



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 08:39 PM UTC

PDB ID : 1AWE / pdb_00001awe
Title : HUMAN SOS1 PLECKSTRIN HOMOLOGY (PH) DOMAIN, NMR, 20
STRUCTURES
Authors : Zheng, J.; Cowburn, D.
Deposited on : 1997-10-01

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

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

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

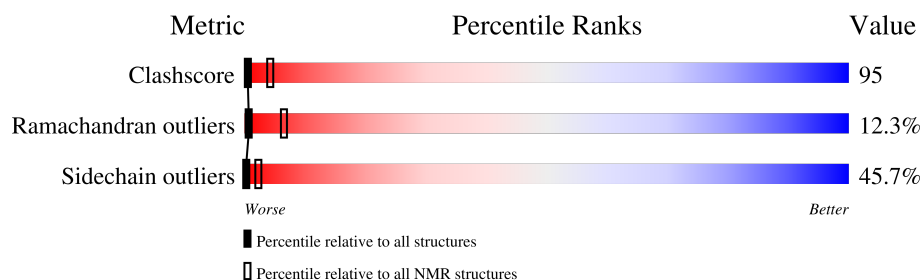
1 Overall quality at a glance

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	130	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 15 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:26-A:32, A:44-A:74, A:86-A:150 (103)	0.79	15

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

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

The models can be grouped into 3 clusters and 2 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

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

- Molecule 1 is a protein called SOS1.

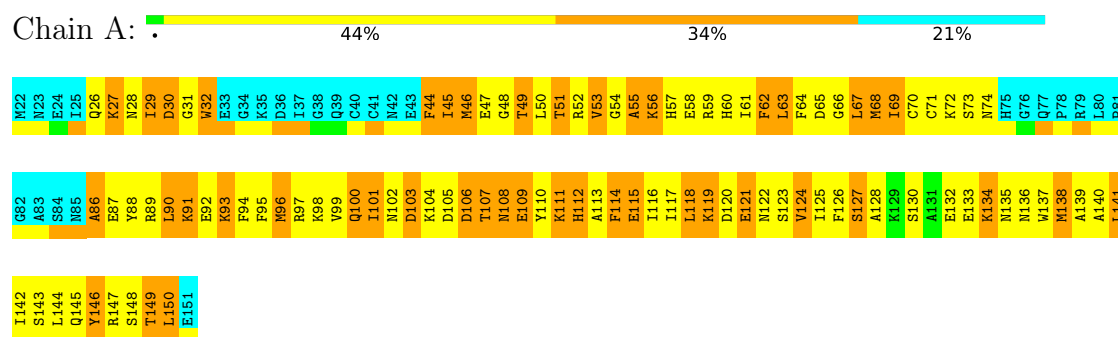
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	130	Total	C	H	N	O	S	0
			1903	661	849	185	199	9	

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: SOS1

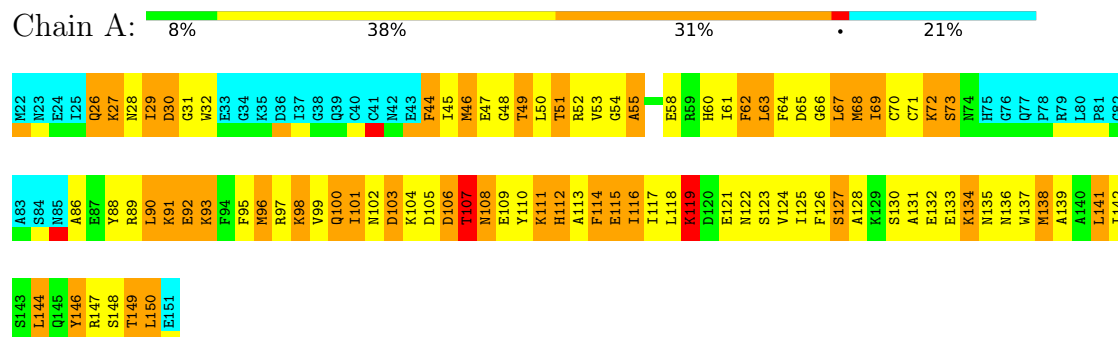


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

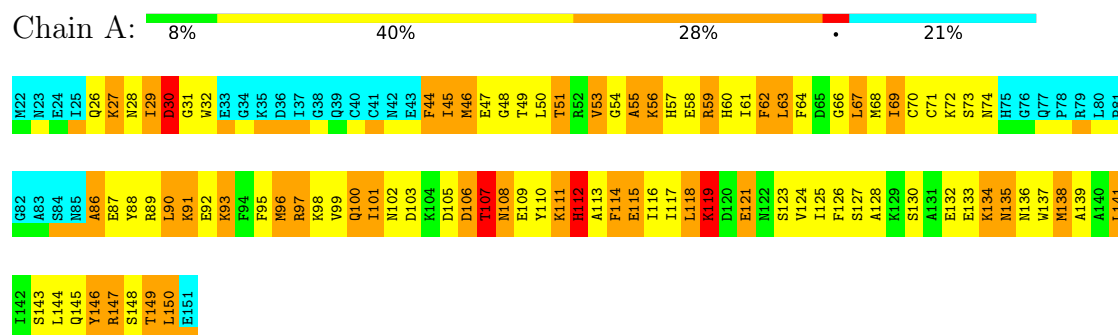
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: SOS1



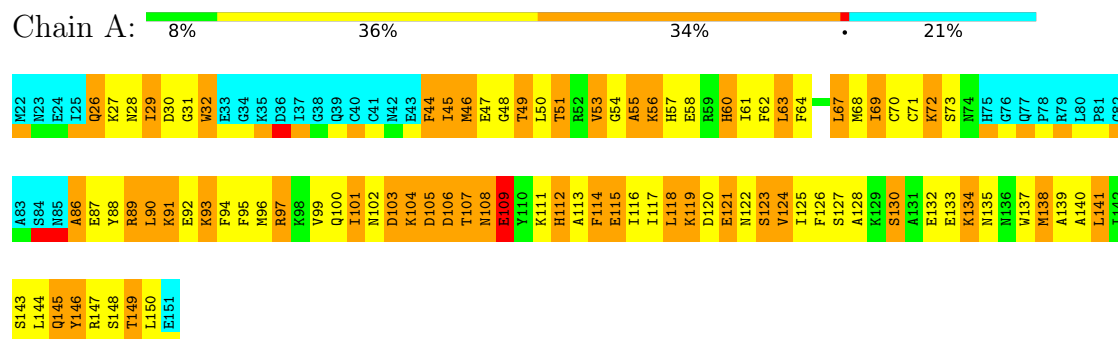
4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: SOS1



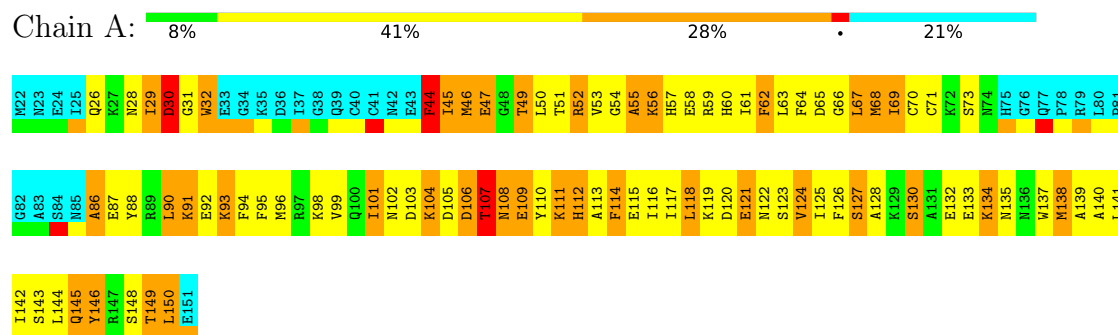
4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: SOS1



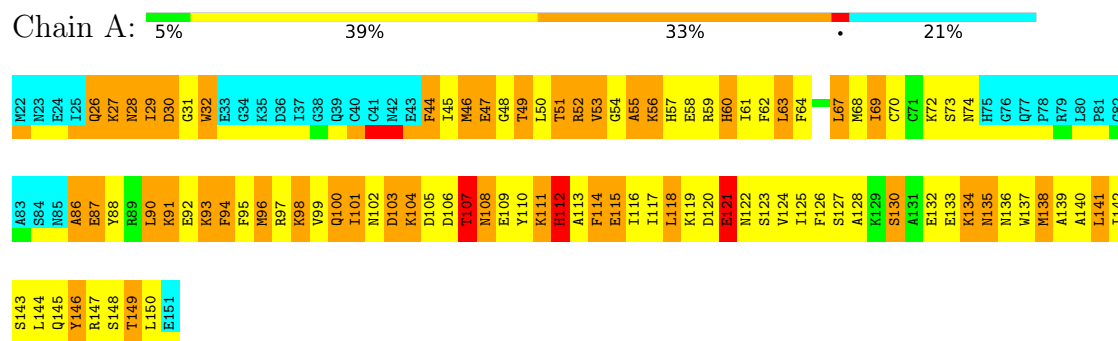
4.2.4 Score per residue for model 4

• Molecule 1: SOS1



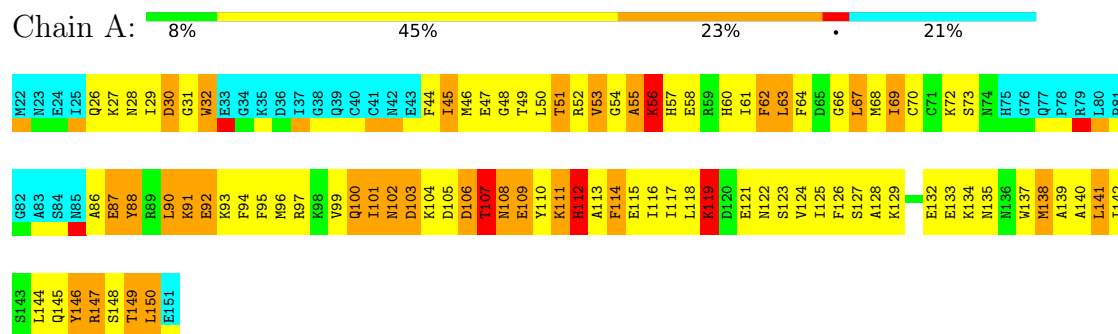
4.2.5 Score per residue for model 5

• Molecule 1: SOS1



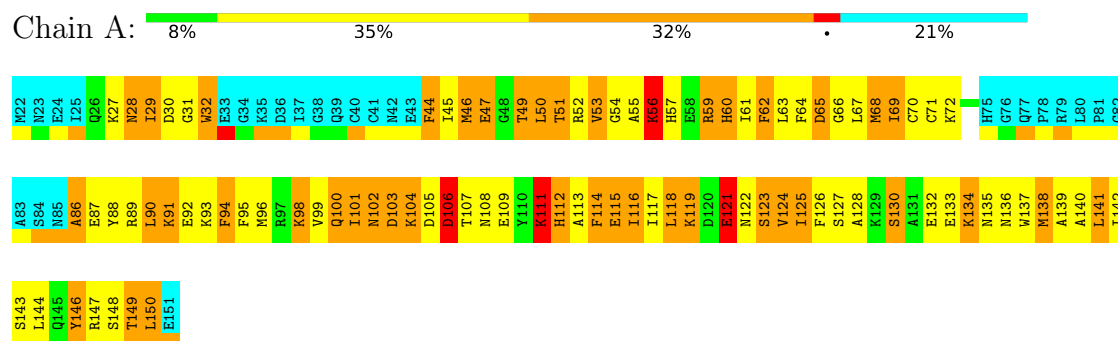
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: SOS1



4.2.7 Score per residue for model 7

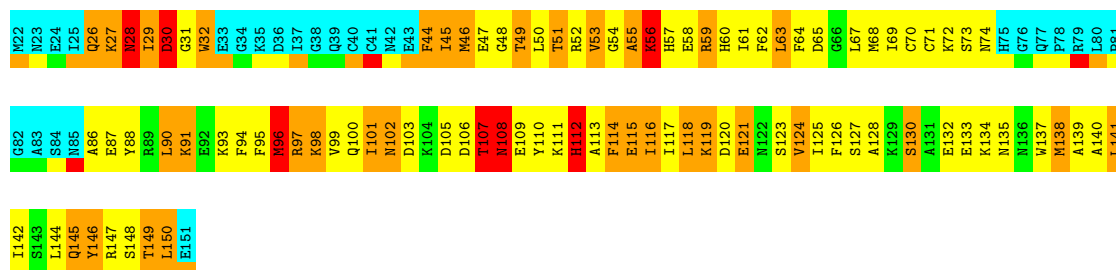
- Molecule 1: SOS1



4.2.8 Score per residue for model 8

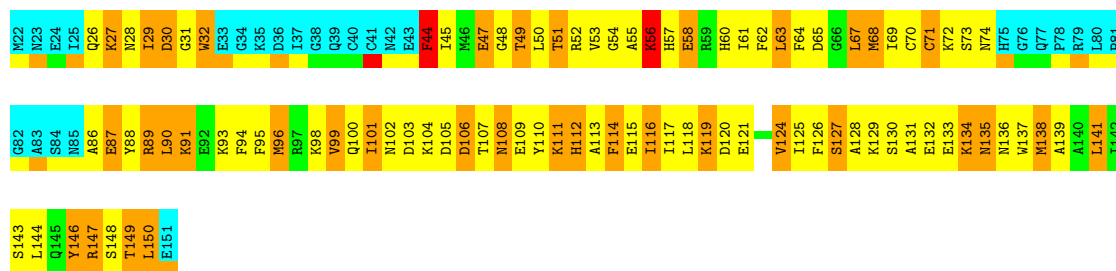
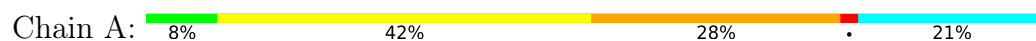
- Molecule 1: SOS1





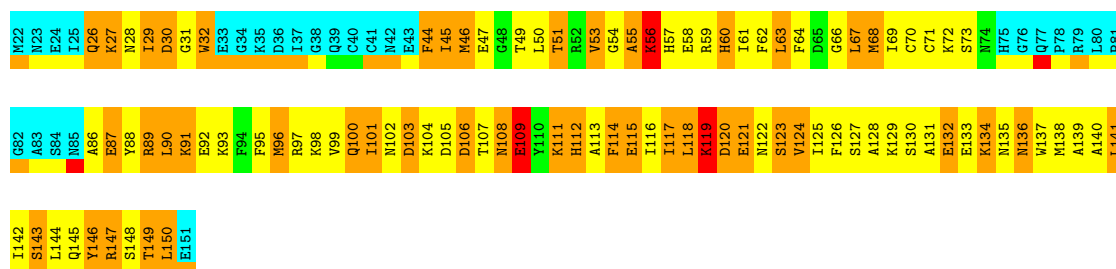
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: SOS1



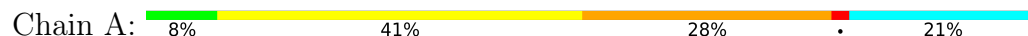
4.2.10 Score per residue for model 10

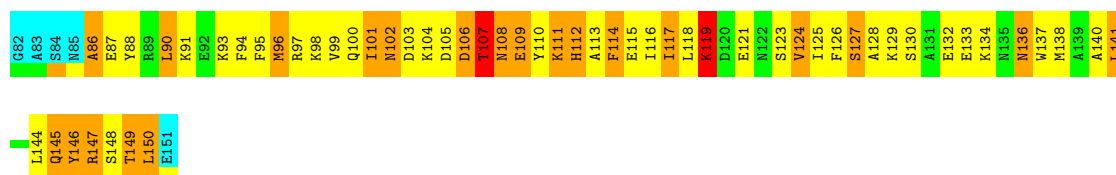
- Molecule 1: SOS1



4.2.11 Score per residue for model 11

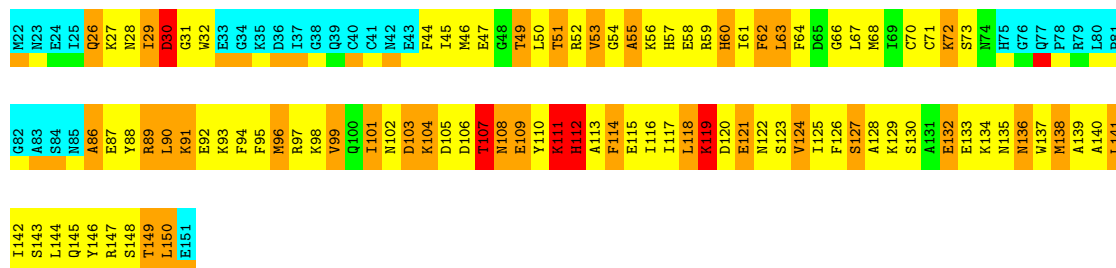
- Molecule 1: SOS1





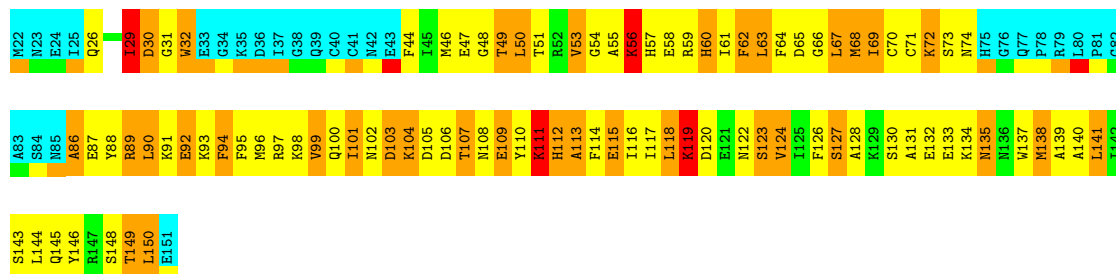
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: SOS1



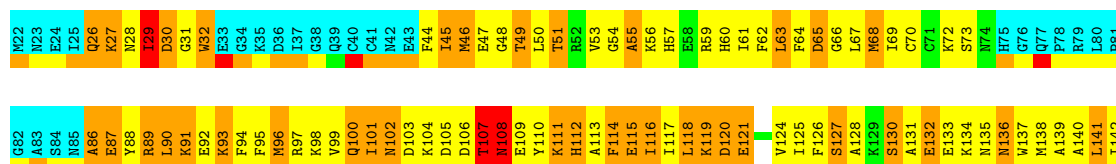
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: SOS1



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: SOS1



S143
L144
Q145
Y146
R147
S148
T149
L150
E151

4.2.15 Score per residue for model 15 (medoid)

- Molecule 1: SOS1

Chain A: 8% 39% 28% . 21%

M22 M23 E24 I25 Q26 K27 N28 I29 D30 G31 W32 E33 E34 G35 K36 D36 I37 I38 G38 Q39 Q40 C41 M42 E43 F44 F45 I46 M46 E47 E48 T49 Y50 L51 T51 T52 R52 V53 V54 G54 A55 K56 H57 H58 E59 H60 I61 I62 F62 F63 L63 F64 F65 L67 M68 I69 C70 C71 K72 S73 N74 H75 N76 G76 G77 P78 R79 L80 P81 G82

A83 S84 N85 A86 E87 Y88 R89 L90 K91 E92 K93 F94 F95 K96 M96 K98 K99 Q100 Q101 I101 N102 D103 K104 D105 D106 D107 M108 M109 Y110 Y111 K111 H112 A113 F114 E115 I116 I117 L118 L119 K119 D120 E121 N122 S123 V124 V125 F126 S127 A128 K129 S130 A131 E132 E133 K134 N135 N136 V137 M138 A139 A140 L141 I142

S143
L144
Q145
Y146
R147
S148
T149
L150
E151

4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: SOS1

Chain A: 6% 42% 27% . 21%

M22 M23 E24 I25 Q26 K27 N28 I29 D30 G31 W32 E33 E34 G35 K36 D36 I37 I38 G38 Q39 Q40 C41 M42 E43 F44 F45 I46 M46 E47 E48 T49 Y50 L51 T51 T52 R52 V53 V54 G54 A55 K56 H57 H58 E59 H60 I61 I62 F62 F63 L63 F64 F65 L66 G66 L67 M68 I69 C70 C71 K72 S73 N74 H75 N76 G76 G77 P78 R79 L80 P81

G82 A83 N85 A86 E87 Y88 R89 L90 K91 E92 K93 F94 F95 K96 M96 K98 K99 Q100 Q101 I101 N102 D103 K104 D105 D106 D107 M108 M109 Y110 Y111 K111 H112 A113 F114 E115 I116 I117 L118 L119 K119 D120 E121 N122 S123 V124 V125 F126 S127 A128 K129 S130 A131 E132 E133 K134 N135 N136 V137 M138 A139 A140 L141 I142

I142
S143
L144
Q145
Y146
R147
S148
T149
L150
E151

4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: SOS1

Chain A: 8% 42% 28% . 21%

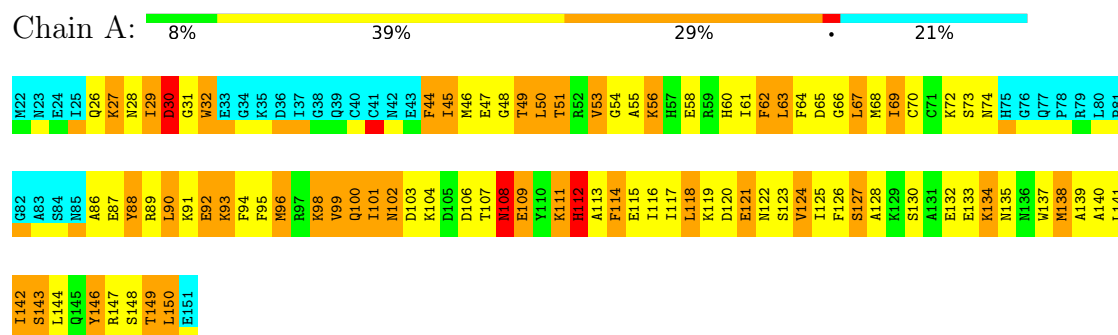
M22 M23 E24 I25 Q26 K27 N28 I29 D30 G31 W32 E33 E34 G35 K36 D36 I37 I38 G38 Q39 Q40 C41 M42 E43 F44 F45 I46 M46 E47 E48 T49 Y50 L51 T51 T52 R52 V53 V54 G54 A55 K56 H57 H58 E59 H60 I61 I62 F62 F63 L63 F64 F65 L67 M68 I69 C70 C71 K72 S73 N74 H75 N76 G76 G77 P78 R79 L80 P81 G82

A83 S84 N85 A86 E87 Y88 R89 L90 K91 E92 K93 F94 F95 K96 M96 K98 K99 Q100 Q101 I101 N102 D103 K104 D105 D106 D107 M108 M109 Y110 Y111 K111 H112 A113 F114 E115 I116 I117 L118 L119 K119 D120 E121 N122 S123 V124 V125 F126 S127 A128 K129 S130 A131 E132 E133 K134 N135 N136 V137 M138 A139 A140 L141 I142

S143
L144
Q145
Y146
R147
S148
T149
L150
E151

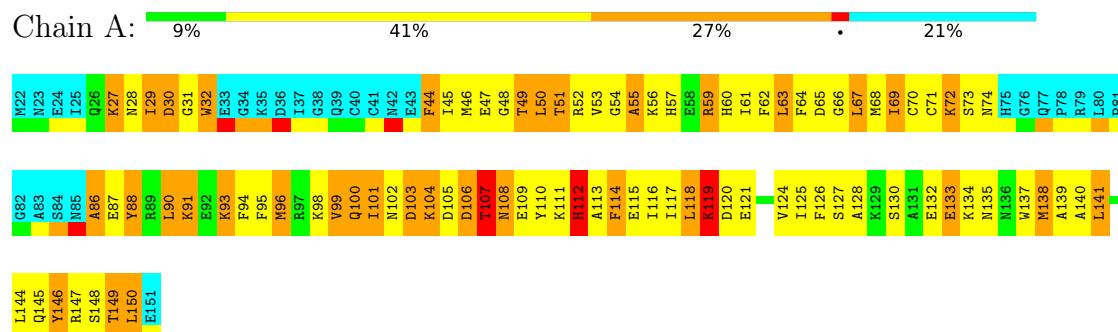
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: SOS1



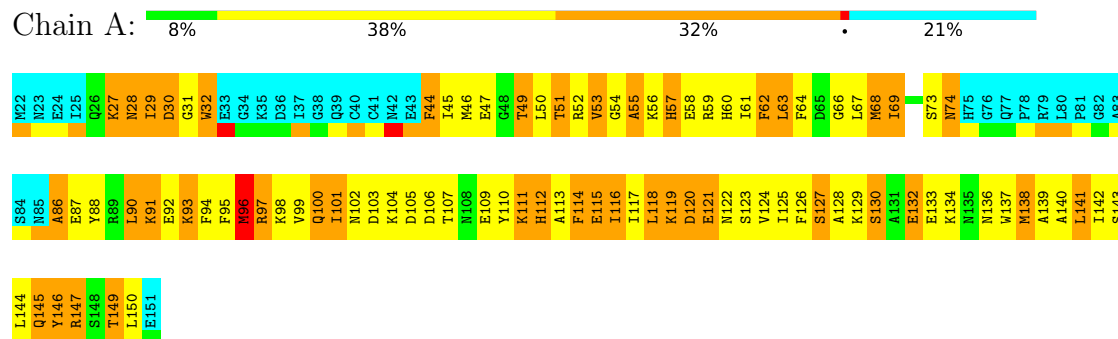
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: SOS1



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: SOS1



5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

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

Of the 750 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *target function*.

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

Software name	Classification	Version
DYANA	refinement	
DYANA	structure solution	

No chemical shift data was provided.

6 Model quality ⓘ

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	853	704	848	162±11
All	All	17060	14080	16960	3230

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 95.

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

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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:LEU:O	1:A:90:LEU:HD13	0.96	1.60	5	18
1:A:64:PHE:O	1:A:66:GLY:N	0.93	2.00	14	2
1:A:67:LEU:HD13	1:A:94:PHE:CD1	0.93	1.98	7	3
1:A:45:ILE:HD12	1:A:144:LEU:HD21	0.92	1.40	20	8
1:A:101:ILE:CD1	1:A:116:ILE:HD12	0.92	1.94	20	5
1:A:61:ILE:CG2	1:A:68:MET:HE2	0.92	1.94	11	3
1:A:95:PHE:CE1	1:A:118:LEU:HD22	0.90	2.02	8	5
1:A:113:ALA:HB2	1:A:127:SER:OG	0.88	1.69	7	13
1:A:69:ILE:HD12	1:A:70:CYS:N	0.88	1.83	6	2
1:A:90:LEU:HD22	1:A:91:LYS:N	0.88	1.83	2	14
1:A:107:THR:HG22	1:A:111:LYS:O	0.87	1.70	15	8
1:A:95:PHE:CZ	1:A:118:LEU:HD22	0.87	2.05	8	5
1:A:96:MET:CB	1:A:144:LEU:HD13	0.87	2.00	19	6
1:A:63:LEU:HD21	1:A:144:LEU:HD11	0.86	1.46	12	3
1:A:63:LEU:HD13	1:A:144:LEU:CD1	0.86	2.00	20	8
1:A:46:MET:SD	1:A:63:LEU:HD23	0.85	2.10	6	2
1:A:146:TYR:O	1:A:150:LEU:HD23	0.85	1.71	7	19
1:A:46:MET:HE2	1:A:63:LEU:HD23	0.85	1.46	19	1
1:A:53:VAL:HG12	1:A:53:VAL:O	0.85	1.72	5	12
1:A:45:ILE:HB	1:A:63:LEU:HD23	0.84	1.49	12	1
1:A:106:ASP:O	1:A:108:ASN:N	0.84	2.10	16	11
1:A:50:LEU:HD13	1:A:61:ILE:CG1	0.84	2.01	2	19
1:A:69:ILE:O	1:A:69:ILE:HD13	0.84	1.72	20	1
1:A:96:MET:HB2	1:A:144:LEU:HD13	0.84	1.47	15	6
1:A:63:LEU:HD21	1:A:144:LEU:CD1	0.83	2.03	16	4
1:A:90:LEU:C	1:A:90:LEU:HD13	0.83	1.96	7	2
1:A:50:LEU:HD13	1:A:61:ILE:HG13	0.83	1.50	3	18
1:A:90:LEU:HD13	1:A:90:LEU:C	0.82	1.97	13	13
1:A:115:GLU:C	1:A:116:ILE:HD13	0.82	1.99	20	9
1:A:63:LEU:HD22	1:A:96:MET:SD	0.81	2.16	1	1
1:A:50:LEU:HD22	1:A:126:PHE:CD2	0.81	2.10	1	17
1:A:133:GLU:O	1:A:137:TRP:N	0.81	2.14	9	20
1:A:31:GLY:O	1:A:32:TRP:C	0.80	2.25	3	20
1:A:46:MET:HG2	1:A:63:LEU:HD23	0.80	1.54	1	4
1:A:118:LEU:HD12	1:A:119:LYS:O	0.80	1.77	1	3
1:A:69:ILE:HD13	1:A:69:ILE:C	0.79	2.02	20	1
1:A:128:ALA:CB	1:A:137:TRP:CZ3	0.79	2.64	2	19
1:A:50:LEU:CD2	1:A:137:TRP:CE3	0.79	2.66	4	19
1:A:124:VAL:O	1:A:125:ILE:HD13	0.78	1.79	18	3
1:A:90:LEU:C	1:A:90:LEU:HD22	0.78	2.03	15	10
1:A:50:LEU:HD23	1:A:137:TRP:CE3	0.78	2.14	19	19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:ILE:HD12	1:A:90:LEU:CD2	0.77	2.10	8	2
1:A:118:LEU:O	1:A:119:LYS:O	0.77	2.02	10	12
1:A:69:ILE:C	1:A:69:ILE:HD13	0.77	2.05	18	6
1:A:67:LEU:HD12	1:A:67:LEU:C	0.77	2.03	3	1
1:A:67:LEU:HD22	1:A:94:PHE:CE1	0.77	2.14	4	1
1:A:53:VAL:O	1:A:125:ILE:HG21	0.76	1.80	10	8
1:A:69:ILE:HG13	1:A:90:LEU:HD23	0.76	1.55	2	5
1:A:95:PHE:CD2	1:A:99:VAL:HG11	0.76	2.16	11	1
1:A:69:ILE:C	1:A:69:ILE:HD12	0.76	2.04	13	1
1:A:53:VAL:HG12	1:A:125:ILE:HG21	0.76	1.55	11	4
1:A:30:ASP:HB3	1:A:90:LEU:HD12	0.76	1.55	18	1
1:A:114:PHE:CD1	1:A:126:PHE:O	0.76	2.38	13	2
1:A:50:LEU:N	1:A:50:LEU:HD12	0.75	1.96	18	16
1:A:63:LEU:HB3	1:A:68:MET:HE3	0.75	1.59	11	1
1:A:133:GLU:O	1:A:137:TRP:CG	0.74	2.40	17	20
1:A:49:THR:C	1:A:50:LEU:HD12	0.74	2.07	18	5
1:A:103:ASP:HA	1:A:114:PHE:HB2	0.74	1.59	16	4
1:A:96:MET:CG	1:A:144:LEU:HD13	0.73	2.13	10	2
1:A:116:ILE:CD1	1:A:126:PHE:CD2	0.73	2.71	17	2
1:A:113:ALA:HB1	1:A:125:ILE:HG22	0.73	1.60	18	2
1:A:106:ASP:C	1:A:107:THR:HG23	0.73	2.07	7	4
1:A:95:PHE:CE2	1:A:141:LEU:HD11	0.73	2.19	20	4
1:A:128:ALA:HB3	1:A:134:LYS:HG2	0.73	1.61	17	1
1:A:96:MET:HA	1:A:144:LEU:HD13	0.72	1.61	13	4
1:A:29:ILE:HG22	1:A:90:LEU:HB3	0.72	1.61	16	7
1:A:64:PHE:CE2	1:A:69:ILE:HG21	0.72	2.19	6	7
1:A:63:LEU:HD12	1:A:64:PHE:N	0.72	1.99	17	7
1:A:63:LEU:C	1:A:63:LEU:HD12	0.71	2.10	20	8
1:A:66:GLY:O	1:A:67:LEU:HD23	0.71	1.85	13	4
1:A:63:LEU:HD11	1:A:144:LEU:CD1	0.71	2.15	4	2
1:A:119:LYS:O	1:A:121:GLU:N	0.71	2.23	10	4
1:A:61:ILE:HD12	1:A:70:CYS:CB	0.71	2.15	19	2
1:A:96:MET:N	1:A:144:LEU:HD13	0.70	2.01	8	5
1:A:45:ILE:HD13	1:A:144:LEU:HD21	0.70	1.62	9	1
1:A:133:GLU:O	1:A:137:TRP:CD1	0.70	2.44	4	20
1:A:95:PHE:CE1	1:A:120:ASP:CG	0.70	2.69	18	2
1:A:106:ASP:O	1:A:107:THR:C	0.70	2.35	8	12
1:A:59:ARG:HB3	1:A:71:CYS:O	0.70	1.86	8	2
1:A:69:ILE:HD13	1:A:70:CYS:N	0.70	2.00	18	2
1:A:63:LEU:HA	1:A:68:MET:HA	0.70	1.63	5	7
1:A:111:LYS:O	1:A:113:ALA:N	0.70	2.23	18	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:VAL:O	1:A:53:VAL:CG1	0.70	2.40	5	12
1:A:68:MET:CB	1:A:95:PHE:CD2	0.70	2.74	3	2
1:A:28:ASN:CG	1:A:88:TYR:CD2	0.70	2.70	2	9
1:A:69:ILE:HG23	1:A:90:LEU:CD2	0.69	2.17	7	3
1:A:63:LEU:HD12	1:A:68:MET:HB2	0.69	1.63	12	1
1:A:99:VAL:HG22	1:A:145:GLN:HB2	0.69	1.64	2	1
1:A:69:ILE:HD12	1:A:69:ILE:C	0.69	2.12	6	1
1:A:63:LEU:HD12	1:A:63:LEU:C	0.69	2.12	2	3
1:A:68:MET:SD	1:A:95:PHE:CE2	0.69	2.85	11	7
1:A:69:ILE:HD12	1:A:90:LEU:HD23	0.69	1.64	8	1
1:A:95:PHE:CD2	1:A:118:LEU:CD1	0.69	2.74	9	2
1:A:28:ASN:ND2	1:A:88:TYR:CE2	0.69	2.61	19	4
1:A:50:LEU:CD2	1:A:126:PHE:CD2	0.69	2.76	8	7
1:A:105:ASP:CB	1:A:113:ALA:O	0.69	2.41	20	4
1:A:114:PHE:CD1	1:A:114:PHE:N	0.68	2.60	7	8
1:A:50:LEU:HG	1:A:137:TRP:CZ3	0.68	2.23	7	20
1:A:95:PHE:CE2	1:A:118:LEU:CD1	0.68	2.75	6	2
1:A:68:MET:SD	1:A:95:PHE:CD2	0.68	2.87	11	5
1:A:45:ILE:CB	1:A:63:LEU:HD23	0.68	2.17	12	1
1:A:96:MET:HB3	1:A:144:LEU:HD12	0.68	1.62	1	1
1:A:101:ILE:HG12	1:A:116:ILE:HG23	0.68	1.66	13	3
1:A:53:VAL:CG1	1:A:125:ILE:HG21	0.68	2.18	7	4
1:A:116:ILE:HD13	1:A:116:ILE:N	0.68	2.04	7	6
1:A:101:ILE:HG12	1:A:116:ILE:HD12	0.68	1.64	14	2
1:A:94:PHE:O	1:A:94:PHE:CD2	0.68	2.47	15	4
1:A:99:VAL:HG21	1:A:141:LEU:HG	0.68	1.66	12	3
1:A:53:VAL:HG21	1:A:113:ALA:CB	0.67	2.19	12	3
1:A:44:PHE:CD1	1:A:62:PHE:CE1	0.67	2.83	18	1
1:A:118:LEU:HD12	1:A:120:ASP:HB3	0.67	1.66	8	1
1:A:112:HIS:O	1:A:112:HIS:CD2	0.67	2.47	10	1
1:A:54:GLY:O	1:A:55:ALA:HB2	0.67	1.90	15	12
1:A:95:PHE:HD2	1:A:118:LEU:HD22	0.67	1.49	16	3
1:A:46:MET:HE2	1:A:63:LEU:HB3	0.67	1.66	18	2
1:A:61:ILE:HD13	1:A:70:CYS:HB3	0.67	1.66	3	4
1:A:54:GLY:O	1:A:55:ALA:HB3	0.67	1.88	20	2
1:A:95:PHE:CZ	1:A:118:LEU:HD13	0.67	2.25	7	3
1:A:45:ILE:HD11	1:A:65:ASP:HA	0.67	1.66	9	3
1:A:105:ASP:O	1:A:110:TYR:CG	0.67	2.48	9	1
1:A:114:PHE:CE1	1:A:126:PHE:O	0.67	2.48	13	2
1:A:44:PHE:C	1:A:44:PHE:CD1	0.66	2.71	20	4
1:A:69:ILE:CG1	1:A:90:LEU:HD23	0.66	2.21	5	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:61:ILE:HD13	1:A:70:CYS:CB	0.66	2.20	3	3
1:A:29:ILE:HG22	1:A:90:LEU:HB2	0.66	1.68	6	4
1:A:69:ILE:HG23	1:A:90:LEU:HD23	0.66	1.64	8	1
1:A:53:VAL:HG21	1:A:113:ALA:HB3	0.66	1.66	13	1
1:A:32:TRP:CD1	1:A:32:TRP:O	0.66	2.49	14	6
1:A:63:LEU:HD13	1:A:96:MET:SD	0.66	2.30	1	1
1:A:67:LEU:HD22	1:A:94:PHE:CZ	0.66	2.26	16	2
1:A:96:MET:HB3	1:A:144:LEU:HD13	0.66	1.68	19	1
1:A:59:ARG:NE	1:A:88:TYR:CE2	0.66	2.64	8	1
1:A:50:LEU:HG	1:A:137:TRP:CE3	0.65	2.26	18	20
1:A:128:ALA:CA	1:A:137:TRP:CZ3	0.65	2.80	18	18
1:A:118:LEU:O	1:A:118:LEU:HD12	0.65	1.91	10	1
1:A:29:ILE:HG22	1:A:90:LEU:CB	0.65	2.21	5	8
1:A:113:ALA:C	1:A:114:PHE:CG	0.65	2.74	15	3
1:A:50:LEU:HD13	1:A:61:ILE:CB	0.65	2.20	7	19
1:A:28:ASN:ND2	1:A:88:TYR:CD2	0.65	2.65	17	6
1:A:50:LEU:HG	1:A:137:TRP:CH2	0.65	2.27	7	20
1:A:28:ASN:OD1	1:A:88:TYR:CD2	0.65	2.49	18	8
1:A:118:LEU:HD12	1:A:122:ASN:HB3	0.65	1.67	4	2
1:A:61:ILE:O	1:A:62:PHE:CD2	0.65	2.50	14	3
1:A:55:ALA:O	1:A:56:LYS:CB	0.65	2.45	8	11
1:A:61:ILE:HD12	1:A:70:CYS:HB2	0.65	1.67	8	2
1:A:107:THR:CG2	1:A:112:HIS:CG	0.65	2.79	18	1
1:A:95:PHE:CG	1:A:99:VAL:HG11	0.65	2.26	2	5
1:A:118:LEU:O	1:A:119:LYS:C	0.65	2.39	10	6
1:A:46:MET:HE1	1:A:137:TRP:HA	0.65	1.67	12	1
1:A:68:MET:CB	1:A:95:PHE:CG	0.65	2.80	3	4
1:A:45:ILE:HG22	1:A:46:MET:HG3	0.65	1.68	20	4
1:A:53:VAL:HG12	1:A:125:ILE:CG2	0.65	2.20	11	4
1:A:60:HIS:ND1	1:A:88:TYR:CE2	0.65	2.65	12	1
1:A:44:PHE:O	1:A:44:PHE:CG	0.65	2.48	16	9
1:A:107:THR:O	1:A:109:GLU:N	0.65	2.30	6	15
1:A:67:LEU:HD12	1:A:68:MET:N	0.64	2.06	9	4
1:A:28:ASN:OD1	1:A:88:TYR:CE2	0.64	2.50	8	2
1:A:96:MET:HG2	1:A:144:LEU:HD22	0.64	1.68	13	1
1:A:31:GLY:H	1:A:90:LEU:HD12	0.64	1.53	2	4
1:A:95:PHE:CZ	1:A:118:LEU:CD2	0.64	2.80	14	4
1:A:44:PHE:CD1	1:A:44:PHE:O	0.64	2.50	12	1
1:A:64:PHE:CZ	1:A:69:ILE:HG21	0.64	2.27	1	3
1:A:99:VAL:HG22	1:A:145:GLN:HB3	0.64	1.70	3	9
1:A:50:LEU:HD12	1:A:50:LEU:N	0.64	2.07	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:PHE:O	1:A:44:PHE:CD2	0.64	2.51	1	5
1:A:95:PHE:CG	1:A:118:LEU:HD13	0.64	2.27	9	1
1:A:90:LEU:C	1:A:90:LEU:CD1	0.64	2.71	7	12
1:A:53:VAL:HG12	1:A:54:GLY:H	0.64	1.53	9	3
1:A:67:LEU:HD13	1:A:94:PHE:CE1	0.64	2.27	18	3
1:A:47:GLU:CB	1:A:62:PHE:CE1	0.63	2.81	5	5
1:A:59:ARG:CG	1:A:71:CYS:O	0.63	2.47	19	2
1:A:68:MET:HB3	1:A:95:PHE:CE1	0.63	2.28	15	1
1:A:53:VAL:HB	1:A:125:ILE:HG22	0.63	1.70	14	5
1:A:50:LEU:HD13	1:A:61:ILE:HB	0.63	1.70	18	12
1:A:133:GLU:HB3	1:A:137:TRP:CE2	0.63	2.28	9	20
1:A:68:MET:CE	1:A:95:PHE:CE2	0.63	2.82	8	2
1:A:53:VAL:HG13	1:A:54:GLY:N	0.63	2.08	7	5
1:A:53:VAL:HG21	1:A:113:ALA:HB2	0.63	1.68	9	2
1:A:86:ALA:O	1:A:87:GLU:C	0.63	2.41	10	19
1:A:142:ILE:CG2	1:A:146:TYR:CE1	0.63	2.81	12	4
1:A:67:LEU:HD12	1:A:68:MET:O	0.63	1.94	5	5
1:A:53:VAL:HG23	1:A:127:SER:OG	0.63	1.93	10	7
1:A:116:ILE:N	1:A:116:ILE:HD12	0.63	2.08	13	3
1:A:73:SER:CB	1:A:88:TYR:CE2	0.63	2.82	15	2
1:A:69:ILE:HD13	1:A:69:ILE:O	0.63	1.93	16	1
1:A:50:LEU:HG	1:A:137:TRP:CD2	0.62	2.28	18	20
1:A:50:LEU:CB	1:A:126:PHE:CD1	0.62	2.82	14	7
1:A:116:ILE:HD11	1:A:126:PHE:CD2	0.62	2.29	17	2
1:A:116:ILE:HD13	1:A:126:PHE:CD2	0.62	2.29	18	2
1:A:95:PHE:CD2	1:A:99:VAL:HG12	0.62	2.29	15	1
1:A:49:THR:O	1:A:137:TRP:CZ2	0.62	2.52	19	9
1:A:64:PHE:CZ	1:A:69:ILE:HD12	0.62	2.30	3	2
1:A:64:PHE:CE2	1:A:69:ILE:CG2	0.62	2.82	16	3
1:A:68:MET:HE3	1:A:141:LEU:HD11	0.62	1.71	10	1
1:A:93:LYS:HB3	1:A:95:PHE:CE2	0.62	2.30	1	9
1:A:96:MET:CA	1:A:144:LEU:HD13	0.62	2.25	8	3
1:A:119:LYS:O	1:A:120:ASP:C	0.62	2.43	10	2
1:A:29:ILE:C	1:A:29:ILE:HD12	0.61	2.20	6	8
1:A:68:MET:HB3	1:A:93:LYS:O	0.61	1.95	12	7
1:A:67:LEU:HD22	1:A:94:PHE:CE2	0.61	2.30	16	1
1:A:103:ASP:HA	1:A:114:PHE:CB	0.61	2.26	16	18
1:A:68:MET:SD	1:A:95:PHE:CZ	0.61	2.93	20	6
1:A:49:THR:HG23	1:A:60:HIS:HA	0.61	1.71	15	5
1:A:45:ILE:CG2	1:A:63:LEU:HD23	0.61	2.25	12	1
1:A:88:TYR:N	1:A:88:TYR:CD1	0.61	2.65	19	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:114:PHE:CZ	1:A:126:PHE:CB	0.61	2.84	13	2
1:A:46:MET:HE2	1:A:63:LEU:CD2	0.61	2.24	19	1
1:A:105:ASP:O	1:A:106:ASP:CB	0.61	2.49	9	3
1:A:95:PHE:CD2	1:A:118:LEU:CB	0.61	2.84	12	2
1:A:103:ASP:HA	1:A:114:PHE:HB3	0.61	1.72	15	8
1:A:101:ILE:HD12	1:A:116:ILE:CD1	0.61	2.26	4	2
1:A:53:VAL:CG1	1:A:54:GLY:N	0.60	2.64	11	5
1:A:107:THR:O	1:A:110:TYR:O	0.60	2.20	1	14
1:A:28:ASN:CG	1:A:88:TYR:CE2	0.60	2.79	2	2
1:A:53:VAL:CG1	1:A:125:ILE:CG2	0.60	2.80	7	3
1:A:29:ILE:HG21	1:A:32:TRP:CE3	0.60	2.32	2	2
1:A:26:GLN:CD	1:A:27:LYS:CE	0.60	2.74	11	2
1:A:95:PHE:CG	1:A:118:LEU:HB2	0.60	2.32	15	3
1:A:67:LEU:HD13	1:A:94:PHE:CA	0.60	2.26	19	3
1:A:50:LEU:N	1:A:50:LEU:CD1	0.60	2.65	13	5
1:A:45:ILE:HD11	1:A:65:ASP:OD1	0.60	1.97	19	1
1:A:29:ILE:HD12	1:A:29:ILE:O	0.60	1.96	6	1
1:A:125:ILE:N	1:A:125:ILE:HD12	0.59	2.11	7	2
1:A:60:HIS:CB	1:A:88:TYR:CD2	0.59	2.85	9	1
1:A:45:ILE:HG21	1:A:63:LEU:HD12	0.59	1.74	11	1
1:A:64:PHE:CD2	1:A:69:ILE:HG21	0.59	2.33	6	2
1:A:113:ALA:HB1	1:A:126:PHE:O	0.59	1.96	17	6
1:A:68:MET:CG	1:A:95:PHE:CD2	0.59	2.85	3	2
1:A:108:ASN:O	1:A:109:GLU:CG	0.59	2.51	10	1
1:A:86:ALA:O	1:A:88:TYR:O	0.59	2.20	17	15
1:A:46:MET:SD	1:A:140:ALA:HB3	0.59	2.37	12	2
1:A:61:ILE:HG22	1:A:68:MET:HE2	0.59	1.73	11	1
1:A:95:PHE:CE1	1:A:120:ASP:HB2	0.59	2.32	12	6
1:A:106:ASP:O	1:A:107:THR:OG1	0.59	2.17	17	3
1:A:108:ASN:O	1:A:109:GLU:CB	0.59	2.51	13	2
1:A:58:GLU:O	1:A:73:SER:O	0.59	2.21	11	15
1:A:45:ILE:HG22	1:A:46:MET:CG	0.59	2.28	10	7
1:A:56:LYS:O	1:A:57:HIS:CG	0.59	2.56	6	4
1:A:57:HIS:CE1	1:A:74:ASN:ND2	0.59	2.71	13	2
1:A:51:THR:HG22	1:A:127:SER:HB2	0.58	1.75	17	10
1:A:69:ILE:C	1:A:69:ILE:CD1	0.58	2.72	20	8
1:A:73:SER:OG	1:A:88:TYR:CE2	0.58	2.53	1	3
1:A:90:LEU:HD22	1:A:90:LEU:O	0.58	1.97	1	1
1:A:59:ARG:CB	1:A:71:CYS:O	0.58	2.51	19	4
1:A:63:LEU:HB2	1:A:68:MET:HE3	0.58	1.73	6	1
1:A:60:HIS:O	1:A:61:ILE:HD13	0.58	1.98	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:54:GLY:O	1:A:55:ALA:CB	0.58	2.52	12	12
1:A:133:GLU:O	1:A:137:TRP:CB	0.58	2.52	13	19
1:A:29:ILE:HG21	1:A:32:TRP:HE3	0.58	1.57	2	2
1:A:106:ASP:C	1:A:107:THR:CG2	0.58	2.76	7	3
1:A:45:ILE:HD11	1:A:65:ASP:CG	0.58	2.22	19	1
1:A:107:THR:C	1:A:109:GLU:N	0.58	2.61	16	20
1:A:119:LYS:C	1:A:121:GLU:N	0.58	2.60	10	13
1:A:28:ASN:O	1:A:29:ILE:O	0.58	2.21	17	9
1:A:44:PHE:CE1	1:A:64:PHE:CE1	0.58	2.91	5	1
1:A:63:LEU:HD22	1:A:68:MET:HE3	0.58	1.74	11	1
1:A:73:SER:OG	1:A:88:TYR:CD2	0.58	2.52	1	3
1:A:90:LEU:C	1:A:90:LEU:CD2	0.58	2.76	15	6
1:A:68:MET:CE	1:A:141:LEU:HD11	0.58	2.28	10	3
1:A:63:LEU:CD1	1:A:68:MET:HE3	0.58	2.28	12	1
1:A:133:GLU:HB3	1:A:137:TRP:NE1	0.58	2.14	8	20
1:A:114:PHE:CE2	1:A:126:PHE:HB2	0.58	2.33	13	2
1:A:100:GLN:N	1:A:117:ILE:O	0.58	2.37	14	12
1:A:73:SER:HB2	1:A:88:TYR:CD1	0.58	2.34	19	6
1:A:95:PHE:CD2	1:A:99:VAL:CG1	0.58	2.86	15	2
1:A:99:VAL:HG21	1:A:141:LEU:HD23	0.58	1.76	14	1
1:A:28:ASN:OD1	1:A:88:TYR:CG	0.58	2.57	7	5
1:A:90:LEU:HD13	1:A:91:LYS:N	0.58	2.13	7	2
1:A:96:MET:HA	1:A:99:VAL:CG1	0.57	2.29	1	1
1:A:134:LYS:O	1:A:138:MET:HG2	0.57	1.98	1	16
1:A:66:GLY:O	1:A:67:LEU:CD2	0.57	2.52	7	2
1:A:114:PHE:CZ	1:A:126:PHE:HB2	0.57	2.34	13	2
1:A:113:ALA:CB	1:A:126:PHE:O	0.57	2.52	17	5
1:A:120:ASP:O	1:A:121:GLU:CB	0.57	2.52	18	7
1:A:69:ILE:CD1	1:A:90:LEU:HD21	0.57	2.18	7	1
1:A:135:ASN:O	1:A:139:ALA:CB	0.57	2.53	7	16
1:A:69:ILE:CG2	1:A:90:LEU:HD23	0.57	2.30	8	1
1:A:61:ILE:HD12	1:A:70:CYS:SG	0.57	2.39	16	2
1:A:99:VAL:CG2	1:A:141:LEU:HD23	0.57	2.30	14	2
1:A:56:LYS:O	1:A:57:HIS:CD2	0.57	2.58	6	1
1:A:53:VAL:CG2	1:A:127:SER:OG	0.57	2.52	10	9
1:A:27:LYS:O	1:A:27:LYS:HG2	0.57	1.98	10	2
1:A:67:LEU:CD1	1:A:93:LYS:C	0.57	2.78	19	2
1:A:107:THR:O	1:A:108:ASN:C	0.57	2.48	8	14
1:A:65:ASP:O	1:A:96:MET:HE1	0.56	2.00	18	2
1:A:44:PHE:CE1	1:A:62:PHE:CE1	0.56	2.93	18	1
1:A:103:ASP:CG	1:A:103:ASP:O	0.56	2.48	16	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:GLY:O	1:A:67:LEU:HG	0.56	2.00	20	3
1:A:105:ASP:HB2	1:A:113:ALA:O	0.56	2.00	20	2
1:A:106:ASP:OD2	1:A:110:TYR:CZ	0.56	2.58	5	1
1:A:109:GLU:C	1:A:110:TYR:CD1	0.56	2.84	15	2
1:A:63:LEU:HD11	1:A:144:LEU:HD11	0.56	1.77	4	2
1:A:73:SER:HA	1:A:88:TYR:CG	0.56	2.35	6	1
1:A:128:ALA:HA	1:A:137:TRP:CH2	0.56	2.36	4	20
1:A:68:MET:HB2	1:A:95:PHE:CD2	0.56	2.35	5	2
1:A:50:LEU:HD23	1:A:114:PHE:HZ	0.56	1.59	13	1
1:A:68:MET:SD	1:A:144:LEU:HD12	0.56	2.40	15	1
1:A:114:PHE:CD1	1:A:116:ILE:HD11	0.56	2.36	2	3
1:A:101:ILE:HD12	1:A:116:ILE:CG1	0.56	2.30	12	2
1:A:29:ILE:O	1:A:86:ALA:CB	0.56	2.54	6	1
1:A:95:PHE:CD2	1:A:118:LEU:HB2	0.56	2.36	15	4
1:A:113:ALA:HB2	1:A:127:SER:HB2	0.56	1.77	11	1
1:A:116:ILE:HG13	1:A:126:PHE:CD2	0.55	2.36	10	10
1:A:90:LEU:HD22	1:A:90:LEU:C	0.55	2.27	19	2
1:A:67:LEU:HD22	1:A:94:PHE:HA	0.55	1.78	11	2
1:A:95:PHE:O	1:A:99:VAL:CG1	0.55	2.54	13	9
1:A:142:ILE:O	1:A:146:TYR:CD1	0.55	2.58	12	5
1:A:95:PHE:CZ	1:A:118:LEU:HB3	0.55	2.36	11	2
1:A:46:MET:HB2	1:A:63:LEU:HD21	0.55	1.77	15	1
1:A:62:PHE:O	1:A:69:ILE:HG22	0.55	2.01	1	4
1:A:63:LEU:HD21	1:A:144:LEU:HD12	0.55	1.76	7	1
1:A:93:LYS:HB3	1:A:95:PHE:CE1	0.55	2.36	14	8
1:A:106:ASP:HB2	1:A:110:TYR:CD2	0.55	2.36	19	3
1:A:73:SER:HB3	1:A:88:TYR:CE2	0.55	2.37	15	2
1:A:26:GLN:HG3	1:A:27:LYS:CE	0.55	2.32	5	1
1:A:106:ASP:CB	1:A:110:TYR:CG	0.55	2.89	19	1
1:A:102:ASN:O	1:A:104:LYS:N	0.55	2.40	13	13
1:A:142:ILE:O	1:A:146:TYR:CG	0.55	2.60	5	5
1:A:68:MET:HB2	1:A:95:PHE:CG	0.55	2.36	5	2
1:A:73:SER:OG	1:A:88:TYR:CE1	0.55	2.53	3	1
1:A:113:ALA:HB2	1:A:127:SER:CB	0.55	2.32	13	1
1:A:26:GLN:HA	1:A:29:ILE:CG1	0.55	2.32	9	6
1:A:32:TRP:O	1:A:32:TRP:CG	0.55	2.60	6	3
1:A:68:MET:HB3	1:A:95:PHE:CG	0.55	2.37	3	5
1:A:68:MET:HE3	1:A:95:PHE:CE2	0.55	2.36	3	3
1:A:61:ILE:HD12	1:A:68:MET:HE1	0.55	1.78	2	1
1:A:111:LYS:CG	1:A:112:HIS:N	0.55	2.69	15	4
1:A:50:LEU:HA	1:A:137:TRP:CH2	0.55	2.37	16	18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:95:PHE:O	1:A:99:VAL:HG12	0.55	2.02	18	3
1:A:116:ILE:CD1	1:A:126:PHE:CG	0.55	2.89	18	1
1:A:95:PHE:CE2	1:A:118:LEU:CD2	0.55	2.72	1	1
1:A:70:CYS:O	1:A:91:LYS:CB	0.55	2.55	6	5
1:A:50:LEU:HD23	1:A:126:PHE:HB3	0.55	1.78	18	1
1:A:144:LEU:O	1:A:147:ARG:N	0.54	2.40	2	15
1:A:59:ARG:NH2	1:A:124:VAL:HG12	0.54	2.17	10	1
1:A:44:PHE:CD1	1:A:47:GLU:CD	0.54	2.86	12	1
1:A:73:SER:CB	1:A:88:TYR:CD2	0.54	2.89	1	1
1:A:99:VAL:CG2	1:A:141:LEU:O	0.54	2.55	8	12
1:A:68:MET:HG3	1:A:95:PHE:CD2	0.54	2.36	3	2
1:A:59:ARG:CA	1:A:71:CYS:O	0.54	2.55	7	2
1:A:29:ILE:CD1	1:A:30:ASP:N	0.54	2.70	2	10
1:A:72:LYS:O	1:A:88:TYR:CB	0.54	2.55	17	4
1:A:47:GLU:HB2	1:A:62:PHE:CZ	0.54	2.38	20	3
1:A:86:ALA:C	1:A:88:TYR:N	0.54	2.64	6	5
1:A:47:GLU:HB3	1:A:62:PHE:CE1	0.54	2.37	5	10
1:A:142:ILE:O	1:A:146:TYR:CD2	0.54	2.60	10	4
1:A:105:ASP:O	1:A:110:TYR:CD2	0.54	2.61	9	1
1:A:93:LYS:HA	1:A:95:PHE:CZ	0.54	2.37	12	1
1:A:95:PHE:O	1:A:99:VAL:HG13	0.54	2.03	6	3
1:A:72:LYS:O	1:A:88:TYR:HB2	0.54	2.03	6	1
1:A:59:ARG:NH1	1:A:72:LYS:CG	0.54	2.71	7	1
1:A:94:PHE:C	1:A:95:PHE:CD1	0.54	2.85	12	5
1:A:61:ILE:HD13	1:A:70:CYS:HB2	0.54	1.79	18	1
1:A:106:ASP:O	1:A:107:THR:HG23	0.54	2.02	20	2
1:A:50:LEU:HG	1:A:137:TRP:CE2	0.54	2.37	17	20
1:A:95:PHE:HE2	1:A:141:LEU:HD11	0.54	1.61	3	3
1:A:67:LEU:HD21	1:A:92:GLU:CD	0.54	2.27	6	1
1:A:92:GLU:HB3	1:A:94:PHE:CZ	0.54	2.38	18	1
1:A:29:ILE:HD12	1:A:30:ASP:N	0.54	2.18	2	6
1:A:95:PHE:CB	1:A:144:LEU:HD12	0.54	2.32	2	1
1:A:47:GLU:HB2	1:A:62:PHE:CE1	0.54	2.38	5	3
1:A:60:HIS:ND1	1:A:88:TYR:CZ	0.54	2.76	12	1
1:A:45:ILE:HG22	1:A:46:MET:N	0.53	2.18	10	5
1:A:61:ILE:HG23	1:A:68:MET:HE1	0.53	1.77	2	2
1:A:61:ILE:HG23	1:A:68:MET:HE2	0.53	1.80	5	2
1:A:73:SER:HB2	1:A:88:TYR:CE2	0.53	2.38	18	5
1:A:50:LEU:HB3	1:A:126:PHE:CD1	0.53	2.37	5	5
1:A:66:GLY:O	1:A:67:LEU:CG	0.53	2.56	20	3
1:A:96:MET:HA	1:A:144:LEU:HD22	0.53	1.78	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:ALA:O	1:A:56:LYS:CD	0.53	2.57	9	1
1:A:116:ILE:CG2	1:A:141:LEU:CD2	0.53	2.86	9	1
1:A:105:ASP:CG	1:A:106:ASP:N	0.53	2.63	17	2
1:A:30:ASP:CG	1:A:31:GLY:N	0.53	2.65	1	15
1:A:73:SER:CB	1:A:88:TYR:CZ	0.53	2.92	16	4
1:A:63:LEU:HD11	1:A:144:LEU:HD12	0.53	1.80	16	3
1:A:61:ILE:HG23	1:A:70:CYS:SG	0.53	2.44	12	1
1:A:68:MET:O	1:A:93:LYS:O	0.53	2.25	12	4
1:A:95:PHE:HA	1:A:99:VAL:CG1	0.53	2.34	11	8
1:A:73:SER:HB3	1:A:88:TYR:CE1	0.53	2.39	11	2
1:A:93:LYS:CB	1:A:95:PHE:CE2	0.53	2.92	12	3
1:A:68:MET:O	1:A:93:LYS:N	0.53	2.42	13	9
1:A:57:HIS:CD2	1:A:58:GLU:O	0.53	2.61	9	1
1:A:73:SER:HB2	1:A:88:TYR:CD2	0.53	2.37	1	3
1:A:28:ASN:O	1:A:88:TYR:C	0.53	2.52	3	5
1:A:117:ILE:HG22	1:A:117:ILE:O	0.53	2.03	17	2
1:A:68:MET:HE3	1:A:70:CYS:HB2	0.53	1.80	2	1
1:A:106:ASP:HB2	1:A:110:TYR:CD1	0.53	2.39	16	1
1:A:95:PHE:CD1	1:A:99:VAL:HG12	0.53	2.39	1	1
1:A:60:HIS:ND1	1:A:62:PHE:CE1	0.53	2.77	8	1
1:A:73:SER:OG	1:A:88:TYR:CZ	0.52	2.59	3	3
1:A:114:PHE:HZ	1:A:128:ALA:HB3	0.52	1.63	9	4
1:A:102:ASN:O	1:A:115:GLU:N	0.52	2.40	18	2
1:A:60:HIS:HB2	1:A:88:TYR:CD2	0.52	2.39	9	2
1:A:109:GLU:HG2	1:A:110:TYR:CE1	0.52	2.40	15	3
1:A:46:MET:HB2	1:A:63:LEU:HB3	0.52	1.80	12	1
1:A:90:LEU:O	1:A:90:LEU:CD1	0.52	2.53	15	1
1:A:50:LEU:HG	1:A:137:TRP:CZ2	0.52	2.39	2	20
1:A:68:MET:CB	1:A:93:LYS:O	0.52	2.57	1	3
1:A:93:LYS:HB3	1:A:95:PHE:CD2	0.52	2.39	16	6
1:A:111:LYS:HG3	1:A:112:HIS:CD2	0.52	2.39	10	2
1:A:146:TYR:O	1:A:150:LEU:CD2	0.52	2.57	20	19
1:A:60:HIS:CB	1:A:71:CYS:SG	0.52	2.98	3	3
1:A:45:ILE:CG2	1:A:63:LEU:HD12	0.52	2.33	11	2
1:A:113:ALA:HB2	1:A:127:SER:HG	0.52	1.64	16	2
1:A:46:MET:CG	1:A:63:LEU:HD23	0.52	2.34	6	2
1:A:106:ASP:OD2	1:A:110:TYR:CE2	0.52	2.62	5	2
1:A:44:PHE:CD1	1:A:47:GLU:CG	0.52	2.92	12	1
1:A:47:GLU:CB	1:A:62:PHE:CZ	0.52	2.93	20	2
1:A:64:PHE:N	1:A:67:LEU:O	0.52	2.41	12	2
1:A:112:HIS:O	1:A:112:HIS:CG	0.52	2.62	6	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:MET:HG3	1:A:63:LEU:HD22	0.52	1.81	12	1
1:A:95:PHE:CE1	1:A:120:ASP:CB	0.52	2.91	12	2
1:A:95:PHE:CD1	1:A:119:LYS:CB	0.52	2.93	13	1
1:A:96:MET:HG3	1:A:144:LEU:HD13	0.52	1.81	18	1
1:A:60:HIS:N	1:A:71:CYS:O	0.52	2.43	2	8
1:A:95:PHE:HB3	1:A:144:LEU:HD12	0.52	1.81	2	3
1:A:66:GLY:C	1:A:96:MET:SD	0.52	2.93	6	2
1:A:106:ASP:O	1:A:107:THR:CG2	0.52	2.57	20	2
1:A:61:ILE:CD1	1:A:70:CYS:SG	0.52	2.98	5	2
1:A:60:HIS:NE2	1:A:62:PHE:CD2	0.52	2.78	4	1
1:A:58:GLU:C	1:A:59:ARG:CG	0.52	2.82	5	2
1:A:50:LEU:HB2	1:A:126:PHE:CD1	0.52	2.39	14	4
1:A:113:ALA:O	1:A:114:PHE:CD2	0.52	2.63	15	1
1:A:26:GLN:HG2	1:A:32:TRP:CZ3	0.52	2.39	18	1
1:A:120:ASP:O	1:A:121:GLU:C	0.52	2.53	10	1
1:A:44:PHE:CG	1:A:47:GLU:OE2	0.52	2.63	12	1
1:A:95:PHE:CD1	1:A:118:LEU:HB2	0.52	2.40	1	2
1:A:46:MET:SD	1:A:140:ALA:CB	0.52	2.98	7	9
1:A:67:LEU:HD13	1:A:94:PHE:N	0.52	2.20	6	3
1:A:95:PHE:CD2	1:A:141:LEU:HD11	0.52	2.40	8	1
1:A:64:PHE:CE2	1:A:69:ILE:HG23	0.52	2.39	20	1
1:A:142:ILE:HG23	1:A:146:TYR:CE1	0.51	2.40	5	5
1:A:73:SER:HB2	1:A:88:TYR:CZ	0.51	2.39	17	5
1:A:63:LEU:HD22	1:A:68:MET:CE	0.51	2.35	11	1
1:A:118:LEU:C	1:A:119:LYS:O	0.51	2.53	10	11
1:A:73:SER:CB	1:A:88:TYR:CD1	0.51	2.92	12	5
1:A:95:PHE:CZ	1:A:120:ASP:OD2	0.51	2.63	18	1
1:A:61:ILE:CG2	1:A:68:MET:CE	0.51	2.83	11	2
1:A:70:CYS:O	1:A:91:LYS:N	0.51	2.43	4	5
1:A:96:MET:SD	1:A:96:MET:N	0.51	2.84	15	2
1:A:95:PHE:CD1	1:A:96:MET:N	0.51	2.78	1	1
1:A:94:PHE:O	1:A:95:PHE:CD1	0.51	2.64	13	2
1:A:95:PHE:CD1	1:A:95:PHE:C	0.51	2.89	1	1
1:A:95:PHE:C	1:A:97:ARG:N	0.51	2.68	5	10
1:A:88:TYR:CD1	1:A:88:TYR:N	0.51	2.74	5	1
1:A:101:ILE:HD11	1:A:114:PHE:CE2	0.51	2.40	16	1
1:A:73:SER:HB2	1:A:88:TYR:CE1	0.51	2.41	10	2
1:A:49:THR:HB	1:A:60:HIS:CD2	0.51	2.40	19	2
1:A:101:ILE:HD12	1:A:116:ILE:HG12	0.51	1.81	12	1
1:A:59:ARG:CB	1:A:72:LYS:HA	0.51	2.36	8	2
1:A:68:MET:CB	1:A:95:PHE:CE1	0.51	2.94	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:72:LYS:N	1:A:89:ARG:O	0.51	2.43	13	4
1:A:107:THR:O	1:A:110:TYR:N	0.51	2.44	5	11
1:A:73:SER:CB	1:A:88:TYR:CE1	0.51	2.94	3	4
1:A:99:VAL:HG21	1:A:141:LEU:O	0.51	2.05	3	3
1:A:139:ALA:O	1:A:143:SER:N	0.51	2.44	20	10
1:A:26:GLN:OE1	1:A:32:TRP:CD2	0.51	2.64	18	1
1:A:73:SER:HA	1:A:88:TYR:HB2	0.51	1.83	6	1
1:A:99:VAL:HG21	1:A:141:LEU:HD13	0.51	1.82	8	2
1:A:68:MET:SD	1:A:144:LEU:CD1	0.51	2.99	15	1
1:A:46:MET:SD	1:A:140:ALA:HB2	0.50	2.45	8	3
1:A:64:PHE:CD2	1:A:69:ILE:CG2	0.50	2.94	16	3
1:A:45:ILE:HD12	1:A:63:LEU:HD11	0.50	1.82	20	3
1:A:93:LYS:C	1:A:95:PHE:CD2	0.50	2.89	7	1
1:A:101:ILE:HB	1:A:141:LEU:HD22	0.50	1.84	13	2
1:A:68:MET:HG2	1:A:95:PHE:CE1	0.50	2.41	15	1
1:A:28:ASN:ND2	1:A:88:TYR:CZ	0.50	2.79	19	1
1:A:50:LEU:CG	1:A:137:TRP:CE3	0.50	2.94	9	19
1:A:93:LYS:CG	1:A:118:LEU:HD13	0.50	2.36	2	1
1:A:95:PHE:CE1	1:A:118:LEU:CB	0.50	2.94	17	2
1:A:68:MET:SD	1:A:93:LYS:CB	0.50	3.00	3	2
1:A:29:ILE:C	1:A:29:ILE:CD1	0.50	2.84	6	2
1:A:105:ASP:HB2	1:A:112:HIS:O	0.50	2.07	13	1
1:A:29:ILE:CG2	1:A:90:LEU:HB3	0.50	2.36	1	3
1:A:106:ASP:HB3	1:A:110:TYR:CD1	0.50	2.41	9	2
1:A:95:PHE:CZ	1:A:120:ASP:CG	0.50	2.90	12	2
1:A:112:HIS:O	1:A:114:PHE:CE1	0.50	2.65	18	1
1:A:112:HIS:O	1:A:112:HIS:ND1	0.50	2.45	20	4
1:A:112:HIS:CD2	1:A:128:ALA:O	0.50	2.65	5	5
1:A:130:SER:O	1:A:131:ALA:C	0.50	2.55	17	3
1:A:26:GLN:NE2	1:A:27:LYS:NZ	0.50	2.60	11	1
1:A:106:ASP:HB3	1:A:110:TYR:CG	0.50	2.42	19	1
1:A:113:ALA:HA	1:A:126:PHE:O	0.50	2.06	9	14
1:A:128:ALA:HB2	1:A:137:TRP:CH2	0.50	2.39	14	2
1:A:113:ALA:CA	1:A:126:PHE:O	0.50	2.59	17	5
1:A:107:THR:OG1	1:A:108:ASN:N	0.50	2.38	13	1
1:A:101:ILE:CG1	1:A:116:ILE:HD12	0.50	2.36	14	1
1:A:113:ALA:C	1:A:114:PHE:CD1	0.50	2.90	14	2
1:A:32:TRP:CH2	1:A:64:PHE:CE2	0.50	3.00	19	1
1:A:29:ILE:HD12	1:A:29:ILE:N	0.50	2.21	14	1
1:A:29:ILE:C	1:A:86:ALA:HB1	0.50	2.29	19	1
1:A:47:GLU:HB3	1:A:62:PHE:CZ	0.50	2.41	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:ALA:O	1:A:56:LYS:C	0.50	2.55	18	2
1:A:105:ASP:CG	1:A:113:ALA:O	0.49	2.55	3	11
1:A:31:GLY:O	1:A:32:TRP:O	0.49	2.30	16	2
1:A:29:ILE:O	1:A:88:TYR:O	0.49	2.29	12	9
1:A:50:LEU:CD2	1:A:137:TRP:CD2	0.49	2.95	14	16
1:A:51:THR:CG2	1:A:127:SER:HB2	0.49	2.37	7	4
1:A:93:LYS:O	1:A:95:PHE:N	0.49	2.45	8	5
1:A:62:PHE:HB3	1:A:64:PHE:CE1	0.49	2.42	16	2
1:A:112:HIS:O	1:A:127:SER:HA	0.49	2.07	9	1
1:A:64:PHE:CE2	1:A:69:ILE:HG13	0.49	2.42	10	2
1:A:98:LYS:CG	1:A:145:GLN:OE1	0.49	2.60	10	1
1:A:136:ASN:O	1:A:140:ALA:CB	0.49	2.61	17	3
1:A:95:PHE:CZ	1:A:120:ASP:HB2	0.49	2.42	12	2
1:A:97:ARG:O	1:A:98:LYS:CG	0.49	2.60	13	1
1:A:96:MET:HG2	1:A:97:ARG:N	0.49	2.22	15	1
1:A:106:ASP:C	1:A:110:TYR:HB2	0.49	2.31	15	1
1:A:50:LEU:HD22	1:A:126:PHE:CG	0.49	2.42	14	4
1:A:44:PHE:CE2	1:A:47:GLU:OE2	0.49	2.66	13	1
1:A:95:PHE:CD1	1:A:120:ASP:HB2	0.49	2.42	18	1
1:A:50:LEU:CD1	1:A:61:ILE:HB	0.49	2.38	12	17
1:A:131:ALA:O	1:A:134:LYS:CG	0.49	2.60	13	3
1:A:67:LEU:HD22	1:A:94:PHE:CB	0.49	2.37	15	1
1:A:48:GLY:O	1:A:61:ILE:O	0.49	2.31	11	12
1:A:60:HIS:HB2	1:A:88:TYR:CE2	0.49	2.42	15	2
1:A:114:PHE:O	1:A:125:ILE:HA	0.49	2.06	11	10
1:A:64:PHE:CE2	1:A:69:ILE:HB	0.49	2.42	2	3
1:A:93:LYS:HG2	1:A:118:LEU:HD13	0.49	1.84	2	1
1:A:57:HIS:CE1	1:A:73:SER:O	0.49	2.65	9	1
1:A:44:PHE:CD1	1:A:47:GLU:OE2	0.49	2.66	12	1
1:A:28:ASN:OD1	1:A:88:TYR:CD1	0.49	2.65	15	1
1:A:114:PHE:HD1	1:A:116:ILE:HD11	0.49	1.68	2	4
1:A:68:MET:HG2	1:A:95:PHE:CE2	0.49	2.42	2	1
1:A:72:LYS:O	1:A:89:ARG:N	0.49	2.45	9	2
1:A:106:ASP:O	1:A:109:GLU:N	0.49	2.40	4	8
1:A:105:ASP:OD2	1:A:107:THR:HG23	0.49	2.08	5	2
1:A:64:PHE:HB2	1:A:67:LEU:O	0.49	2.08	16	11
1:A:92:GLU:O	1:A:93:LYS:CE	0.49	2.61	1	1
1:A:95:PHE:O	1:A:97:ARG:N	0.49	2.46	5	8
1:A:118:LEU:C	1:A:120:ASP:N	0.49	2.69	20	7
1:A:57:HIS:ND1	1:A:74:ASN:ND2	0.49	2.60	13	2
1:A:63:LEU:HD13	1:A:68:MET:HE3	0.49	1.84	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:ILE:HG21	1:A:63:LEU:HD21	0.49	1.84	17	2
1:A:68:MET:CG	1:A:95:PHE:CE2	0.49	2.96	5	2
1:A:123:SER:C	1:A:124:VAL:CG2	0.49	2.85	18	6
1:A:96:MET:C	1:A:96:MET:SD	0.49	2.96	7	2
1:A:63:LEU:H	1:A:63:LEU:HD23	0.49	1.68	11	4
1:A:118:LEU:O	1:A:118:LEU:CD1	0.49	2.60	10	1
1:A:68:MET:HG2	1:A:95:PHE:CZ	0.48	2.42	15	2
1:A:73:SER:HA	1:A:88:TYR:CD1	0.48	2.43	20	3
1:A:50:LEU:CD2	1:A:126:PHE:CG	0.48	2.95	15	6
1:A:120:ASP:O	1:A:122:ASN:N	0.48	2.46	10	1
1:A:93:LYS:HB3	1:A:95:PHE:CD1	0.48	2.43	11	1
1:A:64:PHE:CZ	1:A:69:ILE:CG2	0.48	2.96	2	1
1:A:63:LEU:CD1	1:A:63:LEU:C	0.48	2.81	20	5
1:A:63:LEU:CB	1:A:68:MET:HE3	0.48	2.38	6	1
1:A:70:CYS:SG	1:A:93:LYS:CD	0.48	3.01	16	2
1:A:128:ALA:HA	1:A:137:TRP:CZ3	0.48	2.43	13	3
1:A:62:PHE:O	1:A:69:ILE:CG2	0.48	2.62	18	2
1:A:55:ALA:C	1:A:56:LYS:CG	0.48	2.86	9	3
1:A:119:LYS:C	1:A:121:GLU:H	0.48	2.16	20	1
1:A:59:ARG:HD2	1:A:61:ILE:HD11	0.48	1.84	7	1
1:A:60:HIS:CE1	1:A:88:TYR:CZ	0.48	3.01	12	1
1:A:99:VAL:HG23	1:A:100:GLN:N	0.48	2.23	15	1
1:A:51:THR:O	1:A:127:SER:N	0.48	2.46	9	10
1:A:98:LYS:C	1:A:99:VAL:HG13	0.48	2.33	8	5
1:A:96:MET:O	1:A:144:LEU:HB3	0.48	2.08	18	4
1:A:98:LYS:C	1:A:99:VAL:CG1	0.48	2.87	13	7
1:A:59:ARG:CD	1:A:88:TYR:CE2	0.48	2.96	8	1
1:A:28:ASN:O	1:A:88:TYR:HB2	0.48	2.08	17	3
1:A:112:HIS:O	1:A:127:SER:OG	0.48	2.31	12	2
1:A:67:LEU:HD13	1:A:94:PHE:HA	0.48	1.86	19	2
1:A:118:LEU:O	1:A:120:ASP:N	0.48	2.47	12	3
1:A:71:CYS:O	1:A:71:CYS:SG	0.48	2.71	4	1
1:A:109:GLU:CG	1:A:109:GLU:O	0.48	2.61	15	1
1:A:116:ILE:HD11	1:A:126:PHE:CG	0.48	2.44	18	2
1:A:69:ILE:CD1	1:A:71:CYS:SG	0.47	3.02	1	1
1:A:144:LEU:C	1:A:146:TYR:N	0.47	2.72	17	20
1:A:96:MET:SD	1:A:97:ARG:N	0.47	2.87	10	2
1:A:26:GLN:HG2	1:A:32:TRP:CE3	0.47	2.43	18	1
1:A:100:GLN:O	1:A:117:ILE:N	0.47	2.47	6	9
1:A:117:ILE:HA	1:A:122:ASN:O	0.47	2.08	18	3
1:A:59:ARG:HD3	1:A:88:TYR:CE1	0.47	2.44	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:124:VAL:C	1:A:125:ILE:HD12	0.47	2.34	8	3
1:A:105:ASP:HB3	1:A:114:PHE:N	0.47	2.23	13	1
1:A:61:ILE:HG23	1:A:70:CYS:HB3	0.47	1.86	19	1
1:A:61:ILE:CD1	1:A:70:CYS:HB3	0.47	2.40	6	4
1:A:52:ARG:N	1:A:57:HIS:O	0.47	2.47	17	3
1:A:110:TYR:CD1	1:A:110:TYR:N	0.47	2.82	15	3
1:A:47:GLU:OE1	1:A:62:PHE:CE1	0.47	2.67	12	1
1:A:29:ILE:HD12	1:A:86:ALA:CB	0.47	2.40	16	1
1:A:95:PHE:CE2	1:A:141:LEU:HD21	0.47	2.43	2	1
1:A:55:ALA:O	1:A:56:LYS:HB3	0.47	2.08	11	2
1:A:101:ILE:HG21	1:A:138:MET:HA	0.47	1.86	13	1
1:A:29:ILE:HD12	1:A:29:ILE:C	0.47	2.33	19	1
1:A:111:LYS:HE2	1:A:112:HIS:CE1	0.47	2.43	20	1
1:A:111:LYS:HG3	1:A:112:HIS:N	0.47	2.23	12	7
1:A:120:ASP:C	1:A:122:ASN:N	0.47	2.72	10	1
1:A:132:GLU:O	1:A:136:ASN:N	0.47	2.39	17	4
1:A:50:LEU:CG	1:A:137:TRP:CZ3	0.47	2.97	19	17
1:A:68:MET:HB2	1:A:95:PHE:HB2	0.47	1.86	3	2
1:A:52:ARG:O	1:A:52:ARG:CG	0.47	2.63	4	1
1:A:47:GLU:HB3	1:A:62:PHE:CE2	0.47	2.44	8	1
1:A:95:PHE:O	1:A:98:LYS:C	0.47	2.58	18	2
1:A:106:ASP:CB	1:A:110:TYR:CD2	0.47	2.98	19	1
1:A:64:PHE:C	1:A:66:GLY:H	0.47	2.18	1	4
1:A:57:HIS:NE2	1:A:74:ASN:ND2	0.47	2.63	2	1
1:A:116:ILE:O	1:A:123:SER:HA	0.47	2.09	13	4
1:A:136:ASN:O	1:A:140:ALA:HB2	0.47	2.10	11	4
1:A:27:LYS:N	1:A:27:LYS:HE3	0.47	2.25	14	1
1:A:90:LEU:HD22	1:A:91:LYS:H	0.47	1.70	9	1
1:A:65:ASP:O	1:A:66:GLY:C	0.47	2.58	14	1
1:A:69:ILE:CD1	1:A:91:LYS:O	0.47	2.63	14	1
1:A:51:THR:HG22	1:A:127:SER:CB	0.47	2.39	17	1
1:A:95:PHE:CE1	1:A:118:LEU:HB2	0.47	2.45	17	1
1:A:32:TRP:O	1:A:32:TRP:CD1	0.47	2.68	7	1
1:A:116:ILE:N	1:A:116:ILE:CD1	0.47	2.74	20	5
1:A:111:LYS:HE3	1:A:112:HIS:CG	0.47	2.45	10	1
1:A:44:PHE:CE2	1:A:47:GLU:HB3	0.47	2.45	11	1
1:A:111:LYS:CE	1:A:112:HIS:NE2	0.47	2.77	20	1
1:A:64:PHE:C	1:A:66:GLY:N	0.47	2.72	2	7
1:A:95:PHE:O	1:A:98:LYS:N	0.47	2.39	1	3
1:A:58:GLU:O	1:A:59:ARG:CG	0.47	2.63	12	1
1:A:134:LYS:HG3	1:A:135:ASN:N	0.46	2.25	1	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:102:ASN:O	1:A:115:GLU:O	0.46	2.34	14	9
1:A:67:LEU:HD13	1:A:94:PHE:HD1	0.46	1.59	7	1
1:A:53:VAL:HB	1:A:125:ILE:CG2	0.46	2.40	9	1
1:A:63:LEU:C	1:A:63:LEU:CD1	0.46	2.82	2	3
1:A:95:PHE:HD1	1:A:99:VAL:HG12	0.46	1.68	1	1
1:A:56:LYS:O	1:A:57:HIS:ND1	0.46	2.49	5	7
1:A:45:ILE:HG12	1:A:65:ASP:N	0.46	2.25	16	2
1:A:112:HIS:ND1	1:A:128:ALA:O	0.46	2.47	7	1
1:A:73:SER:HB3	1:A:88:TYR:CZ	0.46	2.46	11	2
1:A:68:MET:CE	1:A:69:ILE:C	0.46	2.88	20	1
1:A:95:PHE:CG	1:A:99:VAL:CG1	0.46	2.96	2	3
1:A:67:LEU:CD1	1:A:68:MET:O	0.46	2.62	16	2
1:A:59:ARG:NH2	1:A:124:VAL:CG1	0.46	2.78	13	2
1:A:59:ARG:HD3	1:A:73:SER:CB	0.46	2.40	19	1
1:A:106:ASP:HB2	1:A:110:TYR:CE2	0.46	2.45	1	3
1:A:116:ILE:HG13	1:A:126:PHE:CG	0.46	2.45	1	3
1:A:62:PHE:O	1:A:64:PHE:CE1	0.46	2.68	6	2
1:A:71:CYS:HA	1:A:89:ARG:O	0.46	2.10	12	2
1:A:116:ILE:O	1:A:117:ILE:CG1	0.46	2.63	4	4
1:A:145:GLN:O	1:A:145:GLN:NE2	0.46	2.48	13	1
1:A:95:PHE:CD2	1:A:118:LEU:HB3	0.46	2.46	15	1
1:A:142:ILE:HD13	1:A:145:GLN:HG2	0.46	1.88	16	1
1:A:31:GLY:N	1:A:90:LEU:HD12	0.46	2.24	2	1
1:A:44:PHE:O	1:A:45:ILE:C	0.46	2.59	2	3
1:A:130:SER:HB3	1:A:133:GLU:CG	0.46	2.40	10	5
1:A:26:GLN:O	1:A:26:GLN:CD	0.46	2.59	5	1
1:A:142:ILE:HG22	1:A:146:TYR:CE2	0.46	2.44	15	3
1:A:51:THR:CG2	1:A:127:SER:HB3	0.46	2.40	11	1
1:A:68:MET:CG	1:A:95:PHE:CZ	0.46	2.98	15	1
1:A:111:LYS:CE	1:A:112:HIS:CD2	0.46	2.99	17	1
1:A:61:ILE:HG23	1:A:68:MET:CE	0.46	2.41	1	1
1:A:107:THR:C	1:A:109:GLU:H	0.46	2.18	10	3
1:A:46:MET:CE	1:A:63:LEU:HD23	0.46	2.32	19	1
1:A:130:SER:HB2	1:A:133:GLU:CG	0.46	2.40	14	6
1:A:68:MET:HG3	1:A:95:PHE:CE2	0.46	2.46	5	1
1:A:100:GLN:O	1:A:117:ILE:O	0.46	2.34	19	3
1:A:114:PHE:CZ	1:A:128:ALA:HB3	0.46	2.46	9	1
1:A:138:MET:HE2	1:A:139:ALA:CA	0.46	2.40	6	2
1:A:45:ILE:HG22	1:A:46:MET:HG2	0.46	1.88	10	1
1:A:105:ASP:O	1:A:106:ASP:CG	0.46	2.58	10	1
1:A:72:LYS:O	1:A:88:TYR:CG	0.46	2.69	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:128:ALA:CB	1:A:137:TRP:CH2	0.46	2.99	2	4
1:A:98:LYS:O	1:A:99:VAL:CG1	0.46	2.64	8	3
1:A:30:ASP:OD2	1:A:89:ARG:CZ	0.46	2.63	10	1
1:A:50:LEU:HD22	1:A:126:PHE:CE2	0.45	2.46	1	4
1:A:138:MET:HE2	1:A:139:ALA:N	0.45	2.26	6	1
1:A:59:ARG:HD3	1:A:88:TYR:CZ	0.45	2.46	8	1
1:A:26:GLN:O	1:A:29:ILE:HD11	0.45	2.11	10	1
1:A:105:ASP:HB3	1:A:113:ALA:O	0.45	2.09	15	2
1:A:92:GLU:CG	1:A:92:GLU:O	0.45	2.63	16	1
1:A:132:GLU:O	1:A:135:ASN:N	0.45	2.48	17	1
1:A:68:MET:C	1:A:68:MET:SD	0.45	2.99	18	1
1:A:118:LEU:O	1:A:121:GLU:N	0.45	2.47	20	1
1:A:59:ARG:CD	1:A:73:SER:CB	0.45	2.95	8	2
1:A:92:GLU:HG2	1:A:94:PHE:CZ	0.45	2.46	13	1
1:A:68:MET:CG	1:A:96:MET:HG2	0.45	2.41	1	1
1:A:45:ILE:C	1:A:46:MET:HG2	0.45	2.36	14	1
1:A:68:MET:CG	1:A:95:PHE:CE1	0.45	2.99	15	1
1:A:130:SER:O	1:A:133:GLU:N	0.45	2.50	8	5
1:A:138:MET:HE3	1:A:139:ALA:CA	0.45	2.41	3	2
1:A:57:HIS:CD2	1:A:74:ASN:HB2	0.45	2.47	5	1
1:A:50:LEU:CD1	1:A:61:ILE:CG1	0.45	2.91	12	2
1:A:59:ARG:HD3	1:A:88:TYR:CD1	0.45	2.46	8	1
1:A:118:LEU:HD12	1:A:118:LEU:C	0.45	2.37	9	1
1:A:68:MET:CB	1:A:95:PHE:HB2	0.45	2.42	17	4
1:A:32:TRP:CZ3	1:A:64:PHE:CE2	0.45	3.05	7	1
1:A:59:ARG:CD	1:A:73:SER:HB3	0.45	2.42	19	2
1:A:116:ILE:O	1:A:124:VAL:N	0.45	2.50	12	1
1:A:96:MET:C	1:A:98:LYS:N	0.45	2.74	19	5
1:A:128:ALA:CA	1:A:137:TRP:CH2	0.45	3.00	2	5
1:A:67:LEU:C	1:A:67:LEU:CD1	0.45	2.78	3	1
1:A:28:ASN:O	1:A:28:ASN:OD1	0.45	2.35	6	1
1:A:63:LEU:CD2	1:A:68:MET:HE3	0.45	2.42	11	1
1:A:62:PHE:O	1:A:69:ILE:O	0.45	2.35	19	2
1:A:53:VAL:O	1:A:125:ILE:CG2	0.45	2.63	8	4
1:A:45:ILE:CD1	1:A:65:ASP:HA	0.45	2.42	7	1
1:A:57:HIS:NE2	1:A:58:GLU:O	0.45	2.50	9	1
1:A:114:PHE:CE2	1:A:134:LYS:HG3	0.45	2.46	15	1
1:A:68:MET:O	1:A:93:LYS:CA	0.45	2.65	13	2
1:A:30:ASP:CB	1:A:89:ARG:CG	0.45	2.94	14	1
1:A:63:LEU:CD2	1:A:96:MET:SD	0.45	2.99	1	1
1:A:133:GLU:OE1	1:A:137:TRP:NE1	0.45	2.50	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:ASN:C	1:A:29:ILE:O	0.45	2.59	3	5
1:A:65:ASP:O	1:A:96:MET:HE3	0.45	2.12	8	1
1:A:51:THR:HB	1:A:127:SER:CB	0.45	2.42	11	1
1:A:28:ASN:ND2	1:A:87:GLU:OE1	0.44	2.51	6	1
1:A:101:ILE:HG22	1:A:142:ILE:HG12	0.44	1.89	14	1
1:A:48:GLY:O	1:A:61:ILE:N	0.44	2.51	9	3
1:A:98:LYS:C	1:A:145:GLN:OE1	0.44	2.60	10	1
1:A:114:PHE:CZ	1:A:126:PHE:HB3	0.44	2.46	13	1
1:A:120:ASP:N	1:A:120:ASP:OD1	0.44	2.50	20	1
1:A:99:VAL:N	1:A:145:GLN:OE1	0.44	2.50	13	2
1:A:112:HIS:CG	1:A:128:ALA:O	0.44	2.71	1	1
1:A:27:LYS:C	1:A:86:ALA:HA	0.44	2.37	2	2
1:A:52:ARG:HA	1:A:125:ILE:O	0.44	2.12	15	4
1:A:28:ASN:CA	1:A:86:ALA:HA	0.44	2.43	20	4
1:A:63:LEU:HD12	1:A:68:MET:CB	0.44	2.38	12	1
1:A:100:GLN:CB	1:A:117:ILE:O	0.44	2.65	1	1
1:A:110:TYR:N	1:A:110:TYR:CD1	0.44	2.84	8	6
1:A:47:GLU:O	1:A:47:GLU:CG	0.44	2.65	2	1
1:A:111:LYS:HE3	1:A:112:HIS:CE1	0.44	2.48	9	1
1:A:123:SER:C	1:A:124:VAL:HG22	0.44	2.38	18	1
1:A:28:ASN:N	1:A:86:ALA:HA	0.44	2.28	20	3
1:A:95:PHE:CB	1:A:99:VAL:HG11	0.44	2.42	17	4
1:A:125:ILE:N	1:A:125:ILE:CD1	0.44	2.78	7	1
1:A:72:LYS:O	1:A:88:TYR:HA	0.44	2.13	12	2
1:A:49:THR:HG23	1:A:60:HIS:CG	0.44	2.48	7	3
1:A:66:GLY:C	1:A:67:LEU:HG	0.44	2.37	7	1
1:A:120:ASP:C	1:A:121:GLU:CG	0.44	2.90	8	1
1:A:68:MET:C	1:A:69:ILE:CG2	0.44	2.90	13	1
1:A:105:ASP:CB	1:A:113:ALA:C	0.44	2.91	13	1
1:A:112:HIS:O	1:A:113:ALA:O	0.44	2.36	13	1
1:A:99:VAL:HB	1:A:141:LEU:HD23	0.44	1.90	1	1
1:A:64:PHE:O	1:A:67:LEU:N	0.44	2.50	2	1
1:A:49:THR:HB	1:A:60:HIS:CG	0.44	2.47	11	3
1:A:96:MET:HG3	1:A:97:ARG:N	0.44	2.26	6	1
1:A:100:GLN:CA	1:A:117:ILE:O	0.44	2.66	7	2
1:A:53:VAL:HG12	1:A:54:GLY:N	0.44	2.24	9	1
1:A:57:HIS:CE1	1:A:73:SER:C	0.44	2.96	9	1
1:A:69:ILE:HD11	1:A:90:LEU:HA	0.43	1.90	1	1
1:A:72:LYS:O	1:A:88:TYR:CA	0.43	2.67	9	3
1:A:68:MET:O	1:A:93:LYS:HB2	0.43	2.14	9	5
1:A:29:ILE:CB	1:A:90:LEU:HB2	0.43	2.43	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:ASN:CG	1:A:74:ASN:O	0.43	2.60	18	1
1:A:107:THR:HG23	1:A:112:HIS:CD2	0.43	2.49	18	1
1:A:93:LYS:HG2	1:A:118:LEU:CD1	0.43	2.44	2	1
1:A:28:ASN:O	1:A:88:TYR:O	0.43	2.35	17	3
1:A:46:MET:CE	1:A:46:MET:C	0.43	2.91	2	1
1:A:118:LEU:HD12	1:A:122:ASN:HB2	0.43	1.90	7	1
1:A:28:ASN:ND2	1:A:88:TYR:CG	0.43	2.86	15	1
1:A:113:ALA:C	1:A:114:PHE:CD2	0.43	2.96	15	1
1:A:57:HIS:CD2	1:A:72:LYS:HD2	0.43	2.49	19	1
1:A:101:ILE:HD13	1:A:138:MET:HA	0.43	1.89	17	4
1:A:73:SER:HB2	1:A:88:TYR:CG	0.43	2.49	5	3
1:A:70:CYS:SG	1:A:93:LYS:CE	0.43	3.07	7	1
1:A:95:PHE:CA	1:A:99:VAL:CG1	0.43	2.96	11	2
1:A:59:ARG:NH2	1:A:124:VAL:HG11	0.43	2.29	12	1
1:A:105:ASP:HA	1:A:112:HIS:O	0.43	2.13	13	1
1:A:106:ASP:HB2	1:A:110:TYR:CE1	0.43	2.48	16	1
1:A:139:ALA:O	1:A:143:SER:CB	0.43	2.67	20	1
1:A:95:PHE:CE1	1:A:118:LEU:HB3	0.43	2.49	3	2
1:A:68:MET:HE3	1:A:95:PHE:HE2	0.43	1.72	3	1
1:A:96:MET:O	1:A:96:MET:SD	0.43	2.76	12	1
1:A:99:VAL:O	1:A:145:GLN:CG	0.43	2.66	12	1
1:A:27:LYS:O	1:A:28:ASN:ND2	0.43	2.52	18	1
1:A:57:HIS:CG	1:A:72:LYS:HD2	0.43	2.49	19	1
1:A:59:ARG:NE	1:A:59:ARG:HA	0.43	2.27	8	2
1:A:65:ASP:O	1:A:96:MET:SD	0.43	2.76	13	1
1:A:30:ASP:OD2	1:A:89:ARG:NH1	0.43	2.52	14	1
1:A:61:ILE:CG2	1:A:68:MET:HE1	0.43	2.43	1	1
1:A:135:ASN:O	1:A:139:ALA:HB2	0.43	2.12	7	2
1:A:106:ASP:C	1:A:107:THR:HG1	0.43	2.20	10	1
1:A:44:PHE:CZ	1:A:47:GLU:HB3	0.43	2.49	11	1
1:A:45:ILE:CG1	1:A:65:ASP:HA	0.43	2.44	11	1
1:A:101:ILE:O	1:A:101:ILE:HG23	0.43	2.12	14	1
1:A:113:ALA:CB	1:A:127:SER:OG	0.43	2.57	4	2
1:A:95:PHE:O	1:A:98:LYS:O	0.43	2.37	9	3
1:A:59:ARG:HA	1:A:71:CYS:O	0.43	2.14	13	1
1:A:26:GLN:HG3	1:A:27:LYS:N	0.43	2.29	16	1
1:A:61:ILE:CD1	1:A:70:CYS:HB2	0.43	2.44	4	2
1:A:51:THR:CB	1:A:127:SER:HB2	0.43	2.43	10	2
1:A:45:ILE:HG13	1:A:65:ASP:N	0.43	2.29	9	1
1:A:44:PHE:CZ	1:A:62:PHE:CE1	0.43	3.07	10	1
1:A:142:ILE:HG22	1:A:146:TYR:CD2	0.43	2.49	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:THR:HG23	1:A:60:HIS:CD2	0.42	2.49	5	1
1:A:29:ILE:HA	1:A:90:LEU:HB3	0.42	1.91	6	1
1:A:47:GLU:N	1:A:47:GLU:OE1	0.42	2.51	17	1
1:A:128:ALA:HB3	1:A:134:LYS:CG	0.42	2.41	17	1
1:A:95:PHE:O	1:A:96:MET:C	0.42	2.61	15	3
1:A:101:ILE:CG2	1:A:142:ILE:HG12	0.42	2.44	4	4
1:A:28:ASN:ND2	1:A:87:GLU:CD	0.42	2.76	6	1
1:A:64:PHE:O	1:A:96:MET:SD	0.42	2.77	9	1
1:A:142:ILE:CG2	1:A:146:TYR:CE2	0.42	3.02	10	1
1:A:59:ARG:CD	1:A:88:TYR:CD2	0.42	3.02	8	1
1:A:55:ALA:C	1:A:56:LYS:HG2	0.42	2.40	11	1
1:A:95:PHE:CG	1:A:118:LEU:HB3	0.42	2.49	4	1
1:A:96:MET:O	1:A:96:MET:CG	0.42	2.66	7	1
1:A:87:GLU:C	1:A:88:TYR:CD1	0.42	2.96	9	1
1:A:101:ILE:HG13	1:A:102:ASN:N	0.42	2.29	9	1
1:A:51:THR:HG22	1:A:127:SER:HB3	0.42	1.90	11	1
1:A:64:PHE:O	1:A:67:LEU:O	0.42	2.37	12	1
1:A:102:ASN:C	1:A:115:GLU:O	0.42	2.62	14	1
1:A:128:ALA:CB	1:A:137:TRP:CE3	0.42	2.86	13	1
1:A:52:ARG:CG	1:A:57:HIS:HB2	0.42	2.44	4	1
1:A:116:ILE:HD11	1:A:126:PHE:HB2	0.42	1.91	12	2
1:A:114:PHE:CZ	1:A:134:LYS:HB2	0.42	2.49	18	1
1:A:66:GLY:O	1:A:96:MET:CE	0.42	2.68	19	1
1:A:89:ARG:CG	1:A:90:LEU:N	0.42	2.82	7	1
1:A:59:ARG:HB2	1:A:71:CYS:O	0.42	2.15	11	1
1:A:60:HIS:HB2	1:A:71:CYS:SG	0.42	2.55	11	2
1:A:94:PHE:O	1:A:94:PHE:CG	0.42	2.71	15	1
1:A:106:ASP:CB	1:A:110:TYR:CD1	0.42	3.03	16	1
1:A:53:VAL:HG13	1:A:54:GLY:H	0.42	1.73	7	2
1:A:56:LYS:O	1:A:74:ASN:ND2	0.42	2.53	8	1
1:A:119:LYS:O	1:A:120:ASP:CB	0.42	2.67	9	1
1:A:44:PHE:CZ	1:A:47:GLU:OE1	0.42	2.73	3	1
1:A:73:SER:HA	1:A:88:TYR:CB	0.42	2.44	6	1
1:A:58:GLU:O	1:A:59:ARG:HG2	0.42	2.15	12	1
1:A:63:LEU:CB	1:A:68:MET:HA	0.42	2.45	14	1
1:A:67:LEU:HD22	1:A:94:PHE:HB3	0.42	1.92	15	1
1:A:142:ILE:HG22	1:A:146:TYR:CE1	0.42	2.50	20	1
1:A:61:ILE:HD11	1:A:70:CYS:SG	0.42	2.55	2	1
1:A:51:THR:O	1:A:125:ILE:O	0.42	2.37	18	1
1:A:67:LEU:CD1	1:A:94:PHE:N	0.42	2.83	19	1
1:A:44:PHE:CE2	1:A:62:PHE:CD1	0.41	3.08	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:ALA:O	1:A:56:LYS:HB2	0.41	2.15	9	2
1:A:59:ARG:HG3	1:A:71:CYS:O	0.41	2.14	8	1
1:A:74:ASN:ND2	1:A:74:ASN:C	0.41	2.78	13	1
1:A:145:GLN:O	1:A:145:GLN:OE1	0.41	2.38	20	1
1:A:101:ILE:C	1:A:101:ILE:HD13	0.41	2.39	2	1
1:A:135:ASN:OD1	1:A:135:ASN:C	0.41	2.63	17	1
1:A:68:MET:HB2	1:A:95:PHE:CB	0.41	2.46	3	1
1:A:46:MET:HG2	1:A:63:LEU:CD2	0.41	2.45	5	1
1:A:98:LYS:HG3	1:A:119:LYS:CB	0.41	2.45	8	1
1:A:45:ILE:CG2	1:A:63:LEU:CD2	0.41	2.97	12	1
1:A:64:PHE:O	1:A:65:ASP:C	0.41	2.58	14	1
1:A:103:ASP:CB	1:A:114:PHE:HB3	0.41	2.44	14	1
1:A:144:LEU:O	1:A:146:TYR:N	0.41	2.54	2	1
1:A:67:LEU:HD12	1:A:67:LEU:O	0.41	2.12	3	1
1:A:63:LEU:HD22	1:A:96:MET:CE	0.41	2.45	1	1
1:A:99:VAL:HG21	1:A:141:LEU:CB	0.41	2.46	1	1
1:A:47:GLU:O	1:A:47:GLU:CD	0.41	2.63	2	1
1:A:59:ARG:CG	1:A:72:LYS:HA	0.41	2.45	2	1
1:A:26:GLN:O	1:A:29:ILE:HG13	0.41	2.15	3	1
1:A:68:MET:O	1:A:93:LYS:CB	0.41	2.69	13	1
1:A:29:ILE:CB	1:A:90:LEU:HB3	0.41	2.45	20	1
1:A:26:GLN:CD	1:A:27:LYS:HE3	0.41	2.40	16	2
1:A:130:SER:CB	1:A:133:GLU:HG3	0.41	2.46	13	1
1:A:47:GLU:HB2	1:A:62:PHE:CE2	0.41	2.49	20	1
1:A:58:GLU:C	1:A:59:ARG:HG3	0.41	2.40	5	2
1:A:46:MET:SD	1:A:140:ALA:HB1	0.41	2.55	6	1
1:A:103:ASP:O	1:A:103:ASP:CG	0.41	2.63	7	1
1:A:106:ASP:C	1:A:108:ASN:H	0.41	2.23	17	2
1:A:51:THR:OG1	1:A:58:GLU:CG	0.41	2.69	8	1
1:A:52:ARG:CZ	1:A:52:ARG:HB2	0.41	2.45	9	1
1:A:134:LYS:O	1:A:138:MET:CG	0.41	2.68	9	1
1:A:60:HIS:O	1:A:71:CYS:SG	0.41	2.79	13	1
1:A:72:LYS:O	1:A:88:TYR:HB3	0.41	2.15	17	1
1:A:49:THR:CG2	1:A:60:HIS:HA	0.41	2.46	20	1
1:A:46:MET:HG2	1:A:63:LEU:HB3	0.41	1.93	6	1
1:A:120:ASP:O	1:A:121:GLU:HB2	0.41	2.15	8	1
1:A:95:PHE:CZ	1:A:118:LEU:CB	0.41	3.03	11	1
1:A:132:GLU:CG	1:A:133:GLU:N	0.41	2.82	17	1
1:A:46:MET:C	1:A:46:MET:HE3	0.41	2.40	2	1
1:A:64:PHE:N	1:A:64:PHE:CD1	0.41	2.87	6	2
1:A:62:PHE:O	1:A:69:ILE:HG23	0.41	2.16	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:MET:HB2	1:A:93:LYS:O	0.41	2.15	6	1
1:A:30:ASP:CB	1:A:89:ARG:HG3	0.41	2.46	14	1
1:A:55:ALA:O	1:A:56:LYS:CG	0.41	2.69	14	1
1:A:63:LEU:HB3	1:A:68:MET:CG	0.41	2.46	14	1
1:A:57:HIS:CD2	1:A:74:ASN:HA	0.41	2.51	20	1
1:A:101:ILE:CD1	1:A:116:ILE:CD1	0.41	2.85	20	1
1:A:130:SER:CB	1:A:133:GLU:HG2	0.41	2.46	4	1
1:A:44:PHE:CD1	1:A:47:GLU:HG3	0.41	2.51	12	1
1:A:64:PHE:CE2	1:A:69:ILE:HG12	0.41	2.51	13	1
1:A:72:LYS:CB	1:A:89:ARG:HG3	0.40	2.46	3	1
1:A:45:ILE:CG2	1:A:46:MET:CG	0.40	2.99	14	1
1:A:109:GLU:O	1:A:109:GLU:CG	0.40	2.69	20	1
1:A:68:MET:O	1:A:93:LYS:C	0.40	2.65	6	1
1:A:118:LEU:CD1	1:A:119:LYS:O	0.40	2.66	9	1
1:A:135:ASN:O	1:A:138:MET:HG3	0.40	2.15	9	1
1:A:112:HIS:C	1:A:113:ALA:O	0.40	2.62	13	1
1:A:101:ILE:HG22	1:A:142:ILE:CG1	0.40	2.47	14	1
1:A:124:VAL:O	1:A:125:ILE:CD1	0.40	2.60	18	1
1:A:116:ILE:C	1:A:117:ILE:HG13	0.40	2.42	4	1
1:A:92:GLU:OE2	1:A:94:PHE:CE2	0.40	2.74	5	1
1:A:59:ARG:CD	1:A:61:ILE:HD11	0.40	2.46	7	1
1:A:95:PHE:CE1	1:A:118:LEU:HD13	0.40	2.51	7	1
1:A:97:ARG:C	1:A:98:LYS:HD3	0.40	2.42	8	1
1:A:58:GLU:O	1:A:73:SER:N	0.40	2.45	12	1
1:A:68:MET:HG3	1:A:95:PHE:CE1	0.40	2.52	1	1
1:A:58:GLU:O	1:A:59:ARG:HG3	0.40	2.16	2	1
1:A:46:MET:HG2	1:A:63:LEU:CG	0.40	2.46	6	1
1:A:132:GLU:O	1:A:136:ASN:HB2	0.40	2.16	12	1
1:A:95:PHE:HD2	1:A:99:VAL:HG12	0.40	1.75	15	1
1:A:46:MET:O	1:A:46:MET:CG	0.40	2.70	17	1
1:A:30:ASP:OD2	1:A:31:GLY:N	0.40	2.55	18	1
1:A:45:ILE:HB	1:A:63:LEU:CD1	0.40	2.47	19	1
1:A:144:LEU:O	1:A:145:GLN:C	0.40	2.65	2	1
1:A:50:LEU:CD1	1:A:61:ILE:HG13	0.40	2.35	3	1
1:A:64:PHE:CD1	1:A:64:PHE:N	0.40	2.88	4	1
1:A:146:TYR:C	1:A:150:LEU:HD23	0.40	2.37	7	1
1:A:56:LYS:C	1:A:57:HIS:CG	0.40	3.00	13	1

6.3 Torsion angles

6.3.1 Protein backbone

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

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

All 29 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	65	ASP	1
1	A	105	ASP	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	92/114 (81%)	50±4 (54±4%)	42±4 (46±4%)	0	2
All	All	1840/2280 (81%)	1000 (54%)	840 (46%)	0	2

All 82 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	49	THR	20
1	A	51	THR	20
1	A	90	LEU	20
1	A	101	ILE	20
1	A	124	VAL	20
1	A	132	GLU	20
1	A	138	MET	20
1	A	141	LEU	20
1	A	149	THR	20
1	A	148	SER	19
1	A	27	LYS	18
1	A	114	PHE	18
1	A	146	TYR	18
1	A	91	LYS	17
1	A	111	LYS	17
1	A	30	ASP	17
1	A	63	LEU	16
1	A	67	LEU	15
1	A	115	GLU	15
1	A	150	LEU	15
1	A	53	VAL	15
1	A	104	LYS	15
1	A	69	ILE	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	92	GLU	14
1	A	119	LYS	14
1	A	118	LEU	14
1	A	100	GLN	13
1	A	134	LYS	13
1	A	46	MET	12
1	A	127	SER	12
1	A	96	MET	12
1	A	26	GLN	11
1	A	123	SER	11
1	A	60	HIS	11
1	A	130	SER	11
1	A	56	LYS	11
1	A	52	ARG	10
1	A	62	PHE	10
1	A	68	MET	10
1	A	72	LYS	10
1	A	93	LYS	10
1	A	107	THR	10
1	A	121	GLU	10
1	A	136	ASN	10
1	A	45	ILE	10
1	A	112	HIS	10
1	A	147	ARG	10
1	A	47	GLU	9
1	A	106	ASP	9
1	A	59	ARG	9
1	A	98	LYS	9
1	A	145	GLN	9
1	A	122	ASN	8
1	A	102	ASN	8
1	A	129	LYS	8
1	A	116	ILE	7
1	A	44	PHE	7
1	A	89	ARG	7
1	A	143	SER	6
1	A	109	GLU	6
1	A	99	VAL	6
1	A	97	ARG	5
1	A	135	ASN	5
1	A	29	ILE	5
1	A	105	ASP	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	50	LEU	4
1	A	120	ASP	4
1	A	65	ASP	3
1	A	108	ASN	3
1	A	57	HIS	3
1	A	73	SER	2
1	A	28	ASN	2
1	A	88	TYR	2
1	A	125	ILE	2
1	A	58	GLU	2
1	A	142	ILE	2
1	A	144	LEU	1
1	A	71	CYS	1
1	A	70	CYS	1
1	A	103	ASP	1
1	A	133	GLU	1
1	A	74	ASN	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

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided