



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 03:36 PM UTC

PDB ID : 1IX5 / pdb_00001ix5
Title : Solution structure of the Methanococcus thermolithotrophicus FKBP
Authors : Suzuki, R.; Nagata, K.; Kawakami, M.; Nemoto, N.; Furutani, M.; Adachi, K.;
Maruyama, T.; Tanokura, M.
Deposited on : 2002-06-12

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

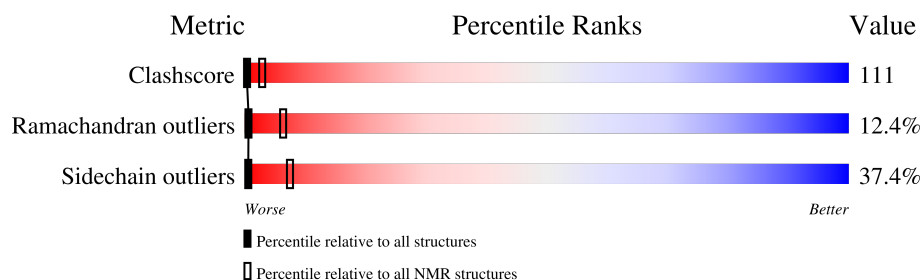
1 Overall quality at a glance

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	151	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 10 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:5-A:40, A:45-A:86, A:138-A:153 (94)	0.55	1
2	A:87-A:137 (51)	0.48	2

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 3 clusters and 1 single-model cluster was found.

Cluster number	Models
1	1, 3, 4, 6, 8
2	7, 9
3	2, 10
Single-model clusters	5

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2348 atoms, of which 1167 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called FKBP.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	151	Total	C	H	N	O	S	0
			2348	753	1167	181	243	4	

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

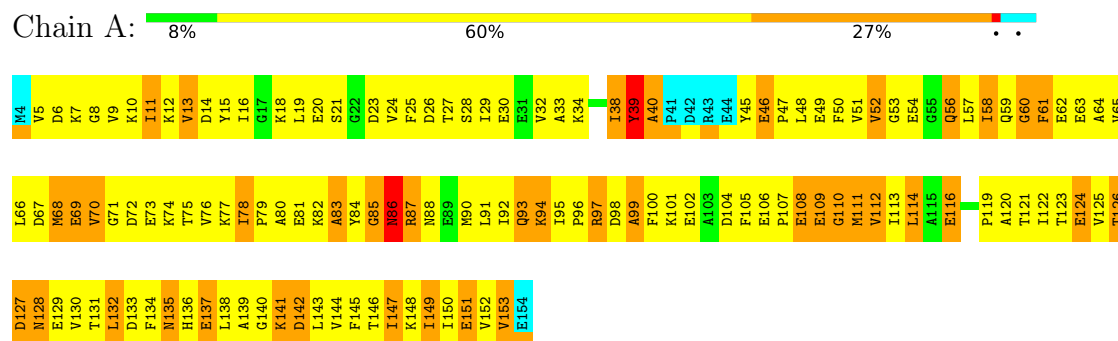
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	4	MET	LEU	engineered mutation	UNP O52980

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: FKBP

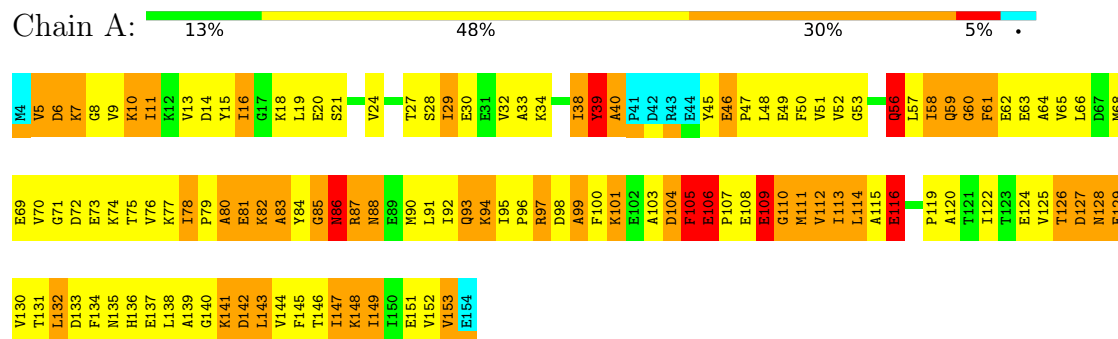


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

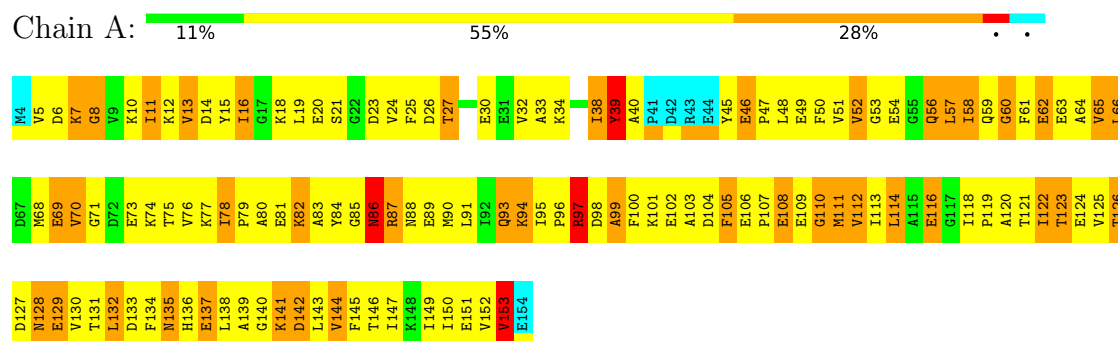
4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

- Molecule 1: FKBP



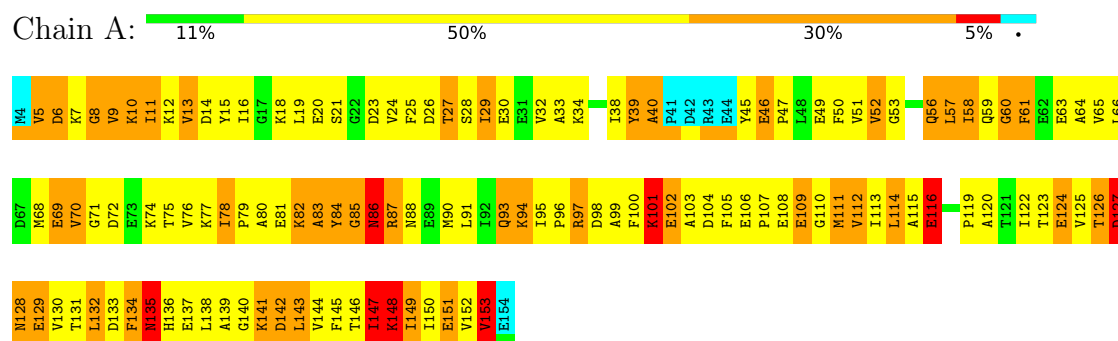
4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: FKBP



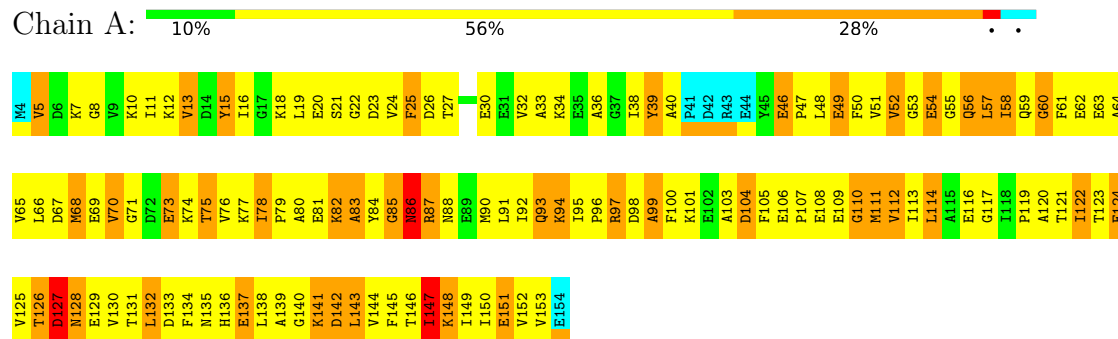
4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: FKBP



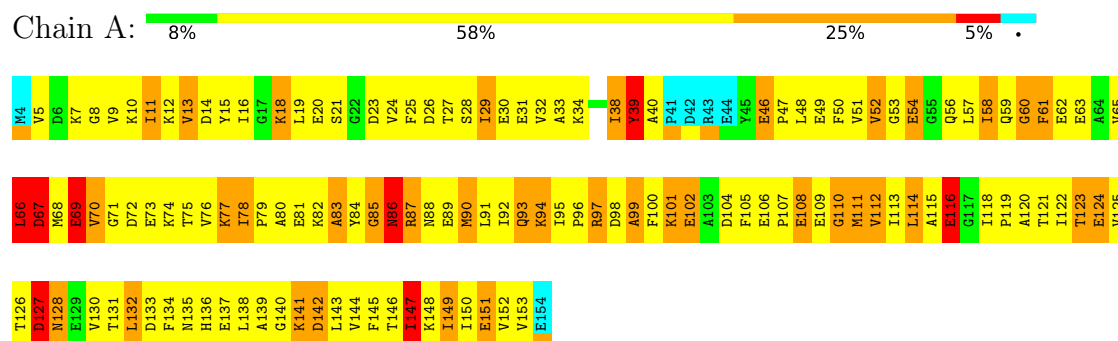
4.2.4 Score per residue for model 4

• Molecule 1: FKBP



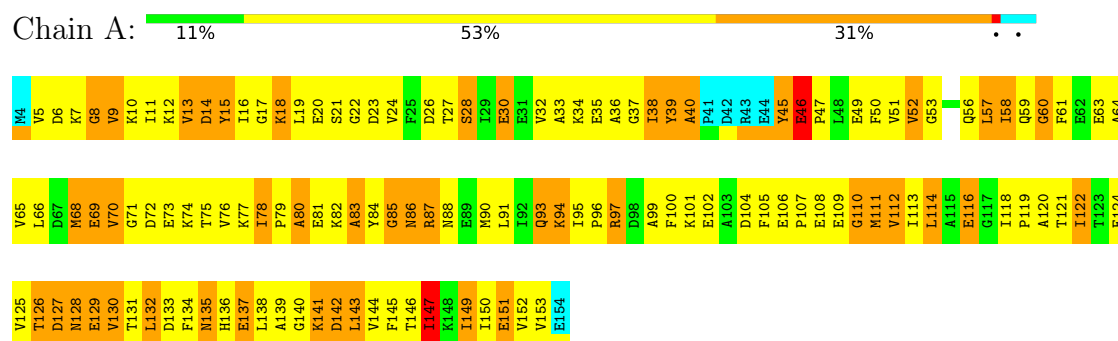
4.2.5 Score per residue for model 5

• Molecule 1: FKBP



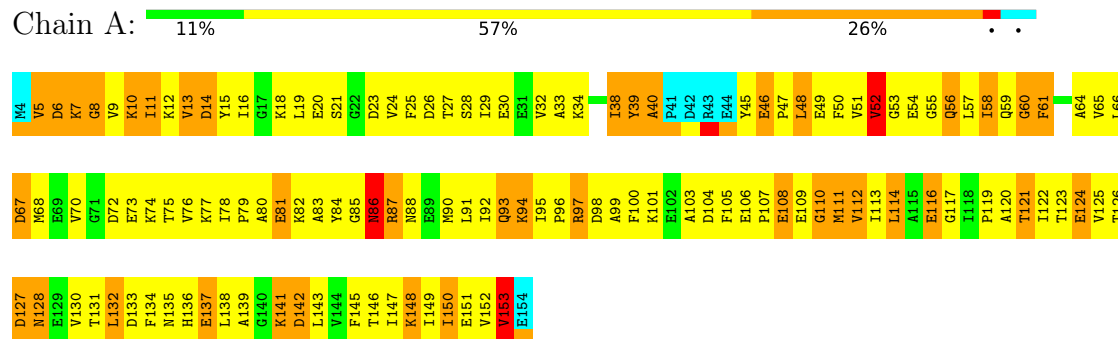
4.2.6 Score per residue for model 6

• Molecule 1: FKBP



4.2.7 Score per residue for model 7

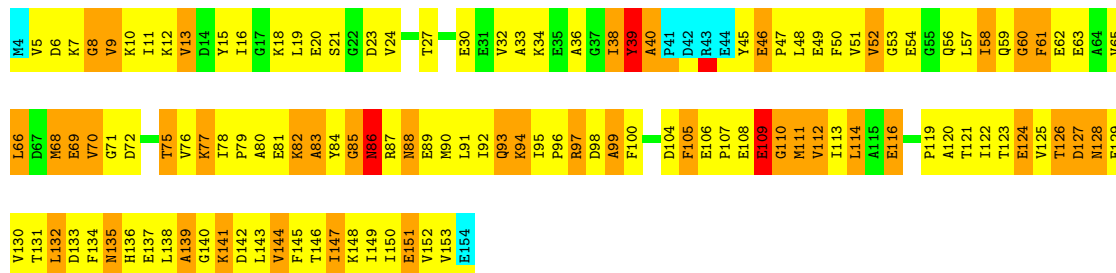
• Molecule 1: FKBP



4.2.8 Score per residue for model 8

• Molecule 1: FKBP

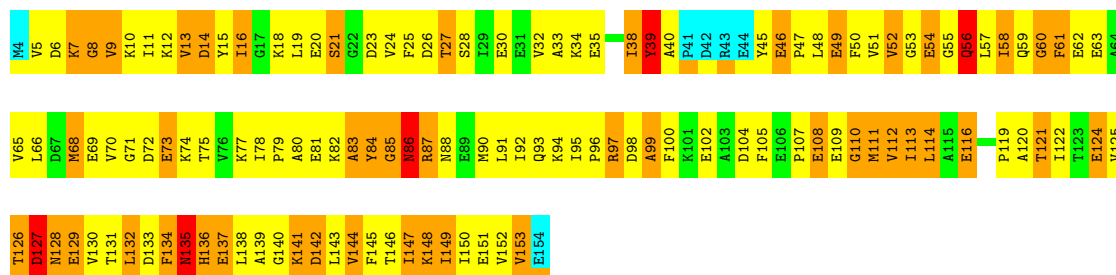
Chain A: 14% 53% 27%



4.2.9 Score per residue for model 9

• Molecule 1: FKBP

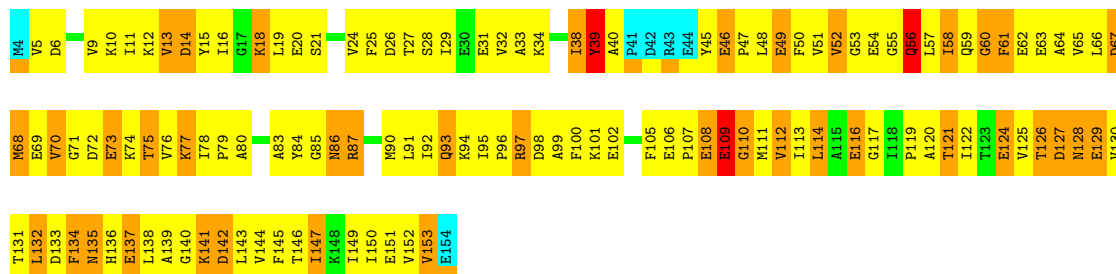
Chain A: 11% 50% 31%



4.2.10 Score per residue for model 10

• Molecule 1: FKBP

Chain A: 13% 56% 26%



5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

The models were refined using the following method: *torsion angle dynamics*.

Of the 100 calculated structures, 10 were deposited, based on the following criterion: *target function*.

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

Software name	Classification	Version
DYANA	structure solution	1.5
DYANA	refinement	1.5

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	0.51±0.00	0±0/1146 (0.0± 0.0%)	0.95±0.01	0±1/1551 (0.0± 0.0%)
All	All	0.51	0/11460 (0.0%)	0.95	3/15510 (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	135	ASN	CB-CA-C	-5.06	110.72	116.54	8	1
1	A	40	ALA	CA-C-N	5.03	124.33	118.85	6	1
1	A	40	ALA	C-N-CA	5.03	124.33	118.85	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	1129	1122	1121	249±14
All	All	11290	11220	11210	2491

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 111.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:138:LEU:HD12	1:A:143:LEU:HD22	1.10	1.21	2	2
1:A:11:ILE:HG22	1:A:152:VAL:HG22	1.05	1.19	8	9
1:A:5:VAL:HG21	1:A:11:ILE:HD13	1.05	1.13	2	6
1:A:87:ARG:HE	1:A:139:ALA:HB3	1.03	1.12	8	1
1:A:78:ILE:CG2	1:A:83:ALA:HB2	0.99	1.87	2	3
1:A:68:MET:HE3	1:A:149:ILE:HD11	0.99	1.33	10	5
1:A:68:MET:HE2	1:A:149:ILE:HD11	0.97	1.32	5	2
1:A:75:THR:CG2	1:A:146:THR:HG23	0.97	1.90	10	3
1:A:58:ILE:HD13	1:A:58:ILE:H	0.96	1.15	9	8
1:A:149:ILE:HD12	1:A:149:ILE:H	0.94	1.22	6	1
1:A:143:LEU:HD23	1:A:143:LEU:H	0.94	1.23	10	5
1:A:16:ILE:HD13	1:A:32:VAL:HG21	0.94	1.37	8	7
1:A:5:VAL:HG21	1:A:11:ILE:HG21	0.93	1.38	6	2
1:A:111:MET:CB	1:A:122:ILE:HD13	0.93	1.94	10	7
1:A:16:ILE:HG21	1:A:32:VAL:HG11	0.92	1.40	2	10
1:A:51:VAL:H	1:A:56:GLN:NE2	0.90	1.64	7	4
1:A:16:ILE:HG23	1:A:27:THR:HB	0.90	1.44	8	10
1:A:78:ILE:HG21	1:A:83:ALA:HB2	0.90	1.40	2	2
1:A:84:TYR:CE1	1:A:138:LEU:HD12	0.89	2.01	9	1
1:A:68:MET:CE	1:A:149:ILE:HD11	0.88	1.99	6	3
1:A:11:ILE:CG2	1:A:152:VAL:HG22	0.88	1.97	8	7
1:A:138:LEU:CD1	1:A:143:LEU:HD22	0.87	1.98	2	3
1:A:88:ASN:CB	1:A:91:LEU:HD12	0.86	1.99	3	9
1:A:95:ILE:HG12	1:A:132:LEU:HD11	0.86	1.46	7	8
1:A:87:ARG:NE	1:A:139:ALA:HB3	0.86	1.86	8	1
1:A:58:ILE:HD13	1:A:58:ILE:N	0.85	1.85	5	9
1:A:51:VAL:H	1:A:56:GLN:HE22	0.85	1.12	6	3
1:A:16:ILE:CD1	1:A:32:VAL:HG21	0.85	2.00	8	6
1:A:91:LEU:HD13	1:A:135:ASN:HA	0.85	1.49	3	4
1:A:58:ILE:H	1:A:58:ILE:CD1	0.83	1.86	5	7
1:A:114:LEU:HD23	1:A:119:PRO:HD3	0.83	1.48	6	6
1:A:107:PRO:CG	1:A:130:VAL:HG11	0.83	2.04	9	7
1:A:136:HIS:CG	1:A:137:GLU:N	0.82	2.47	2	9
1:A:136:HIS:CG	1:A:137:GLU:H	0.82	1.91	2	7
1:A:80:ALA:HB1	1:A:85:GLY:H	0.81	1.35	10	1
1:A:52:VAL:HG11	1:A:66:LEU:CG	0.81	2.05	3	2
1:A:138:LEU:CG	1:A:143:LEU:HD22	0.80	2.06	5	1
1:A:126:THR:CG2	1:A:128:ASN:HD21	0.80	1.89	6	2
1:A:120:ALA:HB1	1:A:132:LEU:HB3	0.80	1.54	4	9
1:A:5:VAL:HG13	1:A:9:VAL:HB	0.80	1.53	6	3
1:A:114:LEU:HD23	1:A:119:PRO:N	0.79	1.93	4	9
1:A:11:ILE:HG22	1:A:152:VAL:CG2	0.79	2.07	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:149:ILE:HD13	1:A:149:ILE:N	0.79	1.92	9	4
1:A:88:ASN:HB2	1:A:91:LEU:HD12	0.79	1.52	2	6
1:A:133:ASP:CG	1:A:135:ASN:HD21	0.79	1.86	1	8
1:A:137:GLU:HG3	1:A:138:LEU:HD22	0.79	1.54	2	1
1:A:141:LYS:C	1:A:141:LYS:CD	0.79	2.56	5	10
1:A:86:ASN:H	1:A:86:ASN:ND2	0.79	1.72	2	4
1:A:97:ARG:CZ	1:A:130:VAL:HG13	0.78	2.07	10	1
1:A:138:LEU:HD23	1:A:141:LYS:HE2	0.78	1.54	3	4
1:A:136:HIS:ND1	1:A:137:GLU:N	0.78	2.31	8	10
1:A:105:PHE:CE1	1:A:113:ILE:HD12	0.78	2.14	1	1
1:A:50:PHE:CZ	1:A:65:VAL:HG21	0.77	2.14	3	8
1:A:111:MET:HB2	1:A:122:ILE:HD13	0.77	1.55	10	6
1:A:138:LEU:CD2	1:A:141:LYS:HE2	0.77	2.10	6	6
1:A:97:ARG:HH21	1:A:107:PRO:CG	0.77	1.91	5	9
1:A:138:LEU:HD22	1:A:143:LEU:HD22	0.77	1.56	4	7
1:A:16:ILE:CG2	1:A:32:VAL:HG11	0.77	2.09	2	4
1:A:143:LEU:HD11	1:A:145:PHE:CZ	0.77	2.15	1	4
1:A:12:LYS:HE2	1:A:153:VAL:HG22	0.76	1.55	6	2
1:A:60:GLY:HA3	1:A:78:ILE:HD12	0.76	1.58	7	2
1:A:138:LEU:HD13	1:A:143:LEU:CD2	0.76	2.10	9	1
1:A:49:GLU:HB3	1:A:153:VAL:HG21	0.76	1.56	4	1
1:A:50:PHE:CD2	1:A:57:LEU:HD23	0.76	2.16	5	3
1:A:126:THR:HG22	1:A:128:ASN:HD21	0.76	1.41	6	2
1:A:50:PHE:CE2	1:A:65:VAL:HG21	0.76	2.15	1	7
1:A:111:MET:HB3	1:A:122:ILE:HD13	0.76	1.56	9	6
1:A:87:ARG:HG3	1:A:139:ALA:HB1	0.76	1.58	5	1
1:A:114:LEU:HD23	1:A:119:PRO:CD	0.76	2.11	2	10
1:A:50:PHE:CE2	1:A:61:PHE:CE1	0.76	2.74	8	3
1:A:48:LEU:HD12	1:A:49:GLU:N	0.75	1.95	4	1
1:A:136:HIS:ND1	1:A:138:LEU:N	0.75	2.35	10	10
1:A:80:ALA:HB1	1:A:85:GLY:N	0.75	1.97	10	1
1:A:107:PRO:HB2	1:A:130:VAL:HG11	0.74	1.59	6	1
1:A:136:HIS:HB3	1:A:139:ALA:HB2	0.74	1.57	5	3
1:A:52:VAL:HG11	1:A:66:LEU:HG	0.74	1.57	5	7
1:A:14:ASP:CG	1:A:150:ILE:HD11	0.74	2.07	7	3
1:A:10:LYS:CA	1:A:51:VAL:HG22	0.74	2.12	5	5
1:A:107:PRO:HG2	1:A:130:VAL:HG11	0.74	1.58	1	6
1:A:68:MET:HE2	1:A:149:ILE:CD1	0.74	2.12	5	1
1:A:78:ILE:CG1	1:A:145:PHE:CD1	0.74	2.71	7	2
1:A:97:ARG:HH21	1:A:107:PRO:HD2	0.74	1.43	1	9
1:A:68:MET:HE3	1:A:149:ILE:CD1	0.73	2.11	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:TYR:CE2	1:A:136:HIS:CE1	0.73	2.77	5	3
1:A:61:PHE:CE1	1:A:147:ILE:HD13	0.73	2.18	4	1
1:A:105:PHE:O	1:A:106:GLU:C	0.73	2.30	1	1
1:A:14:ASP:CG	1:A:29:ILE:HD11	0.73	2.08	7	1
1:A:63:GLU:HA	1:A:66:LEU:HD12	0.73	1.61	1	7
1:A:87:ARG:HE	1:A:139:ALA:CB	0.73	1.92	8	1
1:A:70:VAL:HG22	1:A:152:VAL:HG23	0.73	1.60	7	3
1:A:5:VAL:CG2	1:A:11:ILE:HG21	0.72	2.15	6	5
1:A:10:LYS:O	1:A:11:ILE:HG23	0.72	1.83	3	7
1:A:143:LEU:HD23	1:A:143:LEU:N	0.72	1.98	2	4
1:A:143:LEU:N	1:A:143:LEU:HD23	0.72	2.00	3	3
1:A:84:TYR:CZ	1:A:136:HIS:CE1	0.72	2.77	5	1
1:A:50:PHE:HA	1:A:56:GLN:HE22	0.72	1.44	4	3
1:A:84:TYR:CE2	1:A:136:HIS:NE2	0.72	2.57	5	2
1:A:138:LEU:CD1	1:A:141:LYS:HE2	0.72	2.15	5	2
1:A:122:ILE:CG1	1:A:132:LEU:HD23	0.71	2.14	3	6
1:A:97:ARG:HH21	1:A:107:PRO:HG2	0.71	1.44	6	9
1:A:126:THR:CG2	1:A:128:ASN:ND2	0.71	2.54	6	1
1:A:87:ARG:NE	1:A:140:GLY:H	0.71	1.82	8	1
1:A:78:ILE:CG1	1:A:145:PHE:CD2	0.71	2.73	10	2
1:A:120:ALA:HB1	1:A:132:LEU:CB	0.70	2.16	4	9
1:A:51:VAL:N	1:A:56:GLN:HE22	0.70	1.83	7	4
1:A:51:VAL:HG12	1:A:53:GLY:H	0.70	1.44	4	10
1:A:94:LYS:HD2	1:A:131:THR:HG23	0.70	1.64	1	8
1:A:47:PRO:HB3	1:A:150:ILE:HD12	0.70	1.63	6	2
1:A:86:ASN:N	1:A:86:ASN:ND2	0.70	2.39	5	5
1:A:50:PHE:CE2	1:A:61:PHE:CZ	0.70	2.80	8	4
1:A:16:ILE:HG23	1:A:27:THR:CB	0.69	2.17	8	8
1:A:136:HIS:CE1	1:A:137:GLU:CG	0.69	2.75	8	3
1:A:93:GLN:O	1:A:132:LEU:HD12	0.69	1.88	10	1
1:A:138:LEU:HD12	1:A:141:LYS:HE2	0.69	1.62	5	1
1:A:97:ARG:HH21	1:A:107:PRO:CD	0.69	2.00	1	9
1:A:91:LEU:HB3	1:A:135:ASN:H	0.69	1.48	1	10
1:A:80:ALA:HB2	1:A:141:LYS:N	0.69	2.02	9	8
1:A:111:MET:HB3	1:A:122:ILE:HD12	0.69	1.64	3	2
1:A:19:LEU:HD12	1:A:23:ASP:HB2	0.69	1.63	5	1
1:A:64:ALA:HB1	1:A:74:LYS:HD2	0.69	1.64	1	3
1:A:132:LEU:HD12	1:A:132:LEU:H	0.69	1.47	4	8
1:A:16:ILE:HD13	1:A:32:VAL:HG11	0.69	1.65	4	1
1:A:48:LEU:HD21	1:A:57:LEU:HD21	0.68	1.64	7	3
1:A:5:VAL:CG2	1:A:11:ILE:HD13	0.68	2.17	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:TYR:CD2	1:A:138:LEU:CB	0.68	2.77	2	1
1:A:138:LEU:HD22	1:A:141:LYS:HE2	0.68	1.64	1	5
1:A:58:ILE:HD11	1:A:61:PHE:HB3	0.68	1.65	9	6
1:A:136:HIS:CE1	1:A:138:LEU:H	0.68	2.06	5	2
1:A:75:THR:HG23	1:A:146:THR:HG23	0.68	1.63	8	3
1:A:30:GLU:CG	1:A:45:TYR:CE2	0.68	2.77	6	1
1:A:138:LEU:HD23	1:A:141:LYS:CE	0.68	2.18	3	3
1:A:50:PHE:CB	1:A:56:GLN:NE2	0.68	2.57	10	4
1:A:95:ILE:CD1	1:A:100:PHE:CD1	0.68	2.77	7	3
1:A:135:ASN:N	1:A:135:ASN:ND2	0.68	2.40	3	3
1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:ASP:H	0.68	1.49	10	1
1:A:78:ILE:HD13	1:A:145:PHE:CD2	0.67	2.23	4	6
1:A:61:PHE:CD1	1:A:147:ILE:HD13	0.67	2.24	4	1
1:A:149:ILE:H	1:A:149:ILE:CD1	0.67	2.01	6	1
1:A:124:GLU:HG2	1:A:126:THR:HG23	0.67	1.66	7	1
1:A:138:LEU:HD13	1:A:141:LYS:HD2	0.67	1.65	7	1
1:A:97:ARG:HH11	1:A:129:GLU:HA	0.67	1.49	10	1
1:A:97:ARG:NH2	1:A:130:VAL:CG2	0.67	2.57	10	1
1:A:60:GLY:CA	1:A:82:LYS:HE3	0.67	2.20	1	1
1:A:95:ILE:HG23	1:A:132:LEU:CD1	0.67	2.18	9	8
1:A:61:PHE:CD1	1:A:62:GLU:N	0.67	2.62	8	4
1:A:76:VAL:CG1	1:A:77:LYS:N	0.67	2.57	3	9
1:A:57:LEU:CB	1:A:61:PHE:CD1	0.67	2.77	5	5
1:A:46:GLU:CB	1:A:47:PRO:HD2	0.67	2.20	7	10
1:A:120:ALA:O	1:A:122:ILE:HD12	0.67	1.89	9	5
1:A:138:LEU:HG	1:A:143:LEU:HD22	0.67	1.66	5	1
1:A:136:HIS:CE1	1:A:137:GLU:CD	0.67	2.73	9	2
1:A:93:GLN:NE2	1:A:134:PHE:CD1	0.67	2.63	2	6
1:A:111:MET:CB	1:A:122:ILE:HD12	0.66	2.19	7	2
1:A:80:ALA:HB2	1:A:141:LYS:C	0.66	2.14	1	6
1:A:133:ASP:CG	1:A:135:ASN:ND2	0.66	2.53	1	8
1:A:50:PHE:CZ	1:A:61:PHE:CZ	0.66	2.84	4	4
1:A:61:PHE:CD1	1:A:147:ILE:CD1	0.66	2.79	4	1
1:A:51:VAL:HG11	1:A:54:GLU:OE1	0.66	1.88	4	1
1:A:58:ILE:N	1:A:58:ILE:CD1	0.66	2.58	1	2
1:A:126:THR:C	1:A:128:ASN:H	0.66	1.99	9	10
1:A:50:PHE:CG	1:A:57:LEU:CD2	0.66	2.78	4	4
1:A:50:PHE:CG	1:A:57:LEU:HD23	0.66	2.26	3	5
1:A:62:GLU:O	1:A:65:VAL:HG22	0.65	1.90	5	3
1:A:49:GLU:CD	1:A:153:VAL:HG21	0.65	2.15	2	1
1:A:5:VAL:CG1	1:A:6:ASP:N	0.65	2.59	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:126:THR:HB	1:A:128:ASN:ND2	0.65	2.06	6	4
1:A:51:VAL:N	1:A:56:GLN:NE2	0.65	2.42	5	3
1:A:59:GLN:HE21	1:A:82:LYS:HA	0.65	1.50	9	3
1:A:80:ALA:CB	1:A:141:LYS:N	0.65	2.59	9	5
1:A:149:ILE:HD12	1:A:149:ILE:N	0.65	2.03	6	1
1:A:80:ALA:O	1:A:85:GLY:N	0.65	2.30	10	10
1:A:33:ALA:HB1	1:A:39:TYR:HA	0.65	1.69	1	5
1:A:50:PHE:HB2	1:A:56:GLN:HE21	0.65	1.51	10	4
1:A:71:GLY:H	1:A:149:ILE:HB	0.64	1.52	8	9
1:A:138:LEU:HA	1:A:141:LYS:CG	0.64	2.22	3	7
1:A:30:GLU:O	1:A:33:ALA:HB3	0.64	1.93	1	5
1:A:80:ALA:HB1	1:A:139:ALA:O	0.64	1.91	8	1
1:A:97:ARG:HH21	1:A:107:PRO:HG3	0.64	1.51	10	1
1:A:97:ARG:CZ	1:A:97:ARG:HA	0.64	2.22	10	1
1:A:61:PHE:CE1	1:A:147:ILE:HG21	0.64	2.28	4	1
1:A:75:THR:OG1	1:A:146:THR:HG23	0.64	1.92	7	7
1:A:58:ILE:CD1	1:A:58:ILE:H	0.64	2.04	1	1
1:A:61:PHE:CD1	1:A:61:PHE:C	0.64	2.75	9	10
1:A:11:ILE:HD11	1:A:50:PHE:CZ	0.64	2.28	9	4
1:A:19:LEU:C	1:A:21:SER:H	0.64	2.00	10	9
1:A:124:GLU:HB3	1:A:131:THR:H	0.63	1.52	3	7
1:A:128:ASN:N	1:A:128:ASN:ND2	0.63	2.45	7	7
1:A:124:GLU:CG	1:A:126:THR:HG23	0.63	2.24	7	2
1:A:136:HIS:CE1	1:A:137:GLU:HG2	0.63	2.29	8	4
1:A:138:LEU:HD13	1:A:143:LEU:HD13	0.63	1.70	6	2
1:A:10:LYS:HA	1:A:51:VAL:HG22	0.63	1.71	2	4
1:A:12:LYS:HE2	1:A:153:VAL:CG2	0.63	2.24	6	4
1:A:49:GLU:CD	1:A:153:VAL:HG11	0.63	2.19	6	2
1:A:143:LEU:CD1	1:A:145:PHE:CZ	0.62	2.82	1	4
1:A:33:ALA:HB2	1:A:45:TYR:CE1	0.62	2.29	6	1
1:A:57:LEU:HD22	1:A:61:PHE:CZ	0.62	2.28	10	1
1:A:78:ILE:HG13	1:A:145:PHE:CD2	0.62	2.29	10	1
1:A:125:VAL:O	1:A:125:VAL:HG22	0.62	1.93	7	8
1:A:68:MET:HE2	1:A:149:ILE:HG12	0.62	1.72	2	1
1:A:137:GLU:CG	1:A:138:LEU:HD22	0.62	2.24	2	2
1:A:95:ILE:HG23	1:A:132:LEU:HD11	0.62	1.71	9	2
1:A:5:VAL:HG21	1:A:11:ILE:CG2	0.62	2.22	6	2
1:A:49:GLU:OE1	1:A:153:VAL:HG11	0.62	1.95	6	1
1:A:93:GLN:HE21	1:A:93:GLN:N	0.62	1.93	8	1
1:A:64:ALA:HB1	1:A:74:LYS:CD	0.62	2.25	1	1
1:A:61:PHE:CE1	1:A:65:VAL:HG11	0.62	2.30	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:153:VAL:HG12	1:A:153:VAL:O	0.62	1.93	4	3
1:A:84:TYR:CE2	1:A:136:HIS:CD2	0.62	2.87	9	2
1:A:51:VAL:C	1:A:53:GLY:H	0.62	2.02	4	9
1:A:50:PHE:CD2	1:A:57:LEU:HD21	0.62	2.29	6	2
1:A:100:PHE:CZ	1:A:113:ILE:HD13	0.62	2.29	9	1
1:A:27:THR:HG23	1:A:45:TYR:HE2	0.62	1.54	3	2
1:A:125:VAL:HG13	1:A:125:VAL:O	0.62	1.95	8	3
1:A:135:ASN:N	1:A:135:ASN:HD22	0.62	1.91	3	2
1:A:61:PHE:CD2	1:A:147:ILE:HD13	0.61	2.30	8	2
1:A:95:ILE:HG12	1:A:130:VAL:HG23	0.61	1.73	9	3
1:A:78:ILE:HG12	1:A:145:PHE:CD2	0.61	2.31	9	1
1:A:126:THR:C	1:A:128:ASN:N	0.61	2.58	10	10
1:A:50:PHE:CE1	1:A:65:VAL:HG21	0.61	2.30	2	1
1:A:13:VAL:HG21	1:A:147:ILE:CG2	0.61	2.25	5	4
1:A:58:ILE:CB	1:A:83:ALA:HA	0.61	2.26	2	8
1:A:78:ILE:HG13	1:A:145:PHE:CD1	0.61	2.31	7	1
1:A:70:VAL:CG1	1:A:151:GLU:HA	0.61	2.26	8	9
1:A:93:GLN:HE22	1:A:134:PHE:HB2	0.61	1.54	8	7
1:A:57:LEU:CB	1:A:61:PHE:CE1	0.61	2.83	9	3
1:A:45:TYR:C	1:A:46:GLU:CG	0.61	2.74	6	1
1:A:78:ILE:HG12	1:A:145:PHE:CD1	0.61	2.31	8	2
1:A:91:LEU:C	1:A:93:GLN:NE2	0.61	2.59	9	1
1:A:80:ALA:CB	1:A:85:GLY:H	0.61	2.06	10	1
1:A:68:MET:SD	1:A:73:GLU:N	0.60	2.74	10	3
1:A:149:ILE:N	1:A:149:ILE:CD1	0.60	2.60	9	1
1:A:112:VAL:HG13	1:A:119:PRO:HB2	0.60	1.72	9	4
1:A:84:TYR:CD2	1:A:138:LEU:HB2	0.60	2.32	2	1
1:A:88:ASN:HB3	1:A:91:LEU:HD12	0.60	1.73	3	4
1:A:60:GLY:H	1:A:82:LYS:HB3	0.60	1.57	6	5
1:A:120:ALA:HB1	1:A:132:LEU:HB2	0.60	1.72	6	1
1:A:126:THR:O	1:A:128:ASN:N	0.60	2.34	10	10
1:A:93:GLN:CD	1:A:134:PHE:CD1	0.60	2.79	6	3
1:A:57:LEU:H	1:A:57:LEU:HD22	0.60	1.56	3	4
1:A:146:THR:O	1:A:146:THR:HG22	0.60	1.96	5	6
1:A:70:VAL:CG2	1:A:152:VAL:HG23	0.60	2.26	7	2
1:A:8:GLY:N	1:A:53:GLY:HA3	0.60	2.12	2	2
1:A:11:ILE:CD1	1:A:50:PHE:CZ	0.60	2.85	7	4
1:A:91:LEU:O	1:A:134:PHE:N	0.60	2.34	9	10
1:A:30:GLU:HA	1:A:45:TYR:CD1	0.60	2.32	6	1
1:A:30:GLU:N	1:A:45:TYR:CG	0.60	2.70	6	1
1:A:14:ASP:OD2	1:A:150:ILE:HD11	0.59	1.96	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:LEU:C	1:A:93:GLN:HE22	0.59	2.05	9	1
1:A:61:PHE:O	1:A:65:VAL:HG22	0.59	1.97	10	1
1:A:97:ARG:NH2	1:A:107:PRO:HD2	0.59	2.13	7	9
1:A:48:LEU:HD12	1:A:49:GLU:H	0.59	1.57	4	1
1:A:84:TYR:N	1:A:84:TYR:CD1	0.59	2.70	3	6
1:A:30:GLU:CG	1:A:45:TYR:CD2	0.59	2.86	6	1
1:A:97:ARG:HH22	1:A:130:VAL:CG2	0.59	2.11	10	1
1:A:33:ALA:HB2	1:A:45:TYR:CE2	0.59	2.33	3	1
1:A:135:ASN:HB3	1:A:139:ALA:HB3	0.59	1.74	6	1
1:A:124:GLU:CG	1:A:126:THR:CG2	0.59	2.80	1	2
1:A:138:LEU:HD13	1:A:143:LEU:HD22	0.59	1.75	9	2
1:A:58:ILE:CD1	1:A:58:ILE:N	0.59	2.61	9	2
1:A:61:PHE:CE2	1:A:147:ILE:HG23	0.59	2.33	1	5
1:A:61:PHE:CZ	1:A:147:ILE:CG2	0.59	2.86	6	2
1:A:10:LYS:O	1:A:152:VAL:HG13	0.59	1.98	4	4
1:A:50:PHE:CB	1:A:56:GLN:HE21	0.59	2.11	1	2
1:A:138:LEU:HD22	1:A:143:LEU:HD13	0.59	1.74	3	1
1:A:95:ILE:HD11	1:A:100:PHE:CD1	0.59	2.33	2	3
1:A:84:TYR:CZ	1:A:138:LEU:HD12	0.59	2.32	10	2
1:A:12:LYS:CE	1:A:153:VAL:HG22	0.58	2.29	3	1
1:A:57:LEU:HB2	1:A:61:PHE:CE1	0.58	2.33	8	4
1:A:138:LEU:CB	1:A:143:LEU:HD22	0.58	2.28	5	1
1:A:97:ARG:CZ	1:A:130:VAL:CG1	0.58	2.81	10	1
1:A:68:MET:CE	1:A:149:ILE:CD1	0.58	2.80	1	1
1:A:29:ILE:HG22	1:A:32:VAL:H	0.58	1.58	5	3
1:A:39:TYR:CG	1:A:39:TYR:O	0.58	2.53	6	2
1:A:122:ILE:CG1	1:A:132:LEU:CD2	0.58	2.81	3	2
1:A:5:VAL:CG2	1:A:11:ILE:CG2	0.58	2.82	1	1
1:A:103:ALA:C	1:A:105:PHE:H	0.58	2.05	7	3
1:A:58:ILE:CD1	1:A:61:PHE:HB3	0.58	2.29	9	10
1:A:57:LEU:HB3	1:A:61:PHE:CD1	0.58	2.33	5	3
1:A:114:LEU:HD22	1:A:117:GLY:O	0.58	1.98	7	3
1:A:50:PHE:HA	1:A:56:GLN:NE2	0.58	2.14	1	5
1:A:103:ALA:HB1	1:A:105:PHE:CE1	0.58	2.33	3	1
1:A:64:ALA:HB1	1:A:74:LYS:HB3	0.58	1.76	7	1
1:A:138:LEU:HD23	1:A:141:LYS:HZ3	0.58	1.59	8	1
1:A:95:ILE:CG1	1:A:132:LEU:HD11	0.57	2.27	1	4
1:A:141:LYS:C	1:A:141:LYS:HD2	0.57	2.24	1	7
1:A:14:ASP:CG	1:A:29:ILE:CD1	0.57	2.76	7	1
1:A:138:LEU:HA	1:A:141:LYS:HG3	0.57	1.75	5	7
1:A:57:LEU:N	1:A:57:LEU:CD1	0.57	2.66	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:PHE:CB	1:A:57:LEU:HD23	0.57	2.29	9	3
1:A:76:VAL:HG12	1:A:77:LYS:N	0.57	2.14	3	5
1:A:85:GLY:C	1:A:86:ASN:CG	0.57	2.72	5	6
1:A:107:PRO:CB	1:A:130:VAL:HG11	0.57	2.29	6	3
1:A:88:ASN:CB	1:A:91:LEU:CD1	0.57	2.83	5	5
1:A:84:TYR:HE1	1:A:138:LEU:HD12	0.57	1.54	9	1
1:A:97:ARG:NH1	1:A:129:GLU:HA	0.57	2.14	10	1
1:A:136:HIS:CE1	1:A:137:GLU:HG3	0.57	2.33	8	1
1:A:12:LYS:HE2	1:A:153:VAL:HG21	0.57	1.74	5	2
1:A:59:GLN:O	1:A:60:GLY:C	0.57	2.48	7	10
1:A:10:LYS:HG3	1:A:51:VAL:HG23	0.57	1.77	6	2
1:A:61:PHE:O	1:A:64:ALA:HB3	0.57	1.99	6	1
1:A:126:THR:CB	1:A:128:ASN:ND2	0.57	2.67	6	1
1:A:143:LEU:CD1	1:A:145:PHE:CE2	0.57	2.87	1	3
1:A:84:TYR:CE1	1:A:138:LEU:HB3	0.57	2.35	8	1
1:A:13:VAL:HG22	1:A:50:PHE:CE2	0.56	2.35	6	2
1:A:30:GLU:HG2	1:A:45:TYR:CE2	0.56	2.35	6	1
1:A:91:LEU:HD13	1:A:135:ASN:O	0.56	2.00	6	1
1:A:96:PRO:O	1:A:99:ALA:N	0.56	2.38	3	10
1:A:48:LEU:HD23	1:A:50:PHE:HD2	0.56	1.59	2	1
1:A:136:HIS:HE1	1:A:138:LEU:HD23	0.56	1.60	2	1
1:A:50:PHE:CB	1:A:57:LEU:CD2	0.56	2.83	3	4
1:A:19:LEU:C	1:A:21:SER:N	0.56	2.64	3	9
1:A:75:THR:HG23	1:A:146:THR:OG1	0.56	2.01	9	6
1:A:10:LYS:CE	1:A:49:GLU:CD	0.56	2.79	3	2
1:A:68:MET:SD	1:A:73:GLU:CA	0.56	2.93	10	2
1:A:84:TYR:CE1	1:A:138:LEU:CB	0.56	2.88	8	3
1:A:125:VAL:HA	1:A:130:VAL:HG12	0.56	1.76	8	3
1:A:12:LYS:CG	1:A:153:VAL:HG23	0.56	2.30	8	1
1:A:95:ILE:CG1	1:A:130:VAL:CG2	0.56	2.83	9	1
1:A:141:LYS:C	1:A:141:LYS:HD3	0.56	2.26	7	3
1:A:84:TYR:CE1	1:A:138:LEU:HB2	0.56	2.35	4	3
1:A:95:ILE:HD12	1:A:100:PHE:CD1	0.56	2.35	7	1
1:A:87:ARG:HE	1:A:140:GLY:H	0.56	1.40	8	1
1:A:103:ALA:C	1:A:105:PHE:N	0.56	2.63	1	2
1:A:137:GLU:CG	1:A:138:LEU:CD2	0.56	2.84	7	1
1:A:84:TYR:CD2	1:A:138:LEU:HB3	0.56	2.36	7	1
1:A:100:PHE:HZ	1:A:113:ILE:HD13	0.56	1.59	9	1
1:A:138:LEU:HD13	1:A:143:LEU:CD1	0.56	2.31	6	1
1:A:97:ARG:HA	1:A:97:ARG:NH1	0.56	2.16	10	1
1:A:58:ILE:CG2	1:A:83:ALA:HA	0.56	2.31	9	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:ILE:CD1	1:A:145:PHE:CD2	0.55	2.88	4	1
1:A:69:GLU:N	1:A:72:ASP:CG	0.55	2.65	10	3
1:A:46:GLU:CD	1:A:46:GLU:H	0.55	2.08	1	2
1:A:12:LYS:CG	1:A:153:VAL:CG2	0.55	2.84	8	1
1:A:58:ILE:HG21	1:A:83:ALA:HA	0.55	1.77	2	7
1:A:141:LYS:HE2	1:A:143:LEU:HB3	0.55	1.78	8	5
1:A:95:ILE:CD1	1:A:100:PHE:CE1	0.55	2.89	3	3
1:A:138:LEU:CD2	1:A:141:LYS:CE	0.55	2.84	8	1
1:A:14:ASP:HB2	1:A:29:ILE:HD11	0.55	1.78	1	1
1:A:51:VAL:C	1:A:53:GLY:N	0.55	2.64	9	10
1:A:131:THR:O	1:A:131:THR:HG22	0.55	2.01	10	6
1:A:57:LEU:CD2	1:A:61:PHE:CZ	0.55	2.89	10	1
1:A:13:VAL:HG11	1:A:149:ILE:HD12	0.55	1.78	2	1
1:A:30:GLU:HG3	1:A:45:TYR:CD2	0.55	2.37	6	1
1:A:30:GLU:N	1:A:45:TYR:CD1	0.55	2.75	6	1
1:A:13:VAL:HG22	1:A:50:PHE:CE1	0.55	2.36	8	1
1:A:91:LEU:O	1:A:93:GLN:NE2	0.55	2.39	9	10
1:A:138:LEU:N	1:A:138:LEU:HD22	0.54	2.17	5	1
1:A:137:GLU:HG2	1:A:138:LEU:CD2	0.54	2.32	7	1
1:A:60:GLY:HA3	1:A:82:LYS:HE3	0.54	1.77	1	1
1:A:147:ILE:HG22	1:A:148:LYS:H	0.54	1.62	4	3
1:A:98:ASP:C	1:A:100:PHE:N	0.54	2.63	2	7
1:A:98:ASP:C	1:A:100:PHE:H	0.54	2.10	2	3
1:A:5:VAL:HG21	1:A:11:ILE:CD1	0.54	2.09	2	2
1:A:143:LEU:H	1:A:143:LEU:CD2	0.54	2.07	10	1
1:A:7:LYS:HA	1:A:52:VAL:C	0.54	2.28	4	9
1:A:18:LYS:HE2	1:A:24:VAL:HG22	0.54	1.80	10	4
1:A:61:PHE:CE2	1:A:147:ILE:CG2	0.54	2.91	1	4
1:A:52:VAL:HG11	1:A:66:LEU:HD21	0.54	1.80	1	1
1:A:138:LEU:HB3	1:A:143:LEU:HD22	0.54	1.79	5	2
1:A:10:LYS:CB	1:A:51:VAL:HG22	0.54	2.33	2	6
1:A:13:VAL:HG21	1:A:147:ILE:HG22	0.54	1.79	5	2
1:A:30:GLU:CA	1:A:45:TYR:CG	0.54	2.91	6	1
1:A:80:ALA:O	1:A:85:GLY:CA	0.54	2.56	7	8
1:A:64:ALA:HA	1:A:74:LYS:CD	0.54	2.33	7	1
1:A:85:GLY:C	1:A:86:ASN:ND2	0.54	2.65	5	4
1:A:50:PHE:HB2	1:A:56:GLN:NE2	0.54	2.17	10	3
1:A:61:PHE:CE1	1:A:147:ILE:CD1	0.54	2.91	4	1
1:A:66:LEU:O	1:A:67:ASP:CB	0.54	2.56	7	2
1:A:75:THR:CG2	1:A:146:THR:CG2	0.54	2.79	10	3
1:A:65:VAL:C	1:A:67:ASP:H	0.54	2.11	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:70:VAL:HG13	1:A:150:ILE:C	0.54	2.28	7	1
1:A:128:ASN:H	1:A:128:ASN:ND2	0.54	1.99	7	2
1:A:86:ASN:HA	1:A:140:GLY:HA2	0.53	1.78	10	2
1:A:139:ALA:C	1:A:141:LYS:H	0.53	2.11	8	1
1:A:39:TYR:O	1:A:40:ALA:HB3	0.53	2.03	5	7
1:A:33:ALA:HB1	1:A:39:TYR:CA	0.53	2.32	3	2
1:A:138:LEU:HD23	1:A:141:LYS:NZ	0.53	2.18	8	3
1:A:95:ILE:CD1	1:A:132:LEU:HD21	0.53	2.33	6	1
1:A:46:GLU:CB	1:A:47:PRO:CD	0.53	2.86	7	10
1:A:111:MET:CB	1:A:122:ILE:CD1	0.53	2.86	2	2
1:A:114:LEU:CD2	1:A:119:PRO:HD3	0.53	2.33	10	4
1:A:91:LEU:HD13	1:A:135:ASN:CA	0.53	2.30	3	1
1:A:50:PHE:CG	1:A:57:LEU:HD21	0.53	2.37	6	2
1:A:107:PRO:CB	1:A:122:ILE:HD13	0.53	2.33	7	1
1:A:38:ILE:C	1:A:40:ALA:N	0.53	2.66	1	7
1:A:50:PHE:CZ	1:A:65:VAL:HG11	0.53	2.39	4	5
1:A:52:VAL:HG11	1:A:66:LEU:CD1	0.53	2.34	3	1
1:A:126:THR:HB	1:A:128:ASN:HD22	0.53	1.62	6	1
1:A:58:ILE:HG13	1:A:78:ILE:HG21	0.53	1.81	10	2
1:A:5:VAL:O	1:A:66:LEU:HD23	0.53	2.04	6	1
1:A:11:ILE:HG13	1:A:50:PHE:CE1	0.53	2.39	9	2
1:A:33:ALA:CB	1:A:39:TYR:HA	0.53	2.34	3	5
1:A:93:GLN:NE2	1:A:134:PHE:CG	0.53	2.76	1	5
1:A:124:GLU:CB	1:A:131:THR:HB	0.53	2.33	2	9
1:A:30:GLU:HA	1:A:45:TYR:CE1	0.53	2.39	6	1
1:A:58:ILE:HD11	1:A:61:PHE:CB	0.53	2.34	4	4
1:A:136:HIS:CD2	1:A:137:GLU:H	0.53	2.22	2	1
1:A:50:PHE:HB2	1:A:57:LEU:HD23	0.53	1.81	9	1
1:A:12:LYS:O	1:A:150:ILE:HD12	0.52	2.05	4	3
1:A:50:PHE:CD2	1:A:61:PHE:CE1	0.52	2.97	10	3
1:A:57:LEU:HD22	1:A:61:PHE:CE1	0.52	2.39	10	1
1:A:100:PHE:C	1:A:102:GLU:H	0.52	2.13	6	4
1:A:63:GLU:CA	1:A:66:LEU:HD12	0.52	2.35	6	1
1:A:75:THR:CG2	1:A:146:THR:HA	0.52	2.34	4	1
1:A:143:LEU:HG	1:A:145:PHE:CE1	0.52	2.40	7	1
1:A:61:PHE:CE1	1:A:65:VAL:HG13	0.52	2.39	4	1
1:A:58:ILE:HB	1:A:83:ALA:HA	0.52	1.82	8	10
1:A:111:MET:HB3	1:A:122:ILE:CD1	0.52	2.35	2	7
1:A:57:LEU:N	1:A:57:LEU:HD22	0.52	2.20	5	3
1:A:100:PHE:C	1:A:102:GLU:N	0.52	2.65	3	4
1:A:30:GLU:HG3	1:A:45:TYR:CE2	0.52	2.38	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:LYS:CE	1:A:24:VAL:HG22	0.52	2.35	10	2
1:A:61:PHE:N	1:A:78:ILE:HD11	0.52	2.20	2	2
1:A:68:MET:SD	1:A:73:GLU:C	0.52	2.93	10	2
1:A:59:GLN:NE2	1:A:82:LYS:HA	0.52	2.20	7	2
1:A:122:ILE:CD1	1:A:132:LEU:HD23	0.52	2.35	3	2
1:A:66:LEU:C	1:A:67:ASP:CG	0.52	2.77	7	1
1:A:61:PHE:CE2	1:A:147:ILE:HG12	0.52	2.40	2	5
1:A:80:ALA:HB2	1:A:141:LYS:O	0.52	2.04	6	3
1:A:108:GLU:O	1:A:110:GLY:N	0.52	2.43	6	10
1:A:96:PRO:C	1:A:98:ASP:N	0.52	2.68	2	4
1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:ASP:N	0.52	2.19	10	2
1:A:49:GLU:OE2	1:A:153:VAL:HG21	0.52	2.05	5	1
1:A:51:VAL:HG12	1:A:53:GLY:N	0.51	2.19	4	3
1:A:97:ARG:HB2	1:A:128:ASN:C	0.51	2.30	5	9
1:A:30:GLU:CA	1:A:45:TYR:CD1	0.51	2.93	6	1
1:A:93:GLN:HE22	1:A:134:PHE:CB	0.51	2.19	1	3
1:A:47:PRO:HB3	1:A:150:ILE:CD1	0.51	2.35	4	5
1:A:103:ALA:O	1:A:105:PHE:CE2	0.51	2.63	3	1
1:A:138:LEU:CD1	1:A:143:LEU:HD13	0.51	2.34	6	1
1:A:79:PRO:C	1:A:81:GLU:N	0.51	2.69	2	8
1:A:93:GLN:OE1	1:A:134:PHE:CE2	0.51	2.63	9	1
1:A:57:LEU:HG	1:A:61:PHE:CE2	0.51	2.40	4	1
1:A:93:GLN:OE1	1:A:134:PHE:CD2	0.51	2.63	9	1
1:A:75:THR:O	1:A:76:VAL:HG23	0.51	2.04	10	1
1:A:50:PHE:HZ	1:A:65:VAL:HG21	0.51	1.63	3	1
1:A:50:PHE:CD2	1:A:57:LEU:CD2	0.51	2.93	6	2
1:A:51:VAL:CG1	1:A:54:GLU:OE1	0.51	2.59	4	1
1:A:10:LYS:CB	1:A:51:VAL:CG2	0.51	2.88	5	1
1:A:10:LYS:CG	1:A:51:VAL:HG22	0.51	2.35	8	2
1:A:88:ASN:HB2	1:A:91:LEU:CD1	0.51	2.36	1	2
1:A:104:ASP:C	1:A:106:GLU:N	0.51	2.66	1	1
1:A:141:LYS:HD2	1:A:142:ASP:C	0.51	2.31	3	6
1:A:86:ASN:ND2	1:A:86:ASN:N	0.51	2.49	2	2
1:A:34:LYS:HG2	1:A:39:TYR:CG	0.51	2.41	4	1
1:A:57:LEU:CG	1:A:61:PHE:CE1	0.51	2.93	5	1
1:A:6:ASP:O	1:A:8:GLY:N	0.51	2.43	2	7
1:A:14:ASP:HB2	1:A:29:ILE:CD1	0.51	2.36	1	1
1:A:61:PHE:HE2	1:A:147:ILE:HG23	0.51	1.65	1	3
1:A:97:ARG:NH2	1:A:107:PRO:HG2	0.51	2.20	5	7
1:A:47:PRO:HB3	1:A:150:ILE:HD13	0.51	1.82	4	2
1:A:95:ILE:HD11	1:A:100:PHE:CD2	0.51	2.41	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:137:GLU:HG2	1:A:138:LEU:HD23	0.51	1.83	7	1
1:A:27:THR:O	1:A:45:TYR:CD1	0.51	2.64	9	2
1:A:39:TYR:O	1:A:39:TYR:CD1	0.51	2.64	1	5
1:A:80:ALA:O	1:A:86:ASN:N	0.51	2.43	6	6
1:A:13:VAL:CG1	1:A:149:ILE:HA	0.51	2.36	2	6
1:A:81:GLU:CD	1:A:86:ASN:HD21	0.51	2.14	6	1
1:A:30:GLU:O	1:A:34:LYS:HE3	0.51	2.05	9	1
1:A:80:ALA:HB1	1:A:85:GLY:CA	0.51	2.35	10	1
1:A:15:TYR:CB	1:A:147:ILE:HA	0.51	2.35	1	5
1:A:61:PHE:CZ	1:A:147:ILE:HG23	0.51	2.41	6	1
1:A:138:LEU:HD13	1:A:143:LEU:HD21	0.51	1.83	9	1
1:A:111:MET:C	1:A:112:VAL:HG23	0.51	2.31	4	10
1:A:10:LYS:HE2	1:A:49:GLU:C	0.50	2.31	5	1
1:A:30:GLU:N	1:A:45:TYR:HB3	0.50	2.21	6	1
1:A:122:ILE:HA	1:A:132:LEU:HA	0.50	1.83	10	8
1:A:83:ALA:O	1:A:84:TYR:CD2	0.50	2.64	2	1
1:A:122:ILE:HG13	1:A:132:LEU:HD23	0.50	1.81	3	2
1:A:10:LYS:CG	1:A:51:VAL:HG23	0.50	2.36	6	1
1:A:33:ALA:HA	1:A:38:ILE:CG1	0.50	2.35	6	2
1:A:39:TYR:CZ	1:A:40:ALA:O	0.50	2.64	1	6
1:A:50:PHE:CA	1:A:56:GLN:NE2	0.50	2.74	5	3
1:A:126:THR:O	1:A:129:GLU:N	0.50	2.44	10	5
1:A:136:HIS:N	1:A:139:ALA:HB3	0.50	2.21	3	2
1:A:141:LYS:HD3	1:A:142:ASP:C	0.50	2.32	7	3
1:A:100:PHE:CE2	1:A:107:PRO:HB3	0.50	2.42	6	1
1:A:7:LYS:C	1:A:53:GLY:HA3	0.50	2.32	1	4
1:A:38:ILE:O	1:A:40:ALA:N	0.50	2.45	4	8
1:A:100:PHE:CD1	1:A:105:PHE:HB3	0.50	2.41	1	1
1:A:124:GLU:HG3	1:A:126:THR:CG2	0.50	2.36	1	1
1:A:46:GLU:HB3	1:A:47:PRO:HD2	0.50	1.82	6	2
1:A:149:ILE:CD1	1:A:149:ILE:N	0.50	2.64	5	1
1:A:30:GLU:H	1:A:45:TYR:HB3	0.50	1.67	6	1
1:A:39:TYR:CE2	1:A:40:ALA:O	0.50	2.64	2	8
1:A:33:ALA:HB2	1:A:45:TYR:CD2	0.50	2.42	9	3
1:A:51:VAL:O	1:A:53:GLY:N	0.50	2.45	7	9
1:A:139:ALA:C	1:A:141:LYS:N	0.50	2.69	7	5
1:A:10:LYS:HE2	1:A:49:GLU:O	0.50	2.07	5	2
1:A:14:ASP:OD1	1:A:150:ILE:HD11	0.50	2.07	5	2
1:A:137:GLU:O	1:A:137:GLU:CG	0.50	2.59	10	2
1:A:79:PRO:HG3	1:A:82:LYS:HE3	0.50	1.82	7	1
1:A:97:ARG:NH1	1:A:130:VAL:HG22	0.50	2.22	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:TYR:HA	1:A:147:ILE:HA	0.50	1.84	5	10
1:A:103:ALA:O	1:A:105:PHE:N	0.50	2.44	1	2
1:A:61:PHE:O	1:A:64:ALA:N	0.50	2.44	4	2
1:A:5:VAL:CG1	1:A:52:VAL:HG21	0.50	2.37	5	1
1:A:97:ARG:NH2	1:A:130:VAL:HG21	0.50	2.21	10	1
1:A:16:ILE:O	1:A:18:LYS:HE3	0.50	2.06	5	10
1:A:122:ILE:HG22	1:A:122:ILE:O	0.50	2.05	3	1
1:A:27:THR:O	1:A:45:TYR:CZ	0.50	2.64	2	1
1:A:32:VAL:O	1:A:36:ALA:N	0.50	2.45	6	3
1:A:30:GLU:HG3	1:A:45:TYR:CD1	0.50	2.42	8	2
1:A:10:LYS:HG3	1:A:51:VAL:HG22	0.50	1.82	8	1
1:A:98:ASP:HA	1:A:101:LYS:CB	0.50	2.37	1	2
1:A:27:THR:HG23	1:A:45:TYR:CE2	0.50	2.42	8	2
1:A:95:ILE:CG1	1:A:130:VAL:HG23	0.50	2.37	6	2
1:A:57:LEU:N	1:A:57:LEU:HD12	0.49	2.22	1	2
1:A:6:ASP:HA	1:A:66:LEU:CD2	0.49	2.37	3	3
1:A:62:GLU:O	1:A:65:VAL:HG23	0.49	2.07	4	1
1:A:19:LEU:O	1:A:21:SER:N	0.49	2.45	1	10
1:A:141:LYS:CD	1:A:142:ASP:N	0.49	2.75	5	2
1:A:138:LEU:HG	1:A:143:LEU:HD13	0.49	1.84	5	1
1:A:98:ASP:O	1:A:100:PHE:N	0.49	2.45	2	6
1:A:93:GLN:OE1	1:A:134:PHE:CZ	0.49	2.65	9	1
1:A:50:PHE:CD1	1:A:50:PHE:C	0.49	2.91	6	2
1:A:64:ALA:HA	1:A:74:LYS:HE2	0.49	1.83	4	1
1:A:93:GLN:N	1:A:132:LEU:O	0.49	2.44	5	4
1:A:50:PHE:CA	1:A:56:GLN:HE22	0.49	2.18	4	2
1:A:14:ASP:OD1	1:A:14:ASP:N	0.49	2.46	9	3
1:A:79:PRO:C	1:A:81:GLU:H	0.49	2.15	1	6
1:A:121:THR:O	1:A:121:THR:HG22	0.49	2.06	9	2
1:A:85:GLY:O	1:A:86:ASN:C	0.49	2.56	10	5
1:A:10:LYS:CG	1:A:49:GLU:HG2	0.49	2.38	7	2
1:A:14:ASP:OD1	1:A:150:ILE:CD1	0.49	2.60	5	2
1:A:87:ARG:CD	1:A:140:GLY:HA3	0.49	2.38	10	2
1:A:10:LYS:CD	1:A:51:VAL:CG2	0.49	2.90	8	1
1:A:137:GLU:O	1:A:141:LYS:NZ	0.49	2.44	3	3
1:A:63:GLU:HA	1:A:66:LEU:CD1	0.49	2.38	6	1
1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:ASP:N	0.49	2.22	3	2
1:A:87:ARG:HD2	1:A:135:ASN:CG	0.49	2.33	1	1
1:A:10:LYS:CD	1:A:51:VAL:HG23	0.49	2.38	5	3
1:A:122:ILE:HD11	1:A:132:LEU:HD23	0.49	1.84	3	2
1:A:12:LYS:CE	1:A:153:VAL:CG2	0.49	2.89	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:ILE:HB	1:A:145:PHE:CE2	0.49	2.43	4	1
1:A:18:LYS:HG2	1:A:24:VAL:N	0.49	2.23	8	10
1:A:27:THR:O	1:A:45:TYR:CE1	0.49	2.66	2	1
1:A:143:LEU:N	1:A:143:LEU:CD2	0.49	2.70	2	5
1:A:139:ALA:O	1:A:141:LYS:N	0.49	2.41	8	3
1:A:100:PHE:CB	1:A:107:PRO:HD3	0.49	2.38	9	1
1:A:124:GLU:HB3	1:A:131:THR:N	0.48	2.23	2	5
1:A:87:ARG:HD2	1:A:140:GLY:HA3	0.48	1.83	5	4
1:A:133:ASP:OD1	1:A:135:ASN:ND2	0.48	2.46	4	3
1:A:72:ASP:OD1	1:A:72:ASP:N	0.48	2.46	7	6
1:A:91:LEU:HB3	1:A:135:ASN:N	0.48	2.23	2	8
1:A:120:ALA:CB	1:A:132:LEU:HB3	0.48	2.36	7	5
1:A:60:GLY:O	1:A:63:GLU:N	0.48	2.45	3	6
1:A:29:ILE:HG22	1:A:29:ILE:O	0.48	2.07	5	1
1:A:84:TYR:CE1	1:A:138:LEU:CD1	0.48	2.87	9	1
1:A:97:ARG:HD3	1:A:126:THR:O	0.48	2.08	10	10
1:A:138:LEU:HD22	1:A:138:LEU:N	0.48	2.22	2	1
1:A:141:LYS:HD3	1:A:142:ASP:N	0.48	2.23	7	3
1:A:114:LEU:HD23	1:A:119:PRO:CB	0.48	2.39	1	4
1:A:68:MET:HE3	1:A:73:GLU:N	0.48	2.24	2	1
1:A:136:HIS:H	1:A:139:ALA:HB3	0.48	1.68	3	1
1:A:93:GLN:NE2	1:A:134:PHE:H	0.48	2.06	8	2
1:A:100:PHE:CD2	1:A:107:PRO:HD3	0.48	2.43	9	3
1:A:84:TYR:CE2	1:A:138:LEU:HB2	0.48	2.43	10	1
1:A:16:ILE:CG2	1:A:27:THR:HB	0.48	2.36	9	2
1:A:25:PHE:CE1	1:A:26:ASP:HB2	0.48	2.44	3	3
1:A:103:ALA:HB1	1:A:105:PHE:CZ	0.48	2.43	2	1
1:A:103:ALA:O	1:A:105:PHE:CG	0.48	2.67	7	1
1:A:29:ILE:O	1:A:29:ILE:HG22	0.48	2.08	10	1
1:A:79:PRO:O	1:A:81:GLU:N	0.48	2.46	6	3
1:A:13:VAL:CG1	1:A:149:ILE:HG23	0.48	2.39	2	3
1:A:50:PHE:HZ	1:A:65:VAL:HG11	0.48	1.69	8	2
1:A:97:ARG:HH22	1:A:130:VAL:HG21	0.48	1.69	10	1
1:A:61:PHE:CD2	1:A:147:ILE:HG12	0.48	2.44	1	3
1:A:124:GLU:HB2	1:A:131:THR:HB	0.48	1.86	7	8
1:A:7:LYS:C	1:A:53:GLY:CA	0.48	2.87	2	1
1:A:143:LEU:HG	1:A:145:PHE:CE2	0.48	2.44	10	2
1:A:57:LEU:HD22	1:A:57:LEU:N	0.48	2.23	8	4
1:A:65:VAL:O	1:A:67:ASP:N	0.48	2.44	5	1
1:A:93:GLN:OE1	1:A:134:PHE:CG	0.48	2.67	9	2
1:A:14:ASP:CB	1:A:29:ILE:CD1	0.48	2.91	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:VAL:CG2	1:A:147:ILE:HG22	0.48	2.38	5	1
1:A:33:ALA:O	1:A:37:GLY:N	0.48	2.47	6	1
1:A:133:ASP:O	1:A:134:PHE:C	0.48	2.57	9	10
1:A:51:VAL:O	1:A:54:GLU:N	0.48	2.47	2	5
1:A:19:LEU:O	1:A:22:GLY:N	0.48	2.44	4	2
1:A:34:LYS:HG2	1:A:39:TYR:CB	0.47	2.39	5	4
1:A:104:ASP:O	1:A:106:GLU:N	0.47	2.47	1	1
1:A:124:GLU:HG2	1:A:126:THR:CG2	0.47	2.39	1	2
1:A:10:LYS:HE3	1:A:51:VAL:HG23	0.47	1.86	2	1
1:A:11:ILE:HA	1:A:152:VAL:HA	0.47	1.86	4	2
1:A:137:GLU:CG	1:A:138:LEU:HD23	0.47	2.39	7	1
1:A:61:PHE:CE2	1:A:147:ILE:HG21	0.47	2.44	8	2
1:A:80:ALA:CB	1:A:140:GLY:C	0.47	2.87	9	1
1:A:136:HIS:N	1:A:139:ALA:HB2	0.47	2.24	9	1
1:A:100:PHE:O	1:A:102:GLU:N	0.47	2.47	3	1
1:A:100:PHE:HA	1:A:103:ALA:HB2	0.47	1.86	7	1
1:A:68:MET:SD	1:A:74:LYS:HB2	0.47	2.50	1	4
1:A:92:ILE:HG12	1:A:133:ASP:CG	0.47	2.34	8	6
1:A:5:VAL:HG22	1:A:11:ILE:HG21	0.47	1.87	7	2
1:A:10:LYS:HG2	1:A:49:GLU:CG	0.47	2.40	7	4
1:A:61:PHE:HE1	1:A:147:ILE:HG21	0.47	1.69	4	1
1:A:25:PHE:CE2	1:A:26:ASP:HB2	0.47	2.43	7	4
1:A:30:GLU:N	1:A:45:TYR:CB	0.47	2.78	6	1
1:A:30:GLU:H	1:A:45:TYR:CB	0.47	2.22	6	1
1:A:48:LEU:CD2	1:A:57:LEU:HD21	0.47	2.38	8	2
1:A:97:ARG:NH2	1:A:130:VAL:HG22	0.47	2.23	10	1
1:A:111:MET:O	1:A:112:VAL:CG2	0.47	2.63	6	10
1:A:112:VAL:HG12	1:A:112:VAL:O	0.47	2.09	2	3
1:A:95:ILE:CG1	1:A:130:VAL:HG22	0.47	2.40	5	1
1:A:60:GLY:HA2	1:A:82:LYS:HE3	0.47	1.86	1	1
1:A:136:HIS:HB3	1:A:139:ALA:CB	0.47	2.40	2	1
1:A:52:VAL:HG11	1:A:66:LEU:CD2	0.47	2.40	6	1
1:A:38:ILE:C	1:A:40:ALA:H	0.47	2.17	2	5
1:A:14:ASP:HB3	1:A:29:ILE:CD1	0.47	2.40	3	2
1:A:128:ASN:N	1:A:128:ASN:HD22	0.47	2.07	7	1
1:A:57:LEU:CD2	1:A:61:PHE:CE1	0.47	2.97	10	1
1:A:60:GLY:HA2	1:A:82:LYS:NZ	0.47	2.24	1	1
1:A:69:GLU:N	1:A:72:ASP:OD2	0.47	2.48	5	3
1:A:10:LYS:CG	1:A:51:VAL:CG2	0.47	2.93	6	1
1:A:50:PHE:HD1	1:A:50:PHE:H	0.47	1.51	8	1
1:A:93:GLN:OE1	1:A:134:PHE:CE1	0.47	2.68	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:VAL:HG12	1:A:149:ILE:HA	0.47	1.86	8	7
1:A:89:GLU:C	1:A:91:LEU:H	0.47	2.17	2	2
1:A:12:LYS:HE3	1:A:151:GLU:HB3	0.47	1.87	3	1
1:A:10:LYS:HE3	1:A:49:GLU:HB2	0.47	1.85	10	1
1:A:5:VAL:CG2	1:A:11:ILE:HG23	0.47	2.39	1	1
1:A:13:VAL:CB	1:A:149:ILE:HA	0.47	2.40	6	3
1:A:96:PRO:HA	1:A:129:GLU:HG3	0.47	1.87	9	3
1:A:5:VAL:HG12	1:A:52:VAL:HG21	0.47	1.87	5	2
1:A:87:ARG:NE	1:A:139:ALA:CB	0.47	2.64	8	1
1:A:135:ASN:HB3	1:A:139:ALA:CB	0.47	2.40	6	4
1:A:110:GLY:N	1:A:122:ILE:O	0.47	2.48	5	3
1:A:123:THR:HG23	1:A:131:THR:O	0.47	2.09	5	1
1:A:13:VAL:CG2	1:A:50:PHE:CZ	0.47	2.98	6	1
1:A:96:PRO:O	1:A:98:ASP:N	0.46	2.48	2	1
1:A:81:GLU:CD	1:A:86:ASN:ND2	0.46	2.73	6	2
1:A:84:TYR:CD1	1:A:138:LEU:HB2	0.46	2.46	9	1
1:A:46:GLU:HB2	1:A:47:PRO:HD2	0.46	1.87	1	5
1:A:8:GLY:CA	1:A:53:GLY:HA3	0.46	2.40	2	1
1:A:132:LEU:H	1:A:132:LEU:CD1	0.46	2.22	6	2
1:A:12:LYS:CG	1:A:49:GLU:HB2	0.46	2.40	7	2
1:A:68:MET:SD	1:A:74:LYS:CB	0.46	3.04	1	1
1:A:136:HIS:CE1	1:A:138:LEU:HG	0.46	2.46	6	4
1:A:10:LYS:HB2	1:A:51:VAL:CG2	0.46	2.40	5	1
1:A:61:PHE:CZ	1:A:147:ILE:HG21	0.46	2.45	6	1
1:A:109:GLU:HB2	1:A:125:VAL:HG12	0.46	1.87	10	1
1:A:33:ALA:HA	1:A:38:ILE:HG13	0.46	1.87	4	4
1:A:10:LYS:HD2	1:A:51:VAL:CG2	0.46	2.40	8	1
1:A:10:LYS:HE2	1:A:51:VAL:HG23	0.46	1.88	1	1
1:A:87:ARG:CG	1:A:135:ASN:OD1	0.46	2.64	2	2
1:A:52:VAL:HG13	1:A:62:GLU:O	0.46	2.10	4	1
1:A:70:VAL:HA	1:A:149:ILE:CG2	0.46	2.40	6	2
1:A:95:ILE:HG23	1:A:132:LEU:HD13	0.46	1.87	4	1
1:A:10:LYS:HG3	1:A:51:VAL:CG2	0.46	2.40	6	2
1:A:93:GLN:OE1	1:A:134:PHE:CD1	0.46	2.69	9	1
1:A:97:ARG:NH2	1:A:130:VAL:CG1	0.46	2.79	10	1
1:A:97:ARG:O	1:A:101:LYS:N	0.46	2.47	1	1
1:A:125:VAL:O	1:A:125:VAL:HG13	0.46	2.10	6	2
1:A:15:TYR:CA	1:A:147:ILE:HA	0.46	2.40	1	5
1:A:80:ALA:O	1:A:85:GLY:C	0.46	2.59	9	3
1:A:87:ARG:HA	1:A:139:ALA:HB1	0.46	1.87	8	1
1:A:122:ILE:HG13	1:A:132:LEU:CG	0.46	2.40	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:PHE:CB	1:A:57:LEU:HD21	0.46	2.40	4	1
1:A:88:ASN:O	1:A:91:LEU:N	0.46	2.49	5	1
1:A:88:ASN:HB3	1:A:91:LEU:CD1	0.46	2.41	1	5
1:A:138:LEU:CD1	1:A:141:LYS:CE	0.46	2.93	2	1
1:A:142:ASP:N	1:A:142:ASP:OD1	0.46	2.46	5	1
1:A:46:GLU:CD	1:A:46:GLU:N	0.45	2.74	1	1
1:A:114:LEU:CD2	1:A:119:PRO:HB3	0.45	2.41	5	4
1:A:60:GLY:O	1:A:61:PHE:C	0.45	2.58	6	5
1:A:138:LEU:CD2	1:A:143:LEU:HD13	0.45	2.41	3	1
1:A:10:LYS:HE2	1:A:49:GLU:OE2	0.45	2.10	7	1
1:A:50:PHE:CD2	1:A:61:PHE:CZ	0.45	3.04	10	1
1:A:57:LEU:HG	1:A:61:PHE:CE1	0.45	2.47	5	2
1:A:103:ALA:O	1:A:105:PHE:CD2	0.45	2.70	3	2
1:A:61:PHE:HE1	1:A:65:VAL:HG13	0.45	1.69	4	1
1:A:5:VAL:HG21	1:A:68:MET:O	0.45	2.11	7	1
1:A:93:GLN:N	1:A:93:GLN:NE2	0.45	2.64	8	1
1:A:121:THR:O	1:A:133:ASP:N	0.45	2.49	10	1
1:A:68:MET:HE3	1:A:73:GLU:CA	0.45	2.42	2	1
1:A:65:VAL:C	1:A:67:ASP:N	0.45	2.74	5	1
1:A:7:LYS:HG3	1:A:52:VAL:HG12	0.45	1.89	1	1
1:A:14:ASP:HA	1:A:28:SER:HB2	0.45	1.87	9	4
1:A:133:ASP:C	1:A:135:ASN:ND2	0.45	2.74	3	1
1:A:29:ILE:C	1:A:31:GLU:N	0.45	2.72	10	2
1:A:12:LYS:CD	1:A:153:VAL:CG2	0.45	2.94	8	1
1:A:60:GLY:HA2	1:A:82:LYS:CE	0.45	2.41	1	1
1:A:13:VAL:HB	1:A:149:ILE:HA	0.45	1.88	6	3
1:A:97:ARG:CD	1:A:126:THR:O	0.45	2.64	10	4
1:A:64:ALA:HA	1:A:74:LYS:HD2	0.45	1.88	7	1
1:A:86:ASN:HA	1:A:140:GLY:CA	0.45	2.41	10	1
1:A:61:PHE:CD2	1:A:147:ILE:CD1	0.45	3.00	1	1
1:A:100:PHE:CD1	1:A:105:PHE:CB	0.45	3.00	1	1
1:A:143:LEU:HD11	1:A:145:PHE:CE2	0.45	2.45	1	1
1:A:14:ASP:O	1:A:147:ILE:CG2	0.45	2.65	2	2
1:A:86:ASN:O	1:A:87:ARG:C	0.45	2.59	9	4
1:A:134:PHE:O	1:A:135:ASN:C	0.45	2.59	6	4
1:A:126:THR:HG22	1:A:128:ASN:ND2	0.45	2.18	6	1
1:A:12:LYS:NZ	1:A:151:GLU:HB3	0.45	2.26	3	1
1:A:134:PHE:C	1:A:135:ASN:CG	0.45	2.83	3	1
1:A:103:ALA:O	1:A:105:PHE:CD1	0.45	2.70	7	1
1:A:59:GLN:O	1:A:62:GLU:N	0.45	2.50	1	1
1:A:13:VAL:CG2	1:A:50:PHE:CE2	0.45	2.99	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:LEU:HB2	1:A:61:PHE:CD1	0.45	2.47	10	3
1:A:104:ASP:C	1:A:106:GLU:H	0.45	2.20	1	1
1:A:6:ASP:HA	1:A:66:LEU:HD23	0.45	1.89	6	1
1:A:138:LEU:HD22	1:A:141:LYS:CE	0.45	2.42	9	1
1:A:58:ILE:O	1:A:59:GLN:C	0.45	2.60	2	5
1:A:139:ALA:O	1:A:140:GLY:C	0.45	2.61	10	4
1:A:123:THR:N	1:A:131:THR:O	0.45	2.44	7	2
1:A:126:THR:HB	1:A:128:ASN:HD21	0.45	1.72	5	1
1:A:80:ALA:C	1:A:85:GLY:N	0.45	2.75	10	1
1:A:18:LYS:CG	1:A:24:VAL:HA	0.44	2.42	7	6
1:A:138:LEU:CA	1:A:141:LYS:HG3	0.44	2.42	5	1
1:A:18:LYS:O	1:A:144:VAL:HG23	0.44	2.12	9	1
1:A:34:LYS:CG	1:A:39:TYR:HB2	0.44	2.43	9	6
1:A:81:GLU:HA	1:A:85:GLY:HA2	0.44	1.89	6	7
1:A:25:PHE:CD1	1:A:25:PHE:C	0.44	2.95	4	1
1:A:68:MET:SD	1:A:149:ILE:HD11	0.44	2.52	6	1
1:A:100:PHE:CD1	1:A:107:PRO:HD3	0.44	2.47	6	1
1:A:114:LEU:HB3	1:A:118:ILE:C	0.44	2.37	6	1
1:A:46:GLU:OE1	1:A:46:GLU:N	0.44	2.49	7	1
1:A:98:ASP:HA	1:A:101:LYS:HB2	0.44	1.90	1	1
1:A:138:LEU:HA	1:A:141:LYS:HG2	0.44	1.89	1	3
1:A:93:GLN:CD	1:A:134:PHE:CG	0.44	2.96	8	2
1:A:13:VAL:HG11	1:A:149:ILE:HD13	0.44	1.90	7	1
1:A:68:MET:SD	1:A:72:ASP:CB	0.44	3.06	9	2
1:A:91:LEU:CB	1:A:135:ASN:HD22	0.44	2.26	9	1
1:A:92:ILE:CG2	1:A:131:THR:CG2	0.44	2.95	10	1
1:A:115:ALA:O	1:A:116:GLU:CB	0.44	2.65	1	3
1:A:125:VAL:O	1:A:125:VAL:CG2	0.44	2.64	7	3
1:A:123:THR:CG2	1:A:131:THR:O	0.44	2.64	5	1
1:A:28:SER:O	1:A:46:GLU:N	0.44	2.50	6	1
1:A:77:LYS:HA	1:A:144:VAL:HA	0.44	1.89	8	3
1:A:130:VAL:HG23	1:A:132:LEU:HD11	0.44	1.90	2	1
1:A:12:LYS:CE	1:A:151:GLU:HB3	0.44	2.43	3	1
1:A:144:VAL:HG12	1:A:145:PHE:N	0.44	2.28	5	1
1:A:146:THR:O	1:A:146:THR:CG2	0.44	2.66	5	1
1:A:5:VAL:CG2	1:A:68:MET:O	0.44	2.66	7	1
1:A:70:VAL:HG11	1:A:151:GLU:HA	0.44	1.89	8	1
1:A:56:GLN:NE2	1:A:57:LEU:CD2	0.44	2.81	9	1
1:A:15:TYR:CE2	1:A:17:GLY:N	0.44	2.86	6	1
1:A:32:VAL:O	1:A:35:GLU:N	0.44	2.51	6	2
1:A:79:PRO:HB2	1:A:81:GLU:CG	0.44	2.43	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:PHE:HB3	1:A:107:PRO:HD3	0.44	1.90	9	1
1:A:69:GLU:O	1:A:149:ILE:CB	0.43	2.66	6	2
1:A:24:VAL:HG12	1:A:38:ILE:CD1	0.43	2.43	6	1
1:A:40:ALA:N	1:A:45:TYR:OH	0.43	2.51	6	1
1:A:108:GLU:O	1:A:122:ILE:CG2	0.43	2.66	6	1
1:A:96:PRO:HG2	1:A:99:ALA:HB2	0.43	1.90	7	1
1:A:18:LYS:HG2	1:A:24:VAL:CA	0.43	2.43	8	1
1:A:33:ALA:CB	1:A:45:TYR:CD2	0.43	3.01	9	2
1:A:79:PRO:HA	1:A:142:ASP:CG	0.43	2.38	10	1
1:A:80:ALA:HB2	1:A:141:LYS:CA	0.43	2.44	1	1
1:A:134:PHE:C	1:A:135:ASN:ND2	0.43	2.76	3	1
1:A:79:PRO:CG	1:A:82:LYS:HD3	0.43	2.44	2	1
1:A:141:LYS:CD	1:A:142:ASP:O	0.43	2.66	5	1
1:A:75:THR:O	1:A:76:VAL:CG2	0.43	2.66	10	1
1:A:7:LYS:HA	1:A:52:VAL:HG12	0.43	1.90	1	1
1:A:87:ARG:HG2	1:A:140:GLY:HA3	0.43	1.89	2	1
1:A:134:PHE:O	1:A:135:ASN:CB	0.43	2.65	3	1
1:A:88:ASN:C	1:A:90:MET:N	0.43	2.75	5	1
1:A:138:LEU:HD13	1:A:141:LYS:CD	0.43	2.39	7	1
1:A:105:PHE:CD1	1:A:105:PHE:N	0.43	2.86	8	1
1:A:75:THR:C	1:A:76:VAL:HG23	0.43	2.39	10	1
1:A:61:PHE:CE1	1:A:65:VAL:CG1	0.43	3.01	2	1
1:A:137:GLU:HG3	1:A:138:LEU:CD2	0.43	2.37	2	1
1:A:52:VAL:CG1	1:A:66:LEU:HD11	0.43	2.42	3	1
1:A:97:ARG:HH11	1:A:127:ASP:HA	0.43	1.74	4	3
1:A:10:LYS:O	1:A:11:ILE:CG2	0.43	2.66	4	3
1:A:114:LEU:HD23	1:A:119:PRO:CA	0.43	2.44	9	3
1:A:83:ALA:C	1:A:85:GLY:H	0.43	2.22	7	1
1:A:70:VAL:CG2	1:A:152:VAL:CG2	0.43	2.97	9	1
1:A:70:VAL:HG22	1:A:152:VAL:CG2	0.43	2.44	9	1
1:A:100:PHE:O	1:A:101:LYS:C	0.43	2.62	1	1
1:A:61:PHE:CA	1:A:78:ILE:HD11	0.43	2.44	6	2
1:A:103:ALA:CB	1:A:105:PHE:CE1	0.43	3.01	3	1
1:A:49:GLU:OE2	1:A:153:VAL:CG2	0.43	2.67	5	1
1:A:138:LEU:HG	1:A:143:LEU:CD2	0.43	2.43	5	1
1:A:111:MET:C	1:A:112:VAL:CG2	0.43	2.92	3	9
1:A:83:ALA:C	1:A:84:TYR:CD2	0.43	2.97	7	2
1:A:81:GLU:CG	1:A:82:LYS:N	0.43	2.82	8	4
1:A:87:ARG:HD2	1:A:140:GLY:CA	0.43	2.44	5	1
1:A:16:ILE:HD13	1:A:32:VAL:CG2	0.43	2.25	8	1
1:A:93:GLN:NE2	1:A:134:PHE:HB2	0.43	2.27	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:109:GLU:HB2	1:A:125:VAL:CG1	0.42	2.44	1	1
1:A:91:LEU:C	1:A:133:ASP:OD1	0.42	2.62	2	3
1:A:5:VAL:HG11	1:A:11:ILE:HD13	0.42	1.90	4	1
1:A:23:ASP:N	1:A:23:ASP:OD1	0.42	2.51	9	1
1:A:114:LEU:HA	1:A:118:ILE:O	0.42	2.14	2	1
1:A:103:ALA:O	1:A:104:ASP:C	0.42	2.62	4	1
1:A:28:SER:HA	1:A:45:TYR:HA	0.42	1.91	6	1
1:A:30:GLU:CB	1:A:45:TYR:HB2	0.42	2.45	7	1
1:A:109:GLU:N	1:A:125:VAL:HB	0.42	2.29	8	1
1:A:142:ASP:OD1	1:A:142:ASP:N	0.42	2.51	10	2
1:A:58:ILE:HD11	1:A:61:PHE:H	0.42	1.74	10	1
1:A:61:PHE:O	1:A:65:VAL:HG13	0.42	2.15	1	1
1:A:8:GLY:N	1:A:53:GLY:CA	0.42	2.81	2	1
1:A:58:ILE:CG1	1:A:82:LYS:O	0.42	2.68	2	1
1:A:65:VAL:O	1:A:66:LEU:C	0.42	2.62	4	2
1:A:10:LYS:HB3	1:A:153:VAL:C	0.42	2.39	5	2
1:A:79:PRO:O	1:A:82:LYS:N	0.42	2.53	6	1
1:A:97:ARG:NH1	1:A:97:ARG:CA	0.42	2.81	10	1
1:A:39:TYR:CD1	1:A:39:TYR:C	0.42	2.96	1	2
1:A:84:TYR:O	1:A:85:GLY:C	0.42	2.63	1	3
1:A:96:PRO:O	1:A:97:ARG:C	0.42	2.62	1	5
1:A:69:GLU:HB2	1:A:72:ASP:CG	0.42	2.40	3	2
1:A:62:GLU:O	1:A:65:VAL:CG2	0.42	2.67	4	2
1:A:71:GLY:N	1:A:149:ILE:HB	0.42	2.25	4	1
1:A:124:GLU:HG3	1:A:126:THR:HG23	0.42	1.92	5	1
1:A:33:ALA:CB	1:A:45:TYR:CE2	0.42	3.02	10	1
1:A:97:ARG:CZ	1:A:130:VAL:HG22	0.42	2.44	10	1
1:A:100:PHE:O	1:A:103:ALA:N	0.42	2.53	1	1
1:A:10:LYS:HE3	1:A:49:GLU:CD	0.42	2.40	3	1
1:A:138:LEU:CD1	1:A:141:LYS:HD2	0.42	2.42	7	1
1:A:12:LYS:HA	1:A:49:GLU:HA	0.42	1.91	8	1
1:A:105:PHE:CZ	1:A:113:ILE:HD12	0.42	2.48	1	1
1:A:95:ILE:HD11	1:A:100:PHE:CE1	0.42	2.49	2	1
1:A:133:ASP:O	1:A:135:ASN:CG	0.42	2.63	3	1
1:A:58:ILE:HD11	1:A:61:PHE:HB2	0.42	1.91	4	1
1:A:10:LYS:CA	1:A:51:VAL:CG2	0.42	2.94	5	1
1:A:141:LYS:CD	1:A:142:ASP:C	0.42	2.93	5	1
1:A:45:TYR:C	1:A:46:GLU:HG3	0.42	2.40	6	1
1:A:100:PHE:CD2	1:A:107:PRO:HB3	0.42	2.49	6	1
1:A:66:LEU:O	1:A:67:ASP:CG	0.42	2.62	7	1
1:A:80:ALA:CA	1:A:85:GLY:H	0.42	2.28	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:120:ALA:O	1:A:121:THR:C	0.42	2.62	10	1
1:A:68:MET:HG2	1:A:72:ASP:CB	0.42	2.44	1	1
1:A:18:LYS:HG2	1:A:23:ASP:C	0.42	2.39	7	5
1:A:97:ARG:HD3	1:A:127:ASP:HA	0.42	1.91	5	2
1:A:136:HIS:CB	1:A:139:ALA:HB2	0.42	2.37	5	1
1:A:64:ALA:CA	1:A:74:LYS:HD2	0.42	2.45	7	1
1:A:80:ALA:CB	1:A:139:ALA:O	0.42	2.65	8	1
1:A:55:GLY:O	1:A:56:GLN:C	0.42	2.63	4	4
1:A:13:VAL:HG12	1:A:149:ILE:HG23	0.42	1.92	6	1
1:A:69:GLU:O	1:A:149:ILE:CG1	0.42	2.68	6	1
1:A:14:ASP:CB	1:A:29:ILE:HG13	0.42	2.44	7	1
1:A:138:LEU:HB3	1:A:143:LEU:CD2	0.42	2.45	1	2
1:A:122:ILE:HG13	1:A:132:LEU:CD2	0.42	2.44	2	1
1:A:18:LYS:NZ	1:A:146:THR:OG1	0.42	2.52	2	2
1:A:12:LYS:HG3	1:A:49:GLU:CB	0.42	2.45	10	1
1:A:49:GLU:CG	1:A:153:VAL:HG21	0.41	2.44	2	1
1:A:10:LYS:HD3	1:A:51:VAL:CG2	0.41	2.45	3	1
1:A:114:LEU:CD2	1:A:117:GLY:O	0.41	2.68	7	3
1:A:153:VAL:O	1:A:153:VAL:CG1	0.41	2.65	4	2
1:A:12:LYS:HD2	1:A:153:VAL:CG2	0.41	2.45	8	1
1:A:19:LEU:HD12	1:A:23:ASP:CB	0.41	2.40	5	1
1:A:30:GLU:CB	1:A:45:TYR:CD2	0.41	3.03	6	1
1:A:14:ASP:OD2	1:A:29:ILE:CG1	0.41	2.67	7	1
1:A:137:GLU:O	1:A:138:LEU:HD23	0.41	2.15	9	1
1:A:14:ASP:OD2	1:A:28:SER:C	0.41	2.63	10	1
1:A:48:LEU:HD23	1:A:50:PHE:CD2	0.41	2.46	2	1
1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:ASP:H	0.41	1.76	3	1
1:A:78:ILE:HB	1:A:145:PHE:CD2	0.41	2.50	4	1
1:A:65:VAL:HG13	1:A:147:ILE:HD13	0.41	1.93	6	1
1:A:91:LEU:CB	1:A:135:ASN:ND2	0.41	2.83	9	1
1:A:147:ILE:H	1:A:147:ILE:HG13	0.41	1.48	9	2
1:A:64:ALA:CB	1:A:74:LYS:HD2	0.41	2.41	1	1
1:A:10:LYS:CE	1:A:49:GLU:O	0.41	2.68	5	1
1:A:122:ILE:HG12	1:A:132:LEU:CD2	0.41	2.46	5	1
1:A:138:LEU:HD11	1:A:143:LEU:HD13	0.41	1.93	7	1
1:A:46:GLU:OE2	1:A:46:GLU:N	0.41	2.50	8	1
1:A:25:PHE:CG	1:A:26:ASP:N	0.41	2.88	10	1
1:A:5:VAL:HG22	1:A:9:VAL:HB	0.41	1.91	3	1
1:A:39:TYR:O	1:A:40:ALA:CB	0.41	2.69	5	1
1:A:138:LEU:HD12	1:A:141:LYS:CE	0.41	2.39	5	1
1:A:124:GLU:HB2	1:A:131:THR:CB	0.41	2.45	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:ARG:H	1:A:87:ARG:HD3	0.41	1.75	10	1
1:A:79:PRO:HG3	1:A:82:LYS:NZ	0.41	2.31	4	1
1:A:147:ILE:HG22	1:A:148:LYS:N	0.41	2.30	4	1
1:A:45:TYR:CD1	1:A:45:TYR:N	0.41	2.89	7	1
1:A:18:LYS:HA	1:A:23:ASP:O	0.41	2.16	4	3
1:A:109:GLU:CG	1:A:123:THR:O	0.41	2.68	5	1
1:A:13:VAL:HG22	1:A:50:PHE:CZ	0.41	2.51	6	1
1:A:100:PHE:CG	1:A:107:PRO:HD3	0.41	2.50	9	1
1:A:112:VAL:CG1	1:A:119:PRO:HB2	0.41	2.43	9	1
1:A:124:GLU:O	1:A:130:VAL:HA	0.41	2.15	10	1
1:A:49:GLU:OE2	1:A:153:VAL:HG11	0.41	2.16	2	1
1:A:78:ILE:HG22	1:A:83:ALA:HB2	0.41	1.82	2	2
1:A:89:GLU:C	1:A:91:LEU:N	0.41	2.79	2	1
1:A:10:LYS:HE2	1:A:153:VAL:HB	0.41	1.93	3	1
1:A:83:ALA:HB1	1:A:84:TYR:CD1	0.41	2.51	3	1
1:A:33:ALA:O	1:A:38:ILE:N	0.41	2.52	4	1
1:A:49:GLU:CB	1:A:153:VAL:HG21	0.41	2.38	4	1
1:A:10:LYS:HG2	1:A:49:GLU:HG2	0.41	1.93	5	1
1:A:29:ILE:O	1:A:30:GLU:C	0.41	2.63	5	1
1:A:28:SER:O	1:A:45:TYR:C	0.41	2.63	6	2
1:A:92:ILE:HA	1:A:133:ASP:HA	0.41	1.92	9	1
1:A:10:LYS:HE3	1:A:49:GLU:O	0.41	2.16	10	1
1:A:18:LYS:CG	1:A:24:VAL:HG22	0.41	2.46	10	1
1:A:29:ILE:O	1:A:31:GLU:N	0.41	2.53	10	1
1:A:70:VAL:CG1	1:A:151:GLU:CA	0.41	2.99	10	1
1:A:14:ASP:OD1	1:A:28:SER:HB3	0.41	2.16	3	1
1:A:13:VAL:CG2	1:A:147:ILE:CG2	0.41	2.97	5	1
1:A:103:ALA:O	1:A:105:PHE:CE1	0.41	2.74	7	1
1:A:50:PHE:CD1	1:A:50:PHE:N	0.41	2.88	8	1
1:A:68:MET:HG2	1:A:72:ASP:HB3	0.41	1.93	9	1
1:A:95:ILE:HD11	1:A:100:PHE:CE2	0.41	2.51	10	1
1:A:87:ARG:CD	1:A:135:ASN:OD1	0.40	2.69	2	1
1:A:81:GLU:HG3	1:A:82:LYS:N	0.40	2.30	3	1
1:A:24:VAL:HG12	1:A:38:ILE:HD11	0.40	1.92	5	1
1:A:86:ASN:O	1:A:140:GLY:N	0.40	2.51	6	1
1:A:21:SER:HG	1:A:23:ASP:CG	0.40	2.23	9	1
1:A:111:MET:O	1:A:112:VAL:HG23	0.40	2.15	10	1
1:A:50:PHE:HE2	1:A:65:VAL:HG21	0.40	1.66	1	1
1:A:14:ASP:OD1	1:A:28:SER:CB	0.40	2.69	3	1
1:A:132:LEU:H	1:A:132:LEU:HD12	0.40	1.75	9	1
1:A:136:HIS:C	1:A:138:LEU:N	0.40	2.77	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:VAL:HB	1:A:148:LYS:C	0.40	2.41	3	1
1:A:18:LYS:HG3	1:A:24:VAL:HA	0.40	1.93	10	1
1:A:149:ILE:N	1:A:149:ILE:HD13	0.40	2.31	10	1
1:A:126:THR:OG1	1:A:129:GLU:N	0.40	2.55	1	1
1:A:13:VAL:HG11	1:A:149:ILE:CD1	0.40	2.45	2	1
1:A:84:TYR:CE2	1:A:138:LEU:HG	0.40	2.51	2	1
1:A:16:ILE:HD11	1:A:32:VAL:HG21	0.40	1.92	4	1
1:A:114:LEU:CA	1:A:119:PRO:HA	0.40	2.47	6	1
1:A:93:GLN:O	1:A:132:LEU:N	0.40	2.54	7	1
1:A:135:ASN:O	1:A:136:HIS:C	0.40	2.65	9	1
1:A:75:THR:HG21	1:A:146:THR:HG23	0.40	1.84	10	1

6.3 Torsion angles ⓘ

6.3.1 Protein backbone ⓘ

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	145/151 (96%)	98±3 (67±2%)	29±4 (20±3%)	18±3 (12±2%)	1	6
All	All	1450/1510 (96%)	977 (67%)	293 (20%)	180 (12%)	1	6

All 39 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	60	GLY	10
1	A	112	VAL	10
1	A	116	GLU	10
1	A	127	ASP	10
1	A	20	GLU	9
1	A	110	GLY	9
1	A	52	VAL	9
1	A	39	TYR	8
1	A	86	ASN	8
1	A	109	GLU	8
1	A	8	GLY	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	83	ALA	7
1	A	85	GLY	7
1	A	121	THR	7
1	A	99	ALA	6
1	A	148	LYS	6
1	A	153	VAL	6
1	A	56	GLN	5
1	A	147	ILE	5
1	A	7	LYS	4
1	A	40	ALA	4
1	A	134	PHE	3
1	A	80	ALA	2
1	A	101	LYS	2
1	A	135	ASN	2
1	A	67	ASP	2
1	A	104	ASP	1
1	A	105	PHE	1
1	A	106	GLU	1
1	A	97	ARG	1
1	A	66	LEU	1
1	A	69	GLU	1
1	A	45	TYR	1
1	A	46	GLU	1
1	A	5	VAL	1
1	A	139	ALA	1
1	A	21	SER	1
1	A	54	GLU	1
1	A	136	HIS	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	122/128 (95%)	76±3 (63±2%)	46±3 (37±2%)	0 7
All	All	1220/1280 (95%)	764 (63%)	456 (37%)	0 7

All 85 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	13	VAL	10
1	A	46	GLU	10
1	A	58	ILE	10
1	A	86	ASN	10
1	A	90	MET	10
1	A	94	LYS	10
1	A	97	ARG	10
1	A	113	ILE	10
1	A	114	LEU	10
1	A	128	ASN	10
1	A	132	LEU	10
1	A	141	LYS	10
1	A	142	ASP	10
1	A	38	ILE	9
1	A	87	ARG	9
1	A	93	GLN	9
1	A	106	GLU	9
1	A	111	MET	9
1	A	116	GLU	9
1	A	127	ASP	9
1	A	9	VAL	8
1	A	39	TYR	8
1	A	101	LYS	8
1	A	105	PHE	8
1	A	126	THR	8
1	A	129	GLU	8
1	A	144	VAL	8
1	A	104	ASP	8
1	A	61	PHE	7
1	A	73	GLU	7
1	A	70	VAL	7
1	A	124	GLU	7
1	A	147	ILE	7
1	A	56	GLN	6
1	A	78	ILE	6
1	A	69	GLU	6
1	A	137	GLU	6
1	A	151	GLU	6
1	A	11	ILE	5
1	A	82	LYS	5
1	A	109	GLU	5
1	A	149	ILE	5
1	A	108	GLU	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	123	THR	5
1	A	135	ASN	5
1	A	68	MET	5
1	A	48	LEU	4
1	A	49	GLU	4
1	A	143	LEU	4
1	A	57	LEU	4
1	A	102	GLU	4
1	A	14	ASP	4
1	A	5	VAL	3
1	A	6	ASP	3
1	A	10	LYS	3
1	A	16	ILE	3
1	A	29	ILE	3
1	A	27	THR	3
1	A	66	LEU	3
1	A	122	ILE	3
1	A	153	VAL	3
1	A	148	LYS	3
1	A	54	GLU	3
1	A	67	ASP	3
1	A	75	THR	3
1	A	18	LYS	3
1	A	77	LYS	3
1	A	81	GLU	2
1	A	88	ASN	2
1	A	30	GLU	2
1	A	84	TYR	2
1	A	15	TYR	2
1	A	28	SER	2
1	A	74	LYS	2
1	A	59	GLN	1
1	A	62	GLU	1
1	A	65	VAL	1
1	A	25	PHE	1
1	A	118	ILE	1
1	A	130	VAL	1
1	A	52	VAL	1
1	A	150	ILE	1
1	A	89	GLU	1
1	A	20	GLU	1
1	A	121	THR	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no 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