



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 01:54 PM UTC

PDB ID : 1P88 / pdb_00001p88
Title : Substrate-induced structural changes to the isolated N-terminal domain of 5-enolpyruvylshikimate-3-phosphate synthase
Authors : Young, J.K.; Stauffer, M.E.; Kim, H.J.; Helms, G.L.; Evans, J.N.S.
Deposited on : 2003-05-06

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

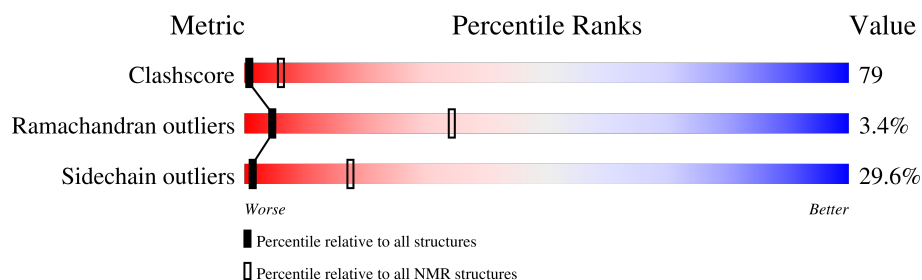
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

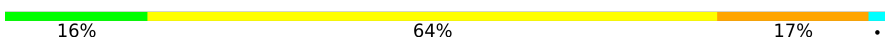
The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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	216	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 11 models. Model 4 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *minimized average structure*.

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:27-A:166, A:170-A:240 (211)	0.22	4

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 2 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3275 atoms, of which 1651 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called 3-phosphoshikimate 1-carboxyvinyltransferase.

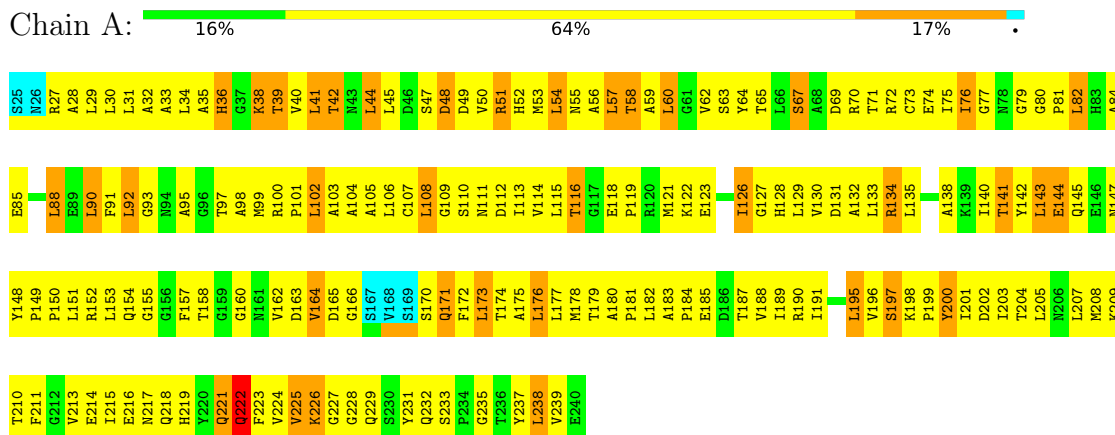
Mol	Chain	Residues	Atoms							Trace
1	A	216	Total	C	H	N	O	S		0
			3275	1024	1651	281	312	7		

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic is the same as shown in the summary in section 1 of this report. The second graphic shows the sequence where residues are colour-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. Stretches of 2 or more consecutive residues without any outliers are shown as green connectors. Residues which are classified as ill-defined in the NMR ensemble, are shown in cyan with an underline colour-coded according to the previous scheme. Residues which were present in the experimental sample, but not modelled in the final structure are shown in grey.

- Molecule 1: 3-phosphoshikimate 1-carboxyvinyltransferase

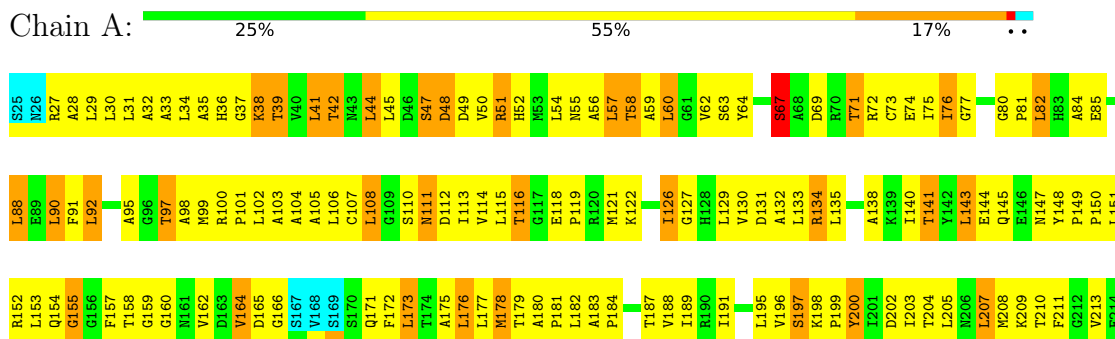


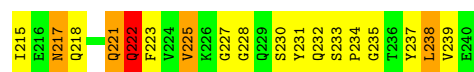
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

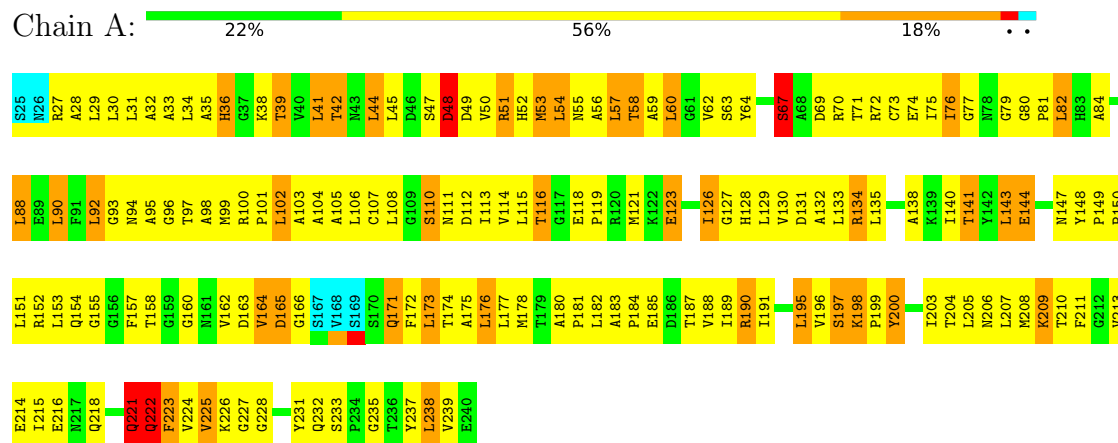
- Molecule 1: 3-phosphoshikimate 1-carboxyvinyltransferase





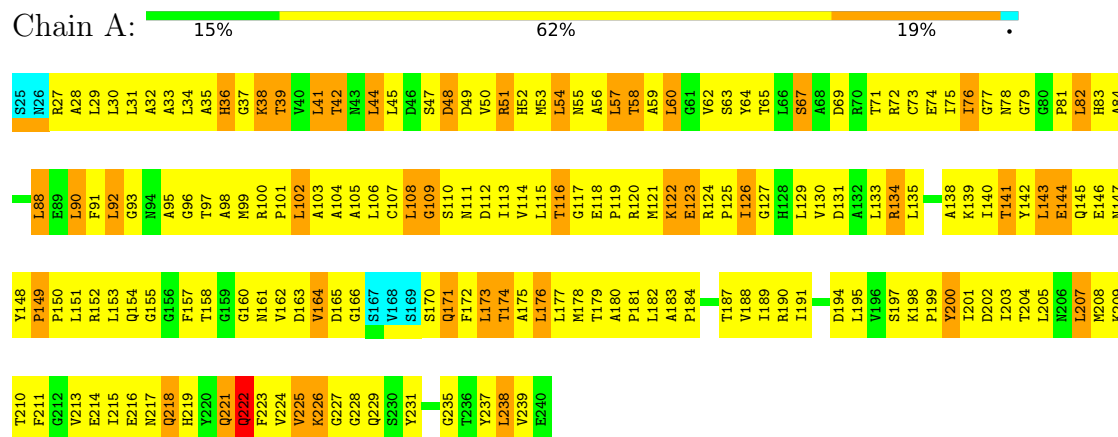
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: 3-phosphoshikimate 1-carboxyvinyltransferase



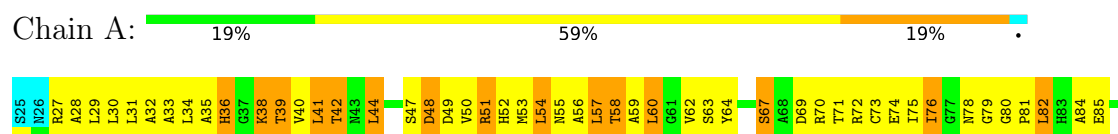
4.2.3 Score per residue for model 3

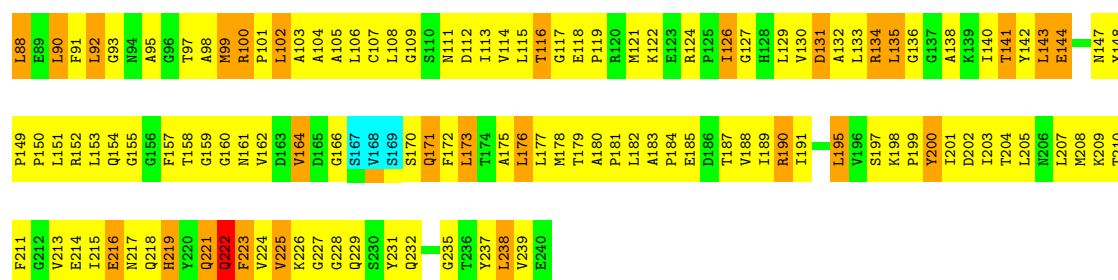
- Molecule 1: 3-phosphoshikimate 1-carboxyvinyltransferase



4.2.4 Score per residue for model 4 (medoid)

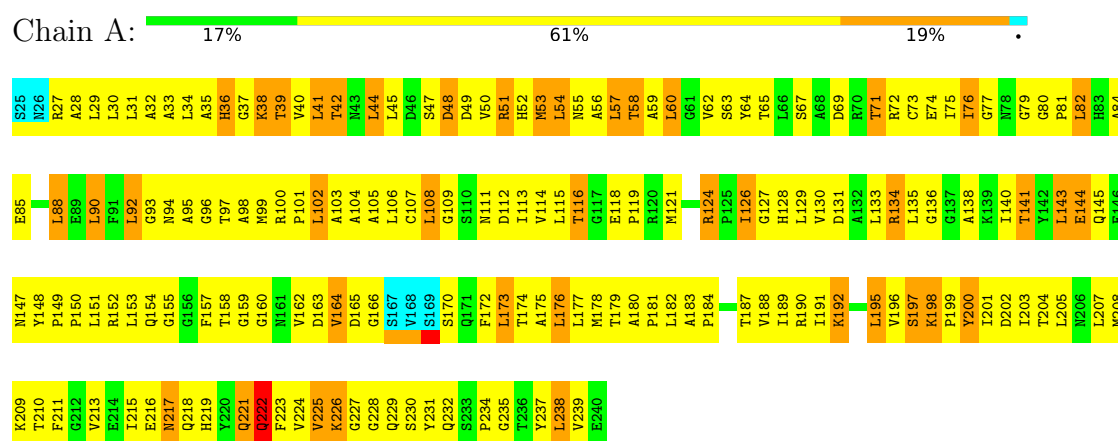
- Molecule 1: 3-phosphoshikimate 1-carboxyvinyltransferase





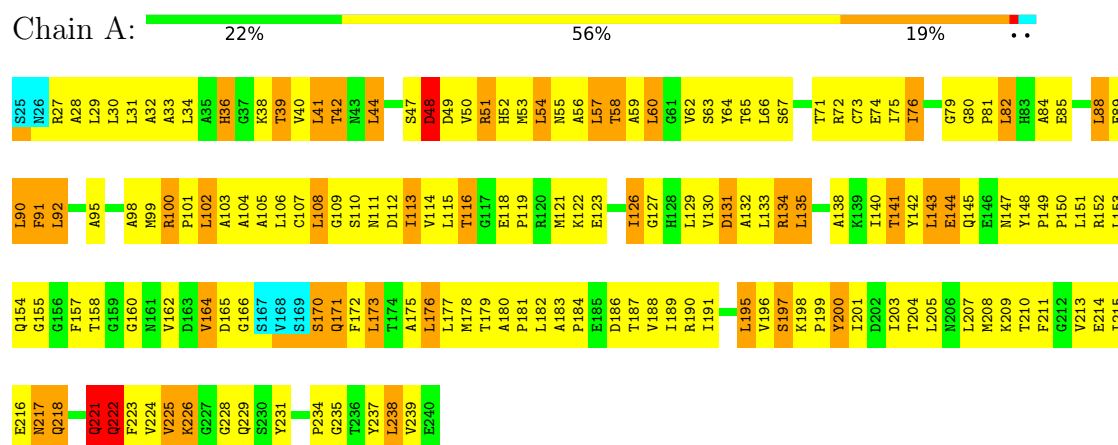
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: 3-phosphoshikimate 1-carboxyvinyltransferase



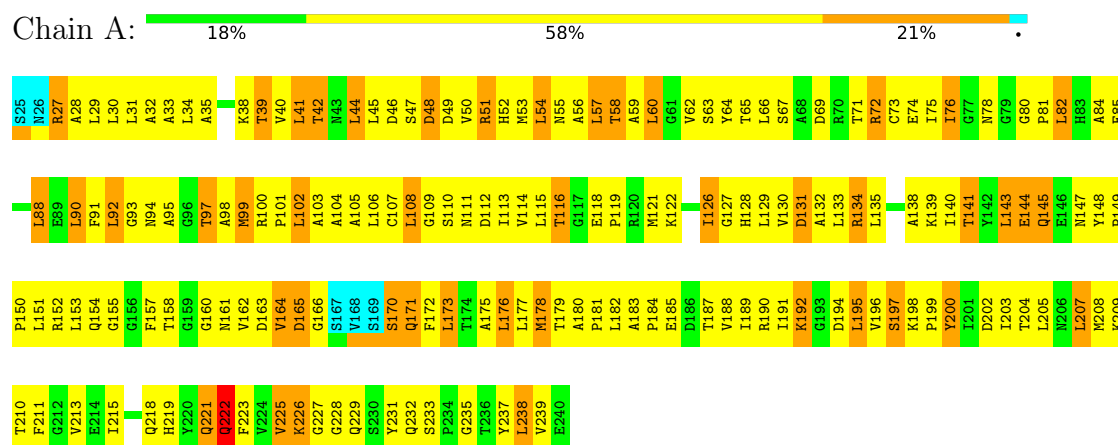
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: 3-phosphoshikimate 1-carboxyvinyltransferase



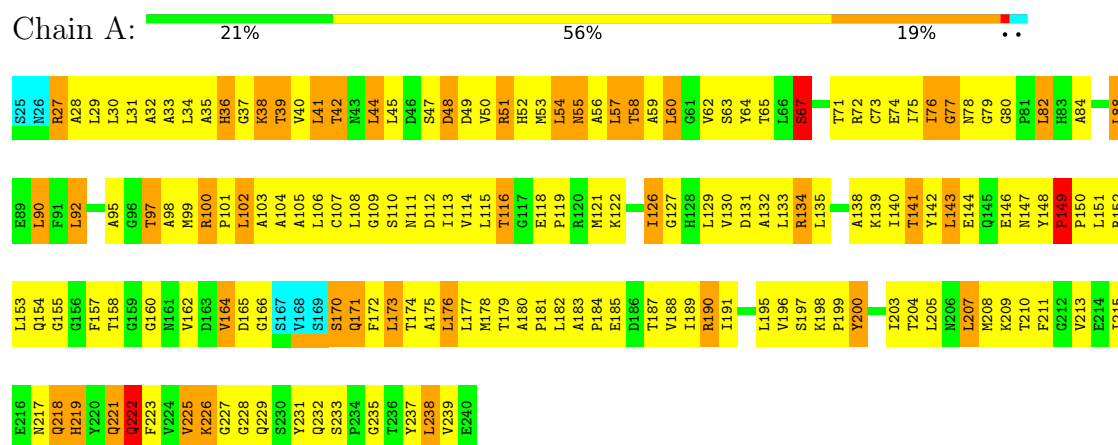
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: 3-phosphoshikimate 1-carboxyvinyltransferase



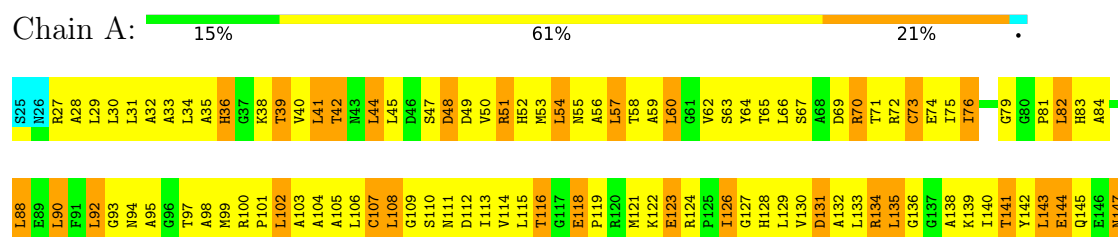
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: 3-phosphoshikimate 1-carboxyvinyltransferase



4.2.9 Score per residue for model 9

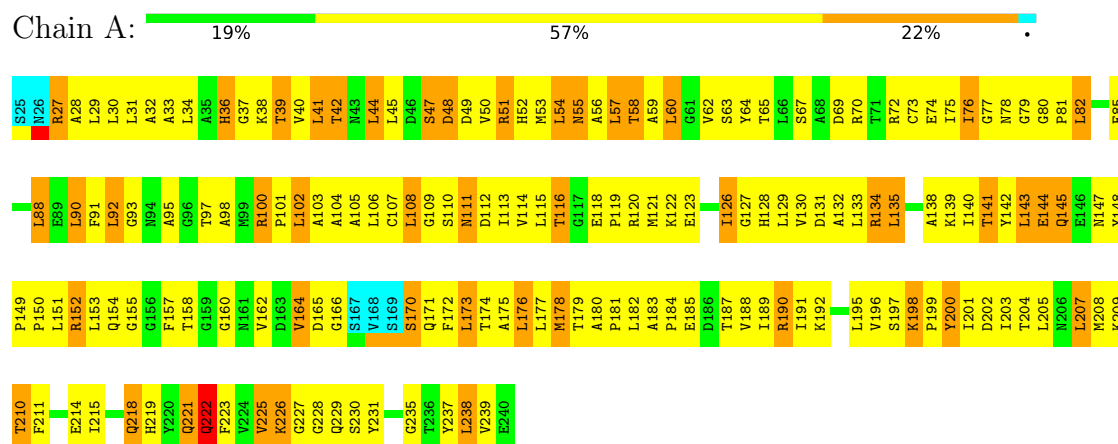
- Molecule 1: 3-phosphoshikimate 1-carboxyvinyltransferase





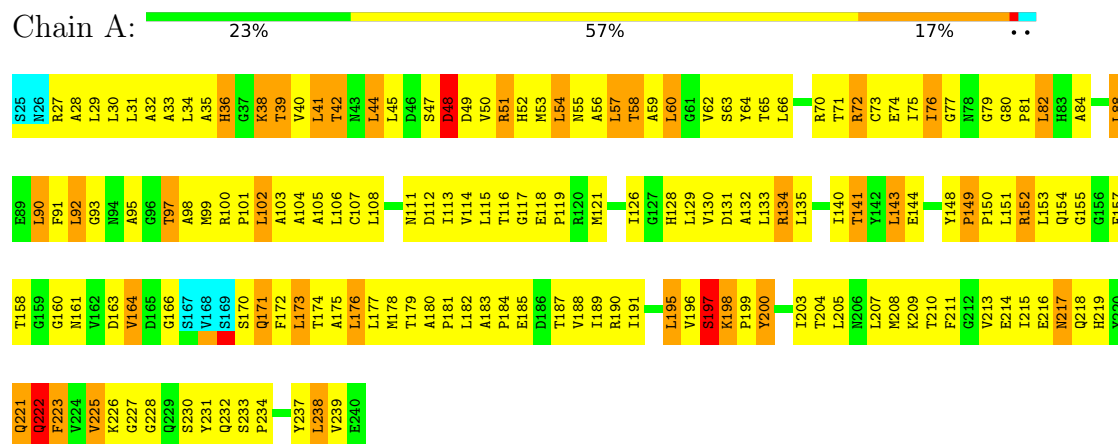
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: 3-phosphoshikimate 1-carboxyvinyltransferase



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: 3-phosphoshikimate 1-carboxyvinyltransferase



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *CNS*.

Of the 10 calculated structures, 11 were deposited, based on the following criterion: *structures with acceptable covalent geometry*.

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

Software name	Classification	Version
CNS	structure solution	1.1
CNS	refinement	1.1

No chemical shift data was provided.

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	0.50±0.02	0±0/1617 (0.0± 0.0%)	0.81±0.01	0±0/2194 (0.0± 0.0%)
All	All	0.50	0/17787 (0.0%)	0.81	3/24134 (0.0%)

There are no bond-length outliers.

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	149	PRO	N-CA-C	5.55	117.48	110.70	11	1
1	A	53	MET	N-CA-C	-5.29	105.62	111.71	2	2

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1591	1619	1616	254±26
All	All	17501	17809	17776	2799

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 79.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:95:ALA:HB1	1:A:98:ALA:HB3	1.09	1.21	11	11
1:A:29:LEU:HD22	1:A:75:ILE:HD11	0.99	1.33	4	11
1:A:56:ALA:HB1	1:A:102:LEU:HD11	0.94	1.38	11	11
1:A:173:LEU:HD13	1:A:195:LEU:HD21	0.93	1.40	10	5
1:A:164:VAL:HG21	1:A:176:LEU:HD11	0.88	1.45	3	11
1:A:49:ASP:HA	1:A:95:ALA:HB2	0.88	1.45	7	9
1:A:207:LEU:O	1:A:210:THR:HG22	0.88	1.69	6	11
1:A:99:MET:HE3	1:A:121:MET:HE2	0.87	1.44	4	4
1:A:215:ILE:HD12	1:A:225:VAL:HB	0.87	1.47	10	11
1:A:29:LEU:CD2	1:A:75:ILE:HD11	0.84	2.02	2	11
1:A:56:ALA:CB	1:A:102:LEU:HD11	0.84	2.02	3	11
1:A:29:LEU:HD23	1:A:41:LEU:HD23	0.83	1.48	3	11
1:A:200:TYR:HA	1:A:203:ILE:HD12	0.83	1.50	4	11
1:A:92:LEU:HB3	1:A:95:ALA:HB3	0.83	1.48	3	11
1:A:197:SER:C	1:A:199:PRO:HD2	0.83	1.98	10	10
1:A:42:THR:HG22	1:A:238:LEU:HA	0.82	1.52	4	11
1:A:112:ASP:HA	1:A:153:LEU:O	0.81	1.75	5	11
1:A:143:LEU:HD11	1:A:152:ARG:HG3	0.81	1.52	9	8
1:A:103:ALA:HA	1:A:153:LEU:HD11	0.81	1.50	7	11
1:A:205:LEU:HD22	1:A:215:ILE:HB	0.81	1.53	3	11
1:A:51:ARG:HA	1:A:54:LEU:HD12	0.80	1.52	3	11
1:A:173:LEU:HD21	1:A:191:ILE:HD11	0.80	1.53	9	6
1:A:104:ALA:HB2	1:A:175:ALA:HB1	0.79	1.54	4	11
1:A:149:PRO:HB2	1:A:150:PRO:HD3	0.79	1.53	3	11
1:A:104:ALA:CB	1:A:175:ALA:HB1	0.78	2.07	11	11
1:A:166:GLY:HA2	1:A:191:ILE:HG23	0.78	1.53	5	11
1:A:173:LEU:HD11	1:A:191:ILE:CG1	0.78	2.09	7	11
1:A:114:VAL:HG13	1:A:143:LEU:CD2	0.78	2.08	1	11
1:A:129:LEU:HD11	1:A:175:ALA:HB3	0.78	1.56	9	9
1:A:64:TYR:HB3	1:A:75:ILE:HG23	0.78	1.56	3	11
1:A:49:ASP:OD1	1:A:50:VAL:HG23	0.77	1.79	5	7
1:A:31:LEU:HD22	1:A:231:TYR:CZ	0.77	2.14	3	8
1:A:164:VAL:HG11	1:A:173:LEU:HG	0.77	1.54	5	10
1:A:41:LEU:HB3	1:A:44:LEU:HD21	0.76	1.57	5	11
1:A:33:ALA:CB	1:A:62:VAL:HG11	0.76	2.10	3	11
1:A:114:VAL:HA	1:A:151:LEU:O	0.75	1.80	10	11
1:A:28:ALA:HB1	1:A:41:LEU:HG	0.75	1.59	10	11
1:A:116:THR:HG23	1:A:150:PRO:HG3	0.75	1.58	5	10
1:A:130:VAL:HG21	1:A:151:LEU:HD21	0.75	1.58	9	11
1:A:130:VAL:HG13	1:A:140:ILE:CG2	0.74	2.12	6	9
1:A:95:ALA:HB1	1:A:98:ALA:CB	0.74	2.08	11	4
1:A:30:LEU:HD22	1:A:101:PRO:HB2	0.74	1.58	11	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:63:SER:O	1:A:76:ILE:HG12	0.74	1.83	3	11
1:A:59:ALA:CB	1:A:90:LEU:HD11	0.74	2.12	11	10
1:A:189:ILE:O	1:A:222:GLN:HA	0.74	1.83	3	11
1:A:177:LEU:HD11	1:A:223:PHE:CD2	0.73	2.18	5	10
1:A:97:THR:HG22	1:A:171:GLN:CD	0.73	2.08	1	1
1:A:41:LEU:CB	1:A:44:LEU:HD21	0.72	2.14	5	11
1:A:31:LEU:HD21	1:A:178:MET:HE2	0.72	1.61	5	10
1:A:158:THR:O	1:A:183:ALA:HB1	0.72	1.83	10	11
1:A:190:ARG:HG3	1:A:222:GLN:HG3	0.72	1.60	7	4
1:A:141:THR:HG22	1:A:152:ARG:HB2	0.71	1.61	3	11
1:A:114:VAL:HG13	1:A:143:LEU:HD23	0.71	1.62	5	11
1:A:129:LEU:HG	1:A:133:LEU:HD11	0.71	1.62	3	11
1:A:173:LEU:HD13	1:A:195:LEU:CD2	0.70	2.16	10	1
1:A:57:LEU:HB3	1:A:62:VAL:HB	0.70	1.64	3	11
1:A:29:LEU:CD2	1:A:41:LEU:HD23	0.70	2.17	9	11
1:A:131:ASP:O	1:A:135:LEU:HB2	0.69	1.88	8	11
1:A:177:LEU:O	1:A:208:MET:HE1	0.69	1.87	4	10
1:A:92:LEU:HD23	1:A:99:MET:SD	0.69	2.28	8	2
1:A:217:ASN:HD22	1:A:217:ASN:H	0.69	1.30	6	1
1:A:108:LEU:HD21	1:A:182:LEU:HB2	0.69	1.65	1	11
1:A:130:VAL:O	1:A:134:ARG:HB2	0.68	1.87	4	11
1:A:173:LEU:HD22	1:A:223:PHE:CE2	0.68	2.23	9	5
1:A:59:ALA:C	1:A:88:LEU:HD21	0.68	2.13	11	11
1:A:162:VAL:O	1:A:189:ILE:HA	0.67	1.89	7	9
1:A:238:LEU:C	1:A:238:LEU:HD22	0.67	2.14	9	11
1:A:27:ARG:HH11	1:A:207:LEU:HD23	0.67	1.50	6	1
1:A:90:LEU:HD23	1:A:102:LEU:CD1	0.67	2.20	6	9
1:A:111:ASN:ND2	1:A:113:ILE:HD13	0.66	2.04	7	1
1:A:32:ALA:HB3	1:A:75:ILE:HD12	0.66	1.66	6	11
1:A:107:CYS:SG	1:A:153:LEU:HD22	0.66	2.31	4	3
1:A:30:LEU:HD11	1:A:105:ALA:CB	0.66	2.20	5	11
1:A:144:GLU:HG3	1:A:145:GLN:H	0.66	1.50	10	1
1:A:31:LEU:CD2	1:A:178:MET:HE2	0.66	2.21	8	9
1:A:217:ASN:HD22	1:A:217:ASN:N	0.65	1.88	6	1
1:A:51:ARG:CA	1:A:54:LEU:HD12	0.65	2.21	3	10
1:A:166:GLY:CA	1:A:191:ILE:HG23	0.65	2.21	2	11
1:A:221:GLN:O	1:A:223:PHE:CD1	0.65	2.49	3	11
1:A:38:LYS:HG3	1:A:76:ILE:HG23	0.65	1.69	1	7
1:A:218:GLN:HB2	1:A:222:GLN:O	0.65	1.92	6	11
1:A:97:THR:HG22	1:A:171:GLN:OE1	0.65	1.90	3	3
1:A:29:LEU:HD23	1:A:41:LEU:CD2	0.65	2.22	9	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:205:LEU:O	1:A:209:LYS:HE2	0.64	1.91	3	7
1:A:107:CYS:SG	1:A:153:LEU:HD13	0.64	2.32	1	3
1:A:62:VAL:HG12	1:A:75:ILE:CG2	0.64	2.23	9	11
1:A:143:LEU:HB2	1:A:150:PRO:HB2	0.64	1.67	11	11
1:A:238:LEU:HD22	1:A:239:VAL:N	0.64	2.08	1	11
1:A:95:ALA:CB	1:A:98:ALA:HB3	0.64	2.13	11	2
1:A:90:LEU:HB2	1:A:115:LEU:HD23	0.64	1.70	3	10
1:A:31:LEU:HB2	1:A:211:PHE:CE2	0.64	2.28	10	11
1:A:144:GLU:HB2	1:A:150:PRO:HG2	0.64	1.69	2	7
1:A:57:LEU:HD23	1:A:75:ILE:HD13	0.64	1.69	9	9
1:A:221:GLN:O	1:A:223:PHE:CE1	0.63	2.51	3	11
1:A:63:SER:HB3	1:A:76:ILE:CG1	0.63	2.23	7	3
1:A:88:LEU:CB	1:A:113:ILE:HG13	0.63	2.23	3	5
1:A:111:ASN:HD22	1:A:113:ILE:HD13	0.63	1.52	7	1
1:A:115:LEU:O	1:A:150:PRO:HA	0.63	1.93	11	11
1:A:195:LEU:HD13	1:A:198:LYS:HA	0.63	1.70	10	4
1:A:59:ALA:HB1	1:A:88:LEU:HD21	0.63	1.70	4	3
1:A:100:ARG:HB2	1:A:101:PRO:HD3	0.63	1.70	3	2
1:A:37:GLY:O	1:A:77:GLY:N	0.63	2.31	5	5
1:A:197:SER:O	1:A:199:PRO:HD2	0.63	1.93	10	1
1:A:27:ARG:HE	1:A:207:LEU:HD23	0.62	1.54	3	2
1:A:210:THR:HG21	1:A:237:TYR:CD2	0.62	2.29	1	11
1:A:44:LEU:HD11	1:A:73:CYS:HB3	0.62	1.71	1	10
1:A:173:LEU:HD11	1:A:191:ILE:HD11	0.62	1.71	3	4
1:A:215:ILE:HD12	1:A:225:VAL:CB	0.62	2.22	10	10
1:A:221:GLN:O	1:A:222:GLN:O	0.62	2.17	10	11
1:A:210:THR:HG21	1:A:237:TYR:CE2	0.62	2.30	8	8
1:A:100:ARG:HE	1:A:126:ILE:HD12	0.62	1.55	4	2
1:A:143:LEU:HD11	1:A:152:ARG:CG	0.62	2.23	7	7
1:A:39:THR:O	1:A:74:GLU:HA	0.62	1.94	10	7
1:A:209:LYS:HA	1:A:213:VAL:O	0.62	1.95	9	10
1:A:129:LEU:HD13	1:A:172:PHE:HA	0.61	1.69	3	6
1:A:130:VAL:CG2	1:A:151:LEU:HD21	0.61	2.26	9	8
1:A:118:GLU:HB2	1:A:119:PRO:HD2	0.61	1.70	3	1
1:A:198:LYS:N	1:A:199:PRO:HD2	0.61	2.11	5	4
1:A:188:VAL:HA	1:A:223:PHE:O	0.61	1.95	3	11
1:A:190:ARG:CG	1:A:222:GLN:HG3	0.61	2.26	7	4
1:A:111:ASN:O	1:A:154:GLN:HA	0.61	1.95	8	11
1:A:112:ASP:C	1:A:113:ILE:HD12	0.61	2.21	6	6
1:A:191:ILE:N	1:A:191:ILE:HD12	0.61	2.11	7	11
1:A:195:LEU:HD11	1:A:223:PHE:HZ	0.61	1.56	4	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:38:LYS:HE3	1:A:76:ILE:HD12	0.61	1.72	3	1
1:A:49:ASP:HB3	1:A:95:ALA:HA	0.61	1.73	4	1
1:A:158:THR:C	1:A:183:ALA:HB1	0.60	2.21	6	11
1:A:100:ARG:O	1:A:129:LEU:HD21	0.60	1.96	9	10
1:A:31:LEU:HD22	1:A:231:TYR:OH	0.60	1.95	3	1
1:A:42:THR:HG22	1:A:238:LEU:CA	0.60	2.26	3	11
1:A:41:LEU:HB2	1:A:44:LEU:HD21	0.60	1.74	8	4
1:A:34:LEU:HB3	1:A:231:TYR:HD2	0.60	1.57	9	9
1:A:99:MET:SD	1:A:115:LEU:HB3	0.60	2.35	5	4
1:A:132:ALA:O	1:A:162:VAL:HG13	0.60	1.96	7	4
1:A:93:GLY:HA3	1:A:118:GLU:H	0.60	1.54	3	6
1:A:49:ASP:CB	1:A:95:ALA:HA	0.60	2.27	4	3
1:A:55:ASN:HA	1:A:58:THR:HB	0.60	1.74	8	11
1:A:118:GLU:HB3	1:A:119:PRO:HD2	0.60	1.74	5	10
1:A:27:ARG:HD3	1:A:174:THR:HG21	0.60	1.74	5	4
1:A:177:LEU:CD2	1:A:205:LEU:HD21	0.59	2.27	1	9
1:A:174:THR:HG23	1:A:204:THR:CG2	0.59	2.27	8	4
1:A:173:LEU:HD11	1:A:191:ILE:HG12	0.59	1.72	4	6
1:A:173:LEU:CD1	1:A:195:LEU:HD21	0.59	2.27	4	3
1:A:100:ARG:HB2	1:A:171:GLN:HB3	0.59	1.73	3	3
1:A:34:LEU:HD23	1:A:80:GLY:O	0.59	1.96	7	9
1:A:183:ALA:O	1:A:228:GLY:N	0.59	2.36	1	11
1:A:140:ILE:CG2	1:A:151:LEU:HD22	0.59	2.27	6	6
1:A:173:LEU:HA	1:A:176:LEU:HD12	0.59	1.75	9	6
1:A:173:LEU:HD11	1:A:191:ILE:HG13	0.59	1.74	10	5
1:A:158:THR:HA	1:A:184:PRO:HD2	0.58	1.74	10	11
1:A:197:SER:C	1:A:199:PRO:CD	0.58	2.76	11	2
1:A:129:LEU:HG	1:A:133:LEU:CD1	0.58	2.27	3	9
1:A:191:ILE:N	1:A:191:ILE:CD1	0.58	2.66	7	8
1:A:107:CYS:SG	1:A:138:ALA:HB1	0.58	2.38	9	1
1:A:198:LYS:HG3	1:A:199:PRO:HD3	0.58	1.75	11	1
1:A:157:PHE:HE2	1:A:180:ALA:HA	0.58	1.58	4	5
1:A:33:ALA:HB2	1:A:57:LEU:HG	0.58	1.76	4	8
1:A:42:THR:CG2	1:A:238:LEU:HD23	0.58	2.28	4	9
1:A:93:GLY:HA3	1:A:118:GLU:HG2	0.58	1.74	3	1
1:A:205:LEU:HD22	1:A:215:ILE:CB	0.58	2.26	3	5
1:A:173:LEU:HD22	1:A:223:PHE:CZ	0.58	2.33	9	3
1:A:201:ILE:HG21	1:A:223:PHE:HE2	0.58	1.58	3	5
1:A:34:LEU:HD11	1:A:105:ALA:HB1	0.58	1.75	11	10
1:A:90:LEU:HB3	1:A:92:LEU:HD11	0.58	1.75	3	6
1:A:54:LEU:HB3	1:A:64:TYR:CZ	0.58	2.34	5	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:ARG:HA	1:A:178:MET:HE1	0.57	1.74	3	7
1:A:91:PHE:C	1:A:92:LEU:HD13	0.57	2.24	3	6
1:A:54:LEU:HB3	1:A:64:TYR:CE2	0.57	2.33	5	11
1:A:130:VAL:HG13	1:A:140:ILE:HG21	0.57	1.76	6	3
1:A:59:ALA:HB1	1:A:88:LEU:CD2	0.57	2.29	4	3
1:A:143:LEU:HB2	1:A:150:PRO:CB	0.57	2.29	7	10
1:A:60:LEU:HD13	1:A:82:LEU:HB2	0.57	1.76	8	11
1:A:100:ARG:CB	1:A:171:GLN:HB3	0.57	2.30	4	4
1:A:123:GLU:O	1:A:123:GLU:HG3	0.57	1.97	3	3
1:A:138:ALA:HB2	1:A:157:PHE:HB2	0.57	1.75	5	4
1:A:38:LYS:HE2	1:A:76:ILE:HD12	0.57	1.76	7	3
1:A:52:HIS:HA	1:A:55:ASN:CB	0.57	2.30	3	11
1:A:221:GLN:O	1:A:222:GLN:C	0.57	2.48	2	11
1:A:205:LEU:O	1:A:209:LYS:CD	0.57	2.52	10	1
1:A:42:THR:HG23	1:A:238:LEU:HD23	0.56	1.77	6	5
1:A:134:ARG:HG3	1:A:140:ILE:HB	0.56	1.77	6	8
1:A:107:CYS:HB2	1:A:138:ALA:HB1	0.56	1.77	3	2
1:A:36:HIS:CG	1:A:79:GLY:HA2	0.56	2.34	5	9
1:A:128:HIS:CE1	1:A:165:ASP:HB2	0.56	2.35	5	1
1:A:173:LEU:HD11	1:A:191:ILE:CD1	0.56	2.31	3	5
1:A:66:LEU:HD21	1:A:70:ARG:HA	0.56	1.76	9	1
1:A:176:LEU:HD13	1:A:189:ILE:HG12	0.56	1.77	8	7
1:A:191:ILE:HB	1:A:221:GLN:CB	0.56	2.30	7	10
1:A:121:MET:HG3	1:A:149:PRO:HG3	0.56	1.77	4	9
1:A:84:ALA:CB	1:A:113:ILE:HD11	0.56	2.31	1	6
1:A:27:ARG:HH12	1:A:203:ILE:HB	0.56	1.61	2	1
1:A:96:GLY:O	1:A:100:ARG:HD3	0.56	2.01	3	3
1:A:51:ARG:HA	1:A:54:LEU:CD1	0.56	2.29	3	2
1:A:66:LEU:HD12	1:A:73:CYS:HB2	0.56	1.76	11	3
1:A:104:ALA:C	1:A:179:THR:OG1	0.56	2.49	8	8
1:A:106:LEU:HB2	1:A:153:LEU:HD12	0.56	1.78	7	11
1:A:130:VAL:HG22	1:A:140:ILE:HG21	0.56	1.77	5	7
1:A:60:LEU:HD13	1:A:82:LEU:CB	0.56	2.31	9	6
1:A:177:LEU:HG	1:A:205:LEU:HD21	0.56	1.76	10	1
1:A:92:LEU:H	1:A:92:LEU:HD22	0.56	1.61	3	3
1:A:204:THR:HG22	1:A:208:MET:SD	0.56	2.41	3	8
1:A:197:SER:O	1:A:199:PRO:CD	0.56	2.53	10	1
1:A:31:LEU:HD21	1:A:178:MET:CE	0.55	2.31	8	2
1:A:84:ALA:HB2	1:A:113:ILE:HD11	0.55	1.78	5	7
1:A:198:LYS:N	1:A:199:PRO:CD	0.55	2.70	11	8
1:A:52:HIS:HA	1:A:55:ASN:HB3	0.55	1.77	11	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:ARG:NH1	1:A:207:LEU:HD23	0.55	2.15	6	1
1:A:191:ILE:HB	1:A:221:GLN:HA	0.55	1.78	5	11
1:A:28:ALA:CB	1:A:41:LEU:HG	0.55	2.31	7	11
1:A:201:ILE:HG21	1:A:223:PHE:CE2	0.55	2.36	3	5
1:A:100:ARG:HD2	1:A:126:ILE:HD12	0.55	1.76	7	1
1:A:111:ASN:OD1	1:A:113:ILE:HD13	0.55	2.02	6	1
1:A:164:VAL:O	1:A:191:ILE:HA	0.54	2.02	3	9
1:A:59:ALA:HB3	1:A:90:LEU:HD11	0.54	1.79	9	6
1:A:33:ALA:HB2	1:A:62:VAL:HG11	0.54	1.78	8	9
1:A:165:ASP:HA	1:A:192:LYS:HG3	0.54	1.80	7	1
1:A:92:LEU:HD13	1:A:92:LEU:N	0.54	2.17	1	6
1:A:63:SER:HB3	1:A:76:ILE:HG12	0.54	1.77	7	3
1:A:34:LEU:HB3	1:A:231:TYR:CD2	0.54	2.37	4	4
1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:HD13	0.54	2.17	7	2
1:A:111:ASN:N	1:A:111:ASN:OD1	0.54	2.41	1	1
1:A:177:LEU:HD11	1:A:223:PHE:HD2	0.54	1.61	9	5
1:A:162:VAL:HB	1:A:189:ILE:HG13	0.54	1.78	3	3
1:A:174:THR:O	1:A:178:MET:HG3	0.54	2.03	2	4
1:A:52:HIS:HA	1:A:55:ASN:HB2	0.54	1.79	10	5
1:A:92:LEU:HD22	1:A:92:LEU:N	0.54	2.17	3	2
1:A:177:LEU:O	1:A:181:PRO:HD3	0.54	2.03	8	10
1:A:181:PRO:HA	1:A:226:LYS:O	0.54	2.01	2	2
1:A:31:LEU:HD11	1:A:208:MET:HG2	0.54	1.79	8	1
1:A:219:HIS:O	1:A:221:GLN:HG2	0.54	2.03	5	7
1:A:44:LEU:O	1:A:71:THR:HG22	0.53	2.03	1	2
1:A:33:ALA:CB	1:A:57:LEU:HG	0.53	2.33	4	10
1:A:127:GLY:CA	1:A:147:ASN:HA	0.53	2.33	3	9
1:A:53:MET:O	1:A:57:LEU:HD13	0.53	2.02	6	10
1:A:127:GLY:HA3	1:A:147:ASN:OD1	0.53	2.04	4	1
1:A:81:PRO:HG3	1:A:108:LEU:HB3	0.53	1.78	9	5
1:A:170:SER:HB3	1:A:197:SER:HB3	0.53	1.80	4	1
1:A:173:LEU:HD13	1:A:223:PHE:CZ	0.53	2.39	4	1
1:A:64:TYR:CB	1:A:75:ILE:HG12	0.53	2.34	7	10
1:A:149:PRO:HB2	1:A:150:PRO:CD	0.53	2.29	3	10
1:A:98:ALA:C	1:A:101:PRO:HD2	0.53	2.29	3	2
1:A:129:LEU:HB2	1:A:172:PHE:CD2	0.53	2.38	3	2
1:A:65:THR:N	1:A:74:GLU:O	0.53	2.40	9	8
1:A:88:LEU:CB	1:A:113:ILE:HD12	0.53	2.34	10	2
1:A:31:LEU:HD13	1:A:208:MET:HA	0.53	1.79	4	6
1:A:140:ILE:HG22	1:A:151:LEU:HD22	0.53	1.81	2	2
1:A:63:SER:C	1:A:76:ILE:HG12	0.53	2.29	9	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:54:LEU:CD2	1:A:73:CYS:SG	0.53	2.97	8	10
1:A:160:GLY:O	1:A:187:THR:HA	0.53	2.03	7	1
1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:HD22	0.53	2.18	10	2
1:A:31:LEU:HD22	1:A:231:TYR:CE2	0.52	2.39	3	5
1:A:130:VAL:HG22	1:A:151:LEU:HD11	0.52	1.81	6	2
1:A:63:SER:O	1:A:76:ILE:N	0.52	2.41	9	11
1:A:174:THR:HG23	1:A:204:THR:HG21	0.52	1.82	8	2
1:A:197:SER:O	1:A:198:LYS:HB3	0.52	2.03	10	1
1:A:49:ASP:OD1	1:A:50:VAL:N	0.52	2.43	9	7
1:A:59:ALA:O	1:A:88:LEU:HD21	0.52	2.04	9	8
1:A:121:MET:O	1:A:149:PRO:HG3	0.52	2.05	4	9
1:A:100:ARG:HD2	1:A:100:ARG:N	0.52	2.18	3	2
1:A:176:LEU:CD1	1:A:189:ILE:HG12	0.52	2.34	3	2
1:A:226:LYS:O	1:A:229:GLN:HG3	0.52	2.03	3	6
1:A:49:ASP:CA	1:A:95:ALA:HB2	0.52	2.30	7	1
1:A:103:ALA:CA	1:A:153:LEU:HD11	0.52	2.30	7	1
1:A:44:LEU:CD1	1:A:73:CYS:HB2	0.52	2.35	9	1
1:A:108:LEU:HD21	1:A:182:LEU:CB	0.52	2.34	1	1
1:A:132:ALA:HB2	1:A:164:VAL:HG23	0.52	1.81	2	7
1:A:88:LEU:HB3	1:A:113:ILE:HG13	0.52	1.81	3	3
1:A:106:LEU:HD13	1:A:113:ILE:HG13	0.52	1.80	4	3
1:A:27:ARG:HB2	1:A:207:LEU:HD21	0.52	1.81	7	3
1:A:52:HIS:O	1:A:56:ALA:N	0.52	2.31	10	8
1:A:63:SER:CB	1:A:76:ILE:CG1	0.52	2.88	11	8
1:A:81:PRO:CG	1:A:108:LEU:HB3	0.52	2.35	7	6
1:A:238:LEU:HD13	1:A:238:LEU:O	0.52	2.05	7	5
1:A:112:ASP:O	1:A:113:ILE:HD12	0.52	2.05	1	2
1:A:180:ALA:N	1:A:181:PRO:HD2	0.52	2.20	6	11
1:A:128:HIS:HB2	1:A:172:PHE:CE2	0.51	2.40	11	4
1:A:40:VAL:HG22	1:A:74:GLU:HB2	0.51	1.81	7	5
1:A:205:LEU:O	1:A:209:LYS:HD3	0.51	2.05	10	1
1:A:103:ALA:HA	1:A:115:LEU:CD1	0.51	2.35	3	7
1:A:63:SER:HB3	1:A:76:ILE:HG13	0.51	1.83	3	3
1:A:93:GLY:HA2	1:A:117:GLY:HA3	0.51	1.82	3	1
1:A:143:LEU:HD22	1:A:151:LEU:N	0.51	2.21	6	4
1:A:99:MET:CG	1:A:126:ILE:HD13	0.51	2.35	7	1
1:A:132:ALA:CA	1:A:162:VAL:HG13	0.51	2.35	7	1
1:A:30:LEU:HD23	1:A:178:MET:CE	0.51	2.35	10	3
1:A:126:ILE:HD11	1:A:129:LEU:HD23	0.51	1.82	5	2
1:A:133:LEU:HB2	1:A:140:ILE:HD11	0.51	1.82	2	1
1:A:191:ILE:CD1	1:A:223:PHE:CE1	0.51	2.94	11	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:38:LYS:HA	1:A:75:ILE:O	0.51	2.05	3	4
1:A:49:ASP:HB3	1:A:94:ASN:O	0.51	2.06	2	4
1:A:205:LEU:O	1:A:209:LYS:HE3	0.51	2.05	9	2
1:A:76:ILE:HD13	1:A:76:ILE:N	0.51	2.21	1	3
1:A:108:LEU:HG	1:A:179:THR:HG23	0.51	1.83	3	6
1:A:38:LYS:CG	1:A:76:ILE:HG23	0.51	2.35	5	1
1:A:41:LEU:O	1:A:72:ARG:HA	0.51	2.05	6	7
1:A:209:LYS:CG	1:A:214:GLU:HG2	0.50	2.36	3	1
1:A:173:LEU:HD12	1:A:195:LEU:HD21	0.50	1.83	4	1
1:A:177:LEU:O	1:A:181:PRO:CD	0.50	2.59	4	8
1:A:170:SER:HB2	1:A:200:TYR:HB3	0.50	1.84	10	2
1:A:148:TYR:HB3	1:A:149:PRO:HD2	0.50	1.83	9	11
1:A:200:TYR:HA	1:A:203:ILE:CD1	0.50	2.33	4	2
1:A:130:VAL:HG11	1:A:142:TYR:CE1	0.50	2.41	4	5
1:A:27:ARG:HB3	1:A:178:MET:HE3	0.50	1.81	1	3
1:A:82:LEU:H	1:A:82:LEU:HD22	0.50	1.66	2	4
1:A:92:LEU:HD22	1:A:92:LEU:H	0.50	1.64	10	1
1:A:214:GLU:O	1:A:215:ILE:HD13	0.50	2.06	2	6
1:A:132:ALA:CB	1:A:164:VAL:HG23	0.50	2.35	1	6
1:A:208:MET:HE2	1:A:213:VAL:CG2	0.50	2.35	2	5
1:A:45:LEU:HB3	1:A:50:VAL:HG21	0.50	1.81	3	5
1:A:216:GLU:HB3	1:A:224:VAL:HB	0.50	1.83	2	6
1:A:90:LEU:HD23	1:A:102:LEU:HD13	0.50	1.83	3	3
1:A:34:LEU:CB	1:A:231:TYR:HD2	0.50	2.20	3	4
1:A:64:TYR:CB	1:A:75:ILE:HA	0.50	2.37	9	4
1:A:217:ASN:C	1:A:217:ASN:HD22	0.50	2.14	11	1
1:A:100:ARG:NE	1:A:172:PHE:CE1	0.50	2.80	3	2
1:A:177:LEU:CG	1:A:205:LEU:HD21	0.50	2.37	10	1
1:A:107:CYS:HB3	1:A:138:ALA:HB1	0.50	1.83	4	3
1:A:128:HIS:CD2	1:A:165:ASP:HB2	0.50	2.42	2	1
1:A:132:ALA:HB1	1:A:162:VAL:CG1	0.50	2.37	6	5
1:A:111:ASN:HB2	1:A:113:ILE:HD13	0.50	1.82	1	1
1:A:189:ILE:O	1:A:223:PHE:N	0.50	2.44	5	10
1:A:195:LEU:HD11	1:A:223:PHE:CZ	0.50	2.40	2	1
1:A:129:LEU:HD11	1:A:175:ALA:CB	0.50	2.32	9	1
1:A:153:LEU:O	1:A:154:GLN:HG3	0.49	2.07	7	10
1:A:177:LEU:HD23	1:A:205:LEU:HD21	0.49	1.83	8	3
1:A:93:GLY:CA	1:A:118:GLU:H	0.49	2.20	4	4
1:A:121:MET:HG3	1:A:149:PRO:CG	0.49	2.37	5	2
1:A:100:ARG:HA	1:A:129:LEU:CD2	0.49	2.37	5	2
1:A:33:ALA:HB1	1:A:62:VAL:HG11	0.49	1.83	3	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:203:ILE:O	1:A:207:LEU:HB3	0.49	2.07	10	4
1:A:182:LEU:HD11	1:A:231:TYR:CD2	0.49	2.41	6	2
1:A:145:GLN:HB3	1:A:148:TYR:CD1	0.49	2.43	3	5
1:A:160:GLY:O	1:A:187:THR:HG23	0.49	2.06	2	10
1:A:178:MET:HA	1:A:208:MET:CE	0.49	2.36	8	4
1:A:183:ALA:O	1:A:227:GLY:HA3	0.49	2.07	5	9
1:A:198:LYS:HE2	1:A:199:PRO:N	0.49	2.22	3	1
1:A:144:GLU:CG	1:A:145:GLN:H	0.49	2.21	10	1
1:A:157:PHE:CD1	1:A:183:ALA:HB2	0.49	2.42	1	5
1:A:27:ARG:HA	1:A:178:MET:CE	0.49	2.38	10	1
1:A:64:TYR:HB2	1:A:74:GLU:O	0.49	2.07	9	11
1:A:177:LEU:HD23	1:A:205:LEU:CD2	0.49	2.38	7	4
1:A:88:LEU:O	1:A:114:VAL:N	0.49	2.44	9	11
1:A:133:LEU:CD2	1:A:176:LEU:HD23	0.49	2.37	1	4
1:A:238:LEU:C	1:A:238:LEU:CD2	0.49	2.85	9	10
1:A:39:THR:HA	1:A:235:GLY:O	0.49	2.07	5	10
1:A:59:ALA:CB	1:A:88:LEU:HD21	0.49	2.36	2	2
1:A:99:MET:CE	1:A:121:MET:HE2	0.49	2.37	2	4
1:A:45:LEU:HD23	1:A:49:ASP:OD2	0.49	2.08	9	1
1:A:190:ARG:C	1:A:191:ILE:HD12	0.49	2.33	7	8
1:A:38:LYS:HG3	1:A:76:ILE:HD13	0.49	1.84	4	2
1:A:126:ILE:O	1:A:130:VAL:HG23	0.49	2.08	5	1
1:A:62:VAL:CG1	1:A:75:ILE:CG2	0.48	2.91	2	11
1:A:204:THR:O	1:A:208:MET:N	0.48	2.46	10	10
1:A:217:ASN:H	1:A:217:ASN:ND2	0.48	2.06	5	2
1:A:30:LEU:HD21	1:A:105:ALA:HB2	0.48	1.85	6	8
1:A:217:ASN:N	1:A:217:ASN:HD22	0.48	2.06	1	1
1:A:29:LEU:CD1	1:A:54:LEU:HG	0.48	2.38	3	8
1:A:198:LYS:HE2	1:A:198:LYS:C	0.48	2.34	3	1
1:A:39:THR:OG1	1:A:234:PRO:HD2	0.48	2.09	9	5
1:A:102:LEU:O	1:A:106:LEU:HG	0.48	2.08	2	5
1:A:84:ALA:CB	1:A:88:LEU:HD22	0.48	2.39	8	5
1:A:121:MET:C	1:A:149:PRO:HG3	0.48	2.33	9	2
1:A:100:ARG:HB3	1:A:171:GLN:O	0.48	2.09	6	3
1:A:63:SER:CB	1:A:76:ILE:HG12	0.48	2.38	11	8
1:A:92:LEU:HB3	1:A:95:ALA:CB	0.48	2.39	4	2
1:A:34:LEU:CD2	1:A:81:PRO:HA	0.48	2.39	2	10
1:A:90:LEU:N	1:A:114:VAL:O	0.48	2.46	10	9
1:A:114:VAL:HG13	1:A:143:LEU:HD21	0.48	1.83	1	2
1:A:207:LEU:O	1:A:207:LEU:HD12	0.48	2.08	6	3
1:A:47:SER:O	1:A:49:ASP:N	0.47	2.47	5	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:31:LEU:CB	1:A:211:PHE:CD2	0.47	2.97	10	2
1:A:106:LEU:HB2	1:A:153:LEU:CD1	0.47	2.39	3	3
1:A:116:THR:HG22	1:A:117:GLY:H	0.47	1.69	3	2
1:A:191:ILE:HB	1:A:221:GLN:CA	0.47	2.38	5	11
1:A:63:SER:HB2	1:A:76:ILE:CG1	0.47	2.39	9	4
1:A:30:LEU:HD22	1:A:101:PRO:CB	0.47	2.39	8	3
1:A:35:ALA:HB2	1:A:231:TYR:HB3	0.47	1.86	9	2
1:A:38:LYS:CD	1:A:74:GLU:HG2	0.47	2.39	6	3
1:A:76:ILE:HD13	1:A:76:ILE:H	0.47	1.70	1	2
1:A:126:ILE:HA	1:A:172:PHE:CZ	0.47	2.43	5	1
1:A:108:LEU:CD2	1:A:182:LEU:HB2	0.47	2.38	9	4
1:A:130:VAL:CG2	1:A:151:LEU:HD11	0.47	2.39	6	1
1:A:32:ALA:CB	1:A:75:ILE:HD12	0.47	2.38	6	7
1:A:197:SER:O	1:A:198:LYS:CB	0.47	2.63	10	1
1:A:88:LEU:HB2	1:A:113:ILE:HG13	0.47	1.86	3	1
1:A:45:LEU:O	1:A:50:VAL:HG21	0.47	2.09	7	7
1:A:191:ILE:CD1	1:A:191:ILE:N	0.47	2.78	1	3
1:A:130:VAL:HG11	1:A:142:TYR:CZ	0.47	2.45	9	3
1:A:40:VAL:O	1:A:237:TYR:N	0.47	2.44	11	4
1:A:47:SER:O	1:A:48:ASP:C	0.46	2.59	11	11
1:A:53:MET:O	1:A:57:LEU:HD22	0.46	2.10	7	3
1:A:46:ASP:CG	1:A:46:ASP:O	0.46	2.59	7	1
1:A:111:ASN:OD1	1:A:113:ILE:CG1	0.46	2.63	10	1
1:A:107:CYS:HA	1:A:155:GLY:HA2	0.46	1.87	5	11
1:A:159:GLY:HA2	1:A:187:THR:OG1	0.46	2.10	1	3
1:A:205:LEU:CD2	1:A:215:ILE:HB	0.46	2.36	2	3
1:A:90:LEU:O	1:A:92:LEU:HD22	0.46	2.09	6	2
1:A:208:MET:HE3	1:A:213:VAL:CG2	0.46	2.40	8	1
1:A:82:LEU:O	1:A:111:ASN:ND2	0.46	2.48	1	1
1:A:133:LEU:HB2	1:A:140:ILE:CD1	0.46	2.41	3	2
1:A:105:ALA:O	1:A:108:LEU:HD12	0.46	2.09	7	1
1:A:35:ALA:HA	1:A:231:TYR:CB	0.46	2.39	3	4
1:A:162:VAL:N	1:A:188:VAL:O	0.46	2.46	10	6
1:A:100:ARG:CG	1:A:172:PHE:CD1	0.46	2.99	4	2
1:A:47:SER:O	1:A:50:VAL:N	0.46	2.46	11	11
1:A:180:ALA:O	1:A:183:ALA:HB3	0.46	2.09	3	3
1:A:27:ARG:HD3	1:A:174:THR:CG2	0.46	2.40	2	1
1:A:133:LEU:C	1:A:138:ALA:HB3	0.46	2.36	2	4
1:A:47:SER:HB3	1:A:49:ASP:OD1	0.46	2.09	9	2
1:A:189:ILE:HG22	1:A:191:ILE:CD1	0.46	2.40	3	3
1:A:226:LYS:O	1:A:229:GLN:HG2	0.46	2.10	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:ARG:NH2	1:A:124:ARG:HB3	0.46	2.26	5	1
1:A:132:ALA:C	1:A:162:VAL:HG13	0.46	2.36	7	1
1:A:173:LEU:O	1:A:177:LEU:HD13	0.46	2.10	7	2
1:A:33:ALA:HB1	1:A:62:VAL:HG21	0.46	1.87	2	3
1:A:98:ALA:O	1:A:102:LEU:HB2	0.46	2.11	3	3
1:A:144:GLU:CB	1:A:150:PRO:HG2	0.46	2.40	3	2
1:A:88:LEU:HB2	1:A:113:ILE:CD1	0.46	2.40	10	2
1:A:118:GLU:HB3	1:A:119:PRO:CD	0.46	2.41	11	1
1:A:164:VAL:HB	1:A:189:ILE:CG2	0.46	2.41	5	2
1:A:28:ALA:O	1:A:32:ALA:HB2	0.46	2.11	10	2
1:A:93:GLY:HA2	1:A:118:GLU:H	0.46	1.71	9	1
1:A:29:LEU:HD11	1:A:54:LEU:CD2	0.46	2.41	10	1
1:A:204:THR:O	1:A:208:MET:HG3	0.45	2.11	4	9
1:A:64:TYR:HB3	1:A:75:ILE:CG2	0.45	2.35	3	7
1:A:145:GLN:CB	1:A:148:TYR:CD1	0.45	2.99	1	1
1:A:29:LEU:HD21	1:A:73:CYS:SG	0.45	2.51	4	2
1:A:67:SER:HB2	1:A:72:ARG:HB2	0.45	1.88	3	4
1:A:99:MET:HE3	1:A:121:MET:CE	0.45	2.32	4	1
1:A:136:GLY:HA3	1:A:157:PHE:CE1	0.45	2.47	4	2
1:A:40:VAL:C	1:A:41:LEU:HD13	0.45	2.36	6	3
1:A:66:LEU:HD21	1:A:70:ARG:CD	0.45	2.41	9	1
1:A:53:MET:HE3	1:A:53:MET:O	0.45	2.11	11	1
1:A:100:ARG:N	1:A:101:PRO:HD2	0.45	2.26	2	6
1:A:97:THR:O	1:A:101:PRO:HG3	0.45	2.12	10	2
1:A:54:LEU:O	1:A:58:THR:N	0.45	2.47	10	4
1:A:126:ILE:HG22	1:A:148:TYR:O	0.45	2.11	1	6
1:A:130:VAL:HG13	1:A:140:ILE:CB	0.45	2.41	1	2
1:A:178:MET:C	1:A:181:PRO:HD2	0.45	2.36	10	8
1:A:78:ASN:CB	1:A:82:LEU:HD12	0.45	2.42	3	2
1:A:166:GLY:HA2	1:A:191:ILE:CG2	0.45	2.36	5	1
1:A:99:MET:HG3	1:A:126:ILE:HD13	0.45	1.87	7	1
1:A:213:VAL:CG1	1:A:231:TYR:CE1	0.45	3.00	8	2
1:A:107:CYS:O	1:A:157:PHE:CB	0.45	2.65	6	9
1:A:218:GLN:CB	1:A:222:GLN:HB3	0.45	2.42	7	2
1:A:190:ARG:HB2	1:A:222:GLN:HG3	0.45	1.88	3	4
1:A:100:ARG:NE	1:A:126:ILE:HD12	0.45	2.26	4	1
1:A:218:GLN:HG3	1:A:222:GLN:HB3	0.45	1.87	5	1
1:A:99:MET:HE2	1:A:121:MET:HE2	0.45	1.88	2	1
1:A:181:PRO:HB3	1:A:229:GLN:NE2	0.45	2.27	3	2
1:A:180:ALA:HB1	1:A:187:THR:HB	0.45	1.88	3	3
1:A:36:HIS:CE1	1:A:79:GLY:HA3	0.45	2.46	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:121:MET:HG3	1:A:149:PRO:HB3	0.45	1.88	5	2
1:A:178:MET:HA	1:A:208:MET:HE1	0.45	1.89	8	1
1:A:104:ALA:HB3	1:A:175:ALA:HB1	0.44	1.88	6	1
1:A:38:LYS:HG2	1:A:74:GLU:HG2	0.44	1.89	10	1
1:A:78:ASN:CB	1:A:82:LEU:CD1	0.44	2.95	3	1
1:A:37:GLY:O	1:A:76:ILE:HA	0.44	2.12	5	1
1:A:48:ASP:HB2	1:A:94:ASN:HB2	0.44	1.89	9	1
1:A:66:LEU:HD21	1:A:70:ARG:CG	0.44	2.42	9	1
1:A:209:LYS:HE2	1:A:214:GLU:HA	0.44	1.89	10	1
1:A:132:ALA:O	1:A:162:VAL:CG1	0.44	2.64	7	1
1:A:40:VAL:HG22	1:A:74:GLU:CG	0.44	2.42	4	2
1:A:223:PHE:CD1	1:A:223:PHE:N	0.44	2.85	5	9
1:A:100:ARG:HH22	1:A:124:ARG:HB3	0.44	1.72	3	1
1:A:144:GLU:CG	1:A:150:PRO:HG2	0.44	2.43	7	3
1:A:100:ARG:CG	1:A:172:PHE:CE1	0.44	3.01	4	2
1:A:129:LEU:CD1	1:A:176:LEU:HD23	0.44	2.42	5	1
1:A:144:GLU:HG3	1:A:145:GLN:N	0.44	2.23	10	1
1:A:100:ARG:HB2	1:A:101:PRO:CD	0.44	2.42	2	5
1:A:107:CYS:C	1:A:155:GLY:HA2	0.44	2.37	7	4
1:A:126:ILE:HG13	1:A:126:ILE:O	0.44	2.13	4	4
1:A:42:THR:OG1	1:A:72:ARG:CG	0.44	2.66	3	3
1:A:78:ASN:HD22	1:A:82:LEU:HD12	0.44	1.72	4	1
1:A:29:LEU:CD1	1:A:54:LEU:CD2	0.44	2.95	10	3
1:A:42:THR:HG22	1:A:238:LEU:CB	0.44	2.43	7	3
1:A:144:GLU:HG2	1:A:150:PRO:HG2	0.44	1.89	10	1
1:A:92:LEU:N	1:A:116:THR:O	0.44	2.49	2	2
1:A:41:LEU:HB3	1:A:44:LEU:CD2	0.43	2.38	5	2
1:A:111:ASN:O	1:A:153:LEU:O	0.43	2.35	3	3
1:A:180:ALA:N	1:A:181:PRO:CD	0.43	2.81	3	11
1:A:83:HIS:HA	1:A:111:ASN:CG	0.43	2.38	9	2
1:A:191:ILE:HD13	1:A:223:PHE:CD1	0.43	2.48	6	4
1:A:170:SER:N	1:A:196:VAL:HG11	0.43	2.28	7	1
1:A:158:THR:HA	1:A:184:PRO:CD	0.43	2.42	10	1
1:A:53:MET:CE	1:A:57:LEU:HD11	0.43	2.43	2	1
1:A:173:LEU:HD23	1:A:176:LEU:HD12	0.43	1.89	3	2
1:A:205:LEU:HD22	1:A:215:ILE:CG1	0.43	2.42	3	1
1:A:100:ARG:HG2	1:A:172:PHE:CD1	0.43	2.48	6	2
1:A:28:ALA:HB1	1:A:41:LEU:CG	0.43	2.43	5	3
1:A:98:ALA:HA	1:A:101:PRO:HG2	0.43	1.89	5	2
1:A:35:ALA:O	1:A:77:GLY:CA	0.43	2.67	5	5
1:A:162:VAL:HG23	1:A:187:THR:HG23	0.43	1.90	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:VAL:HG11	1:A:72:ARG:CZ	0.43	2.44	11	1
1:A:34:LEU:O	1:A:231:TYR:HB2	0.43	2.14	3	1
1:A:209:LYS:HG2	1:A:214:GLU:HG2	0.43	1.90	3	1
1:A:80:GLY:O	1:A:82:LEU:HD13	0.43	2.13	6	1
1:A:111:ASN:ND2	1:A:111:ASN:O	0.43	2.51	7	1
1:A:209:LYS:HD2	1:A:214:GLU:HG2	0.43	1.91	10	1
1:A:208:MET:CE	1:A:213:VAL:HG21	0.43	2.44	2	3
1:A:158:THR:HB	1:A:184:PRO:HG2	0.43	1.89	3	1
1:A:55:ASN:O	1:A:59:ALA:N	0.43	2.52	7	4
1:A:183:ALA:O	1:A:227:GLY:CA	0.43	2.66	1	2
1:A:173:LEU:HD22	1:A:223:PHE:CD2	0.43	2.48	7	1
1:A:27:ARG:HG3	1:A:178:MET:CE	0.43	2.43	10	1
1:A:204:THR:O	1:A:208:MET:CB	0.43	2.66	8	6
1:A:53:MET:O	1:A:53:MET:HE3	0.43	2.13	2	3
1:A:60:LEU:CB	1:A:82:LEU:HB3	0.43	2.44	5	3
1:A:29:LEU:CB	1:A:53:MET:HG3	0.43	2.43	3	2
1:A:49:ASP:HB2	1:A:95:ALA:HA	0.43	1.91	3	1
1:A:173:LEU:HD21	1:A:189:ILE:HG21	0.43	1.89	5	1
1:A:191:ILE:HD13	1:A:223:PHE:CE1	0.43	2.49	6	2
1:A:55:ASN:O	1:A:58:THR:HB	0.43	2.13	1	1
1:A:118:GLU:O	1:A:121:MET:N	0.43	2.51	1	1
1:A:150:PRO:O	1:A:151:LEU:HD23	0.43	2.13	1	1
1:A:110:SER:O	1:A:111:ASN:ND2	0.43	2.52	2	1
1:A:31:LEU:HB2	1:A:211:PHE:CD2	0.43	2.48	3	2
1:A:186:ASP:N	1:A:186:ASP:OD1	0.43	2.52	6	1
1:A:39:THR:OG1	1:A:233:SER:HB2	0.42	2.13	2	2
1:A:31:LEU:HB2	1:A:211:PHE:CZ	0.42	2.48	10	2
1:A:92:LEU:CB	1:A:95:ALA:HB3	0.42	2.39	7	1
1:A:132:ALA:HA	1:A:162:VAL:HG13	0.42	1.90	7	1
1:A:100:ARG:CB	1:A:101:PRO:CD	0.42	2.97	9	6
1:A:130:VAL:HG13	1:A:140:ILE:HB	0.42	1.90	1	1
1:A:139:LYS:HB2	1:A:155:GLY:O	0.42	2.15	3	3
1:A:40:VAL:N	1:A:235:GLY:O	0.42	2.49	5	1
1:A:102:LEU:HD13	1:A:106:LEU:HD11	0.42	1.89	6	1
1:A:31:LEU:CD1	1:A:211:PHE:CD2	0.42	3.02	10	1
1:A:106:LEU:O	1:A:111:ASN:ND2	0.42	2.52	10	1
1:A:28:ALA:HB1	1:A:41:LEU:CD1	0.42	2.45	11	1
1:A:29:LEU:HD11	1:A:54:LEU:HD21	0.42	1.91	10	2
1:A:47:SER:C	1:A:49:ASP:N	0.42	2.77	2	6
1:A:214:GLU:C	1:A:215:ILE:HD13	0.42	2.39	2	2
1:A:136:GLY:HA2	1:A:159:GLY:O	0.42	2.14	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:LEU:N	1:A:57:LEU:CD1	0.42	2.82	8	1
1:A:157:PHE:CD2	1:A:183:ALA:HB2	0.42	2.48	10	1
1:A:57:LEU:O	1:A:62:VAL:HG23	0.42	2.14	1	1
1:A:58:THR:OG1	1:A:64:TYR:OH	0.42	2.33	1	2
1:A:67:SER:HB2	1:A:72:ARG:CB	0.42	2.45	8	2
1:A:204:THR:O	1:A:208:MET:HB2	0.42	2.14	8	2
1:A:129:LEU:HD12	1:A:176:LEU:CD2	0.42	2.44	5	1
1:A:176:LEU:O	1:A:180:ALA:CB	0.42	2.67	9	4
1:A:97:THR:HG23	1:A:171:GLN:OE1	0.42	2.14	7	1
1:A:55:ASN:CA	1:A:58:THR:HB	0.42	2.44	6	3
1:A:145:GLN:NE2	1:A:148:TYR:CE1	0.42	2.87	6	1
1:A:186:ASP:OD1	1:A:187:THR:N	0.42	2.52	9	1
1:A:34:LEU:HD11	1:A:105:ALA:CB	0.42	2.45	11	1
1:A:51:ARG:O	1:A:55:ASN:N	0.42	2.51	5	5
1:A:130:VAL:HG21	1:A:142:TYR:CE1	0.42	2.50	3	1
1:A:160:GLY:O	1:A:162:VAL:HG23	0.42	2.14	3	2
1:A:35:ALA:O	1:A:78:ASN:N	0.42	2.53	7	1
1:A:88:LEU:HB2	1:A:113:ILE:HD12	0.42	1.90	10	1
1:A:222:GLN:C	1:A:223:PHE:CD1	0.42	2.98	3	3
1:A:90:LEU:HD23	1:A:102:LEU:HD11	0.42	1.90	8	1
1:A:121:MET:CG	1:A:149:PRO:HB3	0.42	2.45	4	1
1:A:165:ASP:N	1:A:192:LYS:HE2	0.42	2.29	5	1
1:A:173:LEU:CD2	1:A:189:ILE:HG21	0.42	2.45	5	1
1:A:40:VAL:CG2	1:A:74:GLU:HG3	0.42	2.44	9	1
1:A:54:LEU:HD22	1:A:73:CYS:SG	0.42	2.54	9	1
1:A:64:TYR:CA	1:A:74:GLU:O	0.42	2.68	9	1
1:A:97:THR:O	1:A:101:PRO:CD	0.42	2.68	9	1
1:A:76:ILE:H	1:A:76:ILE:CD1	0.42	2.28	5	2
1:A:113:ILE:HD12	1:A:113:ILE:N	0.42	2.30	3	1
1:A:122:LYS:HE3	1:A:149:PRO:HG2	0.42	1.92	3	1
1:A:100:ARG:NH2	1:A:124:ARG:O	0.42	2.48	4	1
1:A:129:LEU:HD12	1:A:176:LEU:HD21	0.42	1.91	10	2
1:A:218:GLN:NE2	1:A:222:GLN:OE1	0.42	2.52	7	1
1:A:205:LEU:O	1:A:209:LYS:CE	0.41	2.69	1	1
1:A:41:LEU:HD12	1:A:237:TYR:HB3	0.41	1.92	2	1
1:A:166:GLY:O	1:A:196:VAL:N	0.41	2.53	6	2
1:A:170:SER:HB2	1:A:200:TYR:CB	0.41	2.45	6	2
1:A:31:LEU:CD1	1:A:208:MET:HG2	0.41	2.44	8	2
1:A:162:VAL:HG11	1:A:176:LEU:HD22	0.41	1.92	9	1
1:A:62:VAL:CG2	1:A:82:LEU:HG	0.41	2.45	3	1
1:A:106:LEU:C	1:A:108:LEU:H	0.41	2.23	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:125:PRO:O	1:A:172:PHE:HZ	0.41	1.98	3	1
1:A:197:SER:O	1:A:198:LYS:C	0.41	2.64	3	2
1:A:178:MET:HG2	1:A:208:MET:SD	0.41	2.55	8	1
1:A:81:PRO:HB3	1:A:108:LEU:CB	0.41	2.45	11	1
1:A:60:LEU:HB2	1:A:82:LEU:HB3	0.41	1.91	3	1
1:A:97:THR:O	1:A:101:PRO:CG	0.41	2.69	10	1
1:A:90:LEU:HB2	1:A:115:LEU:CD2	0.41	2.43	3	1
1:A:36:HIS:CD2	1:A:79:GLY:HA2	0.41	2.50	4	2
1:A:40:VAL:CG2	1:A:74:GLU:CD	0.41	2.93	4	1
1:A:195:LEU:CD1	1:A:198:LYS:HD2	0.41	2.45	4	2
1:A:64:TYR:HB2	1:A:75:ILE:HG12	0.41	1.93	5	1
1:A:198:LYS:HD2	1:A:198:LYS:C	0.41	2.41	9	1
1:A:171:GLN:HA	1:A:174:THR:HB	0.41	1.92	2	1
1:A:213:VAL:CB	1:A:229:GLN:OE1	0.41	2.68	3	1
1:A:95:ALA:O	1:A:97:THR:N	0.41	2.51	4	2
1:A:109:GLY:O	1:A:155:GLY:HA3	0.41	2.16	3	1
1:A:27:ARG:O	1:A:30:LEU:N	0.41	2.54	7	2
1:A:82:LEU:HD22	1:A:82:LEU:H	0.41	1.75	7	2
1:A:52:HIS:CD2	1:A:91:PHE:O	0.41	2.74	6	1
1:A:117:GLY:HA3	1:A:121:MET:HG2	0.41	1.93	11	1
1:A:157:PHE:CE1	1:A:183:ALA:HB2	0.41	2.50	1	3
1:A:218:GLN:CB	1:A:222:GLN:O	0.41	2.69	7	2
1:A:76:ILE:N	1:A:76:ILE:HD13	0.41	2.31	3	2
1:A:45:LEU:HB3	1:A:50:VAL:CG2	0.41	2.46	5	1
1:A:129:LEU:CD1	1:A:172:PHE:O	0.41	2.69	9	1
1:A:200:TYR:CA	1:A:203:ILE:HD12	0.41	2.38	6	1
1:A:213:VAL:HA	1:A:229:GLN:OE1	0.41	2.16	3	1
1:A:38:LYS:HG3	1:A:76:ILE:CD1	0.41	2.45	4	1
1:A:164:VAL:HG21	1:A:176:LEU:CD1	0.41	2.40	5	1
1:A:170:SER:HB3	1:A:197:SER:HB2	0.41	1.93	5	1
1:A:82:LEU:HD13	1:A:82:LEU:N	0.41	2.31	6	1
1:A:83:HIS:HA	1:A:111:ASN:OD1	0.41	2.16	9	1
1:A:129:LEU:HD13	1:A:172:PHE:CA	0.41	2.42	3	2
1:A:157:PHE:CE2	1:A:183:ALA:HB2	0.41	2.51	7	1
1:A:197:SER:O	1:A:197:SER:OG	0.41	2.39	8	1
1:A:222:GLN:C	1:A:223:PHE:HD1	0.41	2.24	9	1
1:A:181:PRO:HD3	1:A:225:VAL:HG21	0.40	1.93	3	2
1:A:88:LEU:HD12	1:A:88:LEU:HA	0.40	1.76	4	1
1:A:97:THR:HA	1:A:171:GLN:HG2	0.40	1.93	10	1
1:A:198:LYS:HG3	1:A:199:PRO:CD	0.40	2.45	11	1
1:A:208:MET:CE	1:A:213:VAL:CG2	0.40	3.00	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:157:PHE:CE2	1:A:180:ALA:HA	0.40	2.50	7	2
1:A:143:LEU:HD11	1:A:152:ARG:HB2	0.40	1.94	6	1
1:A:76:ILE:H	1:A:76:ILE:HD13	0.40	1.76	9	1
1:A:178:MET:CG	1:A:208:MET:SD	0.40	3.10	9	1
1:A:199:PRO:O	1:A:203:ILE:HG13	0.40	2.16	10	1
1:A:47:SER:CB	1:A:49:ASP:OD2	0.40	2.68	4	2
1:A:56:ALA:HB1	1:A:102:LEU:CD1	0.40	2.31	6	1
1:A:140:ILE:HG12	1:A:153:LEU:HD22	0.40	1.94	6	1
1:A:208:MET:HE3	1:A:231:TYR:OH	0.40	2.16	7	1
1:A:218:GLN:HB2	1:A:222:GLN:HB3	0.40	1.93	10	2
1:A:100:ARG:CZ	1:A:172:PHE:HE1	0.40	2.28	9	1
1:A:127:GLY:HA3	1:A:147:ASN:CG	0.40	2.41	9	1
1:A:52:HIS:C	1:A:54:LEU:N	0.40	2.78	1	1
1:A:118:GLU:HG3	1:A:120:ARG:CG	0.40	2.47	3	1
1:A:27:ARG:O	1:A:28:ALA:C	0.40	2.64	6	1
1:A:178:MET:HA	1:A:208:MET:SD	0.40	2.57	8	1
1:A:153:LEU:C	1:A:154:GLN:HG3	0.40	2.41	5	1
1:A:40:VAL:HG23	1:A:74:GLU:OE2	0.40	2.17	6	1
1:A:107:CYS:SG	1:A:140:ILE:HG12	0.40	2.56	9	1
1:A:148:TYR:CB	1:A:149:PRO:HD2	0.40	2.47	11	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	210/216 (97%)	185±2 (88±1%)	18±2 (8±1%)	7±1 (3±0%)	4	34
All	All	2310/2376 (97%)	2038 (88%)	193 (8%)	79 (3%)	4	34

All 13 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	44	LEU	11
1	A	48	ASP	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	144	GLU	11
1	A	221	GLN	11
1	A	222	GLN	11
1	A	67	SER	9
1	A	109	GLY	8
1	A	149	PRO	2
1	A	155	GLY	1
1	A	110	SER	1
1	A	77	GLY	1
1	A	198	LYS	1
1	A	197	SER	1

6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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	169/174 (97%)	119±4 (70±3%)	50±4 (30±3%)	1	17
All	All	1859/1914 (97%)	1308 (70%)	551 (30%)	1	17

All 93 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	39	THR	11
1	A	41	LEU	11
1	A	42	THR	11
1	A	51	ARG	11
1	A	57	LEU	11
1	A	60	LEU	11
1	A	76	ILE	11
1	A	82	LEU	11
1	A	88	LEU	11
1	A	90	LEU	11
1	A	92	LEU	11
1	A	116	THR	11
1	A	126	ILE	11
1	A	134	ARG	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	141	THR	11
1	A	143	LEU	11
1	A	164	VAL	11
1	A	173	LEU	11
1	A	176	LEU	11
1	A	200	TYR	11
1	A	222	GLN	11
1	A	225	VAL	11
1	A	238	LEU	11
1	A	36	HIS	10
1	A	58	THR	10
1	A	71	THR	10
1	A	54	LEU	10
1	A	102	LEU	10
1	A	69	ASP	8
1	A	122	LYS	8
1	A	232	GLN	8
1	A	171	GLN	8
1	A	226	LYS	8
1	A	38	LYS	7
1	A	108	LEU	7
1	A	110	SER	7
1	A	195	LEU	7
1	A	197	SER	7
1	A	217	ASN	7
1	A	185	GLU	7
1	A	170	SER	7
1	A	85	GLU	6
1	A	97	THR	6
1	A	202	ASP	6
1	A	163	ASP	6
1	A	165	ASP	5
1	A	207	LEU	5
1	A	70	ARG	5
1	A	123	GLU	5
1	A	190	ARG	5
1	A	67	SER	4
1	A	99	MET	4
1	A	230	SER	4
1	A	198	LYS	4
1	A	223	PHE	4
1	A	161	ASN	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	218	GLN	4
1	A	100	ARG	4
1	A	131	ASP	4
1	A	135	LEU	4
1	A	233	SER	4
1	A	178	MET	3
1	A	48	ASP	3
1	A	194	ASP	3
1	A	219	HIS	3
1	A	192	LYS	3
1	A	27	ARG	3
1	A	152	ARG	3
1	A	47	SER	2
1	A	111	ASN	2
1	A	209	LYS	2
1	A	221	GLN	2
1	A	146	GLU	2
1	A	174	THR	2
1	A	91	PHE	2
1	A	216	GLU	2
1	A	124	ARG	2
1	A	72	ARG	2
1	A	139	LYS	2
1	A	145	GLN	2
1	A	55	ASN	2
1	A	206	ASN	1
1	A	89	GLU	1
1	A	113	ILE	1
1	A	149	PRO	1
1	A	73	CYS	1
1	A	107	CYS	1
1	A	118	GLU	1
1	A	147	ASN	1
1	A	78	ASN	1
1	A	120	ARG	1
1	A	128	HIS	1
1	A	210	THR	1

6.3.3 RNA ⓘ

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