



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 6, 2026 – 10:09 AM UTC

PDB ID : 1GKG / pdb_00001gkg
Title : Structure Determination and Rational Mutagenesis reveal binding surface of immune adherence receptor, CR1 (CD35)
Authors : Smith, B.O.; Mallin, R.L.; Krych-Goldberg, M.; Wang, X.; Hauhart, R.E.; Bromek, K.; Uhrin, D.; Atkinson, J.P.; Barlow, P.N.
Deposited on : 2001-08-14

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

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

MolProbity	:	4-5-2 with Phenix2.0
Percentile statistics	:	20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.49

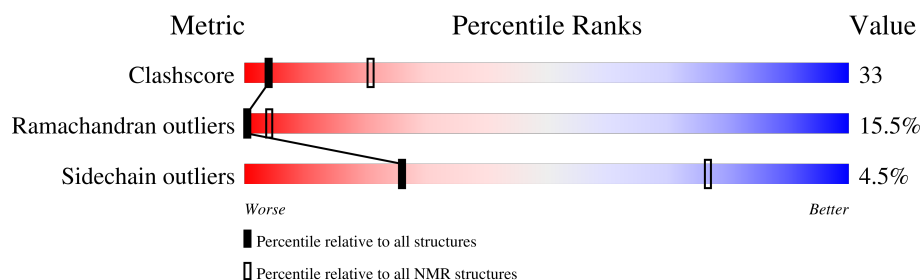
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

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	229148	14424
Ramachandran outliers	224038	12848
Sidechain outliers	223484	12823

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the experimental data. The red, orange, yellow and green segments indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. A cyan segment indicates the fraction of residues that are not part of the well-defined cores, and a grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions $\leq 5\%$

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	136	 30% 65% ...

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 24 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:960-A:1092 (133)	2.36	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 4 clusters and 2 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 10, 11, 13, 15, 16
2	12, 17, 18, 21
3	9, 14, 19
4	20, 22
Single-model clusters	23; 24

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2023 atoms, of which 995 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	136	Total	C	H	N	O	S	0
			2023	637	995	184	198	9	

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

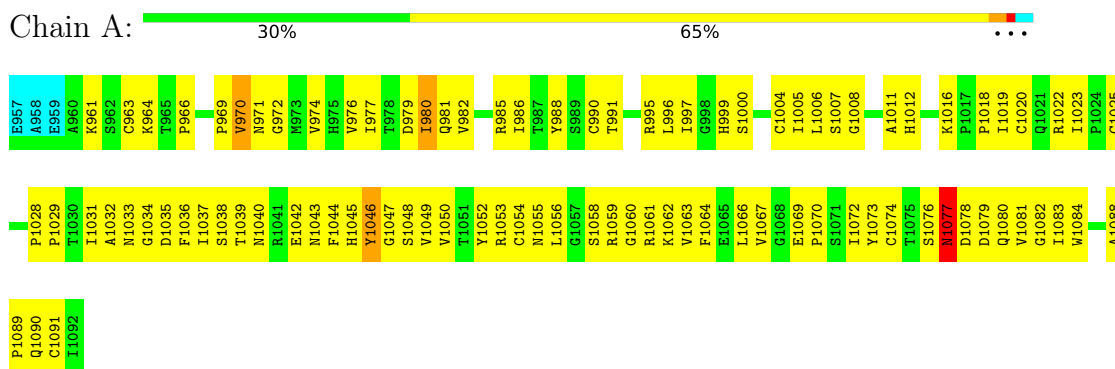
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	987	THR	ASN	engineered mutation	UNP P17927

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic is the same as shown in the summary in section 1 of this report. The second graphic shows the sequence where residues are colour-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. Stretches of 2 or more consecutive residues without any outliers are shown as green connectors. Residues which are classified as ill-defined in the NMR ensemble, are shown in cyan with an underline colour-coded according to the previous scheme. Residues which were present in the experimental sample, but not modelled in the final structure are shown in grey.

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

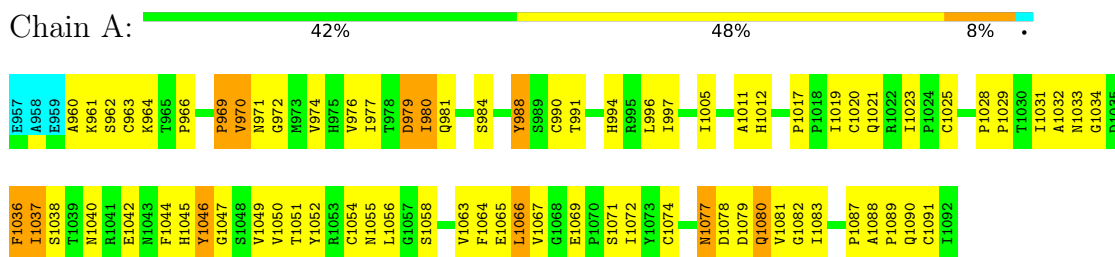


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

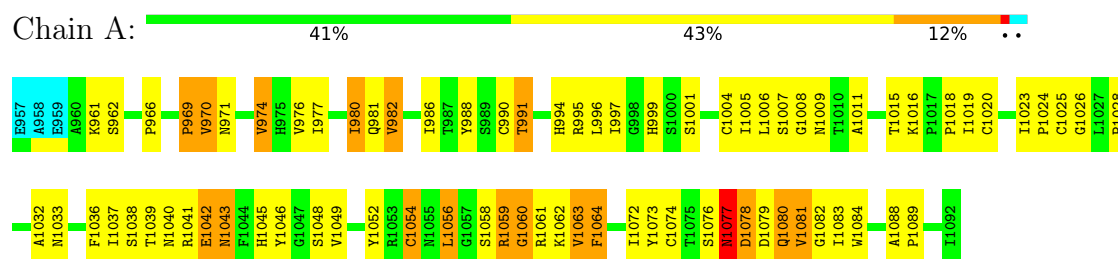
4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1



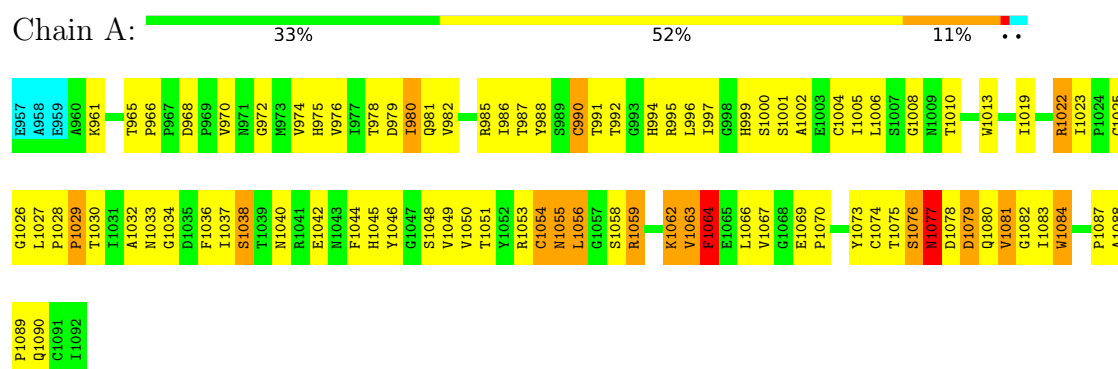
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1



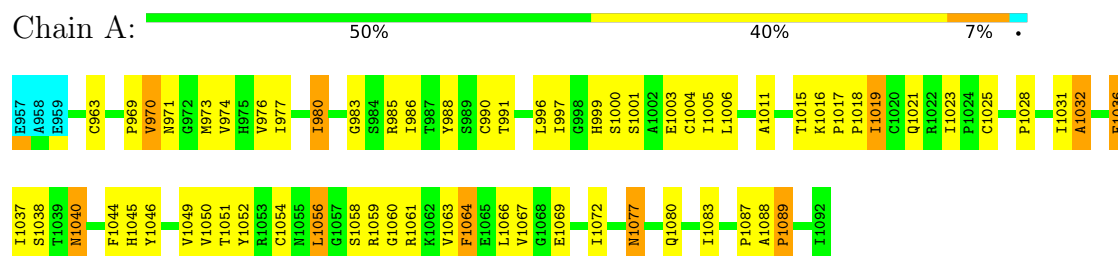
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1



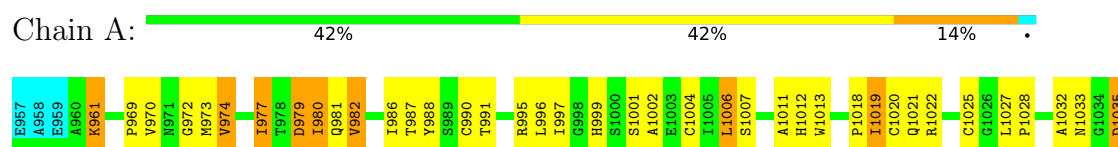
4.2.4 Score per residue for model 4

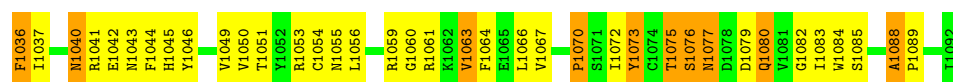
- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

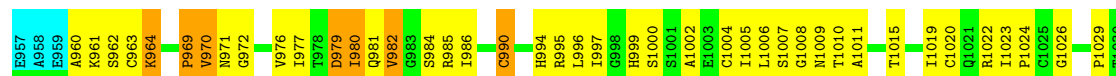




4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

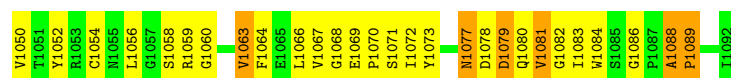
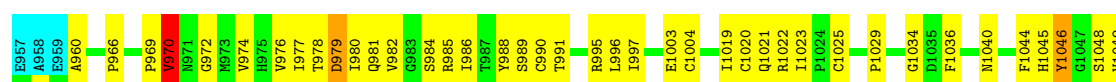
Chain A: 31% 53% 13% ..



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

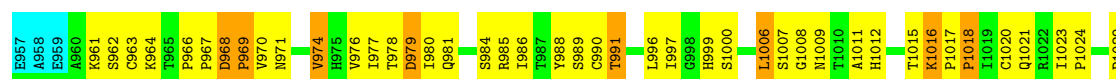
Chain A: 48% 43% 6% ..



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

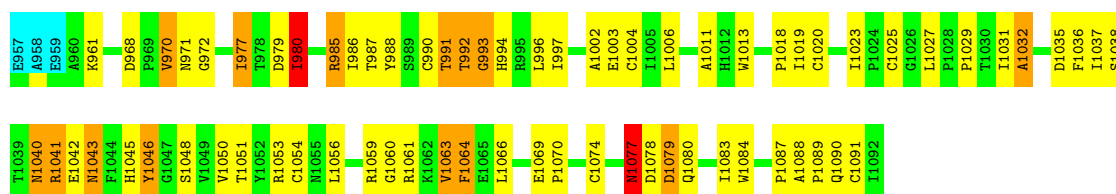
Chain A: 41% 46% 10% ..



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

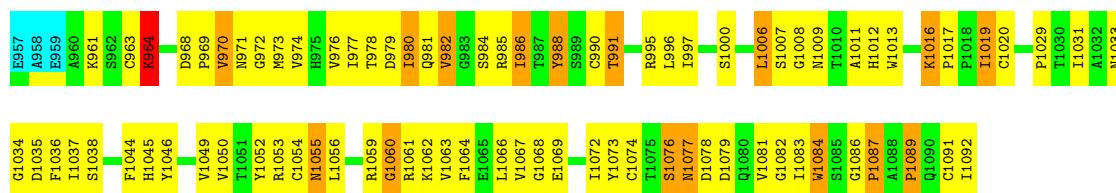
Chain A: 46% 40% 10% ..



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

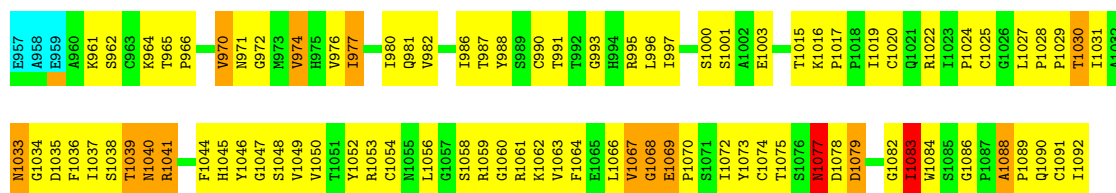
Chain A: 38% 48% 12% ..



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

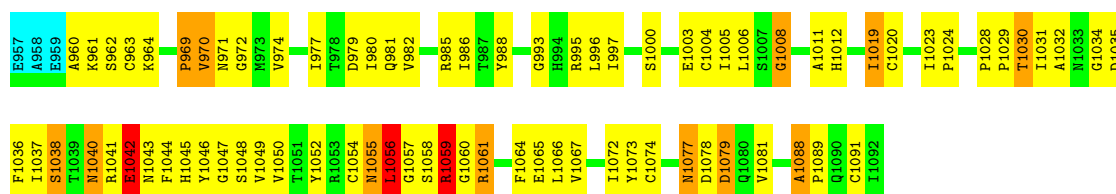
Chain A: 34% 53% 10% ..



4.2.12 Score per residue for model 12

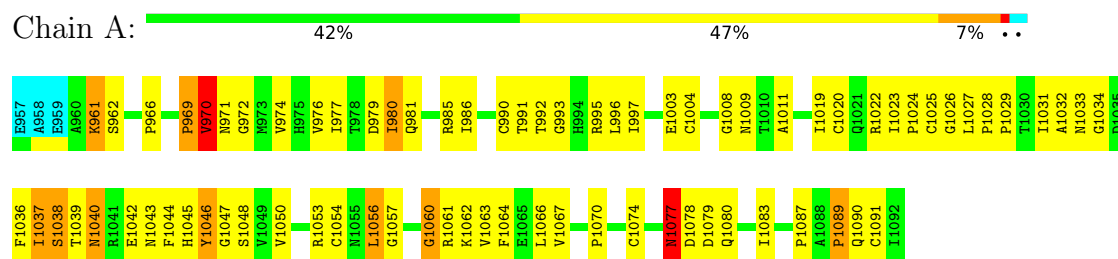
- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

Chain A: 40% 46% 9% ..



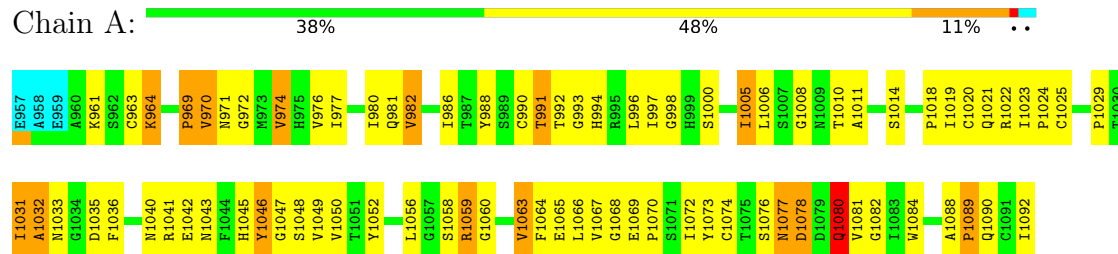
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1



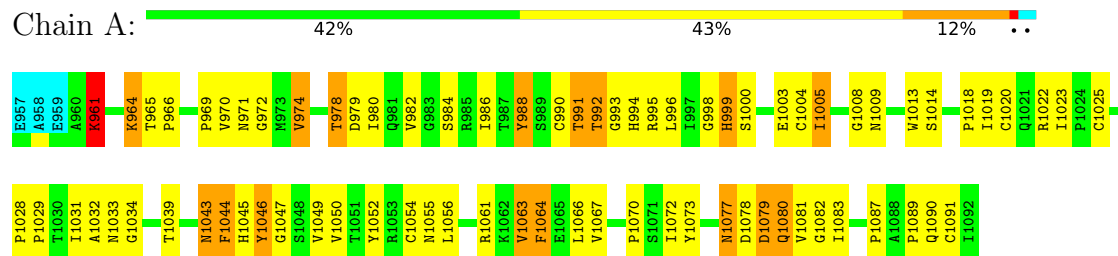
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1



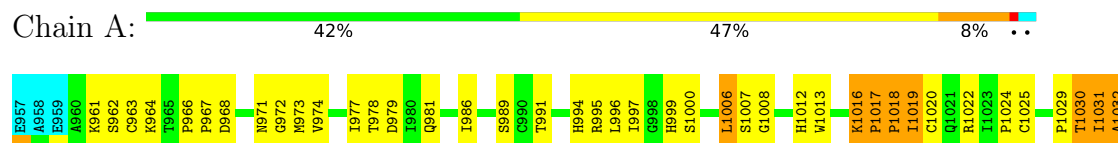
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1



4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

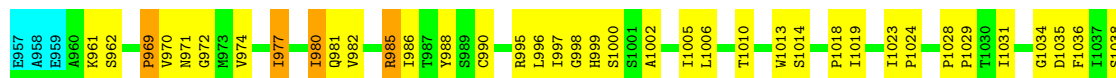




4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

Chain A: 41% 43% 12% ..



4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

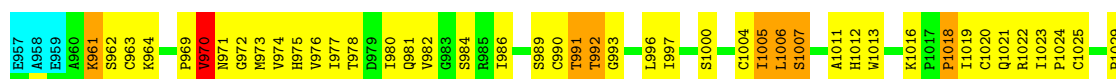
Chain A: 39% 53% 5% ..



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

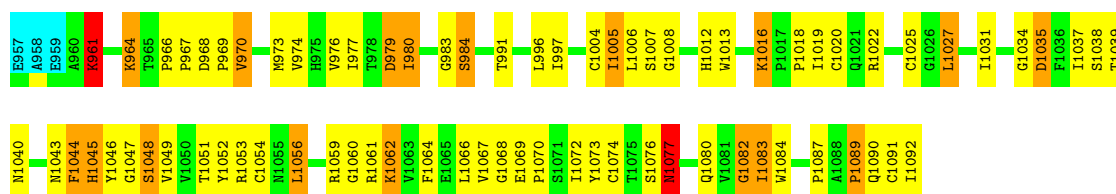
Chain A: 37% 48% 12% ..



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

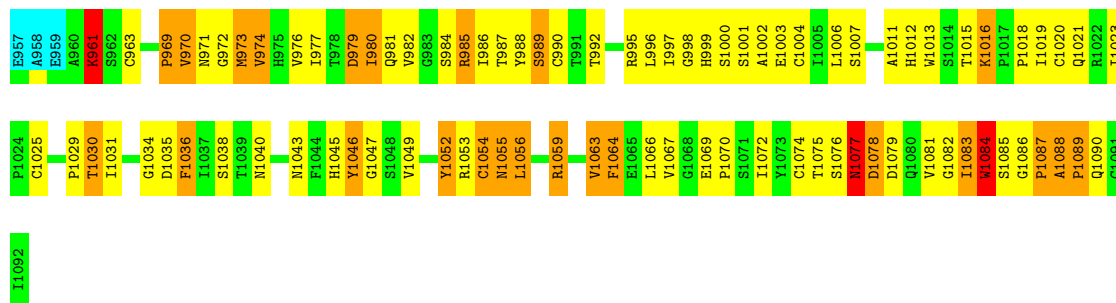
Chain A: 43% 41% 12% ..



4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

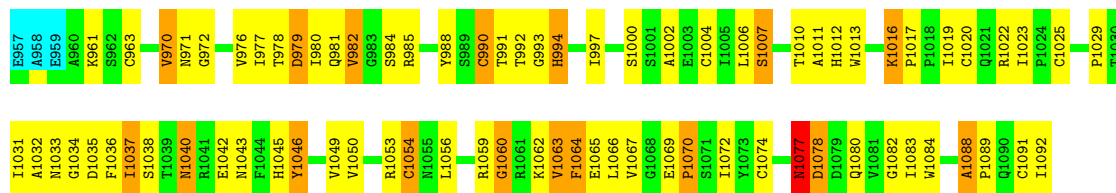
Chain A: 34% 44% 18% ..



4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

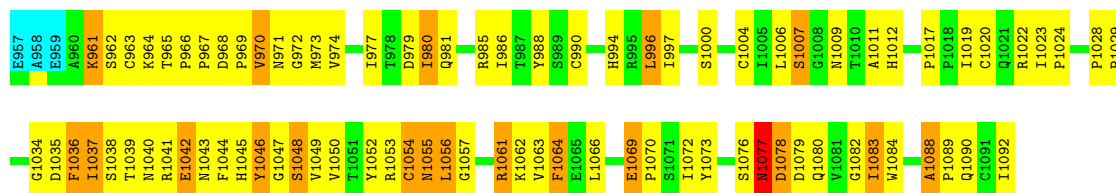
Chain A: 40% 44% 12% ..



4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

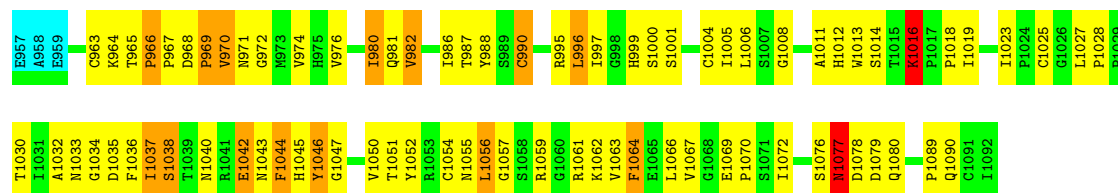
Chain A: 36% 47% 14% ..



4.2.24 Score per residue for model 24

• Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

Chain A: 40% 46% 10% ..



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *MOLECULAR DYNAMICS SIMULATED ANNEALING*.

Of the 120 calculated structures, 24 were deposited, based on the following criterion: *LOWEST ENERGY*.

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

Software name	Classification	Version
CNS	refinement	1.0
CNS	structure solution	1.0

No chemical shift data was provided.

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	0.31±0.01	0±0/1031 (0.0± 0.0%)	0.63±0.03	0±1/1405 (0.0± 0.0%)
All	All	0.31	0/24744 (0.0%)	0.63	7/33720 (0.0%)

There are no bond-length outliers.

All unique angle outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	1079	ASP	CB-CA-C	-5.26	110.53	116.63	6	4
1	A	1038	SER	CB-CA-C	-5.26	110.53	116.63	24	1
1	A	1056	LEU	CB-CA-C	-5.16	109.08	115.89	24	1
1	A	1040	ASN	CB-CA-C	-5.09	110.68	116.54	6	1

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts [i](#)

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	1005	976	971	66±11
All	All	24120	23424	23304	1584

