



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 01:01 PM UTC

PDB ID : 2LNL / pdb_00002lnl
BMRB ID : 18170
Title : Structure of human CXCR1 in phospholipid bilayers
Authors : Park, S.; Das, B.B.; Casagrande, F.; Nothnagel, H.; Chu, M.; Kiefer, H.;
Maier, K.; De Angelis, A.; Marassi, F.M.; Opella, S.J.
Deposited on : 2011-12-31

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
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

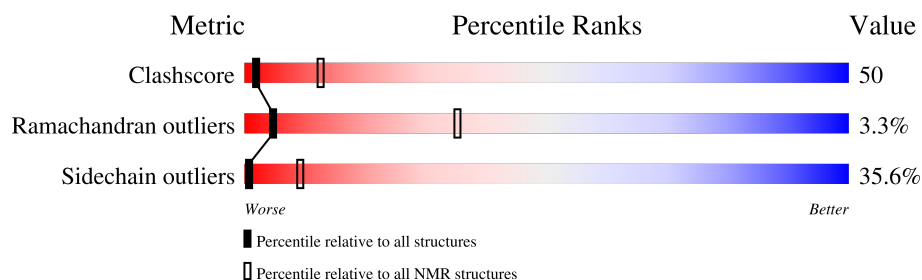
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLID-STATE NMR

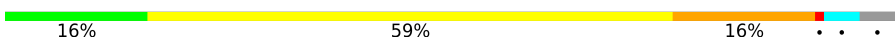
The overall completeness of chemical shifts assignment is 25%.

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	309	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 10 models. Model 1 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:29-A:312 (284)	1.38	1

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 2 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	3, 5, 6
2	4, 8, 10
3	1, 9
Single-model clusters	2; 7

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 4857 atoms, of which 2485 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called C-X-C chemokine receptor type 1.

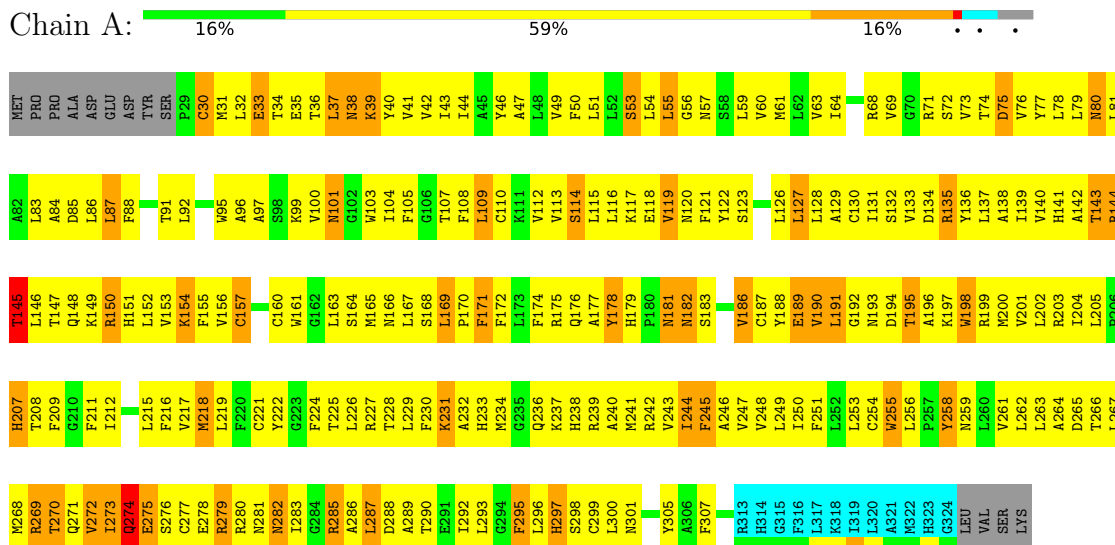
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	296	Total	C	H	N	O	S	0
			4857	1574	2485	397	382	19	

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: C-X-C chemokine receptor type 1

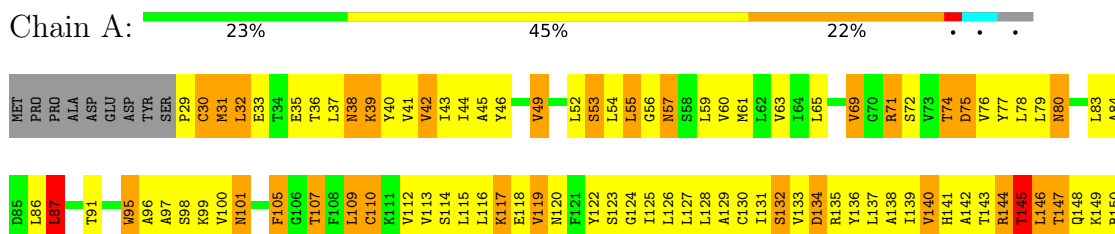


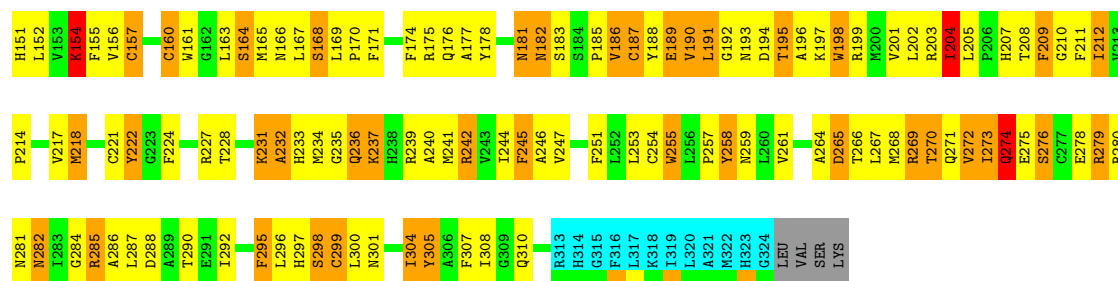
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

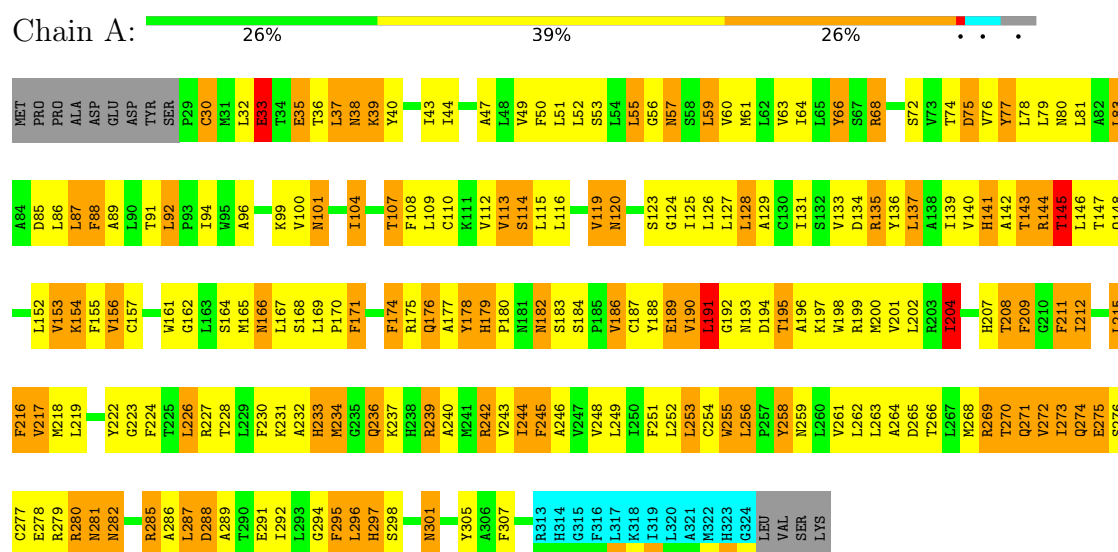
- Molecule 1: C-X-C chemokine receptor type 1





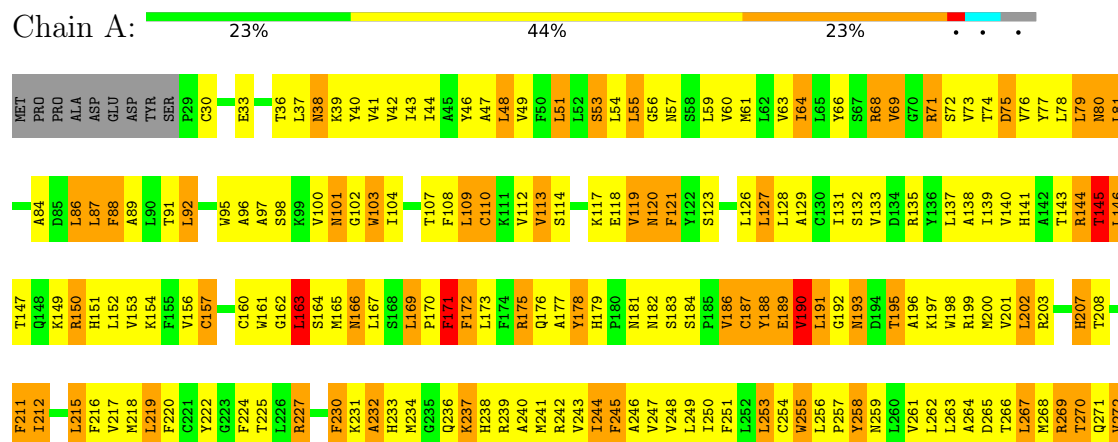
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: C-X-C chemokine receptor type 1



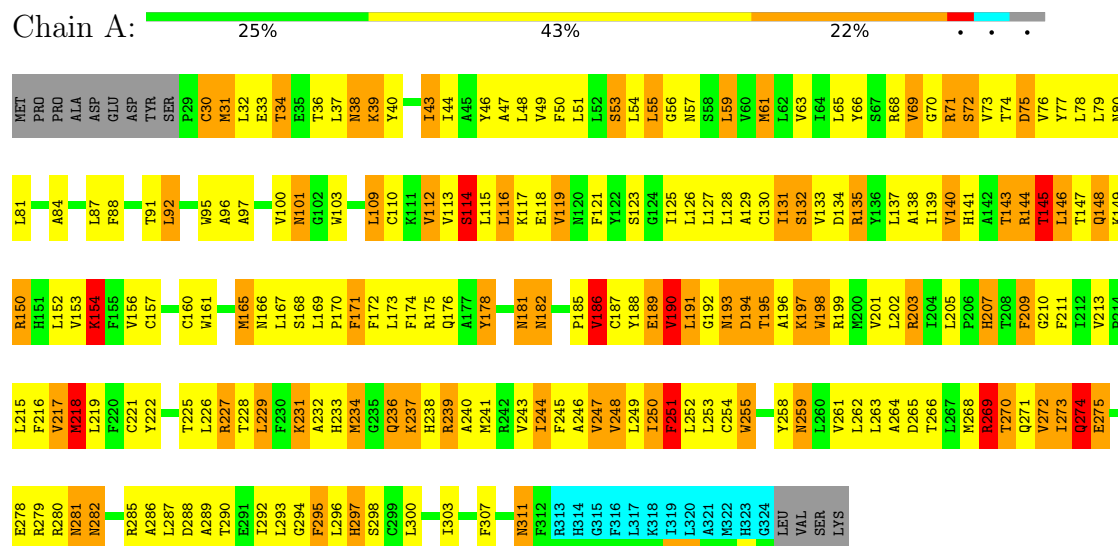
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: C-X-C chemokine receptor type 1

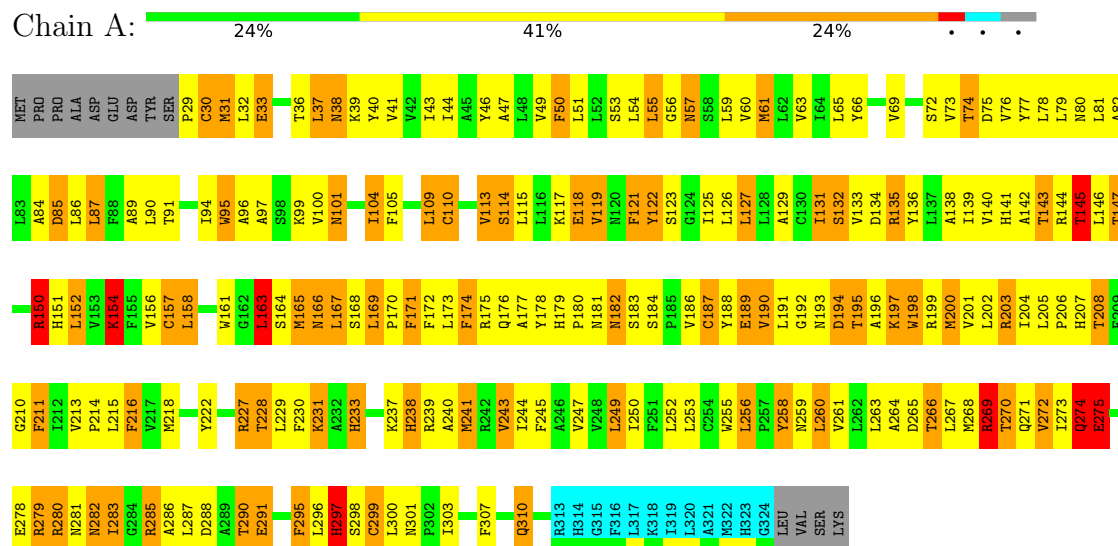


4.2.6 Score per residue for model 6

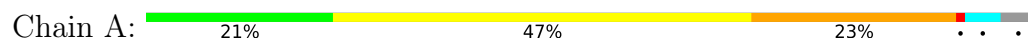
- Molecule 1: C-X-C chemokine receptor type 1

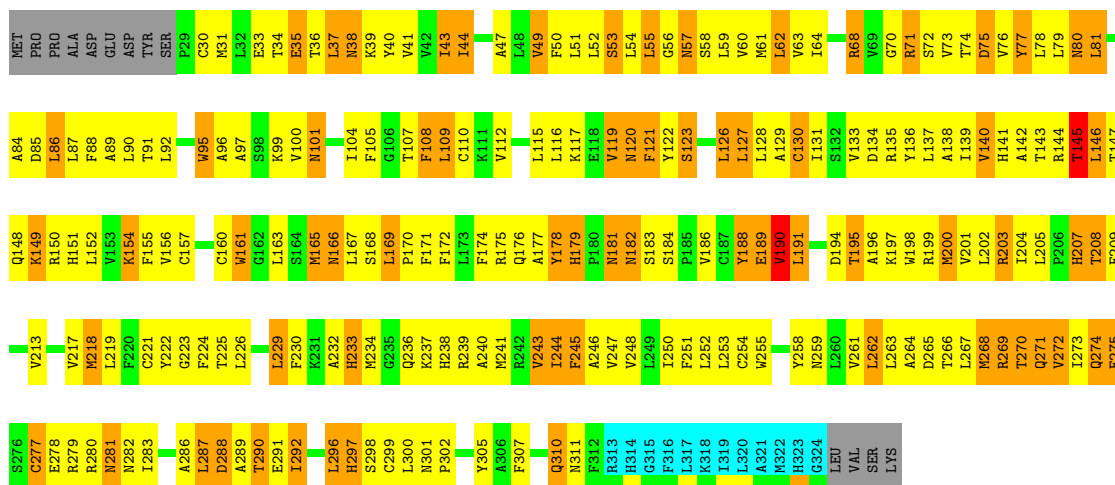


- Molecule 1: C-X-C chemokine receptor type 1



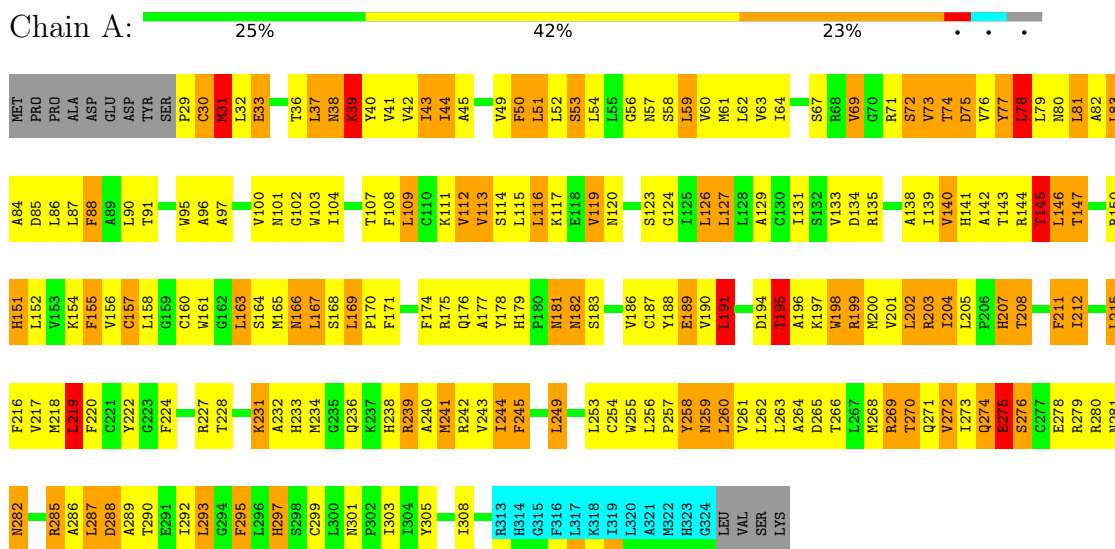
- Molecule 1: C-X-C chemokine receptor type 1





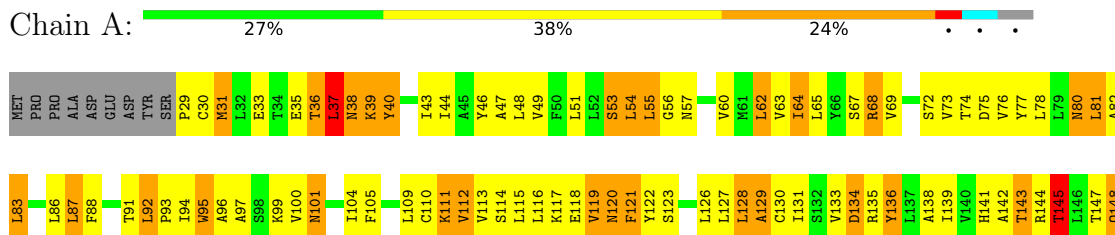
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: C-X-C chemokine receptor type 1



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: C-X-C chemokine receptor type 1



N281	N282	L283	G284	R285	A286	L287	D288	A289	T290	E291	L292	L293	G294	F295	L296	H297	S298	C299	L300	N301	Y305	A306	F307	R313	H314	G315	F316	L317	K318	I319	L320	A321	M322	H323	G324	LEU	VAL	SER	LYS															
N216	V217	M218	L219	F220	G221	Y222	T225	L226	F230	K231	A232	H233	M234	G235	Q236	K237	H238	R239	A240	V243	I244	F245	A246	V247	V248	L249	I250	F251	C254	W255	L256	P257	Y258	N259	L260	V261	L262	L263	A264	D265	T266	M268	R269	T270	Q271	V272	I273	Q274	E275	S276	G277	E278	R279	R280
K149	R150	H151	L152	V153	K154	F155	V156	C157	L158	G159	C160	L163	N166	L167	S168	L169	P170	F171	F172	R175	Q176	A177	Y178	H179	P180	N181	N182	V186	C187	Y188	E189	V190	L191	G192	N193	D194	T195	A196	K197	W198	R199	M200	V201	L202	R203	L204	L205	P206	H207	T208	F211	I212	L215	

5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *simulated annealing*.

Of the 100 calculated structures, 10 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR NIH	refinement	

The following table shows chemical shift validation statistics as aggregates over all chemical shift files. Detailed validation can be found in section 7 of this report.

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1120
Number of shifts mapped to atoms	1079
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	41
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	25%

Note: This is a solid-state NMR structure, where hydrogen atoms are typically not assigned a chemical shift value, which may lead to lower completeness of assignment measure.

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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	0.79±0.01	0±0/2333 (0.0± 0.0%)	1.41±0.01	16±2/3174 (0.5± 0.1%)
All	All	0.79	1/23330 (0.0%)	1.41	158/31740 (0.5%)

All unique bond outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	123	SER	C-O	-5.16	1.18	1.24	8	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	186	VAL	N-CA-C	8.65	120.18	107.37	7	10
1	A	191	LEU	N-CA-C	8.47	120.51	111.28	2	4
1	A	150	ARG	N-CA-C	7.75	119.64	111.03	7	5
1	A	190	VAL	CA-C-N	7.62	130.49	120.28	2	10
1	A	190	VAL	C-N-CA	7.62	130.49	120.28	2	10
1	A	211	PHE	CA-CB-CG	-7.44	106.36	113.80	6	3
1	A	204	ILE	N-CA-C	7.21	117.31	110.74	9	7
1	A	182	ASN	CB-CA-C	-6.99	108.50	116.54	2	9
1	A	154	LYS	N-CA-C	-6.88	103.71	111.14	8	8
1	A	140	VAL	N-CA-C	6.72	117.58	108.17	5	5
1	A	39	LYS	N-CA-C	-6.41	103.42	111.11	6	4
1	A	143	THR	CB-CA-C	-6.41	109.17	116.54	5	5
1	A	107	THR	N-CA-C	-6.32	104.03	112.94	8	3
1	A	178	TYR	N-CA-C	-6.26	103.99	112.26	6	4
1	A	31	MET	N-CA-C	-6.25	105.52	113.02	4	3
1	A	297	HIS	CA-CB-CG	-6.22	107.58	113.80	8	4
1	A	285	ARG	N-CA-C	-6.15	104.64	111.71	4	5
1	A	78	LEU	N-CA-CB	6.01	118.95	110.12	9	1
1	A	144	ARG	N-CA-C	-5.97	105.66	113.12	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	218	MET	N-CA-C	-5.92	104.73	111.07	4	3
1	A	87	LEU	N-CA-C	-5.83	104.11	111.11	2	6
1	A	171	PHE	CA-CB-CG	-5.80	108.00	113.80	5	3
1	A	199	ARG	N-CA-C	-5.79	105.05	111.71	3	1
1	A	127	LEU	N-CA-C	-5.77	104.18	111.11	7	1
1	A	163	LEU	N-CA-C	-5.72	105.05	111.28	3	4
1	A	292	ILE	N-CA-C	5.64	115.83	110.42	3	1
1	A	238	HIS	CA-CB-CG	-5.62	108.18	113.80	7	1
1	A	186	VAL	N-CA-CB	-5.55	104.68	111.67	5	5
1	A	121	PHE	CA-CB-CG	-5.55	108.25	113.80	3	2
1	A	131	ILE	N-CA-C	-5.53	104.94	110.30	3	1
1	A	42	VAL	N-CA-C	-5.43	105.21	110.42	4	3
1	A	114	SER	N-CA-C	-5.42	105.45	111.36	6	2
1	A	207	HIS	CA-CB-CG	-5.42	108.39	113.80	10	1
1	A	105	PHE	CA-CB-CG	-5.34	108.46	113.80	5	3
1	A	195	THR	N-CA-C	5.32	118.56	111.75	9	1
1	A	245	PHE	CA-CB-CG	-5.24	108.56	113.80	10	2
1	A	108	PHE	CA-C-N	-5.22	113.77	120.65	8	2
1	A	108	PHE	C-N-CA	-5.22	113.77	120.65	8	2
1	A	219	LEU	N-CA-CB	5.20	118.23	110.22	9	1
1	A	137	LEU	N-CA-C	-5.18	106.06	112.38	4	1
1	A	37	LEU	N-CA-CB	5.17	119.23	110.49	10	1
1	A	155	PHE	CA-CB-CG	-5.16	108.64	113.80	8	3
1	A	129	ALA	N-CA-C	-5.11	104.98	111.11	10	1
1	A	88	PHE	CA-CB-CG	-5.08	108.72	113.80	2	1
1	A	51	LEU	N-CA-C	-5.07	105.75	111.28	9	1
1	A	279	ARG	N-CA-C	-5.06	105.04	111.11	10	1
1	A	113	VAL	N-CA-C	5.06	115.28	110.53	4	1
1	A	251	PHE	CA-CB-CG	-5.03	108.77	113.80	6	1

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

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	2276	2381	2374	231±13
All	All	22760	23810	23740	2314

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 50.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:LEU:H	1:A:78:LEU:HD13	0.93	1.24	9	1
1:A:287:LEU:HD13	1:A:288:ASP:N	0.90	1.82	8	1
1:A:191:LEU:HD13	1:A:192:GLY:N	0.89	1.82	3	1
1:A:293:LEU:HD13	1:A:294:GLY:N	0.89	1.82	5	1
1:A:293:LEU:HD23	1:A:294:GLY:N	0.89	1.82	3	1
1:A:109:LEU:HD22	1:A:110:CYS:N	0.89	1.83	4	7
1:A:175:ARG:HH21	1:A:202:LEU:HD23	0.86	1.31	3	1
1:A:95:TRP:CD1	1:A:184:SER:HG	0.85	1.90	3	1
1:A:234:MET:N	1:A:234:MET:HE3	0.84	1.88	2	1
1:A:128:LEU:HD12	1:A:129:ALA:N	0.83	1.89	1	2
1:A:126:LEU:HD21	1:A:160:CYS:SG	0.82	2.14	9	2
1:A:88:PHE:CE1	1:A:116:LEU:HD22	0.82	2.09	5	1
1:A:126:LEU:HD11	1:A:160:CYS:SG	0.81	2.15	9	2
1:A:109:LEU:HD22	1:A:110:CYS:H	0.81	1.35	3	7
1:A:38:ASN:O	1:A:41:VAL:HG22	0.80	1.77	3	1
1:A:219:LEU:HD13	1:A:219:LEU:H	0.80	1.35	9	1
1:A:215:LEU:HD23	1:A:216:PHE:N	0.80	1.90	2	1
1:A:226:LEU:HD12	1:A:226:LEU:O	0.80	1.76	2	1
1:A:129:ALA:O	1:A:133:VAL:HG23	0.80	1.77	8	7
1:A:207:HIS:NE2	1:A:260:LEU:HD11	0.80	1.91	7	2
1:A:146:LEU:HD13	1:A:146:LEU:N	0.79	1.92	3	2
1:A:198:TRP:O	1:A:201:VAL:HG22	0.79	1.78	7	10
1:A:143:THR:OG1	1:A:152:LEU:HD22	0.78	1.78	3	2
1:A:87:LEU:O	1:A:91:THR:HG23	0.78	1.79	8	7
1:A:146:LEU:O	1:A:146:LEU:HD22	0.77	1.79	6	1
1:A:59:LEU:O	1:A:63:VAL:HG23	0.77	1.79	7	5
1:A:40:TYR:CE2	1:A:44:ILE:HD11	0.77	2.15	1	3
1:A:255:TRP:CD1	1:A:290:THR:HG1	0.77	1.98	7	1
1:A:229:LEU:HD22	1:A:229:LEU:O	0.77	1.78	8	1
1:A:88:PHE:CZ	1:A:116:LEU:HD22	0.76	2.14	6	1
1:A:267:LEU:HD12	1:A:267:LEU:O	0.76	1.79	3	1
1:A:287:LEU:HD23	1:A:288:ASP:N	0.76	1.94	3	1
1:A:76:VAL:HG21	1:A:130:CYS:SG	0.76	2.21	1	3
1:A:36:THR:O	1:A:37:LEU:HD12	0.76	1.79	7	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:191:LEU:HD13	1:A:191:LEU:N	0.76	1.96	8	1
1:A:96:ALA:O	1:A:100:VAL:HG23	0.75	1.81	7	10
1:A:43:ILE:HD13	1:A:282:ASN:OD1	0.75	1.81	6	1
1:A:263:LEU:HD12	1:A:264:ALA:N	0.74	1.96	9	2
1:A:61:MET:HE2	1:A:82:ALA:HB2	0.73	1.59	5	1
1:A:95:TRP:CZ3	1:A:96:ALA:HB2	0.73	2.17	10	3
1:A:152:LEU:O	1:A:156:VAL:HG23	0.73	1.83	1	6
1:A:88:PHE:CE1	1:A:116:LEU:HD13	0.72	2.19	4	2
1:A:190:VAL:HG21	1:A:199:ARG:O	0.72	1.82	2	2
1:A:56:GLY:O	1:A:60:VAL:HG23	0.72	1.84	10	6
1:A:262:LEU:HD22	1:A:282:ASN:HD21	0.72	1.43	10	1
1:A:92:LEU:HD12	1:A:92:LEU:O	0.71	1.85	4	5
1:A:103:TRP:C	1:A:104:ILE:HD13	0.71	2.11	4	1
1:A:245:PHE:CE2	1:A:249:LEU:HD23	0.71	2.20	9	1
1:A:246:ALA:O	1:A:250:ILE:HG22	0.71	1.85	6	1
1:A:191:LEU:HD13	1:A:192:GLY:H	0.71	1.42	3	1
1:A:215:LEU:HD21	1:A:249:LEU:HD21	0.71	1.61	3	1
1:A:79:LEU:C	1:A:79:LEU:HD22	0.70	2.12	5	1
1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:HD23	0.70	2.02	10	2
1:A:286:ALA:O	1:A:289:ALA:HB3	0.69	1.88	5	6
1:A:57:ASN:ND2	1:A:61:MET:HE1	0.69	2.02	6	1
1:A:287:LEU:HD12	1:A:287:LEU:O	0.69	1.87	4	3
1:A:109:LEU:HD13	1:A:109:LEU:H	0.69	1.48	3	1
1:A:190:VAL:HG13	1:A:203:ARG:HH21	0.69	1.46	6	1
1:A:78:LEU:HD13	1:A:78:LEU:N	0.68	2.02	9	1
1:A:191:LEU:HD22	1:A:191:LEU:C	0.68	2.13	3	1
1:A:127:LEU:HD13	1:A:127:LEU:C	0.68	2.14	5	1
1:A:79:LEU:HD13	1:A:80:ASN:H	0.68	1.47	5	1
1:A:79:LEU:C	1:A:79:LEU:HD13	0.68	2.14	4	1
1:A:54:LEU:HD13	1:A:288:ASP:OD1	0.68	1.89	7	1
1:A:37:LEU:HD23	1:A:182:ASN:HD22	0.67	1.49	6	1
1:A:252:LEU:HD23	1:A:256:LEU:HD12	0.67	1.63	2	1
1:A:264:ALA:HB1	1:A:268:MET:SD	0.67	2.30	1	3
1:A:163:LEU:C	1:A:163:LEU:HD13	0.67	2.15	9	5
1:A:91:THR:CG2	1:A:112:VAL:HG11	0.67	2.20	2	1
1:A:293:LEU:C	1:A:293:LEU:HD22	0.67	2.14	5	1
1:A:61:MET:CE	1:A:82:ALA:HB2	0.67	2.20	7	1
1:A:48:LEU:HD13	1:A:48:LEU:C	0.67	2.15	5	1
1:A:51:LEU:HD23	1:A:51:LEU:O	0.67	1.90	7	2
1:A:190:VAL:HG13	1:A:203:ARG:NH2	0.66	2.04	6	1
1:A:287:LEU:C	1:A:287:LEU:HD22	0.66	2.14	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:VAL:O	1:A:69:VAL:HG22	0.66	1.90	9	4
1:A:115:LEU:HD23	1:A:115:LEU:C	0.66	2.16	6	2
1:A:83:LEU:HD12	1:A:83:LEU:O	0.66	1.91	9	1
1:A:191:LEU:HD13	1:A:191:LEU:H	0.66	1.48	8	1
1:A:34:THR:O	1:A:37:LEU:HD13	0.66	1.90	6	1
1:A:79:LEU:HD13	1:A:79:LEU:C	0.66	2.15	8	4
1:A:219:LEU:HD13	1:A:219:LEU:C	0.66	2.15	8	1
1:A:152:LEU:HD13	1:A:152:LEU:C	0.66	2.16	5	3
1:A:109:LEU:H	1:A:109:LEU:CD1	0.65	2.04	7	7
1:A:190:VAL:HG22	1:A:203:ARG:HE	0.65	1.51	6	1
1:A:258:TYR:CD1	1:A:259:ASN:N	0.65	2.65	10	4
1:A:287:LEU:C	1:A:287:LEU:HD13	0.65	2.16	1	2
1:A:135:ARG:O	1:A:138:ALA:HB3	0.65	1.91	7	7
1:A:244:ILE:O	1:A:248:VAL:HG23	0.65	1.91	3	3
1:A:78:LEU:C	1:A:78:LEU:HD13	0.65	2.17	3	3
1:A:272:VAL:HG13	1:A:272:VAL:O	0.65	1.92	9	2
1:A:40:TYR:CD1	1:A:281:ASN:ND2	0.65	2.65	9	3
1:A:115:LEU:C	1:A:115:LEU:HD13	0.64	2.17	9	5
1:A:131:ILE:HD12	1:A:131:ILE:C	0.64	2.16	6	1
1:A:69:VAL:HG22	1:A:69:VAL:O	0.64	1.93	4	1
1:A:151:HIS:ND1	1:A:152:LEU:N	0.64	2.46	7	2
1:A:203:ARG:N	1:A:203:ARG:HH11	0.64	1.90	6	1
1:A:262:LEU:HD22	1:A:282:ASN:ND2	0.64	2.08	10	1
1:A:40:TYR:CG	1:A:281:ASN:ND2	0.63	2.66	4	2
1:A:152:LEU:C	1:A:152:LEU:HD23	0.63	2.18	4	1
1:A:171:PHE:CD1	1:A:172:PHE:N	0.63	2.67	4	1
1:A:203:ARG:N	1:A:203:ARG:NH1	0.63	2.45	6	1
1:A:104:ILE:N	1:A:104:ILE:HD13	0.63	2.07	2	1
1:A:188:TYR:CD2	1:A:189:GLU:N	0.63	2.66	3	2
1:A:95:TRP:CE3	1:A:96:ALA:N	0.63	2.67	10	3
1:A:247:VAL:HG12	1:A:300:LEU:HD23	0.63	1.69	1	1
1:A:63:VAL:HG13	1:A:64:ILE:N	0.63	2.08	2	4
1:A:262:LEU:O	1:A:266:THR:HG23	0.63	1.93	8	4
1:A:295:PHE:CD1	1:A:296:LEU:N	0.63	2.67	7	3
1:A:62:LEU:HD23	1:A:63:VAL:H	0.63	1.53	8	1
1:A:258:TYR:OH	1:A:286:ALA:HB1	0.63	1.92	7	2
1:A:79:LEU:HD13	1:A:80:ASN:N	0.63	2.08	5	1
1:A:38:ASN:ND2	1:A:39:LYS:N	0.63	2.47	10	7
1:A:34:THR:HG23	1:A:34:THR:O	0.63	1.93	5	1
1:A:283:ILE:C	1:A:283:ILE:HD12	0.63	2.18	10	1
1:A:281:ASN:HD21	1:A:282:ASN:ND2	0.62	1.91	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:211:PHE:CD1	1:A:212:ILE:N	0.62	2.67	1	2
1:A:91:THR:HG21	1:A:116:LEU:CD2	0.62	2.24	4	2
1:A:243:VAL:O	1:A:247:VAL:HG13	0.62	1.95	10	4
1:A:190:VAL:HG22	1:A:203:ARG:NE	0.62	2.09	6	1
1:A:40:TYR:CD2	1:A:182:ASN:ND2	0.62	2.68	1	1
1:A:101:ASN:N	1:A:101:ASN:ND2	0.62	2.48	1	2
1:A:255:TRP:CH2	1:A:259:ASN:ND2	0.62	2.67	1	2
1:A:182:ASN:HD22	1:A:182:ASN:N	0.62	1.92	5	1
1:A:116:LEU:O	1:A:116:LEU:HD12	0.62	1.95	6	1
1:A:116:LEU:HD12	1:A:117:LYS:N	0.62	2.09	8	2
1:A:50:PHE:CD1	1:A:285:ARG:NH2	0.62	2.67	7	1
1:A:191:LEU:H	1:A:191:LEU:HD22	0.62	1.55	8	1
1:A:175:ARG:NH2	1:A:202:LEU:HD23	0.62	2.04	3	1
1:A:279:ARG:NE	1:A:280:ARG:NH2	0.62	2.47	6	2
1:A:104:ILE:HD13	1:A:104:ILE:H	0.62	1.55	2	2
1:A:143:THR:HG22	1:A:144:ARG:H	0.62	1.52	10	6
1:A:178:TYR:N	1:A:178:TYR:CD1	0.62	2.68	3	2
1:A:228:THR:HG23	1:A:229:LEU:N	0.62	2.10	6	2
1:A:101:ASN:ND2	1:A:103:TRP:H	0.62	1.93	9	1
1:A:92:LEU:HD12	1:A:92:LEU:C	0.62	2.20	4	5
1:A:280:ARG:O	1:A:283:ILE:HG22	0.62	1.93	7	1
1:A:257:PRO:O	1:A:261:VAL:HG23	0.62	1.95	9	1
1:A:203:ARG:NH1	1:A:207:HIS:CE1	0.62	2.68	10	1
1:A:55:LEU:C	1:A:55:LEU:HD12	0.62	2.20	8	7
1:A:103:TRP:CG	1:A:104:ILE:N	0.62	2.67	3	2
1:A:166:ASN:HD22	1:A:167:LEU:N	0.62	1.93	7	1
1:A:207:HIS:ND1	1:A:208:THR:N	0.62	2.48	9	4
1:A:268:MET:O	1:A:269:ARG:O	0.62	2.18	7	10
1:A:287:LEU:C	1:A:287:LEU:HD12	0.62	2.20	2	3
1:A:95:TRP:CH2	1:A:99:LYS:NZ	0.61	2.68	1	1
1:A:255:TRP:CZ2	1:A:259:ASN:ND2	0.61	2.68	1	2
1:A:83:LEU:HD12	1:A:83:LEU:C	0.61	2.20	9	1
1:A:109:LEU:HD23	1:A:109:LEU:N	0.61	2.10	9	1
1:A:116:LEU:C	1:A:116:LEU:HD12	0.61	2.20	5	3
1:A:274:GLN:N	1:A:274:GLN:NE2	0.61	2.47	6	2
1:A:242:ARG:NH2	1:A:245:PHE:CE1	0.61	2.67	2	1
1:A:77:TYR:CE2	1:A:127:LEU:HD13	0.61	2.30	4	1
1:A:152:LEU:HD23	1:A:153:VAL:N	0.61	2.10	4	1
1:A:245:PHE:CZ	1:A:249:LEU:HD23	0.61	2.30	7	1
1:A:116:LEU:HD12	1:A:116:LEU:C	0.61	2.20	6	2
1:A:149:LYS:HZ2	1:A:150:ARG:NH2	0.61	1.93	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:255:TRP:CD1	1:A:259:ASN:HD21	0.61	2.13	6	1
1:A:166:ASN:ND2	1:A:167:LEU:N	0.61	2.48	9	2
1:A:242:ARG:NH2	1:A:245:PHE:CD1	0.61	2.68	2	1
1:A:36:THR:O	1:A:37:LEU:HD22	0.61	1.95	4	2
1:A:255:TRP:NE1	1:A:259:ASN:ND2	0.61	2.48	6	1
1:A:101:ASN:ND2	1:A:102:GLY:H	0.61	1.93	3	1
1:A:117:LYS:NZ	1:A:121:PHE:CZ	0.61	2.67	6	3
1:A:236:GLN:NE2	1:A:237:LYS:N	0.61	2.49	10	1
1:A:149:LYS:NZ	1:A:150:ARG:NH2	0.61	2.49	6	2
1:A:54:LEU:HD13	1:A:54:LEU:O	0.61	1.96	3	1
1:A:236:GLN:NE2	1:A:237:LYS:NZ	0.61	2.48	3	1
1:A:212:ILE:N	1:A:212:ILE:HD12	0.61	2.11	10	1
1:A:279:ARG:NH1	1:A:280:ARG:NH1	0.61	2.47	1	1
1:A:175:ARG:NH1	1:A:176:GLN:H	0.61	1.92	3	1
1:A:46:TYR:CE2	1:A:285:ARG:NH1	0.61	2.68	5	1
1:A:248:VAL:HG12	1:A:252:LEU:CD1	0.61	2.26	6	1
1:A:193:ASN:H	1:A:193:ASN:ND2	0.60	1.93	3	1
1:A:57:ASN:ND2	1:A:58:SER:N	0.60	2.49	8	1
1:A:119:VAL:O	1:A:123:SER:N	0.60	2.34	4	10
1:A:123:SER:O	1:A:127:LEU:N	0.60	2.34	8	10
1:A:128:LEU:C	1:A:128:LEU:HD12	0.60	2.21	2	1
1:A:182:ASN:ND2	1:A:183:SER:N	0.60	2.49	7	1
1:A:191:LEU:N	1:A:191:LEU:HD12	0.60	2.10	5	2
1:A:126:LEU:HD11	1:A:164:SER:OG	0.60	1.96	5	1
1:A:76:VAL:N	1:A:150:ARG:HH21	0.60	1.94	7	1
1:A:207:HIS:CG	1:A:208:THR:N	0.60	2.70	8	6
1:A:144:ARG:C	1:A:145:THR:HG22	0.60	2.22	8	3
1:A:171:PHE:CE1	1:A:178:TYR:CE1	0.60	2.90	7	1
1:A:143:THR:HG22	1:A:144:ARG:N	0.60	2.11	10	6
1:A:182:ASN:HD22	1:A:183:SER:N	0.60	1.93	7	1
1:A:267:LEU:HD12	1:A:267:LEU:C	0.60	2.21	3	1
1:A:54:LEU:O	1:A:54:LEU:HD23	0.60	1.97	6	2
1:A:50:PHE:CG	1:A:285:ARG:NH2	0.60	2.70	7	1
1:A:62:LEU:HD23	1:A:63:VAL:N	0.60	2.12	8	1
1:A:31:MET:SD	1:A:31:MET:N	0.60	2.75	6	1
1:A:176:GLN:N	1:A:199:ARG:NH1	0.60	2.50	9	1
1:A:255:TRP:HE1	1:A:259:ASN:ND2	0.60	1.95	9	1
1:A:126:LEU:O	1:A:129:ALA:HB3	0.60	1.96	3	8
1:A:142:ALA:O	1:A:143:THR:HG22	0.60	1.96	1	1
1:A:179:HIS:CE1	1:A:280:ARG:NH1	0.60	2.70	8	1
1:A:222:TYR:O	1:A:226:LEU:HD13	0.59	1.97	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:176:GLN:NE2	1:A:199:ARG:HH21	0.59	1.95	2	1
1:A:207:HIS:HE2	1:A:260:LEU:HD11	0.59	1.58	7	1
1:A:287:LEU:HD22	1:A:287:LEU:O	0.59	1.97	8	1
1:A:295:PHE:CE2	1:A:299:CYS:SG	0.59	2.95	9	1
1:A:104:ILE:HG22	1:A:105:PHE:N	0.59	2.12	10	1
1:A:30:CYS:SG	1:A:182:ASN:N	0.59	2.75	9	4
1:A:108:PHE:CD1	1:A:108:PHE:N	0.59	2.67	4	2
1:A:269:ARG:C	1:A:270:THR:HG23	0.59	2.22	7	4
1:A:234:MET:SD	1:A:234:MET:N	0.59	2.75	6	3
1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:ND2	0.59	2.47	2	2
1:A:109:LEU:HD13	1:A:109:LEU:N	0.59	2.12	3	4
1:A:241:MET:SD	1:A:242:ARG:N	0.59	2.75	9	1
1:A:95:TRP:CZ2	1:A:99:LYS:NZ	0.59	2.71	1	1
1:A:257:PRO:O	1:A:261:VAL:HG12	0.59	1.98	1	3
1:A:222:TYR:CZ	1:A:241:MET:SD	0.59	2.95	3	1
1:A:269:ARG:HH22	1:A:279:ARG:HH21	0.59	1.39	5	1
1:A:218:MET:SD	1:A:219:LEU:N	0.59	2.75	3	1
1:A:36:THR:HG23	1:A:37:LEU:N	0.59	2.12	1	3
1:A:218:MET:SD	1:A:245:PHE:CD2	0.59	2.95	8	1
1:A:200:MET:O	1:A:204:ILE:HG22	0.59	1.98	2	1
1:A:101:ASN:HD22	1:A:102:GLY:H	0.59	1.39	3	1
1:A:287:LEU:HD23	1:A:287:LEU:C	0.59	2.21	3	1
1:A:218:MET:SD	1:A:245:PHE:CE2	0.59	2.95	8	2
1:A:68:ARG:H	1:A:68:ARG:CD	0.59	2.11	4	3
1:A:211:PHE:CG	1:A:212:ILE:N	0.59	2.70	9	4
1:A:113:VAL:HG11	1:A:187:CYS:H	0.58	1.57	5	6
1:A:135:ARG:O	1:A:139:ILE:N	0.58	2.36	8	10
1:A:176:GLN:NE2	1:A:199:ARG:NH2	0.58	2.50	2	1
1:A:255:TRP:CE2	1:A:259:ASN:ND2	0.58	2.71	6	1
1:A:240:ALA:O	1:A:244:ILE:HG23	0.58	1.98	10	1
1:A:236:GLN:O	1:A:240:ALA:HB2	0.58	1.99	2	1
1:A:236:GLN:CD	1:A:236:GLN:H	0.58	2.06	1	2
1:A:219:LEU:HD13	1:A:219:LEU:N	0.58	2.12	9	1
1:A:188:TYR:CZ	1:A:280:ARG:CZ	0.58	2.86	7	2
1:A:256:LEU:CD2	1:A:260:LEU:HD13	0.58	2.28	7	1
1:A:283:ILE:O	1:A:286:ALA:HB3	0.58	1.98	10	1
1:A:222:TYR:CE1	1:A:226:LEU:HD11	0.58	2.33	5	1
1:A:203:ARG:HE	1:A:204:ILE:N	0.58	1.97	7	1
1:A:104:ILE:HD13	1:A:104:ILE:N	0.58	2.14	7	1
1:A:219:LEU:H	1:A:219:LEU:CD1	0.58	2.11	9	1
1:A:203:ARG:HH21	1:A:264:ALA:HB2	0.58	1.59	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:175:ARG:HH12	1:A:202:LEU:HD13	0.58	1.58	9	1
1:A:151:HIS:HD1	1:A:152:LEU:N	0.58	1.97	4	2
1:A:269:ARG:HH22	1:A:279:ARG:NH2	0.58	1.96	5	1
1:A:272:VAL:HG23	1:A:279:ARG:NH1	0.57	2.13	7	1
1:A:30:CYS:C	1:A:32:LEU:H	0.57	2.07	1	6
1:A:40:TYR:CG	1:A:182:ASN:ND2	0.57	2.72	1	2
1:A:171:PHE:CE1	1:A:178:TYR:CZ	0.57	2.91	6	2
1:A:222:TYR:CE2	1:A:241:MET:SD	0.57	2.97	3	1
1:A:51:LEU:HD13	1:A:51:LEU:O	0.57	2.00	8	1
1:A:279:ARG:HE	1:A:280:ARG:NH2	0.57	1.97	7	2
1:A:282:ASN:N	1:A:282:ASN:ND2	0.57	2.50	7	1
1:A:204:ILE:C	1:A:204:ILE:HD12	0.57	2.24	1	1
1:A:279:ARG:NH2	1:A:280:ARG:HH21	0.57	1.97	6	1
1:A:179:HIS:NE2	1:A:181:ASN:ND2	0.57	2.53	8	1
1:A:116:LEU:HD13	1:A:116:LEU:C	0.57	2.24	2	1
1:A:167:LEU:O	1:A:167:LEU:HD23	0.57	2.00	3	1
1:A:188:TYR:CE1	1:A:189:GLU:O	0.57	2.58	10	5
1:A:69:VAL:CG2	1:A:305:TYR:CE2	0.57	2.87	10	1
1:A:283:ILE:HD12	1:A:284:GLY:N	0.57	2.15	10	1
1:A:274:GLN:HE21	1:A:275:GLU:N	0.57	1.98	1	1
1:A:271:GLN:O	1:A:273:ILE:N	0.57	2.37	8	4
1:A:55:LEU:HD12	1:A:55:LEU:O	0.57	1.99	8	2
1:A:141:HIS:ND1	1:A:141:HIS:N	0.56	2.52	2	1
1:A:173:LEU:HD23	1:A:174:PHE:CZ	0.56	2.35	7	1
1:A:104:ILE:N	1:A:104:ILE:CD1	0.56	2.68	2	2
1:A:40:TYR:CZ	1:A:44:ILE:HD11	0.56	2.35	1	2
1:A:282:ASN:ND2	1:A:282:ASN:H	0.56	1.98	7	2
1:A:149:LYS:CB	1:A:149:LYS:NZ	0.56	2.67	5	1
1:A:188:TYR:CE1	1:A:280:ARG:CZ	0.56	2.89	8	1
1:A:72:SER:CB	1:A:301:ASN:ND2	0.56	2.68	8	2
1:A:269:ARG:HH21	1:A:279:ARG:HH21	0.56	1.44	6	1
1:A:179:HIS:NE2	1:A:280:ARG:NH1	0.56	2.53	8	1
1:A:109:LEU:H	1:A:109:LEU:HD13	0.56	1.58	7	5
1:A:230:PHE:CD2	1:A:231:LYS:N	0.56	2.73	2	2
1:A:191:LEU:HD12	1:A:191:LEU:H	0.56	1.61	9	3
1:A:188:TYR:CD1	1:A:188:TYR:C	0.56	2.83	8	3
1:A:203:ARG:NH2	1:A:264:ALA:HB2	0.56	2.14	10	2
1:A:176:GLN:HE21	1:A:199:ARG:HH21	0.56	1.44	2	1
1:A:288:ASP:O	1:A:292:ILE:HG23	0.56	2.01	2	4
1:A:177:ALA:HB1	1:A:179:HIS:CD2	0.56	2.36	3	2
1:A:234:MET:HE3	1:A:234:MET:H	0.56	1.59	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:113:VAL:HG21	1:A:185:PRO:O	0.56	1.99	6	2
1:A:182:ASN:HD22	1:A:183:SER:H	0.56	1.44	1	1
1:A:35:GLU:CD	1:A:35:GLU:H	0.56	2.09	2	2
1:A:74:THR:O	1:A:78:LEU:N	0.56	2.39	2	8
1:A:191:LEU:HD21	1:A:280:ARG:NH2	0.56	2.15	2	2
1:A:274:GLN:NE2	1:A:274:GLN:H	0.56	1.98	3	1
1:A:71:ARG:NE	1:A:71:ARG:CA	0.56	2.69	1	1
1:A:77:TYR:CD2	1:A:297:HIS:CE1	0.56	2.94	1	1
1:A:104:ILE:HD13	1:A:104:ILE:C	0.56	2.26	5	1
1:A:157:CYS:O	1:A:161:TRP:N	0.56	2.38	5	1
1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CD2	0.56	2.69	9	1
1:A:64:ILE:CD1	1:A:297:HIS:NE2	0.56	2.69	10	1
1:A:137:LEU:C	1:A:137:LEU:HD23	0.56	2.26	2	1
1:A:216:PHE:CD1	1:A:216:PHE:N	0.56	2.68	7	2
1:A:146:LEU:H	1:A:146:LEU:CD1	0.56	2.14	6	1
1:A:73:VAL:HG13	1:A:131:ILE:HD11	0.56	1.76	7	1
1:A:255:TRP:CD1	1:A:255:TRP:C	0.55	2.84	1	5
1:A:279:ARG:NH1	1:A:280:ARG:HH11	0.55	1.98	1	1
1:A:97:ALA:O	1:A:101:ASN:ND2	0.55	2.39	3	5
1:A:76:VAL:HG13	1:A:77:TYR:N	0.55	2.16	7	5
1:A:205:LEU:O	1:A:210:GLY:N	0.55	2.39	7	2
1:A:269:ARG:NH2	1:A:279:ARG:HH21	0.55	1.98	5	2
1:A:146:LEU:N	1:A:146:LEU:CD1	0.55	2.69	1	2
1:A:293:LEU:HD23	1:A:294:GLY:H	0.55	1.60	3	1
1:A:182:ASN:OD1	1:A:183:SER:N	0.55	2.40	9	2
1:A:215:LEU:HD23	1:A:215:LEU:C	0.55	2.26	2	2
1:A:271:GLN:CD	1:A:271:GLN:H	0.55	2.08	2	1
1:A:188:TYR:CG	1:A:189:GLU:N	0.55	2.71	10	2
1:A:109:LEU:CD2	1:A:109:LEU:H	0.55	2.13	9	1
1:A:71:ARG:HH21	1:A:149:LYS:NZ	0.55	1.99	4	1
1:A:149:LYS:NZ	1:A:150:ARG:HH22	0.55	2.00	6	1
1:A:211:PHE:CE2	1:A:215:LEU:HD12	0.55	2.37	7	1
1:A:165:MET:O	1:A:169:LEU:N	0.55	2.40	6	6
1:A:281:ASN:CG	1:A:282:ASN:N	0.55	2.64	10	2
1:A:197:LYS:C	1:A:198:TRP:CG	0.55	2.85	6	7
1:A:107:THR:OG1	1:A:178:TYR:CE1	0.55	2.60	2	2
1:A:218:MET:O	1:A:222:TYR:CD1	0.55	2.60	6	7
1:A:148:GLN:NE2	1:A:150:ARG:H	0.55	1.98	6	1
1:A:30:CYS:SG	1:A:30:CYS:O	0.55	2.65	9	3
1:A:71:ARG:CD	1:A:71:ARG:H	0.55	2.15	1	1
1:A:207:HIS:O	1:A:211:PHE:CE2	0.55	2.60	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:293:LEU:HD13	1:A:294:GLY:H	0.55	1.56	5	1
1:A:294:GLY:O	1:A:297:HIS:CD2	0.55	2.60	10	1
1:A:118:GLU:O	1:A:122:TYR:CG	0.55	2.60	1	3
1:A:161:TRP:O	1:A:165:MET:N	0.55	2.40	6	9
1:A:279:ARG:HH11	1:A:280:ARG:NH1	0.55	2.00	1	1
1:A:30:CYS:O	1:A:30:CYS:SG	0.55	2.65	10	4
1:A:84:ALA:O	1:A:88:PHE:CG	0.55	2.60	6	3
1:A:202:LEU:O	1:A:202:LEU:HD23	0.55	2.02	5	1
1:A:275:GLU:N	1:A:275:GLU:CD	0.55	2.65	5	1
1:A:72:SER:CB	1:A:301:ASN:HD21	0.55	2.14	8	1
1:A:61:MET:HE1	1:A:81:LEU:HD23	0.55	1.77	4	1
1:A:258:TYR:CD1	1:A:258:TYR:C	0.55	2.84	9	1
1:A:287:LEU:HD12	1:A:287:LEU:C	0.54	2.28	4	1
1:A:218:MET:SD	1:A:245:PHE:CZ	0.54	3.00	10	2
1:A:109:LEU:CD1	1:A:109:LEU:N	0.54	2.70	6	7
1:A:151:HIS:ND1	1:A:151:HIS:C	0.54	2.65	4	2
1:A:279:ARG:HE	1:A:280:ARG:CZ	0.54	2.15	7	1
1:A:79:LEU:HD23	1:A:154:LYS:NZ	0.54	2.17	1	1
1:A:132:SER:O	1:A:136:TYR:CD1	0.54	2.60	1	2
1:A:279:ARG:NE	1:A:279:ARG:O	0.54	2.41	1	1
1:A:59:LEU:O	1:A:63:VAL:HG12	0.54	2.03	2	4
1:A:146:LEU:CD1	1:A:146:LEU:N	0.54	2.70	6	1
1:A:264:ALA:O	1:A:268:MET:N	0.54	2.41	5	9
1:A:143:THR:OG1	1:A:144:ARG:N	0.54	2.40	9	3
1:A:191:LEU:HD11	1:A:280:ARG:HH21	0.54	1.62	4	1
1:A:88:PHE:N	1:A:88:PHE:CD1	0.54	2.75	5	2
1:A:203:ARG:HH11	1:A:203:ARG:CA	0.54	2.16	6	1
1:A:53:SER:O	1:A:56:GLY:N	0.54	2.40	8	10
1:A:274:GLN:N	1:A:274:GLN:CD	0.54	2.66	1	2
1:A:167:LEU:O	1:A:175:ARG:NH2	0.54	2.41	2	4
1:A:271:GLN:OE1	1:A:271:GLN:N	0.54	2.40	8	2
1:A:103:TRP:CD1	1:A:104:ILE:O	0.54	2.61	3	1
1:A:84:ALA:O	1:A:88:PHE:CD1	0.54	2.60	8	5
1:A:154:LYS:NZ	1:A:157:CYS:SG	0.54	2.80	5	1
1:A:209:PHE:CG	1:A:209:PHE:O	0.54	2.60	5	1
1:A:174:PHE:O	1:A:199:ARG:NH2	0.54	2.41	7	1
1:A:113:VAL:CG1	1:A:187:CYS:H	0.54	2.16	5	5
1:A:234:MET:SD	1:A:235:GLY:N	0.54	2.81	1	1
1:A:94:ILE:HD12	1:A:94:ILE:N	0.54	2.17	7	2
1:A:266:THR:O	1:A:279:ARG:NH2	0.54	2.40	7	2
1:A:181:ASN:O	1:A:182:ASN:ND2	0.54	2.41	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:255:TRP:CD2	1:A:259:ASN:OD1	0.54	2.61	6	1
1:A:179:HIS:CE1	1:A:181:ASN:HD22	0.54	2.19	8	1
1:A:294:GLY:O	1:A:297:HIS:ND1	0.54	2.41	2	2
1:A:50:PHE:CE1	1:A:292:ILE:HG22	0.54	2.37	8	1
1:A:278:GLU:O	1:A:281:ASN:ND2	0.54	2.41	10	1
1:A:182:ASN:HD21	1:A:277:CYS:C	0.54	2.10	5	2
1:A:182:ASN:CG	1:A:281:ASN:ND2	0.54	2.66	9	2
1:A:259:ASN:C	1:A:259:ASN:ND2	0.54	2.66	4	1
1:A:104:ILE:HD13	1:A:104:ILE:O	0.54	2.03	5	1
1:A:136:TYR:CG	1:A:140:VAL:O	0.54	2.61	1	2
1:A:176:GLN:CD	1:A:177:ALA:N	0.54	2.66	4	2
1:A:182:ASN:OD1	1:A:281:ASN:ND2	0.54	2.41	4	3
1:A:50:PHE:O	1:A:50:PHE:CD1	0.54	2.61	6	2
1:A:272:VAL:HG23	1:A:272:VAL:O	0.54	2.03	6	1
1:A:188:TYR:CE2	1:A:189:GLU:O	0.54	2.61	9	3
1:A:209:PHE:CD1	1:A:209:PHE:C	0.54	2.86	1	2
1:A:149:LYS:CB	1:A:149:LYS:HZ2	0.54	2.16	5	1
1:A:227:ARG:NE	1:A:227:ARG:C	0.54	2.66	6	1
1:A:188:TYR:CZ	1:A:189:GLU:O	0.53	2.61	6	5
1:A:116:LEU:HD13	1:A:116:LEU:O	0.53	2.03	2	1
1:A:200:MET:SD	1:A:201:VAL:N	0.53	2.82	4	1
1:A:301:ASN:O	1:A:305:TYR:CG	0.53	2.61	4	1
1:A:146:LEU:N	1:A:146:LEU:CD2	0.53	2.71	8	1
1:A:258:TYR:CD1	1:A:286:ALA:HB1	0.53	2.38	9	1
1:A:212:ILE:N	1:A:212:ILE:CD1	0.53	2.71	10	1
1:A:251:PHE:CD1	1:A:251:PHE:N	0.53	2.74	10	1
1:A:245:PHE:CD1	1:A:246:ALA:N	0.53	2.76	1	2
1:A:273:ILE:C	1:A:275:GLU:H	0.53	2.11	5	9
1:A:224:PHE:O	1:A:227:ARG:NE	0.53	2.41	5	5
1:A:281:ASN:OD1	1:A:282:ASN:N	0.53	2.41	3	2
1:A:274:GLN:CD	1:A:274:GLN:N	0.53	2.66	4	1
1:A:146:LEU:CD2	1:A:146:LEU:H	0.53	2.16	8	1
1:A:130:CYS:SG	1:A:131:ILE:N	0.53	2.81	1	1
1:A:135:ARG:NE	1:A:237:LYS:O	0.53	2.41	1	1
1:A:242:ARG:CZ	1:A:245:PHE:CD1	0.53	2.91	2	1
1:A:81:LEU:HD13	1:A:81:LEU:O	0.53	2.03	3	4
1:A:151:HIS:HD1	1:A:151:HIS:C	0.53	2.12	4	1
1:A:147:THR:HG22	1:A:148:GLN:N	0.53	2.18	5	3
1:A:191:LEU:N	1:A:191:LEU:HD22	0.53	2.18	8	1
1:A:180:PRO:C	1:A:181:ASN:ND2	0.53	2.66	10	1
1:A:74:THR:OG1	1:A:297:HIS:NE2	0.53	2.42	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:301:ASN:ND2	1:A:305:TYR:OH	0.53	2.42	9	2
1:A:39:LYS:NZ	1:A:282:ASN:CG	0.53	2.67	9	1
1:A:71:ARG:NE	1:A:71:ARG:C	0.53	2.66	1	1
1:A:71:ARG:NH1	1:A:305:TYR:OH	0.53	2.42	1	1
1:A:141:HIS:CG	1:A:141:HIS:O	0.53	2.61	3	7
1:A:197:LYS:O	1:A:198:TRP:CE3	0.53	2.61	7	7
1:A:218:MET:O	1:A:222:TYR:N	0.53	2.42	1	6
1:A:273:ILE:O	1:A:275:GLU:N	0.53	2.42	2	9
1:A:182:ASN:ND2	1:A:277:CYS:C	0.53	2.67	5	2
1:A:227:ARG:NE	1:A:228:THR:OG1	0.53	2.42	7	1
1:A:175:ARG:NH1	1:A:202:LEU:HD13	0.53	2.19	9	1
1:A:209:PHE:CD1	1:A:209:PHE:O	0.53	2.62	1	1
1:A:224:PHE:O	1:A:227:ARG:NH1	0.53	2.42	1	1
1:A:128:LEU:HD12	1:A:128:LEU:O	0.53	2.03	2	1
1:A:40:TYR:CG	1:A:182:ASN:OD1	0.53	2.62	6	1
1:A:74:THR:O	1:A:77:TYR:N	0.53	2.41	7	2
1:A:176:GLN:NE2	1:A:188:TYR:O	0.53	2.42	1	1
1:A:209:PHE:O	1:A:209:PHE:CG	0.53	2.61	1	4
1:A:201:VAL:O	1:A:205:LEU:N	0.53	2.42	5	4
1:A:293:LEU:HD22	1:A:293:LEU:O	0.53	2.03	5	1
1:A:279:ARG:NH2	1:A:280:ARG:CZ	0.53	2.71	9	1
1:A:37:LEU:HD13	1:A:182:ASN:OD1	0.53	2.04	1	1
1:A:40:TYR:CD1	1:A:40:TYR:O	0.53	2.62	9	3
1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:HD22	0.53	2.00	2	3
1:A:198:TRP:O	1:A:201:VAL:HG13	0.53	2.03	3	3
1:A:71:ARG:NH1	1:A:149:LYS:CE	0.53	2.72	3	1
1:A:95:TRP:CD1	1:A:95:TRP:C	0.53	2.87	9	4
1:A:181:ASN:ND2	1:A:186:VAL:O	0.53	2.42	4	3
1:A:255:TRP:CH2	1:A:290:THR:OG1	0.53	2.62	10	2
1:A:40:TYR:CD1	1:A:281:ASN:CG	0.53	2.87	4	2
1:A:40:TYR:CD2	1:A:182:ASN:OD1	0.53	2.62	6	1
1:A:74:THR:OG1	1:A:297:HIS:CD2	0.53	2.61	6	1
1:A:95:TRP:C	1:A:95:TRP:CD2	0.53	2.87	7	1
1:A:40:TYR:CE2	1:A:183:SER:OG	0.53	2.62	2	3
1:A:176:GLN:OE1	1:A:177:ALA:N	0.53	2.42	2	1
1:A:272:VAL:O	1:A:279:ARG:NH1	0.53	2.42	2	2
1:A:179:HIS:O	1:A:280:ARG:NH2	0.53	2.42	3	1
1:A:249:LEU:O	1:A:253:LEU:N	0.53	2.42	4	3
1:A:143:THR:OG1	1:A:144:ARG:NE	0.53	2.42	4	1
1:A:155:PHE:CD1	1:A:155:PHE:N	0.53	2.75	9	1
1:A:80:ASN:O	1:A:84:ALA:N	0.53	2.41	8	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:135:ARG:O	1:A:138:ALA:N	0.53	2.42	4	7
1:A:231:LYS:O	1:A:233:HIS:CD2	0.53	2.62	9	3
1:A:233:HIS:O	1:A:233:HIS:ND1	0.53	2.42	2	4
1:A:236:GLN:OE1	1:A:236:GLN:N	0.53	2.41	5	2
1:A:247:VAL:O	1:A:251:PHE:CD2	0.53	2.62	4	2
1:A:103:TRP:O	1:A:104:ILE:HD13	0.53	2.04	4	1
1:A:75:ASP:CG	1:A:150:ARG:NH2	0.53	2.66	6	1
1:A:194:ASP:CG	1:A:199:ARG:NE	0.53	2.67	6	1
1:A:40:TYR:OH	1:A:95:TRP:CZ3	0.53	2.62	7	1
1:A:40:TYR:CD1	1:A:40:TYR:C	0.53	2.87	8	1
1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:HD13	0.52	2.19	6	3
1:A:135:ARG:NH2	1:A:236:GLN:O	0.52	2.43	1	2
1:A:203:ARG:O	1:A:207:HIS:ND1	0.52	2.42	3	5
1:A:207:HIS:CD2	1:A:207:HIS:C	0.52	2.87	7	3
1:A:275:GLU:N	1:A:275:GLU:OE1	0.52	2.42	5	1
1:A:297:HIS:O	1:A:297:HIS:CG	0.52	2.60	7	2
1:A:285:ARG:NE	1:A:285:ARG:O	0.52	2.42	10	1
1:A:194:ASP:N	1:A:194:ASP:OD1	0.52	2.42	2	2
1:A:236:GLN:NE2	1:A:237:LYS:HZ2	0.52	2.02	3	1
1:A:176:GLN:O	1:A:199:ARG:NH1	0.52	2.43	10	2
1:A:232:ALA:O	1:A:233:HIS:CG	0.52	2.62	9	2
1:A:188:TYR:CE2	1:A:189:GLU:OE2	0.52	2.62	6	1
1:A:141:HIS:CE1	1:A:143:THR:O	0.52	2.62	7	2
1:A:211:PHE:O	1:A:215:LEU:N	0.52	2.42	7	1
1:A:215:LEU:O	1:A:215:LEU:HD23	0.52	2.05	7	1
1:A:175:ARG:NH1	1:A:201:VAL:CG2	0.52	2.72	2	1
1:A:195:THR:O	1:A:198:TRP:CE2	0.52	2.62	2	1
1:A:271:GLN:CD	1:A:279:ARG:NH2	0.52	2.68	2	1
1:A:66:TYR:O	1:A:68:ARG:NH2	0.52	2.42	3	1
1:A:101:ASN:OD1	1:A:103:TRP:CZ3	0.52	2.62	3	1
1:A:157:CYS:SG	1:A:158:LEU:N	0.52	2.81	7	3
1:A:75:ASP:CG	1:A:76:VAL:N	0.52	2.67	2	6
1:A:66:TYR:O	1:A:68:ARG:NH1	0.52	2.42	6	2
1:A:285:ARG:NE	1:A:285:ARG:C	0.52	2.67	10	2
1:A:255:TRP:CH2	1:A:259:ASN:CG	0.52	2.87	3	1
1:A:71:ARG:O	1:A:236:GLN:NE2	0.52	2.42	8	2
1:A:188:TYR:HB2	1:A:283:ILE:HG21	0.52	1.79	4	1
1:A:46:TYR:CD2	1:A:285:ARG:NH1	0.52	2.78	5	1
1:A:176:GLN:O	1:A:199:ARG:NH2	0.52	2.42	5	1
1:A:255:TRP:CE2	1:A:259:ASN:CG	0.52	2.87	6	1
1:A:132:SER:O	1:A:136:TYR:CE1	0.52	2.62	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:LEU:HD13	1:A:51:LEU:C	0.52	2.30	8	1
1:A:263:LEU:CD1	1:A:264:ALA:N	0.52	2.72	9	1
1:A:288:ASP:OD1	1:A:288:ASP:N	0.52	2.42	9	1
1:A:191:LEU:O	1:A:269:ARG:NH2	0.52	2.42	10	1
1:A:38:ASN:ND2	1:A:38:ASN:C	0.52	2.68	6	7
1:A:265:ASP:OD2	1:A:271:GLN:NE2	0.52	2.42	6	4
1:A:35:GLU:CD	1:A:35:GLU:N	0.52	2.68	2	2
1:A:72:SER:OG	1:A:301:ASN:ND2	0.52	2.43	8	2
1:A:281:ASN:OD1	1:A:282:ASN:ND2	0.52	2.42	3	1
1:A:57:ASN:ND2	1:A:291:GLU:CD	0.52	2.68	7	1
1:A:141:HIS:NE2	1:A:143:THR:O	0.52	2.42	7	2
1:A:233:HIS:CG	1:A:233:HIS:O	0.52	2.62	1	1
1:A:171:PHE:CD1	1:A:171:PHE:C	0.52	2.88	4	7
1:A:301:ASN:ND2	1:A:301:ASN:C	0.52	2.68	2	1
1:A:236:GLN:O	1:A:238:HIS:N	0.52	2.42	6	1
1:A:265:ASP:O	1:A:271:GLN:NE2	0.52	2.42	7	1
1:A:279:ARG:NH2	1:A:280:ARG:NH2	0.52	2.57	9	1
1:A:301:ASN:ND2	1:A:305:TYR:CZ	0.52	2.77	9	1
1:A:176:GLN:NE2	1:A:189:GLU:C	0.52	2.67	1	1
1:A:282:ASN:C	1:A:282:ASN:ND2	0.52	2.68	2	3
1:A:179:HIS:CE1	1:A:180:PRO:O	0.52	2.63	2	1
1:A:236:GLN:CD	1:A:237:LYS:N	0.52	2.68	2	2
1:A:295:PHE:CD1	1:A:295:PHE:C	0.52	2.86	3	6
1:A:301:ASN:O	1:A:305:TYR:CD2	0.52	2.62	4	1
1:A:279:ARG:HH21	1:A:280:ARG:HH21	0.52	1.46	6	1
1:A:175:ARG:CG	1:A:176:GLN:N	0.52	2.72	1	1
1:A:133:VAL:HG21	1:A:156:VAL:HG11	0.52	1.80	5	4
1:A:211:PHE:CD2	1:A:212:ILE:N	0.52	2.78	2	3
1:A:42:VAL:HG13	1:A:43:ILE:N	0.52	2.20	3	1
1:A:233:HIS:O	1:A:233:HIS:CD2	0.52	2.62	3	3
1:A:209:PHE:O	1:A:209:PHE:CD1	0.52	2.62	5	2
1:A:57:ASN:ND2	1:A:57:ASN:C	0.52	2.67	8	1
1:A:108:PHE:CD2	1:A:112:VAL:HG21	0.52	2.39	8	1
1:A:120:ASN:ND2	1:A:121:PHE:N	0.52	2.58	8	1
1:A:101:ASN:CG	1:A:102:GLY:N	0.52	2.67	9	1
1:A:176:GLN:HE22	1:A:189:GLU:C	0.52	2.12	1	1
1:A:233:HIS:CD2	1:A:233:HIS:O	0.52	2.63	1	1
1:A:266:THR:O	1:A:269:ARG:NH1	0.52	2.42	9	2
1:A:171:PHE:CZ	1:A:178:TYR:OH	0.52	2.63	4	3
1:A:294:GLY:O	1:A:297:HIS:CG	0.52	2.62	6	3
1:A:101:ASN:OD1	1:A:103:TRP:CE3	0.52	2.62	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:143:THR:HG23	1:A:152:LEU:HD23	0.52	1.82	5	1
1:A:73:VAL:HG12	1:A:127:LEU:HD11	0.52	1.82	6	1
1:A:172:PHE:CD1	1:A:178:TYR:OH	0.52	2.62	7	1
1:A:266:THR:OG1	1:A:279:ARG:NE	0.52	2.43	7	2
1:A:39:LYS:N	1:A:278:GLU:OE2	0.52	2.42	8	1
1:A:57:ASN:O	1:A:61:MET:SD	0.52	2.68	8	4
1:A:266:THR:OG1	1:A:279:ARG:NH1	0.52	2.42	1	2
1:A:101:ASN:OD1	1:A:101:ASN:N	0.52	2.43	2	4
1:A:103:TRP:NE1	1:A:104:ILE:O	0.52	2.43	3	1
1:A:57:ASN:O	1:A:61:MET:N	0.52	2.39	7	1
1:A:166:ASN:C	1:A:166:ASN:ND2	0.52	2.67	10	2
1:A:275:GLU:OE2	1:A:279:ARG:NH1	0.52	2.43	8	1
1:A:255:TRP:CZ3	1:A:290:THR:OG1	0.52	2.62	10	1
1:A:144:ARG:NH2	1:A:155:PHE:CD1	0.51	2.78	1	1
1:A:38:ASN:C	1:A:38:ASN:ND2	0.51	2.68	8	2
1:A:141:HIS:O	1:A:143:THR:N	0.51	2.42	2	3
1:A:216:PHE:CD1	1:A:216:PHE:C	0.51	2.87	2	2
1:A:274:GLN:H	1:A:274:GLN:CD	0.51	2.12	3	1
1:A:189:GLU:OE2	1:A:267:LEU:HD13	0.51	2.04	4	1
1:A:274:GLN:NE2	1:A:274:GLN:O	0.51	2.42	10	2
1:A:118:GLU:O	1:A:122:TYR:CD2	0.51	2.63	7	1
1:A:121:PHE:CD1	1:A:121:PHE:C	0.51	2.87	8	1
1:A:91:THR:HG21	1:A:112:VAL:HG11	0.51	1.81	2	2
1:A:143:THR:CG2	1:A:144:ARG:H	0.51	2.17	5	5
1:A:246:ALA:O	1:A:250:ILE:HD13	0.51	2.05	4	1
1:A:77:TYR:O	1:A:81:LEU:N	0.51	2.43	6	2
1:A:112:VAL:CG1	1:A:113:VAL:N	0.51	2.73	9	2
1:A:207:HIS:ND1	1:A:208:THR:OG1	0.51	2.42	8	1
1:A:148:GLN:CD	1:A:148:GLN:N	0.51	2.68	10	1
1:A:239:ARG:HH12	1:A:304:ILE:CG2	0.51	2.19	1	1
1:A:245:PHE:CD1	1:A:245:PHE:C	0.51	2.87	1	3
1:A:233:HIS:O	1:A:233:HIS:CG	0.51	2.62	8	6
1:A:118:GLU:O	1:A:122:TYR:CD1	0.51	2.64	1	1
1:A:295:PHE:O	1:A:295:PHE:CD1	0.51	2.64	1	2
1:A:79:LEU:HD23	1:A:150:ARG:NH2	0.51	2.20	3	1
1:A:191:LEU:H	1:A:191:LEU:CD1	0.51	2.10	8	3
1:A:276:SER:OG	1:A:280:ARG:NH1	0.51	2.43	9	1
1:A:52:LEU:C	1:A:52:LEU:HD23	0.51	2.31	9	2
1:A:174:PHE:O	1:A:174:PHE:CD1	0.51	2.63	5	2
1:A:131:ILE:CD1	1:A:244:ILE:HD13	0.51	2.35	2	1
1:A:68:ARG:NE	1:A:68:ARG:H	0.51	2.04	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:296:LEU:HD12	1:A:296:LEU:N	0.51	2.20	4	1
1:A:311:ASN:N	1:A:311:ASN:HD22	0.51	2.04	6	1
1:A:229:LEU:N	1:A:229:LEU:CD2	0.51	2.73	7	1
1:A:39:LYS:CG	1:A:281:ASN:HD21	0.51	2.18	10	1
1:A:169:LEU:N	1:A:170:PRO:CD	0.51	2.74	8	9
1:A:71:ARG:HH21	1:A:149:LYS:HZ2	0.51	1.49	4	1
1:A:281:ASN:ND2	1:A:282:ASN:ND2	0.51	2.58	6	1
1:A:175:ARG:CG	1:A:199:ARG:NH1	0.51	2.74	8	1
1:A:229:LEU:CD1	1:A:229:LEU:H	0.51	2.18	8	1
1:A:75:ASP:OD1	1:A:76:VAL:N	0.51	2.43	9	1
1:A:255:TRP:O	1:A:255:TRP:CD1	0.51	2.63	9	1
1:A:242:ARG:NH2	1:A:246:ALA:HB2	0.51	2.20	1	1
1:A:95:TRP:C	1:A:95:TRP:CD1	0.51	2.88	4	1
1:A:195:THR:O	1:A:198:TRP:CD1	0.51	2.63	4	1
1:A:72:SER:C	1:A:74:THR:H	0.51	2.13	9	2
1:A:297:HIS:CD2	1:A:297:HIS:O	0.51	2.64	5	1
1:A:73:VAL:HG12	1:A:134:ASP:OD2	0.51	2.06	10	1
1:A:207:HIS:O	1:A:211:PHE:CD2	0.51	2.64	1	1
1:A:258:TYR:CG	1:A:259:ASN:N	0.51	2.77	1	3
1:A:162:GLY:O	1:A:166:ASN:ND2	0.51	2.44	5	3
1:A:278:GLU:CG	1:A:279:ARG:N	0.51	2.74	7	2
1:A:120:ASN:ND2	1:A:290:THR:OG1	0.51	2.43	4	1
1:A:222:TYR:OH	1:A:241:MET:SD	0.51	2.68	6	1
1:A:118:GLU:OE2	1:A:122:TYR:CD1	0.51	2.64	10	1
1:A:255:TRP:O	1:A:259:ASN:ND2	0.51	2.43	6	1
1:A:284:GLY:C	1:A:286:ALA:N	0.50	2.68	5	3
1:A:259:ASN:ND2	1:A:263:LEU:HD11	0.50	2.21	3	1
1:A:39:LYS:NZ	1:A:282:ASN:OD1	0.50	2.45	8	1
1:A:40:TYR:CZ	1:A:44:ILE:CG1	0.50	2.94	1	3
1:A:297:HIS:ND1	1:A:297:HIS:C	0.50	2.68	6	3
1:A:84:ALA:O	1:A:88:PHE:CD2	0.50	2.64	5	2
1:A:227:ARG:C	1:A:227:ARG:HE	0.50	2.15	6	1
1:A:30:CYS:O	1:A:32:LEU:N	0.50	2.44	1	4
1:A:64:ILE:HD13	1:A:64:ILE:N	0.50	2.20	3	1
1:A:238:HIS:O	1:A:241:MET:SD	0.50	2.70	5	2
1:A:157:CYS:SG	1:A:161:TRP:CZ3	0.50	2.98	8	1
1:A:181:ASN:N	1:A:181:ASN:ND2	0.50	2.57	1	2
1:A:269:ARG:CA	1:A:271:GLN:HE22	0.50	2.20	2	1
1:A:110:CYS:SG	1:A:176:GLN:OE1	0.50	2.69	3	1
1:A:274:GLN:NE2	1:A:274:GLN:N	0.50	2.59	3	1
1:A:101:ASN:N	1:A:101:ASN:HD22	0.50	2.03	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:134:ASP:OD2	1:A:135:ARG:NH1	0.50	2.45	1	1
1:A:101:ASN:HD22	1:A:101:ASN:N	0.50	2.03	3	1
1:A:118:GLU:CG	1:A:119:VAL:N	0.50	2.73	3	1
1:A:249:LEU:O	1:A:249:LEU:HD23	0.50	2.06	6	2
1:A:203:ARG:HE	1:A:263:LEU:CD2	0.50	2.18	8	1
1:A:68:ARG:H	1:A:68:ARG:HH11	0.50	1.47	10	1
1:A:77:TYR:CE1	1:A:123:SER:OG	0.50	2.65	10	1
1:A:269:ARG:O	1:A:270:THR:CB	0.50	2.59	8	7
1:A:120:ASN:ND2	1:A:120:ASN:C	0.50	2.70	2	1
1:A:182:ASN:N	1:A:182:ASN:ND2	0.50	2.58	2	2
1:A:75:ASP:O	1:A:150:ARG:NH1	0.50	2.43	5	1
1:A:211:PHE:CZ	1:A:256:LEU:CD2	0.50	2.94	9	1
1:A:59:LEU:N	1:A:59:LEU:CD2	0.50	2.75	1	2
1:A:79:LEU:HD23	1:A:154:LYS:HZ2	0.50	1.66	1	1
1:A:197:LYS:O	1:A:198:TRP:CD2	0.50	2.65	9	5
1:A:188:TYR:CB	1:A:283:ILE:HG21	0.50	2.37	4	1
1:A:57:ASN:HD21	1:A:85:ASP:CG	0.50	2.14	8	1
1:A:191:LEU:H	1:A:191:LEU:CD2	0.50	2.15	8	1
1:A:191:LEU:N	1:A:191:LEU:CD1	0.50	2.74	1	2
1:A:234:MET:SD	1:A:234:MET:O	0.50	2.70	6	3
1:A:197:LYS:NZ	1:A:199:ARG:HH21	0.50	2.04	5	1
1:A:251:PHE:CD1	1:A:293:LEU:HD13	0.50	2.42	6	1
1:A:258:TYR:CZ	1:A:262:LEU:CD1	0.50	2.94	6	1
1:A:88:PHE:CZ	1:A:92:LEU:CD2	0.50	2.95	10	1
1:A:239:ARG:CD	1:A:240:ALA:N	0.50	2.75	2	1
1:A:211:PHE:CD1	1:A:211:PHE:C	0.50	2.87	9	2
1:A:299:CYS:SG	1:A:300:LEU:N	0.49	2.83	1	1
1:A:57:ASN:CG	1:A:61:MET:SD	0.49	2.95	2	1
1:A:226:LEU:HD12	1:A:226:LEU:C	0.49	2.31	2	1
1:A:103:TRP:C	1:A:103:TRP:CD1	0.49	2.87	4	1
1:A:228:THR:CG2	1:A:229:LEU:N	0.49	2.75	6	2
1:A:188:TYR:CD1	1:A:188:TYR:N	0.49	2.78	2	1
1:A:274:GLN:H	1:A:274:GLN:HE21	0.49	1.50	7	1
1:A:282:ASN:ND2	1:A:282:ASN:C	0.49	2.70	10	2
1:A:264:ALA:C	1:A:268:MET:SD	0.49	2.96	1	2
1:A:33:GLU:CD	1:A:33:GLU:N	0.49	2.70	2	2
1:A:47:ALA:O	1:A:51:LEU:N	0.49	2.44	3	6
1:A:179:HIS:CD2	1:A:179:HIS:C	0.49	2.87	2	1
1:A:72:SER:C	1:A:74:THR:N	0.49	2.67	9	4
1:A:305:TYR:CD1	1:A:305:TYR:N	0.49	2.78	4	1
1:A:148:GLN:HE21	1:A:150:ARG:H	0.49	1.50	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:219:LEU:N	1:A:219:LEU:HD12	0.49	2.22	6	2
1:A:166:ASN:HD22	1:A:166:ASN:C	0.49	2.16	7	1
1:A:178:TYR:CD1	1:A:178:TYR:N	0.49	2.75	8	1
1:A:176:GLN:NE2	1:A:202:LEU:HD22	0.49	2.22	10	1
1:A:236:GLN:CD	1:A:236:GLN:N	0.49	2.70	10	3
1:A:81:LEU:O	1:A:85:ASP:N	0.49	2.40	4	3
1:A:272:VAL:O	1:A:273:ILE:HG23	0.49	2.08	5	1
1:A:57:ASN:C	1:A:61:MET:SD	0.49	2.95	1	1
1:A:166:ASN:ND2	1:A:166:ASN:H	0.49	2.04	2	1
1:A:78:LEU:HD13	1:A:78:LEU:O	0.49	2.07	8	3
1:A:287:LEU:HD13	1:A:287:LEU:C	0.49	2.30	8	1
1:A:128:LEU:HD12	1:A:129:ALA:H	0.49	1.61	1	1
1:A:287:LEU:HD13	1:A:287:LEU:O	0.49	2.07	10	2
1:A:252:LEU:CD1	1:A:255:TRP:HE1	0.49	2.19	2	3
1:A:114:SER:OG	1:A:187:CYS:SG	0.49	2.70	6	3
1:A:61:MET:SD	1:A:61:MET:C	0.49	2.95	9	2
1:A:166:ASN:ND2	1:A:166:ASN:O	0.49	2.45	8	1
1:A:188:TYR:OH	1:A:280:ARG:NH2	0.49	2.46	8	1
1:A:193:ASN:ND2	1:A:200:MET:SD	0.49	2.86	10	1
1:A:59:LEU:N	1:A:59:LEU:HD22	0.49	2.22	1	2
1:A:143:THR:HB	1:A:152:LEU:HD22	0.49	1.84	9	1
1:A:297:HIS:O	1:A:297:HIS:ND1	0.49	2.45	9	1
1:A:74:THR:OG1	1:A:78:LEU:HD23	0.49	2.07	1	1
1:A:181:ASN:C	1:A:182:ASN:ND2	0.49	2.71	4	2
1:A:202:LEU:HD23	1:A:202:LEU:C	0.49	2.32	5	1
1:A:266:THR:OG1	1:A:280:ARG:NH2	0.49	2.45	6	1
1:A:154:LYS:O	1:A:157:CYS:SG	0.49	2.70	7	1
1:A:131:ILE:HD12	1:A:244:ILE:HD13	0.49	1.85	2	1
1:A:218:MET:SD	1:A:222:TYR:OH	0.49	2.70	6	2
1:A:48:LEU:O	1:A:48:LEU:HD23	0.49	2.08	3	1
1:A:238:HIS:ND1	1:A:238:HIS:C	0.49	2.71	4	2
1:A:200:MET:SD	1:A:200:MET:C	0.49	2.95	9	2
1:A:222:TYR:CZ	1:A:226:LEU:HD11	0.49	2.42	5	1
1:A:125:ILE:HD11	1:A:206:PRO:O	0.49	2.08	7	1
1:A:146:LEU:H	1:A:146:LEU:HD23	0.49	1.68	8	1
1:A:226:LEU:O	1:A:230:PHE:CD2	0.49	2.66	8	1
1:A:157:CYS:O	1:A:161:TRP:CD1	0.49	2.66	1	3
1:A:176:GLN:CG	1:A:177:ALA:H	0.49	2.20	1	2
1:A:258:TYR:OH	1:A:286:ALA:CB	0.49	2.61	7	2
1:A:285:ARG:CZ	1:A:285:ARG:O	0.49	2.61	6	2
1:A:117:LYS:NZ	1:A:121:PHE:CE1	0.49	2.74	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:59:LEU:O	1:A:62:LEU:HD23	0.49	2.08	8	1
1:A:155:PHE:CD1	1:A:155:PHE:C	0.48	2.88	10	2
1:A:267:LEU:O	1:A:269:ARG:NH1	0.48	2.46	3	1
1:A:91:THR:HG21	1:A:116:LEU:HD21	0.48	1.84	4	1
1:A:63:VAL:O	1:A:67:SER:N	0.48	2.46	9	3
1:A:279:ARG:C	1:A:279:ARG:CD	0.48	2.86	5	1
1:A:139:ILE:HG22	1:A:140:VAL:HG13	0.48	1.85	6	1
1:A:218:MET:O	1:A:222:TYR:CG	0.48	2.65	6	1
1:A:287:LEU:HD13	1:A:288:ASP:H	0.48	1.64	8	1
1:A:163:LEU:C	1:A:163:LEU:CD1	0.48	2.86	10	5
1:A:285:ARG:C	1:A:285:ARG:CD	0.48	2.86	3	2
1:A:295:PHE:CZ	1:A:299:CYS:SG	0.48	3.06	4	1
1:A:147:THR:CG2	1:A:148:GLN:N	0.48	2.76	8	2
1:A:46:TYR:CE1	1:A:285:ARG:NH2	0.48	2.80	6	1
1:A:189:GLU:CG	1:A:263:LEU:HD22	0.48	2.38	6	1
1:A:281:ASN:ND2	1:A:282:ASN:HD22	0.48	2.06	6	1
1:A:276:SER:O	1:A:280:ARG:CG	0.48	2.61	1	1
1:A:279:ARG:O	1:A:283:ILE:CG2	0.48	2.62	3	1
1:A:249:LEU:HD13	1:A:249:LEU:O	0.48	2.09	7	2
1:A:280:ARG:O	1:A:283:ILE:CG2	0.48	2.60	7	1
1:A:71:ARG:NE	1:A:71:ARG:O	0.48	2.46	1	1
1:A:216:PHE:CG	1:A:217:VAL:N	0.48	2.81	2	2
1:A:236:GLN:CD	1:A:237:LYS:H	0.48	2.16	2	1
1:A:84:ALA:O	1:A:88:PHE:CE1	0.48	2.67	5	2
1:A:148:GLN:NE2	1:A:149:LYS:N	0.48	2.61	6	1
1:A:229:LEU:CB	1:A:238:HIS:CD2	0.48	2.96	7	1
1:A:107:THR:HG22	1:A:178:TYR:CE1	0.48	2.43	9	1
1:A:86:LEU:O	1:A:86:LEU:HD13	0.48	2.09	3	2
1:A:101:ASN:ND2	1:A:101:ASN:N	0.48	2.62	3	1
1:A:36:THR:C	1:A:37:LEU:HD22	0.48	2.33	4	1
1:A:122:TYR:N	1:A:122:TYR:CD1	0.48	2.78	7	2
1:A:76:VAL:CG1	1:A:77:TYR:N	0.48	2.77	6	3
1:A:255:TRP:NE1	1:A:259:ASN:HD21	0.48	2.07	6	1
1:A:101:ASN:CG	1:A:103:TRP:H	0.48	2.17	9	1
1:A:29:PRO:C	1:A:31:MET:H	0.48	2.17	10	1
1:A:126:LEU:O	1:A:129:ALA:N	0.48	2.46	8	4
1:A:75:ASP:OD2	1:A:150:ARG:NH1	0.48	2.46	9	1
1:A:273:ILE:C	1:A:275:GLU:N	0.48	2.71	10	9
1:A:79:LEU:C	1:A:79:LEU:CD1	0.48	2.86	4	5
1:A:295:PHE:C	1:A:297:HIS:N	0.48	2.71	6	1
1:A:75:ASP:OD2	1:A:150:ARG:NE	0.48	2.47	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:229:LEU:N	1:A:229:LEU:HD22	0.48	2.23	7	1
1:A:237:LYS:N	1:A:237:LYS:CD	0.48	2.77	7	1
1:A:50:PHE:CD1	1:A:50:PHE:C	0.48	2.91	9	1
1:A:35:GLU:OE2	1:A:103:TRP:CH2	0.48	2.67	5	1
1:A:272:VAL:C	1:A:274:GLN:HE21	0.48	2.17	6	1
1:A:239:ARG:C	1:A:239:ARG:CD	0.48	2.86	9	1
1:A:271:GLN:O	1:A:272:VAL:C	0.48	2.57	9	9
1:A:101:ASN:OD1	1:A:102:GLY:N	0.48	2.47	4	1
1:A:116:LEU:C	1:A:116:LEU:CD1	0.48	2.86	6	3
1:A:127:LEU:C	1:A:127:LEU:CD1	0.48	2.85	5	1
1:A:179:HIS:O	1:A:179:HIS:CD2	0.48	2.67	8	1
1:A:215:LEU:O	1:A:219:LEU:CD1	0.48	2.62	9	1
1:A:40:TYR:OH	1:A:186:VAL:HG21	0.48	2.09	10	1
1:A:239:ARG:O	1:A:240:ALA:C	0.48	2.57	7	8
1:A:63:VAL:CG1	1:A:64:ILE:N	0.48	2.77	2	2
1:A:72:SER:OG	1:A:305:TYR:CZ	0.48	2.64	2	1
1:A:126:LEU:O	1:A:129:ALA:CB	0.47	2.62	3	2
1:A:29:PRO:O	1:A:32:LEU:HD13	0.47	2.10	4	2
1:A:77:TYR:CZ	1:A:127:LEU:HD13	0.47	2.44	4	1
1:A:109:LEU:CD2	1:A:110:CYS:SG	0.47	3.02	8	2
1:A:269:ARG:HH12	1:A:279:ARG:NH2	0.47	2.07	4	1
1:A:123:SER:O	1:A:127:LEU:CB	0.47	2.62	7	3
1:A:236:GLN:C	1:A:238:HIS:H	0.47	2.16	6	1
1:A:35:GLU:O	1:A:37:LEU:CD2	0.47	2.62	8	1
1:A:88:PHE:CZ	1:A:92:LEU:HD21	0.47	2.44	10	1
1:A:83:LEU:O	1:A:87:LEU:N	0.47	2.42	10	3
1:A:115:LEU:C	1:A:115:LEU:CD1	0.47	2.87	2	6
1:A:68:ARG:H	1:A:68:ARG:NE	0.47	2.07	8	2
1:A:191:LEU:HD11	1:A:280:ARG:NE	0.47	2.24	5	1
1:A:143:THR:HG22	1:A:144:ARG:HE	0.47	1.69	7	1
1:A:71:ARG:CZ	1:A:71:ARG:O	0.47	2.62	9	1
1:A:107:THR:HG22	1:A:107:THR:O	0.47	2.09	9	1
1:A:282:ASN:ND2	1:A:282:ASN:N	0.47	2.57	4	1
1:A:257:PRO:O	1:A:261:VAL:CG2	0.47	2.61	9	1
1:A:192:GLY:O	1:A:199:ARG:CG	0.47	2.63	2	2
1:A:120:ASN:ND2	1:A:120:ASN:O	0.47	2.46	2	1
1:A:79:LEU:HD23	1:A:150:ARG:CZ	0.47	2.39	3	2
1:A:69:VAL:O	1:A:69:VAL:CG2	0.47	2.63	6	5
1:A:61:MET:HE3	1:A:82:ALA:HB2	0.47	1.83	7	1
1:A:266:THR:OG1	1:A:279:ARG:CZ	0.47	2.62	7	1
1:A:219:LEU:C	1:A:219:LEU:CD1	0.47	2.87	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:ILE:CG2	1:A:105:PHE:N	0.47	2.78	10	1
1:A:131:ILE:O	1:A:135:ARG:CG	0.47	2.63	10	1
1:A:30:CYS:C	1:A:32:LEU:N	0.47	2.72	5	4
1:A:152:LEU:C	1:A:152:LEU:CD1	0.47	2.87	10	3
1:A:73:VAL:HG12	1:A:240:ALA:HB1	0.47	1.85	8	1
1:A:105:PHE:O	1:A:105:PHE:CG	0.47	2.66	1	1
1:A:246:ALA:O	1:A:250:ILE:N	0.47	2.44	8	2
1:A:95:TRP:CD1	1:A:95:TRP:O	0.47	2.68	5	2
1:A:116:LEU:HD12	1:A:116:LEU:O	0.47	2.09	5	2
1:A:175:ARG:NH2	1:A:201:VAL:HG23	0.47	2.25	5	1
1:A:264:ALA:O	1:A:268:MET:CG	0.47	2.63	5	1
1:A:222:TYR:OH	1:A:241:MET:CE	0.47	2.62	6	1
1:A:37:LEU:CB	1:A:182:ASN:HD21	0.47	2.22	8	1
1:A:38:ASN:CG	1:A:39:LYS:N	0.47	2.73	8	1
1:A:244:ILE:HD12	1:A:245:PHE:N	0.47	2.24	10	1
1:A:125:ILE:HD12	1:A:125:ILE:N	0.47	2.24	1	1
1:A:55:LEU:C	1:A:55:LEU:CD1	0.47	2.87	10	4
1:A:92:LEU:C	1:A:92:LEU:CD1	0.47	2.87	3	3
1:A:287:LEU:C	1:A:287:LEU:CD1	0.47	2.87	1	4
1:A:77:TYR:CD2	1:A:297:HIS:CD2	0.47	3.03	2	1
1:A:77:TYR:O	1:A:81:LEU:CB	0.47	2.63	2	1
1:A:79:LEU:HD22	1:A:154:LYS:HD3	0.47	1.87	2	1
1:A:274:GLN:N	1:A:274:GLN:OE1	0.47	2.48	4	1
1:A:215:LEU:HD21	1:A:249:LEU:HG	0.47	1.87	6	1
1:A:281:ASN:C	1:A:283:ILE:N	0.47	2.72	7	1
1:A:73:VAL:O	1:A:76:VAL:HG12	0.47	2.10	9	1
1:A:194:ASP:CG	1:A:199:ARG:HE	0.47	2.17	9	1
1:A:274:GLN:NE2	1:A:275:GLU:CD	0.47	2.72	10	1
1:A:299:CYS:SG	1:A:300:LEU:HD12	0.47	2.50	7	2
1:A:110:CYS:SG	1:A:177:ALA:O	0.47	2.73	2	1
1:A:276:SER:OG	1:A:280:ARG:CZ	0.47	2.63	4	1
1:A:228:THR:HG23	1:A:229:LEU:H	0.47	1.69	6	2
1:A:225:THR:O	1:A:229:LEU:CD1	0.47	2.63	8	1
1:A:274:GLN:HE21	1:A:274:GLN:C	0.47	2.18	10	1
1:A:135:ARG:CZ	1:A:237:LYS:O	0.46	2.63	1	2
1:A:242:ARG:CZ	1:A:245:PHE:CE1	0.46	2.98	2	1
1:A:101:ASN:ND2	1:A:102:GLY:N	0.46	2.62	3	1
1:A:79:LEU:HD22	1:A:80:ASN:N	0.46	2.24	5	1
1:A:147:THR:CG2	1:A:151:HIS:NE2	0.46	2.78	7	1
1:A:50:PHE:CE2	1:A:54:LEU:HD12	0.46	2.46	8	1
1:A:126:LEU:CD2	1:A:160:CYS:SG	0.46	3.03	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:PRO:O	1:A:32:LEU:CD1	0.46	2.63	9	1
1:A:177:ALA:HB3	1:A:179:HIS:ND1	0.46	2.25	9	1
1:A:203:ARG:O	1:A:203:ARG:NE	0.46	2.48	9	1
1:A:182:ASN:ND2	1:A:183:SER:H	0.46	2.07	1	1
1:A:238:HIS:O	1:A:238:HIS:ND1	0.46	2.48	3	1
1:A:68:ARG:CG	1:A:68:ARG:HH11	0.46	2.23	4	1
1:A:252:LEU:HD23	1:A:255:TRP:CD1	0.46	2.44	6	1
1:A:244:ILE:O	1:A:247:VAL:HG22	0.46	2.10	7	1
1:A:310:GLN:N	1:A:310:GLN:OE1	0.46	2.47	1	1
1:A:37:LEU:HD23	1:A:182:ASN:ND2	0.46	2.24	6	1
1:A:51:LEU:HD23	1:A:51:LEU:C	0.46	2.35	7	2
1:A:171:PHE:CZ	1:A:178:TYR:CZ	0.46	3.04	2	2
1:A:219:LEU:N	1:A:219:LEU:HD22	0.46	2.26	2	1
1:A:66:TYR:O	1:A:68:ARG:CZ	0.46	2.64	6	1
1:A:239:ARG:NH2	1:A:305:TYR:CE1	0.46	2.84	8	1
1:A:152:LEU:HD13	1:A:152:LEU:O	0.46	2.11	2	1
1:A:130:CYS:SG	1:A:153:VAL:CG2	0.46	3.03	5	1
1:A:202:LEU:C	1:A:203:ARG:NH1	0.46	2.74	6	1
1:A:229:LEU:O	1:A:229:LEU:CD2	0.46	2.59	8	1
1:A:44:ILE:HD13	1:A:99:LYS:NZ	0.46	2.26	4	1
1:A:181:ASN:O	1:A:182:ASN:CG	0.46	2.59	9	2
1:A:34:THR:O	1:A:34:THR:CG2	0.46	2.62	5	1
1:A:147:THR:HG22	1:A:151:HIS:NE2	0.46	2.26	7	1
1:A:211:PHE:CZ	1:A:256:LEU:HD23	0.46	2.46	9	1
1:A:296:LEU:C	1:A:298:SER:H	0.46	2.19	3	3
1:A:219:LEU:N	1:A:219:LEU:CD2	0.46	2.78	2	1
1:A:54:LEU:HD13	1:A:54:LEU:C	0.46	2.35	3	1
1:A:169:LEU:HD12	1:A:173:LEU:HD13	0.46	1.88	4	1
1:A:189:GLU:OE2	1:A:207:HIS:CG	0.46	2.69	5	1
1:A:171:PHE:CD2	1:A:172:PHE:N	0.46	2.84	10	2
1:A:219:LEU:N	1:A:219:LEU:CD1	0.46	2.79	10	2
1:A:66:TYR:CG	1:A:66:TYR:O	0.46	2.69	7	1
1:A:40:TYR:CE2	1:A:183:SER:O	0.46	2.69	8	1
1:A:71:ARG:CZ	1:A:236:GLN:OE1	0.46	2.64	9	1
1:A:126:LEU:CD1	1:A:160:CYS:SG	0.46	2.98	9	1
1:A:182:ASN:N	1:A:182:ASN:HD22	0.46	2.07	2	1
1:A:267:LEU:C	1:A:267:LEU:CD1	0.46	2.87	3	1
1:A:141:HIS:O	1:A:141:HIS:CG	0.46	2.68	10	1
1:A:57:ASN:O	1:A:61:MET:CB	0.46	2.64	7	2
1:A:202:LEU:HD23	1:A:206:PRO:HG2	0.46	1.88	4	1
1:A:218:MET:SD	1:A:218:MET:N	0.46	2.89	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:121:PHE:CE2	1:A:207:HIS:CE1	0.46	3.03	6	1
1:A:129:ALA:O	1:A:133:VAL:CG2	0.46	2.62	6	1
1:A:176:GLN:H	1:A:199:ARG:NE	0.46	2.09	8	1
1:A:257:PRO:O	1:A:261:VAL:CG1	0.46	2.64	1	1
1:A:41:VAL:O	1:A:42:VAL:C	0.46	2.58	3	2
1:A:101:ASN:HD22	1:A:102:GLY:N	0.46	2.09	3	1
1:A:143:THR:CG2	1:A:144:ARG:N	0.46	2.74	5	3
1:A:91:THR:O	1:A:91:THR:HG22	0.46	2.11	9	1
1:A:176:GLN:N	1:A:199:ARG:HH11	0.46	2.07	9	1
1:A:86:LEU:O	1:A:87:LEU:C	0.45	2.59	5	9
1:A:146:LEU:O	1:A:146:LEU:CD2	0.45	2.60	6	2
1:A:36:THR:O	1:A:37:LEU:C	0.45	2.60	8	8
1:A:274:GLN:CD	1:A:274:GLN:H	0.45	2.17	2	1
1:A:144:ARG:C	1:A:145:THR:CG2	0.45	2.89	8	2
1:A:79:LEU:HD13	1:A:79:LEU:O	0.45	2.09	7	3
1:A:286:ALA:O	1:A:289:ALA:CB	0.45	2.64	6	1
1:A:221:CYS:O	1:A:224:PHE:CB	0.45	2.64	8	1
1:A:101:ASN:HD21	1:A:103:TRP:C	0.45	2.20	9	1
1:A:191:LEU:HD23	1:A:280:ARG:HH21	0.45	1.70	9	1
1:A:69:VAL:HG13	1:A:69:VAL:O	0.45	2.11	3	2
1:A:224:PHE:O	1:A:227:ARG:CZ	0.45	2.65	2	1
1:A:68:ARG:CG	1:A:68:ARG:NH1	0.45	2.78	4	1
1:A:293:LEU:HD13	1:A:293:LEU:C	0.45	2.36	5	1
1:A:76:VAL:CA	1:A:150:ARG:HH21	0.45	2.24	7	1
1:A:297:HIS:ND1	1:A:297:HIS:N	0.45	2.64	8	1
1:A:71:ARG:NH2	1:A:236:GLN:OE1	0.45	2.49	9	1
1:A:43:ILE:CG1	1:A:281:ASN:OD1	0.45	2.64	10	1
1:A:36:THR:CG2	1:A:37:LEU:N	0.45	2.79	1	3
1:A:136:TYR:C	1:A:138:ALA:N	0.45	2.74	7	4
1:A:137:LEU:HD22	1:A:137:LEU:N	0.45	2.27	1	1
1:A:239:ARG:NH1	1:A:304:ILE:CG2	0.45	2.79	1	1
1:A:128:LEU:C	1:A:128:LEU:CD1	0.45	2.87	2	1
1:A:170:PRO:O	1:A:174:PHE:N	0.45	2.46	9	4
1:A:244:ILE:CG2	1:A:245:PHE:N	0.45	2.79	3	1
1:A:274:GLN:N	1:A:274:GLN:HE21	0.45	2.08	3	2
1:A:149:LYS:HZ2	1:A:149:LYS:HB2	0.45	1.70	5	1
1:A:186:VAL:HG21	1:A:281:ASN:O	0.45	2.11	6	1
1:A:203:ARG:HE	1:A:203:ARG:C	0.45	2.18	7	1
1:A:218:MET:SD	1:A:245:PHE:CG	0.45	3.09	8	1
1:A:177:ALA:HB3	1:A:179:HIS:HD1	0.45	1.71	9	1
1:A:80:ASN:OD1	1:A:81:LEU:N	0.45	2.50	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:ALA:O	1:A:86:LEU:CB	0.45	2.64	10	1
1:A:160:CYS:O	1:A:164:SER:OG	0.45	2.35	1	1
1:A:137:LEU:HD23	1:A:137:LEU:O	0.45	2.10	3	1
1:A:227:ARG:HH11	1:A:228:THR:HG22	0.45	1.71	5	1
1:A:34:THR:O	1:A:37:LEU:CD1	0.45	2.64	4	1
1:A:240:ALA:O	1:A:244:ILE:HD13	0.45	2.11	4	1
1:A:92:LEU:O	1:A:95:TRP:N	0.45	2.47	10	2
1:A:31:MET:HE3	1:A:103:TRP:CD2	0.45	2.47	6	1
1:A:40:TYR:CG	1:A:182:ASN:CG	0.45	2.94	6	1
1:A:273:ILE:H	1:A:274:GLN:HE21	0.45	1.54	7	1
1:A:124:GLY:HA2	1:A:127:LEU:HD12	0.45	1.86	1	1
1:A:144:ARG:C	1:A:145:THR:OG1	0.45	2.60	5	7
1:A:77:TYR:CE2	1:A:81:LEU:HD23	0.45	2.45	3	1
1:A:269:ARG:C	1:A:271:GLN:H	0.45	2.20	5	2
1:A:40:TYR:CD1	1:A:281:ASN:OD1	0.45	2.70	4	1
1:A:166:ASN:ND2	1:A:166:ASN:C	0.45	2.72	9	2
1:A:127:LEU:O	1:A:130:CYS:SG	0.45	2.68	1	1
1:A:204:ILE:HD12	1:A:208:THR:OG1	0.45	2.12	2	1
1:A:72:SER:OG	1:A:73:VAL:N	0.45	2.49	10	2
1:A:188:TYR:OH	1:A:280:ARG:NH1	0.45	2.50	7	1
1:A:256:LEU:HD23	1:A:260:LEU:HD13	0.45	1.87	7	1
1:A:39:LYS:NZ	1:A:272:VAL:CG1	0.45	2.80	1	1
1:A:190:VAL:CG2	1:A:192:GLY:O	0.45	2.64	3	1
1:A:50:PHE:CZ	1:A:292:ILE:HG22	0.45	2.47	8	1
1:A:151:HIS:O	1:A:155:PHE:CD2	0.45	2.70	9	1
1:A:189:GLU:N	1:A:189:GLU:CD	0.45	2.75	9	1
1:A:148:GLN:N	1:A:148:GLN:OE1	0.45	2.50	10	1
1:A:36:THR:HG23	1:A:37:LEU:H	0.45	1.70	1	2
1:A:38:ASN:O	1:A:39:LYS:C	0.45	2.59	6	7
1:A:175:ARG:O	1:A:176:GLN:C	0.45	2.60	9	7
1:A:68:ARG:C	1:A:70:GLY:H	0.45	2.19	4	4
1:A:115:LEU:C	1:A:115:LEU:CD2	0.45	2.87	6	2
1:A:277:CYS:O	1:A:281:ASN:OD1	0.45	2.35	8	1
1:A:43:ILE:O	1:A:44:ILE:C	0.45	2.58	9	9
1:A:125:ILE:HD11	1:A:210:GLY:CA	0.45	2.42	1	1
1:A:194:ASP:O	1:A:198:TRP:N	0.45	2.48	2	3
1:A:71:ARG:NH1	1:A:236:GLN:OE1	0.45	2.50	6	2
1:A:236:GLN:C	1:A:238:HIS:N	0.45	2.75	6	1
1:A:135:ARG:O	1:A:138:ALA:CB	0.45	2.62	7	2
1:A:266:THR:O	1:A:271:GLN:NE2	0.45	2.49	8	1
1:A:111:LYS:CD	1:A:111:LYS:O	0.45	2.65	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:118:GLU:OE2	1:A:122:TYR:CG	0.45	2.69	10	1
1:A:207:HIS:NE2	1:A:260:LEU:CD1	0.45	2.80	10	1
1:A:231:LYS:O	1:A:232:ALA:C	0.44	2.60	4	6
1:A:233:HIS:ND1	1:A:233:HIS:C	0.44	2.75	8	4
1:A:84:ALA:O	1:A:88:PHE:CE2	0.44	2.70	5	1
1:A:68:ARG:HH11	1:A:68:ARG:N	0.44	2.10	10	1
1:A:166:ASN:HD22	1:A:169:LEU:HD12	0.44	1.72	1	1
1:A:35:GLU:CD	1:A:36:THR:H	0.44	2.20	2	1
1:A:98:SER:OG	1:A:104:ILE:HG22	0.44	2.12	3	1
1:A:236:GLN:HE22	1:A:237:LYS:NZ	0.44	2.08	3	1
1:A:127:LEU:O	1:A:131:ILE:HD13	0.44	2.11	4	1
1:A:236:GLN:OE1	1:A:237:LYS:N	0.44	2.48	5	1
1:A:221:CYS:O	1:A:225:THR:HG23	0.44	2.12	6	2
1:A:255:TRP:O	1:A:259:ASN:CG	0.44	2.60	6	1
1:A:40:TYR:CE1	1:A:281:ASN:ND2	0.44	2.83	7	1
1:A:76:VAL:N	1:A:150:ARG:NH2	0.44	2.63	7	1
1:A:174:PHE:N	1:A:174:PHE:CD1	0.44	2.80	7	1
1:A:182:ASN:HD22	1:A:182:ASN:C	0.44	2.20	7	1
1:A:74:THR:OG1	1:A:297:HIS:O	0.44	2.35	8	1
1:A:295:PHE:O	1:A:299:CYS:SG	0.44	2.75	9	1
1:A:71:ARG:CD	1:A:71:ARG:N	0.44	2.80	1	1
1:A:199:ARG:O	1:A:200:MET:C	0.44	2.61	8	5
1:A:269:ARG:C	1:A:270:THR:CG2	0.44	2.90	3	3
1:A:37:LEU:C	1:A:278:GLU:OE2	0.44	2.60	4	1
1:A:40:TYR:CE2	1:A:44:ILE:CD1	0.44	2.98	4	1
1:A:68:ARG:CD	1:A:68:ARG:N	0.44	2.80	8	2
1:A:255:TRP:O	1:A:259:ASN:OD1	0.44	2.36	6	1
1:A:94:ILE:N	1:A:94:ILE:CD1	0.44	2.80	7	1
1:A:179:HIS:ND1	1:A:179:HIS:N	0.44	2.65	7	1
1:A:296:LEU:C	1:A:298:SER:N	0.44	2.75	10	7
1:A:271:GLN:O	1:A:271:GLN:OE1	0.44	2.34	8	2
1:A:132:SER:OG	1:A:135:ARG:CZ	0.44	2.64	6	1
1:A:214:PRO:O	1:A:215:LEU:C	0.44	2.60	7	1
1:A:121:PHE:CG	1:A:122:TYR:N	0.44	2.85	8	1
1:A:207:HIS:CE1	1:A:208:THR:OG1	0.44	2.71	8	1
1:A:29:PRO:CB	1:A:31:MET:SD	0.44	3.06	9	1
1:A:31:MET:SD	1:A:103:TRP:CD1	0.44	3.11	9	1
1:A:49:VAL:O	1:A:52:LEU:CD2	0.44	2.66	8	2
1:A:285:ARG:O	1:A:285:ARG:NH2	0.44	2.50	2	1
1:A:78:LEU:C	1:A:78:LEU:CD1	0.44	2.90	4	3
1:A:95:TRP:CD1	1:A:184:SER:OG	0.44	2.64	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:97:ALA:O	1:A:101:ASN:OD1	0.44	2.36	4	2
1:A:290:THR:O	1:A:293:LEU:HD12	0.44	2.13	5	1
1:A:131:ILE:HD12	1:A:132:SER:N	0.44	2.27	6	1
1:A:258:TYR:CZ	1:A:262:LEU:HD11	0.44	2.47	6	1
1:A:189:GLU:OE2	1:A:267:LEU:HD11	0.44	2.12	7	1
1:A:282:ASN:N	1:A:282:ASN:HD22	0.44	2.09	7	1
1:A:131:ILE:CG2	1:A:135:ARG:NH1	0.44	2.80	9	1
1:A:223:GLY:HA2	1:A:226:LEU:HD23	0.44	1.88	2	1
1:A:131:ILE:HG22	1:A:135:ARG:NH1	0.44	2.28	4	1
1:A:182:ASN:CG	1:A:281:ASN:HD22	0.44	2.21	4	1
1:A:86:LEU:O	1:A:90:LEU:CB	0.44	2.66	9	2
1:A:50:PHE:CD1	1:A:292:ILE:CG2	0.44	3.01	9	1
1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CD2	0.44	2.69	10	1
1:A:121:PHE:O	1:A:211:PHE:CE2	0.44	2.71	10	1
1:A:63:VAL:HG13	1:A:64:ILE:H	0.44	1.69	2	2
1:A:153:VAL:O	1:A:157:CYS:SG	0.44	2.71	2	1
1:A:114:SER:O	1:A:118:GLU:OE1	0.44	2.36	5	1
1:A:171:PHE:CG	1:A:172:PHE:N	0.44	2.78	10	2
1:A:134:ASP:O	1:A:134:ASP:OD1	0.44	2.36	7	1
1:A:61:MET:SD	1:A:82:ALA:HB2	0.44	2.53	9	1
1:A:57:ASN:O	1:A:61:MET:CG	0.44	2.66	1	1
1:A:128:LEU:O	1:A:129:ALA:C	0.44	2.60	8	5
1:A:308:ILE:O	1:A:309:GLY:O	0.44	2.36	3	1
1:A:84:ALA:O	1:A:88:PHE:CZ	0.44	2.70	5	1
1:A:109:LEU:HD21	1:A:178:TYR:O	0.44	2.13	7	1
1:A:130:CYS:O	1:A:134:ASP:OD1	0.44	2.35	8	1
1:A:274:GLN:CD	1:A:274:GLN:O	0.44	2.61	8	1
1:A:297:HIS:N	1:A:297:HIS:HD1	0.44	2.11	8	1
1:A:64:ILE:HD11	1:A:297:HIS:NE2	0.44	2.28	10	1
1:A:274:GLN:HE22	1:A:275:GLU:CD	0.44	2.21	10	1
1:A:292:ILE:O	1:A:293:LEU:C	0.43	2.60	5	3
1:A:57:ASN:N	1:A:57:ASN:OD1	0.43	2.49	4	1
1:A:76:VAL:O	1:A:80:ASN:OD1	0.43	2.36	5	1
1:A:50:PHE:CE1	1:A:292:ILE:HD13	0.43	2.48	6	1
1:A:241:MET:HA	1:A:244:ILE:HD12	0.43	1.90	7	1
1:A:39:LYS:HZ1	1:A:282:ASN:CG	0.43	2.21	9	1
1:A:275:GLU:OE2	1:A:278:GLU:CB	0.43	2.66	9	1
1:A:35:GLU:O	1:A:37:LEU:HD13	0.43	2.13	10	1
1:A:152:LEU:O	1:A:156:VAL:N	0.43	2.46	8	2
1:A:279:ARG:CG	1:A:279:ARG:HH11	0.43	2.26	4	1
1:A:77:TYR:C	1:A:80:ASN:OD1	0.43	2.61	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:176:GLN:H	1:A:199:ARG:CZ	0.43	2.26	8	1
1:A:226:LEU:CD1	1:A:230:PHE:O	0.43	2.66	10	1
1:A:174:PHE:O	1:A:174:PHE:CG	0.43	2.72	5	2
1:A:182:ASN:CG	1:A:183:SER:N	0.43	2.76	4	1
1:A:212:ILE:CG2	1:A:213:VAL:N	0.43	2.81	5	1
1:A:256:LEU:HD13	1:A:256:LEU:O	0.43	2.12	5	1
1:A:114:SER:O	1:A:118:GLU:OE2	0.43	2.37	7	1
1:A:163:LEU:O	1:A:166:ASN:OD1	0.43	2.37	7	1
1:A:112:VAL:HG12	1:A:113:VAL:N	0.43	2.27	10	1
1:A:283:ILE:C	1:A:283:ILE:CD1	0.43	2.87	10	1
1:A:142:ALA:O	1:A:143:THR:CG2	0.43	2.65	1	1
1:A:265:ASP:OD2	1:A:271:GLN:CD	0.43	2.62	10	3
1:A:230:PHE:CG	1:A:231:LYS:N	0.43	2.87	7	2
1:A:40:TYR:OH	1:A:44:ILE:HD11	0.43	2.13	5	1
1:A:188:TYR:CD1	1:A:188:TYR:O	0.43	2.71	6	1
1:A:189:GLU:HG2	1:A:263:LEU:HD22	0.43	1.90	6	1
1:A:72:SER:OG	1:A:74:THR:OG1	0.43	2.37	7	1
1:A:52:LEU:HD23	1:A:52:LEU:O	0.43	2.13	2	2
1:A:204:ILE:CG2	1:A:205:LEU:N	0.43	2.81	7	1
1:A:217:VAL:O	1:A:221:CYS:SG	0.43	2.76	8	1
1:A:182:ASN:CG	1:A:281:ASN:CG	0.43	2.87	9	1
1:A:293:LEU:C	1:A:293:LEU:HD12	0.43	2.39	9	1
1:A:130:CYS:O	1:A:134:ASP:OD2	0.43	2.36	10	1
1:A:123:SER:O	1:A:124:GLY:C	0.43	2.60	9	2
1:A:42:VAL:CG1	1:A:43:ILE:N	0.43	2.81	3	1
1:A:265:ASP:OD2	1:A:271:GLN:OE1	0.43	2.37	7	2
1:A:48:LEU:C	1:A:48:LEU:CD1	0.43	2.87	5	1
1:A:190:VAL:H	1:A:203:ARG:HH21	0.43	1.55	6	1
1:A:279:ARG:CZ	1:A:280:ARG:NH2	0.43	2.81	6	1
1:A:136:TYR:O	1:A:140:VAL:O	0.43	2.36	7	2
1:A:61:MET:SD	1:A:81:LEU:HD12	0.43	2.53	8	1
1:A:130:CYS:O	1:A:134:ASP:CG	0.43	2.62	8	1
1:A:182:ASN:CB	1:A:281:ASN:ND2	0.43	2.82	8	1
1:A:219:LEU:HD13	1:A:219:LEU:O	0.43	2.13	8	1
1:A:288:ASP:O	1:A:292:ILE:CG1	0.43	2.67	2	3
1:A:230:PHE:CD1	1:A:230:PHE:N	0.43	2.83	3	1
1:A:115:LEU:HD11	1:A:165:MET:HE1	0.43	1.90	5	1
1:A:131:ILE:C	1:A:131:ILE:CD1	0.43	2.88	6	1
1:A:274:GLN:O	1:A:275:GLU:CD	0.43	2.62	7	1
1:A:120:ASN:OD1	1:A:291:GLU:OE1	0.43	2.36	8	1
1:A:190:VAL:HG12	1:A:199:ARG:NH2	0.43	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:296:LEU:HD22	1:A:300:LEU:HD12	0.43	1.90	8	1
1:A:203:ARG:CD	1:A:203:ARG:C	0.43	2.92	9	1
1:A:101:ASN:ND2	1:A:101:ASN:H	0.43	2.09	10	1
1:A:121:PHE:O	1:A:211:PHE:CZ	0.43	2.72	10	1
1:A:122:TYR:CD1	1:A:122:TYR:N	0.43	2.85	1	1
1:A:271:GLN:CD	1:A:271:GLN:N	0.43	2.72	2	2
1:A:182:ASN:ND2	1:A:277:CYS:O	0.43	2.52	5	1
1:A:274:GLN:O	1:A:274:GLN:CD	0.43	2.61	5	1
1:A:79:LEU:HD12	1:A:154:LYS:HZ2	0.43	1.72	6	1
1:A:57:ASN:CG	1:A:291:GLU:CD	0.43	2.86	7	1
1:A:117:LYS:O	1:A:120:ASN:CG	0.43	2.61	10	1
1:A:285:ARG:C	1:A:285:ARG:HE	0.43	2.20	10	1
1:A:164:SER:O	1:A:168:SER:OG	0.43	2.37	1	1
1:A:195:THR:O	1:A:196:ALA:C	0.43	2.62	7	10
1:A:247:VAL:HG12	1:A:300:LEU:CD2	0.43	2.43	1	1
1:A:288:ASP:OD1	1:A:288:ASP:C	0.43	2.62	1	1
1:A:188:TYR:CD2	1:A:189:GLU:O	0.43	2.72	2	1
1:A:37:LEU:O	1:A:40:TYR:N	0.43	2.52	3	1
1:A:296:LEU:N	1:A:296:LEU:CD1	0.43	2.82	4	1
1:A:301:ASN:CG	1:A:305:TYR:OH	0.43	2.62	4	1
1:A:79:LEU:HD11	1:A:154:LYS:HE2	0.43	1.91	5	1
1:A:113:VAL:HG11	1:A:187:CYS:N	0.43	2.28	5	1
1:A:228:THR:CG2	1:A:229:LEU:H	0.43	2.27	6	1
1:A:251:PHE:CZ	1:A:293:LEU:HD22	0.43	2.49	6	1
1:A:190:VAL:CG1	1:A:199:ARG:NH2	0.43	2.81	8	1
1:A:256:LEU:HD21	1:A:260:LEU:HD13	0.43	1.90	9	1
1:A:285:ARG:O	1:A:288:ASP:CG	0.43	2.62	9	2
1:A:43:ILE:HD13	1:A:43:ILE:N	0.43	2.29	2	1
1:A:50:PHE:O	1:A:51:LEU:C	0.43	2.60	9	2
1:A:254:CYS:SG	1:A:255:TRP:N	0.43	2.91	3	2
1:A:109:LEU:HD22	1:A:110:CYS:SG	0.43	2.54	8	2
1:A:176:GLN:OE1	1:A:177:ALA:O	0.43	2.37	8	2
1:A:57:ASN:HD22	1:A:58:SER:N	0.43	2.11	8	1
1:A:139:ILE:HG22	1:A:140:VAL:N	0.43	2.29	8	1
1:A:33:GLU:CD	1:A:33:GLU:H	0.43	2.22	9	1
1:A:98:SER:OG	1:A:183:SER:C	0.42	2.62	3	3
1:A:301:ASN:OD1	1:A:301:ASN:C	0.42	2.61	9	5
1:A:126:LEU:O	1:A:127:LEU:C	0.42	2.61	7	4
1:A:129:ALA:O	1:A:133:VAL:N	0.42	2.46	2	1
1:A:261:VAL:O	1:A:265:ASP:CB	0.42	2.67	9	7
1:A:163:LEU:HD13	1:A:163:LEU:O	0.42	2.13	3	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:77:TYR:O	1:A:80:ASN:OD1	0.42	2.37	5	1
1:A:163:LEU:O	1:A:166:ASN:CG	0.42	2.62	7	1
1:A:269:ARG:O	1:A:270:THR:OG1	0.42	2.33	10	2
1:A:62:LEU:HD12	1:A:63:VAL:N	0.42	2.29	9	1
1:A:92:LEU:O	1:A:93:PRO:C	0.42	2.62	10	1
1:A:297:HIS:CD2	1:A:297:HIS:C	0.42	2.97	10	1
1:A:97:ALA:O	1:A:101:ASN:CG	0.42	2.62	10	3
1:A:275:GLU:CD	1:A:278:GLU:OE2	0.42	2.62	1	1
1:A:265:ASP:OD1	1:A:271:GLN:CD	0.42	2.62	3	1
1:A:181:ASN:OD1	1:A:186:VAL:O	0.42	2.37	6	1
1:A:243:VAL:CG1	1:A:244:ILE:N	0.42	2.82	8	1
1:A:83:LEU:C	1:A:83:LEU:CD1	0.42	2.87	9	1
1:A:272:VAL:O	1:A:279:ARG:CZ	0.42	2.68	10	1
1:A:32:LEU:C	1:A:33:GLU:OE1	0.42	2.62	2	1
1:A:72:SER:O	1:A:75:ASP:OD2	0.42	2.37	3	1
1:A:192:GLY:C	1:A:194:ASP:OD1	0.42	2.62	6	3
1:A:279:ARG:CG	1:A:279:ARG:NH1	0.42	2.81	4	1
1:A:34:THR:O	1:A:35:GLU:C	0.42	2.62	5	1
1:A:79:LEU:HD12	1:A:154:LYS:NZ	0.42	2.29	6	1
1:A:189:GLU:OE2	1:A:189:GLU:C	0.42	2.63	6	1
1:A:239:ARG:HH21	1:A:243:VAL:CG1	0.42	2.28	6	1
1:A:218:MET:HE1	1:A:245:PHE:CG	0.42	2.49	8	1
1:A:268:MET:O	1:A:271:GLN:OE1	0.42	2.37	9	1
1:A:269:ARG:O	1:A:271:GLN:OE1	0.42	2.37	9	1
1:A:134:ASP:OD1	1:A:134:ASP:C	0.42	2.62	10	1
1:A:166:ASN:HA	1:A:169:LEU:HD12	0.42	1.90	1	1
1:A:208:THR:O	1:A:212:ILE:N	0.42	2.52	2	1
1:A:46:TYR:O	1:A:47:ALA:C	0.42	2.62	6	6
1:A:30:CYS:O	1:A:33:GLU:OE1	0.42	2.37	5	1
1:A:248:VAL:HG12	1:A:252:LEU:HD11	0.42	1.90	6	1
1:A:50:PHE:CD2	1:A:285:ARG:CZ	0.42	3.02	7	1
1:A:278:GLU:O	1:A:279:ARG:C	0.42	2.62	9	2
1:A:118:GLU:C	1:A:118:GLU:OE1	0.42	2.62	10	1
1:A:114:SER:O	1:A:115:LEU:C	0.42	2.61	6	2
1:A:171:PHE:O	1:A:172:PHE:C	0.42	2.62	6	4
1:A:103:TRP:CD2	1:A:104:ILE:O	0.42	2.73	4	1
1:A:194:ASP:OD1	1:A:194:ASP:N	0.42	2.52	4	1
1:A:244:ILE:HG22	1:A:245:PHE:N	0.42	2.29	4	2
1:A:88:PHE:O	1:A:91:THR:N	0.42	2.52	6	2
1:A:188:TYR:CZ	1:A:280:ARG:NH1	0.42	2.87	7	1
1:A:218:MET:HE1	1:A:245:PHE:CB	0.42	2.44	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:151:HIS:O	1:A:155:PHE:CG	0.42	2.72	9	1
1:A:33:GLU:N	1:A:33:GLU:OE1	0.42	2.53	2	1
1:A:110:CYS:N	1:A:187:CYS:SG	0.42	2.92	2	1
1:A:143:THR:O	1:A:144:ARG:NH2	0.42	2.53	3	1
1:A:236:GLN:HE22	1:A:237:LYS:HZ3	0.42	1.58	3	1
1:A:265:ASP:OD1	1:A:265:ASP:C	0.42	2.62	3	2
1:A:176:GLN:OE1	1:A:176:GLN:C	0.42	2.63	4	1
1:A:189:GLU:OE1	1:A:263:LEU:HD13	0.42	2.14	5	1
1:A:252:LEU:O	1:A:253:LEU:C	0.42	2.61	7	1
1:A:176:GLN:NE2	1:A:190:VAL:N	0.42	2.67	1	1
1:A:269:ARG:C	1:A:270:THR:OG1	0.42	2.62	1	2
1:A:88:PHE:O	1:A:89:ALA:C	0.42	2.62	2	3
1:A:211:PHE:CZ	1:A:256:LEU:CD1	0.42	3.03	2	1
1:A:287:LEU:C	1:A:287:LEU:CD2	0.42	2.86	3	2
1:A:152:LEU:C	1:A:152:LEU:CD2	0.42	2.88	4	1
1:A:243:VAL:O	1:A:244:ILE:C	0.42	2.62	7	5
1:A:98:SER:OG	1:A:183:SER:O	0.42	2.37	5	1
1:A:120:ASN:OD1	1:A:290:THR:OG1	0.42	2.37	8	1
1:A:207:HIS:CE1	1:A:208:THR:HG1	0.42	2.30	9	1
1:A:203:ARG:HH22	1:A:264:ALA:HB2	0.42	1.74	10	1
1:A:248:VAL:CG2	1:A:249:LEU:N	0.42	2.82	10	1
1:A:258:TYR:OH	1:A:259:ASN:ND2	0.42	2.52	1	1
1:A:285:ARG:O	1:A:288:ASP:OD2	0.42	2.38	1	1
1:A:189:GLU:OE1	1:A:190:VAL:O	0.42	2.38	2	1
1:A:135:ARG:NH1	1:A:237:LYS:O	0.42	2.52	3	1
1:A:135:ARG:HH22	1:A:237:LYS:CD	0.42	2.27	5	1
1:A:118:GLU:CD	1:A:168:SER:OG	0.42	2.62	6	1
1:A:149:LYS:NZ	1:A:149:LYS:CB	0.42	2.83	8	1
1:A:311:ASN:O	1:A:311:ASN:ND2	0.42	2.51	8	1
1:A:149:LYS:CE	1:A:150:ARG:CZ	0.42	2.98	10	1
1:A:272:VAL:O	1:A:272:VAL:HG23	0.42	2.14	10	1
1:A:42:VAL:O	1:A:45:ALA:HB3	0.42	2.15	1	2
1:A:122:TYR:O	1:A:123:SER:C	0.42	2.63	8	4
1:A:215:LEU:C	1:A:215:LEU:CD2	0.42	2.91	2	1
1:A:193:ASN:C	1:A:194:ASP:OD1	0.42	2.62	4	2
1:A:215:LEU:HD13	1:A:215:LEU:O	0.42	2.14	5	1
1:A:33:GLU:CD	1:A:275:GLU:OE1	0.42	2.63	7	1
1:A:95:TRP:CG	1:A:96:ALA:N	0.42	2.84	7	1
1:A:177:ALA:CB	1:A:179:HIS:HD1	0.42	2.28	9	1
1:A:166:ASN:ND2	1:A:169:LEU:HD12	0.42	2.30	1	1
1:A:182:ASN:OD1	1:A:281:ASN:CG	0.42	2.62	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:265:ASP:OD1	1:A:271:GLN:OE1	0.42	2.38	3	1
1:A:48:LEU:HD13	1:A:48:LEU:O	0.42	2.14	5	1
1:A:274:GLN:O	1:A:274:GLN:CG	0.42	2.68	5	2
1:A:148:GLN:NE2	1:A:149:LYS:H	0.42	2.13	6	1
1:A:203:ARG:NE	1:A:263:LEU:CD2	0.42	2.83	8	1
1:A:248:VAL:HG22	1:A:297:HIS:NE2	0.42	2.30	8	1
1:A:171:PHE:CD1	1:A:171:PHE:O	0.42	2.73	9	1
1:A:176:GLN:CG	1:A:177:ALA:N	0.41	2.82	1	1
1:A:182:ASN:ND2	1:A:183:SER:OG	0.41	2.52	1	1
1:A:275:GLU:OE2	1:A:278:GLU:OE1	0.41	2.38	2	1
1:A:73:VAL:HG22	1:A:305:TYR:OH	0.41	2.15	4	1
1:A:88:PHE:CD1	1:A:116:LEU:HD13	0.41	2.49	4	1
1:A:239:ARG:HH22	1:A:304:ILE:CG2	0.41	2.28	4	1
1:A:217:VAL:O	1:A:218:MET:C	0.41	2.62	6	1
1:A:222:TYR:O	1:A:223:GLY:C	0.41	2.62	8	1
1:A:293:LEU:HD12	1:A:293:LEU:O	0.41	2.15	9	1
1:A:266:THR:OG1	1:A:279:ARG:CD	0.41	2.68	10	1
1:A:204:ILE:C	1:A:204:ILE:CD1	0.41	2.93	1	1
1:A:271:GLN:CD	1:A:279:ARG:HH22	0.41	2.23	2	1
1:A:79:LEU:C	1:A:79:LEU:CD2	0.41	2.87	5	1
1:A:98:SER:CB	1:A:183:SER:O	0.41	2.67	5	1
1:A:293:LEU:C	1:A:293:LEU:CD2	0.41	2.85	5	1
1:A:87:LEU:O	1:A:91:THR:OG1	0.41	2.36	7	1
1:A:89:ALA:C	1:A:91:THR:N	0.41	2.76	7	1
1:A:88:PHE:O	1:A:91:THR:OG1	0.41	2.35	10	1
1:A:137:LEU:N	1:A:137:LEU:CD2	0.41	2.84	1	1
1:A:271:GLN:OE1	1:A:279:ARG:NH2	0.41	2.50	2	1
1:A:269:ARG:O	1:A:271:GLN:N	0.41	2.52	5	1
1:A:204:ILE:HG23	1:A:205:LEU:N	0.41	2.30	7	1
1:A:269:ARG:O	1:A:270:THR:HG23	0.41	2.16	7	1
1:A:199:ARG:C	1:A:201:VAL:N	0.41	2.77	9	1
1:A:272:VAL:CG2	1:A:278:GLU:OE1	0.41	2.68	9	1
1:A:117:LYS:O	1:A:120:ASN:N	0.41	2.54	1	1
1:A:282:ASN:O	1:A:285:ARG:CG	0.41	2.68	2	1
1:A:35:GLU:CD	1:A:35:GLU:O	0.41	2.63	4	1
1:A:107:THR:O	1:A:111:LYS:CB	0.41	2.69	4	1
1:A:54:LEU:HD11	1:A:85:ASP:OD2	0.41	2.15	9	1
1:A:111:LYS:O	1:A:111:LYS:NZ	0.41	2.48	9	1
1:A:191:LEU:HD23	1:A:280:ARG:NH2	0.41	2.31	9	1
1:A:255:TRP:HE1	1:A:259:ASN:CG	0.41	2.22	9	1
1:A:205:LEU:CB	1:A:206:PRO:CD	0.41	2.98	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:281:ASN:OD1	1:A:281:ASN:C	0.41	2.62	1	1
1:A:179:HIS:CD2	1:A:179:HIS:O	0.41	2.74	2	1
1:A:279:ARG:C	1:A:279:ARG:HE	0.41	2.23	3	1
1:A:293:LEU:HD23	1:A:293:LEU:C	0.41	2.35	3	1
1:A:278:GLU:O	1:A:282:ASN:ND2	0.41	2.53	4	1
1:A:143:THR:HG21	1:A:147:THR:HB	0.41	1.91	6	1
1:A:180:PRO:O	1:A:181:ASN:OD1	0.41	2.38	7	1
1:A:70:GLY:O	1:A:75:ASP:OD1	0.41	2.38	8	1
1:A:264:ALA:CB	1:A:268:MET:SD	0.41	3.05	1	1
1:A:117:LYS:NZ	1:A:121:PHE:CE2	0.41	2.89	3	2
1:A:171:PHE:CE2	1:A:178:TYR:CE1	0.41	3.08	4	1
1:A:192:GLY:O	1:A:194:ASP:OD1	0.41	2.39	4	1
1:A:46:TYR:CE2	1:A:285:ARG:CZ	0.41	3.03	5	1
1:A:104:ILE:C	1:A:104:ILE:CD1	0.41	2.91	5	1
1:A:142:ALA:O	1:A:143:THR:C	0.41	2.62	9	1
1:A:73:VAL:HG21	1:A:244:ILE:HD13	0.41	1.93	10	1
1:A:87:LEU:HD23	1:A:116:LEU:HD11	0.41	1.92	10	1
1:A:95:TRP:CD2	1:A:96:ALA:N	0.41	2.89	10	1
1:A:211:PHE:O	1:A:215:LEU:HD12	0.41	2.16	10	1
1:A:139:ILE:HG22	1:A:140:VAL:HG23	0.41	1.92	1	1
1:A:275:GLU:CD	1:A:278:GLU:CD	0.41	2.89	2	2
1:A:255:TRP:CD1	1:A:256:LEU:N	0.41	2.89	3	1
1:A:109:LEU:CD2	1:A:110:CYS:H	0.41	2.23	4	1
1:A:269:ARG:H	1:A:269:ARG:CD	0.41	2.28	4	1
1:A:272:VAL:O	1:A:272:VAL:HG22	0.41	2.16	4	1
1:A:135:ARG:O	1:A:136:TYR:C	0.41	2.64	5	1
1:A:238:HIS:HD1	1:A:238:HIS:C	0.41	2.24	6	1
1:A:86:LEU:O	1:A:90:LEU:N	0.41	2.45	7	1
1:A:131:ILE:HG23	1:A:135:ARG:CZ	0.41	2.46	8	1
1:A:188:TYR:CE1	1:A:280:ARG:NH1	0.41	2.88	8	1
1:A:62:LEU:O	1:A:63:VAL:C	0.41	2.64	10	1
1:A:186:VAL:HG23	1:A:186:VAL:O	0.41	2.16	10	1
1:A:189:GLU:C	1:A:189:GLU:CD	0.41	2.89	2	1
1:A:141:HIS:CE1	1:A:144:ARG:NH2	0.41	2.88	3	1
1:A:308:ILE:C	1:A:309:GLY:O	0.41	2.63	3	1
1:A:273:ILE:HD12	1:A:279:ARG:CZ	0.41	2.46	6	1
1:A:76:VAL:HG21	1:A:131:ILE:HG12	0.41	1.93	8	1
1:A:280:ARG:HE	1:A:283:ILE:HD12	0.41	1.76	8	1
1:A:60:VAL:O	1:A:64:ILE:CG1	0.41	2.69	10	1
1:A:214:PRO:O	1:A:218:MET:CG	0.41	2.69	1	1
1:A:251:PHE:CE2	1:A:297:HIS:NE2	0.41	2.89	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:TYR:CZ	1:A:183:SER:OG	0.41	2.74	2	1
1:A:134:ASP:CG	1:A:135:ARG:N	0.41	2.78	2	1
1:A:253:LEU:HD13	1:A:253:LEU:O	0.41	2.16	2	1
1:A:236:GLN:C	1:A:236:GLN:CD	0.41	2.88	3	1
1:A:171:PHE:CE1	1:A:178:TYR:CE2	0.41	3.09	5	1
1:A:221:CYS:SG	1:A:222:TYR:N	0.41	2.93	5	1
1:A:50:PHE:CZ	1:A:292:ILE:HG21	0.41	2.50	6	1
1:A:73:VAL:O	1:A:73:VAL:HG12	0.41	2.15	7	1
1:A:310:GLN:N	1:A:310:GLN:HE21	0.41	2.14	8	1
1:A:117:LYS:O	1:A:120:ASN:ND2	0.41	2.54	10	1
1:A:91:THR:HG21	1:A:112:VAL:CG1	0.41	2.46	1	1
1:A:141:HIS:O	1:A:141:HIS:ND1	0.41	2.54	3	1
1:A:292:ILE:C	1:A:294:GLY:N	0.41	2.78	3	1
1:A:204:ILE:O	1:A:208:THR:OG1	0.41	2.39	7	1
1:A:254:CYS:HB2	1:A:293:LEU:HD22	0.41	1.92	9	1
1:A:272:VAL:O	1:A:272:VAL:CG1	0.41	2.63	9	1
1:A:39:LYS:CG	1:A:281:ASN:ND2	0.41	2.84	10	1
1:A:29:PRO:CB	1:A:31:MET:HE3	0.40	2.47	1	1
1:A:53:SER:O	1:A:54:LEU:C	0.40	2.64	1	3
1:A:74:THR:HG1	1:A:297:HIS:CD2	0.40	2.33	2	1
1:A:120:ASN:OD1	1:A:120:ASN:C	0.40	2.62	3	1
1:A:179:HIS:CD2	1:A:179:HIS:N	0.40	2.89	3	1
1:A:211:PHE:CZ	1:A:256:LEU:HD22	0.40	2.50	3	1
1:A:154:LYS:NZ	1:A:157:CYS:CB	0.40	2.84	5	1
1:A:146:LEU:H	1:A:146:LEU:HD13	0.40	1.76	6	1
1:A:50:PHE:CD2	1:A:285:ARG:NH1	0.40	2.89	7	1
1:A:135:ARG:O	1:A:138:ALA:CA	0.40	2.68	7	1
1:A:189:GLU:CD	1:A:263:LEU:HD22	0.40	2.41	7	1
1:A:191:LEU:N	1:A:191:LEU:CD2	0.40	2.84	8	1
1:A:40:TYR:CZ	1:A:44:ILE:CD1	0.40	3.03	1	1
1:A:146:LEU:C	1:A:147:THR:CG2	0.40	2.94	1	2
1:A:126:LEU:HD22	1:A:160:CYS:SG	0.40	2.56	3	1
1:A:117:LYS:NZ	1:A:188:TYR:CE1	0.40	2.88	5	1
1:A:240:ALA:O	1:A:244:ILE:N	0.40	2.47	7	1
1:A:35:GLU:OE2	1:A:36:THR:N	0.40	2.54	8	1
1:A:148:GLN:CD	1:A:148:GLN:H	0.40	2.23	10	1
1:A:190:VAL:HG11	1:A:199:ARG:O	0.40	2.16	10	1
1:A:71:ARG:CZ	1:A:71:ARG:CB	0.40	2.99	3	1
1:A:128:LEU:HD12	1:A:128:LEU:C	0.40	2.41	6	1
1:A:40:TYR:CZ	1:A:281:ASN:ND2	0.40	2.90	7	1
1:A:54:LEU:HD11	1:A:291:GLU:OE2	0.40	2.17	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:298:SER:O	1:A:302:PRO:CD	0.40	2.70	8	1
1:A:233:HIS:CD2	1:A:233:HIS:C	0.40	3.00	1	1
1:A:275:GLU:OE1	1:A:278:GLU:OE2	0.40	2.38	1	1
1:A:236:GLN:N	1:A:236:GLN:OE1	0.40	2.54	2	1
1:A:64:ILE:O	1:A:67:SER:OG	0.40	2.39	4	1
1:A:189:GLU:O	1:A:189:GLU:OE2	0.40	2.39	6	1
1:A:188:TYR:OH	1:A:267:LEU:HD21	0.40	2.16	8	1
1:A:229:LEU:CD1	1:A:229:LEU:N	0.40	2.85	8	1
1:A:64:ILE:CD1	1:A:297:HIS:CE1	0.40	3.05	10	1
1:A:184:SER:OG	1:A:281:ASN:ND2	0.40	2.55	2	1
1:A:144:ARG:O	1:A:145:THR:OG1	0.40	2.37	3	1
1:A:166:ASN:ND2	1:A:166:ASN:N	0.40	2.67	5	1
1:A:310:GLN:OE1	1:A:310:GLN:C	0.40	2.65	7	1
1:A:52:LEU:C	1:A:52:LEU:CD2	0.40	2.95	9	1
1:A:61:MET:SD	1:A:62:LEU:N	0.40	2.95	9	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	283/309 (92%)	249±2 (88±1%)	25±1 (9±0%)	9±1 (3±0%)	5	35
All	All	2830/3090 (92%)	2488 (88%)	249 (9%)	93 (3%)	5	35

All 15 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	33	GLU	10
1	A	145	THR	10
1	A	269	ARG	10
1	A	272	VAL	10
1	A	274	GLN	10
1	A	189	GLU	9
1	A	275	GLU	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	69	VAL	5
1	A	31	MET	4
1	A	232	ALA	4
1	A	273	ILE	4
1	A	142	ALA	4
1	A	237	LYS	2
1	A	309	GLY	1
1	A	35	GLU	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	251/272 (92%)	162±5 (64±2%)	89±5 (36±2%)	1	9
All	All	2510/2720 (92%)	1617 (64%)	893 (36%)	1	9

All 227 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	38	ASN	10
1	A	49	VAL	10
1	A	109	LEU	10
1	A	119	VAL	10
1	A	145	THR	10
1	A	195	THR	10
1	A	270	THR	9
1	A	55	LEU	8
1	A	101	ASN	8
1	A	146	LEU	8
1	A	171	PHE	8
1	A	193	ASN	8
1	A	202	LEU	8
1	A	244	ILE	8
1	A	258	TYR	8
1	A	282	ASN	8
1	A	307	PHE	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	287	LEU	8
1	A	53	SER	7
1	A	57	ASN	7
1	A	75	ASP	7
1	A	114	SER	7
1	A	147	THR	7
1	A	157	CYS	7
1	A	164	SER	7
1	A	198	TRP	7
1	A	231	LYS	7
1	A	253	LEU	7
1	A	274	GLN	7
1	A	295	PHE	7
1	A	37	LEU	7
1	A	92	LEU	7
1	A	166	ASN	7
1	A	197	LYS	7
1	A	30	CYS	6
1	A	41	VAL	6
1	A	80	ASN	6
1	A	151	HIS	6
1	A	154	LYS	6
1	A	167	LEU	6
1	A	181	ASN	6
1	A	217	VAL	6
1	A	255	TRP	6
1	A	279	ARG	6
1	A	290	THR	6
1	A	104	ILE	6
1	A	120	ASN	6
1	A	191	LEU	6
1	A	207	HIS	6
1	A	216	PHE	6
1	A	234	MET	6
1	A	285	ARG	6
1	A	169	LEU	6
1	A	190	VAL	6
1	A	35	GLU	5
1	A	110	CYS	5
1	A	132	SER	5
1	A	168	SER	5
1	A	237	LYS	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	241	MET	5
1	A	245	PHE	5
1	A	254	CYS	5
1	A	298	SER	5
1	A	68	ARG	5
1	A	113	VAL	5
1	A	135	ARG	5
1	A	208	THR	5
1	A	215	LEU	5
1	A	243	VAL	5
1	A	251	PHE	5
1	A	281	ASN	5
1	A	297	HIS	5
1	A	81	LEU	5
1	A	227	ARG	5
1	A	275	GLU	5
1	A	203	ARG	5
1	A	39	LYS	4
1	A	65	LEU	4
1	A	71	ARG	4
1	A	95	TRP	4
1	A	107	THR	4
1	A	134	ASP	4
1	A	148	GLN	4
1	A	149	LYS	4
1	A	160	CYS	4
1	A	187	CYS	4
1	A	204	ILE	4
1	A	212	ILE	4
1	A	218	MET	4
1	A	228	THR	4
1	A	236	GLN	4
1	A	276	SER	4
1	A	299	CYS	4
1	A	308	ILE	4
1	A	59	LEU	4
1	A	99	LYS	4
1	A	128	LEU	4
1	A	140	VAL	4
1	A	233	HIS	4
1	A	239	ARG	4
1	A	249	LEU	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	256	LEU	4
1	A	288	ASP	4
1	A	112	VAL	4
1	A	127	LEU	4
1	A	150	ARG	4
1	A	163	LEU	4
1	A	178	TYR	4
1	A	200	MET	4
1	A	250	ILE	4
1	A	259	ASN	4
1	A	303	ILE	4
1	A	31	MET	4
1	A	72	SER	3
1	A	74	THR	3
1	A	115	LEU	3
1	A	186	VAL	3
1	A	209	PHE	3
1	A	221	CYS	3
1	A	242	ARG	3
1	A	267	LEU	3
1	A	292	ILE	3
1	A	77	TYR	3
1	A	83	LEU	3
1	A	108	PHE	3
1	A	125	ILE	3
1	A	137	LEU	3
1	A	153	VAL	3
1	A	176	GLN	3
1	A	179	HIS	3
1	A	211	PHE	3
1	A	280	ARG	3
1	A	296	LEU	3
1	A	48	LEU	3
1	A	88	PHE	3
1	A	144	ARG	3
1	A	173	LEU	3
1	A	175	ARG	3
1	A	188	TYR	3
1	A	219	LEU	3
1	A	225	THR	3
1	A	277	CYS	3
1	A	293	LEU	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	34	THR	3
1	A	54	LEU	3
1	A	133	VAL	3
1	A	161	TRP	3
1	A	194	ASP	3
1	A	199	ARG	3
1	A	266	THR	3
1	A	61	MET	3
1	A	116	LEU	3
1	A	184	SER	3
1	A	247	VAL	3
1	A	268	MET	3
1	A	300	LEU	3
1	A	43	ILE	3
1	A	165	MET	3
1	A	213	VAL	3
1	A	32	LEU	2
1	A	87	LEU	2
1	A	105	PHE	2
1	A	117	LYS	2
1	A	304	ILE	2
1	A	136	TYR	2
1	A	141	HIS	2
1	A	156	VAL	2
1	A	174	PHE	2
1	A	271	GLN	2
1	A	291	GLU	2
1	A	301	ASN	2
1	A	64	ILE	2
1	A	79	LEU	2
1	A	86	LEU	2
1	A	172	PHE	2
1	A	220	PHE	2
1	A	111	LYS	2
1	A	189	GLU	2
1	A	272	VAL	2
1	A	60	VAL	2
1	A	238	HIS	2
1	A	261	VAL	2
1	A	273	ILE	2
1	A	278	GLU	2
1	A	283	ILE	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	131	ILE	2
1	A	229	LEU	2
1	A	248	VAL	2
1	A	269	ARG	2
1	A	50	PHE	2
1	A	158	LEU	2
1	A	260	LEU	2
1	A	310	GLN	2
1	A	44	ILE	2
1	A	62	LEU	2
1	A	121	PHE	2
1	A	126	LEU	2
1	A	262	LEU	2
1	A	155	PHE	2
1	A	46	TYR	1
1	A	205	LEU	1
1	A	222	TYR	1
1	A	265	ASP	1
1	A	305	TYR	1
1	A	33	GLU	1
1	A	66	TYR	1
1	A	226	LEU	1
1	A	51	LEU	1
1	A	103	TRP	1
1	A	230	PHE	1
1	A	76	VAL	1
1	A	98	SER	1
1	A	182	ASN	1
1	A	311	ASN	1
1	A	69	VAL	1
1	A	85	ASP	1
1	A	118	GLU	1
1	A	122	TYR	1
1	A	152	LEU	1
1	A	90	LEU	1
1	A	130	CYS	1
1	A	58	SER	1
1	A	73	VAL	1
1	A	78	LEU	1
1	A	36	THR	1
1	A	40	TYR	1
1	A	94	ILE	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 25% for the well-defined parts and 25% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_2*

7.1.1 Bookkeeping

The following table shows the results of parsing the chemical shift list and reports the number of nuclei with statistically unusual chemical shifts.

Total number of shifts	1120
Number of shifts mapped to atoms	1079
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	41
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	0

The following assigned chemical shifts were not mapped to the molecules present in the coordinate file.

- No matching atom found in the structure. All 41 occurrences are reported below.

List ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
1	A	20	MET	C	176.7	0.3	1
1	A	20	MET	CA	58.2	0.4	1
1	A	20	MET	CB	31.8	0.4	1
1	A	20	MET	N	119.9	0.5	1
1	A	21	PRO	N	145.0	0.5	1
1	A	23	ALA	C	178.6	0.3	1
1	A	23	ALA	CA	53.4	0.4	4
1	A	23	ALA	CB	18.2	0.4	1
1	A	23	ALA	N	124.4	0.5	1
1	A	24	ASP	C	177.4	0.3	1
1	A	24	ASP	CA	53.1	0.4	1
1	A	24	ASP	CB	39.5	0.4	1
1	A	24	ASP	N	124.2	0.5	1
1	A	25	GLU	C	176.2	0.3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

List ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
1	A	25	GLU	CA	57.9	0.4	1
1	A	25	GLU	N	123.8	0.5	1
1	A	26	ASP	C	177.4	0.3	1
1	A	26	ASP	CA	54.2	0.4	1
1	A	26	ASP	CB	39.2	0.4	1
1	A	26	ASP	N	120.4	0.5	1
1	A	27	TYR	C	176.5	0.3	1
1	A	27	TYR	CA	57.25	0.4	1
1	A	27	TYR	CB	37.25	0.4	1
1	A	27	TYR	N	123.0	0.5	1
1	A	28	SER	C	173.0	0.3	1
1	A	28	SER	CA	57.5	0.4	1
1	A	28	SER	CB	63.0	0.4	1
1	A	28	SER	N	120.4	0.5	1
1	A	325	LEU	C	177.6	0.3	1
1	A	325	LEU	CA	53.9	0.4	1
1	A	325	LEU	CB	39.6	0.4	1
1	A	325	LEU	N	123.7	0.5	1
1	A	326	VAL	C	175.4	0.3	1
1	A	326	VAL	CA	63.0	0.4	1
1	A	326	VAL	CB	30.55	0.4	1
1	A	326	VAL	N	119.7	0.5	1
1	A	327	SER	C	175.3	0.3	1
1	A	327	SER	CA	59.7	0.4	1
1	A	327	SER	N	116.8	0.5	1
1	A	328	LYS	CA	56.64	0.4	1
1	A	328	LYS	N	121.4	0.5	1

7.1.2 Chemical shift referencing ⓘ

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction $\pm$ precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	299	-0.40 ± 0.13	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	234	1.65 ± 0.11	Should be checked
$^{13}\text{C}'$	289	0.40 ± 0.11	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	298	-0.68 ± 0.29	Should be applied

7.1.3 Completeness of resonance assignments [i](#)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 25%, i.e. 1033 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 4134. 0 out of 77 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Backbone	815/1416 (58%)	0/573 (0%)	543/568 (96%)	272/275 (99%)
Sidechain	218/2303 (9%)	0/1533 (0%)	218/696 (31%)	0/74 (0%)
Aromatic	0/415 (0%)	0/202 (0%)	0/194 (0%)	0/19 (0%)
Overall	1033/4134 (25%)	0/2308 (0%)	761/1458 (52%)	272/368 (74%)

Note: This is a solid-state NMR structure, where hydrogen atoms are typically not assigned a chemical shift value, which may lead to lower completeness of assignment measure.

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 25%, i.e. 1077 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 4315. 0 out of 79 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Backbone	851/1478 (58%)	0/599 (0%)	567/592 (96%)	284/287 (99%)
Sidechain	226/2396 (9%)	0/1595 (0%)	226/723 (31%)	0/78 (0%)
Aromatic	0/441 (0%)	0/215 (0%)	0/203 (0%)	0/23 (0%)
Overall	1077/4315 (25%)	0/2409 (0%)	793/1518 (52%)	284/388 (73%)

Note: This is a solid-state NMR structure, where hydrogen atoms are typically not assigned a chemical shift value, which may lead to lower completeness of assignment measure.

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

There are no statistically unusual chemical shifts.

7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots [i](#)

The image below reports *random coil index* values for the protein chains in the structure. The height of each bar gives a probability of a given residue to be disordered, as predicted from the available chemical shifts and the amino acid sequence. A value above 0.2 is an indication of significant predicted disorder. The colour of the bar shows whether the residue is in the well-defined core (black) or in the ill-defined residue ranges (cyan), as described in section 2 on ensemble composition. If well-defined core and ill-defined regions are not identified then it is shown as gray bars.

Random coil index (RCI) for chain A:

