



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 27, 2016 – 12:32 AM BST

PDB ID : 2L90
Title : Solution structure of murine myristoylated msrA
Authors : Gruschus, J.M.; Lim, J.; Piszczek, G.; Levine, R.L.; Tjandra, N.
Deposited on : 2011-01-27

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
<http://wwpdb.org/validation/2016/NMRValidationReportHelp>
with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

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

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)
NmrClust : Kelley et al. (1996)
MolProbity : 4.02b-467
Mogul : 1.7.1 (RC1), CSD as537be (2016)
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)
RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
ShiftChecker : rb-20027457
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : rb-20027457

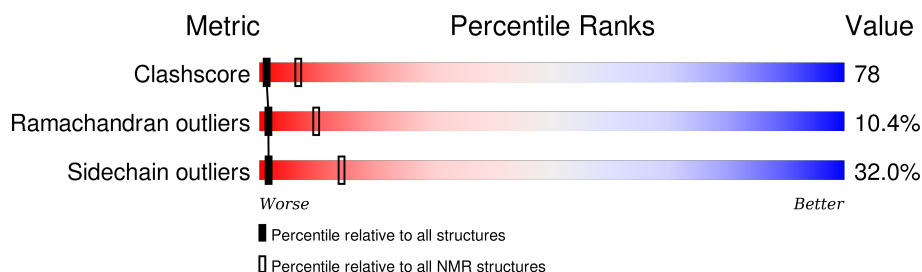
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 2%.

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	114402	11133
Ramachandran outliers	111179	9975
Sidechain outliers	111093	9958

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	212	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 21 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:28-A:35, A:42-A:223 (190)	0.60	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 2 clusters. No single-model clusters were found.

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

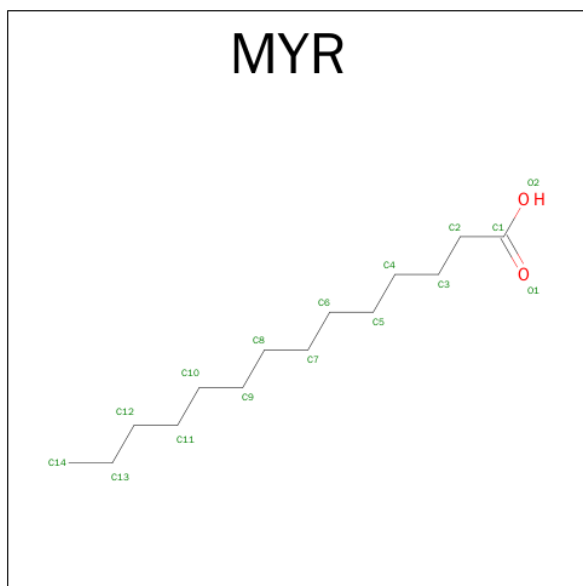
3 Entry composition [i](#)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 3282 atoms, of which 1609 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Peptide methionine sulfoxide reductase.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	212	Total	C	H	N	O	S	1
			3240	1047	1582	289	313	9	

- Molecule 2 is MYRISTIC ACID (three-letter code: MYR) (formula: $C_{14}H_{28}O_2$).



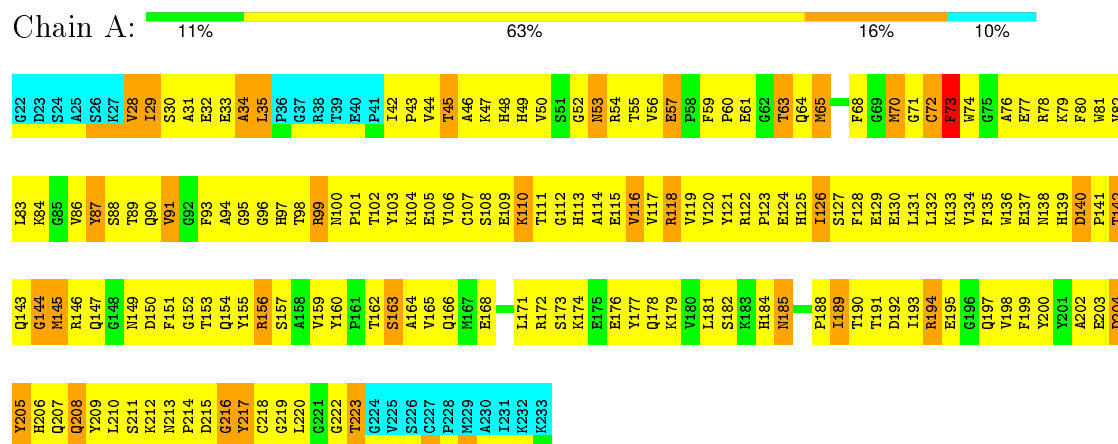
Mol	Chain	Residues	Atoms			
2	A	1	Total	C	H	O
			42	14	27	1

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA and DNA 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: Peptide methionine sulfoxide reductase

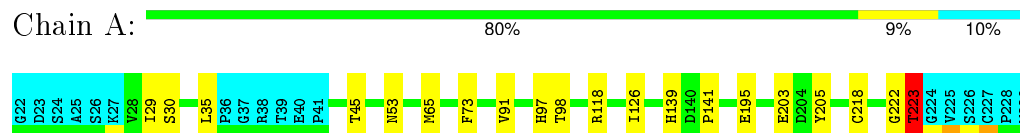


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

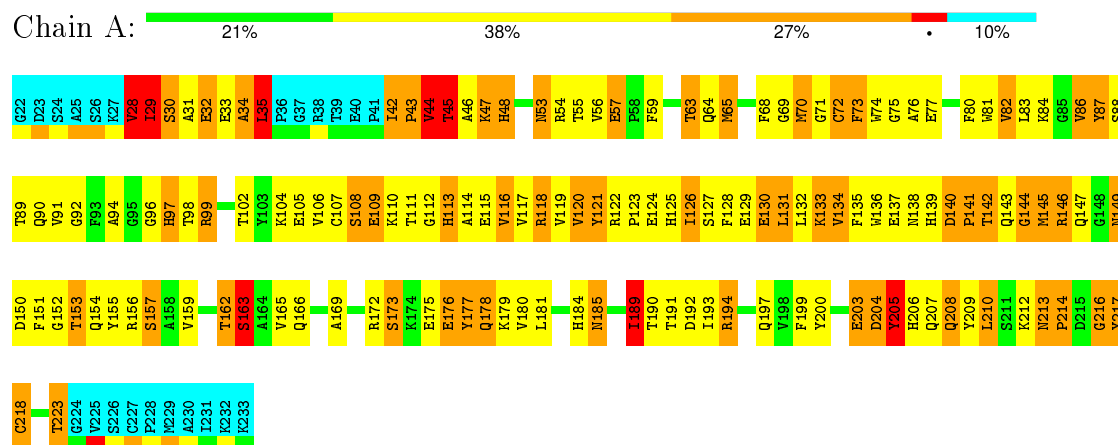
4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase



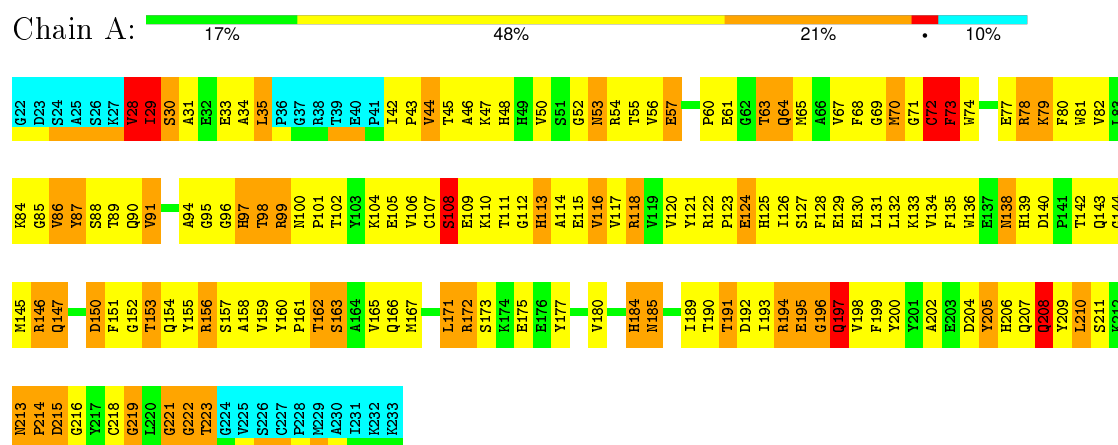
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase



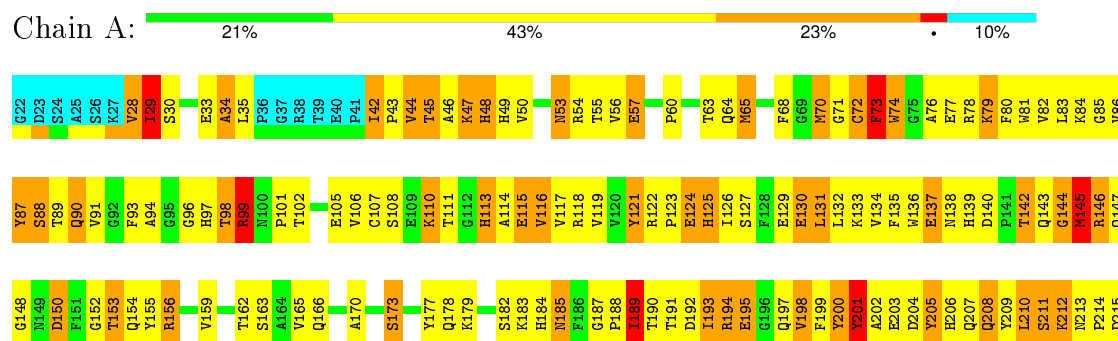
4.2.3 Score per residue for model 3

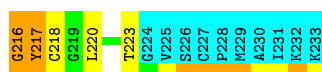
- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase



4.2.4 Score per residue for model 4

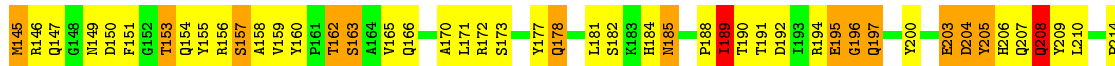
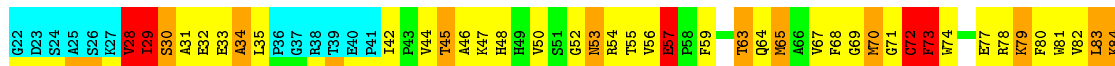
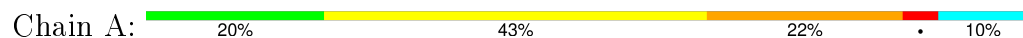
- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase





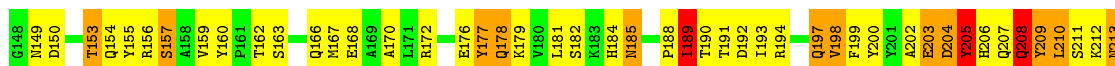
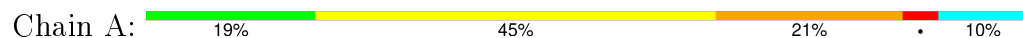
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase



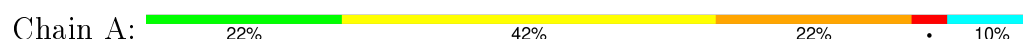
4.2.6 Score per residue for model 6

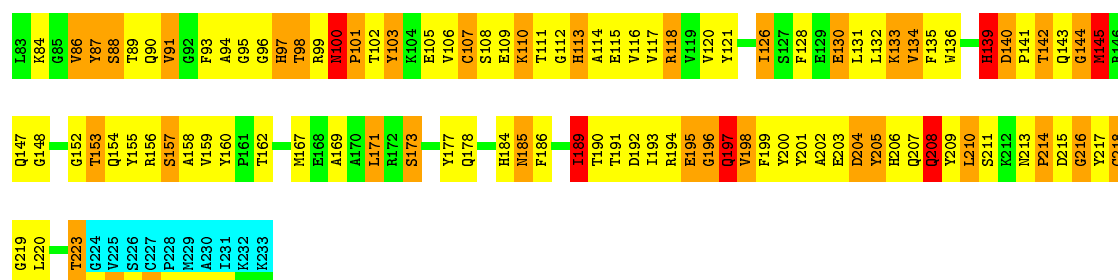
- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase



4.2.7 Score per residue for model 7

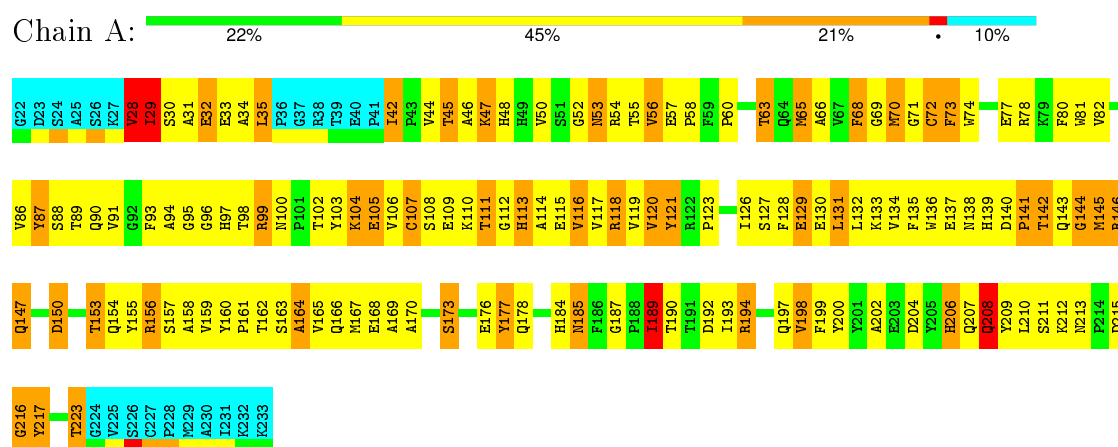
- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase





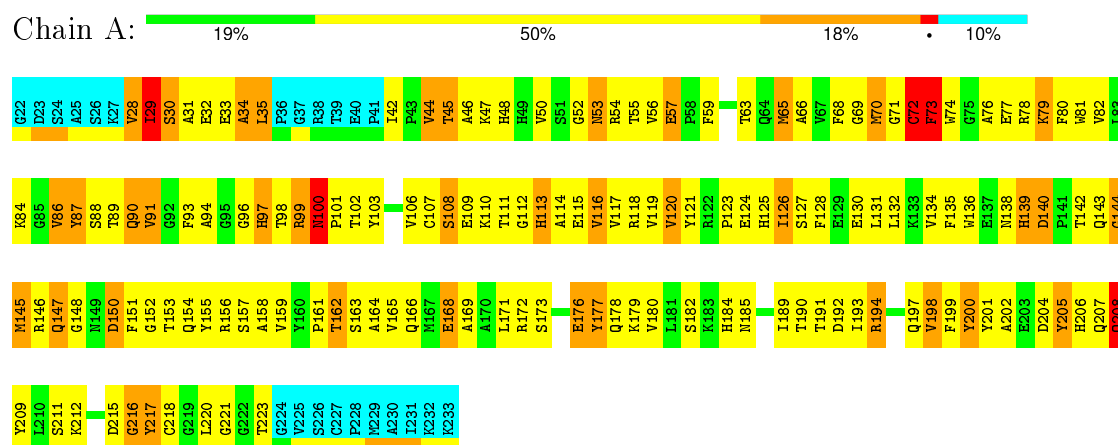
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase



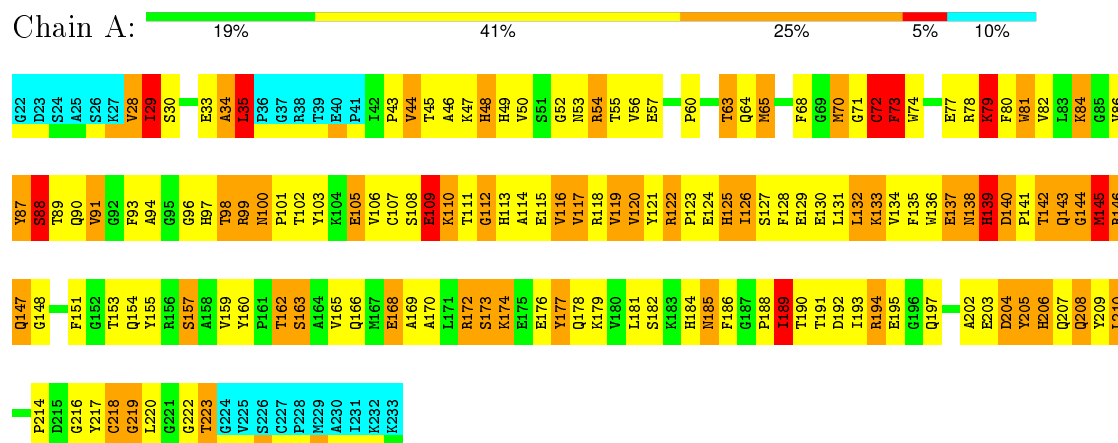
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase



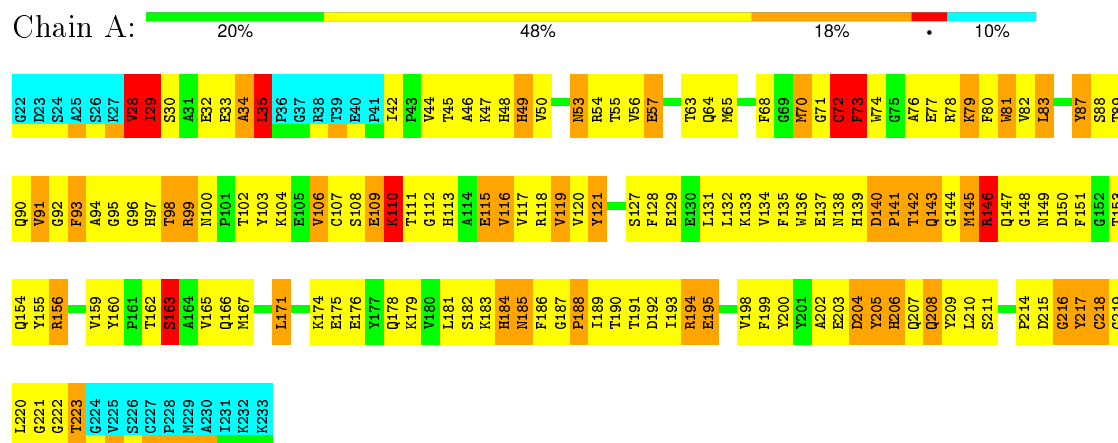
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase



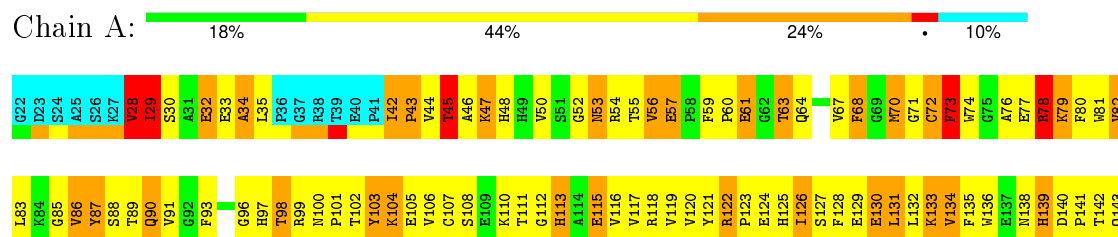
4.2.11 Score per residue for model 11

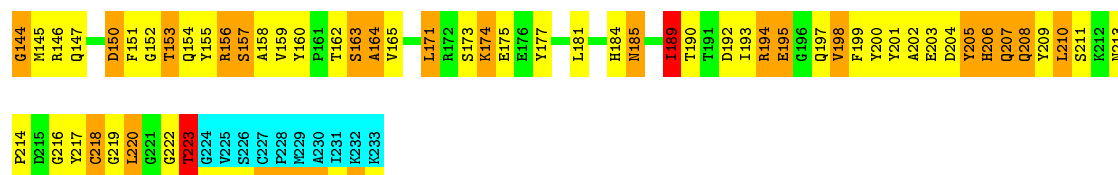
- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase

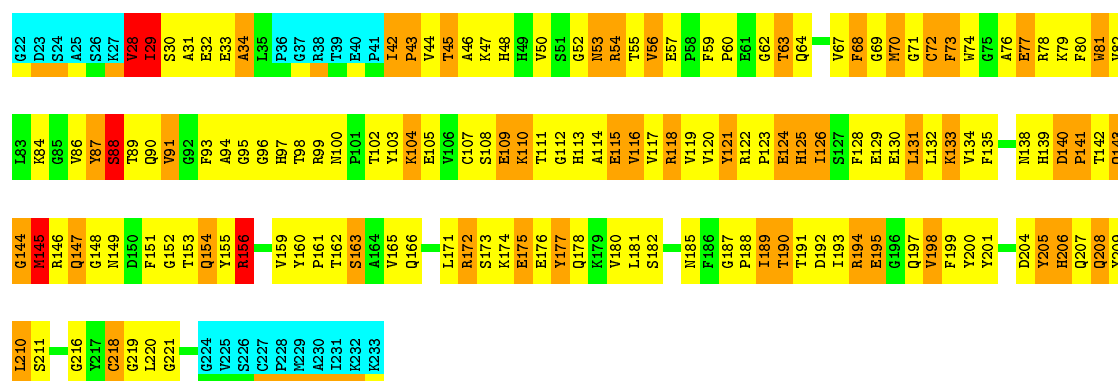




4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase

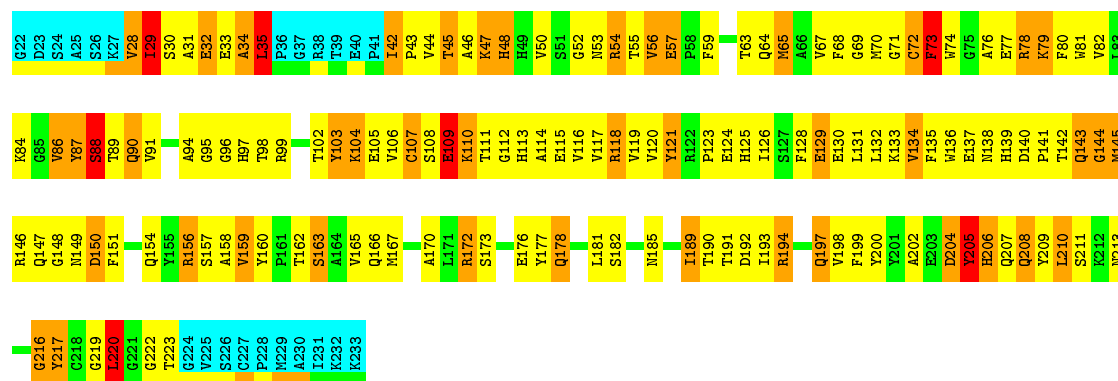
Chain A: 18% 47% 23% 10%



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase

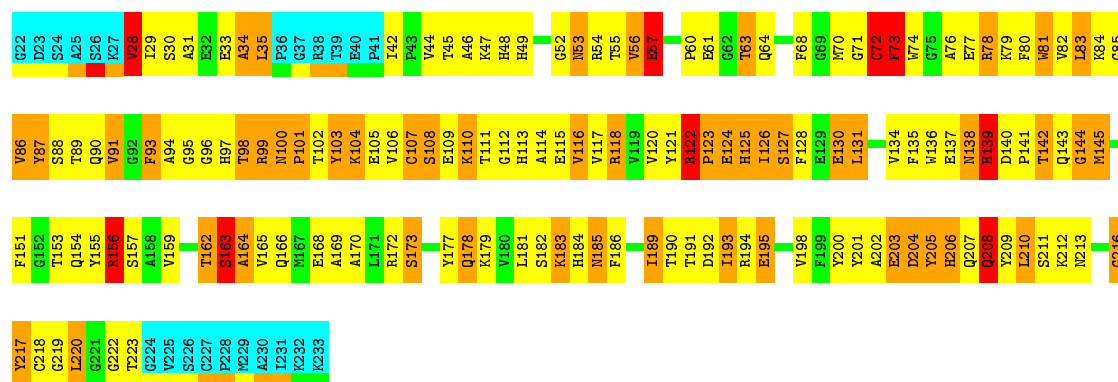
Chain A: 20% 46% 20% 10%



4.2.15 Score per residue for model 15

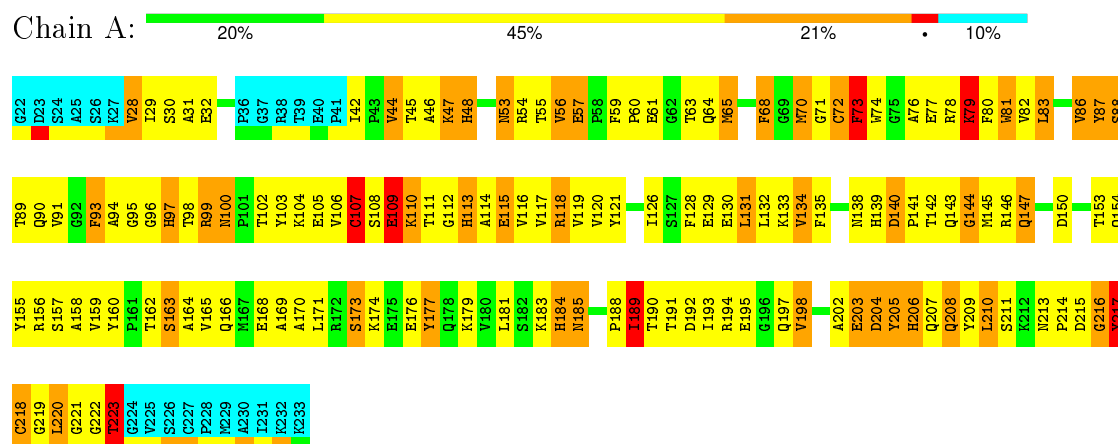
- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase

Chain A: 19% 42% 24% 10%



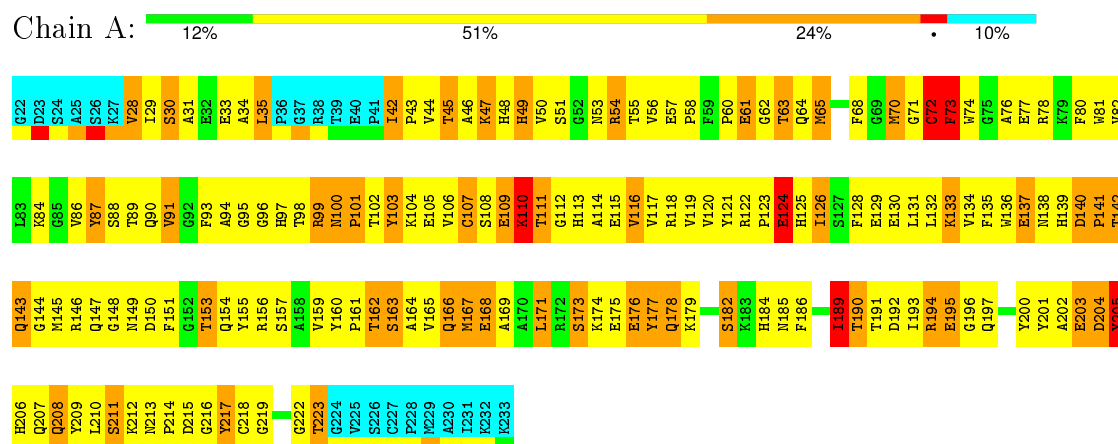
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase



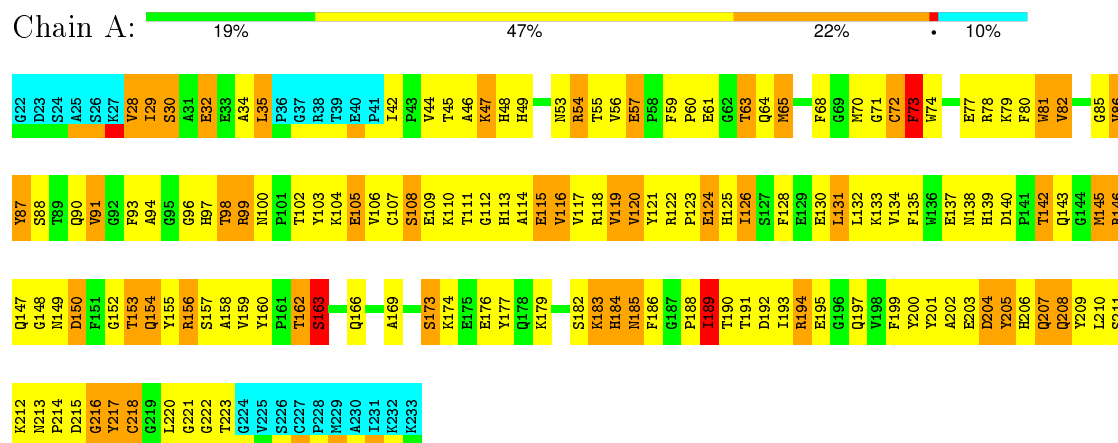
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase



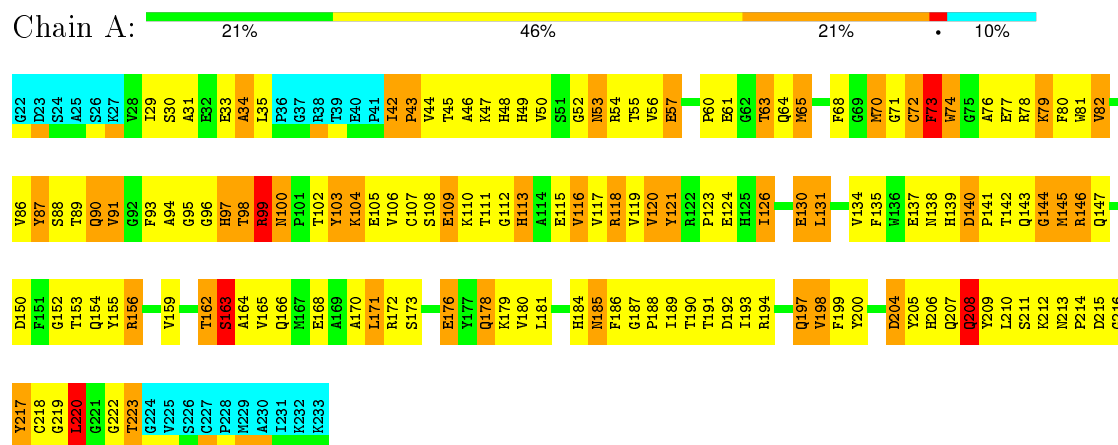
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase



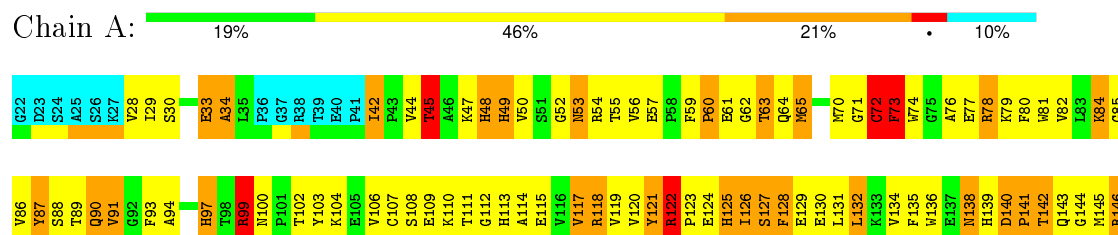
4.2.19 Score per residue for model 19

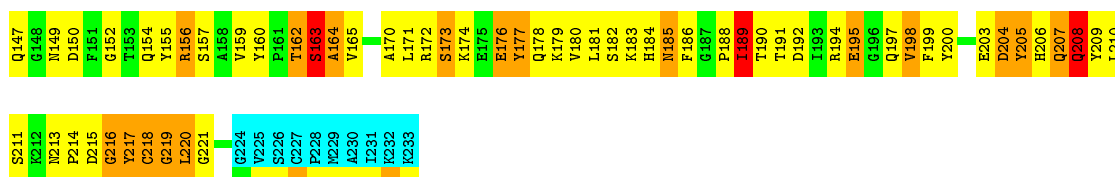
- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase



4.2.20 Score per residue for model 20

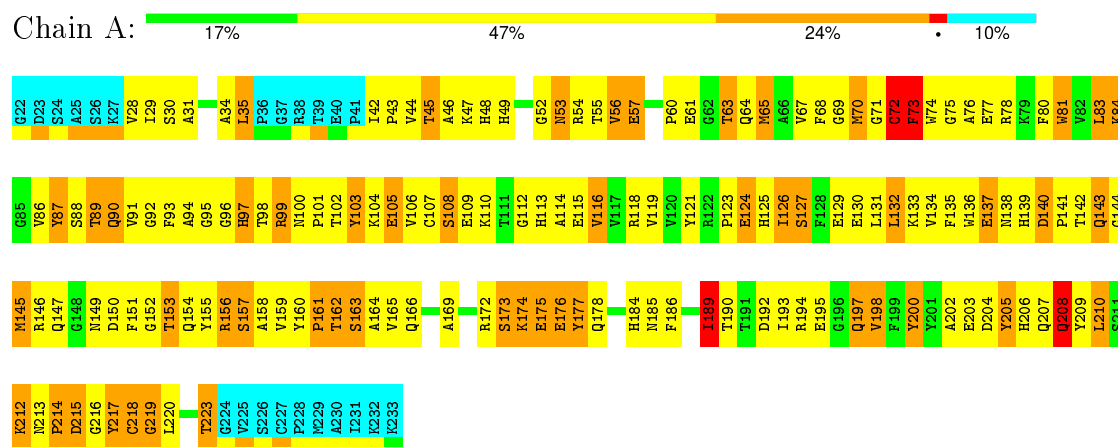
- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase





4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 200 calculated structures, 21 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 NIH	refinement	
X-PLOR NIH	structure solution	

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)	2l90_cs.str
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1010
Number of shifts mapped to atoms	50
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	960
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	2%

No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.

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: MYR

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	1.07±0.07	0±0/1558 (0.0±0.0%)	0.94±0.04	1±1/2113 (0.0±0.0%)
All	All	1.07	0/32718 (0.0%)	0.94	15/44373 (0.0%)

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	0.0±0.2
All	All	0	1

There are no bond-length outliers.

