



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 27, 2026 – 12:32 AM UTC

PDB ID : 1OJG / pdb_00001ojg
Title : Sensory domain of the membraneous two-component fumarate sensor DcuS of E. coli
Authors : Pappalardo, L.; Janausch, I.G.; Vijayan, V.; Zientz, E.; Junker, J.; Peti, W.; Zweckstetter, M.; Unden, G.; Griesinger, C.
Deposited on : 2003-07-10

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

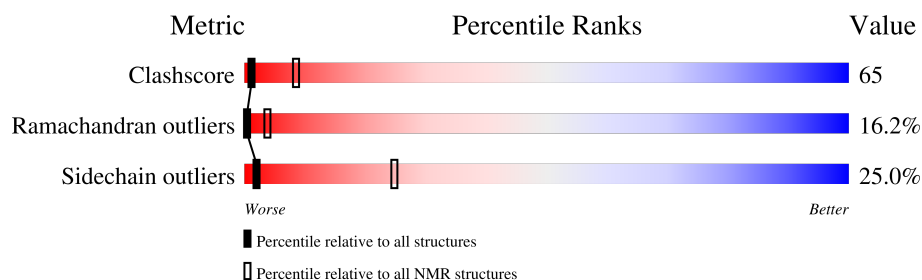
1 Overall quality at a glance

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	136	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 10 models. Model 3 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative.

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:45-A:169 (125)	0.96	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. No single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2144 atoms, of which 1085 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called SENSOR PROTEIN DCUS.

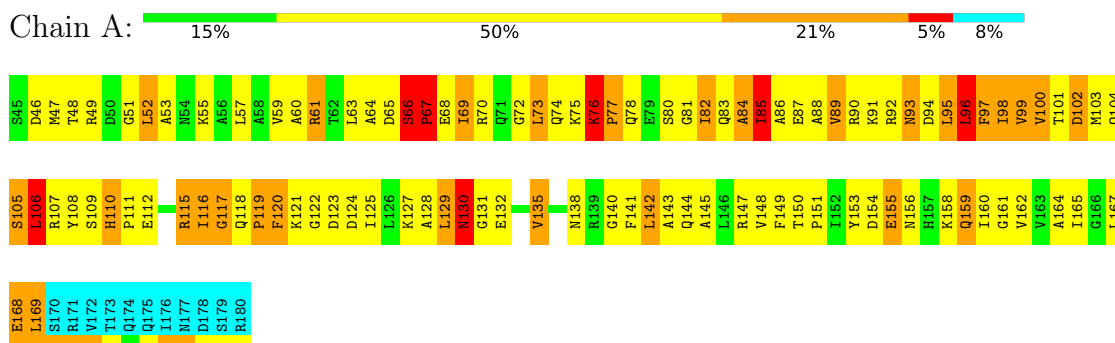
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	136	Total	C	H	N	O	S	0
			2144	658	1085	198	201	2	

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: SENSOR PROTEIN DCUS

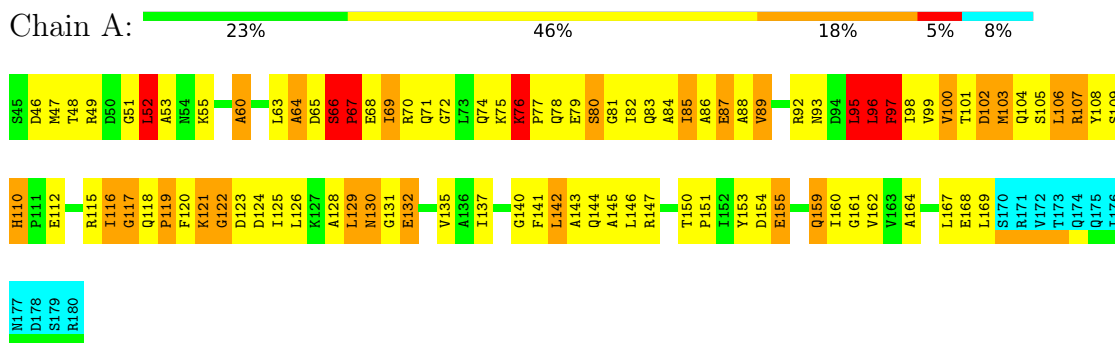


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

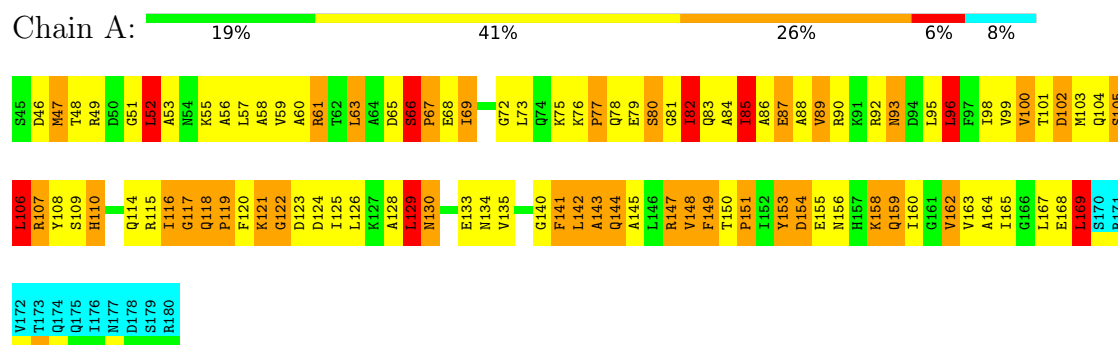
4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: SENSOR PROTEIN DCUS



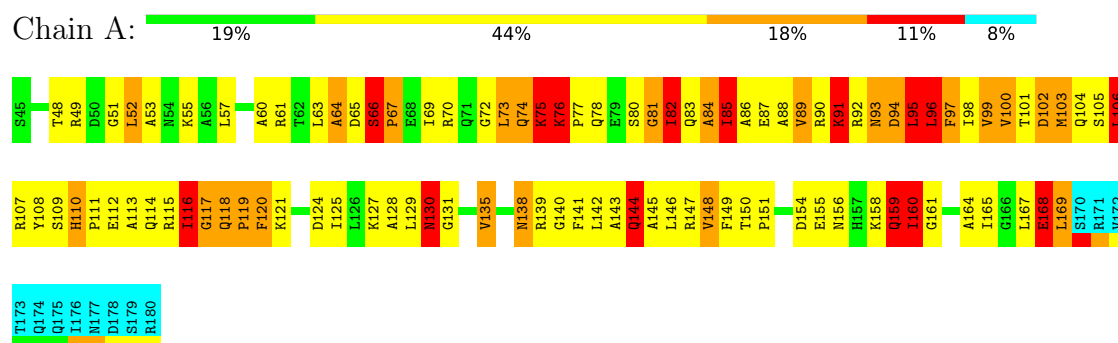
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: SENSOR PROTEIN DCUS



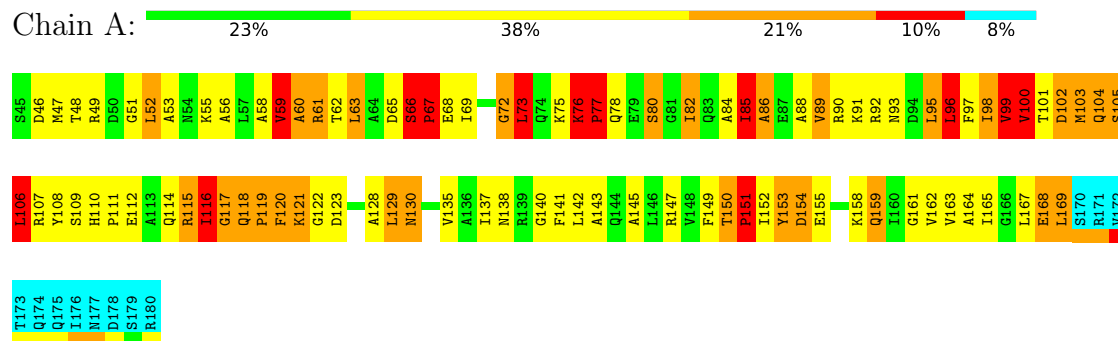
4.2.3 Score per residue for model 3 (medoid)

- Molecule 1: SENSOR PROTEIN DCUS



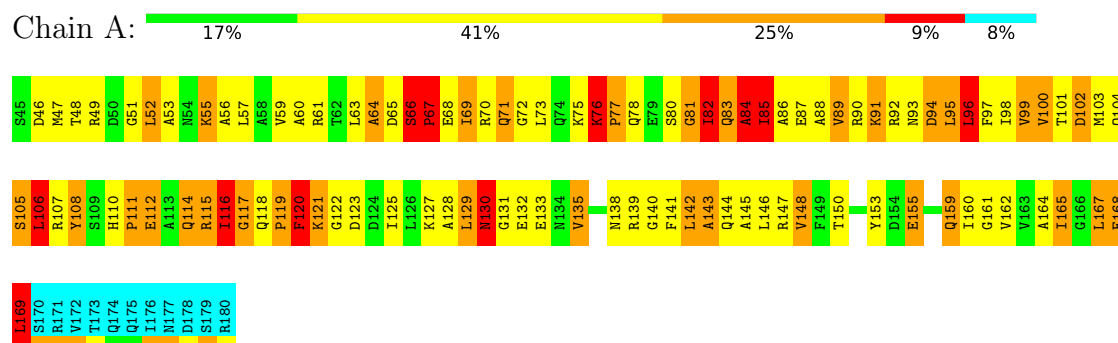
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: SENSOR PROTEIN DCUS



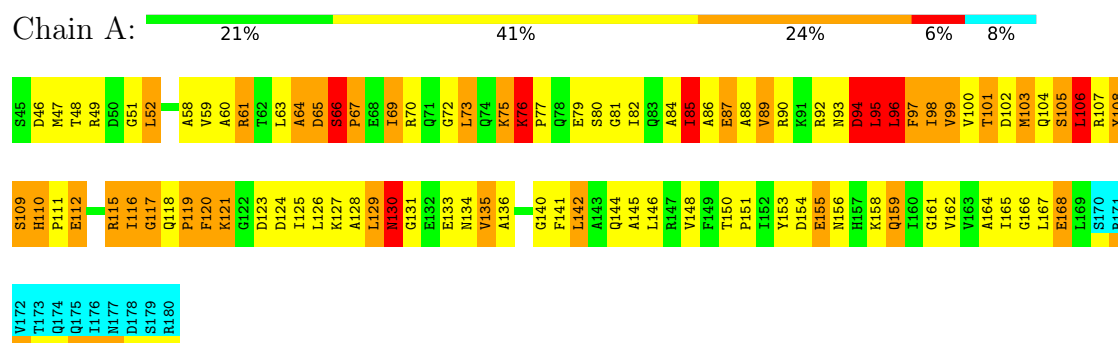
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: SENSOR PROTEIN DCUS



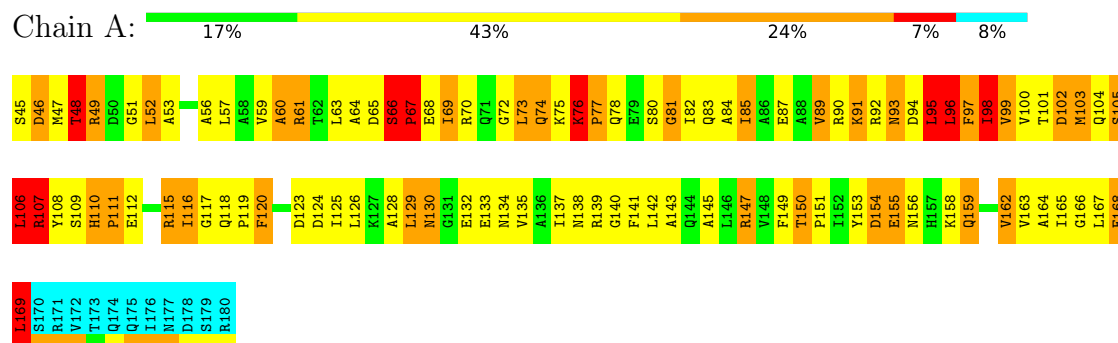
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: SENSOR PROTEIN DCUS



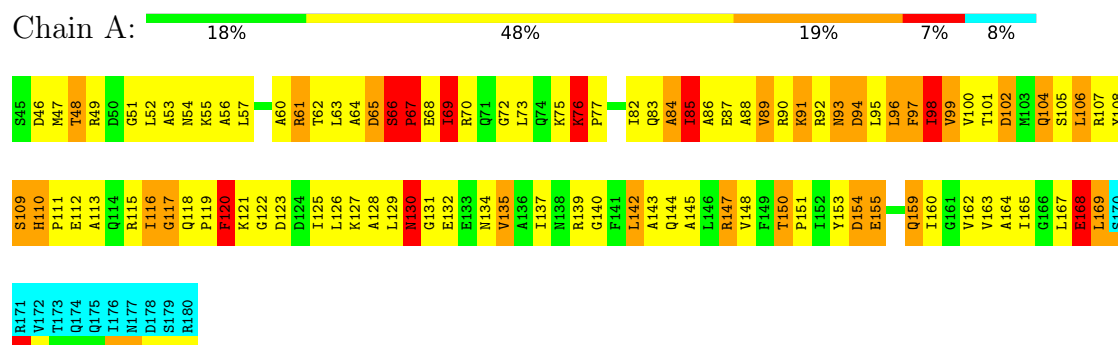
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: SENSOR PROTEIN DCUS



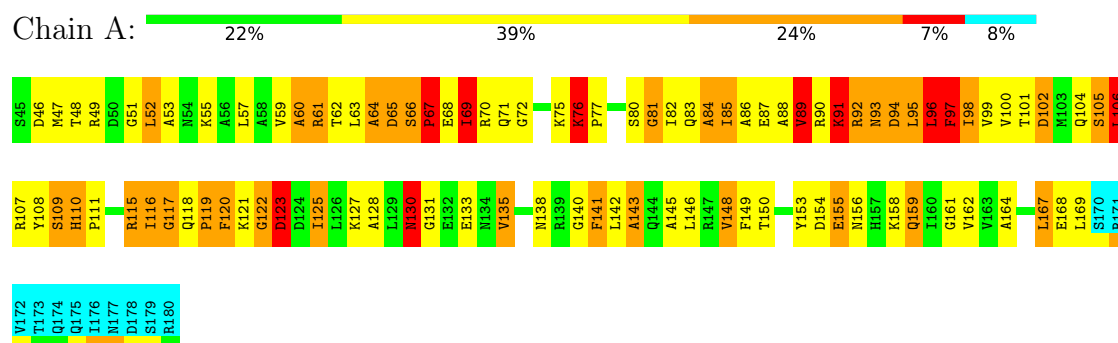
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: SENSOR PROTEIN DCUS



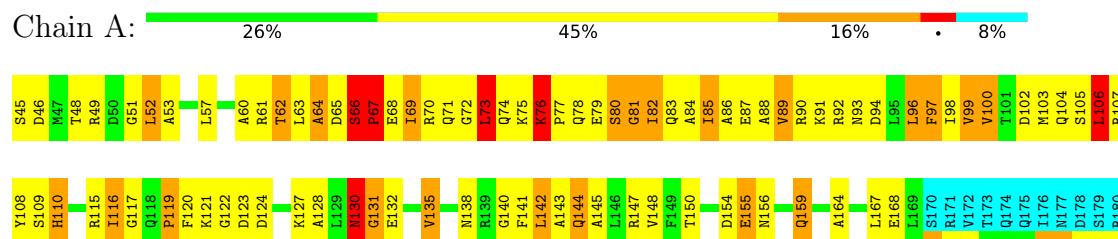
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: SENSOR PROTEIN DCUS



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: SENSOR PROTEIN DCUS



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *RESTRAINED MOLECULAR DYNAMICS*.

Of the 200 calculated structures, 10 were deposited, based on the following criterion: *LOWEST TOTAL ENERGY*.

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

Software name	Classification	Version
Xplor-NIH	refinement	
XwinNMR	structure solution	
XEASY	structure solution	
X-PLOR	structure solution	

No chemical shift data was provided.

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.73±0.02	8±3/983 (0.8± 0.3%)	1.57±0.03	10±2/1327 (0.7± 0.2%)
All	All	1.73	76/9830 (0.8%)	1.57	95/13270 (0.7%)

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	96	LEU	N-CA	7.76	1.56	1.46	7	6
1	A	93	ASN	N-CA	6.91	1.53	1.46	9	1
1	A	87	GLU	N-CA	6.73	1.54	1.46	2	3
1	A	161	GLY	N-CA	6.63	1.52	1.45	4	6
1	A	168	GLU	N-CA	6.54	1.54	1.46	10	7
1	A	165	ILE	C-N	-6.16	1.30	1.33	5	1
1	A	98	ILE	C-N	-6.13	1.25	1.33	8	3
1	A	91	LYS	N-CA	6.08	1.54	1.46	5	4
1	A	94	ASP	N-CA	6.07	1.54	1.46	6	1
1	A	148	VAL	N-CA	5.93	1.52	1.46	2	4
1	A	169	LEU	N-CA	5.90	1.53	1.46	5	3
1	A	76	LYS	CA-C	5.85	1.58	1.52	4	2
1	A	76	LYS	N-CA	5.83	1.54	1.46	7	5
1	A	85	ILE	N-CA	5.75	1.53	1.46	5	2
1	A	162	VAL	N-CA	5.63	1.52	1.46	4	2
1	A	123	ASP	N-CA	5.62	1.53	1.46	9	1
1	A	65	ASP	N-CA	5.58	1.53	1.46	9	3
1	A	107	ARG	C-N	-5.47	1.26	1.33	7	2
1	A	112	GLU	C-N	-5.43	1.27	1.33	5	1
1	A	132	GLU	N-CA	5.42	1.52	1.45	8	1
1	A	95	LEU	N-CA	5.40	1.52	1.45	6	3
1	A	158	LYS	N-CA	5.40	1.52	1.46	2	1
1	A	89	VAL	N-CA	5.33	1.52	1.46	2	2
1	A	106	LEU	C-N	-5.29	1.26	1.33	7	1
1	A	59	VAL	C-N	-5.27	1.26	1.34	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	160	ILE	N-CA	5.22	1.52	1.46	3	1
1	A	102	ASP	C-N	-5.18	1.27	1.33	3	2
1	A	64	ALA	N-CA	5.18	1.52	1.46	10	1
1	A	114	GLN	N-CA	5.17	1.52	1.46	5	1
1	A	144	GLN	N-CA	5.11	1.52	1.46	3	1
1	A	75	LYS	N-CA	5.07	1.52	1.46	3	1
1	A	151	PRO	N-CA	5.07	1.51	1.46	8	1
1	A	82	ILE	C-N	-5.07	1.27	1.33	2	1

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
1	A	100	VAL	N-CA-C	-9.95	94.25	108.17	5	9
1	A	102	ASP	N-CA-C	-9.30	97.51	110.35	10	10
1	A	73	LEU	N-CA-C	-9.01	100.41	111.40	3	5
1	A	110	HIS	CA-CB-CG	-7.76	106.04	113.80	7	4
1	A	108	TYR	N-CA-C	-7.70	103.50	113.12	7	4
1	A	104	GLN	N-CA-C	-7.69	96.84	108.46	8	1
1	A	87	GLU	N-CA-C	-7.34	102.35	111.75	1	2
1	A	130	ASN	CA-CB-CG	-7.24	105.36	112.60	1	9
1	A	114	GLN	N-CA-C	6.77	119.67	111.82	5	1
1	A	124	ASP	N-CA-C	-6.68	105.00	113.01	2	1
1	A	113	ALA	N-CA-C	6.63	118.30	111.14	3	1
1	A	97	PHE	CA-CB-CG	-6.58	107.22	113.80	9	1
1	A	62	THR	N-CA-C	-6.55	104.14	111.28	8	2
1	A	88	ALA	N-CA-C	-6.53	104.09	111.14	4	1
1	A	60	ALA	N-CA-C	-6.43	104.31	111.71	7	6
1	A	92	ARG	CA-C-N	-6.37	113.87	121.90	9	1
1	A	92	ARG	C-N-CA	-6.37	113.87	121.90	9	1
1	A	48	THR	N-CA-C	-6.24	104.48	111.28	7	1
1	A	64	ALA	N-CA-C	-6.15	105.49	112.87	1	5
1	A	72	GLY	N-CA-C	-6.07	105.05	115.61	4	1
1	A	97	PHE	N-CA-C	-6.00	96.32	107.71	1	1
1	A	130	ASN	N-CA-CB	-5.93	100.46	110.49	5	1
1	A	111	PRO	N-CA-C	-5.91	105.48	113.40	9	1
1	A	52	LEU	N-CA-C	-5.89	104.85	111.28	2	2
1	A	99	VAL	N-CA-C	5.78	116.21	108.11	4	1
1	A	84	ALA	N-CA-C	-5.69	98.67	110.80	5	1
1	A	85	ILE	N-CA-C	-5.41	104.68	110.36	2	2
1	A	115	ARG	N-CA-C	-5.36	105.54	111.71	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	149	PHE	CA-CB-CG	-5.25	108.55	113.80	2	1
1	A	86	ALA	N-CA-C	-5.25	105.45	111.07	4	1
1	A	93	ASN	CA-CB-CG	-5.24	107.36	112.60	9	1
1	A	120	PHE	CA-CB-CG	-5.22	108.58	113.80	8	1
1	A	59	VAL	N-CA-C	-5.18	104.62	111.09	4	1
1	A	102	ASP	CA-C-N	-5.17	113.89	122.32	7	3
1	A	102	ASP	C-N-CA	-5.17	113.89	122.32	7	3
1	A	89	VAL	CB-CA-C	-5.17	104.15	112.16	6	2
1	A	76	LYS	CA-C-N	5.12	126.24	119.84	4	1
1	A	76	LYS	C-N-CA	5.12	126.24	119.84	4	1
1	A	99	VAL	N-CA-CB	-5.09	105.04	111.46	8	1
1	A	82	ILE	N-CA-CB	-5.06	102.88	111.23	8	1
1	A	151	PRO	N-CA-CB	-5.04	97.96	103.25	4	1
1	A	74	GLN	N-CA-C	-5.01	107.22	113.19	1	1

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	970	996	991	127±12
All	All	9700	9960	9910	1272

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 65.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:ILE:HG21	1:A:100:VAL:CG1	1.29	1.57	5	1
1:A:90:ARG:CG	1:A:96:LEU:HD11	1.13	1.74	9	1
1:A:142:LEU:HD13	1:A:168:GLU:OE2	1.09	1.48	5	1
1:A:90:ARG:HG3	1:A:96:LEU:HD11	1.07	1.15	9	1
1:A:80:SER:O	1:A:82:ILE:N	1.03	1.91	3	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:ILE:HG21	1:A:100:VAL:HG11	1.01	1.27	5	1
1:A:86:ALA:O	1:A:89:VAL:N	1.00	1.92	6	4
1:A:168:GLU:O	1:A:169:LEU:O	1.00	1.79	2	3
1:A:142:LEU:CD1	1:A:168:GLU:OE2	0.98	2.10	5	2
1:A:130:ASN:ND2	1:A:131:GLY:H	0.97	1.58	10	5
1:A:90:ARG:HA	1:A:96:LEU:HD21	0.94	1.37	9	1
1:A:145:ALA:HB1	1:A:167:LEU:O	0.93	1.64	3	10
1:A:93:ASN:O	1:A:93:ASN:ND2	0.93	2.02	7	1
1:A:90:ARG:HD3	1:A:96:LEU:H	0.93	1.21	8	1
1:A:142:LEU:HD13	1:A:168:GLU:CD	0.91	1.89	5	1
1:A:110:HIS:CD2	1:A:116:ILE:HD11	0.90	2.01	10	3
1:A:75:LYS:O	1:A:76:LYS:O	0.89	1.91	9	7
1:A:84:ALA:O	1:A:87:GLU:N	0.89	2.04	1	9
1:A:85:ILE:O	1:A:88:ALA:N	0.89	2.03	2	3
1:A:82:ILE:HG21	1:A:100:VAL:HG12	0.87	1.44	5	1
1:A:82:ILE:CG2	1:A:100:VAL:CG1	0.87	2.50	5	1
1:A:130:ASN:ND2	1:A:131:GLY:N	0.86	2.23	3	6
1:A:159:GLN:O	1:A:160:ILE:HG23	0.85	1.71	3	1
1:A:90:ARG:CA	1:A:96:LEU:HD21	0.85	2.01	9	1
1:A:110:HIS:ND1	1:A:116:ILE:HD11	0.84	1.85	2	1
1:A:82:ILE:CG2	1:A:100:VAL:HG11	0.84	2.01	5	1
1:A:90:ARG:HG2	1:A:96:LEU:CG	0.84	2.03	9	1
1:A:90:ARG:CG	1:A:96:LEU:CD1	0.83	2.56	9	1
1:A:90:ARG:O	1:A:93:ASN:N	0.83	2.10	5	5
1:A:154:ASP:O	1:A:156:ASN:ND2	0.83	2.12	3	1
1:A:116:ILE:O	1:A:118:GLN:N	0.82	2.13	5	7
1:A:84:ALA:O	1:A:85:ILE:C	0.82	2.19	6	9
1:A:59:VAL:HG13	1:A:88:ALA:HB1	0.81	1.49	2	1
1:A:142:LEU:HD12	1:A:142:LEU:O	0.80	1.75	2	2
1:A:96:LEU:HD11	1:A:167:LEU:HD12	0.79	1.55	10	1
1:A:72:GLY:O	1:A:75:LYS:N	0.78	2.16	8	5
1:A:90:ARG:HG2	1:A:96:LEU:CD2	0.78	2.08	9	1
1:A:85:ILE:HD13	1:A:85:ILE:H	0.78	1.39	1	4
1:A:57:LEU:HD23	1:A:57:LEU:O	0.77	1.79	9	6
1:A:90:ARG:HG2	1:A:96:LEU:HD21	0.77	1.55	9	1
1:A:60:ALA:CB	1:A:98:ILE:HD13	0.77	2.09	8	1
1:A:60:ALA:HB2	1:A:98:ILE:HD11	0.76	1.56	1	3
1:A:116:ILE:HG22	1:A:117:GLY:N	0.76	1.94	7	8
1:A:90:ARG:CG	1:A:96:LEU:HD21	0.76	2.11	9	1
1:A:130:ASN:CG	1:A:131:GLY:H	0.75	1.90	10	6
1:A:82:ILE:HD12	1:A:83:GLN:N	0.75	1.97	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:159:GLN:O	1:A:159:GLN:NE2	0.74	2.19	7	3
1:A:64:ALA:O	1:A:69:ILE:HG21	0.73	1.83	1	2
1:A:63:LEU:O	1:A:85:ILE:HD12	0.73	1.82	4	1
1:A:159:GLN:N	1:A:159:GLN:NE2	0.72	2.37	10	9
1:A:69:ILE:CG2	1:A:70:ARG:N	0.72	2.53	9	1
1:A:159:GLN:CD	1:A:159:GLN:O	0.71	2.32	9	7
1:A:135:VAL:HG23	1:A:147:ARG:O	0.71	1.85	1	3
1:A:90:ARG:HA	1:A:96:LEU:CD2	0.71	2.14	9	1
1:A:102:ASP:O	1:A:104:GLN:N	0.71	2.23	4	6
1:A:84:ALA:O	1:A:86:ALA:N	0.71	2.23	9	5
1:A:93:ASN:OD1	1:A:167:LEU:CD1	0.70	2.39	7	1
1:A:80:SER:N	1:A:108:TYR:OH	0.69	2.25	4	2
1:A:169:LEU:HD12	1:A:169:LEU:C	0.69	2.12	3	2
1:A:94:ASP:C	1:A:96:LEU:H	0.69	1.95	10	1
1:A:99:VAL:CG1	1:A:164:ALA:H	0.69	2.00	2	1
1:A:159:GLN:N	1:A:159:GLN:HE21	0.69	1.85	10	8
1:A:159:GLN:CD	1:A:159:GLN:H	0.69	1.96	7	2
1:A:130:ASN:ND2	1:A:130:ASN:N	0.69	2.37	6	6
1:A:60:ALA:HB2	1:A:165:ILE:HD11	0.68	1.65	2	1
1:A:128:ALA:O	1:A:130:ASN:ND2	0.68	2.26	10	6
1:A:130:ASN:CG	1:A:131:GLY:N	0.68	2.48	5	6
1:A:92:ARG:NH2	1:A:95:LEU:O	0.68	2.26	6	1
1:A:99:VAL:CG1	1:A:164:ALA:HB3	0.68	2.18	3	6
1:A:93:ASN:ND2	1:A:93:ASN:N	0.68	2.42	2	1
1:A:169:LEU:C	1:A:169:LEU:HD13	0.68	2.13	7	1
1:A:86:ALA:O	1:A:87:GLU:C	0.67	2.37	6	3
1:A:127:LYS:O	1:A:130:ASN:ND2	0.67	2.27	6	5
1:A:92:ARG:O	1:A:92:ARG:HD3	0.67	1.89	8	1
1:A:90:ARG:O	1:A:91:LYS:C	0.67	2.34	7	7
1:A:77:PRO:O	1:A:108:TYR:CE2	0.67	2.47	2	2
1:A:128:ALA:C	1:A:130:ASN:ND2	0.67	2.53	10	6
1:A:118:GLN:O	1:A:119:PRO:O	0.67	2.13	9	2
1:A:105:SER:O	1:A:106:LEU:HB2	0.67	1.90	1	9
1:A:122:GLY:O	1:A:123:ASP:OD2	0.67	2.13	9	1
1:A:69:ILE:O	1:A:72:GLY:N	0.66	2.24	1	6
1:A:97:PHE:CD1	1:A:110:HIS:CD2	0.66	2.83	1	1
1:A:93:ASN:O	1:A:94:ASP:CG	0.66	2.38	9	4
1:A:130:ASN:N	1:A:130:ASN:HD22	0.66	1.86	10	5
1:A:105:SER:OG	1:A:125:ILE:HD13	0.66	1.90	7	1
1:A:143:ALA:O	1:A:145:ALA:N	0.66	2.29	3	2
1:A:69:ILE:CG2	1:A:70:ARG:H	0.66	2.04	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:159:GLN:N	1:A:159:GLN:CD	0.66	2.52	1	1
1:A:53:ALA:O	1:A:57:LEU:HD12	0.66	1.91	3	1
1:A:92:ARG:NH2	1:A:95:LEU:H	0.66	1.88	6	1
1:A:107:ARG:NH2	1:A:147:ARG:HH11	0.66	1.89	4	2
1:A:110:HIS:CE1	1:A:116:ILE:HD11	0.66	2.25	2	1
1:A:82:ILE:O	1:A:84:ALA:N	0.66	2.28	5	1
1:A:59:VAL:HG13	1:A:88:ALA:CB	0.66	2.20	2	1
1:A:127:LYS:O	1:A:130:ASN:OD1	0.65	2.14	9	6
1:A:67:PRO:C	1:A:69:ILE:H	0.65	1.99	6	3
1:A:86:ALA:O	1:A:89:VAL:HG13	0.65	1.89	6	1
1:A:68:GLU:O	1:A:72:GLY:N	0.65	2.30	4	4
1:A:69:ILE:CG2	1:A:100:VAL:HG21	0.65	2.22	5	1
1:A:159:GLN:NE2	1:A:159:GLN:N	0.64	2.45	7	1
1:A:52:LEU:O	1:A:56:ALA:HB3	0.64	1.92	7	3
1:A:69:ILE:HG22	1:A:70:ARG:H	0.64	1.53	9	1
1:A:95:LEU:O	1:A:96:LEU:HD23	0.64	1.93	9	1
1:A:97:PHE:CE1	1:A:110:HIS:NE2	0.64	2.66	9	1
1:A:142:LEU:O	1:A:143:ALA:HB2	0.64	1.91	9	2
1:A:159:GLN:NE2	1:A:159:GLN:O	0.64	2.30	1	3
1:A:130:ASN:HD22	1:A:130:ASN:C	0.64	2.01	6	5
1:A:81:GLY:C	1:A:83:GLN:H	0.63	2.01	3	5
1:A:129:LEU:C	1:A:130:ASN:HD22	0.63	2.02	4	2
1:A:130:ASN:HD22	1:A:131:GLY:N	0.63	1.91	6	3
1:A:98:ILE:N	1:A:109:SER:OG	0.63	2.31	4	1
1:A:115:ARG:NE	1:A:118:GLN:OE1	0.62	2.26	7	1
1:A:118:GLN:N	1:A:119:PRO:HD2	0.62	2.09	7	1
1:A:134:ASN:HD22	1:A:135:VAL:N	0.62	1.92	8	1
1:A:116:ILE:CD1	1:A:116:ILE:N	0.62	2.62	4	3
1:A:58:ALA:O	1:A:61:ARG:CG	0.62	2.48	4	2
1:A:130:ASN:N	1:A:130:ASN:ND2	0.61	2.44	4	2
1:A:90:ARG:HG2	1:A:96:LEU:CD1	0.61	2.23	9	1
1:A:107:ARG:NH2	1:A:147:ARG:NH1	0.61	2.48	4	2
1:A:142:LEU:HD11	1:A:168:GLU:OE2	0.61	1.95	2	1
1:A:115:ARG:NH1	1:A:138:ASN:ND2	0.61	2.49	10	2
1:A:107:ARG:NH1	1:A:147:ARG:NH2	0.61	2.49	8	1
1:A:134:ASN:HD22	1:A:135:VAL:H	0.61	1.37	8	1
1:A:69:ILE:HD11	1:A:100:VAL:HG21	0.61	1.71	9	1
1:A:63:LEU:HD12	1:A:84:ALA:HB1	0.61	1.72	1	1
1:A:82:ILE:O	1:A:85:ILE:HG23	0.61	1.95	5	1
1:A:69:ILE:CD1	1:A:69:ILE:N	0.61	2.64	6	3
1:A:57:LEU:C	1:A:57:LEU:HD23	0.61	2.20	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:140:GLY:O	1:A:142:LEU:N	0.60	2.34	3	7
1:A:144:GLN:H	1:A:144:GLN:CD	0.60	2.04	6	1
1:A:82:ILE:C	1:A:82:ILE:CD1	0.60	2.75	5	1
1:A:93:ASN:OD1	1:A:167:LEU:HD11	0.60	1.96	7	1
1:A:124:ASP:N	1:A:124:ASP:OD1	0.60	2.34	10	1
1:A:63:LEU:HB3	1:A:85:ILE:HD12	0.60	1.72	2	1
1:A:60:ALA:O	1:A:63:LEU:N	0.60	2.35	4	1
1:A:83:GLN:O	1:A:87:GLU:HG2	0.60	1.96	8	1
1:A:142:LEU:HD12	1:A:142:LEU:C	0.60	2.20	2	1
1:A:116:ILE:CG2	1:A:117:GLY:N	0.60	2.64	7	5
1:A:133:GLU:O	1:A:134:ASN:ND2	0.59	2.35	7	2
1:A:130:ASN:HD22	1:A:130:ASN:N	0.59	1.95	4	2
1:A:103:MET:SD	1:A:103:MET:N	0.59	2.75	6	1
1:A:86:ALA:HA	1:A:89:VAL:HG13	0.59	1.73	2	2
1:A:107:ARG:CZ	1:A:147:ARG:NH2	0.59	2.65	7	2
1:A:159:GLN:CD	1:A:159:GLN:N	0.59	2.60	7	1
1:A:120:PHE:CG	1:A:120:PHE:O	0.59	2.54	4	5
1:A:82:ILE:C	1:A:84:ALA:N	0.59	2.60	5	2
1:A:63:LEU:HD23	1:A:84:ALA:C	0.59	2.22	10	1
1:A:105:SER:OG	1:A:125:ILE:CD1	0.59	2.51	5	4
1:A:159:GLN:HE21	1:A:159:GLN:H	0.59	1.39	9	7
1:A:101:THR:HG22	1:A:102:ASP:O	0.59	1.97	5	2
1:A:85:ILE:HD13	1:A:85:ILE:N	0.59	2.13	6	1
1:A:96:LEU:HD13	1:A:166:GLY:C	0.59	2.23	6	1
1:A:130:ASN:ND2	1:A:130:ASN:C	0.59	2.56	5	3
1:A:103:MET:SD	1:A:103:MET:O	0.59	2.61	1	2
1:A:127:LYS:O	1:A:130:ASN:CG	0.59	2.45	5	6
1:A:69:ILE:HG22	1:A:70:ARG:N	0.59	2.13	10	3
1:A:83:GLN:O	1:A:86:ALA:HB3	0.59	1.98	1	1
1:A:145:ALA:CB	1:A:167:LEU:O	0.59	2.50	7	5
1:A:94:ASP:OD1	1:A:96:LEU:HD22	0.58	1.98	10	1
1:A:125:ILE:O	1:A:129:LEU:N	0.58	2.27	7	3
1:A:128:ALA:O	1:A:129:LEU:C	0.58	2.46	2	6
1:A:95:LEU:O	1:A:96:LEU:CB	0.58	2.51	9	6
1:A:168:GLU:O	1:A:169:LEU:CB	0.58	2.51	7	2
1:A:90:ARG:C	1:A:92:ARG:N	0.58	2.59	3	4
1:A:86:ALA:C	1:A:88:ALA:N	0.58	2.57	2	2
1:A:75:LYS:O	1:A:102:ASP:CG	0.58	2.46	4	1
1:A:110:HIS:CG	1:A:116:ILE:HD11	0.58	2.34	2	1
1:A:105:SER:O	1:A:106:LEU:CB	0.58	2.52	7	5
1:A:103:MET:SD	1:A:103:MET:C	0.58	2.86	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:ALA:O	1:A:61:ARG:N	0.58	2.34	2	2
1:A:103:MET:SD	1:A:129:LEU:HD21	0.58	2.38	5	2
1:A:88:ALA:O	1:A:89:VAL:C	0.58	2.45	9	5
1:A:98:ILE:HD12	1:A:165:ILE:HG23	0.58	1.75	3	1
1:A:99:VAL:HG22	1:A:164:ALA:HB3	0.57	1.75	4	2
1:A:99:VAL:CG2	1:A:164:ALA:HB3	0.57	2.28	8	2
1:A:154:ASP:OD1	1:A:155:GLU:N	0.57	2.38	10	2
1:A:159:GLN:NE2	1:A:159:GLN:H	0.57	1.98	9	6
1:A:46:ASP:O	1:A:49:ARG:N	0.57	2.37	5	4
1:A:89:VAL:HG13	1:A:96:LEU:HD13	0.57	1.75	8	1
1:A:107:ARG:NE	1:A:107:ARG:N	0.57	2.52	8	2
1:A:73:LEU:O	1:A:102:ASP:OD2	0.57	2.21	4	1
1:A:63:LEU:HD22	1:A:63:LEU:N	0.57	2.15	1	2
1:A:97:PHE:CD1	1:A:107:ARG:NE	0.57	2.73	4	1
1:A:103:MET:HG3	1:A:103:MET:O	0.56	2.00	5	1
1:A:97:PHE:CD1	1:A:110:HIS:CE1	0.56	2.93	9	1
1:A:51:GLY:O	1:A:55:LYS:N	0.56	2.37	3	7
1:A:84:ALA:O	1:A:87:GLU:CB	0.56	2.53	2	1
1:A:101:THR:OG1	1:A:162:VAL:O	0.56	2.21	7	5
1:A:52:LEU:HD11	1:A:96:LEU:HD21	0.56	1.77	8	1
1:A:106:LEU:H	1:A:107:ARG:HH21	0.56	1.41	10	1
1:A:121:LYS:O	1:A:123:ASP:N	0.56	2.38	5	5
1:A:90:ARG:O	1:A:92:ARG:N	0.56	2.39	9	4
1:A:140:GLY:H	1:A:143:ALA:HB3	0.56	1.60	3	1
1:A:106:LEU:N	1:A:107:ARG:NH2	0.56	2.54	8	1
1:A:130:ASN:ND2	1:A:130:ASN:H	0.56	1.97	6	5
1:A:115:ARG:O	1:A:119:PRO:CD	0.56	2.54	7	1
1:A:96:LEU:HD12	1:A:96:LEU:C	0.56	2.26	3	1
1:A:159:GLN:O	1:A:160:ILE:CG2	0.56	2.49	3	1
1:A:60:ALA:HB2	1:A:98:ILE:CD1	0.56	2.30	7	1
1:A:99:VAL:CG2	1:A:101:THR:HG23	0.56	2.31	7	1
1:A:120:PHE:O	1:A:122:GLY:N	0.56	2.39	1	3
1:A:111:PRO:CD	1:A:112:GLU:H	0.56	2.14	3	4
1:A:115:ARG:HH21	1:A:139:ARG:H	0.56	1.44	3	1
1:A:82:ILE:HD12	1:A:82:ILE:C	0.56	2.26	5	1
1:A:76:LYS:HZ2	1:A:78:GLN:H	0.55	1.42	3	1
1:A:96:LEU:CD1	1:A:165:ILE:HG22	0.55	2.31	6	1
1:A:57:LEU:HD23	1:A:57:LEU:C	0.55	2.26	9	1
1:A:82:ILE:HG21	1:A:108:TYR:C	0.55	2.25	3	2
1:A:91:LYS:O	1:A:92:ARG:C	0.55	2.49	5	3
1:A:82:ILE:HD13	1:A:85:ILE:HD13	0.55	1.76	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:120:PHE:C	1:A:122:GLY:N	0.55	2.61	1	3
1:A:110:HIS:CG	1:A:110:HIS:O	0.55	2.60	4	2
1:A:97:PHE:CG	1:A:110:HIS:CE1	0.55	2.95	9	1
1:A:154:ASP:O	1:A:155:GLU:CB	0.55	2.55	1	4
1:A:97:PHE:CZ	1:A:110:HIS:NE2	0.55	2.75	9	1
1:A:122:GLY:O	1:A:123:ASP:CB	0.55	2.55	9	2
1:A:99:VAL:HG13	1:A:164:ALA:H	0.55	1.60	2	1
1:A:97:PHE:CE2	1:A:115:ARG:CD	0.55	2.90	4	1
1:A:120:PHE:C	1:A:122:GLY:H	0.55	2.08	2	3
1:A:47:MET:C	1:A:47:MET:SD	0.55	2.90	2	1
1:A:135:VAL:CG2	1:A:148:VAL:HG12	0.55	2.32	5	5
1:A:89:VAL:HG12	1:A:96:LEU:HD13	0.55	1.79	4	1
1:A:83:GLN:O	1:A:87:GLU:CG	0.55	2.55	8	1
1:A:90:ARG:N	1:A:94:ASP:HB2	0.54	2.16	10	1
1:A:77:PRO:O	1:A:78:GLN:C	0.54	2.50	7	4
1:A:153:TYR:O	1:A:155:GLU:N	0.54	2.38	5	4
1:A:48:THR:HG23	1:A:52:LEU:HD23	0.54	1.79	7	1
1:A:106:LEU:H	1:A:107:ARG:NH2	0.54	2.00	10	2
1:A:104:GLN:O	1:A:105:SER:CB	0.54	2.55	7	7
1:A:168:GLU:O	1:A:169:LEU:C	0.54	2.49	5	5
1:A:97:PHE:N	1:A:97:PHE:CD1	0.54	2.76	3	5
1:A:142:LEU:C	1:A:142:LEU:HD12	0.54	2.27	3	1
1:A:67:PRO:HD2	1:A:68:GLU:H	0.54	1.63	4	2
1:A:92:ARG:NH2	1:A:95:LEU:N	0.54	2.55	6	1
1:A:92:ARG:HH21	1:A:95:LEU:N	0.54	2.00	6	1
1:A:112:GLU:N	1:A:112:GLU:CD	0.54	2.65	6	1
1:A:140:GLY:C	1:A:142:LEU:N	0.54	2.64	7	3
1:A:99:VAL:HG21	1:A:106:LEU:O	0.54	2.03	1	2
1:A:116:ILE:N	1:A:116:ILE:HD13	0.54	2.17	4	1
1:A:101:THR:CG2	1:A:105:SER:H	0.54	2.16	3	1
1:A:83:GLN:O	1:A:87:GLU:HB2	0.54	2.03	10	3
1:A:93:ASN:O	1:A:94:ASP:CB	0.54	2.55	6	5
1:A:76:LYS:O	1:A:80:SER:OG	0.54	2.26	5	1
1:A:85:ILE:C	1:A:87:GLU:N	0.54	2.63	2	2
1:A:143:ALA:O	1:A:144:GLN:C	0.54	2.51	1	6
1:A:63:LEU:HD22	1:A:100:VAL:HG22	0.54	1.78	2	1
1:A:101:THR:OG1	1:A:102:ASP:N	0.54	2.39	2	1
1:A:46:ASP:O	1:A:49:ARG:CB	0.54	2.56	9	5
1:A:66:SER:CB	1:A:67:PRO:CD	0.53	2.86	2	10
1:A:67:PRO:CD	1:A:68:GLU:H	0.53	2.16	4	3
1:A:124:ASP:OD2	1:A:149:PHE:CE2	0.53	2.61	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:115:ARG:O	1:A:116:ILE:C	0.53	2.51	10	5
1:A:139:ARG:NE	1:A:144:GLN:HE22	0.53	2.01	8	1
1:A:89:VAL:HG12	1:A:90:ARG:N	0.53	2.18	9	2
1:A:69:ILE:CD1	1:A:100:VAL:HG11	0.53	2.34	9	1
1:A:141:PHE:C	1:A:143:ALA:H	0.53	2.12	1	2
1:A:67:PRO:C	1:A:69:ILE:N	0.53	2.66	6	4
1:A:156:ASN:C	1:A:158:LYS:H	0.53	2.10	3	4
1:A:75:LYS:CG	1:A:76:LYS:H	0.53	2.16	4	1
1:A:63:LEU:C	1:A:65:ASP:N	0.53	2.61	10	6
1:A:112:GLU:OE1	1:A:115:ARG:NH2	0.53	2.41	1	1
1:A:76:LYS:HZ2	1:A:78:GLN:CB	0.53	2.17	10	1
1:A:93:ASN:ND2	1:A:93:ASN:C	0.53	2.66	7	1
1:A:76:LYS:O	1:A:78:GLN:N	0.53	2.41	2	2
1:A:60:ALA:HB3	1:A:98:ILE:HD13	0.53	1.77	8	1
1:A:89:VAL:O	1:A:90:ARG:C	0.53	2.52	9	5
1:A:107:ARG:C	1:A:109:SER:N	0.53	2.63	9	4
1:A:89:VAL:O	1:A:92:ARG:N	0.53	2.41	8	3
1:A:48:THR:O	1:A:49:ARG:C	0.53	2.51	8	9
1:A:97:PHE:CE1	1:A:110:HIS:CE1	0.53	2.97	9	1
1:A:90:ARG:N	1:A:94:ASP:CB	0.53	2.72	10	1
1:A:94:ASP:O	1:A:96:LEU:N	0.53	2.37	10	1
1:A:103:MET:O	1:A:103:MET:CG	0.52	2.57	7	5
1:A:86:ALA:O	1:A:89:VAL:HG22	0.52	2.04	2	2
1:A:133:GLU:CD	1:A:133:GLU:H	0.52	2.11	5	2
1:A:81:GLY:O	1:A:83:GLN:N	0.52	2.42	5	4
1:A:115:ARG:NH2	1:A:138:ASN:O	0.52	2.43	4	1
1:A:48:THR:O	1:A:52:LEU:CB	0.52	2.58	8	1
1:A:85:ILE:O	1:A:87:GLU:N	0.52	2.42	2	2
1:A:92:ARG:CZ	1:A:95:LEU:O	0.52	2.58	6	1
1:A:90:ARG:HG3	1:A:96:LEU:CD1	0.52	2.10	9	1
1:A:135:VAL:HG22	1:A:148:VAL:HG12	0.52	1.82	3	3
1:A:94:ASP:CG	1:A:94:ASP:O	0.52	2.51	7	1
1:A:106:LEU:N	1:A:107:ARG:HH21	0.52	2.02	10	1
1:A:125:ILE:O	1:A:128:ALA:N	0.52	2.42	6	3
1:A:63:LEU:HD22	1:A:84:ALA:HB1	0.52	1.80	5	4
1:A:94:ASP:C	1:A:96:LEU:N	0.52	2.62	10	1
1:A:46:ASP:CG	1:A:47:MET:H	0.52	2.13	4	1
1:A:96:LEU:HD12	1:A:165:ILE:HG22	0.51	1.82	6	1
1:A:59:VAL:HG12	1:A:98:ILE:CD1	0.51	2.35	2	1
1:A:62:THR:HG22	1:A:63:LEU:HD12	0.51	1.80	10	1
1:A:85:ILE:H	1:A:85:ILE:CD1	0.51	2.07	6	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:ALA:O	1:A:57:LEU:CD1	0.51	2.58	3	1
1:A:82:ILE:HG21	1:A:108:TYR:O	0.51	2.05	3	2
1:A:96:LEU:HD12	1:A:96:LEU:O	0.51	2.04	3	1
1:A:89:VAL:HG12	1:A:96:LEU:CD1	0.51	2.36	4	1
1:A:119:PRO:O	1:A:120:PHE:CB	0.51	2.58	4	2
1:A:142:LEU:O	1:A:143:ALA:CB	0.51	2.57	9	2
1:A:80:SER:C	1:A:82:ILE:N	0.51	2.67	3	2
1:A:122:GLY:O	1:A:123:ASP:CG	0.51	2.53	9	1
1:A:86:ALA:C	1:A:89:VAL:H	0.51	2.13	1	2
1:A:110:HIS:CD2	1:A:110:HIS:O	0.51	2.64	5	1
1:A:61:ARG:O	1:A:65:ASP:CB	0.51	2.58	9	6
1:A:168:GLU:CD	1:A:169:LEU:N	0.51	2.69	9	1
1:A:61:ARG:O	1:A:65:ASP:CG	0.51	2.54	3	1
1:A:116:ILE:HD13	1:A:116:ILE:H	0.51	1.66	4	1
1:A:85:ILE:O	1:A:86:ALA:C	0.51	2.53	2	4
1:A:125:ILE:O	1:A:126:LEU:C	0.51	2.53	7	5
1:A:101:THR:HB	1:A:104:GLN:O	0.51	2.05	8	1
1:A:116:ILE:C	1:A:118:GLN:N	0.51	2.68	4	7
1:A:160:ILE:HD12	1:A:160:ILE:C	0.51	2.31	2	3
1:A:63:LEU:C	1:A:85:ILE:HD12	0.51	2.30	4	1
1:A:60:ALA:HB2	1:A:165:ILE:CD1	0.50	2.36	2	1
1:A:120:PHE:O	1:A:120:PHE:CD2	0.50	2.64	8	3
1:A:154:ASP:O	1:A:156:ASN:N	0.50	2.44	10	2
1:A:89:VAL:O	1:A:94:ASP:N	0.50	2.44	6	1
1:A:90:ARG:HD3	1:A:96:LEU:N	0.50	2.06	8	1
1:A:140:GLY:O	1:A:141:PHE:C	0.50	2.54	9	6
1:A:169:LEU:C	1:A:169:LEU:CD1	0.50	2.84	3	3
1:A:142:LEU:HD12	1:A:143:ALA:N	0.50	2.20	3	1
1:A:60:ALA:O	1:A:61:ARG:C	0.50	2.52	4	1
1:A:133:GLU:O	1:A:134:ASN:CG	0.50	2.54	6	1
1:A:144:GLN:CD	1:A:144:GLN:N	0.50	2.69	6	1
1:A:153:TYR:C	1:A:155:GLU:H	0.50	2.15	7	5
1:A:93:ASN:N	1:A:93:ASN:HD22	0.50	2.04	2	1
1:A:72:GLY:C	1:A:74:GLN:N	0.50	2.63	7	1
1:A:147:ARG:NH2	1:A:164:ALA:HB1	0.50	2.22	7	1
1:A:139:ARG:NE	1:A:144:GLN:NE2	0.50	2.58	8	1
1:A:140:GLY:O	1:A:143:ALA:N	0.50	2.44	1	1
1:A:155:GLU:C	1:A:156:ASN:HD22	0.50	2.14	2	1
1:A:124:ASP:CG	1:A:136:ALA:CB	0.50	2.84	6	1
1:A:99:VAL:HG23	1:A:99:VAL:O	0.50	2.06	8	1
1:A:97:PHE:CD1	1:A:97:PHE:N	0.50	2.80	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:156:ASN:C	1:A:158:LYS:N	0.50	2.69	3	4
1:A:104:GLN:O	1:A:105:SER:O	0.50	2.29	5	1
1:A:116:ILE:C	1:A:118:GLN:H	0.50	2.15	5	7
1:A:68:GLU:C	1:A:69:ILE:HD12	0.50	2.32	10	1
1:A:56:ALA:HB1	1:A:165:ILE:HG21	0.49	1.83	8	3
1:A:62:THR:HG22	1:A:63:LEU:CD1	0.49	2.37	10	1
1:A:66:SER:OG	1:A:67:PRO:CD	0.49	2.60	9	7
1:A:140:GLY:N	1:A:143:ALA:HB3	0.49	2.21	3	1
1:A:130:ASN:ND2	1:A:132:GLU:H	0.49	2.05	5	2
1:A:80:SER:OG	1:A:81:GLY:N	0.49	2.44	1	1
1:A:73:LEU:C	1:A:75:LYS:N	0.49	2.70	7	3
1:A:114:GLN:CD	1:A:114:GLN:H	0.49	2.15	3	1
1:A:98:ILE:CG1	1:A:165:ILE:HG23	0.49	2.37	4	2
1:A:46:ASP:CG	1:A:47:MET:N	0.49	2.70	4	1
1:A:121:LYS:C	1:A:123:ASP:N	0.49	2.69	4	6
1:A:81:GLY:C	1:A:83:GLN:N	0.49	2.70	3	5
1:A:93:ASN:O	1:A:93:ASN:OD1	0.49	2.30	4	1
1:A:54:ASN:C	1:A:54:ASN:HD22	0.49	2.15	8	1
1:A:96:LEU:N	1:A:96:LEU:CD1	0.49	2.76	10	1
1:A:95:LEU:O	1:A:96:LEU:CG	0.49	2.61	9	3
1:A:153:TYR:CD1	1:A:153:TYR:N	0.49	2.80	2	2
1:A:90:ARG:CD	1:A:96:LEU:H	0.49	2.08	8	1
1:A:115:ARG:NH1	1:A:140:GLY:N	0.49	2.60	9	1
1:A:48:THR:OG1	1:A:52:LEU:CD2	0.49	2.61	5	7
1:A:56:ALA:O	1:A:57:LEU:C	0.49	2.55	2	1
1:A:128:ALA:O	1:A:130:ASN:N	0.49	2.46	2	2
1:A:109:SER:C	1:A:110:HIS:ND1	0.49	2.70	3	1
1:A:92:ARG:O	1:A:93:ASN:CG	0.49	2.56	6	1
1:A:95:LEU:O	1:A:96:LEU:HB2	0.49	2.08	6	3
1:A:138:ASN:CG	1:A:139:ARG:N	0.49	2.71	5	1
1:A:107:ARG:N	1:A:107:ARG:CD	0.49	2.76	7	1
1:A:48:THR:OG1	1:A:52:LEU:HB3	0.48	2.07	1	2
1:A:153:TYR:C	1:A:155:GLU:N	0.48	2.69	6	4
1:A:118:GLN:O	1:A:119:PRO:C	0.48	2.56	4	5
1:A:142:LEU:C	1:A:142:LEU:CD1	0.48	2.86	3	2
1:A:99:VAL:HG11	1:A:107:ARG:HA	0.48	1.82	8	1
1:A:76:LYS:NZ	1:A:78:GLN:CD	0.48	2.71	2	1
1:A:46:ASP:N	1:A:46:ASP:OD1	0.48	2.44	4	1
1:A:97:PHE:CD2	1:A:110:HIS:CE1	0.48	3.01	9	1
1:A:107:ARG:N	1:A:107:ARG:HE	0.48	2.07	6	2
1:A:52:LEU:O	1:A:56:ALA:CB	0.48	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:82:ILE:CG2	1:A:100:VAL:HG12	0.48	2.28	5	1
1:A:96:LEU:HD23	1:A:166:GLY:O	0.48	2.09	7	1
1:A:95:LEU:O	1:A:96:LEU:CD2	0.48	2.61	9	2
1:A:63:LEU:C	1:A:63:LEU:CD2	0.48	2.86	4	1
1:A:107:ARG:CZ	1:A:147:ARG:HH22	0.48	2.22	7	1
1:A:150:THR:O	1:A:163:VAL:N	0.48	2.35	8	1
1:A:106:LEU:O	1:A:108:TYR:N	0.48	2.47	2	1
1:A:99:VAL:HG22	1:A:164:ALA:O	0.48	2.08	9	1
1:A:59:VAL:HB	1:A:89:VAL:HG22	0.48	1.85	4	1
1:A:116:ILE:O	1:A:117:GLY:C	0.48	2.57	9	3
1:A:107:ARG:O	1:A:108:TYR:C	0.48	2.57	8	3
1:A:60:ALA:C	1:A:62:THR:N	0.48	2.70	4	1
1:A:154:ASP:CG	1:A:155:GLU:H	0.48	2.16	2	1
1:A:85:ILE:O	1:A:89:VAL:HG22	0.48	2.09	5	1
1:A:96:LEU:HD13	1:A:166:GLY:O	0.48	2.09	6	1
1:A:115:ARG:NH1	1:A:138:ASN:CG	0.48	2.72	7	1
1:A:97:PHE:CE2	1:A:107:ARG:CZ	0.47	2.96	1	1
1:A:97:PHE:CZ	1:A:115:ARG:NE	0.47	2.82	4	1
1:A:135:VAL:CG2	1:A:147:ARG:O	0.47	2.61	1	2
1:A:153:TYR:HA	1:A:158:LYS:O	0.47	2.10	4	1
1:A:86:ALA:CA	1:A:89:VAL:HG13	0.47	2.39	6	1
1:A:110:HIS:ND1	1:A:112:GLU:N	0.47	2.62	1	1
1:A:141:PHE:C	1:A:143:ALA:N	0.47	2.73	1	1
1:A:115:ARG:HE	1:A:143:ALA:CB	0.47	2.22	3	1
1:A:110:HIS:CD2	1:A:110:HIS:N	0.47	2.82	5	3
1:A:66:SER:OG	1:A:67:PRO:HD3	0.47	2.08	10	5
1:A:93:ASN:ND2	1:A:93:ASN:H	0.47	2.07	2	1
1:A:167:LEU:C	1:A:167:LEU:HD23	0.47	2.35	2	1
1:A:71:GLN:O	1:A:71:GLN:CG	0.47	2.63	9	2
1:A:69:ILE:O	1:A:70:ARG:C	0.47	2.56	1	6
1:A:78:GLN:H	1:A:78:GLN:CD	0.47	2.18	1	1
1:A:58:ALA:O	1:A:61:ARG:CB	0.47	2.62	4	1
1:A:97:PHE:CZ	1:A:110:HIS:CE1	0.47	3.03	9	1
1:A:53:ALA:O	1:A:57:LEU:HB2	0.47	2.10	7	1
1:A:91:LYS:C	1:A:91:LYS:CD	0.47	2.87	7	1
1:A:46:ASP:O	1:A:47:MET:C	0.47	2.57	2	7
1:A:63:LEU:N	1:A:63:LEU:CD2	0.47	2.77	1	2
1:A:49:ARG:O	1:A:53:ALA:HB2	0.47	2.09	4	1
1:A:51:GLY:O	1:A:52:LEU:C	0.47	2.54	9	10
1:A:128:ALA:HB1	1:A:150:THR:O	0.47	2.09	4	1
1:A:142:LEU:O	1:A:168:GLU:OE2	0.47	2.33	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:61:ARG:O	1:A:65:ASP:N	0.47	2.48	9	1
1:A:48:THR:OG1	1:A:52:LEU:CB	0.46	2.64	5	2
1:A:80:SER:OG	1:A:108:TYR:CD2	0.46	2.69	3	1
1:A:92:ARG:CD	1:A:92:ARG:C	0.46	2.89	8	1
1:A:80:SER:CB	1:A:108:TYR:CE2	0.46	2.98	4	2
1:A:121:LYS:O	1:A:122:GLY:C	0.46	2.57	8	3
1:A:63:LEU:HB2	1:A:85:ILE:HA	0.46	1.85	1	1
1:A:140:GLY:C	1:A:142:LEU:H	0.46	2.16	7	3
1:A:89:VAL:HB	1:A:94:ASP:HB2	0.46	1.85	10	1
1:A:94:ASP:O	1:A:95:LEU:HD23	0.46	2.10	7	1
1:A:78:GLN:O	1:A:79:GLU:CB	0.46	2.64	10	1
1:A:76:LYS:NZ	1:A:79:GLU:OE1	0.46	2.48	1	1
1:A:85:ILE:HG12	1:A:86:ALA:N	0.46	2.25	5	1
1:A:111:PRO:CG	1:A:112:GLU:H	0.46	2.24	5	1
1:A:93:ASN:OD1	1:A:167:LEU:HD12	0.46	2.08	7	1
1:A:57:LEU:C	1:A:57:LEU:CD2	0.46	2.89	8	2
1:A:88:ALA:HB3	1:A:98:ILE:HD13	0.46	1.87	1	1
1:A:129:LEU:C	1:A:130:ASN:ND2	0.46	2.71	4	2
1:A:89:VAL:HG23	1:A:90:ARG:N	0.46	2.26	2	1
1:A:168:GLU:C	1:A:169:LEU:O	0.46	2.54	2	1
1:A:143:ALA:O	1:A:144:GLN:O	0.46	2.33	10	1
1:A:61:ARG:NH1	1:A:65:ASP:OD2	0.46	2.49	2	1
1:A:93:ASN:HD22	1:A:93:ASN:H	0.46	1.52	2	1
1:A:158:LYS:O	1:A:159:GLN:O	0.46	2.34	3	1
1:A:82:ILE:O	1:A:83:GLN:C	0.46	2.59	5	1
1:A:69:ILE:HG23	1:A:70:ARG:N	0.46	2.23	9	1
1:A:90:ARG:CB	1:A:96:LEU:HD21	0.46	2.40	9	1
1:A:93:ASN:O	1:A:94:ASP:HB2	0.45	2.11	6	1
1:A:63:LEU:CB	1:A:85:ILE:HD12	0.45	2.41	2	1
1:A:128:ALA:C	1:A:130:ASN:N	0.45	2.69	7	3
1:A:83:GLN:O	1:A:84:ALA:O	0.45	2.33	5	1
1:A:52:LEU:C	1:A:52:LEU:HD12	0.45	2.36	7	1
1:A:154:ASP:O	1:A:154:ASP:OD1	0.45	2.34	8	1
1:A:63:LEU:O	1:A:65:ASP:N	0.45	2.49	10	1
1:A:63:LEU:O	1:A:69:ILE:HG13	0.45	2.10	1	1
1:A:138:ASN:OD1	1:A:147:ARG:CZ	0.45	2.64	3	1
1:A:69:ILE:HG22	1:A:100:VAL:HG21	0.45	1.85	5	1
1:A:76:LYS:O	1:A:77:PRO:C	0.45	2.59	5	4
1:A:110:HIS:CD2	1:A:110:HIS:H	0.45	2.29	5	1
1:A:95:LEU:C	1:A:96:LEU:CG	0.45	2.90	9	1
1:A:133:GLU:CD	1:A:133:GLU:N	0.45	2.74	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:101:THR:HG21	1:A:105:SER:HA	0.45	1.86	4	1
1:A:75:LYS:NZ	1:A:79:GLU:CD	0.45	2.75	6	1
1:A:115:ARG:NH2	1:A:143:ALA:O	0.45	2.41	9	1
1:A:82:ILE:CD1	1:A:85:ILE:CD1	0.45	2.94	2	1
1:A:69:ILE:O	1:A:73:LEU:N	0.45	2.47	10	1
1:A:67:PRO:O	1:A:68:GLU:C	0.45	2.59	1	1
1:A:59:VAL:C	1:A:89:VAL:HG22	0.45	2.37	4	1
1:A:159:GLN:O	1:A:159:GLN:OE1	0.45	2.35	9	1
1:A:168:GLU:OE1	1:A:169:LEU:O	0.45	2.34	1	1
1:A:82:ILE:HD12	1:A:100:VAL:HB	0.45	1.89	4	1
1:A:111:PRO:CG	1:A:112:GLU:N	0.45	2.80	5	1
1:A:59:VAL:C	1:A:61:ARG:N	0.45	2.74	7	2
1:A:90:ARG:O	1:A:94:ASP:N	0.45	2.45	7	1
1:A:63:LEU:C	1:A:65:ASP:H	0.45	2.19	10	2
1:A:115:ARG:NE	1:A:143:ALA:HB2	0.45	2.27	1	1
1:A:85:ILE:CG1	1:A:86:ALA:N	0.45	2.80	2	1
1:A:76:LYS:HZ1	1:A:78:GLN:CD	0.45	2.20	2	1
1:A:82:ILE:HD11	1:A:85:ILE:HD11	0.45	1.89	2	1
1:A:120:PHE:CD2	1:A:120:PHE:O	0.45	2.69	7	1
1:A:54:ASN:C	1:A:54:ASN:ND2	0.45	2.73	8	1
1:A:121:LYS:O	1:A:123:ASP:CG	0.44	2.60	1	2
1:A:99:VAL:CG2	1:A:99:VAL:O	0.44	2.65	4	2
1:A:115:ARG:HH12	1:A:139:ARG:N	0.44	2.10	7	1
1:A:95:LEU:C	1:A:96:LEU:HG	0.44	2.36	9	1
1:A:52:LEU:O	1:A:53:ALA:C	0.44	2.60	5	7
1:A:102:ASP:OD1	1:A:103:MET:N	0.44	2.51	1	1
1:A:110:HIS:CB	1:A:116:ILE:HD11	0.44	2.43	4	1
1:A:69:ILE:C	1:A:71:GLN:N	0.44	2.74	5	2
1:A:97:PHE:HB3	1:A:109:SER:O	0.44	2.12	1	1
1:A:101:THR:C	1:A:102:ASP:O	0.44	2.56	1	1
1:A:59:VAL:O	1:A:62:THR:N	0.44	2.37	4	1
1:A:67:PRO:CD	1:A:68:GLU:N	0.44	2.79	4	1
1:A:96:LEU:HD12	1:A:167:LEU:HA	0.44	1.89	10	1
1:A:59:VAL:O	1:A:60:ALA:C	0.44	2.60	9	3
1:A:160:ILE:C	1:A:160:ILE:CD1	0.44	2.90	2	1
1:A:115:ARG:NH1	1:A:138:ASN:OD1	0.44	2.50	7	1
1:A:48:THR:OG1	1:A:52:LEU:HD13	0.44	2.12	8	1
1:A:46:ASP:O	1:A:49:ARG:HB3	0.44	2.12	9	1
1:A:153:TYR:CA	1:A:158:LYS:O	0.44	2.65	4	1
1:A:59:VAL:HG12	1:A:98:ILE:HD12	0.44	1.89	2	1
1:A:63:LEU:CD2	1:A:84:ALA:HB1	0.44	2.43	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:ALA:O	1:A:89:VAL:HB	0.44	2.12	1	1
1:A:124:ASP:OD1	1:A:147:ARG:NH2	0.44	2.51	3	1
1:A:112:GLU:O	1:A:113:ALA:C	0.44	2.60	8	1
1:A:118:GLN:CB	1:A:119:PRO:CD	0.44	2.96	1	4
1:A:99:VAL:CG2	1:A:101:THR:OG1	0.44	2.66	5	1
1:A:97:PHE:CE2	1:A:110:HIS:CE1	0.44	3.05	9	1
1:A:97:PHE:O	1:A:107:ARG:NH2	0.44	2.47	3	1
1:A:141:PHE:O	1:A:141:PHE:CD2	0.44	2.71	4	1
1:A:103:MET:SD	1:A:129:LEU:CD2	0.44	3.06	7	1
1:A:106:LEU:O	1:A:107:ARG:C	0.43	2.61	2	1
1:A:124:ASP:CG	1:A:147:ARG:NH2	0.43	2.76	3	1
1:A:75:LYS:O	1:A:76:LYS:C	0.43	2.61	7	2
1:A:118:GLN:CG	1:A:119:PRO:CD	0.43	2.96	7	1
1:A:86:ALA:O	1:A:90:ARG:N	0.43	2.50	8	1
1:A:85:ILE:O	1:A:88:ALA:CB	0.43	2.66	2	2
1:A:73:LEU:C	1:A:75:LYS:H	0.43	2.20	7	2
1:A:107:ARG:HH22	1:A:138:ASN:CG	0.43	2.20	4	2
1:A:52:LEU:HD11	1:A:148:VAL:HG22	0.43	1.89	5	1
1:A:63:LEU:O	1:A:64:ALA:C	0.43	2.60	10	2
1:A:104:GLN:CD	1:A:104:GLN:C	0.43	2.86	8	1
1:A:90:ARG:HG2	1:A:96:LEU:HG	0.43	1.85	9	1
1:A:76:LYS:NZ	1:A:78:GLN:H	0.43	2.10	3	1
1:A:73:LEU:O	1:A:75:LYS:N	0.43	2.51	7	1
1:A:69:ILE:HD11	1:A:100:VAL:HG11	0.43	1.88	9	1
1:A:122:GLY:C	1:A:124:ASP:H	0.43	2.20	1	1
1:A:99:VAL:HG23	1:A:108:TYR:CD1	0.43	2.49	6	2
1:A:115:ARG:HH21	1:A:139:ARG:N	0.43	2.11	3	1
1:A:52:LEU:HD12	1:A:52:LEU:O	0.43	2.13	6	1
1:A:139:ARG:CZ	1:A:144:GLN:NE2	0.43	2.81	8	1
1:A:112:GLU:OE1	1:A:112:GLU:CA	0.43	2.66	6	1
1:A:69:ILE:HD11	1:A:100:VAL:CG2	0.43	2.42	9	1
1:A:133:GLU:OE1	1:A:149:PHE:O	0.43	2.36	9	1
1:A:85:ILE:O	1:A:89:VAL:HG23	0.43	2.13	7	1
1:A:98:ILE:HD12	1:A:165:ILE:CD1	0.43	2.43	8	1
1:A:86:ALA:O	1:A:88:ALA:N	0.43	2.50	2	1
1:A:116:ILE:H	1:A:116:ILE:HD13	0.43	1.74	3	1
1:A:107:ARG:N	1:A:107:ARG:NE	0.43	2.66	7	1
1:A:88:ALA:CB	1:A:98:ILE:HD13	0.43	2.43	1	1
1:A:52:LEU:HD12	1:A:56:ALA:CB	0.43	2.44	2	1
1:A:63:LEU:C	1:A:63:LEU:HD12	0.43	2.39	2	1
1:A:114:GLN:O	1:A:118:GLN:OE1	0.43	2.37	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:105:SER:OG	1:A:107:ARG:NH2	0.43	2.52	8	1
1:A:97:PHE:CE1	1:A:110:HIS:CD2	0.43	3.07	1	2
1:A:53:ALA:O	1:A:57:LEU:CG	0.43	2.67	3	1
1:A:63:LEU:HD13	1:A:84:ALA:C	0.43	2.39	3	1
1:A:114:GLN:O	1:A:115:ARG:C	0.43	2.62	4	2
1:A:116:ILE:O	1:A:119:PRO:HD2	0.43	2.13	10	1
1:A:48:THR:O	1:A:52:LEU:HB3	0.43	2.14	8	3
1:A:107:ARG:C	1:A:109:SER:H	0.43	2.21	4	2
1:A:99:VAL:HG11	1:A:164:ALA:HB3	0.43	1.90	7	1
1:A:125:ILE:HG22	1:A:149:PHE:CD1	0.43	2.49	7	1
1:A:134:ASN:O	1:A:149:PHE:N	0.42	2.52	2	1
1:A:72:GLY:O	1:A:73:LEU:C	0.42	2.62	5	1
1:A:118:GLN:N	1:A:119:PRO:CD	0.42	2.81	7	1
1:A:99:VAL:HG22	1:A:164:ALA:H	0.42	1.75	10	1
1:A:96:LEU:HD22	1:A:165:ILE:HG22	0.42	1.90	7	1
1:A:85:ILE:O	1:A:88:ALA:HB3	0.42	2.15	1	1
1:A:107:ARG:O	1:A:116:ILE:HG23	0.42	2.15	1	1
1:A:96:LEU:C	1:A:96:LEU:CD1	0.42	2.92	3	1
1:A:75:LYS:CG	1:A:76:LYS:N	0.42	2.82	4	1
1:A:149:PHE:CE1	1:A:164:ALA:HB2	0.42	2.48	4	1
1:A:130:ASN:HD21	1:A:132:GLU:H	0.42	1.58	5	2
1:A:64:ALA:HB1	1:A:69:ILE:HG13	0.42	1.91	9	1
1:A:63:LEU:HD12	1:A:63:LEU:O	0.42	2.15	2	1
1:A:84:ALA:C	1:A:87:GLU:H	0.42	2.16	2	1
1:A:152:ILE:CG1	1:A:163:VAL:HG23	0.42	2.45	4	1
1:A:125:ILE:CG2	1:A:149:PHE:CE1	0.42	3.02	7	1
1:A:58:ALA:O	1:A:59:VAL:C	0.42	2.60	2	1
1:A:80:SER:N	1:A:108:TYR:CZ	0.42	2.87	4	2
1:A:81:GLY:O	1:A:82:ILE:C	0.42	2.60	5	1
1:A:104:GLN:NE2	1:A:105:SER:O	0.42	2.53	1	1
1:A:80:SER:HB2	1:A:108:TYR:CE2	0.42	2.49	4	1
1:A:61:ARG:HA	1:A:64:ALA:HB3	0.42	1.91	8	2
1:A:93:ASN:C	1:A:93:ASN:HD22	0.42	2.04	7	1
1:A:63:LEU:O	1:A:63:LEU:CD2	0.42	2.68	4	1
1:A:115:ARG:NH1	1:A:168:GLU:OE1	0.42	2.53	4	1
1:A:82:ILE:O	1:A:85:ILE:N	0.42	2.53	5	1
1:A:86:ALA:C	1:A:89:VAL:HG13	0.42	2.38	6	1
1:A:100:VAL:O	1:A:108:TYR:CZ	0.42	2.73	9	1
1:A:67:PRO:O	1:A:69:ILE:N	0.41	2.53	6	1
1:A:99:VAL:CG1	1:A:164:ALA:N	0.41	2.78	2	1
1:A:120:PHE:O	1:A:121:LYS:C	0.41	2.62	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:VAL:O	1:A:108:TYR:CE2	0.41	2.73	3	1
1:A:98:ILE:O	1:A:109:SER:OG	0.41	2.31	4	1
1:A:110:HIS:O	1:A:110:HIS:CG	0.41	2.74	5	1
1:A:93:ASN:N	1:A:93:ASN:OD1	0.41	2.53	9	1
1:A:45:SER:O	1:A:48:THR:HG22	0.41	2.16	10	1
1:A:82:ILE:CD1	1:A:100:VAL:H	0.41	2.28	1	1
1:A:89:VAL:CG2	1:A:90:ARG:N	0.41	2.83	2	2
1:A:155:GLU:C	1:A:156:ASN:ND2	0.41	2.79	2	1
1:A:108:TYR:O	1:A:110:HIS:CE1	0.41	2.73	3	1
1:A:89:VAL:CG1	1:A:90:ARG:N	0.41	2.83	8	1
1:A:154:ASP:C	1:A:156:ASN:N	0.41	2.78	10	2
1:A:121:LYS:C	1:A:123:ASP:H	0.41	2.21	1	1
1:A:101:THR:HG22	1:A:162:VAL:O	0.41	2.16	2	1
1:A:153:TYR:O	1:A:154:ASP:C	0.41	2.64	4	1
1:A:87:GLU:C	1:A:89:VAL:N	0.41	2.77	6	1
1:A:92:ARG:HD3	1:A:92:ARG:C	0.41	2.40	8	1
1:A:110:HIS:ND1	1:A:110:HIS:N	0.41	2.68	3	1
1:A:82:ILE:C	1:A:84:ALA:H	0.41	2.23	4	2
1:A:98:ILE:HG13	1:A:165:ILE:HG23	0.41	1.92	6	1
1:A:168:GLU:CD	1:A:168:GLU:C	0.41	2.88	6	1
1:A:83:GLN:N	1:A:83:GLN:CD	0.41	2.79	7	1
1:A:62:THR:HG22	1:A:85:ILE:HG22	0.41	1.92	4	1
1:A:112:GLU:OE2	1:A:114:GLN:N	0.41	2.54	5	1
1:A:95:LEU:O	1:A:96:LEU:HB3	0.41	2.16	9	1
1:A:160:ILE:C	1:A:160:ILE:HD12	0.41	2.41	5	1
1:A:105:SER:O	1:A:106:LEU:HB3	0.41	2.14	7	1
1:A:101:THR:HG23	1:A:102:ASP:O	0.41	2.16	2	1
1:A:131:GLY:HA3	1:A:159:GLN:HB3	0.41	1.93	3	1
1:A:150:THR:N	1:A:163:VAL:O	0.41	2.48	4	1
1:A:153:TYR:CB	1:A:158:LYS:O	0.41	2.68	4	1
1:A:80:SER:CB	1:A:108:TYR:CD2	0.41	3.04	9	2
1:A:82:ILE:HD12	1:A:85:ILE:HG13	0.41	1.92	6	1
1:A:125:ILE:O	1:A:129:LEU:HB2	0.41	2.16	7	1
1:A:60:ALA:HB2	1:A:98:ILE:HD12	0.41	1.92	9	1
1:A:60:ALA:O	1:A:64:ALA:N	0.41	2.39	10	1
1:A:130:ASN:O	1:A:151:PRO:HB3	0.41	2.16	2	1
1:A:65:ASP:O	1:A:66:SER:O	0.41	2.38	4	2
1:A:142:LEU:CB	1:A:168:GLU:OE2	0.41	2.69	5	1
1:A:63:LEU:O	1:A:66:SER:N	0.41	2.42	7	1
1:A:53:ALA:HB2	1:A:148:VAL:HG11	0.41	1.92	8	1
1:A:90:ARG:CG	1:A:96:LEU:CD2	0.41	2.83	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:131:GLY:O	1:A:132:GLU:HB2	0.40	2.16	1	1
1:A:112:GLU:CD	1:A:142:LEU:HD13	0.40	2.41	7	1
1:A:119:PRO:O	1:A:120:PHE:HB3	0.40	2.15	9	1
1:A:64:ALA:HB2	1:A:85:ILE:CG2	0.40	2.46	10	1
1:A:48:THR:HG23	1:A:49:ARG:N	0.40	2.31	1	1
1:A:97:PHE:CD2	1:A:107:ARG:CZ	0.40	3.05	1	1
1:A:154:ASP:N	1:A:160:ILE:HG13	0.40	2.31	2	1
1:A:60:ALA:O	1:A:63:LEU:CB	0.40	2.69	4	1
1:A:61:ARG:O	1:A:62:THR:C	0.40	2.62	9	1
1:A:159:GLN:CD	1:A:159:GLN:C	0.40	2.89	9	1
1:A:154:ASP:N	1:A:160:ILE:CG1	0.40	2.84	2	1
1:A:107:ARG:CG	1:A:110:HIS:CE1	0.40	3.04	8	1
1:A:102:ASP:C	1:A:104:GLN:N	0.40	2.78	4	1
1:A:150:THR:OG1	1:A:163:VAL:O	0.40	2.34	7	1
1:A:65:ASP:O	1:A:65:ASP:OD1	0.40	2.40	9	1
1:A:130:ASN:O	1:A:151:PRO:CB	0.40	2.69	2	1
1:A:64:ALA:N	1:A:85:ILE:CG2	0.40	2.84	3	1
1:A:63:LEU:O	1:A:63:LEU:HD23	0.40	2.17	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	124/136 (91%)	78±2 (63±1%)	26±4 (21±3%)	20±4 (16±3%)	0	4
All	All	1240/1360 (91%)	784 (63%)	255 (21%)	201 (16%)	0	4

All 45 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	66	SER	10
1	A	67	PRO	10
1	A	106	LEU	10
1	A	116	ILE	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	119	PRO	9
1	A	96	LEU	8
1	A	117	GLY	8
1	A	155	GLU	8
1	A	69	ILE	7
1	A	121	LYS	7
1	A	76	LYS	7
1	A	120	PHE	7
1	A	77	PRO	6
1	A	81	GLY	6
1	A	130	ASN	6
1	A	105	SER	5
1	A	141	PHE	5
1	A	169	LEU	5
1	A	85	ILE	5
1	A	94	ASP	5
1	A	122	GLY	4
1	A	82	ILE	4
1	A	143	ALA	4
1	A	154	ASP	4
1	A	84	ALA	4
1	A	89	VAL	4
1	A	111	PRO	4
1	A	80	SER	3
1	A	92	ARG	3
1	A	144	GLN	3
1	A	142	LEU	3
1	A	74	GLN	2
1	A	91	LYS	2
1	A	151	PRO	2
1	A	110	HIS	1
1	A	132	GLU	1
1	A	107	ARG	1
1	A	129	LEU	1
1	A	159	GLN	1
1	A	160	ILE	1
1	A	83	GLN	1
1	A	95	LEU	1
1	A	123	ASP	1
1	A	93	ASN	1
1	A	131	GLY	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	102/113 (90%)	76±4 (75±4%)	26±4 (25±4%)	2	25
All	All	1020/1130 (90%)	765 (75%)	255 (25%)	2	25

All 70 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	150	THR	10
1	A	159	GLN	10
1	A	52	LEU	9
1	A	66	SER	9
1	A	76	LYS	9
1	A	85	ILE	9
1	A	95	LEU	8
1	A	96	LEU	8
1	A	97	PHE	8
1	A	106	LEU	8
1	A	67	PRO	7
1	A	103	MET	7
1	A	129	LEU	7
1	A	135	VAL	7
1	A	61	ARG	6
1	A	109	SER	6
1	A	99	VAL	6
1	A	130	ASN	6
1	A	98	ILE	6
1	A	89	VAL	5
1	A	93	ASN	5
1	A	146	LEU	5
1	A	151	PRO	5
1	A	115	ARG	5
1	A	147	ARG	5
1	A	73	LEU	5
1	A	137	ILE	4
1	A	142	LEU	4
1	A	69	ILE	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	118	GLN	3
1	A	169	LEU	3
1	A	82	ILE	3
1	A	110	HIS	3
1	A	116	ILE	3
1	A	162	VAL	2
1	A	47	MET	2
1	A	63	LEU	2
1	A	153	TYR	2
1	A	74	GLN	2
1	A	75	LYS	2
1	A	168	GLU	2
1	A	100	VAL	2
1	A	107	ARG	2
1	A	167	LEU	2
1	A	48	THR	2
1	A	79	GLU	1
1	A	148	VAL	1
1	A	158	LYS	1
1	A	163	VAL	1
1	A	138	ASN	1
1	A	59	VAL	1
1	A	77	PRO	1
1	A	80	SER	1
1	A	104	GLN	1
1	A	55	LYS	1
1	A	71	GLN	1
1	A	120	PHE	1
1	A	101	THR	1
1	A	112	GLU	1
1	A	45	SER	1
1	A	46	ASP	1
1	A	49	ARG	1
1	A	68	GLU	1
1	A	91	LYS	1
1	A	105	SER	1
1	A	123	ASP	1
1	A	132	GLU	1
1	A	155	GLU	1
1	A	121	LYS	1
1	A	125	ILE	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided