



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 7, 2022 – 08:07 PM EST

PDB ID : 1AWE  
Title : HUMAN SOS1 PLECKSTRIN HOMOLOGY (PH) DOMAIN, NMR, 20  
STRUCTURES  
Authors : Zheng, J.; Cowburn, D.  
Deposited on : 1997-10-01

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

We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto:validation@mail.wwpdb.org)

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

---

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

MolProbity : 4.02b-467  
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)  
RCI : v\_1n\_11\_5\_13\_A (Berjanski et al., 2005)  
PANAV : Wang et al. (2010)  
ShiftChecker : 2.26  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.26

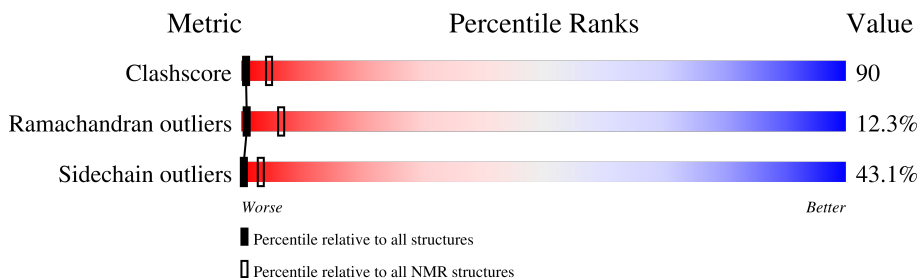
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	158937	12864
Ramachandran outliers	154571	11451
Sidechain outliers	154315	11428

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the experimental data. The red, orange, yellow and green segments indicate the fraction of residues that contain outliers for  $\geq 3$ , 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	130	

## 2 Ensemble composition and analysis i

This entry contains 20 models. Model 15 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:26-A:32, A:44-A:74, A:86-A:150 (103)	0.46	15

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 2 single-model clusters were found.

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

### 3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1903 atoms, of which 849 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called SOS1.

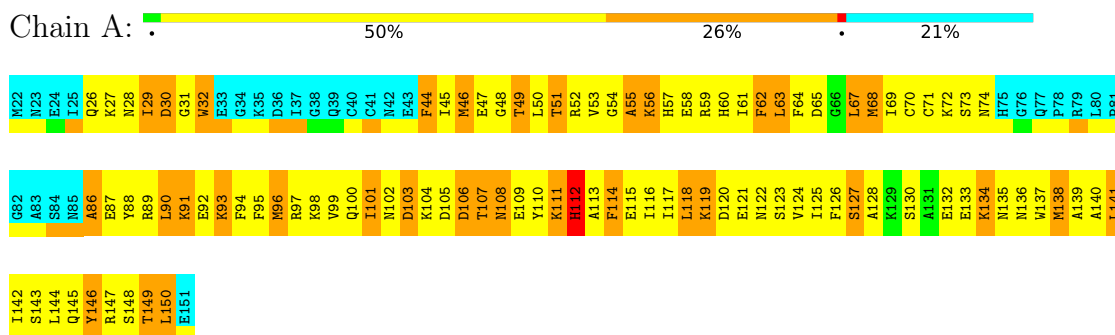
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	130	1903	661	849	185	199	9	0

## 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: SOS1

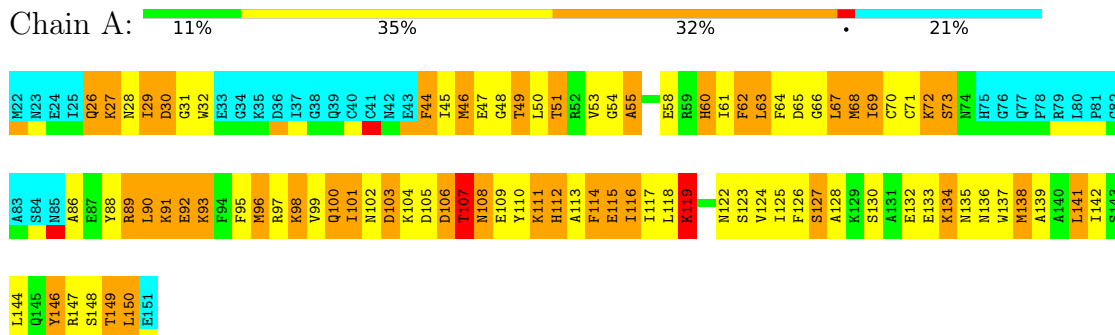


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

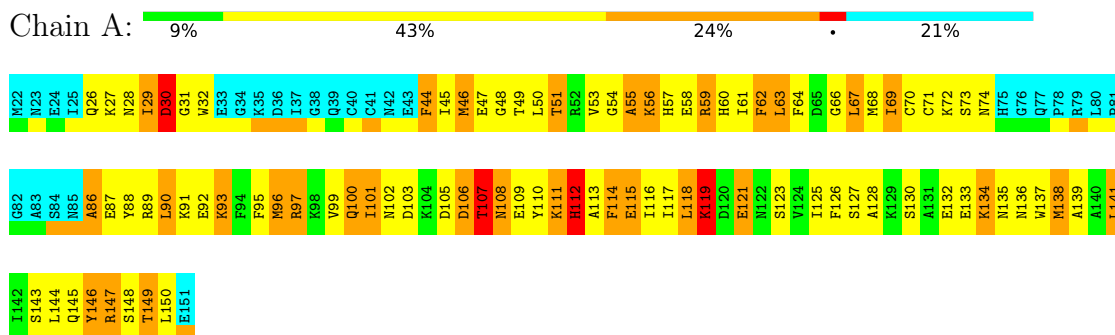
#### 4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: SOS1



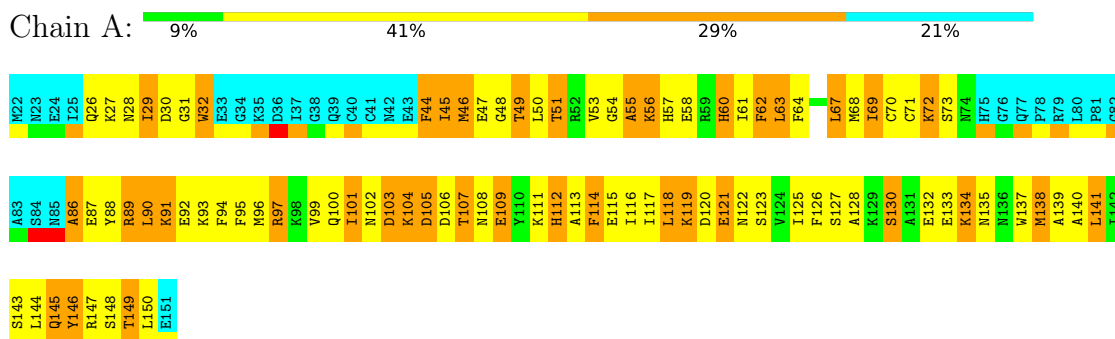
### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: SOS1



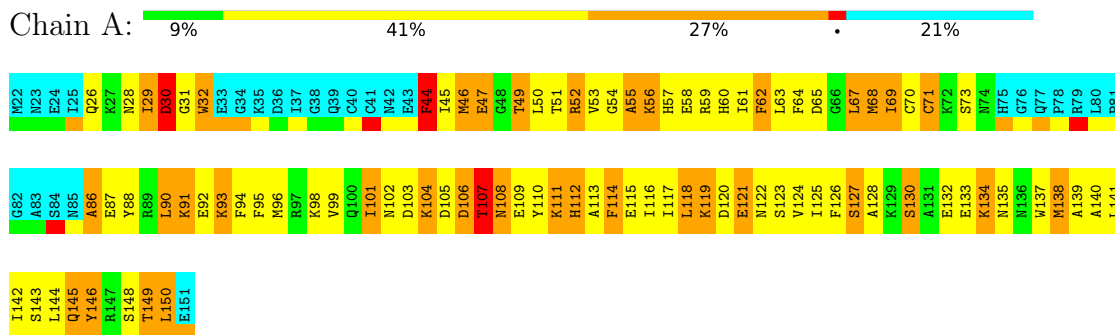
### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: SOS1



### 4.2.4 Score per residue for model 4

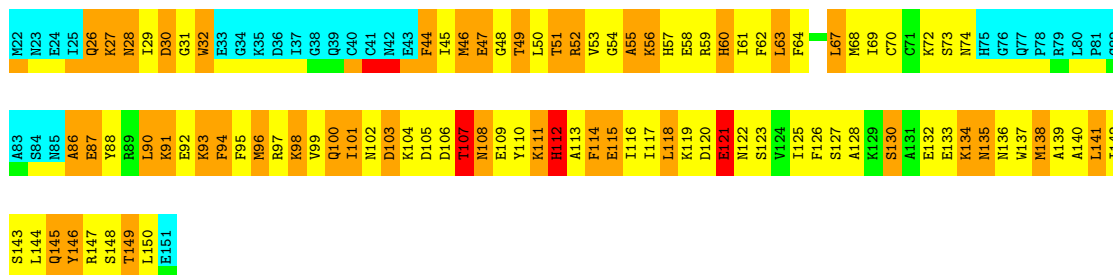
- Molecule 1: SOS1



### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: SOS1

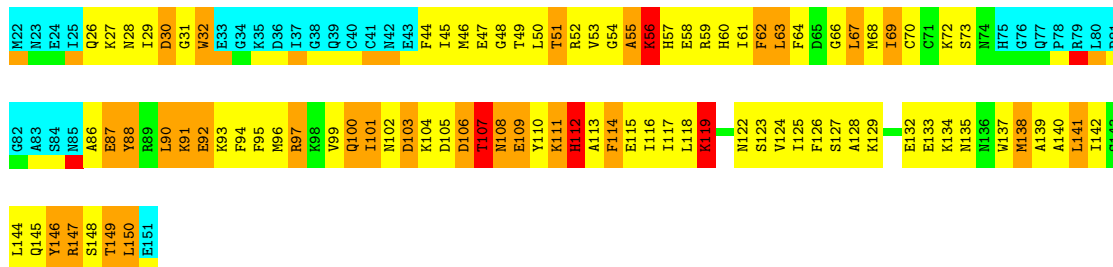
Chain A: 5% 41% 31% 21%



#### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: SOS1

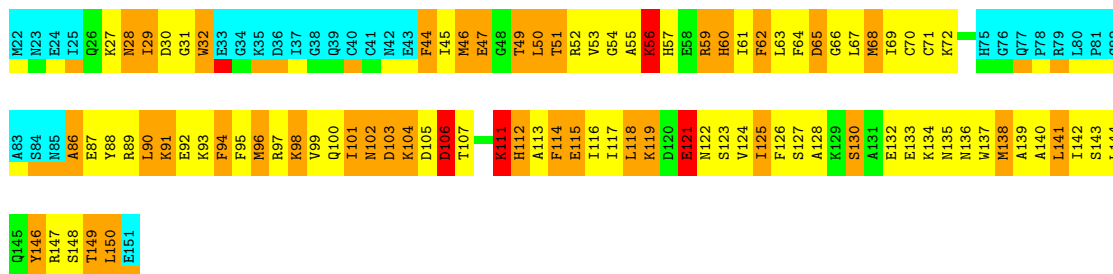
Chain A: 8% 46% 22% 21%



#### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: SOS1

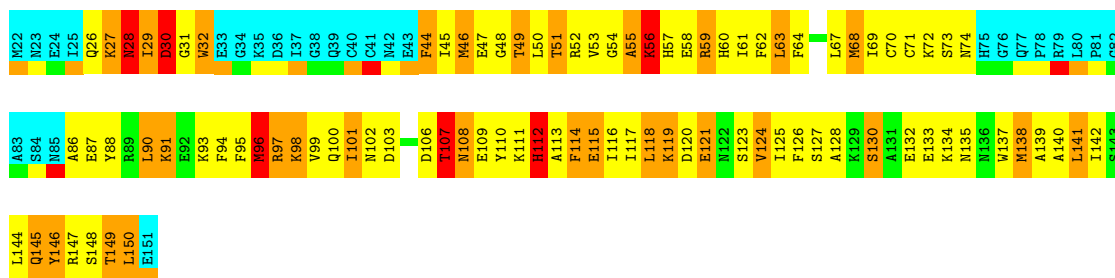
Chain A: 9% 39% 28% 21%



#### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: SOS1

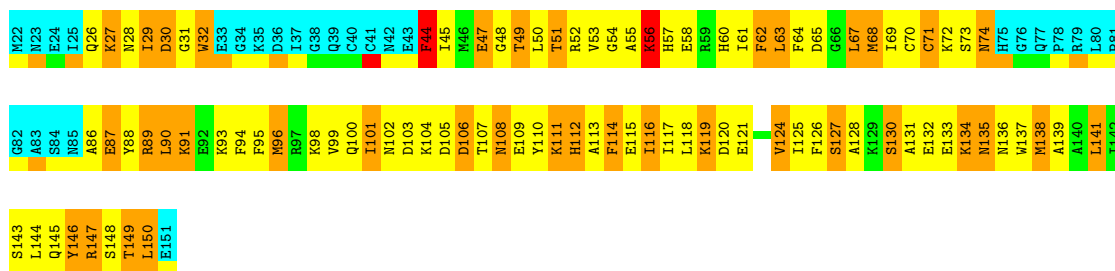
Chain A: 8% 43% 23% 5% 21%



#### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: SOS1

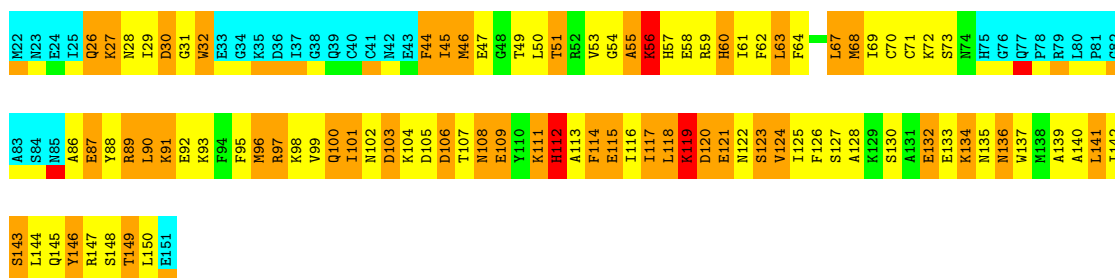
Chain A: 8% 42% 28% 21%



#### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: SOS1

Chain A: 8% 38% 32% 21%



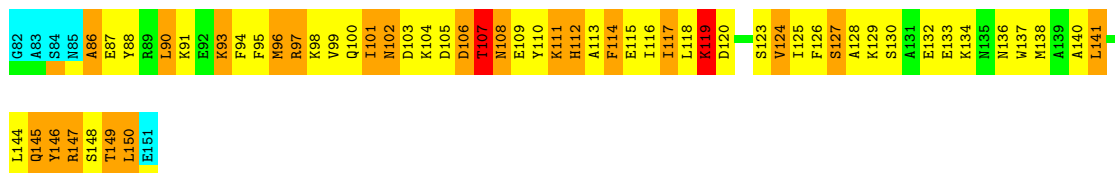
#### 4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: SOS1

Chain A: 8% 41% 28% 21%



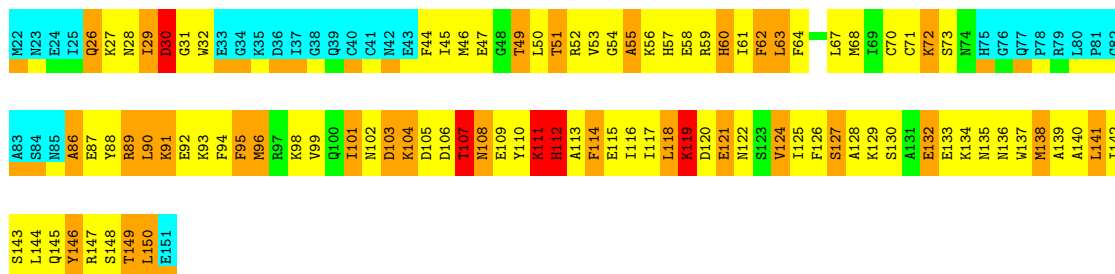




#### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: SOS1

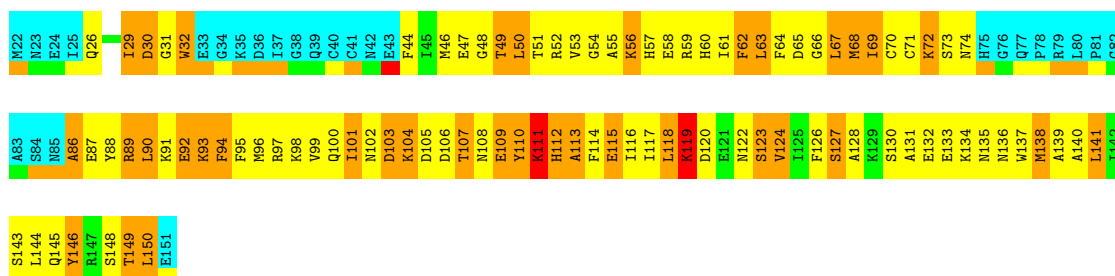
Chain A: 7% 45% 23% 21%



#### 4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: SOS1

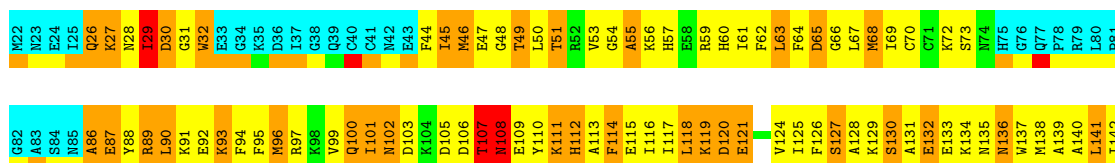
Chain A: 6% 44% 28% 21%



#### 4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: SOS1

Chain A: 7% 42% 28% 21%



S143  
L144  
Q146  
Y146  
R147  
S148  
T149  
L150  
E151

#### 4.2.15 Score per residue for model 15 (medoid)

- Molecule 1: SOS1

Chain A: 9% 39% 27% 21%

M22 M23 M24 E24 I25 I26 Q26 K27 K28 N28 L29 D30 D31 G31 W32 W33 E33 G34 G35 K35 D36 I37 I38 V39 Q39 Q39 Q39 C40 C41 M42 M43 E43 F44 F44 I45 I46 M46 E47 E48 G48 T49 T49 L50 L50 T51 T51 R52 R52 V53 V53 G54 G54 A55 A55 K56 K56 H57 H57 E58 E58 R59 R59 H60 H60 I61 I61 F62 F62 L63 L63 F64 F64 L67 L67 M68 M68 I69 I69 C70 C70 C71 C71 K72 K72 S73 S73 N74 N74 H75 H75 G76 G76 Q77 Q77 P78 P78 R79 R79 L80 L80 P81 P81 G82 G82

A83 A84 M85 A86 E87 Y88 Y88 R89 R90 K91 E92 K93 K93 F94 F95 M96 M96 R97 R97 I97 I97 V99 Q100 Q100 I101 I101 M102 M102 D103 D103 K104 K104 D105 D105 I106 I106 T107 T107 M108 M108 E109 E109 Y110 Y110 T111 T111 H112 H112 A113 A113 F114 F114 E115 E115 I116 I116 I117 I117 L118 L118 K119 K119 D120 D120 E121 E121 M122 M122 I125 I125 F126 F126 S127 S127 A128 A128 K129 K129 S130 S130 I131 I131 E132 E132 E133 E133 K134 K134 N135 N135 N136 N136 W137 W137 H138 H138 M139 M139 A139 A139 A140 A140 L141 L141 I142 I142 P81 P81 G82 G82

L144  
Q145  
Y146  
R147  
S148  
T149  
L150  
E151

#### 4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: SOS1

Chain A: 8% 42% 26% 21%

M22 M23 M24 E24 I25 I26 Q26 K27 K28 N28 L29 D30 D31 G31 W32 W33 E33 G34 G35 K35 D36 I37 I38 V39 Q39 Q39 Q39 C40 C41 M42 M43 E43 F44 F44 I45 I46 M46 E47 E48 G48 T49 T49 L50 L50 T51 T51 R52 R52 V53 V53 G54 G54 A55 A55 K56 K56 H57 H57 E58 E58 R59 R59 H60 H60 I61 I61 F62 F62 L63 L63 F64 F64 D65 D65 G66 G66 L67 L67 M68 M68 I69 I69 C70 C70 C71 C71 K72 K72 S73 S73 N74 N74 H75 H75 G76 G76 Q77 Q77 P78 P78 R79 R79 L80 L80 P81 P81

G82 A83 M85 A86 E87 Y88 Y88 R89 R90 K91 E92 K93 K93 F94 F95 M96 M96 R97 R97 I97 I97 V99 Q100 Q100 I101 I101 M102 M102 D103 D103 K104 K104 D105 D105 I106 I106 T107 T107 M108 M108 E109 E109 Y110 Y110 T111 T111 H112 H112 A113 A113 F114 F114 E115 E115 I116 I116 I117 I117 L118 L118 K119 K119 D120 D120 E121 E121 M122 M122 I125 I125 F126 F126 S127 S127 A128 A128 K129 K129 S130 S130 I131 I131 E132 E132 E133 E133 K134 K134 N135 N135 N136 N136 W137 W137 H138 H138 M139 M139 A139 A139 A140 A140 L141 L141 I142 I142 P81 P81 G82 G82

I142  
S143  
L144  
Q145  
Y146  
R147  
S148  
T149  
L150  
E151

#### 4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: SOS1

Chain A: 12% 43% 22% 21%

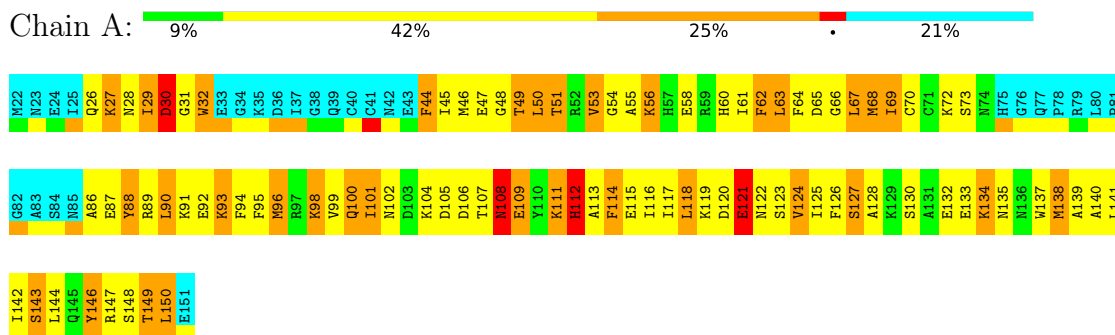
M22 M23 M24 E24 I25 I26 Q26 K27 K28 N28 L29 D30 D31 G31 W32 W33 E33 G34 G35 K35 D36 I37 I38 V39 Q39 Q39 Q39 C40 C41 M42 M43 E43 F44 F44 I45 I46 M46 E47 E48 G48 T49 T49 L50 L50 T51 T51 R52 R52 V53 V53 G54 G54 A55 A55 K56 K56 H57 H57 E58 E58 R59 R59 H60 H60 I61 I61 F62 F62 L63 L63 F64 F64 L67 L67 M68 M68 I69 I69 C70 C70 C71 C71 K72 K72 S73 S73 N74 N74 H75 H75 G76 G76 Q77 Q77 P78 P78 R79 R79 L80 L80 P81 P81 G82 G82

A83 A84 M85 A86 E87 Y88 Y88 R89 R90 K91 E92 K93 K93 F94 F95 M96 M96 R97 R97 I97 I97 V99 Q100 Q100 I101 I101 M102 M102 D103 D103 K104 K104 D105 D105 I106 I106 T107 T107 K111 K111 H112 H112 A113 A113 F114 F114 E115 E115 I116 I116 I117 I117 L118 L118 K119 K119 S123 S123 V124 V124 I125 I125 F126 F126 S127 S127 A128 A128 K129 K129 S130 S130 A131 A131 E132 E132 E133 E133 K134 K134 N135 N135 N136 N136 W137 W137 M138 M138 A139 A139 A140 A140 L141 L141 I142 I142 S145 S145 L144 L144 Q145 Q145 Y146 Y146

R147  
S148  
T149  
L150  
E151

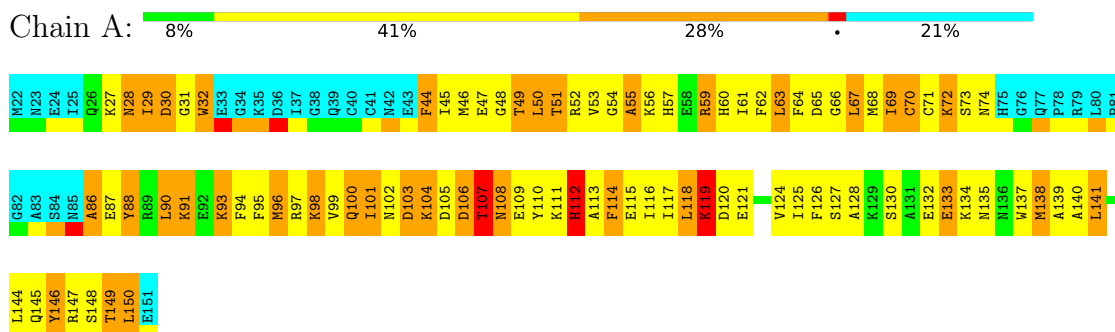
### 4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: SOS1



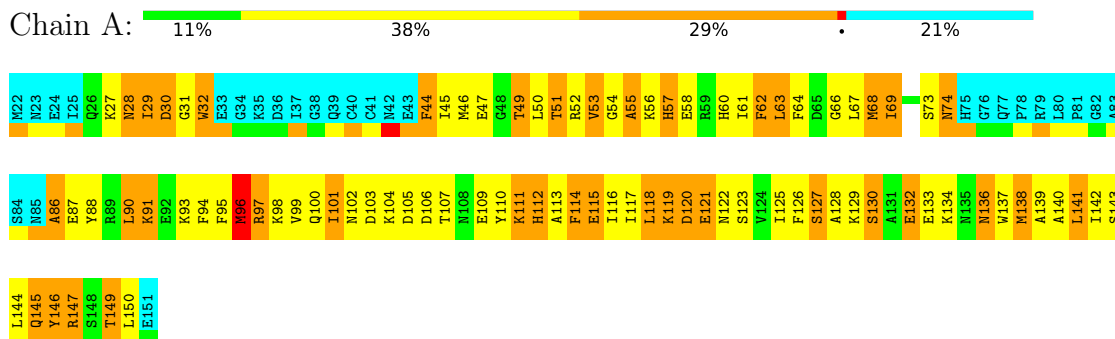
### 4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: SOS1



### 4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: SOS1



## 5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 750 calculated structures, 20 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	refinement	
DYANA	structure solution	

No chemical shift data was provided.

## 6 Model quality i

### 6.1 Standard geometry i

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

### 6.2 Too-close contacts 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	853	704	848	153±11
All	All	17060	14080	16960	3062

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:63:LEU:HD13	1:A:144:LEU:HD11	1.15	1.15	18	11
1:A:95:PHE:CE2	1:A:118:LEU:HD22	1.14	1.77	1	1
1:A:128:ALA:HB2	1:A:137:TRP:CZ3	1.10	1.80	2	20
1:A:86:ALA:O	1:A:88:TYR:N	1.09	1.85	6	5
1:A:128:ALA:HB2	1:A:137:TRP:CE3	1.07	1.84	16	20
1:A:61:ILE:HD11	1:A:126:PHE:CZ	1.04	1.87	13	1
1:A:95:PHE:CD2	1:A:118:LEU:HD13	1.04	1.86	9	5
1:A:101:ILE:HD12	1:A:116:ILE:HD12	1.03	1.20	19	10
1:A:45:ILE:CD1	1:A:144:LEU:HD21	1.03	1.83	9	5
1:A:63:LEU:CD1	1:A:144:LEU:HD11	1.02	1.83	20	11
1:A:95:PHE:CE2	1:A:118:LEU:HD13	1.01	1.90	6	8
1:A:69:ILE:HD12	1:A:90:LEU:HD21	1.00	1.30	7	2
1:A:29:ILE:O	1:A:86:ALA:HB1	0.99	1.56	11	18
1:A:95:PHE:CD2	1:A:118:LEU:HD22	0.97	1.94	4	4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:LEU:O	1:A:90:LEU:HD13	0.96	1.60	5	18
1:A:64:PHE:O	1:A:66:GLY:N	0.93	2.00	14	2
1:A:67:LEU:HD13	1:A:94:PHE:CD1	0.93	1.98	7	3
1:A:45:ILE:HD12	1:A:144:LEU:HD21	0.92	1.40	20	8
1:A:101:ILE:CD1	1:A:116:ILE:HD12	0.92	1.94	20	5
1:A:95:PHE:CE1	1:A:118:LEU:HD22	0.90	2.02	8	5
1:A:113:ALA:HB2	1:A:127:SER:OG	0.88	1.69	7	13
1:A:69:ILE:HD12	1:A:70:CYS:N	0.88	1.83	6	2
1:A:90:LEU:HD22	1:A:91:LYS:N	0.88	1.83	2	14
1:A:107:THR:HG22	1:A:111:LYS:O	0.87	1.70	15	8
1:A:95:PHE:CZ	1:A:118:LEU:HD22	0.87	2.05	8	5
1:A:96:MET:CB	1:A:144:LEU:HD13	0.87	2.00	19	6
1:A:63:LEU:HD21	1:A:144:LEU:HD11	0.86	1.46	12	3
1:A:63:LEU:HD13	1:A:144:LEU:CD1	0.86	2.00	20	8
1:A:46:MET:SD	1:A:63:LEU:HD23	0.85	2.10	6	2
1:A:146:TYR:O	1:A:150:LEU:HD23	0.85	1.71	7	19
1:A:53:VAL:HG12	1:A:53:VAL:O	0.85	1.72	5	12
1:A:45:ILE:HB	1:A:63:LEU:HD23	0.84	1.49	12	1
1:A:106:ASP:O	1:A:108:ASN:N	0.84	2.10	16	11
1:A:50:LEU:HD13	1:A:61:ILE:CG1	0.84	2.01	2	19
1:A:69:ILE:O	1:A:69:ILE:HD13	0.84	1.72	20	2
1:A:96:MET:HB2	1:A:144:LEU:HD13	0.84	1.47	15	6
1:A:63:LEU:HD21	1:A:144:LEU:CD1	0.83	2.03	16	4
1:A:50:LEU:HD13	1:A:61:ILE:HG13	0.83	1.50	3	18
1:A:63:LEU:HD22	1:A:96:MET:SD	0.81	2.16	1	1
1:A:50:LEU:HD22	1:A:126:PHE:CD2	0.81	2.10	1	17
1:A:133:GLU:O	1:A:137:TRP:N	0.81	2.14	9	20
1:A:46:MET:HG2	1:A:63:LEU:HD23	0.80	1.54	1	4
1:A:118:LEU:HD12	1:A:119:LYS:O	0.80	1.77	1	3
1:A:128:ALA:CB	1:A:137:TRP:CZ3	0.79	2.64	2	19
1:A:90:LEU:C	1:A:90:LEU:HD13	0.79	1.96	7	2
1:A:50:LEU:CD2	1:A:137:TRP:CE3	0.79	2.66	4	19
1:A:124:VAL:O	1:A:125:ILE:HD13	0.78	1.79	18	3
1:A:90:LEU:HD13	1:A:90:LEU:C	0.78	1.97	13	12
1:A:50:LEU:HD23	1:A:137:TRP:CE3	0.78	2.14	19	19
1:A:69:ILE:HD12	1:A:90:LEU:CD2	0.77	2.10	8	2
1:A:118:LEU:O	1:A:119:LYS:O	0.77	2.02	10	12
1:A:115:GLU:C	1:A:116:ILE:HD13	0.77	1.99	20	8
1:A:67:LEU:HD22	1:A:94:PHE:CE1	0.77	2.14	4	1
1:A:53:VAL:O	1:A:125:ILE:HG21	0.76	1.80	10	8
1:A:69:ILE:HG13	1:A:90:LEU:HD23	0.76	1.55	2	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:95:PHE:CD2	1:A:99:VAL:HG11	0.76	2.16	11	1
1:A:53:VAL:HG12	1:A:125:ILE:HG21	0.76	1.55	11	4
1:A:30:ASP:HB3	1:A:90:LEU:HD12	0.76	1.55	18	1
1:A:114:PHE:CD1	1:A:126:PHE:O	0.76	2.38	13	2
1:A:31:GLY:O	1:A:32:TRP:C	0.75	2.25	3	20
1:A:50:LEU:N	1:A:50:LEU:HD12	0.75	1.96	18	17
1:A:69:ILE:HD13	1:A:69:ILE:C	0.75	2.02	20	2
1:A:133:GLU:O	1:A:137:TRP:CG	0.74	2.40	17	20
1:A:90:LEU:C	1:A:90:LEU:HD22	0.74	2.03	15	9
1:A:103:ASP:HA	1:A:114:PHE:HB2	0.74	1.59	16	4
1:A:96:MET:CG	1:A:144:LEU:HD13	0.73	2.13	10	2
1:A:116:ILE:CD1	1:A:126:PHE:CD2	0.73	2.71	17	2
1:A:113:ALA:HB1	1:A:125:ILE:HG22	0.73	1.60	18	2
1:A:95:PHE:CE2	1:A:141:LEU:HD11	0.73	2.19	20	4
1:A:128:ALA:HB3	1:A:134:LYS:HG2	0.73	1.61	17	1
1:A:96:MET:HA	1:A:144:LEU:HD13	0.72	1.61	13	4
1:A:29:ILE:HG22	1:A:90:LEU:HB3	0.72	1.61	16	7
1:A:64:PHE:CE2	1:A:69:ILE:HG21	0.72	2.19	6	7
1:A:69:ILE:C	1:A:69:ILE:HD13	0.72	2.05	18	4
1:A:67:LEU:HD12	1:A:67:LEU:C	0.72	2.03	3	1
1:A:63:LEU:HD12	1:A:64:PHE:N	0.72	1.99	17	7
1:A:66:GLY:O	1:A:67:LEU:HD23	0.71	1.85	13	4
1:A:69:ILE:C	1:A:69:ILE:HD12	0.71	2.04	13	1
1:A:63:LEU:HD11	1:A:144:LEU:CD1	0.71	2.15	4	2
1:A:119:LYS:O	1:A:121:GLU:N	0.71	2.23	10	4
1:A:61:ILE:HD12	1:A:70:CYS:CB	0.71	2.15	19	2
1:A:96:MET:N	1:A:144:LEU:HD13	0.70	2.01	8	5
1:A:45:ILE:HD13	1:A:144:LEU:HD21	0.70	1.62	9	1
1:A:133:GLU:O	1:A:137:TRP:CD1	0.70	2.44	4	20
1:A:59:ARG:HB3	1:A:71:CYS:O	0.70	1.86	8	2
1:A:69:ILE:HD13	1:A:70:CYS:N	0.70	2.00	18	2
1:A:63:LEU:HA	1:A:68:MET:HA	0.70	1.63	5	7
1:A:111:LYS:O	1:A:113:ALA:N	0.70	2.23	18	2
1:A:53:VAL:O	1:A:53:VAL:CG1	0.70	2.40	5	12
1:A:68:MET:CB	1:A:95:PHE:CD2	0.70	2.74	3	2
1:A:49:THR:C	1:A:50:LEU:HD12	0.69	2.07	18	5
1:A:69:ILE:HG23	1:A:90:LEU:CD2	0.69	2.17	7	3
1:A:63:LEU:HD12	1:A:68:MET:HB2	0.69	1.63	12	1
1:A:99:VAL:HG22	1:A:145:GLN:HB2	0.69	1.64	2	1
1:A:68:MET:SD	1:A:95:PHE:CE2	0.69	2.85	11	7
1:A:69:ILE:HD12	1:A:90:LEU:HD23	0.69	1.64	8	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:95:PHE:CD2	1:A:118:LEU:CD1	0.69	2.74	9	2
1:A:28:ASN:ND2	1:A:88:TYR:CE2	0.69	2.61	19	4
1:A:50:LEU:CD2	1:A:126:PHE:CD2	0.69	2.76	8	7
1:A:105:ASP:CB	1:A:113:ALA:O	0.69	2.41	20	4
1:A:106:ASP:C	1:A:107:THR:HG23	0.69	2.07	7	4
1:A:114:PHE:CD1	1:A:114:PHE:N	0.68	2.60	7	8
1:A:50:LEU:HG	1:A:137:TRP:CZ3	0.68	2.23	7	20
1:A:54:GLY:O	1:A:55:ALA:HB3	0.68	1.87	12	2
1:A:95:PHE:CE2	1:A:118:LEU:CD1	0.68	2.75	6	2
1:A:68:MET:SD	1:A:95:PHE:CD2	0.68	2.87	11	5
1:A:45:ILE:CB	1:A:63:LEU:HD23	0.68	2.17	12	1
1:A:96:MET:HB3	1:A:144:LEU:HD12	0.68	1.62	1	1
1:A:101:ILE:HG12	1:A:116:ILE:HG23	0.68	1.66	13	3
1:A:53:VAL:CG1	1:A:125:ILE:HG21	0.68	2.18	7	4
1:A:116:ILE:HD13	1:A:116:ILE:N	0.68	2.04	7	6
1:A:101:ILE:HG12	1:A:116:ILE:HD12	0.68	1.64	14	2
1:A:94:PHE:O	1:A:94:PHE:CD2	0.68	2.47	15	4
1:A:99:VAL:HG21	1:A:141:LEU:HG	0.68	1.66	12	3
1:A:53:VAL:HG21	1:A:113:ALA:CB	0.67	2.19	12	3
1:A:44:PHE:CD1	1:A:62:PHE:CE1	0.67	2.83	18	1
1:A:118:LEU:HD12	1:A:120:ASP:HB3	0.67	1.66	8	1
1:A:112:HIS:O	1:A:112:HIS:CD2	0.67	2.47	10	1
1:A:54:GLY:O	1:A:55:ALA:HB2	0.67	1.90	15	12
1:A:95:PHE:HD2	1:A:118:LEU:HD22	0.67	1.49	16	3
1:A:61:ILE:HD13	1:A:70:CYS:HB3	0.67	1.66	3	4
1:A:95:PHE:CZ	1:A:118:LEU:HD13	0.67	2.25	7	3
1:A:63:LEU:C	1:A:63:LEU:HD12	0.67	2.10	20	8
1:A:45:ILE:HD11	1:A:65:ASP:HA	0.67	1.66	9	3
1:A:105:ASP:O	1:A:110:TYR:CG	0.67	2.48	9	1
1:A:114:PHE:CE1	1:A:126:PHE:O	0.67	2.48	13	2
1:A:69:ILE:CG1	1:A:90:LEU:HD23	0.66	2.21	5	3
1:A:61:ILE:HD13	1:A:70:CYS:CB	0.66	2.20	3	3
1:A:29:ILE:HG22	1:A:90:LEU:HB2	0.66	1.68	6	4
1:A:69:ILE:HG23	1:A:90:LEU:HD23	0.66	1.64	8	1
1:A:53:VAL:HG21	1:A:113:ALA:HB3	0.66	1.66	13	1
1:A:32:TRP:CD1	1:A:32:TRP:O	0.66	2.49	14	6
1:A:63:LEU:HD13	1:A:96:MET:SD	0.66	2.30	1	1
1:A:67:LEU:HD22	1:A:94:PHE:CZ	0.66	2.26	16	2
1:A:96:MET:HB3	1:A:144:LEU:HD13	0.66	1.68	19	1
1:A:59:ARG:NE	1:A:88:TYR:CE2	0.66	2.64	8	1
1:A:50:LEU:HG	1:A:137:TRP:CE3	0.65	2.26	18	20

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:106:ASP:O	1:A:107:THR:C	0.65	2.35	8	11
1:A:128:ALA:CA	1:A:137:TRP:CZ3	0.65	2.80	18	18
1:A:118:LEU:O	1:A:118:LEU:HD12	0.65	1.91	10	1
1:A:29:ILE:HG22	1:A:90:LEU:CB	0.65	2.21	5	8
1:A:50:LEU:HD13	1:A:61:ILE:CB	0.65	2.20	7	19
1:A:28:ASN:ND2	1:A:88:TYR:CD2	0.65	2.65	17	6
1:A:50:LEU:HG	1:A:137:TRP:CH2	0.65	2.27	7	20
1:A:28:ASN:OD1	1:A:88:TYR:CD2	0.65	2.49	18	8
1:A:118:LEU:HD12	1:A:122:ASN:HB3	0.65	1.67	4	2
1:A:61:ILE:O	1:A:62:PHE:CD2	0.65	2.50	14	3
1:A:28:ASN:CG	1:A:88:TYR:CD2	0.65	2.70	2	9
1:A:55:ALA:O	1:A:56:LYS:CB	0.65	2.45	8	11
1:A:61:ILE:HD12	1:A:70:CYS:HB2	0.65	1.67	8	2
1:A:107:THR:CG2	1:A:112:HIS:CG	0.65	2.79	18	1
1:A:95:PHE:CG	1:A:99:VAL:HG11	0.65	2.26	2	5
1:A:68:MET:CB	1:A:95:PHE:CG	0.65	2.80	3	4
1:A:63:LEU:HD12	1:A:63:LEU:C	0.65	2.12	2	3
1:A:45:ILE:HG22	1:A:46:MET:HG3	0.65	1.68	20	4
1:A:69:ILE:HD12	1:A:69:ILE:C	0.65	2.12	6	1
1:A:53:VAL:HG12	1:A:125:ILE:CG2	0.65	2.20	11	4
1:A:60:HIS:ND1	1:A:88:TYR:CE2	0.65	2.65	12	1
1:A:95:PHE:CE1	1:A:120:ASP:CG	0.65	2.69	18	2
1:A:44:PHE:O	1:A:44:PHE:CG	0.65	2.48	16	9
1:A:107:THR:O	1:A:109:GLU:N	0.65	2.30	6	15
1:A:67:LEU:HD12	1:A:68:MET:N	0.64	2.06	9	4
1:A:28:ASN:OD1	1:A:88:TYR:CE2	0.64	2.50	8	2
1:A:96:MET:HG2	1:A:144:LEU:HD22	0.64	1.68	13	1
1:A:31:GLY:H	1:A:90:LEU:HD12	0.64	1.53	2	4
1:A:95:PHE:CZ	1:A:118:LEU:CD2	0.64	2.80	14	4
1:A:44:PHE:CD1	1:A:44:PHE:O	0.64	2.50	12	1
1:A:64:PHE:CZ	1:A:69:ILE:HG21	0.64	2.27	1	3
1:A:99:VAL:HG22	1:A:145:GLN:HB3	0.64	1.70	3	9
1:A:44:PHE:O	1:A:44:PHE:CD2	0.64	2.51	1	5
1:A:95:PHE:CG	1:A:118:LEU:HD13	0.64	2.27	9	1
1:A:53:VAL:HG12	1:A:54:GLY:H	0.64	1.53	9	3
1:A:67:LEU:HD13	1:A:94:PHE:CE1	0.64	2.27	18	3
1:A:47:GLU:CB	1:A:62:PHE:CE1	0.63	2.81	5	5
1:A:59:ARG:CG	1:A:71:CYS:O	0.63	2.47	19	2
1:A:68:MET:HB3	1:A:95:PHE:CE1	0.63	2.28	15	1
1:A:53:VAL:HB	1:A:125:ILE:HG22	0.63	1.70	14	5
1:A:63:LEU:HD22	1:A:68:MET:HE3	0.63	1.68	11	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:LEU:HD13	1:A:61:ILE:HB	0.63	1.70	18	12
1:A:133:GLU:HB3	1:A:137:TRP:CE2	0.63	2.28	9	20
1:A:68:MET:CE	1:A:95:PHE:CE2	0.63	2.82	8	2
1:A:53:VAL:HG13	1:A:54:GLY:N	0.63	2.08	7	5
1:A:53:VAL:HG21	1:A:113:ALA:HB2	0.63	1.68	9	2
1:A:142:ILE:CG2	1:A:146:TYR:CE1	0.63	2.81	12	4
1:A:67:LEU:HD12	1:A:68:MET:O	0.63	1.94	5	5
1:A:53:VAL:HG23	1:A:127:SER:OG	0.63	1.93	10	7
1:A:116:ILE:N	1:A:116:ILE:HD12	0.63	2.08	13	3
1:A:73:SER:CB	1:A:88:TYR:CE2	0.63	2.82	15	2
1:A:50:LEU:HG	1:A:137:TRP:CD2	0.62	2.28	18	20
1:A:50:LEU:CB	1:A:126:PHE:CD1	0.62	2.82	14	7
1:A:116:ILE:HD11	1:A:126:PHE:CD2	0.62	2.29	17	2
1:A:116:ILE:HD13	1:A:126:PHE:CD2	0.62	2.29	18	2
1:A:95:PHE:CD2	1:A:99:VAL:HG12	0.62	2.29	15	1
1:A:49:THR:O	1:A:137:TRP:CZ2	0.62	2.52	19	9
1:A:64:PHE:CZ	1:A:69:ILE:HD12	0.62	2.30	3	2
1:A:64:PHE:CE2	1:A:69:ILE:CG2	0.62	2.82	16	3
1:A:93:LYS:HB3	1:A:95:PHE:CE2	0.62	2.30	1	9
1:A:96:MET:CA	1:A:144:LEU:HD13	0.62	2.25	8	3
1:A:44:PHE:C	1:A:44:PHE:CD1	0.62	2.71	20	4
1:A:68:MET:HB3	1:A:93:LYS:O	0.61	1.95	12	7
1:A:67:LEU:HD22	1:A:94:PHE:CE2	0.61	2.30	16	1
1:A:103:ASP:HA	1:A:114:PHE:CB	0.61	2.26	16	18
1:A:68:MET:SD	1:A:95:PHE:CZ	0.61	2.93	20	6
1:A:49:THR:HG23	1:A:60:HIS:HA	0.61	1.71	15	5
1:A:45:ILE:CG2	1:A:63:LEU:HD23	0.61	2.25	12	1
1:A:88:TYR:N	1:A:88:TYR:CD1	0.61	2.65	19	6
1:A:114:PHE:CZ	1:A:126:PHE:CB	0.61	2.84	13	2
1:A:105:ASP:O	1:A:106:ASP:CB	0.61	2.49	9	3
1:A:95:PHE:CD2	1:A:118:LEU:CB	0.61	2.84	12	2
1:A:103:ASP:HA	1:A:114:PHE:HB3	0.61	1.72	15	8
1:A:101:ILE:HD12	1:A:116:ILE:CD1	0.61	2.26	4	2
1:A:53:VAL:CG1	1:A:54:GLY:N	0.60	2.64	11	5
1:A:107:THR:O	1:A:110:TYR:O	0.60	2.20	1	14
1:A:53:VAL:CG1	1:A:125:ILE:CG2	0.60	2.80	7	3
1:A:29:ILE:HG21	1:A:32:TRP:CE3	0.60	2.32	2	2
1:A:118:LEU:O	1:A:119:LYS:C	0.60	2.39	10	2
1:A:95:PHE:CG	1:A:118:LEU:HB2	0.60	2.32	15	3
1:A:67:LEU:HD13	1:A:94:PHE:CA	0.60	2.26	19	3
1:A:50:LEU:N	1:A:50:LEU:CD1	0.60	2.65	13	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:ILE:HD11	1:A:65:ASP:OD1	0.60	1.97	19	1
1:A:29:ILE:O	1:A:29:ILE:HD12	0.60	1.96	6	1
1:A:113:ALA:C	1:A:114:PHE:CG	0.60	2.74	15	2
1:A:125:ILE:N	1:A:125:ILE:HD12	0.59	2.11	7	2
1:A:60:HIS:CB	1:A:88:TYR:CD2	0.59	2.85	9	1
1:A:45:ILE:HG21	1:A:63:LEU:HD12	0.59	1.74	11	1
1:A:64:PHE:CD2	1:A:69:ILE:HG21	0.59	2.33	6	2
1:A:113:ALA:HB1	1:A:126:PHE:O	0.59	1.96	17	6
1:A:68:MET:CG	1:A:95:PHE:CD2	0.59	2.85	3	2
1:A:108:ASN:O	1:A:109:GLU:CG	0.59	2.51	10	1
1:A:86:ALA:O	1:A:88:TYR:O	0.59	2.20	17	15
1:A:46:MET:SD	1:A:140:ALA:HB3	0.59	2.37	12	2
1:A:95:PHE:CE1	1:A:120:ASP:HB2	0.59	2.32	12	6
1:A:106:ASP:O	1:A:107:THR:OG1	0.59	2.17	17	3
1:A:108:ASN:O	1:A:109:GLU:CB	0.59	2.51	13	2
1:A:58:GLU:O	1:A:73:SER:O	0.59	2.21	11	15
1:A:45:ILE:HG22	1:A:46:MET:CG	0.59	2.28	10	7
1:A:56:LYS:O	1:A:57:HIS:CG	0.59	2.56	6	4
1:A:57:HIS:CE1	1:A:74:ASN:ND2	0.59	2.71	13	2
1:A:51:THR:HG22	1:A:127:SER:HB2	0.58	1.75	17	10
1:A:73:SER:OG	1:A:88:TYR:CE2	0.58	2.53	1	3
1:A:90:LEU:O	1:A:90:LEU:HD22	0.58	1.97	1	1
1:A:86:ALA:O	1:A:87:GLU:C	0.58	2.41	10	18
1:A:59:ARG:CB	1:A:71:CYS:O	0.58	2.51	19	4
1:A:60:HIS:O	1:A:61:ILE:HD13	0.58	1.98	19	2
1:A:54:GLY:O	1:A:55:ALA:CB	0.58	2.52	12	12
1:A:133:GLU:O	1:A:137:TRP:CB	0.58	2.52	13	19
1:A:29:ILE:HG21	1:A:32:TRP:HE3	0.58	1.57	2	2
1:A:28:ASN:O	1:A:29:ILE:O	0.58	2.21	17	9
1:A:44:PHE:CE1	1:A:64:PHE:CE1	0.58	2.91	5	1
1:A:73:SER:OG	1:A:88:TYR:CD2	0.58	2.52	1	3
1:A:68:MET:CE	1:A:141:LEU:HD11	0.58	2.28	10	3
1:A:133:GLU:HB3	1:A:137:TRP:NE1	0.58	2.14	8	20
1:A:114:PHE:CE2	1:A:126:PHE:HB2	0.58	2.33	13	2
1:A:100:GLN:N	1:A:117:ILE:O	0.58	2.37	14	12
1:A:73:SER:HB2	1:A:88:TYR:CD1	0.58	2.34	19	6
1:A:95:PHE:CD2	1:A:99:VAL:CG1	0.58	2.86	15	2
1:A:99:VAL:HG21	1:A:141:LEU:HD23	0.58	1.76	14	1
1:A:73:SER:OG	1:A:88:TYR:CE1	0.58	2.53	3	1
1:A:28:ASN:OD1	1:A:88:TYR:CG	0.58	2.57	7	5
1:A:90:LEU:HD13	1:A:91:LYS:N	0.58	2.13	7	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:MET:HA	1:A:99:VAL:CG1	0.57	2.29	1	1
1:A:134:LYS:O	1:A:138:MET:HG2	0.57	1.98	1	16
1:A:66:GLY:O	1:A:67:LEU:CD2	0.57	2.52	7	2
1:A:114:PHE:CZ	1:A:126:PHE:HB2	0.57	2.34	13	2
1:A:113:ALA:CB	1:A:126:PHE:O	0.57	2.52	17	5
1:A:120:ASP:O	1:A:121:GLU:CB	0.57	2.52	18	7
1:A:69:ILE:CD1	1:A:90:LEU:HD21	0.57	2.18	7	1
1:A:135:ASN:O	1:A:139:ALA:CB	0.57	2.53	7	16
1:A:61:ILE:CG2	1:A:68:MET:CE	0.57	2.83	11	2
1:A:69:ILE:CG2	1:A:90:LEU:HD23	0.57	2.30	8	1
1:A:119:LYS:O	1:A:120:ASP:C	0.57	2.43	10	1
1:A:61:ILE:HD12	1:A:70:CYS:SG	0.57	2.39	16	2
1:A:99:VAL:CG2	1:A:141:LEU:HD23	0.57	2.30	14	2
1:A:29:ILE:HD12	1:A:29:ILE:C	0.57	2.20	6	4
1:A:56:LYS:O	1:A:57:HIS:CD2	0.57	2.58	6	1
1:A:53:VAL:CG2	1:A:127:SER:OG	0.57	2.52	10	9
1:A:27:LYS:O	1:A:27:LYS:HG2	0.57	1.98	10	2
1:A:44:PHE:CE1	1:A:62:PHE:CE1	0.56	2.93	18	1
1:A:66:GLY:O	1:A:67:LEU:HG	0.56	2.00	20	3
1:A:105:ASP:HB2	1:A:113:ALA:O	0.56	2.00	20	2
1:A:90:LEU:C	1:A:90:LEU:CD1	0.56	2.72	13	9
1:A:106:ASP:OD2	1:A:110:TYR:CZ	0.56	2.58	5	1
1:A:63:LEU:HD11	1:A:144:LEU:HD11	0.56	1.77	4	2
1:A:73:SER:HA	1:A:88:TYR:CG	0.56	2.35	6	1
1:A:128:ALA:HA	1:A:137:TRP:CH2	0.56	2.36	4	20
1:A:68:MET:HB2	1:A:95:PHE:CD2	0.56	2.35	5	2
1:A:50:LEU:HD23	1:A:114:PHE:HZ	0.56	1.59	13	1
1:A:68:MET:SD	1:A:144:LEU:HD12	0.56	2.40	15	1
1:A:114:PHE:CD1	1:A:116:ILE:HD11	0.56	2.36	2	3
1:A:101:ILE:HD12	1:A:116:ILE:CG1	0.56	2.30	12	2
1:A:107:THR:OG1	1:A:108:ASN:N	0.56	2.38	13	1
1:A:28:ASN:CG	1:A:88:TYR:CE2	0.56	2.79	2	2
1:A:29:ILE:O	1:A:86:ALA:CB	0.56	2.54	6	1
1:A:95:PHE:CD2	1:A:118:LEU:HB2	0.56	2.36	15	4
1:A:73:SER:OG	1:A:88:TYR:CZ	0.56	2.59	17	3
1:A:113:ALA:HB2	1:A:127:SER:HB2	0.56	1.77	11	1
1:A:116:ILE:HG13	1:A:126:PHE:CD2	0.55	2.36	10	10
1:A:67:LEU:HD22	1:A:94:PHE:HA	0.55	1.78	11	2
1:A:95:PHE:O	1:A:99:VAL:CG1	0.55	2.54	13	9
1:A:142:ILE:O	1:A:146:TYR:CD1	0.55	2.58	12	5
1:A:95:PHE:CZ	1:A:118:LEU:HB3	0.55	2.36	11	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:MET:HB2	1:A:63:LEU:HD21	0.55	1.77	15	1
1:A:62:PHE:O	1:A:69:ILE:HG22	0.55	2.01	1	4
1:A:63:LEU:HD21	1:A:144:LEU:HD12	0.55	1.76	7	1
1:A:26:GLN:CD	1:A:27:LYS:CE	0.55	2.74	11	2
1:A:93:LYS:HB3	1:A:95:PHE:CE1	0.55	2.36	14	8
1:A:106:ASP:HB2	1:A:110:TYR:CD2	0.55	2.36	19	3
1:A:73:SER:HB3	1:A:88:TYR:CE2	0.55	2.37	15	2
1:A:26:GLN:HG3	1:A:27:LYS:CE	0.55	2.32	5	1
1:A:46:MET:CE	1:A:63:LEU:HD23	0.55	2.32	19	1
1:A:106:ASP:CB	1:A:110:TYR:CG	0.55	2.89	19	1
1:A:102:ASN:O	1:A:104:LYS:N	0.55	2.40	13	13
1:A:142:ILE:O	1:A:146:TYR:CG	0.55	2.60	5	5
1:A:68:MET:HB2	1:A:95:PHE:CG	0.55	2.36	5	2
1:A:113:ALA:HB2	1:A:127:SER:HG	0.55	1.62	7	2
1:A:113:ALA:HB2	1:A:127:SER:CB	0.55	2.32	13	1
1:A:26:GLN:HA	1:A:29:ILE:CG1	0.55	2.32	9	6
1:A:32:TRP:O	1:A:32:TRP:CG	0.55	2.60	6	3
1:A:68:MET:HB3	1:A:95:PHE:CG	0.55	2.37	3	5
1:A:111:LYS:CG	1:A:112:HIS:N	0.55	2.69	15	4
1:A:50:LEU:HA	1:A:137:TRP:CH2	0.55	2.37	16	18
1:A:95:PHE:O	1:A:99:VAL:HG12	0.55	2.02	18	3
1:A:116:ILE:CD1	1:A:126:PHE:CG	0.55	2.89	18	1
1:A:95:PHE:CE2	1:A:118:LEU:CD2	0.55	2.72	1	1
1:A:70:CYS:O	1:A:91:LYS:CB	0.55	2.55	6	5
1:A:50:LEU:HD23	1:A:126:PHE:HB3	0.55	1.78	18	1
1:A:144:LEU:O	1:A:147:ARG:N	0.54	2.40	2	15
1:A:59:ARG:NH2	1:A:124:VAL:HG12	0.54	2.17	10	1
1:A:73:SER:CB	1:A:88:TYR:CD2	0.54	2.89	1	1
1:A:99:VAL:CG2	1:A:141:LEU:O	0.54	2.55	8	12
1:A:68:MET:HG3	1:A:95:PHE:CD2	0.54	2.36	3	2
1:A:59:ARG:CA	1:A:71:CYS:O	0.54	2.55	7	2
1:A:29:ILE:CD1	1:A:30:ASP:N	0.54	2.70	2	10
1:A:119:LYS:C	1:A:121:GLU:N	0.54	2.60	10	11
1:A:72:LYS:O	1:A:88:TYR:CB	0.54	2.55	17	4
1:A:47:GLU:HB2	1:A:62:PHE:CZ	0.54	2.38	20	3
1:A:47:GLU:HB3	1:A:62:PHE:CE1	0.54	2.37	5	10
1:A:142:ILE:O	1:A:146:TYR:CD2	0.54	2.60	10	4
1:A:105:ASP:O	1:A:110:TYR:CD2	0.54	2.61	9	1
1:A:93:LYS:HA	1:A:95:PHE:CZ	0.54	2.37	12	1
1:A:95:PHE:O	1:A:99:VAL:HG13	0.54	2.03	6	3
1:A:72:LYS:O	1:A:88:TYR:HB2	0.54	2.03	6	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:59:ARG:NH1	1:A:72:LYS:CG	0.54	2.71	7	1
1:A:61:ILE:HD13	1:A:70:CYS:HB2	0.54	1.79	18	1
1:A:69:ILE:C	1:A:69:ILE:CD1	0.54	2.72	20	8
1:A:106:ASP:O	1:A:107:THR:HG23	0.54	2.02	20	2
1:A:50:LEU:HG	1:A:137:TRP:CE2	0.54	2.37	17	20
1:A:95:PHE:HE2	1:A:141:LEU:HD11	0.54	1.61	3	3
1:A:92:GLU:HB3	1:A:94:PHE:CZ	0.54	2.38	18	1
1:A:29:ILE:HD12	1:A:30:ASP:N	0.54	2.18	2	6
1:A:95:PHE:CB	1:A:144:LEU:HD12	0.54	2.32	2	1
1:A:47:GLU:HB2	1:A:62:PHE:CE1	0.54	2.38	5	3
1:A:60:HIS:ND1	1:A:88:TYR:CZ	0.54	2.76	12	1
1:A:107:THR:C	1:A:109:GLU:N	0.53	2.61	16	18
1:A:45:ILE:HG22	1:A:46:MET:N	0.53	2.18	10	5
1:A:45:ILE:HD11	1:A:65:ASP:CG	0.53	2.22	19	1
1:A:73:SER:HB2	1:A:88:TYR:CE2	0.53	2.38	18	5
1:A:50:LEU:HB3	1:A:126:PHE:CD1	0.53	2.37	5	5
1:A:66:GLY:O	1:A:67:LEU:CG	0.53	2.56	20	3
1:A:96:MET:HA	1:A:144:LEU:HD22	0.53	1.78	8	1
1:A:55:ALA:O	1:A:56:LYS:CD	0.53	2.57	9	1
1:A:116:ILE:CG2	1:A:141:LEU:CD2	0.53	2.86	9	1
1:A:73:SER:CB	1:A:88:TYR:CZ	0.53	2.92	16	4
1:A:63:LEU:HD11	1:A:144:LEU:HD12	0.53	1.80	16	3
1:A:61:ILE:HG23	1:A:70:CYS:SG	0.53	2.44	12	1
1:A:68:MET:O	1:A:93:LYS:O	0.53	2.25	12	4
1:A:90:LEU:HD22	1:A:90:LEU:C	0.53	2.24	5	3
1:A:95:PHE:HA	1:A:99:VAL:CG1	0.53	2.34	11	8
1:A:73:SER:HB3	1:A:88:TYR:CE1	0.53	2.39	11	2
1:A:93:LYS:CB	1:A:95:PHE:CE2	0.53	2.92	12	3
1:A:68:MET:O	1:A:93:LYS:N	0.53	2.42	13	9
1:A:57:HIS:CD2	1:A:58:GLU:O	0.53	2.61	9	1
1:A:73:SER:HB2	1:A:88:TYR:CD2	0.53	2.37	1	3
1:A:117:ILE:HG22	1:A:117:ILE:O	0.53	2.03	17	2
1:A:106:ASP:HB2	1:A:110:TYR:CD1	0.53	2.39	16	1
1:A:95:PHE:CD1	1:A:99:VAL:HG12	0.53	2.39	1	1
1:A:60:HIS:ND1	1:A:62:PHE:CE1	0.53	2.77	8	1
1:A:114:PHE:HZ	1:A:128:ALA:HB3	0.52	1.63	9	4
1:A:102:ASN:O	1:A:115:GLU:N	0.52	2.40	18	2
1:A:60:HIS:HB2	1:A:88:TYR:CD2	0.52	2.39	9	2
1:A:109:GLU:HG2	1:A:110:TYR:CE1	0.52	2.40	15	3
1:A:46:MET:HB2	1:A:63:LEU:HB3	0.52	1.80	12	1
1:A:90:LEU:O	1:A:90:LEU:CD1	0.52	2.53	15	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:LEU:HG	1:A:137:TRP:CZ2	0.52	2.39	2	20
1:A:68:MET:CB	1:A:93:LYS:O	0.52	2.57	1	3
1:A:93:LYS:HB3	1:A:95:PHE:CD2	0.52	2.39	16	6
1:A:111:LYS:HG3	1:A:112:HIS:CD2	0.52	2.39	10	2
1:A:146:TYR:O	1:A:150:LEU:CD2	0.52	2.57	20	19
1:A:60:HIS:CB	1:A:71:CYS:SG	0.52	2.98	3	3
1:A:45:ILE:CG2	1:A:63:LEU:HD12	0.52	2.33	11	2
1:A:46:MET:CG	1:A:63:LEU:HD23	0.52	2.34	6	2
1:A:106:ASP:OD2	1:A:110:TYR:CE2	0.52	2.62	5	2
1:A:44:PHE:CD1	1:A:47:GLU:CG	0.52	2.92	12	1
1:A:47:GLU:CB	1:A:62:PHE:CZ	0.52	2.93	20	2
1:A:64:PHE:N	1:A:67:LEU:O	0.52	2.41	12	2
1:A:107:THR:O	1:A:108:ASN:C	0.52	2.48	8	13
1:A:112:HIS:O	1:A:112:HIS:CG	0.52	2.62	6	3
1:A:46:MET:HG3	1:A:63:LEU:HD22	0.52	1.81	12	1
1:A:95:PHE:CE1	1:A:120:ASP:CB	0.52	2.91	12	2
1:A:95:PHE:CD1	1:A:119:LYS:CB	0.52	2.93	13	1
1:A:96:MET:HG3	1:A:144:LEU:HD13	0.52	1.81	18	1
1:A:60:HIS:N	1:A:71:CYS:O	0.52	2.43	2	8
1:A:95:PHE:HB3	1:A:144:LEU:HD12	0.52	1.81	2	3
1:A:106:ASP:O	1:A:107:THR:CG2	0.52	2.57	20	2
1:A:61:ILE:CD1	1:A:70:CYS:SG	0.52	2.98	5	2
1:A:60:HIS:NE2	1:A:62:PHE:CD2	0.52	2.78	4	1
1:A:50:LEU:HB2	1:A:126:PHE:CD1	0.52	2.39	14	4
1:A:103:ASP:CG	1:A:103:ASP:O	0.52	2.48	16	4
1:A:113:ALA:O	1:A:114:PHE:CD2	0.52	2.63	15	1
1:A:26:GLN:HG2	1:A:32:TRP:CZ3	0.52	2.39	18	1
1:A:44:PHE:CG	1:A:47:GLU:OE2	0.52	2.63	12	1
1:A:95:PHE:CD1	1:A:118:LEU:HB2	0.52	2.40	1	2
1:A:46:MET:SD	1:A:140:ALA:CB	0.52	2.98	7	9
1:A:67:LEU:HD13	1:A:94:PHE:N	0.52	2.20	6	3
1:A:95:PHE:CD2	1:A:141:LEU:HD11	0.52	2.40	8	1
1:A:64:PHE:CE2	1:A:69:ILE:HG23	0.52	2.39	20	1
1:A:142:ILE:HG23	1:A:146:TYR:CE1	0.51	2.40	5	5
1:A:73:SER:HB2	1:A:88:TYR:CZ	0.51	2.39	17	5
1:A:63:LEU:HD22	1:A:68:MET:CE	0.51	2.35	11	1
1:A:67:LEU:CD1	1:A:93:LYS:C	0.51	2.78	19	2
1:A:109:GLU:C	1:A:110:TYR:CD1	0.51	2.84	15	1
1:A:73:SER:CB	1:A:88:TYR:CD1	0.51	2.92	12	5
1:A:95:PHE:CZ	1:A:120:ASP:OD2	0.51	2.63	18	1
1:A:70:CYS:O	1:A:91:LYS:N	0.51	2.43	4	5

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:MET:SD	1:A:96:MET:N	0.51	2.84	15	2
1:A:95:PHE:CD1	1:A:96:MET:N	0.51	2.78	1	1
1:A:94:PHE:O	1:A:95:PHE:CD1	0.51	2.64	13	2
1:A:101:ILE:HD11	1:A:114:PHE:CE2	0.51	2.40	16	1
1:A:73:SER:HB2	1:A:88:TYR:CE1	0.51	2.41	10	2
1:A:49:THR:HB	1:A:60:HIS:CD2	0.51	2.40	19	2
1:A:101:ILE:HD12	1:A:116:ILE:HG12	0.51	1.81	12	1
1:A:59:ARG:CB	1:A:72:LYS:HA	0.51	2.36	8	2
1:A:68:MET:CB	1:A:95:PHE:CE1	0.51	2.94	15	1
1:A:72:LYS:N	1:A:89:ARG:O	0.51	2.43	13	4
1:A:107:THR:O	1:A:110:TYR:N	0.51	2.44	5	11
1:A:73:SER:CB	1:A:88:TYR:CE1	0.51	2.94	3	4
1:A:99:VAL:HG21	1:A:141:LEU:O	0.51	2.05	3	3
1:A:139:ALA:O	1:A:143:SER:N	0.51	2.44	20	10
1:A:26:GLN:OE1	1:A:32:TRP:CD2	0.51	2.64	18	1
1:A:73:SER:HA	1:A:88:TYR:HB2	0.51	1.83	6	1
1:A:99:VAL:HG21	1:A:141:LEU:HD13	0.51	1.82	8	2
1:A:68:MET:SD	1:A:144:LEU:CD1	0.51	2.99	15	1
1:A:46:MET:SD	1:A:140:ALA:HB2	0.50	2.45	8	3
1:A:64:PHE:CD2	1:A:69:ILE:CG2	0.50	2.94	16	3
1:A:45:ILE:HD12	1:A:63:LEU:HD11	0.50	1.82	20	3
1:A:101:ILE:HB	1:A:141:LEU:HD22	0.50	1.84	13	2
1:A:68:MET:HG2	1:A:95:PHE:CE1	0.50	2.41	15	1
1:A:28:ASN:ND2	1:A:88:TYR:CZ	0.50	2.79	19	1
1:A:50:LEU:CG	1:A:137:TRP:CE3	0.50	2.94	9	19
1:A:93:LYS:CG	1:A:118:LEU:HD13	0.50	2.36	2	1
1:A:95:PHE:CE1	1:A:118:LEU:CB	0.50	2.94	17	2
1:A:68:MET:SD	1:A:93:LYS:CB	0.50	3.00	3	2
1:A:105:ASP:HB2	1:A:112:HIS:O	0.50	2.07	13	1
1:A:29:ILE:CG2	1:A:90:LEU:HB3	0.50	2.36	1	3
1:A:106:ASP:HB3	1:A:110:TYR:CD1	0.50	2.41	9	2
1:A:65:ASP:O	1:A:96:MET:HE1	0.50	2.07	18	1
1:A:112:HIS:O	1:A:114:PHE:CE1	0.50	2.65	18	1
1:A:112:HIS:O	1:A:112:HIS:ND1	0.50	2.45	20	4
1:A:112:HIS:CD2	1:A:128:ALA:O	0.50	2.65	5	5
1:A:26:GLN:NE2	1:A:27:LYS:NZ	0.50	2.60	11	1
1:A:106:ASP:HB3	1:A:110:TYR:CG	0.50	2.42	19	1
1:A:113:ALA:HA	1:A:126:PHE:O	0.50	2.06	9	14
1:A:128:ALA:HB2	1:A:137:TRP:CH2	0.50	2.39	14	2
1:A:113:ALA:CA	1:A:126:PHE:O	0.50	2.59	17	5
1:A:101:ILE:CG1	1:A:116:ILE:HD12	0.50	2.36	14	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:TRP:CH2	1:A:64:PHE:CE2	0.50	3.00	19	1
1:A:29:ILE:HD12	1:A:29:ILE:N	0.50	2.21	14	1
1:A:47:GLU:HB3	1:A:62:PHE:CZ	0.50	2.41	3	2
1:A:44:PHE:CD1	1:A:47:GLU:CD	0.50	2.86	12	1
1:A:31:GLY:O	1:A:32:TRP:O	0.49	2.30	16	2
1:A:29:ILE:O	1:A:88:TYR:O	0.49	2.29	12	9
1:A:50:LEU:CD2	1:A:137:TRP:CD2	0.49	2.95	14	16
1:A:51:THR:CG2	1:A:127:SER:HB2	0.49	2.37	7	4
1:A:93:LYS:O	1:A:95:PHE:N	0.49	2.45	8	5
1:A:62:PHE:HB3	1:A:64:PHE:CE1	0.49	2.42	16	2
1:A:112:HIS:O	1:A:127:SER:HA	0.49	2.07	9	1
1:A:64:PHE:CE2	1:A:69:ILE:HG13	0.49	2.42	10	2
1:A:98:LYS:CG	1:A:145:GLN:OE1	0.49	2.60	10	1
1:A:136:ASN:O	1:A:140:ALA:CB	0.49	2.61	17	3
1:A:95:PHE:CZ	1:A:120:ASP:HB2	0.49	2.42	12	2
1:A:97:ARG:O	1:A:98:LYS:CG	0.49	2.60	13	1
1:A:96:MET:HG2	1:A:97:ARG:N	0.49	2.22	15	1
1:A:50:LEU:HD22	1:A:126:PHE:CG	0.49	2.42	14	4
1:A:44:PHE:CE2	1:A:47:GLU:OE2	0.49	2.66	13	1
1:A:95:PHE:CD1	1:A:120:ASP:HB2	0.49	2.42	18	1
1:A:50:LEU:CD1	1:A:61:ILE:HB	0.49	2.38	12	17
1:A:94:PHE:C	1:A:95:PHE:CD1	0.49	2.85	12	3
1:A:131:ALA:O	1:A:134:LYS:CG	0.49	2.60	13	3
1:A:67:LEU:HD22	1:A:94:PHE:CB	0.49	2.37	15	1
1:A:48:GLY:O	1:A:61:ILE:O	0.49	2.31	11	12
1:A:60:HIS:HB2	1:A:88:TYR:CE2	0.49	2.42	15	2
1:A:114:PHE:O	1:A:125:ILE:HA	0.49	2.06	11	10
1:A:64:PHE:CE2	1:A:69:ILE:HB	0.49	2.42	2	3
1:A:93:LYS:HG2	1:A:118:LEU:HD13	0.49	1.84	2	1
1:A:57:HIS:CE1	1:A:73:SER:O	0.49	2.65	9	1
1:A:44:PHE:CD1	1:A:47:GLU:OE2	0.49	2.66	12	1
1:A:28:ASN:OD1	1:A:88:TYR:CD1	0.49	2.65	15	1
1:A:114:PHE:HD1	1:A:116:ILE:HD11	0.49	1.68	2	4
1:A:68:MET:HG2	1:A:95:PHE:CE2	0.49	2.42	2	1
1:A:72:LYS:O	1:A:89:ARG:N	0.49	2.45	9	2
1:A:106:ASP:O	1:A:109:GLU:N	0.49	2.40	4	8
1:A:105:ASP:OD2	1:A:107:THR:HG23	0.49	2.08	5	2
1:A:67:LEU:HD21	1:A:92:GLU:CD	0.49	2.27	6	1
1:A:64:PHE:HB2	1:A:67:LEU:O	0.49	2.08	16	11
1:A:92:GLU:O	1:A:93:LYS:CE	0.49	2.61	1	1
1:A:95:PHE:O	1:A:97:ARG:N	0.49	2.46	5	8

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:ASN:O	1:A:88:TYR:C	0.49	2.52	3	5
1:A:57:HIS:ND1	1:A:74:ASN:ND2	0.49	2.60	13	2
1:A:45:ILE:HG21	1:A:63:LEU:HD21	0.49	1.84	17	2
1:A:68:MET:CG	1:A:95:PHE:CE2	0.49	2.96	5	2
1:A:63:LEU:H	1:A:63:LEU:HD23	0.49	1.68	11	4
1:A:68:MET:HE1	1:A:141:LEU:HD11	0.49	1.85	12	2
1:A:118:LEU:O	1:A:118:LEU:CD1	0.49	2.60	10	1
1:A:30:ASP:CG	1:A:31:GLY:N	0.48	2.65	1	13
1:A:68:MET:HG2	1:A:95:PHE:CZ	0.48	2.42	15	2
1:A:73:SER:HA	1:A:88:TYR:CD1	0.48	2.43	20	3
1:A:50:LEU:CD2	1:A:126:PHE:CG	0.48	2.95	15	6
1:A:120:ASP:O	1:A:122:ASN:N	0.48	2.46	10	1
1:A:93:LYS:HB3	1:A:95:PHE:CD1	0.48	2.43	11	1
1:A:105:ASP:CG	1:A:106:ASP:N	0.48	2.63	17	2
1:A:64:PHE:CZ	1:A:69:ILE:CG2	0.48	2.96	2	1
1:A:70:CYS:SG	1:A:93:LYS:CD	0.48	3.01	16	2
1:A:128:ALA:HA	1:A:137:TRP:CZ3	0.48	2.43	13	3
1:A:62:PHE:O	1:A:69:ILE:CG2	0.48	2.62	18	2
1:A:59:ARG:HD2	1:A:61:ILE:HD11	0.48	1.84	7	1
1:A:60:HIS:CE1	1:A:88:TYR:CZ	0.48	3.01	12	1
1:A:99:VAL:HG23	1:A:100:GLN:N	0.48	2.23	15	1
1:A:111:LYS:HG3	1:A:112:HIS:N	0.48	2.23	12	7
1:A:29:ILE:C	1:A:29:ILE:HD12	0.48	2.28	20	4
1:A:61:ILE:CG2	1:A:68:MET:HE1	0.48	2.38	11	1
1:A:51:THR:O	1:A:127:SER:N	0.48	2.46	9	10
1:A:96:MET:O	1:A:144:LEU:HB3	0.48	2.08	18	4
1:A:59:ARG:CD	1:A:88:TYR:CE2	0.48	2.96	8	1
1:A:28:ASN:O	1:A:88:TYR:HB2	0.48	2.08	17	3
1:A:112:HIS:O	1:A:127:SER:OG	0.48	2.31	12	1
1:A:67:LEU:HD13	1:A:94:PHE:HA	0.48	1.86	19	2
1:A:86:ALA:C	1:A:88:TYR:N	0.48	2.64	6	4
1:A:118:LEU:O	1:A:120:ASP:N	0.48	2.47	12	3
1:A:71:CYS:SG	1:A:71:CYS:O	0.48	2.71	4	1
1:A:109:GLU:CG	1:A:109:GLU:O	0.48	2.61	15	1
1:A:116:ILE:HD11	1:A:126:PHE:CG	0.48	2.44	18	2
1:A:69:ILE:CD1	1:A:71:CYS:SG	0.47	3.02	1	1
1:A:106:ASP:C	1:A:107:THR:CG2	0.47	2.76	7	3
1:A:96:MET:SD	1:A:97:ARG:N	0.47	2.87	10	2
1:A:26:GLN:HG2	1:A:32:TRP:CE3	0.47	2.43	18	1
1:A:100:GLN:O	1:A:117:ILE:N	0.47	2.47	6	9
1:A:117:ILE:HA	1:A:122:ASN:O	0.47	2.08	18	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:59:ARG:HD3	1:A:88:TYR:CE1	0.47	2.44	8	1
1:A:105:ASP:HB3	1:A:114:PHE:N	0.47	2.23	13	1
1:A:61:ILE:HG23	1:A:70:CYS:HB3	0.47	1.86	19	1
1:A:61:ILE:CD1	1:A:70:CYS:HB3	0.47	2.40	6	4
1:A:52:ARG:N	1:A:57:HIS:O	0.47	2.47	17	3
1:A:110:TYR:CD1	1:A:110:TYR:N	0.47	2.82	15	3
1:A:47:GLU:OE1	1:A:62:PHE:CE1	0.47	2.67	12	1
1:A:29:ILE:HD12	1:A:86:ALA:CB	0.47	2.40	16	1
1:A:95:PHE:CE2	1:A:141:LEU:HD21	0.47	2.43	2	1
1:A:55:ALA:O	1:A:56:LYS:HB3	0.47	2.08	11	2
1:A:101:ILE:HG21	1:A:138:MET:HA	0.47	1.86	13	1
1:A:111:LYS:HE2	1:A:112:HIS:CE1	0.47	2.43	20	1
1:A:132:GLU:O	1:A:136:ASN:N	0.47	2.39	17	4
1:A:50:LEU:CG	1:A:137:TRP:CZ3	0.47	2.97	19	17
1:A:68:MET:HB2	1:A:95:PHE:HB2	0.47	1.86	3	2
1:A:52:ARG:O	1:A:52:ARG:CG	0.47	2.63	4	1
1:A:66:GLY:C	1:A:96:MET:SD	0.47	2.93	6	2
1:A:47:GLU:HB3	1:A:62:PHE:CE2	0.47	2.44	8	1
1:A:106:ASP:CB	1:A:110:TYR:CD2	0.47	2.98	19	1
1:A:57:HIS:NE2	1:A:74:ASN:ND2	0.47	2.63	2	1
1:A:58:GLU:C	1:A:59:ARG:CG	0.47	2.82	5	1
1:A:116:ILE:O	1:A:123:SER:HA	0.47	2.09	13	4
1:A:120:ASP:O	1:A:121:GLU:C	0.47	2.53	10	1
1:A:136:ASN:O	1:A:140:ALA:HB2	0.47	2.10	11	4
1:A:27:LYS:N	1:A:27:LYS:HE3	0.47	2.25	14	1
1:A:90:LEU:HD22	1:A:91:LYS:H	0.47	1.70	9	1
1:A:69:ILE:CD1	1:A:91:LYS:O	0.47	2.63	14	1
1:A:51:THR:HG22	1:A:127:SER:CB	0.47	2.39	17	1
1:A:95:PHE:CE1	1:A:118:LEU:HB2	0.47	2.45	17	1
1:A:32:TRP:O	1:A:32:TRP:CD1	0.47	2.68	7	1
1:A:116:ILE:N	1:A:116:ILE:CD1	0.47	2.74	20	5
1:A:111:LYS:HE3	1:A:112:HIS:CG	0.47	2.45	10	1
1:A:44:PHE:CE2	1:A:47:GLU:HB3	0.47	2.45	11	1
1:A:111:LYS:CE	1:A:112:HIS:NE2	0.47	2.77	20	1
1:A:95:PHE:O	1:A:98:LYS:N	0.47	2.39	1	3
1:A:118:LEU:C	1:A:119:LYS:O	0.47	2.53	10	1
1:A:58:GLU:O	1:A:59:ARG:CG	0.47	2.63	12	1
1:A:134:LYS:HG3	1:A:135:ASN:N	0.46	2.25	1	5
1:A:102:ASN:O	1:A:115:GLU:O	0.46	2.34	14	9
1:A:67:LEU:HD13	1:A:94:PHE:HD1	0.46	1.59	7	1
1:A:53:VAL:HB	1:A:125:ILE:CG2	0.46	2.40	9	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:95:PHE:HD1	1:A:99:VAL:HG12	0.46	1.68	1	1
1:A:56:LYS:O	1:A:57:HIS:ND1	0.46	2.49	5	7
1:A:45:ILE:HG12	1:A:65:ASP:N	0.46	2.25	16	2
1:A:112:HIS:ND1	1:A:128:ALA:O	0.46	2.47	7	1
1:A:73:SER:HB3	1:A:88:TYR:CZ	0.46	2.46	11	2
1:A:95:PHE:CD1	1:A:95:PHE:C	0.46	2.89	1	1
1:A:95:PHE:CG	1:A:99:VAL:CG1	0.46	2.96	2	3
1:A:67:LEU:CD1	1:A:68:MET:O	0.46	2.62	16	2
1:A:59:ARG:NH2	1:A:124:VAL:CG1	0.46	2.78	13	2
1:A:59:ARG:HD3	1:A:73:SER:CB	0.46	2.40	19	1
1:A:95:PHE:C	1:A:97:ARG:N	0.46	2.68	5	9
1:A:106:ASP:HB2	1:A:110:TYR:CE2	0.46	2.45	1	3
1:A:116:ILE:HG13	1:A:126:PHE:CG	0.46	2.45	1	3
1:A:62:PHE:O	1:A:64:PHE:CE1	0.46	2.68	6	2
1:A:71:CYS:HA	1:A:89:ARG:O	0.46	2.10	12	2
1:A:116:ILE:O	1:A:117:ILE:CG1	0.46	2.63	4	4
1:A:145:GLN:O	1:A:145:GLN:NE2	0.46	2.48	13	1
1:A:95:PHE:CD2	1:A:118:LEU:HB3	0.46	2.46	15	1
1:A:142:ILE:HD13	1:A:145:GLN:HG2	0.46	1.88	16	1
1:A:31:GLY:N	1:A:90:LEU:HD12	0.46	2.24	2	1
1:A:130:SER:HB3	1:A:133:GLU:CG	0.46	2.40	10	5
1:A:142:ILE:HG22	1:A:146:TYR:CE2	0.46	2.44	15	3
1:A:51:THR:CG2	1:A:127:SER:HB3	0.46	2.40	11	1
1:A:68:MET:CG	1:A:95:PHE:CZ	0.46	2.98	15	1
1:A:111:LYS:CE	1:A:112:HIS:CD2	0.46	2.99	17	1
1:A:61:ILE:HG23	1:A:68:MET:CE	0.46	2.41	1	1
1:A:130:SER:HB2	1:A:133:GLU:CG	0.46	2.40	14	6
1:A:68:MET:HG3	1:A:95:PHE:CE2	0.46	2.46	5	1
1:A:100:GLN:O	1:A:117:ILE:O	0.46	2.34	19	3
1:A:114:PHE:CZ	1:A:128:ALA:HB3	0.46	2.46	9	1
1:A:118:LEU:C	1:A:120:ASP:N	0.46	2.68	12	6
1:A:45:ILE:HG22	1:A:46:MET:HG2	0.46	1.88	10	1
1:A:72:LYS:O	1:A:88:TYR:CG	0.46	2.69	17	1
1:A:128:ALA:CB	1:A:137:TRP:CH2	0.46	2.99	2	4
1:A:98:LYS:O	1:A:99:VAL:CG1	0.46	2.64	8	3
1:A:93:LYS:C	1:A:95:PHE:CD2	0.46	2.89	7	1
1:A:30:ASP:OD2	1:A:89:ARG:CZ	0.46	2.63	10	1
1:A:50:LEU:HD22	1:A:126:PHE:CE2	0.45	2.46	1	4
1:A:59:ARG:HD3	1:A:88:TYR:CZ	0.45	2.46	8	1
1:A:26:GLN:O	1:A:29:ILE:HD11	0.45	2.11	10	1
1:A:105:ASP:HB3	1:A:113:ALA:O	0.45	2.09	15	2

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:GLU:CG	1:A:92:GLU:O	0.45	2.63	16	1
1:A:132:GLU:O	1:A:135:ASN:N	0.45	2.48	17	1
1:A:118:LEU:O	1:A:121:GLU:N	0.45	2.47	20	1
1:A:59:ARG:CD	1:A:73:SER:CB	0.45	2.95	8	2
1:A:92:GLU:HG2	1:A:94:PHE:CZ	0.45	2.46	13	1
1:A:130:SER:O	1:A:131:ALA:C	0.45	2.55	17	1
1:A:68:MET:CG	1:A:96:MET:HG2	0.45	2.41	1	1
1:A:29:ILE:C	1:A:29:ILE:CD1	0.45	2.84	6	1
1:A:68:MET:CG	1:A:95:PHE:CE1	0.45	2.99	15	1
1:A:130:SER:O	1:A:133:GLU:N	0.45	2.50	8	5
1:A:57:HIS:CD2	1:A:74:ASN:HB2	0.45	2.47	5	1
1:A:50:LEU:CD1	1:A:61:ILE:CG1	0.45	2.91	12	2
1:A:59:ARG:HD3	1:A:88:TYR:CD1	0.45	2.46	8	1
1:A:135:ASN:O	1:A:138:MET:HE2	0.45	2.12	16	1
1:A:68:MET:CB	1:A:95:PHE:HB2	0.45	2.42	17	4
1:A:32:TRP:CZ3	1:A:64:PHE:CE2	0.45	3.05	7	1
1:A:59:ARG:CD	1:A:73:SER:HB3	0.45	2.42	19	2
1:A:29:ILE:C	1:A:86:ALA:HB1	0.45	2.29	19	1
1:A:116:ILE:O	1:A:124:VAL:N	0.45	2.50	12	1
1:A:128:ALA:CA	1:A:137:TRP:CH2	0.45	3.00	2	5
1:A:67:LEU:HD12	1:A:67:LEU:O	0.45	2.12	3	1
1:A:28:ASN:O	1:A:28:ASN:OD1	0.45	2.35	6	1
1:A:62:PHE:O	1:A:69:ILE:O	0.45	2.35	19	2
1:A:106:ASP:C	1:A:110:TYR:HB2	0.45	2.31	15	1
1:A:55:ALA:O	1:A:56:LYS:C	0.45	2.55	18	2
1:A:105:ASP:CG	1:A:113:ALA:O	0.45	2.55	3	8
1:A:53:VAL:O	1:A:125:ILE:CG2	0.45	2.63	8	4
1:A:45:ILE:CD1	1:A:65:ASP:HA	0.45	2.42	7	1
1:A:57:HIS:NE2	1:A:58:GLU:O	0.45	2.50	9	1
1:A:95:PHE:CZ	1:A:120:ASP:CG	0.45	2.90	12	1
1:A:114:PHE:CE2	1:A:134:LYS:HG3	0.45	2.46	15	1
1:A:68:MET:O	1:A:93:LYS:CA	0.45	2.65	13	2
1:A:30:ASP:CB	1:A:89:ARG:CG	0.45	2.94	14	1
1:A:63:LEU:CD2	1:A:96:MET:SD	0.45	2.99	1	1
1:A:133:GLU:OE1	1:A:137:TRP:NE1	0.45	2.50	1	1
1:A:51:THR:HB	1:A:127:SER:CB	0.45	2.42	11	1
1:A:28:ASN:ND2	1:A:87:GLU:OE1	0.44	2.51	6	1
1:A:101:ILE:HG22	1:A:142:ILE:HG12	0.44	1.89	14	1
1:A:90:LEU:C	1:A:90:LEU:CD2	0.44	2.76	15	2
1:A:48:GLY:O	1:A:61:ILE:N	0.44	2.51	9	3
1:A:114:PHE:CZ	1:A:126:PHE:HB3	0.44	2.46	13	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:120:ASP:N	1:A:120:ASP:OD1	0.44	2.50	20	1
1:A:99:VAL:N	1:A:145:GLN:OE1	0.44	2.50	13	2
1:A:112:HIS:CG	1:A:128:ALA:O	0.44	2.71	1	1
1:A:52:ARG:HA	1:A:125:ILE:O	0.44	2.12	15	4
1:A:28:ASN:CA	1:A:86:ALA:HA	0.44	2.43	20	4
1:A:63:LEU:HD12	1:A:68:MET:CB	0.44	2.38	12	1
1:A:100:GLN:CB	1:A:117:ILE:O	0.44	2.65	1	1
1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CD1	0.44	2.84	8	6
1:A:47:GLU:O	1:A:47:GLU:CG	0.44	2.65	2	1
1:A:111:LYS:HE3	1:A:112:HIS:CE1	0.44	2.48	9	1
1:A:61:ILE:CG2	1:A:68:MET:HE2	0.44	2.42	11	1
1:A:113:ALA:C	1:A:114:PHE:CD1	0.44	2.90	14	2
1:A:123:SER:C	1:A:124:VAL:CG2	0.44	2.85	18	1
1:A:28:ASN:N	1:A:86:ALA:HA	0.44	2.28	20	3
1:A:95:PHE:CB	1:A:99:VAL:HG11	0.44	2.42	17	4
1:A:96:MET:C	1:A:96:MET:SD	0.44	2.96	7	1
1:A:125:ILE:N	1:A:125:ILE:CD1	0.44	2.78	7	1
1:A:72:LYS:O	1:A:88:TYR:HA	0.44	2.13	12	2
1:A:49:THR:HG23	1:A:60:HIS:CG	0.44	2.48	7	3
1:A:46:MET:HE2	1:A:63:LEU:HD23	0.44	1.90	19	1
1:A:63:LEU:CD1	1:A:63:LEU:C	0.44	2.81	20	2
1:A:112:HIS:O	1:A:113:ALA:O	0.44	2.36	13	1
1:A:119:LYS:C	1:A:121:GLU:H	0.44	2.16	20	1
1:A:99:VAL:HB	1:A:141:LEU:HD23	0.44	1.90	1	1
1:A:64:PHE:O	1:A:67:LEU:N	0.44	2.50	2	1
1:A:49:THR:HB	1:A:60:HIS:CG	0.44	2.47	11	3
1:A:96:MET:HG3	1:A:97:ARG:N	0.44	2.26	6	1
1:A:100:GLN:CA	1:A:117:ILE:O	0.44	2.66	7	2
1:A:53:VAL:HG12	1:A:54:GLY:N	0.44	2.24	9	1
1:A:55:ALA:C	1:A:56:LYS:CG	0.44	2.86	9	1
1:A:69:ILE:HD11	1:A:90:LEU:HA	0.43	1.90	1	1
1:A:72:LYS:O	1:A:88:TYR:CA	0.43	2.67	9	3
1:A:68:MET:O	1:A:93:LYS:HB2	0.43	2.14	9	5
1:A:29:ILE:CB	1:A:90:LEU:HB2	0.43	2.43	7	1
1:A:107:THR:HG23	1:A:112:HIS:CD2	0.43	2.49	18	1
1:A:93:LYS:HG2	1:A:118:LEU:CD1	0.43	2.44	2	1
1:A:28:ASN:O	1:A:88:TYR:O	0.43	2.35	17	3
1:A:118:LEU:HD12	1:A:122:ASN:HB2	0.43	1.90	7	1
1:A:28:ASN:ND2	1:A:88:TYR:CG	0.43	2.86	15	1
1:A:57:HIS:CD2	1:A:72:LYS:HD2	0.43	2.49	19	1
1:A:101:ILE:HD13	1:A:138:MET:HA	0.43	1.89	17	4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:73:SER:HB2	1:A:88:TYR:CG	0.43	2.49	5	3
1:A:70:CYS:SG	1:A:93:LYS:CE	0.43	3.07	7	1
1:A:98:LYS:C	1:A:99:VAL:CG1	0.43	2.87	13	4
1:A:95:PHE:CA	1:A:99:VAL:CG1	0.43	2.96	11	2
1:A:59:ARG:NH2	1:A:124:VAL:HG11	0.43	2.29	12	1
1:A:105:ASP:HA	1:A:112:HIS:O	0.43	2.13	13	1
1:A:106:ASP:HB2	1:A:110:TYR:CE1	0.43	2.48	16	1
1:A:139:ALA:O	1:A:143:SER:CB	0.43	2.67	20	1
1:A:95:PHE:CE1	1:A:118:LEU:HB3	0.43	2.49	3	2
1:A:98:LYS:C	1:A:99:VAL:HG13	0.43	2.33	8	3
1:A:96:MET:O	1:A:96:MET:SD	0.43	2.76	12	1
1:A:99:VAL:O	1:A:145:GLN:CG	0.43	2.66	12	1
1:A:101:ILE:O	1:A:101:ILE:HG23	0.43	2.12	14	1
1:A:27:LYS:O	1:A:28:ASN:ND2	0.43	2.52	18	1
1:A:57:HIS:CG	1:A:72:LYS:HD2	0.43	2.49	19	1
1:A:59:ARG:NE	1:A:59:ARG:HA	0.43	2.27	8	2
1:A:65:ASP:O	1:A:96:MET:SD	0.43	2.76	13	1
1:A:30:ASP:OD2	1:A:89:ARG:NH1	0.43	2.52	14	1
1:A:135:ASN:O	1:A:139:ALA:HB2	0.43	2.12	7	2
1:A:44:PHE:CZ	1:A:47:GLU:HB3	0.43	2.49	11	1
1:A:45:ILE:CG1	1:A:65:ASP:HA	0.43	2.44	11	1
1:A:144:LEU:C	1:A:146:TYR:N	0.43	2.71	10	12
1:A:113:ALA:CB	1:A:127:SER:OG	0.43	2.57	4	2
1:A:124:VAL:C	1:A:125:ILE:HD12	0.43	2.34	8	2
1:A:95:PHE:O	1:A:98:LYS:O	0.43	2.37	9	3
1:A:59:ARG:HA	1:A:71:CYS:O	0.43	2.14	13	1
1:A:26:GLN:HG3	1:A:27:LYS:N	0.43	2.29	16	1
1:A:61:ILE:CD1	1:A:70:CYS:HB2	0.43	2.44	4	2
1:A:51:THR:CB	1:A:127:SER:HB2	0.43	2.43	10	2
1:A:45:ILE:HG13	1:A:65:ASP:N	0.43	2.29	9	1
1:A:44:PHE:CZ	1:A:62:PHE:CE1	0.43	3.07	10	1
1:A:142:ILE:HG22	1:A:146:TYR:CD2	0.43	2.49	15	1
1:A:64:PHE:C	1:A:66:GLY:N	0.42	2.72	2	4
1:A:49:THR:HG23	1:A:60:HIS:CD2	0.42	2.49	5	1
1:A:29:ILE:HA	1:A:90:LEU:HB3	0.42	1.91	6	1
1:A:47:GLU:N	1:A:47:GLU:OE1	0.42	2.51	17	1
1:A:128:ALA:HB3	1:A:134:LYS:CG	0.42	2.41	17	1
1:A:101:ILE:CG2	1:A:142:ILE:HG12	0.42	2.44	4	4
1:A:64:PHE:O	1:A:96:MET:SD	0.42	2.77	9	1
1:A:142:ILE:CG2	1:A:146:TYR:CE2	0.42	3.02	10	1
1:A:59:ARG:CD	1:A:88:TYR:CD2	0.42	3.02	8	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:120:ASP:C	1:A:122:ASN:N	0.42	2.72	10	1
1:A:95:PHE:CG	1:A:118:LEU:HB3	0.42	2.49	4	1
1:A:96:MET:O	1:A:96:MET:CG	0.42	2.66	7	1
1:A:101:ILE:HG13	1:A:102:ASN:N	0.42	2.29	9	1
1:A:51:THR:HG22	1:A:127:SER:HB3	0.42	1.90	11	1
1:A:61:ILE:HG21	1:A:68:MET:HE1	0.42	1.90	11	1
1:A:64:PHE:O	1:A:67:LEU:O	0.42	2.37	12	1
1:A:128:ALA:CB	1:A:137:TRP:CE3	0.42	2.86	13	1
1:A:95:PHE:O	1:A:98:LYS:C	0.42	2.58	18	1
1:A:52:ARG:CG	1:A:57:HIS:HB2	0.42	2.44	4	1
1:A:116:ILE:HD11	1:A:126:PHE:HB2	0.42	1.91	12	2
1:A:68:MET:HE3	1:A:141:LEU:HD11	0.42	1.91	10	1
1:A:65:ASP:O	1:A:66:GLY:C	0.42	2.58	14	1
1:A:114:PHE:CZ	1:A:134:LYS:HB2	0.42	2.49	18	1
1:A:66:GLY:O	1:A:96:MET:CE	0.42	2.68	19	1
1:A:89:ARG:CG	1:A:90:LEU:N	0.42	2.82	7	1
1:A:59:ARG:HB2	1:A:71:CYS:O	0.42	2.15	11	1
1:A:60:HIS:HB2	1:A:71:CYS:SG	0.42	2.55	11	2
1:A:94:PHE:O	1:A:94:PHE:CG	0.42	2.71	15	1
1:A:106:ASP:CB	1:A:110:TYR:CD1	0.42	3.03	16	1
1:A:68:MET:CE	1:A:69:ILE:C	0.42	2.88	20	1
1:A:53:VAL:HG13	1:A:54:GLY:H	0.42	1.73	7	2
1:A:56:LYS:O	1:A:74:ASN:ND2	0.42	2.53	8	1
1:A:119:LYS:O	1:A:120:ASP:CB	0.42	2.67	9	1
1:A:44:PHE:CZ	1:A:47:GLU:OE1	0.42	2.73	3	1
1:A:73:SER:HA	1:A:88:TYR:CB	0.42	2.44	6	1
1:A:58:GLU:O	1:A:59:ARG:HG2	0.42	2.15	12	1
1:A:63:LEU:CB	1:A:68:MET:HA	0.42	2.45	14	1
1:A:67:LEU:HD22	1:A:94:PHE:HB3	0.42	1.92	15	1
1:A:142:ILE:HG22	1:A:146:TYR:CE1	0.42	2.50	20	1
1:A:61:ILE:HD11	1:A:70:CYS:SG	0.42	2.55	2	1
1:A:51:THR:O	1:A:125:ILE:O	0.42	2.37	18	1
1:A:67:LEU:CD1	1:A:94:PHE:N	0.42	2.83	19	1
1:A:44:PHE:CE2	1:A:62:PHE:CD1	0.41	3.08	5	1
1:A:55:ALA:O	1:A:56:LYS:HB2	0.41	2.15	9	2
1:A:59:ARG:HG3	1:A:71:CYS:O	0.41	2.14	8	1
1:A:145:GLN:O	1:A:145:GLN:OE1	0.41	2.38	20	1
1:A:68:MET:HB2	1:A:95:PHE:CB	0.41	2.46	3	1
1:A:26:GLN:CD	1:A:26:GLN:O	0.41	2.59	5	1
1:A:46:MET:HG2	1:A:63:LEU:CD2	0.41	2.45	5	1
1:A:98:LYS:HG3	1:A:119:LYS:CB	0.41	2.45	8	1

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:ILE:CG2	1:A:63:LEU:CD2	0.41	2.97	12	1
1:A:103:ASP:CB	1:A:114:PHE:HB3	0.41	2.44	14	1
1:A:44:PHE:O	1:A:45:ILE:C	0.41	2.59	2	1
1:A:144:LEU:O	1:A:146:TYR:N	0.41	2.54	2	1
1:A:63:LEU:HD22	1:A:96:MET:CE	0.41	2.45	1	1
1:A:64:PHE:C	1:A:66:GLY:H	0.41	2.18	1	1
1:A:99:VAL:HG21	1:A:141:LEU:CB	0.41	2.46	1	1
1:A:59:ARG:CG	1:A:72:LYS:HA	0.41	2.45	2	1
1:A:26:GLN:O	1:A:29:ILE:HG13	0.41	2.15	3	1
1:A:68:MET:O	1:A:93:LYS:CB	0.41	2.69	13	1
1:A:29:ILE:CB	1:A:90:LEU:HB3	0.41	2.45	20	1
1:A:107:THR:C	1:A:109:GLU:H	0.41	2.18	10	1
1:A:130:SER:CB	1:A:133:GLU:HG3	0.41	2.46	13	1
1:A:47:GLU:HB2	1:A:62:PHE:CE2	0.41	2.49	20	1
1:A:67:LEU:C	1:A:67:LEU:CD1	0.41	2.78	3	1
1:A:46:MET:SD	1:A:140:ALA:HB1	0.41	2.55	6	1
1:A:51:THR:OG1	1:A:58:GLU:CG	0.41	2.69	8	1
1:A:52:ARG:CZ	1:A:52:ARG:HB2	0.41	2.45	9	1
1:A:134:LYS:O	1:A:138:MET:CG	0.41	2.68	9	1
1:A:105:ASP:O	1:A:106:ASP:CG	0.41	2.58	10	1
1:A:60:HIS:O	1:A:71:CYS:SG	0.41	2.79	13	1
1:A:72:LYS:O	1:A:88:TYR:HB3	0.41	2.15	17	1
1:A:49:THR:CG2	1:A:60:HIS:HA	0.41	2.46	20	1
1:A:46:MET:HG2	1:A:63:LEU:HB3	0.41	1.93	6	1
1:A:120:ASP:O	1:A:121:GLU:HB2	0.41	2.15	8	1
1:A:95:PHE:CZ	1:A:118:LEU:CB	0.41	3.03	11	1
1:A:45:ILE:C	1:A:46:MET:HG2	0.41	2.36	14	1
1:A:132:GLU:CG	1:A:133:GLU:N	0.41	2.82	17	1
1:A:64:PHE:N	1:A:64:PHE:CD1	0.41	2.87	6	2
1:A:62:PHE:O	1:A:69:ILE:HG23	0.41	2.16	4	1
1:A:68:MET:HB2	1:A:93:LYS:O	0.41	2.15	6	1
1:A:30:ASP:CB	1:A:89:ARG:HG3	0.41	2.46	14	1
1:A:55:ALA:O	1:A:56:LYS:CG	0.41	2.69	14	1
1:A:63:LEU:HB3	1:A:68:MET:CG	0.41	2.46	14	1
1:A:68:MET:C	1:A:68:MET:SD	0.41	2.99	18	1
1:A:57:HIS:CD2	1:A:74:ASN:HA	0.41	2.51	20	1
1:A:101:ILE:CD1	1:A:116:ILE:CD1	0.41	2.85	20	1
1:A:130:SER:CB	1:A:133:GLU:HG2	0.41	2.46	4	1
1:A:44:PHE:CD1	1:A:47:GLU:HG3	0.41	2.51	12	1
1:A:64:PHE:CE2	1:A:69:ILE:HG12	0.41	2.51	13	1
1:A:96:MET:C	1:A:98:LYS:N	0.41	2.74	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:72:LYS:CB	1:A:89:ARG:HG3	0.40	2.46	3	1
1:A:45:ILE:CG2	1:A:46:MET:CG	0.40	2.99	14	1
1:A:109:GLU:O	1:A:109:GLU:CG	0.40	2.69	20	1
1:A:118:LEU:CD1	1:A:119:LYS:O	0.40	2.66	9	1
1:A:135:ASN:O	1:A:138:MET:HG3	0.40	2.15	9	1
1:A:98:LYS:C	1:A:145:GLN:OE1	0.40	2.60	10	1
1:A:101:ILE:HG22	1:A:142:ILE:CG1	0.40	2.47	14	1
1:A:124:VAL:O	1:A:125:ILE:CD1	0.40	2.60	18	1
1:A:61:ILE:HD12	1:A:68:MET:CE	0.40	2.46	2	1
1:A:92:GLU:OE2	1:A:94:PHE:CE2	0.40	2.74	5	1
1:A:59:ARG:CD	1:A:61:ILE:HD11	0.40	2.46	7	1
1:A:95:PHE:CE1	1:A:118:LEU:HD13	0.40	2.51	7	1
1:A:58:GLU:O	1:A:73:SER:N	0.40	2.45	12	1
1:A:68:MET:HG3	1:A:95:PHE:CE1	0.40	2.52	1	1
1:A:58:GLU:O	1:A:59:ARG:HG3	0.40	2.16	2	1
1:A:46:MET:HG2	1:A:63:LEU:CG	0.40	2.46	6	1
1:A:132:GLU:O	1:A:136:ASN:HB2	0.40	2.16	12	1
1:A:95:PHE:HD2	1:A:99:VAL:HG12	0.40	1.75	15	1
1:A:46:MET:O	1:A:46:MET:CG	0.40	2.70	17	1
1:A:30:ASP:OD2	1:A:31:GLY:N	0.40	2.55	18	1
1:A:45:ILE:HB	1:A:63:LEU:CD1	0.40	2.47	19	1
1:A:46:MET:HE2	1:A:46:MET:O	0.40	2.17	2	1
1:A:50:LEU:CD1	1:A:61:ILE:HG13	0.40	2.35	3	1
1:A:64:PHE:CD1	1:A:64:PHE:N	0.40	2.88	4	1
1:A:118:LEU:HD12	1:A:118:LEU:C	0.40	2.37	9	1

## 6.3 Torsion angles [\(i\)](#)

### 6.3.1 Protein backbone [\(i\)](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	103/130 (79%)	65±3 (63±3%)	26±2 (25±2%)	13±1 (12±1%)	1	6
All	All	2060/2600 (79%)	1292 (63%)	515 (25%)	253 (12%)	1	6

All 29 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	112	HIS	20
1	A	149	THR	20
1	A	29	ILE	17
1	A	32	TRP	17
1	A	55	ALA	15
1	A	108	ASN	15
1	A	107	THR	13
1	A	119	LYS	13
1	A	103	ASP	12
1	A	56	LYS	12
1	A	86	ALA	12
1	A	44	PHE	11
1	A	28	ASN	10
1	A	121	GLU	9
1	A	30	ASP	8
1	A	96	MET	8
1	A	94	PHE	8
1	A	111	LYS	7
1	A	106	ASP	6
1	A	87	GLU	5
1	A	109	GLU	4
1	A	45	ILE	2
1	A	117	ILE	2
1	A	88	TYR	2
1	A	98	LYS	1
1	A	120	ASP	1
1	A	113	ALA	1
1	A	65	ASP	1
1	A	105	ASP	1

### 6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	92/114 (81%)	52±4 (57±4%)	40±4 (43±4%)	<b>0</b> <b>3</b>
All	All	1840/2280 (81%)	1047 (57%)	793 (43%)	<b>0</b> <b>3</b>

All 82 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	49	THR	20
1	A	51	THR	20
1	A	90	LEU	20
1	A	101	ILE	20
1	A	132	GLU	20
1	A	146	TYR	20
1	A	149	THR	20
1	A	138	MET	19
1	A	141	LEU	19
1	A	148	SER	19
1	A	27	LYS	18
1	A	114	PHE	18
1	A	63	LEU	17
1	A	111	LYS	17
1	A	30	ASP	17
1	A	67	LEU	15
1	A	91	LYS	15
1	A	119	LYS	15
1	A	124	VAL	15
1	A	115	GLU	14
1	A	118	LEU	14
1	A	96	MET	14
1	A	62	PHE	13
1	A	150	LEU	13
1	A	104	LYS	13
1	A	46	MET	12
1	A	68	MET	12
1	A	92	GLU	12
1	A	123	SER	12
1	A	127	SER	12
1	A	134	LYS	12
1	A	112	HIS	12
1	A	130	SER	12
1	A	60	HIS	11
1	A	136	ASN	11
1	A	145	GLN	11
1	A	47	GLU	10
1	A	69	ILE	10
1	A	72	LYS	10
1	A	93	LYS	10
1	A	107	THR	10
1	A	97	ARG	10
1	A	52	ARG	10

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	56	LYS	10
1	A	100	GLN	9
1	A	106	ASP	9
1	A	59	ARG	9
1	A	147	ARG	9
1	A	98	LYS	9
1	A	26	GLN	8
1	A	89	ARG	8
1	A	121	GLU	8
1	A	122	ASN	7
1	A	44	PHE	7
1	A	129	LYS	7
1	A	143	SER	6
1	A	105	ASP	5
1	A	102	ASN	5
1	A	120	ASP	5
1	A	50	LEU	4
1	A	45	ILE	4
1	A	65	ASP	3
1	A	116	ILE	3
1	A	28	ASN	3
1	A	71	CYS	3
1	A	135	ASN	3
1	A	53	VAL	3
1	A	57	HIS	3
1	A	73	SER	2
1	A	88	TYR	2
1	A	74	ASN	2
1	A	108	ASN	2
1	A	70	CYS	2
1	A	109	GLU	1
1	A	125	ILE	1
1	A	95	PHE	1
1	A	110	TYR	1
1	A	29	ILE	1
1	A	99	VAL	1
1	A	58	GLU	1
1	A	103	ASP	1
1	A	133	GLU	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 monosaccharides 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