



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 8, 2026 – 02:06 PM UTC

PDB ID : 1KTM / pdb_00001ktm
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

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

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

MolProbity	:	4-5-2 with Phenix2.0
Percentile statistics	:	20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.49

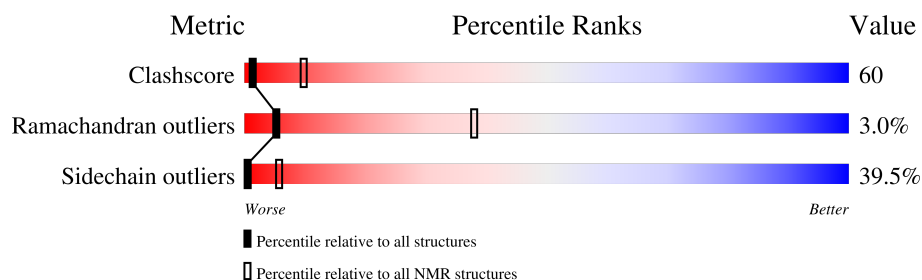
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	229148	14424
Ramachandran outliers	224038	12848
Sidechain outliers	223484	12823

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the experimental data. The red, orange, yellow and green segments indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. A cyan segment indicates the fraction of residues that are not part of the well-defined cores, and a grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions $\leq 5\%$

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	139	

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)	0.66	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 [i](#)

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

- Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1

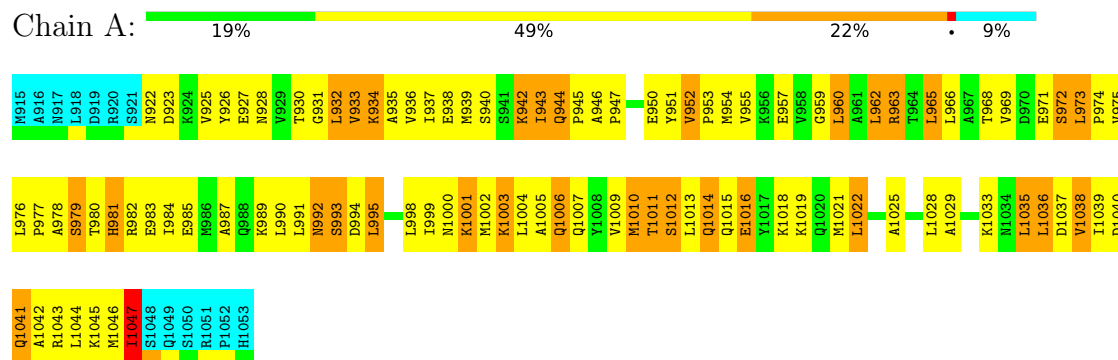


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

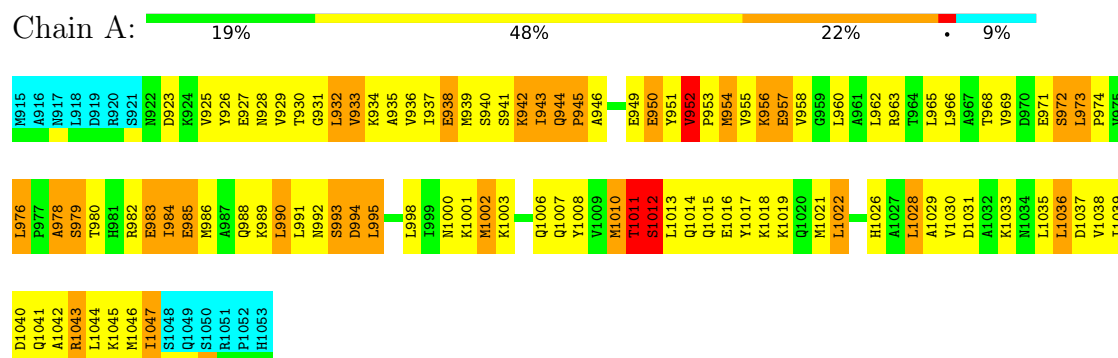
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



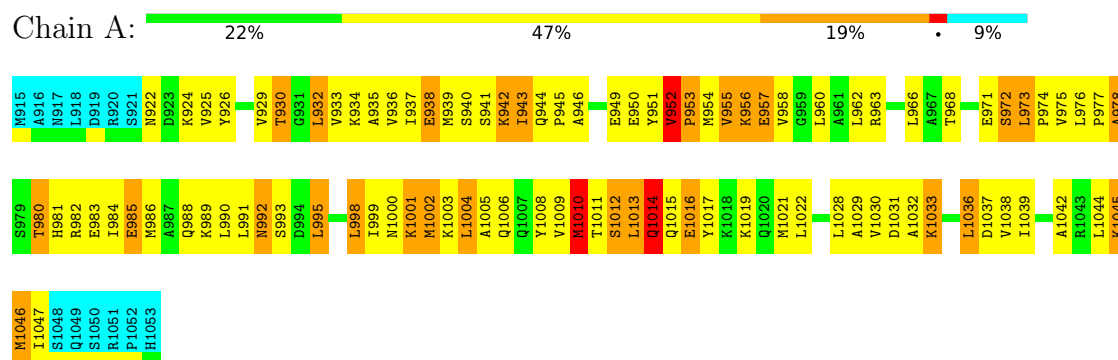
4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



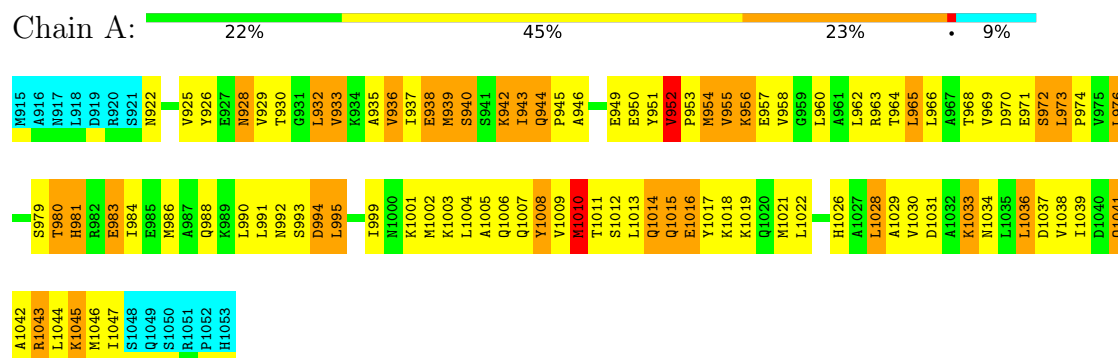
4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



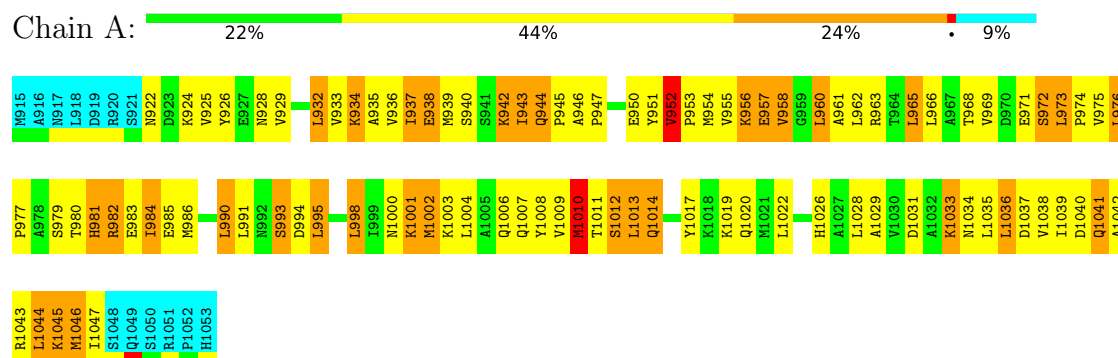
4.2.4 Score per residue for model 4

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



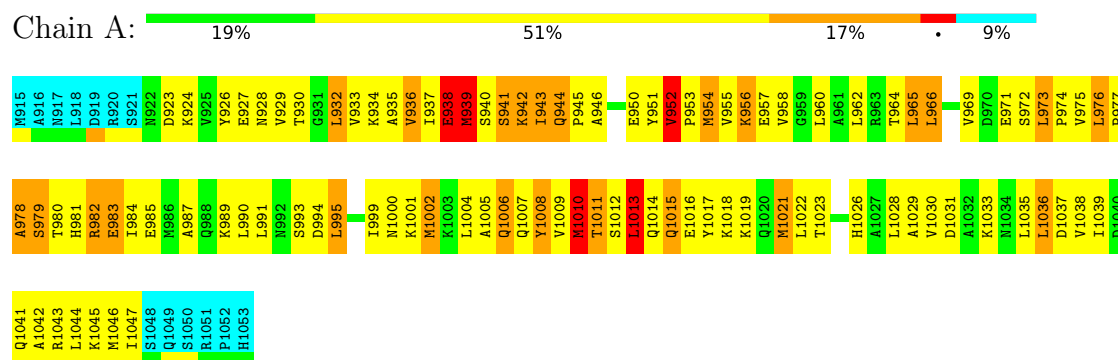
4.2.5 Score per residue for model 5

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



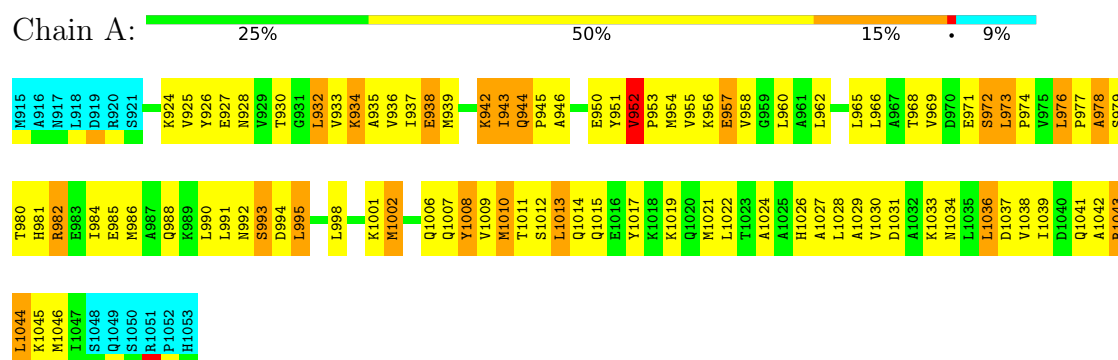
4.2.6 Score per residue for model 6

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



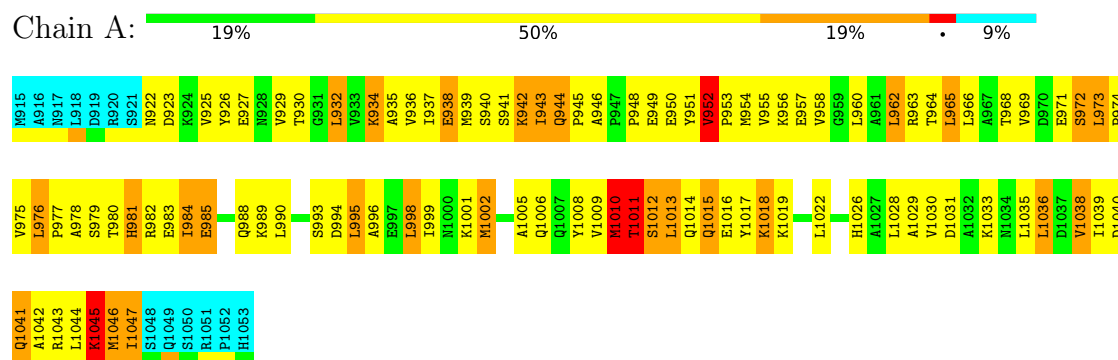
4.2.7 Score per residue for model 7

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



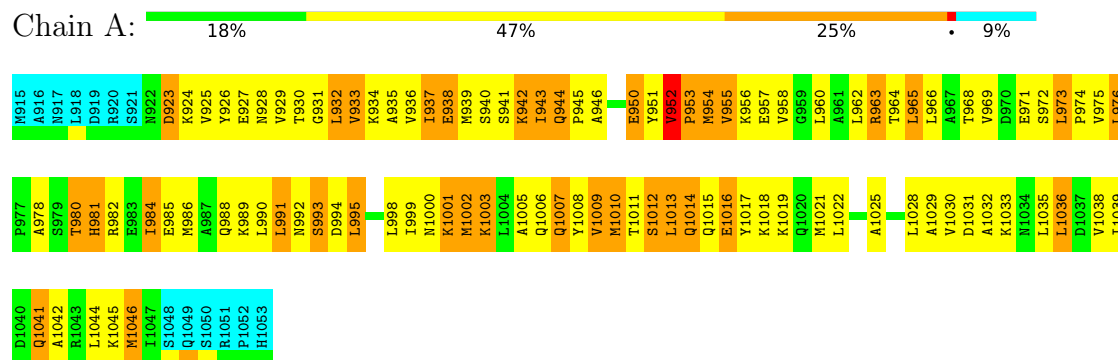
4.2.8 Score per residue for model 8

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



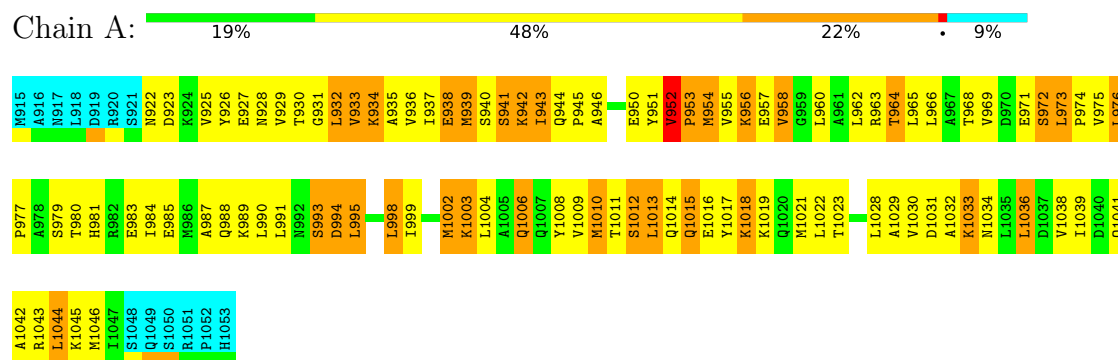
4.2.9 Score per residue for model 9 (medoid)

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



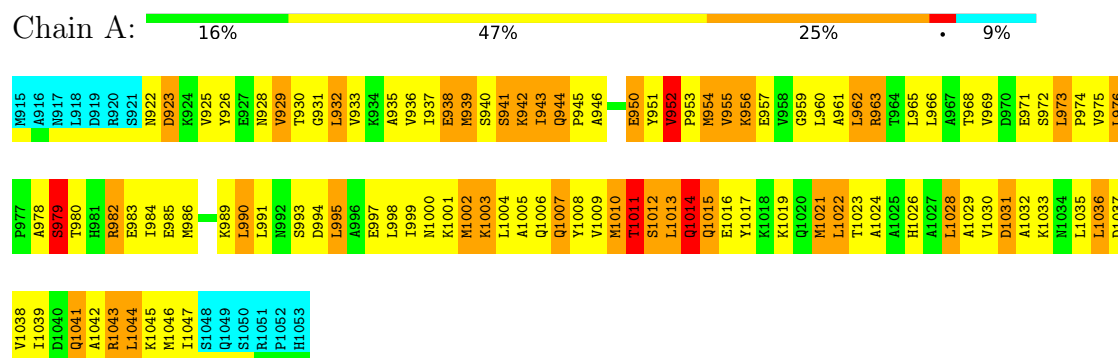
4.2.10 Score per residue for model 10

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



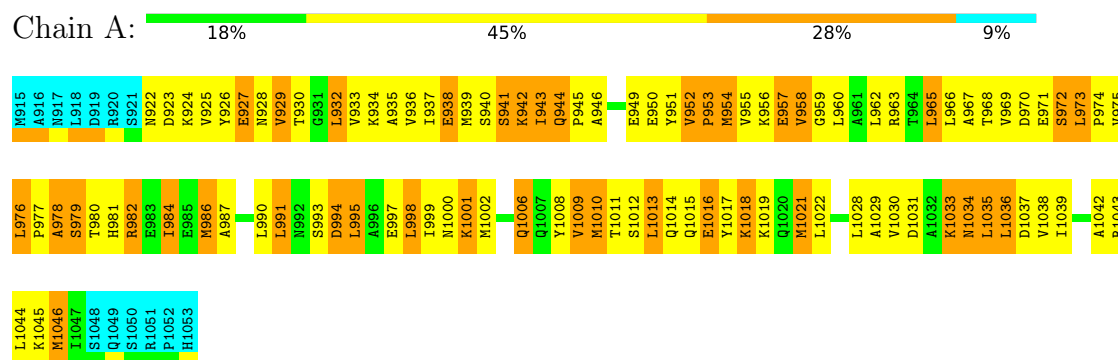
4.2.11 Score per residue for model 11

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



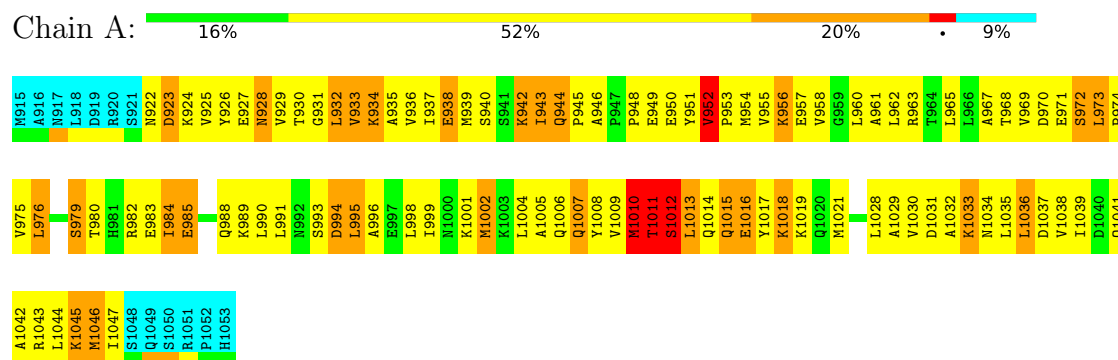
4.2.12 Score per residue for model 12

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



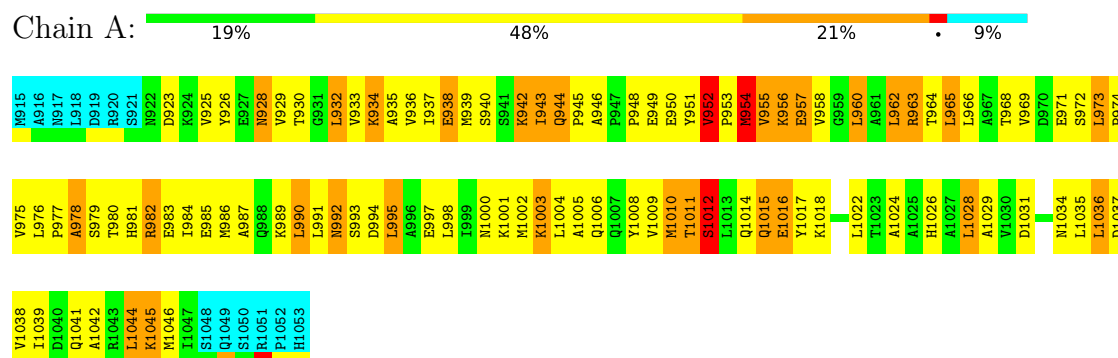
4.2.13 Score per residue for model 13

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



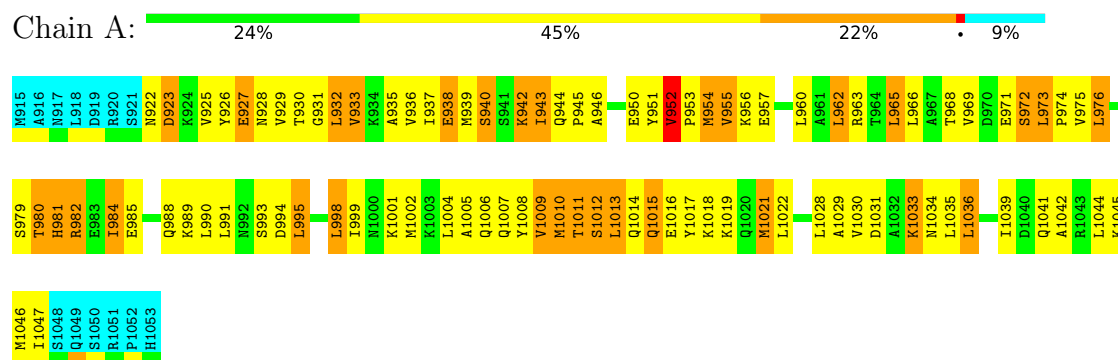
4.2.14 Score per residue for model 14

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



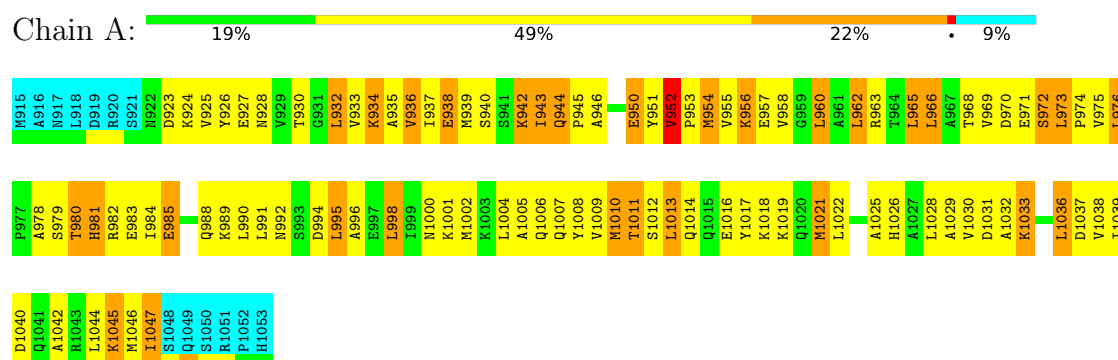
4.2.15 Score per residue for model 15

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



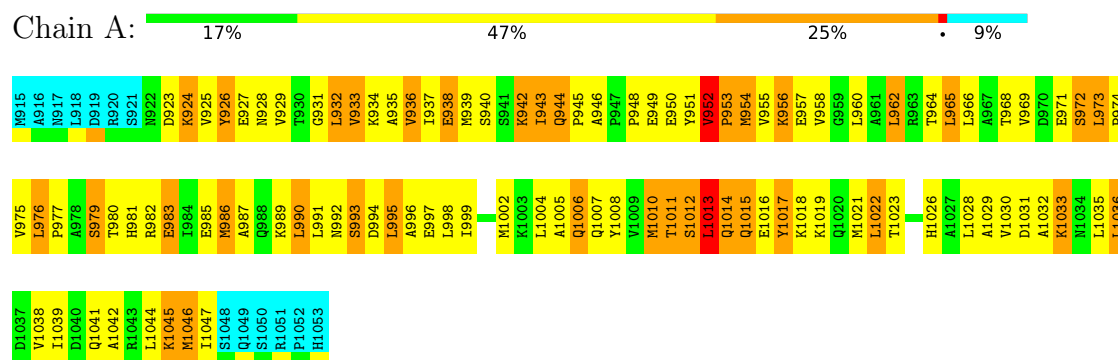
4.2.16 Score per residue for model 16

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



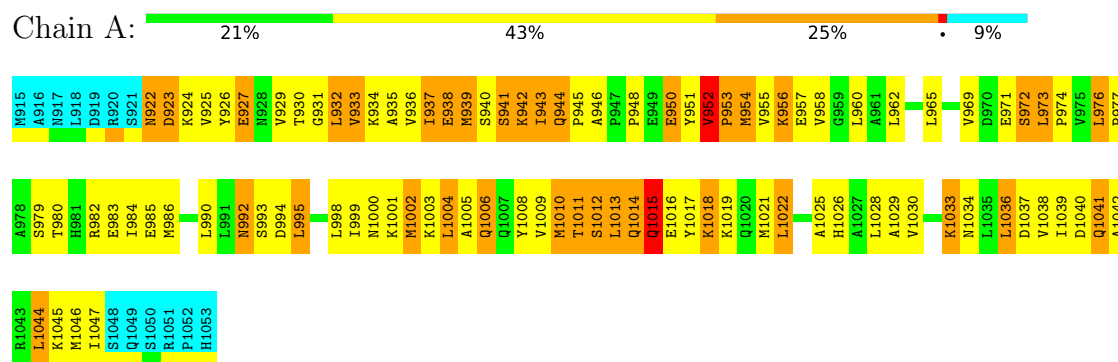
4.2.17 Score per residue for model 17

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



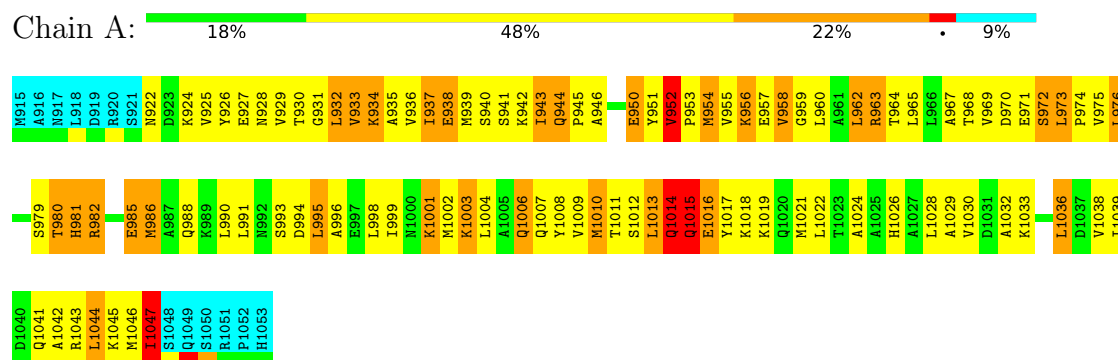
4.2.18 Score per residue for model 18

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



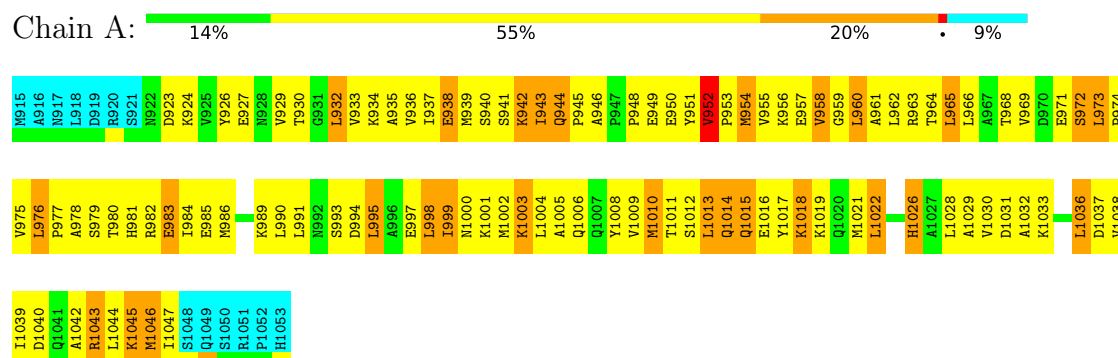
4.2.19 Score per residue for model 19

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



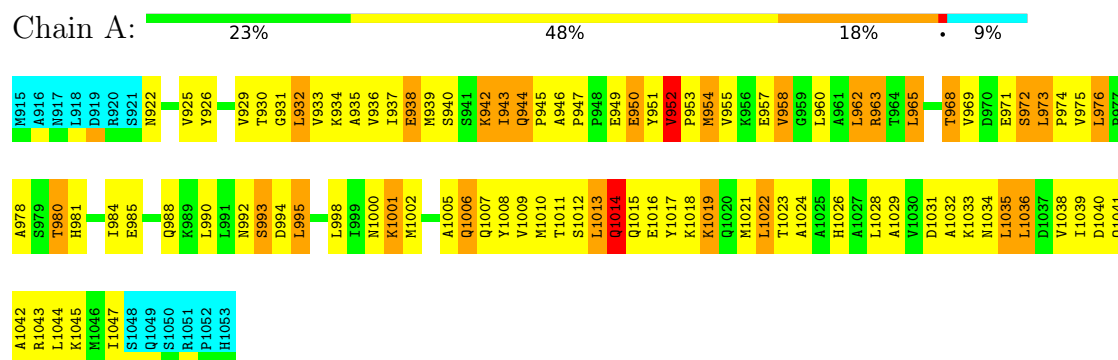
4.2.20 Score per residue for model 20

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



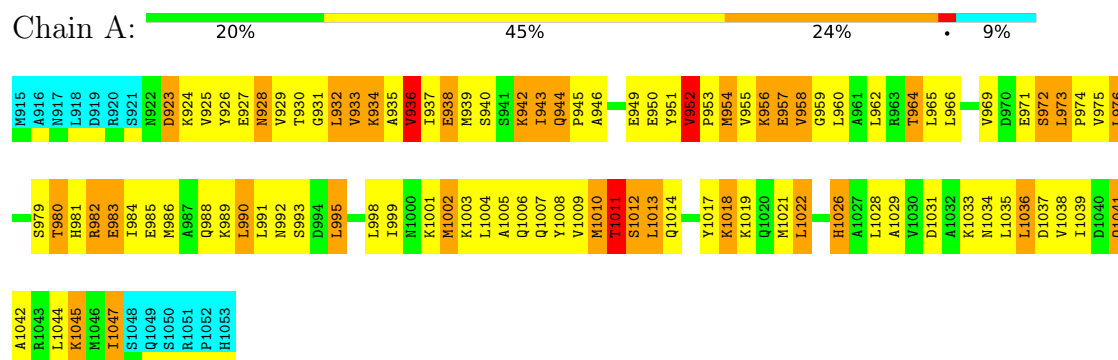
4.2.21 Score per residue for model 21

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



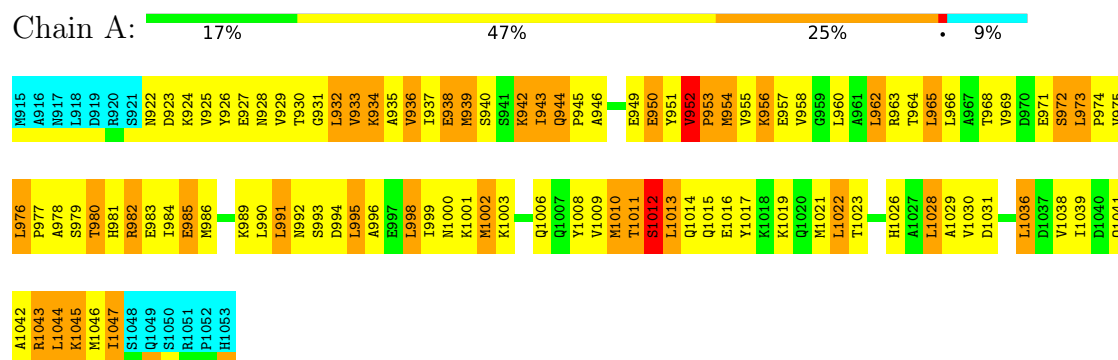
4.2.22 Score per residue for model 22

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



4.2.23 Score per residue for model 23

• Molecule 1: FOCAL ADHESION KINASE 1



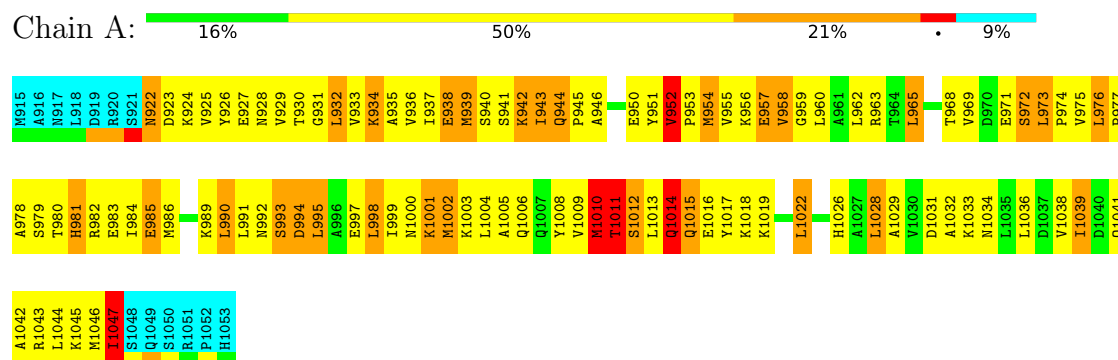
4.2.24 Score per residue for model 24

• 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	

No chemical shift data was provided.

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 5$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the (average) root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	0.62±0.00	0±0/992 (0.0± 0.0%)	1.13±0.01	1±0/1344 (0.1± 0.0%)
All	All	0.62	0/24800 (0.0%)	1.13	23/33600 (0.1%)

There are no bond-length outliers.

All unique angle outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	952	VAL	O-C-N	6.47	124.56	120.42	22	23

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	980	1035	1035	120±9
All	All	24500	25875	25875	3007

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 60.

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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
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:1010:MET:HE3	1:A:1011:THR:HG23	0.94	1.35	18	4
1:A:1005:ALA:O	1:A:1009:VAL:HG23	0.93	1.62	6	2
1:A:1010:MET:HE2	1:A:1010:MET:C	0.92	1.88	17	1
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:HD22	1:A:962:LEU:O	0.91	1.64	21	3
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
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: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:960:LEU:HD12	1:A:960:LEU:O	0.85	1.70	1	1
1:A:980:THR:OG1	1:A:1038:VAL:HG12	0.85	1.69	24	6
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:CD1	1:A:1036:LEU:HD21	0.83	2.08	22	13
1:A:926:TYR:CE1	1:A:1036:LEU:HD21	0.83	2.08	9	21
1:A:932:LEU:C	1:A:932:LEU:HD22	0.83	1.97	4	3
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:932:LEU:C	1:A:932:LEU:HD12	0.81	1.99	12	20
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
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:925:VAL:HG22	1:A:968:THR:HG22	0.79	1.54	7	6
1:A:1010:MET:O	1:A:1010:MET:HE3	0.79	1.78	7	2
1:A:962:LEU:HD22	1:A:962:LEU:C	0.78	2.03	21	3
1:A:983:GLU:CB	1:A:1038:VAL:HG11	0.78	2.09	22	10
1:A:976:LEU:HD12	1:A:1042:ALA:HB3	0.78	1.54	13	4
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:995:LEU:C	1:A:995:LEU:HD12	0.78	2.04	25	8
1:A:1008:TYR:CD1	1:A:1017:TYR:CE1	0.78	2.72	20	8
1:A:932:LEU:HD13	1:A:933:VAL:H	0.78	1.38	4	3
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:980:THR:HG22	1:A:1042:ALA:HB1	0.77	1.56	4	3
1:A:1008:TYR:CD2	1:A:1017:TYR:CE1	0.77	2.73	11	5
1:A:1044:LEU:C	1:A:1044:LEU:HD22	0.77	2.05	10	3
1:A:1009:VAL:HG22	1:A:1014:GLN:CD	0.77	2.05	6	1
1:A:925:VAL:HG21	1:A:972:SER:HB2	0.77	1.55	17	5
1:A:952:VAL:HG23	1:A:1006:GLN:OE1	0.77	1.80	10	1
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: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:939:MET:HE3	1:A:943:ILE:HG13	0.76	1.58	9	1
1:A:1044:LEU:HD12	1:A:1045:LYS:N	0.76	1.96	3	17
1:A:1008:TYR:CE2	1:A:1017:TYR:CZ	0.76	2.74	4	5
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:HD13	1:A:976:LEU:N	0.75	1.97	5	2
1:A:960:LEU:HD12	1:A:960:LEU:C	0.75	2.07	1	1
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:970:ASP:HA	1:A:973:LEU:HD12	0.74	1.58	4	3
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:980:THR:HG23	1:A:984:ILE:HD12	0.74	1.59	5	8
1:A:1010:MET:HE3	1:A:1011:THR:CG2	0.73	2.12	4	5
1:A:1013:LEU:HD12	1:A:1013:LEU:O	0.73	1.84	1	2
1:A:925:VAL:HG11	1:A:972:SER:OG	0.73	1.83	25	2
1:A:952:VAL:HG23	1:A:1006:GLN:NE2	0.73	1.98	17	2
1:A:975:VAL:C	1:A:976:LEU:HD13	0.73	2.07	5	2
1:A:1006:GLN:O	1:A:1009:VAL:HG12	0.72	1.84	20	4
1:A:1022:LEU:C	1:A:1022:LEU:HD13	0.72	2.09	18	14
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:998:LEU:HD21	1:A:1021:MET:HE3	0.71	1.59	12	2
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
1:A:952:VAL:HA	1:A:1002:MET:HE2	0.71	1.62	6	2
1:A:926:TYR:CE1	1:A:1036:LEU:CD2	0.71	2.73	17	7
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:943:ILE:HG12	1:A:954:MET:HE1	0.70	1.63	24	8
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: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:946:ALA:CB	1:A:954:MET:HE1	0.69	2.17	21	5
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:1010:MET:HE2	1:A:1011:THR:HG23	0.68	1.65	1	1
1:A:952:VAL:HG23	1:A:1006:GLN:CD	0.68	2.12	8	4
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
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:994:ASP:CG	1:A:1028:LEU:HD21	0.68	2.13	23	4
1:A:929:VAL:O	1:A:932:LEU:HD13	0.68	1.87	11	3
1:A:952:VAL:HA	1:A:1002:MET:HE1	0.68	1.66	10	1
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:962:LEU:CD1	1:A:995:LEU:HD22	0.66	2.16	2	2
1:A:994:ASP:CB	1:A:1028:LEU:HD21	0.66	2.21	9	13
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
1:A:1010:MET:HE3	1:A:1011:THR:HB	0.65	1.67	20	6
1:A:1011:THR:O	1:A:1012:SER:CB	0.65	2.44	24	9
1:A:1013:LEU:HD23	1:A:1013:LEU:N	0.65	2.06	22	3
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:1008:TYR:CZ	1:A:1017:TYR:CZ	0.65	2.85	6	3
1:A:980:THR:HG23	1:A:1042:ALA:CB	0.65	2.21	15	1
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: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:1010:MET:C	1:A:1011:THR:HG22	0.63	2.16	13	1
1:A:929:VAL:CG2	1:A:965:LEU:HD11	0.63	2.24	10	1
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
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:1002:MET:O	1:A:1002:MET:HE3	0.62	1.95	8	1
1:A:994:ASP:HB3	1:A:1028:LEU:HD11	0.62	1.67	23	3
1:A:926:TYR:CD1	1:A:1036:LEU:CD1	0.62	2.77	9	5
1:A:952:VAL:HG23	1:A:1006:GLN:HG3	0.62	1.71	1	2
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:929:VAL:HG22	1:A:965:LEU:CD2	0.62	2.23	23	1
1:A:932:LEU:C	1:A:932:LEU:CD2	0.61	2.72	11	3
1:A:980:THR:HG23	1:A:984:ILE:CD1	0.61	2.24	7	7
1:A:1002:MET:HE2	1:A:1003:LYS:HA	0.61	1.70	25	3
1:A:981:HIS:O	1:A:985:GLU:N	0.61	2.25	19	3
1:A:1008:TYR:CE1	1:A:1017:TYR:OH	0.61	2.52	23	6
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:1008:TYR:CD2	1:A:1017:TYR:CZ	0.61	2.89	4	7
1:A:962:LEU:CB	1:A:995:LEU:HD22	0.61	2.26	20	5
1:A:943:ILE:CD1	1:A:951:TYR:CE2	0.61	2.84	23	2
1:A:980:THR:HG23	1:A:1042:ALA:HB1	0.61	1.71	12	1
1:A:937:ILE:N	1:A:937:ILE:HD13	0.61	2.10	9	1
1:A:1010:MET:HE3	1:A:1011:THR:HG22	0.61	1.71	25	2
1:A:926:TYR:CZ	1:A:1036:LEU:CD2	0.61	2.83	14	10
1:A:1007:GLN:O	1:A:1010:MET:HE2	0.61	1.94	5	2
1:A:965:LEU:CD2	1:A:991:LEU:CD2	0.61	2.79	22	1
1:A:1010:MET:HE3	1:A:1011:THR:N	0.60	2.12	14	1
1:A:1010:MET:HE2	1:A:1011:THR:N	0.60	2.11	15	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:929:VAL:HG22	1:A:965:LEU:HD12	0.60	1.74	20	3
1:A:926:TYR:CD1	1:A:1036:LEU:CD2	0.60	2.85	17	1
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:969:VAL:HG21	1:A:988:GLN:CD	0.59	2.22	2	1
1:A:987:ALA:HB3	1:A:1035:LEU:HD13	0.59	1.74	14	1
1:A:952:VAL:HA	1:A:1002:MET:HE3	0.59	1.74	7	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:998:LEU:HD22	1:A:998:LEU:C	0.59	2.23	15	1
1:A:1041:GLN:O	1:A:1044:LEU:CD1	0.59	2.51	18	6
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:C	1:A:998:LEU:HD23	0.59	2.22	25	2
1:A:958:VAL:HG12	1:A:995:LEU:HD21	0.59	1.73	9	1
1:A:998:LEU:CD1	1:A:1028:LEU:HD12	0.59	2.27	18	4
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:932:LEU:C	1:A:932:LEU:CD1	0.58	2.77	18	18
1:A:991:LEU:HD11	1:A:995:LEU:HD12	0.58	1.74	9	1
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:937:ILE:O	1:A:938:GLU:C	0.57	2.47	24	24
1:A:958:VAL:HG12	1:A:962:LEU:CD1	0.57	2.29	7	1
1:A:962:LEU:HD12	1:A:991:LEU:CG	0.57	2.28	13	1
1:A:998:LEU:C	1:A:998:LEU:HD13	0.57	2.24	19	2
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:1002:MET:HE2	1:A:1003:LYS:CA	0.57	2.29	11	2
1:A:1002:MET:HE2	1:A:1003:LYS:N	0.57	2.15	11	2
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
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:945:PRO:O	1:A:946:ALA:C	0.56	2.47	16	24
1:A:955:VAL:HG21	1:A:1002:MET:CG	0.56	2.29	3	5
1:A:983:GLU:HB2	1:A:1038:VAL:HG11	0.56	1.76	14	4
1:A:944:GLN:N	1:A:945:PRO:CD	0.56	2.69	4	25
1:A:976:LEU:HD22	1:A:976:LEU:N	0.56	2.15	25	16
1:A:955:VAL:HG21	1:A:1002:MET:HG2	0.56	1.78	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:940:SER:HA	1:A:943:ILE:HD12	0.56	1.76	4	1
1:A:1044:LEU:C	1:A:1044:LEU:CD2	0.56	2.78	10	3
1:A:982:ARG:HB3	1:A:986:MET:HE1	0.56	1.77	12	1
1:A:982:ARG:O	1:A:986:MET:HE3	0.56	2.00	19	1
1:A:933:VAL:CG1	1:A:1032:ALA:CB	0.56	2.83	20	1
1:A:1009:VAL:O	1:A:1010:MET:C	0.56	2.49	25	7
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:1010:MET:HE3	1:A:1011:THR:OG1	0.56	2.00	2	1
1:A:922:ASN:ND2	1:A:1043:ARG:HH22	0.56	1.99	21	1
1:A:953:PRO:O	1:A:954:MET:C	0.56	2.49	23	25
1:A:1008:TYR:HD1	1:A:1013:LEU:HD23	0.56	1.61	25	1
1:A:965:LEU:C	1:A:965:LEU:HD23	0.56	2.26	2	1
1:A:932:LEU:HD23	1:A:965:LEU:CD1	0.55	2.30	23	2
1:A:995:LEU:HD12	1:A:995:LEU:O	0.55	2.01	18	5
1:A:975:VAL:C	1:A:976:LEU:HD22	0.55	2.26	6	2
1:A:976:LEU:CD1	1:A:1043:ARG:N	0.55	2.68	13	3
1:A:1034:ASN:OD1	1:A:1034:ASN:C	0.55	2.50	21	2
1:A:1022:LEU:C	1:A:1022:LEU:CD1	0.55	2.80	1	9
1:A:1008:TYR:CD1	1:A:1013:LEU:HD11	0.55	2.36	2	1
1:A:1008:TYR:CZ	1:A:1017:TYR:OH	0.55	2.60	24	10
1:A:939:MET:HE3	1:A:943:ILE:CG1	0.55	2.31	9	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:1022:LEU:HD13	1:A:1022:LEU:O	0.54	2.01	1	5
1:A:1007:GLN:O	1:A:1008:TYR:C	0.54	2.49	6	2
1:A:1011:THR:HG23	1:A:1013:LEU:H	0.54	1.60	12	4
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:CD2	1:A:991:LEU:HD21	0.54	2.32	9	1
1:A:962:LEU:HD23	1:A:991:LEU:HD11	0.54	1.80	12	1
1:A:998:LEU:HD11	1:A:1021:MET:HE3	0.54	1.78	16	1
1:A:980:THR:O	1:A:984:ILE:CG1	0.54	2.56	24	7
1:A:955:VAL:HG13	1:A:999:ILE:CD1	0.54	2.33	3	2
1:A:976:LEU:CB	1:A:980:THR:HG21	0.54	2.31	12	3
1:A:1012:SER:C	1:A:1014:GLN:N	0.54	2.63	17	9
1:A:982:ARG:HD3	1:A:986:MET:HE1	0.54	1.78	22	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:973:LEU:HD21	1:A:984:ILE:HG21	0.54	1.79	3	1
1:A:958:VAL:HG12	1:A:995:LEU:HD11	0.54	1.78	17	2
1:A:977:PRO:O	1:A:981:HIS:CD2	0.54	2.61	10	1
1:A:1011:THR:OG1	1:A:1012:SER:N	0.54	2.40	9	3
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:1013:LEU:O	1:A:1014:GLN:C	0.54	2.50	17	15
1:A:981:HIS:N	1:A:981:HIS:CD2	0.54	2.75	15	1
1:A:973:LEU:N	1:A:974:PRO:CD	0.54	2.70	4	25
1:A:1010:MET:O	1:A:1010:MET:CE	0.54	2.55	24	3
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: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:962:LEU:CD1	1:A:991:LEU:HD21	0.53	2.32	6	2
1:A:958:VAL:HG13	1:A:995:LEU:HD11	0.53	1.79	19	1
1:A:935:ALA:O	1:A:936:VAL:C	0.53	2.52	23	25
1:A:1010:MET:HE3	1:A:1011:THR:CA	0.53	2.34	14	1
1:A:929:VAL:HG21	1:A:1036:LEU:CD1	0.53	2.30	22	1
1:A:994:ASP:CG	1:A:1028:LEU:CD2	0.53	2.82	2	4
1:A:951:TYR:CE1	1:A:1002:MET:SD	0.53	3.02	3	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:1010:MET:HE2	1:A:1010:MET:O	0.53	2.03	17	1
1:A:952:VAL:CG2	1:A:1006:GLN:CD	0.53	2.82	21	1
1:A:994:ASP:CB	1:A:1028:LEU:CD1	0.53	2.87	24	2
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:981:HIS:O	1:A:982:ARG:C	0.53	2.52	19	9
1:A:1008:TYR:HD1	1:A:1013:LEU:HD11	0.53	1.63	2	1
1:A:975:VAL:HG12	1:A:976:LEU:CD1	0.52	2.34	5	1
1:A:1010:MET:O	1:A:1011:THR:CB	0.52	2.57	13	2
1:A:943:ILE:CG2	1:A:1018:LYS:CD	0.52	2.87	10	1
1:A:1010:MET:HE3	1:A:1010:MET:O	0.52	2.04	18	1
1:A:1007:GLN:O	1:A:1010:MET:CG	0.52	2.57	6	2
1:A:999:ILE:O	1:A:1002:MET:CG	0.52	2.58	23	2
1:A:962:LEU:HD21	1:A:991:LEU:HG	0.52	1.80	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:926:TYR:CG	1:A:1036:LEU:HD11	0.52	2.38	25	1
1:A:947:PRO:O	1:A:951:TYR:CB	0.52	2.58	5	3
1:A:943:ILE:CG2	1:A:944:GLN:N	0.52	2.73	2	23
1:A:939:MET:O	1:A:942:LYS:N	0.52	2.43	9	17
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:1014:GLN:O	1:A:1015:GLN:C	0.52	2.53	25	18
1:A:962:LEU:CD2	1:A:966:LEU:HD13	0.52	2.35	11	1
1:A:951:TYR:CE1	1:A:955:VAL:HG23	0.52	2.39	21	2
1:A:1043:ARG:HG3	1:A:1046:MET:HE3	0.52	1.82	12	1
1:A:972:SER:O	1:A:976:LEU:CD2	0.52	2.58	14	16
1:A:925:VAL:HG22	1:A:968:THR:C	0.52	2.29	17	2
1:A:1000:ASN:O	1:A:1004:LEU:CD2	0.52	2.58	18	1
1:A:951:TYR:HE2	1:A:1005:ALA:HB3	0.52	1.64	9	11
1:A:1009:VAL:HG13	1:A:1014:GLN:HG3	0.52	1.81	3	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	6
1:A:980:THR:OG1	1:A:984:ILE:CD1	0.52	2.58	22	2
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:962:LEU:C	1:A:962:LEU:CD2	0.51	2.76	21	3
1:A:940:SER:HA	1:A:943:ILE:CG2	0.51	2.35	25	17
1:A:942:LYS:CE	1:A:954:MET:SD	0.51	2.99	19	10
1:A:1005:ALA:O	1:A:1009:VAL:CG1	0.51	2.58	11	3
1:A:939:MET:CE	1:A:1021:MET:HE1	0.51	2.35	9	1
1:A:922:ASN:CG	1:A:975:VAL:HG11	0.51	2.30	10	1
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:950:GLU:C	1:A:953:PRO:HD2	0.51	2.30	23	9
1:A:976:LEU:N	1:A:976:LEU:CD1	0.51	2.69	5	1
1:A:960:LEU:C	1:A:960:LEU:CD1	0.51	2.79	1	1
1:A:995:LEU:C	1:A:995:LEU:CD1	0.51	2.77	25	5
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:977:PRO:O	1:A:978:ALA:C	0.51	2.54	14	3
1:A:1010:MET:CE	1:A:1011:THR:OG1	0.51	2.59	2	1
1:A:1008:TYR:O	1:A:1009:VAL:C	0.51	2.54	6	5
1:A:1029:ALA:O	1:A:1033:LYS:CG	0.51	2.59	7	1
1:A:1009:VAL:HG23	1:A:1014:GLN:CG	0.51	2.35	23	1
1:A:952:VAL:O	1:A:1002:MET:HE2	0.50	2.06	21	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1033:LYS:C	1:A:1035:LEU:N	0.50	2.69	12	6
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:962:LEU:HD13	1:A:965:LEU:HD22	0.50	1.83	15	1
1:A:1013:LEU:O	1:A:1016:GLU:CB	0.50	2.60	19	6
1:A:977:PRO:C	1:A:979:SER:N	0.50	2.68	12	3
1:A:1036:LEU:O	1:A:1039:ILE:N	0.50	2.45	14	20
1:A:951:TYR:C	1:A:951:TYR:CD1	0.50	2.89	7	1
1:A:982:ARG:HG2	1:A:986:MET:HE1	0.50	1.84	17	1
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	2
1:A:933:VAL:CG2	1:A:1032:ALA:CB	0.50	2.89	11	2
1:A:995:LEU:O	1:A:998:LEU:N	0.50	2.45	13	12
1:A:926:TYR:CD2	1:A:1036:LEU:HD21	0.50	2.41	20	8
1:A:1009:VAL:O	1:A:1011:THR:N	0.50	2.44	13	7
1:A:1004:LEU:HD12	1:A:1005:ALA:N	0.50	2.21	15	1
1:A:932:LEU:HD12	1:A:932:LEU:O	0.50	2.05	17	6
1:A:1044:LEU:O	1:A:1047:ILE:N	0.50	2.45	13	4
1:A:987:ALA:HB1	1:A:1035:LEU:CD2	0.49	2.37	1	1
1:A:951:TYR:CE1	1:A:1002:MET:HG3	0.49	2.41	24	2
1:A:973:LEU:HD22	1:A:981:HIS:CE1	0.49	2.41	5	1
1:A:932:LEU:HD12	1:A:933:VAL:N	0.49	2.22	18	2
1:A:930:THR:O	1:A:931:GLY:C	0.49	2.55	1	11
1:A:980:THR:HB	1:A:984:ILE:HD12	0.49	1.84	16	1
1:A:972:SER:O	1:A:973:LEU:C	0.49	2.56	8	18
1:A:1013:LEU:N	1:A:1013:LEU:CD2	0.49	2.76	22	2
1:A:1010:MET:O	1:A:1010:MET:HE2	0.49	2.07	24	1
1:A:984:ILE:CD1	1:A:1039:ILE:CG1	0.49	2.86	9	3
1:A:994:ASP:HB2	1:A:1028:LEU:HD21	0.49	1.83	9	5
1:A:932:LEU:HD22	1:A:962:LEU:HG	0.49	1.84	7	1
1:A:952:VAL:CG2	1:A:1006:GLN:OE1	0.49	2.60	22	2
1:A:929:VAL:HG13	1:A:1032:ALA:HB1	0.49	1.84	13	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:1044:LEU:C	1:A:1046:MET:N	0.49	2.69	2	20
1:A:955:VAL:CG1	1:A:956:LYS:N	0.49	2.75	4	1
1:A:922:ASN:OD1	1:A:975:VAL:HG11	0.49	2.07	10	1
1:A:962:LEU:HD13	1:A:962:LEU:C	0.49	2.33	11	1
1:A:939:MET:O	1:A:943:ILE:CB	0.49	2.61	1	2
1:A:1034:ASN:O	1:A:1038:VAL:CG2	0.49	2.61	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1009:VAL:HG13	1:A:1010:MET:N	0.49	2.23	22	4
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:928:ASN:O	1:A:932:LEU:HD12	0.49	2.07	4	1
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:1024:ALA:C	1:A:1026:HIS:N	0.49	2.70	21	5
1:A:977:PRO:O	1:A:980:THR:OG1	0.49	2.31	12	3
1:A:929:VAL:HG22	1:A:965:LEU:CD1	0.49	2.36	20	2
1:A:998:LEU:HD11	1:A:1021:MET:SD	0.49	2.48	24	1
1:A:1042:ALA:O	1:A:1043:ARG:C	0.48	2.56	7	9
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:931:GLY:O	1:A:932:LEU:C	0.48	2.56	17	1
1:A:943:ILE:O	1:A:944:GLN:C	0.48	2.56	1	7
1:A:980:THR:O	1:A:984:ILE:CD1	0.48	2.61	24	2
1:A:980:THR:C	1:A:982:ARG:N	0.48	2.69	20	3
1:A:994:ASP:HB3	1:A:1028:LEU:CD2	0.48	2.38	4	15
1:A:962:LEU:HD22	1:A:995:LEU:HD23	0.48	1.78	14	1
1:A:1038:VAL:CG1	1:A:1039:ILE:N	0.48	2.76	1	1
1:A:955:VAL:HG22	1:A:999:ILE:HD13	0.48	1.85	4	1
1:A:984:ILE:O	1:A:988:GLN:CG	0.48	2.61	21	2
1:A:975:VAL:HG12	1:A:976:LEU:CD2	0.48	2.37	6	1
1:A:998:LEU:CD1	1:A:1028:LEU:CD1	0.48	2.92	10	1
1:A:1031:ASP:O	1:A:1034:ASN:CG	0.48	2.57	21	1
1:A:1004:LEU:O	1:A:1005:ALA:C	0.48	2.57	22	5
1:A:995:LEU:O	1:A:996:ALA:C	0.48	2.56	23	7
1:A:978:ALA:O	1:A:981:HIS:N	0.48	2.47	12	3
1:A:1028:LEU:O	1:A:1029:ALA:C	0.48	2.57	17	24
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:1036:LEU:O	1:A:1037:ASP:C	0.48	2.56	1	16
1:A:976:LEU:HD11	1:A:1039:ILE:O	0.48	2.09	4	1
1:A:1013:LEU:O	1:A:1016:GLU:N	0.48	2.47	17	11
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:976:LEU:CD2	1:A:976:LEU:N	0.47	2.77	11	1
1:A:930:THR:O	1:A:934:LYS:CB	0.47	2.62	12	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:969:VAL:O	1:A:973:LEU:N	0.47	2.47	7	9
1:A:1002:MET:C	1:A:1004:LEU:N	0.47	2.71	20	4
1:A:955:VAL:C	1:A:957:GLU:N	0.47	2.71	2	6
1:A:1002:MET:C	1:A:1002:MET:SD	0.47	2.97	19	9
1:A:962:LEU:HD12	1:A:991:LEU:HD21	0.47	1.87	13	1
1:A:994:ASP:OD1	1:A:1028:LEU:HD21	0.47	2.09	23	1
1:A:962:LEU:HD23	1:A:991:LEU:CD2	0.47	2.39	11	3
1:A:1004:LEU:O	1:A:1008:TYR:N	0.47	2.47	5	3
1:A:979:SER:N	1:A:981:HIS:NE2	0.47	2.61	1	1
1:A:1012:SER:O	1:A:1013:LEU:C	0.47	2.58	6	6
1:A:975:VAL:HG12	1:A:976:LEU:HD13	0.47	1.85	5	3
1:A:1010:MET:O	1:A:1011:THR:C	0.47	2.57	15	1
1:A:965:LEU:HD12	1:A:991:LEU:HD23	0.47	1.86	19	1
1:A:978:ALA:O	1:A:979:SER:C	0.47	2.58	8	1
1:A:951:TYR:CE2	1:A:1002:MET:HG2	0.47	2.44	21	1
1:A:972:SER:C	1:A:976:LEU:HD22	0.47	2.34	21	1
1:A:971:GLU:C	1:A:974:PRO:HD2	0.47	2.34	3	20
1:A:1014:GLN:O	1:A:1016:GLU:N	0.47	2.47	25	10
1:A:1010:MET:HE3	1:A:1011:THR:CB	0.47	2.40	23	3
1:A:1004:LEU:O	1:A:1007:GLN:N	0.47	2.47	1	6
1:A:939:MET:O	1:A:940:SER:C	0.47	2.58	21	17
1:A:1009:VAL:C	1:A:1011:THR:N	0.47	2.72	5	7
1:A:1033:LYS:O	1:A:1034:ASN:C	0.47	2.57	12	8
1:A:1007:GLN:C	1:A:1009:VAL:N	0.47	2.71	6	2
1:A:976:LEU:HD11	1:A:1039:ILE:HG23	0.47	1.87	15	4
1:A:927:GLU:C	1:A:929:VAL:N	0.47	2.72	25	1
1:A:927:GLU:O	1:A:928:ASN:C	0.47	2.58	12	9
1:A:1014:GLN:C	1:A:1016:GLU:N	0.47	2.71	14	14
1:A:1042:ALA:O	1:A:1045:LYS:N	0.47	2.48	8	10
1:A:942:LYS:HE3	1:A:954:MET:HE2	0.47	1.87	5	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:1010:MET:O	1:A:1011:THR:HG23	0.47	2.09	17	1
1:A:1000:ASN:O	1:A:1001:LYS:C	0.47	2.58	16	13
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:937:ILE:O	1:A:940:SER:N	0.47	2.48	1	1
1:A:951:TYR:CZ	1:A:1002:MET:HG3	0.47	2.45	14	4
1:A:1044:LEU:O	1:A:1045:LYS:C	0.47	2.57	17	13
1:A:998:LEU:HD13	1:A:999:ILE:N	0.47	2.25	3	2
1:A:953:PRO:O	1:A:956:LYS:N	0.47	2.48	17	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:938:GLU:O	1:A:941:SER:CB	0.47	2.63	25	2
1:A:952:VAL:CA	1:A:1002:MET:HE2	0.47	2.37	6	1
1:A:929:VAL:HG22	1:A:965:LEU:HD11	0.47	1.86	10	1
1:A:992:ASN:O	1:A:995:LEU:N	0.46	2.48	25	4
1:A:940:SER:CA	1:A:943:ILE:HD12	0.46	2.40	4	1
1:A:939:MET:CE	1:A:1021:MET:SD	0.46	3.03	6	1
1:A:1011:THR:HG22	1:A:1012:SER:N	0.46	2.25	2	1
1:A:1000:ASN:C	1:A:1002:MET:N	0.46	2.72	3	5
1:A:1034:ASN:OD1	1:A:1035:LEU:N	0.46	2.47	21	2
1:A:964:THR:O	1:A:965:LEU:C	0.46	2.58	8	3
1:A:1022:LEU:O	1:A:1023:THR:C	0.46	2.58	24	7
1:A:977:PRO:O	1:A:979:SER:N	0.46	2.48	12	2
1:A:992:ASN:O	1:A:993:SER:C	0.46	2.59	21	9
1:A:952:VAL:HG22	1:A:1002:MET:HE3	0.46	1.86	5	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:933:VAL:C	1:A:935:ALA:N	0.46	2.71	1	2
1:A:982:ARG:O	1:A:983:GLU:C	0.46	2.57	8	6
1:A:925:VAL:CG2	1:A:968:THR:O	0.46	2.63	4	1
1:A:983:GLU:O	1:A:987:ALA:N	0.46	2.49	14	4
1:A:1010:MET:C	1:A:1010:MET:CE	0.46	2.77	17	1
1:A:932:LEU:HD11	1:A:962:LEU:HG	0.46	1.86	25	1
1:A:923:ASP:O	1:A:927:GLU:N	0.46	2.49	22	4
1:A:927:GLU:O	1:A:931:GLY:N	0.46	2.48	18	7
1:A:955:VAL:O	1:A:956:LYS:C	0.46	2.59	20	13
1:A:982:ARG:O	1:A:985:GLU:N	0.46	2.49	2	5
1:A:998:LEU:CD1	1:A:1028:LEU:HD11	0.46	2.41	10	1
1:A:1002:MET:O	1:A:1005:ALA:N	0.46	2.49	4	1
1:A:932:LEU:HB3	1:A:961:ALA:HB1	0.46	1.87	5	1
1:A:991:LEU:CD1	1:A:995:LEU:HD12	0.46	2.40	9	1
1:A:939:MET:HE2	1:A:954:MET:SD	0.46	2.51	10	1
1:A:946:ALA:HB1	1:A:954:MET:HE1	0.46	1.87	21	1
1:A:955:VAL:HG21	1:A:1002:MET:HB3	0.46	1.88	23	1
1:A:994:ASP:O	1:A:998:LEU:N	0.46	2.49	1	1
1:A:928:ASN:O	1:A:929:VAL:C	0.46	2.59	17	4
1:A:928:ASN:HB3	1:A:965:LEU:HD12	0.46	1.86	4	1
1:A:991:LEU:O	1:A:995:LEU:N	0.46	2.48	25	3
1:A:1000:ASN:O	1:A:1003:LYS:N	0.46	2.49	9	4
1:A:929:VAL:HG23	1:A:965:LEU:CD1	0.46	2.41	12	1
1:A:930:THR:O	1:A:933:VAL:N	0.46	2.49	13	3
1:A:933:VAL:O	1:A:934:LYS:C	0.46	2.59	22	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:926:TYR:O	1:A:930:THR:HG23	0.46	2.10	4	4
1:A:1028:LEU:O	1:A:1031:ASP:N	0.46	2.49	4	9
1:A:948:PRO:O	1:A:1006:GLN:NE2	0.46	2.49	17	3
1:A:1010:MET:CE	1:A:1011:THR:CG2	0.46	2.89	4	1
1:A:1012:SER:O	1:A:1015:GLN:CG	0.46	2.64	6	2
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:1008:TYR:O	1:A:1013:LEU:CD1	0.46	2.64	18	1
1:A:1022:LEU:O	1:A:1026:HIS:N	0.46	2.48	20	3
1:A:969:VAL:O	1:A:972:SER:N	0.46	2.49	5	21
1:A:977:PRO:CG	1:A:1042:ALA:O	0.46	2.64	17	3
1:A:940:SER:CB	1:A:1018:LYS:NZ	0.46	2.79	8	1
1:A:969:VAL:HG11	1:A:988:GLN:CD	0.46	2.36	8	1
1:A:991:LEU:CD1	1:A:1028:LEU:HD22	0.46	2.41	20	2
1:A:1038:VAL:O	1:A:1042:ALA:HB2	0.46	2.11	19	2
1:A:1039:ILE:O	1:A:1042:ALA:N	0.45	2.48	25	12
1:A:1004:LEU:C	1:A:1006:GLN:N	0.45	2.73	20	6
1:A:937:ILE:O	1:A:939:MET:N	0.45	2.49	6	3
1:A:1011:THR:CG2	1:A:1012:SER:N	0.45	2.79	10	1
1:A:1010:MET:CE	1:A:1011:THR:N	0.45	2.78	15	1
1:A:980:THR:HG21	1:A:1042:ALA:HB3	0.45	1.88	18	1
1:A:1030:VAL:O	1:A:1031:ASP:C	0.45	2.60	2	12
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:1002:MET:SD	1:A:1002:MET:C	0.45	2.99	3	1
1:A:957:GLU:O	1:A:958:VAL:C	0.45	2.59	5	4
1:A:959:GLY:HA2	1:A:962:LEU:HD12	0.45	1.88	11	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:948:PRO:CA	1:A:1006:GLN:OE1	0.45	2.64	18	2
1:A:962:LEU:HD22	1:A:995:LEU:HB2	0.45	1.88	18	1
1:A:957:GLU:O	1:A:960:LEU:N	0.45	2.49	16	4
1:A:951:TYR:CE1	1:A:955:VAL:CG2	0.45	3.00	21	2
1:A:958:VAL:CG1	1:A:959:GLY:N	0.45	2.80	25	4
1:A:980:THR:HB	1:A:984:ILE:CD1	0.45	2.41	12	1
1:A:981:HIS:CD2	1:A:981:HIS:H	0.45	2.30	15	1
1:A:1004:LEU:HB3	1:A:1008:TYR:CE1	0.45	2.47	10	1
1:A:978:ALA:O	1:A:1045:LYS:NZ	0.45	2.50	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:932:LEU:HD23	1:A:933:VAL:N	0.45	2.27	25	2
1:A:1011:THR:HG23	1:A:1013:LEU:N	0.45	2.26	6	3
1:A:978:ALA:C	1:A:980:THR:N	0.45	2.74	8	3
1:A:951:TYR:HD1	1:A:954:MET:HE2	0.45	1.71	11	2
1:A:1021:MET:HE2	1:A:1021:MET:C	0.45	2.37	11	1
1:A:928:ASN:O	1:A:932:LEU:N	0.45	2.47	14	1
1:A:1011:THR:O	1:A:1013:LEU:CD2	0.45	2.65	17	1
1:A:942:LYS:NZ	1:A:954:MET:SD	0.45	2.89	19	1
1:A:1008:TYR:HB3	1:A:1017:TYR:CD1	0.45	2.47	3	2
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:966:LEU:HD13	1:A:988:GLN:OE1	0.45	2.12	4	1
1:A:922:ASN:OD1	1:A:926:TYR:CE1	0.45	2.70	13	1
1:A:935:ALA:O	1:A:939:MET:CG	0.45	2.65	1	1
1:A:1044:LEU:O	1:A:1046:MET:N	0.45	2.50	8	9
1:A:1021:MET:C	1:A:1021:MET:SD	0.45	3.00	2	3
1:A:923:ASP:C	1:A:925:VAL:N	0.45	2.74	13	1
1:A:939:MET:C	1:A:941:SER:N	0.45	2.75	8	9
1:A:980:THR:CA	1:A:984:ILE:HD13	0.45	2.42	3	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:922:ASN:OD1	1:A:926:TYR:CE2	0.45	2.70	13	1
1:A:1018:LYS:O	1:A:1018:LYS:NZ	0.45	2.49	13	1
1:A:1011:THR:CG2	1:A:1013:LEU:HG	0.45	2.41	24	1
1:A:924:LYS:C	1:A:928:ASN:OD1	0.44	2.60	12	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:933:VAL:HG12	1:A:934:LYS:N	0.44	2.26	1	2
1:A:973:LEU:CD2	1:A:984:ILE:HG21	0.44	2.42	3	1
1:A:980:THR:O	1:A:984:ILE:N	0.44	2.41	22	2
1:A:952:VAL:CG2	1:A:1006:GLN:NE2	0.44	2.80	21	1
1:A:1022:LEU:O	1:A:1025:ALA:HB3	0.44	2.11	16	3
1:A:922:ASN:OD1	1:A:922:ASN:C	0.44	2.61	3	1
1:A:991:LEU:O	1:A:992:ASN:C	0.44	2.60	22	4
1:A:1005:ALA:O	1:A:1006:GLN:C	0.44	2.60	3	4
1:A:939:MET:O	1:A:943:ILE:HB	0.44	2.13	22	6
1:A:1008:TYR:O	1:A:1014:GLN:N	0.44	2.51	20	2
1:A:967:ALA:O	1:A:970:ASP:N	0.44	2.51	19	2
1:A:936:VAL:HG21	1:A:1028:LEU:CD1	0.44	2.42	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1008:TYR:CB	1:A:1017:TYR:CD2	0.44	3.00	18	2
1:A:1045:LYS:CD	1:A:1045:LYS:C	0.44	2.91	24	1
1:A:933:VAL:O	1:A:936:VAL:N	0.44	2.50	1	2
1:A:1002:MET:O	1:A:1003:LYS:C	0.44	2.60	1	3
1:A:962:LEU:O	1:A:966:LEU:HD13	0.44	2.13	7	2
1:A:1001:LYS:O	1:A:1004:LEU:N	0.44	2.49	19	1
1:A:960:LEU:O	1:A:961:ALA:C	0.44	2.60	20	1
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:935:ALA:O	1:A:939:MET:N	0.44	2.45	1	1
1:A:942:LYS:C	1:A:945:PRO:HD2	0.44	2.38	1	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:1027:ALA:O	1:A:1031:ASP:N	0.44	2.46	7	1
1:A:959:GLY:HA2	1:A:995:LEU:HD12	0.44	1.90	1	1
1:A:932:LEU:CD2	1:A:965:LEU:HD13	0.44	2.42	2	2
1:A:940:SER:CB	1:A:1022:LEU:CD2	0.44	2.95	5	1
1:A:923:ASP:O	1:A:924:LYS:C	0.44	2.61	17	2
1:A:925:VAL:O	1:A:929:VAL:CG2	0.44	2.59	4	2
1:A:980:THR:CB	1:A:1038:VAL:HG12	0.44	2.42	10	1
1:A:926:TYR:CE1	1:A:1036:LEU:CG	0.44	3.01	13	1
1:A:955:VAL:HG21	1:A:1002:MET:SD	0.44	2.53	19	1
1:A:1010:MET:C	1:A:1011:THR:OG1	0.44	2.61	24	1
1:A:929:VAL:HA	1:A:965:LEU:HD11	0.44	1.89	4	1
1:A:925:VAL:O	1:A:926:TYR:C	0.44	2.60	7	2
1:A:952:VAL:CG2	1:A:1006:GLN:CG	0.44	2.95	7	1
1:A:1018:LYS:O	1:A:1021:MET:CG	0.44	2.66	18	3
1:A:962:LEU:HD22	1:A:966:LEU:HD13	0.44	1.90	11	1
1:A:923:ASP:O	1:A:927:GLU:CD	0.44	2.61	15	2
1:A:932:LEU:O	1:A:935:ALA:N	0.44	2.51	21	1
1:A:980:THR:O	1:A:984:ILE:HB	0.43	2.12	3	9
1:A:1008:TYR:HB3	1:A:1017:TYR:CE1	0.43	2.48	3	1
1:A:990:LEU:HD22	1:A:1031:ASP:OD1	0.43	2.13	22	2
1:A:972:SER:OG	1:A:976:LEU:HD23	0.43	2.13	16	1
1:A:951:TYR:CE2	1:A:1002:MET:HG3	0.43	2.48	17	1
1:A:990:LEU:O	1:A:994:ASP:CG	0.43	2.60	24	1
1:A:1039:ILE:O	1:A:1042:ALA:HB3	0.43	2.13	24	2
1:A:951:TYR:CZ	1:A:1002:MET:HB2	0.43	2.48	22	2
1:A:962:LEU:HD22	1:A:991:LEU:HG	0.43	1.89	2	1
1:A:1043:ARG:O	1:A:1044:LEU:C	0.43	2.61	23	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1008:TYR:HA	1:A:1010:MET:HE3	0.43	1.90	6	1
1:A:962:LEU:HD12	1:A:991:LEU:CD2	0.43	2.43	24	2
1:A:1006:GLN:O	1:A:1009:VAL:CG1	0.43	2.61	20	3
1:A:994:ASP:HB2	1:A:1028:LEU:CD2	0.43	2.43	17	2
1:A:940:SER:HB2	1:A:1022:LEU:CD2	0.43	2.44	5	1
1:A:932:LEU:CD2	1:A:962:LEU:HD13	0.43	2.39	13	1
1:A:962:LEU:HD11	1:A:991:LEU:HG	0.43	1.91	16	2
1:A:974:PRO:C	1:A:976:LEU:N	0.43	2.76	24	6
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:932:LEU:CD1	1:A:936:VAL:HG23	0.43	2.43	7	2
1:A:973:LEU:HD21	1:A:984:ILE:CG2	0.43	2.44	3	1
1:A:987:ALA:HB3	1:A:1035:LEU:CD2	0.43	2.43	12	1
1:A:939:MET:HG2	1:A:1021:MET:HE1	0.43	1.90	18	1
1:A:955:VAL:O	1:A:958:VAL:N	0.43	2.51	22	2
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:937:ILE:C	1:A:939:MET:N	0.43	2.77	6	3
1:A:1021:MET:O	1:A:1022:LEU:C	0.43	2.62	15	1
1:A:943:ILE:CD1	1:A:951:TYR:CE1	0.43	2.88	9	1
1:A:962:LEU:CD2	1:A:991:LEU:HD11	0.43	2.42	10	1
1:A:998:LEU:O	1:A:1002:MET:N	0.43	2.47	19	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: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:980:THR:O	1:A:980:THR:OG1	0.42	2.35	9	1
1:A:929:VAL:HG23	1:A:965:LEU:HD11	0.42	1.90	10	1
1:A:1039:ILE:O	1:A:1043:ARG:N	0.42	2.48	10	1
1:A:990:LEU:C	1:A:1031:ASP:OD2	0.42	2.62	17	1
1:A:940:SER:OG	1:A:1022:LEU:HD23	0.42	2.14	4	1
1:A:952:VAL:CG2	1:A:1006:GLN:HG3	0.42	2.44	7	1
1:A:965:LEU:C	1:A:969:VAL:HG23	0.42	2.36	7	1
1:A:955:VAL:O	1:A:958:VAL:HG12	0.42	2.14	21	1
1:A:962:LEU:CD2	1:A:991:LEU:CG	0.42	2.97	2	1
1:A:939:MET:SD	1:A:1021:MET:HE2	0.42	2.54	10	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:939:MET:SD	1:A:1021:MET:HE1	0.42	2.54	22	1
1:A:955:VAL:O	1:A:957:GLU:N	0.42	2.52	2	3
1:A:1024:ALA:O	1:A:1028:LEU:N	0.42	2.46	19	1
1:A:989:LYS:O	1:A:993:SER:N	0.42	2.51	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:926:TYR:CE2	1:A:1036:LEU:CD2	0.42	2.98	3	2
1:A:1009:VAL:HG23	1:A:1014:GLN:NE2	0.42	2.30	14	1
1:A:983:GLU:HG2	1:A:1038:VAL:HG21	0.42	1.92	20	1
1:A:994:ASP:HB2	1:A:1028:LEU:CD1	0.42	2.43	24	1
1:A:965:LEU:O	1:A:966:LEU:C	0.42	2.63	7	1
1:A:964:THR:HG22	1:A:968:THR:CG2	0.42	2.43	8	1
1:A:929:VAL:HG12	1:A:930:THR:N	0.42	2.30	11	2
1:A:965:LEU:HD12	1:A:991:LEU:CD2	0.42	2.45	11	1
1:A:933:VAL:HG23	1:A:934:LYS:N	0.42	2.30	12	1
1:A:967:ALA:O	1:A:968:THR:C	0.42	2.62	19	2
1:A:999:ILE:O	1:A:1000:ASN:C	0.42	2.63	23	1
1:A:973:LEU:HD23	1:A:973:LEU:HA	0.42	1.72	14	4
1:A:965:LEU:HD13	1:A:965:LEU:C	0.42	2.39	16	1
1:A:1005:ALA:O	1:A:1009:VAL:N	0.42	2.53	18	1
1:A:962:LEU:C	1:A:962:LEU:HD13	0.42	2.39	19	1
1:A:1002:MET:HG3	1:A:1003:LYS:N	0.42	2.30	19	2
1:A:962:LEU:O	1:A:963:ARG:C	0.42	2.63	14	4
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	2
1:A:990:LEU:O	1:A:994:ASP:OD1	0.41	2.38	11	1
1:A:973:LEU:HD22	1:A:981:HIS:NE2	0.41	2.29	14	1
1:A:1033:LYS:CD	1:A:1033:LYS:C	0.41	2.93	17	1
1:A:950:GLU:O	1:A:954:MET:CB	0.41	2.68	10	1
1:A:928:ASN:OD1	1:A:961:ALA:O	0.41	2.38	11	1
1:A:924:LYS:O	1:A:928:ASN:OD1	0.41	2.38	16	2
1:A:926:TYR:CZ	1:A:1036:LEU:HD11	0.41	2.49	25	1
1:A:984:ILE:CD1	1:A:1039:ILE:HG13	0.41	2.44	24	2
1:A:965:LEU:HD23	1:A:969:VAL:CG2	0.41	2.45	14	1
1:A:962:LEU:CD2	1:A:991:LEU:HG	0.41	2.44	2	1
1:A:981:HIS:O	1:A:984:ILE:N	0.41	2.53	4	1
1:A:1031:ASP:O	1:A:1034:ASN:ND2	0.41	2.54	5	1
1:A:967:ALA:O	1:A:970:ASP:CB	0.41	2.68	12	1
1:A:1033:LYS:O	1:A:1037:ASP:N	0.41	2.45	12	1
1:A:928:ASN:ND2	1:A:968:THR:HG21	0.41	2.30	15	1
1:A:926:TYR:CE1	1:A:1036:LEU:HD23	0.41	2.49	17	1
1:A:935:ALA:C	1:A:937:ILE:N	0.41	2.78	24	2
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: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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
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:943:ILE:HG21	1:A:1018:LYS:NZ	0.41	2.30	8	1
1:A:990:LEU:O	1:A:991:LEU:C	0.41	2.63	14	1
1:A:951:TYR:CZ	1:A:1002:MET:CG	0.41	3.03	2	1
1:A:943:ILE:C	1:A:945:PRO:HD2	0.41	2.40	5	1
1:A:1041:GLN:OE1	1:A:1041:GLN:O	0.41	2.39	5	1
1:A:1006:GLN:C	1:A:1009:VAL:HG12	0.41	2.40	13	1
1:A:1028:LEU:C	1:A:1030:VAL:N	0.41	2.79	17	2
1:A:980:THR:OG1	1:A:980:THR:O	0.41	2.37	21	1
1:A:1002:MET:SD	1:A:1002:MET:O	0.41	2.79	18	2
1:A:1021:MET:HG3	1:A:1022:LEU:N	0.41	2.30	20	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:977:PRO:O	1:A:978:ALA:O	0.41	2.38	3	1
1:A:977:PRO:C	1:A:978:ALA:O	0.41	2.63	3	1
1:A:1027:ALA:O	1:A:1031:ASP:OD2	0.41	2.39	7	1
1:A:1028:LEU:O	1:A:1031:ASP:OD1	0.41	2.38	7	1
1:A:936:VAL:HG12	1:A:1025:ALA:HB1	0.41	1.93	9	1
1:A:939:MET:SD	1:A:954:MET:SD	0.41	3.19	12	1
1:A:995:LEU:HD12	1:A:995:LEU:C	0.41	2.41	15	1
1:A:980:THR:O	1:A:984:ILE:CB	0.41	2.69	16	1
1:A:1010:MET:SD	1:A:1010:MET:O	0.41	2.79	16	1
1:A:971:GLU:O	1:A:975:VAL:CG2	0.41	2.61	19	1
1:A:925:VAL:C	1:A:927:GLU:N	0.41	2.79	22	1
1:A:1000:ASN:O	1:A:1002:MET:N	0.41	2.54	25	1
1:A:933:VAL:O	1:A:935:ALA:N	0.41	2.54	1	1
1:A:1004:LEU:HB3	1:A:1008:TYR:CD2	0.41	2.51	3	1
1:A:998:LEU:C	1:A:998:LEU:CD1	0.41	2.93	5	1
1:A:965:LEU:O	1:A:968:THR:OG1	0.41	2.39	9	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:932:LEU:HG	1:A:933:VAL:N	0.40	2.31	6	3
1:A:1044:LEU:HA	1:A:1047:ILE:CG1	0.40	2.46	13	1
1:A:951:TYR:C	1:A:953:PRO:HD2	0.40	2.41	23	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:943:ILE:HG12	1:A:954:MET:HE3	0.40	1.92	3	1
1:A:972:SER:C	1:A:974:PRO:HD2	0.40	2.40	3	1
1:A:948:PRO:O	1:A:1006:GLN:OE1	0.40	2.39	8	1
1:A:930:THR:C	1:A:932:LEU:N	0.40	2.79	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:978:ALA:HB1	1:A:981:HIS:CE1	0.40	2.52	21	1
1:A:1011:THR:O	1:A:1012:SER:HB3	0.40	2.16	24	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: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:1014:GLN:OE1	1:A:1015:GLN:N	0.40	2.54	2	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:1010:MET:O	1:A:1010:MET:SD	0.40	2.80	18	1
1:A:1009:VAL:O	1:A:1011:THR:O	0.40	2.38	19	1
1:A:943:ILE:HG12	1:A:954:MET:CE	0.40	2.45	23	1
1:A:951:TYR:CE1	1:A:1002:MET:HB2	0.40	2.52	23	1
1:A:932:LEU:CD1	1:A:936:VAL:CG2	0.40	2.99	7	1
1:A:978:ALA:O	1:A:980:THR:N	0.40	2.54	8	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%)	5	38
All	All	3150/3475 (91%)	2317 (74%)	738 (23%)	95 (3%)	5	38

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	978	ALA	7
1	A	953	PRO	7
1	A	1010	MET	7
1	A	1014	GLN	7
1	A	979	SER	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	1047	ILE	6
1	A	982	ARG	5
1	A	1015	GLN	5
1	A	981	HIS	4
1	A	993	SER	3
1	A	939	MET	3
1	A	945	PRO	2
1	A	1008	TYR	2
1	A	1013	LEU	2
1	A	938	GLU	1
1	A	1045	LYS	1
1	A	931	GLY	1
1	A	1034	ASN	1
1	A	954	MET	1
1	A	1009	VAL	1
1	A	936	VAL	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%)	67±4 (60±4%)	43±4 (40±4%)	0 6
All	All	2750/3050 (90%)	1663 (60%)	1087 (40%)	0 6

All 92 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	932	LEU	25
1	A	938	GLU	25
1	A	943	ILE	25
1	A	952	VAL	25
1	A	960	LEU	25
1	A	973	LEU	25
1	A	990	LEU	25
1	A	995	LEU	25
1	A	942	LYS	24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	1010	MET	24
1	A	1036	LEU	24
1	A	950	GLU	23
1	A	1019	LYS	23
1	A	944	GLN	22
1	A	957	GLU	22
1	A	985	GLU	22
1	A	972	SER	21
1	A	976	LEU	21
1	A	963	ARG	20
1	A	1013	LEU	20
1	A	993	SER	19
1	A	954	MET	19
1	A	956	LYS	19
1	A	1018	LYS	18
1	A	934	LYS	17
1	A	989	LYS	17
1	A	965	LEU	16
1	A	1001	LYS	16
1	A	979	SER	15
1	A	958	VAL	14
1	A	986	MET	14
1	A	1002	MET	14
1	A	933	VAL	13
1	A	1022	LEU	13
1	A	1047	ILE	13
1	A	1045	LYS	13
1	A	1006	GLN	12
1	A	1011	THR	12
1	A	1015	GLN	12
1	A	1021	MET	12
1	A	949	GLU	12
1	A	1026	HIS	12
1	A	924	LYS	12
1	A	998	LEU	12
1	A	1033	LYS	12
1	A	1012	SER	11
1	A	1014	GLN	11
1	A	1046	MET	11
1	A	962	LEU	10
1	A	1003	LYS	10
1	A	923	ASP	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	1007	GLN	9
1	A	980	THR	9
1	A	988	GLN	9
1	A	982	ARG	9
1	A	1016	GLU	8
1	A	1040	ASP	8
1	A	1041	GLN	8
1	A	983	GLU	8
1	A	1044	LEU	8
1	A	941	SER	8
1	A	984	ILE	7
1	A	994	ASP	7
1	A	936	VAL	7
1	A	981	HIS	6
1	A	1028	LEU	6
1	A	1043	ARG	6
1	A	955	VAL	6
1	A	928	ASN	6
1	A	939	MET	6
1	A	997	GLU	6
1	A	992	ASN	5
1	A	966	LEU	5
1	A	937	ILE	4
1	A	927	GLU	4
1	A	1035	LEU	3
1	A	930	THR	3
1	A	1004	LEU	3
1	A	991	LEU	3
1	A	1009	VAL	3
1	A	929	VAL	3
1	A	922	ASN	3
1	A	1038	VAL	2
1	A	940	SER	2
1	A	964	THR	2
1	A	968	THR	2
1	A	1008	TYR	1
1	A	1031	ASP	1
1	A	926	TYR	1
1	A	1017	TYR	1
1	A	999	ILE	1
1	A	1039	ILE	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 oligosaccharides 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