



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 6, 2026 – 04:07 PM UTC

PDB ID : 1R6E / pdb_00001r6e
Title : Solution structure of the catalytic domain of SopE2
Authors : Williams, C.; Galyov, E.E.; Bagby, S.
Deposited on : 2003-10-15

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

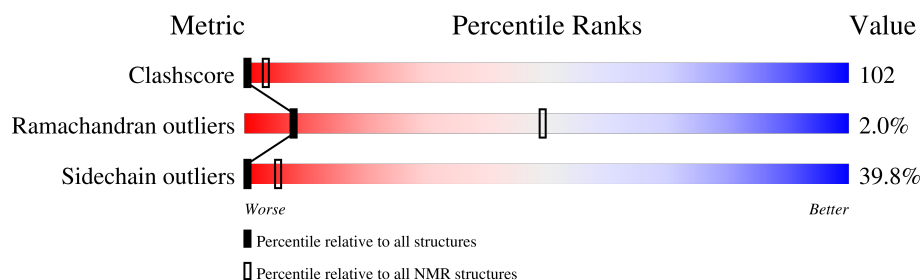
1 Overall quality at a glance

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	168	13% 48% 26% • 10%

2 Ensemble composition and analysis ⓘ

This entry contains 20 models. Model 13 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *closest to the average*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:81-A:156, A:162-A:237 (152)	0.95	13

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 4 clusters and 2 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 6, 12, 13, 14, 15, 16, 18
2	3, 5, 8, 17
3	9, 10, 11
4	4, 19
Single-model clusters	7; 20

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2592 atoms, of which 1311 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called TypeIII-secreted protein effector: invasion-associated protein.

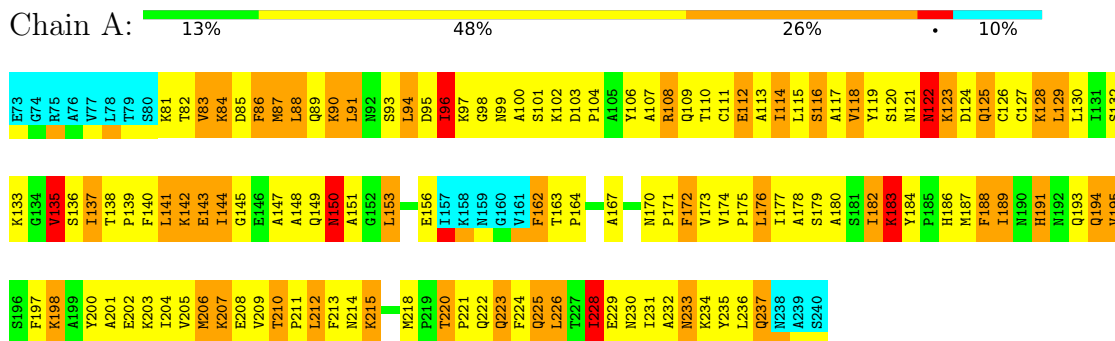
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	168	Total	C	H	N	O	S	0
			2592	816	1311	217	241	7	

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: TypeIII-secreted protein effector: invasion-associated protein

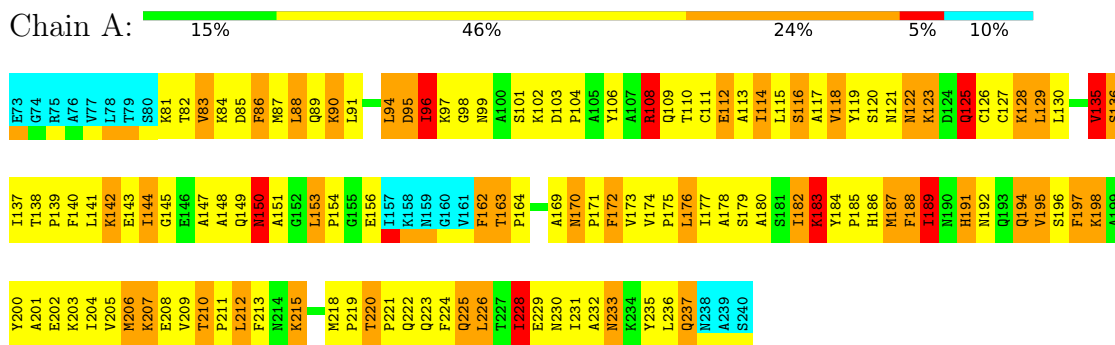


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

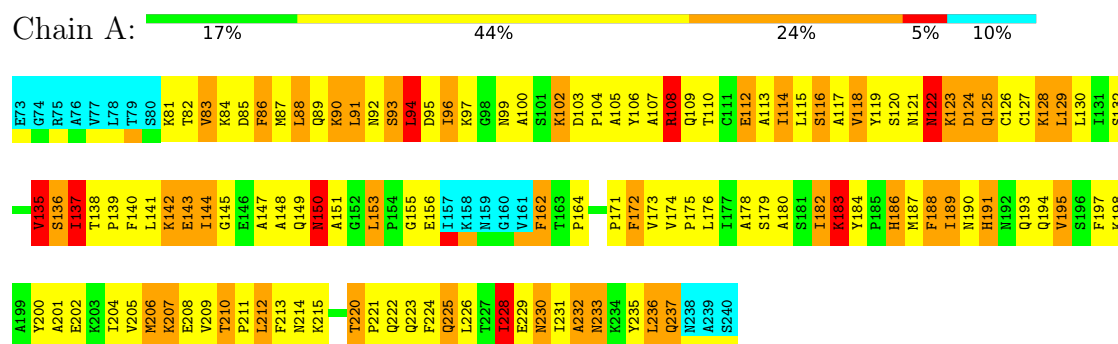
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: TypeIII-secreted protein effector: invasion-associated protein



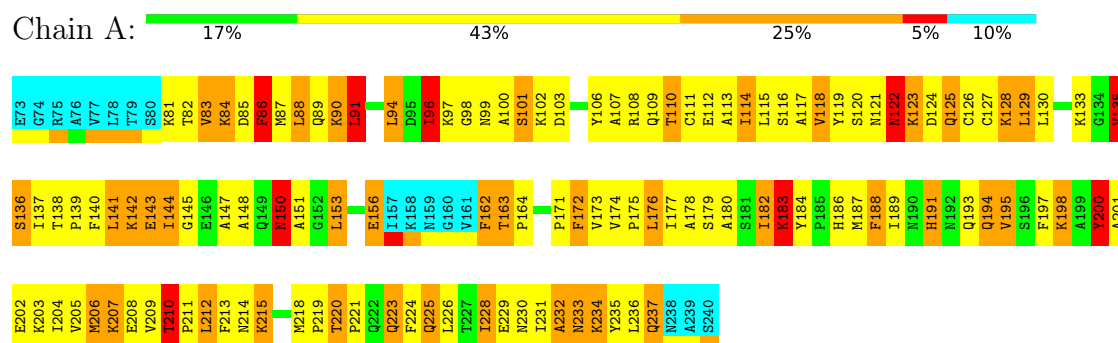
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: TypeIII-secreted protein effector: invasion-associated protein



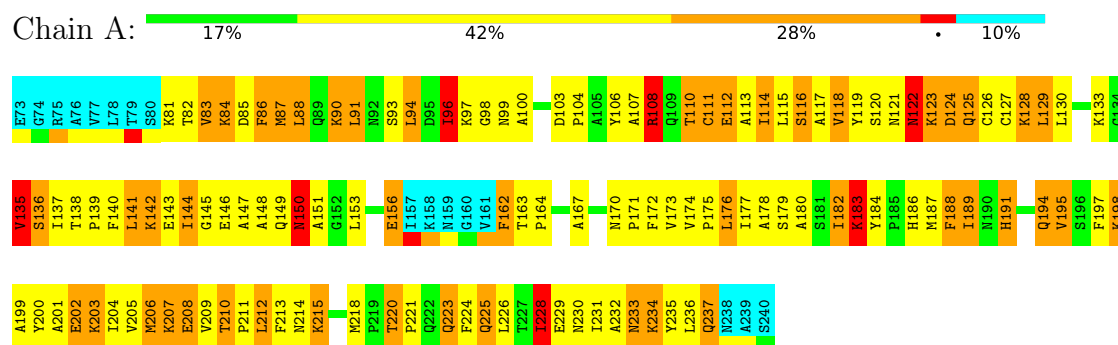
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: TypeIII-secreted protein effector: invasion-associated protein



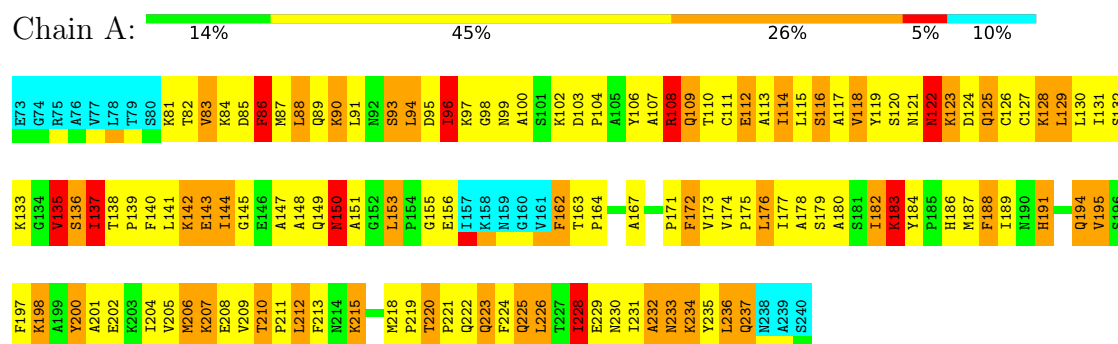
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: TypeIII-secreted protein effector: invasion-associated protein



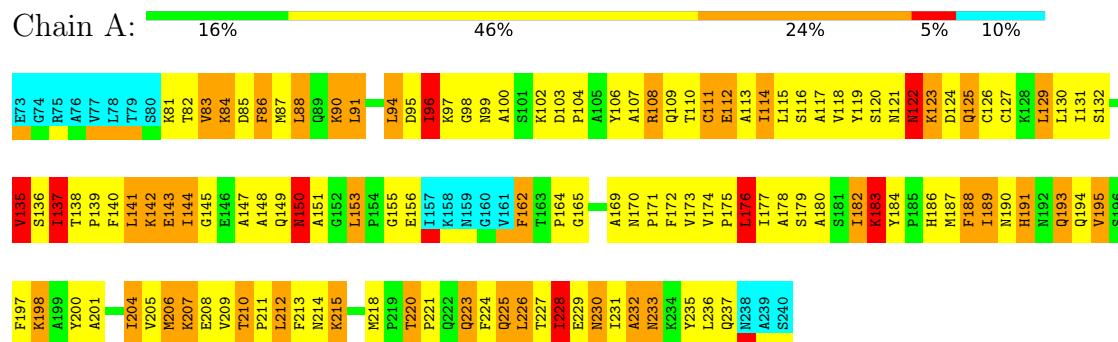
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: TypeIII-secreted protein effector: invasion-associated protein



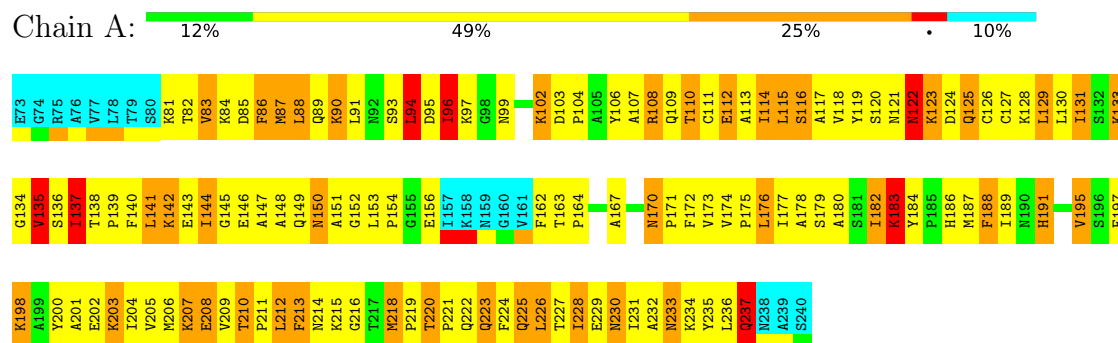
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: TypeIII-secreted protein effector: invasion-associated protein



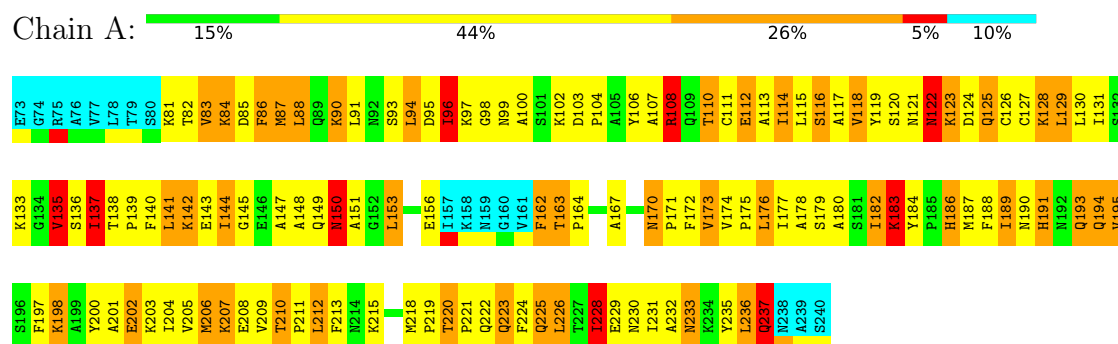
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: TypeIII-secreted protein effector: invasion-associated protein



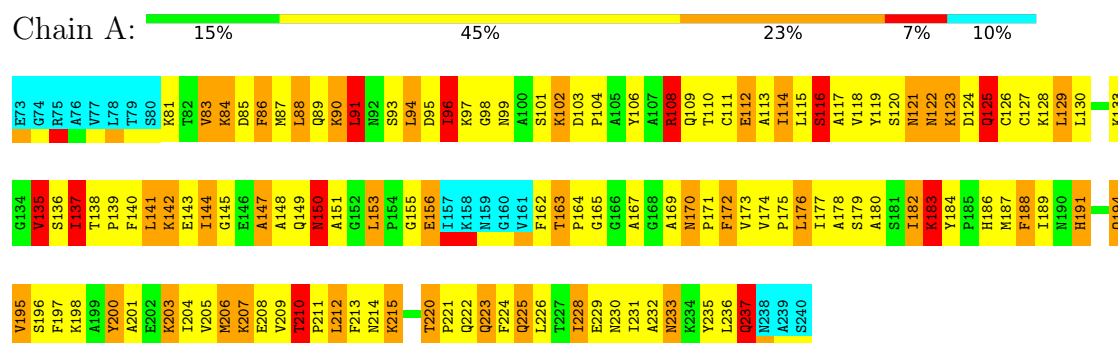
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: TypeIII-secreted protein effector: invasion-associated protein



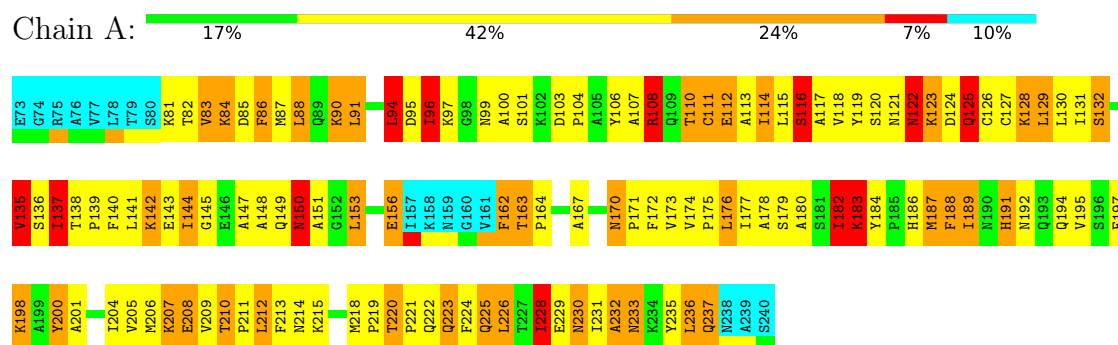
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: TypeIII-secreted protein effector: invasion-associated protein



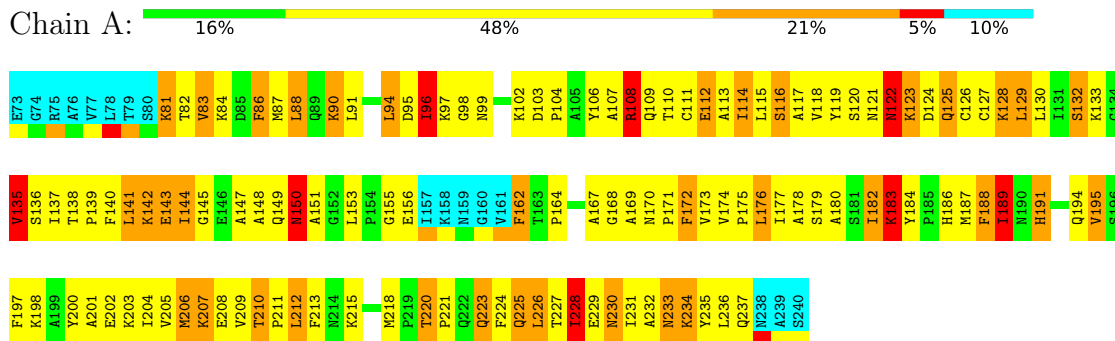
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: TypeIII-secreted protein effector: invasion-associated protein



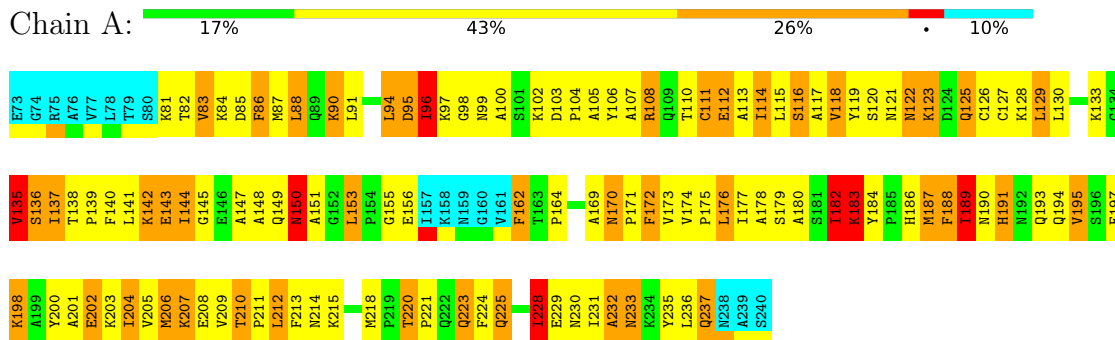
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: TypeIII-secreted protein effector: invasion-associated protein



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: TypeIII-secreted protein effector: invasion-associated protein



4.2.13 Score per residue for model 13 (medoid)

- Molecule 1: TypeIII-secreted protein effector: invasion-associated protein



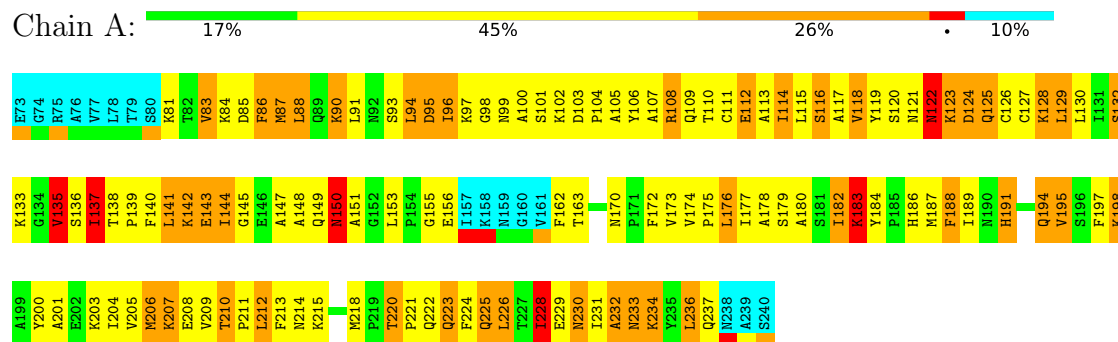
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: TypeIII-secreted protein effector: invasion-associated protein



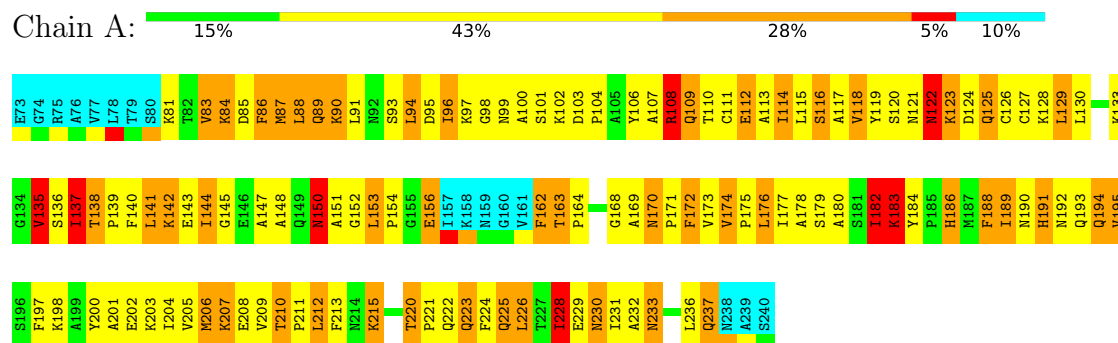
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: TypeIII-secreted protein effector: invasion-associated protein



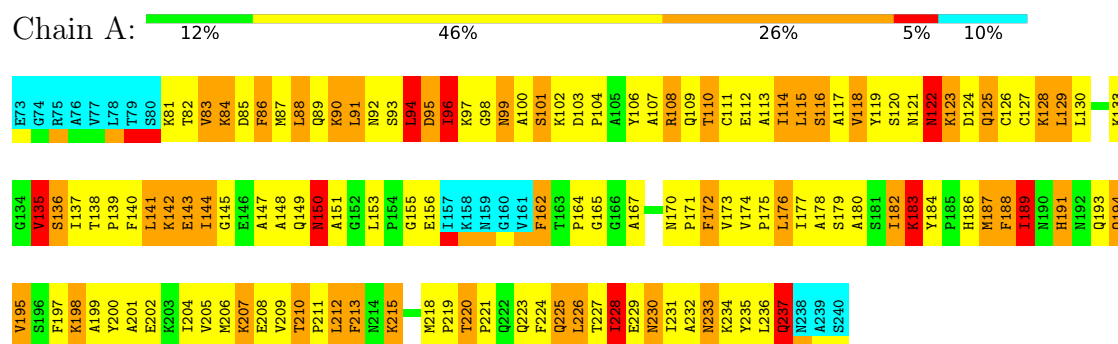
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: TypeIII-secreted protein effector: invasion-associated protein



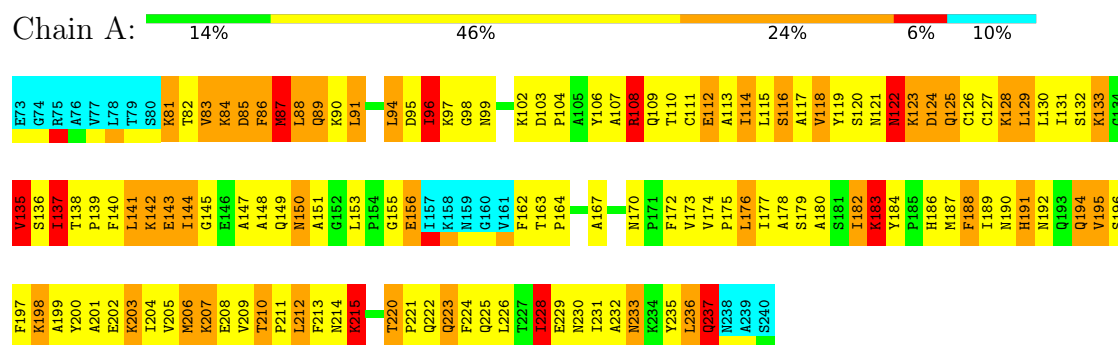
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: TypeIII-secreted protein effector: invasion-associated protein



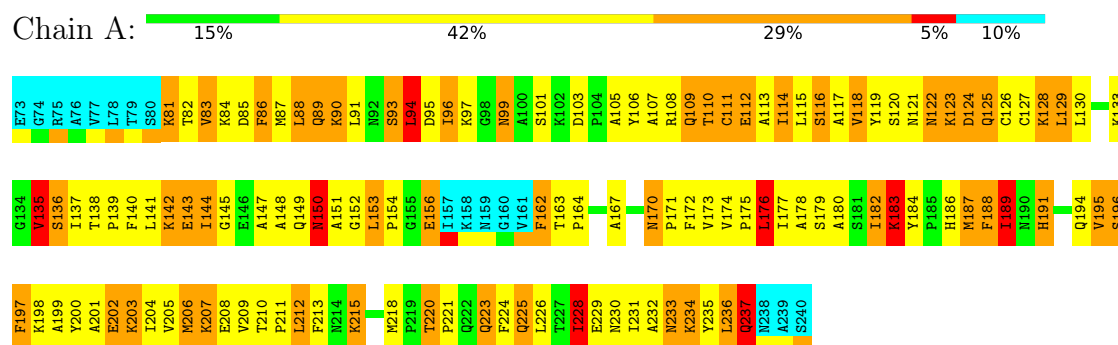
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: TypeIII-secreted protein effector: invasion-associated protein



4.2.19 Score per residue for model 19

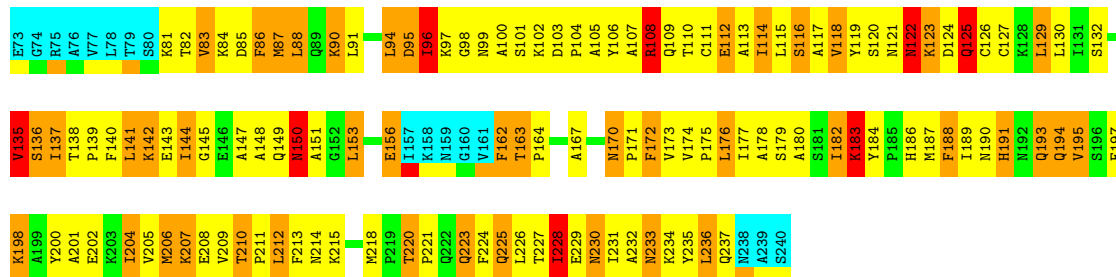
- Molecule 1: TypeIII-secreted protein effector: invasion-associated protein



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: TypeIII-secreted protein effector: invasion-associated protein

Chain A: 



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *simulated annealing*.

Of the 100 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with acceptable covalent geometry, structures with favorable non-bond energy, structures with the least restraint violations, structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
XPLOR-NIH	structure solution	2.02
XPLOR-NIH	refinement	2.06

No chemical shift data was provided.

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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	1.50±0.01	0±1/1193 (0.0± 0.0%)	1.66±0.01	16±2/1615 (1.0± 0.1%)
All	All	1.50	4/23860 (0.0%)	1.66	314/32300 (1.0%)

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	1.0±0.0
All	All	0	20

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	167	ALA	C-N	-6.13	1.29	1.33	14	1
1	A	210	THR	N-CA	5.29	1.51	1.46	3	3

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	96	ILE	N-CA-CB	-8.13	100.31	110.47	19	16
1	A	83	VAL	N-CA-C	-6.60	104.42	110.82	9	20
1	A	150	ASN	N-CA-CB	-6.58	100.47	110.33	7	20
1	A	135	VAL	N-CA-CB	-6.56	100.41	111.23	3	20
1	A	188	PHE	CA-CB-CG	-6.41	107.39	113.80	9	15
1	A	83	VAL	N-CA-CB	-6.37	102.41	110.57	13	15
1	A	95	ASP	N-CA-CB	-6.34	102.07	111.71	16	14
1	A	228	ILE	N-CA-CB	-6.34	103.03	110.64	11	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	188	PHE	N-CA-CB	-6.11	101.09	110.44	9	17
1	A	105	ALA	N-CA-C	-5.96	105.67	113.12	20	5
1	A	183	LYS	N-CA-CB	-5.94	101.34	110.13	12	20
1	A	233	ASN	N-CA-CB	-5.90	101.13	110.22	15	20
1	A	182	ILE	N-CA-CB	-5.77	100.92	110.56	2	20
1	A	207	LYS	N-CA-C	-5.77	106.37	113.41	14	1
1	A	115	LEU	N-CA-C	-5.76	105.52	112.54	17	2
1	A	186	HIS	CA-CB-CG	-5.75	108.05	113.80	13	4
1	A	118	VAL	N-CA-CB	-5.69	102.80	110.54	8	13
1	A	122	ASN	CA-CB-CG	-5.69	106.91	112.60	20	14
1	A	232	ALA	N-CA-C	-5.67	104.49	111.40	6	7
1	A	213	PHE	CA-CB-CG	-5.58	108.22	113.80	7	2
1	A	236	LEU	N-CA-CB	-5.57	101.90	109.98	15	9
1	A	124	ASP	N-CA-CB	-5.52	101.97	110.42	4	9
1	A	162	PHE	CA-CB-CG	-5.30	108.50	113.80	11	1
1	A	189	ILE	N-CA-CB	-5.27	104.66	110.51	17	5
1	A	94	LEU	N-CA-CB	-5.24	101.85	110.40	2	4
1	A	91	LEU	N-CA-CB	-5.23	102.15	109.94	17	4
1	A	176	LEU	N-CA-C	-5.19	105.52	111.07	19	4
1	A	94	LEU	N-CA-C	-5.17	106.81	113.23	10	1
1	A	125	GLN	N-CA-CB	-5.17	102.58	110.07	9	5
1	A	134	GLY	N-CA-C	-5.14	107.50	115.67	7	1
1	A	87	MET	N-CA-C	-5.13	105.76	111.36	18	1
1	A	116	SER	N-CA-C	-5.09	106.58	112.89	10	2
1	A	86	PHE	CA-CB-CG	-5.08	108.72	113.80	5	2
1	A	108	ARG	N-CA-CB	-5.05	103.09	110.47	8	1
1	A	121	ASN	N-CA-C	-5.05	105.86	111.36	9	1
1	A	200	TYR	N-CA-C	-5.04	106.64	112.89	3	1
1	A	147	ALA	N-CA-C	-5.03	105.92	111.71	9	1

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	108	ARG	Sidechain	20

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	1168	1192	1192	242±9
All	All	23360	23840	23840	4837

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 102.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:130:LEU:HD22	1:A:135:VAL:HG11	1.08	1.21	20	20
1:A:83:VAL:HG22	1:A:184:TYR:CD2	0.99	1.91	9	20
1:A:130:LEU:HD22	1:A:135:VAL:CG1	0.97	1.88	18	20
1:A:186:HIS:HA	1:A:189:ILE:HD12	0.96	1.33	16	14
1:A:114:ILE:HG21	1:A:213:PHE:CZ	0.96	1.95	20	18
1:A:176:LEU:HD21	1:A:201:ALA:HB1	0.95	1.37	12	6
1:A:143:GLU:CB	1:A:231:ILE:HG21	0.94	1.92	19	20
1:A:96:ILE:HG23	1:A:212:LEU:HD11	0.94	1.39	7	16
1:A:205:VAL:O	1:A:209:VAL:HG22	0.93	1.63	5	20
1:A:129:LEU:HD13	1:A:236:LEU:HD12	0.92	1.37	15	4
1:A:130:LEU:CD2	1:A:135:VAL:HG11	0.92	1.94	12	18
1:A:91:LEU:HD22	1:A:204:ILE:HB	0.92	1.37	2	8
1:A:127:CYS:HB2	1:A:137:ILE:HD12	0.91	1.43	18	4
1:A:183:LYS:HG2	1:A:184:TYR:CD2	0.90	2.01	12	20
1:A:143:GLU:HB3	1:A:231:ILE:HD13	0.90	1.43	17	19
1:A:87:MET:SD	1:A:176:LEU:HD21	0.89	2.08	7	13
1:A:90:LYS:HB3	1:A:176:LEU:HD22	0.89	1.41	2	2
1:A:110:THR:HG23	1:A:172:PHE:CZ	0.87	2.04	6	3
1:A:140:PHE:HD1	1:A:231:ILE:HG22	0.86	1.30	13	20
1:A:122:ASN:CG	1:A:228:ILE:HG23	0.86	1.96	4	18
1:A:110:THR:HG23	1:A:172:PHE:CE1	0.86	2.04	1	10
1:A:163:THR:HG23	1:A:167:ALA:CB	0.84	2.02	9	1
1:A:144:ILE:HG22	1:A:228:ILE:CG1	0.84	2.03	15	20
1:A:115:LEU:O	1:A:118:VAL:HG22	0.84	1.73	9	20
1:A:96:ILE:HG23	1:A:172:PHE:CE1	0.83	2.09	19	1
1:A:173:VAL:HG22	1:A:201:ALA:HB1	0.82	1.50	3	3
1:A:91:LEU:HD11	1:A:205:VAL:HG12	0.82	1.48	17	1
1:A:140:PHE:CD1	1:A:231:ILE:HG22	0.82	2.09	11	15
1:A:144:ILE:HG22	1:A:228:ILE:HG12	0.82	1.50	11	19
1:A:119:TYR:HA	1:A:228:ILE:HD11	0.82	1.50	20	20
1:A:129:LEU:HD11	1:A:236:LEU:HA	0.81	1.49	7	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:126:CYS:SG	1:A:232:ALA:CB	0.81	2.69	15	1
1:A:135:VAL:HG13	1:A:136:SER:N	0.81	1.90	19	20
1:A:91:LEU:HD13	1:A:204:ILE:HD12	0.81	1.52	20	3
1:A:176:LEU:CD2	1:A:201:ALA:HB1	0.81	2.06	12	14
1:A:122:ASN:ND2	1:A:228:ILE:HG23	0.80	1.90	15	19
1:A:202:GLU:O	1:A:205:VAL:HG22	0.80	1.76	8	10
1:A:129:LEU:CD2	1:A:236:LEU:HD12	0.80	2.06	5	17
1:A:96:ILE:HD11	1:A:172:PHE:CG	0.79	2.13	9	7
1:A:129:LEU:HD22	1:A:236:LEU:HD12	0.79	1.55	10	12
1:A:96:ILE:HG22	1:A:212:LEU:HD11	0.78	1.55	19	2
1:A:96:ILE:CG2	1:A:212:LEU:HD11	0.78	2.08	8	14
1:A:114:ILE:HG21	1:A:213:PHE:HZ	0.77	1.37	8	16
1:A:130:LEU:HD13	1:A:135:VAL:HG11	0.77	1.57	10	17
1:A:153:LEU:HD12	1:A:164:PRO:HB3	0.77	1.55	16	3
1:A:143:GLU:HB3	1:A:231:ILE:HG21	0.77	1.54	19	14
1:A:83:VAL:HG22	1:A:184:TYR:CG	0.77	2.13	2	19
1:A:116:SER:OG	1:A:153:LEU:HD13	0.77	1.80	14	1
1:A:147:ALA:HB1	1:A:224:PHE:CE1	0.76	2.16	20	17
1:A:87:MET:SD	1:A:176:LEU:HD11	0.76	2.20	12	1
1:A:176:LEU:HD23	1:A:177:ILE:N	0.76	1.96	4	18
1:A:176:LEU:HD21	1:A:201:ALA:CB	0.75	2.12	12	3
1:A:145:GLY:HA2	1:A:148:ALA:HB3	0.75	1.58	19	20
1:A:225:GLN:O	1:A:228:ILE:HG22	0.75	1.82	5	20
1:A:126:CYS:SG	1:A:140:PHE:CZ	0.75	2.80	15	1
1:A:109:GLN:O	1:A:113:ALA:HB3	0.74	1.82	9	10
1:A:200:TYR:CZ	1:A:204:ILE:HD13	0.74	2.17	3	3
1:A:119:TYR:CE2	1:A:164:PRO:HD2	0.73	2.18	9	2
1:A:114:ILE:HD12	1:A:209:VAL:HG11	0.73	1.59	17	2
1:A:206:MET:HA	1:A:209:VAL:CG2	0.73	2.13	8	20
1:A:130:LEU:HD22	1:A:135:VAL:HG12	0.73	1.60	18	3
1:A:136:SER:C	1:A:137:ILE:HG23	0.73	2.07	2	9
1:A:162:PHE:C	1:A:162:PHE:CD1	0.73	2.65	12	15
1:A:87:MET:SD	1:A:200:TYR:CE1	0.73	2.82	20	1
1:A:169:ALA:O	1:A:174:VAL:HG23	0.73	1.84	9	4
1:A:94:LEU:HD21	1:A:172:PHE:HB3	0.73	1.58	2	1
1:A:96:ILE:HG23	1:A:212:LEU:CD1	0.73	2.13	7	1
1:A:143:GLU:HB2	1:A:231:ILE:HG21	0.73	1.60	20	20
1:A:145:GLY:CA	1:A:162:PHE:CD1	0.72	2.72	9	6
1:A:84:LYS:HG3	1:A:200:TYR:CE2	0.72	2.19	6	2
1:A:115:LEU:HD11	1:A:213:PHE:CE1	0.72	2.19	14	5
1:A:96:ILE:HD13	1:A:208:GLU:HB3	0.72	1.62	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:111:CYS:SG	1:A:212:LEU:CB	0.72	2.77	7	4
1:A:148:ALA:HB1	1:A:164:PRO:HB3	0.72	1.58	19	3
1:A:91:LEU:HD21	1:A:207:LYS:HE3	0.72	1.60	12	7
1:A:164:PRO:CG	1:A:167:ALA:HB3	0.72	2.14	18	1
1:A:96:ILE:HD13	1:A:209:VAL:HG13	0.72	1.62	13	8
1:A:164:PRO:HG2	1:A:167:ALA:HB2	0.72	1.60	7	5
1:A:144:ILE:CG2	1:A:228:ILE:HG12	0.72	2.14	19	20
1:A:106:TYR:CE1	1:A:110:THR:HG21	0.71	2.21	17	2
1:A:114:ILE:HD13	1:A:209:VAL:HG11	0.71	1.60	14	10
1:A:176:LEU:HD23	1:A:177:ILE:HG12	0.71	1.61	1	18
1:A:145:GLY:HA3	1:A:162:PHE:CD1	0.71	2.19	9	9
1:A:129:LEU:CD1	1:A:236:LEU:HD12	0.71	2.13	15	2
1:A:213:PHE:CD2	1:A:221:PRO:HD3	0.71	2.20	12	20
1:A:129:LEU:HD22	1:A:236:LEU:CD1	0.71	2.15	10	17
1:A:213:PHE:CE2	1:A:221:PRO:HD3	0.71	2.20	14	17
1:A:111:CYS:SG	1:A:212:LEU:HB3	0.70	2.26	7	7
1:A:140:PHE:CE2	1:A:144:ILE:CD1	0.70	2.73	6	20
1:A:119:TYR:CD1	1:A:144:ILE:HG13	0.70	2.22	9	7
1:A:173:VAL:HA	1:A:176:LEU:HD22	0.70	1.63	12	9
1:A:171:PRO:HG2	1:A:172:PHE:CE1	0.70	2.22	2	11
1:A:83:VAL:O	1:A:87:MET:N	0.70	2.24	11	20
1:A:87:MET:SD	1:A:200:TYR:CE2	0.70	2.85	6	1
1:A:123:LYS:C	1:A:123:LYS:HD2	0.70	2.10	9	2
1:A:120:SER:HA	1:A:123:LYS:HD3	0.69	1.64	13	2
1:A:127:CYS:HA	1:A:130:LEU:HB2	0.69	1.65	5	20
1:A:99:ASN:HB2	1:A:106:TYR:CE1	0.69	2.23	19	19
1:A:164:PRO:HB2	1:A:167:ALA:HB2	0.68	1.64	14	1
1:A:149:GLN:HB2	1:A:162:PHE:CE2	0.68	2.24	9	4
1:A:110:THR:HG22	1:A:172:PHE:CZ	0.68	2.24	8	4
1:A:87:MET:SD	1:A:87:MET:C	0.68	2.77	12	1
1:A:232:ALA:O	1:A:236:LEU:HB2	0.68	1.89	15	20
1:A:191:HIS:C	1:A:191:HIS:CD2	0.68	2.72	13	7
1:A:129:LEU:CD1	1:A:236:LEU:HA	0.67	2.18	7	2
1:A:126:CYS:SG	1:A:232:ALA:HB2	0.67	2.29	15	1
1:A:115:LEU:HD11	1:A:213:PHE:CZ	0.67	2.24	17	2
1:A:118:VAL:HG23	1:A:228:ILE:CD1	0.67	2.20	9	11
1:A:112:GLU:O	1:A:153:LEU:HD11	0.67	1.90	10	6
1:A:96:ILE:HG12	1:A:172:PHE:CD1	0.67	2.24	19	5
1:A:200:TYR:CE2	1:A:204:ILE:HG21	0.67	2.24	3	4
1:A:112:GLU:O	1:A:116:SER:HB3	0.67	1.90	1	18
1:A:131:ILE:HD13	1:A:131:ILE:C	0.67	2.15	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:119:TYR:CE1	1:A:144:ILE:HG13	0.67	2.26	1	12
1:A:140:PHE:CZ	1:A:144:ILE:CD1	0.67	2.78	9	20
1:A:117:ALA:HB1	1:A:170:ASN:ND2	0.66	2.06	1	10
1:A:119:TYR:CA	1:A:228:ILE:HD11	0.66	2.19	15	17
1:A:91:LEU:HB2	1:A:204:ILE:HD12	0.66	1.67	2	1
1:A:120:SER:HA	1:A:123:LYS:HG3	0.66	1.67	9	2
1:A:170:ASN:HB3	1:A:173:VAL:CG2	0.66	2.20	8	1
1:A:103:ASP:HB2	1:A:106:TYR:CB	0.66	2.21	2	18
1:A:87:MET:HE1	1:A:204:ILE:HG21	0.66	1.68	6	1
1:A:84:LYS:HA	1:A:200:TYR:CE1	0.65	2.26	16	9
1:A:100:ALA:O	1:A:107:ALA:HB2	0.65	1.91	12	9
1:A:96:ILE:CG1	1:A:172:PHE:CD1	0.65	2.80	10	3
1:A:110:THR:HG23	1:A:172:PHE:HZ	0.65	1.51	7	1
1:A:84:LYS:O	1:A:88:LEU:HB2	0.65	1.91	2	20
1:A:173:VAL:HG22	1:A:201:ALA:CB	0.65	2.21	3	2
1:A:224:PHE:CE2	1:A:228:ILE:HD12	0.65	2.26	10	13
1:A:126:CYS:SG	1:A:232:ALA:HA	0.64	2.31	19	19
1:A:141:LEU:HA	1:A:144:ILE:HD11	0.64	1.68	9	17
1:A:162:PHE:CD1	1:A:162:PHE:C	0.64	2.75	9	4
1:A:129:LEU:HG	1:A:130:LEU:N	0.64	2.08	3	20
1:A:198:LYS:HD3	1:A:198:LYS:C	0.64	2.17	10	4
1:A:186:HIS:CA	1:A:189:ILE:HD12	0.64	2.19	16	12
1:A:123:LYS:CD	1:A:123:LYS:C	0.64	2.70	12	1
1:A:84:LYS:HG3	1:A:200:TYR:CZ	0.64	2.27	19	7
1:A:115:LEU:HA	1:A:118:VAL:HG22	0.64	1.70	13	19
1:A:87:MET:SD	1:A:176:LEU:HB3	0.64	2.33	2	1
1:A:110:THR:HG23	1:A:171:PRO:CG	0.64	2.23	19	3
1:A:84:LYS:HA	1:A:200:TYR:CE2	0.64	2.28	13	2
1:A:145:GLY:CA	1:A:162:PHE:CG	0.64	2.81	11	1
1:A:118:VAL:HG23	1:A:228:ILE:HD12	0.64	1.70	3	4
1:A:91:LEU:CD1	1:A:205:VAL:HG12	0.64	2.23	17	2
1:A:103:ASP:HB2	1:A:106:TYR:HB3	0.63	1.69	2	14
1:A:130:LEU:HB3	1:A:135:VAL:HG12	0.63	1.70	2	9
1:A:110:THR:HG22	1:A:172:PHE:CE2	0.63	2.29	4	3
1:A:164:PRO:HG2	1:A:167:ALA:CB	0.63	2.22	17	5
1:A:122:ASN:OD1	1:A:228:ILE:HG23	0.63	1.92	19	16
1:A:172:PHE:HB2	1:A:205:VAL:HG11	0.63	1.70	2	4
1:A:136:SER:C	1:A:137:ILE:HG22	0.63	2.18	18	3
1:A:135:VAL:CG1	1:A:136:SER:N	0.63	2.62	12	20
1:A:114:ILE:HG21	1:A:213:PHE:CE1	0.63	2.28	19	14
1:A:86:PHE:CE1	1:A:183:LYS:HD2	0.63	2.29	12	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:183:LYS:HD3	1:A:184:TYR:CE2	0.63	2.28	5	18
1:A:120:SER:O	1:A:123:LYS:HG3	0.63	1.92	9	2
1:A:84:LYS:HG3	1:A:200:TYR:CE1	0.63	2.29	20	4
1:A:130:LEU:HD11	1:A:235:TYR:HB3	0.63	1.69	19	9
1:A:145:GLY:O	1:A:162:PHE:CE1	0.62	2.52	1	18
1:A:198:LYS:C	1:A:198:LYS:CD	0.62	2.72	9	11
1:A:191:HIS:HA	1:A:194:GLN:NE2	0.62	2.10	18	7
1:A:186:HIS:HA	1:A:189:ILE:CD1	0.62	2.24	14	20
1:A:228:ILE:CG2	1:A:229:GLU:N	0.62	2.63	7	20
1:A:197:PHE:HA	1:A:200:TYR:CD2	0.62	2.29	16	9
1:A:103:ASP:HB3	1:A:106:TYR:HB2	0.62	1.72	4	17
1:A:110:THR:HG23	1:A:171:PRO:HG2	0.62	1.70	19	3
1:A:117:ALA:HB1	1:A:170:ASN:CG	0.62	2.18	7	2
1:A:180:ALA:HB1	1:A:188:PHE:CZ	0.62	2.30	2	16
1:A:113:ALA:HA	1:A:116:SER:HB2	0.62	1.71	14	2
1:A:112:GLU:HB3	1:A:153:LEU:HD21	0.62	1.71	8	4
1:A:120:SER:HA	1:A:123:LYS:HD2	0.62	1.72	3	16
1:A:86:PHE:CG	1:A:183:LYS:HD3	0.62	2.30	6	13
1:A:210:THR:N	1:A:211:PRO:HD2	0.62	2.09	14	20
1:A:201:ALA:O	1:A:204:ILE:HG13	0.62	1.95	20	5
1:A:115:LEU:O	1:A:118:VAL:CG2	0.61	2.48	19	20
1:A:119:TYR:CZ	1:A:164:PRO:HD2	0.61	2.31	8	6
1:A:138:THR:N	1:A:139:PRO:HD2	0.61	2.10	16	20
1:A:140:PHE:HB2	1:A:235:TYR:CG	0.61	2.30	3	7
1:A:163:THR:HG23	1:A:164:PRO:HD2	0.61	1.71	3	3
1:A:175:PRO:HA	1:A:178:ALA:HB3	0.61	1.72	15	20
1:A:176:LEU:HD22	1:A:201:ALA:HB1	0.61	1.71	5	7
1:A:84:LYS:HA	1:A:200:TYR:CZ	0.61	2.31	18	10
1:A:172:PHE:CE2	1:A:209:VAL:HG12	0.61	2.31	10	4
1:A:129:LEU:HD22	1:A:236:LEU:HD13	0.61	1.71	6	1
1:A:103:ASP:CB	1:A:106:TYR:CB	0.61	2.79	4	20
1:A:197:PHE:HA	1:A:200:TYR:CE2	0.61	2.31	15	10
1:A:144:ILE:HG22	1:A:228:ILE:HG13	0.61	1.73	15	7
1:A:209:VAL:O	1:A:212:LEU:HG	0.61	1.96	17	20
1:A:87:MET:HE2	1:A:200:TYR:CE1	0.60	2.31	12	1
1:A:212:LEU:N	1:A:212:LEU:HD23	0.60	2.10	5	20
1:A:110:THR:HG22	1:A:212:LEU:CD1	0.60	2.27	14	8
1:A:130:LEU:CD1	1:A:135:VAL:HG11	0.60	2.26	19	14
1:A:96:ILE:HD13	1:A:209:VAL:CG1	0.60	2.26	13	8
1:A:81:LYS:O	1:A:85:ASP:HB2	0.60	1.97	3	18
1:A:107:ALA:O	1:A:111:CYS:HB2	0.60	1.96	8	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:151:ALA:HB2	1:A:224:PHE:CE1	0.60	2.31	20	15
1:A:195:VAL:O	1:A:198:LYS:HG3	0.60	1.97	10	13
1:A:141:LEU:HD13	1:A:141:LEU:C	0.60	2.22	5	1
1:A:163:THR:HG23	1:A:167:ALA:HB3	0.60	1.74	9	1
1:A:99:ASN:HB2	1:A:106:TYR:CZ	0.60	2.32	19	12
1:A:197:PHE:HA	1:A:200:TYR:CD1	0.60	2.31	11	3
1:A:110:THR:CG2	1:A:172:PHE:CZ	0.60	2.85	10	4
1:A:115:LEU:C	1:A:118:VAL:HG22	0.60	2.22	17	20
1:A:127:CYS:SG	1:A:137:ILE:HG21	0.59	2.36	12	5
1:A:135:VAL:HG13	1:A:136:SER:H	0.59	1.57	3	19
1:A:218:MET:CG	1:A:219:PRO:HD2	0.59	2.27	5	4
1:A:228:ILE:HG22	1:A:229:GLU:N	0.59	2.12	13	20
1:A:114:ILE:CD1	1:A:209:VAL:HG21	0.59	2.27	17	10
1:A:129:LEU:HD13	1:A:236:LEU:HA	0.59	1.75	6	1
1:A:96:ILE:HD11	1:A:172:PHE:CD2	0.59	2.32	15	2
1:A:114:ILE:HD12	1:A:209:VAL:CG1	0.59	2.25	17	1
1:A:116:SER:HA	1:A:119:TYR:HB3	0.59	1.72	1	15
1:A:156:GLU:CB	1:A:163:THR:HB	0.59	2.27	14	3
1:A:224:PHE:O	1:A:227:THR:HG22	0.59	1.97	6	2
1:A:198:LYS:HD2	1:A:198:LYS:C	0.59	2.21	17	2
1:A:141:LEU:HD21	1:A:163:THR:OG1	0.59	1.96	8	3
1:A:120:SER:O	1:A:123:LYS:HD2	0.59	1.98	2	1
1:A:164:PRO:HG2	1:A:167:ALA:HB3	0.59	1.72	18	3
1:A:103:ASP:HB3	1:A:106:TYR:CB	0.59	2.28	5	13
1:A:136:SER:C	1:A:137:ILE:CG2	0.59	2.75	2	9
1:A:153:LEU:HB3	1:A:164:PRO:CB	0.59	2.28	5	5
1:A:145:GLY:O	1:A:148:ALA:HB3	0.59	1.98	7	4
1:A:90:LYS:O	1:A:94:LEU:N	0.59	2.35	16	20
1:A:121:ASN:O	1:A:125:GLN:HB3	0.59	1.97	3	20
1:A:110:THR:CG2	1:A:172:PHE:CE1	0.59	2.86	19	4
1:A:114:ILE:HG12	1:A:209:VAL:HB	0.59	1.73	1	13
1:A:207:LYS:HG3	1:A:208:GLU:N	0.59	2.13	13	17
1:A:81:LYS:HE3	1:A:88:LEU:HD13	0.59	1.72	4	3
1:A:145:GLY:HA3	1:A:162:PHE:CG	0.59	2.33	11	3
1:A:187:MET:HB3	1:A:197:PHE:CE2	0.59	2.33	18	13
1:A:213:PHE:CD1	1:A:213:PHE:N	0.59	2.67	8	9
1:A:87:MET:SD	1:A:176:LEU:CB	0.58	2.91	2	1
1:A:110:THR:CG2	1:A:171:PRO:HG2	0.58	2.28	19	3
1:A:173:VAL:HG13	1:A:177:ILE:HD13	0.58	1.73	18	1
1:A:176:LEU:CD2	1:A:177:ILE:HG12	0.58	2.28	7	18
1:A:233:ASN:HA	1:A:236:LEU:CB	0.58	2.28	5	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:174:VAL:HB	1:A:175:PRO:HD3	0.58	1.74	8	19
1:A:96:ILE:HG23	1:A:172:PHE:CZ	0.58	2.33	4	3
1:A:96:ILE:CG2	1:A:212:LEU:HD21	0.58	2.29	7	1
1:A:140:PHE:CD1	1:A:231:ILE:CG2	0.58	2.86	11	12
1:A:130:LEU:HB3	1:A:135:VAL:CG1	0.58	2.28	15	16
1:A:103:ASP:CB	1:A:106:TYR:HB2	0.58	2.29	5	20
1:A:153:LEU:HD12	1:A:164:PRO:CB	0.58	2.29	16	4
1:A:87:MET:HE3	1:A:204:ILE:HD13	0.58	1.74	6	2
1:A:91:LEU:HD13	1:A:205:VAL:HG12	0.58	1.75	7	1
1:A:83:VAL:CG2	1:A:184:TYR:CG	0.58	2.87	6	7
1:A:83:VAL:HG12	1:A:200:TYR:OH	0.58	1.98	12	10
1:A:96:ILE:HD11	1:A:172:PHE:HB3	0.57	1.75	3	2
1:A:119:TYR:HA	1:A:228:ILE:CD1	0.57	2.28	14	12
1:A:139:PRO:O	1:A:142:LYS:HB3	0.57	1.99	5	20
1:A:114:ILE:O	1:A:117:ALA:HB3	0.57	1.98	10	18
1:A:129:LEU:HD21	1:A:236:LEU:HD12	0.57	1.74	13	9
1:A:130:LEU:HD13	1:A:135:VAL:CG1	0.57	2.30	20	9
1:A:228:ILE:HA	1:A:231:ILE:HD12	0.57	1.76	13	6
1:A:120:SER:O	1:A:123:LYS:HD3	0.57	1.98	20	13
1:A:96:ILE:HG12	1:A:172:PHE:CE1	0.57	2.33	8	4
1:A:122:ASN:HB2	1:A:232:ALA:HB2	0.57	1.76	14	2
1:A:200:TYR:O	1:A:204:ILE:HG23	0.57	1.99	15	5
1:A:154:PRO:HA	1:A:162:PHE:CE2	0.57	2.34	16	2
1:A:125:GLN:HG2	1:A:126:CYS:N	0.57	2.14	20	15
1:A:87:MET:SD	1:A:176:LEU:CD2	0.57	2.91	4	9
1:A:84:LYS:CG	1:A:200:TYR:CE1	0.57	2.87	19	9
1:A:114:ILE:HG23	1:A:115:LEU:H	0.57	1.60	20	15
1:A:110:THR:HG21	1:A:172:PHE:CE1	0.57	2.34	10	4
1:A:86:PHE:CZ	1:A:183:LYS:HD2	0.57	2.35	17	16
1:A:114:ILE:HG12	1:A:209:VAL:CB	0.57	2.29	1	12
1:A:115:LEU:HA	1:A:118:VAL:CG2	0.57	2.30	13	15
1:A:143:GLU:HB3	1:A:231:ILE:CD1	0.57	2.29	6	3
1:A:112:GLU:HB3	1:A:153:LEU:HB3	0.57	1.76	9	1
1:A:145:GLY:CA	1:A:148:ALA:HB3	0.57	2.28	19	20
1:A:201:ALA:O	1:A:204:ILE:CG1	0.57	2.53	2	8
1:A:209:VAL:HA	1:A:212:LEU:HG	0.57	1.77	7	1
1:A:123:LYS:C	1:A:123:LYS:CD	0.57	2.78	9	1
1:A:91:LEU:HD11	1:A:205:VAL:HA	0.57	1.75	8	6
1:A:183:LYS:CG	1:A:184:TYR:CD2	0.57	2.84	12	2
1:A:140:PHE:CZ	1:A:144:ILE:HD12	0.56	2.35	13	17
1:A:127:CYS:HB2	1:A:137:ILE:CD1	0.56	2.28	20	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:111:CYS:O	1:A:114:ILE:CG2	0.56	2.53	8	12
1:A:156:GLU:HB2	1:A:163:THR:HG22	0.56	1.77	10	4
1:A:132:SER:OG	1:A:133:LYS:NZ	0.56	2.33	11	1
1:A:129:LEU:HD13	1:A:236:LEU:CD1	0.56	2.21	15	1
1:A:194:GLN:HG2	1:A:195:VAL:N	0.56	2.15	15	6
1:A:153:LEU:HD12	1:A:164:PRO:HB2	0.56	1.78	19	2
1:A:104:PRO:O	1:A:108:ARG:HG3	0.56	2.00	17	14
1:A:140:PHE:CZ	1:A:144:ILE:HD13	0.56	2.34	14	7
1:A:96:ILE:CG1	1:A:172:PHE:CE1	0.56	2.88	10	4
1:A:149:GLN:HB2	1:A:162:PHE:CZ	0.56	2.36	7	2
1:A:114:ILE:CG2	1:A:213:PHE:CZ	0.56	2.87	2	17
1:A:140:PHE:CE1	1:A:144:ILE:HD13	0.56	2.36	9	9
1:A:232:ALA:O	1:A:236:LEU:N	0.56	2.38	15	20
1:A:81:LYS:O	1:A:81:LYS:CG	0.56	2.54	10	4
1:A:121:ASN:OD1	1:A:198:LYS:NZ	0.56	2.37	10	1
1:A:108:ARG:CZ	1:A:108:ARG:HA	0.56	2.30	11	2
1:A:148:ALA:HB1	1:A:164:PRO:HG3	0.56	1.78	17	2
1:A:197:PHE:HA	1:A:200:TYR:CE1	0.56	2.36	13	3
1:A:114:ILE:HB	1:A:172:PHE:CE2	0.56	2.36	17	2
1:A:119:TYR:CE2	1:A:164:PRO:CD	0.56	2.88	9	1
1:A:120:SER:HA	1:A:123:LYS:CG	0.56	2.31	9	2
1:A:153:LEU:HB3	1:A:164:PRO:HB3	0.56	1.77	10	5
1:A:106:TYR:O	1:A:110:THR:HB	0.56	2.01	7	3
1:A:84:LYS:HG2	1:A:200:TYR:CE2	0.56	2.36	11	2
1:A:205:VAL:C	1:A:209:VAL:HG22	0.55	2.26	4	19
1:A:140:PHE:HB2	1:A:235:TYR:CD2	0.55	2.35	13	10
1:A:206:MET:HA	1:A:209:VAL:HG22	0.55	1.79	19	13
1:A:148:ALA:O	1:A:153:LEU:HB2	0.55	2.01	11	9
1:A:96:ILE:HD13	1:A:208:GLU:CB	0.55	2.31	10	2
1:A:119:TYR:CD1	1:A:144:ILE:HB	0.55	2.35	13	2
1:A:206:MET:O	1:A:210:THR:HG23	0.55	2.01	14	1
1:A:173:VAL:HA	1:A:176:LEU:HB3	0.55	1.78	14	16
1:A:212:LEU:O	1:A:215:LYS:NZ	0.55	2.39	3	6
1:A:172:PHE:O	1:A:176:LEU:HG	0.55	2.01	18	2
1:A:141:LEU:O	1:A:144:ILE:HG12	0.55	2.02	7	20
1:A:198:LYS:HA	1:A:201:ALA:HB3	0.55	1.79	1	5
1:A:83:VAL:HG12	1:A:87:MET:HE2	0.55	1.78	5	1
1:A:120:SER:HA	1:A:123:LYS:CD	0.55	2.30	13	1
1:A:180:ALA:CB	1:A:188:PHE:CZ	0.55	2.89	2	17
1:A:156:GLU:HB3	1:A:163:THR:HB	0.55	1.79	19	6
1:A:81:LYS:O	1:A:81:LYS:HG3	0.55	2.01	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:140:PHE:HB2	1:A:235:TYR:CD1	0.55	2.36	3	6
1:A:191:HIS:HA	1:A:194:GLN:CD	0.55	2.27	20	5
1:A:176:LEU:HD11	1:A:204:ILE:HD11	0.55	1.79	13	2
1:A:215:LYS:HD3	1:A:215:LYS:C	0.55	2.27	16	1
1:A:116:SER:CB	1:A:167:ALA:HA	0.55	2.30	20	2
1:A:110:THR:O	1:A:114:ILE:CG2	0.55	2.55	1	3
1:A:195:VAL:HA	1:A:198:LYS:HD3	0.55	1.78	19	2
1:A:220:THR:OG1	1:A:223:GLN:HB3	0.55	2.01	17	20
1:A:94:LEU:HD21	1:A:96:ILE:CD1	0.55	2.32	17	1
1:A:110:THR:O	1:A:114:ILE:HG22	0.55	2.02	1	3
1:A:84:LYS:HG2	1:A:200:TYR:CE1	0.55	2.37	7	8
1:A:115:LEU:CD1	1:A:213:PHE:CE1	0.55	2.90	14	5
1:A:194:GLN:O	1:A:198:LYS:HD3	0.55	2.01	15	5
1:A:96:ILE:HG13	1:A:172:PHE:CD1	0.55	2.37	10	1
1:A:206:MET:SD	1:A:222:GLN:HB2	0.55	2.42	7	3
1:A:91:LEU:HD13	1:A:204:ILE:HG13	0.55	1.78	11	3
1:A:194:GLN:HA	1:A:197:PHE:HB2	0.54	1.78	17	2
1:A:206:MET:HB2	1:A:221:PRO:HB2	0.54	1.79	12	7
1:A:152:GLY:C	1:A:154:PRO:HD3	0.54	2.26	14	3
1:A:221:PRO:O	1:A:225:GLN:CB	0.54	2.56	11	18
1:A:141:LEU:HA	1:A:144:ILE:CG1	0.54	2.32	7	12
1:A:179:SER:O	1:A:183:LYS:N	0.54	2.38	2	20
1:A:126:CYS:HA	1:A:129:LEU:HD21	0.54	1.78	6	1
1:A:87:MET:HG3	1:A:176:LEU:HD11	0.54	1.80	7	2
1:A:81:LYS:HG3	1:A:84:LYS:HB3	0.54	1.78	2	9
1:A:209:VAL:HB	1:A:213:PHE:CZ	0.54	2.37	16	14
1:A:104:PRO:O	1:A:108:ARG:HG2	0.54	2.01	12	4
1:A:96:ILE:HD11	1:A:172:PHE:CD1	0.54	2.37	20	3
1:A:208:GLU:O	1:A:211:PRO:HD2	0.54	2.03	14	13
1:A:99:ASN:HB2	1:A:106:TYR:CE2	0.54	2.36	9	1
1:A:116:SER:C	1:A:119:TYR:HB3	0.54	2.28	17	10
1:A:109:GLN:O	1:A:113:ALA:CB	0.54	2.56	15	9
1:A:234:LYS:O	1:A:234:LYS:NZ	0.54	2.39	5	3
1:A:87:MET:SD	1:A:204:ILE:CD1	0.54	2.96	12	1
1:A:199:ALA:O	1:A:202:GLU:HG3	0.54	2.02	19	4
1:A:94:LEU:HD11	1:A:172:PHE:HB3	0.54	1.79	13	3
1:A:119:TYR:CD2	1:A:167:ALA:HB1	0.54	2.38	13	2
1:A:130:LEU:CG	1:A:135:VAL:HG11	0.54	2.33	12	11
1:A:173:VAL:CG1	1:A:177:ILE:HD13	0.54	2.33	18	1
1:A:140:PHE:CE1	1:A:231:ILE:HB	0.54	2.38	15	8
1:A:116:SER:HB2	1:A:167:ALA:HA	0.54	1.80	20	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:173:VAL:CG1	1:A:198:LYS:HB2	0.54	2.33	19	1
1:A:133:LYS:NZ	1:A:236:LEU:O	0.54	2.36	7	7
1:A:144:ILE:O	1:A:148:ALA:N	0.54	2.41	15	9
1:A:173:VAL:HG12	1:A:201:ALA:CB	0.54	2.33	8	1
1:A:81:LYS:HA	1:A:84:LYS:HB2	0.54	1.79	13	1
1:A:108:ARG:HA	1:A:108:ARG:NH2	0.53	2.18	2	9
1:A:113:ALA:HA	1:A:116:SER:OG	0.53	2.03	6	6
1:A:190:ASN:HB2	1:A:193:GLN:HB2	0.53	1.80	8	2
1:A:207:LYS:HA	1:A:210:THR:CG2	0.53	2.33	14	1
1:A:147:ALA:CB	1:A:224:PHE:CE1	0.53	2.91	3	2
1:A:209:VAL:HG23	1:A:221:PRO:HG3	0.53	1.79	7	4
1:A:83:VAL:CG2	1:A:184:TYR:CD2	0.53	2.81	13	4
1:A:94:LEU:CD2	1:A:96:ILE:HG13	0.53	2.33	19	1
1:A:233:ASN:HA	1:A:236:LEU:HB2	0.53	1.79	13	16
1:A:82:THR:OG1	1:A:83:VAL:N	0.53	2.40	1	8
1:A:83:VAL:O	1:A:84:LYS:C	0.53	2.51	17	20
1:A:191:HIS:CD2	1:A:191:HIS:C	0.53	2.86	1	3
1:A:126:CYS:HA	1:A:129:LEU:CD2	0.53	2.33	6	2
1:A:233:ASN:HA	1:A:236:LEU:HB3	0.53	1.79	6	2
1:A:177:ILE:CD1	1:A:197:PHE:HB3	0.53	2.34	19	3
1:A:153:LEU:O	1:A:164:PRO:HA	0.53	2.03	3	6
1:A:119:TYR:CE2	1:A:164:PRO:HG2	0.53	2.38	13	2
1:A:215:LYS:HD3	1:A:215:LYS:N	0.53	2.17	16	1
1:A:206:MET:O	1:A:210:THR:CG2	0.53	2.56	14	1
1:A:151:ALA:HB3	1:A:153:LEU:HD21	0.53	1.81	16	1
1:A:130:LEU:HD21	1:A:235:TYR:O	0.53	2.04	19	1
1:A:137:ILE:O	1:A:141:LEU:N	0.53	2.35	11	13
1:A:144:ILE:CG2	1:A:228:ILE:CG1	0.53	2.87	20	10
1:A:90:LYS:HA	1:A:90:LYS:CE	0.53	2.34	15	5
1:A:151:ALA:HB1	1:A:219:PRO:HG3	0.53	1.79	7	1
1:A:210:THR:OG1	1:A:211:PRO:HD3	0.53	2.03	14	1
1:A:114:ILE:HD12	1:A:209:VAL:CB	0.53	2.33	17	1
1:A:234:LYS:HG3	1:A:235:TYR:CD1	0.53	2.39	3	1
1:A:143:GLU:CB	1:A:231:ILE:CG2	0.53	2.85	15	6
1:A:111:CYS:SG	1:A:212:LEU:HB2	0.53	2.43	7	2
1:A:177:ILE:HG21	1:A:198:LYS:CE	0.53	2.34	8	2
1:A:126:CYS:SG	1:A:232:ALA:CA	0.53	2.97	15	1
1:A:206:MET:CA	1:A:209:VAL:HG22	0.52	2.34	8	14
1:A:107:ALA:O	1:A:111:CYS:SG	0.52	2.67	7	5
1:A:170:ASN:CG	1:A:173:VAL:HB	0.52	2.29	11	3
1:A:123:LYS:CB	1:A:141:LEU:HD12	0.52	2.34	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:LEU:HD21	1:A:96:ILE:HD11	0.52	1.80	17	1
1:A:97:LYS:O	1:A:101:SER:N	0.52	2.42	17	5
1:A:124:ASP:O	1:A:128:LYS:HB2	0.52	2.04	18	9
1:A:133:LYS:NZ	1:A:237:GLN:O	0.52	2.40	18	6
1:A:112:GLU:HB3	1:A:153:LEU:CD2	0.52	2.35	10	10
1:A:201:ALA:O	1:A:204:ILE:HG12	0.52	2.04	15	9
1:A:84:LYS:HD3	1:A:200:TYR:CD1	0.52	2.40	18	1
1:A:113:ALA:O	1:A:117:ALA:N	0.52	2.43	16	17
1:A:170:ASN:HB3	1:A:173:VAL:HB	0.52	1.82	17	6
1:A:106:TYR:CD1	1:A:106:TYR:C	0.52	2.86	19	8
1:A:123:LYS:CB	1:A:137:ILE:HD11	0.52	2.34	18	1
1:A:123:LYS:O	1:A:127:CYS:CB	0.52	2.58	14	19
1:A:147:ALA:O	1:A:151:ALA:HB2	0.52	2.05	2	7
1:A:222:GLN:O	1:A:226:LEU:HB2	0.52	2.05	13	8
1:A:228:ILE:HG22	1:A:229:GLU:H	0.52	1.65	6	18
1:A:81:LYS:HG3	1:A:84:LYS:CB	0.52	2.35	11	1
1:A:118:VAL:O	1:A:122:ASN:ND2	0.52	2.43	14	2
1:A:81:LYS:O	1:A:81:LYS:HG2	0.52	2.03	19	1
1:A:177:ILE:HG13	1:A:198:LYS:HB3	0.52	1.81	12	3
1:A:121:ASN:O	1:A:125:GLN:N	0.52	2.31	11	8
1:A:184:TYR:O	1:A:188:PHE:CD1	0.52	2.63	16	20
1:A:117:ALA:O	1:A:121:ASN:ND2	0.52	2.43	13	17
1:A:194:GLN:O	1:A:197:PHE:HB2	0.52	2.04	15	3
1:A:172:PHE:CE2	1:A:209:VAL:CG1	0.52	2.92	7	3
1:A:113:ALA:HB1	1:A:171:PRO:HG3	0.52	1.82	14	1
1:A:86:PHE:HE2	1:A:180:ALA:HB2	0.51	1.65	18	19
1:A:143:GLU:OE2	1:A:231:ILE:HG23	0.51	2.06	20	2
1:A:141:LEU:HA	1:A:144:ILE:CD1	0.51	2.35	6	13
1:A:84:LYS:HA	1:A:200:TYR:OH	0.51	2.05	20	4
1:A:203:LYS:NZ	1:A:225:GLN:OE1	0.51	2.41	13	3
1:A:115:LEU:HD22	1:A:224:PHE:CB	0.51	2.35	12	11
1:A:224:PHE:O	1:A:228:ILE:HB	0.51	2.05	3	9
1:A:86:PHE:CD2	1:A:183:LYS:HD3	0.51	2.40	4	18
1:A:229:GLU:O	1:A:233:ASN:HB2	0.51	2.05	17	18
1:A:119:TYR:HD1	1:A:144:ILE:HB	0.51	1.65	17	5
1:A:123:LYS:HB2	1:A:141:LEU:HD12	0.51	1.81	9	2
1:A:115:LEU:CA	1:A:118:VAL:HG22	0.51	2.34	13	16
1:A:119:TYR:CD1	1:A:119:TYR:C	0.51	2.87	14	4
1:A:124:ASP:O	1:A:128:LYS:NZ	0.51	2.37	18	1
1:A:200:TYR:CD1	1:A:200:TYR:C	0.51	2.89	7	11
1:A:113:ALA:HA	1:A:116:SER:CB	0.51	2.36	15	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:120:SER:OG	1:A:123:LYS:NZ	0.51	2.32	16	5
1:A:173:VAL:HG21	1:A:202:GLU:HG3	0.51	1.82	3	1
1:A:172:PHE:O	1:A:176:LEU:HB3	0.51	2.06	7	7
1:A:144:ILE:HG23	1:A:231:ILE:HD12	0.51	1.83	15	1
1:A:138:THR:N	1:A:139:PRO:CD	0.51	2.74	6	19
1:A:140:PHE:CE2	1:A:144:ILE:HD11	0.51	2.41	17	5
1:A:90:LYS:CE	1:A:90:LYS:HA	0.51	2.35	8	1
1:A:129:LEU:O	1:A:132:SER:HB3	0.51	2.06	10	2
1:A:172:PHE:O	1:A:176:LEU:CB	0.50	2.59	7	6
1:A:117:ALA:O	1:A:121:ASN:N	0.50	2.36	20	5
1:A:147:ALA:HA	1:A:150:ASN:ND2	0.50	2.21	8	18
1:A:115:LEU:CD1	1:A:213:PHE:CZ	0.50	2.94	17	1
1:A:118:VAL:O	1:A:122:ASN:HB2	0.50	2.06	12	13
1:A:114:ILE:C	1:A:114:ILE:HD12	0.50	2.31	19	10
1:A:114:ILE:HB	1:A:172:PHE:CZ	0.50	2.40	17	2
1:A:230:ASN:O	1:A:234:LYS:HB2	0.50	2.06	15	3
1:A:84:LYS:HG2	1:A:200:TYR:CZ	0.50	2.40	18	1
1:A:177:ILE:HG21	1:A:198:LYS:HD2	0.50	1.83	13	2
1:A:218:MET:HG3	1:A:219:PRO:HD2	0.50	1.84	7	1
1:A:99:ASN:CB	1:A:106:TYR:CE1	0.50	2.95	14	11
1:A:187:MET:HB3	1:A:197:PHE:CZ	0.50	2.41	14	14
1:A:96:ILE:HB	1:A:208:GLU:HG2	0.50	1.83	3	3
1:A:155:GLY:HA3	1:A:164:PRO:HA	0.50	1.82	9	2
1:A:225:GLN:O	1:A:229:GLU:N	0.50	2.36	13	1
1:A:114:ILE:HG23	1:A:115:LEU:N	0.50	2.22	18	12
1:A:136:SER:O	1:A:137:ILE:HG23	0.50	2.07	2	6
1:A:116:SER:OG	1:A:167:ALA:HA	0.50	2.07	5	5
1:A:127:CYS:HB2	1:A:137:ILE:HD13	0.50	1.84	16	3
1:A:115:LEU:CD2	1:A:224:PHE:HB3	0.50	2.37	9	4
1:A:147:ALA:HB1	1:A:224:PHE:CZ	0.50	2.41	13	1
1:A:155:GLY:CA	1:A:164:PRO:HA	0.50	2.37	9	2
1:A:86:PHE:O	1:A:90:LYS:HB2	0.49	2.08	11	7
1:A:110:THR:HG22	1:A:172:PHE:CE1	0.49	2.40	8	1
1:A:118:VAL:HA	1:A:121:ASN:HB2	0.49	1.84	18	3
1:A:113:ALA:O	1:A:117:ALA:HB2	0.49	2.07	3	2
1:A:123:LYS:O	1:A:127:CYS:HB3	0.49	2.07	1	10
1:A:145:GLY:O	1:A:149:GLN:N	0.49	2.45	2	12
1:A:89:GLN:OE1	1:A:89:GLN:HA	0.49	2.07	7	3
1:A:174:VAL:O	1:A:178:ALA:N	0.49	2.44	2	6
1:A:126:CYS:SG	1:A:235:TYR:HB2	0.49	2.47	8	5
1:A:234:LYS:HE3	1:A:234:LYS:N	0.49	2.22	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:151:ALA:CB	1:A:153:LEU:HD21	0.49	2.37	16	1
1:A:86:PHE:CE1	1:A:90:LYS:HG2	0.49	2.42	5	2
1:A:218:MET:HG2	1:A:219:PRO:HD2	0.49	1.82	5	1
1:A:119:TYR:CZ	1:A:164:PRO:CD	0.49	2.95	7	1
1:A:143:GLU:OE2	1:A:234:LYS:NZ	0.49	2.41	17	3
1:A:116:SER:CA	1:A:119:TYR:HB3	0.49	2.37	17	8
1:A:136:SER:OG	1:A:137:ILE:N	0.49	2.45	7	3
1:A:120:SER:CA	1:A:123:LYS:HG3	0.49	2.37	9	1
1:A:149:GLN:NE2	1:A:149:GLN:HA	0.49	2.22	15	3
1:A:114:ILE:O	1:A:114:ILE:HD12	0.49	2.07	19	10
1:A:88:LEU:O	1:A:91:LEU:HB3	0.49	2.08	7	5
1:A:198:LYS:O	1:A:198:LYS:NZ	0.49	2.45	5	1
1:A:145:GLY:HA2	1:A:162:PHE:CG	0.49	2.43	11	1
1:A:83:VAL:O	1:A:87:MET:CB	0.49	2.60	11	4
1:A:97:LYS:CG	1:A:98:GLY:N	0.49	2.76	1	16
1:A:113:ALA:HA	1:A:116:SER:HB3	0.49	1.84	18	11
1:A:169:ALA:O	1:A:170:ASN:HB3	0.49	2.08	1	3
1:A:138:THR:HB	1:A:139:PRO:CD	0.49	2.38	5	8
1:A:173:VAL:O	1:A:174:VAL:C	0.49	2.54	8	2
1:A:202:GLU:HA	1:A:205:VAL:CG2	0.49	2.37	4	1
1:A:96:ILE:HG22	1:A:212:LEU:HD21	0.49	1.85	7	1
1:A:115:LEU:HD22	1:A:224:PHE:CG	0.49	2.43	5	7
1:A:125:GLN:O	1:A:128:LYS:NZ	0.49	2.42	1	3
1:A:140:PHE:HD1	1:A:231:ILE:CG2	0.49	2.21	8	11
1:A:156:GLU:CB	1:A:163:THR:HG22	0.49	2.38	3	1
1:A:129:LEU:HD12	1:A:133:LYS:CE	0.49	2.38	12	4
1:A:87:MET:HE2	1:A:176:LEU:HD21	0.49	1.82	19	1
1:A:156:GLU:N	1:A:163:THR:O	0.49	2.45	9	2
1:A:129:LEU:CD2	1:A:236:LEU:CD1	0.48	2.86	10	7
1:A:112:GLU:HG2	1:A:153:LEU:HG	0.48	1.84	5	1
1:A:183:LYS:HG2	1:A:184:TYR:CE2	0.48	2.43	15	10
1:A:222:GLN:HA	1:A:225:GLN:HB3	0.48	1.83	15	2
1:A:96:ILE:HB	1:A:208:GLU:CG	0.48	2.38	3	3
1:A:129:LEU:HD12	1:A:133:LYS:HE2	0.48	1.85	8	1
1:A:173:VAL:HG12	1:A:201:ALA:HB1	0.48	1.84	8	1
1:A:201:ALA:HA	1:A:204:ILE:HG12	0.48	1.86	3	4
1:A:147:ALA:O	1:A:151:ALA:CB	0.48	2.61	3	17
1:A:148:ALA:O	1:A:153:LEU:HG	0.48	2.08	9	4
1:A:103:ASP:CB	1:A:106:TYR:HB3	0.48	2.39	6	10
1:A:122:ASN:ND2	1:A:228:ILE:CG2	0.48	2.76	14	2
1:A:87:MET:HE2	1:A:176:LEU:HG	0.48	1.85	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:LEU:CD2	1:A:207:LYS:HE3	0.48	2.38	6	2
1:A:91:LEU:CD1	1:A:205:VAL:HA	0.48	2.39	13	3
1:A:112:GLU:CB	1:A:153:LEU:HB3	0.48	2.38	9	1
1:A:207:LYS:NZ	1:A:208:GLU:OE1	0.48	2.44	11	1
1:A:114:ILE:CD1	1:A:209:VAL:HG11	0.48	2.37	6	3
1:A:91:LEU:HD11	1:A:205:VAL:CA	0.48	2.39	8	1
1:A:187:MET:O	1:A:193:GLN:HB3	0.48	2.08	17	1
1:A:177:ILE:HG13	1:A:198:LYS:CB	0.48	2.38	1	2
1:A:126:CYS:SG	1:A:235:TYR:CB	0.48	3.02	17	2
1:A:173:VAL:HG11	1:A:198:LYS:HB2	0.48	1.84	19	1
1:A:81:LYS:HE2	1:A:85:ASP:HA	0.48	1.85	12	3
1:A:86:PHE:CD2	1:A:184:TYR:HE2	0.48	2.26	15	11
1:A:212:LEU:N	1:A:212:LEU:CD2	0.48	2.76	9	13
1:A:131:ILE:C	1:A:131:ILE:CD1	0.48	2.86	7	1
1:A:193:GLN:HG2	1:A:197:PHE:CE2	0.48	2.43	13	1
1:A:214:ASN:O	1:A:215:LYS:NZ	0.47	2.40	4	1
1:A:130:LEU:HD22	1:A:135:VAL:CB	0.47	2.39	19	6
1:A:225:GLN:O	1:A:229:GLU:HB2	0.47	2.09	18	12
1:A:87:MET:HG3	1:A:176:LEU:HG	0.47	1.86	3	1
1:A:168:GLY:O	1:A:170:ASN:N	0.47	2.47	14	2
1:A:190:ASN:HB3	1:A:193:GLN:HB2	0.47	1.86	20	1
1:A:87:MET:SD	1:A:201:ALA:HB2	0.47	2.49	1	1
1:A:169:ALA:O	1:A:170:ASN:CB	0.47	2.62	9	4
1:A:148:ALA:HB1	1:A:164:PRO:HD3	0.47	1.85	3	2
1:A:209:VAL:C	1:A:211:PRO:HD2	0.47	2.34	13	9
1:A:193:GLN:HG2	1:A:197:PHE:CZ	0.47	2.45	6	1
1:A:123:LYS:O	1:A:123:LYS:HG2	0.47	2.09	1	12
1:A:201:ALA:O	1:A:205:VAL:HG13	0.47	2.10	5	3
1:A:191:HIS:O	1:A:195:VAL:HB	0.47	2.10	7	3
1:A:82:THR:O	1:A:85:ASP:HB3	0.47	2.10	18	2
1:A:203:LYS:HD3	1:A:206:MET:SD	0.47	2.49	14	1
1:A:91:LEU:HD22	1:A:204:ILE:HD12	0.47	1.87	17	1
1:A:203:LYS:HE3	1:A:206:MET:SD	0.47	2.49	18	1
1:A:114:ILE:HD12	1:A:114:ILE:C	0.47	2.34	4	5
1:A:125:GLN:O	1:A:129:LEU:HD23	0.47	2.10	20	10
1:A:188:PHE:CZ	1:A:197:PHE:CD2	0.47	3.03	13	7
1:A:221:PRO:O	1:A:225:GLN:HB3	0.47	2.09	3	10
1:A:87:MET:SD	1:A:200:TYR:HE1	0.47	2.32	9	3
1:A:113:ALA:HB3	1:A:171:PRO:HG3	0.47	1.86	10	2
1:A:120:SER:O	1:A:123:LYS:CD	0.47	2.62	11	2
1:A:126:CYS:O	1:A:130:LEU:HG	0.47	2.10	7	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:LEU:HD13	1:A:204:ILE:CG1	0.47	2.39	11	3
1:A:116:SER:HB3	1:A:167:ALA:HB1	0.47	1.85	14	1
1:A:230:ASN:O	1:A:234:LYS:NZ	0.47	2.47	15	1
1:A:96:ILE:CG2	1:A:212:LEU:CD1	0.47	2.93	17	1
1:A:210:THR:N	1:A:211:PRO:CD	0.47	2.77	17	13
1:A:112:GLU:HG2	1:A:153:LEU:HB3	0.47	1.86	9	1
1:A:96:ILE:O	1:A:106:TYR:CE1	0.47	2.68	19	3
1:A:85:ASP:O	1:A:89:GLN:HG2	0.47	2.09	17	1
1:A:190:ASN:HB2	1:A:193:GLN:HG3	0.47	1.86	12	2
1:A:120:SER:CA	1:A:123:LYS:HD3	0.47	2.36	13	1
1:A:99:ASN:O	1:A:103:ASP:N	0.47	2.40	17	13
1:A:127:CYS:CA	1:A:130:LEU:HB2	0.47	2.39	8	7
1:A:122:ASN:OD1	1:A:144:ILE:HD12	0.47	2.10	14	1
1:A:99:ASN:O	1:A:103:ASP:HB2	0.46	2.10	15	14
1:A:200:TYR:O	1:A:204:ILE:HG12	0.46	2.10	9	2
1:A:89:GLN:HA	1:A:89:GLN:OE1	0.46	2.11	5	4
1:A:173:VAL:O	1:A:177:ILE:HB	0.46	2.10	11	4
1:A:225:GLN:O	1:A:228:ILE:N	0.46	2.48	13	1
1:A:81:LYS:NZ	1:A:85:ASP:OD1	0.46	2.46	14	2
1:A:107:ALA:HA	1:A:110:THR:HG22	0.46	1.86	20	2
1:A:180:ALA:O	1:A:184:TYR:N	0.46	2.46	10	3
1:A:122:ASN:HD21	1:A:228:ILE:HG23	0.46	1.69	15	3
1:A:201:ALA:HA	1:A:204:ILE:CG1	0.46	2.40	3	1
1:A:99:ASN:CB	1:A:106:TYR:CZ	0.46	2.98	4	5
1:A:174:VAL:CB	1:A:175:PRO:HD3	0.46	2.40	8	4
1:A:213:PHE:HD2	1:A:221:PRO:HD3	0.46	1.70	8	4
1:A:137:ILE:C	1:A:139:PRO:HD2	0.46	2.34	6	3
1:A:162:PHE:C	1:A:162:PHE:HD1	0.46	2.18	7	1
1:A:127:CYS:SG	1:A:131:ILE:HD13	0.46	2.50	8	1
1:A:87:MET:HE1	1:A:177:ILE:HD13	0.46	1.87	3	1
1:A:136:SER:O	1:A:139:PRO:HD2	0.46	2.10	11	2
1:A:96:ILE:HG12	1:A:110:THR:CG2	0.46	2.40	14	1
1:A:111:CYS:SG	1:A:218:MET:SD	0.46	3.08	14	1
1:A:106:TYR:O	1:A:109:GLN:HG3	0.46	2.10	16	1
1:A:195:VAL:O	1:A:198:LYS:NZ	0.46	2.45	19	2
1:A:102:LYS:NZ	1:A:103:ASP:OD2	0.46	2.44	9	2
1:A:108:ARG:HA	1:A:108:ARG:CZ	0.46	2.40	5	4
1:A:169:ALA:HB1	1:A:174:VAL:CG2	0.46	2.40	6	1
1:A:203:LYS:NZ	1:A:229:GLU:OE2	0.46	2.48	7	1
1:A:209:VAL:HA	1:A:212:LEU:CG	0.46	2.41	17	2
1:A:122:ASN:OD1	1:A:228:ILE:C	0.46	2.58	10	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:162:PHE:CG	1:A:163:THR:N	0.46	2.83	3	3
1:A:116:SER:O	1:A:119:TYR:HB3	0.46	2.11	5	8
1:A:145:GLY:C	1:A:148:ALA:HB3	0.46	2.36	9	2
1:A:207:LYS:HA	1:A:210:THR:HG23	0.46	1.86	14	1
1:A:108:ARG:O	1:A:112:GLU:HB2	0.46	2.10	17	1
1:A:233:ASN:O	1:A:236:LEU:HB3	0.46	2.10	5	12
1:A:200:TYR:CE2	1:A:204:ILE:HD13	0.46	2.45	5	2
1:A:117:ALA:HB1	1:A:170:ASN:OD1	0.46	2.11	7	1
1:A:202:GLU:CD	1:A:202:GLU:C	0.46	2.84	8	2
1:A:115:LEU:HB3	1:A:224:PHE:CD2	0.46	2.46	4	4
1:A:124:ASP:OD2	1:A:198:LYS:NZ	0.46	2.48	20	1
1:A:81:LYS:HG2	1:A:85:ASP:HB2	0.46	1.87	9	4
1:A:87:MET:HE3	1:A:200:TYR:HE1	0.46	1.71	5	1
1:A:162:PHE:O	1:A:164:PRO:HD3	0.46	2.10	11	1
1:A:96:ILE:HD11	1:A:172:PHE:CB	0.46	2.41	3	2
1:A:107:ALA:O	1:A:111:CYS:CB	0.46	2.63	10	5
1:A:144:ILE:HG22	1:A:228:ILE:CD1	0.46	2.39	5	1
1:A:126:CYS:HB3	1:A:140:PHE:CE2	0.46	2.46	6	1
1:A:129:LEU:HD12	1:A:133:LYS:HE3	0.46	1.87	18	3
1:A:114:ILE:CG2	1:A:213:PHE:HZ	0.46	2.24	1	5
1:A:179:SER:O	1:A:183:LYS:HB3	0.46	2.11	12	16
1:A:99:ASN:HB2	1:A:106:TYR:CD1	0.46	2.45	17	1
1:A:90:LYS:O	1:A:94:LEU:HB3	0.45	2.11	19	4
1:A:90:LYS:NZ	1:A:93:SER:OG	0.45	2.37	5	2
1:A:223:GLN:CG	1:A:224:PHE:N	0.45	2.79	20	7
1:A:234:LYS:HE2	1:A:235:TYR:CE1	0.45	2.45	7	2
1:A:215:LYS:HE3	1:A:215:LYS:HA	0.45	1.87	9	1
1:A:152:GLY:O	1:A:154:PRO:HD3	0.45	2.11	16	1
1:A:86:PHE:HE2	1:A:180:ALA:CB	0.45	2.24	13	14
1:A:127:CYS:SG	1:A:137:ILE:HD13	0.45	2.51	1	4
1:A:137:ILE:O	1:A:137:ILE:HG13	0.45	2.12	14	6
1:A:195:VAL:O	1:A:198:LYS:HB2	0.45	2.12	11	5
1:A:106:TYR:HA	1:A:109:GLN:CG	0.45	2.41	16	1
1:A:106:TYR:O	1:A:110:THR:OG1	0.45	2.34	4	3
1:A:86:PHE:CD2	1:A:184:TYR:CE2	0.45	3.04	14	4
1:A:112:GLU:CG	1:A:153:LEU:HB3	0.45	2.41	14	2
1:A:91:LEU:HG	1:A:92:ASN:N	0.45	2.25	2	1
1:A:191:HIS:HA	1:A:194:GLN:HG2	0.45	1.89	11	2
1:A:92:ASN:OD1	1:A:207:LYS:NZ	0.45	2.48	2	1
1:A:148:ALA:CB	1:A:164:PRO:HD3	0.45	2.41	3	1
1:A:201:ALA:HA	1:A:204:ILE:CD1	0.45	2.42	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:180:ALA:HA	1:A:183:LYS:HB3	0.45	1.87	9	4
1:A:225:GLN:HG2	1:A:229:GLU:CD	0.45	2.36	14	2
1:A:207:LYS:HE2	1:A:207:LYS:C	0.45	2.36	16	1
1:A:196:SER:O	1:A:199:ALA:HB3	0.45	2.11	19	2
1:A:109:GLN:O	1:A:113:ALA:N	0.45	2.42	5	1
1:A:136:SER:O	1:A:137:ILE:HG12	0.45	2.11	5	3
1:A:122:ASN:HD22	1:A:228:ILE:CG2	0.45	2.25	14	1
1:A:210:THR:OG1	1:A:211:PRO:CD	0.45	2.65	14	1
1:A:143:GLU:HB3	1:A:231:ILE:CG2	0.45	2.42	15	1
1:A:87:MET:HE2	1:A:176:LEU:CD2	0.45	2.42	19	1
1:A:145:GLY:HA2	1:A:148:ALA:CB	0.45	2.41	9	2
1:A:198:LYS:HA	1:A:201:ALA:CB	0.45	2.42	19	1
1:A:113:ALA:CB	1:A:171:PRO:HG3	0.45	2.42	10	1
1:A:206:MET:HG3	1:A:221:PRO:HG2	0.45	1.88	10	4
1:A:194:GLN:O	1:A:198:LYS:NZ	0.45	2.49	13	2
1:A:97:LYS:HB3	1:A:212:LEU:CD2	0.45	2.42	17	1
1:A:138:THR:HB	1:A:139:PRO:HD3	0.45	1.88	5	3
1:A:94:LEU:O	1:A:95:ASP:C	0.44	2.61	5	9
1:A:83:VAL:C	1:A:85:ASP:N	0.44	2.74	5	15
1:A:120:SER:CA	1:A:123:LYS:HD2	0.44	2.42	11	2
1:A:145:GLY:O	1:A:162:PHE:CD1	0.44	2.70	2	5
1:A:204:ILE:O	1:A:207:LYS:HG2	0.44	2.12	7	5
1:A:226:LEU:O	1:A:230:ASN:HB2	0.44	2.12	6	8
1:A:123:LYS:O	1:A:127:CYS:HB2	0.44	2.12	20	4
1:A:130:LEU:HD23	1:A:133:LYS:HD2	0.44	1.89	5	1
1:A:198:LYS:C	1:A:198:LYS:HD2	0.44	2.37	9	1
1:A:142:LYS:HE3	1:A:142:LYS:O	0.44	2.11	17	1
1:A:221:PRO:O	1:A:225:GLN:N	0.44	2.42	5	3
1:A:112:GLU:CG	1:A:153:LEU:HG	0.44	2.42	5	2
1:A:173:VAL:HG21	1:A:202:GLU:HA	0.44	1.89	7	1
1:A:173:VAL:HG21	1:A:202:GLU:CA	0.44	2.42	7	1
1:A:202:GLU:OE2	1:A:203:LYS:NZ	0.44	2.43	19	1
1:A:209:VAL:O	1:A:210:THR:C	0.44	2.59	6	10
1:A:140:PHE:CE1	1:A:231:ILE:C	0.44	2.95	12	10
1:A:145:GLY:CA	1:A:162:PHE:CE1	0.44	3.01	4	1
1:A:178:ALA:O	1:A:182:ILE:HB	0.44	2.13	10	3
1:A:125:GLN:CG	1:A:126:CYS:N	0.44	2.80	12	1
1:A:122:ASN:OD1	1:A:144:ILE:HG21	0.44	2.13	13	1
1:A:96:ILE:CD1	1:A:208:GLU:HB3	0.44	2.39	10	2
1:A:100:ALA:O	1:A:215:LYS:NZ	0.44	2.40	17	1
1:A:110:THR:OG1	1:A:172:PHE:CE1	0.44	2.69	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:MET:SD	1:A:200:TYR:CZ	0.44	3.10	6	2
1:A:129:LEU:HD11	1:A:236:LEU:CA	0.44	2.35	18	1
1:A:171:PRO:HG2	1:A:172:PHE:CZ	0.44	2.48	1	2
1:A:188:PHE:CD2	1:A:194:GLN:HB2	0.44	2.48	14	3
1:A:123:LYS:CG	1:A:137:ILE:HD11	0.44	2.43	7	2
1:A:130:LEU:HD13	1:A:136:SER:O	0.44	2.13	7	2
1:A:97:LYS:NZ	1:A:208:GLU:OE2	0.44	2.48	9	2
1:A:87:MET:SD	1:A:204:ILE:HD13	0.44	2.53	12	1
1:A:136:SER:O	1:A:139:PRO:HG2	0.44	2.13	20	2
1:A:154:PRO:HA	1:A:162:PHE:CZ	0.44	2.48	14	1
1:A:85:ASP:O	1:A:89:GLN:HG3	0.44	2.13	1	2
1:A:148:ALA:HB3	1:A:162:PHE:HE1	0.44	1.71	5	1
1:A:151:ALA:CB	1:A:219:PRO:HG3	0.44	2.42	7	1
1:A:84:LYS:CD	1:A:200:TYR:CD1	0.44	3.01	18	1
1:A:186:HIS:O	1:A:189:ILE:HD12	0.44	2.12	20	3
1:A:120:SER:C	1:A:123:LYS:HG3	0.44	2.37	9	1
1:A:177:ILE:HG13	1:A:198:LYS:HG3	0.44	1.88	15	2
1:A:120:SER:OG	1:A:168:GLY:O	0.44	2.31	16	1
1:A:107:ALA:HA	1:A:111:CYS:SG	0.44	2.53	17	1
1:A:112:GLU:O	1:A:116:SER:CB	0.43	2.66	3	1
1:A:100:ALA:HA	1:A:107:ALA:HB2	0.43	1.90	8	3
1:A:120:SER:O	1:A:123:LYS:NZ	0.43	2.49	20	2
1:A:172:PHE:HB3	1:A:205:VAL:HG11	0.43	1.90	10	1
1:A:131:ILE:HD13	1:A:131:ILE:O	0.43	2.13	7	1
1:A:177:ILE:HD11	1:A:197:PHE:HB3	0.43	1.88	11	1
1:A:86:PHE:CE1	1:A:90:LYS:HE3	0.43	2.48	12	1
1:A:94:LEU:HD21	1:A:96:ILE:CG1	0.43	2.44	17	1
1:A:81:LYS:CG	1:A:84:LYS:HG3	0.43	2.43	18	1
1:A:219:PRO:HA	1:A:223:GLN:OE1	0.43	2.13	3	1
1:A:87:MET:SD	1:A:87:MET:O	0.43	2.76	12	1
1:A:122:ASN:OD1	1:A:140:PHE:CZ	0.43	2.71	14	1
1:A:96:ILE:HG21	1:A:212:LEU:HD11	0.43	1.89	17	1
1:A:172:PHE:O	1:A:175:PRO:HD2	0.43	2.13	17	1
1:A:119:TYR:CE2	1:A:164:PRO:HG3	0.43	2.49	11	1
1:A:95:ASP:OD2	1:A:98:GLY:HA3	0.43	2.12	17	1
1:A:114:ILE:HG12	1:A:209:VAL:CG2	0.43	2.44	18	1
1:A:102:LYS:HD3	1:A:103:ASP:CG	0.43	2.38	7	2
1:A:183:LYS:CD	1:A:184:TYR:CE2	0.43	3.01	5	3
1:A:87:MET:HE1	1:A:180:ALA:CB	0.43	2.43	7	1
1:A:168:GLY:O	1:A:169:ALA:HB3	0.43	2.14	11	1
1:A:207:LYS:CA	1:A:210:THR:HG23	0.43	2.43	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:121:ASN:HA	1:A:124:ASP:HB3	0.43	1.90	20	2
1:A:87:MET:CE	1:A:180:ALA:HB2	0.43	2.43	7	1
1:A:188:PHE:CD1	1:A:188:PHE:N	0.43	2.87	17	3
1:A:122:ASN:O	1:A:126:CYS:N	0.43	2.40	13	2
1:A:122:ASN:HB3	1:A:140:PHE:HZ	0.43	1.73	18	3
1:A:87:MET:HG2	1:A:204:ILE:CD1	0.43	2.44	16	2
1:A:114:ILE:HG23	1:A:115:LEU:HG	0.43	1.91	7	1
1:A:104:PRO:O	1:A:108:ARG:CG	0.43	2.67	15	2
1:A:81:LYS:CG	1:A:84:LYS:HB3	0.43	2.44	11	1
1:A:139:PRO:HB2	1:A:235:TYR:OH	0.43	2.13	17	1
1:A:114:ILE:CG1	1:A:213:PHE:HZ	0.43	2.27	1	1
1:A:177:ILE:HD11	1:A:197:PHE:C	0.43	2.39	3	2
1:A:174:VAL:CB	1:A:175:PRO:CD	0.43	2.97	8	7
1:A:94:LEU:O	1:A:99:ASN:ND2	0.43	2.51	10	1
1:A:202:GLU:O	1:A:205:VAL:CG2	0.43	2.67	12	1
1:A:145:GLY:HA3	1:A:162:PHE:HD1	0.43	1.70	13	1
1:A:188:PHE:N	1:A:188:PHE:CD1	0.42	2.87	1	1
1:A:204:ILE:O	1:A:207:LYS:CG	0.42	2.67	2	1
1:A:87:MET:CE	1:A:180:ALA:CB	0.42	2.97	3	1
1:A:170:ASN:O	1:A:174:VAL:HG23	0.42	2.14	19	3
1:A:96:ILE:O	1:A:106:TYR:HE1	0.42	1.97	12	7
1:A:83:VAL:HA	1:A:184:TYR:CE2	0.42	2.49	6	1
1:A:119:TYR:CD2	1:A:164:PRO:HG2	0.42	2.49	6	1
1:A:228:ILE:O	1:A:229:GLU:C	0.42	2.61	17	4
1:A:90:LYS:HE3	1:A:176:LEU:CD2	0.42	2.45	2	1
1:A:116:SER:HB2	1:A:167:ALA:HB2	0.42	1.90	5	1
1:A:130:LEU:HD13	1:A:137:ILE:HG22	0.42	1.90	5	1
1:A:164:PRO:O	1:A:165:GLY:C	0.42	2.62	6	1
1:A:225:GLN:O	1:A:226:LEU:C	0.42	2.59	13	2
1:A:234:LYS:HE3	1:A:234:LYS:CA	0.42	2.44	15	1
1:A:140:PHE:CD2	1:A:144:ILE:HD11	0.42	2.49	17	1
1:A:110:THR:HA	1:A:172:PHE:CZ	0.42	2.50	1	2
1:A:183:LYS:O	1:A:185:PRO:CD	0.42	2.67	1	1
1:A:140:PHE:CE2	1:A:144:ILE:HD12	0.42	2.44	6	1
1:A:145:GLY:O	1:A:162:PHE:CZ	0.42	2.72	7	2
1:A:94:LEU:HD23	1:A:96:ILE:CD1	0.42	2.44	8	1
1:A:119:TYR:HA	1:A:122:ASN:HD21	0.42	1.74	13	1
1:A:112:GLU:HB3	1:A:153:LEU:HD23	0.42	1.90	15	1
1:A:180:ALA:HB1	1:A:188:PHE:CE1	0.42	2.49	18	1
1:A:122:ASN:HB3	1:A:140:PHE:CZ	0.42	2.50	18	4
1:A:114:ILE:HD12	1:A:114:ILE:O	0.42	2.15	2	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:LYS:CE	1:A:88:LEU:HD13	0.42	2.45	9	3
1:A:143:GLU:O	1:A:146:GLU:CB	0.42	2.67	13	2
1:A:94:LEU:HD21	1:A:96:ILE:HG13	0.42	1.91	3	2
1:A:119:TYR:CD2	1:A:164:PRO:CG	0.42	3.02	3	1
1:A:153:LEU:HD22	1:A:164:PRO:HB2	0.42	1.91	5	1
1:A:162:PHE:HD1	1:A:163:THR:N	0.42	2.13	7	1
1:A:190:ASN:HB2	1:A:193:GLN:CB	0.42	2.44	13	1
1:A:153:LEU:N	1:A:154:PRO:HD3	0.42	2.29	19	1
1:A:169:ALA:HB1	1:A:174:VAL:HG21	0.42	1.91	6	1
1:A:215:LYS:C	1:A:215:LYS:HD2	0.42	2.39	6	1
1:A:197:PHE:O	1:A:200:TYR:CD2	0.42	2.73	12	1
1:A:127:CYS:CB	1:A:137:ILE:HG21	0.42	2.45	19	2
1:A:183:LYS:CG	1:A:184:TYR:CE2	0.42	3.03	15	2
1:A:206:MET:CA	1:A:209:VAL:CG2	0.42	2.96	16	3
1:A:170:ASN:HB3	1:A:173:VAL:HG22	0.42	1.90	8	1
1:A:142:LYS:O	1:A:142:LYS:NZ	0.42	2.49	16	1
1:A:198:LYS:HD2	1:A:199:ALA:N	0.42	2.30	17	1
1:A:100:ALA:CA	1:A:107:ALA:HB2	0.42	2.45	10	3
1:A:191:HIS:CG	1:A:192:ASN:N	0.42	2.83	16	1
1:A:88:LEU:O	1:A:92:ASN:CG	0.42	2.63	17	1
1:A:197:PHE:HD1	1:A:200:TYR:CE2	0.42	2.33	19	2
1:A:147:ALA:HB1	1:A:224:PHE:HE1	0.42	1.69	18	1
1:A:130:LEU:HD23	1:A:133:LYS:HE3	0.42	1.91	4	1
1:A:111:CYS:C	1:A:114:ILE:HG22	0.42	2.40	10	2
1:A:177:ILE:CG2	1:A:198:LYS:HD2	0.42	2.45	13	1
1:A:170:ASN:CB	1:A:173:VAL:HB	0.42	2.43	17	1
1:A:106:TYR:O	1:A:110:THR:HG22	0.42	2.14	20	1
1:A:219:PRO:HB2	1:A:224:PHE:HB2	0.42	1.92	8	1
1:A:86:PHE:CE2	1:A:180:ALA:HB2	0.42	2.50	13	1
1:A:124:ASP:OD1	1:A:128:LYS:NZ	0.42	2.49	15	1
1:A:81:LYS:HA	1:A:84:LYS:CB	0.41	2.45	13	1
1:A:201:ALA:CA	1:A:204:ILE:HG12	0.41	2.45	3	2
1:A:142:LYS:NZ	1:A:146:GLU:OE1	0.41	2.48	4	1
1:A:114:ILE:O	1:A:118:VAL:HG13	0.41	2.15	7	1
1:A:155:GLY:HA2	1:A:165:GLY:N	0.41	2.31	9	1
1:A:117:ALA:HA	1:A:169:ALA:O	0.41	2.15	11	1
1:A:114:ILE:HD12	1:A:209:VAL:HG21	0.41	1.92	17	1
1:A:91:LEU:O	1:A:94:LEU:HB3	0.41	2.15	2	1
1:A:112:GLU:CB	1:A:153:LEU:HG	0.41	2.45	2	1
1:A:173:VAL:HA	1:A:176:LEU:HD12	0.41	1.92	2	1
1:A:205:VAL:O	1:A:209:VAL:N	0.41	2.35	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:117:ALA:HB1	1:A:202:GLU:OE1	0.41	2.16	5	1
1:A:87:MET:HG3	1:A:176:LEU:CD1	0.41	2.44	7	1
1:A:88:LEU:HD12	1:A:200:TYR:HE2	0.41	1.74	9	2
1:A:99:ASN:HB3	1:A:106:TYR:CG	0.41	2.50	18	1
1:A:198:LYS:O	1:A:202:GLU:HG3	0.41	2.16	18	1
1:A:149:GLN:NE2	1:A:149:GLN:CA	0.41	2.83	15	1
1:A:172:PHE:C	1:A:175:PRO:HD2	0.41	2.41	17	1
1:A:130:LEU:HD23	1:A:130:LEU:HA	0.41	1.63	18	1
1:A:119:TYR:CD2	1:A:120:SER:N	0.41	2.88	1	1
1:A:214:ASN:OD1	1:A:215:LYS:NZ	0.41	2.42	4	1
1:A:203:LYS:O	1:A:206:MET:HB3	0.41	2.16	8	1
1:A:118:VAL:HG23	1:A:228:ILE:HD13	0.41	1.88	9	1
1:A:129:LEU:O	1:A:133:LYS:NZ	0.41	2.42	11	1
1:A:87:MET:HE3	1:A:87:MET:HB2	0.41	1.73	18	2
1:A:203:LYS:CE	1:A:206:MET:SD	0.41	3.08	18	1
1:A:233:ASN:O	1:A:237:GLN:HG3	0.41	2.14	20	1
1:A:91:LEU:HG	1:A:208:GLU:HG3	0.41	1.92	5	1
1:A:110:THR:OG1	1:A:171:PRO:HB2	0.41	2.16	7	1
1:A:127:CYS:CB	1:A:137:ILE:HD12	0.41	2.36	7	1
1:A:174:VAL:HB	1:A:175:PRO:CD	0.41	2.45	8	2
1:A:177:ILE:CG1	1:A:198:LYS:HD2	0.41	2.45	8	1
1:A:144:ILE:O	1:A:148:ALA:CB	0.41	2.69	11	1
1:A:91:LEU:HD11	1:A:208:GLU:HB2	0.41	1.91	14	2
1:A:118:VAL:HG23	1:A:119:TYR:N	0.41	2.30	13	1
1:A:87:MET:HE2	1:A:88:LEU:N	0.41	2.31	20	1
1:A:112:GLU:HB3	1:A:153:LEU:HG	0.41	1.91	2	1
1:A:210:THR:HA	1:A:213:PHE:CD2	0.41	2.50	3	1
1:A:203:LYS:HE2	1:A:203:LYS:HB2	0.41	1.75	4	1
1:A:87:MET:CE	1:A:204:ILE:HD13	0.41	2.45	6	1
1:A:96:ILE:HG22	1:A:212:LEU:CD2	0.41	2.46	17	1
1:A:90:LYS:O	1:A:91:LEU:C	0.41	2.63	19	1
1:A:100:ALA:N	1:A:106:TYR:CD1	0.41	2.89	3	1
1:A:206:MET:O	1:A:221:PRO:HG3	0.41	2.15	10	2
1:A:121:ASN:O	1:A:124:ASP:HB3	0.41	2.16	14	1
1:A:190:ASN:HB3	1:A:192:ASN:OD1	0.41	2.16	18	1
1:A:202:GLU:OE1	1:A:203:LYS:NZ	0.41	2.45	4	1
1:A:171:PRO:HG2	1:A:172:PHE:CE2	0.41	2.50	6	2
1:A:190:ASN:HB2	1:A:193:GLN:NE2	0.41	2.30	6	1
1:A:215:LYS:O	1:A:215:LYS:CG	0.41	2.69	16	1
1:A:89:GLN:O	1:A:93:SER:HB3	0.41	2.16	19	1
1:A:149:GLN:O	1:A:149:GLN:NE2	0.41	2.53	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:VAL:HG22	1:A:184:TYR:CB	0.41	2.46	6	1
1:A:203:LYS:HA	1:A:203:LYS:HE3	0.41	1.92	9	1
1:A:190:ASN:CB	1:A:193:GLN:HG3	0.41	2.46	14	1
1:A:94:LEU:CD2	1:A:172:PHE:HB3	0.40	2.37	2	1
1:A:118:VAL:CG2	1:A:119:TYR:N	0.40	2.84	13	2
1:A:143:GLU:CB	1:A:231:ILE:HD13	0.40	2.43	14	1
1:A:155:GLY:HA3	1:A:163:THR:O	0.40	2.16	15	1
1:A:109:GLN:NE2	1:A:109:GLN:HA	0.40	2.31	19	1
1:A:147:ALA:O	1:A:151:ALA:N	0.40	2.50	19	1
1:A:163:THR:HG23	1:A:164:PRO:CD	0.40	2.45	3	1
1:A:86:PHE:CD1	1:A:183:LYS:CD	0.40	3.05	12	1
1:A:87:MET:CE	1:A:176:LEU:HD21	0.40	2.46	19	1
1:A:118:VAL:C	1:A:228:ILE:CD1	0.40	2.94	3	1
1:A:96:ILE:HA	1:A:106:TYR:OH	0.40	2.16	7	1
1:A:86:PHE:CE1	1:A:90:LYS:CE	0.40	3.04	12	1
1:A:140:PHE:CD1	1:A:231:ILE:C	0.40	3.00	13	1
1:A:99:ASN:HB3	1:A:106:TYR:CD2	0.40	2.52	18	1
1:A:94:LEU:HD23	1:A:96:ILE:HD12	0.40	1.92	8	1
1:A:177:ILE:HG13	1:A:198:LYS:HD2	0.40	1.93	8	1
1:A:177:ILE:HG21	1:A:198:LYS:CD	0.40	2.45	13	1
1:A:122:ASN:O	1:A:126:CYS:SG	0.40	2.79	15	1
1:A:215:LYS:C	1:A:215:LYS:CD	0.40	2.91	16	1
1:A:147:ALA:HA	1:A:150:ASN:HD22	0.40	1.76	3	1
1:A:141:LEU:C	1:A:141:LEU:CD1	0.40	2.93	5	1
1:A:215:LYS:O	1:A:215:LYS:HE2	0.40	2.16	5	1
1:A:208:GLU:O	1:A:211:PRO:CD	0.40	2.69	14	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	152/168 (90%)	139±2 (91±1%)	10±2 (7±1%)	3±1 (2±1%)	8	49
All	All	3040/3360 (90%)	2780 (91%)	198 (7%)	62 (2%)	8	49

All 9 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	135	VAL	17
1	A	237	GLN	16
1	A	137	ILE	12
1	A	170	ASN	7
1	A	155	GLY	5
1	A	165	GLY	2
1	A	216	GLY	1
1	A	169	ALA	1
1	A	215	LYS	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	128/140 (91%)	77±2 (60±2%)	51±2 (40±2%)	0 5
All	All	2560/2800 (91%)	1542 (60%)	1018 (40%)	0 5

All 85 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	86	PHE	20
1	A	88	LEU	20
1	A	94	LEU	20
1	A	114	ILE	20
1	A	123	LYS	20
1	A	125	GLN	20
1	A	129	LEU	20
1	A	135	VAL	20
1	A	142	LYS	20
1	A	144	ILE	20
1	A	150	ASN	20
1	A	156	GLU	20
1	A	182	ILE	20
1	A	183	LYS	20
1	A	191	HIS	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	207	LYS	20
1	A	212	LEU	20
1	A	215	LYS	20
1	A	220	THR	20
1	A	228	ILE	20
1	A	230	ASN	20
1	A	90	LYS	19
1	A	96	ILE	19
1	A	195	VAL	19
1	A	112	GLU	18
1	A	122	ASN	18
1	A	128	LYS	18
1	A	176	LEU	18
1	A	210	THR	18
1	A	226	LEU	18
1	A	116	SER	17
1	A	194	GLN	17
1	A	225	GLN	17
1	A	223	GLN	17
1	A	206	MET	16
1	A	237	GLN	16
1	A	102	LYS	15
1	A	162	PHE	15
1	A	198	LYS	14
1	A	137	ILE	14
1	A	141	LEU	14
1	A	153	LEU	13
1	A	172	PHE	12
1	A	189	ILE	12
1	A	203	LYS	12
1	A	218	MET	12
1	A	108	ARG	11
1	A	93	SER	11
1	A	143	GLU	11
1	A	214	ASN	11
1	A	132	SER	10
1	A	84	LYS	10
1	A	136	SER	9
1	A	187	MET	9
1	A	87	MET	9
1	A	163	THR	8
1	A	91	LEU	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	101	SER	7
1	A	110	THR	7
1	A	193	GLN	6
1	A	234	LYS	6
1	A	111	CYS	6
1	A	170	ASN	6
1	A	202	GLU	5
1	A	131	ILE	5
1	A	200	TYR	4
1	A	208	GLU	4
1	A	109	GLN	4
1	A	81	LYS	4
1	A	196	SER	3
1	A	204	ILE	3
1	A	227	THR	3
1	A	89	GLN	3
1	A	192	ASN	2
1	A	197	PHE	2
1	A	97	LYS	2
1	A	133	LYS	2
1	A	99	ASN	2
1	A	190	ASN	1
1	A	173	VAL	1
1	A	124	ASP	1
1	A	138	THR	1
1	A	174	VAL	1
1	A	85	ASP	1
1	A	222	GLN	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

6.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains ⓘ

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

6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry

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