



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 17, 2018 – 11:53 pm GMT

PDB ID : 1CEY
Title : ASSIGNMENTS, SECONDARY STRUCTURE, GLOBAL FOLD, AND DYNAMICS OF CHEMOTAXIS Y PROTEIN USING THREE-AND FOUR-DIMENSIONAL HETERONUCLEAR (¹³C,¹⁵N) NMR SPECTROSCOPY
Authors : Moy, F.J.; Lowry, D.F.; Matsumura, P.; Dahlquist, F.W.; Krywko, J.E.; Domaille, P.J.
Deposited on : 1994-11-23

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

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

Cyrange	:	Kirchner and Güntert (2011)
NmrClust	:	Kelley et al. (1996)
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20171227.v01 (using entries in the PDB archive December 27th 2017)
RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
ShiftChecker	:	trunk30686
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	trunk30686

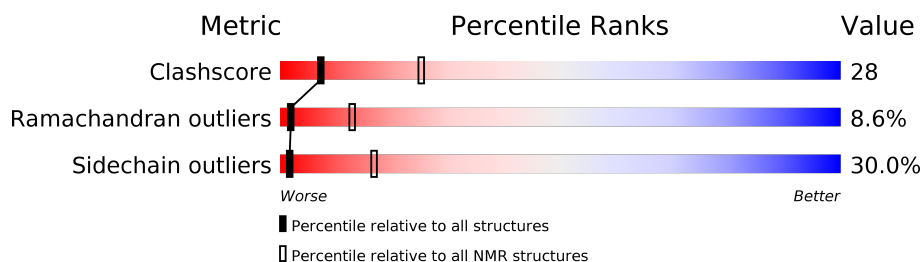
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	136279	12091
Ramachandran outliers	132675	10835
Sidechain outliers	132484	10811

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	128	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 46 models. Model 20 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:2-A:129 (128)	0.67	20

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 6 clusters. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 4, 6, 9, 12, 14, 15, 16, 19, 20, 22, 23, 28, 29, 33, 35, 36, 38, 39, 41
2	5, 7, 11, 17, 25, 26, 27, 30, 31, 37, 42, 44, 45, 46
3	3, 32, 34, 43
4	13, 21, 24
5	18, 40
6	8, 10

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1979 atoms, of which 1000 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called CHEY.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	128	Total	C	H	N	O	S	0
			1979	623	1000	162	188	6	

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: CHEY

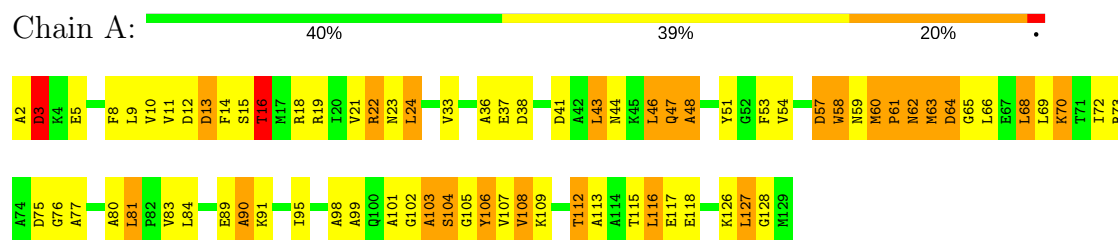


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

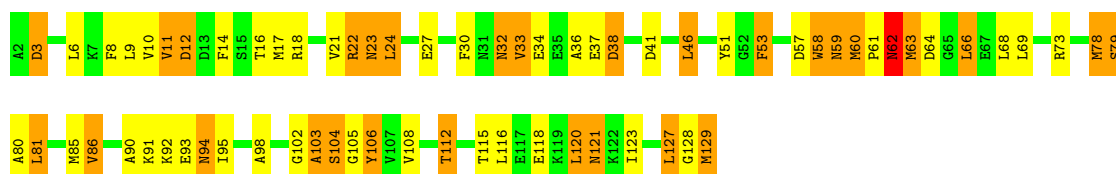
- Molecule 1: CHEY



4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: CHEY

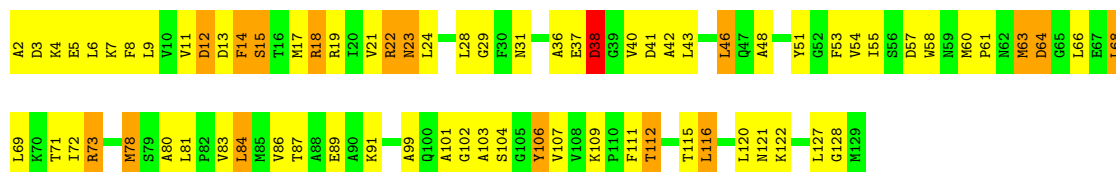




4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: CHEY

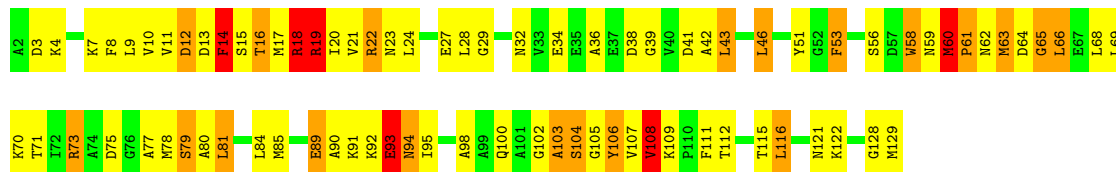
Chain A: 42% 45% 13%



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: CHEY

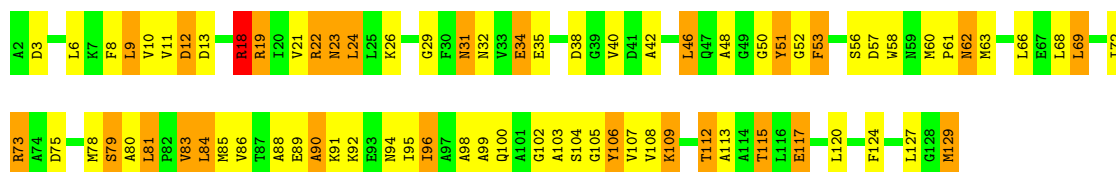
Chain A: 36% 44% 16% 5%



4.2.5 Score per residue for model 5

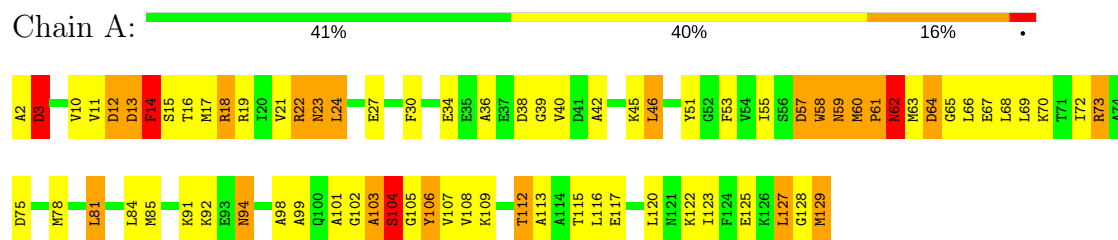
- Molecule 1: CHEY

Chain A: 40% 39% 20%



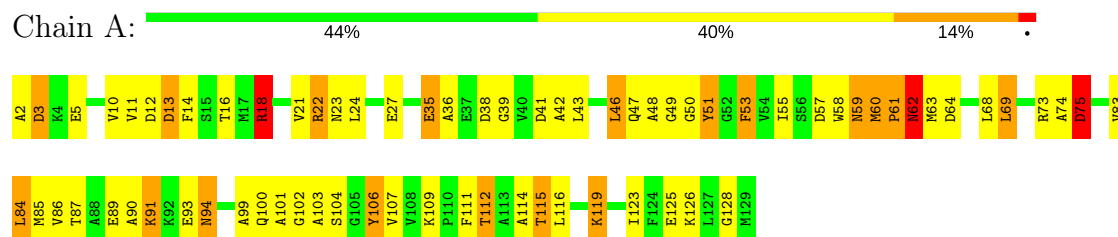
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: CHEY



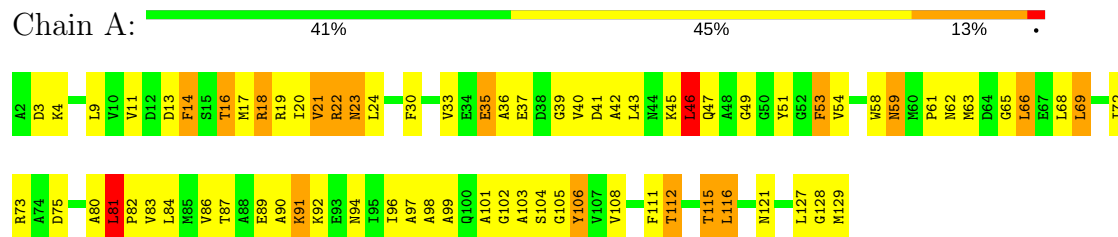
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: CHEY



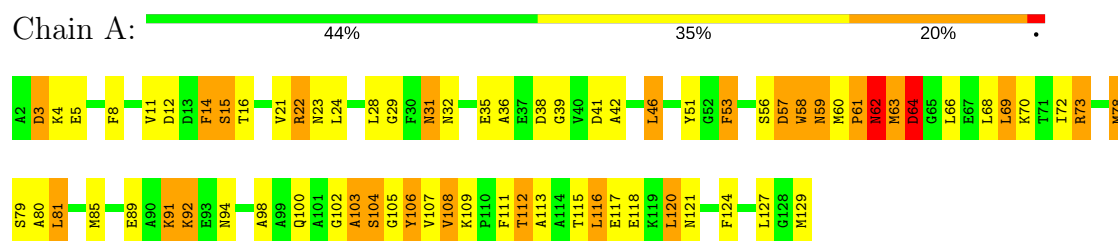
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: CHEY



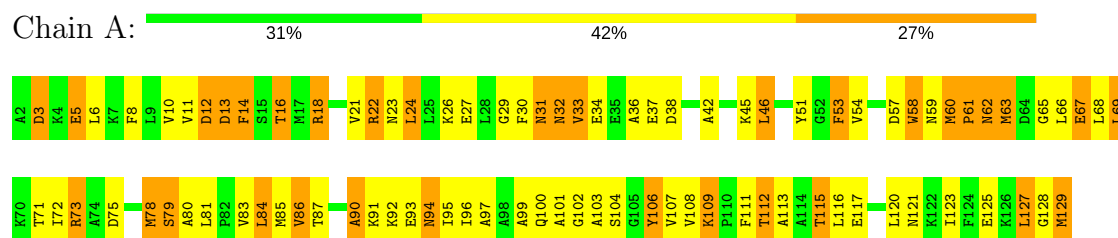
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: CHEY



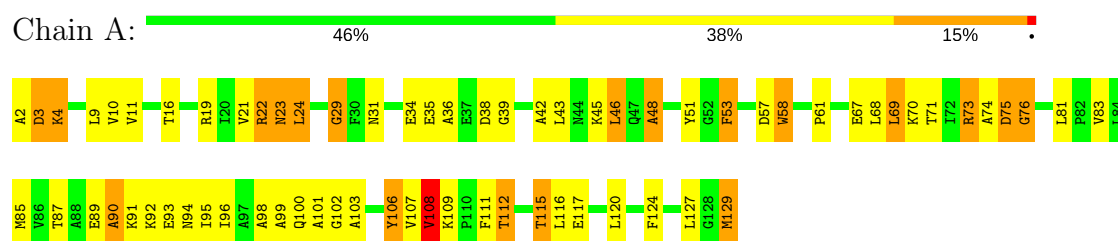
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: CHEY



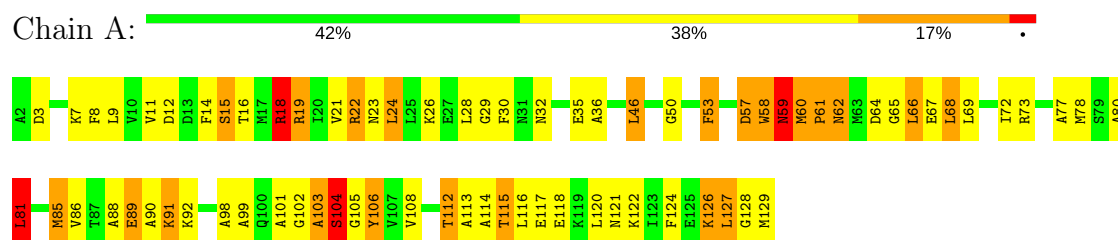
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: CHEY



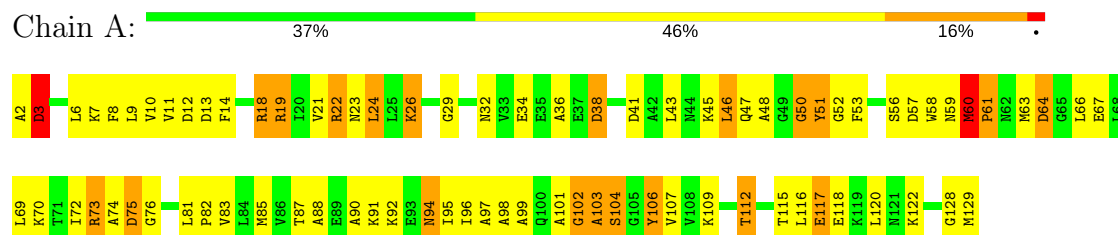
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: CHEY



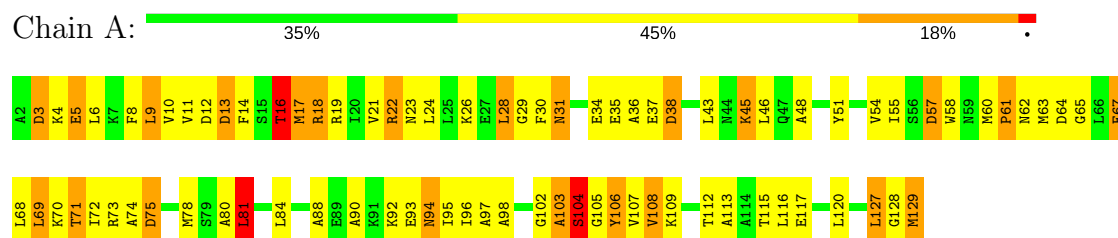
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: CHEY



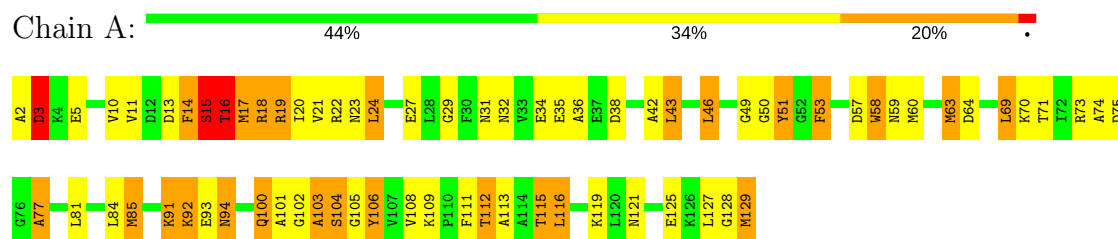
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: CHEY



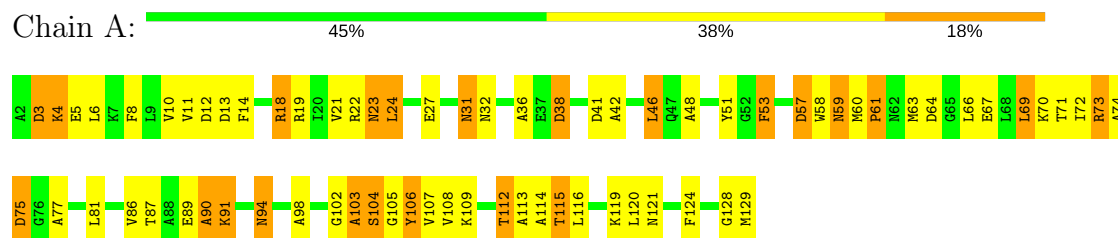
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: CHEY



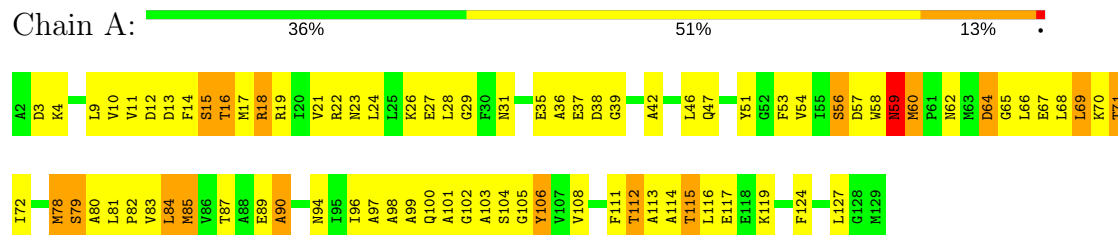
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: CHEY



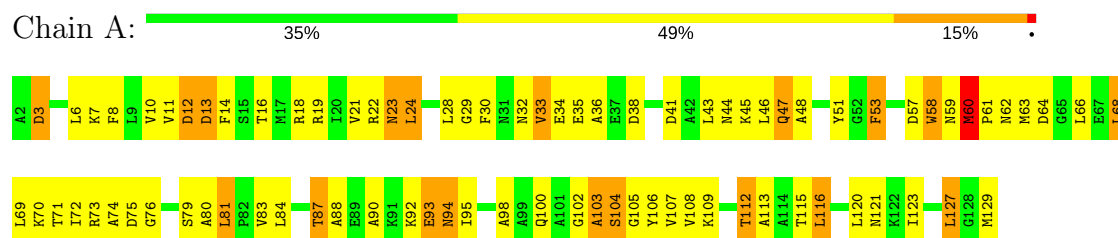
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: CHEY



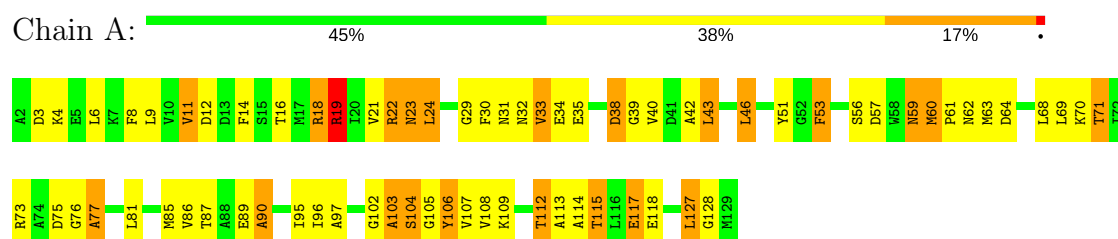
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: CHEY



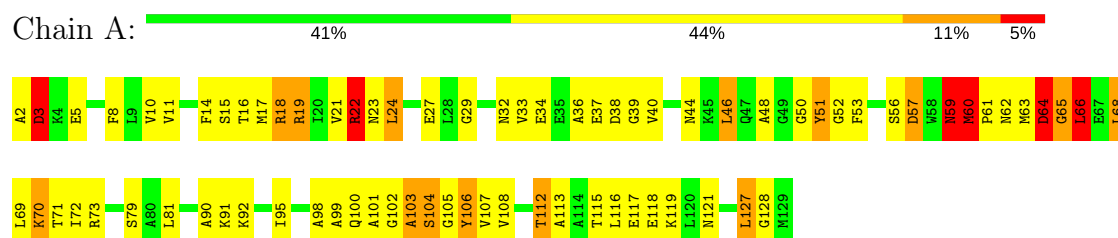
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: CHEY



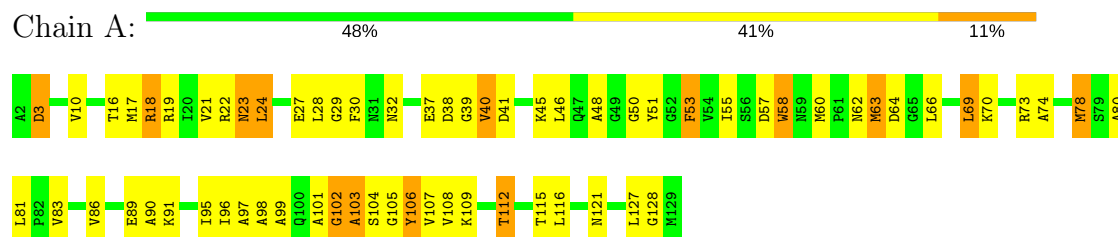
4.2.20 Score per residue for model 20 (medoid)

- Molecule 1: CHEY



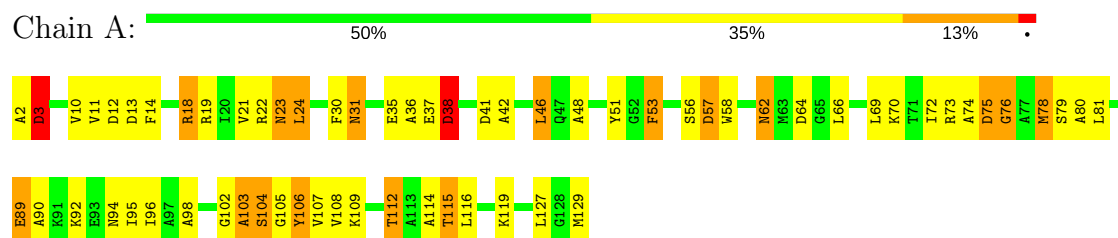
4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: CHEY



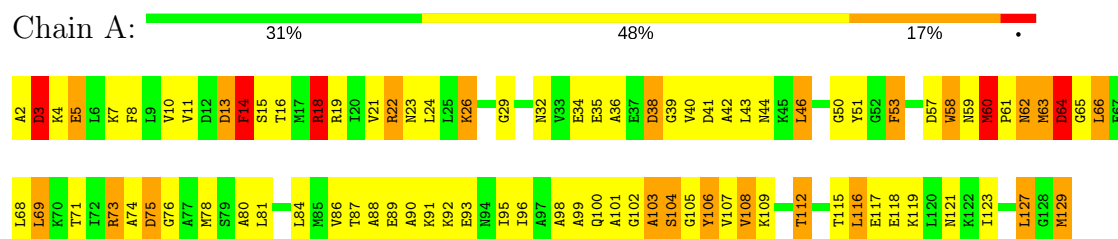
4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: CHEY



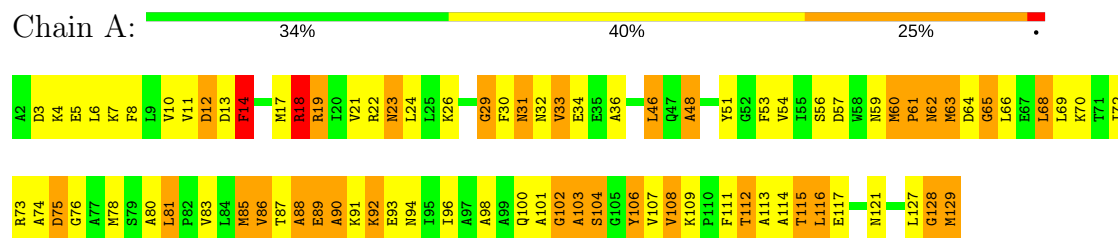
4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: CHEY



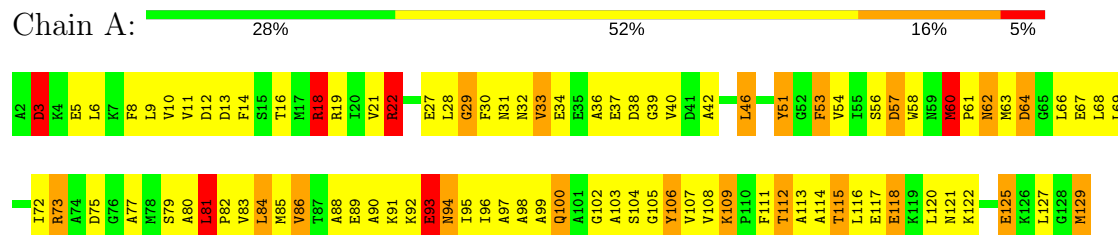
4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: CHEY



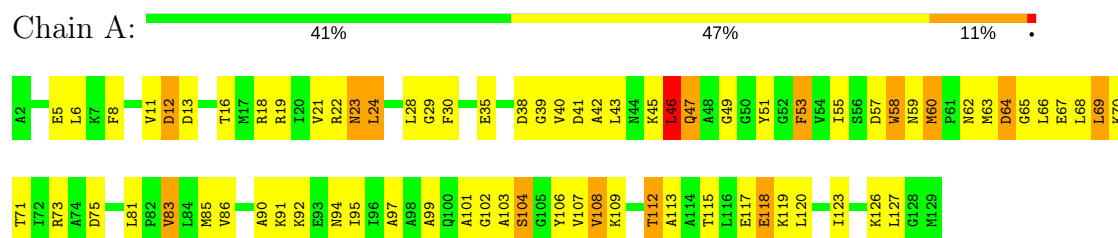
4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: CHEY



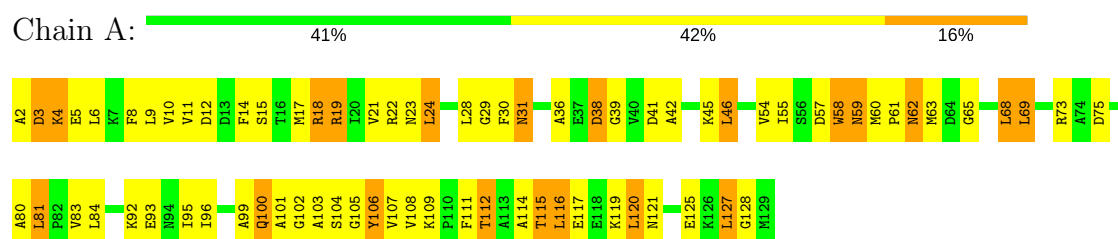
4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: CHEY



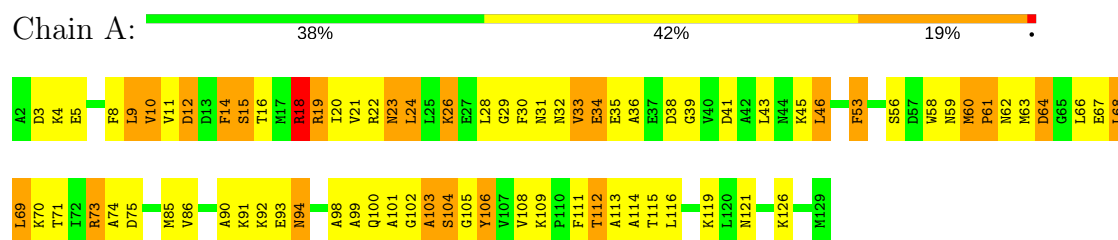
4.2.27 Score per residue for model 27

- Molecule 1: CHEY



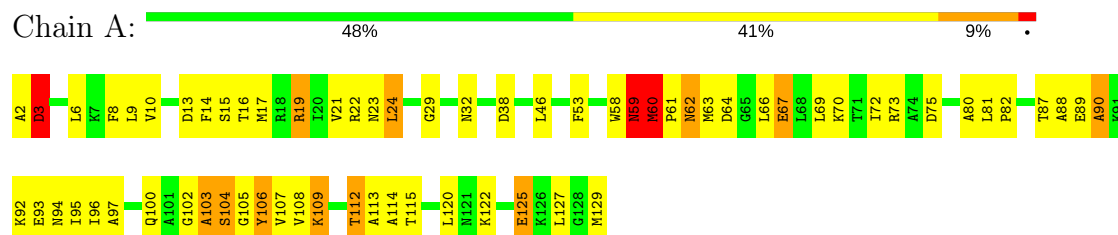
4.2.28 Score per residue for model 28

- Molecule 1: CHEY



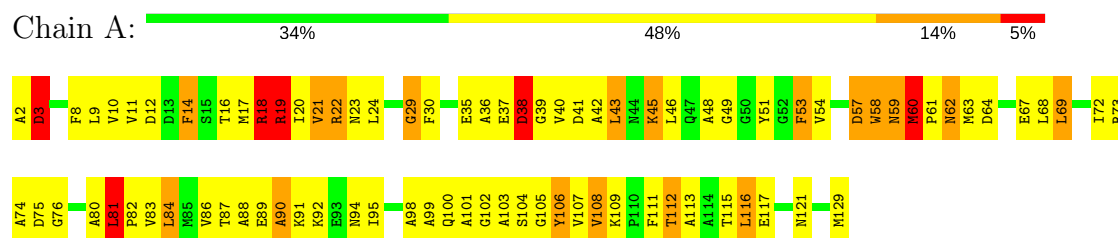
4.2.29 Score per residue for model 29

- Molecule 1: CHEY



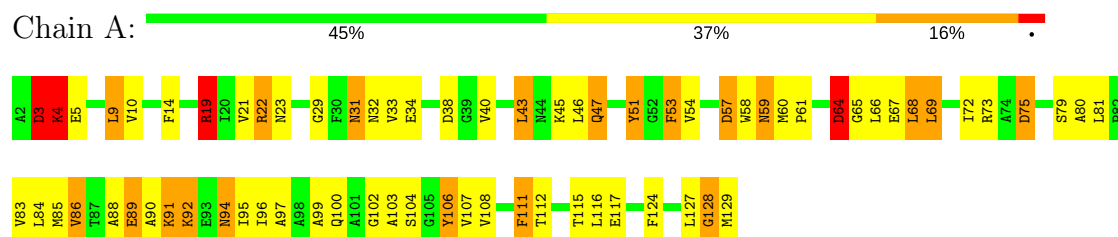
4.2.30 Score per residue for model 30

- Molecule 1: CHEY



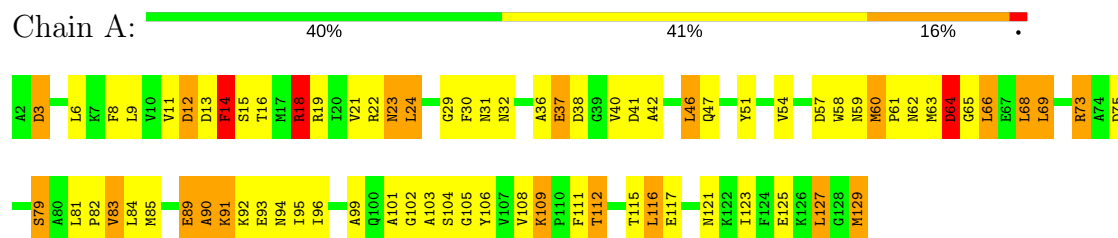
4.2.31 Score per residue for model 31

- Molecule 1: CHEY



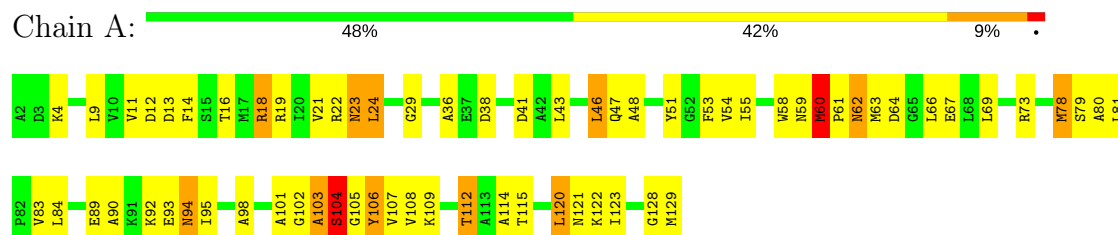
4.2.32 Score per residue for model 32

- Molecule 1: CHEY



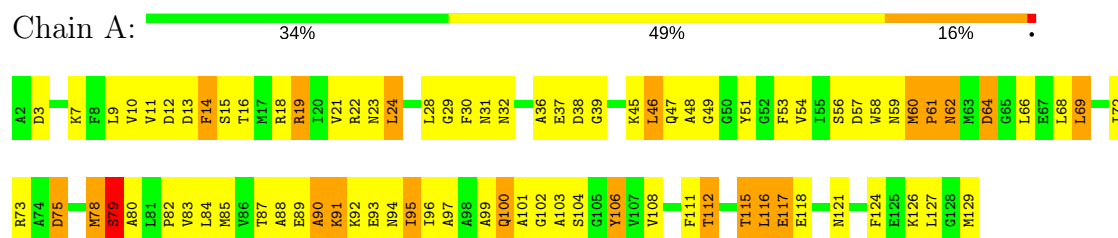
4.2.33 Score per residue for model 33

- Molecule 1: CHEY



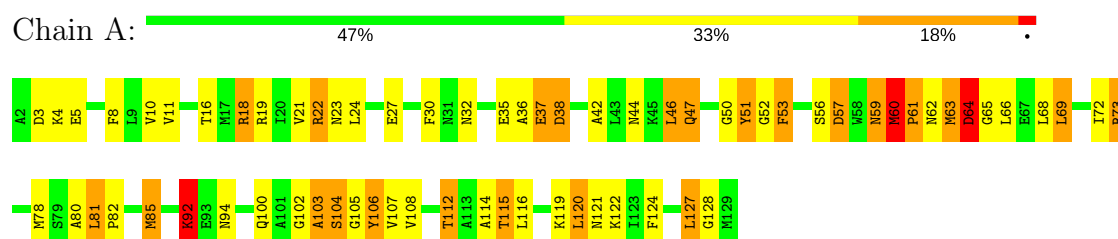
4.2.34 Score per residue for model 34

- Molecule 1: CHEY



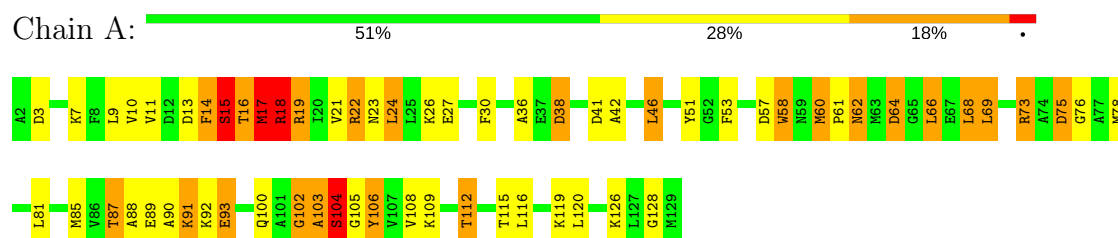
4.2.35 Score per residue for model 35

- Molecule 1: CHEY



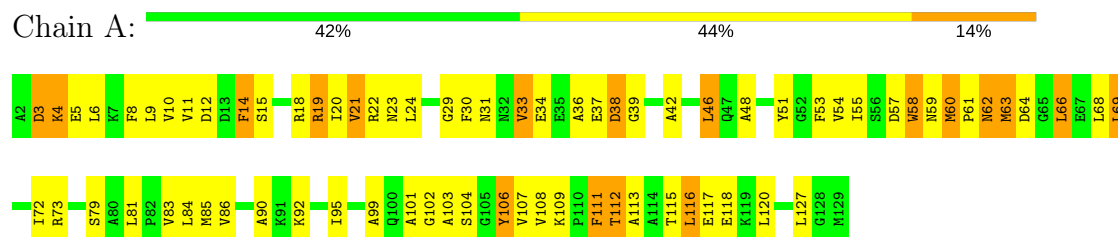
4.2.36 Score per residue for model 36

- Molecule 1: CHEY



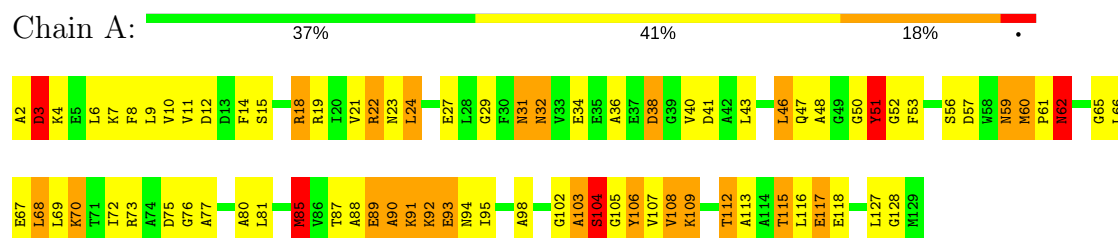
4.2.37 Score per residue for model 37

- Molecule 1: CHEY



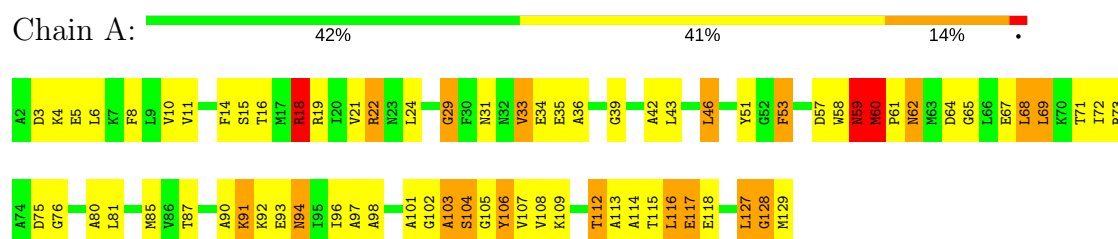
4.2.38 Score per residue for model 38

- Molecule 1: CHEY



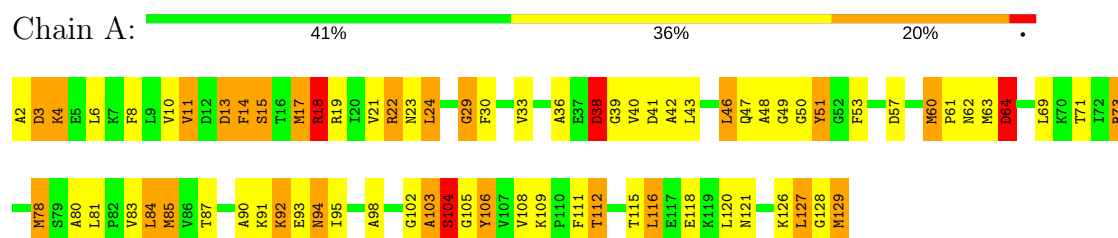
4.2.39 Score per residue for model 39

- Molecule 1: CHEY



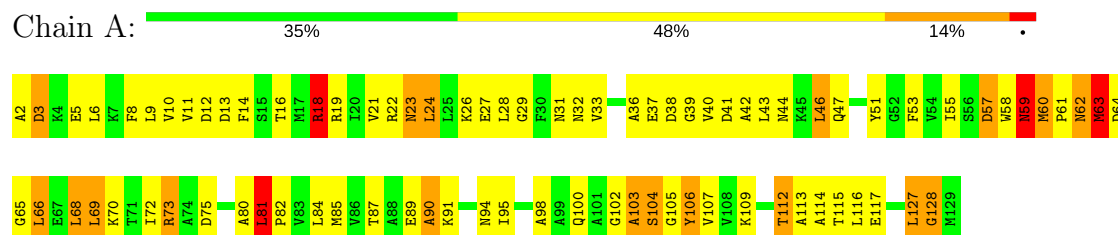
4.2.40 Score per residue for model 40

- Molecule 1: CHEY



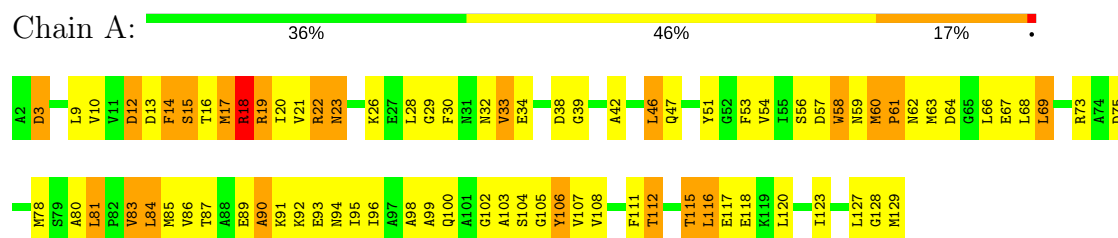
4.2.41 Score per residue for model 41

- Molecule 1: CHEY



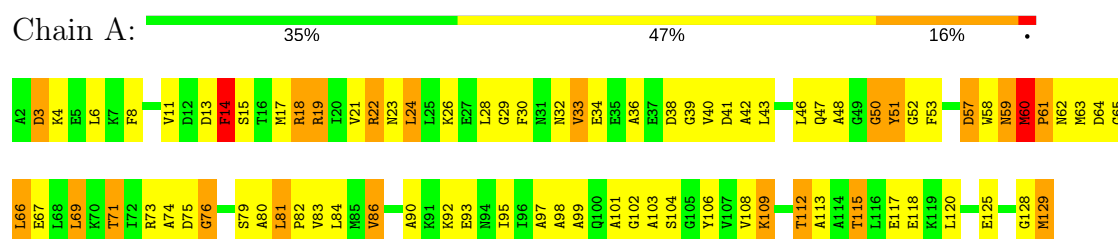
4.2.42 Score per residue for model 42

- Molecule 1: CHEY



4.2.43 Score per residue for model 43

- Molecule 1: CHEY



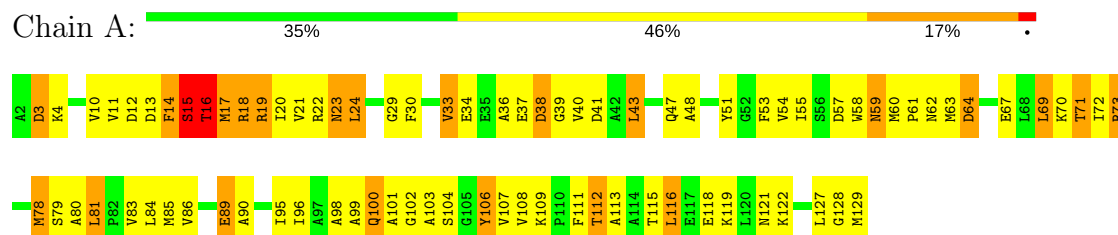
4.2.44 Score per residue for model 44

- Molecule 1: CHEY



4.2.45 Score per residue for model 45

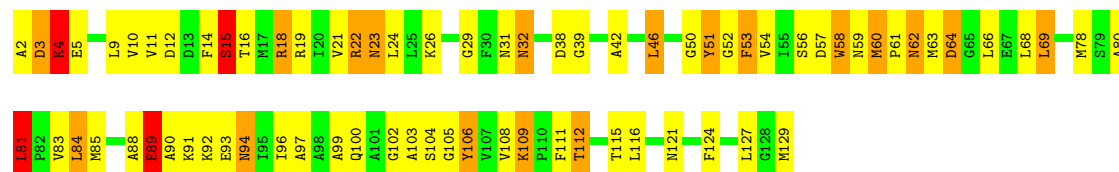
- Molecule 1: CHEY



4.2.46 Score per residue for model 46

- Molecule 1: CHEY

Chain A:  42% 41% 14% 3%



5 Refinement protocol and experimental data overview

Of the ? calculated structures, 46 were deposited, based on the following criterion: ?.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	

No chemical shift data was provided. No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.04±0.00	0±0/991 (0.0±0.0%)	0.90±0.01	0±0/1332 (0.0±0.0%)
All	All	1.04	0/45586 (0.0%)	0.90	1/61272 (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	3.6±0.6
All	All	0	167

There are no bond-length outliers.

All unique angle outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	51	TYR	CB-CG-CD2	-5.53	117.68	121.00	38	1

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	22	ARG	Sidechain	44
1	A	73	ARG	Sidechain	41
1	A	19	ARG	Sidechain	41
1	A	18	ARG	Sidechain	41

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	979	1000	999	56±8
All	All	45034	46000	45954	2591

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 28.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:LEU:HD11	1:A:103:ALA:HB2	1.05	1.26	34	9
1:A:90:ALA:HB1	1:A:95:ILE:HD11	0.96	1.36	5	22
1:A:9:LEU:HD23	1:A:46:LEU:HD12	0.90	1.44	31	4
1:A:68:LEU:O	1:A:68:LEU:HD12	0.82	1.75	24	3
1:A:108:VAL:HG12	1:A:109:LYS:H	0.81	1.35	14	1
1:A:11:VAL:HG22	1:A:36:ALA:HB3	0.80	1.54	12	35
1:A:68:LEU:HD12	1:A:68:LEU:O	0.80	1.77	36	3
1:A:51:TYR:O	1:A:81:LEU:HD11	0.80	1.77	23	7
1:A:69:LEU:HD12	1:A:69:LEU:O	0.78	1.77	21	7
1:A:69:LEU:HD21	1:A:103:ALA:HB2	0.78	1.54	30	10
1:A:69:LEU:HD13	1:A:101:ALA:HB3	0.77	1.54	26	8
1:A:69:LEU:HD13	1:A:101:ALA:O	0.77	1.78	24	2
1:A:51:TYR:O	1:A:81:LEU:HD21	0.76	1.80	33	14
1:A:58:TRP:CZ2	1:A:66:LEU:HD21	0.75	2.15	21	1
1:A:98:ALA:HB1	1:A:102:GLY:O	0.74	1.81	24	1
1:A:101:ALA:O	1:A:103:ALA:N	0.74	2.21	21	3
1:A:72:ILE:HD13	1:A:83:VAL:HG21	0.74	1.59	10	7
1:A:84:LEU:HD22	1:A:104:SER:OG	0.74	1.82	5	3
1:A:51:TYR:O	1:A:81:LEU:HD22	0.73	1.83	17	6
1:A:14:PHE:CG	1:A:15:SER:N	0.72	2.54	45	4
1:A:111:PHE:CG	1:A:116:LEU:HD23	0.72	2.19	30	2
1:A:98:ALA:O	1:A:102:GLY:N	0.72	2.23	21	3
1:A:127:LEU:HD23	1:A:127:LEU:O	0.72	1.84	22	5
1:A:107:VAL:HG21	1:A:116:LEU:CD2	0.71	2.14	9	2
1:A:9:LEU:C	1:A:9:LEU:HD12	0.71	2.06	28	2
1:A:69:LEU:HD21	1:A:103:ALA:N	0.71	2.00	6	5
1:A:107:VAL:HG21	1:A:116:LEU:HD12	0.71	1.63	44	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:LEU:O	1:A:69:LEU:HD12	0.71	1.85	43	6
1:A:69:LEU:CD1	1:A:103:ALA:HB2	0.71	2.11	34	8
1:A:9:LEU:HD12	1:A:10:VAL:N	0.70	2.02	14	3
1:A:69:LEU:HD12	1:A:85:MET:SD	0.70	2.27	24	1
1:A:58:TRP:CH2	1:A:66:LEU:HD21	0.69	2.22	21	1
1:A:32:ASN:HD22	1:A:32:ASN:H	0.69	1.30	10	1
1:A:69:LEU:HD21	1:A:103:ALA:H	0.69	1.47	4	6
1:A:88:ALA:HB2	1:A:109:LYS:NZ	0.69	2.02	5	4
1:A:55:ILE:HG23	1:A:84:LEU:O	0.69	1.88	14	4
1:A:69:LEU:HD22	1:A:103:ALA:HB2	0.69	1.63	27	11
1:A:69:LEU:HD21	1:A:101:ALA:HB3	0.69	1.63	7	5
1:A:15:SER:O	1:A:16:THR:HG23	0.69	1.87	4	1
1:A:60:MET:N	1:A:61:PRO:CD	0.68	2.56	43	35
1:A:69:LEU:CD2	1:A:103:ALA:HB2	0.67	2.18	25	8
1:A:88:ALA:O	1:A:108:VAL:HG23	0.67	1.89	18	1
1:A:108:VAL:O	1:A:108:VAL:HG13	0.66	1.90	33	5
1:A:108:VAL:HG22	1:A:109:LYS:H	0.66	1.49	45	1
1:A:95:ILE:HD12	1:A:106:TYR:CD2	0.66	2.25	44	1
1:A:95:ILE:HD12	1:A:106:TYR:CE2	0.66	2.26	44	1
1:A:72:ILE:HG21	1:A:80:ALA:HB2	0.66	1.66	35	1
1:A:43:LEU:HD11	1:A:71:THR:HG21	0.66	1.68	15	1
1:A:69:LEU:HD21	1:A:101:ALA:O	0.66	1.91	21	1
1:A:108:VAL:HG13	1:A:108:VAL:O	0.66	1.90	29	5
1:A:11:VAL:HG12	1:A:11:VAL:O	0.65	1.91	2	8
1:A:28:LEU:HD21	1:A:117:GLU:OE2	0.65	1.92	9	2
1:A:127:LEU:O	1:A:127:LEU:HD23	0.65	1.91	25	4
1:A:14:PHE:CD1	1:A:15:SER:N	0.65	2.63	4	1
1:A:24:LEU:HD22	1:A:116:LEU:HD12	0.65	1.68	23	4
1:A:43:LEU:HD13	1:A:43:LEU:C	0.65	2.12	28	2
1:A:111:PHE:CE1	1:A:116:LEU:HD12	0.64	2.28	4	12
1:A:43:LEU:C	1:A:43:LEU:HD13	0.64	2.13	41	1
1:A:58:TRP:CZ2	1:A:94:ASN:ND2	0.64	2.66	10	3
1:A:69:LEU:HD21	1:A:102:GLY:N	0.64	2.05	29	4
1:A:60:MET:H	1:A:61:PRO:CD	0.64	2.06	23	3
1:A:106:TYR:CD1	1:A:107:VAL:N	0.64	2.66	37	10
1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:ND2	0.63	2.45	14	3
1:A:108:VAL:HG22	1:A:109:LYS:N	0.63	2.06	45	2
1:A:14:PHE:CE1	1:A:18:ARG:NE	0.63	2.66	45	2
1:A:107:VAL:HG23	1:A:119:LYS:NZ	0.63	2.08	44	1
1:A:28:LEU:HD11	1:A:117:GLU:OE2	0.63	1.93	9	1
1:A:62:ASN:ND2	1:A:62:ASN:N	0.63	2.47	23	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:TRP:CD1	1:A:59:ASN:ND2	0.63	2.67	31	2
1:A:103:ALA:O	1:A:105:GLY:N	0.63	2.32	23	23
1:A:62:ASN:ND2	1:A:62:ASN:H	0.63	1.92	24	1
1:A:12:ASP:N	1:A:18:ARG:NH2	0.62	2.47	41	1
1:A:102:GLY:C	1:A:104:SER:H	0.62	1.98	12	23
1:A:58:TRP:CG	1:A:59:ASN:N	0.62	2.67	45	7
1:A:88:ALA:HB2	1:A:109:LYS:HZ2	0.62	1.54	5	2
1:A:11:VAL:HG21	1:A:42:ALA:HB2	0.62	1.70	15	5
1:A:24:LEU:CD2	1:A:116:LEU:HD12	0.62	2.24	23	3
1:A:18:ARG:H	1:A:18:ARG:NE	0.62	1.93	12	1
1:A:2:ALA:HB2	1:A:129:MET:SD	0.62	2.35	29	1
1:A:10:VAL:O	1:A:10:VAL:HG23	0.62	1.94	7	1
1:A:11:VAL:O	1:A:11:VAL:HG12	0.62	1.95	24	3
1:A:68:LEU:O	1:A:68:LEU:HD23	0.62	1.95	2	1
1:A:18:ARG:HE	1:A:18:ARG:H	0.61	1.37	12	1
1:A:76:GLY:O	1:A:77:ALA:HB3	0.61	1.96	38	2
1:A:90:ALA:HB2	1:A:106:TYR:OH	0.61	1.96	18	4
1:A:90:ALA:HB1	1:A:95:ILE:CD1	0.61	2.20	5	6
1:A:81:LEU:N	1:A:81:LEU:HD23	0.61	2.11	8	2
1:A:89:GLU:O	1:A:90:ALA:HB3	0.61	1.94	12	5
1:A:18:ARG:NH2	1:A:22:ARG:NE	0.61	2.48	43	1
1:A:68:LEU:HD23	1:A:68:LEU:O	0.60	1.95	9	1
1:A:58:TRP:NE1	1:A:94:ASN:ND2	0.60	2.49	11	2
1:A:83:VAL:O	1:A:83:VAL:HG12	0.60	1.96	26	4
1:A:32:ASN:HD22	1:A:32:ASN:N	0.60	1.93	10	1
1:A:14:PHE:CD2	1:A:15:SER:N	0.60	2.69	36	1
1:A:9:LEU:HD12	1:A:9:LEU:C	0.60	2.16	14	2
1:A:28:LEU:HD22	1:A:117:GLU:OE2	0.60	1.96	25	1
1:A:98:ALA:HB1	1:A:103:ALA:CB	0.60	2.26	6	18
1:A:83:VAL:N	1:A:104:SER:OG	0.60	2.34	26	11
1:A:69:LEU:CD2	1:A:102:GLY:H	0.59	2.10	20	4
1:A:11:VAL:HG13	1:A:36:ALA:HB3	0.59	1.74	44	2
1:A:68:LEU:HD12	1:A:68:LEU:C	0.59	2.16	24	2
1:A:111:PHE:CE1	1:A:116:LEU:HD22	0.59	2.31	44	2
1:A:62:ASN:H	1:A:62:ASN:HD22	0.59	1.38	12	2
1:A:69:LEU:HD11	1:A:83:VAL:HG11	0.59	1.73	13	1
1:A:62:ASN:HD22	1:A:62:ASN:N	0.59	1.95	7	2
1:A:18:ARG:H	1:A:18:ARG:CD	0.59	2.08	7	2
1:A:43:LEU:HD12	1:A:43:LEU:C	0.59	2.16	19	1
1:A:63:MET:N	1:A:63:MET:SD	0.59	2.76	15	1
1:A:17:MET:SD	1:A:109:LYS:NZ	0.59	2.76	43	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:HD22	0.59	1.96	25	2
1:A:15:SER:O	1:A:16:THR:OG1	0.59	2.20	4	1
1:A:39:GLY:N	1:A:68:LEU:HD11	0.59	2.11	19	2
1:A:129:MET:SD	1:A:129:MET:N	0.59	2.75	5	5
1:A:107:VAL:HG11	1:A:116:LEU:HD21	0.59	1.74	30	2
1:A:107:VAL:HG21	1:A:116:LEU:CD1	0.59	2.28	14	2
1:A:99:ALA:O	1:A:102:GLY:N	0.59	2.35	37	20
1:A:69:LEU:HD21	1:A:102:GLY:H	0.58	1.57	1	4
1:A:69:LEU:HD11	1:A:103:ALA:CB	0.58	2.18	34	1
1:A:4:LYS:NZ	1:A:4:LYS:CB	0.58	2.66	46	1
1:A:129:MET:N	1:A:129:MET:SD	0.58	2.76	11	4
1:A:108:VAL:HG12	1:A:109:LYS:N	0.58	2.09	14	1
1:A:32:ASN:N	1:A:32:ASN:ND2	0.58	2.51	10	2
1:A:91:LYS:H	1:A:94:ASN:HD22	0.58	1.42	13	1
1:A:15:SER:O	1:A:16:THR:CG2	0.58	2.51	4	1
1:A:69:LEU:HD13	1:A:103:ALA:N	0.58	2.13	40	3
1:A:54:VAL:HB	1:A:83:VAL:HG22	0.58	1.76	25	12
1:A:67:GLU:O	1:A:71:THR:HG23	0.58	1.98	10	4
1:A:3:ASP:O	1:A:30:PHE:CE1	0.58	2.57	18	21
1:A:11:VAL:N	1:A:18:ARG:HH21	0.58	1.95	44	1
1:A:8:PHE:CE2	1:A:53:PHE:CD2	0.58	2.91	9	10
1:A:69:LEU:HD11	1:A:102:GLY:N	0.58	2.14	23	4
1:A:76:GLY:O	1:A:77:ALA:HB2	0.58	1.97	19	1
1:A:78:MET:N	1:A:78:MET:SD	0.58	2.75	10	3
1:A:106:TYR:O	1:A:106:TYR:CG	0.58	2.57	1	13
1:A:68:LEU:C	1:A:68:LEU:HD12	0.58	2.19	12	4
1:A:12:ASP:CB	1:A:14:PHE:CZ	0.58	2.87	42	2
1:A:12:ASP:CB	1:A:14:PHE:CE2	0.58	2.87	30	1
1:A:9:LEU:HD23	1:A:46:LEU:CD1	0.57	2.26	31	2
1:A:91:LYS:H	1:A:94:ASN:ND2	0.57	1.97	13	1
1:A:58:TRP:HE1	1:A:94:ASN:ND2	0.57	1.97	11	2
1:A:107:VAL:HG21	1:A:116:LEU:HD22	0.57	1.75	9	1
1:A:107:VAL:O	1:A:107:VAL:HG13	0.57	1.99	11	17
1:A:69:LEU:HD21	1:A:98:ALA:O	0.57	1.99	42	4
1:A:13:ASP:O	1:A:15:SER:N	0.57	2.37	4	1
1:A:9:LEU:HD22	1:A:51:TYR:CE2	0.57	2.35	36	1
1:A:107:VAL:HG11	1:A:116:LEU:CD1	0.57	2.29	22	4
1:A:39:GLY:HA2	1:A:68:LEU:HD11	0.56	1.75	7	5
1:A:69:LEU:HD12	1:A:69:LEU:C	0.56	2.20	21	7
1:A:6:LEU:O	1:A:8:PHE:CD1	0.56	2.58	16	15
1:A:90:ALA:CB	1:A:95:ILE:HD11	0.56	2.30	43	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:95:ILE:O	1:A:95:ILE:HG22	0.56	2.01	41	1
1:A:91:LYS:N	1:A:94:ASN:OD1	0.56	2.38	25	1
1:A:59:ASN:ND2	1:A:59:ASN:N	0.56	2.51	9	2
1:A:87:THR:O	1:A:109:LYS:N	0.56	2.37	39	11
1:A:58:TRP:NE1	1:A:59:ASN:ND2	0.56	2.53	31	2
1:A:10:VAL:HG23	1:A:10:VAL:O	0.56	2.00	5	2
1:A:14:PHE:CD2	1:A:16:THR:N	0.56	2.74	4	3
1:A:19:ARG:NH2	1:A:22:ARG:HH12	0.56	1.99	31	1
1:A:58:TRP:CE2	1:A:94:ASN:ND2	0.56	2.74	42	4
1:A:69:LEU:HD21	1:A:83:VAL:HG11	0.56	1.78	18	2
1:A:89:GLU:H	1:A:108:VAL:HG23	0.56	1.61	34	1
1:A:106:TYR:CG	1:A:106:TYR:O	0.55	2.59	14	13
1:A:62:ASN:O	1:A:64:ASP:N	0.55	2.40	40	8
1:A:102:GLY:O	1:A:104:SER:N	0.55	2.38	36	23
1:A:18:ARG:CD	1:A:18:ARG:H	0.55	2.13	5	1
1:A:81:LEU:HD23	1:A:81:LEU:H	0.55	1.61	8	2
1:A:42:ALA:O	1:A:46:LEU:HD23	0.55	2.01	36	1
1:A:59:ASN:ND2	1:A:60:MET:N	0.55	2.55	4	1
1:A:9:LEU:HD22	1:A:34:GLU:OE2	0.55	2.02	14	2
1:A:118:GLU:O	1:A:121:ASN:ND2	0.55	2.39	45	1
1:A:69:LEU:HD22	1:A:83:VAL:HG11	0.55	1.79	21	1
1:A:14:PHE:CE2	1:A:18:ARG:CZ	0.55	2.90	4	1
1:A:42:ALA:O	1:A:46:LEU:N	0.55	2.40	39	27
1:A:18:ARG:NE	1:A:35:GLU:OE2	0.55	2.40	30	1
1:A:38:ASP:OD1	1:A:39:GLY:N	0.55	2.40	21	9
1:A:96:ILE:HG22	1:A:100:GLN:OE1	0.55	2.02	34	1
1:A:12:ASP:O	1:A:18:ARG:NH2	0.55	2.39	5	1
1:A:111:PHE:CE2	1:A:116:LEU:HD13	0.55	2.36	31	5
1:A:121:ASN:CG	1:A:122:LYS:N	0.55	2.60	45	1
1:A:96:ILE:O	1:A:96:ILE:HG22	0.55	2.02	32	2
1:A:96:ILE:O	1:A:99:ALA:HB3	0.55	2.02	23	1
1:A:107:VAL:HG13	1:A:107:VAL:O	0.55	2.02	14	6
1:A:87:THR:HG22	1:A:88:ALA:N	0.55	2.17	29	2
1:A:65:GLY:HA2	1:A:68:LEU:HD23	0.54	1.79	6	5
1:A:23:ASN:O	1:A:26:LYS:N	0.54	2.40	42	6
1:A:9:LEU:HD13	1:A:34:GLU:CG	0.54	2.32	31	1
1:A:59:ASN:HD22	1:A:60:MET:N	0.54	2.01	16	2
1:A:58:TRP:CD1	1:A:59:ASN:N	0.54	2.75	45	3
1:A:106:TYR:O	1:A:106:TYR:CD2	0.54	2.60	21	4
1:A:43:LEU:CD2	1:A:47:GLN:HE22	0.54	2.15	31	1
1:A:112:THR:N	1:A:115:THR:OG1	0.54	2.39	34	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:LEU:HD11	1:A:102:GLY:H	0.54	1.61	23	3
1:A:100:GLN:HE21	1:A:100:GLN:N	0.54	2.01	15	1
1:A:22:ARG:CA	1:A:22:ARG:HE	0.54	2.13	46	1
1:A:62:ASN:HD22	1:A:63:MET:N	0.54	2.01	6	2
1:A:6:LEU:O	1:A:8:PHE:CD2	0.54	2.59	39	7
1:A:98:ALA:O	1:A:101:ALA:N	0.54	2.40	21	6
1:A:98:ALA:C	1:A:103:ALA:HB3	0.54	2.23	1	3
1:A:58:TRP:NE1	1:A:94:ASN:OD1	0.54	2.41	17	5
1:A:3:ASP:O	1:A:30:PHE:CD1	0.54	2.61	25	1
1:A:91:LYS:O	1:A:93:GLU:N	0.54	2.40	10	8
1:A:64:ASP:O	1:A:66:LEU:N	0.54	2.41	4	7
1:A:69:LEU:HD21	1:A:102:GLY:CA	0.54	2.32	29	3
1:A:18:ARG:NH2	1:A:22:ARG:HH11	0.54	1.99	43	1
1:A:90:ALA:HB1	1:A:95:ILE:HG21	0.54	1.80	44	1
1:A:14:PHE:C	1:A:14:PHE:CD1	0.54	2.81	15	1
1:A:69:LEU:O	1:A:72:ILE:N	0.54	2.40	18	19
1:A:112:THR:O	1:A:115:THR:N	0.54	2.41	9	38
1:A:45:LYS:O	1:A:47:GLN:N	0.54	2.41	8	3
1:A:98:ALA:O	1:A:101:ALA:C	0.54	2.46	21	3
1:A:88:ALA:O	1:A:90:ALA:N	0.54	2.41	46	3
1:A:86:VAL:HG12	1:A:107:VAL:CG1	0.54	2.33	23	1
1:A:63:MET:SD	1:A:63:MET:N	0.54	2.81	41	1
1:A:43:LEU:HD23	1:A:43:LEU:C	0.54	2.24	40	2
1:A:96:ILE:O	1:A:100:GLN:N	0.53	2.41	27	7
1:A:38:ASP:OD2	1:A:62:ASN:N	0.53	2.41	26	1
1:A:69:LEU:C	1:A:69:LEU:HD12	0.53	2.23	43	4
1:A:65:GLY:O	1:A:68:LEU:N	0.53	2.42	35	3
1:A:90:ALA:HB2	1:A:106:TYR:CZ	0.53	2.39	34	2
1:A:5:GLU:N	1:A:5:GLU:OE1	0.53	2.41	3	1
1:A:96:ILE:HD12	1:A:96:ILE:N	0.53	2.18	27	1
1:A:3:ASP:O	1:A:5:GLU:N	0.53	2.41	16	1
1:A:17:MET:O	1:A:19:ARG:N	0.53	2.41	4	3
1:A:57:ASP:OD1	1:A:58:TRP:N	0.53	2.41	25	3
1:A:40:VAL:O	1:A:44:ASN:ND2	0.53	2.41	41	4
1:A:32:ASN:H	1:A:32:ASN:ND2	0.53	1.99	10	1
1:A:40:VAL:HG13	1:A:41:ASP:N	0.53	2.18	45	3
1:A:59:ASN:O	1:A:60:MET:SD	0.53	2.67	13	4
1:A:9:LEU:HD13	1:A:34:GLU:HG3	0.53	1.80	31	2
1:A:81:LEU:HD23	1:A:81:LEU:N	0.53	2.18	25	2
1:A:18:ARG:NH2	1:A:36:ALA:O	0.53	2.42	25	1
1:A:84:LEU:HD22	1:A:104:SER:HG	0.53	1.64	42	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:LEU:HD13	1:A:98:ALA:O	0.53	2.04	25	1
1:A:112:THR:O	1:A:114:ALA:N	0.53	2.42	25	15
1:A:58:TRP:CH2	1:A:94:ASN:OD1	0.53	2.62	6	1
1:A:106:TYR:CD2	1:A:106:TYR:O	0.53	2.61	24	4
1:A:68:LEU:O	1:A:72:ILE:N	0.53	2.41	30	1
1:A:70:LYS:O	1:A:74:ALA:N	0.53	2.42	28	3
1:A:59:ASN:O	1:A:59:ASN:ND2	0.53	2.41	20	2
1:A:57:ASP:O	1:A:59:ASN:N	0.53	2.42	27	3
1:A:38:ASP:OD1	1:A:40:VAL:N	0.53	2.42	19	2
1:A:74:ALA:O	1:A:76:GLY:N	0.53	2.41	18	3
1:A:55:ILE:HG22	1:A:55:ILE:O	0.53	2.04	3	2
1:A:15:SER:O	1:A:16:THR:CB	0.53	2.57	4	1
1:A:18:ARG:O	1:A:20:ILE:N	0.53	2.42	28	1
1:A:34:GLU:OE1	1:A:35:GLU:N	0.53	2.42	28	1
1:A:58:TRP:NE1	1:A:64:ASP:OD1	0.53	2.42	36	1
1:A:14:PHE:C	1:A:16:THR:H	0.53	2.05	4	1
1:A:4:LYS:O	1:A:31:ASN:ND2	0.53	2.42	27	3
1:A:69:LEU:CG	1:A:103:ALA:HB2	0.53	2.33	30	2
1:A:89:GLU:O	1:A:91:LYS:N	0.53	2.42	11	8
1:A:42:ALA:O	1:A:45:LYS:N	0.53	2.42	8	3
1:A:9:LEU:CD2	1:A:46:LEU:HD12	0.53	2.33	4	6
1:A:12:ASP:OD1	1:A:12:ASP:N	0.53	2.42	2	4
1:A:84:LEU:CD2	1:A:116:LEU:HD21	0.53	2.34	1	3
1:A:75:ASP:OD1	1:A:76:GLY:N	0.53	2.42	23	2
1:A:32:ASN:O	1:A:32:ASN:ND2	0.52	2.42	10	1
1:A:38:ASP:CG	1:A:39:GLY:N	0.52	2.62	19	8
1:A:75:ASP:O	1:A:79:SER:N	0.52	2.42	31	1
1:A:14:PHE:CE2	1:A:17:MET:SD	0.52	3.02	30	1
1:A:84:LEU:HD12	1:A:107:VAL:HG12	0.52	1.81	10	2
1:A:58:TRP:O	1:A:58:TRP:CD1	0.52	2.62	9	1
1:A:66:LEU:O	1:A:69:LEU:N	0.52	2.42	6	6
1:A:61:PRO:O	1:A:62:ASN:ND2	0.52	2.42	33	4
1:A:62:ASN:OD1	1:A:63:MET:N	0.52	2.42	35	5
1:A:92:LYS:O	1:A:94:ASN:N	0.52	2.42	4	11
1:A:69:LEU:CD2	1:A:83:VAL:HG21	0.52	2.35	18	2
1:A:39:GLY:N	1:A:59:ASN:OD1	0.52	2.42	43	1
1:A:3:ASP:C	1:A:5:GLU:H	0.52	2.08	16	7
1:A:13:ASP:C	1:A:14:PHE:CD1	0.52	2.82	36	1
1:A:58:TRP:CE2	1:A:94:ASN:OD1	0.52	2.63	17	7
1:A:38:ASP:OD1	1:A:38:ASP:N	0.52	2.42	45	3
1:A:75:ASP:OD2	1:A:79:SER:N	0.52	2.42	25	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:LYS:NZ	1:A:94:ASN:OD1	0.52	2.42	16	1
1:A:85:MET:O	1:A:85:MET:SD	0.52	2.68	26	1
1:A:111:PHE:CG	1:A:116:LEU:HD13	0.52	2.38	44	1
1:A:60:MET:SD	1:A:60:MET:N	0.52	2.83	46	2
1:A:52:GLY:HA2	1:A:81:LEU:HD12	0.52	1.82	35	1
1:A:9:LEU:HD23	1:A:46:LEU:HD22	0.52	1.80	28	1
1:A:10:VAL:O	1:A:18:ARG:NH2	0.52	2.42	41	1
1:A:117:GLU:O	1:A:119:LYS:N	0.52	2.42	26	1
1:A:38:ASP:OD1	1:A:62:ASN:ND2	0.52	2.42	21	2
1:A:12:ASP:O	1:A:18:ARG:NH1	0.52	2.43	5	1
1:A:93:GLU:N	1:A:93:GLU:OE2	0.52	2.42	4	1
1:A:75:ASP:OD1	1:A:77:ALA:HB3	0.52	2.05	15	1
1:A:38:ASP:OD2	1:A:62:ASN:ND2	0.52	2.43	46	1
1:A:58:TRP:CD1	1:A:64:ASP:OD1	0.52	2.63	36	1
1:A:64:ASP:OD1	1:A:65:GLY:N	0.52	2.42	14	1
1:A:14:PHE:CE1	1:A:18:ARG:CZ	0.52	2.92	45	1
1:A:89:GLU:OE2	1:A:91:LYS:NZ	0.52	2.43	9	1
1:A:35:GLU:OE1	1:A:36:ALA:N	0.52	2.42	8	1
1:A:14:PHE:C	1:A:16:THR:N	0.52	2.61	4	2
1:A:81:LEU:H	1:A:81:LEU:HD23	0.52	1.65	30	1
1:A:39:GLY:CA	1:A:68:LEU:HD13	0.52	2.34	44	5
1:A:98:ALA:HB1	1:A:103:ALA:HB2	0.52	1.81	23	5
1:A:5:GLU:OE1	1:A:5:GLU:N	0.52	2.42	24	1
1:A:78:MET:O	1:A:80:ALA:N	0.52	2.43	34	6
1:A:106:TYR:CD1	1:A:106:TYR:C	0.52	2.83	45	15
1:A:28:LEU:HD21	1:A:117:GLU:OE1	0.52	2.05	42	1
1:A:34:GLU:CD	1:A:51:TYR:CZ	0.52	2.84	31	2
1:A:13:ASP:N	1:A:13:ASP:OD1	0.52	2.42	29	3
1:A:117:GLU:OE1	1:A:118:GLU:N	0.52	2.42	13	5
1:A:35:GLU:OE1	1:A:35:GLU:N	0.52	2.43	17	2
1:A:38:ASP:N	1:A:38:ASP:OD1	0.51	2.42	10	2
1:A:14:PHE:O	1:A:15:SER:CB	0.51	2.56	9	7
1:A:9:LEU:HD22	1:A:46:LEU:CD1	0.51	2.35	27	3
1:A:13:ASP:OD1	1:A:14:PHE:N	0.51	2.43	34	1
1:A:60:MET:H	1:A:61:PRO:HD2	0.51	1.65	20	3
1:A:9:LEU:HD13	1:A:51:TYR:CZ	0.51	2.40	32	1
1:A:12:ASP:N	1:A:12:ASP:OD1	0.51	2.42	32	2
1:A:95:ILE:HG23	1:A:106:TYR:CD2	0.51	2.40	25	2
1:A:29:GLY:O	1:A:30:PHE:CD1	0.51	2.64	30	1
1:A:58:TRP:CE2	1:A:59:ASN:OD1	0.51	2.63	32	2
1:A:39:GLY:N	1:A:64:ASP:OD2	0.51	2.43	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:LYS:O	1:A:48:ALA:N	0.51	2.44	34	2
1:A:81:LEU:HD12	1:A:82:PRO:O	0.51	2.04	29	1
1:A:34:GLU:OE1	1:A:45:LYS:NZ	0.51	2.43	13	1
1:A:39:GLY:N	1:A:64:ASP:OD1	0.51	2.44	45	1
1:A:28:LEU:N	1:A:28:LEU:HD12	0.51	2.21	21	2
1:A:39:GLY:H	1:A:68:LEU:HD11	0.51	1.64	19	1
1:A:57:ASP:OD1	1:A:59:ASN:ND2	0.51	2.43	27	1
1:A:83:VAL:HG12	1:A:83:VAL:O	0.51	2.04	27	7
1:A:9:LEU:C	1:A:9:LEU:CD1	0.51	2.79	5	2
1:A:7:LYS:NZ	1:A:50:GLY:O	0.51	2.42	12	2
1:A:59:ASN:OD1	1:A:59:ASN:N	0.51	2.44	41	2
1:A:16:THR:O	1:A:18:ARG:N	0.51	2.44	14	1
1:A:126:LYS:CD	1:A:126:LYS:N	0.51	2.73	7	1
1:A:57:ASP:N	1:A:57:ASP:OD1	0.51	2.43	6	4
1:A:43:LEU:HD12	1:A:43:LEU:O	0.51	2.06	19	1
1:A:51:TYR:C	1:A:53:PHE:N	0.51	2.64	26	23
1:A:78:MET:O	1:A:79:SER:O	0.51	2.29	5	1
1:A:72:ILE:HG23	1:A:80:ALA:HB3	0.51	1.83	5	5
1:A:14:PHE:O	1:A:16:THR:N	0.51	2.44	17	2
1:A:39:GLY:O	1:A:43:LEU:N	0.51	2.43	19	4
1:A:106:TYR:O	1:A:119:LYS:NZ	0.50	2.45	16	2
1:A:124:PHE:O	1:A:127:LEU:N	0.50	2.44	5	7
1:A:22:ARG:CG	1:A:22:ARG:HH11	0.50	2.19	20	1
1:A:89:GLU:O	1:A:90:ALA:CB	0.50	2.59	12	2
1:A:17:MET:O	1:A:20:ILE:N	0.50	2.45	4	4
1:A:34:GLU:OE2	1:A:51:TYR:CE1	0.50	2.64	14	1
1:A:56:SER:OG	1:A:85:MET:SD	0.50	2.69	34	4
1:A:124:PHE:CD2	1:A:129:MET:SD	0.50	3.04	16	1
1:A:35:GLU:N	1:A:35:GLU:CD	0.50	2.65	7	5
1:A:28:LEU:HD11	1:A:117:GLU:CD	0.50	2.27	12	1
1:A:74:ALA:O	1:A:75:ASP:C	0.50	2.49	11	3
1:A:57:ASP:O	1:A:85:MET:SD	0.50	2.69	7	2
1:A:112:THR:C	1:A:114:ALA:N	0.50	2.65	25	14
1:A:58:TRP:CH2	1:A:66:LEU:HD23	0.50	2.42	8	2
1:A:22:ARG:NH1	1:A:35:GLU:OE2	0.50	2.44	12	1
1:A:69:LEU:HA	1:A:72:ILE:HD12	0.50	1.84	18	4
1:A:51:TYR:C	1:A:53:PHE:H	0.50	2.09	13	19
1:A:99:ALA:C	1:A:102:GLY:H	0.50	2.10	8	16
1:A:34:GLU:CD	1:A:35:GLU:N	0.50	2.65	28	2
1:A:69:LEU:HD11	1:A:102:GLY:CA	0.50	2.37	15	3
1:A:17:MET:O	1:A:18:ARG:C	0.50	2.49	30	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:ARG:CG	1:A:19:ARG:N	0.50	2.74	19	1
1:A:31:ASN:OD1	1:A:31:ASN:N	0.50	2.44	16	2
1:A:14:PHE:CD1	1:A:14:PHE:C	0.50	2.80	45	1
1:A:62:ASN:H	1:A:62:ASN:ND2	0.50	2.04	10	3
1:A:60:MET:SD	1:A:60:MET:O	0.50	2.70	9	2
1:A:91:LYS:O	1:A:92:LYS:CB	0.50	2.60	32	4
1:A:90:ALA:CB	1:A:106:TYR:OH	0.50	2.60	18	12
1:A:35:GLU:CD	1:A:35:GLU:N	0.50	2.65	5	1
1:A:61:PRO:C	1:A:62:ASN:ND2	0.50	2.65	38	3
1:A:64:ASP:CG	1:A:65:GLY:N	0.50	2.65	1	2
1:A:15:SER:O	1:A:18:ARG:NH1	0.50	2.44	12	1
1:A:9:LEU:HB3	1:A:54:VAL:HG22	0.50	1.83	42	2
1:A:100:GLN:N	1:A:100:GLN:OE1	0.50	2.44	29	1
1:A:87:THR:CG2	1:A:88:ALA:N	0.50	2.75	29	2
1:A:65:GLY:H	1:A:68:LEU:HD12	0.50	1.67	27	1
1:A:62:ASN:ND2	1:A:62:ASN:O	0.50	2.44	10	1
1:A:129:MET:OXT	1:A:129:MET:SD	0.50	2.70	40	2
1:A:58:TRP:O	1:A:58:TRP:CG	0.50	2.64	9	1
1:A:113:ALA:O	1:A:117:GLU:CG	0.50	2.60	25	4
1:A:66:LEU:C	1:A:66:LEU:HD23	0.50	2.26	44	1
1:A:2:ALA:O	1:A:3:ASP:CB	0.50	2.60	27	1
1:A:4:LYS:O	1:A:4:LYS:CG	0.50	2.60	28	1
1:A:56:SER:O	1:A:85:MET:SD	0.50	2.70	38	2
1:A:85:MET:C	1:A:85:MET:SD	0.49	2.91	26	3
1:A:3:ASP:O	1:A:30:PHE:CE2	0.49	2.65	12	2
1:A:93:GLU:OE2	1:A:94:ASN:N	0.49	2.45	4	1
1:A:40:VAL:HG22	1:A:44:ASN:ND2	0.49	2.22	20	1
1:A:65:GLY:H	1:A:68:LEU:HD13	0.49	1.66	41	1
1:A:12:ASP:OD1	1:A:13:ASP:N	0.49	2.45	7	1
1:A:51:TYR:O	1:A:53:PHE:N	0.49	2.45	18	10
1:A:80:ALA:O	1:A:81:LEU:C	0.49	2.50	43	13
1:A:51:TYR:O	1:A:81:LEU:HD13	0.49	2.07	19	3
1:A:60:MET:O	1:A:60:MET:SD	0.49	2.71	35	1
1:A:107:VAL:HG11	1:A:116:LEU:HD11	0.49	1.84	10	5
1:A:66:LEU:O	1:A:68:LEU:N	0.49	2.45	5	4
1:A:14:PHE:O	1:A:18:ARG:NE	0.49	2.45	24	1
1:A:36:ALA:HB1	1:A:41:ASP:HB3	0.49	1.83	23	12
1:A:76:GLY:O	1:A:77:ALA:CB	0.49	2.60	38	3
1:A:128:GLY:O	1:A:129:MET:SD	0.49	2.71	24	2
1:A:51:TYR:O	1:A:81:LEU:CD2	0.49	2.61	37	7
1:A:12:ASP:OD1	1:A:17:MET:SD	0.49	2.71	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:59:ASN:HD22	1:A:59:ASN:C	0.49	2.10	12	1
1:A:106:TYR:OH	1:A:108:VAL:CG2	0.49	2.61	31	2
1:A:67:GLU:CD	1:A:67:GLU:N	0.49	2.66	38	1
1:A:9:LEU:HD23	1:A:46:LEU:CD2	0.49	2.38	11	5
1:A:18:ARG:NH2	1:A:22:ARG:NH2	0.49	2.61	42	1
1:A:12:ASP:O	1:A:14:PHE:N	0.49	2.46	18	1
1:A:107:VAL:O	1:A:108:VAL:O	0.49	2.31	24	4
1:A:46:LEU:CD2	1:A:51:TYR:CD2	0.49	2.96	1	1
1:A:102:GLY:C	1:A:104:SER:N	0.49	2.65	14	23
1:A:60:MET:N	1:A:61:PRO:HD3	0.49	2.23	43	5
1:A:4:LYS:CG	1:A:4:LYS:O	0.49	2.60	43	1
1:A:26:LYS:HZ3	1:A:26:LYS:HB3	0.49	1.67	23	1
1:A:18:ARG:HE	1:A:22:ARG:NH1	0.49	2.06	30	1
1:A:58:TRP:O	1:A:59:ASN:ND2	0.49	2.46	30	1
1:A:94:ASN:ND2	1:A:94:ASN:C	0.49	2.66	10	2
1:A:69:LEU:HD13	1:A:103:ALA:HB2	0.49	1.84	5	11
1:A:59:ASN:H	1:A:59:ASN:ND2	0.49	2.05	9	1
1:A:98:ALA:O	1:A:99:ALA:C	0.49	2.49	21	2
1:A:85:MET:SD	1:A:85:MET:O	0.49	2.70	12	2
1:A:19:ARG:NH2	1:A:22:ARG:NH1	0.49	2.60	31	1
1:A:39:GLY:CA	1:A:68:LEU:HD11	0.48	2.38	23	4
1:A:87:THR:HG23	1:A:90:ALA:HB2	0.48	1.84	41	2
1:A:62:ASN:O	1:A:63:MET:CB	0.48	2.60	27	2
1:A:40:VAL:CG1	1:A:41:ASP:N	0.48	2.75	45	4
1:A:96:ILE:C	1:A:98:ALA:N	0.48	2.65	13	3
1:A:96:ILE:N	1:A:96:ILE:HD12	0.48	2.22	8	1
1:A:91:LYS:O	1:A:94:ASN:N	0.48	2.46	42	2
1:A:11:VAL:N	1:A:18:ARG:NH2	0.48	2.61	44	1
1:A:10:VAL:O	1:A:10:VAL:CG2	0.48	2.61	7	1
1:A:127:LEU:O	1:A:127:LEU:HD13	0.48	2.08	32	6
1:A:37:GLU:N	1:A:41:ASP:OD2	0.48	2.46	8	1
1:A:18:ARG:N	1:A:18:ARG:CD	0.48	2.76	5	3
1:A:37:GLU:CD	1:A:37:GLU:N	0.48	2.67	32	3
1:A:78:MET:O	1:A:79:SER:CB	0.48	2.61	2	1
1:A:18:ARG:CD	1:A:35:GLU:OE2	0.48	2.61	30	1
1:A:100:GLN:HE21	1:A:100:GLN:CA	0.48	2.20	15	1
1:A:45:LYS:C	1:A:47:GLN:N	0.48	2.66	34	3
1:A:121:ASN:OD1	1:A:121:ASN:N	0.48	2.46	21	1
1:A:108:VAL:CG1	1:A:108:VAL:O	0.48	2.60	35	6
1:A:12:ASP:O	1:A:18:ARG:CZ	0.48	2.62	5	1
1:A:60:MET:N	1:A:61:PRO:HD2	0.48	2.24	37	19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:LYS:NZ	1:A:32:ASN:OD1	0.48	2.42	4	2
1:A:12:ASP:OD2	1:A:17:MET:SD	0.48	2.71	17	3
1:A:47:GLN:NE2	1:A:47:GLN:O	0.48	2.46	32	1
1:A:9:LEU:HB3	1:A:54:VAL:HG12	0.48	1.83	32	1
1:A:124:PHE:CE2	1:A:129:MET:SD	0.48	3.06	16	1
1:A:115:THR:O	1:A:116:LEU:C	0.48	2.51	18	24
1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:OD1	0.48	2.46	9	2
1:A:99:ALA:C	1:A:101:ALA:N	0.48	2.67	20	5
1:A:4:LYS:CB	1:A:29:GLY:O	0.48	2.62	40	1
1:A:75:ASP:CG	1:A:79:SER:H	0.48	2.12	43	1
1:A:14:PHE:O	1:A:18:ARG:CZ	0.48	2.62	24	1
1:A:18:ARG:C	1:A:20:ILE:N	0.48	2.67	28	1
1:A:50:GLY:O	1:A:52:GLY:N	0.48	2.47	43	7
1:A:80:ALA:O	1:A:81:LEU:O	0.48	2.32	8	10
1:A:92:LYS:CG	1:A:93:GLU:N	0.48	2.76	36	1
1:A:92:LYS:C	1:A:94:ASN:N	0.48	2.67	28	12
1:A:9:LEU:HD13	1:A:51:TYR:CE2	0.48	2.44	38	1
1:A:69:LEU:O	1:A:70:LYS:C	0.48	2.52	18	17
1:A:64:ASP:C	1:A:66:LEU:N	0.48	2.67	35	4
1:A:18:ARG:HH21	1:A:19:ARG:N	0.48	2.07	12	1
1:A:82:PRO:CA	1:A:104:SER:OG	0.48	2.62	43	2
1:A:43:LEU:HD13	1:A:71:THR:HG21	0.48	1.86	23	1
1:A:78:MET:C	1:A:80:ALA:N	0.48	2.66	34	8
1:A:31:ASN:HD22	1:A:31:ASN:N	0.48	2.05	14	1
1:A:57:ASP:C	1:A:59:ASN:H	0.48	2.12	18	1
1:A:62:ASN:HD22	1:A:62:ASN:H	0.47	1.52	7	1
1:A:62:ASN:CG	1:A:63:MET:N	0.47	2.67	7	1
1:A:2:ALA:O	1:A:3:ASP:O	0.47	2.32	22	13
1:A:66:LEU:C	1:A:68:LEU:N	0.47	2.66	34	10
1:A:9:LEU:HD22	1:A:51:TYR:CD2	0.47	2.44	36	1
1:A:85:MET:SD	1:A:85:MET:C	0.47	2.93	11	1
1:A:59:ASN:N	1:A:59:ASN:ND2	0.47	2.58	17	1
1:A:40:VAL:HG22	1:A:63:MET:SD	0.47	2.49	5	1
1:A:39:GLY:HA2	1:A:68:LEU:HD22	0.47	1.85	6	1
1:A:69:LEU:HD13	1:A:103:ALA:H	0.47	1.68	40	3
1:A:69:LEU:CD2	1:A:101:ALA:O	0.47	2.62	21	1
1:A:62:ASN:HD22	1:A:63:MET:H	0.47	1.52	1	2
1:A:108:VAL:O	1:A:108:VAL:CG1	0.47	2.62	33	2
1:A:100:GLN:NE2	1:A:100:GLN:CA	0.47	2.76	15	1
1:A:46:LEU:C	1:A:48:ALA:N	0.47	2.68	1	8
1:A:62:ASN:ND2	1:A:63:MET:N	0.47	2.62	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:88:ALA:O	1:A:89:GLU:CB	0.47	2.62	34	2
1:A:22:ARG:CZ	1:A:35:GLU:OE2	0.47	2.62	14	1
1:A:117:GLU:O	1:A:120:LEU:N	0.47	2.48	11	7
1:A:38:ASP:O	1:A:41:ASP:N	0.47	2.48	28	6
1:A:18:ARG:NE	1:A:18:ARG:N	0.47	2.62	12	1
1:A:14:PHE:CZ	1:A:18:ARG:NH2	0.47	2.83	4	1
1:A:44:ASN:O	1:A:47:GLN:CG	0.47	2.63	1	3
1:A:9:LEU:CB	1:A:54:VAL:HG12	0.47	2.40	32	1
1:A:87:THR:C	1:A:109:LYS:NZ	0.47	2.68	10	1
1:A:106:TYR:C	1:A:106:TYR:CD1	0.47	2.86	19	9
1:A:28:LEU:N	1:A:28:LEU:CD1	0.47	2.78	21	2
1:A:13:ASP:O	1:A:14:PHE:O	0.47	2.33	36	5
1:A:84:LEU:HD21	1:A:116:LEU:HD21	0.47	1.87	1	3
1:A:127:LEU:HD13	1:A:127:LEU:O	0.47	2.10	40	2
1:A:18:ARG:NH2	1:A:22:ARG:NH1	0.47	2.63	43	1
1:A:60:MET:SD	1:A:60:MET:C	0.47	2.93	29	2
1:A:57:ASP:CG	1:A:59:ASN:ND2	0.47	2.68	27	1
1:A:58:TRP:O	1:A:59:ASN:CB	0.47	2.63	28	1
1:A:57:ASP:C	1:A:59:ASN:N	0.47	2.67	18	1
1:A:103:ALA:O	1:A:104:SER:C	0.47	2.53	4	24
1:A:57:ASP:CG	1:A:58:TRP:N	0.47	2.68	17	5
1:A:34:GLU:OE2	1:A:51:TYR:CZ	0.47	2.68	31	2
1:A:108:VAL:CG2	1:A:109:LYS:N	0.47	2.76	45	3
1:A:58:TRP:CH2	1:A:64:ASP:OD2	0.47	2.68	17	1
1:A:4:LYS:O	1:A:29:GLY:O	0.47	2.33	11	9
1:A:59:ASN:ND2	1:A:59:ASN:C	0.47	2.68	31	2
1:A:89:GLU:N	1:A:89:GLU:CD	0.47	2.68	31	1
1:A:94:ASN:C	1:A:94:ASN:ND2	0.47	2.69	14	3
1:A:5:GLU:CG	1:A:5:GLU:O	0.47	2.62	41	3
1:A:86:VAL:HG23	1:A:107:VAL:O	0.47	2.10	30	1
1:A:28:LEU:CD1	1:A:117:GLU:OE1	0.47	2.62	41	1
1:A:46:LEU:HD21	1:A:51:TYR:CD2	0.47	2.45	1	1
1:A:58:TRP:CZ2	1:A:64:ASP:OD2	0.47	2.68	17	1
1:A:22:ARG:NH1	1:A:33:VAL:HG22	0.47	2.25	25	1
1:A:79:SER:OG	1:A:80:ALA:N	0.46	2.47	25	2
1:A:107:VAL:O	1:A:107:VAL:CG1	0.46	2.63	39	8
1:A:82:PRO:CB	1:A:104:SER:OG	0.46	2.63	32	2
1:A:122:LYS:O	1:A:125:GLU:CG	0.46	2.62	29	1
1:A:74:ALA:C	1:A:76:GLY:N	0.46	2.67	13	1
1:A:69:LEU:HD21	1:A:103:ALA:CB	0.46	2.36	30	1
1:A:9:LEU:HB3	1:A:54:VAL:HG23	0.46	1.86	33	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:5:GLU:O	1:A:32:ASN:OD1	0.46	2.33	10	1
1:A:37:GLU:OE1	1:A:37:GLU:N	0.46	2.49	21	1
1:A:9:LEU:HD13	1:A:34:GLU:OE2	0.46	2.10	5	1
1:A:54:VAL:CG2	1:A:83:VAL:HG22	0.46	2.40	32	2
1:A:91:LYS:CG	1:A:92:LYS:N	0.46	2.78	39	1
1:A:111:PHE:CD2	1:A:116:LEU:HD23	0.46	2.44	9	1
1:A:31:ASN:C	1:A:31:ASN:HD22	0.46	2.13	5	2
1:A:96:ILE:O	1:A:98:ALA:N	0.46	2.47	21	2
1:A:95:ILE:O	1:A:95:ILE:CG2	0.46	2.63	41	2
1:A:43:LEU:CD1	1:A:43:LEU:C	0.46	2.84	28	2
1:A:27:GLU:OE1	1:A:113:ALA:CB	0.46	2.64	20	3
1:A:85:MET:O	1:A:85:MET:CG	0.46	2.63	2	1
1:A:67:GLU:CD	1:A:67:GLU:H	0.46	2.13	38	1
1:A:91:LYS:C	1:A:93:GLU:N	0.46	2.68	7	1
1:A:112:THR:O	1:A:113:ALA:C	0.46	2.54	9	18
1:A:10:VAL:CG2	1:A:10:VAL:O	0.46	2.63	5	1
1:A:37:GLU:O	1:A:38:ASP:CB	0.46	2.61	30	5
1:A:35:GLU:OE2	1:A:35:GLU:N	0.46	2.48	7	1
1:A:67:GLU:O	1:A:71:THR:CG2	0.46	2.62	10	3
1:A:9:LEU:HD22	1:A:46:LEU:HD12	0.46	1.88	27	3
1:A:58:TRP:O	1:A:59:ASN:O	0.46	2.33	43	2
1:A:54:VAL:HG13	1:A:83:VAL:HG22	0.46	1.87	33	1
1:A:106:TYR:O	1:A:119:LYS:CE	0.46	2.63	16	1
1:A:111:PHE:CD2	1:A:116:LEU:HD13	0.46	2.45	10	2
1:A:73:ARG:CZ	1:A:100:GLN:O	0.46	2.64	9	1
1:A:63:MET:SD	1:A:63:MET:O	0.46	2.73	3	1
1:A:65:GLY:O	1:A:68:LEU:CB	0.46	2.64	10	2
1:A:66:LEU:O	1:A:66:LEU:HD13	0.46	2.11	41	2
1:A:43:LEU:HD13	1:A:43:LEU:O	0.46	2.11	44	4
1:A:39:GLY:HA2	1:A:68:LEU:HD21	0.46	1.87	11	1
1:A:16:THR:C	1:A:18:ARG:N	0.46	2.69	14	1
1:A:89:GLU:O	1:A:89:GLU:CG	0.46	2.63	45	1
1:A:87:THR:CG2	1:A:90:ALA:HB2	0.46	2.41	41	2
1:A:89:GLU:CG	1:A:89:GLU:O	0.46	2.63	46	1
1:A:31:ASN:N	1:A:31:ASN:OD1	0.46	2.47	10	1
1:A:117:GLU:C	1:A:119:LYS:N	0.46	2.68	26	1
1:A:9:LEU:HB3	1:A:54:VAL:HG13	0.46	1.88	8	7
1:A:38:ASP:OD2	1:A:40:VAL:HG23	0.46	2.10	40	1
1:A:75:ASP:O	1:A:79:SER:CB	0.46	2.64	32	1
1:A:124:PHE:C	1:A:126:LYS:N	0.46	2.69	12	2
1:A:68:LEU:CD1	1:A:68:LEU:C	0.46	2.83	24	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:ASP:O	1:A:14:PHE:C	0.45	2.55	4	2
1:A:58:TRP:CZ2	1:A:94:ASN:OD1	0.45	2.70	32	4
1:A:81:LEU:CD2	1:A:81:LEU:N	0.45	2.73	8	3
1:A:13:ASP:CG	1:A:14:PHE:N	0.45	2.68	32	1
1:A:68:LEU:C	1:A:68:LEU:CD1	0.45	2.85	12	2
1:A:96:ILE:O	1:A:100:GLN:CB	0.45	2.65	11	3
1:A:16:THR:O	1:A:19:ARG:N	0.45	2.50	45	1
1:A:18:ARG:HE	1:A:18:ARG:N	0.45	2.09	12	1
1:A:38:ASP:C	1:A:68:LEU:HD21	0.45	2.32	19	1
1:A:64:ASP:O	1:A:68:LEU:N	0.45	2.49	32	2
1:A:57:ASP:O	1:A:86:VAL:O	0.45	2.35	25	6
1:A:120:LEU:O	1:A:123:ILE:N	0.45	2.49	18	6
1:A:89:GLU:O	1:A:90:ALA:HB2	0.45	2.11	1	1
1:A:18:ARG:NE	1:A:35:GLU:OE1	0.45	2.50	23	1
1:A:7:LYS:O	1:A:51:TYR:O	0.45	2.34	34	1
1:A:59:ASN:ND2	1:A:64:ASP:O	0.45	2.49	45	1
1:A:3:ASP:C	1:A:5:GLU:N	0.45	2.69	16	1
1:A:59:ASN:H	1:A:59:ASN:HD22	0.45	1.54	9	2
1:A:108:VAL:CG2	1:A:109:LYS:H	0.45	2.23	45	1
1:A:12:ASP:OD2	1:A:14:PHE:CE2	0.45	2.70	30	1
1:A:57:ASP:OD1	1:A:57:ASP:N	0.45	2.50	41	2
1:A:43:LEU:O	1:A:43:LEU:HD23	0.45	2.11	7	1
1:A:68:LEU:O	1:A:71:THR:OG1	0.45	2.35	26	5
1:A:99:ALA:O	1:A:101:ALA:N	0.45	2.50	20	1
1:A:108:VAL:CG1	1:A:109:LYS:N	0.45	2.80	14	1
1:A:46:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG21	0.45	1.88	17	2
1:A:59:ASN:ND2	1:A:59:ASN:H	0.45	2.10	16	1
1:A:61:PRO:O	1:A:62:ASN:O	0.45	2.34	9	2
1:A:112:THR:N	1:A:115:THR:HG1	0.45	2.10	42	1
1:A:58:TRP:NE1	1:A:94:ASN:CG	0.45	2.70	34	1
1:A:9:LEU:HD13	1:A:51:TYR:CE1	0.45	2.47	32	1
1:A:60:MET:H	1:A:61:PRO:HD3	0.45	1.71	30	1
1:A:98:ALA:HB1	1:A:103:ALA:HB3	0.45	1.89	12	4
1:A:57:ASP:O	1:A:58:TRP:O	0.45	2.35	30	2
1:A:128:GLY:C	1:A:129:MET:SD	0.45	2.95	43	1
1:A:129:MET:C	1:A:129:MET:SD	0.45	2.96	32	2
1:A:59:ASN:HD22	1:A:59:ASN:N	0.45	2.10	17	2
1:A:58:TRP:CD1	1:A:64:ASP:OD2	0.45	2.70	26	1
1:A:18:ARG:CZ	1:A:35:GLU:CD	0.45	2.86	19	1
1:A:111:PHE:CD1	1:A:116:LEU:HD13	0.45	2.46	44	1
1:A:129:MET:SD	1:A:129:MET:OXT	0.45	2.74	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:59:ASN:C	1:A:60:MET:SD	0.45	2.95	46	2
1:A:54:VAL:HG23	1:A:83:VAL:HG22	0.45	1.88	32	1
1:A:33:VAL:HG23	1:A:34:GLU:N	0.44	2.27	28	12
1:A:96:ILE:N	1:A:96:ILE:CD1	0.44	2.80	8	1
1:A:87:THR:OG1	1:A:88:ALA:N	0.44	2.49	30	3
1:A:4:LYS:O	1:A:31:ASN:OD1	0.44	2.36	16	2
1:A:74:ALA:O	1:A:75:ASP:O	0.44	2.34	22	8
1:A:9:LEU:HB2	1:A:51:TYR:CD2	0.44	2.47	1	1
1:A:34:GLU:CD	1:A:51:TYR:OH	0.44	2.56	14	5
1:A:18:ARG:CZ	1:A:22:ARG:NE	0.44	2.80	43	1
1:A:5:GLU:OE1	1:A:31:ASN:OD1	0.44	2.35	14	1
1:A:46:LEU:HD21	1:A:54:VAL:HG11	0.44	1.89	32	1
1:A:38:ASP:OD1	1:A:63:MET:O	0.44	2.35	30	1
1:A:26:LYS:NZ	1:A:31:ASN:HD21	0.44	2.09	46	1
1:A:105:GLY:HA2	1:A:123:ILE:HD11	0.44	1.89	6	2
1:A:58:TRP:CD1	1:A:59:ASN:OD1	0.44	2.71	12	1
1:A:4:LYS:CA	1:A:29:GLY:O	0.44	2.65	40	2
1:A:58:TRP:CZ3	1:A:98:ALA:HB2	0.44	2.47	43	1
1:A:31:ASN:ND2	1:A:31:ASN:O	0.44	2.51	22	1
1:A:64:ASP:OD1	1:A:64:ASP:N	0.44	2.51	34	1
1:A:11:VAL:CG1	1:A:11:VAL:O	0.44	2.66	24	2
1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:ND2	0.44	2.65	7	1
1:A:56:SER:O	1:A:57:ASP:O	0.44	2.35	35	5
1:A:67:GLU:O	1:A:71:THR:OG1	0.44	2.35	17	6
1:A:75:ASP:CG	1:A:76:GLY:N	0.44	2.71	24	1
1:A:92:LYS:C	1:A:94:ASN:H	0.44	2.16	18	3
1:A:18:ARG:CB	1:A:35:GLU:OE2	0.44	2.65	28	1
1:A:12:ASP:C	1:A:14:PHE:N	0.44	2.68	18	1
1:A:81:LEU:CB	1:A:82:PRO:CD	0.44	2.96	25	5
1:A:64:ASP:CG	1:A:66:LEU:H	0.44	2.16	1	1
1:A:59:ASN:O	1:A:60:MET:CB	0.44	2.63	29	3
1:A:58:TRP:CE3	1:A:85:MET:CE	0.44	3.01	26	1
1:A:42:ALA:O	1:A:43:LEU:C	0.44	2.55	8	6
1:A:84:LEU:CD1	1:A:105:GLY:C	0.44	2.86	17	8
1:A:75:ASP:OD2	1:A:76:GLY:N	0.44	2.51	43	1
1:A:94:ASN:C	1:A:96:ILE:N	0.44	2.71	22	1
1:A:91:LYS:CB	1:A:94:ASN:HD21	0.44	2.26	44	1
1:A:59:ASN:OD1	1:A:62:ASN:O	0.44	2.35	20	1
1:A:37:GLU:O	1:A:38:ASP:OD1	0.44	2.34	25	2
1:A:63:MET:O	1:A:64:ASP:OD2	0.44	2.36	3	2
1:A:104:SER:OG	1:A:105:GLY:N	0.44	2.51	42	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:LEU:O	1:A:67:GLU:C	0.44	2.57	29	4
1:A:129:MET:SD	1:A:129:MET:C	0.44	2.96	23	3
1:A:90:ALA:HB1	1:A:95:ILE:CG1	0.44	2.43	11	1
1:A:56:SER:OG	1:A:85:MET:CE	0.44	2.66	25	2
1:A:11:VAL:C	1:A:18:ARG:HH22	0.44	2.17	41	1
1:A:120:LEU:O	1:A:120:LEU:HD13	0.43	2.13	9	1
1:A:46:LEU:C	1:A:48:ALA:H	0.43	2.16	14	6
1:A:84:LEU:O	1:A:85:MET:O	0.43	2.36	40	2
1:A:63:MET:O	1:A:64:ASP:O	0.43	2.36	23	1
1:A:94:ASN:C	1:A:96:ILE:H	0.43	2.16	22	1
1:A:92:LYS:O	1:A:95:ILE:N	0.43	2.51	38	2
1:A:58:TRP:CH2	1:A:98:ALA:HB2	0.43	2.48	33	1
1:A:11:VAL:O	1:A:57:ASP:OD1	0.43	2.36	7	5
1:A:94:ASN:O	1:A:97:ALA:N	0.43	2.51	10	5
1:A:35:GLU:OE1	1:A:36:ALA:O	0.43	2.37	8	1
1:A:95:ILE:HG22	1:A:95:ILE:O	0.43	2.12	22	1
1:A:31:ASN:ND2	1:A:31:ASN:H	0.43	2.11	31	1
1:A:69:LEU:O	1:A:71:THR:N	0.43	2.51	20	1
1:A:97:ALA:O	1:A:100:GLN:N	0.43	2.51	17	1
1:A:3:ASP:O	1:A:29:GLY:O	0.43	2.36	25	1
1:A:88:ALA:C	1:A:90:ALA:H	0.43	2.17	25	1
1:A:23:ASN:O	1:A:24:LEU:C	0.43	2.56	12	38
1:A:18:ARG:HH22	1:A:22:ARG:NH2	0.43	2.11	42	1
1:A:13:ASP:O	1:A:13:ASP:OD1	0.43	2.37	43	1
1:A:85:MET:SD	1:A:86:VAL:N	0.43	2.92	19	1
1:A:28:LEU:HD21	1:A:113:ALA:HB1	0.43	1.88	44	1
1:A:66:LEU:O	1:A:66:LEU:HD23	0.43	2.14	44	1
1:A:121:ASN:ND2	1:A:122:LYS:H	0.43	2.10	45	1
1:A:38:ASP:OD1	1:A:41:ASP:N	0.43	2.51	27	1
1:A:58:TRP:C	1:A:60:MET:SD	0.43	2.97	46	1
1:A:51:TYR:O	1:A:81:LEU:CD1	0.43	2.66	18	1
1:A:47:GLN:O	1:A:47:GLN:CG	0.43	2.66	40	3
1:A:49:GLY:C	1:A:51:TYR:N	0.43	2.72	26	2
1:A:72:ILE:O	1:A:72:ILE:HG22	0.43	2.14	37	1
1:A:43:LEU:HD23	1:A:43:LEU:O	0.43	2.13	40	1
1:A:74:ALA:O	1:A:75:ASP:OD1	0.43	2.37	43	1
1:A:93:GLU:O	1:A:97:ALA:N	0.43	2.51	43	1
1:A:90:ALA:N	1:A:106:TYR:OH	0.43	2.51	34	1
1:A:22:ARG:CA	1:A:22:ARG:NE	0.43	2.81	46	1
1:A:108:VAL:HG22	1:A:108:VAL:O	0.43	2.13	38	1
1:A:106:TYR:CD1	1:A:106:TYR:O	0.43	2.71	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:117:GLU:O	1:A:117:GLU:OE1	0.43	2.36	9	2
1:A:34:GLU:CG	1:A:51:TYR:OH	0.43	2.66	23	7
1:A:14:PHE:CG	1:A:17:MET:CB	0.43	3.01	42	1
1:A:39:GLY:HA2	1:A:68:LEU:HD13	0.43	1.91	44	1
1:A:37:GLU:O	1:A:38:ASP:OD2	0.43	2.37	14	1
1:A:15:SER:O	1:A:15:SER:OG	0.43	2.37	15	2
1:A:47:GLN:OE1	1:A:47:GLN:O	0.43	2.37	17	1
1:A:17:MET:SD	1:A:57:ASP:OD2	0.43	2.76	21	1
1:A:83:VAL:O	1:A:104:SER:OG	0.43	2.36	46	2
1:A:69:LEU:CD1	1:A:69:LEU:C	0.43	2.86	42	3
1:A:34:GLU:OE1	1:A:51:TYR:OH	0.43	2.36	2	3
1:A:75:ASP:O	1:A:76:GLY:O	0.43	2.37	22	1
1:A:88:ALA:O	1:A:89:GLU:O	0.43	2.37	44	1
1:A:6:LEU:O	1:A:8:PHE:CE1	0.43	2.71	38	2
1:A:43:LEU:C	1:A:43:LEU:CD1	0.43	2.84	41	1
1:A:57:ASP:CG	1:A:58:TRP:H	0.43	2.16	7	4
1:A:37:GLU:OE1	1:A:41:ASP:OD2	0.43	2.36	41	2
1:A:15:SER:C	1:A:16:THR:HG22	0.43	2.34	15	2
1:A:40:VAL:HG23	1:A:64:ASP:OD2	0.43	2.14	3	1
1:A:113:ALA:O	1:A:117:GLU:OE2	0.43	2.36	17	2
1:A:89:GLU:OE1	1:A:89:GLU:CA	0.43	2.67	24	1
1:A:53:PHE:CE2	1:A:120:LEU:HD11	0.43	2.49	12	1
1:A:92:LYS:HA	1:A:95:ILE:HD12	0.43	1.90	32	1
1:A:65:GLY:H	1:A:68:LEU:CD1	0.43	2.25	27	2
1:A:12:ASP:OD2	1:A:57:ASP:OD1	0.43	2.37	38	1
1:A:12:ASP:O	1:A:13:ASP:O	0.43	2.37	10	1
1:A:106:TYR:OH	1:A:108:VAL:CG1	0.43	2.67	24	2
1:A:37:GLU:H	1:A:41:ASP:CB	0.43	2.26	30	1
1:A:107:VAL:CG1	1:A:107:VAL:O	0.43	2.67	38	2
1:A:63:MET:O	1:A:64:ASP:OD1	0.42	2.37	13	2
1:A:124:PHE:O	1:A:128:GLY:N	0.42	2.52	31	1
1:A:89:GLU:O	1:A:90:ALA:O	0.42	2.36	24	5
1:A:96:ILE:HG22	1:A:96:ILE:O	0.42	2.14	45	1
1:A:113:ALA:O	1:A:117:GLU:CB	0.42	2.67	9	5
1:A:117:GLU:OE2	1:A:117:GLU:O	0.42	2.37	42	1
1:A:80:ALA:O	1:A:82:PRO:N	0.42	2.52	43	1
1:A:64:ASP:O	1:A:64:ASP:OD1	0.42	2.37	16	1
1:A:78:MET:C	1:A:80:ALA:H	0.42	2.18	23	7
1:A:66:LEU:O	1:A:70:LYS:N	0.42	2.53	1	1
1:A:34:GLU:CD	1:A:51:TYR:HH	0.42	2.18	43	1
1:A:58:TRP:CH2	1:A:66:LEU:HD12	0.42	2.49	23	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:GLU:OE2	1:A:35:GLU:C	0.42	2.58	5	1
1:A:57:ASP:OD1	1:A:58:TRP:O	0.42	2.37	37	1
1:A:64:ASP:O	1:A:65:GLY:C	0.42	2.57	31	2
1:A:11:VAL:O	1:A:11:VAL:CG1	0.42	2.66	1	1
1:A:34:GLU:OE2	1:A:45:LYS:O	0.42	2.37	14	1
1:A:99:ALA:O	1:A:100:GLN:C	0.42	2.57	25	2
1:A:123:ILE:C	1:A:125:GLU:N	0.42	2.73	7	2
1:A:14:PHE:CE1	1:A:18:ARG:N	0.42	2.86	42	1
1:A:115:THR:O	1:A:118:GLU:N	0.42	2.52	1	2
1:A:8:PHE:HB2	1:A:33:VAL:HG22	0.42	1.91	1	3
1:A:87:THR:HG23	1:A:88:ALA:N	0.42	2.30	24	2
1:A:64:ASP:O	1:A:67:GLU:OE2	0.42	2.37	25	1
1:A:109:LYS:CD	1:A:109:LYS:C	0.42	2.87	32	1
1:A:37:GLU:H	1:A:41:ASP:CG	0.42	2.17	30	1
1:A:117:GLU:O	1:A:118:GLU:C	0.42	2.58	25	7
1:A:12:ASP:OD1	1:A:57:ASP:OD2	0.42	2.37	41	3
1:A:99:ALA:O	1:A:102:GLY:CA	0.42	2.67	8	2
1:A:37:GLU:OE2	1:A:41:ASP:OD2	0.42	2.37	45	1
1:A:38:ASP:OD2	1:A:40:VAL:HG12	0.42	2.15	21	1
1:A:60:MET:C	1:A:62:ASN:N	0.42	2.74	21	1
1:A:64:ASP:C	1:A:66:LEU:H	0.42	2.17	36	3
1:A:54:VAL:CB	1:A:83:VAL:HG22	0.42	2.43	8	2
1:A:111:PHE:CE1	1:A:116:LEU:CD1	0.42	3.03	42	1
1:A:57:ASP:OD2	1:A:58:TRP:N	0.42	2.52	1	1
1:A:47:GLN:O	1:A:48:ALA:C	0.42	2.58	45	3
1:A:96:ILE:HG22	1:A:97:ALA:N	0.42	2.29	19	1
1:A:123:ILE:C	1:A:125:GLU:H	0.42	2.18	32	1
1:A:45:LYS:O	1:A:46:LEU:C	0.42	2.58	26	2
1:A:96:ILE:O	1:A:97:ALA:C	0.42	2.58	29	5
1:A:94:ASN:O	1:A:95:ILE:C	0.42	2.58	34	1
1:A:28:LEU:CD1	1:A:117:GLU:OE2	0.42	2.68	14	1
1:A:58:TRP:O	1:A:59:ASN:OD1	0.41	2.37	10	1
1:A:38:ASP:OD1	1:A:64:ASP:OD2	0.41	2.38	40	1
1:A:61:PRO:O	1:A:62:ASN:C	0.41	2.58	23	3
1:A:72:ILE:O	1:A:75:ASP:OD1	0.41	2.38	31	1
1:A:95:ILE:CG2	1:A:95:ILE:O	0.41	2.68	13	1
1:A:12:ASP:OD1	1:A:18:ARG:NE	0.41	2.53	28	1
1:A:90:ALA:O	1:A:91:LYS:O	0.41	2.38	36	2
1:A:96:ILE:N	1:A:96:ILE:HD13	0.41	2.29	11	1
1:A:79:SER:O	1:A:79:SER:OG	0.41	2.37	17	2
1:A:96:ILE:CD1	1:A:96:ILE:N	0.41	2.83	27	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:VAL:CG1	1:A:83:VAL:O	0.41	2.62	26	1
1:A:60:MET:C	1:A:62:ASN:H	0.41	2.18	21	1
1:A:69:LEU:CD1	1:A:83:VAL:HG21	0.41	2.45	1	1
1:A:118:GLU:C	1:A:121:ASN:ND2	0.41	2.73	45	1
1:A:62:ASN:O	1:A:63:MET:O	0.41	2.38	24	1
1:A:17:MET:SD	1:A:17:MET:C	0.41	2.98	40	1
1:A:46:LEU:HD23	1:A:46:LEU:O	0.41	2.16	31	1
1:A:86:VAL:O	1:A:86:VAL:CG2	0.41	2.67	2	1
1:A:65:GLY:O	1:A:69:LEU:N	0.41	2.54	35	1
1:A:125:GLU:CA	1:A:125:GLU:OE1	0.41	2.67	25	1
1:A:59:ASN:N	1:A:59:ASN:HD22	0.41	2.13	16	1
1:A:43:LEU:CD2	1:A:71:THR:HG21	0.41	2.45	18	1
1:A:60:MET:CE	1:A:65:GLY:CA	0.41	2.98	26	1
1:A:94:ASN:O	1:A:97:ALA:HB3	0.41	2.16	8	2
1:A:57:ASP:O	1:A:57:ASP:OD1	0.41	2.38	40	2
1:A:69:LEU:HD22	1:A:102:GLY:H	0.41	1.75	22	1
1:A:93:GLU:OE1	1:A:94:ASN:N	0.41	2.54	44	1
1:A:95:ILE:C	1:A:97:ALA:N	0.41	2.74	25	1
1:A:55:ILE:HG23	1:A:86:VAL:HG21	0.41	1.93	7	1
1:A:16:THR:O	1:A:17:MET:C	0.41	2.58	36	1
1:A:3:ASP:O	1:A:30:PHE:CZ	0.41	2.73	40	1
1:A:2:ALA:O	1:A:3:ASP:C	0.41	2.59	3	3
1:A:13:ASP:OD1	1:A:37:GLU:O	0.41	2.39	1	1
1:A:46:LEU:O	1:A:48:ALA:N	0.41	2.53	20	2
1:A:94:ASN:O	1:A:94:ASN:ND2	0.41	2.54	14	1
1:A:75:ASP:CG	1:A:76:GLY:H	0.41	2.19	24	1
1:A:34:GLU:OE1	1:A:51:TYR:CE1	0.41	2.73	38	1
1:A:106:TYR:OH	1:A:108:VAL:HG22	0.41	2.15	12	1
1:A:91:LYS:O	1:A:92:LYS:C	0.41	2.58	42	1
1:A:13:ASP:OD1	1:A:13:ASP:O	0.41	2.37	3	1
1:A:91:LYS:CB	1:A:94:ASN:OD1	0.41	2.68	25	2
1:A:120:LEU:O	1:A:121:ASN:C	0.41	2.58	2	1
1:A:27:GLU:OE2	1:A:27:GLU:O	0.41	2.38	17	1
1:A:40:VAL:CG2	1:A:63:MET:SD	0.41	3.09	8	1
1:A:7:LYS:HZ3	1:A:32:ASN:CG	0.41	2.17	4	1
1:A:43:LEU:CD2	1:A:47:GLN:NE2	0.41	2.83	31	1
1:A:54:VAL:HG12	1:A:55:ILE:N	0.41	2.31	14	1
1:A:26:LYS:NZ	1:A:26:LYS:CB	0.41	2.83	10	1
1:A:53:PHE:CE2	1:A:120:LEU:HD21	0.41	2.51	9	1
1:A:11:VAL:O	1:A:12:ASP:OD1	0.41	2.38	26	1
1:A:83:VAL:C	1:A:104:SER:OG	0.41	2.60	26	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:59:ASN:OD1	1:A:59:ASN:O	0.41	2.39	6	1
1:A:18:ARG:HH11	1:A:35:GLU:CD	0.41	2.19	39	1
1:A:75:ASP:O	1:A:79:SER:CA	0.41	2.68	34	1
1:A:96:ILE:O	1:A:100:GLN:OE1	0.41	2.39	29	1
1:A:97:ALA:O	1:A:98:ALA:C	0.41	2.59	17	1
1:A:57:ASP:OD2	1:A:59:ASN:ND2	0.41	2.54	27	1
1:A:14:PHE:CD2	1:A:17:MET:SD	0.41	3.14	30	1
1:A:93:GLU:O	1:A:94:ASN:C	0.41	2.59	25	1
1:A:95:ILE:C	1:A:97:ALA:H	0.41	2.20	25	1
1:A:10:VAL:C	1:A:18:ARG:NH2	0.41	2.74	41	1
1:A:93:GLU:CD	1:A:94:ASN:N	0.41	2.74	4	1
1:A:4:LYS:O	1:A:5:GLU:OE1	0.41	2.39	23	1
1:A:69:LEU:C	1:A:69:LEU:CD1	0.41	2.88	31	2
1:A:64:ASP:CG	1:A:65:GLY:H	0.41	2.20	17	1
1:A:67:GLU:CG	1:A:68:LEU:N	0.41	2.84	25	1
1:A:88:ALA:CB	1:A:109:LYS:NZ	0.41	2.84	25	1
1:A:28:LEU:HD23	1:A:30:PHE:CE2	0.40	2.51	26	1
1:A:20:ILE:HG22	1:A:21:VAL:N	0.40	2.31	8	3
1:A:59:ASN:OD1	1:A:59:ASN:C	0.40	2.59	6	1
1:A:11:VAL:C	1:A:18:ARG:HH21	0.40	2.20	44	1
1:A:66:LEU:C	1:A:68:LEU:H	0.40	2.18	44	1
1:A:85:MET:SD	1:A:98:ALA:HB2	0.40	2.56	45	1
1:A:66:LEU:HD13	1:A:97:ALA:O	0.40	2.16	25	1
1:A:112:THR:C	1:A:114:ALA:H	0.40	2.20	33	1
1:A:35:GLU:OE2	1:A:36:ALA:O	0.40	2.39	9	1
1:A:70:LYS:O	1:A:73:ARG:N	0.40	2.54	16	2
1:A:43:LEU:CD2	1:A:43:LEU:C	0.40	2.89	40	1
1:A:46:LEU:CD2	1:A:51:TYR:H	0.40	2.29	1	1
1:A:127:LEU:O	1:A:128:GLY:C	0.40	2.59	41	2
1:A:103:ALA:C	1:A:105:GLY:N	0.40	2.74	23	1
1:A:9:LEU:CD1	1:A:9:LEU:C	0.40	2.84	14	1
1:A:121:ASN:O	1:A:125:GLU:N	0.40	2.54	27	1
1:A:85:MET:N	1:A:105:GLY:O	0.40	2.54	41	1
1:A:84:LEU:C	1:A:84:LEU:CD1	0.40	2.90	7	1
1:A:62:ASN:O	1:A:63:MET:C	0.40	2.60	9	1
1:A:11:VAL:O	1:A:12:ASP:CB	0.40	2.68	4	1
1:A:57:ASP:O	1:A:58:TRP:C	0.40	2.60	23	1
1:A:55:ILE:CG2	1:A:86:VAL:HG21	0.40	2.46	45	1
1:A:61:PRO:C	1:A:63:MET:N	0.40	2.74	25	1
1:A:71:THR:O	1:A:74:ALA:HB3	0.40	2.17	15	1
1:A:31:ASN:C	1:A:31:ASN:ND2	0.40	2.75	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:117:GLU:OE1	1:A:117:GLU:C	0.40	2.60	6	1
1:A:26:LYS:CB	1:A:26:LYS:NZ	0.40	2.84	23	1
1:A:86:VAL:HG12	1:A:107:VAL:HG12	0.40	1.93	23	1
1:A:75:ASP:CB	1:A:79:SER:O	0.40	2.70	44	1
1:A:39:GLY:CA	1:A:64:ASP:OD2	0.40	2.70	20	1
1:A:96:ILE:O	1:A:96:ILE:CG2	0.40	2.70	32	1
1:A:62:ASN:CG	1:A:63:MET:H	0.40	2.20	42	1
1:A:94:ASN:O	1:A:96:ILE:N	0.40	2.54	22	1
1:A:95:ILE:O	1:A:97:ALA:N	0.40	2.54	31	1
1:A:21:VAL:O	1:A:22:ARG:C	0.40	2.59	44	1
1:A:89:GLU:O	1:A:90:ALA:C	0.40	2.59	32	1
1:A:65:GLY:O	1:A:66:LEU:C	0.40	2.60	24	1
1:A:120:LEU:HD13	1:A:124:PHE:CE1	0.40	2.51	35	1
1:A:38:ASP:OD2	1:A:61:PRO:O	0.40	2.38	46	1
1:A:80:ALA:C	1:A:81:LEU:HD12	0.40	2.37	41	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	126/128 (98%)	86±5 (69±4%)	29±4 (23±3%)	11±3 (9±3%)	2	13
All	All	5796/5888 (98%)	3975 (69%)	1321 (23%)	500 (9%)	2	13

All 52 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	29	GLY	32
1	A	128	GLY	28
1	A	103	ALA	27
1	A	58	TRP	24
1	A	104	SER	23
1	A	61	PRO	20
1	A	60	MET	18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	90	ALA	18
1	A	92	LYS	17
1	A	3	ASP	17
1	A	63	MET	17
1	A	57	ASP	15
1	A	75	ASP	15
1	A	59	ASN	14
1	A	62	ASN	14
1	A	16	THR	14
1	A	81	LEU	12
1	A	51	TYR	12
1	A	91	LYS	11
1	A	108	VAL	10
1	A	48	ALA	10
1	A	14	PHE	10
1	A	64	ASP	9
1	A	93	GLU	8
1	A	89	GLU	7
1	A	85	MET	6
1	A	76	GLY	6
1	A	77	ALA	6
1	A	38	ASP	6
1	A	15	SER	6
1	A	79	SER	6
1	A	50	GLY	6
1	A	65	GLY	5
1	A	13	ASP	5
1	A	49	GLY	5
1	A	101	ALA	4
1	A	17	MET	4
1	A	4	LYS	4
1	A	32	ASN	4
1	A	102	GLY	4
1	A	18	ARG	3
1	A	46	LEU	3
1	A	11	VAL	3
1	A	5	GLU	2
1	A	82	PRO	2
1	A	113	ALA	2
1	A	19	ARG	1
1	A	88	ALA	1
1	A	66	LEU	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	120	LEU	1
1	A	12	ASP	1
1	A	118	GLU	1

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	102/102 (100%)	71±4 (70±4%)	31±4 (30±4%)	2	17
All	All	4692/4692 (100%)	3284 (70%)	1408 (30%)	2	17

All 86 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	21	VAL	46
1	A	112	THR	46
1	A	106	TYR	45
1	A	46	LEU	40
1	A	53	PHE	36
1	A	14	PHE	35
1	A	24	LEU	32
1	A	10	VAL	31
1	A	3	ASP	30
1	A	60	MET	30
1	A	18	ARG	30
1	A	129	MET	29
1	A	38	ASP	29
1	A	64	ASP	29
1	A	69	LEU	29
1	A	109	LYS	27
1	A	16	THR	26
1	A	23	ASN	26
1	A	127	LEU	26
1	A	62	ASN	24
1	A	115	THR	24
1	A	22	ARG	23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	32	ASN	23
1	A	12	ASP	22
1	A	121	ASN	22
1	A	108	VAL	21
1	A	15	SER	21
1	A	31	ASN	21
1	A	59	ASN	20
1	A	66	LEU	19
1	A	94	ASN	19
1	A	116	LEU	19
1	A	75	ASP	18
1	A	73	ARG	18
1	A	13	ASP	18
1	A	81	LEU	17
1	A	78	MET	17
1	A	86	VAL	16
1	A	104	SER	16
1	A	84	LEU	16
1	A	19	ARG	16
1	A	100	GLN	16
1	A	33	VAL	15
1	A	68	LEU	14
1	A	91	LYS	14
1	A	120	LEU	13
1	A	85	MET	13
1	A	4	LYS	13
1	A	93	GLU	12
1	A	119	LYS	12
1	A	27	GLU	11
1	A	43	LEU	11
1	A	63	MET	11
1	A	117	GLU	10
1	A	45	LYS	10
1	A	79	SER	10
1	A	71	THR	9
1	A	47	GLN	9
1	A	26	LYS	9
1	A	92	LYS	9
1	A	89	GLU	9
1	A	17	MET	8
1	A	122	LYS	8
1	A	67	GLU	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	57	ASP	8
1	A	87	THR	8
1	A	28	LEU	7
1	A	5	GLU	7
1	A	37	GLU	6
1	A	126	LYS	6
1	A	70	LYS	6
1	A	56	SER	6
1	A	125	GLU	5
1	A	35	GLU	5
1	A	55	ILE	5
1	A	7	LYS	5
1	A	40	VAL	4
1	A	83	VAL	4
1	A	111	PHE	4
1	A	118	GLU	4
1	A	9	LEU	4
1	A	58	TRP	2
1	A	95	ILE	2
1	A	34	GLU	2
1	A	20	ILE	1
1	A	96	ILE	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided