



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 6, 2026 – 02:50 PM UTC

PDB ID : 1PRS / pdb_00001prs
Title : NMR-DERIVED THREE-DIMENSIONAL SOLUTION STRUCTURE OF
PROTEIN S COMPLEXED WITH CALCIUM
Authors : Bagby, S.; Harvey, T.S.; Eagle, S.G.; Inouye, S.; Ikura, M.
Deposited on : 1994-03-25

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

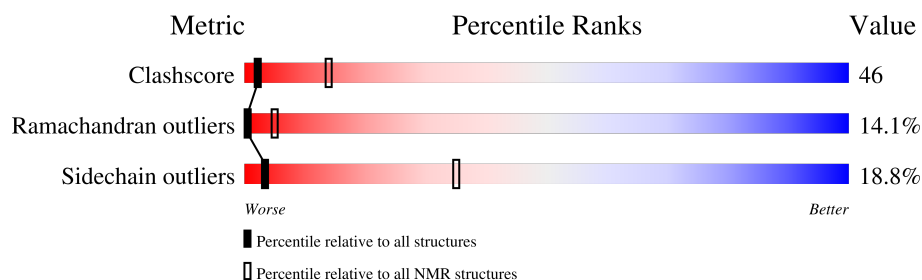
1 Overall quality at a glance

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	173	 30% 54% 12% . .

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 30 models. The atoms present in the NMR models are not consistent. Some calculations may have failed as a result. All residues are included in the validation scores. Model 26 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:2-A:161, A:166-A:173 (168)	0.85	26

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 5 clusters. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 5, 7, 8, 12, 14, 16, 17, 21, 22, 26, 28, 30
2	3, 4, 9, 10, 13, 18, 20, 25
3	6, 11, 19
4	23, 24, 27
5	15, 29

3 Entry composition [i](#)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2626 atoms, of which 1298 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	173	Total	C	H	N	O	S	0
			2624	832	1298	226	266	2	

- Molecule 2 is CALCIUM ION (CCD ID: CA) (formula: Ca).

Mol	Chain	Residues	Atoms	
2	A	2	Total	Ca
			2	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: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S

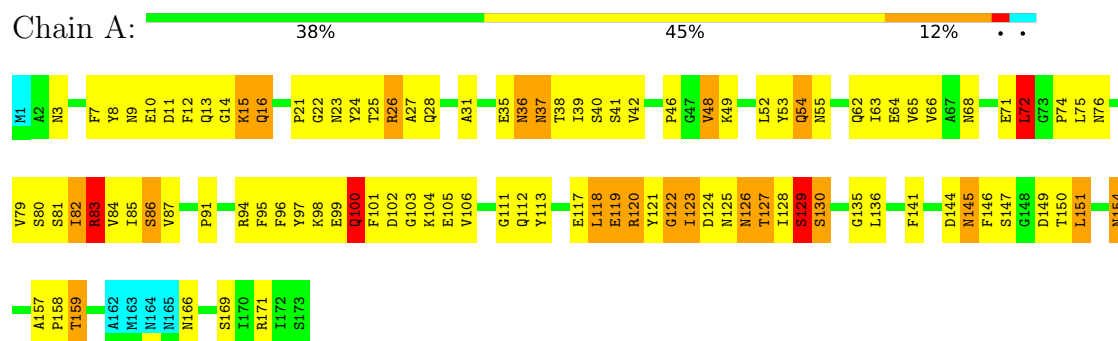


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

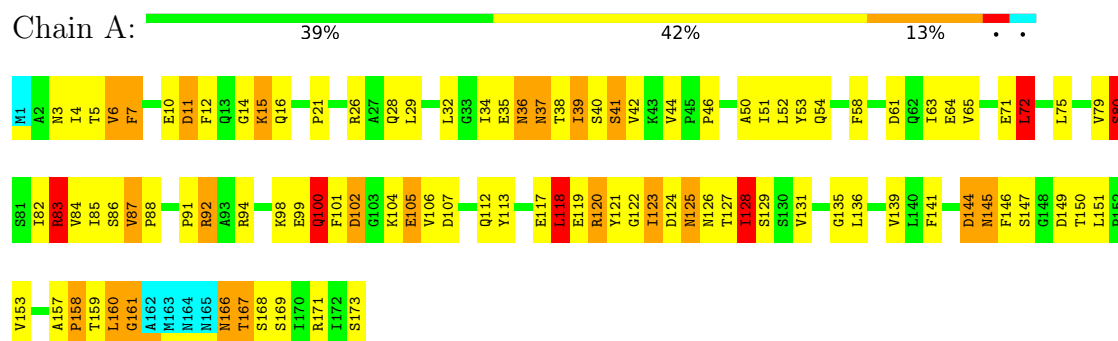
4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



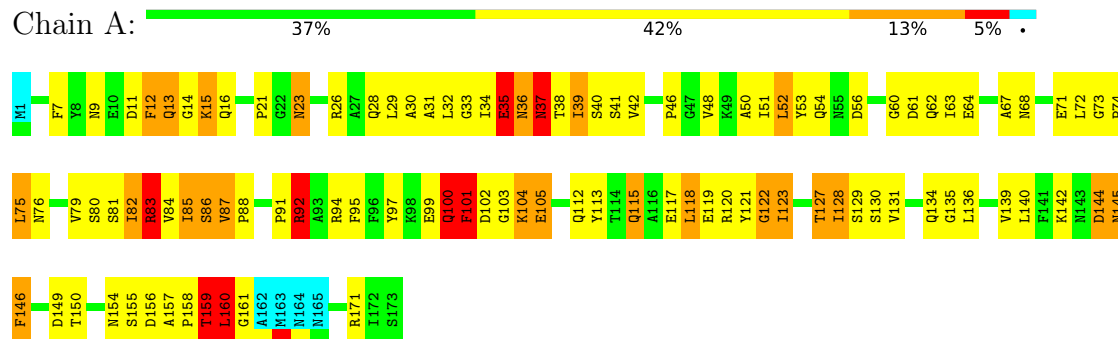
4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



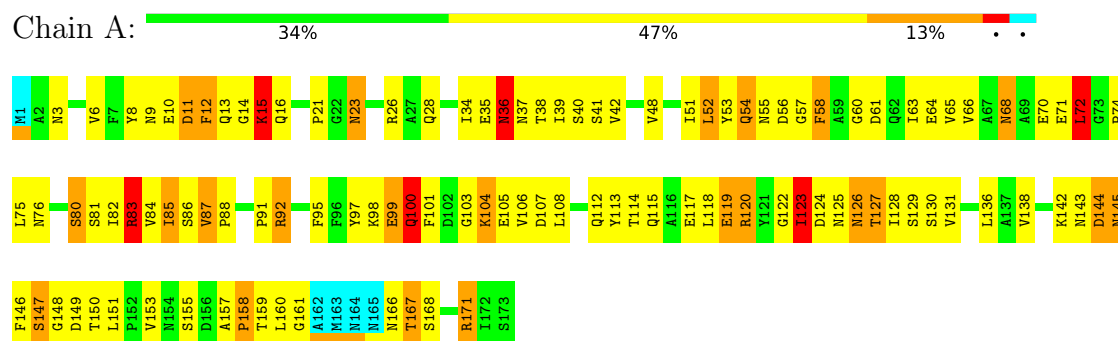
4.2.4 Score per residue for model 4

• Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



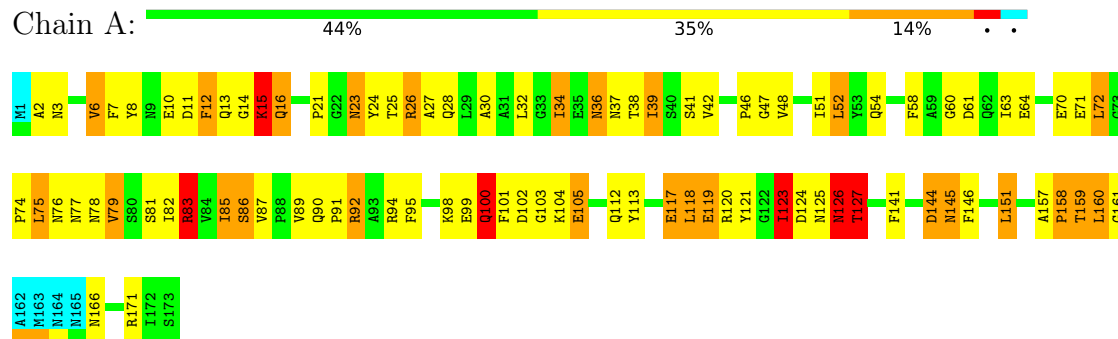
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



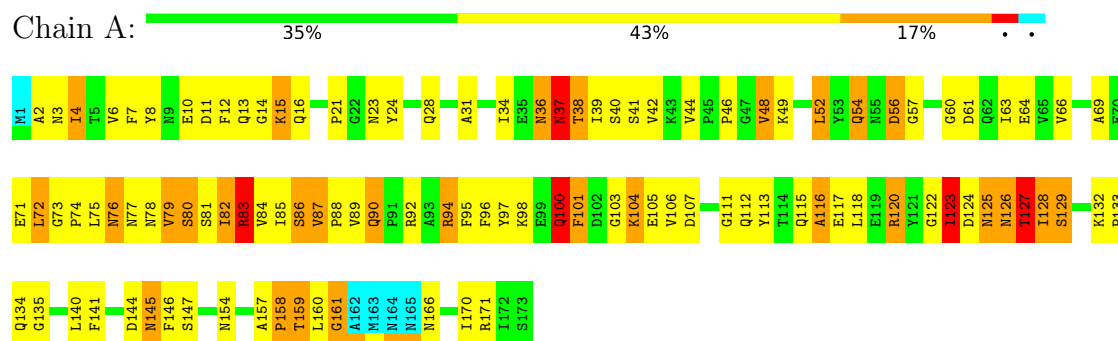
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



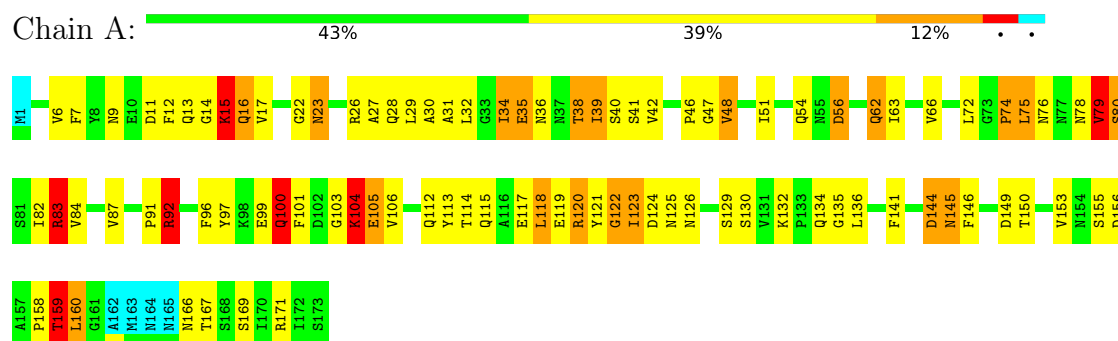
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



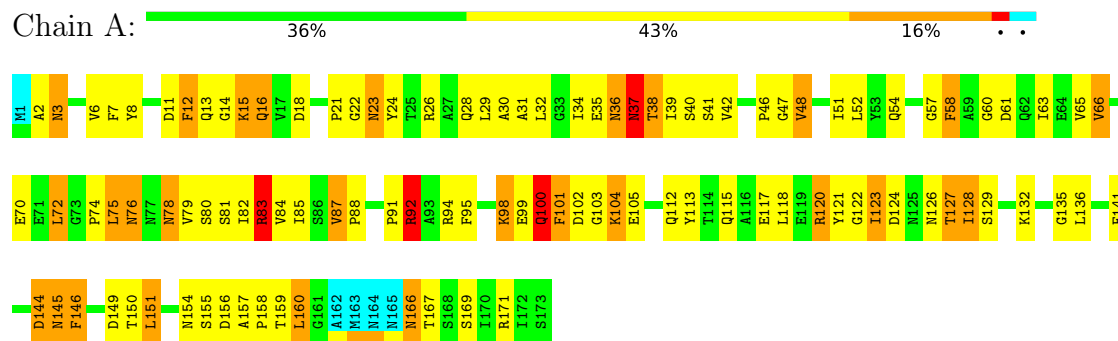
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



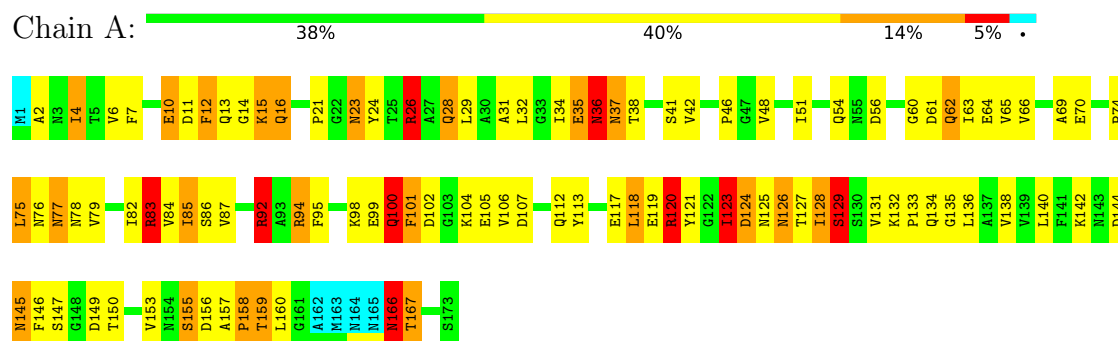
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



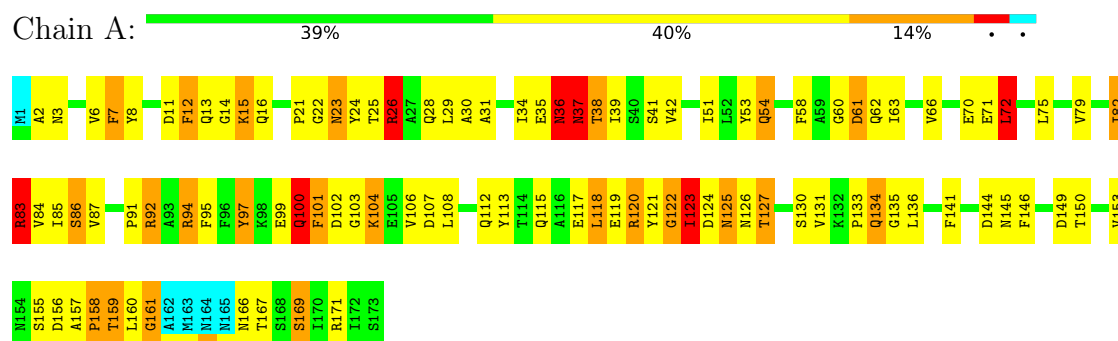
4.2.11 Score per residue for model 11

• Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



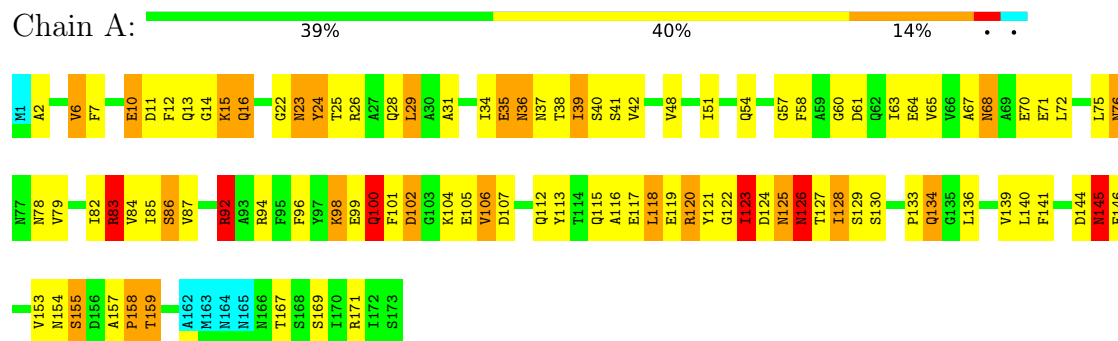
4.2.12 Score per residue for model 12

• Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



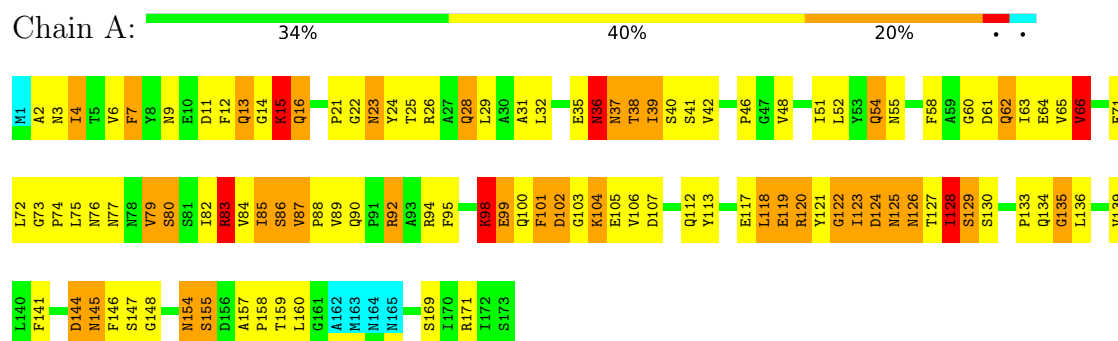
4.2.13 Score per residue for model 13

• Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



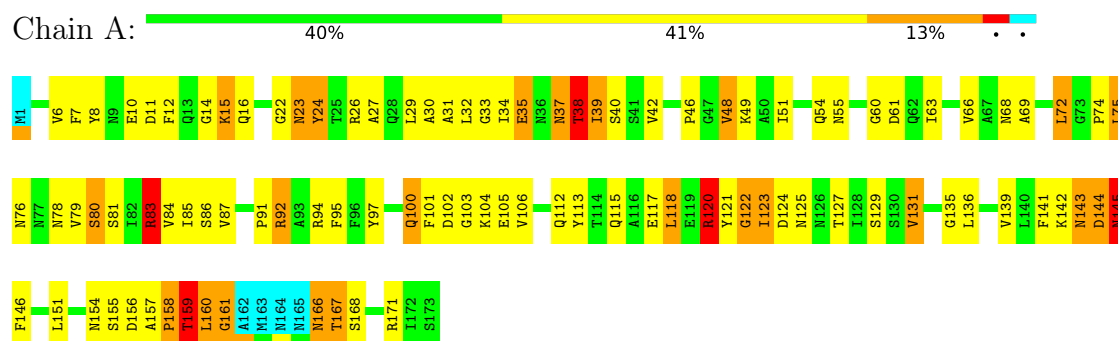
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



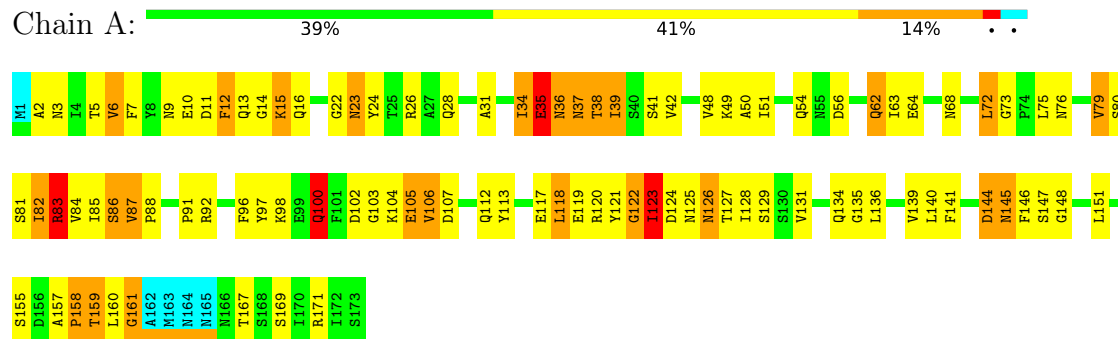
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



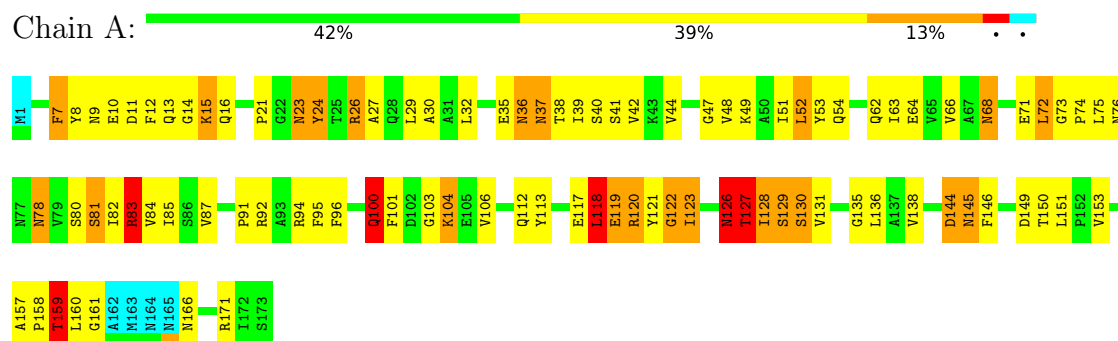
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



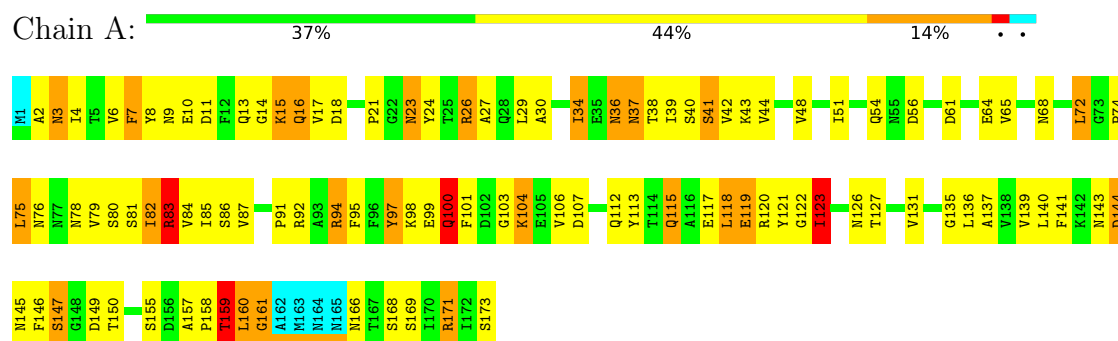
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



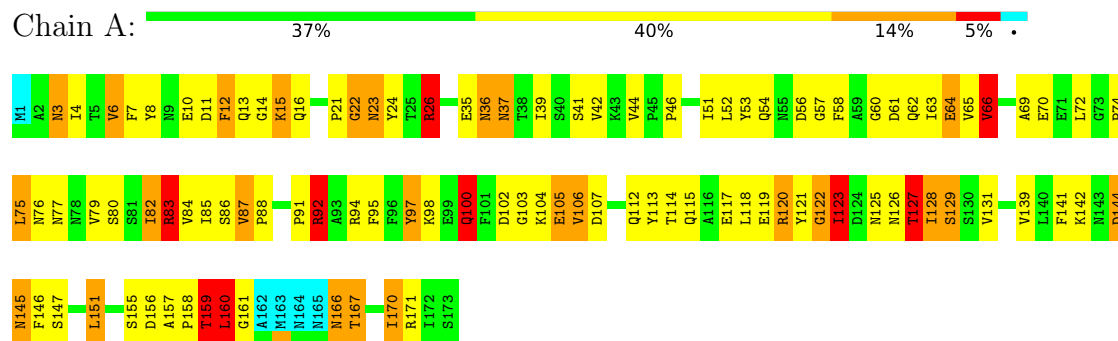
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



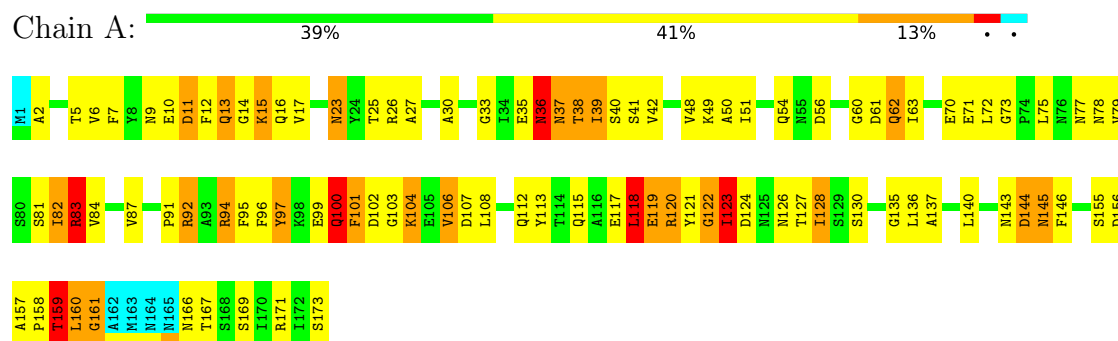
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



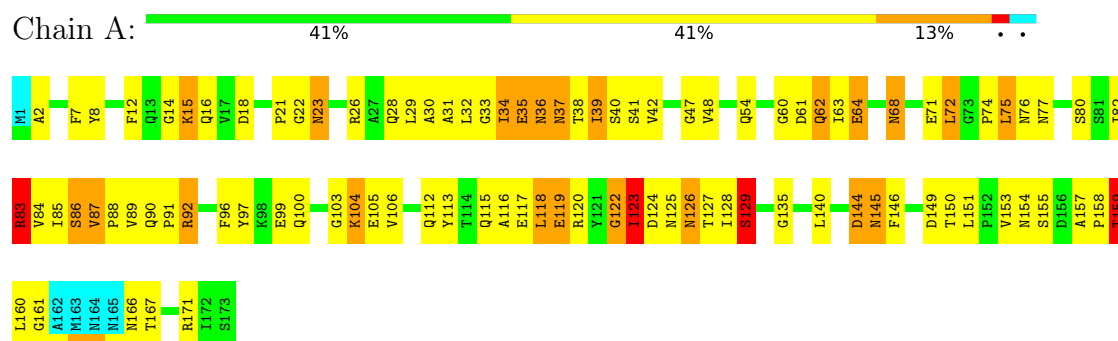
4.2.20 Score per residue for model 20

• Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



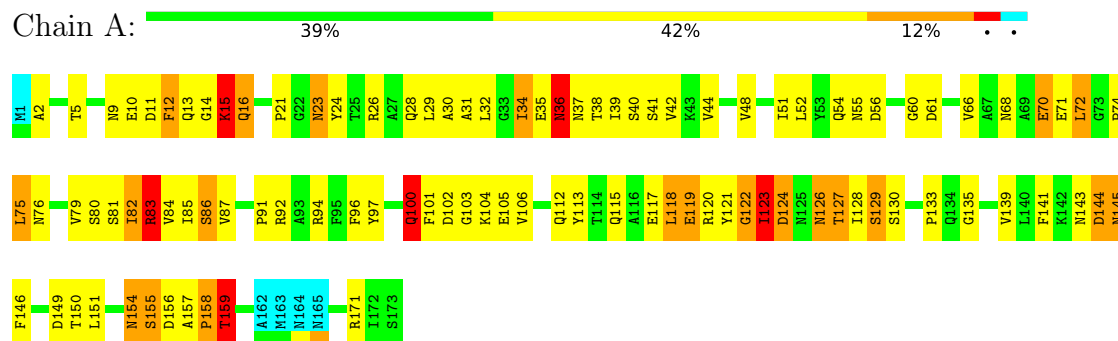
4.2.21 Score per residue for model 21

• Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



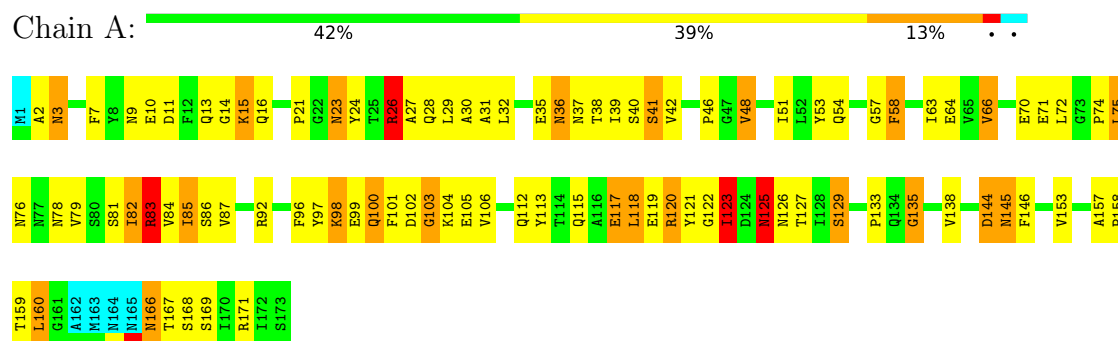
4.2.22 Score per residue for model 22

• Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



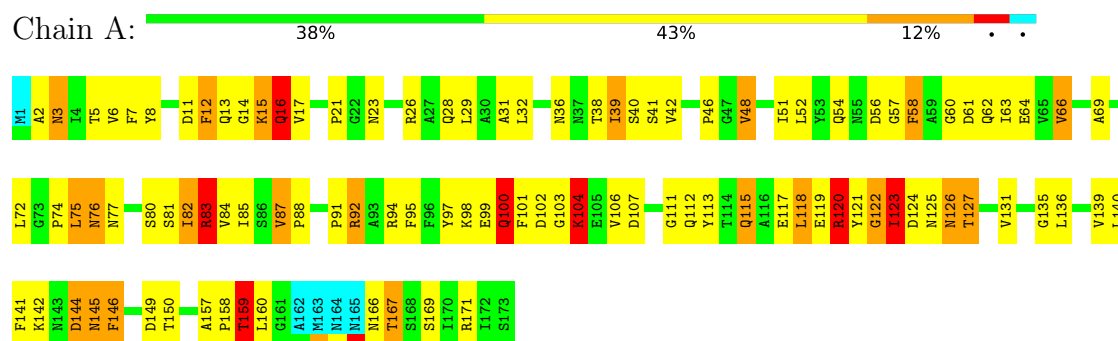
4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



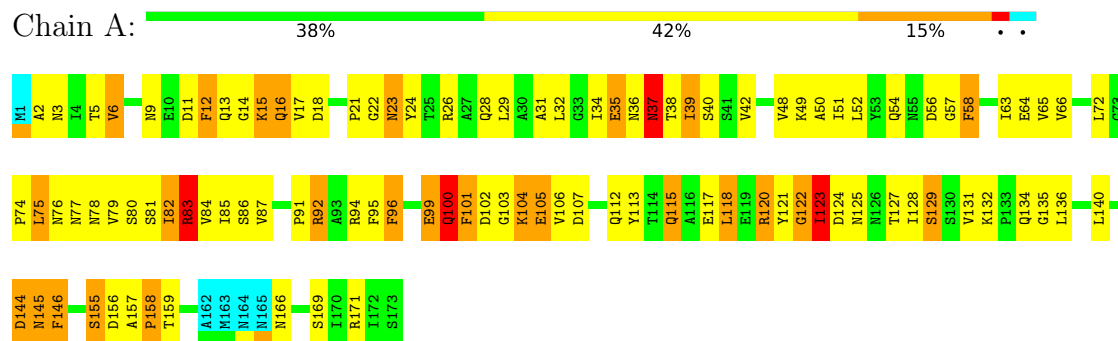
4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



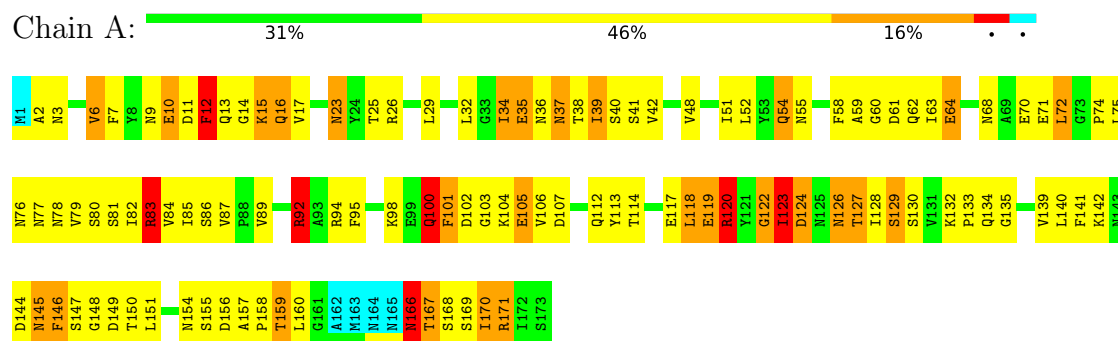
4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



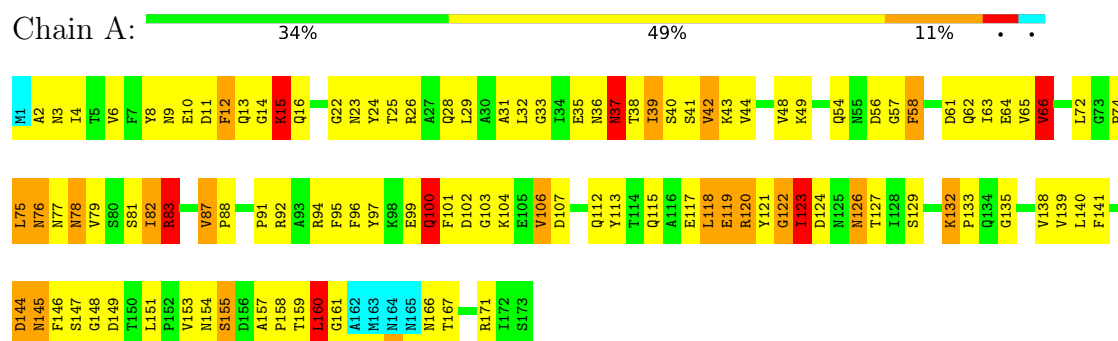
4.2.26 Score per residue for model 26 (medoid)

- Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



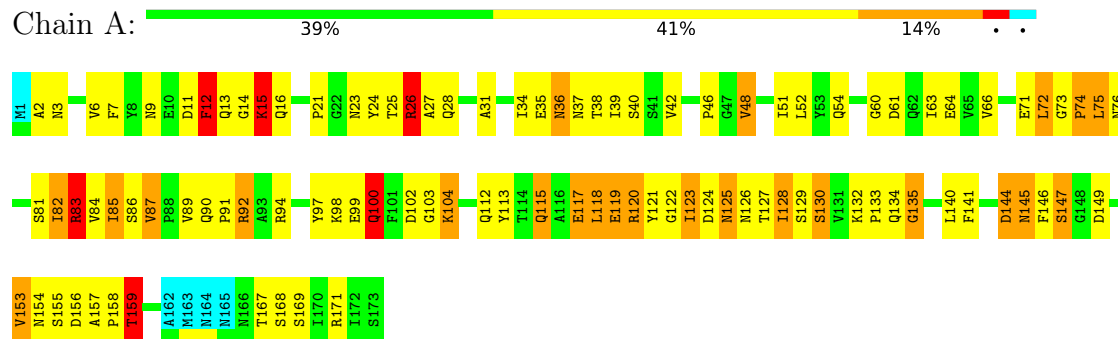
4.2.27 Score per residue for model 27

- Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



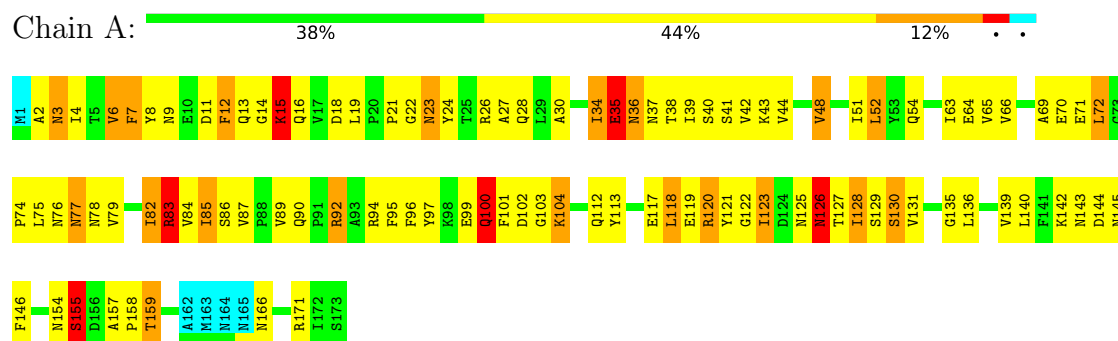
4.2.28 Score per residue for model 28

- Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



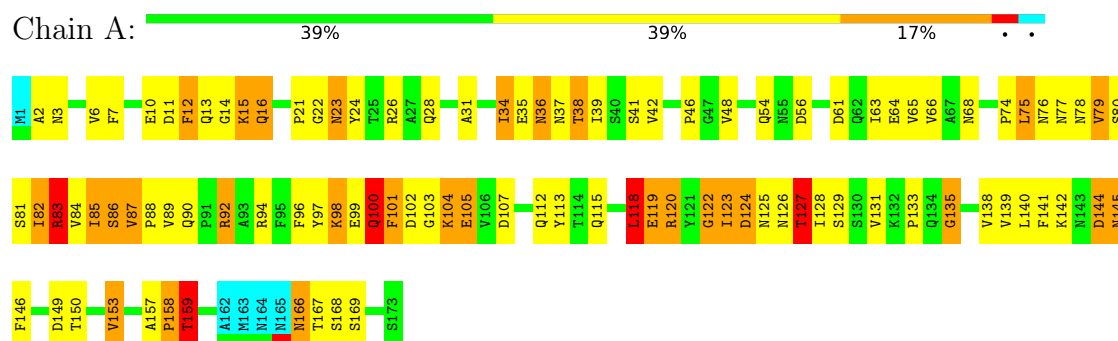
4.2.29 Score per residue for model 29

- Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



4.2.30 Score per residue for model 30

- Molecule 1: DEVELOPMENT-SPECIFIC PROTEIN S



5 Refinement protocol and experimental data overview

Of the ? calculated structures, 30 were deposited, based on the following criterion: ?.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	

No chemical shift data was provided.

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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

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	1.37±0.12	0±1/1314 (0.0± 0.1%)	1.45±0.12	1±1/1790 (0.0± 0.1%)
All	All	1.37	13/39420 (0.0%)	1.46	25/53700 (0.0%)

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	5.5±0.6
All	All	0	165

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	16	GLN	CD-NE2	43.66	2.25	1.33	24	1
1	A	16	GLN	CD-OE1	29.87	1.80	1.23	24	1
1	A	22	GLY	N-CA	5.66	1.50	1.45	27	2
1	A	100	GLN	N-CA	5.54	1.53	1.46	3	6
1	A	111	GLY	N-CA	5.45	1.51	1.44	8	1
1	A	44	VAL	N-CA	5.28	1.50	1.45	17	1
1	A	103	GLY	N-CA	5.04	1.50	1.44	5	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	16	GLN	OE1-CD-NE2	-58.50	64.10	122.60	24	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	16	GLN	CG-CD-NE2	-24.98	78.92	116.40	24	1
1	A	16	GLN	CG-CD-OE1	-14.41	91.97	120.80	24	1
1	A	129	SER	CB-CA-C	-6.74	108.81	116.63	15	1
1	A	36	ASN	CB-CA-C	-6.74	108.81	116.63	8	2
1	A	126	ASN	CB-CA-C	-6.32	109.30	116.63	26	1
1	A	127	THR	CB-CA-C	-5.72	108.99	115.79	16	1
1	A	7	PHE	CA-CB-CG	-5.62	108.18	113.80	17	7
1	A	96	PHE	CA-CB-CG	-5.43	108.37	113.80	9	7
1	A	141	PHE	CA-CB-CG	-5.17	108.64	113.80	16	1
1	A	44	VAL	N-CA-C	5.08	113.03	107.60	8	1
1	A	101	PHE	CA-CB-CG	-5.01	108.79	113.80	8	1

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	83	ARG	Sidechain	29
1	A	120	ARG	Sidechain	29
1	A	26	ARG	Sidechain	27
1	A	171	ARG	Sidechain	27
1	A	92	ARG	Sidechain	27
1	A	94	ARG	Sidechain	25
1	A	16	GLN	Sidechain	1

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	1289	1261	1261	118±14
All	All	38730	37828	37821	3552

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 46.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:GLN:NE2	1:A:101:PHE:CE1	1.43	1.85	26	5
1:A:100:GLN:NE2	1:A:101:PHE:CD1	1.32	1.95	25	5
1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:NE2	1.31	1.87	6	2
1:A:7:PHE:CE2	1:A:16:GLN:NE2	1.30	1.98	10	5
1:A:16:GLN:HE21	1:A:16:GLN:N	1.30	1.25	6	3
1:A:7:PHE:CZ	1:A:16:GLN:NE2	1.29	1.99	10	3
1:A:100:GLN:O	1:A:100:GLN:NE2	1.28	1.66	2	3
1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:HE21	1.27	1.33	6	2
1:A:16:GLN:OE1	1:A:16:GLN:CD	1.23	1.80	24	1
1:A:14:GLY:O	1:A:16:GLN:NE2	1.14	1.79	6	3
1:A:98:LYS:HB3	1:A:100:GLN:OE1	1.13	1.44	19	1
1:A:16:GLN:NE2	1:A:16:GLN:N	1.12	1.96	6	4
1:A:7:PHE:CD2	1:A:16:GLN:NE2	1.10	2.19	18	1
1:A:99:GLU:O	1:A:100:GLN:NE2	1.09	1.86	4	1
1:A:7:PHE:CE2	1:A:16:GLN:HG2	1.08	1.81	11	1
1:A:100:GLN:NE2	1:A:101:PHE:HD1	1.04	1.50	20	3
1:A:5:THR:HG21	1:A:16:GLN:NE2	1.03	1.69	22	1
1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:NE2	1.02	2.07	14	1
1:A:123:ILE:N	1:A:123:ILE:HD13	0.97	1.73	30	15
1:A:42:VAL:HG22	1:A:69:ALA:HB3	0.96	1.37	29	5
1:A:100:GLN:HE21	1:A:100:GLN:HA	0.96	1.20	26	9
1:A:5:THR:CG2	1:A:16:GLN:HE21	0.96	1.72	22	1
1:A:16:GLN:CD	1:A:16:GLN:NE2	0.94	2.24	24	1
1:A:16:GLN:NE2	1:A:16:GLN:H	0.93	1.60	25	3
1:A:5:THR:CG2	1:A:16:GLN:NE2	0.92	2.31	22	1
1:A:7:PHE:CE2	1:A:16:GLN:OE1	0.91	2.24	14	2
1:A:75:LEU:HD23	1:A:75:LEU:H	0.89	1.26	17	19
1:A:100:GLN:N	1:A:100:GLN:NE2	0.89	2.21	1	1
1:A:100:GLN:HE21	1:A:100:GLN:CA	0.88	1.81	26	8
1:A:52:LEU:HD12	1:A:52:LEU:N	0.86	1.84	1	8
1:A:100:GLN:C	1:A:100:GLN:HE21	0.86	1.79	1	1
1:A:100:GLN:CD	1:A:101:PHE:CE1	0.85	2.55	25	5
1:A:34:ILE:HD13	1:A:34:ILE:C	0.85	1.97	30	5
1:A:16:GLN:HE21	1:A:16:GLN:CA	0.85	1.83	6	3
1:A:52:LEU:HD23	1:A:82:ILE:HG23	0.84	1.48	26	2
1:A:7:PHE:CD2	1:A:16:GLN:OE1	0.84	2.31	14	1
1:A:79:VAL:HG12	1:A:80:SER:H	0.84	1.30	15	3
1:A:141:PHE:CD2	1:A:146:PHE:CD1	0.84	2.66	15	1
1:A:23:ASN:H	1:A:23:ASN:HD22	0.83	1.16	18	17
1:A:16:GLN:HE21	1:A:16:GLN:C	0.83	1.81	26	1
1:A:51:ILE:HD13	1:A:83:ARG:HH22	0.82	1.35	20	1
1:A:24:TYR:OH	1:A:29:LEU:HD21	0.81	1.73	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:ASN:N	1:A:23:ASN:HD22	0.81	1.73	19	5
1:A:63:ILE:HD11	1:A:75:LEU:HD21	0.81	1.51	29	5
1:A:25:THR:HG23	1:A:26:ARG:N	0.81	1.90	1	2
1:A:85:ILE:HD12	1:A:85:ILE:N	0.81	1.90	4	3
1:A:85:ILE:HD12	1:A:85:ILE:H	0.80	1.35	4	1
1:A:100:GLN:HE21	1:A:100:GLN:C	0.79	1.84	25	5
1:A:50:ALA:C	1:A:51:ILE:HD12	0.79	2.02	20	1
1:A:7:PHE:CZ	1:A:12:PHE:CE1	0.79	2.70	4	4
1:A:100:GLN:N	1:A:100:GLN:HE21	0.79	1.75	1	1
1:A:83:ARG:NH1	1:A:84:VAL:N	0.78	2.31	24	17
1:A:16:GLN:NE2	1:A:16:GLN:CG	0.78	2.46	24	1
1:A:28:GLN:NE2	1:A:32:LEU:HD21	0.78	1.93	2	1
1:A:83:ARG:HH12	1:A:84:VAL:N	0.78	1.77	4	9
1:A:83:ARG:NH2	1:A:84:VAL:N	0.77	2.32	23	15
1:A:118:LEU:C	1:A:118:LEU:HD23	0.77	2.02	8	29
1:A:100:GLN:NE2	1:A:102:ASP:HB2	0.77	1.95	24	1
1:A:24:TYR:N	1:A:83:ARG:NH2	0.77	2.33	3	2
1:A:23:ASN:H	1:A:23:ASN:ND2	0.77	1.78	18	10
1:A:16:GLN:OE1	1:A:16:GLN:NE2	0.76	2.18	24	1
1:A:83:ARG:NH1	1:A:84:VAL:CA	0.76	2.49	26	7
1:A:24:TYR:N	1:A:83:ARG:HH21	0.76	1.78	27	2
1:A:100:GLN:HE22	1:A:101:PHE:HE1	0.76	0.81	26	2
1:A:7:PHE:CE2	1:A:16:GLN:CD	0.75	2.64	18	2
1:A:75:LEU:HD23	1:A:75:LEU:N	0.75	1.97	10	17
1:A:100:GLN:NE2	1:A:100:GLN:HA	0.75	1.97	26	3
1:A:23:ASN:CB	1:A:83:ARG:HE	0.75	1.94	27	3
1:A:14:GLY:C	1:A:16:GLN:HE22	0.74	1.89	6	2
1:A:37:ASN:ND2	1:A:37:ASN:N	0.74	2.33	2	4
1:A:52:LEU:HD12	1:A:52:LEU:H	0.74	1.39	8	1
1:A:83:ARG:HH22	1:A:84:VAL:N	0.74	1.81	13	13
1:A:79:VAL:HG12	1:A:80:SER:N	0.74	1.97	15	2
1:A:25:THR:HG23	1:A:27:ALA:H	0.73	1.41	7	3
1:A:145:ASN:C	1:A:146:PHE:CG	0.73	2.66	24	28
1:A:52:LEU:N	1:A:52:LEU:CD1	0.73	2.51	29	8
1:A:63:ILE:HG22	1:A:64:GLU:N	0.73	1.98	26	17
1:A:100:GLN:NE2	1:A:100:GLN:C	0.73	2.47	25	5
1:A:106:VAL:HG21	1:A:122:GLY:O	0.73	1.83	1	12
1:A:24:TYR:H	1:A:83:ARG:NH2	0.73	1.82	3	2
1:A:100:GLN:C	1:A:101:PHE:CD1	0.73	2.67	7	21
1:A:35:GLU:H	1:A:38:THR:HG21	0.73	1.42	13	4
1:A:112:GLN:C	1:A:113:TYR:CD1	0.73	2.67	12	28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:ASN:ND2	1:A:36:ASN:C	0.72	2.46	3	2
1:A:83:ARG:HH12	1:A:84:VAL:H	0.72	1.25	16	6
1:A:37:ASN:N	1:A:37:ASN:HD22	0.72	1.77	2	1
1:A:115:GLN:H	1:A:115:GLN:CD	0.72	1.92	24	3
1:A:24:TYR:OH	1:A:82:ILE:HD12	0.72	1.84	1	5
1:A:83:ARG:HH22	1:A:84:VAL:H	0.72	1.25	22	6
1:A:38:THR:H	1:A:79:VAL:CG2	0.72	1.97	3	1
1:A:57:GLY:C	1:A:58:PHE:CG	0.72	2.67	25	8
1:A:145:ASN:C	1:A:146:PHE:CD1	0.72	2.68	8	26
1:A:52:LEU:HD23	1:A:53:TYR:H	0.72	1.45	17	2
1:A:23:ASN:HD22	1:A:23:ASN:N	0.71	1.79	18	10
1:A:3:ASN:ND2	1:A:3:ASN:N	0.71	2.37	6	4
1:A:11:ASP:C	1:A:12:PHE:CD1	0.71	2.69	5	10
1:A:39:ILE:HD12	1:A:79:VAL:HG11	0.71	1.61	26	4
1:A:68:ASN:ND2	1:A:106:VAL:HG13	0.71	2.00	15	1
1:A:24:TYR:CD1	1:A:24:TYR:C	0.71	2.69	3	4
1:A:123:ILE:N	1:A:123:ILE:CD1	0.71	2.48	30	3
1:A:38:THR:O	1:A:40:SER:N	0.70	2.24	14	12
1:A:83:ARG:NH2	1:A:83:ARG:C	0.70	2.49	16	8
1:A:83:ARG:NH1	1:A:83:ARG:C	0.70	2.49	11	17
1:A:100:GLN:OE1	1:A:101:PHE:CE1	0.70	2.45	25	3
1:A:75:LEU:H	1:A:75:LEU:CD2	0.70	1.99	10	14
1:A:36:ASN:O	1:A:38:THR:HG23	0.70	1.87	29	8
1:A:115:GLN:NE2	1:A:119:GLU:CD	0.70	2.50	6	1
1:A:83:ARG:NH1	1:A:84:VAL:C	0.70	2.50	26	10
1:A:16:GLN:O	1:A:16:GLN:NE2	0.70	2.25	26	1
1:A:111:GLY:C	1:A:112:GLN:NE2	0.70	2.50	1	2
1:A:68:ASN:HD21	1:A:106:VAL:HG13	0.69	1.46	15	2
1:A:11:ASP:C	1:A:12:PHE:CG	0.69	2.69	10	11
1:A:82:ILE:C	1:A:83:ARG:NH1	0.69	2.50	3	2
1:A:142:LYS:NZ	1:A:143:ASN:ND2	0.69	2.41	29	1
1:A:119:GLU:H	1:A:119:GLU:CD	0.69	1.95	7	13
1:A:99:GLU:C	1:A:100:GLN:HG2	0.69	2.13	21	2
1:A:7:PHE:CZ	1:A:12:PHE:CZ	0.69	2.80	17	8
1:A:63:ILE:HD11	1:A:75:LEU:HD11	0.69	1.62	23	7
1:A:83:ARG:HH11	1:A:84:VAL:C	0.69	1.96	9	4
1:A:23:ASN:N	1:A:23:ASN:ND2	0.69	2.37	14	7
1:A:145:ASN:H	1:A:145:ASN:HD22	0.69	1.31	15	2
1:A:83:ARG:HH22	1:A:84:VAL:CA	0.68	2.00	5	5
1:A:160:LEU:C	1:A:160:LEU:HD13	0.68	2.12	17	3
1:A:126:ASN:O	1:A:127:THR:HG22	0.68	1.88	20	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:ARG:NH1	1:A:84:VAL:H	0.68	1.85	16	6
1:A:16:GLN:OE1	1:A:16:GLN:CG	0.68	2.40	24	1
1:A:83:ARG:HH12	1:A:84:VAL:C	0.68	1.96	11	5
1:A:7:PHE:CD2	1:A:16:GLN:CD	0.68	2.71	14	2
1:A:100:GLN:HA	1:A:100:GLN:NE2	0.68	2.04	16	5
1:A:83:ARG:HH12	1:A:84:VAL:CA	0.68	2.01	11	8
1:A:36:ASN:CG	1:A:37:ASN:N	0.68	2.48	21	1
1:A:98:LYS:O	1:A:100:GLN:NE2	0.68	2.26	1	1
1:A:36:ASN:C	1:A:37:ASN:ND2	0.68	2.52	2	1
1:A:78:ASN:ND2	1:A:78:ASN:N	0.68	2.40	17	2
1:A:158:PRO:C	1:A:159:THR:HG22	0.67	2.13	4	3
1:A:144:ASP:C	1:A:145:ASN:ND2	0.67	2.53	13	1
1:A:39:ILE:HG22	1:A:39:ILE:O	0.67	1.86	20	1
1:A:100:GLN:HG2	1:A:102:ASP:OD1	0.67	1.89	19	1
1:A:38:THR:OG1	1:A:39:ILE:N	0.67	2.28	8	6
1:A:118:LEU:CD2	1:A:118:LEU:C	0.66	2.68	30	22
1:A:62:GLN:N	1:A:62:GLN:NE2	0.66	2.43	14	1
1:A:62:GLN:H	1:A:62:GLN:CD	0.66	1.98	11	5
1:A:100:GLN:CA	1:A:100:GLN:NE2	0.66	2.56	16	3
1:A:83:ARG:NH1	1:A:85:ILE:CG1	0.66	2.59	22	9
1:A:100:GLN:NE2	1:A:100:GLN:CA	0.66	2.56	20	3
1:A:99:GLU:C	1:A:100:GLN:HE21	0.66	1.97	4	1
1:A:100:GLN:HG2	1:A:102:ASP:CG	0.66	2.16	10	2
1:A:94:ARG:C	1:A:95:PHE:CD1	0.66	2.73	3	4
1:A:125:ASN:HD22	1:A:126:ASN:N	0.66	1.89	23	2
1:A:97:TYR:N	1:A:97:TYR:CD1	0.66	2.63	18	4
1:A:58:PHE:H	1:A:81:SER:CB	0.65	2.03	3	4
1:A:22:GLY:C	1:A:23:ASN:HD22	0.65	1.99	6	3
1:A:127:THR:HG23	1:A:128:ILE:N	0.65	2.07	13	5
1:A:7:PHE:CE2	1:A:16:GLN:CG	0.65	2.72	11	2
1:A:146:PHE:N	1:A:146:PHE:CD1	0.65	2.65	24	2
1:A:123:ILE:HD13	1:A:123:ILE:H	0.65	1.51	30	1
1:A:23:ASN:ND2	1:A:23:ASN:H	0.65	1.88	17	12
1:A:42:VAL:CG2	1:A:69:ALA:HB3	0.65	2.20	11	3
1:A:83:ARG:NH2	1:A:84:VAL:CA	0.64	2.61	19	3
1:A:85:ILE:N	1:A:85:ILE:CD1	0.64	2.57	4	1
1:A:145:ASN:ND2	1:A:146:PHE:CZ	0.64	2.65	9	2
1:A:83:ARG:NH1	1:A:85:ILE:HD11	0.64	2.06	30	1
1:A:25:THR:CG2	1:A:26:ARG:N	0.64	2.60	1	2
1:A:37:ASN:HD22	1:A:37:ASN:N	0.64	1.90	12	4
1:A:100:GLN:NE2	1:A:102:ASP:OD2	0.64	2.30	23	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:125:ASN:HD22	1:A:125:ASN:C	0.64	1.99	23	1
1:A:42:VAL:HG22	1:A:69:ALA:CB	0.64	2.22	8	4
1:A:40:SER:OG	1:A:41:SER:N	0.64	2.30	2	1
1:A:36:ASN:HD22	1:A:78:ASN:ND2	0.64	1.91	9	1
1:A:34:ILE:O	1:A:34:ILE:HD13	0.64	1.91	18	1
1:A:96:PHE:CD1	1:A:101:PHE:CE1	0.64	2.86	23	1
1:A:16:GLN:CD	1:A:16:GLN:H	0.64	2.00	24	1
1:A:36:ASN:HD22	1:A:37:ASN:ND2	0.64	1.90	16	2
1:A:63:ILE:CG2	1:A:64:GLU:N	0.64	2.61	7	15
1:A:127:THR:OG1	1:A:128:ILE:N	0.64	2.29	29	7
1:A:35:GLU:CG	1:A:36:ASN:N	0.63	2.62	2	1
1:A:118:LEU:C	1:A:118:LEU:CD2	0.63	2.70	13	8
1:A:13:GLN:CD	1:A:14:GLY:H	0.63	2.02	4	2
1:A:74:PRO:C	1:A:75:LEU:HD23	0.63	2.19	6	3
1:A:68:ASN:ND2	1:A:107:ASP:OD1	0.63	2.32	5	2
1:A:79:VAL:HG13	1:A:80:SER:N	0.63	2.09	14	2
1:A:36:ASN:ND2	1:A:37:ASN:HD21	0.63	1.91	16	1
1:A:146:PHE:CD1	1:A:146:PHE:N	0.63	2.67	3	24
1:A:76:ASN:H	1:A:76:ASN:HD22	0.63	1.34	13	3
1:A:36:ASN:ND2	1:A:37:ASN:ND2	0.63	2.46	16	1
1:A:34:ILE:HD13	1:A:35:GLU:N	0.63	2.09	30	1
1:A:51:ILE:HG23	1:A:63:ILE:O	0.63	1.92	26	13
1:A:34:ILE:C	1:A:34:ILE:CD1	0.63	2.72	26	4
1:A:112:GLN:NE2	1:A:146:PHE:CG	0.63	2.67	12	1
1:A:48:VAL:O	1:A:66:VAL:HG13	0.62	1.94	29	7
1:A:95:PHE:CD1	1:A:95:PHE:N	0.62	2.67	3	15
1:A:83:ARG:HE	1:A:85:ILE:HD11	0.62	1.53	19	1
1:A:159:THR:O	1:A:159:THR:HG23	0.62	1.94	25	5
1:A:115:GLN:HE22	1:A:119:GLU:CD	0.62	2.02	6	1
1:A:97:TYR:CE2	1:A:127:THR:HG21	0.62	2.28	5	1
1:A:12:PHE:C	1:A:12:PHE:CD1	0.62	2.78	28	2
1:A:83:ARG:HH11	1:A:85:ILE:HD11	0.62	1.54	30	1
1:A:4:ILE:HG22	1:A:44:VAL:HG22	0.62	1.70	27	4
1:A:83:ARG:CA	1:A:83:ARG:CZ	0.62	2.78	10	7
1:A:2:ALA:HB3	1:A:48:VAL:HG11	0.62	1.72	25	5
1:A:127:THR:HG23	1:A:128:ILE:HG13	0.62	1.71	2	1
1:A:15:LYS:C	1:A:16:GLN:HE22	0.62	1.96	6	1
1:A:100:GLN:NE2	1:A:101:PHE:HE1	0.62	1.85	25	2
1:A:57:GLY:C	1:A:58:PHE:CD1	0.62	2.77	25	3
1:A:96:PHE:CE1	1:A:101:PHE:CE1	0.61	2.87	23	1
1:A:10:GLU:CG	1:A:11:ASP:N	0.61	2.63	5	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:GLU:O	1:A:100:GLN:CB	0.61	2.49	25	19
1:A:17:VAL:CG1	1:A:18:ASP:N	0.61	2.63	25	2
1:A:129:SER:O	1:A:131:VAL:HG23	0.61	1.94	19	2
1:A:36:ASN:HD22	1:A:37:ASN:HD22	0.61	1.36	27	1
1:A:28:GLN:HE21	1:A:32:LEU:HD21	0.61	1.53	2	1
1:A:63:ILE:CD1	1:A:75:LEU:HD21	0.61	2.25	29	2
1:A:64:GLU:N	1:A:64:GLU:CD	0.61	2.58	21	2
1:A:96:PHE:CZ	1:A:105:GLU:CD	0.61	2.79	21	1
1:A:101:PHE:O	1:A:101:PHE:CD1	0.61	2.54	4	2
1:A:34:ILE:O	1:A:38:THR:HG21	0.61	1.96	18	1
1:A:35:GLU:C	1:A:36:ASN:CG	0.61	2.69	14	7
1:A:115:GLN:CD	1:A:115:GLN:N	0.61	2.57	24	3
1:A:106:VAL:HG12	1:A:107:ASP:N	0.61	2.10	14	4
1:A:154:ASN:HD22	1:A:154:ASN:N	0.61	1.93	3	4
1:A:83:ARG:NH2	1:A:84:VAL:C	0.61	2.59	5	2
1:A:62:GLN:NE2	1:A:62:GLN:H	0.61	1.93	14	1
1:A:10:GLU:CG	1:A:11:ASP:H	0.60	2.09	5	3
1:A:83:ARG:HH21	1:A:85:ILE:HD11	0.60	1.56	25	1
1:A:142:LYS:HZ2	1:A:143:ASN:ND2	0.60	1.93	29	1
1:A:155:SER:OG	1:A:156:ASP:N	0.60	2.33	3	12
1:A:15:LYS:CB	1:A:15:LYS:NZ	0.60	2.64	22	2
1:A:126:ASN:ND2	1:A:126:ASN:N	0.60	2.47	17	1
1:A:160:LEU:HD13	1:A:160:LEU:O	0.60	1.95	17	1
1:A:36:ASN:C	1:A:36:ASN:HD22	0.60	2.04	3	1
1:A:97:TYR:CE2	1:A:127:THR:OG1	0.60	2.54	12	1
1:A:26:ARG:HH11	1:A:30:ALA:HB2	0.60	1.56	23	1
1:A:83:ARG:NH1	1:A:85:ILE:CD1	0.60	2.64	30	1
1:A:74:PRO:C	1:A:76:ASN:H	0.60	2.05	19	21
1:A:113:TYR:CD1	1:A:113:TYR:N	0.60	2.69	1	26
1:A:24:TYR:CE2	1:A:29:LEU:CD2	0.60	2.84	13	1
1:A:24:TYR:OH	1:A:29:LEU:CD2	0.60	2.50	17	1
1:A:117:GLU:CG	1:A:118:LEU:N	0.60	2.65	4	16
1:A:38:THR:C	1:A:40:SER:H	0.60	2.05	20	3
1:A:63:ILE:HG22	1:A:64:GLU:H	0.60	1.57	29	8
1:A:83:ARG:CZ	1:A:84:VAL:N	0.60	2.65	16	5
1:A:125:ASN:C	1:A:126:ASN:CG	0.60	2.69	29	3
1:A:63:ILE:CG1	1:A:75:LEU:HD21	0.60	2.26	6	1
1:A:114:THR:OG1	1:A:115:GLN:N	0.60	2.31	5	3
1:A:15:LYS:O	1:A:16:GLN:NE2	0.60	2.30	6	1
1:A:52:LEU:HD23	1:A:53:TYR:N	0.60	2.12	17	2
1:A:36:ASN:ND2	1:A:78:ASN:ND2	0.60	2.48	25	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:106:VAL:CG1	1:A:107:ASP:N	0.59	2.65	14	8
1:A:37:ASN:H	1:A:37:ASN:ND2	0.59	1.94	20	2
1:A:27:ALA:O	1:A:30:ALA:HB3	0.59	1.97	3	9
1:A:126:ASN:CG	1:A:127:THR:H	0.59	2.05	11	3
1:A:3:ASN:N	1:A:3:ASN:HD22	0.59	1.96	6	2
1:A:10:GLU:N	1:A:40:SER:OG	0.59	2.35	26	7
1:A:76:ASN:HD22	1:A:76:ASN:N	0.59	1.94	13	2
1:A:100:GLN:C	1:A:102:ASP:N	0.59	2.59	4	5
1:A:62:GLN:NE2	1:A:62:GLN:C	0.59	2.61	9	2
1:A:97:TYR:OH	1:A:123:ILE:HG22	0.59	1.98	6	1
1:A:83:ARG:NH2	1:A:85:ILE:CG1	0.59	2.66	12	4
1:A:13:GLN:NE2	1:A:14:GLY:N	0.59	2.51	4	1
1:A:83:ARG:HH21	1:A:84:VAL:C	0.59	2.06	19	1
1:A:105:GLU:CD	1:A:105:GLU:N	0.59	2.61	5	6
1:A:122:GLY:C	1:A:123:ILE:HD13	0.59	2.23	25	4
1:A:101:PHE:CG	1:A:101:PHE:O	0.59	2.56	13	2
1:A:11:ASP:O	1:A:12:PHE:CG	0.59	2.55	6	11
1:A:129:SER:OG	1:A:130:SER:N	0.59	2.31	9	4
1:A:126:ASN:C	1:A:127:THR:HG23	0.59	2.23	29	1
1:A:159:THR:HG23	1:A:160:LEU:H	0.59	1.57	4	5
1:A:144:ASP:CG	1:A:145:ASN:H	0.59	2.06	9	3
1:A:95:PHE:CD2	1:A:131:VAL:HG13	0.59	2.33	29	5
1:A:35:GLU:O	1:A:38:THR:HG22	0.59	1.98	20	1
1:A:125:ASN:ND2	1:A:126:ASN:N	0.59	2.50	23	1
1:A:16:GLN:C	1:A:16:GLN:NE2	0.59	2.59	26	1
1:A:99:GLU:OE2	1:A:100:GLN:NE2	0.58	2.36	4	1
1:A:133:PRO:C	1:A:135:GLY:H	0.58	2.05	8	3
1:A:36:ASN:HD22	1:A:37:ASN:N	0.58	1.96	17	1
1:A:7:PHE:CE1	1:A:12:PHE:CE1	0.58	2.91	2	3
1:A:11:ASP:C	1:A:13:GLN:H	0.58	2.06	26	12
1:A:23:ASN:CB	1:A:83:ARG:NE	0.58	2.67	27	3
1:A:37:ASN:N	1:A:37:ASN:ND2	0.58	2.48	4	3
1:A:83:ARG:HH22	1:A:84:VAL:C	0.58	2.05	16	7
1:A:13:GLN:CG	1:A:14:GLY:N	0.58	2.67	28	4
1:A:99:GLU:H	1:A:99:GLU:CD	0.58	2.03	5	1
1:A:36:ASN:ND2	1:A:36:ASN:N	0.58	2.50	19	5
1:A:159:THR:OG1	1:A:160:LEU:N	0.58	2.31	20	3
1:A:7:PHE:CD2	1:A:16:GLN:HG2	0.58	2.31	11	1
1:A:36:ASN:HD22	1:A:37:ASN:H	0.58	1.41	17	1
1:A:168:SER:OG	1:A:169:SER:N	0.58	2.36	26	3
1:A:87:VAL:HG22	1:A:88:PRO:HD2	0.58	1.75	10	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:ASN:HD22	1:A:68:ASN:H	0.58	1.41	17	1
1:A:133:PRO:O	1:A:135:GLY:N	0.58	2.36	8	3
1:A:62:GLN:C	1:A:62:GLN:HE21	0.58	2.06	9	1
1:A:141:PHE:N	1:A:141:PHE:CD1	0.58	2.71	24	11
1:A:101:PHE:H	1:A:130:SER:CB	0.58	2.12	20	1
1:A:78:ASN:HD22	1:A:79:VAL:N	0.58	1.97	25	4
1:A:25:THR:CG2	1:A:58:PHE:CE2	0.58	2.87	26	2
1:A:15:LYS:CA	1:A:16:GLN:NE2	0.58	2.66	6	2
1:A:10:GLU:C	1:A:11:ASP:CG	0.57	2.69	2	4
1:A:124:ASP:CG	1:A:125:ASN:H	0.57	2.06	9	11
1:A:105:GLU:H	1:A:105:GLU:CD	0.57	2.07	26	4
1:A:124:ASP:CG	1:A:125:ASN:N	0.57	2.61	9	6
1:A:94:ARG:NE	1:A:105:GLU:CD	0.57	2.62	8	1
1:A:130:SER:OG	1:A:158:PRO:C	0.57	2.46	17	3
1:A:37:ASN:H	1:A:37:ASN:HD22	0.57	1.42	21	4
1:A:4:ILE:HG22	1:A:44:VAL:HG13	0.57	1.75	18	1
1:A:126:ASN:ND2	1:A:166:ASN:H	0.57	1.98	27	1
1:A:83:ARG:NH1	1:A:83:ARG:N	0.57	2.53	3	1
1:A:100:GLN:OE1	1:A:102:ASP:OD2	0.57	2.21	10	1
1:A:26:ARG:O	1:A:30:ALA:HB2	0.57	2.00	20	1
1:A:101:PHE:CD2	1:A:101:PHE:O	0.57	2.58	6	13
1:A:83:ARG:NH2	1:A:84:VAL:H	0.57	1.94	22	3
1:A:96:PHE:CE1	1:A:101:PHE:CZ	0.57	2.92	23	1
1:A:53:TYR:CZ	1:A:62:GLN:NE2	0.57	2.73	12	2
1:A:145:ASN:O	1:A:146:PHE:CG	0.57	2.58	7	23
1:A:23:ASN:CG	1:A:83:ARG:HE	0.57	2.08	3	1
1:A:102:ASP:CG	1:A:103:GLY:N	0.57	2.62	27	5
1:A:54:GLN:CD	1:A:55:ASN:N	0.57	2.62	14	2
1:A:23:ASN:CA	1:A:83:ARG:HH11	0.57	2.13	10	2
1:A:83:ARG:C	1:A:83:ARG:CZ	0.57	2.78	16	4
1:A:106:VAL:HG13	1:A:107:ASP:N	0.57	2.14	13	1
1:A:123:ILE:C	1:A:124:ASP:CG	0.57	2.73	26	2
1:A:119:GLU:OE1	1:A:120:ARG:NH1	0.57	2.37	19	1
1:A:115:GLN:NE2	1:A:144:ASP:CG	0.57	2.62	30	1
1:A:22:GLY:C	1:A:83:ARG:NH2	0.57	2.62	30	4
1:A:9:ASN:C	1:A:40:SER:OG	0.57	2.48	23	12
1:A:102:ASP:OD1	1:A:102:ASP:N	0.57	2.38	3	3
1:A:159:THR:O	1:A:160:LEU:HD12	0.57	1.99	2	1
1:A:151:LEU:C	1:A:151:LEU:HD13	0.57	2.25	15	3
1:A:97:TYR:CE2	1:A:104:LYS:O	0.56	2.57	18	1
1:A:117:GLU:O	1:A:121:TYR:N	0.56	2.38	28	24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:144:ASP:O	1:A:146:PHE:N	0.56	2.37	16	25
1:A:36:ASN:C	1:A:37:ASN:CG	0.56	2.73	2	3
1:A:115:GLN:CD	1:A:144:ASP:CG	0.56	2.72	30	1
1:A:58:PHE:CD1	1:A:58:PHE:N	0.56	2.72	25	5
1:A:154:ASN:N	1:A:154:ASN:ND2	0.56	2.53	3	4
1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASN:ND2	0.56	2.64	8	4
1:A:127:THR:HG23	1:A:128:ILE:H	0.56	1.60	8	3
1:A:130:SER:H	1:A:160:LEU:H	0.56	1.42	17	1
1:A:131:VAL:HG12	1:A:157:ALA:HB3	0.56	1.78	17	1
1:A:100:GLN:HE22	1:A:101:PHE:HD1	0.56	1.35	20	1
1:A:12:PHE:CD2	1:A:12:PHE:O	0.56	2.58	24	1
1:A:126:ASN:O	1:A:127:THR:HG23	0.56	2.00	30	1
1:A:101:PHE:C	1:A:101:PHE:CD1	0.56	2.81	13	1
1:A:83:ARG:HE	1:A:85:ILE:CD1	0.56	2.14	19	1
1:A:23:ASN:C	1:A:83:ARG:HH21	0.56	2.08	3	2
1:A:137:ALA:N	1:A:173:SER:O	0.56	2.39	20	3
1:A:24:TYR:N	1:A:24:TYR:CD1	0.56	2.73	11	7
1:A:36:ASN:O	1:A:38:THR:HG22	0.56	2.00	8	1
1:A:76:ASN:CG	1:A:77:ASN:H	0.56	2.09	8	1
1:A:22:GLY:C	1:A:83:ARG:NH1	0.56	2.64	25	4
1:A:142:LYS:O	1:A:143:ASN:CB	0.56	2.54	15	1
1:A:100:GLN:O	1:A:101:PHE:CD1	0.56	2.58	17	14
1:A:92:ARG:N	1:A:92:ARG:CD	0.56	2.69	3	2
1:A:10:GLU:C	1:A:11:ASP:OD1	0.56	2.49	16	2
1:A:141:PHE:CD2	1:A:146:PHE:CB	0.56	2.89	9	6
1:A:130:SER:OG	1:A:159:THR:N	0.56	2.39	20	1
1:A:34:ILE:CG1	1:A:35:GLU:N	0.56	2.68	3	2
1:A:64:GLU:OE1	1:A:64:GLU:N	0.56	2.37	3	2
1:A:11:ASP:O	1:A:12:PHE:CD1	0.56	2.58	24	9
1:A:11:ASP:C	1:A:12:PHE:CD2	0.56	2.84	6	1
1:A:83:ARG:NE	1:A:83:ARG:HA	0.56	2.16	6	2
1:A:22:GLY:O	1:A:83:ARG:NH1	0.56	2.38	12	6
1:A:100:GLN:O	1:A:101:PHE:CG	0.56	2.59	1	6
1:A:38:THR:O	1:A:39:ILE:C	0.56	2.48	9	13
1:A:129:SER:O	1:A:160:LEU:N	0.56	2.39	8	3
1:A:16:GLN:HE21	1:A:16:GLN:HA	0.56	1.61	18	1
1:A:154:ASN:C	1:A:154:ASN:HD22	0.56	2.08	1	1
1:A:22:GLY:C	1:A:23:ASN:ND2	0.56	2.64	6	1
1:A:89:VAL:CG2	1:A:90:GLN:N	0.56	2.68	14	6
1:A:112:GLN:NE2	1:A:146:PHE:CD1	0.56	2.73	12	1
1:A:83:ARG:CZ	1:A:83:ARG:CB	0.56	2.84	16	19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:128:ILE:O	1:A:129:SER:CB	0.56	2.54	17	9
1:A:75:LEU:N	1:A:75:LEU:CD2	0.56	2.67	4	9
1:A:12:PHE:CG	1:A:12:PHE:O	0.56	2.58	25	5
1:A:62:GLN:CD	1:A:62:GLN:C	0.56	2.73	16	3
1:A:100:GLN:NE2	1:A:100:GLN:O	0.56	2.39	16	2
1:A:119:GLU:N	1:A:119:GLU:CD	0.56	2.64	26	1
1:A:126:ASN:OD1	1:A:127:THR:N	0.55	2.40	3	2
1:A:120:ARG:CD	1:A:120:ARG:N	0.55	2.69	5	13
1:A:11:ASP:O	1:A:13:GLN:N	0.55	2.39	6	17
1:A:79:VAL:CG1	1:A:80:SER:H	0.55	2.10	15	2
1:A:100:GLN:O	1:A:102:ASP:N	0.55	2.39	25	10
1:A:100:GLN:C	1:A:102:ASP:H	0.55	2.10	4	1
1:A:106:VAL:HG11	1:A:122:GLY:O	0.55	2.01	17	3
1:A:99:GLU:CD	1:A:99:GLU:N	0.55	2.65	5	1
1:A:56:ASP:CG	1:A:57:GLY:H	0.55	2.10	8	1
1:A:92:ARG:HH11	1:A:107:ASP:CB	0.55	2.15	26	1
1:A:106:VAL:HG11	1:A:122:GLY:C	0.55	2.26	17	3
1:A:76:ASN:ND2	1:A:76:ASN:C	0.55	2.62	24	4
1:A:70:GLU:CD	1:A:70:GLU:C	0.55	2.69	29	1
1:A:105:GLU:CD	1:A:105:GLU:C	0.55	2.74	13	7
1:A:154:ASN:HD22	1:A:154:ASN:H	0.55	1.42	3	1
1:A:83:ARG:CZ	1:A:85:ILE:CG1	0.55	2.84	17	3
1:A:117:GLU:O	1:A:118:LEU:C	0.55	2.49	14	28
1:A:61:ASP:OD2	1:A:75:LEU:HD22	0.55	2.02	5	1
1:A:83:ARG:HB2	1:A:83:ARG:CZ	0.55	2.32	6	1
1:A:124:ASP:OD2	1:A:125:ASN:ND2	0.55	2.40	13	3
1:A:154:ASN:C	1:A:155:SER:OG	0.55	2.50	29	4
1:A:23:ASN:HD22	1:A:23:ASN:H	0.55	1.42	20	1
1:A:57:GLY:O	1:A:58:PHE:CD2	0.55	2.60	6	6
1:A:144:ASP:N	1:A:144:ASP:OD1	0.55	2.35	14	2
1:A:24:TYR:CE2	1:A:82:ILE:HD12	0.55	2.37	30	7
1:A:66:VAL:HG12	1:A:92:ARG:NH2	0.55	2.17	23	1
1:A:100:GLN:C	1:A:101:PHE:CG	0.55	2.85	15	5
1:A:36:ASN:C	1:A:38:THR:H	0.55	2.09	12	6
1:A:36:ASN:ND2	1:A:37:ASN:H	0.55	1.99	17	1
1:A:132:LYS:NZ	1:A:156:ASP:OD2	0.55	2.40	28	1
1:A:74:PRO:O	1:A:76:ASN:N	0.55	2.40	6	9
1:A:76:ASN:CG	1:A:77:ASN:N	0.55	2.65	8	1
1:A:63:ILE:HD11	1:A:75:LEU:CD2	0.55	2.30	29	2
1:A:157:ALA:C	1:A:159:THR:H	0.55	2.10	1	24
1:A:11:ASP:N	1:A:11:ASP:OD1	0.55	2.39	2	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:119:GLU:CD	1:A:120:ARG:HH11	0.55	2.10	14	1
1:A:53:TYR:CD2	1:A:58:PHE:C	0.54	2.85	2	1
1:A:2:ALA:CB	1:A:48:VAL:HG11	0.54	2.32	27	11
1:A:54:GLN:HE21	1:A:55:ASN:ND2	0.54	1.99	1	1
1:A:99:GLU:C	1:A:100:GLN:CG	0.54	2.78	1	4
1:A:126:ASN:HD22	1:A:166:ASN:HD22	0.54	1.45	6	1
1:A:126:ASN:HD22	1:A:127:THR:N	0.54	2.01	8	1
1:A:34:ILE:HG22	1:A:35:GLU:H	0.54	1.63	9	1
1:A:92:ARG:NH1	1:A:134:GLN:HE22	0.54	1.99	14	1
1:A:7:PHE:CD2	1:A:12:PHE:O	0.54	2.61	3	8
1:A:125:ASN:O	1:A:126:ASN:ND2	0.54	2.40	3	1
1:A:139:VAL:C	1:A:140:LEU:HD12	0.54	2.26	24	9
1:A:80:SER:OG	1:A:81:SER:N	0.54	2.40	5	2
1:A:89:VAL:HG22	1:A:90:GLN:N	0.54	2.16	30	6
1:A:96:PHE:CE2	1:A:101:PHE:O	0.54	2.61	8	1
1:A:126:ASN:HD22	1:A:126:ASN:C	0.54	2.10	13	2
1:A:151:LEU:C	1:A:151:LEU:HD23	0.54	2.28	5	7
1:A:126:ASN:C	1:A:127:THR:HG22	0.54	2.27	17	3
1:A:90:GLN:O	1:A:92:ARG:NE	0.54	2.41	14	2
1:A:9:ASN:HD22	1:A:13:GLN:HE22	0.54	1.45	4	1
1:A:115:GLN:CD	1:A:115:GLN:C	0.54	2.75	18	3
1:A:78:ASN:ND2	1:A:79:VAL:N	0.54	2.56	25	2
1:A:140:LEU:HD12	1:A:140:LEU:N	0.54	2.18	8	10
1:A:159:THR:O	1:A:161:GLY:N	0.54	2.41	18	4
1:A:36:ASN:CG	1:A:36:ASN:O	0.54	2.51	18	1
1:A:9:ASN:HD22	1:A:13:GLN:NE2	0.54	2.01	4	1
1:A:63:ILE:HG13	1:A:75:LEU:HD11	0.54	1.79	4	3
1:A:78:ASN:ND2	1:A:78:ASN:C	0.54	2.65	29	4
1:A:24:TYR:CE1	1:A:29:LEU:HD21	0.54	2.38	15	1
1:A:145:ASN:O	1:A:146:PHE:CD2	0.54	2.60	17	18
1:A:145:ASN:ND2	1:A:147:SER:CB	0.54	2.71	14	4
1:A:112:GLN:OE1	1:A:146:PHE:CE1	0.54	2.60	3	1
1:A:64:GLU:OE2	1:A:65:VAL:N	0.54	2.41	29	2
1:A:144:ASP:CG	1:A:145:ASN:N	0.54	2.64	9	4
1:A:77:ASN:ND2	1:A:77:ASN:N	0.54	2.53	11	2
1:A:119:GLU:OE2	1:A:120:ARG:CZ	0.54	2.56	28	1
1:A:105:GLU:CD	1:A:105:GLU:H	0.53	2.11	14	3
1:A:35:GLU:O	1:A:38:THR:HG23	0.53	2.03	12	3
1:A:7:PHE:CE2	1:A:12:PHE:O	0.53	2.61	20	2
1:A:10:GLU:O	1:A:11:ASP:CB	0.53	2.56	15	6
1:A:64:GLU:N	1:A:64:GLU:OE1	0.53	2.41	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:ASN:HD22	1:A:77:ASN:N	0.53	2.01	24	2
1:A:25:THR:OG1	1:A:26:ARG:N	0.53	2.41	28	1
1:A:35:GLU:O	1:A:36:ASN:CB	0.53	2.55	10	18
1:A:51:ILE:HD12	1:A:83:ARG:HH21	0.53	1.63	7	2
1:A:62:GLN:O	1:A:62:GLN:NE2	0.53	2.42	19	1
1:A:99:GLU:N	1:A:129:SER:OG	0.53	2.41	23	1
1:A:53:TYR:OH	1:A:62:GLN:NE2	0.53	2.41	12	2
1:A:103:GLY:O	1:A:104:LYS:C	0.53	2.50	1	23
1:A:128:ILE:C	1:A:129:SER:OG	0.53	2.50	21	5
1:A:147:SER:OG	1:A:148:GLY:N	0.53	2.40	27	6
1:A:133:PRO:C	1:A:135:GLY:N	0.53	2.66	8	7
1:A:166:ASN:N	1:A:166:ASN:OD1	0.53	2.41	11	1
1:A:63:ILE:C	1:A:64:GLU:CD	0.53	2.76	24	2
1:A:115:GLN:NE2	1:A:144:ASP:OD2	0.53	2.41	30	1
1:A:36:ASN:O	1:A:38:THR:N	0.53	2.42	6	13
1:A:73:GLY:O	1:A:76:ASN:ND2	0.53	2.42	8	2
1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASN:HD22	0.53	2.11	10	2
1:A:126:ASN:O	1:A:128:ILE:N	0.53	2.42	22	2
1:A:127:THR:HG22	1:A:127:THR:O	0.53	2.03	23	1
1:A:76:ASN:ND2	1:A:77:ASN:ND2	0.53	2.57	27	1
1:A:126:ASN:HD22	1:A:166:ASN:H	0.53	1.45	27	1
1:A:78:ASN:C	1:A:78:ASN:HD22	0.53	2.11	29	1
1:A:68:ASN:ND2	1:A:68:ASN:C	0.53	2.66	13	3
1:A:139:VAL:HG12	1:A:141:PHE:CE1	0.53	2.39	22	5
1:A:98:LYS:C	1:A:129:SER:OG	0.53	2.51	28	2
1:A:14:GLY:O	1:A:15:LYS:C	0.53	2.52	15	30
1:A:144:ASP:O	1:A:145:ASN:C	0.53	2.52	10	22
1:A:115:GLN:NE2	1:A:115:GLN:O	0.53	2.42	18	1
1:A:126:ASN:N	1:A:126:ASN:HD22	0.53	2.00	17	1
1:A:100:GLN:O	1:A:101:PHE:C	0.53	2.52	14	23
1:A:92:ARG:CD	1:A:92:ARG:C	0.53	2.81	4	3
1:A:29:LEU:HD23	1:A:32:LEU:HD12	0.53	1.80	11	9
1:A:11:ASP:OD1	1:A:12:PHE:CE1	0.53	2.62	27	1
1:A:23:ASN:CA	1:A:83:ARG:HH21	0.53	2.17	3	4
1:A:74:PRO:C	1:A:76:ASN:N	0.53	2.67	21	17
1:A:126:ASN:CG	1:A:127:THR:N	0.53	2.65	11	2
1:A:29:LEU:HD13	1:A:34:ILE:HD11	0.53	1.80	21	1
1:A:71:GLU:O	1:A:72:LEU:C	0.52	2.52	8	4
1:A:112:GLN:OE1	1:A:146:PHE:CD1	0.52	2.62	3	1
1:A:97:TYR:CE2	1:A:127:THR:CG2	0.52	2.91	5	1
1:A:77:ASN:N	1:A:77:ASN:HD22	0.52	2.02	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:TYR:CZ	1:A:29:LEU:HD21	0.52	2.39	13	1
1:A:102:ASP:OD1	1:A:103:GLY:N	0.52	2.43	29	1
1:A:23:ASN:ND2	1:A:23:ASN:N	0.52	2.57	15	14
1:A:76:ASN:C	1:A:76:ASN:HD22	0.52	2.11	22	2
1:A:79:VAL:O	1:A:80:SER:CB	0.52	2.57	9	2
1:A:83:ARG:HH11	1:A:84:VAL:CA	0.52	2.13	20	3
1:A:112:GLN:N	1:A:112:GLN:CD	0.52	2.67	4	3
1:A:112:GLN:OE1	1:A:171:ARG:NH1	0.52	2.42	5	1
1:A:11:ASP:O	1:A:12:PHE:CD2	0.52	2.63	6	2
1:A:23:ASN:ND2	1:A:83:ARG:CD	0.52	2.72	6	1
1:A:17:VAL:HG12	1:A:18:ASP:N	0.52	2.17	25	2
1:A:130:SER:HG	1:A:158:PRO:C	0.52	2.13	20	1
1:A:36:ASN:ND2	1:A:37:ASN:OD1	0.52	2.41	18	1
1:A:68:ASN:HD22	1:A:68:ASN:C	0.52	2.11	21	1
1:A:124:ASP:OD1	1:A:125:ASN:N	0.52	2.42	24	1
1:A:11:ASP:C	1:A:13:GLN:N	0.52	2.67	26	25
1:A:98:LYS:C	1:A:100:GLN:NE2	0.52	2.68	1	1
1:A:68:ASN:O	1:A:68:ASN:ND2	0.52	2.43	3	1
1:A:10:GLU:CD	1:A:11:ASP:N	0.52	2.68	15	1
1:A:23:ASN:ND2	1:A:23:ASN:O	0.52	2.43	18	2
1:A:119:GLU:N	1:A:119:GLU:OE1	0.52	2.42	17	3
1:A:7:PHE:N	1:A:7:PHE:CD1	0.52	2.77	19	6
1:A:62:GLN:CD	1:A:62:GLN:N	0.52	2.68	21	4
1:A:39:ILE:CD1	1:A:82:ILE:HD11	0.52	2.33	7	1
1:A:112:GLN:CD	1:A:113:TYR:N	0.52	2.68	29	2
1:A:26:ARG:CD	1:A:26:ARG:C	0.52	2.82	11	1
1:A:125:ASN:ND2	1:A:125:ASN:C	0.52	2.64	28	3
1:A:158:PRO:C	1:A:159:THR:CG2	0.52	2.82	4	1
1:A:52:LEU:HD23	1:A:82:ILE:CG2	0.52	2.29	26	1
1:A:79:VAL:C	1:A:80:SER:OG	0.52	2.53	2	3
1:A:57:GLY:O	1:A:58:PHE:CG	0.52	2.63	5	3
1:A:16:GLN:NE2	1:A:16:GLN:HG3	0.52	2.20	24	1
1:A:34:ILE:C	1:A:35:GLU:CG	0.52	2.83	26	5
1:A:34:ILE:O	1:A:34:ILE:CD1	0.52	2.58	18	1
1:A:118:LEU:HD11	1:A:170:ILE:HD12	0.52	1.81	19	1
1:A:105:GLU:OE1	1:A:105:GLU:C	0.52	2.53	30	1
1:A:144:ASP:C	1:A:146:PHE:N	0.51	2.67	25	18
1:A:24:TYR:CE2	1:A:29:LEU:HD21	0.51	2.39	13	1
1:A:62:GLN:N	1:A:62:GLN:HE21	0.51	2.02	14	1
1:A:98:LYS:CG	1:A:99:GLU:N	0.51	2.73	30	1
1:A:28:GLN:O	1:A:31:ALA:HB3	0.51	2.06	10	18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:ILE:C	1:A:52:LEU:HD12	0.51	2.29	28	6
1:A:11:ASP:OD2	1:A:12:PHE:CZ	0.51	2.62	19	1
1:A:126:ASN:ND2	1:A:127:THR:H	0.51	2.03	20	1
1:A:2:ALA:C	1:A:3:ASN:CG	0.51	2.78	14	3
1:A:37:ASN:ND2	1:A:77:ASN:O	0.51	2.43	26	2
1:A:100:GLN:O	1:A:100:GLN:HG3	0.51	2.06	5	1
1:A:83:ARG:NH1	1:A:83:ARG:CG	0.51	2.71	6	1
1:A:68:ASN:ND2	1:A:68:ASN:H	0.51	2.04	30	1
1:A:36:ASN:ND2	1:A:36:ASN:O	0.51	2.42	3	2
1:A:99:GLU:CD	1:A:99:GLU:C	0.51	2.78	9	2
1:A:35:GLU:H	1:A:38:THR:CG2	0.51	2.17	13	2
1:A:89:VAL:HG12	1:A:90:GLN:N	0.51	2.19	29	1
1:A:117:GLU:CG	1:A:118:LEU:H	0.51	2.19	10	8
1:A:156:ASP:OD1	1:A:156:ASP:N	0.51	2.44	20	5
1:A:116:ALA:C	1:A:118:LEU:N	0.51	2.66	8	1
1:A:125:ASN:CG	1:A:126:ASN:N	0.51	2.66	14	2
1:A:26:ARG:H	1:A:26:ARG:CD	0.51	2.18	19	1
1:A:83:ARG:NH2	1:A:85:ILE:CD1	0.51	2.74	25	1
1:A:151:LEU:C	1:A:151:LEU:CD2	0.51	2.83	19	6
1:A:88:PRO:O	1:A:90:GLN:NE2	0.51	2.43	8	1
1:A:56:ASP:OD1	1:A:80:SER:CB	0.51	2.59	9	1
1:A:6:VAL:O	1:A:16:GLN:CB	0.51	2.59	10	2
1:A:72:LEU:CD2	1:A:76:ASN:ND2	0.51	2.73	10	1
1:A:10:GLU:OE2	1:A:11:ASP:N	0.51	2.44	15	1
1:A:76:ASN:H	1:A:76:ASN:ND2	0.51	2.03	8	2
1:A:71:GLU:O	1:A:73:GLY:N	0.50	2.45	20	6
1:A:55:ASN:C	1:A:80:SER:OG	0.50	2.54	5	1
1:A:17:VAL:O	1:A:17:VAL:HG13	0.50	2.05	20	2
1:A:28:GLN:CA	1:A:28:GLN:HE21	0.50	2.19	11	1
1:A:125:ASN:C	1:A:125:ASN:HD22	0.50	2.14	28	2
1:A:123:ILE:CG1	1:A:124:ASP:H	0.50	2.20	12	7
1:A:146:PHE:H	1:A:169:SER:CB	0.50	2.19	12	2
1:A:13:GLN:CD	1:A:14:GLY:N	0.50	2.67	4	1
1:A:140:LEU:CD1	1:A:140:LEU:N	0.50	2.75	18	3
1:A:11:ASP:OD2	1:A:12:PHE:CE1	0.50	2.64	12	2
1:A:36:ASN:OD1	1:A:37:ASN:N	0.50	2.45	21	1
1:A:75:LEU:C	1:A:77:ASN:H	0.50	2.14	24	5
1:A:145:ASN:H	1:A:145:ASN:ND2	0.50	2.03	15	1
1:A:75:LEU:C	1:A:77:ASN:N	0.50	2.70	25	6
1:A:99:GLU:OE1	1:A:100:GLN:OE1	0.50	2.28	14	1
1:A:77:ASN:N	1:A:77:ASN:ND2	0.50	2.59	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:126:ASN:ND2	1:A:166:ASN:HD22	0.50	2.04	19	1
1:A:100:GLN:NE2	1:A:102:ASP:H	0.50	2.05	1	1
1:A:96:PHE:CE1	1:A:105:GLU:OE1	0.50	2.64	21	1
1:A:112:GLN:CG	1:A:113:TYR:N	0.50	2.74	21	4
1:A:127:THR:HG23	1:A:128:ILE:CG1	0.50	2.36	2	1
1:A:9:ASN:N	1:A:13:GLN:O	0.50	2.45	6	4
1:A:160:LEU:C	1:A:160:LEU:CD1	0.50	2.85	17	3
1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:HD12	0.50	2.21	18	2
1:A:83:ARG:HH21	1:A:84:VAL:CA	0.50	2.20	19	1
1:A:39:ILE:O	1:A:39:ILE:CG2	0.50	2.59	20	1
1:A:125:ASN:H	1:A:125:ASN:HD22	0.50	1.49	13	1
1:A:100:GLN:C	1:A:100:GLN:NE2	0.50	2.68	16	1
1:A:96:PHE:CE2	1:A:105:GLU:OE2	0.50	2.64	22	1
1:A:160:LEU:N	1:A:160:LEU:CD2	0.50	2.75	24	1
1:A:34:ILE:HD13	1:A:34:ILE:O	0.50	2.06	26	1
1:A:51:ILE:HG22	1:A:53:TYR:CE1	0.50	2.41	2	2
1:A:157:ALA:N	1:A:158:PRO:HD3	0.50	2.21	6	19
1:A:158:PRO:O	1:A:159:THR:CB	0.50	2.60	4	1
1:A:97:TYR:O	1:A:98:LYS:CB	0.50	2.59	5	1
1:A:53:TYR:CE2	1:A:62:GLN:CD	0.50	2.90	12	1
1:A:36:ASN:HD22	1:A:37:ASN:HD21	0.50	1.46	16	1
1:A:2:ALA:O	1:A:3:ASN:ND2	0.50	2.45	30	2
1:A:9:ASN:HD22	1:A:9:ASN:N	0.50	2.05	1	1
1:A:54:GLN:HE21	1:A:61:ASP:H	0.50	1.49	2	1
1:A:91:PRO:C	1:A:92:ARG:CG	0.50	2.85	7	2
1:A:124:ASP:C	1:A:126:ASN:H	0.50	2.14	30	2
1:A:36:ASN:CG	1:A:37:ASN:H	0.50	2.13	21	2
1:A:154:ASN:H	1:A:154:ASN:ND2	0.50	2.03	14	1
1:A:130:SER:N	1:A:160:LEU:H	0.50	2.05	17	1
1:A:97:TYR:CE1	1:A:123:ILE:CG2	0.50	2.95	18	1
1:A:104:LYS:HZ2	1:A:104:LYS:HB2	0.50	1.65	19	1
1:A:63:ILE:CG2	1:A:64:GLU:H	0.49	2.19	26	5
1:A:143:ASN:CG	1:A:144:ASP:H	0.49	2.15	22	2
1:A:26:ARG:CD	1:A:26:ARG:N	0.49	2.75	19	1
1:A:92:ARG:CZ	1:A:107:ASP:CG	0.49	2.85	25	1
1:A:82:ILE:O	1:A:83:ARG:CZ	0.49	2.59	27	2
1:A:71:GLU:O	1:A:72:LEU:CB	0.49	2.61	7	6
1:A:126:ASN:ND2	1:A:166:ASN:ND2	0.49	2.59	17	2
1:A:35:GLU:C	1:A:37:ASN:H	0.49	2.15	26	1
1:A:96:PHE:CD2	1:A:101:PHE:C	0.49	2.91	17	2
1:A:12:PHE:CD1	1:A:12:PHE:N	0.49	2.79	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:ASN:N	1:A:83:ARG:HH21	0.49	2.06	1	6
1:A:83:ARG:CZ	1:A:83:ARG:HB3	0.49	2.38	26	17
1:A:82:ILE:O	1:A:83:ARG:NH2	0.49	2.45	27	2
1:A:7:PHE:HE2	1:A:16:GLN:OE1	0.49	1.82	14	1
1:A:92:ARG:CZ	1:A:134:GLN:HE22	0.49	2.21	14	1
1:A:68:ASN:C	1:A:68:ASN:ND2	0.49	2.71	21	1
1:A:74:PRO:O	1:A:75:LEU:C	0.49	2.56	6	3
1:A:140:LEU:N	1:A:140:LEU:CD1	0.49	2.76	6	6
1:A:159:THR:O	1:A:160:LEU:CB	0.49	2.60	9	1
1:A:51:ILE:HD12	1:A:83:ARG:NH1	0.49	2.22	19	2
1:A:76:ASN:ND2	1:A:76:ASN:O	0.49	2.45	22	1
1:A:122:GLY:C	1:A:123:ILE:CG1	0.49	2.85	15	3
1:A:36:ASN:C	1:A:38:THR:N	0.49	2.71	12	9
1:A:141:PHE:CD2	1:A:146:PHE:HB3	0.49	2.43	7	4
1:A:10:GLU:CD	1:A:40:SER:OG	0.49	2.56	8	1
1:A:36:ASN:N	1:A:36:ASN:OD1	0.49	2.44	13	1
1:A:151:LEU:HD13	1:A:151:LEU:O	0.49	2.08	15	1
1:A:95:PHE:CE1	1:A:131:VAL:HG23	0.49	2.43	17	1
1:A:100:GLN:N	1:A:100:GLN:CD	0.49	2.68	1	1
1:A:107:ASP:N	1:A:107:ASP:OD1	0.49	2.45	27	3
1:A:124:ASP:OD1	1:A:124:ASP:C	0.49	2.55	10	1
1:A:124:ASP:OD1	1:A:124:ASP:N	0.49	2.45	11	1
1:A:69:ALA:HB1	1:A:72:LEU:HA	0.49	1.83	15	2
1:A:145:ASN:HD22	1:A:145:ASN:N	0.49	2.04	15	1
1:A:23:ASN:CA	1:A:83:ARG:HE	0.49	2.21	3	2
1:A:23:ASN:CG	1:A:83:ARG:NE	0.49	2.71	6	1
1:A:36:ASN:OD1	1:A:36:ASN:C	0.49	2.55	21	1
1:A:98:LYS:C	1:A:100:GLN:CD	0.48	2.80	1	1
1:A:36:ASN:O	1:A:37:ASN:CB	0.48	2.61	28	2
1:A:34:ILE:O	1:A:38:THR:CG2	0.48	2.60	3	2
1:A:83:ARG:HH11	1:A:84:VAL:N	0.48	2.06	26	2
1:A:34:ILE:HG12	1:A:38:THR:HG21	0.48	1.85	26	1
1:A:124:ASP:O	1:A:126:ASN:N	0.48	2.46	30	1
1:A:51:ILE:HD12	1:A:83:ARG:NH2	0.48	2.23	11	5
1:A:35:GLU:O	1:A:38:THR:CG2	0.48	2.61	9	2
1:A:99:GLU:C	1:A:99:GLU:OE1	0.48	2.55	9	1
1:A:74:PRO:O	1:A:76:ASN:ND2	0.48	2.47	24	3
1:A:121:TYR:O	1:A:121:TYR:CD1	0.48	2.66	15	6
1:A:125:ASN:HD22	1:A:125:ASN:N	0.48	2.06	13	3
1:A:4:ILE:O	1:A:4:ILE:CG1	0.48	2.61	11	4
1:A:100:GLN:CD	1:A:102:ASP:OD1	0.48	2.57	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:ASN:O	1:A:76:ASN:ND2	0.48	2.46	26	2
1:A:127:THR:O	1:A:129:SER:N	0.48	2.46	29	1
1:A:145:ASN:O	1:A:146:PHE:C	0.48	2.57	3	27
1:A:24:TYR:O	1:A:58:PHE:CE1	0.48	2.67	7	1
1:A:4:ILE:CG1	1:A:4:ILE:O	0.48	2.62	8	1
1:A:83:ARG:NH1	1:A:84:VAL:HA	0.48	2.24	2	2
1:A:102:ASP:O	1:A:103:GLY:C	0.48	2.55	16	3
1:A:9:ASN:C	1:A:40:SER:HG	0.48	2.17	3	1
1:A:35:GLU:O	1:A:36:ASN:CG	0.48	2.57	12	7
1:A:102:ASP:N	1:A:102:ASP:OD1	0.48	2.46	10	1
1:A:133:PRO:O	1:A:134:GLN:CB	0.48	2.59	12	1
1:A:37:ASN:OD1	1:A:37:ASN:N	0.48	2.46	16	2
1:A:3:ASN:OD1	1:A:3:ASN:N	0.48	2.46	27	4
1:A:119:GLU:CD	1:A:119:GLU:N	0.48	2.71	13	7
1:A:95:PHE:O	1:A:105:GLU:CB	0.48	2.62	7	2
1:A:125:ASN:ND2	1:A:126:ASN:OD1	0.48	2.47	13	2
1:A:140:LEU:HD23	1:A:167:THR:OG1	0.48	2.08	11	2
1:A:9:ASN:N	1:A:9:ASN:ND2	0.48	2.61	1	1
1:A:99:GLU:O	1:A:100:GLN:HG3	0.48	2.09	1	1
1:A:47:GLY:C	1:A:48:VAL:CG1	0.48	2.87	9	1
1:A:120:ARG:NH1	1:A:124:ASP:OD1	0.48	2.46	9	1
1:A:38:THR:C	1:A:40:SER:N	0.48	2.71	20	2
1:A:77:ASN:HD22	1:A:77:ASN:C	0.48	2.17	29	1
1:A:154:ASN:H	1:A:154:ASN:HD22	0.47	1.50	8	1
1:A:121:TYR:O	1:A:121:TYR:CG	0.47	2.67	2	8
1:A:39:ILE:N	1:A:39:ILE:HD13	0.47	2.24	4	1
1:A:158:PRO:O	1:A:159:THR:HG22	0.47	2.09	4	1
1:A:57:GLY:C	1:A:58:PHE:CD2	0.47	2.91	6	4
1:A:83:ARG:NH2	1:A:85:ILE:HG13	0.47	2.24	15	5
1:A:37:ASN:C	1:A:38:THR:HG22	0.47	2.33	15	1
1:A:131:VAL:HG11	1:A:153:VAL:HG11	0.47	1.84	17	1
1:A:97:TYR:CD2	1:A:104:LYS:O	0.47	2.67	18	1
1:A:117:GLU:HG3	1:A:118:LEU:N	0.47	2.24	4	5
1:A:149:ASP:CG	1:A:150:THR:N	0.47	2.72	4	1
1:A:143:ASN:O	1:A:144:ASP:C	0.47	2.58	3	1
1:A:83:ARG:CG	1:A:83:ARG:HH11	0.47	2.22	6	1
1:A:96:PHE:CZ	1:A:105:GLU:CG	0.47	2.98	16	1
1:A:63:ILE:CD1	1:A:75:LEU:HD11	0.47	2.37	23	1
1:A:71:GLU:C	1:A:73:GLY:H	0.47	2.18	28	1
1:A:99:GLU:O	1:A:100:GLN:CG	0.47	2.62	30	3
1:A:115:GLN:CG	1:A:168:SER:OG	0.47	2.62	23	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:GLN:N	1:A:90:GLN:OE1	0.47	2.48	28	1
1:A:129:SER:O	1:A:130:SER:C	0.47	2.58	1	3
1:A:128:ILE:O	1:A:130:SER:N	0.47	2.47	4	1
1:A:11:ASP:O	1:A:12:PHE:C	0.47	2.57	12	9
1:A:72:LEU:HD23	1:A:76:ASN:ND2	0.47	2.24	6	2
1:A:76:ASN:ND2	1:A:76:ASN:N	0.47	2.57	27	2
1:A:37:ASN:O	1:A:38:THR:C	0.47	2.57	14	2
1:A:92:ARG:CZ	1:A:134:GLN:NE2	0.47	2.77	14	1
1:A:37:ASN:HD22	1:A:37:ASN:H	0.47	1.51	27	1
1:A:36:ASN:HD21	1:A:78:ASN:ND2	0.47	2.07	29	1
1:A:39:ILE:HG13	1:A:79:VAL:HG11	0.47	1.86	4	1
1:A:62:GLN:N	1:A:62:GLN:OE1	0.47	2.48	4	1
1:A:92:ARG:NH2	1:A:134:GLN:CG	0.47	2.77	13	1
1:A:7:PHE:HB2	1:A:41:SER:CB	0.47	2.39	23	2
1:A:97:TYR:CZ	1:A:104:LYS:O	0.47	2.68	18	1
1:A:29:LEU:HD22	1:A:34:ILE:CG1	0.47	2.39	21	1
1:A:91:PRO:C	1:A:92:ARG:HE	0.47	2.16	21	1
1:A:71:GLU:C	1:A:73:GLY:N	0.47	2.70	28	1
1:A:11:ASP:CG	1:A:12:PHE:CE1	0.47	2.93	12	1
1:A:24:TYR:CE2	1:A:82:ILE:HD13	0.47	2.45	14	1
1:A:143:ASN:OD1	1:A:144:ASP:N	0.47	2.48	15	1
1:A:83:ARG:NH2	1:A:85:ILE:HD11	0.47	2.25	25	1
1:A:13:GLN:HG2	1:A:14:GLY:N	0.47	2.25	28	3
1:A:96:PHE:CG	1:A:101:PHE:HA	0.47	2.44	25	3
1:A:10:GLU:O	1:A:11:ASP:C	0.47	2.58	26	5
1:A:62:GLN:C	1:A:62:GLN:CD	0.47	2.82	6	1
1:A:7:PHE:CE2	1:A:12:PHE:CZ	0.47	3.03	17	1
1:A:166:ASN:O	1:A:167:THR:C	0.46	2.57	15	5
1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:OD1	0.46	2.46	16	5
1:A:57:GLY:O	1:A:58:PHE:C	0.46	2.58	6	7
1:A:95:PHE:CE2	1:A:131:VAL:HG13	0.46	2.45	6	2
1:A:26:ARG:N	1:A:26:ARG:HD3	0.46	2.26	19	2
1:A:154:ASN:HD22	1:A:155:SER:N	0.46	2.08	22	1
1:A:100:GLN:CD	1:A:102:ASP:OD2	0.46	2.58	23	1
1:A:81:SER:C	1:A:82:ILE:CG1	0.46	2.87	18	18
1:A:39:ILE:O	1:A:40:SER:C	0.46	2.57	20	4
1:A:97:TYR:CZ	1:A:127:THR:HG21	0.46	2.45	5	2
1:A:115:GLN:O	1:A:119:GLU:CD	0.46	2.59	5	4
1:A:107:ASP:OD1	1:A:107:ASP:N	0.46	2.44	8	3
1:A:151:LEU:C	1:A:151:LEU:CD1	0.46	2.89	7	2
1:A:72:LEU:CD2	1:A:76:ASN:HD21	0.46	2.23	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:37:ASN:ND2	1:A:37:ASN:H	0.46	2.06	19	1
1:A:29:LEU:HD13	1:A:34:ILE:CD1	0.46	2.40	21	1
1:A:83:ARG:NH1	1:A:85:ILE:HG13	0.46	2.25	14	8
1:A:121:TYR:CG	1:A:121:TYR:O	0.46	2.69	1	1
1:A:57:GLY:N	1:A:81:SER:OG	0.46	2.48	3	1
1:A:92:ARG:N	1:A:92:ARG:HD3	0.46	2.26	3	1
1:A:67:ALA:CB	1:A:121:TYR:OH	0.46	2.63	4	1
1:A:160:LEU:O	1:A:161:GLY:C	0.46	2.58	8	7
1:A:24:TYR:CZ	1:A:82:ILE:HD12	0.46	2.46	8	1
1:A:100:GLN:CG	1:A:102:ASP:CG	0.46	2.88	10	1
1:A:92:ARG:HD3	1:A:92:ARG:N	0.46	2.25	13	1
1:A:32:LEU:HD23	1:A:32:LEU:N	0.46	2.25	17	1
1:A:15:LYS:NZ	1:A:15:LYS:HB3	0.46	2.25	22	1
1:A:100:GLN:NE2	1:A:102:ASP:CB	0.46	2.75	24	1
1:A:85:ILE:O	1:A:86:SER:C	0.46	2.58	7	21
1:A:34:ILE:O	1:A:35:GLU:C	0.46	2.58	3	1
1:A:104:LYS:CG	1:A:105:GLU:N	0.46	2.78	5	1
1:A:2:ALA:O	1:A:3:ASN:CG	0.46	2.59	8	7
1:A:76:ASN:N	1:A:76:ASN:ND2	0.46	2.63	13	1
1:A:99:GLU:OE1	1:A:100:GLN:CD	0.46	2.58	14	1
1:A:138:VAL:CG1	1:A:140:LEU:CD1	0.46	2.93	6	1
1:A:56:ASP:CG	1:A:57:GLY:N	0.46	2.72	8	1
1:A:49:LYS:CG	1:A:50:ALA:N	0.46	2.79	16	2
1:A:149:ASP:C	1:A:150:THR:CG2	0.46	2.89	26	15
1:A:52:LEU:H	1:A:52:LEU:CD1	0.46	2.15	8	1
1:A:18:ASP:OD1	1:A:18:ASP:N	0.46	2.48	29	2
1:A:144:ASP:OD1	1:A:144:ASP:N	0.46	2.48	22	1
1:A:132:LYS:CB	1:A:132:LYS:HZ2	0.46	2.22	27	1
1:A:89:VAL:CG1	1:A:90:GLN:N	0.46	2.78	29	1
1:A:125:ASN:OD1	1:A:126:ASN:N	0.46	2.48	2	1
1:A:138:VAL:O	1:A:153:VAL:N	0.46	2.49	30	7
1:A:115:GLN:C	1:A:119:GLU:OE2	0.46	2.59	22	1
1:A:123:ILE:HD13	1:A:123:ILE:N	0.46	2.26	25	1
1:A:125:ASN:O	1:A:126:ASN:CB	0.46	2.64	29	1
1:A:100:GLN:OE1	1:A:101:PHE:HE1	0.46	1.94	20	3
1:A:98:LYS:CB	1:A:102:ASP:CB	0.46	2.94	13	1
1:A:145:ASN:ND2	1:A:147:SER:HB3	0.46	2.25	14	1
1:A:115:GLN:CD	1:A:168:SER:OG	0.46	2.59	23	1
1:A:7:PHE:CD1	1:A:12:PHE:O	0.46	2.68	29	1
1:A:126:ASN:O	1:A:127:THR:C	0.45	2.58	7	3
1:A:36:ASN:O	1:A:37:ASN:CG	0.45	2.60	26	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:37:ASN:H	1:A:79:VAL:H	0.45	1.54	2	1
1:A:112:GLN:OE1	1:A:113:TYR:N	0.45	2.49	7	1
1:A:68:ASN:H	1:A:68:ASN:ND2	0.45	2.09	17	1
1:A:9:ASN:H	1:A:14:GLY:HA3	0.45	1.71	25	1
1:A:119:GLU:OE2	1:A:120:ARG:NH2	0.45	2.49	28	1
1:A:12:PHE:O	1:A:12:PHE:CD2	0.45	2.69	8	2
1:A:100:GLN:O	1:A:101:PHE:CD2	0.45	2.70	4	1
1:A:10:GLU:HG2	1:A:11:ASP:N	0.45	2.25	5	3
1:A:112:GLN:O	1:A:113:TYR:CD1	0.45	2.70	7	1
1:A:22:GLY:C	1:A:83:ARG:HH21	0.45	2.19	13	1
1:A:25:THR:C	1:A:27:ALA:N	0.45	2.74	28	2
1:A:16:GLN:CD	1:A:16:GLN:N	0.45	2.73	24	1
1:A:12:PHE:CD1	1:A:12:PHE:O	0.45	2.69	28	1
1:A:117:GLU:O	1:A:121:TYR:CB	0.45	2.64	1	16
1:A:35:GLU:HG3	1:A:36:ASN:N	0.45	2.24	2	1
1:A:60:GLY:O	1:A:61:ASP:C	0.45	2.59	4	18
1:A:144:ASP:OD2	1:A:145:ASN:N	0.45	2.49	9	1
1:A:26:ARG:N	1:A:26:ARG:CD	0.45	2.79	12	1
1:A:23:ASN:ND2	1:A:83:ARG:CG	0.45	2.79	14	1
1:A:97:TYR:CE1	1:A:127:THR:HG21	0.45	2.46	24	2
1:A:10:GLU:O	1:A:11:ASP:CG	0.45	2.60	5	4
1:A:38:THR:N	1:A:79:VAL:CG2	0.45	2.76	3	1
1:A:105:GLU:CD	1:A:105:GLU:O	0.45	2.59	3	2
1:A:83:ARG:CB	1:A:83:ARG:CZ	0.45	2.95	18	2
1:A:6:VAL:HB	1:A:39:ILE:HG23	0.45	1.88	13	1
1:A:13:GLN:CG	1:A:14:GLY:H	0.45	2.23	28	1
1:A:119:GLU:OE1	1:A:125:ASN:ND2	0.45	2.49	1	1
1:A:29:LEU:O	1:A:32:LEU:N	0.45	2.50	9	8
1:A:126:ASN:HD22	1:A:166:ASN:ND2	0.45	2.09	6	1
1:A:99:GLU:O	1:A:100:GLN:HG2	0.45	2.11	21	1
1:A:145:ASN:ND2	1:A:147:SER:HB2	0.45	2.27	1	3
1:A:144:ASP:OD2	1:A:145:ASN:ND2	0.45	2.50	2	1
1:A:83:ARG:HB2	1:A:83:ARG:NH1	0.45	2.26	6	1
1:A:51:ILE:CD1	1:A:83:ARG:HH21	0.45	2.25	7	1
1:A:83:ARG:CZ	1:A:83:ARG:CA	0.45	2.94	8	3
1:A:116:ALA:O	1:A:117:GLU:C	0.45	2.59	8	1
1:A:100:GLN:OE1	1:A:102:ASP:CG	0.45	2.60	10	1
1:A:10:GLU:CA	1:A:40:SER:OG	0.45	2.64	13	1
1:A:100:GLN:NE2	1:A:100:GLN:H	0.45	2.06	1	1
1:A:101:PHE:O	1:A:101:PHE:CG	0.45	2.68	30	6
1:A:157:ALA:N	1:A:158:PRO:CD	0.45	2.79	12	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:VAL:CG2	1:A:7:PHE:N	0.45	2.78	7	1
1:A:115:GLN:OE1	1:A:144:ASP:CG	0.45	2.60	8	1
1:A:115:GLN:O	1:A:115:GLN:CG	0.45	2.64	18	2
1:A:83:ARG:NH1	1:A:83:ARG:HA	0.45	2.27	10	6
1:A:36:ASN:O	1:A:37:ASN:C	0.45	2.59	18	2
1:A:40:SER:O	1:A:72:LEU:HD22	0.45	2.12	23	1
1:A:36:ASN:ND2	1:A:78:ASN:HD21	0.45	2.08	25	1
1:A:126:ASN:C	1:A:128:ILE:N	0.45	2.73	26	1
1:A:23:ASN:HB3	1:A:83:ARG:NE	0.45	2.27	22	6
1:A:50:ALA:CB	1:A:84:VAL:HG22	0.45	2.42	4	1
1:A:23:ASN:ND2	1:A:83:ARG:NE	0.45	2.64	6	1
1:A:118:LEU:C	1:A:118:LEU:HD22	0.45	2.36	6	1
1:A:145:ASN:ND2	1:A:145:ASN:N	0.45	2.65	7	1
1:A:97:TYR:CD1	1:A:104:LYS:O	0.45	2.70	8	2
1:A:16:GLN:HG3	1:A:16:GLN:O	0.45	2.12	9	1
1:A:83:ARG:CZ	1:A:83:ARG:HA	0.45	2.42	15	3
1:A:90:GLN:O	1:A:92:ARG:CD	0.45	2.65	21	1
1:A:154:ASN:O	1:A:154:ASN:ND2	0.45	2.49	26	1
1:A:99:GLU:O	1:A:99:GLU:CD	0.45	2.60	29	1
1:A:95:PHE:CE1	1:A:108:LEU:HD12	0.45	2.47	5	1
1:A:128:ILE:O	1:A:129:SER:C	0.45	2.60	5	1
1:A:144:ASP:CG	1:A:145:ASN:OD1	0.45	2.60	14	1
1:A:83:ARG:CZ	1:A:85:ILE:HG13	0.45	2.42	17	1
1:A:83:ARG:NH2	1:A:84:VAL:HA	0.45	2.26	19	1
1:A:125:ASN:O	1:A:126:ASN:C	0.45	2.58	24	1
1:A:63:ILE:CG1	1:A:75:LEU:HD11	0.45	2.41	27	2
1:A:115:GLN:N	1:A:115:GLN:OE1	0.45	2.50	28	1
1:A:34:ILE:HG12	1:A:35:GLU:N	0.45	2.27	3	2
1:A:37:ASN:O	1:A:39:ILE:N	0.45	2.50	14	1
1:A:99:GLU:OE1	1:A:100:GLN:HG3	0.45	2.11	14	1
1:A:144:ASP:CG	1:A:145:ASN:HD22	0.45	2.20	15	1
1:A:5:THR:HG21	1:A:16:GLN:HE22	0.45	1.63	22	1
1:A:26:ARG:NH2	1:A:36:ASN:ND2	0.44	2.65	6	1
1:A:97:TYR:CZ	1:A:127:THR:OG1	0.44	2.68	12	1
1:A:34:ILE:HG13	1:A:35:GLU:N	0.44	2.27	29	1
1:A:157:ALA:C	1:A:159:THR:N	0.44	2.75	1	13
1:A:107:ASP:OD1	1:A:107:ASP:C	0.44	2.59	3	1
1:A:106:VAL:HG11	1:A:122:GLY:CA	0.44	2.42	17	1
1:A:16:GLN:OE1	1:A:16:GLN:HG3	0.44	2.11	24	1
1:A:134:GLN:O	1:A:134:GLN:CG	0.44	2.65	25	1
1:A:145:ASN:HD21	1:A:147:SER:CB	0.44	2.25	27	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:ASN:C	1:A:68:ASN:HD22	0.44	2.20	13	1
1:A:83:ARG:NH1	1:A:85:ILE:HG12	0.44	2.27	22	3
1:A:171:ARG:CZ	1:A:173:SER:OG	0.44	2.65	2	1
1:A:56:ASP:OD1	1:A:56:ASP:N	0.44	2.44	9	1
1:A:116:ALA:N	1:A:119:GLU:OE1	0.44	2.51	13	1
1:A:73:GLY:O	1:A:76:ASN:CG	0.44	2.61	16	1
1:A:112:GLN:CD	1:A:171:ARG:NH1	0.44	2.76	18	1
1:A:62:GLN:CD	1:A:62:GLN:O	0.44	2.61	16	1
1:A:125:ASN:C	1:A:126:ASN:OD1	0.44	2.61	19	2
1:A:12:PHE:CE2	1:A:70:GLU:HG2	0.44	2.47	22	1
1:A:71:GLU:O	1:A:71:GLU:CG	0.44	2.65	29	1
1:A:112:GLN:NE2	1:A:113:TYR:O	0.44	2.51	29	1
1:A:100:GLN:CD	1:A:102:ASP:CG	0.44	2.85	10	1
1:A:92:ARG:CA	1:A:136:LEU:HD12	0.44	2.42	11	1
1:A:115:GLN:C	1:A:115:GLN:NE2	0.44	2.75	18	1
1:A:7:PHE:CE2	1:A:16:GLN:HG3	0.44	2.48	14	1
1:A:62:GLN:C	1:A:62:GLN:NE2	0.44	2.76	16	1
1:A:144:ASP:C	1:A:145:ASN:OD1	0.44	2.60	1	2
1:A:35:GLU:O	1:A:36:ASN:C	0.44	2.61	2	1
1:A:65:VAL:C	1:A:66:VAL:CG2	0.44	2.90	3	6
1:A:77:ASN:O	1:A:78:ASN:CG	0.44	2.61	30	3
1:A:78:ASN:C	1:A:79:VAL:CG2	0.44	2.90	30	9
1:A:92:ARG:C	1:A:136:LEU:HD12	0.44	2.38	11	1
1:A:98:LYS:HB3	1:A:98:LYS:HZ2	0.44	1.72	14	1
1:A:24:TYR:CZ	1:A:29:LEU:HG	0.44	2.48	17	1
1:A:18:ASP:N	1:A:18:ASP:OD1	0.44	2.51	21	1
1:A:100:GLN:HG2	1:A:101:PHE:CE1	0.44	2.47	27	1
1:A:38:THR:OG1	1:A:79:VAL:HG21	0.44	2.12	3	1
1:A:153:VAL:C	1:A:155:SER:H	0.44	2.21	21	3
1:A:28:GLN:O	1:A:28:GLN:CD	0.44	2.60	13	1
1:A:61:ASP:OD1	1:A:62:GLN:N	0.44	2.50	27	1
1:A:25:THR:HG23	1:A:58:PHE:CZ	0.43	2.48	26	2
1:A:24:TYR:CD1	1:A:24:TYR:N	0.43	2.86	16	6
1:A:112:GLN:C	1:A:113:TYR:CD2	0.43	2.96	8	1
1:A:37:ASN:O	1:A:37:ASN:ND2	0.43	2.50	11	1
1:A:65:VAL:HG12	1:A:121:TYR:CE1	0.43	2.48	11	2
1:A:68:ASN:ND2	1:A:68:ASN:N	0.43	2.66	16	1
1:A:143:ASN:CB	1:A:147:SER:C	0.43	2.92	18	1
1:A:149:ASP:OD1	1:A:149:ASP:N	0.43	2.51	18	2
1:A:128:ILE:C	1:A:129:SER:HG	0.43	2.21	8	3
1:A:123:ILE:O	1:A:124:ASP:CG	0.43	2.61	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:160:LEU:CD1	1:A:161:GLY:O	0.43	2.67	5	1
1:A:112:GLN:C	1:A:113:TYR:CG	0.43	2.95	19	2
1:A:117:GLU:HG2	1:A:118:LEU:N	0.43	2.28	1	1
1:A:6:VAL:HG22	1:A:17:VAL:CG1	0.43	2.44	9	1
1:A:98:LYS:HB2	1:A:102:ASP:CB	0.43	2.44	13	1
1:A:96:PHE:CD2	1:A:101:PHE:HA	0.43	2.48	20	1
1:A:44:VAL:H	1:A:68:ASN:HD22	0.43	1.56	22	1
1:A:118:LEU:CD1	1:A:170:ILE:HD12	0.43	2.44	26	1
1:A:101:PHE:O	1:A:101:PHE:CD2	0.43	2.72	29	1
1:A:52:LEU:CD2	1:A:53:TYR:N	0.43	2.82	4	1
1:A:67:ALA:HB3	1:A:121:TYR:OH	0.43	2.14	13	2
1:A:16:GLN:NE2	1:A:16:GLN:CA	0.43	2.68	14	2
1:A:123:ILE:CG1	1:A:124:ASP:N	0.43	2.81	20	4
1:A:36:ASN:O	1:A:79:VAL:HG23	0.43	2.12	10	1
1:A:24:TYR:O	1:A:25:THR:HG23	0.43	2.13	13	1
1:A:29:LEU:N	1:A:29:LEU:HD23	0.43	2.27	18	1
1:A:34:ILE:O	1:A:34:ILE:CG1	0.43	2.66	18	1
1:A:139:VAL:CG1	1:A:141:PHE:CZ	0.43	3.01	26	1
1:A:124:ASP:C	1:A:126:ASN:N	0.43	2.76	30	1
1:A:154:ASN:C	1:A:154:ASN:ND2	0.43	2.76	1	1
1:A:4:ILE:CG2	1:A:44:VAL:HG22	0.43	2.41	27	3
1:A:58:PHE:N	1:A:81:SER:CB	0.43	2.80	3	2
1:A:29:LEU:HD23	1:A:29:LEU:N	0.43	2.28	13	1
1:A:126:ASN:C	1:A:126:ASN:ND2	0.43	2.76	13	1
1:A:54:GLN:CD	1:A:54:GLN:C	0.43	2.86	15	2
1:A:141:PHE:CG	1:A:146:PHE:CD1	0.43	3.07	15	1
1:A:2:ALA:HB1	1:A:48:VAL:HG11	0.43	1.91	26	1
1:A:83:ARG:NH1	1:A:83:ARG:HB3	0.43	2.28	21	6
1:A:9:ASN:ND2	1:A:14:GLY:HA2	0.43	2.28	4	1
1:A:29:LEU:O	1:A:30:ALA:C	0.43	2.61	15	7
1:A:126:ASN:OD1	1:A:126:ASN:N	0.43	2.51	11	1
1:A:82:ILE:HG22	1:A:83:ARG:N	0.43	2.28	13	1
1:A:11:ASP:O	1:A:12:PHE:CB	0.43	2.65	14	1
1:A:55:ASN:HB3	1:A:59:ALA:HB3	0.43	1.90	26	1
1:A:92:ARG:NH1	1:A:107:ASP:CG	0.43	2.77	26	1
1:A:85:ILE:CD1	1:A:85:ILE:N	0.43	2.81	30	1
1:A:50:ALA:HB3	1:A:65:VAL:HG23	0.43	1.91	2	1
1:A:125:ASN:O	1:A:126:ASN:CG	0.43	2.61	19	4
1:A:119:GLU:CD	1:A:119:GLU:H	0.43	2.21	26	1
1:A:16:GLN:N	1:A:16:GLN:HE21	0.43	2.11	7	1
1:A:48:VAL:N	1:A:87:VAL:HG12	0.43	2.29	15	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:120:ARG:N	1:A:120:ARG:HD2	0.43	2.28	8	4
1:A:127:THR:CG2	1:A:128:ILE:N	0.43	2.73	13	2
1:A:154:ASN:OD1	1:A:154:ASN:N	0.43	2.52	10	1
1:A:9:ASN:HD22	1:A:14:GLY:CA	0.43	2.27	14	1
1:A:123:ILE:HG12	1:A:124:ASP:N	0.43	2.29	20	1
1:A:76:ASN:O	1:A:76:ASN:CG	0.43	2.61	30	2
1:A:77:ASN:O	1:A:78:ASN:ND2	0.43	2.52	30	1
1:A:83:ARG:C	1:A:83:ARG:HH12	0.43	2.22	30	1
1:A:48:VAL:O	1:A:48:VAL:CG2	0.43	2.66	9	1
1:A:99:GLU:O	1:A:100:GLN:HB2	0.43	2.14	29	4
1:A:101:PHE:CD1	1:A:101:PHE:N	0.43	2.87	14	1
1:A:100:GLN:CG	1:A:102:ASP:OD1	0.43	2.65	19	1
1:A:9:ASN:C	1:A:40:SER:CB	0.43	2.92	26	2
1:A:123:ILE:O	1:A:124:ASP:C	0.43	2.62	30	1
1:A:26:ARG:O	1:A:30:ALA:N	0.42	2.52	6	3
1:A:116:ALA:O	1:A:118:LEU:N	0.42	2.51	8	1
1:A:125:ASN:CG	1:A:126:ASN:H	0.42	2.20	12	1
1:A:160:LEU:C	1:A:160:LEU:HD23	0.42	2.39	14	1
1:A:13:GLN:HG3	1:A:14:GLY:N	0.42	2.29	24	1
1:A:118:LEU:O	1:A:119:GLU:C	0.42	2.62	26	2
1:A:124:ASP:OD1	1:A:126:ASN:N	0.42	2.51	10	1
1:A:94:ARG:CD	1:A:105:GLU:OE1	0.42	2.67	11	1
1:A:24:TYR:CE1	1:A:82:ILE:HD12	0.42	2.49	13	1
1:A:143:ASN:CG	1:A:144:ASP:N	0.42	2.76	18	1
1:A:36:ASN:OD1	1:A:38:THR:HG23	0.42	2.14	21	1
1:A:76:ASN:HD22	1:A:76:ASN:C	0.42	2.20	27	1
1:A:54:GLN:HG3	1:A:55:ASN:N	0.42	2.30	3	1
1:A:37:ASN:ND2	1:A:37:ASN:O	0.42	2.51	4	1
1:A:115:GLN:CD	1:A:115:GLN:O	0.42	2.63	4	2
1:A:22:GLY:O	1:A:84:VAL:N	0.42	2.52	9	1
1:A:108:LEU:HD22	1:A:121:TYR:CD2	0.42	2.49	20	2
1:A:10:GLU:N	1:A:10:GLU:OE1	0.42	2.51	13	1
1:A:37:ASN:CG	1:A:77:ASN:O	0.42	2.62	14	1
1:A:91:PRO:O	1:A:92:ARG:C	0.42	2.61	19	1
1:A:25:THR:HG23	1:A:26:ARG:H	0.42	1.71	1	1
1:A:8:TYR:CD2	1:A:15:LYS:NZ	0.42	2.74	10	1
1:A:96:PHE:CE1	1:A:105:GLU:HB3	0.42	2.49	23	1
1:A:7:PHE:CE2	1:A:12:PHE:CE2	0.42	3.08	26	1
1:A:36:ASN:CB	1:A:79:VAL:O	0.42	2.68	2	1
1:A:2:ALA:CB	1:A:48:VAL:CG1	0.42	2.98	3	1
1:A:118:LEU:HD23	1:A:118:LEU:O	0.42	2.15	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:THR:CG2	1:A:27:ALA:H	0.42	2.20	7	1
1:A:48:VAL:CG2	1:A:49:LYS:N	0.42	2.79	15	2
1:A:36:ASN:HB2	1:A:79:VAL:H	0.42	1.74	9	1
1:A:78:ASN:O	1:A:79:VAL:HG13	0.42	2.13	10	1
1:A:78:ASN:C	1:A:78:ASN:ND2	0.42	2.77	15	1
1:A:166:ASN:O	1:A:168:SER:N	0.42	2.52	15	1
1:A:166:ASN:OD1	1:A:166:ASN:C	0.42	2.61	23	1
1:A:145:ASN:ND2	1:A:147:SER:OG	0.42	2.52	28	1
1:A:149:ASP:CG	1:A:150:THR:H	0.42	2.23	4	1
1:A:51:ILE:HG22	1:A:53:TYR:CE2	0.42	2.49	19	1
1:A:5:THR:HG23	1:A:16:GLN:HE21	0.42	1.65	22	1
1:A:37:ASN:O	1:A:38:THR:HG23	0.42	2.15	27	1
1:A:9:ASN:N	1:A:40:SER:HB3	0.42	2.30	28	1
1:A:52:LEU:CD1	1:A:52:LEU:H	0.42	2.25	1	1
1:A:12:PHE:O	1:A:12:PHE:CG	0.42	2.73	2	2
1:A:63:ILE:C	1:A:64:GLU:CG	0.42	2.93	17	3
1:A:5:THR:HG23	1:A:16:GLN:NE2	0.42	2.24	22	1
1:A:119:GLU:HB3	1:A:124:ASP:C	0.42	2.40	14	2
1:A:12:PHE:CD2	1:A:104:LYS:NZ	0.42	2.87	5	1
1:A:126:ASN:HD22	1:A:166:ASN:CB	0.42	2.27	9	1
1:A:166:ASN:OD1	1:A:166:ASN:N	0.42	2.51	10	1
1:A:35:GLU:C	1:A:36:ASN:OD1	0.42	2.63	13	1
1:A:123:ILE:HG13	1:A:128:ILE:HD11	0.42	1.91	13	2
1:A:127:THR:O	1:A:128:ILE:C	0.42	2.62	17	1
1:A:112:GLN:HG2	1:A:113:TYR:N	0.42	2.29	23	1
1:A:12:PHE:CD1	1:A:12:PHE:C	0.42	2.97	25	1
1:A:119:GLU:CB	1:A:124:ASP:C	0.42	2.93	2	1
1:A:83:ARG:NE	1:A:83:ARG:CA	0.42	2.81	6	1
1:A:166:ASN:ND2	1:A:166:ASN:C	0.42	2.76	8	1
1:A:119:GLU:C	1:A:121:TYR:H	0.42	2.23	11	1
1:A:99:GLU:CD	1:A:100:GLN:HG3	0.42	2.39	14	1
1:A:125:ASN:HD22	1:A:126:ASN:H	0.42	1.56	24	1
1:A:145:ASN:C	1:A:146:PHE:CD2	0.42	2.98	26	1
1:A:151:LEU:CD2	1:A:160:LEU:HD21	0.42	2.45	27	1
1:A:39:ILE:HD13	1:A:39:ILE:H	0.42	1.73	4	1
1:A:115:GLN:O	1:A:115:GLN:NE2	0.42	2.52	4	1
1:A:36:ASN:CB	1:A:79:VAL:C	0.42	2.93	9	1
1:A:128:ILE:HG22	1:A:129:SER:N	0.42	2.28	11	1
1:A:120:ARG:N	1:A:120:ARG:CD	0.42	2.83	13	2
1:A:145:ASN:OD1	1:A:145:ASN:N	0.42	2.53	18	1
1:A:70:GLU:HG3	1:A:71:GLU:N	0.42	2.30	23	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:LEU:HD22	1:A:34:ILE:CG2	0.41	2.45	2	1
1:A:53:TYR:O	1:A:54:GLN:C	0.41	2.62	5	1
1:A:64:GLU:CD	1:A:64:GLU:C	0.41	2.88	29	2
1:A:47:GLY:C	1:A:48:VAL:HG13	0.41	2.40	21	3
1:A:94:ARG:CZ	1:A:105:GLU:OE1	0.41	2.68	8	1
1:A:23:ASN:ND2	1:A:83:ARG:HD2	0.41	2.30	11	1
1:A:143:ASN:ND2	1:A:147:SER:HB3	0.41	2.30	18	1
1:A:116:ALA:N	1:A:119:GLU:OE2	0.41	2.53	21	1
1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:HD3	0.41	2.30	29	1
1:A:125:ASN:CG	1:A:126:ASN:ND2	0.41	2.78	29	1
1:A:157:ALA:O	1:A:159:THR:N	0.41	2.53	1	3
1:A:83:ARG:NH1	1:A:83:ARG:HG2	0.41	2.29	4	3
1:A:126:ASN:O	1:A:127:THR:CB	0.41	2.68	5	1
1:A:78:ASN:HD22	1:A:78:ASN:C	0.41	2.21	15	1
1:A:96:PHE:CZ	1:A:105:GLU:HG2	0.41	2.50	16	1
1:A:100:GLN:CD	1:A:101:PHE:CD1	0.41	2.96	20	1
1:A:170:ILE:HG12	1:A:171:ARG:N	0.41	2.30	26	1
1:A:78:ASN:N	1:A:78:ASN:HD22	0.41	2.10	10	1
1:A:104:LYS:HE3	1:A:104:LYS:H	0.41	1.75	10	1
1:A:26:ARG:CD	1:A:26:ARG:H	0.41	2.29	12	1
1:A:83:ARG:C	1:A:84:VAL:CG2	0.41	2.93	14	1
1:A:97:TYR:CE1	1:A:127:THR:CG2	0.41	3.03	24	1
1:A:139:VAL:HG12	1:A:141:PHE:CZ	0.41	2.49	26	1
1:A:15:LYS:NZ	1:A:15:LYS:CB	0.41	2.83	3	1
1:A:126:ASN:O	1:A:127:THR:CG2	0.41	2.66	3	2
1:A:102:ASP:CG	1:A:103:GLY:H	0.41	2.23	4	1
1:A:15:LYS:CD	1:A:15:LYS:H	0.41	2.28	7	1
1:A:29:LEU:C	1:A:31:ALA:N	0.41	2.76	9	2
1:A:123:ILE:CG2	1:A:127:THR:CG2	0.41	2.98	10	1
1:A:139:VAL:CG1	1:A:141:PHE:CE1	0.41	3.03	22	1
1:A:39:ILE:O	1:A:39:ILE:HG22	0.41	2.14	27	1
1:A:68:ASN:HD21	1:A:107:ASP:H	0.41	1.59	30	1
1:A:99:GLU:C	1:A:100:GLN:HG3	0.41	2.40	30	1
1:A:7:PHE:N	1:A:41:SER:O	0.41	2.52	6	1
1:A:100:GLN:HG3	1:A:101:PHE:CE1	0.41	2.51	11	1
1:A:6:VAL:HG23	1:A:7:PHE:N	0.41	2.30	2	1
1:A:115:GLN:C	1:A:119:GLU:OE1	0.41	2.63	4	1
1:A:47:GLY:C	1:A:48:VAL:HG12	0.41	2.39	10	1
1:A:141:PHE:CZ	1:A:171:ARG:CB	0.41	3.03	18	1
1:A:99:GLU:O	1:A:99:GLU:CG	0.41	2.68	25	1
1:A:25:THR:HG22	1:A:81:SER:OG	0.41	2.15	27	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:61:ASP:CG	1:A:62:GLN:N	0.41	2.78	27	1
1:A:9:ASN:CA	1:A:40:SER:CB	0.41	2.99	28	1
1:A:79:VAL:C	1:A:80:SER:HG	0.41	2.24	2	1
1:A:104:LYS:CB	1:A:104:LYS:NZ	0.41	2.83	3	1
1:A:146:PHE:H	1:A:169:SER:HB2	0.41	1.75	3	1
1:A:126:ASN:C	1:A:127:THR:CG2	0.41	2.93	7	2
1:A:83:ARG:CZ	1:A:83:ARG:C	0.41	2.93	12	1
1:A:127:THR:O	1:A:127:THR:CG2	0.41	2.69	23	1
1:A:160:LEU:N	1:A:160:LEU:HD22	0.41	2.30	24	1
1:A:5:THR:C	1:A:6:VAL:CG1	0.41	2.93	25	1
1:A:95:PHE:N	1:A:95:PHE:CD1	0.41	2.88	7	1
1:A:104:LYS:CD	1:A:105:GLU:N	0.41	2.83	9	1
1:A:26:ARG:O	1:A:30:ALA:CB	0.41	2.67	20	1
1:A:78:ASN:HD22	1:A:79:VAL:H	0.41	1.57	25	1
1:A:23:ASN:HB3	1:A:83:ARG:HE	0.41	1.72	27	1
1:A:23:ASN:HB2	1:A:83:ARG:NE	0.41	2.30	27	1
1:A:6:VAL:HG11	1:A:19:LEU:HD11	0.41	1.93	29	1
1:A:25:THR:OG1	1:A:81:SER:OG	0.41	2.34	1	1
1:A:42:VAL:CG2	1:A:69:ALA:CB	0.41	2.97	6	2
1:A:83:ARG:NH2	1:A:83:ARG:HB3	0.41	2.31	12	2
1:A:112:GLN:NE2	1:A:146:PHE:CE1	0.41	2.89	13	1
1:A:6:VAL:C	1:A:7:PHE:CD1	0.41	2.99	19	2
1:A:126:ASN:ND2	1:A:127:THR:N	0.41	2.69	20	1
1:A:96:PHE:CZ	1:A:101:PHE:CZ	0.41	3.09	23	1
1:A:167:THR:CG2	1:A:168:SER:N	0.41	2.83	26	1
1:A:7:PHE:CE2	1:A:12:PHE:CD2	0.41	3.09	28	1
1:A:83:ARG:NH2	1:A:83:ARG:HA	0.41	2.31	8	3
1:A:17:VAL:O	1:A:17:VAL:CG1	0.41	2.69	20	2
1:A:98:LYS:CB	1:A:102:ASP:OD1	0.41	2.69	10	1
1:A:98:LYS:HB3	1:A:98:LYS:NZ	0.41	2.31	14	1
1:A:49:LYS:O	1:A:84:VAL:HG13	0.41	2.16	20	1
1:A:66:VAL:HG12	1:A:92:ARG:HH22	0.41	1.75	23	1
1:A:39:ILE:O	1:A:72:LEU:HD22	0.41	2.16	26	1
1:A:102:ASP:OD1	1:A:102:ASP:C	0.41	2.64	29	1
1:A:68:ASN:ND2	1:A:106:VAL:HG22	0.40	2.31	3	1
1:A:6:VAL:CG2	1:A:39:ILE:HG23	0.40	2.47	7	1
1:A:28:GLN:CD	1:A:28:GLN:C	0.40	2.89	13	1
1:A:34:ILE:O	1:A:34:ILE:HG23	0.40	2.15	25	1
1:A:12:PHE:O	1:A:12:PHE:CD1	0.40	2.73	26	1
1:A:42:VAL:HG13	1:A:43:LYS:N	0.40	2.31	27	1
1:A:15:LYS:H	1:A:15:LYS:HE3	0.40	1.77	29	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:GLU:C	1:A:65:VAL:HG13	0.40	2.41	13	4
1:A:7:PHE:CZ	1:A:16:GLN:HB3	0.40	2.51	3	1
1:A:67:ALA:HB1	1:A:107:ASP:OD1	0.40	2.17	6	1
1:A:145:ASN:HB3	1:A:146:PHE:CE1	0.40	2.52	12	1
1:A:149:ASP:C	1:A:150:THR:HG23	0.40	2.41	12	1
1:A:115:GLN:O	1:A:115:GLN:CD	0.40	2.65	25	1
1:A:95:PHE:CE2	1:A:131:VAL:CG1	0.40	3.05	29	1
1:A:83:ARG:HH11	1:A:83:ARG:HG2	0.40	1.75	6	1
1:A:74:PRO:C	1:A:76:ASN:HD22	0.40	2.24	8	1
1:A:99:GLU:O	1:A:100:GLN:HB3	0.40	2.16	10	1
1:A:34:ILE:O	1:A:35:GLU:CB	0.40	2.69	16	1
1:A:62:GLN:O	1:A:62:GLN:CD	0.40	2.64	19	1
1:A:99:GLU:C	1:A:100:GLN:CD	0.40	2.88	1	1
1:A:24:TYR:OH	1:A:82:ILE:CD1	0.40	2.64	3	1
1:A:144:ASP:C	1:A:145:ASN:CG	0.40	2.88	13	2
1:A:24:TYR:O	1:A:25:THR:CG2	0.40	2.69	13	1
1:A:61:ASP:OD1	1:A:61:ASP:N	0.40	2.51	14	2
1:A:159:THR:C	1:A:160:LEU:HD22	0.40	2.41	24	1
1:A:4:ILE:HG22	1:A:44:VAL:CG2	0.40	2.45	27	1
1:A:68:ASN:OD1	1:A:68:ASN:N	0.40	2.54	18	1
1:A:13:GLN:CA	1:A:13:GLN:HE21	0.40	2.28	20	1
1:A:15:LYS:N	1:A:15:LYS:HD2	0.40	2.30	24	1
1:A:39:ILE:HD12	1:A:79:VAL:CG1	0.40	2.39	26	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	167/173 (97%)	108±4 (64±2%)	36±4 (21±2%)	24±3 (14±2%)	0	5
All	All	5010/5190 (97%)	3227 (64%)	1075 (21%)	708 (14%)	0	5

All 61 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	15	LYS	30
1	A	123	ILE	29
1	A	100	GLN	28
1	A	54	GLN	27
1	A	122	GLY	27
1	A	145	ASN	26
1	A	144	ASP	26
1	A	72	LEU	24
1	A	104	LYS	24
1	A	135	GLY	23
1	A	21	PRO	22
1	A	37	ASN	22
1	A	158	PRO	21
1	A	39	ILE	19
1	A	80	SER	19
1	A	36	ASN	18
1	A	75	LEU	18
1	A	91	PRO	17
1	A	46	PRO	16
1	A	12	PHE	16
1	A	127	THR	16
1	A	126	ASN	15
1	A	159	THR	15
1	A	129	SER	14
1	A	128	ILE	14
1	A	86	SER	13
1	A	98	LYS	13
1	A	92	ARG	12
1	A	70	GLU	11
1	A	101	PHE	10
1	A	125	ASN	9
1	A	35	GLU	9
1	A	56	ASP	9
1	A	155	SER	9
1	A	166	ASN	8
1	A	118	LEU	8
1	A	161	GLY	7
1	A	66	VAL	6
1	A	160	LEU	6
1	A	167	THR	5
1	A	33	GLY	5
1	A	142	LYS	5
1	A	38	THR	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	130	SER	4
1	A	134	GLN	4
1	A	74	PRO	3
1	A	133	PRO	3
1	A	97	TYR	2
1	A	143	ASN	2
1	A	10	GLU	2
1	A	61	ASP	2
1	A	147	SER	1
1	A	11	ASP	1
1	A	32	LEU	1
1	A	78	ASN	1
1	A	116	ALA	1
1	A	79	VAL	1
1	A	2	ALA	1
1	A	103	GLY	1
1	A	154	ASN	1
1	A	124	ASP	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	143/147 (97%)	116±3 (81±2%)	27±3 (19±2%)	3	35
All	All	4290/4410 (97%)	3484 (81%)	806 (19%)	3	35

All 100 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	83	ARG	30
1	A	16	GLN	29
1	A	87	VAL	29
1	A	41	SER	27
1	A	123	ILE	27
1	A	42	VAL	25
1	A	100	GLN	25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	118	LEU	24
1	A	23	ASN	23
1	A	82	ILE	21
1	A	159	THR	21
1	A	6	VAL	21
1	A	136	LEU	18
1	A	34	ILE	18
1	A	119	GLU	16
1	A	8	TYR	14
1	A	169	SER	14
1	A	97	TYR	13
1	A	105	GLU	13
1	A	66	VAL	13
1	A	167	THR	13
1	A	36	ASN	12
1	A	48	VAL	11
1	A	52	LEU	11
1	A	106	VAL	11
1	A	160	LEU	11
1	A	3	ASN	10
1	A	127	THR	10
1	A	37	ASN	10
1	A	85	ILE	10
1	A	72	LEU	9
1	A	115	GLN	9
1	A	62	GLN	9
1	A	131	VAL	8
1	A	58	PHE	8
1	A	15	LYS	8
1	A	79	VAL	8
1	A	120	ARG	7
1	A	151	LEU	7
1	A	92	ARG	7
1	A	132	LYS	7
1	A	26	ARG	7
1	A	129	SER	6
1	A	147	SER	6
1	A	28	GLN	6
1	A	76	ASN	6
1	A	68	ASN	6
1	A	154	ASN	5
1	A	153	VAL	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	130	SER	5
1	A	35	GLU	5
1	A	134	GLN	5
1	A	146	PHE	5
1	A	126	ASN	5
1	A	38	THR	5
1	A	166	ASN	5
1	A	5	THR	4
1	A	128	ILE	4
1	A	24	TYR	4
1	A	99	GLU	4
1	A	4	ILE	4
1	A	117	GLU	4
1	A	124	ASP	4
1	A	49	LYS	3
1	A	11	ASP	3
1	A	102	ASP	3
1	A	168	SER	3
1	A	39	ILE	3
1	A	43	LYS	3
1	A	13	GLN	3
1	A	104	LYS	3
1	A	54	GLN	3
1	A	170	ILE	3
1	A	78	ASN	3
1	A	10	GLU	3
1	A	125	ASN	3
1	A	155	SER	3
1	A	64	GLU	3
1	A	12	PHE	3
1	A	80	SER	2
1	A	56	ASP	2
1	A	89	VAL	2
1	A	142	LYS	2
1	A	77	ASN	2
1	A	107	ASP	2
1	A	145	ASN	2
1	A	98	LYS	2
1	A	81	SER	2
1	A	17	VAL	2
1	A	94	ARG	1
1	A	95	PHE	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	101	PHE	1
1	A	40	SER	1
1	A	9	ASN	1
1	A	90	GLN	1
1	A	61	ASP	1
1	A	29	LEU	1
1	A	143	ASN	1
1	A	55	ASN	1
1	A	114	THR	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](#)

Of 2 ligands modelled in this entry, 2 are monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

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