



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 09:03 PM UTC

PDB ID : 2KGK / pdb_00002kgk
Title : Solution structure of Bacillus anthracis dihydrofolate reductase
Authors : Deshmukh, L.; Vinogradova, O.; Beierlein, J.M.; Frey, K.M.; Anderson, A.C.
Deposited on : 2009-03-12

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
Mogul	:	2022.3.0, CSD as543be (2022)
Buster-report	:	wwPDB partial adaption of 1.1.7 (2018)
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

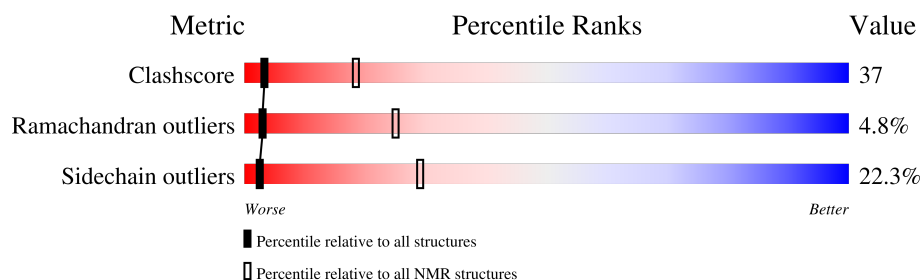
1 Overall quality at a glance

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	172	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 15 models. Model 14 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *closest to the average*.

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:1-A:52, A:58-A:127, A:134-A:162 (151)	1.06	14

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 3 single-model clusters were found.

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

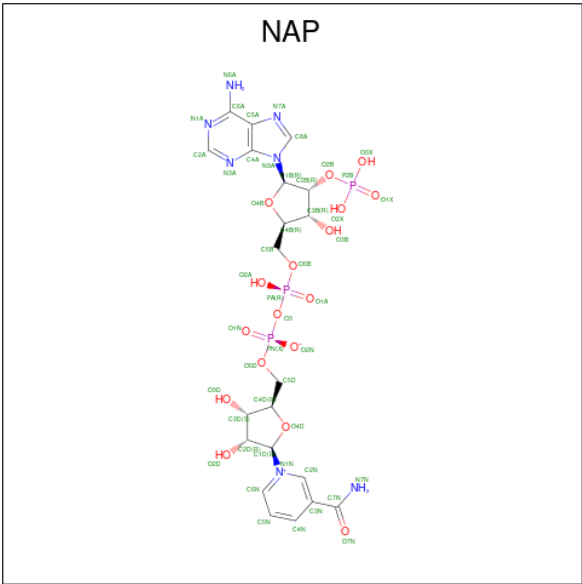
3 Entry composition [i](#)

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2739 atoms, of which 1321 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Dihydrofolate reductase.

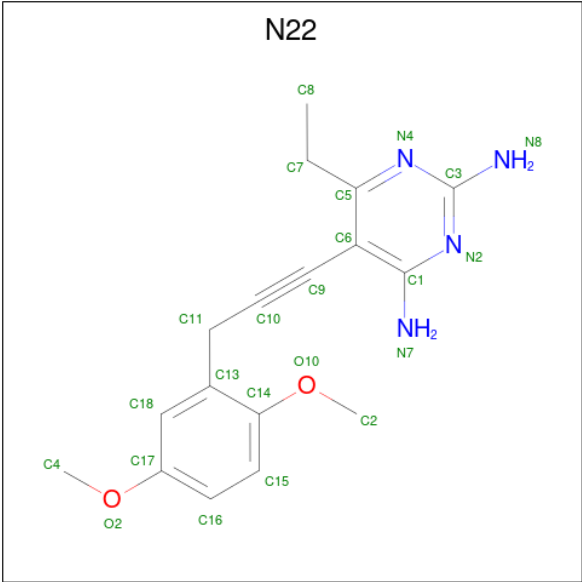
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	162	2658	870	1311	221	247	9	0

- Molecule 2 is NADP NICOTINAMIDE-ADENINE-DINUCLEOTIDE PHOSPHATE (CCD ID: NAP) (formula: C₂₁H₂₈N₇O₁₇P₃).



Mol	Chain	Residues	Atoms					
			Total	C	H	N	O	P
2	A	1	54	21	6	7	17	3

- Molecule 3 is 5-[3-(2,5-dimethoxyphenyl)prop-1-yn-1-yl]-6-ethylpyrimidine-2,4-diamine (CCD ID: N22) (formula: C₁₇H₂₀N₄O₂).



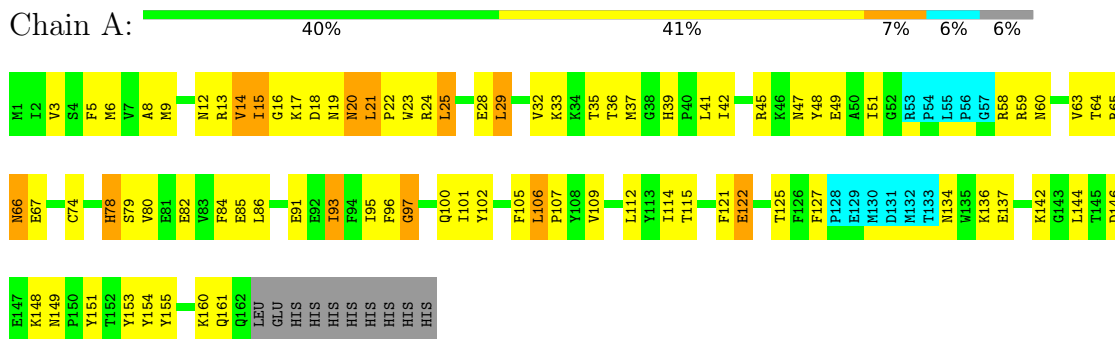
Mol	Chain	Residues	Atoms				
			Total	C	H	N	O
3	A	1	27	17	4	4	2

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: Dihydrofolate reductase

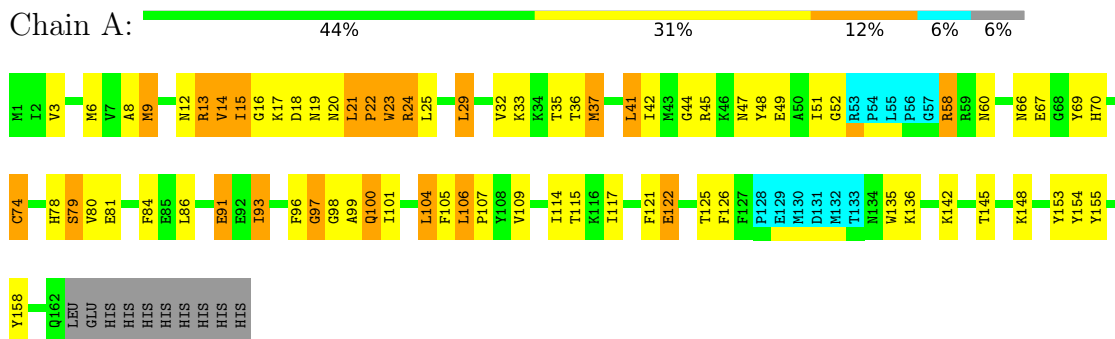


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

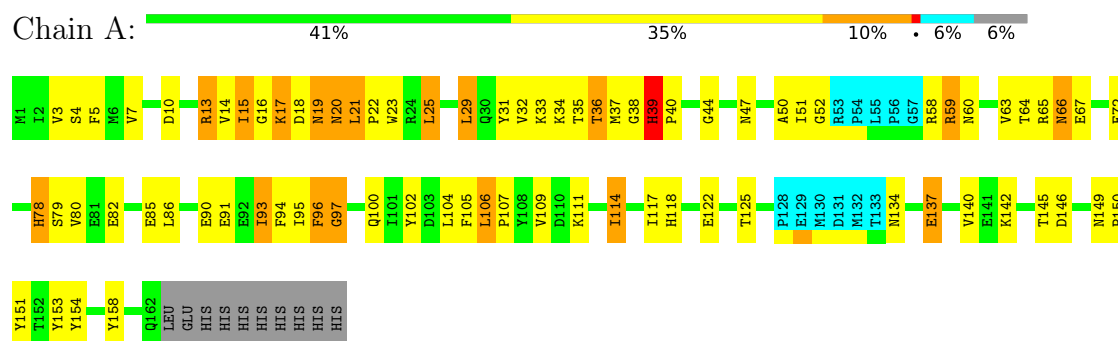
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Dihydrofolate reductase



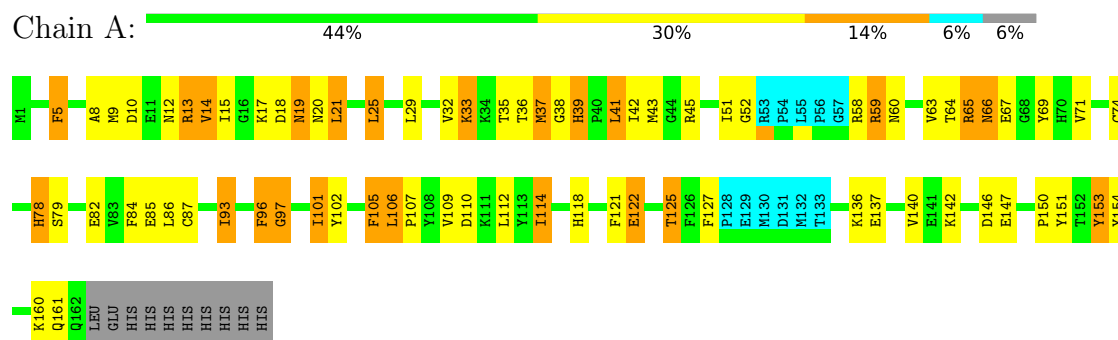
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Dihydrofolate reductase



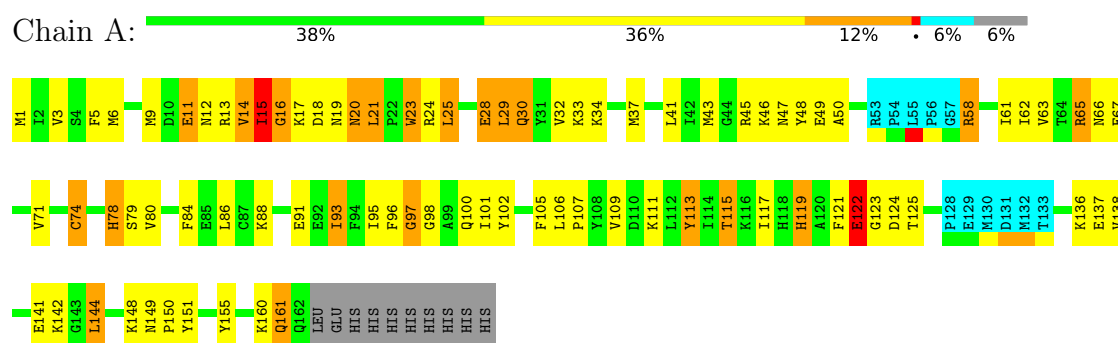
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Dihydrofolate reductase



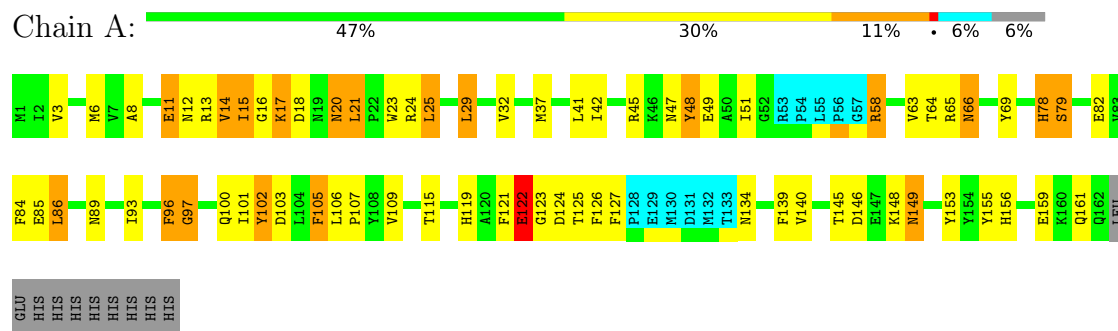
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Dihydrofolate reductase



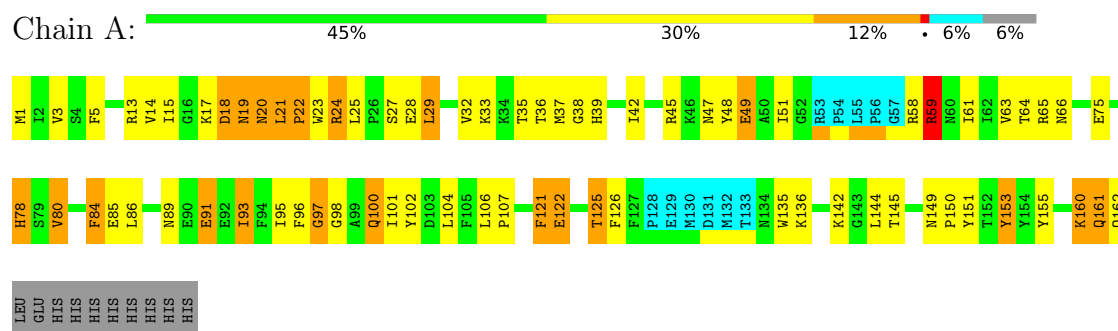
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Dihydrofolate reductase



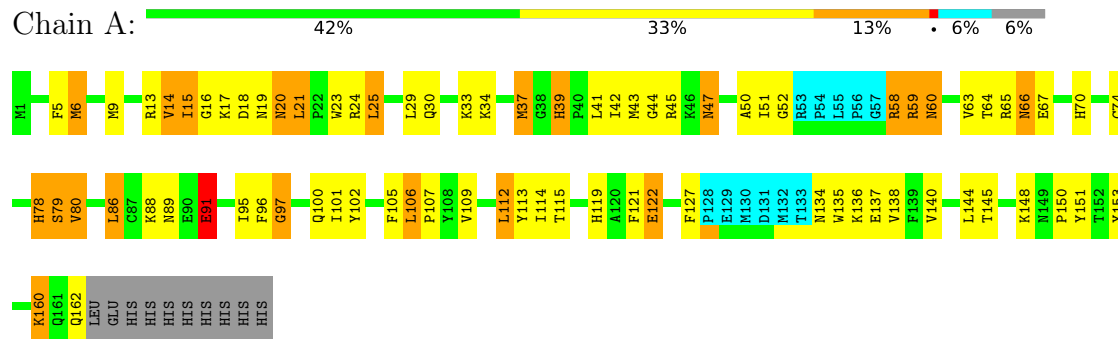
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Dihydrofolate reductase



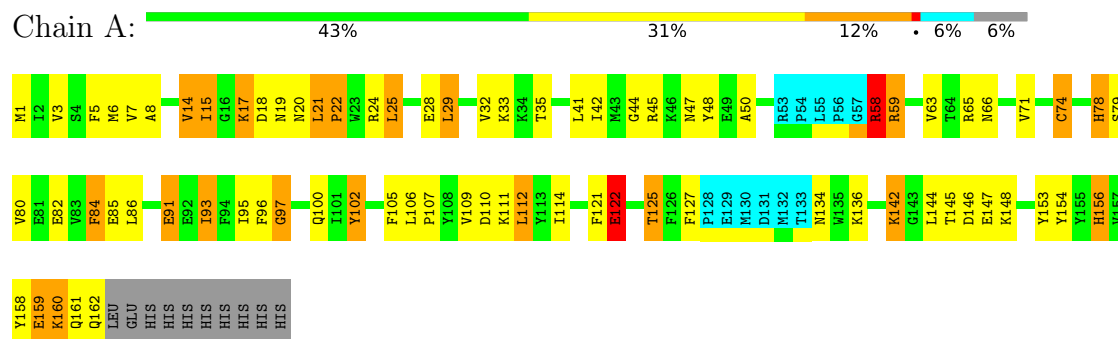
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Dihydrofolate reductase



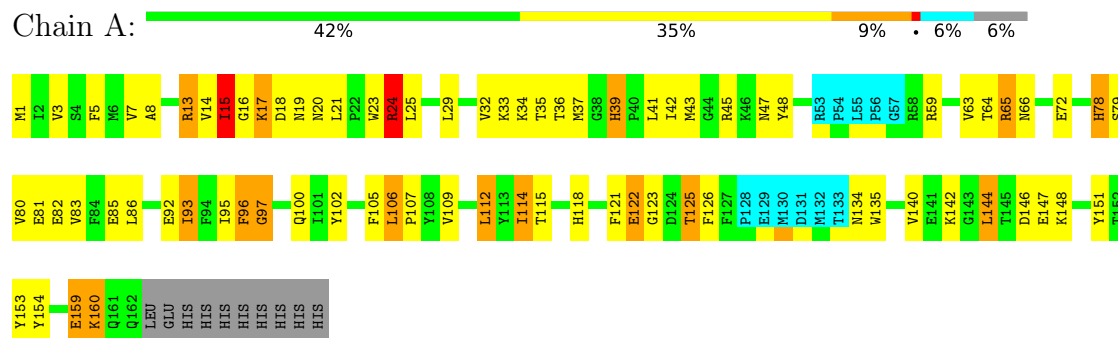
4.2.14 Score per residue for model 14 (medoid)

- Molecule 1: Dihydrofolate reductase



4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Dihydrofolate reductase



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *DGSA-distance geometry simulated annealing*.

Of the 200 calculated structures, 15 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
X-PLOR NIH	refinement	2.20
CYANA	structure solution	2.1

No chemical shift data was provided.

6 Model quality ⓘ

6.1 Standard geometry ⓘ

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: N22, NAP

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	1263	1228	1223	95±13
2	A	48	6	25	20±6
3	A	23	4	20	7±4
All	All	20010	18570	19020	1452

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 37.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:ASN:ND2	2:A:173:NAP:H6N	1.09	1.62	10	6
1:A:23:TRP:CD1	3:A:174:N22:H2B	1.07	1.83	1	1
1:A:100:GLN:NE2	2:A:173:NAP:H52A	1.03	1.68	11	7
1:A:23:TRP:CD2	3:A:174:N22:H7	1.01	1.89	2	1
1:A:21:LEU:H	1:A:21:LEU:HD13	1.00	1.16	3	3
1:A:47:ASN:CG	2:A:173:NAP:H6N	0.99	1.82	8	9
1:A:47:ASN:OD1	2:A:173:NAP:H6N	0.94	1.62	8	6
1:A:20:ASN:ND2	3:A:174:N22:H8B	0.94	1.76	12	1
1:A:29:LEU:HD12	1:A:29:LEU:O	0.93	1.62	3	7
1:A:100:GLN:OE1	2:A:173:NAP:H52A	0.92	1.63	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:ASN:HD21	2:A:173:NAP:H6N	0.92	1.25	3	4
1:A:47:ASN:OD1	2:A:173:NAP:H2D	0.92	1.64	15	6
1:A:21:LEU:HD22	1:A:21:LEU:N	0.90	1.82	10	3
1:A:47:ASN:CB	2:A:173:NAP:H2D	0.90	1.96	1	4
1:A:21:LEU:C	1:A:21:LEU:HD13	0.90	1.92	6	1
1:A:21:LEU:HD13	1:A:21:LEU:N	0.89	1.80	13	6
1:A:114:ILE:HD12	1:A:114:ILE:N	0.89	1.83	8	8
1:A:96:PHE:CE1	2:A:173:NAP:H4N	0.87	2.04	10	3
1:A:47:ASN:ND2	2:A:173:NAP:H2D	0.87	1.84	6	2
1:A:21:LEU:HD23	1:A:21:LEU:H	0.87	1.28	11	1
1:A:19:ASN:HD21	3:A:174:N22:H2A	0.86	1.29	12	1
1:A:96:PHE:O	2:A:173:NAP:H5N	0.85	1.70	3	4
1:A:100:GLN:H	1:A:100:GLN:NE2	0.85	1.70	2	2
2:A:173:NAP:PA	2:A:173:NAP:H52N	0.85	2.10	5	1
1:A:100:GLN:CD	2:A:173:NAP:H52A	0.85	1.96	6	5
1:A:21:LEU:HD13	1:A:21:LEU:H	0.84	1.32	12	3
1:A:24:ARG:HE	3:A:174:N22:H8A	0.84	1.31	12	1
1:A:29:LEU:C	1:A:29:LEU:HD12	0.83	1.98	8	4
1:A:5:PHE:CE1	1:A:109:VAL:HG22	0.82	2.10	2	2
1:A:47:ASN:HD22	2:A:173:NAP:H3D	0.81	1.34	6	1
1:A:29:LEU:CB	3:A:174:N22:H7	0.81	2.05	5	1
1:A:100:GLN:NE2	1:A:101:ILE:H	0.81	1.73	7	1
1:A:21:LEU:HD13	2:A:173:NAP:C7N	0.81	2.05	11	1
1:A:24:ARG:NE	3:A:174:N22:H8B	0.81	1.89	6	1
1:A:24:ARG:NH2	1:A:151:TYR:CZ	0.81	2.48	15	1
1:A:114:ILE:HD13	1:A:156:HIS:CE1	0.80	2.11	4	2
1:A:100:GLN:CD	1:A:100:GLN:N	0.80	2.39	7	1
1:A:21:LEU:HD12	2:A:173:NAP:C2N	0.80	2.07	1	2
1:A:24:ARG:NH2	1:A:151:TYR:CE2	0.79	2.50	15	1
2:A:173:NAP:O2A	2:A:173:NAP:H52N	0.78	1.78	4	4
1:A:19:ASN:ND2	3:A:174:N22:H2A	0.78	1.92	12	1
1:A:47:ASN:HD21	2:A:173:NAP:H2D	0.78	1.37	6	1
1:A:106:LEU:C	1:A:106:LEU:HD23	0.78	2.04	4	2
1:A:100:GLN:NE2	1:A:100:GLN:N	0.77	2.33	12	2
1:A:19:ASN:H	2:A:173:NAP:H2D	0.77	1.39	12	1
1:A:29:LEU:HD12	1:A:29:LEU:C	0.77	2.03	14	3
1:A:105:PHE:O	1:A:109:VAL:HG23	0.77	1.78	11	5
1:A:20:ASN:OD1	3:A:174:N22:H2B	0.76	1.81	5	1
1:A:5:PHE:CD2	1:A:102:TYR:CE2	0.76	2.73	9	1
1:A:13:ARG:NH1	1:A:123:GLY:H	0.76	1.78	15	2
1:A:96:PHE:CZ	3:A:174:N22:N7	0.76	2.54	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
3:A:174:N22:C9	3:A:174:N22:H8B	0.75	2.11	13	2
2:A:173:NAP:H52N	2:A:173:NAP:O2A	0.75	1.81	5	1
1:A:21:LEU:HD22	1:A:22:PRO:O	0.75	1.81	8	2
1:A:100:GLN:NE2	2:A:173:NAP:O3	0.75	2.19	2	1
1:A:14:VAL:O	1:A:15:ILE:HG23	0.75	1.82	7	7
1:A:21:LEU:H	1:A:21:LEU:CD1	0.74	1.95	4	6
1:A:105:PHE:O	1:A:109:VAL:HG12	0.74	1.83	15	2
1:A:14:VAL:HG12	1:A:125:THR:C	0.74	2.07	3	9
1:A:21:LEU:C	1:A:21:LEU:HD22	0.74	2.07	4	3
1:A:156:HIS:ND1	1:A:156:HIS:C	0.74	2.44	14	1
1:A:21:LEU:HD23	1:A:21:LEU:N	0.74	1.98	11	1
1:A:100:GLN:NE2	2:A:173:NAP:O1A	0.74	2.21	7	2
1:A:45:ARG:NH1	2:A:173:NAP:O3X	0.73	2.21	4	1
1:A:23:TRP:O	1:A:24:ARG:NH1	0.73	2.22	15	1
1:A:5:PHE:CE2	1:A:102:TYR:CD2	0.73	2.77	9	1
1:A:113:TYR:CD1	1:A:113:TYR:C	0.73	2.66	10	1
1:A:8:ALA:CB	2:A:173:NAP:H72N	0.72	1.97	3	5
1:A:100:GLN:CD	1:A:100:GLN:H	0.72	1.92	7	1
1:A:106:LEU:N	1:A:107:PRO:CD	0.72	2.52	11	13
1:A:97:GLY:O	2:A:173:NAP:H5N	0.72	1.84	9	6
1:A:15:ILE:HD12	2:A:173:NAP:H1D	0.72	1.60	6	1
1:A:102:TYR:CD1	1:A:103:ASP:N	0.72	2.57	6	4
1:A:45:ARG:NH1	2:A:173:NAP:O3B	0.72	2.23	9	1
1:A:113:TYR:CE1	1:A:155:TYR:CZ	0.71	2.78	10	1
1:A:47:ASN:O	1:A:51:ILE:HD13	0.71	1.86	5	2
1:A:19:ASN:N	2:A:173:NAP:O2D	0.71	2.24	5	1
1:A:28:GLU:OE2	3:A:174:N22:N8	0.71	2.24	12	1
1:A:14:VAL:HG23	1:A:126:PHE:CA	0.71	2.15	5	2
1:A:8:ALA:HB3	2:A:173:NAP:H72N	0.71	1.46	15	4
1:A:96:PHE:CZ	2:A:173:NAP:C4N	0.71	2.74	10	2
1:A:15:ILE:HD12	2:A:173:NAP:C1D	0.71	2.16	6	3
1:A:44:GLY:N	1:A:47:ASN:HD22	0.71	1.83	5	3
1:A:23:TRP:CD2	3:A:174:N22:C7	0.71	2.74	2	1
1:A:23:TRP:CE2	3:A:174:N22:H7	0.71	2.21	2	1
1:A:47:ASN:ND2	2:A:173:NAP:C2D	0.70	2.54	6	1
1:A:15:ILE:HD11	1:A:99:ALA:HB2	0.70	1.60	1	2
1:A:96:PHE:CE1	2:A:173:NAP:C4N	0.70	2.74	10	1
1:A:14:VAL:HG12	1:A:125:THR:O	0.70	1.87	10	10
1:A:79:SER:OG	2:A:173:NAP:H2A	0.70	1.87	4	5
1:A:113:TYR:CD1	1:A:155:TYR:CZ	0.70	2.79	10	1
1:A:45:ARG:NH2	2:A:173:NAP:O3X	0.70	2.24	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:TRP:CG	1:A:24:ARG:N	0.70	2.59	2	1
1:A:98:GLY:O	1:A:102:TYR:CG	0.70	2.44	10	3
1:A:98:GLY:O	1:A:102:TYR:CD2	0.70	2.45	12	3
1:A:43:MET:SD	3:A:174:N22:H4	0.70	2.26	10	1
1:A:114:ILE:CD1	1:A:158:TYR:CG	0.69	2.74	1	1
1:A:13:ARG:HH21	1:A:122:GLU:N	0.69	1.85	11	1
1:A:23:TRP:HB2	3:A:174:N22:H8	0.69	1.63	2	1
1:A:13:ARG:HH12	1:A:121:PHE:N	0.69	1.85	7	1
1:A:19:ASN:ND2	3:A:174:N22:H11	0.69	2.02	12	1
1:A:100:GLN:NE2	2:A:173:NAP:C5B	0.69	2.55	6	6
1:A:102:TYR:CD1	1:A:102:TYR:C	0.69	2.71	14	5
1:A:15:ILE:HG13	2:A:173:NAP:H1D	0.69	1.65	10	1
1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CD2	0.69	2.56	10	3
1:A:47:ASN:HB2	2:A:173:NAP:H2D	0.69	1.64	1	1
1:A:100:GLN:NE2	2:A:173:NAP:O4B	0.69	2.26	14	1
1:A:63:VAL:HG13	1:A:78:HIS:O	0.69	1.87	12	13
1:A:45:ARG:NH2	2:A:173:NAP:O2B	0.69	2.25	9	1
1:A:100:GLN:H	1:A:100:GLN:HE21	0.69	1.26	12	1
1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:HD12	0.69	2.02	11	5
1:A:23:TRP:CG	1:A:24:ARG:H	0.69	2.04	2	1
1:A:100:GLN:OE1	2:A:173:NAP:O2N	0.69	2.11	7	2
1:A:8:ALA:HB3	2:A:173:NAP:N7N	0.68	2.04	3	3
1:A:44:GLY:H	1:A:47:ASN:HD22	0.68	1.30	5	3
1:A:58:ARG:O	1:A:60:ASN:N	0.68	2.26	13	3
1:A:21:LEU:HD22	1:A:21:LEU:O	0.68	1.87	3	6
1:A:28:GLU:OE1	3:A:174:N22:N8	0.68	2.26	3	1
1:A:82:GLU:OE2	1:A:86:LEU:HD12	0.68	1.89	8	1
1:A:100:GLN:NE2	2:A:173:NAP:C8A	0.68	2.56	10	1
1:A:44:GLY:H	1:A:47:ASN:ND2	0.68	1.85	1	3
1:A:12:ASN:O	1:A:13:ARG:NE	0.68	2.27	9	2
1:A:100:GLN:HE21	1:A:101:ILE:H	0.68	1.30	7	1
1:A:43:MET:SD	3:A:174:N22:C4	0.68	2.82	10	1
1:A:160:LYS:O	1:A:161:GLN:NE2	0.67	2.27	3	1
1:A:156:HIS:NE2	1:A:158:TYR:CD1	0.67	2.62	4	1
1:A:60:ASN:C	1:A:61:ILE:HD13	0.67	2.13	5	1
1:A:100:GLN:NE2	2:A:173:NAP:PN	0.67	2.67	2	2
1:A:13:ARG:NH2	1:A:122:GLU:OE1	0.67	2.27	11	1
1:A:19:ASN:ND2	1:A:19:ASN:O	0.67	2.27	12	1
3:A:174:N22:H11	3:A:174:N22:H2B	0.67	1.64	14	1
1:A:29:LEU:HD23	1:A:30:GLN:N	0.67	2.03	10	1
1:A:153:TYR:O	1:A:154:TYR:CD1	0.67	2.48	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:ASN:HD21	3:A:174:N22:H11	0.67	1.50	12	1
1:A:122:GLU:H	1:A:122:GLU:CD	0.66	1.98	11	1
1:A:100:GLN:OE1	2:A:173:NAP:PN	0.66	2.54	7	2
1:A:10:ASP:OD2	1:A:13:ARG:NH1	0.66	2.29	8	1
1:A:45:ARG:NH1	2:A:173:NAP:O2B	0.66	2.27	9	1
1:A:51:ILE:HG13	3:A:174:N22:H11A	0.66	1.65	5	1
1:A:29:LEU:HB3	3:A:174:N22:H7	0.66	1.66	5	1
1:A:93:ILE:N	1:A:93:ILE:HD13	0.66	2.05	8	9
1:A:18:ASP:O	1:A:20:ASN:N	0.66	2.29	8	2
1:A:47:ASN:HB3	2:A:173:NAP:H2D	0.66	1.66	5	4
1:A:79:SER:OG	1:A:80:VAL:N	0.66	2.29	15	4
1:A:23:TRP:CD1	3:A:174:N22:C2	0.66	2.74	1	1
1:A:47:ASN:HB2	2:A:173:NAP:H6N	0.66	1.65	7	3
1:A:92:GLU:N	1:A:92:GLU:CD	0.65	2.54	3	1
1:A:109:VAL:HG22	1:A:110:ASP:N	0.65	2.05	6	2
1:A:8:ALA:HB2	2:A:173:NAP:H72N	0.65	1.48	4	1
1:A:156:HIS:CD2	1:A:156:HIS:C	0.65	2.73	4	1
1:A:24:ARG:CD	3:A:174:N22:H8A	0.65	2.21	14	1
1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CD1	0.65	2.56	12	4
1:A:100:GLN:CD	2:A:173:NAP:O3	0.65	2.39	7	2
1:A:21:LEU:HD22	1:A:21:LEU:H	0.65	1.52	10	2
1:A:91:GLU:H	1:A:91:GLU:CD	0.65	2.00	13	2
3:A:174:N22:H2B	3:A:174:N22:C11	0.65	2.22	14	1
1:A:98:GLY:N	1:A:102:TYR:CE1	0.65	2.65	10	2
1:A:29:LEU:HD12	3:A:174:N22:H7	0.65	1.68	7	1
1:A:21:LEU:C	1:A:21:LEU:CD1	0.65	2.67	6	1
1:A:23:TRP:NE1	3:A:174:N22:C14	0.64	2.60	10	1
1:A:121:PHE:O	1:A:122:GLU:C	0.64	2.40	6	9
1:A:65:ARG:O	1:A:66:ASN:ND2	0.64	2.30	13	9
1:A:10:ASP:OD1	1:A:120:ALA:HB2	0.64	1.92	7	1
1:A:150:PRO:O	1:A:151:TYR:CG	0.64	2.50	12	4
1:A:51:ILE:HG23	3:A:174:N22:C14	0.64	2.23	11	1
1:A:34:LYS:O	1:A:37:MET:SD	0.64	2.56	13	3
1:A:45:ARG:HH12	1:A:64:THR:CB	0.64	2.04	4	1
1:A:58:ARG:O	1:A:58:ARG:CG	0.64	2.46	11	1
1:A:19:ASN:N	2:A:173:NAP:H2D	0.64	2.07	12	1
1:A:104:LEU:C	1:A:104:LEU:HD12	0.63	2.18	1	2
1:A:44:GLY:H	1:A:47:ASN:HD21	0.63	1.36	1	1
1:A:48:TYR:C	1:A:48:TYR:CD1	0.63	2.76	2	6
1:A:100:GLN:CD	1:A:101:ILE:H	0.63	2.01	2	2
1:A:104:LEU:HD12	1:A:104:LEU:O	0.63	1.94	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:121:PHE:O	1:A:122:GLU:O	0.63	2.16	2	10
1:A:17:LYS:CG	1:A:18:ASP:N	0.63	2.61	12	2
1:A:21:LEU:CD1	1:A:21:LEU:N	0.63	2.60	2	2
1:A:8:ALA:HB2	2:A:173:NAP:N7N	0.63	2.09	4	1
1:A:96:PHE:CE1	2:A:173:NAP:O7N	0.63	2.52	13	2
1:A:32:VAL:O	1:A:36:THR:HG22	0.63	1.93	7	5
1:A:100:GLN:OE1	1:A:101:ILE:HD11	0.63	1.93	3	1
1:A:113:TYR:CZ	1:A:157:VAL:HG13	0.63	2.27	5	1
2:A:173:NAP:H8A	2:A:173:NAP:H3B	0.63	1.70	10	1
1:A:145:THR:OG1	1:A:151:TYR:N	0.63	2.31	12	1
2:A:173:NAP:O3B	2:A:173:NAP:O2X	0.63	2.17	4	1
1:A:45:ARG:NH1	1:A:64:THR:OG1	0.63	2.31	4	1
1:A:13:ARG:NE	1:A:121:PHE:O	0.63	2.32	12	1
1:A:96:PHE:O	1:A:97:GLY:C	0.63	2.40	15	15
1:A:100:GLN:N	1:A:100:GLN:CD	0.63	2.57	2	1
2:A:173:NAP:O2A	2:A:173:NAP:O5D	0.63	2.17	8	3
1:A:47:ASN:CB	2:A:173:NAP:H6N	0.63	2.23	14	2
1:A:96:PHE:CD1	2:A:173:NAP:H4N	0.62	2.28	10	2
1:A:13:ARG:NH1	1:A:123:GLY:N	0.62	2.46	15	1
1:A:29:LEU:C	1:A:29:LEU:CD1	0.62	2.70	14	7
1:A:44:GLY:N	1:A:47:ASN:ND2	0.62	2.48	1	3
1:A:48:TYR:CE1	1:A:52:GLY:O	0.62	2.52	1	1
1:A:161:GLN:H	1:A:161:GLN:CD	0.62	2.02	2	4
1:A:48:TYR:CD2	1:A:49:GLU:N	0.62	2.67	6	2
1:A:44:GLY:N	1:A:47:ASN:HD21	0.62	1.92	1	1
2:A:173:NAP:O2A	2:A:173:NAP:C5D	0.62	2.46	7	4
1:A:13:ARG:HE	1:A:123:GLY:H	0.62	1.36	10	1
1:A:21:LEU:HD11	3:A:174:N22:H11	0.62	1.69	9	1
1:A:161:GLN:H	1:A:161:GLN:HE21	0.62	1.36	5	1
1:A:45:ARG:HH21	1:A:64:THR:CB	0.62	2.07	9	1
1:A:44:GLY:CA	1:A:47:ASN:ND2	0.62	2.63	5	2
1:A:15:ILE:O	1:A:17:LYS:N	0.62	2.32	7	1
1:A:17:LYS:CB	1:A:17:LYS:NZ	0.62	2.62	8	1
1:A:19:ASN:O	1:A:50:ALA:HB1	0.62	1.94	13	5
1:A:113:TYR:CE1	1:A:155:TYR:OH	0.62	2.51	10	1
1:A:14:VAL:HG13	1:A:15:ILE:HG12	0.62	1.70	3	5
1:A:29:LEU:O	1:A:29:LEU:HD13	0.61	1.95	12	1
3:A:174:N22:H8B	3:A:174:N22:C10	0.61	2.25	13	1
1:A:24:ARG:NE	3:A:174:N22:C8	0.61	2.63	6	1
1:A:100:GLN:OE1	2:A:173:NAP:O1A	0.61	2.18	2	1
1:A:160:LYS:O	1:A:161:GLN:C	0.61	2.44	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:GLU:OE1	1:A:12:ASN:N	0.61	2.33	10	1
1:A:32:VAL:HG13	1:A:33:LYS:N	0.61	2.09	15	11
1:A:36:THR:OG1	1:A:39:HIS:CG	0.61	2.54	4	1
1:A:15:ILE:HB	2:A:173:NAP:H71N	0.61	1.56	1	3
1:A:97:GLY:O	2:A:173:NAP:C5N	0.61	2.49	7	3
1:A:5:PHE:CE2	1:A:95:ILE:HG21	0.61	2.31	2	2
1:A:47:ASN:HD22	2:A:173:NAP:C3D	0.61	2.07	6	1
1:A:115:THR:OG1	1:A:155:TYR:CZ	0.60	2.54	2	3
1:A:19:ASN:OD1	2:A:173:NAP:C3N	0.60	2.49	5	1
1:A:65:ARG:O	1:A:65:ARG:NE	0.60	2.34	9	1
1:A:13:ARG:NH1	1:A:124:ASP:N	0.60	2.50	3	1
1:A:47:ASN:OD1	1:A:48:TYR:N	0.60	2.35	1	1
1:A:47:ASN:OD1	2:A:173:NAP:C3D	0.60	2.50	5	3
1:A:5:PHE:CD1	1:A:95:ILE:O	0.60	2.55	3	2
1:A:20:ASN:ND2	3:A:174:N22:C8	0.60	2.61	12	1
1:A:6:MET:O	1:A:96:PHE:CE1	0.60	2.55	1	2
1:A:19:ASN:OD1	2:A:173:NAP:C4N	0.60	2.50	5	1
1:A:11:GLU:OE1	1:A:12:ASN:CG	0.59	2.45	11	1
1:A:156:HIS:ND1	1:A:156:HIS:O	0.59	2.34	14	1
1:A:114:ILE:HD12	1:A:114:ILE:H	0.59	1.56	8	2
1:A:83:VAL:O	1:A:87:CYS:SG	0.59	2.55	3	4
1:A:102:TYR:CE2	1:A:106:LEU:HD11	0.59	2.33	6	1
1:A:13:ARG:HH11	1:A:123:GLY:H	0.59	1.41	2	1
1:A:100:GLN:OE1	2:A:173:NAP:O5B	0.59	2.20	3	2
1:A:45:ARG:CZ	2:A:173:NAP:O3X	0.59	2.50	9	2
1:A:96:PHE:CG	1:A:96:PHE:O	0.59	2.56	10	1
1:A:161:GLN:N	1:A:161:GLN:CD	0.59	2.60	12	2
1:A:18:ASP:O	1:A:19:ASN:OD1	0.59	2.21	12	1
1:A:159:GLU:CD	1:A:160:LYS:O	0.59	2.46	15	3
1:A:137:GLU:OE1	1:A:137:GLU:N	0.59	2.35	7	2
1:A:100:GLN:NE2	2:A:173:NAP:O2N	0.59	2.34	12	2
1:A:113:TYR:CE1	1:A:157:VAL:HG13	0.59	2.32	4	1
1:A:100:GLN:CD	2:A:173:NAP:C5B	0.59	2.73	6	1
2:A:173:NAP:O2X	2:A:173:NAP:O3B	0.59	2.20	11	2
1:A:100:GLN:NE2	2:A:173:NAP:H8A	0.59	2.12	14	3
1:A:14:VAL:HG23	1:A:126:PHE:C	0.59	2.23	5	1
1:A:13:ARG:HE	1:A:16:GLY:C	0.59	2.05	8	1
1:A:6:MET:HG2	3:A:174:N22:HN7	0.59	1.58	3	1
1:A:45:ARG:CB	1:A:45:ARG:CZ	0.59	2.80	4	1
1:A:8:ALA:O	1:A:14:VAL:O	0.59	2.21	9	1
1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CD1	0.59	2.66	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:ASN:CG	2:A:173:NAP:C6N	0.59	2.75	10	6
1:A:47:ASN:ND2	1:A:97:GLY:O	0.59	2.34	11	5
1:A:47:ASN:OD1	2:A:173:NAP:O2A	0.59	2.21	8	3
1:A:65:ARG:O	1:A:66:ASN:CG	0.59	2.46	13	7
1:A:17:LYS:O	1:A:122:GLU:O	0.58	2.21	4	8
1:A:15:ILE:HD12	2:A:173:NAP:O4D	0.58	1.98	4	2
1:A:47:ASN:OD1	2:A:173:NAP:C6N	0.58	2.50	4	3
1:A:47:ASN:ND2	2:A:173:NAP:C6N	0.58	2.55	10	2
1:A:161:GLN:HE21	1:A:161:GLN:N	0.58	1.96	5	2
1:A:18:ASP:C	1:A:19:ASN:CG	0.58	2.71	9	1
1:A:25:LEU:HD22	1:A:153:TYR:OH	0.58	1.99	12	1
3:A:174:N22:C9	3:A:174:N22:C8	0.58	2.81	13	1
1:A:115:THR:OG1	1:A:155:TYR:CE1	0.58	2.55	6	2
1:A:20:ASN:HD21	3:A:174:N22:C2	0.58	2.11	5	1
1:A:17:LYS:CB	1:A:17:LYS:HZ2	0.58	2.12	8	1
1:A:29:LEU:HD13	1:A:29:LEU:C	0.58	2.23	12	1
1:A:100:GLN:OE1	1:A:101:ILE:CD1	0.58	2.52	3	1
1:A:5:PHE:CZ	1:A:95:ILE:HG21	0.58	2.33	15	3
1:A:156:HIS:CE1	1:A:158:TYR:CG	0.58	2.92	14	1
1:A:9:MET:SD	1:A:9:MET:C	0.58	2.87	1	3
1:A:19:ASN:HD21	3:A:174:N22:C2	0.58	2.08	12	1
1:A:18:ASP:C	1:A:20:ASN:N	0.58	2.59	8	6
1:A:144:LEU:O	1:A:151:TYR:O	0.58	2.22	15	2
1:A:47:ASN:CG	2:A:173:NAP:H2D	0.58	2.24	15	1
1:A:18:ASP:O	1:A:19:ASN:CG	0.58	2.46	7	4
1:A:47:ASN:OD1	2:A:173:NAP:C2D	0.57	2.52	8	5
1:A:149:ASN:O	1:A:149:ASN:OD1	0.57	2.22	12	3
1:A:115:THR:OG1	1:A:155:TYR:CE2	0.57	2.56	2	1
1:A:8:ALA:CB	2:A:173:NAP:N7N	0.57	2.65	3	4
1:A:23:TRP:CD1	1:A:23:TRP:N	0.57	2.72	4	2
1:A:100:GLN:CD	2:A:173:NAP:O5B	0.57	2.48	12	1
1:A:29:LEU:HD23	1:A:29:LEU:C	0.57	2.24	10	1
1:A:23:TRP:NE1	3:A:174:N22:H2B	0.57	2.13	1	2
1:A:23:TRP:NE1	3:A:174:N22:H7A	0.57	2.13	1	1
1:A:149:ASN:OD1	1:A:153:TYR:OH	0.57	2.22	11	1
1:A:140:VAL:O	1:A:140:VAL:HG13	0.57	1.98	13	3
2:A:173:NAP:PA	2:A:173:NAP:C5D	0.57	2.91	5	1
1:A:101:ILE:HG22	1:A:105:PHE:CZ	0.57	2.35	9	1
1:A:13:ARG:NH2	1:A:121:PHE:O	0.57	2.37	12	1
1:A:33:LYS:O	1:A:37:MET:N	0.57	2.38	4	2
1:A:11:GLU:OE2	1:A:119:HIS:O	0.57	2.23	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:ARG:HD3	3:A:174:N22:H8A	0.57	1.76	14	1
1:A:106:LEU:C	1:A:106:LEU:CD2	0.57	2.74	4	1
1:A:19:ASN:N	1:A:19:ASN:OD1	0.57	2.35	6	2
1:A:47:ASN:ND2	2:A:173:NAP:C3D	0.57	2.67	6	1
1:A:96:PHE:O	1:A:97:GLY:O	0.56	2.23	2	3
1:A:24:ARG:HE	3:A:174:N22:C8	0.56	2.13	6	1
1:A:96:PHE:CE1	3:A:174:N22:N7	0.56	2.73	15	1
1:A:10:ASP:CG	1:A:13:ARG:NH1	0.56	2.63	8	1
1:A:14:VAL:HG22	1:A:127:PHE:HB2	0.56	1.74	5	1
1:A:19:ASN:O	1:A:19:ASN:ND2	0.56	2.37	5	2
1:A:23:TRP:NE1	3:A:174:N22:C2	0.56	2.69	8	2
1:A:154:TYR:CD1	1:A:154:TYR:N	0.56	2.72	14	4
1:A:100:GLN:CD	1:A:101:ILE:N	0.56	2.63	12	2
1:A:159:GLU:CD	1:A:159:GLU:C	0.56	2.74	11	3
1:A:82:GLU:OE1	1:A:83:VAL:N	0.56	2.39	7	1
1:A:9:MET:SD	1:A:10:ASP:N	0.56	2.78	9	1
1:A:80:VAL:HG13	1:A:105:PHE:CZ	0.56	2.35	15	2
1:A:80:VAL:HG23	1:A:105:PHE:CZ	0.56	2.35	14	2
1:A:19:ASN:OD1	3:A:174:N22:C2	0.56	2.54	12	1
1:A:6:MET:HE1	3:A:174:N22:N8	0.56	2.14	11	2
1:A:13:ARG:NH1	1:A:121:PHE:N	0.56	2.53	7	1
1:A:13:ARG:HH21	1:A:122:GLU:CA	0.56	2.13	11	1
1:A:96:PHE:CZ	2:A:173:NAP:H4N	0.56	2.36	12	1
1:A:14:VAL:O	1:A:15:ILE:CG2	0.56	2.53	10	8
1:A:14:VAL:HG23	1:A:126:PHE:HA	0.56	1.76	5	2
1:A:109:VAL:CG2	1:A:110:ASP:N	0.56	2.69	6	2
1:A:118:HIS:O	1:A:118:HIS:CD2	0.56	2.59	15	1
1:A:18:ASP:O	1:A:19:ASN:CB	0.56	2.54	15	3
1:A:60:ASN:O	1:A:75:GLU:OE1	0.56	2.23	3	1
1:A:98:GLY:O	1:A:102:TYR:CD1	0.56	2.59	10	1
1:A:96:PHE:CZ	2:A:173:NAP:O7N	0.56	2.59	13	1
1:A:19:ASN:O	1:A:20:ASN:OD1	0.55	2.23	2	2
1:A:96:PHE:CE2	2:A:173:NAP:C4N	0.55	2.89	7	3
1:A:118:HIS:O	1:A:118:HIS:ND1	0.55	2.38	2	2
1:A:20:ASN:HD22	3:A:174:N22:H8B	0.55	1.55	12	1
1:A:112:LEU:HD22	1:A:114:ILE:HD11	0.55	1.77	13	1
1:A:23:TRP:CH2	3:A:174:N22:N4	0.55	2.74	2	1
1:A:23:TRP:HE1	3:A:174:N22:C2	0.55	2.14	8	1
1:A:20:ASN:CB	3:A:174:N22:H8B	0.55	2.32	5	1
1:A:47:ASN:HD21	2:A:173:NAP:C6N	0.55	2.08	3	3
1:A:60:ASN:O	1:A:60:ASN:ND2	0.55	2.39	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:137:GLU:O	1:A:137:GLU:CD	0.55	2.50	9	3
1:A:15:ILE:O	1:A:16:GLY:C	0.55	2.49	7	1
1:A:5:PHE:CE2	1:A:95:ILE:CG2	0.55	2.89	8	2
1:A:161:GLN:CD	1:A:161:GLN:N	0.55	2.65	2	2
1:A:62:ILE:HG23	1:A:74:CYS:SG	0.55	2.42	6	1
1:A:29:LEU:HB2	3:A:174:N22:H7	0.55	1.79	5	1
1:A:28:GLU:O	1:A:32:VAL:HG12	0.55	2.01	10	2
1:A:47:ASN:ND2	2:A:173:NAP:H3D	0.55	2.10	6	1
1:A:15:ILE:CG1	2:A:173:NAP:H1D	0.55	2.32	10	1
1:A:14:VAL:CG2	1:A:126:PHE:C	0.54	2.79	5	1
1:A:19:ASN:CG	3:A:174:N22:H2A	0.54	2.27	12	1
1:A:112:LEU:HD13	1:A:114:ILE:HD11	0.54	1.79	14	1
1:A:37:MET:CG	1:A:37:MET:O	0.54	2.55	15	1
1:A:45:ARG:O	1:A:49:GLU:CG	0.54	2.56	1	1
1:A:25:LEU:O	1:A:27:SER:N	0.54	2.40	2	1
1:A:100:GLN:HE22	2:A:173:NAP:H8A	0.54	1.61	10	2
1:A:146:ASP:OD1	1:A:147:GLU:N	0.54	2.39	9	2
1:A:19:ASN:H	2:A:173:NAP:C2D	0.54	2.13	12	1
1:A:125:THR:OG1	2:A:173:NAP:O2D	0.54	2.26	12	1
1:A:137:GLU:OE2	1:A:137:GLU:O	0.54	2.25	2	1
1:A:45:ARG:NH2	1:A:64:THR:OG1	0.54	2.40	12	3
1:A:19:ASN:OD1	3:A:174:N22:H2A	0.54	2.02	12	1
1:A:121:PHE:CE2	1:A:122:GLU:OE1	0.54	2.60	13	1
1:A:36:THR:O	1:A:37:MET:C	0.54	2.50	9	7
1:A:21:LEU:C	1:A:21:LEU:CD2	0.54	2.80	3	3
1:A:137:GLU:CG	1:A:137:GLU:O	0.54	2.55	4	3
1:A:47:ASN:ND2	2:A:173:NAP:O2A	0.54	2.40	11	2
1:A:122:GLU:N	1:A:122:GLU:CD	0.54	2.65	11	1
1:A:20:ASN:OD1	3:A:174:N22:C10	0.54	2.55	12	1
1:A:15:ILE:HG13	2:A:173:NAP:H2N	0.54	1.80	12	1
1:A:13:ARG:O	1:A:127:PHE:O	0.54	2.26	11	2
1:A:96:PHE:O	1:A:96:PHE:CD2	0.54	2.61	10	2
1:A:21:LEU:O	3:A:174:N22:H2	0.54	2.03	9	3
1:A:112:LEU:HD13	1:A:113:TYR:N	0.54	2.17	7	1
1:A:114:ILE:N	1:A:114:ILE:CD1	0.54	2.56	8	4
1:A:45:ARG:NH1	1:A:46:LYS:HZ3	0.54	1.99	5	1
1:A:45:ARG:NH2	2:A:173:NAP:P2B	0.54	2.81	9	1
1:A:21:LEU:CB	2:A:173:NAP:N7N	0.54	2.71	13	1
1:A:114:ILE:CD1	1:A:158:TYR:CD2	0.53	2.91	2	2
1:A:38:GLY:O	1:A:39:HIS:CG	0.53	2.61	5	2
1:A:38:GLY:O	1:A:39:HIS:O	0.53	2.25	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:98:GLY:N	1:A:102:TYR:CZ	0.53	2.76	10	1
1:A:60:ASN:O	1:A:74:CYS:SG	0.53	2.66	5	3
1:A:23:TRP:CE3	3:A:174:N22:H8A	0.53	2.38	2	1
1:A:26:PRO:CD	1:A:149:ASN:HD21	0.53	2.16	2	1
1:A:79:SER:OG	2:A:173:NAP:C2A	0.53	2.57	2	3
1:A:13:ARG:HH12	1:A:124:ASP:N	0.53	2.01	3	1
1:A:21:LEU:HD13	1:A:21:LEU:O	0.53	2.02	8	2
1:A:66:ASN:N	1:A:66:ASN:OD1	0.53	2.39	9	2
1:A:11:GLU:OE1	1:A:11:GLU:N	0.53	2.41	10	1
1:A:25:LEU:H	1:A:25:LEU:HD12	0.53	1.62	10	1
1:A:153:TYR:C	1:A:154:TYR:CD1	0.53	2.86	14	7
1:A:45:ARG:CZ	2:A:173:NAP:O2B	0.53	2.56	9	1
1:A:23:TRP:HE1	3:A:174:N22:C14	0.53	2.16	10	1
1:A:113:TYR:CD1	1:A:155:TYR:OH	0.53	2.58	10	1
1:A:100:GLN:HE21	2:A:173:NAP:PN	0.53	2.26	11	1
1:A:156:HIS:N	1:A:156:HIS:CD2	0.53	2.76	11	1
1:A:82:GLU:OE1	1:A:82:GLU:C	0.53	2.51	7	1
1:A:23:TRP:NE1	3:A:174:N22:O10	0.53	2.42	10	1
1:A:19:ASN:ND2	3:A:174:N22:C2	0.53	2.71	12	1
1:A:32:VAL:CG1	1:A:33:LYS:N	0.53	2.72	15	9
2:A:173:NAP:O3B	2:A:173:NAP:P2B	0.53	2.66	4	3
1:A:6:MET:SD	1:A:7:VAL:N	0.53	2.81	14	1
1:A:106:LEU:HD23	1:A:107:PRO:N	0.53	2.18	4	1
1:A:15:ILE:CB	2:A:173:NAP:H71N	0.53	2.17	1	1
1:A:63:VAL:O	1:A:63:VAL:HG23	0.53	2.04	5	1
1:A:10:ASP:CG	1:A:13:ARG:HH12	0.53	2.12	8	1
1:A:6:MET:HE1	1:A:24:ARG:HH12	0.53	1.64	13	1
1:A:102:TYR:CD1	1:A:102:TYR:O	0.52	2.61	8	2
1:A:23:TRP:HE1	3:A:174:N22:C15	0.52	2.18	13	1
1:A:6:MET:CG	1:A:96:PHE:CE2	0.52	2.92	14	1
1:A:161:GLN:H	1:A:161:GLN:NE2	0.52	2.01	9	3
1:A:21:LEU:CD2	1:A:22:PRO:O	0.52	2.57	4	2
1:A:21:LEU:N	1:A:22:PRO:CD	0.52	2.72	6	1
1:A:16:GLY:O	1:A:124:ASP:N	0.52	2.43	10	2
1:A:39:HIS:CD2	1:A:94:PHE:CE2	0.52	2.98	8	1
1:A:80:VAL:H	2:A:173:NAP:H2A	0.52	1.64	10	1
1:A:100:GLN:OE1	2:A:173:NAP:H8A	0.52	2.05	8	2
1:A:104:LEU:C	1:A:104:LEU:CD1	0.52	2.83	1	2
1:A:137:GLU:OE2	1:A:139:PHE:N	0.52	2.43	6	1
1:A:36:THR:O	1:A:36:THR:OG1	0.52	2.27	8	1
1:A:160:LYS:C	1:A:161:GLN:NE2	0.52	2.67	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:ARG:NE	1:A:123:GLY:H	0.52	2.03	10	1
1:A:45:ARG:CG	2:A:173:NAP:O3B	0.52	2.57	2	2
1:A:137:GLU:H	1:A:137:GLU:CD	0.52	2.12	2	1
1:A:13:ARG:HE	1:A:123:GLY:N	0.52	2.03	10	1
1:A:161:GLN:NE2	1:A:161:GLN:H	0.52	2.02	11	1
1:A:39:HIS:N	1:A:39:HIS:ND1	0.52	2.54	15	2
1:A:82:GLU:OE2	1:A:85:GLU:OE2	0.52	2.28	15	2
1:A:15:ILE:HG21	2:A:173:NAP:H71N	0.52	1.65	5	1
1:A:11:GLU:N	1:A:11:GLU:CD	0.52	2.68	10	1
1:A:17:LYS:O	1:A:121:PHE:O	0.52	2.28	11	1
1:A:137:GLU:OE1	1:A:137:GLU:C	0.52	2.53	6	1
1:A:82:GLU:OE2	1:A:85:GLU:CD	0.52	2.53	4	4
1:A:159:GLU:OE2	1:A:160:LYS:O	0.52	2.28	15	2
1:A:41:LEU:C	1:A:42:ILE:HD12	0.51	2.31	11	2
1:A:12:ASN:HB2	1:A:120:ALA:HB3	0.51	1.81	6	1
1:A:13:ARG:NE	1:A:17:LYS:N	0.51	2.57	8	1
1:A:106:LEU:O	1:A:109:VAL:HG12	0.51	2.05	8	1
1:A:24:ARG:O	1:A:25:LEU:C	0.51	2.54	14	2
1:A:25:LEU:C	1:A:27:SER:N	0.51	2.68	2	1
1:A:21:LEU:N	1:A:22:PRO:HD2	0.51	2.20	6	1
1:A:40:PRO:HG2	1:A:93:ILE:HG22	0.51	1.82	7	2
1:A:62:ILE:HD11	1:A:74:CYS:SG	0.51	2.46	10	1
1:A:24:ARG:NE	3:A:174:N22:H8A	0.51	2.13	12	1
1:A:45:ARG:NH1	1:A:45:ARG:CB	0.51	2.74	4	1
1:A:32:VAL:HG11	3:A:174:N22:N8	0.51	2.20	8	3
1:A:49:GLU:CD	1:A:49:GLU:C	0.51	2.79	12	1
1:A:121:PHE:CZ	1:A:122:GLU:OE1	0.51	2.64	13	1
1:A:21:LEU:CD2	1:A:21:LEU:H	0.51	2.17	14	1
1:A:113:TYR:CE2	1:A:157:VAL:HG22	0.51	2.40	5	1
1:A:113:TYR:CZ	1:A:155:TYR:OH	0.51	2.62	10	1
1:A:21:LEU:HG	3:A:174:N22:H2	0.51	1.83	11	1
1:A:14:VAL:HG13	1:A:15:ILE:HG13	0.51	1.82	7	1
1:A:5:PHE:CD1	1:A:109:VAL:HG22	0.51	2.39	2	1
1:A:28:GLU:CD	1:A:28:GLU:C	0.51	2.78	6	2
1:A:15:ILE:O	2:A:173:NAP:H2N	0.51	2.06	8	1
1:A:21:LEU:HD11	3:A:174:N22:H2	0.51	1.82	4	1
1:A:45:ARG:HH11	1:A:45:ARG:CG	0.51	2.19	4	1
1:A:64:THR:OG1	1:A:66:ASN:ND2	0.51	2.43	8	2
1:A:64:THR:HG23	1:A:64:THR:O	0.51	2.04	13	2
1:A:33:LYS:CG	1:A:34:LYS:N	0.51	2.74	8	3
1:A:44:GLY:CA	1:A:47:ASN:HD22	0.51	2.18	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:ILE:HB	2:A:173:NAP:H2N	0.51	1.83	14	2
1:A:21:LEU:HD11	2:A:173:NAP:O2D	0.51	2.06	10	1
1:A:23:TRP:HE1	3:A:174:N22:H2A	0.51	1.66	8	1
1:A:106:LEU:N	1:A:107:PRO:HD2	0.50	2.21	9	9
1:A:19:ASN:ND2	1:A:19:ASN:C	0.50	2.70	12	2
1:A:21:LEU:HD13	3:A:174:N22:H2	0.50	1.82	8	1
3:A:174:N22:H11	3:A:174:N22:C2	0.50	2.36	14	1
1:A:92:GLU:CG	1:A:92:GLU:O	0.50	2.59	15	2
1:A:79:SER:CB	2:A:173:NAP:H2A	0.50	2.37	4	2
1:A:11:GLU:OE2	1:A:119:HIS:C	0.50	2.54	10	1
1:A:148:LYS:O	1:A:149:ASN:ND2	0.50	2.44	10	1
1:A:13:ARG:CZ	1:A:121:PHE:O	0.50	2.59	12	1
1:A:126:PHE:O	1:A:126:PHE:CD1	0.50	2.65	11	2
1:A:29:LEU:C	1:A:29:LEU:HD23	0.50	2.32	7	1
1:A:137:GLU:O	1:A:137:GLU:OE2	0.50	2.30	7	1
1:A:98:GLY:C	1:A:102:TYR:CE2	0.50	2.90	10	1
1:A:25:LEU:H	1:A:25:LEU:CD1	0.50	2.20	10	1
1:A:23:TRP:CH2	1:A:29:LEU:HD22	0.50	2.41	1	2
1:A:47:ASN:ND2	2:A:173:NAP:O4D	0.50	2.45	3	1
1:A:150:PRO:O	1:A:151:TYR:CD2	0.50	2.65	9	2
1:A:24:ARG:CZ	1:A:151:TYR:CZ	0.50	2.95	15	1
1:A:100:GLN:OE1	2:A:173:NAP:O3	0.50	2.29	6	3
1:A:98:GLY:CA	1:A:102:TYR:CZ	0.50	2.95	10	1
1:A:24:ARG:NE	1:A:115:THR:HG21	0.50	2.22	11	1
1:A:135:TRP:CB	1:A:158:TYR:CD2	0.50	2.95	4	2
1:A:21:LEU:HD22	1:A:21:LEU:C	0.50	2.32	8	1
1:A:58:ARG:O	1:A:59:ARG:C	0.50	2.55	13	1
1:A:21:LEU:CD1	3:A:174:N22:H2	0.49	2.37	4	1
1:A:15:ILE:CG1	1:A:16:GLY:H	0.49	2.20	7	1
1:A:45:ARG:CZ	1:A:64:THR:OG1	0.49	2.60	12	1
1:A:60:ASN:N	1:A:60:ASN:OD1	0.49	2.44	8	1
1:A:15:ILE:CD1	1:A:99:ALA:HB2	0.49	2.33	1	1
1:A:23:TRP:CG	3:A:174:N22:H7	0.49	2.40	2	1
1:A:156:HIS:CD2	1:A:158:TYR:CD1	0.49	3.01	4	1
1:A:20:ASN:CG	3:A:174:N22:H2B	0.49	2.32	5	1
1:A:47:ASN:O	1:A:51:ILE:CD1	0.49	2.59	5	1
1:A:60:ASN:O	1:A:61:ILE:HD13	0.49	2.07	5	1
1:A:40:PRO:CG	1:A:93:ILE:HG22	0.49	2.37	8	2
1:A:5:PHE:CD2	1:A:102:TYR:CD2	0.49	2.99	9	1
1:A:82:GLU:OE1	1:A:85:GLU:CD	0.49	2.55	14	1
1:A:36:THR:OG1	1:A:39:HIS:CD2	0.49	2.65	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:159:GLU:OE2	1:A:159:GLU:O	0.49	2.29	14	1
1:A:65:ARG:HE	1:A:65:ARG:CA	0.49	2.20	15	1
1:A:15:ILE:HD12	2:A:173:NAP:C2N	0.49	2.38	10	1
1:A:100:GLN:CG	1:A:101:ILE:N	0.49	2.76	2	5
1:A:137:GLU:C	1:A:137:GLU:CD	0.49	2.80	6	1
1:A:21:LEU:HD11	2:A:173:NAP:H1D	0.49	1.85	7	1
1:A:18:ASP:O	1:A:19:ASN:C	0.49	2.56	8	2
1:A:20:ASN:OD1	3:A:174:N22:C2	0.49	2.58	5	2
1:A:96:PHE:CE2	2:A:173:NAP:H4N	0.49	2.42	12	1
1:A:75:GLU:CD	1:A:75:GLU:N	0.49	2.71	12	2
1:A:106:LEU:N	1:A:107:PRO:HD3	0.49	2.23	3	3
1:A:47:ASN:ND2	2:A:173:NAP:C5N	0.49	2.76	15	3
1:A:45:ARG:NH2	1:A:69:TYR:CZ	0.49	2.80	11	1
1:A:96:PHE:O	2:A:173:NAP:C5N	0.49	2.61	7	2
1:A:33:LYS:O	1:A:37:MET:CA	0.49	2.61	8	1
1:A:102:TYR:CD1	1:A:102:TYR:N	0.49	2.79	10	1
1:A:156:HIS:CE1	1:A:158:TYR:CD1	0.49	3.01	14	1
1:A:15:ILE:HB	2:A:173:NAP:H1D	0.48	1.85	3	1
1:A:15:ILE:CG2	2:A:173:NAP:H71N	0.48	2.21	5	1
1:A:45:ARG:NE	1:A:64:THR:OG1	0.48	2.46	11	2
1:A:47:ASN:CG	2:A:173:NAP:O2A	0.48	2.56	11	1
1:A:96:PHE:CD2	2:A:173:NAP:C4N	0.48	2.96	3	1
1:A:18:ASP:OD1	1:A:122:GLU:O	0.48	2.32	4	1
1:A:24:ARG:HH11	1:A:25:LEU:H	0.48	1.51	12	1
1:A:106:LEU:HD12	1:A:106:LEU:O	0.48	2.08	14	1
1:A:25:LEU:CD2	1:A:25:LEU:N	0.48	2.76	1	1
1:A:126:PHE:O	1:A:126:PHE:CG	0.48	2.66	1	1
1:A:139:PHE:CD1	1:A:140:VAL:N	0.48	2.81	3	3
1:A:18:ASP:C	1:A:20:ASN:H	0.48	2.16	8	5
1:A:13:ARG:HH21	1:A:122:GLU:H	0.48	1.51	11	1
1:A:21:LEU:CD1	2:A:173:NAP:O2D	0.48	2.62	13	1
1:A:31:TYR:O	1:A:35:THR:OG1	0.48	2.21	8	1
1:A:126:PHE:O	1:A:127:PHE:CG	0.48	2.66	11	1
1:A:96:PHE:HZ	3:A:174:N22:HN7A	0.48	1.51	3	1
1:A:45:ARG:NH1	1:A:45:ARG:CG	0.48	2.75	4	1
1:A:100:GLN:OE1	2:A:173:NAP:C5B	0.48	2.51	5	1
1:A:3:VAL:HG22	1:A:93:ILE:HD11	0.48	1.85	6	2
1:A:45:ARG:NH1	1:A:64:THR:CB	0.48	2.75	4	1
1:A:20:ASN:C	1:A:20:ASN:ND2	0.48	2.71	6	1
1:A:142:LYS:CB	1:A:142:LYS:HZ3	0.48	2.22	6	1
1:A:29:LEU:C	1:A:29:LEU:CD2	0.48	2.87	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:149:ASN:ND2	1:A:149:ASN:N	0.48	2.62	7	1
1:A:23:TRP:O	1:A:24:ARG:HD3	0.48	2.08	15	1
1:A:24:ARG:CZ	1:A:151:TYR:CE2	0.48	2.96	15	1
1:A:142:LYS:CB	1:A:142:LYS:NZ	0.48	2.76	6	1
1:A:10:ASP:CB	1:A:13:ARG:NH1	0.48	2.77	8	1
1:A:45:ARG:NH2	1:A:64:THR:CB	0.48	2.75	9	1
1:A:148:LYS:C	1:A:149:ASN:HD22	0.47	2.16	10	1
1:A:100:GLN:HG3	2:A:173:NAP:H52A	0.47	1.85	12	1
1:A:96:PHE:O	1:A:102:TYR:OH	0.47	2.32	12	2
1:A:13:ARG:NH2	1:A:122:GLU:N	0.47	2.61	11	1
1:A:159:GLU:OE1	1:A:160:LYS:O	0.47	2.31	15	1
1:A:113:TYR:CE2	1:A:157:VAL:HG13	0.47	2.43	5	1
1:A:112:LEU:HD12	1:A:114:ILE:HD11	0.47	1.85	15	1
1:A:93:ILE:HD12	1:A:95:ILE:HD11	0.47	1.85	4	1
1:A:142:LYS:HZ3	1:A:142:LYS:HB3	0.47	1.70	4	1
1:A:21:LEU:HD13	1:A:22:PRO:N	0.47	2.23	6	1
1:A:13:ARG:HH12	1:A:121:PHE:H	0.47	1.49	7	1
1:A:47:ASN:HB3	2:A:173:NAP:H6N	0.47	1.86	14	1
1:A:21:LEU:H	1:A:21:LEU:HD22	0.47	1.70	12	3
1:A:110:ASP:N	1:A:110:ASP:OD1	0.47	2.46	2	2
1:A:96:PHE:HB3	2:A:173:NAP:H4N	0.47	1.85	5	1
1:A:79:SER:HA	2:A:173:NAP:H2A	0.47	1.85	6	1
1:A:118:HIS:CD2	1:A:118:HIS:C	0.47	2.91	8	1
1:A:9:MET:N	1:A:115:THR:O	0.47	2.48	10	1
1:A:58:ARG:O	1:A:59:ARG:NH2	0.47	2.48	12	1
1:A:21:LEU:CB	2:A:173:NAP:H71N	0.47	2.22	13	1
1:A:21:LEU:HB3	2:A:173:NAP:H71N	0.47	1.70	13	1
1:A:15:ILE:CD1	2:A:173:NAP:H1D	0.47	2.39	10	1
1:A:58:ARG:O	1:A:58:ARG:HG3	0.47	2.10	11	2
1:A:97:GLY:O	2:A:173:NAP:C6N	0.47	2.63	5	1
1:A:13:ARG:CZ	1:A:13:ARG:CB	0.47	2.92	6	1
1:A:23:TRP:HE1	3:A:174:N22:C10	0.47	2.23	1	1
1:A:150:PRO:C	1:A:151:TYR:CG	0.47	2.93	4	3
1:A:142:LYS:H	1:A:142:LYS:HD2	0.47	1.70	14	2
1:A:5:PHE:CE2	1:A:102:TYR:CG	0.47	3.03	9	1
1:A:47:ASN:OD1	1:A:47:ASN:C	0.46	2.58	1	1
1:A:12:ASN:O	1:A:13:ARG:NH2	0.46	2.47	9	1
1:A:14:VAL:C	1:A:15:ILE:HG23	0.46	2.35	15	6
1:A:152:THR:C	1:A:153:TYR:CD1	0.46	2.93	4	1
1:A:45:ARG:NH1	1:A:46:LYS:NZ	0.46	2.63	5	1
1:A:14:VAL:HG13	1:A:15:ILE:CG1	0.46	2.40	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:98:GLY:CA	1:A:100:GLN:HE22	0.46	2.23	7	1
1:A:102:TYR:OH	2:A:173:NAP:C4N	0.46	2.64	10	1
1:A:22:PRO:O	1:A:23:TRP:CD1	0.46	2.68	7	1
1:A:60:ASN:ND2	1:A:74:CYS:SG	0.46	2.88	1	3
1:A:71:VAL:O	1:A:74:CYS:O	0.46	2.33	14	3
1:A:45:ARG:NH1	1:A:45:ARG:HB3	0.46	2.25	9	2
1:A:3:VAL:HG22	1:A:93:ILE:CD1	0.46	2.39	6	1
1:A:64:THR:HG21	1:A:69:TYR:CD2	0.46	2.45	11	1
1:A:12:ASN:HD22	1:A:12:ASN:N	0.46	2.08	4	1
1:A:3:VAL:O	1:A:109:VAL:HG22	0.46	2.11	5	1
1:A:12:ASN:O	1:A:13:ARG:CZ	0.46	2.63	9	1
2:A:173:NAP:H8A	2:A:173:NAP:C3B	0.46	2.39	10	1
1:A:155:TYR:C	1:A:156:HIS:CD2	0.46	2.93	11	1
1:A:21:LEU:HD12	2:A:173:NAP:H2N	0.46	1.88	13	1
1:A:100:GLN:HE21	2:A:173:NAP:H8A	0.46	1.69	14	1
1:A:5:PHE:CZ	1:A:109:VAL:HG22	0.46	2.43	2	1
1:A:124:ASP:N	1:A:124:ASP:OD1	0.46	2.47	4	1
1:A:137:GLU:N	1:A:137:GLU:CD	0.46	2.73	7	1
1:A:5:PHE:CD1	1:A:109:VAL:CG2	0.46	2.99	10	1
1:A:42:ILE:HD13	1:A:95:ILE:CD1	0.46	2.41	14	3
1:A:23:TRP:CE3	3:A:174:N22:C8	0.46	2.99	2	1
1:A:153:TYR:CD1	1:A:153:TYR:N	0.46	2.83	2	1
1:A:24:ARG:HD3	3:A:174:N22:N4	0.46	2.26	3	1
1:A:47:ASN:HA	2:A:173:NAP:H3D	0.46	1.87	15	2
1:A:135:TRP:HB3	1:A:158:TYR:CD2	0.46	2.46	4	1
1:A:59:ARG:CB	1:A:59:ARG:NH1	0.46	2.79	9	1
1:A:13:ARG:HH21	1:A:121:PHE:H	0.46	1.53	12	1
1:A:44:GLY:CA	1:A:47:ASN:OD1	0.46	2.64	13	1
1:A:161:GLN:N	1:A:161:GLN:NE2	0.46	2.64	2	2
1:A:135:TRP:CH2	1:A:160:LYS:CG	0.46	2.99	4	2
1:A:17:LYS:NZ	1:A:17:LYS:HB3	0.46	2.25	8	1
1:A:25:LEU:HD21	1:A:153:TYR:OH	0.46	2.10	13	1
1:A:44:GLY:N	1:A:47:ASN:OD1	0.46	2.48	13	1
1:A:47:ASN:CG	1:A:48:TYR:N	0.45	2.74	1	1
1:A:102:TYR:CE2	1:A:106:LEU:CD1	0.45	3.00	6	1
1:A:93:ILE:H	1:A:93:ILE:HD13	0.45	1.70	10	1
1:A:123:GLY:C	1:A:124:ASP:OD1	0.45	2.59	11	1
1:A:6:MET:CE	1:A:24:ARG:HH12	0.45	2.22	13	1
1:A:161:GLN:O	1:A:162:GLN:C	0.45	2.57	14	1
1:A:66:ASN:ND2	1:A:66:ASN:N	0.45	2.62	2	1
1:A:100:GLN:CD	2:A:173:NAP:O1A	0.45	2.58	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:GLN:OE1	2:A:173:NAP:O4B	0.45	2.35	3	1
1:A:82:GLU:CD	1:A:82:GLU:C	0.45	2.85	8	1
1:A:25:LEU:HD13	1:A:153:TYR:OH	0.45	2.12	3	1
1:A:160:LYS:O	1:A:162:GLN:N	0.45	2.50	3	1
1:A:6:MET:SD	1:A:6:MET:C	0.45	2.99	14	1
1:A:137:GLU:CD	1:A:137:GLU:N	0.45	2.73	2	1
1:A:145:THR:OG1	1:A:146:ASP:N	0.45	2.50	6	1
1:A:100:GLN:HE21	1:A:101:ILE:HG12	0.45	1.72	7	1
1:A:19:ASN:CA	2:A:173:NAP:H2D	0.45	2.41	12	1
1:A:22:PRO:O	1:A:23:TRP:C	0.45	2.60	12	1
1:A:38:GLY:O	1:A:39:HIS:C	0.45	2.60	12	1
1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:HD22	0.45	2.26	12	3
1:A:112:LEU:CD1	1:A:114:ILE:HD11	0.45	2.41	6	1
1:A:17:LYS:HZ2	1:A:17:LYS:HB3	0.45	1.72	8	1
1:A:93:ILE:HD13	1:A:93:ILE:N	0.45	2.25	10	1
1:A:15:ILE:HG13	1:A:16:GLY:N	0.45	2.27	11	3
1:A:21:LEU:CD2	3:A:174:N22:O10	0.45	2.64	1	1
1:A:100:GLN:HE22	2:A:173:NAP:C8A	0.45	2.18	10	1
1:A:82:GLU:O	1:A:85:GLU:CG	0.45	2.64	8	2
1:A:45:ARG:CZ	1:A:45:ARG:HB2	0.45	2.42	4	1
1:A:5:PHE:CE2	1:A:95:ILE:HG22	0.45	2.47	6	1
1:A:21:LEU:HD21	3:A:174:N22:H11	0.45	1.88	9	2
1:A:21:LEU:HB2	3:A:174:N22:H2A	0.45	1.89	10	1
1:A:18:ASP:C	1:A:19:ASN:OD1	0.45	2.60	9	1
1:A:47:ASN:ND2	2:A:173:NAP:H5N	0.45	2.27	12	1
1:A:1:MET:O	1:A:110:ASP:OD2	0.45	2.34	2	1
1:A:113:TYR:CE1	1:A:157:VAL:CG1	0.45	2.99	4	1
1:A:20:ASN:ND2	3:A:174:N22:C2	0.45	2.80	5	1
1:A:13:ARG:NE	1:A:16:GLY:C	0.45	2.73	8	1
1:A:47:ASN:OD1	2:A:173:NAP:H3D	0.45	2.11	11	2
1:A:114:ILE:HD11	1:A:158:TYR:CG	0.44	2.46	1	1
1:A:64:THR:HG22	1:A:76:VAL:HG23	0.44	1.90	3	1
1:A:25:LEU:HD12	1:A:28:GLU:H	0.44	1.72	5	1
1:A:45:ARG:CD	2:A:173:NAP:O3X	0.44	2.65	13	1
1:A:118:HIS:O	1:A:118:HIS:CG	0.44	2.69	15	1
1:A:11:GLU:C	1:A:12:ASN:HD22	0.44	2.20	4	1
1:A:32:VAL:HG11	3:A:174:N22:HN8	0.44	1.73	8	2
1:A:10:ASP:OD2	1:A:13:ARG:NH2	0.44	2.51	6	1
1:A:93:ILE:N	1:A:93:ILE:CD1	0.44	2.75	7	2
1:A:23:TRP:NE1	3:A:174:N22:C7	0.44	2.80	1	1
1:A:60:ASN:CG	1:A:74:CYS:SG	0.44	3.01	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:37:MET:O	1:A:37:MET:CG	0.44	2.66	6	3
1:A:91:GLU:CB	1:A:92:GLU:OE1	0.44	2.66	3	1
1:A:48:TYR:CE2	1:A:71:VAL:HG11	0.44	2.47	5	1
1:A:25:LEU:O	1:A:28:GLU:N	0.44	2.51	2	1
1:A:17:LYS:HG2	1:A:18:ASP:N	0.44	2.27	13	3
1:A:15:ILE:CG1	1:A:16:GLY:N	0.44	2.81	13	2
1:A:13:ARG:CG	1:A:125:THR:O	0.44	2.65	3	1
1:A:47:ASN:ND2	2:A:173:NAP:H52N	0.44	2.28	4	1
1:A:87:CYS:C	1:A:89:ASN:H	0.44	2.21	4	1
1:A:109:VAL:CG1	1:A:111:LYS:O	0.44	2.66	7	1
2:A:173:NAP:C8A	2:A:173:NAP:C3B	0.44	2.96	10	1
3:A:174:N22:C11	3:A:174:N22:C2	0.44	2.94	14	1
1:A:17:LYS:HG3	1:A:18:ASP:N	0.44	2.27	15	1
1:A:100:GLN:HE21	1:A:101:ILE:CG1	0.44	2.26	7	1
1:A:96:PHE:HE1	2:A:173:NAP:H4N	0.44	1.73	11	1
1:A:80:VAL:HG11	1:A:104:LEU:CD2	0.44	2.43	12	1
1:A:80:VAL:O	1:A:83:VAL:N	0.43	2.51	7	3
1:A:106:LEU:CB	1:A:107:PRO:CD	0.43	2.96	8	1
1:A:80:VAL:O	1:A:81:GLU:C	0.43	2.61	15	1
1:A:14:VAL:HG22	1:A:127:PHE:HD1	0.43	1.74	6	1
1:A:58:ARG:NH1	1:A:58:ARG:CG	0.43	2.81	10	1
1:A:14:VAL:HG22	1:A:15:ILE:HG23	0.43	1.88	1	1
1:A:12:ASN:H	1:A:12:ASN:HD22	0.43	1.56	3	1
1:A:162:GLN:CD	1:A:162:GLN:C	0.43	2.86	6	2
1:A:23:TRP:O	1:A:151:TYR:OH	0.43	2.35	7	1
1:A:21:LEU:HB3	2:A:173:NAP:N7N	0.43	2.28	9	1
1:A:110:ASP:O	1:A:110:ASP:OD1	0.43	2.36	9	1
1:A:11:GLU:CD	1:A:12:ASN:ND2	0.43	2.76	11	1
1:A:13:ARG:NH2	1:A:121:PHE:H	0.43	2.12	12	1
1:A:6:MET:SD	1:A:24:ARG:NH1	0.43	2.91	13	1
1:A:70:HIS:CD2	1:A:70:HIS:N	0.43	2.85	13	1
1:A:22:PRO:CG	1:A:117:ILE:CD1	0.43	2.96	1	1
1:A:60:ASN:OD1	1:A:60:ASN:N	0.43	2.51	1	1
1:A:151:TYR:CD1	1:A:151:TYR:O	0.43	2.72	7	1
1:A:5:PHE:CE1	1:A:95:ILE:HG13	0.43	2.48	12	3
1:A:86:LEU:O	1:A:89:ASN:CB	0.43	2.66	13	1
1:A:80:VAL:HG23	1:A:105:PHE:CE2	0.43	2.47	14	1
1:A:1:MET:SD	1:A:1:MET:N	0.43	2.77	2	1
1:A:142:LYS:H	1:A:142:LYS:CD	0.43	2.26	5	1
1:A:47:ASN:OD1	1:A:97:GLY:O	0.43	2.37	13	1
1:A:13:ARG:NH2	1:A:126:PHE:HB3	0.43	2.28	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:VAL:HB	1:A:127:PHE:N	0.43	2.28	3	2
1:A:48:TYR:O	1:A:52:GLY:N	0.43	2.51	1	1
1:A:21:LEU:HG	2:A:173:NAP:N7N	0.43	2.29	4	1
1:A:126:PHE:C	1:A:126:PHE:CD1	0.43	2.96	5	1
1:A:113:TYR:O	1:A:113:TYR:CG	0.43	2.68	10	1
1:A:24:ARG:HH11	1:A:24:ARG:HB2	0.43	1.74	15	1
1:A:15:ILE:CB	2:A:173:NAP:H2N	0.43	2.44	10	1
1:A:100:GLN:CG	2:A:173:NAP:O2N	0.43	2.67	10	1
1:A:32:VAL:HG21	3:A:174:N22:N8	0.43	2.29	5	2
1:A:82:GLU:OE1	1:A:85:GLU:OE2	0.43	2.36	14	1
1:A:91:GLU:CD	1:A:91:GLU:H	0.43	2.21	6	1
1:A:45:ARG:HH12	2:A:173:NAP:C3B	0.43	2.26	9	1
1:A:135:TRP:CZ3	1:A:160:LYS:N	0.42	2.87	3	1
1:A:11:GLU:OE1	1:A:118:HIS:ND1	0.42	2.52	6	1
1:A:112:LEU:CD1	1:A:113:TYR:N	0.42	2.82	7	1
1:A:150:PRO:O	1:A:151:TYR:CD1	0.42	2.72	8	1
1:A:24:ARG:NH2	1:A:153:TYR:CD1	0.42	2.87	14	1
1:A:23:TRP:CE3	3:A:174:N22:C7	0.42	3.03	2	1
1:A:17:LYS:O	1:A:18:ASP:CG	0.42	2.61	6	1
1:A:145:THR:O	1:A:146:ASP:CG	0.42	2.63	8	1
1:A:28:GLU:O	1:A:28:GLU:OE1	0.42	2.38	10	1
1:A:70:HIS:CD2	1:A:70:HIS:O	0.42	2.73	7	1
1:A:51:ILE:HG23	3:A:174:N22:C15	0.42	2.45	9	1
1:A:117:ILE:HG22	1:A:119:HIS:H	0.42	1.73	10	1
1:A:97:GLY:HA3	1:A:101:ILE:HG21	0.42	1.92	13	1
1:A:13:ARG:NH2	1:A:122:GLU:H	0.42	2.11	4	1
1:A:45:ARG:HH11	1:A:45:ARG:HG2	0.42	1.74	4	1
1:A:20:ASN:ND2	3:A:174:N22:H11	0.42	2.29	5	1
1:A:19:ASN:OD1	1:A:51:ILE:CG1	0.42	2.67	12	1
1:A:64:THR:O	1:A:64:THR:CG2	0.42	2.67	13	1
1:A:2:ILE:O	1:A:93:ILE:HD13	0.42	2.14	2	1
1:A:23:TRP:HA	3:A:174:N22:H8	0.42	1.90	3	2
1:A:152:THR:HG22	1:A:153:TYR:N	0.42	2.29	5	1
1:A:137:GLU:N	1:A:137:GLU:OE1	0.42	2.44	2	1
1:A:24:ARG:HG2	3:A:174:N22:H7	0.42	1.90	3	1
1:A:6:MET:CB	1:A:96:PHE:CE1	0.42	3.03	4	1
1:A:32:VAL:O	1:A:36:THR:OG1	0.42	2.25	9	1
1:A:42:ILE:O	1:A:96:PHE:N	0.42	2.53	9	1
1:A:96:PHE:CZ	2:A:173:NAP:C7N	0.42	3.03	13	1
1:A:30:GLN:O	1:A:34:LYS:CB	0.42	2.68	4	1
1:A:90:GLU:O	1:A:93:ILE:HD12	0.42	2.14	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:PHE:O	1:A:96:PHE:CG	0.42	2.72	12	1
1:A:114:ILE:CD1	1:A:158:TYR:CD1	0.42	3.02	1	1
1:A:156:HIS:CD2	1:A:157:VAL:N	0.42	2.87	4	1
1:A:58:ARG:CG	1:A:58:ARG:HH11	0.42	2.26	10	1
1:A:6:MET:CE	3:A:174:N22:N2	0.42	2.83	3	1
1:A:137:GLU:CD	1:A:137:GLU:C	0.42	2.86	7	2
1:A:45:ARG:NH2	1:A:64:THR:HA	0.42	2.30	9	1
1:A:51:ILE:O	1:A:52:GLY:C	0.42	2.63	9	1
1:A:23:TRP:CH2	1:A:29:LEU:CD2	0.42	3.03	1	2
1:A:161:GLN:O	1:A:161:GLN:CD	0.42	2.63	3	1
1:A:45:ARG:NH1	1:A:64:THR:HB	0.42	2.30	4	1
1:A:45:ARG:HH21	1:A:64:THR:CA	0.42	2.28	9	1
1:A:6:MET:HB2	1:A:96:PHE:CE2	0.42	2.50	11	1
1:A:18:ASP:O	1:A:20:ASN:CG	0.42	2.62	11	1
1:A:140:VAL:O	1:A:140:VAL:CG1	0.42	2.66	13	1
1:A:25:LEU:N	1:A:25:LEU:HD22	0.41	2.29	1	1
1:A:49:GLU:HG2	1:A:50:ALA:N	0.41	2.29	3	2
1:A:84:PHE:CG	1:A:85:GLU:N	0.41	2.87	12	3
1:A:41:LEU:HD12	1:A:58:ARG:NE	0.41	2.30	9	1
1:A:42:ILE:O	1:A:97:GLY:N	0.41	2.53	12	1
1:A:160:LYS:C	1:A:162:GLN:H	0.41	2.21	14	1
1:A:153:TYR:C	1:A:154:TYR:CG	0.41	2.98	6	1
1:A:5:PHE:CZ	1:A:95:ILE:CB	0.41	3.03	8	2
1:A:110:ASP:OD1	1:A:110:ASP:C	0.41	2.63	9	1
1:A:86:LEU:O	1:A:89:ASN:CG	0.41	2.63	11	1
1:A:42:ILE:HD13	1:A:95:ILE:HD13	0.41	1.91	12	1
1:A:13:ARG:HH12	1:A:123:GLY:H	0.41	1.53	15	1
1:A:5:PHE:CE2	1:A:102:TYR:CE2	0.41	3.06	9	1
1:A:80:VAL:CG2	1:A:105:PHE:CZ	0.41	3.03	14	1
1:A:45:ARG:HG3	1:A:46:LYS:N	0.41	2.30	3	1
1:A:6:MET:HE2	3:A:174:N22:N8	0.41	2.30	7	1
1:A:48:TYR:CG	1:A:49:GLU:N	0.41	2.87	7	1
1:A:21:LEU:HD13	1:A:21:LEU:C	0.41	2.41	8	1
1:A:98:GLY:C	1:A:102:TYR:CD2	0.41	2.98	12	1
1:A:146:ASP:CG	1:A:147:GLU:H	0.41	2.23	15	1
1:A:5:PHE:CE1	1:A:95:ILE:O	0.41	2.74	3	1
1:A:136:LYS:HD3	1:A:137:GLU:N	0.41	2.30	3	1
1:A:20:ASN:ND2	3:A:174:N22:H2B	0.41	2.30	5	1
1:A:64:THR:O	1:A:64:THR:HG23	0.41	2.15	5	2
1:A:17:LYS:O	1:A:123:GLY:CA	0.41	2.69	2	1
1:A:140:VAL:HG13	1:A:140:VAL:O	0.41	2.16	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:GLN:CD	2:A:173:NAP:O2N	0.41	2.63	10	1
1:A:141:GLU:O	1:A:155:TYR:N	0.41	2.45	10	1
1:A:21:LEU:O	1:A:22:PRO:O	0.41	2.39	14	2
1:A:101:ILE:HG22	1:A:105:PHE:CD2	0.41	2.51	1	1
1:A:25:LEU:C	1:A:27:SER:H	0.41	2.22	2	1
1:A:114:ILE:HB	1:A:156:HIS:NE2	0.41	2.31	14	1
1:A:96:PHE:O	1:A:98:GLY:N	0.41	2.53	1	1
1:A:23:TRP:CB	3:A:174:N22:H8	0.41	2.42	2	1
1:A:82:GLU:OE2	1:A:85:GLU:OE1	0.41	2.38	2	2
1:A:96:PHE:N	1:A:96:PHE:CD1	0.41	2.89	6	1
1:A:22:PRO:C	1:A:23:TRP:CG	0.41	2.98	7	1
1:A:137:GLU:OE1	1:A:158:TYR:OH	0.41	2.30	8	1
1:A:5:PHE:CZ	1:A:95:ILE:HG13	0.41	2.51	10	1
1:A:3:VAL:O	1:A:109:VAL:HG13	0.41	2.16	11	1
1:A:25:LEU:HD22	1:A:149:ASN:OD1	0.41	2.16	11	1
1:A:20:ASN:HD21	1:A:51:ILE:CG1	0.41	2.28	13	1
1:A:47:ASN:O	1:A:50:ALA:N	0.41	2.54	14	1
1:A:24:ARG:O	1:A:25:LEU:O	0.41	2.38	7	1
1:A:35:THR:HG23	1:A:36:THR:HG23	0.40	1.92	9	1
1:A:113:TYR:CE1	1:A:155:TYR:CE1	0.40	3.08	10	1
1:A:51:ILE:CG2	3:A:174:N22:C14	0.40	2.98	11	1
1:A:5:PHE:CZ	1:A:95:ILE:CG2	0.40	3.04	13	1
1:A:12:ASN:ND2	1:A:13:ARG:N	0.40	2.70	3	1
1:A:114:ILE:HD13	1:A:156:HIS:NE2	0.40	2.29	4	1
1:A:135:TRP:CH2	1:A:160:LYS:HG2	0.40	2.52	4	1
1:A:13:ARG:CZ	1:A:13:ARG:HB2	0.40	2.45	6	1
1:A:113:TYR:CD1	1:A:113:TYR:O	0.40	2.75	10	1
1:A:47:ASN:OD1	2:A:173:NAP:O4D	0.40	2.40	14	1
1:A:69:TYR:O	1:A:70:HIS:CD2	0.40	2.74	1	1
1:A:24:ARG:O	1:A:25:LEU:HD12	0.40	2.16	4	1
1:A:100:GLN:HG3	1:A:101:ILE:N	0.40	2.30	5	1
1:A:20:ASN:C	1:A:20:ASN:HD22	0.40	2.22	6	1
1:A:45:ARG:CZ	2:A:173:NAP:P2B	0.40	3.09	9	1
1:A:146:ASP:O	1:A:149:ASN:C	0.40	2.65	11	1
1:A:136:LYS:C	1:A:136:LYS:CD	0.40	2.94	3	1
1:A:45:ARG:HH12	1:A:46:LYS:NZ	0.40	2.14	5	1
1:A:8:ALA:N	2:A:173:NAP:H72N	0.40	2.14	14	1
1:A:121:PHE:CG	1:A:122:GLU:N	0.40	2.90	14	1
1:A:29:LEU:CD1	3:A:174:N22:H7A	0.40	2.46	2	1
1:A:43:MET:HE3	1:A:48:TYR:HA	0.40	1.94	6	1
1:A:21:LEU:H	1:A:21:LEU:CD2	0.40	2.29	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:LEU:C	1:A:113:TYR:CD1	0.40	3.00	13	1
1:A:135:TRP:CZ3	1:A:160:LYS:HG2	0.40	2.52	15	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	149/172 (87%)	125±3 (84±2%)	16±4 (11±3%)	7±2 (5±1%)	3	25
All	All	2235/2580 (87%)	1882 (84%)	245 (11%)	108 (5%)	3	25

All 26 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	97	GLY	15
1	A	122	GLU	13
1	A	15	ILE	12
1	A	14	VAL	9
1	A	66	ASN	7
1	A	79	SER	7
1	A	91	GLU	7
1	A	59	ARG	5
1	A	22	PRO	4
1	A	25	LEU	4
1	A	37	MET	3
1	A	52	GLY	3
1	A	39	HIS	3
1	A	18	ASP	2
1	A	58	ARG	2
1	A	16	GLY	2
1	A	26	PRO	1
1	A	161	GLN	1
1	A	23	TRP	1
1	A	20	ASN	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	21	LEU	1
1	A	38	GLY	1
1	A	17	LYS	1
1	A	13	ARG	1
1	A	19	ASN	1
1	A	24	ARG	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	136/156 (87%)	106±4 (78±3%)	30±4 (22±3%)	2	29
All	All	2040/2340 (87%)	1586 (78%)	454 (22%)	2	29

All 101 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	78	HIS	15
1	A	21	LEU	14
1	A	29	LEU	14
1	A	86	LEU	12
1	A	93	ILE	12
1	A	142	LYS	12
1	A	84	PHE	11
1	A	3	VAL	10
1	A	106	LEU	10
1	A	136	LYS	10
1	A	25	LEU	10
1	A	160	LYS	10
1	A	20	ASN	10
1	A	35	THR	9
1	A	67	GLU	8
1	A	102	TYR	8
1	A	13	ARG	7
1	A	41	LEU	7
1	A	148	LYS	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	125	THR	7
1	A	144	LEU	7
1	A	58	ARG	6
1	A	74	CYS	6
1	A	91	GLU	6
1	A	45	ARG	6
1	A	15	ILE	6
1	A	17	LYS	6
1	A	59	ARG	6
1	A	111	LYS	6
1	A	23	TRP	5
1	A	24	ARG	5
1	A	80	VAL	5
1	A	100	GLN	5
1	A	43	MET	5
1	A	66	ASN	5
1	A	119	HIS	5
1	A	65	ARG	5
1	A	96	PHE	5
1	A	6	MET	5
1	A	114	ILE	5
1	A	161	GLN	5
1	A	1	MET	5
1	A	112	LEU	5
1	A	9	MET	4
1	A	145	THR	4
1	A	4	SER	4
1	A	48	TYR	4
1	A	149	ASN	4
1	A	153	TYR	4
1	A	60	ASN	4
1	A	95	ILE	4
1	A	39	HIS	4
1	A	19	ASN	4
1	A	37	MET	3
1	A	30	GLN	3
1	A	137	GLU	3
1	A	12	ASN	3
1	A	47	ASN	3
1	A	138	VAL	3
1	A	61	ILE	3
1	A	155	TYR	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	162	GLN	3
1	A	33	LYS	3
1	A	115	THR	3
1	A	122	GLU	3
1	A	5	PHE	2
1	A	124	ASP	2
1	A	156	HIS	2
1	A	27	SER	2
1	A	121	PHE	2
1	A	146	ASP	2
1	A	46	LYS	2
1	A	7	VAL	2
1	A	72	GLU	2
1	A	101	ILE	2
1	A	105	PHE	2
1	A	11	GLU	2
1	A	88	LYS	2
1	A	159	GLU	2
1	A	81	GLU	1
1	A	104	LEU	1
1	A	76	VAL	1
1	A	70	HIS	1
1	A	92	GLU	1
1	A	116	LYS	1
1	A	10	ASP	1
1	A	82	GLU	1
1	A	36	THR	1
1	A	117	ILE	1
1	A	69	TYR	1
1	A	87	CYS	1
1	A	140	VAL	1
1	A	28	GLU	1
1	A	71	VAL	1
1	A	79	SER	1
1	A	113	TYR	1
1	A	18	ASP	1
1	A	49	GLU	1
1	A	89	ASN	1
1	A	34	LYS	1
1	A	42	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 ⓘ

2 ligands are modelled in this entry.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds that are observed in the model and the number of bonds that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond length is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the average root-mean-square of all Z scores of the bond lengths.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths		
					Counts	RMSZ	#Z>2
3	N22	A	174	-	24,24,24	0.87±0.01	2±0 (8±0%)
2	NAP	A	173	-	50,52,52	1.61±0.00	7±0 (14±0%)

In the following table, the Counts columns list the number of angles for which Mogul statistics could be retrieved, the number of angles that are observed in the model and the number of angles that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond angle is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond angle with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the average root-mean-square of all Z scores of the bond angles.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond angles		
					Counts	RMSZ	#Z>2
3	N22	A	174	-	24,32,32	2.50±0.01	8±0 (33±0%)
2	NAP	A	173	-	71,80,80	1.64±0.01	12±0 (16±0%)

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the chemical component dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
3	N22	A	174	-	-	0±0,11,12,12	0±0,2,2,2
2	NAP	A	173	-	-	0±0,35,67,67	0±0,5,5,5

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
2	A	173	NAP	O7N-C7N	6.66	1.36	1.24	12	15
2	A	173	NAP	C2N-N1N	5.04	1.40	1.35	13	15
2	A	173	NAP	C5A-N7A	3.18	1.33	1.39	4	15
3	A	174	N22	C9-C10	2.56	1.22	1.19	6	15
3	A	174	N22	C6-C1	2.50	1.39	1.42	10	15
2	A	173	NAP	O4D-C1D	2.46	1.44	1.40	6	15
2	A	173	NAP	C8A-N9A	2.42	1.33	1.37	6	15
2	A	173	NAP	C6N-N1N	2.27	1.40	1.35	13	15
2	A	173	NAP	C4A-N9A	2.08	1.33	1.37	12	15

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
3	A	174	N22	C3-N4-C5	7.41	121.66	116.26	10	15
2	A	173	NAP	C4D-O4D-C1D	6.03	104.41	109.92	7	15
3	A	174	N22	C2-O10-C14	5.52	109.42	117.51	3	15
2	A	173	NAP	C5A-C4A-N3A	5.34	119.36	126.72	1	15
2	A	173	NAP	N3A-C2A-N1A	4.59	121.64	128.58	3	15
2	A	173	NAP	N3A-C4A-N9A	3.78	133.60	127.17	10	15
3	A	174	N22	C4-O2-C17	3.76	109.43	117.50	10	15
2	A	173	NAP	C2A-N3A-C4A	3.59	120.60	111.83	10	15
2	A	173	NAP	N9A-C8A-N7A	3.12	109.51	113.94	12	15
3	A	174	N22	N2-C3-N4	3.09	120.75	125.48	12	15
2	A	173	NAP	C5A-N7A-C8A	2.84	107.91	103.45	3	15
2	A	173	NAP	C4A-C5A-N7A	2.78	107.41	110.58	3	15
3	A	174	N22	O10-C14-C15	2.77	119.64	124.30	2	15
3	A	174	N22	C3-N2-C1	2.69	120.51	117.28	2	15
2	A	173	NAP	C4B-O4B-C1B	2.58	103.78	109.47	2	14
2	A	173	NAP	C2B-C1B-N9A	2.57	109.52	113.75	2	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

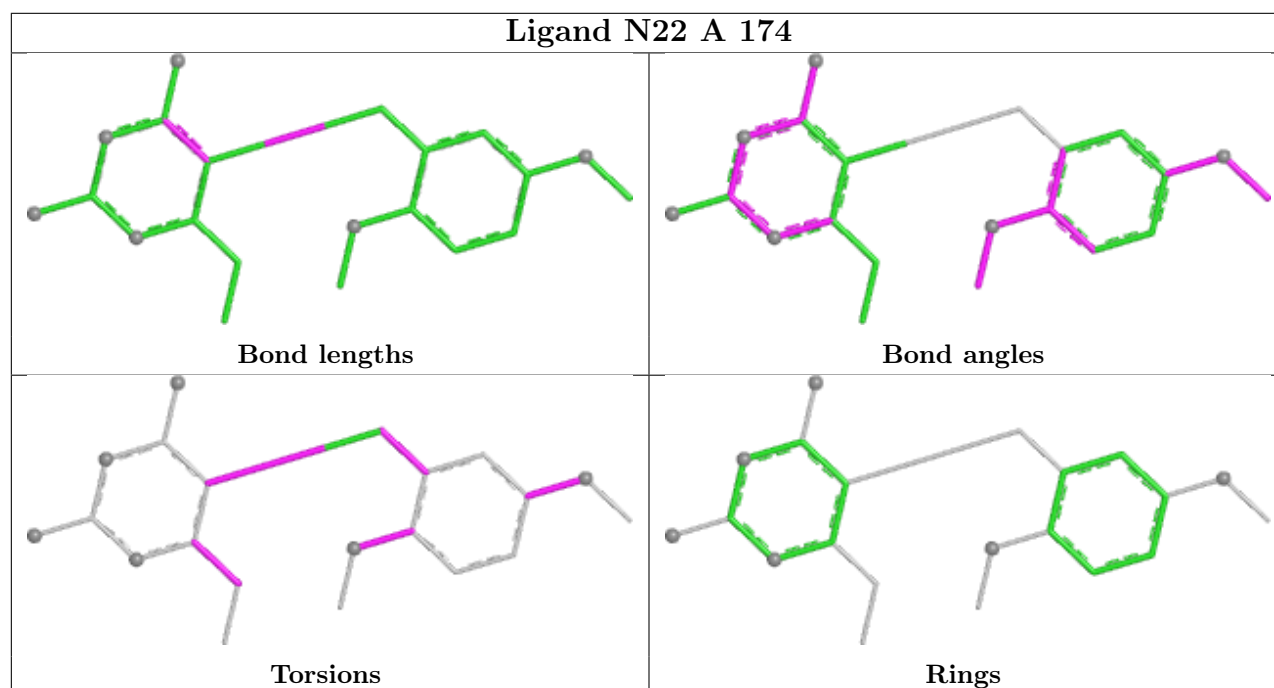
Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
3	A	174	N22	O10-C14-C13	2.52	119.72	115.96	8	15
2	A	173	NAP	C6N-N1N-C2N	2.47	119.77	121.88	15	15
3	A	174	N22	N7-C1-N2	2.43	120.31	117.03	3	15
2	A	173	NAP	C4A-N9A-C8A	2.32	108.18	105.74	12	15

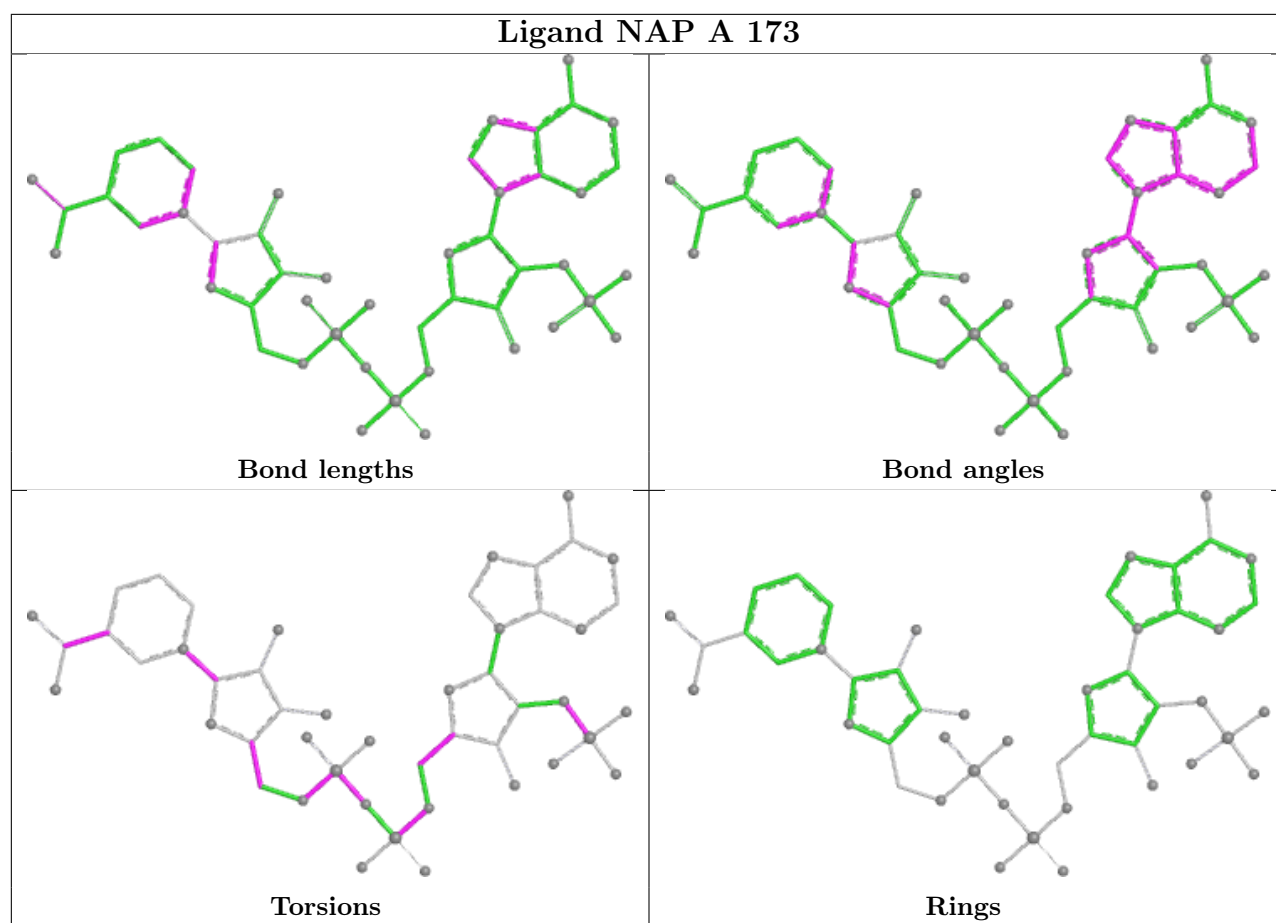
There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

The following is a two-dimensional graphical depiction of Mogul quality analysis of bond lengths, bond angles, torsion angles, and ring geometry for all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the validation Tables will also be included. For torsion angles, if less than 5% of the Mogul distribution of torsion angles is within 10 degrees of the torsion angle in question, then that torsion angle is considered an outlier. Any bond that is central to one or more torsion angles identified as an outlier by Mogul will be highlighted in the graph. For rings, the root-mean-square deviation (RMSD) between the ring in question and similar rings identified by Mogul is calculated over all ring torsion angles. If the average RMSD is greater than 60 degrees and the minimal RMSD between the ring in question and any Mogul-identified rings is also greater than 60 degrees, then that ring is considered an outlier. The outliers are highlighted in purple. The color gray indicates Mogul did not find sufficient equivalents in the CSD to analyse the geometry.





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