



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 02:59 PM BST

PDB ID : 1GKG  
Title : STRUCTURE DETERMINATION AND RATIONAL MUTAGENESIS REVEAL BINDING SURFACE OF IMMUNE ADHERENCE RECEPTOR, CR1 (CD35)  
Authors : Smith, B.O.; Mallin, R.L.; Krych-Goldberg, M.; Wang, X.; Hauhart, R.E.; Bromek, K.; Uhrin, D.; Atkinson, J.P.; Barlow, P.N.  
Deposited on : 2001-08-14

This is a Full wwPDB NMR Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.  
We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto:validation@mail.wwpdb.org)  
A user guide is available at  
<http://wwpdb.org/validation/2016/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:

Cyrange	:	Kirchner and Güntert (2011)
NmrClust	:	Kelley et al. (1996)
MolProbity	:	4.02b-467
Mogul	:	unknown
Percentile statistics	:	20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)
RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
ShiftChecker	:	rb-20027457
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	rb-20027457

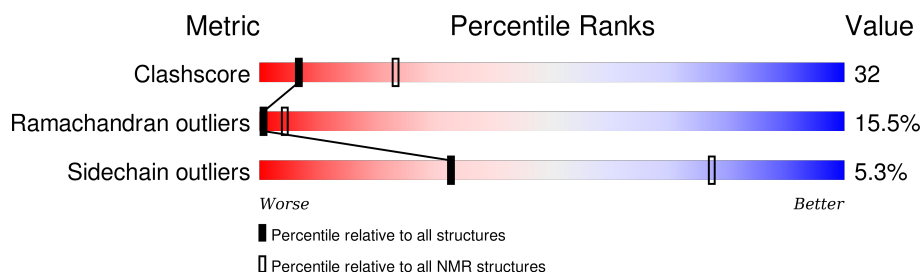
# 1 Overall quality at a glance

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	114402	11133
Ramachandran outliers	111179	9975
Sidechain outliers	111093	9958

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	136	<div> <div>28%</div> <div>68%</div> <div>...</div> </div>

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 24 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

The following residues are included in the computation of the global validation metrics.

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:960-A:1092 (133)	1.36	1

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

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

The models can be grouped into 4 clusters and 2 single-model clusters were found.

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

### 3 Entry composition

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

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

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

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

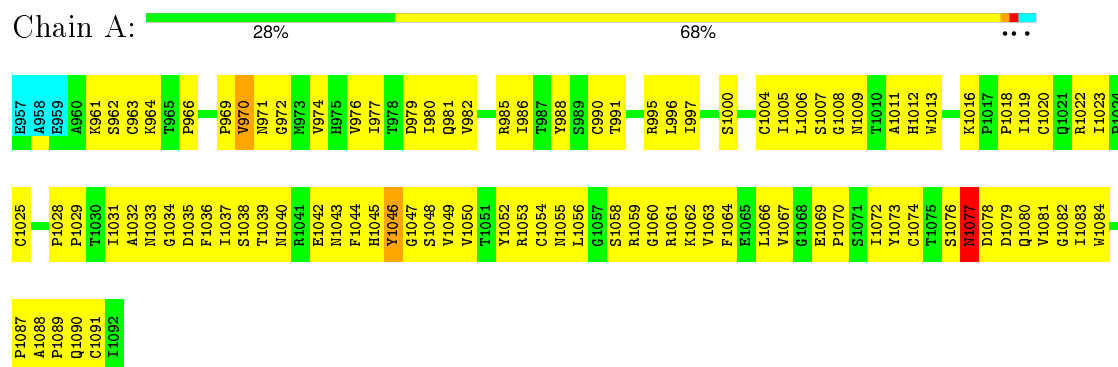
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	987	THR	ASN	ENGINEERED MUTATION	UNP P17927

## 4 Residue-property plots

### 4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

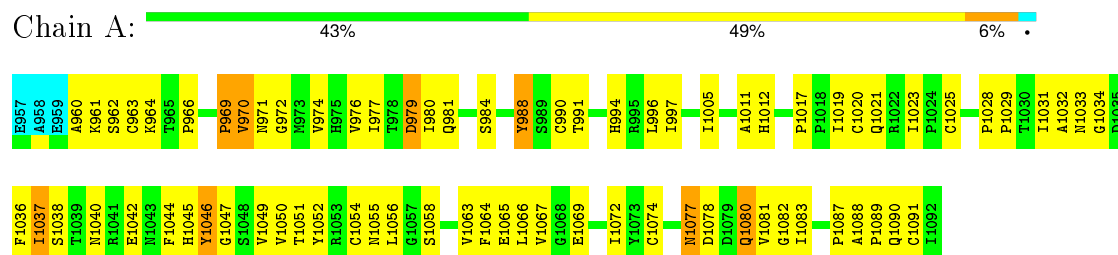


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

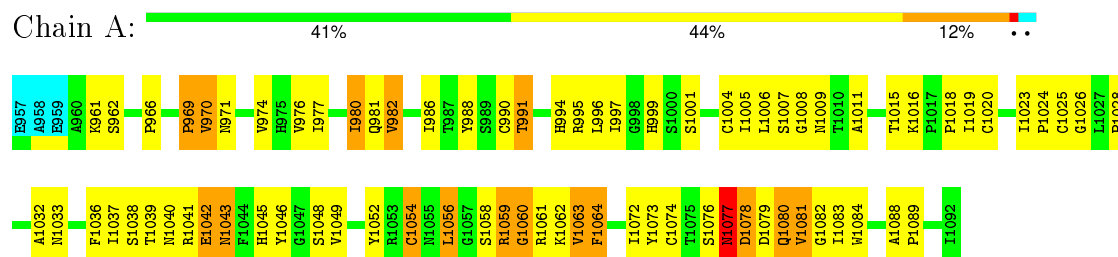
#### 4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1



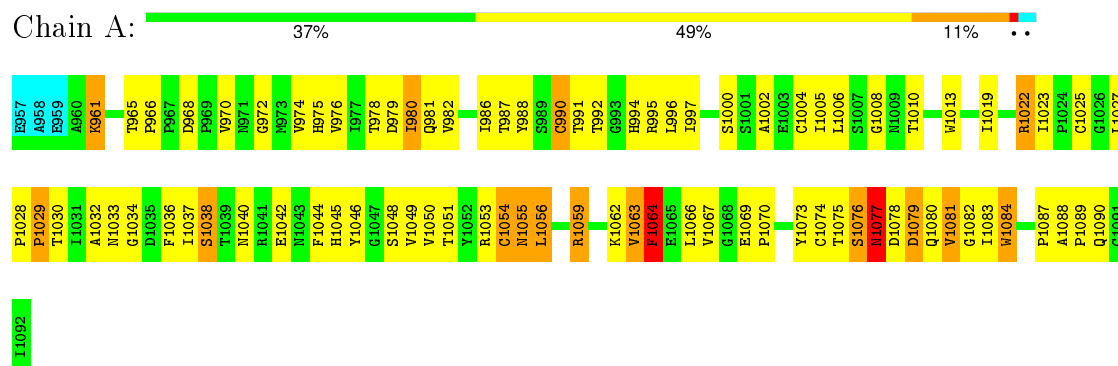
#### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1



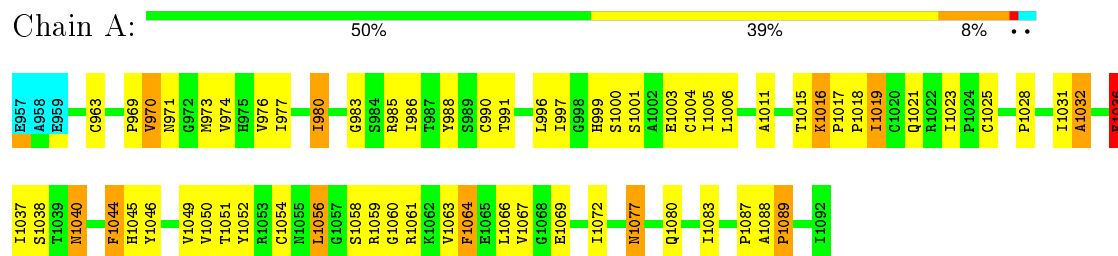
### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1



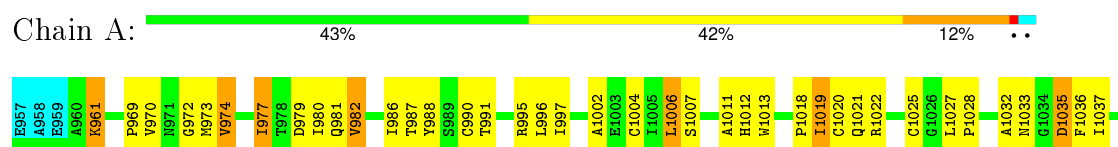
### 4.2.4 Score per residue for model 4

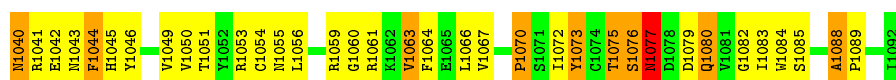
- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1



### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

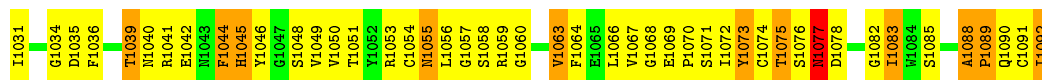
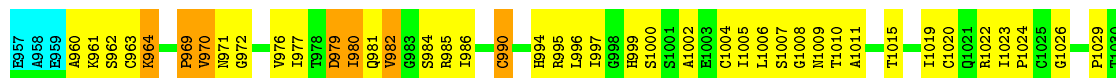




#### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

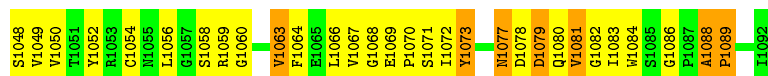
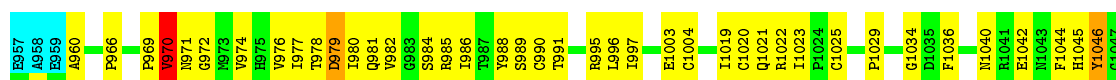
Chain A: 33% 51% 13% ..



#### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

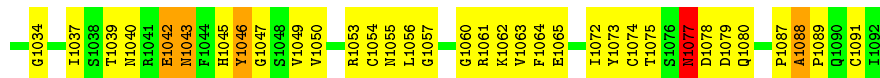
Chain A: 46% 44% 7% ..



#### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

Chain A: 43% 45% 10% ..



#### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

Chain A: 46% 40% 11% ..



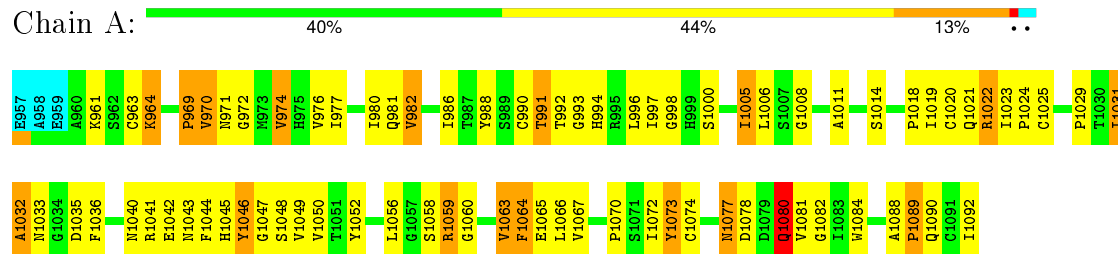
### 4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1



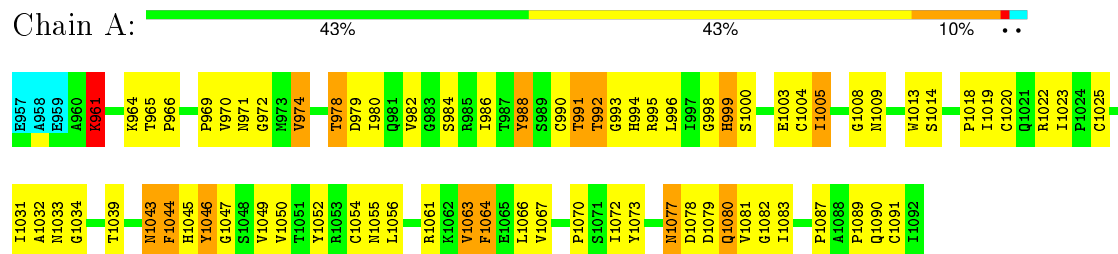
### 4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1



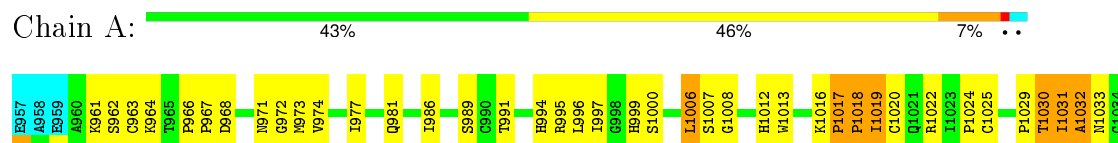
### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1



### 4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1





#### 4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

Chain A: 43% 42% 13% ..



#### 4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

Chain A: 39% 51% 7% ..



#### 4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

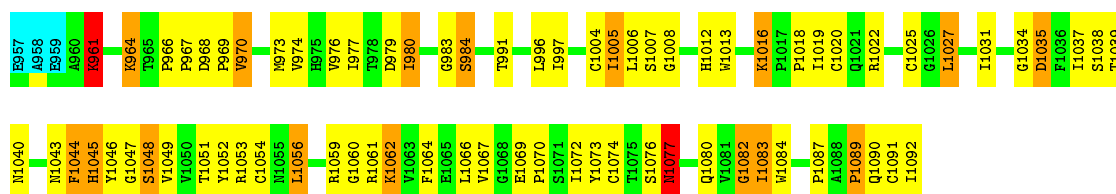
Chain A: 38% 46% 13% ..



#### 4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

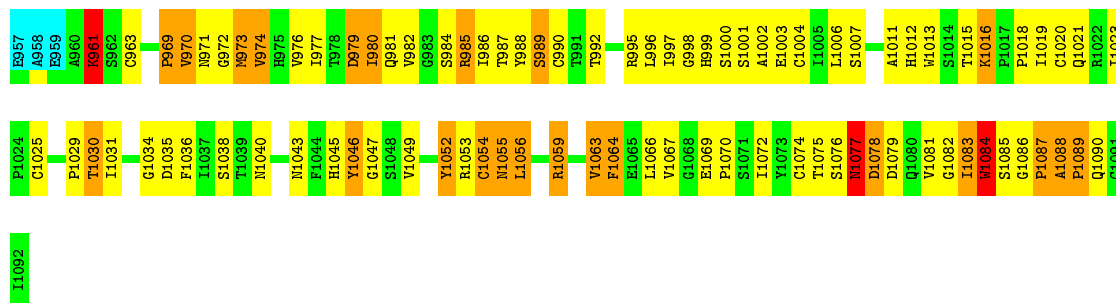
Chain A: 43% 41% 12% ..



#### 4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

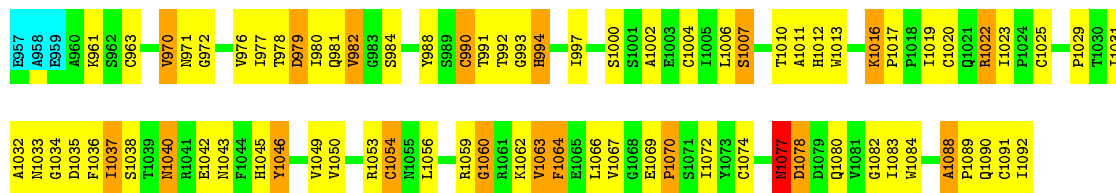
Chain A: 34% 45% 17% ..



#### 4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

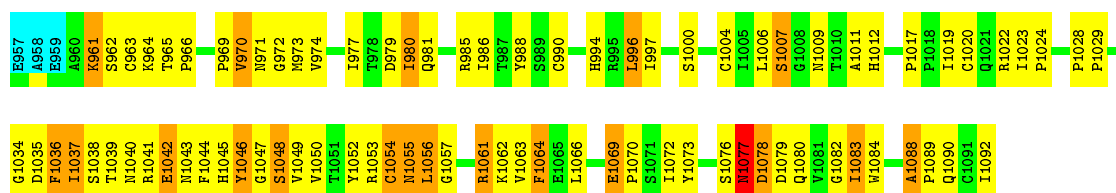
Chain A: 41% 43% 13% ..



#### 4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

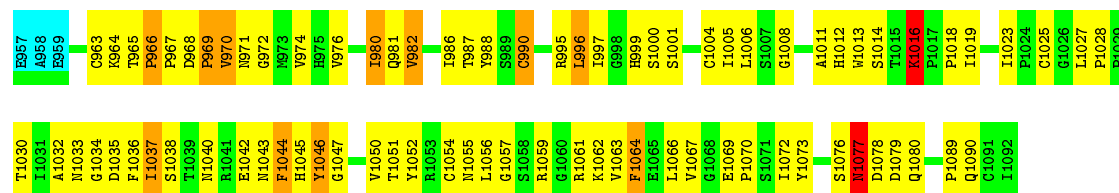
Chain A: 38% 46% 14% ..



#### 4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: COMPLEMENT RECEPTOR TYPE 1

Chain A:  39% 49% 8% ..



## 5 Refinement protocol and experimental data overview

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

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

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

Software name	Classification	Version
CNS 1.0	refinement	
CNS VERSION: 1.0	structure solution	

No chemical shift data was provided. No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.

## 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	1005	976	971	63±11
All	All	24120	23424	23304	1511

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 32.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1076:SER:HB2	1:A:1081:VAL:HB	0.93	1.36	21	1
1:A:1049:VAL:HG12	1:A:1073:TYR:HB3	0.93	1.39	3	2
1:A:976:VAL:HG13	1:A:980:ILE:HG23	0.87	1.46	22	6
1:A:962:SER:HA	1:A:981:GLN:HA	0.84	1.50	19	9
1:A:996:LEU:HA	1:A:1020:CYS:HA	0.83	1.50	8	5
1:A:1066:LEU:HD23	1:A:1067:VAL:N	0.83	1.89	19	6
1:A:1077:ASN:HA	1:A:1083:ILE:HG12	0.82	1.49	5	1
1:A:1056:LEU:HB2	1:A:1063:VAL:HA	0.81	1.52	17	1
1:A:1053:ARG:HA	1:A:1066:LEU:HD22	0.80	1.53	13	1
1:A:966:PRO:HG2	1:A:974:VAL:HG11	0.80	1.54	23	10
1:A:1028:PRO:HB3	1:A:1072:ILE:HD11	0.78	1.56	23	2
1:A:974:VAL:HA	1:A:988:TYR:HB3	0.78	1.55	5	1
1:A:974:VAL:HG21	1:A:986:ILE:HD12	0.78	1.56	13	8
1:A:1091:CYS:O	1:A:1092:ILE:HG12	0.78	1.79	6	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1029:PRO:HD3	1:A:1085:SER:HA	0.77	1.55	21	1
1:A:1075:THR:HG21	1:A:1084:TRP:H	0.76	1.38	21	1
1:A:1075:THR:HG21	1:A:1084:TRP:N	0.76	1.95	21	1
1:A:1056:LEU:HD22	1:A:1060:GLY:HA2	0.75	1.58	16	3
1:A:997:ILE:HB	1:A:1019:ILE:HB	0.75	1.56	19	2
1:A:1074:CYS:HA	1:A:1084:TRP:HA	0.74	1.58	9	8
1:A:990:CYS:HB2	1:A:996:LEU:HD12	0.74	1.58	11	1
1:A:970:VAL:HG11	1:A:1019:ILE:HA	0.74	1.59	24	1
1:A:1031:ILE:HD13	1:A:1089:PRO:HB2	0.73	1.59	1	2
1:A:1034:GLY:HA3	1:A:1054:CYS:HA	0.73	1.59	13	2
1:A:1049:VAL:HG22	1:A:1073:TYR:HB3	0.73	1.61	14	5
1:A:1077:ASN:HD21	1:A:1083:ILE:HD13	0.73	1.43	17	1
1:A:1054:CYS:HB2	1:A:1063:VAL:HG12	0.72	1.60	2	2
1:A:961:LYS:H	1:A:961:LYS:HD2	0.72	1.44	23	1
1:A:977:ILE:HD11	1:A:987:THR:HG23	0.72	1.60	11	1
1:A:1024:PRO:HA	1:A:1045:HIS:HA	0.72	1.60	2	3
1:A:1066:LEU:HD21	1:A:1070:PRO:HA	0.71	1.62	7	6
1:A:997:ILE:HB	1:A:1019:ILE:HG12	0.71	1.62	5	1
1:A:1037:ILE:HG22	1:A:1038:SER:H	0.71	1.46	24	3
1:A:1069:GLU:O	1:A:1089:PRO:HG3	0.70	1.86	1	6
1:A:1019:ILE:HG22	1:A:1020:CYS:H	0.70	1.46	1	2
1:A:1077:ASN:N	1:A:1077:ASN:HD22	0.70	1.84	21	12
1:A:1023:ILE:HG21	1:A:1077:ASN:HB2	0.70	1.61	18	1
1:A:1027:LEU:HD12	1:A:1028:PRO:HD2	0.70	1.61	13	1
1:A:1034:GLY:HA2	1:A:1054:CYS:HA	0.70	1.63	8	7
1:A:1037:ILE:HD11	1:A:1053:ARG:HD3	0.70	1.62	23	1
1:A:1029:PRO:HG2	1:A:1087:PRO:HA	0.70	1.64	8	1
1:A:970:VAL:HG22	1:A:971:ASN:H	0.70	1.46	6	2
1:A:970:VAL:HG11	1:A:1019:ILE:HG13	0.70	1.64	22	1
1:A:1031:ILE:HG21	1:A:1089:PRO:HD2	0.70	1.64	4	1
1:A:1054:CYS:O	1:A:1056:LEU:HD22	0.69	1.86	22	1
1:A:1047:GLY:HA3	1:A:1074:CYS:HB3	0.69	1.63	20	1
1:A:1056:LEU:HD23	1:A:1060:GLY:C	0.69	2.08	2	1
1:A:988:TYR:HB2	1:A:1000:SER:HA	0.69	1.62	11	7
1:A:980:ILE:HG22	1:A:986:ILE:HG21	0.69	1.63	7	2
1:A:1037:ILE:HD12	1:A:1053:ARG:HD2	0.69	1.65	22	1
1:A:1067:VAL:HG12	1:A:1090:GLN:O	0.69	1.87	1	1
1:A:1036:PHE:HB2	1:A:1050:VAL:HG21	0.68	1.65	16	1
1:A:1068:GLY:HA3	1:A:1089:PRO:HA	0.68	1.64	11	1
1:A:1064:PHE:HB3	1:A:1091:CYS:HB3	0.68	1.63	1	2
1:A:985:ARG:HD2	1:A:986:ILE:N	0.68	2.02	23	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:997:ILE:HB	1:A:1019:ILE:HG13	0.68	1.65	16	8
1:A:1036:PHE:HB3	1:A:1050:VAL:HG13	0.68	1.65	14	1
1:A:976:VAL:HA	1:A:986:ILE:HG22	0.68	1.65	21	7
1:A:1056:LEU:HD21	1:A:1064:PHE:HB2	0.67	1.65	8	1
1:A:974:VAL:HB	1:A:986:ILE:HD12	0.67	1.65	10	1
1:A:985:ARG:HB3	1:A:1003:GLU:HA	0.67	1.63	9	1
1:A:1067:VAL:HB	1:A:1090:GLN:HE21	0.67	1.49	21	1
1:A:1077:ASN:ND2	1:A:1078:ASP:H	0.67	1.87	15	12
1:A:1056:LEU:HA	1:A:1063:VAL:HG13	0.67	1.65	18	1
1:A:970:VAL:HG21	1:A:1019:ILE:HG13	0.67	1.66	14	2
1:A:1031:ILE:HG22	1:A:1088:ALA:HB1	0.67	1.66	4	1
1:A:996:LEU:HD21	1:A:1000:SER:HB3	0.67	1.67	15	3
1:A:1046:TYR:HA	1:A:1074:CYS:SG	0.67	2.30	13	5
1:A:971:ASN:HB2	1:A:1020:CYS:HB3	0.67	1.66	16	2
1:A:1067:VAL:HB	1:A:1090:GLN:HB2	0.67	1.64	3	5
1:A:970:VAL:HG13	1:A:971:ASN:N	0.67	2.05	2	2
1:A:1068:GLY:O	1:A:1069:GLU:HB3	0.66	1.91	11	1
1:A:1029:PRO:HB2	1:A:1088:ALA:HB2	0.66	1.68	14	6
1:A:1078:ASP:HB2	1:A:1081:VAL:HG21	0.66	1.68	7	1
1:A:970:VAL:HG22	1:A:971:ASN:ND2	0.66	2.06	4	1
1:A:1049:VAL:HG23	1:A:1072:ILE:O	0.66	1.91	19	12
1:A:964:LYS:HA	1:A:964:LYS:HE3	0.66	1.67	18	1
1:A:972:GLY:HA2	1:A:990:CYS:HA	0.65	1.67	7	10
1:A:1067:VAL:HG21	1:A:1092:ILE:HD11	0.65	1.68	22	2
1:A:1077:ASN:HD21	1:A:1083:ILE:HG12	0.65	1.51	6	3
1:A:1025:CYS:HA	1:A:1082:GLY:HA3	0.65	1.68	15	8
1:A:1038:SER:HB2	1:A:1050:VAL:HA	0.65	1.67	10	1
1:A:1016:LYS:HE3	1:A:1016:LYS:HA	0.65	1.68	24	1
1:A:970:VAL:HG11	1:A:1020:CYS:H	0.65	1.51	2	2
1:A:961:LYS:HG3	1:A:1011:ALA:HB2	0.65	1.69	21	2
1:A:1023:ILE:HA	1:A:1080:GLN:HE22	0.65	1.50	23	1
1:A:963:CYS:SG	1:A:1011:ALA:HB1	0.64	2.32	8	10
1:A:1076:SER:HA	1:A:1082:GLY:HA2	0.64	1.68	6	2
1:A:990:CYS:SG	1:A:996:LEU:HG	0.64	2.32	19	3
1:A:1056:LEU:HD23	1:A:1063:VAL:HG23	0.64	1.68	24	1
1:A:1076:SER:CB	1:A:1081:VAL:HB	0.64	2.19	21	1
1:A:964:LYS:HE3	1:A:964:LYS:HA	0.64	1.69	10	2
1:A:985:ARG:HD3	1:A:986:ILE:N	0.64	2.08	21	1
1:A:965:THR:HA	1:A:980:ILE:HG21	0.64	1.69	23	1
1:A:997:ILE:HD11	1:A:1021:GLN:HB2	0.64	1.69	4	1
1:A:1056:LEU:HD23	1:A:1060:GLY:HA3	0.64	1.70	17	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1056:LEU:HG	1:A:1060:GLY:HA2	0.64	1.70	4	4
1:A:995:ARG:HG2	1:A:996:LEU:H	0.64	1.53	5	1
1:A:1077:ASN:ND2	1:A:1083:ILE:HD11	0.63	2.07	23	2
1:A:1023:ILE:HD13	1:A:1080:GLN:HA	0.63	1.68	13	1
1:A:972:GLY:HA2	1:A:1020:CYS:SG	0.63	2.33	21	1
1:A:962:SER:HB3	1:A:981:GLN:HG2	0.63	1.70	18	6
1:A:1082:GLY:C	1:A:1083:ILE:HD13	0.63	2.13	21	2
1:A:1002:ALA:HB1	1:A:1013:TRP:HB3	0.63	1.69	3	6
1:A:1056:LEU:H	1:A:1056:LEU:HD22	0.63	1.54	20	1
1:A:1088:ALA:N	1:A:1089:PRO:HD2	0.63	2.09	5	6
1:A:1064:PHE:HB3	1:A:1091:CYS:SG	0.62	2.34	18	8
1:A:1077:ASN:N	1:A:1077:ASN:ND2	0.62	2.46	21	7
1:A:1080:GLN:OE1	1:A:1081:VAL:HG23	0.62	1.93	14	1
1:A:1061:ARG:O	1:A:1063:VAL:HG13	0.62	1.94	8	1
1:A:1029:PRO:HG3	1:A:1087:PRO:HA	0.62	1.71	13	1
1:A:1046:TYR:O	1:A:1074:CYS:HB3	0.62	1.95	6	2
1:A:969:PRO:HD2	1:A:973:MET:HA	0.62	1.71	10	4
1:A:1056:LEU:HA	1:A:1063:VAL:HG23	0.62	1.70	3	3
1:A:1088:ALA:H	1:A:1089:PRO:HD2	0.62	1.53	17	5
1:A:995:ARG:HB2	1:A:1023:ILE:HG12	0.61	1.73	21	1
1:A:1036:PHE:CD1	1:A:1050:VAL:HG23	0.61	2.31	12	2
1:A:1066:LEU:HD13	1:A:1067:VAL:N	0.61	2.09	12	2
1:A:1061:ARG:O	1:A:1062:LYS:HB3	0.61	1.96	17	2
1:A:1049:VAL:HG22	1:A:1073:TYR:HA	0.61	1.73	2	1
1:A:1031:ILE:HG13	1:A:1034:GLY:O	0.61	1.96	13	1
1:A:1077:ASN:HD22	1:A:1078:ASP:H	0.61	1.39	16	15
1:A:961:LYS:HG2	1:A:1006:LEU:HD11	0.61	1.72	22	2
1:A:1081:VAL:HG22	1:A:1082:GLY:N	0.61	2.11	17	1
1:A:1036:PHE:HA	1:A:1051:THR:O	0.61	1.96	17	4
1:A:1036:PHE:CB	1:A:1050:VAL:HG13	0.61	2.25	14	1
1:A:1036:PHE:HB2	1:A:1050:VAL:HG23	0.60	1.71	7	2
1:A:964:LYS:HE2	1:A:964:LYS:HA	0.60	1.72	6	1
1:A:1046:TYR:HE1	1:A:1081:VAL:HG11	0.60	1.55	21	1
1:A:997:ILE:HB	1:A:1019:ILE:O	0.60	1.96	3	8
1:A:997:ILE:HB	1:A:1019:ILE:HG23	0.60	1.72	22	6
1:A:1027:LEU:H	1:A:1027:LEU:HD23	0.60	1.57	20	1
1:A:1042:GLU:HA	1:A:1044:PHE:CE2	0.60	2.32	13	1
1:A:1038:SER:HB3	1:A:1050:VAL:HA	0.60	1.72	9	4
1:A:1015:THR:O	1:A:1016:LYS:HG2	0.60	1.95	8	2
1:A:1052:TYR:OH	1:A:1072:ILE:HD13	0.60	1.96	20	2
1:A:1023:ILE:HG12	1:A:1080:GLN:HG3	0.60	1.73	2	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1036:PHE:HZ	1:A:1041:ARG:HA	0.60	1.55	23	1
1:A:1072:ILE:HG13	1:A:1085:SER:HB2	0.60	1.74	5	1
1:A:1023:ILE:O	1:A:1046:TYR:HB2	0.60	1.96	17	3
1:A:981:GLN:O	1:A:982:VAL:HB	0.60	1.96	10	6
1:A:1031:ILE:HD11	1:A:1091:CYS:HB2	0.60	1.73	15	1
1:A:992:THR:O	1:A:992:THR:HG22	0.60	1.96	22	1
1:A:1066:LEU:HD21	1:A:1070:PRO:HB3	0.59	1.74	17	7
1:A:1076:SER:OG	1:A:1077:ASN:ND2	0.59	2.35	21	1
1:A:1066:LEU:HD11	1:A:1069:GLU:O	0.59	1.97	4	1
1:A:961:LYS:HE2	1:A:961:LYS:HA	0.59	1.75	21	1
1:A:1045:HIS:O	1:A:1047:GLY:N	0.59	2.35	20	3
1:A:990:CYS:SG	1:A:996:LEU:HD13	0.59	2.37	21	1
1:A:996:LEU:HA	1:A:1020:CYS:SG	0.59	2.38	23	1
1:A:1036:PHE:HD1	1:A:1050:VAL:HG23	0.59	1.56	22	2
1:A:990:CYS:SG	1:A:996:LEU:HA	0.59	2.38	13	4
1:A:1055:ASN:O	1:A:1056:LEU:HG	0.59	1.97	15	4
1:A:1067:VAL:O	1:A:1089:PRO:HA	0.59	1.96	17	4
1:A:1056:LEU:O	1:A:1061:ARG:HA	0.59	1.96	23	1
1:A:1056:LEU:HB3	1:A:1060:GLY:HA2	0.59	1.74	10	3
1:A:1067:VAL:HB	1:A:1090:GLN:NE2	0.59	2.13	21	1
1:A:1037:ILE:O	1:A:1050:VAL:HG23	0.59	1.98	5	2
1:A:1083:ILE:HD13	1:A:1083:ILE:N	0.59	2.12	23	1
1:A:1025:CYS:SG	1:A:1046:TYR:HA	0.59	2.37	7	6
1:A:1038:SER:HB3	1:A:1050:VAL:HG12	0.59	1.73	3	1
1:A:1047:GLY:O	1:A:1048:SER:CB	0.59	2.51	18	2
1:A:996:LEU:HD12	1:A:997:ILE:N	0.58	2.13	21	6
1:A:1002:ALA:HB2	1:A:1015:THR:OG1	0.58	1.98	6	2
1:A:996:LEU:O	1:A:996:LEU:HD12	0.58	1.97	8	1
1:A:1056:LEU:CD2	1:A:1060:GLY:HA3	0.58	2.29	17	1
1:A:1031:ILE:O	1:A:1031:ILE:HG13	0.58	1.98	12	1
1:A:990:CYS:SG	1:A:996:LEU:HD22	0.58	2.38	21	1
1:A:1045:HIS:O	1:A:1074:CYS:SG	0.58	2.61	21	2
1:A:1031:ILE:HD13	1:A:1088:ALA:HB1	0.58	1.74	11	1
1:A:1077:ASN:HD21	1:A:1083:ILE:HB	0.58	1.59	15	2
1:A:970:VAL:HB	1:A:1020:CYS:H	0.58	1.58	15	3
1:A:1028:PRO:HG3	1:A:1040:ASN:HD21	0.58	1.58	18	2
1:A:1061:ARG:N	1:A:1061:ARG:HD2	0.58	2.13	9	1
1:A:1063:VAL:O	1:A:1064:PHE:HB2	0.58	1.98	18	6
1:A:996:LEU:HD11	1:A:1018:PRO:HB3	0.58	1.74	20	2
1:A:1061:ARG:HG2	1:A:1062:LYS:H	0.58	1.59	20	1
1:A:1056:LEU:HA	1:A:1063:VAL:CG1	0.58	2.29	15	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:970:VAL:HG21	1:A:1021:GLN:HA	0.58	1.75	21	1
1:A:1066:LEU:HD22	1:A:1067:VAL:H	0.58	1.57	12	1
1:A:1090:GLN:HG2	1:A:1092:ILE:HG12	0.58	1.74	23	1
1:A:1005:ILE:HD13	1:A:1012:HIS:O	0.57	1.99	19	2
1:A:1035:ASP:HB2	1:A:1055:ASN:HA	0.57	1.77	17	1
1:A:1059:ARG:N	1:A:1059:ARG:HD3	0.57	2.13	12	1
1:A:965:THR:HB	1:A:980:ILE:HD13	0.57	1.76	3	1
1:A:961:LYS:HE2	1:A:1010:THR:HA	0.57	1.76	22	1
1:A:1016:LYS:HB3	1:A:1016:LYS:NZ	0.57	2.14	22	1
1:A:1036:PHE:C	1:A:1037:ILE:HD12	0.57	2.20	12	1
1:A:1052:TYR:O	1:A:1053:ARG:HG2	0.57	2.00	23	1
1:A:1022:ARG:NH1	1:A:1046:TYR:HB3	0.57	2.15	15	1
1:A:979:ASP:O	1:A:980:ILE:HG12	0.57	1.99	15	2
1:A:961:LYS:HG3	1:A:1006:LEU:HD11	0.57	1.77	9	1
1:A:1024:PRO:HA	1:A:1045:HIS:O	0.57	2.00	14	5
1:A:970:VAL:HG11	1:A:1020:CYS:N	0.57	2.14	2	2
1:A:1037:ILE:HD11	1:A:1053:ARG:HD2	0.56	1.77	3	2
1:A:1023:ILE:HA	1:A:1080:GLN:NE2	0.56	2.13	23	1
1:A:997:ILE:O	1:A:1018:PRO:HB2	0.56	2.00	8	1
1:A:1069:GLU:HG2	1:A:1089:PRO:HB3	0.56	1.76	6	1
1:A:1034:GLY:HA2	1:A:1055:ASN:ND2	0.56	2.14	6	1
1:A:1050:VAL:HG23	1:A:1084:TRP:CH2	0.56	2.36	10	1
1:A:997:ILE:HG13	1:A:1021:GLN:HG2	0.56	1.76	14	1
1:A:972:GLY:O	1:A:989:SER:HB2	0.56	2.00	21	1
1:A:1025:CYS:HB3	1:A:1075:THR:O	0.56	2.01	21	1
1:A:1077:ASN:HD22	1:A:1078:ASP:N	0.56	1.98	11	9
1:A:1056:LEU:HB3	1:A:1059:ARG:O	0.56	2.01	21	1
1:A:1033:ASN:HA	1:A:1055:ASN:ND2	0.56	2.15	15	2
1:A:1035:ASP:HB2	1:A:1053:ARG:HB2	0.56	1.78	9	1
1:A:1023:ILE:HG23	1:A:1080:GLN:NE2	0.56	2.16	15	1
1:A:1040:ASN:HB2	1:A:1050:VAL:HG11	0.56	1.77	11	1
1:A:1056:LEU:HB2	1:A:1063:VAL:CA	0.56	2.29	17	1
1:A:1031:ILE:HG23	1:A:1034:GLY:HA3	0.56	1.76	17	1
1:A:980:ILE:O	1:A:980:ILE:HG13	0.56	2.00	22	1
1:A:1025:CYS:HB3	1:A:1075:THR:H	0.56	1.60	21	1
1:A:1045:HIS:O	1:A:1046:TYR:HB2	0.56	2.01	17	16
1:A:996:LEU:HD13	1:A:1000:SER:OG	0.56	2.00	10	1
1:A:1029:PRO:HB2	1:A:1087:PRO:HB3	0.56	1.77	1	3
1:A:1019:ILE:HG22	1:A:1020:CYS:N	0.56	2.15	19	2
1:A:1083:ILE:N	1:A:1083:ILE:HD13	0.55	2.16	20	3
1:A:1069:GLU:HB3	1:A:1089:PRO:HD3	0.55	1.77	21	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1077:ASN:HA	1:A:1083:ILE:HG22	0.55	1.76	18	1
1:A:1081:VAL:HG13	1:A:1082:GLY:H	0.55	1.59	17	1
1:A:1006:LEU:HD13	1:A:1007:SER:N	0.55	2.16	16	5
1:A:979:ASP:HB2	1:A:984:SER:OG	0.55	2.02	1	2
1:A:1023:ILE:HG21	1:A:1076:SER:OG	0.55	2.02	21	1
1:A:1031:ILE:HG23	1:A:1034:GLY:O	0.55	2.02	10	2
1:A:1058:SER:O	1:A:1059:ARG:HG2	0.55	2.02	19	3
1:A:962:SER:HB2	1:A:981:GLN:HG2	0.55	1.79	19	1
1:A:1038:SER:CB	1:A:1050:VAL:HG12	0.55	2.32	3	2
1:A:1063:VAL:HG23	1:A:1064:PHE:CD1	0.55	2.37	10	1
1:A:1007:SER:HB3	1:A:1012:HIS:NE2	0.55	2.17	5	4
1:A:1090:GLN:HE21	1:A:1092:ILE:HD13	0.55	1.60	6	1
1:A:1066:LEU:HD23	1:A:1067:VAL:H	0.54	1.61	19	2
1:A:1057:GLY:N	1:A:1061:ARG:N	0.54	2.55	8	1
1:A:995:ARG:HB2	1:A:1023:ILE:HD11	0.54	1.79	12	3
1:A:1090:GLN:NE2	1:A:1092:ILE:HD13	0.54	2.17	6	1
1:A:1046:TYR:CE1	1:A:1081:VAL:HG11	0.54	2.37	21	1
1:A:988:TYR:CE2	1:A:1018:PRO:HG3	0.54	2.37	15	4
1:A:1056:LEU:CD2	1:A:1063:VAL:HG23	0.54	2.33	24	1
1:A:1056:LEU:N	1:A:1056:LEU:HD22	0.54	2.16	20	5
1:A:1056:LEU:O	1:A:1063:VAL:HB	0.54	2.02	23	1
1:A:1005:ILE:HD13	1:A:1014:SER:HB2	0.54	1.78	24	1
1:A:960:ALA:C	1:A:961:LYS:HD2	0.54	2.23	6	1
1:A:970:VAL:HG21	1:A:1019:ILE:HG12	0.54	1.79	12	1
1:A:1034:GLY:HA2	1:A:1055:ASN:N	0.54	2.18	18	1
1:A:1028:PRO:O	1:A:1030:THR:HG23	0.54	2.03	12	3
1:A:969:PRO:HB3	1:A:1018:PRO:HB2	0.54	1.79	15	1
1:A:998:GLY:HA3	1:A:1018:PRO:HB3	0.54	1.80	17	2
1:A:961:LYS:HD2	1:A:1011:ALA:H	0.54	1.63	18	1
1:A:1077:ASN:HD22	1:A:1077:ASN:N	0.54	1.99	8	5
1:A:982:VAL:HA	1:A:1004:CYS:SG	0.54	2.43	6	4
1:A:969:PRO:HD2	1:A:972:GLY:O	0.54	2.03	24	6
1:A:1054:CYS:HB3	1:A:1064:PHE:HB2	0.54	1.79	20	1
1:A:1066:LEU:HD11	1:A:1070:PRO:HA	0.54	1.78	21	2
1:A:1035:ASP:N	1:A:1053:ARG:O	0.54	2.41	5	2
1:A:1028:PRO:HD3	1:A:1044:PHE:CE2	0.54	2.38	12	3
1:A:992:THR:HG23	1:A:993:GLY:N	0.53	2.18	15	5
1:A:1047:GLY:HA3	1:A:1074:CYS:CB	0.53	2.32	20	2
1:A:1024:PRO:HA	1:A:1046:TYR:N	0.53	2.18	12	1
1:A:1022:ARG:HD3	1:A:1022:ARG:H	0.53	1.63	3	2
1:A:1023:ILE:HG23	1:A:1080:GLN:HA	0.53	1.79	8	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1084:TRP:CG	1:A:1085:SER:N	0.53	2.77	21	1
1:A:981:GLN:O	1:A:982:VAL:CG2	0.53	2.56	11	2
1:A:1037:ILE:HB	1:A:1051:THR:HB	0.53	1.80	4	1
1:A:970:VAL:HG13	1:A:972:GLY:H	0.53	1.64	6	1
1:A:995:ARG:NH1	1:A:997:ILE:HG12	0.53	2.19	17	1
1:A:1075:THR:HG21	1:A:1083:ILE:HA	0.53	1.79	21	1
1:A:1067:VAL:O	1:A:1089:PRO:HB2	0.53	2.03	10	6
1:A:996:LEU:HG	1:A:1019:ILE:O	0.53	2.03	16	2
1:A:972:GLY:HA3	1:A:990:CYS:HA	0.53	1.81	9	1
1:A:971:ASN:O	1:A:991:THR:HG23	0.53	2.03	19	2
1:A:1056:LEU:HA	1:A:1063:VAL:O	0.53	2.02	13	1
1:A:1080:GLN:HG2	1:A:1081:VAL:H	0.53	1.64	1	1
1:A:1077:ASN:ND2	1:A:1078:ASP:N	0.53	2.56	6	15
1:A:1028:PRO:HG3	1:A:1040:ASN:ND2	0.53	2.19	18	1
1:A:985:ARG:HD3	1:A:1001:SER:HB2	0.53	1.81	4	1
1:A:1063:VAL:HG22	1:A:1063:VAL:O	0.53	2.02	23	2
1:A:988:TYR:N	1:A:988:TYR:CD1	0.53	2.77	15	2
1:A:1063:VAL:HG23	1:A:1064:PHE:HD2	0.53	1.64	16	1
1:A:980:ILE:HG22	1:A:1013:TRP:HH2	0.53	1.64	17	3
1:A:1022:ARG:HE	1:A:1045:HIS:HB3	0.53	1.63	16	1
1:A:1029:PRO:HG3	1:A:1086:GLY:O	0.53	2.03	7	2
1:A:997:ILE:HD13	1:A:1021:GLN:H	0.53	1.63	19	2
1:A:1031:ILE:HD13	1:A:1052:TYR:HD2	0.53	1.64	4	1
1:A:1082:GLY:O	1:A:1083:ILE:HG12	0.53	2.04	6	2
1:A:982:VAL:HG22	1:A:1006:LEU:HD21	0.52	1.79	21	1
1:A:1054:CYS:SG	1:A:1064:PHE:HB3	0.52	2.44	11	2
1:A:996:LEU:HD22	1:A:1000:SER:HB3	0.52	1.80	6	2
1:A:1066:LEU:CD2	1:A:1070:PRO:HB3	0.52	2.35	16	5
1:A:969:PRO:O	1:A:970:VAL:O	0.52	2.27	6	2
1:A:961:LYS:HA	1:A:961:LYS:HE3	0.52	1.81	13	1
1:A:963:CYS:SG	1:A:1012:HIS:N	0.52	2.82	18	9
1:A:1063:VAL:HG23	1:A:1064:PHE:HD1	0.52	1.65	11	2
1:A:1025:CYS:HB2	1:A:1044:PHE:O	0.52	2.04	4	1
1:A:985:ARG:HG2	1:A:1003:GLU:HB3	0.52	1.81	13	1
1:A:1056:LEU:HD13	1:A:1061:ARG:O	0.52	2.05	17	1
1:A:1032:ALA:O	1:A:1033:ASN:HB2	0.52	2.05	3	12
1:A:1075:THR:OG1	1:A:1081:VAL:HG12	0.52	2.04	21	1
1:A:977:ILE:HG13	1:A:986:ILE:HA	0.52	1.82	11	1
1:A:994:HIS:HB3	1:A:1020:CYS:SG	0.52	2.44	2	3
1:A:1040:ASN:HD21	1:A:1050:VAL:HB	0.52	1.64	8	4
1:A:1083:ILE:HD12	1:A:1083:ILE:N	0.52	2.19	1	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1031:ILE:HG21	1:A:1089:PRO:O	0.52	2.03	22	2
1:A:1056:LEU:HD13	1:A:1056:LEU:H	0.52	1.65	13	1
1:A:977:ILE:HG12	1:A:986:ILE:HA	0.52	1.80	17	1
1:A:988:TYR:O	1:A:990:CYS:N	0.52	2.42	21	1
1:A:969:PRO:O	1:A:971:ASN:N	0.52	2.41	14	8
1:A:974:VAL:CG2	1:A:986:ILE:HD12	0.52	2.35	14	7
1:A:1056:LEU:HD12	1:A:1060:GLY:HA2	0.52	1.82	7	1
1:A:970:VAL:HG12	1:A:971:ASN:ND2	0.52	2.20	9	3
1:A:1077:ASN:ND2	1:A:1083:ILE:HB	0.52	2.20	3	2
1:A:1056:LEU:HB3	1:A:1061:ARG:O	0.52	2.05	5	1
1:A:978:THR:OG1	1:A:984:SER:HB3	0.51	2.05	15	4
1:A:990:CYS:SG	1:A:991:THR:N	0.51	2.83	8	3
1:A:1082:GLY:O	1:A:1083:ILE:O	0.51	2.28	11	2
1:A:981:GLN:O	1:A:982:VAL:CB	0.51	2.58	14	4
1:A:1079:ASP:OD1	1:A:1080:GLN:HG3	0.51	2.05	7	1
1:A:1001:SER:O	1:A:1015:THR:HG21	0.51	2.05	2	3
1:A:1077:ASN:HD21	1:A:1083:ILE:HD11	0.51	1.65	20	2
1:A:1049:VAL:HG12	1:A:1073:TYR:CB	0.51	2.27	3	1
1:A:1045:HIS:C	1:A:1047:GLY:H	0.51	2.08	18	2
1:A:972:GLY:HA3	1:A:989:SER:O	0.51	2.05	16	1
1:A:1028:PRO:HG2	1:A:1050:VAL:HG11	0.51	1.81	23	1
1:A:1056:LEU:HA	1:A:1060:GLY:HA3	0.51	1.81	8	1
1:A:1040:ASN:HD22	1:A:1048:SER:HB3	0.51	1.65	9	1
1:A:1028:PRO:HD3	1:A:1044:PHE:HE2	0.51	1.65	1	1
1:A:1024:PRO:HG2	1:A:1080:GLN:HB2	0.51	1.83	17	1
1:A:1019:ILE:C	1:A:1019:ILE:HD13	0.51	2.25	12	1
1:A:970:VAL:HG13	1:A:1020:CYS:H	0.51	1.65	7	1
1:A:1049:VAL:HA	1:A:1072:ILE:O	0.51	2.06	11	2
1:A:1022:ARG:HD3	1:A:1046:TYR:HB3	0.51	1.80	13	1
1:A:1050:VAL:O	1:A:1071:SER:HA	0.51	2.05	7	2
1:A:974:VAL:HG23	1:A:988:TYR:HD2	0.51	1.65	5	1
1:A:1022:ARG:HH12	1:A:1046:TYR:HB3	0.51	1.66	15	1
1:A:1043:ASN:HD22	1:A:1043:ASN:N	0.51	2.04	15	1
1:A:985:ARG:NE	1:A:1003:GLU:HB2	0.51	2.21	18	1
1:A:1079:ASP:O	1:A:1081:VAL:HG23	0.51	2.06	10	1
1:A:972:GLY:HA3	1:A:990:CYS:SG	0.51	2.46	23	1
1:A:987:THR:HA	1:A:1001:SER:HA	0.50	1.81	24	1
1:A:1041:ARG:O	1:A:1043:ASN:N	0.50	2.44	12	1
1:A:1066:LEU:HD21	1:A:1070:PRO:CA	0.50	2.36	23	2
1:A:988:TYR:O	1:A:1000:SER:HB2	0.50	2.06	24	6
1:A:1054:CYS:HB2	1:A:1056:LEU:CD2	0.50	2.35	7	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:970:VAL:HG11	1:A:1019:ILE:HG23	0.50	1.81	19	1
1:A:972:GLY:HA2	1:A:990:CYS:SG	0.50	2.46	14	1
1:A:1007:SER:HB2	1:A:1012:HIS:NE2	0.50	2.21	20	1
1:A:1069:GLU:OE2	1:A:1072:ILE:HD13	0.50	2.05	7	1
1:A:1077:ASN:ND2	1:A:1083:ILE:HD13	0.50	2.20	5	1
1:A:962:SER:CA	1:A:981:GLN:HA	0.50	2.31	19	2
1:A:970:VAL:HG22	1:A:970:VAL:O	0.50	2.06	13	2
1:A:1015:THR:O	1:A:1016:LYS:O	0.50	2.28	21	1
1:A:1055:ASN:HB2	1:A:1063:VAL:HA	0.50	1.82	23	1
1:A:1031:ILE:HG13	1:A:1031:ILE:O	0.50	2.07	6	1
1:A:1040:ASN:OD1	1:A:1048:SER:HB3	0.50	2.07	14	1
1:A:980:ILE:HD13	1:A:980:ILE:N	0.50	2.22	23	1
1:A:1040:ASN:ND2	1:A:1050:VAL:HB	0.50	2.22	22	2
1:A:970:VAL:HG11	1:A:1020:CYS:O	0.50	2.06	12	1
1:A:1080:GLN:O	1:A:1080:GLN:HG2	0.50	2.06	5	2
1:A:1061:ARG:HD2	1:A:1062:LYS:N	0.50	2.22	24	1
1:A:990:CYS:HB2	1:A:996:LEU:HB2	0.50	1.84	9	1
1:A:1023:ILE:O	1:A:1045:HIS:O	0.50	2.30	3	6
1:A:1062:LYS:HB3	1:A:1062:LYS:NZ	0.50	2.22	3	1
1:A:1066:LEU:CD2	1:A:1070:PRO:HA	0.50	2.34	22	2
1:A:1028:PRO:HD3	1:A:1040:ASN:ND2	0.50	2.22	4	1
1:A:988:TYR:CE2	1:A:1018:PRO:HG2	0.50	2.41	14	1
1:A:1016:LYS:NZ	1:A:1016:LYS:HB3	0.50	2.22	16	1
1:A:961:LYS:NZ	1:A:961:LYS:HB2	0.50	2.22	20	1
1:A:1037:ILE:HG22	1:A:1038:SER:N	0.49	2.22	18	4
1:A:1088:ALA:N	1:A:1089:PRO:CD	0.49	2.75	1	7
1:A:995:ARG:NH2	1:A:1080:GLN:HA	0.49	2.22	3	1
1:A:996:LEU:HD13	1:A:1000:SER:CB	0.49	2.37	16	2
1:A:969:PRO:HD3	1:A:974:VAL:HB	0.49	1.83	2	1
1:A:972:GLY:CA	1:A:990:CYS:HA	0.49	2.38	15	7
1:A:1066:LEU:HD11	1:A:1069:GLU:C	0.49	2.28	4	1
1:A:976:VAL:HG13	1:A:979:ASP:O	0.49	2.06	21	2
1:A:1025:CYS:O	1:A:1044:PHE:HB2	0.49	2.07	11	3
1:A:982:VAL:HA	1:A:1004:CYS:O	0.49	2.07	5	7
1:A:967:PRO:O	1:A:968:ASP:C	0.49	2.48	24	2
1:A:1052:TYR:OH	1:A:1072:ILE:HD11	0.49	2.06	4	2
1:A:970:VAL:CG1	1:A:971:ASN:N	0.49	2.74	2	1
1:A:978:THR:OG1	1:A:984:SER:HB2	0.49	2.07	22	1
1:A:961:LYS:O	1:A:982:VAL:HG23	0.49	2.06	10	1
1:A:1066:LEU:CD2	1:A:1067:VAL:N	0.49	2.74	1	1
1:A:1069:GLU:O	1:A:1069:GLU:HG2	0.49	2.08	7	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:974:VAL:HG12	1:A:988:TYR:CD2	0.49	2.42	15	1
1:A:1022:ARG:HB3	1:A:1046:TYR:HB3	0.49	1.83	19	1
1:A:1040:ASN:HB3	1:A:1048:SER:OG	0.49	2.08	3	2
1:A:970:VAL:HG22	1:A:971:ASN:N	0.49	2.22	2	2
1:A:970:VAL:CG1	1:A:1019:ILE:HB	0.49	2.37	21	1
1:A:996:LEU:HD23	1:A:997:ILE:N	0.49	2.21	2	6
1:A:1054:CYS:O	1:A:1056:LEU:HD23	0.49	2.07	5	2
1:A:961:LYS:HB2	1:A:961:LYS:NZ	0.49	2.23	15	1
1:A:997:ILE:HB	1:A:1019:ILE:CG1	0.49	2.36	5	4
1:A:1040:ASN:O	1:A:1041:ARG:HG2	0.49	2.06	11	2
1:A:1016:LYS:HD3	1:A:1016:LYS:H	0.49	1.67	10	1
1:A:1054:CYS:O	1:A:1055:ASN:C	0.49	2.50	23	3
1:A:1022:ARG:H	1:A:1022:ARG:HD3	0.49	1.67	11	2
1:A:961:LYS:N	1:A:961:LYS:HD3	0.49	2.22	12	1
1:A:1004:CYS:SG	1:A:1011:ALA:HB1	0.49	2.48	13	8
1:A:1042:GLU:O	1:A:1043:ASN:HB2	0.49	2.08	23	4
1:A:980:ILE:HG13	1:A:980:ILE:O	0.48	2.07	7	1
1:A:970:VAL:HB	1:A:1019:ILE:HA	0.48	1.84	9	1
1:A:1022:ARG:NH2	1:A:1046:TYR:HB3	0.48	2.23	7	1
1:A:981:GLN:O	1:A:982:VAL:C	0.48	2.52	5	1
1:A:1076:SER:HA	1:A:1082:GLY:O	0.48	2.08	17	3
1:A:988:TYR:CD2	1:A:1018:PRO:HG2	0.48	2.43	4	1
1:A:980:ILE:HG22	1:A:1013:TRP:CH2	0.48	2.44	10	3
1:A:1059:ARG:N	1:A:1059:ARG:HD2	0.48	2.23	3	1
1:A:969:PRO:HG3	1:A:1018:PRO:HG2	0.48	1.84	18	1
1:A:995:ARG:NH2	1:A:1079:ASP:HA	0.48	2.23	11	2
1:A:1039:THR:O	1:A:1041:ARG:N	0.48	2.46	2	1
1:A:1068:GLY:O	1:A:1089:PRO:HG3	0.48	2.08	10	1
1:A:1022:ARG:N	1:A:1022:ARG:HD3	0.48	2.23	3	3
1:A:1031:ILE:O	1:A:1032:ALA:O	0.48	2.32	14	4
1:A:966:PRO:HG2	1:A:974:VAL:HG21	0.48	1.85	3	1
1:A:1068:GLY:CA	1:A:1089:PRO:HA	0.48	2.37	11	1
1:A:1040:ASN:HA	1:A:1044:PHE:CZ	0.48	2.43	24	1
1:A:1069:GLU:HB3	1:A:1089:PRO:HB3	0.48	1.84	4	1
1:A:1049:VAL:HG22	1:A:1050:VAL:H	0.48	1.67	17	1
1:A:996:LEU:HD23	1:A:997:ILE:O	0.48	2.08	10	2
1:A:1058:SER:O	1:A:1059:ARG:HD2	0.48	2.08	11	1
1:A:1006:LEU:HG	1:A:1010:THR:O	0.48	2.08	6	1
1:A:1049:VAL:HG23	1:A:1073:TYR:HB3	0.48	1.84	10	1
1:A:969:PRO:HG2	1:A:973:MET:N	0.48	2.22	5	1
1:A:1058:SER:C	1:A:1059:ARG:HD2	0.48	2.29	7	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1072:ILE:HG12	1:A:1073:TYR:N	0.48	2.23	5	1
1:A:1047:GLY:O	1:A:1048:SER:HB3	0.48	2.09	20	1
1:A:981:GLN:O	1:A:1004:CYS:HB3	0.48	2.09	7	3
1:A:1049:VAL:HG13	1:A:1072:ILE:O	0.48	2.09	23	4
1:A:979:ASP:OD1	1:A:981:GLN:HB2	0.48	2.09	3	1
1:A:1016:LYS:N	1:A:1016:LYS:HD3	0.48	2.23	19	1
1:A:962:SER:HA	1:A:981:GLN:O	0.48	2.09	6	4
1:A:1042:GLU:HG2	1:A:1043:ASN:H	0.48	1.68	22	1
1:A:996:LEU:CD2	1:A:1000:SER:HB3	0.48	2.39	6	1
1:A:1040:ASN:HB3	1:A:1044:PHE:CZ	0.48	2.43	1	1
1:A:1080:GLN:O	1:A:1081:VAL:HG13	0.48	2.08	3	1
1:A:996:LEU:HD13	1:A:1000:SER:HB3	0.48	1.84	18	1
1:A:1038:SER:HB2	1:A:1040:ASN:OD1	0.48	2.08	16	1
1:A:1061:ARG:O	1:A:1062:LYS:CB	0.47	2.62	17	1
1:A:1056:LEU:HD13	1:A:1059:ARG:O	0.47	2.09	16	1
1:A:983:GLY:O	1:A:984:SER:O	0.47	2.32	20	1
1:A:1028:PRO:CG	1:A:1050:VAL:HG11	0.47	2.39	23	1
1:A:1022:ARG:H	1:A:1022:ARG:CD	0.47	2.22	3	3
1:A:991:THR:OG1	1:A:992:THR:N	0.47	2.47	3	3
1:A:961:LYS:HB3	1:A:1006:LEU:HD23	0.47	1.87	8	1
1:A:1042:GLU:N	1:A:1042:GLU:OE1	0.47	2.47	12	1
1:A:1016:LYS:H	1:A:1016:LYS:HD2	0.47	1.69	20	1
1:A:1035:ASP:HB2	1:A:1053:ARG:HB3	0.47	1.86	21	1
1:A:996:LEU:O	1:A:997:ILE:HD13	0.47	2.09	14	1
1:A:1037:ILE:HD12	1:A:1051:THR:HB	0.47	1.86	20	2
1:A:1037:ILE:HD12	1:A:1053:ARG:HD3	0.47	1.85	13	1
1:A:1074:CYS:HA	1:A:1084:TRP:CE2	0.47	2.43	17	1
1:A:1063:VAL:O	1:A:1064:PHE:C	0.47	2.52	17	3
1:A:1036:PHE:HB2	1:A:1050:VAL:CG2	0.47	2.38	16	2
1:A:985:ARG:HA	1:A:1003:GLU:HA	0.47	1.86	7	1
1:A:1031:ILE:HG21	1:A:1052:TYR:CE2	0.47	2.44	15	1
1:A:1023:ILE:HG21	1:A:1077:ASN:CB	0.47	2.38	18	1
1:A:1077:ASN:OD1	1:A:1080:GLN:C	0.47	2.53	18	1
1:A:1056:LEU:N	1:A:1056:LEU:CD2	0.47	2.78	4	2
1:A:976:VAL:HG23	1:A:980:ILE:HG23	0.47	1.87	4	1
1:A:974:VAL:HA	1:A:988:TYR:HA	0.47	1.84	17	1
1:A:1063:VAL:HG22	1:A:1064:PHE:HD1	0.47	1.70	15	1
1:A:1049:VAL:HB	1:A:1073:TYR:HB3	0.47	1.86	15	1
1:A:995:ARG:HH21	1:A:1079:ASP:HA	0.47	1.68	11	1
1:A:1075:THR:CG2	1:A:1084:TRP:H	0.47	2.17	21	1
1:A:963:CYS:SG	1:A:980:ILE:O	0.47	2.73	21	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:990:CYS:N	1:A:996:LEU:HD12	0.47	2.24	5	1
1:A:988:TYR:HB2	1:A:1000:SER:CA	0.47	2.39	15	1
1:A:985:ARG:CZ	1:A:1003:GLU:HB2	0.47	2.39	18	1
1:A:1039:THR:O	1:A:1040:ASN:O	0.47	2.32	11	1
1:A:970:VAL:O	1:A:1020:CYS:SG	0.47	2.72	11	4
1:A:1063:VAL:HG23	1:A:1064:PHE:CD2	0.47	2.45	8	1
1:A:967:PRO:O	1:A:968:ASP:HB2	0.47	2.10	8	2
1:A:1036:PHE:HB2	1:A:1050:VAL:CG1	0.47	2.40	10	1
1:A:971:ASN:HD22	1:A:1020:CYS:HB2	0.47	1.68	9	1
1:A:1047:GLY:N	1:A:1074:CYS:HB2	0.47	2.24	1	1
1:A:970:VAL:HG13	1:A:1020:CYS:N	0.47	2.24	7	1
1:A:969:PRO:HG3	1:A:988:TYR:CD2	0.47	2.45	7	1
1:A:1016:LYS:NZ	1:A:1016:LYS:HB2	0.47	2.24	2	1
1:A:1054:CYS:O	1:A:1063:VAL:HG23	0.47	2.10	23	1
1:A:995:ARG:HB3	1:A:1080:GLN:NE2	0.47	2.25	2	1
1:A:1031:ILE:HD12	1:A:1088:ALA:HB1	0.47	1.87	21	1
1:A:1077:ASN:CA	1:A:1083:ILE:HG22	0.47	2.40	18	1
1:A:1005:ILE:HG12	1:A:1012:HIS:O	0.47	2.09	1	1
1:A:1077:ASN:ND2	1:A:1077:ASN:N	0.46	2.63	7	6
1:A:1025:CYS:HB2	1:A:1044:PHE:CE1	0.46	2.46	15	1
1:A:1037:ILE:HD11	1:A:1053:ARG:HB2	0.46	1.87	18	1
1:A:1057:GLY:C	1:A:1059:ARG:N	0.46	2.68	24	1
1:A:1088:ALA:H	1:A:1089:PRO:CD	0.46	2.22	22	1
1:A:1042:GLU:OE1	1:A:1042:GLU:N	0.46	2.48	23	1
1:A:1054:CYS:HB2	1:A:1056:LEU:HD23	0.46	1.86	7	1
1:A:970:VAL:HG22	1:A:971:ASN:OD1	0.46	2.10	2	1
1:A:1086:GLY:C	1:A:1088:ALA:H	0.46	2.14	21	1
1:A:994:HIS:CD2	1:A:1022:ARG:HA	0.46	2.45	23	1
1:A:973:MET:HB2	1:A:989:SER:HB2	0.46	1.86	21	1
1:A:1027:LEU:HD12	1:A:1044:PHE:CD2	0.46	2.45	5	1
1:A:1060:GLY:CA	1:A:1063:VAL:HG21	0.46	2.40	8	1
1:A:1016:LYS:HD3	1:A:1016:LYS:N	0.46	2.26	4	2
1:A:1006:LEU:HD13	1:A:1006:LEU:C	0.46	2.30	14	1
1:A:998:GLY:O	1:A:999:HIS:CD2	0.46	2.69	21	1
1:A:1037:ILE:O	1:A:1038:SER:HB2	0.46	2.10	20	3
1:A:1035:ASP:O	1:A:1052:TYR:HA	0.46	2.11	17	2
1:A:1055:ASN:C	1:A:1056:LEU:HG	0.46	2.31	19	1
1:A:1056:LEU:HD23	1:A:1063:VAL:O	0.46	2.09	24	1
1:A:995:ARG:HG3	1:A:1080:GLN:HG3	0.46	1.88	13	1
1:A:985:ARG:HG2	1:A:986:ILE:N	0.46	2.26	6	1
1:A:1016:LYS:HZ3	1:A:1017:PRO:HD2	0.46	1.70	16	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1036:PHE:CE2	1:A:1038:SER:O	0.46	2.69	2	1
1:A:1073:TYR:CE1	1:A:1085:SER:HB3	0.46	2.46	6	1
1:A:1031:ILE:HD12	1:A:1090:GLN:HA	0.46	1.88	16	1
1:A:1048:SER:O	1:A:1073:TYR:HA	0.46	2.09	11	2
1:A:1069:GLU:HG3	1:A:1069:GLU:O	0.46	2.11	6	1
1:A:979:ASP:O	1:A:980:ILE:CG1	0.46	2.64	7	3
1:A:970:VAL:HG13	1:A:971:ASN:H	0.46	1.68	2	1
1:A:1081:VAL:HG12	1:A:1082:GLY:N	0.46	2.26	2	1
1:A:1053:ARG:O	1:A:1054:CYS:SG	0.46	2.73	6	1
1:A:971:ASN:HB2	1:A:1020:CYS:SG	0.46	2.50	10	1
1:A:1028:PRO:HB3	1:A:1084:TRP:CZ3	0.46	2.46	5	1
1:A:996:LEU:HD21	1:A:1018:PRO:HB2	0.46	1.88	16	4
1:A:976:VAL:O	1:A:976:VAL:HG13	0.46	2.10	4	2
1:A:1068:GLY:O	1:A:1069:GLU:C	0.46	2.53	6	2
1:A:997:ILE:HD13	1:A:1019:ILE:HG13	0.46	1.88	5	1
1:A:1063:VAL:HG13	1:A:1064:PHE:CD1	0.46	2.46	5	1
1:A:1068:GLY:O	1:A:1069:GLU:O	0.46	2.34	18	1
1:A:1033:ASN:O	1:A:1055:ASN:HB2	0.46	2.10	19	2
1:A:970:VAL:O	1:A:971:ASN:HB3	0.45	2.10	23	3
1:A:1049:VAL:HG22	1:A:1050:VAL:N	0.45	2.26	15	2
1:A:1066:LEU:HD13	1:A:1066:LEU:C	0.45	2.31	4	2
1:A:988:TYR:HB2	1:A:996:LEU:HD11	0.45	1.87	17	1
1:A:1021:GLN:HG3	1:A:1023:ILE:H	0.45	1.71	8	1
1:A:1062:LYS:C	1:A:1063:VAL:HG23	0.45	2.31	2	1
1:A:1035:ASP:HB3	1:A:1053:ARG:H	0.45	1.70	22	1
1:A:1066:LEU:HG	1:A:1067:VAL:N	0.45	2.25	22	1
1:A:993:GLY:O	1:A:994:HIS:O	0.45	2.34	22	1
1:A:1031:ILE:HG22	1:A:1088:ALA:CB	0.45	2.38	4	1
1:A:1076:SER:HB3	1:A:1082:GLY:O	0.45	2.10	21	1
1:A:997:ILE:HD11	1:A:1021:GLN:HB3	0.45	1.86	19	1
1:A:1062:LYS:O	1:A:1062:LYS:HG2	0.45	2.11	24	3
1:A:1025:CYS:HA	1:A:1082:GLY:CA	0.45	2.41	14	2
1:A:1022:ARG:O	1:A:1046:TYR:HB2	0.45	2.11	6	1
1:A:988:TYR:CD1	1:A:988:TYR:N	0.45	2.84	18	4
1:A:1061:ARG:O	1:A:1062:LYS:C	0.45	2.55	18	1
1:A:1052:TYR:HB2	1:A:1066:LEU:HD11	0.45	1.87	10	1
1:A:1016:LYS:HD2	1:A:1016:LYS:N	0.45	2.25	20	1
1:A:1029:PRO:CD	1:A:1085:SER:HA	0.45	2.35	21	1
1:A:961:LYS:N	1:A:961:LYS:HD2	0.45	2.23	23	1
1:A:1037:ILE:HG12	1:A:1051:THR:O	0.45	2.11	5	2
1:A:962:SER:OG	1:A:981:GLN:HG2	0.45	2.12	13	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:994:HIS:HB3	1:A:1020:CYS:HB3	0.45	1.88	9	3
1:A:1036:PHE:HB2	1:A:1050:VAL:HG13	0.45	1.88	6	1
1:A:1054:CYS:HB3	1:A:1064:PHE:CD1	0.45	2.46	17	1
1:A:994:HIS:NE2	1:A:1022:ARG:HD2	0.45	2.26	15	1
1:A:1069:GLU:CD	1:A:1069:GLU:H	0.45	2.15	24	1
1:A:1037:ILE:O	1:A:1037:ILE:HG22	0.45	2.12	13	1
1:A:1040:ASN:ND2	1:A:1048:SER:HB3	0.45	2.26	9	1
1:A:990:CYS:H	1:A:996:LEU:HD12	0.45	1.72	5	1
1:A:970:VAL:HG23	1:A:1019:ILE:HG22	0.45	1.89	15	1
1:A:998:GLY:O	1:A:999:HIS:HB2	0.45	2.11	15	1
1:A:1054:CYS:O	1:A:1056:LEU:HD13	0.45	2.12	13	1
1:A:995:ARG:HA	1:A:1080:GLN:NE2	0.45	2.26	13	1
1:A:990:CYS:HB2	1:A:996:LEU:HB3	0.45	1.88	6	1
1:A:1083:ILE:HD12	1:A:1083:ILE:H	0.45	1.72	1	1
1:A:1023:ILE:HG22	1:A:1076:SER:HA	0.45	1.88	21	1
1:A:1025:CYS:HA	1:A:1076:SER:O	0.45	2.11	21	1
1:A:974:VAL:HG23	1:A:988:TYR:CD2	0.45	2.45	5	1
1:A:1061:ARG:O	1:A:1063:VAL:HG12	0.45	2.12	15	1
1:A:1077:ASN:O	1:A:1079:ASP:N	0.45	2.50	13	1
1:A:1050:VAL:HG23	1:A:1084:TRP:CZ3	0.45	2.46	10	1
1:A:1064:PHE:CD1	1:A:1064:PHE:N	0.45	2.85	23	3
1:A:1077:ASN:HB2	1:A:1082:GLY:N	0.45	2.26	5	1
1:A:1057:GLY:HA2	1:A:1064:PHE:HE1	0.45	1.72	12	1
1:A:989:SER:O	1:A:996:LEU:HD12	0.45	2.11	16	1
1:A:984:SER:O	1:A:1003:GLU:HA	0.45	2.11	21	1
1:A:973:MET:N	1:A:990:CYS:HA	0.45	2.27	19	1
1:A:1067:VAL:HG13	1:A:1067:VAL:O	0.45	2.12	11	1
1:A:1052:TYR:N	1:A:1052:TYR:CD1	0.44	2.84	21	1
1:A:1061:ARG:CD	1:A:1062:LYS:H	0.44	2.25	23	1
1:A:995:ARG:CZ	1:A:1021:GLN:HB2	0.44	2.42	7	1
1:A:1066:LEU:CD1	1:A:1070:PRO:HA	0.44	2.43	18	1
1:A:997:ILE:HG22	1:A:997:ILE:O	0.44	2.11	17	2
1:A:1035:ASP:OD1	1:A:1036:PHE:N	0.44	2.50	24	1
1:A:1056:LEU:HD13	1:A:1064:PHE:CZ	0.44	2.47	14	1
1:A:1081:VAL:HG13	1:A:1082:GLY:N	0.44	2.27	17	1
1:A:1006:LEU:HD13	1:A:1007:SER:H	0.44	1.70	16	1
1:A:1006:LEU:HD23	1:A:1007:SER:N	0.44	2.27	2	2
1:A:1037:ILE:HG13	1:A:1053:ARG:CZ	0.44	2.42	10	1
1:A:974:VAL:HG23	1:A:988:TYR:CE2	0.44	2.48	14	1
1:A:961:LYS:HD2	1:A:1006:LEU:HD21	0.44	1.88	17	1
1:A:1069:GLU:N	1:A:1069:GLU:OE1	0.44	2.50	23	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1052:TYR:CE2	1:A:1089:PRO:HD2	0.44	2.47	14	3
1:A:1061:ARG:O	1:A:1061:ARG:HG2	0.44	2.13	13	2
1:A:964:LYS:O	1:A:964:LYS:HD3	0.44	2.12	20	1
1:A:995:ARG:HG2	1:A:996:LEU:N	0.44	2.26	5	1
1:A:1039:THR:O	1:A:1040:ASN:C	0.44	2.56	18	2
1:A:1062:LYS:HG2	1:A:1062:LYS:O	0.44	2.13	11	1
1:A:1090:GLN:HE21	1:A:1092:ILE:HG23	0.44	1.72	20	2
1:A:1033:ASN:HB3	1:A:1054:CYS:SG	0.44	2.53	13	1
1:A:1056:LEU:HD22	1:A:1060:GLY:C	0.44	2.33	17	1
1:A:1042:GLU:N	1:A:1044:PHE:HE1	0.44	2.10	12	1
1:A:1056:LEU:HB3	1:A:1060:GLY:CA	0.44	2.43	7	1
1:A:1022:ARG:O	1:A:1024:PRO:HD3	0.44	2.13	11	1
1:A:1038:SER:CB	1:A:1050:VAL:HA	0.44	2.40	10	2
1:A:1047:GLY:O	1:A:1048:SER:OG	0.44	2.31	23	1
1:A:1037:ILE:HG22	1:A:1037:ILE:O	0.44	2.13	19	2
1:A:1062:LYS:HD2	1:A:1062:LYS:O	0.44	2.12	2	1
1:A:999:HIS:O	1:A:1018:PRO:HG3	0.44	2.13	4	1
1:A:1065:GLU:HB2	1:A:1092:ILE:OXT	0.44	2.13	14	1
1:A:1087:PRO:O	1:A:1088:ALA:O	0.44	2.36	21	1
1:A:1083:ILE:CD1	1:A:1083:ILE:N	0.44	2.81	23	1
1:A:963:CYS:O	1:A:964:LYS:O	0.44	2.35	6	3
1:A:966:PRO:HB2	1:A:974:VAL:HG21	0.44	1.90	18	1
1:A:969:PRO:HG2	1:A:988:TYR:HE2	0.44	1.73	8	1
1:A:1063:VAL:O	1:A:1063:VAL:HG23	0.44	2.13	6	2
1:A:1006:LEU:HD11	1:A:1008:GLY:O	0.44	2.13	14	1
1:A:963:CYS:HA	1:A:1011:ALA:O	0.44	2.12	14	1
1:A:1006:LEU:HD13	1:A:1008:GLY:N	0.44	2.28	12	1
1:A:970:VAL:O	1:A:971:ASN:HB2	0.44	2.13	11	2
1:A:986:ILE:HD11	1:A:1002:ALA:HB3	0.44	1.89	5	1
1:A:1031:ILE:HD11	1:A:1052:TYR:CD2	0.44	2.48	11	1
1:A:1024:PRO:CB	1:A:1045:HIS:HA	0.44	2.43	12	2
1:A:977:ILE:HG13	1:A:987:THR:HG23	0.44	1.90	9	1
1:A:1035:ASP:CG	1:A:1055:ASN:HA	0.44	2.33	16	1
1:A:987:THR:HA	1:A:1000:SER:O	0.44	2.13	21	1
1:A:1029:PRO:CB	1:A:1087:PRO:HB3	0.44	2.42	3	1
1:A:1054:CYS:O	1:A:1056:LEU:HD12	0.44	2.13	18	1
1:A:1003:GLU:OE1	1:A:1003:GLU:N	0.44	2.51	11	1
1:A:1077:ASN:ND2	1:A:1083:ILE:HG12	0.44	2.28	4	1
1:A:1039:THR:O	1:A:1041:ARG:HG3	0.44	2.12	6	1
1:A:983:GLY:O	1:A:984:SER:C	0.44	2.56	20	1
1:A:1055:ASN:HB2	1:A:1064:PHE:HB2	0.43	1.90	3	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:975:HIS:HB2	1:A:987:THR:O	0.43	2.13	3	1
1:A:1022:ARG:HD2	1:A:1022:ARG:N	0.43	2.28	19	1
1:A:1043:ASN:O	1:A:1044:PHE:HB2	0.43	2.13	24	1
1:A:1077:ASN:HD21	1:A:1083:ILE:HD12	0.43	1.72	9	1
1:A:973:MET:N	1:A:973:MET:SD	0.43	2.91	16	1
1:A:1044:PHE:HD1	1:A:1044:PHE:O	0.43	1.96	20	1
1:A:1053:ARG:NE	1:A:1053:ARG:HA	0.43	2.28	21	1
1:A:1049:VAL:HB	1:A:1072:ILE:O	0.43	2.14	7	1
1:A:1079:ASP:O	1:A:1080:GLN:HB2	0.43	2.13	3	1
1:A:996:LEU:HD13	1:A:1000:SER:HA	0.43	1.90	19	1
1:A:997:ILE:CD1	1:A:1021:GLN:HB2	0.43	2.42	4	1
1:A:1007:SER:HB3	1:A:1012:HIS:CD2	0.43	2.48	23	1
1:A:1044:PHE:N	1:A:1044:PHE:CD1	0.43	2.86	23	1
1:A:1040:ASN:OD1	1:A:1050:VAL:HB	0.43	2.13	7	1
1:A:1053:ARG:O	1:A:1054:CYS:HB3	0.43	2.14	3	1
1:A:1063:VAL:O	1:A:1064:PHE:CB	0.43	2.65	18	1
1:A:1016:LYS:HB2	1:A:1017:PRO:HD2	0.43	1.89	11	1
1:A:1029:PRO:HD2	1:A:1052:TYR:OH	0.43	2.13	12	1
1:A:995:ARG:HH22	1:A:1079:ASP:HB3	0.43	1.73	15	1
1:A:1043:ASN:N	1:A:1043:ASN:ND2	0.43	2.65	15	1
1:A:1005:ILE:HD13	1:A:1014:SER:HB3	0.43	1.91	17	3
1:A:1065:GLU:O	1:A:1091:CYS:HA	0.43	2.13	1	2
1:A:1056:LEU:CG	1:A:1060:GLY:HA2	0.43	2.44	6	1
1:A:1029:PRO:O	1:A:1030:THR:HG22	0.43	2.14	16	1
1:A:1027:LEU:H	1:A:1027:LEU:CD2	0.43	2.21	20	1
1:A:1073:TYR:CD1	1:A:1075:THR:HB	0.43	2.48	6	2
1:A:993:GLY:O	1:A:1023:ILE:HD12	0.43	2.13	12	1
1:A:1060:GLY:O	1:A:1061:ARG:HB3	0.43	2.14	8	2
1:A:995:ARG:HH11	1:A:997:ILE:HG12	0.43	1.72	17	1
1:A:1055:ASN:OD1	1:A:1056:LEU:N	0.43	2.52	21	1
1:A:1039:THR:HG23	1:A:1040:ASN:N	0.43	2.28	23	1
1:A:1072:ILE:HG13	1:A:1084:TRP:CE3	0.43	2.49	23	1
1:A:997:ILE:N	1:A:997:ILE:HD12	0.43	2.29	5	2
1:A:1022:ARG:HD3	1:A:1045:HIS:HB3	0.43	1.89	5	1
1:A:966:PRO:HD3	1:A:1013:TRP:CZ2	0.43	2.49	15	1
1:A:1037:ILE:O	1:A:1038:SER:HB3	0.43	2.14	2	1
1:A:1084:TRP:O	1:A:1085:SER:HB3	0.43	2.14	21	1
1:A:961:LYS:O	1:A:981:GLN:HG3	0.43	2.13	5	1
1:A:1065:GLU:HB2	1:A:1092:ILE:O	0.43	2.14	19	2
1:A:1056:LEU:HG	1:A:1064:PHE:HB2	0.43	1.90	11	1
1:A:1036:PHE:O	1:A:1037:ILE:HD13	0.43	2.14	9	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:963:CYS:O	1:A:1013:TRP:NE1	0.43	2.51	24	1
1:A:1025:CYS:HB2	1:A:1048:SER:OG	0.43	2.14	2	1
1:A:1023:ILE:HD13	1:A:1079:ASP:O	0.43	2.12	9	1
1:A:1069:GLU:O	1:A:1089:PRO:HB3	0.43	2.14	17	1
1:A:1055:ASN:O	1:A:1056:LEU:C	0.43	2.57	12	1
1:A:966:PRO:HB2	1:A:974:VAL:HG11	0.43	1.90	16	1
1:A:1058:SER:O	1:A:1059:ARG:HB2	0.43	2.12	2	1
1:A:1050:VAL:HB	1:A:1072:ILE:HG13	0.43	1.91	14	1
1:A:1025:CYS:SG	1:A:1044:PHE:HB3	0.43	2.54	16	1
1:A:1092:ILE:OXT	1:A:1092:ILE:HG13	0.43	2.14	23	1
1:A:1063:VAL:HG13	1:A:1063:VAL:O	0.43	2.14	18	2
1:A:1023:ILE:HG22	1:A:1023:ILE:O	0.43	2.13	6	2
1:A:961:LYS:O	1:A:962:SER:HB3	0.43	2.14	19	1
1:A:1029:PRO:HG2	1:A:1086:GLY:O	0.43	2.13	11	3
1:A:970:VAL:HG13	1:A:970:VAL:O	0.43	2.14	24	1
1:A:992:THR:O	1:A:992:THR:CG2	0.43	2.67	22	1
1:A:1055:ASN:HB3	1:A:1064:PHE:HB2	0.42	1.90	21	1
1:A:1084:TRP:N	1:A:1084:TRP:CD1	0.42	2.87	7	1
1:A:1046:TYR:O	1:A:1046:TYR:CG	0.42	2.71	18	1
1:A:1036:PHE:CB	1:A:1050:VAL:HG23	0.42	2.44	19	1
1:A:1035:ASP:CG	1:A:1036:PHE:H	0.42	2.17	22	2
1:A:969:PRO:HD3	1:A:974:VAL:HG13	0.42	1.91	10	1
1:A:1050:VAL:HB	1:A:1072:ILE:CG1	0.42	2.44	14	1
1:A:1049:VAL:CG1	1:A:1050:VAL:N	0.42	2.82	23	1
1:A:1040:ASN:ND2	1:A:1084:TRP:HH2	0.42	2.12	23	1
1:A:968:ASP:OD1	1:A:968:ASP:O	0.42	2.36	3	2
1:A:977:ILE:HD11	1:A:987:THR:OG1	0.42	2.15	5	1
1:A:995:ARG:NH1	1:A:997:ILE:HD13	0.42	2.29	16	1
1:A:990:CYS:SG	1:A:996:LEU:HB2	0.42	2.54	3	2
1:A:1057:GLY:O	1:A:1061:ARG:HG2	0.42	2.14	23	1
1:A:1075:THR:O	1:A:1076:SER:O	0.42	2.38	5	2
1:A:1042:GLU:O	1:A:1043:ASN:C	0.42	2.58	2	2
1:A:1077:ASN:ND2	1:A:1077:ASN:H	0.42	2.12	15	1
1:A:1003:GLU:HG3	1:A:1005:ILE:HG23	0.42	1.91	15	1
1:A:1027:LEU:N	1:A:1027:LEU:CD2	0.42	2.82	11	1
1:A:1056:LEU:CD2	1:A:1061:ARG:O	0.42	2.66	2	1
1:A:1049:VAL:HG22	1:A:1073:TYR:CA	0.42	2.43	2	1
1:A:1064:PHE:N	1:A:1064:PHE:CD1	0.42	2.87	21	3
1:A:995:ARG:O	1:A:1020:CYS:SG	0.42	2.77	5	1
1:A:1036:PHE:HB2	1:A:1050:VAL:HB	0.42	1.92	11	1
1:A:1037:ILE:HG13	1:A:1051:THR:O	0.42	2.14	24	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1027:LEU:HD23	1:A:1044:PHE:CE2	0.42	2.50	18	1
1:A:1034:GLY:O	1:A:1035:ASP:OD1	0.42	2.37	19	2
1:A:1061:ARG:O	1:A:1061:ARG:HG3	0.42	2.15	11	1
1:A:1066:LEU:HD21	1:A:1089:PRO:HG2	0.42	1.89	4	1
1:A:1042:GLU:O	1:A:1043:ASN:CG	0.42	2.58	14	1
1:A:985:ARG:HE	1:A:1003:GLU:HB2	0.42	1.73	12	1
1:A:1059:ARG:HA	1:A:1059:ARG:NE	0.42	2.30	5	1
1:A:996:LEU:HD12	1:A:997:ILE:H	0.42	1.74	14	1
1:A:1069:GLU:HG2	1:A:1069:GLU:O	0.42	2.15	20	1
1:A:987:THR:HG22	1:A:1001:SER:OG	0.42	2.14	24	1
1:A:985:ARG:N	1:A:985:ARG:HD2	0.42	2.30	10	1
1:A:1007:SER:HB3	1:A:1012:HIS:HD2	0.42	1.74	23	1
1:A:1056:LEU:HD13	1:A:1064:PHE:H	0.42	1.74	5	1
1:A:1057:GLY:O	1:A:1058:SER:HB2	0.42	2.15	6	1
1:A:1065:GLU:HB2	1:A:1092:ILE:C	0.42	2.35	14	1
1:A:1066:LEU:HD22	1:A:1067:VAL:N	0.42	2.28	12	1
1:A:1040:ASN:HB2	1:A:1044:PHE:CE2	0.42	2.50	12	1
1:A:1035:ASP:HB2	1:A:1053:ARG:HD3	0.42	1.91	20	1
1:A:964:LYS:HE2	1:A:965:THR:H	0.42	1.75	15	1
1:A:993:GLY:HA3	1:A:1046:TYR:CZ	0.42	2.50	11	1
1:A:996:LEU:HA	1:A:1020:CYS:CA	0.42	2.36	8	1
1:A:995:ARG:HB2	1:A:1080:GLN:HB2	0.42	1.92	24	1
1:A:991:THR:O	1:A:994:HIS:ND1	0.42	2.53	22	1
1:A:996:LEU:HD23	1:A:998:GLY:N	0.42	2.29	17	1
1:A:1016:LYS:O	1:A:1018:PRO:HD3	0.42	2.14	21	1
1:A:1044:PHE:CD1	1:A:1044:PHE:N	0.42	2.87	7	1
1:A:976:VAL:HA	1:A:986:ILE:CG2	0.42	2.44	3	1
1:A:1063:VAL:HG13	1:A:1064:PHE:N	0.42	2.29	5	1
1:A:970:VAL:HB	1:A:1020:CYS:N	0.42	2.27	15	1
1:A:1069:GLU:OE1	1:A:1070:PRO:HD2	0.42	2.14	18	1
1:A:1039:THR:HG22	1:A:1039:THR:O	0.42	2.14	19	1
1:A:1033:ASN:OD1	1:A:1034:GLY:N	0.42	2.52	11	1
1:A:991:THR:O	1:A:992:THR:C	0.42	2.57	22	1
1:A:1028:PRO:CB	1:A:1050:VAL:HG11	0.42	2.44	4	1
1:A:1029:PRO:HG2	1:A:1087:PRO:O	0.42	2.14	10	1
1:A:996:LEU:HD22	1:A:1000:SER:H	0.42	1.75	17	1
1:A:1069:GLU:HG3	1:A:1089:PRO:HD3	0.42	1.92	16	1
1:A:1034:GLY:HA2	1:A:1054:CYS:CA	0.41	2.45	21	1
1:A:1028:PRO:HG3	1:A:1084:TRP:CE2	0.41	2.50	23	1
1:A:1006:LEU:HG	1:A:1010:THR:C	0.41	2.35	3	1
1:A:1047:GLY:HA3	1:A:1074:CYS:HB2	0.41	1.91	18	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:997:ILE:HD12	1:A:997:ILE:N	0.41	2.30	2	1
1:A:1044:PHE:HD1	1:A:1045:HIS:H	0.41	1.58	6	1
1:A:990:CYS:O	1:A:994:HIS:HB2	0.41	2.14	1	1
1:A:1028:PRO:HB2	1:A:1052:TYR:OH	0.41	2.15	1	1
1:A:1090:GLN:NE2	1:A:1092:ILE:HG23	0.41	2.29	17	1
1:A:961:LYS:HD3	1:A:1006:LEU:HD21	0.41	1.92	23	1
1:A:1006:LEU:HD23	1:A:1008:GLY:N	0.41	2.29	3	1
1:A:1077:ASN:N	1:A:1082:GLY:HA2	0.41	2.30	5	1
1:A:1039:THR:O	1:A:1039:THR:HG22	0.41	2.15	8	1
1:A:1059:ARG:N	1:A:1059:ARG:CD	0.41	2.82	12	1
1:A:1028:PRO:HG3	1:A:1050:VAL:HG11	0.41	1.92	3	1
1:A:977:ILE:H	1:A:986:ILE:HG22	0.41	1.75	17	1
1:A:1027:LEU:N	1:A:1027:LEU:HD23	0.41	2.27	20	1
1:A:1029:PRO:O	1:A:1030:THR:O	0.41	2.37	21	2
1:A:961:LYS:CD	1:A:1006:LEU:HD11	0.41	2.46	21	1
1:A:1035:ASP:OD2	1:A:1055:ASN:HA	0.41	2.14	16	2
1:A:1052:TYR:HB2	1:A:1070:PRO:HA	0.41	1.92	11	1
1:A:991:THR:HG23	1:A:992:THR:N	0.41	2.30	9	1
1:A:1073:TYR:O	1:A:1084:TRP:HA	0.41	2.16	5	1
1:A:1040:ASN:OD1	1:A:1041:ARG:N	0.41	2.54	5	1
1:A:1031:ILE:O	1:A:1031:ILE:HG23	0.41	2.15	15	1
1:A:1033:ASN:O	1:A:1054:CYS:HA	0.41	2.16	22	1
1:A:1039:THR:O	1:A:1040:ASN:HB2	0.41	2.14	13	1
1:A:1056:LEU:CB	1:A:1060:GLY:HA2	0.41	2.45	6	2
1:A:1064:PHE:HB2	1:A:1091:CYS:HB3	0.41	1.92	17	1
1:A:1056:LEU:H	1:A:1056:LEU:CD2	0.41	2.23	20	1
1:A:986:ILE:O	1:A:1001:SER:HA	0.41	2.15	21	1
1:A:976:VAL:O	1:A:977:ILE:HB	0.41	2.16	22	1
1:A:997:ILE:CB	1:A:1019:ILE:O	0.41	2.69	22	1
1:A:1034:GLY:CA	1:A:1054:CYS:HA	0.41	2.45	10	1
1:A:980:ILE:HG22	1:A:1013:TRP:CZ2	0.41	2.51	9	1
1:A:1075:THR:CG2	1:A:1083:ILE:HA	0.41	2.45	21	1
1:A:988:TYR:CZ	1:A:1018:PRO:HG3	0.41	2.51	5	1
1:A:1045:HIS:C	1:A:1047:GLY:N	0.41	2.73	18	1
1:A:999:HIS:ND1	1:A:1015:THR:HG21	0.41	2.30	4	1
1:A:1091:CYS:C	1:A:1092:ILE:HG23	0.41	2.35	6	1
1:A:1026:GLY:HA2	1:A:1044:PHE:CE1	0.41	2.50	6	1
1:A:1056:LEU:HD12	1:A:1061:ARG:O	0.41	2.16	4	1
1:A:1022:ARG:HD2	1:A:1045:HIS:CD2	0.41	2.51	20	1
1:A:1004:CYS:SG	1:A:1013:TRP:CZ3	0.41	3.14	20	1
1:A:970:VAL:O	1:A:1020:CYS:HB2	0.41	2.15	7	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:988:TYR:N	1:A:988:TYR:HD1	0.41	2.11	15	1
1:A:1043:ASN:ND2	1:A:1043:ASN:O	0.41	2.54	15	1
1:A:1016:LYS:HD2	1:A:1017:PRO:O	0.41	2.16	18	1
1:A:963:CYS:HB2	1:A:1013:TRP:CE2	0.41	2.51	19	1
1:A:1056:LEU:HD13	1:A:1060:GLY:HA2	0.41	1.93	19	1
1:A:1061:ARG:HD2	1:A:1061:ARG:C	0.41	2.36	24	1
1:A:1050:VAL:CG2	1:A:1072:ILE:HG13	0.41	2.46	17	1
1:A:1051:THR:HA	1:A:1070:PRO:O	0.41	2.15	16	1
1:A:1013:TRP:HB2	1:A:1016:LYS:HA	0.41	1.93	16	1
1:A:1056:LEU:HD12	1:A:1060:GLY:CA	0.41	2.44	7	1
1:A:1027:LEU:HA	1:A:1044:PHE:CZ	0.41	2.51	3	1
1:A:965:THR:HA	1:A:980:ILE:HD12	0.41	1.93	24	1
1:A:1056:LEU:C	1:A:1063:VAL:HG13	0.41	2.37	2	1
1:A:995:ARG:HD3	1:A:1021:GLN:OE1	0.40	2.15	21	1
1:A:1067:VAL:O	1:A:1090:GLN:NE2	0.40	2.55	21	1
1:A:1022:ARG:HH22	1:A:1046:TYR:HB3	0.40	1.75	7	1
1:A:1052:TYR:CD1	1:A:1052:TYR:N	0.40	2.90	7	1
1:A:1031:ILE:CG1	1:A:1031:ILE:O	0.40	2.69	12	1
1:A:1066:LEU:C	1:A:1066:LEU:CD2	0.40	2.90	21	1
1:A:965:THR:OG1	1:A:976:VAL:HG21	0.40	2.16	3	1
1:A:1025:CYS:HB2	1:A:1044:PHE:HE1	0.40	1.77	15	1
1:A:982:VAL:N	1:A:1004:CYS:SG	0.40	2.94	18	1
1:A:1075:THR:O	1:A:1082:GLY:O	0.40	2.39	11	1
1:A:1027:LEU:HB3	1:A:1028:PRO:HD2	0.40	1.93	24	1
1:A:1057:GLY:N	1:A:1063:VAL:HB	0.40	2.31	13	1
1:A:985:ARG:HD2	1:A:985:ARG:H	0.40	1.76	10	1
1:A:1040:ASN:HD22	1:A:1044:PHE:HE2	0.40	1.58	16	1
1:A:1083:ILE:N	1:A:1083:ILE:CD1	0.40	2.83	20	1
1:A:974:VAL:HA	1:A:987:THR:O	0.40	2.16	21	1
1:A:997:ILE:HD13	1:A:1021:GLN:HG2	0.40	1.93	7	1
1:A:974:VAL:HG23	1:A:988:TYR:CE1	0.40	2.51	7	1
1:A:1036:PHE:CE1	1:A:1040:ASN:HB3	0.40	2.50	18	1
1:A:986:ILE:HG13	1:A:988:TYR:CE1	0.40	2.52	11	1
1:A:969:PRO:HG2	1:A:972:GLY:C	0.40	2.36	10	1
1:A:1080:GLN:HG2	1:A:1081:VAL:N	0.40	2.32	1	1
1:A:1028:PRO:O	1:A:1029:PRO:C	0.40	2.59	17	1
1:A:1050:VAL:HG12	1:A:1084:TRP:CZ3	0.40	2.51	23	1
1:A:1066:LEU:HD11	1:A:1089:PRO:CB	0.40	2.47	5	1
1:A:1037:ILE:CG2	1:A:1038:SER:N	0.40	2.84	18	1
1:A:962:SER:CB	1:A:981:GLN:HA	0.40	2.47	11	1
1:A:1040:ASN:O	1:A:1041:ARG:HB2	0.40	2.16	6	1

*Continued on next page...*





Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1063:VAL:HG23	1:A:1063:VAL:O	0.40	2.16	7	1
1:A:996:LEU:HD11	1:A:1000:SER:N	0.40	2.31	15	1
1:A:975:HIS:CD2	1:A:975:HIS:N	0.40	2.89	19	1
1:A:969:PRO:HG2	1:A:988:TYR:CE2	0.40	2.52	8	1
1:A:983:GLY:HA2	1:A:1003:GLU:OE2	0.40	2.17	4	1

## 6.3 Torsion angles

### 6.3.1 Protein backbone

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	132/136 (97%)	80±5 (61±4%)	31±5 (24±4%)	21±4 (16±3%)		
All	All	3168/3264 (97%)	1929 (61%)	747 (24%)	492 (16%)		

All 81 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	977	ILE	20
1	A	980	ILE	18
1	A	970	VAL	18
1	A	1077	ASN	17
1	A	1046	TYR	16
1	A	1089	PRO	14
1	A	979	ASP	13
1	A	1088	ALA	13
1	A	991	THR	12
1	A	1079	ASP	12
1	A	969	PRO	11
1	A	1078	ASP	11
1	A	1059	ARG	11
1	A	1080	GLN	11
1	A	964	LYS	11
1	A	1040	ASN	10
1	A	961	LYS	10

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	1008	GLY	10
1	A	1063	VAL	10
1	A	1054	CYS	9
1	A	1055	ASN	9
1	A	1076	SER	8
1	A	1048	SER	8
1	A	1009	ASN	8
1	A	1038	SER	8
1	A	1060	GLY	8
1	A	1047	GLY	8
1	A	982	VAL	7
1	A	1042	GLU	7
1	A	1005	ILE	7
1	A	1017	PRO	7
1	A	999	HIS	7
1	A	1081	VAL	6
1	A	1064	PHE	6
1	A	1083	ILE	6
1	A	1056	LEU	6
1	A	1087	PRO	5
1	A	1058	SER	5
1	A	1084	TRP	5
1	A	1030	THR	5
1	A	1037	ILE	5
1	A	1043	ASN	4
1	A	990	CYS	4
1	A	989	SER	4
1	A	992	THR	4
1	A	1035	ASP	4
1	A	1019	ILE	4
1	A	1062	LYS	4
1	A	1032	ALA	4
1	A	1041	ARG	3
1	A	1016	LYS	3
1	A	1039	THR	3
1	A	1034	GLY	3
1	A	960	ALA	3
1	A	1007	SER	3
1	A	986	ILE	3
1	A	1075	THR	3
1	A	1018	PRO	3
1	A	1069	GLU	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	1045	HIS	2
1	A	1029	PRO	2
1	A	968	ASP	2
1	A	1044	PHE	2
1	A	1061	ARG	2
1	A	1036	PHE	2
1	A	984	SER	2
1	A	1070	PRO	2
1	A	978	THR	2
1	A	1082	GLY	2
1	A	1031	ILE	2
1	A	994	HIS	1
1	A	993	GLY	1
1	A	1072	ILE	1
1	A	1067	VAL	1
1	A	1065	GLU	1
1	A	1033	ASN	1
1	A	966	PRO	1
1	A	1068	GLY	1
1	A	974	VAL	1
1	A	1026	GLY	1
1	A	973	MET	1

### 6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	115/117 (98%)	109±2 (95±2%)	6±2 (5±2%)	33 77
All	All	2760/2808 (98%)	2615 (95%)	145 (5%)	33 77

All 38 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	1077	ASN	24
1	A	1006	LEU	9
1	A	1064	PHE	7

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	1016	LYS	7
1	A	961	LYS	7
1	A	1044	PHE	7
1	A	1073	TYR	7
1	A	1036	PHE	5
1	A	974	VAL	5
1	A	1022	ARG	4
1	A	985	ARG	4
1	A	970	VAL	4
1	A	1083	ILE	4
1	A	1056	LEU	4
1	A	1009	ASN	4
1	A	1090	GLN	4
1	A	1042	GLU	3
1	A	1061	ARG	3
1	A	988	TYR	3
1	A	991	THR	3
1	A	964	LYS	3
1	A	1059	ARG	3
1	A	1043	ASN	2
1	A	1005	ILE	2
1	A	996	LEU	2
1	A	1027	LEU	2
1	A	1063	VAL	2
1	A	994	HIS	1
1	A	1080	GLN	1
1	A	1069	GLU	1
1	A	1019	ILE	1
1	A	1084	TRP	1
1	A	1052	TYR	1
1	A	1092	ILE	1
1	A	1021	GLN	1
1	A	980	ILE	1
1	A	1025	CYS	1
1	A	1074	CYS	1

### 6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

## 6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates 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