Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Feb 20, 2022 – 03:08 AM EST

PDB ID	:	1TWO
Title	:	NMR structure of the pheromone binding protein from Antheraea polyphemus at acidic pH
Authors	:	Mohanty, S.; Zubkov, S.
Deposited on	:	2004-07-01

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:

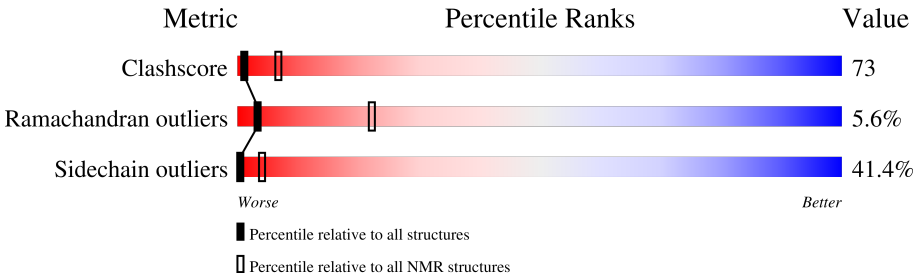
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
ShiftChecker	:	2.26
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)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

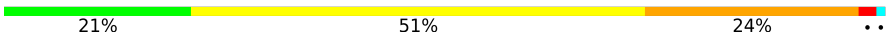
The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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	142	

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 20 models. Model 6 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *fewest violations*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	**Residue range (total)**	**Backbone RMSD (Å)**	**Medoid model**
1	A:3-A:127 (125)	0.41	6
2	A:128-A:142 (15)	0.76	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 1 single-model cluster was found.

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

3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2167 atoms, of which 1070 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Pheromone-binding protein.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	142	2167	686	1070	183	214	14	0

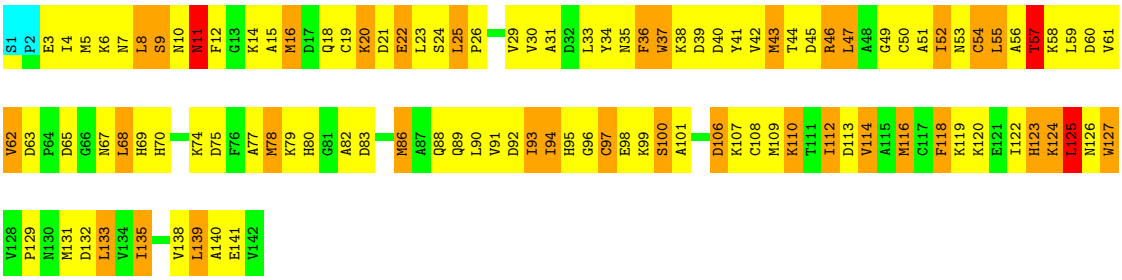
4 Residue-property plots (i)

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: Pheromone-binding protein

Chain A: 21% 51% 24%



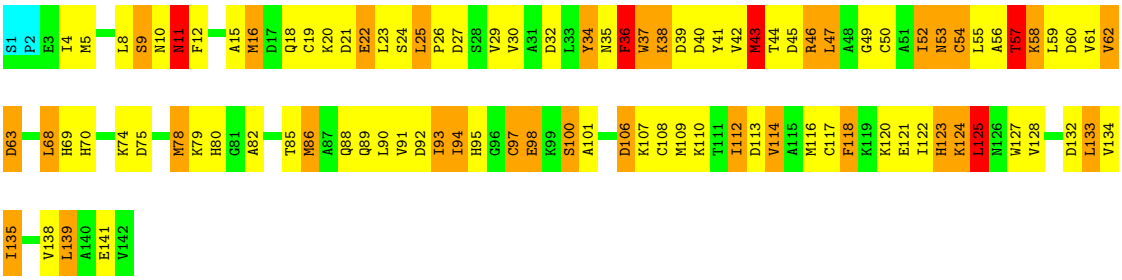
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: Pheromone-binding protein

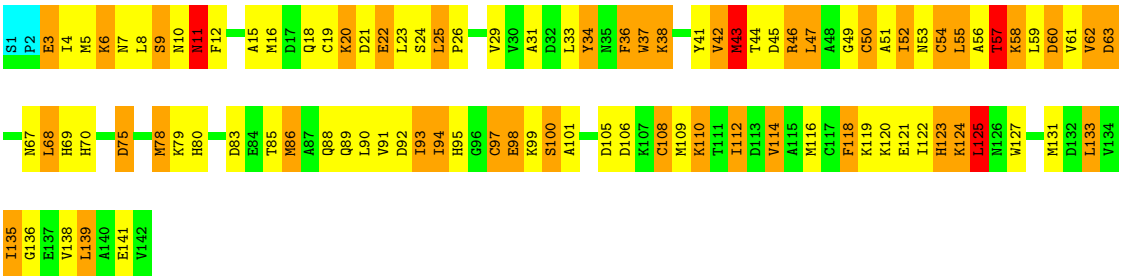
Chain A: 29% 44% 23%



4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: Pheromone-binding protein

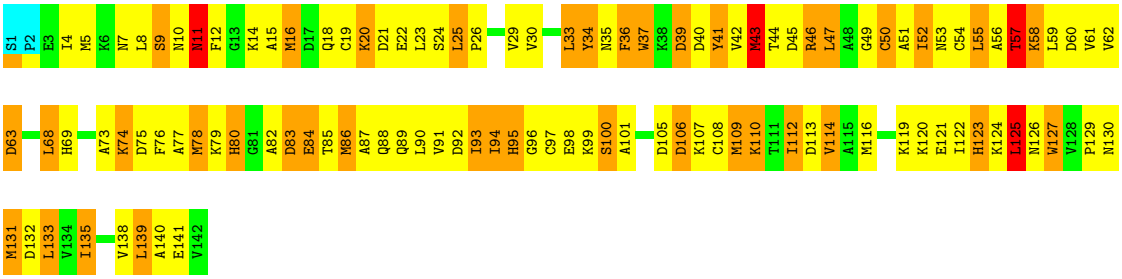
Chain A: 30% 38% 28%



4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: Pheromone-binding protein

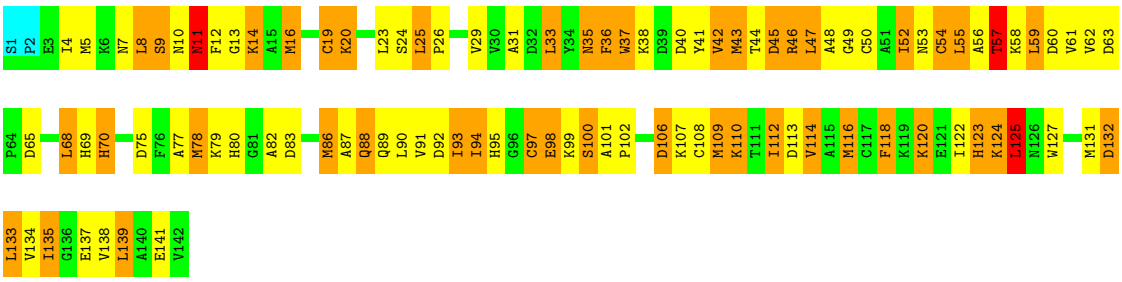
Chain A: 21% 47% 27%



4.2.4 Score per residue for model 4

• Molecule 1: Pheromone-binding protein

Chain A: 29% 37% 31%



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Pheromone-binding protein

Chain A: 26% 43% 27%

S1 P2 E3 I4 M5 K6 N7 L8 S9 N10 N11 F12 A15 M16 D17 Q18 C19 K20 D21 E22 L23 S24 L25 P26 D27 S28 V29 V30 A31 D32 L33 Y34 N35 F36 W37 K38 D39 D40 Y41 V42 M43 T44 D45 R46 L47 A48 G49 I52 N53 C54 L55 A56 T57 K58 L59 D60 V61 V62

D63 P64 D65 G66 N67 L68 H69 H70 K74 D75 M78 K79 H80 G81 A82 M86 A87 Q88 Q89 L90 V91 D92 I93 I94 H95 G96 C97 E98 K99 S100 A101 D106 K107 C108 M109 K110 T111 I112 D113 V114 A115 M116 C117 F118 K119 K120 E121 I122 H123 K124 L125 N126 W127 D132 L133

V134 I135 G136 E137 V138 L139 A140 E141 V142

4.2.6 Score per residue for model 6 (medoid)

- Molecule 1: Pheromone-binding protein

Chain A: 23% 45% 27%

S1 P2 E3 I4 M5 L8 S9 N10 N11 F12 G13 K14 A15 M16 D17 Q18 C19 K20 D21 E22 L23 S24 L25 P26 D27 S28 V29 V30 A31 D32 L33 Y34 N35 F36 W37 K38 D39 D40 Y41 V42 M43 T44 D45 R46 L47 A48 G49 C50 A51 I52 N53 C54 L55 A56 T57 K58 L59 D60 V61

V62 D63 P64 D65 L68 H69 H70 A73 K74 A77 M78 K79 H80 G81 A82 D83 E84 T85 M86 A87 Q88 Q89 L90 V91 D92 I93 I94 H95 G96 C97 E98 K99 S100 A101 D106 K107 C108 M109 K110 T111 I112 D113 V114 A115 M116 C117 F118 K119 K120 E121 I122 H123 K124 L125 N126 W127

V128 P129 N130 M131 D132 L133 V134 I135 V138 L139 A140 E141 V142

4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Pheromone-binding protein

Chain A: 27% 44% 24%

S1 P2 E3 I4 M5 L8 S9 N10 N11 F12 G13 K14 A15 M16 D17 Q18 C19 K20 D21 E22 L23 S24 L25 P26 V29 V30 A31 D32 L33 Y34 N35 F36 W37 K38 D39 D40 Y41 V42 M43 T44 D45 R46 L47 A48 G49 I52 N53 C54 L55 A56 T57 K58 L59 D60 V61 V62 D63

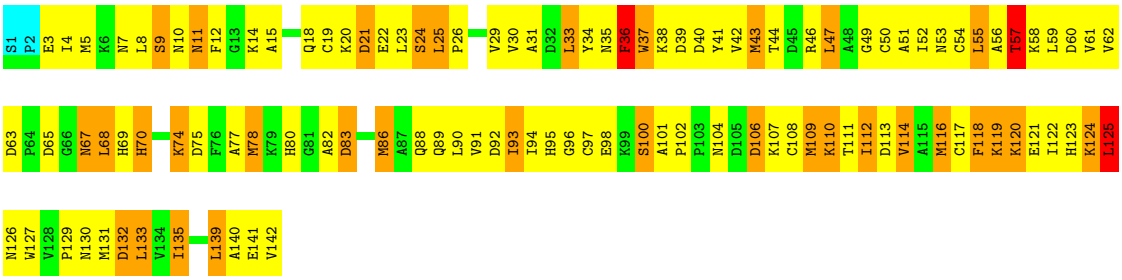
L68 H69 H70 K74 D75 F76 A77 M78 K79 H80 G81 A82 D83 M86 A87 Q88 Q89 L90 V91 D92 I93 I94 H95 G96 C97 E98 K99 S100 A101 D106 K107 C108 M109 K110 T111 I112 D113 V114 A115 M116 C117 F118 K119 I122 H123 K124 L125 N126 W127 Y128 P129 N130 M131 D132 L133

V134 I135 G136 E137 V138 L139 A140 E141 V142

4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Pheromone-binding protein

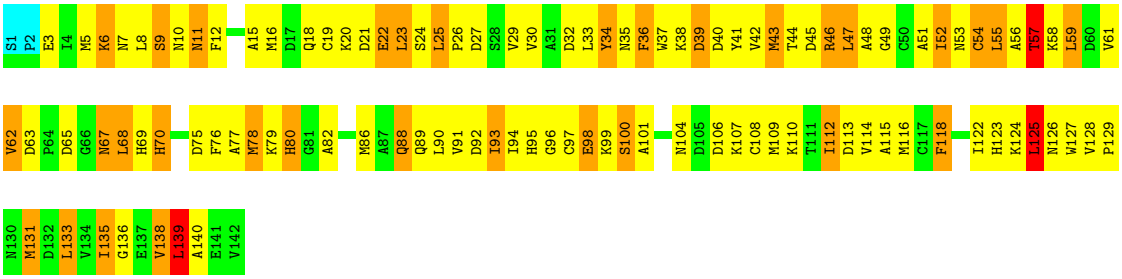
Chain A: 20% 53% 23%



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Pheromone-binding protein

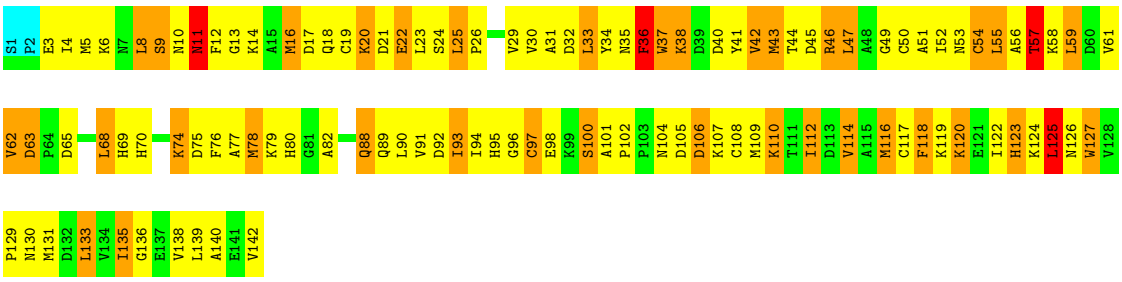
Chain A: 23% 51% 23%



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Pheromone-binding protein

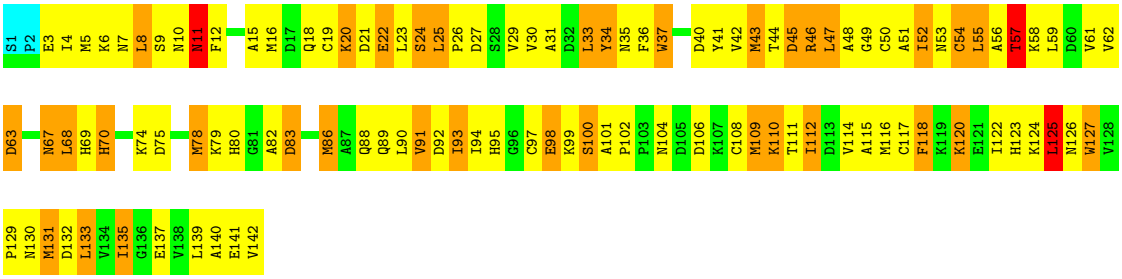
Chain A: 21% 49% 25%



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Pheromone-binding protein

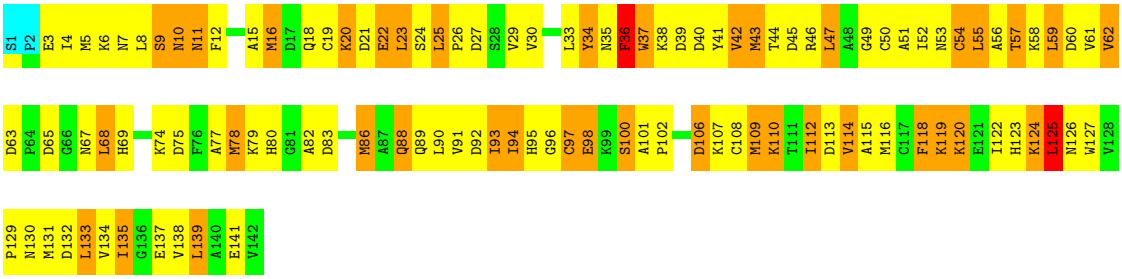
Chain A: 22% 50% 25%



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Pheromone-binding protein

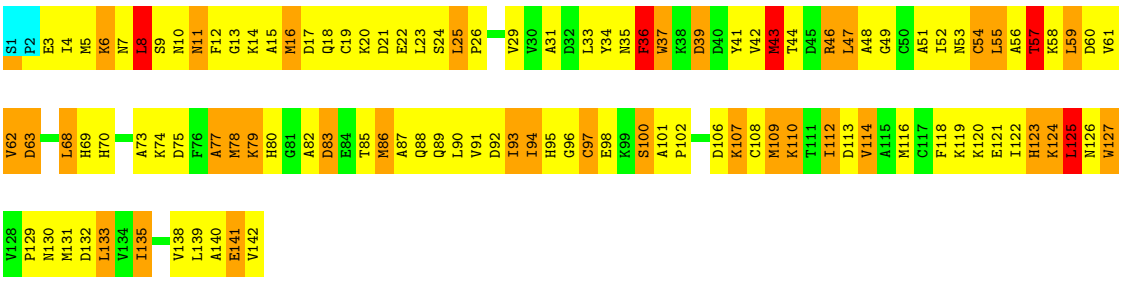
Chain A: 20% 49% 27%



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Pheromone-binding protein

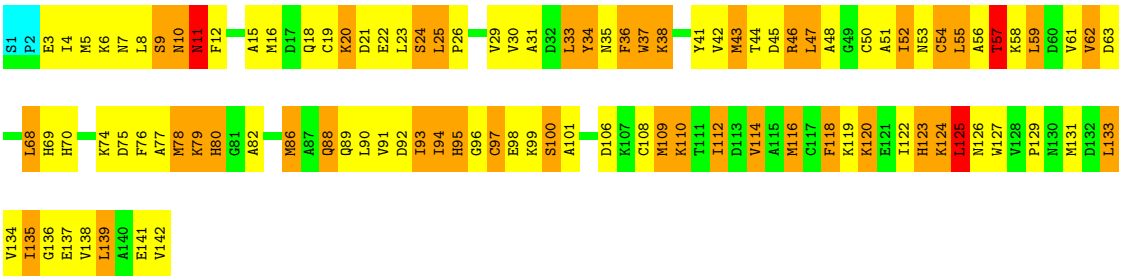
Chain A: 20% 51% 24%



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Pheromone-binding protein

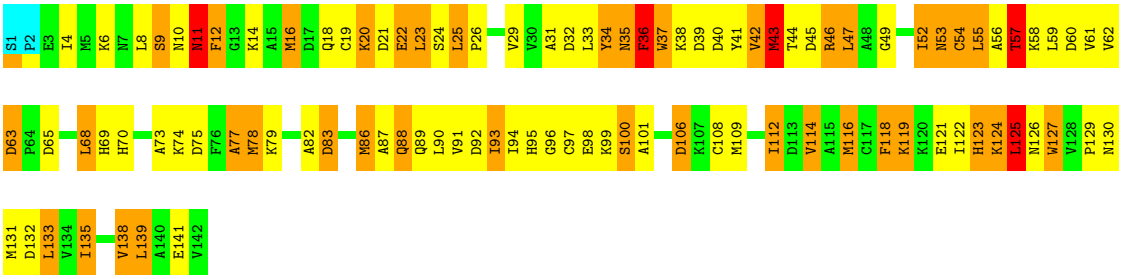
Chain A: 25% 42% 29%



4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Pheromone-binding protein

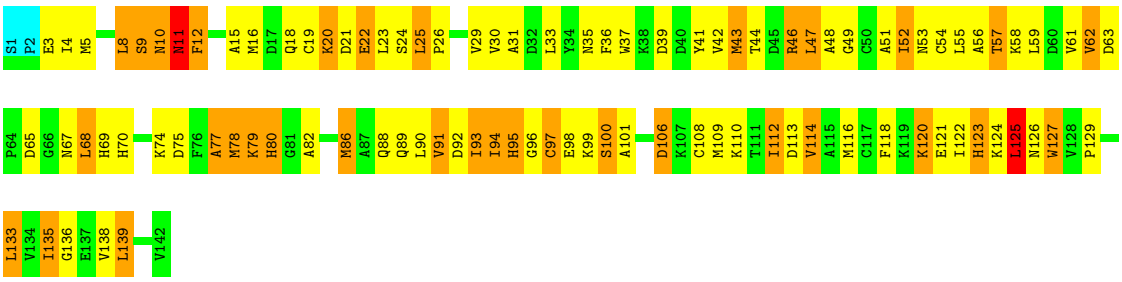
Chain A: 27% 40% 27%



4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Pheromone-binding protein

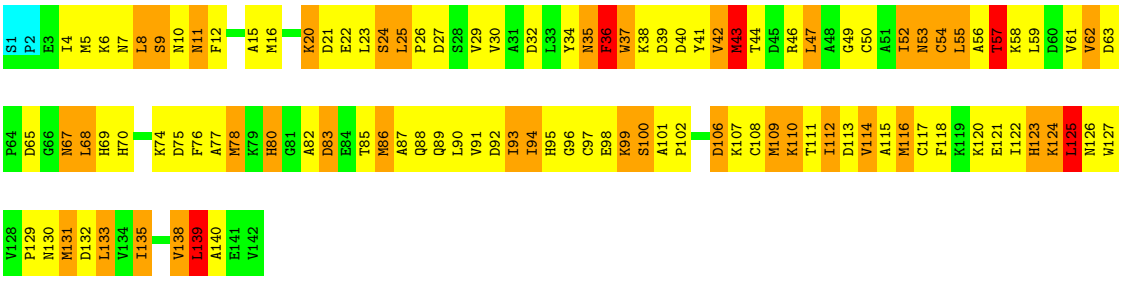
Chain A: 30% 43% 24%



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Pheromone-binding protein

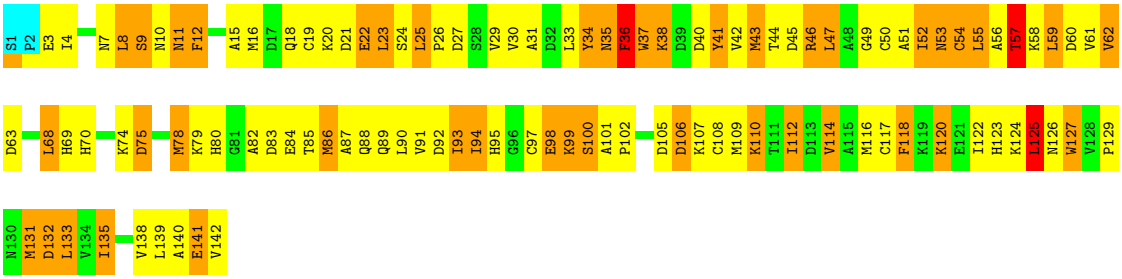
Chain A: 22% 47% 26%



4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Pheromone-binding protein

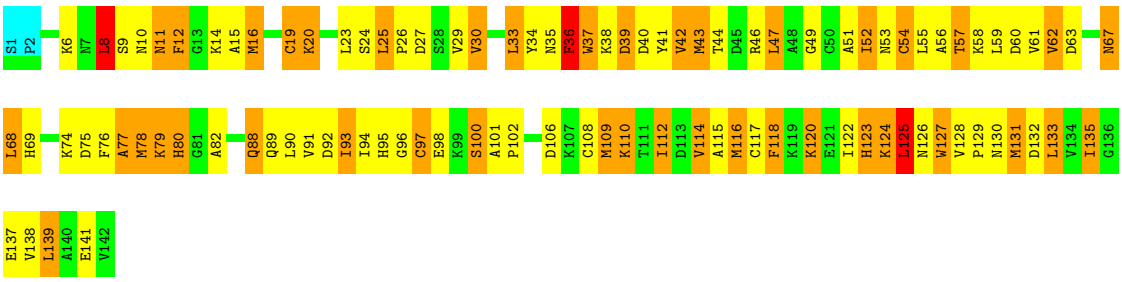
Chain A: 23% 44% 30%



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Pheromone-binding protein

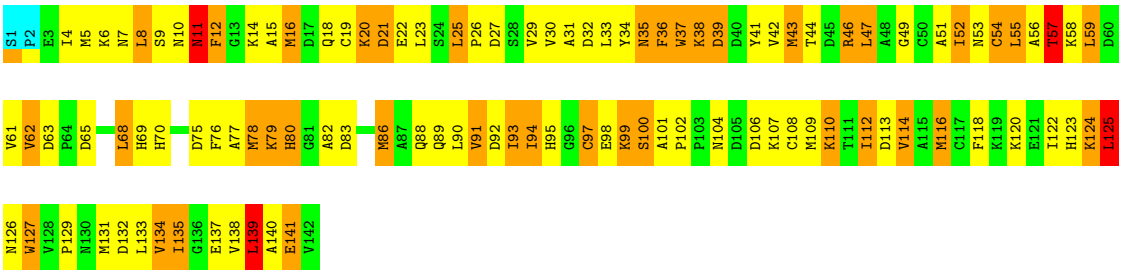
Chain A: 29% 39% 29%



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Pheromone-binding protein

Chain A: 23% 45% 27%



5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

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

Of the 500 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
CYANA	structure solution	1.0.6
CYANA	refinement	1.0.6

No chemical shift data was provided.

6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

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	1084	1058	1053	156±11
All	All	21680	21160	21060	3119

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 73.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:LEU:HD21	1:A:118:PHE:CE1	1.07	1.83	9	13
1:A:12:PHE:CE1	1:A:55:LEU:HD21	1.03	1.88	20	5
1:A:12:PHE:CD2	1:A:55:LEU:HD11	1.03	1.88	10	4
1:A:33:LEU:HD13	1:A:37:TRP:CZ3	1.03	1.88	20	3
1:A:58:LYS:O	1:A:61:VAL:HG22	1.00	1.54	5	20
1:A:134:VAL:HG13	1:A:135:ILE:HD13	0.99	1.34	20	1
1:A:68:LEU:C	1:A:68:LEU:HD13	0.95	1.82	8	20
1:A:12:PHE:CZ	1:A:55:LEU:HD21	0.93	1.98	10	3
1:A:54:CYS:O	1:A:57:THR:HG23	0.90	1.66	19	3
1:A:125:LEU:HD11	1:A:127:TRP:CE2	0.89	2.02	9	8
1:A:26:PRO:O	1:A:29:VAL:HG22	0.88	1.69	19	20
1:A:125:LEU:HD11	1:A:127:TRP:CD2	0.86	2.06	6	16
1:A:12:PHE:CD1	1:A:55:LEU:HD11	0.85	2.06	1	4
1:A:82:ALA:HB1	1:A:86:MET:HG2	0.85	1.47	8	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:LEU:HD22	1:A:69:HIS:N	0.83	1.86	14	2
1:A:90:LEU:HD21	1:A:118:PHE:CD1	0.83	2.08	14	13
1:A:133:LEU:HD22	1:A:133:LEU:O	0.83	1.74	7	10
1:A:56:ALA:O	1:A:59:LEU:HD23	0.82	1.74	2	6
1:A:12:PHE:CE2	1:A:55:LEU:HD21	0.82	2.09	4	2
1:A:33:LEU:HD21	1:A:48:ALA:HB1	0.81	1.52	16	1
1:A:4:ILE:HG23	1:A:31:ALA:HB1	0.80	1.52	8	2
1:A:8:LEU:HD22	1:A:11:ASN:HB3	0.80	1.54	9	3
1:A:8:LEU:HD22	1:A:9:SER:N	0.80	1.91	10	1
1:A:12:PHE:CE1	1:A:34:TYR:CE1	0.79	2.69	1	1
1:A:86:MET:SD	1:A:90:LEU:HD22	0.79	2.18	2	8
1:A:118:PHE:CE1	1:A:122:ILE:HD11	0.79	2.13	9	2
1:A:134:VAL:HG13	1:A:135:ILE:CD1	0.78	2.09	20	1
1:A:8:LEU:HD12	1:A:11:ASN:HB3	0.78	1.56	17	2
1:A:8:LEU:HD12	1:A:11:ASN:OD1	0.78	1.79	20	2
1:A:46:ARG:HG3	1:A:47:LEU:HD13	0.77	1.54	14	1
1:A:55:LEU:HD13	1:A:55:LEU:O	0.77	1.80	12	10
1:A:8:LEU:HD12	1:A:11:ASN:CG	0.77	1.98	20	1
1:A:133:LEU:HD13	1:A:133:LEU:O	0.77	1.80	17	8
1:A:15:ALA:HB3	1:A:55:LEU:HD22	0.76	1.56	16	9
1:A:41:TYR:CZ	1:A:42:VAL:HG22	0.76	2.16	20	2
1:A:33:LEU:HD22	1:A:33:LEU:O	0.76	1.80	4	4
1:A:41:TYR:CE1	1:A:42:VAL:HG22	0.76	2.16	14	3
1:A:133:LEU:O	1:A:133:LEU:HD13	0.75	1.82	7	8
1:A:42:VAL:HG23	1:A:46:ARG:HA	0.75	1.58	7	1
1:A:68:LEU:C	1:A:68:LEU:CD1	0.75	2.55	15	20
1:A:42:VAL:HG11	1:A:109:MET:HE1	0.75	1.58	3	1
1:A:12:PHE:CZ	1:A:34:TYR:CE1	0.74	2.76	1	2
1:A:82:ALA:HB1	1:A:86:MET:CG	0.73	2.13	4	15
1:A:125:LEU:N	1:A:125:LEU:HD12	0.73	1.98	8	20
1:A:42:VAL:HG11	1:A:109:MET:CE	0.73	2.14	3	1
1:A:42:VAL:HG13	1:A:46:ARG:HB2	0.73	1.60	11	4
1:A:8:LEU:HD12	1:A:9:SER:N	0.72	1.99	15	1
1:A:111:THR:O	1:A:115:ALA:N	0.72	2.23	11	1
1:A:12:PHE:CD2	1:A:16:MET:CE	0.72	2.73	7	3
1:A:42:VAL:HG13	1:A:46:ARG:CB	0.72	2.15	13	6
1:A:133:LEU:O	1:A:133:LEU:HD22	0.72	1.83	14	6
1:A:75:ASP:HA	1:A:78:MET:HE1	0.71	1.62	3	2
1:A:8:LEU:HD13	1:A:9:SER:N	0.71	2.00	5	4
1:A:8:LEU:HD11	1:A:12:PHE:HB2	0.71	1.62	19	4
1:A:15:ALA:CB	1:A:55:LEU:HD22	0.71	2.16	12	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:122:ILE:HD12	1:A:122:ILE:N	0.71	2.01	17	1
1:A:42:VAL:HG22	1:A:46:ARG:HA	0.70	1.61	5	9
1:A:42:VAL:HG13	1:A:46:ARG:HB3	0.70	1.62	5	3
1:A:33:LEU:HD22	1:A:33:LEU:C	0.70	2.05	4	2
1:A:132:ASP:HB3	1:A:140:ALA:HB1	0.70	1.62	17	1
1:A:33:LEU:HD22	1:A:37:TRP:CD2	0.70	2.21	16	1
1:A:11:ASN:ND2	1:A:61:VAL:HG23	0.70	2.01	5	1
1:A:122:ILE:N	1:A:122:ILE:HD13	0.69	2.00	11	19
1:A:37:TRP:CZ2	1:A:48:ALA:CB	0.69	2.74	9	1
1:A:42:VAL:HG13	1:A:46:ARG:CA	0.69	2.17	13	5
1:A:88:GLN:NE2	1:A:88:GLN:C	0.69	2.45	12	2
1:A:33:LEU:CD2	1:A:37:TRP:CH2	0.69	2.76	18	1
1:A:42:VAL:HG13	1:A:46:ARG:HA	0.69	1.62	9	4
1:A:78:MET:O	1:A:78:MET:HG2	0.69	1.86	15	7
1:A:90:LEU:O	1:A:93:ILE:HD13	0.69	1.87	4	20
1:A:68:LEU:CB	1:A:77:ALA:HB2	0.69	2.17	16	9
1:A:33:LEU:HD22	1:A:37:TRP:CD1	0.69	2.22	16	1
1:A:132:ASP:O	1:A:134:VAL:HG23	0.69	1.88	1	2
1:A:25:LEU:C	1:A:25:LEU:HD13	0.68	2.08	17	1
1:A:90:LEU:HD11	1:A:118:PHE:CE1	0.68	2.23	17	2
1:A:112:ILE:O	1:A:112:ILE:HD13	0.68	1.89	15	17
1:A:33:LEU:HD22	1:A:37:TRP:CE2	0.68	2.24	16	1
1:A:33:LEU:HD22	1:A:37:TRP:CG	0.68	2.23	16	1
1:A:19:CYS:SG	1:A:23:LEU:HD12	0.67	2.29	4	1
1:A:11:ASN:OD1	1:A:62:VAL:HG23	0.67	1.90	1	1
1:A:54:CYS:O	1:A:57:THR:HG22	0.67	1.89	8	15
1:A:37:TRP:CE3	1:A:37:TRP:C	0.67	2.67	18	10
1:A:54:CYS:O	1:A:57:THR:N	0.67	2.25	16	20
1:A:25:LEU:HD13	1:A:25:LEU:O	0.66	1.90	17	20
1:A:8:LEU:HD13	1:A:9:SER:H	0.66	1.51	5	4
1:A:37:TRP:CZ2	1:A:116:MET:CE	0.66	2.79	14	1
1:A:46:ARG:HD2	1:A:47:LEU:HD13	0.66	1.68	18	5
1:A:8:LEU:HD22	1:A:11:ASN:HB2	0.66	1.66	11	4
1:A:56:ALA:O	1:A:57:THR:C	0.65	2.35	2	20
1:A:133:LEU:C	1:A:133:LEU:HD22	0.65	2.12	4	5
1:A:82:ALA:HB1	1:A:86:MET:HG3	0.65	1.69	7	3
1:A:12:PHE:CZ	1:A:55:LEU:CD2	0.65	2.80	10	1
1:A:38:LYS:O	1:A:41:TYR:CE2	0.64	2.50	10	2
1:A:133:LEU:HD22	1:A:133:LEU:C	0.64	2.12	19	13
1:A:37:TRP:CD1	1:A:40:ASP:O	0.64	2.50	9	1
1:A:16:MET:SD	1:A:55:LEU:HD23	0.64	2.33	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:LEU:H	1:A:47:LEU:HD22	0.64	1.50	18	20
1:A:68:LEU:HB3	1:A:77:ALA:HB2	0.64	1.70	8	9
1:A:8:LEU:HD11	1:A:12:PHE:H	0.64	1.52	1	1
1:A:90:LEU:CD2	1:A:118:PHE:CD1	0.64	2.80	9	11
1:A:33:LEU:HD23	1:A:37:TRP:NE1	0.64	2.07	4	1
1:A:39:ASP:CB	1:A:123:HIS:CD2	0.64	2.81	20	5
1:A:12:PHE:CZ	1:A:34:TYR:CD1	0.63	2.86	1	1
1:A:10:ASN:O	1:A:12:PHE:N	0.63	2.31	10	20
1:A:90:LEU:HD21	1:A:118:PHE:CZ	0.63	2.26	9	3
1:A:12:PHE:CE1	1:A:55:LEU:CD2	0.63	2.76	20	2
1:A:41:TYR:CD1	1:A:41:TYR:N	0.63	2.63	18	3
1:A:93:ILE:HG21	1:A:121:GLU:OE2	0.63	1.94	13	5
1:A:15:ALA:HB1	1:A:55:LEU:HA	0.62	1.70	3	7
1:A:12:PHE:CD2	1:A:16:MET:SD	0.62	2.92	19	1
1:A:133:LEU:HD23	1:A:136:GLY:HA2	0.62	1.71	5	6
1:A:33:LEU:CD2	1:A:37:TRP:CZ3	0.62	2.82	14	1
1:A:38:LYS:C	1:A:123:HIS:CD2	0.62	2.72	8	1
1:A:123:HIS:CD2	1:A:123:HIS:O	0.62	2.52	20	3
1:A:39:ASP:CG	1:A:123:HIS:CE1	0.62	2.73	16	2
1:A:8:LEU:HD11	1:A:12:PHE:N	0.62	2.09	1	2
1:A:59:LEU:HA	1:A:62:VAL:CG2	0.62	2.25	5	13
1:A:37:TRP:CE3	1:A:40:ASP:CG	0.61	2.73	6	6
1:A:125:LEU:CD1	1:A:127:TRP:CD2	0.61	2.83	12	11
1:A:128:VAL:HG13	1:A:128:VAL:O	0.61	1.96	1	2
1:A:37:TRP:CZ3	1:A:40:ASP:CG	0.61	2.73	5	5
1:A:118:PHE:C	1:A:118:PHE:CD1	0.61	2.71	7	5
1:A:82:ALA:HB1	1:A:86:MET:SD	0.61	2.36	18	6
1:A:56:ALA:HB1	1:A:59:LEU:CD1	0.61	2.25	16	10
1:A:68:LEU:O	1:A:69:HIS:CD2	0.61	2.54	19	8
1:A:133:LEU:O	1:A:133:LEU:CD2	0.61	2.48	7	12
1:A:38:LYS:O	1:A:41:TYR:CD2	0.61	2.53	7	4
1:A:12:PHE:HA	1:A:55:LEU:HD21	0.61	1.71	16	2
1:A:127:TRP:N	1:A:127:TRP:CD1	0.61	2.69	10	9
1:A:10:ASN:O	1:A:11:ASN:C	0.60	2.39	10	20
1:A:30:VAL:HA	1:A:33:LEU:HD13	0.60	1.72	9	1
1:A:37:TRP:CZ3	1:A:40:ASP:OD1	0.60	2.54	1	6
1:A:93:ILE:HG21	1:A:121:GLU:CD	0.60	2.16	16	2
1:A:4:ILE:HD11	1:A:35:ASN:HD21	0.60	1.55	20	1
1:A:97:CYS:O	1:A:101:ALA:N	0.60	2.35	15	20
1:A:37:TRP:CH2	1:A:48:ALA:O	0.60	2.55	4	2
1:A:54:CYS:O	1:A:57:THR:CG2	0.60	2.49	8	18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:122:ILE:O	1:A:125:LEU:N	0.60	2.35	5	20
1:A:41:TYR:CZ	1:A:42:VAL:CG2	0.60	2.84	2	2
1:A:33:LEU:HD12	1:A:37:TRP:CG	0.60	2.32	3	2
1:A:41:TYR:CD1	1:A:43:MET:CB	0.60	2.84	3	1
1:A:33:LEU:HD23	1:A:37:TRP:CZ3	0.60	2.32	18	1
1:A:35:ASN:O	1:A:36:PHE:CD1	0.60	2.54	15	1
1:A:106:ASP:O	1:A:110:LYS:N	0.59	2.35	20	14
1:A:78:MET:HE2	1:A:79:LYS:HB2	0.59	1.73	3	1
1:A:6:LYS:O	1:A:34:TYR:CE2	0.59	2.54	9	3
1:A:12:PHE:CE1	1:A:55:LEU:HD11	0.59	2.32	8	3
1:A:138:VAL:O	1:A:138:VAL:HG23	0.59	1.97	19	14
1:A:120:LYS:O	1:A:123:HIS:CD2	0.59	2.54	14	3
1:A:36:PHE:CD2	1:A:36:PHE:O	0.59	2.54	4	1
1:A:102:PRO:O	1:A:110:LYS:CE	0.59	2.51	18	10
1:A:90:LEU:CG	1:A:118:PHE:CD1	0.59	2.86	9	1
1:A:68:LEU:HD22	1:A:69:HIS:H	0.59	1.57	14	1
1:A:37:TRP:CD2	1:A:37:TRP:O	0.59	2.56	11	4
1:A:90:LEU:HD11	1:A:118:PHE:CD1	0.59	2.32	15	1
1:A:91:VAL:O	1:A:95:HIS:CG	0.59	2.56	12	20
1:A:4:ILE:HD12	1:A:31:ALA:HB1	0.59	1.73	13	3
1:A:89:GLN:O	1:A:92:ASP:CB	0.59	2.50	3	20
1:A:38:LYS:HB2	1:A:123:HIS:CD2	0.59	2.33	12	1
1:A:4:ILE:HD12	1:A:31:ALA:O	0.58	1.97	8	6
1:A:38:LYS:O	1:A:41:TYR:CD1	0.58	2.56	1	2
1:A:78:MET:HE1	1:A:79:LYS:HB2	0.58	1.76	6	1
1:A:25:LEU:HD13	1:A:25:LEU:C	0.58	2.19	3	19
1:A:102:PRO:O	1:A:110:LYS:CD	0.58	2.50	10	10
1:A:41:TYR:CD1	1:A:43:MET:HB2	0.58	2.33	18	2
1:A:83:ASP:O	1:A:86:MET:N	0.58	2.36	3	8
1:A:33:LEU:HD23	1:A:37:TRP:CE3	0.58	2.33	14	1
1:A:59:LEU:HD11	1:A:70:HIS:HB2	0.58	1.75	14	1
1:A:37:TRP:O	1:A:37:TRP:CG	0.58	2.55	10	9
1:A:16:MET:HE1	1:A:55:LEU:CD1	0.58	2.29	1	1
1:A:35:ASN:O	1:A:36:PHE:CG	0.58	2.57	8	14
1:A:30:VAL:HG11	1:A:51:ALA:CB	0.58	2.29	12	6
1:A:35:ASN:C	1:A:36:PHE:CG	0.58	2.75	5	4
1:A:124:LYS:O	1:A:125:LEU:O	0.58	2.22	1	20
1:A:37:TRP:O	1:A:37:TRP:CD2	0.58	2.57	10	6
1:A:119:LYS:O	1:A:123:HIS:CD2	0.57	2.57	12	1
1:A:39:ASP:CB	1:A:123:HIS:CG	0.57	2.87	19	1
1:A:59:LEU:HD23	1:A:69:HIS:CD2	0.57	2.34	7	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:ALA:CB	1:A:70:HIS:CG	0.57	2.87	14	2
1:A:8:LEU:CD2	1:A:8:LEU:C	0.57	2.72	19	1
1:A:118:PHE:CD1	1:A:118:PHE:C	0.57	2.76	11	12
1:A:25:LEU:HD22	1:A:26:PRO:O	0.57	2.00	7	20
1:A:36:PHE:CD1	1:A:36:PHE:N	0.57	2.70	1	3
1:A:3:GLU:OE2	1:A:34:TYR:CE1	0.57	2.57	11	2
1:A:97:CYS:O	1:A:100:SER:N	0.57	2.38	3	20
1:A:33:LEU:HD21	1:A:48:ALA:CB	0.57	2.29	16	1
1:A:133:LEU:HD12	1:A:140:ALA:HB3	0.57	1.74	6	2
1:A:32:ASP:CG	1:A:37:TRP:CG	0.57	2.78	1	6
1:A:35:ASN:O	1:A:36:PHE:CD2	0.57	2.58	18	6
1:A:16:MET:HE2	1:A:17:ASP:N	0.57	2.14	13	2
1:A:67:ASN:OD1	1:A:68:LEU:HD12	0.57	2.00	19	2
1:A:8:LEU:HD11	1:A:12:PHE:CB	0.57	2.29	19	1
1:A:37:TRP:CG	1:A:37:TRP:O	0.57	2.57	3	1
1:A:52:ILE:O	1:A:55:LEU:CB	0.57	2.53	14	11
1:A:11:ASN:H	1:A:11:ASN:ND2	0.57	1.98	4	2
1:A:33:LEU:HD23	1:A:37:TRP:CH2	0.57	2.33	18	1
1:A:12:PHE:CD2	1:A:55:LEU:CD1	0.56	2.79	10	1
1:A:51:ALA:O	1:A:54:CYS:SG	0.56	2.63	16	4
1:A:37:TRP:C	1:A:37:TRP:CD2	0.56	2.79	12	9
1:A:83:ASP:O	1:A:86:MET:CG	0.56	2.54	4	1
1:A:112:ILE:HD11	1:A:116:MET:SD	0.56	2.40	7	5
1:A:39:ASP:HB3	1:A:123:HIS:CD2	0.56	2.35	20	3
1:A:12:PHE:CE2	1:A:34:TYR:CZ	0.56	2.94	15	1
1:A:125:LEU:CD1	1:A:127:TRP:CE2	0.56	2.85	9	2
1:A:133:LEU:O	1:A:133:LEU:CD1	0.56	2.53	7	11
1:A:41:TYR:CG	1:A:42:VAL:N	0.56	2.73	6	5
1:A:49:GLY:O	1:A:52:ILE:HG22	0.56	2.01	18	4
1:A:41:TYR:CE2	1:A:42:VAL:HG22	0.56	2.36	20	2
1:A:12:PHE:CD2	1:A:16:MET:HE1	0.56	2.35	7	2
1:A:11:ASN:ND2	1:A:12:PHE:CD2	0.56	2.74	17	1
1:A:4:ILE:HD11	1:A:35:ASN:ND2	0.56	2.14	20	1
1:A:56:ALA:O	1:A:58:LYS:N	0.56	2.39	2	19
1:A:91:VAL:O	1:A:95:HIS:CD2	0.56	2.58	14	17
1:A:78:MET:O	1:A:78:MET:CG	0.56	2.54	3	6
1:A:12:PHE:O	1:A:16:MET:HE3	0.56	2.00	4	1
1:A:16:MET:CE	1:A:55:LEU:CD1	0.56	2.84	1	1
1:A:12:PHE:CE2	1:A:16:MET:SD	0.55	2.99	1	1
1:A:54:CYS:O	1:A:57:THR:CB	0.55	2.54	8	17
1:A:19:CYS:HB3	1:A:23:LEU:HD12	0.55	1.77	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:ALA:HB1	1:A:86:MET:CB	0.55	2.32	3	2
1:A:38:LYS:O	1:A:41:TYR:CZ	0.55	2.58	10	1
1:A:35:ASN:ND2	1:A:35:ASN:N	0.55	2.54	20	1
1:A:35:ASN:O	1:A:36:PHE:CB	0.55	2.54	18	11
1:A:78:MET:N	1:A:78:MET:SD	0.55	2.80	8	7
1:A:8:LEU:CD1	1:A:9:SER:N	0.55	2.70	15	1
1:A:12:PHE:CE2	1:A:55:LEU:HD11	0.55	2.36	20	1
1:A:45:ASP:OD2	1:A:47:LEU:HD23	0.55	2.00	4	1
1:A:68:LEU:HD13	1:A:68:LEU:O	0.55	2.01	18	20
1:A:118:PHE:CD1	1:A:118:PHE:O	0.55	2.60	9	15
1:A:112:ILE:O	1:A:116:MET:N	0.55	2.40	11	17
1:A:33:LEU:C	1:A:33:LEU:CD2	0.55	2.75	4	4
1:A:112:ILE:O	1:A:116:MET:CB	0.55	2.55	11	1
1:A:68:LEU:HB2	1:A:77:ALA:HB2	0.55	1.77	3	7
1:A:37:TRP:O	1:A:40:ASP:CB	0.55	2.54	8	1
1:A:78:MET:O	1:A:78:MET:CE	0.55	2.54	17	5
1:A:89:GLN:O	1:A:92:ASP:N	0.54	2.36	17	20
1:A:75:ASP:CA	1:A:78:MET:HE1	0.54	2.31	3	1
1:A:16:MET:CE	1:A:17:ASP:N	0.54	2.70	10	2
1:A:8:LEU:HD13	1:A:11:ASN:ND2	0.54	2.17	15	1
1:A:91:VAL:O	1:A:95:HIS:HB2	0.54	2.02	11	16
1:A:42:VAL:HG21	1:A:109:MET:HE3	0.54	1.80	3	1
1:A:23:LEU:HD13	1:A:50:CYS:HB3	0.54	1.77	3	3
1:A:33:LEU:HG	1:A:37:TRP:CZ3	0.54	2.37	14	4
1:A:123:HIS:CD2	1:A:129:PRO:HG3	0.54	2.38	9	1
1:A:3:GLU:OE2	1:A:34:TYR:CZ	0.54	2.59	18	1
1:A:37:TRP:CE3	1:A:40:ASP:CB	0.54	2.90	6	5
1:A:16:MET:HE1	1:A:55:LEU:HD11	0.54	1.79	3	1
1:A:116:MET:O	1:A:120:LYS:N	0.54	2.37	10	12
1:A:90:LEU:HG	1:A:118:PHE:CD1	0.54	2.37	9	2
1:A:101:ALA:CB	1:A:114:VAL:HG22	0.54	2.33	8	16
1:A:37:TRP:CD1	1:A:48:ALA:HB1	0.54	2.38	14	1
1:A:41:TYR:CE2	1:A:120:LYS:HG3	0.54	2.37	17	1
1:A:38:LYS:O	1:A:123:HIS:CD2	0.54	2.60	8	1
1:A:29:VAL:O	1:A:37:TRP:CZ3	0.54	2.61	9	1
1:A:8:LEU:HD23	1:A:9:SER:N	0.54	2.17	9	6
1:A:33:LEU:CD1	1:A:33:LEU:N	0.54	2.71	3	2
1:A:122:ILE:N	1:A:122:ILE:CD1	0.54	2.71	17	5
1:A:37:TRP:CD2	1:A:116:MET:CE	0.54	2.90	16	1
1:A:4:ILE:HD11	1:A:35:ASN:OD1	0.54	2.02	4	2
1:A:38:LYS:HG2	1:A:123:HIS:CE1	0.54	2.38	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:37:TRP:CZ2	1:A:48:ALA:HB3	0.54	2.37	9	1
1:A:16:MET:SD	1:A:30:VAL:CG2	0.53	2.96	17	1
1:A:90:LEU:HA	1:A:93:ILE:CD1	0.53	2.33	11	20
1:A:29:VAL:O	1:A:37:TRP:CE3	0.53	2.61	9	1
1:A:94:ILE:O	1:A:98:GLU:CB	0.53	2.56	6	17
1:A:12:PHE:CD1	1:A:55:LEU:HD21	0.53	2.38	18	6
1:A:58:LYS:HG2	1:A:61:VAL:HG13	0.53	1.78	3	1
1:A:90:LEU:HD12	1:A:121:GLU:OE1	0.53	2.03	3	2
1:A:56:ALA:HB2	1:A:70:HIS:CG	0.53	2.39	14	7
1:A:34:TYR:N	1:A:34:TYR:CD1	0.53	2.74	15	1
1:A:16:MET:SD	1:A:30:VAL:HG11	0.53	2.43	16	1
1:A:41:TYR:CE2	1:A:120:LYS:HD2	0.53	2.39	1	1
1:A:46:ARG:CG	1:A:47:LEU:HD13	0.53	2.31	14	1
1:A:41:TYR:O	1:A:43:MET:N	0.53	2.41	15	18
1:A:120:LYS:HA	1:A:123:HIS:CD2	0.53	2.39	8	1
1:A:37:TRP:CE2	1:A:40:ASP:CG	0.53	2.82	9	1
1:A:41:TYR:CE2	1:A:120:LYS:CG	0.53	2.92	17	1
1:A:19:CYS:HB3	1:A:25:LEU:HD11	0.53	1.79	20	1
1:A:4:ILE:CD1	1:A:31:ALA:O	0.52	2.57	16	9
1:A:133:LEU:H	1:A:140:ALA:HB3	0.52	1.64	8	1
1:A:33:LEU:HG	1:A:37:TRP:CZ2	0.52	2.39	4	2
1:A:38:LYS:CG	1:A:123:HIS:CE1	0.52	2.92	8	1
1:A:39:ASP:HB2	1:A:123:HIS:CD2	0.52	2.39	7	7
1:A:47:LEU:HD13	1:A:47:LEU:N	0.52	2.19	12	15
1:A:25:LEU:HD21	1:A:30:VAL:HG13	0.52	1.81	8	3
1:A:12:PHE:O	1:A:16:MET:CE	0.52	2.57	4	2
1:A:33:LEU:HD13	1:A:37:TRP:CE2	0.52	2.39	13	1
1:A:29:VAL:O	1:A:37:TRP:CZ2	0.52	2.63	7	3
1:A:16:MET:CE	1:A:55:LEU:HD23	0.52	2.35	16	2
1:A:78:MET:O	1:A:86:MET:CE	0.52	2.58	6	4
1:A:138:VAL:O	1:A:138:VAL:CG1	0.52	2.58	15	3
1:A:41:TYR:CD1	1:A:116:MET:HG3	0.52	2.39	10	2
1:A:33:LEU:CD2	1:A:33:LEU:C	0.52	2.77	14	1
1:A:58:LYS:O	1:A:61:VAL:CG2	0.52	2.57	7	8
1:A:41:TYR:CE1	1:A:43:MET:HB3	0.52	2.40	3	1
1:A:132:ASP:O	1:A:140:ALA:HB1	0.52	2.05	13	2
1:A:82:ALA:HB1	1:A:86:MET:CE	0.52	2.35	20	3
1:A:125:LEU:N	1:A:125:LEU:CD1	0.52	2.71	11	15
1:A:33:LEU:HD12	1:A:37:TRP:NE1	0.52	2.20	6	1
1:A:125:LEU:HD13	1:A:127:TRP:H	0.52	1.64	2	4
1:A:78:MET:O	1:A:86:MET:HE3	0.52	2.05	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:ASN:C	1:A:12:PHE:N	0.51	2.62	1	20
1:A:106:ASP:O	1:A:109:MET:N	0.51	2.43	17	20
1:A:135:ILE:HD13	1:A:135:ILE:N	0.51	2.20	8	20
1:A:37:TRP:CZ3	1:A:48:ALA:HB1	0.51	2.39	4	2
1:A:93:ILE:HD11	1:A:121:GLU:OE2	0.51	2.05	5	2
1:A:125:LEU:HD13	1:A:126:ASN:H	0.51	1.65	3	15
1:A:32:ASP:OD2	1:A:37:TRP:CG	0.51	2.63	6	3
1:A:12:PHE:HE1	1:A:55:LEU:HD21	0.51	1.65	8	2
1:A:78:MET:C	1:A:82:ALA:HB3	0.51	2.26	9	5
1:A:41:TYR:CE2	1:A:120:LYS:HA	0.51	2.41	10	1
1:A:19:CYS:O	1:A:25:LEU:HD12	0.51	2.06	4	16
1:A:37:TRP:CD1	1:A:40:ASP:HB3	0.51	2.41	12	6
1:A:39:ASP:CB	1:A:123:HIS:CE1	0.51	2.93	16	1
1:A:37:TRP:CE3	1:A:40:ASP:HB3	0.51	2.40	1	6
1:A:33:LEU:HD12	1:A:37:TRP:CD2	0.51	2.41	19	2
1:A:123:HIS:CE1	1:A:129:PRO:HB3	0.51	2.41	16	5
1:A:139:LEU:HD23	1:A:140:ALA:N	0.51	2.21	9	1
1:A:13:GLY:O	1:A:16:MET:CE	0.51	2.58	10	2
1:A:3:GLU:CD	1:A:34:TYR:CE1	0.51	2.84	11	1
1:A:93:ILE:HD13	1:A:94:ILE:H	0.51	1.66	7	17
1:A:37:TRP:CD1	1:A:37:TRP:O	0.51	2.64	9	1
1:A:138:VAL:O	1:A:139:LEU:HD23	0.51	2.06	17	1
1:A:123:HIS:CE1	1:A:129:PRO:HG3	0.51	2.41	16	3
1:A:32:ASP:C	1:A:37:TRP:CD1	0.51	2.84	6	6
1:A:12:PHE:CE2	1:A:34:TYR:OH	0.51	2.57	3	1
1:A:51:ALA:HA	1:A:54:CYS:SG	0.51	2.46	3	4
1:A:78:MET:HE2	1:A:79:LYS:CB	0.51	2.36	3	1
1:A:32:ASP:OD2	1:A:37:TRP:CD2	0.51	2.63	15	4
1:A:59:LEU:O	1:A:63:ASP:N	0.51	2.38	10	14
1:A:12:PHE:CE1	1:A:16:MET:SD	0.51	3.04	6	1
1:A:33:LEU:C	1:A:33:LEU:HD22	0.51	2.26	11	3
1:A:90:LEU:CD1	1:A:121:GLU:OE2	0.50	2.59	5	1
1:A:86:MET:CE	1:A:118:PHE:CZ	0.50	2.95	12	1
1:A:33:LEU:HD13	1:A:37:TRP:CZ2	0.50	2.40	13	1
1:A:8:LEU:HD22	1:A:11:ASN:CB	0.50	2.34	14	3
1:A:132:ASP:O	1:A:133:LEU:C	0.50	2.49	18	3
1:A:112:ILE:HA	1:A:115:ALA:HB3	0.50	1.83	7	5
1:A:90:LEU:HD22	1:A:118:PHE:CD1	0.50	2.42	7	1
1:A:33:LEU:CD1	1:A:37:TRP:NE1	0.50	2.74	13	1
1:A:90:LEU:HD21	1:A:118:PHE:CG	0.50	2.41	14	3
1:A:93:ILE:CG1	1:A:117:CYS:SG	0.50	3.00	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:37:TRP:CG	1:A:116:MET:HE2	0.50	2.41	16	1
1:A:101:ALA:HB3	1:A:114:VAL:HG22	0.50	1.84	5	9
1:A:33:LEU:HG	1:A:37:TRP:CH2	0.50	2.41	14	3
1:A:73:ALA:HB1	1:A:77:ALA:HB3	0.50	1.83	3	4
1:A:102:PRO:O	1:A:110:LYS:CG	0.50	2.60	13	6
1:A:12:PHE:CD2	1:A:16:MET:HE3	0.50	2.41	7	3
1:A:77:ALA:HA	1:A:80:HIS:CE1	0.50	2.41	20	5
1:A:30:VAL:HG11	1:A:51:ALA:HB3	0.50	1.84	9	1
1:A:106:ASP:C	1:A:108:CYS:N	0.50	2.65	13	20
1:A:70:HIS:CD2	1:A:70:HIS:O	0.50	2.65	8	1
1:A:132:ASP:O	1:A:140:ALA:CB	0.50	2.60	13	1
1:A:39:ASP:HB3	1:A:123:HIS:CE1	0.50	2.42	9	1
1:A:27:ASP:O	1:A:30:VAL:HG22	0.50	2.06	17	1
1:A:41:TYR:CE1	1:A:43:MET:HB2	0.50	2.42	18	1
1:A:75:ASP:O	1:A:78:MET:HE1	0.50	2.06	19	1
1:A:11:ASN:OD1	1:A:11:ASN:N	0.49	2.45	7	5
1:A:33:LEU:CD1	1:A:37:TRP:CD2	0.49	2.95	3	2
1:A:83:ASP:O	1:A:86:MET:SD	0.49	2.70	3	4
1:A:8:LEU:O	1:A:9:SER:O	0.49	2.29	1	7
1:A:75:ASP:HA	1:A:78:MET:CE	0.49	2.38	18	13
1:A:93:ILE:HG12	1:A:94:ILE:N	0.49	2.22	3	20
1:A:133:LEU:CD1	1:A:142:VAL:C	0.49	2.80	8	1
1:A:6:LYS:O	1:A:34:TYR:CD2	0.49	2.65	9	1
1:A:78:MET:O	1:A:78:MET:SD	0.49	2.70	17	13
1:A:122:ILE:C	1:A:124:LYS:N	0.49	2.66	20	20
1:A:33:LEU:HD23	1:A:52:ILE:HG12	0.49	1.83	19	1
1:A:38:LYS:O	1:A:41:TYR:CE1	0.49	2.65	1	2
1:A:41:TYR:O	1:A:42:VAL:C	0.49	2.50	15	12
1:A:37:TRP:CE3	1:A:48:ALA:HB1	0.49	2.42	4	2
1:A:33:LEU:HA	1:A:37:TRP:CE3	0.49	2.42	10	3
1:A:86:MET:HE1	1:A:118:PHE:CZ	0.49	2.43	12	1
1:A:20:LYS:CG	1:A:25:LEU:O	0.49	2.60	7	18
1:A:46:ARG:CD	1:A:47:LEU:HD13	0.49	2.35	18	5
1:A:48:ALA:O	1:A:52:ILE:HG22	0.49	2.08	9	1
1:A:138:VAL:O	1:A:139:LEU:CD2	0.49	2.61	17	1
1:A:35:ASN:ND2	1:A:35:ASN:H	0.49	2.05	20	1
1:A:39:ASP:O	1:A:41:TYR:CE1	0.49	2.66	8	1
1:A:12:PHE:CG	1:A:16:MET:CE	0.49	2.95	15	1
1:A:86:MET:SD	1:A:90:LEU:HD12	0.49	2.48	17	2
1:A:106:ASP:O	1:A:108:CYS:N	0.49	2.46	12	20
1:A:25:LEU:CD2	1:A:29:VAL:CG2	0.49	2.91	17	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:121:GLU:O	1:A:124:LYS:CG	0.49	2.60	15	3
1:A:33:LEU:HB2	1:A:37:TRP:CE2	0.49	2.42	13	2
1:A:39:ASP:O	1:A:41:TYR:CD1	0.49	2.65	8	1
1:A:134:VAL:CG1	1:A:135:ILE:HD13	0.49	2.23	20	1
1:A:91:VAL:O	1:A:95:HIS:CB	0.49	2.61	11	6
1:A:75:ASP:O	1:A:78:MET:CE	0.49	2.60	19	4
1:A:4:ILE:N	1:A:4:ILE:HD13	0.49	2.23	15	10
1:A:133:LEU:HG	1:A:142:VAL:HG23	0.49	1.85	5	1
1:A:123:HIS:O	1:A:123:HIS:ND1	0.49	2.46	13	4
1:A:8:LEU:HD13	1:A:8:LEU:C	0.49	2.27	10	1
1:A:3:GLU:CD	1:A:34:TYR:CZ	0.49	2.86	11	1
1:A:33:LEU:HB2	1:A:37:TRP:CZ2	0.48	2.42	4	1
1:A:3:GLU:HB3	1:A:34:TYR:CD2	0.48	2.43	6	1
1:A:125:LEU:HD11	1:A:127:TRP:CE3	0.48	2.43	12	6
1:A:19:CYS:O	1:A:23:LEU:N	0.48	2.46	8	2
1:A:19:CYS:O	1:A:23:LEU:HB2	0.48	2.08	20	2
1:A:73:ALA:HB1	1:A:77:ALA:CB	0.48	2.38	15	2
1:A:75:ASP:C	1:A:78:MET:CE	0.48	2.82	15	2
1:A:82:ALA:CB	1:A:86:MET:SD	0.48	3.01	1	2
1:A:114:VAL:C	1:A:116:MET:N	0.48	2.66	8	16
1:A:37:TRP:CD2	1:A:37:TRP:C	0.48	2.86	11	1
1:A:123:HIS:CD2	1:A:123:HIS:N	0.48	2.80	12	1
1:A:101:ALA:CB	1:A:114:VAL:CG2	0.48	2.92	20	9
1:A:11:ASN:ND2	1:A:12:PHE:CD1	0.48	2.81	8	1
1:A:55:LEU:O	1:A:55:LEU:CD1	0.48	2.60	12	1
1:A:29:VAL:HG21	1:A:45:ASP:OD2	0.48	2.09	1	3
1:A:33:LEU:O	1:A:33:LEU:CD2	0.48	2.60	8	2
1:A:107:LYS:O	1:A:111:THR:CB	0.48	2.61	8	2
1:A:37:TRP:CE2	1:A:40:ASP:OD1	0.48	2.66	9	1
1:A:46:ARG:HG3	1:A:47:LEU:N	0.48	2.21	14	2
1:A:123:HIS:O	1:A:123:HIS:CD2	0.48	2.66	16	1
1:A:33:LEU:HD13	1:A:37:TRP:CE3	0.48	2.41	20	1
1:A:41:TYR:CE1	1:A:120:LYS:HG2	0.48	2.43	1	1
1:A:37:TRP:O	1:A:40:ASP:N	0.48	2.46	15	11
1:A:119:LYS:O	1:A:123:HIS:CE1	0.48	2.67	8	1
1:A:38:LYS:O	1:A:123:HIS:CE1	0.48	2.67	12	1
1:A:46:ARG:O	1:A:49:GLY:N	0.48	2.45	2	18
1:A:53:ASN:HA	1:A:70:HIS:CE1	0.48	2.44	1	3
1:A:13:GLY:O	1:A:16:MET:HE2	0.48	2.08	10	1
1:A:16:MET:SD	1:A:30:VAL:HG23	0.48	2.49	17	1
1:A:20:LYS:O	1:A:24:SER:HA	0.48	2.09	18	18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:88:GLN:C	1:A:88:GLN:CD	0.48	2.72	15	2
1:A:39:ASP:HB2	1:A:123:HIS:CG	0.48	2.43	19	2
1:A:75:ASP:O	1:A:79:LYS:CB	0.48	2.62	7	12
1:A:86:MET:HG3	1:A:90:LEU:HD22	0.48	1.86	1	1
1:A:16:MET:HA	1:A:16:MET:CE	0.48	2.39	11	6
1:A:123:HIS:CD2	1:A:123:HIS:H	0.48	2.27	12	1
1:A:132:ASP:O	1:A:134:VAL:N	0.48	2.47	12	1
1:A:16:MET:SD	1:A:30:VAL:CG1	0.48	3.02	16	2
1:A:8:LEU:HD11	1:A:12:PHE:CD1	0.48	2.44	20	1
1:A:132:ASP:CB	1:A:141:GLU:N	0.48	2.77	20	1
1:A:15:ALA:O	1:A:19:CYS:SG	0.47	2.71	8	7
1:A:82:ALA:CB	1:A:86:MET:HG2	0.47	2.39	11	5
1:A:41:TYR:HH	1:A:123:HIS:CE1	0.47	2.26	5	1
1:A:112:ILE:C	1:A:112:ILE:HD13	0.47	2.29	8	3
1:A:41:TYR:CD1	1:A:116:MET:HB2	0.47	2.44	17	1
1:A:56:ALA:O	1:A:59:LEU:CD2	0.47	2.59	15	5
1:A:58:LYS:CG	1:A:61:VAL:HG13	0.47	2.39	14	1
1:A:33:LEU:CD2	1:A:37:TRP:CZ2	0.47	2.96	18	1
1:A:23:LEU:C	1:A:25:LEU:N	0.47	2.67	8	20
1:A:42:VAL:O	1:A:44:THR:N	0.47	2.48	3	17
1:A:3:GLU:HB3	1:A:34:TYR:CD1	0.47	2.45	5	3
1:A:19:CYS:SG	1:A:51:ALA:HA	0.47	2.49	8	1
1:A:33:LEU:CD2	1:A:33:LEU:O	0.47	2.62	10	3
1:A:25:LEU:HD22	1:A:26:PRO:N	0.47	2.24	1	20
1:A:57:THR:HG23	1:A:58:LYS:H	0.47	1.67	8	12
1:A:133:LEU:N	1:A:140:ALA:CB	0.47	2.76	5	2
1:A:16:MET:HA	1:A:16:MET:HE2	0.47	1.86	6	4
1:A:126:ASN:O	1:A:126:ASN:ND2	0.47	2.48	11	7
1:A:12:PHE:CE2	1:A:55:LEU:CD2	0.47	2.98	10	1
1:A:104:ASN:CB	1:A:106:ASP:OD1	0.47	2.63	11	1
1:A:15:ALA:HB3	1:A:55:LEU:CD2	0.47	2.39	19	1
1:A:7:ASN:ND2	1:A:8:LEU:O	0.47	2.47	4	13
1:A:129:PRO:C	1:A:131:MET:N	0.47	2.68	12	15
1:A:127:TRP:CD1	1:A:127:TRP:N	0.47	2.83	15	5
1:A:3:GLU:HG3	1:A:34:TYR:CD1	0.47	2.45	11	2
1:A:41:TYR:CG	1:A:116:MET:HG3	0.47	2.45	15	1
1:A:16:MET:CE	1:A:55:LEU:HD11	0.47	2.39	3	1
1:A:37:TRP:C	1:A:37:TRP:CD1	0.47	2.88	13	2
1:A:68:LEU:O	1:A:69:HIS:ND1	0.47	2.47	12	3
1:A:39:ASP:HB3	1:A:123:HIS:CG	0.47	2.44	9	1
1:A:33:LEU:HD13	1:A:37:TRP:NE1	0.47	2.24	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:ASP:HB2	1:A:123:HIS:CE1	0.47	2.44	16	2
1:A:31:ALA:HA	1:A:34:TYR:CE2	0.47	2.45	15	1
1:A:37:TRP:NE1	1:A:40:ASP:O	0.47	2.48	9	2
1:A:123:HIS:CD2	1:A:129:PRO:CG	0.47	2.97	9	1
1:A:8:LEU:HD12	1:A:8:LEU:C	0.47	2.29	15	1
1:A:11:ASN:OD1	1:A:62:VAL:CG2	0.47	2.63	1	1
1:A:27:ASP:HA	1:A:30:VAL:HG12	0.47	1.87	5	3
1:A:23:LEU:HD11	1:A:51:ALA:HA	0.47	1.87	9	1
1:A:88:GLN:NE2	1:A:88:GLN:O	0.47	2.48	15	2
1:A:68:LEU:CD2	1:A:69:HIS:N	0.47	2.71	14	1
1:A:68:LEU:HD13	1:A:69:HIS:N	0.47	2.24	8	11
1:A:89:GLN:O	1:A:92:ASP:CG	0.47	2.53	7	8
1:A:125:LEU:CD1	1:A:127:TRP:CG	0.47	2.97	12	7
1:A:78:MET:CB	1:A:118:PHE:CE2	0.47	2.98	15	1
1:A:41:TYR:C	1:A:43:MET:N	0.46	2.68	9	18
1:A:16:MET:HG3	1:A:30:VAL:HG11	0.46	1.87	3	1
1:A:41:TYR:CD1	1:A:43:MET:HB3	0.46	2.44	3	1
1:A:90:LEU:O	1:A:94:ILE:CG1	0.46	2.64	11	1
1:A:33:LEU:CD2	1:A:37:TRP:CE3	0.46	2.98	14	1
1:A:78:MET:HB2	1:A:118:PHE:CE2	0.46	2.45	15	1
1:A:11:ASN:ND2	1:A:11:ASN:N	0.46	2.58	4	1
1:A:32:ASP:CG	1:A:37:TRP:CD1	0.46	2.88	17	2
1:A:8:LEU:CD1	1:A:11:ASN:HB3	0.46	2.40	6	1
1:A:8:LEU:CD1	1:A:12:PHE:HB2	0.46	2.39	10	1
1:A:90:LEU:CD2	1:A:118:PHE:CG	0.46	2.99	11	1
1:A:16:MET:HG3	1:A:30:VAL:HG21	0.46	1.87	12	1
1:A:78:MET:HB2	1:A:118:PHE:CZ	0.46	2.46	15	2
1:A:52:ILE:CD1	1:A:55:LEU:HD22	0.46	2.41	3	1
1:A:30:VAL:CG1	1:A:51:ALA:CB	0.46	2.94	12	1
1:A:16:MET:SD	1:A:16:MET:N	0.46	2.89	19	1
1:A:30:VAL:CG1	1:A:51:ALA:HB3	0.46	2.40	19	1
1:A:112:ILE:HD13	1:A:112:ILE:C	0.46	2.31	1	16
1:A:25:LEU:CB	1:A:47:LEU:HB3	0.46	2.40	2	8
1:A:112:ILE:CD1	1:A:116:MET:CG	0.46	2.94	2	3
1:A:86:MET:SD	1:A:87:ALA:N	0.46	2.88	15	4
1:A:12:PHE:CD2	1:A:34:TYR:OH	0.46	2.63	8	1
1:A:86:MET:HE2	1:A:118:PHE:CE1	0.46	2.44	12	1
1:A:52:ILE:CD1	1:A:52:ILE:O	0.46	2.63	18	1
1:A:18:GLN:O	1:A:22:GLU:CD	0.46	2.54	10	12
1:A:95:HIS:O	1:A:99:LYS:CE	0.46	2.63	11	1
1:A:56:ALA:HB1	1:A:59:LEU:HD11	0.46	1.88	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:SER:OG	1:A:138:VAL:HG21	0.46	2.10	18	2
1:A:8:LEU:CD1	1:A:11:ASN:HB2	0.46	2.40	16	2
1:A:8:LEU:HD23	1:A:9:SER:H	0.46	1.71	9	1
1:A:88:GLN:NE2	1:A:89:GLN:OE1	0.46	2.48	9	4
1:A:78:MET:O	1:A:82:ALA:HB3	0.46	2.10	15	1
1:A:49:GLY:CA	1:A:112:ILE:HG13	0.46	2.40	4	7
1:A:82:ALA:CB	1:A:86:MET:HG3	0.46	2.41	3	3
1:A:90:LEU:O	1:A:94:ILE:HB	0.46	2.11	3	6
1:A:33:LEU:HD22	1:A:37:TRP:NE1	0.46	2.24	16	1
1:A:41:TYR:CE1	1:A:120:LYS:HB2	0.46	2.45	5	1
1:A:54:CYS:C	1:A:56:ALA:N	0.46	2.69	16	3
1:A:11:ASN:HB3	1:A:61:VAL:HG21	0.46	1.87	16	1
1:A:3:GLU:HB3	1:A:34:TYR:CG	0.46	2.46	11	3
1:A:90:LEU:O	1:A:94:ILE:N	0.46	2.46	19	10
1:A:12:PHE:C	1:A:16:MET:SD	0.46	2.94	20	2
1:A:49:GLY:O	1:A:52:ILE:CG2	0.46	2.64	4	1
1:A:23:LEU:CD1	1:A:51:ALA:HA	0.46	2.41	9	3
1:A:76:PHE:O	1:A:80:HIS:ND1	0.46	2.49	19	2
1:A:123:HIS:C	1:A:123:HIS:ND1	0.46	2.69	14	1
1:A:11:ASN:C	1:A:11:ASN:ND2	0.45	2.69	1	1
1:A:123:HIS:CD2	1:A:123:HIS:C	0.45	2.88	2	3
1:A:11:ASN:HB3	1:A:61:VAL:CG2	0.45	2.42	16	2
1:A:12:PHE:O	1:A:15:ALA:N	0.45	2.49	20	1
1:A:35:ASN:C	1:A:36:PHE:CD2	0.45	2.89	14	3
1:A:129:PRO:O	1:A:131:MET:N	0.45	2.50	12	10
1:A:86:MET:O	1:A:90:LEU:HD13	0.45	2.12	12	3
1:A:56:ALA:HB1	1:A:70:HIS:HB2	0.45	1.88	14	1
1:A:8:LEU:HD21	1:A:12:PHE:CB	0.45	2.41	19	1
1:A:60:ASP:N	1:A:60:ASP:OD1	0.45	2.49	2	1
1:A:67:ASN:O	1:A:67:ASN:ND2	0.45	2.50	9	4
1:A:63:ASP:O	1:A:63:ASP:OD1	0.45	2.34	14	4
1:A:53:ASN:CG	1:A:70:HIS:CE1	0.45	2.89	15	1
1:A:11:ASN:ND2	1:A:61:VAL:C	0.45	2.69	5	1
1:A:116:MET:O	1:A:119:LYS:N	0.45	2.49	8	1
1:A:95:HIS:O	1:A:99:LYS:CG	0.45	2.65	9	1
1:A:56:ALA:CB	1:A:70:HIS:HB2	0.45	2.42	5	3
1:A:122:ILE:O	1:A:124:LYS:N	0.45	2.50	13	5
1:A:25:LEU:HD21	1:A:30:VAL:CG1	0.45	2.42	12	2
1:A:138:VAL:O	1:A:138:VAL:CG2	0.45	2.64	19	9
1:A:27:ASP:HA	1:A:30:VAL:HG22	0.45	1.89	11	3
1:A:78:MET:CE	1:A:79:LYS:HB2	0.45	2.41	13	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:54:CYS:O	1:A:57:THR:HB	0.45	2.12	8	14
1:A:41:TYR:OH	1:A:123:HIS:CE1	0.45	2.70	5	1
1:A:41:TYR:CD1	1:A:42:VAL:N	0.45	2.85	13	1
1:A:42:VAL:C	1:A:44:THR:N	0.45	2.70	5	19
1:A:114:VAL:O	1:A:116:MET:N	0.45	2.50	8	1
1:A:119:LYS:O	1:A:123:HIS:ND1	0.45	2.50	8	1
1:A:37:TRP:CE3	1:A:38:LYS:N	0.45	2.85	18	7
1:A:90:LEU:C	1:A:92:ASP:N	0.45	2.70	15	10
1:A:23:LEU:HD21	1:A:50:CYS:SG	0.45	2.51	3	1
1:A:19:CYS:N	1:A:22:GLU:OE2	0.45	2.49	5	2
1:A:12:PHE:CD1	1:A:16:MET:SD	0.45	3.10	6	1
1:A:27:ASP:HA	1:A:30:VAL:CG2	0.45	2.42	9	2
1:A:49:GLY:O	1:A:112:ILE:CG1	0.45	2.66	20	1
1:A:59:LEU:HA	1:A:62:VAL:HG23	0.44	1.88	5	10
1:A:104:ASN:O	1:A:107:LYS:N	0.44	2.50	9	1
1:A:31:ALA:HA	1:A:34:TYR:CD2	0.44	2.47	13	1
1:A:41:TYR:HH	1:A:113:ASP:CG	0.44	2.14	13	1
1:A:37:TRP:NE1	1:A:48:ALA:HB1	0.44	2.27	14	1
1:A:18:GLN:O	1:A:22:GLU:HG2	0.44	2.12	13	4
1:A:19:CYS:O	1:A:24:SER:N	0.44	2.50	8	1
1:A:19:CYS:SG	1:A:51:ALA:CA	0.44	3.05	8	1
1:A:83:ASP:N	1:A:83:ASP:OD1	0.44	2.50	8	2
1:A:38:LYS:O	1:A:116:MET:CE	0.44	2.66	20	1
1:A:58:LYS:O	1:A:61:VAL:HG13	0.44	2.13	10	1
1:A:16:MET:HE1	1:A:55:LEU:HD23	0.44	1.88	12	1
1:A:32:ASP:O	1:A:35:ASN:OD1	0.44	2.36	20	1
1:A:33:LEU:CD1	1:A:37:TRP:CZ3	0.44	2.98	2	1
1:A:33:LEU:HG	1:A:37:TRP:CE2	0.44	2.46	3	1
1:A:77:ALA:O	1:A:80:HIS:ND1	0.44	2.50	3	1
1:A:13:GLY:HA2	1:A:16:MET:SD	0.44	2.53	4	1
1:A:131:MET:O	1:A:131:MET:CG	0.44	2.65	9	1
1:A:12:PHE:CG	1:A:16:MET:HE3	0.44	2.48	15	1
1:A:138:VAL:O	1:A:138:VAL:HG12	0.44	2.12	15	2
1:A:27:ASP:O	1:A:27:ASP:OD1	0.44	2.36	17	1
1:A:90:LEU:CD2	1:A:118:PHE:CE1	0.44	2.87	20	1
1:A:8:LEU:C	1:A:8:LEU:HD12	0.44	2.32	1	1
1:A:93:ILE:O	1:A:96:GLY:N	0.44	2.50	3	13
1:A:120:LYS:HA	1:A:123:HIS:CE1	0.44	2.47	12	1
1:A:86:MET:SD	1:A:86:MET:C	0.44	2.95	12	6
1:A:58:LYS:HB3	1:A:61:VAL:HG13	0.44	1.88	10	2
1:A:32:ASP:HB3	1:A:37:TRP:CE2	0.44	2.48	1	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:59:LEU:O	1:A:63:ASP:CG	0.44	2.56	18	11
1:A:112:ILE:HD11	1:A:116:MET:HG3	0.44	1.89	9	2
1:A:54:CYS:O	1:A:56:ALA:N	0.44	2.50	19	3
1:A:134:VAL:HG12	1:A:135:ILE:HD13	0.44	1.89	14	1
1:A:124:LYS:O	1:A:124:LYS:CG	0.44	2.66	5	3
1:A:25:LEU:HD23	1:A:29:VAL:CG2	0.44	2.43	20	2
1:A:90:LEU:O	1:A:94:ILE:CB	0.44	2.66	11	2
1:A:35:ASN:HB3	1:A:36:PHE:CD1	0.44	2.48	10	1
1:A:37:TRP:CE2	1:A:48:ALA:HB1	0.44	2.48	11	1
1:A:35:ASN:O	1:A:36:PHE:HB3	0.44	2.13	4	2
1:A:10:ASN:CB	1:A:14:LYS:HB2	0.44	2.43	8	4
1:A:42:VAL:HG21	1:A:109:MET:CE	0.44	2.42	3	1
1:A:132:ASP:C	1:A:140:ALA:HB1	0.44	2.33	3	3
1:A:41:TYR:OH	1:A:113:ASP:CG	0.44	2.57	13	3
1:A:11:ASN:ND2	1:A:61:VAL:O	0.44	2.50	11	1
1:A:16:MET:CE	1:A:30:VAL:HG21	0.44	2.42	14	1
1:A:93:ILE:CG1	1:A:94:ILE:N	0.43	2.81	3	20
1:A:126:ASN:O	1:A:126:ASN:CG	0.43	2.56	14	5
1:A:37:TRP:CE2	1:A:40:ASP:O	0.43	2.71	10	1
1:A:74:LYS:HG2	1:A:76:PHE:CE2	0.43	2.48	10	1
1:A:112:ILE:HD13	1:A:112:ILE:O	0.43	2.12	17	1
1:A:8:LEU:C	1:A:8:LEU:HD23	0.43	2.33	19	1
1:A:112:ILE:HD11	1:A:116:MET:CG	0.43	2.44	2	3
1:A:74:LYS:O	1:A:78:MET:SD	0.43	2.76	8	4
1:A:132:ASP:O	1:A:134:VAL:HG13	0.43	2.13	5	1
1:A:59:LEU:O	1:A:63:ASP:OD2	0.43	2.36	14	5
1:A:19:CYS:SG	1:A:51:ALA:O	0.43	2.76	8	5
1:A:120:LYS:O	1:A:123:HIS:ND1	0.43	2.51	17	1
1:A:52:ILE:O	1:A:52:ILE:HD13	0.43	2.13	18	1
1:A:128:VAL:O	1:A:128:VAL:CG1	0.43	2.65	1	1
1:A:83:ASP:O	1:A:85:THR:N	0.43	2.52	3	1
1:A:101:ALA:CB	1:A:114:VAL:HG12	0.43	2.43	7	1
1:A:32:ASP:HB3	1:A:37:TRP:CG	0.43	2.49	10	1
1:A:125:LEU:HD13	1:A:127:TRP:CD1	0.43	2.49	11	1
1:A:88:GLN:O	1:A:91:VAL:N	0.43	2.51	12	1
1:A:56:ALA:CB	1:A:70:HIS:HB3	0.43	2.44	4	3
1:A:89:GLN:O	1:A:92:ASP:HB2	0.43	2.13	5	3
1:A:78:MET:HE1	1:A:79:LYS:CB	0.43	2.43	6	3
1:A:38:LYS:HB3	1:A:123:HIS:CG	0.43	2.49	8	1
1:A:6:LYS:O	1:A:6:LYS:CG	0.43	2.66	13	1
1:A:41:TYR:CZ	1:A:119:LYS:HB3	0.43	2.49	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:MET:CE	1:A:78:MET:O	0.43	2.67	1	4
1:A:116:MET:O	1:A:117:CYS:C	0.43	2.56	17	6
1:A:37:TRP:CG	1:A:40:ASP:HB3	0.43	2.49	9	2
1:A:41:TYR:CE2	1:A:120:LYS:CD	0.43	3.01	1	1
1:A:8:LEU:HD22	1:A:11:ASN:CG	0.43	2.33	2	1
1:A:58:LYS:CB	1:A:61:VAL:HG13	0.43	2.44	13	3
1:A:76:PHE:O	1:A:80:HIS:CD2	0.43	2.72	17	1
1:A:132:ASP:CG	1:A:140:ALA:HB1	0.43	2.34	20	1
1:A:19:CYS:HB2	1:A:25:LEU:HD11	0.43	1.91	8	1
1:A:121:GLU:OE2	1:A:141:GLU:CG	0.43	2.67	8	1
1:A:56:ALA:HB1	1:A:59:LEU:CD2	0.42	2.44	2	1
1:A:86:MET:CA	1:A:90:LEU:HD13	0.42	2.44	3	1
1:A:57:THR:HG23	1:A:58:LYS:N	0.42	2.28	8	1
1:A:30:VAL:HA	1:A:33:LEU:CD1	0.42	2.44	16	1
1:A:113:ASP:O	1:A:116:MET:HG3	0.42	2.13	17	1
1:A:32:ASP:O	1:A:35:ASN:CG	0.42	2.58	20	1
1:A:59:LEU:O	1:A:63:ASP:OD1	0.42	2.36	7	5
1:A:16:MET:HE3	1:A:17:ASP:CA	0.42	2.44	10	1
1:A:19:CYS:HA	1:A:22:GLU:CG	0.42	2.44	16	1
1:A:76:PHE:CD1	1:A:76:PHE:N	0.42	2.87	3	1
1:A:113:ASP:O	1:A:117:CYS:N	0.42	2.50	5	1
1:A:102:PRO:O	1:A:110:LYS:HG3	0.42	2.14	13	3
1:A:67:ASN:ND2	1:A:67:ASN:C	0.42	2.73	11	5
1:A:129:PRO:O	1:A:130:ASN:C	0.42	2.58	10	9
1:A:56:ALA:CB	1:A:70:HIS:CB	0.42	2.97	14	2
1:A:8:LEU:CG	1:A:12:PHE:HB2	0.42	2.44	7	2
1:A:11:ASN:C	1:A:11:ASN:OD1	0.42	2.57	6	1
1:A:11:ASN:ND2	1:A:12:PHE:CE1	0.42	2.87	8	1
1:A:122:ILE:O	1:A:125:LEU:HG	0.42	2.14	17	2
1:A:12:PHE:CA	1:A:16:MET:HE3	0.42	2.44	20	1
1:A:85:THR:O	1:A:89:GLN:N	0.42	2.45	18	3
1:A:12:PHE:CD2	1:A:34:TYR:CE1	0.42	3.08	20	1
1:A:112:ILE:C	1:A:112:ILE:CD1	0.42	2.88	15	4
1:A:27:ASP:OD1	1:A:30:VAL:CG1	0.42	2.67	5	1
1:A:87:ALA:O	1:A:91:VAL:HG23	0.42	2.14	17	3
1:A:99:LYS:HG3	1:A:100:SER:N	0.42	2.29	20	4
1:A:39:ASP:HA	1:A:123:HIS:CG	0.42	2.50	7	2
1:A:23:LEU:O	1:A:25:LEU:N	0.42	2.53	20	2
1:A:15:ALA:O	1:A:19:CYS:CB	0.42	2.68	9	1
1:A:22:GLU:OE2	1:A:54:CYS:SG	0.42	2.78	2	2
1:A:86:MET:HG3	1:A:87:ALA:N	0.42	2.30	17	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:38:LYS:HD3	1:A:123:HIS:CE1	0.42	2.50	8	1
1:A:83:ASP:OD1	1:A:83:ASP:N	0.42	2.53	13	1
1:A:39:ASP:OD1	1:A:123:HIS:CE1	0.42	2.73	15	1
1:A:16:MET:CE	1:A:16:MET:HA	0.42	2.44	16	1
1:A:93:ILE:CD1	1:A:121:GLU:OE2	0.42	2.67	5	2
1:A:112:ILE:O	1:A:113:ASP:C	0.42	2.58	7	2
1:A:142:VAL:HG22	1:A:142:VAL:O	0.42	2.15	10	1
1:A:16:MET:O	1:A:27:ASP:OD2	0.42	2.37	17	1
1:A:86:MET:SD	1:A:90:LEU:CD1	0.42	3.08	17	1
1:A:52:ILE:HD13	1:A:55:LEU:CB	0.42	2.44	14	1
1:A:40:ASP:O	1:A:40:ASP:OD1	0.41	2.38	3	2
1:A:16:MET:HE3	1:A:17:ASP:N	0.41	2.30	10	1
1:A:132:ASP:C	1:A:140:ALA:CB	0.41	2.88	11	1
1:A:58:LYS:C	1:A:60:ASP:N	0.41	2.73	12	1
1:A:52:ILE:O	1:A:55:LEU:HB3	0.41	2.15	16	2
1:A:12:PHE:CD2	1:A:16:MET:HG3	0.41	2.50	16	1
1:A:116:MET:HG3	1:A:117:CYS:N	0.41	2.30	18	2
1:A:39:ASP:HA	1:A:123:HIS:ND1	0.41	2.30	12	1
1:A:18:GLN:C	1:A:22:GLU:OE2	0.41	2.59	5	3
1:A:90:LEU:CD1	1:A:121:GLU:OE1	0.41	2.67	3	1
1:A:97:CYS:SG	1:A:142:VAL:CG2	0.41	3.08	14	1
1:A:4:ILE:HD13	1:A:4:ILE:N	0.41	2.30	17	1
1:A:20:LYS:CD	1:A:27:ASP:HB3	0.41	2.45	20	1
1:A:138:VAL:O	1:A:139:LEU:HD12	0.41	2.15	20	1
1:A:75:ASP:O	1:A:79:LYS:HB3	0.41	2.15	3	1
1:A:37:TRP:CD2	1:A:40:ASP:CG	0.41	2.94	9	1
1:A:48:ALA:O	1:A:52:ILE:CG2	0.41	2.68	9	1
1:A:141:GLU:O	1:A:142:VAL:C	0.41	2.59	13	2
1:A:33:LEU:N	1:A:37:TRP:NE1	0.41	2.68	15	1
1:A:86:MET:O	1:A:90:LEU:HB2	0.41	2.15	8	1
1:A:110:LYS:O	1:A:113:ASP:N	0.41	2.54	8	1
1:A:120:LYS:HA	1:A:123:HIS:CG	0.41	2.50	8	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:26:PRO:HD2	0.41	2.45	17	1
1:A:128:VAL:HG23	1:A:128:VAL:O	0.41	2.16	19	1
1:A:82:ALA:CB	1:A:86:MET:HE3	0.41	2.45	5	1
1:A:133:LEU:N	1:A:133:LEU:CD1	0.41	2.83	6	1
1:A:133:LEU:O	1:A:133:LEU:CG	0.41	2.68	7	1
1:A:86:MET:SD	1:A:90:LEU:CD2	0.41	3.06	8	1
1:A:133:LEU:HA	1:A:140:ALA:HB3	0.41	1.93	11	1
1:A:140:ALA:O	1:A:142:VAL:HG12	0.41	2.15	11	1
1:A:12:PHE:HD1	1:A:55:LEU:HD11	0.41	1.68	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:33:LEU:CG	1:A:37:TRP:CZ3	0.41	3.03	14	1
1:A:35:ASN:HB3	1:A:36:PHE:CD2	0.41	2.50	14	1
1:A:53:ASN:OD1	1:A:70:HIS:NE2	0.41	2.51	15	1
1:A:59:LEU:HD23	1:A:69:HIS:ND1	0.41	2.30	16	1
1:A:11:ASN:OD1	1:A:11:ASN:O	0.41	2.39	6	1
1:A:19:CYS:C	1:A:21:ASP:N	0.41	2.74	20	2
1:A:33:LEU:HD12	1:A:52:ILE:HD13	0.41	1.91	11	1
1:A:87:ALA:O	1:A:91:VAL:CG2	0.41	2.69	17	1
1:A:69:HIS:O	1:A:70:HIS:C	0.41	2.57	5	5
1:A:3:GLU:O	1:A:6:LYS:O	0.41	2.39	13	2
1:A:39:ASP:O	1:A:41:TYR:N	0.41	2.49	3	1
1:A:83:ASP:C	1:A:85:THR:N	0.41	2.72	3	3
1:A:58:LYS:O	1:A:62:VAL:HG22	0.41	2.16	5	1
1:A:108:CYS:O	1:A:112:ILE:CG2	0.41	2.69	7	1
1:A:22:GLU:HG3	1:A:23:LEU:HD23	0.41	1.93	8	2
1:A:41:TYR:OH	1:A:119:LYS:CG	0.41	2.69	15	1
1:A:67:ASN:OD1	1:A:80:HIS:NE2	0.41	2.54	16	1
1:A:106:ASP:O	1:A:107:LYS:C	0.41	2.59	3	3
1:A:133:LEU:C	1:A:133:LEU:CD2	0.41	2.86	11	3
1:A:134:VAL:HB	1:A:135:ILE:HD13	0.41	1.93	1	1
1:A:23:LEU:CD1	1:A:50:CYS:HB3	0.41	2.46	3	1
1:A:37:TRP:O	1:A:40:ASP:O	0.41	2.39	4	1
1:A:18:GLN:C	1:A:22:GLU:CD	0.41	2.80	5	1
1:A:128:VAL:O	1:A:128:VAL:HG13	0.41	2.16	6	1
1:A:95:HIS:O	1:A:99:LYS:HG2	0.41	2.16	9	1
1:A:111:THR:HG22	1:A:115:ALA:HB2	0.41	1.92	11	1
1:A:123:HIS:CD2	1:A:129:PRO:HB3	0.41	2.50	13	1
1:A:121:GLU:O	1:A:124:LYS:HG2	0.41	2.15	15	1
1:A:30:VAL:O	1:A:33:LEU:HD12	0.41	2.16	18	1
1:A:12:PHE:CE1	1:A:16:MET:HE1	0.41	2.50	1	1
1:A:41:TYR:CE1	1:A:43:MET:CB	0.41	3.03	3	1
1:A:95:HIS:O	1:A:99:LYS:HB3	0.41	2.16	9	1
1:A:43:MET:CE	1:A:141:GLU:HG3	0.41	2.45	12	1
1:A:33:LEU:CD1	1:A:37:TRP:CE2	0.41	3.04	19	1
1:A:30:VAL:CG2	1:A:51:ALA:HB1	0.41	2.45	20	1
1:A:63:ASP:OD1	1:A:63:ASP:O	0.41	2.39	20	1
1:A:8:LEU:CD2	1:A:11:ASN:CG	0.40	2.89	12	1
1:A:32:ASP:OD1	1:A:37:TRP:CD1	0.40	2.74	17	1
1:A:20:LYS:CD	1:A:27:ASP:HB2	0.40	2.46	19	1
1:A:16:MET:HG3	1:A:30:VAL:CG1	0.40	2.46	3	1
1:A:12:PHE:C	1:A:16:MET:CE	0.40	2.89	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:123:HIS:CE1	1:A:127:TRP:CZ3	0.40	3.09	9	1
1:A:8:LEU:CD2	1:A:9:SER:N	0.40	2.74	10	1
1:A:112:ILE:O	1:A:116:MET:HB3	0.40	2.16	11	1
1:A:41:TYR:CD2	1:A:43:MET:HB2	0.40	2.51	16	1
1:A:86:MET:SD	1:A:86:MET:O	0.40	2.80	5	1
1:A:15:ALA:O	1:A:19:CYS:N	0.40	2.47	12	1
1:A:10:ASN:HB3	1:A:14:LYS:CB	0.40	2.46	20	1
1:A:85:THR:CG2	1:A:86:MET:N	0.40	2.85	2	1
1:A:112:ILE:CD1	1:A:116:MET:HB2	0.40	2.47	5	1
1:A:38:LYS:C	1:A:40:ASP:N	0.40	2.75	6	1
1:A:3:GLU:OE1	1:A:34:TYR:O	0.40	2.40	8	1
1:A:39:ASP:CA	1:A:123:HIS:HB3	0.40	2.46	8	1
1:A:109:MET:HA	1:A:112:ILE:CG2	0.40	2.47	9	1
1:A:42:VAL:CG1	1:A:46:ARG:HA	0.40	2.45	13	1
1:A:50:CYS:O	1:A:54:CYS:SG	0.40	2.80	14	1
1:A:88:GLN:O	1:A:92:ASP:OD1	0.40	2.40	4	1
1:A:101:ALA:HB3	1:A:114:VAL:CG2	0.40	2.46	5	1
1:A:10:ASN:O	1:A:14:LYS:CB	0.40	2.70	8	1
1:A:109:MET:C	1:A:112:ILE:HG22	0.40	2.37	8	1
1:A:33:LEU:HB2	1:A:37:TRP:CZ3	0.40	2.51	12	1
1:A:32:ASP:OD1	1:A:37:TRP:CG	0.40	2.75	17	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	139/142 (98%)	103±1 (74±1%)	28±1 (20±1%)	8±1 (6±1%)	3 22
All	All	2780/2840 (98%)	2064 (74%)	560 (20%)	156 (6%)	3 22

All 14 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	9	SER	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	57	THR	20
1	A	125	LEU	20
1	A	139	LEU	20
1	A	11	ASN	19
1	A	36	PHE	19
1	A	43	MET	14
1	A	42	VAL	9
1	A	107	LYS	5
1	A	77	ALA	5
1	A	8	LEU	2
1	A	84	GLU	1
1	A	133	LEU	1
1	A	123	HIS	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	121/123 (98%)	71±4 (59±4%)	50±4 (41±4%)	0 4
All	All	2420/2460 (98%)	1418 (59%)	1002 (41%)	0 4

All 94 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	25	LEU	20
1	A	47	LEU	20
1	A	53	ASN	20
1	A	68	LEU	20
1	A	78	MET	20
1	A	88	GLN	20
1	A	93	ILE	20
1	A	100	SER	20
1	A	112	ILE	20
1	A	125	LEU	20
1	A	133	LEU	20
1	A	135	ILE	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	52	ILE	19
1	A	62	VAL	19
1	A	110	LYS	19
1	A	80	HIS	18
1	A	114	VAL	18
1	A	5	MET	17
1	A	37	TRP	17
1	A	54	CYS	17
1	A	57	THR	17
1	A	55	LEU	17
1	A	21	ASP	16
1	A	86	MET	16
1	A	20	LYS	16
1	A	46	ARG	15
1	A	118	PHE	15
1	A	123	HIS	15
1	A	139	LEU	15
1	A	34	TYR	14
1	A	74	LYS	14
1	A	94	ILE	14
1	A	120	LYS	14
1	A	11	ASN	13
1	A	22	GLU	13
1	A	36	PHE	13
1	A	141	GLU	13
1	A	16	MET	12
1	A	43	MET	12
1	A	97	CYS	12
1	A	106	ASP	12
1	A	124	LYS	12
1	A	50	CYS	11
1	A	99	LYS	11
1	A	127	TRP	11
1	A	8	LEU	11
1	A	65	ASP	11
1	A	60	ASP	10
1	A	98	GLU	10
1	A	6	LYS	10
1	A	45	ASP	10
1	A	83	ASP	10
1	A	116	MET	10
1	A	63	ASP	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	119	LYS	9
1	A	131	MET	9
1	A	33	LEU	9
1	A	109	MET	9
1	A	59	LEU	9
1	A	38	LYS	8
1	A	35	ASN	8
1	A	137	GLU	8
1	A	12	PHE	8
1	A	67	ASN	7
1	A	79	LYS	7
1	A	39	ASP	6
1	A	14	LYS	6
1	A	132	ASP	6
1	A	23	LEU	6
1	A	113	ASP	5
1	A	95	HIS	5
1	A	70	HIS	5
1	A	24	SER	5
1	A	3	GLU	4
1	A	105	ASP	4
1	A	91	VAL	4
1	A	107	LYS	4
1	A	58	LYS	3
1	A	75	ASP	3
1	A	104	ASN	3
1	A	138	VAL	3
1	A	10	ASN	3
1	A	85	THR	2
1	A	41	TYR	2
1	A	84	GLU	2
1	A	19	CYS	2
1	A	134	VAL	2
1	A	76	PHE	2
1	A	108	CYS	1
1	A	92	ASP	1
1	A	117	CYS	1
1	A	32	ASP	1
1	A	130	ASN	1
1	A	30	VAL	1

6.3.3 RNA (i)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates (i)

There are no monosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry (i)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers (i)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues (i)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation (i)

No chemical shift data were provided