



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 06:11 AM UTC

PDB ID : 1P89 / pdb_00001p89
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

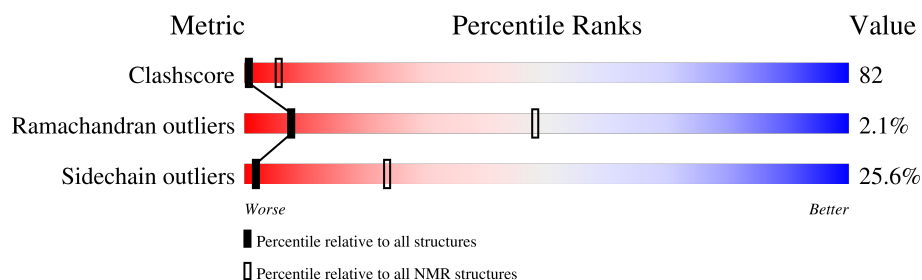
1 Overall quality at a glance

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	17% 67% 15% .

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 11 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:26-A:238 (213)	0.22	1

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 3 clusters. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 3, 5, 6, 7, 8, 10
2	9, 11
3	2, 4

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.

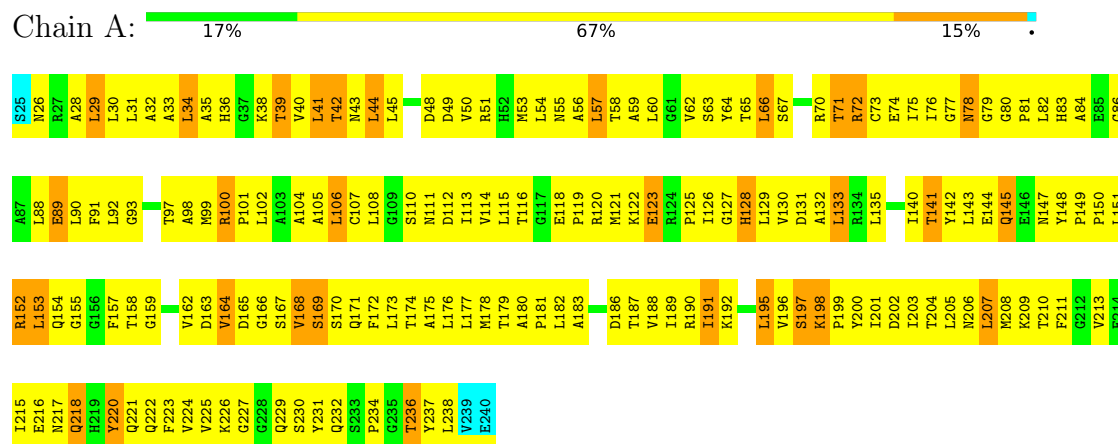
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	216	Total	C	H	N	O	S	0
			3275	1024	1651	281	312	7	

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

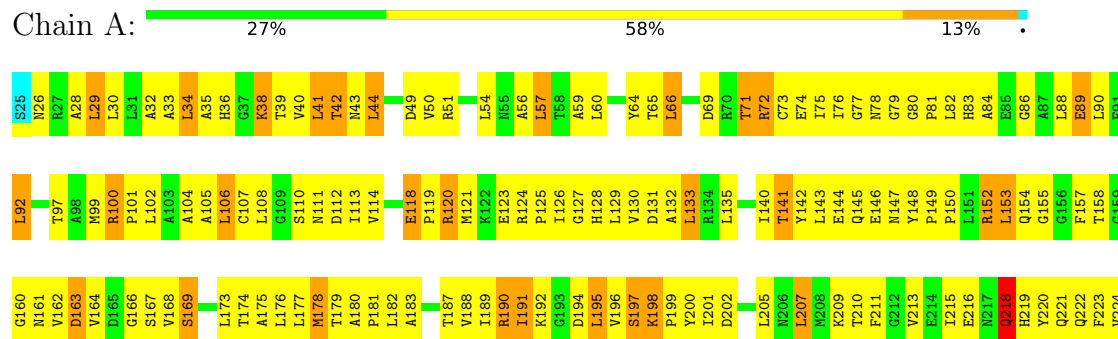


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

- Molecule 1: 3-phosphoshikimate 1-carboxyvinyltransferase

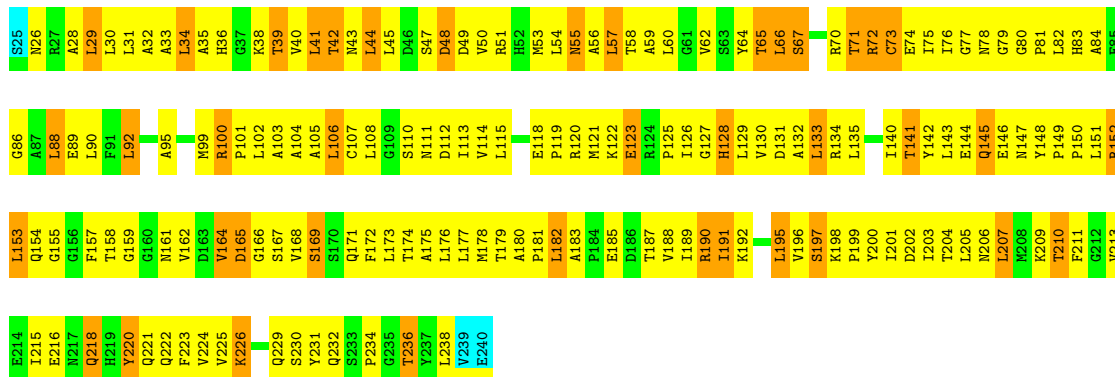




4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: 3-phosphoshikimate 1-carboxyvinyltransferase

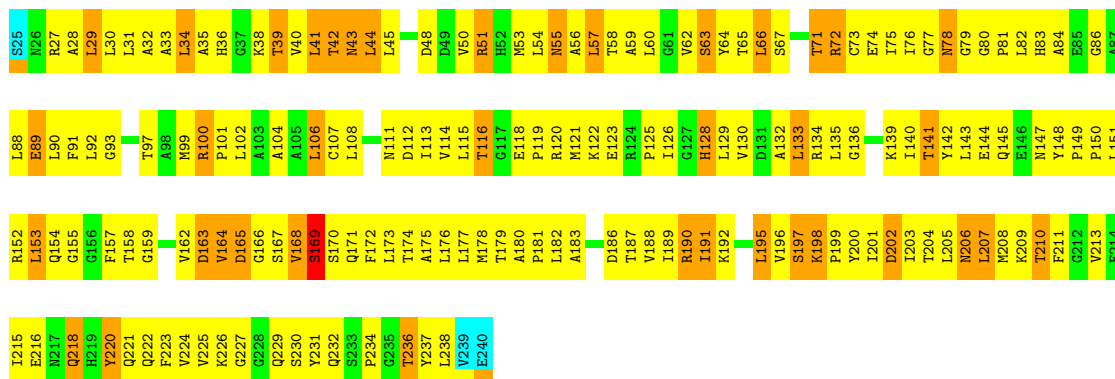
Chain A: 19% 61% 19%



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: 3-phosphoshikimate 1-carboxyvinyltransferase

Chain A: 19% 61% 18%

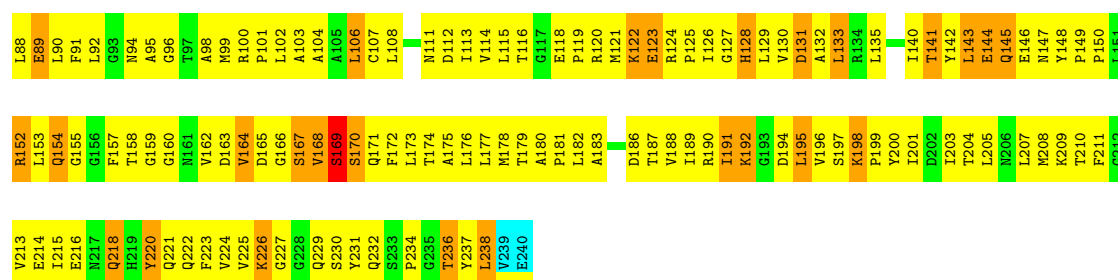


4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: 3-phosphoshikimate 1-carboxyvinyltransferase

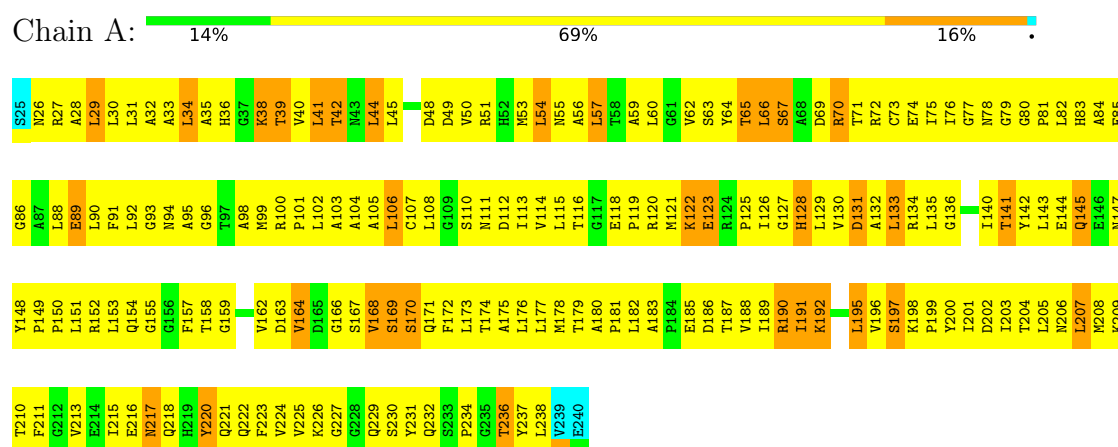
Chain A: 16% 63% 19%





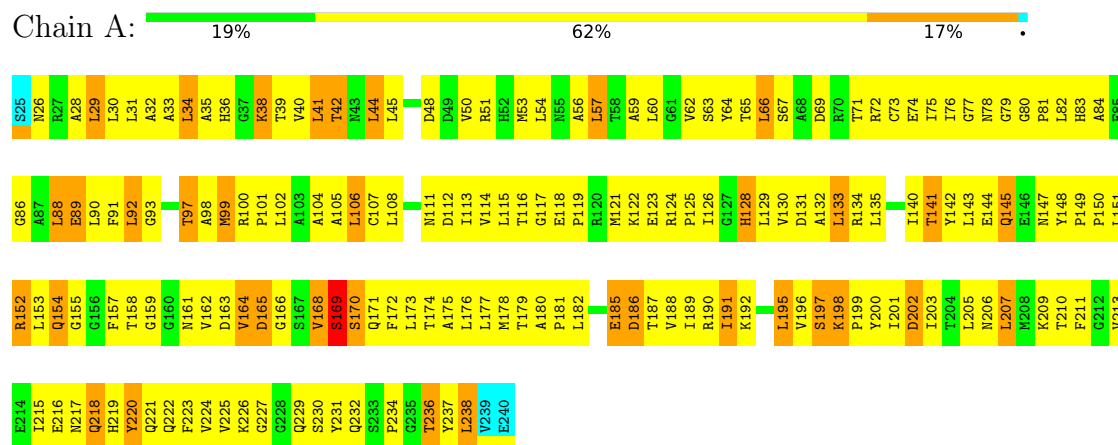
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: 3-phosphoshikimate 1-carboxyvinyltransferase



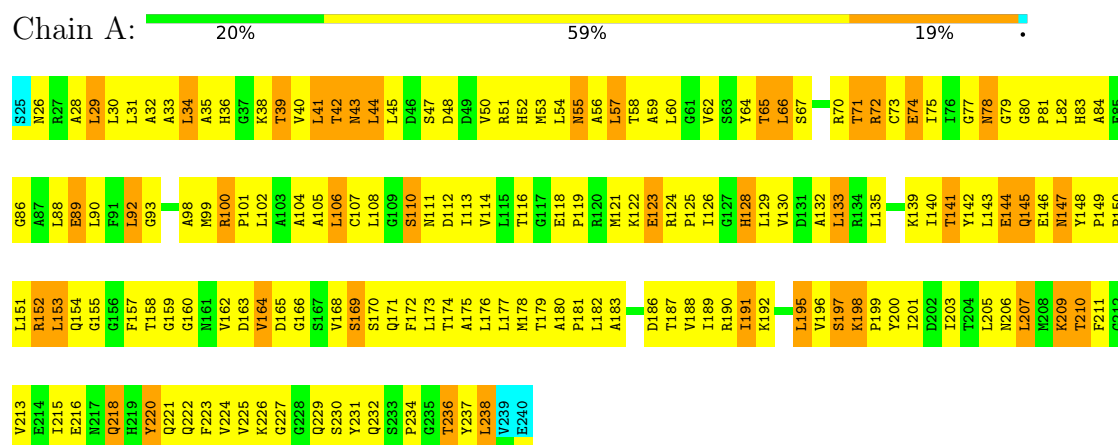
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: 3-phosphoshikimate 1-carboxyvinyltransferase



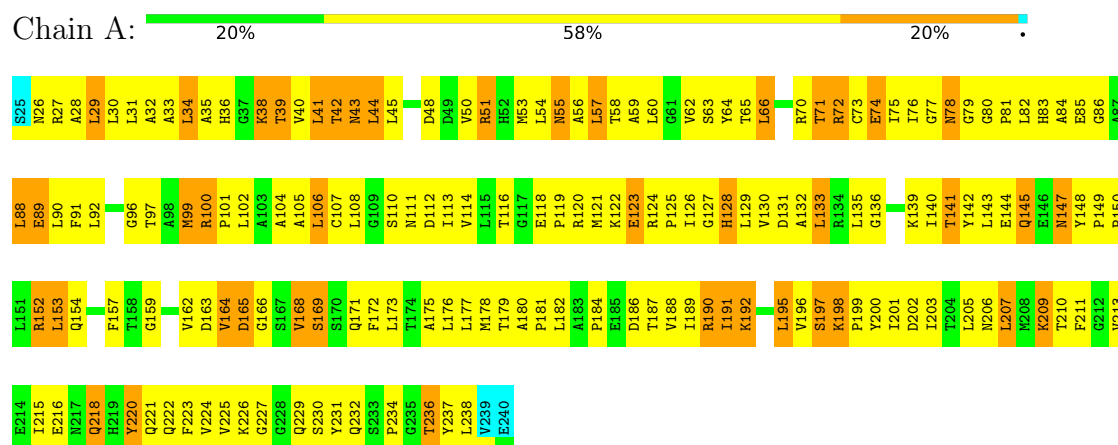
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: 3-phosphoshikimate 1-carboxyvinyltransferase



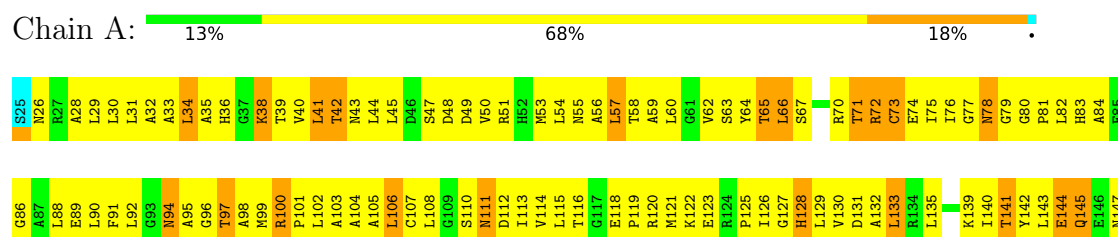
4.2.8 Score per residue for model 8

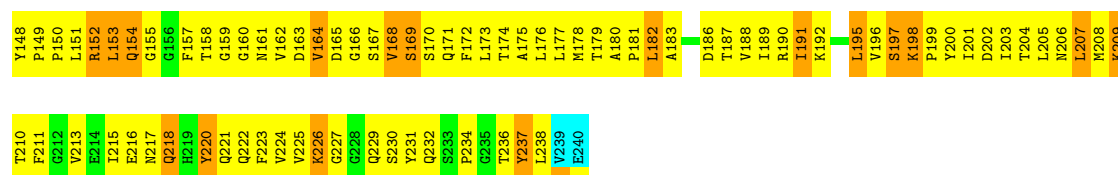
- Molecule 1: 3-phosphoshikimate 1-carboxyvinyltransferase



4.2.9 Score per residue for model 9

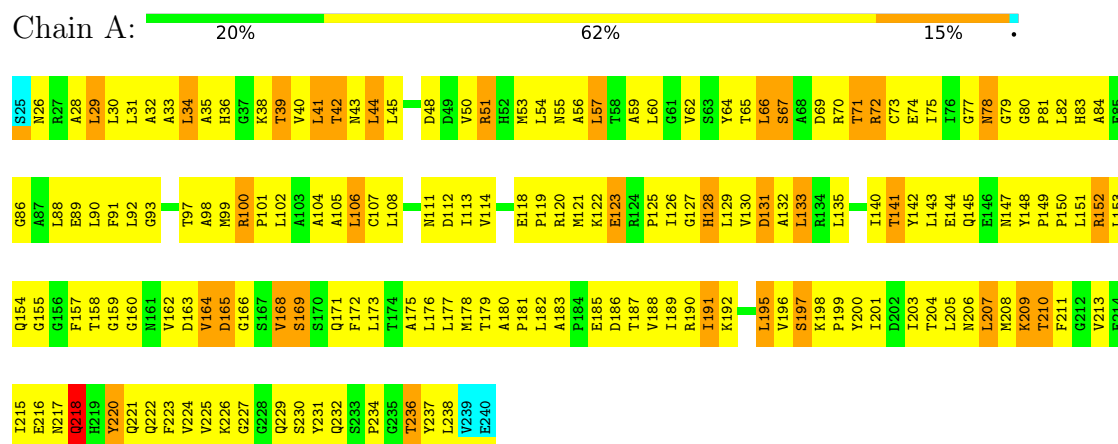
- Molecule 1: 3-phosphoshikimate 1-carboxyvinyltransferase





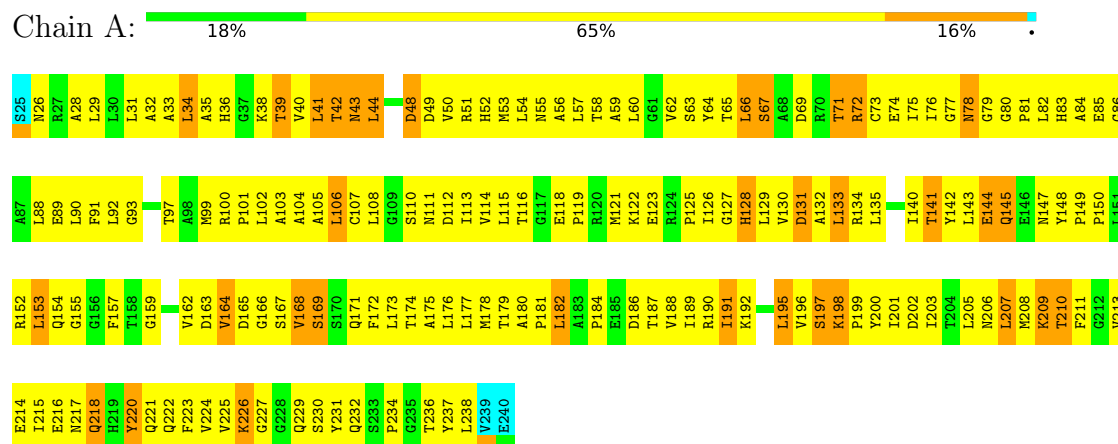
4.2.10 Score per residue for model 10

- 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

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

6.1 Standard geometry

There are no covalent bond-length or bond-angle outliers.

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1601	1629	1626	265±33
All	All	17611	17919	17886	2914

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 82.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:177:LEU:HD22	1:A:205:LEU:HD21	0.99	1.30	4	11
1:A:188:VAL:HG22	1:A:224:VAL:HG13	0.97	1.34	10	11
1:A:59:ALA:HB1	1:A:88:LEU:HD21	0.97	1.36	6	10
1:A:60:LEU:HD21	1:A:106:LEU:HD22	0.96	1.32	7	11
1:A:42:THR:HB	1:A:72:ARG:HD3	0.95	1.36	4	4
1:A:130:VAL:HG13	1:A:140:ILE:HD12	0.95	1.35	11	11
1:A:215:ILE:HG21	1:A:225:VAL:HG12	0.93	1.40	2	11
1:A:174:THR:HG22	1:A:178:MET:HE2	0.92	1.40	5	4
1:A:216:GLU:HB3	1:A:224:VAL:HB	0.92	1.39	4	11
1:A:140:ILE:HG23	1:A:153:LEU:HD23	0.91	1.43	11	11
1:A:177:LEU:HD12	1:A:201:ILE:HD11	0.91	1.43	3	11
1:A:180:ALA:CB	1:A:225:VAL:HG21	0.90	1.97	3	11
1:A:102:LEU:HD13	1:A:106:LEU:HD11	0.89	1.44	2	11
1:A:133:LEU:HD23	1:A:176:LEU:CD2	0.88	1.99	11	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:177:LEU:HD11	1:A:223:PHE:CD2	0.88	2.04	11	11
1:A:164:VAL:HG11	1:A:173:LEU:HD13	0.87	1.46	3	9
1:A:40:VAL:HG22	1:A:74:GLU:HG2	0.86	1.47	3	5
1:A:205:LEU:HD22	1:A:215:ILE:HG12	0.85	1.47	4	10
1:A:92:LEU:HB2	1:A:99:MET:HE3	0.84	1.48	11	6
1:A:42:THR:HG23	1:A:238:LEU:HD12	0.84	1.49	9	8
1:A:28:ALA:HB1	1:A:41:LEU:HD22	0.83	1.50	10	9
1:A:132:ALA:HA	1:A:135:LEU:HD12	0.83	1.49	3	11
1:A:34:LEU:HA	1:A:80:GLY:O	0.81	1.76	8	11
1:A:66:LEU:HD22	1:A:73:CYS:SG	0.81	2.15	9	10
1:A:106:LEU:HD12	1:A:153:LEU:CD1	0.81	2.06	7	11
1:A:92:LEU:HB2	1:A:99:MET:HE2	0.81	1.50	7	4
1:A:177:LEU:HD21	1:A:223:PHE:HB3	0.81	1.51	3	11
1:A:104:ALA:HB3	1:A:175:ALA:HB1	0.80	1.52	2	11
1:A:133:LEU:HD23	1:A:176:LEU:HD21	0.80	1.54	4	11
1:A:66:LEU:HD22	1:A:73:CYS:HG	0.79	1.34	9	5
1:A:42:THR:HG23	1:A:238:LEU:HA	0.79	1.53	4	11
1:A:190:ARG:C	1:A:191:ILE:HD13	0.79	2.02	11	11
1:A:129:LEU:CD1	1:A:133:LEU:HD21	0.79	2.07	11	10
1:A:44:LEU:HD22	1:A:66:LEU:HD11	0.78	1.53	2	11
1:A:53:MET:HE3	1:A:57:LEU:HD21	0.78	1.53	5	4
1:A:112:ASP:O	1:A:113:ILE:HD13	0.78	1.78	11	1
1:A:40:VAL:HG22	1:A:74:GLU:CG	0.78	2.09	9	9
1:A:33:ALA:HB2	1:A:57:LEU:HD23	0.77	1.55	11	1
1:A:198:LYS:O	1:A:201:ILE:HG22	0.77	1.79	4	11
1:A:205:LEU:HD13	1:A:215:ILE:HD11	0.77	1.56	10	9
1:A:191:ILE:HD11	1:A:223:PHE:CD1	0.77	2.15	7	11
1:A:114:VAL:HG22	1:A:152:ARG:HG2	0.77	1.57	3	2
1:A:173:LEU:HD21	1:A:223:PHE:CD1	0.76	2.15	2	11
1:A:205:LEU:O	1:A:209:LYS:HG3	0.76	1.81	4	1
1:A:180:ALA:HB3	1:A:225:VAL:HG21	0.76	1.57	4	11
1:A:40:VAL:HG22	1:A:74:GLU:HG3	0.76	1.55	9	7
1:A:29:LEU:HD13	1:A:54:LEU:HG	0.76	1.55	9	2
1:A:38:LYS:HA	1:A:75:ILE:O	0.76	1.80	11	11
1:A:102:LEU:CD1	1:A:106:LEU:HD11	0.76	2.09	2	11
1:A:218:GLN:HB2	1:A:222:GLN:O	0.76	1.81	5	10
1:A:81:PRO:HD2	1:A:83:HIS:NE2	0.75	1.96	4	11
1:A:100:ARG:HB2	1:A:171:GLN:HB3	0.75	1.57	9	10
1:A:92:LEU:HG	1:A:99:MET:HA	0.75	1.58	4	5
1:A:195:LEU:HD23	1:A:198:LYS:HA	0.75	1.59	10	11
1:A:169:SER:N	1:A:196:VAL:HG11	0.75	1.97	9	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:LEU:HD23	1:A:84:ALA:HB2	0.74	1.58	4	11
1:A:226:LYS:O	1:A:229:GLN:HG2	0.74	1.82	11	10
1:A:67:SER:HB3	1:A:72:ARG:HG3	0.73	1.60	7	1
1:A:173:LEU:HD23	1:A:201:ILE:HG12	0.73	1.59	2	10
1:A:104:ALA:O	1:A:179:THR:HG21	0.73	1.82	10	11
1:A:92:LEU:HD23	1:A:92:LEU:N	0.73	1.98	6	1
1:A:38:LYS:HB2	1:A:76:ILE:HD13	0.73	1.59	2	4
1:A:106:LEU:HB3	1:A:111:ASN:HD21	0.73	1.43	8	1
1:A:33:ALA:CB	1:A:82:LEU:HD21	0.73	2.14	4	11
1:A:56:ALA:HA	1:A:90:LEU:HD13	0.73	1.60	7	10
1:A:29:LEU:HD21	1:A:54:LEU:HD23	0.72	1.59	8	9
1:A:88:LEU:HD12	1:A:89:GLU:N	0.72	1.98	6	11
1:A:148:TYR:HB3	1:A:149:PRO:HD2	0.72	1.59	9	10
1:A:33:ALA:HB3	1:A:82:LEU:HD21	0.72	1.62	4	11
1:A:33:ALA:HB2	1:A:57:LEU:CD2	0.72	2.15	11	1
1:A:60:LEU:HD23	1:A:84:ALA:CB	0.72	2.14	6	11
1:A:82:LEU:HB2	1:A:106:LEU:HD23	0.72	1.62	2	11
1:A:126:ILE:HD11	1:A:129:LEU:HD23	0.71	1.60	2	10
1:A:53:MET:HE2	1:A:57:LEU:HD21	0.71	1.63	7	3
1:A:177:LEU:HD22	1:A:205:LEU:CD2	0.71	2.16	11	7
1:A:39:THR:OG1	1:A:234:PRO:HD2	0.71	1.83	8	8
1:A:59:ALA:CB	1:A:88:LEU:HD21	0.71	2.15	9	10
1:A:187:THR:HB	1:A:225:VAL:CG2	0.71	2.15	4	11
1:A:125:PRO:HA	1:A:147:ASN:O	0.71	1.85	4	11
1:A:211:PHE:HA	1:A:234:PRO:HG3	0.71	1.61	4	3
1:A:180:ALA:HB1	1:A:225:VAL:HG21	0.70	1.63	3	10
1:A:197:SER:HB3	1:A:200:TYR:HB2	0.70	1.63	4	9
1:A:29:LEU:HD23	1:A:41:LEU:HD11	0.70	1.61	11	2
1:A:211:PHE:O	1:A:232:GLN:HG2	0.70	1.86	3	5
1:A:187:THR:HB	1:A:225:VAL:HG23	0.70	1.63	4	10
1:A:60:LEU:HD21	1:A:106:LEU:CD2	0.70	2.16	11	6
1:A:59:ALA:CB	1:A:90:LEU:HD21	0.70	2.17	9	7
1:A:188:VAL:CG2	1:A:224:VAL:HG13	0.69	2.15	6	11
1:A:26:ASN:ND2	1:A:98:ALA:HB2	0.69	2.01	6	2
1:A:88:LEU:O	1:A:113:ILE:HG23	0.69	1.85	10	11
1:A:114:VAL:HG22	1:A:152:ARG:CG	0.69	2.18	3	2
1:A:198:LYS:HB3	1:A:199:PRO:HD3	0.69	1.63	4	11
1:A:53:MET:HE2	1:A:57:LEU:CD2	0.68	2.19	2	2
1:A:104:ALA:CB	1:A:175:ALA:HB1	0.68	2.18	2	7
1:A:205:LEU:HD22	1:A:215:ILE:CG1	0.68	2.18	4	6
1:A:63:SER:CB	1:A:76:ILE:HD13	0.68	2.18	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:ASP:C	1:A:113:ILE:HD12	0.68	2.14	3	10
1:A:200:TYR:HA	1:A:203:ILE:HD12	0.68	1.65	9	6
1:A:53:MET:O	1:A:57:LEU:HD12	0.68	1.88	11	1
1:A:82:LEU:CB	1:A:106:LEU:HD23	0.68	2.19	2	11
1:A:42:THR:CG2	1:A:238:LEU:HD22	0.67	2.19	4	2
1:A:56:ALA:O	1:A:60:LEU:HD12	0.67	1.90	5	11
1:A:188:VAL:HG22	1:A:224:VAL:CG1	0.67	2.18	10	11
1:A:215:ILE:CG2	1:A:225:VAL:HG12	0.67	2.18	1	4
1:A:63:SER:HB3	1:A:76:ILE:HD13	0.67	1.63	9	2
1:A:207:LEU:HD11	1:A:237:TYR:CZ	0.67	2.25	9	3
1:A:129:LEU:HD12	1:A:133:LEU:HD21	0.67	1.66	11	8
1:A:53:MET:HE1	1:A:102:LEU:HB2	0.67	1.65	7	3
1:A:102:LEU:O	1:A:106:LEU:HG	0.67	1.90	8	10
1:A:107:CYS:SG	1:A:140:ILE:HD11	0.67	2.30	6	10
1:A:141:THR:HG23	1:A:142:TYR:N	0.67	2.04	3	11
1:A:180:ALA:N	1:A:181:PRO:HD2	0.67	2.04	4	11
1:A:26:ASN:HA	1:A:29:LEU:HD12	0.67	1.67	11	2
1:A:169:SER:H	1:A:196:VAL:HG11	0.67	1.49	4	11
1:A:164:VAL:CG1	1:A:173:LEU:HD13	0.67	2.18	3	5
1:A:42:THR:CG2	1:A:238:LEU:HD12	0.67	2.18	8	5
1:A:29:LEU:HD11	1:A:44:LEU:HD11	0.67	1.65	11	1
1:A:84:ALA:HB3	1:A:113:ILE:HD11	0.67	1.65	11	4
1:A:30:LEU:HD21	1:A:105:ALA:HB2	0.66	1.67	9	5
1:A:205:LEU:HD23	1:A:208:MET:HE2	0.66	1.66	4	1
1:A:108:LEU:HD11	1:A:179:THR:O	0.66	1.90	4	10
1:A:145:GLN:HB3	1:A:148:TYR:CD2	0.66	2.26	4	2
1:A:67:SER:HB2	1:A:72:ARG:HG3	0.65	1.67	9	4
1:A:42:THR:HB	1:A:72:ARG:CD	0.65	2.21	5	4
1:A:126:ILE:O	1:A:130:VAL:HG23	0.65	1.91	10	8
1:A:100:ARG:CB	1:A:171:GLN:HB3	0.65	2.20	9	3
1:A:81:PRO:CB	1:A:108:LEU:HB2	0.65	2.21	7	11
1:A:191:ILE:HD11	1:A:223:PHE:HD1	0.65	1.50	9	11
1:A:215:ILE:HD12	1:A:215:ILE:C	0.65	2.16	6	11
1:A:101:PRO:HA	1:A:175:ALA:HB2	0.65	1.67	8	6
1:A:141:THR:HG22	1:A:152:ARG:HB2	0.65	1.66	5	2
1:A:174:THR:HG23	1:A:204:THR:OG1	0.65	1.92	5	4
1:A:206:ASN:HA	1:A:209:LYS:HG2	0.65	1.68	7	7
1:A:32:ALA:O	1:A:77:GLY:HA2	0.64	1.93	6	11
1:A:144:GLU:HB2	1:A:150:PRO:HG3	0.64	1.68	8	8
1:A:128:HIS:HB3	1:A:165:ASP:HB2	0.64	1.68	3	9
1:A:63:SER:HB2	1:A:76:ILE:HD12	0.64	1.68	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:VAL:HG12	1:A:54:LEU:HD11	0.64	1.70	4	6
1:A:122:LYS:HA	1:A:149:PRO:CG	0.64	2.22	3	10
1:A:140:ILE:HG22	1:A:141:THR:H	0.64	1.52	7	11
1:A:31:LEU:CD1	1:A:207:LEU:HB3	0.64	2.21	4	10
1:A:65:THR:O	1:A:73:CYS:HA	0.63	1.93	6	11
1:A:92:LEU:HD23	1:A:99:MET:CE	0.63	2.22	10	4
1:A:63:SER:CB	1:A:76:ILE:HD12	0.63	2.23	5	1
1:A:28:ALA:CB	1:A:41:LEU:HD22	0.63	2.23	8	11
1:A:42:THR:HG21	1:A:238:LEU:HD22	0.63	1.70	4	2
1:A:143:LEU:HD21	1:A:152:ARG:N	0.63	2.08	4	11
1:A:54:LEU:HB3	1:A:64:TYR:CZ	0.63	2.29	7	10
1:A:232:GLN:O	1:A:234:PRO:HD3	0.63	1.93	6	11
1:A:159:GLY:HA2	1:A:187:THR:OG1	0.63	1.92	6	10
1:A:140:ILE:CG2	1:A:153:LEU:HD23	0.63	2.21	11	9
1:A:88:LEU:O	1:A:113:ILE:HA	0.63	1.94	11	11
1:A:121:MET:O	1:A:149:PRO:HD3	0.63	1.93	9	10
1:A:38:LYS:HD3	1:A:74:GLU:HB3	0.62	1.71	8	3
1:A:149:PRO:N	1:A:150:PRO:HD2	0.62	2.09	9	11
1:A:129:LEU:HD13	1:A:172:PHE:HA	0.62	1.71	8	8
1:A:129:LEU:HD13	1:A:172:PHE:O	0.62	1.95	4	2
1:A:213:VAL:HB	1:A:231:TYR:CE1	0.62	2.29	3	10
1:A:35:ALA:HA	1:A:231:TYR:O	0.62	1.95	6	11
1:A:92:LEU:HD12	1:A:99:MET:HA	0.62	1.71	6	1
1:A:84:ALA:O	1:A:111:ASN:HB2	0.61	1.95	8	3
1:A:191:ILE:HD13	1:A:191:ILE:N	0.61	2.10	11	11
1:A:172:PHE:O	1:A:176:LEU:HD12	0.61	1.94	6	7
1:A:99:MET:HE2	1:A:149:PRO:HA	0.61	1.72	6	1
1:A:103:ALA:HB2	1:A:115:LEU:CD1	0.61	2.25	9	4
1:A:190:ARG:HA	1:A:222:GLN:HA	0.61	1.72	9	11
1:A:59:ALA:HB1	1:A:88:LEU:HD11	0.61	1.73	2	2
1:A:90:LEU:HD12	1:A:102:LEU:HD11	0.61	1.70	2	3
1:A:60:LEU:HD13	1:A:82:LEU:HD12	0.61	1.73	1	9
1:A:177:LEU:CD2	1:A:205:LEU:HD21	0.61	2.26	11	6
1:A:26:ASN:OD1	1:A:50:VAL:HA	0.61	1.95	9	4
1:A:54:LEU:HA	1:A:57:LEU:HD13	0.61	1.72	11	1
1:A:89:GLU:C	1:A:90:LEU:HD23	0.61	2.19	11	2
1:A:133:LEU:HA	1:A:157:PHE:CE1	0.61	2.31	4	10
1:A:141:THR:HG22	1:A:152:ARG:HB3	0.61	1.72	4	9
1:A:29:LEU:HD21	1:A:54:LEU:CD2	0.60	2.26	1	8
1:A:188:VAL:HG13	1:A:224:VAL:HG22	0.60	1.72	9	5
1:A:189:ILE:O	1:A:223:PHE:N	0.60	2.34	4	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:67:SER:HB3	1:A:72:ARG:CG	0.60	2.25	7	1
1:A:31:LEU:HD21	1:A:178:MET:HG2	0.60	1.74	10	2
1:A:120:ARG:HH11	1:A:123:GLU:HG3	0.60	1.55	5	1
1:A:81:PRO:HB3	1:A:108:LEU:HB2	0.60	1.73	8	11
1:A:42:THR:HG23	1:A:238:LEU:HD13	0.60	1.74	6	1
1:A:166:GLY:CA	1:A:195:LEU:HD12	0.60	2.27	10	7
1:A:144:GLU:HG3	1:A:145:GLN:N	0.60	2.10	7	3
1:A:198:LYS:HD3	1:A:220:TYR:CE2	0.60	2.32	9	1
1:A:173:LEU:HD21	1:A:223:PHE:CE1	0.59	2.32	9	11
1:A:191:ILE:N	1:A:221:GLN:O	0.59	2.34	9	11
1:A:207:LEU:HD21	1:A:237:TYR:OH	0.59	1.97	1	3
1:A:132:ALA:HB1	1:A:162:VAL:HG11	0.59	1.73	1	7
1:A:42:THR:HG23	1:A:238:LEU:CD1	0.59	2.24	8	5
1:A:64:TYR:HA	1:A:74:GLU:O	0.59	1.98	11	7
1:A:118:GLU:HB3	1:A:119:PRO:HD2	0.59	1.73	3	8
1:A:122:LYS:HE2	1:A:150:PRO:HD3	0.59	1.74	5	1
1:A:36:HIS:CE1	1:A:79:GLY:O	0.59	2.55	9	11
1:A:89:GLU:HB2	1:A:114:VAL:HB	0.59	1.72	6	8
1:A:126:ILE:CD1	1:A:129:LEU:HD23	0.59	2.28	2	6
1:A:38:LYS:HG3	1:A:76:ILE:HG12	0.59	1.72	5	1
1:A:60:LEU:HD22	1:A:82:LEU:C	0.59	2.22	6	11
1:A:123:GLU:HA	1:A:148:TYR:CE1	0.59	2.33	9	11
1:A:140:ILE:HG22	1:A:141:THR:N	0.59	2.12	2	11
1:A:48:ASP:HA	1:A:51:ARG:HG2	0.59	1.75	4	10
1:A:32:ALA:HA	1:A:211:PHE:CE1	0.59	2.32	2	1
1:A:60:LEU:CD2	1:A:84:ALA:HB2	0.59	2.27	4	10
1:A:203:ILE:HG22	1:A:207:LEU:HD23	0.59	1.74	5	4
1:A:215:ILE:HD12	1:A:216:GLU:C	0.58	2.23	1	7
1:A:133:LEU:HD12	1:A:140:ILE:HD11	0.58	1.73	7	4
1:A:90:LEU:O	1:A:116:THR:HG22	0.58	1.98	5	2
1:A:58:THR:HB	1:A:64:TYR:CE2	0.58	2.34	4	7
1:A:48:ASP:HA	1:A:51:ARG:CG	0.58	2.28	4	6
1:A:218:GLN:HB2	1:A:222:GLN:HG2	0.58	1.74	9	1
1:A:57:LEU:HD12	1:A:57:LEU:H	0.58	1.59	11	1
1:A:177:LEU:HD13	1:A:205:LEU:HD21	0.58	1.75	7	4
1:A:133:LEU:HD12	1:A:140:ILE:CD1	0.58	2.29	7	8
1:A:62:VAL:HG21	1:A:82:LEU:HD11	0.58	1.76	4	9
1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:HD22	0.58	2.13	7	8
1:A:157:PHE:CD2	1:A:179:THR:HG22	0.58	2.34	3	8
1:A:174:THR:O	1:A:178:MET:CG	0.58	2.52	1	1
1:A:50:VAL:HG12	1:A:54:LEU:CD1	0.58	2.29	9	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:LEU:HD22	1:A:92:LEU:N	0.58	2.13	1	1
1:A:92:LEU:HD23	1:A:99:MET:HE3	0.58	1.75	9	5
1:A:108:LEU:CD1	1:A:179:THR:HG23	0.58	2.29	2	11
1:A:129:LEU:O	1:A:133:LEU:HG	0.58	1.99	5	11
1:A:54:LEU:HB3	1:A:64:TYR:CE2	0.58	2.34	8	4
1:A:57:LEU:HD23	1:A:57:LEU:N	0.57	2.14	2	10
1:A:43:ASN:HB2	1:A:238:LEU:HD11	0.57	1.76	1	5
1:A:222:GLN:HG3	1:A:224:VAL:HG23	0.57	1.75	9	1
1:A:32:ALA:HA	1:A:211:PHE:CE2	0.57	2.34	9	10
1:A:209:LYS:HG3	1:A:210:THR:N	0.57	2.14	8	8
1:A:81:PRO:HD2	1:A:83:HIS:CD2	0.57	2.34	6	11
1:A:33:ALA:O	1:A:78:ASN:HB2	0.57	1.98	4	9
1:A:198:LYS:HG3	1:A:220:TYR:CE1	0.57	2.34	4	2
1:A:181:PRO:HG3	1:A:208:MET:SD	0.57	2.39	4	1
1:A:40:VAL:HB	1:A:236:THR:HA	0.57	1.76	10	8
1:A:108:LEU:HG	1:A:179:THR:HG23	0.57	1.75	7	5
1:A:42:THR:CG2	1:A:238:LEU:HA	0.57	2.30	6	5
1:A:88:LEU:HD11	1:A:90:LEU:CD2	0.57	2.29	8	6
1:A:170:SER:HB2	1:A:197:SER:HB2	0.57	1.77	9	2
1:A:129:LEU:HD11	1:A:133:LEU:HD21	0.56	1.77	3	4
1:A:133:LEU:HD23	1:A:176:LEU:CG	0.56	2.30	7	7
1:A:166:GLY:HA3	1:A:195:LEU:HA	0.56	1.77	6	11
1:A:51:ARG:O	1:A:55:ASN:HB2	0.56	2.00	3	9
1:A:217:ASN:HD22	1:A:217:ASN:H	0.56	1.42	5	1
1:A:53:MET:O	1:A:56:ALA:HB3	0.56	1.99	2	3
1:A:143:LEU:HD21	1:A:152:ARG:CB	0.56	2.29	4	5
1:A:59:ALA:HB1	1:A:90:LEU:HD21	0.56	1.76	6	3
1:A:49:ASP:OD1	1:A:50:VAL:HG23	0.56	2.01	11	1
1:A:133:LEU:N	1:A:176:LEU:HD21	0.56	2.16	7	7
1:A:178:MET:HA	1:A:231:TYR:OH	0.56	2.00	8	6
1:A:203:ILE:O	1:A:207:LEU:HB2	0.56	2.01	7	7
1:A:130:VAL:HG13	1:A:140:ILE:CD1	0.56	2.29	7	5
1:A:33:ALA:CB	1:A:57:LEU:HD23	0.56	2.29	11	1
1:A:215:ILE:HD12	1:A:216:GLU:N	0.56	2.16	1	4
1:A:177:LEU:HD12	1:A:201:ILE:CD1	0.56	2.26	3	5
1:A:158:THR:O	1:A:183:ALA:HB1	0.56	2.00	7	8
1:A:53:MET:HE3	1:A:57:LEU:CD2	0.56	2.29	5	2
1:A:145:GLN:HB2	1:A:148:TYR:HD2	0.56	1.59	1	2
1:A:101:PRO:HA	1:A:175:ALA:CB	0.56	2.31	8	8
1:A:128:HIS:HE1	1:A:168:VAL:HG21	0.56	1.61	8	8
1:A:41:LEU:HD21	1:A:75:ILE:HD13	0.56	1.78	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:LEU:HD23	1:A:178:MET:CE	0.56	2.31	9	2
1:A:43:ASN:HB2	1:A:238:LEU:CD1	0.55	2.31	4	4
1:A:164:VAL:HG21	1:A:176:LEU:CD1	0.55	2.31	5	7
1:A:197:SER:CB	1:A:200:TYR:HB2	0.55	2.32	9	9
1:A:111:ASN:O	1:A:154:GLN:HA	0.55	2.02	7	11
1:A:238:LEU:HD12	1:A:238:LEU:C	0.55	2.27	6	1
1:A:145:GLN:CB	1:A:148:TYR:HD2	0.55	2.15	1	4
1:A:182:LEU:HD23	1:A:230:SER:HA	0.55	1.78	7	11
1:A:121:MET:HE3	1:A:124:ARG:HB2	0.55	1.78	4	3
1:A:207:LEU:O	1:A:210:THR:HG22	0.55	2.01	5	5
1:A:92:LEU:CD1	1:A:99:MET:HA	0.55	2.31	6	1
1:A:94:ASN:OD1	1:A:120:ARG:HB3	0.55	2.02	9	1
1:A:29:LEU:CD1	1:A:54:LEU:HG	0.55	2.32	9	7
1:A:166:GLY:HA3	1:A:195:LEU:HD12	0.55	1.77	10	5
1:A:133:LEU:HA	1:A:157:PHE:CE2	0.54	2.37	7	1
1:A:114:VAL:HG22	1:A:152:ARG:HB2	0.54	1.79	7	2
1:A:56:ALA:CB	1:A:102:LEU:HG	0.54	2.31	11	2
1:A:100:ARG:O	1:A:129:LEU:HD21	0.54	2.03	4	8
1:A:213:VAL:HB	1:A:231:TYR:CD1	0.54	2.38	8	10
1:A:38:LYS:HB2	1:A:76:ILE:HG13	0.54	1.78	9	1
1:A:43:ASN:N	1:A:71:THR:O	0.54	2.40	10	8
1:A:30:LEU:O	1:A:34:LEU:HG	0.54	2.02	6	9
1:A:164:VAL:HG11	1:A:173:LEU:CD1	0.54	2.29	3	3
1:A:67:SER:HB3	1:A:72:ARG:HB2	0.54	1.80	6	1
1:A:92:LEU:CB	1:A:99:MET:HE3	0.54	2.29	11	3
1:A:127:GLY:O	1:A:131:ASP:HB2	0.54	2.01	4	8
1:A:100:ARG:HB2	1:A:101:PRO:HD3	0.54	1.78	7	10
1:A:91:PHE:C	1:A:92:LEU:HD23	0.54	2.28	6	1
1:A:144:GLU:HB3	1:A:150:PRO:HG3	0.54	1.80	7	2
1:A:103:ALA:HB2	1:A:115:LEU:HD11	0.53	1.80	9	2
1:A:147:ASN:O	1:A:148:TYR:CD1	0.53	2.61	3	8
1:A:100:ARG:HB3	1:A:129:LEU:HD22	0.53	1.79	6	4
1:A:89:GLU:HA	1:A:114:VAL:O	0.53	2.03	5	11
1:A:41:LEU:O	1:A:72:ARG:HA	0.53	2.03	7	5
1:A:128:HIS:HB2	1:A:172:PHE:CD2	0.53	2.38	8	7
1:A:145:GLN:H	1:A:150:PRO:HG3	0.53	1.63	4	1
1:A:157:PHE:HE2	1:A:180:ALA:HA	0.53	1.63	4	2
1:A:99:MET:SD	1:A:121:MET:HE2	0.53	2.44	11	5
1:A:53:MET:HE3	1:A:53:MET:HA	0.53	1.81	2	1
1:A:170:SER:HB2	1:A:197:SER:CB	0.53	2.33	6	3
1:A:198:LYS:HD3	1:A:220:TYR:CZ	0.53	2.38	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:131:ASP:O	1:A:135:LEU:HD12	0.53	2.03	11	4
1:A:63:SER:CB	1:A:76:ILE:HG13	0.53	2.33	8	3
1:A:122:LYS:HE3	1:A:150:PRO:HD3	0.53	1.81	4	1
1:A:41:LEU:HA	1:A:237:TYR:O	0.53	2.04	11	3
1:A:206:ASN:HA	1:A:209:LYS:HE3	0.53	1.79	6	1
1:A:56:ALA:CA	1:A:90:LEU:HD13	0.53	2.33	11	7
1:A:106:LEU:HD12	1:A:153:LEU:HD12	0.53	1.79	6	3
1:A:104:ALA:CB	1:A:133:LEU:HD22	0.52	2.33	6	8
1:A:31:LEU:HD13	1:A:207:LEU:HB3	0.52	1.81	10	3
1:A:186:ASP:OD1	1:A:226:LYS:HA	0.52	2.04	4	1
1:A:59:ALA:HB1	1:A:88:LEU:CD2	0.52	2.32	9	3
1:A:88:LEU:HD11	1:A:90:LEU:HD23	0.52	1.82	8	3
1:A:50:VAL:O	1:A:54:LEU:HD12	0.52	2.03	4	8
1:A:105:ALA:HA	1:A:179:THR:OG1	0.52	2.04	10	6
1:A:60:LEU:CG	1:A:84:ALA:HB2	0.52	2.35	6	7
1:A:81:PRO:CG	1:A:108:LEU:HB3	0.52	2.35	4	2
1:A:64:TYR:HB2	1:A:73:CYS:SG	0.52	2.44	7	1
1:A:26:ASN:HA	1:A:53:MET:HG2	0.52	1.82	4	5
1:A:29:LEU:HD11	1:A:54:LEU:CD2	0.52	2.34	5	2
1:A:157:PHE:CE2	1:A:180:ALA:HA	0.52	2.40	4	2
1:A:53:MET:SD	1:A:98:ALA:HB1	0.52	2.44	10	3
1:A:198:LYS:HB3	1:A:199:PRO:CD	0.52	2.35	7	6
1:A:91:PHE:HA	1:A:116:THR:O	0.52	2.04	4	3
1:A:118:GLU:HB3	1:A:119:PRO:CD	0.51	2.35	4	7
1:A:41:LEU:HD11	1:A:75:ILE:HD13	0.51	1.82	8	1
1:A:217:ASN:H	1:A:217:ASN:ND2	0.51	2.03	5	1
1:A:53:MET:O	1:A:57:LEU:CD1	0.51	2.57	11	1
1:A:177:LEU:O	1:A:181:PRO:HG3	0.51	2.05	6	11
1:A:132:ALA:HB3	1:A:176:LEU:HD11	0.51	1.82	7	3
1:A:33:ALA:O	1:A:78:ASN:HB3	0.51	2.05	5	1
1:A:92:LEU:N	1:A:92:LEU:CD2	0.51	2.73	1	5
1:A:72:ARG:O	1:A:72:ARG:HG3	0.51	2.06	1	2
1:A:148:TYR:C	1:A:150:PRO:HD2	0.51	2.31	10	9
1:A:102:LEU:HD13	1:A:102:LEU:C	0.51	2.31	3	3
1:A:66:LEU:HD13	1:A:72:ARG:C	0.51	2.30	10	6
1:A:81:PRO:CG	1:A:108:LEU:HB2	0.51	2.36	7	6
1:A:44:LEU:HD11	1:A:50:VAL:CG1	0.51	2.36	5	2
1:A:113:ILE:O	1:A:152:ARG:HA	0.51	2.06	7	7
1:A:207:LEU:HD11	1:A:237:TYR:CE2	0.51	2.41	10	5
1:A:67:SER:HB2	1:A:72:ARG:HB2	0.51	1.82	4	2
1:A:92:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HD13	0.51	1.82	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:126:ILE:O	1:A:126:ILE:HG12	0.51	2.04	9	8
1:A:211:PHE:O	1:A:232:GLN:HB2	0.51	2.05	6	4
1:A:111:ASN:HB2	1:A:113:ILE:HD11	0.51	1.81	9	1
1:A:33:ALA:O	1:A:78:ASN:N	0.50	2.43	5	10
1:A:198:LYS:HG2	1:A:220:TYR:CE1	0.50	2.41	7	6
1:A:204:THR:HG22	1:A:208:MET:SD	0.50	2.46	10	3
1:A:56:ALA:O	1:A:59:ALA:HB3	0.50	2.07	6	2
1:A:165:ASP:N	1:A:192:LYS:HE3	0.50	2.22	8	1
1:A:38:LYS:HD2	1:A:74:GLU:HB3	0.50	1.82	6	2
1:A:99:MET:HG2	1:A:121:MET:HE2	0.50	1.83	5	1
1:A:88:LEU:HD12	1:A:88:LEU:C	0.50	2.31	6	1
1:A:42:THR:CB	1:A:72:ARG:HD3	0.50	2.23	4	1
1:A:174:THR:CG2	1:A:178:MET:HE2	0.50	2.28	5	1
1:A:174:THR:O	1:A:178:MET:HG3	0.50	2.07	5	2
1:A:81:PRO:HG2	1:A:108:LEU:HB3	0.50	1.84	4	1
1:A:57:LEU:HB3	1:A:62:VAL:HB	0.50	1.83	11	1
1:A:42:THR:HB	1:A:72:ARG:NE	0.50	2.22	6	1
1:A:122:LYS:HA	1:A:149:PRO:CD	0.50	2.37	9	1
1:A:145:GLN:HB3	1:A:148:TYR:HD2	0.49	1.67	2	4
1:A:205:LEU:CD2	1:A:208:MET:HE2	0.49	2.35	4	1
1:A:88:LEU:O	1:A:113:ILE:CG2	0.49	2.59	10	6
1:A:141:THR:CG2	1:A:142:TYR:N	0.49	2.72	3	1
1:A:205:LEU:CD1	1:A:215:ILE:HD11	0.49	2.35	5	7
1:A:143:LEU:HD21	1:A:152:ARG:HB3	0.49	1.83	4	2
1:A:180:ALA:N	1:A:181:PRO:CD	0.49	2.74	4	11
1:A:96:GLY:O	1:A:171:GLN:HG3	0.49	2.07	4	3
1:A:44:LEU:HD21	1:A:50:VAL:HG11	0.49	1.84	9	2
1:A:143:LEU:HD22	1:A:143:LEU:N	0.49	2.22	4	5
1:A:122:LYS:HA	1:A:149:PRO:HG3	0.49	1.82	3	6
1:A:148:TYR:HB3	1:A:149:PRO:CD	0.49	2.37	9	2
1:A:133:LEU:HA	1:A:157:PHE:HE1	0.49	1.64	4	2
1:A:48:ASP:HA	1:A:51:ARG:CD	0.49	2.37	6	1
1:A:218:GLN:CB	1:A:222:GLN:HG2	0.49	2.38	9	1
1:A:213:VAL:HG13	1:A:229:GLN:CG	0.49	2.37	10	8
1:A:108:LEU:HD21	1:A:179:THR:O	0.49	2.07	3	5
1:A:191:ILE:HD11	1:A:223:PHE:CE1	0.49	2.42	7	5
1:A:112:ASP:HA	1:A:153:LEU:O	0.49	2.08	11	6
1:A:130:VAL:HA	1:A:133:LEU:CD1	0.49	2.38	4	5
1:A:135:LEU:HD13	1:A:162:VAL:HG13	0.49	1.85	6	4
1:A:63:SER:HB2	1:A:76:ILE:HG13	0.49	1.84	8	2
1:A:81:PRO:CG	1:A:108:LEU:CB	0.49	2.91	8	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:31:LEU:HD11	1:A:207:LEU:HB3	0.49	1.84	7	3
1:A:133:LEU:HA	1:A:157:PHE:HE2	0.49	1.67	7	1
1:A:100:ARG:HD2	1:A:126:ILE:HD12	0.49	1.85	11	1
1:A:160:GLY:O	1:A:162:VAL:HG23	0.49	2.08	7	3
1:A:90:LEU:HD23	1:A:90:LEU:N	0.49	2.21	11	2
1:A:195:LEU:CD2	1:A:198:LYS:HA	0.49	2.37	4	6
1:A:31:LEU:CD1	1:A:207:LEU:HD12	0.49	2.38	7	3
1:A:60:LEU:HD22	1:A:82:LEU:HB3	0.48	1.85	2	5
1:A:106:LEU:HD12	1:A:153:LEU:HD13	0.48	1.85	3	1
1:A:38:LYS:CG	1:A:76:ILE:HD13	0.48	2.38	6	2
1:A:45:LEU:HB3	1:A:50:VAL:HG21	0.48	1.84	6	7
1:A:99:MET:HE1	1:A:116:THR:O	0.48	2.08	7	2
1:A:26:ASN:HD21	1:A:50:VAL:HA	0.48	1.68	7	1
1:A:50:VAL:O	1:A:53:MET:N	0.48	2.46	6	9
1:A:195:LEU:HD23	1:A:198:LYS:CA	0.48	2.37	10	4
1:A:205:LEU:HD23	1:A:208:MET:SD	0.48	2.48	9	2
1:A:148:TYR:CB	1:A:149:PRO:HD2	0.48	2.37	9	10
1:A:149:PRO:N	1:A:150:PRO:CD	0.48	2.76	9	6
1:A:29:LEU:HD23	1:A:41:LEU:CD1	0.48	2.35	11	1
1:A:44:LEU:HD23	1:A:70:ARG:O	0.48	2.08	8	4
1:A:63:SER:O	1:A:76:ILE:HD13	0.48	2.08	4	1
1:A:163:ASP:HA	1:A:190:ARG:CG	0.48	2.39	7	4
1:A:54:LEU:HB3	1:A:64:TYR:CE1	0.48	2.43	4	1
1:A:29:LEU:HG	1:A:41:LEU:HD11	0.48	1.84	7	2
1:A:49:ASP:HA	1:A:95:ALA:HB2	0.48	1.85	2	3
1:A:173:LEU:HD21	1:A:223:PHE:CG	0.48	2.44	2	2
1:A:198:LYS:HG2	1:A:220:TYR:CZ	0.48	2.44	2	1
1:A:29:LEU:CD2	1:A:41:LEU:HD11	0.48	2.37	11	2
1:A:208:MET:HB3	1:A:231:TYR:CE1	0.48	2.44	9	1
1:A:88:LEU:O	1:A:113:ILE:CA	0.48	2.62	5	10
1:A:30:LEU:HB2	1:A:53:MET:HE2	0.48	1.84	10	3
1:A:35:ALA:HB2	1:A:231:TYR:HB2	0.48	1.83	4	2
1:A:174:THR:HG22	1:A:178:MET:CE	0.48	2.38	7	1
1:A:120:ARG:O	1:A:123:GLU:HG2	0.47	2.08	5	3
1:A:120:ARG:HD3	1:A:123:GLU:HG2	0.47	1.83	4	2
1:A:203:ILE:O	1:A:207:LEU:HD23	0.47	2.09	4	1
1:A:215:ILE:HB	1:A:224:VAL:O	0.47	2.09	4	4
1:A:29:LEU:CD2	1:A:41:LEU:CD1	0.47	2.92	11	1
1:A:45:LEU:O	1:A:50:VAL:HG21	0.47	2.10	2	2
1:A:146:GLU:O	1:A:148:TYR:CD2	0.47	2.67	2	2
1:A:173:LEU:HG	1:A:177:LEU:HD12	0.47	1.87	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:LEU:HD11	1:A:105:ALA:CB	0.47	2.40	7	4
1:A:81:PRO:O	1:A:83:HIS:N	0.47	2.48	4	9
1:A:90:LEU:HD12	1:A:102:LEU:CD1	0.47	2.39	2	1
1:A:135:LEU:CD1	1:A:162:VAL:HG13	0.47	2.40	6	4
1:A:142:TYR:CE1	1:A:151:LEU:HD21	0.47	2.44	7	1
1:A:88:LEU:CG	1:A:90:LEU:HD21	0.47	2.40	11	1
1:A:178:MET:O	1:A:182:LEU:HD12	0.47	2.08	1	6
1:A:58:THR:HB	1:A:64:TYR:HE2	0.47	1.67	4	1
1:A:104:ALA:O	1:A:107:CYS:HB2	0.47	2.09	4	4
1:A:107:CYS:C	1:A:155:GLY:HA2	0.47	2.35	10	10
1:A:51:ARG:HA	1:A:54:LEU:HD12	0.47	1.86	3	2
1:A:91:PHE:CE1	1:A:93:GLY:CA	0.47	2.97	11	3
1:A:42:THR:OG1	1:A:238:LEU:HD12	0.47	2.10	5	1
1:A:26:ASN:OD1	1:A:50:VAL:HG13	0.47	2.10	6	1
1:A:29:LEU:HD22	1:A:54:LEU:CD2	0.47	2.39	9	2
1:A:170:SER:O	1:A:174:THR:HG22	0.47	2.09	9	1
1:A:99:MET:SD	1:A:115:LEU:HD13	0.47	2.49	3	1
1:A:170:SER:CB	1:A:197:SER:HB2	0.47	2.39	4	1
1:A:164:VAL:C	1:A:192:LYS:HE3	0.47	2.34	8	1
1:A:64:TYR:CD1	1:A:64:TYR:C	0.47	2.93	8	8
1:A:129:LEU:N	1:A:172:PHE:CD2	0.47	2.83	2	9
1:A:67:SER:HB2	1:A:72:ARG:CG	0.47	2.39	3	1
1:A:72:ARG:HG3	1:A:72:ARG:O	0.47	2.09	3	4
1:A:108:LEU:CG	1:A:179:THR:HG23	0.47	2.39	7	3
1:A:142:TYR:CE1	1:A:151:LEU:CD2	0.47	2.98	7	2
1:A:145:GLN:CB	1:A:148:TYR:CD2	0.46	2.97	1	1
1:A:82:LEU:O	1:A:111:ASN:ND2	0.46	2.49	2	1
1:A:97:THR:HA	1:A:171:GLN:CG	0.46	2.40	9	1
1:A:72:ARG:CG	1:A:72:ARG:O	0.46	2.63	7	2
1:A:202:ASP:O	1:A:206:ASN:HB2	0.46	2.11	8	3
1:A:169:SER:CA	1:A:196:VAL:HG11	0.46	2.39	4	3
1:A:150:PRO:O	1:A:151:LEU:HD23	0.46	2.10	6	4
1:A:209:LYS:HE2	1:A:214:GLU:HG2	0.46	1.86	4	1
1:A:62:VAL:HG21	1:A:82:LEU:CD1	0.46	2.41	7	6
1:A:132:ALA:CA	1:A:135:LEU:HD12	0.46	2.35	4	2
1:A:204:THR:O	1:A:208:MET:HG3	0.46	2.11	9	2
1:A:92:LEU:HB2	1:A:99:MET:CE	0.46	2.36	8	2
1:A:167:SER:C	1:A:168:VAL:HG23	0.46	2.34	11	3
1:A:92:LEU:HD23	1:A:99:MET:HE2	0.46	1.85	10	1
1:A:57:LEU:HB3	1:A:62:VAL:CB	0.46	2.41	11	1
1:A:162:VAL:O	1:A:189:ILE:HA	0.46	2.11	5	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:181:PRO:O	1:A:229:GLN:HB2	0.46	2.10	9	2
1:A:142:TYR:HE1	1:A:151:LEU:HD21	0.46	1.71	7	1
1:A:29:LEU:HD22	1:A:54:LEU:HD21	0.46	1.88	11	1
1:A:38:LYS:CB	1:A:76:ILE:HD13	0.46	2.39	2	3
1:A:27:ARG:O	1:A:31:LEU:HD12	0.46	2.11	3	1
1:A:186:ASP:HA	1:A:227:GLY:H	0.46	1.71	11	9
1:A:42:THR:HG23	1:A:238:LEU:CA	0.46	2.41	8	3
1:A:26:ASN:HB3	1:A:53:MET:SD	0.46	2.51	7	1
1:A:107:CYS:O	1:A:155:GLY:HA2	0.46	2.10	4	3
1:A:88:LEU:HD12	1:A:89:GLU:H	0.46	1.70	4	1
1:A:129:LEU:HD11	1:A:175:ALA:HB3	0.46	1.88	4	1
1:A:133:LEU:HD23	1:A:176:LEU:HG	0.46	1.87	7	2
1:A:28:ALA:HB2	1:A:237:TYR:HE2	0.46	1.71	9	1
1:A:136:GLY:HA3	1:A:157:PHE:CE1	0.45	2.45	3	3
1:A:152:ARG:HG2	1:A:152:ARG:O	0.45	2.11	8	1
1:A:103:ALA:HA	1:A:115:LEU:HD11	0.45	1.89	5	1
1:A:62:VAL:HG22	1:A:78:ASN:ND2	0.45	2.27	8	1
1:A:176:LEU:O	1:A:180:ALA:CB	0.45	2.64	11	5
1:A:176:LEU:O	1:A:180:ALA:HB3	0.45	2.10	11	3
1:A:113:ILE:HD12	1:A:113:ILE:N	0.45	2.25	9	4
1:A:215:ILE:C	1:A:215:ILE:CD1	0.45	2.87	6	1
1:A:133:LEU:HD23	1:A:176:LEU:HD23	0.45	1.87	9	1
1:A:171:GLN:HA	1:A:174:THR:CG2	0.45	2.41	9	2
1:A:169:SER:HB3	1:A:171:GLN:HG2	0.45	1.87	3	1
1:A:213:VAL:HG13	1:A:229:GLN:OE1	0.45	2.12	3	1
1:A:92:LEU:HG	1:A:99:MET:CA	0.45	2.37	4	3
1:A:191:ILE:N	1:A:191:ILE:CD1	0.45	2.79	11	10
1:A:98:ALA:C	1:A:101:PRO:HD2	0.45	2.37	6	5
1:A:72:ARG:O	1:A:72:ARG:CG	0.45	2.65	9	4
1:A:26:ASN:HB2	1:A:53:MET:SD	0.45	2.51	8	1
1:A:130:VAL:HA	1:A:133:LEU:HD12	0.45	1.87	3	1
1:A:34:LEU:HD12	1:A:231:TYR:CE2	0.45	2.47	6	3
1:A:112:ASP:C	1:A:113:ILE:HD13	0.45	2.37	11	1
1:A:108:LEU:HG	1:A:179:THR:CG2	0.45	2.41	9	7
1:A:128:HIS:CE1	1:A:168:VAL:HG21	0.45	2.43	8	4
1:A:190:ARG:NH1	1:A:192:LYS:HA	0.45	2.27	5	1
1:A:177:LEU:CD1	1:A:205:LEU:HD21	0.45	2.40	7	1
1:A:120:ARG:O	1:A:123:GLU:HG3	0.45	2.12	8	1
1:A:56:ALA:HB1	1:A:102:LEU:HG	0.44	1.89	4	2
1:A:120:ARG:HD3	1:A:123:GLU:CG	0.44	2.42	4	1
1:A:38:LYS:HG3	1:A:76:ILE:CG1	0.44	2.42	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:157:PHE:CD1	1:A:183:ALA:HB2	0.44	2.47	7	1
1:A:100:ARG:H	1:A:100:ARG:HD3	0.44	1.73	10	1
1:A:44:LEU:O	1:A:71:THR:CG2	0.44	2.65	3	3
1:A:93:GLY:CA	1:A:118:GLU:HG3	0.44	2.41	3	1
1:A:162:VAL:O	1:A:190:ARG:N	0.44	2.51	4	4
1:A:41:LEU:HD12	1:A:44:LEU:HD13	0.44	1.89	6	2
1:A:146:GLU:C	1:A:147:ASN:CG	0.44	2.84	7	1
1:A:163:ASP:O	1:A:192:LYS:HE2	0.44	2.12	8	1
1:A:171:GLN:HA	1:A:174:THR:HG22	0.44	1.89	9	2
1:A:29:LEU:HD23	1:A:75:ILE:HG12	0.44	1.88	1	1
1:A:100:ARG:N	1:A:101:PRO:CD	0.44	2.80	1	3
1:A:143:LEU:CD2	1:A:152:ARG:N	0.44	2.79	2	6
1:A:140:ILE:HA	1:A:152:ARG:O	0.44	2.12	4	2
1:A:145:GLN:H	1:A:150:PRO:CG	0.44	2.26	4	1
1:A:60:LEU:CB	1:A:84:ALA:HB2	0.44	2.42	5	5
1:A:162:VAL:HG12	1:A:163:ASP:N	0.44	2.27	8	4
1:A:53:MET:CE	1:A:57:LEU:HD21	0.44	2.43	3	1
1:A:209:LYS:HG2	1:A:214:GLU:HG2	0.44	1.88	4	1
1:A:57:LEU:HB2	1:A:62:VAL:HB	0.44	1.89	6	2
1:A:157:PHE:CE1	1:A:180:ALA:HA	0.44	2.47	7	1
1:A:163:ASP:HA	1:A:190:ARG:HG2	0.44	1.90	7	1
1:A:157:PHE:HD2	1:A:179:THR:HG22	0.44	1.73	6	4
1:A:94:ASN:N	1:A:118:GLU:HG3	0.44	2.27	9	2
1:A:163:ASP:HB2	1:A:192:LYS:HE2	0.44	1.90	4	1
1:A:173:LEU:HD23	1:A:201:ILE:CG1	0.44	2.38	8	2
1:A:104:ALA:HB1	1:A:133:LEU:HD22	0.44	1.89	10	3
1:A:168:VAL:O	1:A:169:SER:O	0.44	2.36	6	2
1:A:174:THR:HG22	1:A:178:MET:SD	0.44	2.53	4	1
1:A:97:THR:HA	1:A:171:GLN:HG2	0.44	1.88	9	1
1:A:142:TYR:CD2	1:A:146:GLU:HA	0.44	2.47	1	1
1:A:88:LEU:O	1:A:114:VAL:N	0.44	2.48	2	3
1:A:32:ALA:HA	1:A:211:PHE:HE2	0.44	1.72	11	7
1:A:59:ALA:CB	1:A:90:LEU:CD2	0.44	2.96	1	1
1:A:44:LEU:HD22	1:A:66:LEU:HD21	0.44	1.90	3	3
1:A:67:SER:CB	1:A:72:ARG:HG3	0.44	2.42	2	1
1:A:126:ILE:HG12	1:A:130:VAL:HG23	0.44	1.88	11	3
1:A:170:SER:HG	1:A:174:THR:HG1	0.44	1.49	3	1
1:A:132:ALA:HB3	1:A:176:LEU:HD21	0.44	1.88	6	1
1:A:205:LEU:CD2	1:A:215:ILE:HG12	0.43	2.34	4	2
1:A:93:GLY:HA2	1:A:118:GLU:HG2	0.43	1.88	11	2
1:A:170:SER:OG	1:A:201:ILE:HD13	0.43	2.13	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:118:GLU:CB	1:A:119:PRO:HD2	0.43	2.42	10	1
1:A:198:LYS:CB	1:A:199:PRO:HD3	0.43	2.43	10	2
1:A:129:LEU:HB2	1:A:172:PHE:CD2	0.43	2.48	6	4
1:A:40:VAL:HA	1:A:73:CYS:O	0.43	2.14	11	3
1:A:84:ALA:O	1:A:111:ASN:HB3	0.43	2.12	4	1
1:A:102:LEU:HD13	1:A:106:LEU:CD1	0.43	2.31	2	1
1:A:92:LEU:HD21	1:A:115:LEU:HD22	0.43	1.89	4	2
1:A:122:LYS:HE3	1:A:149:PRO:HG2	0.43	1.91	4	1
1:A:211:PHE:CD2	1:A:231:TYR:HB3	0.43	2.48	4	2
1:A:114:VAL:HG13	1:A:143:LEU:CD2	0.43	2.44	6	3
1:A:62:VAL:CG1	1:A:63:SER:N	0.43	2.81	11	1
1:A:97:THR:HG22	1:A:171:GLN:NE2	0.43	2.28	10	1
1:A:128:HIS:CB	1:A:165:ASP:HB2	0.43	2.43	10	1
1:A:120:ARG:CG	1:A:120:ARG:HH11	0.43	2.26	1	1
1:A:121:MET:O	1:A:149:PRO:CD	0.43	2.66	1	5
1:A:132:ALA:HB1	1:A:162:VAL:CG1	0.43	2.42	1	1
1:A:232:GLN:O	1:A:234:PRO:CD	0.43	2.67	2	2
1:A:211:PHE:CD2	1:A:234:PRO:HD3	0.43	2.49	5	1
1:A:31:LEU:HD21	1:A:208:MET:HG2	0.43	1.90	9	1
1:A:121:MET:O	1:A:149:PRO:HG3	0.43	2.13	5	2
1:A:140:ILE:CG2	1:A:141:THR:N	0.43	2.81	2	5
1:A:29:LEU:HD23	1:A:57:LEU:CD1	0.43	2.43	3	2
1:A:38:LYS:HE2	1:A:74:GLU:HB3	0.43	1.91	3	1
1:A:180:ALA:HB1	1:A:225:VAL:CG2	0.43	2.39	3	1
1:A:29:LEU:HG	1:A:41:LEU:CD1	0.43	2.44	7	1
1:A:215:ILE:CG2	1:A:225:VAL:HA	0.43	2.44	4	1
1:A:35:ALA:HB2	1:A:211:PHE:CD2	0.43	2.48	8	2
1:A:142:TYR:CD2	1:A:146:GLU:HG2	0.43	2.49	7	1
1:A:88:LEU:HD11	1:A:90:LEU:HD21	0.43	1.89	3	1
1:A:91:PHE:CE1	1:A:93:GLY:HA2	0.43	2.49	3	3
1:A:34:LEU:CD1	1:A:231:TYR:HE2	0.43	2.27	4	1
1:A:84:ALA:H	1:A:111:ASN:HB3	0.43	1.74	9	1
1:A:30:LEU:HD23	1:A:178:MET:SD	0.42	2.54	3	1
1:A:128:HIS:HB3	1:A:165:ASP:CB	0.42	2.42	4	2
1:A:89:GLU:CB	1:A:114:VAL:HB	0.42	2.43	6	1
1:A:75:ILE:HD12	1:A:75:ILE:N	0.42	2.29	1	3
1:A:216:GLU:OE2	1:A:224:VAL:HG21	0.42	2.14	4	1
1:A:174:THR:O	1:A:178:MET:HG2	0.42	2.14	7	1
1:A:127:GLY:HA3	1:A:147:ASN:OD1	0.42	2.14	8	1
1:A:56:ALA:O	1:A:60:LEU:CD1	0.42	2.66	2	1
1:A:29:LEU:HD11	1:A:54:LEU:HD21	0.42	1.91	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:179:THR:C	1:A:181:PRO:HD2	0.42	2.40	4	1
1:A:57:LEU:CB	1:A:62:VAL:HB	0.42	2.44	6	1
1:A:131:ASP:O	1:A:135:LEU:CD1	0.42	2.67	11	2
1:A:163:ASP:CG	1:A:190:ARG:HG2	0.42	2.39	9	1
1:A:190:ARG:CB	1:A:222:GLN:HG2	0.42	2.45	10	3
1:A:177:LEU:O	1:A:181:PRO:CD	0.42	2.67	7	4
1:A:42:THR:OG1	1:A:43:ASN:N	0.42	2.52	11	1
1:A:104:ALA:O	1:A:179:THR:CG2	0.42	2.68	7	6
1:A:53:MET:HE1	1:A:102:LEU:CB	0.42	2.44	2	1
1:A:44:LEU:HD22	1:A:66:LEU:CD1	0.42	2.40	4	2
1:A:48:ASP:O	1:A:52:HIS:CD2	0.42	2.73	7	3
1:A:48:ASP:HA	1:A:51:ARG:HD3	0.42	1.92	6	1
1:A:211:PHE:CD2	1:A:232:GLN:O	0.42	2.73	9	1
1:A:208:MET:HG2	1:A:231:TYR:CZ	0.42	2.50	10	2
1:A:88:LEU:HG	1:A:90:LEU:HD21	0.42	1.91	11	1
1:A:160:GLY:H	1:A:187:THR:HA	0.42	1.73	4	2
1:A:100:ARG:CB	1:A:129:LEU:HD22	0.42	2.44	10	1
1:A:111:ASN:HB3	1:A:113:ILE:HD11	0.42	1.91	4	1
1:A:177:LEU:HD23	1:A:225:VAL:CG1	0.42	2.45	4	4
1:A:66:LEU:HG	1:A:70:ARG:HG2	0.42	1.91	5	1
1:A:213:VAL:HG13	1:A:229:GLN:CD	0.42	2.39	10	3
1:A:126:ILE:HG21	1:A:151:LEU:HD11	0.42	1.90	2	2
1:A:26:ASN:HD22	1:A:98:ALA:HB2	0.42	1.71	6	1
1:A:91:PHE:CE1	1:A:117:GLY:O	0.42	2.73	6	1
1:A:126:ILE:CG1	1:A:129:LEU:HD23	0.42	2.45	10	1
1:A:213:VAL:HG13	1:A:229:GLN:NE2	0.42	2.29	11	1
1:A:81:PRO:CD	1:A:83:HIS:NE2	0.42	2.79	2	3
1:A:159:GLY:CA	1:A:187:THR:OG1	0.42	2.68	8	5
1:A:132:ALA:HB3	1:A:176:LEU:CD1	0.42	2.45	7	1
1:A:34:LEU:HD12	1:A:231:TYR:CD2	0.42	2.50	9	1
1:A:63:SER:O	1:A:76:ILE:HG13	0.42	2.15	5	1
1:A:110:SER:O	1:A:111:ASN:ND2	0.42	2.53	7	1
1:A:163:ASP:OD1	1:A:190:ARG:HG2	0.42	2.15	8	1
1:A:48:ASP:HA	1:A:51:ARG:HE	0.42	1.75	11	1
1:A:126:ILE:HA	1:A:172:PHE:CZ	0.41	2.50	7	1
1:A:47:SER:O	1:A:51:ARG:HG2	0.41	2.15	9	1
1:A:36:HIS:CE1	1:A:230:SER:HB3	0.41	2.51	5	1
1:A:177:LEU:HD13	1:A:205:LEU:CD2	0.41	2.43	7	1
1:A:98:ALA:O	1:A:102:LEU:CB	0.41	2.68	5	1
1:A:180:ALA:HB1	1:A:187:THR:HB	0.41	1.92	9	1
1:A:163:ASP:N	1:A:163:ASP:OD1	0.41	2.54	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:144:GLU:CG	1:A:145:GLN:N	0.41	2.84	4	1
1:A:66:LEU:HA	1:A:72:ARG:O	0.41	2.16	8	1
1:A:64:TYR:HB3	1:A:75:ILE:HG13	0.41	1.91	11	1
1:A:56:ALA:CB	1:A:90:LEU:HD13	0.41	2.46	10	1
1:A:35:ALA:O	1:A:77:GLY:HA3	0.41	2.15	11	1
1:A:132:ALA:HA	1:A:162:VAL:CG1	0.41	2.45	4	1
1:A:49:ASP:CG	1:A:95:ALA:HA	0.41	2.40	9	1
1:A:88:LEU:HD21	1:A:90:LEU:HD21	0.41	1.93	1	2
1:A:206:ASN:CA	1:A:209:LYS:HG2	0.41	2.45	8	2
1:A:173:LEU:HG	1:A:177:LEU:CD1	0.41	2.45	4	1
1:A:28:ALA:CB	1:A:41:LEU:HB3	0.41	2.45	6	1
1:A:173:LEU:CD2	1:A:201:ILE:HG12	0.41	2.42	6	1
1:A:129:LEU:HB2	1:A:172:PHE:CG	0.41	2.51	10	1
1:A:29:LEU:HD23	1:A:75:ILE:CG1	0.41	2.46	6	1
1:A:190:ARG:CB	1:A:222:GLN:CG	0.41	2.99	6	1
1:A:96:GLY:O	1:A:171:GLN:HG2	0.41	2.16	9	1
1:A:31:LEU:HB3	1:A:211:PHE:CE1	0.41	2.51	3	1
1:A:54:LEU:O	1:A:64:TYR:CE2	0.41	2.74	4	1
1:A:63:SER:HB2	1:A:76:ILE:HB	0.41	1.93	4	1
1:A:190:ARG:CA	1:A:222:GLN:HG2	0.41	2.45	4	1
1:A:29:LEU:CD2	1:A:57:LEU:HD11	0.41	2.46	5	1
1:A:116:THR:HG22	1:A:117:GLY:H	0.41	1.76	6	1
1:A:158:THR:O	1:A:185:GLU:N	0.41	2.52	6	1
1:A:44:LEU:HD11	1:A:50:VAL:HG11	0.41	1.92	7	1
1:A:60:LEU:CD2	1:A:84:ALA:CB	0.41	2.96	7	1
1:A:106:LEU:CD1	1:A:153:LEU:HD12	0.41	2.45	7	1
1:A:121:MET:HE3	1:A:124:ARG:CB	0.41	2.46	8	1
1:A:144:GLU:HB2	1:A:150:PRO:CG	0.41	2.44	8	1
1:A:29:LEU:HB3	1:A:57:LEU:HD11	0.41	1.93	9	1
1:A:30:LEU:HD23	1:A:178:MET:HE2	0.41	1.93	9	1
1:A:180:ALA:HB1	1:A:187:THR:CB	0.41	2.46	9	1
1:A:74:GLU:C	1:A:75:ILE:HD12	0.41	2.41	11	1
1:A:201:ILE:HG21	1:A:223:PHE:CZ	0.41	2.51	11	1
1:A:66:LEU:HG	1:A:70:ARG:HA	0.41	1.92	2	1
1:A:133:LEU:CD1	1:A:140:ILE:HD11	0.41	2.45	3	1
1:A:54:LEU:HD21	1:A:66:LEU:CD2	0.41	2.45	4	1
1:A:29:LEU:HD11	1:A:54:LEU:CG	0.41	2.46	5	1
1:A:35:ALA:CA	1:A:231:TYR:O	0.41	2.67	8	2
1:A:60:LEU:CD2	1:A:82:LEU:O	0.41	2.69	7	1
1:A:82:LEU:HB3	1:A:106:LEU:HD23	0.41	1.88	9	1
1:A:76:ILE:N	1:A:76:ILE:HD12	0.40	2.31	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:42:THR:HG23	1:A:238:LEU:CB	0.40	2.46	8	1
1:A:178:MET:HA	1:A:231:TYR:HH	0.40	1.77	3	1
1:A:42:THR:HG22	1:A:237:TYR:O	0.40	2.15	4	1
1:A:54:LEU:CD2	1:A:66:LEU:CD2	0.40	2.99	4	1
1:A:113:ILE:O	1:A:153:LEU:N	0.40	2.48	4	1
1:A:102:LEU:HD13	1:A:102:LEU:O	0.40	2.16	5	1
1:A:97:THR:HA	1:A:171:GLN:CD	0.40	2.42	6	1
1:A:42:THR:HG23	1:A:238:LEU:HD22	0.40	1.90	7	1
1:A:169:SER:HB3	1:A:171:GLN:NE2	0.40	2.31	9	1
1:A:106:LEU:O	1:A:111:ASN:ND2	0.40	2.54	10	1
1:A:34:LEU:HB2	1:A:231:TYR:HD2	0.40	1.76	2	1
1:A:31:LEU:HD23	1:A:231:TYR:CE2	0.40	2.52	9	1
1:A:144:GLU:HG3	1:A:150:PRO:HB3	0.40	1.94	6	1
1:A:60:LEU:HD22	1:A:82:LEU:O	0.40	2.15	7	1
1:A:73:CYS:SG	1:A:75:ILE:CD1	0.40	3.10	8	1
1:A:60:LEU:CD2	1:A:106:LEU:HD22	0.40	2.29	10	1
1:A:60:LEU:CD2	1:A:82:LEU:C	0.40	2.94	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	213/216 (99%)	184±2 (86±1%)	24±3 (11±1%)	5±1 (2±0%)	8	48
All	All	2343/2376 (99%)	2026 (86%)	267 (11%)	50 (2%)	8	48

All 7 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	86	GLY	11
1	A	169	SER	11
1	A	192	LYS	11
1	A	168	VAL	9
1	A	218	GLN	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	184	PRO	2
1	A	93	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	171/174 (98%)	127±3 (74±2%)	44±3 (26±2%)	2	23
All	All	1881/1914 (98%)	1399 (74%)	482 (26%)	2	23

All 91 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	34	LEU	11
1	A	39	THR	11
1	A	41	LEU	11
1	A	42	THR	11
1	A	66	LEU	11
1	A	71	THR	11
1	A	106	LEU	11
1	A	128	HIS	11
1	A	133	LEU	11
1	A	141	THR	11
1	A	164	VAL	11
1	A	191	ILE	11
1	A	195	LEU	11
1	A	220	TYR	11
1	A	236	THR	11
1	A	44	LEU	10
1	A	57	LEU	10
1	A	197	SER	10
1	A	207	LEU	10
1	A	145	GLN	10
1	A	29	LEU	9
1	A	72	ARG	9
1	A	152	ARG	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	198	LYS	8
1	A	89	GLU	7
1	A	100	ARG	7
1	A	110	SER	7
1	A	153	LEU	7
1	A	202	ASP	7
1	A	210	THR	7
1	A	218	GLN	7
1	A	97	THR	6
1	A	209	LYS	6
1	A	123	GLU	6
1	A	78	ASN	6
1	A	38	LYS	5
1	A	51	ARG	5
1	A	69	ASP	5
1	A	167	SER	5
1	A	190	ARG	5
1	A	226	LYS	5
1	A	65	THR	5
1	A	67	SER	5
1	A	134	ARG	5
1	A	165	ASP	5
1	A	43	ASN	5
1	A	217	ASN	5
1	A	92	LEU	4
1	A	161	ASN	4
1	A	55	ASN	4
1	A	185	GLU	4
1	A	139	LYS	4
1	A	131	ASP	4
1	A	144	GLU	4
1	A	170	SER	4
1	A	163	ASP	3
1	A	48	ASP	3
1	A	88	LEU	3
1	A	182	LEU	3
1	A	169	SER	3
1	A	74	GLU	3
1	A	154	GLN	3
1	A	238	LEU	3
1	A	70	ARG	3
1	A	85	GLU	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	124	ARG	2
1	A	194	ASP	2
1	A	219	HIS	2
1	A	47	SER	2
1	A	73	CYS	2
1	A	206	ASN	2
1	A	122	LYS	2
1	A	168	VAL	2
1	A	27	ARG	2
1	A	94	ASN	2
1	A	99	MET	2
1	A	147	ASN	2
1	A	26	ASN	1
1	A	49	ASP	1
1	A	76	ILE	1
1	A	118	GLU	1
1	A	120	ARG	1
1	A	178	MET	1
1	A	63	SER	1
1	A	116	THR	1
1	A	143	LEU	1
1	A	54	LEU	1
1	A	186	ASP	1
1	A	111	ASN	1
1	A	237	TYR	1
1	A	214	GLU	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

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided