



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 12, 2017 – 09:08 pm GMT

PDB ID : 2BID
Title : HUMAN PRO-APOPTOTIC PROTEIN BID
Authors : Chou, J.J.; Li, H.; Salvesen, G.S.; Yuan, J.; Wagner, G.
Deposited on : 1999-01-27

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

<http://wwpdb.org/validation/2016/NMRValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The following versions of software and data (see [references ⓘ](#)) were used in the production of this report:

Cyrange	:	Kirchner and Güntert (2011)
NmrClust	:	Kelley et al. (1996)
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20161228.v01 (using entries in the PDB archive December 28th 2016)
RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
ShiftChecker	:	trunk28760
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	recalc28949

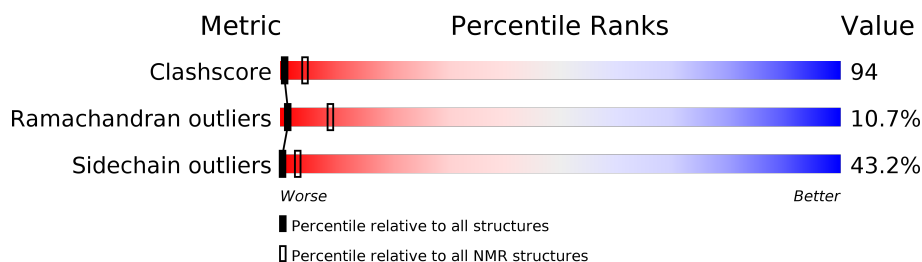
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 38%.

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	125131	11601
Ramachandran outliers	121729	10391
Sidechain outliers	121581	10367

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	197	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 15 models. Model 15 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:16-A:44, A:81-A:101, A:108-A:140, A:145-A:196 (135)	0.36	15

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 and 1 single-model cluster was found.

Cluster number	Models
1	3, 5, 6, 7
2	2, 4, 15
3	1, 12, 14
4	11, 13
5	8, 9
Single-model clusters	10

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3083 atoms, of which 1532 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called PROTEIN (BID).

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	197	Total	C	H	N	O	S	0
			3083	947	1532	288	308	8	

There are 2 discrepancies between the modelled and reference sequences:

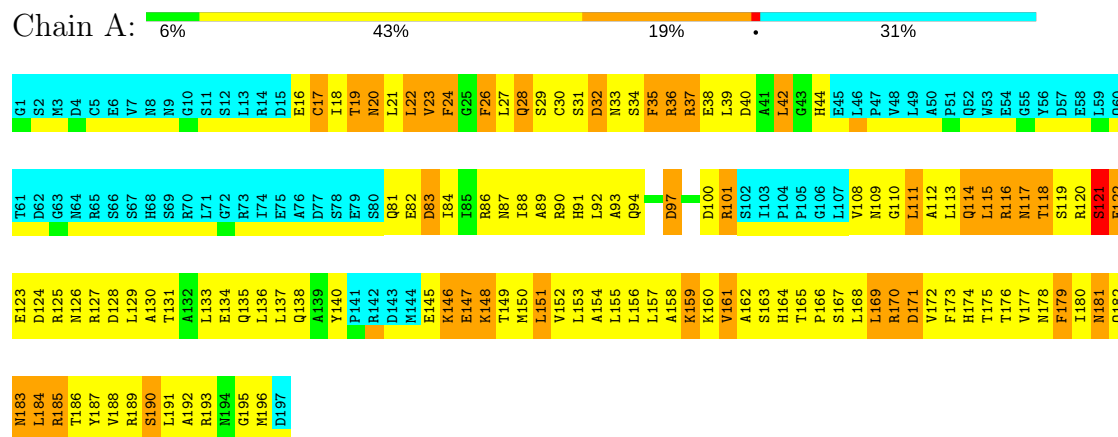
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1	GLY	-	INSERTION	UNP P55957
A	2	SER	-	INSERTION	UNP P55957

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA and DNA 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: PROTEIN (BID)

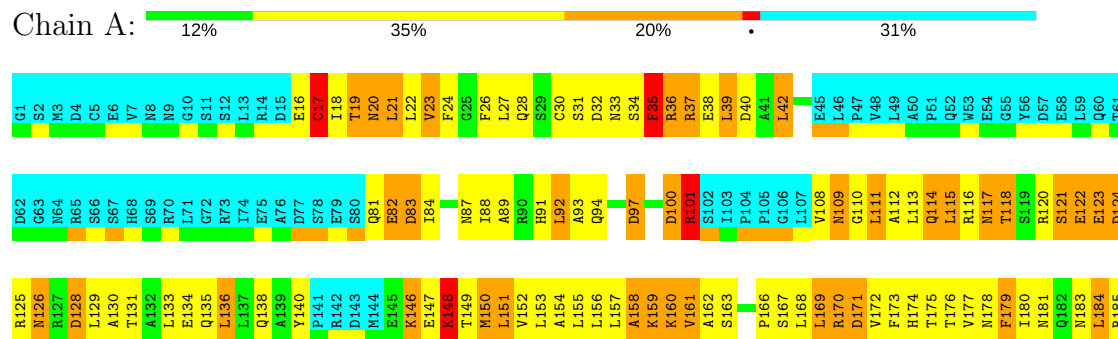


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

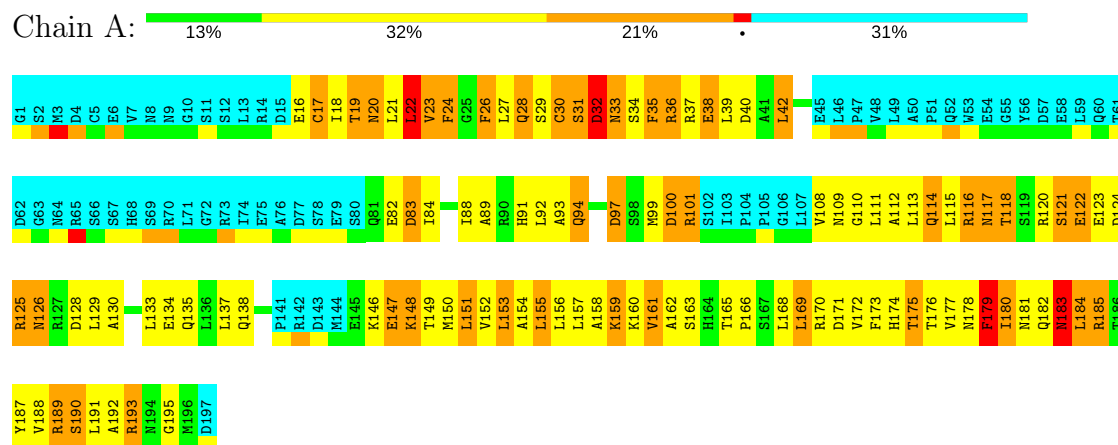
- Molecule 1: PROTEIN (BID)





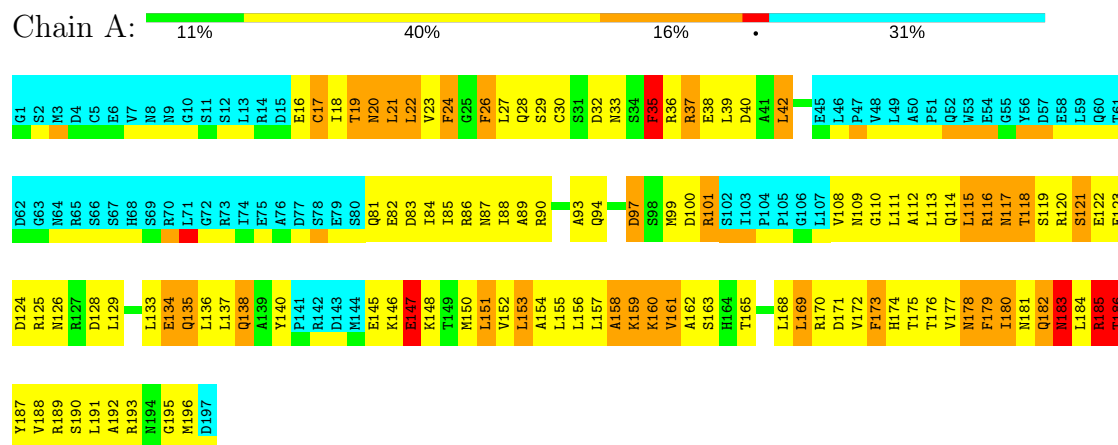
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: PROTEIN (BID)



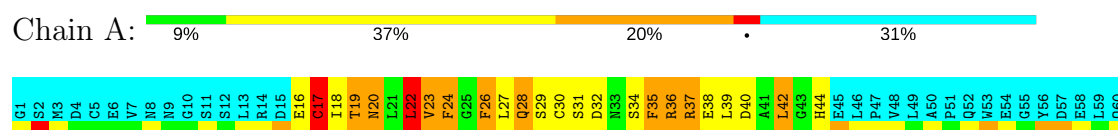
4.2.3 Score per residue for model 3

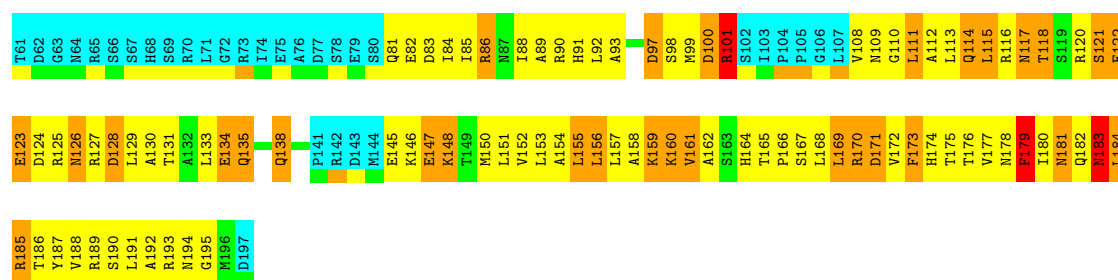
- Molecule 1: PROTEIN (BID)



4.2.4 Score per residue for model 4

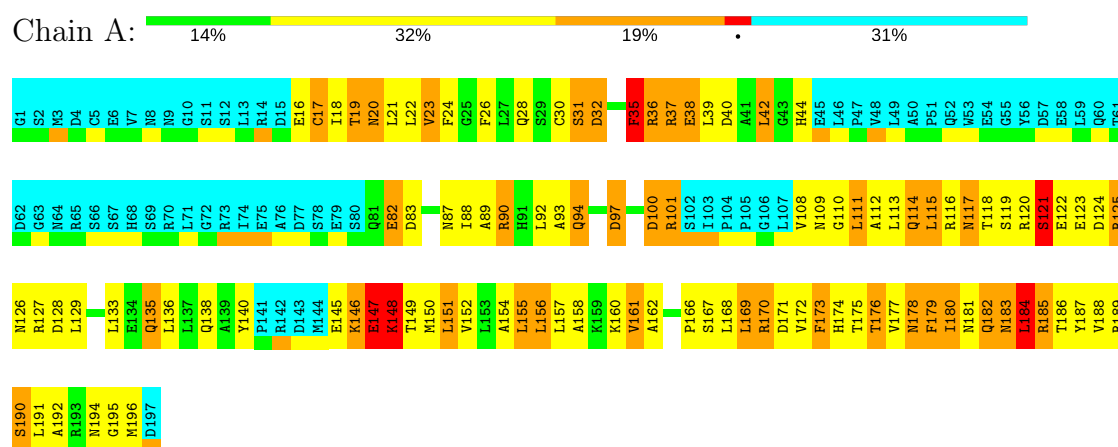
- Molecule 1: PROTEIN (BID)





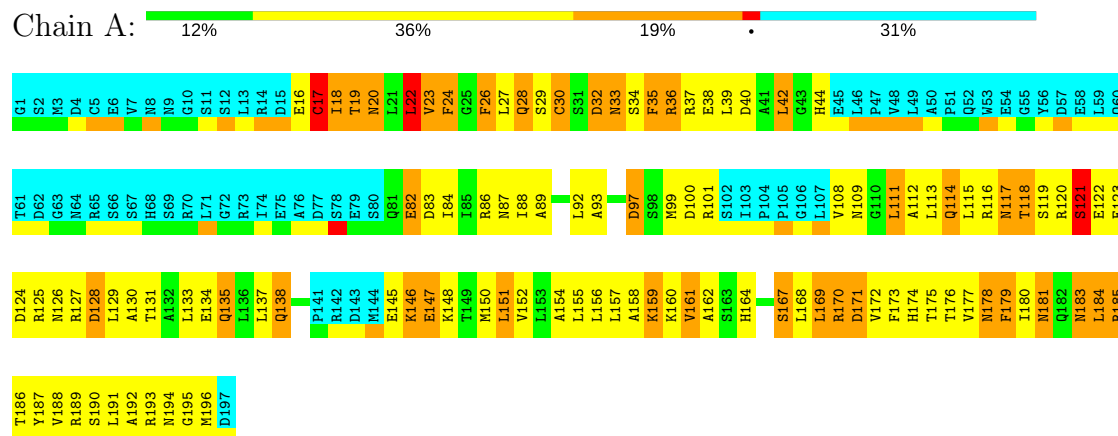
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: PROTEIN (BID)



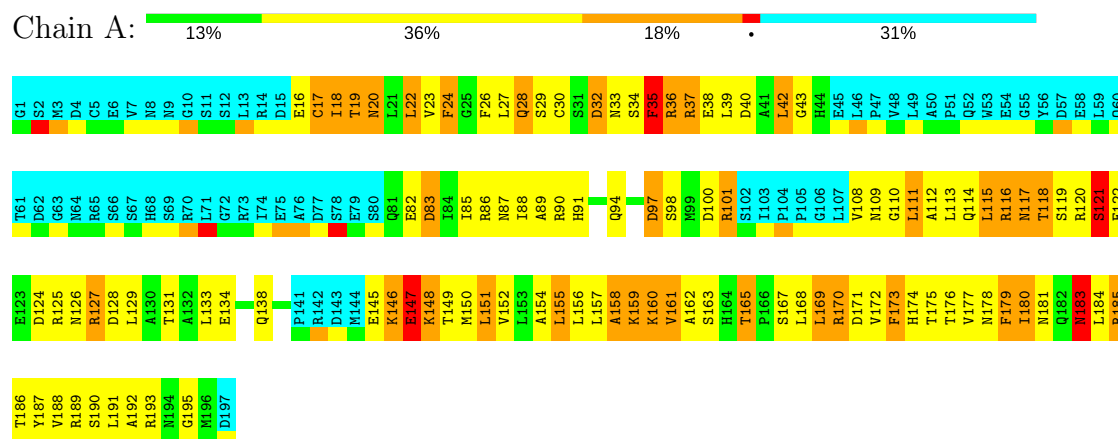
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: PROTEIN (BID)



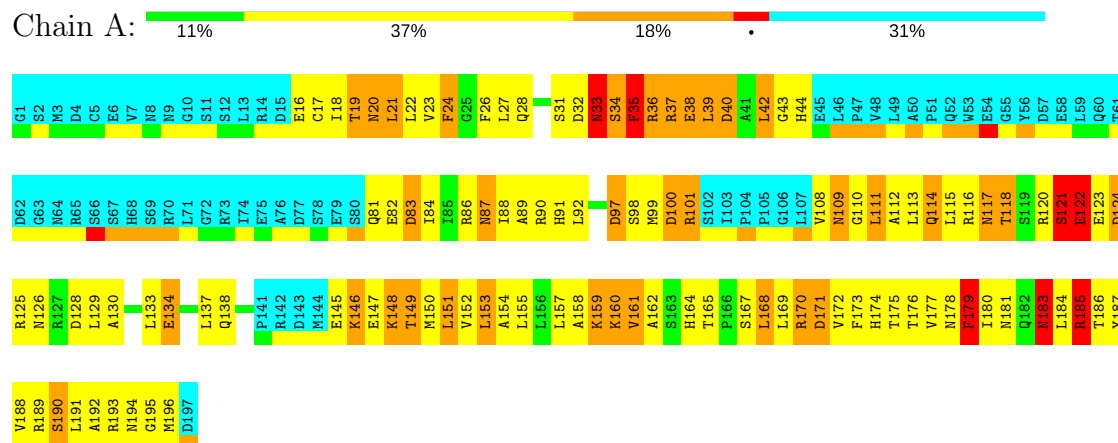
4.2.7 Score per residue for model 7

• Molecule 1: PROTEIN (BID)



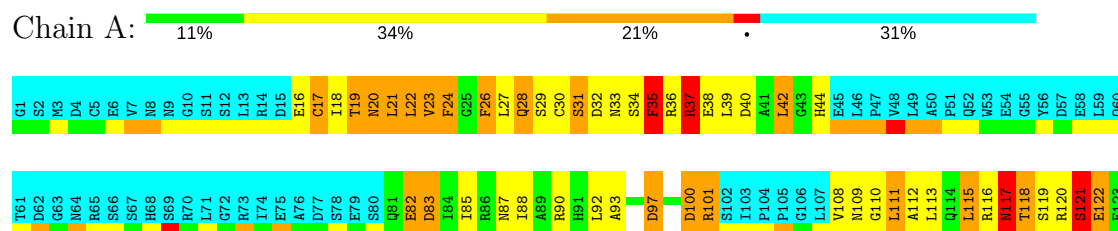
4.2.8 Score per residue for model 8

• Molecule 1: PROTEIN (BID)



4.2.9 Score per residue for model 9

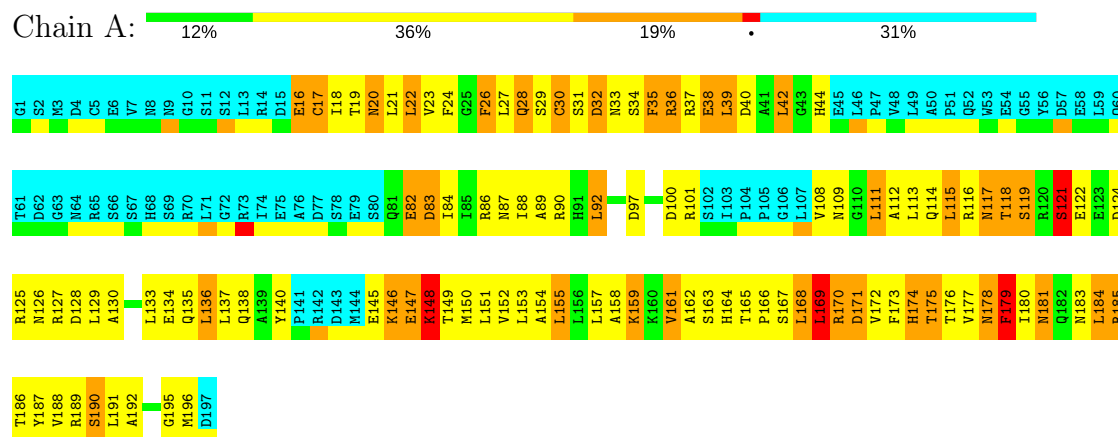
• Molecule 1: PROTEIN (BID)





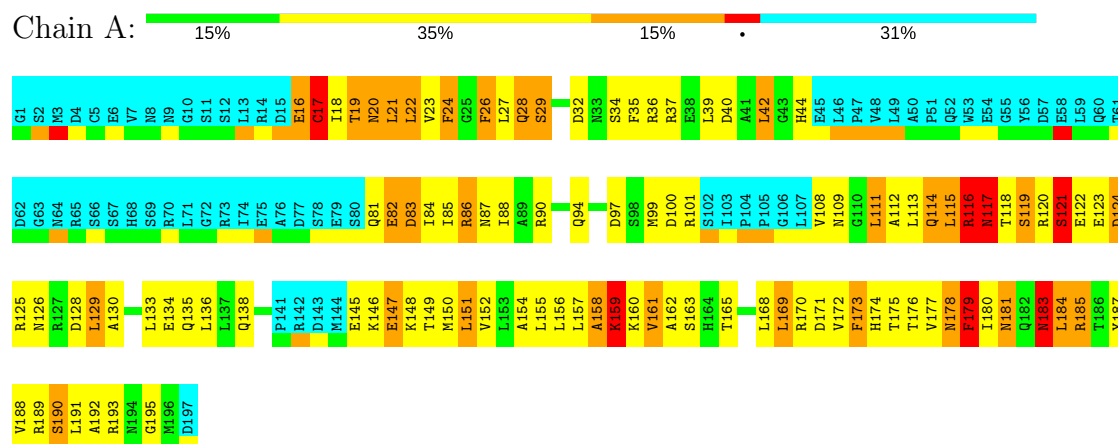
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: PROTEIN (BID)



4.2.11 Score per residue for model 11

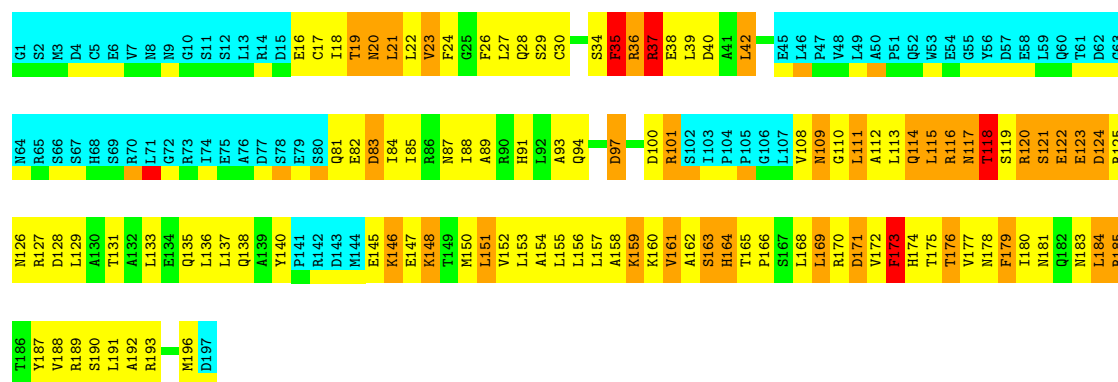
- Molecule 1: PROTEIN (BID)



4.2.12 Score per residue for model 12

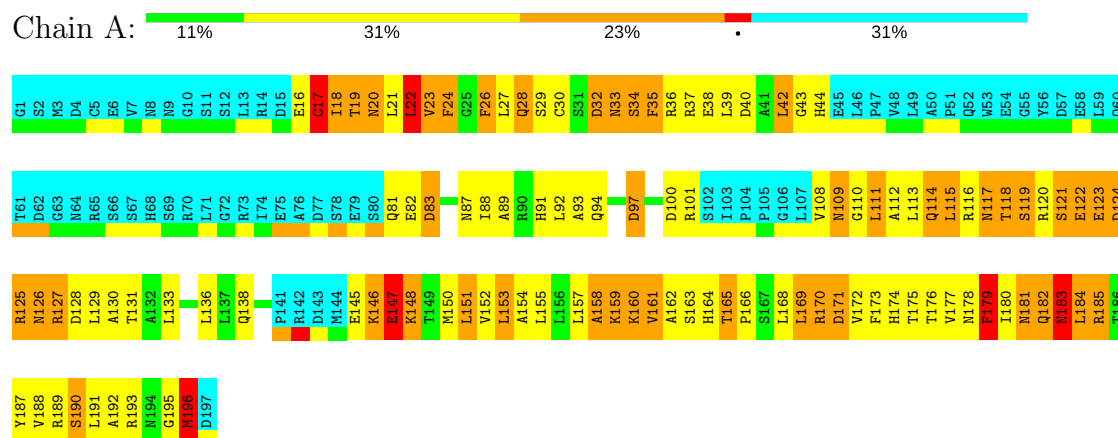
- Molecule 1: PROTEIN (BID)





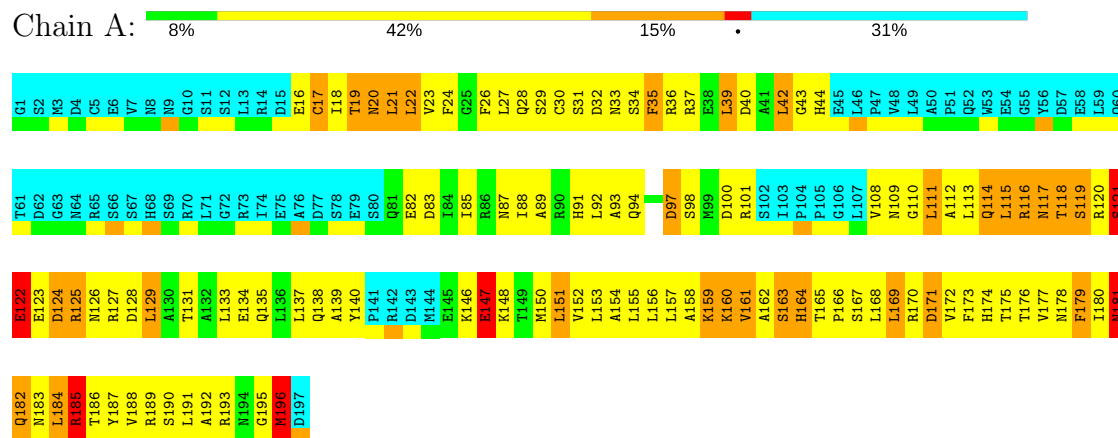
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: PROTEIN (BID)



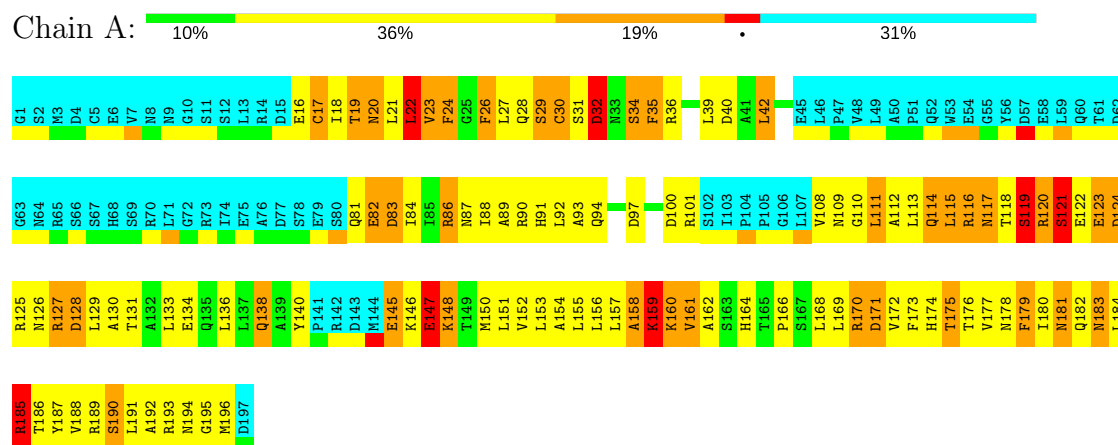
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: PROTEIN (BID)



4.2.15 Score per residue for model 15 (medoid)

● Molecule 1: PROTEIN (BID)



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *DISTANCE GEOMETRY*.

Of the 20 calculated structures, 15 were deposited, based on the following criterion: *ZERO VIOLATION AND LOWEST ENERGY*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	3.1
XPLOR-3.1	structure solution	
DYANA	structure solution	
XEASY	structure solution	
FELIX	structure solution	97

The following table shows chemical shift validation statistics as aggregates over all chemical shift files. Detailed validation can be found in section 7 of this report.

