Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

May 28, 2020 – 08:43 pm BST

PDB ID	:	1QO6
Title	:	Solution structure of a pair of modules from the gelatin-binding domain of fibronectin
Authors	:	Bocquier, A.A.; Potts, J.R.; Pickford, A.R.; Campbell, I.D.
Deposited on	:	1999-11-04

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 (i) symbol.

The following versions of software and data (see references (1)) were used in the production of this report:

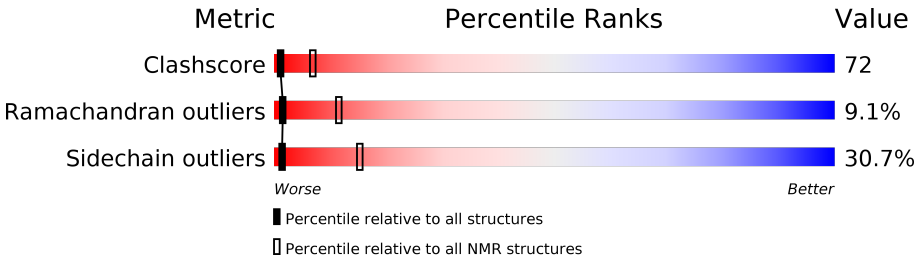
Cyrange	:	Kirchner and Güntert (2011)
NmrClust	:	Kelley et al. (1996)
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
ShiftChecker	:	2.11
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.11

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	158937	12864
Ramachandran outliers	154571	11451
Sidechain outliers	154315	11428

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 <=5%

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	101	13% 54% 13% • 19%

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 55 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:3-A:20, A:26-A:39 (32)	0.37	14
2	A:45-A:74, A:79-A:98 (50)	0.33	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 9 clusters. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	2, 4, 13, 14, 16, 26, 35, 41, 44, 48, 49, 52, 53
2	1, 3, 5, 8, 9, 12, 20, 23, 28, 46, 51
3	6, 7, 10, 11, 22, 24, 25, 27, 32, 37
4	30, 31, 38, 42, 47, 50, 54
5	15, 21, 29, 34, 39, 45
6	36, 55
7	19, 33
8	17, 43
9	18, 40

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1481 atoms, of which 702 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called FIBRONECTIN.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	101	1481	476	702	132	161	10	0

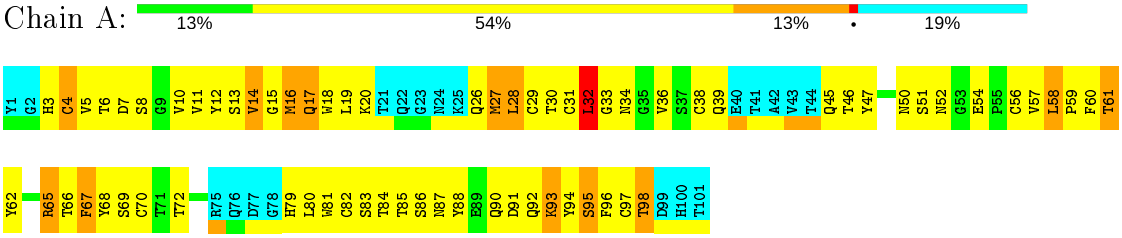
4 Residue-property plots

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: FIBRONECTIN

Chain A:



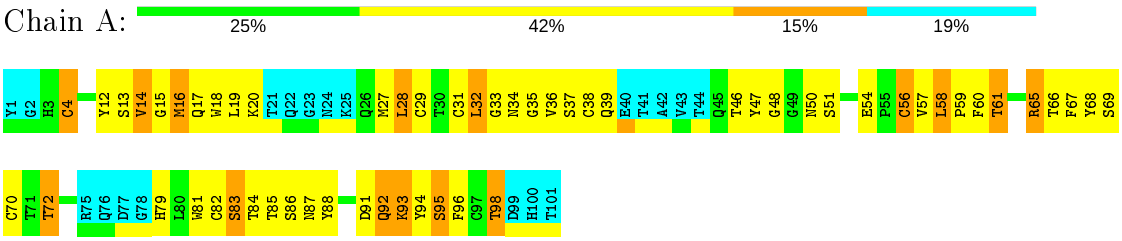
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

• Molecule 1: FIBRONECTIN

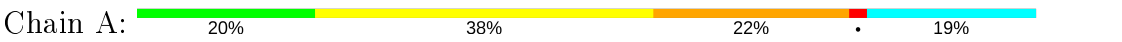
Chain A:

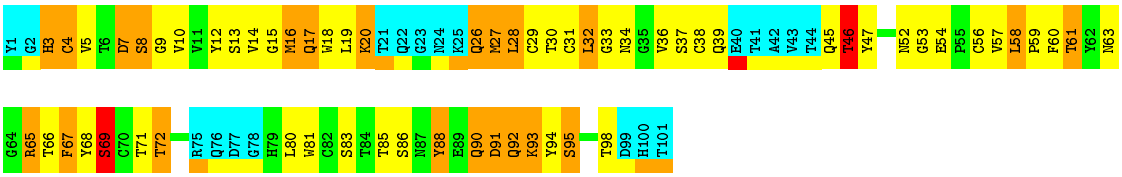


4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: FIBRONECTIN

Chain A:

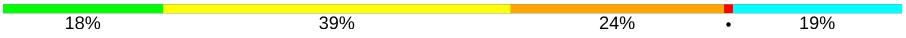


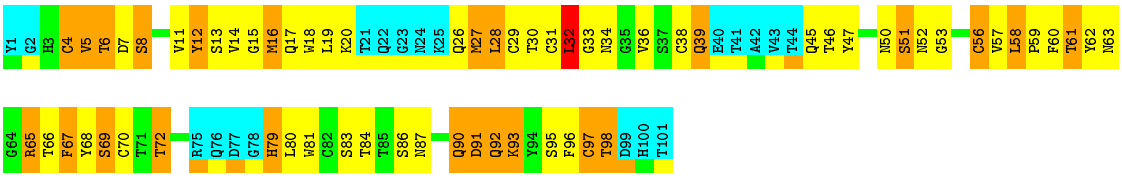


4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: FIBRONECTIN

Chain A:

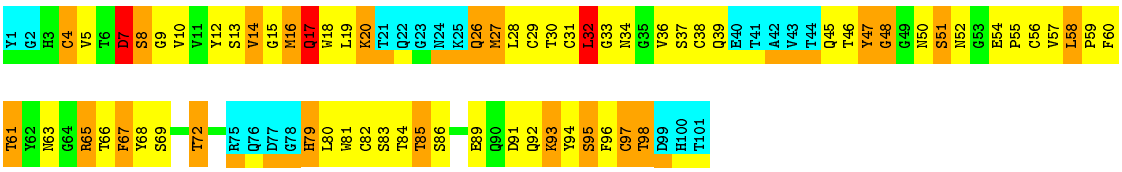




4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: FIBRONECTIN

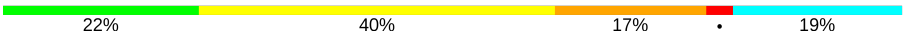
Chain A:

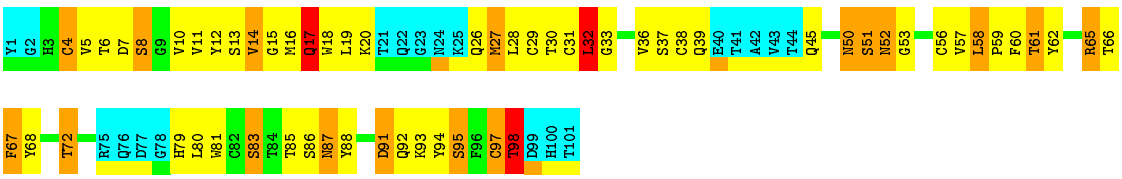


4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: FIBRONECTIN

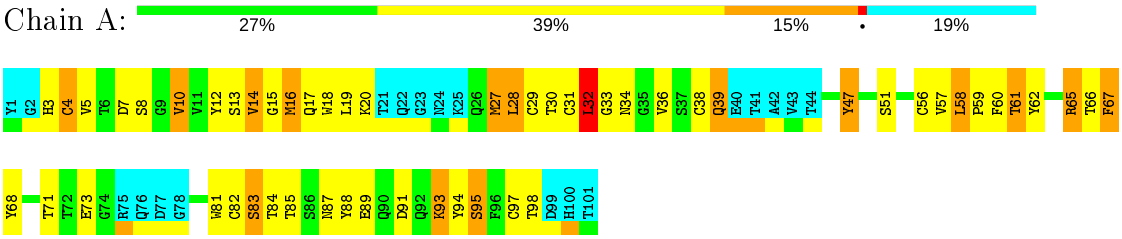
Chain A:





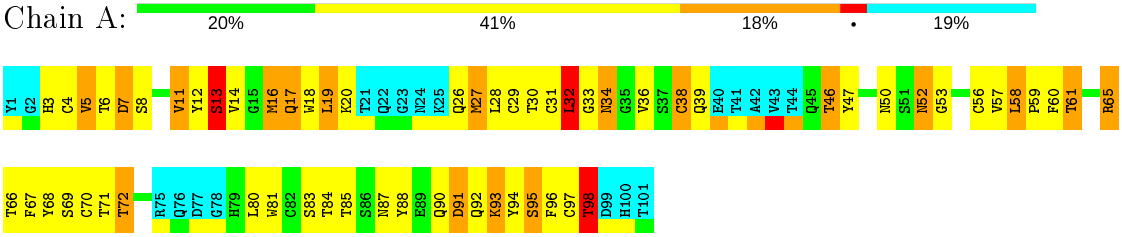
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: FIBRONECTIN



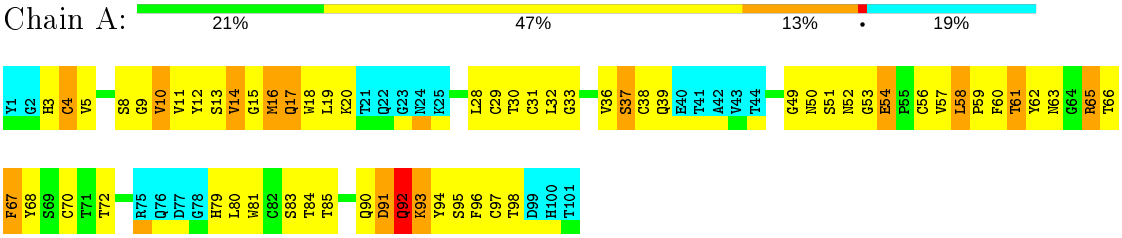
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: FIBRONECTIN



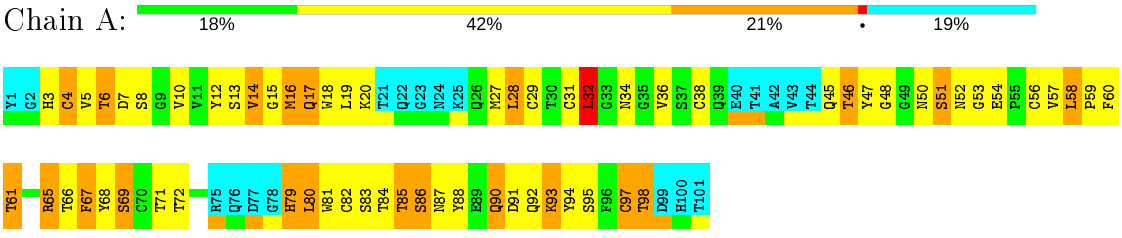
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: FIBRONECTIN



4.2.9 Score per residue for model 9

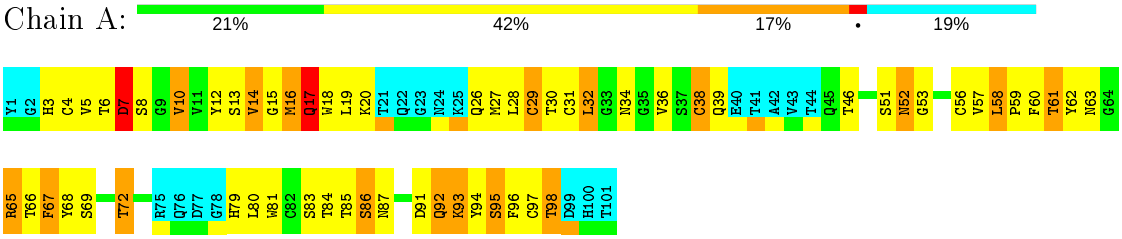
- Molecule 1: FIBRONECTIN



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: FIBRONECTIN

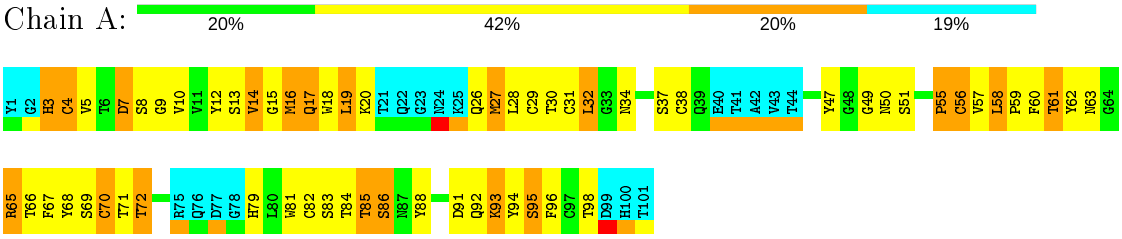
Chain A:



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: FIBRONECTIN

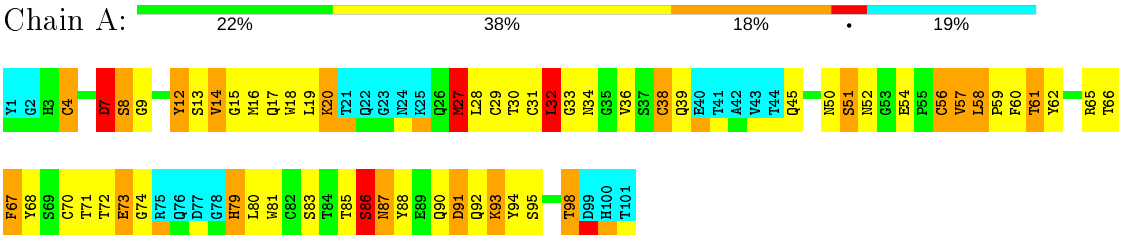
Chain A:



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: FIBRONECTIN

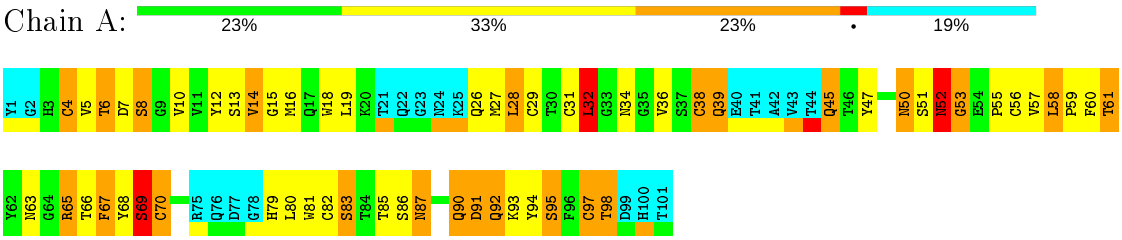
Chain A:



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: FIBRONECTIN

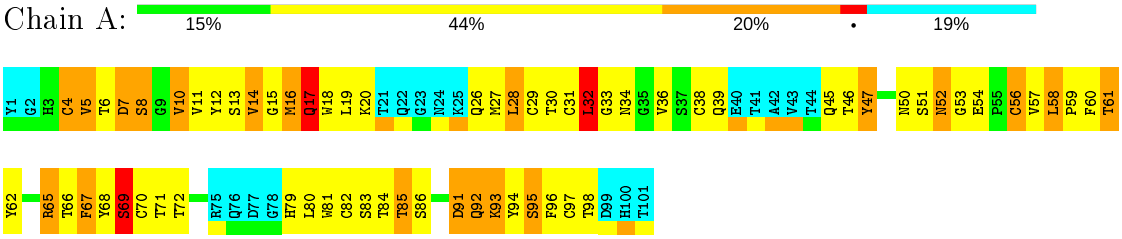
Chain A:



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: FIBRONECTIN

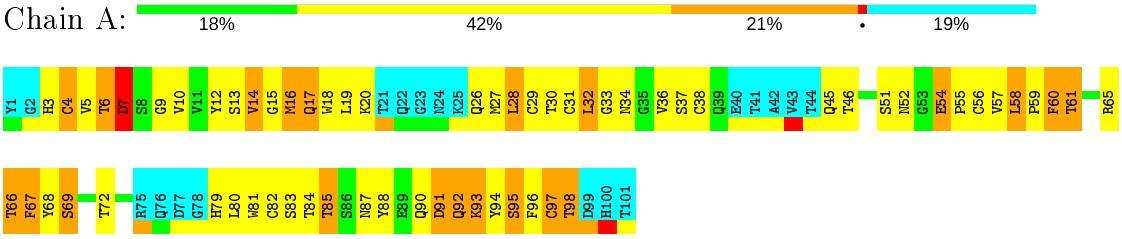
Chain A:



4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: FIBRONECTIN

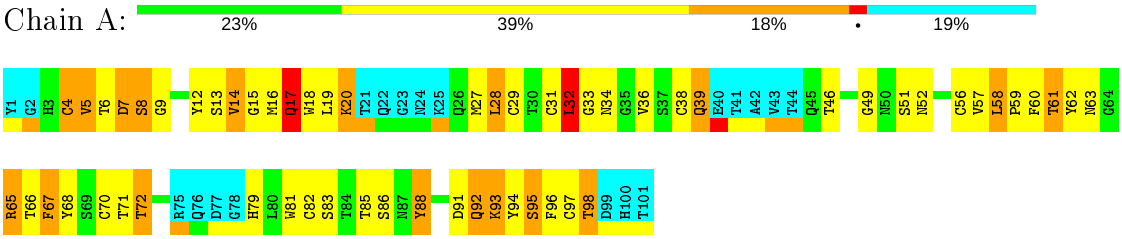
Chain A:



4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: FIBRONECTIN

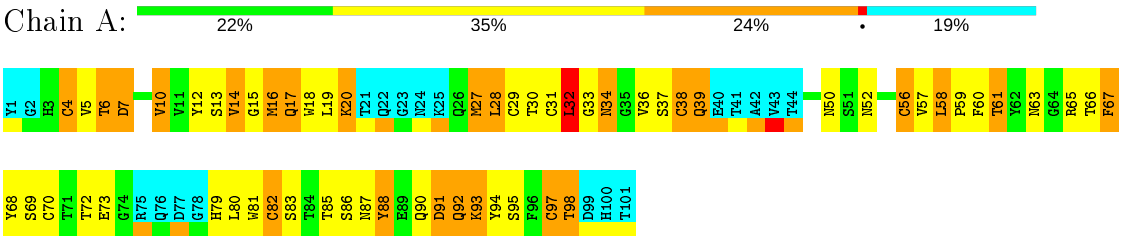
Chain A:



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: FIBRONECTIN

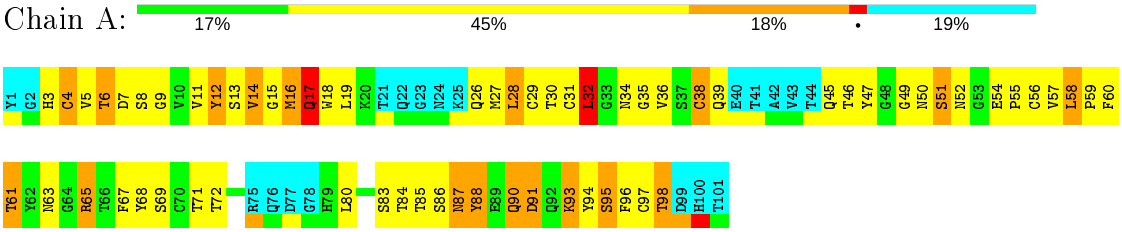
Chain A:



4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: FIBRONECTIN

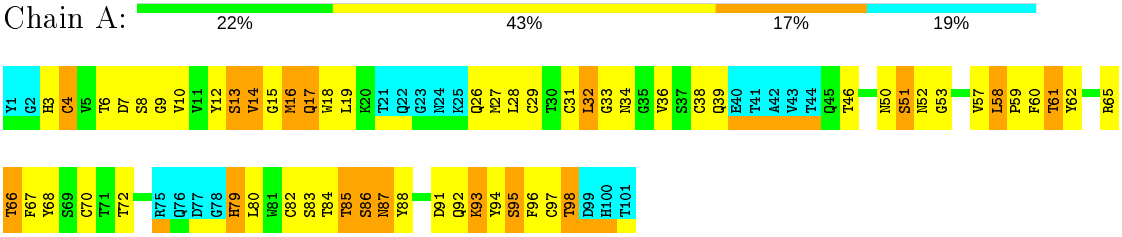
Chain A:



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: FIBRONECTIN

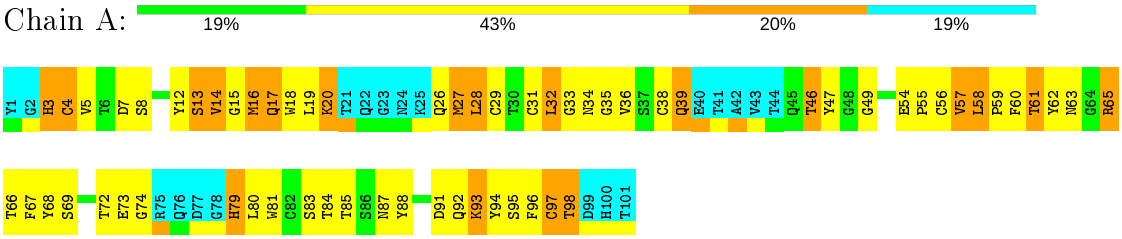
Chain A:



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: FIBRONECTIN

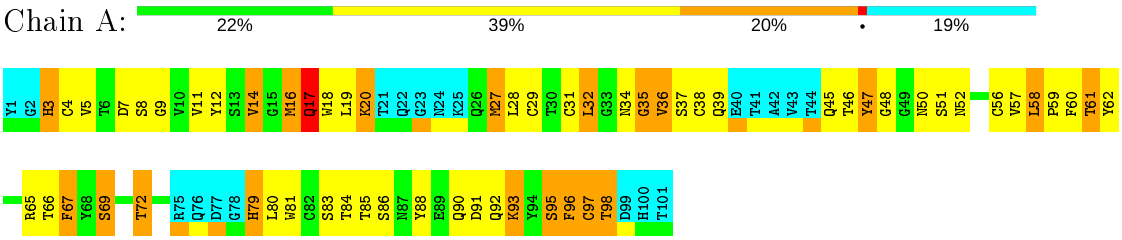
Chain A:



4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: FIBRONECTIN

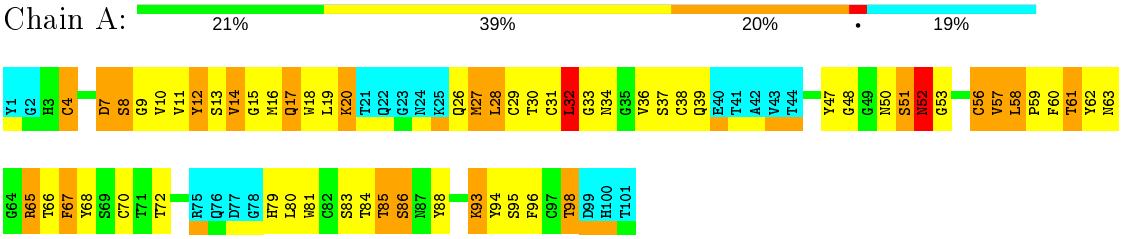
Chain A:



4.2.22 Score per residue for model 22

• Molecule 1: FIBRONECTIN

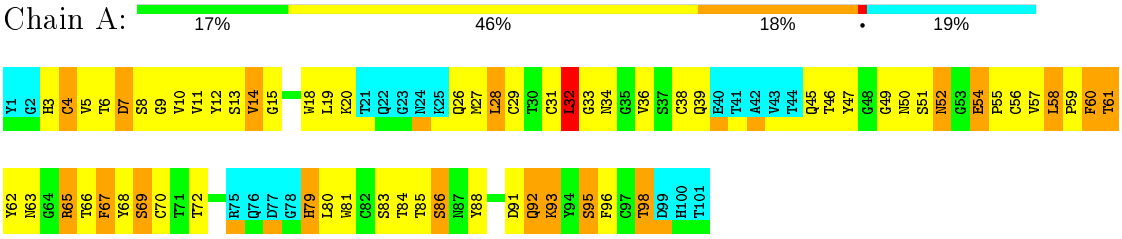
Chain A:



4.2.23 Score per residue for model 23

• Molecule 1: FIBRONECTIN

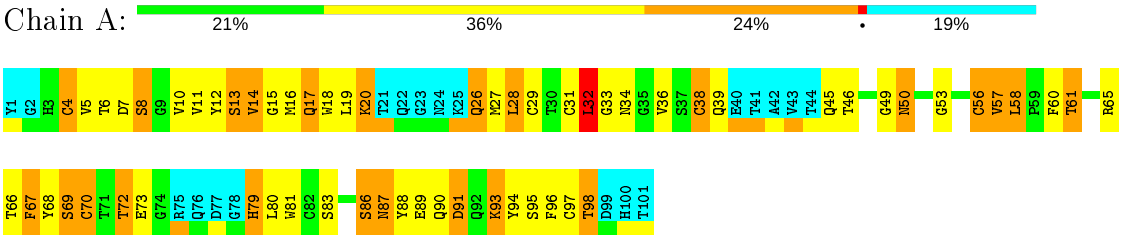
Chain A:



4.2.24 Score per residue for model 24

• Molecule 1: FIBRONECTIN

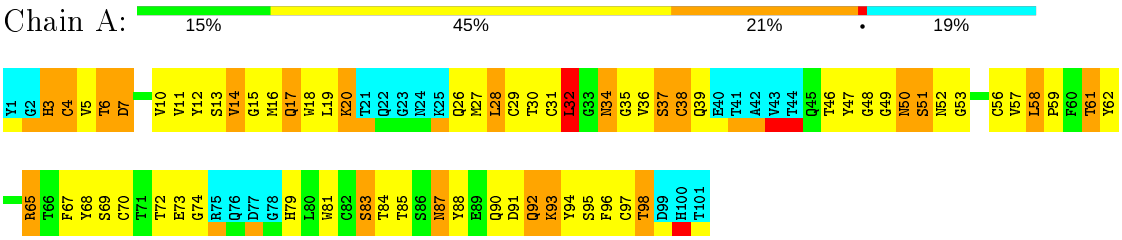
Chain A:



4.2.25 Score per residue for model 25

• Molecule 1: FIBRONECTIN

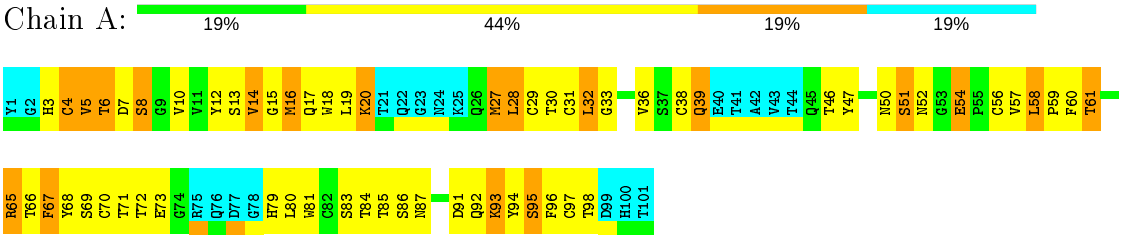
Chain A:



4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: FIBRONECTIN

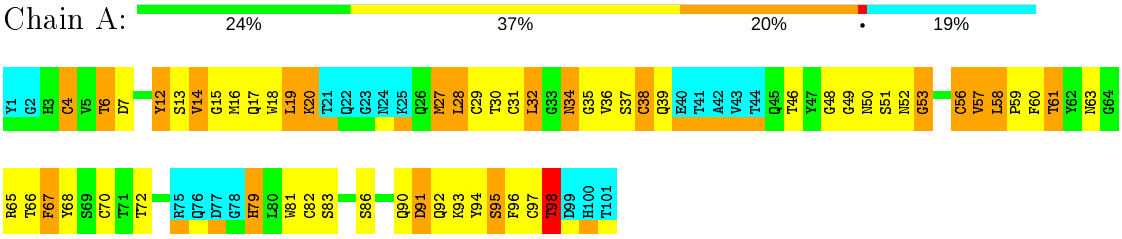
Chain A:



4.2.27 Score per residue for model 27

- Molecule 1: FIBRONECTIN

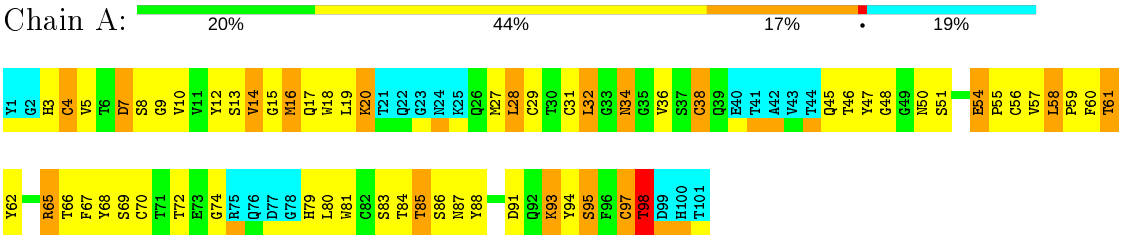
Chain A:



4.2.28 Score per residue for model 28

- Molecule 1: FIBRONECTIN

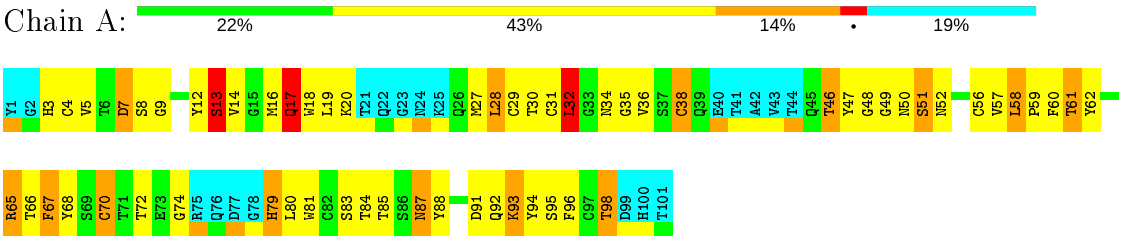
Chain A:



4.2.29 Score per residue for model 29

- Molecule 1: FIBRONECTIN

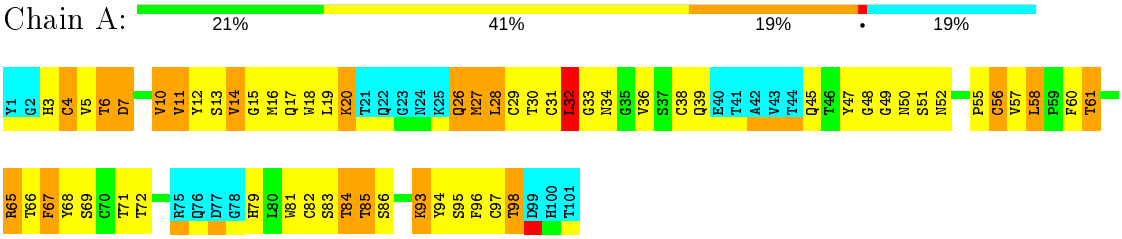
Chain A:



4.2.30 Score per residue for model 30

- Molecule 1: FIBRONECTIN

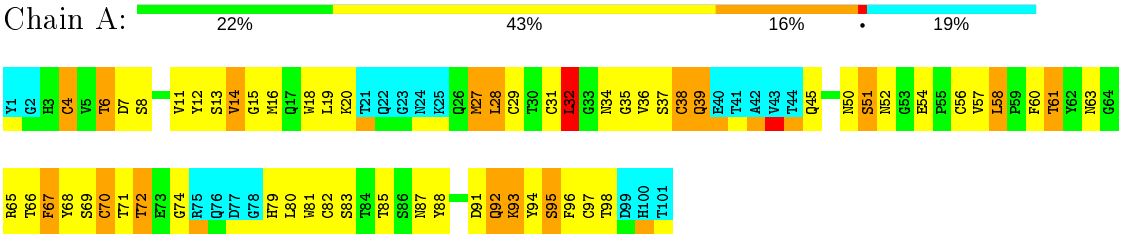
Chain A:



4.2.31 Score per residue for model 31

- Molecule 1: FIBRONECTIN

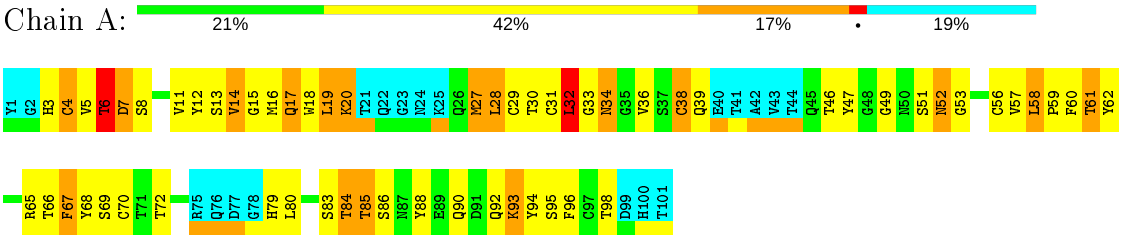
Chain A:



4.2.32 Score per residue for model 32

- Molecule 1: FIBRONECTIN

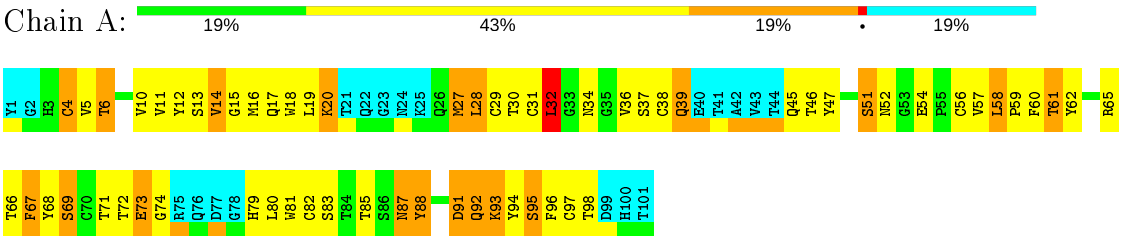
Chain A:



4.2.33 Score per residue for model 33

- Molecule 1: FIBRONECTIN

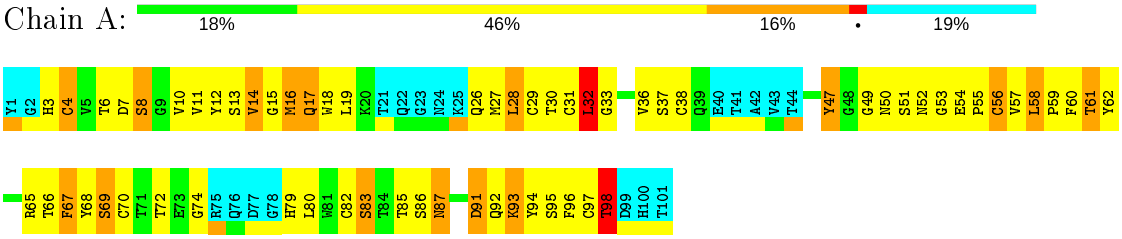
Chain A:



4.2.34 Score per residue for model 34

- Molecule 1: FIBRONECTIN

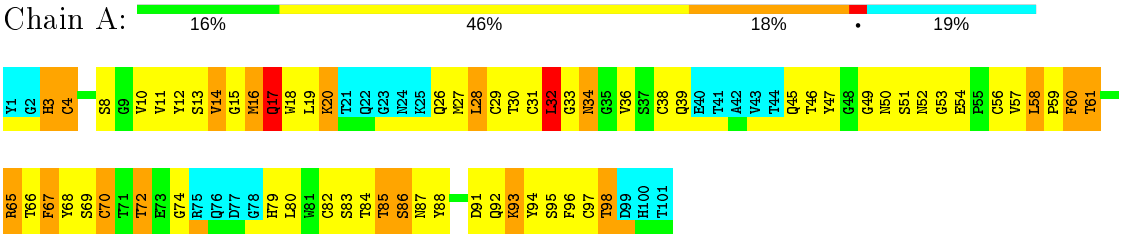
Chain A:



4.2.35 Score per residue for model 35

- Molecule 1: FIBRONECTIN

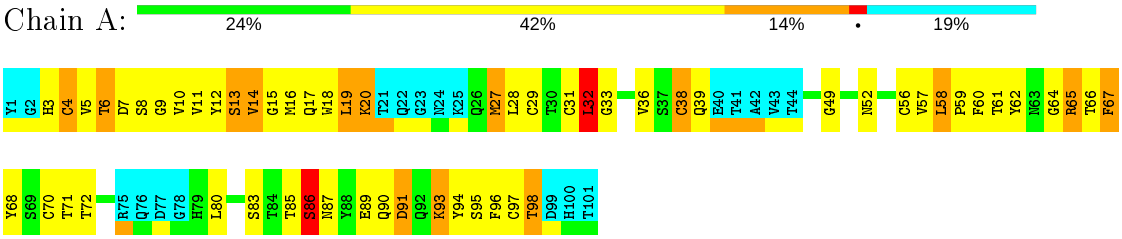
Chain A:



4.2.36 Score per residue for model 36

- Molecule 1: FIBRONECTIN

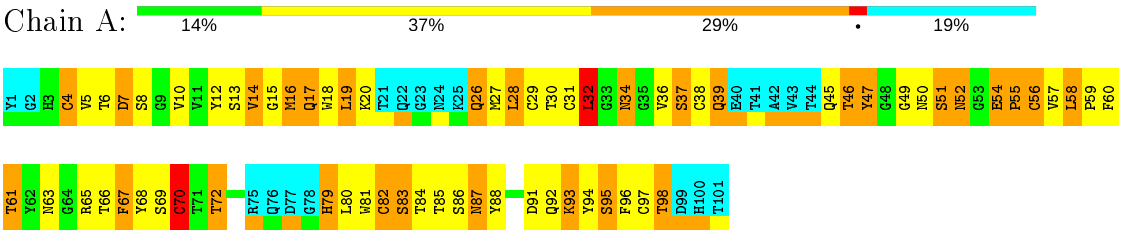
Chain A:



4.2.37 Score per residue for model 37

- Molecule 1: FIBRONECTIN

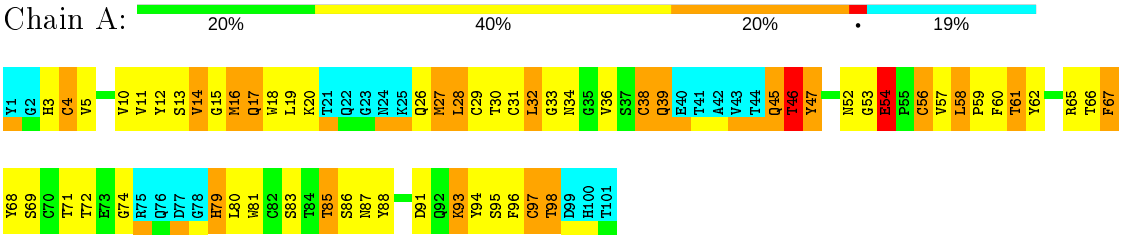
Chain A:



4.2.38 Score per residue for model 38

- Molecule 1: FIBRONECTIN

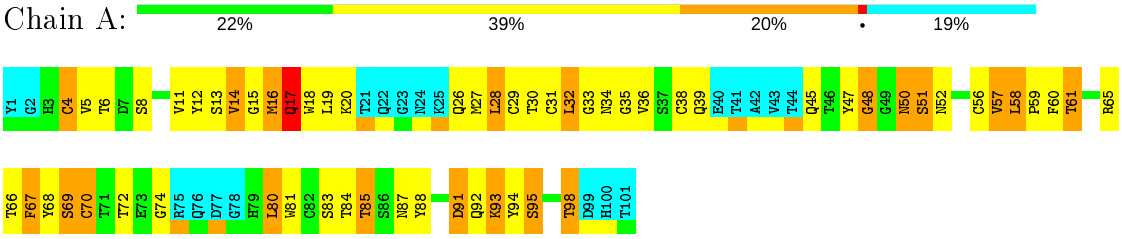
Chain A:



4.2.39 Score per residue for model 39

- Molecule 1: FIBRONECTIN

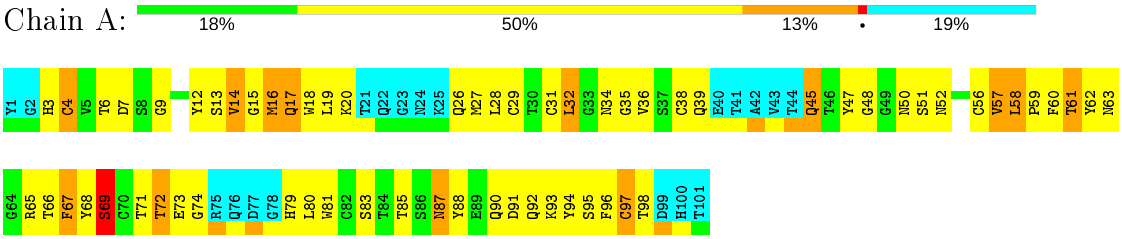
Chain A:



4.2.40 Score per residue for model 40

- Molecule 1: FIBRONECTIN

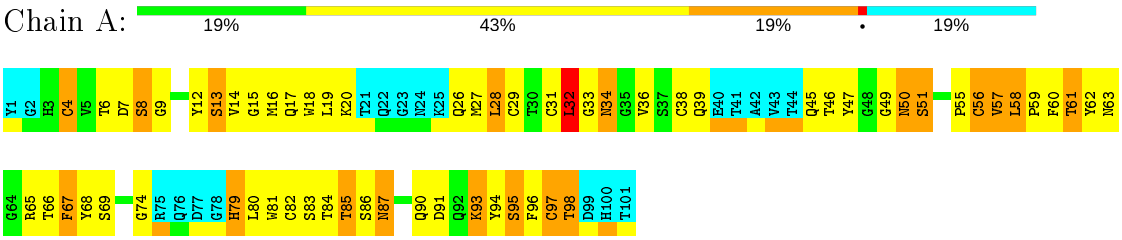
Chain A:



4.2.41 Score per residue for model 41

- Molecule 1: FIBRONECTIN

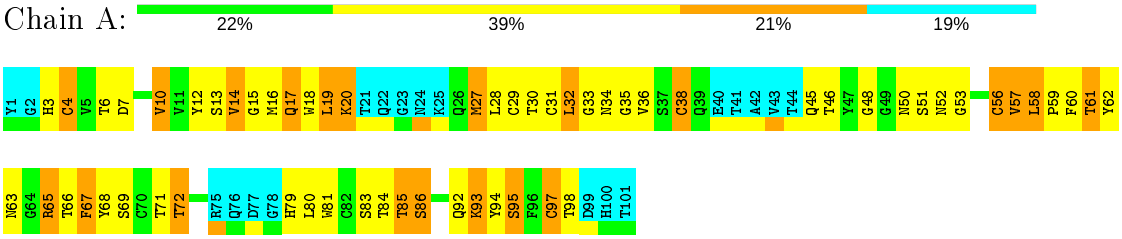
Chain A:



4.2.42 Score per residue for model 42

- Molecule 1: FIBRONECTIN

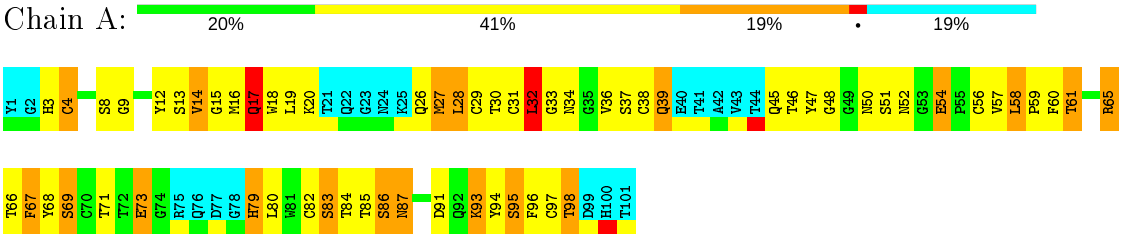
Chain A:



4.2.43 Score per residue for model 43

- Molecule 1: FIBRONECTIN

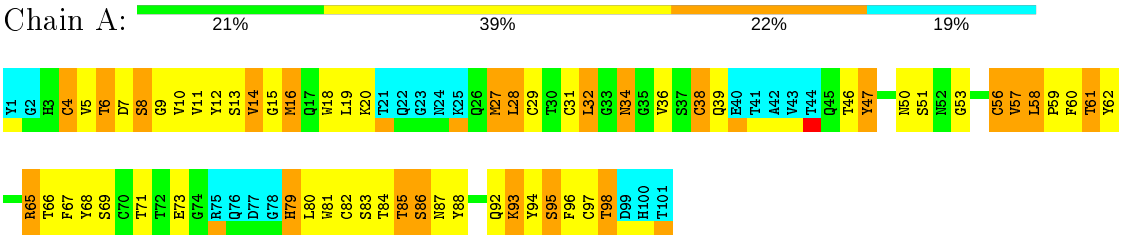
Chain A:



4.2.44 Score per residue for model 44

- Molecule 1: FIBRONECTIN

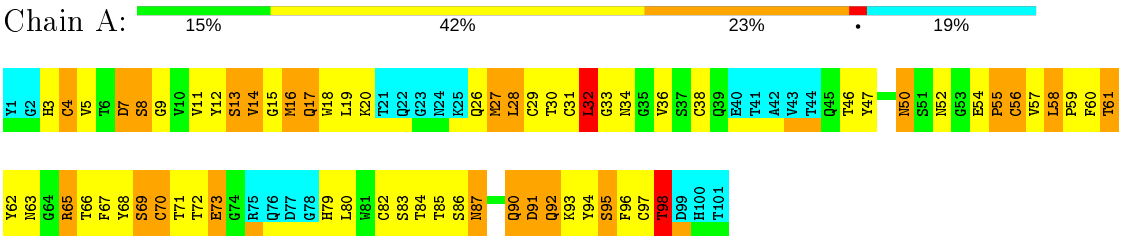
Chain A:



4.2.45 Score per residue for model 45

- Molecule 1: FIBRONECTIN

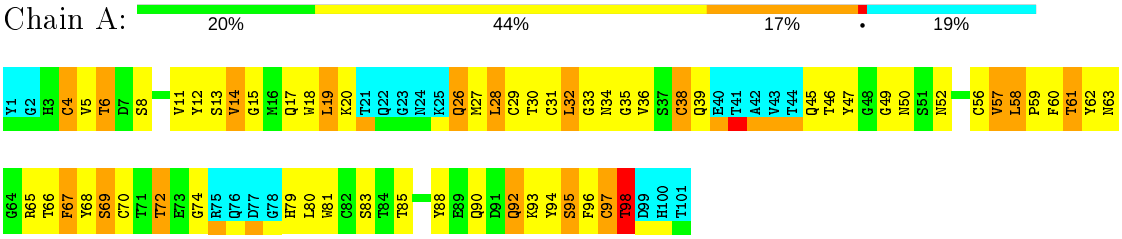
Chain A:



4.2.46 Score per residue for model 46

- Molecule 1: FIBRONECTIN

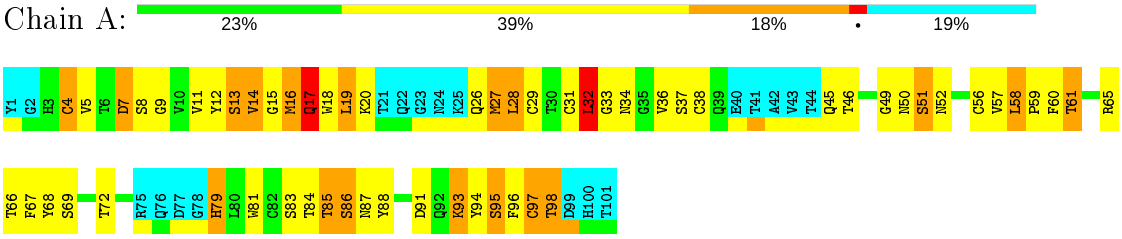
Chain A:



4.2.47 Score per residue for model 47

- Molecule 1: FIBRONECTIN

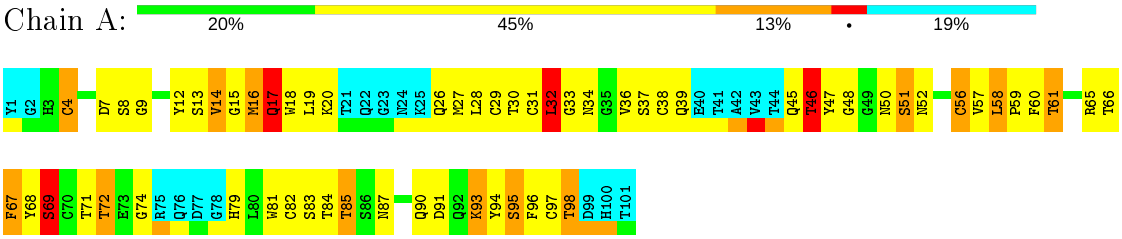
Chain A:



4.2.48 Score per residue for model 48

- Molecule 1: FIBRONECTIN

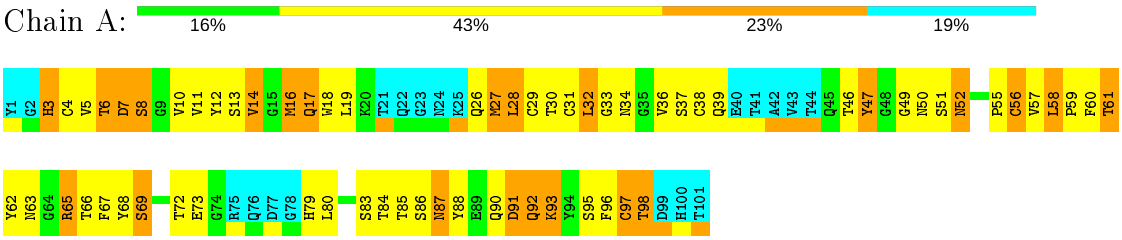
Chain A:



4.2.49 Score per residue for model 49

- Molecule 1: FIBRONECTIN

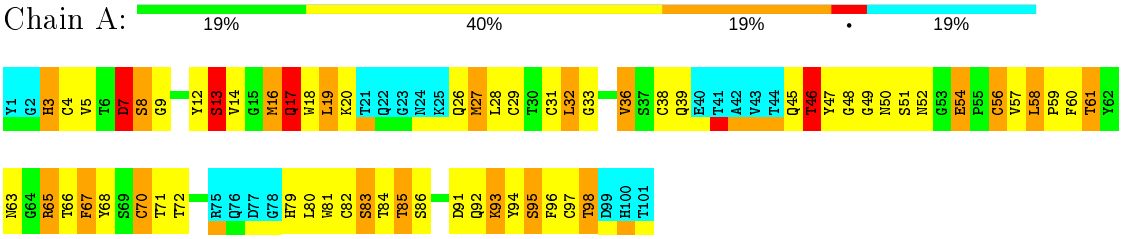
Chain A:



4.2.50 Score per residue for model 50

- Molecule 1: FIBRONECTIN

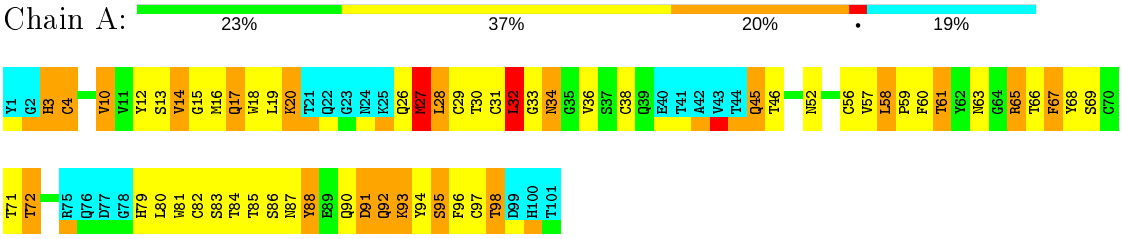
Chain A:



