



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 04:24 PM UTC

PDB ID : 1BXD / pdb_00001bxid
Title : NMR STRUCTURE OF THE HISTIDINE KINASE DOMAIN OF THE E. COLI OSMOSENSOR ENVZ
Authors : Tanaka, T.; Saha, S.K.; Tomomori, C.; Ishima, R.; Liu, D.; Tong, K.I.; Park, H.; Dutta, R.; Qin, L.; Swindells, M.B.; Yamazaki, T.; Ono, A.M.; Kainosho, M.; Inouye, M.; Ikura, M.
Deposited on : 1998-10-02

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 types of validation reports are described at

<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

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

MolProbity	:	4-5-2 with Phenix2.0
Mogul	:	2022.3.0, CSD as543be (2022)
Buster-report	:	wwPDB partial adaption of 1.1.7 (2018)
Percentile statistics	:	20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.49

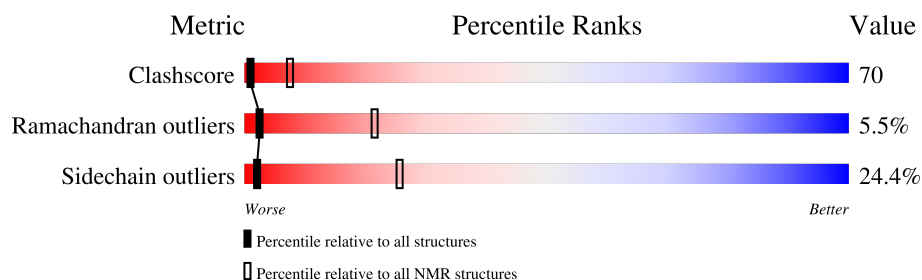
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

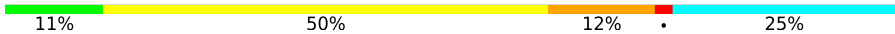
The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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	229148	14424
Ramachandran outliers	224038	12848
Sidechain outliers	223484	12823

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	161	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 9 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:295-A:386, A:408-A:424, A:429-A:439 (120)	1.21	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 3 clusters and 4 single-model clusters were found.

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

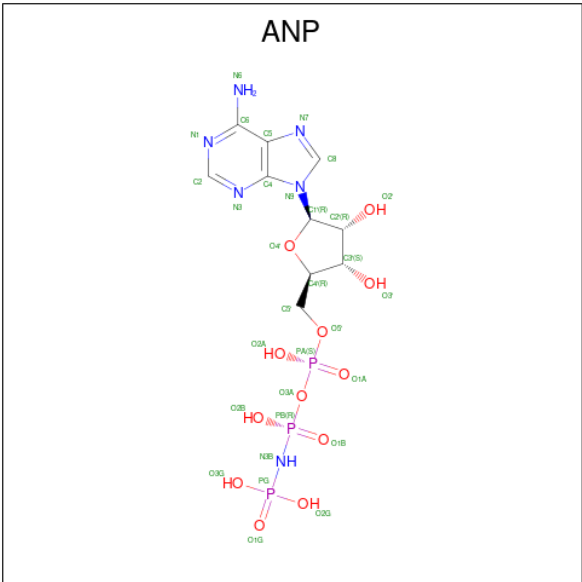
3 Entry composition [i](#)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2481 atoms, of which 1228 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called PROTEIN (OSMOLARITY SENSOR PROTEIN (ENVZ)).

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	161	Total	C	H	N	O	S	0
			2436	761	1214	221	234	6	

- Molecule 2 is PHOSPHOAMINOPHOSPHONIC ACID-ADENYLATE ESTER (CCD ID: ANP) (formula: C₁₀H₁₇N₆O₁₂P₃).



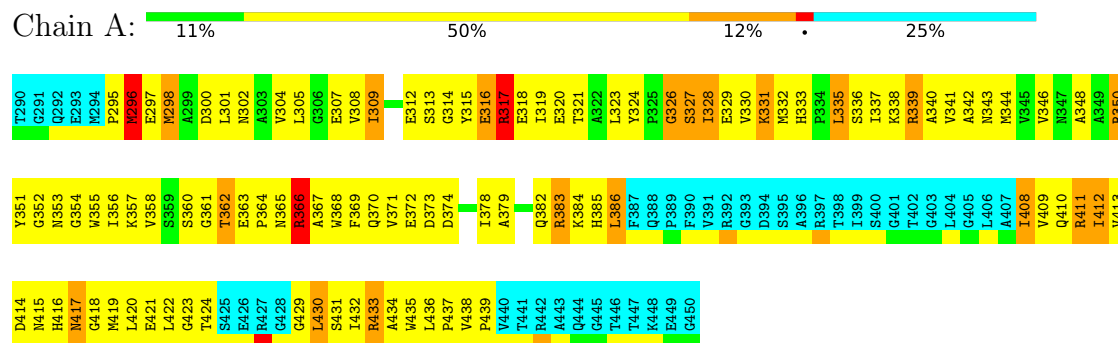
Mol	Chain	Residues	Atoms					
2	A	1	Total	C	H	N	O	P
			45	10	14	6	12	3

4 Residue-property plots

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: PROTEIN (OSMOLARITY SENSOR PROTEIN (ENVZ))

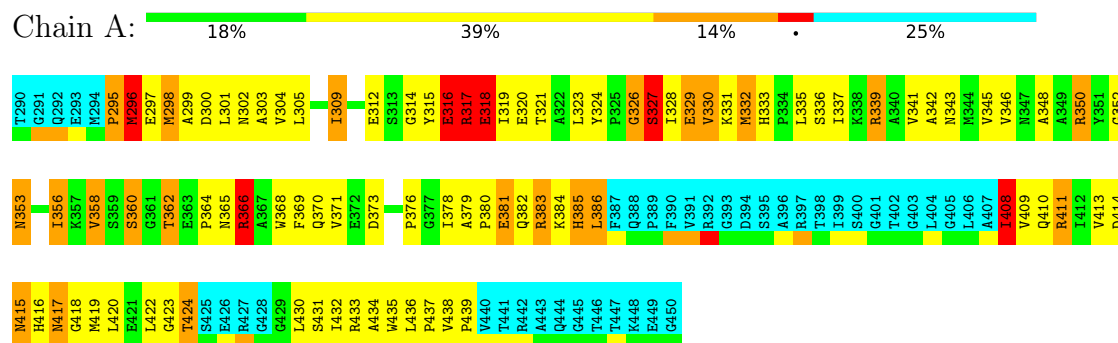


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

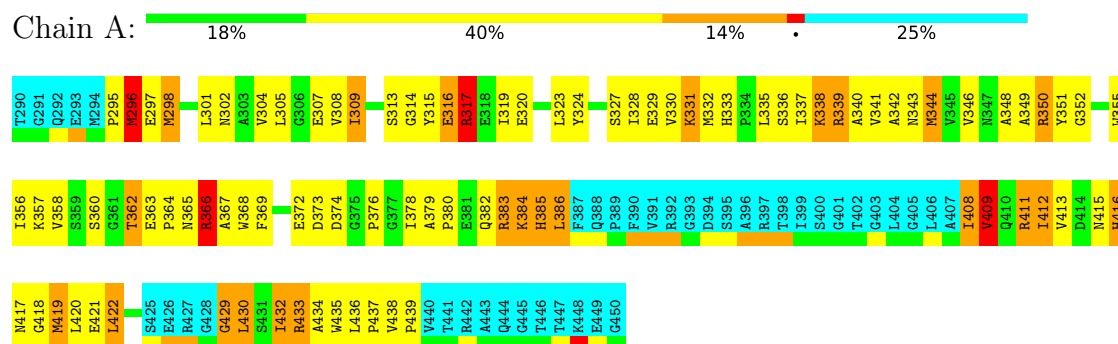
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: PROTEIN (OSMOLARITY SENSOR PROTEIN (ENVZ))



4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: PROTEIN (OSMOLARITY SENSOR PROTEIN (ENVZ))



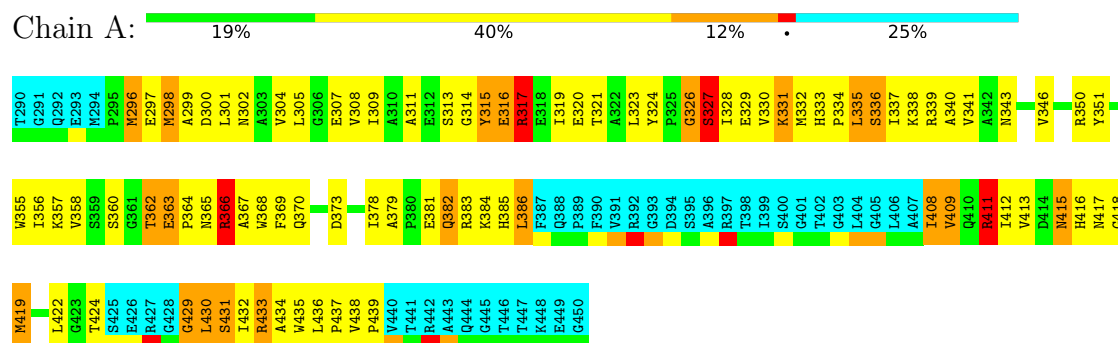
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: PROTEIN (OSMOLARITY SENSOR PROTEIN (ENVZ))



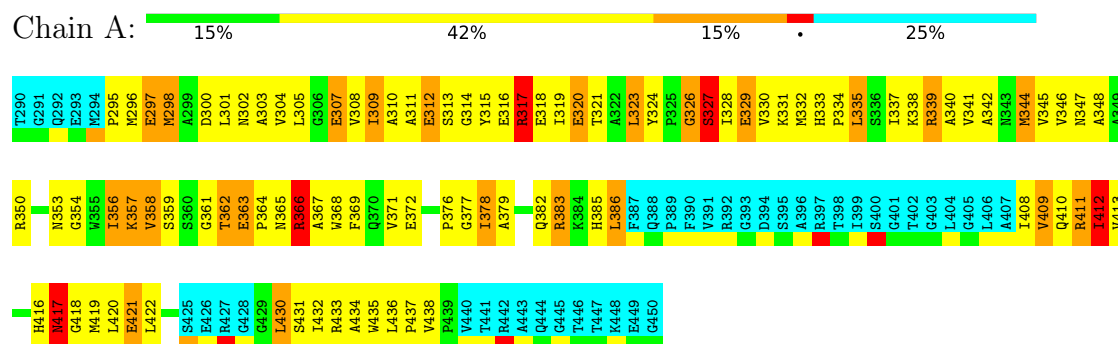
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: PROTEIN (OSMOLARITY SENSOR PROTEIN (ENVZ))



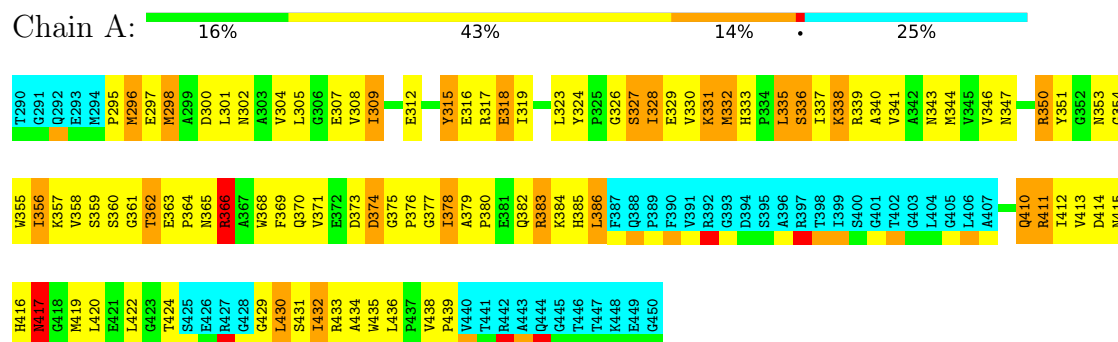
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: PROTEIN (OSMOLARITY SENSOR PROTEIN (ENVZ))



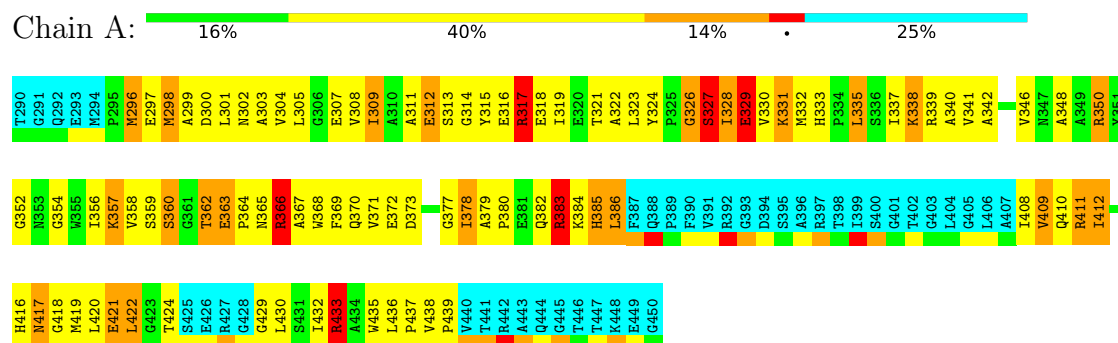
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: PROTEIN (OSMOLARITY SENSOR PROTEIN (ENVZ))



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: PROTEIN (OSMOLARITY SENSOR PROTEIN (ENVZ))



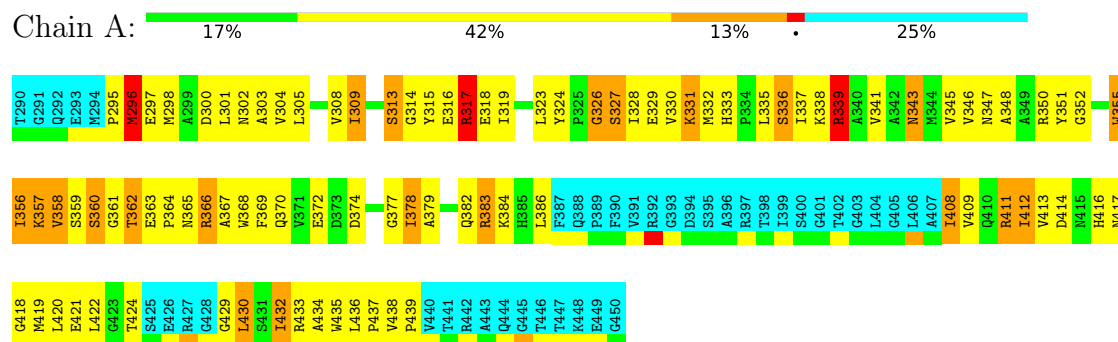
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: PROTEIN (OSMOLARITY SENSOR PROTEIN (ENVZ))



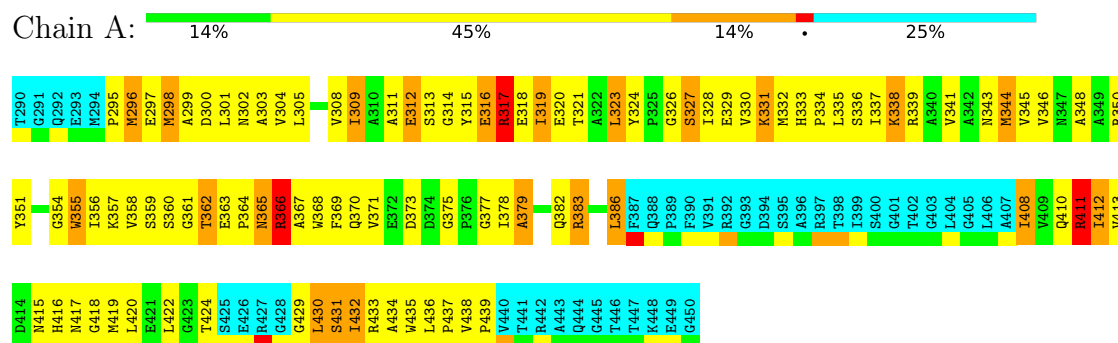
4.2.9 Score per residue for model 9 (medoid)

- Molecule 1: PROTEIN (OSMOLARITY SENSOR PROTEIN (ENVZ))



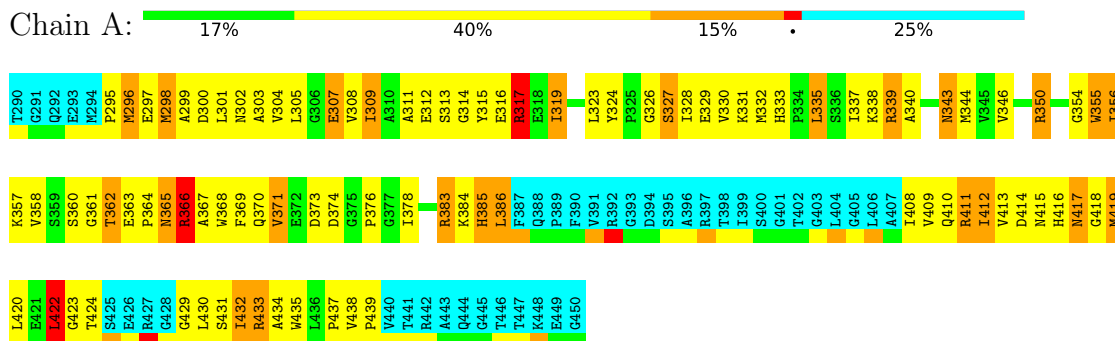
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: PROTEIN (OSMOLARITY SENSOR PROTEIN (ENVZ))



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: PROTEIN (OSMOLARITY SENSOR PROTEIN (ENVZ))



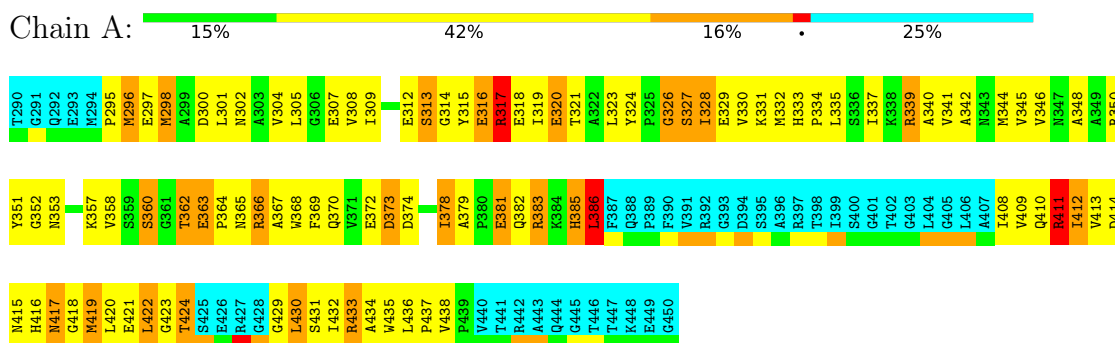
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: PROTEIN (OSMOLARITY SENSOR PROTEIN (ENVZ))



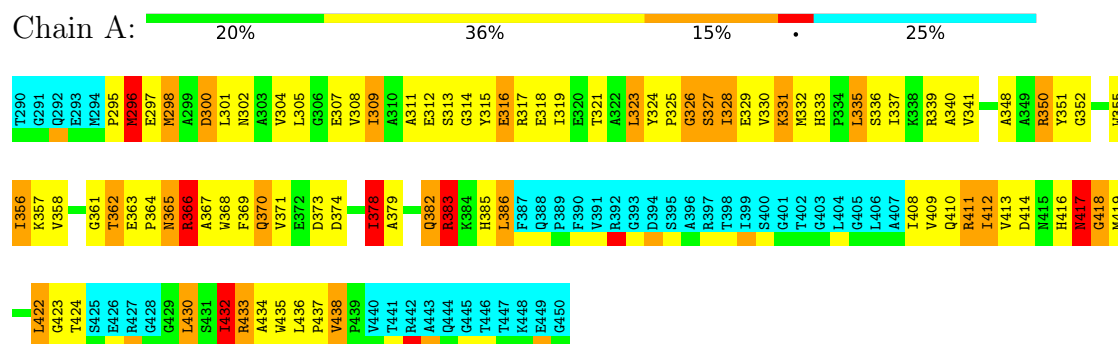
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: PROTEIN (OSMOLARITY SENSOR PROTEIN (ENVZ))



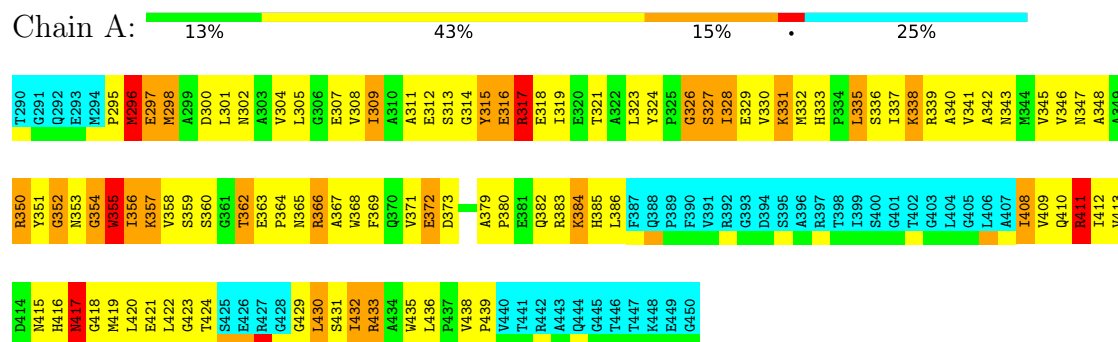
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: PROTEIN (OSMOLARITY SENSOR PROTEIN (ENVZ))



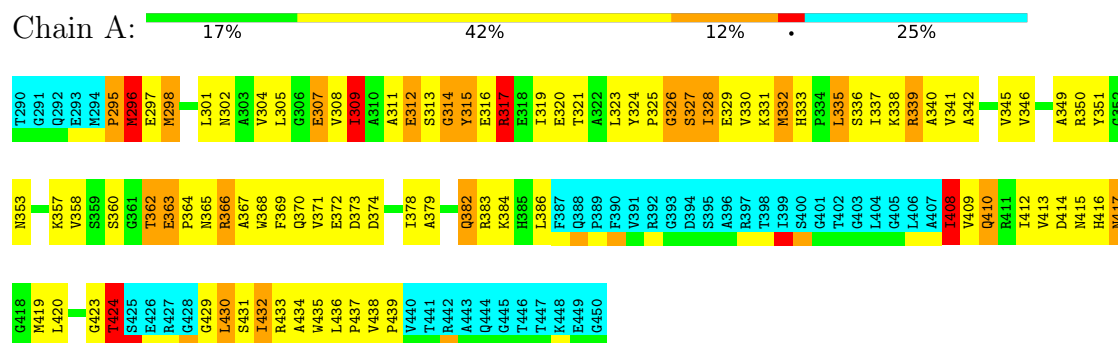
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: PROTEIN (OSMOLARITY SENSOR PROTEIN (ENVZ))



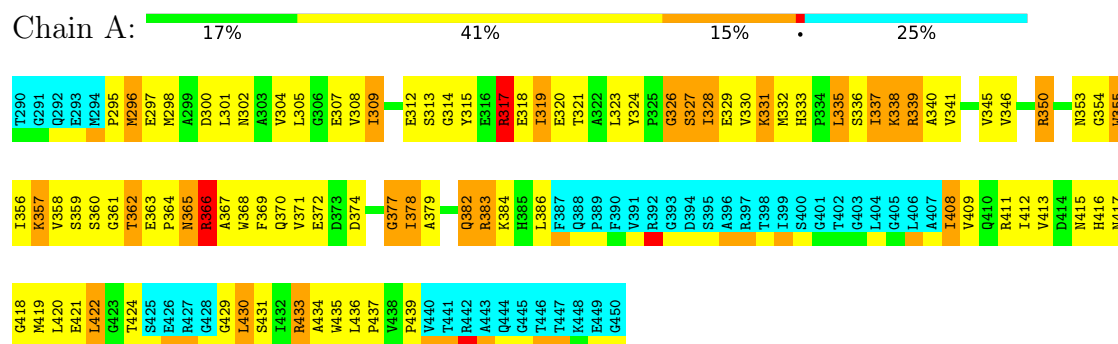
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: PROTEIN (OSMOLARITY SENSOR PROTEIN (ENVZ))



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: PROTEIN (OSMOLARITY SENSOR PROTEIN (ENVZ))



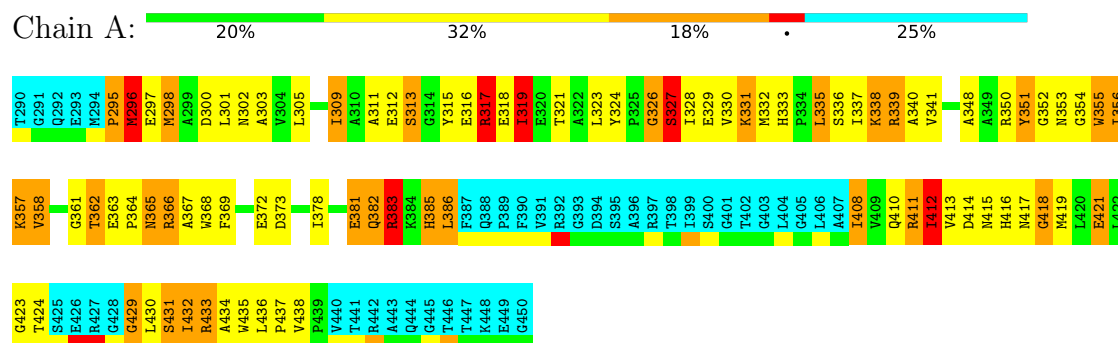
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: PROTEIN (OSMOLARITY SENSOR PROTEIN (ENVZ))



4.2.19 Score per residue for model 19

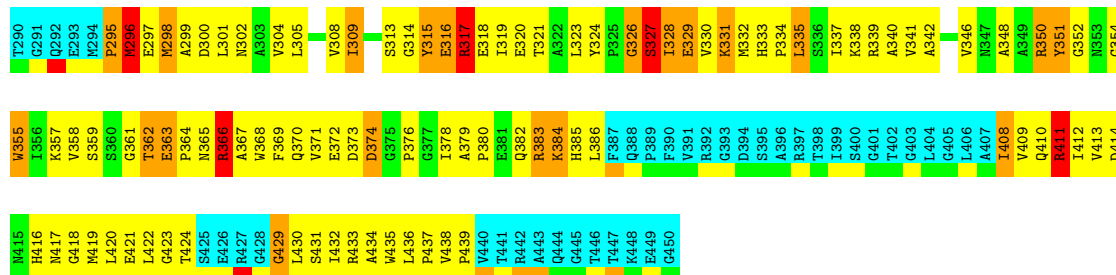
- Molecule 1: PROTEIN (OSMOLARITY SENSOR PROTEIN (ENVZ))



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: PROTEIN (OSMOLARITY SENSOR PROTEIN (ENVZ))

Chain A: 



5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

Of the ? calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: ?.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	3.8.5.1

No chemical shift data was provided.

6 Model quality i

6.1 Standard geometry i

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

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.52±0.02	1±1/945 (0.1± 0.1%)	1.58±0.02	3±2/1285 (0.2± 0.1%)
All	All	1.52	20/18900 (0.1%)	1.58	57/25700 (0.2%)

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	6.7±0.6
All	All	0	134

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	296	MET	C-N	-6.86	1.27	1.33	1	9
1	A	318	GLU	C-N	-6.02	1.25	1.33	1	1
1	A	429	GLY	N-CA	5.73	1.49	1.44	2	2
1	A	417	ASN	N-CA	5.70	1.53	1.46	6	1
1	A	422	LEU	C-N	-5.70	1.28	1.33	11	1
1	A	352	GLY	N-CA	5.50	1.49	1.44	18	1
1	A	330	VAL	C-N	-5.39	1.26	1.33	1	1
1	A	316	GLU	CA-C	-5.31	1.45	1.52	1	1
1	A	317	ARG	C-N	-5.23	1.27	1.33	4	1
1	A	418	GLY	N-CA	5.12	1.49	1.45	19	1
1	A	316	GLU	C-N	-5.10	1.26	1.33	1	1

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	358	VAL	N-CA-CB	-7.32	105.33	112.65	18	7
1	A	356	ILE	N-CA-CB	-6.53	104.90	112.34	11	4
1	A	363	GLU	N-CA-CB	-6.32	104.78	111.29	7	2
1	A	409	VAL	N-CA-CB	-6.21	104.95	112.33	5	3
1	A	408	ILE	N-CA-CB	-6.17	104.99	112.33	17	3
1	A	312	GLU	N-CA-CB	-6.09	104.48	111.79	7	5
1	A	379	ALA	N-CA-CB	-5.99	104.81	111.10	10	2
1	A	432	ILE	N-CA-CB	-5.76	104.44	110.72	11	9
1	A	378	ILE	N-CA-CB	-5.50	106.72	112.06	14	2
1	A	296	MET	N-CA-CB	-5.37	103.94	111.62	15	1
1	A	438	VAL	N-CA-CB	-5.33	103.74	111.21	10	3
1	A	371	VAL	N-CA-CB	-5.28	105.34	112.10	11	1
1	A	319	ILE	N-CA-CB	-5.27	104.67	110.99	11	2
1	A	412	ILE	N-CA-CB	-5.25	104.71	110.65	18	6
1	A	309	ILE	N-CA-CB	-5.21	103.91	110.57	16	1
1	A	416	HIS	CA-CB-CG	-5.15	108.65	113.80	2	1
1	A	355	TRP	N-CA-CB	-5.13	103.02	111.69	15	1
1	A	386	LEU	N-CA-CB	-5.11	103.52	110.56	13	1
1	A	332	MET	N-CA-CB	-5.08	103.38	111.62	12	1
1	A	417	ASN	N-CA-CB	-5.02	106.03	114.27	14	1
1	A	314	GLY	N-CA-C	-5.00	108.09	115.30	16	1

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	366	ARG	Sidechain	20
1	A	433	ARG	Sidechain	20
1	A	339	ARG	Sidechain	19
1	A	350	ARG	Sidechain	19
1	A	383	ARG	Sidechain	19
1	A	411	ARG	Sidechain	19
1	A	317	ARG	Sidechain	18

6.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	924	920	920	131±13
2	A	31	14	13	10±3
All	All	19100	18680	18660	2631

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 70.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:309:ILE:HD11	1:A:358:VAL:HG11	1.07	1.15	5	8
1:A:340:ALA:HB2	1:A:412:ILE:HG21	1.03	1.31	3	9
1:A:386:LEU:HD11	2:A:451:ANP:O4'	1.01	1.55	1	6
1:A:340:ALA:HB2	1:A:412:ILE:HD13	1.00	1.33	11	1
1:A:330:VAL:HG12	1:A:438:VAL:HG22	0.99	1.32	19	7
1:A:309:ILE:CG1	1:A:358:VAL:HG11	0.97	1.89	13	9
1:A:309:ILE:HD11	1:A:358:VAL:CG1	0.96	1.90	12	8
1:A:386:LEU:CD1	1:A:422:LEU:HD13	0.96	1.91	3	1
1:A:308:VAL:HG11	1:A:341:VAL:CG1	0.96	1.91	2	14
1:A:430:LEU:HD22	2:A:451:ANP:N6	0.96	1.75	12	5
1:A:419:MET:HE2	1:A:435:TRP:CD1	0.95	1.94	5	1
1:A:417:ASN:HA	1:A:436:LEU:HD23	0.95	1.35	3	2
1:A:330:VAL:HG11	1:A:367:ALA:HB3	0.94	1.35	10	13
1:A:337:ILE:HD11	1:A:416:HIS:CE1	0.94	1.98	4	16
1:A:308:VAL:HG11	1:A:341:VAL:HG12	0.91	1.37	2	13
1:A:330:VAL:CG1	1:A:367:ALA:HB3	0.90	1.96	9	6
1:A:378:ILE:HG23	2:A:451:ANP:O2'	0.90	1.64	7	7
1:A:313:SER:O	1:A:319:ILE:HD11	0.89	1.67	5	6
1:A:340:ALA:CB	1:A:412:ILE:HD13	0.89	1.96	11	1
1:A:430:LEU:HD13	1:A:431:SER:N	0.88	1.83	17	3
1:A:342:ALA:O	1:A:346:VAL:HG23	0.88	1.69	16	9
1:A:386:LEU:HD21	2:A:451:ANP:O2'	0.86	1.69	1	1
1:A:413:VAL:HG21	1:A:420:LEU:HD13	0.86	1.46	8	8
1:A:309:ILE:CD1	1:A:358:VAL:HG11	0.85	2.00	5	7
1:A:378:ILE:HD11	1:A:422:LEU:HD12	0.85	1.48	20	1
1:A:308:VAL:HG11	1:A:341:VAL:HB	0.85	1.44	5	6
1:A:378:ILE:HD11	1:A:422:LEU:HD21	0.85	1.47	8	1
1:A:313:SER:OG	1:A:319:ILE:HD12	0.85	1.72	10	1
1:A:301:LEU:HD11	1:A:436:LEU:HD12	0.85	1.49	2	12
1:A:319:ILE:HG13	1:A:356:ILE:HD12	0.84	1.45	12	13
1:A:332:MET:CE	1:A:337:ILE:HG21	0.84	2.02	3	5
1:A:430:LEU:HD22	1:A:431:SER:N	0.84	1.88	10	2
1:A:313:SER:HB2	1:A:319:ILE:HD13	0.83	1.46	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:332:MET:HE1	1:A:337:ILE:HG21	0.83	1.48	3	5
1:A:386:LEU:HD22	1:A:422:LEU:HD21	0.83	1.51	17	2
1:A:296:MET:HE3	1:A:416:HIS:NE2	0.83	1.89	11	2
1:A:343:ASN:O	1:A:346:VAL:HG22	0.82	1.74	1	1
1:A:343:ASN:O	1:A:346:VAL:HG12	0.82	1.75	10	5
1:A:300:ASP:O	1:A:304:VAL:HG23	0.81	1.75	13	15
1:A:408:ILE:HG12	1:A:409:VAL:HG23	0.81	1.52	1	1
1:A:319:ILE:CG1	1:A:356:ILE:HD12	0.81	2.05	12	8
1:A:301:LEU:HD11	1:A:436:LEU:CD1	0.81	2.05	12	11
1:A:340:ALA:HA	1:A:409:VAL:HG12	0.81	1.53	5	2
1:A:379:ALA:HB3	1:A:382:GLN:HB2	0.81	1.48	8	5
1:A:312:GLU:OE2	1:A:358:VAL:HG21	0.81	1.75	6	2
1:A:332:MET:HE2	1:A:337:ILE:HG13	0.81	1.50	7	3
1:A:432:ILE:HD11	2:A:451:ANP:N1	0.80	1.92	19	5
1:A:330:VAL:HG12	1:A:438:VAL:CG2	0.80	2.07	4	2
1:A:379:ALA:HB3	1:A:382:GLN:CB	0.80	2.06	9	4
1:A:432:ILE:HD13	2:A:451:ANP:N1	0.79	1.91	7	1
1:A:430:LEU:HD21	2:A:451:ANP:C6	0.79	2.06	10	2
1:A:309:ILE:HD13	1:A:321:THR:HG22	0.79	1.54	18	6
1:A:301:LEU:HD21	1:A:332:MET:HE3	0.79	1.55	1	2
1:A:430:LEU:C	1:A:430:LEU:HD22	0.79	2.02	6	1
1:A:379:ALA:HB1	1:A:380:PRO:HD2	0.79	1.55	2	8
1:A:304:VAL:O	1:A:308:VAL:HG23	0.79	1.77	17	13
1:A:413:VAL:HG11	1:A:420:LEU:HB2	0.78	1.53	8	9
1:A:379:ALA:HB3	1:A:382:GLN:HG2	0.78	1.54	20	1
1:A:302:ASN:HA	1:A:323:LEU:HD23	0.78	1.53	15	13
1:A:424:THR:HG22	1:A:429:GLY:O	0.78	1.78	16	3
1:A:378:ILE:HD11	1:A:430:LEU:HD11	0.78	1.56	11	5
1:A:307:GLU:O	1:A:311:ALA:HB2	0.77	1.78	5	8
1:A:309:ILE:HG13	1:A:358:VAL:HG11	0.77	1.56	13	8
1:A:341:VAL:O	1:A:345:VAL:HG23	0.77	1.80	10	1
1:A:340:ALA:CB	1:A:412:ILE:HG21	0.77	2.08	3	10
1:A:332:MET:SD	1:A:436:LEU:HD13	0.76	2.21	5	4
1:A:378:ILE:HD12	2:A:451:ANP:N9	0.75	1.95	18	4
1:A:408:ILE:O	1:A:412:ILE:HD13	0.75	1.81	8	4
1:A:308:VAL:CG1	1:A:341:VAL:HG12	0.75	2.12	20	10
1:A:377:GLY:C	1:A:378:ILE:HD13	0.74	2.07	17	4
1:A:408:ILE:HD12	1:A:409:VAL:HG12	0.74	1.57	15	1
1:A:417:ASN:CA	1:A:436:LEU:HD23	0.74	2.11	3	2
1:A:430:LEU:HD13	2:A:451:ANP:C5	0.74	2.13	19	2
1:A:408:ILE:O	1:A:408:ILE:HG23	0.73	1.84	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:301:LEU:CD2	1:A:332:MET:HE3	0.73	2.13	1	3
1:A:424:THR:HG22	1:A:429:GLY:C	0.72	2.10	13	2
1:A:345:VAL:O	1:A:349:ALA:HB2	0.72	1.85	8	2
1:A:386:LEU:O	1:A:386:LEU:HD23	0.71	1.84	18	1
1:A:344:MET:HE3	1:A:432:ILE:HG21	0.71	1.60	2	1
1:A:335:LEU:HD12	1:A:335:LEU:C	0.71	2.09	19	5
1:A:301:LEU:HD21	1:A:332:MET:SD	0.71	2.25	6	4
1:A:378:ILE:CD1	1:A:422:LEU:HD21	0.71	2.14	8	1
1:A:386:LEU:HD21	2:A:451:ANP:N3	0.71	2.00	16	1
1:A:379:ALA:HB3	1:A:382:GLN:HB3	0.71	1.62	3	4
1:A:332:MET:HE3	1:A:337:ILE:HG13	0.71	1.61	11	8
1:A:319:ILE:CG2	1:A:358:VAL:HG23	0.70	2.16	3	15
1:A:408:ILE:O	1:A:409:VAL:HG23	0.70	1.87	4	1
1:A:430:LEU:CD1	2:A:451:ANP:N7	0.69	2.55	19	3
1:A:378:ILE:HG13	1:A:430:LEU:HD11	0.69	1.63	12	1
1:A:430:LEU:HD22	2:A:451:ANP:C6	0.69	2.17	9	2
1:A:379:ALA:HB3	1:A:382:GLN:NE2	0.69	2.03	14	1
1:A:368:TRP:CD1	1:A:435:TRP:CZ3	0.69	2.80	1	20
1:A:430:LEU:HD12	2:A:451:ANP:C6	0.69	2.16	18	1
1:A:305:LEU:O	1:A:309:ILE:HD12	0.69	1.87	9	5
1:A:429:GLY:C	1:A:430:LEU:HD22	0.69	2.13	2	1
1:A:408:ILE:HG23	1:A:409:VAL:HG23	0.69	1.64	3	2
1:A:386:LEU:O	1:A:386:LEU:HD13	0.69	1.87	19	1
1:A:301:LEU:CD2	1:A:332:MET:HE1	0.69	2.18	15	4
1:A:296:MET:HE1	1:A:416:HIS:CD2	0.68	2.23	6	7
1:A:408:ILE:HD13	1:A:408:ILE:N	0.68	2.02	1	2
1:A:379:ALA:HB3	1:A:382:GLN:CD	0.68	2.14	14	1
1:A:422:LEU:HD23	1:A:432:ILE:CD1	0.68	2.18	1	1
1:A:378:ILE:HD11	1:A:430:LEU:CD1	0.68	2.17	11	3
1:A:333:HIS:CE1	1:A:335:LEU:HB2	0.68	2.23	1	6
1:A:330:VAL:HG23	1:A:332:MET:HG2	0.68	1.66	11	5
1:A:337:ILE:HD11	1:A:416:HIS:CG	0.68	2.24	3	2
1:A:336:SER:O	1:A:412:ILE:HD12	0.68	1.89	6	2
1:A:378:ILE:HG23	2:A:451:ANP:H1'	0.68	1.63	18	3
1:A:422:LEU:HD12	1:A:432:ILE:HG12	0.67	1.65	5	1
1:A:312:GLU:CD	1:A:342:ALA:HB1	0.67	2.13	5	1
1:A:301:LEU:HD11	1:A:436:LEU:HD13	0.67	1.65	12	1
1:A:378:ILE:HD13	1:A:378:ILE:N	0.67	2.04	17	3
1:A:378:ILE:HD11	1:A:430:LEU:HG	0.67	1.67	6	1
1:A:386:LEU:HD12	1:A:422:LEU:HD13	0.67	1.64	3	1
1:A:298:MET:HE2	1:A:330:VAL:C	0.67	2.15	7	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:304:VAL:HG21	1:A:332:MET:HE1	0.67	1.65	17	1
1:A:340:ALA:HB2	1:A:412:ILE:HG12	0.66	1.68	2	4
1:A:324:TYR:CG	1:A:362:THR:CG2	0.66	2.79	13	15
1:A:373:ASP:OD1	2:A:451:ANP:N1	0.66	2.29	13	1
1:A:417:ASN:HA	1:A:436:LEU:CD2	0.66	2.21	16	1
1:A:378:ILE:HD12	2:A:451:ANP:C1'	0.66	2.19	9	5
1:A:412:ILE:HG22	1:A:413:VAL:N	0.66	2.05	18	4
1:A:413:VAL:HG13	1:A:417:ASN:HB2	0.66	1.66	16	1
1:A:295:PRO:CB	1:A:333:HIS:CD2	0.66	2.79	8	7
1:A:335:LEU:C	1:A:335:LEU:HD13	0.66	2.15	10	1
1:A:301:LEU:HD23	1:A:332:MET:HE3	0.66	1.68	20	2
1:A:417:ASN:HD22	1:A:434:ALA:HB1	0.66	1.51	16	1
1:A:430:LEU:CD2	2:A:451:ANP:N6	0.65	2.60	8	4
1:A:318:GLU:N	1:A:356:ILE:HD12	0.65	2.06	1	1
1:A:344:MET:SD	1:A:432:ILE:HG21	0.65	2.31	13	3
1:A:413:VAL:HG21	1:A:420:LEU:HB2	0.65	1.67	17	1
1:A:319:ILE:HG23	1:A:358:VAL:HG23	0.65	1.68	15	12
1:A:386:LEU:HD13	2:A:451:ANP:O4'	0.65	1.91	16	1
1:A:378:ILE:CD1	2:A:451:ANP:C8	0.64	2.75	14	4
1:A:386:LEU:HD11	2:A:451:ANP:C5'	0.64	2.22	13	1
1:A:302:ASN:CG	1:A:323:LEU:HD23	0.64	2.17	14	1
1:A:430:LEU:CD2	2:A:451:ANP:C5	0.64	2.76	11	4
1:A:378:ILE:CD1	2:A:451:ANP:N9	0.64	2.60	9	5
1:A:330:VAL:HG12	1:A:438:VAL:HG21	0.64	1.66	9	1
1:A:333:HIS:CE1	1:A:335:LEU:CB	0.64	2.80	20	5
1:A:301:LEU:HD21	1:A:332:MET:CE	0.64	2.22	1	1
1:A:413:VAL:HG22	1:A:417:ASN:ND2	0.64	2.07	3	1
1:A:408:ILE:C	1:A:409:VAL:HG23	0.64	2.18	3	3
1:A:413:VAL:HG22	1:A:417:ASN:HD21	0.64	1.51	3	1
1:A:430:LEU:HD11	2:A:451:ANP:C6	0.64	2.23	6	2
1:A:430:LEU:HD13	1:A:430:LEU:N	0.64	2.08	6	1
1:A:369:PHE:CZ	1:A:434:ALA:CB	0.64	2.80	4	14
1:A:341:VAL:O	1:A:345:VAL:HG22	0.64	1.91	9	2
1:A:416:HIS:O	1:A:417:ASN:CB	0.64	2.45	6	16
1:A:438:VAL:HG23	1:A:439:PRO:HD2	0.63	1.69	1	2
1:A:296:MET:CE	1:A:416:HIS:CD2	0.63	2.81	6	8
1:A:378:ILE:HD13	2:A:451:ANP:C8	0.63	2.23	10	3
1:A:416:HIS:CB	1:A:436:LEU:HD23	0.63	2.22	7	2
1:A:413:VAL:HG11	1:A:419:MET:O	0.63	1.93	18	6
1:A:348:ALA:HB1	1:A:373:ASP:CB	0.63	2.23	3	1
1:A:330:VAL:HG11	1:A:367:ALA:CB	0.63	2.21	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:430:LEU:N	1:A:430:LEU:CD1	0.63	2.61	6	1
1:A:296:MET:HE1	1:A:415:ASN:HB3	0.63	1.71	17	4
1:A:408:ILE:O	1:A:412:ILE:HD12	0.63	1.93	10	1
1:A:378:ILE:N	1:A:378:ILE:HD13	0.63	2.09	18	3
1:A:336:SER:C	1:A:412:ILE:HD12	0.63	2.19	6	1
1:A:385:HIS:CD2	1:A:385:HIS:N	0.63	2.67	13	4
1:A:302:ASN:OD1	1:A:323:LEU:HD23	0.63	1.94	14	4
1:A:330:VAL:HB	1:A:438:VAL:HG22	0.63	1.71	7	2
1:A:430:LEU:CD2	2:A:451:ANP:C6	0.63	2.76	14	4
1:A:430:LEU:HD21	2:A:451:ANP:N6	0.62	2.10	10	1
1:A:430:LEU:HD11	2:A:451:ANP:N7	0.62	2.10	8	1
1:A:430:LEU:HD22	1:A:430:LEU:C	0.62	2.19	10	1
1:A:438:VAL:HG12	1:A:438:VAL:O	0.62	1.94	4	1
1:A:385:HIS:C	1:A:385:HIS:CD2	0.62	2.78	14	1
1:A:422:LEU:HD21	2:A:451:ANP:C2	0.62	2.25	5	3
1:A:422:LEU:HD12	1:A:422:LEU:O	0.62	1.95	15	2
1:A:297:GLU:O	1:A:331:LYS:HA	0.61	1.95	1	20
1:A:342:ALA:O	1:A:345:VAL:HG12	0.61	1.94	1	1
1:A:378:ILE:HD11	1:A:430:LEU:HD21	0.61	1.70	3	2
1:A:299:ALA:HB3	1:A:332:MET:CG	0.61	2.25	4	1
1:A:417:ASN:ND2	1:A:434:ALA:HB1	0.61	2.10	16	1
1:A:296:MET:HE2	1:A:416:HIS:NE2	0.61	2.09	16	4
1:A:348:ALA:HB2	1:A:373:ASP:OD1	0.61	1.95	7	1
1:A:430:LEU:CB	2:A:451:ANP:C6	0.61	2.78	3	1
1:A:337:ILE:CD1	1:A:416:HIS:CE1	0.61	2.83	20	9
1:A:378:ILE:CG1	1:A:430:LEU:HD21	0.61	2.25	13	2
1:A:315:TYR:O	1:A:316:GLU:CB	0.61	2.47	1	10
1:A:378:ILE:CD1	1:A:430:LEU:HD11	0.61	2.24	11	3
1:A:295:PRO:HB3	1:A:333:HIS:CD2	0.61	2.30	15	3
1:A:369:PHE:CE1	1:A:434:ALA:CB	0.61	2.84	4	2
1:A:299:ALA:HB3	1:A:332:MET:HG3	0.60	1.72	11	6
1:A:424:THR:O	1:A:430:LEU:HD22	0.60	1.96	13	1
1:A:316:GLU:O	1:A:319:ILE:HD11	0.60	1.96	18	1
1:A:369:PHE:CZ	1:A:434:ALA:HB3	0.60	2.30	17	13
1:A:381:GLU:O	1:A:385:HIS:CD2	0.60	2.54	1	3
1:A:417:ASN:N	1:A:417:ASN:OD1	0.60	2.34	3	1
1:A:430:LEU:HD11	2:A:451:ANP:HN61	0.60	1.54	10	1
1:A:333:HIS:CB	1:A:416:HIS:NE2	0.60	2.65	16	2
1:A:386:LEU:CD2	1:A:422:LEU:CD2	0.60	2.78	13	1
1:A:309:ILE:HD11	1:A:321:THR:CG2	0.60	2.26	16	1
1:A:378:ILE:HD12	2:A:451:ANP:HI'	0.60	1.73	5	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:408:ILE:O	1:A:409:VAL:HG12	0.60	1.96	2	1
1:A:319:ILE:CG2	1:A:358:VAL:CG2	0.60	2.79	3	12
1:A:369:PHE:CE1	1:A:434:ALA:HB3	0.60	2.32	4	7
1:A:345:VAL:HG23	1:A:356:ILE:HG21	0.60	1.71	1	1
1:A:430:LEU:CD1	2:A:451:ANP:C6	0.60	2.80	18	2
1:A:296:MET:HE1	1:A:415:ASN:O	0.59	1.97	16	1
1:A:408:ILE:N	1:A:408:ILE:CD1	0.59	2.65	1	1
1:A:424:THR:N	1:A:429:GLY:O	0.59	2.36	8	1
1:A:430:LEU:CD1	2:A:451:ANP:C5	0.59	2.80	19	2
1:A:378:ILE:CD1	1:A:430:LEU:CD2	0.59	2.79	17	1
1:A:378:ILE:CD1	1:A:422:LEU:HD12	0.59	2.27	20	1
1:A:368:TRP:O	1:A:368:TRP:CE3	0.59	2.56	2	3
1:A:330:VAL:CG1	1:A:438:VAL:HG22	0.59	2.18	19	2
1:A:422:LEU:HD13	1:A:430:LEU:HD11	0.59	1.74	13	1
1:A:314:GLY:O	1:A:315:TYR:CG	0.59	2.56	1	1
1:A:312:GLU:O	1:A:317:ARG:CD	0.59	2.51	1	1
1:A:314:GLY:C	1:A:315:TYR:CD2	0.59	2.81	17	2
1:A:305:LEU:CD2	1:A:341:VAL:HG21	0.59	2.28	19	10
1:A:309:ILE:HD12	1:A:321:THR:CG2	0.59	2.28	1	1
1:A:408:ILE:CG2	1:A:409:VAL:HG23	0.59	2.27	3	1
1:A:296:MET:HE2	1:A:416:HIS:CD2	0.59	2.33	16	4
1:A:344:MET:CE	1:A:432:ILE:HG21	0.59	2.27	8	2
1:A:365:ASN:O	1:A:366:ARG:CG	0.59	2.51	6	11
1:A:432:ILE:HD11	2:A:451:ANP:C2	0.59	2.28	12	1
1:A:328:ILE:HG23	1:A:362:THR:HG21	0.58	1.74	12	3
1:A:323:LEU:CD1	1:A:323:LEU:N	0.58	2.66	15	16
1:A:416:HIS:CG	1:A:436:LEU:CD2	0.58	2.86	7	1
1:A:378:ILE:CD1	1:A:430:LEU:HD21	0.58	2.28	13	1
1:A:299:ALA:HB3	1:A:332:MET:SD	0.58	2.38	20	3
1:A:430:LEU:HD23	1:A:431:SER:N	0.58	2.13	12	2
2:A:451:ANP:O3G	2:A:451:ANP:O2B	0.58	2.21	12	3
1:A:301:LEU:CD2	1:A:332:MET:CE	0.58	2.81	1	1
1:A:296:MET:HE2	1:A:415:ASN:O	0.58	1.98	3	1
1:A:424:THR:HG23	1:A:429:GLY:N	0.58	2.12	4	1
1:A:314:GLY:O	1:A:315:TYR:CB	0.58	2.51	16	3
1:A:361:GLY:C	1:A:362:THR:HG22	0.58	2.23	19	10
1:A:319:ILE:N	1:A:319:ILE:HD13	0.58	2.13	10	1
1:A:314:GLY:O	1:A:317:ARG:CG	0.58	2.52	16	1
1:A:424:THR:HA	1:A:430:LEU:HG	0.58	1.74	8	1
1:A:328:ILE:N	1:A:328:ILE:HD13	0.58	2.11	8	5
1:A:369:PHE:C	1:A:369:PHE:CD1	0.58	2.81	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:332:MET:CG	1:A:416:HIS:NE2	0.58	2.66	6	2
1:A:326:GLY:O	1:A:327:SER:CB	0.58	2.52	6	6
1:A:409:VAL:HA	1:A:412:ILE:HD13	0.58	1.76	3	3
1:A:296:MET:CE	1:A:416:HIS:NE2	0.58	2.67	16	4
1:A:369:PHE:CD1	1:A:369:PHE:O	0.58	2.57	9	7
1:A:315:TYR:O	1:A:316:GLU:CG	0.58	2.52	16	3
1:A:377:GLY:O	2:A:451:ANP:N3	0.57	2.37	3	1
1:A:378:ILE:HG21	1:A:386:LEU:HD21	0.57	1.76	3	1
1:A:417:ASN:CB	1:A:435:TRP:O	0.57	2.51	3	1
1:A:330:VAL:CG1	1:A:367:ALA:CB	0.57	2.81	17	3
1:A:318:GLU:C	1:A:319:ILE:HD13	0.57	2.24	10	1
1:A:369:PHE:CE2	1:A:434:ALA:CB	0.57	2.87	2	3
1:A:422:LEU:HD13	1:A:432:ILE:CG1	0.57	2.29	7	1
1:A:316:GLU:O	1:A:319:ILE:CD1	0.57	2.52	18	1
1:A:369:PHE:CE2	1:A:434:ALA:HB3	0.57	2.34	2	3
1:A:430:LEU:HB2	2:A:451:ANP:N6	0.57	2.15	2	1
1:A:378:ILE:CD1	2:A:451:ANP:C4	0.57	2.82	5	2
1:A:369:PHE:HE2	1:A:436:LEU:HD11	0.57	1.60	15	1
1:A:408:ILE:CD1	1:A:409:VAL:HG12	0.57	2.28	15	1
1:A:379:ALA:HB3	1:A:382:GLN:HG3	0.57	1.76	1	3
1:A:385:HIS:ND1	1:A:385:HIS:N	0.57	2.52	11	4
1:A:430:LEU:CD1	1:A:430:LEU:N	0.57	2.68	10	1
1:A:355:TRP:CZ2	1:A:357:LYS:HB2	0.57	2.35	17	12
1:A:309:ILE:HG12	1:A:358:VAL:HG11	0.57	1.73	13	3
1:A:424:THR:CG2	1:A:429:GLY:O	0.57	2.53	16	1
1:A:296:MET:HE3	1:A:415:ASN:HB3	0.57	1.75	18	3
1:A:373:ASP:OD2	2:A:451:ANP:N6	0.57	2.38	6	2
1:A:382:GLN:CD	2:A:451:ANP:O2'	0.57	2.47	18	1
1:A:305:LEU:HD22	1:A:341:VAL:HG11	0.57	1.75	19	1
1:A:296:MET:SD	1:A:416:HIS:CD2	0.57	2.98	6	2
1:A:363:GLU:CB	1:A:364:PRO:CD	0.57	2.83	14	4
1:A:378:ILE:CD1	1:A:422:LEU:CD2	0.57	2.82	8	1
1:A:416:HIS:HB3	1:A:436:LEU:HD23	0.57	1.76	7	2
1:A:419:MET:SD	1:A:435:TRP:CD1	0.56	2.98	16	2
1:A:410:GLN:O	1:A:414:ASP:CB	0.56	2.54	11	5
1:A:309:ILE:O	1:A:313:SER:CB	0.56	2.53	9	12
1:A:317:ARG:CG	1:A:318:GLU:N	0.56	2.67	5	4
1:A:324:TYR:CD2	1:A:362:THR:HG21	0.56	2.35	1	7
1:A:364:PRO:O	1:A:365:ASN:CB	0.56	2.53	1	11
1:A:313:SER:C	1:A:319:ILE:CD1	0.56	2.79	19	1
1:A:308:VAL:HG11	1:A:341:VAL:CB	0.56	2.25	5	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:321:THR:HG22	1:A:358:VAL:HB	0.56	1.76	16	1
1:A:430:LEU:HD21	2:A:451:ANP:C5	0.56	2.31	1	3
1:A:430:LEU:HB3	2:A:451:ANP:C6	0.56	2.29	3	1
1:A:430:LEU:HD11	2:A:451:ANP:C5	0.56	2.30	6	2
1:A:295:PRO:O	1:A:296:MET:C	0.56	2.47	1	8
1:A:421:GLU:O	1:A:433:ARG:CG	0.56	2.54	13	1
1:A:309:ILE:CD1	1:A:321:THR:CG2	0.56	2.83	16	2
1:A:348:ALA:HB1	1:A:373:ASP:HB3	0.56	1.77	3	1
1:A:430:LEU:C	1:A:430:LEU:CD2	0.56	2.76	6	2
1:A:378:ILE:HD11	1:A:422:LEU:CD2	0.56	2.27	8	2
1:A:378:ILE:HG22	1:A:383:ARG:CB	0.56	2.31	14	1
1:A:328:ILE:O	1:A:329:GLU:CG	0.56	2.54	7	20
1:A:424:THR:HG23	1:A:429:GLY:CA	0.56	2.31	4	1
1:A:335:LEU:HD12	1:A:335:LEU:O	0.56	2.01	12	1
1:A:423:GLY:O	1:A:430:LEU:HD12	0.55	2.01	1	1
1:A:295:PRO:HG2	1:A:333:HIS:CE1	0.55	2.37	18	9
1:A:313:SER:CB	1:A:319:ILE:CD1	0.55	2.84	2	3
1:A:318:GLU:N	1:A:356:ILE:CD1	0.55	2.69	1	1
1:A:408:ILE:O	1:A:409:VAL:CB	0.55	2.53	2	3
1:A:312:GLU:OE2	1:A:358:VAL:CG2	0.55	2.54	3	1
1:A:386:LEU:HD11	1:A:422:LEU:HD13	0.55	1.75	3	1
1:A:296:MET:HE3	1:A:416:HIS:CE1	0.55	2.35	11	2
1:A:332:MET:HG2	1:A:416:HIS:NE2	0.55	2.17	2	4
1:A:345:VAL:HG13	1:A:356:ILE:HG21	0.55	1.77	5	1
1:A:324:TYR:CD2	1:A:362:THR:CG2	0.55	2.90	10	3
1:A:313:SER:HA	1:A:319:ILE:CD1	0.55	2.31	13	1
1:A:378:ILE:HG21	1:A:386:LEU:CD2	0.55	2.31	3	1
1:A:332:MET:SD	1:A:337:ILE:HD12	0.55	2.42	19	1
1:A:316:GLU:O	1:A:319:ILE:CG1	0.55	2.55	18	1
1:A:385:HIS:O	1:A:386:LEU:HD12	0.55	2.01	5	2
1:A:313:SER:OG	1:A:319:ILE:CD1	0.55	2.54	15	3
1:A:373:ASP:OD1	1:A:373:ASP:N	0.55	2.39	13	3
1:A:430:LEU:HD13	1:A:430:LEU:C	0.55	2.25	17	2
1:A:332:MET:SD	1:A:436:LEU:HD11	0.55	2.41	16	1
1:A:416:HIS:O	1:A:436:LEU:HD23	0.55	2.01	16	1
1:A:430:LEU:HD23	2:A:451:ANP:N6	0.55	2.17	1	2
1:A:408:ILE:HG23	1:A:409:VAL:CG2	0.55	2.31	3	1
1:A:438:VAL:O	1:A:438:VAL:HG13	0.55	2.00	5	1
1:A:422:LEU:HD21	2:A:451:ANP:H2	0.55	1.79	18	1
1:A:430:LEU:HB3	2:A:451:ANP:N6	0.54	2.17	3	2
1:A:373:ASP:CG	2:A:451:ANP:N6	0.54	2.65	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:424:THR:HG23	1:A:429:GLY:O	0.54	2.02	10	2
1:A:313:SER:HB3	1:A:319:ILE:HD13	0.54	1.79	11	1
1:A:332:MET:HG3	1:A:416:HIS:CE1	0.54	2.37	6	1
1:A:422:LEU:HD11	2:A:451:ANP:C2	0.54	2.31	8	1
1:A:378:ILE:HG13	1:A:430:LEU:HD21	0.54	1.80	13	2
1:A:313:SER:OG	1:A:319:ILE:HD13	0.54	2.03	20	1
1:A:333:HIS:CE1	1:A:335:LEU:HB3	0.54	2.37	3	9
1:A:378:ILE:HG23	2:A:451:ANP:O4'	0.54	2.02	3	1
1:A:422:LEU:HD22	1:A:432:ILE:HG12	0.54	1.80	7	1
1:A:416:HIS:O	1:A:417:ASN:HB2	0.54	2.01	6	11
1:A:373:ASP:OD1	2:A:451:ANP:N6	0.54	2.40	6	1
1:A:365:ASN:O	1:A:366:ARG:CB	0.54	2.56	12	11
1:A:385:HIS:O	1:A:386:LEU:CG	0.54	2.56	2	1
1:A:431:SER:O	1:A:432:ILE:CG1	0.54	2.56	5	1
1:A:378:ILE:HD11	1:A:422:LEU:HD23	0.54	1.78	12	1
1:A:342:ALA:O	1:A:346:VAL:CG2	0.54	2.56	13	5
1:A:348:ALA:CB	1:A:373:ASP:CB	0.54	2.85	3	1
1:A:348:ALA:CB	1:A:373:ASP:CG	0.54	2.81	3	1
1:A:313:SER:O	1:A:319:ILE:CD1	0.54	2.55	17	4
1:A:432:ILE:HD11	2:A:451:ANP:H2	0.54	1.80	12	1
1:A:295:PRO:HB2	1:A:333:HIS:CD2	0.54	2.38	19	3
1:A:305:LEU:HD13	1:A:360:SER:OG	0.54	2.01	6	1
1:A:341:VAL:O	1:A:345:VAL:CG2	0.54	2.55	10	1
1:A:333:HIS:NE2	1:A:335:LEU:HB2	0.54	2.18	15	8
1:A:412:ILE:O	1:A:416:HIS:ND1	0.54	2.41	8	3
1:A:378:ILE:CG1	1:A:430:LEU:CD2	0.54	2.86	19	2
1:A:379:ALA:HB3	1:A:382:GLN:CG	0.54	2.29	20	3
1:A:296:MET:CE	1:A:415:ASN:O	0.54	2.56	3	1
1:A:424:THR:OG1	1:A:430:LEU:CD2	0.54	2.56	15	1
1:A:296:MET:CE	1:A:416:HIS:CE1	0.54	2.90	16	1
1:A:314:GLY:C	1:A:315:TYR:CG	0.54	2.83	17	2
1:A:382:GLN:HA	1:A:385:HIS:CD2	0.54	2.38	14	6
1:A:312:GLU:OE2	1:A:342:ALA:HB1	0.54	2.03	5	1
1:A:424:THR:OG1	1:A:430:LEU:N	0.54	2.41	9	1
1:A:368:TRP:CE3	1:A:368:TRP:C	0.53	2.86	16	12
1:A:365:ASN:N	1:A:365:ASN:OD1	0.53	2.41	19	3
2:A:451:ANP:O1A	2:A:451:ANP:C4'	0.53	2.56	12	1
1:A:352:GLY:O	1:A:353:ASN:CB	0.53	2.55	13	1
1:A:430:LEU:HD13	2:A:451:ANP:N6	0.53	2.19	15	1
1:A:408:ILE:O	1:A:408:ILE:CG2	0.53	2.57	16	2
1:A:408:ILE:O	1:A:412:ILE:CD1	0.53	2.57	7	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:418:GLY:HA2	1:A:437:PRO:CD	0.53	2.33	10	2
1:A:369:PHE:CE2	1:A:436:LEU:HD11	0.53	2.38	15	1
1:A:422:LEU:HD23	1:A:432:ILE:HD13	0.53	1.79	1	1
1:A:313:SER:O	1:A:356:ILE:CD1	0.53	2.56	10	1
1:A:430:LEU:HD13	2:A:451:ANP:N7	0.53	2.18	15	1
1:A:363:GLU:OE1	1:A:364:PRO:CD	0.53	2.56	17	1
1:A:378:ILE:HG21	1:A:386:LEU:HD13	0.53	1.81	13	1
1:A:429:GLY:O	1:A:430:LEU:HD22	0.53	2.04	2	1
1:A:369:PHE:CD1	1:A:369:PHE:N	0.53	2.77	3	1
1:A:413:VAL:CG1	1:A:419:MET:O	0.53	2.56	18	4
1:A:409:VAL:HG13	1:A:410:GLN:N	0.53	2.18	7	1
1:A:363:GLU:HB3	1:A:364:PRO:CD	0.53	2.34	14	3
1:A:430:LEU:HD23	2:A:451:ANP:C6	0.53	2.34	11	1
1:A:317:ARG:O	1:A:318:GLU:CG	0.53	2.56	13	2
1:A:295:PRO:HB3	1:A:333:HIS:NE2	0.53	2.18	1	5
1:A:298:MET:CE	1:A:330:VAL:C	0.53	2.82	13	5
1:A:309:ILE:HD13	1:A:321:THR:CG2	0.53	2.30	18	3
1:A:344:MET:O	1:A:347:ASN:ND2	0.53	2.41	5	1
1:A:386:LEU:HD11	2:A:451:ANP:C1'	0.53	2.33	5	2
1:A:301:LEU:HD23	1:A:332:MET:HE1	0.53	1.81	15	2
1:A:382:GLN:HB3	2:A:451:ANP:O2'	0.53	2.04	5	2
1:A:430:LEU:HG	2:A:451:ANP:C5	0.53	2.33	2	3
1:A:430:LEU:C	1:A:430:LEU:HD13	0.53	2.28	10	1
1:A:365:ASN:C	1:A:366:ARG:CG	0.53	2.81	16	2
1:A:418:GLY:CA	1:A:437:PRO:HD3	0.53	2.34	9	12
1:A:330:VAL:CG2	1:A:332:MET:SD	0.53	2.97	3	4
1:A:413:VAL:HG13	1:A:417:ASN:ND2	0.53	2.18	3	1
1:A:430:LEU:CD1	1:A:430:LEU:C	0.53	2.82	4	1
1:A:382:GLN:OE1	1:A:382:GLN:CA	0.53	2.57	20	1
1:A:347:ASN:OD1	1:A:348:ALA:N	0.53	2.42	5	1
1:A:302:ASN:CA	1:A:323:LEU:HD23	0.53	2.34	12	2
1:A:309:ILE:HG13	1:A:321:THR:HG21	0.53	1.80	16	1
1:A:298:MET:HE1	1:A:329:GLU:C	0.53	2.29	17	1
1:A:316:GLU:OE1	1:A:356:ILE:CD1	0.53	2.57	18	1
1:A:416:HIS:O	1:A:417:ASN:CG	0.53	2.51	6	1
1:A:316:GLU:OE1	1:A:316:GLU:CA	0.53	2.57	12	1
1:A:412:ILE:CG2	1:A:413:VAL:N	0.53	2.72	18	2
1:A:365:ASN:O	1:A:366:ARG:HB3	0.52	2.05	11	7
1:A:378:ILE:HG23	2:A:451:ANP:C1'	0.52	2.34	3	1
1:A:382:GLN:OE1	2:A:451:ANP:O2'	0.52	2.27	17	2
1:A:334:PRO:O	1:A:338:LYS:CG	0.52	2.57	12	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:305:LEU:CD1	1:A:360:SER:OG	0.52	2.57	6	1
1:A:317:ARG:HG3	1:A:318:GLU:N	0.52	2.20	13	6
1:A:408:ILE:O	1:A:408:ILE:HG22	0.52	2.03	8	1
1:A:302:ASN:OD1	1:A:303:ALA:N	0.52	2.43	19	4
1:A:309:ILE:CD1	1:A:321:THR:HG22	0.52	2.34	15	7
1:A:332:MET:SD	1:A:337:ILE:CD1	0.52	2.98	19	3
1:A:430:LEU:HG	2:A:451:ANP:N6	0.52	2.19	4	3
1:A:438:VAL:O	1:A:438:VAL:CG1	0.52	2.57	5	1
1:A:366:ARG:NH1	1:A:419:MET:HE2	0.52	2.18	14	1
1:A:314:GLY:O	1:A:315:TYR:CD2	0.52	2.63	17	1
1:A:324:TYR:CG	1:A:362:THR:HG22	0.52	2.40	10	9
1:A:323:LEU:O	1:A:324:TYR:C	0.52	2.52	14	11
1:A:376:PRO:O	2:A:451:ANP:N7	0.52	2.42	2	1
1:A:304:VAL:O	1:A:308:VAL:CG2	0.52	2.56	14	6
1:A:333:HIS:NE2	1:A:335:LEU:HB3	0.52	2.19	10	4
1:A:385:HIS:O	1:A:386:LEU:C	0.52	2.52	11	1
1:A:312:GLU:O	1:A:317:ARG:CB	0.52	2.57	1	1
1:A:409:VAL:CA	1:A:412:ILE:HD13	0.52	2.34	2	1
1:A:301:LEU:CD2	1:A:332:MET:SD	0.52	2.97	9	4
1:A:318:GLU:CG	1:A:318:GLU:O	0.52	2.57	19	3
1:A:417:ASN:O	1:A:437:PRO:HD2	0.52	2.04	3	2
1:A:430:LEU:HD13	1:A:431:SER:H	0.52	1.63	3	2
1:A:381:GLU:O	1:A:385:HIS:CE1	0.52	2.62	19	1
1:A:330:VAL:HG23	1:A:332:MET:CG	0.52	2.35	7	4
1:A:386:LEU:HD11	2:A:451:ANP:O2'	0.52	2.05	9	2
1:A:432:ILE:CD1	2:A:451:ANP:N1	0.52	2.69	7	1
1:A:422:LEU:O	1:A:422:LEU:CD1	0.52	2.56	15	2
1:A:383:ARG:CD	1:A:383:ARG:C	0.52	2.83	14	1
1:A:430:LEU:HD22	2:A:451:ANP:N7	0.52	2.20	14	1
1:A:386:LEU:HD21	2:A:451:ANP:O5'	0.52	2.04	17	1
1:A:386:LEU:O	1:A:386:LEU:CD2	0.52	2.56	18	1
1:A:376:PRO:O	1:A:430:LEU:HD23	0.52	2.05	20	1
1:A:419:MET:HB3	1:A:435:TRP:HB2	0.52	1.80	16	13
1:A:422:LEU:O	1:A:422:LEU:CG	0.52	2.58	15	2
1:A:409:VAL:HG12	1:A:409:VAL:O	0.52	2.04	14	2
1:A:365:ASN:C	1:A:366:ARG:HG3	0.52	2.30	16	1
1:A:423:GLY:N	1:A:431:SER:O	0.52	2.43	18	2
1:A:332:MET:SD	1:A:436:LEU:CD1	0.51	2.98	16	3
1:A:430:LEU:CB	2:A:451:ANP:N6	0.51	2.73	2	1
1:A:363:GLU:CB	1:A:364:PRO:HD2	0.51	2.35	13	8
1:A:424:THR:HB	1:A:430:LEU:HA	0.51	1.81	13	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:307:GLU:O	1:A:311:ALA:CB	0.51	2.57	15	5
1:A:316:GLU:O	1:A:316:GLU:CG	0.51	2.58	10	1
1:A:335:LEU:C	1:A:335:LEU:CD1	0.51	2.83	10	3
1:A:337:ILE:O	1:A:341:VAL:HG23	0.51	2.04	20	2
1:A:378:ILE:HG22	1:A:379:ALA:H	0.51	1.65	10	1
1:A:323:LEU:HA	1:A:360:SER:O	0.51	2.04	13	2
1:A:345:VAL:CG1	1:A:346:VAL:N	0.51	2.72	17	1
1:A:297:GLU:O	1:A:331:LYS:CA	0.51	2.59	1	1
1:A:408:ILE:O	1:A:409:VAL:HB	0.51	2.06	1	3
1:A:408:ILE:O	1:A:409:VAL:CG1	0.51	2.59	2	1
1:A:365:ASN:HA	1:A:438:VAL:CG1	0.51	2.35	1	2
1:A:332:MET:HG3	1:A:416:HIS:CD2	0.51	2.40	2	2
1:A:357:LYS:CB	1:A:372:GLU:O	0.51	2.58	3	3
1:A:332:MET:CG	1:A:337:ILE:CG1	0.51	2.89	13	2
1:A:363:GLU:O	1:A:366:ARG:O	0.51	2.29	9	1
1:A:334:PRO:O	1:A:338:LYS:CE	0.51	2.58	12	2
1:A:313:SER:HB3	1:A:319:ILE:CD1	0.51	2.36	12	3
1:A:347:ASN:CG	2:A:451:ANP:O2A	0.51	2.54	18	1
1:A:378:ILE:HA	2:A:451:ANP:O2'	0.51	2.06	11	2
2:A:451:ANP:O1A	2:A:451:ANP:O4'	0.51	2.27	12	1
1:A:376:PRO:O	2:A:451:ANP:C2	0.51	2.59	6	1
1:A:333:HIS:HB2	1:A:416:HIS:NE2	0.51	2.20	16	1
1:A:330:VAL:HG23	1:A:332:MET:HB2	0.51	1.83	2	2
1:A:378:ILE:HG13	1:A:430:LEU:CD1	0.51	2.36	7	1
1:A:308:VAL:CG1	1:A:341:VAL:CG1	0.51	2.80	4	6
1:A:418:GLY:CA	1:A:437:PRO:CD	0.51	2.89	18	2
1:A:336:SER:HB3	1:A:416:HIS:CE1	0.51	2.40	3	1
1:A:324:TYR:HB3	1:A:328:ILE:CD1	0.51	2.36	14	5
1:A:430:LEU:CD2	1:A:431:SER:N	0.51	2.74	6	2
1:A:423:GLY:O	1:A:430:LEU:CD2	0.51	2.59	8	1
1:A:331:LYS:O	1:A:331:LYS:CD	0.50	2.60	1	1
1:A:378:ILE:HG13	1:A:430:LEU:CD2	0.50	2.36	13	2
1:A:300:ASP:HB3	1:A:303:ALA:HB3	0.50	1.82	10	1
1:A:320:GLU:O	1:A:358:VAL:O	0.50	2.29	10	4
1:A:324:TYR:CD1	1:A:325:PRO:HD2	0.50	2.42	8	3
1:A:416:HIS:C	1:A:417:ASN:OD1	0.50	2.55	8	1
1:A:408:ILE:HD12	1:A:408:ILE:O	0.50	2.06	18	1
1:A:326:GLY:O	1:A:327:SER:O	0.50	2.30	15	11
1:A:360:SER:OG	1:A:369:PHE:CB	0.50	2.59	3	1
1:A:409:VAL:HA	1:A:412:ILE:HD12	0.50	1.83	11	1
1:A:378:ILE:HD11	1:A:430:LEU:HD22	0.50	1.83	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:297:GLU:N	1:A:297:GLU:CD	0.50	2.69	19	1
1:A:417:ASN:HB3	1:A:435:TRP:O	0.50	2.06	3	2
1:A:386:LEU:HD11	2:A:451:ANP:C4'	0.50	2.36	18	3
1:A:409:VAL:O	1:A:409:VAL:CG1	0.50	2.60	14	1
1:A:316:GLU:O	1:A:319:ILE:HG13	0.50	2.05	18	1
1:A:378:ILE:HG22	1:A:383:ARG:HB3	0.50	1.83	14	1
1:A:319:ILE:HG23	1:A:358:VAL:CG2	0.50	2.37	1	4
1:A:331:LYS:O	1:A:331:LYS:HD2	0.50	2.07	1	1
1:A:355:TRP:CH2	1:A:357:LYS:HB2	0.50	2.41	2	2
1:A:438:VAL:HG13	1:A:439:PRO:HD2	0.50	1.84	2	1
1:A:364:PRO:O	1:A:365:ASN:CG	0.50	2.55	15	3
1:A:361:GLY:O	1:A:362:THR:CB	0.50	2.60	19	4
1:A:345:VAL:HG13	1:A:346:VAL:N	0.50	2.20	17	1
1:A:378:ILE:CD1	1:A:430:LEU:HD22	0.50	2.36	17	1
1:A:313:SER:HB2	1:A:319:ILE:CD1	0.50	2.37	15	3
1:A:347:ASN:O	1:A:351:TYR:CB	0.50	2.60	6	1
1:A:342:ALA:HA	1:A:345:VAL:CG2	0.50	2.36	15	1
1:A:368:TRP:HB3	1:A:435:TRP:CE3	0.50	2.41	11	8
1:A:408:ILE:O	1:A:409:VAL:CG2	0.50	2.59	4	1
1:A:422:LEU:HD12	1:A:422:LEU:C	0.50	2.32	17	3
1:A:309:ILE:O	1:A:313:SER:OG	0.50	2.30	14	10
1:A:300:ASP:HB2	1:A:303:ALA:HB3	0.50	1.84	19	2
1:A:359:SER:O	1:A:370:GLN:O	0.50	2.30	6	3
1:A:378:ILE:HG12	2:A:451:ANP:C1'	0.50	2.37	7	1
1:A:328:ILE:HG22	1:A:329:GLU:H	0.49	1.66	2	11
1:A:438:VAL:CG2	1:A:439:PRO:HD2	0.49	2.36	1	3
1:A:350:ARG:O	1:A:351:TYR:C	0.49	2.55	6	1
1:A:370:GLN:CG	1:A:432:ILE:O	0.49	2.60	11	1
1:A:378:ILE:CD1	1:A:430:LEU:HD13	0.49	2.37	14	1
1:A:378:ILE:HD13	2:A:451:ANP:N9	0.49	2.22	5	1
1:A:374:ASP:OD1	1:A:375:GLY:N	0.49	2.44	6	1
1:A:386:LEU:HD23	1:A:386:LEU:N	0.49	2.22	20	1
1:A:333:HIS:HB3	1:A:416:HIS:NE2	0.49	2.22	3	2
1:A:335:LEU:HG	1:A:336:SER:N	0.49	2.23	19	2
1:A:385:HIS:ND1	1:A:385:HIS:C	0.49	2.71	18	1
1:A:312:GLU:O	1:A:317:ARG:HD3	0.49	2.08	1	1
1:A:430:LEU:HG	2:A:451:ANP:C4	0.49	2.38	13	2
1:A:351:TYR:O	1:A:353:ASN:N	0.49	2.44	8	1
1:A:301:LEU:CD1	1:A:436:LEU:HD12	0.49	2.37	20	2
1:A:365:ASN:O	1:A:366:ARG:HG3	0.49	2.07	8	7
1:A:318:GLU:CD	1:A:355:TRP:N	0.49	2.71	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:312:GLU:CD	1:A:358:VAL:HG21	0.49	2.33	6	1
1:A:383:ARG:O	1:A:385:HIS:O	0.49	2.30	7	1
1:A:348:ALA:O	1:A:352:GLY:C	0.49	2.55	18	5
1:A:385:HIS:O	1:A:386:LEU:CD1	0.49	2.60	2	1
1:A:296:MET:HE1	1:A:416:HIS:CG	0.49	2.41	6	1
1:A:408:ILE:O	1:A:409:VAL:C	0.49	2.54	15	2
1:A:386:LEU:HD21	2:A:451:ANP:C1'	0.49	2.37	19	1
1:A:333:HIS:NE2	1:A:335:LEU:CB	0.49	2.75	10	6
1:A:309:ILE:O	1:A:313:SER:HB2	0.49	2.06	5	8
1:A:348:ALA:O	1:A:352:GLY:CA	0.49	2.61	15	4
1:A:378:ILE:HG12	1:A:430:LEU:CD1	0.49	2.38	14	1
2:A:451:ANP:O1G	2:A:451:ANP:O1B	0.49	2.30	19	1
1:A:382:GLN:HA	1:A:385:HIS:NE2	0.49	2.22	1	1
1:A:309:ILE:O	1:A:313:SER:HB3	0.49	2.08	15	5
1:A:313:SER:O	1:A:314:GLY:C	0.49	2.55	2	3
1:A:378:ILE:HD12	1:A:422:LEU:HD12	0.49	1.84	7	1
1:A:313:SER:HA	1:A:345:VAL:CG1	0.49	2.38	10	1
1:A:386:LEU:HD11	2:A:451:ANP:HI'	0.49	1.84	11	1
1:A:430:LEU:HG	2:A:451:ANP:N7	0.49	2.21	18	1
1:A:342:ALA:O	1:A:346:VAL:HG13	0.49	2.08	1	1
1:A:335:LEU:O	1:A:336:SER:C	0.49	2.56	2	4
1:A:313:SER:CB	1:A:319:ILE:HD13	0.49	2.38	4	2
1:A:332:MET:C	1:A:332:MET:SD	0.49	2.95	13	3
1:A:332:MET:HG3	1:A:337:ILE:CG1	0.49	2.37	13	1
1:A:423:GLY:O	1:A:429:GLY:O	0.49	2.30	20	1
1:A:366:ARG:O	1:A:366:ARG:CG	0.49	2.61	5	1
1:A:384:LYS:O	1:A:385:HIS:C	0.49	2.56	8	1
1:A:386:LEU:HD12	1:A:386:LEU:O	0.49	2.07	8	1
1:A:423:GLY:O	1:A:430:LEU:HD23	0.49	2.08	15	1
1:A:378:ILE:HG12	2:A:451:ANP:N9	0.48	2.23	16	3
1:A:408:ILE:HG22	1:A:409:VAL:N	0.48	2.22	9	1
1:A:410:GLN:O	1:A:414:ASP:CG	0.48	2.56	16	1
1:A:324:TYR:CD1	1:A:362:THR:CG2	0.48	2.95	5	6
1:A:430:LEU:HG	2:A:451:ANP:C6	0.48	2.38	2	3
1:A:424:THR:HB	1:A:431:SER:N	0.48	2.22	3	3
1:A:368:TRP:CZ3	1:A:370:GLN:HG3	0.48	2.42	13	1
1:A:357:LYS:HB3	1:A:372:GLU:CB	0.48	2.38	16	2
1:A:372:GLU:C	1:A:373:ASP:CG	0.48	2.80	15	1
1:A:438:VAL:N	1:A:439:PRO:CD	0.48	2.76	15	1
1:A:351:TYR:O	1:A:352:GLY:C	0.48	2.56	19	1
1:A:418:GLY:HA2	1:A:437:PRO:HD3	0.48	1.85	1	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:314:GLY:O	1:A:317:ARG:CD	0.48	2.62	2	1
1:A:386:LEU:HD12	1:A:422:LEU:CD1	0.48	2.38	3	1
1:A:329:GLU:C	1:A:330:VAL:CG1	0.48	2.85	6	4
1:A:305:LEU:HD21	1:A:341:VAL:HG21	0.48	1.84	19	1
1:A:298:MET:CE	1:A:331:LYS:HB2	0.48	2.38	1	1
1:A:364:PRO:O	1:A:365:ASN:C	0.48	2.57	3	2
1:A:424:THR:HA	1:A:430:LEU:CB	0.48	2.39	6	2
1:A:430:LEU:HD22	2:A:451:ANP:C5	0.48	2.38	14	3
1:A:295:PRO:HA	1:A:297:GLU:OE1	0.48	2.08	19	1
1:A:370:GLN:HG2	1:A:371:VAL:N	0.48	2.23	17	9
1:A:362:THR:HA	1:A:367:ALA:HA	0.48	1.85	16	9
1:A:328:ILE:HG22	1:A:329:GLU:N	0.48	2.22	10	3
1:A:363:GLU:HB3	1:A:364:PRO:HD2	0.48	1.86	12	9
2:A:451:ANP:O2G	2:A:451:ANP:O3A	0.48	2.31	5	1
1:A:416:HIS:C	1:A:417:ASN:CG	0.48	2.80	20	1
1:A:296:MET:HE1	1:A:416:HIS:CE1	0.48	2.44	6	1
1:A:382:GLN:O	1:A:383:ARG:C	0.48	2.56	9	3
1:A:312:GLU:O	1:A:312:GLU:CD	0.48	2.57	15	1
1:A:377:GLY:HA2	1:A:430:LEU:HD12	0.48	1.84	10	2
1:A:337:ILE:O	1:A:338:LYS:C	0.48	2.55	19	8
1:A:422:LEU:CD2	1:A:432:ILE:HD12	0.48	2.39	10	1
1:A:326:GLY:C	1:A:327:SER:OG	0.48	2.56	15	3
1:A:364:PRO:O	1:A:365:ASN:HB3	0.48	2.09	19	7
1:A:413:VAL:HG21	1:A:420:LEU:CD1	0.48	2.35	6	2
1:A:419:MET:HB3	1:A:435:TRP:CD1	0.48	2.43	8	15
1:A:314:GLY:O	1:A:315:TYR:HB2	0.48	2.09	20	9
1:A:430:LEU:HD23	2:A:451:ANP:N7	0.48	2.24	2	1
1:A:339:ARG:NH1	1:A:343:ASN:OD1	0.48	2.47	9	1
1:A:354:GLY:O	1:A:355:TRP:CB	0.48	2.60	10	2
1:A:422:LEU:HB3	1:A:432:ILE:CD1	0.48	2.38	13	1
1:A:301:LEU:O	1:A:305:LEU:HG	0.48	2.09	2	20
1:A:350:ARG:CG	1:A:351:TYR:N	0.48	2.76	2	2
1:A:357:LYS:HB2	1:A:372:GLU:O	0.48	2.09	5	2
1:A:386:LEU:HD21	2:A:451:ANP:O4'	0.48	2.07	5	4
1:A:323:LEU:CD1	1:A:359:SER:HA	0.48	2.38	10	3
1:A:337:ILE:HD13	1:A:412:ILE:CG2	0.48	2.38	10	1
1:A:313:SER:HB2	1:A:319:ILE:HD11	0.48	1.85	15	1
1:A:347:ASN:OD1	2:A:451:ANP:O2A	0.48	2.31	15	1
1:A:424:THR:OG1	1:A:430:LEU:HD23	0.48	2.08	15	1
1:A:424:THR:O	1:A:430:LEU:HG	0.48	2.09	16	1
1:A:382:GLN:HG2	1:A:386:LEU:CD2	0.48	2.38	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:378:ILE:HG12	2:A:451:ANP:C2'	0.47	2.39	7	1
1:A:315:TYR:O	1:A:316:GLU:HG3	0.47	2.08	10	2
1:A:357:LYS:N	1:A:372:GLU:O	0.47	2.47	16	1
1:A:298:MET:HE2	1:A:331:LYS:N	0.47	2.24	1	1
1:A:332:MET:HG2	1:A:337:ILE:HG13	0.47	1.86	17	4
1:A:348:ALA:O	1:A:352:GLY:O	0.47	2.33	8	4
1:A:357:LYS:HB3	1:A:372:GLU:O	0.47	2.09	16	3
1:A:423:GLY:C	1:A:430:LEU:HA	0.47	2.34	8	1
1:A:333:HIS:ND1	1:A:336:SER:HB2	0.47	2.23	9	1
1:A:312:GLU:HB2	1:A:345:VAL:CG1	0.47	2.39	13	1
1:A:373:ASP:CG	2:A:451:ANP:N1	0.47	2.72	13	1
1:A:378:ILE:HG12	2:A:451:ANP:C8	0.47	2.39	16	1
1:A:313:SER:O	1:A:313:SER:OG	0.47	2.31	18	1
1:A:333:HIS:O	1:A:337:ILE:CG1	0.47	2.61	6	5
1:A:360:SER:OG	1:A:369:PHE:HB3	0.47	2.08	3	1
1:A:378:ILE:O	1:A:379:ALA:C	0.47	2.56	3	4
1:A:302:ASN:O	1:A:302:ASN:OD1	0.47	2.32	11	5
1:A:336:SER:OG	1:A:412:ILE:HD13	0.47	2.09	6	1
1:A:332:MET:CE	1:A:337:ILE:HG13	0.47	2.39	4	7
1:A:417:ASN:CA	1:A:436:LEU:CD2	0.47	2.91	3	1
1:A:347:ASN:O	1:A:351:TYR:HB2	0.47	2.10	6	1
1:A:378:ILE:CG2	2:A:451:ANP:O2'	0.47	2.52	7	2
1:A:386:LEU:HD21	2:A:451:ANP:H4'	0.47	1.86	7	1
1:A:424:THR:OG1	1:A:429:GLY:C	0.47	2.57	9	1
1:A:353:ASN:CG	1:A:374:ASP:O	0.47	2.57	16	1
1:A:323:LEU:HG	1:A:360:SER:CB	0.47	2.39	3	10
1:A:332:MET:CG	1:A:337:ILE:HG13	0.47	2.39	6	4
1:A:323:LEU:HD12	1:A:359:SER:HA	0.47	1.87	10	3
1:A:295:PRO:O	1:A:296:MET:O	0.47	2.33	20	1
1:A:345:VAL:HG23	1:A:356:ILE:CG2	0.47	2.40	1	1
1:A:350:ARG:HG3	1:A:351:TYR:N	0.47	2.23	20	2
1:A:332:MET:O	1:A:332:MET:SD	0.47	2.73	7	1
1:A:298:MET:HE3	1:A:331:LYS:HB2	0.47	1.86	1	1
1:A:343:ASN:O	1:A:346:VAL:CG2	0.47	2.55	1	1
1:A:364:PRO:O	1:A:366:ARG:NH1	0.47	2.48	2	1
1:A:413:VAL:HG11	1:A:420:LEU:CB	0.47	2.35	2	2
1:A:313:SER:C	1:A:315:TYR:N	0.47	2.72	3	2
1:A:365:ASN:O	1:A:365:ASN:OD1	0.47	2.33	12	2
1:A:368:TRP:CE3	1:A:368:TRP:O	0.47	2.68	13	3
1:A:364:PRO:O	1:A:365:ASN:HB2	0.47	2.09	7	8
1:A:422:LEU:HD11	2:A:451:ANP:H2	0.47	1.85	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:322:ALA:HB3	1:A:359:SER:OG	0.47	2.10	7	1
1:A:332:MET:SD	1:A:333:HIS:C	0.47	2.98	17	4
1:A:313:SER:C	1:A:319:ILE:HD11	0.47	2.34	13	2
1:A:346:VAL:HG13	1:A:347:ASN:N	0.47	2.24	9	1
1:A:302:ASN:OD1	1:A:302:ASN:O	0.47	2.32	10	2
1:A:313:SER:OG	1:A:319:ILE:HG23	0.47	2.09	10	1
1:A:367:ALA:H	1:A:438:VAL:HG23	0.47	1.69	19	2
1:A:423:GLY:O	1:A:424:THR:OG1	0.47	2.33	15	3
1:A:373:ASP:OD1	2:A:451:ANP:C2	0.47	2.63	13	1
1:A:421:GLU:O	1:A:433:ARG:HG3	0.47	2.10	13	1
1:A:423:GLY:C	1:A:424:THR:OG1	0.47	2.57	14	1
1:A:386:LEU:O	1:A:386:LEU:CD1	0.47	2.59	19	1
1:A:419:MET:CB	1:A:435:TRP:HB2	0.47	2.40	11	14
1:A:386:LEU:HD13	2:A:451:ANP:O2A	0.47	2.09	7	1
1:A:313:SER:CB	1:A:319:ILE:HD11	0.47	2.39	15	1
1:A:328:ILE:O	1:A:329:GLU:HG3	0.47	2.10	13	17
1:A:324:TYR:CG	1:A:325:PRO:HD2	0.47	2.44	8	1
1:A:378:ILE:CG2	1:A:386:LEU:HD13	0.47	2.40	13	1
1:A:422:LEU:CB	1:A:432:ILE:CD1	0.47	2.93	13	1
1:A:371:VAL:O	1:A:432:ILE:HG22	0.47	2.09	15	1
1:A:424:THR:OG1	1:A:430:LEU:HD12	0.47	2.10	1	2
1:A:379:ALA:HB1	1:A:380:PRO:CD	0.47	2.40	15	6
1:A:378:ILE:N	1:A:378:ILE:CD1	0.47	2.70	6	2
1:A:348:ALA:HB2	1:A:373:ASP:CG	0.47	2.34	10	2
1:A:314:GLY:O	1:A:317:ARG:HG3	0.47	2.10	16	1
1:A:305:LEU:CD2	1:A:341:VAL:HG11	0.47	2.40	19	1
1:A:332:MET:SD	1:A:332:MET:O	0.47	2.72	20	1
1:A:326:GLY:O	1:A:327:SER:OG	0.46	2.32	11	9
1:A:353:ASN:O	1:A:353:ASN:OD1	0.46	2.33	15	3
1:A:437:PRO:C	1:A:439:PRO:HD3	0.46	2.35	12	3
1:A:329:GLU:C	1:A:330:VAL:HG13	0.46	2.35	18	4
1:A:378:ILE:CG1	1:A:430:LEU:HD11	0.46	2.41	9	3
1:A:314:GLY:O	1:A:317:ARG:HB2	0.46	2.11	10	1
1:A:364:PRO:C	1:A:365:ASN:CG	0.46	2.79	6	1
1:A:378:ILE:CD1	1:A:422:LEU:CD1	0.46	2.93	7	1
1:A:377:GLY:HA3	1:A:424:THR:O	0.46	2.10	8	1
1:A:423:GLY:O	1:A:424:THR:O	0.46	2.33	13	2
1:A:315:TYR:O	1:A:316:GLU:CD	0.46	2.57	18	1
1:A:366:ARG:NE	1:A:437:PRO:HB3	0.46	2.24	18	1
1:A:315:TYR:O	1:A:316:GLU:C	0.46	2.57	16	2
1:A:301:LEU:HD12	1:A:328:ILE:HG21	0.46	1.87	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:A:451:ANP:O3G	2:A:451:ANP:O1B	0.46	2.34	11	2
1:A:340:ALA:O	1:A:344:MET:SD	0.46	2.74	2	2
1:A:309:ILE:CD1	1:A:358:VAL:CG1	0.46	2.88	15	1
1:A:333:HIS:O	1:A:337:ILE:HG12	0.46	2.10	6	6
1:A:374:ASP:O	1:A:374:ASP:OD1	0.46	2.33	9	1
1:A:424:THR:OG1	1:A:430:LEU:CA	0.46	2.64	9	1
1:A:379:ALA:O	1:A:383:ARG:HB2	0.46	2.10	18	1
1:A:315:TYR:CD1	1:A:315:TYR:O	0.46	2.68	19	1
1:A:354:GLY:HA3	1:A:374:ASP:CB	0.46	2.41	20	1
1:A:432:ILE:HG22	1:A:432:ILE:O	0.46	2.11	8	1
1:A:386:LEU:CD2	2:A:451:ANP:O3'	0.46	2.63	10	1
1:A:361:GLY:O	1:A:362:THR:HB	0.46	2.11	12	3
1:A:347:ASN:OD1	1:A:347:ASN:C	0.46	2.59	5	1
1:A:301:LEU:HB2	1:A:328:ILE:CG1	0.46	2.41	6	1
1:A:330:VAL:CG2	1:A:332:MET:HG2	0.46	2.40	7	2
1:A:365:ASN:O	1:A:366:ARG:HG2	0.46	2.10	16	1
1:A:354:GLY:CA	1:A:374:ASP:HB2	0.46	2.39	20	1
1:A:318:GLU:O	1:A:356:ILE:O	0.46	2.34	1	1
1:A:337:ILE:HD11	1:A:416:HIS:CD2	0.46	2.45	3	1
1:A:321:THR:HA	1:A:358:VAL:O	0.46	2.10	5	6
1:A:333:HIS:ND1	1:A:335:LEU:HB2	0.46	2.26	8	2
1:A:372:GLU:CG	1:A:431:SER:HB2	0.46	2.41	15	2
1:A:423:GLY:HA3	1:A:431:SER:O	0.46	2.10	18	1
1:A:314:GLY:O	1:A:317:ARG:HG2	0.46	2.10	16	3
1:A:365:ASN:C	1:A:365:ASN:OD1	0.46	2.59	3	1
1:A:424:THR:HA	1:A:429:GLY:O	0.46	2.11	12	6
1:A:430:LEU:C	1:A:430:LEU:CD1	0.46	2.88	17	1
1:A:298:MET:HA	1:A:331:LYS:HA	0.46	1.85	1	1
1:A:301:LEU:O	1:A:305:LEU:CG	0.46	2.64	2	4
1:A:332:MET:SD	1:A:337:ILE:HG13	0.46	2.51	13	7
1:A:298:MET:HE2	1:A:330:VAL:O	0.46	2.09	8	3
1:A:332:MET:SD	1:A:337:ILE:CG1	0.46	3.04	13	3
1:A:370:GLN:CD	1:A:433:ARG:HB3	0.46	2.36	13	1
1:A:354:GLY:O	1:A:355:TRP:O	0.46	2.33	18	2
1:A:352:GLY:O	1:A:353:ASN:C	0.46	2.59	19	1
1:A:296:MET:HE3	1:A:416:HIS:CD2	0.45	2.46	3	1
1:A:411:ARG:O	1:A:415:ASN:OD1	0.45	2.34	4	1
1:A:313:SER:HB3	1:A:345:VAL:HG11	0.45	1.88	5	1
1:A:374:ASP:OD1	1:A:374:ASP:C	0.45	2.58	6	1
1:A:315:TYR:O	1:A:315:TYR:CD2	0.45	2.69	7	1
1:A:295:PRO:HG2	1:A:333:HIS:NE2	0.45	2.27	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:416:HIS:CB	1:A:436:LEU:CD2	0.45	2.93	7	1
1:A:312:GLU:OE1	1:A:312:GLU:CA	0.45	2.62	13	1
1:A:333:HIS:CD2	1:A:334:PRO:HD2	0.45	2.46	13	1
1:A:410:GLN:O	1:A:414:ASP:HB2	0.45	2.11	11	8
1:A:296:MET:SD	1:A:415:ASN:O	0.45	2.74	2	1
1:A:423:GLY:O	1:A:424:THR:HB	0.45	2.11	3	1
1:A:386:LEU:CD1	2:A:451:ANP:O2A	0.45	2.64	7	1
1:A:298:MET:SD	1:A:329:GLU:OE1	0.45	2.75	15	1
1:A:370:GLN:CD	1:A:372:GLU:OE2	0.45	2.59	17	1
1:A:315:TYR:O	1:A:316:GLU:HB2	0.45	2.12	9	8
1:A:318:GLU:OE1	1:A:354:GLY:O	0.45	2.34	6	1
1:A:378:ILE:HD12	1:A:422:LEU:CD1	0.45	2.41	7	1
1:A:317:ARG:O	1:A:318:GLU:HG3	0.45	2.11	13	4
1:A:363:GLU:CG	1:A:364:PRO:HD2	0.45	2.41	8	1
1:A:366:ARG:CG	1:A:437:PRO:HA	0.45	2.42	10	1
1:A:382:GLN:HA	1:A:385:HIS:CE1	0.45	2.47	1	1
1:A:424:THR:OG1	1:A:430:LEU:CD1	0.45	2.65	1	1
1:A:383:ARG:O	1:A:385:HIS:N	0.45	2.50	2	1
1:A:367:ALA:O	1:A:436:LEU:HB2	0.45	2.11	3	1
1:A:383:ARG:O	1:A:384:LYS:C	0.45	2.56	7	1
1:A:330:VAL:CB	1:A:438:VAL:HG22	0.45	2.41	9	1
1:A:386:LEU:HD21	2:A:451:ANP:O3'	0.45	2.11	10	1
1:A:309:ILE:HD11	1:A:321:THR:HG23	0.45	1.88	16	1
1:A:410:GLN:O	1:A:414:ASP:OD2	0.45	2.34	16	1
1:A:297:GLU:O	1:A:331:LYS:HG2	0.45	2.12	1	1
1:A:309:ILE:HD11	1:A:321:THR:HG22	0.45	1.88	15	3
1:A:363:GLU:HB2	1:A:366:ARG:CD	0.45	2.42	5	1
1:A:386:LEU:HD21	2:A:451:ANP:C4'	0.45	2.42	7	1
1:A:330:VAL:HA	1:A:438:VAL:HG23	0.45	1.89	5	1
1:A:369:PHE:CD1	1:A:369:PHE:C	0.45	2.94	15	5
1:A:298:MET:CG	1:A:331:LYS:HE3	0.45	2.42	14	1
1:A:296:MET:CE	1:A:415:ASN:HB3	0.45	2.42	15	6
1:A:332:MET:HA	1:A:416:HIS:CD2	0.45	2.46	6	4
1:A:348:ALA:HA	1:A:352:GLY:HA3	0.45	1.89	3	1
1:A:378:ILE:O	1:A:379:ALA:O	0.45	2.34	5	2
1:A:332:MET:HG3	1:A:416:HIS:NE2	0.45	2.26	6	1
1:A:330:VAL:CG2	1:A:332:MET:CG	0.45	2.96	7	1
1:A:348:ALA:O	1:A:352:GLY:HA2	0.45	2.12	15	2
1:A:334:PRO:O	1:A:338:LYS:HE2	0.45	2.12	10	1
1:A:384:LYS:HB2	1:A:385:HIS:CE1	0.45	2.47	11	1
1:A:366:ARG:NH2	1:A:435:TRP:CZ3	0.45	2.85	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:386:LEU:CD1	2:A:451:ANP:O4'	0.45	2.65	18	2
1:A:301:LEU:HD21	1:A:436:LEU:CD1	0.45	2.42	20	1
1:A:373:ASP:OD1	1:A:373:ASP:C	0.44	2.59	1	2
1:A:438:VAL:CG1	1:A:439:PRO:HD2	0.44	2.42	2	3
1:A:334:PRO:O	1:A:338:LYS:CD	0.44	2.65	10	1
1:A:309:ILE:HG12	1:A:358:VAL:HG21	0.44	1.87	12	1
1:A:372:GLU:CG	1:A:431:SER:OG	0.44	2.66	13	1
1:A:351:TYR:O	1:A:352:GLY:O	0.44	2.34	15	1
1:A:337:ILE:HD11	1:A:416:HIS:CB	0.44	2.42	16	1
1:A:382:GLN:HG2	1:A:386:LEU:HD22	0.44	1.89	19	1
1:A:317:ARG:CZ	1:A:317:ARG:HB2	0.44	2.42	20	1
1:A:385:HIS:O	1:A:386:LEU:HG	0.44	2.11	2	1
1:A:421:GLU:CB	1:A:433:ARG:HG3	0.44	2.43	7	1
1:A:423:GLY:O	1:A:430:LEU:HG	0.44	2.12	8	1
1:A:378:ILE:CD1	1:A:430:LEU:CD1	0.44	2.95	14	2
1:A:409:VAL:CA	1:A:412:ILE:HD12	0.44	2.42	11	1
1:A:408:ILE:CD1	1:A:410:GLN:HG3	0.44	2.42	13	1
1:A:313:SER:HA	1:A:319:ILE:HD13	0.44	1.88	19	1
1:A:371:VAL:O	1:A:431:SER:HA	0.44	2.12	12	2
1:A:295:PRO:CA	1:A:333:HIS:CD2	0.44	3.01	8	1
1:A:332:MET:HG2	1:A:333:HIS:N	0.44	2.28	19	2
1:A:313:SER:O	1:A:356:ILE:HD12	0.44	2.12	10	1
1:A:314:GLY:O	1:A:317:ARG:CB	0.44	2.65	10	1
1:A:327:SER:OG	1:A:327:SER:O	0.44	2.34	10	1
1:A:411:ARG:O	1:A:415:ASN:CG	0.44	2.60	13	1
1:A:432:ILE:O	1:A:432:ILE:CG2	0.44	2.65	14	1
1:A:345:VAL:O	1:A:349:ALA:CB	0.44	2.65	16	1
1:A:318:GLU:CA	1:A:356:ILE:HD12	0.44	2.43	1	1
1:A:424:THR:OG1	1:A:431:SER:CB	0.44	2.65	3	1
1:A:435:TRP:C	1:A:436:LEU:HG	0.44	2.38	7	9
1:A:421:GLU:O	1:A:432:ILE:HA	0.44	2.12	19	2
1:A:365:ASN:OD1	1:A:365:ASN:N	0.44	2.48	8	1
1:A:332:MET:SD	1:A:332:MET:C	0.44	3.01	17	1
1:A:382:GLN:OE1	1:A:382:GLN:HA	0.44	2.12	20	1
1:A:323:LEU:N	1:A:323:LEU:CD1	0.44	2.81	3	2
1:A:300:ASP:CG	1:A:302:ASN:OD1	0.44	2.60	7	1
1:A:369:PHE:CE1	1:A:436:LEU:HD11	0.44	2.47	7	1
1:A:432:ILE:O	1:A:432:ILE:HG23	0.44	2.12	9	2
1:A:362:THR:C	1:A:363:GLU:HG2	0.44	2.36	12	2
1:A:418:GLY:O	1:A:419:MET:HB2	0.44	2.12	15	6
1:A:409:VAL:CG1	1:A:410:GLN:N	0.44	2.80	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:301:LEU:HB2	1:A:328:ILE:CB	0.44	2.43	18	3
1:A:366:ARG:NH2	1:A:435:TRP:CE3	0.44	2.86	14	1
1:A:378:ILE:HD11	1:A:430:LEU:HD13	0.44	1.89	14	1
1:A:438:VAL:HB	1:A:439:PRO:HD3	0.44	1.89	15	1
1:A:323:LEU:HG	1:A:360:SER:OG	0.44	2.12	17	1
1:A:313:SER:HA	1:A:319:ILE:HD11	0.44	1.90	13	2
1:A:379:ALA:O	1:A:383:ARG:HB3	0.44	2.13	14	1
1:A:417:ASN:HA	1:A:436:LEU:HA	0.44	1.88	16	1
1:A:412:ILE:HG22	1:A:413:VAL:HG23	0.44	1.89	18	1
1:A:437:PRO:O	1:A:439:PRO:HD3	0.44	2.12	11	2
1:A:346:VAL:CG1	1:A:347:ASN:N	0.44	2.81	15	2
1:A:411:ARG:NH2	1:A:411:ARG:HG2	0.44	2.28	10	1
1:A:339:ARG:O	1:A:343:ASN:HB2	0.44	2.13	15	1
1:A:300:ASP:HB2	1:A:303:ALA:CB	0.44	2.43	19	1
1:A:320:GLU:HB3	1:A:357:LYS:CG	0.44	2.42	20	1
1:A:412:ILE:O	1:A:416:HIS:HB2	0.44	2.12	3	2
1:A:419:MET:CE	1:A:435:TRP:CD1	0.44	3.01	3	1
1:A:380:PRO:O	1:A:383:ARG:HG3	0.44	2.13	7	1
1:A:422:LEU:CD2	1:A:432:ILE:HG12	0.44	2.42	7	1
1:A:357:LYS:HB3	1:A:372:GLU:HB3	0.44	1.89	16	1
1:A:365:ASN:OD1	1:A:438:VAL:O	0.43	2.36	5	1
1:A:416:HIS:O	1:A:417:ASN:OD1	0.43	2.36	6	1
1:A:319:ILE:HG13	1:A:356:ILE:CD1	0.43	2.43	19	2
1:A:344:MET:HE2	1:A:432:ILE:HG21	0.43	1.88	8	1
1:A:430:LEU:HD13	1:A:430:LEU:O	0.43	2.13	10	1
1:A:311:ALA:HB3	1:A:312:GLU:OE1	0.43	2.12	19	1
1:A:423:GLY:HA3	1:A:431:SER:CB	0.43	2.43	19	1
1:A:379:ALA:CB	1:A:380:PRO:HD2	0.43	2.39	12	2
1:A:319:ILE:HG22	1:A:358:VAL:HG23	0.43	1.90	13	1
1:A:408:ILE:HD12	1:A:409:VAL:N	0.43	2.28	15	1
1:A:423:GLY:CA	1:A:431:SER:O	0.43	2.66	18	1
1:A:365:ASN:C	1:A:366:ARG:HG2	0.43	2.37	11	3
1:A:416:HIS:O	1:A:417:ASN:HB3	0.43	2.14	2	3
1:A:423:GLY:O	1:A:424:THR:CB	0.43	2.65	3	1
1:A:431:SER:C	1:A:432:ILE:CG1	0.43	2.91	5	1
1:A:378:ILE:HG13	1:A:430:LEU:HD13	0.43	1.89	7	1
1:A:332:MET:HG3	1:A:337:ILE:HG13	0.43	1.90	13	2
1:A:357:LYS:O	1:A:371:VAL:HA	0.43	2.14	14	2
1:A:340:ALA:HA	1:A:409:VAL:HG13	0.43	1.91	3	1
1:A:410:GLN:HA	1:A:420:LEU:CD2	0.43	2.43	11	1
1:A:313:SER:HA	1:A:345:VAL:HG21	0.43	1.90	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:374:ASP:O	1:A:374:ASP:CG	0.43	2.61	17	1
1:A:300:ASP:HB3	1:A:303:ALA:CB	0.43	2.43	10	4
1:A:326:GLY:O	1:A:327:SER:C	0.43	2.60	15	3
1:A:409:VAL:HA	1:A:412:ILE:CD1	0.43	2.43	14	2
1:A:421:GLU:HB2	1:A:433:ARG:HG3	0.43	1.90	7	1
1:A:357:LYS:CB	1:A:372:GLU:HB3	0.43	2.43	16	1
1:A:417:ASN:C	1:A:437:PRO:HD2	0.43	2.39	16	1
1:A:370:GLN:HG3	1:A:432:ILE:O	0.43	2.12	7	4
1:A:370:GLN:NE2	1:A:433:ARG:HG2	0.43	2.29	4	1
1:A:304:VAL:HG13	1:A:338:LYS:HD3	0.43	1.91	7	1
1:A:314:GLY:O	1:A:315:TYR:HB3	0.43	2.13	7	2
1:A:331:LYS:HD3	1:A:439:PRO:CG	0.43	2.43	10	1
1:A:295:PRO:CB	1:A:333:HIS:NE2	0.43	2.82	16	1
1:A:431:SER:C	1:A:432:ILE:HG13	0.43	2.38	5	1
1:A:316:GLU:O	1:A:316:GLU:HG3	0.43	2.14	10	1
1:A:317:ARG:CD	1:A:317:ARG:C	0.43	2.92	13	1
1:A:332:MET:HE3	1:A:332:MET:HB3	0.43	1.75	13	1
1:A:378:ILE:CG2	1:A:383:ARG:CB	0.43	2.96	14	1
1:A:354:GLY:O	1:A:355:TRP:HB3	0.43	2.13	20	1
1:A:363:GLU:HB2	1:A:366:ARG:O	0.43	2.13	16	3
1:A:366:ARG:HG3	1:A:437:PRO:HA	0.43	1.91	10	1
1:A:315:TYR:C	1:A:316:GLU:CG	0.43	2.92	16	1
1:A:373:ASP:O	1:A:373:ASP:OD1	0.43	2.36	8	2
1:A:386:LEU:HD11	2:A:451:ANP:O5'	0.43	2.14	13	1
1:A:421:GLU:O	1:A:433:ARG:HG2	0.43	2.14	13	1
1:A:378:ILE:CG1	1:A:430:LEU:CD1	0.43	2.97	14	1
1:A:296:MET:O	1:A:297:GLU:HG3	0.43	2.13	16	1
1:A:311:ALA:C	1:A:312:GLU:HG3	0.43	2.39	16	1
1:A:302:ASN:N	1:A:302:ASN:OD1	0.43	2.49	17	1
1:A:363:GLU:OE1	1:A:364:PRO:HD2	0.43	2.13	17	1
1:A:386:LEU:HD23	1:A:386:LEU:H	0.43	1.73	20	1
2:A:451:ANP:O2B	2:A:451:ANP:O3G	0.43	2.36	20	1
1:A:413:VAL:CG2	1:A:420:LEU:HD13	0.43	2.39	6	1
1:A:323:LEU:HG	1:A:360:SER:HB3	0.43	1.91	10	1
1:A:408:ILE:O	1:A:412:ILE:HG13	0.43	2.13	20	1
1:A:335:LEU:O	1:A:338:LYS:HB2	0.42	2.14	2	1
1:A:334:PRO:O	1:A:338:LYS:HB2	0.42	2.14	10	3
1:A:385:HIS:O	1:A:386:LEU:CB	0.42	2.67	3	1
1:A:348:ALA:CB	1:A:373:ASP:OD1	0.42	2.65	7	1
1:A:363:GLU:OE1	1:A:366:ARG:CZ	0.42	2.67	9	1
1:A:370:GLN:HG2	1:A:432:ILE:O	0.42	2.14	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:370:GLN:HA	1:A:432:ILE:O	0.42	2.14	16	1
1:A:363:GLU:OE1	1:A:364:PRO:HD3	0.42	2.14	17	1
1:A:336:SER:OG	1:A:412:ILE:HG13	0.42	2.14	18	1
1:A:315:TYR:O	1:A:315:TYR:CG	0.42	2.71	19	1
1:A:319:ILE:CG1	1:A:356:ILE:CD1	0.42	2.96	2	1
1:A:344:MET:SD	1:A:432:ILE:HB	0.42	2.54	6	1
1:A:319:ILE:HG21	1:A:358:VAL:CG2	0.42	2.44	7	2
1:A:378:ILE:CD1	1:A:378:ILE:N	0.42	2.76	9	4
1:A:430:LEU:HB3	2:A:451:ANP:C2	0.42	2.44	13	1
1:A:408:ILE:C	1:A:409:VAL:CG2	0.42	2.88	1	1
1:A:340:ALA:CA	1:A:409:VAL:HG13	0.42	2.44	3	1
1:A:424:THR:OG1	1:A:431:SER:HB3	0.42	2.15	3	1
1:A:424:THR:CG2	1:A:430:LEU:CA	0.42	2.97	3	1
1:A:319:ILE:CG1	1:A:356:ILE:HB	0.42	2.45	4	1
1:A:363:GLU:CB	1:A:366:ARG:CD	0.42	2.97	5	1
1:A:348:ALA:O	1:A:349:ALA:C	0.42	2.60	8	1
1:A:430:LEU:HD22	1:A:431:SER:CA	0.42	2.44	10	1
1:A:430:LEU:HD11	2:A:451:ANP:N6	0.42	2.28	10	1
1:A:339:ARG:O	1:A:343:ASN:CB	0.42	2.67	15	1
1:A:308:VAL:CG2	1:A:338:LYS:HG3	0.42	2.43	6	1
1:A:308:VAL:O	1:A:311:ALA:HB3	0.42	2.14	10	1
1:A:363:GLU:CD	1:A:364:PRO:HD2	0.42	2.40	20	1
1:A:320:GLU:CB	1:A:357:LYS:HG3	0.42	2.45	20	1
1:A:340:ALA:HB2	1:A:412:ILE:CG1	0.42	2.44	2	1
1:A:334:PRO:O	1:A:338:LYS:HG3	0.42	2.13	12	3
1:A:298:MET:CE	1:A:330:VAL:CA	0.42	2.97	5	1
1:A:326:GLY:O	1:A:327:SER:HB2	0.42	2.13	14	3
1:A:422:LEU:O	1:A:422:LEU:HG	0.42	2.15	9	2
1:A:416:HIS:O	1:A:436:LEU:CD2	0.42	2.68	16	1
1:A:355:TRP:CH2	1:A:357:LYS:HG3	0.42	2.50	2	1
1:A:361:GLY:C	1:A:362:THR:CG2	0.42	2.92	12	1
1:A:357:LYS:CD	1:A:372:GLU:HB2	0.42	2.45	13	1
1:A:369:PHE:CZ	1:A:434:ALA:HB1	0.42	2.49	19	1
1:A:386:LEU:HD22	2:A:451:ANP:H4'	0.42	1.91	20	1
1:A:343:ASN:C	1:A:346:VAL:HG22	0.42	2.38	1	1
1:A:354:GLY:HA3	1:A:374:ASP:O	0.42	2.14	11	1
1:A:317:ARG:C	1:A:317:ARG:HD3	0.42	2.39	13	1
1:A:364:PRO:C	1:A:365:ASN:OD1	0.42	2.62	15	1
1:A:373:ASP:N	1:A:373:ASP:OD1	0.42	2.51	16	1
1:A:312:GLU:O	1:A:317:ARG:HB3	0.42	2.15	1	1
2:A:451:ANP:O2G	2:A:451:ANP:O1B	0.42	2.38	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:366:ARG:O	1:A:366:ARG:HD3	0.42	2.15	5	1
1:A:302:ASN:OD1	1:A:302:ASN:C	0.42	2.63	10	1
1:A:311:ALA:C	1:A:312:GLU:CG	0.42	2.93	10	1
1:A:361:GLY:HA3	1:A:368:TRP:CZ2	0.42	2.50	10	1
1:A:318:GLU:O	1:A:356:ILE:HB	0.42	2.14	1	1
1:A:376:PRO:O	2:A:451:ANP:C8	0.42	2.67	2	1
1:A:408:ILE:CG2	1:A:409:VAL:N	0.42	2.82	9	1
1:A:408:ILE:HG21	1:A:410:GLN:OE1	0.42	2.15	11	1
1:A:301:LEU:HD23	1:A:301:LEU:HA	0.42	1.70	12	2
1:A:355:TRP:NE1	1:A:356:ILE:O	0.42	2.53	15	1
1:A:355:TRP:CZ2	1:A:357:LYS:HG3	0.41	2.50	2	1
1:A:354:GLY:O	1:A:356:ILE:HG13	0.41	2.15	3	1
1:A:301:LEU:O	1:A:305:LEU:HD12	0.41	2.15	10	1
1:A:430:LEU:HD22	2:A:451:ANP:HN62	0.41	1.63	12	1
1:A:348:ALA:O	1:A:352:GLY:HA3	0.41	2.15	13	3
1:A:373:ASP:OD2	2:A:451:ANP:N1	0.41	2.53	13	1
1:A:408:ILE:O	1:A:410:GLN:N	0.41	2.52	15	1
1:A:296:MET:HE1	1:A:416:HIS:NE2	0.41	2.28	6	2
1:A:422:LEU:C	1:A:422:LEU:HD23	0.41	2.39	8	1
1:A:430:LEU:HD13	2:A:451:ANP:C6	0.41	2.45	15	1
1:A:416:HIS:C	1:A:436:LEU:CD2	0.41	2.93	16	1
1:A:333:HIS:O	1:A:337:ILE:HB	0.41	2.15	17	1
1:A:296:MET:HE3	1:A:333:HIS:HB2	0.41	1.91	20	1
1:A:379:ALA:CB	1:A:382:GLN:HG3	0.41	2.43	1	1
1:A:298:MET:HA	1:A:330:VAL:O	0.41	2.15	6	1
1:A:301:LEU:HD21	1:A:332:MET:HE1	0.41	1.92	15	1
1:A:301:LEU:HD13	1:A:369:PHE:HB3	0.41	1.92	2	1
1:A:313:SER:CA	1:A:319:ILE:HD11	0.41	2.45	2	1
1:A:420:LEU:O	1:A:420:LEU:HG	0.41	2.14	3	2
1:A:309:ILE:HA	1:A:312:GLU:HG2	0.41	1.93	6	1
1:A:386:LEU:CD1	2:A:451:ANP:O5'	0.41	2.68	13	1
1:A:332:MET:CG	1:A:337:ILE:CD1	0.41	2.98	17	1
1:A:317:ARG:O	1:A:319:ILE:N	0.41	2.53	1	1
1:A:365:ASN:C	1:A:438:VAL:HG12	0.41	2.41	1	1
1:A:383:ARG:C	1:A:385:HIS:N	0.41	2.79	2	1
1:A:362:THR:OG1	1:A:363:GLU:N	0.41	2.54	3	2
1:A:319:ILE:HA	1:A:356:ILE:O	0.41	2.15	5	1
1:A:332:MET:HE3	1:A:337:ILE:CG1	0.41	2.43	9	1
1:A:314:GLY:O	1:A:315:TYR:C	0.41	2.63	13	2
1:A:295:PRO:O	1:A:297:GLU:HG2	0.41	2.15	17	1
1:A:313:SER:O	1:A:315:TYR:N	0.41	2.54	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:370:GLN:CG	1:A:371:VAL:N	0.41	2.84	3	1
1:A:301:LEU:O	1:A:305:LEU:CD1	0.41	2.68	10	1
1:A:351:TYR:N	1:A:351:TYR:CD1	0.41	2.84	13	1
1:A:332:MET:HE2	1:A:337:ILE:CG1	0.41	2.38	20	1
1:A:370:GLN:CG	1:A:433:ARG:HA	0.41	2.45	4	1
1:A:312:GLU:OE2	1:A:342:ALA:CB	0.41	2.68	5	1
1:A:363:GLU:CB	1:A:366:ARG:HD2	0.41	2.46	5	1
1:A:373:ASP:OD1	1:A:373:ASP:O	0.41	2.39	6	1
1:A:318:GLU:O	1:A:318:GLU:HG3	0.41	2.15	14	2
1:A:371:VAL:C	1:A:372:GLU:HG3	0.41	2.40	20	1
1:A:347:ASN:CG	1:A:348:ALA:N	0.41	2.79	5	1
1:A:419:MET:HE2	1:A:435:TRP:NE1	0.41	2.27	5	1
1:A:429:GLY:O	1:A:430:LEU:HB3	0.41	2.16	10	1
1:A:300:ASP:OD1	1:A:328:ILE:O	0.41	2.38	15	1
1:A:295:PRO:C	1:A:297:GLU:OE1	0.41	2.64	19	1
1:A:315:TYR:O	1:A:315:TYR:CD1	0.41	2.73	20	1
1:A:368:TRP:O	1:A:368:TRP:CD2	0.41	2.73	2	2
1:A:309:ILE:HG22	1:A:310:ALA:N	0.41	2.31	5	1
1:A:386:LEU:CD1	2:A:451:ANP:O2'	0.41	2.69	18	2
1:A:324:TYR:HB3	1:A:328:ILE:HD11	0.41	1.92	8	1
1:A:363:GLU:HG2	1:A:364:PRO:HD2	0.41	1.92	8	1
1:A:323:LEU:HD12	1:A:360:SER:N	0.41	2.31	10	1
1:A:410:GLN:O	1:A:414:ASP:HB3	0.41	2.15	11	1
1:A:334:PRO:HB2	1:A:338:LYS:CE	0.41	2.46	12	1
1:A:437:PRO:C	1:A:439:PRO:CD	0.41	2.94	12	1
1:A:378:ILE:HG22	1:A:383:ARG:CA	0.41	2.45	14	1
1:A:353:ASN:O	1:A:353:ASN:CG	0.41	2.64	15	1
1:A:411:ARG:HD3	1:A:415:ASN:ND2	0.41	2.31	15	1
1:A:353:ASN:OD1	1:A:374:ASP:O	0.41	2.38	16	1
1:A:309:ILE:HD11	1:A:358:VAL:HG12	0.41	1.87	18	1
1:A:316:GLU:OE1	1:A:316:GLU:HA	0.41	2.15	18	1
1:A:348:ALA:HB1	1:A:374:ASP:O	0.41	2.16	20	1
1:A:408:ILE:HD13	1:A:408:ILE:H	0.41	1.75	2	1
1:A:422:LEU:HD13	1:A:432:ILE:HG12	0.41	1.93	7	1
1:A:421:GLU:HB2	1:A:433:ARG:HB2	0.41	1.93	8	1
1:A:408:ILE:HG22	1:A:409:VAL:HG12	0.41	1.92	9	1
1:A:371:VAL:O	1:A:431:SER:HB2	0.40	2.16	6	1
1:A:366:ARG:CZ	1:A:435:TRP:CE3	0.40	3.03	14	1
1:A:352:GLY:O	1:A:353:ASN:HB3	0.40	2.16	18	1
1:A:385:HIS:CD2	1:A:385:HIS:H	0.40	2.33	1	1
1:A:378:ILE:HD12	2:A:451:ANP:O4'	0.40	2.15	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:323:LEU:N	1:A:323:LEU:HD12	0.40	2.30	6	1
1:A:368:TRP:HB2	1:A:434:ALA:O	0.40	2.16	9	1
1:A:424:THR:CB	1:A:430:LEU:HA	0.40	2.46	9	1
1:A:319:ILE:HG22	1:A:358:VAL:CG2	0.40	2.47	10	1
1:A:411:ARG:O	1:A:415:ASN:HB2	0.40	2.15	10	1
1:A:303:ALA:O	1:A:307:GLU:OE1	0.40	2.38	11	1
1:A:316:GLU:HG3	1:A:316:GLU:O	0.40	2.15	16	1
1:A:422:LEU:C	1:A:422:LEU:CD1	0.40	2.94	17	1
1:A:315:TYR:O	1:A:316:GLU:HG2	0.40	2.15	18	1
1:A:298:MET:HE2	1:A:331:LYS:CA	0.40	2.46	1	1
1:A:378:ILE:HD11	1:A:430:LEU:CG	0.40	2.43	6	1
1:A:330:VAL:CG1	1:A:438:VAL:CG2	0.40	2.98	9	1
1:A:313:SER:HA	1:A:345:VAL:HG11	0.40	1.93	10	1
1:A:323:LEU:N	1:A:323:LEU:HD13	0.40	2.31	10	1
1:A:371:VAL:O	1:A:431:SER:HB3	0.40	2.17	10	1
1:A:423:GLY:O	1:A:430:LEU:HA	0.40	2.17	11	1
1:A:386:LEU:CD2	2:A:451:ANP:N3	0.40	2.81	16	1
1:A:333:HIS:NE2	1:A:335:LEU:HG	0.40	2.31	2	1
1:A:386:LEU:HD11	2:A:451:ANP:C2'	0.40	2.46	5	1
1:A:308:VAL:HG22	1:A:338:LYS:HG3	0.40	1.91	6	1
1:A:366:ARG:HG2	1:A:437:PRO:HB3	0.40	1.91	10	1
1:A:327:SER:O	1:A:327:SER:OG	0.40	2.37	12	1
1:A:311:ALA:O	1:A:312:GLU:OE2	0.40	2.40	14	1
1:A:386:LEU:HD21	2:A:451:ANP:PA	0.40	2.57	17	1
1:A:302:ASN:ND2	1:A:327:SER:HA	0.40	2.31	19	1
1:A:324:TYR:CB	1:A:328:ILE:CD1	0.40	2.98	19	1
1:A:408:ILE:O	1:A:408:ILE:HG13	0.40	2.17	19	1
1:A:379:ALA:CB	1:A:380:PRO:CD	0.40	2.99	2	1
1:A:337:ILE:CG1	1:A:416:HIS:CE1	0.40	3.04	12	1
1:A:379:ALA:CB	1:A:382:GLN:NE2	0.40	2.80	14	1
1:A:409:VAL:O	1:A:412:ILE:HB	0.40	2.16	18	1

6.3 Torsion angles ⓘ

6.3.1 Protein backbone ⓘ

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	120/161 (75%)	89±3 (74±2%)	24±3 (20±3%)	7±2 (6±2%)	2	21
All	All	2400/3220 (75%)	1783 (74%)	485 (20%)	132 (6%)	2	21

All 30 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	327	SER	19
1	A	326	GLY	15
1	A	366	ARG	12
1	A	317	ARG	12
1	A	408	ILE	7
1	A	417	ASN	7
1	A	354	GLY	7
1	A	296	MET	6
1	A	365	ASN	6
1	A	295	PRO	5
1	A	409	VAL	3
1	A	352	GLY	3
1	A	412	ILE	3
1	A	429	GLY	3
1	A	315	TYR	3
1	A	353	ASN	2
1	A	318	GLU	2
1	A	386	LEU	2
1	A	376	PRO	2
1	A	424	THR	2
1	A	355	TRP	2
1	A	316	GLU	1
1	A	349	ALA	1
1	A	384	LYS	1
1	A	329	GLU	1
1	A	351	TYR	1
1	A	418	GLY	1
1	A	350	ARG	1
1	A	377	GLY	1
1	A	378	ILE	1

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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	97/127 (76%)	73±3 (76±3%)	24±3 (24±3%)	2	26
All	All	1940/2540 (76%)	1467 (76%)	473 (24%)	2	26

All 68 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	296	MET	20
1	A	362	THR	20
1	A	298	MET	19
1	A	309	ILE	17
1	A	411	ARG	16
1	A	331	LYS	15
1	A	335	LEU	14
1	A	386	LEU	13
1	A	430	LEU	13
1	A	339	ARG	12
1	A	383	ARG	11
1	A	338	LYS	11
1	A	317	ARG	10
1	A	320	GLU	10
1	A	384	LYS	10
1	A	412	ILE	10
1	A	422	LEU	10
1	A	328	ILE	10
1	A	316	GLU	9
1	A	351	TYR	9
1	A	327	SER	8
1	A	366	ARG	8
1	A	421	GLU	8
1	A	433	ARG	8
1	A	357	LYS	8
1	A	336	SER	7
1	A	350	ARG	7
1	A	360	SER	7
1	A	415	ASN	7
1	A	307	GLU	7
1	A	417	ASN	7
1	A	382	GLN	7
1	A	378	ILE	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	385	HIS	6
1	A	343	ASN	6
1	A	344	MET	6
1	A	363	GLU	6
1	A	374	ASP	6
1	A	355	TRP	6
1	A	329	GLU	5
1	A	356	ILE	5
1	A	381	GLU	5
1	A	408	ILE	5
1	A	419	MET	5
1	A	431	SER	5
1	A	313	SER	5
1	A	323	LEU	4
1	A	319	ILE	4
1	A	332	MET	3
1	A	414	ASP	3
1	A	300	ASP	3
1	A	297	GLU	3
1	A	372	GLU	3
1	A	432	ILE	3
1	A	318	GLU	2
1	A	424	THR	2
1	A	315	TYR	2
1	A	353	ASN	2
1	A	346	VAL	2
1	A	410	GLN	2
1	A	312	GLU	2
1	A	409	VAL	1
1	A	347	ASN	1
1	A	359	SER	1
1	A	371	VAL	1
1	A	373	ASP	1
1	A	370	GLN	1
1	A	337	ILE	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 oligosaccharides 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	ANP	A	451	-	33,33,33	1.22±0.05	3±1 (9±2%)

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	ANP	A	451	-	45,52,52	1.15±0.01	4±0 (9±1%)

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	ANP	A	451	-	-	0±0,18,38,38	0±0,3,3,3

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	451	ANP	C8-N9	4.11	1.30	1.37	7	2
2	A	451	ANP	PB-O2B	3.27	1.48	1.56	9	20
2	A	451	ANP	PG-O2G	3.24	1.48	1.56	15	20
2	A	451	ANP	PB-O3A	2.48	1.62	1.59	7	8
2	A	451	ANP	PA-O3A	2.36	1.62	1.59	15	9
2	A	451	ANP	C8-N7	2.07	1.27	1.31	18	1

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
2	A	451	ANP	O2B-PB-O1B	3.43	117.22	109.87	18	20
2	A	451	ANP	N9-C8-N7	3.31	118.63	113.94	7	20
2	A	451	ANP	O3G-PG-O1G	3.21	105.40	113.45	3	20
2	A	451	ANP	C4-N9-C8	2.52	103.10	105.74	16	15
2	A	451	ANP	C3'-C2'-C1'	2.41	106.02	101.46	6	5
2	A	451	ANP	C2'-C3'-C4'	2.02	106.50	102.61	6	1

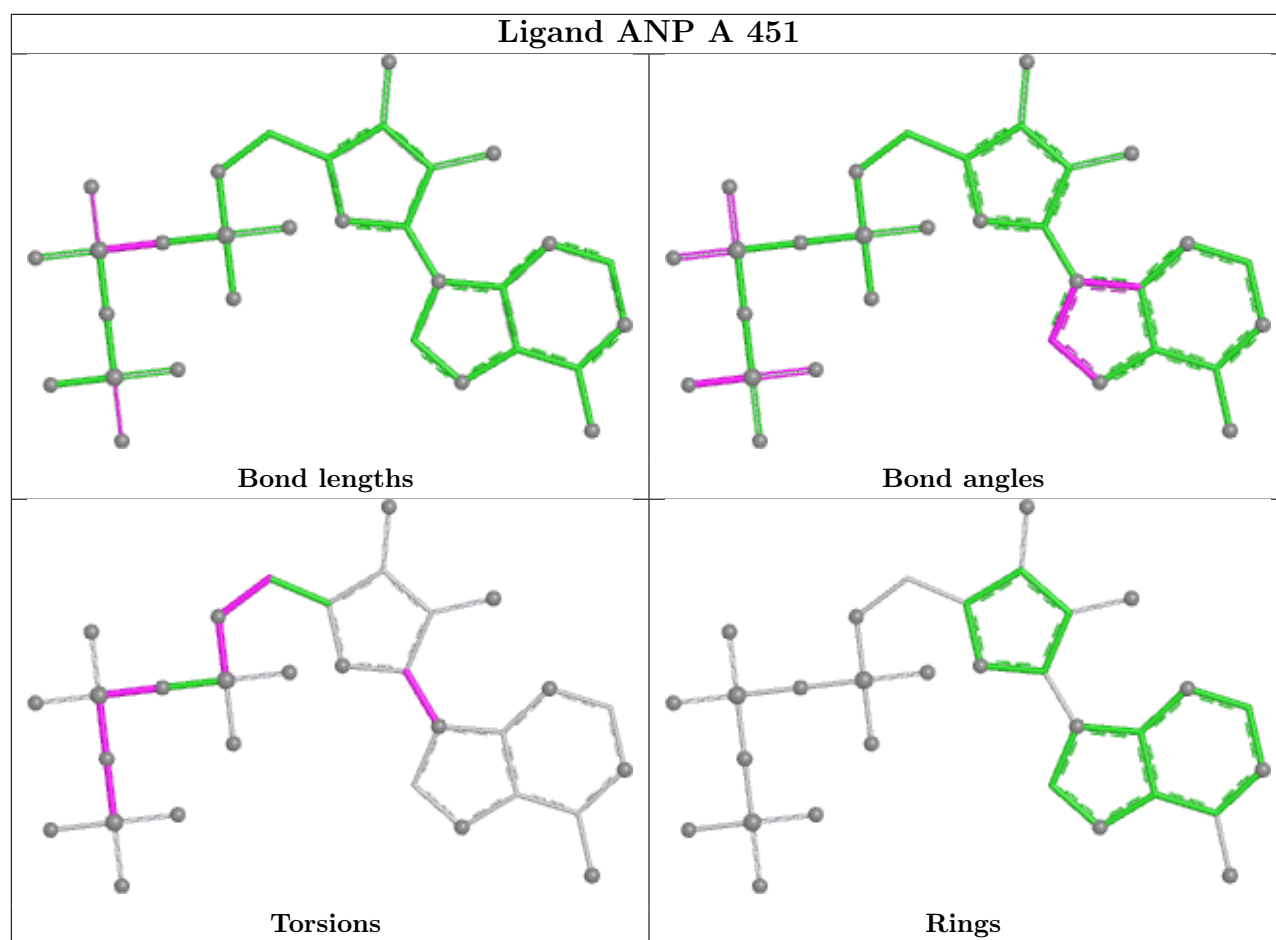
There are no chirality outliers.

All unique torsion outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Models (Total)
2	A	451	ANP	PB-N3B-PG-O1G	1

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