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 33.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1076:SER:HB2	1:A:1081:VAL:HB	0.93	1.36	21	1
1:A:1049:VAL:HG12	1:A:1073:TYR:HB3	0.93	1.39	3	2
1:A:976:VAL:HG13	1:A:980:ILE:HG23	0.87	1.46	22	6
1:A:962:SER:HA	1:A:981:GLN:HA	0.84	1.50	19	9
1:A:996:LEU:HA	1:A:1020:CYS:HA	0.83	1.50	8	5
1:A:1066:LEU:HD23	1:A:1067:VAL:N	0.83	1.89	19	6
1:A:1077:ASN:HA	1:A:1083:ILE:HG12	0.82	1.49	5	1
1:A:1056:LEU:HB2	1:A:1063:VAL:HA	0.81	1.52	17	1
1:A:1053:ARG:HA	1:A:1066:LEU:HD22	0.80	1.53	13	1
1:A:966:PRO:HG2	1:A:974:VAL:HG11	0.80	1.54	23	10
1:A:1028:PRO:HB3	1:A:1072:ILE:HD11	0.78	1.56	23	2
1:A:974:VAL:HA	1:A:988:TYR:HB3	0.78	1.55	5	1
1:A:974:VAL:HG21	1:A:986:ILE:HD12	0.78	1.56	13	8
1:A:1091:CYS:O	1:A:1092:ILE:HG12	0.78	1.79	6	1
1:A:1029:PRO:HD3	1:A:1085:SER:HA	0.77	1.55	21	1
1:A:1075:THR:HG21	1:A:1084:TRP:H	0.76	1.38	21	1
1:A:1075:THR:HG21	1:A:1084:TRP:N	0.76	1.95	21	1
1:A:1056:LEU:HD22	1:A:1060:GLY:HA2	0.75	1.58	16	3
1:A:997:ILE:HB	1:A:1019:ILE:HB	0.75	1.56	19	2
1:A:1074:CYS:HA	1:A:1084:TRP:HA	0.74	1.58	9	8
1:A:990:CYS:HB2	1:A:996:LEU:HD12	0.74	1.58	11	1
1:A:970:VAL:HG11	1:A:1019:ILE:HA	0.74	1.59	24	1
1:A:1056:LEU:HD23	1:A:1060:GLY:C	0.74	2.08	2	1
1:A:1031:ILE:HD13	1:A:1089:PRO:HB2	0.73	1.59	1	2
1:A:1034:GLY:HA3	1:A:1054:CYS:HA	0.73	1.59	13	2
1:A:1049:VAL:HG22	1:A:1073:TYR:HB3	0.73	1.61	14	5
1:A:1077:ASN:HD21	1:A:1083:ILE:HD13	0.73	1.43	17	1
1:A:1054:CYS:HB2	1:A:1063:VAL:HG12	0.72	1.60	2	2
1:A:961:LYS:HD2	1:A:961:LYS:H	0.72	1.44	23	1
1:A:977:ILE:HD11	1:A:987:THR:HG23	0.72	1.60	11	1
1:A:1024:PRO:HA	1:A:1045:HIS:HA	0.72	1.60	2	3
1:A:1066:LEU:HD21	1:A:1070:PRO:HA	0.71	1.62	7	6
1:A:997:ILE:HB	1:A:1019:ILE:HG12	0.71	1.62	5	1
1:A:1037:ILE:HG22	1:A:1038:SER:H	0.71	1.46	24	3
1:A:1019:ILE:HG22	1:A:1020:CYS:H	0.70	1.46	1	2
1:A:1069:GLU:O	1:A:1089:PRO:HG3	0.70	1.86	1	6
1:A:1077:ASN:N	1:A:1077:ASN:HD22	0.70	1.84	21	9
1:A:1027:LEU:HD12	1:A:1028:PRO:HD2	0.70	1.61	13	1
1:A:1023:ILE:HG21	1:A:1077:ASN:HB2	0.70	1.61	18	1
1:A:1034:GLY:HA2	1:A:1054:CYS:HA	0.70	1.63	8	7
1:A:1037:ILE:HD11	1:A:1053:ARG:HD3	0.70	1.62	23	1
1:A:970:VAL:HG22	1:A:971:ASN:H	0.70	1.46	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1029:PRO:HG2	1:A:1087:PRO:HA	0.70	1.64	8	1
1:A:1031:ILE:HG21	1:A:1089:PRO:HD2	0.70	1.64	4	1
1:A:970:VAL:HG11	1:A:1019:ILE:HG13	0.70	1.64	22	1
1:A:1054:CYS:O	1:A:1056:LEU:HD22	0.69	1.86	22	1
1:A:1047:GLY:HA3	1:A:1074:CYS:HB3	0.69	1.63	20	1
1:A:988:TYR:HB2	1:A:1000:SER:HA	0.69	1.62	11	7
1:A:980:ILE:HG22	1:A:986:ILE:HG21	0.69	1.63	7	2
1:A:1067:VAL:HG12	1:A:1090:GLN:O	0.69	1.87	1	1
1:A:1037:ILE:HD12	1:A:1053:ARG:HD2	0.69	1.65	22	1
1:A:1036:PHE:HB2	1:A:1050:VAL:HG21	0.68	1.65	16	1
1:A:1064:PHE:HB3	1:A:1091:CYS:HB3	0.68	1.63	1	2
1:A:1068:GLY:HA3	1:A:1089:PRO:HA	0.68	1.64	11	1
1:A:985:ARG:HD2	1:A:986:ILE:N	0.68	2.02	23	1
1:A:997:ILE:HB	1:A:1019:ILE:HG13	0.68	1.65	16	8
1:A:1082:GLY:C	1:A:1083:ILE:HD13	0.68	2.13	21	2
1:A:1036:PHE:HB3	1:A:1050:VAL:HG13	0.68	1.65	14	1
1:A:976:VAL:HA	1:A:986:ILE:HG22	0.68	1.65	21	7
1:A:1056:LEU:HD21	1:A:1064:PHE:HB2	0.67	1.65	8	1
1:A:985:ARG:HB3	1:A:1003:GLU:HA	0.67	1.63	9	1
1:A:974:VAL:HB	1:A:986:ILE:HD12	0.67	1.65	10	1
1:A:1067:VAL:HB	1:A:1090:GLN:HE21	0.67	1.49	21	1
1:A:1077:ASN:ND2	1:A:1078:ASP:H	0.67	1.87	15	12
1:A:970:VAL:HG21	1:A:1019:ILE:HG13	0.67	1.66	14	2
1:A:1056:LEU:HA	1:A:1063:VAL:HG13	0.67	1.65	18	1
1:A:1031:ILE:HG22	1:A:1088:ALA:HB1	0.67	1.66	4	1
1:A:996:LEU:HD21	1:A:1000:SER:HB3	0.67	1.67	15	3
1:A:1046:TYR:HA	1:A:1074:CYS:SG	0.67	2.30	13	5
1:A:971:ASN:HB2	1:A:1020:CYS:HB3	0.67	1.66	16	2
1:A:1067:VAL:HB	1:A:1090:GLN:HB2	0.67	1.64	3	5
1:A:1068:GLY:O	1:A:1069:GLU:HB3	0.66	1.91	11	1
1:A:1029:PRO:HB2	1:A:1088:ALA:HB2	0.66	1.68	14	6
1:A:970:VAL:HG22	1:A:971:ASN:ND2	0.66	2.06	4	1
1:A:1078:ASP:HB2	1:A:1081:VAL:HG21	0.66	1.68	7	1
1:A:1049:VAL:HG23	1:A:1072:ILE:O	0.66	1.91	19	12
1:A:964:LYS:HE3	1:A:964:LYS:HA	0.66	1.67	18	3
1:A:970:VAL:HG13	1:A:971:ASN:N	0.66	2.05	2	2
1:A:972:GLY:HA2	1:A:990:CYS:HA	0.65	1.67	7	10
1:A:1067:VAL:HG21	1:A:1092:ILE:HD11	0.65	1.68	22	2
1:A:1077:ASN:HD21	1:A:1083:ILE:HG12	0.65	1.51	6	3
1:A:1025:CYS:HA	1:A:1082:GLY:HA3	0.65	1.68	15	8
1:A:1038:SER:HB2	1:A:1050:VAL:HA	0.65	1.67	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:970:VAL:HG11	1:A:1020:CYS:H	0.65	1.51	2	2
1:A:1016:LYS:HE3	1:A:1016:LYS:HA	0.65	1.68	24	1
1:A:961:LYS:HG3	1:A:1011:ALA:HB2	0.65	1.69	21	2
1:A:1023:ILE:HA	1:A:1080:GLN:HE22	0.65	1.50	23	1
1:A:963:CYS:SG	1:A:1011:ALA:HB1	0.64	2.32	8	10
1:A:1076:SER:HA	1:A:1082:GLY:HA2	0.64	1.68	6	2
1:A:990:CYS:SG	1:A:996:LEU:HG	0.64	2.32	19	3
1:A:1056:LEU:HD23	1:A:1063:VAL:HG23	0.64	1.68	24	1
1:A:1076:SER:CB	1:A:1081:VAL:HB	0.64	2.19	21	1
1:A:997:ILE:HD11	1:A:1021:GLN:HB2	0.64	1.69	4	1
1:A:1056:LEU:HD23	1:A:1060:GLY:HA3	0.64	1.70	17	1
1:A:985:ARG:HD3	1:A:986:ILE:N	0.64	2.08	21	1
1:A:965:THR:HA	1:A:980:ILE:HG21	0.64	1.69	23	1
1:A:1056:LEU:HG	1:A:1060:GLY:HA2	0.64	1.70	4	4
1:A:995:ARG:HG2	1:A:996:LEU:H	0.64	1.53	5	1
1:A:1077:ASN:ND2	1:A:1083:ILE:HD11	0.63	2.07	23	2
1:A:1023:ILE:HD13	1:A:1080:GLN:HA	0.63	1.68	13	1
1:A:962:SER:HB3	1:A:981:GLN:HG2	0.63	1.70	18	6
1:A:972:GLY:HA2	1:A:1020:CYS:SG	0.63	2.33	21	1
1:A:1002:ALA:HB1	1:A:1013:TRP:HB3	0.63	1.69	3	6
1:A:1056:LEU:HD22	1:A:1056:LEU:H	0.63	1.54	20	1
1:A:1088:ALA:N	1:A:1089:PRO:HD2	0.63	2.09	5	6
1:A:1064:PHE:HB3	1:A:1091:CYS:SG	0.62	2.34	18	8
1:A:1077:ASN:N	1:A:1077:ASN:ND2	0.62	2.46	21	6
1:A:1080:GLN:OE1	1:A:1081:VAL:HG23	0.62	1.93	14	1
1:A:1061:ARG:O	1:A:1063:VAL:HG13	0.62	1.94	8	1
1:A:1029:PRO:HG3	1:A:1087:PRO:HA	0.62	1.71	13	1
1:A:1046:TYR:O	1:A:1074:CYS:HB3	0.62	1.95	6	2
1:A:969:PRO:HD2	1:A:973:MET:HA	0.62	1.71	10	4
1:A:1056:LEU:HA	1:A:1063:VAL:HG23	0.62	1.70	3	3
1:A:1088:ALA:H	1:A:1089:PRO:HD2	0.62	1.53	17	5
1:A:1036:PHE:C	1:A:1037:ILE:HD12	0.62	2.20	12	1
1:A:1066:LEU:HD13	1:A:1067:VAL:N	0.61	2.09	12	2
1:A:1036:PHE:CD1	1:A:1050:VAL:HG23	0.61	2.31	12	2
1:A:995:ARG:HB2	1:A:1023:ILE:HG12	0.61	1.73	21	1
1:A:1049:VAL:HG22	1:A:1073:TYR:HA	0.61	1.73	2	1
1:A:1031:ILE:HG13	1:A:1034:GLY:O	0.61	1.96	13	1
1:A:1077:ASN:HD22	1:A:1078:ASP:H	0.61	1.39	16	15
1:A:1081:VAL:HG22	1:A:1082:GLY:N	0.61	2.11	17	1
1:A:961:LYS:HG2	1:A:1006:LEU:HD11	0.61	1.72	22	2
1:A:1036:PHE:HA	1:A:1051:THR:O	0.61	1.96	17	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1036:PHE:CB	1:A:1050:VAL:HG13	0.61	2.25	14	1
1:A:964:LYS:HA	1:A:964:LYS:HE2	0.60	1.72	6	1
1:A:1036:PHE:HB2	1:A:1050:VAL:HG23	0.60	1.71	7	2
1:A:997:ILE:HB	1:A:1019:ILE:O	0.60	1.96	3	8
1:A:1046:TYR:HE1	1:A:1081:VAL:HG11	0.60	1.55	21	1
1:A:997:ILE:HB	1:A:1019:ILE:HG23	0.60	1.72	22	6
1:A:1027:LEU:HD23	1:A:1027:LEU:H	0.60	1.57	20	1
1:A:1038:SER:HB3	1:A:1050:VAL:HA	0.60	1.72	9	4
1:A:1042:GLU:HA	1:A:1044:PHE:CE2	0.60	2.32	13	1
1:A:1023:ILE:HG12	1:A:1080:GLN:HG3	0.60	1.73	2	1
1:A:1052:TYR:OH	1:A:1072:ILE:HD13	0.60	1.96	20	2
1:A:1015:THR:O	1:A:1016:LYS:HG2	0.60	1.95	8	2
1:A:1036:PHE:HZ	1:A:1041:ARG:HA	0.60	1.55	23	1
1:A:1023:ILE:O	1:A:1046:TYR:HB2	0.60	1.96	17	3
1:A:981:GLN:O	1:A:982:VAL:HB	0.60	1.96	10	6
1:A:1072:ILE:HG13	1:A:1085:SER:HB2	0.60	1.74	5	1
1:A:1031:ILE:HD11	1:A:1091:CYS:HB2	0.60	1.73	15	1
1:A:992:THR:HG22	1:A:992:THR:O	0.60	1.96	22	1
1:A:1066:LEU:HD21	1:A:1070:PRO:HB3	0.59	1.74	17	7
1:A:1061:ARG:O	1:A:1062:LYS:HB3	0.59	1.96	17	2
1:A:1066:LEU:HD11	1:A:1069:GLU:O	0.59	1.97	4	1
1:A:1076:SER:OG	1:A:1077:ASN:ND2	0.59	2.35	21	1
1:A:1045:HIS:O	1:A:1047:GLY:N	0.59	2.35	20	3
1:A:961:LYS:HA	1:A:961:LYS:HE2	0.59	1.75	21	1
1:A:990:CYS:SG	1:A:996:LEU:HA	0.59	2.38	13	4
1:A:1036:PHE:HD1	1:A:1050:VAL:HG23	0.59	1.56	22	2
1:A:990:CYS:SG	1:A:996:LEU:HD13	0.59	2.37	21	1
1:A:996:LEU:HA	1:A:1020:CYS:SG	0.59	2.38	23	1
1:A:1055:ASN:O	1:A:1056:LEU:HG	0.59	1.97	15	4
1:A:1067:VAL:O	1:A:1089:PRO:HA	0.59	1.96	17	4
1:A:1056:LEU:HB3	1:A:1060:GLY:HA2	0.59	1.74	10	3
1:A:1056:LEU:O	1:A:1061:ARG:HA	0.59	1.96	23	1
1:A:1037:ILE:O	1:A:1050:VAL:HG23	0.59	1.98	5	2
1:A:960:ALA:C	1:A:961:LYS:HD2	0.59	2.23	6	1
1:A:1067:VAL:HB	1:A:1090:GLN:NE2	0.59	2.13	21	1
1:A:1025:CYS:SG	1:A:1046:TYR:HA	0.59	2.37	7	6
1:A:1038:SER:HB3	1:A:1050:VAL:HG12	0.59	1.73	3	1
1:A:1047:GLY:O	1:A:1048:SER:CB	0.59	2.51	18	2
1:A:1083:ILE:N	1:A:1083:ILE:HD13	0.59	2.12	23	2
1:A:996:LEU:HD12	1:A:997:ILE:N	0.58	2.13	21	6
1:A:1002:ALA:HB2	1:A:1015:THR:OG1	0.58	1.98	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:996:LEU:O	1:A:996:LEU:HD12	0.58	1.97	8	1
1:A:1056:LEU:CD2	1:A:1060:GLY:HA3	0.58	2.29	17	1
1:A:1045:HIS:O	1:A:1074:CYS:SG	0.58	2.61	21	2
1:A:1031:ILE:HD13	1:A:1088:ALA:HB1	0.58	1.74	11	1
1:A:990:CYS:SG	1:A:996:LEU:HD22	0.58	2.38	21	1
1:A:1077:ASN:HD21	1:A:1083:ILE:HB	0.58	1.59	15	2
1:A:1061:ARG:HD2	1:A:1061:ARG:N	0.58	2.13	9	1
1:A:970:VAL:HB	1:A:1020:CYS:H	0.58	1.58	15	3
1:A:1028:PRO:HG3	1:A:1040:ASN:HD21	0.58	1.58	18	2
1:A:1063:VAL:O	1:A:1064:PHE:HB2	0.58	1.98	18	6
1:A:996:LEU:HD11	1:A:1018:PRO:HB3	0.58	1.74	20	2
1:A:1061:ARG:HG2	1:A:1062:LYS:H	0.58	1.59	20	1
1:A:1056:LEU:HA	1:A:1063:VAL:CG1	0.58	2.29	15	1
1:A:1031:ILE:O	1:A:1031:ILE:HG13	0.58	1.98	12	2
1:A:970:VAL:HG21	1:A:1021:GLN:HA	0.58	1.75	21	1
1:A:1066:LEU:HD22	1:A:1067:VAL:H	0.58	1.57	12	1
1:A:1090:GLN:HG2	1:A:1092:ILE:HG12	0.58	1.74	23	1
1:A:1059:ARG:N	1:A:1059:ARG:HD3	0.57	2.13	12	1
1:A:1035:ASP:HB2	1:A:1055:ASN:HA	0.57	1.77	17	1
1:A:1005:ILE:HD13	1:A:1012:HIS:O	0.57	1.99	19	2
1:A:965:THR:HB	1:A:980:ILE:HD13	0.57	1.76	3	1
1:A:1016:LYS:NZ	1:A:1016:LYS:HB3	0.57	2.14	22	2
1:A:961:LYS:HE2	1:A:1010:THR:HA	0.57	1.76	22	1
1:A:1022:ARG:NH1	1:A:1046:TYR:HB3	0.57	2.15	15	1
1:A:1052:TYR:O	1:A:1053:ARG:HG2	0.57	2.00	23	1
1:A:961:LYS:HG3	1:A:1006:LEU:HD11	0.57	1.77	9	1
1:A:979:ASP:O	1:A:980:ILE:HG12	0.57	1.99	15	2
1:A:1084:TRP:CG	1:A:1085:SER:H	0.57	2.17	21	1
1:A:970:VAL:HG11	1:A:1020:CYS:N	0.57	2.14	2	2
1:A:1024:PRO:HA	1:A:1045:HIS:O	0.57	2.00	14	5
1:A:1037:ILE:HD11	1:A:1053:ARG:HD2	0.56	1.77	3	2
1:A:1045:HIS:C	1:A:1047:GLY:H	0.56	2.08	18	2
1:A:1034:GLY:HA2	1:A:1055:ASN:ND2	0.56	2.14	6	1
1:A:1069:GLU:HG2	1:A:1089:PRO:HB3	0.56	1.76	6	1
1:A:997:ILE:O	1:A:1018:PRO:HB2	0.56	2.00	8	1
1:A:1050:VAL:HG23	1:A:1084:TRP:CH2	0.56	2.36	10	1
1:A:997:ILE:HG13	1:A:1021:GLN:HG2	0.56	1.76	14	1
1:A:1023:ILE:HA	1:A:1080:GLN:NE2	0.56	2.13	23	1
1:A:972:GLY:O	1:A:989:SER:HB2	0.56	2.00	21	1
1:A:1033:ASN:HA	1:A:1055:ASN:ND2	0.56	2.15	15	2
1:A:1077:ASN:HD22	1:A:1078:ASP:N	0.56	1.98	11	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1035:ASP:HB2	1:A:1053:ARG:HB2	0.56	1.78	9	1
1:A:1025:CYS:HB3	1:A:1075:THR:O	0.56	2.01	21	1
1:A:1056:LEU:HB3	1:A:1059:ARG:O	0.56	2.01	21	1
1:A:1040:ASN:HB2	1:A:1050:VAL:HG11	0.56	1.77	11	1
1:A:1023:ILE:HG23	1:A:1080:GLN:NE2	0.56	2.16	15	1
1:A:1031:ILE:HG23	1:A:1034:GLY:HA3	0.56	1.76	17	1
1:A:1056:LEU:HB2	1:A:1063:VAL:CA	0.56	2.29	17	1
1:A:980:ILE:HG13	1:A:980:ILE:O	0.56	2.00	22	2
1:A:1045:HIS:O	1:A:1046:TYR:HB2	0.56	2.01	17	16
1:A:996:LEU:HD13	1:A:1000:SER:OG	0.56	2.00	10	1
1:A:1025:CYS:HB3	1:A:1075:THR:H	0.56	1.60	21	1
1:A:1029:PRO:HB2	1:A:1087:PRO:HB3	0.56	1.77	1	3
1:A:1019:ILE:HG22	1:A:1020:CYS:N	0.56	2.15	19	2
1:A:1019:ILE:C	1:A:1019:ILE:HD13	0.56	2.25	12	1
1:A:1069:GLU:HB3	1:A:1089:PRO:HD3	0.55	1.77	21	2
1:A:1081:VAL:HG13	1:A:1082:GLY:H	0.55	1.59	17	1
1:A:1077:ASN:HA	1:A:1083:ILE:HG22	0.55	1.76	18	1
1:A:1006:LEU:HD13	1:A:1007:SER:N	0.55	2.16	16	5
1:A:979:ASP:HB2	1:A:984:SER:OG	0.55	2.02	1	2
1:A:1031:ILE:HG23	1:A:1034:GLY:O	0.55	2.02	10	2
1:A:1023:ILE:HG21	1:A:1076:SER:OG	0.55	2.02	21	1
1:A:1058:SER:O	1:A:1059:ARG:HG2	0.55	2.02	19	3
1:A:962:SER:HB2	1:A:981:GLN:HG2	0.55	1.79	19	1
1:A:1038:SER:CB	1:A:1050:VAL:HG12	0.55	2.32	3	2
1:A:1063:VAL:HG23	1:A:1064:PHE:CD1	0.55	2.37	10	1
1:A:1007:SER:HB3	1:A:1012:HIS:NE2	0.55	2.17	5	4
1:A:1090:GLN:HE21	1:A:1092:ILE:HD13	0.55	1.60	6	1
1:A:1066:LEU:HD23	1:A:1067:VAL:H	0.54	1.61	19	2
1:A:1057:GLY:N	1:A:1061:ARG:N	0.54	2.55	8	1
1:A:995:ARG:HB2	1:A:1023:ILE:HD11	0.54	1.79	12	3
1:A:1090:GLN:NE2	1:A:1092:ILE:HD13	0.54	2.17	6	1
1:A:988:TYR:CE2	1:A:1018:PRO:HG3	0.54	2.37	15	4
1:A:1056:LEU:HD22	1:A:1056:LEU:N	0.54	2.16	20	5
1:A:1066:LEU:HD11	1:A:1069:GLU:C	0.54	2.28	4	1
1:A:1046:TYR:CE1	1:A:1081:VAL:HG11	0.54	2.37	21	1
1:A:1056:LEU:CD2	1:A:1063:VAL:HG23	0.54	2.33	24	1
1:A:970:VAL:HG21	1:A:1019:ILE:HG12	0.54	1.79	12	1
1:A:967:PRO:O	1:A:968:ASP:C	0.54	2.48	24	3
1:A:1056:LEU:O	1:A:1063:VAL:HB	0.54	2.02	23	1
1:A:1005:ILE:HD13	1:A:1014:SER:HB2	0.54	1.78	24	1
1:A:1034:GLY:HA2	1:A:1055:ASN:N	0.54	2.18	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1028:PRO:O	1:A:1030:THR:HG23	0.54	2.03	12	3
1:A:998:GLY:HA3	1:A:1018:PRO:HB3	0.54	1.80	17	2
1:A:969:PRO:HB3	1:A:1018:PRO:HB2	0.54	1.79	15	1
1:A:982:VAL:HA	1:A:1004:CYS:SG	0.54	2.43	6	4
1:A:1077:ASN:HD22	1:A:1077:ASN:N	0.54	1.99	8	8
1:A:961:LYS:HD2	1:A:1011:ALA:H	0.54	1.63	18	1
1:A:969:PRO:HD2	1:A:972:GLY:O	0.54	2.03	24	6
1:A:1054:CYS:HB3	1:A:1064:PHE:HB2	0.54	1.79	20	1
1:A:1028:PRO:HD3	1:A:1044:PHE:CE2	0.54	2.38	12	3
1:A:1035:ASP:N	1:A:1053:ARG:O	0.54	2.41	5	2
1:A:1066:LEU:HD11	1:A:1070:PRO:HA	0.54	1.78	21	2
1:A:1054:CYS:O	1:A:1055:ASN:C	0.53	2.50	23	3
1:A:992:THR:HG23	1:A:993:GLY:N	0.53	2.18	15	5
1:A:1024:PRO:HA	1:A:1046:TYR:N	0.53	2.18	12	1
1:A:1047:GLY:HA3	1:A:1074:CYS:CB	0.53	2.32	20	2
1:A:1022:ARG:HD3	1:A:1022:ARG:H	0.53	1.63	3	3
1:A:1023:ILE:HG23	1:A:1080:GLN:HA	0.53	1.79	8	2
1:A:1037:ILE:HB	1:A:1051:THR:HB	0.53	1.80	4	1
1:A:981:GLN:O	1:A:982:VAL:CG2	0.53	2.56	11	2
1:A:1084:TRP:CG	1:A:1085:SER:N	0.53	2.77	21	1
1:A:981:GLN:O	1:A:982:VAL:C	0.53	2.52	5	1
1:A:970:VAL:HG13	1:A:972:GLY:H	0.53	1.64	6	1
1:A:995:ARG:NH1	1:A:997:ILE:HG12	0.53	2.19	17	1
1:A:996:LEU:HG	1:A:1019:ILE:O	0.53	2.03	16	2
1:A:1067:VAL:O	1:A:1089:PRO:HB2	0.53	2.03	10	6
1:A:972:GLY:HA3	1:A:990:CYS:HA	0.53	1.81	9	1
1:A:1075:THR:HG21	1:A:1083:ILE:HA	0.53	1.79	21	1
1:A:1080:GLN:HG2	1:A:1081:VAL:H	0.53	1.64	1	1
1:A:1056:LEU:HA	1:A:1063:VAL:O	0.53	2.02	13	1
1:A:971:ASN:O	1:A:991:THR:HG23	0.53	2.03	19	2
1:A:1077:ASN:ND2	1:A:1078:ASP:N	0.53	2.56	6	15
1:A:985:ARG:HD3	1:A:1001:SER:HB2	0.53	1.81	4	1
1:A:1028:PRO:HG3	1:A:1040:ASN:ND2	0.53	2.19	18	1
1:A:988:TYR:CD1	1:A:988:TYR:N	0.53	2.77	15	6
1:A:1063:VAL:HG22	1:A:1063:VAL:O	0.53	2.02	23	2
1:A:1063:VAL:HG23	1:A:1064:PHE:HD2	0.53	1.64	16	1
1:A:980:ILE:HG22	1:A:1013:TRP:HH2	0.53	1.64	17	3
1:A:1022:ARG:HE	1:A:1045:HIS:HB3	0.53	1.63	16	1
1:A:997:ILE:HD13	1:A:1021:GLN:H	0.53	1.63	19	2
1:A:1058:SER:C	1:A:1059:ARG:HD2	0.53	2.29	7	3
1:A:1031:ILE:HD13	1:A:1052:TYR:HD2	0.53	1.64	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1082:GLY:O	1:A:1083:ILE:HG12	0.53	2.04	6	2
1:A:1029:PRO:HG3	1:A:1086:GLY:O	0.53	2.03	7	2
1:A:1054:CYS:SG	1:A:1064:PHE:HB3	0.52	2.44	11	2
1:A:982:VAL:HG22	1:A:1006:LEU:HD21	0.52	1.79	21	1
1:A:969:PRO:O	1:A:970:VAL:O	0.52	2.27	6	2
1:A:1066:LEU:CD2	1:A:1070:PRO:HB3	0.52	2.35	16	5
1:A:996:LEU:HD22	1:A:1000:SER:HB3	0.52	1.80	6	2
1:A:961:LYS:HE3	1:A:961:LYS:HA	0.52	1.81	13	1
1:A:963:CYS:SG	1:A:1012:HIS:N	0.52	2.82	18	9
1:A:1025:CYS:HB2	1:A:1044:PHE:O	0.52	2.04	4	1
1:A:1063:VAL:HG23	1:A:1064:PHE:HD1	0.52	1.65	11	2
1:A:985:ARG:HG2	1:A:1003:GLU:HB3	0.52	1.81	13	1
1:A:1056:LEU:HD13	1:A:1061:ARG:O	0.52	2.05	17	1
1:A:1032:ALA:O	1:A:1033:ASN:HB2	0.52	2.05	3	12
1:A:994:HIS:HB3	1:A:1020:CYS:SG	0.52	2.44	2	3
1:A:977:ILE:HG13	1:A:986:ILE:HA	0.52	1.82	11	1
1:A:1075:THR:OG1	1:A:1081:VAL:HG12	0.52	2.04	21	1
1:A:1083:ILE:HD12	1:A:1083:ILE:N	0.52	2.19	1	3
1:A:1063:VAL:O	1:A:1064:PHE:C	0.52	2.52	17	3
1:A:1040:ASN:HD21	1:A:1050:VAL:HB	0.52	1.64	8	4
1:A:1031:ILE:HG21	1:A:1089:PRO:O	0.52	2.03	22	2
1:A:1056:LEU:HD13	1:A:1056:LEU:H	0.52	1.65	13	1
1:A:977:ILE:HG12	1:A:986:ILE:HA	0.52	1.80	17	1
1:A:1077:ASN:OD1	1:A:1080:GLN:C	0.52	2.53	18	1
1:A:969:PRO:O	1:A:971:ASN:N	0.52	2.41	14	8
1:A:988:TYR:O	1:A:990:CYS:N	0.52	2.42	21	1
1:A:974:VAL:CG2	1:A:986:ILE:HD12	0.52	2.35	14	7
1:A:1056:LEU:HD12	1:A:1060:GLY:HA2	0.52	1.82	7	1
1:A:970:VAL:HG12	1:A:971:ASN:ND2	0.52	2.20	9	3
1:A:1077:ASN:ND2	1:A:1083:ILE:HB	0.52	2.20	3	2
1:A:1056:LEU:HB3	1:A:1061:ARG:O	0.52	2.05	5	1
1:A:990:CYS:SG	1:A:991:THR:N	0.51	2.83	8	3
1:A:1082:GLY:O	1:A:1083:ILE:O	0.51	2.28	11	2
1:A:978:THR:OG1	1:A:984:SER:HB3	0.51	2.05	15	4
1:A:981:GLN:O	1:A:982:VAL:CB	0.51	2.58	14	4
1:A:1001:SER:O	1:A:1015:THR:HG21	0.51	2.05	2	3
1:A:1079:ASP:OD1	1:A:1080:GLN:HG3	0.51	2.05	7	1
1:A:1049:VAL:HG12	1:A:1073:TYR:CB	0.51	2.27	3	1
1:A:1077:ASN:HD21	1:A:1083:ILE:HD11	0.51	1.65	20	2
1:A:972:GLY:HA3	1:A:989:SER:O	0.51	2.05	16	1
1:A:1028:PRO:HD3	1:A:1044:PHE:HE2	0.51	1.65	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1056:LEU:HA	1:A:1060:GLY:HA3	0.51	1.81	8	1
1:A:1040:ASN:HD22	1:A:1048:SER:HB3	0.51	1.65	9	1
1:A:1024:PRO:HG2	1:A:1080:GLN:HB2	0.51	1.83	17	1
1:A:1028:PRO:HG2	1:A:1050:VAL:HG11	0.51	1.81	23	1
1:A:1055:ASN:C	1:A:1056:LEU:HG	0.51	2.31	19	4
1:A:970:VAL:HG13	1:A:1020:CYS:H	0.51	1.65	7	1
1:A:1049:VAL:HA	1:A:1072:ILE:O	0.51	2.06	11	2
1:A:1022:ARG:HD3	1:A:1046:TYR:HB3	0.51	1.80	13	1
1:A:1006:LEU:C	1:A:1006:LEU:HD13	0.51	2.30	14	1
1:A:974:VAL:HG23	1:A:988:TYR:HD2	0.51	1.65	5	1
1:A:1050:VAL:O	1:A:1071:SER:HA	0.51	2.05	7	2
1:A:1079:ASP:O	1:A:1081:VAL:HG23	0.51	2.06	10	1
1:A:1022:ARG:HH12	1:A:1046:TYR:HB3	0.51	1.66	15	1
1:A:1043:ASN:N	1:A:1043:ASN:HD22	0.51	2.04	15	1
1:A:985:ARG:NE	1:A:1003:GLU:HB2	0.51	2.21	18	1
1:A:972:GLY:HA3	1:A:990:CYS:SG	0.51	2.46	23	1
1:A:1041:ARG:O	1:A:1043:ASN:N	0.50	2.44	12	1
1:A:987:THR:HA	1:A:1001:SER:HA	0.50	1.81	24	1
1:A:988:TYR:O	1:A:1000:SER:HB2	0.50	2.06	24	6
1:A:1068:GLY:O	1:A:1069:GLU:C	0.50	2.53	6	5
1:A:1054:CYS:HB2	1:A:1056:LEU:CD2	0.50	2.35	7	1
1:A:972:GLY:HA2	1:A:990:CYS:SG	0.50	2.46	14	1
1:A:1066:LEU:HD21	1:A:1070:PRO:CA	0.50	2.36	23	2
1:A:970:VAL:HG11	1:A:1019:ILE:HG23	0.50	1.81	19	1
1:A:1007:SER:HB2	1:A:1012:HIS:NE2	0.50	2.21	20	1
1:A:1077:ASN:ND2	1:A:1083:ILE:HD13	0.50	2.20	5	1
1:A:1069:GLU:OE2	1:A:1072:ILE:HD13	0.50	2.05	7	1
1:A:962:SER:CA	1:A:981:GLN:HA	0.50	2.31	19	2
1:A:970:VAL:HG22	1:A:970:VAL:O	0.50	2.06	13	2
1:A:1066:LEU:C	1:A:1066:LEU:HD13	0.50	2.31	4	1
1:A:1062:LYS:C	1:A:1063:VAL:HG23	0.50	2.31	2	2
1:A:1040:ASN:OD1	1:A:1048:SER:HB3	0.50	2.07	14	1
1:A:1015:THR:O	1:A:1016:LYS:O	0.50	2.28	21	1
1:A:1055:ASN:HB2	1:A:1063:VAL:HA	0.50	1.82	23	1
1:A:970:VAL:HG11	1:A:1020:CYS:O	0.50	2.06	12	1
1:A:1061:ARG:O	1:A:1062:LYS:C	0.50	2.55	18	1
1:A:1040:ASN:ND2	1:A:1050:VAL:HB	0.50	2.22	22	2
1:A:980:ILE:N	1:A:980:ILE:HD13	0.50	2.22	23	1
1:A:1080:GLN:O	1:A:1080:GLN:HG2	0.50	2.06	5	2
1:A:990:CYS:HB2	1:A:996:LEU:HB2	0.50	1.84	9	1
1:A:1061:ARG:HD2	1:A:1062:LYS:N	0.50	2.22	24	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1023:ILE:O	1:A:1045:HIS:O	0.50	2.30	3	6
1:A:1062:LYS:HB3	1:A:1062:LYS:NZ	0.50	2.22	3	1
1:A:1028:PRO:HD3	1:A:1040:ASN:ND2	0.50	2.22	4	1
1:A:988:TYR:CE2	1:A:1018:PRO:HG2	0.50	2.41	14	1
1:A:961:LYS:HB2	1:A:961:LYS:NZ	0.50	2.22	20	2
1:A:1066:LEU:CD2	1:A:1070:PRO:HA	0.50	2.34	22	2
1:A:1088:ALA:N	1:A:1089:PRO:CD	0.49	2.75	1	7
1:A:969:PRO:HD3	1:A:974:VAL:HB	0.49	1.83	2	1
1:A:995:ARG:NH2	1:A:1080:GLN:HA	0.49	2.22	3	1
1:A:996:LEU:HD13	1:A:1000:SER:CB	0.49	2.37	16	2
1:A:972:GLY:CA	1:A:990:CYS:HA	0.49	2.38	15	7
1:A:1066:LEU:CD2	1:A:1067:VAL:N	0.49	2.74	1	1
1:A:970:VAL:CG1	1:A:971:ASN:N	0.49	2.74	2	1
1:A:982:VAL:HA	1:A:1004:CYS:O	0.49	2.07	5	7
1:A:1037:ILE:HG22	1:A:1038:SER:N	0.49	2.22	18	4
1:A:1052:TYR:OH	1:A:1072:ILE:HD11	0.49	2.06	4	2
1:A:976:VAL:HG13	1:A:979:ASP:O	0.49	2.06	21	2
1:A:1025:CYS:O	1:A:1044:PHE:HB2	0.49	2.07	11	3
1:A:961:LYS:O	1:A:982:VAL:HG23	0.49	2.06	10	1
1:A:978:THR:OG1	1:A:984:SER:HB2	0.49	2.07	22	1
1:A:1069:GLU:O	1:A:1069:GLU:HG2	0.49	2.08	7	4
1:A:974:VAL:HG12	1:A:988:TYR:CD2	0.49	2.42	15	1
1:A:1022:ARG:HB3	1:A:1046:TYR:HB3	0.49	1.83	19	1
1:A:970:VAL:HG22	1:A:971:ASN:N	0.49	2.22	2	2
1:A:1040:ASN:HB3	1:A:1048:SER:OG	0.49	2.08	3	2
1:A:1077:ASN:ND2	1:A:1077:ASN:N	0.49	2.61	15	6
1:A:1086:GLY:C	1:A:1088:ALA:H	0.49	2.14	21	1
1:A:996:LEU:HD23	1:A:997:ILE:N	0.49	2.21	2	6
1:A:1054:CYS:O	1:A:1056:LEU:HD23	0.49	2.07	5	2
1:A:1069:GLU:H	1:A:1069:GLU:CD	0.49	2.15	24	2
1:A:970:VAL:CG1	1:A:1019:ILE:HB	0.49	2.37	21	1
1:A:997:ILE:HB	1:A:1019:ILE:CG1	0.49	2.36	5	4
1:A:1040:ASN:O	1:A:1041:ARG:HG2	0.49	2.06	11	2
1:A:1016:LYS:HD3	1:A:1016:LYS:H	0.49	1.67	10	1
1:A:1056:LEU:HD22	1:A:1060:GLY:C	0.49	2.33	17	1
1:A:1039:THR:O	1:A:1040:ASN:C	0.49	2.56	18	2
1:A:961:LYS:N	1:A:961:LYS:HD3	0.49	2.22	12	1
1:A:1004:CYS:SG	1:A:1011:ALA:HB1	0.49	2.48	13	8
1:A:1042:GLU:O	1:A:1043:ASN:HB2	0.49	2.08	23	4
1:A:970:VAL:HB	1:A:1019:ILE:HA	0.48	1.84	9	1
1:A:961:LYS:HB2	1:A:961:LYS:HZ3	0.48	1.68	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:988:TYR:CD2	1:A:1018:PRO:HG2	0.48	2.43	4	1
1:A:1022:ARG:NH2	1:A:1046:TYR:HB3	0.48	2.23	7	1
1:A:980:ILE:HG22	1:A:1013:TRP:CH2	0.48	2.44	10	3
1:A:1076:SER:HA	1:A:1082:GLY:O	0.48	2.08	17	3
1:A:1057:GLY:C	1:A:1059:ARG:N	0.48	2.68	24	1
1:A:1039:THR:O	1:A:1041:ARG:N	0.48	2.46	2	1
1:A:1059:ARG:N	1:A:1059:ARG:HD2	0.48	2.23	3	1
1:A:995:ARG:NH2	1:A:1079:ASP:HA	0.48	2.23	11	2
1:A:1068:GLY:O	1:A:1089:PRO:HG3	0.48	2.08	10	1
1:A:969:PRO:HG3	1:A:1018:PRO:HG2	0.48	1.84	18	1
1:A:983:GLY:O	1:A:984:SER:C	0.48	2.56	20	1
1:A:1022:ARG:HD3	1:A:1022:ARG:N	0.48	2.23	3	3
1:A:1031:ILE:O	1:A:1032:ALA:O	0.48	2.32	14	4
1:A:966:PRO:HG2	1:A:974:VAL:HG21	0.48	1.85	3	1
1:A:1069:GLU:HB3	1:A:1089:PRO:HB3	0.48	1.84	4	1
1:A:1068:GLY:CA	1:A:1089:PRO:HA	0.48	2.37	11	1
1:A:1049:VAL:HG22	1:A:1050:VAL:H	0.48	1.67	17	1
1:A:1040:ASN:HA	1:A:1044:PHE:CZ	0.48	2.43	24	1
1:A:996:LEU:HD23	1:A:997:ILE:O	0.48	2.08	10	2
1:A:1006:LEU:HG	1:A:1010:THR:O	0.48	2.08	6	1
1:A:1049:VAL:HG23	1:A:1073:TYR:HB3	0.48	1.84	10	1
1:A:1058:SER:O	1:A:1059:ARG:HD2	0.48	2.08	11	1
1:A:1035:ASP:CG	1:A:1055:ASN:HA	0.48	2.33	16	1
1:A:969:PRO:HG2	1:A:973:MET:N	0.48	2.22	5	1
1:A:1072:ILE:HG12	1:A:1073:TYR:N	0.48	2.23	5	1
1:A:1047:GLY:O	1:A:1048:SER:HB3	0.48	2.09	20	1
1:A:1040:ASN:HB3	1:A:1044:PHE:CZ	0.48	2.43	1	1
1:A:962:SER:HA	1:A:981:GLN:O	0.48	2.09	6	4
1:A:979:ASP:OD1	1:A:981:GLN:HB2	0.48	2.09	3	1
1:A:1016:LYS:N	1:A:1016:LYS:HD3	0.48	2.23	19	2
1:A:996:LEU:CD2	1:A:1000:SER:HB3	0.48	2.39	6	1
1:A:981:GLN:O	1:A:1004:CYS:HB3	0.48	2.09	7	3
1:A:1049:VAL:HG13	1:A:1072:ILE:O	0.48	2.09	23	4
1:A:1042:GLU:HG2	1:A:1043:ASN:H	0.48	1.68	22	1
1:A:1080:GLN:O	1:A:1081:VAL:HG13	0.48	2.08	3	1
1:A:1038:SER:HB2	1:A:1040:ASN:OD1	0.48	2.08	16	1
1:A:996:LEU:HD13	1:A:1000:SER:HB3	0.48	1.84	18	1
1:A:1055:ASN:O	1:A:1056:LEU:C	0.47	2.57	12	1
1:A:1056:LEU:HD13	1:A:1059:ARG:O	0.47	2.09	16	1
1:A:1061:ARG:O	1:A:1062:LYS:CB	0.47	2.62	17	1
1:A:983:GLY:O	1:A:984:SER:O	0.47	2.32	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:991:THR:OG1	1:A:992:THR:N	0.47	2.47	3	3
1:A:1022:ARG:H	1:A:1022:ARG:CD	0.47	2.22	3	2
1:A:961:LYS:HB3	1:A:1006:LEU:HD23	0.47	1.87	8	1
1:A:1042:GLU:N	1:A:1042:GLU:OE1	0.47	2.47	12	2
1:A:1016:LYS:H	1:A:1016:LYS:HD2	0.47	1.69	20	1
1:A:1028:PRO:CG	1:A:1050:VAL:HG11	0.47	2.39	23	1
1:A:996:LEU:O	1:A:997:ILE:HD13	0.47	2.09	14	1
1:A:1035:ASP:HB2	1:A:1053:ARG:HB3	0.47	1.86	21	1
1:A:1035:ASP:CG	1:A:1036:PHE:H	0.47	2.17	22	3
1:A:1037:ILE:HD12	1:A:1053:ARG:HD3	0.47	1.85	13	1
1:A:1074:CYS:HA	1:A:1084:TRP:CE2	0.47	2.43	17	1
1:A:1037:ILE:HD12	1:A:1051:THR:HB	0.47	1.86	20	2
1:A:976:VAL:HG23	1:A:980:ILE:HG23	0.47	1.87	4	1
1:A:1056:LEU:N	1:A:1056:LEU:CD2	0.47	2.78	4	2
1:A:985:ARG:HA	1:A:1003:GLU:HA	0.47	1.86	7	1
1:A:1036:PHE:HB2	1:A:1050:VAL:CG2	0.47	2.38	16	2
1:A:1031:ILE:HG21	1:A:1052:TYR:CE2	0.47	2.44	15	1
1:A:974:VAL:HA	1:A:988:TYR:HA	0.47	1.84	17	1
1:A:1023:ILE:HG21	1:A:1077:ASN:CB	0.47	2.38	18	1
1:A:1042:GLU:O	1:A:1043:ASN:C	0.47	2.58	2	4
1:A:995:ARG:HH21	1:A:1079:ASP:HA	0.47	1.68	11	1
1:A:1049:VAL:HB	1:A:1073:TYR:HB3	0.47	1.86	15	1
1:A:1063:VAL:HG22	1:A:1064:PHE:HD1	0.47	1.70	15	1
1:A:1047:GLY:N	1:A:1074:CYS:HB2	0.47	2.24	1	1
1:A:990:CYS:N	1:A:996:LEU:HD12	0.47	2.24	5	1
1:A:967:PRO:O	1:A:968:ASP:HB2	0.47	2.10	8	2
1:A:1063:VAL:HG23	1:A:1064:PHE:CD2	0.47	2.45	8	1
1:A:971:ASN:HD22	1:A:1020:CYS:HB2	0.47	1.68	9	1
1:A:970:VAL:O	1:A:1020:CYS:SG	0.47	2.72	11	4
1:A:1036:PHE:HB2	1:A:1050:VAL:CG1	0.47	2.40	10	1
1:A:1039:THR:O	1:A:1040:ASN:O	0.47	2.32	11	1
1:A:988:TYR:HB2	1:A:1000:SER:CA	0.47	2.39	15	1
1:A:985:ARG:CZ	1:A:1003:GLU:HB2	0.47	2.39	18	1
1:A:963:CYS:SG	1:A:980:ILE:O	0.47	2.73	21	1
1:A:1075:THR:CG2	1:A:1084:TRP:H	0.47	2.17	21	1
1:A:1016:LYS:HB2	1:A:1016:LYS:NZ	0.47	2.24	2	1
1:A:969:PRO:HG3	1:A:988:TYR:CD2	0.47	2.45	7	1
1:A:970:VAL:HG13	1:A:1020:CYS:N	0.47	2.24	7	1
1:A:1042:GLU:O	1:A:1043:ASN:CG	0.47	2.58	14	2
1:A:995:ARG:HB3	1:A:1080:GLN:NE2	0.47	2.25	2	1
1:A:1054:CYS:O	1:A:1063:VAL:HG23	0.47	2.10	23	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1005:ILE:HG12	1:A:1012:HIS:O	0.47	2.09	1	1
1:A:1065:GLU:HB2	1:A:1092:ILE:C	0.47	2.35	14	1
1:A:1077:ASN:CA	1:A:1083:ILE:HG22	0.47	2.40	18	1
1:A:1031:ILE:HD12	1:A:1088:ALA:HB1	0.47	1.87	21	1
1:A:1025:CYS:HB2	1:A:1044:PHE:CE1	0.46	2.46	15	1
1:A:1037:ILE:HD11	1:A:1053:ARG:HB2	0.46	1.87	18	1
1:A:1088:ALA:H	1:A:1089:PRO:CD	0.46	2.22	22	1
1:A:970:VAL:HG22	1:A:971:ASN:OD1	0.46	2.10	2	1
1:A:1054:CYS:HB2	1:A:1056:LEU:HD23	0.46	1.86	7	1
1:A:991:THR:O	1:A:992:THR:C	0.46	2.57	22	1
1:A:994:HIS:CD2	1:A:1022:ARG:HA	0.46	2.45	23	1
1:A:1006:LEU:HG	1:A:1010:THR:C	0.46	2.35	3	1
1:A:1027:LEU:HD12	1:A:1044:PHE:CD2	0.46	2.45	5	1
1:A:1060:GLY:CA	1:A:1063:VAL:HG21	0.46	2.40	8	1
1:A:973:MET:HB2	1:A:989:SER:HB2	0.46	1.86	21	1
1:A:985:ARG:HG2	1:A:986:ILE:N	0.46	2.26	6	1
1:A:995:ARG:HG3	1:A:1080:GLN:HG3	0.46	1.88	13	1
1:A:1016:LYS:HZ3	1:A:1017:PRO:HD2	0.46	1.70	16	1
1:A:1035:ASP:O	1:A:1052:TYR:HA	0.46	2.11	17	2
1:A:998:GLY:O	1:A:999:HIS:CD2	0.46	2.69	21	1
1:A:1056:LEU:HD23	1:A:1063:VAL:O	0.46	2.09	24	1
1:A:1036:PHE:CE2	1:A:1038:SER:O	0.46	2.69	2	1
1:A:1073:TYR:CE1	1:A:1085:SER:HB3	0.46	2.46	6	1
1:A:1031:ILE:HD12	1:A:1090:GLN:HA	0.46	1.88	16	1
1:A:1069:GLU:O	1:A:1069:GLU:HG3	0.46	2.11	6	1
1:A:1048:SER:O	1:A:1073:TYR:HA	0.46	2.09	11	2
1:A:970:VAL:HG13	1:A:971:ASN:H	0.46	1.68	2	1
1:A:1081:VAL:HG12	1:A:1082:GLY:N	0.46	2.26	2	1
1:A:1053:ARG:O	1:A:1054:CYS:SG	0.46	2.73	6	1
1:A:1091:CYS:C	1:A:1092:ILE:HG23	0.46	2.35	6	1
1:A:979:ASP:O	1:A:980:ILE:CG1	0.46	2.64	7	3
1:A:971:ASN:HB2	1:A:1020:CYS:SG	0.46	2.50	10	1
1:A:976:VAL:HG13	1:A:976:VAL:O	0.46	2.10	4	2
1:A:996:LEU:HD21	1:A:1018:PRO:HB2	0.46	1.88	16	4
1:A:1028:PRO:HB3	1:A:1084:TRP:CZ3	0.46	2.46	5	1
1:A:1045:HIS:C	1:A:1047:GLY:N	0.46	2.73	18	1
1:A:997:ILE:HD13	1:A:1019:ILE:HG13	0.46	1.88	5	1
1:A:1063:VAL:HG13	1:A:1064:PHE:CD1	0.46	2.46	5	1
1:A:1033:ASN:O	1:A:1055:ASN:HB2	0.46	2.10	19	2
1:A:1068:GLY:O	1:A:1069:GLU:O	0.46	2.34	18	1
1:A:1047:GLY:O	1:A:1048:SER:OG	0.46	2.31	23	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:970:VAL:O	1:A:971:ASN:HB3	0.45	2.10	23	3
1:A:1056:LEU:C	1:A:1063:VAL:HG13	0.45	2.37	2	1
1:A:1049:VAL:HG22	1:A:1050:VAL:N	0.45	2.26	15	2
1:A:988:TYR:HB2	1:A:996:LEU:HD11	0.45	1.87	17	1
1:A:1037:ILE:O	1:A:1038:SER:HB2	0.45	2.10	20	3
1:A:1031:ILE:HG22	1:A:1088:ALA:CB	0.45	2.38	4	1
1:A:1021:GLN:HG3	1:A:1023:ILE:H	0.45	1.71	8	1
1:A:993:GLY:O	1:A:994:HIS:O	0.45	2.34	22	1
1:A:1035:ASP:HB3	1:A:1053:ARG:H	0.45	1.70	22	1
1:A:1066:LEU:HG	1:A:1067:VAL:N	0.45	2.25	22	1
1:A:1025:CYS:HA	1:A:1082:GLY:CA	0.45	2.41	14	2
1:A:1022:ARG:O	1:A:1046:TYR:HB2	0.45	2.11	6	1
1:A:1062:LYS:HG2	1:A:1062:LYS:O	0.45	2.11	24	4
1:A:1066:LEU:HD13	1:A:1066:LEU:C	0.45	2.35	12	1
1:A:997:ILE:HD11	1:A:1021:GLN:HB3	0.45	1.86	19	1
1:A:1076:SER:HB3	1:A:1082:GLY:O	0.45	2.10	21	1
1:A:1052:TYR:HB2	1:A:1066:LEU:HD11	0.45	1.87	10	1
1:A:1016:LYS:HD2	1:A:1016:LYS:N	0.45	2.25	20	1
1:A:1037:ILE:HG12	1:A:1051:THR:O	0.45	2.11	5	2
1:A:994:HIS:HB3	1:A:1020:CYS:HB3	0.45	1.88	9	3
1:A:1036:PHE:HB2	1:A:1050:VAL:HG13	0.45	1.88	6	1
1:A:962:SER:OG	1:A:981:GLN:HG2	0.45	2.12	13	1
1:A:1054:CYS:HB3	1:A:1064:PHE:CD1	0.45	2.46	17	1
1:A:1029:PRO:CD	1:A:1085:SER:HA	0.45	2.35	21	1
1:A:1066:LEU:CD2	1:A:1066:LEU:C	0.45	2.90	21	1
1:A:961:LYS:HD2	1:A:961:LYS:N	0.45	2.23	23	1
1:A:969:PRO:HG2	1:A:972:GLY:C	0.45	2.36	10	2
1:A:1040:ASN:ND2	1:A:1048:SER:HB3	0.45	2.26	9	1
1:A:994:HIS:NE2	1:A:1022:ARG:HD2	0.45	2.26	15	1
1:A:1028:PRO:O	1:A:1029:PRO:C	0.45	2.59	17	2
1:A:1083:ILE:HD12	1:A:1083:ILE:H	0.45	1.72	1	1
1:A:990:CYS:H	1:A:996:LEU:HD12	0.45	1.72	5	1
1:A:990:CYS:HB2	1:A:996:LEU:HB3	0.45	1.88	6	1
1:A:995:ARG:HA	1:A:1080:GLN:NE2	0.45	2.26	13	1
1:A:1054:CYS:O	1:A:1056:LEU:HD13	0.45	2.12	13	1
1:A:970:VAL:HG23	1:A:1019:ILE:HG22	0.45	1.89	15	1
1:A:998:GLY:O	1:A:999:HIS:HB2	0.45	2.11	15	1
1:A:974:VAL:HG23	1:A:988:TYR:CD2	0.45	2.45	5	1
1:A:1050:VAL:HG23	1:A:1084:TRP:CZ3	0.45	2.46	10	1
1:A:1077:ASN:O	1:A:1079:ASP:N	0.45	2.50	13	1
1:A:1061:ARG:O	1:A:1063:VAL:HG12	0.45	2.12	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1023:ILE:HG22	1:A:1076:SER:HA	0.45	1.88	21	1
1:A:1025:CYS:HA	1:A:1076:SER:O	0.45	2.11	21	1
1:A:1036:PHE:CD1	1:A:1036:PHE:C	0.45	2.95	21	5
1:A:1064:PHE:CD1	1:A:1064:PHE:N	0.45	2.85	23	5
1:A:1077:ASN:HB2	1:A:1082:GLY:N	0.45	2.26	5	1
1:A:1057:GLY:HA2	1:A:1064:PHE:HE1	0.45	1.72	12	1
1:A:989:SER:O	1:A:996:LEU:HD12	0.45	2.11	16	1
1:A:1067:VAL:O	1:A:1067:VAL:HG13	0.45	2.12	11	1
1:A:1040:ASN:CG	1:A:1048:SER:HB3	0.45	2.37	16	1
1:A:973:MET:N	1:A:990:CYS:HA	0.45	2.27	19	1
1:A:984:SER:O	1:A:1003:GLU:HA	0.45	2.11	21	1
1:A:1061:ARG:HD2	1:A:1061:ARG:C	0.45	2.36	24	1
1:A:995:ARG:CZ	1:A:1021:GLN:HB2	0.44	2.42	7	1
1:A:1056:LEU:HD13	1:A:1064:PHE:CZ	0.44	2.47	14	1
1:A:1006:LEU:HD13	1:A:1007:SER:H	0.44	1.70	16	1
1:A:1081:VAL:HG13	1:A:1082:GLY:N	0.44	2.27	17	1
1:A:1066:LEU:CD1	1:A:1070:PRO:HA	0.44	2.43	18	1
1:A:1052:TYR:CD1	1:A:1052:TYR:N	0.44	2.84	21	1
1:A:1061:ARG:CD	1:A:1062:LYS:H	0.44	2.25	23	1
1:A:1035:ASP:OD1	1:A:1036:PHE:N	0.44	2.50	24	1
1:A:1006:LEU:HD23	1:A:1007:SER:N	0.44	2.27	2	2
1:A:1037:ILE:HG13	1:A:1053:ARG:CZ	0.44	2.42	10	1
1:A:974:VAL:HG23	1:A:988:TYR:CE2	0.44	2.48	14	1
1:A:961:LYS:HD2	1:A:1006:LEU:HD21	0.44	1.88	17	1
1:A:990:CYS:O	1:A:991:THR:C	0.44	2.60	10	1
1:A:1016:LYS:HD3	1:A:1016:LYS:N	0.44	2.27	10	1
1:A:1052:TYR:CE2	1:A:1089:PRO:HD2	0.44	2.47	14	3
1:A:1061:ARG:O	1:A:1061:ARG:HG2	0.44	2.13	13	2
1:A:964:LYS:O	1:A:964:LYS:HD3	0.44	2.12	20	1
1:A:1069:GLU:N	1:A:1069:GLU:OE1	0.44	2.50	23	1
1:A:995:ARG:HG2	1:A:996:LEU:N	0.44	2.26	5	1
1:A:1090:GLN:HE21	1:A:1092:ILE:HG23	0.44	1.72	20	2
1:A:1042:GLU:N	1:A:1044:PHE:HE1	0.44	2.10	12	1
1:A:1033:ASN:HB3	1:A:1054:CYS:SG	0.44	2.53	13	1
1:A:1056:LEU:HB3	1:A:1060:GLY:CA	0.44	2.43	7	1
1:A:1038:SER:CB	1:A:1050:VAL:HA	0.44	2.41	9	2
1:A:1022:ARG:O	1:A:1024:PRO:HD3	0.44	2.13	11	1
1:A:1056:LEU:HB3	1:A:1060:GLY:C	0.44	2.38	12	1
1:A:1062:LYS:O	1:A:1062:LYS:HD2	0.44	2.12	2	1
1:A:1037:ILE:HG22	1:A:1037:ILE:O	0.44	2.13	19	3
1:A:999:HIS:O	1:A:1018:PRO:HG3	0.44	2.13	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1080:GLN:CD	1:A:1080:GLN:N	0.44	2.75	6	1
1:A:1065:GLU:HB2	1:A:1092:ILE:OXT	0.44	2.13	14	1
1:A:1084:TRP:H	1:A:1084:TRP:CD1	0.44	2.30	21	1
1:A:963:CYS:O	1:A:964:LYS:O	0.44	2.35	6	3
1:A:1063:VAL:O	1:A:1063:VAL:HG23	0.44	2.13	6	3
1:A:969:PRO:HG2	1:A:988:TYR:HE2	0.44	1.73	8	1
1:A:1006:LEU:HD13	1:A:1008:GLY:N	0.44	2.28	12	1
1:A:963:CYS:HA	1:A:1011:ALA:O	0.44	2.12	14	1
1:A:1006:LEU:HD11	1:A:1008:GLY:O	0.44	2.13	14	1
1:A:966:PRO:HB2	1:A:974:VAL:HG21	0.44	1.90	18	1
1:A:1083:ILE:N	1:A:1083:ILE:CD1	0.44	2.81	23	2
1:A:1087:PRO:O	1:A:1088:ALA:O	0.44	2.36	21	1
1:A:986:ILE:HD11	1:A:1002:ALA:HB3	0.44	1.89	5	1
1:A:1024:PRO:CB	1:A:1045:HIS:HA	0.44	2.43	12	2
1:A:977:ILE:HG13	1:A:987:THR:HG23	0.44	1.90	9	1
1:A:970:VAL:O	1:A:971:ASN:HB2	0.44	2.13	11	1
1:A:1031:ILE:HD11	1:A:1052:TYR:CD2	0.44	2.48	11	1
1:A:1029:PRO:CB	1:A:1087:PRO:HB3	0.44	2.42	3	1
1:A:1077:ASN:ND2	1:A:1083:ILE:HG12	0.44	2.28	4	1
1:A:1039:THR:O	1:A:1041:ARG:HG3	0.44	2.12	6	1
1:A:997:ILE:HG22	1:A:997:ILE:O	0.44	2.12	11	2
1:A:1003:GLU:N	1:A:1003:GLU:OE1	0.44	2.51	11	1
1:A:1054:CYS:O	1:A:1056:LEU:HD12	0.44	2.13	18	1
1:A:987:THR:HA	1:A:1000:SER:O	0.44	2.13	21	1
1:A:975:HIS:HB2	1:A:987:THR:O	0.43	2.13	3	1
1:A:1055:ASN:HB2	1:A:1064:PHE:HB2	0.43	1.90	3	1
1:A:1077:ASN:HD21	1:A:1083:ILE:HD12	0.43	1.72	9	1
1:A:1066:LEU:HD23	1:A:1066:LEU:C	0.43	2.37	21	3
1:A:973:MET:SD	1:A:973:MET:N	0.43	2.91	16	1
1:A:1022:ARG:HD2	1:A:1022:ARG:N	0.43	2.28	19	1
1:A:1044:PHE:O	1:A:1044:PHE:HD1	0.43	1.96	20	1
1:A:1043:ASN:O	1:A:1044:PHE:HB2	0.43	2.13	24	1
1:A:1079:ASP:O	1:A:1080:GLN:HB2	0.43	2.13	3	1
1:A:997:ILE:CD1	1:A:1021:GLN:HB2	0.43	2.42	4	1
1:A:1049:VAL:HB	1:A:1072:ILE:O	0.43	2.14	7	1
1:A:1090:GLN:NE2	1:A:1090:GLN:C	0.43	2.76	17	1
1:A:996:LEU:HD13	1:A:1000:SER:HA	0.43	1.90	19	1
1:A:1053:ARG:NE	1:A:1053:ARG:HA	0.43	2.28	21	1
1:A:1053:ARG:O	1:A:1054:CYS:HB3	0.43	2.14	3	1
1:A:1040:ASN:OD1	1:A:1050:VAL:HB	0.43	2.13	7	1
1:A:1044:PHE:CD1	1:A:1044:PHE:N	0.43	2.86	23	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1016:LYS:HB2	1:A:1017:PRO:HD2	0.43	1.89	11	1
1:A:1029:PRO:HD2	1:A:1052:TYR:OH	0.43	2.13	12	1
1:A:1063:VAL:O	1:A:1064:PHE:CB	0.43	2.65	18	1
1:A:1007:SER:HB3	1:A:1012:HIS:CD2	0.43	2.48	23	1
1:A:1065:GLU:O	1:A:1091:CYS:HA	0.43	2.13	1	2
1:A:1056:LEU:CG	1:A:1060:GLY:HA2	0.43	2.44	6	1
1:A:1005:ILE:HD13	1:A:1014:SER:HB3	0.43	1.91	17	3
1:A:995:ARG:HH22	1:A:1079:ASP:HB3	0.43	1.73	15	1
1:A:1029:PRO:O	1:A:1030:THR:HG22	0.43	2.14	16	1
1:A:1027:LEU:H	1:A:1027:LEU:CD2	0.43	2.21	20	1
1:A:985:ARG:C	1:A:985:ARG:HD2	0.43	2.38	3	4
1:A:1073:TYR:CD1	1:A:1075:THR:HB	0.43	2.48	6	2
1:A:981:GLN:C	1:A:982:VAL:CG2	0.43	2.91	11	2
1:A:993:GLY:O	1:A:1023:ILE:HD12	0.43	2.13	12	1
1:A:1022:ARG:CD	1:A:1022:ARG:H	0.43	2.27	22	1
1:A:1060:GLY:O	1:A:1061:ARG:HB3	0.43	2.14	8	2
1:A:995:ARG:HH11	1:A:997:ILE:HG12	0.43	1.72	17	1
1:A:1082:GLY:C	1:A:1083:ILE:HD12	0.43	2.39	17	1
1:A:1037:ILE:O	1:A:1038:SER:HB3	0.43	2.14	2	1
1:A:997:ILE:HD12	1:A:997:ILE:N	0.43	2.29	5	2
1:A:1022:ARG:HD3	1:A:1045:HIS:HB3	0.43	1.89	5	1
1:A:966:PRO:HD3	1:A:1013:TRP:CZ2	0.43	2.49	15	1
1:A:1055:ASN:OD1	1:A:1056:LEU:N	0.43	2.52	21	1
1:A:1039:THR:HG23	1:A:1040:ASN:N	0.43	2.28	23	1
1:A:1072:ILE:HG13	1:A:1084:TRP:CE3	0.43	2.49	23	1
1:A:1025:CYS:HB2	1:A:1048:SER:OG	0.43	2.14	2	1
1:A:999:HIS:C	1:A:1001:SER:H	0.43	2.22	5	3
1:A:961:LYS:O	1:A:981:GLN:HG3	0.43	2.13	5	1
1:A:1031:ILE:C	1:A:1033:ASN:H	0.43	2.21	6	1
1:A:1023:ILE:HD13	1:A:1079:ASP:O	0.43	2.12	9	1
1:A:1036:PHE:O	1:A:1037:ILE:HD13	0.43	2.14	9	2
1:A:1056:LEU:HG	1:A:1064:PHE:HB2	0.43	1.90	11	1
1:A:966:PRO:HB2	1:A:974:VAL:HG11	0.43	1.90	16	1
1:A:1065:GLU:HB2	1:A:1092:ILE:O	0.43	2.14	19	2
1:A:1069:GLU:O	1:A:1089:PRO:HB3	0.43	2.14	17	1
1:A:1084:TRP:O	1:A:1085:SER:HB3	0.43	2.14	21	1
1:A:963:CYS:O	1:A:1013:TRP:NE1	0.43	2.51	24	1
1:A:1058:SER:O	1:A:1059:ARG:HB2	0.43	2.12	2	1
1:A:981:GLN:C	1:A:982:VAL:HG23	0.43	2.38	17	2
1:A:1056:LEU:CD2	1:A:1056:LEU:C	0.43	2.92	13	1
1:A:1050:VAL:HB	1:A:1072:ILE:HG13	0.43	1.91	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1025:CYS:SG	1:A:1044:PHE:HB3	0.43	2.54	16	1
1:A:1063:VAL:C	1:A:1064:PHE:CD1	0.43	2.97	2	1
1:A:978:THR:O	1:A:979:ASP:CG	0.43	2.62	16	2
1:A:1029:PRO:HG2	1:A:1086:GLY:O	0.43	2.13	11	3
1:A:1063:VAL:HG13	1:A:1063:VAL:O	0.43	2.14	18	1
1:A:961:LYS:O	1:A:962:SER:HB3	0.43	2.14	19	1
1:A:992:THR:O	1:A:992:THR:CG2	0.43	2.67	22	1
1:A:1092:ILE:HG13	1:A:1092:ILE:OXT	0.43	2.14	23	1
1:A:970:VAL:HG13	1:A:970:VAL:O	0.43	2.14	24	1
1:A:1084:TRP:N	1:A:1084:TRP:CD1	0.42	2.87	7	1
1:A:969:PRO:HD3	1:A:974:VAL:HG13	0.42	1.91	10	1
1:A:1050:VAL:HB	1:A:1072:ILE:CG1	0.42	2.44	14	1
1:A:1046:TYR:O	1:A:1046:TYR:CG	0.42	2.71	18	1
1:A:1036:PHE:CB	1:A:1050:VAL:HG23	0.42	2.44	19	1
1:A:1055:ASN:HB3	1:A:1064:PHE:HB2	0.42	1.90	21	1
1:A:1062:LYS:C	1:A:1063:VAL:CG2	0.42	2.91	2	1
1:A:968:ASP:O	1:A:968:ASP:OD1	0.42	2.36	3	2
1:A:977:ILE:HD11	1:A:987:THR:OG1	0.42	2.15	5	1
1:A:1043:ASN:N	1:A:1043:ASN:ND2	0.42	2.65	15	1
1:A:995:ARG:NH1	1:A:997:ILE:HD13	0.42	2.29	16	1
1:A:1040:ASN:ND2	1:A:1084:TRP:HH2	0.42	2.12	23	1
1:A:1049:VAL:CG1	1:A:1050:VAL:N	0.42	2.82	23	1
1:A:1049:VAL:HG22	1:A:1073:TYR:CA	0.42	2.43	2	1
1:A:1056:LEU:CD2	1:A:1061:ARG:O	0.42	2.66	2	1
1:A:990:CYS:SG	1:A:996:LEU:HB2	0.42	2.54	3	2
1:A:1075:THR:O	1:A:1076:SER:O	0.42	2.38	5	2
1:A:1023:ILE:HG22	1:A:1023:ILE:O	0.42	2.13	6	1
1:A:1056:LEU:HD12	1:A:1060:GLY:C	0.42	2.40	7	1
1:A:1078:ASP:CG	1:A:1079:ASP:H	0.42	2.21	8	1
1:A:1027:LEU:N	1:A:1027:LEU:CD2	0.42	2.82	11	1
1:A:1003:GLU:HG3	1:A:1005:ILE:HG23	0.42	1.91	15	1
1:A:1077:ASN:ND2	1:A:1077:ASN:H	0.42	2.12	15	1
1:A:1057:GLY:O	1:A:1061:ARG:HG2	0.42	2.14	23	1
1:A:1064:PHE:N	1:A:1064:PHE:CD1	0.42	2.87	4	1
1:A:995:ARG:O	1:A:1020:CYS:SG	0.42	2.77	5	1
1:A:1036:PHE:HB2	1:A:1050:VAL:HB	0.42	1.92	11	1
1:A:1037:ILE:HG13	1:A:1051:THR:O	0.42	2.14	24	1
1:A:1066:LEU:HD21	1:A:1089:PRO:HG2	0.42	1.89	4	1
1:A:1034:GLY:O	1:A:1035:ASP:OD1	0.42	2.37	19	2
1:A:1061:ARG:HG3	1:A:1061:ARG:O	0.42	2.15	11	1
1:A:985:ARG:HE	1:A:1003:GLU:HB2	0.42	1.73	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1027:LEU:HD23	1:A:1044:PHE:CE2	0.42	2.50	18	1
1:A:1061:ARG:C	1:A:1063:VAL:H	0.42	2.22	2	1
1:A:1059:ARG:NE	1:A:1059:ARG:HA	0.42	2.30	5	1
1:A:996:LEU:HD12	1:A:997:ILE:H	0.42	1.74	14	1
1:A:985:ARG:N	1:A:985:ARG:HD2	0.42	2.30	10	1
1:A:1025:CYS:O	1:A:1026:GLY:C	0.42	2.63	13	2
1:A:987:THR:HG22	1:A:1001:SER:OG	0.42	2.14	24	1
1:A:1056:LEU:HD13	1:A:1064:PHE:H	0.42	1.74	5	1
1:A:1057:GLY:O	1:A:1058:SER:HB2	0.42	2.15	6	1
1:A:1083:ILE:HD13	1:A:1083:ILE:N	0.42	2.30	11	1
1:A:1031:ILE:O	1:A:1032:ALA:C	0.42	2.63	12	1
1:A:1040:ASN:HB2	1:A:1044:PHE:CE2	0.42	2.50	12	1
1:A:1066:LEU:HD22	1:A:1067:VAL:N	0.42	2.28	12	1
1:A:1035:ASP:HB2	1:A:1053:ARG:HD3	0.42	1.91	20	1
1:A:1007:SER:HB3	1:A:1012:HIS:HD2	0.42	1.74	23	1
1:A:979:ASP:CG	1:A:980:ILE:H	0.42	2.22	5	3
1:A:996:LEU:HA	1:A:1020:CYS:CA	0.42	2.36	8	1
1:A:993:GLY:HA3	1:A:1046:TYR:CZ	0.42	2.50	11	1
1:A:964:LYS:HE2	1:A:965:THR:H	0.42	1.75	15	1
1:A:1023:ILE:O	1:A:1023:ILE:HG22	0.42	2.15	15	1
1:A:996:LEU:HD23	1:A:998:GLY:N	0.42	2.29	17	1
1:A:991:THR:O	1:A:994:HIS:ND1	0.42	2.53	22	1
1:A:995:ARG:HB2	1:A:1080:GLN:HB2	0.42	1.92	24	1
1:A:976:VAL:HA	1:A:986:ILE:CG2	0.42	2.44	3	1
1:A:1028:PRO:CB	1:A:1050:VAL:HG11	0.42	2.44	4	1
1:A:1063:VAL:HG13	1:A:1064:PHE:N	0.42	2.29	5	1
1:A:1039:THR:HG22	1:A:1039:THR:O	0.42	2.14	19	2
1:A:1029:PRO:HG2	1:A:1087:PRO:O	0.42	2.14	10	1
1:A:1033:ASN:OD1	1:A:1034:GLY:N	0.42	2.52	11	1
1:A:1079:ASP:C	1:A:1081:VAL:H	0.42	2.23	12	1
1:A:970:VAL:HB	1:A:1020:CYS:N	0.42	2.27	15	1
1:A:1069:GLU:HG3	1:A:1089:PRO:HD3	0.42	1.92	16	1
1:A:996:LEU:HD22	1:A:1000:SER:H	0.42	1.75	17	1
1:A:1069:GLU:OE1	1:A:1070:PRO:HD2	0.42	2.14	18	1
1:A:1016:LYS:O	1:A:1018:PRO:HD3	0.42	2.14	21	1
1:A:990:CYS:O	1:A:994:HIS:HB2	0.41	2.14	1	1
1:A:1028:PRO:HB2	1:A:1052:TYR:OH	0.41	2.15	1	1
1:A:997:ILE:N	1:A:997:ILE:HD12	0.41	2.30	2	1
1:A:1026:GLY:O	1:A:1027:LEU:C	0.41	2.63	3	1
1:A:1044:PHE:HD1	1:A:1045:HIS:H	0.41	1.58	6	1
1:A:964:LYS:O	1:A:965:THR:C	0.41	2.62	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1090:GLN:NE2	1:A:1092:ILE:HG23	0.41	2.29	17	1
1:A:1047:GLY:HA3	1:A:1074:CYS:HB2	0.41	1.91	18	1
1:A:1034:GLY:HA2	1:A:1054:CYS:CA	0.41	2.45	21	1
1:A:1028:PRO:HG3	1:A:1084:TRP:CE2	0.41	2.50	23	1
1:A:1006:LEU:HD23	1:A:1008:GLY:N	0.41	2.29	3	1
1:A:1077:ASN:N	1:A:1082:GLY:HA2	0.41	2.30	5	1
1:A:1059:ARG:N	1:A:1059:ARG:CD	0.41	2.82	12	1
1:A:1063:VAL:O	1:A:1063:VAL:HG13	0.41	2.15	15	1
1:A:961:LYS:HD3	1:A:1006:LEU:HD21	0.41	1.92	23	1
1:A:1028:PRO:HG3	1:A:1050:VAL:HG11	0.41	1.92	3	1
1:A:977:ILE:H	1:A:986:ILE:HG22	0.41	1.75	17	1
1:A:1027:LEU:HD23	1:A:1027:LEU:N	0.41	2.27	20	1
1:A:1035:ASP:OD2	1:A:1055:ASN:HA	0.41	2.14	16	2
1:A:991:THR:HG23	1:A:992:THR:N	0.41	2.30	9	1
1:A:1052:TYR:HB2	1:A:1070:PRO:HA	0.41	1.92	11	1
1:A:1029:PRO:O	1:A:1030:THR:O	0.41	2.37	21	2
1:A:961:LYS:CD	1:A:1006:LEU:HD11	0.41	2.46	21	1
1:A:1022:ARG:H	1:A:1022:ARG:HD3	0.41	1.74	22	1
1:A:1040:ASN:OD1	1:A:1041:ARG:N	0.41	2.54	5	1
1:A:1073:TYR:O	1:A:1084:TRP:HA	0.41	2.16	5	1
1:A:1056:LEU:CB	1:A:1060:GLY:HA2	0.41	2.45	6	2
1:A:1039:THR:O	1:A:1040:ASN:HB2	0.41	2.14	13	1
1:A:1031:ILE:HG23	1:A:1031:ILE:O	0.41	2.15	15	1
1:A:1064:PHE:HB2	1:A:1091:CYS:HB3	0.41	1.92	17	1
1:A:1056:LEU:H	1:A:1056:LEU:CD2	0.41	2.23	20	1
1:A:1033:ASN:O	1:A:1054:CYS:HA	0.41	2.16	22	1
1:A:980:ILE:HG22	1:A:1013:TRP:CZ2	0.41	2.51	9	1
1:A:1033:ASN:C	1:A:1055:ASN:ND2	0.41	2.79	10	1
1:A:1034:GLY:CA	1:A:1054:CYS:HA	0.41	2.45	10	1
1:A:986:ILE:O	1:A:1001:SER:HA	0.41	2.15	21	1
1:A:976:VAL:O	1:A:977:ILE:HB	0.41	2.16	22	1
1:A:997:ILE:CB	1:A:1019:ILE:O	0.41	2.69	22	1
1:A:999:HIS:ND1	1:A:1015:THR:HG21	0.41	2.30	4	1
1:A:988:TYR:CZ	1:A:1018:PRO:HG3	0.41	2.51	5	1
1:A:1026:GLY:HA2	1:A:1044:PHE:CE1	0.41	2.50	6	1
1:A:1006:LEU:HD13	1:A:1010:THR:C	0.41	2.41	17	1
1:A:1075:THR:CG2	1:A:1083:ILE:HA	0.41	2.45	21	1
1:A:1056:LEU:HD12	1:A:1061:ARG:O	0.41	2.16	4	1
1:A:970:VAL:C	1:A:972:GLY:H	0.41	2.24	13	1
1:A:1004:CYS:SG	1:A:1013:TRP:CZ3	0.41	3.14	20	1
1:A:1022:ARG:HD2	1:A:1045:HIS:CD2	0.41	2.51	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:970:VAL:O	1:A:1020:CYS:HB2	0.41	2.15	7	1
1:A:1008:GLY:C	1:A:1010:THR:H	0.41	2.24	14	1
1:A:988:TYR:N	1:A:988:TYR:HD1	0.41	2.11	15	1
1:A:1043:ASN:ND2	1:A:1043:ASN:O	0.41	2.54	15	1
1:A:1013:TRP:HB2	1:A:1016:LYS:HA	0.41	1.93	16	1
1:A:1051:THR:HA	1:A:1070:PRO:O	0.41	2.15	16	1
1:A:985:ARG:HD2	1:A:985:ARG:C	0.41	2.41	17	1
1:A:1050:VAL:CG2	1:A:1072:ILE:HG13	0.41	2.46	17	1
1:A:1016:LYS:HD2	1:A:1017:PRO:O	0.41	2.16	18	1
1:A:963:CYS:HB2	1:A:1013:TRP:CE2	0.41	2.51	19	1
1:A:1056:LEU:HD13	1:A:1060:GLY:HA2	0.41	1.93	19	1
1:A:1027:LEU:HA	1:A:1044:PHE:CZ	0.41	2.51	3	1
1:A:1056:LEU:HD12	1:A:1060:GLY:CA	0.41	2.44	7	1
1:A:969:PRO:O	1:A:970:VAL:C	0.41	2.63	10	1
1:A:1054:CYS:SG	1:A:1065:GLU:C	0.41	3.04	22	1
1:A:965:THR:HA	1:A:980:ILE:HD12	0.41	1.93	24	1
1:A:1006:LEU:HD23	1:A:1006:LEU:C	0.40	2.41	2	1
1:A:1022:ARG:HH22	1:A:1046:TYR:HB3	0.40	1.75	7	1
1:A:1052:TYR:N	1:A:1052:TYR:CD1	0.40	2.90	7	1
1:A:1031:ILE:O	1:A:1031:ILE:CG1	0.40	2.69	12	1
1:A:995:ARG:HD3	1:A:1021:GLN:OE1	0.40	2.15	21	1
1:A:1067:VAL:O	1:A:1090:GLN:NE2	0.40	2.55	21	1
1:A:965:THR:OG1	1:A:976:VAL:HG21	0.40	2.16	3	1
1:A:985:ARG:HD2	1:A:985:ARG:H	0.40	1.76	10	1
1:A:1075:THR:O	1:A:1082:GLY:O	0.40	2.39	11	1
1:A:1057:GLY:N	1:A:1063:VAL:HB	0.40	2.31	13	1
1:A:1025:CYS:HB2	1:A:1044:PHE:HE1	0.40	1.77	15	1
1:A:1040:ASN:HD22	1:A:1044:PHE:HE2	0.40	1.58	16	1
1:A:999:HIS:O	1:A:1000:SER:C	0.40	2.64	17	1
1:A:982:VAL:N	1:A:1004:CYS:SG	0.40	2.94	18	1
1:A:1027:LEU:HB3	1:A:1028:PRO:HD2	0.40	1.93	24	1
1:A:1069:GLU:C	1:A:1071:SER:H	0.40	2.23	1	1
1:A:1080:GLN:HG2	1:A:1081:VAL:N	0.40	2.32	1	1
1:A:974:VAL:HG23	1:A:988:TYR:CE1	0.40	2.51	7	1
1:A:997:ILE:HD13	1:A:1021:GLN:HG2	0.40	1.93	7	1
1:A:986:ILE:HG13	1:A:988:TYR:CE1	0.40	2.52	11	1
1:A:996:LEU:HD23	1:A:996:LEU:C	0.40	2.42	11	1
1:A:1076:SER:C	1:A:1078:ASP:H	0.40	2.25	14	1
1:A:1036:PHE:CE1	1:A:1040:ASN:HB3	0.40	2.50	18	1
1:A:974:VAL:HA	1:A:987:THR:O	0.40	2.16	21	1
1:A:1077:ASN:C	1:A:1083:ILE:HG23	0.40	2.40	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1066:LEU:HD11	1:A:1089:PRO:CB	0.40	2.47	5	1
1:A:1040:ASN:O	1:A:1041:ARG:HB2	0.40	2.16	6	1
1:A:962:SER:CB	1:A:981:GLN:HA	0.40	2.47	11	1
1:A:1037:ILE:CG2	1:A:1038:SER:N	0.40	2.84	18	1
1:A:1050:VAL:HG12	1:A:1084:TRP:CZ3	0.40	2.51	23	1
1:A:983:GLY:HA2	1:A:1003:GLU:OE2	0.40	2.17	4	1
1:A:969:PRO:HG2	1:A:988:TYR:CE2	0.40	2.52	8	1
1:A:996:LEU:HD11	1:A:1000:SER:N	0.40	2.31	15	1
1:A:975:HIS:N	1:A:975:HIS:CD2	0.40	2.89	19	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	132/136 (97%)	80±5 (61±4%)	31±5 (24±4%)	20±4 (16±3%)	0	4
All	All	3168/3264 (97%)	1929 (61%)	747 (24%)	492 (16%)	0	4

All 81 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	977	ILE	20
1	A	970	VAL	18
1	A	980	ILE	18
1	A	1077	ASN	17
1	A	1046	TYR	16
1	A	1089	PRO	14
1	A	979	ASP	13
1	A	1088	ALA	13
1	A	991	THR	12
1	A	1079	ASP	12
1	A	964	LYS	11
1	A	969	PRO	11
1	A	1078	ASP	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	1080	GLN	11
1	A	1059	ARG	11
1	A	961	LYS	10
1	A	1063	VAL	10
1	A	1008	GLY	10
1	A	1040	ASN	10
1	A	1054	CYS	9
1	A	1055	ASN	9
1	A	1038	SER	8
1	A	1009	ASN	8
1	A	1060	GLY	8
1	A	1076	SER	8
1	A	1048	SER	8
1	A	1047	GLY	8
1	A	1017	PRO	7
1	A	1042	GLU	7
1	A	982	VAL	7
1	A	999	HIS	7
1	A	1005	ILE	7
1	A	1081	VAL	6
1	A	1056	LEU	6
1	A	1064	PHE	6
1	A	1083	ILE	6
1	A	1037	ILE	5
1	A	1058	SER	5
1	A	1084	TRP	5
1	A	1087	PRO	5
1	A	1030	THR	5
1	A	1043	ASN	4
1	A	990	CYS	4
1	A	1019	ILE	4
1	A	1032	ALA	4
1	A	1035	ASP	4
1	A	989	SER	4
1	A	992	THR	4
1	A	1062	LYS	4
1	A	960	ALA	3
1	A	1075	THR	3
1	A	1039	THR	3
1	A	1016	LYS	3
1	A	1018	PRO	3
1	A	986	ILE	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	1041	ARG	3
1	A	1034	GLY	3
1	A	1007	SER	3
1	A	978	THR	2
1	A	1029	PRO	2
1	A	1036	PHE	2
1	A	1070	PRO	2
1	A	984	SER	2
1	A	1045	HIS	2
1	A	968	ASP	2
1	A	1069	GLU	2
1	A	1061	ARG	2
1	A	1031	ILE	2
1	A	1044	PHE	2
1	A	1082	GLY	2
1	A	1026	GLY	1
1	A	993	GLY	1
1	A	1033	ASN	1
1	A	1067	VAL	1
1	A	1068	GLY	1
1	A	1065	GLU	1
1	A	974	VAL	1
1	A	1072	ILE	1
1	A	973	MET	1
1	A	994	HIS	1
1	A	966	PRO	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	115/117 (98%)	110±2 (96±2%)	5±2 (4±2%)	26	77
All	All	2760/2808 (98%)	2636 (96%)	124 (4%)	26	77

All 38 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	1077	ASN	22
1	A	1006	LEU	9
1	A	974	VAL	6
1	A	1064	PHE	6
1	A	970	VAL	6
1	A	1016	LYS	5
1	A	961	LYS	5
1	A	980	ILE	4
1	A	1036	PHE	4
1	A	1056	LEU	4
1	A	1044	PHE	4
1	A	964	LYS	4
1	A	1083	ILE	4
1	A	988	TYR	3
1	A	991	THR	3
1	A	985	ARG	3
1	A	1090	GLN	3
1	A	1063	VAL	2
1	A	1059	ARG	2
1	A	1027	LEU	2
1	A	1042	GLU	2
1	A	1043	ASN	2
1	A	1061	ARG	2
1	A	1005	ILE	2
1	A	996	LEU	2
1	A	1066	LEU	1
1	A	994	HIS	1
1	A	1022	ARG	1
1	A	1062	LYS	1
1	A	1021	GLN	1
1	A	1073	TYR	1
1	A	1092	ILE	1
1	A	1019	ILE	1
1	A	1080	GLN	1
1	A	1025	CYS	1
1	A	1052	TYR	1
1	A	1084	TRP	1
1	A	1069	GLU	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided