



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 07:56 PM UTC

PDB ID : 1BY1 / pdb_00001by1
Title : DBL homology domain from beta-PIX
Authors : Aghazadeh, B.; Zhu, K.; Kubiseski, T.J.; Liu, G.A.; Pawson, T.; Zheng, Y.;
Rosen, M.K.
Deposited on : 1998-10-22

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

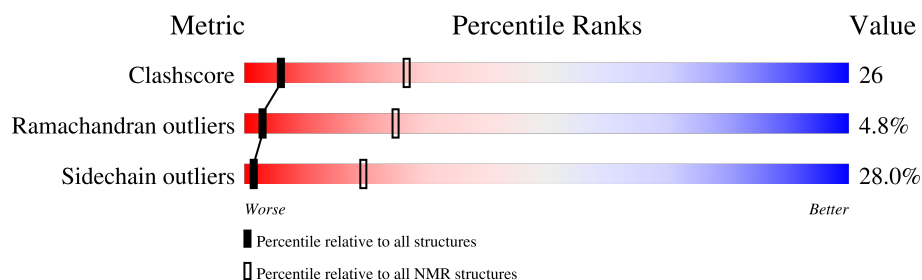
1 Overall quality at a glance

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	209	31% 39% 9% 21%

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 4 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:13-A:43, A:49-A:164, A:175-A:192 (165)	1.12	4

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 5 clusters and 1 single-model cluster was found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3361 atoms, of which 1688 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called PROTEIN (PIX).

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	209	Total	C	H	N	O	S	0
			3361	1051	1688	279	329	14	

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

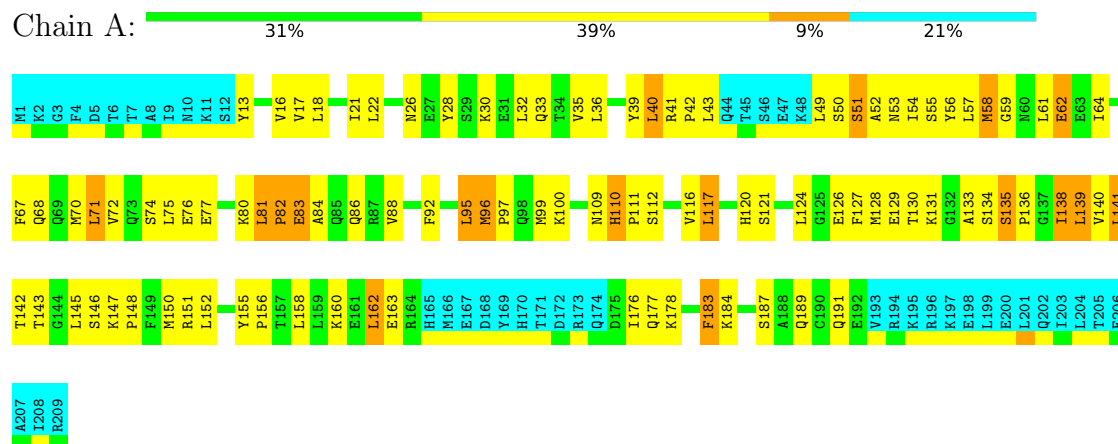
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1	MET	PRO	cloning artifact	UNP Q14155

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: PROTEIN (PIX)

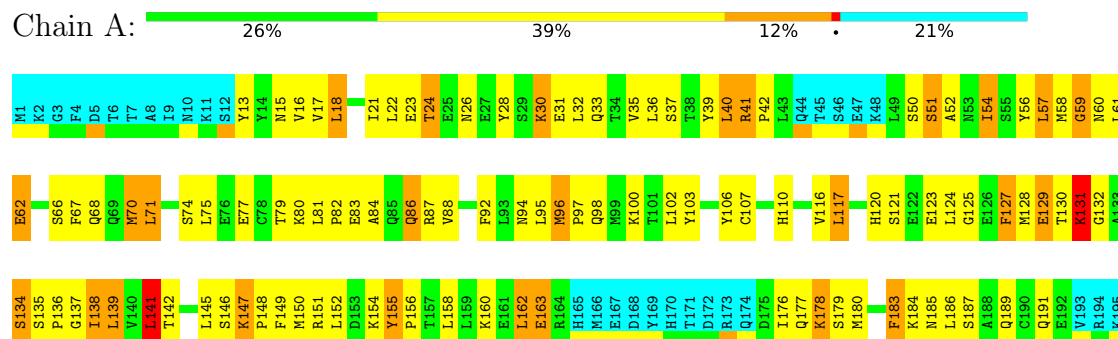


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: PROTEIN (PIX)

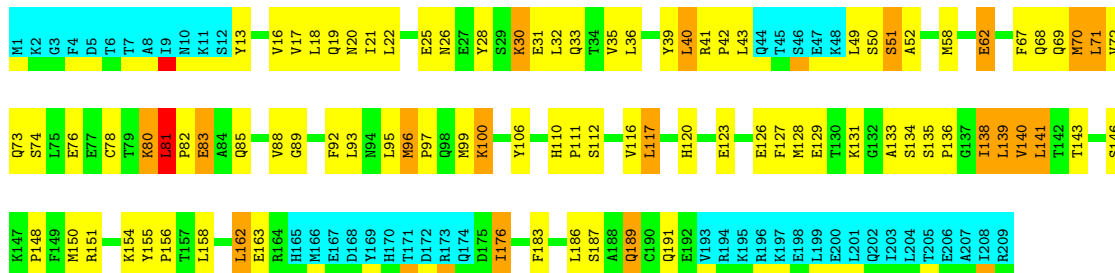




4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: PROTEIN (PIX)

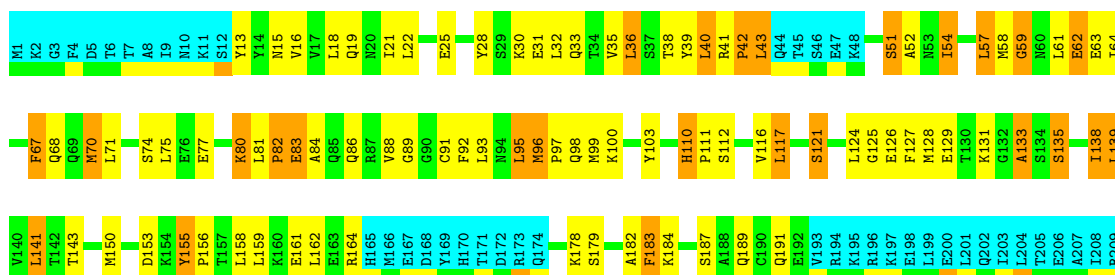
Chain A: 36% 34% 9% 21%



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: PROTEIN (PIX)

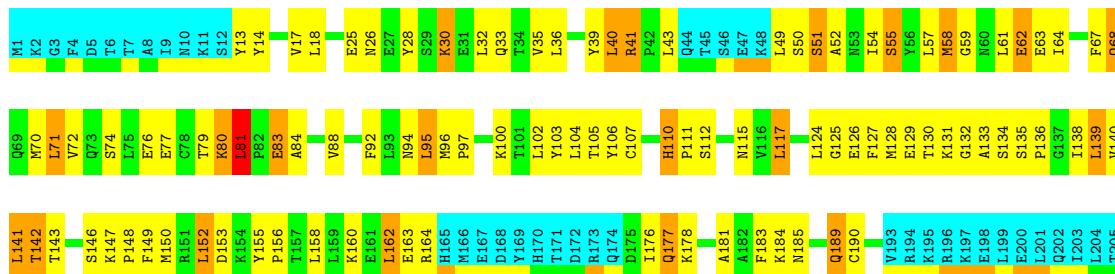
Chain A: 35% 32% 12% 21%



4.2.4 Score per residue for model 4 (medoid)

- Molecule 1: PROTEIN (PIX)

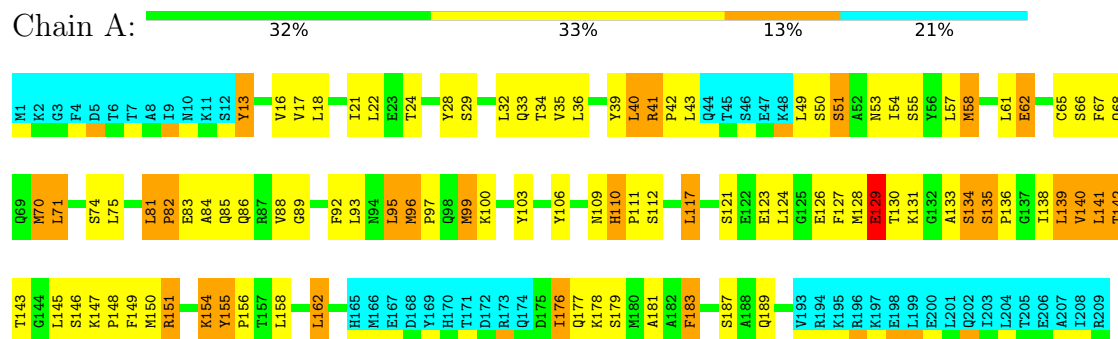
Chain A: 30% 38% 10% 21%





4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: PROTEIN (PIX)



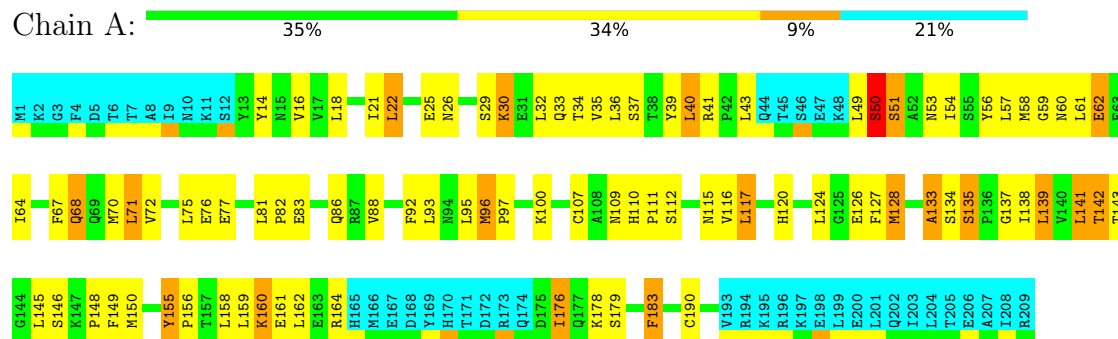
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: PROTEIN (PIX)



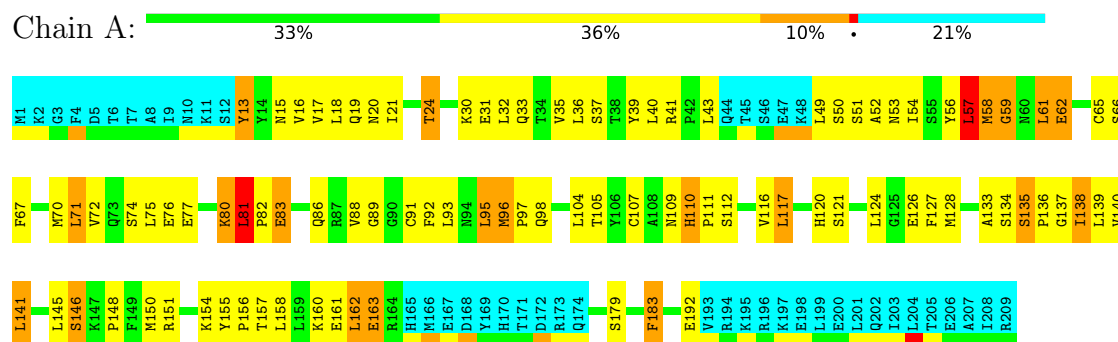
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: PROTEIN (PIX)



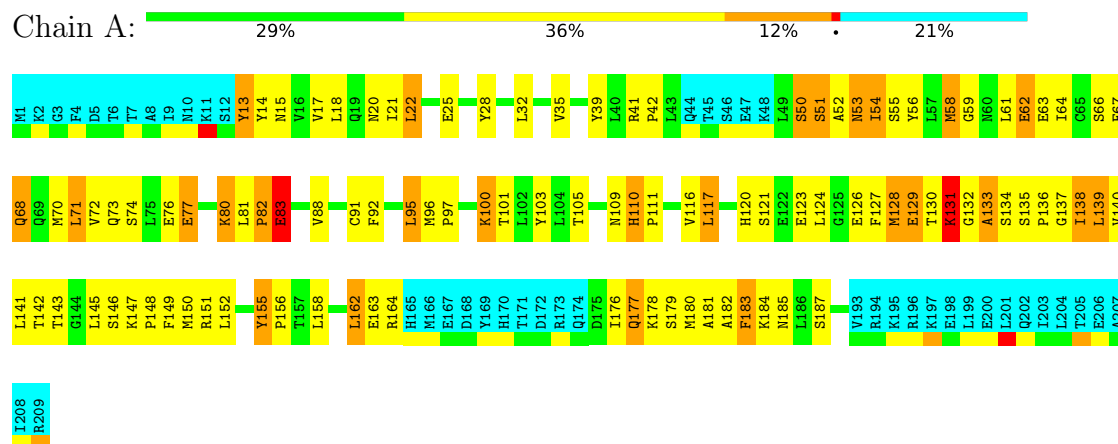
4.2.11 Score per residue for model 11

• Molecule 1: PROTEIN (PIX)



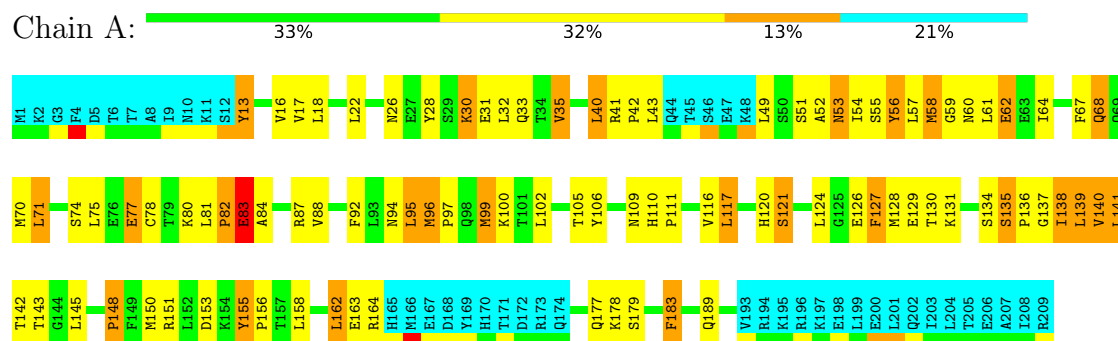
4.2.12 Score per residue for model 12

• Molecule 1: PROTEIN (PIX)



4.2.13 Score per residue for model 13

• Molecule 1: PROTEIN (PIX)



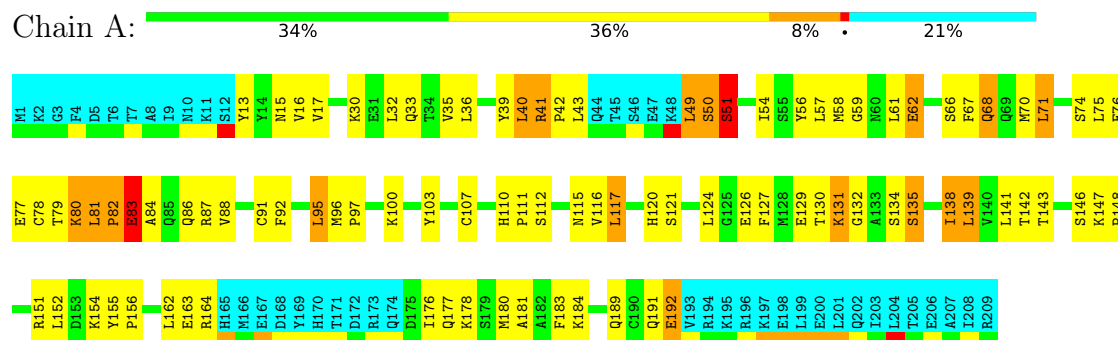
4.2.14 Score per residue for model 14

• Molecule 1: PROTEIN (PIX)



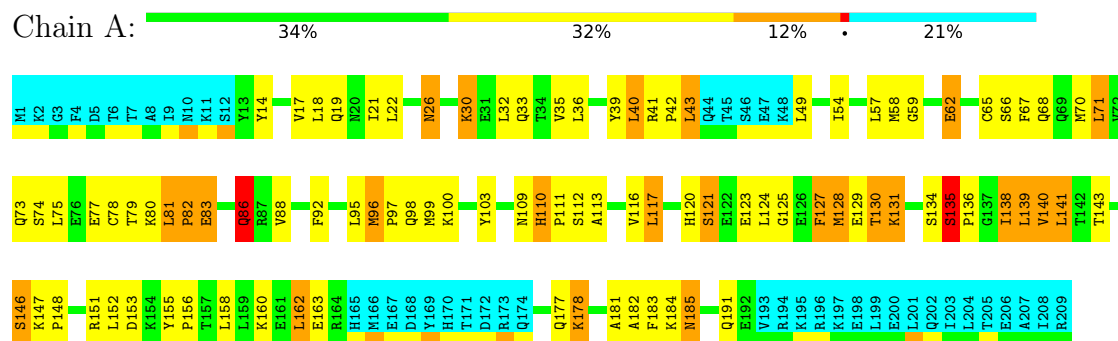
4.2.15 Score per residue for model 15

• Molecule 1: PROTEIN (PIX)



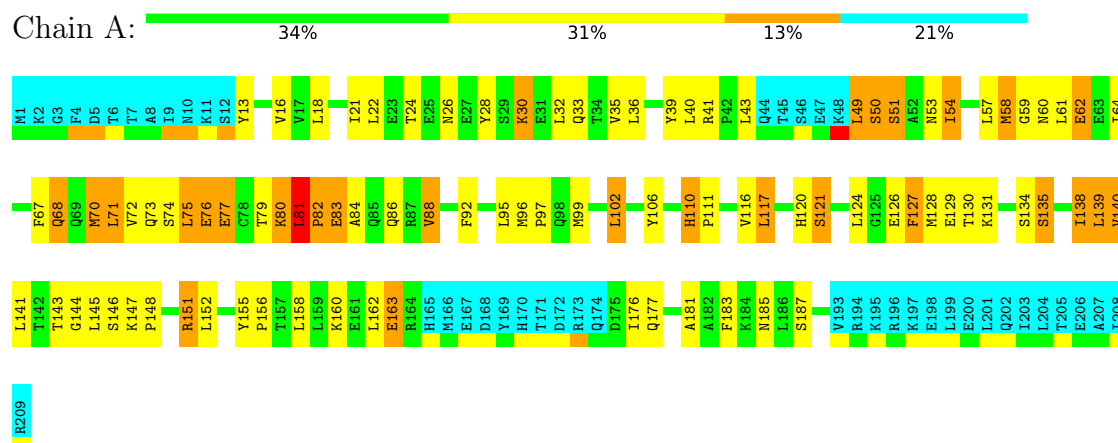
4.2.16 Score per residue for model 16

• Molecule 1: PROTEIN (PIX)



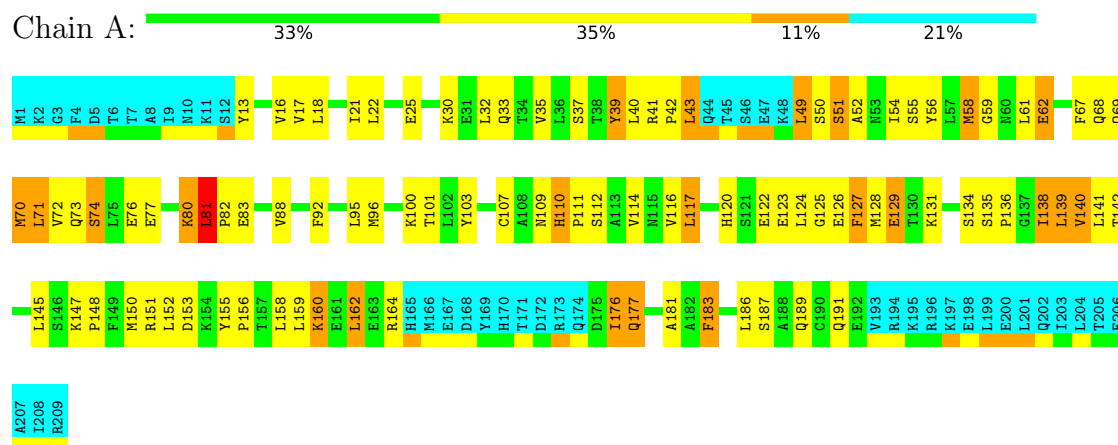
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: PROTEIN (PIX)



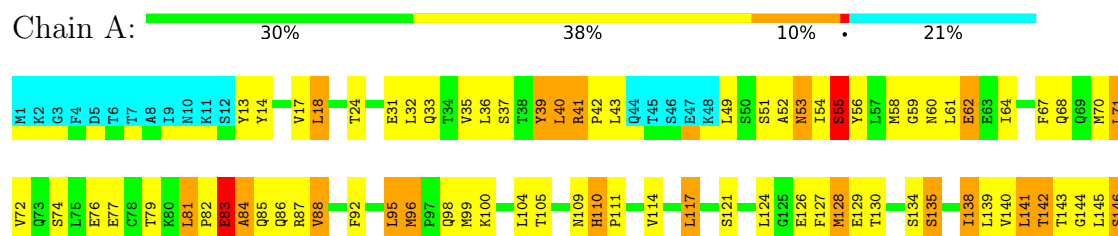
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: PROTEIN (PIX)



4.2.19 Score per residue for model 19

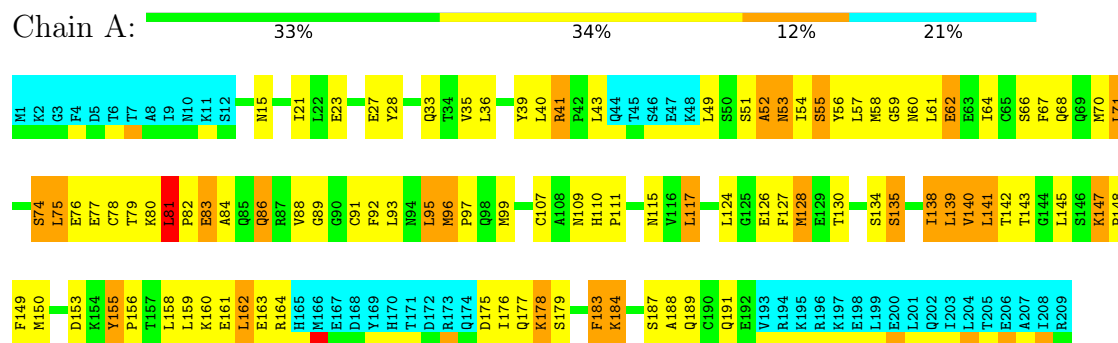
- Molecule 1: PROTEIN (PIX)





4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: PROTEIN (PIX)



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *SIMULATED ANNEALING*, *TORSION ANGLE DYNAMICS*.

Of the 80 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *LEAST RESTRAINT VIOLATION*.

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

Software name	Classification	Version
CNS 0.3, X-PLOR	refinement	3.851
NMRPipe	structure solution	
NMRView	structure solution	
ARIA	structure solution	
X-PLOR	structure solution	
CNS	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	1304	1312	1310	69±10
All	All	26080	26240	26200	1375

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 26.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:141:LEU:HD13	1:A:145:LEU:HD12	1.03	1.23	5	2
1:A:67:PHE:CE1	1:A:95:LEU:HD21	0.96	1.95	16	3
1:A:67:PHE:CE1	1:A:71:LEU:HD22	0.94	1.98	5	17
1:A:61:LEU:HD22	1:A:145:LEU:HD11	0.93	1.40	12	4
1:A:35:VAL:HG13	1:A:39:TYR:CE2	0.92	1.99	15	15
1:A:57:LEU:HD13	1:A:141:LEU:HD23	0.89	1.45	17	1
1:A:67:PHE:CE1	1:A:71:LEU:HD13	0.88	2.03	18	2
1:A:57:LEU:HD21	1:A:141:LEU:HD21	0.88	1.43	9	1
1:A:70:MET:HE3	1:A:95:LEU:HD21	0.87	1.46	15	1
1:A:88:VAL:HG12	1:A:92:PHE:CD2	0.86	2.05	15	18
1:A:49:LEU:HD21	1:A:124:LEU:HD21	0.86	1.46	10	5
1:A:18:LEU:HD22	1:A:76:GLU:OE2	0.83	1.73	12	2
1:A:49:LEU:HD12	1:A:58:MET:SD	0.83	2.13	5	2
1:A:138:ILE:HD13	1:A:138:ILE:O	0.82	1.74	20	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:124:LEU:CB	1:A:138:ILE:HG21	0.82	2.05	9	5
1:A:112:SER:O	1:A:116:VAL:HG23	0.82	1.74	11	7
1:A:13:TYR:O	1:A:17:VAL:HG23	0.81	1.74	18	14
1:A:77:GLU:O	1:A:81:LEU:HD12	0.80	1.76	14	8
1:A:43:LEU:HD23	1:A:58:MET:CE	0.80	2.06	3	1
1:A:57:LEU:HD21	1:A:141:LEU:CD2	0.80	2.07	9	1
1:A:67:PHE:CE1	1:A:95:LEU:HD13	0.80	2.12	12	3
1:A:141:LEU:HD23	1:A:145:LEU:CD1	0.79	2.07	8	1
1:A:124:LEU:HB2	1:A:138:ILE:HG21	0.77	1.56	9	3
1:A:43:LEU:HD22	1:A:43:LEU:O	0.77	1.79	10	1
1:A:61:LEU:CD2	1:A:145:LEU:HD13	0.77	2.10	14	1
1:A:21:ILE:HG21	1:A:158:LEU:HD11	0.76	1.55	10	8
1:A:124:LEU:O	1:A:138:ILE:HD13	0.75	1.81	17	4
1:A:43:LEU:HD13	1:A:127:PHE:CE2	0.74	2.17	17	4
1:A:99:MET:HE1	1:A:186:LEU:HD11	0.74	1.57	19	1
1:A:136:PRO:HG2	1:A:140:VAL:HG22	0.73	1.59	9	4
1:A:67:PHE:CZ	1:A:95:LEU:HD11	0.73	2.18	6	2
1:A:88:VAL:HG23	1:A:162:LEU:HD22	0.73	1.59	8	1
1:A:42:PRO:HG2	1:A:128:MET:HE1	0.73	1.58	10	1
1:A:35:VAL:CG1	1:A:40:LEU:HD22	0.73	2.13	13	1
1:A:25:GLU:CD	1:A:72:VAL:HG22	0.72	2.10	6	2
1:A:163:GLU:OE1	1:A:176:ILE:HG23	0.72	1.84	14	1
1:A:75:LEU:O	1:A:79:THR:HG23	0.72	1.84	15	7
1:A:127:PHE:CZ	1:A:138:ILE:HD11	0.72	2.19	6	4
1:A:128:MET:HE3	1:A:133:ALA:HB3	0.72	1.61	11	1
1:A:32:LEU:HD13	1:A:64:ILE:HG22	0.71	1.60	9	1
1:A:49:LEU:HD21	1:A:124:LEU:CD2	0.70	2.16	10	2
1:A:95:LEU:HD12	1:A:99:MET:SD	0.70	2.26	13	1
1:A:127:PHE:CE2	1:A:138:ILE:HD11	0.70	2.21	14	4
1:A:54:ILE:HD13	1:A:58:MET:CB	0.70	2.17	11	9
1:A:18:LEU:O	1:A:22:LEU:HD13	0.69	1.87	13	7
1:A:128:MET:HE1	1:A:137:GLY:C	0.69	2.11	11	1
1:A:139:LEU:HD13	1:A:139:LEU:N	0.69	2.02	5	10
1:A:141:LEU:HD13	1:A:145:LEU:CD1	0.69	2.13	5	1
1:A:128:MET:O	1:A:133:ALA:HB2	0.68	1.88	5	3
1:A:79:THR:HG22	1:A:86:GLN:HA	0.68	1.63	20	1
1:A:18:LEU:HD22	1:A:76:GLU:OE1	0.68	1.88	9	2
1:A:95:LEU:HD23	1:A:98:GLN:OE1	0.68	1.88	11	1
1:A:35:VAL:HG13	1:A:40:LEU:HD13	0.68	1.63	13	1
1:A:67:PHE:CE2	1:A:95:LEU:HD22	0.66	2.25	9	1
1:A:152:LEU:HD23	1:A:155:TYR:CG	0.66	2.25	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:LEU:HD23	1:A:40:LEU:CD2	0.66	2.21	15	3
1:A:43:LEU:HD21	1:A:58:MET:HE2	0.65	1.67	7	1
1:A:18:LEU:HD13	1:A:80:LYS:HE2	0.65	1.68	13	2
1:A:57:LEU:HD21	1:A:141:LEU:HD13	0.65	1.67	1	1
1:A:141:LEU:HD23	1:A:145:LEU:HD11	0.65	1.68	8	1
1:A:43:LEU:HD13	1:A:127:PHE:CD2	0.65	2.27	17	2
1:A:36:LEU:HD23	1:A:40:LEU:HD23	0.64	1.69	15	5
1:A:128:MET:HB2	1:A:138:ILE:HD13	0.64	1.67	5	1
1:A:71:LEU:HD21	1:A:155:TYR:OH	0.64	1.92	18	3
1:A:60:ASN:C	1:A:64:ILE:HD12	0.64	2.17	13	5
1:A:21:ILE:HG21	1:A:158:LEU:CD1	0.64	2.22	10	2
1:A:14:TYR:CE1	1:A:18:LEU:HD11	0.64	2.27	12	1
1:A:54:ILE:HD13	1:A:58:MET:HB2	0.64	1.70	7	6
1:A:56:TYR:CE2	1:A:116:VAL:HG11	0.64	2.28	1	1
1:A:88:VAL:HG12	1:A:92:PHE:HD2	0.64	1.53	18	12
1:A:117:LEU:HD13	1:A:139:LEU:HA	0.63	1.70	16	8
1:A:141:LEU:HG	1:A:145:LEU:HD12	0.63	1.69	1	2
1:A:32:LEU:CD1	1:A:64:ILE:HG22	0.63	2.23	3	4
1:A:32:LEU:HD11	1:A:64:ILE:CG2	0.63	2.23	3	1
1:A:67:PHE:CD2	1:A:99:MET:HE2	0.63	2.28	13	1
1:A:95:LEU:O	1:A:95:LEU:HD12	0.63	1.93	19	3
1:A:39:TYR:O	1:A:128:MET:HE3	0.63	1.93	10	1
1:A:70:MET:HG3	1:A:95:LEU:HD11	0.63	1.69	9	2
1:A:117:LEU:HD11	1:A:141:LEU:HD12	0.62	1.69	6	1
1:A:61:LEU:HA	1:A:64:ILE:HD12	0.62	1.70	8	3
1:A:70:MET:HE2	1:A:95:LEU:HD11	0.62	1.70	14	1
1:A:49:LEU:HD22	1:A:53:ASN:CG	0.62	2.20	20	1
1:A:24:THR:HG22	1:A:151:ARG:HG2	0.62	1.70	1	2
1:A:18:LEU:HD21	1:A:162:LEU:HD21	0.62	1.71	16	2
1:A:125:GLY:HA2	1:A:128:MET:HE3	0.62	1.71	3	1
1:A:71:LEU:HD11	1:A:155:TYR:OH	0.62	1.95	9	2
1:A:81:LEU:HD23	1:A:82:PRO:HD3	0.62	1.71	14	2
1:A:89:GLY:O	1:A:93:LEU:HD13	0.62	1.95	9	6
1:A:67:PHE:CD1	1:A:95:LEU:HD22	0.61	2.29	3	1
1:A:67:PHE:CZ	1:A:95:LEU:HD21	0.61	2.30	16	2
1:A:43:LEU:O	1:A:43:LEU:HD13	0.61	1.95	19	3
1:A:18:LEU:HD21	1:A:162:LEU:CD1	0.61	2.25	2	5
1:A:24:THR:HG22	1:A:151:ARG:CG	0.61	2.26	1	1
1:A:60:ASN:O	1:A:64:ILE:HD12	0.60	1.97	14	2
1:A:61:LEU:C	1:A:61:LEU:HD13	0.60	2.20	18	8
1:A:141:LEU:CD1	1:A:145:LEU:HD12	0.60	2.13	5	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:LEU:HD12	1:A:58:MET:CG	0.60	2.26	15	2
1:A:81:LEU:HD12	1:A:81:LEU:O	0.60	1.97	10	1
1:A:100:LYS:HG2	1:A:186:LEU:HD22	0.60	1.73	2	1
1:A:128:MET:SD	1:A:133:ALA:HB2	0.59	2.36	3	4
1:A:61:LEU:HD23	1:A:145:LEU:HD13	0.59	1.73	14	1
1:A:18:LEU:HD23	1:A:158:LEU:HD21	0.59	1.73	8	2
1:A:35:VAL:HG13	1:A:39:TYR:CD2	0.59	2.32	18	5
1:A:32:LEU:HD11	1:A:64:ILE:HG22	0.59	1.72	3	1
1:A:56:TYR:CE2	1:A:116:VAL:HG21	0.59	2.33	9	1
1:A:67:PHE:CZ	1:A:71:LEU:HD23	0.59	2.32	9	1
1:A:72:VAL:HG13	1:A:76:GLU:HG3	0.59	1.75	18	4
1:A:61:LEU:O	1:A:61:LEU:HD13	0.59	1.97	11	1
1:A:155:TYR:CE2	1:A:159:LEU:HD11	0.58	2.33	6	1
1:A:67:PHE:CE1	1:A:71:LEU:CD2	0.58	2.87	9	1
1:A:81:LEU:HD12	1:A:81:LEU:C	0.58	2.22	7	3
1:A:67:PHE:CE1	1:A:71:LEU:HD23	0.58	2.33	9	1
1:A:106:TYR:CE2	1:A:149:PHE:CE2	0.58	2.91	1	1
1:A:155:TYR:CE2	1:A:183:PHE:CZ	0.58	2.92	6	9
1:A:18:LEU:O	1:A:22:LEU:HD22	0.58	1.98	7	1
1:A:124:LEU:HB3	1:A:138:ILE:HD12	0.58	1.76	20	6
1:A:33:GLN:HA	1:A:36:LEU:HD12	0.58	1.75	10	1
1:A:59:GLY:O	1:A:102:LEU:HD22	0.57	1.99	4	1
1:A:128:MET:CG	1:A:133:ALA:HB2	0.57	2.30	8	2
1:A:54:ILE:HD13	1:A:58:MET:HB3	0.57	1.74	20	9
1:A:92:PHE:CZ	1:A:155:TYR:CE2	0.57	2.92	11	4
1:A:92:PHE:CE1	1:A:155:TYR:CE1	0.57	2.92	3	1
1:A:57:LEU:HD11	1:A:117:LEU:HD21	0.57	1.76	17	3
1:A:155:TYR:CE1	1:A:183:PHE:CZ	0.57	2.92	5	2
1:A:125:GLY:O	1:A:128:MET:HE2	0.57	2.00	1	1
1:A:155:TYR:CD2	1:A:183:PHE:CE1	0.57	2.92	8	3
1:A:96:MET:SD	1:A:182:ALA:HB1	0.57	2.40	12	2
1:A:55:SER:O	1:A:105:THR:HG21	0.57	1.99	13	1
1:A:24:THR:HG22	1:A:151:ARG:HG3	0.57	1.76	17	3
1:A:19:GLN:HA	1:A:22:LEU:HD12	0.57	1.76	10	1
1:A:117:LEU:HD23	1:A:117:LEU:N	0.57	2.15	2	13
1:A:96:MET:HG2	1:A:99:MET:HE2	0.57	1.75	19	1
1:A:57:LEU:HD21	1:A:141:LEU:CD1	0.57	2.30	1	1
1:A:135:SER:N	1:A:136:PRO:CD	0.56	2.68	9	10
1:A:35:VAL:HG13	1:A:39:TYR:CZ	0.56	2.35	3	4
1:A:39:TYR:OH	1:A:141:LEU:HD12	0.56	1.99	4	1
1:A:35:VAL:HG12	1:A:40:LEU:HD22	0.56	1.77	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:130:THR:O	1:A:130:THR:HG23	0.56	2.00	13	2
1:A:164:ARG:NH1	1:A:176:ILE:HD12	0.56	2.15	20	1
1:A:17:VAL:HG21	1:A:161:GLU:OE1	0.56	1.99	11	1
1:A:67:PHE:HE1	1:A:71:LEU:HD13	0.56	1.60	3	1
1:A:57:LEU:HD11	1:A:141:LEU:HD22	0.56	1.76	9	3
1:A:99:MET:HA	1:A:99:MET:HE3	0.55	1.78	13	1
1:A:81:LEU:O	1:A:83:GLU:N	0.55	2.39	5	18
1:A:18:LEU:HD21	1:A:162:LEU:HD13	0.55	1.77	2	2
1:A:88:VAL:HG12	1:A:92:PHE:CE2	0.55	2.37	15	7
1:A:67:PHE:CZ	1:A:71:LEU:HD13	0.55	2.35	18	1
1:A:75:LEU:HD11	1:A:76:GLU:OE2	0.55	2.01	7	1
1:A:56:TYR:CG	1:A:57:LEU:N	0.55	2.75	1	2
1:A:32:LEU:HD13	1:A:68:GLN:OE1	0.55	2.02	17	1
1:A:22:LEU:HD23	1:A:25:GLU:OE2	0.55	2.02	10	1
1:A:49:LEU:HD13	1:A:53:ASN:CG	0.55	2.26	10	2
1:A:96:MET:HE2	1:A:182:ALA:HB1	0.55	1.79	16	1
1:A:75:LEU:HD13	1:A:88:VAL:HG13	0.54	1.79	9	3
1:A:141:LEU:O	1:A:145:LEU:HD12	0.54	2.02	13	2
1:A:72:VAL:HG12	1:A:76:GLU:HG3	0.54	1.79	17	3
1:A:81:LEU:HD23	1:A:81:LEU:N	0.54	2.18	18	3
1:A:49:LEU:HD12	1:A:58:MET:HG2	0.54	1.80	15	2
1:A:67:PHE:HA	1:A:70:MET:HE2	0.54	1.78	15	1
1:A:49:LEU:HD11	1:A:124:LEU:HD21	0.54	1.80	9	1
1:A:88:VAL:CG2	1:A:162:LEU:HD22	0.54	2.33	8	4
1:A:32:LEU:HD12	1:A:68:GLN:HG3	0.54	1.78	4	3
1:A:42:PRO:CG	1:A:128:MET:HE1	0.54	2.31	10	1
1:A:61:LEU:HD13	1:A:145:LEU:HD21	0.54	1.79	20	1
1:A:117:LEU:HB3	1:A:139:LEU:HD12	0.54	1.79	20	1
1:A:139:LEU:N	1:A:139:LEU:HD23	0.54	2.17	17	2
1:A:92:PHE:O	1:A:99:MET:HE2	0.54	2.03	14	1
1:A:162:LEU:HD13	1:A:162:LEU:O	0.54	2.03	1	3
1:A:128:MET:HE1	1:A:137:GLY:HA2	0.54	1.79	1	3
1:A:67:PHE:CZ	1:A:95:LEU:CD2	0.54	2.91	2	1
1:A:136:PRO:O	1:A:139:LEU:HD12	0.53	2.03	4	1
1:A:141:LEU:C	1:A:145:LEU:HD12	0.53	2.29	13	1
1:A:128:MET:HB2	1:A:138:ILE:HD12	0.53	1.80	6	1
1:A:35:VAL:CG1	1:A:39:TYR:CE2	0.53	2.92	10	3
1:A:106:TYR:CD2	1:A:149:PHE:CZ	0.53	2.97	1	1
1:A:124:LEU:C	1:A:138:ILE:HD13	0.53	2.28	17	2
1:A:67:PHE:CD1	1:A:95:LEU:CD2	0.53	2.92	3	1
1:A:61:LEU:HD22	1:A:145:LEU:CD1	0.53	2.26	12	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:SER:O	1:A:52:ALA:HB2	0.53	2.04	20	2
1:A:67:PHE:CZ	1:A:95:LEU:HD22	0.53	2.39	20	2
1:A:60:ASN:CG	1:A:64:ILE:HD11	0.53	2.29	19	1
1:A:81:LEU:CB	1:A:82:PRO:HD2	0.53	2.34	18	1
1:A:67:PHE:HE1	1:A:95:LEU:HD21	0.53	1.58	17	2
1:A:110:HIS:O	1:A:114:VAL:HG23	0.52	2.04	18	1
1:A:70:MET:SD	1:A:95:LEU:HD11	0.52	2.44	11	1
1:A:147:LYS:N	1:A:148:PRO:CD	0.52	2.72	6	8
1:A:35:VAL:CG1	1:A:40:LEU:HD13	0.52	2.34	3	5
1:A:83:GLU:O	1:A:84:ALA:HB3	0.52	2.04	17	7
1:A:81:LEU:CB	1:A:82:PRO:CD	0.52	2.88	20	4
1:A:18:LEU:HD21	1:A:79:THR:OG1	0.52	2.04	1	1
1:A:127:PHE:CZ	1:A:138:ILE:CD1	0.52	2.93	4	6
1:A:127:PHE:CD1	1:A:127:PHE:C	0.52	2.88	1	20
1:A:127:PHE:CD1	1:A:128:MET:N	0.52	2.77	12	4
1:A:151:ARG:NH2	1:A:155:TYR:CE2	0.52	2.78	5	1
1:A:61:LEU:HD12	1:A:61:LEU:O	0.52	2.05	8	1
1:A:67:PHE:CZ	1:A:71:LEU:HD22	0.52	2.40	13	1
1:A:17:VAL:O	1:A:21:ILE:HD12	0.51	2.05	16	2
1:A:124:LEU:HB3	1:A:138:ILE:HG21	0.51	1.78	9	1
1:A:105:THR:HG22	1:A:109:ASN:ND2	0.51	2.21	11	1
1:A:18:LEU:HD12	1:A:76:GLU:OE1	0.51	2.05	7	2
1:A:102:LEU:HD23	1:A:102:LEU:N	0.51	2.20	17	1
1:A:39:TYR:CE1	1:A:40:LEU:HD12	0.51	2.41	2	2
1:A:88:VAL:CG1	1:A:92:PHE:CD2	0.51	2.93	9	9
1:A:61:LEU:CD1	1:A:145:LEU:HD22	0.51	2.36	17	1
1:A:57:LEU:CD1	1:A:117:LEU:HD21	0.51	2.35	17	2
1:A:51:SER:O	1:A:52:ALA:HB3	0.50	2.06	3	5
1:A:49:LEU:HD23	1:A:53:ASN:HB3	0.50	1.83	6	1
1:A:149:PHE:C	1:A:149:PHE:CD1	0.50	2.89	6	2
1:A:121:SER:HA	1:A:139:LEU:HD11	0.50	1.82	9	1
1:A:96:MET:N	1:A:97:PRO:CD	0.50	2.74	17	15
1:A:43:LEU:HD23	1:A:58:MET:HE3	0.50	1.83	3	1
1:A:18:LEU:HD23	1:A:158:LEU:CD2	0.50	2.37	18	2
1:A:157:THR:HG22	1:A:161:GLU:OE2	0.50	2.06	11	1
1:A:36:LEU:HD23	1:A:40:LEU:HD22	0.50	1.84	19	1
1:A:35:VAL:HG12	1:A:40:LEU:HD13	0.50	1.83	7	3
1:A:99:MET:CE	1:A:183:PHE:CE1	0.50	2.94	9	1
1:A:127:PHE:CE2	1:A:138:ILE:CD1	0.50	2.95	16	2
1:A:103:TYR:CD1	1:A:149:PHE:CE2	0.50	2.99	9	1
1:A:43:LEU:HD23	1:A:127:PHE:CE2	0.50	2.41	16	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:VAL:HG12	1:A:158:LEU:CD2	0.50	2.37	1	8
1:A:32:LEU:O	1:A:36:LEU:HD12	0.50	2.06	11	3
1:A:18:LEU:O	1:A:22:LEU:HD12	0.50	2.07	17	2
1:A:99:MET:HE1	1:A:183:PHE:CZ	0.50	2.41	9	1
1:A:49:LEU:N	1:A:49:LEU:HD23	0.50	2.21	18	1
1:A:61:LEU:HD13	1:A:61:LEU:O	0.49	2.06	18	4
1:A:124:LEU:HD13	1:A:138:ILE:HD12	0.49	1.84	15	1
1:A:60:ASN:ND2	1:A:64:ILE:HD11	0.49	2.22	19	1
1:A:32:LEU:C	1:A:36:LEU:HD12	0.49	2.32	7	4
1:A:155:TYR:OH	1:A:183:PHE:CE2	0.49	2.65	6	1
1:A:155:TYR:CD2	1:A:183:PHE:CE2	0.49	3.00	9	2
1:A:28:TYR:OH	1:A:64:ILE:HG23	0.49	2.06	8	2
1:A:139:LEU:N	1:A:139:LEU:CD1	0.49	2.75	9	4
1:A:28:TYR:CD2	1:A:68:GLN:OE1	0.49	2.65	13	1
1:A:137:GLY:O	1:A:140:VAL:HG23	0.49	2.07	8	2
1:A:120:HIS:HB2	1:A:124:LEU:HD12	0.49	1.83	9	1
1:A:100:LYS:CD	1:A:101:THR:N	0.49	2.75	12	1
1:A:81:LEU:HD23	1:A:82:PRO:HD2	0.49	1.85	5	1
1:A:36:LEU:HD11	1:A:61:LEU:HD11	0.49	1.85	6	1
1:A:88:VAL:CG1	1:A:92:PHE:CE2	0.49	2.96	15	10
1:A:177:GLN:O	1:A:181:ALA:HB3	0.49	2.08	12	3
1:A:152:LEU:HD13	1:A:186:LEU:HB2	0.49	1.84	18	1
1:A:110:HIS:N	1:A:111:PRO:CD	0.48	2.76	2	12
1:A:155:TYR:CB	1:A:156:PRO:CD	0.48	2.91	9	6
1:A:116:VAL:O	1:A:120:HIS:CG	0.48	2.66	16	3
1:A:146:SER:O	1:A:149:PHE:CE2	0.48	2.66	12	1
1:A:149:PHE:HB3	1:A:152:LEU:HD12	0.48	1.85	4	1
1:A:67:PHE:CD2	1:A:99:MET:CE	0.48	2.96	13	1
1:A:32:LEU:HD12	1:A:68:GLN:HB3	0.48	1.85	2	3
1:A:67:PHE:CE2	1:A:99:MET:CG	0.48	2.97	13	1
1:A:39:TYR:OH	1:A:141:LEU:HD23	0.48	2.08	19	1
1:A:99:MET:CE	1:A:186:LEU:HD11	0.48	2.34	19	1
1:A:32:LEU:CD1	1:A:64:ILE:CG2	0.48	2.92	9	4
1:A:70:MET:O	1:A:74:SER:CB	0.48	2.61	10	17
1:A:124:LEU:O	1:A:127:PHE:CD2	0.48	2.67	20	7
1:A:163:GLU:CD	1:A:176:ILE:HD13	0.48	2.34	12	1
1:A:67:PHE:CD1	1:A:67:PHE:C	0.48	2.92	3	1
1:A:36:LEU:HD13	1:A:65:CYS:SG	0.48	2.49	9	1
1:A:103:TYR:CE2	1:A:152:LEU:HD21	0.48	2.44	12	1
1:A:138:ILE:HG23	1:A:139:LEU:HD13	0.48	1.85	5	2
1:A:146:SER:O	1:A:149:PHE:CD1	0.48	2.67	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:LEU:CD2	1:A:127:PHE:CE2	0.48	2.97	13	2
1:A:39:TYR:CD1	1:A:39:TYR:C	0.48	2.92	7	8
1:A:152:LEU:HD23	1:A:155:TYR:CD1	0.48	2.44	16	1
1:A:41:ARG:N	1:A:42:PRO:CD	0.47	2.77	9	8
1:A:184:LYS:HE2	1:A:188:ALA:HB2	0.47	1.85	20	1
1:A:114:VAL:HG22	1:A:142:THR:HG21	0.47	1.86	6	1
1:A:116:VAL:O	1:A:120:HIS:CD2	0.47	2.68	12	4
1:A:99:MET:O	1:A:103:TYR:CG	0.47	2.68	3	1
1:A:71:LEU:O	1:A:75:LEU:HD23	0.47	2.10	10	2
1:A:128:MET:HA	1:A:128:MET:HE2	0.47	1.87	20	2
1:A:77:GLU:O	1:A:81:LEU:HD21	0.47	2.10	18	1
1:A:14:TYR:CE1	1:A:86:GLN:OE1	0.47	2.68	7	1
1:A:92:PHE:CE2	1:A:155:TYR:OH	0.47	2.65	6	1
1:A:103:TYR:CD2	1:A:186:LEU:HD13	0.47	2.45	18	1
1:A:43:LEU:HD21	1:A:49:LEU:HD12	0.46	1.87	11	2
1:A:43:LEU:CD2	1:A:58:MET:HE2	0.46	2.38	7	1
1:A:67:PHE:CZ	1:A:71:LEU:CD2	0.46	2.99	9	1
1:A:36:LEU:HD21	1:A:65:CYS:SG	0.46	2.50	11	2
1:A:130:THR:O	1:A:131:LYS:CG	0.46	2.64	16	1
1:A:57:LEU:HD13	1:A:141:LEU:CD2	0.46	2.30	17	1
1:A:79:THR:HG22	1:A:86:GLN:CB	0.46	2.40	1	1
1:A:104:LEU:HD23	1:A:190:CYS:SG	0.46	2.50	4	1
1:A:49:LEU:O	1:A:51:SER:N	0.46	2.49	9	3
1:A:82:PRO:O	1:A:84:ALA:N	0.46	2.48	20	5
1:A:21:ILE:HD13	1:A:158:LEU:HD21	0.46	1.87	16	1
1:A:58:MET:O	1:A:62:GLU:CG	0.46	2.64	19	20
1:A:139:LEU:HD22	1:A:139:LEU:H	0.46	1.69	18	5
1:A:158:LEU:CD2	1:A:162:LEU:HD23	0.46	2.41	18	1
1:A:21:ILE:HG13	1:A:158:LEU:HD11	0.46	1.88	17	5
1:A:120:HIS:CG	1:A:123:GLU:OE2	0.46	2.68	16	1
1:A:135:SER:CB	1:A:136:PRO:CD	0.46	2.94	16	1
1:A:21:ILE:CG2	1:A:158:LEU:HD11	0.46	2.37	10	1
1:A:67:PHE:CE2	1:A:99:MET:SD	0.46	3.09	13	1
1:A:156:PRO:HA	1:A:159:LEU:CG	0.46	2.41	18	1
1:A:88:VAL:HG22	1:A:162:LEU:HD22	0.46	1.88	4	2
1:A:158:LEU:HD22	1:A:162:LEU:HD13	0.46	1.87	11	1
1:A:103:TYR:HE2	1:A:152:LEU:HD21	0.46	1.70	12	1
1:A:120:HIS:CB	1:A:124:LEU:HD12	0.45	2.40	9	1
1:A:52:ALA:O	1:A:53:ASN:CB	0.45	2.65	13	3
1:A:26:ASN:O	1:A:30:LYS:CG	0.45	2.64	4	10
1:A:155:TYR:CB	1:A:156:PRO:HD3	0.45	2.41	11	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:TYR:O	1:A:28:TYR:CD1	0.45	2.69	5	2
1:A:32:LEU:HD12	1:A:68:GLN:CG	0.45	2.41	4	2
1:A:67:PHE:O	1:A:71:LEU:N	0.45	2.49	13	1
1:A:40:LEU:HD11	1:A:141:LEU:HD21	0.45	1.88	20	1
1:A:18:LEU:HD13	1:A:162:LEU:CD2	0.45	2.42	1	1
1:A:58:MET:O	1:A:62:GLU:N	0.45	2.49	11	18
1:A:32:LEU:CD2	1:A:145:LEU:HD22	0.45	2.41	5	2
1:A:123:GLU:HG3	1:A:124:LEU:N	0.45	2.27	1	2
1:A:81:LEU:HB3	1:A:82:PRO:CD	0.45	2.42	11	4
1:A:83:GLU:CD	1:A:86:GLN:CG	0.45	2.90	5	1
1:A:146:SER:O	1:A:149:PHE:CE1	0.45	2.70	6	1
1:A:73:GLN:CG	1:A:74:SER:N	0.45	2.79	10	2
1:A:61:LEU:C	1:A:61:LEU:CD1	0.45	2.89	18	4
1:A:86:GLN:O	1:A:162:LEU:HD23	0.45	2.12	5	1
1:A:155:TYR:CE2	1:A:183:PHE:CE1	0.45	3.04	20	2
1:A:67:PHE:CE1	1:A:71:LEU:HG	0.45	2.47	9	1
1:A:141:LEU:CG	1:A:145:LEU:HD12	0.45	2.41	1	1
1:A:39:TYR:CE1	1:A:138:ILE:HD12	0.45	2.47	5	1
1:A:39:TYR:CD1	1:A:128:MET:SD	0.45	3.10	9	1
1:A:75:LEU:HD22	1:A:88:VAL:HG13	0.45	1.89	15	1
1:A:26:ASN:O	1:A:30:LYS:HG2	0.45	2.12	16	2
1:A:103:TYR:OH	1:A:152:LEU:HD13	0.45	2.11	15	1
1:A:28:TYR:C	1:A:28:TYR:CD1	0.44	2.95	1	1
1:A:59:GLY:O	1:A:63:GLU:CG	0.44	2.65	12	5
1:A:79:THR:HG21	1:A:162:LEU:HD21	0.44	1.88	4	1
1:A:117:LEU:HD11	1:A:141:LEU:HB2	0.44	1.89	7	3
1:A:22:LEU:O	1:A:26:ASN:N	0.44	2.50	16	1
1:A:70:MET:HE2	1:A:95:LEU:HD13	0.44	1.89	19	1
1:A:81:LEU:CB	1:A:82:PRO:HD3	0.44	2.42	20	1
1:A:177:GLN:CG	1:A:178:LYS:N	0.44	2.80	1	4
1:A:67:PHE:CE2	1:A:95:LEU:HD21	0.44	2.47	2	1
1:A:18:LEU:O	1:A:22:LEU:CD1	0.44	2.65	6	5
1:A:110:HIS:CB	1:A:111:PRO:CD	0.44	2.95	6	5
1:A:158:LEU:O	1:A:162:LEU:CB	0.44	2.65	4	13
1:A:61:LEU:HD13	1:A:61:LEU:C	0.44	2.37	11	1
1:A:129:GLU:O	1:A:130:THR:CG2	0.44	2.66	5	4
1:A:17:VAL:HG12	1:A:158:LEU:HD21	0.44	1.88	4	3
1:A:18:LEU:HD12	1:A:76:GLU:CD	0.44	2.38	7	2
1:A:88:VAL:HG23	1:A:162:LEU:HD12	0.44	1.88	6	1
1:A:77:GLU:O	1:A:81:LEU:CD2	0.44	2.66	18	1
1:A:96:MET:HE1	1:A:183:PHE:CD2	0.44	2.48	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:155:TYR:CD2	1:A:183:PHE:CZ	0.44	3.05	3	2
1:A:106:TYR:CE2	1:A:110:HIS:CE1	0.44	3.05	4	1
1:A:155:TYR:CE1	1:A:183:PHE:CE2	0.44	3.06	5	1
1:A:155:TYR:OH	1:A:159:LEU:HD21	0.44	2.13	6	1
1:A:32:LEU:HD12	1:A:68:GLN:CB	0.44	2.42	16	1
1:A:32:LEU:HD11	1:A:64:ILE:HG21	0.44	1.90	4	1
1:A:160:LYS:O	1:A:164:ARG:CG	0.44	2.66	4	3
1:A:18:LEU:HD13	1:A:80:LYS:HE3	0.44	1.88	8	1
1:A:77:GLU:O	1:A:81:LEU:HD23	0.44	2.13	17	1
1:A:81:LEU:HB2	1:A:82:PRO:CD	0.44	2.42	20	1
1:A:164:ARG:CZ	1:A:176:ILE:HD12	0.44	2.43	20	1
1:A:22:LEU:O	1:A:26:ASN:ND2	0.44	2.51	1	1
1:A:36:LEU:O	1:A:41:ARG:N	0.44	2.51	20	9
1:A:70:MET:O	1:A:74:SER:N	0.44	2.51	16	6
1:A:32:LEU:HD22	1:A:61:LEU:HD21	0.44	1.89	6	1
1:A:120:HIS:CB	1:A:124:LEU:CD1	0.44	2.95	7	1
1:A:82:PRO:O	1:A:83:GLU:C	0.44	2.61	12	2
1:A:125:GLY:O	1:A:128:MET:CG	0.44	2.66	16	1
1:A:147:LYS:N	1:A:148:PRO:HD2	0.44	2.28	10	4
1:A:120:HIS:HB3	1:A:124:LEU:CD1	0.44	2.43	7	2
1:A:13:TYR:O	1:A:17:VAL:N	0.44	2.51	18	1
1:A:88:VAL:HG13	1:A:92:PHE:CE2	0.43	2.47	3	1
1:A:125:GLY:O	1:A:129:GLU:N	0.43	2.51	18	3
1:A:177:GLN:O	1:A:181:ALA:CB	0.43	2.66	18	7
1:A:24:THR:HG21	1:A:154:LYS:HG3	0.43	1.89	5	1
1:A:18:LEU:C	1:A:22:LEU:HD13	0.43	2.38	13	2
1:A:14:TYR:HH	1:A:162:LEU:HD11	0.43	1.72	16	1
1:A:71:LEU:C	1:A:71:LEU:CD1	0.43	2.92	20	9
1:A:89:GLY:O	1:A:93:LEU:CB	0.43	2.66	2	1
1:A:99:MET:HE2	1:A:103:TYR:CE1	0.43	2.48	5	1
1:A:106:TYR:CD2	1:A:149:PHE:CE1	0.43	3.06	5	1
1:A:117:LEU:O	1:A:121:SER:N	0.43	2.52	19	12
1:A:92:PHE:CZ	1:A:155:TYR:CE1	0.43	3.06	3	3
1:A:54:ILE:HG23	1:A:59:GLY:CA	0.43	2.43	11	1
1:A:32:LEU:O	1:A:36:LEU:CG	0.43	2.67	1	5
1:A:28:TYR:CD1	1:A:28:TYR:C	0.43	2.94	2	6
1:A:28:TYR:CD1	1:A:28:TYR:O	0.43	2.71	2	1
1:A:129:GLU:CG	1:A:130:THR:N	0.43	2.81	4	1
1:A:124:LEU:CB	1:A:138:ILE:HG12	0.43	2.44	5	1
1:A:120:HIS:CE1	1:A:123:GLU:OE1	0.43	2.71	9	1
1:A:73:GLN:O	1:A:77:GLU:CG	0.43	2.66	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:THR:CG2	1:A:151:ARG:NE	0.43	2.82	19	1
1:A:54:ILE:O	1:A:59:GLY:N	0.43	2.52	3	12
1:A:128:MET:CG	1:A:129:GLU:N	0.43	2.81	1	1
1:A:41:ARG:N	1:A:42:PRO:HD2	0.43	2.29	2	1
1:A:159:LEU:HD11	1:A:183:PHE:HD2	0.43	1.74	7	2
1:A:53:ASN:HA	1:A:56:TYR:CE2	0.43	2.48	13	1
1:A:96:MET:O	1:A:99:MET:N	0.43	2.52	14	1
1:A:159:LEU:HD11	1:A:183:PHE:CD2	0.43	2.49	20	1
1:A:162:LEU:O	1:A:162:LEU:CD1	0.43	2.66	1	1
1:A:139:LEU:O	1:A:141:LEU:N	0.43	2.51	13	4
1:A:83:GLU:OE2	1:A:86:GLN:NE2	0.43	2.52	3	1
1:A:161:GLU:O	1:A:164:ARG:CG	0.43	2.67	3	1
1:A:116:VAL:O	1:A:120:HIS:N	0.43	2.52	10	7
1:A:61:LEU:CD2	1:A:141:LEU:CD1	0.43	2.95	13	1
1:A:14:TYR:CE1	1:A:162:LEU:HD22	0.43	2.49	19	1
1:A:155:TYR:N	1:A:156:PRO:CD	0.43	2.82	6	3
1:A:28:TYR:OH	1:A:64:ILE:CG2	0.43	2.67	14	4
1:A:96:MET:CB	1:A:97:PRO:CD	0.43	2.97	14	2
1:A:49:LEU:O	1:A:53:ASN:ND2	0.43	2.51	9	1
1:A:60:ASN:O	1:A:64:ILE:CD1	0.43	2.66	14	1
1:A:96:MET:N	1:A:97:PRO:HD2	0.43	2.29	17	7
1:A:178:LYS:O	1:A:182:ALA:HB2	0.43	2.13	3	2
1:A:128:MET:HG2	1:A:133:ALA:HB2	0.43	1.89	4	1
1:A:81:LEU:HB3	1:A:82:PRO:HD2	0.43	1.91	18	1
1:A:66:SER:O	1:A:70:MET:CG	0.43	2.67	1	2
1:A:117:LEU:O	1:A:120:HIS:N	0.43	2.52	7	9
1:A:135:SER:N	1:A:136:PRO:HD2	0.43	2.29	9	1
1:A:22:LEU:O	1:A:26:ASN:CB	0.43	2.67	10	2
1:A:95:LEU:CD2	1:A:98:GLN:OE1	0.43	2.65	11	1
1:A:39:TYR:CE1	1:A:128:MET:HB2	0.43	2.49	12	1
1:A:50:SER:O	1:A:52:ALA:N	0.43	2.51	12	1
1:A:17:VAL:CG1	1:A:158:LEU:HD23	0.43	2.44	1	1
1:A:81:LEU:O	1:A:82:PRO:C	0.43	2.62	3	6
1:A:18:LEU:HD21	1:A:162:LEU:HD11	0.43	1.90	4	1
1:A:106:TYR:O	1:A:110:HIS:N	0.43	2.52	4	2
1:A:124:LEU:HB3	1:A:138:ILE:HD13	0.43	1.88	9	2
1:A:53:ASN:OD1	1:A:120:HIS:CE1	0.43	2.72	13	1
1:A:159:LEU:O	1:A:176:ILE:HG23	0.43	2.13	20	1
1:A:43:LEU:HD23	1:A:58:MET:HE2	0.42	1.83	3	1
1:A:18:LEU:HD12	1:A:76:GLU:OE2	0.42	2.14	4	2
1:A:140:VAL:O	1:A:141:LEU:C	0.42	2.62	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:LEU:C	1:A:75:LEU:HD12	0.42	2.39	6	1
1:A:155:TYR:CZ	1:A:159:LEU:HD21	0.42	2.48	6	1
1:A:34:THR:O	1:A:38:THR:CB	0.42	2.68	9	1
1:A:110:HIS:O	1:A:113:ALA:HB3	0.42	2.13	9	2
1:A:18:LEU:HD23	1:A:80:LYS:CE	0.42	2.43	11	1
1:A:49:LEU:O	1:A:53:ASN:CB	0.42	2.67	7	1
1:A:26:ASN:O	1:A:30:LYS:CB	0.42	2.68	9	3
1:A:69:GLN:O	1:A:73:GLN:CG	0.42	2.67	2	1
1:A:121:SER:OG	1:A:139:LEU:HD21	0.42	2.14	3	1
1:A:140:VAL:O	1:A:144:GLY:N	0.42	2.52	17	3
1:A:105:THR:O	1:A:109:ASN:N	0.42	2.52	13	2
1:A:158:LEU:O	1:A:162:LEU:N	0.42	2.51	14	1
1:A:181:ALA:O	1:A:185:ASN:ND2	0.42	2.52	16	1
1:A:75:LEU:CD2	1:A:75:LEU:C	0.42	2.92	20	1
1:A:32:LEU:HD12	1:A:68:GLN:OE1	0.42	2.15	4	1
1:A:57:LEU:HD11	1:A:141:LEU:HD11	0.42	1.91	5	1
1:A:83:GLU:CG	1:A:84:ALA:N	0.42	2.82	5	1
1:A:54:ILE:HG23	1:A:59:GLY:HA2	0.42	1.90	8	2
1:A:14:TYR:CE1	1:A:18:LEU:CD1	0.42	3.01	12	1
1:A:14:TYR:CZ	1:A:83:GLU:OE2	0.42	2.73	12	1
1:A:35:VAL:O	1:A:39:TYR:CB	0.42	2.68	18	1
1:A:85:GLN:O	1:A:87:ARG:N	0.42	2.53	19	1
1:A:60:ASN:ND2	1:A:102:LEU:O	0.42	2.53	1	2
1:A:141:LEU:O	1:A:145:LEU:N	0.42	2.51	1	3
1:A:72:VAL:O	1:A:76:GLU:CG	0.42	2.67	9	3
1:A:99:MET:HE1	1:A:183:PHE:CE1	0.42	2.49	9	1
1:A:40:LEU:HD21	1:A:61:LEU:HD21	0.42	1.91	13	1
1:A:35:VAL:HG13	1:A:39:TYR:HD2	0.42	1.74	14	2
1:A:43:LEU:HG	1:A:127:PHE:CE2	0.42	2.49	16	3
1:A:57:LEU:HD11	1:A:117:LEU:CD2	0.42	2.45	3	1
1:A:106:TYR:CE2	1:A:149:PHE:CD1	0.42	3.08	5	1
1:A:105:THR:CG2	1:A:109:ASN:OD1	0.42	2.68	8	1
1:A:89:GLY:C	1:A:93:LEU:HD13	0.42	2.39	10	1
1:A:37:SER:O	1:A:41:ARG:CB	0.42	2.68	18	1
1:A:123:GLU:CG	1:A:124:LEU:N	0.42	2.82	1	1
1:A:25:GLU:OE1	1:A:72:VAL:HG22	0.42	2.14	10	1
1:A:18:LEU:HD23	1:A:80:LYS:HE2	0.42	1.92	11	1
1:A:110:HIS:N	1:A:111:PRO:HD2	0.42	2.30	14	2
1:A:43:LEU:HB2	1:A:127:PHE:CZ	0.42	2.50	16	1
1:A:131:LYS:CG	1:A:131:LYS:O	0.42	2.67	16	1
1:A:92:PHE:O	1:A:96:MET:N	0.42	2.52	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:TYR:C	1:A:56:TYR:CD1	0.42	2.96	1	1
1:A:40:LEU:O	1:A:41:ARG:C	0.42	2.63	18	2
1:A:152:LEU:HD12	1:A:155:TYR:CD1	0.42	2.49	19	1
1:A:18:LEU:HD13	1:A:162:LEU:HD21	0.42	1.90	1	1
1:A:56:TYR:O	1:A:109:ASN:ND2	0.42	2.53	7	1
1:A:26:ASN:O	1:A:30:LYS:N	0.42	2.51	9	1
1:A:55:SER:O	1:A:109:ASN:ND2	0.42	2.53	20	1
1:A:112:SER:O	1:A:115:ASN:N	0.42	2.53	4	1
1:A:148:PRO:HA	1:A:151:ARG:NH2	0.42	2.30	13	1
1:A:103:TYR:CE2	1:A:152:LEU:HD11	0.42	2.50	16	1
1:A:155:TYR:CZ	1:A:183:PHE:CZ	0.42	3.08	20	1
1:A:130:THR:O	1:A:131:LYS:CB	0.41	2.68	12	3
1:A:55:SER:O	1:A:105:THR:CG2	0.41	2.68	4	1
1:A:58:MET:O	1:A:59:GLY:C	0.41	2.63	8	6
1:A:75:LEU:HD22	1:A:92:PHE:CE2	0.41	2.50	7	1
1:A:115:ASN:O	1:A:119:GLU:CG	0.41	2.68	9	1
1:A:49:LEU:HD13	1:A:53:ASN:ND2	0.41	2.30	10	1
1:A:99:MET:HG3	1:A:103:TYR:CD1	0.41	2.50	16	1
1:A:58:MET:HE3	1:A:62:GLU:HB3	0.41	1.92	9	1
1:A:21:ILE:HG22	1:A:25:GLU:HG2	0.41	1.92	10	1
1:A:41:ARG:CB	1:A:42:PRO:HD3	0.41	2.45	19	2
1:A:75:LEU:CD2	1:A:76:GLU:N	0.41	2.83	20	1
1:A:56:TYR:HE2	1:A:116:VAL:HG11	0.41	1.69	1	1
1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:CD2	0.41	2.83	2	2
1:A:25:GLU:OE1	1:A:72:VAL:CG2	0.41	2.69	4	1
1:A:56:TYR:CD1	1:A:109:ASN:OD1	0.41	2.73	9	1
1:A:14:TYR:CE1	1:A:162:LEU:HD21	0.41	2.50	10	1
1:A:159:LEU:O	1:A:176:ILE:CG2	0.41	2.68	19	1
1:A:51:SER:O	1:A:52:ALA:CB	0.41	2.68	20	1
1:A:25:GLU:O	1:A:28:TYR:N	0.41	2.53	3	1
1:A:17:VAL:O	1:A:21:ILE:CD1	0.41	2.69	9	1
1:A:28:TYR:CD1	1:A:148:PRO:HB3	0.41	2.50	10	1
1:A:21:ILE:HG23	1:A:25:GLU:OE1	0.41	2.16	12	1
1:A:75:LEU:HD12	1:A:76:GLU:N	0.41	2.31	14	1
1:A:32:LEU:O	1:A:36:LEU:N	0.41	2.52	3	1
1:A:83:GLU:O	1:A:85:GLN:N	0.41	2.51	5	1
1:A:117:LEU:HD11	1:A:141:LEU:CB	0.41	2.46	5	1
1:A:163:GLU:HB2	1:A:176:ILE:CD1	0.41	2.46	6	1
1:A:128:MET:O	1:A:129:GLU:C	0.41	2.63	10	1
1:A:135:SER:H	1:A:136:PRO:CD	0.41	2.29	13	2
1:A:50:SER:O	1:A:51:SER:CB	0.41	2.68	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:MET:HB3	1:A:97:PRO:CD	0.41	2.46	14	1
1:A:147:LYS:O	1:A:151:ARG:NH1	0.41	2.54	15	1
1:A:86:GLN:NE2	1:A:162:LEU:HD13	0.41	2.30	16	1
1:A:21:ILE:HG21	1:A:158:LEU:HD12	0.41	1.91	18	1
1:A:185:ASN:O	1:A:189:GLN:NE2	0.41	2.54	4	1
1:A:110:HIS:HB3	1:A:111:PRO:CD	0.41	2.45	6	1
1:A:163:GLU:OE1	1:A:176:ILE:HD13	0.41	2.16	17	1
1:A:67:PHE:CD1	1:A:71:LEU:HD22	0.41	2.49	4	1
1:A:39:TYR:CG	1:A:128:MET:SD	0.41	3.14	9	1
1:A:155:TYR:CE2	1:A:183:PHE:CE2	0.41	3.09	9	1
1:A:21:ILE:CG2	1:A:25:GLU:OE1	0.41	2.69	12	1
1:A:30:LYS:CD	1:A:30:LYS:C	0.41	2.94	13	1
1:A:114:VAL:HG22	1:A:142:THR:CG2	0.41	2.46	19	1
1:A:78:CYS:O	1:A:83:GLU:N	0.41	2.53	20	1
1:A:21:ILE:HG13	1:A:158:LEU:HD21	0.41	1.92	5	1
1:A:67:PHE:CE1	1:A:95:LEU:HG	0.41	2.51	10	2
1:A:70:MET:O	1:A:71:LEU:C	0.41	2.64	16	1
1:A:67:PHE:CZ	1:A:71:LEU:CD1	0.41	3.03	18	1
1:A:138:ILE:O	1:A:138:ILE:CG1	0.41	2.69	18	1
1:A:43:LEU:HB2	1:A:127:PHE:CE1	0.41	2.51	19	1
1:A:79:THR:O	1:A:81:LEU:O	0.41	2.38	19	1
1:A:124:LEU:O	1:A:127:PHE:CE2	0.41	2.73	4	1
1:A:122:GLU:O	1:A:126:GLU:CB	0.41	2.69	10	1
1:A:147:LYS:N	1:A:148:PRO:HD3	0.41	2.31	14	2
1:A:28:TYR:OH	1:A:67:PHE:CE2	0.40	2.69	3	1
1:A:75:LEU:HD12	1:A:75:LEU:C	0.40	2.41	5	1
1:A:29:SER:OG	1:A:68:GLN:NE2	0.40	2.54	7	1
1:A:156:PRO:HA	1:A:159:LEU:HG	0.40	1.93	18	1
1:A:54:ILE:O	1:A:55:SER:C	0.40	2.64	19	2
1:A:22:LEU:O	1:A:23:GLU:C	0.40	2.64	1	1
1:A:42:PRO:HB2	1:A:127:PHE:CD1	0.40	2.51	6	1
1:A:87:ARG:NH1	1:A:175:ASP:OD2	0.40	2.54	6	1
1:A:109:ASN:O	1:A:112:SER:N	0.40	2.52	14	1
1:A:35:VAL:O	1:A:39:TYR:HB2	0.40	2.16	18	1
1:A:105:THR:O	1:A:109:ASN:ND2	0.40	2.54	19	1
1:A:103:TYR:CD2	1:A:186:LEU:HB3	0.40	2.51	1	1
1:A:83:GLU:HG3	1:A:84:ALA:N	0.40	2.32	5	1
1:A:188:ALA:O	1:A:191:GLN:CG	0.40	2.69	8	1
1:A:83:GLU:HG2	1:A:86:GLN:CG	0.40	2.46	11	1
1:A:72:VAL:HG13	1:A:76:GLU:CD	0.40	2.41	14	1
1:A:158:LEU:HD22	1:A:162:LEU:HD23	0.40	1.92	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:124:LEU:CD1	1:A:138:ILE:HD12	0.40	2.46	15	1
1:A:14:TYR:OH	1:A:86:GLN:CG	0.40	2.69	16	1
1:A:64:ILE:O	1:A:68:GLN:N	0.40	2.49	20	1
1:A:139:LEU:H	1:A:139:LEU:HD22	0.40	1.77	20	1
1:A:139:LEU:O	1:A:140:VAL:C	0.40	2.64	13	4
1:A:117:LEU:HD12	1:A:142:THR:OG1	0.40	2.16	4	1
1:A:134:SER:OG	1:A:140:VAL:HG21	0.40	2.16	5	1
1:A:133:ALA:HB1	1:A:137:GLY:O	0.40	2.17	7	1
1:A:100:LYS:HD3	1:A:101:THR:N	0.40	2.31	12	1
1:A:41:ARG:CB	1:A:42:PRO:CD	0.40	2.99	13	1
1:A:67:PHE:CZ	1:A:95:LEU:HG	0.40	2.51	15	1
1:A:14:TYR:OH	1:A:86:GLN:CB	0.40	2.70	16	1
1:A:128:MET:SD	1:A:133:ALA:CB	0.40	3.09	3	1
1:A:57:LEU:O	1:A:58:MET:C	0.40	2.65	4	2
1:A:58:MET:O	1:A:62:GLU:CB	0.40	2.69	6	1
1:A:117:LEU:N	1:A:117:LEU:HD23	0.40	2.31	11	1
1:A:154:LYS:O	1:A:155:TYR:C	0.40	2.65	14	1
1:A:39:TYR:CB	1:A:132:GLY:O	0.40	2.69	15	1
1:A:141:LEU:O	1:A:145:LEU:CG	0.40	2.69	17	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	165/209 (79%)	129±4 (78±3%)	28±4 (17±3%)	8±2 (5±1%)	3	25
All	All	3300/4180 (79%)	2576 (78%)	566 (17%)	158 (5%)	3	25

All 32 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	83	GLU	14
1	A	82	PRO	13
1	A	134	SER	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	51	SER	11
1	A	140	VAL	10
1	A	135	SER	10
1	A	50	SER	9
1	A	148	PRO	8
1	A	141	LEU	7
1	A	81	LEU	6
1	A	133	ALA	6
1	A	146	SER	6
1	A	59	GLY	5
1	A	86	GLN	4
1	A	129	GLU	4
1	A	132	GLY	4
1	A	142	THR	4
1	A	131	LYS	3
1	A	84	ALA	3
1	A	87	ARG	3
1	A	52	ALA	3
1	A	34	THR	2
1	A	49	LEU	2
1	A	74	SER	2
1	A	36	LEU	1
1	A	38	THR	1
1	A	42	PRO	1
1	A	191	GLN	1
1	A	57	LEU	1
1	A	53	ASN	1
1	A	54	ILE	1
1	A	55	SER	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	150/191 (79%)	108±4 (72±3%)	42±4 (28±3%)	1	20
All	All	3000/3820 (79%)	2159 (72%)	841 (28%)	1	20

All 115 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	62	GLU	20
1	A	117	LEU	20
1	A	139	LEU	20
1	A	162	LEU	20
1	A	33	GLN	19
1	A	183	PHE	19
1	A	71	LEU	18
1	A	95	LEU	17
1	A	126	GLU	17
1	A	80	LYS	16
1	A	138	ILE	16
1	A	30	LYS	15
1	A	110	HIS	15
1	A	141	LEU	14
1	A	143	THR	14
1	A	40	LEU	13
1	A	68	GLN	13
1	A	96	MET	13
1	A	150	MET	13
1	A	178	LYS	13
1	A	81	LEU	13
1	A	129	GLU	13
1	A	135	SER	13
1	A	100	LYS	12
1	A	163	GLU	12
1	A	184	LYS	12
1	A	77	GLU	11
1	A	131	LYS	11
1	A	142	THR	11
1	A	160	LYS	11
1	A	187	SER	11
1	A	31	GLU	10
1	A	147	LYS	10
1	A	179	SER	10
1	A	58	MET	10
1	A	41	ARG	9
1	A	51	SER	9
1	A	146	SER	9
1	A	191	GLN	9
1	A	151	ARG	9
1	A	153	ASP	9
1	A	107	CYS	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	127	PHE	8
1	A	134	SER	8
1	A	155	TYR	8
1	A	128	MET	8
1	A	13	TYR	8
1	A	91	CYS	8
1	A	55	SER	8
1	A	66	SER	8
1	A	57	LEU	7
1	A	70	MET	7
1	A	98	GLN	7
1	A	152	LEU	7
1	A	154	LYS	7
1	A	176	ILE	7
1	A	43	LEU	7
1	A	53	ASN	7
1	A	56	TYR	7
1	A	15	ASN	6
1	A	37	SER	6
1	A	75	LEU	6
1	A	50	SER	6
1	A	177	GLN	6
1	A	83	GLU	6
1	A	180	MET	5
1	A	19	GLN	5
1	A	78	CYS	5
1	A	99	MET	5
1	A	121	SER	5
1	A	94	ASN	4
1	A	185	ASN	4
1	A	20	ASN	4
1	A	123	GLU	4
1	A	189	GLN	4
1	A	149	PHE	4
1	A	86	GLN	4
1	A	130	THR	4
1	A	54	ILE	3
1	A	25	GLU	3
1	A	109	ASN	3
1	A	112	SER	3
1	A	69	GLN	3
1	A	161	GLU	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	22	LEU	3
1	A	115	ASN	3
1	A	18	LEU	2
1	A	24	THR	2
1	A	106	TYR	2
1	A	65	CYS	2
1	A	73	GLN	2
1	A	192	GLU	2
1	A	23	GLU	2
1	A	175	ASP	2
1	A	76	GLU	2
1	A	88	VAL	2
1	A	39	TYR	2
1	A	87	ARG	1
1	A	85	GLN	1
1	A	67	PHE	1
1	A	159	LEU	1
1	A	14	TYR	1
1	A	103	TYR	1
1	A	29	SER	1
1	A	93	LEU	1
1	A	60	ASN	1
1	A	61	LEU	1
1	A	164	ARG	1
1	A	35	VAL	1
1	A	26	ASN	1
1	A	102	LEU	1
1	A	49	LEU	1
1	A	122	GLU	1
1	A	190	CYS	1
1	A	27	GLU	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

6.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains ⓘ

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