



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 6, 2026 – 09:42 PM UTC

PDB ID : 1DS9 / pdb_00001ds9
Title : SOLUTION STRUCTURE OF CHLAMYDOMONAS OUTER ARM
DYNEIN LIGHT CHAIN 1
Authors : Wu, H.W.; Maciejewski, M.W.; Marintchev, A.; Benashski, S.E.; Mullen, G.P.;
King, S.M.
Deposited on : 2000-01-07

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

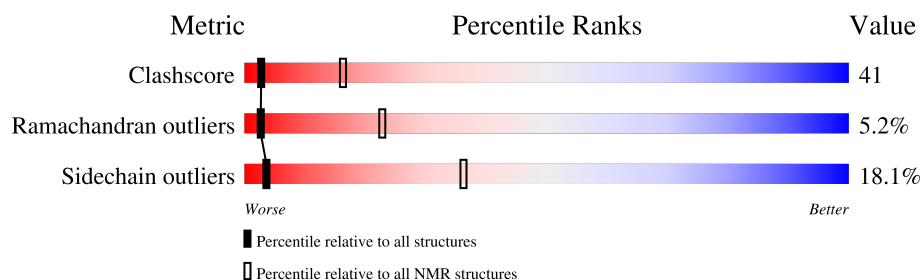
1 Overall quality at a glance

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	198	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 17 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 8 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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:2-A:195 (194)	0.79	1

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

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

The models can be grouped into 2 clusters. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 4, 5, 6, 7, 8, 10, 11, 12, 14, 15, 16, 17
2	2, 3, 9, 13

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3161 atoms, of which 1610 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called OUTER ARM DYNEIN.

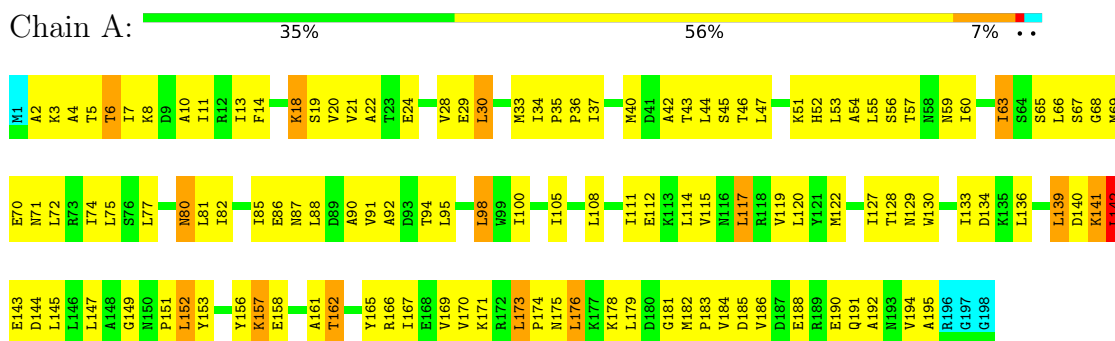
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	198	Total	C	H	N	O	S	0
			3161	975	1610	267	302	7	

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: OUTER ARM DYNEIN

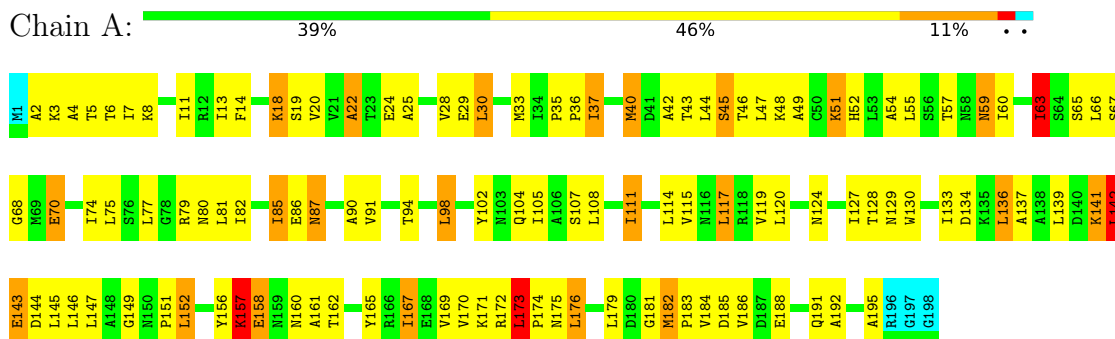


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

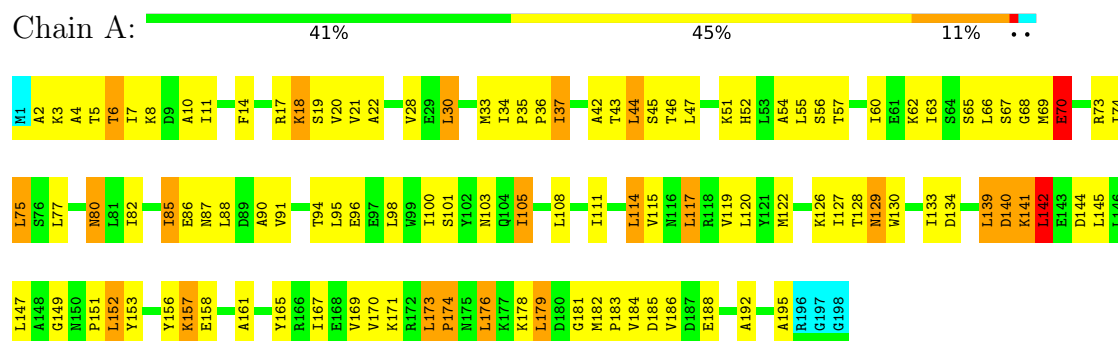
4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

• Molecule 1: OUTER ARM DYNEIN



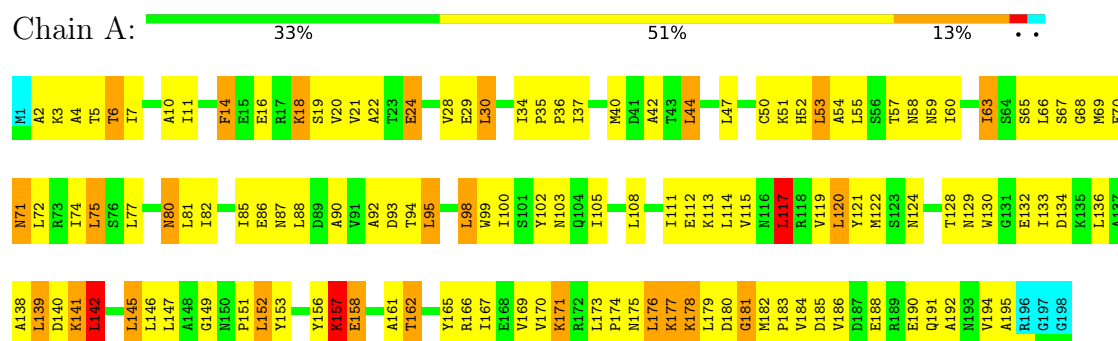
4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: OUTER ARM DYNEIN



4.2.3 Score per residue for model 3

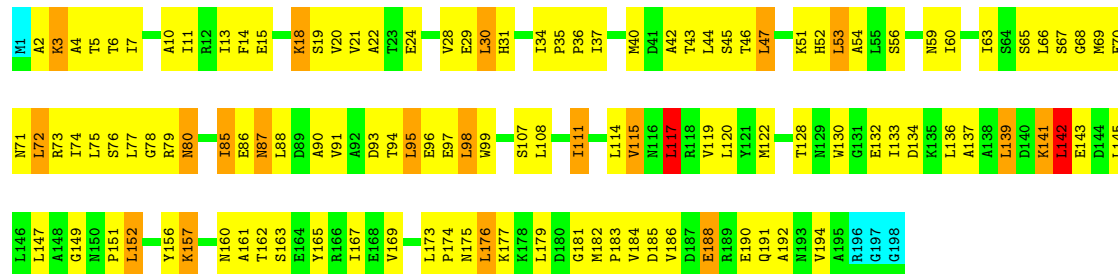
• Molecule 1: OUTER ARM DYNEIN

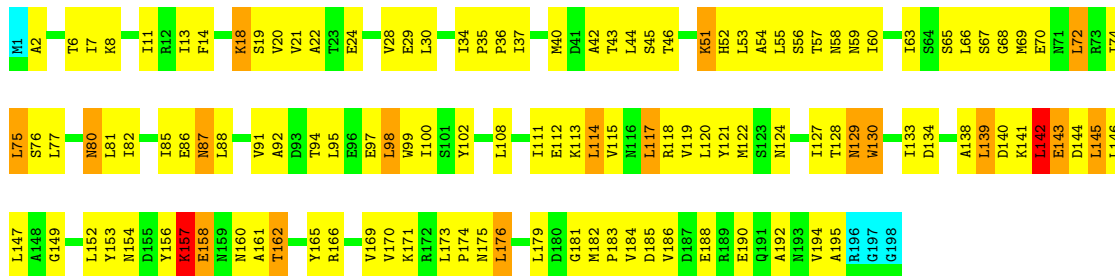


4.2.4 Score per residue for model 4

• Molecule 1: OUTER ARM DYNEIN







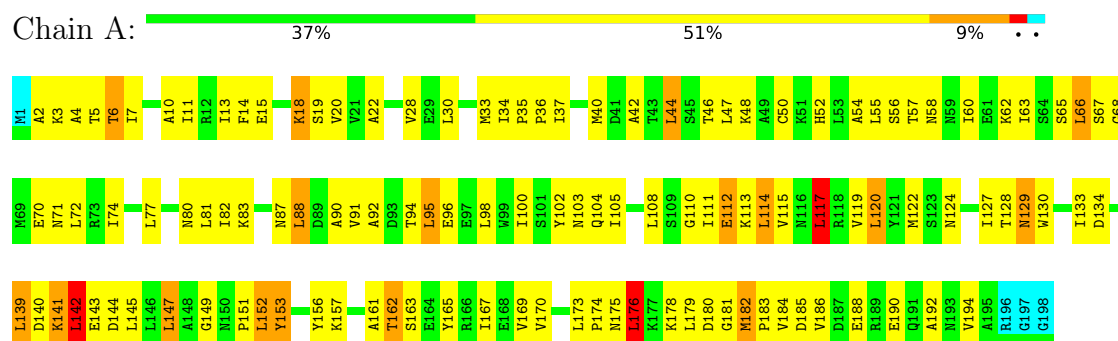
4.2.11 Score per residue for model 11

• Molecule 1: OUTER ARM DYNEIN



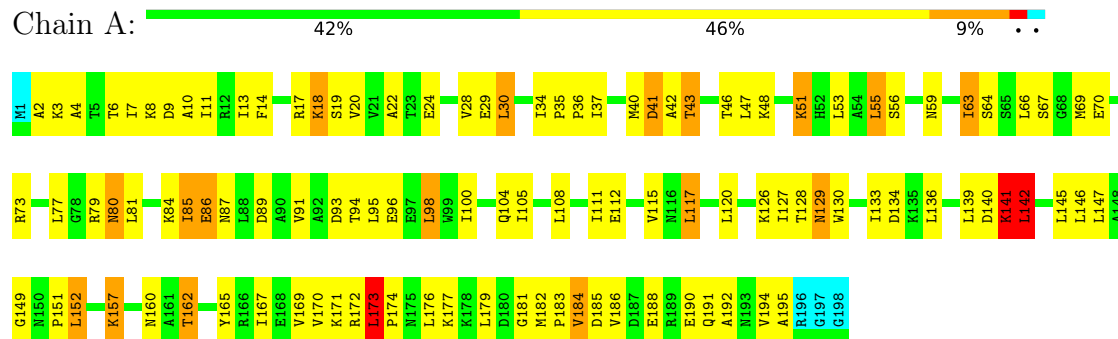
4.2.12 Score per residue for model 12

• Molecule 1: OUTER ARM DYNEIN



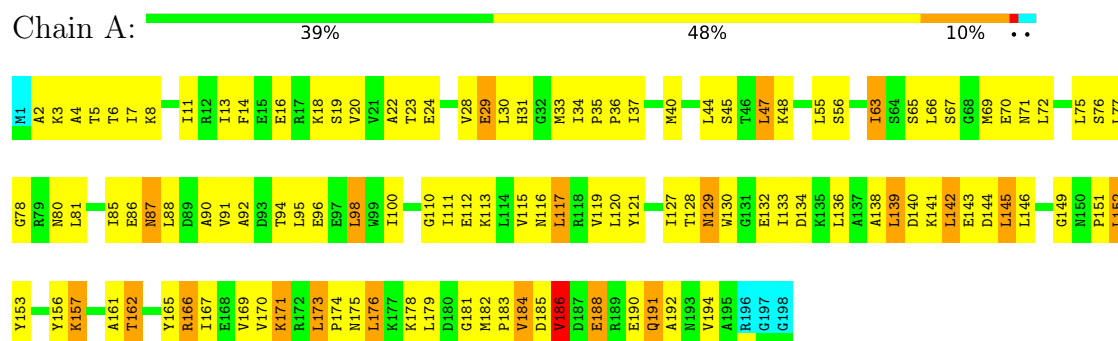
4.2.13 Score per residue for model 13

• Molecule 1: OUTER ARM DYNEIN



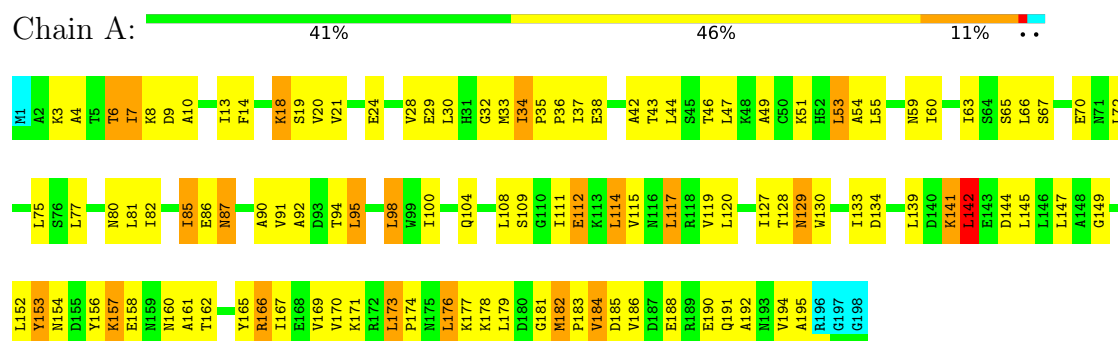
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: OUTER ARM DYNEIN



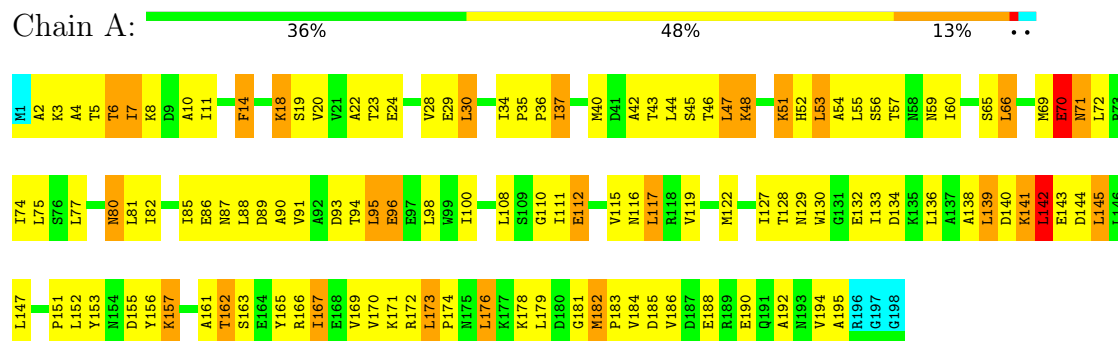
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: OUTER ARM DYNEIN



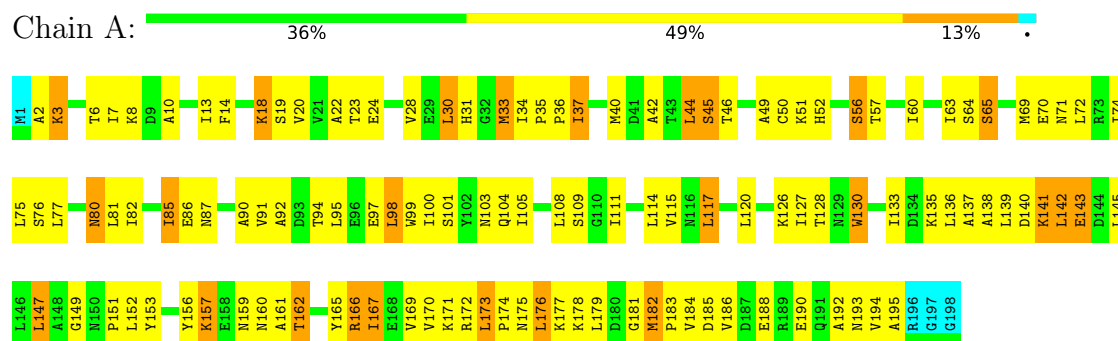
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: OUTER ARM DYNEIN



4.2.17 Score per residue for model 17

● Molecule 1: OUTER ARM DYNEIN



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 150 calculated structures, 17 were deposited, based on the following criterion: *structures with the least restraint violations, structures with the lowest energy, target function*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	4.0
DYANA	structure solution	1.5

No chemical shift data was provided.

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.44±0.01	1±1/1541 (0.1± 0.0%)	1.17±0.01	0±0/2082 (0.0± 0.0%)
All	All	1.44	15/26197 (0.1%)	1.17	0/35394 (0.0%)

All unique bond outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	142	LEU	N-CA	5.81	1.53	1.46	10	11
1	A	34	ILE	CA-C	5.27	1.56	1.52	15	1
1	A	176	LEU	N-CA	5.23	1.52	1.46	8	1
1	A	32	GLY	N-CA	5.13	1.50	1.44	15	2

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1524	1582	1582	127±6
All	All	25908	26894	26894	2157

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 41.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:115:VAL:HG22	1:A:142:LEU:HD21	1.07	1.25	17	2
1:A:145:LEU:HD12	1:A:147:LEU:HD11	1.06	1.27	4	11
1:A:60:ILE:HD11	1:A:82:ILE:HG23	1.01	1.27	9	3
1:A:142:LEU:HD13	1:A:145:LEU:HD13	1.00	1.31	7	5
1:A:173:LEU:HD23	1:A:176:LEU:HD21	1.00	1.25	10	1
1:A:142:LEU:HD13	1:A:145:LEU:HD21	0.99	1.28	4	1
1:A:145:LEU:HD11	1:A:179:LEU:HD12	0.99	1.31	7	4
1:A:170:VAL:HG11	1:A:192:ALA:HB1	0.98	1.31	15	12
1:A:77:LEU:HD22	1:A:100:ILE:HG23	0.97	1.34	6	3
1:A:115:VAL:HG22	1:A:142:LEU:HD11	0.97	1.31	7	3
1:A:169:VAL:HG13	1:A:176:LEU:HD12	0.95	1.32	17	4
1:A:105:ILE:HD12	1:A:111:ILE:HG22	0.95	1.34	6	3
1:A:82:ILE:HG21	1:A:88:LEU:HD12	0.93	1.36	11	1
1:A:85:ILE:HG21	1:A:88:LEU:HD12	0.91	1.43	6	1
1:A:37:ILE:HG21	1:A:60:ILE:HG22	0.88	1.42	4	8
1:A:55:LEU:HD11	1:A:77:LEU:HD13	0.88	1.44	14	1
1:A:98:LEU:HD12	1:A:117:LEU:HD13	0.87	1.46	4	2
1:A:33:MET:HE2	1:A:55:LEU:HD22	0.87	1.46	12	1
1:A:114:LEU:HD13	1:A:115:VAL:N	0.85	1.87	6	1
1:A:115:VAL:HG22	1:A:142:LEU:CD2	0.84	2.02	17	2
1:A:115:VAL:HG22	1:A:142:LEU:CD1	0.84	2.02	12	3
1:A:47:LEU:HD13	1:A:48:LYS:N	0.84	1.87	16	1
1:A:169:VAL:HG13	1:A:176:LEU:HD11	0.83	1.47	14	3
1:A:169:VAL:HG13	1:A:176:LEU:CD1	0.83	2.03	6	7
1:A:82:ILE:CG2	1:A:105:ILE:HG22	0.83	2.04	1	3
1:A:145:LEU:HD11	1:A:179:LEU:CD1	0.82	2.03	7	9
1:A:120:LEU:HD21	1:A:122:MET:HE3	0.81	1.50	10	1
1:A:28:VAL:HG12	1:A:30:LEU:HD11	0.81	1.51	7	4
1:A:165:TYR:O	1:A:169:VAL:HG23	0.80	1.76	7	17
1:A:169:VAL:HG21	1:A:179:LEU:HB3	0.80	1.52	5	14
1:A:144:ASP:O	1:A:145:LEU:HD13	0.80	1.75	14	1
1:A:128:THR:HG22	1:A:151:PRO:CG	0.80	2.07	1	14
1:A:70:GLU:O	1:A:94:THR:HG21	0.80	1.76	16	14
1:A:107:SER:O	1:A:111:ILE:HG22	0.79	1.77	1	2
1:A:4:ALA:HB2	1:A:34:ILE:HG21	0.79	1.54	14	2
1:A:115:VAL:CG1	1:A:142:LEU:HD11	0.78	2.08	13	2
1:A:80:ASN:C	1:A:81:LEU:HD12	0.78	2.04	5	5
1:A:77:LEU:HD21	1:A:80:ASN:CG	0.78	2.03	7	8
1:A:173:LEU:HD23	1:A:176:LEU:CD2	0.78	2.07	10	1
1:A:188:GLU:O	1:A:192:ALA:HB3	0.78	1.79	12	17
1:A:20:VAL:HG21	1:A:30:LEU:HD23	0.78	1.56	3	1
1:A:114:LEU:HD23	1:A:115:VAL:N	0.78	1.94	12	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:115:VAL:O	1:A:142:LEU:HD11	0.78	1.79	6	5
1:A:28:VAL:HG12	1:A:30:LEU:HD13	0.78	1.56	14	2
1:A:169:VAL:HG22	1:A:173:LEU:HD12	0.77	1.53	5	3
1:A:42:ALA:O	1:A:46:THR:HG23	0.77	1.79	17	2
1:A:37:ILE:CG1	1:A:40:MET:HE1	0.77	2.10	11	1
1:A:47:LEU:HD23	1:A:68:GLY:O	0.77	1.79	7	3
1:A:95:LEU:O	1:A:117:LEU:HD11	0.77	1.79	16	5
1:A:2:ALA:CB	1:A:13:ILE:HG22	0.77	2.09	5	3
1:A:66:LEU:CD2	1:A:90:ALA:HB2	0.77	2.08	8	1
1:A:190:GLU:O	1:A:194:VAL:HG23	0.77	1.80	14	15
1:A:111:ILE:HD11	1:A:137:ALA:HB2	0.77	1.57	1	3
1:A:100:ILE:HD12	1:A:103:ASN:CG	0.77	2.05	9	4
1:A:138:ALA:CB	1:A:142:LEU:HD23	0.77	2.08	14	1
1:A:145:LEU:CD1	1:A:147:LEU:HD11	0.76	2.09	4	3
1:A:114:LEU:HD13	1:A:122:MET:HE1	0.76	1.56	10	1
1:A:170:VAL:HG21	1:A:192:ALA:HB1	0.76	1.57	14	2
1:A:42:ALA:O	1:A:46:THR:HG22	0.76	1.81	8	12
1:A:173:LEU:HD13	1:A:176:LEU:HD12	0.75	1.57	8	1
1:A:98:LEU:HD13	1:A:117:LEU:HD13	0.75	1.57	13	1
1:A:163:SER:O	1:A:167:ILE:HD12	0.75	1.81	12	4
1:A:129:ASN:HB2	1:A:133:ILE:HD12	0.75	1.59	8	7
1:A:129:ASN:CB	1:A:133:ILE:HD12	0.75	2.10	2	9
1:A:130:TRP:N	1:A:152:LEU:HD11	0.74	1.97	11	9
1:A:95:LEU:HD22	1:A:98:LEU:HD12	0.74	1.60	9	2
1:A:44:LEU:O	1:A:47:LEU:HD12	0.74	1.82	16	1
1:A:2:ALA:O	1:A:34:ILE:HD13	0.74	1.81	4	1
1:A:20:VAL:HG21	1:A:30:LEU:HD12	0.74	1.57	13	6
1:A:47:LEU:HD21	1:A:71:ASN:CB	0.74	2.11	3	3
1:A:128:THR:HG22	1:A:151:PRO:HG2	0.74	1.57	2	14
1:A:7:ILE:HD12	1:A:45:SER:HB2	0.74	1.60	10	5
1:A:70:GLU:C	1:A:94:THR:HG21	0.74	2.08	10	10
1:A:2:ALA:HB1	1:A:14:PHE:CD1	0.74	2.18	6	2
1:A:181:GLY:O	1:A:184:VAL:HG23	0.73	1.82	7	12
1:A:98:LEU:HD12	1:A:117:LEU:CD1	0.73	2.13	14	2
1:A:77:LEU:HD23	1:A:100:ILE:HG22	0.73	1.58	15	4
1:A:69:MET:HB3	1:A:91:VAL:HG22	0.73	1.59	10	2
1:A:69:MET:CB	1:A:91:VAL:HG22	0.73	2.13	6	2
1:A:176:LEU:HD11	1:A:179:LEU:HD23	0.72	1.58	2	1
1:A:142:LEU:HD23	1:A:145:LEU:HD22	0.72	1.60	11	2
1:A:85:ILE:HD13	1:A:86:GLU:N	0.72	2.00	2	8
1:A:4:ALA:HB2	1:A:37:ILE:HD12	0.72	1.60	7	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:ILE:HG23	1:A:105:ILE:HG22	0.72	1.61	12	1
1:A:28:VAL:CG1	1:A:30:LEU:HD11	0.72	2.14	7	7
1:A:111:ILE:HG21	1:A:133:ILE:CD1	0.72	2.13	1	2
1:A:60:ILE:HD12	1:A:82:ILE:CD1	0.72	2.14	17	1
1:A:95:LEU:HD13	1:A:98:LEU:HD21	0.72	1.61	2	1
1:A:169:VAL:CG1	1:A:176:LEU:HD22	0.72	2.15	13	1
1:A:141:LYS:O	1:A:142:LEU:O	0.71	2.07	13	9
1:A:178:LYS:HE2	1:A:184:VAL:HG21	0.71	1.60	9	1
1:A:95:LEU:HD23	1:A:96:GLU:N	0.71	2.01	14	1
1:A:60:ILE:HD11	1:A:82:ILE:HG12	0.71	1.62	10	3
1:A:144:ASP:C	1:A:145:LEU:HD13	0.71	2.09	14	1
1:A:28:VAL:CG1	1:A:30:LEU:HD21	0.71	2.15	13	9
1:A:77:LEU:HD11	1:A:80:ASN:HB3	0.71	1.61	17	13
1:A:145:LEU:HD23	1:A:146:LEU:N	0.71	2.00	13	3
1:A:81:LEU:HD13	1:A:104:GLN:HB2	0.71	1.62	17	1
1:A:142:LEU:HD13	1:A:145:LEU:CD2	0.70	2.14	4	1
1:A:34:ILE:HD12	1:A:34:ILE:O	0.70	1.86	6	1
1:A:111:ILE:HD11	1:A:137:ALA:CB	0.70	2.17	1	3
1:A:77:LEU:CD2	1:A:100:ILE:HG23	0.70	2.16	6	4
1:A:95:LEU:HB3	1:A:117:LEU:HD21	0.70	1.64	6	2
1:A:63:ILE:HD13	1:A:64:SER:N	0.70	2.01	6	1
1:A:171:LYS:NZ	1:A:195:ALA:HB1	0.70	2.01	15	7
1:A:20:VAL:HG21	1:A:30:LEU:HD22	0.70	1.62	5	2
1:A:43:THR:HG22	1:A:69:MET:HE3	0.70	1.64	13	1
1:A:92:ALA:HA	1:A:117:LEU:HD12	0.70	1.64	4	2
1:A:120:LEU:HD22	1:A:122:MET:HE2	0.70	1.63	7	2
1:A:181:GLY:O	1:A:184:VAL:HG13	0.69	1.86	17	4
1:A:120:LEU:HD21	1:A:122:MET:CE	0.69	2.16	10	1
1:A:70:GLU:CB	1:A:90:ALA:HB1	0.69	2.17	4	10
1:A:142:LEU:O	1:A:176:LEU:HD22	0.69	1.87	9	2
1:A:114:LEU:O	1:A:117:LEU:HD22	0.69	1.86	3	1
1:A:169:VAL:HG13	1:A:176:LEU:HD22	0.69	1.62	13	1
1:A:153:TYR:CZ	1:A:162:THR:HG23	0.69	2.22	8	4
1:A:66:LEU:HD22	1:A:67:SER:N	0.69	2.03	12	1
1:A:28:VAL:HG12	1:A:30:LEU:CD1	0.69	2.17	7	5
1:A:37:ILE:CG2	1:A:60:ILE:HG23	0.69	2.18	2	1
1:A:70:GLU:CG	1:A:90:ALA:HB1	0.69	2.17	7	8
1:A:134:ASP:O	1:A:139:LEU:HD22	0.69	1.88	11	14
1:A:29:GLU:HA	1:A:54:ALA:HB3	0.69	1.65	8	8
1:A:173:LEU:CD1	1:A:176:LEU:HD11	0.69	2.18	7	1
1:A:47:LEU:HD21	1:A:71:ASN:HB2	0.68	1.65	8	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:3:LYS:HB2	1:A:13:ILE:HG21	0.68	1.64	12	2
1:A:167:ILE:HG22	1:A:171:LYS:HE2	0.68	1.64	1	3
1:A:14:PHE:CD1	1:A:30:LEU:HD22	0.68	2.22	3	2
1:A:111:ILE:O	1:A:115:VAL:HG22	0.68	1.88	1	3
1:A:3:LYS:HB3	1:A:13:ILE:HD13	0.68	1.64	7	4
1:A:162:THR:HG22	1:A:183:PRO:HG3	0.68	1.66	9	6
1:A:69:MET:HB2	1:A:91:VAL:HG22	0.68	1.64	6	1
1:A:81:LEU:HD22	1:A:104:GLN:NE2	0.68	2.03	9	1
1:A:4:ALA:CB	1:A:34:ILE:HG21	0.68	2.18	14	2
1:A:138:ALA:HB1	1:A:142:LEU:HD23	0.68	1.65	14	1
1:A:173:LEU:HD13	1:A:174:PRO:HD2	0.68	1.65	2	1
1:A:44:LEU:HD12	1:A:45:SER:N	0.67	2.04	6	2
1:A:92:ALA:O	1:A:117:LEU:HD12	0.67	1.88	11	2
1:A:145:LEU:N	1:A:145:LEU:HD22	0.67	2.03	14	1
1:A:115:VAL:HG12	1:A:142:LEU:HD11	0.67	1.64	15	1
1:A:11:ILE:HG23	1:A:22:ALA:HB3	0.67	1.65	14	12
1:A:90:ALA:O	1:A:94:THR:HG22	0.67	1.89	8	4
1:A:44:LEU:HD12	1:A:65:SER:OG	0.67	1.89	2	1
1:A:142:LEU:CD1	1:A:145:LEU:HD13	0.67	2.18	5	2
1:A:53:LEU:HD22	1:A:72:LEU:HD21	0.67	1.66	10	1
1:A:7:ILE:HD12	1:A:45:SER:CB	0.67	2.20	10	5
1:A:66:LEU:HD21	1:A:90:ALA:HB2	0.67	1.65	8	1
1:A:63:ILE:HD11	1:A:87:ASN:HB2	0.67	1.66	10	1
1:A:140:ASP:HA	1:A:173:LEU:HD11	0.67	1.65	12	1
1:A:119:VAL:C	1:A:120:LEU:HD22	0.66	2.16	14	2
1:A:91:VAL:HG22	1:A:95:LEU:CD1	0.66	2.20	2	1
1:A:77:LEU:HG	1:A:100:ILE:HG22	0.66	1.65	11	1
1:A:134:ASP:O	1:A:139:LEU:HD13	0.66	1.90	16	11
1:A:77:LEU:HB3	1:A:100:ILE:HG22	0.66	1.67	2	5
1:A:91:VAL:HG12	1:A:95:LEU:HD12	0.66	1.66	6	1
1:A:98:LEU:HD22	1:A:100:ILE:HD11	0.66	1.68	10	2
1:A:52:HIS:CE1	1:A:74:ILE:HG21	0.66	2.24	8	5
1:A:176:LEU:HD22	1:A:179:LEU:HB2	0.66	1.67	8	2
1:A:140:ASP:HA	1:A:173:LEU:HD21	0.66	1.66	5	2
1:A:72:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HD12	0.66	1.64	14	3
1:A:111:ILE:HD12	1:A:112:GLU:N	0.66	2.06	4	11
1:A:169:VAL:CG2	1:A:179:LEU:HD23	0.66	2.20	10	10
1:A:14:PHE:O	1:A:20:VAL:HG22	0.66	1.91	6	14
1:A:167:ILE:HG23	1:A:192:ALA:HA	0.66	1.66	12	13
1:A:34:ILE:HD13	1:A:36:PRO:HG2	0.66	1.67	6	1
1:A:53:LEU:HD12	1:A:55:LEU:HD11	0.66	1.67	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:VAL:HG12	1:A:95:LEU:CD1	0.66	2.20	6	1
1:A:116:ASN:HA	1:A:142:LEU:HD21	0.66	1.67	14	2
1:A:115:VAL:HG12	1:A:142:LEU:HD21	0.66	1.65	8	1
1:A:127:ILE:HG22	1:A:152:LEU:HD13	0.65	1.65	8	6
1:A:171:LYS:HD3	1:A:195:ALA:HB1	0.65	1.67	5	2
1:A:114:LEU:HD23	1:A:115:VAL:HG23	0.65	1.66	15	1
1:A:37:ILE:HG12	1:A:40:MET:HE1	0.65	1.69	11	1
1:A:53:LEU:HD22	1:A:55:LEU:HD23	0.65	1.69	15	1
1:A:145:LEU:HD21	1:A:176:LEU:HD21	0.65	1.66	16	4
1:A:114:LEU:O	1:A:120:LEU:HD13	0.65	1.91	9	2
1:A:170:VAL:HG11	1:A:192:ALA:HB2	0.65	1.67	1	1
1:A:173:LEU:HD22	1:A:176:LEU:HB2	0.65	1.69	5	1
1:A:10:ALA:CB	1:A:42:ALA:HB2	0.65	2.22	8	4
1:A:117:LEU:HB2	1:A:120:LEU:HD21	0.65	1.66	14	1
1:A:91:VAL:HG13	1:A:95:LEU:HD13	0.65	1.68	8	2
1:A:173:LEU:HD21	1:A:176:LEU:O	0.65	1.92	11	1
1:A:59:ASN:OD1	1:A:81:LEU:HD13	0.65	1.91	1	3
1:A:95:LEU:HB3	1:A:117:LEU:HD11	0.65	1.68	4	2
1:A:80:ASN:C	1:A:81:LEU:HD22	0.65	2.17	12	2
1:A:33:MET:HE2	1:A:55:LEU:CD2	0.65	2.19	12	1
1:A:77:LEU:HD23	1:A:100:ILE:CG2	0.64	2.22	3	2
1:A:142:LEU:CD1	1:A:145:LEU:HD21	0.64	2.15	4	1
1:A:77:LEU:HD11	1:A:80:ASN:CG	0.64	2.16	6	1
1:A:142:LEU:HD13	1:A:142:LEU:O	0.64	1.91	1	1
1:A:4:ALA:HB2	1:A:34:ILE:CG2	0.64	2.22	14	2
1:A:69:MET:O	1:A:91:VAL:HG12	0.64	1.92	14	1
1:A:66:LEU:HD12	1:A:67:SER:N	0.64	2.07	7	11
1:A:2:ALA:HB3	1:A:13:ILE:HG22	0.64	1.69	5	1
1:A:92:ALA:HA	1:A:117:LEU:HD13	0.64	1.70	17	3
1:A:111:ILE:CD1	1:A:133:ILE:HD13	0.64	2.23	2	2
1:A:75:LEU:HD23	1:A:98:LEU:HD21	0.64	1.68	8	2
1:A:169:VAL:HG13	1:A:176:LEU:HB3	0.64	1.70	2	3
1:A:63:ILE:HD12	1:A:87:ASN:CB	0.64	2.22	6	1
1:A:111:ILE:HD12	1:A:133:ILE:HD13	0.64	1.70	2	2
1:A:82:ILE:HG22	1:A:105:ILE:HG13	0.64	1.70	4	1
1:A:55:LEU:HD22	1:A:55:LEU:N	0.64	2.07	13	1
1:A:69:MET:CG	1:A:72:LEU:HD12	0.64	2.23	17	1
1:A:130:TRP:N	1:A:152:LEU:HD21	0.63	2.08	2	8
1:A:47:LEU:HD12	1:A:68:GLY:O	0.63	1.93	6	2
1:A:47:LEU:C	1:A:47:LEU:HD22	0.63	2.18	16	1
1:A:170:VAL:HG11	1:A:192:ALA:CB	0.63	2.23	13	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:95:LEU:C	1:A:117:LEU:HD11	0.63	2.18	8	2
1:A:142:LEU:HB2	1:A:176:LEU:HD12	0.63	1.69	13	1
1:A:37:ILE:HG21	1:A:60:ILE:CG2	0.63	2.21	12	1
1:A:167:ILE:HG13	1:A:192:ALA:HB2	0.63	1.68	16	2
1:A:70:GLU:HG3	1:A:90:ALA:HB1	0.63	1.69	7	6
1:A:170:VAL:O	1:A:173:LEU:HD23	0.63	1.93	1	1
1:A:47:LEU:HD11	1:A:71:ASN:CB	0.63	2.24	3	2
1:A:72:LEU:O	1:A:95:LEU:HD12	0.63	1.94	8	3
1:A:75:LEU:HD23	1:A:98:LEU:CD2	0.63	2.23	8	1
1:A:63:ILE:HG21	1:A:87:ASN:OD1	0.63	1.93	12	1
1:A:59:ASN:ND2	1:A:81:LEU:HD12	0.63	2.08	9	2
1:A:145:LEU:HD23	1:A:145:LEU:N	0.63	2.09	17	10
1:A:34:ILE:HG23	1:A:37:ILE:HB	0.63	1.70	14	2
1:A:47:LEU:HD12	1:A:48:LYS:N	0.62	2.09	12	2
1:A:2:ALA:HB1	1:A:14:PHE:CE1	0.62	2.28	14	6
1:A:20:VAL:HG11	1:A:30:LEU:HD23	0.62	1.70	6	2
1:A:117:LEU:CB	1:A:120:LEU:HD11	0.62	2.24	1	1
1:A:119:VAL:HG23	1:A:144:ASP:HB3	0.62	1.69	10	6
1:A:171:LYS:CE	1:A:195:ALA:HB1	0.62	2.24	8	6
1:A:115:VAL:HG12	1:A:142:LEU:CD2	0.62	2.24	8	1
1:A:127:ILE:CG2	1:A:133:ILE:HD13	0.62	2.24	11	11
1:A:54:ALA:O	1:A:55:LEU:HD22	0.62	1.93	5	2
1:A:82:ILE:CG2	1:A:88:LEU:HD12	0.62	2.17	11	1
1:A:98:LEU:HD23	1:A:117:LEU:HD13	0.62	1.71	2	1
1:A:88:LEU:HD12	1:A:114:LEU:HB3	0.62	1.70	7	2
1:A:120:LEU:HD22	1:A:120:LEU:N	0.62	2.09	15	2
1:A:111:ILE:O	1:A:115:VAL:HG12	0.62	1.94	6	5
1:A:66:LEU:HD22	1:A:66:LEU:C	0.62	2.20	12	1
1:A:87:ASN:O	1:A:91:VAL:HG23	0.62	1.93	1	8
1:A:100:ILE:HD13	1:A:120:LEU:HD11	0.62	1.70	3	1
1:A:43:THR:HG21	1:A:69:MET:HG3	0.62	1.72	7	1
1:A:2:ALA:HB3	1:A:14:PHE:CE2	0.62	2.28	10	2
1:A:115:VAL:O	1:A:142:LEU:HD23	0.62	1.95	1	1
1:A:82:ILE:HD13	1:A:83:LYS:N	0.61	2.09	4	1
1:A:60:ILE:HD11	1:A:82:ILE:CG2	0.61	2.15	9	1
1:A:18:LYS:HE3	1:A:20:VAL:HG13	0.61	1.70	6	15
1:A:171:LYS:NZ	1:A:195:ALA:HB3	0.61	2.11	4	1
1:A:111:ILE:C	1:A:111:ILE:HD13	0.61	2.19	7	3
1:A:169:VAL:HG21	1:A:179:LEU:CB	0.61	2.25	5	6
1:A:28:VAL:HG12	1:A:30:LEU:HG	0.61	1.71	5	3
1:A:88:LEU:HD22	1:A:114:LEU:HB3	0.61	1.70	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:77:LEU:HD21	1:A:80:ASN:ND2	0.61	2.10	17	5
1:A:115:VAL:HG11	1:A:137:ALA:O	0.61	1.95	4	1
1:A:77:LEU:CG	1:A:100:ILE:HG22	0.61	2.25	11	1
1:A:132:GLU:HB2	1:A:136:LEU:HD12	0.61	1.72	9	1
1:A:70:GLU:HB2	1:A:90:ALA:HB1	0.61	1.73	17	7
1:A:140:ASP:HA	1:A:173:LEU:HD22	0.61	1.73	9	1
1:A:111:ILE:HA	1:A:114:LEU:HD22	0.61	1.73	15	3
1:A:169:VAL:HG22	1:A:173:LEU:CD1	0.61	2.25	5	1
1:A:3:LYS:CB	1:A:13:ILE:HG21	0.61	2.25	12	1
1:A:87:ASN:O	1:A:91:VAL:HG22	0.60	1.96	16	5
1:A:115:VAL:HG22	1:A:142:LEU:HD22	0.60	1.71	11	1
1:A:105:ILE:CD1	1:A:111:ILE:HG22	0.60	2.26	17	2
1:A:28:VAL:CG1	1:A:30:LEU:HD13	0.60	2.26	14	2
1:A:169:VAL:HG21	1:A:179:LEU:HB2	0.60	1.73	2	1
1:A:169:VAL:HG22	1:A:179:LEU:HD23	0.60	1.73	11	2
1:A:30:LEU:HD22	1:A:30:LEU:N	0.60	2.11	13	9
1:A:34:ILE:HD12	1:A:36:PRO:HG2	0.60	1.72	12	2
1:A:63:ILE:HG21	1:A:87:ASN:HB2	0.60	1.72	15	1
1:A:88:LEU:HD13	1:A:114:LEU:HD23	0.60	1.74	8	1
1:A:63:ILE:HD11	1:A:87:ASN:CB	0.60	2.26	10	1
1:A:169:VAL:CG1	1:A:176:LEU:HD12	0.60	2.27	7	1
1:A:69:MET:HE3	1:A:91:VAL:CG1	0.60	2.26	16	1
1:A:3:LYS:HA	1:A:34:ILE:HD13	0.60	1.73	17	3
1:A:138:ALA:HB3	1:A:142:LEU:CD2	0.60	2.26	16	2
1:A:2:ALA:O	1:A:34:ILE:HG23	0.60	1.96	16	2
1:A:95:LEU:HG	1:A:98:LEU:HD11	0.60	1.72	13	1
1:A:40:MET:HE3	1:A:64:SER:OG	0.60	1.96	6	1
1:A:145:LEU:CD2	1:A:147:LEU:HD11	0.60	2.26	12	1
1:A:95:LEU:C	1:A:117:LEU:HD21	0.60	2.22	9	2
1:A:114:LEU:CD2	1:A:115:VAL:HG23	0.60	2.26	15	1
1:A:156:TYR:CD1	1:A:161:ALA:HB2	0.59	2.32	16	5
1:A:122:MET:HE2	1:A:125:ASN:CB	0.59	2.27	5	1
1:A:165:TYR:HB3	1:A:179:LEU:HD23	0.59	1.72	9	1
1:A:104:GLN:O	1:A:105:ILE:HD13	0.59	1.96	13	1
1:A:111:ILE:O	1:A:115:VAL:HG13	0.59	1.97	9	2
1:A:141:LYS:HA	1:A:176:LEU:HD23	0.59	1.74	6	1
1:A:37:ILE:CD1	1:A:40:MET:HE3	0.59	2.28	8	1
1:A:81:LEU:HD22	1:A:81:LEU:N	0.59	2.12	12	2
1:A:105:ILE:HD13	1:A:105:ILE:N	0.59	2.12	11	2
1:A:11:ILE:HD13	1:A:24:GLU:N	0.59	2.12	8	8
1:A:171:LYS:CD	1:A:195:ALA:HB1	0.59	2.27	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:GLU:CA	1:A:117:LEU:HD21	0.59	2.27	12	1
1:A:142:LEU:HD13	1:A:145:LEU:HD22	0.59	1.74	12	2
1:A:47:LEU:HD13	1:A:48:LYS:H	0.59	1.54	16	1
1:A:75:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HD11	0.59	1.75	10	1
1:A:29:GLU:C	1:A:30:LEU:HD12	0.59	2.23	14	2
1:A:173:LEU:HD13	1:A:176:LEU:CD1	0.59	2.28	8	1
1:A:137:ALA:O	1:A:142:LEU:HD11	0.59	1.98	17	1
1:A:127:ILE:HG21	1:A:133:ILE:HG21	0.59	1.75	1	3
1:A:111:ILE:HD12	1:A:133:ILE:CD1	0.59	2.27	2	1
1:A:120:LEU:CD2	1:A:122:MET:HE2	0.59	2.26	7	1
1:A:85:ILE:HD12	1:A:110:GLY:N	0.59	2.13	16	1
1:A:63:ILE:HD12	1:A:63:ILE:O	0.58	1.98	2	2
1:A:14:PHE:CE1	1:A:30:LEU:HD22	0.58	2.32	3	1
1:A:47:LEU:C	1:A:47:LEU:HD13	0.58	2.23	3	3
1:A:142:LEU:CD2	1:A:145:LEU:HD22	0.58	2.28	11	2
1:A:37:ILE:HD11	1:A:40:MET:SD	0.58	2.37	17	4
1:A:142:LEU:HD22	1:A:145:LEU:HB3	0.58	1.75	9	1
1:A:80:ASN:O	1:A:81:LEU:HD23	0.58	1.98	9	2
1:A:115:VAL:HG13	1:A:145:LEU:CD1	0.58	2.28	10	1
1:A:173:LEU:N	1:A:173:LEU:HD12	0.58	2.13	10	1
1:A:77:LEU:HD11	1:A:80:ASN:CB	0.58	2.29	9	6
1:A:72:LEU:HD22	1:A:75:LEU:CD2	0.58	2.28	11	1
1:A:88:LEU:HD22	1:A:110:GLY:HA2	0.58	1.75	12	1
1:A:77:LEU:HD23	1:A:100:ILE:HG23	0.58	1.74	3	1
1:A:7:ILE:C	1:A:7:ILE:HD13	0.58	2.24	16	3
1:A:142:LEU:HD23	1:A:143:GLU:N	0.58	2.13	6	1
1:A:7:ILE:HG21	1:A:45:SER:CB	0.58	2.29	8	2
1:A:115:VAL:CG2	1:A:142:LEU:HD21	0.58	2.17	17	1
1:A:115:VAL:HG22	1:A:142:LEU:HD12	0.58	1.74	12	2
1:A:3:LYS:CB	1:A:13:ILE:HD13	0.58	2.29	7	3
1:A:4:ALA:HB1	1:A:37:ILE:HD13	0.58	1.76	1	1
1:A:115:VAL:O	1:A:142:LEU:HD21	0.58	1.99	15	7
1:A:117:LEU:HB2	1:A:120:LEU:HD11	0.58	1.74	2	2
1:A:145:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD21	0.58	1.76	2	2
1:A:47:LEU:HD11	1:A:71:ASN:HB2	0.58	1.74	3	2
1:A:95:LEU:HD23	1:A:117:LEU:HD21	0.58	1.75	15	2
1:A:69:MET:HE3	1:A:91:VAL:HG11	0.58	1.74	16	1
1:A:126:LYS:O	1:A:127:ILE:HD13	0.57	1.99	4	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:82:ILE:HG23	0.57	2.18	9	1
1:A:63:ILE:C	1:A:63:ILE:HD13	0.57	2.23	14	6
1:A:47:LEU:O	1:A:47:LEU:HD22	0.57	1.99	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:LEU:HD23	1:A:90:ALA:HB2	0.57	1.74	12	2
1:A:60:ILE:HD12	1:A:82:ILE:HD12	0.57	1.75	17	1
1:A:140:ASP:CA	1:A:173:LEU:HD21	0.57	2.29	2	2
1:A:173:LEU:HD13	1:A:176:LEU:HD13	0.57	1.76	5	1
1:A:95:LEU:CD2	1:A:117:LEU:HD21	0.57	2.29	15	1
1:A:184:VAL:HG13	1:A:188:GLU:HG2	0.57	1.75	7	3
1:A:114:LEU:CD1	1:A:122:MET:HE1	0.57	2.30	10	1
1:A:43:THR:HG22	1:A:68:GLY:HA3	0.57	1.75	1	4
1:A:7:ILE:HG23	1:A:42:ALA:HA	0.57	1.76	8	3
1:A:2:ALA:HB1	1:A:13:ILE:HG22	0.57	1.77	10	3
1:A:37:ILE:HD11	1:A:40:MET:HG2	0.57	1.76	1	1
1:A:176:LEU:HD23	1:A:177:LYS:N	0.57	2.15	13	3
1:A:114:LEU:C	1:A:114:LEU:HD22	0.57	2.25	6	1
1:A:169:VAL:HG12	1:A:173:LEU:CD1	0.57	2.29	16	1
1:A:75:LEU:HB3	1:A:98:LEU:HD13	0.56	1.76	2	1
1:A:105:ILE:HD12	1:A:111:ILE:CG2	0.56	2.20	6	2
1:A:63:ILE:HD12	1:A:87:ASN:HB2	0.56	1.77	13	2
1:A:142:LEU:HD12	1:A:145:LEU:HD22	0.56	1.76	8	1
1:A:115:VAL:HB	1:A:142:LEU:HD11	0.56	1.77	9	1
1:A:53:LEU:HD23	1:A:55:LEU:HD21	0.56	1.77	13	1
1:A:53:LEU:CD2	1:A:55:LEU:HD23	0.56	2.30	15	1
1:A:2:ALA:O	1:A:34:ILE:HG21	0.56	2.01	12	1
1:A:47:LEU:HD13	1:A:47:LEU:O	0.56	2.01	3	1
1:A:20:VAL:HG11	1:A:30:LEU:HA	0.56	1.76	7	4
1:A:60:ILE:HG13	1:A:82:ILE:HD13	0.56	1.77	12	1
1:A:80:ASN:O	1:A:81:LEU:HD12	0.56	2.01	4	5
1:A:85:ILE:O	1:A:85:ILE:HG23	0.56	2.00	5	11
1:A:142:LEU:O	1:A:176:LEU:HA	0.56	2.01	8	3
1:A:3:LYS:HB2	1:A:13:ILE:HD13	0.56	1.77	13	3
1:A:117:LEU:C	1:A:117:LEU:HD12	0.55	2.25	10	1
1:A:142:LEU:HB3	1:A:145:LEU:HD22	0.55	1.78	9	4
1:A:157:LYS:HB3	1:A:161:ALA:HB3	0.55	1.79	6	1
1:A:24:GLU:O	1:A:49:ALA:HB1	0.55	2.02	15	2
1:A:28:VAL:HG12	1:A:30:LEU:HD21	0.55	1.76	13	2
1:A:47:LEU:HD13	1:A:71:ASN:ND2	0.55	2.16	12	1
1:A:167:ILE:HG23	1:A:192:ALA:CA	0.55	2.31	7	3
1:A:153:TYR:CE1	1:A:162:THR:HG23	0.55	2.36	8	9
1:A:117:LEU:HB3	1:A:120:LEU:HD21	0.55	1.78	15	1
1:A:85:ILE:C	1:A:85:ILE:HD13	0.55	2.27	1	6
1:A:185:ASP:O	1:A:186:VAL:HG12	0.55	2.01	14	11
1:A:129:ASN:C	1:A:152:LEU:HD11	0.55	2.27	6	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:111:ILE:HD13	1:A:133:ILE:HG23	0.55	1.78	13	10
1:A:145:LEU:CD1	1:A:179:LEU:HD12	0.54	2.20	7	2
1:A:70:GLU:HB3	1:A:90:ALA:HB1	0.54	1.79	12	1
1:A:20:VAL:HG21	1:A:30:LEU:CD2	0.54	2.33	6	4
1:A:173:LEU:HD22	1:A:176:LEU:CB	0.54	2.32	5	1
1:A:138:ALA:HB3	1:A:142:LEU:HD12	0.54	1.79	6	1
1:A:145:LEU:HD22	1:A:147:LEU:CD1	0.54	2.32	10	2
1:A:140:ASP:CA	1:A:173:LEU:HD11	0.54	2.31	12	1
1:A:166:ARG:HG3	1:A:184:VAL:HG22	0.54	1.78	16	1
1:A:37:ILE:C	1:A:37:ILE:HD13	0.54	2.28	17	1
1:A:77:LEU:HD22	1:A:80:ASN:ND2	0.54	2.16	1	1
1:A:20:VAL:HG11	1:A:30:LEU:CD2	0.54	2.33	5	2
1:A:33:MET:HE3	1:A:58:ASN:HB2	0.54	1.78	12	1
1:A:170:VAL:CG1	1:A:192:ALA:HB1	0.54	2.32	3	8
1:A:44:LEU:HD12	1:A:44:LEU:C	0.54	2.28	6	2
1:A:114:LEU:O	1:A:117:LEU:HD13	0.54	2.02	6	1
1:A:173:LEU:CD2	1:A:176:LEU:HD21	0.54	2.15	10	1
1:A:47:LEU:HD21	1:A:71:ASN:ND2	0.54	2.17	9	2
1:A:72:LEU:CB	1:A:95:LEU:HD21	0.54	2.32	7	1
1:A:135:LYS:HG3	1:A:136:LEU:HD12	0.54	1.78	17	1
1:A:11:ILE:HD13	1:A:24:GLU:H	0.54	1.63	3	5
1:A:82:ILE:HD13	1:A:88:LEU:HD21	0.54	1.79	3	2
1:A:95:LEU:O	1:A:117:LEU:HD21	0.54	2.03	5	2
1:A:145:LEU:HD11	1:A:179:LEU:HD13	0.54	1.78	11	2
1:A:186:VAL:HG22	1:A:186:VAL:O	0.54	2.03	13	10
1:A:115:VAL:HG12	1:A:142:LEU:CG	0.54	2.33	8	1
1:A:20:VAL:HG21	1:A:30:LEU:HG	0.54	1.80	14	1
1:A:181:GLY:CA	1:A:184:VAL:HG23	0.54	2.33	2	5
1:A:120:LEU:HD21	1:A:122:MET:SD	0.54	2.43	10	1
1:A:66:LEU:HD11	1:A:86:GLU:O	0.54	2.02	16	1
1:A:82:ILE:HG21	1:A:88:LEU:HD11	0.54	1.79	2	3
1:A:169:VAL:HA	1:A:173:LEU:HD12	0.54	1.79	9	2
1:A:34:ILE:HG23	1:A:34:ILE:O	0.54	2.03	14	3
1:A:69:MET:HA	1:A:69:MET:HE2	0.54	1.78	13	1
1:A:10:ALA:HB3	1:A:42:ALA:HB2	0.54	1.78	17	4
1:A:100:ILE:HD12	1:A:103:ASN:ND2	0.54	2.18	17	2
1:A:77:LEU:HD21	1:A:80:ASN:CB	0.53	2.32	14	6
1:A:88:LEU:O	1:A:92:ALA:HB2	0.53	2.03	3	2
1:A:111:ILE:HD13	1:A:137:ALA:HB2	0.53	1.79	4	1
1:A:178:LYS:CE	1:A:184:VAL:HG21	0.53	2.34	9	1
1:A:142:LEU:HD13	1:A:142:LEU:C	0.53	2.28	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:THR:HG22	1:A:68:GLY:CA	0.53	2.32	1	4
1:A:82:ILE:HG21	1:A:105:ILE:HG22	0.53	1.80	1	1
1:A:138:ALA:O	1:A:142:LEU:HD23	0.53	2.03	4	1
1:A:4:ALA:HB1	1:A:37:ILE:HG13	0.53	1.81	15	2
1:A:153:TYR:OH	1:A:162:THR:HG23	0.53	2.02	9	1
1:A:114:LEU:HD12	1:A:115:VAL:N	0.53	2.17	17	2
1:A:98:LEU:HD13	1:A:117:LEU:HD22	0.53	1.78	12	1
1:A:95:LEU:HD12	1:A:98:LEU:CD2	0.53	2.33	7	1
1:A:88:LEU:HD22	1:A:110:GLY:CA	0.53	2.34	12	1
1:A:4:ALA:HB3	1:A:34:ILE:HD11	0.53	1.79	2	2
1:A:157:LYS:HB2	1:A:161:ALA:HB2	0.53	1.81	4	2
1:A:169:VAL:CG2	1:A:179:LEU:HD22	0.53	2.34	9	1
1:A:185:ASP:O	1:A:186:VAL:HG22	0.53	2.04	7	6
1:A:82:ILE:HG22	1:A:105:ILE:HG22	0.53	1.81	2	1
1:A:98:LEU:CB	1:A:120:LEU:HD23	0.53	2.34	2	1
1:A:105:ILE:HD13	1:A:105:ILE:H	0.53	1.63	2	2
1:A:111:ILE:O	1:A:115:VAL:HG23	0.53	2.04	8	6
1:A:85:ILE:HD13	1:A:85:ILE:C	0.53	2.29	13	3
1:A:70:GLU:HA	1:A:91:VAL:HG22	0.53	1.81	15	1
1:A:24:GLU:HG3	1:A:49:ALA:HB3	0.53	1.80	17	1
1:A:57:THR:O	1:A:57:THR:HG23	0.53	2.04	5	10
1:A:47:LEU:HD12	1:A:47:LEU:C	0.53	2.29	13	2
1:A:28:VAL:HG12	1:A:30:LEU:CD2	0.52	2.33	12	8
1:A:21:VAL:O	1:A:21:VAL:HG13	0.52	2.04	4	6
1:A:145:LEU:HD12	1:A:147:LEU:CD1	0.52	2.18	4	1
1:A:96:GLU:HA	1:A:117:LEU:HD21	0.52	1.81	12	1
1:A:4:ALA:CB	1:A:37:ILE:HD12	0.52	2.33	11	8
1:A:72:LEU:HD12	1:A:95:LEU:HD21	0.52	1.82	5	1
1:A:50:CYS:SG	1:A:72:LEU:HD21	0.52	2.44	12	2
1:A:79:ARG:NH1	1:A:81:LEU:HD11	0.52	2.19	1	1
1:A:180:ASP:O	1:A:182:MET:N	0.52	2.42	9	2
1:A:63:ILE:HG21	1:A:87:ASN:CG	0.52	2.29	11	2
1:A:55:LEU:HD12	1:A:56:SER:N	0.52	2.20	14	1
1:A:6:THR:O	1:A:10:ALA:HB2	0.52	2.05	8	11
1:A:119:VAL:HG22	1:A:121:TYR:CE1	0.52	2.40	3	1
1:A:2:ALA:HB1	1:A:14:PHE:HE1	0.52	1.64	7	3
1:A:63:ILE:O	1:A:63:ILE:HG23	0.52	2.05	8	7
1:A:105:ILE:HD11	1:A:127:ILE:CG1	0.52	2.35	11	2
1:A:122:MET:CE	1:A:145:LEU:HD11	0.52	2.35	12	1
1:A:81:LEU:HD23	1:A:104:GLN:CD	0.52	2.29	1	1
1:A:122:MET:HE3	1:A:145:LEU:HD11	0.52	1.81	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:105:ILE:HD13	1:A:114:LEU:CD2	0.52	2.34	5	1
1:A:44:LEU:HD11	1:A:65:SER:HB2	0.52	1.81	12	1
1:A:50:CYS:SG	1:A:72:LEU:HD11	0.52	2.45	12	1
1:A:43:THR:HA	1:A:46:THR:HG22	0.52	1.81	6	5
1:A:120:LEU:HD22	1:A:122:MET:CE	0.52	2.35	7	1
1:A:117:LEU:HD12	1:A:118:ARG:N	0.52	2.20	10	1
1:A:135:LYS:HA	1:A:139:LEU:HD13	0.52	1.82	17	1
1:A:108:LEU:HD11	1:A:136:LEU:CD2	0.52	2.34	1	1
1:A:145:LEU:HD21	1:A:179:LEU:HD12	0.52	1.81	9	2
1:A:181:GLY:O	1:A:184:VAL:HG22	0.51	2.05	5	3
1:A:173:LEU:HD12	1:A:176:LEU:HB2	0.51	1.81	12	1
1:A:96:GLU:N	1:A:117:LEU:HD21	0.51	2.20	16	1
1:A:40:MET:HB3	1:A:43:THR:HG22	0.51	1.82	5	1
1:A:87:ASN:O	1:A:91:VAL:HG12	0.51	2.04	2	1
1:A:47:LEU:HD22	1:A:50:CYS:HB2	0.51	1.81	3	1
1:A:98:LEU:CB	1:A:120:LEU:HD22	0.51	2.36	3	1
1:A:80:ASN:OD1	1:A:82:ILE:HD11	0.51	2.05	6	4
1:A:92:ALA:HB3	1:A:113:LYS:HB3	0.51	1.81	10	2
1:A:3:LYS:HG3	1:A:34:ILE:HD13	0.51	1.81	12	1
1:A:108:LEU:C	1:A:108:LEU:HD23	0.51	2.30	16	1
1:A:127:ILE:HB	1:A:152:LEU:HD12	0.51	1.81	17	1
1:A:24:GLU:CG	1:A:49:ALA:HB3	0.51	2.35	17	1
1:A:54:ALA:C	1:A:55:LEU:HD12	0.51	2.30	3	5
1:A:37:ILE:HG23	1:A:60:ILE:HG23	0.51	1.82	2	1
1:A:59:ASN:CG	1:A:81:LEU:HD12	0.51	2.30	3	1
1:A:82:ILE:HD12	1:A:84:LYS:O	0.51	2.05	4	1
1:A:176:LEU:HD11	1:A:179:LEU:HD13	0.51	1.82	5	2
1:A:120:LEU:C	1:A:120:LEU:HD23	0.51	2.31	7	1
1:A:142:LEU:HD13	1:A:145:LEU:CD1	0.51	2.31	5	2
1:A:173:LEU:HB3	1:A:176:LEU:HD21	0.51	1.83	7	1
1:A:167:ILE:HD11	1:A:191:GLN:HB3	0.51	1.82	13	3
1:A:167:ILE:HG22	1:A:171:LYS:HE3	0.51	1.82	15	2
1:A:108:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD23	0.51	1.82	16	1
1:A:91:VAL:HG22	1:A:95:LEU:HD11	0.51	1.81	2	1
1:A:114:LEU:C	1:A:114:LEU:HD12	0.51	2.30	11	2
1:A:47:LEU:C	1:A:47:LEU:HD23	0.51	2.31	4	3
1:A:47:LEU:HD21	1:A:71:ASN:HB3	0.51	1.83	3	1
1:A:100:ILE:HG21	1:A:103:ASN:HB3	0.51	1.82	3	2
1:A:77:LEU:HD12	1:A:78:GLY:N	0.51	2.21	14	3
1:A:72:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HD21	0.51	1.82	7	2
1:A:138:ALA:HB3	1:A:142:LEU:HD23	0.51	1.82	16	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:142:LEU:HD22	1:A:143:GLU:N	0.51	2.21	1	1
1:A:2:ALA:HB2	1:A:14:PHE:CE1	0.51	2.40	9	2
1:A:139:LEU:HD21	1:A:165:TYR:CE2	0.51	2.40	11	1
1:A:91:VAL:O	1:A:95:LEU:HD23	0.51	2.05	13	1
1:A:173:LEU:O	1:A:173:LEU:HD12	0.51	2.06	1	1
1:A:35:PRO:N	1:A:36:PRO:CD	0.50	2.74	5	17
1:A:43:THR:HG22	1:A:68:GLY:C	0.50	2.31	2	4
1:A:88:LEU:HD12	1:A:113:LYS:HD2	0.50	1.83	12	1
1:A:4:ALA:CB	1:A:37:ILE:HD13	0.50	2.36	1	1
1:A:82:ILE:HD13	1:A:83:LYS:H	0.50	1.65	4	1
1:A:77:LEU:HD12	1:A:78:GLY:H	0.50	1.66	14	3
1:A:115:VAL:HA	1:A:120:LEU:HD22	0.50	1.82	8	2
1:A:95:LEU:HD21	1:A:97:GLU:C	0.50	2.32	11	2
1:A:171:LYS:HZ2	1:A:195:ALA:HB3	0.50	1.65	4	1
1:A:35:PRO:N	1:A:36:PRO:HD2	0.50	2.22	6	6
1:A:139:LEU:HD23	1:A:165:TYR:CE1	0.50	2.41	14	1
1:A:91:VAL:CG1	1:A:95:LEU:HD13	0.50	2.35	17	1
1:A:142:LEU:HD22	1:A:145:LEU:HD13	0.50	1.82	17	1
1:A:139:LEU:O	1:A:176:LEU:HD12	0.50	2.07	2	1
1:A:156:TYR:CD2	1:A:165:TYR:CE2	0.50	2.99	2	5
1:A:18:LYS:CE	1:A:20:VAL:HG13	0.50	2.36	5	2
1:A:47:LEU:HD11	1:A:71:ASN:CG	0.50	2.32	11	1
1:A:135:LYS:HA	1:A:139:LEU:HD22	0.50	1.83	17	1
1:A:72:LEU:CB	1:A:95:LEU:HD23	0.50	2.36	4	2
1:A:100:ILE:HD12	1:A:120:LEU:HD21	0.50	1.83	12	1
1:A:81:LEU:HD22	1:A:104:GLN:OE1	0.50	2.07	15	1
1:A:30:LEU:HD22	1:A:30:LEU:H	0.50	1.67	2	8
1:A:98:LEU:CD2	1:A:117:LEU:HD13	0.50	2.37	2	1
1:A:63:ILE:HD13	1:A:63:ILE:C	0.50	2.32	6	1
1:A:69:MET:HG3	1:A:72:LEU:HD12	0.50	1.82	17	1
1:A:91:VAL:CG1	1:A:95:LEU:HD23	0.50	2.37	7	1
1:A:173:LEU:HD12	1:A:176:LEU:HD11	0.50	1.83	7	1
1:A:104:GLN:C	1:A:105:ILE:HD12	0.50	2.32	9	1
1:A:133:ILE:HG21	1:A:152:LEU:CD1	0.50	2.36	17	1
1:A:47:LEU:HD22	1:A:68:GLY:HA2	0.50	1.84	12	1
1:A:171:LYS:HE2	1:A:195:ALA:HB1	0.49	1.83	2	1
1:A:44:LEU:HD12	1:A:65:SER:HB2	0.49	1.84	1	2
1:A:92:ALA:HB1	1:A:113:LYS:C	0.49	2.32	3	1
1:A:105:ILE:HB	1:A:127:ILE:HD11	0.49	1.83	4	1
1:A:60:ILE:HD12	1:A:60:ILE:N	0.49	2.22	5	1
1:A:85:ILE:HD13	1:A:110:GLY:CA	0.49	2.37	5	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:103:ASN:HB2	1:A:105:ILE:HD11	0.49	1.83	9	1
1:A:44:LEU:HD12	1:A:65:SER:HB3	0.49	1.84	17	2
1:A:7:ILE:HD13	1:A:7:ILE:O	0.49	2.06	15	2
1:A:181:GLY:C	1:A:184:VAL:HG23	0.49	2.32	2	5
1:A:140:ASP:CA	1:A:173:LEU:HD22	0.49	2.37	9	2
1:A:119:VAL:HG13	1:A:119:VAL:O	0.49	2.06	6	5
1:A:4:ALA:CB	1:A:34:ILE:HD11	0.49	2.38	2	1
1:A:37:ILE:O	1:A:37:ILE:HG23	0.49	2.08	12	5
1:A:53:LEU:HD23	1:A:55:LEU:HD11	0.49	1.83	3	1
1:A:69:MET:HE3	1:A:72:LEU:CD1	0.49	2.37	3	1
1:A:117:LEU:C	1:A:117:LEU:HD23	0.49	2.31	3	1
1:A:105:ILE:O	1:A:127:ILE:HD13	0.49	2.07	4	1
1:A:144:ASP:C	1:A:145:LEU:HD23	0.49	2.33	4	6
1:A:54:ALA:C	1:A:55:LEU:HD22	0.49	2.32	5	2
1:A:108:LEU:HD13	1:A:108:LEU:O	0.49	2.08	9	1
1:A:70:GLU:O	1:A:94:THR:HG23	0.49	2.08	12	1
1:A:115:VAL:HG23	1:A:142:LEU:HD11	0.49	1.85	3	1
1:A:147:LEU:HD12	1:A:180:ASP:HB2	0.49	1.83	12	2
1:A:170:VAL:HA	1:A:173:LEU:HD12	0.49	1.85	4	1
1:A:59:ASN:OD1	1:A:81:LEU:HD23	0.49	2.05	8	2
1:A:81:LEU:HD22	1:A:104:GLN:HE21	0.49	1.62	9	1
1:A:156:TYR:CE2	1:A:161:ALA:HB1	0.49	2.43	2	3
1:A:2:ALA:HB3	1:A:14:PHE:CE1	0.49	2.43	3	2
1:A:75:LEU:HD23	1:A:95:LEU:CD1	0.49	2.37	11	1
1:A:47:LEU:HD11	1:A:71:ASN:ND2	0.49	2.22	11	1
1:A:145:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HG	0.49	1.84	1	3
1:A:145:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD11	0.49	1.85	12	1
1:A:142:LEU:HB3	1:A:145:LEU:HD21	0.49	1.84	14	1
1:A:69:MET:HG2	1:A:72:LEU:HD12	0.49	1.84	17	1
1:A:139:LEU:HD23	1:A:140:ASP:N	0.49	2.23	17	1
1:A:5:THR:HG22	1:A:6:THR:N	0.49	2.22	11	2
1:A:142:LEU:C	1:A:142:LEU:HD23	0.49	2.33	12	1
1:A:142:LEU:HD11	1:A:145:LEU:HB2	0.48	1.84	1	1
1:A:182:MET:N	1:A:183:PRO:CD	0.48	2.76	10	15
1:A:59:ASN:ND2	1:A:81:LEU:HD13	0.48	2.22	11	1
1:A:14:PHE:CD2	1:A:30:LEU:HD21	0.48	2.42	15	1
1:A:63:ILE:HD12	1:A:87:ASN:HB3	0.48	1.85	1	3
1:A:95:LEU:HD13	1:A:98:LEU:CD1	0.48	2.38	5	1
1:A:119:VAL:HG23	1:A:144:ASP:CB	0.48	2.38	16	4
1:A:140:ASP:C	1:A:173:LEU:HD11	0.48	2.33	2	2
1:A:115:VAL:HG21	1:A:137:ALA:O	0.48	2.08	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:MET:HA	1:A:72:LEU:HD23	0.48	1.84	14	1
1:A:114:LEU:O	1:A:120:LEU:HD22	0.48	2.08	4	2
1:A:136:LEU:O	1:A:136:LEU:HD13	0.48	2.08	11	1
1:A:98:LEU:HD12	1:A:117:LEU:HD22	0.48	1.86	15	2
1:A:21:VAL:O	1:A:21:VAL:HG22	0.48	2.08	3	5
1:A:46:THR:HG23	1:A:50:CYS:SG	0.48	2.49	4	1
1:A:77:LEU:HD23	1:A:78:GLY:N	0.48	2.23	6	2
1:A:169:VAL:HG13	1:A:176:LEU:HD13	0.48	1.85	11	1
1:A:66:LEU:HD13	1:A:66:LEU:N	0.48	2.24	12	1
1:A:37:ILE:CG2	1:A:60:ILE:HG22	0.48	2.28	4	1
1:A:108:LEU:HD22	1:A:108:LEU:N	0.48	2.24	7	2
1:A:130:TRP:HA	1:A:152:LEU:HD21	0.48	1.84	8	2
1:A:77:LEU:HD21	1:A:80:ASN:HB3	0.48	1.86	3	3
1:A:136:LEU:HD23	1:A:136:LEU:O	0.48	2.09	14	3
1:A:139:LEU:HD21	1:A:165:TYR:CZ	0.48	2.43	11	1
1:A:108:LEU:HD21	1:A:136:LEU:HD22	0.48	1.86	1	1
1:A:145:LEU:HD22	1:A:147:LEU:CG	0.48	2.39	13	3
1:A:130:TRP:HA	1:A:152:LEU:HD11	0.48	1.83	7	3
1:A:88:LEU:HD22	1:A:114:LEU:HD23	0.48	1.86	5	1
1:A:47:LEU:O	1:A:47:LEU:HD13	0.48	2.09	11	2
1:A:139:LEU:HD23	1:A:140:ASP:H	0.48	1.68	17	1
1:A:100:ILE:CD1	1:A:120:LEU:HD11	0.48	2.39	3	1
1:A:91:VAL:HG13	1:A:95:LEU:HD23	0.48	1.85	7	1
1:A:91:VAL:HG13	1:A:95:LEU:CD2	0.48	2.39	7	1
1:A:134:ASP:O	1:A:139:LEU:HD23	0.48	2.09	9	1
1:A:2:ALA:HB3	1:A:14:PHE:CD2	0.48	2.43	10	1
1:A:81:LEU:HD12	1:A:104:GLN:NE2	0.48	2.24	12	1
1:A:63:ILE:HG21	1:A:87:ASN:ND2	0.48	2.24	14	1
1:A:37:ILE:HG21	1:A:60:ILE:HG23	0.47	1.85	2	1
1:A:7:ILE:HD13	1:A:45:SER:CB	0.47	2.39	5	1
1:A:95:LEU:HB2	1:A:117:LEU:HD11	0.47	1.86	5	1
1:A:145:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD11	0.47	1.86	10	2
1:A:127:ILE:CG2	1:A:152:LEU:HD12	0.47	2.38	16	1
1:A:20:VAL:HG21	1:A:30:LEU:CD1	0.47	2.39	12	2
1:A:52:HIS:NE2	1:A:74:ILE:HG22	0.47	2.25	1	1
1:A:108:LEU:HD11	1:A:136:LEU:HD22	0.47	1.84	1	1
1:A:142:LEU:C	1:A:142:LEU:HD22	0.47	2.34	1	1
1:A:156:TYR:CD1	1:A:161:ALA:CB	0.47	2.96	15	9
1:A:10:ALA:HB1	1:A:14:PHE:CZ	0.47	2.44	5	2
1:A:72:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HD21	0.47	1.85	16	1
1:A:166:ARG:NH1	1:A:169:VAL:HG11	0.47	2.24	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:ILE:HD12	1:A:34:ILE:C	0.47	2.34	6	1
1:A:114:LEU:CD1	1:A:115:VAL:N	0.47	2.72	6	1
1:A:73:ARG:C	1:A:95:LEU:HD13	0.47	2.34	13	2
1:A:167:ILE:HD11	1:A:191:GLN:CG	0.47	2.40	13	1
1:A:111:ILE:HG21	1:A:127:ILE:HD13	0.47	1.86	14	1
1:A:60:ILE:HD12	1:A:82:ILE:HD11	0.47	1.85	17	1
1:A:72:LEU:HD13	1:A:75:LEU:HD21	0.47	1.86	11	1
1:A:77:LEU:HD22	1:A:80:ASN:HD22	0.47	1.69	1	1
1:A:72:LEU:C	1:A:95:LEU:HD22	0.47	2.35	4	2
1:A:63:ILE:HD12	1:A:63:ILE:C	0.47	2.35	7	1
1:A:167:ILE:HD11	1:A:191:GLN:CD	0.47	2.35	8	1
1:A:175:ASN:O	1:A:176:LEU:C	0.47	2.57	8	5
1:A:77:LEU:HD12	1:A:77:LEU:C	0.47	2.35	11	1
1:A:166:ARG:O	1:A:170:VAL:HG23	0.47	2.10	14	1
1:A:72:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HD23	0.47	1.87	4	1
1:A:156:TYR:CG	1:A:161:ALA:CB	0.47	2.98	12	4
1:A:142:LEU:HB3	1:A:176:LEU:HD21	0.47	1.86	8	1
1:A:95:LEU:HD22	1:A:98:LEU:HG	0.47	1.86	17	2
1:A:35:PRO:HG2	1:A:36:PRO:HD3	0.47	1.87	9	4
1:A:111:ILE:HG21	1:A:133:ILE:HD11	0.46	1.85	1	1
1:A:119:VAL:HG23	1:A:144:ASP:CG	0.46	2.34	1	2
1:A:33:MET:HG3	1:A:55:LEU:HD13	0.46	1.87	8	1
1:A:72:LEU:O	1:A:95:LEU:HD22	0.46	2.09	12	1
1:A:166:ARG:NH1	1:A:184:VAL:HG13	0.46	2.24	4	1
1:A:140:ASP:C	1:A:173:LEU:HD21	0.46	2.35	5	1
1:A:169:VAL:HG21	1:A:179:LEU:HD22	0.46	1.87	9	1
1:A:60:ILE:HD12	1:A:81:LEU:O	0.46	2.09	1	1
1:A:173:LEU:HD13	1:A:176:LEU:HD11	0.46	1.88	7	1
1:A:69:MET:HA	1:A:72:LEU:HD13	0.46	1.86	10	1
1:A:142:LEU:HD23	1:A:145:LEU:HD13	0.46	1.86	11	1
1:A:95:LEU:CG	1:A:98:LEU:HD11	0.46	2.41	13	1
1:A:142:LEU:HB3	1:A:145:LEU:HD11	0.46	1.87	14	1
1:A:142:LEU:O	1:A:176:LEU:CA	0.46	2.63	4	1
1:A:140:ASP:C	1:A:176:LEU:HD23	0.46	2.35	14	1
1:A:52:HIS:CD2	1:A:74:ILE:HG21	0.46	2.45	2	2
1:A:120:LEU:HD12	1:A:122:MET:CG	0.46	2.40	3	1
1:A:77:LEU:HD22	1:A:100:ILE:HG22	0.46	1.88	9	2
1:A:153:TYR:CD1	1:A:154:ASN:N	0.46	2.84	15	1
1:A:167:ILE:HG22	1:A:171:LYS:CE	0.46	2.39	15	1
1:A:98:LEU:HD12	1:A:117:LEU:CD2	0.46	2.41	17	1
1:A:82:ILE:O	1:A:82:ILE:HG23	0.46	2.11	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:ASN:OD1	1:A:77:LEU:HD11	0.46	2.10	3	1
1:A:173:LEU:CD1	1:A:176:LEU:HD13	0.46	2.40	5	1
1:A:82:ILE:HB	1:A:105:ILE:HG22	0.46	1.86	6	1
1:A:173:LEU:CD2	1:A:173:LEU:N	0.46	2.79	13	1
1:A:114:LEU:HD12	1:A:114:LEU:C	0.46	2.36	17	1
1:A:108:LEU:HD12	1:A:108:LEU:N	0.46	2.26	10	2
1:A:88:LEU:HD23	1:A:114:LEU:CD2	0.46	2.41	10	1
1:A:95:LEU:HD22	1:A:98:LEU:CG	0.46	2.40	10	1
1:A:88:LEU:HD22	1:A:114:LEU:CD2	0.46	2.41	5	1
1:A:95:LEU:CB	1:A:117:LEU:HD21	0.46	2.39	6	1
1:A:139:LEU:HD21	1:A:165:TYR:HE1	0.46	1.70	7	2
1:A:171:LYS:HZ1	1:A:195:ALA:HB1	0.46	1.70	15	1
1:A:142:LEU:HD21	1:A:179:LEU:HD13	0.46	1.86	4	1
1:A:69:MET:CB	1:A:91:VAL:HG12	0.46	2.41	5	1
1:A:95:LEU:HD13	1:A:98:LEU:HD11	0.46	1.88	5	1
1:A:9:ASP:O	1:A:13:ILE:HD12	0.46	2.11	15	3
1:A:108:LEU:HD12	1:A:132:GLU:HB3	0.46	1.88	7	1
1:A:145:LEU:N	1:A:145:LEU:CD2	0.46	2.76	14	4
1:A:52:HIS:CE1	1:A:74:ILE:HG22	0.46	2.46	10	1
1:A:81:LEU:HD23	1:A:104:GLN:NE2	0.46	2.26	1	1
1:A:28:VAL:HG12	1:A:30:LEU:CG	0.46	2.40	5	4
1:A:108:LEU:HD12	1:A:109:SER:N	0.46	2.26	6	3
1:A:145:LEU:HD23	1:A:146:LEU:H	0.46	1.67	13	1
1:A:122:MET:HE2	1:A:125:ASN:HB3	0.45	1.87	5	1
1:A:153:TYR:CE1	1:A:162:THR:CG2	0.45	3.00	12	1
1:A:4:ALA:HB1	1:A:37:ILE:CG1	0.45	2.41	15	1
1:A:52:HIS:CD2	1:A:74:ILE:CG2	0.45	3.00	5	5
1:A:21:VAL:HG12	1:A:21:VAL:O	0.45	2.12	15	2
1:A:2:ALA:CB	1:A:14:PHE:CZ	0.45	2.99	9	2
1:A:28:VAL:HB	1:A:53:LEU:HD23	0.45	1.88	11	1
1:A:55:LEU:N	1:A:55:LEU:CD2	0.45	2.80	13	1
1:A:173:LEU:HD13	1:A:174:PRO:CD	0.45	2.38	2	1
1:A:52:HIS:CE1	1:A:74:ILE:CG2	0.45	3.00	12	6
1:A:117:LEU:HD11	1:A:120:LEU:HD23	0.45	1.89	3	1
1:A:53:LEU:HD12	1:A:72:LEU:HD21	0.45	1.89	11	1
1:A:2:ALA:HB3	1:A:33:MET:HA	0.45	1.88	14	1
1:A:99:TRP:CD1	1:A:99:TRP:N	0.45	2.84	7	3
1:A:129:ASN:C	1:A:152:LEU:HD21	0.45	2.37	3	1
1:A:63:ILE:HG21	1:A:87:ASN:CB	0.45	2.42	11	1
1:A:135:LYS:CA	1:A:139:LEU:HD22	0.45	2.42	17	1
1:A:157:LYS:O	1:A:158:GLU:C	0.45	2.60	6	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:167:ILE:HD12	1:A:191:GLN:HB3	0.45	1.87	1	1
1:A:40:MET:HA	1:A:40:MET:HE2	0.45	1.87	4	1
1:A:40:MET:HE1	1:A:69:MET:HG3	0.45	1.87	9	1
1:A:96:GLU:C	1:A:117:LEU:HD21	0.45	2.37	12	1
1:A:40:MET:O	1:A:41:ASP:C	0.45	2.59	13	1
1:A:115:VAL:C	1:A:142:LEU:HD21	0.45	2.36	2	1
1:A:170:VAL:O	1:A:173:LEU:HD13	0.45	2.12	13	1
1:A:14:PHE:CD1	1:A:30:LEU:CD2	0.45	3.00	3	1
1:A:31:HIS:CE1	1:A:56:SER:CB	0.45	3.00	7	2
1:A:156:TYR:CD2	1:A:161:ALA:CB	0.45	3.00	8	1
1:A:2:ALA:CB	1:A:14:PHE:CE1	0.45	3.00	13	2
1:A:142:LEU:CB	1:A:176:LEU:HD12	0.45	2.40	13	1
1:A:7:ILE:HG23	1:A:8:LYS:N	0.44	2.28	10	12
1:A:172:ARG:O	1:A:173:LEU:C	0.44	2.61	1	7
1:A:103:ASN:CG	1:A:122:MET:HE2	0.44	2.37	3	1
1:A:2:ALA:CB	1:A:14:PHE:CD2	0.44	3.00	10	1
1:A:139:LEU:HD21	1:A:165:TYR:OH	0.44	2.12	11	1
1:A:44:LEU:HD21	1:A:65:SER:HA	0.44	1.89	10	1
1:A:120:LEU:N	1:A:120:LEU:CD2	0.44	2.80	15	2
1:A:115:VAL:HG21	1:A:137:ALA:CA	0.44	2.42	9	1
1:A:130:TRP:CD1	1:A:152:LEU:HD13	0.44	2.47	2	1
1:A:121:TYR:N	1:A:121:TYR:CD1	0.44	2.85	3	1
1:A:111:ILE:HD12	1:A:111:ILE:C	0.44	2.37	4	1
1:A:153:TYR:HH	1:A:165:TYR:CB	0.44	2.25	8	1
1:A:105:ILE:HD12	1:A:105:ILE:N	0.44	2.26	9	1
1:A:139:LEU:CD2	1:A:165:TYR:CE1	0.44	3.00	16	1
1:A:142:LEU:O	1:A:176:LEU:CB	0.44	2.66	1	5
1:A:10:ALA:O	1:A:14:PHE:CG	0.44	2.70	5	1
1:A:44:LEU:HD13	1:A:65:SER:OG	0.44	2.13	7	1
1:A:72:LEU:C	1:A:95:LEU:HD12	0.44	2.37	8	2
1:A:133:ILE:HG21	1:A:152:LEU:HD11	0.44	1.90	10	1
1:A:63:ILE:C	1:A:63:ILE:HD12	0.44	2.38	12	1
1:A:73:ARG:HB3	1:A:74:ILE:HD12	0.44	1.89	2	1
1:A:82:ILE:HG21	1:A:88:LEU:CD1	0.44	2.26	11	1
1:A:105:ILE:N	1:A:105:ILE:CD1	0.44	2.80	11	2
1:A:69:MET:HG2	1:A:72:LEU:HD11	0.44	1.90	3	1
1:A:142:LEU:O	1:A:176:LEU:HD23	0.44	2.13	11	1
1:A:6:THR:HG23	1:A:9:ASP:H	0.44	1.73	13	1
1:A:75:LEU:CD1	1:A:98:LEU:HD21	0.44	2.43	15	1
1:A:139:LEU:HD23	1:A:140:ASP:OD1	0.44	2.13	17	1
1:A:75:LEU:HD13	1:A:98:LEU:HD21	0.43	1.89	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:3:LYS:HE3	1:A:13:ILE:HD13	0.43	1.90	1	1
1:A:91:VAL:HG22	1:A:95:LEU:HD12	0.43	1.88	2	1
1:A:115:VAL:HG21	1:A:137:ALA:HA	0.43	1.90	9	1
1:A:137:ALA:O	1:A:142:LEU:HD12	0.43	2.14	9	1
1:A:182:MET:HE3	1:A:182:MET:HA	0.43	1.89	10	1
1:A:63:ILE:HG21	1:A:87:ASN:HB3	0.43	1.89	11	1
1:A:142:LEU:HD22	1:A:145:LEU:HD22	0.43	1.89	15	1
1:A:14:PHE:CZ	1:A:33:MET:CE	0.43	3.01	4	1
1:A:99:TRP:CD1	1:A:121:TYR:CD2	0.43	3.07	10	1
1:A:66:LEU:N	1:A:66:LEU:CD1	0.43	2.82	12	1
1:A:91:VAL:HA	1:A:95:LEU:HD23	0.43	1.91	16	1
1:A:70:GLU:HG2	1:A:94:THR:HG22	0.43	1.90	17	1
1:A:95:LEU:HD21	1:A:97:GLU:O	0.43	2.13	17	1
1:A:81:LEU:HD12	1:A:81:LEU:N	0.43	2.27	5	3
1:A:43:THR:HG21	1:A:69:MET:HG2	0.43	1.90	2	2
1:A:63:ILE:HD12	1:A:87:ASN:CG	0.43	2.37	6	1
1:A:37:ILE:HG12	1:A:63:ILE:HG22	0.43	1.91	10	1
1:A:44:LEU:HD11	1:A:65:SER:CB	0.43	2.43	12	1
1:A:7:ILE:HA	1:A:42:ALA:HB2	0.43	1.90	6	2
1:A:185:ASP:O	1:A:186:VAL:CG1	0.43	2.67	8	10
1:A:105:ILE:CG2	1:A:111:ILE:HG23	0.43	2.43	3	1
1:A:138:ALA:O	1:A:142:LEU:HD12	0.43	2.13	10	1
1:A:66:LEU:C	1:A:66:LEU:CD2	0.43	2.90	12	1
1:A:94:THR:HG23	1:A:95:LEU:N	0.43	2.27	15	1
1:A:185:ASP:O	1:A:186:VAL:CG2	0.43	2.67	9	6
1:A:10:ALA:O	1:A:14:PHE:CD2	0.43	2.72	4	7
1:A:115:VAL:HG13	1:A:145:LEU:HD11	0.43	1.89	10	1
1:A:141:LYS:O	1:A:142:LEU:C	0.43	2.61	9	5
1:A:115:VAL:HG13	1:A:145:LEU:HD12	0.43	1.89	10	1
1:A:103:ASN:HD21	1:A:122:MET:HE3	0.43	1.74	6	1
1:A:63:ILE:HD13	1:A:87:ASN:HB2	0.43	1.90	15	1
1:A:47:LEU:HD23	1:A:71:ASN:CB	0.43	2.44	16	1
1:A:73:ARG:C	1:A:95:LEU:HD23	0.43	2.39	2	1
1:A:22:ALA:C	1:A:23:THR:HG22	0.43	2.39	9	4
1:A:173:LEU:CG	1:A:173:LEU:O	0.43	2.67	13	1
1:A:121:TYR:CD2	1:A:146:LEU:HD23	0.43	2.49	14	1
1:A:129:ASN:HB3	1:A:133:ILE:HD12	0.43	1.90	2	2
1:A:35:PRO:HA	1:A:59:ASN:O	0.43	2.14	13	1
1:A:43:THR:HG23	1:A:44:LEU:N	0.43	2.29	15	1
1:A:33:MET:CE	1:A:40:MET:HE1	0.43	2.44	17	1
1:A:63:ILE:C	1:A:63:ILE:CD1	0.42	2.92	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:70:GLU:CD	1:A:90:ALA:HB1	0.42	2.38	7	1
1:A:59:ASN:HD22	1:A:81:LEU:HD12	0.42	1.69	9	1
1:A:120:LEU:O	1:A:145:LEU:HD12	0.42	2.14	12	1
1:A:81:LEU:HD23	1:A:104:GLN:OE1	0.42	2.14	13	1
1:A:59:ASN:ND2	1:A:81:LEU:HD22	0.42	2.29	5	1
1:A:138:ALA:HB3	1:A:142:LEU:CD1	0.42	2.44	3	1
1:A:178:LYS:NZ	1:A:184:VAL:HG21	0.42	2.28	3	1
1:A:52:HIS:CD2	1:A:74:ILE:HG22	0.42	2.50	4	2
1:A:95:LEU:HD12	1:A:98:LEU:HD23	0.42	1.90	7	1
1:A:80:ASN:C	1:A:81:LEU:HD23	0.42	2.40	9	2
1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CD2	0.42	2.82	13	2
1:A:119:VAL:O	1:A:120:LEU:HD13	0.42	2.14	15	1
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:134:ASP:CG	0.42	2.98	6	7
1:A:40:MET:HE2	1:A:43:THR:OG1	0.42	2.13	7	1
1:A:111:ILE:C	1:A:111:ILE:CD1	0.42	2.93	11	1
1:A:130:TRP:N	1:A:152:LEU:CD2	0.42	2.81	2	1
1:A:77:LEU:HD21	1:A:80:ASN:HD22	0.42	1.73	6	1
1:A:37:ILE:HD11	1:A:40:MET:HE3	0.42	1.91	8	1
1:A:110:GLY:O	1:A:114:LEU:HD23	0.42	2.14	8	1
1:A:120:LEU:CD2	1:A:122:MET:HE3	0.42	2.34	10	1
1:A:47:LEU:HD13	1:A:47:LEU:C	0.42	2.40	11	1
1:A:167:ILE:HD11	1:A:191:GLN:CB	0.42	2.45	13	1
1:A:59:ASN:HD21	1:A:81:LEU:HD22	0.42	1.75	1	1
1:A:117:LEU:HB3	1:A:120:LEU:HD11	0.42	1.91	1	2
1:A:81:LEU:N	1:A:81:LEU:CD2	0.42	2.81	12	2
1:A:153:TYR:OH	1:A:165:TYR:CD2	0.42	2.72	17	1
1:A:182:MET:N	1:A:183:PRO:HD2	0.42	2.30	3	4
1:A:153:TYR:CZ	1:A:165:TYR:CD2	0.42	3.08	10	2
1:A:173:LEU:N	1:A:173:LEU:CD1	0.42	2.83	10	1
1:A:138:ALA:HB3	1:A:142:LEU:HG	0.42	1.91	17	1
1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:HD13	0.42	2.30	9	1
1:A:142:LEU:HD12	1:A:145:LEU:HD11	0.42	1.92	14	1
1:A:132:GLU:O	1:A:136:LEU:CB	0.42	2.68	3	3
1:A:85:ILE:HD12	1:A:85:ILE:N	0.42	2.30	6	1
1:A:47:LEU:HD22	1:A:47:LEU:C	0.42	2.39	8	1
1:A:140:ASP:CB	1:A:173:LEU:HD22	0.42	2.44	9	1
1:A:102:TYR:CD1	1:A:124:ASN:O	0.41	2.73	12	6
1:A:130:TRP:CE2	1:A:134:ASP:CG	0.41	2.98	14	3
1:A:117:LEU:HD23	1:A:118:ARG:N	0.41	2.30	4	1
1:A:127:ILE:CG2	1:A:133:ILE:CD1	0.41	2.98	5	4
1:A:114:LEU:HD13	1:A:114:LEU:C	0.41	2.37	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:ILE:HD13	1:A:45:SER:HB2	0.41	1.91	5	1
1:A:130:TRP:CH2	1:A:134:ASP:OD2	0.41	2.74	16	3
1:A:121:TYR:CE2	1:A:146:LEU:HD22	0.41	2.49	6	1
1:A:88:LEU:HD12	1:A:114:LEU:CB	0.41	2.43	7	1
1:A:20:VAL:CG2	1:A:30:LEU:HD12	0.41	2.39	13	2
1:A:77:LEU:HD13	1:A:80:ASN:HB3	0.41	1.92	11	1
1:A:127:ILE:HG23	1:A:133:ILE:HD13	0.41	1.89	11	1
1:A:3:LYS:HA	1:A:34:ILE:HG21	0.41	1.90	2	1
1:A:53:LEU:HD12	1:A:72:LEU:HD11	0.41	1.92	7	1
1:A:37:ILE:HD13	1:A:40:MET:HE3	0.41	1.91	8	1
1:A:173:LEU:O	1:A:173:LEU:HG	0.41	2.16	13	1
1:A:30:LEU:N	1:A:30:LEU:CD1	0.41	2.83	15	2
1:A:82:ILE:HD13	1:A:88:LEU:HD11	0.41	1.92	16	1
1:A:184:VAL:HG13	1:A:188:GLU:CG	0.41	2.46	15	1
1:A:74:ILE:CG2	1:A:99:TRP:CH2	0.41	3.04	17	1
1:A:47:LEU:CD2	1:A:71:ASN:CB	0.41	2.99	8	1
1:A:111:ILE:HD13	1:A:127:ILE:HD13	0.41	1.92	8	1
1:A:40:MET:HE3	1:A:63:ILE:CG2	0.41	2.45	9	1
1:A:3:LYS:N	1:A:13:ILE:HG21	0.41	2.31	13	1
1:A:127:ILE:HG21	1:A:133:ILE:HD13	0.41	1.91	14	1
1:A:88:LEU:HD12	1:A:88:LEU:N	0.41	2.30	16	1
1:A:133:ILE:HG23	1:A:137:ALA:HB2	0.41	1.91	4	1
1:A:69:MET:CB	1:A:91:VAL:CG1	0.41	2.99	5	1
1:A:176:LEU:H	1:A:176:LEU:HD23	0.41	1.76	7	1
1:A:3:LYS:HA	1:A:34:ILE:HD12	0.41	1.92	9	1
1:A:7:ILE:C	1:A:7:ILE:CD1	0.41	2.93	15	1
1:A:85:ILE:C	1:A:85:ILE:CD1	0.41	2.93	1	3
1:A:2:ALA:HB3	1:A:14:PHE:CZ	0.41	2.51	3	1
1:A:133:ILE:HG21	1:A:152:LEU:HG	0.41	1.92	7	1
1:A:44:LEU:HD23	1:A:65:SER:OG	0.41	2.14	16	1
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:134:ASP:OD1	0.41	2.73	16	4
1:A:77:LEU:CD2	1:A:80:ASN:ND2	0.41	2.84	13	2
1:A:2:ALA:CB	1:A:14:PHE:CD1	0.41	3.04	3	1
1:A:21:VAL:O	1:A:21:VAL:HG12	0.41	2.15	6	1
1:A:99:TRP:CD1	1:A:121:TYR:CE2	0.41	3.09	10	1
1:A:130:TRP:CH2	1:A:134:ASP:CG	0.41	2.99	10	2
1:A:44:LEU:CD1	1:A:65:SER:CB	0.41	2.98	12	1
1:A:4:ALA:HB1	1:A:37:ILE:CD1	0.41	2.44	1	1
1:A:128:THR:HG22	1:A:151:PRO:HG3	0.41	1.83	1	2
1:A:88:LEU:HA	1:A:91:VAL:HG12	0.41	1.92	2	1
1:A:70:GLU:O	1:A:94:THR:CG2	0.41	2.69	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:102:TYR:CD1	1:A:102:TYR:C	0.41	2.98	6	1
1:A:129:ASN:CB	1:A:133:ILE:CD1	0.41	2.99	10	3
1:A:6:THR:O	1:A:10:ALA:CB	0.41	2.69	12	1
1:A:4:ALA:N	1:A:34:ILE:HG21	0.41	2.30	13	1
1:A:7:ILE:CG2	1:A:8:LYS:N	0.41	2.84	15	1
1:A:133:ILE:O	1:A:134:ASP:C	0.41	2.64	16	1
1:A:24:GLU:HG2	1:A:49:ALA:HB3	0.41	1.93	1	1
1:A:47:LEU:HD12	1:A:68:GLY:HA2	0.41	1.93	1	1
1:A:98:LEU:HB3	1:A:120:LEU:HD22	0.41	1.92	3	1
1:A:169:VAL:CG2	1:A:179:LEU:CD2	0.41	2.99	7	2
1:A:43:THR:CG2	1:A:44:LEU:N	0.41	2.84	6	1
1:A:108:LEU:N	1:A:108:LEU:CD2	0.41	2.84	7	1
1:A:156:TYR:CD2	1:A:161:ALA:HB1	0.41	2.51	8	1
1:A:77:LEU:CD2	1:A:100:ILE:HG22	0.41	2.38	15	1
1:A:153:TYR:CZ	1:A:158:GLU:O	0.41	2.74	15	1
1:A:22:ALA:O	1:A:25:ALA:HB2	0.40	2.16	1	1
1:A:76:SER:OG	1:A:99:TRP:CZ3	0.40	2.75	8	1
1:A:166:ARG:NH1	1:A:167:ILE:CG1	0.40	2.84	9	1
1:A:47:LEU:CD1	1:A:48:LYS:N	0.40	2.84	13	1
1:A:153:TYR:CE2	1:A:158:GLU:O	0.40	2.74	15	1
1:A:145:LEU:HD21	1:A:176:LEU:CD2	0.40	2.40	16	1
1:A:114:LEU:O	1:A:120:LEU:HD21	0.40	2.16	17	1
1:A:55:LEU:HD12	1:A:55:LEU:N	0.40	2.31	12	2
1:A:184:VAL:HG13	1:A:188:GLU:HB2	0.40	1.93	2	1
1:A:111:ILE:CD1	1:A:133:ILE:CD1	0.40	2.99	3	1
1:A:146:LEU:HD12	1:A:180:ASP:O	0.40	2.16	3	1
1:A:142:LEU:HD22	1:A:145:LEU:HD11	0.40	1.93	4	1
1:A:120:LEU:CD2	1:A:122:MET:CG	0.40	3.00	9	1
1:A:154:ASN:ND2	1:A:158:GLU:CG	0.40	2.84	10	1
1:A:47:LEU:CD1	1:A:71:ASN:CB	0.40	2.99	14	1
1:A:166:ARG:HH12	1:A:169:VAL:HG11	0.40	1.75	15	1
1:A:167:ILE:CG2	1:A:195:ALA:CB	0.40	2.99	15	1
1:A:100:ILE:HD11	1:A:122:MET:CG	0.40	2.46	16	1
1:A:31:HIS:CG	1:A:56:SER:OG	0.40	2.74	17	1
1:A:117:LEU:CD1	1:A:120:LEU:HD23	0.40	2.46	3	1
1:A:4:ALA:CB	1:A:37:ILE:CD1	0.40	2.99	4	4
1:A:184:VAL:HG23	1:A:185:ASP:N	0.40	2.32	5	1
1:A:37:ILE:CD1	1:A:63:ILE:HG22	0.40	2.46	10	1
1:A:59:ASN:ND2	1:A:81:LEU:CD1	0.40	2.85	11	1
1:A:142:LEU:HD22	1:A:145:LEU:HB2	0.40	1.92	12	1
1:A:111:ILE:HD13	1:A:137:ALA:CB	0.40	2.46	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:LYS:CE	1:A:20:VAL:CG1	0.40	2.99	5	1
1:A:69:MET:HB3	1:A:91:VAL:HG12	0.40	1.93	5	1
1:A:166:ARG:CZ	1:A:188:GLU:CB	0.40	3.00	17	1
1:A:111:ILE:HG13	1:A:133:ILE:HD12	0.40	1.92	1	1
1:A:145:LEU:HD23	1:A:145:LEU:C	0.40	2.42	1	1
1:A:108:LEU:H	1:A:108:LEU:HD12	0.40	1.77	2	1
1:A:75:LEU:HB3	1:A:98:LEU:HD23	0.40	1.93	3	1
1:A:28:VAL:CG1	1:A:30:LEU:CD2	0.40	2.99	4	1
1:A:141:LYS:N	1:A:176:LEU:CD2	0.40	2.85	4	1
1:A:63:ILE:CD1	1:A:87:ASN:CB	0.40	2.98	10	1
1:A:98:LEU:HB3	1:A:120:LEU:HD23	0.40	1.93	17	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	194/198 (98%)	144±4 (74±2%)	40±4 (20±2%)	10±2 (5±1%)	3	23
All	All	3298/3366 (98%)	2456 (74%)	672 (20%)	170 (5%)	3	23

All 26 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	117	LEU	17
1	A	157	LYS	17
1	A	174	PRO	17
1	A	142	LEU	14
1	A	51	LYS	13
1	A	141	LYS	13
1	A	149	GLY	13
1	A	173	LEU	9
1	A	143	GLU	8
1	A	87	ASN	7
1	A	158	GLU	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	176	LEU	6
1	A	175	ASN	5
1	A	184	VAL	5
1	A	96	GLU	3
1	A	63	ILE	2
1	A	70	GLU	2
1	A	181	GLY	2
1	A	186	VAL	2
1	A	95	LEU	2
1	A	86	GLU	2
1	A	22	ALA	1
1	A	42	ALA	1
1	A	64	SER	1
1	A	41	ASP	1
1	A	56	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	170/172 (99%)	139±4 (82±2%)	31±4 (18±2%)	3	36
All	All	2890/2924 (99%)	2368 (82%)	522 (18%)	3	36

All 111 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	18	LYS	17
1	A	19	SER	17
1	A	162	THR	16
1	A	6	THR	15
1	A	98	LEU	15
1	A	157	LYS	14
1	A	152	LEU	12
1	A	178	LYS	12
1	A	142	LEU	11
1	A	80	ASN	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	129	ASN	11
1	A	139	LEU	11
1	A	176	LEU	11
1	A	30	LEU	10
1	A	75	LEU	10
1	A	85	ILE	9
1	A	63	ILE	8
1	A	160	ASN	8
1	A	56	SER	8
1	A	53	LEU	8
1	A	145	LEU	8
1	A	5	THR	7
1	A	173	LEU	7
1	A	44	LEU	7
1	A	117	LEU	7
1	A	166	ARG	7
1	A	191	GLN	7
1	A	33	MET	6
1	A	40	MET	6
1	A	136	LEU	6
1	A	182	MET	6
1	A	114	LEU	6
1	A	126	LYS	6
1	A	140	ASP	6
1	A	143	GLU	6
1	A	76	SER	6
1	A	37	ILE	5
1	A	45	SER	5
1	A	3	LYS	5
1	A	86	GLU	5
1	A	93	ASP	5
1	A	95	LEU	5
1	A	120	LEU	5
1	A	177	LYS	5
1	A	47	LEU	5
1	A	48	LYS	4
1	A	51	LYS	4
1	A	34	ILE	4
1	A	72	LEU	4
1	A	59	ASN	3
1	A	70	GLU	3
1	A	111	ILE	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	167	ILE	3
1	A	175	ASN	3
1	A	101	SER	3
1	A	153	TYR	3
1	A	158	GLU	3
1	A	14	PHE	3
1	A	16	GLU	3
1	A	24	GLU	3
1	A	71	ASN	3
1	A	171	LYS	3
1	A	108	LEU	3
1	A	128	THR	3
1	A	7	ILE	3
1	A	29	GLU	3
1	A	43	THR	3
1	A	79	ARG	3
1	A	64	SER	3
1	A	113	LYS	3
1	A	112	GLU	3
1	A	65	SER	3
1	A	62	LYS	2
1	A	105	ILE	2
1	A	179	LEU	2
1	A	57	THR	2
1	A	39	LYS	2
1	A	83	LYS	2
1	A	84	LYS	2
1	A	15	GLU	2
1	A	188	GLU	2
1	A	17	ARG	2
1	A	58	ASN	2
1	A	130	TRP	2
1	A	66	LEU	2
1	A	147	LEU	2
1	A	89	ASP	2
1	A	82	ILE	1
1	A	125	ASN	1
1	A	190	GLU	1
1	A	109	SER	1
1	A	172	ARG	1
1	A	97	GLU	1
1	A	115	VAL	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	107	SER	1
1	A	9	ASP	1
1	A	60	ILE	1
1	A	69	MET	1
1	A	124	ASN	1
1	A	135	LYS	1
1	A	168	GLU	1
1	A	189	ARG	1
1	A	88	LEU	1
1	A	55	LEU	1
1	A	141	LYS	1
1	A	186	VAL	1
1	A	38	GLU	1
1	A	96	GLU	1
1	A	155	ASP	1
1	A	159	ASN	1
1	A	193	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