



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 08:32 PM UTC

PDB ID : 1EZO / pdb_00001ezo
Title : GLOBAL FOLD OF MALTODEXTRIN BINDING PROTEIN COM-
PLEXED WITH BETA-CYCLODEXTRIN
Authors : Mueller, G.A.; Choy, W.Y.; Yang, D.; Forman-Kay, J.D.; Venters, R.A.; Kay,
L.E.
Deposited on : 2000-05-11

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

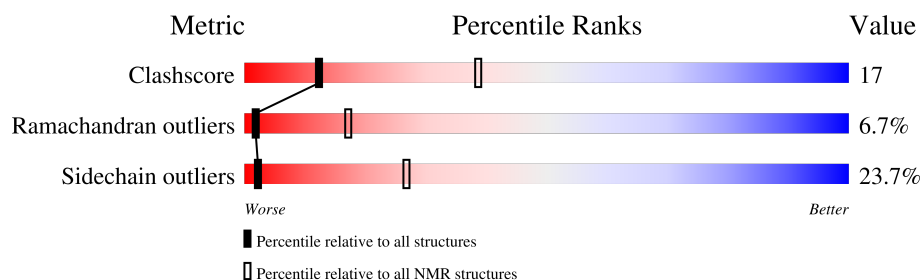
1 Overall quality at a glance

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	370	54% 36% • 8%

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 10 models. Model 9 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:4-A:168, A:182-A:229, A:242-A:370 (342)	4.30	9

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

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

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

Cluster number	Models
1	2, 3, 4, 5, 8, 9, 10
2	1, 6, 7

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 5735 atoms, of which 2858 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called MALTOSE-BINDING PERIPLASMIC PROTEIN.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	370	Total	C	H	N	O	S	0
			5735	1851	2858	469	551	6	

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

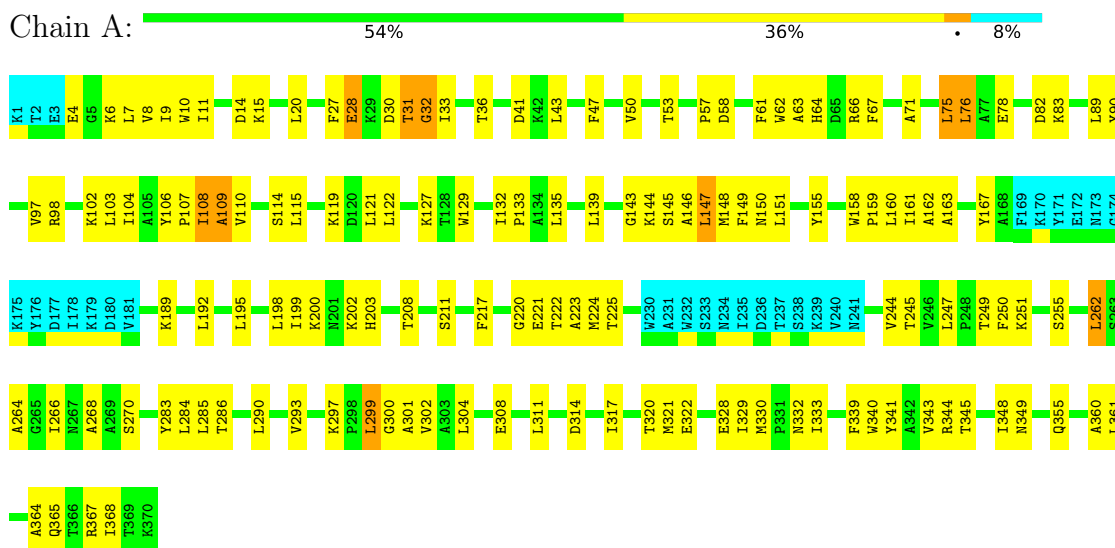
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	2	THR	ILE	engineered mutation	UNP P02928

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: MALTOSE-BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

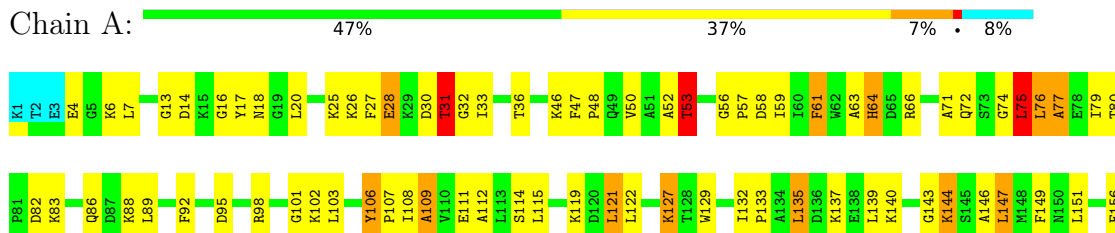


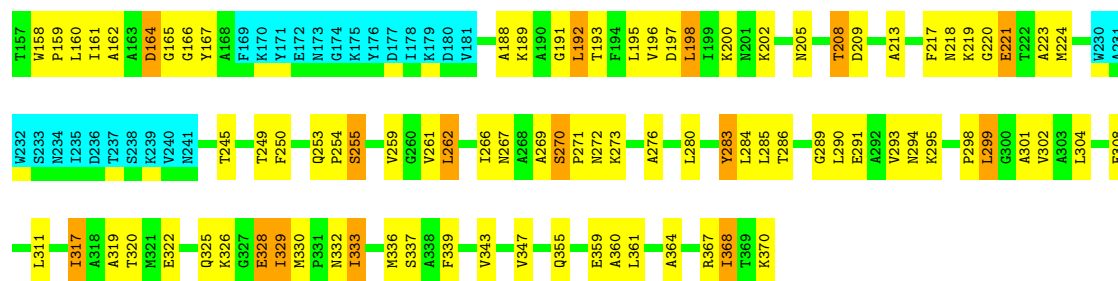
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

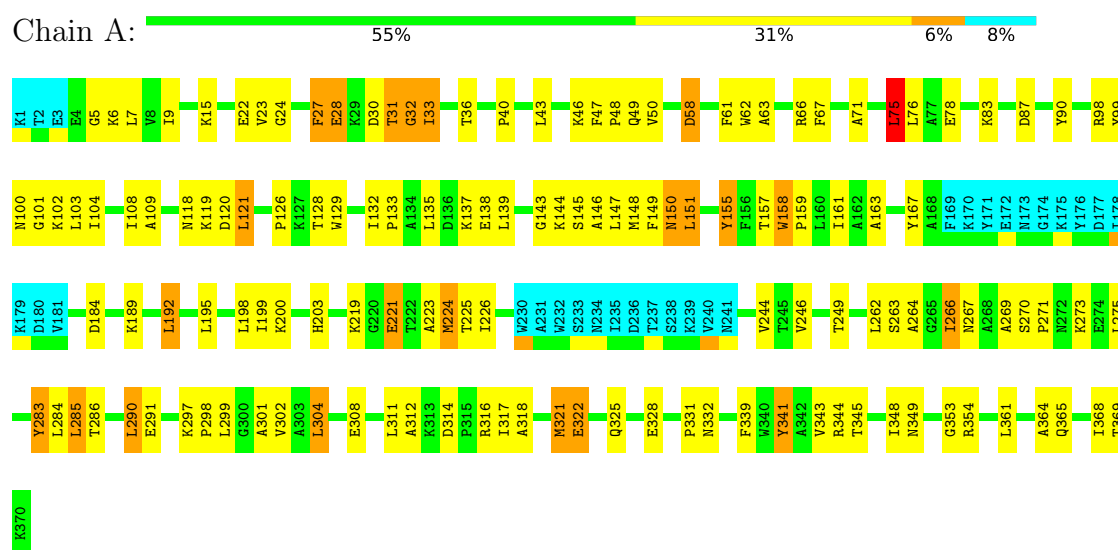
• Molecule 1: MALTOSE-BINDING PERIPLASMIC PROTEIN





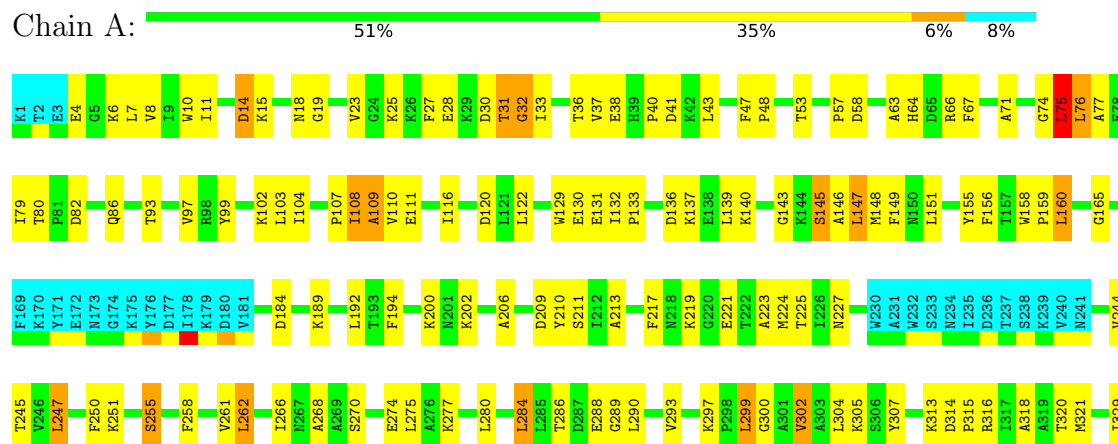
4.2.2 Score per residue for model 2

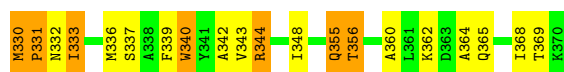
• Molecule 1: MALTOSE-BINDING PERIPLASMIC PROTEIN



4.2.3 Score per residue for model 3

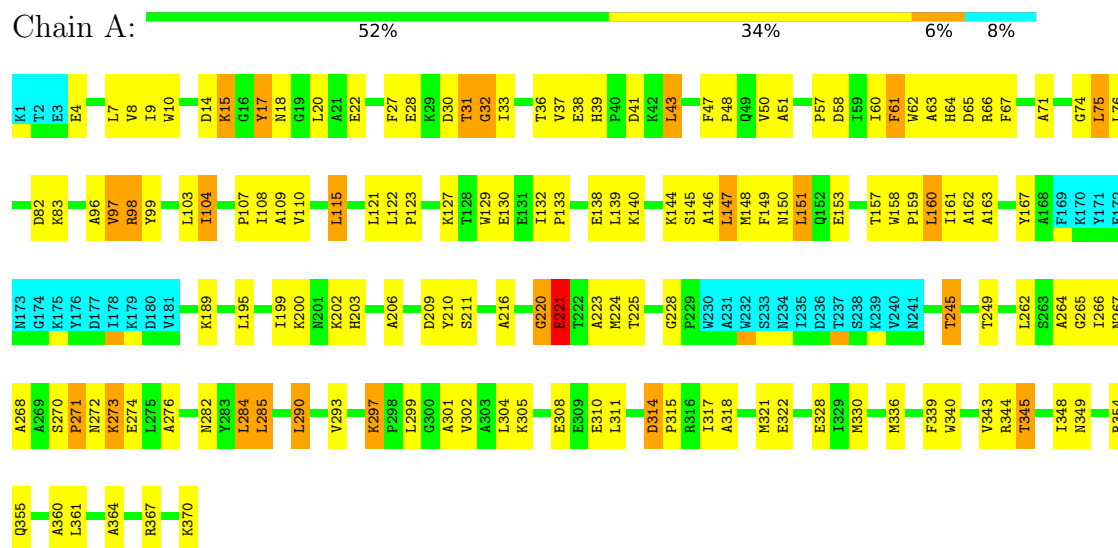
• Molecule 1: MALTOSE-BINDING PERIPLASMIC PROTEIN





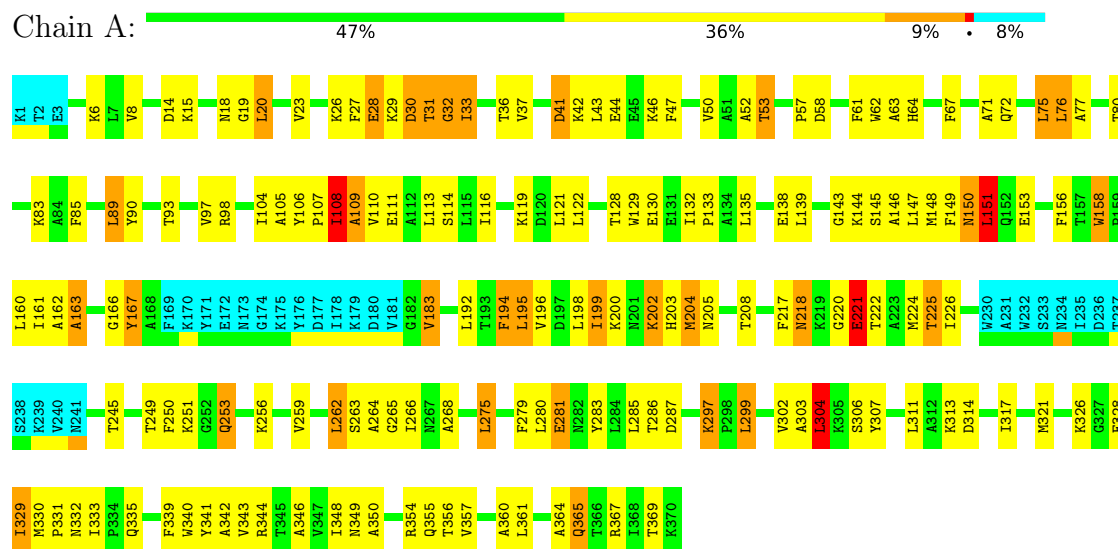
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: MALTOSE-BINDING PERIPLASMIC PROTEIN



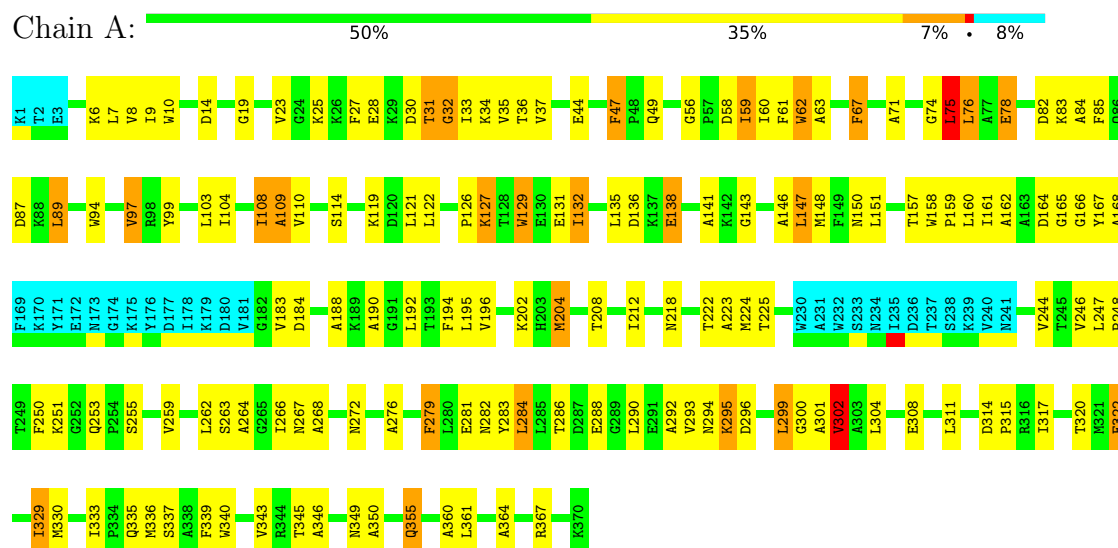
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: MALTOSE-BINDING PERIPLASMIC PROTEIN



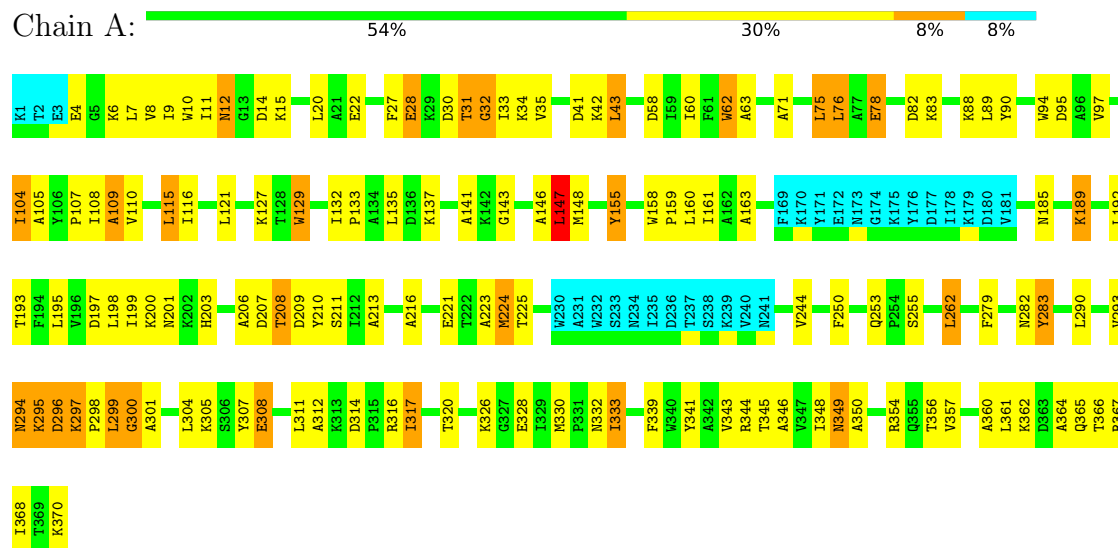
4.2.6 Score per residue for model 6

• Molecule 1: MALTOS-BINDING PERIPLASMIC PROTEIN



4.2.7 Score per residue for model 7

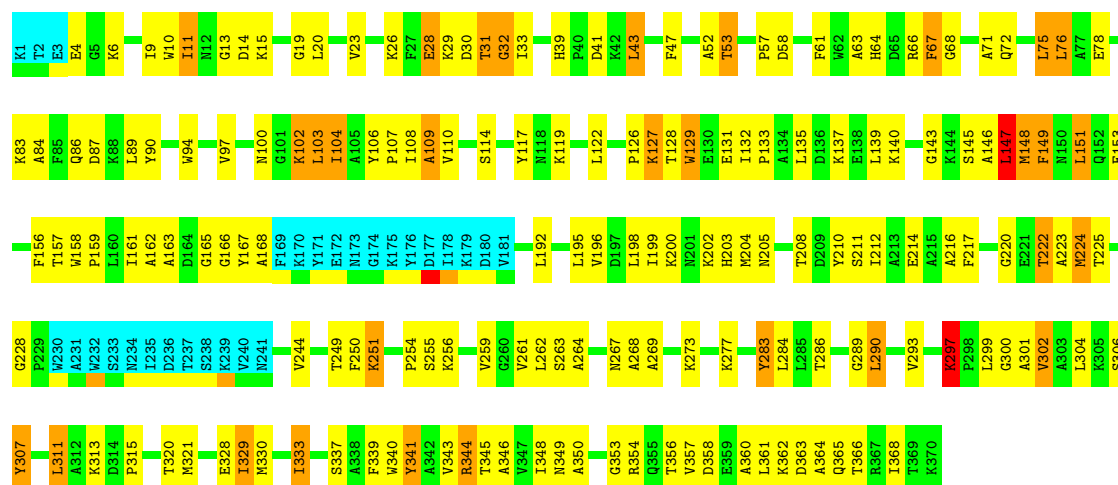
• Molecule 1: MALTOS-BINDING PERIPLASMIC PROTEIN



4.2.8 Score per residue for model 8

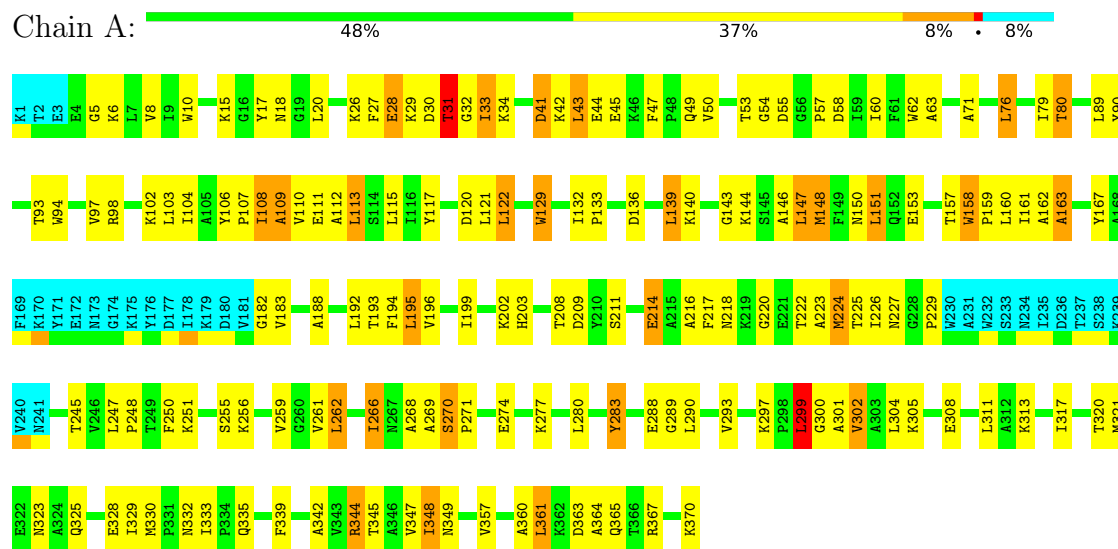
• Molecule 1: MALTOS-BINDING PERIPLASMIC PROTEIN





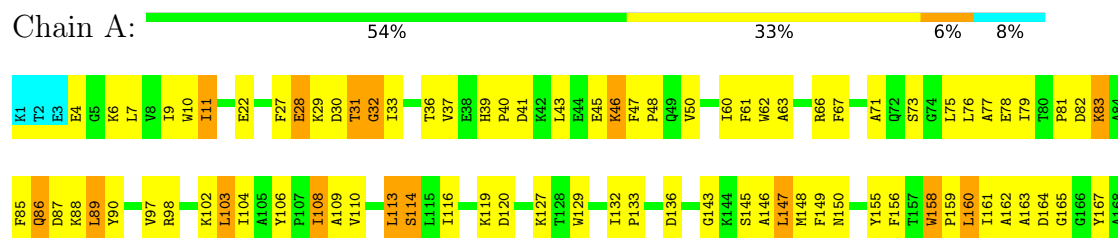
4.2.9 Score per residue for model 9 (medoid)

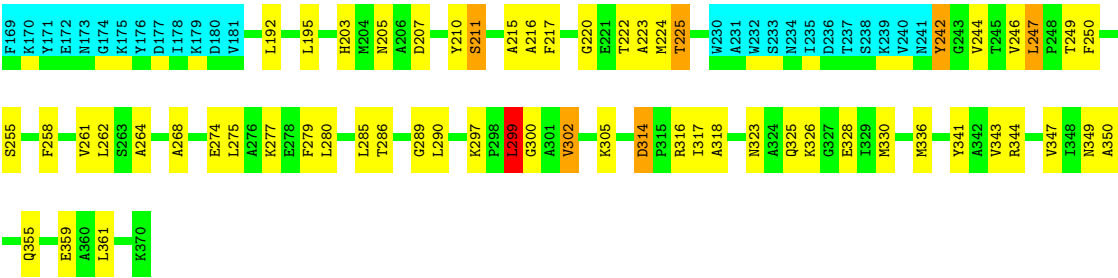
- Molecule 1: MALTOSE-BINDING PERIPLASMIC PROTEIN



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: MALTOSE-BINDING PERIPLASMIC PROTEIN





5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *simulated annealing from extended coordinates, torsion angle dynamics, and finish with cartesian dynamics.*

Of the 384 calculated structures, 10 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy.*

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

Software name	Classification	Version
CNS	structure solution	0.5
CNS	refinement	0.5

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	2638	2630	2627	90±7
All	All	26380	26300	26270	895

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 17.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:208:THR:HG22	1:A:213:ALA:HB2	0.95	1.36	7	2
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:HD23	0.94	1.37	6	1
1:A:146:ALA:HB1	1:A:223:ALA:HB3	0.89	1.45	2	2
1:A:157:THR:HG23	1:A:195:LEU:HD13	0.87	1.42	4	1
1:A:110:VAL:HG21	1:A:302:VAL:HG12	0.84	1.48	8	1
1:A:293:VAL:HG13	1:A:297:LYS:CB	0.83	2.02	4	1
1:A:217:PHE:CG	1:A:225:THR:HG23	0.82	2.08	5	1
1:A:109:ALA:CB	1:A:262:LEU:HD23	0.82	2.04	1	1
1:A:129:TRP:CE3	1:A:132:ILE:HD12	0.82	2.09	2	2
1:A:108:ILE:HD12	1:A:285:LEU:HD21	0.81	1.51	1	1
1:A:10:TRP:CB	1:A:60:ILE:HG22	0.81	2.06	9	1
1:A:299:LEU:HD22	1:A:300:GLY:N	0.80	1.91	9	1
1:A:32:GLY:O	1:A:33:ILE:HD13	0.80	1.76	5	7
1:A:149:PHE:CD2	1:A:226:ILE:HD13	0.80	2.11	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:VAL:HG22	1:A:320:THR:HG21	0.80	1.52	6	1
1:A:342:ALA:O	1:A:345:THR:HG22	0.79	1.78	9	1
1:A:90:TYR:O	1:A:93:THR:HG22	0.79	1.78	9	2
1:A:31:THR:HG22	1:A:31:THR:O	0.78	1.79	10	3
1:A:27:PHE:O	1:A:33:ILE:HD13	0.77	1.79	2	2
1:A:266:ILE:HD13	1:A:276:ALA:HB1	0.77	1.56	6	1
1:A:247:LEU:HD13	1:A:255:SER:CB	0.77	2.09	3	1
1:A:71:ALA:CB	1:A:76:LEU:HD23	0.77	2.10	6	1
1:A:28:GLU:OE2	1:A:35:VAL:HG22	0.76	1.80	6	1
1:A:116:ILE:HD11	1:A:242:TYR:CD1	0.76	2.15	10	1
1:A:157:THR:O	1:A:161:ILE:HG22	0.76	1.81	6	2
1:A:109:ALA:HB3	1:A:262:LEU:HB2	0.74	1.58	6	8
1:A:110:VAL:HG11	1:A:320:THR:HG21	0.74	1.59	3	1
1:A:107:PRO:O	1:A:108:ILE:HD13	0.73	1.84	1	3
1:A:146:ALA:HA	1:A:223:ALA:HB3	0.73	1.60	3	7
1:A:302:VAL:HG21	1:A:311:LEU:HD12	0.73	1.59	8	1
1:A:139:LEU:HD13	1:A:145:SER:CB	0.73	2.14	8	1
1:A:93:THR:HG23	1:A:94:TRP:CD1	0.73	2.19	9	1
1:A:27:PHE:CG	1:A:33:ILE:HG21	0.72	2.19	1	2
1:A:360:ALA:O	1:A:364:ALA:HB2	0.72	1.85	5	6
1:A:339:PHE:O	1:A:343:VAL:HG23	0.72	1.85	1	4
1:A:19:GLY:O	1:A:23:VAL:HG23	0.72	1.84	8	3
1:A:97:VAL:HG11	1:A:107:PRO:HD3	0.72	1.61	5	3
1:A:314:ASP:HB3	1:A:317:ILE:HG22	0.71	1.60	2	2
1:A:344:ARG:O	1:A:348:ILE:HG22	0.71	1.85	8	5
1:A:167:TYR:CZ	1:A:343:VAL:HG21	0.71	2.20	5	1
1:A:307:TYR:O	1:A:311:LEU:HD13	0.71	1.86	5	1
1:A:97:VAL:HG21	1:A:105:ALA:O	0.71	1.86	7	1
1:A:139:LEU:CD1	1:A:146:ALA:HB2	0.70	2.16	5	2
1:A:116:ILE:HG22	1:A:225:THR:O	0.70	1.87	10	1
1:A:146:ALA:CB	1:A:223:ALA:HB3	0.70	2.16	6	3
1:A:6:LYS:C	1:A:7:LEU:HD22	0.70	2.11	3	2
1:A:75:LEU:O	1:A:76:LEU:HD22	0.69	1.86	5	2
1:A:61:PHE:CE2	1:A:264:ALA:HB2	0.69	2.22	10	2
1:A:67:PHE:O	1:A:71:ALA:HB3	0.69	1.87	10	6
1:A:296:ASP:O	1:A:299:LEU:HD23	0.69	1.88	7	1
1:A:146:ALA:CA	1:A:223:ALA:HB3	0.69	2.18	6	7
1:A:77:ALA:HB3	1:A:266:ILE:HG23	0.69	1.63	5	1
1:A:297:LYS:O	1:A:299:LEU:HD23	0.69	1.87	5	1
1:A:129:TRP:CZ3	1:A:132:ILE:HD13	0.69	2.22	8	1
1:A:339:PHE:O	1:A:343:VAL:HG12	0.69	1.88	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:283:TYR:C	1:A:284:LEU:HD22	0.69	2.13	8	1
1:A:344:ARG:HG3	1:A:348:ILE:HD12	0.68	1.65	4	1
1:A:109:ALA:HB2	1:A:262:LEU:HD23	0.68	1.66	1	1
1:A:117:TYR:HB3	1:A:122:LEU:HD22	0.68	1.64	9	1
1:A:301:ALA:HB3	1:A:317:ILE:HD12	0.68	1.65	6	1
1:A:193:THR:HB	1:A:357:VAL:HG21	0.67	1.65	9	1
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:HG23	0.67	1.90	9	2
1:A:295:LYS:O	1:A:299:LEU:HD21	0.67	1.90	6	1
1:A:76:LEU:HD12	1:A:76:LEU:O	0.67	1.89	6	1
1:A:10:TRP:HB2	1:A:60:ILE:HG22	0.67	1.65	9	1
1:A:157:THR:HG23	1:A:195:LEU:CD1	0.67	2.18	4	1
1:A:317:ILE:HG22	1:A:321:MET:HE3	0.67	1.67	5	1
1:A:8:VAL:HG23	1:A:57:PRO:HB2	0.67	1.67	3	2
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:CD2	0.67	2.19	6	2
1:A:247:LEU:N	1:A:247:LEU:HD13	0.67	2.05	10	1
1:A:339:PHE:O	1:A:343:VAL:HG22	0.67	1.90	7	1
1:A:266:ILE:CD1	1:A:276:ALA:HB1	0.67	2.20	6	1
1:A:110:VAL:HG11	1:A:317:ILE:HG12	0.67	1.64	7	1
1:A:10:TRP:CZ3	1:A:43:LEU:HD22	0.67	2.25	8	1
1:A:188:ALA:O	1:A:192:LEU:HD23	0.67	1.90	9	1
1:A:341:TYR:O	1:A:345:THR:HG23	0.66	1.90	2	1
1:A:84:ALA:HB1	1:A:94:TRP:CH2	0.66	2.25	6	1
1:A:192:LEU:O	1:A:196:VAL:HG23	0.66	1.90	6	2
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:HD22	0.66	1.68	4	1
1:A:284:LEU:HD21	1:A:297:LYS:NZ	0.66	2.06	4	1
1:A:284:LEU:O	1:A:290:LEU:HD13	0.66	1.90	6	1
1:A:192:LEU:O	1:A:196:VAL:HG12	0.66	1.91	5	2
1:A:299:LEU:HD12	1:A:300:GLY:N	0.65	2.06	6	4
1:A:317:ILE:O	1:A:320:THR:HG22	0.65	1.91	7	1
1:A:98:ARG:CZ	1:A:103:LEU:HD11	0.65	2.22	4	1
1:A:23:VAL:HG12	1:A:27:PHE:CE2	0.65	2.27	5	1
1:A:158:TRP:CE2	1:A:343:VAL:HG13	0.65	2.27	2	1
1:A:293:VAL:HG13	1:A:297:LYS:HG3	0.65	1.69	3	1
1:A:332:ASN:C	1:A:333:ILE:HD12	0.65	2.17	7	1
1:A:266:ILE:HD11	1:A:273:LYS:CD	0.64	2.23	4	1
1:A:10:TRP:HB2	1:A:60:ILE:HG23	0.64	1.68	6	2
1:A:204:MET:HE3	1:A:205:ASN:ND2	0.64	2.08	5	1
1:A:293:VAL:HG13	1:A:297:LYS:HB2	0.64	1.68	4	1
1:A:293:VAL:HG13	1:A:297:LYS:HB3	0.64	1.66	4	1
1:A:249:THR:HG22	1:A:254:PRO:HD3	0.64	1.67	8	2
1:A:31:THR:O	1:A:31:THR:CG2	0.64	2.46	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:303:ALA:HB3	1:A:306:SER:HB2	0.64	1.67	5	1
1:A:317:ILE:O	1:A:317:ILE:HD13	0.64	1.92	7	1
1:A:135:LEU:O	1:A:139:LEU:HD23	0.64	1.92	1	2
1:A:290:LEU:HD21	1:A:307:TYR:OH	0.64	1.91	8	1
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:OG1	0.64	2.14	3	3
1:A:109:ALA:HB3	1:A:262:LEU:CB	0.63	2.23	6	3
1:A:6:LYS:C	1:A:7:LEU:HD12	0.63	2.19	10	2
1:A:46:LYS:O	1:A:50:VAL:HG12	0.63	1.93	2	1
1:A:87:ASP:OD2	1:A:89:LEU:HD12	0.63	1.92	6	1
1:A:151:LEU:HB2	1:A:208:THR:HG21	0.63	1.69	8	1
1:A:216:ALA:HB1	1:A:224:MET:SD	0.63	2.33	8	1
1:A:217:PHE:CE1	1:A:225:THR:HG21	0.63	2.29	8	1
1:A:184:ASP:HA	1:A:361:LEU:HD22	0.63	1.69	2	1
1:A:160:LEU:HD13	1:A:195:LEU:CD2	0.63	2.24	4	1
1:A:217:PHE:CD1	1:A:225:THR:HG23	0.62	2.28	5	1
1:A:189:LYS:O	1:A:193:THR:HG23	0.62	1.94	7	2
1:A:244:VAL:HG11	1:A:315:PRO:HA	0.62	1.71	6	1
1:A:71:ALA:HB3	1:A:76:LEU:HD12	0.62	1.70	1	1
1:A:129:TRP:CE3	1:A:132:ILE:HD11	0.62	2.30	6	1
1:A:246:VAL:C	1:A:247:LEU:HD13	0.62	2.19	10	1
1:A:52:ALA:O	1:A:53:THR:HG23	0.62	1.95	8	3
1:A:110:VAL:CG2	1:A:302:VAL:HG12	0.62	2.25	8	1
1:A:346:ALA:O	1:A:350:ALA:HB2	0.61	1.94	6	4
1:A:161:ILE:HD13	1:A:192:LEU:HD22	0.61	1.71	1	1
1:A:151:LEU:HD12	1:A:208:THR:HG23	0.61	1.70	6	1
1:A:311:LEU:O	1:A:317:ILE:HD11	0.61	1.96	1	1
1:A:314:ASP:O	1:A:318:ALA:HB2	0.61	1.94	3	3
1:A:113:LEU:C	1:A:113:LEU:HD22	0.61	2.20	10	1
1:A:8:VAL:HG23	1:A:57:PRO:HG2	0.61	1.72	5	2
1:A:136:ASP:OD1	1:A:146:ALA:HB3	0.61	1.96	9	1
1:A:109:ALA:HB3	1:A:262:LEU:HD23	0.61	1.72	1	1
1:A:110:VAL:CG1	1:A:320:THR:HG21	0.61	2.26	3	1
1:A:76:LEU:HD11	1:A:265:GLY:HA3	0.61	1.73	5	1
1:A:104:ILE:HD12	1:A:104:ILE:O	0.61	1.96	5	1
1:A:196:VAL:HG11	1:A:357:VAL:HG21	0.61	1.73	5	1
1:A:10:TRP:CE3	1:A:43:LEU:HD22	0.61	2.31	8	1
1:A:158:TRP:CZ2	1:A:343:VAL:HG13	0.60	2.32	2	1
1:A:244:VAL:HG21	1:A:315:PRO:HB3	0.60	1.73	3	1
1:A:78:GLU:HA	1:A:104:ILE:HG22	0.60	1.71	7	2
1:A:106:TYR:CE1	1:A:285:LEU:HD11	0.60	2.31	10	1
1:A:301:ALA:HB3	1:A:317:ILE:CG2	0.60	2.27	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:HIS:CD2	1:A:330:MET:HE1	0.60	2.31	5	1
1:A:283:TYR:O	1:A:284:LEU:HD22	0.60	1.95	8	1
1:A:71:ALA:HB2	1:A:76:LEU:HD12	0.60	1.72	9	1
1:A:75:LEU:C	1:A:76:LEU:HD22	0.60	2.22	2	1
1:A:109:ALA:HB2	1:A:262:LEU:HD12	0.60	1.73	10	1
1:A:364:ALA:O	1:A:368:ILE:HG22	0.59	1.96	2	2
1:A:158:TRP:O	1:A:162:ALA:HB2	0.59	1.97	5	6
1:A:7:LEU:HD22	1:A:279:PHE:CE1	0.59	2.32	6	1
1:A:314:ASP:CB	1:A:317:ILE:HG22	0.59	2.27	2	2
1:A:108:ILE:O	1:A:109:ALA:HB2	0.59	1.98	9	4
1:A:289:GLY:O	1:A:293:VAL:HG13	0.59	1.96	9	1
1:A:108:ILE:HD12	1:A:108:ILE:O	0.59	1.98	2	1
1:A:247:LEU:HD22	1:A:247:LEU:H	0.59	1.58	10	1
1:A:299:LEU:HD13	1:A:299:LEU:N	0.59	2.13	9	1
1:A:32:GLY:C	1:A:33:ILE:HD13	0.59	2.21	5	5
1:A:76:LEU:C	1:A:268:ALA:HB2	0.59	2.23	6	1
1:A:189:LYS:HG3	1:A:361:LEU:HD11	0.58	1.75	2	1
1:A:266:ILE:CG2	1:A:269:ALA:HB2	0.58	2.28	2	1
1:A:329:ILE:HD13	1:A:329:ILE:C	0.58	2.22	5	1
1:A:132:ILE:HG22	1:A:136:ASP:OD1	0.58	1.97	10	1
1:A:6:LYS:O	1:A:7:LEU:HD22	0.58	1.98	7	1
1:A:285:LEU:O	1:A:290:LEU:HD13	0.58	1.98	2	1
1:A:286:THR:HG23	1:A:289:GLY:H	0.58	1.57	1	4
1:A:132:ILE:HG22	1:A:133:PRO:HD3	0.58	1.76	1	3
1:A:10:TRP:HB3	1:A:60:ILE:HG22	0.58	1.74	9	1
1:A:266:ILE:N	1:A:266:ILE:HD13	0.58	2.14	9	1
1:A:87:ASP:OD1	1:A:304:LEU:HD21	0.58	1.97	2	1
1:A:192:LEU:O	1:A:196:VAL:HG22	0.58	1.98	9	1
1:A:132:ILE:N	1:A:133:PRO:CD	0.58	2.66	4	6
1:A:111:GLU:HA	1:A:320:THR:HG21	0.58	1.75	9	1
1:A:78:GLU:CA	1:A:104:ILE:HG22	0.58	2.29	7	1
1:A:285:LEU:O	1:A:290:LEU:HD22	0.57	1.98	2	1
1:A:132:ILE:HD11	1:A:147:LEU:HB3	0.57	1.75	8	1
1:A:247:LEU:HD13	1:A:255:SER:HB3	0.57	1.75	3	1
1:A:262:LEU:C	1:A:262:LEU:HD12	0.57	2.24	1	1
1:A:11:ILE:HG21	1:A:14:ASP:HB2	0.57	1.76	3	1
1:A:259:VAL:HB	1:A:329:ILE:HG22	0.57	1.74	6	1
1:A:357:VAL:HG12	1:A:361:LEU:CD1	0.57	2.28	7	1
1:A:107:PRO:CB	1:A:261:VAL:HG21	0.57	2.30	9	1
1:A:357:VAL:HG12	1:A:361:LEU:HD12	0.57	1.76	7	1
1:A:344:ARG:HG2	1:A:348:ILE:HD12	0.57	1.77	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:129:TRP:CD2	1:A:132:ILE:HD12	0.57	2.34	10	1
1:A:304:LEU:N	1:A:304:LEU:HD23	0.57	2.14	5	1
1:A:110:VAL:O	1:A:110:VAL:HG13	0.57	2.00	9	3
1:A:362:LYS:O	1:A:366:THR:HG22	0.57	2.00	7	1
1:A:299:LEU:HD23	1:A:299:LEU:N	0.57	2.15	1	1
1:A:47:PHE:CZ	1:A:60:ILE:HD11	0.56	2.35	6	1
1:A:151:LEU:CD1	1:A:208:THR:HG21	0.56	2.29	9	1
1:A:33:ILE:HD12	1:A:33:ILE:N	0.56	2.15	2	1
1:A:302:VAL:O	1:A:302:VAL:HG13	0.56	1.99	8	3
1:A:311:LEU:HD11	1:A:317:ILE:CB	0.56	2.30	9	1
1:A:89:LEU:C	1:A:89:LEU:HD12	0.56	2.26	10	1
1:A:104:ILE:HD13	1:A:104:ILE:N	0.56	2.14	8	3
1:A:9:ILE:HD12	1:A:9:ILE:N	0.56	2.15	8	2
1:A:280:LEU:HD12	1:A:281:GLU:N	0.56	2.16	5	1
1:A:365:GLN:O	1:A:369:THR:HG23	0.56	2.00	2	2
1:A:77:ALA:HB2	1:A:268:ALA:HA	0.56	1.76	5	2
1:A:139:LEU:HD13	1:A:145:SER:HB2	0.56	1.78	8	1
1:A:329:ILE:HG23	1:A:329:ILE:O	0.56	2.01	5	5
1:A:126:PRO:HG2	1:A:128:THR:HG22	0.56	1.77	2	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:HB2	0.56	1.78	7	2
1:A:333:ILE:HG23	1:A:333:ILE:O	0.55	2.00	1	1
1:A:110:VAL:HG21	1:A:317:ILE:CD1	0.55	2.31	10	1
1:A:17:TYR:CE2	1:A:37:VAL:HG13	0.55	2.36	4	1
1:A:61:PHE:CD2	1:A:264:ALA:HB2	0.55	2.35	10	2
1:A:332:ASN:O	1:A:333:ILE:HG23	0.55	2.02	3	1
1:A:62:TRP:N	1:A:262:LEU:HD23	0.55	2.17	5	1
1:A:116:ILE:HB	1:A:244:VAL:HG12	0.55	1.79	10	1
1:A:212:ILE:HD12	1:A:212:ILE:N	0.55	2.16	6	1
1:A:8:VAL:HG23	1:A:57:PRO:CG	0.55	2.32	9	1
1:A:71:ALA:HA	1:A:76:LEU:HD23	0.55	1.78	2	1
1:A:10:TRP:CD2	1:A:43:LEU:HD13	0.55	2.37	8	1
1:A:76:LEU:HD22	1:A:104:ILE:C	0.55	2.26	9	1
1:A:290:LEU:O	1:A:293:VAL:HG22	0.55	2.02	9	1
1:A:109:ALA:CB	1:A:262:LEU:HD12	0.55	2.31	10	1
1:A:76:LEU:HD22	1:A:104:ILE:O	0.55	2.02	9	1
1:A:336:MET:HE3	1:A:337:SER:OG	0.54	2.02	1	1
1:A:145:SER:HB2	1:A:222:THR:HG22	0.54	1.79	10	1
1:A:121:LEU:HD12	1:A:121:LEU:O	0.54	2.02	6	2
1:A:132:ILE:HB	1:A:133:PRO:HD3	0.54	1.78	9	3
1:A:129:TRP:CE3	1:A:132:ILE:HG21	0.54	2.38	8	2
1:A:10:TRP:CE3	1:A:43:LEU:HD12	0.54	2.37	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:266:ILE:O	1:A:266:ILE:HG23	0.54	2.02	3	1
1:A:104:ILE:HD13	1:A:104:ILE:H	0.54	1.63	7	3
1:A:246:VAL:HG21	1:A:323:ASN:HB2	0.54	1.78	10	1
1:A:311:LEU:HD13	1:A:317:ILE:CD1	0.54	2.33	4	1
1:A:299:LEU:HD22	1:A:299:LEU:C	0.54	2.27	9	1
1:A:8:VAL:O	1:A:8:VAL:HG23	0.53	2.03	7	1
1:A:299:LEU:HD22	1:A:299:LEU:N	0.53	2.19	8	2
1:A:139:LEU:HD13	1:A:145:SER:HB3	0.53	1.80	8	1
1:A:151:LEU:CB	1:A:208:THR:HG21	0.53	2.33	8	1
1:A:114:SER:OG	1:A:319:ALA:HB1	0.53	2.02	1	1
1:A:7:LEU:CD1	1:A:276:ALA:HB1	0.53	2.33	4	1
1:A:40:PRO:O	1:A:43:LEU:HD23	0.53	2.02	2	1
1:A:150:ASN:CG	1:A:226:ILE:HG21	0.53	2.28	2	1
1:A:8:VAL:HG13	1:A:8:VAL:O	0.53	2.03	4	1
1:A:115:LEU:HD13	1:A:116:ILE:N	0.53	2.17	7	1
1:A:151:LEU:CD1	1:A:199:ILE:HG21	0.53	2.34	2	1
1:A:208:THR:CG2	1:A:213:ALA:HB2	0.53	2.32	1	2
1:A:47:PHE:CZ	1:A:75:LEU:HD22	0.53	2.39	3	1
1:A:76:LEU:HD23	1:A:104:ILE:O	0.53	2.03	3	1
1:A:304:LEU:HD13	1:A:307:TYR:CD2	0.53	2.38	3	1
1:A:27:PHE:CD1	1:A:33:ILE:HG21	0.53	2.39	1	2
1:A:110:VAL:HG23	1:A:259:VAL:CG2	0.53	2.34	5	1
1:A:104:ILE:O	1:A:104:ILE:HG22	0.53	2.04	3	2
1:A:116:ILE:HG22	1:A:244:VAL:HG22	0.53	1.79	7	1
1:A:116:ILE:HD12	1:A:225:THR:O	0.53	2.04	3	1
1:A:50:VAL:HG12	1:A:50:VAL:O	0.53	2.04	4	1
1:A:135:LEU:O	1:A:139:LEU:HD12	0.53	2.04	5	1
1:A:167:TYR:HA	1:A:183:VAL:HG12	0.52	1.79	5	1
1:A:317:ILE:HD13	1:A:317:ILE:C	0.52	2.28	7	1
1:A:14:ASP:O	1:A:299:LEU:HD22	0.52	2.03	5	1
1:A:108:ILE:HG22	1:A:108:ILE:O	0.52	2.05	7	2
1:A:266:ILE:HD11	1:A:273:LYS:HB3	0.52	1.79	4	1
1:A:167:TYR:OH	1:A:343:VAL:HG11	0.52	2.04	6	1
1:A:158:TRP:O	1:A:162:ALA:HB3	0.52	2.03	8	1
1:A:120:ASP:C	1:A:121:LEU:HD23	0.52	2.30	2	1
1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:HD23	0.52	2.19	10	1
1:A:343:VAL:O	1:A:347:VAL:HG23	0.52	2.03	10	2
1:A:311:LEU:HD12	1:A:311:LEU:C	0.52	2.29	4	1
1:A:11:ILE:HD13	1:A:11:ILE:H	0.52	1.64	10	1
1:A:11:ILE:HD13	1:A:11:ILE:N	0.52	2.19	10	1
1:A:37:VAL:O	1:A:37:VAL:HG13	0.52	2.05	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:299:LEU:HD12	1:A:299:LEU:C	0.52	2.30	7	1
1:A:129:TRP:CH2	1:A:132:ILE:HD13	0.52	2.40	8	1
1:A:342:ALA:HB1	1:A:364:ALA:HB1	0.52	1.82	3	1
1:A:308:GLU:O	1:A:312:ALA:HB3	0.52	2.04	7	1
1:A:312:ALA:HB1	1:A:321:MET:HE3	0.52	1.83	2	1
1:A:266:ILE:HD13	1:A:266:ILE:H	0.52	1.65	9	1
1:A:192:LEU:HD13	1:A:192:LEU:O	0.51	2.05	1	2
1:A:112:ALA:HB3	1:A:320:THR:HG22	0.51	1.82	1	1
1:A:156:PHE:O	1:A:160:LEU:HD23	0.51	2.06	5	1
1:A:246:VAL:HG21	1:A:322:GLU:HB3	0.51	1.82	6	1
1:A:290:LEU:O	1:A:290:LEU:HD13	0.51	2.06	4	1
1:A:301:ALA:O	1:A:302:VAL:HG13	0.51	2.06	9	2
1:A:299:LEU:N	1:A:299:LEU:CD1	0.51	2.73	9	1
1:A:46:LYS:O	1:A:50:VAL:HG22	0.51	2.05	5	2
1:A:184:ASP:OD1	1:A:364:ALA:HB3	0.51	2.06	6	1
1:A:76:LEU:HD23	1:A:104:ILE:HB	0.51	1.83	8	1
1:A:148:MET:SD	1:A:222:THR:HG21	0.51	2.46	9	1
1:A:118:ASN:CB	1:A:121:LEU:HD21	0.51	2.36	2	1
1:A:98:ARG:NH2	1:A:103:LEU:HD11	0.51	2.20	4	1
1:A:302:VAL:O	1:A:302:VAL:HG23	0.51	2.05	4	1
1:A:280:LEU:HD12	1:A:280:LEU:C	0.51	2.31	5	1
1:A:147:LEU:C	1:A:147:LEU:HD12	0.51	2.31	4	1
1:A:259:VAL:HG13	1:A:328:GLU:O	0.51	2.06	1	1
1:A:139:LEU:HD21	1:A:224:MET:HE1	0.51	1.83	8	1
1:A:9:ILE:HD13	1:A:20:LEU:HD22	0.51	1.82	4	1
1:A:84:ALA:HB1	1:A:94:TRP:CZ2	0.51	2.40	6	2
1:A:363:ASP:O	1:A:366:THR:HG22	0.51	2.05	8	1
1:A:266:ILE:HG21	1:A:269:ALA:HB2	0.51	1.81	2	1
1:A:149:PHE:CE1	1:A:217:PHE:CG	0.51	2.99	3	1
1:A:8:VAL:HG12	1:A:57:PRO:HB2	0.51	1.83	4	1
1:A:183:VAL:O	1:A:183:VAL:HG22	0.51	2.04	9	1
1:A:291:GLU:OE1	1:A:311:LEU:HD11	0.51	2.05	2	1
1:A:266:ILE:HD11	1:A:273:LYS:CB	0.51	2.36	4	1
1:A:157:THR:HB	1:A:161:ILE:HD12	0.51	1.82	8	1
1:A:10:TRP:NE1	1:A:43:LEU:HD22	0.50	2.21	3	1
1:A:110:VAL:CG2	1:A:320:THR:HG21	0.50	2.30	6	1
1:A:161:ILE:HD11	1:A:195:LEU:HD12	0.50	1.81	1	1
1:A:97:VAL:HG23	1:A:103:LEU:HD23	0.50	1.82	3	1
1:A:156:PHE:O	1:A:160:LEU:HD12	0.50	2.05	3	1
1:A:150:ASN:ND2	1:A:226:ILE:HG21	0.50	2.21	2	1
1:A:283:TYR:HB3	1:A:284:LEU:HD12	0.50	1.83	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:VAL:HG23	1:A:110:VAL:O	0.50	2.05	10	1
1:A:209:ASP:O	1:A:213:ALA:HB3	0.50	2.05	3	2
1:A:97:VAL:O	1:A:97:VAL:HG13	0.50	2.06	7	1
1:A:135:LEU:HD22	1:A:146:ALA:HB3	0.50	1.83	8	1
1:A:155:TYR:CD2	1:A:258:PHE:CD2	0.50	2.99	10	1
1:A:155:TYR:CD2	1:A:258:PHE:CE2	0.50	2.99	10	1
1:A:93:THR:O	1:A:97:VAL:HG22	0.50	2.06	5	1
1:A:10:TRP:CH2	1:A:43:LEU:HD13	0.50	2.42	7	1
1:A:117:TYR:HB3	1:A:223:ALA:HB2	0.50	1.84	8	1
1:A:60:ILE:HD11	1:A:62:TRP:CZ3	0.50	2.41	7	1
1:A:246:VAL:HG21	1:A:323:ASN:CG	0.50	2.32	10	1
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:CG2	0.50	2.59	1	2
1:A:226:ILE:O	1:A:226:ILE:HG23	0.50	2.07	2	1
1:A:64:HIS:HB3	1:A:261:VAL:HG13	0.50	1.82	3	1
1:A:149:PHE:CE2	1:A:156:PHE:CZ	0.50	3.00	1	1
1:A:139:LEU:HD12	1:A:146:ALA:HB2	0.50	1.83	9	2
1:A:113:LEU:HD12	1:A:113:LEU:O	0.50	2.06	5	1
1:A:76:LEU:HD13	1:A:104:ILE:O	0.50	2.07	9	1
1:A:108:ILE:O	1:A:108:ILE:HG22	0.50	2.05	9	1
1:A:109:ALA:CB	1:A:262:LEU:HD22	0.50	2.37	4	1
1:A:167:TYR:OH	1:A:343:VAL:HG21	0.50	2.07	6	1
1:A:145:SER:HB3	1:A:224:MET:HE2	0.50	1.83	8	1
1:A:10:TRP:HB3	1:A:60:ILE:HG23	0.50	1.84	10	1
1:A:145:SER:O	1:A:222:THR:HG21	0.49	2.06	8	1
1:A:151:LEU:HD21	1:A:199:ILE:HG12	0.49	1.83	8	1
1:A:27:PHE:HB3	1:A:33:ILE:HG21	0.49	1.84	7	6
1:A:267:ASN:O	1:A:268:ALA:HB3	0.49	2.07	4	1
1:A:61:PHE:CE2	1:A:264:ALA:HB1	0.49	2.41	6	1
1:A:301:ALA:CB	1:A:317:ILE:HD12	0.49	2.36	6	1
1:A:117:TYR:CB	1:A:122:LEU:HD22	0.49	2.36	9	1
1:A:156:PHE:CE2	1:A:157:THR:HG23	0.49	2.42	8	1
1:A:39:HIS:O	1:A:43:LEU:HD22	0.49	2.08	10	1
1:A:109:ALA:O	1:A:261:VAL:HG12	0.49	2.08	10	1
1:A:129:TRP:CD2	1:A:250:PHE:CE2	0.49	3.00	10	1
1:A:27:PHE:CE2	1:A:283:TYR:CE2	0.49	3.00	1	1
1:A:163:ALA:HB2	1:A:250:PHE:CZ	0.49	2.43	9	1
1:A:6:LYS:O	1:A:7:LEU:HD12	0.49	2.08	10	1
1:A:8:VAL:O	1:A:59:ILE:HG23	0.49	2.07	6	1
1:A:106:TYR:HD2	1:A:108:ILE:HD11	0.49	1.66	1	1
1:A:8:VAL:HG23	1:A:57:PRO:CB	0.49	2.38	9	2
1:A:131:GLU:O	1:A:135:LEU:HD13	0.49	2.06	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:244:VAL:O	1:A:244:VAL:HG13	0.49	2.07	2	1
1:A:311:LEU:HD11	1:A:317:ILE:HB	0.49	1.84	9	1
1:A:266:ILE:HG13	1:A:276:ALA:HB1	0.49	1.84	1	1
1:A:129:TRP:CE2	1:A:250:PHE:CE2	0.49	3.01	8	2
1:A:47:PHE:O	1:A:51:ALA:HB2	0.49	2.07	4	1
1:A:113:LEU:HD13	1:A:226:ILE:CG2	0.49	2.38	5	1
1:A:357:VAL:HB	1:A:361:LEU:HD23	0.49	1.85	8	1
1:A:110:VAL:HB	1:A:302:VAL:HG22	0.49	1.84	4	1
1:A:43:LEU:O	1:A:43:LEU:HD13	0.49	2.07	9	1
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:CB	0.48	2.61	2	10
1:A:76:LEU:HD23	1:A:77:ALA:H	0.48	1.68	1	1
1:A:129:TRP:CE2	1:A:250:PHE:CZ	0.48	3.01	8	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:HB	0.48	1.85	2	1
1:A:28:GLU:CB	1:A:33:ILE:O	0.48	2.61	4	5
1:A:166:GLY:O	1:A:188:ALA:HB2	0.48	2.07	1	1
1:A:32:GLY:C	1:A:33:ILE:HD12	0.48	2.33	2	1
1:A:160:LEU:HD21	1:A:250:PHE:CZ	0.48	2.43	10	1
1:A:96:ALA:O	1:A:97:VAL:HG13	0.48	2.09	4	1
1:A:148:MET:HB3	1:A:216:ALA:HB1	0.48	1.83	4	1
1:A:190:ALA:HB1	1:A:194:PHE:CE1	0.48	2.43	6	1
1:A:145:SER:CB	1:A:224:MET:HE2	0.48	2.39	8	1
1:A:27:PHE:CE2	1:A:283:TYR:CD2	0.48	3.02	1	1
1:A:208:THR:HG23	1:A:208:THR:O	0.48	2.08	5	1
1:A:109:ALA:N	1:A:302:VAL:HG21	0.48	2.22	6	1
1:A:139:LEU:HG	1:A:146:ALA:HB2	0.48	1.85	2	1
1:A:85:PHE:CE2	1:A:89:LEU:HD22	0.48	2.44	5	1
1:A:19:GLY:CA	1:A:293:VAL:HG13	0.48	2.38	6	1
1:A:158:TRP:CD1	1:A:167:TYR:CD2	0.48	3.00	6	1
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:HB	0.48	2.08	5	5
1:A:311:LEU:O	1:A:317:ILE:HG21	0.48	2.09	2	1
1:A:314:ASP:O	1:A:318:ALA:HB3	0.48	2.09	4	1
1:A:272:ASN:O	1:A:276:ALA:HB2	0.48	2.09	1	2
1:A:311:LEU:HD11	1:A:317:ILE:CG2	0.48	2.39	9	1
1:A:114:SER:HB3	1:A:244:VAL:HG13	0.48	1.86	8	1
1:A:115:LEU:HD11	1:A:224:MET:HG2	0.48	1.85	9	1
1:A:108:ILE:O	1:A:109:ALA:CB	0.47	2.61	9	1
1:A:129:TRP:CD1	1:A:250:PHE:CD2	0.47	3.02	10	1
1:A:28:GLU:HA	1:A:33:ILE:H	0.47	1.69	1	3
1:A:208:THR:HG22	1:A:213:ALA:CB	0.47	2.37	1	2
1:A:27:PHE:CE2	1:A:283:TYR:CE1	0.47	3.02	2	1
1:A:61:PHE:CD1	1:A:61:PHE:N	0.47	2.82	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:139:LEU:HD13	1:A:145:SER:O	0.47	2.09	4	1
1:A:76:LEU:HD23	1:A:77:ALA:N	0.47	2.24	1	1
1:A:47:PHE:HZ	1:A:75:LEU:HD22	0.47	1.69	3	1
1:A:10:TRP:CB	1:A:60:ILE:HG23	0.47	2.36	6	2
1:A:106:TYR:CE1	1:A:108:ILE:HD11	0.47	2.44	9	1
1:A:28:GLU:N	1:A:33:ILE:HB	0.47	2.24	4	4
1:A:97:VAL:HG12	1:A:97:VAL:O	0.47	2.10	6	1
1:A:293:VAL:O	1:A:294:ASN:C	0.47	2.58	7	1
1:A:302:VAL:HG11	1:A:304:LEU:HD12	0.47	1.86	2	1
1:A:342:ALA:HB1	1:A:367:ARG:NH1	0.47	2.24	5	1
1:A:74:GLY:O	1:A:75:LEU:HD12	0.47	2.10	6	1
1:A:329:ILE:N	1:A:329:ILE:HD13	0.47	2.24	6	1
1:A:161:ILE:CD1	1:A:195:LEU:HD12	0.47	2.39	1	1
1:A:360:ALA:O	1:A:364:ALA:CB	0.47	2.62	8	3
1:A:97:VAL:O	1:A:97:VAL:HG23	0.47	2.10	8	2
1:A:113:LEU:HD12	1:A:113:LEU:C	0.47	2.34	5	1
1:A:113:LEU:HD12	1:A:323:ASN:CG	0.47	2.34	9	1
1:A:193:THR:CB	1:A:357:VAL:HG21	0.47	2.37	9	1
1:A:298:PRO:C	1:A:299:LEU:HD23	0.47	2.35	1	1
1:A:122:LEU:CD2	1:A:135:LEU:HD23	0.47	2.39	6	1
1:A:160:LEU:HD23	1:A:195:LEU:HG	0.47	1.87	6	1
1:A:216:ALA:O	1:A:220:GLY:N	0.47	2.47	10	3
1:A:107:PRO:HB2	1:A:261:VAL:HG21	0.47	1.86	9	1
1:A:106:TYR:CD1	1:A:108:ILE:HD11	0.47	2.45	9	1
1:A:246:VAL:HG21	1:A:323:ASN:CB	0.47	2.39	10	1
1:A:192:LEU:HD13	1:A:357:VAL:HG12	0.47	1.87	8	1
1:A:10:TRP:CD1	1:A:43:LEU:HD23	0.47	2.45	9	1
1:A:71:ALA:HB2	1:A:76:LEU:CD1	0.47	2.40	9	1
1:A:210:TYR:CD1	1:A:211:SER:N	0.46	2.83	3	4
1:A:151:LEU:CD2	1:A:203:HIS:CD2	0.46	2.99	5	1
1:A:160:LEU:HD23	1:A:195:LEU:CG	0.46	2.40	6	1
1:A:161:ILE:CG2	1:A:195:LEU:HD13	0.46	2.40	7	1
1:A:347:VAL:HG23	1:A:348:ILE:N	0.46	2.25	9	1
1:A:217:PHE:CD1	1:A:218:ASN:N	0.46	2.83	5	2
1:A:259:VAL:HG22	1:A:328:GLU:O	0.46	2.11	1	2
1:A:355:GLN:O	1:A:356:THR:HG23	0.46	2.10	3	1
1:A:161:ILE:HD11	1:A:167:TYR:CD1	0.46	2.46	5	1
1:A:139:LEU:HD13	1:A:145:SER:C	0.46	2.36	3	3
1:A:129:TRP:O	1:A:132:ILE:HG13	0.46	2.11	6	1
1:A:247:LEU:HD13	1:A:255:SER:HB2	0.46	1.82	3	1
1:A:97:VAL:HG21	1:A:107:PRO:HD3	0.46	1.86	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:275:LEU:HD23	1:A:279:PHE:CE1	0.46	2.45	5	1
1:A:129:TRP:CE3	1:A:132:ILE:CD1	0.46	2.98	6	1
1:A:7:LEU:HD23	1:A:57:PRO:HB3	0.46	1.87	1	1
1:A:217:PHE:CB	1:A:225:THR:HG23	0.46	2.41	5	1
1:A:311:LEU:HD21	1:A:317:ILE:HB	0.46	1.86	9	1
1:A:75:LEU:O	1:A:75:LEU:HD12	0.46	2.10	2	2
1:A:196:VAL:HG11	1:A:357:VAL:CG2	0.46	2.41	5	1
1:A:129:TRP:NE1	1:A:250:PHE:CZ	0.46	2.84	8	1
1:A:47:PHE:N	1:A:48:PRO:HD2	0.46	2.25	3	4
1:A:344:ARG:O	1:A:348:ILE:N	0.46	2.48	9	2
1:A:361:LEU:O	1:A:361:LEU:HD13	0.46	2.11	9	1
1:A:158:TRP:N	1:A:159:PRO:HD2	0.46	2.26	4	8
1:A:27:PHE:CE2	1:A:283:TYR:CD1	0.46	3.04	2	1
1:A:160:LEU:CD2	1:A:250:PHE:CZ	0.46	2.99	10	1
1:A:98:ARG:NE	1:A:103:LEU:HD11	0.45	2.26	4	1
1:A:302:VAL:HG21	1:A:311:LEU:CD1	0.45	2.36	8	1
1:A:77:ALA:HB1	1:A:269:ALA:HB2	0.45	1.87	1	1
1:A:30:ASP:C	1:A:31:THR:HG22	0.45	2.35	2	5
1:A:9:ILE:HD13	1:A:20:LEU:HD21	0.45	1.88	7	1
1:A:167:TYR:OH	1:A:361:LEU:HD21	0.45	2.10	10	1
1:A:17:TYR:CE2	1:A:37:VAL:CG1	0.45	3.00	4	1
1:A:151:LEU:HD23	1:A:199:ILE:HG12	0.45	1.86	4	1
1:A:9:ILE:HG23	1:A:61:PHE:HE1	0.45	1.72	10	1
1:A:61:PHE:CE2	1:A:264:ALA:CB	0.45	2.98	10	1
1:A:138:GLU:O	1:A:141:ALA:HB3	0.45	2.12	6	1
1:A:137:LYS:O	1:A:141:ALA:HB2	0.45	2.11	7	1
1:A:83:LYS:O	1:A:87:ASP:HB3	0.45	2.12	10	1
1:A:67:PHE:CD2	1:A:71:ALA:CB	0.45	3.00	3	1
1:A:311:LEU:HD11	1:A:317:ILE:HG21	0.45	1.88	9	1
1:A:59:ILE:HG23	1:A:59:ILE:O	0.45	2.11	1	1
1:A:64:HIS:CD2	1:A:261:VAL:CG2	0.45	2.99	1	1
1:A:67:PHE:CZ	1:A:265:GLY:N	0.45	2.85	4	1
1:A:217:PHE:CD1	1:A:225:THR:CG2	0.45	2.99	5	1
1:A:297:LYS:N	1:A:298:PRO:HD2	0.45	2.26	7	1
1:A:10:TRP:CG	1:A:43:LEU:HD13	0.45	2.46	8	1
1:A:341:TYR:O	1:A:345:THR:HG22	0.45	2.10	8	1
1:A:259:VAL:HG23	1:A:329:ILE:HG13	0.45	1.88	9	1
1:A:76:LEU:HD13	1:A:104:ILE:HB	0.45	1.87	6	1
1:A:129:TRP:CD1	1:A:132:ILE:CD1	0.45	3.00	7	1
1:A:304:LEU:HD22	1:A:307:TYR:HB3	0.45	1.88	7	1
1:A:64:HIS:CE1	1:A:261:VAL:CG2	0.45	3.00	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:VAL:HG23	1:A:54:GLY:HA3	0.45	1.89	9	1
1:A:202:LYS:CE	1:A:203:HIS:CD2	0.45	2.99	5	1
1:A:301:ALA:HB3	1:A:317:ILE:HG23	0.45	1.87	6	2
1:A:160:LEU:HD13	1:A:195:LEU:HD21	0.45	1.88	4	1
1:A:163:ALA:HB1	1:A:253:GLN:HB2	0.45	1.89	5	1
1:A:161:ILE:HG21	1:A:167:TYR:CD1	0.45	2.46	6	1
1:A:301:ALA:HB1	1:A:308:GLU:HG3	0.45	1.89	6	1
1:A:300:GLY:O	1:A:301:ALA:HB2	0.45	2.12	9	1
1:A:85:PHE:CD2	1:A:86:GLN:N	0.45	2.85	10	1
1:A:301:ALA:HB1	1:A:311:LEU:CD2	0.45	2.42	1	1
1:A:9:ILE:CG2	1:A:61:PHE:CE2	0.45	3.00	8	1
1:A:329:ILE:C	1:A:329:ILE:CD1	0.44	2.90	5	1
1:A:151:LEU:HD12	1:A:208:THR:HG21	0.44	1.88	9	1
1:A:302:VAL:CG2	1:A:304:LEU:HD23	0.44	2.42	1	1
1:A:116:ILE:O	1:A:225:THR:HG23	0.44	2.12	7	1
1:A:217:PHE:CE1	1:A:225:THR:CG2	0.44	2.99	8	1
1:A:161:ILE:HG22	1:A:161:ILE:O	0.44	2.11	1	2
1:A:94:TRP:CE3	1:A:95:ASP:N	0.44	2.85	7	1
1:A:148:MET:HE2	1:A:149:PHE:O	0.44	2.13	8	1
1:A:10:TRP:CD1	1:A:43:LEU:CD2	0.44	3.00	9	1
1:A:217:PHE:CD1	1:A:217:PHE:C	0.44	2.95	10	3
1:A:161:ILE:HG22	1:A:166:GLY:HA3	0.44	1.87	8	1
1:A:247:LEU:N	1:A:247:LEU:HD22	0.44	2.26	10	1
1:A:77:ALA:CB	1:A:269:ALA:HB2	0.44	2.42	1	1
1:A:20:LEU:HD22	1:A:37:VAL:HG11	0.44	1.88	5	1
1:A:10:TRP:CZ2	1:A:43:LEU:HD13	0.44	2.48	7	1
1:A:115:LEU:HD13	1:A:116:ILE:H	0.44	1.72	7	1
1:A:146:ALA:O	1:A:147:LEU:HD23	0.44	2.13	7	1
1:A:349:ASN:OD1	1:A:350:ALA:N	0.44	2.51	10	1
1:A:17:TYR:CD1	1:A:18:ASN:N	0.44	2.85	9	2
1:A:62:TRP:O	1:A:263:SER:N	0.44	2.48	6	3
1:A:280:LEU:HD23	1:A:280:LEU:O	0.44	2.13	3	1
1:A:7:LEU:HD21	1:A:276:ALA:CB	0.44	2.43	4	1
1:A:356:THR:HG23	1:A:358:ASP:H	0.44	1.72	8	1
1:A:132:ILE:CG2	1:A:133:PRO:HD3	0.44	2.43	4	1
1:A:121:LEU:HD11	1:A:221:GLU:O	0.44	2.13	5	1
1:A:346:ALA:HB1	1:A:360:ALA:HB1	0.44	1.89	5	1
1:A:333:ILE:HD12	1:A:335:GLN:HB2	0.44	1.89	6	1
1:A:160:LEU:C	1:A:160:LEU:HD13	0.44	2.38	7	1
1:A:77:ALA:HB2	1:A:268:ALA:CB	0.44	2.43	10	1
1:A:161:ILE:HG23	1:A:191:GLY:HA3	0.44	1.90	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:288:GLU:O	1:A:292:ALA:HB3	0.44	2.12	6	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:CB	0.44	2.42	7	1
1:A:112:ALA:O	1:A:113:LEU:CB	0.44	2.65	9	1
1:A:61:PHE:HD1	1:A:262:LEU:HD13	0.44	1.72	1	1
1:A:77:ALA:HB3	1:A:268:ALA:HB3	0.44	1.90	3	1
1:A:64:HIS:CE1	1:A:330:MET:CE	0.44	3.00	8	1
1:A:365:GLN:HA	1:A:368:ILE:HD12	0.43	1.90	8	1
1:A:107:PRO:CB	1:A:261:VAL:CG2	0.43	2.95	9	1
1:A:302:VAL:O	1:A:302:VAL:HG22	0.43	2.13	10	1
1:A:79:ILE:HG22	1:A:80:THR:N	0.43	2.29	3	3
1:A:23:VAL:HG12	1:A:27:PHE:HE2	0.43	1.70	5	1
1:A:43:LEU:C	1:A:43:LEU:HD12	0.43	2.38	5	1
1:A:298:PRO:C	1:A:299:LEU:HD12	0.43	2.38	2	1
1:A:303:ALA:HB3	1:A:306:SER:CB	0.43	2.41	5	1
1:A:317:ILE:HG22	1:A:321:MET:CE	0.43	2.41	5	1
1:A:27:PHE:O	1:A:33:ILE:HD12	0.43	2.13	9	1
1:A:113:LEU:C	1:A:113:LEU:CD2	0.43	2.91	10	1
1:A:211:SER:O	1:A:215:ALA:HB2	0.43	2.14	10	1
1:A:129:TRP:CG	1:A:132:ILE:HD12	0.43	2.48	7	2
1:A:339:PHE:CZ	1:A:368:ILE:CD1	0.43	3.01	7	1
1:A:116:ILE:HD11	1:A:227:ASN:HB2	0.43	1.89	3	1
1:A:129:TRP:CD1	1:A:132:ILE:HD12	0.43	2.49	7	1
1:A:16:GLY:O	1:A:20:LEU:HD23	0.43	2.13	1	1
1:A:210:TYR:CD2	1:A:211:SER:N	0.43	2.87	4	1
1:A:258:PHE:CZ	1:A:330:MET:CE	0.43	3.02	3	1
1:A:196:VAL:HG13	1:A:197:ASP:N	0.43	2.28	1	1
1:A:266:ILE:HG22	1:A:267:ASN:N	0.43	2.29	1	3
1:A:301:ALA:HB3	1:A:317:ILE:HG21	0.43	1.89	1	1
1:A:149:PHE:O	1:A:149:PHE:CD2	0.43	2.72	2	1
1:A:301:ALA:O	1:A:317:ILE:HD12	0.43	2.13	4	1
1:A:9:ILE:HG21	1:A:20:LEU:HD21	0.43	1.91	7	1
1:A:197:ASP:OD1	1:A:198:LEU:N	0.43	2.51	1	1
1:A:115:LEU:HD12	1:A:245:THR:OG1	0.43	2.14	4	1
1:A:132:ILE:N	1:A:133:PRO:HD3	0.43	2.28	4	1
1:A:195:LEU:O	1:A:199:ILE:HG22	0.43	2.14	5	1
1:A:7:LEU:HB2	1:A:35:VAL:HG12	0.43	1.91	7	1
1:A:76:LEU:HD12	1:A:267:ASN:HB3	0.43	1.91	8	1
1:A:9:ILE:HG23	1:A:61:PHE:CE1	0.43	2.49	10	1
1:A:293:VAL:HG13	1:A:294:ASN:N	0.43	2.28	1	1
1:A:61:PHE:HB3	1:A:264:ALA:HB2	0.43	1.91	4	1
1:A:158:TRP:O	1:A:162:ALA:CB	0.43	2.67	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:203:HIS:CD2	1:A:207:ASP:CB	0.43	3.02	7	1
1:A:27:PHE:CE1	1:A:283:TYR:CD2	0.42	3.06	5	1
1:A:102:LYS:C	1:A:103:LEU:HD12	0.42	2.38	2	1
1:A:62:TRP:CG	1:A:62:TRP:O	0.42	2.72	4	1
1:A:162:ALA:O	1:A:164:ASP:N	0.42	2.52	10	1
1:A:132:ILE:HG21	1:A:147:LEU:HD21	0.42	1.90	7	1
1:A:28:GLU:HB2	1:A:33:ILE:O	0.42	2.13	8	1
1:A:31:THR:O	1:A:31:THR:OG1	0.42	2.37	7	3
1:A:220:GLY:O	1:A:221:GLU:CB	0.42	2.68	4	1
1:A:11:ILE:HD11	1:A:15:LYS:HB2	0.42	1.91	8	1
1:A:158:TRP:NE1	1:A:167:TYR:CE2	0.42	2.87	5	1
1:A:350:ALA:O	1:A:355:GLN:N	0.42	2.52	6	1
1:A:9:ILE:HG21	1:A:20:LEU:CD2	0.42	2.44	7	1
1:A:266:ILE:N	1:A:266:ILE:CD1	0.42	2.83	9	1
1:A:275:LEU:CD2	1:A:279:PHE:CE1	0.42	3.03	5	1
1:A:148:MET:SD	1:A:216:ALA:HB3	0.42	2.55	7	1
1:A:195:LEU:O	1:A:199:ILE:HG23	0.42	2.14	9	1
1:A:113:LEU:HD22	1:A:114:SER:N	0.42	2.30	10	1
1:A:345:THR:O	1:A:349:ASN:CB	0.42	2.67	4	4
1:A:365:GLN:O	1:A:368:ILE:HD12	0.42	2.15	3	1
1:A:304:LEU:N	1:A:304:LEU:CD2	0.42	2.83	5	1
1:A:160:LEU:HD22	1:A:255:SER:HB3	0.42	1.89	7	1
1:A:199:ILE:HD12	1:A:200:LYS:N	0.42	2.29	7	1
1:A:79:ILE:HG22	1:A:277:LYS:CE	0.42	2.45	10	1
1:A:158:TRP:CB	1:A:159:PRO:HD3	0.42	2.45	10	1
1:A:104:ILE:N	1:A:104:ILE:CD1	0.42	2.83	4	2
1:A:19:GLY:HA3	1:A:293:VAL:HG13	0.42	1.92	6	1
1:A:146:ALA:O	1:A:147:LEU:HB3	0.42	2.15	10	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:10:TRP:CZ3	0.42	3.03	3	1
1:A:146:ALA:HB1	1:A:223:ALA:CB	0.42	2.43	6	1
1:A:61:PHE:CD1	1:A:262:LEU:HD13	0.41	2.50	1	1
1:A:77:ALA:HB2	1:A:268:ALA:CA	0.41	2.43	10	1
1:A:46:LYS:O	1:A:50:VAL:HG23	0.41	2.15	1	1
1:A:339:PHE:CD1	1:A:339:PHE:O	0.41	2.73	3	1
1:A:308:GLU:OE2	1:A:311:LEU:HD21	0.41	2.15	4	1
1:A:149:PHE:CG	1:A:226:ILE:HD13	0.41	2.48	5	1
1:A:78:GLU:HG3	1:A:104:ILE:HG22	0.41	1.92	6	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:311:LEU:CB	0.41	2.46	6	1
1:A:61:PHE:CD1	1:A:264:ALA:HB1	0.41	2.49	8	1
1:A:62:TRP:O	1:A:62:TRP:CD1	0.41	2.74	4	1
1:A:286:THR:O	1:A:290:LEU:N	0.41	2.53	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:GLU:HB3	1:A:33:ILE:O	0.41	2.14	1	3
1:A:194:PHE:C	1:A:194:PHE:CD1	0.41	2.99	3	1
1:A:84:ALA:CB	1:A:94:TRP:CZ2	0.41	3.03	6	1
1:A:11:ILE:HG22	1:A:12:ASN:N	0.41	2.31	7	1
1:A:297:LYS:N	1:A:298:PRO:CD	0.41	2.83	7	1
1:A:139:LEU:HD12	1:A:144:LYS:CB	0.41	2.46	1	1
1:A:363:ASP:OD1	1:A:364:ALA:N	0.41	2.54	9	1
1:A:270:SER:CB	1:A:271:PRO:CD	0.41	2.99	2	2
1:A:161:ILE:HD11	1:A:188:ALA:HA	0.41	1.92	6	1
1:A:332:ASN:O	1:A:333:ILE:C	0.41	2.63	1	1
1:A:129:TRP:CZ3	1:A:132:ILE:HD12	0.41	2.49	2	1
1:A:151:LEU:HD12	1:A:199:ILE:HG21	0.41	1.93	2	1
1:A:250:PHE:CE1	1:A:253:GLN:O	0.41	2.74	7	1
1:A:148:MET:CB	1:A:216:ALA:CB	0.41	2.98	9	1
1:A:290:LEU:HD23	1:A:302:VAL:CG2	0.41	2.46	2	1
1:A:64:HIS:CD2	1:A:97:VAL:CG1	0.41	3.03	4	1
1:A:270:SER:N	1:A:271:PRO:HD2	0.41	2.31	4	1
1:A:190:ALA:O	1:A:194:PHE:CD1	0.41	2.74	6	1
1:A:64:HIS:NE2	1:A:97:VAL:HG12	0.41	2.31	8	1
1:A:214:GLU:O	1:A:218:ASN:N	0.41	2.54	9	1
1:A:110:VAL:HG11	1:A:302:VAL:HG12	0.41	1.92	10	1
1:A:118:ASN:HB3	1:A:121:LEU:HD21	0.41	1.93	2	1
1:A:246:VAL:HG11	1:A:322:GLU:CD	0.41	2.41	2	1
1:A:123:PRO:HG3	1:A:223:ALA:HB2	0.41	1.93	4	1
1:A:9:ILE:HB	1:A:37:VAL:HG12	0.41	1.90	6	1
1:A:23:VAL:HG12	1:A:282:ASN:ND2	0.41	2.31	6	1
1:A:282:ASN:O	1:A:283:TYR:CD2	0.41	2.74	7	1
1:A:117:TYR:CD1	1:A:117:TYR:O	0.41	2.74	9	1
1:A:193:THR:CA	1:A:357:VAL:HG21	0.41	2.46	9	1
1:A:344:ARG:CD	1:A:345:THR:N	0.41	2.84	9	1
1:A:81:PRO:HD2	1:A:103:LEU:HD13	0.41	1.92	10	1
1:A:250:PHE:O	1:A:250:PHE:CD2	0.41	2.74	3	2
1:A:330:MET:CB	1:A:331:PRO:CD	0.41	2.99	3	1
1:A:107:PRO:C	1:A:108:ILE:CG1	0.41	2.94	9	1
1:A:150:ASN:OD1	1:A:156:PHE:CZ	0.41	2.74	10	1
1:A:164:ASP:OD1	1:A:250:PHE:CD1	0.40	2.74	1	1
1:A:23:VAL:HG23	1:A:24:GLY:N	0.40	2.32	2	1
1:A:47:PHE:CB	1:A:48:PRO:CD	0.40	2.99	2	1
1:A:60:ILE:O	1:A:67:PHE:CE1	0.40	2.74	4	1
1:A:293:VAL:O	1:A:295:LYS:N	0.40	2.54	7	1
1:A:211:SER:O	1:A:214:GLU:CG	0.40	2.69	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:217:PHE:CE1	1:A:226:ILE:O	0.40	2.74	9	1
1:A:61:PHE:CD1	1:A:61:PHE:C	0.40	2.97	1	1
1:A:149:PHE:O	1:A:149:PHE:CG	0.40	2.74	2	1
1:A:337:SER:O	1:A:340:TRP:CE3	0.40	2.74	3	1
1:A:311:LEU:HD13	1:A:317:ILE:HG12	0.40	1.91	4	1
1:A:194:PHE:CZ	1:A:250:PHE:CZ	0.40	3.09	5	1
1:A:84:ALA:O	1:A:87:ASP:OD1	0.40	2.40	8	1
1:A:67:PHE:CE1	1:A:104:ILE:O	0.40	2.74	10	1
1:A:108:ILE:HD11	1:A:284:LEU:HB3	0.40	1.94	3	1
1:A:102:LYS:O	1:A:103:LEU:HD12	0.40	2.17	8	1
1:A:293:VAL:O	1:A:297:LYS:N	0.40	2.54	8	1
1:A:348:ILE:CG2	1:A:349:ASN:N	0.40	2.84	9	1
1:A:299:LEU:N	1:A:299:LEU:CD2	0.40	2.85	1	1
1:A:184:ASP:OD2	1:A:339:PHE:CD2	0.40	2.75	3	1
1:A:67:PHE:CE2	1:A:264:ALA:C	0.40	3.00	4	1
1:A:106:TYR:CZ	1:A:264:ALA:O	0.40	2.75	5	1
1:A:156:PHE:CD1	1:A:156:PHE:N	0.40	2.90	5	1
1:A:303:ALA:C	1:A:304:LEU:HD23	0.40	2.41	5	1
1:A:110:VAL:HG22	1:A:301:ALA:CA	0.40	2.46	8	1
1:A:270:SER:N	1:A:271:PRO:CD	0.40	2.85	9	1
1:A:10:TRP:CD1	1:A:10:TRP:C	0.40	2.98	10	1
1:A:10:TRP:HE3	1:A:60:ILE:HD13	0.40	1.75	10	1
1:A:216:ALA:O	1:A:220:GLY:CA	0.40	2.69	10	1
1:A:10:TRP:CH2	1:A:38:GLU:HB3	0.40	2.52	3	1
1:A:20:LEU:HD12	1:A:297:LYS:CE	0.40	2.47	4	1
1:A:209:ASP:OD1	1:A:211:SER:N	0.40	2.55	4	1
1:A:67:PHE:CE1	1:A:263:SER:O	0.40	2.74	5	1
1:A:153:GLU:O	1:A:156:PHE:CD1	0.40	2.75	5	1
1:A:333:ILE:O	1:A:333:ILE:HG23	0.40	2.16	5	1
1:A:129:TRP:CE3	1:A:129:TRP:HA	0.40	2.51	6	1
1:A:210:TYR:O	1:A:214:GLU:CB	0.40	2.70	8	1
1:A:311:LEU:O	1:A:311:LEU:HD23	0.40	2.16	9	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	341/370 (92%)	271±4 (79±1%)	47±3 (14±1%)	23±3 (7±1%)	2	17
All	All	3410/3700 (92%)	2707 (79%)	473 (14%)	230 (7%)	2	17

All 77 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	31	THR	10
1	A	32	GLY	10
1	A	63	ALA	10
1	A	58	ASP	9
1	A	143	GLY	9
1	A	75	LEU	8
1	A	147	LEU	8
1	A	109	ALA	7
1	A	163	ALA	7
1	A	108	ILE	6
1	A	302	VAL	6
1	A	41	ASP	6
1	A	165	GLY	5
1	A	255	SER	5
1	A	299	LEU	5
1	A	221	GLU	4
1	A	333	ILE	4
1	A	150	ASN	4
1	A	97	VAL	4
1	A	74	GLY	3
1	A	127	LYS	3
1	A	167	TYR	3
1	A	220	GLY	3
1	A	283	TYR	3
1	A	155	TYR	3
1	A	224	MET	3
1	A	331	PRO	3
1	A	206	ALA	3
1	A	82	ASP	3
1	A	4	GLU	2
1	A	13	GLY	2
1	A	14	ASP	2
1	A	53	THR	2
1	A	56	GLY	2
1	A	101	GLY	2
1	A	5	GLY	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	15	LYS	2
1	A	121	LEU	2
1	A	151	LEU	2
1	A	285	LEU	2
1	A	332	ASN	2
1	A	353	GLY	2
1	A	354	ARG	2
1	A	40	PRO	2
1	A	120	ASP	2
1	A	228	GLY	2
1	A	315	PRO	2
1	A	166	GLY	2
1	A	126	PRO	2
1	A	248	PRO	2
1	A	300	GLY	2
1	A	205	ASN	2
1	A	268	ALA	2
1	A	269	ALA	2
1	A	77	ALA	1
1	A	284	LEU	1
1	A	271	PRO	1
1	A	105	ALA	1
1	A	183	VAL	1
1	A	304	LEU	1
1	A	313	LYS	1
1	A	168	ALA	1
1	A	204	MET	1
1	A	296	ASP	1
1	A	12	ASN	1
1	A	294	ASN	1
1	A	301	ALA	1
1	A	57	PRO	1
1	A	68	GLY	1
1	A	251	LYS	1
1	A	297	LYS	1
1	A	55	ASP	1
1	A	113	LEU	1
1	A	182	GLY	1
1	A	229	PRO	1
1	A	89	LEU	1
1	A	207	ASP	1

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	271/297 (91%)	207±9 (76±3%)	64±9 (24±3%)	2	27
All	All	2710/2970 (91%)	2068 (76%)	642 (24%)	2	27

All 202 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	224	MET	9
1	A	75	LEU	8
1	A	76	LEU	8
1	A	83	LYS	8
1	A	147	LEU	8
1	A	28	GLU	7
1	A	36	THR	7
1	A	202	LYS	7
1	A	290	LEU	7
1	A	328	GLU	7
1	A	330	MET	7
1	A	148	MET	7
1	A	297	LYS	7
1	A	129	TRP	7
1	A	66	ARG	6
1	A	89	LEU	6
1	A	98	ARG	6
1	A	119	LYS	6
1	A	122	LEU	6
1	A	127	LYS	6
1	A	151	LEU	6
1	A	200	LYS	6
1	A	221	GLU	6
1	A	355	GLN	6
1	A	225	THR	6
1	A	304	LEU	6
1	A	6	LYS	5
1	A	102	LYS	5
1	A	103	LEU	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	140	LYS	5
1	A	144	LYS	5
1	A	160	LEU	5
1	A	192	LEU	5
1	A	198	LEU	5
1	A	245	THR	5
1	A	262	LEU	5
1	A	361	LEU	5
1	A	367	ARG	5
1	A	195	LEU	5
1	A	203	HIS	5
1	A	321	MET	5
1	A	341	TYR	5
1	A	251	LYS	5
1	A	305	LYS	5
1	A	340	TRP	5
1	A	314	ASP	5
1	A	26	LYS	4
1	A	53	THR	4
1	A	86	GLN	4
1	A	137	LYS	4
1	A	273	LYS	4
1	A	308	GLU	4
1	A	322	GLU	4
1	A	325	GLN	4
1	A	326	LYS	4
1	A	329	ILE	4
1	A	370	LYS	4
1	A	22	GLU	4
1	A	78	GLU	4
1	A	90	TYR	4
1	A	99	TYR	4
1	A	138	GLU	4
1	A	158	TRP	4
1	A	249	THR	4
1	A	275	LEU	4
1	A	283	TYR	4
1	A	316	ARG	4
1	A	4	GLU	4
1	A	14	ASP	4
1	A	15	LYS	4
1	A	247	LEU	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	274	GLU	4
1	A	299	LEU	4
1	A	344	ARG	4
1	A	43	LEU	4
1	A	29	LYS	4
1	A	47	PHE	4
1	A	62	TRP	4
1	A	25	LYS	3
1	A	72	GLN	3
1	A	82	ASP	3
1	A	88	LYS	3
1	A	111	GLU	3
1	A	115	LEU	3
1	A	121	LEU	3
1	A	219	LYS	3
1	A	253	GLN	3
1	A	270	SER	3
1	A	280	LEU	3
1	A	295	LYS	3
1	A	33	ILE	3
1	A	49	GLN	3
1	A	18	ASN	3
1	A	41	ASP	3
1	A	130	GLU	3
1	A	189	LYS	3
1	A	277	LYS	3
1	A	284	LEU	3
1	A	313	LYS	3
1	A	356	THR	3
1	A	104	ILE	3
1	A	149	PHE	3
1	A	153	GLU	3
1	A	336	MET	3
1	A	354	ARG	3
1	A	20	LEU	3
1	A	42	LYS	3
1	A	44	GLU	3
1	A	114	SER	3
1	A	204	MET	3
1	A	222	THR	3
1	A	256	LYS	3
1	A	349	ASN	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	365	GLN	3
1	A	34	LYS	3
1	A	279	PHE	3
1	A	31	THR	2
1	A	61	PHE	2
1	A	106	TYR	2
1	A	135	LEU	2
1	A	164	ASP	2
1	A	208	THR	2
1	A	209	ASP	2
1	A	255	SER	2
1	A	317	ILE	2
1	A	359	GLU	2
1	A	100	ASN	2
1	A	145	SER	2
1	A	155	TYR	2
1	A	157	THR	2
1	A	161	ILE	2
1	A	167	TYR	2
1	A	266	ILE	2
1	A	286	THR	2
1	A	131	GLU	2
1	A	136	ASP	2
1	A	288	GLU	2
1	A	362	LYS	2
1	A	39	HIS	2
1	A	285	LEU	2
1	A	80	THR	2
1	A	108	ILE	2
1	A	128	THR	2
1	A	150	ASN	2
1	A	194	PHE	2
1	A	218	ASN	2
1	A	281	GLU	2
1	A	335	GLN	2
1	A	339	PHE	2
1	A	67	PHE	2
1	A	337	SER	2
1	A	311	LEU	2
1	A	11	ILE	2
1	A	45	GLU	2
1	A	64	HIS	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	92	PHE	1
1	A	95	ASP	1
1	A	205	ASN	1
1	A	291	GLU	1
1	A	368	ILE	1
1	A	27	PHE	1
1	A	58	ASP	1
1	A	93	THR	1
1	A	333	ILE	1
1	A	369	THR	1
1	A	17	TYR	1
1	A	38	GLU	1
1	A	65	ASP	1
1	A	272	ASN	1
1	A	282	ASN	1
1	A	310	GLU	1
1	A	345	THR	1
1	A	30	ASP	1
1	A	116	ILE	1
1	A	199	ILE	1
1	A	287	ASP	1
1	A	59	ILE	1
1	A	85	PHE	1
1	A	132	ILE	1
1	A	250	PHE	1
1	A	294	ASN	1
1	A	302	VAL	1
1	A	185	ASN	1
1	A	197	ASP	1
1	A	201	ASN	1
1	A	296	ASP	1
1	A	212	ILE	1
1	A	263	SER	1
1	A	306	SER	1
1	A	307	TYR	1
1	A	320	THR	1
1	A	120	ASP	1
1	A	139	LEU	1
1	A	214	GLU	1
1	A	227	ASN	1
1	A	332	ASN	1
1	A	348	ILE	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	46	LYS	1
1	A	73	SER	1
1	A	113	LEU	1
1	A	211	SER	1
1	A	242	TYR	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

6.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains [i](#)

There are no non-standard protein/DNA/RNA residues in this entry.

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no 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