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	201	TYR	CB-CG-CD2	-7.94	116.24	121.00	4	1
1	A	205	TYR	CB-CG-CD1	-7.44	116.54	121.00	14	1
1	A	139	HIS	CG-ND1-CE1	-6.17	97.68	105.70	1	1
1	A	206	HIS	CA-CB-CG	-5.82	103.71	113.60	4	9
1	A	118	ARG	NE-CZ-NH1	5.80	123.20	120.30	1	1
1	A	222	GLY	C-N-CA	5.74	136.04	121.70	1	1
1	A	123	PRO	N-CD-CG	-5.15	95.48	103.20	15	1

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	218	CYS	Peptide	1

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	1514	1437	1437	235±54
2	A	15	27	27	1±2
All	All	32109	30744	30744	4934

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 79.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:196:GLY:O	1:A:197:GLN:NE2	1.24	1.69	3	2
1:A:131:LEU:HD23	1:A:131:LEU:H	1.10	1.05	15	5
1:A:121:TYR:CD2	1:A:131:LEU:HD22	1.04	1.86	4	4
1:A:131:LEU:H	1:A:131:LEU:HD12	1.03	1.13	19	4
1:A:131:LEU:HD22	1:A:131:LEU:H	1.01	1.16	13	1
1:A:68:PHE:O	1:A:117:VAL:HG22	1.00	1.57	6	9
1:A:106:VAL:HG12	1:A:111:THR:HG21	1.00	1.30	15	3
1:A:160:TYR:CG	1:A:198:VAL:HG21	0.98	1.92	21	1
1:A:98:THR:HG22	1:A:100:ASN:HD21	0.97	1.19	7	1
1:A:122:ARG:N	1:A:123:PRO:CD	0.97	2.28	10	3
1:A:128:PHE:CZ	1:A:132:LEU:HD11	0.96	1.95	8	6
1:A:89:THR:HG22	1:A:119:VAL:HG12	0.96	1.37	11	2
1:A:156:ARG:HH21	2:A:21:MYR:C13	0.95	1.73	20	1
1:A:91:VAL:HG12	1:A:117:VAL:HG22	0.94	1.35	16	1
1:A:28:VAL:O	1:A:29:ILE:O	0.94	1.84	8	13
1:A:122:ARG:H	1:A:123:PRO:CD	0.94	1.74	20	3
1:A:106:VAL:HG12	1:A:111:THR:OG1	0.93	1.63	10	8
1:A:35:LEU:N	1:A:35:LEU:HD13	0.93	1.79	17	2
1:A:139:HIS:O	1:A:223:THR:HG23	0.92	1.63	10	6
1:A:122:ARG:N	1:A:123:PRO:HD3	0.92	1.76	15	1
1:A:114:ALA:HB2	1:A:156:ARG:NH2	0.92	1.79	5	1
1:A:74:TRP:O	1:A:210:LEU:HD11	0.91	1.64	11	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:VAL:HG22	1:A:211:SER:OG	0.89	1.68	19	5
1:A:100:ASN:N	1:A:100:ASN:ND2	0.89	2.19	17	4
1:A:94:ALA:C	1:A:113:HIS:HD1	0.89	1.70	14	4
1:A:131:LEU:H	1:A:131:LEU:HD23	0.88	1.28	8	1
1:A:102:THR:O	1:A:106:VAL:HG13	0.87	1.69	7	2
1:A:142:THR:O	1:A:142:THR:HG23	0.86	1.69	13	2
1:A:31:ALA:HB2	1:A:97:HIS:ND1	0.86	1.85	16	3
1:A:48:HIS:CE1	1:A:89:THR:HG1	0.86	1.89	6	2
1:A:207:GLN:O	1:A:209:TYR:N	0.85	2.08	15	20
1:A:74:TRP:O	1:A:210:LEU:HD21	0.85	1.71	20	4
1:A:121:TYR:CD2	1:A:131:LEU:HD21	0.85	2.06	13	4
1:A:80:PHE:CD2	1:A:119:VAL:HG21	0.85	2.06	6	3
1:A:43:PRO:O	1:A:44:VAL:HG13	0.85	1.70	4	6
1:A:128:PHE:CE2	1:A:132:LEU:HD11	0.85	2.07	5	6
1:A:122:ARG:N	1:A:123:PRO:HD2	0.85	1.85	10	2
1:A:121:TYR:CZ	1:A:131:LEU:HD22	0.85	2.06	11	2
1:A:131:LEU:CD2	1:A:131:LEU:H	0.84	1.85	16	4
1:A:70:MET:SD	1:A:76:ALA:HB2	0.84	2.12	21	2
1:A:131:LEU:HD23	1:A:131:LEU:N	0.84	1.87	4	4
1:A:122:ARG:H	1:A:123:PRO:HD3	0.84	1.26	15	3
1:A:196:GLY:O	1:A:197:GLN:CD	0.83	2.15	3	2
1:A:136:TRP:O	1:A:223:THR:HG21	0.83	1.73	15	4
1:A:35:LEU:HD23	1:A:105:GLU:OE1	0.83	1.74	3	1
1:A:121:TYR:CG	1:A:131:LEU:HD21	0.82	2.08	19	1
1:A:106:VAL:HG12	1:A:111:THR:CG2	0.82	2.05	15	3
1:A:131:LEU:N	1:A:131:LEU:HD12	0.82	1.90	19	3
1:A:132:LEU:HD12	1:A:132:LEU:C	0.82	1.95	17	1
1:A:142:THR:HG22	1:A:189:ILE:HG22	0.82	1.49	8	7
1:A:46:ALA:O	1:A:55:THR:HG23	0.82	1.75	21	2
1:A:132:LEU:C	1:A:132:LEU:HD12	0.81	1.95	7	3
1:A:154:GLN:NE2	1:A:155:TYR:CE2	0.81	2.48	8	12
1:A:72:CYS:SG	1:A:74:TRP:CD2	0.81	2.74	11	3
1:A:100:ASN:H	1:A:100:ASN:HD22	0.81	1.19	17	1
1:A:143:GLN:NE2	1:A:147:GLN:NE2	0.81	2.28	14	1
1:A:135:PHE:CE1	1:A:139:HIS:CD2	0.81	2.69	21	7
1:A:100:ASN:ND2	1:A:100:ASN:H	0.81	1.69	17	1
1:A:121:TYR:CG	1:A:131:LEU:HD22	0.81	2.09	16	3
1:A:64:GLN:NE2	1:A:121:TYR:H	0.81	1.74	3	1
1:A:195:GLU:O	1:A:197:GLN:N	0.81	2.14	3	3
1:A:135:PHE:CZ	1:A:139:HIS:NE2	0.81	2.49	19	7
1:A:78:ARG:O	1:A:82:VAL:HG13	0.80	1.76	5	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:GLN:N	1:A:121:TYR:O	0.80	2.15	20	3
1:A:134:VAL:O	1:A:138:ASN:ND2	0.80	2.15	10	16
1:A:135:PHE:CE1	1:A:139:HIS:NE2	0.80	2.50	4	10
1:A:73:PHE:CZ	1:A:206:HIS:ND1	0.80	2.49	7	5
1:A:135:PHE:CZ	1:A:139:HIS:CE1	0.80	2.69	3	4
1:A:55:THR:O	1:A:56:VAL:HG13	0.80	1.76	20	8
1:A:91:VAL:HG12	1:A:117:VAL:HG12	0.80	1.53	4	5
1:A:59:PHE:CZ	1:A:118:ARG:NH2	0.80	2.50	18	7
1:A:187:GLY:N	1:A:188:PRO:CD	0.79	2.45	19	1
1:A:219:GLY:O	1:A:220:LEU:HD12	0.79	1.77	15	1
1:A:118:ARG:NH1	1:A:201:TYR:CZ	0.79	2.50	4	1
1:A:135:PHE:CE1	1:A:139:HIS:CE1	0.79	2.70	7	3
1:A:35:LEU:HD21	1:A:110:LYS:CG	0.79	2.07	15	2
1:A:217:TYR:CG	1:A:218:CYS:N	0.79	2.51	19	6
1:A:205:TYR:CD1	1:A:205:TYR:N	0.79	2.51	21	2
1:A:209:TYR:CD2	1:A:213:ASN:ND2	0.79	2.51	8	1
1:A:49:HIS:N	1:A:49:HIS:ND1	0.79	2.30	20	1
1:A:72:CYS:SG	1:A:74:TRP:CE3	0.79	2.75	7	8
1:A:131:LEU:HD22	1:A:131:LEU:N	0.79	1.93	13	1
1:A:59:PHE:CZ	1:A:118:ARG:NH1	0.79	2.51	7	1
1:A:73:PHE:CE1	1:A:206:HIS:ND1	0.79	2.51	9	12
1:A:103:TYR:CD2	1:A:206:HIS:NE2	0.79	2.51	17	5
1:A:45:THR:O	1:A:45:THR:HG23	0.79	1.75	16	7
1:A:131:LEU:N	1:A:131:LEU:HD23	0.79	1.92	8	4
1:A:72:CYS:SG	1:A:74:TRP:CZ3	0.78	2.76	16	4
1:A:118:ARG:NH1	1:A:201:TYR:CE1	0.78	2.51	4	1
1:A:74:TRP:CZ2	1:A:206:HIS:CE1	0.78	2.71	10	3
1:A:59:PHE:CE2	1:A:118:ARG:NH2	0.78	2.51	6	6
1:A:98:THR:HG22	1:A:100:ASN:ND2	0.78	1.92	7	1
1:A:35:LEU:HD22	1:A:110:LYS:O	0.78	1.77	8	4
1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CD1	0.78	2.50	9	6
1:A:194:ARG:NE	1:A:197:GLN:NE2	0.78	2.31	10	1
1:A:103:TYR:CG	1:A:206:HIS:CE1	0.78	2.72	10	8
1:A:70:MET:SD	1:A:76:ALA:HB1	0.78	2.18	19	4
1:A:121:TYR:CE1	1:A:131:LEU:HD22	0.78	2.14	11	2
1:A:70:MET:SD	1:A:139:HIS:CE1	0.78	2.77	8	4
1:A:28:VAL:C	1:A:29:ILE:HD13	0.78	1.99	8	1
1:A:48:HIS:NE2	1:A:208:GLN:NE2	0.78	2.31	4	2
1:A:100:ASN:HD22	1:A:100:ASN:N	0.77	1.78	7	1
1:A:65:MET:SD	1:A:65:MET:N	0.77	2.57	7	8
1:A:45:THR:HG23	1:A:45:THR:O	0.77	1.79	9	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:GLN:NE2	1:A:128:PHE:CD1	0.77	2.52	15	1
1:A:131:LEU:HD12	1:A:131:LEU:H	0.77	1.39	6	1
1:A:131:LEU:CD1	1:A:131:LEU:H	0.77	1.89	19	4
1:A:88:SER:O	1:A:89:THR:HG23	0.77	1.78	5	7
1:A:72:CYS:O	1:A:74:TRP:N	0.77	2.17	14	17
1:A:156:ARG:HH21	2:A:21:MYR:H132	0.77	1.37	20	1
1:A:195:GLU:O	1:A:196:GLY:C	0.77	2.22	3	3
1:A:118:ARG:CD	1:A:199:PHE:CZ	0.77	2.68	12	3
1:A:209:TYR:CD1	1:A:213:ASN:ND2	0.77	2.52	4	1
1:A:135:PHE:O	1:A:139:HIS:ND1	0.77	2.18	11	16
1:A:135:PHE:O	1:A:139:HIS:CE1	0.77	2.38	13	3
1:A:50:VAL:HG21	1:A:81:TRP:CG	0.77	2.14	6	1
1:A:123:PRO:C	1:A:125:HIS:H	0.76	1.80	15	6
1:A:94:ALA:HB1	1:A:198:VAL:HG13	0.76	1.57	21	1
1:A:65:MET:N	1:A:65:MET:SD	0.76	2.58	19	7
1:A:34:ALA:HB2	1:A:97:HIS:NE2	0.76	1.96	7	1
1:A:218:CYS:SG	1:A:219:GLY:N	0.76	2.58	17	4
1:A:160:TYR:CD1	1:A:198:VAL:HG21	0.76	2.15	21	1
1:A:76:ALA:O	1:A:80:PHE:CD1	0.76	2.38	14	12
1:A:156:ARG:NH2	1:A:194:ARG:NH2	0.76	2.33	7	1
1:A:28:VAL:HG13	1:A:28:VAL:O	0.76	1.80	15	7
1:A:59:PHE:CE1	1:A:118:ARG:NH2	0.75	2.53	7	1
1:A:96:GLY:N	1:A:113:HIS:ND1	0.75	2.35	5	14
1:A:91:VAL:CG1	1:A:117:VAL:HG22	0.75	2.12	16	2
1:A:210:LEU:HD22	1:A:216:GLY:O	0.75	1.82	19	2
1:A:118:ARG:HH22	1:A:120:VAL:N	0.75	1.80	8	1
1:A:184:HIS:O	1:A:185:ASN:ND2	0.75	2.20	16	2
1:A:74:TRP:NE1	1:A:209:TYR:CE1	0.74	2.55	6	1
1:A:138:ASN:O	1:A:139:HIS:ND1	0.74	2.21	11	9
1:A:184:HIS:CD2	1:A:186:PHE:CE2	0.74	2.76	11	1
1:A:194:ARG:HE	1:A:197:GLN:NE2	0.74	1.80	10	1
1:A:198:VAL:CG1	1:A:200:TYR:CE2	0.74	2.70	6	3
1:A:31:ALA:HB1	1:A:97:HIS:CE1	0.74	2.18	14	1
1:A:53:ASN:OD1	1:A:54:ARG:N	0.74	2.21	21	16
1:A:123:PRO:C	1:A:125:HIS:N	0.74	2.40	15	11
1:A:72:CYS:SG	1:A:72:CYS:O	0.74	2.45	20	2
1:A:145:MET:SD	1:A:145:MET:O	0.74	2.46	13	5
1:A:184:HIS:CD2	1:A:186:PHE:CD2	0.74	2.75	11	1
1:A:217:TYR:CD2	1:A:218:CYS:N	0.74	2.56	18	4
1:A:143:GLN:OE1	1:A:143:GLN:N	0.74	2.20	13	1
1:A:205:TYR:O	1:A:205:TYR:CD1	0.74	2.41	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:80:PHE:CZ	1:A:134:VAL:CG1	0.73	2.70	7	13
1:A:131:LEU:HD12	1:A:131:LEU:N	0.73	1.98	9	3
1:A:97:HIS:O	1:A:97:HIS:CD2	0.73	2.40	8	2
1:A:121:TYR:CE2	1:A:128:PHE:N	0.73	2.56	10	1
1:A:131:LEU:H	1:A:131:LEU:CD2	0.73	1.86	15	2
1:A:140:ASP:O	1:A:142:THR:N	0.73	2.21	20	3
1:A:156:ARG:HH21	2:A:21:MYR:H131	0.73	1.43	20	1
1:A:136:TRP:CG	1:A:177:TYR:CZ	0.73	2.75	7	1
1:A:98:THR:CG2	1:A:99:ARG:NH1	0.73	2.52	19	1
1:A:119:VAL:O	1:A:121:TYR:CE1	0.73	2.41	4	1
1:A:73:PHE:CD1	1:A:73:PHE:N	0.73	2.52	10	13
1:A:60:PRO:O	1:A:63:THR:HG23	0.73	1.83	15	1
1:A:94:ALA:N	1:A:113:HIS:ND1	0.73	2.36	13	5
1:A:74:TRP:CD1	1:A:209:TYR:OH	0.73	2.42	6	2
1:A:159:VAL:HG23	1:A:191:THR:CG2	0.73	2.12	11	9
1:A:218:CYS:O	1:A:219:GLY:O	0.73	2.06	10	5
1:A:78:ARG:CB	1:A:210:LEU:HD13	0.73	2.13	11	1
1:A:131:LEU:H	1:A:131:LEU:CD1	0.73	1.97	9	2
1:A:34:ALA:HB3	1:A:97:HIS:NE2	0.72	1.99	13	3
1:A:71:GLY:O	1:A:72:CYS:CB	0.72	2.38	18	6
1:A:121:TYR:CG	1:A:131:LEU:HD11	0.72	2.19	8	2
1:A:143:GLN:OE1	1:A:148:GLY:N	0.72	2.23	7	2
1:A:203:GLU:OE2	1:A:204:ASP:N	0.72	2.23	6	1
1:A:34:ALA:C	1:A:35:LEU:HD13	0.72	2.04	17	1
1:A:74:TRP:CD1	1:A:209:TYR:CZ	0.72	2.78	6	2
1:A:34:ALA:HB1	1:A:110:LYS:O	0.72	1.85	13	2
1:A:205:TYR:CG	1:A:205:TYR:O	0.72	2.43	14	1
1:A:42:ILE:N	1:A:43:PRO:CD	0.72	2.52	4	2
1:A:70:MET:SD	1:A:70:MET:N	0.72	2.63	7	1
1:A:71:GLY:O	1:A:72:CYS:C	0.72	2.28	19	14
1:A:35:LEU:CB	1:A:98:THR:HG23	0.72	2.15	5	2
1:A:127:SER:H	1:A:130:GLU:CD	0.71	1.89	21	1
1:A:121:TYR:CD1	1:A:121:TYR:N	0.71	2.57	11	6
1:A:68:PHE:CE2	1:A:131:LEU:O	0.71	2.44	17	4
1:A:74:TRP:CG	1:A:209:TYR:OH	0.71	2.43	16	3
1:A:103:TYR:CG	1:A:104:LYS:N	0.71	2.57	14	3
1:A:208:GLN:H	1:A:208:GLN:CD	0.71	1.85	6	7
1:A:48:HIS:NE2	1:A:208:GLN:CG	0.71	2.54	18	5
1:A:106:VAL:HG12	1:A:111:THR:CB	0.71	2.16	16	5
1:A:203:GLU:OE2	1:A:205:TYR:CD1	0.71	2.44	6	1
1:A:156:ARG:NH2	1:A:194:ARG:HH22	0.71	1.81	7	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:184:HIS:O	1:A:184:HIS:CD2	0.71	2.43	11	1
1:A:99:ARG:O	1:A:101:PRO:N	0.71	2.23	9	2
1:A:136:TRP:CZ2	1:A:173:SER:CA	0.71	2.74	20	1
1:A:53:ASN:ND2	1:A:87:TYR:O	0.71	2.24	4	14
1:A:91:VAL:CG1	1:A:117:VAL:HG12	0.71	2.15	11	4
1:A:141:PRO:O	1:A:190:THR:N	0.71	2.24	21	6
1:A:94:ALA:O	1:A:113:HIS:ND1	0.71	2.24	16	13
1:A:142:THR:OG1	1:A:190:THR:N	0.71	2.23	17	3
1:A:142:THR:O	1:A:144:GLY:N	0.71	2.23	11	3
1:A:78:ARG:HB2	1:A:210:LEU:HD13	0.71	1.62	11	1
1:A:103:TYR:CD1	1:A:206:HIS:CE1	0.71	2.79	7	3
1:A:143:GLN:NE2	1:A:147:GLN:CD	0.71	2.44	14	1
1:A:99:ARG:O	1:A:200:TYR:CZ	0.71	2.44	18	8
1:A:123:PRO:O	1:A:125:HIS:N	0.70	2.24	15	10
1:A:209:TYR:CG	1:A:213:ASN:ND2	0.70	2.58	4	2
1:A:185:ASN:ND2	1:A:185:ASN:C	0.70	2.44	18	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:131:LEU:O	0.70	2.43	13	13
1:A:116:VAL:HG11	1:A:160:TYR:CE2	0.70	2.21	6	7
1:A:103:TYR:CG	1:A:206:HIS:NE2	0.70	2.59	18	3
1:A:69:GLY:CA	1:A:116:VAL:HG12	0.70	2.16	21	4
1:A:106:VAL:O	1:A:108:SER:N	0.70	2.25	15	7
1:A:154:GLN:N	1:A:154:GLN:OE1	0.70	2.24	8	5
1:A:203:GLU:OE2	1:A:205:TYR:CE1	0.70	2.44	6	1
1:A:150:ASP:OD1	1:A:150:ASP:N	0.70	2.25	9	2
1:A:203:GLU:OE1	1:A:204:ASP:N	0.70	2.24	17	3
1:A:128:PHE:HA	1:A:131:LEU:HD21	0.70	1.61	15	2
1:A:73:PHE:CZ	1:A:115:GLU:OE1	0.70	2.44	2	5
1:A:97:HIS:CG	1:A:97:HIS:O	0.70	2.44	10	3
1:A:35:LEU:HD21	1:A:110:LYS:HG3	0.70	1.60	15	1
1:A:198:VAL:HG11	1:A:200:TYR:CZ	0.70	2.22	15	2
1:A:70:MET:O	1:A:147:GLN:NE2	0.70	2.24	12	2
1:A:76:ALA:O	1:A:80:PHE:CE1	0.70	2.45	7	10
1:A:97:HIS:CD2	1:A:97:HIS:O	0.70	2.45	10	4
1:A:121:TYR:CD1	1:A:131:LEU:HD11	0.70	2.22	14	2
1:A:88:SER:OG	1:A:90:GLN:NE2	0.70	2.24	13	7
1:A:185:ASN:C	1:A:185:ASN:ND2	0.70	2.45	16	1
1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:HD13	0.70	2.02	21	1
1:A:143:GLN:N	1:A:190:THR:OG1	0.70	2.25	12	5
1:A:99:ARG:O	1:A:200:TYR:CE1	0.70	2.45	12	3
1:A:139:HIS:O	1:A:223:THR:N	0.69	2.25	11	3
1:A:48:HIS:NE2	1:A:89:THR:OG1	0.69	2.25	2	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:PHE:CE2	1:A:101:PRO:O	0.69	2.45	21	3
1:A:107:CYS:SG	1:A:108:SER:N	0.69	2.64	18	3
1:A:56:VAL:HG12	1:A:201:TYR:CZ	0.69	2.21	12	1
1:A:96:GLY:CA	1:A:113:HIS:ND1	0.69	2.56	5	8
1:A:32:GLU:OE2	1:A:33:GLU:N	0.69	2.25	8	1
1:A:99:ARG:O	1:A:200:TYR:CD1	0.69	2.45	12	1
1:A:99:ARG:NE	1:A:100:ASN:HD22	0.69	1.85	9	1
1:A:159:VAL:HG13	1:A:191:THR:CG2	0.69	2.17	5	5
1:A:208:GLN:CD	1:A:208:GLN:H	0.69	1.91	20	6
1:A:209:TYR:CZ	1:A:213:ASN:OD1	0.69	2.45	17	3
1:A:197:GLN:N	1:A:197:GLN:OE1	0.69	2.26	10	2
1:A:143:GLN:CD	1:A:143:GLN:N	0.69	2.44	13	1
1:A:48:HIS:CG	1:A:88:SER:OG	0.69	2.46	5	3
1:A:73:PHE:CG	1:A:115:GLU:OE2	0.69	2.45	10	1
1:A:192:ASP:OD1	1:A:194:ARG:NH1	0.69	2.25	8	7
1:A:135:PHE:CD1	1:A:139:HIS:NE2	0.69	2.60	6	3
1:A:71:GLY:N	1:A:147:GLN:OE1	0.69	2.26	13	2
1:A:154:GLN:O	1:A:155:TYR:CD1	0.69	2.46	12	3
1:A:192:ASP:OD2	1:A:194:ARG:NH2	0.69	2.25	8	7
1:A:98:THR:O	1:A:99:ARG:O	0.69	2.11	9	5
1:A:151:PHE:CD1	1:A:151:PHE:O	0.69	2.46	3	4
1:A:99:ARG:CD	1:A:99:ARG:H	0.69	2.01	19	2
1:A:74:TRP:CD2	1:A:209:TYR:OH	0.69	2.45	6	1
1:A:48:HIS:CD2	1:A:208:GLN:NE2	0.69	2.60	4	6
1:A:73:PHE:CD1	1:A:115:GLU:OE1	0.69	2.46	3	2
1:A:85:GLY:O	1:A:123:PRO:CG	0.69	2.41	15	1
1:A:64:GLN:CB	1:A:121:TYR:O	0.69	2.40	20	1
1:A:99:ARG:O	1:A:200:TYR:CG	0.69	2.46	12	1
1:A:78:ARG:O	1:A:80:PHE:N	0.69	2.25	10	15
1:A:115:GLU:OE1	1:A:155:TYR:CE1	0.69	2.46	7	1
1:A:70:MET:SD	1:A:76:ALA:CB	0.69	2.81	13	4
1:A:77:GLU:OE1	1:A:91:VAL:HG13	0.69	1.87	21	3
1:A:65:MET:SD	1:A:118:ARG:NH2	0.69	2.65	11	1
1:A:90:GLN:OE1	1:A:118:ARG:NH2	0.69	2.24	13	1
1:A:89:THR:O	1:A:208:GLN:NE2	0.69	2.26	21	4
1:A:124:GLU:OE2	1:A:125:HIS:CD2	0.69	2.46	21	1
1:A:103:TYR:CZ	1:A:155:TYR:OH	0.69	2.46	8	1
1:A:121:TYR:CD1	1:A:131:LEU:HD21	0.69	2.23	19	3
1:A:119:VAL:O	1:A:121:TYR:CZ	0.69	2.46	4	1
1:A:99:ARG:O	1:A:200:TYR:CE2	0.69	2.46	12	4
1:A:106:VAL:O	1:A:109:GLU:N	0.69	2.26	10	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:VAL:O	1:A:28:VAL:HG12	0.69	1.86	18	4
1:A:71:GLY:O	1:A:73:PHE:N	0.69	2.26	15	8
1:A:73:PHE:CE1	1:A:115:GLU:OE1	0.69	2.45	3	7
1:A:180:VAL:O	1:A:184:HIS:CE1	0.69	2.46	3	1
1:A:74:TRP:NE1	1:A:209:TYR:CZ	0.69	2.60	6	1
1:A:73:PHE:CE2	1:A:115:GLU:OE1	0.68	2.45	14	2
1:A:73:PHE:CZ	1:A:115:GLU:OE2	0.68	2.46	3	8
1:A:108:SER:O	1:A:110:LYS:N	0.68	2.25	10	9
1:A:124:GLU:OE2	1:A:124:GLU:N	0.68	2.26	17	1
1:A:48:HIS:CE1	1:A:89:THR:OG1	0.68	2.46	21	5
1:A:67:VAL:O	1:A:68:PHE:CD1	0.68	2.46	3	2
1:A:87:TYR:CE2	1:A:88:SER:OG	0.68	2.46	6	1
1:A:99:ARG:O	1:A:200:TYR:CD2	0.68	2.46	12	1
1:A:54:ARG:NE	1:A:57:GLU:O	0.68	2.26	2	1
1:A:34:ALA:HB2	1:A:97:HIS:CE1	0.68	2.23	18	1
1:A:98:THR:CG2	1:A:100:ASN:ND2	0.68	2.56	7	1
1:A:109:GLU:O	1:A:111:THR:N	0.68	2.27	14	4
1:A:154:GLN:OE1	1:A:155:TYR:CE2	0.68	2.46	18	2
1:A:192:ASP:OD2	1:A:194:ARG:CZ	0.68	2.42	8	9
1:A:192:ASP:OD2	1:A:194:ARG:NH1	0.68	2.27	10	10
1:A:103:TYR:CE2	1:A:155:TYR:OH	0.68	2.45	8	1
1:A:147:GLN:OE1	1:A:148:GLY:N	0.68	2.26	14	1
1:A:156:ARG:NH2	1:A:192:ASP:OD2	0.68	2.26	2	3
1:A:208:GLN:N	1:A:208:GLN:OE1	0.68	2.26	7	4
1:A:142:THR:CG2	1:A:142:THR:O	0.68	2.42	13	2
1:A:73:PHE:N	1:A:115:GLU:OE1	0.68	2.27	4	1
1:A:62:GLY:O	1:A:122:ARG:NE	0.68	2.27	20	1
1:A:91:VAL:HG23	1:A:207:GLN:CD	0.68	2.09	11	9
1:A:115:GLU:OE1	1:A:115:GLU:N	0.68	2.27	16	1
1:A:100:ASN:N	1:A:100:ASN:HD22	0.68	1.86	15	2
1:A:178:GLN:NE2	1:A:182:SER:OG	0.68	2.27	15	1
1:A:31:ALA:CB	1:A:97:HIS:ND1	0.68	2.56	2	1
1:A:72:CYS:N	1:A:150:ASP:OD2	0.68	2.27	6	2
1:A:144:GLY:O	1:A:156:ARG:NH1	0.68	2.26	21	2
1:A:64:GLN:OE1	1:A:65:MET:N	0.68	2.27	18	3
1:A:174:LYS:HZ3	1:A:175:GLU:N	0.68	1.87	21	1
1:A:160:TYR:OH	1:A:194:ARG:NH2	0.68	2.27	6	1
1:A:185:ASN:HD22	1:A:185:ASN:C	0.68	1.92	18	1
1:A:197:GLN:O	1:A:199:PHE:N	0.68	2.27	7	1
1:A:48:HIS:O	1:A:52:GLY:N	0.68	2.26	12	14
1:A:108:SER:O	1:A:109:GLU:CG	0.68	2.41	11	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:208:GLN:OE1	1:A:208:GLN:N	0.68	2.27	8	5
1:A:144:GLY:N	1:A:190:THR:OG1	0.68	2.26	3	5
1:A:73:PHE:CE2	1:A:115:GLU:CD	0.68	2.68	2	1
1:A:124:GLU:OE2	1:A:125:HIS:CE1	0.68	2.47	21	1
1:A:35:LEU:HD21	1:A:110:LYS:HG2	0.68	1.66	8	2
1:A:78:ARG:NH1	1:A:214:PRO:O	0.68	2.27	12	3
1:A:76:ALA:CB	1:A:117:VAL:HG21	0.68	2.19	14	3
1:A:118:ARG:NH1	1:A:201:TYR:OH	0.68	2.26	15	5
1:A:194:ARG:O	1:A:197:GLN:NE2	0.68	2.27	13	2
1:A:153:THR:O	1:A:156:ARG:NH1	0.68	2.27	5	3
1:A:150:ASP:OD1	1:A:155:TYR:CE2	0.68	2.46	8	1
1:A:80:PHE:CZ	1:A:134:VAL:HG12	0.67	2.24	21	11
1:A:44:VAL:HG12	1:A:204:ASP:N	0.67	2.03	18	7
1:A:192:ASP:OD1	1:A:194:ARG:NE	0.67	2.27	9	5
1:A:142:THR:N	1:A:143:GLN:OE1	0.67	2.27	13	1
1:A:185:ASN:O	1:A:185:ASN:ND2	0.67	2.26	16	1
1:A:124:GLU:OE1	1:A:125:HIS:ND1	0.67	2.27	21	1
1:A:168:GLU:O	1:A:172:ARG:NH1	0.67	2.27	15	1
1:A:129:GLU:O	1:A:132:LEU:CD2	0.67	2.43	20	1
1:A:117:VAL:HG23	1:A:117:VAL:O	0.67	1.87	3	2
1:A:80:PHE:CE2	1:A:134:VAL:CG1	0.67	2.77	4	5
1:A:48:HIS:NE2	1:A:89:THR:O	0.67	2.26	5	2
1:A:185:ASN:C	1:A:185:ASN:HD22	0.67	1.92	16	1
1:A:137:GLU:OE1	1:A:137:GLU:N	0.67	2.27	4	2
1:A:178:GLN:OE1	1:A:189:ILE:HG23	0.67	1.89	4	2
1:A:156:ARG:NH1	1:A:190:THR:O	0.67	2.27	14	2
1:A:91:VAL:O	1:A:207:GLN:NE2	0.67	2.27	15	10
1:A:91:VAL:N	1:A:207:GLN:OE1	0.67	2.27	4	12
1:A:121:TYR:CD2	1:A:131:LEU:HD13	0.67	2.24	11	2
1:A:44:VAL:O	1:A:46:ALA:N	0.67	2.27	21	8
1:A:77:GLU:OE2	1:A:90:GLN:N	0.67	2.27	19	4
1:A:145:MET:O	1:A:152:GLY:CA	0.67	2.42	12	2
1:A:64:GLN:NE2	1:A:121:TYR:N	0.67	2.42	3	1
1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:OE1	0.67	2.27	18	1
1:A:94:ALA:O	1:A:114:ALA:N	0.67	2.27	17	12
1:A:157:SER:OG	1:A:190:THR:HG23	0.67	1.89	18	3
1:A:140:ASP:CG	1:A:143:GLN:NE2	0.67	2.48	11	4
1:A:205:TYR:O	1:A:209:TYR:CE2	0.67	2.48	6	3
1:A:160:TYR:CD2	1:A:198:VAL:HG11	0.67	2.24	21	1
1:A:209:TYR:O	1:A:213:ASN:ND2	0.67	2.27	4	2
1:A:192:ASP:OD2	1:A:194:ARG:NE	0.67	2.27	12	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:HIS:CD2	1:A:212:LYS:HZ2	0.67	2.07	15	1
1:A:154:GLN:CD	1:A:155:TYR:CZ	0.67	2.68	3	4
1:A:65:MET:O	1:A:65:MET:SD	0.67	2.53	14	2
1:A:103:TYR:CD1	1:A:115:GLU:OE2	0.67	2.47	15	1
1:A:45:THR:OG1	1:A:49:HIS:NE2	0.67	2.27	20	1
1:A:185:ASN:ND2	1:A:185:ASN:O	0.67	2.27	18	1
1:A:70:MET:CG	1:A:71:GLY:N	0.67	2.57	20	3
1:A:139:HIS:C	1:A:139:HIS:ND1	0.67	2.45	10	2
1:A:107:CYS:O	1:A:109:GLU:N	0.67	2.28	9	6
1:A:143:GLN:O	1:A:143:GLN:CG	0.67	2.42	6	1
1:A:168:GLU:OE2	1:A:169:ALA:N	0.67	2.28	9	1
1:A:72:CYS:SG	1:A:74:TRP:CG	0.67	2.88	11	2
1:A:145:MET:CG	1:A:145:MET:O	0.67	2.43	13	1
1:A:115:GLU:CD	1:A:115:GLU:N	0.67	2.48	16	1
1:A:145:MET:O	1:A:145:MET:SD	0.67	2.53	15	3
1:A:149:ASN:H	1:A:220:LEU:HD11	0.67	1.49	20	1
1:A:145:MET:O	1:A:152:GLY:N	0.67	2.28	12	2
1:A:45:THR:N	1:A:204:ASP:OD2	0.67	2.27	18	1
1:A:216:GLY:O	1:A:218:CYS:N	0.67	2.27	16	3
1:A:192:ASP:O	1:A:193:ILE:HD13	0.67	1.90	17	1
1:A:70:MET:N	1:A:115:GLU:OE2	0.67	2.27	11	1
1:A:203:GLU:H	1:A:203:GLU:CD	0.67	1.91	10	1
1:A:120:VAL:C	1:A:121:TYR:CD1	0.66	2.68	18	4
1:A:213:ASN:O	1:A:215:ASP:N	0.66	2.27	20	9
1:A:208:GLN:CD	1:A:208:GLN:N	0.66	2.48	20	6
1:A:150:ASP:OD1	1:A:155:TYR:CZ	0.66	2.47	8	1
1:A:216:GLY:O	1:A:217:TYR:O	0.66	2.12	20	6
1:A:210:LEU:HD22	1:A:218:CYS:SG	0.66	2.30	4	1
1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:OE1	0.66	2.27	17	3
1:A:108:SER:O	1:A:109:GLU:CB	0.66	2.43	5	5
1:A:72:CYS:SG	1:A:103:TYR:OH	0.66	2.53	15	1
1:A:159:VAL:N	1:A:192:ASP:O	0.66	2.27	10	11
1:A:97:HIS:N	1:A:97:HIS:ND1	0.66	2.39	21	2
1:A:77:GLU:OE2	1:A:119:VAL:HG13	0.66	1.91	11	1
1:A:203:GLU:CD	1:A:204:ASP:N	0.66	2.49	2	3
1:A:73:PHE:CE1	1:A:103:TYR:CD2	0.66	2.84	15	1
1:A:114:ALA:CB	1:A:156:ARG:HH12	0.66	2.02	20	2
1:A:121:TYR:CD2	1:A:131:LEU:HD12	0.66	2.26	2	1
1:A:99:ARG:C	1:A:100:ASN:ND2	0.66	2.48	7	2
1:A:195:GLU:H	1:A:195:GLU:CD	0.66	1.94	3	3
1:A:209:TYR:CZ	1:A:213:ASN:CG	0.66	2.69	14	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:73:PHE:CZ	1:A:115:GLU:CD	0.66	2.69	20	8
1:A:195:GLU:CD	1:A:195:GLU:H	0.66	1.92	17	6
1:A:118:ARG:CZ	1:A:118:ARG:C	0.66	2.64	8	1
1:A:64:GLN:HE21	1:A:121:TYR:H	0.66	1.30	3	1
1:A:73:PHE:HB2	1:A:91:VAL:HG11	0.66	1.67	6	4
1:A:65:MET:SD	1:A:65:MET:O	0.66	2.53	17	1
1:A:136:TRP:CB	1:A:177:TYR:CE2	0.66	2.79	17	1
1:A:140:ASP:OD2	1:A:143:GLN:NE2	0.66	2.29	3	3
1:A:115:GLU:N	1:A:115:GLU:CD	0.66	2.48	12	1
1:A:91:VAL:HG12	1:A:117:VAL:HA	0.66	1.66	2	7
1:A:72:CYS:SG	1:A:74:TRP:CH2	0.66	2.89	16	1
1:A:203:GLU:OE1	1:A:205:TYR:CZ	0.66	2.49	6	1
1:A:139:HIS:NE2	1:A:157:SER:OG	0.66	2.27	9	1
1:A:163:SER:O	1:A:165:VAL:N	0.66	2.29	12	9
1:A:143:GLN:HE22	1:A:147:GLN:CD	0.66	1.95	14	1
1:A:119:VAL:HG21	1:A:131:LEU:HD23	0.66	1.67	20	1
1:A:73:PHE:CD2	1:A:115:GLU:OE1	0.66	2.48	10	2
1:A:73:PHE:CD1	1:A:115:GLU:OE2	0.66	2.49	10	1
1:A:203:GLU:CD	1:A:205:TYR:CE2	0.66	2.69	6	1
1:A:114:ALA:HB2	1:A:156:ARG:HH12	0.66	1.49	3	2
1:A:93:PHE:N	1:A:200:TYR:O	0.65	2.29	6	11
1:A:44:VAL:CG1	1:A:202:ALA:O	0.65	2.44	3	9
1:A:192:ASP:CG	1:A:194:ARG:NH1	0.65	2.50	21	8
1:A:195:GLU:CD	1:A:195:GLU:N	0.65	2.50	4	5
1:A:32:GLU:CD	1:A:32:GLU:N	0.65	2.49	14	2
1:A:72:CYS:SG	1:A:150:ASP:OD2	0.65	2.53	12	1
1:A:94:ALA:C	1:A:113:HIS:ND1	0.65	2.48	17	12
1:A:103:TYR:CE2	1:A:206:HIS:NE2	0.65	2.65	17	1
1:A:102:THR:OG1	1:A:105:GLU:CG	0.65	2.44	13	8
1:A:123:PRO:HG2	1:A:126:ILE:H	0.65	1.49	10	2
1:A:35:LEU:O	1:A:98:THR:CG2	0.65	2.44	10	3
1:A:126:ILE:HD11	1:A:130:GLU:HB3	0.65	1.67	8	1
1:A:103:TYR:CE1	1:A:115:GLU:CD	0.65	2.70	15	1
1:A:56:VAL:HG12	1:A:201:TYR:OH	0.65	1.90	12	1
1:A:121:TYR:HB2	1:A:126:ILE:HG22	0.65	1.68	10	1
1:A:146:ARG:CZ	1:A:148:GLY:O	0.65	2.45	4	1
1:A:34:ALA:HB3	1:A:97:HIS:CD2	0.65	2.27	17	1
1:A:154:GLN:OE1	1:A:154:GLN:N	0.65	2.30	5	6
1:A:64:GLN:O	1:A:121:TYR:N	0.65	2.27	10	4
1:A:121:TYR:CD1	1:A:131:LEU:CD2	0.65	2.79	18	1
1:A:108:SER:C	1:A:110:LYS:H	0.65	1.94	10	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:GLN:OE1	1:A:118:ARG:CZ	0.65	2.45	13	1
1:A:81:TRP:CH2	1:A:210:LEU:HD12	0.65	2.26	16	1
1:A:203:GLU:OE2	1:A:205:TYR:CE2	0.65	2.50	21	1
1:A:74:TRP:O	1:A:210:LEU:CD1	0.65	2.45	14	11
1:A:132:LEU:HD12	1:A:133:LYS:N	0.65	2.07	16	3
1:A:207:GLN:C	1:A:209:TYR:H	0.65	1.94	21	20
1:A:91:VAL:HG23	1:A:207:GLN:OE1	0.65	1.90	11	12
1:A:165:VAL:O	1:A:168:GLU:CG	0.65	2.45	17	1
1:A:146:ARG:CD	1:A:146:ARG:C	0.65	2.65	3	2
1:A:192:ASP:OD2	1:A:194:ARG:CG	0.65	2.45	12	1
1:A:169:ALA:O	1:A:173:SER:N	0.65	2.30	17	3
1:A:135:PHE:O	1:A:139:HIS:CG	0.65	2.49	11	5
1:A:94:ALA:HB3	1:A:116:VAL:HG21	0.65	1.69	5	7
1:A:48:HIS:CD2	1:A:208:GLN:HE21	0.65	2.10	4	1
1:A:108:SER:OG	1:A:110:LYS:CD	0.65	2.45	15	1
1:A:73:PHE:CD2	1:A:115:GLU:CD	0.65	2.70	10	1
1:A:98:THR:CG2	1:A:100:ASN:HD21	0.65	2.01	7	1
1:A:102:THR:C	1:A:106:VAL:HG13	0.65	2.12	7	1
1:A:98:THR:O	1:A:99:ARG:C	0.65	2.33	21	6
1:A:70:MET:CB	1:A:139:HIS:NE2	0.65	2.60	20	4
1:A:114:ALA:O	1:A:116:VAL:HG22	0.65	1.92	2	5
1:A:139:HIS:CG	1:A:140:ASP:N	0.65	2.62	10	2
1:A:218:CYS:SG	1:A:218:CYS:O	0.65	2.54	5	2
1:A:121:TYR:CD2	1:A:131:LEU:HD11	0.65	2.27	9	3
1:A:205:TYR:N	1:A:205:TYR:CD1	0.65	2.62	10	3
1:A:124:GLU:CD	1:A:124:GLU:H	0.65	1.96	2	2
1:A:196:GLY:O	1:A:197:GLN:CB	0.65	2.45	7	2
1:A:154:GLN:NE2	1:A:155:TYR:OH	0.65	2.31	3	3
1:A:89:THR:C	1:A:90:GLN:NE2	0.65	2.50	2	6
1:A:139:HIS:O	1:A:223:THR:CG2	0.65	2.45	18	8
1:A:195:GLU:OE1	1:A:195:GLU:N	0.65	2.30	4	3
1:A:100:ASN:O	1:A:101:PRO:O	0.64	2.14	15	3
1:A:34:ALA:CB	1:A:97:HIS:CD2	0.64	2.79	7	1
1:A:195:GLU:N	1:A:195:GLU:CD	0.64	2.50	13	5
1:A:184:HIS:C	1:A:184:HIS:CD2	0.64	2.68	11	1
1:A:83:LEU:C	1:A:84:LYS:HZ1	0.64	1.95	5	1
1:A:64:GLN:CA	1:A:121:TYR:O	0.64	2.45	20	1
1:A:48:HIS:NE2	1:A:208:GLN:CD	0.64	2.50	18	5
1:A:144:GLY:CA	1:A:190:THR:HG21	0.64	2.21	13	4
1:A:203:GLU:OE2	1:A:205:TYR:CD2	0.64	2.50	21	1
1:A:65:MET:O	1:A:162:THR:HG23	0.64	1.92	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:ALA:CB	1:A:110:LYS:O	0.64	2.45	14	4
1:A:145:MET:O	1:A:152:GLY:O	0.64	2.16	20	7
1:A:172:ARG:O	1:A:176:GLU:CG	0.64	2.45	14	3
1:A:192:ASP:CG	1:A:194:ARG:NH2	0.64	2.50	5	3
1:A:203:GLU:CD	1:A:205:TYR:CZ	0.64	2.70	6	1
1:A:50:VAL:HG21	1:A:81:TRP:CD2	0.64	2.27	6	2
1:A:197:GLN:O	1:A:198:VAL:CB	0.64	2.46	21	1
1:A:103:TYR:CD1	1:A:115:GLU:CD	0.64	2.70	15	1
1:A:105:GLU:O	1:A:110:LYS:NZ	0.64	2.30	17	1
1:A:197:GLN:H	1:A:197:GLN:CD	0.64	1.95	5	1
1:A:55:THR:C	1:A:56:VAL:HG22	0.64	2.13	15	4
1:A:176:GLU:OE2	1:A:177:TYR:CD2	0.64	2.51	17	1
1:A:124:GLU:H	1:A:124:GLU:CD	0.64	1.96	6	3
1:A:139:HIS:O	1:A:222:GLY:CA	0.64	2.45	14	2
1:A:151:PHE:CG	1:A:151:PHE:O	0.64	2.49	3	3
1:A:210:LEU:HD13	1:A:216:GLY:O	0.64	1.92	19	2
1:A:168:GLU:CD	1:A:169:ALA:N	0.64	2.50	9	1
1:A:98:THR:C	1:A:100:ASN:HD22	0.64	1.96	7	1
1:A:122:ARG:CG	1:A:122:ARG:O	0.64	2.46	12	1
1:A:83:LEU:HD11	1:A:134:VAL:HG21	0.64	1.69	4	1
1:A:208:GLN:N	1:A:208:GLN:CD	0.64	2.51	3	8
1:A:212:LYS:NZ	1:A:212:LYS:CB	0.64	2.60	17	1
1:A:115:GLU:CG	1:A:154:GLN:O	0.64	2.46	14	3
1:A:71:GLY:N	1:A:115:GLU:OE2	0.64	2.30	11	1
1:A:48:HIS:CD2	1:A:208:GLN:CD	0.64	2.71	16	4
1:A:70:MET:O	1:A:155:TYR:O	0.64	2.15	15	2
1:A:103:TYR:CD1	1:A:103:TYR:O	0.64	2.51	5	1
1:A:42:ILE:O	1:A:42:ILE:CG1	0.64	2.46	6	1
1:A:77:GLU:OE2	1:A:208:GLN:NE2	0.64	2.31	20	1
1:A:192:ASP:OD2	1:A:194:ARG:CD	0.64	2.46	12	1
1:A:154:GLN:NE2	1:A:155:TYR:CZ	0.63	2.66	3	5
1:A:31:ALA:O	1:A:97:HIS:CD2	0.63	2.51	17	1
1:A:209:TYR:CE1	1:A:213:ASN:OD1	0.63	2.51	17	1
1:A:184:HIS:O	1:A:184:HIS:CG	0.63	2.51	11	1
1:A:49:HIS:CG	1:A:212:LYS:CE	0.63	2.81	21	1
1:A:61:GLU:O	1:A:122:ARG:NE	0.63	2.31	20	1
1:A:96:GLY:H	1:A:113:HIS:CE1	0.63	2.11	21	5
1:A:171:LEU:C	1:A:171:LEU:HD12	0.63	2.13	13	1
1:A:128:PHE:CZ	1:A:132:LEU:HD23	0.63	2.28	16	1
1:A:94:ALA:CB	1:A:198:VAL:HG13	0.63	2.23	21	1
1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:OE2	0.63	2.30	21	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:O	0.63	2.47	20	1
1:A:77:GLU:CD	1:A:78:ARG:N	0.63	2.50	18	1
1:A:192:ASP:OD1	1:A:194:ARG:CZ	0.63	2.46	4	6
1:A:219:GLY:C	1:A:220:LEU:HD12	0.63	2.14	11	1
1:A:81:TRP:CZ2	1:A:211:SER:OG	0.63	2.47	13	1
1:A:112:GLY:O	2:A:21:MYR:C14	0.63	2.46	8	2
1:A:210:LEU:O	1:A:214:PRO:N	0.63	2.32	7	2
1:A:45:THR:O	1:A:45:THR:CG2	0.63	2.47	16	6
1:A:192:ASP:OD1	1:A:194:ARG:CD	0.63	2.46	11	3
1:A:153:THR:O	1:A:156:ARG:CD	0.63	2.47	2	3
1:A:198:VAL:HG13	1:A:198:VAL:O	0.63	1.91	7	3
1:A:70:MET:CG	1:A:71:GLY:H	0.63	2.07	13	2
1:A:74:TRP:CE2	1:A:209:TYR:OH	0.63	2.46	6	1
1:A:196:GLY:O	1:A:197:GLN:HB3	0.63	1.92	7	1
1:A:77:GLU:OE2	1:A:90:GLN:CA	0.63	2.47	13	2
1:A:84:LYS:CA	1:A:84:LYS:NZ	0.63	2.62	5	1
1:A:104:LYS:O	1:A:107:CYS:SG	0.63	2.54	5	3
1:A:219:GLY:O	1:A:220:LEU:CG	0.63	2.46	19	1
1:A:140:ASP:CG	1:A:143:GLN:HE21	0.63	1.96	2	2
1:A:139:HIS:ND1	1:A:139:HIS:O	0.63	2.31	9	2
1:A:215:ASP:O	1:A:217:TYR:N	0.63	2.32	11	8
1:A:95:GLY:O	1:A:112:GLY:O	0.63	2.17	21	12
1:A:178:GLN:OE1	1:A:189:ILE:CG1	0.63	2.47	9	3
1:A:84:LYS:N	1:A:84:LYS:NZ	0.63	2.47	5	1
1:A:103:TYR:O	1:A:107:CYS:SG	0.63	2.56	21	2
1:A:99:ARG:O	1:A:100:ASN:C	0.63	2.36	9	2
1:A:87:TYR:CD1	1:A:120:VAL:HG22	0.63	2.28	15	1
1:A:73:PHE:CD1	1:A:206:HIS:ND1	0.63	2.64	19	4
1:A:83:LEU:C	1:A:83:LEU:HD12	0.63	2.15	16	3
1:A:137:GLU:CD	1:A:137:GLU:N	0.63	2.52	4	1
1:A:128:PHE:O	1:A:128:PHE:CD1	0.63	2.51	7	1
1:A:83:LEU:C	1:A:83:LEU:CD1	0.63	2.68	11	2
1:A:44:VAL:O	1:A:45:THR:C	0.63	2.36	4	5
1:A:93:PHE:CD2	1:A:101:PRO:O	0.63	2.52	5	3
1:A:145:MET:SD	1:A:145:MET:C	0.63	2.77	5	2
1:A:28:VAL:O	1:A:28:VAL:HG13	0.63	1.92	12	3
1:A:115:GLU:N	1:A:115:GLU:OE1	0.63	2.32	12	1
1:A:219:GLY:O	1:A:220:LEU:CB	0.62	2.47	19	5
1:A:178:GLN:NE2	1:A:187:GLY:O	0.62	2.30	4	4
1:A:57:GLU:H	1:A:57:GLU:CD	0.62	1.97	5	2
1:A:159:VAL:CG1	1:A:191:THR:CG2	0.62	2.77	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:192:ASP:CG	1:A:194:ARG:CZ	0.62	2.67	16	5
1:A:145:MET:C	1:A:145:MET:SD	0.62	2.77	13	2
1:A:122:ARG:O	1:A:122:ARG:CG	0.62	2.47	5	1
1:A:126:ILE:HD11	1:A:130:GLU:CB	0.62	2.22	8	1
1:A:197:GLN:CD	1:A:197:GLN:H	0.62	1.97	6	1
1:A:64:GLN:HE22	1:A:121:TYR:CA	0.62	2.06	3	1
1:A:46:ALA:O	1:A:55:THR:OG1	0.62	2.17	5	16
1:A:154:GLN:CD	1:A:154:GLN:H	0.62	1.98	18	4
1:A:215:ASP:OD2	1:A:217:TYR:CE1	0.62	2.52	6	1
1:A:143:GLN:O	1:A:144:GLY:O	0.62	2.16	9	11
1:A:103:TYR:CB	1:A:206:HIS:CE1	0.62	2.82	8	4
1:A:149:ASN:N	1:A:149:ASN:OD1	0.62	2.30	14	1
1:A:91:VAL:HG21	1:A:206:HIS:O	0.62	1.93	13	11
1:A:83:LEU:CD1	1:A:83:LEU:C	0.62	2.68	16	1
1:A:49:HIS:CE1	1:A:212:LYS:HZ2	0.62	2.12	15	1
1:A:121:TYR:CE2	1:A:131:LEU:HD13	0.62	2.29	11	2
1:A:74:TRP:C	1:A:210:LEU:CD1	0.62	2.68	12	3
1:A:209:TYR:O	1:A:213:ASN:N	0.62	2.32	21	2
1:A:32:GLU:OE2	1:A:33:GLU:CB	0.62	2.47	8	1
1:A:157:SER:O	1:A:192:ASP:N	0.62	2.33	2	10
1:A:70:MET:O	1:A:156:ARG:O	0.62	2.18	8	4
1:A:33:GLU:O	1:A:34:ALA:O	0.62	2.17	7	11
1:A:100:ASN:OD1	1:A:113:HIS:NE2	0.62	2.32	17	1
1:A:103:TYR:CD1	1:A:103:TYR:C	0.62	2.69	19	6
1:A:209:TYR:C	1:A:209:TYR:CD1	0.62	2.72	18	5
1:A:81:TRP:CE2	1:A:211:SER:OG	0.62	2.46	4	1
1:A:196:GLY:O	1:A:197:GLN:CG	0.62	2.48	3	1
1:A:216:GLY:O	1:A:217:TYR:C	0.62	2.38	4	5
1:A:118:ARG:HD2	1:A:199:PHE:CZ	0.62	2.30	12	5
1:A:54:ARG:O	1:A:87:TYR:OH	0.62	2.18	15	18
1:A:140:ASP:OD1	1:A:140:ASP:N	0.61	2.32	13	2
1:A:77:GLU:OE2	1:A:91:VAL:HG13	0.61	1.95	5	2
1:A:28:VAL:O	1:A:28:VAL:CG1	0.61	2.47	15	5
1:A:106:VAL:CG1	1:A:111:THR:OG1	0.61	2.46	10	4
1:A:136:TRP:CG	1:A:177:TYR:CE2	0.61	2.87	21	1
1:A:127:SER:O	1:A:130:GLU:OE2	0.61	2.17	21	1
1:A:28:VAL:O	1:A:29:ILE:HD13	0.61	1.94	8	1
1:A:143:GLN:HE22	1:A:147:GLN:NE2	0.61	1.92	14	1
1:A:140:ASP:OD1	1:A:142:THR:N	0.61	2.32	12	1
1:A:136:TRP:NE1	1:A:173:SER:OG	0.61	2.33	7	2
1:A:54:ARG:CB	1:A:87:TYR:OH	0.61	2.48	9	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:VAL:HG22	1:A:211:SER:CB	0.61	2.25	19	3
1:A:129:GLU:O	1:A:133:LYS:N	0.61	2.32	13	5
1:A:100:ASN:CB	1:A:101:PRO:CD	0.61	2.79	7	2
1:A:134:VAL:O	1:A:138:ASN:OD1	0.61	2.19	21	12
1:A:140:ASP:OD1	1:A:147:GLN:NE2	0.61	2.33	16	1
1:A:156:ARG:HH22	1:A:192:ASP:CB	0.61	2.08	9	1
1:A:134:VAL:O	1:A:138:ASN:CG	0.61	2.39	5	13
1:A:121:TYR:CG	1:A:131:LEU:CD2	0.61	2.84	19	1
1:A:143:GLN:O	1:A:146:ARG:O	0.61	2.17	2	3
1:A:198:VAL:HG11	1:A:200:TYR:CE2	0.61	2.31	15	2
1:A:155:TYR:O	1:A:156:ARG:O	0.61	2.18	13	2
1:A:209:TYR:CE2	1:A:217:TYR:OH	0.61	2.52	14	1
1:A:73:PHE:CE1	1:A:115:GLU:OE2	0.61	2.54	6	3
1:A:43:PRO:O	1:A:44:VAL:CG1	0.61	2.49	4	6
1:A:89:THR:C	1:A:90:GLN:HE21	0.61	1.99	14	2
1:A:163:SER:C	1:A:165:VAL:N	0.61	2.51	12	17
1:A:139:HIS:O	1:A:139:HIS:ND1	0.61	2.33	15	1
1:A:208:GLN:O	1:A:210:LEU:N	0.61	2.34	6	1
1:A:126:ILE:HG22	1:A:130:GLU:CD	0.61	2.15	3	1
1:A:157:SER:OG	1:A:190:THR:O	0.61	2.18	14	5
1:A:29:ILE:HG21	1:A:109:GLU:O	0.61	1.95	13	4
1:A:163:SER:OG	1:A:164:ALA:N	0.61	2.34	19	2
1:A:54:ARG:C	1:A:87:TYR:OH	0.61	2.40	4	16
1:A:209:TYR:CE1	1:A:213:ASN:CG	0.61	2.75	17	1
1:A:140:ASP:O	1:A:143:GLN:OE1	0.61	2.19	9	2
1:A:216:GLY:O	1:A:218:CYS:SG	0.61	2.57	4	1
1:A:208:GLN:CA	1:A:208:GLN:OE1	0.61	2.48	20	5
1:A:128:PHE:CE1	1:A:132:LEU:CD1	0.60	2.84	3	3
1:A:45:THR:CG2	1:A:45:THR:O	0.60	2.49	18	5
1:A:119:VAL:HG23	1:A:121:TYR:OH	0.60	1.96	4	1
1:A:157:SER:OG	1:A:190:THR:CG2	0.60	2.48	6	3
1:A:106:VAL:C	1:A:108:SER:N	0.60	2.53	16	6
1:A:209:TYR:CD2	1:A:217:TYR:OH	0.60	2.52	14	1
1:A:136:TRP:O	1:A:223:THR:CG2	0.60	2.47	12	2
1:A:70:MET:C	1:A:147:GLN:OE1	0.60	2.39	13	3
1:A:185:ASN:ND2	1:A:186:PHE:CD2	0.60	2.69	18	1
1:A:76:ALA:HB1	1:A:117:VAL:HG21	0.60	1.72	13	3
1:A:64:GLN:OE1	1:A:64:GLN:N	0.60	2.35	14	4
1:A:124:GLU:OE2	1:A:125:HIS:NE2	0.60	2.34	21	1
1:A:35:LEU:HD13	1:A:110:LYS:CB	0.60	2.25	3	1
1:A:70:MET:O	1:A:147:GLN:OE1	0.60	2.18	17	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:209:TYR:CD1	1:A:209:TYR:C	0.60	2.75	20	2
1:A:209:TYR:CE2	1:A:213:ASN:CB	0.60	2.85	21	2
1:A:104:LYS:O	1:A:104:LYS:CD	0.60	2.49	19	3
1:A:91:VAL:HG13	1:A:117:VAL:HG13	0.60	1.72	9	1
1:A:144:GLY:N	1:A:190:THR:HG21	0.60	2.11	6	6
1:A:47:LYS:O	1:A:48:HIS:C	0.60	2.40	17	20
1:A:133:LYS:CB	1:A:133:LYS:NZ	0.60	2.65	10	1
1:A:130:GLU:O	1:A:131:LEU:C	0.60	2.39	18	10
1:A:142:THR:OG1	1:A:188:PRO:O	0.60	2.18	11	1
1:A:126:ILE:HD11	1:A:130:GLU:CG	0.60	2.27	2	2
1:A:203:GLU:OE2	1:A:204:ASP:CB	0.60	2.50	6	1
1:A:50:VAL:HG22	1:A:211:SER:HB2	0.60	1.74	9	1
1:A:77:GLU:O	1:A:77:GLU:OE1	0.60	2.19	7	1
1:A:142:THR:HG23	1:A:142:THR:O	0.60	1.95	11	1
1:A:89:THR:O	1:A:90:GLN:OE1	0.60	2.20	8	1
1:A:57:GLU:CD	1:A:57:GLU:H	0.60	2.00	6	2
1:A:156:ARG:CG	1:A:156:ARG:HH11	0.60	2.09	20	1
1:A:146:ARG:HB2	1:A:152:GLY:H	0.60	1.56	2	1
1:A:143:GLN:CA	1:A:190:THR:OG1	0.60	2.50	3	1
1:A:118:ARG:NH2	1:A:120:VAL:HG12	0.60	2.12	7	1
1:A:99:ARG:C	1:A:100:ASN:HD22	0.60	2.00	15	4
1:A:83:LEU:HD12	1:A:83:LEU:O	0.60	1.97	5	2
1:A:137:GLU:O	1:A:223:THR:OG1	0.60	2.19	18	2
1:A:140:ASP:O	1:A:140:ASP:OD2	0.60	2.20	2	2
1:A:34:ALA:HB2	1:A:97:HIS:CD2	0.60	2.31	7	3
1:A:147:GLN:O	1:A:150:ASP:OD1	0.60	2.20	9	2
1:A:118:ARG:CG	1:A:118:ARG:O	0.60	2.50	10	2
1:A:97:HIS:C	1:A:97:HIS:CD2	0.60	2.73	14	1
1:A:31:ALA:HB2	1:A:97:HIS:CE1	0.60	2.32	19	2
1:A:156:ARG:HH22	1:A:194:ARG:HH22	0.60	1.38	2	2
1:A:157:SER:OG	1:A:191:THR:HG23	0.60	1.97	2	1
1:A:57:GLU:OE1	1:A:57:GLU:N	0.59	2.35	7	1
1:A:140:ASP:CG	1:A:143:GLN:HE22	0.59	2.00	17	3
1:A:174:LYS:CG	1:A:175:GLU:N	0.59	2.65	17	1
1:A:82:VAL:HG23	1:A:82:VAL:O	0.59	1.96	12	5
1:A:97:HIS:O	1:A:97:HIS:CG	0.59	2.54	8	3
1:A:107:CYS:C	1:A:109:GLU:N	0.59	2.54	9	6
1:A:119:VAL:HG23	1:A:119:VAL:O	0.59	1.96	19	4
1:A:154:GLN:CG	1:A:155:TYR:CZ	0.59	2.85	6	1
1:A:175:GLU:CG	1:A:176:GLU:N	0.59	2.65	2	1
1:A:77:GLU:OE2	1:A:208:GLN:OE1	0.59	2.20	7	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:GLN:O	1:A:118:ARG:N	0.59	2.34	2	4
1:A:141:PRO:CG	1:A:186:PHE:CZ	0.59	2.86	17	1
1:A:82:VAL:O	1:A:82:VAL:HG23	0.59	1.96	2	5
1:A:117:VAL:O	1:A:117:VAL:HG23	0.59	1.97	8	4
1:A:219:GLY:O	1:A:220:LEU:CD1	0.59	2.50	14	1
1:A:117:VAL:CG2	1:A:117:VAL:O	0.59	2.50	3	3
1:A:86:VAL:CG2	1:A:121:TYR:CE1	0.59	2.84	9	2
1:A:180:VAL:O	1:A:184:HIS:NE2	0.59	2.35	3	1
1:A:69:GLY:O	1:A:156:ARG:O	0.59	2.20	21	3
1:A:61:GLU:CD	1:A:61:GLU:H	0.59	1.99	16	1
1:A:103:TYR:CG	1:A:115:GLU:OE2	0.59	2.56	15	1
1:A:60:PRO:CG	1:A:87:TYR:CD2	0.59	2.86	16	4
1:A:105:GLU:C	1:A:110:LYS:HZ1	0.59	1.99	17	1
1:A:195:GLU:O	1:A:197:GLN:OE1	0.59	2.21	17	4
1:A:42:ILE:CG2	1:A:201:TYR:O	0.59	2.51	17	1
1:A:177:TYR:CD1	1:A:181:LEU:CD1	0.59	2.86	13	1
1:A:209:TYR:CD1	1:A:210:LEU:N	0.59	2.71	16	4
1:A:117:VAL:O	1:A:117:VAL:CG2	0.59	2.50	8	2
1:A:105:GLU:HG3	1:A:106:VAL:N	0.59	2.13	8	1
1:A:148:GLY:HA3	1:A:220:LEU:HD12	0.59	1.75	4	1
1:A:63:THR:O	1:A:65:MET:SD	0.59	2.60	20	1
1:A:74:TRP:O	1:A:77:GLU:OE1	0.59	2.20	18	1
1:A:60:PRO:O	1:A:63:THR:OG1	0.59	2.20	8	11
1:A:57:GLU:CD	1:A:57:GLU:N	0.59	2.55	7	3
1:A:154:GLN:H	1:A:154:GLN:CD	0.59	2.00	17	2
1:A:34:ALA:O	1:A:35:LEU:O	0.59	2.20	14	5
1:A:194:ARG:HE	1:A:197:GLN:HE22	0.59	1.39	10	1
1:A:142:THR:O	1:A:190:THR:OG1	0.59	2.20	17	1
1:A:102:THR:OG1	1:A:105:GLU:OE1	0.59	2.21	10	1
1:A:93:PHE:CZ	1:A:202:ALA:HB2	0.59	2.33	4	1
1:A:91:VAL:HG22	1:A:207:GLN:OE1	0.59	1.98	2	1
1:A:169:ALA:O	1:A:173:SER:OG	0.59	2.20	21	7
1:A:72:CYS:C	1:A:74:TRP:H	0.59	2.00	14	17
1:A:35:LEU:CD1	1:A:35:LEU:N	0.59	2.55	17	1
1:A:64:GLN:NE2	1:A:166:GLN:HE22	0.59	1.96	18	2
1:A:129:GLU:O	1:A:133:LYS:CB	0.59	2.50	6	3
1:A:103:TYR:CB	1:A:206:HIS:NE2	0.59	2.66	10	2
1:A:123:PRO:O	1:A:126:ILE:O	0.59	2.20	19	5
1:A:115:GLU:O	1:A:115:GLU:OE2	0.59	2.21	4	3
1:A:208:GLN:OE1	1:A:208:GLN:CA	0.59	2.51	7	7
1:A:126:ILE:HD13	1:A:130:GLU:HG2	0.59	1.75	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:VAL:CG1	1:A:28:VAL:O	0.59	2.51	13	5
1:A:197:GLN:O	1:A:198:VAL:O	0.59	2.21	13	5
1:A:114:ALA:CB	1:A:156:ARG:NH1	0.59	2.65	20	1
1:A:129:GLU:OE1	1:A:129:GLU:O	0.58	2.21	8	2
1:A:146:ARG:O	1:A:147:GLN:OE1	0.58	2.21	19	3
1:A:49:HIS:NE2	1:A:212:LYS:NZ	0.58	2.48	15	1
1:A:208:GLN:O	1:A:211:SER:N	0.58	2.35	19	10
1:A:121:TYR:CE2	1:A:131:LEU:HD11	0.58	2.33	6	3
1:A:49:HIS:CE1	1:A:212:LYS:NZ	0.58	2.71	15	1
1:A:142:THR:O	1:A:142:THR:OG1	0.58	2.21	18	3
1:A:77:GLU:OE1	1:A:208:GLN:OE1	0.58	2.21	20	1
1:A:159:VAL:O	1:A:159:VAL:CG2	0.58	2.51	16	4
1:A:77:GLU:OE2	1:A:90:GLN:O	0.58	2.22	12	5
1:A:70:MET:HE2	1:A:135:PHE:CZ	0.58	2.33	14	1
1:A:64:GLN:OE1	1:A:123:PRO:CG	0.58	2.51	4	1
1:A:62:GLY:O	1:A:123:PRO:CD	0.58	2.52	6	1
1:A:140:ASP:O	1:A:147:GLN:OE1	0.58	2.22	2	1
1:A:33:GLU:O	1:A:34:ALA:C	0.58	2.42	11	9
1:A:197:GLN:O	1:A:198:VAL:HB	0.58	1.99	21	1
1:A:209:TYR:CZ	1:A:213:ASN:CB	0.58	2.86	21	2
1:A:35:LEU:HD21	1:A:110:LYS:HB3	0.58	1.74	21	1
1:A:143:GLN:HE22	1:A:147:GLN:CB	0.58	2.12	14	1
1:A:137:GLU:O	1:A:222:GLY:O	0.58	2.22	14	1
1:A:198:VAL:HG23	1:A:199:PHE:N	0.58	2.13	19	1
1:A:126:ILE:CD1	1:A:130:GLU:CD	0.58	2.72	18	1
1:A:143:GLN:OE1	1:A:147:GLN:OE1	0.58	2.21	7	1
1:A:133:LYS:O	1:A:137:GLU:OE2	0.58	2.22	4	1
1:A:105:GLU:O	1:A:108:SER:OG	0.58	2.21	3	1
1:A:178:GLN:OE1	1:A:182:SER:CB	0.58	2.51	15	2
1:A:188:PRO:O	1:A:189:ILE:O	0.58	2.22	4	7
1:A:103:TYR:O	1:A:107:CYS:CB	0.58	2.52	16	1
1:A:64:GLN:CB	1:A:121:TYR:CE1	0.58	2.87	10	1
1:A:132:LEU:HD23	1:A:133:LYS:H	0.58	1.57	10	1
1:A:201:TYR:CD1	1:A:201:TYR:N	0.58	2.72	4	1
1:A:138:ASN:O	1:A:221:GLY:O	0.58	2.21	20	1
1:A:147:GLN:OE1	1:A:155:TYR:O	0.58	2.21	20	1
1:A:136:TRP:CZ2	1:A:173:SER:HA	0.58	2.34	20	1
1:A:121:TYR:CG	1:A:131:LEU:HD12	0.58	2.33	2	1
1:A:80:PHE:CB	1:A:119:VAL:HG11	0.58	2.27	18	1
1:A:121:TYR:CE2	1:A:131:LEU:HD22	0.58	2.34	11	3
1:A:140:ASP:OD2	1:A:143:GLN:OE1	0.58	2.22	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:114:ALA:HB2	1:A:156:ARG:HH21	0.58	1.54	5	1
1:A:192:ASP:CG	1:A:194:ARG:HH21	0.58	2.01	20	2
1:A:115:GLU:OE2	1:A:115:GLU:O	0.58	2.22	16	1
1:A:70:MET:SD	1:A:157:SER:CB	0.58	2.92	14	1
1:A:118:ARG:CZ	1:A:201:TYR:OH	0.58	2.52	15	1
1:A:195:GLU:OE1	1:A:195:GLU:O	0.58	2.21	3	1
1:A:205:TYR:O	1:A:209:TYR:CD2	0.58	2.56	6	3
1:A:126:ILE:HD13	1:A:130:GLU:HG3	0.58	1.74	10	2
1:A:71:GLY:O	1:A:72:CYS:O	0.58	2.22	19	1
1:A:192:ASP:CG	1:A:194:ARG:HH12	0.58	2.01	3	1
1:A:160:TYR:CB	1:A:197:GLN:NE2	0.58	2.66	7	1
1:A:78:ARG:C	1:A:80:PHE:H	0.58	2.01	13	11
1:A:42:ILE:O	1:A:43:PRO:O	0.58	2.22	12	4
1:A:107:CYS:C	1:A:109:GLU:H	0.58	2.02	9	7
1:A:145:MET:O	1:A:145:MET:CG	0.58	2.51	15	2
1:A:85:GLY:O	1:A:123:PRO:HG3	0.58	1.99	15	1
1:A:172:ARG:O	1:A:176:GLU:OE2	0.58	2.22	9	1
1:A:87:TYR:CE1	1:A:88:SER:OG	0.58	2.57	7	10
1:A:77:GLU:OE1	1:A:90:GLN:O	0.58	2.22	11	1
1:A:178:GLN:HE22	1:A:187:GLY:C	0.58	2.02	13	1
1:A:178:GLN:O	1:A:182:SER:OG	0.58	2.22	6	4
1:A:90:GLN:N	1:A:90:GLN:CD	0.58	2.56	20	2
1:A:218:CYS:O	1:A:219:GLY:C	0.58	2.41	10	4
1:A:166:GLN:O	1:A:170:ALA:CB	0.58	2.52	10	2
1:A:139:HIS:O	1:A:222:GLY:O	0.58	2.22	19	1
1:A:136:TRP:CZ2	1:A:173:SER:N	0.58	2.72	20	1
1:A:176:GLU:O	1:A:176:GLU:OE1	0.58	2.22	20	2
1:A:115:GLU:OE2	1:A:156:ARG:O	0.58	2.21	12	1
1:A:203:GLU:OE1	1:A:205:TYR:OH	0.57	2.21	12	2
1:A:221:GLY:O	1:A:222:GLY:C	0.57	2.41	3	1
1:A:46:ALA:O	1:A:55:THR:N	0.57	2.37	13	10
1:A:100:ASN:CG	1:A:113:HIS:HE2	0.57	2.01	17	1
1:A:109:GLU:OE2	1:A:153:THR:OG1	0.57	2.21	17	1
1:A:99:ARG:O	1:A:101:PRO:CD	0.57	2.53	9	3
1:A:42:ILE:HG23	1:A:100:ASN:OD1	0.57	1.98	8	1
1:A:127:SER:OG	1:A:128:PHE:N	0.57	2.36	15	2
1:A:101:PRO:CG	1:A:113:HIS:CD2	0.57	2.87	3	2
1:A:140:ASP:OD1	1:A:223:THR:OG1	0.57	2.22	9	1
1:A:77:GLU:OE2	1:A:89:THR:OG1	0.57	2.22	20	3
1:A:205:TYR:CE1	1:A:209:TYR:CE1	0.57	2.93	17	5
1:A:55:THR:C	1:A:56:VAL:HG12	0.57	2.18	21	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:VAL:O	1:A:58:PRO:O	0.57	2.21	8	1
1:A:121:TYR:CD2	1:A:126:ILE:CG2	0.57	2.87	15	1
1:A:62:GLY:O	1:A:122:ARG:CD	0.57	2.52	20	1
1:A:90:GLN:OE1	1:A:118:ARG:O	0.57	2.22	20	1
1:A:150:ASP:OD2	1:A:155:TYR:CD1	0.57	2.57	18	1
1:A:136:TRP:O	1:A:223:THR:CB	0.57	2.52	7	2
1:A:143:GLN:H	1:A:143:GLN:CD	0.57	2.01	13	1
1:A:74:TRP:HE1	1:A:210:LEU:CB	0.57	2.12	6	1
1:A:70:MET:SD	1:A:135:PHE:CD1	0.57	2.97	9	1
1:A:204:ASP:O	1:A:206:HIS:N	0.57	2.36	2	4
1:A:81:TRP:CZ3	1:A:208:GLN:HA	0.57	2.35	16	15
1:A:176:GLU:CG	1:A:177:TYR:N	0.57	2.67	16	4
1:A:79:LYS:O	1:A:82:VAL:HG22	0.57	2.00	6	4
1:A:77:GLU:O	1:A:77:GLU:CD	0.57	2.43	8	2
1:A:115:GLU:CD	1:A:156:ARG:O	0.57	2.42	12	1
1:A:147:GLN:O	1:A:150:ASP:OD2	0.57	2.22	3	1
1:A:134:VAL:HG13	1:A:138:ASN:ND2	0.57	2.15	13	1
1:A:71:GLY:O	1:A:72:CYS:HB3	0.57	2.00	18	6
1:A:89:THR:C	1:A:90:GLN:OE1	0.57	2.43	21	2
1:A:123:PRO:O	1:A:124:GLU:CB	0.57	2.52	10	2
1:A:77:GLU:O	1:A:77:GLU:OE2	0.57	2.22	10	2
1:A:99:ARG:HH21	1:A:100:ASN:C	0.57	2.03	19	1
1:A:128:PHE:CE1	1:A:132:LEU:HD11	0.57	2.34	3	2
1:A:55:THR:O	1:A:56:VAL:CG1	0.57	2.52	10	7
1:A:100:ASN:O	1:A:105:GLU:OE1	0.57	2.22	21	1
1:A:128:PHE:CE2	1:A:132:LEU:CD1	0.57	2.88	2	4
1:A:204:ASP:OD1	1:A:204:ASP:N	0.57	2.37	14	2
1:A:64:GLN:O	1:A:121:TYR:O	0.57	2.22	20	1
1:A:196:GLY:C	1:A:197:GLN:CG	0.57	2.72	3	1
1:A:70:MET:SD	1:A:139:HIS:CG	0.57	2.97	9	1
1:A:48:HIS:N	1:A:55:THR:HG23	0.57	2.14	4	2
1:A:121:TYR:CD2	1:A:131:LEU:CD2	0.57	2.88	12	2
1:A:31:ALA:CB	1:A:97:HIS:CE1	0.57	2.88	19	3
1:A:203:GLU:CD	1:A:204:ASP:H	0.57	2.02	6	2
1:A:128:PHE:CZ	1:A:132:LEU:CD2	0.57	2.88	12	2
1:A:70:MET:O	1:A:147:GLN:CD	0.57	2.42	12	3
1:A:147:GLN:OE1	1:A:157:SER:N	0.57	2.37	18	1
1:A:56:VAL:O	1:A:57:GLU:O	0.57	2.22	5	14
1:A:136:TRP:CG	1:A:177:TYR:CD2	0.57	2.92	17	1
1:A:167:MET:O	1:A:171:LEU:HD12	0.57	2.00	11	1
1:A:162:THR:O	1:A:163:SER:OG	0.57	2.22	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:TRP:CE3	1:A:208:GLN:OE1	0.57	2.57	14	1
1:A:132:LEU:HD23	1:A:173:SER:HB3	0.57	1.76	4	1
1:A:178:GLN:OE1	1:A:182:SER:OG	0.57	2.22	15	1
1:A:32:GLU:N	1:A:32:GLU:OE1	0.57	2.38	2	1
1:A:99:ARG:CD	1:A:100:ASN:ND2	0.57	2.67	9	1
1:A:139:HIS:O	1:A:223:THR:OG1	0.56	2.22	17	3
1:A:93:PHE:CD1	1:A:93:PHE:N	0.56	2.72	17	4
1:A:106:VAL:O	1:A:107:CYS:C	0.56	2.44	16	7
1:A:121:TYR:CG	1:A:131:LEU:CD1	0.56	2.88	2	3
1:A:222:GLY:O	1:A:223:THR:OG1	0.56	2.22	14	2
1:A:32:GLU:O	1:A:32:GLU:OE2	0.56	2.23	12	1
1:A:56:VAL:CG1	1:A:201:TYR:CZ	0.56	2.89	12	2
1:A:130:GLU:CD	1:A:130:GLU:C	0.56	2.64	19	3
1:A:103:TYR:CD2	1:A:206:HIS:CE1	0.56	2.93	17	2
1:A:72:CYS:H	1:A:150:ASP:CG	0.56	2.03	11	2
1:A:80:PHE:CE1	1:A:134:VAL:HG12	0.56	2.34	13	3
1:A:163:SER:C	1:A:165:VAL:H	0.56	2.04	15	7
1:A:87:TYR:CD1	1:A:88:SER:N	0.56	2.73	10	16
1:A:34:ALA:CB	1:A:97:HIS:NE2	0.56	2.68	7	2
1:A:109:GLU:C	1:A:111:THR:H	0.56	2.04	11	2
1:A:80:PHE:CE2	1:A:134:VAL:HG12	0.56	2.35	10	2
1:A:72:CYS:SG	1:A:73:PHE:N	0.56	2.78	8	1
1:A:70:MET:HB2	1:A:139:HIS:NE2	0.56	2.15	20	1
1:A:180:VAL:O	1:A:184:HIS:CD2	0.56	2.58	20	1
1:A:128:PHE:CD1	1:A:128:PHE:C	0.56	2.77	20	1
1:A:145:MET:O	1:A:152:GLY:C	0.56	2.43	12	2
1:A:35:LEU:HD22	1:A:108:SER:OG	0.56	2.00	3	1
1:A:33:GLU:CG	1:A:110:LYS:NZ	0.56	2.69	3	1
1:A:64:GLN:CD	1:A:65:MET:H	0.56	2.04	7	1
1:A:213:ASN:C	1:A:215:ASP:H	0.56	2.03	20	9
1:A:83:LEU:C	1:A:84:LYS:NZ	0.56	2.59	5	1
1:A:153:THR:HG23	1:A:153:THR:O	0.56	2.00	18	2
1:A:90:GLN:N	1:A:90:GLN:NE2	0.56	2.53	14	2
1:A:148:GLY:CA	1:A:220:LEU:HD12	0.56	2.30	4	1
1:A:69:GLY:O	1:A:139:HIS:CD2	0.56	2.58	2	1
1:A:156:ARG:HH22	1:A:192:ASP:CG	0.56	2.04	4	3
1:A:108:SER:OG	1:A:109:GLU:N	0.56	2.37	11	5
1:A:153:THR:OG1	1:A:156:ARG:NH1	0.56	2.39	5	1
1:A:76:ALA:O	1:A:80:PHE:CG	0.56	2.58	14	1
1:A:210:LEU:CD2	1:A:218:CYS:SG	0.56	2.93	4	1
1:A:207:GLN:C	1:A:209:TYR:N	0.56	2.58	18	18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:209:TYR:OH	1:A:213:ASN:OD1	0.56	2.22	15	4
1:A:128:PHE:CZ	1:A:132:LEU:CD1	0.56	2.88	13	5
1:A:209:TYR:CE1	1:A:217:TYR:OH	0.56	2.50	16	1
1:A:198:VAL:HG12	1:A:198:VAL:O	0.56	1.99	21	1
1:A:73:PHE:CG	1:A:115:GLU:OE1	0.56	2.59	14	2
1:A:146:ARG:CB	1:A:152:GLY:H	0.56	2.13	2	1
1:A:165:VAL:O	1:A:168:GLU:OE2	0.56	2.22	9	1
1:A:128:PHE:O	1:A:130:GLU:N	0.56	2.39	12	3
1:A:111:THR:O	1:A:112:GLY:C	0.56	2.42	10	10
1:A:160:TYR:CD2	1:A:198:VAL:HG21	0.56	2.33	21	1
1:A:77:GLU:OE2	1:A:89:THR:O	0.56	2.24	21	2
1:A:54:ARG:C	1:A:87:TYR:HH	0.56	2.03	5	12
1:A:77:GLU:OE2	1:A:90:GLN:C	0.56	2.45	5	2
1:A:50:VAL:HG11	1:A:81:TRP:HB2	0.56	1.78	6	2
1:A:156:ARG:CG	1:A:156:ARG:NH1	0.56	2.66	20	1
1:A:147:GLN:OE1	1:A:156:ARG:C	0.56	2.44	18	1
1:A:80:PHE:CE1	1:A:134:VAL:CG1	0.56	2.89	13	6
1:A:167:MET:CG	1:A:171:LEU:HD22	0.56	2.31	17	1
1:A:89:THR:CG2	1:A:119:VAL:HG12	0.56	2.23	11	1
1:A:162:THR:OG1	1:A:166:GLN:OE1	0.56	2.22	5	1
1:A:203:GLU:OE1	1:A:206:HIS:CD2	0.56	2.59	21	1
1:A:62:GLY:O	1:A:122:ARG:CB	0.56	2.54	20	1
1:A:64:GLN:HE22	1:A:121:TYR:C	0.56	2.04	3	1
1:A:139:HIS:O	1:A:139:HIS:CG	0.56	2.58	18	2
1:A:132:LEU:C	1:A:132:LEU:CD1	0.56	2.70	7	3
1:A:142:THR:C	1:A:190:THR:OG1	0.56	2.44	13	4
1:A:89:THR:O	1:A:90:GLN:NE2	0.56	2.38	16	2
1:A:132:LEU:O	1:A:132:LEU:HD12	0.56	2.01	21	1
1:A:121:TYR:O	1:A:121:TYR:CD1	0.56	2.59	10	1
1:A:143:GLN:NE2	1:A:147:GLN:HA	0.56	2.16	14	1
1:A:77:GLU:OE1	1:A:90:GLN:CA	0.56	2.54	19	1
1:A:81:TRP:CD1	1:A:81:TRP:C	0.55	2.79	16	10
1:A:68:PHE:CZ	1:A:131:LEU:C	0.55	2.79	18	3
1:A:83:LEU:O	1:A:83:LEU:HD12	0.55	2.01	15	2
1:A:71:GLY:N	1:A:147:GLN:HB3	0.55	2.16	8	1
1:A:147:GLN:N	1:A:155:TYR:O	0.55	2.39	3	1
1:A:213:ASN:O	1:A:215:ASP:OD1	0.55	2.23	3	1
1:A:105:GLU:C	1:A:110:LYS:NZ	0.55	2.60	17	1
1:A:121:TYR:C	1:A:121:TYR:CD1	0.55	2.79	6	3
1:A:88:SER:OG	1:A:89:THR:N	0.55	2.37	10	4
1:A:197:GLN:O	1:A:198:VAL:C	0.55	2.44	4	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:73:PHE:O	1:A:77:GLU:CB	0.55	2.53	10	1
1:A:48:HIS:CD2	1:A:89:THR:O	0.55	2.58	19	3
1:A:143:GLN:C	1:A:190:THR:OG1	0.55	2.45	12	2
1:A:136:TRP:CZ2	1:A:173:SER:O	0.55	2.59	3	2
1:A:70:MET:SD	1:A:139:HIS:NE2	0.55	2.79	11	3
1:A:138:ASN:C	1:A:139:HIS:ND1	0.55	2.59	14	3
1:A:160:TYR:N	1:A:160:TYR:CD1	0.55	2.71	14	5
1:A:133:LYS:HZ3	1:A:133:LYS:HB3	0.55	1.61	10	1
1:A:97:HIS:CD2	1:A:97:HIS:C	0.55	2.80	10	1
1:A:121:TYR:CD1	1:A:131:LEU:CD1	0.55	2.89	14	1
1:A:50:VAL:HG21	1:A:81:TRP:CB	0.55	2.29	6	1
1:A:191:THR:HG22	1:A:193:ILE:HD11	0.55	1.76	17	2
1:A:97:HIS:NE2	1:A:110:LYS:O	0.55	2.33	7	1
1:A:106:VAL:HG11	1:A:113:HIS:CD2	0.55	2.37	4	2
1:A:73:PHE:CD2	1:A:115:GLU:OE2	0.55	2.59	10	1
1:A:194:ARG:NE	1:A:197:GLN:HE21	0.55	1.98	10	1
1:A:154:GLN:NE2	1:A:155:TYR:CD2	0.55	2.74	8	2
1:A:149:ASN:H	1:A:220:LEU:CD1	0.55	2.14	20	1
1:A:198:VAL:HG21	1:A:200:TYR:CZ	0.55	2.36	12	1
1:A:99:ARG:N	1:A:100:ASN:ND2	0.55	2.55	7	1
1:A:124:GLU:CD	1:A:124:GLU:N	0.55	2.60	17	2
1:A:99:ARG:O	1:A:200:TYR:OH	0.55	2.22	2	2
1:A:140:ASP:O	1:A:140:ASP:CG	0.55	2.43	20	2
1:A:128:PHE:CE1	1:A:132:LEU:CD2	0.55	2.90	12	1
1:A:79:LYS:O	1:A:134:VAL:HG21	0.55	2.02	9	1
1:A:70:MET:C	1:A:115:GLU:OE2	0.55	2.45	11	1
1:A:126:ILE:HD13	1:A:130:GLU:CG	0.55	2.31	15	3
1:A:145:MET:O	1:A:146:ARG:CD	0.55	2.54	20	1
1:A:146:ARG:C	1:A:155:TYR:O	0.55	2.45	12	2
1:A:158:ALA:CB	1:A:160:TYR:OH	0.55	2.55	3	1
1:A:194:ARG:CG	1:A:195:GLU:OE2	0.55	2.54	3	1
1:A:115:GLU:OE1	1:A:115:GLU:C	0.55	2.46	11	2
1:A:205:TYR:C	1:A:205:TYR:CD1	0.55	2.80	14	1
1:A:103:TYR:CE1	1:A:155:TYR:OH	0.55	2.60	19	1
1:A:69:GLY:HA3	1:A:116:VAL:HG12	0.55	1.77	7	2
1:A:46:ALA:C	1:A:55:THR:OG1	0.55	2.45	7	3
1:A:35:LEU:HB2	1:A:98:THR:HG23	0.55	1.78	5	3
1:A:97:HIS:HD1	1:A:97:HIS:H	0.55	1.45	21	1
1:A:115:GLU:OE2	1:A:115:GLU:C	0.55	2.45	18	2
1:A:126:ILE:HG22	1:A:130:GLU:OE2	0.55	2.01	3	1
1:A:128:PHE:CD1	1:A:128:PHE:O	0.55	2.60	20	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:PRO:O	1:A:63:THR:CG2	0.55	2.54	15	1
1:A:218:CYS:O	1:A:220:LEU:CD1	0.55	2.55	6	1
1:A:143:GLN:CG	1:A:143:GLN:O	0.55	2.55	9	1
1:A:98:THR:CB	1:A:100:ASN:ND2	0.54	2.70	7	1
1:A:106:VAL:C	1:A:108:SER:H	0.54	2.06	4	5
1:A:56:VAL:O	1:A:57:GLU:C	0.54	2.45	15	19
1:A:142:THR:OG1	1:A:189:ILE:C	0.54	2.46	17	1
1:A:176:GLU:OE2	1:A:177:TYR:CA	0.54	2.55	17	1
1:A:196:GLY:C	1:A:197:GLN:OE1	0.54	2.45	17	1
1:A:115:GLU:CD	1:A:115:GLU:O	0.54	2.45	11	4
1:A:88:SER:O	1:A:89:THR:CG2	0.54	2.54	5	10
1:A:63:THR:C	1:A:64:GLN:OE1	0.54	2.46	4	5
1:A:77:GLU:CD	1:A:208:GLN:NE2	0.54	2.61	16	1
1:A:219:GLY:O	1:A:220:LEU:HD13	0.54	2.02	14	1
1:A:77:GLU:OE1	1:A:90:GLN:C	0.54	2.46	19	1
1:A:176:GLU:C	1:A:176:GLU:OE1	0.54	2.46	2	3
1:A:222:GLY:O	1:A:223:THR:C	0.54	2.45	16	5
1:A:145:MET:C	1:A:152:GLY:O	0.54	2.46	12	1
1:A:81:TRP:C	1:A:81:TRP:CD1	0.54	2.80	2	10
1:A:142:THR:OG1	1:A:142:THR:O	0.54	2.20	5	3
1:A:137:GLU:OE1	1:A:137:GLU:CA	0.54	2.55	4	1
1:A:77:GLU:OE2	1:A:89:THR:C	0.54	2.46	4	1
1:A:45:THR:OG1	1:A:204:ASP:OD1	0.54	2.22	6	2
1:A:140:ASP:CG	1:A:223:THR:OG1	0.54	2.46	9	1
1:A:150:ASP:CB	1:A:155:TYR:CG	0.54	2.91	11	1
1:A:78:ARG:C	1:A:80:PHE:N	0.54	2.61	16	12
1:A:123:PRO:O	1:A:124:GLU:C	0.54	2.46	13	10
1:A:115:GLU:O	1:A:115:GLU:CD	0.54	2.46	19	2
1:A:135:PHE:CD1	1:A:139:HIS:CE1	0.54	2.95	16	3
1:A:84:LYS:CD	1:A:84:LYS:C	0.54	2.75	21	1
1:A:111:THR:O	1:A:113:HIS:N	0.54	2.40	10	3
1:A:70:MET:CG	1:A:139:HIS:CE1	0.54	2.91	2	1
1:A:172:ARG:O	1:A:176:GLU:CD	0.54	2.46	9	1
1:A:164:ALA:O	1:A:168:GLU:OE1	0.54	2.25	16	1
1:A:143:GLN:OE1	1:A:147:GLN:CD	0.54	2.45	8	1
1:A:99:ARG:HE	1:A:100:ASN:H	0.54	1.45	19	1
1:A:74:TRP:NE1	1:A:209:TYR:OH	0.54	2.39	6	1
1:A:87:TYR:CD2	1:A:88:SER:N	0.54	2.76	6	4
1:A:157:SER:O	1:A:191:THR:OG1	0.54	2.24	3	1
1:A:64:GLN:CD	1:A:65:MET:N	0.54	2.61	7	2
1:A:108:SER:O	1:A:109:GLU:CD	0.54	2.46	11	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:GLN:OE1	1:A:118:ARG:NH1	0.54	2.40	13	1
1:A:144:GLY:HA2	1:A:190:THR:HG21	0.54	1.78	9	3
1:A:194:ARG:HH12	2:A:21:MYR:C10	0.54	2.16	16	1
1:A:127:SER:O	1:A:130:GLU:HG2	0.54	2.03	21	1
1:A:97:HIS:HD1	1:A:97:HIS:N	0.54	2.01	21	1
1:A:84:LYS:CD	1:A:84:LYS:O	0.54	2.55	21	1
1:A:194:ARG:C	1:A:195:GLU:OE2	0.54	2.46	10	1
1:A:67:VAL:O	1:A:67:VAL:HG12	0.54	2.02	14	1
1:A:189:ILE:O	1:A:189:ILE:HD12	0.54	2.02	19	1
1:A:64:GLN:C	1:A:65:MET:SD	0.54	2.86	4	1
1:A:177:TYR:CD2	1:A:181:LEU:HD11	0.54	2.37	6	1
1:A:65:MET:SD	1:A:162:THR:HG21	0.54	2.42	2	1
1:A:136:TRP:O	1:A:223:THR:OG1	0.54	2.26	7	1
1:A:121:TYR:CZ	1:A:131:LEU:HB3	0.54	2.38	5	2
1:A:159:VAL:O	1:A:159:VAL:HG23	0.54	2.01	16	5
1:A:77:GLU:OE2	1:A:208:GLN:CD	0.54	2.46	20	1
1:A:144:GLY:CA	1:A:190:THR:O	0.54	2.55	3	1
1:A:77:GLU:OE2	1:A:117:VAL:HG13	0.54	2.03	9	1
1:A:94:ALA:CA	1:A:113:HIS:ND1	0.54	2.71	13	6
1:A:124:GLU:O	1:A:124:GLU:OE2	0.54	2.26	13	1
1:A:136:TRP:NE1	1:A:173:SER:HB2	0.54	2.18	20	3
1:A:174:LYS:NZ	1:A:175:GLU:N	0.54	2.55	21	1
1:A:203:GLU:OE2	1:A:205:TYR:N	0.54	2.37	6	1
1:A:194:ARG:C	1:A:197:GLN:OE1	0.54	2.46	20	1
1:A:91:VAL:HG12	1:A:117:VAL:CA	0.54	2.32	2	1
1:A:102:THR:O	1:A:106:VAL:CG1	0.54	2.52	7	1
1:A:146:ARG:NH2	1:A:149:ASN:OD1	0.54	2.41	13	1
1:A:127:SER:C	1:A:130:GLU:OE2	0.54	2.46	21	1
1:A:176:GLU:CA	1:A:176:GLU:OE1	0.54	2.55	19	1
1:A:74:TRP:NE1	1:A:205:TYR:O	0.54	2.40	4	2
1:A:114:ALA:HB2	1:A:156:ARG:NH1	0.54	2.17	20	1
1:A:147:GLN:O	1:A:150:ASP:O	0.54	2.26	12	1
1:A:61:GLU:O	1:A:61:GLU:CD	0.54	2.46	3	1
1:A:136:TRP:CB	1:A:177:TYR:CZ	0.54	2.90	7	1
1:A:203:GLU:OE2	1:A:206:HIS:CD2	0.54	2.61	7	3
1:A:121:TYR:N	1:A:121:TYR:CD1	0.54	2.76	16	2
1:A:214:PRO:O	1:A:216:GLY:N	0.54	2.41	21	1
1:A:209:TYR:CE1	1:A:213:ASN:CB	0.54	2.90	19	2
1:A:143:GLN:NE2	1:A:147:GLN:OE1	0.54	2.41	8	1
1:A:140:ASP:OD1	1:A:143:GLN:OE1	0.54	2.26	3	2
1:A:140:ASP:CG	1:A:143:GLN:OE1	0.54	2.46	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:ARG:CG	1:A:200:TYR:OH	0.53	2.56	7	1
1:A:64:GLN:NE2	1:A:65:MET:O	0.53	2.41	7	2
1:A:32:GLU:CD	1:A:32:GLU:H	0.53	2.07	11	1
1:A:126:ILE:O	1:A:126:ILE:HG22	0.53	2.01	13	2
1:A:114:ALA:O	1:A:116:VAL:HG13	0.53	2.03	16	1
1:A:65:MET:O	1:A:162:THR:HG21	0.53	2.02	3	2
1:A:156:ARG:NH2	2:A:21:MYR:H131	0.53	2.16	20	1
1:A:217:TYR:O	1:A:217:TYR:CD2	0.53	2.61	12	1
1:A:209:TYR:O	1:A:211:SER:N	0.53	2.41	16	2
1:A:181:LEU:C	1:A:183:LYS:H	0.53	2.07	11	2
1:A:115:GLU:CD	1:A:115:GLU:C	0.53	2.66	13	2
1:A:149:ASN:CG	1:A:149:ASN:O	0.53	2.46	5	2
1:A:108:SER:O	1:A:109:GLU:HB3	0.53	2.01	16	2
1:A:133:LYS:CB	1:A:133:LYS:HZ3	0.53	2.16	10	1
1:A:119:VAL:CG2	1:A:131:LEU:HD23	0.53	2.32	20	1
1:A:48:HIS:CD2	1:A:208:GLN:CG	0.53	2.92	10	6
1:A:184:HIS:O	1:A:186:PHE:CE2	0.53	2.60	21	2
1:A:184:HIS:CG	1:A:186:PHE:CE2	0.53	2.96	11	1
1:A:64:GLN:OE1	1:A:64:GLN:CA	0.53	2.56	11	1
1:A:54:ARG:O	1:A:87:TYR:CZ	0.53	2.62	8	3
1:A:127:SER:N	1:A:130:GLU:CD	0.53	2.61	21	1
1:A:70:MET:SD	1:A:157:SER:HB3	0.53	2.43	14	1
1:A:176:GLU:O	1:A:180:VAL:HG23	0.53	2.02	2	3
1:A:45:THR:CB	1:A:49:HIS:NE2	0.53	2.72	20	1
1:A:146:ARG:CD	1:A:146:ARG:O	0.53	2.57	3	1
1:A:45:THR:O	1:A:55:THR:OG1	0.53	2.21	13	2
1:A:139:HIS:ND1	1:A:140:ASP:N	0.53	2.56	10	1
1:A:44:VAL:HG11	1:A:203:GLU:HA	0.53	1.79	4	1
1:A:156:ARG:HD2	1:A:158:ALA:HB2	0.53	1.80	12	1
1:A:126:ILE:CG1	1:A:127:SER:N	0.53	2.72	8	1
1:A:105:GLU:CG	1:A:106:VAL:N	0.53	2.71	8	2
1:A:140:ASP:OD2	1:A:143:GLN:CG	0.53	2.56	8	2
1:A:118:ARG:HH22	1:A:119:VAL:C	0.53	2.06	8	1
1:A:126:ILE:HD12	1:A:131:LEU:HD11	0.53	1.81	20	1
1:A:196:GLY:C	1:A:197:GLN:HG2	0.53	2.24	3	1
1:A:208:GLN:O	1:A:209:TYR:C	0.53	2.45	2	18
1:A:203:GLU:CD	1:A:203:GLU:H	0.53	2.07	16	1
1:A:78:ARG:O	1:A:79:LYS:C	0.53	2.47	12	4
1:A:34:ALA:O	1:A:35:LEU:C	0.53	2.46	14	5
1:A:195:GLU:N	1:A:195:GLU:OE1	0.53	2.42	13	2
1:A:131:LEU:N	1:A:131:LEU:CD2	0.53	2.61	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:33:GLU:O	1:A:35:LEU:N	0.53	2.40	10	1
1:A:151:PHE:CD2	1:A:151:PHE:O	0.53	2.61	14	1
1:A:145:MET:O	1:A:145:MET:HG2	0.53	2.04	13	1
1:A:84:LYS:O	1:A:126:ILE:CG1	0.53	2.57	9	2
1:A:74:TRP:O	1:A:210:LEU:CD2	0.53	2.57	5	2
1:A:215:ASP:OD1	1:A:215:ASP:C	0.53	2.47	16	1
1:A:127:SER:O	1:A:130:GLU:CD	0.53	2.46	21	1
1:A:194:ARG:CZ	1:A:197:GLN:HE21	0.53	2.17	10	1
1:A:70:MET:CE	1:A:135:PHE:CZ	0.53	2.92	14	1
1:A:109:GLU:C	1:A:111:THR:N	0.53	2.63	11	2
1:A:66:ALA:HB2	1:A:166:GLN:HE22	0.53	1.63	8	2
1:A:138:ASN:OD1	1:A:139:HIS:CE1	0.53	2.62	14	1
1:A:74:TRP:O	1:A:210:LEU:HD13	0.52	2.04	7	1
1:A:151:PHE:CD1	1:A:151:PHE:C	0.52	2.83	11	1
1:A:140:ASP:C	1:A:142:THR:H	0.52	2.07	8	3
1:A:70:MET:HG2	1:A:71:GLY:N	0.52	2.19	20	2
1:A:80:PHE:CD2	1:A:119:VAL:CG2	0.52	2.88	6	1
1:A:64:GLN:HE21	1:A:166:GLN:HE21	0.52	1.47	2	1
1:A:161:PRO:O	1:A:197:GLN:NE2	0.52	2.43	3	1
1:A:203:GLU:CD	1:A:205:TYR:H	0.52	2.06	5	3
1:A:128:PHE:CE1	1:A:131:LEU:HD11	0.52	2.39	5	1
1:A:138:ASN:C	1:A:139:HIS:HD1	0.52	2.08	20	2
1:A:198:VAL:CG1	1:A:200:TYR:CZ	0.52	2.92	15	1
1:A:128:PHE:CZ	1:A:132:LEU:HD21	0.52	2.39	18	2
1:A:75:GLY:N	1:A:217:TYR:OH	0.52	2.41	2	1
1:A:213:ASN:N	1:A:214:PRO:CD	0.52	2.72	2	1
1:A:28:VAL:O	1:A:29:ILE:C	0.52	2.46	10	13
1:A:128:PHE:C	1:A:130:GLU:N	0.52	2.60	12	3
1:A:96:GLY:CA	1:A:113:HIS:CE1	0.52	2.92	11	1
1:A:32:GLU:O	1:A:32:GLU:OE1	0.52	2.28	13	1
1:A:98:THR:C	1:A:100:ASN:ND2	0.52	2.62	7	1
1:A:91:VAL:CG2	1:A:206:HIS:O	0.52	2.57	2	9
1:A:121:TYR:CB	1:A:131:LEU:HD11	0.52	2.34	13	1
1:A:154:GLN:OE1	1:A:155:TYR:CD2	0.52	2.63	18	2
1:A:150:ASP:C	1:A:150:ASP:OD1	0.52	2.46	21	1
1:A:143:GLN:O	1:A:147:GLN:OE1	0.52	2.28	4	1
1:A:98:THR:C	1:A:99:ARG:O	0.52	2.47	9	1
1:A:204:ASP:C	1:A:206:HIS:N	0.52	2.63	2	4
1:A:184:HIS:O	1:A:186:PHE:CD2	0.52	2.62	21	3
1:A:142:THR:C	1:A:190:THR:HG1	0.52	2.06	17	1
1:A:115:GLU:CG	1:A:115:GLU:O	0.52	2.57	11	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:140:ASP:C	1:A:140:ASP:OD1	0.52	2.47	8	1
1:A:70:MET:CB	1:A:157:SER:HA	0.52	2.34	14	1
1:A:119:VAL:HG23	1:A:121:TYR:CZ	0.52	2.38	4	1
1:A:61:GLU:O	1:A:122:ARG:CD	0.52	2.57	20	1
1:A:144:GLY:H	1:A:190:THR:HG21	0.52	1.65	16	3
1:A:96:GLY:N	1:A:113:HIS:CE1	0.52	2.78	6	5
1:A:131:LEU:CD2	1:A:131:LEU:N	0.52	2.57	4	2
1:A:143:GLN:CD	1:A:148:GLY:H	0.52	2.08	10	1
1:A:145:MET:N	1:A:145:MET:SD	0.52	2.82	18	1
1:A:158:ALA:HB1	1:A:160:TYR:CE1	0.52	2.39	7	1
1:A:139:HIS:O	1:A:223:THR:CB	0.52	2.58	17	2
1:A:131:LEU:CD1	1:A:131:LEU:N	0.52	2.72	20	4
1:A:100:ASN:HB3	1:A:101:PRO:CD	0.52	2.35	15	2
1:A:144:GLY:O	1:A:156:ARG:CG	0.52	2.58	17	1
1:A:160:TYR:CG	1:A:197:GLN:NE2	0.52	2.77	20	2
1:A:124:GLU:N	1:A:124:GLU:CD	0.52	2.63	14	3
1:A:73:PHE:CG	1:A:115:GLU:CD	0.52	2.83	10	1
1:A:77:GLU:OE1	1:A:119:VAL:HG11	0.52	2.04	8	1
1:A:101:PRO:CG	1:A:113:HIS:NE2	0.52	2.73	4	3
1:A:137:GLU:O	1:A:137:GLU:OE2	0.52	2.28	2	1
1:A:91:VAL:CG2	1:A:207:GLN:OE1	0.52	2.58	2	16
1:A:130:GLU:O	1:A:133:LYS:N	0.52	2.43	14	6
1:A:108:SER:C	1:A:110:LYS:N	0.52	2.62	10	9
1:A:42:ILE:HG21	1:A:201:TYR:O	0.52	2.05	17	1
1:A:53:ASN:CG	1:A:54:ARG:N	0.52	2.63	6	15
1:A:181:LEU:N	1:A:181:LEU:CD2	0.52	2.73	20	3
1:A:68:PHE:CD2	1:A:135:PHE:CB	0.52	2.93	5	1
1:A:126:ILE:CD1	1:A:130:GLU:CB	0.52	2.87	15	2
1:A:33:GLU:O	1:A:110:LYS:NZ	0.52	2.39	20	1
1:A:208:GLN:O	1:A:211:SER:OG	0.52	2.22	18	2
1:A:139:HIS:H	1:A:223:THR:CG2	0.52	2.18	18	1
1:A:189:ILE:CG2	1:A:191:THR:OG1	0.52	2.58	9	1
1:A:72:CYS:C	1:A:74:TRP:N	0.52	2.63	9	14
1:A:87:TYR:CE1	1:A:88:SER:CB	0.52	2.93	11	12
1:A:94:ALA:HB1	1:A:198:VAL:O	0.52	2.05	16	2
1:A:93:PHE:N	1:A:93:PHE:CD1	0.52	2.76	11	1
1:A:181:LEU:O	1:A:183:LYS:N	0.52	2.43	11	2
1:A:114:ALA:CB	1:A:160:TYR:OH	0.52	2.58	3	3
1:A:178:GLN:OE1	1:A:189:ILE:CG2	0.52	2.58	8	1
1:A:141:PRO:HD3	1:A:223:THR:HG23	0.52	1.82	1	1
1:A:192:ASP:OD1	1:A:194:ARG:NH2	0.51	2.43	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:220:LEU:HD23	1:A:220:LEU:N	0.51	2.19	16	1
1:A:192:ASP:CG	1:A:194:ARG:HH11	0.51	2.08	21	1
1:A:116:VAL:HG11	1:A:160:TYR:CE1	0.51	2.40	3	1
1:A:139:HIS:NE2	1:A:157:SER:CB	0.51	2.73	3	1
1:A:64:GLN:NE2	1:A:121:TYR:O	0.51	2.43	3	1
1:A:122:ARG:C	1:A:124:GLU:OE2	0.51	2.48	17	1
1:A:135:PHE:CZ	1:A:159:VAL:CG2	0.51	2.93	13	1
1:A:160:TYR:CD2	1:A:197:GLN:NE2	0.51	2.78	14	1
1:A:42:ILE:HD13	1:A:42:ILE:N	0.51	2.21	4	1
1:A:207:GLN:HB3	1:A:208:GLN:OE1	0.51	2.05	6	1
1:A:95:GLY:O	1:A:194:ARG:NH2	0.51	2.40	3	1
1:A:158:ALA:HB1	1:A:160:TYR:CZ	0.51	2.40	7	2
1:A:136:TRP:HE1	1:A:173:SER:HG	0.51	1.41	7	1
1:A:50:VAL:HG11	1:A:81:TRP:CD1	0.51	2.41	7	1
1:A:96:GLY:HA3	1:A:113:HIS:ND1	0.51	2.20	7	10
1:A:176:GLU:C	1:A:176:GLU:CD	0.51	2.69	20	4
1:A:127:SER:O	1:A:130:GLU:CG	0.51	2.58	21	1
1:A:94:ALA:CA	1:A:113:HIS:HD1	0.51	2.18	20	2
1:A:136:TRP:CB	1:A:177:TYR:OH	0.51	2.58	7	1
1:A:93:PHE:CE1	1:A:202:ALA:HB2	0.51	2.41	11	2
1:A:190:THR:O	1:A:191:THR:C	0.51	2.49	6	7
1:A:142:THR:HG22	1:A:189:ILE:HA	0.51	1.82	16	1
1:A:90:GLN:OE1	1:A:90:GLN:N	0.51	2.43	21	1
1:A:166:GLN:O	1:A:170:ALA:HB2	0.51	2.05	10	1
1:A:204:ASP:N	1:A:204:ASP:OD1	0.51	2.43	10	1
1:A:177:TYR:CD2	1:A:181:LEU:CD2	0.51	2.93	12	1
1:A:171:LEU:HD23	1:A:171:LEU:C	0.51	2.26	3	1
1:A:73:PHE:CE2	1:A:115:GLU:CG	0.51	2.93	7	1
1:A:192:ASP:OD1	1:A:194:ARG:CG	0.51	2.59	11	3
1:A:70:MET:CG	1:A:139:HIS:NE2	0.51	2.74	20	2
1:A:126:ILE:HD11	1:A:130:GLU:HG3	0.51	1.82	2	2
1:A:205:TYR:CE1	1:A:209:TYR:CE2	0.51	2.98	18	1
1:A:78:ARG:CG	1:A:79:LYS:N	0.51	2.72	14	4
1:A:151:PHE:O	1:A:151:PHE:CG	0.51	2.64	11	1
1:A:143:GLN:CB	1:A:146:ARG:O	0.51	2.58	8	3
1:A:98:THR:HG22	1:A:99:ARG:NH1	0.51	2.19	19	1
1:A:80:PHE:CE1	1:A:134:VAL:HG11	0.51	2.40	12	1
1:A:32:GLU:OE1	1:A:32:GLU:N	0.51	2.44	18	1
1:A:100:ASN:CB	1:A:101:PRO:HD2	0.51	2.36	15	2
1:A:156:ARG:NH1	2:A:21:MYR:C8	0.51	2.74	17	1
1:A:203:GLU:OE2	1:A:204:ASP:CA	0.51	2.57	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:59:PHE:CE2	1:A:120:VAL:CG2	0.51	2.94	12	1
1:A:35:LEU:HD13	1:A:110:LYS:HB2	0.51	1.82	3	1
1:A:159:VAL:HG23	1:A:159:VAL:O	0.51	2.06	7	1
1:A:184:HIS:NE2	1:A:186:PHE:CE1	0.51	2.79	11	1
1:A:90:GLN:O	1:A:91:VAL:HG13	0.51	2.06	4	1
1:A:44:VAL:HG11	1:A:202:ALA:O	0.51	2.06	17	6
1:A:74:TRP:HB3	1:A:210:LEU:HD11	0.51	1.83	17	1
1:A:162:THR:C	1:A:163:SER:OG	0.51	2.49	10	4
1:A:143:GLN:C	1:A:145:MET:H	0.51	2.08	16	2
1:A:156:ARG:NH2	2:A:21:MYR:H132	0.51	2.17	20	1
1:A:192:ASP:C	1:A:193:ILE:HD12	0.51	2.26	18	1
1:A:144:GLY:O	1:A:146:ARG:N	0.51	2.43	10	6
1:A:61:GLU:CD	1:A:61:GLU:N	0.51	2.63	16	1
1:A:77:GLU:OE1	1:A:91:VAL:HG22	0.51	2.05	10	1
1:A:80:PHE:HB3	1:A:119:VAL:HG11	0.51	1.81	18	1
1:A:32:GLU:H	1:A:32:GLU:CD	0.50	2.09	7	1
1:A:159:VAL:HG13	1:A:191:THR:HG23	0.50	1.81	15	3
1:A:93:PHE:CE1	1:A:106:VAL:HG21	0.50	2.41	8	1
1:A:143:GLN:HE22	1:A:147:GLN:HB2	0.50	1.65	14	1
1:A:80:PHE:CE1	1:A:134:VAL:HG13	0.50	2.41	14	2
1:A:123:PRO:O	1:A:126:ILE:N	0.50	2.41	3	2
1:A:124:GLU:O	1:A:125:HIS:ND1	0.50	2.44	6	1
1:A:91:VAL:HG12	1:A:117:VAL:CB	0.50	2.37	2	1
1:A:121:TYR:HB2	1:A:131:LEU:HD21	0.50	1.81	3	1
1:A:154:GLN:CD	1:A:154:GLN:N	0.50	2.64	18	1
1:A:66:ALA:CB	1:A:131:LEU:HD13	0.50	2.35	7	1
1:A:46:ALA:HA	1:A:55:THR:OG1	0.50	2.07	13	17
1:A:56:VAL:HG23	1:A:57:GLU:N	0.50	2.21	8	1
1:A:98:THR:HG22	1:A:99:ARG:H	0.50	1.65	6	1
1:A:116:VAL:CG1	1:A:160:TYR:CE1	0.50	2.94	3	1
1:A:55:THR:C	1:A:56:VAL:CG2	0.50	2.79	15	2
1:A:159:VAL:HG23	1:A:191:THR:HG23	0.50	1.82	11	2
1:A:118:ARG:C	1:A:118:ARG:CD	0.50	2.80	5	1
1:A:120:VAL:HG23	1:A:121:TYR:N	0.50	2.21	19	1
1:A:178:GLN:CD	1:A:178:GLN:C	0.50	2.69	19	2
1:A:80:PHE:CE2	1:A:119:VAL:HG21	0.50	2.41	6	1
1:A:156:ARG:NE	1:A:194:ARG:HH22	0.50	2.04	20	1
1:A:28:VAL:CG2	1:A:145:MET:SD	0.50	2.99	9	1
1:A:48:HIS:CD2	1:A:88:SER:OG	0.50	2.63	5	1
1:A:214:PRO:C	1:A:216:GLY:H	0.50	2.09	21	2
1:A:166:GLN:O	1:A:170:ALA:N	0.50	2.41	8	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:197:GLN:C	1:A:198:VAL:HG23	0.50	2.25	21	1
1:A:87:TYR:CE2	1:A:88:SER:CB	0.50	2.95	6	2
1:A:64:GLN:O	1:A:121:TYR:CD1	0.50	2.65	20	1
1:A:138:ASN:C	1:A:221:GLY:O	0.50	2.50	20	1
1:A:72:CYS:C	1:A:115:GLU:CD	0.50	2.69	8	1
1:A:118:ARG:HH12	1:A:119:VAL:C	0.50	2.10	8	1
1:A:187:GLY:N	1:A:188:PRO:HD3	0.50	2.21	19	1
1:A:140:ASP:OD1	1:A:221:GLY:O	0.50	2.29	18	1
1:A:141:PRO:O	1:A:190:THR:OG1	0.50	2.20	19	2
1:A:70:MET:CE	1:A:138:ASN:OD1	0.50	2.60	10	2
1:A:118:ARG:HH22	1:A:119:VAL:CA	0.50	2.19	8	1
1:A:50:VAL:CG2	1:A:81:TRP:CD2	0.50	2.95	6	1
1:A:59:PHE:CE2	1:A:118:ARG:NH1	0.50	2.80	2	1
1:A:83:LEU:HD12	1:A:131:LEU:HD21	0.50	1.84	2	1
1:A:136:TRP:CE3	1:A:177:TYR:CD2	0.50	2.98	7	1
1:A:178:GLN:O	1:A:182:SER:CB	0.50	2.60	14	6
1:A:115:GLU:O	1:A:115:GLU:CG	0.50	2.59	16	3
1:A:181:LEU:N	1:A:181:LEU:HD22	0.50	2.22	20	2
1:A:197:GLN:O	1:A:198:VAL:CG2	0.50	2.59	21	1
1:A:174:LYS:NZ	1:A:189:ILE:CD1	0.50	2.75	10	1
1:A:64:GLN:OE1	1:A:123:PRO:CD	0.50	2.60	4	2
1:A:195:GLU:N	1:A:197:GLN:OE1	0.50	2.45	20	1
1:A:55:THR:CB	1:A:90:GLN:OE1	0.50	2.60	12	2
1:A:157:SER:O	1:A:191:THR:CB	0.50	2.60	3	1
1:A:80:PHE:CE2	1:A:134:VAL:HG11	0.50	2.41	4	4
1:A:128:PHE:CZ	1:A:131:LEU:HD11	0.50	2.41	7	1
1:A:92:GLY:CA	1:A:200:TYR:O	0.50	2.60	21	2
1:A:176:GLU:CD	1:A:176:GLU:C	0.50	2.69	21	1
1:A:130:GLU:CD	1:A:130:GLU:N	0.50	2.64	12	3
1:A:35:LEU:HD23	1:A:105:GLU:CD	0.50	2.27	3	1
1:A:215:ASP:C	1:A:215:ASP:OD1	0.50	2.49	9	1
1:A:77:GLU:CD	1:A:89:THR:OG1	0.50	2.50	7	1
1:A:103:TYR:C	1:A:103:TYR:CD1	0.50	2.84	6	3
1:A:70:MET:HB3	1:A:139:HIS:CE1	0.50	2.41	13	3
1:A:74:TRP:CD1	1:A:209:TYR:CE2	0.50	3.00	16	2
1:A:69:GLY:N	1:A:116:VAL:HG12	0.50	2.22	8	1
1:A:128:PHE:CE2	1:A:132:LEU:HD22	0.50	2.41	6	1
1:A:203:GLU:CB	1:A:205:TYR:CE2	0.50	2.94	12	2
1:A:73:PHE:O	1:A:206:HIS:O	0.50	2.30	18	1
1:A:143:GLN:OE1	1:A:147:GLN:C	0.49	2.51	7	1
1:A:140:ASP:OD2	1:A:143:GLN:CD	0.49	2.50	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:135:PHE:CD1	1:A:139:HIS:CD2	0.49	3.00	6	2
1:A:35:LEU:HD13	1:A:105:GLU:OE1	0.49	2.07	19	1
1:A:128:PHE:CE1	1:A:132:LEU:HD21	0.49	2.42	12	1
1:A:146:ARG:HB2	1:A:152:GLY:N	0.49	2.21	2	1
1:A:160:TYR:HB2	1:A:197:GLN:NE2	0.49	2.22	7	1
1:A:80:PHE:N	1:A:80:PHE:CD1	0.49	2.80	11	3
1:A:53:ASN:CG	1:A:54:ARG:H	0.49	2.10	6	9
1:A:160:TYR:CE1	1:A:192:ASP:OD2	0.49	2.65	14	1
1:A:44:VAL:HG12	1:A:204:ASP:CA	0.49	2.37	20	1
1:A:128:PHE:C	1:A:128:PHE:CD1	0.49	2.86	7	1
1:A:184:HIS:CD2	1:A:184:HIS:N	0.49	2.78	16	1
1:A:197:GLN:O	1:A:198:VAL:HG23	0.49	2.07	21	1
1:A:142:THR:CG2	1:A:181:LEU:HD13	0.49	2.37	10	1
1:A:129:GLU:OE1	1:A:129:GLU:CA	0.49	2.60	8	1
1:A:118:ARG:NH2	1:A:119:VAL:CA	0.49	2.75	8	1
1:A:70:MET:SD	1:A:140:ASP:O	0.49	2.71	14	1
1:A:172:ARG:O	1:A:176:GLU:CB	0.49	2.60	14	1
1:A:203:GLU:CG	1:A:204:ASP:N	0.49	2.75	6	2
1:A:86:VAL:HG12	1:A:86:VAL:O	0.49	2.07	2	1
1:A:93:PHE:CE1	1:A:202:ALA:CB	0.49	2.96	11	2
1:A:86:VAL:HG22	1:A:120:VAL:O	0.49	2.07	16	6
1:A:97:HIS:CE1	1:A:111:THR:C	0.49	2.85	7	1
1:A:130:GLU:O	1:A:130:GLU:OE2	0.49	2.30	7	2
1:A:114:ALA:O	1:A:115:GLU:C	0.49	2.49	15	1
1:A:146:ARG:CA	1:A:152:GLY:H	0.49	2.20	2	1
1:A:63:THR:CG2	1:A:120:VAL:CG2	0.49	2.90	2	1
1:A:99:ARG:NE	1:A:100:ASN:ND2	0.49	2.59	9	1
1:A:99:ARG:N	1:A:100:ASN:HD22	0.49	2.05	7	1
1:A:32:GLU:N	1:A:32:GLU:CD	0.49	2.66	7	2
1:A:189:ILE:O	1:A:189:ILE:HG22	0.49	2.06	11	2
1:A:84:LYS:HZ1	1:A:84:LYS:CA	0.49	2.21	5	1
1:A:81:TRP:CZ3	1:A:208:GLN:OE1	0.49	2.65	14	1
1:A:70:MET:CG	1:A:76:ALA:HB1	0.49	2.36	19	1
1:A:203:GLU:HG3	1:A:204:ASP:N	0.49	2.22	15	1
1:A:74:TRP:HE1	1:A:210:LEU:HB3	0.49	1.66	6	1
1:A:198:VAL:CG2	1:A:200:TYR:CZ	0.49	2.95	12	1
1:A:184:HIS:N	1:A:184:HIS:CD2	0.49	2.80	3	1
1:A:136:TRP:O	1:A:138:ASN:N	0.49	2.46	17	2
1:A:108:SER:O	1:A:109:GLU:HB2	0.49	2.07	5	3
1:A:140:ASP:O	1:A:141:PRO:O	0.49	2.30	13	1
1:A:104:LYS:C	1:A:104:LYS:CD	0.49	2.80	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:118:ARG:O	1:A:118:ARG:HG3	0.49	2.08	4	4
1:A:78:ARG:HH12	1:A:215:ASP:C	0.49	2.11	16	1
1:A:139:HIS:O	1:A:222:GLY:C	0.49	2.51	14	1
1:A:85:GLY:O	1:A:122:ARG:CG	0.49	2.61	12	4
1:A:154:GLN:CD	1:A:155:TYR:CE2	0.49	2.86	9	2
1:A:64:GLN:NE2	1:A:166:GLN:NE2	0.49	2.60	18	2
1:A:80:PHE:CZ	1:A:134:VAL:HG13	0.49	2.43	16	3
1:A:98:THR:HG22	1:A:99:ARG:N	0.49	2.23	8	1
1:A:159:VAL:O	1:A:159:VAL:HG22	0.49	2.06	14	1
1:A:192:ASP:CG	1:A:194:ARG:NE	0.49	2.65	14	1
1:A:178:GLN:CD	1:A:182:SER:OG	0.49	2.51	15	1
1:A:34:ALA:HB1	1:A:98:THR:OG1	0.49	2.08	6	1
1:A:77:GLU:CD	1:A:208:GLN:OE1	0.49	2.51	20	1
1:A:121:TYR:CD2	1:A:131:LEU:CD1	0.49	2.96	9	2
1:A:134:VAL:CG1	1:A:138:ASN:ND2	0.49	2.76	13	1
1:A:68:PHE:O	1:A:117:VAL:N	0.49	2.43	6	3
1:A:77:GLU:OE1	1:A:208:GLN:NE2	0.49	2.46	16	1
1:A:72:CYS:H	1:A:115:GLU:CD	0.49	2.11	8	1
1:A:142:THR:HG22	1:A:181:LEU:HD13	0.48	1.84	10	1
1:A:70:MET:HB3	1:A:147:GLN:NE2	0.48	2.22	8	1
1:A:91:VAL:HG12	1:A:117:VAL:CG1	0.48	2.34	4	1
1:A:70:MET:O	1:A:147:GLN:CB	0.48	2.61	18	1
1:A:197:GLN:OE1	1:A:197:GLN:N	0.48	2.46	18	1
1:A:160:TYR:OH	1:A:194:ARG:NH1	0.48	2.46	7	1
1:A:77:GLU:OE2	1:A:119:VAL:CG1	0.48	2.61	11	1
1:A:135:PHE:CZ	1:A:159:VAL:HG22	0.48	2.43	13	2
1:A:219:GLY:O	1:A:220:LEU:HD23	0.48	2.08	19	1
1:A:128:PHE:CE2	1:A:132:LEU:CD2	0.48	2.97	6	1
1:A:143:GLN:NE2	1:A:147:GLN:HB2	0.48	2.22	9	1
1:A:156:ARG:CB	1:A:156:ARG:NH1	0.48	2.77	9	1
1:A:176:GLU:OE2	1:A:177:TYR:N	0.48	2.46	17	1
1:A:139:HIS:O	1:A:141:PRO:CD	0.48	2.60	2	2
1:A:107:CYS:O	1:A:154:GLN:NE2	0.48	2.46	10	1
1:A:77:GLU:CD	1:A:77:GLU:O	0.48	2.51	10	1
1:A:142:THR:HG22	1:A:189:ILE:CG2	0.48	2.36	14	3
1:A:159:VAL:CG2	1:A:159:VAL:O	0.48	2.61	7	2
1:A:69:GLY:O	1:A:158:ALA:N	0.48	2.46	7	4
1:A:121:TYR:HB3	1:A:131:LEU:HD11	0.48	1.83	13	1
1:A:121:TYR:CD1	1:A:121:TYR:C	0.48	2.86	10	1
1:A:170:ALA:O	1:A:173:SER:OG	0.48	2.29	4	2
1:A:74:TRP:C	1:A:210:LEU:HD11	0.48	2.28	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:154:GLN:HG3	1:A:155:TYR:CZ	0.48	2.44	6	1
1:A:181:LEU:C	1:A:183:LYS:N	0.48	2.64	11	3
1:A:71:GLY:O	1:A:72:CYS:HB2	0.48	2.09	8	3
1:A:204:ASP:O	1:A:204:ASP:OD1	0.48	2.32	16	1
1:A:76:ALA:HB3	1:A:117:VAL:HG21	0.48	1.84	14	1
1:A:44:VAL:CG2	1:A:202:ALA:O	0.48	2.62	12	1
1:A:150:ASP:OD2	1:A:155:TYR:CE1	0.48	2.66	18	1
1:A:210:LEU:N	1:A:210:LEU:HD23	0.48	2.24	7	1
1:A:121:TYR:CZ	1:A:131:LEU:CB	0.48	2.96	7	1
1:A:70:MET:HA	1:A:139:HIS:NE2	0.48	2.24	13	2
1:A:62:GLY:O	1:A:64:GLN:OE1	0.48	2.32	13	1
1:A:209:TYR:CE2	1:A:213:ASN:HB2	0.48	2.44	21	2
1:A:113:HIS:O	1:A:153:THR:O	0.48	2.31	4	2
1:A:130:GLU:OE2	1:A:130:GLU:N	0.48	2.47	12	1
1:A:136:TRP:CE3	1:A:177:TYR:CD1	0.48	3.00	12	1
1:A:191:THR:CG2	1:A:192:ASP:N	0.48	2.76	3	1
1:A:205:TYR:CE1	1:A:209:TYR:CZ	0.48	3.01	17	1
1:A:136:TRP:HB3	1:A:177:TYR:CE2	0.48	2.44	17	1
1:A:144:GLY:CA	1:A:190:THR:OG1	0.48	2.62	16	2
1:A:144:GLY:C	1:A:146:ARG:H	0.48	2.12	10	3
1:A:89:THR:C	1:A:90:GLN:CD	0.48	2.72	12	3
1:A:121:TYR:CE2	1:A:131:LEU:HB3	0.48	2.44	7	2
1:A:198:VAL:CG1	1:A:198:VAL:O	0.48	2.61	3	4
1:A:153:THR:OG1	2:A:21:MYR:C13	0.48	2.62	7	1
1:A:108:SER:O	1:A:109:GLU:OE2	0.48	2.31	11	1
1:A:146:ARG:NE	1:A:148:GLY:O	0.48	2.46	11	1
1:A:155:TYR:O	1:A:156:ARG:C	0.48	2.51	15	2
1:A:171:LEU:CD1	1:A:171:LEU:C	0.48	2.81	13	1
1:A:132:LEU:HD23	1:A:133:LYS:N	0.48	2.24	10	1
1:A:70:MET:SD	1:A:138:ASN:O	0.48	2.72	10	1
1:A:118:ARG:NH1	1:A:119:VAL:N	0.48	2.61	8	1
1:A:209:TYR:C	1:A:213:ASN:HD22	0.48	2.12	4	1
1:A:132:LEU:HD23	1:A:173:SER:CB	0.48	2.39	4	1
1:A:154:GLN:HG2	1:A:155:TYR:CZ	0.48	2.44	6	2
1:A:46:ALA:CA	1:A:55:THR:OG1	0.48	2.61	13	3
1:A:144:GLY:O	1:A:156:ARG:CB	0.48	2.62	17	2
1:A:195:GLU:OE1	1:A:195:GLU:C	0.48	2.51	11	2
1:A:121:TYR:CB	1:A:126:ILE:HG22	0.48	2.37	10	1
1:A:72:CYS:C	1:A:115:GLU:OE1	0.48	2.52	8	1
1:A:77:GLU:OE2	1:A:81:TRP:CZ3	0.48	2.67	18	1
1:A:79:LYS:O	1:A:134:VAL:CG2	0.48	2.62	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:VAL:C	1:A:29:ILE:O	0.48	2.53	14	11
1:A:123:PRO:N	1:A:124:GLU:OE2	0.48	2.47	17	1
1:A:81:TRP:HB3	1:A:89:THR:HG21	0.48	1.85	5	4
1:A:143:GLN:O	1:A:145:MET:N	0.48	2.47	16	1
1:A:42:ILE:CG2	1:A:100:ASN:OD1	0.48	2.62	8	1
1:A:204:ASP:C	1:A:206:HIS:H	0.47	2.11	2	3
1:A:29:ILE:O	1:A:29:ILE:HD13	0.47	2.08	10	2
1:A:102:THR:HG22	1:A:105:GLU:HG3	0.47	1.86	16	1
1:A:140:ASP:C	1:A:142:THR:N	0.47	2.67	20	2
1:A:162:THR:O	1:A:163:SER:CB	0.47	2.62	15	4
1:A:168:GLU:OE1	1:A:172:ARG:NH1	0.47	2.47	15	1
1:A:121:TYR:CE2	1:A:131:LEU:HB2	0.47	2.44	2	1
1:A:77:GLU:OE1	1:A:91:VAL:CG1	0.47	2.61	21	1
1:A:42:ILE:N	1:A:43:PRO:HD3	0.47	2.23	14	2
1:A:187:GLY:H	1:A:188:PRO:CD	0.47	2.21	19	1
1:A:118:ARG:NH1	1:A:201:TYR:HH	0.47	2.07	15	1
1:A:49:HIS:CD2	1:A:211:SER:OG	0.47	2.67	6	1
1:A:118:ARG:HD3	1:A:199:PHE:CZ	0.47	2.42	12	1
1:A:98:THR:CG2	1:A:99:ARG:N	0.47	2.76	9	1
1:A:140:ASP:CB	1:A:143:GLN:NE2	0.47	2.78	17	3
1:A:213:ASN:C	1:A:215:ASP:N	0.47	2.67	7	6
1:A:209:TYR:C	1:A:211:SER:N	0.47	2.68	11	2
1:A:84:LYS:HZ1	1:A:84:LYS:N	0.47	2.06	5	1
1:A:65:MET:O	1:A:162:THR:CG2	0.47	2.63	5	4
1:A:73:PHE:HD1	1:A:206:HIS:HD1	0.47	1.46	19	1
1:A:130:GLU:OE1	1:A:130:GLU:O	0.47	2.32	19	1
1:A:49:HIS:ND1	1:A:208:GLN:HG2	0.47	2.24	20	1
1:A:32:GLU:O	1:A:32:GLU:CD	0.47	2.52	12	1
1:A:132:LEU:HD13	1:A:173:SER:OG	0.47	2.09	9	1
1:A:93:PHE:CE1	1:A:103:TYR:CB	0.47	2.97	7	1
1:A:30:SER:OG	1:A:33:GLU:CB	0.47	2.62	17	1
1:A:46:ALA:O	1:A:55:THR:CG2	0.47	2.56	21	1
1:A:64:GLN:HB3	1:A:121:TYR:CZ	0.47	2.45	10	2
1:A:174:LYS:HZ2	1:A:189:ILE:HD12	0.47	1.69	10	1
1:A:187:GLY:H	1:A:188:PRO:HD2	0.47	1.70	19	1
1:A:210:LEU:HD23	1:A:210:LEU:N	0.47	2.24	3	1
1:A:105:GLU:C	1:A:107:CYS:N	0.47	2.68	15	2
1:A:203:GLU:OE1	1:A:205:TYR:N	0.47	2.46	17	1
1:A:98:THR:OG1	1:A:111:THR:HG22	0.47	2.10	13	1
1:A:129:GLU:O	1:A:132:LEU:HD23	0.47	2.08	10	2
1:A:138:ASN:OD1	1:A:139:HIS:ND1	0.47	2.47	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:156:ARG:NE	1:A:194:ARG:NH2	0.47	2.63	20	1
1:A:139:HIS:H	1:A:223:THR:HG23	0.47	1.70	18	1
1:A:78:ARG:CA	1:A:210:LEU:HD13	0.47	2.39	11	1
1:A:64:GLN:CD	1:A:64:GLN:C	0.47	2.72	11	1
1:A:132:LEU:O	1:A:136:TRP:CD1	0.47	2.68	5	1
1:A:174:LYS:HZ2	1:A:189:ILE:CD1	0.47	2.22	10	1
1:A:48:HIS:H	1:A:55:THR:HG23	0.47	1.69	4	1
1:A:143:GLN:CB	1:A:147:GLN:OE1	0.47	2.63	4	1
1:A:189:ILE:O	1:A:190:THR:CG2	0.47	2.62	20	1
1:A:103:TYR:CE1	1:A:107:CYS:SG	0.47	3.08	20	1
1:A:44:VAL:HG21	1:A:202:ALA:O	0.47	2.10	12	1
1:A:57:GLU:O	1:A:57:GLU:OE2	0.47	2.33	7	1
1:A:81:TRP:CH2	1:A:208:GLN:HA	0.47	2.44	11	1
1:A:48:HIS:CE1	1:A:50:VAL:CG2	0.47	2.97	14	3
1:A:121:TYR:CD1	1:A:131:LEU:HD22	0.47	2.44	20	2
1:A:49:HIS:O	1:A:49:HIS:ND1	0.47	2.47	11	1
1:A:195:GLU:O	1:A:197:GLN:NE2	0.47	2.47	16	1
1:A:105:GLU:OE2	1:A:111:THR:CG2	0.47	2.63	8	1
1:A:90:GLN:N	1:A:90:GLN:HE21	0.47	2.08	14	1
1:A:54:ARG:CA	1:A:87:TYR:OH	0.47	2.62	9	3
1:A:73:PHE:CZ	1:A:103:TYR:CD2	0.47	3.02	15	1
1:A:210:LEU:HD12	1:A:210:LEU:O	0.47	2.10	6	1
1:A:77:GLU:OE1	1:A:81:TRP:CE3	0.47	2.68	20	1
1:A:135:PHE:CE2	1:A:139:HIS:NE2	0.47	2.83	12	1
1:A:119:VAL:CG2	1:A:121:TYR:OH	0.47	2.63	18	1
1:A:70:MET:HB3	1:A:139:HIS:CD2	0.47	2.44	8	5
1:A:184:HIS:O	1:A:185:ASN:CB	0.47	2.63	11	12
1:A:49:HIS:CG	1:A:212:LYS:HE2	0.47	2.45	21	1
1:A:126:ILE:HG23	1:A:130:GLU:CG	0.47	2.39	21	1
1:A:64:GLN:HB2	1:A:121:TYR:CE1	0.47	2.45	10	1
1:A:143:GLN:NE2	1:A:147:GLN:CB	0.47	2.78	14	1
1:A:132:LEU:HD12	1:A:132:LEU:N	0.47	2.25	4	1
1:A:80:PHE:CZ	1:A:134:VAL:HG11	0.47	2.44	3	1
1:A:119:VAL:HG21	1:A:121:TYR:OH	0.47	2.10	18	1
1:A:145:MET:SD	2:A:21:MYR:C9	0.47	3.03	7	1
1:A:96:GLY:C	1:A:113:HIS:CE1	0.47	2.88	5	1
1:A:63:THR:HG22	1:A:122:ARG:HB3	0.47	1.87	15	2
1:A:174:LYS:NZ	1:A:191:THR:OG1	0.47	2.38	10	1
1:A:209:TYR:CE1	1:A:213:ASN:HB2	0.47	2.44	19	2
1:A:140:ASP:O	1:A:147:GLN:NE2	0.47	2.43	19	1
1:A:49:HIS:ND1	1:A:211:SER:OG	0.47	2.43	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:203:GLU:CG	1:A:205:TYR:CD2	0.47	2.98	6	1
1:A:203:GLU:HG2	1:A:205:TYR:CD2	0.47	2.44	6	1
1:A:123:PRO:HG2	1:A:126:ILE:N	0.47	2.25	20	1
1:A:91:VAL:HG23	1:A:206:HIS:O	0.47	2.08	2	1
1:A:99:ARG:CG	1:A:100:ASN:ND2	0.47	2.77	3	1
1:A:62:GLY:O	1:A:63:THR:HG23	0.47	2.10	17	1
1:A:168:GLU:OE1	1:A:168:GLU:N	0.47	2.48	10	1
1:A:102:THR:O	1:A:105:GLU:N	0.47	2.47	8	1
1:A:28:VAL:HG12	1:A:28:VAL:O	0.47	2.10	20	2
1:A:89:THR:O	1:A:90:GLN:CD	0.47	2.54	4	1
1:A:102:THR:O	1:A:106:VAL:HG22	0.46	2.09	20	11
1:A:150:ASP:HB2	1:A:155:TYR:CG	0.46	2.45	11	1
1:A:87:TYR:CE1	1:A:88:SER:HB2	0.46	2.44	5	3
1:A:184:HIS:O	1:A:185:ASN:CG	0.46	2.54	18	2
1:A:143:GLN:C	1:A:145:MET:N	0.46	2.69	16	2
1:A:86:VAL:HG23	1:A:121:TYR:CZ	0.46	2.45	15	1
1:A:78:ARG:NE	1:A:82:VAL:HG11	0.46	2.25	15	1
1:A:49:HIS:CE1	1:A:212:LYS:CG	0.46	2.98	6	1
1:A:118:ARG:HG3	1:A:118:ARG:O	0.46	2.09	13	1
1:A:195:GLU:C	1:A:197:GLN:OE1	0.46	2.53	13	1
1:A:66:ALA:HB2	1:A:166:GLN:NE2	0.46	2.25	8	1
1:A:70:MET:H	1:A:139:HIS:CD2	0.46	2.27	14	1
1:A:64:GLN:OE1	1:A:64:GLN:C	0.46	2.53	18	1
1:A:160:TYR:HB3	1:A:197:GLN:NE2	0.46	2.25	3	2
1:A:136:TRP:CD1	1:A:177:TYR:CE1	0.46	3.02	7	1
1:A:60:PRO:HG2	1:A:87:TYR:CD2	0.46	2.46	7	3
1:A:175:GLU:OE1	1:A:175:GLU:O	0.46	2.34	13	1
1:A:87:TYR:CD1	1:A:87:TYR:C	0.46	2.87	14	1
1:A:101:PRO:HG2	1:A:113:HIS:NE2	0.46	2.26	3	1
1:A:59:PHE:CE1	1:A:118:ARG:CZ	0.46	2.99	7	1
1:A:185:ASN:O	1:A:186:PHE:CG	0.46	2.68	7	1
1:A:166:GLN:O	1:A:168:GLU:N	0.46	2.48	17	1
1:A:163:SER:O	1:A:164:ALA:C	0.46	2.54	20	7
1:A:142:THR:CB	1:A:188:PRO:O	0.46	2.63	11	1
1:A:154:GLN:N	1:A:154:GLN:CD	0.46	2.69	13	1
1:A:70:MET:HG3	1:A:139:HIS:CD2	0.46	2.46	14	1
1:A:86:VAL:HG23	1:A:121:TYR:CE1	0.46	2.45	15	2
1:A:103:TYR:CE1	1:A:206:HIS:CE1	0.46	3.03	7	1
1:A:136:TRP:CG	1:A:177:TYR:CE1	0.46	3.03	7	1
1:A:136:TRP:HB3	1:A:177:TYR:CZ	0.46	2.46	7	2
1:A:136:TRP:CZ3	1:A:191:THR:OG1	0.46	2.68	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:THR:HB	1:A:119:VAL:HG12	0.46	1.86	13	2
1:A:116:VAL:CG1	1:A:160:TYR:CE2	0.46	2.98	13	2
1:A:118:ARG:HD3	1:A:118:ARG:C	0.46	2.31	5	1
1:A:109:GLU:O	1:A:112:GLY:N	0.46	2.39	10	1
1:A:71:GLY:N	1:A:147:GLN:CB	0.46	2.78	8	1
1:A:80:PHE:CD2	1:A:117:VAL:HG11	0.46	2.46	14	1
1:A:153:THR:O	1:A:153:THR:OG1	0.46	2.34	4	1
1:A:118:ARG:HD2	1:A:199:PHE:CE1	0.46	2.45	4	2
1:A:70:MET:HG2	1:A:71:GLY:H	0.46	1.70	20	1
1:A:49:HIS:ND1	1:A:208:GLN:HB2	0.46	2.25	20	1
1:A:176:GLU:OE1	1:A:176:GLU:CA	0.46	2.63	20	1
1:A:102:THR:OG1	1:A:105:GLU:HB3	0.46	2.11	18	1
1:A:143:GLN:O	1:A:190:THR:OG1	0.46	2.29	9	1
1:A:69:GLY:N	1:A:158:ALA:O	0.46	2.49	9	1
1:A:96:GLY:N	1:A:113:HIS:HD1	0.46	2.09	7	1
1:A:73:PHE:CE1	1:A:206:HIS:CE1	0.46	3.03	9	2
1:A:35:LEU:HD22	1:A:110:LYS:C	0.46	2.30	8	1
1:A:81:TRP:CA	1:A:89:THR:HG21	0.46	2.40	4	1
1:A:139:HIS:O	1:A:223:THR:HG22	0.46	2.10	4	2
1:A:157:SER:O	1:A:191:THR:HG23	0.46	2.11	3	1
1:A:185:ASN:CG	1:A:185:ASN:O	0.46	2.54	18	1
1:A:136:TRP:CH2	1:A:191:THR:OG1	0.46	2.67	17	1
1:A:162:THR:OG1	1:A:166:GLN:NE2	0.46	2.48	5	2
1:A:203:GLU:OE2	1:A:205:TYR:CB	0.46	2.64	11	1
1:A:214:PRO:C	1:A:216:GLY:N	0.46	2.69	5	3
1:A:181:LEU:HD22	1:A:181:LEU:N	0.46	2.25	11	1
1:A:68:PHE:CE1	1:A:80:PHE:CE2	0.46	3.03	13	1
1:A:162:THR:OG1	1:A:166:GLN:CD	0.46	2.54	5	1
1:A:101:PRO:HG2	1:A:113:HIS:CD2	0.46	2.46	3	3
1:A:105:GLU:O	1:A:107:CYS:N	0.46	2.49	15	1
1:A:54:ARG:CD	1:A:57:GLU:O	0.46	2.64	2	1
1:A:140:ASP:CG	1:A:143:GLN:CD	0.46	2.73	3	1
1:A:189:ILE:HG23	1:A:191:THR:OG1	0.46	2.11	11	1
1:A:31:ALA:O	1:A:33:GLU:N	0.46	2.49	5	3
1:A:180:VAL:HG13	1:A:181:LEU:N	0.46	2.26	13	1
1:A:68:PHE:CD2	1:A:135:PHE:HB2	0.46	2.46	5	2
1:A:185:ASN:O	1:A:185:ASN:CG	0.46	2.53	16	1
1:A:147:GLN:O	1:A:150:ASP:CG	0.46	2.54	21	1
1:A:72:CYS:N	1:A:115:GLU:OE2	0.46	2.44	8	1
1:A:72:CYS:CB	1:A:150:ASP:CG	0.46	2.84	6	1
1:A:80:PHE:CG	1:A:119:VAL:HG11	0.46	2.46	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:167:MET:HG3	1:A:171:LEU:HD22	0.46	1.87	17	1
1:A:103:TYR:HB2	1:A:206:HIS:CE1	0.46	2.46	14	5
1:A:203:GLU:HG3	1:A:205:TYR:H	0.46	1.71	4	2
1:A:177:TYR:CD2	1:A:181:LEU:HD21	0.46	2.46	12	1
1:A:73:PHE:CE2	1:A:92:GLY:O	0.46	2.69	2	1
1:A:77:GLU:OE2	1:A:91:VAL:HG22	0.46	2.10	3	1
1:A:189:ILE:HG22	1:A:191:THR:H	0.46	1.69	9	1
1:A:145:MET:SD	2:A:21:MYR:C7	0.46	3.04	7	1
1:A:31:ALA:C	1:A:33:GLU:N	0.46	2.69	13	4
1:A:197:GLN:N	1:A:197:GLN:CD	0.46	2.69	5	2
1:A:75:GLY:CA	1:A:218:CYS:SG	0.46	3.04	21	1
1:A:126:ILE:HD13	1:A:130:GLU:CB	0.46	2.41	10	2
1:A:159:VAL:HG23	1:A:191:THR:HG21	0.46	1.87	2	1
1:A:139:HIS:NE2	1:A:157:SER:HB2	0.46	2.26	3	1
1:A:128:PHE:O	1:A:129:GLU:C	0.45	2.51	10	3
1:A:143:GLN:HB3	1:A:146:ARG:O	0.45	2.11	2	2
1:A:118:ARG:HG3	1:A:199:PHE:CE1	0.45	2.46	20	5
1:A:45:THR:HB	1:A:49:HIS:NE2	0.45	2.27	20	1
1:A:87:TYR:CE2	1:A:88:SER:HB3	0.45	2.46	18	3
1:A:61:GLU:CD	1:A:61:GLU:C	0.45	2.75	3	1
1:A:126:ILE:CD1	1:A:130:GLU:OE2	0.45	2.64	18	1
1:A:35:LEU:HD11	1:A:105:GLU:OE2	0.45	2.11	18	1
1:A:136:TRP:HB2	1:A:177:TYR:CE2	0.45	2.46	17	1
1:A:136:TRP:O	1:A:137:GLU:C	0.45	2.53	21	5
1:A:212:LYS:HZ1	1:A:212:LYS:HB2	0.45	1.71	17	1
1:A:126:ILE:O	1:A:126:ILE:CG2	0.45	2.64	13	1
1:A:78:ARG:CZ	1:A:214:PRO:CB	0.45	2.94	5	1
1:A:35:LEU:HD13	1:A:35:LEU:N	0.45	2.26	21	2
1:A:209:TYR:CE2	1:A:213:ASN:ND2	0.45	2.84	8	1
1:A:210:LEU:HD22	1:A:216:GLY:C	0.45	2.31	19	2
1:A:50:VAL:CG2	1:A:211:SER:OG	0.45	2.65	4	2
1:A:73:PHE:CD2	1:A:92:GLY:O	0.45	2.69	2	1
1:A:136:TRP:HE1	1:A:173:SER:HB3	0.45	1.72	9	1
1:A:190:THR:OG1	1:A:190:THR:O	0.45	2.29	16	1
1:A:87:TYR:C	1:A:87:TYR:CD1	0.45	2.90	9	2
1:A:71:GLY:CA	1:A:147:GLN:CB	0.45	2.94	8	1
1:A:64:GLN:NE2	1:A:128:PHE:CE1	0.45	2.82	15	1
1:A:149:ASN:ND2	1:A:218:CYS:O	0.45	2.49	2	1
1:A:182:SER:OG	1:A:183:LYS:N	0.45	2.49	18	1
1:A:73:PHE:CZ	1:A:115:GLU:HG2	0.45	2.46	7	1
1:A:72:CYS:CB	1:A:150:ASP:OD1	0.45	2.64	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:141:PRO:CG	1:A:181:LEU:CD1	0.45	2.94	15	3
1:A:48:HIS:CD2	1:A:208:GLN:HG2	0.45	2.47	16	2
1:A:197:GLN:CD	1:A:197:GLN:N	0.45	2.70	21	2
1:A:98:THR:O	1:A:100:ASN:N	0.45	2.49	21	1
1:A:60:PRO:HG3	1:A:87:TYR:CE2	0.45	2.46	8	1
1:A:156:ARG:NH2	2:A:21:MYR:C11	0.45	2.80	2	1
1:A:70:MET:SD	1:A:139:HIS:CB	0.45	3.04	18	1
1:A:64:GLN:CB	1:A:121:TYR:CZ	0.45	2.99	10	2
1:A:203:GLU:N	1:A:203:GLU:CD	0.45	2.68	10	1
1:A:174:LYS:NZ	1:A:189:ILE:HD13	0.45	2.27	10	1
1:A:77:GLU:OE2	1:A:77:GLU:O	0.45	2.35	8	1
1:A:69:GLY:HA2	1:A:117:VAL:HG13	0.45	1.89	6	1
1:A:138:ASN:O	1:A:138:ASN:OD1	0.45	2.34	2	1
1:A:171:LEU:HD23	1:A:172:ARG:N	0.45	2.27	3	1
1:A:193:ILE:N	1:A:193:ILE:HD12	0.45	2.26	18	1
1:A:59:PHE:CZ	1:A:118:ARG:CZ	0.45	3.00	7	1
1:A:140:ASP:O	1:A:141:PRO:C	0.45	2.55	17	2
1:A:203:GLU:HG3	1:A:205:TYR:CD2	0.45	2.46	10	2
1:A:162:THR:HG22	1:A:163:SER:OG	0.45	2.11	10	1
1:A:156:ARG:NH1	2:A:21:MYR:C9	0.45	2.80	8	1
1:A:118:ARG:CZ	1:A:119:VAL:N	0.45	2.80	8	1
1:A:122:ARG:HG2	1:A:122:ARG:O	0.45	2.11	12	1
1:A:177:TYR:CE2	1:A:181:LEU:HD21	0.45	2.47	2	1
1:A:64:GLN:NE2	1:A:121:TYR:HB2	0.45	2.27	3	1
1:A:121:TYR:CE2	1:A:131:LEU:HG	0.45	2.47	18	2
1:A:68:PHE:CD1	1:A:135:PHE:HB2	0.45	2.47	2	4
1:A:212:LYS:NZ	1:A:212:LYS:HB2	0.45	2.25	17	1
1:A:146:ARG:CD	1:A:148:GLY:O	0.45	2.64	17	1
1:A:70:MET:HG3	1:A:71:GLY:H	0.45	1.72	13	1
1:A:150:ASP:HB3	1:A:155:TYR:CE2	0.45	2.47	12	1
1:A:98:THR:HB	1:A:100:ASN:ND2	0.45	2.25	7	2
1:A:70:MET:HB3	1:A:139:HIS:NE2	0.45	2.26	13	4
1:A:154:GLN:HG2	1:A:155:TYR:CE2	0.45	2.47	12	3
1:A:103:TYR:CD1	1:A:104:LYS:N	0.45	2.84	14	1
1:A:98:THR:HG22	1:A:99:ARG:HH11	0.45	1.71	19	1
1:A:56:VAL:CG2	1:A:56:VAL:O	0.45	2.65	4	1
1:A:135:PHE:CE2	1:A:159:VAL:CG1	0.45	3.00	15	1
1:A:33:GLU:HG2	1:A:110:LYS:NZ	0.45	2.27	3	1
1:A:64:GLN:HE22	1:A:121:TYR:CB	0.45	2.24	3	1
1:A:151:PHE:C	1:A:151:PHE:CD1	0.45	2.89	3	1
1:A:179:LYS:O	1:A:182:SER:OG	0.45	2.23	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:148:GLY:CA	1:A:220:LEU:HD22	0.45	2.42	9	1
1:A:141:PRO:HG3	1:A:186:PHE:CZ	0.45	2.46	17	1
1:A:48:HIS:NE2	1:A:208:GLN:HG2	0.45	2.27	16	1
1:A:160:TYR:O	1:A:161:PRO:O	0.45	2.34	21	1
1:A:49:HIS:CG	1:A:212:LYS:HE3	0.45	2.45	21	1
1:A:102:THR:H	1:A:105:GLU:HG2	0.45	1.72	8	1
1:A:55:THR:HG22	1:A:90:GLN:CD	0.45	2.32	15	1
1:A:49:HIS:CE1	1:A:208:GLN:HG2	0.45	2.47	20	1
1:A:156:ARG:HH21	1:A:192:ASP:CB	0.45	2.25	3	1
1:A:195:GLU:O	1:A:195:GLU:OE1	0.45	2.35	17	1
1:A:60:PRO:O	1:A:61:GLU:C	0.45	2.55	16	7
1:A:34:ALA:CA	1:A:110:LYS:O	0.45	2.65	13	1
1:A:64:GLN:O	1:A:120:VAL:CA	0.45	2.65	10	1
1:A:141:PRO:HG3	1:A:177:TYR:CD2	0.45	2.47	10	1
1:A:130:GLU:O	1:A:132:LEU:N	0.45	2.49	8	1
1:A:181:LEU:N	1:A:181:LEU:HD23	0.45	2.27	6	2
1:A:55:THR:O	1:A:56:VAL:HG22	0.45	2.11	15	1
1:A:142:THR:O	1:A:143:GLN:OE1	0.45	2.34	15	1
1:A:133:LYS:O	1:A:137:GLU:N	0.45	2.46	2	1
1:A:87:TYR:CE1	1:A:88:SER:HB3	0.44	2.47	11	12
1:A:59:PHE:CE1	1:A:120:VAL:HG11	0.44	2.46	9	3
1:A:174:LYS:CE	1:A:189:ILE:HD13	0.44	2.41	10	1
1:A:125:HIS:ND1	1:A:125:HIS:N	0.44	2.63	2	1
1:A:128:PHE:CZ	1:A:166:GLN:NE2	0.44	2.85	18	1
1:A:70:MET:HA	1:A:139:HIS:CD2	0.44	2.47	6	4
1:A:147:GLN:OE1	1:A:147:GLN:CA	0.44	2.63	8	1
1:A:145:MET:CA	1:A:156:ARG:HH11	0.44	2.24	19	1
1:A:135:PHE:CE2	1:A:159:VAL:HG11	0.44	2.47	15	1
1:A:34:ALA:CB	1:A:98:THR:OG1	0.44	2.65	6	1
1:A:59:PHE:CZ	1:A:120:VAL:HG21	0.44	2.47	12	1
1:A:212:LYS:C	1:A:214:PRO:CD	0.44	2.84	2	1
1:A:96:GLY:O	1:A:198:VAL:HG11	0.44	2.12	7	1
1:A:139:HIS:HE2	1:A:157:SER:HB3	0.44	1.72	5	1
1:A:53:ASN:ND2	1:A:87:TYR:CD2	0.44	2.85	4	3
1:A:138:ASN:OD1	1:A:138:ASN:O	0.44	2.35	21	1
1:A:108:SER:O	1:A:109:GLU:HG2	0.44	2.12	10	1
1:A:176:GLU:OE1	1:A:176:GLU:O	0.44	2.36	19	1
1:A:74:TRP:CD1	1:A:74:TRP:C	0.44	2.86	6	1
1:A:143:GLN:O	1:A:143:GLN:HG3	0.44	2.13	6	1
1:A:49:HIS:CG	1:A:211:SER:OG	0.44	2.70	6	1
1:A:140:ASP:O	1:A:143:GLN:CD	0.44	2.55	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:ARG:HG2	1:A:79:LYS:N	0.44	2.28	11	6
1:A:123:PRO:HB2	1:A:125:HIS:H	0.44	1.73	20	2
1:A:174:LYS:CD	1:A:189:ILE:CD1	0.44	2.96	10	1
1:A:140:ASP:OD1	1:A:140:ASP:C	0.44	2.55	14	1
1:A:190:THR:O	1:A:190:THR:OG1	0.44	2.32	14	1
1:A:203:GLU:CG	1:A:205:TYR:H	0.44	2.25	4	2
1:A:154:GLN:CG	1:A:155:TYR:CE2	0.44	3.01	6	1
1:A:158:ALA:CB	1:A:160:TYR:CZ	0.44	3.01	3	1
1:A:149:ASN:O	1:A:149:ASN:OD1	0.44	2.35	18	1
1:A:210:LEU:HD22	1:A:216:GLY:HA2	0.44	1.88	7	1
1:A:156:ARG:NH1	2:A:21:MYR:H82	0.44	2.28	17	1
1:A:91:VAL:CG2	1:A:207:GLN:HA	0.44	2.42	8	2
1:A:86:VAL:O	1:A:86:VAL:HG12	0.44	2.11	14	2
1:A:68:PHE:CE1	1:A:135:PHE:HB2	0.44	2.48	14	1
1:A:133:LYS:NZ	1:A:137:GLU:OE2	0.44	2.51	18	1
1:A:30:SER:C	1:A:32:GLU:N	0.44	2.70	9	1
1:A:97:HIS:NE2	1:A:111:THR:C	0.44	2.71	7	1
1:A:180:VAL:CG1	1:A:181:LEU:N	0.44	2.80	13	1
1:A:209:TYR:CE2	1:A:213:ASN:HB3	0.44	2.46	21	1
1:A:156:ARG:NE	1:A:192:ASP:HB2	0.44	2.27	14	2
1:A:187:GLY:N	1:A:188:PRO:HD2	0.44	2.23	19	1
1:A:178:GLN:OE1	1:A:178:GLN:O	0.44	2.36	19	1
1:A:208:GLN:C	1:A:210:LEU:N	0.44	2.71	6	1
1:A:47:LYS:O	1:A:49:HIS:N	0.44	2.51	20	1
1:A:157:SER:O	1:A:191:THR:HA	0.44	2.13	3	1
1:A:127:SER:C	1:A:129:GLU:N	0.44	2.71	3	1
1:A:153:THR:OG1	1:A:153:THR:O	0.44	2.26	3	2
1:A:141:PRO:HG2	1:A:186:PHE:CZ	0.44	2.47	17	1
1:A:77:GLU:O	1:A:81:TRP:CE3	0.44	2.71	13	2
1:A:140:ASP:CG	1:A:140:ASP:O	0.44	2.55	8	1
1:A:60:PRO:CG	1:A:87:TYR:CE2	0.44	3.00	8	1
1:A:193:ILE:O	1:A:194:ARG:CG	0.44	2.66	15	1
1:A:50:VAL:CG2	1:A:81:TRP:CG	0.44	2.96	6	1
1:A:91:VAL:CG2	1:A:207:GLN:CD	0.44	2.86	12	1
1:A:29:ILE:HG12	1:A:30:SER:N	0.44	2.28	5	5
1:A:174:LYS:HG2	1:A:175:GLU:N	0.44	2.26	17	1
1:A:99:ARG:HG3	1:A:100:ASN:ND2	0.44	2.28	13	1
1:A:80:PHE:O	1:A:83:LEU:HD11	0.44	2.13	5	1
1:A:70:MET:HG2	1:A:139:HIS:NE2	0.44	2.28	8	3
1:A:146:ARG:HD2	1:A:147:GLN:N	0.44	2.28	4	2
1:A:212:LYS:C	1:A:213:ASN:HD22	0.44	2.16	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:124:GLU:OE2	1:A:125:HIS:CG	0.44	2.70	21	1
1:A:140:ASP:CB	1:A:143:GLN:OE1	0.44	2.66	21	1
1:A:70:MET:SD	1:A:139:HIS:HB3	0.44	2.53	18	3
1:A:49:HIS:CE1	1:A:212:LYS:HG2	0.44	2.48	6	1
1:A:128:PHE:C	1:A:130:GLU:H	0.44	2.15	12	1
1:A:150:ASP:HB2	1:A:155:TYR:CD2	0.44	2.48	12	1
1:A:86:VAL:HG23	1:A:121:TYR:CD1	0.44	2.48	9	2
1:A:178:GLN:NE2	1:A:178:GLN:O	0.44	2.51	17	1
1:A:150:ASP:HB3	1:A:155:TYR:CD2	0.44	2.48	11	3
1:A:31:ALA:C	1:A:33:GLU:H	0.44	2.15	5	2
1:A:84:LYS:NZ	1:A:84:LYS:HA	0.44	2.27	5	1
1:A:103:TYR:HB3	1:A:206:HIS:CE1	0.44	2.47	21	2
1:A:92:GLY:HA3	1:A:200:TYR:O	0.44	2.13	21	1
1:A:121:TYR:CD2	1:A:126:ILE:HG21	0.44	2.47	15	1
1:A:203:GLU:HB3	1:A:205:TYR:CZ	0.44	2.48	12	2
1:A:126:ILE:CD1	1:A:130:GLU:OE1	0.43	2.65	17	1
1:A:94:ALA:HB3	1:A:116:VAL:CG2	0.43	2.43	19	2
1:A:55:THR:C	1:A:56:VAL:CG1	0.43	2.87	21	2
1:A:77:GLU:OE1	1:A:119:VAL:CG1	0.43	2.66	8	1
1:A:115:GLU:C	1:A:115:GLU:CD	0.43	2.77	4	1
1:A:154:GLN:HG2	1:A:155:TYR:CE1	0.43	2.47	6	1
1:A:203:GLU:OE1	1:A:205:TYR:CE2	0.43	2.70	6	1
1:A:93:PHE:CZ	1:A:202:ALA:HB1	0.43	2.47	12	1
1:A:48:HIS:NE2	1:A:208:GLN:HG3	0.43	2.27	17	2
1:A:80:PHE:CD1	1:A:80:PHE:N	0.43	2.85	15	3
1:A:140:ASP:HB3	1:A:143:GLN:NE2	0.43	2.28	19	2
1:A:140:ASP:HB2	1:A:143:GLN:NE2	0.43	2.28	10	1
1:A:141:PRO:CD	1:A:223:THR:OG1	0.43	2.66	19	1
1:A:209:TYR:CE1	1:A:213:ASN:ND2	0.43	2.85	4	1
1:A:47:LYS:O	1:A:48:HIS:O	0.43	2.36	2	2
1:A:88:SER:C	1:A:90:GLN:HE22	0.43	2.16	2	1
1:A:33:GLU:OE2	1:A:33:GLU:O	0.43	2.36	2	1
1:A:127:SER:O	1:A:129:GLU:N	0.43	2.51	3	1
1:A:160:TYR:CE1	1:A:194:ARG:HB2	0.43	2.49	7	1
1:A:150:ASP:HB3	1:A:155:TYR:CG	0.43	2.48	11	3
1:A:96:GLY:HA3	1:A:113:HIS:CG	0.43	2.48	18	8
1:A:48:HIS:CE1	1:A:50:VAL:HB	0.43	2.48	14	7
1:A:67:VAL:HG12	1:A:116:VAL:CG1	0.43	2.43	13	1
1:A:98:THR:OG1	1:A:111:THR:CG2	0.43	2.66	13	1
1:A:70:MET:SD	1:A:157:SER:HB2	0.43	2.54	14	1
1:A:119:VAL:CG2	1:A:119:VAL:O	0.43	2.66	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:123:PRO:HA	1:A:126:ILE:O	0.43	2.14	9	4
1:A:132:LEU:CD2	1:A:132:LEU:N	0.43	2.81	12	1
1:A:147:GLN:OE1	1:A:157:SER:CA	0.43	2.67	18	1
1:A:29:ILE:CG2	1:A:109:GLU:O	0.43	2.66	7	1
1:A:81:TRP:CH2	1:A:210:LEU:HB2	0.43	2.48	11	2
1:A:204:ASP:OD1	1:A:204:ASP:C	0.43	2.56	11	1
1:A:126:ILE:HG23	1:A:130:GLU:HG3	0.43	1.89	21	1
1:A:50:VAL:HG21	1:A:81:TRP:CE2	0.43	2.48	10	1
1:A:219:GLY:O	1:A:220:LEU:CD2	0.43	2.66	19	1
1:A:93:PHE:CZ	1:A:202:ALA:CB	0.43	3.01	4	1
1:A:144:GLY:O	1:A:156:ARG:CD	0.43	2.66	6	1
1:A:59:PHE:O	1:A:60:PRO:O	0.43	2.36	20	1
1:A:33:GLU:O	1:A:110:LYS:CE	0.43	2.66	20	1
1:A:170:ALA:C	1:A:172:ARG:N	0.43	2.72	20	1
1:A:138:ASN:O	1:A:139:HIS:HB3	0.43	2.13	12	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:131:LEU:HB3	0.43	2.48	9	1
1:A:196:GLY:C	1:A:197:GLN:CD	0.43	2.75	7	1
1:A:93:PHE:CE1	1:A:103:TYR:HB2	0.43	2.49	7	1
1:A:141:PRO:C	1:A:143:GLN:OE1	0.43	2.56	13	1
1:A:69:GLY:CA	1:A:115:GLU:OE2	0.43	2.66	13	1
1:A:220:LEU:C	1:A:220:LEU:HD23	0.43	2.34	5	1
1:A:75:GLY:HA3	1:A:218:CYS:SG	0.43	2.53	21	1
1:A:219:GLY:O	1:A:220:LEU:HB2	0.43	2.13	14	2
1:A:127:SER:H	1:A:130:GLU:HG2	0.43	1.73	15	1
1:A:87:TYR:CG	1:A:88:SER:N	0.43	2.87	6	1
1:A:126:ILE:CG1	1:A:130:GLU:HG2	0.43	2.44	2	1
1:A:33:GLU:HG2	1:A:110:LYS:HZ3	0.43	1.73	3	1
1:A:140:ASP:CB	1:A:143:GLN:CD	0.43	2.86	21	1
1:A:90:GLN:O	1:A:118:ARG:O	0.43	2.37	14	1
1:A:85:GLY:O	1:A:122:ARG:CD	0.43	2.67	12	1
1:A:157:SER:O	1:A:191:THR:CA	0.43	2.67	3	1
1:A:56:VAL:HG13	1:A:201:TYR:CZ	0.43	2.49	7	1
1:A:102:THR:O	1:A:103:TYR:C	0.43	2.56	8	2
1:A:117:VAL:O	1:A:117:VAL:HG12	0.43	2.13	13	1
1:A:74:TRP:C	1:A:210:LEU:HD21	0.43	2.33	5	1
1:A:209:TYR:CD2	1:A:209:TYR:C	0.43	2.90	10	1
1:A:93:PHE:HB3	1:A:113:HIS:CD2	0.43	2.49	8	1
1:A:72:CYS:CA	1:A:115:GLU:CD	0.43	2.87	8	1
1:A:72:CYS:O	1:A:115:GLU:OE2	0.43	2.36	8	1
1:A:32:GLU:OE1	1:A:32:GLU:CA	0.43	2.67	14	1
1:A:136:TRP:C	1:A:137:GLU:OE1	0.43	2.57	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:VAL:HG12	1:A:204:ASP:HA	0.43	1.90	20	1
1:A:70:MET:O	1:A:147:GLN:HB2	0.43	2.14	2	1
1:A:156:ARG:NH2	2:A:21:MYR:H111	0.43	2.28	2	1
1:A:91:VAL:CG1	1:A:117:VAL:HG13	0.43	2.44	9	2
1:A:215:ASP:OD1	1:A:217:TYR:O	0.43	2.36	7	1
1:A:124:GLU:CD	1:A:124:GLU:C	0.43	2.78	21	1
1:A:88:SER:C	1:A:89:THR:HG23	0.43	2.34	15	5
1:A:101:PRO:HG3	1:A:113:HIS:NE2	0.43	2.28	12	2
1:A:66:ALA:CB	1:A:166:GLN:HE22	0.43	2.26	9	1
1:A:30:SER:O	1:A:32:GLU:N	0.43	2.51	9	1
1:A:72:CYS:SG	1:A:74:TRP:CB	0.43	3.07	11	2
1:A:93:PHE:CZ	1:A:202:ALA:HA	0.43	2.49	21	5
1:A:145:MET:SD	2:A:21:MYR:H71	0.43	2.54	7	1
1:A:121:TYR:CE2	1:A:128:PHE:HA	0.43	2.49	13	2
1:A:171:LEU:HG	1:A:172:ARG:N	0.43	2.29	9	2
1:A:87:TYR:CD1	1:A:88:SER:CB	0.43	3.02	5	2
1:A:72:CYS:SG	1:A:74:TRP:CZ2	0.43	3.12	16	1
1:A:96:GLY:HA3	1:A:113:HIS:CD2	0.43	2.49	21	1
1:A:135:PHE:CE2	1:A:136:TRP:CZ3	0.43	3.07	10	1
1:A:121:TYR:CE2	1:A:131:LEU:HD21	0.43	2.48	19	1
1:A:152:GLY:C	1:A:154:GLN:H	0.43	2.16	4	2
1:A:208:GLN:HA	1:A:208:GLN:OE1	0.43	2.13	20	1
1:A:69:GLY:O	1:A:139:HIS:NE2	0.43	2.52	2	1
1:A:59:PHE:CZ	1:A:120:VAL:HG11	0.43	2.49	2	2
1:A:89:THR:N	1:A:90:GLN:NE2	0.43	2.67	2	1
1:A:153:THR:O	1:A:153:THR:CG2	0.43	2.66	18	1
1:A:166:GLN:C	1:A:168:GLU:N	0.43	2.72	17	1
1:A:184:HIS:CE1	1:A:186:PHE:CZ	0.43	3.07	11	1
1:A:46:ALA:C	1:A:55:THR:HG1	0.43	2.11	11	1
1:A:147:GLN:O	1:A:148:GLY:C	0.43	2.56	13	2
1:A:31:ALA:CB	1:A:97:HIS:NE2	0.43	2.82	21	1
1:A:87:TYR:CD1	1:A:88:SER:HB3	0.43	2.49	9	3
1:A:158:ALA:CB	1:A:192:ASP:HB3	0.43	2.43	8	1
1:A:171:LEU:HD13	1:A:171:LEU:O	0.43	2.14	19	1
1:A:70:MET:O	1:A:147:GLN:CG	0.43	2.67	6	1
1:A:121:TYR:HD2	1:A:131:LEU:HD21	0.43	1.74	6	1
1:A:177:TYR:CE2	1:A:181:LEU:HD11	0.43	2.49	6	1
1:A:90:GLN:OE1	1:A:120:VAL:HG23	0.43	2.14	20	1
1:A:121:TYR:HB3	1:A:126:ILE:CD1	0.43	2.44	3	1
1:A:48:HIS:CE1	1:A:208:GLN:CG	0.43	3.01	18	1
1:A:31:ALA:HA	1:A:97:HIS:NE2	0.42	2.29	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:106:VAL:HG12	1:A:111:THR:HG23	0.42	1.86	17	1
1:A:77:GLU:CG	1:A:77:GLU:O	0.42	2.67	17	2
1:A:172:ARG:O	1:A:176:GLU:N	0.42	2.43	14	2
1:A:177:TYR:CD1	1:A:181:LEU:HD11	0.42	2.49	13	1
1:A:77:GLU:OE1	1:A:91:VAL:CG2	0.42	2.67	10	1
1:A:79:LYS:NZ	1:A:138:ASN:HB2	0.42	2.28	10	1
1:A:78:ARG:HA	1:A:81:TRP:CE3	0.42	2.49	10	1
1:A:91:VAL:CG2	1:A:207:GLN:CG	0.42	2.96	12	1
1:A:194:ARG:CD	1:A:194:ARG:N	0.42	2.80	18	1
1:A:184:HIS:CD2	1:A:186:PHE:CG	0.42	3.07	11	1
1:A:151:PHE:O	1:A:151:PHE:CD1	0.42	2.71	15	2
1:A:78:ARG:NH2	1:A:214:PRO:HB3	0.42	2.29	5	1
1:A:98:THR:HB	1:A:100:ASN:HD21	0.42	1.72	15	1
1:A:189:ILE:C	1:A:190:THR:HG23	0.42	2.35	20	1
1:A:129:GLU:HA	1:A:132:LEU:HD22	0.42	1.91	20	1
1:A:80:PHE:CE2	1:A:134:VAL:HB	0.42	2.48	17	1
1:A:57:GLU:HA	1:A:58:PRO:C	0.42	2.34	17	1
1:A:48:HIS:HD1	1:A:50:VAL:HB	0.42	1.73	11	1
1:A:128:PHE:CE2	1:A:132:LEU:HD23	0.42	2.49	16	1
1:A:71:GLY:CA	1:A:147:GLN:OE1	0.42	2.67	10	1
1:A:60:PRO:HG2	1:A:87:TYR:CE2	0.42	2.50	10	1
1:A:154:GLN:OE1	1:A:154:GLN:CA	0.42	2.67	8	1
1:A:146:ARG:CG	1:A:150:ASP:O	0.42	2.67	14	1
1:A:130:GLU:C	1:A:130:GLU:OE2	0.42	2.58	2	1
1:A:105:GLU:HG2	1:A:106:VAL:N	0.42	2.28	18	1
1:A:77:GLU:HG2	1:A:91:VAL:HG13	0.42	1.92	7	1
1:A:48:HIS:CE1	1:A:208:GLN:HG2	0.42	2.50	16	2
1:A:159:VAL:HG12	1:A:191:THR:CG2	0.42	2.42	14	1
1:A:109:GLU:HG2	1:A:110:LYS:N	0.42	2.30	14	1
1:A:219:GLY:O	1:A:220:LEU:HG	0.42	2.14	19	1
1:A:85:GLY:CA	1:A:123:PRO:HB3	0.42	2.44	20	1
1:A:145:MET:O	1:A:146:ARG:HD2	0.42	2.13	20	1
1:A:197:GLN:O	1:A:197:GLN:HG2	0.42	2.14	7	1
1:A:128:PHE:CZ	1:A:166:GLN:HG2	0.42	2.49	9	2
1:A:175:GLU:OE1	1:A:175:GLU:C	0.42	2.58	13	1
1:A:178:GLN:HA	1:A:178:GLN:OE1	0.42	2.15	21	1
1:A:112:GLY:O	2:A:21:MYR:H141	0.42	2.14	8	1
1:A:113:HIS:O	1:A:154:GLN:CB	0.42	2.67	8	1
1:A:216:GLY:C	1:A:217:TYR:CD2	0.42	2.93	8	1
1:A:193:ILE:C	1:A:194:ARG:CG	0.42	2.88	4	1
1:A:105:GLU:O	1:A:106:VAL:C	0.42	2.58	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:TRP:C	1:A:76:ALA:N	0.42	2.73	12	1
1:A:103:TYR:O	1:A:103:TYR:CD1	0.42	2.72	9	1
1:A:96:GLY:HA3	1:A:113:HIS:CE1	0.42	2.49	11	3
1:A:49:HIS:CD2	1:A:212:LYS:HD3	0.42	2.50	17	1
1:A:81:TRP:CH2	1:A:211:SER:OG	0.42	2.72	13	1
1:A:86:VAL:CG2	1:A:120:VAL:O	0.42	2.68	16	1
1:A:78:ARG:HA	1:A:81:TRP:CE2	0.42	2.50	21	1
1:A:135:PHE:CZ	1:A:159:VAL:CG1	0.42	3.03	15	1
1:A:156:ARG:NH1	2:A:21:MYR:H102	0.42	2.30	15	1
1:A:143:GLN:CB	1:A:147:GLN:HG2	0.42	2.45	12	1
1:A:198:VAL:HG13	1:A:200:TYR:CE2	0.42	2.49	12	1
1:A:63:THR:CG2	1:A:122:ARG:CD	0.42	2.97	18	1
1:A:128:PHE:CE1	1:A:132:LEU:HD23	0.42	2.49	7	1
1:A:86:VAL:HG23	1:A:121:TYR:CD2	0.42	2.49	5	1
1:A:64:GLN:CA	1:A:64:GLN:OE1	0.42	2.68	5	1
1:A:177:TYR:OH	1:A:223:THR:HG21	0.42	2.14	16	1
1:A:147:GLN:HA	1:A:147:GLN:OE1	0.42	2.15	21	1
1:A:134:VAL:HG22	1:A:138:ASN:ND2	0.42	2.30	14	1
1:A:150:ASP:HB3	1:A:155:TYR:CD1	0.42	2.50	19	1
1:A:153:THR:CA	1:A:156:ARG:HH11	0.42	2.28	6	1
1:A:140:ASP:N	1:A:141:PRO:HD3	0.42	2.30	6	1
1:A:70:MET:O	1:A:147:GLN:HG3	0.42	2.14	20	1
1:A:87:TYR:CD1	1:A:120:VAL:HG11	0.42	2.49	12	1
1:A:136:TRP:HE1	1:A:173:SER:HB2	0.42	1.74	12	1
1:A:147:GLN:OE1	1:A:157:SER:CB	0.42	2.67	2	1
1:A:126:ILE:CG2	1:A:130:GLU:CD	0.42	2.86	3	1
1:A:203:GLU:OE1	1:A:203:GLU:N	0.42	2.43	18	1
1:A:54:ARG:CB	1:A:54:ARG:NH1	0.42	2.83	13	1
1:A:216:GLY:C	1:A:217:TYR:O	0.42	2.58	9	3
1:A:70:MET:HG3	1:A:76:ALA:HB1	0.42	1.90	19	1
1:A:98:THR:HB	1:A:99:ARG:NH1	0.42	2.30	19	1
1:A:64:GLN:NE2	1:A:121:TYR:CA	0.42	2.77	3	1
1:A:168:GLU:C	1:A:168:GLU:CD	0.42	2.79	9	1
1:A:184:HIS:CD2	1:A:186:PHE:CZ	0.42	3.08	11	1
1:A:54:ARG:NH1	1:A:57:GLU:O	0.42	2.53	5	1
1:A:195:GLU:C	1:A:197:GLN:N	0.42	2.73	5	1
1:A:55:THR:HG22	1:A:90:GLN:OE1	0.42	2.14	8	1
1:A:35:LEU:HD23	1:A:35:LEU:N	0.42	2.30	6	1
1:A:156:ARG:HD3	1:A:157:SER:N	0.42	2.30	12	1
1:A:101:PRO:HG3	1:A:113:HIS:CD2	0.42	2.50	3	1
1:A:49:HIS:NE2	1:A:212:LYS:HD2	0.42	2.29	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:142:THR:O	1:A:190:THR:CG2	0.42	2.68	17	1
1:A:176:GLU:HG3	1:A:177:TYR:N	0.42	2.30	20	5
1:A:50:VAL:HG23	1:A:208:GLN:HG3	0.42	1.91	5	1
1:A:49:HIS:ND1	1:A:212:LYS:CE	0.42	2.82	21	1
1:A:47:LYS:HA	1:A:53:ASN:O	0.42	2.15	8	1
1:A:157:SER:OG	1:A:191:THR:HA	0.42	2.15	14	1
1:A:67:VAL:HG11	1:A:160:TYR:CD2	0.42	2.50	12	1
1:A:118:ARG:HB2	1:A:199:PHE:CE1	0.42	2.50	2	1
1:A:99:ARG:HG2	1:A:100:ASN:ND2	0.42	2.30	3	1
1:A:107:CYS:O	1:A:108:SER:C	0.42	2.58	9	1
1:A:64:GLN:CG	1:A:65:MET:N	0.41	2.82	7	1
1:A:121:TYR:CE1	1:A:131:LEU:HB3	0.41	2.50	5	1
1:A:68:PHE:O	1:A:116:VAL:HG12	0.41	2.15	21	1
1:A:178:GLN:OE1	1:A:189:ILE:HG12	0.41	2.14	21	1
1:A:118:ARG:O	1:A:118:ARG:NH2	0.41	2.53	8	1
1:A:64:GLN:OE1	1:A:65:MET:SD	0.41	2.77	19	1
1:A:156:ARG:HB2	1:A:156:ARG:NH1	0.41	2.30	4	1
1:A:81:TRP:CZ3	1:A:208:GLN:HB3	0.41	2.49	6	1
1:A:156:ARG:NH2	2:A:21:MYR:C13	0.41	2.58	20	1
1:A:173:SER:OG	1:A:174:LYS:N	0.41	2.53	12	1
1:A:94:ALA:O	1:A:95:GLY:C	0.41	2.58	3	1
1:A:31:ALA:HA	1:A:97:HIS:CD2	0.41	2.49	17	1
1:A:179:LYS:C	1:A:182:SER:OG	0.41	2.59	17	1
1:A:35:LEU:CG	1:A:98:THR:HG23	0.41	2.45	21	1
1:A:73:PHE:O	1:A:77:GLU:HB2	0.41	2.15	10	1
1:A:109:GLU:O	1:A:110:LYS:C	0.41	2.58	8	1
1:A:179:LYS:O	1:A:179:LYS:CG	0.41	2.69	19	1
1:A:48:HIS:N	1:A:55:THR:CG2	0.41	2.81	4	1
1:A:34:ALA:HB2	1:A:111:THR:HA	0.41	1.92	6	1
1:A:44:VAL:HG12	1:A:203:GLU:C	0.41	2.35	20	1
1:A:72:CYS:SG	1:A:74:TRP:HB2	0.41	2.56	6	2
1:A:30:SER:N	1:A:33:GLU:OE1	0.41	2.49	7	1
1:A:102:THR:O	1:A:106:VAL:N	0.41	2.35	11	1
1:A:160:TYR:CZ	1:A:192:ASP:OD2	0.41	2.73	14	1
1:A:34:ALA:C	1:A:35:LEU:O	0.41	2.59	14	1
1:A:121:TYR:CE1	1:A:131:LEU:HD21	0.41	2.50	19	1
1:A:203:GLU:CD	1:A:205:TYR:CD2	0.41	2.93	6	1
1:A:153:THR:CB	1:A:156:ARG:NH1	0.41	2.83	6	1
1:A:114:ALA:CA	1:A:156:ARG:HH12	0.41	2.29	20	1
1:A:118:ARG:HB2	1:A:199:PHE:CZ	0.41	2.50	2	1
1:A:154:GLN:HG3	1:A:155:TYR:CE2	0.41	2.50	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:171:LEU:CD2	1:A:171:LEU:C	0.41	2.88	3	1
1:A:88:SER:C	1:A:89:THR:CG2	0.41	2.88	7	1
1:A:136:TRP:HB3	1:A:177:TYR:CE1	0.41	2.50	9	2
1:A:70:MET:HB3	1:A:147:GLN:HE21	0.41	1.74	8	1
1:A:89:THR:CB	1:A:119:VAL:HG12	0.41	2.46	14	1
1:A:198:VAL:CG2	1:A:199:PHE:N	0.41	2.83	19	1
1:A:147:GLN:HG2	1:A:155:TYR:O	0.41	2.15	4	1
1:A:85:GLY:C	1:A:123:PRO:HG3	0.41	2.36	20	1
1:A:45:THR:N	1:A:204:ASP:OD1	0.41	2.50	20	1
1:A:77:GLU:OE1	1:A:81:TRP:CZ3	0.41	2.72	20	1
1:A:156:ARG:NH2	1:A:158:ALA:HB2	0.41	2.30	3	1
1:A:64:GLN:NE2	1:A:131:LEU:HD21	0.41	2.30	3	1
1:A:128:PHE:HE1	1:A:132:LEU:HD23	0.41	1.76	7	1
1:A:129:GLU:HA	1:A:132:LEU:HD12	0.41	1.92	11	1
1:A:104:LYS:HZ3	1:A:104:LYS:CB	0.41	2.29	13	1
1:A:119:VAL:HG13	1:A:131:LEU:HD22	0.41	1.92	10	1
1:A:118:ARG:NH2	1:A:118:ARG:C	0.41	2.74	8	1
1:A:118:ARG:NH2	1:A:120:VAL:N	0.41	2.61	8	1
1:A:34:ALA:HB2	1:A:110:LYS:O	0.41	2.13	14	1
1:A:145:MET:N	1:A:156:ARG:NH1	0.41	2.68	19	1
1:A:49:HIS:CG	1:A:212:LYS:HD2	0.41	2.51	4	2
1:A:156:ARG:HG2	1:A:156:ARG:NH1	0.41	2.31	15	1
1:A:118:ARG:HG3	1:A:199:PHE:CZ	0.41	2.51	6	1
1:A:64:GLN:HB2	1:A:121:TYR:CZ	0.41	2.51	6	1
1:A:176:GLU:HG2	1:A:177:TYR:N	0.41	2.29	6	1
1:A:129:GLU:H	1:A:129:GLU:CD	0.41	2.18	12	1
1:A:140:ASP:OD2	1:A:141:PRO:CD	0.41	2.68	11	1
1:A:188:PRO:O	1:A:189:ILE:C	0.41	2.59	19	2
1:A:80:PHE:CD1	1:A:134:VAL:HG11	0.41	2.50	5	1
1:A:29:ILE:HD13	1:A:29:ILE:N	0.41	2.29	8	1
1:A:35:LEU:HD21	1:A:110:LYS:CB	0.41	2.45	8	1
1:A:81:TRP:CZ2	1:A:211:SER:CB	0.41	3.03	4	1
1:A:83:LEU:HD12	1:A:121:TYR:OH	0.41	2.15	12	1
1:A:142:THR:CG2	1:A:189:ILE:HD13	0.41	2.45	9	1
1:A:145:MET:SD	2:A:21:MYR:H92	0.41	2.55	7	1
1:A:212:LYS:HB3	1:A:212:LYS:NZ	0.41	2.30	17	1
1:A:115:GLU:OE1	1:A:115:GLU:O	0.41	2.37	11	1
1:A:210:LEU:HD23	1:A:216:GLY:CA	0.41	2.45	11	1
1:A:55:THR:HG22	1:A:88:SER:OG	0.41	2.14	21	1
1:A:34:ALA:CB	1:A:97:HIS:CE1	0.41	3.04	8	2
1:A:216:GLY:O	1:A:217:TYR:CB	0.41	2.68	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:171:LEU:O	1:A:171:LEU:HD13	0.41	2.15	12	1
1:A:151:PHE:N	1:A:151:PHE:CD1	0.41	2.88	9	1
1:A:143:GLN:HG3	1:A:148:GLY:H	0.41	1.76	13	1
1:A:67:VAL:HG13	1:A:117:VAL:O	0.41	2.16	5	1
1:A:178:GLN:OE1	1:A:189:ILE:HG13	0.41	2.16	21	1
1:A:150:ASP:O	1:A:150:ASP:OD1	0.41	2.38	21	1
1:A:70:MET:N	1:A:139:HIS:CD2	0.41	2.89	14	1
1:A:77:GLU:CD	1:A:90:GLN:N	0.41	2.73	19	1
1:A:79:LYS:C	1:A:80:PHE:CD1	0.41	2.94	4	1
1:A:198:VAL:HG22	1:A:200:TYR:CE2	0.41	2.51	4	1
1:A:113:HIS:O	1:A:156:ARG:NH2	0.41	2.53	6	1
1:A:59:PHE:CE2	1:A:118:ARG:CZ	0.41	3.04	2	1
1:A:60:PRO:HG3	1:A:87:TYR:CD2	0.41	2.51	3	1
1:A:147:GLN:HA	1:A:147:GLN:NE2	0.41	2.31	17	1
1:A:150:ASP:CB	1:A:155:TYR:CD2	0.41	3.04	11	1
1:A:102:THR:OG1	1:A:105:GLU:HB2	0.41	2.16	13	1
1:A:103:TYR:O	1:A:107:CYS:N	0.41	2.49	16	1
1:A:94:ALA:CB	1:A:198:VAL:O	0.41	2.69	16	1
1:A:93:PHE:HB2	1:A:113:HIS:CD2	0.41	2.51	16	1
1:A:49:HIS:CE1	1:A:212:LYS:HE2	0.41	2.51	21	1
1:A:53:ASN:OD1	1:A:53:ASN:C	0.41	2.59	21	1
1:A:140:ASP:C	1:A:143:GLN:OE1	0.41	2.59	21	1
1:A:139:HIS:NE2	1:A:141:PRO:HB3	0.41	2.30	19	1
1:A:178:GLN:OE1	1:A:178:GLN:C	0.41	2.59	19	1
1:A:106:VAL:HG11	1:A:113:HIS:HD2	0.41	1.76	4	1
1:A:132:LEU:CD1	1:A:132:LEU:N	0.41	2.83	4	1
1:A:141:PRO:HG2	1:A:181:LEU:CD1	0.41	2.46	15	1
1:A:29:ILE:HD13	1:A:29:ILE:C	0.41	2.36	6	2
1:A:136:TRP:CZ2	1:A:173:SER:CB	0.41	3.03	20	1
1:A:77:GLU:OE2	1:A:119:VAL:HG12	0.41	2.16	12	1
1:A:204:ASP:O	1:A:209:TYR:CB	0.41	2.69	18	1
1:A:32:GLU:CA	1:A:32:GLU:OE1	0.41	2.69	18	1
1:A:202:ALA:HB1	1:A:206:HIS:CB	0.41	2.46	9	1
1:A:172:ARG:C	1:A:176:GLU:OE2	0.41	2.59	9	1
1:A:156:ARG:HH22	1:A:194:ARG:NH2	0.41	2.12	7	1
1:A:93:PHE:HB2	1:A:113:HIS:NE2	0.41	2.30	7	1
1:A:210:LEU:HD13	1:A:218:CYS:HB3	0.41	1.93	17	1
1:A:81:TRP:CZ2	1:A:210:LEU:HB2	0.41	2.51	11	1
1:A:155:TYR:C	1:A:156:ARG:O	0.41	2.59	13	1
1:A:116:VAL:HG11	1:A:160:TYR:CD2	0.41	2.50	13	1
1:A:84:LYS:HZ1	1:A:84:LYS:HA	0.41	1.75	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:TRP:CZ2	1:A:211:SER:HA	0.41	2.51	20	1
1:A:173:SER:OG	1:A:191:THR:HG21	0.41	2.16	20	1
1:A:59:PHE:CE2	1:A:120:VAL:HG21	0.41	2.51	12	1
1:A:70:MET:CG	1:A:76:ALA:HB2	0.40	2.46	7	1
1:A:128:PHE:CD2	1:A:131:LEU:HD21	0.40	2.51	7	1
1:A:184:HIS:NE2	1:A:186:PHE:CZ	0.40	2.89	11	1
1:A:33:GLU:C	1:A:34:ALA:O	0.40	2.60	15	2
1:A:93:PHE:CZ	1:A:102:THR:HA	0.40	2.51	10	1
1:A:118:ARG:HD3	1:A:199:PHE:CE1	0.40	2.52	14	1
1:A:35:LEU:CD2	1:A:35:LEU:N	0.40	2.84	4	1
1:A:121:TYR:CD1	1:A:126:ILE:HG22	0.40	2.51	6	1
1:A:146:ARG:HB2	1:A:151:PHE:CB	0.40	2.46	12	1
1:A:156:ARG:NH2	1:A:194:ARG:HH12	0.40	2.14	2	1
1:A:121:TYR:CD2	1:A:131:LEU:HG	0.40	2.51	18	1
1:A:121:TYR:CZ	1:A:131:LEU:HG	0.40	2.51	18	1
1:A:77:GLU:CD	1:A:78:ARG:H	0.40	2.20	18	1
1:A:158:ALA:HB1	1:A:194:ARG:NH1	0.40	2.31	18	1
1:A:29:ILE:HG21	1:A:110:LYS:O	0.40	2.16	18	1
1:A:128:PHE:HE2	1:A:132:LEU:HD11	0.40	1.67	9	1
1:A:84:LYS:O	1:A:126:ILE:HG12	0.40	2.16	9	1
1:A:67:VAL:HG21	1:A:197:GLN:CD	0.40	2.37	7	1
1:A:77:GLU:CD	1:A:208:GLN:HE21	0.40	2.19	16	1
1:A:139:HIS:CE1	1:A:141:PRO:N	0.40	2.89	10	1
1:A:135:PHE:CE2	1:A:159:VAL:CG2	0.40	3.04	18	2
1:A:145:MET:CA	1:A:156:ARG:NH1	0.40	2.84	19	1
1:A:118:ARG:C	1:A:118:ARG:HD3	0.40	2.37	15	1
1:A:72:CYS:CB	1:A:150:ASP:OD2	0.40	2.70	12	1
1:A:31:ALA:HA	1:A:97:HIS:CE1	0.40	2.51	2	1
1:A:156:ARG:NH1	1:A:192:ASP:HB2	0.40	2.31	7	1
1:A:194:ARG:HH12	2:A:21:MYR:H101	0.40	1.76	16	1
1:A:49:HIS:ND1	1:A:212:LYS:HE3	0.40	2.31	21	1
1:A:64:GLN:HB3	1:A:121:TYR:CE2	0.40	2.51	10	1
1:A:194:ARG:C	1:A:195:GLU:CD	0.40	2.79	10	1
1:A:160:TYR:CD1	1:A:197:GLN:HG3	0.40	2.51	8	1
1:A:108:SER:OG	1:A:110:LYS:CE	0.40	2.68	15	1
1:A:198:VAL:HG11	1:A:200:TYR:OH	0.40	2.15	15	1
1:A:122:ARG:NH1	1:A:122:ARG:HB2	0.40	2.30	12	1
1:A:107:CYS:O	1:A:109:GLU:OE1	0.40	2.39	13	1
1:A:68:PHE:HA	1:A:158:ALA:O	0.40	2.16	16	1
1:A:98:THR:CB	1:A:99:ARG:NH1	0.40	2.84	19	1
1:A:178:GLN:O	1:A:178:GLN:CD	0.40	2.60	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:73:PHE:HA	1:A:76:ALA:HB3	0.40	1.92	15	1
1:A:43:PRO:C	1:A:44:VAL:HG13	0.40	2.36	12	1
1:A:69:GLY:C	1:A:139:HIS:NE2	0.40	2.74	2	1
1:A:142:THR:HG22	1:A:189:ILE:HD13	0.40	1.92	9	1
1:A:167:MET:SD	1:A:171:LEU:CD1	0.40	3.10	7	1
1:A:126:ILE:HD13	1:A:130:GLU:CD	0.40	2.36	13	1
1:A:74:TRP:CA	1:A:210:LEU:HD11	0.40	2.46	8	1
1:A:140:ASP:HB3	1:A:143:GLN:HE21	0.40	1.76	6	1
1:A:94:ALA:N	1:A:113:HIS:HD1	0.40	2.12	20	1
1:A:84:LYS:O	1:A:84:LYS:CG	0.40	2.66	20	1
1:A:154:GLN:HG3	1:A:155:TYR:CD2	0.40	2.51	9	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

In the following table, the Percentiles column shows the percent Ramachandran outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all NMR entries. The Analysed column shows the number of residues for which the backbone conformation was analysed and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	190/212 (90%)	137±7 (72±4%)	33±4 (17±2%)	20±5 (10±2%)	1	10
All	All	3990/4452 (90%)	2878 (72%)	698 (17%)	414 (10%)	1	10

All 62 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	53	ASN	21
1	A	208	GLN	20
1	A	72	CYS	18
1	A	73	PHE	17
1	A	216	GLY	17
1	A	28	VAL	15
1	A	189	ILE	14
1	A	144	GLY	13
1	A	29	ILE	13
1	A	57	GLU	13
1	A	217	TYR	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	79	LYS	13
1	A	99	ARG	13
1	A	45	THR	13
1	A	34	ALA	13
1	A	214	PRO	11
1	A	124	GLU	9
1	A	198	VAL	9
1	A	141	PRO	8
1	A	223	THR	8
1	A	145	MET	8
1	A	163	SER	8
1	A	109	GLU	8
1	A	107	CYS	7
1	A	43	PRO	7
1	A	35	LEU	7
1	A	108	SER	6
1	A	48	HIS	6
1	A	218	CYS	6
1	A	161	PRO	5
1	A	219	GLY	5
1	A	44	VAL	5
1	A	221	GLY	5
1	A	164	ALA	4
1	A	205	TYR	4
1	A	100	ASN	4
1	A	110	LYS	4
1	A	139	HIS	4
1	A	196	GLY	3
1	A	122	ARG	3
1	A	101	PRO	3
1	A	88	SER	3
1	A	220	LEU	2
1	A	156	ARG	2
1	A	143	GLN	2
1	A	197	GLN	2
1	A	78	ARG	2
1	A	61	GLU	2
1	A	137	GLU	2
1	A	97	HIS	2
1	A	60	PRO	1
1	A	167	MET	1
1	A	56	VAL	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	188	PRO	1
1	A	209	TYR	1
1	A	222	GLY	1
1	A	32	GLU	1
1	A	182	SER	1
1	A	215	ASP	1
1	A	146	ARG	1
1	A	210	LEU	1
1	A	112	GLY	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	159/176 (90%)	108±10 (68±6%)	51±10 (32±6%)	1	14
All	All	3339/3696 (90%)	2270 (68%)	1069 (32%)	1	14

All 131 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	73	PHE	21
1	A	30	SER	21
1	A	29	ILE	20
1	A	205	TYR	20
1	A	204	ASP	20
1	A	87	TYR	20
1	A	162	THR	20
1	A	185	ASN	20
1	A	86	VAL	18
1	A	63	THR	18
1	A	126	ILE	17
1	A	153	THR	17
1	A	189	ILE	16
1	A	193	ILE	16
1	A	65	MET	16
1	A	42	ILE	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	140	ASP	15
1	A	70	MET	15
1	A	177	TYR	15
1	A	163	SER	14
1	A	116	VAL	14
1	A	145	MET	14
1	A	142	THR	14
1	A	173	SER	14
1	A	91	VAL	13
1	A	98	THR	13
1	A	120	VAL	13
1	A	194	ARG	12
1	A	35	LEU	12
1	A	84	LYS	12
1	A	150	ASP	12
1	A	156	ARG	12
1	A	118	ARG	12
1	A	104	LYS	12
1	A	28	VAL	11
1	A	146	ARG	11
1	A	97	HIS	11
1	A	223	THR	11
1	A	72	CYS	11
1	A	131	LEU	11
1	A	195	GLU	11
1	A	210	LEU	11
1	A	220	LEU	10
1	A	157	SER	10
1	A	208	GLN	10
1	A	110	LYS	10
1	A	113	HIS	10
1	A	47	LYS	9
1	A	127	SER	9
1	A	133	LYS	9
1	A	90	GLN	9
1	A	171	LEU	9
1	A	179	LYS	9
1	A	172	ARG	9
1	A	103	TYR	9
1	A	174	LYS	8
1	A	178	GLN	8
1	A	121	TYR	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	45	THR	8
1	A	147	GLN	8
1	A	197	GLN	8
1	A	125	HIS	8
1	A	176	GLU	7
1	A	138	ASN	7
1	A	81	TRP	7
1	A	100	ASN	7
1	A	56	VAL	7
1	A	203	GLU	7
1	A	168	GLU	6
1	A	134	VAL	6
1	A	130	GLU	6
1	A	79	LYS	6
1	A	99	ARG	6
1	A	115	GLU	6
1	A	139	HIS	6
1	A	119	VAL	6
1	A	88	SER	6
1	A	32	GLU	6
1	A	149	ASN	5
1	A	129	GLU	5
1	A	218	CYS	5
1	A	83	LEU	5
1	A	122	ARG	5
1	A	54	ARG	5
1	A	184	HIS	5
1	A	105	GLU	5
1	A	213	ASN	5
1	A	82	VAL	5
1	A	175	GLU	5
1	A	49	HIS	5
1	A	143	GLN	5
1	A	109	GLU	5
1	A	137	GLU	4
1	A	68	PHE	4
1	A	212	LYS	4
1	A	166	GLN	4
1	A	93	PHE	4
1	A	57	GLU	4
1	A	186	PHE	4
1	A	78	ARG	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	183	LYS	4
1	A	167	MET	4
1	A	207	GLN	3
1	A	61	GLU	3
1	A	200	TYR	3
1	A	44	VAL	3
1	A	107	CYS	3
1	A	132	LEU	3
1	A	154	GLN	3
1	A	117	VAL	2
1	A	108	SER	2
1	A	198	VAL	2
1	A	211	SER	2
1	A	77	GLU	2
1	A	215	ASP	2
1	A	74	TRP	2
1	A	217	TYR	2
1	A	151	PHE	2
1	A	182	SER	2
1	A	190	THR	2
1	A	124	GLU	2
1	A	89	THR	2
1	A	111	THR	2
1	A	201	TYR	1
1	A	64	GLN	1
1	A	51	SER	1
1	A	191	THR	1
1	A	33	GLU	1
1	A	159	VAL	1
1	A	128	PHE	1
1	A	106	VAL	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry ⓘ

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	MYR	A	21	1	14,14,15	0.50±0.05	0±0 (0±0%)

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond angles		
					Counts	RMSZ	#Z>2
2	MYR	A	21	1	13,13,15	0.95±0.04	0±0 (0±0%)

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	MYR	A	21	1	-	0±0,11,12,13	0±0,0,0,0

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

6.7 Other polymers ⓘ

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 2% for the well-defined parts and 2% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: 2l90_cs.str

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_1*

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	1010
Number of shifts mapped to atoms	50
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	960
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	1

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

- Residue not found in structure. All 960 occurrences are reported below.

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	136	SER	CB	61.495	0.2	1
A	121	THR	HA	5.02	0.02	1
A	58	LYS	N	114.07	0.1	1
A	83	LYS	CA	59.711	0.2	1
A	99	VAL	N	128.01	0.1	1
A	136	SER	N	117.35	0.1	1
A	177	VAL	N	123.46	0.1	1
A	32	ASN	CB	37.241	0.2	1
A	133	GLN	CA	55.8	0.2	1
A	197	CYS	CB	29.3	0.2	1
A	154	GLU	CA	58.905	0.2	1
A	110	LEU	H	7.61	0.02	1
A	99	VAL	CB	31.261	0.2	1
A	85	VAL	H	8.46	0.02	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	33	ARG	CB	31.614	0.2	1
A	54	GLY	H	8.19	0.02	1
A	61	VAL	N	110.81	0.1	1
A	146	MET	H	7.75	0.02	1
A	6	LYS	CB	33.179	0.2	1
A	13	ALA	H	7.0	0.02	1
A	92	HIS	N	121.88	0.1	1
A	152	SER	HA	4.27	0.02	1
A	105	ILE	H	8.45	0.02	1
A	170	THR	HA	3.66	0.02	1
A	177	VAL	CA	61.814	0.2	1
A	6	LYS	N	120.17	0.1	1
A	148	ALA	H	7.71	0.02	1
A	85	VAL	CB	29.2	0.2	1
A	34	THR	CA	60.839	0.2	1
A	199	LEU	H	8.41	0.02	1
A	125	ARG	CB	32.05	0.2	1
A	125	ARG	HA	4.46	0.02	1
A	33	ARG	HA	4.7	0.02	1
A	202	THR	H	8.49	0.02	1
A	112	LYS	HA	3.95	0.02	1
A	95	VAL	CB	36.746	0.2	1
A	38	PHE	CB	37.373	0.2	1
A	68	THR	N	111.27	0.1	1
A	118	HIS	H	7.77	0.02	1
A	38	PHE	N	123.87	0.1	1
A	23	VAL	H	7.75	0.02	1
A	62	LEU	H	7.18	0.02	1
A	118	HIS	CB	30.79	0.2	1
A	76	HIS	HA	4.62	0.02	1
A	95	VAL	N	118.52	0.1	1
A	177	VAL	H	7.83	0.02	1
A	96	VAL	CB	35.22	0.2	1
A	127	GLY	N	120.71	0.1	1
A	32	ASN	CA	52.027	0.2	1
A	210	ILE	CA	60.672	0.2	1
A	165	PHE	H	7.88	0.02	1
A	101	ARG	N	120.4	0.1	1
A	110	LEU	CA	57.867	0.2	1
A	124	MET	H	9.12	0.02	1
A	211	LYS	H	8.39	0.02	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	135	ARG	CB	29.798	0.2	1
A	68	THR	CB	71.551	0.2	1
A	138	VAL	H	8.06	0.02	1
A	103	GLU	CA	57.667	0.2	1
A	156	TYR	CB	36.199	0.2	1
A	11	GLU	CA	59.004	0.2	1
A	101	ARG	HA	4.88	0.02	1
A	105	ILE	CA	60.979	0.2	1
A	210	ILE	N	121.2	0.1	1
A	182	GLU	CB	30.749	0.2	1
A	122	GLN	CA	57.182	0.2	1
A	199	LEU	N	120.84	0.1	1
A	16	GLY	N	109.28	0.1	1
A	84	GLU	N	117.62	0.1	1
A	89	LYS	HA	4.42	0.02	1
A	113	VAL	H	6.85	0.02	1
A	183	ASP	CA	57.994	0.2	1
A	134	TYR	N	119.5	0.1	1
A	84	GLU	CB	29.229	0.2	1
A	134	TYR	H	7.38	0.02	1
A	68	THR	HA	5.6	0.02	1
A	115	TRP	N	120.696	0.1	1
A	92	HIS	CB	33.551	0.2	1
A	45	ALA	H	9.08	0.02	1
A	31	GLY	HA3	3.75	0.02	2
A	6	LYS	HA	4.29	0.02	1
A	193	PRO	CA	64.4	0.2	1
A	176	GLN	CA	53.731	0.2	1
A	168	ILE	HA	3.94	0.02	1
A	92	HIS	CA	57.233	0.2	1
A	193	PRO	CB	31.9	0.2	1
A	134	TYR	CB	38.083	0.2	1
A	63	LYS	CB	31.376	0.2	1
A	49	MET	CA	53.6	0.2	1
A	145	GLN	CA	58.488	0.2	1
A	186	GLN	CB	25.729	0.2	1
A	111	LEU	CA	56.778	0.2	1
A	170	THR	N	119.18	0.1	1
A	195	GLY	H	8.057	0.02	1
A	124	MET	HA	4.56	0.02	1
A	82	TYR	N	124.4	0.1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	120	PRO	CB	31.75	0.2	1
A	151	ARG	CB	30.33	0.2	1
A	98	VAL	HA	4.13	0.02	1
A	82	TYR	CB	38.0	0.2	1
A	127	GLY	HA3	3.65	0.02	2
A	126	GLN	N	120.94	0.1	1
A	64	GLY	H	8.62	0.02	1
A	173	ARG	H	7.42	0.02	1
A	191	LYS	CB	33.2	0.2	1
A	157	GLN	CB	29.546	0.2	1
A	57	ARG	CB	31.188	0.2	1
A	51	CYS	HA	4.38	0.02	1
A	58	LYS	HA	3.57	0.02	1
A	93	ALA	CB	20.019	0.2	1
A	157	GLN	N	117.87	0.1	1
A	57	ARG	N	115.46	0.1	1
A	141	THR	CB	69.66	0.2	1
A	152	SER	CB	62.709	0.2	1
A	93	ALA	N	122.02	0.1	1
A	64	GLY	HA3	3.7	0.02	2
A	143	ALA	CA	54.82	0.2	1
A	81	THR	CA	58.746	0.2	1
A	194	ASP	H	8.19	0.02	1
A	130	PHE	H	8.82	0.02	1
A	45	ALA	CA	49.81	0.2	1
A	2	ASP	CA	54.8	0.2	1
A	137	ALA	HA	5.1	0.02	1
A	174	GLU	CA	56.683	0.2	1
A	136	SER	H	7.89	0.02	1
A	118	HIS	CA	54.5	0.2	1
A	39	PRO	HA	4.17	0.02	1
A	172	ILE	H	8.1	0.02	1
A	56	GLU	CA	60.674	0.2	1
A	197	CYS	H	8.17	0.02	1
A	194	ASP	HA	4.85	0.02	1
A	77	THR	H	6.54	0.02	1
A	99	VAL	H	8.92	0.02	1
A	180	TYR	N	120.69	0.1	1
A	33	ARG	H	8.04	0.02	1
A	92	HIS	H	7.95	0.02	1
A	146	MET	CB	32.138	0.2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	13	ALA	CB	20.246	0.2	1
A	54	GLY	N	105.146	0.1	1
A	21	ILE	HA	4.2	0.02	1
A	161	SER	CA	58.321	0.2	1
A	23	VAL	HA	4.5	0.02	1
A	129	ASP	CA	53.926	0.2	1
A	100	TYR	N	125.68	0.1	1
A	202	THR	N	108.63	0.1	1
A	125	ARG	CA	55.354	0.2	1
A	116	GLU	CA	57.736	0.2	1
A	125	ARG	H	7.96	0.02	1
A	114	PHE	HA	3.92	0.02	1
A	202	THR	CB	71.5	0.2	1
A	189	LEU	HA	4.25	0.02	1
A	38	PHE	H	8.71	0.02	1
A	17	ARG	CA	54.689	0.2	1
A	179	TYR	CB	40.715	0.2	1
A	84	GLU	HA	3.72	0.02	1
A	14	LEU	CB	40.496	0.2	1
A	155	GLU	HA	4.05	0.02	1
A	191	LYS	H	6.77	0.02	1
A	11	GLU	HA	3.9	0.02	1
A	88	GLU	CA	61.226	0.2	1
A	58	LYS	CA	56.14	0.2	1
A	179	TYR	N	127.51	0.1	1
A	198	GLY	H	8.44	0.02	1
A	67	SER	N	110.48	0.1	1
A	211	LYS	CA	56.217	0.2	1
A	136	SER	CA	58.689	0.2	1
A	117	ASN	HA	4.79	0.02	1
A	95	VAL	CA	58.76	0.2	1
A	8	ILE	HA	3.94	0.02	1
A	48	GLY	HA3	3.41	0.02	2
A	86	CYS	H	8.29	0.02	1
A	116	GLU	H	7.43	0.02	1
A	98	VAL	CA	60.993	0.2	1
A	108	GLU	HA	3.73	0.02	1
A	149	ALA	CB	18.399	0.2	1
A	4	ALA	N	123.5	0.1	1
A	135	ARG	H	6.7	0.02	1
A	77	THR	HA	3.75	0.02	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	138	VAL	CB	34.685	0.2	1
A	141	THR	N	113.44	0.1	1
A	183	ASP	N	120.51	0.1	1
A	108	GLU	CB	28.506	0.2	1
A	6	LYS	CA	56.065	0.2	1
A	138	VAL	N	118.52	0.1	1
A	126	GLN	HA	4.84	0.02	1
A	182	GLU	H	10.87	0.02	1
A	72	PHE	CA	53.168	0.2	1
A	184	TYR	HA	4.25	0.02	1
A	13	ALA	HA	4.33	0.02	1
A	26	LYS	CB	35.807	0.2	1
A	111	LEU	HA	3.46	0.02	1
A	129	ASP	N	120.83	0.1	1
A	26	LYS	N	116.3	0.1	1
A	108	GLU	N	117.05	0.1	1
A	196	TYR	HA	4.66	0.02	1
A	166	GLY	HA3	3.92	0.02	2
A	139	TYR	H	7.84	0.02	1
A	70	VAL	CB	34.65	0.2	1
A	137	ALA	CA	52.6	0.2	1
A	70	VAL	N	111.08	0.1	1
A	160	LEU	CA	58.436	0.2	1
A	63	LYS	H	8.62	0.02	1
A	180	TYR	CB	38.4	0.2	1
A	137	ALA	N	133.0	0.1	1
A	107	PHE	HA	3.99	0.02	1
A	210	ILE	CB	38.732	0.2	1
A	177	VAL	HA	3.77	0.02	1
A	154	GLU	HA	4.03	0.02	1
A	169	THR	CB	69.228	0.2	1
A	16	GLY	HA2	4.39	0.02	2
A	203	GLY	HA2	4.19	0.02	2
A	98	VAL	H	9.23	0.02	1
A	156	TYR	H	8.77	0.02	1
A	82	TYR	H	11.05	0.02	1
A	44	MET	CA	53.959	0.2	1
A	114	PHE	N	120.97	0.1	1
A	67	SER	HA	4.39	0.02	1
A	141	THR	H	8.89	0.02	1
A	157	GLN	H	8.65	0.02	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	57	ARG	H	6.35	0.02	1
A	178	PHE	N	124.44	0.1	1
A	158	LYS	CA	59.897	0.2	1
A	195	GLY	HA2	4.05	0.02	2
A	93	ALA	H	9.57	0.02	1
A	100	TYR	HA	5.5	0.02	1
A	119	ASP	CA	50.057	0.2	1
A	73	ALA	CA	52.28	0.2	1
A	171	ASP	N	129.5	0.1	1
A	97	ARG	CA	54.1	0.2	1
A	107	PHE	CA	61.4	0.2	1
A	53	TRP	N	123.42	0.1	1
A	194	ASP	CB	40.498	0.2	1
A	154	GLU	N	118.51	0.1	1
A	31	GLY	HA2	4.24	0.02	2
A	178	PHE	H	8.01	0.02	1
A	176	GLN	CB	27.983	0.2	1
A	181	ALA	CB	21.274	0.2	1
A	5	SER	HA	4.35	0.02	1
A	156	TYR	HA	4.45	0.02	1
A	111	LEU	N	118.69	0.1	1
A	145	GLN	H	7.48	0.02	1
A	187	GLN	H	10.2	0.02	1
A	63	LYS	CA	57.563	0.2	1
A	142	SER	N	113.4	0.1	1
A	210	ILE	HA	4.08	0.02	1
A	200	GLY	H	8.33	0.02	1
A	8	ILE	N	127.46	0.1	1
A	125	ARG	N	120.35	0.1	1
A	77	THR	CB	71.778	0.2	1
A	83	LYS	HA	3.76	0.02	1
A	101	ARG	H	8.53	0.02	1
A	9	SER	CA	57.503	0.2	1
A	87	SER	CB	65.342	0.2	1
A	142	SER	CB	66.455	0.2	1
A	106	SER	CA	56.095	0.2	1
A	77	THR	N	114.25	0.1	1
A	144	VAL	CB	31.743	0.2	1
A	87	SER	N	114.085	0.1	1
A	192	ASN	CB	38.307	0.2	1
A	157	GLN	CA	58.327	0.2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	164	ASN	CB	36.478	0.2	1
A	157	GLN	HA	3.64	0.02	1
A	189	LEU	N	115.21	0.1	1
A	47	PHE	HA	4.91	0.02	1
A	164	ASN	N	111.33	0.1	1
A	10	ALA	CA	54.322	0.2	1
A	104	HIS	CA	55.912	0.2	1
A	119	ASP	H	9.23	0.02	1
A	47	PHE	CA	54.948	0.2	1
A	189	LEU	CB	41.5	0.2	1
A	73	ALA	H	8.85	0.02	1
A	202	THR	HA	3.7	0.02	1
A	201	GLY	H	8.28	0.02	1
A	64	GLY	HA2	4.38	0.02	2
A	120	PRO	HA	4.69	0.02	1
A	115	TRP	H	8.99	0.02	1
A	179	TYR	H	8.21	0.02	1
A	188	TYR	N	120.4	0.1	1
A	51	CYS	CB	26.6	0.2	1
A	55	ALA	CA	54.896	0.2	1
A	19	GLU	CB	29.749	0.2	1
A	19	GLU	N	123.76	0.1	1
A	82	TYR	HA	4.09	0.02	1
A	203	GLY	HA3	3.45	0.02	2
A	200	GLY	N	109.89	0.1	1
A	211	LYS	CB	32.974	0.2	1
A	54	GLY	CA	46.58	0.2	1
A	46	VAL	CA	61.414	0.2	1
A	134	TYR	HA	4.87	0.02	1
A	89	LYS	N	116.13	0.1	1
A	5	SER	CA	59.255	0.2	1
A	101	ARG	CB	30.274	0.2	1
A	163	HIS	CB	29.777	0.2	1
A	41	GLY	CA	45.141	0.2	1
A	26	LYS	H	6.87	0.02	1
A	180	TYR	CA	59.673	0.2	1
A	94	GLU	HA	4.64	0.02	1
A	17	ARG	N	117.65	0.1	1
A	28	HIS	CA	61.657	0.2	1
A	167	PRO	CA	62.06	0.2	1
A	208	MET	CB	33.58	0.2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	20	PRO	HA	4.46	0.02	1
A	70	VAL	H	9.36	0.02	1
A	179	TYR	CA	57.66	0.2	1
A	80	PRO	CB	33.0	0.2	1
A	67	SER	CA	56.685	0.2	1
A	65	VAL	HA	3.93	0.02	1
A	85	VAL	CA	66.4	0.2	1
A	61	VAL	CA	61.228	0.2	1
A	203	GLY	CA	44.859	0.2	1
A	57	ARG	HA	4.75	0.02	1
A	62	LEU	HA	4.21	0.02	1
A	96	VAL	HA	4.95	0.02	1
A	140	PRO	CB	34.4	0.2	1
A	156	TYR	N	121.33	0.1	1
A	132	THR	N	113.04	0.1	1
A	155	GLU	H	7.89	0.02	1
A	48	GLY	HA2	5.12	0.02	2
A	4	ALA	CA	54.322	0.2	1
A	3	SER	CA	60.567	0.2	1
A	197	CYS	N	123.6	0.1	1
A	196	TYR	CA	58.633	0.2	1
A	98	VAL	CB	33.219	0.2	1
A	112	LYS	CB	32.954	0.2	1
A	151	ARG	HA	4.24	0.02	1
A	205	SER	CB	63.265	0.2	1
A	33	ARG	N	117.16	0.1	1
A	24	THR	CA	63.754	0.2	1
A	112	LYS	N	119.09	0.1	1
A	172	ILE	N	125.52	0.1	1
A	18	THR	N	112.5	0.1	1
A	121	THR	N	110.7	0.1	1
A	72	PHE	N	123.337	0.1	1
A	74	GLY	H	9.35	0.02	1
A	119	ASP	HA	4.82	0.02	1
A	162	LYS	CA	58.226	0.2	1
A	72	PHE	CB	42.3	0.2	1
A	199	LEU	CB	43.384	0.2	1
A	200	GLY	HA3	3.88	0.02	2
A	7	VAL	H	7.7	0.02	1
A	97	ARG	HA	4.98	0.02	1
A	31	GLY	CA	45.77	0.2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	209	ALA	H	8.55	0.02	1
A	35	VAL	HA	4.25	0.02	1
A	156	TYR	CA	58.448	0.2	1
A	190	SER	CB	59.272	0.2	1
A	14	LEU	N	119.75	0.1	1
A	158	LYS	N	115.74	0.1	1
A	121	THR	CA	62.01	0.2	1
A	190	SER	N	113.83	0.1	1
A	16	GLY	HA3	3.44	0.02	2
A	178	PHE	CB	40.69	0.2	1
A	160	LEU	N	122.69	0.1	1
A	137	ALA	CB	22.3	0.2	1
A	205	SER	H	8.81	0.02	1
A	136	SER	HA	4.57	0.02	1
A	122	GLN	N	121.85	0.1	1
A	102	PRO	CA	63.5	0.1	1
A	206	CYS	CB	27.97	0.2	1
A	187	GLN	HA	4.1	0.02	1
A	169	THR	CA	61.793	0.2	1
A	44	MET	N	115.81	0.1	1
A	99	VAL	HA	4.82	0.02	1
A	87	SER	H	7.23	0.02	1
A	20	PRO	CB	32.632	0.2	1
A	44	MET	CB	36.822	0.2	1
A	44	MET	HA	5.59	0.02	1
A	69	GLN	HA	4.97	0.02	1
A	3	SER	CB	63.7	0.2	1
A	160	LEU	HA	3.86	0.02	1
A	121	THR	CB	70.1	0.2	1
A	172	ILE	CA	60.641	0.2	1
A	192	ASN	H	7.94	0.02	1
A	128	ASN	HA	4.7	0.02	1
A	73	ALA	N	121.62	0.1	1
A	52	PHE	CA	57.1	0.2	1
A	41	GLY	HA2	4.26	0.02	2
A	97	ARG	N	125.9	0.1	1
A	107	PHE	N	121.08	0.1	1
A	189	LEU	H	10.207	0.02	1
A	17	ARG	HA	4.89	0.02	1
A	198	GLY	HA2	3.96	0.02	2
A	113	VAL	HA	3.34	0.02	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	38	PHE	HA	4.61	0.02	1
A	27	HIS	HA	3.93	0.02	1
A	60	TRP	HA	4.57	0.02	1
A	211	LYS	N	127.31	0.1	1
A	91	GLY	H	6.63	0.02	1
A	190	SER	HA	4.34	0.02	1
A	198	GLY	HA3	3.84	0.02	2
A	66	TYR	CB	39.5	0.2	1
A	129	ASP	HA	4.52	0.02	1
A	142	SER	HA	4.69	0.02	1
A	23	VAL	CA	59.32	0.2	1
A	51	CYS	H	8.91	0.02	1
A	119	ASP	CB	38.721	0.2	1
A	201	GLY	HA2	3.94	0.02	2
A	8	ILE	CA	61.435	0.2	1
A	199	LEU	HA	4.42	0.02	1
A	72	PHE	HA	5.99	0.02	1
A	90	THR	N	105.28	0.1	1
A	54	GLY	HA2	4.05	0.02	2
A	95	VAL	HA	5.58	0.02	1
A	106	SER	N	118.64	0.1	1
A	48	GLY	CA	45.888	0.2	1
A	119	ASP	N	120.8	0.1	1
A	32	ASN	HA	4.71	0.02	1
A	73	ALA	CB	23.796	0.2	1
A	124	MET	CA	51.8	0.2	1
A	87	SER	CA	60.188	0.2	1
A	84	GLU	CA	58.923	0.2	1
A	209	ALA	CA	52.09	0.2	1
A	113	VAL	CB	32.975	0.2	1
A	163	HIS	H	7.55	0.02	1
A	165	PHE	CA	58.689	0.2	1
A	182	GLU	HA	4.02	0.02	1
A	43	GLN	HA	4.34	0.02	1
A	47	PHE	CB	44.086	0.2	1
A	43	GLN	CA	53.427	0.2	1
A	107	PHE	CB	38.755	0.2	1
A	130	PHE	N	123.84	0.1	1
A	74	GLY	HA2	4.4	0.02	2
A	37	PRO	CB	33.891	0.2	1
A	88	GLU	H	7.68	0.02	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	50	GLY	HA2	4.41	0.02	2
A	187	GLN	CA	58.3	0.2	1
A	201	GLY	HA3	3.69	0.02	2
A	55	ALA	CB	20.71	0.2	1
A	42	THR	CA	60.257	0.2	1
A	191	LYS	HA	3.46	0.02	1
A	19	GLU	HA	4.6	0.02	1
A	195	GLY	CA	45.263	0.2	1
A	86	CYS	CA	61.857	0.2	1
A	48	GLY	H	9.92	0.02	1
A	112	LYS	H	7.41	0.02	1
A	127	GLY	H	10.33	0.02	1
A	66	TYR	CA	59.9	0.2	1
A	186	GLN	H	7.57	0.02	1
A	168	ILE	CA	63.279	0.2	1
A	204	VAL	H	7.55	0.02	1
A	60	TRP	CA	60.4	0.2	1
A	29	VAL	HA	3.61	0.02	1
A	64	GLY	CA	46.083	0.2	1
A	5	SER	N	112.06	0.1	1
A	130	PHE	CB	40.795	0.2	1
A	83	LYS	H	8.65	0.02	1
A	50	GLY	N	111.3	0.1	1
A	165	PHE	N	117.17	0.1	1
A	72	PHE	H	9.09	0.02	1
A	100	TYR	CB	42.021	0.2	1
A	185	HIS	N	115.9	0.1	1
A	7	VAL	CB	32.081	0.2	1
A	28	HIS	CB	33.648	0.2	1
A	190	SER	H	7.47	0.02	1
A	7	VAL	N	119.88	0.1	1
A	43	GLN	H	8.35	0.02	1
A	137	ALA	H	10.13	0.02	1
A	110	LEU	HA	3.85	0.02	1
A	153	LYS	HA	3.42	0.02	1
A	27	HIS	H	9.47	0.02	1
A	85	VAL	HA	3.3	0.02	1
A	81	THR	HA	4.69	0.02	1
A	150	LEU	H	8.57	0.02	1
A	171	ASP	CA	52.66	0.2	1
A	66	TYR	N	131.3	0.1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	203	GLY	N	110.3	0.1	1
A	113	VAL	CA	65.759	0.2	1
A	184	TYR	CB	36.972	0.2	1
A	62	LEU	N	122.07	0.1	1
A	61	VAL	CB	31.871	0.2	1
A	83	LYS	N	118.6	0.1	1
A	153	LYS	CB	32.307	0.2	1
A	105	ILE	HA	4.42	0.02	1
A	29	VAL	CA	63.919	0.2	1
A	151	ARG	N	119.86	0.1	1
A	165	PHE	CB	41.373	0.2	1
A	133	GLN	N	124.5	0.1	1
A	96	VAL	H	9.41	0.02	1
A	83	LYS	CB	32.431	0.2	1
A	140	PRO	CA	62.6	0.2	1
A	99	VAL	CA	60.974	0.2	1
A	170	THR	CA	65.443	0.2	1
A	56	GLU	H	8.41	0.02	1
A	118	HIS	HA	4.4	0.02	1
A	186	GLN	CA	55.559	0.2	1
A	87	SER	HA	4.3	0.02	1
A	112	LYS	CA	60.818	0.2	1
A	142	SER	H	7.26	0.02	1
A	44	MET	H	8.29	0.02	1
A	150	LEU	CA	58.345	0.2	1
A	3	SER	H	8.25	0.02	1
A	19	GLU	H	7.72	0.02	1
A	181	ALA	H	7.15	0.02	1
A	121	THR	H	8.36	0.02	1
A	76	HIS	CB	33.799	0.2	1
A	162	LYS	N	122.31	0.1	1
A	142	SER	CA	56.367	0.2	1
A	89	LYS	H	7.8	0.02	1
A	31	GLY	N	109.7	0.1	1
A	207	PRO	HA	4.44	0.02	1
A	162	LYS	HA	4.1	0.02	1
A	49	MET	HA	3.91	0.02	1
A	14	LEU	CA	53.179	0.2	1
A	34	THR	HA	4.47	0.02	1
A	21	ILE	CA	58.71	0.2	1
A	144	VAL	H	7.79	0.02	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	153	LYS	N	124.08	0.1	1
A	68	THR	CA	59.839	0.2	1
A	190	SER	CA	61.375	0.2	1
A	4	ALA	HA	4.1	0.02	1
A	53	TRP	HA	5.66	0.02	1
A	107	PHE	H	9.23	0.02	1
A	166	GLY	HA2	4.18	0.02	2
A	208	MET	CA	54.531	0.2	1
A	38	PHE	CA	56.51	0.2	1
A	66	TYR	H	9.53	0.02	1
A	172	ILE	HA	5.59	0.02	1
A	138	VAL	HA	3.88	0.02	1
A	123	GLY	H	6.95	0.02	1
A	195	GLY	HA3	3.53	0.02	2
A	96	VAL	CA	58.899	0.2	1
A	169	THR	H	10.0	0.02	1
A	95	VAL	H	9.59	0.02	1
A	191	LYS	N	118.4	0.1	1
A	85	VAL	N	124.2	0.1	1
A	28	HIS	HA	3.91	0.02	1
A	101	ARG	CA	53.169	0.2	1
A	103	GLU	N	118.6	0.1	1
A	11	GLU	CB	29.0	0.2	1
A	135	ARG	CA	54.81	0.2	1
A	105	ILE	N	121.42	0.1	1
A	11	GLU	N	114.46	0.1	1
A	18	THR	H	8.52	0.02	1
A	144	VAL	HA	3.93	0.02	1
A	36	GLU	HA	3.02	0.02	1
A	52	PHE	N	126.6	0.1	1
A	180	TYR	H	8.99	0.02	1
A	182	GLU	CA	59.052	0.2	1
A	26	LYS	HA	4.81	0.02	1
A	106	SER	CB	67.307	0.2	1
A	16	GLY	CA	45.078	0.2	1
A	92	HIS	HA	4.03	0.02	1
A	149	ALA	H	9.25	0.02	1
A	126	GLN	CA	55.083	0.2	1
A	152	SER	N	114.24	0.1	1
A	86	CYS	HA	4.3	0.02	1
A	127	GLY	HA2	3.92	0.02	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	70	VAL	HA	5.58	0.02	1
A	194	ASP	N	116.98	0.1	1
A	126	GLN	H	8.72	0.02	1
A	23	VAL	N	113.811	0.1	1
A	29	VAL	N	114.64	0.1	1
A	199	LEU	CA	55.103	0.2	1
A	176	GLN	N	118.79	0.1	1
A	200	GLY	HA2	3.89	0.02	2
A	49	MET	N	125.4	0.1	1
A	145	GLN	CB	29.527	0.2	1
A	91	GLY	HA2	3.69	0.02	2
A	29	VAL	CB	32.358	0.2	1
A	111	LEU	CB	41.401	0.2	1
A	197	CYS	CA	57.2	0.2	1
A	55	ALA	H	6.89	0.02	1
A	131	GLY	CA	45.01	0.2	1
A	49	MET	CB	36.4	0.2	1
A	145	GLN	N	120.0	0.1	1
A	207	PRO	CB	31.7	0.2	1
A	54	GLY	HA3	3.78	0.02	2
A	120	PRO	CA	63.98	0.2	1
A	117	ASN	CA	53.867	0.2	1
A	133	GLN	CB	27.7	0.2	1
A	82	TYR	CA	62.9	0.2	1
A	204	VAL	CA	61.405	0.2	1
A	24	THR	HA	4.09	0.02	1
A	181	ALA	HA	4.56	0.02	1
A	117	ASN	CB	39.584	0.2	1
A	117	ASN	N	113.05	0.1	1
A	186	GLN	HA	3.97	0.02	1
A	65	VAL	CA	64.146	0.2	1
A	209	ALA	CB	18.827	0.2	1
A	181	ALA	N	119.0	0.1	1
A	22	PRO	CB	32.107	0.2	1
A	131	GLY	HA3	3.95	0.02	2
A	57	ARG	CA	56.539	0.2	1
A	158	LYS	H	7.16	0.02	1
A	100	TYR	H	9.36	0.02	1
A	152	SER	CA	61.173	0.2	1
A	7	VAL	HA	4.06	0.02	1
A	43	GLN	N	118.88	0.1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	139	TYR	HA	5.97	0.02	1
A	97	ARG	H	9.23	0.02	1
A	28	HIS	H	9.03	0.02	1
A	81	THR	N	107.377	0.1	1
A	182	GLU	N	117.59	0.1	1
A	185	HIS	HA	4.43	0.02	1
A	43	GLN	CB	32.787	0.2	1
A	45	ALA	N	125.78	0.1	1
A	27	HIS	CB	35.941	0.2	1
A	81	THR	CB	71.193	0.2	1
A	106	SER	HA	4.94	0.02	1
A	74	GLY	HA3	3.56	0.02	2
A	187	GLN	N	123.5	0.1	1
A	27	HIS	N	127.22	0.1	1
A	46	VAL	HA	4.67	0.02	1
A	61	VAL	H	6.5	0.02	1
A	118	HIS	N	113.8	0.1	1
A	204	VAL	N	121.92	0.1	1
A	50	GLY	HA3	3.78	0.02	2
A	187	GLN	CB	26.6	0.2	1
A	209	ALA	HA	4.29	0.02	1
A	170	THR	H	7.69	0.02	1
A	195	GLY	N	107.3	0.1	1
A	56	GLU	N	118.14	0.1	1
A	204	VAL	HA	3.77	0.02	1
A	63	LYS	HA	4.07	0.02	1
A	148	ALA	HA	4.3	0.02	1
A	90	THR	H	8.17	0.02	1
A	9	SER	H	8.04	0.02	1
A	56	GLU	CB	32.917	0.2	1
A	131	GLY	HA2	4.83	0.02	2
A	106	SER	H	8.31	0.02	1
A	60	TRP	N	115.3	0.1	1
A	175	GLY	HA3	3.75	0.02	2
A	146	MET	HA	4.17	0.02	1
A	164	ASN	CA	54.989	0.2	1
A	123	GLY	HA2	4.12	0.02	2
A	146	MET	CA	58.54	0.2	1
A	168	ILE	CB	39.061	0.2	1
A	66	TYR	HA	4.34	0.02	1
A	39	PRO	CB	31.698	0.2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	128	ASN	CB	39.009	0.2	1
A	94	GLU	CB	27.8	0.2	1
A	89	LYS	CB	31.247	0.2	1
A	116	GLU	N	106.2	0.1	1
A	148	ALA	CA	54.875	0.2	1
A	100	TYR	CA	54.942	0.2	1
A	202	THR	CA	63.221	0.2	1
A	34	THR	H	8.24	0.02	1
A	7	VAL	CA	62.63	0.2	1
A	31	GLY	H	7.86	0.02	1
A	10	ALA	HA	2.67	0.02	1
A	17	ARG	CB	29.414	0.2	1
A	93	ALA	CA	50.292	0.2	1
A	126	GLN	CB	30.078	0.2	1
A	201	GLY	CA	43.044	0.2	1
A	147	GLU	H	7.89	0.02	1
A	37	PRO	HA	4.47	0.02	1
A	205	SER	N	127.05	0.1	1
A	176	GLN	HA	4.11	0.02	1
A	163	HIS	CA	56.421	0.2	1
A	175	GLY	CA	46.832	0.2	1
A	88	GLU	N	111.038	0.1	1
A	58	LYS	CB	30.842	0.2	1
A	32	ASN	N	118.75	0.1	1
A	132	THR	CB	70.044	0.2	1
A	94	GLU	N	120.4	0.1	1
A	90	THR	HA	5.29	0.02	1
A	98	VAL	N	125.89	0.1	1
A	149	ALA	HA	4.3	0.02	1
A	9	SER	HA	4.29	0.02	1
A	11	GLU	H	8.38	0.02	1
A	186	GLN	N	118.12	0.1	1
A	138	VAL	CA	62.23	0.2	1
A	153	LYS	CA	59.827	0.2	1
A	47	PHE	N	123.15	0.1	1
A	46	VAL	H	7.81	0.02	1
A	18	THR	CB	69.008	0.2	1
A	5	SER	H	7.92	0.02	1
A	50	GLY	H	9.77	0.02	1
A	53	TRP	H	8.11	0.02	1
A	35	VAL	CB	35.72	0.2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	147	GLU	CB	29.414	0.2	1
A	185	HIS	H	7.28	0.02	1
A	26	LYS	CA	54.21	0.2	1
A	108	GLU	CA	61.763	0.2	1
A	35	VAL	N	116.46	0.1	1
A	131	GLY	H	8.24	0.02	1
A	166	GLY	CA	44.241	0.2	1
A	149	ALA	N	122.95	0.1	1
A	177	VAL	CB	33.384	0.2	1
A	143	ALA	CB	18.34	0.2	1
A	70	VAL	CA	58.585	0.2	1
A	160	LEU	CB	40.7	0.2	1
A	67	SER	H	8.21	0.02	1
A	96	VAL	N	118.86	0.1	1
A	184	TYR	H	7.84	0.02	1
A	88	GLU	HA	4.05	0.02	1
A	175	GLY	H	9.08	0.02	1
A	111	LEU	H	8.42	0.02	1
A	171	ASP	H	8.94	0.02	1
A	49	MET	H	9.46	0.02	1
A	196	TYR	H	8.27	0.02	1
A	167	PRO	CB	32.38	0.2	1
A	4	ALA	H	8.2	0.02	1
A	135	ARG	N	116.25	0.1	1
A	114	PHE	CA	60.322	0.2	1
A	132	THR	HA	4.22	0.02	1
A	117	ASN	H	7.29	0.02	1
A	149	ALA	CA	55.626	0.2	1
A	135	ARG	HA	4.29	0.02	1
A	3	SER	N	115.52	0.1	1
A	171	ASP	HA	4.56	0.02	1
A	178	PHE	HA	4.35	0.02	1
A	176	GLN	H	8.74	0.02	1
A	180	TYR	HA	3.62	0.02	1
A	158	LYS	CB	32.618	0.2	1
A	174	GLU	N	121.94	0.1	1
A	14	LEU	HA	4.33	0.02	1
A	174	GLU	CB	32.577	0.2	1
A	97	ARG	CB	33.2	0.2	1
A	108	GLU	H	9.25	0.02	1
A	53	TRP	CA	57.218	0.2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	194	ASP	CA	53.59	0.2	1
A	166	GLY	H	9.05	0.02	1
A	12	GLU	HA	4.22	0.02	1
A	141	THR	HA	4.51	0.02	1
A	81	THR	H	8.31	0.02	1
A	188	TYR	CB	39.6	0.2	1
A	145	GLN	HA	3.68	0.02	1
A	18	THR	HA	3.97	0.02	1
A	188	TYR	H	7.72	0.02	1
A	63	LYS	N	125.89	0.1	1
A	184	TYR	CA	59.644	0.2	1
A	184	TYR	N	113.04	0.1	1
A	174	GLU	H	9.03	0.02	1
A	123	GLY	N	110.78	0.1	1
A	42	THR	N	107.87	0.1	1
A	170	THR	CB	70.055	0.2	1
A	76	HIS	H	7.68	0.02	1
A	207	PRO	CA	62.8	0.2	1
A	90	THR	CB	71.705	0.2	1
A	29	VAL	H	8.09	0.02	1
A	143	ALA	HA	4.15	0.02	1
A	9	SER	CB	65.0	0.2	1
A	56	GLU	HA	3.88	0.02	1
A	77	THR	CA	64.128	0.2	1
A	114	PHE	H	7.96	0.02	1
A	208	MET	H	8.15	0.02	1
A	65	VAL	N	120.89	0.1	1
A	45	ALA	HA	4.84	0.02	1
A	9	SER	N	120.31	0.1	1
A	103	GLU	H	9.89	0.02	1
A	203	GLY	H	8.56	0.02	1
A	80	PRO	HA	4.38	0.02	1
A	168	ILE	H	9.11	0.02	1
A	192	ASN	CA	50.1	0.2	1
A	65	VAL	CB	31.521	0.2	1
A	174	GLU	HA	4.38	0.02	1
A	164	ASN	HA	4.35	0.02	1
A	128	ASN	H	9.04	0.02	1
A	22	PRO	CA	62.078	0.2	1
A	122	GLN	H	8.23	0.02	1
A	52	PHE	H	8.54	0.02	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	10	ALA	N	123.19	0.1	1
A	104	HIS	CB	35.44	0.2	1
A	140	PRO	HA	3.99	0.02	1
A	204	VAL	CB	31.181	0.2	1
A	41	GLY	N	112.3	0.1	1
A	189	LEU	CA	55.578	0.2	1
A	205	SER	CA	59.279	0.2	1
A	10	ALA	CB	18.261	0.2	1
A	104	HIS	N	119.37	0.1	1
A	116	GLU	HA	4.06	0.02	1
A	17	ARG	H	7.89	0.02	1
A	8	ILE	H	7.73	0.02	1
A	210	ILE	H	8.1	0.02	1
A	27	HIS	CA	58.414	0.2	1
A	192	ASN	HA	4.83	0.02	1
A	91	GLY	CA	46.307	0.2	1
A	147	GLU	N	117.69	0.1	1
A	22	PRO	HA	4.54	0.02	1
A	188	TYR	CA	63.7	0.2	1
A	200	GLY	CA	44.987	0.2	1
A	58	LYS	H	6.88	0.02	1
A	163	HIS	HA	4.54	0.02	1
A	15	PRO	HA	4.39	0.02	1
A	55	ALA	N	121.94	0.1	1
A	19	GLU	CA	53.351	0.2	1
A	76	HIS	CA	56.545	0.2	1
A	21	ILE	H	8.59	0.02	1
A	86	CYS	CB	26.723	0.2	1
A	132	THR	H	9.21	0.02	1
A	147	GLU	CA	59.646	0.2	1
A	146	MET	N	120.83	0.1	1
A	46	VAL	N	121.21	0.1	1
A	173	ARG	CA	55.549	0.2	1
A	133	GLN	H	10.45	0.02	1
A	123	GLY	HA3	3.51	0.02	2
A	46	VAL	CB	33.375	0.2	1
A	5	SER	CB	63.333	0.2	1
A	39	PRO	CA	63.408	0.2	1
A	36	GLU	CB	28.652	0.2	1
A	89	LYS	CA	56.715	0.2	1
A	74	GLY	N	106.22	0.1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	155	GLU	N	117.52	0.1	1
A	35	VAL	H	6.99	0.02	1
A	131	GLY	N	111.88	0.1	1
A	36	GLU	N	120.91	0.1	1
A	42	THR	HA	4.6	0.02	1
A	185	HIS	CB	32.85	0.2	1
A	201	GLY	N	105.82	0.1	1
A	173	ARG	N	122.72	0.1	1
A	144	VAL	CA	65.412	0.2	1
A	28	HIS	N	128.9	0.1	1
A	173	ARG	HA	4.86	0.02	1
A	103	GLU	HA	4.19	0.02	1
A	69	GLN	CA	55.328	0.2	1
A	175	GLY	N	109.42	0.1	1
A	160	LEU	H	8.45	0.02	1
A	67	SER	CB	64.808	0.2	1
A	12	GLU	CA	55.608	0.2	1
A	42	THR	H	7.4	0.02	1
A	155	GLU	CA	58.689	0.2	1
A	169	THR	HA	4.42	0.02	1
A	154	GLU	CB	29.066	0.2	1
A	196	TYR	CB	39.47	0.2	1
A	132	THR	CA	64.355	0.2	1
A	127	GLY	CA	46.969	0.2	1
A	4	ALA	CB	18.692	0.2	1
A	33	ARG	CA	50.423	0.2	1
A	24	THR	CB	68.397	0.2	1
A	147	GLU	HA	4.33	0.02	1
A	196	TYR	N	120.74	0.1	1
A	60	TRP	H	7.94	0.02	1
A	183	ASP	CB	42.564	0.2	1
A	113	VAL	N	116.77	0.1	1
A	141	THR	CA	61.032	0.2	1
A	12	GLU	H	7.1	0.02	1
A	24	THR	N	119.85	0.1	1
A	169	THR	N	120.521	0.1	1
A	165	PHE	HA	4.45	0.02	1
A	18	THR	CA	63.508	0.2	1
A	76	HIS	N	118.09	0.1	1
A	162	LYS	CB	31.972	0.2	1
A	161	SER	CB	62.929	0.2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	91	GLY	HA3	3.69	0.02	2
A	129	ASP	CB	38.959	0.2	1
A	35	VAL	CA	58.6	0.2	1
A	166	GLY	N	108.208	0.1	1
A	161	SER	N	116.52	0.1	1
A	34	THR	N	109.318	0.1	1
A	51	CYS	CA	59.243	0.2	1
A	183	ASP	HA	4.57	0.02	1
A	13	ALA	CA	51.272	0.2	1
A	74	GLY	CA	44.084	0.2	1
A	69	GLN	H	8.83	0.02	1
A	178	PHE	CA	57.685	0.2	1
A	206	CYS	N	127.89	0.1	1
A	205	SER	HA	4.19	0.02	1
A	164	ASN	H	7.82	0.02	1
A	148	ALA	N	119.82	0.1	1
A	102	PRO	CB	31.9	0.1	1
A	162	LYS	H	7.37	0.02	1
A	52	PHE	HA	4.6	0.02	1
A	32	ASN	H	7.58	0.02	1
A	13	ALA	N	121.31	0.1	1
A	163	HIS	N	116.98	0.1	1
A	110	LEU	CB	41.153	0.2	1
A	133	GLN	HA	5.16	0.02	1
A	20	PRO	CA	61.112	0.2	1
A	208	MET	HA	4.47	0.02	1
A	114	PHE	CB	38.0	0.2	1
A	206	CYS	CA	63.367	0.2	1
A	148	ALA	CB	18.995	0.2	1
A	110	LEU	N	120.44	0.1	1
A	103	GLU	CB	27.693	0.2	1
A	128	ASN	CA	52.939	0.2	1
A	6	LYS	H	7.85	0.02	1
A	208	MET	N	120.66	0.1	1
A	65	VAL	H	7.55	0.02	1
A	105	ILE	CB	39.928	0.2	1
A	179	TYR	HA	4.63	0.02	1
A	102	PRO	HA	5.31	0.02	1
A	172	ILE	CB	38.027	0.2	1
A	52	PHE	CB	39.3	0.2	1
A	94	GLU	H	9.27	0.02	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	104	HIS	H	8.18	0.02	1
A	158	LYS	HA	4.02	0.02	1
A	191	LYS	CA	58.6	0.2	1
A	68	THR	H	7.0	0.02	1
A	10	ALA	H	8.36	0.02	1
A	128	ASN	N	125.49	0.1	1
A	53	TRP	CB	29.37	0.2	1
A	122	GLN	HA	4.16	0.02	1
A	155	GLU	CB	29.414	0.2	1
A	115	TRP	CA	59.673	0.2	1
A	14	LEU	H	7.65	0.02	1
A	23	VAL	CB	32.174	0.2	1
A	123	GLY	CA	45.071	0.2	1
A	93	ALA	HA	4.7	0.02	1
A	161	SER	HA	4.45	0.02	1
A	21	ILE	N	125.25	0.1	1
A	198	GLY	CA	45.078	0.2	1
A	8	ILE	CB	39.159	0.2	1
A	144	VAL	N	118.11	0.1	1
A	21	ILE	CB	38.419	0.2	1
A	90	THR	CA	61.612	0.2	1
A	47	PHE	H	8.48	0.02	1
A	116	GLU	CB	30.212	0.2	1
A	151	ARG	CA	59.299	0.2	1
A	124	MET	CB	29.0	0.2	1
A	150	LEU	HA	4.17	0.02	1
A	48	GLY	N	110.503	0.1	1
A	206	CYS	H	10.58	0.02	1
A	124	MET	N	129.2	0.1	1
A	150	LEU	N	118.52	0.1	1
A	73	ALA	HA	4.97	0.02	1
A	209	ALA	N	127.46	0.1	1
A	161	SER	H	8.89	0.02	1
A	167	PRO	HA	4.38	0.02	1
A	36	GLU	H	8.22	0.02	1
A	61	VAL	HA	4.42	0.02	1
A	134	TYR	CA	56.027	0.2	1
A	175	GLY	HA2	3.81	0.02	2
A	94	GLU	CA	57.5	0.2	1
A	41	GLY	H	8.8	0.02	1
A	104	HIS	HA	4.9	0.02	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	16	GLY	H	8.44	0.02	1
A	84	GLU	H	7.51	0.02	1
A	91	GLY	N	108.88	0.1	1
A	193	PRO	HA	4.66	0.02	1
A	45	ALA	CB	23.76	0.2	1
A	37	PRO	CA	61.343	0.2	1
A	211	LYS	HA	4.31	0.02	1
A	2	ASP	CB	40.6	0.2	1
A	198	GLY	N	109.28	0.1	1
A	192	ASN	N	114.21	0.1	1
A	51	CYS	N	124.54	0.1	1
A	42	THR	CB	71.761	0.2	1
A	130	PHE	HA	4.43	0.02	1
A	139	TYR	CB	37.32	0.2	1
A	86	CYS	N	117.68	0.1	1
A	154	GLU	H	7.68	0.02	1
A	139	TYR	CA	62.315	0.2	1
A	151	ARG	H	8.19	0.02	1
A	12	GLU	N	116.68	0.1	1
A	24	THR	H	8.82	0.02	1
A	115	TRP	HA	3.84	0.02	1
A	60	TRP	CB	25.15	0.2	1
A	183	ASP	H	8.71	0.02	1
A	181	ALA	CA	49.873	0.2	1
A	12	GLU	CB	31.208	0.2	1
A	173	ARG	CB	38.06	0.2	1
A	168	ILE	N	122.67	0.1	1
A	55	ALA	HA	3.91	0.02	1
A	64	GLY	N	111.17	0.1	1
A	80	PRO	CA	61.96	0.2	1
A	130	PHE	CA	57.767	0.2	1
A	36	GLU	CA	55.381	0.2	1
A	50	GLY	CA	43.548	0.2	1
A	129	ASP	H	7.75	0.02	1
A	152	SER	H	8.34	0.02	1
A	185	HIS	CA	58.42	0.2	1
A	62	LEU	CB	41.866	0.2	1
A	69	GLN	N	115.27	0.1	1
A	150	LEU	CB	41.614	0.2	1
A	139	TYR	N	124.41	0.1	1
A	171	ASP	CB	42.71	0.2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	69	GLN	CB	33.823	0.2	1
A	62	LEU	CA	54.541	0.2	1
A	153	LYS	H	8.23	0.02	1

7.1.2 Chemical shift referencing [i](#)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction \pm precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	209	-0.29 ± 1.44	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	184	0.00 ± 0.00	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	0	—	—
^{15}N	196	-0.07 ± 1.49	None needed (< 0.5 ppm)

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 2%, i.e. 38 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2324. 0 out of 26 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	32/932 (3%)	16/371 (4%)	8/380 (2%)	8/181 (4%)
Sidechain	6/1122 (1%)	0/662 (0%)	6/407 (1%)	0/53 (0%)
Aromatic	0/270 (0%)	0/144 (0%)	0/115 (0%)	0/11 (0%)
Overall	38/2324 (2%)	16/1177 (1%)	14/902 (2%)	8/245 (3%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 2%, i.e. 48 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2566. 0 out of 27 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	40/1036 (4%)	20/412 (5%)	10/424 (2%)	10/200 (5%)
Sidechain	8/1260 (1%)	0/746 (0%)	8/455 (2%)	0/59 (0%)
Aromatic	0/270 (0%)	0/144 (0%)	0/115 (0%)	0/11 (0%)
Overall	48/2566 (2%)	20/1302 (2%)	18/994 (2%)	10/270 (4%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

Mol	Chain	Res	Type	Atom	Shift, <i>ppm</i>	Expected range, <i>ppm</i>	Z-score
1	A	75	GLY	HA3	1.92	5.80 – 2.00	-5.2

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.

Random coil index (RCI) for chain A:

