



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 8, 2026 – 01:08 PM UTC

PDB ID : 1MYO / pdb_00001myo
Title : SOLUTION STRUCTURE OF MYOTROPHIN, NMR, 44 STRUCTURES
Authors : Yang, Y.; Nanduri, S.; Sen, S.; Qin, J.
Deposited on : 1998-08-17

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

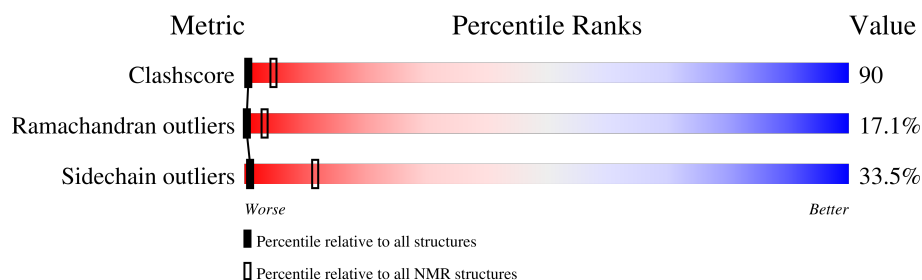
1 Overall quality at a glance

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	118	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 44 models. Model 38 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:4-A:118 (115)	0.52	38

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 10 clusters and 14 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1815 atoms, of which 913 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called MYOTROPHIN.

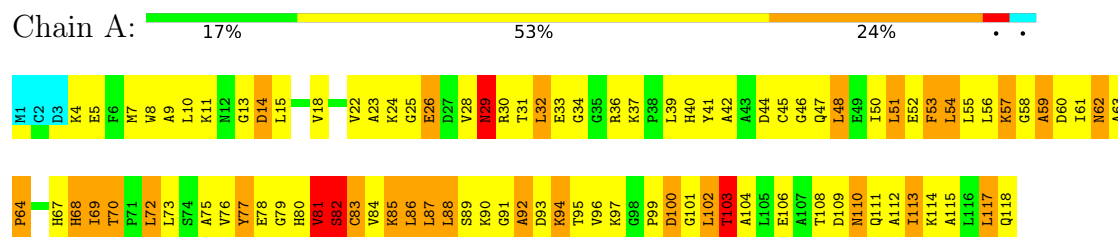
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	118	Total	C	H	N	O	S	0
			1815	570	913	152	175	5	

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: MYOTROPHIN

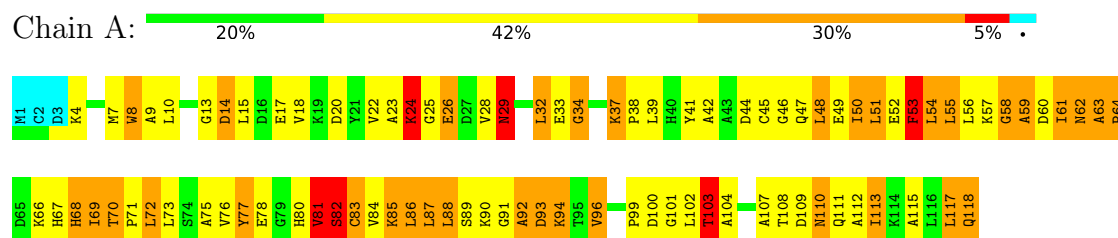


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

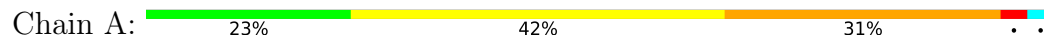
4.2.1 Score per residue for model 1

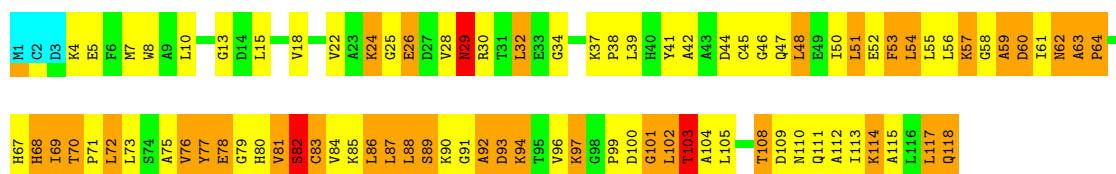
• Molecule 1: MYOTROPHIN



4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: MYOTROPHIN

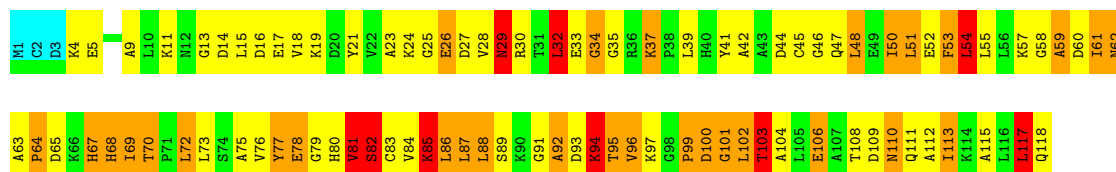




4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: MYOTROPHIN

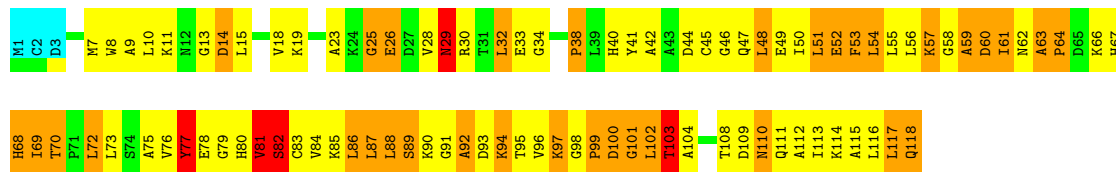
Chain A: 19% 44% 26% 8%



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: MYOTROPHIN

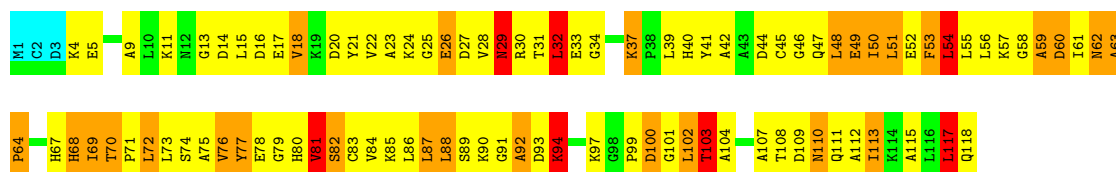
Chain A: 19% 45% 29%



4.2.5 Score per residue for model 5

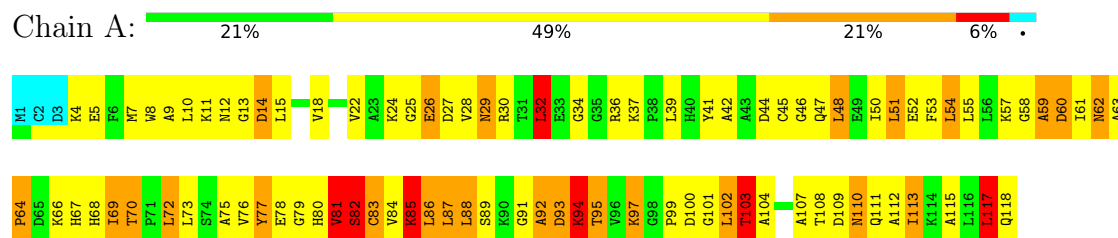
- Molecule 1: MYOTROPHIN

Chain A: 16% 53% 23% 6%



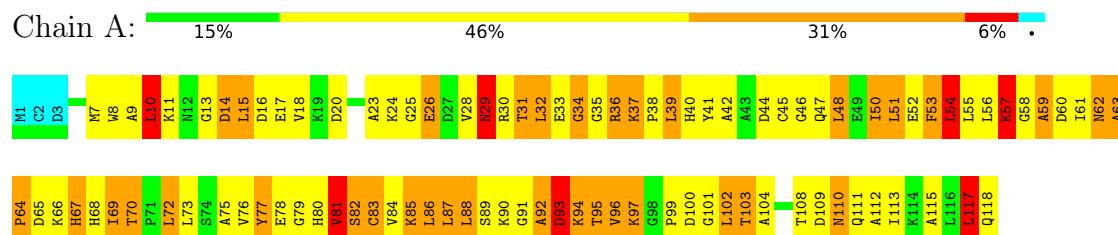
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: MYOTROPHIN



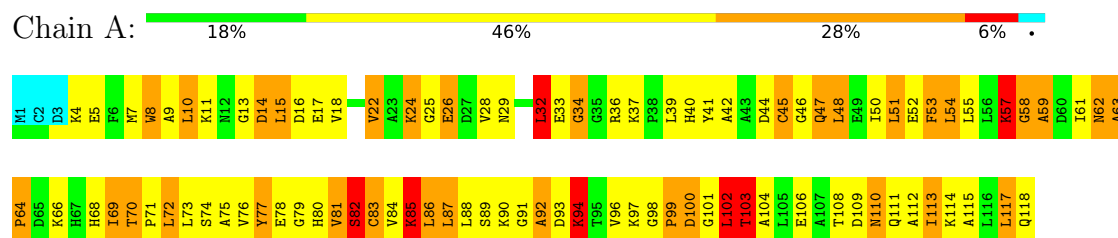
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: MYOTROPHIN



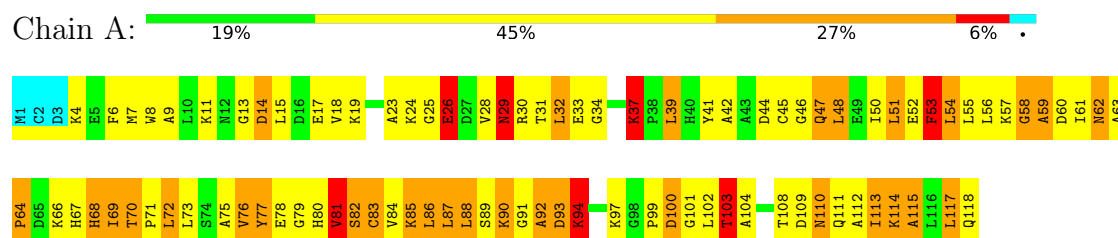
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: MYOTROPHIN



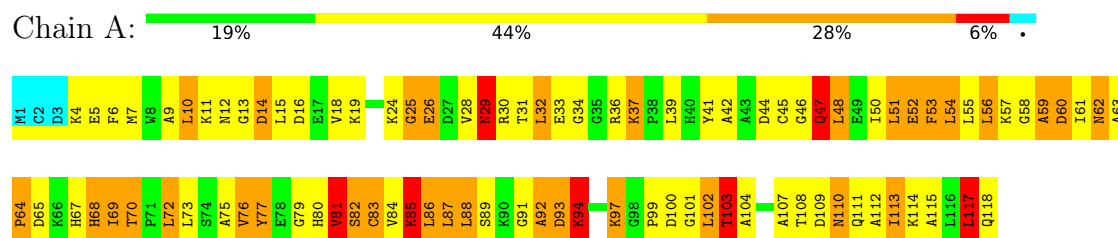
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: MYOTROPHIN



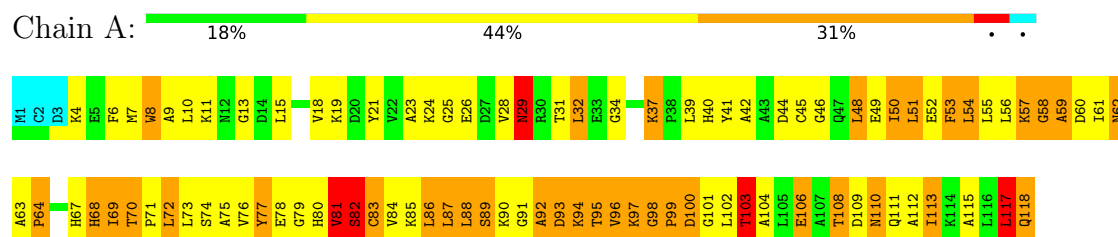
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: MYOTROPHIN



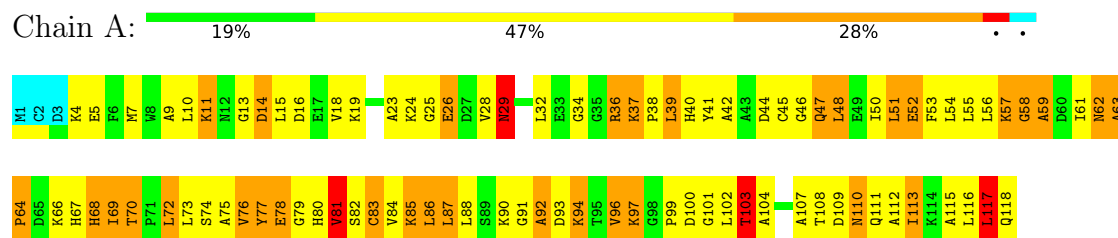
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: MYOTROPHIN



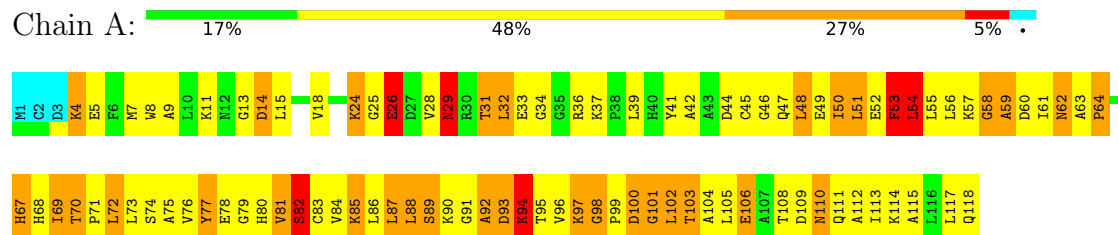
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: MYOTROPHIN



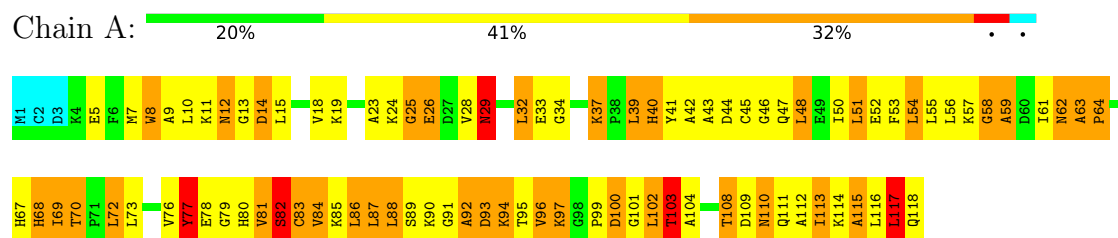
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: MYOTROPHIN



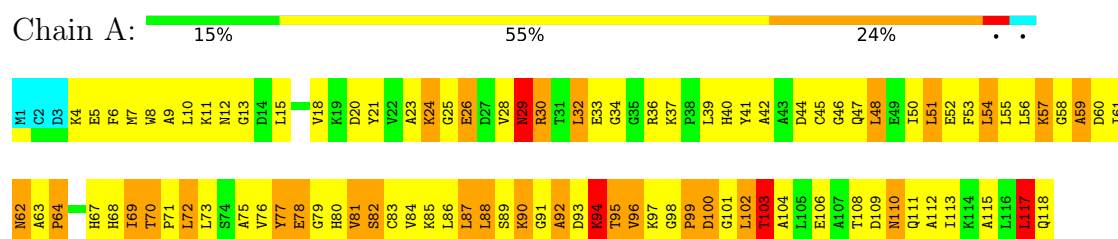
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: MYOTROPHIN



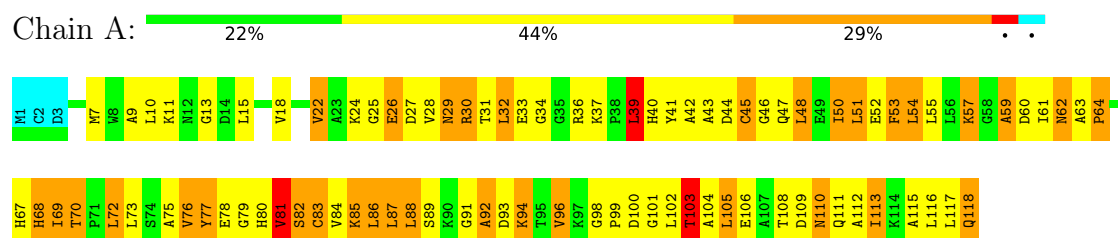
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: MYOTROPHIN



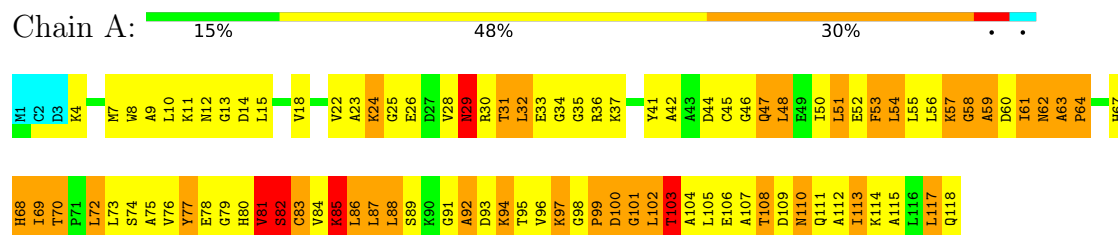
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: MYOTROPHIN



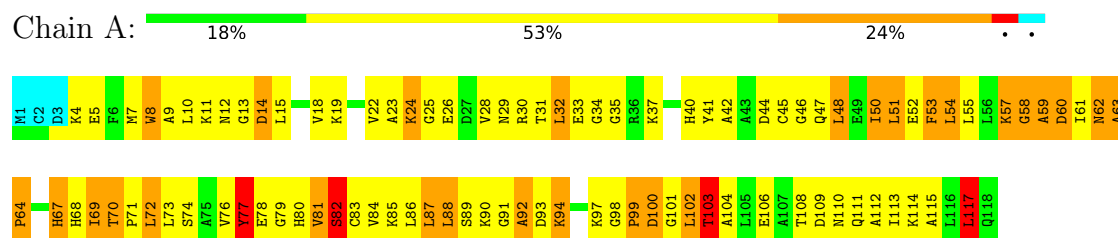
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: MYOTROPHIN



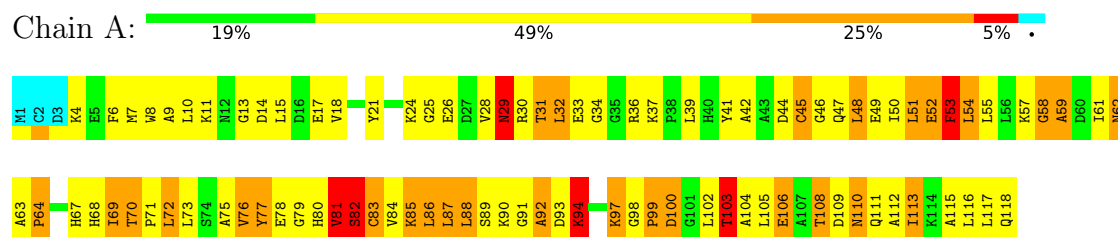
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: MYOTROPHIN



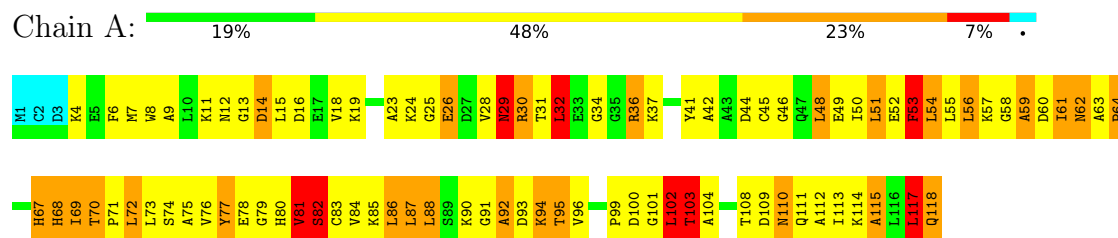
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: MYOTROPHIN



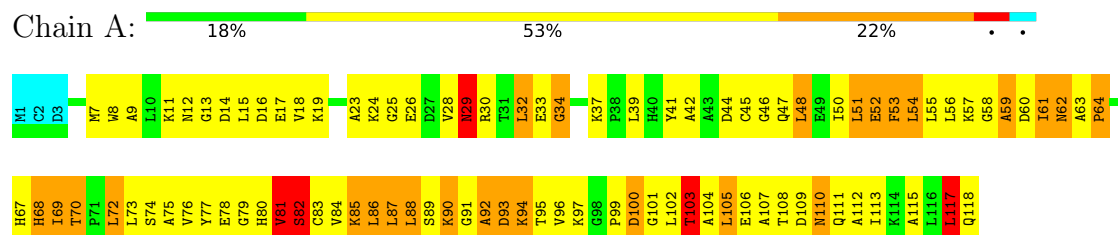
4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: MYOTROPHIN



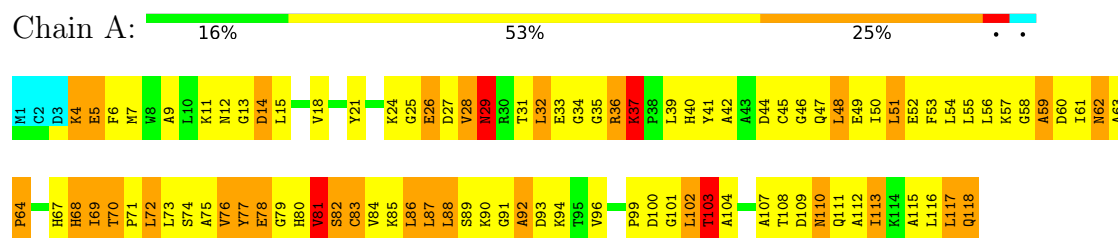
4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: MYOTROPHIN



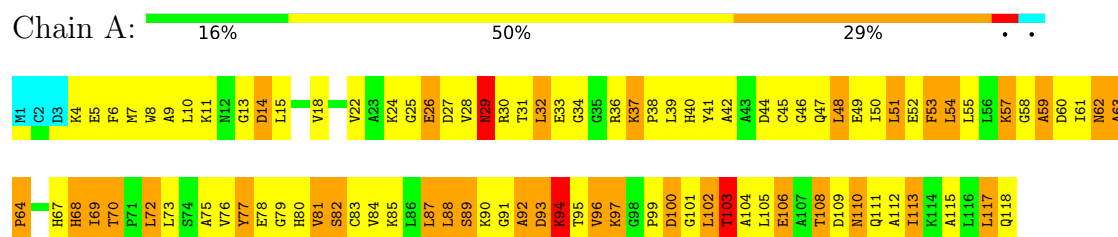
4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: MYOTROPHIN



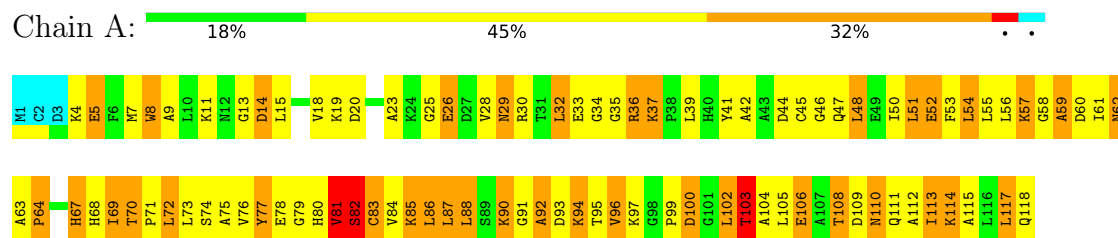
4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: MYOTROPHIN



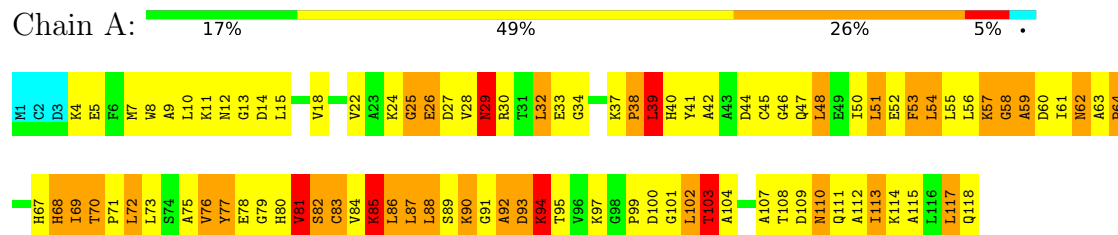
4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: MYOTROPHIN



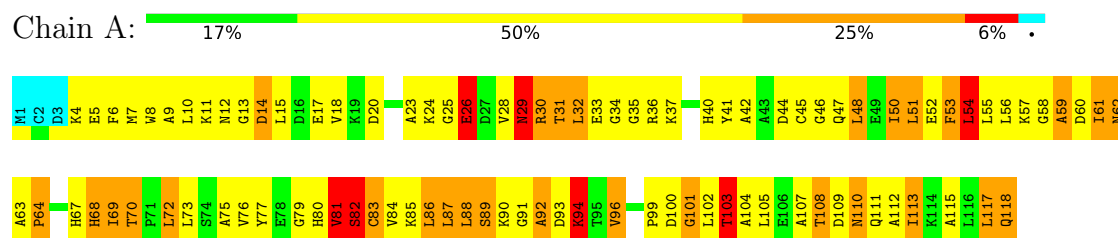
4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: MYOTROPHIN



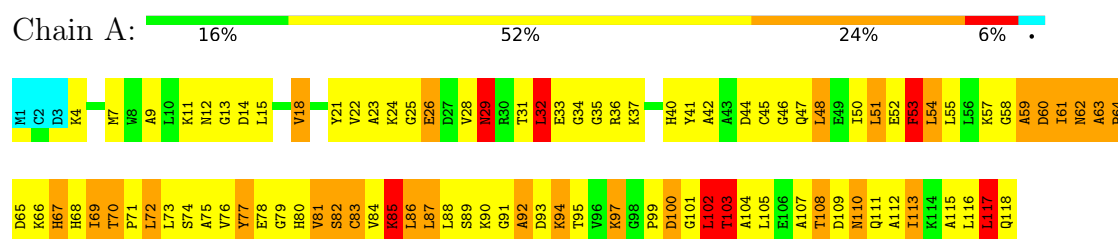
4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: MYOTROPHIN



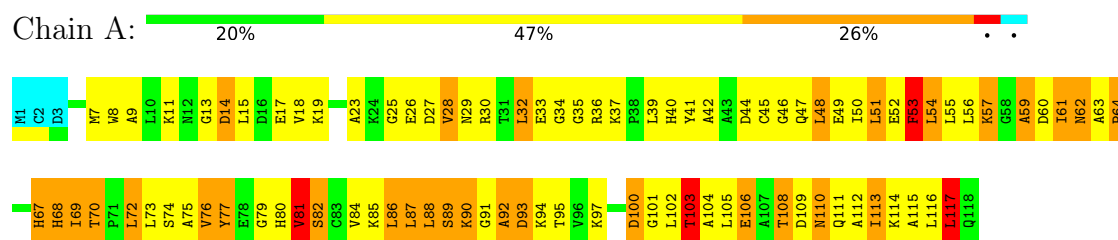
4.2.27 Score per residue for model 27

- Molecule 1: MYOTROPHIN



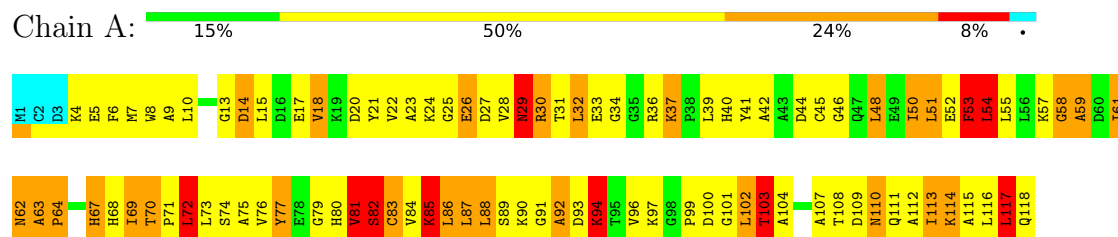
4.2.28 Score per residue for model 28

- Molecule 1: MYOTROPHIN



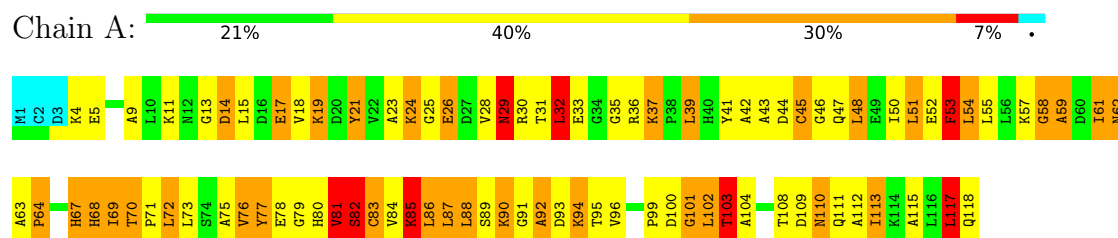
4.2.29 Score per residue for model 29

- Molecule 1: MYOTROPHIN



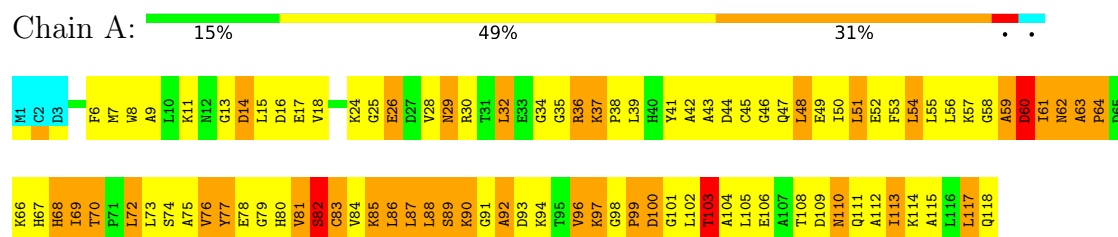
4.2.30 Score per residue for model 30

- Molecule 1: MYOTROPHIN



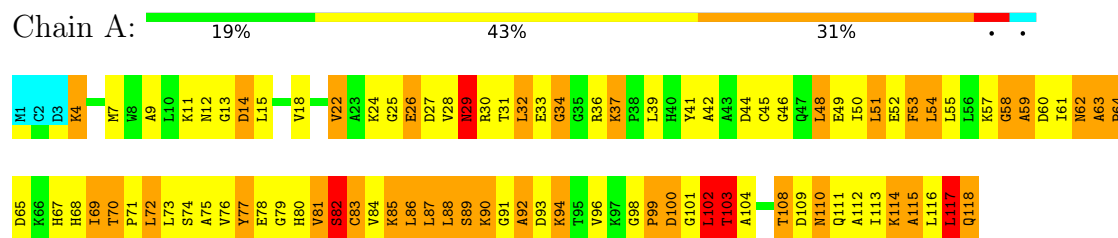
4.2.31 Score per residue for model 31

- Molecule 1: MYOTROPHIN



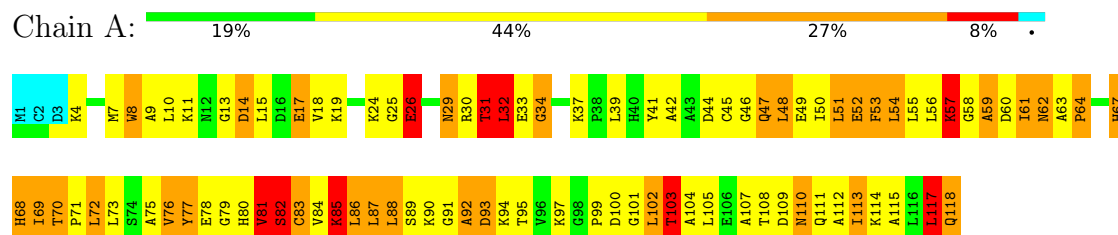
4.2.32 Score per residue for model 32

- Molecule 1: MYOTROPHIN



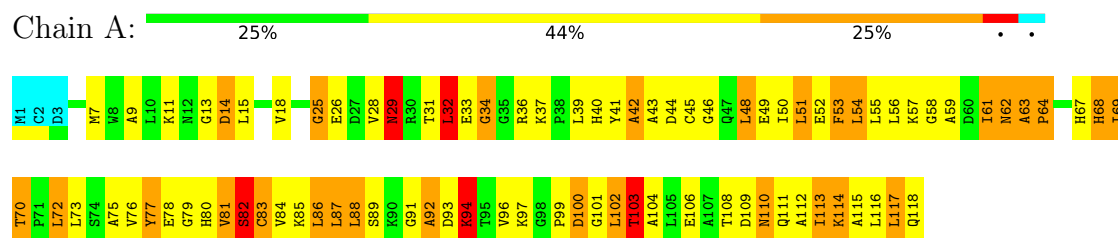
4.2.33 Score per residue for model 33

- Molecule 1: MYOTROPHIN



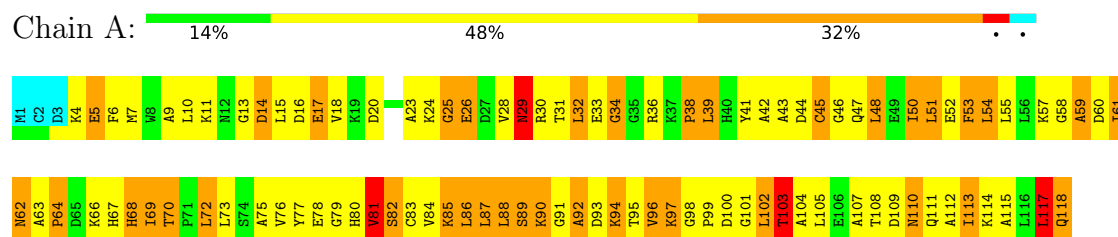
4.2.38 Score per residue for model 38 (medoid)

- Molecule 1: MYOTROPHIN



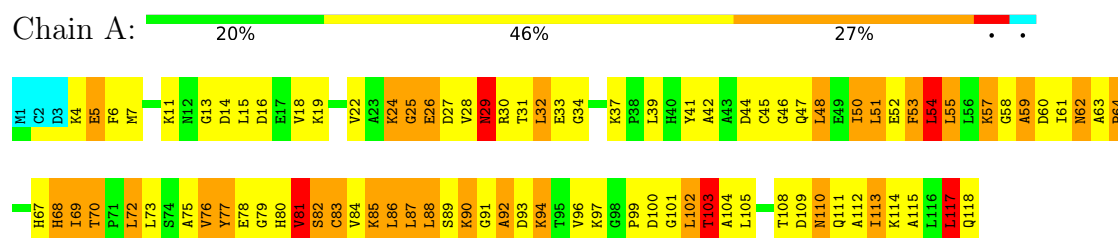
4.2.39 Score per residue for model 39

- Molecule 1: MYOTROPHIN



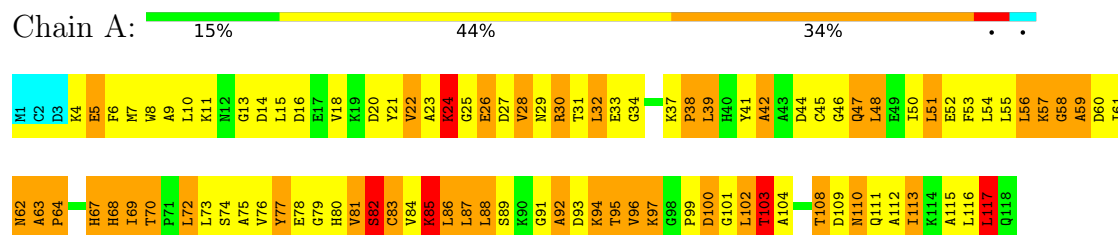
4.2.40 Score per residue for model 40

- Molecule 1: MYOTROPHIN



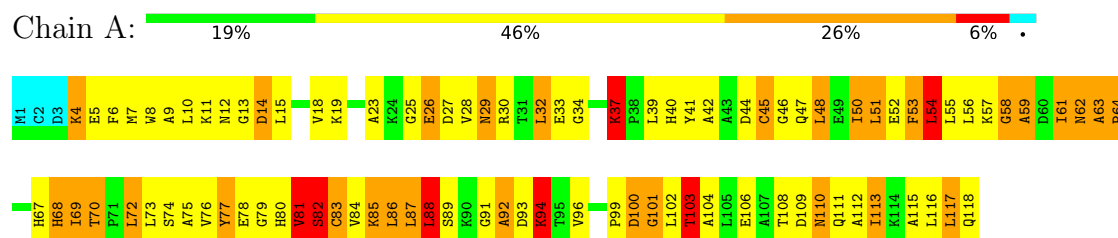
4.2.41 Score per residue for model 41

- Molecule 1: MYOTROPHIN



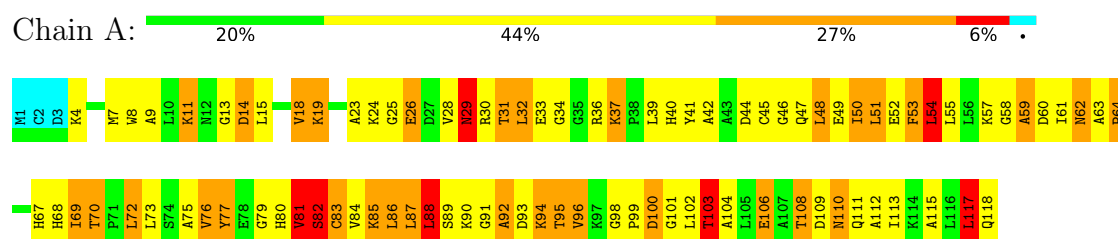
4.2.42 Score per residue for model 42

- Molecule 1: MYOTROPHIN



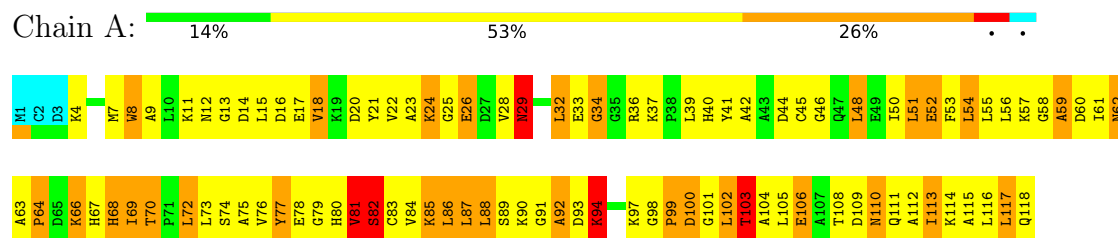
4.2.43 Score per residue for model 43

- Molecule 1: MYOTROPHIN



4.2.44 Score per residue for model 44

- Molecule 1: MYOTROPHIN



5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

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

Of the 90 calculated structures, 44 were deposited, based on the following criterion: *RESTRAINT VIOLATION*.

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

Software name	Classification	Version
XPLOR	structure solution	
XPLOR	refinement	

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	1.47±0.04	0±1/894 (0.1± 0.1%)	1.33±0.03	4±1/1206 (0.4± 0.1%)
All	All	1.47	20/39336 (0.1%)	1.33	194/53064 (0.4%)

All unique bond 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(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	38	PRO	CA-C	7.73	1.63	1.52	41	1
1	A	37	LYS	N-CA	6.02	1.51	1.45	23	6
1	A	98	GLY	N-CA	5.63	1.50	1.43	13	5
1	A	103	THR	C-N	-5.52	1.25	1.33	32	6
1	A	84	VAL	N-CA	5.26	1.52	1.46	37	1
1	A	39	LEU	N-CA	5.12	1.52	1.46	41	1

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	82	SER	N-CA-C	-9.13	101.91	113.23	2	41
1	A	39	LEU	N-CA-C	-7.39	104.11	113.72	39	5
1	A	117	LEU	N-CA-C	-6.75	105.01	113.18	5	24
1	A	79	GLY	N-CA-C	-6.53	106.72	115.21	31	43
1	A	60	ASP	N-CA-C	-6.35	105.59	113.15	9	29
1	A	115	ALA	N-CA-C	-6.19	104.53	111.28	32	4
1	A	53	PHE	CA-CB-CG	-6.09	107.71	113.80	1	13
1	A	14	ASP	CA-CB-CG	-5.66	106.94	112.60	8	1
1	A	108	THR	CB-CA-C	-5.61	106.40	114.87	17	12
1	A	89	SER	N-CA-C	-5.55	105.61	112.38	31	9
1	A	93	ASP	CB-CA-C	-5.49	110.22	116.54	2	1
1	A	47	GLN	N-CA-C	-5.44	107.01	113.38	5	2
1	A	42	ALA	N-CA-C	-5.27	105.22	110.97	38	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	72	LEU	N-CA-C	-5.16	105.77	111.71	29	1
1	A	23	ALA	N-CA-C	-5.12	106.13	112.38	17	1
1	A	101	GLY	N-CA-C	-5.12	108.96	115.31	42	1
1	A	38	PRO	N-CA-C	-5.11	108.83	114.92	39	1
1	A	108	THR	N-CA-CB	-5.10	104.31	109.51	41	1
1	A	6	PHE	CA-CB-CG	-5.08	108.72	113.80	31	1
1	A	67	HIS	N-CA-C	-5.07	107.06	113.20	20	1
1	A	108	THR	N-CA-C	5.03	114.27	108.49	24	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	880	893	893	160±14
All	All	38720	39292	39292	7021

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 90.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:LEU:H	1:A:51:LEU:HD13	1.08	1.07	42	44
1:A:61:ILE:HD11	1:A:92:ALA:HB2	1.06	1.25	44	44
1:A:86:LEU:O	1:A:86:LEU:HD22	1.02	1.52	40	24
1:A:117:LEU:HD12	1:A:117:LEU:O	0.99	1.55	28	23
1:A:32:LEU:H	1:A:32:LEU:HD13	0.98	1.17	39	19
1:A:32:LEU:HD22	1:A:33:GLU:N	0.97	1.74	1	20
1:A:72:LEU:HD22	1:A:72:LEU:H	0.97	1.19	18	13
1:A:32:LEU:N	1:A:36:ARG:HH12	0.93	1.59	7	1
1:A:72:LEU:N	1:A:72:LEU:HD13	0.91	1.80	16	44
1:A:86:LEU:C	1:A:86:LEU:HD23	0.91	1.90	4	1
1:A:14:ASP:O	1:A:16:ASP:N	0.89	2.05	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:ASN:HD21	1:A:113:ILE:HD12	0.88	1.27	13	5
1:A:86:LEU:C	1:A:86:LEU:HD13	0.88	1.92	34	23
1:A:103:THR:OG1	1:A:104:ALA:N	0.87	2.04	15	42
1:A:110:ASN:HD21	1:A:113:ILE:HD13	0.87	1.28	32	32
1:A:62:ASN:H	1:A:62:ASN:HD22	0.85	1.14	22	34
1:A:86:LEU:H	1:A:86:LEU:HD13	0.84	1.32	41	14
1:A:32:LEU:HD22	1:A:33:GLU:H	0.84	1.27	7	8
1:A:108:THR:HG21	1:A:110:ASN:ND2	0.84	1.87	26	37
1:A:51:LEU:HD13	1:A:51:LEU:N	0.84	1.88	1	44
1:A:86:LEU:HD13	1:A:87:LEU:N	0.84	1.87	28	24
1:A:102:LEU:O	1:A:103:THR:C	0.83	2.17	8	44
1:A:80:HIS:O	1:A:82:SER:N	0.83	2.12	7	44
1:A:110:ASN:ND2	1:A:113:ILE:HD12	0.83	1.89	13	5
1:A:110:ASN:ND2	1:A:113:ILE:HD13	0.83	1.88	24	36
1:A:95:THR:HG22	1:A:103:THR:OG1	0.83	1.74	13	1
1:A:69:ILE:CD1	1:A:73:LEU:HD13	0.81	2.05	2	34
1:A:9:ALA:HB1	1:A:14:ASP:OD2	0.80	1.76	7	2
1:A:72:LEU:HD13	1:A:72:LEU:H	0.80	1.35	26	34
1:A:88:LEU:HD22	1:A:88:LEU:C	0.80	2.02	20	40
1:A:51:LEU:H	1:A:51:LEU:CD1	0.79	1.89	34	44
1:A:70:THR:OG1	1:A:72:LEU:CD2	0.79	2.31	34	44
1:A:102:LEU:C	1:A:102:LEU:HD23	0.78	2.04	16	44
1:A:73:LEU:HD12	1:A:73:LEU:H	0.78	1.37	5	36
1:A:86:LEU:HD13	1:A:86:LEU:C	0.77	2.03	28	1
1:A:62:ASN:HD22	1:A:62:ASN:N	0.77	1.78	22	34
1:A:33:GLU:H	1:A:36:ARG:NH1	0.77	1.77	7	1
1:A:108:THR:HG21	1:A:110:ASN:HD21	0.76	1.40	26	34
1:A:9:ALA:HB1	1:A:14:ASP:CG	0.76	2.05	7	2
1:A:70:THR:OG1	1:A:72:LEU:HD22	0.76	1.81	7	11
1:A:56:LEU:HD12	1:A:57:LYS:N	0.76	1.95	7	1
1:A:81:VAL:HG11	1:A:113:ILE:CG1	0.75	2.11	13	6
1:A:62:ASN:C	1:A:64:PRO:HD2	0.75	2.07	7	34
1:A:32:LEU:H	1:A:32:LEU:CD1	0.75	1.94	1	15
1:A:32:LEU:HD13	1:A:32:LEU:N	0.75	1.97	40	18
1:A:31:THR:HG22	1:A:36:ARG:NH2	0.75	1.97	7	1
1:A:104:ALA:HB2	1:A:113:ILE:HG22	0.75	1.59	13	3
1:A:86:LEU:HD22	1:A:86:LEU:C	0.74	2.07	39	19
1:A:72:LEU:H	1:A:72:LEU:CD2	0.74	1.96	36	9
1:A:72:LEU:HD22	1:A:72:LEU:N	0.74	1.98	36	10
1:A:103:THR:HG22	1:A:104:ALA:N	0.73	1.97	13	2
1:A:61:ILE:CD1	1:A:92:ALA:HB2	0.73	2.11	1	38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:54:LEU:C	1:A:54:LEU:HD22	0.73	2.08	24	16
1:A:72:LEU:HD12	1:A:87:LEU:HD13	0.73	1.60	15	21
1:A:28:VAL:HG21	1:A:58:GLY:H	0.73	1.44	24	36
1:A:83:CYS:SG	1:A:84:VAL:N	0.72	2.62	3	9
1:A:34:GLY:C	1:A:36:ARG:HH21	0.72	1.91	7	1
1:A:81:VAL:O	1:A:84:VAL:HG22	0.72	1.84	12	33
1:A:32:LEU:HD22	1:A:32:LEU:C	0.72	2.10	26	16
1:A:91:GLY:O	1:A:93:ASP:N	0.72	2.22	34	44
1:A:86:LEU:C	1:A:86:LEU:HD22	0.72	2.10	19	14
1:A:92:ALA:O	1:A:93:ASP:C	0.71	2.31	28	44
1:A:28:VAL:O	1:A:28:VAL:HG23	0.71	1.86	16	7
1:A:32:LEU:HD13	1:A:41:TYR:CE1	0.71	2.21	44	17
1:A:36:ARG:NE	1:A:36:ARG:N	0.71	2.38	7	1
1:A:13:GLY:O	1:A:15:LEU:N	0.71	2.22	10	42
1:A:86:LEU:HD13	1:A:86:LEU:N	0.71	2.00	7	14
1:A:51:LEU:HD22	1:A:52:GLU:H	0.70	1.46	15	43
1:A:118:GLN:OE1	1:A:118:GLN:N	0.70	2.22	1	1
1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:HD22	0.70	1.85	7	9
1:A:95:THR:HG22	1:A:95:THR:O	0.70	1.86	7	2
1:A:34:GLY:N	1:A:36:ARG:NH2	0.69	2.39	7	1
1:A:113:ILE:HD12	1:A:113:ILE:N	0.69	2.02	34	6
1:A:70:THR:OG1	1:A:72:LEU:HD23	0.69	1.87	18	10
1:A:9:ALA:C	1:A:14:ASP:OD1	0.69	2.35	7	2
1:A:102:LEU:C	1:A:102:LEU:CD2	0.69	2.66	7	44
1:A:55:LEU:HD23	1:A:55:LEU:O	0.69	1.88	33	40
1:A:6:PHE:CZ	1:A:21:TYR:CE2	0.68	2.81	19	2
1:A:19:LYS:O	1:A:23:ALA:HB2	0.68	1.88	42	15
1:A:33:GLU:N	1:A:36:ARG:NH1	0.68	2.41	7	1
1:A:48:LEU:O	1:A:51:LEU:HD21	0.68	1.89	1	44
1:A:62:ASN:HD22	1:A:62:ASN:H	0.68	1.31	7	9
1:A:81:VAL:HG11	1:A:113:ILE:HG13	0.68	1.65	4	6
1:A:63:ALA:N	1:A:64:PRO:HD2	0.67	2.02	7	40
1:A:69:ILE:HD13	1:A:70:THR:H	0.67	1.49	36	44
1:A:80:HIS:C	1:A:82:SER:H	0.67	1.97	44	44
1:A:62:ASN:H	1:A:62:ASN:ND2	0.67	1.88	35	28
1:A:37:LYS:H	1:A:37:LYS:CD	0.67	2.02	33	8
1:A:72:LEU:N	1:A:72:LEU:CD1	0.67	2.57	17	34
1:A:47:GLN:NE2	1:A:47:GLN:N	0.67	2.44	13	13
1:A:36:ARG:NE	1:A:36:ARG:H	0.66	1.88	7	1
1:A:93:ASP:CG	1:A:96:VAL:HG23	0.66	2.16	23	3
1:A:42:ALA:O	1:A:51:LEU:HD12	0.66	1.90	42	28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CD1	0.66	2.59	3	27
1:A:62:ASN:ND2	1:A:62:ASN:N	0.66	2.43	43	4
1:A:84:VAL:HG23	1:A:85:LYS:N	0.66	2.06	23	43
1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:ND2	0.66	2.43	1	39
1:A:108:THR:OG1	1:A:109:ASP:N	0.66	2.29	4	43
1:A:32:LEU:HD23	1:A:33:GLU:N	0.66	2.05	28	7
1:A:42:ALA:O	1:A:46:GLY:N	0.65	2.29	30	44
1:A:94:LYS:CE	1:A:95:THR:HG23	0.65	2.22	13	4
1:A:15:LEU:C	1:A:15:LEU:HD13	0.65	2.16	11	32
1:A:44:ASP:O	1:A:45:CYS:SG	0.65	2.53	1	35
1:A:110:ASN:O	1:A:110:ASN:ND2	0.65	2.30	9	2
1:A:15:LEU:HD13	1:A:15:LEU:O	0.65	1.92	3	35
1:A:93:ASP:CG	1:A:94:LYS:H	0.65	2.00	23	4
1:A:62:ASN:ND2	1:A:63:ALA:H	0.65	1.89	23	27
1:A:7:MET:SD	1:A:32:LEU:HD23	0.65	2.32	1	7
1:A:117:LEU:O	1:A:117:LEU:CD1	0.65	2.44	44	16
1:A:86:LEU:H	1:A:86:LEU:CD1	0.64	2.05	3	14
1:A:73:LEU:HD12	1:A:73:LEU:N	0.64	2.08	5	31
1:A:55:LEU:HD22	1:A:90:LYS:NZ	0.64	2.07	1	2
1:A:53:PHE:CD2	1:A:54:LEU:N	0.64	2.65	16	7
1:A:95:THR:HG21	1:A:100:ASP:O	0.64	1.93	37	5
1:A:32:LEU:N	1:A:36:ARG:NH1	0.64	2.40	7	1
1:A:15:LEU:HD13	1:A:15:LEU:C	0.64	2.18	33	10
1:A:28:VAL:C	1:A:29:ASN:ND2	0.63	2.56	28	32
1:A:58:GLY:O	1:A:59:ALA:HB2	0.63	1.93	6	33
1:A:62:ASN:HD22	1:A:63:ALA:H	0.63	1.37	35	20
1:A:46:GLY:O	1:A:48:LEU:N	0.63	2.31	10	37
1:A:76:VAL:HG13	1:A:113:ILE:HG12	0.63	1.70	7	29
1:A:14:ASP:O	1:A:15:LEU:C	0.63	2.41	7	7
1:A:32:LEU:HD21	1:A:41:TYR:CZ	0.63	2.28	23	5
1:A:80:HIS:C	1:A:82:SER:N	0.63	2.57	25	44
1:A:110:ASN:ND2	1:A:110:ASN:O	0.63	2.32	32	33
1:A:6:PHE:CE2	1:A:30:ARG:NH1	0.63	2.67	15	1
1:A:92:ALA:O	1:A:94:LYS:N	0.62	2.32	7	5
1:A:117:LEU:HD12	1:A:117:LEU:C	0.62	2.19	1	5
1:A:117:LEU:O	1:A:118:GLN:C	0.62	2.43	33	7
1:A:113:ILE:N	1:A:113:ILE:CD1	0.62	2.62	14	6
1:A:88:LEU:C	1:A:90:LYS:N	0.62	2.56	12	31
1:A:32:LEU:N	1:A:32:LEU:HD13	0.62	2.06	7	2
1:A:6:PHE:CE1	1:A:30:ARG:NH2	0.62	2.67	20	2
1:A:52:GLU:CD	1:A:86:LEU:HD21	0.62	2.19	24	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:LEU:O	1:A:86:LEU:CD2	0.62	2.44	21	20
1:A:86:LEU:C	1:A:86:LEU:CD2	0.62	2.72	7	23
1:A:32:LEU:CD1	1:A:32:LEU:H	0.62	2.08	26	5
1:A:62:ASN:O	1:A:63:ALA:C	0.62	2.42	1	44
1:A:83:CYS:O	1:A:84:VAL:C	0.62	2.41	20	43
1:A:69:ILE:HD11	1:A:73:LEU:HD13	0.62	1.70	2	30
1:A:32:LEU:HD13	1:A:41:TYR:CD1	0.62	2.30	42	4
1:A:44:ASP:C	1:A:45:CYS:SG	0.61	2.83	16	13
1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CD	0.61	2.63	13	4
1:A:42:ALA:C	1:A:51:LEU:HD12	0.61	2.20	4	44
1:A:46:GLY:C	1:A:48:LEU:N	0.61	2.57	4	44
1:A:35:GLY:N	1:A:36:ARG:HE	0.61	1.94	7	1
1:A:88:LEU:N	1:A:88:LEU:HD13	0.61	2.11	1	33
1:A:25:GLY:O	1:A:26:GLU:O	0.60	2.19	7	31
1:A:47:GLN:CD	1:A:47:GLN:N	0.60	2.59	10	13
1:A:48:LEU:HA	1:A:51:LEU:HD11	0.60	1.73	20	42
1:A:13:GLY:C	1:A:15:LEU:H	0.60	2.04	7	36
1:A:86:LEU:C	1:A:86:LEU:CD1	0.60	2.72	24	15
1:A:102:LEU:O	1:A:105:LEU:N	0.60	2.33	16	9
1:A:61:ILE:HD11	1:A:92:ALA:CB	0.60	2.26	8	13
1:A:8:TRP:NE1	1:A:12:ASN:ND2	0.60	2.48	44	1
1:A:118:GLN:C	1:A:118:GLN:CD	0.60	2.69	1	16
1:A:26:GLU:CD	1:A:26:GLU:N	0.60	2.59	12	5
1:A:67:HIS:O	1:A:69:ILE:N	0.60	2.35	26	34
1:A:46:GLY:C	1:A:48:LEU:H	0.60	2.03	19	43
1:A:37:LYS:NZ	1:A:60:ASP:CB	0.60	2.64	31	1
1:A:9:ALA:O	1:A:11:LYS:N	0.59	2.35	7	15
1:A:30:ARG:HH11	1:A:30:ARG:CG	0.59	2.09	29	2
1:A:14:ASP:C	1:A:16:ASP:N	0.59	2.60	7	5
1:A:106:GLU:O	1:A:106:GLU:CD	0.59	2.45	13	4
1:A:67:HIS:ND1	1:A:67:HIS:N	0.59	2.49	35	6
1:A:88:LEU:C	1:A:90:LYS:H	0.59	2.04	8	11
1:A:110:ASN:ND2	1:A:110:ASN:N	0.59	2.47	14	6
1:A:108:THR:HG23	1:A:114:LYS:NZ	0.59	2.11	28	2
1:A:21:TYR:CD1	1:A:21:TYR:N	0.59	2.68	30	3
1:A:53:PHE:CG	1:A:54:LEU:N	0.59	2.70	20	14
1:A:28:VAL:C	1:A:29:ASN:HD22	0.59	2.05	38	32
1:A:14:ASP:OD1	1:A:14:ASP:N	0.59	2.36	39	20
1:A:62:ASN:O	1:A:97:LYS:NZ	0.59	2.32	7	2
1:A:85:LYS:O	1:A:88:LEU:CD1	0.59	2.51	26	24
1:A:102:LEU:HD23	1:A:103:THR:O	0.59	1.98	17	19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:ALA:HB1	1:A:113:ILE:HG22	0.59	1.74	15	8
1:A:110:ASN:ND2	1:A:110:ASN:C	0.59	2.61	36	21
1:A:55:LEU:HD23	1:A:55:LEU:C	0.59	2.23	21	28
1:A:69:ILE:CD1	1:A:70:THR:H	0.59	2.11	36	18
1:A:31:THR:HG23	1:A:36:ARG:H	0.59	1.57	37	5
1:A:95:THR:HG21	1:A:103:THR:OG1	0.59	1.98	34	1
1:A:91:GLY:C	1:A:93:ASP:H	0.58	2.06	20	43
1:A:33:GLU:OE2	1:A:36:ARG:NH2	0.58	2.36	36	2
1:A:113:ILE:C	1:A:115:ALA:N	0.58	2.60	16	44
1:A:86:LEU:HD23	1:A:87:LEU:N	0.58	2.12	4	1
1:A:70:THR:OG1	1:A:73:LEU:CD1	0.58	2.51	27	12
1:A:88:LEU:HD21	1:A:116:LEU:HD21	0.58	1.74	27	1
1:A:9:ALA:C	1:A:11:LYS:H	0.58	2.07	20	29
1:A:52:GLU:OE1	1:A:53:PHE:N	0.58	2.36	33	4
1:A:108:THR:CG2	1:A:110:ASN:ND2	0.58	2.67	34	29
1:A:41:TYR:CD1	1:A:41:TYR:N	0.58	2.71	6	41
1:A:110:ASN:HD22	1:A:110:ASN:C	0.58	2.05	24	13
1:A:32:LEU:HD11	1:A:41:TYR:CE1	0.58	2.34	23	4
1:A:73:LEU:O	1:A:77:TYR:CE2	0.58	2.56	34	25
1:A:67:HIS:O	1:A:68:HIS:CG	0.58	2.57	2	11
1:A:86:LEU:HD23	1:A:86:LEU:O	0.58	1.98	13	4
1:A:67:HIS:CD2	1:A:67:HIS:H	0.58	2.16	29	4
1:A:88:LEU:C	1:A:88:LEU:CD2	0.58	2.77	24	40
1:A:104:ALA:O	1:A:114:LYS:NZ	0.58	2.33	4	4
1:A:70:THR:C	1:A:72:LEU:HD22	0.58	2.24	27	8
1:A:32:LEU:N	1:A:36:ARG:O	0.58	2.37	27	10
1:A:34:GLY:N	1:A:36:ARG:CZ	0.58	2.66	7	1
1:A:112:ALA:O	1:A:115:ALA:HB3	0.57	1.99	10	43
1:A:14:ASP:O	1:A:17:GLU:N	0.57	2.37	7	7
1:A:13:GLY:N	1:A:47:GLN:HE21	0.57	1.96	8	2
1:A:13:GLY:CA	1:A:47:GLN:NE2	0.57	2.67	37	4
1:A:88:LEU:O	1:A:90:LYS:N	0.57	2.37	8	4
1:A:8:TRP:CH2	1:A:14:ASP:OD2	0.57	2.57	26	2
1:A:31:THR:CG2	1:A:36:ARG:NH2	0.57	2.68	7	1
1:A:47:GLN:N	1:A:47:GLN:OE1	0.57	2.37	33	3
1:A:52:GLU:CG	1:A:86:LEU:HD21	0.57	2.30	21	2
1:A:44:ASP:O	1:A:78:GLU:CD	0.57	2.48	1	3
1:A:75:ALA:CB	1:A:83:CYS:SG	0.57	2.92	35	16
1:A:104:ALA:HB3	1:A:117:LEU:HD23	0.57	1.77	35	13
1:A:73:LEU:O	1:A:77:TYR:CE1	0.57	2.57	16	17
1:A:67:HIS:CD2	1:A:67:HIS:N	0.57	2.72	21	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:VAL:O	1:A:29:ASN:CG	0.57	2.47	16	4
1:A:87:LEU:C	1:A:89:SER:N	0.57	2.62	4	35
1:A:30:ARG:H	1:A:30:ARG:CD	0.57	2.13	2	1
1:A:64:PRO:O	1:A:97:LYS:NZ	0.57	2.36	19	7
1:A:103:THR:O	1:A:107:ALA:HB2	0.56	1.99	1	14
1:A:78:GLU:O	1:A:78:GLU:CD	0.56	2.47	12	6
1:A:9:ALA:C	1:A:11:LYS:N	0.56	2.60	30	35
1:A:78:GLU:OE2	1:A:80:HIS:CD2	0.56	2.58	38	11
1:A:110:ASN:ND2	1:A:110:ASN:H	0.56	1.97	14	6
1:A:30:ARG:CG	1:A:30:ARG:NH1	0.56	2.66	29	4
1:A:100:ASP:C	1:A:102:LEU:H	0.56	2.08	13	37
1:A:9:ALA:CB	1:A:14:ASP:CG	0.56	2.78	7	2
1:A:4:LYS:O	1:A:7:MET:SD	0.56	2.64	22	4
1:A:47:GLN:N	1:A:47:GLN:CD	0.56	2.64	26	15
1:A:36:ARG:HH11	1:A:36:ARG:CG	0.56	2.12	12	3
1:A:37:LYS:H	1:A:37:LYS:HD3	0.56	1.60	33	6
1:A:102:LEU:O	1:A:104:ALA:N	0.56	2.37	13	12
1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:HD12	0.56	2.15	20	5
1:A:72:LEU:H	1:A:72:LEU:CD1	0.56	2.12	17	20
1:A:36:ARG:NH1	1:A:36:ARG:O	0.56	2.39	7	1
1:A:110:ASN:OD1	1:A:113:ILE:HD13	0.56	2.00	43	20
1:A:115:ALA:O	1:A:118:GLN:CB	0.56	2.54	40	9
1:A:37:LYS:CD	1:A:37:LYS:H	0.56	2.14	13	3
1:A:28:VAL:O	1:A:29:ASN:ND2	0.56	2.39	41	3
1:A:118:GLN:C	1:A:118:GLN:NE2	0.56	2.63	2	4
1:A:25:GLY:O	1:A:26:GLU:C	0.55	2.49	12	44
1:A:91:GLY:C	1:A:93:ASP:N	0.55	2.63	28	44
1:A:68:HIS:O	1:A:68:HIS:ND1	0.55	2.37	15	7
1:A:108:THR:OG1	1:A:110:ASN:ND2	0.55	2.39	16	3
1:A:48:LEU:C	1:A:51:LEU:HD21	0.55	2.26	7	43
1:A:33:GLU:CD	1:A:34:GLY:N	0.55	2.65	1	3
1:A:37:LYS:C	1:A:39:LEU:H	0.55	2.09	9	4
1:A:30:ARG:CB	1:A:30:ARG:CZ	0.55	2.85	26	3
1:A:4:LYS:O	1:A:8:TRP:N	0.55	2.39	24	9
1:A:87:LEU:O	1:A:89:SER:N	0.55	2.40	14	26
1:A:18:VAL:O	1:A:21:TYR:CE1	0.55	2.59	5	3
1:A:37:LYS:NZ	1:A:60:ASP:OD2	0.55	2.40	25	1
1:A:53:PHE:O	1:A:55:LEU:N	0.55	2.40	3	16
1:A:10:LEU:CD2	1:A:38:PRO:O	0.55	2.55	25	4
1:A:54:LEU:HD12	1:A:54:LEU:N	0.55	2.17	25	9
1:A:40:HIS:CD2	1:A:44:ASP:OD2	0.55	2.60	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:59:ALA:C	1:A:61:ILE:H	0.55	2.08	1	34
1:A:70:THR:OG1	1:A:72:LEU:HD21	0.55	2.02	26	27
1:A:88:LEU:N	1:A:88:LEU:CD1	0.55	2.70	33	17
1:A:110:ASN:HD21	1:A:113:ILE:CD1	0.55	2.09	13	18
1:A:44:ASP:C	1:A:45:CYS:HG	0.55	2.06	7	5
1:A:14:ASP:OD2	1:A:17:GLU:CB	0.55	2.55	7	2
1:A:36:ARG:CG	1:A:36:ARG:NH1	0.55	2.67	12	3
1:A:31:THR:HG23	1:A:36:ARG:N	0.55	2.17	22	4
1:A:62:ASN:HD22	1:A:63:ALA:N	0.55	2.00	37	14
1:A:62:ASN:C	1:A:64:PRO:CD	0.55	2.79	7	14
1:A:104:ALA:O	1:A:114:LYS:CE	0.55	2.54	40	2
1:A:115:ALA:O	1:A:118:GLN:CD	0.55	2.50	39	3
1:A:15:LEU:HD11	1:A:19:LYS:NZ	0.55	2.16	42	1
1:A:13:GLY:C	1:A:15:LEU:N	0.55	2.65	10	44
1:A:111:GLN:O	1:A:111:GLN:CG	0.55	2.55	28	44
1:A:86:LEU:O	1:A:90:LYS:NZ	0.55	2.40	12	3
1:A:6:PHE:CE2	1:A:21:TYR:CD1	0.55	2.95	15	1
1:A:93:ASP:OD2	1:A:94:LYS:N	0.55	2.40	26	2
1:A:7:MET:O	1:A:9:ALA:N	0.54	2.41	18	22
1:A:63:ALA:O	1:A:64:PRO:C	0.54	2.49	19	44
1:A:104:ALA:CB	1:A:113:ILE:HG22	0.54	2.31	13	9
1:A:53:PHE:C	1:A:55:LEU:N	0.54	2.66	7	24
1:A:62:ASN:ND2	1:A:63:ALA:N	0.54	2.54	37	21
1:A:110:ASN:CG	1:A:113:ILE:HD12	0.54	2.26	13	4
1:A:27:ASP:O	1:A:29:ASN:N	0.54	2.40	41	3
1:A:36:ARG:NH2	1:A:40:HIS:CG	0.54	2.75	26	1
1:A:100:ASP:O	1:A:102:LEU:N	0.54	2.41	17	18
1:A:108:THR:HG23	1:A:114:LYS:HZ3	0.54	1.62	38	1
1:A:7:MET:C	1:A:9:ALA:N	0.54	2.65	8	24
1:A:44:ASP:O	1:A:78:GLU:OE2	0.54	2.25	1	9
1:A:53:PHE:C	1:A:55:LEU:H	0.54	2.10	7	15
1:A:40:HIS:NE2	1:A:44:ASP:OD2	0.54	2.40	4	4
1:A:40:HIS:ND1	1:A:74:SER:OG	0.54	2.41	36	3
1:A:117:LEU:O	1:A:118:GLN:O	0.54	2.25	35	3
1:A:68:HIS:CG	1:A:68:HIS:O	0.54	2.60	1	6
1:A:76:VAL:HG13	1:A:113:ILE:CG1	0.54	2.33	15	23
1:A:96:VAL:CG1	1:A:96:VAL:O	0.54	2.55	34	2
1:A:32:LEU:CD1	1:A:32:LEU:N	0.54	2.69	15	12
1:A:27:ASP:O	1:A:30:ARG:NH1	0.54	2.41	29	3
1:A:86:LEU:HD22	1:A:87:LEU:N	0.54	2.17	8	14
1:A:83:CYS:O	1:A:87:LEU:N	0.54	2.40	23	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:GLY:CA	1:A:36:ARG:HH21	0.54	2.15	7	1
1:A:27:ASP:CG	1:A:30:ARG:NH1	0.54	2.66	16	1
1:A:100:ASP:C	1:A:102:LEU:N	0.54	2.66	13	40
1:A:96:VAL:O	1:A:96:VAL:HG13	0.54	2.03	11	4
1:A:30:ARG:O	1:A:32:LEU:N	0.54	2.41	17	7
1:A:95:THR:O	1:A:95:THR:CG2	0.54	2.55	11	2
1:A:88:LEU:HD22	1:A:88:LEU:O	0.54	2.03	9	6
1:A:103:THR:CG2	1:A:104:ALA:N	0.54	2.67	13	2
1:A:113:ILE:CD1	1:A:113:ILE:H	0.54	2.16	37	6
1:A:6:PHE:CE2	1:A:21:TYR:CE2	0.54	2.96	41	2
1:A:70:THR:CB	1:A:72:LEU:CD2	0.53	2.86	18	8
1:A:71:PRO:O	1:A:74:SER:N	0.53	2.40	29	9
1:A:81:VAL:O	1:A:84:VAL:CG2	0.53	2.56	33	6
1:A:72:LEU:CD2	1:A:72:LEU:H	0.53	2.08	13	1
1:A:60:ASP:O	1:A:60:ASP:OD1	0.53	2.26	31	14
1:A:93:ASP:CG	1:A:94:LYS:N	0.53	2.67	23	4
1:A:84:VAL:CG2	1:A:85:LYS:N	0.53	2.71	31	33
1:A:32:LEU:CD2	1:A:33:GLU:N	0.53	2.70	28	7
1:A:100:ASP:OD1	1:A:101:GLY:N	0.53	2.41	8	5
1:A:46:GLY:O	1:A:47:GLN:C	0.53	2.51	10	22
1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:HD13	0.53	2.18	23	20
1:A:115:ALA:O	1:A:118:GLN:OE1	0.53	2.26	1	1
1:A:33:GLU:CG	1:A:34:GLY:N	0.53	2.70	38	6
1:A:33:GLU:OE2	1:A:36:ARG:NE	0.53	2.41	19	3
1:A:51:LEU:N	1:A:51:LEU:CD1	0.53	2.67	36	30
1:A:110:ASN:ND2	1:A:113:ILE:H	0.53	2.00	13	3
1:A:78:GLU:OE2	1:A:80:HIS:CG	0.53	2.62	41	6
1:A:12:ASN:O	1:A:47:GLN:NE2	0.53	2.42	27	2
1:A:108:THR:CG2	1:A:114:LYS:NZ	0.53	2.72	38	1
1:A:93:ASP:CG	1:A:94:LYS:NZ	0.53	2.66	21	2
1:A:44:ASP:OD1	1:A:45:CYS:SG	0.53	2.67	16	10
1:A:12:ASN:ND2	1:A:14:ASP:OD2	0.53	2.40	44	1
1:A:7:MET:C	1:A:9:ALA:H	0.53	2.12	9	17
1:A:76:VAL:O	1:A:78:GLU:N	0.53	2.42	14	10
1:A:88:LEU:CD1	1:A:88:LEU:N	0.53	2.72	43	17
1:A:37:LYS:HZ3	1:A:60:ASP:CB	0.53	2.15	31	1
1:A:64:PRO:CB	1:A:69:ILE:O	0.53	2.57	36	11
1:A:72:LEU:HG	1:A:92:ALA:HB1	0.53	1.81	8	6
1:A:52:GLU:OE2	1:A:90:LYS:NZ	0.53	2.42	12	3
1:A:48:LEU:O	1:A:51:LEU:CD2	0.53	2.57	40	26
1:A:55:LEU:HD22	1:A:90:LYS:CE	0.53	2.33	18	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:LYS:O	1:A:23:ALA:CB	0.53	2.56	42	10
1:A:32:LEU:HD23	1:A:32:LEU:C	0.53	2.29	24	6
1:A:95:THR:HG23	1:A:103:THR:HG22	0.53	1.80	15	1
1:A:8:TRP:CZ3	1:A:14:ASP:OD2	0.53	2.61	26	2
1:A:21:TYR:CD1	1:A:22:VAL:N	0.53	2.77	29	1
1:A:35:GLY:O	1:A:67:HIS:CE1	0.52	2.62	3	3
1:A:6:PHE:CZ	1:A:30:ARG:NH2	0.52	2.77	29	3
1:A:105:LEU:O	1:A:114:LYS:NZ	0.52	2.42	44	3
1:A:65:ASP:O	1:A:68:HIS:CE1	0.52	2.62	32	1
1:A:110:ASN:CG	1:A:113:ILE:HD13	0.52	2.28	32	21
1:A:82:SER:O	1:A:86:LEU:CD1	0.52	2.57	31	11
1:A:16:ASP:OD1	1:A:16:ASP:N	0.52	2.43	31	4
1:A:9:ALA:HB3	1:A:18:VAL:HG13	0.52	1.79	43	3
1:A:21:TYR:CG	1:A:22:VAL:N	0.52	2.78	29	4
1:A:27:ASP:OD2	1:A:30:ARG:NH2	0.52	2.41	6	2
1:A:96:VAL:O	1:A:96:VAL:CG1	0.52	2.57	3	13
1:A:18:VAL:O	1:A:21:TYR:CD1	0.52	2.62	44	3
1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CD1	0.52	2.71	7	5
1:A:84:VAL:HG23	1:A:85:LYS:H	0.52	1.63	23	2
1:A:32:LEU:C	1:A:32:LEU:CD2	0.52	2.83	18	12
1:A:7:MET:CG	1:A:8:TRP:N	0.52	2.73	31	12
1:A:40:HIS:ND1	1:A:40:HIS:C	0.52	2.65	14	3
1:A:110:ASN:HD22	1:A:110:ASN:N	0.52	2.01	5	15
1:A:67:HIS:C	1:A:68:HIS:CG	0.52	2.88	18	9
1:A:113:ILE:O	1:A:115:ALA:N	0.52	2.42	38	19
1:A:73:LEU:O	1:A:77:TYR:CD1	0.52	2.63	38	9
1:A:117:LEU:O	1:A:118:GLN:OXT	0.52	2.28	13	1
1:A:93:ASP:OD1	1:A:96:VAL:HG23	0.52	2.05	23	1
1:A:8:TRP:CD1	1:A:12:ASN:ND2	0.52	2.78	44	1
1:A:81:VAL:C	1:A:84:VAL:HG22	0.52	2.30	12	21
1:A:67:HIS:C	1:A:68:HIS:ND1	0.52	2.68	27	1
1:A:80:HIS:O	1:A:81:VAL:C	0.51	2.52	41	44
1:A:73:LEU:O	1:A:77:TYR:CD2	0.51	2.64	34	11
1:A:55:LEU:HD22	1:A:90:LYS:HZ3	0.51	1.66	1	1
1:A:67:HIS:O	1:A:68:HIS:C	0.51	2.54	11	41
1:A:88:LEU:HD22	1:A:89:SER:N	0.51	2.19	1	6
1:A:40:HIS:O	1:A:44:ASP:CB	0.51	2.57	25	5
1:A:37:LYS:O	1:A:39:LEU:N	0.51	2.43	25	2
1:A:52:GLU:CD	1:A:90:LYS:NZ	0.51	2.68	12	1
1:A:17:GLU:N	1:A:17:GLU:OE1	0.51	2.43	39	5
1:A:18:VAL:O	1:A:21:TYR:CE2	0.51	2.63	29	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:115:ALA:O	1:A:118:GLN:NE2	0.51	2.43	39	2
1:A:93:ASP:OD1	1:A:94:LYS:N	0.51	2.43	44	3
1:A:94:LYS:CE	1:A:103:THR:OG1	0.51	2.59	25	2
1:A:37:LYS:CD	1:A:37:LYS:N	0.51	2.72	42	4
1:A:67:HIS:C	1:A:69:ILE:N	0.51	2.67	44	32
1:A:51:LEU:CD2	1:A:52:GLU:H	0.51	2.19	22	29
1:A:52:GLU:O	1:A:56:LEU:CB	0.51	2.58	14	1
1:A:4:LYS:O	1:A:6:PHE:N	0.51	2.44	22	5
1:A:110:ASN:N	1:A:110:ASN:HD22	0.51	2.03	14	11
1:A:33:GLU:CG	1:A:33:GLU:O	0.51	2.59	30	1
1:A:20:ASP:O	1:A:23:ALA:HB3	0.51	2.06	44	11
1:A:78:GLU:OE1	1:A:80:HIS:CD2	0.51	2.64	2	2
1:A:54:LEU:H	1:A:54:LEU:HD12	0.51	1.66	3	8
1:A:94:LYS:HE2	1:A:95:THR:HG23	0.51	1.81	13	2
1:A:76:VAL:HG13	1:A:113:ILE:HG21	0.51	1.83	4	5
1:A:36:ARG:NH1	1:A:36:ARG:CG	0.51	2.73	8	7
1:A:59:ALA:C	1:A:61:ILE:N	0.51	2.68	1	21
1:A:26:GLU:O	1:A:26:GLU:CD	0.51	2.54	7	2
1:A:31:THR:HG22	1:A:36:ARG:CZ	0.51	2.35	7	1
1:A:101:GLY:O	1:A:102:LEU:C	0.50	2.53	15	42
1:A:6:PHE:CZ	1:A:21:TYR:CD2	0.50	2.99	19	2
1:A:73:LEU:O	1:A:76:VAL:HG22	0.50	2.06	21	1
1:A:37:LYS:HZ2	1:A:60:ASP:CG	0.50	2.13	31	1
1:A:118:GLN:OXT	1:A:118:GLN:CD	0.50	2.55	35	1
1:A:102:LEU:O	1:A:102:LEU:HD23	0.50	2.05	25	15
1:A:30:ARG:HG2	1:A:30:ARG:NH1	0.50	2.21	42	5
1:A:68:HIS:O	1:A:68:HIS:CG	0.50	2.64	7	2
1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:OE1	0.50	2.45	12	2
1:A:44:ASP:OD1	1:A:74:SER:OG	0.50	2.28	28	3
1:A:113:ILE:O	1:A:116:LEU:N	0.50	2.45	38	4
1:A:6:PHE:C	1:A:6:PHE:CD1	0.50	2.88	10	1
1:A:106:GLU:O	1:A:106:GLU:CG	0.50	2.59	21	9
1:A:103:THR:HG22	1:A:104:ALA:H	0.50	1.66	34	2
1:A:20:ASP:OD1	1:A:24:LYS:NZ	0.50	2.45	15	1
1:A:33:GLU:OE1	1:A:36:ARG:NH1	0.50	2.45	17	1
1:A:48:LEU:N	1:A:48:LEU:HD13	0.50	2.22	10	22
1:A:104:ALA:C	1:A:114:LYS:HZ1	0.50	2.13	38	1
1:A:110:ASN:HD21	1:A:113:ILE:HB	0.50	1.67	1	7
1:A:92:ALA:O	1:A:93:ASP:OD1	0.50	2.29	23	1
1:A:95:THR:OG1	1:A:103:THR:HG21	0.50	2.07	39	1
1:A:40:HIS:CE1	1:A:44:ASP:OD2	0.50	2.65	34	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:GLY:O	1:A:59:ALA:CB	0.50	2.60	21	16
1:A:52:GLU:C	1:A:52:GLU:OE1	0.50	2.55	11	4
1:A:9:ALA:O	1:A:14:ASP:OD1	0.50	2.30	7	2
1:A:105:LEU:HA	1:A:114:LYS:HZ1	0.49	1.66	2	1
1:A:103:THR:HG23	1:A:104:ALA:H	0.49	1.66	7	1
1:A:83:CYS:O	1:A:85:LYS:N	0.49	2.44	14	8
1:A:26:GLU:CD	1:A:26:GLU:O	0.49	2.55	20	2
1:A:63:ALA:O	1:A:64:PRO:O	0.49	2.31	14	23
1:A:76:VAL:C	1:A:78:GLU:H	0.49	2.16	18	9
1:A:103:THR:HG23	1:A:104:ALA:N	0.49	2.23	7	1
1:A:54:LEU:HD12	1:A:55:LEU:N	0.49	2.22	19	5
1:A:40:HIS:CE1	1:A:74:SER:OG	0.49	2.66	11	3
1:A:35:GLY:O	1:A:67:HIS:CD2	0.49	2.66	30	4
1:A:93:ASP:OD2	1:A:96:VAL:N	0.49	2.45	34	2
1:A:5:GLU:N	1:A:5:GLU:OE1	0.49	2.45	40	1
1:A:113:ILE:C	1:A:115:ALA:H	0.49	2.14	38	31
1:A:19:LYS:O	1:A:23:ALA:N	0.49	2.45	9	7
1:A:93:ASP:OD1	1:A:94:LYS:NZ	0.49	2.42	40	4
1:A:88:LEU:HD13	1:A:89:SER:N	0.49	2.21	9	5
1:A:28:VAL:HG21	1:A:58:GLY:N	0.49	2.22	8	6
1:A:94:LYS:HD2	1:A:103:THR:OG1	0.49	2.07	19	1
1:A:53:PHE:O	1:A:56:LEU:HG	0.49	2.07	10	1
1:A:85:LYS:CG	1:A:86:LEU:N	0.49	2.75	28	1
1:A:37:LYS:NZ	1:A:67:HIS:CE1	0.49	2.81	32	1
1:A:22:VAL:C	1:A:24:LYS:N	0.49	2.69	41	7
1:A:54:LEU:C	1:A:54:LEU:CD2	0.49	2.85	39	7
1:A:35:GLY:O	1:A:67:HIS:NE2	0.49	2.46	30	4
1:A:31:THR:O	1:A:32:LEU:C	0.49	2.55	43	3
1:A:4:LYS:C	1:A:6:PHE:N	0.49	2.70	22	6
1:A:40:HIS:C	1:A:40:HIS:HD1	0.49	2.15	23	2
1:A:8:TRP:O	1:A:8:TRP:CG	0.49	2.65	29	1
1:A:87:LEU:C	1:A:89:SER:H	0.48	2.16	31	16
1:A:52:GLU:OE2	1:A:53:PHE:N	0.48	2.46	13	1
1:A:9:ALA:O	1:A:10:LEU:C	0.48	2.56	36	12
1:A:26:GLU:O	1:A:27:ASP:OD1	0.48	2.31	5	3
1:A:94:LYS:CE	1:A:94:LYS:O	0.48	2.61	19	9
1:A:47:GLN:OE1	1:A:47:GLN:CA	0.48	2.61	33	2
1:A:105:LEU:N	1:A:105:LEU:CD2	0.48	2.77	13	2
1:A:4:LYS:HA	1:A:7:MET:HE3	0.48	1.85	43	3
1:A:67:HIS:O	1:A:68:HIS:CD2	0.48	2.66	2	1
1:A:91:GLY:O	1:A:92:ALA:C	0.48	2.55	25	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:LEU:HD23	1:A:83:CYS:SG	0.48	2.48	20	1
1:A:118:GLN:OE1	1:A:118:GLN:CA	0.48	2.59	1	1
1:A:36:ARG:CG	1:A:36:ARG:HH11	0.48	2.21	24	4
1:A:33:GLU:CD	1:A:36:ARG:NE	0.48	2.71	10	2
1:A:28:VAL:O	1:A:28:VAL:CG2	0.48	2.58	16	1
1:A:48:LEU:O	1:A:52:GLU:OE2	0.48	2.32	23	1
1:A:93:ASP:CG	1:A:96:VAL:CG2	0.48	2.86	26	1
1:A:61:ILE:CG2	1:A:62:ASN:HD22	0.48	2.21	4	1
1:A:106:GLU:CD	1:A:106:GLU:C	0.48	2.82	13	1
1:A:25:GLY:O	1:A:26:GLU:OE2	0.48	2.31	7	5
1:A:69:ILE:HG23	1:A:70:THR:N	0.48	2.23	11	6
1:A:13:GLY:CA	1:A:47:GLN:HE21	0.48	2.21	16	4
1:A:88:LEU:HD21	1:A:116:LEU:CD2	0.48	2.38	27	1
1:A:63:ALA:O	1:A:65:ASP:OD2	0.48	2.32	7	2
1:A:64:PRO:C	1:A:97:LYS:NZ	0.48	2.72	19	1
1:A:47:GLN:N	1:A:47:GLN:NE2	0.48	2.61	43	3
1:A:110:ASN:OD1	1:A:113:ILE:HD12	0.48	2.08	13	4
1:A:81:VAL:HG11	1:A:113:ILE:CD1	0.48	2.38	14	2
1:A:33:GLU:O	1:A:33:GLU:CD	0.48	2.57	25	1
1:A:66:LYS:O	1:A:68:HIS:ND1	0.48	2.46	39	1
1:A:75:ALA:O	1:A:76:VAL:C	0.48	2.56	7	41
1:A:117:LEU:C	1:A:117:LEU:CD1	0.48	2.86	1	3
1:A:50:ILE:O	1:A:51:LEU:C	0.48	2.55	11	14
1:A:71:PRO:O	1:A:74:SER:CB	0.48	2.62	32	3
1:A:12:ASN:OD1	1:A:14:ASP:CG	0.48	2.57	44	1
1:A:80:HIS:C	1:A:81:VAL:CG2	0.47	2.87	1	44
1:A:118:GLN:O	1:A:118:GLN:CD	0.47	2.57	13	1
1:A:100:ASP:OD2	1:A:101:GLY:N	0.47	2.47	3	6
1:A:100:ASP:CG	1:A:101:GLY:H	0.47	2.16	17	10
1:A:57:LYS:O	1:A:58:GLY:O	0.47	2.32	41	7
1:A:102:LEU:HD23	1:A:103:THR:N	0.47	2.24	43	3
1:A:87:LEU:O	1:A:88:LEU:C	0.47	2.56	14	17
1:A:44:ASP:CG	1:A:78:GLU:CD	0.47	2.82	42	10
1:A:34:GLY:H	1:A:36:ARG:NE	0.47	2.07	7	1
1:A:44:ASP:OD2	1:A:78:GLU:OE1	0.47	2.33	21	6
1:A:16:ASP:N	1:A:16:ASP:OD1	0.47	2.46	20	3
1:A:95:THR:O	1:A:95:THR:OG1	0.47	2.30	43	1
1:A:8:TRP:HE1	1:A:12:ASN:ND2	0.47	2.04	44	1
1:A:40:HIS:CD2	1:A:74:SER:OG	0.47	2.67	44	2
1:A:108:THR:CG2	1:A:110:ASN:HD21	0.47	2.20	37	5
1:A:59:ALA:HB1	1:A:61:ILE:HG22	0.47	1.86	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:109:ASP:N	1:A:114:LYS:HZ1	0.47	2.08	28	1
1:A:6:PHE:CD1	1:A:6:PHE:C	0.47	2.91	29	2
1:A:17:GLU:CD	1:A:17:GLU:N	0.47	2.72	30	1
1:A:60:ASP:C	1:A:62:ASN:N	0.47	2.72	1	6
1:A:70:THR:OG1	1:A:71:PRO:CD	0.47	2.63	2	3
1:A:95:THR:CG2	1:A:100:ASP:O	0.47	2.63	20	5
1:A:44:ASP:CG	1:A:78:GLU:OE1	0.47	2.58	7	1
1:A:94:LYS:HE3	1:A:95:THR:HG23	0.47	1.85	13	1
1:A:40:HIS:ND1	1:A:40:HIS:O	0.47	2.45	14	2
1:A:102:LEU:HD23	1:A:102:LEU:O	0.47	2.08	34	2
1:A:93:ASP:OD2	1:A:94:LYS:NZ	0.47	2.46	21	1
1:A:18:VAL:O	1:A:21:TYR:CD2	0.47	2.67	29	1
1:A:27:ASP:CG	1:A:30:ARG:NH2	0.47	2.72	32	1
1:A:10:LEU:H	1:A:10:LEU:HD12	0.47	1.70	8	4
1:A:78:GLU:CD	1:A:78:GLU:C	0.47	2.82	15	3
1:A:32:LEU:N	1:A:32:LEU:CD1	0.47	2.78	18	4
1:A:106:GLU:O	1:A:106:GLU:HG3	0.47	2.08	28	5
1:A:36:ARG:CZ	1:A:36:ARG:O	0.47	2.63	7	1
1:A:44:ASP:OD1	1:A:78:GLU:CD	0.47	2.58	7	2
1:A:115:ALA:O	1:A:118:GLN:CG	0.47	2.63	31	3
1:A:105:LEU:CD2	1:A:117:LEU:HD22	0.47	2.40	31	4
1:A:117:LEU:C	1:A:117:LEU:HD13	0.47	2.35	37	1
1:A:94:LYS:CE	1:A:95:THR:OG1	0.46	2.63	3	2
1:A:26:GLU:O	1:A:26:GLU:OE1	0.46	2.33	14	5
1:A:31:THR:C	1:A:36:ARG:HH12	0.46	2.16	7	1
1:A:88:LEU:O	1:A:91:GLY:N	0.46	2.47	8	3
1:A:115:ALA:O	1:A:118:GLN:HB3	0.46	2.10	12	5
1:A:83:CYS:O	1:A:86:LEU:HD13	0.46	2.11	30	4
1:A:55:LEU:HD13	1:A:90:LYS:CE	0.46	2.40	34	1
1:A:32:LEU:C	1:A:32:LEU:HD23	0.46	2.35	35	1
1:A:8:TRP:CD1	1:A:8:TRP:O	0.46	2.69	44	1
1:A:62:ASN:O	1:A:64:PRO:N	0.46	2.48	1	2
1:A:83:CYS:O	1:A:86:LEU:CD1	0.46	2.63	30	3
1:A:37:LYS:C	1:A:39:LEU:N	0.46	2.74	9	2
1:A:6:PHE:CE1	1:A:21:TYR:CD2	0.46	3.03	19	1
1:A:106:GLU:OE2	1:A:106:GLU:O	0.46	2.33	19	1
1:A:50:ILE:O	1:A:54:LEU:HD12	0.46	2.10	35	4
1:A:112:ALA:O	1:A:115:ALA:CB	0.46	2.64	28	14
1:A:11:LYS:C	1:A:13:GLY:H	0.46	2.19	15	6
1:A:64:PRO:CG	1:A:69:ILE:O	0.46	2.64	8	3
1:A:54:LEU:CD1	1:A:54:LEU:H	0.46	2.23	11	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:LEU:CD1	1:A:51:LEU:N	0.46	2.66	26	4
1:A:85:LYS:C	1:A:87:LEU:H	0.46	2.19	7	5
1:A:25:GLY:C	1:A:26:GLU:CD	0.46	2.83	13	5
1:A:44:ASP:OD1	1:A:78:GLU:OE1	0.46	2.34	35	2
1:A:110:ASN:C	1:A:110:ASN:HD22	0.46	2.19	36	3
1:A:40:HIS:O	1:A:44:ASP:N	0.46	2.43	25	2
1:A:88:LEU:O	1:A:89:SER:C	0.46	2.57	19	3
1:A:69:ILE:HD11	1:A:73:LEU:HD22	0.46	1.88	16	5
1:A:33:GLU:CD	1:A:33:GLU:C	0.46	2.84	4	7
1:A:108:THR:HG22	1:A:113:ILE:HG21	0.46	1.88	8	6
1:A:56:LEU:HD12	1:A:56:LEU:C	0.46	2.36	17	4
1:A:10:LEU:HG	1:A:18:VAL:HG11	0.46	1.87	29	1
1:A:4:LYS:O	1:A:5:GLU:C	0.46	2.59	15	20
1:A:15:LEU:C	1:A:15:LEU:CD1	0.46	2.88	3	13
1:A:102:LEU:CD2	1:A:103:THR:O	0.46	2.63	36	12
1:A:55:LEU:O	1:A:58:GLY:O	0.46	2.33	9	10
1:A:31:THR:O	1:A:32:LEU:O	0.46	2.33	30	3
1:A:29:ASN:ND2	1:A:29:ASN:N	0.46	2.63	29	4
1:A:20:ASP:OD1	1:A:20:ASP:C	0.46	2.59	24	1
1:A:118:GLN:NE2	1:A:118:GLN:O	0.46	2.49	36	1
1:A:32:LEU:O	1:A:33:GLU:C	0.46	2.59	27	2
1:A:83:CYS:O	1:A:86:LEU:N	0.46	2.49	20	2
1:A:33:GLU:OE2	1:A:36:ARG:CZ	0.46	2.64	15	2
1:A:28:VAL:C	1:A:29:ASN:CG	0.46	2.84	18	3
1:A:6:PHE:CE1	1:A:21:TYR:CE2	0.46	3.04	19	1
1:A:92:ALA:C	1:A:93:ASP:OD1	0.46	2.59	26	3
1:A:109:ASP:CA	1:A:114:LYS:HZ1	0.46	2.23	28	1
1:A:40:HIS:HD1	1:A:40:HIS:C	0.46	2.18	37	1
1:A:100:ASP:CG	1:A:101:GLY:N	0.45	2.74	35	8
1:A:30:ARG:NH1	1:A:30:ARG:CG	0.45	2.78	20	3
1:A:12:ASN:O	1:A:14:ASP:OD1	0.45	2.34	26	1
1:A:37:LYS:CD	1:A:37:LYS:C	0.45	2.88	29	2
1:A:106:GLU:O	1:A:106:GLU:OE2	0.45	2.34	43	1
1:A:12:ASN:CG	1:A:14:ASP:OD1	0.45	2.59	44	1
1:A:14:ASP:O	1:A:14:ASP:CG	0.45	2.59	8	1
1:A:52:GLU:CD	1:A:52:GLU:C	0.45	2.84	13	2
1:A:41:TYR:O	1:A:45:CYS:N	0.45	2.48	41	4
1:A:116:LEU:C	1:A:118:GLN:H	0.45	2.19	44	5
1:A:49:GLU:O	1:A:52:GLU:OE1	0.45	2.33	23	4
1:A:118:GLN:CD	1:A:118:GLN:OXT	0.45	2.59	24	1
1:A:108:THR:HG23	1:A:109:ASP:N	0.45	2.27	17	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:PHE:CE2	1:A:21:TYR:CG	0.45	3.05	11	1
1:A:83:CYS:SG	1:A:87:LEU:HD12	0.45	2.51	11	1
1:A:63:ALA:HB3	1:A:64:PRO:CD	0.45	2.41	1	8
1:A:8:TRP:O	1:A:8:TRP:CD1	0.45	2.70	33	4
1:A:55:LEU:HD22	1:A:90:LYS:HE3	0.45	1.87	15	1
1:A:94:LYS:CD	1:A:103:THR:OG1	0.45	2.65	25	2
1:A:37:LYS:HD2	1:A:37:LYS:H	0.45	1.72	43	2
1:A:30:ARG:HH11	1:A:30:ARG:HG3	0.45	1.71	33	2
1:A:44:ASP:OD1	1:A:78:GLU:OE2	0.45	2.34	30	9
1:A:49:GLU:O	1:A:52:GLU:CD	0.45	2.59	35	2
1:A:83:CYS:C	1:A:85:LYS:N	0.45	2.75	11	4
1:A:68:HIS:ND1	1:A:68:HIS:C	0.45	2.75	30	1
1:A:7:MET:HA	1:A:10:LEU:HD12	0.45	1.87	39	1
1:A:15:LEU:HD11	1:A:19:LYS:HZ1	0.45	1.70	42	1
1:A:98:GLY:O	1:A:99:PRO:C	0.45	2.58	13	12
1:A:75:ALA:O	1:A:78:GLU:CB	0.45	2.64	41	5
1:A:6:PHE:CD1	1:A:21:TYR:CD2	0.45	3.04	36	1
1:A:34:GLY:CA	1:A:36:ARG:NH2	0.45	2.79	7	1
1:A:12:ASN:O	1:A:12:ASN:ND2	0.45	2.50	6	1
1:A:36:ARG:CB	1:A:41:TYR:OH	0.45	2.65	39	1
1:A:10:LEU:HD23	1:A:42:ALA:HB2	0.45	1.88	12	1
1:A:40:HIS:CE1	1:A:74:SER:HG	0.45	2.29	12	1
1:A:27:ASP:CG	1:A:30:ARG:HH12	0.45	2.20	16	1
1:A:81:VAL:O	1:A:85:LYS:HG2	0.45	2.12	39	1
1:A:28:VAL:CG2	1:A:58:GLY:H	0.44	2.24	11	3
1:A:49:GLU:O	1:A:52:GLU:OE2	0.44	2.35	22	5
1:A:5:GLU:CD	1:A:5:GLU:O	0.44	2.60	14	1
1:A:6:PHE:CE2	1:A:10:LEU:HD11	0.44	2.47	36	2
1:A:44:ASP:O	1:A:44:ASP:OD1	0.44	2.35	38	4
1:A:36:ARG:HG3	1:A:36:ARG:NH1	0.44	2.27	26	1
1:A:118:GLN:C	1:A:118:GLN:HE21	0.44	2.21	2	1
1:A:67:HIS:O	1:A:68:HIS:ND1	0.44	2.51	14	3
1:A:46:GLY:C	1:A:47:GLN:NE2	0.44	2.75	13	2
1:A:31:THR:CG2	1:A:36:ARG:H	0.44	2.25	22	2
1:A:8:TRP:CD2	1:A:11:LYS:NZ	0.44	2.86	34	1
1:A:64:PRO:O	1:A:65:ASP:OD1	0.44	2.36	27	1
1:A:117:LEU:CD1	1:A:117:LEU:C	0.44	2.90	28	1
1:A:103:THR:CG2	1:A:104:ALA:H	0.44	2.24	34	1
1:A:66:LYS:O	1:A:68:HIS:CE1	0.44	2.70	37	1
1:A:114:LYS:O	1:A:117:LEU:CB	0.44	2.66	37	1
1:A:53:PHE:O	1:A:56:LEU:CB	0.44	2.65	41	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:63:ALA:N	1:A:64:PRO:CD	0.44	2.80	42	2
1:A:32:LEU:HD21	1:A:41:TYR:CE1	0.44	2.47	9	1
1:A:44:ASP:OD1	1:A:44:ASP:C	0.44	2.60	9	6
1:A:52:GLU:O	1:A:56:LEU:HD13	0.44	2.12	11	1
1:A:72:LEU:HD12	1:A:87:LEU:CD1	0.44	2.42	1	2
1:A:33:GLU:CD	1:A:33:GLU:O	0.44	2.61	4	1
1:A:86:LEU:CD2	1:A:90:LYS:NZ	0.44	2.81	5	1
1:A:14:ASP:C	1:A:16:ASP:H	0.44	2.20	7	1
1:A:52:GLU:C	1:A:52:GLU:CD	0.44	2.85	20	1
1:A:70:THR:OG1	1:A:71:PRO:HD2	0.44	2.12	1	1
1:A:76:VAL:C	1:A:78:GLU:N	0.44	2.76	18	4
1:A:118:GLN:O	1:A:118:GLN:OE1	0.44	2.35	13	1
1:A:30:ARG:HG2	1:A:30:ARG:HH11	0.44	1.73	7	1
1:A:31:THR:HG22	1:A:36:ARG:O	0.44	2.13	23	2
1:A:12:ASN:O	1:A:12:ASN:CG	0.44	2.60	25	1
1:A:51:LEU:O	1:A:55:LEU:HB2	0.43	2.12	4	1
1:A:11:LYS:O	1:A:45:CYS:O	0.43	2.36	44	4
1:A:5:GLU:CD	1:A:5:GLU:C	0.43	2.86	14	1
1:A:102:LEU:C	1:A:103:THR:CG2	0.43	2.91	23	7
1:A:31:THR:O	1:A:31:THR:OG1	0.43	2.33	23	1
1:A:25:GLY:O	1:A:27:ASP:OD1	0.43	2.36	25	1
1:A:52:GLU:O	1:A:56:LEU:HG	0.43	2.13	42	1
1:A:72:LEU:H	1:A:72:LEU:HD22	0.43	1.74	2	3
1:A:85:LYS:C	1:A:87:LEU:N	0.43	2.76	8	8
1:A:22:VAL:CG2	1:A:28:VAL:CG1	0.43	2.96	32	1
1:A:33:GLU:N	1:A:36:ARG:CZ	0.43	2.82	7	1
1:A:114:LYS:O	1:A:117:LEU:N	0.43	2.49	32	2
1:A:40:HIS:O	1:A:44:ASP:OD1	0.43	2.36	11	3
1:A:39:LEU:O	1:A:43:ALA:CB	0.43	2.66	39	5
1:A:5:GLU:O	1:A:5:GLU:OE1	0.43	2.36	24	1
1:A:92:ALA:O	1:A:93:ASP:CG	0.43	2.61	26	1
1:A:44:ASP:OD2	1:A:78:GLU:CD	0.43	2.61	39	2
1:A:4:LYS:CB	1:A:4:LYS:NZ	0.43	2.82	32	1
1:A:19:LYS:HD3	1:A:53:PHE:CZ	0.43	2.48	33	1
1:A:40:HIS:C	1:A:40:HIS:ND1	0.43	2.75	37	1
1:A:24:LYS:N	1:A:24:LYS:CD	0.43	2.81	40	2
1:A:44:ASP:O	1:A:78:GLU:OE1	0.43	2.36	1	1
1:A:9:ALA:CA	1:A:14:ASP:CG	0.43	2.92	7	2
1:A:25:GLY:O	1:A:26:GLU:CD	0.43	2.61	7	2
1:A:19:LYS:CE	1:A:53:PHE:CE1	0.43	3.01	10	3
1:A:55:LEU:C	1:A:55:LEU:CD2	0.43	2.91	21	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:ASP:OD2	1:A:30:ARG:NE	0.43	2.52	28	1
1:A:33:GLU:OE1	1:A:34:GLY:N	0.43	2.50	39	1
1:A:16:ASP:O	1:A:20:ASP:OD1	0.43	2.36	44	1
1:A:32:LEU:HD13	1:A:36:ARG:NH1	0.43	2.28	7	1
1:A:51:LEU:O	1:A:52:GLU:C	0.43	2.60	14	2
1:A:78:GLU:O	1:A:78:GLU:OE1	0.43	2.36	15	1
1:A:30:ARG:CD	1:A:30:ARG:N	0.43	2.80	2	1
1:A:63:ALA:O	1:A:65:ASP:OD1	0.43	2.36	3	1
1:A:92:ALA:C	1:A:93:ASP:CG	0.43	2.87	34	1
1:A:78:GLU:CD	1:A:80:HIS:CG	0.43	2.97	41	1
1:A:109:ASP:O	1:A:109:ASP:OD1	0.43	2.37	10	1
1:A:12:ASN:O	1:A:12:ASN:OD1	0.43	2.36	21	1
1:A:118:GLN:CD	1:A:118:GLN:C	0.43	2.87	31	1
1:A:8:TRP:HE1	1:A:12:ASN:HD22	0.43	1.56	44	1
1:A:60:ASP:C	1:A:62:ASN:H	0.43	2.21	1	1
1:A:71:PRO:O	1:A:72:LEU:C	0.43	2.62	30	14
1:A:56:LEU:O	1:A:57:LYS:O	0.43	2.36	34	4
1:A:73:LEU:H	1:A:73:LEU:CD1	0.43	2.23	14	2
1:A:110:ASN:OD1	1:A:113:ILE:CD1	0.43	2.67	30	2
1:A:8:TRP:NE1	1:A:12:ASN:OD1	0.43	2.52	15	1
1:A:73:LEU:O	1:A:76:VAL:HB	0.43	2.13	25	1
1:A:19:LYS:CD	1:A:53:PHE:CE1	0.43	3.01	30	1
1:A:54:LEU:HD12	1:A:55:LEU:H	0.43	1.74	19	4
1:A:95:THR:HG22	1:A:103:THR:CB	0.43	2.43	13	1
1:A:33:GLU:CD	1:A:36:ARG:HE	0.43	2.22	19	1
1:A:110:ASN:O	1:A:114:LYS:HG3	0.43	2.14	24	1
1:A:30:ARG:O	1:A:31:THR:C	0.43	2.61	30	1
1:A:44:ASP:O	1:A:80:HIS:NE2	0.43	2.52	44	1
1:A:118:GLN:OE1	1:A:118:GLN:C	0.42	2.62	1	1
1:A:9:ALA:CB	1:A:14:ASP:OD2	0.42	2.61	8	2
1:A:52:GLU:CB	1:A:86:LEU:HD21	0.42	2.43	20	1
1:A:76:VAL:HG23	1:A:77:TYR:N	0.42	2.28	21	1
1:A:113:ILE:O	1:A:114:LYS:C	0.42	2.59	18	4
1:A:52:GLU:HB3	1:A:86:LEU:HD21	0.42	1.90	20	1
1:A:73:LEU:O	1:A:74:SER:C	0.42	2.59	21	1
1:A:66:LYS:O	1:A:68:HIS:CD2	0.42	2.73	8	1
1:A:95:THR:C	1:A:97:LYS:H	0.42	2.23	14	2
1:A:11:LYS:CD	1:A:12:ASN:N	0.42	2.82	20	1
1:A:102:LEU:HG	1:A:106:GLU:CG	0.42	2.44	13	1
1:A:69:ILE:HD12	1:A:73:LEU:HD13	0.42	1.87	23	2
1:A:115:ALA:C	1:A:117:LEU:H	0.42	2.23	37	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:ASP:O	1:A:62:ASN:N	0.42	2.52	1	3
1:A:61:ILE:HG23	1:A:62:ASN:HD22	0.42	1.75	4	1
1:A:54:LEU:HD13	1:A:55:LEU:N	0.42	2.30	13	6
1:A:44:ASP:OD1	1:A:44:ASP:N	0.42	2.51	11	1
1:A:72:LEU:H	1:A:72:LEU:HD13	0.42	1.66	13	3
1:A:5:GLU:O	1:A:17:GLU:OE1	0.42	2.38	29	1
1:A:19:LYS:CD	1:A:53:PHE:CZ	0.42	3.03	30	1
1:A:95:THR:OG1	1:A:103:THR:CG2	0.42	2.66	39	1
1:A:37:LYS:HD2	1:A:37:LYS:O	0.42	2.15	43	1
1:A:44:ASP:CG	1:A:78:GLU:OE2	0.42	2.62	5	1
1:A:12:ASN:CB	1:A:14:ASP:OD1	0.42	2.68	14	1
1:A:37:LYS:H	1:A:37:LYS:HD2	0.42	1.75	32	3
1:A:72:LEU:CD1	1:A:87:LEU:HD13	0.42	2.40	15	1
1:A:42:ALA:O	1:A:43:ALA:C	0.42	2.62	38	3
1:A:99:PRO:HG2	1:A:102:LEU:HD12	0.42	1.89	44	4
1:A:5:GLU:OE1	1:A:17:GLU:OE1	0.42	2.37	5	1
1:A:5:GLU:OE1	1:A:17:GLU:OE2	0.42	2.37	5	1
1:A:32:LEU:CD1	1:A:41:TYR:CD1	0.42	3.03	38	2
1:A:116:LEU:C	1:A:118:GLN:N	0.42	2.78	14	1
1:A:108:THR:C	1:A:114:LYS:HZ1	0.42	2.21	28	1
1:A:21:TYR:CE1	1:A:30:ARG:NH2	0.42	2.88	29	1
1:A:68:HIS:O	1:A:97:LYS:O	0.42	2.38	35	1
1:A:12:ASN:C	1:A:14:ASP:N	0.42	2.77	17	1
1:A:95:THR:CG2	1:A:103:THR:OG1	0.42	2.67	34	1
1:A:37:LYS:O	1:A:37:LYS:CD	0.42	2.68	43	1
1:A:51:LEU:O	1:A:54:LEU:CD1	0.41	2.68	11	1
1:A:76:VAL:HG12	1:A:77:TYR:N	0.41	2.30	25	1
1:A:69:ILE:HD13	1:A:70:THR:N	0.41	2.27	2	1
1:A:116:LEU:HD23	1:A:116:LEU:HA	0.41	1.75	42	6
1:A:32:LEU:HD21	1:A:41:TYR:OH	0.41	2.14	7	1
1:A:6:PHE:CZ	1:A:21:TYR:CB	0.41	3.03	11	1
1:A:84:VAL:HB	1:A:116:LEU:HD11	0.41	1.90	12	1
1:A:108:THR:HG23	1:A:114:LYS:HZ1	0.41	1.74	28	1
1:A:30:ARG:HH11	1:A:30:ARG:HG2	0.41	1.75	29	1
1:A:44:ASP:C	1:A:44:ASP:OD1	0.41	2.62	2	2
1:A:110:ASN:ND2	1:A:113:ILE:HB	0.41	2.30	42	1
1:A:40:HIS:CD2	1:A:40:HIS:C	0.41	2.97	7	1
1:A:55:LEU:HD22	1:A:90:LYS:HD2	0.41	1.90	12	1
1:A:7:MET:SD	1:A:32:LEU:CD2	0.41	3.09	17	1
1:A:36:ARG:NH1	1:A:41:TYR:OH	0.41	2.53	30	1
1:A:115:ALA:C	1:A:117:LEU:N	0.41	2.75	37	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:VAL:O	1:A:57:LYS:NZ	0.41	2.54	16	1
1:A:30:ARG:CG	1:A:30:ARG:HH11	0.41	2.28	20	2
1:A:10:LEU:HD22	1:A:38:PRO:O	0.41	2.15	39	1
1:A:16:ASP:O	1:A:20:ASP:CG	0.41	2.63	44	1
1:A:37:LYS:CB	1:A:38:PRO:CD	0.41	2.98	7	1
1:A:7:MET:O	1:A:8:TRP:C	0.41	2.63	15	3
1:A:51:LEU:HD22	1:A:52:GLU:OE1	0.41	2.15	23	1
1:A:37:LYS:HD3	1:A:38:PRO:N	0.41	2.30	41	1
1:A:19:LYS:CG	1:A:53:PHE:CZ	0.41	3.04	43	1
1:A:52:GLU:HB3	1:A:86:LEU:HD11	0.41	1.92	20	1
1:A:25:GLY:C	1:A:26:GLU:CG	0.41	2.94	42	2
1:A:61:ILE:CG2	1:A:62:ASN:N	0.41	2.84	9	1
1:A:108:THR:O	1:A:114:LYS:CE	0.41	2.68	10	1
1:A:51:LEU:HD22	1:A:52:GLU:N	0.41	2.25	15	1
1:A:49:GLU:C	1:A:52:GLU:OE1	0.41	2.64	23	1
1:A:22:VAL:O	1:A:23:ALA:C	0.41	2.63	27	1
1:A:37:LYS:NZ	1:A:37:LYS:HB2	0.41	2.31	31	1
1:A:5:GLU:OE1	1:A:5:GLU:CA	0.41	2.69	40	1
1:A:13:GLY:N	1:A:47:GLN:NE2	0.41	2.67	8	1
1:A:108:THR:O	1:A:114:LYS:NZ	0.41	2.53	8	1
1:A:27:ASP:OD1	1:A:30:ARG:NH2	0.41	2.54	32	1
1:A:47:GLN:C	1:A:49:GLU:H	0.40	2.24	1	1
1:A:9:ALA:CA	1:A:14:ASP:OD1	0.40	2.69	7	1
1:A:41:TYR:O	1:A:45:CYS:SG	0.40	2.75	39	1
1:A:86:LEU:CD2	1:A:90:LYS:HZ1	0.40	2.28	5	1
1:A:10:LEU:HD12	1:A:10:LEU:H	0.40	1.76	6	1
1:A:76:VAL:HG23	1:A:77:TYR:CD1	0.40	2.51	21	1
1:A:114:LYS:NZ	1:A:117:LEU:CD2	0.40	2.84	29	1
1:A:15:LEU:CD1	1:A:19:LYS:NZ	0.40	2.82	42	1
1:A:60:ASP:O	1:A:60:ASP:CG	0.40	2.65	43	1
1:A:17:GLU:N	1:A:17:GLU:CD	0.40	2.78	9	1
1:A:30:ARG:NH1	1:A:30:ARG:HG2	0.40	2.31	19	1
1:A:117:LEU:CD1	1:A:117:LEU:O	0.40	2.69	20	1
1:A:8:TRP:CZ2	1:A:14:ASP:OD2	0.40	2.75	26	1
1:A:60:ASP:O	1:A:61:ILE:C	0.40	2.63	31	1
1:A:73:LEU:CD2	1:A:103:THR:HA	0.40	2.47	13	1
1:A:101:GLY:O	1:A:105:LEU:HD12	0.40	2.16	31	1
1:A:54:LEU:HD12	1:A:54:LEU:H	0.40	1.76	35	1
1:A:32:LEU:HD22	1:A:41:TYR:CE1	0.40	2.51	5	1
1:A:36:ARG:HG2	1:A:36:ARG:HH11	0.40	1.76	10	1
1:A:52:GLU:CD	1:A:90:LYS:HZ2	0.40	2.24	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:VAL:O	1:A:96:VAL:HG12	0.40	2.16	21	1
1:A:4:LYS:C	1:A:6:PHE:H	0.40	2.25	22	1
1:A:7:MET:SD	1:A:7:MET:N	0.40	2.94	22	1
1:A:44:ASP:OD1	1:A:74:SER:O	0.40	2.40	22	1
1:A:94:LYS:NZ	1:A:103:THR:OG1	0.40	2.55	25	1
1:A:7:MET:HG2	1:A:8:TRP:N	0.40	2.31	29	1
1:A:94:LYS:O	1:A:94:LYS:CE	0.40	2.70	37	1
1:A:44:ASP:OD1	1:A:44:ASP:O	0.40	2.39	39	1
1:A:101:GLY:O	1:A:103:THR:HG22	0.40	2.17	39	1
1:A:66:LYS:CD	1:A:66:LYS:O	0.40	2.70	44	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	114/118 (97%)	61±2 (53±2%)	34±3 (30±2%)	20±2 (17±2%)	0	3
All	All	5016/5192 (97%)	2670 (53%)	1488 (30%)	858 (17%)	0	3

All 41 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	57	LYS	44
1	A	59	ALA	44
1	A	64	PRO	44
1	A	81	VAL	44
1	A	92	ALA	44
1	A	103	THR	44
1	A	34	GLY	43
1	A	99	PRO	42
1	A	29	ASN	41
1	A	53	PHE	40
1	A	24	LYS	39
1	A	94	LYS	37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	26	GLU	36
1	A	68	HIS	30
1	A	100	ASP	30
1	A	97	LYS	29
1	A	85	LYS	24
1	A	32	LEU	24
1	A	63	ALA	21
1	A	58	GLY	19
1	A	102	LEU	18
1	A	93	ASP	15
1	A	76	VAL	15
1	A	8	TRP	13
1	A	54	LEU	12
1	A	31	THR	12
1	A	101	GLY	7
1	A	25	GLY	7
1	A	38	PRO	6
1	A	77	TYR	5
1	A	105	LEU	5
1	A	14	ASP	4
1	A	5	GLU	4
1	A	4	LYS	3
1	A	28	VAL	3
1	A	10	LEU	2
1	A	15	LEU	2
1	A	84	VAL	2
1	A	88	LEU	2
1	A	47	GLN	1
1	A	6	PHE	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	93/96 (97%)	62±3 (66±3%)	31±3 (34±3%)	1	12
All	All	4092/4224 (97%)	2720 (66%)	1372 (34%)	1	12

All 65 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	18	VAL	44
1	A	48	LEU	44
1	A	50	ILE	44
1	A	51	LEU	44
1	A	54	LEU	44
1	A	69	ILE	44
1	A	70	THR	44
1	A	72	LEU	44
1	A	87	LEU	44
1	A	62	ASN	43
1	A	110	ASN	42
1	A	117	LEU	42
1	A	77	TYR	41
1	A	88	LEU	41
1	A	103	THR	41
1	A	29	ASN	39
1	A	86	LEU	39
1	A	37	LYS	37
1	A	39	LEU	36
1	A	94	LYS	36
1	A	32	LEU	34
1	A	81	VAL	32
1	A	82	SER	32
1	A	113	ILE	32
1	A	83	CYS	31
1	A	96	VAL	29
1	A	14	ASP	29
1	A	56	LEU	19
1	A	61	ILE	17
1	A	97	LYS	17
1	A	106	GLU	17
1	A	102	LEU	16
1	A	85	LYS	16
1	A	95	THR	15
1	A	118	GLN	14
1	A	114	LYS	13
1	A	66	LYS	12
1	A	67	HIS	12
1	A	30	ARG	12
1	A	90	LYS	12
1	A	57	LYS	11
1	A	22	VAL	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	52	GLU	9
1	A	45	CYS	9
1	A	31	THR	8
1	A	47	GLN	8
1	A	49	GLU	7
1	A	12	ASN	7
1	A	24	LYS	6
1	A	36	ARG	6
1	A	11	LYS	6
1	A	17	GLU	6
1	A	78	GLU	5
1	A	26	GLU	5
1	A	10	LEU	4
1	A	5	GLU	3
1	A	74	SER	3
1	A	4	LYS	3
1	A	19	LYS	3
1	A	89	SER	3
1	A	55	LEU	2
1	A	93	ASP	1
1	A	40	HIS	1
1	A	21	TYR	1
1	A	60	ASP	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

6.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains ⓘ

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

6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry ⓘ

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