

```

HEADER      ModPipe Model of GI 115833068                2018-01-2
TITLE       Model of Sequence 2 from patent US 7105656
SOURCE
EXPDTA      THEORETICAL MODEL, MODELLER SVN 2018/01/27 03:13:33
AUTHOR      URSULA PIEPER, BENJAMIN WEBB, EASHWAR NARAYANAN, ANDREJ SALI
REMARK 220  Original ID: MDR1_HUMAN_MUT
REMARK 220  EXPERIMENTAL DETAILS
REMARK 220  EXPERIMENT TYPE: THEORETICAL MODEL
REMARK 220  METHOD: HOMOLOGY MODELING
REMARK 220  PROGRAM: MODPIPE
REMARK 220  SEQUENCE IDENTITY:                89.00
REMARK 220  GA341 SCORE:                      1.00
REMARK 220  EVALUE:                          0
REMARK 220  MPQS:                            1.9388
REMARK 220  zDOPE SCORE:                     -0.33
REMARK 220  TSVMOD METHOD:                    NA
REMARK 220  TSVMOD RMSD:
REMARK 220  TSVMOD NO35:
REMARK 220  TEMPLATE PDB:                    5ko2
REMARK 220  TEMPLATE CHAIN:                  A
REMARK 220  TARGET LENGTH:                   1280
REMARK 220  TARGET BEGIN:                    29
REMARK 220  TARGET END:                     1276
REMARK 220  TEMPLATE BEGIN:                  28
REMARK 220  TEMPLATE END:                   1272
REMARK 220  MODPIPE RUN:                     MW-hPGPmutantG185V
REMARK 220  MODPIPE MODEL ID:                444f339089431267be00029d242df5ac
REMARK 220  MODPIPE ALIGN ID:                fdb3ed07482b784b780105ef8458cc3e
REMARK 220  MODPIPE SEQUENCE ID:             60d39a16bd58385778d9588e6f45244eMDLETKRQ
REMARK      6  MODELLER OBJECTIVE FUNCTION:    7692.9263
REMARK      6  MODELLER BEST TEMPLATE % SEQ ID: 88.861
REMARK      6  GENERATED BY MODPIPE VERSION SVN.r1610
HELIX   81  81  VAL      36  TYR      42  1              7
HELIX   82  82  TRP      45  LEU      85  1             41
HELIX   83  83  ILE      98  ARG     157  1             60
HELIX   84  84  ILE     160  VAL     165  1              6
HELIX   85  85  VAL     168  ILE     186  1             19
HELIX   86  86  ASP     188  PHE     267  1             80
HELIX   87  87  LYS     272  LYS     279  1              8
HELIX   88  88  GLU     282  LEU     322  1             41
HELIX   89  89  ILE     328  ASP     370  1             43
HELIX   90  90  SER     434  MET     440  1              7
HELIX   91  91  ILE     458  THR     460  1              3
HELIX   92  92  VAL     463  ILE     469  1              7
HELIX   93  93  ILE     484  ARG     489  1              6
HELIX   94  94  MET     497  ALA     507  1             11
HELIX   95  95  TYR     510  LYS     515  1              6
HELIX   96  96  GLY     533  ARG     547  1             15
HELIX   97  97  THR     563  ARG     577  1             15
HELIX   98  98  LEU     589  ASN     594  1              6
HELIX   99  99  HIS     612  GLU     618  1              7
HELIX  100 100  ILE     621  THR     630  1             10
HELIX  101 101  PHE     697  ASN     704  1              8
HELIX  102 102  TRP     708  ARG     741  1             34
HELIX  103 103  PRO     745  ARG     798  1             54
HELIX  104 104  VAL     801  ASP     805  1              5
HELIX  105 105  THR     811  TYR     853  1             43
HELIX  106 106  TRP     855  GLU     902  1             48
HELIX  107 107  PHE     904  LEU     910  1              7
HELIX  108 108  GLU     913  ALA     965  1             53
HELIX  109 109  PHE     971  PHE     994  1             24
HELIX  110 110  TYR     998  GLU    1013  1             16
HELIX  111 111  LYS    1076  GLU    1084  1              9
HELIX  112 112  VAL    1106  HIS    1112  1              7
HELIX  113 113  ILE    1127  GLY    1134  1              8
HELIX  114 114  GLN    1142  ALA    1152  1             11
HELIX  115 115  HIS    1155  SER    1160  1              6
HELIX  116 116  GLY    1178  ARG    1192  1             15
HELIX  117 117  THR    1208  ARG    1222  1             15
HELIX  118 118  LEU    1234  ASN    1239  1              6
HELIX  119 119  HIS    1257  GLN    1263  1              7
HELIX  120 120  ILE    1266  ALA    1275  1             10
SHEET   37  37  1  LEU     392  ARG     395  0
SHEET   38  38  1  LEU     415  VAL     417  0

```

SHEET	39	39	1	THR	422	GLY	427	0																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																											
-------	----	----	---	-----	-----	-----	-----	---	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--

[illegible]