Chemical shift file(s)	BMRB entry 5340
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	880
Number of shifts mapped to atoms	880
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	38%

No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1077	1096	1092	203±12
All	All	16155	16440	16380	3050

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 94.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:158:ALA:HB2	1:A:175:THR:HG21	1.09	1.13	15	13
1:A:188:VAL:HG13	1:A:191:LEU:HD12	1.06	1.23	15	15
1:A:151:LEU:HD13	1:A:180:ILE:HD12	1.06	1.22	4	5
1:A:180:ILE:HG21	1:A:188:VAL:HG23	1.06	1.27	14	15
1:A:22:LEU:HD11	1:A:192:ALA:HB2	1.06	1.21	10	14
1:A:22:LEU:HD12	1:A:26:PHE:CZ	1.04	1.86	14	6
1:A:155:LEU:HD13	1:A:176:THR:HG23	1.03	1.28	6	4
1:A:151:LEU:HD23	1:A:187:TYR:CG	1.02	1.89	1	3
1:A:133:LEU:HD12	1:A:179:PHE:CE2	1.01	1.90	2	15
1:A:133:LEU:HD21	1:A:154:ALA:HB2	1.01	1.28	1	15
1:A:151:LEU:HD12	1:A:187:TYR:CD2	1.00	1.92	3	3
1:A:22:LEU:CD1	1:A:192:ALA:HB2	1.00	1.87	14	15
1:A:22:LEU:HD11	1:A:192:ALA:CB	0.99	1.86	14	11
1:A:151:LEU:HD12	1:A:187:TYR:CD1	0.98	1.93	13	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:155:LEU:HD12	1:A:191:LEU:HD21	0.96	1.35	14	13
1:A:180:ILE:HD13	1:A:188:VAL:HG22	0.96	1.30	15	2
1:A:133:LEU:HD13	1:A:150:MET:CG	0.96	1.91	3	14
1:A:151:LEU:HD12	1:A:187:TYR:CG	0.95	1.95	4	2
1:A:158:ALA:CB	1:A:175:THR:HG21	0.93	1.93	15	10
1:A:151:LEU:HD23	1:A:187:TYR:CD2	0.93	1.98	1	4
1:A:88:ILE:HG21	1:A:192:ALA:O	0.92	1.64	3	15
1:A:151:LEU:CD1	1:A:180:ILE:HD12	0.92	1.95	5	9
1:A:23:VAL:HG13	1:A:177:VAL:HG23	0.91	1.40	3	6
1:A:158:ALA:HB2	1:A:175:THR:CG2	0.90	1.97	3	15
1:A:168:LEU:O	1:A:172:VAL:HG23	0.89	1.66	2	9
1:A:162:ALA:HB2	1:A:172:VAL:HG21	0.89	1.39	3	11
1:A:133:LEU:CD2	1:A:154:ALA:HB2	0.89	1.98	1	15
1:A:23:VAL:HG21	1:A:173:PHE:O	0.89	1.66	1	4
1:A:19:THR:HG22	1:A:188:VAL:HG11	0.88	1.41	4	9
1:A:151:LEU:HD21	1:A:184:LEU:HD12	0.88	1.44	5	3
1:A:133:LEU:HD13	1:A:150:MET:HG2	0.87	1.45	14	13
1:A:151:LEU:HD22	1:A:180:ILE:CD1	0.87	2.00	4	2
1:A:23:VAL:HG23	1:A:177:VAL:HG23	0.87	1.46	12	1
1:A:22:LEU:HD12	1:A:26:PHE:CE2	0.87	2.05	8	5
1:A:180:ILE:HG23	1:A:184:LEU:O	0.87	1.69	9	2
1:A:111:LEU:HD12	1:A:125:ARG:NH2	0.86	1.84	14	1
1:A:42:LEU:HD23	1:A:173:PHE:CZ	0.85	2.05	12	1
1:A:18:ILE:HD12	1:A:19:THR:N	0.85	1.86	2	15
1:A:133:LEU:HD13	1:A:150:MET:HG3	0.85	1.47	9	8
1:A:111:LEU:HD21	1:A:157:LEU:HD23	0.84	1.46	2	4
1:A:23:VAL:HG11	1:A:173:PHE:O	0.82	1.74	14	9
1:A:155:LEU:HD21	1:A:180:ILE:HD11	0.81	1.50	4	8
1:A:133:LEU:HD21	1:A:154:ALA:CB	0.81	2.06	1	15
1:A:28:GLN:OE1	1:A:39:LEU:HD12	0.81	1.74	1	1
1:A:147:GLU:HA	1:A:184:LEU:HD11	0.79	1.54	15	3
1:A:42:LEU:HD21	1:A:170:ARG:HA	0.79	1.55	6	11
1:A:23:VAL:HG21	1:A:177:VAL:HG23	0.79	1.52	10	3
1:A:152:VAL:O	1:A:156:LEU:HD23	0.78	1.78	15	1
1:A:133:LEU:CG	1:A:154:ALA:HB2	0.78	2.08	11	15
1:A:155:LEU:HD22	1:A:176:THR:HA	0.78	1.55	8	6
1:A:22:LEU:HD21	1:A:192:ALA:HB2	0.78	1.53	15	10
1:A:111:LEU:HD21	1:A:157:LEU:HD13	0.78	1.54	8	1
1:A:151:LEU:HD22	1:A:180:ILE:HD13	0.78	1.55	10	1
1:A:155:LEU:HD13	1:A:176:THR:CG2	0.78	2.06	1	3
1:A:155:LEU:CD1	1:A:191:LEU:HD11	0.77	2.08	5	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:180:ILE:HG21	1:A:188:VAL:CG2	0.77	2.08	9	14
1:A:39:LEU:HD23	1:A:39:LEU:N	0.77	1.95	10	8
1:A:112:ALA:HB1	1:A:165:THR:OG1	0.77	1.79	8	5
1:A:151:LEU:CD2	1:A:184:LEU:HD12	0.77	2.10	15	2
1:A:23:VAL:HG22	1:A:27:LEU:CD2	0.77	2.10	2	3
1:A:147:GLU:HG2	1:A:184:LEU:HD21	0.76	1.58	5	2
1:A:176:THR:O	1:A:180:ILE:HD12	0.76	1.80	15	2
1:A:151:LEU:HD11	1:A:180:ILE:HG23	0.76	1.58	5	1
1:A:180:ILE:N	1:A:180:ILE:HD13	0.76	1.96	5	1
1:A:111:LEU:HD13	1:A:125:ARG:NH2	0.76	1.95	10	1
1:A:151:LEU:CD1	1:A:155:LEU:HD11	0.75	2.10	11	2
1:A:108:VAL:HG21	1:A:164:HIS:HB2	0.75	1.58	15	3
1:A:19:THR:HG22	1:A:177:VAL:HG13	0.75	1.57	13	2
1:A:151:LEU:HG	1:A:180:ILE:HD12	0.75	1.57	12	3
1:A:151:LEU:HD11	1:A:180:ILE:HG13	0.75	1.56	14	3
1:A:151:LEU:HD11	1:A:180:ILE:CG1	0.75	2.11	15	3
1:A:180:ILE:CG2	1:A:188:VAL:HG23	0.75	2.11	7	13
1:A:81:GLN:O	1:A:85:ILE:HD12	0.75	1.81	4	1
1:A:23:VAL:CG1	1:A:177:VAL:HG23	0.74	2.12	3	10
1:A:173:PHE:O	1:A:177:VAL:HG23	0.74	1.83	15	4
1:A:137:LEU:HD11	1:A:150:MET:HG3	0.74	1.60	14	3
1:A:147:GLU:CG	1:A:184:LEU:HD11	0.74	2.13	12	5
1:A:19:THR:HG22	1:A:188:VAL:CG1	0.74	2.13	4	6
1:A:133:LEU:HD11	1:A:154:ALA:CB	0.73	2.12	6	15
1:A:147:GLU:HG2	1:A:184:LEU:HD11	0.73	1.60	12	4
1:A:148:LYS:O	1:A:152:VAL:HG23	0.73	1.83	12	7
1:A:39:LEU:HD23	1:A:169:LEU:HD13	0.73	1.58	6	5
1:A:116:ARG:HA	1:A:168:LEU:HD21	0.73	1.59	4	9
1:A:26:PHE:CD1	1:A:89:ALA:HB1	0.73	2.17	14	6
1:A:22:LEU:HD21	1:A:192:ALA:CB	0.73	2.14	4	5
1:A:176:THR:O	1:A:180:ILE:HD11	0.72	1.83	5	1
1:A:22:LEU:HD12	1:A:26:PHE:CE1	0.72	2.19	1	1
1:A:23:VAL:HG13	1:A:177:VAL:CG2	0.72	2.13	5	9
1:A:155:LEU:HD22	1:A:176:THR:CB	0.72	2.14	15	2
1:A:188:VAL:CG1	1:A:191:LEU:HD12	0.72	2.11	15	7
1:A:180:ILE:HG22	1:A:184:LEU:O	0.72	1.83	3	6
1:A:148:LYS:O	1:A:152:VAL:HG22	0.72	1.82	7	1
1:A:116:ARG:CA	1:A:168:LEU:HD11	0.72	2.14	5	9
1:A:28:GLN:HG2	1:A:39:LEU:HD12	0.72	1.62	2	10
1:A:39:LEU:N	1:A:39:LEU:HD23	0.72	1.99	1	5
1:A:155:LEU:CD1	1:A:176:THR:HG23	0.71	2.12	1	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:VAL:CG2	1:A:177:VAL:HG23	0.71	2.15	12	4
1:A:22:LEU:CD2	1:A:192:ALA:HB2	0.71	2.15	4	7
1:A:158:ALA:C	1:A:172:VAL:HG13	0.70	2.06	3	10
1:A:42:LEU:HD23	1:A:173:PHE:CD2	0.70	2.22	10	4
1:A:151:LEU:HD13	1:A:155:LEU:HD11	0.70	1.62	11	2
1:A:155:LEU:HD11	1:A:180:ILE:HD11	0.70	1.63	15	2
1:A:129:LEU:HD13	1:A:157:LEU:HD12	0.70	1.62	14	5
1:A:137:LEU:HD13	1:A:146:LYS:HG2	0.70	1.64	8	2
1:A:42:LEU:HD11	1:A:169:LEU:HB3	0.70	1.64	7	2
1:A:136:LEU:HD13	1:A:153:LEU:HD13	0.70	1.61	13	1
1:A:152:VAL:O	1:A:156:LEU:HD12	0.69	1.87	3	3
1:A:21:LEU:HD11	1:A:82:GLU:HG2	0.69	1.64	9	2
1:A:147:GLU:CB	1:A:184:LEU:HD11	0.69	2.16	9	3
1:A:180:ILE:HD13	1:A:180:ILE:N	0.69	2.00	3	4
1:A:151:LEU:HD21	1:A:184:LEU:HD23	0.69	1.63	6	3
1:A:42:LEU:HD23	1:A:173:PHE:CE1	0.69	2.23	12	1
1:A:115:LEU:HD11	1:A:175:THR:HG21	0.68	1.64	12	1
1:A:115:LEU:HD13	1:A:172:VAL:HG22	0.68	1.64	8	2
1:A:116:ARG:HA	1:A:168:LEU:HD11	0.68	1.65	12	10
1:A:184:LEU:HD13	1:A:187:TYR:CG	0.68	2.23	15	1
1:A:39:LEU:HD22	1:A:169:LEU:HD22	0.68	1.66	14	10
1:A:180:ILE:HG22	1:A:185:ARG:N	0.68	2.03	5	4
1:A:125:ARG:CD	1:A:175:THR:HG23	0.68	2.19	7	1
1:A:180:ILE:HG22	1:A:185:ARG:HA	0.68	1.65	14	4
1:A:111:LEU:CD2	1:A:157:LEU:HD23	0.68	2.17	2	1
1:A:111:LEU:HD12	1:A:125:ARG:HH22	0.67	1.48	14	1
1:A:28:GLN:HG3	1:A:39:LEU:HD12	0.67	1.64	10	2
1:A:42:LEU:HD22	1:A:173:PHE:CE1	0.67	2.24	5	3
1:A:20:ASN:O	1:A:23:VAL:HG23	0.67	1.89	13	9
1:A:116:ARG:HA	1:A:168:LEU:HD12	0.67	1.66	10	2
1:A:121:SER:O	1:A:125:ARG:N	0.67	2.25	8	15
1:A:18:ILE:C	1:A:18:ILE:HD12	0.67	2.10	13	8
1:A:19:THR:HG22	1:A:188:VAL:HG21	0.67	1.67	2	3
1:A:180:ILE:HG22	1:A:185:ARG:CA	0.66	2.20	2	4
1:A:147:GLU:HB3	1:A:184:LEU:HD11	0.66	1.66	9	1
1:A:115:LEU:HD21	1:A:125:ARG:HG3	0.66	1.66	11	2
1:A:112:ALA:HB2	1:A:161:VAL:HB	0.66	1.67	5	10
1:A:21:LEU:HD11	1:A:82:GLU:OE1	0.66	1.90	1	1
1:A:42:LEU:HD11	1:A:170:ARG:H	0.66	1.48	11	8
1:A:111:LEU:HD11	1:A:157:LEU:HB3	0.66	1.68	4	10
1:A:162:ALA:HB2	1:A:172:VAL:HG11	0.66	1.66	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:PHE:CZ	1:A:166:PRO:CB	0.65	2.79	15	2
1:A:85:ILE:HG23	1:A:192:ALA:CB	0.65	2.21	14	6
1:A:151:LEU:CB	1:A:187:TYR:CE2	0.65	2.79	8	5
1:A:19:THR:CG2	1:A:177:VAL:HG13	0.65	2.21	3	2
1:A:165:THR:HG22	1:A:168:LEU:CD1	0.65	2.21	8	2
1:A:23:VAL:HG22	1:A:27:LEU:HD23	0.65	1.67	2	3
1:A:184:LEU:HD22	1:A:187:TYR:HB2	0.65	1.68	15	1
1:A:180:ILE:HG22	1:A:184:LEU:C	0.65	2.11	8	8
1:A:108:VAL:HG12	1:A:160:LYS:HB3	0.65	1.69	2	4
1:A:23:VAL:CG1	1:A:173:PHE:CD2	0.64	2.80	12	5
1:A:137:LEU:HD11	1:A:150:MET:CG	0.64	2.22	14	5
1:A:151:LEU:CD1	1:A:187:TYR:CG	0.64	2.80	10	2
1:A:116:ARG:CA	1:A:168:LEU:HD21	0.64	2.22	5	7
1:A:23:VAL:CG1	1:A:173:PHE:CG	0.64	2.79	6	5
1:A:129:LEU:HD11	1:A:157:LEU:HB2	0.64	1.68	14	1
1:A:151:LEU:HD23	1:A:187:TYR:CD1	0.64	2.27	8	3
1:A:21:LEU:HD21	1:A:82:GLU:OE2	0.64	1.93	9	2
1:A:39:LEU:CD2	1:A:169:LEU:HD22	0.64	2.22	13	5
1:A:158:ALA:HB2	1:A:175:THR:HG22	0.64	1.68	12	2
1:A:23:VAL:HG21	1:A:177:VAL:CG2	0.64	2.23	10	1
1:A:151:LEU:HD13	1:A:180:ILE:CD1	0.64	2.22	10	3
1:A:151:LEU:CD1	1:A:187:TYR:CD1	0.63	2.81	6	4
1:A:23:VAL:HG11	1:A:177:VAL:CG2	0.63	2.23	15	3
1:A:133:LEU:CD1	1:A:179:PHE:CE2	0.63	2.81	5	13
1:A:39:LEU:CD2	1:A:169:LEU:HD13	0.63	2.23	1	4
1:A:184:LEU:HD13	1:A:187:TYR:CB	0.63	2.22	15	2
1:A:23:VAL:HG11	1:A:177:VAL:HG23	0.63	1.68	15	4
1:A:42:LEU:CD2	1:A:173:PHE:CD1	0.63	2.82	5	4
1:A:188:VAL:HG13	1:A:191:LEU:CD1	0.63	2.15	15	2
1:A:155:LEU:HD12	1:A:191:LEU:CD2	0.63	2.20	14	3
1:A:92:LEU:HD12	1:A:196:MET:HB2	0.63	1.70	1	5
1:A:109:ASN:O	1:A:112:ALA:HB3	0.62	1.93	9	2
1:A:158:ALA:HB3	1:A:176:THR:HG22	0.62	1.70	5	2
1:A:133:LEU:C	1:A:137:LEU:HD12	0.62	2.15	2	1
1:A:151:LEU:HD12	1:A:155:LEU:HD11	0.62	1.72	15	3
1:A:92:LEU:HD22	1:A:194:ASN:O	0.62	1.94	5	1
1:A:28:GLN:CG	1:A:39:LEU:HD12	0.62	2.24	2	12
1:A:26:PHE:HA	1:A:89:ALA:HB1	0.62	1.71	13	3
1:A:165:THR:CG2	1:A:168:LEU:CD1	0.62	2.78	10	2
1:A:158:ALA:C	1:A:172:VAL:HG12	0.62	2.15	15	1
1:A:18:ILE:CD1	1:A:19:THR:N	0.62	2.63	6	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:152:VAL:O	1:A:156:LEU:HD13	0.62	1.95	1	1
1:A:151:LEU:CB	1:A:187:TYR:CE1	0.61	2.82	7	6
1:A:191:LEU:HD23	1:A:196:MET:O	0.61	1.94	9	2
1:A:155:LEU:HD13	1:A:176:THR:HB	0.61	1.72	10	4
1:A:88:ILE:HD13	1:A:192:ALA:O	0.61	1.96	4	2
1:A:151:LEU:HD11	1:A:180:ILE:HD12	0.61	1.71	7	2
1:A:133:LEU:HD11	1:A:154:ALA:HB2	0.61	1.72	8	14
1:A:111:LEU:HD21	1:A:157:LEU:CD2	0.61	2.25	5	4
1:A:151:LEU:CD1	1:A:180:ILE:CD1	0.61	2.79	12	7
1:A:180:ILE:HG13	1:A:188:VAL:HG22	0.61	1.72	3	5
1:A:180:ILE:CD1	1:A:188:VAL:HG22	0.61	2.18	15	1
1:A:19:THR:HG21	1:A:181:ASN:HD21	0.61	1.55	11	7
1:A:27:LEU:CB	1:A:173:PHE:CE1	0.61	2.83	14	11
1:A:191:LEU:HD23	1:A:196:MET:HB3	0.61	1.71	14	3
1:A:133:LEU:HD12	1:A:179:PHE:CZ	0.61	2.31	7	6
1:A:23:VAL:CG1	1:A:177:VAL:CG2	0.61	2.79	15	9
1:A:26:PHE:CD2	1:A:27:LEU:CD2	0.60	2.83	13	6
1:A:180:ILE:HG22	1:A:185:ARG:H	0.60	1.55	5	1
1:A:125:ARG:HD2	1:A:175:THR:HG23	0.60	1.71	15	1
1:A:84:ILE:HG22	1:A:88:ILE:HD12	0.60	1.73	10	4
1:A:161:VAL:HG21	1:A:168:LEU:HD13	0.60	1.72	6	6
1:A:42:LEU:HD11	1:A:169:LEU:CB	0.60	2.27	7	1
1:A:151:LEU:HD11	1:A:180:ILE:HG12	0.60	1.73	15	1
1:A:151:LEU:HD21	1:A:184:LEU:HD13	0.60	1.72	3	2
1:A:151:LEU:HD11	1:A:184:LEU:HD23	0.60	1.73	1	1
1:A:151:LEU:HD23	1:A:151:LEU:N	0.60	2.12	3	2
1:A:133:LEU:CD1	1:A:154:ALA:HB2	0.60	2.27	8	15
1:A:26:PHE:CE2	1:A:27:LEU:CD2	0.59	2.84	13	1
1:A:151:LEU:HD12	1:A:187:TYR:CE1	0.59	2.32	6	3
1:A:125:ARG:NE	1:A:175:THR:HG23	0.59	2.13	9	2
1:A:116:ARG:N	1:A:168:LEU:HD11	0.59	2.13	2	3
1:A:151:LEU:CD2	1:A:187:TYR:CD2	0.59	2.84	8	2
1:A:155:LEU:HA	1:A:176:THR:HG22	0.59	1.74	4	2
1:A:84:ILE:HG22	1:A:88:ILE:HD11	0.59	1.74	12	1
1:A:34:SER:O	1:A:35:PHE:CD1	0.59	2.56	11	2
1:A:147:GLU:O	1:A:151:LEU:HD22	0.59	1.98	8	2
1:A:151:LEU:CB	1:A:187:TYR:CZ	0.59	2.85	6	6
1:A:20:ASN:O	1:A:24:PHE:CD1	0.59	2.56	6	4
1:A:151:LEU:CD2	1:A:187:TYR:CG	0.59	2.85	7	3
1:A:115:LEU:HD21	1:A:125:ARG:HD3	0.59	1.75	9	1
1:A:151:LEU:CD1	1:A:180:ILE:CG1	0.58	2.81	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:PHE:CD2	1:A:27:LEU:HD22	0.58	2.33	4	6
1:A:88:ILE:HG22	1:A:195:GLY:HA2	0.58	1.74	3	6
1:A:174:HIS:O	1:A:178:ASN:N	0.58	2.33	14	12
1:A:159:LYS:HA	1:A:172:VAL:HG11	0.58	1.74	9	4
1:A:23:VAL:HG23	1:A:176:THR:OG1	0.58	1.99	2	1
1:A:115:LEU:HD21	1:A:125:ARG:HE	0.58	1.59	3	2
1:A:151:LEU:CD2	1:A:151:LEU:N	0.58	2.67	13	3
1:A:115:LEU:HD12	1:A:161:VAL:HG11	0.57	1.76	8	2
1:A:151:LEU:HD21	1:A:184:LEU:CD1	0.57	2.29	3	1
1:A:121:SER:O	1:A:125:ARG:CB	0.57	2.53	15	11
1:A:111:LEU:HD13	1:A:157:LEU:HB3	0.57	1.77	3	2
1:A:180:ILE:HD13	1:A:188:VAL:CG2	0.57	2.19	15	2
1:A:125:ARG:HD3	1:A:175:THR:HG23	0.57	1.75	11	4
1:A:184:LEU:HD12	1:A:187:TYR:HB2	0.57	1.76	9	5
1:A:155:LEU:HD22	1:A:176:THR:HB	0.57	1.74	15	2
1:A:151:LEU:CD2	1:A:180:ILE:CD1	0.57	2.81	4	1
1:A:115:LEU:HD23	1:A:121:SER:OG	0.57	2.00	9	4
1:A:34:SER:O	1:A:35:PHE:CD2	0.57	2.58	8	5
1:A:19:THR:CG2	1:A:188:VAL:HG11	0.57	2.28	5	3
1:A:26:PHE:C	1:A:26:PHE:CD1	0.57	2.78	10	2
1:A:183:ASN:ND2	1:A:183:ASN:N	0.57	2.53	11	1
1:A:170:ARG:O	1:A:174:HIS:CE1	0.57	2.57	10	1
1:A:26:PHE:CE1	1:A:89:ALA:HB1	0.56	2.35	8	2
1:A:140:TYR:N	1:A:140:TYR:CD1	0.56	2.71	15	4
1:A:158:ALA:CB	1:A:175:THR:CG2	0.56	2.81	9	12
1:A:115:LEU:CD1	1:A:172:VAL:HG22	0.56	2.30	5	1
1:A:20:ASN:O	1:A:23:VAL:CG2	0.56	2.54	7	10
1:A:38:GLU:CB	1:A:169:LEU:CD1	0.56	2.83	9	2
1:A:23:VAL:CG2	1:A:173:PHE:O	0.56	2.53	12	1
1:A:35:PHE:CE2	1:A:166:PRO:CB	0.56	2.88	5	2
1:A:27:LEU:HD11	1:A:172:VAL:HG11	0.56	1.77	11	2
1:A:42:LEU:HD11	1:A:170:ARG:N	0.56	2.14	11	10
1:A:125:ARG:CG	1:A:126:ASN:N	0.56	2.68	4	1
1:A:26:PHE:CD1	1:A:26:PHE:C	0.56	2.79	6	5
1:A:133:LEU:HD12	1:A:179:PHE:HE2	0.56	1.54	11	4
1:A:151:LEU:CG	1:A:180:ILE:HD12	0.56	2.31	12	3
1:A:165:THR:CG2	1:A:168:LEU:HD11	0.56	2.30	10	2
1:A:27:LEU:HB2	1:A:173:PHE:CE1	0.56	2.36	3	9
1:A:151:LEU:HB2	1:A:187:TYR:CZ	0.56	2.36	14	8
1:A:34:SER:O	1:A:35:PHE:CG	0.56	2.59	14	5
1:A:151:LEU:CD1	1:A:187:TYR:CD2	0.56	2.80	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:111:LEU:HD12	1:A:125:ARG:CZ	0.56	2.31	14	1
1:A:151:LEU:HG	1:A:180:ILE:HD11	0.56	1.77	9	1
1:A:151:LEU:HD12	1:A:180:ILE:CD1	0.56	2.31	2	2
1:A:18:ILE:O	1:A:22:LEU:HD22	0.56	2.01	11	2
1:A:24:PHE:O	1:A:28:GLN:N	0.55	2.39	12	11
1:A:28:GLN:CG	1:A:39:LEU:CD1	0.55	2.84	9	8
1:A:136:LEU:O	1:A:140:TYR:CD2	0.55	2.59	12	2
1:A:26:PHE:CZ	1:A:159:LYS:HB2	0.55	2.36	9	7
1:A:158:ALA:HB3	1:A:176:THR:HG23	0.55	1.78	4	1
1:A:151:LEU:HB3	1:A:187:TYR:CE2	0.55	2.36	15	2
1:A:176:THR:O	1:A:180:ILE:CG1	0.55	2.55	13	7
1:A:84:ILE:HG22	1:A:88:ILE:CD1	0.55	2.32	12	5
1:A:38:GLU:OE1	1:A:169:LEU:HD12	0.55	2.00	5	1
1:A:42:LEU:HD22	1:A:173:PHE:CD1	0.55	2.37	5	1
1:A:26:PHE:CE1	1:A:89:ALA:CB	0.55	2.89	8	3
1:A:111:LEU:HB3	1:A:161:VAL:HG12	0.55	1.78	4	10
1:A:129:LEU:CD1	1:A:157:LEU:HD12	0.55	2.31	3	3
1:A:155:LEU:CD1	1:A:191:LEU:HD21	0.55	2.26	1	2
1:A:150:MET:CE	1:A:184:LEU:HD21	0.55	2.31	11	1
1:A:180:ILE:O	1:A:185:ARG:N	0.55	2.40	10	10
1:A:35:PHE:CE2	1:A:166:PRO:CG	0.55	2.89	12	2
1:A:161:VAL:HG22	1:A:162:ALA:N	0.55	2.15	8	4
1:A:39:LEU:CD2	1:A:169:LEU:CD1	0.55	2.84	1	4
1:A:151:LEU:CD1	1:A:180:ILE:HG13	0.55	2.31	14	2
1:A:180:ILE:N	1:A:180:ILE:CD1	0.54	2.70	14	2
1:A:151:LEU:HB3	1:A:187:TYR:CE1	0.54	2.37	12	4
1:A:151:LEU:HB3	1:A:187:TYR:CZ	0.54	2.37	9	1
1:A:23:VAL:CG1	1:A:173:PHE:O	0.54	2.55	11	5
1:A:115:LEU:HD12	1:A:161:VAL:CG1	0.54	2.31	8	1
1:A:121:SER:O	1:A:122:GLU:C	0.54	2.45	4	15
1:A:115:LEU:HD23	1:A:125:ARG:CB	0.54	2.31	13	2
1:A:180:ILE:CG2	1:A:184:LEU:O	0.54	2.55	8	8
1:A:154:ALA:HA	1:A:157:LEU:HD13	0.54	1.79	2	1
1:A:147:GLU:CA	1:A:184:LEU:HD11	0.54	2.31	5	3
1:A:108:VAL:CG2	1:A:109:ASN:N	0.54	2.70	9	4
1:A:151:LEU:HD12	1:A:155:LEU:HD21	0.54	1.80	9	3
1:A:23:VAL:CG2	1:A:177:VAL:CG2	0.54	2.86	10	2
1:A:151:LEU:N	1:A:151:LEU:CD2	0.54	2.70	14	1
1:A:85:ILE:HG23	1:A:192:ALA:HB1	0.54	1.80	3	4
1:A:147:GLU:HB3	1:A:187:TYR:CD2	0.54	2.38	11	1
1:A:42:LEU:HD21	1:A:170:ARG:CA	0.54	2.32	14	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:LEU:CD2	1:A:39:LEU:N	0.54	2.67	10	5
1:A:97:ASP:O	1:A:101:ARG:N	0.54	2.39	3	5
1:A:130:ALA:HA	1:A:179:PHE:CE2	0.54	2.37	4	8
1:A:169:LEU:O	1:A:172:VAL:CG2	0.54	2.55	15	1
1:A:24:PHE:HA	1:A:173:PHE:CE2	0.54	2.38	7	10
1:A:155:LEU:HD22	1:A:176:THR:CA	0.54	2.33	15	2
1:A:146:LYS:O	1:A:150:MET:CB	0.53	2.56	12	11
1:A:23:VAL:O	1:A:27:LEU:HD23	0.53	2.03	1	4
1:A:180:ILE:CD1	1:A:180:ILE:N	0.53	2.69	3	2
1:A:116:ARG:O	1:A:118:THR:N	0.53	2.41	9	14
1:A:118:THR:O	1:A:119:SER:CB	0.53	2.57	11	4
1:A:187:TYR:O	1:A:190:SER:N	0.53	2.40	2	15
1:A:112:ALA:CB	1:A:165:THR:OG1	0.53	2.56	4	3
1:A:151:LEU:CD2	1:A:184:LEU:HD23	0.53	2.34	8	2
1:A:39:LEU:N	1:A:39:LEU:CD2	0.53	2.71	1	3
1:A:82:GLU:CA	1:A:82:GLU:OE1	0.53	2.56	5	1
1:A:89:ALA:O	1:A:93:ALA:CB	0.53	2.57	14	10
1:A:188:VAL:O	1:A:191:LEU:N	0.53	2.41	3	15
1:A:178:ASN:O	1:A:180:ILE:N	0.53	2.41	13	13
1:A:115:LEU:HD22	1:A:171:ASP:HB3	0.53	1.80	10	3
1:A:19:THR:HG22	1:A:188:VAL:CB	0.53	2.33	7	3
1:A:39:LEU:CD2	1:A:169:LEU:CD2	0.53	2.87	6	3
1:A:165:THR:HG21	1:A:168:LEU:HD12	0.53	1.79	3	1
1:A:21:LEU:HD11	1:A:82:GLU:CG	0.53	2.34	15	2
1:A:111:LEU:HD21	1:A:157:LEU:HG	0.53	1.81	4	1
1:A:26:PHE:CA	1:A:89:ALA:HB1	0.53	2.34	13	1
1:A:121:SER:CB	1:A:171:ASP:OD2	0.53	2.57	9	3
1:A:32:ASP:O	1:A:33:ASN:CB	0.53	2.57	8	1
1:A:16:GLU:O	1:A:20:ASN:ND2	0.53	2.42	12	15
1:A:23:VAL:HG11	1:A:173:PHE:CD2	0.53	2.37	12	1
1:A:133:LEU:HD13	1:A:150:MET:SD	0.53	2.44	15	2
1:A:146:LYS:O	1:A:150:MET:N	0.53	2.38	4	13
1:A:169:LEU:O	1:A:172:VAL:N	0.53	2.42	10	10
1:A:155:LEU:N	1:A:155:LEU:HD23	0.53	2.18	13	2
1:A:176:THR:O	1:A:180:ILE:CD1	0.53	2.55	15	2
1:A:109:ASN:O	1:A:113:LEU:N	0.52	2.41	8	8
1:A:120:ARG:O	1:A:123:GLU:N	0.52	2.42	11	5
1:A:125:ARG:NE	1:A:175:THR:OG1	0.52	2.42	3	1
1:A:151:LEU:CD1	1:A:180:ILE:HG12	0.52	2.35	15	1
1:A:38:GLU:HB3	1:A:169:LEU:CD1	0.52	2.35	9	5
1:A:130:ALA:HA	1:A:179:PHE:CZ	0.52	2.39	8	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:184:LEU:N	1:A:184:LEU:CD1	0.52	2.72	8	2
1:A:19:THR:HG23	1:A:188:VAL:HG21	0.52	1.82	10	2
1:A:121:SER:O	1:A:125:ARG:CG	0.52	2.57	2	2
1:A:184:LEU:O	1:A:186:THR:N	0.52	2.42	15	3
1:A:191:LEU:O	1:A:195:GLY:CA	0.52	2.57	13	8
1:A:151:LEU:HB2	1:A:187:TYR:CE2	0.52	2.38	9	3
1:A:161:VAL:O	1:A:164:HIS:N	0.52	2.43	8	4
1:A:120:ARG:O	1:A:122:GLU:N	0.52	2.41	8	1
1:A:114:GLN:O	1:A:125:ARG:NH1	0.52	2.42	5	1
1:A:125:ARG:NE	1:A:129:LEU:CD2	0.52	2.71	14	1
1:A:160:LYS:O	1:A:163:SER:N	0.52	2.41	14	6
1:A:23:VAL:CG1	1:A:176:THR:OG1	0.52	2.57	14	1
1:A:180:ILE:HG23	1:A:184:LEU:C	0.52	2.25	9	2
1:A:16:GLU:O	1:A:18:ILE:N	0.52	2.43	13	14
1:A:183:ASN:N	1:A:183:ASN:ND2	0.52	2.58	6	4
1:A:121:SER:O	1:A:123:GLU:N	0.52	2.43	4	5
1:A:151:LEU:O	1:A:155:LEU:CG	0.52	2.58	2	3
1:A:151:LEU:HD11	1:A:180:ILE:CD1	0.52	2.34	6	5
1:A:125:ARG:CZ	1:A:175:THR:OG1	0.52	2.57	3	1
1:A:26:PHE:CE1	1:A:195:GLY:O	0.52	2.63	7	1
1:A:115:LEU:HD21	1:A:175:THR:OG1	0.52	2.03	12	1
1:A:23:VAL:HG12	1:A:24:PHE:N	0.52	2.20	12	1
1:A:129:LEU:HD12	1:A:154:ALA:CA	0.52	2.34	8	2
1:A:108:VAL:HG23	1:A:109:ASN:N	0.52	2.20	3	15
1:A:125:ARG:HG3	1:A:126:ASN:N	0.52	2.19	13	3
1:A:125:ARG:NH1	1:A:126:ASN:OD1	0.52	2.43	11	1
1:A:114:GLN:CG	1:A:128:ASP:OD1	0.52	2.58	13	2
1:A:151:LEU:CD1	1:A:184:LEU:HD23	0.52	2.34	1	1
1:A:129:LEU:HD12	1:A:154:ALA:HB1	0.52	1.82	4	4
1:A:110:GLY:O	1:A:113:LEU:N	0.52	2.43	7	11
1:A:22:LEU:HD11	1:A:192:ALA:CA	0.52	2.34	11	7
1:A:137:LEU:HD11	1:A:150:MET:CB	0.52	2.35	3	1
1:A:19:THR:HG23	1:A:188:VAL:CB	0.52	2.35	10	1
1:A:112:ALA:O	1:A:116:ARG:CB	0.52	2.57	9	4
1:A:125:ARG:NH2	1:A:126:ASN:OD1	0.52	2.43	13	2
1:A:148:LYS:O	1:A:152:VAL:N	0.52	2.41	10	7
1:A:28:GLN:HG2	1:A:39:LEU:CD1	0.52	2.35	4	6
1:A:125:ARG:NH1	1:A:125:ARG:O	0.52	2.43	13	1
1:A:168:LEU:C	1:A:172:VAL:HG23	0.51	2.23	2	3
1:A:151:LEU:O	1:A:155:LEU:CB	0.51	2.58	2	4
1:A:23:VAL:HG22	1:A:27:LEU:HD21	0.51	1.82	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:125:ARG:HG2	1:A:129:LEU:HD23	0.51	1.82	7	1
1:A:22:LEU:HB3	1:A:26:PHE:CE2	0.51	2.41	14	7
1:A:114:GLN:CG	1:A:128:ASP:OD2	0.51	2.58	8	2
1:A:121:SER:O	1:A:125:ARG:HB2	0.51	2.04	5	3
1:A:109:ASN:OD1	1:A:164:HIS:ND1	0.51	2.43	4	1
1:A:111:LEU:CD1	1:A:125:ARG:NH2	0.51	2.68	14	1
1:A:42:LEU:HD12	1:A:170:ARG:NH1	0.51	2.20	3	1
1:A:82:GLU:OE1	1:A:82:GLU:N	0.51	2.44	10	2
1:A:28:GLN:OE1	1:A:90:ARG:NE	0.51	2.43	9	1
1:A:81:GLN:HA	1:A:84:ILE:HD12	0.51	1.82	8	1
1:A:115:LEU:O	1:A:116:ARG:C	0.51	2.49	2	15
1:A:118:THR:HG22	1:A:119:SER:N	0.51	2.20	9	3
1:A:28:GLN:HG3	1:A:39:LEU:CD1	0.51	2.35	9	3
1:A:151:LEU:HG	1:A:187:TYR:CD1	0.51	2.41	7	4
1:A:151:LEU:HG	1:A:187:TYR:CG	0.51	2.41	6	2
1:A:147:GLU:HA	1:A:151:LEU:HD22	0.51	1.81	7	1
1:A:125:ARG:NH1	1:A:129:LEU:CD2	0.51	2.74	10	1
1:A:185:ARG:O	1:A:187:TYR:N	0.51	2.44	14	4
1:A:23:VAL:HB	1:A:173:PHE:CD2	0.51	2.41	4	6
1:A:23:VAL:HG13	1:A:173:PHE:CG	0.51	2.40	6	4
1:A:133:LEU:CD1	1:A:150:MET:HG2	0.51	2.35	8	2
1:A:26:PHE:CZ	1:A:191:LEU:HB3	0.51	2.41	8	6
1:A:156:LEU:O	1:A:160:LYS:N	0.51	2.44	4	4
1:A:165:THR:O	1:A:167:SER:N	0.51	2.43	8	1
1:A:116:ARG:CA	1:A:168:LEU:HD12	0.51	2.36	10	2
1:A:151:LEU:CD1	1:A:180:ILE:HG23	0.51	2.34	5	1
1:A:151:LEU:CD1	1:A:155:LEU:HD21	0.51	2.36	15	1
1:A:116:ARG:O	1:A:117:ASN:C	0.51	2.49	11	13
1:A:131:THR:O	1:A:135:GLN:CG	0.51	2.58	12	2
1:A:125:ARG:HG3	1:A:129:LEU:HD23	0.51	1.83	6	1
1:A:168:LEU:CD2	1:A:168:LEU:C	0.51	2.80	10	2
1:A:23:VAL:HG11	1:A:173:PHE:CB	0.50	2.36	2	3
1:A:114:GLN:CG	1:A:128:ASP:CG	0.50	2.80	14	1
1:A:120:ARG:O	1:A:121:SER:C	0.50	2.50	8	8
1:A:147:GLU:O	1:A:151:LEU:N	0.50	2.44	10	5
1:A:100:ASP:OD2	1:A:159:LYS:NZ	0.50	2.44	2	1
1:A:27:LEU:HD11	1:A:172:VAL:CG1	0.50	2.36	3	3
1:A:173:PHE:O	1:A:177:VAL:CG2	0.50	2.60	10	2
1:A:185:ARG:CG	1:A:186:THR:N	0.50	2.74	15	1
1:A:117:ASN:O	1:A:118:THR:C	0.50	2.50	8	9
1:A:35:PHE:CE2	1:A:166:PRO:HB3	0.50	2.42	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:115:LEU:CD2	1:A:125:ARG:HG2	0.50	2.37	14	1
1:A:97:ASP:O	1:A:100:ASP:N	0.50	2.45	9	1
1:A:88:ILE:CD1	1:A:192:ALA:O	0.50	2.59	4	1
1:A:39:LEU:HD23	1:A:169:LEU:CD1	0.50	2.32	6	1
1:A:133:LEU:HG	1:A:154:ALA:HB2	0.50	1.81	11	1
1:A:191:LEU:O	1:A:195:GLY:N	0.50	2.44	5	1
1:A:115:LEU:O	1:A:117:ASN:N	0.50	2.44	14	2
1:A:125:ARG:NE	1:A:129:LEU:HD21	0.50	2.22	14	1
1:A:148:LYS:O	1:A:152:VAL:CG2	0.50	2.59	4	4
1:A:22:LEU:CD1	1:A:26:PHE:CZ	0.50	2.80	8	3
1:A:42:LEU:CD2	1:A:173:PHE:CD2	0.50	2.94	10	7
1:A:151:LEU:HD21	1:A:180:ILE:HD12	0.50	1.82	11	1
1:A:149:THR:O	1:A:153:LEU:CD1	0.50	2.58	8	1
1:A:24:PHE:CD1	1:A:173:PHE:CE2	0.49	3.00	14	2
1:A:23:VAL:O	1:A:27:LEU:N	0.49	2.35	13	5
1:A:23:VAL:CG2	1:A:176:THR:OG1	0.49	2.60	2	2
1:A:16:GLU:O	1:A:19:THR:N	0.49	2.44	6	6
1:A:27:LEU:HD11	1:A:159:LYS:HA	0.49	1.81	14	3
1:A:117:ASN:O	1:A:118:THR:O	0.49	2.31	2	6
1:A:184:LEU:CD1	1:A:187:TYR:HB2	0.49	2.37	9	1
1:A:176:THR:O	1:A:180:ILE:HG12	0.49	2.06	8	10
1:A:82:GLU:OE1	1:A:82:GLU:CA	0.49	2.60	6	1
1:A:17:CYS:HA	1:A:20:ASN:ND2	0.49	2.23	6	15
1:A:151:LEU:HG	1:A:187:TYR:CD2	0.49	2.42	15	2
1:A:158:ALA:O	1:A:160:LYS:N	0.49	2.45	7	7
1:A:151:LEU:HD12	1:A:187:TYR:CB	0.49	2.37	4	1
1:A:125:ARG:NH2	1:A:175:THR:OG1	0.49	2.45	3	1
1:A:140:TYR:CD1	1:A:140:TYR:N	0.49	2.79	3	1
1:A:134:GLU:CA	1:A:134:GLU:OE1	0.49	2.61	8	1
1:A:22:LEU:CD1	1:A:26:PHE:CE2	0.49	2.90	8	2
1:A:156:LEU:O	1:A:160:LYS:CB	0.49	2.61	4	2
1:A:183:ASN:O	1:A:185:ARG:CD	0.49	2.61	2	1
1:A:171:ASP:OD1	1:A:171:ASP:N	0.49	2.45	8	1
1:A:111:LEU:CD1	1:A:157:LEU:HB3	0.49	2.38	13	13
1:A:23:VAL:CG2	1:A:173:PHE:CD2	0.49	2.95	11	2
1:A:158:ALA:O	1:A:161:VAL:HG13	0.49	2.07	4	7
1:A:100:ASP:OD1	1:A:160:LYS:NZ	0.49	2.45	4	1
1:A:165:THR:HG22	1:A:168:LEU:HD13	0.49	1.85	8	2
1:A:180:ILE:HG23	1:A:187:TYR:HB3	0.49	1.85	10	1
1:A:24:PHE:HA	1:A:173:PHE:CZ	0.49	2.43	12	7
1:A:114:GLN:HB3	1:A:125:ARG:CZ	0.49	2.38	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:184:LEU:CD1	1:A:184:LEU:N	0.49	2.76	1	1
1:A:108:VAL:HG21	1:A:164:HIS:CD2	0.49	2.42	14	1
1:A:147:GLU:CG	1:A:184:LEU:HD21	0.49	2.35	5	1
1:A:117:ASN:O	1:A:120:ARG:O	0.48	2.31	9	4
1:A:111:LEU:CD1	1:A:157:LEU:HG	0.48	2.38	9	2
1:A:27:LEU:HD12	1:A:162:ALA:CB	0.48	2.39	11	2
1:A:136:LEU:CD2	1:A:136:LEU:N	0.48	2.75	1	1
1:A:108:VAL:HG21	1:A:164:HIS:CG	0.48	2.43	14	1
1:A:125:ARG:CZ	1:A:125:ARG:HB3	0.48	2.38	7	1
1:A:115:LEU:O	1:A:121:SER:OG	0.48	2.32	14	7
1:A:120:ARG:O	1:A:124:ASP:N	0.48	2.42	11	5
1:A:158:ALA:C	1:A:172:VAL:CG1	0.48	2.80	3	8
1:A:18:ILE:O	1:A:22:LEU:CD2	0.48	2.61	8	2
1:A:151:LEU:CD2	1:A:187:TYR:CD1	0.48	2.96	7	1
1:A:38:GLU:HB3	1:A:169:LEU:HD12	0.48	1.86	9	1
1:A:36:ARG:O	1:A:39:LEU:N	0.48	2.46	9	4
1:A:121:SER:O	1:A:125:ARG:HB3	0.48	2.08	11	6
1:A:180:ILE:CG2	1:A:184:LEU:C	0.48	2.81	1	4
1:A:23:VAL:HB	1:A:173:PHE:CG	0.48	2.44	11	1
1:A:158:ALA:HB1	1:A:172:VAL:HG13	0.48	1.85	1	2
1:A:162:ALA:CB	1:A:172:VAL:HG21	0.48	2.27	3	1
1:A:180:ILE:O	1:A:182:GLN:N	0.48	2.46	14	1
1:A:28:GLN:HA	1:A:39:LEU:HD11	0.48	1.83	7	6
1:A:151:LEU:O	1:A:155:LEU:N	0.48	2.47	8	4
1:A:31:SER:O	1:A:33:ASN:N	0.48	2.46	14	1
1:A:147:GLU:O	1:A:151:LEU:CB	0.48	2.61	10	3
1:A:161:VAL:CG2	1:A:162:ALA:N	0.48	2.76	8	2
1:A:151:LEU:CD2	1:A:184:LEU:CD1	0.48	2.90	5	2
1:A:18:ILE:HD12	1:A:19:THR:CA	0.48	2.38	6	15
1:A:42:LEU:CD1	1:A:169:LEU:HB3	0.48	2.38	7	1
1:A:184:LEU:HD13	1:A:187:TYR:HB2	0.48	1.83	15	2
1:A:125:ARG:NH1	1:A:128:ASP:HB3	0.48	2.24	6	1
1:A:26:PHE:CE2	1:A:191:LEU:HB3	0.48	2.44	5	4
1:A:171:ASP:O	1:A:175:THR:OG1	0.48	2.31	4	3
1:A:27:LEU:HG	1:A:173:PHE:CD1	0.48	2.44	9	3
1:A:111:LEU:HD13	1:A:157:LEU:HG	0.48	1.86	9	1
1:A:125:ARG:NH2	1:A:174:HIS:HB3	0.48	2.24	4	1
1:A:23:VAL:HG11	1:A:173:PHE:C	0.48	2.28	7	4
1:A:30:CYS:HB2	1:A:159:LYS:CG	0.48	2.39	10	1
1:A:19:THR:CG2	1:A:188:VAL:HG21	0.48	2.39	10	1
1:A:146:LYS:O	1:A:147:GLU:C	0.47	2.51	13	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:156:LEU:O	1:A:160:LYS:CG	0.47	2.62	4	1
1:A:184:LEU:O	1:A:187:TYR:N	0.47	2.42	8	2
1:A:42:LEU:HD21	1:A:170:ARG:N	0.47	2.24	14	1
1:A:129:LEU:O	1:A:133:LEU:N	0.47	2.41	5	9
1:A:121:SER:OG	1:A:171:ASP:OD2	0.47	2.32	4	2
1:A:110:GLY:O	1:A:114:GLN:N	0.47	2.46	13	4
1:A:18:ILE:HD12	1:A:18:ILE:C	0.47	2.29	1	5
1:A:151:LEU:CD2	1:A:180:ILE:HD12	0.47	2.39	11	1
1:A:88:ILE:CG2	1:A:195:GLY:HA2	0.47	2.40	3	2
1:A:42:LEU:CD2	1:A:173:PHE:CG	0.47	2.97	1	3
1:A:129:LEU:N	1:A:129:LEU:CD2	0.47	2.78	8	1
1:A:150:MET:CE	1:A:179:PHE:CZ	0.47	2.97	8	1
1:A:19:THR:HB	1:A:177:VAL:HG13	0.47	1.86	14	4
1:A:127:ARG:O	1:A:131:THR:CB	0.47	2.63	4	5
1:A:20:ASN:O	1:A:23:VAL:HG22	0.47	2.09	8	3
1:A:195:GLY:O	1:A:196:MET:C	0.47	2.52	13	4
1:A:147:GLU:HA	1:A:184:LEU:CD1	0.47	2.40	3	2
1:A:42:LEU:HD22	1:A:173:PHE:CZ	0.47	2.45	8	4
1:A:88:ILE:CG2	1:A:192:ALA:O	0.47	2.56	1	3
1:A:147:GLU:HA	1:A:151:LEU:CD2	0.47	2.39	12	2
1:A:18:ILE:CD1	1:A:18:ILE:C	0.47	2.80	13	2
1:A:117:ASN:O	1:A:118:THR:HB	0.47	2.09	3	1
1:A:162:ALA:HB2	1:A:172:VAL:CG2	0.47	2.27	3	1
1:A:151:LEU:HG	1:A:180:ILE:CD1	0.47	2.38	1	2
1:A:116:ARG:O	1:A:117:ASN:O	0.47	2.31	13	1
1:A:111:LEU:CG	1:A:157:LEU:HB3	0.47	2.40	14	9
1:A:147:GLU:CB	1:A:187:TYR:CD2	0.47	2.98	14	1
1:A:23:VAL:HG12	1:A:176:THR:OG1	0.47	2.10	14	1
1:A:116:ARG:O	1:A:121:SER:OG	0.47	2.33	13	2
1:A:115:LEU:HD23	1:A:125:ARG:HB3	0.47	1.85	13	1
1:A:147:GLU:HB3	1:A:184:LEU:CD1	0.47	2.40	13	3
1:A:114:GLN:CB	1:A:128:ASP:OD2	0.47	2.63	4	1
1:A:180:ILE:CG2	1:A:188:VAL:CG2	0.47	2.90	4	4
1:A:153:LEU:O	1:A:156:LEU:N	0.47	2.48	2	2
1:A:161:VAL:O	1:A:165:THR:N	0.47	2.40	7	2
1:A:22:LEU:HB3	1:A:26:PHE:CD2	0.47	2.45	11	1
1:A:29:SER:OG	1:A:90:ARG:CG	0.47	2.63	15	1
1:A:169:LEU:O	1:A:170:ARG:C	0.47	2.53	12	15
1:A:111:LEU:HG	1:A:157:LEU:CB	0.47	2.40	6	2
1:A:151:LEU:O	1:A:155:LEU:HG	0.47	2.10	4	9
1:A:188:VAL:HA	1:A:191:LEU:HD12	0.47	1.87	12	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:150:MET:HE2	1:A:184:LEU:HD21	0.47	1.85	11	1
1:A:168:LEU:HD23	1:A:172:VAL:CG2	0.47	2.40	8	2
1:A:169:LEU:O	1:A:172:VAL:HG22	0.47	2.09	15	1
1:A:125:ARG:CZ	1:A:129:LEU:HD21	0.47	2.40	14	1
1:A:30:CYS:SG	1:A:159:LYS:O	0.47	2.73	9	6
1:A:22:LEU:O	1:A:23:VAL:C	0.47	2.53	9	6
1:A:187:TYR:O	1:A:190:SER:CB	0.47	2.63	4	4
1:A:155:LEU:HD13	1:A:191:LEU:HD11	0.47	1.86	5	1
1:A:155:LEU:HD11	1:A:191:LEU:HD11	0.46	1.85	14	1
1:A:26:PHE:CZ	1:A:159:LYS:CB	0.46	2.98	9	3
1:A:29:SER:OG	1:A:90:ARG:CA	0.46	2.62	9	1
1:A:174:HIS:O	1:A:178:ASN:HB2	0.46	2.10	2	9
1:A:21:LEU:HB3	1:A:85:ILE:HG21	0.46	1.86	11	1
1:A:117:ASN:OD1	1:A:124:ASP:OD2	0.46	2.33	1	2
1:A:151:LEU:CG	1:A:187:TYR:CE1	0.46	2.97	6	3
1:A:184:LEU:O	1:A:185:ARG:C	0.46	2.54	3	11
1:A:177:VAL:HG12	1:A:177:VAL:O	0.46	2.09	12	4
1:A:146:LYS:O	1:A:150:MET:HB2	0.46	2.10	1	5
1:A:16:GLU:O	1:A:19:THR:OG1	0.46	2.32	7	3
1:A:133:LEU:HD21	1:A:154:ALA:H	0.46	1.69	2	3
1:A:88:ILE:CG2	1:A:195:GLY:CA	0.46	2.94	3	1
1:A:23:VAL:CG1	1:A:24:PHE:N	0.46	2.79	12	1
1:A:114:GLN:OE1	1:A:128:ASP:OD2	0.46	2.34	15	1
1:A:30:CYS:O	1:A:97:ASP:OD2	0.46	2.33	4	7
1:A:155:LEU:HD23	1:A:155:LEU:N	0.46	2.25	2	4
1:A:112:ALA:CB	1:A:161:VAL:HB	0.46	2.39	5	5
1:A:111:LEU:CD2	1:A:157:LEU:HG	0.46	2.40	4	2
1:A:177:VAL:O	1:A:181:ASN:OD1	0.46	2.33	5	3
1:A:111:LEU:HD22	1:A:125:ARG:HH21	0.46	1.71	6	1
1:A:116:ARG:HA	1:A:168:LEU:CD2	0.46	2.38	5	2
1:A:19:THR:HG23	1:A:188:VAL:CG2	0.46	2.40	10	1
1:A:35:PHE:CE2	1:A:166:PRO:HB2	0.46	2.45	5	1
1:A:137:LEU:HD12	1:A:150:MET:HE3	0.46	1.86	9	1
1:A:21:LEU:HD11	1:A:82:GLU:OE2	0.46	2.10	9	1
1:A:116:ARG:HA	1:A:168:LEU:CD1	0.46	2.40	5	4
1:A:133:LEU:HD11	1:A:154:ALA:HB3	0.46	1.85	6	2
1:A:187:TYR:C	1:A:187:TYR:CD1	0.46	2.89	9	2
1:A:129:LEU:CD2	1:A:129:LEU:N	0.46	2.78	12	5
1:A:29:SER:CB	1:A:90:ARG:HG3	0.46	2.41	11	1
1:A:145:GLU:OE1	1:A:147:GLU:OE1	0.46	2.34	11	1
1:A:149:THR:O	1:A:153:LEU:HD12	0.46	2.11	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:LEU:HB3	1:A:173:PHE:CE1	0.46	2.46	10	1
1:A:124:ASP:O	1:A:128:ASP:CB	0.46	2.63	8	3
1:A:30:CYS:O	1:A:97:ASP:OD1	0.46	2.33	2	2
1:A:161:VAL:CG2	1:A:168:LEU:HD13	0.46	2.40	6	2
1:A:184:LEU:O	1:A:187:TYR:HB3	0.46	2.10	6	2
1:A:152:VAL:O	1:A:156:LEU:CD1	0.46	2.63	3	1
1:A:33:ASN:N	1:A:33:ASN:OD1	0.46	2.49	8	1
1:A:168:LEU:HB3	1:A:172:VAL:HG23	0.46	1.88	5	1
1:A:125:ARG:CD	1:A:129:LEU:HD23	0.46	2.41	14	1
1:A:137:LEU:HD13	1:A:146:LYS:HG3	0.46	1.88	6	1
1:A:115:LEU:CD2	1:A:125:ARG:HG3	0.46	2.41	8	4
1:A:30:CYS:SG	1:A:163:SER:N	0.46	2.89	12	1
1:A:36:ARG:O	1:A:38:GLU:N	0.46	2.49	9	9
1:A:183:ASN:O	1:A:185:ARG:HD3	0.46	2.11	2	1
1:A:115:LEU:HG	1:A:125:ARG:CZ	0.45	2.41	14	1
1:A:18:ILE:CG1	1:A:19:THR:N	0.45	2.79	7	10
1:A:114:GLN:HG2	1:A:128:ASP:OD1	0.45	2.11	13	2
1:A:151:LEU:HD23	1:A:187:TYR:CE2	0.45	2.46	8	2
1:A:31:SER:O	1:A:32:ASP:O	0.45	2.34	5	2
1:A:125:ARG:HD2	1:A:175:THR:CG2	0.45	2.41	15	1
1:A:115:LEU:HD23	1:A:125:ARG:HG2	0.45	1.87	14	1
1:A:151:LEU:CG	1:A:187:TYR:CD1	0.45	2.99	7	4
1:A:112:ALA:CA	1:A:161:VAL:HB	0.45	2.41	8	2
1:A:172:VAL:O	1:A:175:THR:HB	0.45	2.11	8	12
1:A:178:ASN:O	1:A:179:PHE:C	0.45	2.55	9	14
1:A:35:PHE:CD1	1:A:35:PHE:N	0.45	2.83	9	1
1:A:148:LYS:O	1:A:152:VAL:CB	0.45	2.65	10	2
1:A:117:ASN:HB3	1:A:120:ARG:O	0.45	2.12	7	1
1:A:23:VAL:HG23	1:A:177:VAL:CG2	0.45	2.31	12	1
1:A:168:LEU:O	1:A:169:LEU:C	0.45	2.55	12	12
1:A:180:ILE:CG2	1:A:185:ARG:HA	0.45	2.40	9	1
1:A:133:LEU:CD1	1:A:150:MET:CG	0.45	2.82	8	2
1:A:31:SER:O	1:A:32:ASP:C	0.45	2.55	8	2
1:A:136:LEU:HD23	1:A:136:LEU:N	0.45	2.26	12	1
1:A:26:PHE:CE2	1:A:27:LEU:HD21	0.45	2.45	13	1
1:A:115:LEU:N	1:A:125:ARG:HD3	0.45	2.26	5	1
1:A:108:VAL:HG21	1:A:164:HIS:CB	0.45	2.37	15	1
1:A:21:LEU:O	1:A:24:PHE:HB2	0.45	2.12	1	8
1:A:36:ARG:O	1:A:37:ARG:C	0.45	2.54	12	11
1:A:23:VAL:HB	1:A:177:VAL:CG2	0.45	2.42	2	2
1:A:137:LEU:CD1	1:A:150:MET:SD	0.45	3.05	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:168:LEU:HD13	1:A:168:LEU:N	0.45	2.26	10	1
1:A:124:ASP:O	1:A:128:ASP:OD2	0.45	2.35	14	2
1:A:111:LEU:HD22	1:A:157:LEU:HB3	0.45	1.88	9	1
1:A:157:LEU:N	1:A:157:LEU:CD1	0.45	2.79	9	1
1:A:159:LYS:N	1:A:172:VAL:CG1	0.45	2.80	9	3
1:A:111:LEU:HD21	1:A:157:LEU:CG	0.45	2.40	4	1
1:A:125:ARG:NH1	1:A:175:THR:HG23	0.45	2.27	13	1
1:A:17:CYS:CA	1:A:20:ASN:ND2	0.45	2.80	6	11
1:A:112:ALA:O	1:A:116:ARG:HB2	0.45	2.11	9	11
1:A:89:ALA:O	1:A:93:ALA:HB3	0.45	2.12	6	2
1:A:125:ARG:NH2	1:A:158:ALA:HA	0.45	2.27	14	1
1:A:28:GLN:HA	1:A:39:LEU:CD1	0.45	2.42	5	7
1:A:34:SER:O	1:A:35:PHE:CB	0.45	2.65	12	1
1:A:168:LEU:H	1:A:168:LEU:HD13	0.45	1.72	8	2
1:A:29:SER:OG	1:A:90:ARG:O	0.45	2.35	9	1
1:A:147:GLU:O	1:A:151:LEU:CD2	0.45	2.65	2	1
1:A:184:LEU:N	1:A:184:LEU:HD12	0.45	2.27	8	1
1:A:84:ILE:CG2	1:A:88:ILE:CD1	0.45	2.94	8	1
1:A:125:ARG:HB3	1:A:125:ARG:NH1	0.45	2.27	9	2
1:A:29:SER:HB2	1:A:93:ALA:HB3	0.44	1.89	9	1
1:A:152:VAL:O	1:A:156:LEU:CG	0.44	2.65	6	1
1:A:35:PHE:CZ	1:A:166:PRO:CG	0.44	3.01	1	1
1:A:36:ARG:CD	1:A:37:ARG:N	0.44	2.80	1	1
1:A:111:LEU:HA	1:A:125:ARG:NH2	0.44	2.26	10	1
1:A:174:HIS:O	1:A:175:THR:C	0.44	2.56	15	6
1:A:127:ARG:O	1:A:131:THR:OG1	0.44	2.33	15	3
1:A:23:VAL:HG13	1:A:173:PHE:CD1	0.44	2.46	12	1
1:A:22:LEU:CD2	1:A:85:ILE:CG2	0.44	2.95	12	1
1:A:155:LEU:HD22	1:A:176:THR:CG2	0.44	2.40	15	1
1:A:24:PHE:CD1	1:A:24:PHE:N	0.44	2.83	14	1
1:A:115:LEU:HG	1:A:125:ARG:CG	0.44	2.42	14	1
1:A:21:LEU:O	1:A:22:LEU:C	0.44	2.55	12	2
1:A:177:VAL:O	1:A:181:ASN:CG	0.44	2.56	2	2
1:A:121:SER:CB	1:A:171:ASP:CG	0.44	2.86	12	1
1:A:133:LEU:CD1	1:A:150:MET:SD	0.44	3.06	15	1
1:A:108:VAL:HG23	1:A:109:ASN:H	0.44	1.72	4	2
1:A:22:LEU:O	1:A:26:PHE:HB3	0.44	2.13	10	5
1:A:168:LEU:HD23	1:A:172:VAL:HG23	0.44	1.88	8	1
1:A:21:LEU:HD21	1:A:82:GLU:CD	0.44	2.32	15	1
1:A:86:ARG:CG	1:A:87:ASN:N	0.44	2.80	15	1
1:A:129:LEU:HD12	1:A:154:ALA:CB	0.44	2.42	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:155:LEU:CD2	1:A:176:THR:HA	0.44	2.43	15	2
1:A:115:LEU:CD2	1:A:125:ARG:HB2	0.44	2.43	13	2
1:A:187:TYR:CE1	1:A:191:LEU:HG	0.44	2.48	12	2
1:A:178:ASN:C	1:A:180:ILE:N	0.44	2.71	10	11
1:A:151:LEU:O	1:A:152:VAL:C	0.44	2.56	1	8
1:A:35:PHE:CZ	1:A:166:PRO:HB3	0.44	2.47	15	1
1:A:114:GLN:O	1:A:128:ASP:OD2	0.44	2.35	4	1
1:A:125:ARG:NH1	1:A:128:ASP:CB	0.44	2.81	6	1
1:A:42:LEU:CD2	1:A:173:PHE:CZ	0.44	3.01	8	1
1:A:115:LEU:C	1:A:168:LEU:HD21	0.44	2.32	9	1
1:A:26:PHE:HB3	1:A:159:LYS:CD	0.44	2.43	1	1
1:A:125:ARG:NH2	1:A:175:THR:HA	0.44	2.28	7	1
1:A:148:LYS:HA	1:A:187:TYR:CE1	0.44	2.47	8	1
1:A:124:ASP:O	1:A:128:ASP:CG	0.43	2.56	14	2
1:A:28:GLN:OE1	1:A:90:ARG:CZ	0.43	2.66	9	1
1:A:23:VAL:O	1:A:27:LEU:HB2	0.43	2.13	13	7
1:A:157:LEU:O	1:A:160:LYS:HB2	0.43	2.13	3	5
1:A:185:ARG:O	1:A:186:THR:C	0.43	2.57	3	1
1:A:121:SER:HB2	1:A:171:ASP:OD2	0.43	2.13	10	2
1:A:160:LYS:O	1:A:161:VAL:C	0.43	2.57	6	6
1:A:108:VAL:O	1:A:109:ASN:C	0.43	2.56	13	8
1:A:156:LEU:O	1:A:160:LYS:HG3	0.43	2.13	4	2
1:A:35:PHE:CZ	1:A:166:PRO:HB2	0.43	2.47	2	2
1:A:122:GLU:O	1:A:126:ASN:HB2	0.43	2.14	9	9
1:A:20:ASN:O	1:A:24:PHE:CD2	0.43	2.71	3	2
1:A:158:ALA:O	1:A:159:LYS:C	0.43	2.56	1	7
1:A:136:LEU:O	1:A:140:TYR:CE2	0.43	2.70	15	1
1:A:147:GLU:O	1:A:151:LEU:HB2	0.43	2.13	3	6
1:A:108:VAL:O	1:A:112:ALA:N	0.43	2.51	2	5
1:A:137:LEU:CD1	1:A:150:MET:HG3	0.43	2.40	10	1
1:A:42:LEU:CD2	1:A:170:ARG:HA	0.43	2.40	14	2
1:A:180:ILE:N	1:A:180:ILE:HD12	0.43	2.28	14	1
1:A:117:ASN:HB3	1:A:120:ARG:CB	0.43	2.44	9	2
1:A:151:LEU:O	1:A:155:LEU:HB2	0.43	2.13	9	5
1:A:190:SER:O	1:A:191:LEU:C	0.43	2.57	2	7
1:A:36:ARG:C	1:A:38:GLU:N	0.43	2.72	9	5
1:A:111:LEU:HD11	1:A:157:LEU:HG	0.43	1.90	2	1
1:A:181:ASN:HA	1:A:185:ARG:CG	0.43	2.43	11	1
1:A:92:LEU:HG	1:A:196:MET:N	0.43	2.29	10	2
1:A:149:THR:HA	1:A:152:VAL:CG2	0.43	2.44	7	1
1:A:147:GLU:O	1:A:151:LEU:HD23	0.43	2.14	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:152:VAL:O	1:A:156:LEU:HB2	0.43	2.14	11	3
1:A:35:PHE:CZ	1:A:166:PRO:HG2	0.43	2.49	1	1
1:A:33:ASN:OD1	1:A:33:ASN:N	0.43	2.52	13	1
1:A:134:GLU:O	1:A:138:GLN:HB2	0.43	2.14	9	5
1:A:114:GLN:HG2	1:A:128:ASP:CG	0.43	2.35	14	1
1:A:111:LEU:CD2	1:A:157:LEU:HB3	0.43	2.43	9	1
1:A:118:THR:O	1:A:119:SER:C	0.43	2.57	3	2
1:A:109:ASN:O	1:A:113:LEU:HG	0.43	2.14	14	7
1:A:115:LEU:O	1:A:168:LEU:HD21	0.43	2.14	9	1
1:A:133:LEU:O	1:A:135:GLN:N	0.43	2.51	10	3
1:A:133:LEU:C	1:A:135:GLN:N	0.43	2.71	10	5
1:A:100:ASP:O	1:A:101:ARG:C	0.43	2.57	4	3
1:A:27:LEU:CD1	1:A:159:LYS:HA	0.43	2.44	10	3
1:A:18:ILE:C	1:A:18:ILE:CD1	0.43	2.81	7	1
1:A:108:VAL:HG12	1:A:160:LYS:HG2	0.43	1.90	12	2
1:A:149:THR:O	1:A:153:LEU:HG	0.43	2.14	8	1
1:A:29:SER:CB	1:A:90:ARG:O	0.42	2.67	9	1
1:A:115:LEU:HA	1:A:121:SER:OG	0.42	2.13	6	4
1:A:134:GLU:O	1:A:138:GLN:N	0.42	2.51	6	1
1:A:18:ILE:O	1:A:22:LEU:HD23	0.42	2.14	8	1
1:A:84:ILE:O	1:A:88:ILE:CG1	0.42	2.67	15	2
1:A:124:ASP:O	1:A:128:ASP:HB2	0.42	2.14	8	5
1:A:161:VAL:O	1:A:162:ALA:C	0.42	2.56	8	4
1:A:145:GLU:OE1	1:A:147:GLU:OE2	0.42	2.37	3	2
1:A:131:THR:O	1:A:135:GLN:HG2	0.42	2.14	12	1
1:A:145:GLU:OE1	1:A:147:GLU:CD	0.42	2.58	10	1
1:A:161:VAL:CG2	1:A:168:LEU:HD21	0.42	2.44	10	1
1:A:169:LEU:O	1:A:171:ASP:N	0.42	2.52	15	1
1:A:168:LEU:O	1:A:172:VAL:N	0.42	2.43	14	1
1:A:187:TYR:CD1	1:A:188:VAL:N	0.42	2.88	9	1
1:A:30:CYS:O	1:A:97:ASP:CG	0.42	2.58	9	2
1:A:151:LEU:CD1	1:A:187:TYR:CE1	0.42	3.01	6	1
1:A:152:VAL:O	1:A:156:LEU:HG	0.42	2.14	6	1
1:A:86:ARG:O	1:A:90:ARG:CB	0.42	2.68	11	1
1:A:116:ARG:HA	1:A:168:LEU:CG	0.42	2.44	5	1
1:A:122:GLU:HA	1:A:125:ARG:NE	0.42	2.29	4	1
1:A:130:ALA:HB2	1:A:179:PHE:CE1	0.42	2.48	1	1
1:A:117:ASN:CB	1:A:120:ARG:O	0.42	2.66	7	1
1:A:187:TYR:HE1	1:A:191:LEU:HD21	0.42	1.75	10	1
1:A:84:ILE:O	1:A:88:ILE:HG13	0.42	2.14	10	2
1:A:151:LEU:N	1:A:151:LEU:HD23	0.42	2.29	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:115:LEU:HD21	1:A:125:ARG:NE	0.42	2.29	3	1
1:A:23:VAL:O	1:A:27:LEU:CD2	0.42	2.67	1	2
1:A:125:ARG:HD3	1:A:175:THR:CB	0.42	2.44	8	2
1:A:28:GLN:NE2	1:A:90:ARG:CZ	0.42	2.82	8	1
1:A:42:LEU:CD2	1:A:173:PHE:CE2	0.42	3.03	8	2
1:A:121:SER:HB3	1:A:171:ASP:OD1	0.42	2.13	12	5
1:A:133:LEU:O	1:A:136:LEU:N	0.42	2.52	9	1
1:A:188:VAL:O	1:A:191:LEU:HB2	0.42	2.15	3	6
1:A:150:MET:HE3	1:A:184:LEU:HD12	0.42	1.92	7	1
1:A:156:LEU:O	1:A:160:LYS:HB2	0.42	2.14	14	3
1:A:164:HIS:O	1:A:166:PRO:HD3	0.42	2.15	4	1
1:A:172:VAL:HA	1:A:175:THR:OG1	0.42	2.15	4	2
1:A:127:ARG:O	1:A:131:THR:HB	0.42	2.15	15	3
1:A:182:GLN:C	1:A:183:ASN:CG	0.42	2.78	13	3
1:A:84:ILE:O	1:A:88:ILE:N	0.42	2.49	2	1
1:A:16:GLU:O	1:A:17:CYS:C	0.42	2.58	15	5
1:A:159:LYS:HA	1:A:172:VAL:CG1	0.42	2.44	3	1
1:A:165:THR:CG2	1:A:168:LEU:HD12	0.42	2.45	3	1
1:A:184:LEU:O	1:A:187:TYR:CB	0.42	2.67	8	1
1:A:38:GLU:CA	1:A:38:GLU:OE1	0.42	2.65	8	1
1:A:151:LEU:HD23	1:A:184:LEU:HD12	0.42	1.87	15	1
1:A:115:LEU:CG	1:A:125:ARG:HG2	0.42	2.45	14	1
1:A:86:ARG:O	1:A:90:ARG:HB3	0.42	2.14	4	1
1:A:16:GLU:C	1:A:18:ILE:N	0.42	2.73	15	11
1:A:154:ALA:CA	1:A:157:LEU:HD13	0.42	2.45	2	1
1:A:174:HIS:O	1:A:178:ASN:CB	0.42	2.68	2	1
1:A:177:VAL:O	1:A:177:VAL:HG12	0.42	2.15	3	1
1:A:108:VAL:CG1	1:A:160:LYS:HG2	0.42	2.45	7	1
1:A:191:LEU:O	1:A:195:GLY:C	0.42	2.58	7	2
1:A:125:ARG:CZ	1:A:175:THR:HA	0.42	2.45	12	2
1:A:30:CYS:HG	1:A:159:LYS:HG2	0.42	1.75	2	3
1:A:39:LEU:HD23	1:A:39:LEU:H	0.42	1.74	2	1
1:A:151:LEU:CA	1:A:155:LEU:HG	0.42	2.45	11	1
1:A:125:ARG:CD	1:A:175:THR:CG2	0.42	2.96	7	1
1:A:117:ASN:O	1:A:121:SER:OG	0.42	2.32	13	1
1:A:26:PHE:CE2	1:A:27:LEU:HD22	0.42	2.50	13	1
1:A:180:ILE:O	1:A:181:ASN:C	0.42	2.58	14	1
1:A:42:LEU:CD2	1:A:173:PHE:CE1	0.42	3.03	11	1
1:A:155:LEU:HD21	1:A:180:ILE:CD1	0.42	2.44	3	1
1:A:182:GLN:O	1:A:183:ASN:OD1	0.42	2.38	3	1
1:A:170:ARG:O	1:A:173:PHE:HB2	0.42	2.14	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:ILE:HA	1:A:88:ILE:HD12	0.42	1.92	12	1
1:A:168:LEU:N	1:A:168:LEU:HD13	0.42	2.30	8	1
1:A:37:ARG:O	1:A:40:ASP:HB2	0.42	2.15	8	1
1:A:187:TYR:O	1:A:190:SER:HB2	0.42	2.15	10	1
1:A:82:GLU:CD	1:A:82:GLU:N	0.41	2.73	14	1
1:A:29:SER:O	1:A:30:CYS:C	0.41	2.58	9	1
1:A:158:ALA:HB3	1:A:176:THR:CG2	0.41	2.45	2	1
1:A:91:HIS:O	1:A:94:GLN:HB2	0.41	2.15	15	2
1:A:87:ASN:O	1:A:91:HIS:HB2	0.41	2.15	8	1
1:A:170:ARG:O	1:A:174:HIS:CD2	0.41	2.73	9	1
1:A:35:PHE:C	1:A:35:PHE:CD1	0.41	2.94	9	1
1:A:131:THR:O	1:A:135:GLN:HG3	0.41	2.15	6	2
1:A:117:ASN:O	1:A:118:THR:CB	0.41	2.67	3	1
1:A:180:ILE:O	1:A:184:LEU:N	0.41	2.53	3	2
1:A:92:LEU:HD12	1:A:196:MET:CB	0.41	2.43	1	1
1:A:191:LEU:O	1:A:195:GLY:HA2	0.41	2.14	13	1
1:A:155:LEU:CD1	1:A:191:LEU:CD1	0.41	2.94	14	1
1:A:26:PHE:CE2	1:A:176:THR:HG21	0.41	2.50	9	1
1:A:29:SER:OG	1:A:90:ARG:CB	0.41	2.69	9	1
1:A:177:VAL:O	1:A:177:VAL:CG1	0.41	2.67	12	2
1:A:188:VAL:HA	1:A:191:LEU:CD1	0.41	2.46	10	1
1:A:183:ASN:O	1:A:184:LEU:C	0.41	2.57	15	2
1:A:42:LEU:HD21	1:A:173:PHE:CD1	0.41	2.50	15	1
1:A:125:ARG:HB3	1:A:125:ARG:CZ	0.41	2.46	9	1
1:A:21:LEU:HD11	1:A:82:GLU:HG3	0.41	1.91	11	1
1:A:147:GLU:O	1:A:151:LEU:HG	0.41	2.15	10	1
1:A:23:VAL:HG11	1:A:173:PHE:CA	0.41	2.45	10	1
1:A:153:LEU:O	1:A:154:ALA:C	0.41	2.59	2	2
1:A:190:SER:O	1:A:193:ARG:N	0.41	2.54	2	1
1:A:158:ALA:C	1:A:160:LYS:N	0.41	2.74	1	3
1:A:133:LEU:HD21	1:A:154:ALA:N	0.41	2.30	8	1
1:A:86:ARG:O	1:A:90:ARG:HG3	0.41	2.16	8	1
1:A:42:LEU:HD23	1:A:173:PHE:CG	0.41	2.50	10	1
1:A:182:GLN:HB3	1:A:183:ASN:ND2	0.41	2.31	5	1
1:A:151:LEU:HD12	1:A:155:LEU:CD1	0.41	2.44	15	1
1:A:22:LEU:HD13	1:A:22:LEU:HA	0.41	1.77	4	1
1:A:114:GLN:HB3	1:A:125:ARG:NH1	0.41	2.31	6	1
1:A:114:GLN:CB	1:A:125:ARG:NH1	0.41	2.83	6	1
1:A:108:VAL:HG12	1:A:160:LYS:CB	0.41	2.45	7	1
1:A:159:LYS:O	1:A:162:ALA:HB3	0.41	2.15	13	1
1:A:115:LEU:HG	1:A:125:ARG:HG2	0.41	1.92	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:CYS:SG	1:A:162:ALA:HB3	0.41	2.56	9	1
1:A:114:GLN:HG2	1:A:128:ASP:OD2	0.41	2.14	8	1
1:A:147:GLU:CA	1:A:151:LEU:HD22	0.41	2.46	8	1
1:A:19:THR:HA	1:A:188:VAL:HG11	0.41	1.92	5	1
1:A:155:LEU:CD2	1:A:176:THR:HB	0.41	2.43	15	1
1:A:152:VAL:HG22	1:A:196:MET:CG	0.41	2.45	14	1
1:A:111:LEU:HD11	1:A:157:LEU:CB	0.41	2.43	13	1
1:A:19:THR:HG21	1:A:181:ASN:ND2	0.41	2.31	13	1
1:A:154:ALA:HA	1:A:157:LEU:HG	0.41	1.91	14	1
1:A:35:PHE:CZ	1:A:166:PRO:HG3	0.41	2.51	14	1
1:A:26:PHE:CE1	1:A:159:LYS:HB2	0.41	2.51	9	1
1:A:155:LEU:CA	1:A:176:THR:HG22	0.41	2.44	4	1
1:A:181:ASN:ND2	1:A:185:ARG:HG2	0.41	2.31	11	1
1:A:86:ARG:O	1:A:90:ARG:HB2	0.41	2.15	11	1
1:A:177:VAL:CG1	1:A:177:VAL:O	0.41	2.68	7	1
1:A:148:LYS:C	1:A:152:VAL:HG23	0.41	2.36	12	1
1:A:100:ASP:OD2	1:A:160:LYS:HE3	0.41	2.16	8	1
1:A:125:ARG:NH1	1:A:171:ASP:O	0.41	2.54	8	1
1:A:28:GLN:NE2	1:A:90:ARG:NH2	0.41	2.69	8	1
1:A:35:PHE:CE1	1:A:166:PRO:HB2	0.41	2.51	13	1
1:A:121:SER:HB3	1:A:171:ASP:CG	0.41	2.36	13	1
1:A:155:LEU:HD22	1:A:176:THR:HG22	0.41	1.92	15	1
1:A:117:ASN:ND2	1:A:124:ASP:CG	0.41	2.74	14	1
1:A:115:LEU:CD2	1:A:125:ARG:HD3	0.41	2.45	9	1
1:A:122:GLU:HA	1:A:125:ARG:CZ	0.41	2.46	4	1
1:A:129:LEU:HD13	1:A:157:LEU:HD22	0.41	1.93	2	1
1:A:188:VAL:O	1:A:189:ARG:C	0.41	2.60	2	1
1:A:130:ALA:HA	1:A:179:PHE:CE1	0.41	2.51	6	1
1:A:172:VAL:O	1:A:176:THR:HG23	0.41	2.16	12	1
1:A:19:THR:CG2	1:A:188:VAL:CG1	0.41	2.97	12	1
1:A:129:LEU:HD12	1:A:154:ALA:HA	0.41	1.92	8	1
1:A:42:LEU:HD23	1:A:173:PHE:CE2	0.41	2.51	8	1
1:A:148:LYS:O	1:A:152:VAL:HB	0.41	2.16	10	1
1:A:115:LEU:HA	1:A:125:ARG:CD	0.41	2.46	5	1
1:A:180:ILE:CB	1:A:188:VAL:CG2	0.40	2.99	7	1
1:A:90:ARG:O	1:A:94:GLN:HB2	0.40	2.16	5	1
1:A:24:PHE:O	1:A:28:GLN:HB2	0.40	2.17	14	1
1:A:97:ASP:OD2	1:A:163:SER:OG	0.40	2.33	9	1
1:A:39:LEU:HD21	1:A:169:LEU:CD2	0.40	2.46	6	1
1:A:115:LEU:HD22	1:A:171:ASP:CB	0.40	2.46	8	1
1:A:115:LEU:CD2	1:A:125:ARG:CG	0.40	3.00	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:CYS:CA	1:A:20:ASN:HD21	0.40	2.30	14	1
1:A:24:PHE:CD1	1:A:173:PHE:CD2	0.40	3.09	14	1
1:A:128:ASP:O	1:A:132:ALA:N	0.40	2.49	9	1
1:A:114:GLN:CB	1:A:125:ARG:CZ	0.40	3.00	6	1
1:A:114:GLN:HB3	1:A:128:ASP:OD2	0.40	2.15	11	1
1:A:21:LEU:HD23	1:A:21:LEU:HA	0.40	1.76	13	1
1:A:38:GLU:HB2	1:A:169:LEU:CD1	0.40	2.44	9	1
1:A:35:PHE:O	1:A:38:GLU:HB2	0.40	2.16	3	1
1:A:160:LYS:C	1:A:162:ALA:N	0.40	2.74	7	1
1:A:109:ASN:O	1:A:112:ALA:N	0.40	2.55	8	1
1:A:147:GLU:C	1:A:151:LEU:HD22	0.40	2.36	8	1
1:A:180:ILE:HG21	1:A:188:VAL:H	0.40	1.76	10	1
1:A:30:CYS:HB2	1:A:159:LYS:HG2	0.40	1.93	10	1
1:A:21:LEU:HD11	1:A:82:GLU:HB3	0.40	1.94	5	1
1:A:154:ALA:O	1:A:157:LEU:HB2	0.40	2.16	14	1
1:A:26:PHE:HE2	1:A:176:THR:HG21	0.40	1.76	9	1
1:A:29:SER:O	1:A:31:SER:N	0.40	2.54	9	1
1:A:114:GLN:O	1:A:117:ASN:ND2	0.40	2.52	12	1
1:A:39:LEU:H	1:A:39:LEU:HD23	0.40	1.70	8	1
1:A:136:LEU:HD12	1:A:140:TYR:CZ	0.40	2.51	10	1
1:A:111:LEU:HG	1:A:157:LEU:HB3	0.40	1.94	5	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	135/197 (69%)	90±3 (66±2%)	31±3 (23±3%)	14±2 (11±2%)	1	9
All	All	2025/2955 (69%)	1343 (66%)	466 (23%)	216 (11%)	1	9

All 32 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	117	ASN	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	148	LYS	15
1	A	121	SER	14
1	A	179	PHE	13
1	A	17	CYS	13
1	A	35	PHE	13
1	A	169	LEU	13
1	A	118	THR	11
1	A	24	PHE	10
1	A	183	ASN	8
1	A	32	ASP	8
1	A	147	GLU	8
1	A	158	ALA	7
1	A	122	GLU	6
1	A	153	LEU	6
1	A	173	PHE	6
1	A	22	LEU	6
1	A	116	ARG	5
1	A	185	ARG	5
1	A	186	THR	5
1	A	159	LYS	5
1	A	33	ASN	5
1	A	145	GLU	3
1	A	101	ARG	3
1	A	175	THR	3
1	A	37	ARG	2
1	A	119	SER	2
1	A	196	MET	2
1	A	170	ARG	1
1	A	184	LEU	1
1	A	181	ASN	1
1	A	167	SER	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	119/173 (69%)	68±4 (57±3%)	51±4 (43±3%)	0 3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
All	All	1785/2595 (69%)	1014 (57%)	771 (43%)	0 3

All 99 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	97	ASP	15
1	A	124	ASP	15
1	A	100	ASP	15
1	A	161	VAL	15
1	A	183	ASN	15
1	A	20	ASN	15
1	A	40	ASP	15
1	A	83	ASP	15
1	A	138	GLN	15
1	A	42	LEU	15
1	A	189	ARG	14
1	A	82	GLU	14
1	A	19	THR	14
1	A	101	ARG	14
1	A	171	ASP	14
1	A	111	LEU	13
1	A	114	GLN	13
1	A	115	LEU	12
1	A	185	ARG	12
1	A	36	ARG	12
1	A	193	ARG	12
1	A	87	ASN	12
1	A	181	ASN	12
1	A	184	LEU	11
1	A	29	SER	11
1	A	32	ASP	11
1	A	151	LEU	11
1	A	159	LYS	11
1	A	37	ARG	10
1	A	128	ASP	10
1	A	123	GLU	10
1	A	22	LEU	10
1	A	134	GLU	10
1	A	121	SER	10
1	A	146	LYS	9
1	A	170	ARG	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	147	GLU	9
1	A	35	PHE	9
1	A	190	SER	9
1	A	26	PHE	9
1	A	44	HIS	9
1	A	94	GLN	9
1	A	23	VAL	9
1	A	160	LYS	8
1	A	28	GLN	8
1	A	179	PHE	8
1	A	127	ARG	8
1	A	21	LEU	7
1	A	34	SER	7
1	A	167	SER	7
1	A	92	LEU	7
1	A	149	THR	7
1	A	126	ASN	7
1	A	86	ARG	7
1	A	33	ASN	7
1	A	31	SER	6
1	A	163	SER	6
1	A	135	GLN	6
1	A	99	MET	6
1	A	178	ASN	6
1	A	91	HIS	6
1	A	119	SER	6
1	A	148	LYS	5
1	A	17	CYS	5
1	A	180	ILE	5
1	A	38	GLU	5
1	A	194	ASN	5
1	A	81	GLN	5
1	A	155	LEU	5
1	A	136	LEU	5
1	A	125	ARG	5
1	A	182	GLN	5
1	A	153	LEU	5
1	A	122	GLU	4
1	A	145	GLU	4
1	A	90	ARG	4
1	A	165	THR	4
1	A	98	SER	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	109	ASN	4
1	A	164	HIS	4
1	A	120	ARG	4
1	A	30	CYS	4
1	A	39	LEU	4
1	A	116	ARG	3
1	A	186	THR	3
1	A	196	MET	3
1	A	156	LEU	3
1	A	18	ILE	3
1	A	168	LEU	2
1	A	16	GLU	2
1	A	129	LEU	2
1	A	176	THR	2
1	A	117	ASN	2
1	A	118	THR	2
1	A	174	HIS	1
1	A	169	LEU	1
1	A	157	LEU	1
1	A	173	PHE	1
1	A	150	MET	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 carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 38% for the well-defined parts and 36% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: BMRB entry 5340

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_1*

7.1.1 Bookkeeping

The following table shows the results of parsing the chemical shift list and reports the number of nuclei with statistically unusual chemical shifts.

Total number of shifts	880
Number of shifts mapped to atoms	880
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	2

7.1.2 Chemical shift referencing

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction \pm precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	176	-1.24 ± 0.07	Should be applied
$^{13}\text{C}_\beta$	170	-0.15 ± 0.06	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	178	-0.05 ± 0.08	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	178	0.52 ± 0.15	Should be applied

7.1.3 Completeness of resonance assignments

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 38%, i.e. 656 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1724. 0 out of 30 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	528/673 (78%)	133/269 (49%)	262/270 (97%)	133/134 (99%)
Sidechain	128/958 (13%)	0/556 (0%)	128/342 (37%)	0/60 (0%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Aromatic	0/93 (0%)	0/49 (0%)	0/36 (0%)	0/8 (0%)
Overall	656/1724 (38%)	133/874 (15%)	390/648 (60%)	133/202 (66%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 36%, i.e. 880 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2445. 0 out of 38 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Backbone	710/973 (73%)	178/388 (46%)	354/394 (90%)	178/191 (93%)
Sidechain	170/1351 (13%)	0/789 (0%)	170/482 (35%)	0/80 (0%)
Aromatic	0/121 (0%)	0/63 (0%)	0/47 (0%)	0/11 (0%)
Overall	880/2445 (36%)	178/1240 (14%)	524/923 (57%)	178/282 (63%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

Mol	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	14	ARG	CB	42.14	39.81 – 21.51	6.3
1	A	125	ARG	CB	41.58	39.81 – 21.51	6.0

7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots [i](#)

The image below reports *random coil index* values for the protein chains in the structure. The height of each bar gives a probability of a given residue to be disordered, as predicted from the available chemical shifts and the amino acid sequence. A value above 0.2 is an indication of significant predicted disorder. The colour of the bar shows whether the residue is in the well-defined core (black) or in the ill-defined residue ranges (cyan), as described in section 2 on ensemble composition.

Random coil index (RCI) for chain A:

