



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 03:39 PM BST

PDB ID : 1KTM
Title : SOLUTION STRUCTURE OF FAT DOMAIN OF FOCAL ADHESION KINASE
Authors : Liu, G.; Guibao, C.; Zheng, J.
Deposited on : 2002-01-16

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
<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

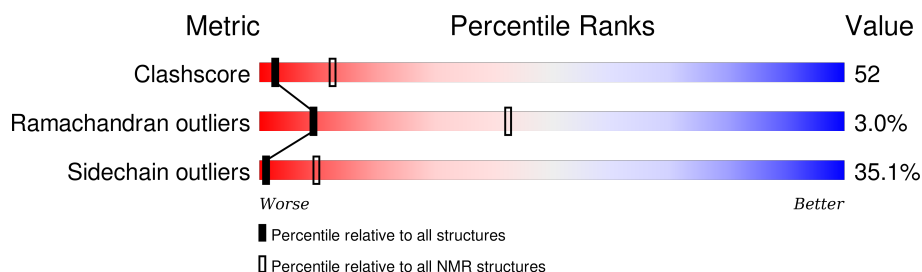
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 31%.

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 ≥ 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	139	<div> <div>17%</div> <div>59%</div> <div>14%</div> <div>9%</div> </div>

2 Ensemble composition and analysis ⓘ

This entry contains 25 models. Model 9 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *fewest violations*.

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:922-A:1047 (126)	0.38	9

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 7 clusters and 2 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 11, 14
2	8, 9, 13, 17
3	19, 20, 21, 23
4	10, 15, 24
5	3, 16, 18
6	12, 22, 25
7	6, 7
Single-model clusters	4; 5

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2215 atoms, of which 1132 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called FOCAL ADHESION KINASE 1.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	139	Total	C	H	N	O	S	0
			2215	682	1132	186	207	8	

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

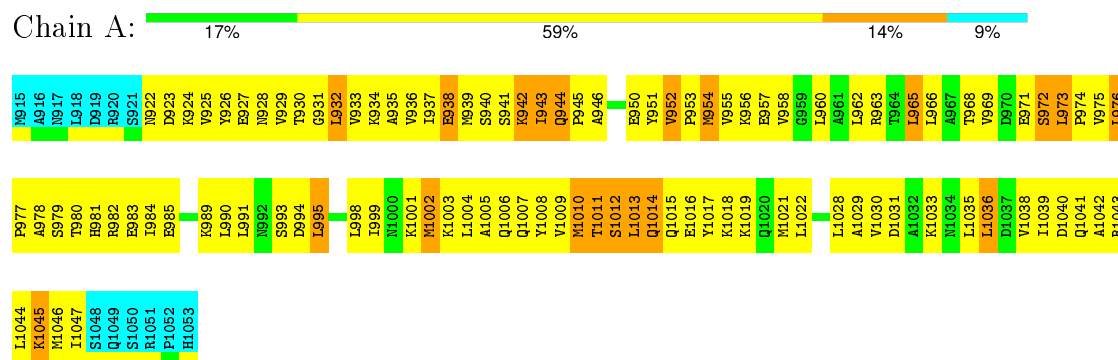
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	915	MET	-	INITIATING MET	UNP Q00944

4 Residue-property plots [i](#)

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: FOCAL ADHESION KINASE 1

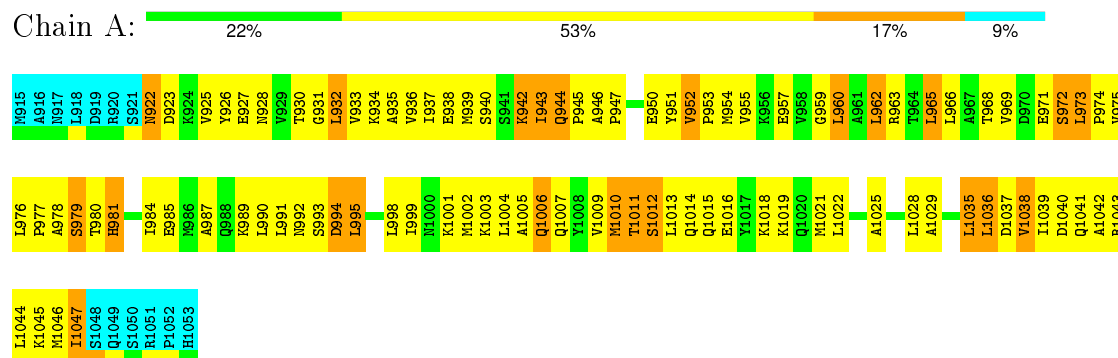


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

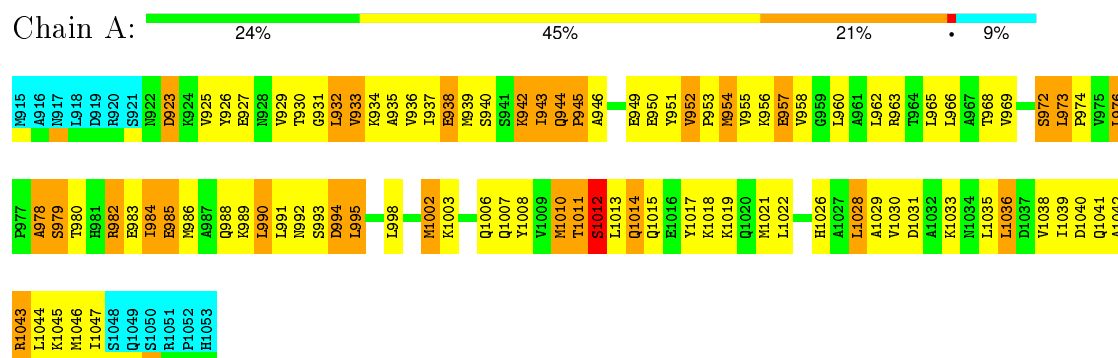
4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



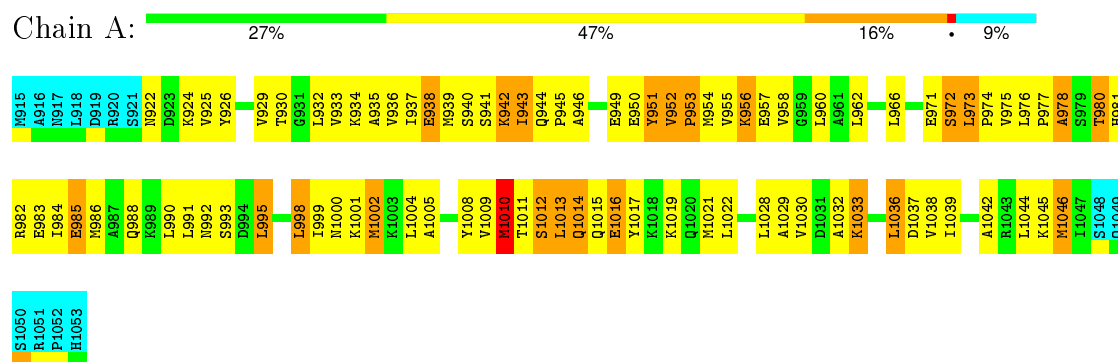
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



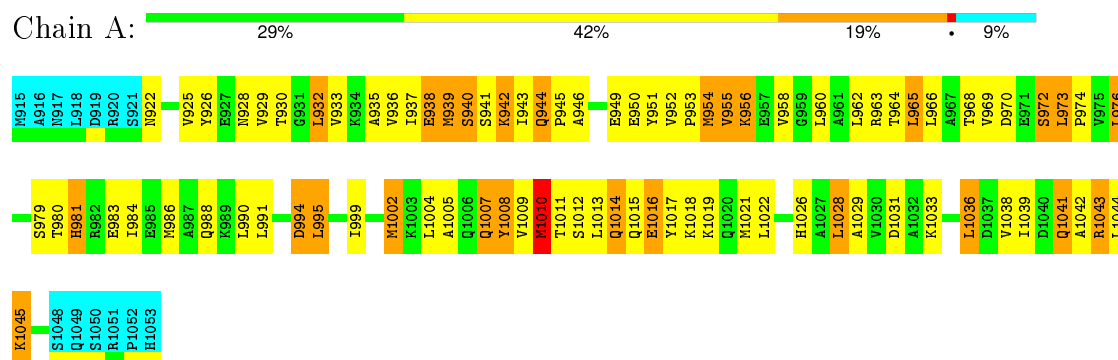
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



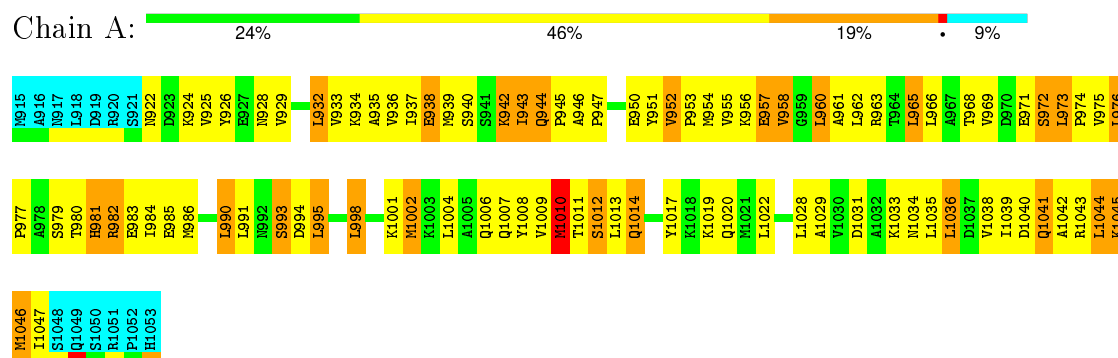
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



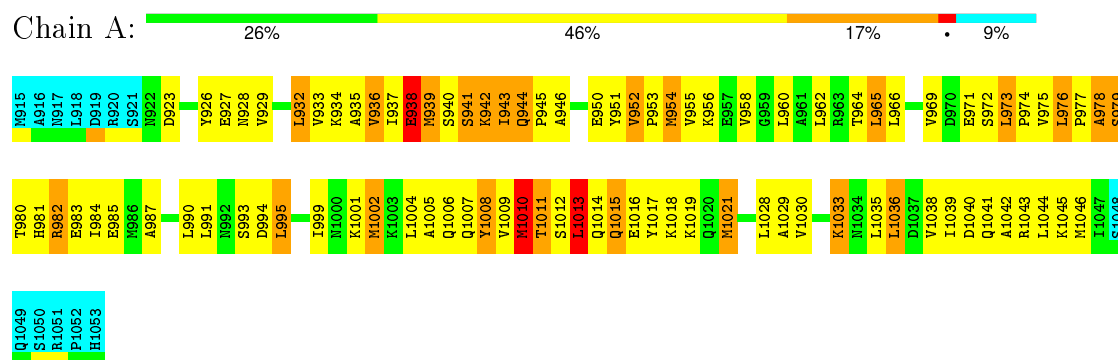
4.2.5 Score per residue for model 5

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



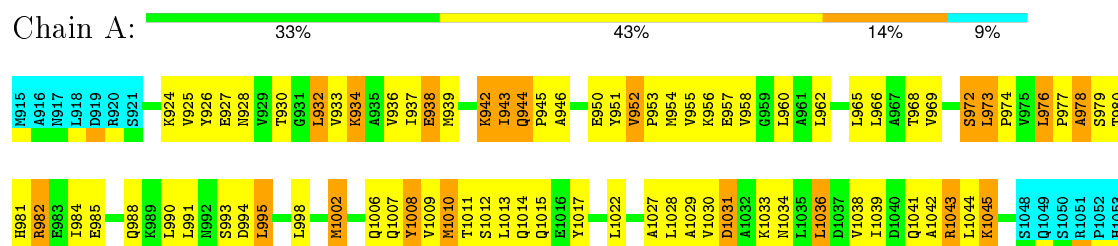
4.2.6 Score per residue for model 6

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



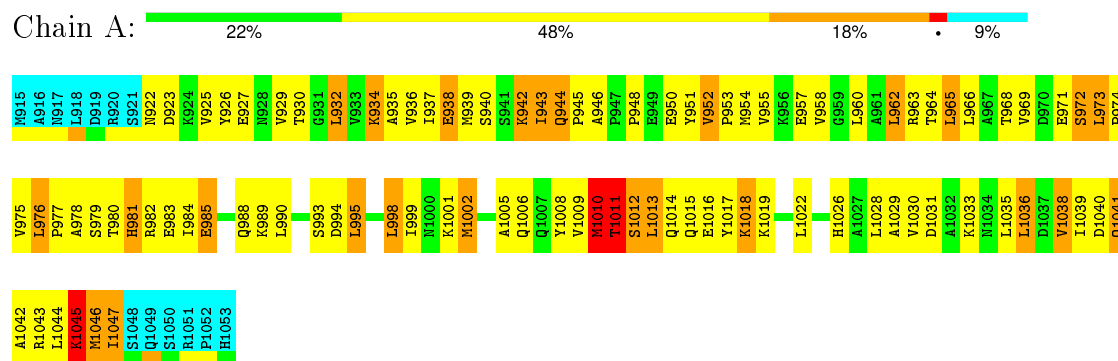
4.2.7 Score per residue for model 7

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



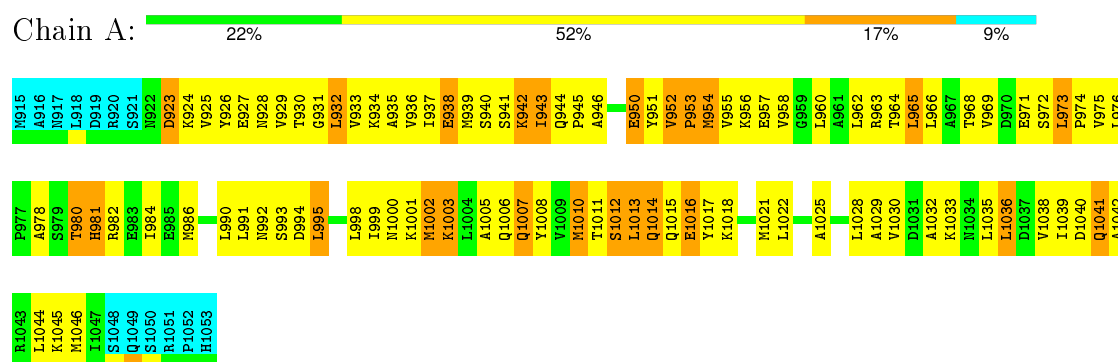
4.2.8 Score per residue for model 8

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



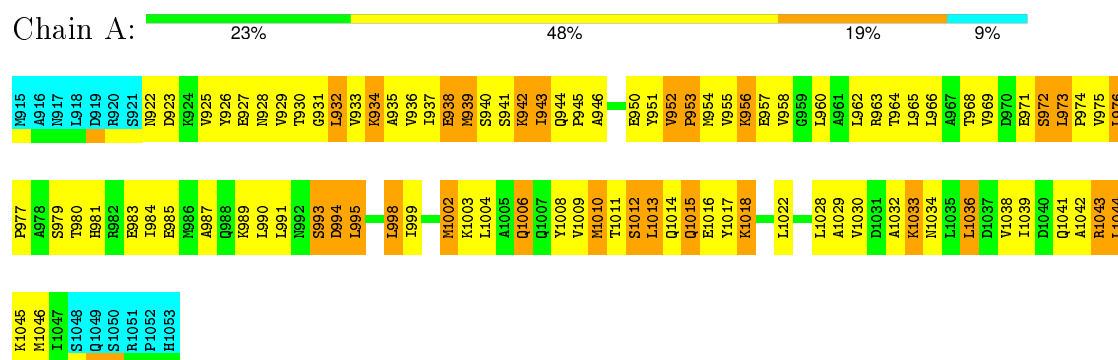
4.2.9 Score per residue for model 9 (medoid)

- Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



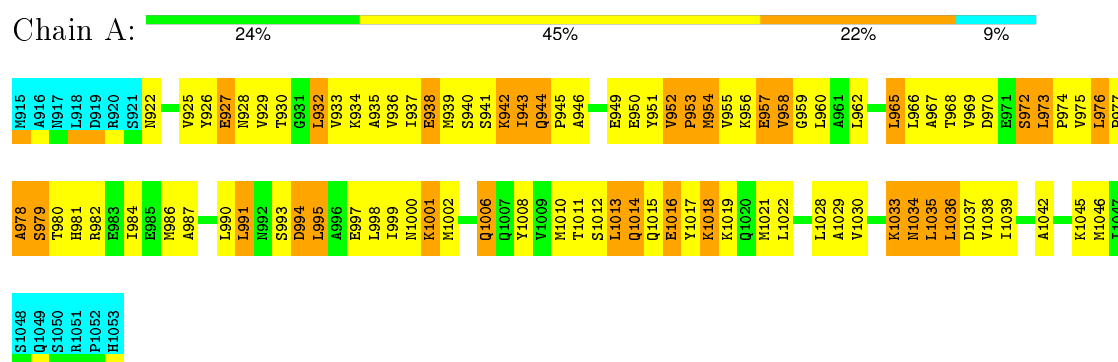
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



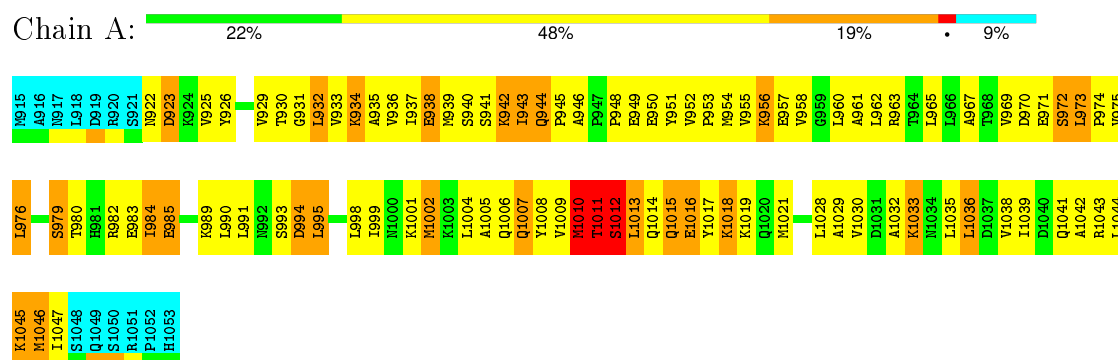
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



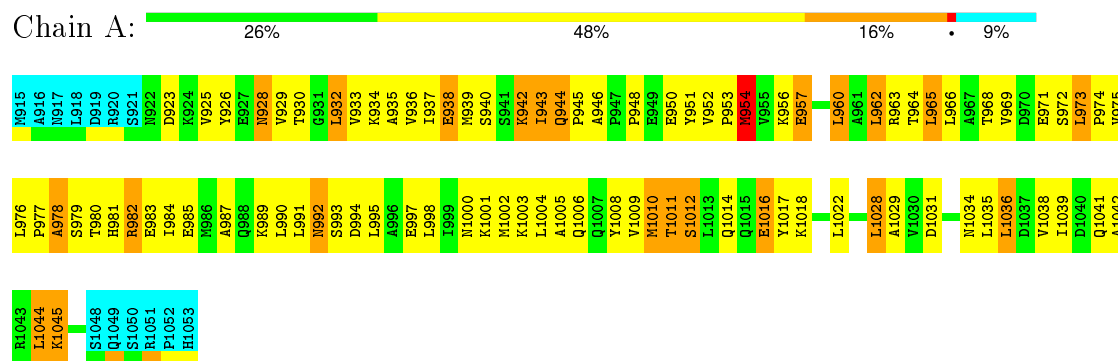
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



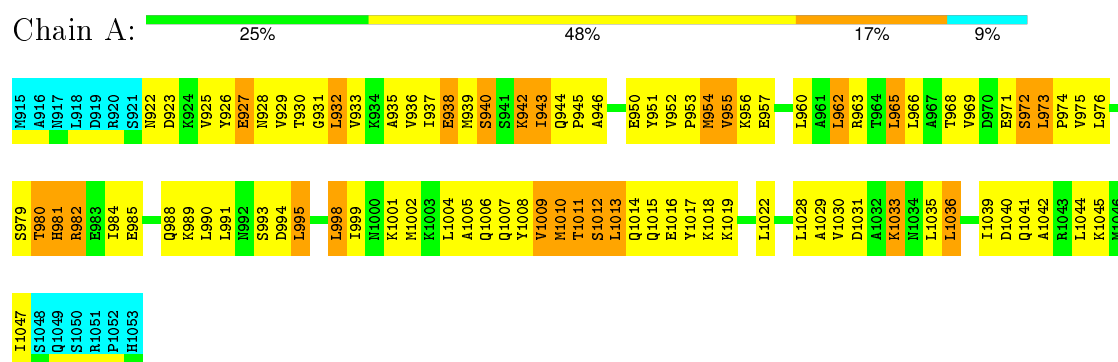
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



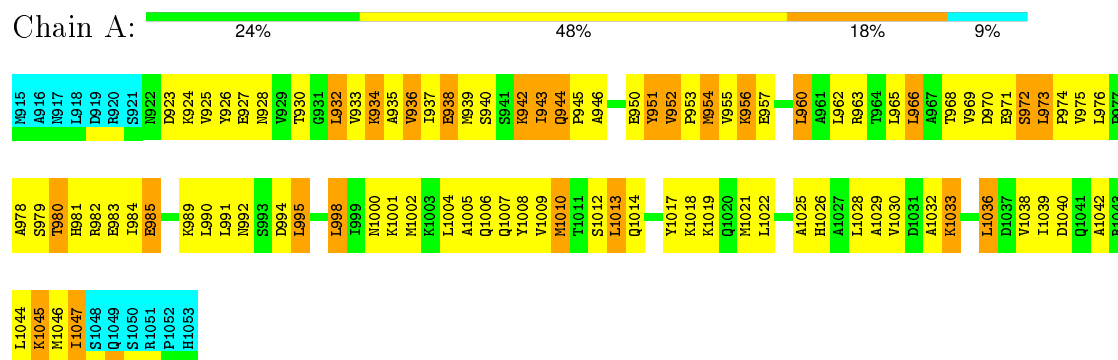
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



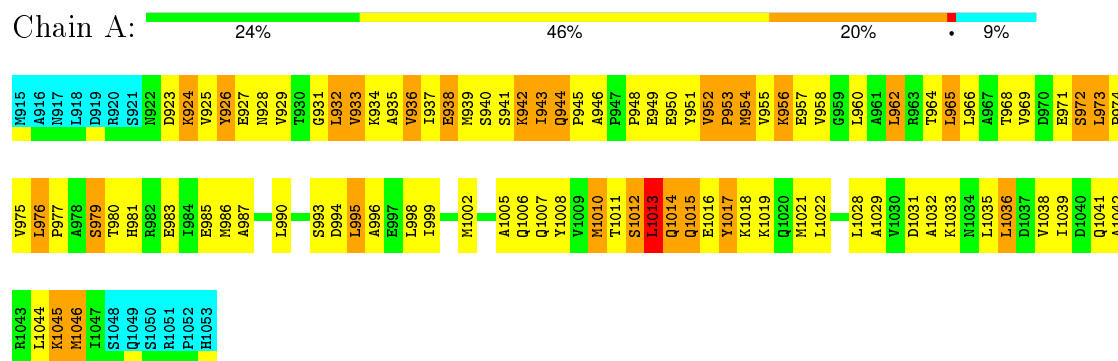
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



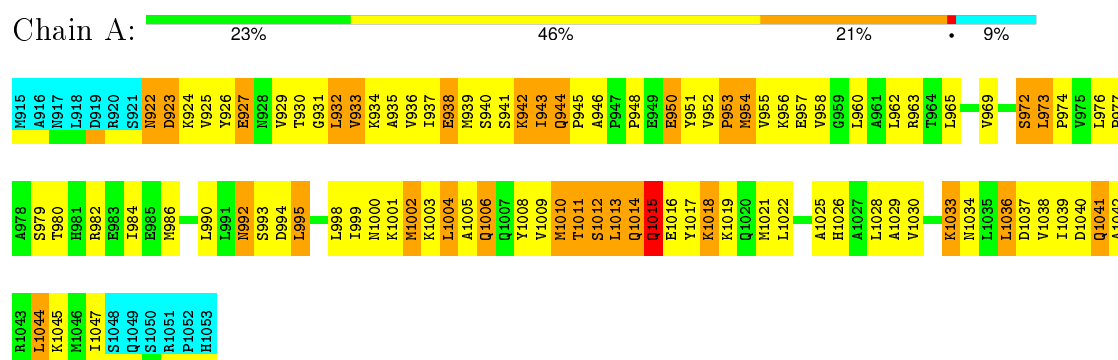
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



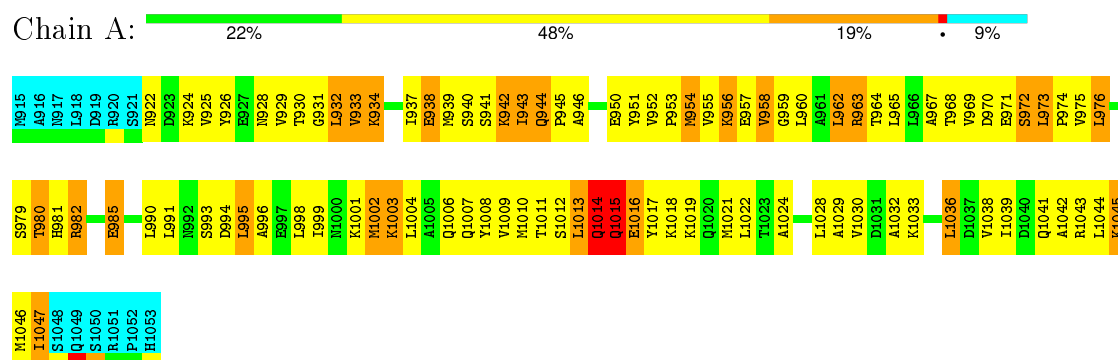
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



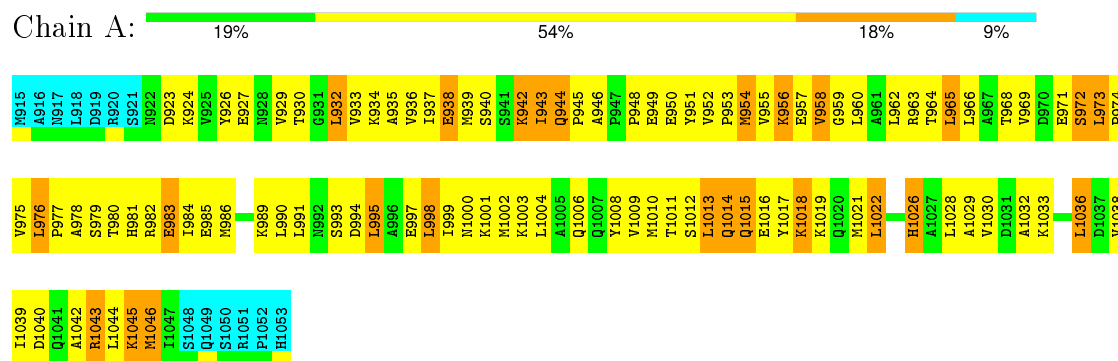
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



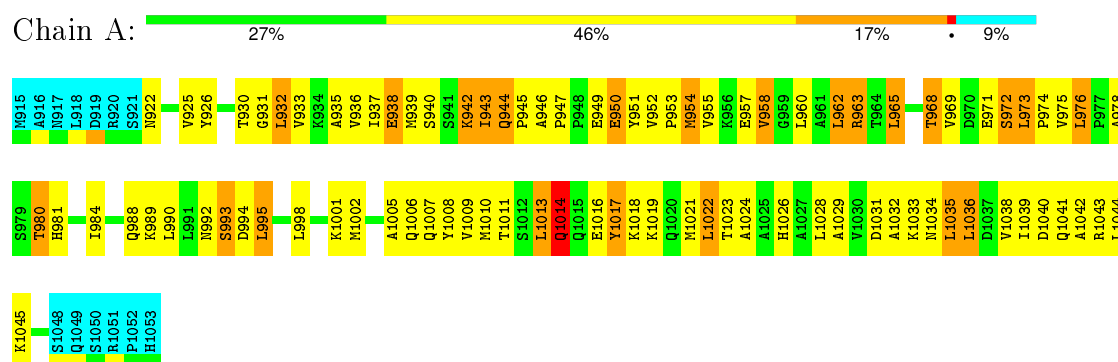
4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



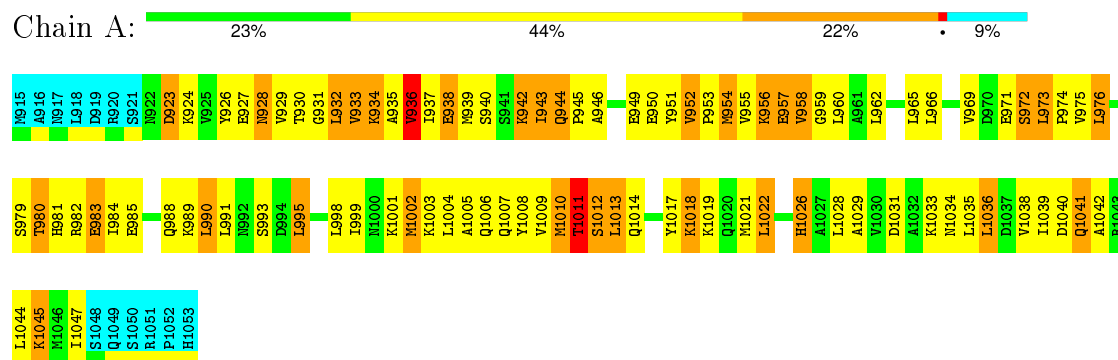
4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



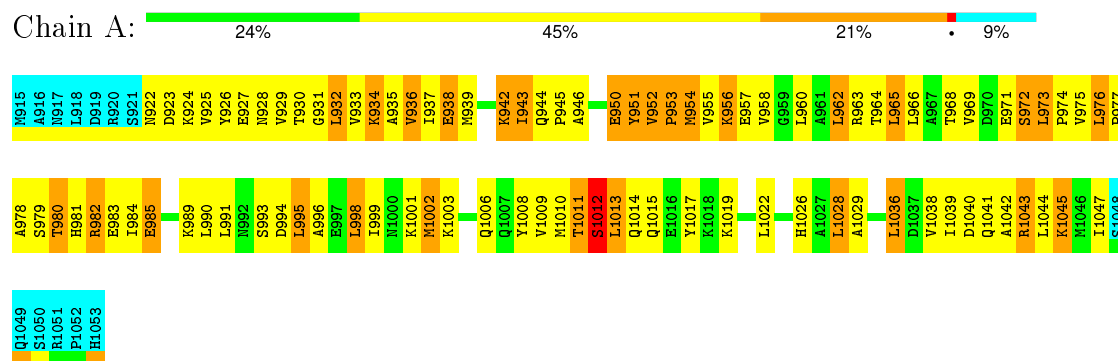
4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



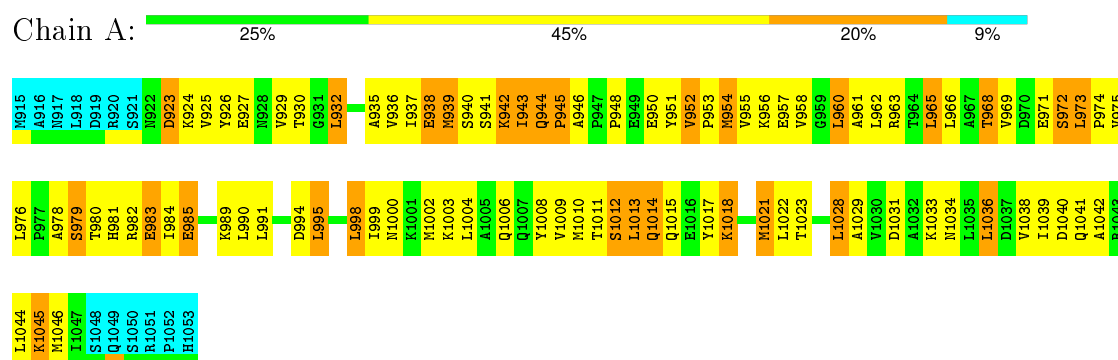
4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



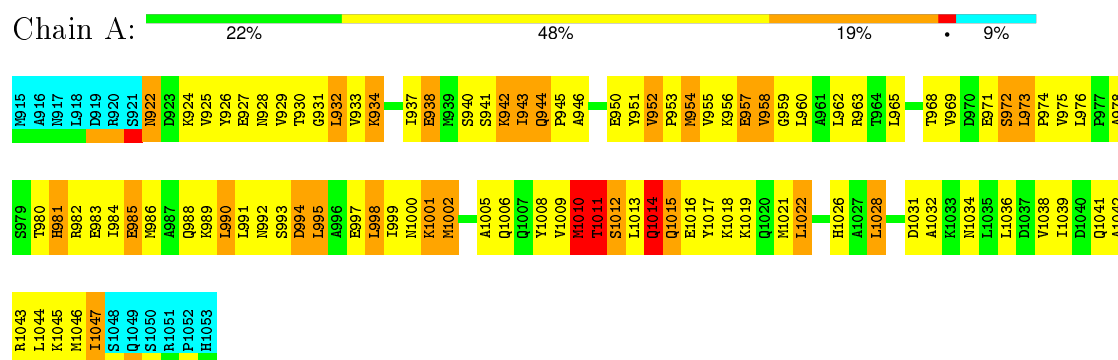
4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 270 calculated structures, 25 were deposited, based on the following criterion: *structures with the least restraint violations*.

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

Software name	Classification	Version
DYANA	structure solution	1.5
DYANA	refinement	

The following table shows chemical shift validation statistics as aggregates over all chemical shift files. Detailed validation can be found in section 7 of this report.

Chemical shift file(s)	BMRB entry 5266
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	520
Number of shifts mapped to atoms	520
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	31%

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	980	1035	1035	106±8
All	All	24500	25875	25875	2639

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 52.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:926:TYR:CD1	1:A:1036:LEU:HD11	1.10	1.81	23	21
1:A:962:LEU:HD11	1:A:995:LEU:HD13	1.07	1.23	9	1
1:A:943:ILE:HD11	1:A:951:TYR:CE1	1.01	1.91	15	18
1:A:962:LEU:HD13	1:A:995:LEU:HD22	1.00	1.28	2	6
1:A:926:TYR:CZ	1:A:1036:LEU:HD21	0.99	1.93	13	22
1:A:984:ILE:HD11	1:A:1039:ILE:CG1	0.96	1.89	2	17
1:A:965:LEU:O	1:A:969:VAL:HG23	0.95	1.62	16	23
1:A:1005:ALA:O	1:A:1009:VAL:HG23	0.93	1.62	6	2
1:A:994:ASP:CB	1:A:1028:LEU:HD11	0.92	1.95	23	3
1:A:943:ILE:HD11	1:A:951:TYR:CZ	0.91	2.01	3	11
1:A:962:LEU:O	1:A:962:LEU:HD22	0.91	1.64	21	2
1:A:1008:TYR:O	1:A:1011:THR:HG22	0.90	1.66	7	2
1:A:962:LEU:HD22	1:A:995:LEU:CD2	0.90	1.97	14	1
1:A:972:SER:O	1:A:976:LEU:HD22	0.90	1.67	21	18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:929:VAL:O	1:A:933:VAL:HG22	0.89	1.66	14	1
1:A:984:ILE:HG23	1:A:1035:LEU:HD11	0.89	1.41	22	1
1:A:962:LEU:HD22	1:A:962:LEU:O	0.88	1.67	11	1
1:A:925:VAL:HG21	1:A:972:SER:OG	0.87	1.68	8	2
1:A:1013:LEU:HD12	1:A:1017:TYR:CE2	0.87	2.05	12	1
1:A:962:LEU:HD22	1:A:995:LEU:HD22	0.87	1.45	14	1
1:A:962:LEU:CD1	1:A:995:LEU:HD13	0.86	1.99	9	6
1:A:998:LEU:HD13	1:A:1028:LEU:CD1	0.86	2.01	18	8
1:A:929:VAL:HG22	1:A:965:LEU:HD21	0.86	1.48	23	2
1:A:980:THR:OG1	1:A:1038:VAL:HG12	0.85	1.69	24	6
1:A:960:LEU:O	1:A:960:LEU:HD12	0.85	1.70	1	1
1:A:1010:MET:CE	1:A:1011:THR:HG23	0.85	2.01	1	4
1:A:994:ASP:HB2	1:A:1028:LEU:HD11	0.85	1.49	21	3
1:A:929:VAL:HG21	1:A:1036:LEU:HD13	0.84	1.46	22	1
1:A:942:LYS:O	1:A:946:ALA:HB2	0.84	1.72	8	25
1:A:1035:LEU:O	1:A:1038:VAL:HG12	0.84	1.73	21	7
1:A:1044:LEU:HD13	1:A:1045:LYS:N	0.83	1.88	18	1
1:A:926:TYR:CE1	1:A:1036:LEU:HD21	0.83	2.08	9	21
1:A:926:TYR:CD1	1:A:1036:LEU:HD21	0.83	2.08	22	13
1:A:983:GLU:HB3	1:A:1038:VAL:HG11	0.81	1.51	22	9
1:A:980:THR:HG22	1:A:1042:ALA:CB	0.81	2.04	4	10
1:A:998:LEU:HD13	1:A:1028:LEU:HD12	0.81	1.52	18	6
1:A:962:LEU:HD13	1:A:995:LEU:HD13	0.81	1.53	18	6
1:A:980:THR:HB	1:A:1042:ALA:HB2	0.81	1.53	11	9
1:A:1008:TYR:CE2	1:A:1017:TYR:CE1	0.80	2.69	4	3
1:A:955:VAL:HG21	1:A:1002:MET:HB2	0.80	1.52	15	9
1:A:964:THR:O	1:A:968:THR:HG23	0.80	1.74	14	8
1:A:925:VAL:O	1:A:929:VAL:HG23	0.79	1.77	18	12
1:A:1008:TYR:CD2	1:A:1017:TYR:CE2	0.79	2.70	15	6
1:A:984:ILE:HD11	1:A:1039:ILE:HG12	0.79	1.55	5	12
1:A:962:LEU:HD13	1:A:963:ARG:N	0.79	1.92	11	3
1:A:932:LEU:C	1:A:932:LEU:HD22	0.79	1.98	5	2
1:A:925:VAL:HG22	1:A:968:THR:HG22	0.79	1.54	7	6
1:A:932:LEU:HD22	1:A:932:LEU:C	0.78	1.97	4	1
1:A:976:LEU:HD12	1:A:1042:ALA:HB3	0.78	1.54	13	4
1:A:983:GLU:CB	1:A:1038:VAL:HG11	0.78	2.09	22	10
1:A:984:ILE:HD11	1:A:1039:ILE:HG13	0.78	1.55	2	12
1:A:926:TYR:CE1	1:A:1036:LEU:HD11	0.78	2.14	23	9
1:A:926:TYR:CE2	1:A:1036:LEU:HD21	0.78	2.13	3	18
1:A:932:LEU:HD13	1:A:933:VAL:H	0.78	1.38	4	3
1:A:1008:TYR:CD1	1:A:1017:TYR:CE1	0.78	2.72	20	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:984:ILE:HG23	1:A:1035:LEU:CD1	0.78	2.09	22	1
1:A:940:SER:CB	1:A:1022:LEU:HD23	0.77	2.09	14	5
1:A:962:LEU:O	1:A:966:LEU:HD12	0.77	1.79	6	11
1:A:1009:VAL:HG22	1:A:1014:GLN:NE2	0.77	1.95	6	1
1:A:1008:TYR:CD2	1:A:1017:TYR:CE1	0.77	2.73	11	5
1:A:980:THR:HG22	1:A:1042:ALA:HB1	0.77	1.56	4	3
1:A:952:VAL:HG23	1:A:1006:GLN:OE1	0.77	1.80	10	1
1:A:925:VAL:HG21	1:A:972:SER:HB2	0.77	1.55	17	5
1:A:971:GLU:O	1:A:975:VAL:HG23	0.77	1.79	19	20
1:A:1008:TYR:CD1	1:A:1017:TYR:CZ	0.77	2.73	22	7
1:A:925:VAL:HG21	1:A:972:SER:HG	0.77	1.37	8	1
1:A:932:LEU:C	1:A:932:LEU:HD12	0.76	1.99	12	10
1:A:1008:TYR:CG	1:A:1017:TYR:CE2	0.76	2.73	18	5
1:A:962:LEU:HD11	1:A:995:LEU:CD1	0.76	2.10	9	1
1:A:1008:TYR:CE2	1:A:1017:TYR:CZ	0.76	2.74	4	5
1:A:1044:LEU:HD12	1:A:1045:LYS:N	0.76	1.96	3	17
1:A:1013:LEU:HD12	1:A:1017:TYR:CD2	0.76	2.15	12	1
1:A:932:LEU:HD13	1:A:933:VAL:N	0.75	1.97	4	3
1:A:976:LEU:N	1:A:976:LEU:HD13	0.75	1.97	5	2
1:A:976:LEU:HG	1:A:1039:ILE:HG23	0.74	1.58	5	20
1:A:925:VAL:CG2	1:A:968:THR:HG22	0.74	2.12	7	3
1:A:970:ASP:HA	1:A:973:LEU:HD12	0.74	1.58	4	3
1:A:932:LEU:HD12	1:A:932:LEU:C	0.74	2.03	7	9
1:A:980:THR:CB	1:A:1042:ALA:HB2	0.74	2.11	6	7
1:A:925:VAL:HG23	1:A:968:THR:HG22	0.74	1.58	11	2
1:A:962:LEU:HD13	1:A:995:LEU:HG	0.74	1.59	23	3
1:A:962:LEU:C	1:A:962:LEU:HD22	0.74	2.03	21	2
1:A:980:THR:HG23	1:A:984:ILE:HD12	0.74	1.59	5	8
1:A:1013:LEU:O	1:A:1013:LEU:HD12	0.73	1.84	1	2
1:A:925:VAL:HG11	1:A:972:SER:OG	0.73	1.83	25	2
1:A:995:LEU:C	1:A:995:LEU:HD12	0.73	2.04	25	5
1:A:952:VAL:HG23	1:A:1006:GLN:NE2	0.73	1.98	17	2
1:A:1006:GLN:O	1:A:1009:VAL:HG12	0.72	1.84	20	4
1:A:1044:LEU:HD22	1:A:1044:LEU:C	0.72	2.05	10	3
1:A:1009:VAL:HG22	1:A:1014:GLN:CD	0.72	2.05	6	1
1:A:932:LEU:O	1:A:936:VAL:HG23	0.72	1.82	11	2
1:A:973:LEU:HD22	1:A:981:HIS:CD2	0.72	2.19	14	2
1:A:1009:VAL:HG23	1:A:1014:GLN:HG3	0.72	1.60	1	5
1:A:1044:LEU:HD13	1:A:1045:LYS:H	0.72	1.42	18	1
1:A:1034:ASN:O	1:A:1038:VAL:HG23	0.71	1.85	10	9
1:A:962:LEU:HD13	1:A:995:LEU:CD2	0.71	2.10	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:926:TYR:CE1	1:A:1036:LEU:CD2	0.71	2.73	17	7
1:A:962:LEU:HD22	1:A:962:LEU:C	0.71	2.05	11	1
1:A:983:GLU:HB2	1:A:1038:VAL:HG21	0.71	1.59	11	1
1:A:932:LEU:HD23	1:A:933:VAL:HG13	0.71	1.62	25	2
1:A:998:LEU:O	1:A:998:LEU:HD22	0.71	1.85	15	1
1:A:1008:TYR:CG	1:A:1017:TYR:CZ	0.70	2.79	17	9
1:A:1008:TYR:CZ	1:A:1017:TYR:CE1	0.70	2.79	6	1
1:A:995:LEU:HD12	1:A:995:LEU:C	0.70	2.06	18	3
1:A:1044:LEU:HD22	1:A:1045:LYS:N	0.70	2.00	14	2
1:A:1008:TYR:CE1	1:A:1017:TYR:CZ	0.70	2.79	6	3
1:A:960:LEU:HD12	1:A:960:LEU:C	0.70	2.07	1	1
1:A:987:ALA:HB1	1:A:1035:LEU:HD22	0.70	1.64	1	1
1:A:955:VAL:HG21	1:A:1002:MET:CB	0.69	2.17	18	7
1:A:962:LEU:CD1	1:A:991:LEU:HD11	0.69	2.17	13	1
1:A:933:VAL:HG11	1:A:1032:ALA:HB3	0.69	1.64	20	1
1:A:1008:TYR:CG	1:A:1017:TYR:CE1	0.69	2.81	21	8
1:A:1010:MET:HE2	1:A:1011:THR:HG23	0.69	1.63	1	2
1:A:926:TYR:O	1:A:930:THR:HG22	0.69	1.87	25	1
1:A:983:GLU:CB	1:A:1038:VAL:HG21	0.69	2.18	11	1
1:A:975:VAL:C	1:A:976:LEU:HD13	0.68	2.07	5	2
1:A:925:VAL:HG22	1:A:968:THR:HG23	0.68	1.63	24	1
1:A:943:ILE:HD11	1:A:951:TYR:CE2	0.68	2.23	3	2
1:A:962:LEU:HG	1:A:995:LEU:HD22	0.68	1.65	20	1
1:A:955:VAL:CG1	1:A:999:ILE:HD13	0.68	2.18	19	11
1:A:955:VAL:HG11	1:A:1002:MET:HG2	0.68	1.65	10	4
1:A:1022:LEU:C	1:A:1022:LEU:HD13	0.68	2.09	18	9
1:A:929:VAL:O	1:A:932:LEU:HD13	0.68	1.87	11	3
1:A:1022:LEU:HD13	1:A:1022:LEU:C	0.68	2.09	2	4
1:A:1013:LEU:HD13	1:A:1016:GLU:HB3	0.68	1.65	21	4
1:A:980:THR:CG2	1:A:1042:ALA:CB	0.67	2.72	18	24
1:A:962:LEU:CG	1:A:995:LEU:HD22	0.67	2.20	20	1
1:A:973:LEU:HD21	1:A:981:HIS:HB3	0.67	1.66	19	2
1:A:937:ILE:HD11	1:A:1029:ALA:HB2	0.67	1.64	9	4
1:A:962:LEU:CD2	1:A:995:LEU:HD22	0.67	2.20	14	1
1:A:976:LEU:CG	1:A:1039:ILE:HG23	0.66	2.20	24	16
1:A:980:THR:OG1	1:A:1038:VAL:HG22	0.66	1.91	6	2
1:A:962:LEU:HD12	1:A:991:LEU:HD11	0.66	1.67	13	1
1:A:994:ASP:CB	1:A:1028:LEU:HD21	0.66	2.21	9	13
1:A:962:LEU:CD1	1:A:995:LEU:HD22	0.66	2.16	2	2
1:A:977:PRO:HD2	1:A:1042:ALA:HB1	0.66	1.68	7	4
1:A:975:VAL:HG12	1:A:976:LEU:HD22	0.66	1.68	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1011:THR:O	1:A:1012:SER:CB	0.65	2.44	24	9
1:A:1013:LEU:N	1:A:1013:LEU:HD23	0.65	2.06	22	1
1:A:933:VAL:O	1:A:937:ILE:HD12	0.65	1.91	2	2
1:A:932:LEU:HD22	1:A:933:VAL:N	0.65	2.07	11	3
1:A:980:THR:HG23	1:A:1042:ALA:CB	0.65	2.21	15	1
1:A:1008:TYR:CZ	1:A:1017:TYR:CZ	0.65	2.85	6	3
1:A:976:LEU:HB3	1:A:980:THR:HG21	0.64	1.67	19	5
1:A:933:VAL:CG1	1:A:1032:ALA:HB3	0.64	2.22	20	5
1:A:976:LEU:CD1	1:A:1039:ILE:HG23	0.64	2.23	24	9
1:A:925:VAL:HG21	1:A:972:SER:CB	0.64	2.23	17	4
1:A:932:LEU:HD22	1:A:962:LEU:HD22	0.64	1.69	15	1
1:A:962:LEU:HD21	1:A:991:LEU:HD11	0.64	1.70	10	2
1:A:940:SER:HB2	1:A:1022:LEU:HD23	0.64	1.68	16	3
1:A:962:LEU:HD11	1:A:991:LEU:HD23	0.64	1.69	15	1
1:A:952:VAL:HG23	1:A:1006:GLN:CD	0.64	2.12	8	3
1:A:933:VAL:HG22	1:A:1029:ALA:HA	0.64	1.70	9	7
1:A:980:THR:HG23	1:A:1042:ALA:HB2	0.64	1.68	15	1
1:A:1041:GLN:HA	1:A:1044:LEU:HD21	0.63	1.69	7	16
1:A:929:VAL:CG2	1:A:965:LEU:HD11	0.63	2.24	10	1
1:A:994:ASP:CG	1:A:1028:LEU:HD21	0.63	2.13	23	4
1:A:932:LEU:HD22	1:A:962:LEU:HD13	0.63	1.70	13	1
1:A:980:THR:HG21	1:A:1042:ALA:CB	0.63	2.24	1	12
1:A:962:LEU:HD23	1:A:991:LEU:HD21	0.63	1.69	2	6
1:A:980:THR:CG2	1:A:1042:ALA:HB1	0.62	2.24	19	6
1:A:994:ASP:HB3	1:A:1028:LEU:HD21	0.62	1.71	19	18
1:A:994:ASP:HB3	1:A:1028:LEU:HD11	0.62	1.67	23	3
1:A:952:VAL:HG23	1:A:1006:GLN:HG3	0.62	1.71	1	2
1:A:926:TYR:CD1	1:A:1036:LEU:CD1	0.62	2.77	9	5
1:A:998:LEU:HD13	1:A:1028:LEU:HD11	0.62	1.70	1	3
1:A:925:VAL:HG22	1:A:968:THR:CG2	0.62	2.23	1	2
1:A:1008:TYR:CE1	1:A:1017:TYR:OH	0.62	2.53	14	7
1:A:929:VAL:HG22	1:A:965:LEU:CD2	0.62	2.23	23	1
1:A:980:THR:HG23	1:A:984:ILE:CD1	0.61	2.24	7	7
1:A:981:HIS:O	1:A:985:GLU:N	0.61	2.25	19	3
1:A:952:VAL:N	1:A:953:PRO:CD	0.61	2.63	11	25
1:A:955:VAL:CG1	1:A:999:ILE:CD1	0.61	2.78	3	5
1:A:962:LEU:CB	1:A:995:LEU:HD22	0.61	2.26	20	5
1:A:1008:TYR:CD2	1:A:1017:TYR:CZ	0.61	2.89	4	7
1:A:980:THR:HG23	1:A:1042:ALA:HB1	0.61	1.71	12	1
1:A:943:ILE:CD1	1:A:951:TYR:CE2	0.61	2.84	23	2
1:A:937:ILE:HD13	1:A:937:ILE:N	0.61	2.10	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:926:TYR:CZ	1:A:1036:LEU:CD2	0.61	2.83	14	10
1:A:965:LEU:CD2	1:A:991:LEU:CD2	0.61	2.79	22	1
1:A:980:THR:OG1	1:A:984:ILE:HD12	0.60	1.95	22	1
1:A:933:VAL:HG12	1:A:1029:ALA:HA	0.60	1.73	21	3
1:A:991:LEU:HD12	1:A:1028:LEU:HD22	0.60	1.73	20	3
1:A:1011:THR:HG23	1:A:1013:LEU:HB2	0.60	1.73	3	2
1:A:922:ASN:O	1:A:926:TYR:CD1	0.60	2.55	11	9
1:A:980:THR:CG2	1:A:1042:ALA:HB2	0.60	2.27	5	13
1:A:926:TYR:CD1	1:A:1036:LEU:CD2	0.60	2.85	17	1
1:A:929:VAL:HG22	1:A:965:LEU:HD12	0.60	1.74	20	3
1:A:955:VAL:HG21	1:A:1002:MET:HG3	0.60	1.73	25	1
1:A:937:ILE:HD11	1:A:1029:ALA:CB	0.59	2.27	11	2
1:A:987:ALA:HB3	1:A:1035:LEU:HD13	0.59	1.74	14	1
1:A:1041:GLN:O	1:A:1044:LEU:CD1	0.59	2.51	18	6
1:A:1013:LEU:HD23	1:A:1013:LEU:N	0.59	2.13	23	2
1:A:1008:TYR:CB	1:A:1017:TYR:CE2	0.59	2.86	22	1
1:A:962:LEU:HD13	1:A:995:LEU:CG	0.59	2.28	7	1
1:A:942:LYS:O	1:A:946:ALA:CB	0.59	2.51	1	24
1:A:998:LEU:CD1	1:A:1028:LEU:HD12	0.59	2.27	18	4
1:A:958:VAL:HG12	1:A:995:LEU:HD21	0.59	1.73	9	1
1:A:955:VAL:HG11	1:A:999:ILE:HA	0.58	1.74	20	1
1:A:962:LEU:HD12	1:A:991:LEU:CD1	0.58	2.28	13	1
1:A:930:THR:O	1:A:934:LYS:N	0.58	2.33	13	9
1:A:1010:MET:C	1:A:1011:THR:HG22	0.58	2.16	13	1
1:A:991:LEU:HD11	1:A:995:LEU:HD12	0.58	1.74	9	1
1:A:932:LEU:C	1:A:932:LEU:CD2	0.58	2.72	11	2
1:A:932:LEU:HD23	1:A:965:LEU:HD13	0.58	1.76	2	2
1:A:939:MET:O	1:A:943:ILE:N	0.58	2.37	9	22
1:A:925:VAL:HG22	1:A:968:THR:O	0.58	1.99	4	3
1:A:962:LEU:HD12	1:A:991:LEU:CG	0.57	2.28	13	1
1:A:958:VAL:HG12	1:A:962:LEU:CD1	0.57	2.29	7	1
1:A:943:ILE:HD13	1:A:1021:MET:SD	0.57	2.39	4	1
1:A:962:LEU:HD11	1:A:991:LEU:CD2	0.57	2.28	15	1
1:A:955:VAL:HG13	1:A:999:ILE:HD13	0.57	1.76	3	6
1:A:1009:VAL:HG13	1:A:1010:MET:H	0.57	1.58	15	1
1:A:980:THR:O	1:A:984:ILE:HD12	0.57	1.99	24	4
1:A:943:ILE:HD11	1:A:951:TYR:CD1	0.57	2.34	9	3
1:A:990:LEU:HD22	1:A:1031:ASP:OD2	0.57	1.99	25	2
1:A:1008:TYR:CE2	1:A:1017:TYR:CE2	0.57	2.93	24	4
1:A:1008:TYR:CD1	1:A:1017:TYR:OH	0.57	2.58	22	2
1:A:951:TYR:CD1	1:A:1002:MET:SD	0.57	2.97	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:976:LEU:HD12	1:A:1042:ALA:CB	0.57	2.29	13	1
1:A:1011:THR:HG23	1:A:1012:SER:H	0.57	1.60	25	3
1:A:998:LEU:HD23	1:A:999:ILE:N	0.57	2.14	25	1
1:A:983:GLU:HB2	1:A:1038:VAL:HG11	0.56	1.76	14	4
1:A:955:VAL:HG21	1:A:1002:MET:CG	0.56	2.29	3	5
1:A:944:GLN:N	1:A:945:PRO:CD	0.56	2.69	4	25
1:A:940:SER:HA	1:A:943:ILE:HD12	0.56	1.76	4	1
1:A:976:LEU:N	1:A:976:LEU:HD22	0.56	2.15	25	8
1:A:955:VAL:HG21	1:A:1002:MET:HG2	0.56	1.78	3	1
1:A:933:VAL:CG1	1:A:1032:ALA:CB	0.56	2.83	20	1
1:A:929:VAL:O	1:A:932:LEU:CD1	0.56	2.53	11	3
1:A:1043:ARG:O	1:A:1047:ILE:HD12	0.56	2.00	8	3
1:A:962:LEU:HD13	1:A:992:ASN:OD1	0.56	2.01	9	1
1:A:943:ILE:HG22	1:A:944:GLN:N	0.56	2.15	1	5
1:A:1007:GLN:O	1:A:1009:VAL:N	0.56	2.38	6	2
1:A:922:ASN:ND2	1:A:1043:ARG:HH22	0.56	1.99	21	1
1:A:1008:TYR:HD1	1:A:1013:LEU:HD23	0.56	1.61	25	1
1:A:995:LEU:HD12	1:A:995:LEU:O	0.55	2.01	18	3
1:A:932:LEU:HD23	1:A:965:LEU:CD1	0.55	2.30	23	2
1:A:976:LEU:CD1	1:A:1043:ARG:N	0.55	2.68	13	3
1:A:969:VAL:HG21	1:A:988:GLN:CD	0.55	2.22	2	1
1:A:1008:TYR:CZ	1:A:1017:TYR:OH	0.55	2.60	24	9
1:A:1010:MET:HE3	1:A:1011:THR:HG23	0.55	1.78	4	1
1:A:1008:TYR:CD1	1:A:1013:LEU:HD11	0.55	2.36	2	1
1:A:995:LEU:HD12	1:A:999:ILE:HG12	0.55	1.77	15	2
1:A:926:TYR:CG	1:A:1036:LEU:HD21	0.55	2.37	22	2
1:A:962:LEU:HD13	1:A:995:LEU:CD1	0.55	2.32	3	5
1:A:1011:THR:HG23	1:A:1013:LEU:H	0.54	1.60	12	4
1:A:1022:LEU:O	1:A:1022:LEU:HD13	0.54	2.01	1	4
1:A:998:LEU:C	1:A:998:LEU:HD22	0.54	2.23	15	1
1:A:998:LEU:C	1:A:998:LEU:HD23	0.54	2.22	25	1
1:A:995:LEU:O	1:A:995:LEU:HD12	0.54	2.02	12	3
1:A:955:VAL:HG11	1:A:1002:MET:CB	0.54	2.32	5	1
1:A:1040:ASP:O	1:A:1044:LEU:CD2	0.54	2.56	5	1
1:A:962:LEU:HD23	1:A:991:LEU:HD11	0.54	1.80	12	1
1:A:962:LEU:CD2	1:A:991:LEU:HD21	0.54	2.32	9	1
1:A:980:THR:O	1:A:984:ILE:CG1	0.54	2.56	24	7
1:A:976:LEU:CB	1:A:980:THR:HG21	0.54	2.31	12	3
1:A:932:LEU:CD2	1:A:932:LEU:C	0.54	2.72	4	1
1:A:955:VAL:HG13	1:A:999:ILE:CD1	0.54	2.33	3	2
1:A:977:PRO:O	1:A:981:HIS:CD2	0.54	2.61	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:958:VAL:HG12	1:A:995:LEU:HD11	0.54	1.78	17	2
1:A:973:LEU:HD21	1:A:984:ILE:HG21	0.54	1.79	3	1
1:A:1011:THR:OG1	1:A:1012:SER:N	0.54	2.40	9	4
1:A:1013:LEU:HD12	1:A:1017:TYR:CD1	0.54	2.38	16	1
1:A:1012:SER:O	1:A:1014:GLN:N	0.54	2.41	17	7
1:A:962:LEU:HB2	1:A:995:LEU:HD11	0.54	1.79	7	1
1:A:939:MET:O	1:A:943:ILE:CG1	0.54	2.56	1	2
1:A:981:HIS:N	1:A:981:HIS:CD2	0.54	2.75	15	1
1:A:962:LEU:C	1:A:962:LEU:CD2	0.54	2.76	21	1
1:A:973:LEU:N	1:A:974:PRO:CD	0.54	2.70	4	25
1:A:1014:GLN:O	1:A:1018:LYS:N	0.54	2.40	10	7
1:A:1000:ASN:O	1:A:1004:LEU:HD23	0.54	2.01	18	1
1:A:1010:MET:O	1:A:1010:MET:CE	0.54	2.55	24	1
1:A:1010:MET:HE3	1:A:1010:MET:O	0.54	2.03	24	1
1:A:978:ALA:O	1:A:979:SER:CB	0.53	2.56	6	7
1:A:926:TYR:CE1	1:A:1036:LEU:CD1	0.53	2.89	13	4
1:A:962:LEU:CD1	1:A:991:LEU:CD2	0.53	2.86	6	1
1:A:1005:ALA:O	1:A:1009:VAL:HG12	0.53	2.03	13	5
1:A:958:VAL:HG13	1:A:995:LEU:HD11	0.53	1.79	19	1
1:A:1010:MET:CE	1:A:1010:MET:O	0.53	2.57	7	2
1:A:962:LEU:CD1	1:A:991:LEU:HD21	0.53	2.32	6	2
1:A:937:ILE:O	1:A:938:GLU:C	0.53	2.47	24	24
1:A:929:VAL:HG21	1:A:1036:LEU:CD1	0.53	2.30	22	1
1:A:998:LEU:C	1:A:998:LEU:HD13	0.53	2.24	19	1
1:A:994:ASP:CB	1:A:1028:LEU:CD2	0.53	2.86	17	7
1:A:1011:THR:HG23	1:A:1012:SER:N	0.53	2.17	6	3
1:A:994:ASP:CB	1:A:1028:LEU:CD1	0.53	2.87	24	2
1:A:951:TYR:CE1	1:A:1002:MET:SD	0.53	3.02	3	1
1:A:922:ASN:O	1:A:926:TYR:CG	0.53	2.61	1	8
1:A:1013:LEU:HD13	1:A:1016:GLU:CB	0.53	2.34	3	3
1:A:1008:TYR:HD1	1:A:1013:LEU:HD11	0.53	1.63	2	1
1:A:1010:MET:CE	1:A:1010:MET:C	0.53	2.77	17	1
1:A:975:VAL:HG12	1:A:976:LEU:CD1	0.52	2.34	5	1
1:A:943:ILE:CG2	1:A:1018:LYS:CD	0.52	2.87	10	1
1:A:1010:MET:O	1:A:1011:THR:CB	0.52	2.57	13	2
1:A:1007:GLN:O	1:A:1010:MET:CG	0.52	2.57	6	2
1:A:962:LEU:HD21	1:A:991:LEU:HG	0.52	1.80	14	1
1:A:999:ILE:O	1:A:1002:MET:CG	0.52	2.58	23	2
1:A:926:TYR:CG	1:A:1036:LEU:HD11	0.52	2.38	25	1
1:A:976:LEU:HD22	1:A:976:LEU:N	0.52	2.20	7	8
1:A:947:PRO:O	1:A:951:TYR:CB	0.52	2.58	5	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:945:PRO:O	1:A:946:ALA:C	0.52	2.47	16	24
1:A:939:MET:O	1:A:942:LYS:N	0.52	2.43	9	17
1:A:943:ILE:CG2	1:A:944:GLN:N	0.52	2.73	2	23
1:A:1042:ALA:O	1:A:1045:LYS:CB	0.52	2.57	20	4
1:A:1035:LEU:HD23	1:A:1036:LEU:N	0.52	2.20	21	1
1:A:1044:LEU:C	1:A:1044:LEU:CD2	0.52	2.78	10	3
1:A:951:TYR:CE1	1:A:955:VAL:HG23	0.52	2.39	21	2
1:A:962:LEU:CD2	1:A:966:LEU:HD13	0.52	2.35	11	1
1:A:972:SER:O	1:A:976:LEU:CD2	0.52	2.58	14	16
1:A:1000:ASN:O	1:A:1004:LEU:CD2	0.52	2.58	18	1
1:A:955:VAL:HG11	1:A:1002:MET:HB2	0.52	1.81	5	1
1:A:1008:TYR:CE2	1:A:1017:TYR:OH	0.52	2.63	7	5
1:A:951:TYR:HE2	1:A:1005:ALA:HB3	0.52	1.64	9	11
1:A:980:THR:OG1	1:A:984:ILE:CD1	0.52	2.58	22	2
1:A:1009:VAL:HG13	1:A:1014:GLN:HG3	0.52	1.81	3	1
1:A:1009:VAL:O	1:A:1010:MET:C	0.51	2.49	25	5
1:A:930:THR:O	1:A:934:LYS:CG	0.51	2.58	12	8
1:A:1005:ALA:O	1:A:1009:VAL:CG2	0.51	2.58	3	1
1:A:1035:LEU:O	1:A:1038:VAL:CG1	0.51	2.59	11	3
1:A:942:LYS:CE	1:A:954:MET:SD	0.51	2.99	19	10
1:A:940:SER:HA	1:A:943:ILE:CG2	0.51	2.35	25	17
1:A:1005:ALA:O	1:A:1009:VAL:CG1	0.51	2.58	11	3
1:A:922:ASN:OD1	1:A:926:TYR:CZ	0.51	2.63	13	1
1:A:926:TYR:HD1	1:A:1036:LEU:HD11	0.51	1.57	1	2
1:A:953:PRO:O	1:A:954:MET:C	0.51	2.49	23	24
1:A:976:LEU:CD1	1:A:976:LEU:N	0.51	2.69	5	1
1:A:965:LEU:HD23	1:A:965:LEU:C	0.51	2.26	2	1
1:A:965:LEU:HD22	1:A:969:VAL:HG23	0.51	1.83	8	1
1:A:965:LEU:O	1:A:969:VAL:CG2	0.51	2.59	6	5
1:A:1010:MET:CE	1:A:1011:THR:OG1	0.51	2.59	2	1
1:A:975:VAL:C	1:A:976:LEU:HD22	0.51	2.26	6	1
1:A:1009:VAL:HG23	1:A:1014:GLN:CG	0.51	2.35	23	1
1:A:1029:ALA:O	1:A:1033:LYS:CG	0.51	2.59	7	1
1:A:1034:ASN:C	1:A:1034:ASN:OD1	0.50	2.50	21	2
1:A:932:LEU:HD12	1:A:936:VAL:HG23	0.50	1.83	7	5
1:A:948:PRO:CB	1:A:1006:GLN:OE1	0.50	2.60	18	3
1:A:1022:LEU:C	1:A:1022:LEU:CD1	0.50	2.79	2	4
1:A:962:LEU:HD13	1:A:965:LEU:HD22	0.50	1.83	15	1
1:A:1022:LEU:CD1	1:A:1022:LEU:C	0.50	2.80	1	2
1:A:1013:LEU:O	1:A:1016:GLU:CB	0.50	2.60	19	6
1:A:1012:SER:C	1:A:1014:GLN:N	0.50	2.63	17	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1036:LEU:O	1:A:1039:ILE:N	0.50	2.45	14	20
1:A:933:VAL:CG2	1:A:1032:ALA:CB	0.50	2.89	11	2
1:A:923:ASP:O	1:A:927:GLU:CG	0.50	2.60	2	5
1:A:962:LEU:O	1:A:966:LEU:CD1	0.50	2.59	23	7
1:A:976:LEU:N	1:A:976:LEU:CD2	0.50	2.75	6	3
1:A:1009:VAL:O	1:A:1011:THR:N	0.50	2.44	13	7
1:A:926:TYR:CD2	1:A:1036:LEU:HD21	0.50	2.41	20	8
1:A:995:LEU:O	1:A:998:LEU:N	0.50	2.45	13	12
1:A:1004:LEU:HD12	1:A:1005:ALA:N	0.50	2.21	15	1
1:A:1007:GLN:O	1:A:1008:TYR:C	0.50	2.49	6	2
1:A:1044:LEU:O	1:A:1047:ILE:N	0.50	2.45	13	4
1:A:932:LEU:HD12	1:A:932:LEU:O	0.50	2.05	17	2
1:A:973:LEU:HD22	1:A:981:HIS:CE1	0.49	2.41	5	1
1:A:951:TYR:CE1	1:A:1002:MET:HG3	0.49	2.41	24	2
1:A:932:LEU:HD12	1:A:933:VAL:N	0.49	2.22	18	2
1:A:987:ALA:HB1	1:A:1035:LEU:CD2	0.49	2.37	1	1
1:A:932:LEU:C	1:A:932:LEU:CD1	0.49	2.73	12	8
1:A:980:THR:HB	1:A:984:ILE:HD12	0.49	1.84	16	1
1:A:1013:LEU:CD2	1:A:1013:LEU:N	0.49	2.76	22	2
1:A:995:LEU:CD1	1:A:995:LEU:C	0.49	2.77	25	4
1:A:952:VAL:CG2	1:A:1006:GLN:OE1	0.49	2.60	22	2
1:A:994:ASP:HB2	1:A:1028:LEU:HD21	0.49	1.83	9	5
1:A:929:VAL:HG13	1:A:1032:ALA:HB1	0.49	1.84	13	1
1:A:984:ILE:CD1	1:A:1039:ILE:CG1	0.49	2.86	9	3
1:A:932:LEU:HD22	1:A:962:LEU:HG	0.49	1.84	7	1
1:A:952:VAL:N	1:A:953:PRO:HD2	0.49	2.23	13	25
1:A:951:TYR:CE2	1:A:1002:MET:CG	0.49	2.96	14	2
1:A:1013:LEU:O	1:A:1014:GLN:C	0.49	2.50	17	13
1:A:922:ASN:OD1	1:A:975:VAL:HG11	0.49	2.07	10	1
1:A:955:VAL:CG1	1:A:956:LYS:N	0.49	2.75	4	1
1:A:939:MET:O	1:A:943:ILE:CB	0.49	2.61	1	2
1:A:1009:VAL:HG13	1:A:1010:MET:N	0.49	2.23	22	4
1:A:1034:ASN:O	1:A:1038:VAL:CG2	0.49	2.61	12	1
1:A:1010:MET:CE	1:A:1011:THR:CG2	0.49	2.89	4	1
1:A:962:LEU:CG	1:A:995:LEU:HD13	0.49	2.37	9	1
1:A:933:VAL:CG2	1:A:1032:ALA:HB3	0.49	2.38	11	5
1:A:932:LEU:CD1	1:A:932:LEU:C	0.49	2.79	22	10
1:A:976:LEU:CD1	1:A:1039:ILE:O	0.49	2.61	19	2
1:A:962:LEU:HB3	1:A:995:LEU:HD22	0.49	1.85	5	1
1:A:928:ASN:O	1:A:932:LEU:HD12	0.49	2.07	4	1
1:A:929:VAL:HG22	1:A:965:LEU:CD1	0.49	2.36	20	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:998:LEU:HD11	1:A:1021:MET:SD	0.49	2.48	24	1
1:A:980:THR:HG21	1:A:1042:ALA:HB2	0.48	1.82	7	2
1:A:922:ASN:OD1	1:A:923:ASP:N	0.48	2.46	11	1
1:A:1030:VAL:O	1:A:1033:LYS:N	0.48	2.46	7	15
1:A:998:LEU:HD13	1:A:998:LEU:C	0.48	2.28	3	1
1:A:980:THR:O	1:A:984:ILE:CD1	0.48	2.61	24	2
1:A:994:ASP:HB3	1:A:1028:LEU:CD2	0.48	2.38	4	15
1:A:935:ALA:O	1:A:936:VAL:C	0.48	2.52	23	22
1:A:962:LEU:HD22	1:A:995:LEU:HD23	0.48	1.78	14	1
1:A:998:LEU:CD1	1:A:1028:LEU:CD1	0.48	2.92	10	1
1:A:984:ILE:O	1:A:988:GLN:CG	0.48	2.61	21	2
1:A:955:VAL:HG22	1:A:999:ILE:HD13	0.48	1.85	4	1
1:A:975:VAL:HG12	1:A:976:LEU:CD2	0.48	2.37	6	1
1:A:1038:VAL:CG1	1:A:1039:ILE:N	0.48	2.76	1	1
1:A:994:ASP:CG	1:A:1028:LEU:CD2	0.48	2.82	2	4
1:A:952:VAL:CG2	1:A:1006:GLN:CD	0.48	2.82	21	1
1:A:978:ALA:O	1:A:981:HIS:N	0.48	2.47	12	3
1:A:981:HIS:O	1:A:982:ARG:C	0.48	2.52	19	7
1:A:981:HIS:O	1:A:985:GLU:HB2	0.48	2.09	20	3
1:A:984:ILE:HD11	1:A:1039:ILE:CD1	0.48	2.38	13	1
1:A:1013:LEU:O	1:A:1016:GLU:N	0.48	2.47	17	11
1:A:976:LEU:HD11	1:A:1039:ILE:O	0.48	2.09	4	1
1:A:962:LEU:HD11	1:A:995:LEU:HD22	0.48	1.85	21	1
1:A:929:VAL:CG2	1:A:965:LEU:HD21	0.48	2.31	23	1
1:A:928:ASN:OD1	1:A:968:THR:HG21	0.48	2.08	5	5
1:A:958:VAL:O	1:A:961:ALA:N	0.48	2.47	13	1
1:A:930:THR:O	1:A:934:LYS:CB	0.47	2.62	12	3
1:A:969:VAL:O	1:A:973:LEU:N	0.47	2.47	7	9
1:A:994:ASP:OD1	1:A:1028:LEU:HD21	0.47	2.09	23	1
1:A:962:LEU:HD12	1:A:991:LEU:HD21	0.47	1.87	13	1
1:A:1004:LEU:O	1:A:1008:TYR:N	0.47	2.47	5	3
1:A:962:LEU:HD23	1:A:991:LEU:CD2	0.47	2.39	11	3
1:A:965:LEU:HD12	1:A:991:LEU:HD23	0.47	1.86	19	1
1:A:975:VAL:HG12	1:A:976:LEU:HD13	0.47	1.85	5	3
1:A:979:SER:N	1:A:981:HIS:NE2	0.47	2.61	1	1
1:A:951:TYR:CE2	1:A:1002:MET:HG2	0.47	2.44	21	1
1:A:1014:GLN:O	1:A:1016:GLU:N	0.47	2.47	25	10
1:A:1012:SER:O	1:A:1012:SER:OG	0.47	2.32	10	1
1:A:925:VAL:HG22	1:A:968:THR:C	0.47	2.29	17	1
1:A:1014:GLN:O	1:A:1015:GLN:C	0.47	2.53	25	13
1:A:1004:LEU:O	1:A:1007:GLN:N	0.47	2.47	1	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:976:LEU:HD11	1:A:1039:ILE:HG23	0.47	1.87	15	4
1:A:1042:ALA:O	1:A:1045:LYS:N	0.47	2.48	8	10
1:A:1010:MET:O	1:A:1011:THR:HG23	0.47	2.09	17	1
1:A:952:VAL:O	1:A:1002:MET:CE	0.47	2.63	6	1
1:A:958:VAL:O	1:A:962:LEU:HD12	0.47	2.10	7	1
1:A:994:ASP:HB3	1:A:1028:LEU:CD1	0.47	2.40	11	5
1:A:978:ALA:HA	1:A:981:HIS:CD2	0.47	2.45	14	3
1:A:953:PRO:O	1:A:956:LYS:N	0.47	2.48	17	11
1:A:929:VAL:HG22	1:A:965:LEU:HD11	0.47	1.86	10	1
1:A:998:LEU:HD23	1:A:998:LEU:C	0.47	2.30	2	1
1:A:951:TYR:CZ	1:A:1002:MET:HG3	0.47	2.45	14	4
1:A:998:LEU:HD13	1:A:999:ILE:N	0.47	2.25	3	2
1:A:977:PRO:C	1:A:979:SER:N	0.47	2.68	12	2
1:A:938:GLU:O	1:A:941:SER:CB	0.47	2.63	25	2
1:A:950:GLU:C	1:A:953:PRO:HD2	0.47	2.30	23	2
1:A:937:ILE:O	1:A:940:SER:N	0.47	2.48	1	1
1:A:940:SER:CA	1:A:943:ILE:HD12	0.46	2.40	4	1
1:A:992:ASN:O	1:A:995:LEU:N	0.46	2.48	25	4
1:A:939:MET:CE	1:A:1021:MET:SD	0.46	3.03	6	1
1:A:962:LEU:CD2	1:A:962:LEU:C	0.46	2.77	11	2
1:A:1034:ASN:OD1	1:A:1035:LEU:N	0.46	2.47	21	2
1:A:922:ASN:CG	1:A:975:VAL:HG11	0.46	2.30	10	1
1:A:1011:THR:HG22	1:A:1012:SER:N	0.46	2.25	2	1
1:A:977:PRO:O	1:A:979:SER:N	0.46	2.48	12	2
1:A:960:LEU:CD1	1:A:960:LEU:C	0.46	2.79	1	1
1:A:926:TYR:CZ	1:A:1036:LEU:HD23	0.46	2.45	17	1
1:A:943:ILE:HD12	1:A:1018:LYS:CE	0.46	2.40	18	1
1:A:983:GLU:O	1:A:987:ALA:N	0.46	2.49	14	4
1:A:925:VAL:CG2	1:A:968:THR:O	0.46	2.63	4	1
1:A:1010:MET:CE	1:A:1011:THR:N	0.46	2.78	15	1
1:A:932:LEU:HD11	1:A:962:LEU:HG	0.46	1.86	25	1
1:A:998:LEU:CD1	1:A:1028:LEU:HD11	0.46	2.41	10	1
1:A:927:GLU:O	1:A:931:GLY:N	0.46	2.48	18	7
1:A:982:ARG:O	1:A:985:GLU:N	0.46	2.49	2	5
1:A:923:ASP:O	1:A:927:GLU:N	0.46	2.49	22	4
1:A:932:LEU:HB3	1:A:961:ALA:HB1	0.46	1.87	5	1
1:A:1002:MET:O	1:A:1005:ALA:N	0.46	2.49	4	1
1:A:977:PRO:O	1:A:978:ALA:C	0.46	2.54	14	2
1:A:955:VAL:HG21	1:A:1002:MET:HB3	0.46	1.88	23	1
1:A:991:LEU:CD1	1:A:995:LEU:HD12	0.46	2.40	9	1
1:A:928:ASN:HB3	1:A:965:LEU:HD12	0.46	1.86	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:991:LEU:O	1:A:995:LEU:N	0.46	2.48	25	3
1:A:1008:TYR:O	1:A:1009:VAL:C	0.46	2.54	6	2
1:A:929:VAL:HG23	1:A:965:LEU:CD1	0.46	2.41	12	1
1:A:1000:ASN:O	1:A:1003:LYS:N	0.46	2.49	9	4
1:A:994:ASP:O	1:A:998:LEU:N	0.46	2.49	1	1
1:A:1028:LEU:O	1:A:1031:ASP:N	0.46	2.49	4	9
1:A:926:TYR:O	1:A:930:THR:HG23	0.46	2.10	4	4
1:A:948:PRO:O	1:A:1006:GLN:NE2	0.46	2.49	17	3
1:A:930:THR:O	1:A:933:VAL:N	0.46	2.49	13	3
1:A:1033:LYS:C	1:A:1035:LEU:N	0.46	2.69	12	5
1:A:1041:GLN:O	1:A:1044:LEU:HD13	0.46	2.11	10	1
1:A:1033:LYS:O	1:A:1035:LEU:N	0.46	2.49	12	2
1:A:1022:LEU:HD13	1:A:1022:LEU:O	0.46	2.11	12	1
1:A:1012:SER:O	1:A:1015:GLN:CG	0.46	2.64	6	2
1:A:1022:LEU:O	1:A:1026:HIS:N	0.46	2.48	20	3
1:A:1008:TYR:O	1:A:1013:LEU:CD1	0.46	2.64	18	1
1:A:969:VAL:O	1:A:972:SER:N	0.46	2.49	5	21
1:A:1038:VAL:O	1:A:1042:ALA:HB2	0.46	2.11	19	2
1:A:1011:THR:CG2	1:A:1012:SER:N	0.46	2.79	10	1
1:A:977:PRO:CG	1:A:1042:ALA:O	0.46	2.64	17	3
1:A:991:LEU:CD1	1:A:1028:LEU:HD22	0.46	2.41	20	2
1:A:940:SER:CB	1:A:1018:LYS:NZ	0.46	2.79	8	1
1:A:1044:LEU:C	1:A:1046:MET:N	0.45	2.69	19	12
1:A:1039:ILE:O	1:A:1042:ALA:N	0.45	2.48	25	12
1:A:937:ILE:O	1:A:939:MET:N	0.45	2.49	6	3
1:A:980:THR:HG21	1:A:1042:ALA:HB3	0.45	1.88	18	1
1:A:1017:TYR:O	1:A:1020:GLN:N	0.45	2.49	5	1
1:A:950:GLU:O	1:A:954:MET:SD	0.45	2.75	23	5
1:A:922:ASN:OD1	1:A:922:ASN:N	0.45	2.50	25	1
1:A:1001:LYS:HA	1:A:1004:LEU:HD12	0.45	1.88	3	2
1:A:962:LEU:O	1:A:965:LEU:N	0.45	2.49	14	1
1:A:973:LEU:CD2	1:A:981:HIS:CD2	0.45	2.96	22	2
1:A:987:ALA:CB	1:A:1035:LEU:HD13	0.45	2.42	14	1
1:A:959:GLY:HA2	1:A:962:LEU:HD12	0.45	1.88	11	2
1:A:962:LEU:HD22	1:A:995:LEU:HB2	0.45	1.88	18	1
1:A:948:PRO:CA	1:A:1006:GLN:OE1	0.45	2.64	18	2
1:A:951:TYR:CD1	1:A:951:TYR:C	0.45	2.89	7	1
1:A:958:VAL:CG1	1:A:959:GLY:N	0.45	2.80	25	4
1:A:957:GLU:O	1:A:960:LEU:N	0.45	2.49	16	4
1:A:981:HIS:CD2	1:A:981:HIS:H	0.45	2.30	15	1
1:A:980:THR:HB	1:A:984:ILE:CD1	0.45	2.41	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:951:TYR:CE1	1:A:955:VAL:CG2	0.45	3.00	21	2
1:A:1004:LEU:HB3	1:A:1008:TYR:CE1	0.45	2.47	10	1
1:A:932:LEU:HD23	1:A:933:VAL:N	0.45	2.27	25	2
1:A:978:ALA:O	1:A:1045:LYS:NZ	0.45	2.50	16	1
1:A:942:LYS:NZ	1:A:954:MET:SD	0.45	2.89	19	1
1:A:1011:THR:HG23	1:A:1013:LEU:N	0.45	2.26	6	3
1:A:1011:THR:O	1:A:1013:LEU:CD2	0.45	2.65	17	1
1:A:928:ASN:O	1:A:932:LEU:N	0.45	2.47	14	1
1:A:930:THR:O	1:A:931:GLY:C	0.45	2.55	1	10
1:A:966:LEU:HD13	1:A:988:GLN:OE1	0.45	2.12	4	1
1:A:944:GLN:NE2	1:A:1014:GLN:OE1	0.45	2.49	4	1
1:A:951:TYR:CZ	1:A:1002:MET:HG2	0.45	2.47	4	1
1:A:1008:TYR:HB3	1:A:1017:TYR:CD1	0.45	2.47	3	2
1:A:922:ASN:OD1	1:A:926:TYR:CE1	0.45	2.70	13	1
1:A:1044:LEU:O	1:A:1046:MET:N	0.45	2.50	8	9
1:A:972:SER:O	1:A:973:LEU:C	0.45	2.56	8	7
1:A:935:ALA:O	1:A:939:MET:CG	0.45	2.65	1	1
1:A:944:GLN:N	1:A:945:PRO:HD2	0.45	2.27	4	5
1:A:958:VAL:CG1	1:A:962:LEU:CD1	0.45	2.95	10	1
1:A:999:ILE:O	1:A:1003:LYS:N	0.45	2.48	10	1
1:A:980:THR:CA	1:A:984:ILE:HD13	0.45	2.42	3	1
1:A:922:ASN:OD1	1:A:926:TYR:CE2	0.45	2.70	13	1
1:A:1018:LYS:NZ	1:A:1018:LYS:O	0.45	2.49	13	1
1:A:1011:THR:CG2	1:A:1013:LEU:HG	0.45	2.41	24	1
1:A:1038:VAL:O	1:A:1042:ALA:N	0.44	2.50	12	1
1:A:923:ASP:OD1	1:A:924:LYS:N	0.44	2.50	18	1
1:A:1002:MET:SD	1:A:1003:LYS:N	0.44	2.89	20	1
1:A:1042:ALA:O	1:A:1043:ARG:C	0.44	2.55	5	7
1:A:977:PRO:O	1:A:980:THR:OG1	0.44	2.31	12	2
1:A:1002:MET:C	1:A:1004:LEU:N	0.44	2.71	20	3
1:A:952:VAL:CG2	1:A:1006:GLN:NE2	0.44	2.80	21	1
1:A:980:THR:O	1:A:984:ILE:N	0.44	2.41	22	2
1:A:973:LEU:CD2	1:A:984:ILE:HG21	0.44	2.42	3	1
1:A:933:VAL:HG12	1:A:934:LYS:N	0.44	2.26	1	2
1:A:962:LEU:C	1:A:962:LEU:HD13	0.44	2.33	11	1
1:A:967:ALA:O	1:A:970:ASP:N	0.44	2.51	19	2
1:A:939:MET:O	1:A:943:ILE:HB	0.44	2.13	22	6
1:A:1008:TYR:CB	1:A:1017:TYR:CD2	0.44	3.00	18	2
1:A:1022:LEU:O	1:A:1025:ALA:HB3	0.44	2.11	16	3
1:A:936:VAL:HG21	1:A:1028:LEU:CD1	0.44	2.42	16	1
1:A:1008:TYR:O	1:A:1014:GLN:N	0.44	2.51	20	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1001:LYS:O	1:A:1004:LEU:N	0.44	2.49	19	1
1:A:962:LEU:O	1:A:966:LEU:HD13	0.44	2.13	7	2
1:A:980:THR:C	1:A:982:ARG:N	0.44	2.69	20	3
1:A:933:VAL:O	1:A:936:VAL:N	0.44	2.50	1	2
1:A:1010:MET:O	1:A:1011:THR:OG1	0.44	2.31	24	1
1:A:1013:LEU:HD11	1:A:1016:GLU:OE1	0.44	2.12	25	1
1:A:1008:TYR:CG	1:A:1017:TYR:OH	0.44	2.68	17	1
1:A:1021:MET:SD	1:A:1022:LEU:N	0.44	2.91	2	2
1:A:1007:GLN:O	1:A:1010:MET:HG2	0.44	2.12	6	1
1:A:1007:GLN:C	1:A:1009:VAL:N	0.44	2.71	7	2
1:A:1024:ALA:C	1:A:1026:HIS:N	0.44	2.70	21	1
1:A:1027:ALA:O	1:A:1031:ASP:N	0.44	2.46	7	1
1:A:935:ALA:O	1:A:939:MET:N	0.44	2.45	1	1
1:A:940:SER:CB	1:A:1022:LEU:CD2	0.44	2.95	5	1
1:A:932:LEU:CD2	1:A:965:LEU:HD13	0.44	2.42	2	2
1:A:959:GLY:HA2	1:A:995:LEU:HD12	0.44	1.90	1	1
1:A:955:VAL:HG21	1:A:1002:MET:SD	0.44	2.53	19	1
1:A:980:THR:CB	1:A:1038:VAL:HG12	0.44	2.42	10	1
1:A:925:VAL:O	1:A:929:VAL:CG2	0.44	2.59	4	2
1:A:931:GLY:O	1:A:932:LEU:C	0.44	2.56	17	1
1:A:926:TYR:CE1	1:A:1036:LEU:CG	0.44	3.01	13	1
1:A:929:VAL:HA	1:A:965:LEU:HD11	0.44	1.89	4	1
1:A:932:LEU:O	1:A:935:ALA:N	0.44	2.51	21	1
1:A:1018:LYS:O	1:A:1021:MET:CG	0.44	2.66	22	3
1:A:952:VAL:CG2	1:A:1006:GLN:CG	0.44	2.95	7	1
1:A:962:LEU:HD22	1:A:966:LEU:HD13	0.44	1.90	11	1
1:A:943:ILE:O	1:A:944:GLN:C	0.44	2.56	1	1
1:A:990:LEU:HD22	1:A:1031:ASP:OD1	0.43	2.13	22	2
1:A:980:THR:O	1:A:984:ILE:HB	0.43	2.12	3	9
1:A:951:TYR:CE2	1:A:1002:MET:HG3	0.43	2.48	17	1
1:A:972:SER:OG	1:A:976:LEU:HD23	0.43	2.13	16	1
1:A:1008:TYR:HB3	1:A:1017:TYR:CE1	0.43	2.48	3	1
1:A:951:TYR:CZ	1:A:1002:MET:HB2	0.43	2.48	22	2
1:A:1031:ASP:O	1:A:1034:ASN:CG	0.43	2.57	21	1
1:A:1039:ILE:O	1:A:1042:ALA:HB3	0.43	2.13	24	2
1:A:995:LEU:O	1:A:996:ALA:C	0.43	2.56	23	3
1:A:962:LEU:HD22	1:A:991:LEU:HG	0.43	1.89	2	1
1:A:955:VAL:C	1:A:957:GLU:N	0.43	2.70	22	4
1:A:1004:LEU:O	1:A:1005:ALA:C	0.43	2.57	22	2
1:A:962:LEU:HD12	1:A:991:LEU:CD2	0.43	2.43	24	2
1:A:994:ASP:HB2	1:A:1028:LEU:CD2	0.43	2.43	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1006:GLN:O	1:A:1009:VAL:CG1	0.43	2.61	20	3
1:A:940:SER:HB2	1:A:1022:LEU:CD2	0.43	2.44	5	1
1:A:971:GLU:C	1:A:974:PRO:HD2	0.43	2.34	3	2
1:A:932:LEU:CD2	1:A:962:LEU:HD13	0.43	2.39	13	1
1:A:1028:LEU:O	1:A:1029:ALA:C	0.43	2.57	17	19
1:A:995:LEU:O	1:A:999:ILE:HD12	0.43	2.13	10	1
1:A:1013:LEU:HD12	1:A:1017:TYR:HD1	0.43	1.74	21	1
1:A:1036:LEU:O	1:A:1037:ASP:C	0.43	2.56	1	3
1:A:962:LEU:HD11	1:A:991:LEU:HG	0.43	1.91	16	2
1:A:955:VAL:O	1:A:958:VAL:N	0.43	2.51	22	2
1:A:932:LEU:CD1	1:A:936:VAL:HG23	0.43	2.43	7	2
1:A:987:ALA:HB3	1:A:1035:LEU:CD2	0.43	2.43	12	1
1:A:1010:MET:O	1:A:1010:MET:HE1	0.43	2.13	17	1
1:A:973:LEU:HD21	1:A:984:ILE:CG2	0.43	2.44	3	1
1:A:973:LEU:N	1:A:974:PRO:HD2	0.43	2.29	4	11
1:A:952:VAL:HG23	1:A:1006:GLN:CG	0.43	2.44	24	1
1:A:1002:MET:C	1:A:1002:MET:SD	0.43	2.97	19	4
1:A:998:LEU:O	1:A:1002:MET:N	0.43	2.47	19	1
1:A:962:LEU:CD2	1:A:991:LEU:HD11	0.43	2.42	10	1
1:A:1014:GLN:C	1:A:1016:GLU:N	0.43	2.72	20	6
1:A:943:ILE:CD1	1:A:951:TYR:CE1	0.43	2.88	9	1
1:A:1039:ILE:O	1:A:1043:ARG:N	0.42	2.48	10	1
1:A:929:VAL:HG23	1:A:965:LEU:HD11	0.42	1.90	10	1
1:A:980:THR:CB	1:A:1038:VAL:HG22	0.42	2.44	2	1
1:A:1010:MET:O	1:A:1011:THR:C	0.42	2.57	15	1
1:A:1012:SER:O	1:A:1013:LEU:C	0.42	2.58	6	4
1:A:980:THR:O	1:A:980:THR:OG1	0.42	2.35	9	2
1:A:1010:MET:O	1:A:1011:THR:HB	0.42	2.14	8	2
1:A:933:VAL:HG21	1:A:1032:ALA:HB3	0.42	1.91	9	1
1:A:940:SER:OG	1:A:1022:LEU:HD23	0.42	2.14	4	1
1:A:955:VAL:O	1:A:958:VAL:HG12	0.42	2.14	21	1
1:A:978:ALA:O	1:A:979:SER:C	0.42	2.58	8	1
1:A:952:VAL:CG2	1:A:1006:GLN:HG3	0.42	2.44	7	1
1:A:962:LEU:CD2	1:A:991:LEU:CG	0.42	2.97	2	1
1:A:958:VAL:O	1:A:961:ALA:HB3	0.42	2.15	24	1
1:A:998:LEU:O	1:A:998:LEU:HD13	0.42	2.14	5	1
1:A:1024:ALA:O	1:A:1028:LEU:N	0.42	2.46	19	1
1:A:1009:VAL:C	1:A:1011:THR:N	0.42	2.72	5	5
1:A:939:MET:O	1:A:940:SER:C	0.42	2.58	24	7
1:A:955:VAL:O	1:A:957:GLU:N	0.42	2.52	2	3
1:A:1033:LYS:O	1:A:1034:ASN:C	0.42	2.57	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:943:ILE:HG12	1:A:954:MET:CE	0.42	2.45	8	2
1:A:927:GLU:C	1:A:929:VAL:N	0.42	2.72	25	1
1:A:989:LYS:O	1:A:993:SER:N	0.42	2.51	20	1
1:A:927:GLU:O	1:A:928:ASN:C	0.42	2.58	12	5
1:A:1002:MET:SD	1:A:1002:MET:C	0.42	2.98	16	4
1:A:1000:ASN:O	1:A:1001:LYS:C	0.42	2.58	16	6
1:A:1009:VAL:HG23	1:A:1014:GLN:NE2	0.42	2.30	14	1
1:A:926:TYR:CE2	1:A:1036:LEU:CD2	0.42	2.98	3	2
1:A:994:ASP:HB2	1:A:1028:LEU:CD1	0.42	2.43	24	1
1:A:983:GLU:HG2	1:A:1038:VAL:HG21	0.42	1.92	20	1
1:A:1044:LEU:O	1:A:1045:LYS:C	0.42	2.57	17	6
1:A:932:LEU:O	1:A:932:LEU:HD12	0.42	2.14	12	4
1:A:933:VAL:HG23	1:A:934:LYS:N	0.42	2.30	12	1
1:A:929:VAL:HG12	1:A:930:THR:N	0.42	2.30	11	2
1:A:964:THR:HG22	1:A:968:THR:CG2	0.42	2.43	8	1
1:A:965:LEU:HD12	1:A:991:LEU:CD2	0.42	2.45	11	1
1:A:1002:MET:HG3	1:A:1003:LYS:N	0.42	2.30	19	2
1:A:973:LEU:HA	1:A:973:LEU:HD23	0.42	1.72	14	2
1:A:1005:ALA:O	1:A:1009:VAL:N	0.42	2.53	18	1
1:A:964:THR:O	1:A:965:LEU:C	0.42	2.58	8	2
1:A:1022:LEU:O	1:A:1023:THR:C	0.42	2.58	24	2
1:A:933:VAL:C	1:A:935:ALA:N	0.42	2.71	1	1
1:A:969:VAL:HG21	1:A:988:GLN:NE2	0.41	2.29	2	2
1:A:927:GLU:O	1:A:930:THR:OG1	0.41	2.39	8	4
1:A:973:LEU:HD22	1:A:981:HIS:NE2	0.41	2.29	14	1
1:A:1000:ASN:C	1:A:1002:MET:N	0.41	2.72	3	3
1:A:992:ASN:O	1:A:993:SER:C	0.41	2.59	21	2
1:A:990:LEU:O	1:A:994:ASP:OD1	0.41	2.38	11	1
1:A:950:GLU:O	1:A:954:MET:CB	0.41	2.68	10	1
1:A:955:VAL:O	1:A:956:LYS:C	0.41	2.58	2	9
1:A:924:LYS:O	1:A:928:ASN:OD1	0.41	2.38	16	2
1:A:982:ARG:O	1:A:983:GLU:C	0.41	2.57	8	1
1:A:926:TYR:CZ	1:A:1036:LEU:HD11	0.41	2.49	25	1
1:A:928:ASN:OD1	1:A:961:ALA:O	0.41	2.38	11	1
1:A:965:LEU:HD23	1:A:969:VAL:CG2	0.41	2.45	14	1
1:A:984:ILE:CD1	1:A:1039:ILE:HG13	0.41	2.44	24	2
1:A:1031:ASP:O	1:A:1034:ASN:ND2	0.41	2.54	5	1
1:A:981:HIS:O	1:A:984:ILE:N	0.41	2.53	4	1
1:A:962:LEU:CD2	1:A:991:LEU:HG	0.41	2.44	2	1
1:A:973:LEU:HD23	1:A:973:LEU:HA	0.41	1.72	21	2
1:A:928:ASN:ND2	1:A:968:THR:HG21	0.41	2.30	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1033:LYS:O	1:A:1037:ASP:N	0.41	2.45	12	1
1:A:967:ALA:O	1:A:970:ASP:CB	0.41	2.68	12	1
1:A:926:TYR:CE1	1:A:1036:LEU:HD23	0.41	2.49	17	1
1:A:995:LEU:CD1	1:A:999:ILE:CG1	0.41	2.98	25	1
1:A:959:GLY:O	1:A:963:ARG:CG	0.41	2.68	19	1
1:A:928:ASN:O	1:A:929:VAL:C	0.41	2.59	17	1
1:A:969:VAL:HG11	1:A:988:GLN:OE1	0.41	2.14	21	1
1:A:1038:VAL:O	1:A:1041:GLN:CG	0.41	2.68	23	1
1:A:952:VAL:CG2	1:A:1006:GLN:HG2	0.41	2.46	24	1
1:A:951:TYR:CE2	1:A:1005:ALA:HB3	0.41	2.50	25	1
1:A:955:VAL:HG12	1:A:956:LYS:N	0.41	2.31	4	1
1:A:933:VAL:O	1:A:934:LYS:C	0.41	2.59	22	2
1:A:943:ILE:HG21	1:A:1018:LYS:NZ	0.41	2.30	8	1
1:A:1041:GLN:O	1:A:1041:GLN:OE1	0.41	2.39	5	1
1:A:951:TYR:CZ	1:A:1002:MET:CG	0.41	3.03	2	1
1:A:1019:LYS:O	1:A:1023:THR:OG1	0.41	2.39	21	1
1:A:943:ILE:CD1	1:A:951:TYR:CZ	0.41	3.04	23	1
1:A:1002:MET:O	1:A:1002:MET:SD	0.41	2.79	18	2
1:A:969:VAL:HG11	1:A:988:GLN:CD	0.41	2.36	8	1
1:A:1021:MET:HG3	1:A:1022:LEU:N	0.41	2.30	20	1
1:A:971:GLU:O	1:A:975:VAL:CG2	0.41	2.61	19	1
1:A:1004:LEU:C	1:A:1006:GLN:N	0.41	2.73	20	2
1:A:939:MET:SD	1:A:954:MET:SD	0.41	3.19	12	1
1:A:952:VAL:O	1:A:1002:MET:HE2	0.41	2.15	6	1
1:A:980:THR:O	1:A:984:ILE:CB	0.41	2.69	16	1
1:A:1010:MET:O	1:A:1010:MET:SD	0.41	2.79	16	1
1:A:977:PRO:O	1:A:978:ALA:O	0.41	2.38	3	1
1:A:1028:LEU:O	1:A:1031:ASP:OD1	0.41	2.38	7	1
1:A:1027:ALA:O	1:A:1031:ASP:OD2	0.41	2.39	7	1
1:A:1000:ASN:O	1:A:1002:MET:N	0.41	2.54	25	1
1:A:936:VAL:HG12	1:A:1025:ALA:HB1	0.41	1.93	9	1
1:A:957:GLU:O	1:A:958:VAL:C	0.41	2.59	5	1
1:A:1030:VAL:O	1:A:1031:ASP:C	0.41	2.60	2	1
1:A:978:ALA:C	1:A:980:THR:N	0.41	2.74	12	2
1:A:952:VAL:HA	1:A:1002:MET:CE	0.41	2.46	6	1
1:A:1004:LEU:HB3	1:A:1008:TYR:CD2	0.41	2.51	3	1
1:A:955:VAL:CG1	1:A:999:ILE:HD12	0.41	2.46	13	1
1:A:1008:TYR:CD1	1:A:1013:LEU:HD12	0.41	2.51	20	1
1:A:933:VAL:O	1:A:935:ALA:N	0.41	2.54	1	1
1:A:932:LEU:HG	1:A:933:VAL:N	0.40	2.31	12	3
1:A:923:ASP:C	1:A:925:VAL:N	0.40	2.74	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1044:LEU:HA	1:A:1047:ILE:CG1	0.40	2.46	13	1
1:A:982:ARG:O	1:A:986:MET:N	0.40	2.50	25	1
1:A:1041:GLN:HA	1:A:1044:LEU:CD2	0.40	2.46	2	1
1:A:978:ALA:HB1	1:A:981:HIS:CE1	0.40	2.52	21	1
1:A:948:PRO:O	1:A:1006:GLN:OE1	0.40	2.39	8	1
1:A:1011:THR:O	1:A:1012:SER:HB3	0.40	2.16	24	1
1:A:932:LEU:CD2	1:A:965:LEU:HD22	0.40	2.46	10	1
1:A:1011:THR:O	1:A:1012:SER:HB2	0.40	2.16	10	1
1:A:943:ILE:O	1:A:946:ALA:N	0.40	2.55	4	1
1:A:948:PRO:HA	1:A:1006:GLN:OE1	0.40	2.16	8	1
1:A:1009:VAL:O	1:A:1011:THR:O	0.40	2.38	19	1
1:A:1014:GLN:OE1	1:A:1015:GLN:N	0.40	2.54	2	1
1:A:951:TYR:CE1	1:A:1002:MET:HB2	0.40	2.52	23	1
1:A:1010:MET:SD	1:A:1010:MET:O	0.40	2.80	18	1
1:A:962:LEU:HD13	1:A:995:LEU:HD11	0.40	1.92	7	1
1:A:980:THR:O	1:A:981:HIS:O	0.40	2.40	9	1
1:A:1021:MET:SD	1:A:1021:MET:C	0.40	3.00	2	1
1:A:978:ALA:O	1:A:980:THR:N	0.40	2.54	8	1
1:A:932:LEU:CD1	1:A:936:VAL:CG2	0.40	2.99	7	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	126/139 (91%)	93±4 (74±3%)	30±4 (23±3%)	4±1 (3±1%)	9	42
All	All	3150/3475 (91%)	2317 (74%)	738 (23%)	95 (3%)	9	42

All 23 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	1012	SER	14
1	A	1011	THR	8
1	A	1014	GLN	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	978	ALA	7
1	A	953	PRO	7
1	A	1010	MET	7
1	A	979	SER	6
1	A	1047	ILE	6
1	A	1015	GLN	5
1	A	982	ARG	5
1	A	981	HIS	4
1	A	993	SER	3
1	A	939	MET	3
1	A	1013	LEU	2
1	A	945	PRO	2
1	A	1008	TYR	2
1	A	1009	VAL	1
1	A	931	GLY	1
1	A	954	MET	1
1	A	1045	LYS	1
1	A	1034	ASN	1
1	A	936	VAL	1
1	A	938	GLU	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	110/122 (90%)	71±4 (65±4%)	39±4 (35±4%)	1	10
All	All	2750/3050 (90%)	1785 (65%)	965 (35%)	1	10

All 86 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	938	GLU	25
1	A	960	LEU	25
1	A	973	LEU	25
1	A	942	LYS	25
1	A	932	LEU	25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	990	LEU	25
1	A	995	LEU	24
1	A	1036	LEU	24
1	A	1010	MET	24
1	A	943	ILE	24
1	A	950	GLU	23
1	A	972	SER	21
1	A	957	GLU	21
1	A	944	GLN	20
1	A	1019	LYS	19
1	A	993	SER	19
1	A	985	GLU	19
1	A	963	ARG	19
1	A	954	MET	18
1	A	1018	LYS	18
1	A	1013	LEU	18
1	A	956	LYS	17
1	A	976	LEU	16
1	A	952	VAL	16
1	A	1002	MET	16
1	A	1040	ASP	14
1	A	989	LYS	14
1	A	965	LEU	14
1	A	1045	LYS	14
1	A	934	LYS	14
1	A	958	VAL	13
1	A	979	SER	13
1	A	923	ASP	13
1	A	941	SER	12
1	A	998	LEU	12
1	A	1033	LYS	12
1	A	1001	LYS	12
1	A	1021	MET	11
1	A	1015	GLN	11
1	A	924	LYS	11
1	A	1012	SER	11
1	A	1014	GLN	11
1	A	1046	MET	10
1	A	986	MET	10
1	A	1007	GLN	10
1	A	982	ARG	10
1	A	1011	THR	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	949	GLU	9
1	A	1006	GLN	9
1	A	994	ASP	9
1	A	962	LEU	9
1	A	1016	GLU	8
1	A	980	THR	8
1	A	1026	HIS	8
1	A	1022	LEU	7
1	A	1028	LEU	7
1	A	1041	GLN	7
1	A	1043	ARG	7
1	A	1003	LYS	7
1	A	933	VAL	6
1	A	928	ASN	5
1	A	936	VAL	5
1	A	997	GLU	5
1	A	992	ASN	5
1	A	1044	LEU	4
1	A	981	HIS	4
1	A	988	GLN	4
1	A	922	ASN	4
1	A	1035	LEU	4
1	A	983	GLU	4
1	A	966	LEU	4
1	A	951	TYR	3
1	A	927	GLU	3
1	A	955	VAL	2
1	A	991	LEU	2
1	A	984	ILE	2
1	A	1038	VAL	2
1	A	1004	LEU	2
1	A	940	SER	2
1	A	1017	TYR	2
1	A	939	MET	2
1	A	1031	ASP	2
1	A	968	THR	2
1	A	926	TYR	1
1	A	930	THR	1
1	A	1008	TYR	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 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

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 31% for the well-defined parts and 30% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: BMRB entry 5266

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_1*

7.1.1 Bookkeeping

The following table shows the results of parsing the chemical shift list and reports the number of nuclei with statistically unusual chemical shifts.

Total number of shifts	520
Number of shifts mapped to atoms	520
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	1

7.1.2 Chemical shift referencing

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction \pm precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	138	-0.90 ± 0.06	Should be applied
$^{13}\text{C}_\beta$	132	0.39 ± 0.05	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	0	—	—
^{15}N	124	1.22 ± 0.15	Should be applied

7.1.3 Completeness of resonance assignments

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 31%, i.e. 478 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1556. 0 out of 30 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	356/618 (58%)	116/246 (47%)	125/252 (50%)	115/120 (96%)
Sidechain	122/892 (14%)	0/518 (0%)	121/341 (35%)	1/33 (3%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Aromatic	0/46 (0%)	0/24 (0%)	0/20 (0%)	0/2 (0%)
Overall	478/1556 (31%)	116/788 (15%)	246/613 (40%)	116/155 (75%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 30%, i.e. 520 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1723. 0 out of 31 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	387/681 (57%)	125/271 (46%)	138/278 (50%)	124/132 (94%)
Sidechain	133/989 (13%)	0/577 (0%)	132/371 (36%)	1/41 (2%)
Aromatic	0/53 (0%)	0/28 (0%)	0/22 (0%)	0/3 (0%)
Overall	520/1723 (30%)	125/876 (14%)	270/671 (40%)	125/176 (71%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

Mol	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	982	ARG	NE	117.84	92.63 – 76.73	20.9

7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots [i](#)

The image below reports *random coil index* values for the protein chains in the structure. The height of each bar gives a probability of a given residue to be disordered, as predicted from the available chemical shifts and the amino acid sequence. A value above 0.2 is an indication of significant predicted disorder. The colour of the bar shows whether the residue is in the well-defined core (black) or in the ill-defined residue ranges (cyan), as described in section 2 on ensemble composition.

Random coil index (RCI) for chain A:

