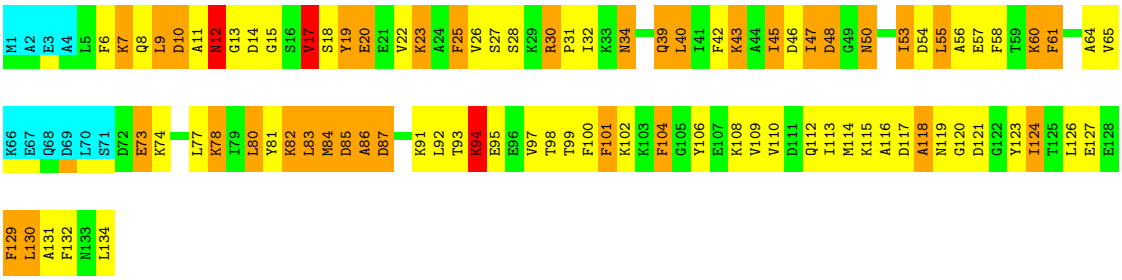
Chain A: 16% 50% 24% • 7%



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Calcium binding protein 2

Chain A: 25% 39% 26% • 7%



5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

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

Of the 400 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *target function*.

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

Software name	Classification	Version
DYANA	structure solution	1.5
DYANA	refinement	1.5

No chemical shift data was provided.

6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

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

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	976	845	978	127±11
2	A	4	0	0	0±1
All	All	19600	16900	19560	2549

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 65.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:PHE:CE1	1:A:22:VAL:HG23	1.08	1.84	15	9
1:A:19:TYR:CD2	1:A:53:ILE:HD12	1.05	1.87	11	7
1:A:81:TYR:CE1	1:A:92:LEU:HD22	1.01	1.91	8	3
1:A:6:PHE:CE1	1:A:22:VAL:HG22	1.00	1.91	14	3
1:A:113:ILE:HG23	1:A:124:ILE:HD12	1.00	1.34	10	12
1:A:25:PHE:CE2	1:A:26:VAL:HG23	0.98	1.93	16	11
1:A:6:PHE:CD1	1:A:22:VAL:HG23	0.97	1.95	1	17
1:A:109:VAL:HG13	1:A:132:PHE:CE1	0.95	1.96	20	1
1:A:77:LEU:HD13	1:A:104:PHE:CD1	0.94	1.96	19	4
1:A:9:LEU:HD23	1:A:25:PHE:CE2	0.94	1.96	2	3
1:A:81:TYR:CE1	1:A:92:LEU:HD12	0.92	1.99	1	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:TYR:CE1	1:A:92:LEU:HD13	0.91	2.00	18	8
1:A:77:LEU:HD13	1:A:129:PHE:CE1	0.91	2.00	13	3
1:A:81:TYR:CD2	1:A:92:LEU:HD13	0.91	1.99	19	3
1:A:19:TYR:O	1:A:22:VAL:HG12	0.90	1.64	13	13
1:A:81:TYR:CE2	1:A:92:LEU:HD23	0.90	2.01	4	2
1:A:9:LEU:HD11	1:A:25:PHE:CD1	0.89	2.03	3	3
1:A:9:LEU:HD21	1:A:25:PHE:CE1	0.89	2.02	16	2
1:A:97:VAL:CG1	1:A:113:ILE:HD13	0.88	1.98	15	6
1:A:77:LEU:HD12	1:A:104:PHE:CZ	0.86	2.06	3	2
1:A:77:LEU:HD23	1:A:78:LYS:N	0.85	1.85	15	1
1:A:77:LEU:HD11	1:A:104:PHE:CG	0.84	2.06	16	3
1:A:54:ASP:OD1	1:A:56:ALA:HB3	0.84	1.72	15	3
1:A:85:ASP:OD1	1:A:92:LEU:HD21	0.84	1.71	15	1
1:A:101:PHE:CZ	1:A:129:PHE:CE1	0.83	2.66	15	1
1:A:101:PHE:CZ	1:A:109:VAL:HG11	0.83	2.09	16	2
1:A:98:THR:HG22	1:A:110:VAL:HG13	0.82	1.49	17	5
1:A:97:VAL:HG11	1:A:113:ILE:HG21	0.82	1.51	17	12
1:A:53:ILE:HG21	1:A:57:GLU:CD	0.82	1.94	7	1
1:A:53:ILE:CD1	2:A:155:CA:CA	0.81	1.88	14	1
1:A:25:PHE:CD2	1:A:26:VAL:HG23	0.81	2.11	3	12
1:A:101:PHE:CD2	1:A:129:PHE:CE1	0.81	2.68	20	1
1:A:92:LEU:HB3	1:A:97:VAL:HG23	0.80	1.53	14	17
1:A:77:LEU:HD21	1:A:104:PHE:CD1	0.80	2.10	6	1
1:A:9:LEU:HD11	1:A:25:PHE:CG	0.80	2.11	3	2
1:A:101:PHE:CD2	1:A:113:ILE:HD11	0.80	2.12	17	6
1:A:100:PHE:CE2	1:A:104:PHE:CZ	0.79	2.69	4	1
1:A:81:TYR:CD2	1:A:129:PHE:CD2	0.79	2.71	6	5
1:A:46:ASP:HB2	1:A:53:ILE:HD11	0.78	1.52	6	5
1:A:53:ILE:HD12	1:A:53:ILE:N	0.78	1.93	10	1
1:A:92:LEU:HD23	1:A:96:GLU:HB3	0.78	1.54	17	2
1:A:101:PHE:CD1	1:A:129:PHE:CE2	0.78	2.72	15	1
1:A:44:ALA:HB1	1:A:130:LEU:HD21	0.78	1.53	19	1
1:A:81:TYR:CD2	1:A:100:PHE:CE1	0.76	2.74	8	3
1:A:48:ASP:C	2:A:155:CA:CA	0.76	1.48	13	1
1:A:109:VAL:HG12	1:A:113:ILE:HG13	0.76	1.56	11	7
1:A:6:PHE:CZ	1:A:22:VAL:HG22	0.75	2.15	14	1
1:A:85:ASP:O	1:A:92:LEU:HD11	0.75	1.81	20	1
1:A:74:LYS:HB3	1:A:130:LEU:HD12	0.75	1.57	20	1
1:A:92:LEU:CB	1:A:97:VAL:HG23	0.74	2.12	4	11
1:A:101:PHE:CE2	1:A:129:PHE:CZ	0.74	2.75	15	1
1:A:77:LEU:HD22	1:A:104:PHE:CE2	0.73	2.18	8	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:77:LEU:HD23	1:A:129:PHE:CE1	0.73	2.19	10	3
1:A:48:ASP:O	2:A:155:CA:CA	0.73	1.64	13	1
1:A:81:TYR:CD1	1:A:92:LEU:HD13	0.73	2.18	6	4
1:A:109:VAL:HG12	1:A:113:ILE:HG12	0.72	1.60	16	10
1:A:47:ILE:HD12	1:A:47:ILE:C	0.72	2.05	6	3
1:A:81:TYR:CE2	1:A:92:LEU:HD12	0.72	2.19	2	1
1:A:81:TYR:CZ	1:A:92:LEU:HD12	0.72	2.20	1	2
1:A:77:LEU:HD21	1:A:104:PHE:CE1	0.71	2.20	6	3
1:A:74:LYS:HG2	1:A:130:LEU:HD21	0.71	1.61	7	1
1:A:106:TYR:CZ	1:A:110:VAL:HG22	0.71	2.19	16	1
1:A:6:PHE:CZ	1:A:22:VAL:CG2	0.71	2.73	14	3
1:A:109:VAL:HG12	1:A:113:ILE:CG1	0.71	2.16	4	8
1:A:9:LEU:HD21	1:A:25:PHE:CD1	0.71	2.20	16	3
1:A:47:ILE:HD13	1:A:47:ILE:N	0.71	2.00	13	4
1:A:6:PHE:CE1	1:A:22:VAL:CG2	0.70	2.74	4	8
1:A:127:GLU:O	1:A:131:ALA:HB2	0.70	1.86	7	6
1:A:130:LEU:C	1:A:130:LEU:HD23	0.70	2.06	9	7
1:A:81:TYR:CE2	1:A:129:PHE:CD2	0.70	2.79	6	5
1:A:53:ILE:HG21	1:A:57:GLU:OE1	0.70	1.85	7	1
1:A:134:LEU:C	1:A:134:LEU:HD12	0.70	2.06	10	8
1:A:101:PHE:CG	1:A:129:PHE:CZ	0.70	2.80	20	2
1:A:112:GLN:O	1:A:116:ALA:HB2	0.69	1.86	14	14
1:A:101:PHE:CD2	1:A:129:PHE:CZ	0.69	2.80	15	1
1:A:130:LEU:C	1:A:130:LEU:HD13	0.69	2.08	11	4
1:A:17:VAL:HG11	1:A:21:GLU:CD	0.69	2.08	8	13
1:A:6:PHE:CD1	1:A:22:VAL:CG2	0.69	2.75	3	12
1:A:81:TYR:CE2	1:A:129:PHE:CG	0.69	2.80	6	1
1:A:101:PHE:CE2	1:A:113:ILE:HD11	0.68	2.24	16	2
1:A:129:PHE:C	1:A:129:PHE:CD1	0.68	2.67	1	14
1:A:81:TYR:CD2	1:A:100:PHE:CE2	0.68	2.82	6	3
1:A:23:LYS:CD	1:A:38:LEU:HD13	0.68	2.18	2	1
1:A:106:TYR:CE1	1:A:110:VAL:HG22	0.68	2.24	16	1
1:A:124:ILE:HG23	1:A:128:GLU:HB3	0.67	1.65	1	2
1:A:41:ILE:HG22	1:A:45:ILE:HD12	0.67	1.66	16	1
1:A:77:LEU:HD21	1:A:129:PHE:CZ	0.67	2.25	1	1
1:A:81:TYR:OH	1:A:124:ILE:HG22	0.67	1.89	1	3
1:A:32:ILE:O	1:A:32:ILE:HG23	0.67	1.88	10	2
1:A:77:LEU:HD12	1:A:104:PHE:CE2	0.67	2.25	15	2
1:A:81:TYR:CD1	1:A:100:PHE:CE2	0.67	2.82	7	2
1:A:43:LYS:O	1:A:47:ILE:HG23	0.67	1.89	2	2
1:A:9:LEU:HD23	1:A:25:PHE:CD2	0.67	2.24	2	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:LYS:HD3	1:A:38:LEU:HD13	0.66	1.67	2	1
1:A:81:TYR:CD1	1:A:100:PHE:CE1	0.66	2.83	2	3
1:A:92:LEU:CD2	1:A:100:PHE:CD2	0.66	2.79	14	1
1:A:109:VAL:HG22	1:A:132:PHE:CZ	0.66	2.26	18	2
1:A:54:ASP:OD2	1:A:56:ALA:HB3	0.66	1.91	11	3
1:A:92:LEU:HB2	1:A:97:VAL:HG23	0.66	1.67	4	2
1:A:74:LYS:O	1:A:77:LEU:HD23	0.66	1.90	1	1
1:A:81:TYR:CE1	1:A:92:LEU:CD1	0.66	2.79	17	2
1:A:116:ALA:CB	1:A:124:ILE:HD11	0.66	2.21	18	1
1:A:116:ALA:HB3	1:A:124:ILE:HD11	0.66	1.65	18	1
1:A:85:ASP:O	1:A:86:ALA:HB2	0.66	1.91	2	13
1:A:77:LEU:HD22	1:A:104:PHE:CD2	0.66	2.26	8	2
1:A:79:ILE:HG23	1:A:82:LYS:HE3	0.66	1.67	18	1
1:A:94:LYS:O	1:A:98:THR:HG23	0.65	1.91	9	1
1:A:25:PHE:C	1:A:25:PHE:CD1	0.65	2.70	8	8
1:A:8:GLN:CG	1:A:9:LEU:HD22	0.65	2.21	2	1
1:A:42:PHE:CG	1:A:43:LYS:N	0.65	2.64	12	4
1:A:25:PHE:CE2	1:A:26:VAL:CG2	0.65	2.79	3	8
1:A:19:TYR:CG	1:A:53:ILE:HD12	0.65	2.26	11	1
1:A:31:PRO:O	1:A:32:ILE:HG22	0.65	1.91	10	2
1:A:130:LEU:O	1:A:134:LEU:HD23	0.65	1.92	13	1
1:A:44:ALA:O	1:A:47:ILE:HD12	0.65	1.91	4	1
1:A:53:ILE:HG23	1:A:57:GLU:CD	0.65	2.11	14	4
1:A:130:LEU:O	1:A:130:LEU:HD13	0.65	1.92	15	3
1:A:97:VAL:HG22	1:A:129:PHE:CE1	0.65	2.27	20	1
1:A:30:ARG:N	1:A:31:PRO:CD	0.64	2.60	15	18
1:A:101:PHE:CG	1:A:129:PHE:CE2	0.64	2.85	15	1
1:A:117:ASP:O	1:A:118:ALA:HB2	0.64	1.92	8	19
1:A:45:ILE:HG23	1:A:45:ILE:O	0.64	1.90	10	2
1:A:17:VAL:HG13	1:A:18:SER:N	0.64	2.06	18	20
1:A:74:LYS:CG	1:A:130:LEU:HD21	0.64	2.23	7	1
1:A:43:LYS:CD	1:A:43:LYS:C	0.64	2.66	10	8
1:A:101:PHE:CZ	1:A:129:PHE:CZ	0.64	2.86	15	1
1:A:129:PHE:CG	1:A:130:LEU:N	0.64	2.66	1	16
1:A:9:LEU:CD1	1:A:25:PHE:CG	0.64	2.80	3	3
1:A:124:ILE:HG21	1:A:129:PHE:CD2	0.64	2.28	15	1
1:A:42:PHE:HA	1:A:45:ILE:HG22	0.63	1.70	17	5
1:A:85:ASP:HA	1:A:92:LEU:HD11	0.63	1.70	16	4
1:A:53:ILE:HD13	2:A:155:CA:CA	0.63	1.51	14	1
1:A:47:ILE:HD12	1:A:48:ASP:N	0.63	2.09	6	3
1:A:131:ALA:HA	1:A:134:LEU:HD12	0.63	1.70	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:TYR:CD2	1:A:92:LEU:CD1	0.63	2.82	2	2
1:A:128:GLU:O	1:A:131:ALA:HB3	0.63	1.93	3	12
1:A:109:VAL:HG13	1:A:132:PHE:CD2	0.63	2.29	6	1
1:A:97:VAL:HG12	1:A:98:THR:N	0.62	2.09	6	15
1:A:106:TYR:CD2	1:A:106:TYR:O	0.62	2.51	6	1
1:A:47:ILE:HD13	1:A:47:ILE:H	0.62	1.54	13	2
1:A:109:VAL:HG13	1:A:132:PHE:CZ	0.62	2.28	20	3
1:A:92:LEU:HD21	1:A:100:PHE:CD2	0.62	2.28	10	3
1:A:104:PHE:C	1:A:104:PHE:CD1	0.62	2.73	16	1
1:A:121:ASP:OD1	1:A:123:TYR:CD2	0.62	2.53	5	1
1:A:97:VAL:HG11	1:A:113:ILE:HD13	0.62	1.69	5	2
1:A:113:ILE:HG23	1:A:124:ILE:CD1	0.61	2.23	5	7
1:A:77:LEU:CD2	1:A:129:PHE:CE1	0.61	2.83	10	1
1:A:29:LYS:O	1:A:30:ARG:CG	0.61	2.48	19	2
1:A:106:TYR:CG	1:A:107:GLU:N	0.61	2.69	18	1
1:A:112:GLN:O	1:A:116:ALA:N	0.61	2.33	6	14
1:A:5:LEU:HD22	1:A:7:LYS:HB2	0.61	1.72	18	1
1:A:6:PHE:CE2	1:A:10:ASP:OD1	0.61	2.54	8	1
1:A:77:LEU:HD12	1:A:104:PHE:CE1	0.61	2.30	3	1
1:A:47:ILE:HG13	1:A:134:LEU:HD13	0.61	1.72	19	1
1:A:6:PHE:HA	1:A:9:LEU:HD23	0.61	1.72	20	6
1:A:130:LEU:HD13	1:A:130:LEU:O	0.61	1.96	2	4
1:A:129:PHE:CZ	1:A:130:LEU:HD23	0.61	2.30	7	3
1:A:106:TYR:CE2	1:A:110:VAL:HG23	0.61	2.30	18	1
1:A:97:VAL:CG1	1:A:113:ILE:HG21	0.60	2.26	17	6
1:A:85:ASP:O	1:A:100:PHE:CE1	0.60	2.54	4	1
1:A:19:TYR:CG	1:A:53:ILE:HD13	0.60	2.31	10	1
1:A:9:LEU:CD2	1:A:25:PHE:CE1	0.60	2.81	16	2
1:A:130:LEU:HD22	1:A:130:LEU:O	0.60	1.97	4	2
1:A:81:TYR:CZ	1:A:92:LEU:HD22	0.60	2.32	16	4
1:A:100:PHE:CZ	1:A:104:PHE:CZ	0.60	2.90	18	2
1:A:105:GLY:O	1:A:106:TYR:CD1	0.60	2.54	6	3
1:A:53:ILE:N	1:A:53:ILE:CD1	0.60	2.62	10	1
1:A:9:LEU:CD2	1:A:25:PHE:CE2	0.60	2.81	2	3
1:A:19:TYR:CD2	1:A:53:ILE:CD1	0.60	2.78	11	1
1:A:40:LEU:HD13	1:A:134:LEU:HD22	0.59	1.75	8	1
1:A:37:LEU:O	1:A:41:ILE:HD12	0.59	1.97	15	3
1:A:104:PHE:CD1	1:A:104:PHE:C	0.59	2.76	6	1
1:A:77:LEU:HD13	1:A:129:PHE:CZ	0.59	2.33	5	1
1:A:45:ILE:O	1:A:45:ILE:HG22	0.59	1.98	3	9
1:A:40:LEU:C	1:A:40:LEU:HD12	0.59	2.17	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:33:LYS:O	1:A:34:ASN:CB	0.58	2.49	14	7
1:A:130:LEU:HD13	1:A:130:LEU:C	0.58	2.18	15	1
1:A:17:VAL:O	1:A:53:ILE:N	0.58	2.37	4	19
1:A:129:PHE:CD1	1:A:130:LEU:N	0.58	2.71	4	3
1:A:106:TYR:O	1:A:106:TYR:CG	0.58	2.57	6	1
1:A:104:PHE:CG	1:A:105:GLY:N	0.58	2.70	16	2
1:A:42:PHE:O	1:A:46:ASP:N	0.58	2.36	13	15
1:A:82:LYS:CD	1:A:82:LYS:C	0.58	2.72	20	19
1:A:81:TYR:CE2	1:A:92:LEU:HD13	0.58	2.33	12	2
1:A:106:TYR:O	1:A:107:GLU:C	0.58	2.41	18	1
1:A:126:LEU:HD12	1:A:127:GLU:N	0.58	2.13	2	5
1:A:46:ASP:O	1:A:48:ASP:N	0.58	2.36	17	17
1:A:131:ALA:HA	1:A:134:LEU:HD23	0.58	1.76	20	6
1:A:12:ASN:HD22	1:A:13:GLY:N	0.58	1.97	20	2
1:A:97:VAL:CG1	1:A:113:ILE:HD12	0.58	2.29	16	1
1:A:53:ILE:HG22	1:A:57:GLU:HB3	0.57	1.75	17	4
1:A:121:ASP:CG	1:A:123:TYR:CZ	0.57	2.77	18	17
1:A:19:TYR:CZ	1:A:53:ILE:CG2	0.57	2.88	6	1
1:A:22:VAL:HG21	1:A:55:LEU:HD11	0.57	1.75	7	1
1:A:78:LYS:HG3	1:A:126:LEU:HD13	0.57	1.75	7	2
1:A:91:LYS:C	1:A:92:LEU:HD22	0.57	2.19	15	2
1:A:46:ASP:OD1	1:A:53:ILE:HD11	0.57	2.00	18	1
1:A:81:TYR:CE1	1:A:92:LEU:CD2	0.57	2.80	8	1
1:A:81:TYR:CE2	1:A:100:PHE:CE1	0.57	2.92	11	2
1:A:127:GLU:O	1:A:131:ALA:CB	0.57	2.53	15	7
1:A:101:PHE:CE1	1:A:106:TYR:CD2	0.57	2.92	20	1
1:A:19:TYR:O	1:A:22:VAL:N	0.56	2.38	10	20
1:A:77:LEU:HD12	1:A:104:PHE:CD2	0.56	2.36	4	2
1:A:5:LEU:CD1	1:A:134:LEU:HD11	0.56	2.31	13	1
1:A:8:GLN:HG3	1:A:9:LEU:HD22	0.56	1.77	13	1
1:A:6:PHE:CD2	1:A:55:LEU:HD23	0.56	2.35	2	7
1:A:10:ASP:O	1:A:12:ASN:N	0.56	2.38	9	10
1:A:121:ASP:CG	1:A:123:TYR:CE2	0.56	2.79	11	8
1:A:81:TYR:OH	1:A:97:VAL:HG22	0.56	2.01	8	5
1:A:9:LEU:O	1:A:12:ASN:ND2	0.56	2.38	9	1
1:A:81:TYR:CE1	1:A:129:PHE:CD2	0.56	2.93	20	1
1:A:18:SER:O	1:A:20:GLU:N	0.56	2.38	8	20
1:A:98:THR:HG22	1:A:110:VAL:HG22	0.56	1.76	15	1
1:A:30:ARG:CB	1:A:31:PRO:HD3	0.56	2.31	11	13
1:A:130:LEU:HD23	1:A:130:LEU:O	0.56	2.00	9	1
1:A:104:PHE:CD2	1:A:106:TYR:CE2	0.56	2.94	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:LYS:HD2	1:A:38:LEU:HD22	0.56	1.76	2	2
1:A:77:LEU:HD23	1:A:129:PHE:CZ	0.56	2.35	19	3
1:A:44:ALA:HB2	1:A:134:LEU:HD13	0.56	1.78	8	1
1:A:31:PRO:O	1:A:32:ILE:CB	0.56	2.54	19	2
1:A:24:ALA:HB1	1:A:35:GLU:OE1	0.56	2.01	16	1
1:A:74:LYS:HG2	1:A:130:LEU:HD11	0.56	1.77	12	1
1:A:77:LEU:HD11	1:A:104:PHE:HB2	0.55	1.78	6	1
1:A:121:ASP:OD1	1:A:123:TYR:CZ	0.55	2.59	8	2
1:A:22:VAL:O	1:A:26:VAL:HG23	0.55	2.00	5	3
1:A:81:TYR:CD2	1:A:100:PHE:CZ	0.55	2.94	8	4
1:A:49:GLY:O	1:A:50:ASN:CB	0.55	2.54	4	7
1:A:41:ILE:CG2	1:A:45:ILE:HD12	0.55	2.31	16	1
1:A:17:VAL:HG11	1:A:21:GLU:OE2	0.55	2.01	6	3
1:A:101:PHE:CB	1:A:129:PHE:CZ	0.55	2.88	20	1
1:A:93:THR:O	1:A:94:LYS:C	0.55	2.45	1	19
1:A:109:VAL:HG13	1:A:132:PHE:CD1	0.55	2.36	20	1
1:A:41:ILE:HG23	1:A:45:ILE:HD13	0.55	1.77	19	1
1:A:109:VAL:O	1:A:112:GLN:N	0.55	2.40	18	14
1:A:84:MET:O	1:A:86:ALA:N	0.55	2.40	17	17
1:A:41:ILE:HD13	1:A:41:ILE:O	0.55	2.01	10	1
1:A:81:TYR:CD2	1:A:92:LEU:HD12	0.54	2.36	2	1
1:A:12:ASN:HD22	1:A:12:ASN:N	0.54	2.00	8	1
1:A:77:LEU:HD21	1:A:104:PHE:CZ	0.54	2.38	17	1
1:A:42:PHE:C	1:A:42:PHE:CD1	0.54	2.79	19	1
1:A:121:ASP:CG	1:A:123:TYR:CD2	0.54	2.80	5	1
1:A:99:THR:HG22	1:A:100:PHE:N	0.54	2.17	6	12
1:A:44:ALA:O	1:A:47:ILE:HD11	0.54	2.03	13	2
1:A:101:PHE:CE2	1:A:129:PHE:CE1	0.54	2.96	15	1
1:A:112:GLN:CG	1:A:132:PHE:CE1	0.54	2.90	16	1
1:A:104:PHE:CE2	1:A:106:TYR:CE2	0.54	2.95	8	2
1:A:19:TYR:CE1	1:A:53:ILE:HB	0.54	2.37	6	20
1:A:97:VAL:HG21	1:A:124:ILE:HB	0.54	1.78	5	1
1:A:22:VAL:HG21	1:A:55:LEU:HD21	0.54	1.80	19	2
1:A:23:LYS:O	1:A:27:SER:CB	0.53	2.55	5	9
1:A:47:ILE:O	1:A:49:GLY:N	0.53	2.41	14	3
1:A:91:LYS:HD2	1:A:123:TYR:CD2	0.53	2.39	18	13
1:A:97:VAL:HG11	1:A:113:ILE:CG2	0.53	2.32	17	3
1:A:101:PHE:HE2	1:A:109:VAL:HG11	0.53	1.63	8	3
1:A:77:LEU:HD23	1:A:77:LEU:O	0.53	2.03	13	2
1:A:77:LEU:HD11	1:A:104:PHE:CD1	0.53	2.38	17	3
1:A:81:TYR:CE2	1:A:100:PHE:CE2	0.53	2.97	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:TYR:CE2	1:A:129:PHE:CB	0.53	2.92	6	1
1:A:123:TYR:C	1:A:123:TYR:CD1	0.53	2.82	5	12
1:A:44:ALA:O	1:A:47:ILE:CD1	0.53	2.57	10	1
1:A:85:ASP:O	1:A:92:LEU:HD21	0.53	2.03	17	1
1:A:112:GLN:O	1:A:116:ALA:CB	0.53	2.57	15	14
1:A:6:PHE:HD1	1:A:9:LEU:HD12	0.53	1.62	9	2
1:A:112:GLN:HG2	1:A:132:PHE:CE1	0.53	2.38	16	1
1:A:6:PHE:CD2	1:A:55:LEU:CD2	0.53	2.92	2	7
1:A:129:PHE:CZ	1:A:130:LEU:HD13	0.53	2.39	12	1
1:A:47:ILE:HD12	1:A:47:ILE:O	0.53	2.04	17	2
1:A:81:TYR:CE1	1:A:129:PHE:CG	0.53	2.96	20	1
1:A:54:ASP:OD2	1:A:56:ALA:CB	0.53	2.57	4	1
1:A:43:LYS:O	1:A:47:ILE:CD1	0.53	2.57	5	2
1:A:9:LEU:CD2	1:A:25:PHE:CD1	0.53	2.92	16	2
1:A:6:PHE:CD1	1:A:22:VAL:HG22	0.53	2.38	8	2
1:A:98:THR:O	1:A:102:LYS:CG	0.53	2.57	19	1
1:A:53:ILE:HG23	1:A:57:GLU:OE1	0.52	2.04	13	4
1:A:9:LEU:CD2	1:A:25:PHE:CZ	0.52	2.92	2	1
1:A:10:ASP:O	1:A:11:ALA:C	0.52	2.47	9	9
1:A:46:ASP:OD2	1:A:47:ILE:N	0.52	2.43	15	5
1:A:9:LEU:HD11	1:A:25:PHE:CE1	0.52	2.40	9	2
1:A:19:TYR:CZ	1:A:53:ILE:HG22	0.52	2.40	6	1
1:A:31:PRO:O	1:A:32:ILE:CG2	0.52	2.57	10	2
1:A:106:TYR:CE2	1:A:110:VAL:HG22	0.52	2.39	16	1
1:A:46:ASP:HA	1:A:53:ILE:HD11	0.52	1.82	2	1
1:A:24:ALA:O	1:A:28:SER:CB	0.52	2.58	17	4
1:A:80:LEU:O	1:A:84:MET:CB	0.52	2.57	18	9
1:A:85:ASP:O	1:A:86:ALA:CB	0.52	2.56	2	1
1:A:121:ASP:HB3	1:A:123:TYR:CE2	0.52	2.40	18	6
1:A:98:THR:O	1:A:102:LYS:CB	0.52	2.58	15	17
1:A:53:ILE:CG2	1:A:57:GLU:CD	0.52	2.77	19	5
1:A:97:VAL:HG11	1:A:113:ILE:HD12	0.52	1.81	8	1
1:A:30:ARG:N	1:A:31:PRO:HD2	0.52	2.20	15	4
1:A:6:PHE:CZ	1:A:10:ASP:CG	0.52	2.83	8	1
1:A:46:ASP:C	1:A:48:ASP:N	0.52	2.63	14	19
1:A:117:ASP:O	1:A:118:ALA:CB	0.52	2.58	10	19
1:A:45:ILE:O	1:A:45:ILE:CG2	0.52	2.58	9	9
1:A:11:ALA:O	1:A:12:ASN:C	0.51	2.48	11	20
1:A:41:ILE:O	1:A:45:ILE:N	0.51	2.43	19	5
1:A:47:ILE:C	1:A:47:ILE:CD1	0.51	2.79	3	3
1:A:32:ILE:O	1:A:32:ILE:CG2	0.51	2.57	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:132:PHE:CE2	1:A:133:ASN:ND2	0.51	2.79	18	1
1:A:101:PHE:CE2	1:A:109:VAL:HG11	0.51	2.40	8	3
1:A:74:LYS:HG3	1:A:130:LEU:HD23	0.51	1.81	5	1
1:A:12:ASN:ND2	1:A:13:GLY:N	0.51	2.58	20	4
1:A:81:TYR:CD1	1:A:126:LEU:HB3	0.51	2.40	16	1
1:A:92:LEU:HD22	1:A:92:LEU:N	0.51	2.20	20	1
1:A:53:ILE:HG22	1:A:57:GLU:CB	0.51	2.35	17	3
1:A:91:LYS:HE3	1:A:123:TYR:CD2	0.51	2.40	20	1
1:A:46:ASP:O	1:A:47:ILE:C	0.51	2.48	17	9
1:A:23:LYS:HG3	1:A:42:PHE:CE2	0.51	2.41	4	1
1:A:97:VAL:O	1:A:98:THR:C	0.51	2.49	15	19
1:A:19:TYR:CE2	1:A:53:ILE:HD12	0.51	2.41	8	1
1:A:42:PHE:O	1:A:45:ILE:N	0.51	2.43	10	19
1:A:7:LYS:O	1:A:11:ALA:N	0.51	2.44	13	9
1:A:121:ASP:OD1	1:A:123:TYR:CE2	0.51	2.64	11	4
1:A:42:PHE:CD1	1:A:42:PHE:C	0.51	2.84	14	2
1:A:61:PHE:O	1:A:65:VAL:HG23	0.51	2.05	17	2
1:A:77:LEU:HD22	1:A:104:PHE:CZ	0.51	2.40	8	2
1:A:97:VAL:O	1:A:101:PHE:N	0.51	2.43	13	17
1:A:93:THR:O	1:A:97:VAL:N	0.51	2.42	11	3
1:A:77:LEU:CD1	1:A:104:PHE:CD1	0.51	2.83	19	2
1:A:41:ILE:CG2	1:A:42:PHE:N	0.51	2.74	8	2
1:A:81:TYR:CE2	1:A:92:LEU:CD1	0.51	2.93	2	1
1:A:19:TYR:CD1	1:A:53:ILE:HD13	0.51	2.41	10	1
1:A:81:TYR:OH	1:A:97:VAL:CG2	0.51	2.59	14	1
1:A:132:PHE:CD1	1:A:132:PHE:O	0.51	2.64	18	1
1:A:6:PHE:O	1:A:9:LEU:N	0.51	2.44	16	9
1:A:77:LEU:HD13	1:A:104:PHE:CZ	0.51	2.41	9	1
1:A:81:TYR:HE1	1:A:92:LEU:HD23	0.51	1.66	15	1
1:A:79:ILE:O	1:A:82:LYS:CD	0.51	2.59	18	1
1:A:78:LYS:O	1:A:81:TYR:CB	0.50	2.59	5	3
1:A:86:ALA:CB	1:A:96:GLU:OE1	0.50	2.59	4	6
1:A:6:PHE:CE1	1:A:22:VAL:HB	0.50	2.42	13	4
1:A:77:LEU:HG	1:A:129:PHE:CZ	0.50	2.41	10	1
1:A:27:SER:CB	1:A:35:GLU:OE2	0.50	2.59	13	1
1:A:77:LEU:HB2	1:A:104:PHE:CZ	0.50	2.42	5	3
1:A:113:ILE:O	1:A:116:ALA:HB3	0.50	2.06	9	2
1:A:23:LYS:HE3	1:A:42:PHE:CE1	0.50	2.41	7	1
1:A:99:THR:CG2	1:A:100:PHE:N	0.50	2.75	18	7
1:A:101:PHE:CD2	1:A:113:ILE:CD1	0.50	2.95	6	2
1:A:107:GLU:CG	1:A:107:GLU:O	0.50	2.60	19	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:ILE:HD13	1:A:57:GLU:OE1	0.50	2.06	7	1
1:A:127:GLU:O	1:A:131:ALA:N	0.50	2.45	18	18
1:A:22:VAL:O	1:A:26:VAL:CG2	0.50	2.60	5	2
1:A:12:ASN:ND2	1:A:12:ASN:C	0.50	2.65	3	5
1:A:46:ASP:CB	1:A:53:ILE:HD11	0.50	2.30	6	2
1:A:14:ASP:O	1:A:16:SER:N	0.50	2.44	9	1
1:A:85:ASP:OD1	1:A:92:LEU:CD2	0.50	2.59	1	1
1:A:17:VAL:O	1:A:53:ILE:O	0.50	2.30	6	14
1:A:130:LEU:C	1:A:130:LEU:CD2	0.50	2.80	9	5
1:A:5:LEU:O	1:A:8:GLN:CG	0.50	2.60	6	3
1:A:11:ALA:O	1:A:13:GLY:N	0.50	2.45	8	19
1:A:91:LYS:HB2	1:A:123:TYR:CD1	0.50	2.41	7	3
1:A:37:LEU:O	1:A:41:ILE:CG1	0.50	2.60	12	4
1:A:19:TYR:CE2	1:A:58:PHE:HB2	0.50	2.42	7	2
1:A:106:TYR:HE2	1:A:110:VAL:HG23	0.50	1.65	18	1
1:A:98:THR:HA	1:A:110:VAL:HG22	0.50	1.83	20	1
1:A:46:ASP:OD1	1:A:47:ILE:N	0.50	2.45	8	3
1:A:46:ASP:OD1	1:A:51:GLY:C	0.50	2.50	14	2
1:A:5:LEU:HD13	1:A:134:LEU:HD11	0.50	1.84	13	1
1:A:46:ASP:C	1:A:46:ASP:OD2	0.50	2.51	14	1
1:A:77:LEU:HG	1:A:104:PHE:CE2	0.49	2.42	6	2
1:A:101:PHE:CD2	1:A:106:TYR:HB3	0.49	2.42	12	1
1:A:10:ASP:C	1:A:12:ASN:N	0.49	2.65	11	9
1:A:121:ASP:CB	1:A:123:TYR:CE2	0.49	2.95	11	8
1:A:77:LEU:HB3	1:A:129:PHE:CZ	0.49	2.42	6	6
1:A:14:ASP:CG	1:A:16:SER:O	0.49	2.51	8	3
1:A:91:LYS:CE	1:A:123:TYR:CD2	0.49	2.95	20	2
1:A:19:TYR:OH	1:A:58:PHE:CB	0.49	2.60	19	9
1:A:100:PHE:CZ	1:A:104:PHE:CE2	0.49	3.00	1	1
1:A:8:GLN:CG	1:A:9:LEU:N	0.49	2.75	2	7
1:A:81:TYR:CZ	1:A:92:LEU:HD23	0.49	2.42	20	2
1:A:50:ASN:HD22	1:A:53:ILE:HD13	0.49	1.67	14	1
1:A:126:LEU:O	1:A:129:PHE:CD2	0.49	2.65	1	3
1:A:53:ILE:CG2	1:A:57:GLU:OE1	0.49	2.60	15	2
1:A:38:LEU:HG	1:A:42:PHE:CZ	0.49	2.43	8	1
1:A:97:VAL:HG12	1:A:113:ILE:HD13	0.49	1.77	15	1
1:A:9:LEU:HG	1:A:25:PHE:CD1	0.49	2.43	4	4
1:A:32:ILE:CG2	1:A:32:ILE:O	0.49	2.60	5	1
1:A:109:VAL:CG2	1:A:132:PHE:CE2	0.49	2.96	18	1
1:A:98:THR:O	1:A:102:LYS:CD	0.49	2.60	19	1
1:A:41:ILE:HD12	1:A:134:LEU:HA	0.49	1.84	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:ILE:HG22	1:A:47:ILE:O	0.49	2.07	9	3
1:A:9:LEU:HD13	1:A:25:PHE:CD1	0.49	2.42	15	1
1:A:101:PHE:CE1	1:A:129:PHE:CZ	0.49	3.00	15	1
1:A:35:GLU:O	1:A:39:GLN:CB	0.49	2.60	1	5
1:A:81:TYR:CD1	1:A:126:LEU:HA	0.49	2.42	10	8
1:A:25:PHE:CD1	1:A:25:PHE:C	0.49	2.84	6	2
1:A:97:VAL:CG1	1:A:98:THR:N	0.49	2.75	6	5
1:A:57:GLU:O	1:A:61:PHE:CD1	0.49	2.66	18	3
1:A:41:ILE:O	1:A:45:ILE:CG1	0.49	2.61	18	1
1:A:91:LYS:CD	1:A:123:TYR:CD2	0.49	2.96	18	6
1:A:9:LEU:HG	1:A:25:PHE:CE1	0.49	2.43	8	1
1:A:27:SER:O	1:A:32:ILE:N	0.48	2.46	19	1
1:A:54:ASP:O	1:A:56:ALA:N	0.48	2.46	11	14
1:A:47:ILE:C	1:A:49:GLY:N	0.48	2.66	14	6
1:A:125:THR:O	1:A:128:GLU:N	0.48	2.47	17	11
1:A:6:PHE:CD2	1:A:55:LEU:HG	0.48	2.42	7	1
1:A:9:LEU:CD2	1:A:25:PHE:CD2	0.48	2.96	10	1
1:A:112:GLN:HG2	1:A:132:PHE:CD1	0.48	2.43	16	1
1:A:18:SER:C	1:A:20:GLU:N	0.48	2.67	8	20
1:A:85:ASP:OD1	1:A:92:LEU:CD1	0.48	2.62	3	1
1:A:86:ALA:HB3	1:A:96:GLU:OE1	0.48	2.08	4	6
1:A:77:LEU:CD2	1:A:104:PHE:CE1	0.48	2.95	6	1
1:A:91:LYS:HD3	1:A:123:TYR:CD2	0.48	2.44	16	1
1:A:121:ASP:HB3	1:A:123:TYR:CD2	0.48	2.44	3	7
1:A:77:LEU:HD11	1:A:100:PHE:CE1	0.48	2.43	8	1
1:A:19:TYR:HB2	1:A:42:PHE:CZ	0.48	2.43	12	1
1:A:19:TYR:CZ	1:A:53:ILE:HB	0.48	2.44	8	15
1:A:123:TYR:CD1	1:A:123:TYR:C	0.48	2.87	7	5
1:A:130:LEU:C	1:A:130:LEU:CD1	0.48	2.82	11	2
1:A:134:LEU:C	1:A:134:LEU:CD1	0.48	2.80	10	3
1:A:54:ASP:OD2	1:A:54:ASP:N	0.48	2.47	16	1
1:A:102:LYS:HG2	1:A:106:TYR:CE1	0.48	2.43	6	1
1:A:17:VAL:CG1	1:A:18:SER:N	0.48	2.77	7	5
1:A:43:LYS:CD	1:A:44:ALA:N	0.48	2.77	18	3
1:A:19:TYR:OH	1:A:54:ASP:O	0.48	2.32	10	16
1:A:77:LEU:CD1	1:A:104:PHE:CE1	0.48	2.96	9	2
1:A:91:LYS:HG3	1:A:123:TYR:CD1	0.48	2.43	20	7
1:A:24:ALA:O	1:A:28:SER:N	0.48	2.47	17	1
1:A:81:TYR:CE2	1:A:126:LEU:N	0.48	2.82	20	1
1:A:101:PHE:CG	1:A:129:PHE:CE1	0.48	3.02	20	1
1:A:81:TYR:HA	1:A:100:PHE:CZ	0.48	2.44	1	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:PHE:CD1	1:A:25:PHE:O	0.48	2.67	5	5
1:A:17:VAL:CG1	1:A:21:GLU:OE2	0.48	2.62	6	3
1:A:46:ASP:CG	1:A:47:ILE:N	0.48	2.67	16	5
1:A:11:ALA:C	1:A:13:GLY:N	0.47	2.67	8	19
1:A:91:LYS:HG3	1:A:123:TYR:CG	0.47	2.43	12	10
1:A:20:GLU:HB2	1:A:42:PHE:CE2	0.47	2.44	2	1
1:A:106:TYR:CD1	1:A:106:TYR:N	0.47	2.82	4	1
1:A:32:ILE:O	1:A:34:ASN:N	0.47	2.47	17	1
1:A:54:ASP:O	1:A:57:GLU:N	0.47	2.47	8	10
1:A:94:LYS:O	1:A:95:GLU:C	0.47	2.52	12	13
1:A:101:PHE:O	1:A:106:TYR:N	0.47	2.47	12	1
1:A:86:ALA:CB	1:A:96:GLU:OE2	0.47	2.62	14	1
1:A:19:TYR:CD1	1:A:53:ILE:HB	0.47	2.45	4	4
1:A:77:LEU:O	1:A:81:TYR:N	0.47	2.46	3	5
1:A:77:LEU:HA	1:A:104:PHE:CZ	0.47	2.44	13	3
1:A:77:LEU:HD11	1:A:104:PHE:CB	0.47	2.40	6	2
1:A:81:TYR:CD2	1:A:129:PHE:CE2	0.47	3.02	6	1
1:A:112:GLN:HB2	1:A:132:PHE:CD1	0.47	2.44	6	1
1:A:47:ILE:N	1:A:47:ILE:CD1	0.47	2.77	18	2
1:A:57:GLU:O	1:A:61:PHE:CD2	0.47	2.68	20	1
1:A:10:ASP:O	1:A:11:ALA:HB3	0.47	2.09	1	10
1:A:113:ILE:HA	1:A:124:ILE:HD11	0.47	1.84	5	1
1:A:77:LEU:HG	1:A:104:PHE:CZ	0.47	2.45	11	1
1:A:54:ASP:C	1:A:56:ALA:N	0.47	2.68	11	13
1:A:91:LYS:HG3	1:A:123:TYR:CD2	0.47	2.45	1	2
1:A:50:ASN:N	1:A:50:ASN:OD1	0.47	2.47	11	7
1:A:6:PHE:CD1	1:A:9:LEU:HB2	0.47	2.44	6	2
1:A:92:LEU:CD2	1:A:100:PHE:CG	0.47	2.98	6	1
1:A:46:ASP:OD1	1:A:53:ILE:CG1	0.47	2.63	18	1
1:A:47:ILE:O	1:A:48:ASP:C	0.47	2.53	14	2
1:A:109:VAL:HB	1:A:113:ILE:HD11	0.47	1.86	6	1
1:A:96:GLU:O	1:A:100:PHE:CB	0.47	2.62	9	1
1:A:81:TYR:CD2	1:A:126:LEU:HA	0.47	2.45	13	2
1:A:81:TYR:HA	1:A:100:PHE:CE1	0.47	2.45	15	1
1:A:117:ASP:OD2	1:A:118:ALA:N	0.47	2.48	8	4
1:A:128:GLU:O	1:A:131:ALA:N	0.47	2.47	1	10
1:A:80:LEU:O	1:A:84:MET:N	0.47	2.48	4	9
1:A:38:LEU:O	1:A:39:GLN:C	0.46	2.53	5	11
1:A:77:LEU:HB2	1:A:104:PHE:CE1	0.46	2.45	1	3
1:A:83:LEU:O	1:A:85:ASP:N	0.46	2.48	2	2
1:A:19:TYR:HB2	1:A:42:PHE:CE1	0.46	2.46	12	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:LYS:O	1:A:81:TYR:N	0.46	2.48	15	7
1:A:85:ASP:OD1	1:A:87:ASP:N	0.46	2.48	4	5
1:A:101:PHE:CE2	1:A:113:ILE:HG12	0.46	2.45	6	1
1:A:38:LEU:O	1:A:41:ILE:N	0.46	2.48	9	2
1:A:91:LYS:HD2	1:A:123:TYR:CE2	0.46	2.45	5	2
1:A:105:GLY:O	1:A:106:TYR:C	0.46	2.52	6	1
1:A:9:LEU:HD23	1:A:25:PHE:CZ	0.46	2.42	2	1
1:A:101:PHE:CD1	1:A:106:TYR:HB3	0.46	2.46	6	2
1:A:84:MET:HB3	1:A:100:PHE:CE1	0.46	2.45	17	1
1:A:85:ASP:CG	1:A:86:ALA:N	0.46	2.69	5	13
1:A:105:GLY:C	1:A:106:TYR:CD1	0.46	2.88	3	2
1:A:23:LYS:HG3	1:A:42:PHE:CD2	0.46	2.44	4	1
1:A:34:ASN:O	1:A:38:LEU:HD23	0.46	2.11	4	1
1:A:30:ARG:CB	1:A:31:PRO:CD	0.46	2.93	11	2
1:A:50:ASN:C	1:A:52:GLU:N	0.46	2.69	12	3
1:A:37:LEU:O	1:A:41:ILE:CD1	0.46	2.63	15	1
1:A:46:ASP:OD1	1:A:53:ILE:CD1	0.46	2.64	18	1
1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CD2	0.46	2.77	20	1
1:A:97:VAL:O	1:A:100:PHE:N	0.46	2.48	15	7
1:A:109:VAL:O	1:A:110:VAL:C	0.46	2.54	5	16
1:A:8:GLN:HG3	1:A:9:LEU:HD23	0.46	1.88	3	1
1:A:124:ILE:HG23	1:A:129:PHE:N	0.46	2.25	5	1
1:A:53:ILE:CD1	1:A:57:GLU:OE1	0.46	2.64	7	1
1:A:117:ASP:OD1	1:A:118:ALA:N	0.46	2.49	10	4
1:A:23:LYS:CD	1:A:38:LEU:HD23	0.46	2.39	3	1
1:A:42:PHE:O	1:A:44:ALA:N	0.46	2.49	11	3
1:A:85:ASP:OD1	1:A:88:GLY:N	0.46	2.48	5	3
1:A:52:GLU:C	1:A:53:ILE:CG1	0.46	2.84	7	1
1:A:77:LEU:HD13	1:A:104:PHE:CE2	0.46	2.45	9	1
1:A:121:ASP:O	1:A:123:TYR:CD2	0.46	2.68	13	1
1:A:5:LEU:O	1:A:7:LYS:N	0.46	2.48	16	1
1:A:60:LYS:CG	1:A:61:PHE:N	0.46	2.78	14	3
1:A:12:ASN:ND2	1:A:12:ASN:H	0.46	2.08	11	2
1:A:50:ASN:OD1	1:A:50:ASN:N	0.46	2.47	16	2
1:A:54:ASP:CG	1:A:56:ALA:HB3	0.46	2.31	2	2
1:A:47:ILE:HD12	1:A:47:ILE:N	0.46	2.26	3	1
1:A:42:PHE:O	1:A:43:LYS:C	0.46	2.55	11	4
1:A:112:GLN:HB3	1:A:132:PHE:CZ	0.46	2.45	11	1
1:A:44:ALA:HB1	1:A:130:LEU:CD2	0.46	2.34	19	1
1:A:85:ASP:OD2	1:A:88:GLY:N	0.46	2.49	9	1
1:A:92:LEU:CD1	1:A:96:GLU:OE2	0.46	2.63	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:ASP:O	1:A:100:PHE:CD1	0.46	2.68	4	1
1:A:117:ASP:OD1	1:A:122:GLY:N	0.46	2.49	7	2
1:A:49:GLY:O	1:A:52:GLU:N	0.46	2.49	11	1
1:A:91:LYS:HB2	1:A:125:THR:HG22	0.46	1.88	12	2
1:A:101:PHE:CD1	1:A:129:PHE:CZ	0.46	3.04	15	1
1:A:18:SER:O	1:A:19:TYR:C	0.46	2.55	8	11
1:A:93:THR:O	1:A:96:GLU:N	0.46	2.49	12	2
1:A:95:GLU:O	1:A:98:THR:OG1	0.46	2.34	12	15
1:A:127:GLU:O	1:A:128:GLU:C	0.46	2.54	1	3
1:A:6:PHE:CD1	1:A:9:LEU:HD12	0.46	2.46	3	2
1:A:19:TYR:CE1	1:A:53:ILE:C	0.46	2.90	6	1
1:A:106:TYR:CD2	1:A:109:VAL:HG21	0.45	2.45	12	1
1:A:14:ASP:OD1	1:A:15:GLY:N	0.45	2.49	20	3
1:A:81:TYR:CD1	1:A:126:LEU:HG	0.45	2.46	1	1
1:A:54:ASP:OD1	1:A:55:LEU:N	0.45	2.49	14	4
1:A:6:PHE:C	1:A:8:GLN:N	0.45	2.70	5	2
1:A:79:ILE:O	1:A:82:LYS:N	0.45	2.49	13	5
1:A:81:TYR:CE1	1:A:100:PHE:CE2	0.45	3.04	7	1
1:A:85:ASP:OD2	1:A:90:GLY:N	0.45	2.49	15	1
1:A:77:LEU:CD2	1:A:104:PHE:CE2	0.45	2.97	2	1
1:A:26:VAL:O	1:A:29:LYS:N	0.45	2.49	8	1
1:A:86:ALA:CB	1:A:96:GLU:CD	0.45	2.85	11	2
1:A:46:ASP:OD1	1:A:50:ASN:O	0.45	2.35	14	2
1:A:92:LEU:O	1:A:124:ILE:N	0.45	2.45	16	5
1:A:6:PHE:CZ	1:A:22:VAL:HB	0.45	2.47	11	2
1:A:33:LYS:C	1:A:35:GLU:N	0.45	2.68	11	1
1:A:19:TYR:O	1:A:23:LYS:N	0.45	2.49	4	5
1:A:54:ASP:O	1:A:55:LEU:C	0.45	2.54	4	19
1:A:46:ASP:OD2	1:A:51:GLY:C	0.45	2.55	3	2
1:A:131:ALA:O	1:A:134:LEU:HD23	0.45	2.11	3	1
1:A:81:TYR:OH	1:A:124:ILE:O	0.45	2.34	20	1
1:A:8:GLN:O	1:A:9:LEU:C	0.45	2.55	18	11
1:A:125:THR:O	1:A:126:LEU:C	0.45	2.54	2	13
1:A:109:VAL:O	1:A:111:ASP:N	0.45	2.49	11	6
1:A:42:PHE:C	1:A:44:ALA:N	0.45	2.70	4	3
1:A:47:ILE:HD13	1:A:48:ASP:N	0.45	2.26	4	1
1:A:106:TYR:CD1	1:A:109:VAL:HG21	0.45	2.47	20	1
1:A:109:VAL:C	1:A:111:ASP:N	0.45	2.69	3	6
1:A:34:ASN:OD1	1:A:34:ASN:N	0.45	2.50	20	3
1:A:130:LEU:O	1:A:130:LEU:HD22	0.45	2.11	5	2
1:A:81:TYR:HA	1:A:100:PHE:CE2	0.45	2.45	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:ASP:OD1	1:A:52:GLU:N	0.45	2.49	4	1
1:A:105:GLY:O	1:A:107:GLU:N	0.45	2.50	6	1
1:A:46:ASP:OD2	1:A:46:ASP:C	0.45	2.55	12	1
1:A:30:ARG:HB2	1:A:31:PRO:HD3	0.45	1.88	19	1
1:A:46:ASP:CG	1:A:46:ASP:O	0.45	2.55	11	2
1:A:101:PHE:CD2	1:A:106:TYR:CB	0.45	2.99	13	2
1:A:60:LYS:O	1:A:64:ALA:N	0.45	2.50	15	3
1:A:101:PHE:CE1	1:A:129:PHE:CE1	0.45	3.04	15	1
1:A:32:ILE:HG23	1:A:33:LYS:N	0.45	2.27	13	1
1:A:117:ASP:OD2	1:A:122:GLY:N	0.45	2.50	18	1
1:A:106:TYR:HB3	1:A:109:VAL:HG21	0.45	1.88	20	1
1:A:84:MET:O	1:A:85:ASP:C	0.45	2.55	10	14
1:A:49:GLY:C	1:A:50:ASN:OD1	0.45	2.55	11	6
1:A:46:ASP:CG	1:A:53:ILE:HD11	0.45	2.32	9	1
1:A:100:PHE:O	1:A:103:LYS:N	0.45	2.50	19	2
1:A:77:LEU:CD1	1:A:104:PHE:CZ	0.44	2.93	3	1
1:A:102:LYS:O	1:A:105:GLY:N	0.44	2.49	3	1
1:A:99:THR:O	1:A:103:LYS:N	0.44	2.48	9	4
1:A:5:LEU:C	1:A:7:LYS:N	0.44	2.70	16	1
1:A:85:ASP:C	1:A:92:LEU:HD11	0.44	2.32	20	1
1:A:77:LEU:HA	1:A:104:PHE:CE2	0.44	2.47	7	4
1:A:92:LEU:N	1:A:124:ILE:O	0.44	2.50	6	2
1:A:101:PHE:CD1	1:A:106:TYR:CB	0.44	3.01	6	1
1:A:81:TYR:CD2	1:A:92:LEU:HG	0.44	2.47	2	1
1:A:19:TYR:HB3	1:A:42:PHE:CD2	0.44	2.47	7	2
1:A:12:ASN:ND2	1:A:14:ASP:OD1	0.44	2.50	20	2
1:A:31:PRO:O	1:A:32:ILE:HB	0.44	2.12	19	1
1:A:83:LEU:HD23	1:A:84:MET:N	0.44	2.28	1	1
1:A:40:LEU:C	1:A:42:PHE:N	0.44	2.69	5	6
1:A:72:ASP:O	1:A:75:VAL:N	0.44	2.51	19	5
1:A:81:TYR:CE1	1:A:92:LEU:HD23	0.44	2.46	15	1
1:A:19:TYR:OH	1:A:53:ILE:HG22	0.44	2.13	6	1
1:A:5:LEU:HD23	1:A:5:LEU:N	0.44	2.28	3	1
1:A:85:ASP:OD1	1:A:86:ALA:N	0.44	2.50	20	4
1:A:101:PHE:CD1	1:A:106:TYR:HB2	0.44	2.47	4	2
1:A:6:PHE:O	1:A:8:GLN:N	0.44	2.51	5	2
1:A:33:LYS:O	1:A:35:GLU:N	0.44	2.50	11	1
1:A:81:TYR:CD1	1:A:92:LEU:CD1	0.44	3.01	11	2
1:A:61:PHE:O	1:A:65:VAL:CG2	0.44	2.66	17	1
1:A:106:TYR:CD1	1:A:110:VAL:HG22	0.44	2.47	16	1
1:A:12:ASN:ND2	1:A:13:GLY:H	0.44	2.11	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:LYS:CG	1:A:130:LEU:HD11	0.44	2.43	12	1
1:A:7:LYS:O	1:A:10:ASP:N	0.44	2.51	13	1
1:A:92:LEU:HD23	1:A:96:GLU:C	0.44	2.33	13	1
1:A:34:ASN:HB3	1:A:37:LEU:CB	0.44	2.42	17	1
1:A:81:TYR:CD1	1:A:92:LEU:HD12	0.44	2.47	17	1
1:A:48:ASP:O	1:A:48:ASP:CG	0.44	2.56	9	5
1:A:40:LEU:HD12	1:A:40:LEU:O	0.44	2.13	8	1
1:A:101:PHE:CD2	1:A:129:PHE:CD1	0.44	3.06	20	1
1:A:43:LYS:HG2	1:A:44:ALA:N	0.43	2.27	2	5
1:A:56:ALA:O	1:A:57:GLU:C	0.43	2.57	2	2
1:A:23:LYS:CG	1:A:42:PHE:CE2	0.43	3.01	4	1
1:A:94:LYS:O	1:A:98:THR:OG1	0.43	2.36	20	10
1:A:81:TYR:O	1:A:85:ASP:CB	0.43	2.66	12	1
1:A:79:ILE:HG22	1:A:83:LEU:HD12	0.43	1.90	14	1
1:A:77:LEU:HD21	1:A:129:PHE:HZ	0.43	1.68	1	1
1:A:88:GLY:O	1:A:89:ASP:CB	0.43	2.66	19	6
1:A:8:GLN:HG2	1:A:9:LEU:HD22	0.43	1.88	2	1
1:A:38:LEU:O	1:A:42:PHE:N	0.43	2.49	4	3
1:A:9:LEU:CD2	1:A:25:PHE:CG	0.43	3.01	6	1
1:A:77:LEU:HB3	1:A:129:PHE:CE2	0.43	2.48	7	1
1:A:32:ILE:O	1:A:33:LYS:C	0.43	2.57	10	2
1:A:81:TYR:CD2	1:A:126:LEU:HB3	0.43	2.48	20	1
1:A:81:TYR:CE2	1:A:92:LEU:CD2	0.43	2.90	4	1
1:A:35:GLU:O	1:A:39:GLN:N	0.43	2.51	6	2
1:A:16:SER:N	1:A:54:ASP:OD2	0.43	2.52	7	1
1:A:35:GLU:CG	1:A:36:GLN:N	0.43	2.80	10	1
1:A:22:VAL:HG22	1:A:25:PHE:CD2	0.43	2.48	15	1
1:A:85:ASP:CG	1:A:92:LEU:HD21	0.43	2.30	15	1
1:A:83:LEU:HD13	1:A:83:LEU:C	0.43	2.34	16	1
1:A:81:TYR:CD1	1:A:129:PHE:CD2	0.43	3.07	20	1
1:A:78:LYS:O	1:A:82:LYS:N	0.43	2.48	3	1
1:A:9:LEU:CD1	1:A:25:PHE:CD1	0.43	3.02	15	2
1:A:106:TYR:CD1	1:A:109:VAL:CG2	0.43	3.01	15	1
1:A:45:ILE:HD13	1:A:134:LEU:HD21	0.43	1.89	18	1
1:A:47:ILE:CG1	1:A:134:LEU:HD13	0.43	2.44	19	1
1:A:97:VAL:HG21	1:A:124:ILE:CG2	0.43	2.43	20	1
1:A:6:PHE:O	1:A:7:LYS:C	0.43	2.56	15	11
1:A:59:THR:O	1:A:62:ALA:HB3	0.43	2.13	4	1
1:A:6:PHE:O	1:A:10:ASP:N	0.43	2.48	9	1
1:A:110:VAL:HA	1:A:113:ILE:HD12	0.43	1.89	15	1
1:A:112:GLN:C	1:A:116:ALA:HB2	0.43	2.33	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:ASP:O	1:A:46:ASP:OD1	0.43	2.36	3	2
1:A:77:LEU:O	1:A:77:LEU:CD2	0.43	2.67	13	1
1:A:84:MET:HB3	1:A:100:PHE:CZ	0.43	2.49	15	1
1:A:38:LEU:C	1:A:40:LEU:N	0.43	2.71	17	1
1:A:49:GLY:O	1:A:50:ASN:CG	0.43	2.57	4	3
1:A:19:TYR:HB3	1:A:42:PHE:CE2	0.43	2.49	7	1
1:A:27:SER:OG	1:A:35:GLU:N	0.43	2.52	7	1
1:A:40:LEU:CD1	1:A:134:LEU:HD22	0.43	2.43	8	1
1:A:89:ASP:OD1	1:A:90:GLY:N	0.43	2.51	8	1
1:A:10:ASP:OD1	1:A:15:GLY:O	0.43	2.37	11	1
1:A:50:ASN:O	1:A:52:GLU:N	0.43	2.51	12	1
1:A:101:PHE:CZ	1:A:129:PHE:CD1	0.43	3.07	18	1
1:A:39:GLN:OE1	1:A:40:LEU:N	0.43	2.52	20	1
1:A:56:ALA:O	1:A:60:LYS:N	0.43	2.48	11	2
1:A:39:GLN:O	1:A:42:PHE:CB	0.43	2.67	15	1
1:A:119:ASN:OD1	1:A:119:ASN:N	0.43	2.51	18	1
1:A:132:PHE:CD1	1:A:132:PHE:C	0.43	2.90	18	1
1:A:34:ASN:O	1:A:36:GLN:N	0.43	2.52	19	1
1:A:34:ASN:C	1:A:36:GLN:N	0.43	2.72	19	1
1:A:88:GLY:C	1:A:89:ASP:CG	0.42	2.77	2	4
1:A:12:ASN:N	1:A:12:ASN:ND2	0.42	2.66	11	2
1:A:49:GLY:C	1:A:50:ASN:CG	0.42	2.77	3	9
1:A:37:LEU:O	1:A:41:ILE:N	0.42	2.50	18	1
1:A:46:ASP:CG	1:A:50:ASN:O	0.42	2.58	14	2
1:A:9:LEU:CD1	1:A:25:PHE:CE1	0.42	3.02	15	1
1:A:128:GLU:O	1:A:132:PHE:N	0.42	2.52	16	1
1:A:83:LEU:C	1:A:83:LEU:HD23	0.42	2.35	6	1
1:A:38:LEU:O	1:A:40:LEU:N	0.42	2.51	17	1
1:A:46:ASP:OD2	1:A:51:GLY:O	0.42	2.38	9	2
1:A:46:ASP:C	1:A:48:ASP:H	0.42	2.18	13	2
1:A:60:LYS:O	1:A:63:ALA:N	0.42	2.52	2	1
1:A:40:LEU:O	1:A:42:PHE:N	0.42	2.53	11	4
1:A:77:LEU:CB	1:A:129:PHE:CZ	0.42	3.03	7	1
1:A:78:LYS:CG	1:A:126:LEU:HD12	0.42	2.45	18	1
1:A:14:ASP:OD1	1:A:14:ASP:O	0.42	2.37	5	3
1:A:72:ASP:O	1:A:73:GLU:C	0.42	2.58	5	1
1:A:77:LEU:HG	1:A:104:PHE:CE1	0.42	2.50	5	1
1:A:72:ASP:O	1:A:76:GLY:N	0.42	2.50	7	1
1:A:10:ASP:OD2	1:A:15:GLY:O	0.42	2.37	10	1
1:A:55:LEU:HD22	1:A:55:LEU:HA	0.42	1.77	11	1
1:A:105:GLY:O	1:A:106:TYR:O	0.42	2.38	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:ILE:HD13	1:A:35:GLU:OE2	0.42	2.14	19	1
1:A:15:GLY:O	1:A:54:ASP:CG	0.42	2.58	17	8
1:A:50:ASN:O	1:A:52:GLU:CG	0.42	2.67	4	1
1:A:46:ASP:OD2	1:A:51:GLY:CA	0.42	2.68	7	1
1:A:49:GLY:C	1:A:51:GLY:N	0.42	2.72	11	1
1:A:19:TYR:O	1:A:22:VAL:CG1	0.42	2.54	13	1
1:A:83:LEU:C	1:A:85:ASP:N	0.42	2.72	1	2
1:A:14:ASP:OD1	1:A:14:ASP:C	0.42	2.58	16	2
1:A:52:GLU:C	1:A:53:ILE:HG13	0.42	2.35	10	1
1:A:47:ILE:HD13	1:A:48:ASP:H	0.42	1.73	4	1
1:A:101:PHE:CD2	1:A:113:ILE:HD13	0.42	2.50	6	1
1:A:26:VAL:C	1:A:28:SER:N	0.42	2.72	8	1
1:A:12:ASN:ND2	1:A:14:ASP:CG	0.42	2.73	14	1
1:A:27:SER:CB	1:A:35:GLU:OE1	0.42	2.68	15	1
1:A:53:ILE:HG22	1:A:54:ASP:H	0.42	1.74	18	1
1:A:128:GLU:O	1:A:131:ALA:CB	0.41	2.67	2	4
1:A:17:VAL:N	1:A:53:ILE:O	0.41	2.45	10	2
1:A:6:PHE:CZ	1:A:22:VAL:HG23	0.41	2.50	8	1
1:A:79:ILE:O	1:A:82:LYS:HD2	0.41	2.15	18	1
1:A:33:LYS:O	1:A:34:ASN:ND2	0.41	2.53	5	1
1:A:94:LYS:O	1:A:98:THR:N	0.41	2.49	7	2
1:A:82:LYS:HG3	1:A:83:LEU:N	0.41	2.30	13	4
1:A:6:PHE:CG	1:A:55:LEU:HG	0.41	2.50	7	1
1:A:9:LEU:HG	1:A:25:PHE:CG	0.41	2.50	7	2
1:A:34:ASN:O	1:A:38:LEU:CG	0.41	2.68	17	1
1:A:10:ASP:OD1	1:A:15:GLY:N	0.41	2.52	3	1
1:A:74:LYS:O	1:A:78:LYS:CB	0.41	2.68	11	1
1:A:14:ASP:OD2	1:A:16:SER:O	0.41	2.38	5	2
1:A:121:ASP:OD2	1:A:123:TYR:CE1	0.41	2.74	6	1
1:A:23:LYS:CE	1:A:23:LYS:HA	0.41	2.46	7	2
1:A:92:LEU:HD12	1:A:92:LEU:N	0.41	2.31	8	1
1:A:117:ASP:OD2	1:A:123:TYR:O	0.41	2.39	17	1
1:A:81:TYR:O	1:A:85:ASP:CA	0.41	2.68	18	1
1:A:101:PHE:CE2	1:A:129:PHE:CD1	0.41	3.08	20	1
1:A:40:LEU:O	1:A:41:ILE:C	0.41	2.59	6	1
1:A:53:ILE:HG21	1:A:57:GLU:OE2	0.41	2.16	7	1
1:A:54:ASP:OD1	1:A:56:ALA:CB	0.41	2.67	8	1
1:A:109:VAL:HG22	1:A:132:PHE:CE2	0.41	2.49	18	1
1:A:77:LEU:HG	1:A:104:PHE:CD2	0.41	2.51	6	1
1:A:41:ILE:CD1	1:A:134:LEU:HA	0.41	2.46	7	1
1:A:77:LEU:CD2	1:A:104:PHE:CD2	0.41	3.02	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:ASP:O	1:A:48:ASP:OD1	0.41	2.39	9	2
1:A:29:LYS:O	1:A:30:ARG:CB	0.41	2.69	10	1
1:A:42:PHE:CE1	1:A:46:ASP:HB2	0.41	2.50	14	1
1:A:129:PHE:CD1	1:A:129:PHE:C	0.41	2.91	14	1
1:A:24:ALA:CB	1:A:35:GLU:OE1	0.41	2.68	16	1
1:A:81:TYR:CE1	1:A:126:LEU:N	0.41	2.89	16	1
1:A:77:LEU:HD11	1:A:104:PHE:CD2	0.41	2.50	17	1
1:A:81:TYR:CD1	1:A:126:LEU:CA	0.41	3.03	18	1
1:A:100:PHE:CD1	1:A:100:PHE:C	0.41	2.94	3	1
1:A:92:LEU:HD21	1:A:100:PHE:CD1	0.41	2.51	6	1
1:A:84:MET:O	1:A:85:ASP:O	0.40	2.40	2	1
1:A:16:SER:CA	1:A:54:ASP:OD2	0.40	2.68	7	1
1:A:46:ASP:OD1	1:A:51:GLY:O	0.40	2.40	7	1
1:A:130:LEU:O	1:A:134:LEU:N	0.40	2.49	11	1
1:A:48:ASP:OD1	1:A:50:ASN:OD1	0.40	2.39	14	1
1:A:109:VAL:O	1:A:113:ILE:N	0.40	2.52	18	1
1:A:109:VAL:HB	1:A:113:ILE:CD1	0.40	2.45	6	1
1:A:25:PHE:O	1:A:29:LYS:CG	0.40	2.68	10	1
1:A:46:ASP:O	1:A:49:GLY:N	0.40	2.41	10	1
1:A:106:TYR:HD2	1:A:109:VAL:HG21	0.40	1.77	12	1
1:A:15:GLY:O	1:A:54:ASP:OD2	0.40	2.38	15	1
1:A:85:ASP:CA	1:A:92:LEU:HD11	0.40	2.44	16	1
1:A:79:ILE:HA	1:A:82:LYS:CE	0.40	2.46	18	1
1:A:34:ASN:O	1:A:35:GLU:C	0.40	2.60	19	1
1:A:16:SER:O	1:A:17:VAL:HB	0.40	2.16	6	1
1:A:133:ASN:O	1:A:134:LEU:C	0.40	2.60	3	1
1:A:48:ASP:O	1:A:50:ASN:OD1	0.40	2.40	10	1
1:A:116:ALA:HB2	1:A:132:PHE:CE2	0.40	2.52	11	1
1:A:46:ASP:OD1	1:A:51:GLY:CA	0.40	2.70	12	1
1:A:98:THR:O	1:A:102:LYS:HB3	0.40	2.17	15	1
1:A:106:TYR:HB3	1:A:109:VAL:CG2	0.40	2.46	20	1
1:A:9:LEU:N	1:A:9:LEU:HD22	0.40	2.32	5	1
1:A:77:LEU:HG	1:A:104:PHE:CD1	0.40	2.52	5	1
1:A:85:ASP:OD2	1:A:92:LEU:CD1	0.40	2.69	5	1
1:A:87:ASP:O	1:A:89:ASP:OD1	0.40	2.40	7	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	123/134 (92%)	74±5 (60±4%)	35±4 (28±3%)	14±3 (11±2%)	1 7
All	All	2460/2680 (92%)	1482 (60%)	696 (28%)	282 (11%)	1 7

All 33 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	VAL	20
1	A	19	TYR	20
1	A	32	ILE	20
1	A	118	ALA	20
1	A	94	LYS	19
1	A	120	GLY	19
1	A	50	ASN	17
1	A	85	ASP	16
1	A	34	ASN	15
1	A	86	ALA	15
1	A	105	GLY	13
1	A	108	LYS	12
1	A	12	ASN	10
1	A	47	ILE	10
1	A	11	ALA	9
1	A	5	LEU	5
1	A	33	LYS	5
1	A	14	ASP	4
1	A	31	PRO	4
1	A	88	GLY	4
1	A	55	LEU	4
1	A	51	GLY	4
1	A	84	MET	2
1	A	48	ASP	2
1	A	106	TYR	2
1	A	49	GLY	2
1	A	30	ARG	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	107	GLU	2
1	A	15	GLY	1
1	A	76	GLY	1
1	A	110	VAL	1
1	A	6	PHE	1
1	A	35	GLU	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	103/111 (93%)	62±4 (60±4%)	41±4 (40±4%)	0 5
All	All	2060/2220 (93%)	1241 (60%)	819 (40%)	0 5

All 88 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	17	VAL	20
1	A	25	PHE	20
1	A	55	LEU	20
1	A	80	LEU	20
1	A	82	LYS	20
1	A	99	THR	20
1	A	129	PHE	20
1	A	101	PHE	19
1	A	119	ASN	19
1	A	130	LEU	18
1	A	7	LYS	17
1	A	30	ARG	17
1	A	40	LEU	17
1	A	108	LYS	17
1	A	89	ASP	15
1	A	42	PHE	15
1	A	60	LYS	15
1	A	23	LYS	14
1	A	29	LYS	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	50	ASN	14
1	A	43	LYS	14
1	A	81	TYR	14
1	A	83	LEU	14
1	A	53	ILE	14
1	A	84	MET	13
1	A	111	ASP	13
1	A	78	LYS	13
1	A	87	ASP	13
1	A	102	LYS	13
1	A	5	LEU	12
1	A	20	GLU	12
1	A	94	LYS	12
1	A	114	MET	12
1	A	115	LYS	12
1	A	74	LYS	11
1	A	73	GLU	11
1	A	9	LEU	10
1	A	22	VAL	10
1	A	48	ASP	10
1	A	12	ASN	10
1	A	35	GLU	10
1	A	39	GLN	9
1	A	37	LEU	9
1	A	32	ILE	8
1	A	104	PHE	8
1	A	126	LEU	8
1	A	95	GLU	8
1	A	97	VAL	8
1	A	45	ILE	7
1	A	65	VAL	7
1	A	77	LEU	7
1	A	91	LYS	7
1	A	107	GLU	7
1	A	112	GLN	7
1	A	33	LYS	7
1	A	28	SER	7
1	A	134	LEU	7
1	A	103	LYS	6
1	A	127	GLU	6
1	A	124	ILE	6
1	A	54	ASP	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	92	LEU	6
1	A	41	ILE	5
1	A	128	GLU	5
1	A	52	GLU	5
1	A	85	ASP	4
1	A	72	ASP	4
1	A	16	SER	4
1	A	38	LEU	4
1	A	61	PHE	3
1	A	47	ILE	3
1	A	106	TYR	3
1	A	10	ASP	3
1	A	132	PHE	3
1	A	36	GLN	2
1	A	75	VAL	2
1	A	98	THR	2
1	A	26	VAL	2
1	A	34	ASN	1
1	A	79	ILE	1
1	A	133	ASN	1
1	A	121	ASP	1
1	A	8	GLN	1
1	A	14	ASP	1
1	A	46	ASP	1
1	A	100	PHE	1
1	A	125	THR	1
1	A	117	ASP	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 4 ligands modelled in this entry, 4 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 (i)

No chemical shift data were provided