4.2.51 Score per residue for model 51

- Molecule 1: FIBRONECTIN

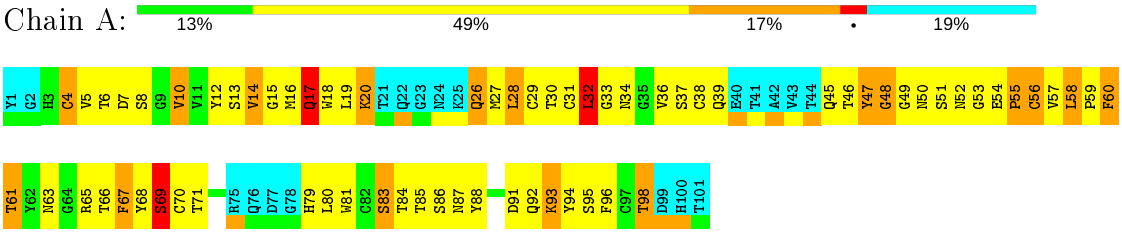
Chain A:



4.2.52 Score per residue for model 52

- Molecule 1: FIBRONECTIN

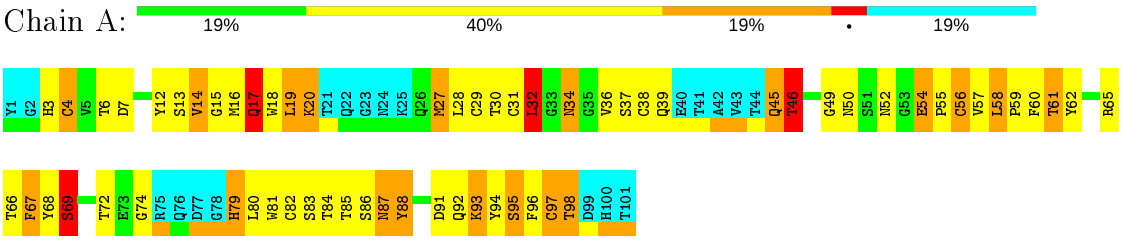
Chain A:



4.2.53 Score per residue for model 53

- Molecule 1: FIBRONECTIN

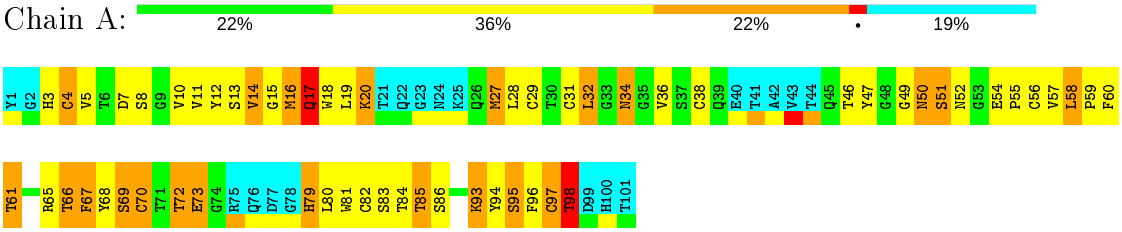
Chain A:



4.2.54 Score per residue for model 54

- Molecule 1: FIBRONECTIN

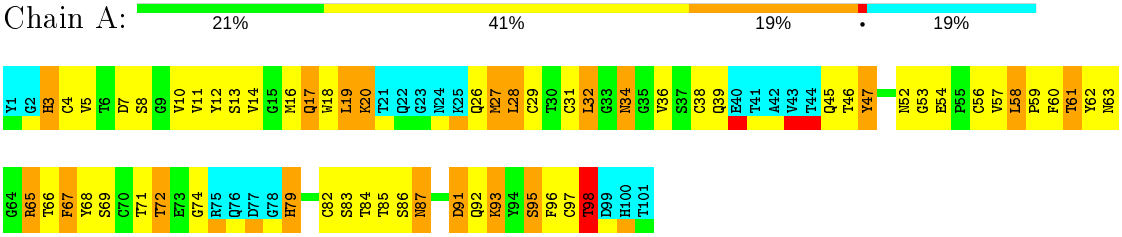
Chain A:



4.2.55 Score per residue for model 55

- Molecule 1: FIBRONECTIN

Chain A:



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 100 calculated structures, 55 were deposited, based on the following criterion: *LOW ENERGY AND AGREEMENT WITH EXPERIMENTAL RESTRAINTS*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	3.851
XPLOR	structure solution	3.851

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

There are no covalent bond-length or bond-angle outliers.

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	633	570	568	87±9
All	All	34815	31350	31240	4779

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 72.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:LEU:HD13	1:A:68:TYR:CD2	1.04	1.88	14	25
1:A:19:LEU:HD21	1:A:68:TYR:CE2	1.02	1.88	26	7
1:A:28:LEU:HD21	1:A:68:TYR:CE1	1.01	1.91	43	1
1:A:19:LEU:HD21	1:A:68:TYR:CZ	0.98	1.93	36	7
1:A:14:VAL:HG23	1:A:32:LEU:O	0.97	1.60	34	24
1:A:19:LEU:HD12	1:A:28:LEU:CD2	0.95	1.91	53	2
1:A:46:THR:HG22	1:A:96:PHE:O	0.95	1.60	52	24
1:A:57:VAL:HG11	1:A:85:THR:C	0.93	1.84	15	49
1:A:28:LEU:HD11	1:A:68:TYR:CD2	0.93	1.99	55	4
1:A:57:VAL:HG12	1:A:83:SER:O	0.93	1.63	21	26
1:A:57:VAL:HG11	1:A:85:THR:O	0.91	1.66	32	21
1:A:72:THR:HG22	1:A:79:HIS:O	0.90	1.65	19	17
1:A:3:HIS:NE2	1:A:11:VAL:HG13	0.89	1.83	25	5
1:A:51:SER:OG	1:A:84:THR:HG21	0.87	1.67	47	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:CYS:CB	1:A:58:LEU:HD11	0.87	1.99	52	41
1:A:19:LEU:CD1	1:A:28:LEU:HD22	0.87	2.00	50	1
1:A:19:LEU:HD13	1:A:28:LEU:HD12	0.86	1.45	18	6
1:A:28:LEU:HD13	1:A:68:TYR:CG	0.86	2.05	18	11
1:A:5:VAL:HG23	1:A:10:VAL:O	0.86	1.70	6	8
1:A:19:LEU:HD21	1:A:68:TYR:CD2	0.86	2.04	32	3
1:A:19:LEU:HD22	1:A:68:TYR:CE2	0.85	2.06	44	6
1:A:19:LEU:CD1	1:A:28:LEU:HD12	0.85	2.01	51	14
1:A:72:THR:HG23	1:A:80:LEU:HD12	0.85	1.48	9	4
1:A:60:PHE:O	1:A:66:THR:HG23	0.84	1.72	33	47
1:A:10:VAL:HG11	1:A:12:TYR:CZ	0.84	2.07	51	16
1:A:5:VAL:HG12	1:A:10:VAL:O	0.84	1.72	14	3
1:A:28:LEU:HD11	1:A:68:TYR:CG	0.83	2.08	43	2
1:A:4:CYS:SG	1:A:36:VAL:HG23	0.82	2.14	29	7
1:A:56:CYS:HB2	1:A:58:LEU:HD11	0.82	1.49	34	34
1:A:32:LEU:HD12	1:A:34:ASN:OD1	0.82	1.72	17	18
1:A:19:LEU:HD11	1:A:68:TYR:CD2	0.82	2.09	37	9
1:A:67:PHE:CD2	1:A:71:THR:HG21	0.82	2.09	40	7
1:A:56:CYS:CB	1:A:58:LEU:HD21	0.82	2.05	49	2
1:A:28:LEU:HD12	1:A:68:TYR:CD2	0.81	2.10	12	11
1:A:58:LEU:HD13	1:A:58:LEU:N	0.81	1.91	13	21
1:A:28:LEU:HD11	1:A:68:TYR:CD1	0.81	2.11	43	1
1:A:19:LEU:HD13	1:A:28:LEU:HA	0.80	1.52	29	2
1:A:19:LEU:HD11	1:A:28:LEU:HD12	0.80	1.51	38	2
1:A:58:LEU:N	1:A:58:LEU:HD13	0.80	1.92	21	23
1:A:31:CYS:HB3	1:A:36:VAL:HG22	0.80	1.51	9	45
1:A:5:VAL:HG13	1:A:10:VAL:O	0.79	1.77	25	6
1:A:19:LEU:HD22	1:A:59:PRO:HD3	0.79	1.52	7	7
1:A:71:THR:HG21	1:A:73:GLU:OE1	0.78	1.78	12	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:28:LEU:HD12	0.78	2.09	29	2
1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:HD22	0.78	1.94	37	5
1:A:18:TRP:CH2	1:A:36:VAL:HG11	0.77	2.15	6	2
1:A:57:VAL:O	1:A:57:VAL:HG13	0.76	1.81	37	29
1:A:57:VAL:HG13	1:A:57:VAL:O	0.76	1.80	17	26
1:A:19:LEU:HD23	1:A:68:TYR:CZ	0.76	2.16	50	1
1:A:26:GLN:NE2	1:A:58:LEU:HD21	0.76	1.96	11	1
1:A:19:LEU:HD12	1:A:28:LEU:HD21	0.75	1.59	53	1
1:A:19:LEU:HD12	1:A:28:LEU:HD22	0.75	1.58	50	2
1:A:31:CYS:CB	1:A:36:VAL:HG22	0.74	2.12	44	30
1:A:58:LEU:HD12	1:A:60:PHE:CE2	0.74	2.17	41	16
1:A:14:VAL:HG23	1:A:14:VAL:O	0.74	1.80	51	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:LEU:HD12	1:A:28:LEU:HA	0.73	1.59	35	21
1:A:72:THR:HG23	1:A:80:LEU:HA	0.73	1.58	50	8
1:A:84:THR:HG23	1:A:93:LYS:O	0.73	1.83	39	4
1:A:28:LEU:HD13	1:A:68:TYR:CD1	0.73	2.19	18	3
1:A:85:THR:HG22	1:A:93:LYS:NZ	0.73	1.97	32	2
1:A:19:LEU:HD12	1:A:28:LEU:CA	0.73	2.14	34	20
1:A:19:LEU:HD12	1:A:28:LEU:HD12	0.72	1.61	6	3
1:A:58:LEU:HD12	1:A:58:LEU:N	0.72	2.00	2	3
1:A:51:SER:HB2	1:A:84:THR:HG21	0.72	1.61	29	2
1:A:47:TYR:CE2	1:A:98:THR:HG22	0.72	2.20	4	5
1:A:30:THR:O	1:A:36:VAL:HG13	0.72	1.84	14	4
1:A:19:LEU:HD22	1:A:68:TYR:HE2	0.71	1.45	44	5
1:A:19:LEU:HD21	1:A:68:TYR:HE2	0.71	1.45	43	2
1:A:85:THR:HG22	1:A:93:LYS:CE	0.71	2.15	39	5
1:A:71:THR:HG23	1:A:73:GLU:HG3	0.71	1.62	33	1
1:A:56:CYS:HB3	1:A:58:LEU:HD11	0.71	1.63	2	23
1:A:85:THR:HG21	1:A:91:ASP:OD2	0.70	1.86	20	3
1:A:12:TYR:CE2	1:A:18:TRP:CD2	0.70	2.80	39	27
1:A:12:TYR:CZ	1:A:18:TRP:CG	0.70	2.80	15	36
1:A:58:LEU:H	1:A:58:LEU:HD12	0.70	1.46	23	4
1:A:85:THR:HG23	1:A:87:ASN:H	0.69	1.44	9	1
1:A:12:TYR:CD2	1:A:18:TRP:CE3	0.69	2.80	20	20
1:A:58:LEU:HD12	1:A:58:LEU:H	0.69	1.47	35	3
1:A:12:TYR:CD2	1:A:18:TRP:CZ3	0.69	2.80	43	21
1:A:56:CYS:HB2	1:A:58:LEU:HD21	0.69	1.63	49	2
1:A:18:TRP:C	1:A:19:LEU:HD22	0.69	2.07	32	7
1:A:12:TYR:CE1	1:A:18:TRP:CD2	0.69	2.81	40	9
1:A:12:TYR:CE1	1:A:18:TRP:CG	0.68	2.81	10	9
1:A:57:VAL:HG12	1:A:83:SER:OG	0.68	1.86	30	12
1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:PHE:CE2	0.68	2.22	54	6
1:A:12:TYR:CZ	1:A:18:TRP:CD1	0.68	2.82	40	5
1:A:58:LEU:HD12	1:A:60:PHE:HE2	0.67	1.50	40	13
1:A:28:LEU:HD13	1:A:68:TYR:HD2	0.67	1.50	26	1
1:A:12:TYR:CZ	1:A:18:TRP:CD2	0.67	2.83	4	29
1:A:12:TYR:CD1	1:A:18:TRP:CE3	0.67	2.83	10	12
1:A:58:LEU:CD2	1:A:60:PHE:CE2	0.66	2.79	54	6
1:A:28:LEU:CD1	1:A:68:TYR:CD2	0.66	2.79	45	14
1:A:14:VAL:O	1:A:14:VAL:HG13	0.66	1.90	55	7
1:A:35:GLY:O	1:A:36:VAL:HG23	0.66	1.91	21	2
1:A:57:VAL:HG11	1:A:86:SER:N	0.66	2.06	43	7
1:A:28:LEU:CD1	1:A:68:TYR:CD1	0.65	2.79	43	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:65:ARG:CG	1:A:67:PHE:CZ	0.65	2.80	2	54
1:A:19:LEU:CG	1:A:28:LEU:HD22	0.65	2.20	50	1
1:A:19:LEU:HD11	1:A:68:TYR:CE2	0.65	2.26	29	3
1:A:14:VAL:HG22	1:A:14:VAL:O	0.65	1.90	7	10
1:A:72:THR:HG22	1:A:79:HIS:C	0.65	2.11	19	11
1:A:85:THR:HG22	1:A:93:LYS:HE2	0.65	1.66	39	1
1:A:19:LEU:HD21	1:A:28:LEU:HD12	0.64	1.66	29	1
1:A:19:LEU:HD21	1:A:68:TYR:CE1	0.64	2.26	36	3
1:A:28:LEU:CD1	1:A:68:TYR:CG	0.64	2.80	35	12
1:A:28:LEU:HD11	1:A:68:TYR:CB	0.64	2.22	51	4
1:A:18:TRP:CE2	1:A:29:CYS:CB	0.64	2.81	37	17
1:A:12:TYR:CB	1:A:18:TRP:CZ3	0.64	2.81	50	2
1:A:19:LEU:CD2	1:A:68:TYR:CZ	0.64	2.79	36	6
1:A:47:TYR:CE2	1:A:96:PHE:CB	0.64	2.80	38	2
1:A:67:PHE:N	1:A:67:PHE:CD1	0.64	2.66	5	21
1:A:67:PHE:CD1	1:A:67:PHE:N	0.64	2.66	16	29
1:A:19:LEU:CD2	1:A:68:TYR:CD2	0.64	2.80	32	1
1:A:10:VAL:CG1	1:A:12:TYR:CE2	0.63	2.82	10	4
1:A:5:VAL:HG23	1:A:6:THR:N	0.63	2.08	16	1
1:A:17:GLN:HB3	1:A:30:THR:HG23	0.63	1.70	35	6
1:A:19:LEU:HD12	1:A:28:LEU:HB2	0.63	1.70	25	13
1:A:10:VAL:CG1	1:A:12:TYR:CZ	0.63	2.81	30	4
1:A:85:THR:HG22	1:A:87:ASN:H	0.63	1.52	55	16
1:A:79:HIS:ND1	1:A:96:PHE:CE1	0.63	2.67	54	1
1:A:19:LEU:CB	1:A:68:TYR:CE2	0.63	2.82	16	7
1:A:62:TYR:CE2	1:A:74:GLY:CA	0.62	2.82	29	2
1:A:19:LEU:CD1	1:A:68:TYR:CE2	0.62	2.81	54	4
1:A:61:THR:HG22	1:A:65:ARG:O	0.62	1.93	4	31
1:A:51:SER:O	1:A:52:ASN:CB	0.62	2.48	23	2
1:A:12:TYR:CG	1:A:18:TRP:CE3	0.62	2.88	3	14
1:A:58:LEU:HD22	1:A:69:SER:CA	0.62	2.24	35	5
1:A:5:VAL:HG13	1:A:11:VAL:HA	0.62	1.71	7	2
1:A:58:LEU:N	1:A:58:LEU:HD12	0.62	2.10	9	3
1:A:19:LEU:HD11	1:A:28:LEU:CD1	0.62	2.24	43	2
1:A:67:PHE:CE2	1:A:73:GLU:OE1	0.62	2.53	12	1
1:A:62:TYR:CD2	1:A:73:GLU:OE2	0.62	2.53	33	3
1:A:19:LEU:CD1	1:A:28:LEU:CD2	0.61	2.76	53	3
1:A:47:TYR:CE1	1:A:96:PHE:CB	0.61	2.83	54	9
1:A:58:LEU:HD22	1:A:69:SER:N	0.61	2.11	15	4
1:A:19:LEU:CD1	1:A:28:LEU:CD1	0.61	2.79	42	4
1:A:19:LEU:HD13	1:A:68:TYR:HD2	0.61	1.54	39	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:LEU:HD12	1:A:28:LEU:CB	0.60	2.26	14	13
1:A:19:LEU:CD1	1:A:68:TYR:CD2	0.60	2.84	37	8
1:A:57:VAL:HG21	1:A:86:SER:N	0.60	2.10	9	5
1:A:91:ASP:CB	1:A:93:LYS:CD	0.60	2.79	39	5
1:A:6:THR:O	1:A:6:THR:HG23	0.60	1.97	5	2
1:A:71:THR:CG2	1:A:73:GLU:HG2	0.60	2.26	45	2
1:A:28:LEU:HD13	1:A:68:TYR:CD2	0.60	2.32	26	4
1:A:58:LEU:N	1:A:58:LEU:CD1	0.60	2.65	45	17
1:A:12:TYR:CG	1:A:18:TRP:CZ3	0.60	2.90	14	3
1:A:28:LEU:HD22	1:A:68:TYR:HB2	0.60	1.73	54	2
1:A:45:GLN:O	1:A:46:THR:HG23	0.60	1.97	51	5
1:A:19:LEU:HD22	1:A:68:TYR:CE1	0.60	2.31	49	3
1:A:58:LEU:O	1:A:58:LEU:HD22	0.59	1.97	5	3
1:A:14:VAL:HG23	1:A:31:CYS:O	0.59	1.96	55	1
1:A:3:HIS:CD2	1:A:12:TYR:O	0.59	2.56	8	10
1:A:59:PRO:CG	1:A:68:TYR:CD2	0.59	2.85	9	2
1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:ASP:H	0.59	1.56	37	1
1:A:58:LEU:HD13	1:A:69:SER:N	0.59	2.11	53	2
1:A:12:TYR:CG	1:A:18:TRP:CD2	0.59	2.90	50	1
1:A:65:ARG:CD	1:A:67:PHE:CZ	0.59	2.86	38	11
1:A:31:CYS:HA	1:A:36:VAL:HG22	0.59	1.73	21	4
1:A:14:VAL:O	1:A:14:VAL:CG2	0.59	2.50	51	1
1:A:56:CYS:CB	1:A:58:LEU:CD1	0.59	2.81	45	35
1:A:32:LEU:HD12	1:A:34:ASN:CG	0.59	2.18	28	1
1:A:19:LEU:CD1	1:A:28:LEU:HD13	0.59	2.27	50	1
1:A:32:LEU:HD11	1:A:34:ASN:OD1	0.59	1.98	27	13
1:A:6:THR:HG23	1:A:12:TYR:CE2	0.59	2.32	17	1
1:A:12:TYR:CD2	1:A:18:TRP:CD2	0.59	2.91	50	1
1:A:19:LEU:HD11	1:A:68:TYR:CZ	0.59	2.33	54	1
1:A:19:LEU:HB2	1:A:68:TYR:CE2	0.59	2.33	53	18
1:A:19:LEU:CD2	1:A:19:LEU:N	0.59	2.66	32	3
1:A:79:HIS:ND1	1:A:96:PHE:CZ	0.59	2.71	54	1
1:A:58:LEU:CD1	1:A:58:LEU:N	0.59	2.65	52	22
1:A:28:LEU:CD1	1:A:68:TYR:CB	0.59	2.80	12	6
1:A:47:TYR:CD1	1:A:47:TYR:O	0.59	2.56	55	6
1:A:72:THR:CG2	1:A:80:LEU:HD12	0.59	2.27	20	6
1:A:62:TYR:CE2	1:A:73:GLU:OE1	0.59	2.55	33	1
1:A:71:THR:O	1:A:81:TRP:CD1	0.58	2.56	33	19
1:A:28:LEU:HD23	1:A:28:LEU:N	0.58	2.13	50	1
1:A:47:TYR:O	1:A:47:TYR:CD1	0.58	2.56	14	6
1:A:10:VAL:HG11	1:A:12:TYR:CE1	0.58	2.34	28	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:CYS:CB	1:A:58:LEU:CD2	0.58	2.81	49	2
1:A:58:LEU:H	1:A:58:LEU:HD22	0.58	1.57	17	18
1:A:58:LEU:H	1:A:58:LEU:HD13	0.58	1.58	8	14
1:A:12:TYR:CE2	1:A:18:TRP:CE3	0.58	2.92	27	9
1:A:12:TYR:CE2	1:A:18:TRP:CD1	0.58	2.91	50	1
1:A:12:TYR:OH	1:A:18:TRP:CG	0.58	2.57	27	8
1:A:18:TRP:CZ2	1:A:29:CYS:SG	0.58	2.96	18	4
1:A:67:PHE:CZ	1:A:73:GLU:OE2	0.58	2.57	44	1
1:A:12:TYR:CE2	1:A:18:TRP:CE2	0.58	2.92	11	16
1:A:18:TRP:NE1	1:A:29:CYS:CB	0.58	2.67	9	16
1:A:59:PRO:HG3	1:A:68:TYR:CD2	0.58	2.34	9	6
1:A:12:TYR:CD2	1:A:18:TRP:CE2	0.58	2.92	50	1
1:A:27:MET:C	1:A:28:LEU:HD23	0.58	2.18	52	3
1:A:85:THR:HG22	1:A:93:LYS:HE3	0.57	1.76	4	5
1:A:65:ARG:HG3	1:A:67:PHE:CZ	0.57	2.34	1	48
1:A:28:LEU:HD13	1:A:68:TYR:CB	0.57	2.29	18	5
1:A:59:PRO:HB3	1:A:68:TYR:CD1	0.57	2.34	27	27
1:A:45:GLN:C	1:A:46:THR:HG23	0.57	2.20	47	1
1:A:19:LEU:HG	1:A:28:LEU:HD22	0.57	1.75	50	1
1:A:19:LEU:CD1	1:A:28:LEU:HD21	0.57	2.28	53	1
1:A:3:HIS:CD2	1:A:13:SER:OG	0.57	2.57	40	6
1:A:19:LEU:CD2	1:A:68:TYR:CE2	0.57	2.87	32	5
1:A:58:LEU:HD22	1:A:58:LEU:H	0.57	1.59	50	19
1:A:28:LEU:HD21	1:A:68:TYR:CD2	0.57	2.34	50	2
1:A:12:TYR:OH	1:A:18:TRP:CD1	0.57	2.57	11	4
1:A:81:TRP:O	1:A:81:TRP:CE3	0.57	2.57	8	1
1:A:71:THR:CG2	1:A:73:GLU:OE1	0.57	2.53	12	1
1:A:58:LEU:HD22	1:A:58:LEU:O	0.57	1.99	14	2
1:A:88:TYR:CE1	1:A:92:GLN:OE1	0.57	2.58	23	2
1:A:32:LEU:CD1	1:A:34:ASN:ND2	0.57	2.67	28	2
1:A:93:LYS:CD	1:A:93:LYS:N	0.57	2.68	25	7
1:A:58:LEU:HD13	1:A:58:LEU:H	0.57	1.60	40	19
1:A:12:TYR:HB3	1:A:18:TRP:CZ3	0.57	2.35	50	4
1:A:29:CYS:SG	1:A:36:VAL:HG12	0.56	2.40	24	6
1:A:19:LEU:CD1	1:A:68:TYR:CZ	0.56	2.88	54	1
1:A:26:GLN:HE21	1:A:58:LEU:HD21	0.56	1.58	11	1
1:A:11:VAL:O	1:A:11:VAL:HG12	0.56	2.00	33	4
1:A:28:LEU:CD2	1:A:68:TYR:CE1	0.56	2.80	43	1
1:A:46:THR:HG22	1:A:97:CYS:SG	0.56	2.40	45	2
1:A:51:SER:CB	1:A:84:THR:HG21	0.56	2.31	47	8
1:A:57:VAL:CG1	1:A:57:VAL:O	0.56	2.53	17	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:PHE:CD2	1:A:83:SER:OG	0.56	2.57	28	4
1:A:57:VAL:N	1:A:83:SER:O	0.56	2.38	11	53
1:A:17:GLN:HG2	1:A:30:THR:HG23	0.56	1.78	51	7
1:A:67:PHE:CZ	1:A:73:GLU:CD	0.56	2.79	44	2
1:A:19:LEU:HD11	1:A:28:LEU:HD13	0.56	1.78	50	1
1:A:47:TYR:CE2	1:A:96:PHE:HB3	0.56	2.35	52	1
1:A:10:VAL:HG11	1:A:12:TYR:CE2	0.56	2.34	10	3
1:A:62:TYR:CD2	1:A:73:GLU:CD	0.56	2.79	44	2
1:A:56:CYS:HB3	1:A:58:LEU:CD1	0.56	2.31	40	45
1:A:93:LYS:CE	1:A:93:LYS:O	0.56	2.54	30	4
1:A:46:THR:HG21	1:A:82:CYS:SG	0.56	2.40	16	4
1:A:65:ARG:CG	1:A:67:PHE:CE1	0.56	2.89	44	14
1:A:47:TYR:CE1	1:A:96:PHE:HB2	0.56	2.35	54	3
1:A:4:CYS:O	1:A:12:TYR:N	0.55	2.39	51	51
1:A:18:TRP:CE2	1:A:29:CYS:HB3	0.55	2.36	54	39
1:A:19:LEU:HB2	1:A:68:TYR:CD2	0.55	2.36	46	6
1:A:47:TYR:CZ	1:A:96:PHE:HB3	0.55	2.36	49	12
1:A:6:THR:CG2	1:A:12:TYR:CE2	0.55	2.89	49	1
1:A:57:VAL:O	1:A:57:VAL:CG1	0.55	2.55	50	24
1:A:12:TYR:CE1	1:A:18:TRP:CB	0.55	2.90	3	8
1:A:56:CYS:HB3	1:A:58:LEU:HD21	0.55	1.78	53	2
1:A:65:ARG:HG3	1:A:67:PHE:CE1	0.55	2.36	44	11
1:A:3:HIS:CD2	1:A:11:VAL:HG12	0.55	2.37	55	5
1:A:31:CYS:SG	1:A:36:VAL:HG22	0.55	2.40	40	1
1:A:13:SER:O	1:A:15:GLY:N	0.55	2.40	32	49
1:A:59:PRO:HB3	1:A:68:TYR:CD2	0.55	2.37	47	7
1:A:66:THR:C	1:A:67:PHE:CD1	0.55	2.80	40	19
1:A:28:LEU:CD1	1:A:68:TYR:CE2	0.55	2.90	24	1
1:A:12:TYR:CE1	1:A:18:TRP:HB3	0.55	2.37	50	18
1:A:84:THR:OG1	1:A:93:LYS:CE	0.55	2.55	37	6
1:A:49:GLY:HA3	1:A:96:PHE:CE2	0.55	2.37	49	2
1:A:18:TRP:CZ2	1:A:29:CYS:HB3	0.55	2.37	55	25
1:A:7:ASP:O	1:A:8:SER:CB	0.55	2.55	34	12
1:A:47:TYR:CD2	1:A:98:THR:HG22	0.55	2.37	44	3
1:A:6:THR:O	1:A:7:ASP:CB	0.55	2.55	25	9
1:A:35:GLY:O	1:A:36:VAL:CB	0.55	2.55	21	1
1:A:94:TYR:C	1:A:94:TYR:CD1	0.54	2.80	52	19
1:A:11:VAL:HG12	1:A:11:VAL:O	0.54	2.02	54	6
1:A:91:ASP:O	1:A:92:GLN:CB	0.54	2.55	40	23
1:A:85:THR:OG1	1:A:93:LYS:CE	0.54	2.55	6	3
1:A:28:LEU:O	1:A:38:CYS:HA	0.54	2.03	55	33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:TYR:CE1	1:A:96:PHE:HB3	0.54	2.36	25	7
1:A:88:TYR:C	1:A:88:TYR:CD1	0.54	2.81	9	3
1:A:71:THR:HG23	1:A:73:GLU:HG2	0.54	1.79	44	2
1:A:5:VAL:HG22	1:A:11:VAL:HG13	0.54	1.77	47	3
1:A:4:CYS:SG	1:A:12:TYR:CB	0.54	2.96	33	45
1:A:61:THR:CG2	1:A:65:ARG:O	0.54	2.56	43	54
1:A:94:TYR:CD1	1:A:94:TYR:C	0.54	2.81	33	17
1:A:58:LEU:HG	1:A:60:PHE:CE2	0.54	2.38	9	5
1:A:93:LYS:O	1:A:93:LYS:CE	0.54	2.56	41	7
1:A:84:THR:CG2	1:A:95:SER:OG	0.54	2.56	45	11
1:A:56:CYS:SG	1:A:58:LEU:CD1	0.54	2.95	17	1
1:A:85:THR:HG22	1:A:93:LYS:HZ2	0.54	1.62	32	1
1:A:47:TYR:CE2	1:A:96:PHE:HB2	0.54	2.38	38	1
1:A:28:LEU:O	1:A:39:GLN:N	0.54	2.40	38	25
1:A:84:THR:OG1	1:A:93:LYS:CG	0.54	2.56	30	13
1:A:29:CYS:SG	1:A:36:VAL:CG1	0.54	2.96	7	14
1:A:4:CYS:N	1:A:12:TYR:O	0.54	2.41	55	7
1:A:65:ARG:HG2	1:A:67:PHE:CE1	0.54	2.38	14	9
1:A:28:LEU:O	1:A:38:CYS:HB3	0.54	2.02	52	41
1:A:68:TYR:O	1:A:69:SER:CB	0.54	2.56	13	7
1:A:3:HIS:CE1	1:A:13:SER:OG	0.54	2.61	19	1
1:A:35:GLY:O	1:A:36:VAL:CG2	0.54	2.55	21	1
1:A:73:GLU:OE1	1:A:74:GLY:N	0.54	2.41	33	1
1:A:95:SER:OG	1:A:96:PHE:N	0.54	2.41	22	3
1:A:14:VAL:CG2	1:A:32:LEU:O	0.53	2.56	49	7
1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:CD2	0.53	2.72	36	2
1:A:87:ASN:OD1	1:A:90:GLN:CG	0.53	2.56	9	1
1:A:62:TYR:CE2	1:A:74:GLY:HA3	0.53	2.38	29	1
1:A:26:GLN:O	1:A:27:MET:CG	0.53	2.56	48	1
1:A:20:LYS:N	1:A:27:MET:O	0.53	2.42	50	18
1:A:30:THR:HG22	1:A:31:CYS:N	0.53	2.18	7	11
1:A:57:VAL:HG12	1:A:83:SER:C	0.53	2.24	21	3
1:A:58:LEU:CB	1:A:59:PRO:HA	0.53	2.34	2	32
1:A:4:CYS:SG	1:A:13:SER:N	0.53	2.81	30	42
1:A:62:TYR:CE2	1:A:63:ASN:ND2	0.53	2.76	16	4
1:A:6:THR:HG23	1:A:12:TYR:HE2	0.53	1.62	17	2
1:A:12:TYR:OH	1:A:18:TRP:CB	0.53	2.57	46	1
1:A:17:GLN:CG	1:A:30:THR:OG1	0.53	2.56	52	1
1:A:28:LEU:HD13	1:A:68:TYR:HB2	0.53	1.81	18	7
1:A:19:LEU:HD11	1:A:68:TYR:CG	0.53	2.39	3	2
1:A:32:LEU:CD1	1:A:34:ASN:OD1	0.53	2.56	44	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:SER:O	1:A:16:MET:N	0.53	2.42	35	5
1:A:45:GLN:O	1:A:97:CYS:CB	0.53	2.56	43	1
1:A:62:TYR:OH	1:A:74:GLY:CA	0.53	2.57	34	3
1:A:57:VAL:CG1	1:A:83:SER:OG	0.53	2.56	4	11
1:A:56:CYS:CB	1:A:83:SER:O	0.53	2.56	18	3
1:A:91:ASP:HB2	1:A:93:LYS:CD	0.53	2.34	39	5
1:A:27:MET:CB	1:A:39:GLN:O	0.53	2.57	48	1
1:A:12:TYR:CB	1:A:18:TRP:CE3	0.53	2.91	50	1
1:A:18:TRP:NE1	1:A:29:CYS:HB2	0.53	2.19	9	36
1:A:10:VAL:HG12	1:A:11:VAL:N	0.53	2.18	23	4
1:A:19:LEU:HD13	1:A:28:LEU:CD1	0.53	2.29	18	1
1:A:49:GLY:HA2	1:A:96:PHE:CD2	0.53	2.38	50	11
1:A:91:ASP:CB	1:A:93:LYS:HD2	0.53	2.33	47	6
1:A:5:VAL:HG23	1:A:10:VAL:C	0.53	2.24	38	4
1:A:87:ASN:OD1	1:A:90:GLN:CB	0.53	2.56	9	2
1:A:58:LEU:CD2	1:A:69:SER:O	0.53	2.57	54	1
1:A:5:VAL:CG1	1:A:10:VAL:O	0.53	2.57	55	1
1:A:60:PHE:O	1:A:66:THR:CG2	0.53	2.57	23	9
1:A:28:LEU:HD11	1:A:68:TYR:CE1	0.53	2.39	43	2
1:A:62:TYR:CZ	1:A:74:GLY:HA3	0.53	2.39	34	5
1:A:88:TYR:CD1	1:A:88:TYR:C	0.53	2.81	16	7
1:A:84:THR:OG1	1:A:93:LYS:CD	0.53	2.57	6	3
1:A:88:TYR:O	1:A:88:TYR:CD1	0.53	2.62	9	1
1:A:84:THR:CG2	1:A:93:LYS:O	0.53	2.56	39	1
1:A:49:GLY:CA	1:A:96:PHE:CE2	0.53	2.92	49	2
1:A:51:SER:O	1:A:53:GLY:N	0.52	2.42	13	2
1:A:66:THR:HG22	1:A:67:PHE:N	0.52	2.20	49	6
1:A:28:LEU:HD11	1:A:68:TYR:HB2	0.52	1.79	53	2
1:A:30:THR:O	1:A:37:SER:N	0.52	2.41	52	6
1:A:30:THR:CG2	1:A:31:CYS:N	0.52	2.73	25	6
1:A:12:TYR:CZ	1:A:18:TRP:CB	0.52	2.92	46	5
1:A:34:ASN:OD1	1:A:35:GLY:N	0.52	2.43	40	9
1:A:31:CYS:HB3	1:A:36:VAL:CG2	0.52	2.34	34	23
1:A:12:TYR:CD1	1:A:18:TRP:CD2	0.52	2.97	29	3
1:A:32:LEU:HD21	1:A:37:SER:HB2	0.52	1.79	5	3
1:A:87:ASN:O	1:A:91:ASP:CB	0.52	2.57	9	1
1:A:65:ARG:HD2	1:A:67:PHE:CZ	0.52	2.39	38	13
1:A:80:LEU:O	1:A:97:CYS:N	0.52	2.43	54	21
1:A:18:TRP:CE2	1:A:29:CYS:HB2	0.52	2.39	50	5
1:A:56:CYS:CA	1:A:83:SER:O	0.52	2.58	47	5
1:A:87:ASN:ND2	1:A:90:GLN:OE1	0.52	2.43	24	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:31:CYS:SG	1:A:36:VAL:CG2	0.52	2.98	40	1
1:A:70:CYS:HB2	1:A:80:LEU:HD23	0.52	1.82	54	1
1:A:58:LEU:HG	1:A:60:PHE:CD2	0.52	2.40	23	7
1:A:20:LYS:O	1:A:27:MET:N	0.52	2.43	17	6
1:A:34:ASN:OD1	1:A:34:ASN:N	0.52	2.43	28	4
1:A:87:ASN:OD1	1:A:90:GLN:NE2	0.52	2.43	36	2
1:A:27:MET:SD	1:A:38:CYS:CB	0.52	2.97	33	5
1:A:4:CYS:SG	1:A:36:VAL:CG2	0.52	2.96	7	2
1:A:3:HIS:NE2	1:A:13:SER:OG	0.52	2.43	19	5
1:A:71:THR:CG2	1:A:73:GLU:HG3	0.52	2.33	33	1
1:A:20:LYS:CD	1:A:29:CYS:SG	0.52	2.97	37	2
1:A:3:HIS:CD2	1:A:11:VAL:HG13	0.52	2.39	25	3
1:A:19:LEU:HG	1:A:68:TYR:CE2	0.52	2.39	47	2
1:A:32:LEU:HD12	1:A:34:ASN:H	0.52	1.64	54	2
1:A:51:SER:O	1:A:52:ASN:HB3	0.52	2.04	47	18
1:A:48:GLY:O	1:A:52:ASN:CA	0.52	2.58	4	7
1:A:52:ASN:ND2	1:A:52:ASN:O	0.52	2.43	19	3
1:A:93:LYS:O	1:A:93:LYS:NZ	0.52	2.43	19	3
1:A:62:TYR:HB3	1:A:67:PHE:CE1	0.52	2.39	40	11
1:A:18:TRP:CZ3	1:A:30:THR:HA	0.52	2.40	7	1
1:A:85:THR:OG1	1:A:93:LYS:NZ	0.52	2.43	37	4
1:A:91:ASP:HB3	1:A:93:LYS:CD	0.52	2.35	28	5
1:A:17:GLN:NE2	1:A:66:THR:O	0.52	2.43	29	1
1:A:52:ASN:O	1:A:52:ASN:ND2	0.52	2.43	35	4
1:A:56:CYS:HB3	1:A:58:LEU:CD2	0.52	2.35	49	2
1:A:58:LEU:HD23	1:A:58:LEU:N	0.52	2.20	49	2
1:A:79:HIS:CE1	1:A:96:PHE:CZ	0.52	2.98	54	1
1:A:30:THR:C	1:A:36:VAL:HG13	0.51	2.24	26	2
1:A:28:LEU:O	1:A:38:CYS:CA	0.51	2.58	43	26
1:A:93:LYS:O	1:A:93:LYS:HG2	0.51	2.06	41	7
1:A:51:SER:N	1:A:94:TYR:O	0.51	2.42	50	2
1:A:48:GLY:O	1:A:52:ASN:N	0.51	2.44	27	6
1:A:93:LYS:NZ	1:A:93:LYS:O	0.51	2.43	30	2
1:A:19:LEU:HG	1:A:68:TYR:CZ	0.51	2.40	47	2
1:A:16:MET:O	1:A:17:GLN:C	0.51	2.48	25	20
1:A:60:PHE:CZ	1:A:67:PHE:HB2	0.51	2.40	49	11
1:A:83:SER:OG	1:A:85:THR:O	0.51	2.29	44	12
1:A:87:ASN:OD1	1:A:87:ASN:O	0.51	2.29	9	1
1:A:12:TYR:CG	1:A:16:MET:HG2	0.51	2.40	36	1
1:A:57:VAL:CG1	1:A:85:THR:O	0.51	2.56	51	7
1:A:50:ASN:ND2	1:A:92:GLN:O	0.51	2.44	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:3:HIS:CE1	1:A:5:VAL:CG2	0.51	2.94	25	1
1:A:30:THR:N	1:A:37:SER:O	0.51	2.44	37	9
1:A:84:THR:OG1	1:A:93:LYS:NZ	0.51	2.43	6	1
1:A:49:GLY:HA2	1:A:96:PHE:CE2	0.51	2.41	16	17
1:A:88:TYR:CD1	1:A:88:TYR:O	0.51	2.64	18	1
1:A:31:CYS:CA	1:A:36:VAL:HG22	0.51	2.35	55	5
1:A:19:LEU:HB2	1:A:68:TYR:CZ	0.51	2.40	31	4
1:A:67:PHE:CE1	1:A:73:GLU:OE2	0.51	2.64	44	1
1:A:47:TYR:CD1	1:A:47:TYR:N	0.51	2.78	52	1
1:A:91:ASP:OD2	1:A:93:LYS:CE	0.51	2.58	55	1
1:A:5:VAL:HG12	1:A:11:VAL:HA	0.51	1.83	32	3
1:A:6:THR:OG1	1:A:7:ASP:N	0.50	2.44	14	10
1:A:12:TYR:CD2	1:A:16:MET:HG2	0.50	2.41	16	1
1:A:12:TYR:CZ	1:A:18:TRP:CE2	0.50	2.99	11	2
1:A:5:VAL:O	1:A:7:ASP:N	0.50	2.43	13	3
1:A:58:LEU:O	1:A:58:LEU:CD2	0.50	2.59	22	2
1:A:93:LYS:HG2	1:A:93:LYS:O	0.50	2.06	47	10
1:A:3:HIS:CD2	1:A:13:SER:HA	0.50	2.41	29	2
1:A:48:GLY:O	1:A:53:GLY:N	0.50	2.43	22	1
1:A:47:TYR:CE2	1:A:98:THR:HG23	0.50	2.41	45	2
1:A:93:LYS:N	1:A:93:LYS:HD3	0.50	2.22	5	13
1:A:20:LYS:CG	1:A:27:MET:HB3	0.50	2.37	43	3
1:A:4:CYS:O	1:A:5:VAL:HG22	0.50	2.06	7	2
1:A:29:CYS:CA	1:A:38:CYS:HB3	0.50	2.36	10	18
1:A:50:ASN:OD1	1:A:94:TYR:CZ	0.50	2.64	44	2
1:A:28:LEU:HD12	1:A:68:TYR:CE2	0.50	2.41	24	1
1:A:14:VAL:O	1:A:14:VAL:HG22	0.50	2.06	25	18
1:A:59:PRO:HG3	1:A:68:TYR:CG	0.50	2.42	33	5
1:A:12:TYR:CZ	1:A:18:TRP:CE3	0.50	2.99	27	2
1:A:10:VAL:CG1	1:A:12:TYR:CE1	0.50	2.95	28	1
1:A:93:LYS:N	1:A:93:LYS:CD	0.50	2.75	49	10
1:A:45:GLN:O	1:A:46:THR:CG2	0.50	2.59	51	2
1:A:59:PRO:HG3	1:A:68:TYR:CD1	0.50	2.42	37	6
1:A:50:ASN:HB2	1:A:94:TYR:CE2	0.50	2.41	46	2
1:A:85:THR:HG23	1:A:87:ASN:N	0.50	2.18	9	1
1:A:61:THR:HG23	1:A:65:ARG:O	0.50	2.07	22	5
1:A:82:CYS:N	1:A:95:SER:O	0.50	2.44	11	11
1:A:85:THR:N	1:A:93:LYS:HE3	0.50	2.22	4	5
1:A:26:GLN:HG3	1:A:68:TYR:CE2	0.50	2.41	50	1
1:A:58:LEU:HB3	1:A:60:PHE:CD2	0.50	2.42	40	15
1:A:28:LEU:N	1:A:28:LEU:HD23	0.50	2.21	52	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:72:THR:CG2	1:A:79:HIS:C	0.49	2.81	4	13
1:A:58:LEU:CD2	1:A:58:LEU:O	0.49	2.60	24	3
1:A:93:LYS:HD3	1:A:93:LYS:N	0.49	2.22	2	10
1:A:90:GLN:CG	1:A:91:ASP:N	0.49	2.75	48	2
1:A:91:ASP:CG	1:A:93:LYS:CG	0.49	2.81	9	3
1:A:46:THR:CG2	1:A:82:CYS:SG	0.49	3.01	16	2
1:A:59:PRO:HG3	1:A:68:TYR:CE2	0.49	2.42	54	5
1:A:54:GLU:O	1:A:56:CYS:N	0.49	2.45	37	1
1:A:71:THR:OG1	1:A:72:THR:N	0.49	2.45	36	3
1:A:46:THR:CG2	1:A:96:PHE:O	0.49	2.57	38	5
1:A:29:CYS:SG	1:A:36:VAL:HG13	0.49	2.46	42	3
1:A:59:PRO:HB3	1:A:68:TYR:CG	0.49	2.42	32	17
1:A:19:LEU:CD1	1:A:28:LEU:HA	0.49	2.37	18	2
1:A:32:LEU:HD12	1:A:34:ASN:ND2	0.49	2.22	28	1
1:A:87:ASN:ND2	1:A:90:GLN:CD	0.49	2.66	36	2
1:A:18:TRP:O	1:A:28:LEU:HD12	0.49	2.08	40	1
1:A:13:SER:O	1:A:14:VAL:C	0.49	2.49	44	24
1:A:58:LEU:CD2	1:A:58:LEU:C	0.49	2.81	5	2
1:A:45:GLN:CD	1:A:98:THR:CG2	0.49	2.81	24	1
1:A:45:GLN:CG	1:A:98:THR:CG2	0.49	2.90	24	1
1:A:60:PHE:CE1	1:A:67:PHE:HB2	0.49	2.42	52	15
1:A:88:TYR:CE1	1:A:94:TYR:HB3	0.49	2.43	24	10
1:A:28:LEU:N	1:A:28:LEU:CD2	0.49	2.76	52	1
1:A:18:TRP:CH2	1:A:36:VAL:CG1	0.49	2.91	6	1
1:A:12:TYR:O	1:A:13:SER:O	0.49	2.31	50	3
1:A:19:LEU:HD21	1:A:68:TYR:OH	0.49	2.07	18	1
1:A:58:LEU:CD1	1:A:69:SER:HA	0.49	2.37	53	2
1:A:85:THR:O	1:A:87:ASN:N	0.49	2.46	36	6
1:A:4:CYS:HB3	1:A:36:VAL:CG2	0.49	2.38	49	3
1:A:27:MET:CG	1:A:39:GLN:O	0.49	2.61	16	3
1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:PHE:CE1	0.49	2.42	49	1
1:A:27:MET:C	1:A:28:LEU:CD2	0.49	2.81	52	1
1:A:58:LEU:C	1:A:58:LEU:CD2	0.49	2.81	22	3
1:A:46:THR:OG1	1:A:53:GLY:CA	0.49	2.60	27	1
1:A:58:LEU:HB3	1:A:60:PHE:CD1	0.49	2.43	51	2
1:A:3:HIS:CD2	1:A:13:SER:N	0.49	2.81	50	1
1:A:56:CYS:HB2	1:A:58:LEU:CD1	0.48	2.36	35	11
1:A:10:VAL:HB	1:A:12:TYR:CE2	0.48	2.43	49	3
1:A:12:TYR:CZ	1:A:18:TRP:NE1	0.48	2.81	40	1
1:A:58:LEU:HD12	1:A:60:PHE:CD2	0.48	2.43	52	1
1:A:28:LEU:CD1	1:A:68:TYR:HB2	0.48	2.38	8	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:TYR:CD2	1:A:18:TRP:CZ2	0.48	3.01	11	2
1:A:63:ASN:C	1:A:63:ASN:OD1	0.48	2.50	41	1
1:A:56:CYS:HA	1:A:83:SER:O	0.48	2.09	47	15
1:A:73:GLU:OE2	1:A:81:TRP:CZ2	0.48	2.66	12	1
1:A:71:THR:N	1:A:81:TRP:O	0.48	2.45	40	1
1:A:45:GLN:CG	1:A:98:THR:HG22	0.48	2.38	24	1
1:A:4:CYS:C	1:A:5:VAL:CG2	0.48	2.81	7	3
1:A:62:TYR:CD2	1:A:73:GLU:CG	0.48	2.96	12	1
1:A:88:TYR:O	1:A:92:GLN:N	0.48	2.46	35	3
1:A:56:CYS:SG	1:A:83:SER:O	0.48	2.72	17	1
1:A:59:PRO:CG	1:A:68:TYR:CD1	0.48	2.96	18	4
1:A:47:TYR:CE2	1:A:98:THR:CG2	0.48	2.96	40	2
1:A:28:LEU:CD1	1:A:68:TYR:HB3	0.48	2.38	51	3
1:A:20:LYS:O	1:A:27:MET:O	0.48	2.32	42	12
1:A:71:THR:O	1:A:81:TRP:N	0.48	2.45	12	1
1:A:18:TRP:C	1:A:19:LEU:HD23	0.48	2.28	55	1
1:A:4:CYS:SG	1:A:12:TYR:HB2	0.48	2.49	51	42
1:A:16:MET:O	1:A:17:GLN:O	0.48	2.32	50	30
1:A:19:LEU:HD13	1:A:68:TYR:CE2	0.48	2.40	4	1
1:A:51:SER:O	1:A:52:ASN:C	0.48	2.52	22	2
1:A:81:TRP:HB2	1:A:94:TYR:CD1	0.48	2.44	54	1
1:A:62:TYR:O	1:A:63:ASN:OD1	0.48	2.31	41	1
1:A:96:PHE:O	1:A:97:CYS:SG	0.48	2.72	31	11
1:A:51:SER:OG	1:A:84:THR:CG2	0.47	2.57	25	1
1:A:57:VAL:C	1:A:58:LEU:HD13	0.47	2.28	52	1
1:A:93:LYS:CG	1:A:93:LYS:O	0.47	2.61	14	10
1:A:98:THR:OG1	1:A:98:THR:O	0.47	2.31	29	4
1:A:71:THR:CG2	1:A:73:GLU:CG	0.47	2.92	33	2
1:A:67:PHE:CE2	1:A:73:GLU:HG2	0.47	2.44	33	1
1:A:59:PRO:HG3	1:A:68:TYR:CZ	0.47	2.44	42	1
1:A:79:HIS:ND1	1:A:79:HIS:N	0.47	2.62	44	1
1:A:19:LEU:HG	1:A:28:LEU:CD2	0.47	2.38	50	1
1:A:85:THR:N	1:A:93:LYS:CE	0.47	2.78	35	6
1:A:50:ASN:OD1	1:A:94:TYR:O	0.47	2.32	14	1
1:A:47:TYR:N	1:A:47:TYR:CD1	0.47	2.82	21	3
1:A:60:PHE:CE1	1:A:67:PHE:CD1	0.47	3.03	29	9
1:A:47:TYR:CD1	1:A:48:GLY:N	0.47	2.82	43	3
1:A:71:THR:HG23	1:A:73:GLU:CG	0.47	2.37	33	2
1:A:85:THR:CB	1:A:93:LYS:HE2	0.47	2.39	42	1
1:A:80:LEU:HB3	1:A:97:CYS:CB	0.47	2.39	13	3
1:A:81:TRP:O	1:A:81:TRP:CD2	0.47	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:58:LEU:HD22	1:A:69:SER:HA	0.47	1.84	35	2
1:A:79:HIS:HB2	1:A:96:PHE:CE1	0.47	2.45	20	8
1:A:79:HIS:HB2	1:A:96:PHE:CD1	0.47	2.44	29	5
1:A:50:ASN:OD1	1:A:94:TYR:CD1	0.47	2.67	39	1
1:A:12:TYR:HB3	1:A:18:TRP:CE3	0.47	2.45	50	1
1:A:31:CYS:HB2	1:A:36:VAL:CG2	0.47	2.39	50	2
1:A:18:TRP:NE1	1:A:29:CYS:HB3	0.47	2.24	36	18
1:A:19:LEU:HD13	1:A:28:LEU:CA	0.47	2.33	29	1
1:A:12:TYR:CZ	1:A:18:TRP:HB3	0.47	2.45	46	1
1:A:62:TYR:CE2	1:A:73:GLU:CG	0.47	2.98	12	1
1:A:58:LEU:CG	1:A:60:PHE:CE2	0.47	2.98	2	3
1:A:17:GLN:HG2	1:A:30:THR:CG2	0.47	2.39	26	8
1:A:20:LYS:HD3	1:A:38:CYS:CB	0.47	2.39	27	2
1:A:3:HIS:CE1	1:A:5:VAL:HB	0.47	2.44	30	2
1:A:50:ASN:N	1:A:94:TYR:O	0.47	2.46	42	2
1:A:81:TRP:CH2	1:A:88:TYR:CE2	0.47	3.02	11	1
1:A:59:PRO:HB3	1:A:68:TYR:CE1	0.47	2.44	3	9
1:A:62:TYR:CD2	1:A:73:GLU:HG3	0.47	2.45	12	1
1:A:4:CYS:O	1:A:5:VAL:CG1	0.47	2.63	16	1
1:A:55:PRO:O	1:A:56:CYS:O	0.47	2.33	30	7
1:A:16:MET:HA	1:A:16:MET:HE2	0.47	1.87	36	1
1:A:28:LEU:HD21	1:A:68:TYR:HD2	0.47	1.70	55	2
1:A:17:GLN:CB	1:A:30:THR:HA	0.47	2.39	53	1
1:A:10:VAL:HG11	1:A:12:TYR:OH	0.47	2.10	6	1
1:A:65:ARG:NH1	1:A:73:GLU:OE2	0.47	2.48	17	1
1:A:60:PHE:CE2	1:A:67:PHE:HB2	0.47	2.44	49	1
1:A:84:THR:OG1	1:A:93:LYS:HG2	0.47	2.10	14	12
1:A:50:ASN:O	1:A:50:ASN:OD1	0.47	2.33	7	1
1:A:6:THR:O	1:A:7:ASP:OD2	0.47	2.33	10	1
1:A:68:TYR:O	1:A:69:SER:OG	0.47	2.33	47	5
1:A:16:MET:CE	1:A:16:MET:HA	0.47	2.39	36	1
1:A:28:LEU:HD12	1:A:68:TYR:CD1	0.47	2.45	44	2
1:A:88:TYR:O	1:A:92:GLN:NE2	0.46	2.48	1	1
1:A:45:GLN:O	1:A:46:THR:OG1	0.46	2.33	50	6
1:A:97:CYS:O	1:A:98:THR:C	0.46	2.54	27	4
1:A:62:TYR:CZ	1:A:74:GLY:CA	0.46	2.98	29	1
1:A:28:LEU:HD21	1:A:68:TYR:HE1	0.46	1.61	43	1
1:A:97:CYS:O	1:A:98:THR:O	0.46	2.33	46	1
1:A:19:LEU:CD1	1:A:59:PRO:HG3	0.46	2.41	55	1
1:A:18:TRP:CZ2	1:A:36:VAL:HG11	0.46	2.45	6	1
1:A:87:ASN:CB	1:A:90:GLN:OE1	0.46	2.63	48	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:LEU:HD12	1:A:28:LEU:CD1	0.46	2.40	52	1
1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:O	0.46	2.11	2	2
1:A:65:ARG:NE	1:A:67:PHE:CZ	0.46	2.83	12	1
1:A:19:LEU:CD1	1:A:28:LEU:HB2	0.46	2.41	1	10
1:A:45:GLN:O	1:A:46:THR:O	0.46	2.33	2	5
1:A:82:CYS:O	1:A:94:TYR:HB2	0.46	2.11	14	17
1:A:85:THR:CB	1:A:93:LYS:HE3	0.46	2.40	50	7
1:A:65:ARG:HG2	1:A:67:PHE:CZ	0.46	2.46	6	5
1:A:85:THR:HB	1:A:93:LYS:CE	0.46	2.40	28	4
1:A:69:SER:O	1:A:70:CYS:O	0.46	2.34	45	4
1:A:13:SER:O	1:A:31:CYS:SG	0.46	2.73	51	5
1:A:31:CYS:HA	1:A:36:VAL:CG2	0.46	2.40	55	2
1:A:4:CYS:SG	1:A:12:TYR:HB3	0.46	2.50	16	10
1:A:3:HIS:CE1	1:A:13:SER:HB3	0.46	2.46	7	1
1:A:48:GLY:HA2	1:A:53:GLY:N	0.46	2.26	52	1
1:A:81:TRP:CE3	1:A:81:TRP:C	0.46	2.89	8	1
1:A:52:ASN:O	1:A:52:ASN:OD1	0.46	2.34	48	5
1:A:84:THR:HG22	1:A:95:SER:OG	0.46	2.10	19	2
1:A:46:THR:OG1	1:A:53:GLY:O	0.46	2.34	25	1
1:A:32:LEU:HD21	1:A:37:SER:N	0.46	2.26	21	1
1:A:93:LYS:HE3	1:A:93:LYS:O	0.46	2.11	22	1
1:A:91:ASP:CG	1:A:93:LYS:CD	0.46	2.84	41	1
1:A:81:TRP:HA	1:A:95:SER:O	0.46	2.11	50	19
1:A:4:CYS:SG	1:A:13:SER:O	0.46	2.74	15	6
1:A:85:THR:CG2	1:A:93:LYS:HE3	0.46	2.41	4	3
1:A:93:LYS:O	1:A:93:LYS:CG	0.46	2.64	4	6
1:A:8:SER:OG	1:A:8:SER:O	0.46	2.33	26	3
1:A:6:THR:O	1:A:7:ASP:HB2	0.46	2.11	25	6
1:A:80:LEU:HB2	1:A:97:CYS:O	0.46	2.11	46	1
1:A:72:THR:CG2	1:A:79:HIS:O	0.46	2.63	11	4
1:A:58:LEU:HB3	1:A:59:PRO:HA	0.46	1.87	23	6
1:A:14:VAL:HG13	1:A:14:VAL:O	0.46	2.10	50	8
1:A:29:CYS:HA	1:A:38:CYS:CB	0.46	2.41	55	10
1:A:50:ASN:OD1	1:A:94:TYR:CE2	0.46	2.69	13	2
1:A:16:MET:O	1:A:16:MET:SD	0.46	2.74	36	1
1:A:50:ASN:CB	1:A:94:TYR:O	0.46	2.64	41	3
1:A:6:THR:HG22	1:A:12:TYR:CD2	0.46	2.46	49	1
1:A:28:LEU:HD12	1:A:68:TYR:CG	0.45	2.46	9	2
1:A:29:CYS:SG	1:A:37:SER:O	0.45	2.74	25	2
1:A:72:THR:HG23	1:A:79:HIS:C	0.45	2.31	54	2
1:A:85:THR:HG21	1:A:91:ASP:CG	0.45	2.31	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:TYR:CE2	1:A:18:TRP:CG	0.45	3.04	50	2
1:A:87:ASN:OD1	1:A:90:GLN:HB3	0.45	2.11	41	1
1:A:87:ASN:O	1:A:91:ASP:OD1	0.45	2.34	5	1
1:A:88:TYR:HA	1:A:93:LYS:NZ	0.45	2.26	22	2
1:A:62:TYR:O	1:A:63:ASN:CG	0.45	2.55	40	2
1:A:82:CYS:O	1:A:95:SER:N	0.45	2.44	41	4
1:A:53:GLY:O	1:A:54:GLU:O	0.45	2.33	38	2
1:A:91:ASP:O	1:A:92:GLN:HB3	0.45	2.12	31	4
1:A:45:GLN:O	1:A:97:CYS:SG	0.45	2.74	13	6
1:A:73:GLU:HG2	1:A:74:GLY:N	0.45	2.26	12	1
1:A:27:MET:SD	1:A:39:GLN:O	0.45	2.74	43	1
1:A:19:LEU:HG	1:A:20:LYS:N	0.45	2.27	41	3
1:A:91:ASP:OD1	1:A:93:LYS:HG2	0.45	2.12	51	1
1:A:47:TYR:CD2	1:A:98:THR:HG23	0.45	2.47	34	1
1:A:54:GLU:HB3	1:A:55:PRO:CD	0.45	2.42	54	2
1:A:54:GLU:OE2	1:A:55:PRO:O	0.45	2.35	15	1
1:A:6:THR:O	1:A:7:ASP:OD1	0.45	2.35	19	1
1:A:3:HIS:CE1	1:A:13:SER:HG	0.45	2.29	26	2
1:A:85:THR:CG2	1:A:93:LYS:HE2	0.45	2.41	39	2
1:A:37:SER:O	1:A:38:CYS:SG	0.45	2.75	43	1
1:A:5:VAL:CG2	1:A:11:VAL:HG13	0.45	2.40	45	1
1:A:58:LEU:CB	1:A:59:PRO:CA	0.45	2.95	23	3
1:A:80:LEU:CB	1:A:97:CYS:HB3	0.45	2.42	20	2
1:A:90:GLN:NE2	1:A:90:GLN:O	0.45	2.49	7	1
1:A:84:THR:OG1	1:A:93:LYS:HE3	0.45	2.10	9	1
1:A:91:ASP:CB	1:A:93:LYS:HD3	0.45	2.41	11	2
1:A:20:LYS:HG3	1:A:27:MET:CB	0.45	2.41	43	1
1:A:19:LEU:CG	1:A:68:TYR:CZ	0.45	3.00	47	1
1:A:91:ASP:O	1:A:92:GLN:HB2	0.45	2.12	15	8
1:A:10:VAL:CG1	1:A:11:VAL:N	0.45	2.80	23	2
1:A:62:TYR:OH	1:A:74:GLY:HA2	0.45	2.12	53	5
1:A:19:LEU:CG	1:A:68:TYR:CE2	0.45	3.00	29	1
1:A:62:TYR:O	1:A:63:ASN:ND2	0.45	2.50	40	1
1:A:90:GLN:HG3	1:A:91:ASP:N	0.45	2.27	21	9
1:A:84:THR:OG1	1:A:93:LYS:HE2	0.45	2.12	48	7
1:A:4:CYS:HB2	1:A:12:TYR:O	0.45	2.12	49	3
1:A:65:ARG:CZ	1:A:73:GLU:OE2	0.45	2.65	17	1
1:A:49:GLY:CA	1:A:96:PHE:CD2	0.45	3.00	50	2
1:A:17:GLN:HB3	1:A:30:THR:CB	0.45	2.42	53	2
1:A:51:SER:OG	1:A:54:GLU:OE2	0.45	2.34	26	1
1:A:51:SER:OG	1:A:54:GLU:OE1	0.45	2.34	35	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:LEU:HG	1:A:35:GLY:O	0.45	2.11	39	2
1:A:81:TRP:HB2	1:A:95:SER:O	0.45	2.12	46	12
1:A:54:GLU:OE1	1:A:55:PRO:HD2	0.45	2.12	20	1
1:A:20:LYS:CD	1:A:38:CYS:SG	0.45	3.05	32	1
1:A:90:GLN:CA	1:A:90:GLN:OE1	0.45	2.65	32	1
1:A:62:TYR:CD2	1:A:63:ASN:OD1	0.45	2.70	40	1
1:A:54:GLU:HG2	1:A:84:THR:CG2	0.44	2.42	1	6
1:A:30:THR:O	1:A:36:VAL:CG1	0.44	2.63	14	1
1:A:65:ARG:HD2	1:A:67:PHE:CE2	0.44	2.47	38	1
1:A:58:LEU:HA	1:A:60:PHE:N	0.44	2.27	54	1
1:A:50:ASN:OD1	1:A:50:ASN:N	0.44	2.50	13	1
1:A:54:GLU:CB	1:A:55:PRO:HD2	0.44	2.42	28	2
1:A:45:GLN:CG	1:A:98:THR:HG23	0.44	2.42	33	1
1:A:80:LEU:CB	1:A:97:CYS:HB2	0.44	2.41	34	3
1:A:57:VAL:HG22	1:A:57:VAL:O	0.44	2.12	49	1
1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:PHE:CE2	0.44	2.47	53	1
1:A:6:THR:O	1:A:8:SER:N	0.44	2.49	24	1
1:A:84:THR:OG1	1:A:93:LYS:O	0.44	2.32	8	2
1:A:5:VAL:CG2	1:A:6:THR:N	0.44	2.76	16	1
1:A:51:SER:OG	1:A:52:ASN:N	0.44	2.51	49	1
1:A:19:LEU:HD12	1:A:28:LEU:HD13	0.44	1.88	52	1
1:A:91:ASP:OD1	1:A:93:LYS:NZ	0.44	2.43	7	1
1:A:17:GLN:HB3	1:A:30:THR:CG2	0.44	2.43	48	3
1:A:65:ARG:NH1	1:A:73:GLU:OE1	0.44	2.50	40	1
1:A:28:LEU:HD21	1:A:68:TYR:CD1	0.44	2.42	43	1
1:A:62:TYR:CD1	1:A:88:TYR:CE1	0.44	3.06	46	1
1:A:7:ASP:O	1:A:8:SER:HB2	0.44	2.13	14	9
1:A:27:MET:SD	1:A:38:CYS:HB3	0.44	2.53	49	10
1:A:91:ASP:HB3	1:A:93:LYS:HD3	0.44	1.89	28	3
1:A:84:THR:OG1	1:A:93:LYS:C	0.44	2.55	49	1
1:A:80:LEU:CD1	1:A:80:LEU:N	0.44	2.81	42	3
1:A:53:GLY:O	1:A:54:GLU:CB	0.44	2.64	9	1
1:A:56:CYS:SG	1:A:58:LEU:HD11	0.44	2.53	17	1
1:A:6:THR:HG23	1:A:6:THR:O	0.44	2.13	42	1
1:A:67:PHE:CE2	1:A:71:THR:HG21	0.44	2.48	44	1
1:A:60:PHE:CD2	1:A:83:SER:HB3	0.44	2.48	36	3
1:A:85:THR:OG1	1:A:93:LYS:HE2	0.44	2.13	42	3
1:A:85:THR:HB	1:A:93:LYS:HE3	0.44	1.89	35	1
1:A:59:PRO:HB2	1:A:66:THR:CG2	0.44	2.42	45	2
1:A:20:LYS:HA	1:A:20:LYS:CE	0.44	2.42	47	1
1:A:91:ASP:O	1:A:93:LYS:HD3	0.44	2.13	20	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:THR:O	1:A:6:THR:CG2	0.44	2.64	5	1
1:A:17:GLN:OE1	1:A:66:THR:O	0.44	2.36	29	1
1:A:46:THR:HB	1:A:53:GLY:CA	0.44	2.43	24	2
1:A:47:TYR:CZ	1:A:96:PHE:CB	0.44	3.01	49	1
1:A:26:GLN:N	1:A:26:GLN:NE2	0.44	2.66	50	1
1:A:58:LEU:HD13	1:A:69:SER:CA	0.44	2.43	53	1
1:A:14:VAL:CG2	1:A:31:CYS:O	0.44	2.65	55	1
1:A:52:ASN:O	1:A:52:ASN:CG	0.44	2.56	18	9
1:A:54:GLU:HG3	1:A:55:PRO:N	0.44	2.27	23	1
1:A:68:TYR:C	1:A:69:SER:OG	0.44	2.56	53	2
1:A:19:LEU:HD13	1:A:68:TYR:CG	0.44	2.48	30	2
1:A:32:LEU:HD23	1:A:32:LEU:H	0.44	1.71	40	2
1:A:85:THR:OG1	1:A:93:LYS:HE3	0.43	2.12	6	2
1:A:48:GLY:O	1:A:52:ASN:HA	0.43	2.13	27	2
1:A:5:VAL:O	1:A:6:THR:C	0.43	2.56	32	2
1:A:47:TYR:O	1:A:48:GLY:C	0.43	2.57	30	5
1:A:4:CYS:SG	1:A:13:SER:C	0.43	2.97	51	27
1:A:58:LEU:HB2	1:A:59:PRO:HA	0.43	1.89	40	5
1:A:14:VAL:HA	1:A:31:CYS:SG	0.43	2.53	10	6
1:A:52:ASN:CG	1:A:52:ASN:O	0.43	2.57	29	10
1:A:6:THR:HG23	1:A:7:ASP:H	0.43	1.74	32	1
1:A:53:GLY:O	1:A:95:SER:OG	0.43	2.36	42	1
1:A:68:TYR:N	1:A:68:TYR:CD1	0.43	2.86	28	3
1:A:82:CYS:SG	1:A:95:SER:OG	0.43	2.74	13	1
1:A:56:CYS:HB3	1:A:58:LEU:HD13	0.43	1.89	22	1
1:A:85:THR:CG2	1:A:86:SER:N	0.43	2.81	22	3
1:A:82:CYS:O	1:A:94:TYR:HA	0.43	2.13	35	1
1:A:55:PRO:O	1:A:56:CYS:C	0.43	2.57	37	1
1:A:45:GLN:C	1:A:46:THR:OG1	0.43	2.56	48	3
1:A:26:GLN:NE2	1:A:58:LEU:O	0.43	2.51	46	1
1:A:3:HIS:CG	1:A:13:SER:HA	0.43	2.49	7	1
1:A:4:CYS:SG	1:A:12:TYR:C	0.43	2.97	54	8
1:A:20:LYS:CD	1:A:27:MET:HB3	0.43	2.43	25	1
1:A:19:LEU:HD12	1:A:68:TYR:CE2	0.43	2.48	54	1
1:A:50:ASN:HB2	1:A:94:TYR:CZ	0.43	2.47	34	1
1:A:27:MET:SD	1:A:38:CYS:HB2	0.43	2.54	3	4
1:A:80:LEU:O	1:A:96:PHE:HA	0.43	2.14	20	15
1:A:62:TYR:O	1:A:65:ARG:HD3	0.43	2.14	5	3
1:A:85:THR:O	1:A:86:SER:C	0.43	2.57	12	5
1:A:19:LEU:HB2	1:A:28:LEU:HD12	0.43	1.91	21	1
1:A:96:PHE:C	1:A:97:CYS:SG	0.43	2.97	24	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:SER:O	1:A:51:SER:OG	0.43	2.37	28	1
1:A:71:THR:HG21	1:A:73:GLU:HG2	0.43	1.90	45	1
1:A:32:LEU:CD2	1:A:37:SER:CB	0.43	2.96	49	1
1:A:91:ASP:O	1:A:91:ASP:OD1	0.43	2.36	41	1
1:A:65:ARG:HG3	1:A:66:THR:N	0.43	2.29	12	1
1:A:56:CYS:SG	1:A:83:SER:C	0.43	2.97	17	1
1:A:47:TYR:O	1:A:47:TYR:CD2	0.43	2.71	20	2
1:A:20:LYS:HD3	1:A:27:MET:O	0.43	2.14	25	1
1:A:51:SER:CB	1:A:54:GLU:HG3	0.43	2.43	31	1
1:A:62:TYR:CG	1:A:63:ASN:OD1	0.43	2.72	40	1
1:A:10:VAL:HG12	1:A:11:VAL:H	0.43	1.73	24	1
1:A:62:TYR:O	1:A:65:ARG:CD	0.43	2.67	14	1
1:A:88:TYR:CE2	1:A:94:TYR:HB3	0.43	2.48	47	2
1:A:93:LYS:O	1:A:93:LYS:HE2	0.43	2.13	48	1
1:A:18:TRP:O	1:A:19:LEU:CD2	0.43	2.67	55	1
1:A:46:THR:HB	1:A:96:PHE:O	0.43	2.14	4	1
1:A:32:LEU:CD2	1:A:37:SER:N	0.43	2.82	21	1
1:A:28:LEU:O	1:A:38:CYS:CB	0.43	2.66	38	3
1:A:85:THR:HB	1:A:93:LYS:HE2	0.43	1.91	28	2
1:A:81:TRP:CA	1:A:95:SER:O	0.43	2.66	42	4
1:A:85:THR:HB	1:A:93:LYS:CD	0.43	2.44	28	3
1:A:50:ASN:HB2	1:A:94:TYR:CE1	0.43	2.48	12	1
1:A:91:ASP:HB3	1:A:93:LYS:CG	0.43	2.44	15	1
1:A:12:TYR:HA	1:A:16:MET:CE	0.43	2.43	52	4
1:A:12:TYR:HA	1:A:16:MET:HE2	0.43	1.89	51	1
1:A:27:MET:SD	1:A:29:CYS:SG	0.43	3.16	34	1
1:A:37:SER:C	1:A:38:CYS:SG	0.43	2.97	1	1
1:A:46:THR:OG1	1:A:53:GLY:HA2	0.43	2.13	35	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:68:TYR:CE1	0.43	3.01	50	1
1:A:51:SER:O	1:A:52:ASN:HB2	0.42	2.14	37	5
1:A:10:VAL:HG12	1:A:12:TYR:CE2	0.42	2.49	10	1
1:A:39:GLN:HA	1:A:39:GLN:NE2	0.42	2.28	18	1
1:A:17:GLN:HG2	1:A:30:THR:OG1	0.42	2.14	38	3
1:A:6:THR:O	1:A:7:ASP:C	0.42	2.57	44	1
1:A:46:THR:CG2	1:A:95:SER:HB2	0.42	2.44	54	1
1:A:3:HIS:HA	1:A:12:TYR:O	0.42	2.15	21	1
1:A:88:TYR:O	1:A:92:GLN:HA	0.42	2.15	35	1
1:A:18:TRP:CZ3	1:A:31:CYS:HB2	0.42	2.49	40	1
1:A:71:THR:OG1	1:A:73:GLU:OE1	0.42	2.38	43	1
1:A:20:LYS:HB3	1:A:27:MET:O	0.42	2.13	52	1
1:A:28:LEU:HD11	1:A:68:TYR:HD2	0.42	1.75	30	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:5:VAL:CG2	1:A:10:VAL:O	0.42	2.66	8	2
1:A:58:LEU:HA	1:A:59:PRO:C	0.42	2.35	8	5
1:A:51:SER:OG	1:A:54:GLU:HG3	0.42	2.14	12	1
1:A:46:THR:HA	1:A:96:PHE:O	0.42	2.14	14	2
1:A:73:GLU:C	1:A:73:GLU:OE1	0.42	2.57	33	1
1:A:15:GLY:N	1:A:31:CYS:O	0.42	2.52	40	1
1:A:87:ASN:HB3	1:A:90:GLN:OE1	0.42	2.15	48	1
1:A:19:LEU:HG	1:A:59:PRO:CG	0.42	2.45	55	1
1:A:50:ASN:HB2	1:A:94:TYR:O	0.42	2.13	24	1
1:A:57:VAL:N	1:A:58:LEU:HD13	0.42	2.29	43	3
1:A:4:CYS:C	1:A:5:VAL:CG1	0.42	2.87	16	1
1:A:6:THR:CG2	1:A:12:TYR:CD2	0.42	3.02	49	1
1:A:17:GLN:HB3	1:A:30:THR:OG1	0.42	2.15	18	2
1:A:56:CYS:HB3	1:A:83:SER:O	0.42	2.14	18	2
1:A:31:CYS:CB	1:A:36:VAL:CG2	0.42	2.97	27	1
1:A:48:GLY:N	1:A:52:ASN:O	0.42	2.53	27	1
1:A:4:CYS:O	1:A:12:TYR:O	0.42	2.37	28	1
1:A:20:LYS:CD	1:A:29:CYS:HB2	0.42	2.44	32	1
1:A:63:ASN:O	1:A:65:ARG:NH2	0.42	2.53	11	1
1:A:70:CYS:SG	1:A:81:TRP:C	0.42	2.97	31	2
1:A:92:GLN:NE2	1:A:92:GLN:HA	0.42	2.29	29	1
1:A:85:THR:HG22	1:A:93:LYS:HZ1	0.42	1.73	39	1
1:A:69:SER:OG	1:A:70:CYS:N	0.42	2.52	3	2
1:A:46:THR:O	1:A:47:TYR:HB3	0.42	2.15	7	1
1:A:91:ASP:O	1:A:93:LYS:CD	0.42	2.68	16	2
1:A:70:CYS:HA	1:A:81:TRP:O	0.42	2.14	39	4
1:A:27:MET:HB3	1:A:39:GLN:O	0.42	2.14	48	1
1:A:6:THR:O	1:A:7:ASP:HB3	0.42	2.14	52	2
1:A:5:VAL:HG22	1:A:7:ASP:H	0.42	1.74	6	1
1:A:68:TYR:O	1:A:69:SER:HB2	0.42	2.15	3	2
1:A:93:LYS:O	1:A:93:LYS:HD3	0.42	2.15	6	1
1:A:56:CYS:SG	1:A:83:SER:N	0.42	2.92	17	1
1:A:8:SER:O	1:A:8:SER:OG	0.41	2.38	3	1
1:A:26:GLN:CD	1:A:26:GLN:N	0.41	2.73	10	1
1:A:13:SER:HB2	1:A:16:MET:CG	0.41	2.44	22	1
1:A:79:HIS:O	1:A:80:LEU:C	0.41	2.58	31	1
1:A:82:CYS:O	1:A:94:TYR:CA	0.41	2.68	35	1
1:A:88:TYR:HA	1:A:93:LYS:HZ2	0.41	1.75	44	1
1:A:70:CYS:O	1:A:71:THR:HB	0.41	2.15	45	1
1:A:53:GLY:O	1:A:54:GLU:OE2	0.41	2.37	55	1
1:A:18:TRP:O	1:A:29:CYS:O	0.41	2.38	41	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:CYS:HA	1:A:38:CYS:HB3	0.41	1.91	10	7
1:A:47:TYR:CG	1:A:47:TYR:O	0.41	2.73	22	1
1:A:20:LYS:HD3	1:A:38:CYS:SG	0.41	2.55	32	1
1:A:12:TYR:HB2	1:A:18:TRP:CZ3	0.41	2.50	50	1
1:A:4:CYS:O	1:A:12:TYR:HB2	0.41	2.15	51	2
1:A:58:LEU:HB3	1:A:60:PHE:CE2	0.41	2.50	5	2
1:A:26:GLN:N	1:A:26:GLN:OE1	0.41	2.53	10	1
1:A:85:THR:C	1:A:87:ASN:N	0.41	2.73	12	1
1:A:6:THR:C	1:A:7:ASP:OD1	0.41	2.59	18	1
1:A:18:TRP:CH2	1:A:31:CYS:HB2	0.41	2.50	40	1
1:A:7:ASP:O	1:A:7:ASP:OD1	0.41	2.37	52	1
1:A:65:ARG:NH2	1:A:73:GLU:OE1	0.41	2.52	6	1
1:A:62:TYR:O	1:A:63:ASN:HB2	0.41	2.15	23	5
1:A:80:LEU:HB3	1:A:97:CYS:HB2	0.41	1.92	9	2
1:A:27:MET:HG3	1:A:39:GLN:O	0.41	2.14	16	1
1:A:28:LEU:CD2	1:A:68:TYR:CD1	0.41	3.03	43	1
1:A:32:LEU:CD2	1:A:37:SER:HB2	0.41	2.45	49	1
1:A:62:TYR:OH	1:A:74:GLY:HA3	0.41	2.14	34	1
1:A:80:LEU:N	1:A:80:LEU:CD1	0.41	2.83	34	1
1:A:85:THR:O	1:A:93:LYS:NZ	0.41	2.53	41	1
1:A:87:ASN:OD1	1:A:90:GLN:HG3	0.41	2.15	9	1
1:A:28:LEU:HD11	1:A:68:TYR:HB3	0.41	1.92	3	2
1:A:47:TYR:HA	1:A:52:ASN:O	0.41	2.15	3	1
1:A:81:TRP:CB	1:A:95:SER:O	0.41	2.68	3	2
1:A:14:VAL:CA	1:A:31:CYS:SG	0.41	3.08	10	1
1:A:27:MET:C	1:A:27:MET:SD	0.41	2.98	28	1
1:A:45:GLN:C	1:A:46:THR:CG2	0.41	2.89	47	1
1:A:20:LYS:HB2	1:A:29:CYS:SG	0.41	2.56	20	1
1:A:5:VAL:O	1:A:6:THR:O	0.41	2.39	36	1
1:A:70:CYS:SG	1:A:82:CYS:SG	0.41	3.18	37	1
1:A:93:LYS:CD	1:A:93:LYS:O	0.41	2.69	50	1
1:A:20:LYS:HD2	1:A:29:CYS:SG	0.41	2.56	55	1
1:A:87:ASN:OD1	1:A:90:GLN:HG2	0.41	2.16	41	1
1:A:5:VAL:C	1:A:6:THR:CG2	0.41	2.88	3	1
1:A:57:VAL:HG12	1:A:83:SER:HB3	0.41	1.93	9	1
1:A:91:ASP:CG	1:A:93:LYS:HG2	0.41	2.36	9	1
1:A:87:ASN:O	1:A:91:ASP:HB2	0.41	2.16	36	2
1:A:59:PRO:CB	1:A:68:TYR:CD1	0.41	3.03	18	1
1:A:86:SER:O	1:A:88:TYR:N	0.41	2.54	19	1
1:A:79:HIS:N	1:A:79:HIS:CD2	0.41	2.87	21	1
1:A:4:CYS:CB	1:A:36:VAL:CG2	0.41	2.99	29	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:ASN:HB3	1:A:94:TYR:O	0.41	2.16	48	1
1:A:14:VAL:HA	1:A:31:CYS:O	0.41	2.17	10	2
1:A:4:CYS:O	1:A:5:VAL:HG12	0.41	2.16	16	1
1:A:65:ARG:NH2	1:A:73:GLU:OE2	0.41	2.54	17	1
1:A:65:ARG:CZ	1:A:73:GLU:OE1	0.41	2.68	20	1
1:A:91:ASP:OD2	1:A:93:LYS:NZ	0.41	2.48	31	1
1:A:14:VAL:HG23	1:A:32:LEU:C	0.41	2.35	40	2
1:A:19:LEU:HD11	1:A:68:TYR:CE1	0.41	2.50	54	1
1:A:85:THR:CB	1:A:93:LYS:CE	0.40	2.99	50	2
1:A:71:THR:O	1:A:80:LEU:HA	0.40	2.16	12	1
1:A:50:ASN:HB2	1:A:94:TYR:CD1	0.40	2.52	12	1
1:A:27:MET:HG3	1:A:39:GLN:C	0.40	2.36	16	1
1:A:84:THR:OG1	1:A:93:LYS:HB3	0.40	2.16	18	1
1:A:20:LYS:CG	1:A:27:MET:CB	0.40	2.99	43	1
1:A:46:THR:OG1	1:A:53:GLY:HA3	0.40	2.16	27	1
1:A:48:GLY:HA3	1:A:52:ASN:CA	0.40	2.46	52	1
1:A:51:SER:HB3	1:A:54:GLU:OE1	0.40	2.17	1	1
1:A:46:THR:CB	1:A:96:PHE:O	0.40	2.69	4	1
1:A:87:ASN:OD1	1:A:90:GLN:HB2	0.40	2.15	9	1
1:A:50:ASN:HB2	1:A:94:TYR:CD2	0.40	2.51	25	1
1:A:91:ASP:HB2	1:A:93:LYS:CE	0.40	2.45	39	1
1:A:45:GLN:O	1:A:97:CYS:HA	0.40	2.16	43	1
1:A:79:HIS:N	1:A:79:HIS:ND1	0.40	2.69	50	1
1:A:7:ASP:O	1:A:8:SER:HB3	0.40	2.15	3	2
1:A:47:TYR:CD1	1:A:96:PHE:HB3	0.40	2.52	21	1
1:A:20:LYS:HB3	1:A:27:MET:SD	0.40	2.57	35	1
1:A:56:CYS:HB2	1:A:58:LEU:CD2	0.40	2.38	49	1
1:A:20:LYS:CA	1:A:27:MET:O	0.40	2.69	52	1
1:A:91:ASP:OD2	1:A:93:LYS:HD2	0.40	2.16	41	1
1:A:88:TYR:O	1:A:92:GLN:OE1	0.40	2.40	20	1
1:A:60:PHE:O	1:A:66:THR:HA	0.40	2.16	36	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	82/101 (81%)	59±3 (72±4%)	15±3 (19±4%)	7±2 (9±3%)	1 11
All	All	4510/5555 (81%)	3255 (72%)	843 (19%)	412 (9%)	1 11

All 36 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	14	VAL	51
1	A	32	LEU	39
1	A	17	GLN	39
1	A	33	GLY	37
1	A	8	SER	30
1	A	9	GLY	23
1	A	56	CYS	22
1	A	98	THR	22
1	A	70	CYS	18
1	A	7	ASP	15
1	A	69	SER	14
1	A	52	ASN	14
1	A	53	GLY	11
1	A	57	VAL	11
1	A	46	THR	8
1	A	74	GLY	6
1	A	55	PRO	6
1	A	6	THR	6
1	A	12	TYR	5
1	A	3	HIS	4
1	A	10	VAL	4
1	A	48	GLY	4
1	A	13	SER	3
1	A	11	VAL	3
1	A	86	SER	3
1	A	27	MET	2
1	A	45	GLN	2
1	A	54	GLU	2
1	A	64	GLY	1
1	A	35	GLY	1
1	A	87	ASN	1
1	A	92	GLN	1
1	A	49	GLY	1
1	A	5	VAL	1
1	A	36	VAL	1
1	A	80	LEU	1

6.3.2 Protein sidechains (i)

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	73/88 (83%)	51±3 (69±4%)	22±3 (31±4%)	1 15
All	All	4015/4840 (83%)	2784 (69%)	1231 (31%)	1 15

All 59 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	32	LEU	55
1	A	61	THR	55
1	A	58	LEU	55
1	A	95	SER	52
1	A	93	LYS	50
1	A	4	CYS	48
1	A	67	PHE	43
1	A	28	LEU	40
1	A	86	SER	40
1	A	20	LYS	37
1	A	16	MET	36
1	A	69	SER	35
1	A	27	MET	35
1	A	50	ASN	35
1	A	98	THR	35
1	A	65	ARG	33
1	A	87	ASN	32
1	A	51	SER	28
1	A	92	GLN	28
1	A	91	ASP	26
1	A	79	HIS	25
1	A	39	GLN	24
1	A	97	CYS	23
1	A	7	ASP	23
1	A	34	ASN	22
1	A	72	THR	22
1	A	85	THR	20
1	A	17	GLN	19
1	A	26	GLN	19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	38	CYS	18
1	A	6	THR	16
1	A	63	ASN	15
1	A	88	TYR	14
1	A	54	GLU	14
1	A	3	HIS	12
1	A	19	LEU	12
1	A	13	SER	12
1	A	8	SER	12
1	A	90	GLN	11
1	A	47	TYR	11
1	A	83	SER	10
1	A	5	VAL	10
1	A	46	THR	9
1	A	10	VAL	9
1	A	45	GLN	9
1	A	73	GLU	8
1	A	37	SER	5
1	A	66	THR	4
1	A	89	GLU	4
1	A	60	PHE	4
1	A	82	CYS	3
1	A	70	CYS	3
1	A	84	THR	3
1	A	52	ASN	3
1	A	56	CYS	1
1	A	96	PHE	1
1	A	36	VAL	1
1	A	80	LEU	1
1	A	29	CYS	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

There are no ligands in this entry.

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

No chemical shift data were provided