



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 19, 2022 – 07:00 PM EST

PDB ID : 1S7E
Title : Solution structure of HNF-6
Authors : Liao, X.; Sheng, W.
Deposited on : 2004-01-29

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 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

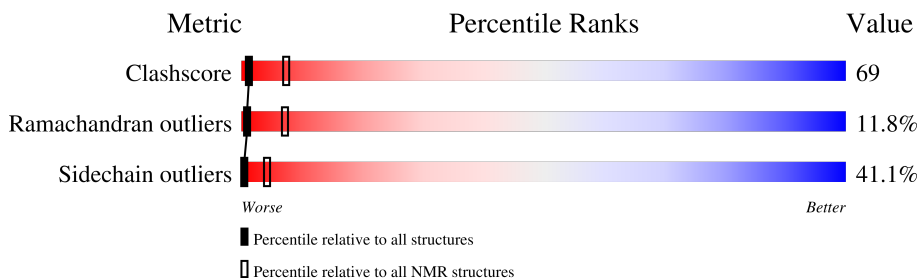
1 Overall quality at a glance

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 ≥ 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	147	

2 Ensemble composition and analysis i

This entry contains 20 models. Model 18 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest target function*.

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:7-A:71 (65)	0.49	18
2	A:107-A:152 (46)	0.31	11

Ill-defined regions of proteins are excluded from the global statistics.

Ligands and non-protein polymers are included in the analysis.

The models can be grouped into 3 clusters and 1 single-model cluster was found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2472 atoms, of which 1252 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Hepatocyte nuclear factor 6.

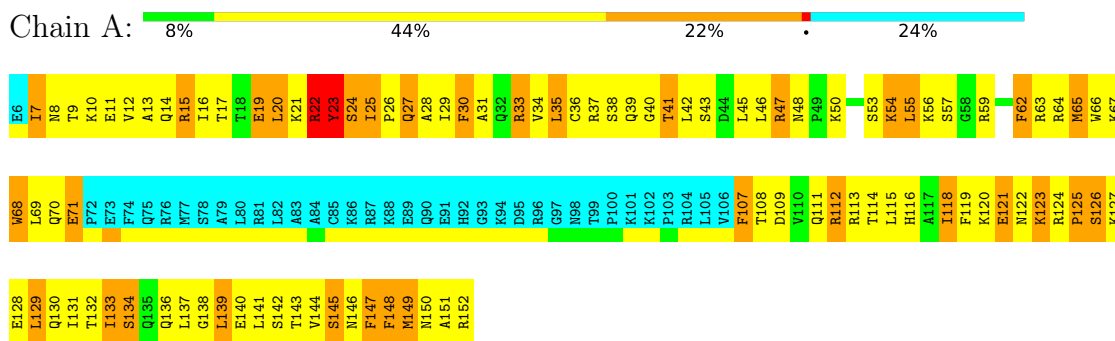
Mol	Chain	Residues	Atoms					Trace	
			Total	C	H	N	O		S
1	A	147	2472	766	1252	236	213	5	0

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: Hepatocyte nuclear factor 6

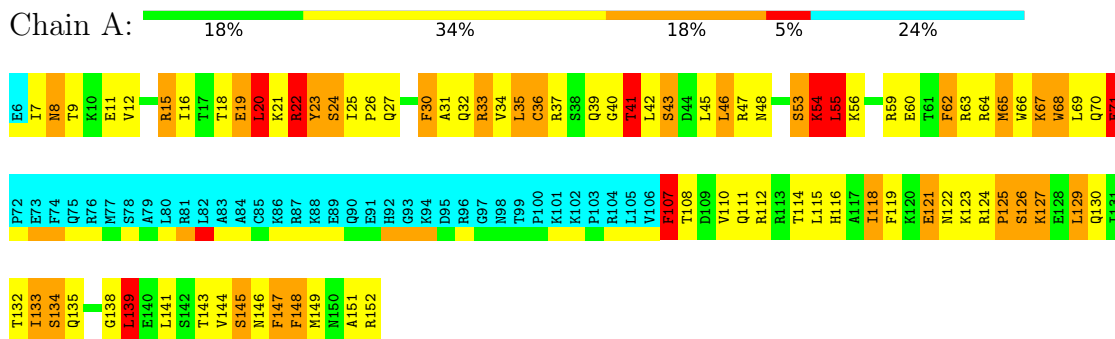


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

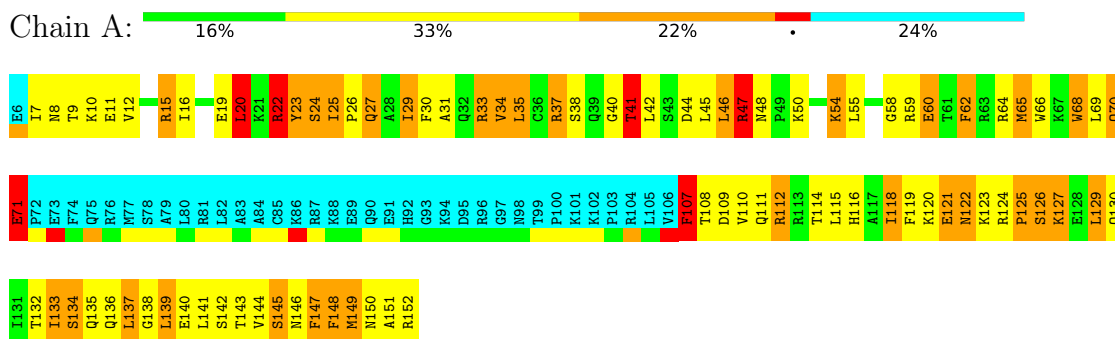
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Hepatocyte nuclear factor 6



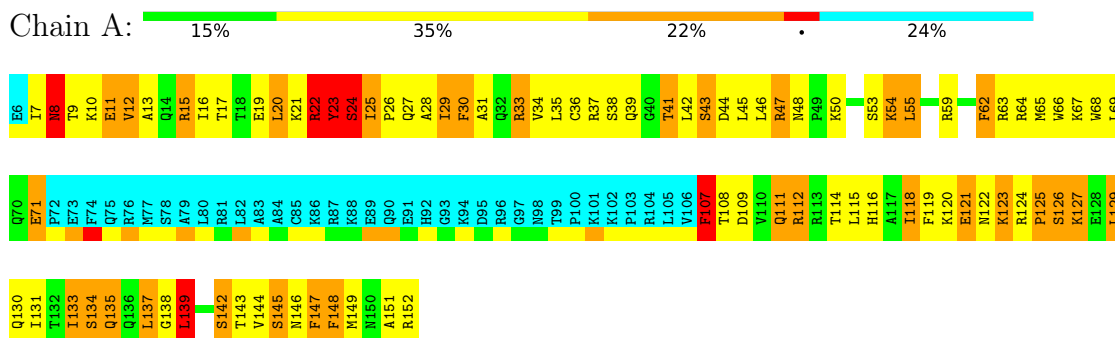
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Hepatocyte nuclear factor 6



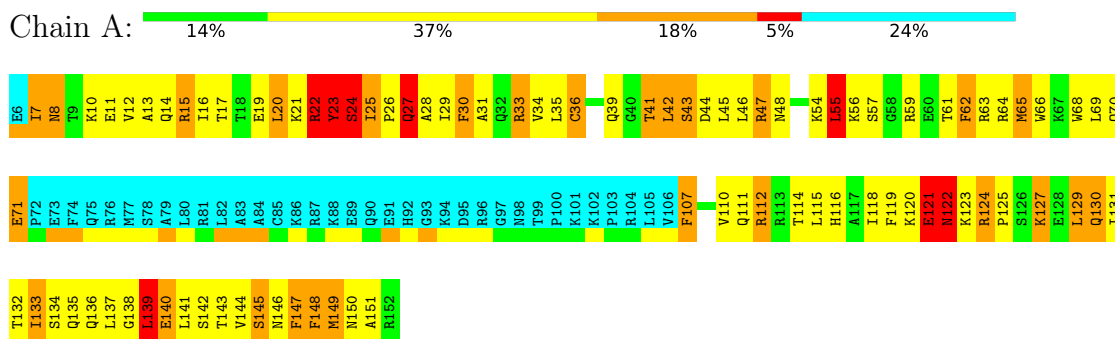
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Hepatocyte nuclear factor 6



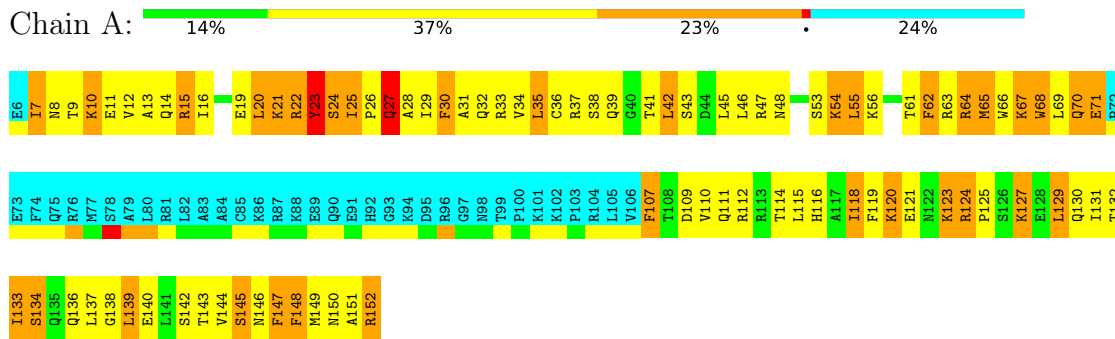
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Hepatocyte nuclear factor 6



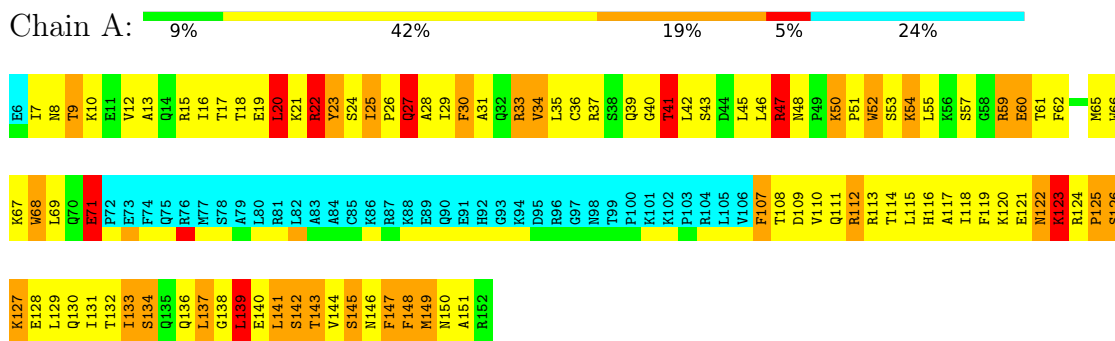
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Hepatocyte nuclear factor 6



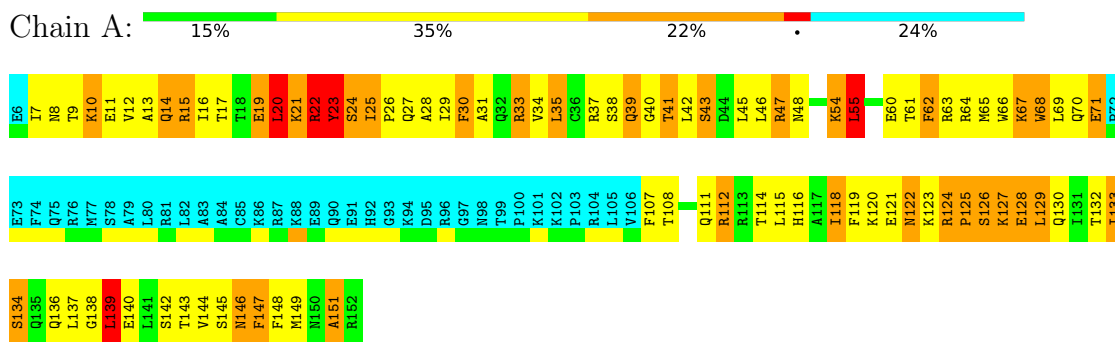
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Hepatocyte nuclear factor 6



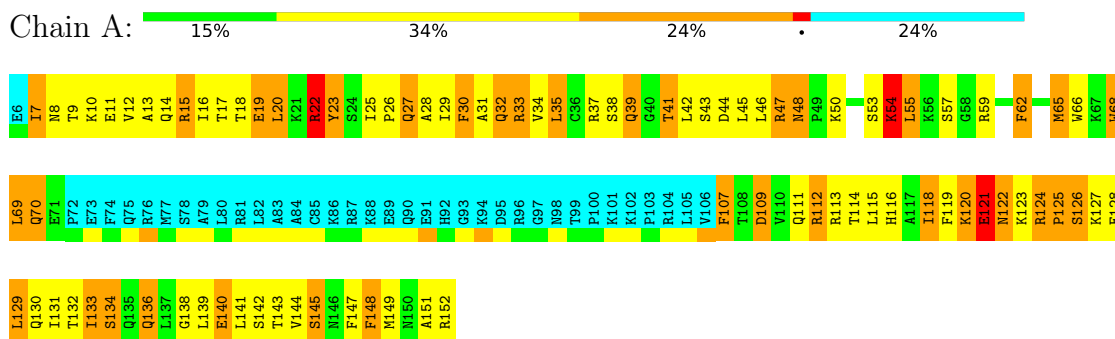
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Hepatocyte nuclear factor 6



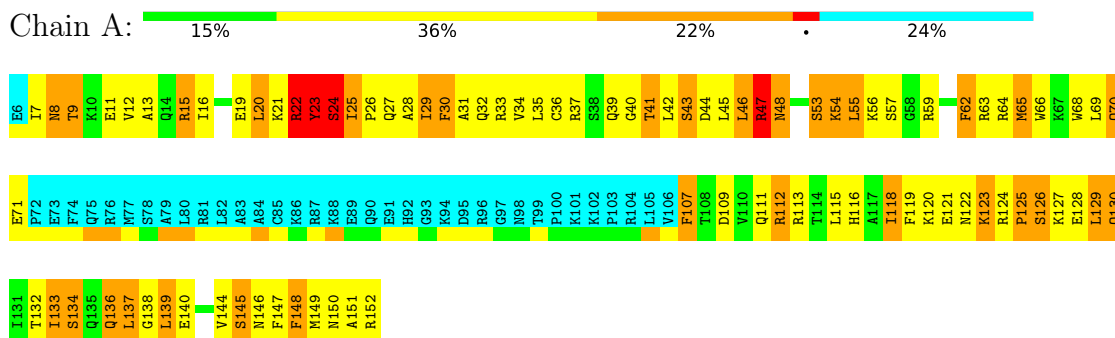
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Hepatocyte nuclear factor 6



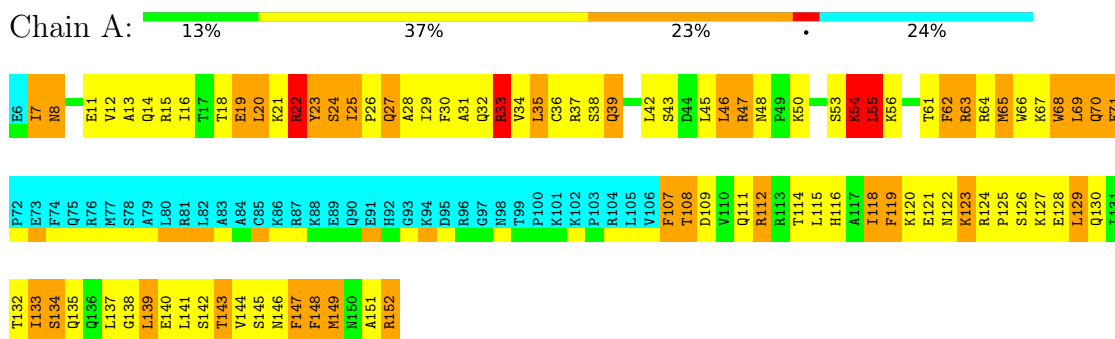
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Hepatocyte nuclear factor 6



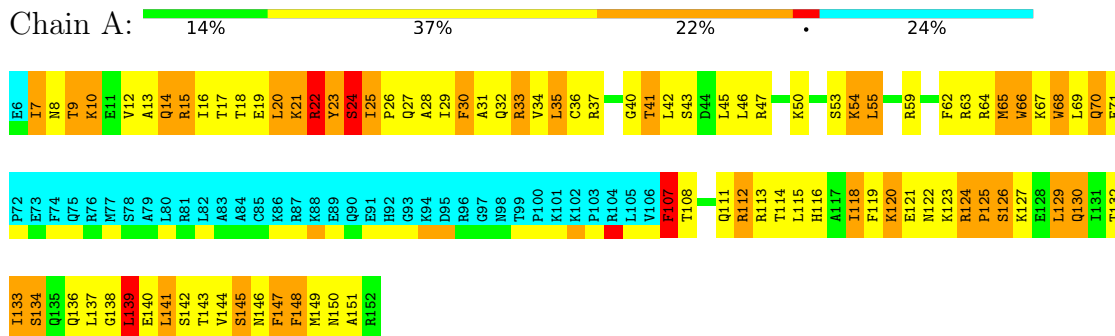
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Hepatocyte nuclear factor 6



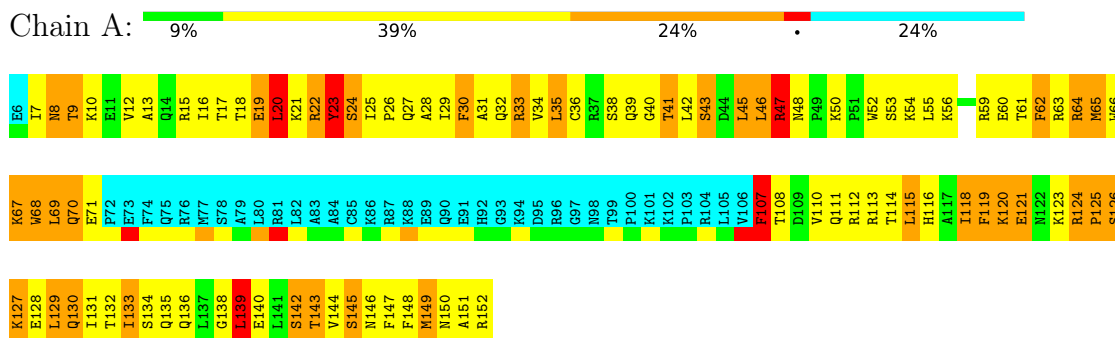
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Hepatocyte nuclear factor 6



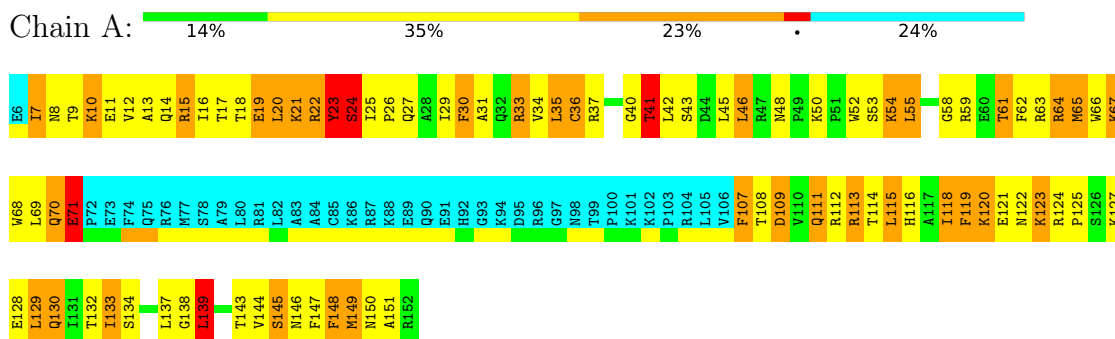
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Hepatocyte nuclear factor 6



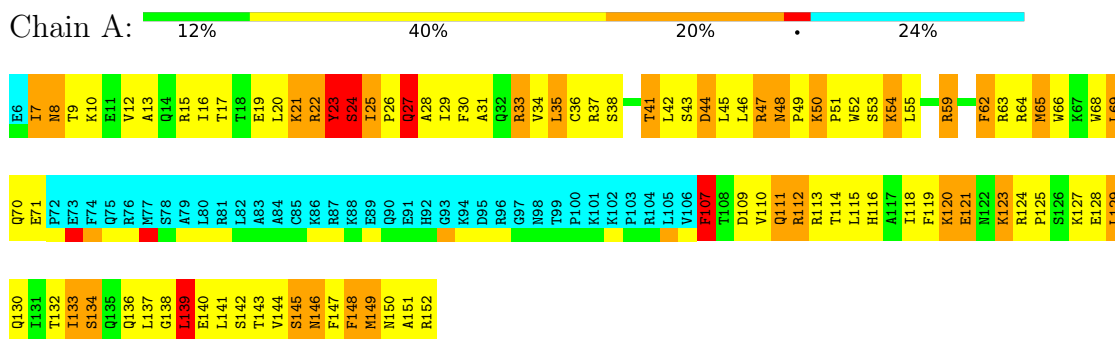
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Hepatocyte nuclear factor 6



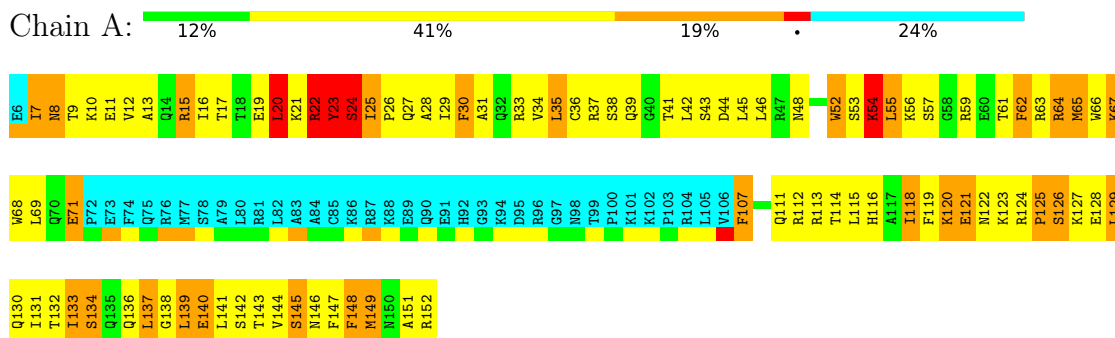
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Hepatocyte nuclear factor 6



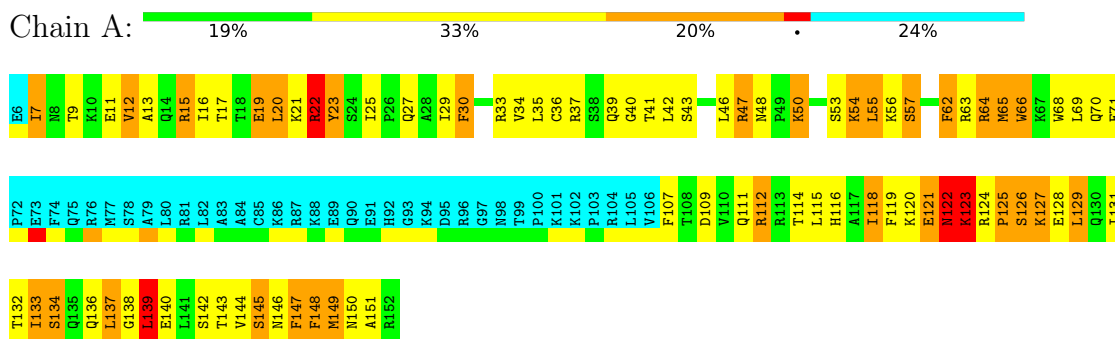
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Hepatocyte nuclear factor 6



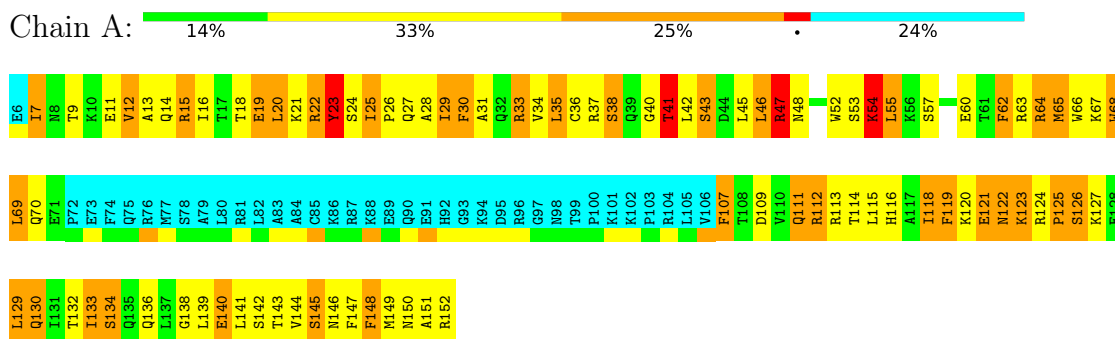
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Hepatocyte nuclear factor 6



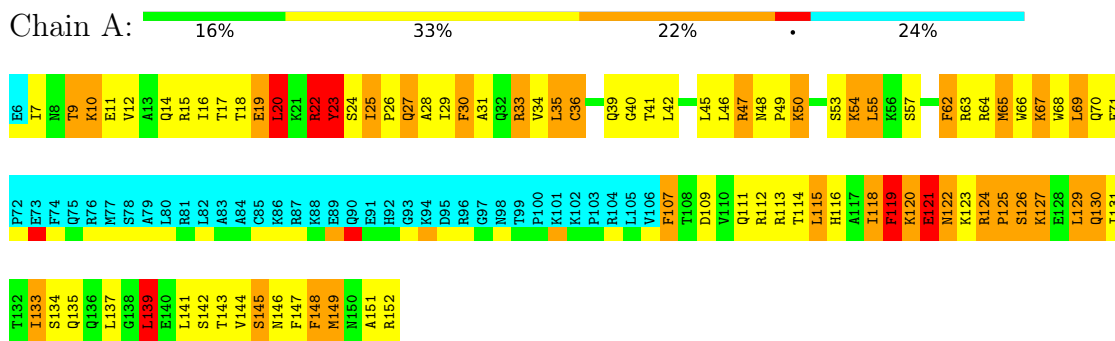
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Hepatocyte nuclear factor 6



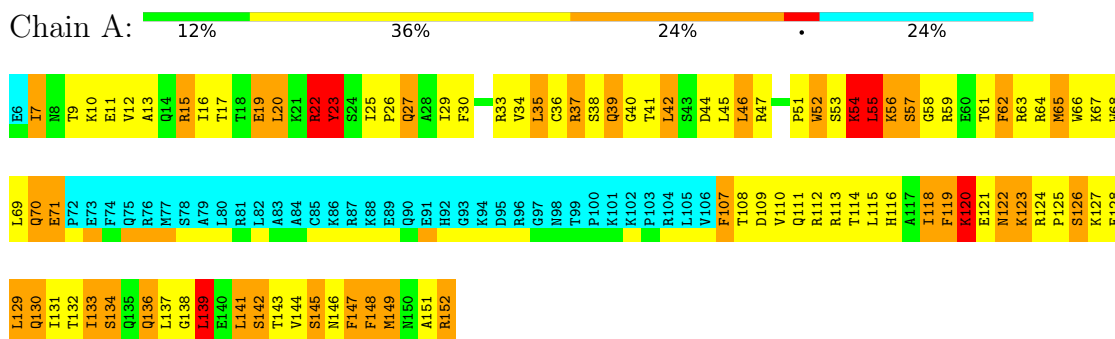
4.2.18 Score per residue for model 18 (medoid)

- Molecule 1: Hepatocyte nuclear factor 6



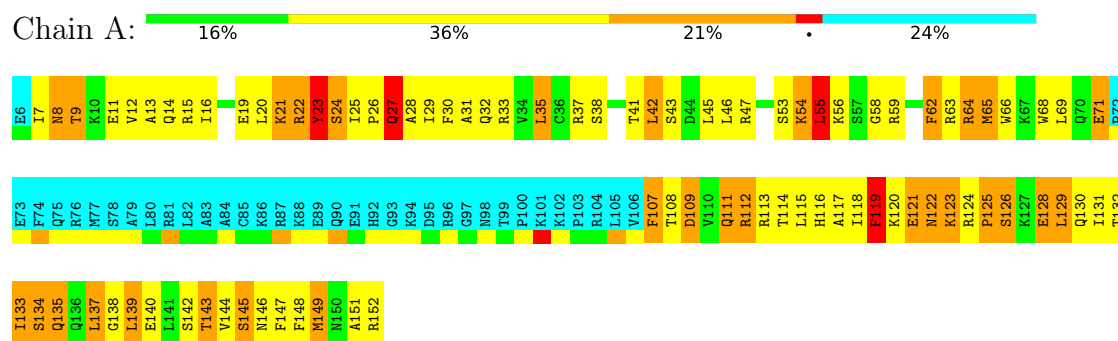
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Hepatocyte nuclear factor 6



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Hepatocyte nuclear factor 6



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 100 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	structure solution	1.5
DYANA	refinement	1.5

No chemical shift data was provided.

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	927	951	963	131±13
All	All	18540	19020	19260	2613

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 69.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:LEU:HD13	1:A:55:LEU:HD11	1.12	1.18	9	5
1:A:30:PHE:CE2	1:A:35:LEU:HD23	1.10	1.81	10	2
1:A:115:LEU:HD13	1:A:133:ILE:HG21	1.06	1.23	4	17
1:A:16:ILE:HD13	1:A:42:LEU:HD12	1.05	1.27	8	8
1:A:55:LEU:HD23	1:A:62:PHE:CD1	1.05	1.87	14	3
1:A:20:LEU:HD23	1:A:25:ILE:HD13	1.03	1.26	18	5
1:A:45:LEU:HD13	1:A:55:LEU:HD21	0.99	1.31	20	4
1:A:45:LEU:HD11	1:A:55:LEU:HD21	0.97	1.34	8	2
1:A:115:LEU:HD21	1:A:144:VAL:HG22	0.95	1.36	12	1
1:A:115:LEU:CD2	1:A:144:VAL:HG13	0.95	1.91	7	3
1:A:129:LEU:HD13	1:A:130:GLN:N	0.94	1.78	12	6
1:A:115:LEU:HD22	1:A:147:PHE:CE2	0.91	2.01	13	1
1:A:123:LYS:O	1:A:129:LEU:HD22	0.91	1.66	7	7
1:A:12:VAL:HG11	1:A:62:PHE:CE2	0.88	2.04	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:111:GLN:NE2	1:A:143:THR:HG21	0.87	1.83	13	2
1:A:42:LEU:HD22	1:A:62:PHE:CD1	0.86	2.04	11	5
1:A:7:ILE:HG23	1:A:12:VAL:HG21	0.86	1.46	11	9
1:A:42:LEU:HD21	1:A:62:PHE:CD1	0.85	2.06	13	6
1:A:55:LEU:HD12	1:A:62:PHE:CD1	0.85	2.05	20	2
1:A:45:LEU:CD1	1:A:55:LEU:HD11	0.84	2.02	9	5
1:A:136:GLN:C	1:A:137:LEU:HD13	0.84	1.93	6	4
1:A:115:LEU:CD1	1:A:133:ILE:HG21	0.84	2.02	4	9
1:A:16:ILE:HG21	1:A:65:MET:SD	0.83	2.14	5	3
1:A:20:LEU:HD21	1:A:30:PHE:CE1	0.83	2.08	13	2
1:A:111:GLN:CG	1:A:137:LEU:HD22	0.83	2.02	20	1
1:A:115:LEU:HD22	1:A:147:PHE:CD2	0.83	2.07	13	1
1:A:12:VAL:CG1	1:A:42:LEU:HD23	0.83	2.04	3	1
1:A:30:PHE:CZ	1:A:35:LEU:HD23	0.83	2.08	10	1
1:A:123:LYS:CB	1:A:129:LEU:HD13	0.82	2.03	17	10
1:A:123:LYS:HB3	1:A:129:LEU:HD13	0.82	1.52	1	10
1:A:42:LEU:HD12	1:A:61:THR:HG22	0.81	1.52	5	2
1:A:118:ILE:HG12	1:A:129:LEU:HD11	0.81	1.51	5	1
1:A:55:LEU:HD23	1:A:62:PHE:CE2	0.81	2.10	16	3
1:A:127:LYS:O	1:A:131:ILE:HD12	0.81	1.74	3	8
1:A:45:LEU:CD1	1:A:55:LEU:HD21	0.80	2.05	8	4
1:A:42:LEU:HD13	1:A:65:MET:SD	0.80	2.16	20	4
1:A:123:LYS:O	1:A:129:LEU:HD13	0.80	1.76	10	4
1:A:111:GLN:OE1	1:A:143:THR:HG21	0.80	1.75	1	2
1:A:115:LEU:HD21	1:A:144:VAL:HG13	0.80	1.50	7	2
1:A:115:LEU:HD13	1:A:133:ILE:CG2	0.79	2.07	9	13
1:A:16:ILE:CD1	1:A:42:LEU:HD12	0.79	2.06	10	8
1:A:118:ILE:HG13	1:A:129:LEU:HD11	0.78	1.55	8	10
1:A:115:LEU:CD2	1:A:144:VAL:HG22	0.78	2.09	2	6
1:A:42:LEU:O	1:A:46:LEU:HD12	0.78	1.78	17	6
1:A:34:VAL:HG11	1:A:64:ARG:O	0.78	1.79	9	2
1:A:42:LEU:CD1	1:A:61:THR:HG22	0.77	2.09	5	2
1:A:138:GLY:C	1:A:139:LEU:HD22	0.77	2.00	8	1
1:A:130:GLN:HG2	1:A:144:VAL:HG21	0.77	1.56	12	5
1:A:20:LEU:HD11	1:A:68:TRP:CE3	0.77	2.13	19	10
1:A:133:ILE:C	1:A:133:ILE:HD13	0.75	2.01	13	4
1:A:45:LEU:HD12	1:A:55:LEU:HG	0.75	1.57	1	4
1:A:111:GLN:O	1:A:133:ILE:HD11	0.75	1.81	4	8
1:A:45:LEU:HD13	1:A:45:LEU:O	0.75	1.79	17	4
1:A:7:ILE:HG21	1:A:66:TRP:CZ2	0.74	2.17	11	10
1:A:147:PHE:CE1	1:A:151:ALA:CB	0.74	2.71	13	19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:129:LEU:HD23	1:A:130:GLN:N	0.74	1.96	10	12
1:A:144:VAL:CG1	1:A:148:PHE:CD2	0.74	2.71	12	5
1:A:37:ARG:HB3	1:A:41:THR:HG21	0.74	1.56	7	5
1:A:111:GLN:HG3	1:A:137:LEU:HD22	0.74	1.58	20	1
1:A:20:LEU:HB3	1:A:25:ILE:HD13	0.74	1.60	12	11
1:A:42:LEU:C	1:A:46:LEU:HD12	0.74	2.02	17	1
1:A:16:ILE:HD13	1:A:42:LEU:CD1	0.74	2.11	8	5
1:A:55:LEU:HD23	1:A:62:PHE:CE1	0.74	2.18	14	2
1:A:25:ILE:HD11	1:A:30:PHE:CD1	0.73	2.17	10	2
1:A:31:ALA:HB1	1:A:36:CYS:O	0.73	1.84	4	11
1:A:20:LEU:CD2	1:A:25:ILE:HD13	0.73	2.11	18	3
1:A:118:ILE:HD13	1:A:121:GLU:HB2	0.73	1.60	3	5
1:A:20:LEU:HD11	1:A:68:TRP:CD2	0.73	2.18	10	2
1:A:119:PHE:CE2	1:A:151:ALA:HB1	0.73	2.19	12	8
1:A:42:LEU:HD21	1:A:62:PHE:CG	0.73	2.19	13	2
1:A:129:LEU:HD22	1:A:129:LEU:O	0.72	1.83	4	6
1:A:138:GLY:O	1:A:139:LEU:HD23	0.72	1.83	17	5
1:A:12:VAL:HG13	1:A:16:ILE:HD11	0.72	1.59	12	1
1:A:108:THR:HG21	1:A:111:GLN:OE1	0.72	1.85	3	2
1:A:129:LEU:HD22	1:A:129:LEU:C	0.72	2.05	4	1
1:A:42:LEU:HD22	1:A:62:PHE:CE1	0.72	2.18	11	1
1:A:45:LEU:HB3	1:A:55:LEU:HD21	0.71	1.61	12	1
1:A:69:LEU:N	1:A:69:LEU:HD23	0.71	2.00	12	8
1:A:20:LEU:CD1	1:A:68:TRP:CE3	0.71	2.74	9	13
1:A:130:GLN:CG	1:A:144:VAL:HG11	0.71	2.16	11	6
1:A:7:ILE:O	1:A:12:VAL:HG23	0.71	1.84	3	2
1:A:129:LEU:C	1:A:129:LEU:HD22	0.71	2.06	12	5
1:A:19:GLU:HG2	1:A:69:LEU:HD13	0.70	1.61	1	1
1:A:20:LEU:CD1	1:A:69:LEU:HD23	0.70	2.16	15	5
1:A:16:ILE:O	1:A:20:LEU:HD22	0.70	1.87	2	2
1:A:27:GLN:O	1:A:31:ALA:HB2	0.70	1.86	11	12
1:A:115:LEU:HD22	1:A:133:ILE:CG2	0.70	2.17	12	11
1:A:144:VAL:HG13	1:A:148:PHE:CD1	0.70	2.22	6	10
1:A:30:PHE:CE1	1:A:35:LEU:CD2	0.70	2.75	5	1
1:A:137:LEU:HD21	1:A:143:THR:HG21	0.70	1.64	20	1
1:A:20:LEU:HD23	1:A:25:ILE:CD1	0.70	2.14	18	2
1:A:129:LEU:HD23	1:A:129:LEU:C	0.70	2.07	6	1
1:A:34:VAL:HG23	1:A:68:TRP:CD1	0.70	2.21	19	1
1:A:144:VAL:CG1	1:A:148:PHE:CE2	0.69	2.74	9	3
1:A:133:ILE:HD13	1:A:133:ILE:O	0.69	1.86	12	8
1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:LEU:HD22	0.69	1.63	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:125:PRO:O	1:A:126:SER:C	0.69	2.31	12	15
1:A:9:THR:O	1:A:46:LEU:HD21	0.69	1.86	11	3
1:A:58:GLY:O	1:A:61:THR:HG22	0.69	1.87	19	1
1:A:111:GLN:HA	1:A:133:ILE:HD11	0.69	1.65	20	9
1:A:138:GLY:C	1:A:139:LEU:HD23	0.69	2.07	11	3
1:A:20:LEU:CD1	1:A:30:PHE:CE1	0.69	2.75	11	1
1:A:130:GLN:HG3	1:A:144:VAL:HG11	0.69	1.64	11	6
1:A:119:PHE:CD2	1:A:151:ALA:HB1	0.68	2.23	6	11
1:A:9:THR:HG22	1:A:62:PHE:CE2	0.68	2.22	12	1
1:A:30:PHE:CE1	1:A:35:LEU:CD1	0.68	2.76	3	4
1:A:12:VAL:HG21	1:A:66:TRP:NE1	0.68	2.02	14	7
1:A:42:LEU:O	1:A:46:LEU:HD13	0.68	1.88	11	5
1:A:124:ARG:N	1:A:125:PRO:CD	0.68	2.57	15	20
1:A:30:PHE:CD2	1:A:35:LEU:HD23	0.68	2.24	1	2
1:A:112:ARG:HH21	1:A:116:HIS:CG	0.68	2.07	14	1
1:A:20:LEU:CD2	1:A:30:PHE:CE2	0.68	2.76	5	4
1:A:26:PRO:HG2	1:A:29:ILE:HD12	0.68	1.67	6	1
1:A:115:LEU:HD12	1:A:144:VAL:HA	0.68	1.63	18	2
1:A:115:LEU:HD22	1:A:144:VAL:HG22	0.67	1.66	2	4
1:A:16:ILE:O	1:A:20:LEU:HD13	0.67	1.89	5	3
1:A:136:GLN:O	1:A:137:LEU:HD13	0.67	1.88	6	3
1:A:42:LEU:CD2	1:A:62:PHE:CD1	0.67	2.77	20	7
1:A:118:ILE:HD13	1:A:121:GLU:CB	0.67	2.20	3	5
1:A:42:LEU:HD11	1:A:65:MET:HG3	0.67	1.65	2	1
1:A:12:VAL:O	1:A:16:ILE:HD12	0.67	1.89	18	4
1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:LEU:H	0.67	1.50	5	4
1:A:115:LEU:O	1:A:118:ILE:HG22	0.67	1.89	6	1
1:A:8:ASN:O	1:A:12:VAL:HG23	0.67	1.88	12	2
1:A:42:LEU:HD11	1:A:62:PHE:HA	0.67	1.65	19	6
1:A:20:LEU:HD21	1:A:30:PHE:CZ	0.67	2.24	5	3
1:A:35:LEU:HD21	1:A:65:MET:SD	0.67	2.30	17	2
1:A:17:THR:HG22	1:A:23:TYR:HA	0.66	1.65	3	5
1:A:20:LEU:CD2	1:A:30:PHE:CE1	0.66	2.77	13	2
1:A:108:THR:HG22	1:A:110:VAL:HG12	0.66	1.66	1	2
1:A:136:GLN:HB3	1:A:137:LEU:HD22	0.66	1.67	16	4
1:A:130:GLN:CG	1:A:148:PHE:CZ	0.66	2.79	2	1
1:A:107:PHE:CD1	1:A:146:ASN:ND2	0.65	2.64	1	1
1:A:115:LEU:HG	1:A:133:ILE:HG21	0.65	1.69	13	2
1:A:20:LEU:HD21	1:A:30:PHE:CE2	0.65	2.26	9	2
1:A:45:LEU:HD11	1:A:55:LEU:HD11	0.65	1.67	20	1
1:A:55:LEU:HD12	1:A:62:PHE:CE2	0.65	2.26	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:38:SER:O	1:A:41:THR:HG22	0.65	1.90	19	1
1:A:7:ILE:CG2	1:A:66:TRP:CZ2	0.65	2.80	9	9
1:A:42:LEU:O	1:A:46:LEU:HD23	0.65	1.92	2	3
1:A:42:LEU:HD13	1:A:65:MET:HG3	0.65	1.68	5	1
1:A:35:LEU:HD21	1:A:64:ARG:HB3	0.65	1.68	19	3
1:A:33:ARG:NE	1:A:68:TRP:CZ2	0.64	2.65	1	1
1:A:123:LYS:O	1:A:129:LEU:HD12	0.64	1.91	18	5
1:A:35:LEU:HD23	1:A:64:ARG:HB3	0.64	1.69	17	4
1:A:45:LEU:HD13	1:A:55:LEU:CD1	0.64	2.12	9	2
1:A:9:THR:HG22	1:A:46:LEU:HD21	0.64	1.70	13	1
1:A:16:ILE:HD13	1:A:65:MET:HG2	0.64	1.68	15	6
1:A:37:ARG:CB	1:A:41:THR:HG21	0.64	2.22	14	3
1:A:147:PHE:CG	1:A:148:PHE:N	0.63	2.66	7	17
1:A:129:LEU:HD13	1:A:129:LEU:C	0.63	2.11	15	3
1:A:16:ILE:HG12	1:A:69:LEU:HD21	0.63	1.69	8	1
1:A:12:VAL:HG13	1:A:16:ILE:CD1	0.63	2.23	12	1
1:A:115:LEU:HD21	1:A:144:VAL:CG2	0.63	2.19	12	1
1:A:34:VAL:CG2	1:A:68:TRP:CD1	0.63	2.81	19	1
1:A:46:LEU:HD11	1:A:62:PHE:CE1	0.63	2.28	10	5
1:A:55:LEU:HD23	1:A:62:PHE:CD2	0.63	2.28	2	1
1:A:30:PHE:CD1	1:A:35:LEU:HD12	0.63	2.29	4	4
1:A:30:PHE:CE1	1:A:68:TRP:CD1	0.63	2.87	11	11
1:A:115:LEU:HD22	1:A:133:ILE:HG21	0.63	1.69	10	9
1:A:30:PHE:CE2	1:A:35:LEU:HD22	0.63	2.28	11	1
1:A:118:ILE:CG1	1:A:129:LEU:HD11	0.63	2.23	1	6
1:A:42:LEU:HD13	1:A:62:PHE:CD1	0.62	2.29	7	5
1:A:30:PHE:CE1	1:A:35:LEU:HD12	0.62	2.29	4	3
1:A:12:VAL:CG1	1:A:42:LEU:HD13	0.62	2.24	13	1
1:A:107:PHE:CD1	1:A:107:PHE:C	0.62	2.73	1	2
1:A:7:ILE:HG23	1:A:12:VAL:CG2	0.62	2.24	3	6
1:A:35:LEU:HD13	1:A:35:LEU:N	0.62	2.10	1	2
1:A:12:VAL:HG12	1:A:42:LEU:HD23	0.62	1.70	3	1
1:A:30:PHE:CE2	1:A:65:MET:HE2	0.62	2.29	18	2
1:A:19:GLU:CG	1:A:69:LEU:HD13	0.62	2.24	1	1
1:A:35:LEU:HD23	1:A:64:ARG:CB	0.62	2.25	7	3
1:A:108:THR:H	1:A:143:THR:HG22	0.62	1.54	19	1
1:A:16:ILE:CG2	1:A:20:LEU:HD22	0.62	2.24	12	1
1:A:41:THR:HG22	1:A:65:MET:HE3	0.62	1.70	11	2
1:A:46:LEU:CD1	1:A:55:LEU:HD12	0.62	2.25	7	1
1:A:7:ILE:CG2	1:A:66:TRP:CZ3	0.62	2.82	17	1
1:A:7:ILE:HG12	1:A:12:VAL:HG23	0.62	1.69	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:ARG:O	1:A:19:GLU:N	0.62	2.32	10	20
1:A:62:PHE:O	1:A:66:TRP:CD1	0.62	2.52	11	16
1:A:30:PHE:CZ	1:A:65:MET:CE	0.62	2.82	17	1
1:A:115:LEU:HD13	1:A:147:PHE:HD2	0.62	1.55	18	1
1:A:10:LYS:HG2	1:A:46:LEU:HD23	0.62	1.72	11	1
1:A:9:THR:CG2	1:A:62:PHE:CE2	0.62	2.83	12	1
1:A:26:PRO:O	1:A:29:ILE:N	0.61	2.33	18	15
1:A:123:LYS:HB2	1:A:129:LEU:HD13	0.61	1.70	11	5
1:A:33:ARG:NH1	1:A:68:TRP:CZ2	0.61	2.68	5	1
1:A:9:THR:HA	1:A:62:PHE:CZ	0.61	2.30	17	5
1:A:7:ILE:HD12	1:A:7:ILE:N	0.61	2.10	13	3
1:A:22:ARG:O	1:A:23:TYR:CG	0.61	2.53	13	16
1:A:136:GLN:HB3	1:A:137:LEU:HD12	0.61	1.72	11	1
1:A:119:PHE:CZ	1:A:151:ALA:O	0.61	2.53	9	1
1:A:130:GLN:CD	1:A:148:PHE:CZ	0.61	2.73	2	1
1:A:42:LEU:HD13	1:A:65:MET:HG2	0.61	1.73	4	1
1:A:138:GLY:O	1:A:139:LEU:HD22	0.61	1.96	8	1
1:A:25:ILE:HD12	1:A:26:PRO:HD2	0.61	1.72	12	8
1:A:144:VAL:CG1	1:A:148:PHE:CD1	0.61	2.84	15	7
1:A:119:PHE:CZ	1:A:151:ALA:HB1	0.61	2.31	12	2
1:A:19:GLU:CB	1:A:69:LEU:HD11	0.61	2.26	9	1
1:A:8:ASN:O	1:A:12:VAL:CG1	0.60	2.49	14	7
1:A:22:ARG:O	1:A:23:TYR:CD2	0.60	2.54	11	14
1:A:30:PHE:CD2	1:A:38:SER:O	0.60	2.54	10	3
1:A:115:LEU:HD22	1:A:133:ILE:HD12	0.60	1.72	12	1
1:A:17:THR:HA	1:A:25:ILE:HD11	0.60	1.73	13	4
1:A:46:LEU:HD21	1:A:62:PHE:CE1	0.60	2.32	15	2
1:A:61:THR:HG22	1:A:62:PHE:N	0.60	2.12	13	1
1:A:25:ILE:HG23	1:A:39:GLN:HB2	0.60	1.72	10	2
1:A:13:ALA:HA	1:A:16:ILE:HD12	0.60	1.74	15	5
1:A:111:GLN:HG2	1:A:133:ILE:HD13	0.59	1.73	4	2
1:A:111:GLN:HG2	1:A:137:LEU:HD22	0.59	1.74	20	1
1:A:45:LEU:CD2	1:A:55:LEU:HD11	0.59	2.27	10	2
1:A:42:LEU:CD2	1:A:62:PHE:CE1	0.59	2.85	14	6
1:A:133:ILE:HD13	1:A:133:ILE:C	0.59	2.18	9	7
1:A:12:VAL:HG12	1:A:13:ALA:N	0.59	2.12	13	3
1:A:35:LEU:HD11	1:A:65:MET:CE	0.59	2.28	19	3
1:A:9:THR:HG21	1:A:52:TRP:HA	0.59	1.73	14	3
1:A:16:ILE:CD1	1:A:42:LEU:CD1	0.59	2.81	2	6
1:A:55:LEU:HD12	1:A:62:PHE:HD1	0.59	1.56	5	2
1:A:41:THR:OG1	1:A:45:LEU:HD23	0.59	1.96	8	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:LEU:CD1	1:A:69:LEU:CD2	0.59	2.80	15	8
1:A:107:PHE:CD1	1:A:107:PHE:O	0.59	2.55	2	1
1:A:45:LEU:HD21	1:A:55:LEU:HD21	0.59	1.74	4	1
1:A:16:ILE:HG13	1:A:69:LEU:HD11	0.58	1.73	11	2
1:A:130:GLN:O	1:A:144:VAL:HG21	0.58	1.98	17	2
1:A:107:PHE:CZ	1:A:146:ASN:OD1	0.58	2.55	9	1
1:A:17:THR:HG22	1:A:23:TYR:CA	0.58	2.27	4	1
1:A:16:ILE:HG23	1:A:20:LEU:CD2	0.58	2.28	17	2
1:A:20:LEU:HD13	1:A:30:PHE:CE1	0.58	2.33	11	1
1:A:20:LEU:HD22	1:A:68:TRP:CE3	0.58	2.33	14	2
1:A:147:PHE:CD1	1:A:151:ALA:HB2	0.58	2.33	4	3
1:A:20:LEU:HD11	1:A:30:PHE:CE1	0.58	2.33	11	1
1:A:108:THR:N	1:A:143:THR:HG22	0.58	2.13	19	1
1:A:16:ILE:O	1:A:25:ILE:HD11	0.58	1.99	16	1
1:A:111:GLN:HG2	1:A:137:LEU:HD13	0.58	1.76	20	1
1:A:114:THR:O	1:A:117:ALA:HB3	0.58	1.99	6	2
1:A:12:VAL:CG2	1:A:66:TRP:CD1	0.58	2.87	7	1
1:A:144:VAL:HG12	1:A:148:PHE:CD2	0.58	2.33	12	3
1:A:12:VAL:HG21	1:A:66:TRP:CE2	0.58	2.34	14	1
1:A:115:LEU:HD23	1:A:144:VAL:HA	0.57	1.76	1	4
1:A:144:VAL:HG13	1:A:148:PHE:CE1	0.57	2.34	1	6
1:A:46:LEU:HD11	1:A:62:PHE:CZ	0.57	2.33	3	6
1:A:41:THR:HG22	1:A:65:MET:CE	0.57	2.28	11	5
1:A:7:ILE:HG21	1:A:66:TRP:CE2	0.57	2.33	5	9
1:A:118:ILE:HD12	1:A:121:GLU:HB3	0.57	1.75	6	1
1:A:16:ILE:HG21	1:A:65:MET:HG2	0.57	1.74	20	2
1:A:20:LEU:HD11	1:A:69:LEU:HD23	0.57	1.76	15	4
1:A:30:PHE:CD1	1:A:68:TRP:CD1	0.57	2.91	15	12
1:A:46:LEU:HD11	1:A:62:PHE:HE1	0.57	1.58	4	3
1:A:7:ILE:HG21	1:A:66:TRP:CZ3	0.57	2.35	1	6
1:A:7:ILE:HG21	1:A:66:TRP:CH2	0.57	2.34	16	4
1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:LEU:HD13	0.57	1.76	12	1
1:A:107:PHE:O	1:A:107:PHE:CG	0.57	2.57	2	1
1:A:20:LEU:CD2	1:A:69:LEU:CD2	0.57	2.83	11	2
1:A:45:LEU:HD13	1:A:55:LEU:CD2	0.57	2.29	10	3
1:A:42:LEU:HD11	1:A:65:MET:HB2	0.56	1.77	8	1
1:A:147:PHE:CE1	1:A:151:ALA:HB3	0.56	2.35	16	18
1:A:147:PHE:CD1	1:A:151:ALA:CB	0.56	2.88	18	13
1:A:53:SER:O	1:A:54:LYS:CB	0.56	2.54	17	6
1:A:116:HIS:HA	1:A:147:PHE:CE1	0.56	2.36	12	6
1:A:45:LEU:HG	1:A:55:LEU:HD21	0.56	1.77	11	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:144:VAL:HG13	1:A:148:PHE:CE2	0.56	2.35	9	2
1:A:45:LEU:HD21	1:A:55:LEU:HD11	0.56	1.77	5	1
1:A:133:ILE:C	1:A:133:ILE:CD1	0.56	2.74	13	5
1:A:16:ILE:HG22	1:A:20:LEU:HD22	0.56	1.78	15	3
1:A:130:GLN:HG3	1:A:144:VAL:HG21	0.56	1.78	9	2
1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:HD23	0.56	2.16	14	1
1:A:42:LEU:HD12	1:A:61:THR:CG2	0.56	2.29	5	1
1:A:118:ILE:HG12	1:A:129:LEU:HD21	0.56	1.78	12	2
1:A:55:LEU:CD2	1:A:62:PHE:CE1	0.56	2.89	14	1
1:A:30:PHE:CZ	1:A:65:MET:HE3	0.55	2.36	17	1
1:A:27:GLN:O	1:A:31:ALA:CB	0.55	2.54	11	12
1:A:129:LEU:O	1:A:132:THR:N	0.55	2.39	11	15
1:A:30:PHE:CZ	1:A:35:LEU:CD1	0.55	2.89	3	3
1:A:45:LEU:HB3	1:A:55:LEU:HD11	0.55	1.77	11	1
1:A:111:GLN:HB3	1:A:143:THR:HG21	0.55	1.79	2	1
1:A:21:LYS:O	1:A:22:ARG:CB	0.55	2.54	14	11
1:A:12:VAL:HG13	1:A:13:ALA:N	0.55	2.17	4	9
1:A:125:PRO:O	1:A:127:LYS:N	0.55	2.40	15	3
1:A:31:ALA:CB	1:A:36:CYS:O	0.55	2.55	11	11
1:A:41:THR:CG2	1:A:65:MET:CE	0.55	2.85	1	2
1:A:107:PHE:CG	1:A:107:PHE:O	0.55	2.60	1	1
1:A:130:GLN:CG	1:A:144:VAL:CG1	0.55	2.85	4	2
1:A:123:LYS:O	1:A:129:LEU:CD1	0.55	2.54	16	5
1:A:147:PHE:CE2	1:A:148:PHE:CE1	0.55	2.95	7	1
1:A:20:LEU:HD22	1:A:68:TRP:CZ3	0.55	2.37	14	1
1:A:48:ASN:ND2	1:A:50:LYS:CE	0.55	2.70	16	1
1:A:9:THR:HB	1:A:62:PHE:CE2	0.55	2.37	7	1
1:A:107:PHE:CD2	1:A:146:ASN:ND2	0.55	2.74	12	1
1:A:12:VAL:CG1	1:A:42:LEU:CD2	0.54	2.82	3	1
1:A:20:LEU:CD1	1:A:68:TRP:CD2	0.54	2.89	10	2
1:A:138:GLY:O	1:A:139:LEU:CB	0.54	2.55	16	4
1:A:111:GLN:CD	1:A:143:THR:HG21	0.54	2.23	1	1
1:A:8:ASN:O	1:A:12:VAL:CG2	0.54	2.54	3	2
1:A:115:LEU:HD11	1:A:129:LEU:CD2	0.54	2.33	6	2
1:A:20:LEU:HG	1:A:68:TRP:CZ3	0.54	2.37	19	5
1:A:62:PHE:O	1:A:66:TRP:CG	0.54	2.60	8	1
1:A:115:LEU:HD12	1:A:147:PHE:CD2	0.54	2.37	12	1
1:A:116:HIS:HA	1:A:147:PHE:CD1	0.54	2.37	17	19
1:A:15:ARG:O	1:A:19:GLU:CB	0.54	2.56	4	7
1:A:30:PHE:CE1	1:A:35:LEU:HD22	0.54	2.37	12	5
1:A:62:PHE:CG	1:A:66:TRP:CZ2	0.54	2.96	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:VAL:HG23	1:A:35:LEU:N	0.54	2.17	11	3
1:A:42:LEU:HD13	1:A:65:MET:CG	0.54	2.33	4	1
1:A:124:ARG:N	1:A:125:PRO:HD2	0.54	2.17	16	12
1:A:146:ASN:O	1:A:150:ASN:CB	0.54	2.56	9	1
1:A:115:LEU:HD11	1:A:144:VAL:HG13	0.54	1.79	18	1
1:A:9:THR:HG23	1:A:46:LEU:HD21	0.53	1.78	9	1
1:A:130:GLN:O	1:A:144:VAL:CG2	0.53	2.56	3	9
1:A:13:ALA:HB1	1:A:43:SER:CB	0.53	2.33	3	2
1:A:12:VAL:CG2	1:A:66:TRP:NE1	0.53	2.70	14	5
1:A:46:LEU:HD21	1:A:62:PHE:CZ	0.53	2.38	19	1
1:A:7:ILE:CG2	1:A:66:TRP:CH2	0.53	2.91	9	4
1:A:42:LEU:HD11	1:A:65:MET:CG	0.53	2.33	2	2
1:A:112:ARG:O	1:A:116:HIS:CB	0.53	2.56	19	18
1:A:119:PHE:CG	1:A:151:ALA:HB1	0.53	2.38	6	2
1:A:35:LEU:CD2	1:A:65:MET:HE3	0.53	2.33	16	2
1:A:145:SER:O	1:A:149:MET:CB	0.53	2.56	2	16
1:A:20:LEU:CB	1:A:25:ILE:HD13	0.53	2.33	12	8
1:A:107:PHE:CE2	1:A:146:ASN:OD1	0.53	2.61	9	1
1:A:20:LEU:CD1	1:A:68:TRP:CZ3	0.53	2.92	18	2
1:A:51:PRO:HB2	1:A:52:TRP:CE3	0.53	2.39	19	1
1:A:53:SER:O	1:A:54:LYS:C	0.53	2.47	1	3
1:A:133:ILE:CG2	1:A:134:SER:N	0.53	2.72	19	7
1:A:12:VAL:HG21	1:A:66:TRP:HE1	0.53	1.61	15	2
1:A:26:PRO:CG	1:A:29:ILE:HD12	0.53	2.32	6	1
1:A:7:ILE:N	1:A:7:ILE:CD1	0.53	2.72	13	1
1:A:119:PHE:HB2	1:A:147:PHE:CE1	0.53	2.39	16	19
1:A:118:ILE:HD12	1:A:121:GLU:CB	0.53	2.33	6	2
1:A:121:GLU:O	1:A:122:ASN:CB	0.53	2.57	18	2
1:A:137:LEU:CD2	1:A:143:THR:HG21	0.53	2.33	20	1
1:A:34:VAL:HG22	1:A:35:LEU:HD13	0.53	1.80	5	1
1:A:9:THR:O	1:A:62:PHE:CZ	0.53	2.62	19	1
1:A:33:ARG:CG	1:A:68:TRP:CD1	0.52	2.92	9	1
1:A:126:SER:O	1:A:129:LEU:N	0.52	2.42	20	11
1:A:115:LEU:HB3	1:A:147:PHE:CD2	0.52	2.39	4	9
1:A:110:VAL:HG11	1:A:137:LEU:HD22	0.52	1.79	14	1
1:A:114:THR:HB	1:A:133:ILE:CG1	0.52	2.35	4	17
1:A:115:LEU:HG	1:A:147:PHE:CD2	0.52	2.40	6	14
1:A:130:GLN:HG2	1:A:148:PHE:CE1	0.52	2.40	2	1
1:A:55:LEU:HD13	1:A:61:THR:HB	0.52	1.80	5	1
1:A:16:ILE:HD13	1:A:65:MET:HB3	0.52	1.81	9	1
1:A:118:ILE:HG13	1:A:129:LEU:HD21	0.52	1.80	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:TRP:CD1	1:A:66:TRP:N	0.52	2.77	14	11
1:A:64:ARG:O	1:A:67:LYS:CB	0.52	2.58	11	4
1:A:20:LEU:HD21	1:A:69:LEU:CD2	0.52	2.33	11	1
1:A:30:PHE:CE2	1:A:35:LEU:CD2	0.52	2.92	11	3
1:A:118:ILE:HG23	1:A:124:ARG:HA	0.52	1.80	6	2
1:A:35:LEU:HD11	1:A:65:MET:HE3	0.52	1.82	9	3
1:A:42:LEU:HA	1:A:55:LEU:HD11	0.52	1.81	7	1
1:A:9:THR:C	1:A:12:VAL:HG12	0.52	2.25	14	3
1:A:119:PHE:HB2	1:A:147:PHE:CZ	0.52	2.40	12	11
1:A:20:LEU:HD21	1:A:69:LEU:HD23	0.52	1.82	11	1
1:A:131:ILE:O	1:A:135:GLN:CG	0.52	2.57	20	1
1:A:35:LEU:HD23	1:A:64:ARG:HB2	0.52	1.80	2	3
1:A:149:MET:O	1:A:152:ARG:CG	0.52	2.58	9	1
1:A:115:LEU:HD22	1:A:133:ILE:HG23	0.52	1.81	12	1
1:A:7:ILE:HD12	1:A:7:ILE:C	0.52	2.25	15	1
1:A:147:PHE:O	1:A:149:MET:N	0.52	2.43	13	19
1:A:20:LEU:CD2	1:A:30:PHE:CZ	0.52	2.93	13	2
1:A:9:THR:HG21	1:A:53:SER:H	0.52	1.65	18	2
1:A:147:PHE:CD1	1:A:151:ALA:HB3	0.52	2.40	3	10
1:A:111:GLN:CA	1:A:133:ILE:HD11	0.52	2.35	20	5
1:A:118:ILE:CD1	1:A:122:ASN:CB	0.52	2.88	19	1
1:A:12:VAL:CG1	1:A:62:PHE:CE1	0.51	2.93	1	1
1:A:12:VAL:CG1	1:A:13:ALA:N	0.51	2.73	17	10
1:A:147:PHE:C	1:A:147:PHE:CD1	0.51	2.82	7	1
1:A:115:LEU:CD2	1:A:133:ILE:HD12	0.51	2.35	12	1
1:A:15:ARG:O	1:A:19:GLU:CG	0.51	2.59	3	4
1:A:115:LEU:O	1:A:147:PHE:CE2	0.51	2.63	13	1
1:A:62:PHE:HB3	1:A:66:TRP:CZ2	0.51	2.40	17	15
1:A:55:LEU:CD2	1:A:62:PHE:CE2	0.51	2.90	2	1
1:A:20:LEU:HD11	1:A:69:LEU:CD2	0.51	2.36	4	3
1:A:111:GLN:O	1:A:114:THR:N	0.51	2.43	20	5
1:A:66:TRP:O	1:A:70:GLN:N	0.51	2.43	8	3
1:A:128:GLU:O	1:A:132:THR:N	0.51	2.43	12	3
1:A:50:LYS:N	1:A:51:PRO:HD3	0.51	2.20	14	1
1:A:9:THR:HA	1:A:62:PHE:CE2	0.51	2.40	15	1
1:A:123:LYS:CE	1:A:126:SER:OG	0.51	2.58	16	1
1:A:46:LEU:O	1:A:47:ARG:C	0.51	2.48	12	17
1:A:7:ILE:HG22	1:A:7:ILE:O	0.51	2.04	11	1
1:A:21:LYS:O	1:A:22:ARG:CD	0.51	2.59	7	3
1:A:54:LYS:CG	1:A:54:LYS:O	0.51	2.58	18	3
1:A:8:ASN:O	1:A:12:VAL:N	0.51	2.43	3	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:GLU:OE1	1:A:69:LEU:HD13	0.51	2.05	4	1
1:A:132:THR:HG22	1:A:136:GLN:OE1	0.51	2.05	19	1
1:A:133:ILE:HG23	1:A:134:SER:N	0.51	2.20	16	10
1:A:48:ASN:CB	1:A:49:PRO:CD	0.51	2.89	14	1
1:A:25:ILE:HG12	1:A:30:PHE:CD2	0.51	2.41	12	8
1:A:120:LYS:O	1:A:121:GLU:CB	0.51	2.58	8	5
1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:LEU:N	0.51	2.19	13	4
1:A:143:THR:O	1:A:146:ASN:CB	0.51	2.59	16	6
1:A:9:THR:O	1:A:46:LEU:CD2	0.51	2.59	16	4
1:A:42:LEU:HD23	1:A:62:PHE:CE1	0.51	2.41	14	2
1:A:123:LYS:CD	1:A:126:SER:OG	0.51	2.59	16	1
1:A:123:LYS:O	1:A:124:ARG:C	0.51	2.48	9	6
1:A:127:LYS:O	1:A:131:ILE:CD1	0.51	2.59	18	3
1:A:118:ILE:O	1:A:124:ARG:CG	0.51	2.59	13	4
1:A:118:ILE:HD12	1:A:123:LYS:H	0.51	1.66	17	3
1:A:49:PRO:O	1:A:50:LYS:C	0.51	2.48	14	1
1:A:134:SER:HB3	1:A:144:VAL:HG23	0.51	1.82	12	3
1:A:136:GLN:C	1:A:137:LEU:HD22	0.51	2.25	19	1
1:A:45:LEU:HD12	1:A:55:LEU:HD21	0.50	1.83	2	1
1:A:10:LYS:CB	1:A:50:LYS:CB	0.50	2.90	14	1
1:A:123:LYS:O	1:A:129:LEU:CD2	0.50	2.58	16	2
1:A:138:GLY:O	1:A:139:LEU:CD2	0.50	2.58	17	1
1:A:115:LEU:HD11	1:A:129:LEU:HD21	0.50	1.83	9	1
1:A:34:VAL:HG23	1:A:35:LEU:H	0.50	1.64	11	2
1:A:8:ASN:O	1:A:12:VAL:CB	0.50	2.59	3	1
1:A:29:ILE:O	1:A:33:ARG:CG	0.50	2.60	7	4
1:A:15:ARG:O	1:A:18:THR:N	0.50	2.45	13	8
1:A:53:SER:O	1:A:55:LEU:N	0.50	2.44	1	2
1:A:7:ILE:O	1:A:8:ASN:CB	0.50	2.60	4	4
1:A:33:ARG:CZ	1:A:71:GLU:OE2	0.50	2.59	6	1
1:A:12:VAL:HG21	1:A:66:TRP:CD1	0.50	2.41	7	1
1:A:27:GLN:O	1:A:28:ALA:C	0.50	2.49	15	2
1:A:7:ILE:HD11	1:A:12:VAL:HA	0.50	1.84	15	1
1:A:42:LEU:O	1:A:46:LEU:CD1	0.50	2.60	13	2
1:A:11:GLU:O	1:A:15:ARG:CG	0.50	2.59	20	1
1:A:20:LEU:HG	1:A:68:TRP:CE3	0.50	2.41	8	2
1:A:44:ASP:O	1:A:47:ARG:CD	0.50	2.59	9	1
1:A:46:LEU:O	1:A:48:ASN:N	0.50	2.45	6	7
1:A:10:LYS:O	1:A:13:ALA:HB3	0.50	2.06	7	1
1:A:20:LEU:HD22	1:A:68:TRP:CD2	0.50	2.42	11	1
1:A:55:LEU:HB2	1:A:62:PHE:CE2	0.50	2.42	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:115:LEU:HD21	1:A:148:PHE:CE1	0.50	2.42	17	1
1:A:13:ALA:HB1	1:A:43:SER:CA	0.50	2.37	3	3
1:A:42:LEU:HB3	1:A:62:PHE:CE1	0.50	2.42	7	1
1:A:65:MET:O	1:A:68:TRP:N	0.50	2.45	7	3
1:A:67:LYS:O	1:A:71:GLU:CG	0.50	2.60	18	1
1:A:34:VAL:CG2	1:A:35:LEU:N	0.49	2.75	3	2
1:A:115:LEU:HD22	1:A:147:PHE:HE2	0.49	1.61	13	1
1:A:124:ARG:CB	1:A:125:PRO:HD3	0.49	2.37	9	5
1:A:129:LEU:C	1:A:129:LEU:CD2	0.49	2.80	20	4
1:A:22:ARG:O	1:A:23:TYR:CB	0.49	2.60	20	4
1:A:44:ASP:O	1:A:47:ARG:CG	0.49	2.60	8	1
1:A:7:ILE:HG13	1:A:8:ASN:N	0.49	2.22	15	1
1:A:41:THR:HG22	1:A:65:MET:HE2	0.49	1.84	15	1
1:A:10:LYS:HA	1:A:46:LEU:HD23	0.49	1.83	18	1
1:A:107:PHE:CE2	1:A:146:ASN:ND2	0.49	2.80	20	1
1:A:133:ILE:O	1:A:136:GLN:CB	0.49	2.60	2	3
1:A:19:GLU:HB3	1:A:69:LEU:HD11	0.49	1.83	9	1
1:A:111:GLN:CD	1:A:112:ARG:N	0.49	2.65	12	1
1:A:144:VAL:HG11	1:A:148:PHE:CE2	0.49	2.42	12	1
1:A:45:LEU:HD12	1:A:46:LEU:HD12	0.49	1.84	13	1
1:A:39:GLN:CG	1:A:39:GLN:O	0.49	2.60	7	4
1:A:134:SER:O	1:A:138:GLY:N	0.49	2.43	7	5
1:A:116:HIS:O	1:A:119:PHE:CB	0.49	2.61	16	4
1:A:18:THR:HG23	1:A:22:ARG:O	0.49	2.08	10	1
1:A:17:THR:O	1:A:23:TYR:N	0.49	2.45	11	2
1:A:37:ARG:O	1:A:37:ARG:CG	0.49	2.60	11	1
1:A:42:LEU:O	1:A:46:LEU:CG	0.49	2.60	4	4
1:A:130:GLN:O	1:A:144:VAL:HG22	0.49	2.07	5	1
1:A:134:SER:HB2	1:A:143:THR:HG23	0.49	1.84	12	1
1:A:115:LEU:O	1:A:118:ILE:N	0.49	2.46	2	11
1:A:141:LEU:O	1:A:142:SER:C	0.49	2.51	8	1
1:A:69:LEU:N	1:A:69:LEU:CD2	0.49	2.74	17	2
1:A:8:ASN:ND2	1:A:52:TRP:NE1	0.49	2.61	13	1
1:A:111:GLN:C	1:A:111:GLN:OE1	0.49	2.50	19	1
1:A:134:SER:O	1:A:139:LEU:N	0.49	2.46	19	10
1:A:12:VAL:O	1:A:16:ILE:CD1	0.49	2.60	18	2
1:A:64:ARG:O	1:A:67:LYS:N	0.49	2.45	19	2
1:A:42:LEU:CD1	1:A:65:MET:SD	0.49	3.00	19	2
1:A:12:VAL:CG1	1:A:62:PHE:CE2	0.49	2.90	3	1
1:A:55:LEU:HB2	1:A:62:PHE:CD1	0.49	2.43	5	3
1:A:143:THR:CG2	1:A:144:VAL:N	0.49	2.75	8	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:107:PHE:CE2	1:A:146:ASN:HA	0.49	2.43	11	2
1:A:33:ARG:HG2	1:A:68:TRP:CD1	0.48	2.42	4	1
1:A:29:ILE:O	1:A:33:ARG:CB	0.48	2.61	9	3
1:A:20:LEU:HD13	1:A:69:LEU:CD2	0.48	2.38	13	2
1:A:25:ILE:CG2	1:A:30:PHE:CD2	0.48	2.96	19	2
1:A:30:PHE:CZ	1:A:65:MET:HE2	0.48	2.43	17	1
1:A:35:LEU:CD1	1:A:65:MET:CE	0.48	2.91	19	1
1:A:141:LEU:H	1:A:141:LEU:HD13	0.48	1.69	11	1
1:A:130:GLN:HG3	1:A:148:PHE:CE2	0.48	2.43	13	1
1:A:9:THR:HG23	1:A:10:LYS:N	0.48	2.23	5	2
1:A:16:ILE:HG23	1:A:69:LEU:HD21	0.48	1.85	3	1
1:A:50:LYS:O	1:A:50:LYS:CG	0.48	2.60	14	1
1:A:111:GLN:O	1:A:133:ILE:CD1	0.48	2.61	16	2
1:A:54:LYS:HA	1:A:62:PHE:CD2	0.48	2.44	20	3
1:A:42:LEU:HD13	1:A:62:PHE:HD1	0.48	1.68	12	1
1:A:134:SER:CB	1:A:140:GLU:O	0.48	2.61	16	1
1:A:41:THR:HG22	1:A:65:MET:HE1	0.48	1.86	1	1
1:A:134:SER:O	1:A:138:GLY:CA	0.48	2.62	15	8
1:A:147:PHE:CD2	1:A:148:PHE:CD1	0.48	3.02	2	5
1:A:63:ARG:HA	1:A:66:TRP:CE3	0.48	2.43	12	5
1:A:53:SER:O	1:A:54:LYS:CE	0.48	2.62	20	1
1:A:46:LEU:O	1:A:48:ASN:O	0.48	2.32	10	10
1:A:33:ARG:NH2	1:A:68:TRP:CD2	0.48	2.81	5	1
1:A:7:ILE:HG21	1:A:66:TRP:CE3	0.48	2.43	19	2
1:A:14:GLN:O	1:A:18:THR:CB	0.48	2.62	11	1
1:A:130:GLN:CG	1:A:144:VAL:HG21	0.48	2.35	12	1
1:A:147:PHE:CE2	1:A:148:PHE:CD1	0.48	3.02	7	2
1:A:13:ALA:HB1	1:A:43:SER:N	0.48	2.24	4	3
1:A:42:LEU:CD2	1:A:55:LEU:HD13	0.48	2.39	7	1
1:A:55:LEU:HG	1:A:62:PHE:CE1	0.48	2.44	6	1
1:A:70:GLN:O	1:A:71:GLU:C	0.48	2.52	9	4
1:A:134:SER:O	1:A:138:GLY:C	0.47	2.52	7	5
1:A:42:LEU:HD22	1:A:62:PHE:HD1	0.47	1.69	6	1
1:A:20:LEU:CD1	1:A:69:LEU:HD22	0.47	2.40	12	1
1:A:27:GLN:O	1:A:31:ALA:N	0.47	2.47	15	2
1:A:108:THR:O	1:A:111:GLN:NE2	0.47	2.47	12	1
1:A:142:SER:O	1:A:145:SER:N	0.47	2.47	12	1
1:A:10:LYS:CB	1:A:50:LYS:HB3	0.47	2.38	14	1
1:A:21:LYS:CB	1:A:24:SER:O	0.47	2.62	14	1
1:A:122:ASN:O	1:A:123:LYS:CB	0.47	2.61	16	1
1:A:63:ARG:HG2	1:A:66:TRP:CZ3	0.47	2.44	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:118:ILE:O	1:A:120:LYS:N	0.47	2.47	18	4
1:A:114:THR:CG2	1:A:133:ILE:HG13	0.47	2.38	18	4
1:A:115:LEU:CD1	1:A:129:LEU:HD21	0.47	2.38	6	1
1:A:21:LYS:CD	1:A:21:LYS:C	0.47	2.82	16	1
1:A:147:PHE:O	1:A:151:ALA:N	0.47	2.39	18	7
1:A:147:PHE:O	1:A:148:PHE:C	0.47	2.51	4	16
1:A:42:LEU:HD21	1:A:62:PHE:CD2	0.47	2.44	3	1
1:A:114:THR:CG2	1:A:133:ILE:CG1	0.47	2.92	13	8
1:A:61:THR:CG2	1:A:62:PHE:N	0.47	2.77	13	3
1:A:118:ILE:HG23	1:A:124:ARG:CG	0.47	2.39	13	2
1:A:30:PHE:CD1	1:A:30:PHE:O	0.47	2.67	20	2
1:A:67:LYS:O	1:A:71:GLU:N	0.47	2.48	18	5
1:A:54:LYS:HA	1:A:62:PHE:CE2	0.47	2.44	5	3
1:A:31:ALA:O	1:A:35:LEU:O	0.47	2.31	11	6
1:A:10:LYS:HA	1:A:46:LEU:HD22	0.47	1.87	13	1
1:A:143:THR:O	1:A:146:ASN:N	0.47	2.48	7	14
1:A:42:LEU:HD23	1:A:45:LEU:HD11	0.47	1.86	2	1
1:A:12:VAL:O	1:A:15:ARG:N	0.47	2.48	11	5
1:A:26:PRO:O	1:A:28:ALA:N	0.47	2.47	5	11
1:A:112:ARG:HH21	1:A:113:ARG:HG2	0.47	1.69	9	1
1:A:130:GLN:HG3	1:A:148:PHE:CZ	0.47	2.44	12	1
1:A:112:ARG:NH2	1:A:116:HIS:CG	0.47	2.79	14	1
1:A:121:GLU:O	1:A:122:ASN:HB3	0.47	2.08	18	1
1:A:20:LEU:CG	1:A:25:ILE:HD13	0.47	2.39	1	6
1:A:131:ILE:O	1:A:135:GLN:CB	0.47	2.62	12	3
1:A:39:GLN:N	1:A:39:GLN:OE1	0.47	2.47	4	1
1:A:62:PHE:O	1:A:66:TRP:NE1	0.47	2.48	14	7
1:A:147:PHE:CD1	1:A:147:PHE:C	0.47	2.87	2	5
1:A:108:THR:CG2	1:A:111:GLN:OE1	0.47	2.60	3	1
1:A:27:GLN:OE1	1:A:39:GLN:CG	0.47	2.62	6	1
1:A:9:THR:HB	1:A:62:PHE:CZ	0.47	2.44	12	2
1:A:16:ILE:CG2	1:A:20:LEU:CD1	0.47	2.92	11	1
1:A:107:PHE:CZ	1:A:146:ASN:HA	0.47	2.45	11	1
1:A:111:GLN:NE2	1:A:134:SER:O	0.47	2.48	11	1
1:A:111:GLN:NE2	1:A:143:THR:CG2	0.47	2.69	13	1
1:A:115:LEU:HG	1:A:147:PHE:CE2	0.47	2.45	6	7
1:A:147:PHE:O	1:A:150:ASN:N	0.47	2.47	4	7
1:A:46:LEU:C	1:A:48:ASN:N	0.47	2.68	14	5
1:A:20:LEU:HD13	1:A:68:TRP:CE3	0.47	2.45	14	1
1:A:25:ILE:CD1	1:A:26:PRO:HD2	0.47	2.39	4	6
1:A:135:GLN:O	1:A:135:GLN:CG	0.47	2.62	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:PHE:CG	1:A:35:LEU:HD12	0.47	2.45	6	1
1:A:35:LEU:HD11	1:A:64:ARG:CG	0.47	2.40	10	1
1:A:128:GLU:O	1:A:131:ILE:N	0.47	2.47	12	3
1:A:9:THR:CG2	1:A:10:LYS:N	0.47	2.79	2	2
1:A:30:PHE:CZ	1:A:35:LEU:HD11	0.47	2.45	3	2
1:A:43:SER:O	1:A:47:ARG:N	0.47	2.48	6	4
1:A:9:THR:HG23	1:A:62:PHE:HZ	0.46	1.70	3	1
1:A:35:LEU:HD13	1:A:37:ARG:O	0.46	2.10	20	2
1:A:115:LEU:CD2	1:A:133:ILE:CG2	0.46	2.92	12	1
1:A:112:ARG:N	1:A:143:THR:OG1	0.46	2.48	2	1
1:A:107:PHE:N	1:A:142:SER:OG	0.46	2.48	8	1
1:A:29:ILE:N	1:A:29:ILE:CD1	0.46	2.79	9	1
1:A:16:ILE:HG23	1:A:20:LEU:HD23	0.46	1.87	17	2
1:A:9:THR:CG2	1:A:52:TRP:HA	0.46	2.40	14	3
1:A:54:LYS:O	1:A:54:LYS:HG2	0.46	2.10	18	1
1:A:111:GLN:OE1	1:A:112:ARG:N	0.46	2.48	4	3
1:A:61:THR:HG23	1:A:62:PHE:N	0.46	2.25	12	2
1:A:27:GLN:CG	1:A:39:GLN:OE1	0.46	2.64	15	1
1:A:67:LYS:O	1:A:71:GLU:CB	0.46	2.64	18	1
1:A:67:LYS:O	1:A:70:GLN:N	0.46	2.49	19	3
1:A:9:THR:OG1	1:A:53:SER:N	0.46	2.48	20	2
1:A:109:ASP:O	1:A:113:ARG:N	0.46	2.48	13	1
1:A:54:LYS:O	1:A:56:LYS:N	0.46	2.49	19	1
1:A:111:GLN:CG	1:A:137:LEU:HB3	0.46	2.41	20	1
1:A:23:TYR:O	1:A:24:SER:CB	0.46	2.62	9	6
1:A:136:GLN:OE1	1:A:137:LEU:CD2	0.46	2.63	4	1
1:A:119:PHE:CD2	1:A:151:ALA:CB	0.46	2.95	6	1
1:A:140:GLU:C	1:A:142:SER:N	0.46	2.67	8	1
1:A:61:THR:O	1:A:64:ARG:N	0.46	2.49	15	1
1:A:15:ARG:O	1:A:16:ILE:C	0.46	2.54	10	6
1:A:33:ARG:CZ	1:A:68:TRP:CZ2	0.46	2.98	1	1
1:A:63:ARG:O	1:A:67:LYS:CG	0.46	2.64	15	1
1:A:129:LEU:HD13	1:A:130:GLN:CA	0.46	2.41	15	3
1:A:112:ARG:HG3	1:A:113:ARG:N	0.46	2.24	20	1
1:A:40:GLY:O	1:A:42:LEU:N	0.46	2.48	17	8
1:A:114:THR:CG2	1:A:133:ILE:HG12	0.46	2.41	1	9
1:A:41:THR:O	1:A:42:LEU:C	0.46	2.54	3	3
1:A:108:THR:CB	1:A:111:GLN:NE2	0.46	2.79	7	1
1:A:111:GLN:NE2	1:A:137:LEU:O	0.46	2.49	10	2
1:A:55:LEU:HB2	1:A:62:PHE:CE1	0.46	2.46	19	2
1:A:137:LEU:HD22	1:A:137:LEU:N	0.46	2.26	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:141:LEU:HD12	1:A:141:LEU:O	0.46	2.11	15	3
1:A:140:GLU:OE1	1:A:141:LEU:HD23	0.46	2.11	8	1
1:A:35:LEU:CD2	1:A:65:MET:HE1	0.46	2.40	15	1
1:A:39:GLN:OE1	1:A:39:GLN:N	0.46	2.48	15	1
1:A:7:ILE:HG23	1:A:66:TRP:CE3	0.46	2.46	17	1
1:A:40:GLY:O	1:A:44:ASP:N	0.46	2.49	19	1
1:A:118:ILE:HG22	1:A:124:ARG:HG3	0.46	1.87	4	1
1:A:132:THR:O	1:A:136:GLN:CB	0.46	2.64	12	2
1:A:55:LEU:HB2	1:A:62:PHE:CD2	0.46	2.46	18	2
1:A:16:ILE:CG2	1:A:20:LEU:HD11	0.46	2.40	11	1
1:A:121:GLU:CG	1:A:122:ASN:OD1	0.46	2.64	18	1
1:A:42:LEU:O	1:A:46:LEU:CD2	0.46	2.64	2	1
1:A:33:ARG:NE	1:A:71:GLU:OE2	0.46	2.49	3	1
1:A:145:SER:O	1:A:146:ASN:C	0.46	2.55	13	3
1:A:109:ASP:CG	1:A:110:VAL:N	0.46	2.70	5	3
1:A:20:LEU:CD2	1:A:69:LEU:HD23	0.46	2.40	11	1
1:A:20:LEU:HD23	1:A:25:ILE:CG1	0.45	2.41	5	1
1:A:9:THR:CG2	1:A:46:LEU:HD21	0.45	2.39	13	1
1:A:15:ARG:CZ	1:A:19:GLU:CG	0.45	2.94	13	1
1:A:48:ASN:N	1:A:48:ASN:OD1	0.45	2.48	14	1
1:A:33:ARG:HD3	1:A:68:TRP:CE2	0.45	2.46	10	1
1:A:55:LEU:HD12	1:A:62:PHE:HE1	0.45	1.71	19	2
1:A:115:LEU:CD2	1:A:133:ILE:HG23	0.45	2.41	12	1
1:A:63:ARG:O	1:A:66:TRP:N	0.45	2.49	13	3
1:A:7:ILE:C	1:A:8:ASN:OD1	0.45	2.55	3	1
1:A:111:GLN:HG2	1:A:143:THR:CB	0.45	2.42	8	1
1:A:33:ARG:O	1:A:33:ARG:NE	0.45	2.50	9	1
1:A:26:PRO:HG2	1:A:29:ILE:HD13	0.45	1.86	12	1
1:A:111:GLN:HG3	1:A:137:LEU:HD23	0.45	1.87	15	1
1:A:41:THR:O	1:A:44:ASP:N	0.45	2.49	3	3
1:A:20:LEU:HG	1:A:68:TRP:CD2	0.45	2.46	3	2
1:A:126:SER:C	1:A:128:GLU:N	0.45	2.70	7	4
1:A:126:SER:O	1:A:128:GLU:N	0.45	2.50	7	2
1:A:31:ALA:CA	1:A:36:CYS:O	0.45	2.63	10	1
1:A:16:ILE:CG1	1:A:69:LEU:HD11	0.45	2.42	11	1
1:A:39:GLN:C	1:A:41:THR:N	0.45	2.70	19	1
1:A:20:LEU:HD13	1:A:69:LEU:HD21	0.45	1.88	5	1
1:A:48:ASN:OD1	1:A:50:LYS:CD	0.45	2.65	6	1
1:A:119:PHE:CE2	1:A:151:ALA:CB	0.45	2.98	6	1
1:A:42:LEU:HD21	1:A:61:THR:HG22	0.45	1.89	10	1
1:A:12:VAL:CG1	1:A:16:ILE:CD1	0.45	2.94	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:LEU:HD12	1:A:68:TRP:CE3	0.45	2.47	9	2
1:A:29:ILE:O	1:A:33:ARG:N	0.45	2.50	2	4
1:A:12:VAL:HG13	1:A:13:ALA:H	0.45	1.70	4	1
1:A:65:MET:C	1:A:67:LYS:N	0.45	2.70	12	3
1:A:133:ILE:O	1:A:136:GLN:N	0.45	2.49	8	1
1:A:20:LEU:HD21	1:A:69:LEU:HD22	0.45	1.89	14	1
1:A:123:LYS:O	1:A:129:LEU:CG	0.45	2.65	18	3
1:A:111:GLN:HA	1:A:133:ILE:CD1	0.45	2.41	19	1
1:A:16:ILE:HG21	1:A:65:MET:CG	0.45	2.42	20	1
1:A:26:PRO:C	1:A:28:ALA:N	0.45	2.70	20	11
1:A:33:ARG:NH1	1:A:33:ARG:C	0.45	2.70	3	1
1:A:16:ILE:HD13	1:A:65:MET:SD	0.45	2.52	5	2
1:A:20:LEU:CD2	1:A:68:TRP:CE3	0.45	3.00	11	1
1:A:46:LEU:N	1:A:46:LEU:CD1	0.45	2.79	19	1
1:A:111:GLN:HG2	1:A:137:LEU:CD2	0.45	2.41	20	1
1:A:41:THR:CG2	1:A:65:MET:HE3	0.45	2.42	1	2
1:A:54:LYS:O	1:A:55:LEU:C	0.45	2.55	5	13
1:A:35:LEU:CD2	1:A:64:ARG:CB	0.45	2.94	7	1
1:A:25:ILE:HD11	1:A:30:PHE:HD1	0.45	1.67	10	1
1:A:125:PRO:O	1:A:129:LEU:HD23	0.45	2.12	16	1
1:A:108:THR:HB	1:A:137:LEU:HD13	0.45	1.89	20	1
1:A:40:GLY:O	1:A:43:SER:N	0.44	2.50	7	3
1:A:26:PRO:O	1:A:27:GLN:C	0.44	2.55	10	9
1:A:147:PHE:CE1	1:A:151:ALA:HB2	0.44	2.45	4	2
1:A:45:LEU:HD12	1:A:46:LEU:N	0.44	2.28	10	1
1:A:138:GLY:O	1:A:139:LEU:HB2	0.44	2.13	16	1
1:A:40:GLY:C	1:A:42:LEU:N	0.44	2.70	6	9
1:A:63:ARG:O	1:A:64:ARG:C	0.44	2.56	1	9
1:A:130:GLN:CG	1:A:148:PHE:CE1	0.44	3.00	2	1
1:A:7:ILE:CG2	1:A:12:VAL:HG21	0.44	2.42	12	2
1:A:9:THR:HG21	1:A:52:TRP:CA	0.44	2.42	14	1
1:A:119:PHE:O	1:A:124:ARG:NH1	0.44	2.50	18	1
1:A:13:ALA:HB2	1:A:46:LEU:HD12	0.44	1.90	3	1
1:A:107:PHE:CE1	1:A:142:SER:O	0.44	2.71	6	1
1:A:114:THR:HG21	1:A:133:ILE:HG12	0.44	1.88	20	4
1:A:118:ILE:C	1:A:120:LYS:N	0.44	2.70	18	5
1:A:9:THR:OG1	1:A:62:PHE:CE2	0.44	2.63	9	1
1:A:115:LEU:CD1	1:A:144:VAL:HA	0.44	2.42	13	1
1:A:130:GLN:CD	1:A:144:VAL:HG11	0.44	2.33	15	2
1:A:135:GLN:O	1:A:135:GLN:NE2	0.44	2.49	3	2
1:A:46:LEU:HD11	1:A:62:PHE:CE2	0.44	2.48	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:LEU:N	0.44	2.28	9	1
1:A:46:LEU:HD11	1:A:55:LEU:CD2	0.44	2.42	16	1
1:A:41:THR:CG2	1:A:65:MET:HE1	0.44	2.42	1	1
1:A:147:PHE:C	1:A:149:MET:N	0.44	2.70	5	13
1:A:110:VAL:HG13	1:A:111:GLN:N	0.44	2.27	12	1
1:A:27:GLN:HA	1:A:38:SER:CB	0.44	2.42	2	5
1:A:62:PHE:CD1	1:A:66:TRP:CZ2	0.44	3.05	8	1
1:A:7:ILE:O	1:A:8:ASN:ND2	0.44	2.51	15	2
1:A:39:GLN:O	1:A:41:THR:N	0.44	2.50	19	1
1:A:68:TRP:CE3	1:A:68:TRP:O	0.44	2.71	19	1
1:A:11:GLU:O	1:A:15:ARG:CB	0.44	2.66	20	2
1:A:12:VAL:HG11	1:A:62:PHE:CD2	0.44	2.48	3	2
1:A:111:GLN:CD	1:A:143:THR:OG1	0.44	2.56	12	2
1:A:13:ALA:HB2	1:A:42:LEU:HB3	0.44	1.90	11	2
1:A:42:LEU:HD22	1:A:55:LEU:HD13	0.44	1.89	1	1
1:A:53:SER:C	1:A:55:LEU:N	0.44	2.70	11	3
1:A:25:ILE:HG23	1:A:39:GLN:HA	0.44	1.90	3	1
1:A:33:ARG:NH1	1:A:68:TRP:CH2	0.44	2.85	5	1
1:A:39:GLN:O	1:A:39:GLN:CG	0.44	2.65	12	2
1:A:40:GLY:O	1:A:41:THR:C	0.44	2.55	13	2
1:A:121:GLU:C	1:A:122:ASN:OD1	0.44	2.56	18	1
1:A:130:GLN:HB3	1:A:144:VAL:HG11	0.44	1.89	7	1
1:A:19:GLU:HB2	1:A:69:LEU:HD11	0.44	1.89	9	1
1:A:108:THR:CG2	1:A:110:VAL:HG12	0.43	2.40	1	2
1:A:111:GLN:OE1	1:A:137:LEU:HD12	0.43	2.12	18	1
1:A:129:LEU:CD1	1:A:130:GLN:N	0.43	2.70	18	3
1:A:46:LEU:CD2	1:A:55:LEU:HD21	0.43	2.44	2	1
1:A:110:VAL:HG12	1:A:137:LEU:HG	0.43	1.89	4	1
1:A:33:ARG:CZ	1:A:68:TRP:CE2	0.43	3.00	5	1
1:A:30:PHE:CZ	1:A:39:GLN:HB2	0.43	2.48	19	1
1:A:42:LEU:HG	1:A:62:PHE:CE1	0.43	2.49	19	2
1:A:137:LEU:HD13	1:A:137:LEU:N	0.43	2.27	6	1
1:A:16:ILE:HG23	1:A:69:LEU:CD2	0.43	2.42	8	1
1:A:7:ILE:CG1	1:A:12:VAL:HG23	0.43	2.40	15	1
1:A:27:GLN:O	1:A:30:PHE:N	0.43	2.52	15	1
1:A:30:PHE:CE2	1:A:39:GLN:HB2	0.43	2.48	19	1
1:A:59:ARG:O	1:A:61:THR:N	0.43	2.51	6	1
1:A:35:LEU:CD2	1:A:64:ARG:HB3	0.43	2.44	7	1
1:A:38:SER:HB2	1:A:41:THR:HG22	0.43	1.90	8	1
1:A:20:LEU:HD11	1:A:30:PHE:CZ	0.43	2.48	11	1
1:A:26:PRO:CG	1:A:29:ILE:HD13	0.43	2.43	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:109:ASP:O	1:A:112:ARG:CG	0.43	2.66	20	1
1:A:108:THR:OG1	1:A:111:GLN:NE2	0.43	2.52	10	1
1:A:50:LYS:N	1:A:51:PRO:CD	0.43	2.81	14	1
1:A:51:PRO:O	1:A:52:TRP:HB2	0.43	2.14	14	1
1:A:46:LEU:CD1	1:A:55:LEU:CD2	0.43	2.96	16	1
1:A:34:VAL:CG1	1:A:35:LEU:HD22	0.43	2.44	13	1
1:A:115:LEU:CD2	1:A:133:ILE:HG21	0.43	2.43	11	3
1:A:118:ILE:CD1	1:A:121:GLU:HB3	0.43	2.44	2	1
1:A:126:SER:O	1:A:127:LYS:C	0.43	2.57	7	4
1:A:11:GLU:O	1:A:15:ARG:N	0.43	2.49	7	1
1:A:45:LEU:HD12	1:A:45:LEU:C	0.43	2.33	10	1
1:A:20:LEU:HB2	1:A:25:ILE:CD1	0.43	2.43	13	2
1:A:7:ILE:HD11	1:A:12:VAL:CA	0.43	2.43	15	1
1:A:46:LEU:CD1	1:A:55:LEU:HD21	0.43	2.44	16	1
1:A:7:ILE:HG23	1:A:66:TRP:CD2	0.43	2.48	17	1
1:A:39:GLN:CD	1:A:40:GLY:N	0.43	2.71	19	1
1:A:118:ILE:CD1	1:A:122:ASN:HB2	0.43	2.43	19	1
1:A:108:THR:CB	1:A:137:LEU:HD13	0.43	2.43	20	1
1:A:70:GLN:O	1:A:71:GLU:O	0.43	2.37	13	3
1:A:20:LEU:HG	1:A:25:ILE:CD1	0.43	2.43	2	2
1:A:35:LEU:HD21	1:A:65:MET:HG2	0.43	1.91	2	2
1:A:54:LYS:O	1:A:55:LEU:O	0.43	2.36	3	1
1:A:124:ARG:CB	1:A:124:ARG:CZ	0.43	2.97	11	1
1:A:54:LYS:O	1:A:54:LYS:HD2	0.43	2.14	18	1
1:A:9:THR:O	1:A:46:LEU:HD13	0.43	2.14	20	1
1:A:111:GLN:HG2	1:A:137:LEU:CD1	0.43	2.42	20	1
1:A:145:SER:O	1:A:149:MET:CG	0.43	2.67	9	1
1:A:123:LYS:HB3	1:A:129:LEU:CB	0.43	2.44	19	2
1:A:21:LYS:O	1:A:22:ARG:HB2	0.43	2.13	14	2
1:A:118:ILE:CD1	1:A:122:ASN:HB3	0.43	2.43	19	2
1:A:107:PHE:CE1	1:A:146:ASN:OD1	0.43	2.71	9	1
1:A:115:LEU:HB3	1:A:147:PHE:CB	0.43	2.44	12	1
1:A:131:ILE:O	1:A:131:ILE:CG2	0.43	2.66	12	1
1:A:52:TRP:O	1:A:53:SER:C	0.43	2.56	14	1
1:A:111:GLN:HG2	1:A:133:ILE:HD12	0.43	1.90	19	1
1:A:107:PHE:CE1	1:A:146:ASN:ND2	0.42	2.86	1	2
1:A:61:THR:O	1:A:65:MET:SD	0.42	2.77	19	2
1:A:10:LYS:HB2	1:A:50:LYS:CB	0.42	2.43	14	1
1:A:21:LYS:C	1:A:22:ARG:CG	0.42	2.86	14	1
1:A:8:ASN:HB2	1:A:11:GLU:CB	0.42	2.44	3	1
1:A:55:LEU:CD2	1:A:62:PHE:CD1	0.42	3.02	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:ILE:N	1:A:29:ILE:HD12	0.42	2.29	5	1
1:A:123:LYS:HB3	1:A:129:LEU:CD1	0.42	2.44	6	1
1:A:123:LYS:HB2	1:A:129:LEU:CD1	0.42	2.44	9	1
1:A:23:TYR:C	1:A:24:SER:OG	0.42	2.56	14	1
1:A:55:LEU:C	1:A:57:SER:N	0.42	2.72	15	1
1:A:16:ILE:O	1:A:20:LEU:HD23	0.42	2.14	17	1
1:A:49:PRO:O	1:A:50:LYS:CD	0.42	2.67	18	1
1:A:9:THR:HG23	1:A:62:PHE:CZ	0.42	2.50	3	1
1:A:111:GLN:OE1	1:A:111:GLN:C	0.42	2.57	4	1
1:A:15:ARG:C	1:A:17:THR:N	0.42	2.72	12	3
1:A:48:ASN:CB	1:A:49:PRO:HD2	0.42	2.44	14	1
1:A:18:THR:HG23	1:A:22:ARG:HD2	0.42	1.90	17	1
1:A:123:LYS:CG	1:A:126:SER:HB2	0.42	2.45	20	1
1:A:16:ILE:O	1:A:20:LEU:CD2	0.42	2.63	2	1
1:A:55:LEU:HD23	1:A:62:PHE:CZ	0.42	2.48	9	1
1:A:107:PHE:CE1	1:A:146:ASN:CG	0.42	2.92	18	1
1:A:17:THR:HA	1:A:25:ILE:CG1	0.42	2.44	19	1
1:A:33:ARG:NE	1:A:33:ARG:C	0.42	2.72	9	1
1:A:130:GLN:HB2	1:A:148:PHE:CZ	0.42	2.50	9	1
1:A:16:ILE:CD1	1:A:42:LEU:HD22	0.42	2.44	14	1
1:A:111:GLN:CG	1:A:137:LEU:HD23	0.42	2.45	15	1
1:A:134:SER:HB3	1:A:144:VAL:CG2	0.42	2.45	7	1
1:A:20:LEU:CD2	1:A:30:PHE:CD1	0.42	3.02	8	1
1:A:121:GLU:O	1:A:122:ASN:OD1	0.42	2.38	16	1
1:A:20:LEU:HG	1:A:68:TRP:CH2	0.42	2.49	19	1
1:A:149:MET:C	1:A:149:MET:SD	0.42	2.98	1	2
1:A:62:PHE:O	1:A:66:TRP:CE2	0.42	2.72	15	2
1:A:120:LYS:O	1:A:121:GLU:C	0.42	2.58	18	1
1:A:34:VAL:HG22	1:A:35:LEU:N	0.42	2.29	6	2
1:A:48:ASN:OD1	1:A:48:ASN:O	0.42	2.38	6	1
1:A:151:ALA:O	1:A:152:ARG:C	0.42	2.57	9	3
1:A:143:THR:HG23	1:A:144:VAL:N	0.42	2.30	15	2
1:A:30:PHE:CD1	1:A:38:SER:HA	0.42	2.49	19	1
1:A:63:ARG:HA	1:A:66:TRP:CD2	0.42	2.49	19	1
1:A:124:ARG:CZ	1:A:124:ARG:HB2	0.42	2.44	1	1
1:A:130:GLN:HG3	1:A:144:VAL:CG1	0.42	2.44	4	1
1:A:59:ARG:O	1:A:60:GLU:C	0.42	2.56	6	1
1:A:14:GLN:OE1	1:A:43:SER:CB	0.42	2.68	7	1
1:A:125:PRO:O	1:A:126:SER:O	0.42	2.38	8	2
1:A:136:GLN:CB	1:A:137:LEU:HD12	0.42	2.44	11	1
1:A:45:LEU:CD1	1:A:55:LEU:HG	0.42	2.45	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:118:ILE:CD1	1:A:129:LEU:HD11	0.42	2.45	13	1
1:A:145:SER:O	1:A:149:MET:HB3	0.42	2.14	13	1
1:A:39:GLN:C	1:A:39:GLN:CD	0.42	2.77	19	1
1:A:55:LEU:CD2	1:A:57:SER:CB	0.42	2.98	19	1
1:A:10:LYS:HG3	1:A:46:LEU:HD12	0.42	1.92	2	1
1:A:109:ASP:O	1:A:113:ARG:CB	0.42	2.68	8	1
1:A:134:SER:HA	1:A:143:THR:HG21	0.42	1.92	15	1
1:A:29:ILE:HG23	1:A:33:ARG:CG	0.42	2.45	19	1
1:A:42:LEU:HD22	1:A:55:LEU:CD1	0.41	2.45	1	1
1:A:111:GLN:HG2	1:A:133:ILE:CD1	0.41	2.45	4	2
1:A:108:THR:CB	1:A:111:GLN:OE1	0.41	2.68	6	1
1:A:12:VAL:HG12	1:A:42:LEU:HD13	0.41	1.92	13	1
1:A:111:GLN:CG	1:A:137:LEU:CD2	0.41	2.90	20	1
1:A:41:THR:HG23	1:A:65:MET:HE3	0.41	1.92	2	1
1:A:68:TRP:O	1:A:69:LEU:C	0.41	2.58	2	1
1:A:12:VAL:HG22	1:A:16:ILE:HD11	0.41	1.91	4	1
1:A:120:LYS:O	1:A:121:GLU:CG	0.41	2.68	8	1
1:A:123:LYS:C	1:A:125:PRO:HD2	0.41	2.35	15	2
1:A:35:LEU:HD21	1:A:65:MET:HE2	0.41	1.91	13	1
1:A:118:ILE:CG2	1:A:124:ARG:HA	0.41	2.45	16	1
1:A:134:SER:OG	1:A:140:GLU:O	0.41	2.35	15	2
1:A:119:PHE:CE1	1:A:151:ALA:HB1	0.41	2.50	6	1
1:A:20:LEU:CD2	1:A:69:LEU:HD21	0.41	2.46	10	1
1:A:115:LEU:CD2	1:A:147:PHE:CD2	0.41	2.93	13	1
1:A:130:GLN:OE1	1:A:148:PHE:CZ	0.41	2.74	15	1
1:A:58:GLY:O	1:A:60:GLU:N	0.41	2.54	2	1
1:A:115:LEU:CD1	1:A:129:LEU:CD2	0.41	2.99	6	1
1:A:111:GLN:CG	1:A:137:LEU:HB2	0.41	2.45	7	1
1:A:118:ILE:HD13	1:A:122:ASN:HB2	0.41	1.91	19	2
1:A:146:ASN:O	1:A:150:ASN:CG	0.41	2.58	16	1
1:A:122:ASN:OD1	1:A:122:ASN:N	0.41	2.52	18	1
1:A:30:PHE:CZ	1:A:35:LEU:HD12	0.41	2.50	3	1
1:A:118:ILE:HD13	1:A:118:ILE:HA	0.41	1.70	3	3
1:A:139:LEU:HD12	1:A:140:GLU:OE1	0.41	2.15	4	1
1:A:45:LEU:C	1:A:45:LEU:HD12	0.41	2.35	9	1
1:A:123:LYS:CB	1:A:129:LEU:HG	0.41	2.46	12	1
1:A:63:ARG:O	1:A:65:MET:N	0.41	2.53	16	2
1:A:108:THR:OG1	1:A:137:LEU:CD1	0.41	2.68	20	1
1:A:33:ARG:HH21	1:A:68:TRP:HA	0.41	1.75	5	1
1:A:130:GLN:HG2	1:A:131:ILE:N	0.41	2.31	5	1
1:A:9:THR:CA	1:A:62:PHE:CZ	0.41	3.04	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:ALA:O	1:A:31:ALA:HB3	0.41	2.16	10	1
1:A:39:GLN:O	1:A:39:GLN:CD	0.41	2.59	12	1
1:A:128:GLU:O	1:A:129:LEU:C	0.41	2.58	12	1
1:A:35:LEU:CD2	1:A:65:MET:CE	0.41	2.98	18	1
1:A:30:PHE:CD2	1:A:38:SER:HB3	0.41	2.51	20	1
1:A:111:GLN:HG2	1:A:137:LEU:CG	0.41	2.45	20	1
1:A:15:ARG:O	1:A:17:THR:N	0.41	2.53	6	1
1:A:59:ARG:O	1:A:62:PHE:N	0.41	2.54	6	1
1:A:124:ARG:O	1:A:148:PHE:CZ	0.41	2.74	6	1
1:A:45:LEU:CD1	1:A:55:LEU:CD2	0.41	2.91	8	1
1:A:144:VAL:O	1:A:148:PHE:HB2	0.41	2.15	8	1
1:A:19:GLU:O	1:A:20:LEU:C	0.41	2.59	11	1
1:A:55:LEU:O	1:A:59:ARG:N	0.41	2.54	14	1
1:A:111:GLN:OE1	1:A:134:SER:O	0.41	2.39	2	1
1:A:29:ILE:O	1:A:32:GLN:N	0.41	2.54	8	1
1:A:23:TYR:O	1:A:24:SER:OG	0.41	2.37	13	1
1:A:8:ASN:O	1:A:12:VAL:HB	0.41	2.15	3	1
1:A:8:ASN:CB	1:A:11:GLU:HB2	0.41	2.46	3	1
1:A:27:GLN:OE1	1:A:39:GLN:CD	0.41	2.59	4	2
1:A:118:ILE:O	1:A:119:PHE:C	0.41	2.59	4	3
1:A:42:LEU:HD11	1:A:62:PHE:CA	0.41	2.44	5	1
1:A:119:PHE:CD1	1:A:151:ALA:HB1	0.41	2.51	6	1
1:A:141:LEU:O	1:A:144:VAL:N	0.41	2.53	8	1
1:A:42:LEU:CD2	1:A:61:THR:HG22	0.41	2.45	10	1
1:A:141:LEU:C	1:A:141:LEU:CD2	0.41	2.89	11	1
1:A:46:LEU:CD1	1:A:55:LEU:HD23	0.41	2.45	12	1
1:A:55:LEU:N	1:A:55:LEU:HD22	0.41	2.31	12	1
1:A:115:LEU:HB3	1:A:147:PHE:CG	0.41	2.50	12	1
1:A:147:PHE:CD2	1:A:148:PHE:HD1	0.41	2.34	12	1
1:A:13:ALA:CA	1:A:16:ILE:HD12	0.41	2.46	14	2
1:A:21:LYS:O	1:A:22:ARG:CG	0.41	2.68	14	1
1:A:110:VAL:CG1	1:A:137:LEU:HD22	0.41	2.45	14	1
1:A:29:ILE:HG22	1:A:33:ARG:HG3	0.41	1.92	18	1
1:A:64:ARG:O	1:A:67:LYS:HB2	0.41	2.16	19	1
1:A:111:GLN:NE2	1:A:133:ILE:HG23	0.41	2.31	19	1
1:A:16:ILE:CD1	1:A:65:MET:HB3	0.41	2.45	4	1
1:A:51:PRO:O	1:A:52:TRP:CB	0.41	2.69	6	1
1:A:9:THR:CB	1:A:62:PHE:CZ	0.41	3.03	12	1
1:A:20:LEU:HD13	1:A:68:TRP:CD2	0.41	2.51	14	1
1:A:111:GLN:C	1:A:113:ARG:N	0.41	2.72	20	2
1:A:34:VAL:HG12	1:A:64:ARG:HG2	0.41	1.93	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:148:PHE:O	1:A:152:ARG:C	0.41	2.60	17	1
1:A:9:THR:HG23	1:A:62:PHE:CE2	0.41	2.50	19	1
1:A:111:GLN:CB	1:A:143:THR:OG1	0.40	2.69	2	1
1:A:59:ARG:C	1:A:61:THR:N	0.40	2.74	6	1
1:A:110:VAL:CG1	1:A:111:GLN:N	0.40	2.84	12	1
1:A:13:ALA:CB	1:A:42:LEU:HB3	0.40	2.46	14	1
1:A:55:LEU:HD12	1:A:62:PHE:CE1	0.40	2.50	19	1
1:A:58:GLY:C	1:A:60:GLU:N	0.40	2.73	2	1
1:A:17:THR:CG2	1:A:24:SER:N	0.40	2.84	4	1
1:A:42:LEU:CG	1:A:62:PHE:CD1	0.40	3.04	4	1
1:A:30:PHE:CZ	1:A:35:LEU:CD2	0.40	2.94	10	1
1:A:30:PHE:O	1:A:35:LEU:O	0.40	2.39	12	1
1:A:58:GLY:O	1:A:59:ARG:C	0.40	2.60	2	1
1:A:143:THR:O	1:A:144:VAL:C	0.40	2.59	2	1
1:A:111:GLN:CD	1:A:137:LEU:O	0.40	2.60	3	1
1:A:20:LEU:CD1	1:A:69:LEU:HD21	0.40	2.46	5	1
1:A:8:ASN:O	1:A:12:VAL:HG12	0.40	2.17	7	1
1:A:12:VAL:HG22	1:A:66:TRP:CD1	0.40	2.50	7	1
1:A:124:ARG:CB	1:A:125:PRO:CD	0.40	2.99	9	1
1:A:53:SER:O	1:A:54:LYS:HB2	0.40	2.16	10	1
1:A:71:GLU:OE1	1:A:71:GLU:CA	0.40	2.69	13	1
1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HA	0.40	1.78	14	1
1:A:139:LEU:HD12	1:A:140:GLU:HG2	0.40	1.94	14	1
1:A:148:PHE:O	1:A:152:ARG:CA	0.40	2.70	5	1
1:A:122:ASN:CG	1:A:122:ASN:O	0.40	2.60	6	1
1:A:7:ILE:CG2	1:A:7:ILE:O	0.40	2.68	7	1
1:A:38:SER:HB2	1:A:41:THR:CG2	0.40	2.46	8	1
1:A:129:LEU:C	1:A:129:LEU:CD1	0.40	2.83	15	1
1:A:35:LEU:CD1	1:A:65:MET:HE2	0.40	2.47	19	1
1:A:124:ARG:HB3	1:A:124:ARG:CZ	0.40	2.47	4	1
1:A:130:GLN:O	1:A:133:ILE:HG22	0.40	2.17	5	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	110/147 (75%)	72±4 (66±4%)	25±5 (23±4%)	13±2 (12±2%)	1	7
All	All	2200/2940 (75%)	1444 (66%)	497 (23%)	259 (12%)	1	7

All 30 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	23	TYR	20
1	A	107	PHE	18
1	A	139	LEU	18
1	A	20	LEU	17
1	A	22	ARG	17
1	A	24	SER	17
1	A	148	PHE	17
1	A	122	ASN	15
1	A	126	SER	15
1	A	125	PRO	14
1	A	121	GLU	14
1	A	55	LEU	9
1	A	7	ILE	9
1	A	71	GLU	8
1	A	54	LYS	7
1	A	47	ARG	7
1	A	41	THR	6
1	A	8	ASN	5
1	A	27	GLN	5
1	A	120	LYS	5
1	A	119	PHE	3
1	A	52	TRP	2
1	A	53	SER	2
1	A	123	LYS	2
1	A	58	GLY	2
1	A	151	ALA	1
1	A	33	ARG	1
1	A	57	SER	1
1	A	37	ARG	1
1	A	138	GLY	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	103/134 (77%)	61±3 (59±3%)	42±3 (41±3%)	0 4
All	All	2060/2680 (77%)	1214 (59%)	846 (41%)	0 4

All 89 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	54	LYS	20
1	A	133	ILE	20
1	A	145	SER	20
1	A	129	LEU	19
1	A	22	ARG	17
1	A	62	PHE	17
1	A	65	MET	17
1	A	41	THR	16
1	A	118	ILE	16
1	A	134	SER	16
1	A	139	LEU	16
1	A	30	PHE	15
1	A	33	ARG	15
1	A	35	LEU	15
1	A	127	LYS	15
1	A	120	LYS	15
1	A	142	SER	15
1	A	11	GLU	14
1	A	15	ARG	14
1	A	43	SER	14
1	A	112	ARG	14
1	A	24	SER	13
1	A	55	LEU	13
1	A	59	ARG	13
1	A	25	ILE	13
1	A	23	TYR	13
1	A	37	ARG	12
1	A	152	ARG	12
1	A	70	GLN	12
1	A	149	MET	12
1	A	10	LYS	12
1	A	123	LYS	12
1	A	147	PHE	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	27	GLN	11
1	A	47	ARG	11
1	A	50	LYS	11
1	A	109	ASP	11
1	A	140	GLU	11
1	A	19	GLU	10
1	A	56	LYS	10
1	A	68	TRP	10
1	A	71	GLU	10
1	A	141	LEU	10
1	A	14	GLN	10
1	A	67	LYS	9
1	A	121	GLU	9
1	A	137	LEU	9
1	A	8	ASN	8
1	A	20	LEU	8
1	A	21	LYS	8
1	A	36	CYS	8
1	A	46	LEU	8
1	A	122	ASN	8
1	A	57	SER	8
1	A	64	ARG	8
1	A	130	GLN	8
1	A	113	ARG	8
1	A	32	GLN	7
1	A	34	VAL	7
1	A	107	PHE	7
1	A	124	ARG	7
1	A	128	GLU	7
1	A	69	LEU	7
1	A	60	GLU	6
1	A	39	GLN	6
1	A	9	THR	6
1	A	119	PHE	6
1	A	135	GLN	5
1	A	111	GLN	5
1	A	48	ASN	5
1	A	45	LEU	5
1	A	136	GLN	5
1	A	29	ILE	4
1	A	42	LEU	4
1	A	63	ARG	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	143	THR	4
1	A	53	SER	3
1	A	12	VAL	3
1	A	38	SER	3
1	A	150	ASN	3
1	A	115	LEU	3
1	A	17	THR	2
1	A	146	ASN	2
1	A	66	TRP	2
1	A	52	TRP	2
1	A	7	ILE	2
1	A	44	ASP	2
1	A	108	THR	1
1	A	61	THR	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no 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