



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 19, 2022 – 04:24 PM EST

PDB ID : 1RML
Title : NMR STUDY OF ACID FIBROBLAST GROWTH FACTOR BOUND TO
1,3,6-NAPHTHALENE TRISULPHONATE, 26 STRUCTURES
Authors : Lozano, R.M.; Jimenez, M.A.; Santoro, J.; Rico, M.; Gimenez-Gallego, G.
Deposited on : 1998-05-21

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

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

A user guide is available at

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/NMRValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

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

MolProbity : 4.02b-467
Mogul : 1.8.5 (274361), CSD as541be (2020)
buster-report : 1.1.7 (2018)
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
ShiftChecker : 2.26
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.26

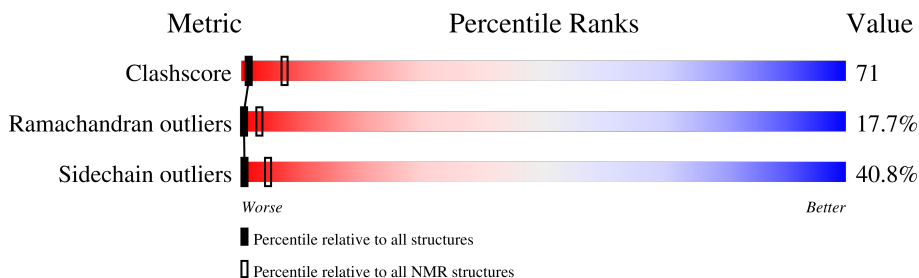
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

Percentile scores (ranging between 0-100) for global validation metrics of the entry are shown in the following graphic. The table shows the number of entries on which the scores are based.



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	158937	12864
Ramachandran outliers	154571	11451
Sidechain outliers	154315	11428

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the experimental data. The red, orange, yellow and green segments indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. A cyan segment indicates the fraction of residues that are not part of the well-defined cores, and a grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions $\leq 5\%$

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	155	

2 Ensemble composition and analysis i

This entry contains 26 models. Model 3 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:26-A:31, A:35-A:139, A:144-A:151 (119)	0.37	3

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

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

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

Cluster number	Models
1	1, 3, 6, 7, 8, 10, 12, 13, 14, 15, 17, 18, 19, 21, 25, 26
2	2, 4, 5, 9, 16, 20, 23, 24
3	11, 22

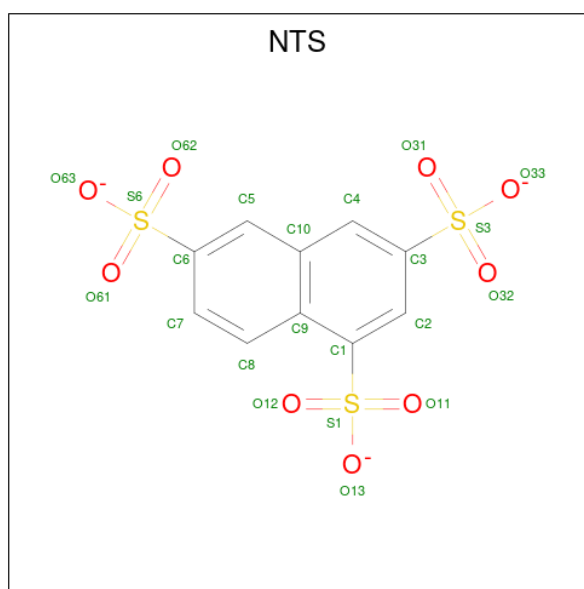
3 Entry composition [i](#)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2091 atoms, of which 1027 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called ACIDIC FIBROBLAST GROWTH FACTOR.

Mol	Chain	Residues	Atoms					Trace	
			Total	C	H	N	O		S
1	A	131	2064	656	1022	182	200	4	0

- Molecule 2 is NAPHTHALENE TRISULFONATE (three-letter code: NTS) (formula: C₁₀H₅O₉S₃).



Mol	Chain	Residues	Atoms				
			Total	C	H	O	S
2	A	1	27	10	5	9	3

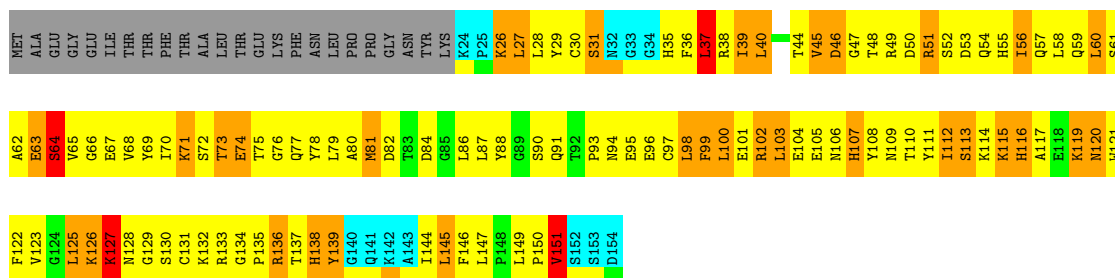
4 Residue-property plots i

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: ACIDIC FIBROBLAST GROWTH FACTOR

Chain A: 6% 46% 21% 8% 15%



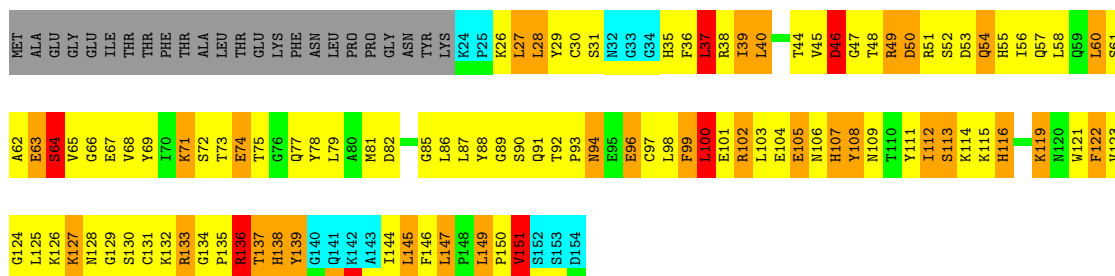
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: ACIDIC FIBROBLAST GROWTH FACTOR

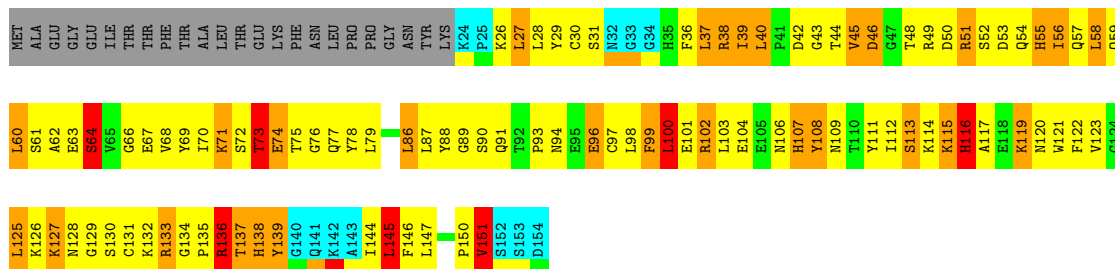
Chain A: 10% 43% 20% 8% 15%




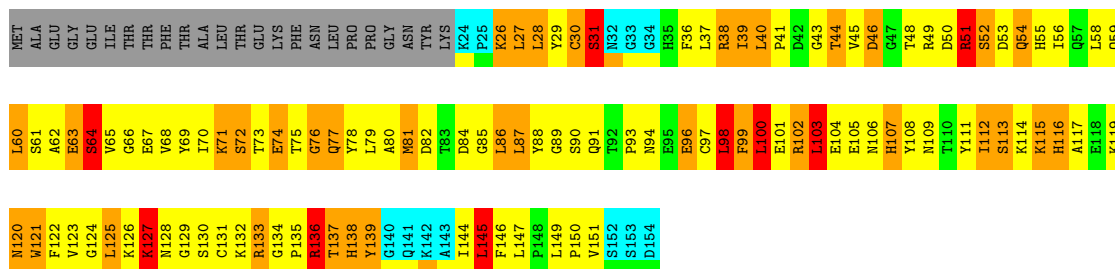
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: ACIDIC FIBROBLAST GROWTH FACTOR

Chain A: 12% 42% 19% 5% 8% 15%



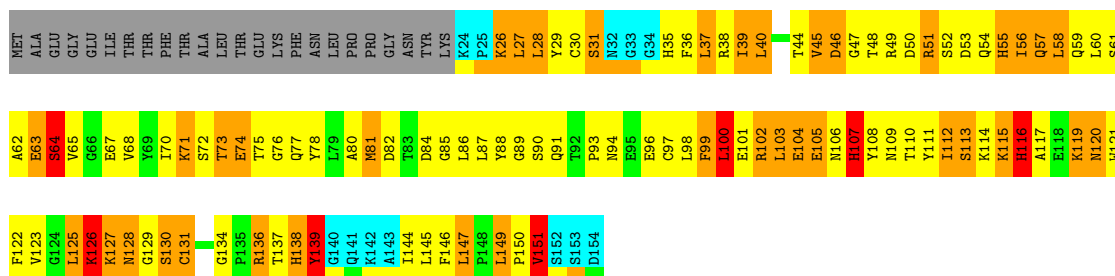
Chain A: 



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: ACIDIC FIBROBLAST GROWTH FACTOR

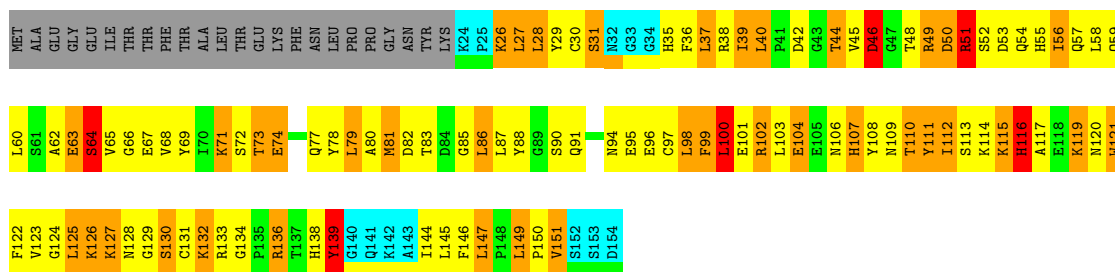
Chain A: 



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: ACIDIC FIBROBLAST GROWTH FACTOR

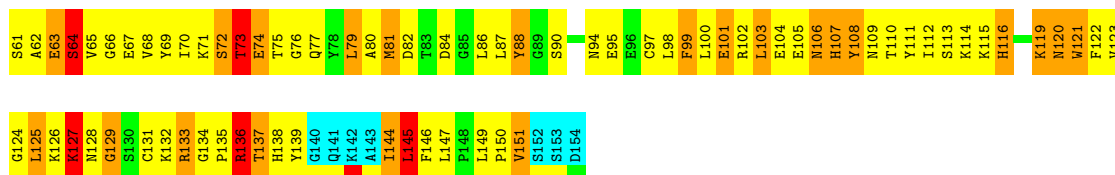
Chain A: 



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: ACIDIC FIBROBLAST GROWTH FACTOR

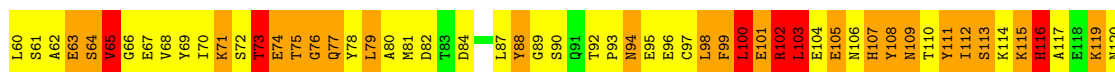
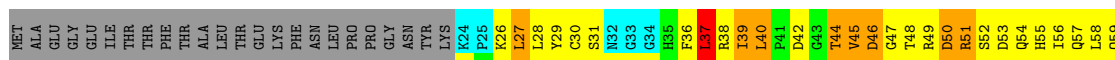
Chain A: 



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: ACIDIC FIBROBLAST GROWTH FACTOR

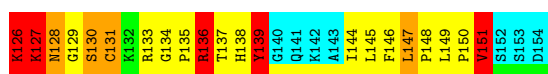
Chain A: 7% 41% 22% 7% 8% 15%



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: ACIDIC FIBROBLAST GROWTH FACTOR

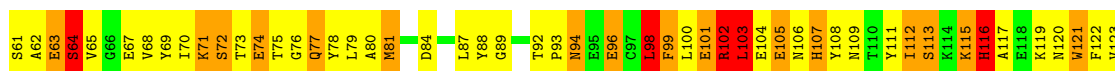
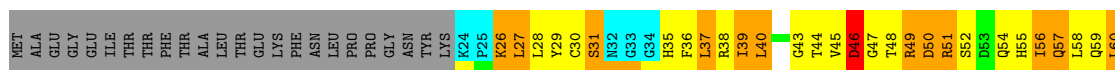
Chain A: 10% 35% 26% 5% 8% 15%



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: ACIDIC FIBROBLAST GROWTH FACTOR

Chain A: 11% 37% 22% 6% 8% 15%

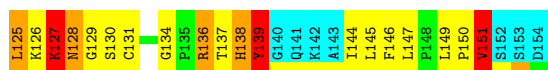
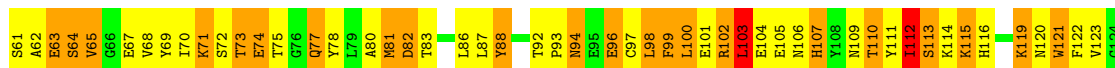




4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: ACIDIC FIBROBLAST GROWTH FACTOR

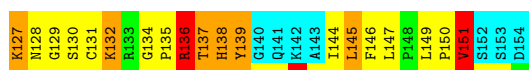
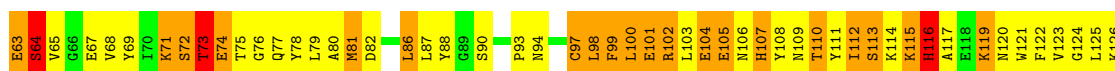
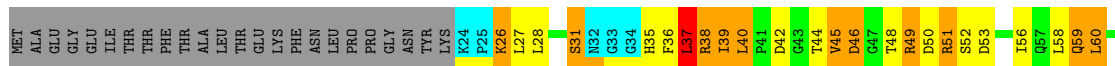
Chain A: 13% 34% 25% 5% 8% 15%



4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: ACIDIC FIBROBLAST GROWTH FACTOR

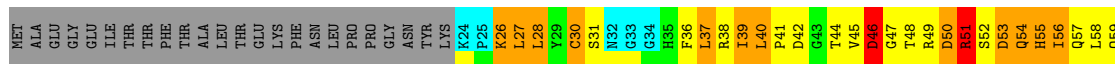
Chain A: 15% 34% 24% 8% 15%




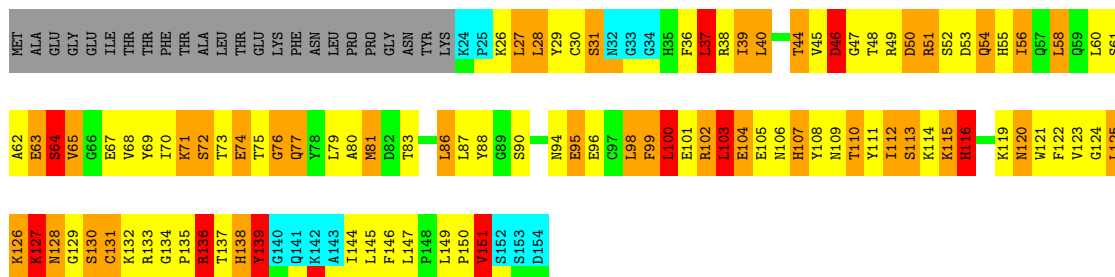
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: ACIDIC FIBROBLAST GROWTH FACTOR

Chain A: 9% 39% 22% 6% 8% 15%




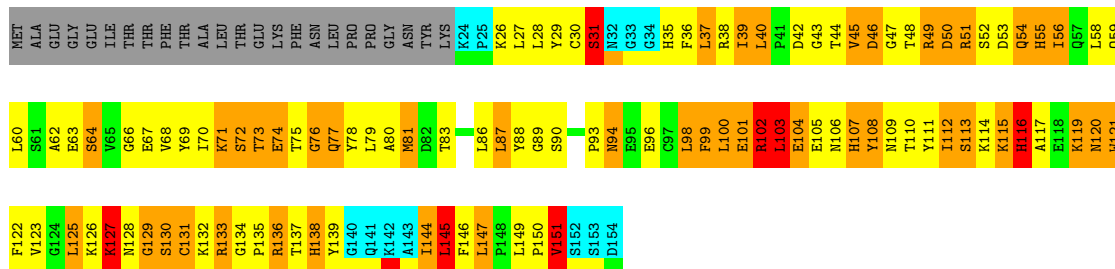
Chain A:  12% 34% 24% 6% 8% 15%



4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: ACIDIC FIBROBLAST GROWTH FACTOR

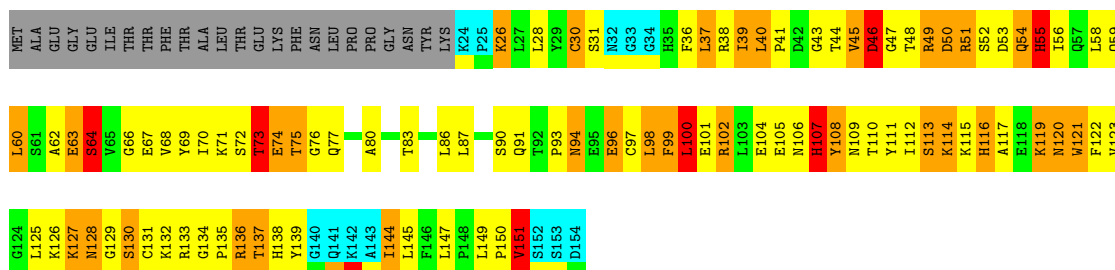
Chain A:  9% 35% 28% 5% 8% 15%



4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: ACIDIC FIBROBLAST GROWTH FACTOR

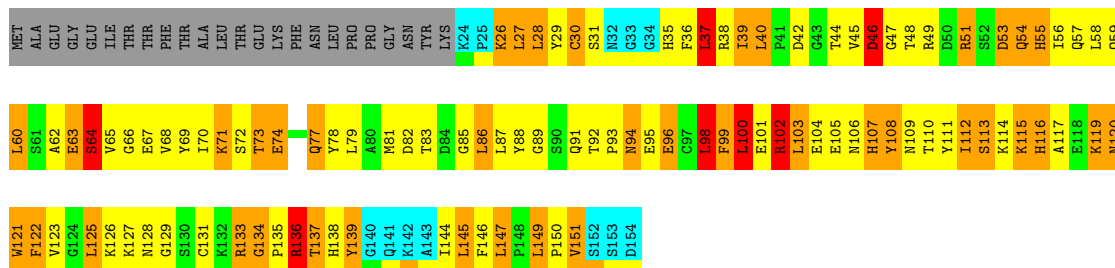
Chain A:  14% 37% 21% 5% 8% 15%



4.2.24 Score per residue for model 24

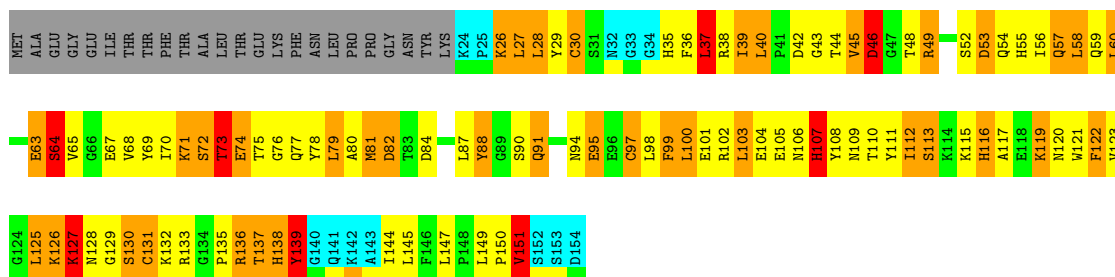
- Molecule 1: ACIDIC FIBROBLAST GROWTH FACTOR

Chain A:  10% 36% 26% 5% 8% 15%



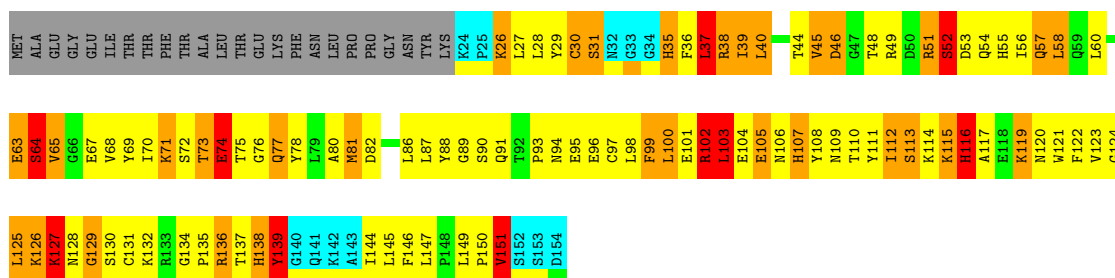
4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: ACIDIC FIBROBLAST GROWTH FACTOR



4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: ACIDIC FIBROBLAST GROWTH FACTOR



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *VARIABLE TARGET FUNCTION*.

Of the 26 calculated structures, 26 were deposited, based on the following criterion: ?.

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

Software name	Classification	Version
DIANA	refinement	
DIANA	structure solution	

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:
NTS

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	963	947	947	137±15
2	A	22	5	5	3±2
All	All	25610	24752	24752	3564

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 71.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:ILE:HD11	1:A:122:PHE:CE1	1.07	1.84	12	14
1:A:108:TYR:CE2	1:A:145:LEU:HD23	0.96	1.95	25	3
1:A:108:TYR:CD2	1:A:145:LEU:HD23	0.91	2.00	3	7
1:A:37:LEU:HD23	1:A:125:LEU:HD21	0.90	1.43	8	2
1:A:70:ILE:HD12	1:A:99:PHE:CD2	0.89	2.01	24	13
1:A:112:ILE:HD11	1:A:122:PHE:CE2	0.89	2.02	14	5
1:A:68:VAL:O	1:A:98:LEU:HD23	0.89	1.66	20	23
1:A:104:GLU:OE2	1:A:145:LEU:HD21	0.89	1.67	25	3
1:A:69:TYR:CZ	1:A:98:LEU:HD21	0.88	2.02	2	3
1:A:87:LEU:HD21	1:A:123:VAL:HG23	0.88	1.41	14	15
1:A:60:LEU:HD23	1:A:111:TYR:OH	0.86	1.71	1	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:GLU:OE1	1:A:145:LEU:HD21	0.86	1.71	7	2
1:A:37:LEU:HD12	1:A:146:PHE:CZ	0.86	2.06	12	17
1:A:47:GLY:N	1:A:125:LEU:HD22	0.86	1.86	12	11
1:A:29:TYR:CD1	1:A:36:PHE:CZ	0.85	2.63	7	12
1:A:28:LEU:HD21	1:A:146:PHE:HB3	0.84	1.49	14	7
1:A:79:LEU:HD11	1:A:87:LEU:HD23	0.84	1.46	1	2
1:A:87:LEU:HD21	1:A:123:VAL:CG2	0.83	2.04	23	13
1:A:108:TYR:CE2	1:A:145:LEU:HD13	0.83	2.07	23	2
1:A:112:ILE:HD11	1:A:122:PHE:CZ	0.83	2.08	23	9
1:A:144:ILE:HG13	1:A:145:LEU:HD12	0.82	1.50	18	4
1:A:104:GLU:CD	1:A:145:LEU:HD21	0.82	1.92	19	4
1:A:108:TYR:CD2	1:A:145:LEU:HD13	0.82	2.09	20	2
1:A:122:PHE:CE2	1:A:144:ILE:HD12	0.81	2.10	22	13
1:A:150:PRO:O	1:A:151:VAL:HG13	0.81	1.76	6	25
1:A:56:ILE:O	1:A:56:ILE:HD12	0.81	1.76	25	5
1:A:68:VAL:HG21	1:A:111:TYR:CE2	0.81	2.11	26	5
1:A:83:THR:HG22	1:A:115:LYS:HE2	0.79	1.50	15	1
1:A:67:GLU:OE2	1:A:98:LEU:HD13	0.79	1.76	13	9
1:A:134:GLY:O	1:A:137:THR:HG22	0.79	1.78	24	3
1:A:39:ILE:HD11	1:A:79:LEU:HD13	0.79	1.54	24	6
1:A:67:GLU:HB2	1:A:98:LEU:HD22	0.79	1.55	15	3
1:A:63:GLU:HG2	1:A:98:LEU:HD21	0.78	1.55	3	15
1:A:39:ILE:HG21	1:A:72:SER:CB	0.78	2.08	2	8
1:A:37:LEU:HG	1:A:125:LEU:HD11	0.78	1.54	8	18
1:A:102:ARG:NH2	1:A:112:ILE:HD12	0.78	1.93	17	6
1:A:149:LEU:O	1:A:149:LEU:HD12	0.78	1.77	3	15
1:A:112:ILE:HD11	1:A:122:PHE:CD1	0.78	2.14	12	4
1:A:27:LEU:HD12	1:A:28:LEU:O	0.78	1.77	6	7
1:A:47:GLY:HA3	1:A:125:LEU:HD13	0.77	1.55	18	6
1:A:110:THR:CG2	1:A:145:LEU:HD23	0.77	2.07	6	5
1:A:116:HIS:CE1	1:A:121:TRP:CZ3	0.77	2.72	3	5
1:A:47:GLY:CA	1:A:125:LEU:HD22	0.77	2.10	8	9
1:A:29:TYR:CD1	1:A:36:PHE:CE1	0.77	2.72	18	5
1:A:68:VAL:O	1:A:98:LEU:HD13	0.77	1.80	12	2
1:A:56:ILE:O	1:A:58:LEU:HD12	0.77	1.79	13	11
1:A:81:MET:HG3	1:A:87:LEU:HD12	0.76	1.55	6	6
1:A:59:GLN:O	1:A:70:ILE:HG23	0.76	1.80	10	8
1:A:125:LEU:N	1:A:125:LEU:HD12	0.76	1.96	5	2
1:A:102:ARG:CZ	1:A:112:ILE:HD12	0.75	2.10	22	2
1:A:31:SER:HB3	1:A:145:LEU:HD23	0.75	1.59	12	1
1:A:27:LEU:HD12	1:A:27:LEU:C	0.74	2.01	17	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:LEU:HD12	1:A:27:LEU:O	0.74	1.81	16	9
1:A:139:TYR:O	1:A:139:TYR:CD2	0.74	2.41	9	1
1:A:37:LEU:HB3	1:A:58:LEU:HD13	0.74	1.57	23	3
1:A:39:ILE:CG1	1:A:45:VAL:HG13	0.74	2.12	23	3
1:A:40:LEU:HD12	1:A:55:HIS:CE1	0.74	2.17	15	1
1:A:67:GLU:HG2	1:A:98:LEU:HD22	0.73	1.58	17	18
1:A:139:TYR:CB	1:A:144:ILE:HD11	0.73	2.12	24	10
1:A:56:ILE:C	1:A:56:ILE:HD12	0.73	2.03	7	1
1:A:139:TYR:HB2	1:A:144:ILE:HD11	0.73	1.59	24	10
1:A:83:THR:HG22	1:A:115:LYS:CE	0.73	2.12	15	1
1:A:28:LEU:HD23	1:A:29:TYR:N	0.73	1.98	14	4
1:A:39:ILE:HD12	1:A:45:VAL:HG13	0.73	1.58	25	5
1:A:27:LEU:HG	1:A:149:LEU:HD11	0.73	1.59	14	4
1:A:29:TYR:CE2	1:A:30:CYS:O	0.73	2.42	14	11
1:A:60:LEU:HD22	1:A:111:TYR:OH	0.72	1.83	16	6
1:A:37:LEU:CD2	1:A:125:LEU:HD21	0.72	2.13	8	6
1:A:39:ILE:CD1	1:A:45:VAL:HG13	0.72	2.14	25	3
1:A:68:VAL:HG11	1:A:101:GLU:OE1	0.72	1.85	15	4
1:A:121:TRP:HA	1:A:137:THR:HG23	0.72	1.61	24	3
1:A:37:LEU:HD11	1:A:146:PHE:CZ	0.71	2.19	16	3
1:A:56:ILE:HD12	1:A:56:ILE:C	0.71	2.05	18	5
1:A:46:ASP:C	1:A:125:LEU:HD22	0.70	2.07	21	12
1:A:60:LEU:HD22	1:A:111:TYR:CZ	0.70	2.21	14	2
1:A:39:ILE:HG12	1:A:45:VAL:HG13	0.70	1.64	23	1
1:A:108:TYR:CD2	1:A:145:LEU:CD1	0.70	2.75	12	2
1:A:37:LEU:CD1	1:A:146:PHE:CZ	0.70	2.75	8	14
1:A:40:LEU:HD12	1:A:44:THR:HB	0.70	1.62	11	5
1:A:75:THR:HG23	1:A:77:GLN:OE1	0.70	1.85	18	4
1:A:116:HIS:CG	1:A:121:TRP:CE3	0.70	2.80	3	4
1:A:113:SER:HG	1:A:116:HIS:CE1	0.69	2.05	12	15
1:A:68:VAL:HG22	1:A:99:PHE:O	0.69	1.86	14	14
1:A:145:LEU:HD11	2:A:178:NTS:O61	0.69	1.87	18	2
1:A:59:GLN:OE1	1:A:60:LEU:HD12	0.69	1.87	11	1
1:A:145:LEU:HD23	1:A:145:LEU:N	0.69	2.03	5	6
1:A:116:HIS:ND1	1:A:121:TRP:CZ3	0.69	2.61	8	5
1:A:104:GLU:CD	1:A:145:LEU:HD22	0.69	2.09	11	2
1:A:36:PHE:CZ	1:A:51:ARG:CZ	0.69	2.76	17	2
1:A:47:GLY:HA3	1:A:125:LEU:HD22	0.68	1.65	9	7
1:A:68:VAL:C	1:A:98:LEU:HD23	0.68	2.08	3	22
1:A:126:LYS:O	1:A:128:ASN:N	0.68	2.27	21	26
1:A:40:LEU:HD13	1:A:40:LEU:N	0.68	2.03	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:122:PHE:CZ	1:A:139:TYR:CD1	0.68	2.82	18	2
1:A:108:TYR:CD2	1:A:145:LEU:HD11	0.68	2.24	12	2
1:A:133:ARG:O	1:A:134:GLY:C	0.68	2.33	24	11
1:A:38:ARG:NH2	1:A:48:THR:HG21	0.67	2.04	4	8
1:A:62:ALA:CB	1:A:68:VAL:HG12	0.67	2.20	19	12
1:A:47:GLY:CA	1:A:125:LEU:HD13	0.67	2.20	23	3
1:A:139:TYR:CD2	2:A:178:NTS:O62	0.67	2.47	14	5
1:A:41:PRO:CD	1:A:55:HIS:CD2	0.67	2.78	10	1
1:A:69:TYR:CZ	1:A:98:LEU:CD2	0.66	2.77	12	3
1:A:115:LYS:CE	1:A:116:HIS:CD2	0.66	2.77	2	5
1:A:111:TYR:N	1:A:111:TYR:CD1	0.66	2.63	12	3
1:A:112:ILE:HD12	1:A:122:PHE:CE1	0.66	2.25	9	1
1:A:109:ASN:O	1:A:111:TYR:CE1	0.66	2.48	7	20
1:A:73:THR:HG23	1:A:73:THR:O	0.66	1.91	22	14
1:A:31:SER:CB	1:A:145:LEU:HD23	0.66	2.19	12	1
1:A:60:LEU:N	1:A:60:LEU:HD12	0.66	2.06	2	2
1:A:112:ILE:CD1	1:A:122:PHE:CE1	0.66	2.73	12	4
1:A:147:LEU:O	1:A:149:LEU:HD23	0.65	1.91	10	5
1:A:139:TYR:CB	1:A:144:ILE:CD1	0.65	2.73	22	10
1:A:60:LEU:HD13	1:A:111:TYR:OH	0.65	1.91	24	6
1:A:139:TYR:CD1	1:A:144:ILE:CD1	0.65	2.79	14	5
1:A:60:LEU:HD12	1:A:60:LEU:H	0.65	1.50	2	3
1:A:67:GLU:HG2	1:A:98:LEU:HD12	0.65	1.66	2	2
1:A:116:HIS:ND1	1:A:121:TRP:CE3	0.65	2.64	24	5
1:A:144:ILE:CG1	1:A:145:LEU:HD12	0.65	2.21	14	3
1:A:109:ASN:O	1:A:111:TYR:CD1	0.65	2.50	6	20
1:A:37:LEU:HG	1:A:125:LEU:HD21	0.65	1.68	11	4
1:A:60:LEU:HD23	1:A:70:ILE:HG12	0.65	1.67	20	4
1:A:39:ILE:CD1	1:A:79:LEU:HD13	0.65	2.22	10	4
1:A:67:GLU:HB2	1:A:98:LEU:HD12	0.65	1.66	4	1
1:A:139:TYR:CD2	2:A:178:NTS:O61	0.65	2.49	15	2
1:A:35:HIS:CD2	1:A:49:ARG:N	0.65	2.64	11	4
1:A:39:ILE:HD12	1:A:45:VAL:CG1	0.65	2.21	25	2
1:A:28:LEU:HD23	1:A:29:TYR:H	0.65	1.52	10	4
1:A:103:LEU:HD11	1:A:107:HIS:N	0.65	2.07	10	1
1:A:108:TYR:CD2	1:A:145:LEU:HD22	0.65	2.27	19	2
1:A:139:TYR:CD2	2:A:178:NTS:O63	0.64	2.50	26	4
1:A:109:ASN:O	1:A:111:TYR:CD2	0.64	2.51	14	2
1:A:109:ASN:O	1:A:111:TYR:CE2	0.64	2.50	14	1
1:A:71:LYS:HZ2	1:A:72:SER:N	0.64	1.91	2	8
1:A:27:LEU:HD11	1:A:149:LEU:HD11	0.64	1.69	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:LEU:HD12	1:A:133:ARG:HD3	0.63	1.71	1	1
1:A:68:VAL:HG21	1:A:111:TYR:HE2	0.63	1.52	16	4
1:A:102:ARG:O	1:A:103:LEU:C	0.63	2.37	12	12
1:A:29:TYR:CZ	1:A:30:CYS:O	0.63	2.51	6	11
1:A:36:PHE:CD2	1:A:51:ARG:CG	0.63	2.82	18	3
1:A:125:LEU:O	1:A:126:LYS:C	0.63	2.37	3	26
1:A:106:ASN:O	1:A:107:HIS:CD2	0.62	2.52	18	21
1:A:40:LEU:HD12	1:A:44:THR:O	0.62	1.94	26	6
1:A:139:TYR:HB3	1:A:144:ILE:CD1	0.62	2.24	2	10
1:A:82:ASP:O	1:A:116:HIS:CE1	0.62	2.52	1	2
1:A:103:LEU:HD11	1:A:106:ASN:HA	0.62	1.70	24	1
1:A:121:TRP:CD1	1:A:134:GLY:O	0.62	2.52	2	20
1:A:56:ILE:HD12	1:A:56:ILE:O	0.62	1.94	7	1
1:A:40:LEU:HD12	1:A:44:THR:CB	0.62	2.24	17	5
1:A:40:LEU:N	1:A:40:LEU:CD1	0.62	2.62	15	1
1:A:70:ILE:HD12	1:A:99:PHE:HD2	0.62	1.51	24	10
1:A:40:LEU:HD23	1:A:44:THR:CG2	0.62	2.24	23	6
1:A:102:ARG:HH21	1:A:112:ILE:HD12	0.62	1.54	25	4
1:A:139:TYR:CE2	2:A:178:NTS:O61	0.62	2.52	10	3
1:A:39:ILE:HG23	1:A:75:THR:HG21	0.62	1.71	25	1
1:A:87:LEU:HD11	1:A:123:VAL:HG23	0.62	1.72	22	4
1:A:40:LEU:HD23	1:A:44:THR:HG22	0.62	1.71	5	6
1:A:40:LEU:HD12	1:A:44:THR:HG22	0.62	1.71	4	10
1:A:36:PHE:CE2	1:A:51:ARG:CG	0.61	2.82	18	3
1:A:145:LEU:HD13	2:A:178:NTS:O61	0.61	1.95	9	1
1:A:104:GLU:OE2	1:A:145:LEU:HD13	0.61	1.95	24	1
1:A:39:ILE:HG21	1:A:72:SER:HB2	0.61	1.72	2	3
1:A:132:LYS:HB3	1:A:137:THR:HG23	0.61	1.70	11	1
1:A:55:HIS:CE1	1:A:74:GLU:CD	0.61	2.74	14	5
1:A:113:SER:OG	1:A:116:HIS:CE1	0.61	2.54	7	16
1:A:54:GLN:NE2	1:A:54:GLN:H	0.61	1.93	25	4
1:A:71:LYS:CG	1:A:78:TYR:CE2	0.61	2.83	15	2
1:A:69:TYR:CE2	1:A:98:LEU:HD21	0.61	2.31	12	1
1:A:139:TYR:CE2	2:A:178:NTS:O62	0.61	2.54	13	1
1:A:100:LEU:HD13	1:A:117:ALA:CB	0.61	2.24	23	5
1:A:103:LEU:HD21	1:A:106:ASN:HA	0.61	1.71	10	2
1:A:79:LEU:CD1	1:A:87:LEU:HD23	0.61	2.25	1	1
1:A:57:GLN:O	1:A:58:LEU:HD23	0.61	1.96	17	1
1:A:36:PHE:CE2	1:A:51:ARG:CD	0.60	2.83	11	6
1:A:37:LEU:CD1	1:A:146:PHE:CE2	0.60	2.84	14	4
1:A:112:ILE:CG2	1:A:117:ALA:HB1	0.60	2.25	22	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:LEU:HD22	1:A:146:PHE:CD1	0.60	2.30	24	3
1:A:82:ASP:OD1	1:A:88:TYR:CE2	0.60	2.54	5	6
1:A:69:TYR:CE2	1:A:97:CYS:SG	0.60	2.94	19	2
1:A:137:THR:C	1:A:138:HIS:CG	0.60	2.75	17	2
1:A:88:TYR:CD2	1:A:89:GLY:O	0.60	2.55	1	6
1:A:123:VAL:HG22	1:A:123:VAL:O	0.60	1.96	3	15
1:A:106:ASN:O	1:A:107:HIS:CG	0.60	2.55	4	24
1:A:30:CYS:SG	1:A:146:PHE:CE1	0.60	2.90	22	6
1:A:41:PRO:HD3	1:A:55:HIS:CD2	0.60	2.32	10	2
1:A:144:ILE:HD11	2:A:178:NTS:O61	0.60	1.96	26	2
1:A:83:THR:O	1:A:121:TRP:CH2	0.60	2.55	23	6
1:A:39:ILE:HD11	1:A:79:LEU:CD1	0.60	2.27	11	1
1:A:39:ILE:CD1	1:A:79:LEU:CD2	0.60	2.79	25	2
1:A:82:ASP:OD1	1:A:88:TYR:CD2	0.60	2.54	3	8
1:A:122:PHE:CD2	1:A:144:ILE:HD12	0.60	2.31	17	6
1:A:27:LEU:HD13	1:A:36:PHE:CD1	0.60	2.31	26	1
1:A:115:LYS:O	1:A:116:HIS:CD2	0.59	2.55	3	2
1:A:55:HIS:CE1	1:A:74:GLU:OE1	0.59	2.55	22	2
1:A:79:LEU:HD13	1:A:80:ALA:H	0.59	1.56	25	1
1:A:82:ASP:OD1	1:A:88:TYR:CE1	0.59	2.54	6	11
1:A:60:LEU:HD21	1:A:111:TYR:CZ	0.59	2.32	18	2
1:A:27:LEU:HD11	1:A:149:LEU:HD21	0.59	1.74	12	1
1:A:60:LEU:HD23	1:A:70:ILE:CG1	0.59	2.27	21	2
1:A:83:THR:HG23	1:A:115:LYS:HE2	0.59	1.74	13	1
1:A:139:TYR:CG	2:A:178:NTS:O62	0.59	2.55	21	4
1:A:39:ILE:HD13	1:A:72:SER:HB2	0.59	1.74	24	3
1:A:104:GLU:OE1	1:A:145:LEU:HD11	0.59	1.98	17	1
1:A:145:LEU:HD11	2:A:178:NTS:C6	0.59	2.28	21	2
1:A:145:LEU:HD11	2:A:178:NTS:C7	0.59	2.27	21	2
1:A:29:TYR:CD1	1:A:36:PHE:CE2	0.59	2.90	7	4
1:A:100:LEU:HD12	1:A:114:LYS:HG2	0.59	1.72	9	8
1:A:106:ASN:C	1:A:107:HIS:CG	0.59	2.76	6	3
1:A:72:SER:O	1:A:74:GLU:N	0.59	2.36	16	16
1:A:40:LEU:CD1	1:A:55:HIS:CE1	0.59	2.86	15	1
1:A:40:LEU:HD22	1:A:44:THR:O	0.59	1.98	15	1
1:A:38:ARG:HB2	1:A:56:ILE:HG22	0.58	1.74	25	1
1:A:81:MET:O	1:A:116:HIS:CE1	0.58	2.56	25	5
1:A:28:LEU:HD21	1:A:146:PHE:CB	0.58	2.26	6	3
1:A:37:LEU:HD11	1:A:146:PHE:CE2	0.58	2.32	14	2
1:A:67:GLU:HG2	1:A:98:LEU:HD13	0.58	1.76	26	7
1:A:53:ASP:CB	1:A:56:ILE:CG2	0.58	2.81	10	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:108:TYR:CD2	1:A:145:LEU:CD2	0.58	2.87	17	1
1:A:39:ILE:HD13	1:A:40:LEU:N	0.58	2.13	5	2
1:A:37:LEU:HB3	1:A:58:LEU:HD11	0.58	1.76	20	8
1:A:108:TYR:CG	1:A:145:LEU:HB3	0.58	2.33	22	8
1:A:123:VAL:O	1:A:146:PHE:CE2	0.58	2.57	2	7
1:A:87:LEU:CD2	1:A:123:VAL:HG23	0.58	2.28	8	5
1:A:73:THR:O	1:A:73:THR:HG22	0.58	1.96	10	1
1:A:112:ILE:HD11	1:A:122:PHE:CD2	0.58	2.34	14	1
1:A:139:TYR:O	1:A:139:TYR:CG	0.58	2.57	9	1
1:A:108:TYR:CE2	1:A:145:LEU:CD2	0.58	2.86	17	2
1:A:39:ILE:HD12	1:A:79:LEU:HD13	0.58	1.74	17	2
1:A:86:LEU:HD12	1:A:133:ARG:HD2	0.58	1.74	18	1
1:A:39:ILE:C	1:A:40:LEU:HD13	0.58	2.19	15	9
1:A:50:ASP:O	1:A:51:ARG:C	0.58	2.43	19	17
1:A:144:ILE:HG23	2:A:178:NTS:O62	0.58	1.98	24	1
1:A:139:TYR:CG	2:A:178:NTS:O63	0.57	2.57	3	2
1:A:30:CYS:SG	1:A:125:LEU:HD13	0.57	2.39	11	1
1:A:37:LEU:HD12	1:A:146:PHE:CE2	0.57	2.33	12	3
1:A:36:PHE:CD2	1:A:51:ARG:CD	0.57	2.88	21	1
1:A:123:VAL:HG13	1:A:123:VAL:O	0.57	2.00	9	5
1:A:53:ASP:HB3	1:A:56:ILE:HG22	0.57	1.76	4	1
1:A:112:ILE:CD1	1:A:122:PHE:CD1	0.57	2.88	6	3
1:A:40:LEU:HD12	1:A:55:HIS:ND1	0.57	2.14	15	1
1:A:122:PHE:CZ	1:A:139:TYR:CE1	0.57	2.92	18	1
1:A:55:HIS:CD2	1:A:74:GLU:OE1	0.57	2.57	25	3
1:A:124:GLY:C	1:A:125:LEU:HD12	0.57	2.19	11	1
1:A:125:LEU:N	1:A:125:LEU:CD1	0.57	2.68	11	2
1:A:81:MET:CG	1:A:87:LEU:HD12	0.57	2.30	16	3
1:A:39:ILE:CD1	1:A:79:LEU:CD1	0.57	2.83	14	1
1:A:66:GLY:CA	1:A:100:LEU:HD23	0.57	2.30	2	1
1:A:36:PHE:CD2	1:A:51:ARG:HG3	0.57	2.35	7	5
1:A:37:LEU:CG	1:A:125:LEU:HD11	0.57	2.30	6	7
1:A:61:SER:CB	1:A:69:TYR:O	0.57	2.53	19	1
1:A:54:GLN:NE2	1:A:55:HIS:CE1	0.57	2.72	24	1
1:A:125:LEU:HD23	1:A:131:CYS:SG	0.57	2.40	25	1
1:A:30:CYS:SG	1:A:146:PHE:CD1	0.56	2.94	26	1
1:A:39:ILE:HG21	1:A:72:SER:OG	0.56	1.99	2	6
1:A:88:TYR:CE2	1:A:89:GLY:O	0.56	2.58	5	5
1:A:112:ILE:CG2	1:A:117:ALA:CB	0.56	2.84	25	13
1:A:80:ALA:CB	1:A:88:TYR:CE1	0.56	2.87	15	4
1:A:40:LEU:HD23	1:A:44:THR:CB	0.56	2.31	23	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:LEU:HD23	1:A:70:ILE:HG23	0.56	1.78	19	1
1:A:104:GLU:HB2	1:A:110:THR:HG21	0.56	1.78	24	2
1:A:62:ALA:HA	1:A:68:VAL:HG12	0.56	1.77	2	12
1:A:29:TYR:HB2	1:A:36:PHE:CD2	0.56	2.35	6	6
1:A:139:TYR:CZ	2:A:178:NTS:O61	0.56	2.59	19	2
1:A:26:LYS:CG	1:A:58:LEU:O	0.56	2.53	12	11
1:A:80:ALA:HB2	1:A:97:CYS:HA	0.56	1.78	26	14
1:A:36:PHE:CE2	1:A:51:ARG:HD2	0.56	2.36	11	7
1:A:37:LEU:CD2	1:A:125:LEU:HD11	0.56	2.30	6	2
1:A:36:PHE:CE2	1:A:51:ARG:HG3	0.56	2.35	18	4
1:A:31:SER:HB2	1:A:108:TYR:CE1	0.56	2.36	7	5
1:A:55:HIS:CG	1:A:74:GLU:CD	0.56	2.79	12	1
1:A:104:GLU:OE1	1:A:145:LEU:HD22	0.56	2.01	16	1
1:A:60:LEU:CD2	1:A:111:TYR:OH	0.56	2.53	11	13
1:A:54:GLN:O	1:A:55:HIS:CG	0.56	2.59	26	4
1:A:55:HIS:CE1	1:A:74:GLU:OE2	0.56	2.59	1	2
1:A:60:LEU:H	1:A:60:LEU:HD12	0.56	1.61	1	2
1:A:119:LYS:CD	1:A:121:TRP:CZ2	0.56	2.89	16	11
1:A:39:ILE:O	1:A:39:ILE:CG2	0.55	2.54	26	3
1:A:83:THR:HG23	1:A:115:LYS:NZ	0.55	2.16	24	1
1:A:102:ARG:O	1:A:104:GLU:N	0.55	2.39	3	14
1:A:40:LEU:CD1	1:A:44:THR:HG22	0.55	2.31	4	10
1:A:29:TYR:HB2	1:A:36:PHE:CE2	0.55	2.35	19	8
1:A:85:GLY:CA	1:A:121:TRP:CE3	0.55	2.89	13	3
1:A:139:TYR:CZ	2:A:178:NTS:O62	0.55	2.59	13	1
1:A:68:VAL:HG13	1:A:101:GLU:HB2	0.55	1.77	21	2
1:A:82:ASP:OD1	1:A:88:TYR:CZ	0.55	2.59	1	12
1:A:127:LYS:O	1:A:127:LYS:CD	0.55	2.54	18	15
1:A:121:TRP:CD1	1:A:134:GLY:C	0.55	2.80	14	7
1:A:35:HIS:CD2	1:A:129:GLY:HA2	0.55	2.37	19	13
1:A:82:ASP:OD2	1:A:88:TYR:CG	0.55	2.60	24	6
1:A:133:ARG:O	1:A:137:THR:HG23	0.55	2.02	22	2
1:A:45:VAL:CG2	1:A:46:ASP:N	0.55	2.69	16	8
1:A:147:LEU:HD23	1:A:148:PRO:N	0.55	2.17	9	1
1:A:144:ILE:HG23	2:A:178:NTS:S6	0.55	2.41	24	1
1:A:37:LEU:HD23	1:A:46:ASP:O	0.55	2.01	13	3
1:A:82:ASP:CG	1:A:88:TYR:CD1	0.55	2.80	26	4
1:A:122:PHE:HB3	1:A:144:ILE:HG22	0.55	1.79	7	4
1:A:138:HIS:C	2:A:178:NTS:O61	0.55	2.45	24	1
1:A:79:LEU:HG	1:A:87:LEU:HD23	0.55	1.78	5	1
1:A:29:TYR:CD2	1:A:30:CYS:O	0.55	2.60	14	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:TYR:CE1	1:A:36:PHE:CE1	0.55	2.95	7	4
1:A:36:PHE:CZ	1:A:51:ARG:NH1	0.55	2.75	26	1
1:A:36:PHE:CE2	1:A:51:ARG:HD3	0.54	2.37	21	8
1:A:54:GLN:NE2	1:A:55:HIS:H	0.54	2.00	6	3
1:A:26:LYS:HZ1	1:A:58:LEU:N	0.54	2.00	8	1
1:A:39:ILE:CG2	1:A:39:ILE:O	0.54	2.56	18	10
1:A:81:MET:SD	1:A:87:LEU:HD12	0.54	2.42	19	5
1:A:82:ASP:OD1	1:A:88:TYR:CG	0.54	2.59	25	4
1:A:120:ASN:O	1:A:122:PHE:CD1	0.54	2.60	21	2
1:A:83:THR:HG23	1:A:115:LYS:CE	0.54	2.32	13	1
1:A:100:LEU:CD1	1:A:117:ALA:CB	0.54	2.86	23	4
1:A:122:PHE:CE1	1:A:144:ILE:HD12	0.54	2.37	5	3
1:A:132:LYS:CB	1:A:137:THR:HG23	0.54	2.33	5	2
1:A:55:HIS:CD2	1:A:74:GLU:CD	0.54	2.81	12	1
1:A:99:PHE:CZ	1:A:123:VAL:CG2	0.54	2.90	18	4
1:A:30:CYS:O	1:A:31:SER:O	0.54	2.26	7	5
1:A:82:ASP:OD2	1:A:88:TYR:CD1	0.54	2.61	6	1
1:A:64:SER:O	1:A:67:GLU:O	0.54	2.25	1	24
1:A:99:PHE:CZ	1:A:123:VAL:HG21	0.54	2.37	18	2
1:A:69:TYR:CE1	1:A:98:LEU:CG	0.54	2.91	19	1
1:A:137:THR:O	1:A:138:HIS:CG	0.54	2.61	17	1
1:A:66:GLY:O	1:A:100:LEU:HD23	0.54	2.03	22	10
1:A:31:SER:OG	1:A:108:TYR:CZ	0.54	2.58	12	3
1:A:73:THR:O	1:A:73:THR:CG2	0.54	2.56	10	15
1:A:149:LEU:N	1:A:150:PRO:HD3	0.54	2.17	12	1
1:A:36:PHE:CZ	1:A:51:ARG:HD3	0.53	2.38	26	3
1:A:36:PHE:CD2	1:A:51:ARG:HD2	0.53	2.38	21	11
1:A:115:LYS:HE2	1:A:116:HIS:CD2	0.53	2.38	2	2
1:A:26:LYS:CE	1:A:27:LEU:N	0.53	2.71	20	4
1:A:36:PHE:O	1:A:37:LEU:C	0.53	2.46	14	21
1:A:122:PHE:O	1:A:137:THR:CG2	0.53	2.57	23	5
1:A:138:HIS:O	2:A:178:NTS:S6	0.53	2.67	2	7
1:A:27:LEU:O	1:A:27:LEU:CD1	0.53	2.55	18	7
1:A:68:VAL:C	1:A:98:LEU:HD13	0.53	2.22	12	1
1:A:69:TYR:CE1	1:A:98:LEU:HG	0.53	2.39	19	10
1:A:115:LYS:HE3	1:A:116:HIS:CD2	0.53	2.38	2	4
1:A:54:GLN:HG3	1:A:55:HIS:CE1	0.53	2.38	19	3
1:A:60:LEU:HD12	1:A:60:LEU:N	0.53	2.18	11	1
1:A:123:VAL:O	1:A:144:ILE:HG22	0.53	2.03	24	1
1:A:60:LEU:HD21	1:A:111:TYR:OH	0.53	2.04	9	2
1:A:112:ILE:HD12	1:A:122:PHE:CD1	0.53	2.38	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:ASP:O	1:A:52:SER:N	0.53	2.42	15	6
1:A:104:GLU:CG	1:A:145:LEU:HD22	0.53	2.34	11	2
1:A:36:PHE:CE1	1:A:51:ARG:HD3	0.53	2.39	26	1
1:A:104:GLU:CB	1:A:110:THR:OG1	0.53	2.57	18	2
1:A:63:GLU:O	1:A:64:SER:CB	0.53	2.56	11	19
1:A:111:TYR:O	1:A:112:ILE:CG1	0.53	2.57	8	4
1:A:46:ASP:C	1:A:125:LEU:CD2	0.53	2.78	8	8
1:A:139:TYR:HA	1:A:144:ILE:HD13	0.53	1.81	9	3
1:A:104:GLU:OE1	1:A:105:GLU:CG	0.52	2.57	19	4
1:A:127:LYS:O	1:A:127:LYS:CE	0.52	2.57	21	2
1:A:56:ILE:C	1:A:56:ILE:CD1	0.52	2.78	7	5
1:A:40:LEU:HD12	1:A:44:THR:CG2	0.52	2.34	4	7
1:A:41:PRO:HD3	1:A:55:HIS:CE1	0.52	2.39	17	4
1:A:38:ARG:CZ	1:A:53:ASP:CG	0.52	2.78	9	12
1:A:119:LYS:HD2	1:A:121:TRP:CZ2	0.52	2.39	17	12
1:A:108:TYR:CD2	1:A:145:LEU:HG	0.52	2.39	24	3
1:A:71:LYS:CE	1:A:72:SER:O	0.52	2.57	16	1
1:A:104:GLU:CB	1:A:110:THR:HG21	0.52	2.34	24	2
1:A:53:ASP:O	1:A:56:ILE:HG23	0.52	2.05	4	1
1:A:69:TYR:CE1	1:A:98:LEU:CD2	0.52	2.92	12	2
1:A:30:CYS:O	1:A:31:SER:C	0.52	2.48	7	5
1:A:39:ILE:HD13	1:A:79:LEU:CD2	0.52	2.35	12	1
1:A:86:LEU:HD12	1:A:133:ARG:CD	0.52	2.33	1	2
1:A:115:LYS:C	1:A:116:HIS:CG	0.52	2.83	16	13
1:A:53:ASP:CB	1:A:56:ILE:HG22	0.52	2.35	4	1
1:A:27:LEU:HD21	1:A:51:ARG:NE	0.52	2.19	14	1
1:A:66:GLY:O	1:A:100:LEU:CD2	0.52	2.58	8	10
1:A:69:TYR:O	1:A:70:ILE:CG1	0.52	2.57	4	4
1:A:39:ILE:HD13	1:A:40:LEU:H	0.52	1.64	5	1
1:A:108:TYR:CE2	1:A:145:LEU:HD21	0.52	2.39	12	1
1:A:67:GLU:CD	1:A:114:LYS:CE	0.52	2.78	24	18
1:A:99:PHE:CZ	1:A:123:VAL:HB	0.52	2.40	8	16
1:A:144:ILE:O	1:A:146:PHE:N	0.52	2.43	24	5
1:A:67:GLU:CG	1:A:98:LEU:HD22	0.52	2.35	17	3
1:A:85:GLY:HA3	1:A:121:TRP:CE3	0.52	2.40	13	2
1:A:60:LEU:CD2	1:A:111:TYR:CZ	0.52	2.92	18	3
1:A:38:ARG:CZ	1:A:48:THR:OG1	0.52	2.58	21	14
1:A:86:LEU:HD23	1:A:87:LEU:N	0.52	2.20	11	2
1:A:61:SER:N	1:A:69:TYR:O	0.51	2.43	19	8
1:A:102:ARG:NH2	1:A:112:ILE:CD1	0.51	2.70	22	5
1:A:71:LYS:HG3	1:A:78:TYR:CE2	0.51	2.40	15	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:LEU:C	1:A:27:LEU:CD1	0.51	2.77	7	6
1:A:87:LEU:CD1	1:A:123:VAL:HG23	0.51	2.34	5	1
1:A:145:LEU:CD1	2:A:178:NTS:O61	0.51	2.58	9	1
1:A:101:GLU:O	1:A:102:ARG:CG	0.51	2.58	16	1
1:A:73:THR:CG2	1:A:73:THR:O	0.51	2.59	1	3
1:A:116:HIS:CE1	1:A:121:TRP:CH2	0.51	2.98	24	3
1:A:109:ASN:HB3	1:A:111:TYR:CE2	0.51	2.40	18	3
1:A:134:GLY:N	1:A:135:PRO:CD	0.51	2.74	3	6
1:A:150:PRO:C	1:A:151:VAL:HG22	0.51	2.24	13	6
1:A:54:GLN:CD	1:A:55:HIS:N	0.51	2.64	22	3
1:A:73:THR:O	1:A:74:GLU:CB	0.51	2.58	10	8
1:A:54:GLN:OE1	1:A:54:GLN:N	0.51	2.43	24	1
1:A:36:PHE:CZ	1:A:51:ARG:HG3	0.51	2.41	18	2
1:A:137:THR:HG23	1:A:137:THR:O	0.51	2.06	12	2
1:A:108:TYR:CD2	1:A:145:LEU:HB3	0.51	2.41	11	8
1:A:112:ILE:O	1:A:113:SER:C	0.51	2.49	12	17
1:A:109:ASN:O	1:A:111:TYR:CZ	0.51	2.64	12	4
1:A:82:ASP:OD1	1:A:88:TYR:CD1	0.51	2.64	25	3
1:A:26:LYS:CE	1:A:58:LEU:O	0.51	2.58	16	3
1:A:77:GLN:C	1:A:78:TYR:CD1	0.51	2.84	15	2
1:A:36:PHE:CZ	1:A:51:ARG:NE	0.51	2.78	17	1
1:A:45:VAL:CG1	1:A:87:LEU:O	0.51	2.59	6	7
1:A:99:PHE:CE2	1:A:123:VAL:HG21	0.51	2.41	18	2
1:A:83:THR:HG23	1:A:116:HIS:NE2	0.51	2.21	3	1
1:A:67:GLU:CD	1:A:98:LEU:HD13	0.51	2.26	7	1
1:A:40:LEU:HD23	1:A:44:THR:HB	0.51	1.80	23	4
1:A:31:SER:OG	1:A:145:LEU:CB	0.51	2.59	21	1
1:A:103:LEU:HD21	1:A:105:GLU:O	0.51	2.05	24	1
1:A:39:ILE:HD12	1:A:77:GLN:CG	0.51	2.35	26	1
1:A:31:SER:CB	1:A:108:TYR:CE1	0.51	2.94	7	2
1:A:36:PHE:CD2	1:A:51:ARG:HD3	0.51	2.41	6	4
1:A:105:GLU:CG	1:A:106:ASN:N	0.51	2.71	17	15
1:A:135:PRO:O	1:A:136:ARG:CG	0.51	2.59	2	14
1:A:103:LEU:HD21	1:A:107:HIS:N	0.51	2.20	26	3
1:A:127:LYS:CE	2:A:178:NTS:O11	0.51	2.59	11	2
1:A:27:LEU:CD1	1:A:28:LEU:O	0.51	2.58	21	3
1:A:68:VAL:HG21	1:A:111:TYR:CD2	0.51	2.41	11	1
1:A:135:PRO:O	1:A:136:ARG:CD	0.51	2.59	19	2
1:A:72:SER:O	1:A:73:THR:C	0.50	2.48	23	5
1:A:81:MET:CE	1:A:87:LEU:HD12	0.50	2.35	1	1
1:A:85:GLY:CA	1:A:121:TRP:CZ3	0.50	2.95	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:125:LEU:CD2	1:A:131:CYS:SG	0.50	2.99	25	1
1:A:133:ARG:O	1:A:137:THR:CG2	0.50	2.60	22	2
1:A:108:TYR:CE2	1:A:145:LEU:CG	0.50	2.93	12	1
1:A:149:LEU:O	1:A:149:LEU:CG	0.50	2.59	12	1
1:A:104:GLU:OE1	1:A:145:LEU:CD2	0.50	2.60	19	2
1:A:81:MET:CE	1:A:122:PHE:O	0.50	2.60	21	6
1:A:127:LYS:CE	2:A:178:NTS:O13	0.50	2.59	23	3
1:A:103:LEU:CD2	1:A:107:HIS:N	0.50	2.74	26	1
1:A:111:TYR:O	1:A:122:PHE:CD2	0.50	2.64	1	1
1:A:45:VAL:CG2	1:A:87:LEU:O	0.50	2.59	23	4
1:A:44:THR:CG2	1:A:45:VAL:N	0.50	2.74	5	7
1:A:54:GLN:O	1:A:55:HIS:CD2	0.50	2.64	13	3
1:A:68:VAL:HG11	1:A:101:GLU:CD	0.50	2.26	16	2
1:A:26:LYS:O	1:A:57:GLN:CB	0.50	2.60	7	2
1:A:68:VAL:HG21	1:A:111:TYR:CD1	0.50	2.42	14	2
1:A:57:GLN:O	1:A:58:LEU:CD2	0.50	2.59	17	1
1:A:39:ILE:CG2	1:A:75:THR:HG21	0.50	2.35	25	1
1:A:26:LYS:O	1:A:57:GLN:CG	0.50	2.59	19	5
1:A:112:ILE:HD11	1:A:120:ASN:CA	0.50	2.37	9	1
1:A:109:ASN:CB	1:A:111:TYR:CZ	0.50	2.94	14	4
1:A:68:VAL:O	1:A:99:PHE:N	0.50	2.44	5	16
1:A:38:ARG:NH2	1:A:48:THR:CG2	0.50	2.74	4	3
1:A:132:LYS:CG	1:A:136:ARG:O	0.50	2.60	9	1
1:A:62:ALA:CA	1:A:68:VAL:HG12	0.50	2.36	19	6
1:A:122:PHE:CD1	1:A:138:HIS:HA	0.50	2.41	3	4
1:A:38:ARG:HH21	1:A:48:THR:HG21	0.50	1.65	4	3
1:A:51:ARG:O	1:A:51:ARG:CG	0.50	2.60	5	5
1:A:80:ALA:HB1	1:A:88:TYR:CE1	0.50	2.42	15	2
1:A:108:TYR:CD1	1:A:147:LEU:HD23	0.50	2.41	18	4
1:A:54:GLN:NE2	1:A:55:HIS:CG	0.50	2.80	15	2
1:A:40:LEU:CD1	1:A:44:THR:O	0.50	2.59	26	4
1:A:96:GLU:OE2	1:A:115:LYS:CD	0.50	2.60	22	1
1:A:83:THR:O	1:A:121:TRP:CZ3	0.50	2.65	23	1
1:A:36:PHE:N	1:A:48:THR:O	0.50	2.45	12	13
1:A:39:ILE:CG2	1:A:72:SER:OG	0.50	2.60	1	6
1:A:112:ILE:O	1:A:114:LYS:N	0.50	2.45	1	12
1:A:138:HIS:N	1:A:138:HIS:ND1	0.50	2.60	4	3
1:A:81:MET:SD	1:A:87:LEU:CD1	0.50	3.00	16	4
1:A:69:TYR:CD2	1:A:97:CYS:SG	0.50	3.05	19	1
1:A:150:PRO:O	1:A:151:VAL:CG1	0.49	2.60	11	18
1:A:109:ASN:HB3	1:A:111:TYR:CZ	0.49	2.41	14	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:PHE:CE2	1:A:51:ARG:HG2	0.49	2.41	18	1
1:A:41:PRO:CD	1:A:54:GLN:OE1	0.49	2.59	23	2
1:A:27:LEU:O	1:A:27:LEU:CG	0.49	2.60	6	5
1:A:94:ASN:O	1:A:96:GLU:N	0.49	2.46	3	17
1:A:69:TYR:CE1	1:A:98:LEU:HD21	0.49	2.41	2	3
1:A:29:TYR:CE1	1:A:36:PHE:CZ	0.49	3.00	7	2
1:A:69:TYR:CE2	1:A:98:LEU:HG	0.49	2.42	8	3
1:A:104:GLU:HG2	1:A:145:LEU:HD11	0.49	1.83	9	1
1:A:68:VAL:HG22	1:A:101:GLU:HB2	0.49	1.82	12	2
1:A:73:THR:O	1:A:73:THR:HG23	0.49	2.07	5	3
1:A:138:HIS:C	2:A:178:NTS:O63	0.49	2.51	1	1
1:A:54:GLN:NE2	1:A:55:HIS:N	0.49	2.60	6	2
1:A:27:LEU:O	1:A:149:LEU:CD2	0.49	2.60	9	1
1:A:108:TYR:CE2	1:A:145:LEU:HG	0.49	2.42	12	3
1:A:84:ASP:OD2	1:A:133:ARG:CZ	0.49	2.60	14	1
1:A:56:ILE:O	1:A:58:LEU:CD1	0.49	2.60	18	4
1:A:107:HIS:HB3	1:A:147:LEU:HD23	0.49	1.83	3	2
1:A:110:THR:HG22	1:A:144:ILE:O	0.49	2.07	12	1
1:A:91:GLN:O	1:A:91:GLN:CG	0.49	2.60	19	3
1:A:38:ARG:NE	1:A:48:THR:OG1	0.49	2.45	2	23
1:A:122:PHE:N	1:A:137:THR:O	0.49	2.46	8	7
1:A:82:ASP:CG	1:A:88:TYR:CG	0.49	2.86	25	5
1:A:38:ARG:HD3	1:A:40:LEU:HD21	0.49	1.83	7	1
1:A:110:THR:CG2	1:A:144:ILE:HG13	0.49	2.37	22	5
1:A:56:ILE:O	1:A:56:ILE:CD1	0.49	2.59	24	5
1:A:36:PHE:CD1	1:A:50:ASP:HA	0.49	2.42	10	5
1:A:80:ALA:HB3	1:A:88:TYR:O	0.49	2.07	19	6
1:A:132:LYS:CE	1:A:136:ARG:O	0.49	2.60	11	1
1:A:60:LEU:CD1	1:A:111:TYR:OH	0.49	2.60	24	5
1:A:147:LEU:HD23	1:A:147:LEU:C	0.49	2.29	9	1
1:A:121:TRP:CE2	1:A:134:GLY:CA	0.49	2.96	13	1
1:A:120:ASN:O	1:A:122:PHE:N	0.49	2.46	18	11
1:A:40:LEU:CD2	1:A:44:THR:HG22	0.49	2.38	23	3
1:A:54:GLN:HE21	1:A:55:HIS:N	0.49	2.06	15	4
1:A:147:LEU:O	1:A:149:LEU:CD2	0.49	2.60	10	3
1:A:122:PHE:O	1:A:137:THR:OG1	0.49	2.30	9	1
1:A:27:LEU:HD21	1:A:51:ARG:CZ	0.49	2.37	13	2
1:A:69:TYR:CE1	1:A:98:LEU:HD11	0.49	2.43	19	1
1:A:101:GLU:HG3	1:A:111:TYR:CD2	0.49	2.43	13	8
1:A:81:MET:HE1	1:A:122:PHE:O	0.49	2.08	14	4
1:A:145:LEU:N	1:A:145:LEU:CD2	0.49	2.73	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:LEU:HD21	1:A:146:PHE:CG	0.49	2.43	6	1
1:A:73:THR:O	1:A:74:GLU:CG	0.49	2.60	10	2
1:A:41:PRO:CD	1:A:55:HIS:CE1	0.49	2.96	17	1
1:A:121:TRP:CE2	1:A:134:GLY:C	0.49	2.86	24	1
1:A:71:LYS:O	1:A:73:THR:N	0.48	2.46	22	11
1:A:93:PRO:C	1:A:94:ASN:ND2	0.48	2.66	3	20
1:A:119:LYS:O	1:A:138:HIS:CD2	0.48	2.66	1	1
1:A:119:LYS:HB3	1:A:121:TRP:CD1	0.48	2.43	7	20
1:A:39:ILE:CD1	1:A:45:VAL:CG1	0.48	2.85	25	2
1:A:63:GLU:CG	1:A:98:LEU:HD21	0.48	2.38	9	5
1:A:75:THR:O	1:A:76:GLY:C	0.48	2.51	23	8
1:A:60:LEU:N	1:A:60:LEU:CD1	0.48	2.75	2	2
1:A:139:TYR:HA	1:A:144:ILE:CD1	0.48	2.38	9	1
1:A:27:LEU:CD1	1:A:149:LEU:HD21	0.48	2.37	12	2
1:A:121:TRP:CA	1:A:137:THR:HG23	0.48	2.37	1	2
1:A:104:GLU:OE1	1:A:105:GLU:N	0.48	2.46	6	16
1:A:37:LEU:O	1:A:58:LEU:CD1	0.48	2.61	4	1
1:A:71:LYS:HZ3	1:A:76:GLY:HA2	0.48	1.68	14	1
1:A:36:PHE:CG	1:A:51:ARG:HG3	0.48	2.43	18	2
1:A:101:GLU:HG3	1:A:111:TYR:CE2	0.48	2.43	5	10
1:A:51:ARG:NE	1:A:51:ARG:O	0.48	2.46	15	5
1:A:40:LEU:CD2	1:A:53:ASP:OD2	0.48	2.62	6	1
1:A:80:ALA:N	1:A:88:TYR:O	0.48	2.47	17	18
1:A:125:LEU:HD23	1:A:125:LEU:N	0.48	2.23	16	1
1:A:31:SER:N	1:A:145:LEU:O	0.48	2.45	21	2
1:A:99:PHE:CE1	1:A:123:VAL:HB	0.48	2.43	12	16
1:A:148:PRO:C	1:A:150:PRO:HD3	0.48	2.29	12	1
1:A:103:LEU:HD23	1:A:108:TYR:O	0.48	2.08	21	1
1:A:104:GLU:CA	1:A:104:GLU:OE1	0.48	2.61	21	1
1:A:71:LYS:HG3	1:A:78:TYR:CE1	0.48	2.44	25	4
1:A:113:SER:OG	1:A:116:HIS:ND1	0.48	2.47	25	12
1:A:58:LEU:CD2	1:A:79:LEU:HD22	0.48	2.38	22	1
1:A:133:ARG:O	1:A:135:PRO:N	0.48	2.47	24	1
1:A:66:GLY:N	1:A:101:GLU:O	0.48	2.47	7	5
1:A:104:GLU:CD	1:A:104:GLU:C	0.48	2.73	7	10
1:A:78:TYR:O	1:A:89:GLY:CA	0.48	2.62	12	6
1:A:55:HIS:ND1	1:A:74:GLU:CG	0.48	2.76	12	1
1:A:75:THR:CG2	1:A:77:GLN:OE1	0.48	2.61	18	2
1:A:105:GLU:OE1	1:A:108:TYR:CE2	0.48	2.67	22	1
1:A:149:LEU:O	1:A:149:LEU:CD1	0.47	2.61	12	5
1:A:57:GLN:C	1:A:58:LEU:HD12	0.47	2.29	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:71:LYS:HG2	1:A:78:TYR:CD2	0.47	2.44	15	1
1:A:133:ARG:O	1:A:136:ARG:N	0.47	2.47	24	1
1:A:92:THR:C	1:A:94:ASN:ND2	0.47	2.67	15	11
1:A:51:ARG:N	1:A:51:ARG:HD3	0.47	2.24	7	5
1:A:112:ILE:CD1	1:A:122:PHE:CZ	0.47	2.96	3	5
1:A:104:GLU:OE1	1:A:145:LEU:CD1	0.47	2.62	17	2
1:A:109:ASN:HB3	1:A:111:TYR:CE1	0.47	2.44	14	1
1:A:104:GLU:OE1	1:A:145:LEU:HD13	0.47	2.10	16	1
1:A:133:ARG:CG	1:A:133:ARG:O	0.47	2.62	17	1
1:A:45:VAL:C	1:A:46:ASP:CG	0.47	2.73	4	25
1:A:53:ASP:HB3	1:A:56:ILE:CG2	0.47	2.39	10	8
1:A:112:ILE:HG13	1:A:122:PHE:CD2	0.47	2.44	3	1
1:A:78:TYR:N	1:A:78:TYR:CD1	0.47	2.83	8	2
1:A:100:LEU:HD13	1:A:117:ALA:HB1	0.47	1.86	8	2
1:A:59:GLN:CB	1:A:73:THR:HG23	0.47	2.39	25	3
1:A:113:SER:O	1:A:117:ALA:N	0.47	2.48	24	6
1:A:26:LYS:NZ	1:A:58:LEU:C	0.47	2.68	8	1
1:A:75:THR:O	1:A:77:GLN:N	0.47	2.48	12	1
1:A:36:PHE:CD1	1:A:51:ARG:HD3	0.47	2.44	26	1
1:A:75:THR:O	1:A:75:THR:HG23	0.47	2.09	26	1
1:A:27:LEU:HD21	1:A:149:LEU:HD11	0.47	1.87	5	1
1:A:99:PHE:O	1:A:101:GLU:N	0.47	2.47	17	4
1:A:104:GLU:OE1	1:A:105:GLU:CB	0.47	2.62	19	7
1:A:108:TYR:CD2	1:A:145:LEU:CG	0.47	2.98	12	2
1:A:84:ASP:O	1:A:134:GLY:N	0.47	2.48	17	2
1:A:55:HIS:CE1	1:A:74:GLU:HG2	0.47	2.44	23	1
1:A:41:PRO:HG3	1:A:55:HIS:CD2	0.47	2.43	4	1
1:A:111:TYR:CD1	1:A:111:TYR:N	0.47	2.82	4	3
1:A:111:TYR:CD1	1:A:123:VAL:HG11	0.47	2.44	7	1
1:A:147:LEU:HD23	1:A:148:PRO:HD2	0.47	1.87	13	1
1:A:78:TYR:CD1	1:A:78:TYR:N	0.47	2.83	15	1
1:A:121:TRP:NE1	1:A:134:GLY:O	0.47	2.48	24	5
1:A:72:SER:N	1:A:77:GLN:O	0.47	2.48	5	4
1:A:104:GLU:CD	1:A:145:LEU:CD2	0.47	2.83	13	2
1:A:83:THR:CG2	1:A:115:LYS:CE	0.47	2.93	13	1
1:A:39:ILE:C	1:A:40:LEU:CD1	0.47	2.83	15	1
1:A:71:LYS:HG3	1:A:78:TYR:CZ	0.47	2.45	15	19
1:A:38:ARG:NH2	1:A:53:ASP:CG	0.47	2.69	7	7
1:A:104:GLU:CG	1:A:145:LEU:HD21	0.47	2.40	19	2
1:A:82:ASP:O	1:A:116:HIS:NE2	0.46	2.47	25	3
1:A:104:GLU:HG3	1:A:145:LEU:HD21	0.46	1.86	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:LYS:NZ	1:A:58:LEU:O	0.46	2.48	16	4
1:A:53:ASP:HB3	1:A:56:ILE:HG23	0.46	1.86	19	2
1:A:101:GLU:CD	1:A:102:ARG:N	0.46	2.68	24	1
1:A:46:ASP:N	1:A:46:ASP:OD1	0.46	2.47	11	6
1:A:63:GLU:HG2	1:A:69:TYR:CE2	0.46	2.45	4	2
1:A:53:ASP:HB2	1:A:56:ILE:CG2	0.46	2.41	15	6
1:A:94:ASN:O	1:A:98:LEU:HD23	0.46	2.11	4	2
1:A:36:PHE:CE1	1:A:50:ASP:HA	0.46	2.46	17	5
1:A:38:ARG:CB	1:A:56:ILE:HG22	0.46	2.40	25	3
1:A:36:PHE:CE1	1:A:51:ARG:CD	0.46	2.97	26	1
1:A:81:MET:CE	1:A:85:GLY:O	0.46	2.64	1	3
1:A:121:TRP:CH2	1:A:134:GLY:HA2	0.46	2.45	8	2
1:A:111:TYR:CD1	1:A:123:VAL:CG1	0.46	2.99	7	2
1:A:71:LYS:CD	1:A:77:GLN:O	0.46	2.63	8	1
1:A:26:LYS:NZ	1:A:27:LEU:C	0.46	2.69	10	2
1:A:36:PHE:CD2	1:A:51:ARG:HB3	0.46	2.46	5	1
1:A:29:TYR:CE1	1:A:30:CYS:O	0.46	2.69	12	3
1:A:108:TYR:CG	1:A:145:LEU:CB	0.46	2.98	11	2
1:A:88:TYR:CE2	1:A:90:SER:HB2	0.46	2.46	18	1
1:A:122:PHE:N	1:A:137:THR:OG1	0.46	2.49	22	6
1:A:56:ILE:C	1:A:56:ILE:HD13	0.46	2.31	15	3
1:A:78:TYR:CD1	1:A:93:PRO:HB3	0.46	2.46	22	2
1:A:126:LYS:CD	1:A:128:ASN:OD1	0.46	2.64	22	1
1:A:36:PHE:CZ	1:A:51:ARG:CD	0.46	2.99	26	1
1:A:70:ILE:HG22	1:A:79:LEU:HB2	0.46	1.88	25	4
1:A:74:GLU:CG	1:A:75:THR:N	0.46	2.79	3	1
1:A:121:TRP:CE2	1:A:134:GLY:HA3	0.46	2.46	7	4
1:A:63:GLU:HG2	1:A:69:TYR:CD2	0.46	2.45	4	2
1:A:104:GLU:CG	1:A:145:LEU:HD11	0.46	2.41	9	1
1:A:71:LYS:NZ	1:A:77:GLN:O	0.46	2.49	24	2
1:A:71:LYS:CE	1:A:71:LYS:C	0.46	2.83	25	1
1:A:121:TRP:NE1	1:A:134:GLY:C	0.46	2.69	7	4
1:A:104:GLU:CD	1:A:105:GLU:N	0.46	2.69	4	3
1:A:139:TYR:C	2:A:178:NTS:O63	0.46	2.54	9	4
1:A:84:ASP:O	1:A:86:LEU:N	0.46	2.49	17	1
1:A:87:LEU:HD12	1:A:87:LEU:H	0.46	1.69	17	1
1:A:31:SER:HB2	1:A:108:TYR:CD1	0.46	2.46	14	3
1:A:36:PHE:CD1	1:A:51:ARG:HG3	0.46	2.46	18	2
1:A:94:ASN:ND2	1:A:94:ASN:N	0.46	2.64	15	3
1:A:55:HIS:CG	1:A:74:GLU:HG2	0.46	2.46	26	5
1:A:122:PHE:CD1	1:A:144:ILE:HD12	0.46	2.46	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:GLU:OE1	1:A:145:LEU:CG	0.46	2.64	17	1
1:A:108:TYR:CZ	1:A:145:LEU:HD23	0.46	2.45	17	1
1:A:86:LEU:HD12	1:A:133:ARG:HB3	0.46	1.87	18	1
1:A:108:TYR:CE2	1:A:145:LEU:CD1	0.46	2.97	20	2
1:A:53:ASP:CG	1:A:54:GLN:NE2	0.46	2.69	21	1
1:A:26:LYS:HZ2	1:A:27:LEU:C	0.46	2.14	1	2
1:A:64:SER:O	1:A:65:VAL:C	0.46	2.54	12	7
1:A:54:GLN:HE22	1:A:55:HIS:CD2	0.46	2.28	15	2
1:A:40:LEU:O	1:A:77:GLN:NE2	0.45	2.50	9	3
1:A:46:ASP:OD1	1:A:46:ASP:N	0.45	2.49	18	7
1:A:48:THR:O	1:A:49:ARG:C	0.45	2.55	25	9
1:A:28:LEU:CD2	1:A:146:PHE:CD1	0.45	2.98	11	2
1:A:121:TRP:CD2	1:A:134:GLY:HA3	0.45	2.46	15	1
1:A:51:ARG:O	1:A:51:ARG:CD	0.45	2.64	15	3
1:A:71:LYS:HG3	1:A:78:TYR:CD2	0.45	2.46	4	1
1:A:149:LEU:N	1:A:150:PRO:CD	0.45	2.79	12	1
1:A:56:ILE:HG12	1:A:56:ILE:O	0.45	2.12	14	1
1:A:104:GLU:HB2	1:A:110:THR:CG2	0.45	2.41	23	3
1:A:37:LEU:CD1	1:A:125:LEU:HD11	0.45	2.41	26	1
1:A:57:GLN:OE1	1:A:74:GLU:CG	0.45	2.64	14	1
1:A:122:PHE:O	1:A:137:THR:HG21	0.45	2.10	20	2
1:A:36:PHE:CE1	1:A:51:ARG:HG3	0.45	2.45	18	2
1:A:69:TYR:CZ	1:A:98:LEU:HG	0.45	2.46	20	14
1:A:38:ARG:NH1	1:A:53:ASP:OD1	0.45	2.49	17	1
1:A:112:ILE:O	1:A:112:ILE:HG22	0.45	2.12	18	2
1:A:119:LYS:HD3	1:A:121:TRP:CZ2	0.45	2.45	23	1
1:A:138:HIS:O	1:A:139:TYR:O	0.45	2.34	21	15
1:A:115:LYS:HB3	1:A:116:HIS:CE1	0.45	2.46	2	1
1:A:48:THR:O	1:A:50:ASP:N	0.45	2.50	4	1
1:A:75:THR:OG1	1:A:76:GLY:N	0.45	2.49	10	5
1:A:55:HIS:CE1	1:A:74:GLU:HG3	0.45	2.46	13	1
1:A:39:ILE:O	1:A:54:GLN:NE2	0.45	2.50	14	1
1:A:139:TYR:CA	2:A:178:NTS:O62	0.45	2.64	19	1
1:A:54:GLN:OE1	1:A:55:HIS:N	0.45	2.42	24	1
1:A:108:TYR:CG	1:A:145:LEU:HG	0.45	2.46	24	1
1:A:52:SER:O	1:A:52:SER:OG	0.45	2.32	19	4
1:A:68:VAL:HG11	1:A:101:GLU:OE2	0.45	2.11	10	1
1:A:53:ASP:OD2	1:A:54:GLN:NE2	0.45	2.50	21	2
1:A:37:LEU:CG	1:A:125:LEU:HD21	0.45	2.42	10	2
1:A:111:TYR:O	1:A:122:PHE:CD1	0.45	2.69	7	1
1:A:81:MET:CE	1:A:137:THR:HG21	0.45	2.42	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:101:GLU:CD	1:A:109:ASN:ND2	0.45	2.70	21	2
1:A:121:TRP:CD2	1:A:134:GLY:CA	0.45	3.00	13	1
1:A:112:ILE:CD1	1:A:122:PHE:CE2	0.45	2.90	14	1
1:A:57:GLN:N	1:A:57:GLN:OE1	0.45	2.50	18	2
1:A:54:GLN:CG	1:A:55:HIS:CE1	0.45	2.99	19	1
1:A:135:PRO:O	1:A:136:ARG:NE	0.45	2.50	25	1
1:A:39:ILE:HD12	1:A:77:GLN:HG2	0.45	1.87	26	1
1:A:120:ASN:O	1:A:137:THR:O	0.45	2.35	4	5
1:A:57:GLN:NE2	1:A:73:THR:O	0.45	2.50	6	1
1:A:94:ASN:N	1:A:97:CYS:SG	0.45	2.89	13	1
1:A:38:ARG:NH1	1:A:53:ASP:OD2	0.45	2.50	21	1
1:A:100:LEU:O	1:A:112:ILE:N	0.45	2.49	23	1
1:A:79:LEU:HD13	1:A:80:ALA:N	0.45	2.27	25	1
1:A:35:HIS:NE2	1:A:129:GLY:CA	0.45	2.80	10	3
1:A:94:ASN:O	1:A:97:CYS:N	0.45	2.50	13	4
1:A:111:TYR:HB2	1:A:123:VAL:HG11	0.45	1.89	22	6
1:A:83:THR:HA	1:A:116:HIS:CD2	0.45	2.47	18	2
1:A:71:LYS:CG	1:A:78:TYR:CD2	0.45	3.00	15	1
1:A:102:ARG:O	1:A:110:THR:OG1	0.45	2.35	16	1
1:A:71:LYS:HZ2	1:A:76:GLY:HA2	0.45	1.72	25	1
1:A:92:THR:O	1:A:94:ASN:ND2	0.44	2.50	15	2
1:A:101:GLU:OE2	1:A:103:LEU:N	0.44	2.50	20	1
1:A:132:LYS:HB3	1:A:137:THR:HG22	0.44	1.88	22	1
1:A:54:GLN:NE2	1:A:55:HIS:ND1	0.44	2.64	24	1
1:A:38:ARG:NH2	1:A:48:THR:OG1	0.44	2.50	21	3
1:A:82:ASP:CG	1:A:88:TYR:CE1	0.44	2.91	6	1
1:A:39:ILE:O	1:A:39:ILE:HG22	0.44	2.12	7	6
1:A:94:ASN:O	1:A:95:GLU:C	0.44	2.56	13	3
1:A:87:LEU:HD11	1:A:99:PHE:HZ	0.44	1.72	16	1
1:A:113:SER:N	1:A:121:TRP:O	0.44	2.50	19	3
1:A:139:TYR:N	2:A:178:NTS:O61	0.44	2.50	24	1
1:A:127:LYS:CE	2:A:178:NTS:O33	0.44	2.66	1	1
1:A:101:GLU:OE2	1:A:109:ASN:ND2	0.44	2.50	14	4
1:A:110:THR:HG21	1:A:145:LEU:CD2	0.44	2.42	22	1
1:A:104:GLU:HG3	1:A:145:LEU:HD11	0.44	1.90	25	1
1:A:131:CYS:SG	1:A:132:LYS:N	0.44	2.90	16	2
1:A:104:GLU:CD	1:A:105:GLU:CG	0.44	2.86	25	2
1:A:115:LYS:HD3	1:A:116:HIS:CD2	0.44	2.48	18	1
1:A:132:LYS:NZ	1:A:136:ARG:O	0.44	2.50	11	1
1:A:35:HIS:NE2	1:A:128:ASN:C	0.44	2.71	16	1
1:A:139:TYR:CD1	2:A:178:NTS:O62	0.44	2.71	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:138:HIS:O	2:A:178:NTS:O63	0.44	2.36	22	1
1:A:26:LYS:NZ	1:A:73:THR:OG1	0.44	2.49	23	1
1:A:123:VAL:O	1:A:123:VAL:CG2	0.44	2.65	3	3
1:A:112:ILE:CD1	1:A:120:ASN:HA	0.44	2.42	9	1
1:A:115:LYS:C	1:A:116:HIS:CD2	0.44	2.91	18	1
1:A:122:PHE:HB3	1:A:144:ILE:CG2	0.44	2.43	18	1
1:A:39:ILE:CG2	1:A:75:THR:CG2	0.44	2.96	19	1
1:A:30:CYS:HA	1:A:145:LEU:O	0.44	2.12	21	1
1:A:26:LYS:CG	1:A:150:PRO:HA	0.44	2.43	23	1
1:A:100:LEU:O	1:A:111:TYR:HA	0.44	2.13	17	2
1:A:81:MET:HE3	1:A:85:GLY:O	0.44	2.13	19	2
1:A:80:ALA:HB3	1:A:88:TYR:CE1	0.44	2.47	10	2
1:A:67:GLU:CG	1:A:98:LEU:HD13	0.44	2.42	26	2
1:A:121:TRP:CD1	1:A:134:GLY:CA	0.44	2.99	14	1
1:A:109:ASN:O	1:A:111:TYR:CG	0.44	2.71	17	3
1:A:27:LEU:HD21	1:A:51:ARG:NH2	0.44	2.28	2	1
1:A:65:VAL:O	1:A:67:GLU:CD	0.44	2.56	4	4
1:A:31:SER:HB2	1:A:108:TYR:CZ	0.44	2.48	6	2
1:A:57:GLN:NE2	1:A:74:GLU:OE1	0.44	2.50	8	1
1:A:59:GLN:HB2	1:A:73:THR:CG2	0.44	2.43	11	2
1:A:112:ILE:HG13	1:A:122:PHE:CD1	0.44	2.48	14	1
1:A:137:THR:C	1:A:138:HIS:ND1	0.44	2.70	25	1
1:A:62:ALA:HA	1:A:68:VAL:CG1	0.44	2.43	2	3
1:A:137:THR:OG1	1:A:137:THR:O	0.44	2.36	6	2
1:A:66:GLY:HA2	1:A:101:GLU:O	0.44	2.12	22	2
1:A:44:THR:C	1:A:45:VAL:CG2	0.44	2.86	23	1
1:A:26:LYS:CE	1:A:28:LEU:N	0.43	2.80	6	1
1:A:30:CYS:HB2	1:A:35:HIS:N	0.43	2.28	18	2
1:A:61:SER:O	1:A:62:ALA:C	0.43	2.57	19	13
1:A:127:LYS:N	1:A:127:LYS:HD2	0.43	2.28	10	8
1:A:68:VAL:CG1	1:A:101:GLU:HB3	0.43	2.44	13	1
1:A:104:GLU:CB	1:A:110:THR:CG2	0.43	2.96	24	2
1:A:102:ARG:N	1:A:102:ARG:CD	0.43	2.81	2	1
1:A:27:LEU:CD2	1:A:149:LEU:HD11	0.43	2.43	5	1
1:A:77:GLN:O	1:A:78:TYR:CD1	0.43	2.71	10	1
1:A:35:HIS:CE1	1:A:127:LYS:C	0.43	2.92	16	1
1:A:123:VAL:O	1:A:123:VAL:HG13	0.43	2.14	24	1
1:A:35:HIS:CG	1:A:49:ARG:HA	0.43	2.48	14	4
1:A:86:LEU:O	1:A:87:LEU:C	0.43	2.57	23	17
1:A:112:ILE:HG23	1:A:117:ALA:CB	0.43	2.44	6	1
1:A:82:ASP:O	1:A:85:GLY:N	0.43	2.49	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:PHE:O	1:A:37:LEU:O	0.43	2.35	26	5
1:A:104:GLU:OE2	1:A:105:GLU:CG	0.43	2.67	11	1
1:A:68:VAL:CG1	1:A:101:GLU:CB	0.43	2.95	13	1
1:A:97:CYS:SG	1:A:98:LEU:N	0.43	2.91	13	1
1:A:29:TYR:CD1	1:A:30:CYS:N	0.43	2.86	21	2
1:A:68:VAL:CG1	1:A:101:GLU:HB2	0.43	2.44	21	2
1:A:101:GLU:C	1:A:102:ARG:HG2	0.43	2.33	18	1
1:A:31:SER:OG	1:A:145:LEU:HB2	0.43	2.12	21	1
1:A:136:ARG:C	1:A:137:THR:CG2	0.43	2.86	21	1
1:A:71:LYS:HZ3	1:A:77:GLN:N	0.43	2.11	2	1
1:A:68:VAL:CG2	1:A:111:TYR:CD2	0.43	3.01	26	1
1:A:139:TYR:C	2:A:178:NTS:O62	0.43	2.57	11	2
1:A:101:GLU:HB2	1:A:111:TYR:CD2	0.43	2.49	24	1
1:A:127:LYS:N	1:A:127:LYS:CD	0.43	2.78	6	2
1:A:55:HIS:CG	1:A:74:GLU:HG3	0.43	2.49	23	2
1:A:27:LEU:CD2	1:A:51:ARG:CZ	0.43	2.96	24	1
1:A:53:ASP:OD1	1:A:54:GLN:NE2	0.43	2.52	2	1
1:A:29:TYR:HB2	1:A:149:LEU:CD2	0.43	2.44	9	2
1:A:55:HIS:NE2	1:A:74:GLU:OE2	0.43	2.51	12	1
1:A:138:HIS:ND1	1:A:138:HIS:N	0.43	2.66	1	1
1:A:147:LEU:HD22	1:A:148:PRO:HD2	0.43	1.91	3	1
1:A:74:GLU:OE1	1:A:74:GLU:CA	0.43	2.67	11	1
1:A:68:VAL:HG21	1:A:111:TYR:CE1	0.43	2.49	14	2
1:A:55:HIS:CE1	1:A:74:GLU:CG	0.43	3.02	23	1
1:A:27:LEU:CD1	1:A:36:PHE:CE1	0.43	3.02	26	1
1:A:36:PHE:CG	1:A:51:ARG:HD3	0.43	2.49	26	1
1:A:45:VAL:HG23	1:A:87:LEU:O	0.42	2.14	2	1
1:A:123:VAL:O	1:A:123:VAL:CG1	0.42	2.67	9	1
1:A:105:GLU:OE1	1:A:106:ASN:N	0.42	2.50	13	1
1:A:139:TYR:CD1	1:A:144:ILE:HD11	0.42	2.49	13	2
1:A:26:LYS:CD	1:A:59:GLN:OE1	0.42	2.66	24	1
1:A:112:ILE:O	1:A:112:ILE:CG2	0.42	2.67	24	1
1:A:68:VAL:CG2	1:A:101:GLU:HB2	0.42	2.43	12	2
1:A:39:ILE:O	1:A:40:LEU:HD13	0.42	2.14	2	2
1:A:62:ALA:CB	1:A:68:VAL:CG1	0.42	2.94	19	3
1:A:101:GLU:OE2	1:A:109:ASN:CB	0.42	2.67	5	1
1:A:138:HIS:O	2:A:178:NTS:O62	0.42	2.37	16	5
1:A:54:GLN:NE2	1:A:55:HIS:O	0.42	2.51	6	1
1:A:124:GLY:HA2	1:A:146:PHE:CZ	0.42	2.49	26	2
1:A:85:GLY:HA3	1:A:121:TRP:CZ3	0.42	2.49	13	1
1:A:38:ARG:NH2	1:A:53:ASP:OD2	0.42	2.52	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:139:TYR:O	2:A:178:NTS:O63	0.42	2.37	20	2
1:A:78:TYR:CE2	1:A:93:PRO:HG3	0.42	2.49	22	1
1:A:108:TYR:O	1:A:109:ASN:CG	0.42	2.58	1	3
1:A:26:LYS:CG	1:A:150:PRO:HB3	0.42	2.43	24	3
1:A:94:ASN:C	1:A:96:GLU:N	0.42	2.71	7	5
1:A:114:LYS:C	1:A:116:HIS:N	0.42	2.73	11	1
1:A:139:TYR:HA	2:A:178:NTS:O62	0.42	2.14	19	1
1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CD1	0.42	2.82	3	1
1:A:139:TYR:O	2:A:178:NTS:O62	0.42	2.38	16	2
1:A:39:ILE:HD11	1:A:79:LEU:HD22	0.42	1.90	7	1
1:A:102:ARG:NH2	1:A:122:PHE:CZ	0.42	2.87	9	1
1:A:38:ARG:NH2	1:A:53:ASP:OD1	0.42	2.52	24	2
1:A:145:LEU:HD21	2:A:178:NTS:O61	0.42	2.14	13	1
1:A:48:THR:C	1:A:50:ASP:N	0.42	2.73	1	5
1:A:26:LYS:HG3	1:A:150:PRO:CA	0.42	2.45	6	2
1:A:26:LYS:CD	1:A:26:LYS:C	0.42	2.88	8	1
1:A:26:LYS:HZ2	1:A:58:LEU:C	0.42	2.18	8	1
1:A:145:LEU:CD2	2:A:178:NTS:O61	0.42	2.67	13	1
1:A:39:ILE:CD1	1:A:79:LEU:HD12	0.42	2.44	14	1
1:A:70:ILE:CG2	1:A:79:LEU:HB3	0.42	2.44	17	1
1:A:84:ASP:C	1:A:86:LEU:N	0.42	2.72	17	1
1:A:39:ILE:HD13	1:A:72:SER:HB3	0.42	1.91	3	1
1:A:26:LYS:HZ3	1:A:58:LEU:C	0.42	2.17	4	1
1:A:39:ILE:HG23	1:A:77:GLN:OE1	0.42	2.14	12	1
1:A:101:GLU:OE2	1:A:102:ARG:O	0.42	2.38	23	1
1:A:111:TYR:HB2	1:A:123:VAL:CG1	0.42	2.44	17	6
1:A:66:GLY:O	1:A:67:GLU:OE1	0.42	2.38	4	2
1:A:71:LYS:HG2	1:A:78:TYR:CG	0.42	2.50	8	2
1:A:112:ILE:HG22	1:A:117:ALA:CB	0.42	2.45	12	2
1:A:58:LEU:O	1:A:73:THR:OG1	0.42	2.38	25	2
1:A:107:HIS:O	1:A:108:TYR:O	0.42	2.38	22	5
1:A:27:LEU:O	1:A:27:LEU:HG	0.42	2.14	6	2
1:A:38:ARG:HA	1:A:56:ILE:HA	0.42	1.92	10	2
1:A:38:ARG:N	1:A:46:ASP:O	0.42	2.48	12	1
1:A:68:VAL:CG1	1:A:101:GLU:OE1	0.42	2.63	15	1
1:A:81:MET:HE3	1:A:122:PHE:O	0.42	2.15	22	1
1:A:113:SER:HB2	1:A:116:HIS:CE1	0.42	2.50	10	1
1:A:93:PRO:HA	1:A:97:CYS:SG	0.42	2.55	13	2
1:A:147:LEU:CD2	1:A:148:PRO:HD2	0.42	2.45	13	1
1:A:132:LYS:CG	1:A:136:ARG:HB3	0.42	2.45	18	1
1:A:26:LYS:HE3	1:A:27:LEU:N	0.42	2.30	20	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:125:LEU:CD2	0.42	2.68	3	1
1:A:124:GLY:HA3	1:A:144:ILE:HG22	0.42	1.92	5	1
1:A:71:LYS:NZ	1:A:72:SER:C	0.42	2.73	6	1
1:A:62:ALA:HB1	1:A:68:VAL:HG12	0.42	1.91	19	2
1:A:78:TYR:CB	1:A:97:CYS:SG	0.42	3.08	15	1
1:A:27:LEU:HD11	1:A:36:PHE:CE2	0.42	2.49	18	1
1:A:69:TYR:CE1	1:A:98:LEU:CD1	0.42	3.03	19	1
1:A:131:CYS:O	1:A:132:LYS:CD	0.42	2.67	21	1
1:A:55:HIS:ND1	1:A:57:GLN:OE1	0.41	2.50	12	1
1:A:115:LYS:HE3	1:A:116:HIS:HE2	0.41	1.75	12	1
1:A:78:TYR:O	1:A:79:LEU:C	0.41	2.58	13	1
1:A:125:LEU:HD13	1:A:131:CYS:HA	0.41	1.91	16	1
1:A:67:GLU:CG	1:A:114:LYS:CE	0.41	2.98	24	1
1:A:81:MET:O	1:A:116:HIS:NE2	0.41	2.53	25	1
1:A:137:THR:O	1:A:137:THR:OG1	0.41	2.37	21	3
1:A:93:PRO:O	1:A:94:ASN:CG	0.41	2.59	2	1
1:A:96:GLU:CD	1:A:115:LYS:HZ3	0.41	2.19	3	1
1:A:139:TYR:C	2:A:178:NTS:O61	0.41	2.59	4	1
1:A:132:LYS:HB2	1:A:137:THR:HG23	0.41	1.92	5	1
1:A:145:LEU:HD23	1:A:145:LEU:H	0.41	1.74	5	1
1:A:29:TYR:CG	1:A:36:PHE:CE2	0.41	3.08	7	1
1:A:31:SER:CB	1:A:145:LEU:HB3	0.41	2.45	12	1
1:A:83:THR:CG2	1:A:115:LYS:NZ	0.41	2.83	13	1
1:A:44:THR:HG22	1:A:45:VAL:N	0.41	2.30	14	1
1:A:113:SER:O	1:A:116:HIS:N	0.41	2.46	8	1
1:A:59:GLN:O	1:A:71:LYS:N	0.41	2.50	17	1
1:A:70:ILE:CG2	1:A:79:LEU:HB2	0.41	2.45	3	6
1:A:39:ILE:CD1	1:A:79:LEU:HD22	0.41	2.45	12	1
1:A:38:ARG:CZ	1:A:53:ASP:OD2	0.41	2.68	21	1
1:A:60:LEU:CD2	1:A:70:ILE:HG12	0.41	2.45	21	1
1:A:68:VAL:CG2	1:A:101:GLU:CB	0.41	2.99	1	1
1:A:67:GLU:HG3	1:A:114:LYS:CD	0.41	2.46	2	1
1:A:138:HIS:O	2:A:178:NTS:O61	0.41	2.39	4	1
1:A:101:GLU:OE2	1:A:109:ASN:CG	0.41	2.59	5	2
1:A:46:ASP:HA	1:A:125:LEU:CD2	0.41	2.45	19	1
1:A:132:LYS:CD	1:A:136:ARG:O	0.41	2.69	20	1
1:A:41:PRO:CD	1:A:55:HIS:NE2	0.41	2.84	4	1
1:A:53:ASP:OD2	1:A:54:GLN:OE1	0.41	2.38	6	1
1:A:55:HIS:CG	1:A:74:GLU:CG	0.41	3.04	12	1
1:A:53:ASP:CG	1:A:54:GLN:OE1	0.41	2.59	13	2
1:A:121:TRP:CZ2	1:A:135:PRO:HB3	0.41	2.50	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:GLN:NE2	1:A:74:GLU:CD	0.41	2.74	24	1
1:A:30:CYS:SG	1:A:35:HIS:O	0.41	2.78	14	1
1:A:144:ILE:HD11	2:A:178:NTS:O62	0.41	2.16	15	1
1:A:145:LEU:HD12	1:A:145:LEU:HA	0.41	1.82	24	1
1:A:38:ARG:CD	1:A:48:THR:OG1	0.41	2.68	26	1
1:A:104:GLU:CD	1:A:104:GLU:O	0.41	2.59	7	1
1:A:100:LEU:HB3	1:A:112:ILE:HG22	0.41	1.93	9	1
1:A:122:PHE:CE2	1:A:144:ILE:CD1	0.41	3.04	12	1
1:A:123:VAL:CG2	1:A:123:VAL:O	0.41	2.68	14	1
1:A:70:ILE:CG2	1:A:79:LEU:CB	0.41	2.98	24	1
1:A:26:LYS:NZ	1:A:27:LEU:O	0.41	2.49	1	1
1:A:62:ALA:HA	1:A:68:VAL:CB	0.41	2.46	1	2
1:A:124:GLY:O	1:A:131:CYS:SG	0.41	2.79	1	1
1:A:59:GLN:OE1	1:A:73:THR:HG21	0.41	2.16	2	1
1:A:54:GLN:HG2	1:A:55:HIS:CD2	0.41	2.51	4	1
1:A:139:TYR:O	2:A:178:NTS:O61	0.41	2.38	4	1
1:A:67:GLU:OE1	1:A:114:LYS:NZ	0.41	2.52	5	1
1:A:105:GLU:HG2	1:A:107:HIS:CE1	0.41	2.50	23	2
1:A:130:SER:O	1:A:131:CYS:O	0.41	2.39	22	4
1:A:38:ARG:HB3	1:A:56:ILE:CG2	0.41	2.46	7	1
1:A:51:ARG:O	1:A:51:ARG:CZ	0.41	2.69	7	1
1:A:124:GLY:HA3	1:A:144:ILE:N	0.41	2.31	21	3
1:A:92:THR:O	1:A:92:THR:OG1	0.41	2.39	13	2
1:A:29:TYR:O	1:A:147:LEU:N	0.41	2.50	13	1
1:A:139:TYR:CD1	2:A:178:NTS:O63	0.41	2.74	13	1
1:A:73:THR:O	1:A:74:GLU:HB2	0.41	2.16	16	1
1:A:104:GLU:OE2	1:A:105:GLU:N	0.41	2.54	16	1
1:A:35:HIS:N	1:A:35:HIS:ND1	0.41	2.69	18	1
1:A:75:THR:O	1:A:76:GLY:O	0.41	2.38	18	2
1:A:57:GLN:OE1	1:A:73:THR:O	0.41	2.39	20	1
1:A:29:TYR:CG	1:A:30:CYS:N	0.41	2.89	21	1
1:A:104:GLU:HG2	1:A:145:LEU:HD21	0.41	1.92	21	1
1:A:110:THR:CG2	1:A:145:LEU:CD2	0.41	2.99	22	1
1:A:35:HIS:ND1	1:A:35:HIS:N	0.41	2.69	26	1
1:A:27:LEU:CD1	1:A:149:LEU:HD11	0.41	2.44	1	1
1:A:67:GLU:C	1:A:98:LEU:CD2	0.41	2.90	5	1
1:A:109:ASN:O	1:A:110:THR:C	0.41	2.58	7	1
1:A:104:GLU:OE2	1:A:105:GLU:CA	0.41	2.69	16	1
1:A:37:LEU:C	1:A:58:LEU:CD1	0.41	2.90	23	1
1:A:138:HIS:O	2:A:178:NTS:C7	0.41	2.69	24	1
1:A:67:GLU:CG	1:A:114:LYS:HD2	0.40	2.45	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:71:LYS:NZ	1:A:72:SER:O	0.40	2.54	2	1
1:A:29:TYR:CE2	1:A:31:SER:O	0.40	2.73	7	1
1:A:73:THR:O	1:A:74:GLU:CD	0.40	2.60	8	1
1:A:30:CYS:SG	1:A:125:LEU:CD1	0.40	3.09	11	1
1:A:26:LYS:HE3	1:A:27:LEU:CA	0.40	2.46	12	1
1:A:85:GLY:N	1:A:121:TRP:CZ3	0.40	2.90	13	1
1:A:67:GLU:HG3	1:A:114:LYS:CE	0.40	2.46	16	1
1:A:84:ASP:O	1:A:133:ARG:C	0.40	2.60	17	1
1:A:99:PHE:O	1:A:100:LEU:C	0.40	2.59	17	1
1:A:68:VAL:CG2	1:A:111:TYR:CE2	0.40	2.95	26	1
1:A:86:LEU:HD12	1:A:133:ARG:HB2	0.40	1.93	1	1
1:A:27:LEU:CD2	1:A:51:ARG:NH2	0.40	2.84	2	1
1:A:38:ARG:NH1	1:A:53:ASP:CG	0.40	2.74	8	1
1:A:75:THR:C	1:A:77:GLN:N	0.40	2.74	12	1
1:A:78:TYR:O	1:A:89:GLY:HA2	0.40	2.17	12	1
1:A:68:VAL:N	1:A:98:LEU:HD23	0.40	2.31	15	1
1:A:71:LYS:CG	1:A:78:TYR:CZ	0.40	3.05	15	1
1:A:100:LEU:HD12	1:A:114:LYS:HG3	0.40	1.94	18	1
1:A:83:THR:HG23	1:A:115:LYS:HZ3	0.40	1.73	24	1
1:A:69:TYR:CE1	1:A:98:LEU:HD22	0.40	2.52	4	1
1:A:37:LEU:HB3	1:A:58:LEU:CD1	0.40	2.45	6	1
1:A:131:CYS:O	1:A:132:LYS:NZ	0.40	2.50	7	1
1:A:73:THR:O	1:A:74:GLU:OE1	0.40	2.39	8	2
1:A:83:THR:HA	1:A:116:HIS:NE2	0.40	2.31	15	1
1:A:39:ILE:HB	1:A:58:LEU:HD21	0.40	1.94	16	1
1:A:104:GLU:HB2	1:A:110:THR:OG1	0.40	2.16	18	1
1:A:110:THR:HG22	1:A:145:LEU:HA	0.40	1.93	18	1
1:A:108:TYR:CD1	1:A:108:TYR:N	0.40	2.86	21	1
1:A:121:TRP:NE1	1:A:135:PRO:HA	0.40	2.32	1	1
1:A:55:HIS:CE1	1:A:57:GLN:NE2	0.40	2.89	2	1
1:A:38:ARG:NH1	1:A:46:ASP:OD1	0.40	2.54	5	1
1:A:99:PHE:CD1	1:A:111:TYR:HB3	0.40	2.51	5	1
1:A:26:LYS:HZ2	1:A:59:GLN:N	0.40	2.14	8	1
1:A:132:LYS:HG2	1:A:136:ARG:CB	0.40	2.46	18	1
1:A:110:THR:HG22	1:A:144:ILE:HG13	0.40	1.92	21	1
1:A:88:TYR:OH	1:A:96:GLU:OE2	0.40	2.40	9	1
1:A:88:TYR:OH	1:A:96:GLU:CD	0.40	2.60	12	1
1:A:78:TYR:O	1:A:97:CYS:SG	0.40	2.80	20	1
1:A:57:GLN:CD	1:A:74:GLU:OE1	0.40	2.60	26	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	119/155 (77%)	72±3 (60±3%)	26±3 (22±2%)	21±2 (18±2%)	0	3
All	All	3094/4030 (77%)	1864 (60%)	682 (22%)	548 (18%)	0	3

All 46 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	74	GLU	26
1	A	107	HIS	26
1	A	151	VAL	26
1	A	113	SER	24
1	A	130	SER	23
1	A	31	SER	22
1	A	64	SER	22
1	A	139	TYR	22
1	A	136	ARG	21
1	A	103	LEU	21
1	A	73	THR	20
1	A	52	SER	19
1	A	127	LYS	19
1	A	37	LEU	18
1	A	100	LEU	17
1	A	129	GLY	16
1	A	116	HIS	14
1	A	46	ASP	13
1	A	96	GLU	13
1	A	98	LEU	13
1	A	108	TYR	12
1	A	121	TRP	12
1	A	126	LYS	12
1	A	102	ARG	12
1	A	72	SER	11
1	A	145	LEU	10
1	A	110	THR	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	131	CYS	10
1	A	76	GLY	9
1	A	43	GLY	8
1	A	51	ARG	8
1	A	122	PHE	7
1	A	82	ASP	7
1	A	95	GLU	5
1	A	55	HIS	4
1	A	26	LYS	2
1	A	75	THR	2
1	A	79	LEU	2
1	A	106	ASN	2
1	A	65	VAL	2
1	A	49	ARG	1
1	A	109	ASN	1
1	A	112	ILE	1
1	A	85	GLY	1
1	A	128	ASN	1
1	A	134	GLY	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	107/135 (79%)	63±3 (59±3%)	44±3 (41±3%)	0 4
All	All	2782/3510 (79%)	1646 (59%)	1136 (41%)	0 4

All 83 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	40	LEU	26
1	A	46	ASP	26
1	A	71	LYS	26
1	A	99	PHE	26
1	A	100	LEU	26
1	A	115	LYS	26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	127	LYS	26
1	A	39	ILE	25
1	A	63	GLU	25
1	A	64	SER	25
1	A	51	ARG	24
1	A	56	ILE	24
1	A	28	LEU	23
1	A	116	HIS	23
1	A	136	ARG	23
1	A	77	GLN	23
1	A	37	LEU	22
1	A	125	LEU	22
1	A	60	LEU	21
1	A	65	VAL	21
1	A	90	SER	21
1	A	102	ARG	21
1	A	112	ILE	21
1	A	119	LYS	21
1	A	147	LEU	21
1	A	81	MET	21
1	A	49	ARG	20
1	A	26	LYS	20
1	A	120	ASN	20
1	A	151	VAL	19
1	A	27	LEU	18
1	A	103	LEU	18
1	A	54	GLN	16
1	A	138	HIS	16
1	A	30	CYS	15
1	A	133	ARG	15
1	A	139	TYR	15
1	A	91	GLN	13
1	A	132	LYS	13
1	A	137	THR	13
1	A	45	VAL	13
1	A	98	LEU	13
1	A	94	ASN	12
1	A	50	ASP	11
1	A	105	GLU	11
1	A	38	ARG	11
1	A	42	ASP	11
1	A	131	CYS	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	84	ASP	11
1	A	101	GLU	11
1	A	149	LEU	10
1	A	58	LEU	10
1	A	88	TYR	10
1	A	55	HIS	9
1	A	73	THR	9
1	A	53	ASP	9
1	A	95	GLU	9
1	A	59	GLN	9
1	A	44	THR	8
1	A	74	GLU	8
1	A	128	ASN	8
1	A	104	GLU	7
1	A	75	THR	6
1	A	97	CYS	6
1	A	86	LEU	6
1	A	79	LEU	6
1	A	126	LYS	6
1	A	57	GLN	5
1	A	130	SER	5
1	A	145	LEU	4
1	A	114	LYS	4
1	A	31	SER	4
1	A	111	TYR	4
1	A	144	ILE	4
1	A	107	HIS	3
1	A	48	THR	2
1	A	87	LEU	2
1	A	52	SER	2
1	A	35	HIS	2
1	A	67	GLU	1
1	A	108	TYR	1
1	A	113	SER	1
1	A	61	SER	1

6.3.3 RNA

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](#)

1 ligand is modelled in this entry.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds that are observed in the model and the number of bonds that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond length is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the average root-mean-square of all Z scores of the bond lengths.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths		
					Counts	RMSZ	#Z>2
2	NTS	A	178	-	22,23,23	4.74±0.00	11±0 (50±0%)

In the following table, the Counts columns list the number of angles for which Mogul statistics could be retrieved, the number of angles that are observed in the model and the number of angles that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond angle is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond angle with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the average root-mean-square of all Z scores of the bond angles.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond angles		
					Counts	RMSZ	#Z>2
2	NTS	A	178	-	35,38,38	0.87±0.00	0±0 (0±0%)

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the chemical component dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	NTS	A	178	-	-	0±0,18,18,18	0±0,2,2,2

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
2	A	178	NTS	O61-S6	7.35	1.80	1.43	26	26
2	A	178	NTS	O31-S3	7.35	1.80	1.43	22	26
2	A	178	NTS	O32-S3	7.35	1.80	1.43	16	26
2	A	178	NTS	O12-S1	7.34	1.80	1.43	12	26
2	A	178	NTS	O11-S1	7.33	1.80	1.43	4	26
2	A	178	NTS	O62-S6	7.32	1.80	1.43	5	26
2	A	178	NTS	O13-S1	6.89	1.80	1.45	23	26
2	A	178	NTS	O33-S3	6.89	1.80	1.45	10	26
2	A	178	NTS	O63-S6	6.89	1.80	1.45	10	26
2	A	178	NTS	C6-S6	2.51	1.82	1.77	25	26
2	A	178	NTS	C3-S3	2.50	1.82	1.77	24	26

All unique angle outliers are listed below.

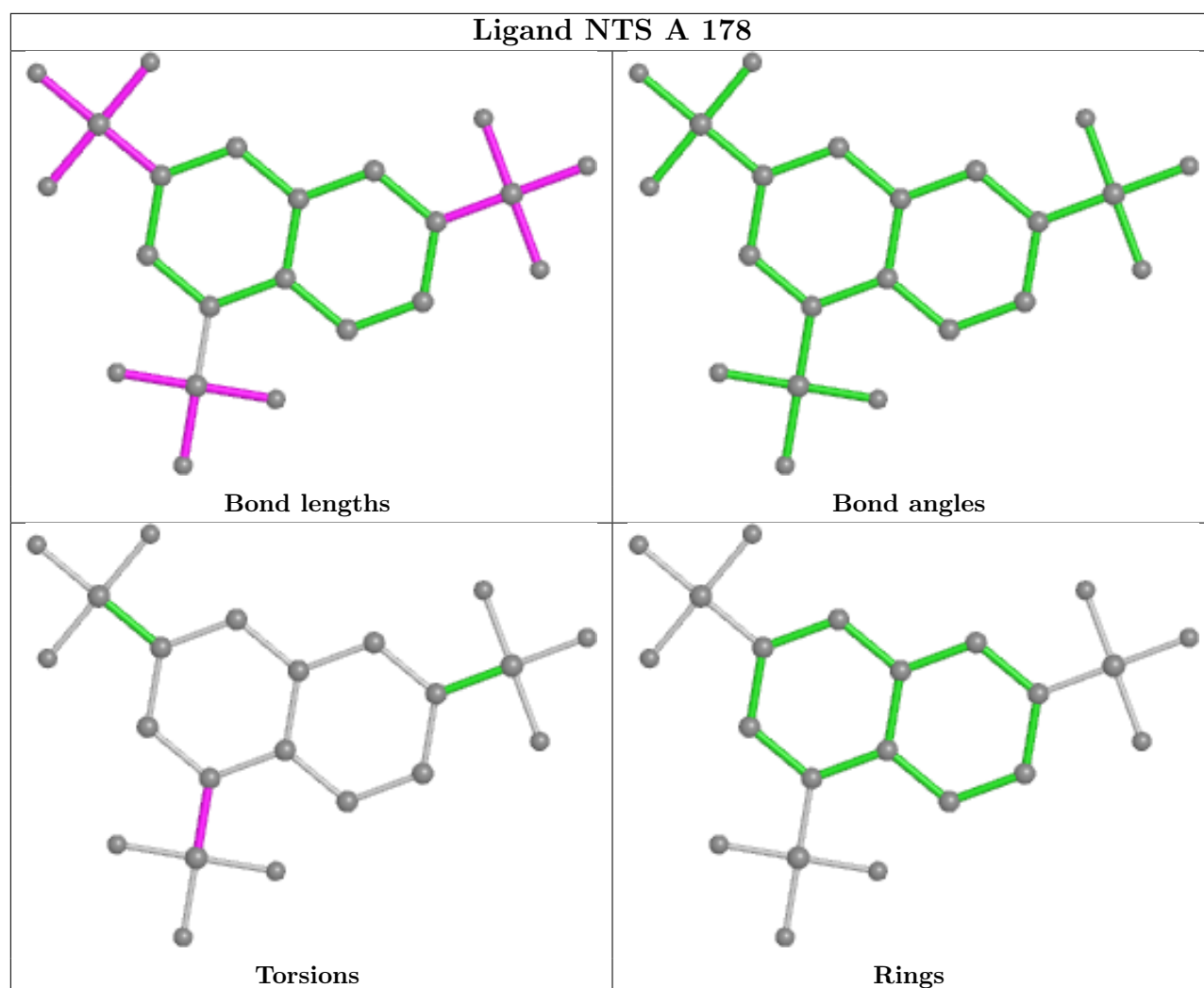
Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
2	A	178	NTS	C1-C9-C10	2.01	119.66	117.49	21	1

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

The following is a two-dimensional graphical depiction of Mogul quality analysis of bond lengths, bond angles, torsion angles, and ring geometry for all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the validation Tables will also be included. For torsion angles, if less than 5% of the Mogul distribution of torsion angles is within 10 degrees of the torsion angle in question, then that torsion angle is considered an outlier. Any bond that is central to one or more torsion angles identified as an outlier by Mogul will be highlighted in the graph. For rings, the root-mean-square deviation (RMSD) between the ring in question and similar rings identified by Mogul is calculated over all ring torsion angles. If the average RMSD is greater than 60 degrees and the minimal RMSD between the ring in question and any Mogul-identified rings is also greater than 60 degrees, then that ring is considered an outlier. The outliers are highlighted in purple. The color gray indicates Mogul did not find sufficient equivalents in the CSD to analyse the geometry.



6.7 Other polymers [\(i\)](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [\(i\)](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided