



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 6, 2026 – 10:59 PM UTC

PDB ID : 2IEM / pdb_00002iem
Title : Solution structure of an oxidized form (Cys51-Cys198) of E. coli Methionine Sulfoxide Reductase A (MsrA)
Authors : Coudeville, N.; Antoine, M.; Bouguet-Bonnet, S.; Mutzenhardt, P.; Boschi-Muller, S.; Branlant, G.; Cung, M.T.
Deposited on : 2006-09-19

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

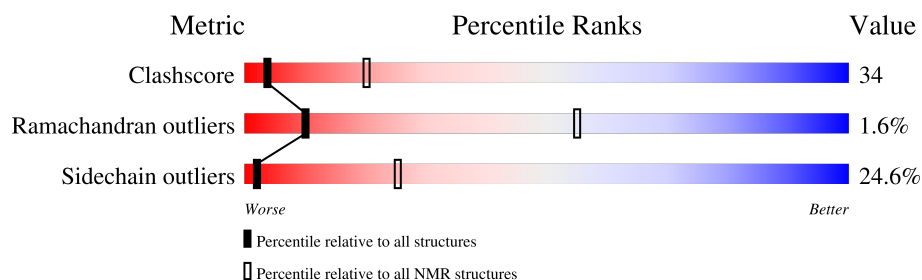
1 Overall quality at a glance

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	211	33% 40% . 23%

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 3 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *fewest violations*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:21-A:121, A:133-A:194 (163)	0.70	3

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 and 1 single-model cluster was found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3176 atoms, of which 1543 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Peptide methionine sulfoxide reductase msrA.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	211	Total	C	H	N	O	S	0
			3176	1031	1543	280	314	8	

There are 2 discrepancies between the modelled and reference sequences:

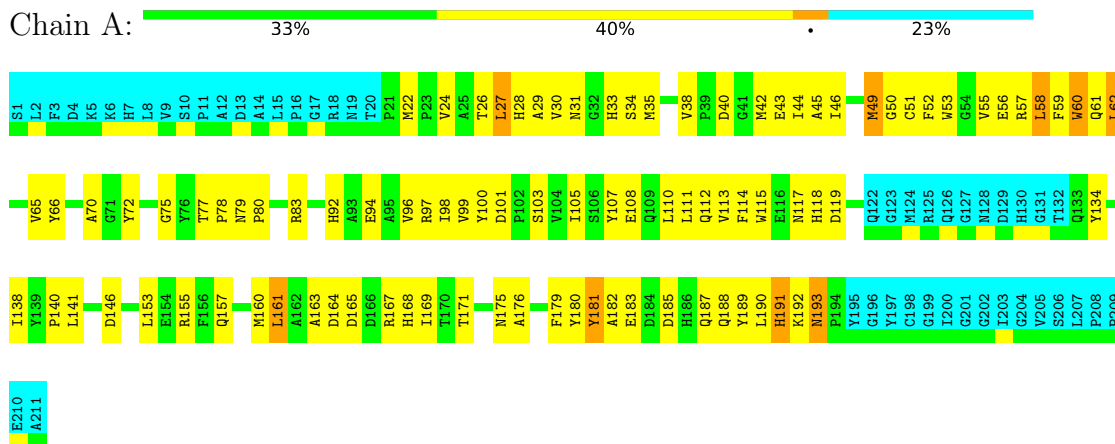
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	86	SER	CYS	engineered mutation	UNP P0A744
A	206	SER	CYS	engineered mutation	UNP P0A744

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: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA

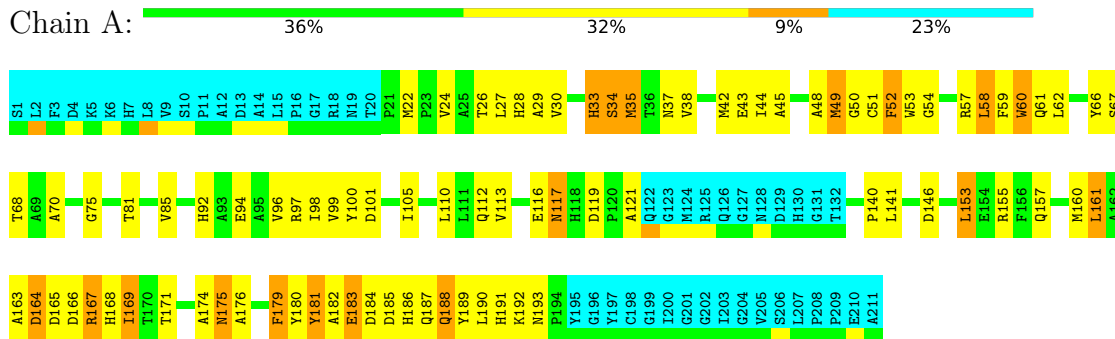


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

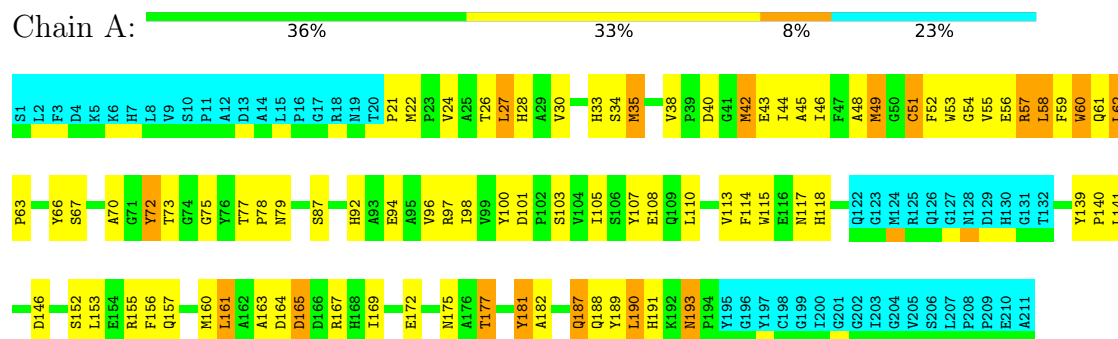
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA



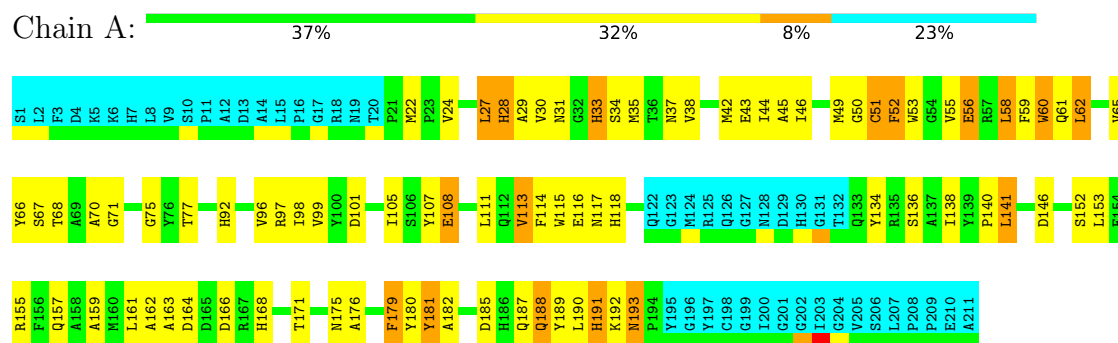
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA



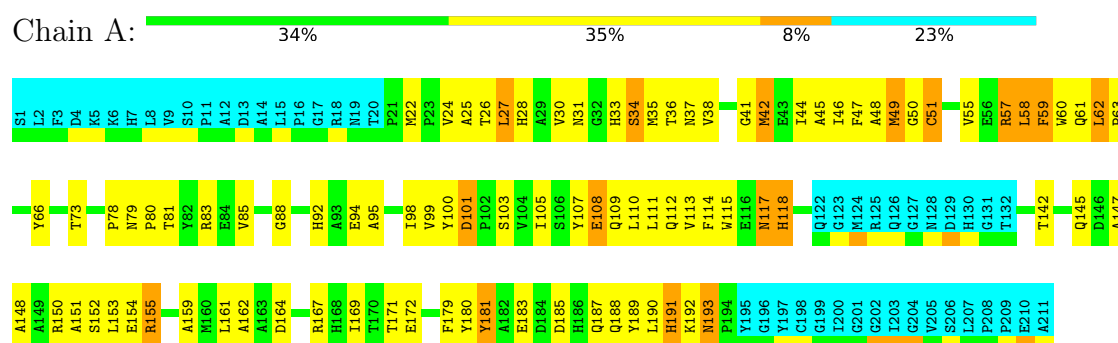
4.2.3 Score per residue for model 3 (medoid)

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA



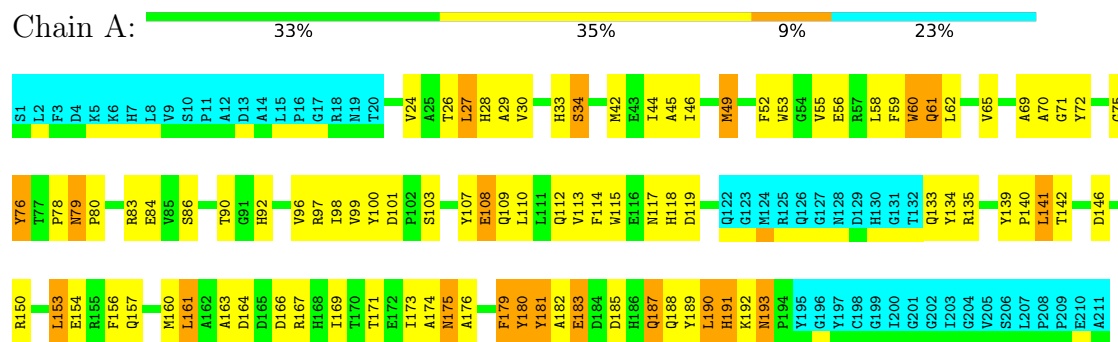
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA



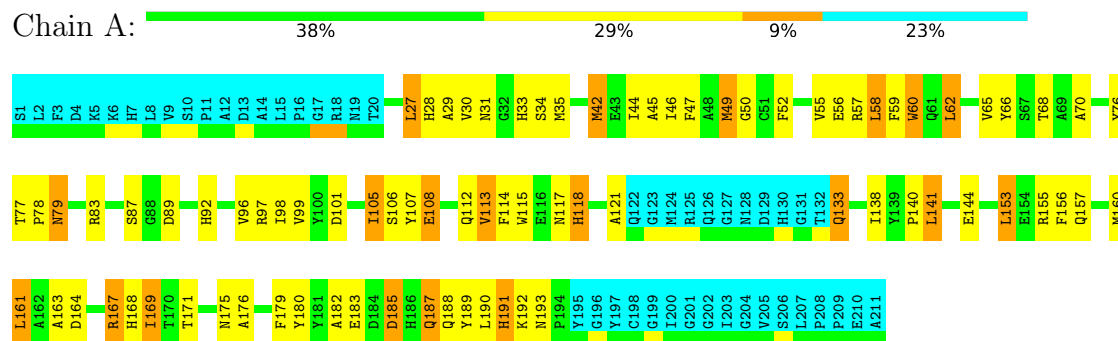
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA



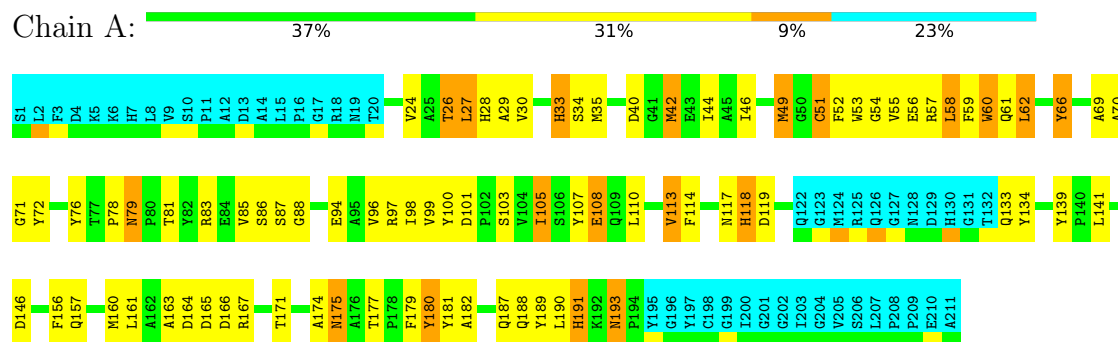
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA



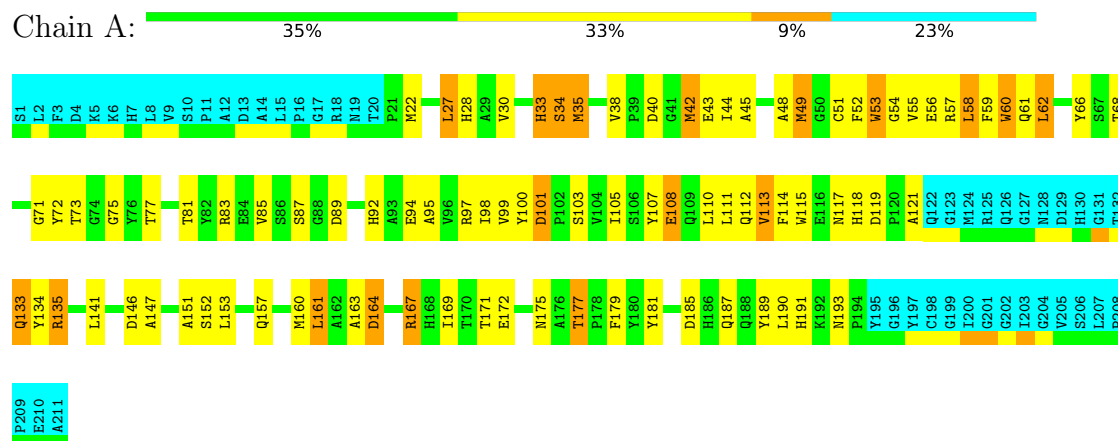
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA



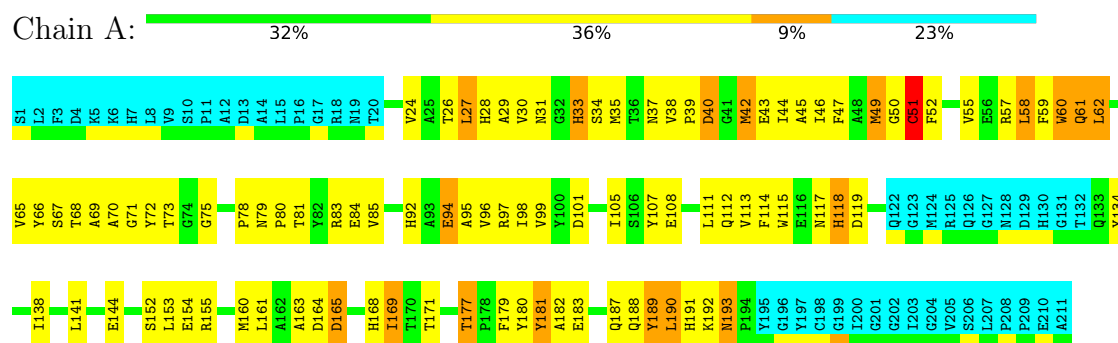
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA



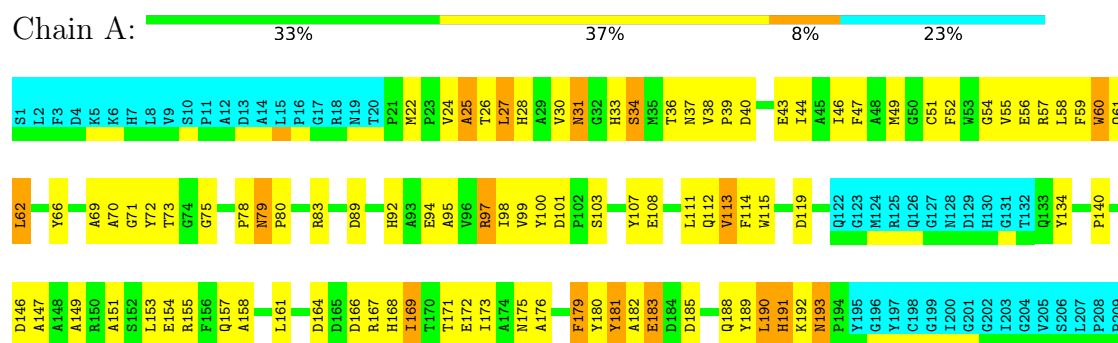
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA



4.2.10 Score per residue for model 10

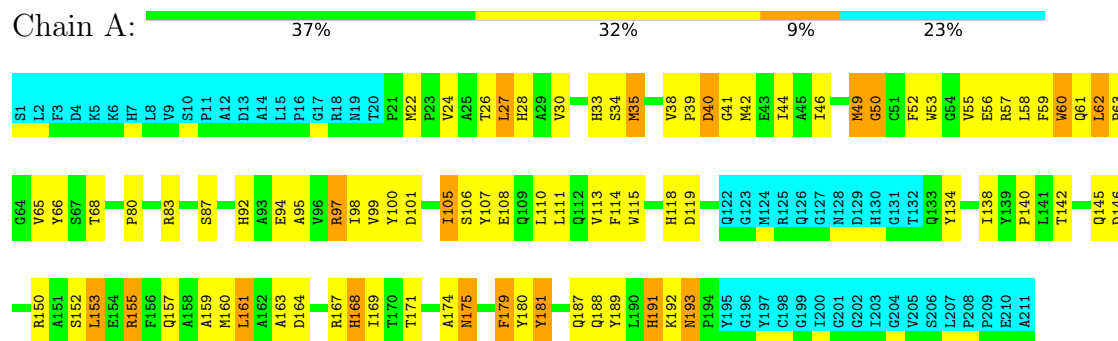
- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA



E210
A211

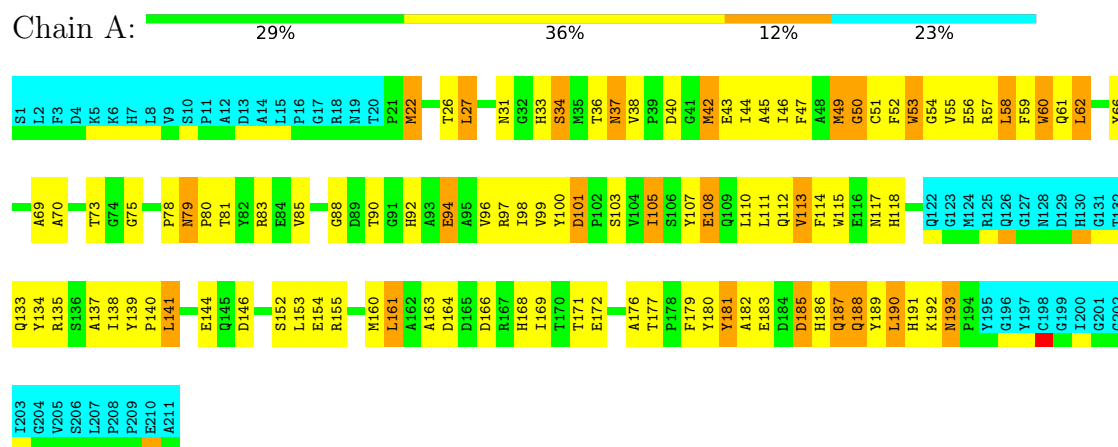
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA



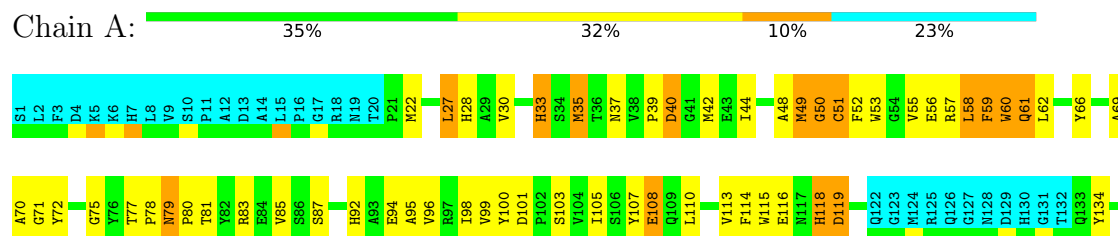
4.2.12 Score per residue for model 12

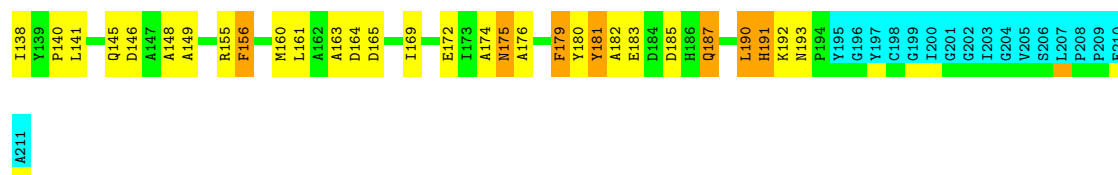
- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA

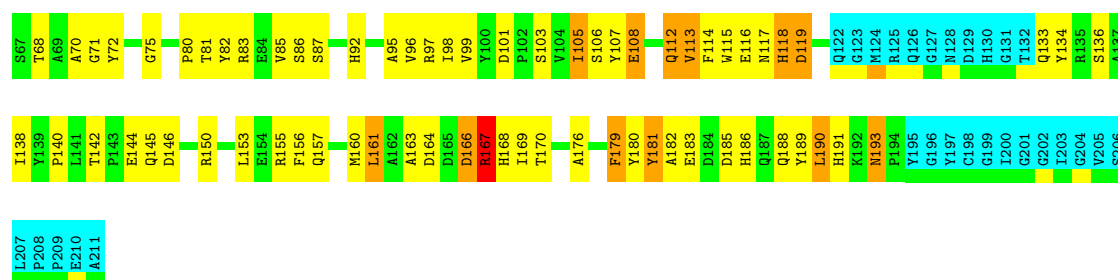


4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA

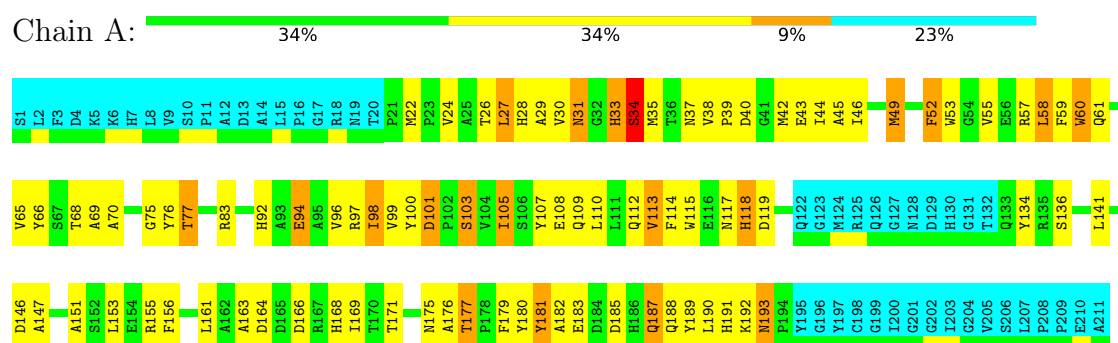






4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA



5 Refinement protocol and experimental data overview

Of the 200 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *target function*.

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

Software name	Classification	Version
DYANA	structure solution	
DYANA	refinement	

No chemical shift data was provided.

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	0.84±0.00	0±0/1326 (0.0± 0.0%)	1.17±0.01	0±0/1817 (0.0± 0.0%)
All	All	0.84	0/26520 (0.0%)	1.17	9/36340 (0.0%)

There are no bond-length outliers.

All unique angle outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	79	ASN	O-C-N	6.62	124.58	121.53	7	9

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	1284	1206	1187	85±11
All	All	25680	24120	23743	1700

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 34.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:VAL:HG11	1:A:60:TRP:CE2	1.00	1.92	2	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:LEU:HD11	1:A:113:VAL:HG11	0.99	1.31	5	3
1:A:30:VAL:HG11	1:A:60:TRP:CD2	0.95	1.96	8	13
1:A:140:PRO:O	1:A:176:ALA:HB2	0.94	1.62	14	8
1:A:38:VAL:HG21	1:A:44:ILE:HD11	0.93	1.39	1	12
1:A:153:LEU:HD11	1:A:171:THR:CG2	0.93	1.93	10	1
1:A:47:PHE:CZ	1:A:98:ILE:HD13	0.92	1.99	16	1
1:A:62:LEU:HD11	1:A:113:VAL:HG21	0.90	1.43	4	6
1:A:182:ALA:HB1	1:A:186:HIS:NE2	0.90	1.80	12	1
1:A:182:ALA:HB1	1:A:186:HIS:CE1	0.88	2.03	12	1
1:A:73:THR:HG21	1:A:179:PHE:CZ	0.87	2.03	12	3
1:A:26:THR:C	1:A:27:LEU:HD13	0.85	1.96	4	7
1:A:47:PHE:CE2	1:A:59:PHE:CZ	0.84	2.66	16	1
1:A:46:ILE:HG21	1:A:179:PHE:CE2	0.83	2.08	12	3
1:A:69:ALA:HB1	1:A:181:TYR:CE1	0.83	2.08	7	1
1:A:77:THR:HG21	1:A:84:GLU:OE2	0.82	1.73	18	1
1:A:153:LEU:HD11	1:A:171:THR:HG21	0.82	1.49	10	1
1:A:97:ARG:C	1:A:98:ILE:HD12	0.81	2.00	7	6
1:A:81:THR:O	1:A:85:VAL:HG23	0.81	1.76	4	9
1:A:53:TRP:CH2	1:A:189:TYR:CD2	0.80	2.69	12	1
1:A:55:VAL:HA	1:A:58:LEU:HD23	0.80	1.53	8	5
1:A:44:ILE:O	1:A:141:LEU:HD12	0.80	1.74	9	1
1:A:51:CYS:O	1:A:55:VAL:HG23	0.80	1.75	9	4
1:A:53:TRP:CH2	1:A:189:TYR:CD1	0.80	2.69	8	2
1:A:53:TRP:CZ3	1:A:189:TYR:CE1	0.79	2.71	3	6
1:A:29:ALA:HB3	1:A:188:GLN:OE1	0.79	1.77	18	9
1:A:69:ALA:HB1	1:A:187:GLN:OE1	0.79	1.78	14	1
1:A:70:ALA:HB3	1:A:187:GLN:OE1	0.78	1.78	7	4
1:A:141:LEU:HD22	1:A:176:ALA:CB	0.78	2.09	16	3
1:A:29:ALA:HB1	1:A:191:HIS:CE1	0.78	2.13	6	4
1:A:29:ALA:HB3	1:A:188:GLN:CD	0.78	2.03	1	2
1:A:59:PHE:CZ	1:A:98:ILE:HG23	0.77	2.13	20	1
1:A:138:ILE:HG22	1:A:140:PRO:HD3	0.77	1.54	17	11
1:A:49:MET:HE1	1:A:117:ASN:CB	0.77	2.10	2	6
1:A:160:MET:HE1	1:A:167:ARG:C	0.77	2.05	5	7
1:A:62:LEU:CD1	1:A:113:VAL:HG11	0.76	2.10	5	2
1:A:53:TRP:CZ2	1:A:189:TYR:CD2	0.76	2.74	12	2
1:A:153:LEU:C	1:A:153:LEU:HD23	0.75	2.07	14	13
1:A:52:PHE:CZ	1:A:70:ALA:HB1	0.75	2.16	9	3
1:A:160:MET:HE1	1:A:167:ARG:O	0.74	1.81	19	2
1:A:42:MET:HE3	1:A:66:TYR:CG	0.73	2.17	20	2
1:A:62:LEU:HD13	1:A:63:PRO:HD2	0.73	1.60	18	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:TRP:CZ2	1:A:189:TYR:CG	0.73	2.76	8	1
1:A:46:ILE:CG2	1:A:179:PHE:CE2	0.73	2.72	4	3
1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:HD23	0.72	1.98	17	1
1:A:59:PHE:CE2	1:A:98:ILE:HG23	0.72	2.20	20	1
1:A:29:ALA:HB3	1:A:188:GLN:HG3	0.72	1.61	3	1
1:A:44:ILE:CG1	1:A:99:VAL:HG22	0.71	2.15	9	17
1:A:70:ALA:HA	1:A:96:VAL:HG12	0.71	1.59	16	13
1:A:73:THR:HG21	1:A:179:PHE:CE2	0.71	2.19	12	2
1:A:30:VAL:HG22	1:A:191:HIS:ND1	0.71	1.99	5	3
1:A:47:PHE:CZ	1:A:59:PHE:CE1	0.71	2.78	16	1
1:A:190:LEU:HD23	1:A:193:ASN:O	0.71	1.85	16	1
1:A:52:PHE:CE1	1:A:96:VAL:CG1	0.71	2.74	9	1
1:A:105:ILE:HD11	1:A:110:LEU:CD1	0.71	2.15	18	1
1:A:100:TYR:CE2	1:A:110:LEU:CD1	0.71	2.74	11	11
1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:PHE:CE2	0.71	2.21	11	7
1:A:105:ILE:HD13	1:A:106:SER:N	0.71	2.00	11	4
1:A:114:PHE:CE2	1:A:138:ILE:HD11	0.71	2.21	9	1
1:A:53:TRP:HB3	1:A:190:LEU:HD23	0.70	1.62	18	5
1:A:53:TRP:CH2	1:A:189:TYR:CE2	0.70	2.79	12	2
1:A:30:VAL:HG22	1:A:191:HIS:CG	0.70	2.21	17	6
1:A:60:TRP:C	1:A:60:TRP:CD1	0.70	2.69	16	7
1:A:62:LEU:HD22	1:A:110:LEU:HD23	0.70	1.64	12	1
1:A:105:ILE:HD11	1:A:110:LEU:CD2	0.70	2.17	17	1
1:A:59:PHE:CE2	1:A:98:ILE:HD11	0.69	2.21	13	8
1:A:153:LEU:HD11	1:A:171:THR:HG23	0.69	1.63	20	3
1:A:59:PHE:CE2	1:A:98:ILE:CD1	0.69	2.75	6	3
1:A:22:MET:HE1	1:A:81:THR:HA	0.69	1.62	12	1
1:A:52:PHE:CZ	1:A:53:TRP:CD1	0.69	2.80	7	1
1:A:59:PHE:CZ	1:A:98:ILE:CG2	0.69	2.75	20	1
1:A:169:ILE:HG13	1:A:171:THR:HG22	0.69	1.65	11	1
1:A:47:PHE:CE2	1:A:59:PHE:CE1	0.69	2.81	16	1
1:A:49:MET:HB3	1:A:55:VAL:HG21	0.68	1.66	18	6
1:A:59:PHE:CE2	1:A:98:ILE:HD13	0.68	2.23	6	2
1:A:49:MET:HE1	1:A:117:ASN:HB3	0.68	1.64	14	8
1:A:53:TRP:CE3	1:A:189:TYR:CE1	0.67	2.83	3	2
1:A:49:MET:CB	1:A:55:VAL:HG21	0.67	2.19	11	6
1:A:107:TYR:CD1	1:A:108:GLU:N	0.67	2.63	16	16
1:A:58:LEU:HD12	1:A:58:LEU:O	0.67	1.88	12	4
1:A:147:ALA:O	1:A:151:ALA:HB2	0.67	1.90	18	7
1:A:98:ILE:HD12	1:A:98:ILE:N	0.66	2.06	16	5
1:A:100:TYR:CD1	1:A:105:ILE:HG23	0.66	2.26	4	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:97:ARG:NE	1:A:179:PHE:CD2	0.66	2.64	7	1
1:A:53:TRP:CH2	1:A:189:TYR:CE1	0.65	2.84	8	4
1:A:182:ALA:HB1	1:A:186:HIS:HE2	0.65	1.51	12	1
1:A:42:MET:HE2	1:A:66:TYR:HB2	0.65	1.69	16	1
1:A:24:VAL:HG21	1:A:181:TYR:HB3	0.65	1.68	1	10
1:A:53:TRP:CE3	1:A:189:TYR:CD1	0.65	2.85	3	5
1:A:53:TRP:CD2	1:A:189:TYR:CD1	0.65	2.85	3	3
1:A:182:ALA:CB	1:A:186:HIS:CE1	0.65	2.79	12	1
1:A:179:PHE:C	1:A:179:PHE:CD1	0.65	2.75	5	9
1:A:142:THR:HG23	1:A:145:GLN:HB2	0.65	1.68	17	1
1:A:60:TRP:CZ2	1:A:61:GLN:NE2	0.65	2.64	9	2
1:A:115:TRP:CZ2	1:A:152:SER:CB	0.64	2.80	12	6
1:A:189:TYR:CE1	1:A:193:ASN:ND2	0.64	2.65	18	1
1:A:27:LEU:HD13	1:A:27:LEU:N	0.64	2.05	4	2
1:A:52:PHE:CD1	1:A:53:TRP:N	0.64	2.66	11	2
1:A:44:ILE:HG12	1:A:99:VAL:HG22	0.64	1.70	3	16
1:A:60:TRP:HA	1:A:65:VAL:HG11	0.64	1.70	6	2
1:A:73:THR:CB	1:A:179:PHE:CE1	0.64	2.81	4	2
1:A:52:PHE:CE1	1:A:96:VAL:HG13	0.64	2.26	9	1
1:A:60:TRP:CE3	1:A:60:TRP:C	0.63	2.76	10	13
1:A:58:LEU:HD12	1:A:58:LEU:C	0.63	2.18	12	2
1:A:71:GLY:HA2	1:A:182:ALA:HB2	0.63	1.70	16	4
1:A:53:TRP:CH2	1:A:189:TYR:CZ	0.63	2.87	19	2
1:A:160:MET:HE1	1:A:168:HIS:HA	0.63	1.69	17	2
1:A:82:TYR:CE1	1:A:186:HIS:CE1	0.63	2.87	19	1
1:A:49:MET:HB2	1:A:55:VAL:HG21	0.63	1.68	11	4
1:A:141:LEU:HD22	1:A:176:ALA:HB3	0.63	1.71	3	3
1:A:68:THR:HG23	1:A:98:ILE:HG13	0.63	1.70	16	1
1:A:35:MET:SD	1:A:69:ALA:HB2	0.63	2.34	13	1
1:A:59:PHE:O	1:A:65:VAL:HG21	0.63	1.94	17	8
1:A:161:LEU:HD23	1:A:168:HIS:NE2	0.63	2.09	12	1
1:A:52:PHE:CZ	1:A:96:VAL:CG1	0.62	2.82	9	1
1:A:30:VAL:HG23	1:A:188:GLN:HG2	0.62	1.72	7	1
1:A:115:TRP:HZ3	1:A:171:THR:HG21	0.62	1.54	17	1
1:A:160:MET:HE3	1:A:165:ASP:O	0.62	1.95	1	5
1:A:30:VAL:HG22	1:A:191:HIS:CD2	0.62	2.30	4	1
1:A:29:ALA:HB2	1:A:188:GLN:OE1	0.62	1.95	15	1
1:A:26:THR:HG22	1:A:27:LEU:HD13	0.62	1.71	9	7
1:A:105:ILE:C	1:A:105:ILE:HD13	0.62	2.19	18	1
1:A:115:TRP:CZ3	1:A:171:THR:HG21	0.62	2.30	17	1
1:A:60:TRP:CZ2	1:A:61:GLN:OE1	0.61	2.54	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:73:THR:OG1	1:A:179:PHE:CE1	0.61	2.54	4	1
1:A:107:TYR:CD1	1:A:107:TYR:C	0.61	2.79	19	5
1:A:187:GLN:C	1:A:188:GLN:HG2	0.61	2.21	18	3
1:A:38:VAL:HG22	1:A:99:VAL:HG11	0.61	1.72	12	2
1:A:49:MET:HB3	1:A:55:VAL:HG11	0.61	1.73	5	1
1:A:118:HIS:CD2	1:A:118:HIS:C	0.61	2.78	7	4
1:A:24:VAL:HG11	1:A:181:TYR:CE1	0.61	2.30	16	1
1:A:142:THR:HG23	1:A:145:GLN:CB	0.61	2.25	17	1
1:A:49:MET:SD	1:A:114:PHE:CE2	0.60	2.94	6	2
1:A:26:THR:HG22	1:A:27:LEU:CD1	0.60	2.26	12	6
1:A:58:LEU:HD22	1:A:117:ASN:CG	0.60	2.21	4	3
1:A:73:THR:CG2	1:A:179:PHE:CZ	0.60	2.84	12	2
1:A:189:TYR:C	1:A:189:TYR:CD1	0.60	2.80	9	4
1:A:189:TYR:CE2	1:A:193:ASN:OD1	0.60	2.54	12	1
1:A:118:HIS:CE1	1:A:119:ASP:O	0.60	2.55	8	8
1:A:153:LEU:HD23	1:A:154:GLU:N	0.60	2.11	5	2
1:A:59:PHE:CE2	1:A:65:VAL:HG22	0.60	2.32	20	1
1:A:33:HIS:CG	1:A:34:SER:N	0.60	2.70	16	10
1:A:49:MET:SD	1:A:114:PHE:CZ	0.60	2.95	20	1
1:A:140:PRO:C	1:A:141:LEU:HD22	0.59	2.22	1	2
1:A:62:LEU:HD11	1:A:113:VAL:CG1	0.59	2.21	5	1
1:A:57:ARG:HD3	1:A:190:LEU:HD13	0.59	1.72	16	1
1:A:179:PHE:CZ	1:A:181:TYR:CE1	0.59	2.90	17	1
1:A:42:MET:HE2	1:A:100:TYR:C	0.59	2.22	14	1
1:A:33:HIS:CD2	1:A:34:SER:O	0.59	2.56	4	4
1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CD2	0.59	2.66	17	1
1:A:28:HIS:CE1	1:A:188:GLN:OE1	0.58	2.55	16	2
1:A:59:PHE:CZ	1:A:98:ILE:HD13	0.58	2.32	6	2
1:A:42:MET:HE3	1:A:66:TYR:CD1	0.58	2.32	20	2
1:A:134:TYR:CD1	1:A:134:TYR:O	0.58	2.57	5	12
1:A:62:LEU:HD21	1:A:113:VAL:HG21	0.58	1.75	6	1
1:A:73:THR:HG23	1:A:95:ALA:HB3	0.58	1.74	10	1
1:A:28:HIS:CE1	1:A:188:GLN:CD	0.58	2.81	16	2
1:A:52:PHE:CD1	1:A:94:GLU:CG	0.58	2.87	9	1
1:A:22:MET:HE1	1:A:182:ALA:O	0.58	1.97	15	1
1:A:53:TRP:CZ3	1:A:189:TYR:CD1	0.58	2.92	19	2
1:A:105:ILE:HD11	1:A:109:GLN:CG	0.58	2.29	16	1
1:A:49:MET:HE1	1:A:117:ASN:HB2	0.58	1.74	12	4
1:A:169:ILE:HD12	1:A:171:THR:CG2	0.58	2.29	5	1
1:A:49:MET:HB2	1:A:55:VAL:HG11	0.57	1.75	17	2
1:A:52:PHE:CZ	1:A:96:VAL:HG12	0.57	2.34	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:72:TYR:N	1:A:72:TYR:CD1	0.57	2.73	2	2
1:A:44:ILE:HG13	1:A:99:VAL:HG22	0.57	1.76	9	5
1:A:42:MET:HE1	1:A:66:TYR:CD1	0.57	2.34	19	5
1:A:30:VAL:HG11	1:A:60:TRP:CE3	0.57	2.34	8	3
1:A:49:MET:SD	1:A:114:PHE:CD2	0.57	2.97	6	1
1:A:168:HIS:CE1	1:A:169:ILE:O	0.57	2.57	11	1
1:A:105:ILE:CD1	1:A:109:GLN:CD	0.57	2.78	16	1
1:A:53:TRP:CZ2	1:A:189:TYR:CD1	0.57	2.93	18	2
1:A:24:VAL:HG21	1:A:181:TYR:CB	0.57	2.29	20	7
1:A:24:VAL:HG21	1:A:181:TYR:CG	0.57	2.35	16	1
1:A:42:MET:HE3	1:A:100:TYR:C	0.56	2.25	16	1
1:A:51:CYS:CB	1:A:55:VAL:HG23	0.56	2.31	10	2
1:A:42:MET:HE3	1:A:101:ASP:OD2	0.56	2.00	14	1
1:A:47:PHE:CZ	1:A:98:ILE:CD1	0.56	2.83	16	1
1:A:58:LEU:O	1:A:62:LEU:HD23	0.56	2.01	2	2
1:A:111:LEU:O	1:A:115:TRP:CD1	0.56	2.58	10	3
1:A:52:PHE:CE2	1:A:70:ALA:HB1	0.56	2.36	9	2
1:A:169:ILE:HD12	1:A:171:THR:HG22	0.56	1.75	5	1
1:A:97:ARG:CZ	1:A:179:PHE:CD2	0.56	2.88	7	1
1:A:30:VAL:CG1	1:A:60:TRP:CD2	0.56	2.83	8	3
1:A:22:MET:CE	1:A:81:THR:HG23	0.56	2.30	12	1
1:A:62:LEU:HD23	1:A:65:VAL:HG23	0.56	1.77	3	2
1:A:58:LEU:C	1:A:58:LEU:HD12	0.56	2.25	7	1
1:A:60:TRP:CD2	1:A:60:TRP:C	0.56	2.84	1	12
1:A:72:TYR:CZ	1:A:182:ALA:HB1	0.56	2.36	13	2
1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CD1	0.55	2.74	1	10
1:A:100:TYR:CD2	1:A:110:LEU:HD11	0.55	2.36	12	6
1:A:52:PHE:HZ	1:A:70:ALA:HB1	0.55	1.61	9	1
1:A:97:ARG:NE	1:A:179:PHE:CG	0.55	2.75	7	1
1:A:59:PHE:CD2	1:A:65:VAL:CG2	0.55	2.90	20	1
1:A:183:GLU:CB	1:A:186:HIS:CD2	0.55	2.89	15	2
1:A:80:PRO:HG3	1:A:92:HIS:CD2	0.55	2.36	12	8
1:A:42:MET:HE3	1:A:101:ASP:CG	0.55	2.26	14	1
1:A:59:PHE:CD1	1:A:98:ILE:HG21	0.55	2.37	19	1
1:A:153:LEU:C	1:A:153:LEU:CD2	0.55	2.79	6	12
1:A:153:LEU:CD1	1:A:171:THR:HG23	0.55	2.32	5	2
1:A:179:PHE:CD1	1:A:179:PHE:O	0.55	2.60	18	3
1:A:111:LEU:O	1:A:115:TRP:CD2	0.55	2.60	11	4
1:A:153:LEU:HD23	1:A:153:LEU:O	0.55	2.02	15	7
1:A:58:LEU:CD2	1:A:117:ASN:ND2	0.55	2.69	6	2
1:A:59:PHE:HD1	1:A:65:VAL:HG21	0.55	1.62	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:160:MET:HE3	1:A:165:ASP:HB3	0.55	1.79	9	1
1:A:191:HIS:CD2	1:A:192:LYS:N	0.55	2.75	16	3
1:A:30:VAL:HG21	1:A:60:TRP:CE2	0.55	2.37	13	2
1:A:72:TYR:CZ	1:A:182:ALA:CB	0.55	2.90	13	2
1:A:47:PHE:CD2	1:A:114:PHE:CE2	0.54	2.95	6	1
1:A:57:ARG:HA	1:A:60:TRP:CE3	0.54	2.37	16	4
1:A:42:MET:SD	1:A:66:TYR:CG	0.54	3.00	2	5
1:A:30:VAL:HG11	1:A:60:TRP:CG	0.54	2.37	9	3
1:A:141:LEU:CD1	1:A:176:ALA:HB3	0.54	2.32	20	1
1:A:47:PHE:CD2	1:A:59:PHE:CZ	0.54	2.96	4	1
1:A:62:LEU:CD1	1:A:113:VAL:HG21	0.54	2.28	4	1
1:A:97:ARG:CB	1:A:179:PHE:CZ	0.54	2.89	6	2
1:A:121:ALA:HB2	1:A:169:ILE:HG13	0.54	1.78	8	1
1:A:118:HIS:CE1	1:A:119:ASP:OD1	0.54	2.61	15	1
1:A:105:ILE:HD11	1:A:110:LEU:HG	0.54	1.80	17	1
1:A:76:TYR:C	1:A:76:TYR:CD1	0.54	2.85	5	1
1:A:115:TRP:CZ2	1:A:153:LEU:HD21	0.54	2.37	17	1
1:A:139:TYR:CD1	1:A:139:TYR:N	0.54	2.75	18	1
1:A:57:ARG:O	1:A:61:GLN:CG	0.54	2.55	9	8
1:A:59:PHE:CZ	1:A:114:PHE:CZ	0.54	2.96	10	1
1:A:111:LEU:HD23	1:A:112:GLN:N	0.54	2.17	17	1
1:A:121:ALA:HB1	1:A:168:HIS:O	0.53	2.04	1	1
1:A:160:MET:HE1	1:A:168:HIS:N	0.53	2.18	15	3
1:A:57:ARG:CZ	1:A:61:GLN:CD	0.53	2.80	10	1
1:A:22:MET:HE2	1:A:183:GLU:OE1	0.53	2.02	12	1
1:A:42:MET:CE	1:A:66:TYR:CG	0.53	2.91	20	1
1:A:30:VAL:CG1	1:A:60:TRP:CE2	0.53	2.83	7	6
1:A:60:TRP:C	1:A:60:TRP:CD2	0.53	2.85	2	1
1:A:42:MET:HE1	1:A:66:TYR:CG	0.53	2.39	19	2
1:A:30:VAL:CG2	1:A:191:HIS:CD2	0.53	2.91	4	1
1:A:60:TRP:CG	1:A:61:GLN:N	0.53	2.75	10	13
1:A:30:VAL:HG11	1:A:60:TRP:CZ2	0.53	2.38	7	4
1:A:141:LEU:CD2	1:A:176:ALA:HB3	0.53	2.33	3	2
1:A:153:LEU:HD23	1:A:153:LEU:C	0.53	2.27	15	1
1:A:82:TYR:CD1	1:A:186:HIS:NE2	0.53	2.77	19	1
1:A:183:GLU:HB3	1:A:186:HIS:CD2	0.53	2.38	15	6
1:A:160:MET:HE2	1:A:167:ARG:O	0.53	2.03	7	1
1:A:113:VAL:HG22	1:A:117:ASN:HD21	0.53	1.63	12	1
1:A:27:LEU:HD22	1:A:27:LEU:N	0.53	2.19	20	11
1:A:46:ILE:HG22	1:A:139:TYR:CD2	0.53	2.38	7	3
1:A:100:TYR:CE2	1:A:110:LEU:HD11	0.53	2.39	11	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:72:TYR:CE2	1:A:182:ALA:HA	0.53	2.39	13	2
1:A:141:LEU:HD12	1:A:176:ALA:HB3	0.53	1.81	20	1
1:A:28:HIS:CD2	1:A:68:THR:O	0.53	2.61	16	6
1:A:98:ILE:N	1:A:98:ILE:CD1	0.53	2.71	16	3
1:A:105:ILE:CD1	1:A:106:SER:O	0.53	2.57	19	2
1:A:73:THR:CG2	1:A:179:PHE:CE2	0.53	2.91	12	1
1:A:69:ALA:HB3	1:A:97:ARG:HB3	0.53	1.80	20	1
1:A:187:GLN:O	1:A:188:GLN:HG2	0.52	2.04	3	3
1:A:27:LEU:CB	1:A:33:HIS:C	0.52	2.82	3	3
1:A:42:MET:HE3	1:A:66:TYR:CD2	0.52	2.38	20	2
1:A:72:TYR:CZ	1:A:182:ALA:HA	0.52	2.39	13	2
1:A:115:TRP:CZ2	1:A:138:ILE:HD11	0.52	2.40	17	2
1:A:153:LEU:O	1:A:157:GLN:CB	0.52	2.57	17	1
1:A:52:PHE:CD1	1:A:94:GLU:HG3	0.52	2.39	9	1
1:A:105:ILE:HD11	1:A:110:LEU:CG	0.52	2.34	17	1
1:A:187:GLN:C	1:A:188:GLN:CG	0.52	2.82	12	3
1:A:97:ARG:HB2	1:A:179:PHE:CZ	0.52	2.40	6	5
1:A:59:PHE:CD2	1:A:98:ILE:CD1	0.52	2.92	9	2
1:A:59:PHE:CD2	1:A:98:ILE:HD11	0.52	2.40	9	1
1:A:154:GLU:O	1:A:158:ALA:CB	0.52	2.57	10	1
1:A:28:HIS:CE1	1:A:188:GLN:HG2	0.52	2.40	17	9
1:A:69:ALA:HB3	1:A:97:ARG:HG2	0.52	1.82	5	1
1:A:111:LEU:O	1:A:115:TRP:CE2	0.52	2.63	12	1
1:A:115:TRP:CZ2	1:A:152:SER:HB2	0.52	2.40	3	6
1:A:29:ALA:CB	1:A:188:GLN:CD	0.52	2.82	1	1
1:A:53:TRP:O	1:A:57:ARG:CB	0.52	2.58	20	1
1:A:33:HIS:CD2	1:A:34:SER:N	0.52	2.78	18	2
1:A:30:VAL:CG2	1:A:191:HIS:CG	0.52	2.93	17	1
1:A:45:ALA:N	1:A:98:ILE:O	0.51	2.43	20	15
1:A:100:TYR:C	1:A:100:TYR:CD1	0.51	2.88	8	5
1:A:68:THR:HG22	1:A:98:ILE:HG23	0.51	1.81	9	1
1:A:60:TRP:CD2	1:A:61:GLN:N	0.51	2.78	11	12
1:A:62:LEU:HD23	1:A:63:PRO:HD2	0.51	1.81	4	2
1:A:105:ILE:HD11	1:A:110:LEU:HD21	0.51	1.82	17	1
1:A:180:TYR:O	1:A:181:TYR:C	0.51	2.54	11	11
1:A:48:ALA:HB1	1:A:94:GLU:O	0.51	2.06	15	5
1:A:193:ASN:ND2	1:A:193:ASN:N	0.51	2.58	12	4
1:A:157:GLN:CD	1:A:169:ILE:HG21	0.51	2.31	10	1
1:A:28:HIS:NE2	1:A:188:GLN:NE2	0.51	2.59	11	4
1:A:65:VAL:HG13	1:A:98:ILE:HG23	0.51	1.83	9	1
1:A:59:PHE:CD2	1:A:98:ILE:HD13	0.51	2.41	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:ALA:CB	1:A:188:GLN:OE1	0.51	2.59	17	11
1:A:69:ALA:CB	1:A:181:TYR:CE1	0.51	2.90	7	1
1:A:168:HIS:CD2	1:A:168:HIS:O	0.51	2.64	10	1
1:A:79:ASN:N	1:A:80:PRO:HD3	0.51	2.21	12	2
1:A:105:ILE:HD11	1:A:110:LEU:HD11	0.51	1.81	18	1
1:A:35:MET:HE2	1:A:181:TYR:HE1	0.50	1.65	2	2
1:A:69:ALA:CB	1:A:187:GLN:OE1	0.50	2.56	14	1
1:A:163:ALA:O	1:A:164:ASP:CB	0.50	2.60	9	14
1:A:49:MET:SD	1:A:114:PHE:CE1	0.50	3.04	9	1
1:A:38:VAL:HG13	1:A:42:MET:HB3	0.50	1.83	16	3
1:A:59:PHE:CE1	1:A:98:ILE:HG21	0.50	2.40	19	1
1:A:81:THR:O	1:A:85:VAL:CG2	0.50	2.60	1	2
1:A:80:PRO:CG	1:A:92:HIS:CD2	0.50	2.93	9	2
1:A:152:SER:O	1:A:156:PHE:CB	0.50	2.60	17	1
1:A:187:GLN:O	1:A:188:GLN:C	0.50	2.54	3	5
1:A:114:PHE:CE2	1:A:138:ILE:CD1	0.50	2.94	9	1
1:A:72:TYR:CE1	1:A:182:ALA:CB	0.50	2.94	13	2
1:A:45:ALA:HB1	1:A:47:PHE:CE2	0.50	2.41	15	1
1:A:59:PHE:O	1:A:65:VAL:CG2	0.50	2.60	5	4
1:A:111:LEU:HB3	1:A:115:TRP:CZ2	0.50	2.42	3	5
1:A:96:VAL:HG23	1:A:98:ILE:HD11	0.50	1.82	7	1
1:A:47:PHE:CG	1:A:114:PHE:CZ	0.50	2.99	10	1
1:A:170:THR:HG22	1:A:170:THR:O	0.50	2.06	19	1
1:A:48:ALA:CB	1:A:94:GLU:O	0.50	2.60	8	4
1:A:160:MET:HG3	1:A:161:LEU:N	0.50	2.21	19	11
1:A:97:ARG:CZ	1:A:179:PHE:CG	0.50	2.95	7	1
1:A:53:TRP:CH2	1:A:189:TYR:CG	0.50	2.99	8	1
1:A:188:GLN:O	1:A:188:GLN:CG	0.50	2.60	14	2
1:A:73:THR:CB	1:A:179:PHE:CZ	0.50	2.95	4	1
1:A:147:ALA:O	1:A:151:ALA:CB	0.50	2.59	18	5
1:A:56:GLU:O	1:A:60:TRP:CE3	0.50	2.65	15	2
1:A:57:ARG:NH2	1:A:61:GLN:NE2	0.50	2.60	20	1
1:A:115:TRP:HB3	1:A:156:PHE:CZ	0.49	2.42	5	1
1:A:118:HIS:CG	1:A:119:ASP:N	0.49	2.79	14	6
1:A:59:PHE:CD2	1:A:98:ILE:HG12	0.49	2.42	19	3
1:A:52:PHE:CG	1:A:94:GLU:OE1	0.49	2.65	11	1
1:A:60:TRP:CE3	1:A:60:TRP:O	0.49	2.66	20	8
1:A:60:TRP:CE2	1:A:61:GLN:HG2	0.49	2.43	9	11
1:A:97:ARG:CZ	1:A:99:VAL:HG21	0.49	2.38	6	1
1:A:54:GLY:HA2	1:A:190:LEU:HD23	0.49	1.84	7	1
1:A:71:GLY:N	1:A:97:ARG:NH2	0.49	2.60	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:72:TYR:CE1	1:A:85:VAL:HG11	0.49	2.42	9	2
1:A:35:MET:HE1	1:A:187:GLN:NE2	0.49	2.23	8	1
1:A:59:PHE:CE2	1:A:98:ILE:HG12	0.49	2.42	20	1
1:A:73:THR:OG1	1:A:177:THR:CG2	0.49	2.60	8	2
1:A:153:LEU:HD13	1:A:173:ILE:HD11	0.49	1.84	14	2
1:A:97:ARG:HG3	1:A:179:PHE:CE1	0.49	2.43	6	1
1:A:69:ALA:O	1:A:96:VAL:HG13	0.49	2.07	14	1
1:A:51:CYS:HB3	1:A:55:VAL:HG23	0.49	1.83	2	3
1:A:56:GLU:CD	1:A:70:ALA:HB2	0.49	2.32	2	1
1:A:56:GLU:OE1	1:A:70:ALA:HB2	0.49	2.07	2	1
1:A:97:ARG:HD2	1:A:179:PHE:CD1	0.49	2.42	7	1
1:A:52:PHE:CG	1:A:53:TRP:N	0.49	2.81	12	2
1:A:55:VAL:HG22	1:A:117:ASN:OD1	0.49	2.07	16	1
1:A:105:ILE:HD11	1:A:109:GLN:HG2	0.49	1.84	16	1
1:A:115:TRP:CH2	1:A:171:THR:HG21	0.49	2.42	5	1
1:A:66:TYR:N	1:A:99:VAL:O	0.49	2.44	20	8
1:A:42:MET:SD	1:A:66:TYR:CD1	0.49	3.06	2	2
1:A:52:PHE:O	1:A:56:GLU:CB	0.49	2.61	16	5
1:A:155:ARG:O	1:A:159:ALA:CB	0.49	2.61	4	1
1:A:100:TYR:CE2	1:A:110:LEU:HD13	0.48	2.41	4	2
1:A:55:VAL:HG23	1:A:56:GLU:N	0.48	2.23	5	1
1:A:107:TYR:C	1:A:107:TYR:CD1	0.48	2.91	13	3
1:A:191:HIS:N	1:A:191:HIS:CD2	0.48	2.81	11	1
1:A:72:TYR:CE1	1:A:182:ALA:HB1	0.48	2.43	13	1
1:A:42:MET:HE1	1:A:66:TYR:HB2	0.48	1.85	14	1
1:A:72:TYR:C	1:A:73:THR:HG23	0.48	2.33	15	1
1:A:60:TRP:CH2	1:A:191:HIS:CB	0.48	2.95	16	1
1:A:54:GLY:O	1:A:58:LEU:CB	0.48	2.61	1	2
1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:PHE:CZ	0.48	2.43	17	2
1:A:75:GLY:HA3	1:A:92:HIS:CD2	0.48	2.44	15	7
1:A:97:ARG:HD3	1:A:99:VAL:HG23	0.48	1.84	6	1
1:A:111:LEU:CB	1:A:115:TRP:CZ2	0.48	2.95	18	1
1:A:157:GLN:O	1:A:160:MET:CG	0.48	2.61	17	11
1:A:58:LEU:CD2	1:A:117:ASN:CG	0.48	2.86	3	2
1:A:38:VAL:HG13	1:A:39:PRO:HD2	0.48	1.85	18	1
1:A:53:TRP:CB	1:A:190:LEU:HD23	0.48	2.38	19	1
1:A:75:GLY:HA3	1:A:92:HIS:CG	0.48	2.43	12	13
1:A:52:PHE:CE1	1:A:70:ALA:HB1	0.48	2.43	10	1
1:A:169:ILE:CG1	1:A:171:THR:HG22	0.48	2.37	11	1
1:A:107:TYR:CE1	1:A:148:ALA:CB	0.48	2.96	15	2
1:A:28:HIS:NE2	1:A:188:GLN:CD	0.48	2.71	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:LEU:HD22	1:A:117:ASN:HD22	0.48	1.68	8	1
1:A:161:LEU:HD22	1:A:165:ASP:O	0.48	2.09	16	1
1:A:51:CYS:O	1:A:55:VAL:CG2	0.48	2.57	9	1
1:A:105:ILE:HD11	1:A:109:GLN:CD	0.48	2.34	16	1
1:A:42:MET:SD	1:A:101:ASP:CA	0.48	3.01	18	1
1:A:107:TYR:O	1:A:111:LEU:HD23	0.48	2.08	4	1
1:A:109:GLN:O	1:A:113:VAL:HG23	0.48	2.09	4	1
1:A:155:ARG:O	1:A:159:ALA:N	0.48	2.47	17	2
1:A:114:PHE:C	1:A:114:PHE:CD1	0.48	2.91	13	1
1:A:114:PHE:CD1	1:A:114:PHE:C	0.48	2.92	2	3
1:A:59:PHE:CD1	1:A:98:ILE:HG12	0.48	2.44	7	6
1:A:57:ARG:O	1:A:61:GLN:CB	0.48	2.62	9	1
1:A:169:ILE:HG22	1:A:171:THR:HG23	0.48	1.85	9	1
1:A:30:VAL:CG1	1:A:60:TRP:CZ2	0.48	2.97	2	3
1:A:62:LEU:CD2	1:A:105:ILE:HD13	0.48	2.39	4	1
1:A:97:ARG:CD	1:A:179:PHE:CD1	0.47	2.97	19	1
1:A:114:PHE:CE2	1:A:138:ILE:CG1	0.47	2.97	9	1
1:A:114:PHE:CZ	1:A:138:ILE:HG12	0.47	2.44	9	1
1:A:107:TYR:CG	1:A:108:GLU:N	0.47	2.83	16	4
1:A:28:HIS:CE1	1:A:188:GLN:CG	0.47	2.97	19	4
1:A:118:HIS:ND1	1:A:118:HIS:C	0.47	2.71	19	1
1:A:182:ALA:O	1:A:183:GLU:C	0.47	2.58	10	7
1:A:49:MET:O	1:A:50:GLY:C	0.47	2.56	16	5
1:A:66:TYR:CB	1:A:99:VAL:O	0.47	2.63	10	1
1:A:46:ILE:HD13	1:A:177:THR:O	0.47	2.09	20	1
1:A:189:TYR:O	1:A:193:ASN:ND2	0.47	2.47	9	14
1:A:31:ASN:CG	1:A:66:TYR:O	0.47	2.58	20	8
1:A:80:PRO:HB3	1:A:92:HIS:CD2	0.47	2.44	11	4
1:A:115:TRP:HH2	1:A:171:THR:HG21	0.47	1.68	5	1
1:A:97:ARG:CZ	1:A:99:VAL:CG2	0.47	2.93	6	1
1:A:36:THR:HG23	1:A:37:ASN:N	0.47	2.25	10	2
1:A:28:HIS:CE1	1:A:30:VAL:HB	0.47	2.44	20	14
1:A:114:PHE:O	1:A:118:HIS:N	0.47	2.47	16	10
1:A:73:THR:HB	1:A:179:PHE:CD1	0.47	2.45	4	1
1:A:50:GLY:O	1:A:52:PHE:N	0.47	2.48	9	2
1:A:46:ILE:O	1:A:47:PHE:CD1	0.47	2.68	12	2
1:A:54:GLY:O	1:A:57:ARG:CG	0.47	2.63	12	1
1:A:59:PHE:CG	1:A:98:ILE:HG12	0.47	2.44	11	14
1:A:24:VAL:HG11	1:A:181:TYR:CD1	0.47	2.45	2	2
1:A:97:ARG:NE	1:A:179:PHE:CD1	0.47	2.83	3	1
1:A:121:ALA:HB2	1:A:169:ILE:HG22	0.47	1.85	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:52:PHE:CE2	1:A:53:TRP:CD1	0.47	3.03	12	2
1:A:60:TRP:CZ2	1:A:61:GLN:HG2	0.47	2.45	11	1
1:A:81:THR:O	1:A:85:VAL:N	0.47	2.47	12	1
1:A:38:VAL:CG2	1:A:44:ILE:HD11	0.47	2.40	11	1
1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:PHE:CD2	0.47	2.45	13	3
1:A:118:HIS:CD2	1:A:136:SER:CB	0.47	2.98	18	1
1:A:142:THR:OG1	1:A:145:GLN:CD	0.47	2.58	11	4
1:A:105:ILE:HD13	1:A:106:SER:O	0.47	2.09	19	2
1:A:24:VAL:CG2	1:A:182:ALA:O	0.47	2.63	7	1
1:A:177:THR:HG22	1:A:179:PHE:CE1	0.47	2.44	9	1
1:A:30:VAL:CG1	1:A:60:TRP:CE3	0.47	2.98	8	3
1:A:52:PHE:CD1	1:A:52:PHE:C	0.47	2.92	8	2
1:A:97:ARG:HB2	1:A:179:PHE:CE1	0.47	2.45	8	1
1:A:78:PRO:O	1:A:79:ASN:CG	0.47	2.58	15	1
1:A:49:MET:HE2	1:A:114:PHE:CD2	0.46	2.45	8	1
1:A:51:CYS:O	1:A:55:VAL:N	0.46	2.42	9	2
1:A:58:LEU:HD11	1:A:113:VAL:CG1	0.46	2.40	20	2
1:A:55:VAL:CG1	1:A:59:PHE:CE2	0.46	2.97	11	3
1:A:56:GLU:HG3	1:A:57:ARG:N	0.46	2.26	12	1
1:A:111:LEU:HD21	1:A:138:ILE:HD13	0.46	1.88	15	1
1:A:94:GLU:N	1:A:94:GLU:OE1	0.46	2.48	16	1
1:A:44:ILE:HG23	1:A:97:ARG:CG	0.46	2.39	10	2
1:A:88:GLY:CA	1:A:133:GLN:OE1	0.46	2.63	7	1
1:A:111:LEU:HD23	1:A:111:LEU:C	0.46	2.36	17	1
1:A:59:PHE:CD2	1:A:65:VAL:HG21	0.46	2.45	20	1
1:A:183:GLU:O	1:A:186:HIS:N	0.46	2.49	1	1
1:A:57:ARG:HA	1:A:60:TRP:CZ3	0.46	2.46	15	2
1:A:62:LEU:HD21	1:A:105:ILE:CD1	0.46	2.41	9	1
1:A:47:PHE:CD2	1:A:114:PHE:CZ	0.46	3.03	10	1
1:A:115:TRP:CH2	1:A:153:LEU:HG	0.46	2.45	10	1
1:A:28:HIS:CD2	1:A:188:GLN:NE2	0.46	2.84	11	1
1:A:105:ILE:C	1:A:105:ILE:CD1	0.46	2.86	18	1
1:A:35:MET:O	1:A:97:ARG:NH2	0.46	2.49	1	1
1:A:140:PRO:O	1:A:176:ALA:CB	0.46	2.59	10	1
1:A:166:ASP:O	1:A:168:HIS:N	0.46	2.48	19	2
1:A:42:MET:SD	1:A:101:ASP:CB	0.46	3.04	18	1
1:A:97:ARG:NH2	1:A:181:TYR:OH	0.46	2.49	1	1
1:A:76:TYR:CD1	1:A:76:TYR:N	0.46	2.83	7	2
1:A:78:PRO:O	1:A:79:ASN:C	0.46	2.58	12	13
1:A:53:TRP:CZ3	1:A:189:TYR:CZ	0.46	3.04	3	1
1:A:42:MET:HE1	1:A:66:TYR:CD2	0.46	2.45	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:ARG:NH2	1:A:61:GLN:OE1	0.46	2.49	10	1
1:A:72:TYR:C	1:A:73:THR:CG2	0.46	2.89	15	2
1:A:31:ASN:ND2	1:A:66:TYR:O	0.46	2.49	19	2
1:A:39:PRO:HG3	1:A:66:TYR:CE2	0.46	2.46	16	1
1:A:160:MET:C	1:A:160:MET:SD	0.46	2.98	16	1
1:A:47:PHE:CZ	1:A:55:VAL:CG1	0.46	2.98	19	1
1:A:26:THR:O	1:A:35:MET:N	0.46	2.49	20	3
1:A:33:HIS:O	1:A:34:SER:C	0.46	2.59	8	12
1:A:28:HIS:N	1:A:33:HIS:O	0.46	2.49	3	3
1:A:70:ALA:O	1:A:182:ALA:N	0.46	2.49	16	7
1:A:39:PRO:O	1:A:40:ASP:C	0.45	2.59	11	5
1:A:72:TYR:OH	1:A:182:ALA:HB1	0.45	2.11	13	2
1:A:46:ILE:HG21	1:A:179:PHE:CZ	0.45	2.45	4	1
1:A:57:ARG:NH1	1:A:61:GLN:OE1	0.45	2.50	11	1
1:A:28:HIS:NE2	1:A:68:THR:O	0.45	2.50	19	5
1:A:159:ALA:O	1:A:162:ALA:HB3	0.45	2.11	3	2
1:A:100:TYR:CD1	1:A:105:ILE:CG2	0.45	2.99	13	2
1:A:52:PHE:CZ	1:A:53:TRP:NE1	0.45	2.85	7	1
1:A:190:LEU:HD13	1:A:193:ASN:O	0.45	2.11	12	1
1:A:160:MET:HE1	1:A:168:HIS:CA	0.45	2.41	14	1
1:A:60:TRP:C	1:A:62:LEU:N	0.45	2.74	19	7
1:A:27:LEU:N	1:A:27:LEU:CD1	0.45	2.76	4	2
1:A:36:THR:CG2	1:A:37:ASN:N	0.45	2.80	12	3
1:A:49:MET:HG3	1:A:114:PHE:CE1	0.45	2.46	5	1
1:A:81:THR:OG1	1:A:84:GLU:CB	0.45	2.65	9	1
1:A:108:GLU:HA	1:A:111:LEU:HD12	0.45	1.87	9	1
1:A:73:THR:OG1	1:A:74:GLY:N	0.45	2.50	14	1
1:A:115:TRP:CE3	1:A:156:PHE:CE2	0.45	3.05	2	2
1:A:42:MET:SD	1:A:100:TYR:C	0.45	2.99	18	3
1:A:56:GLU:OE1	1:A:188:GLN:N	0.45	2.49	3	1
1:A:141:LEU:CD2	1:A:176:ALA:CB	0.45	2.95	3	1
1:A:100:TYR:CZ	1:A:110:LEU:CD1	0.45	3.00	4	2
1:A:53:TRP:CE2	1:A:189:TYR:CD2	0.45	3.05	11	1
1:A:72:TYR:CD2	1:A:85:VAL:HG21	0.45	2.47	15	1
1:A:53:TRP:NE1	1:A:186:HIS:O	0.45	2.50	17	1
1:A:118:HIS:NE2	1:A:136:SER:CB	0.45	2.79	3	1
1:A:42:MET:SD	1:A:101:ASP:CG	0.45	2.99	16	2
1:A:52:PHE:CE1	1:A:53:TRP:CD1	0.45	3.04	18	1
1:A:77:THR:O	1:A:92:HIS:NE2	0.45	2.49	14	6
1:A:107:TYR:CE2	1:A:148:ALA:HB2	0.45	2.46	4	1
1:A:115:TRP:HB3	1:A:156:PHE:CE2	0.45	2.47	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:PHE:CE1	1:A:138:ILE:HG23	0.45	2.47	15	1
1:A:175:ASN:O	1:A:177:THR:N	0.45	2.50	20	1
1:A:42:MET:SD	1:A:66:TYR:CD2	0.45	3.10	7	1
1:A:44:ILE:CG2	1:A:97:ARG:CG	0.45	2.94	10	1
1:A:71:GLY:CA	1:A:179:PHE:CE2	0.45	3.00	13	1
1:A:118:HIS:NE2	1:A:119:ASP:O	0.45	2.50	19	1
1:A:153:LEU:HD21	1:A:169:ILE:HD11	0.44	1.89	1	1
1:A:27:LEU:O	1:A:28:HIS:C	0.44	2.59	3	2
1:A:101:ASP:OD1	1:A:101:ASP:N	0.44	2.51	8	1
1:A:117:ASN:O	1:A:117:ASN:CG	0.44	2.60	20	1
1:A:28:HIS:CD2	1:A:67:SER:HB3	0.44	2.47	2	1
1:A:113:VAL:O	1:A:117:ASN:N	0.44	2.50	3	2
1:A:57:ARG:HA	1:A:60:TRP:CE2	0.44	2.48	12	2
1:A:189:TYR:CD1	1:A:189:TYR:C	0.44	2.95	3	5
1:A:100:TYR:CD1	1:A:100:TYR:C	0.44	2.96	13	2
1:A:49:MET:O	1:A:94:GLU:CD	0.44	2.61	20	2
1:A:57:ARG:HE	1:A:190:LEU:HD12	0.44	1.73	19	1
1:A:179:PHE:CZ	1:A:181:TYR:HA	0.44	2.48	16	4
1:A:49:MET:CG	1:A:114:PHE:CE1	0.44	3.00	5	1
1:A:187:GLN:NE2	1:A:188:GLN:NE2	0.44	2.65	11	1
1:A:67:SER:C	1:A:68:THR:CG2	0.44	2.91	9	3
1:A:24:VAL:O	1:A:25:ALA:C	0.44	2.60	10	2
1:A:161:LEU:HD23	1:A:168:HIS:CD2	0.44	2.47	12	1
1:A:72:TYR:O	1:A:73:THR:CG2	0.44	2.66	15	1
1:A:69:ALA:HB3	1:A:97:ARG:CG	0.44	2.43	9	1
1:A:153:LEU:HD12	1:A:173:ILE:HD11	0.44	1.90	10	1
1:A:65:VAL:HG11	1:A:68:THR:CG2	0.44	2.43	14	1
1:A:40:ASP:CG	1:A:40:ASP:O	0.44	2.60	18	1
1:A:86:SER:O	1:A:133:GLN:NE2	0.44	2.51	5	1
1:A:141:LEU:O	1:A:141:LEU:HD13	0.44	2.12	5	1
1:A:30:VAL:HG21	1:A:60:TRP:CD1	0.44	2.48	9	1
1:A:112:GLN:HA	1:A:115:TRP:CE3	0.44	2.47	12	3
1:A:47:PHE:CD2	1:A:114:PHE:CE1	0.44	3.05	10	1
1:A:47:PHE:HE1	1:A:138:ILE:HG23	0.44	1.72	15	1
1:A:59:PHE:CD2	1:A:98:ILE:CG1	0.44	3.01	19	1
1:A:115:TRP:O	1:A:118:HIS:ND1	0.44	2.51	6	1
1:A:168:HIS:NE2	1:A:169:ILE:O	0.44	2.50	9	1
1:A:111:LEU:O	1:A:115:TRP:CG	0.44	2.71	12	1
1:A:118:HIS:ND1	1:A:119:ASP:O	0.44	2.50	16	1
1:A:138:ILE:HG21	1:A:149:ALA:HB1	0.44	1.90	18	1
1:A:35:MET:O	1:A:97:ARG:NH1	0.43	2.51	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:59:PHE:CD2	1:A:65:VAL:CG1	0.43	3.00	20	1
1:A:174:ALA:O	1:A:175:ASN:C	0.43	2.61	5	7
1:A:115:TRP:CE2	1:A:152:SER:HB2	0.43	2.48	4	1
1:A:160:MET:O	1:A:163:ALA:HB3	0.43	2.13	5	3
1:A:35:MET:HE1	1:A:187:GLN:HE21	0.43	1.72	8	1
1:A:57:ARG:NH2	1:A:61:GLN:CD	0.43	2.76	10	1
1:A:142:THR:OG1	1:A:145:GLN:CG	0.43	2.66	11	2
1:A:137:ALA:HB3	1:A:139:TYR:CE1	0.43	2.49	12	1
1:A:94:GLU:OE1	1:A:133:GLN:C	0.43	2.61	17	1
1:A:119:ASP:OD1	1:A:119:ASP:C	0.43	2.61	17	1
1:A:45:ALA:HB3	1:A:98:ILE:HG22	0.43	1.88	20	1
1:A:105:ILE:CD1	1:A:109:GLN:HB2	0.43	2.43	20	1
1:A:97:ARG:HB2	1:A:179:PHE:CE2	0.43	2.48	6	1
1:A:145:GLN:O	1:A:149:ALA:N	0.43	2.50	13	1
1:A:45:ALA:O	1:A:98:ILE:N	0.43	2.52	17	4
1:A:51:CYS:O	1:A:55:VAL:HG21	0.43	2.13	15	1
1:A:49:MET:HG3	1:A:114:PHE:CE2	0.43	2.48	2	1
1:A:111:LEU:HB3	1:A:115:TRP:CE2	0.43	2.47	18	2
1:A:65:VAL:HG13	1:A:98:ILE:CG2	0.43	2.43	9	1
1:A:88:GLY:CA	1:A:133:GLN:NE2	0.43	2.81	12	1
1:A:42:MET:HE3	1:A:66:TYR:HB2	0.43	1.88	18	1
1:A:42:MET:HG2	1:A:99:VAL:CG1	0.43	2.43	3	1
1:A:55:VAL:CG1	1:A:59:PHE:CZ	0.43	3.02	17	1
1:A:71:GLY:HA3	1:A:179:PHE:CE2	0.43	2.49	5	2
1:A:97:ARG:CZ	1:A:179:PHE:CB	0.43	2.96	7	1
1:A:52:PHE:CD2	1:A:53:TRP:N	0.43	2.87	12	1
1:A:78:PRO:C	1:A:79:ASN:OD1	0.43	2.62	15	1
1:A:53:TRP:C	1:A:190:LEU:HD12	0.43	2.39	16	1
1:A:42:MET:CE	1:A:66:TYR:CD1	0.43	3.01	20	1
1:A:84:GLU:OE2	1:A:90:THR:CG2	0.43	2.67	5	1
1:A:58:LEU:HD22	1:A:117:ASN:ND2	0.43	2.28	6	2
1:A:54:GLY:O	1:A:58:LEU:N	0.43	2.51	19	2
1:A:153:LEU:CD1	1:A:173:ILE:HD11	0.43	2.44	10	1
1:A:72:TYR:CZ	1:A:182:ALA:CA	0.43	3.01	13	2
1:A:97:ARG:HD3	1:A:179:PHE:CD1	0.43	2.49	19	1
1:A:110:LEU:O	1:A:114:PHE:CB	0.43	2.67	5	1
1:A:107:TYR:CE1	1:A:108:GLU:HG3	0.43	2.49	5	1
1:A:183:GLU:C	1:A:185:ASP:N	0.43	2.75	12	2
1:A:57:ARG:HA	1:A:60:TRP:CH2	0.43	2.49	15	1
1:A:179:PHE:CE1	1:A:181:TYR:N	0.43	2.87	16	2
1:A:42:MET:HE2	1:A:66:TYR:CD1	0.42	2.49	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:ILE:HD12	1:A:176:ALA:HB1	0.42	1.89	3	2
1:A:35:MET:HE2	1:A:181:TYR:CE1	0.42	2.49	11	1
1:A:147:ALA:O	1:A:151:ALA:N	0.42	2.52	17	1
1:A:112:GLN:OE1	1:A:112:GLN:C	0.42	2.62	19	1
1:A:27:LEU:HB2	1:A:33:HIS:C	0.42	2.40	3	1
1:A:49:MET:SD	1:A:114:PHE:CD1	0.42	3.12	16	2
1:A:97:ARG:CZ	1:A:179:PHE:HB2	0.42	2.44	7	1
1:A:59:PHE:CD1	1:A:65:VAL:HG21	0.42	2.45	19	1
1:A:57:ARG:HA	1:A:60:TRP:CD2	0.42	2.49	14	5
1:A:42:MET:CG	1:A:99:VAL:CG1	0.42	2.97	13	1
1:A:115:TRP:CZ3	1:A:156:PHE:CD2	0.42	3.07	20	1
1:A:152:SER:O	1:A:156:PHE:N	0.42	2.52	2	1
1:A:153:LEU:CD1	1:A:171:THR:CG2	0.42	2.83	10	1
1:A:79:ASN:N	1:A:80:PRO:CD	0.42	2.82	12	1
1:A:79:ASN:N	1:A:79:ASN:OD1	0.42	2.52	18	1
1:A:112:GLN:HG3	1:A:113:VAL:N	0.42	2.30	19	1
1:A:71:GLY:O	1:A:95:ALA:O	0.42	2.38	9	5
1:A:121:ALA:HB3	1:A:167:ARG:O	0.42	2.15	8	1
1:A:59:PHE:CE1	1:A:114:PHE:CE2	0.42	3.08	10	1
1:A:149:ALA:O	1:A:153:LEU:N	0.42	2.50	10	1
1:A:49:MET:HE2	1:A:117:ASN:HB3	0.42	1.92	18	1
1:A:115:TRP:CE3	1:A:156:PHE:CZ	0.42	3.08	2	2
1:A:182:ALA:O	1:A:187:GLN:NE2	0.42	2.49	2	2
1:A:72:TYR:CE2	1:A:94:GLU:OE2	0.42	2.72	8	1
1:A:47:PHE:CB	1:A:114:PHE:CZ	0.42	3.02	10	1
1:A:69:ALA:O	1:A:179:PHE:CE2	0.42	2.73	10	1
1:A:107:TYR:HE2	1:A:148:ALA:HB2	0.42	1.73	4	1
1:A:114:PHE:CZ	1:A:138:ILE:CG1	0.42	3.03	9	1
1:A:115:TRP:HB3	1:A:156:PHE:CE1	0.42	2.50	19	1
1:A:115:TRP:CZ2	1:A:152:SER:OG	0.42	2.58	8	1
1:A:95:ALA:CB	1:A:179:PHE:CZ	0.42	3.02	11	1
1:A:105:ILE:HD13	1:A:106:SER:H	0.42	1.72	11	1
1:A:97:ARG:CZ	1:A:181:TYR:OH	0.42	2.67	12	1
1:A:29:ALA:CB	1:A:188:GLN:HG3	0.42	2.45	14	1
1:A:44:ILE:HG13	1:A:99:VAL:HG13	0.42	1.91	15	1
1:A:105:ILE:CD1	1:A:109:GLN:HG2	0.42	2.45	16	1
1:A:53:TRP:CG	1:A:189:TYR:HB3	0.42	2.50	5	2
1:A:191:HIS:CD2	1:A:191:HIS:C	0.42	2.98	10	1
1:A:62:LEU:CD2	1:A:105:ILE:CD1	0.42	2.97	15	1
1:A:180:TYR:O	1:A:181:TYR:O	0.41	2.37	15	7
1:A:57:ARG:HG3	1:A:60:TRP:CZ2	0.41	2.50	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:VAL:O	1:A:58:LEU:N	0.41	2.53	12	1
1:A:81:THR:OG1	1:A:84:GLU:CD	0.41	2.63	14	1
1:A:101:ASP:C	1:A:103:SER:H	0.41	2.22	20	1
1:A:58:LEU:HD22	1:A:117:ASN:OD1	0.41	2.15	4	1
1:A:97:ARG:NH1	1:A:181:TYR:OH	0.41	2.53	12	1
1:A:57:ARG:CG	1:A:60:TRP:CZ2	0.41	3.03	14	1
1:A:189:TYR:CZ	1:A:193:ASN:ND2	0.41	2.87	18	1
1:A:24:VAL:HG11	1:A:181:TYR:CD2	0.41	2.51	4	1
1:A:76:TYR:CD1	1:A:76:TYR:O	0.41	2.74	6	1
1:A:60:TRP:CH2	1:A:61:GLN:OE1	0.41	2.74	8	1
1:A:71:GLY:C	1:A:72:TYR:CD1	0.41	2.98	8	1
1:A:183:GLU:HB2	1:A:186:HIS:CD2	0.41	2.51	15	1
1:A:71:GLY:CA	1:A:180:TYR:O	0.41	2.67	17	1
1:A:42:MET:SD	1:A:101:ASP:OD1	0.41	2.79	18	1
1:A:79:ASN:OD1	1:A:79:ASN:N	0.41	2.52	4	1
1:A:55:VAL:CG2	1:A:56:GLU:N	0.41	2.83	5	1
1:A:169:ILE:HD13	1:A:169:ILE:N	0.41	2.31	10	1
1:A:53:TRP:CE2	1:A:189:TYR:HB3	0.41	2.51	17	1
1:A:85:VAL:HG12	1:A:133:GLN:HG2	0.41	1.90	19	1
1:A:42:MET:SD	1:A:100:TYR:O	0.41	2.79	20	1
1:A:41:GLY:O	1:A:101:ASP:OD1	0.41	2.38	11	2
1:A:59:PHE:CE1	1:A:114:PHE:CZ	0.41	3.09	10	1
1:A:56:GLU:OE2	1:A:70:ALA:N	0.41	2.53	13	1
1:A:94:GLU:OE1	1:A:94:GLU:O	0.41	2.39	16	1
1:A:94:GLU:N	1:A:133:GLN:O	0.41	2.54	8	1
1:A:42:MET:HE3	1:A:101:ASP:OD1	0.41	2.16	12	1
1:A:42:MET:HE2	1:A:66:TYR:CB	0.41	2.43	16	1
1:A:39:PRO:HG2	1:A:42:MET:HE2	0.41	1.93	18	1
1:A:49:MET:O	1:A:94:GLU:OE1	0.41	2.39	20	1
1:A:98:ILE:HG22	1:A:100:TYR:HD2	0.41	1.75	7	1
1:A:45:ALA:HB1	1:A:47:PHE:HE1	0.41	1.76	9	1
1:A:54:GLY:C	1:A:57:ARG:HG2	0.41	2.41	12	1
1:A:23:PRO:C	1:A:184:ASP:OD1	0.41	2.64	15	1
1:A:73:THR:HB	1:A:179:PHE:CE1	0.41	2.49	4	1
1:A:31:ASN:OD1	1:A:66:TYR:O	0.41	2.39	10	1
1:A:193:ASN:N	1:A:193:ASN:HD22	0.40	2.14	7	1
1:A:50:GLY:O	1:A:94:GLU:OE1	0.40	2.39	12	1
1:A:59:PHE:C	1:A:61:GLN:N	0.40	2.77	13	1
1:A:153:LEU:HD13	1:A:173:ILE:CD1	0.40	2.47	5	1
1:A:69:ALA:HB3	1:A:97:ARG:HD3	0.40	1.94	12	1
1:A:71:GLY:N	1:A:179:PHE:CE2	0.40	2.90	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:MET:O	1:A:94:GLU:OE2	0.40	2.40	4	1
1:A:71:GLY:C	1:A:72:TYR:CG	0.40	2.98	5	1
1:A:140:PRO:C	1:A:176:ALA:HB2	0.40	2.38	10	1
1:A:46:ILE:HG23	1:A:179:PHE:CE1	0.40	2.52	11	1
1:A:112:GLN:OE1	1:A:112:GLN:O	0.40	2.38	19	1
1:A:80:PRO:HG3	1:A:92:HIS:CE1	0.40	2.51	5	1
1:A:115:TRP:CH2	1:A:156:PHE:HB2	0.40	2.51	6	1
1:A:187:GLN:NE2	1:A:187:GLN:HA	0.40	2.30	15	1
1:A:84:GLU:HB3	1:A:90:THR:CG2	0.40	2.46	16	1
1:A:190:LEU:O	1:A:193:ASN:O	0.40	2.39	16	1
1:A:53:TRP:CE2	1:A:189:TYR:CB	0.40	3.04	17	1
1:A:111:LEU:HB2	1:A:115:TRP:CZ2	0.40	2.52	18	1
1:A:58:LEU:O	1:A:58:LEU:HD12	0.40	2.16	3	1
1:A:95:ALA:CB	1:A:179:PHE:CE2	0.40	3.05	4	1
1:A:105:ILE:HD11	1:A:109:GLN:HB3	0.40	1.94	4	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	163/211 (77%)	150±2 (92±1%)	11±3 (7±2%)	3±1 (2±1%)	10	55
All	All	3260/4220 (77%)	2992 (92%)	217 (7%)	51 (2%)	10	55

All 11 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	181	TYR	17
1	A	175	ASN	13
1	A	50	GLY	9
1	A	25	ALA	3
1	A	28	HIS	2
1	A	187	GLN	2
1	A	133	GLN	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	51	CYS	1
1	A	136	SER	1
1	A	167	ARG	1
1	A	34	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	132/168 (79%)	100±3 (75±3%)	32±3 (25±3%)	2	25
All	All	2640/3360 (79%)	1991 (75%)	649 (25%)	2	25

All 87 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	27	LEU	20
1	A	49	MET	20
1	A	58	LEU	20
1	A	161	LEU	20
1	A	191	HIS	20
1	A	60	TRP	19
1	A	193	ASN	19
1	A	101	ASP	18
1	A	146	ASP	17
1	A	83	ARG	16
1	A	35	MET	15
1	A	155	ARG	15
1	A	190	LEU	15
1	A	185	ASP	14
1	A	62	LEU	14
1	A	103	SER	14
1	A	169	ILE	12
1	A	40	ASP	12
1	A	22	MET	11
1	A	43	GLU	11
1	A	108	GLU	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	113	VAL	11
1	A	141	LEU	11
1	A	51	CYS	10
1	A	112	GLN	10
1	A	179	PHE	10
1	A	192	LYS	10
1	A	118	HIS	10
1	A	33	HIS	9
1	A	42	MET	9
1	A	172	GLU	9
1	A	105	ILE	9
1	A	34	SER	8
1	A	87	SER	8
1	A	56	GLU	8
1	A	166	ASP	7
1	A	167	ARG	7
1	A	183	GLU	7
1	A	144	GLU	7
1	A	94	GLU	7
1	A	37	ASN	6
1	A	153	LEU	6
1	A	171	THR	6
1	A	177	THR	6
1	A	187	GLN	6
1	A	150	ARG	6
1	A	135	ARG	6
1	A	116	GLU	5
1	A	117	ASN	5
1	A	119	ASP	5
1	A	188	GLN	5
1	A	165	ASP	5
1	A	61	GLN	5
1	A	154	GLU	5
1	A	86	SER	5
1	A	52	PHE	4
1	A	57	ARG	4
1	A	164	ASP	4
1	A	157	GLN	4
1	A	168	HIS	4
1	A	180	TYR	4
1	A	72	TYR	3
1	A	77	THR	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	31	ASN	3
1	A	89	ASP	3
1	A	97	ARG	3
1	A	59	PHE	2
1	A	142	THR	2
1	A	66	TYR	2
1	A	156	PHE	2
1	A	53	TRP	2
1	A	111	LEU	2
1	A	136	SER	2
1	A	184	ASP	1
1	A	76	TYR	1
1	A	109	GLN	1
1	A	68	THR	1
1	A	133	GLN	1
1	A	26	THR	1
1	A	175	ASN	1
1	A	189	TYR	1
1	A	90	THR	1
1	A	160	MET	1
1	A	36	THR	1
1	A	47	PHE	1
1	A	73	THR	1
1	A	98	ILE	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry ⓘ

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