



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 12, 2017 – 09:53 pm GMT

PDB ID : 2FEJ
Title : Solution structure of human p53 DNA binding domain.
Authors : Perez-Canadillas, J.M.; Tidow, H.; Freund, S.M.; Rutherford, T.J.; Ang, H.C.;
Fersht, A.R.
Deposited on : 2005-12-16

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

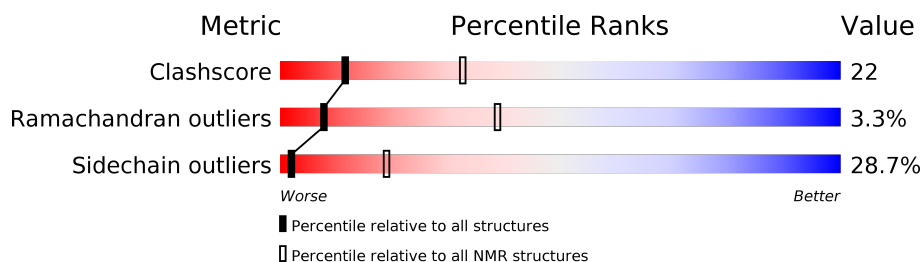
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment 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	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	204	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 36 models. Model 11 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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:98-A:118, A:123-A:181, A:189-A:223, A:228-A:287 (175)	0.53	11

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 4 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 3, 4, 6, 7, 8, 10, 11, 13, 14, 16, 18, 20, 21, 22, 23, 24, 26, 27, 29, 31, 32, 33, 35, 36
2	9, 15
3	5, 28
4	12, 34
Single-model clusters	17; 19; 25; 30

3 Entry composition [i](#)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 3179 atoms, of which 1573 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Cellular tumor antigen p53.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	204	Total	C	H	N	O	S	0
			3178	987	1573	300	302	16	

- Molecule 2 is ZINC ION (three-letter code: ZN) (formula: Zn).

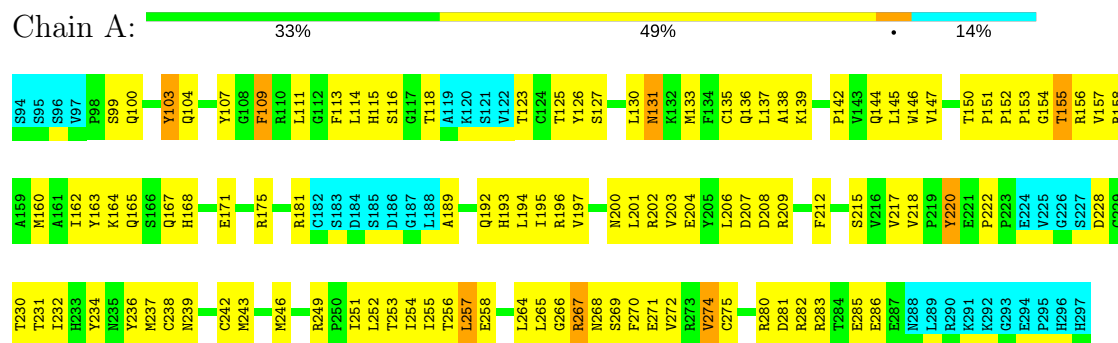
Mol	Chain	Residues	Atoms	
2	A	1	Total	Zn
			1	1

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: Cellular tumor antigen p53

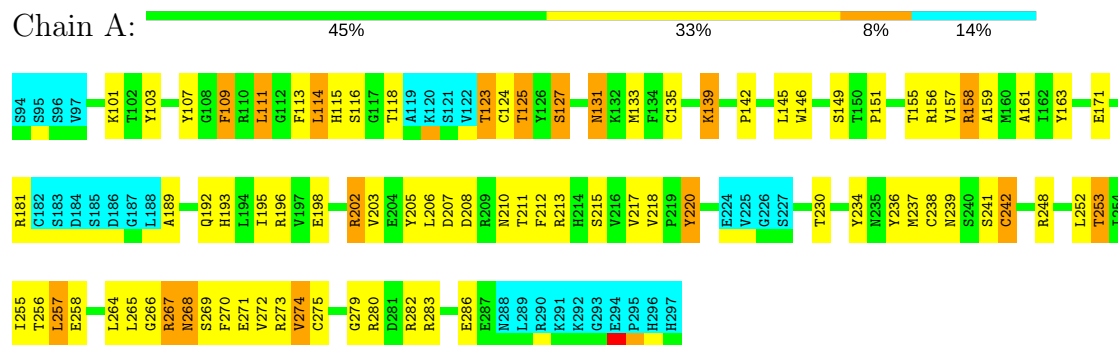


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

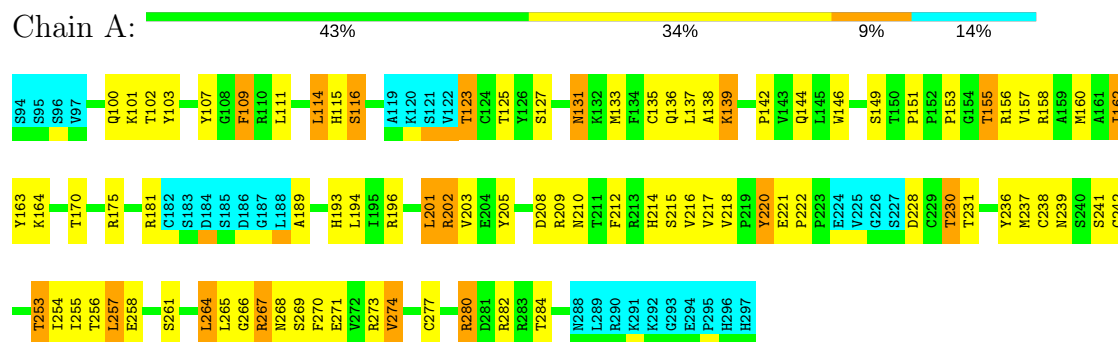
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



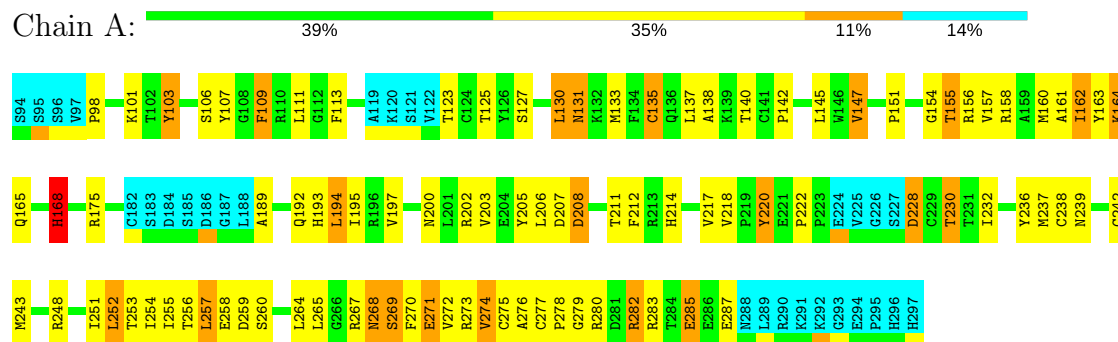
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



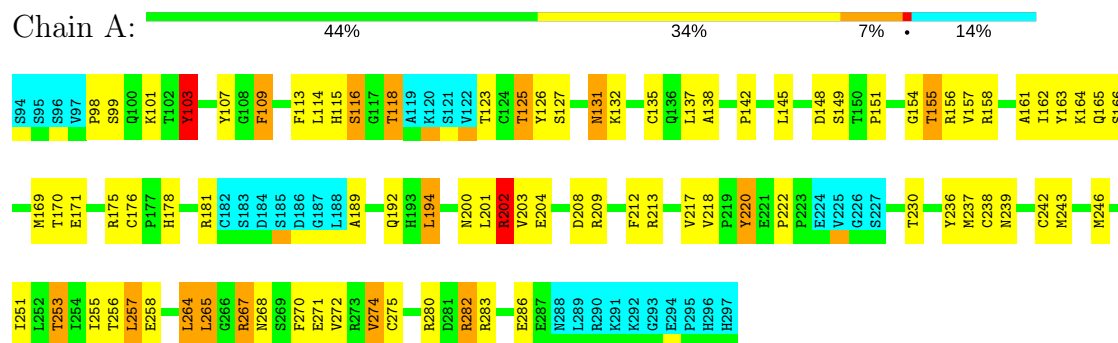
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



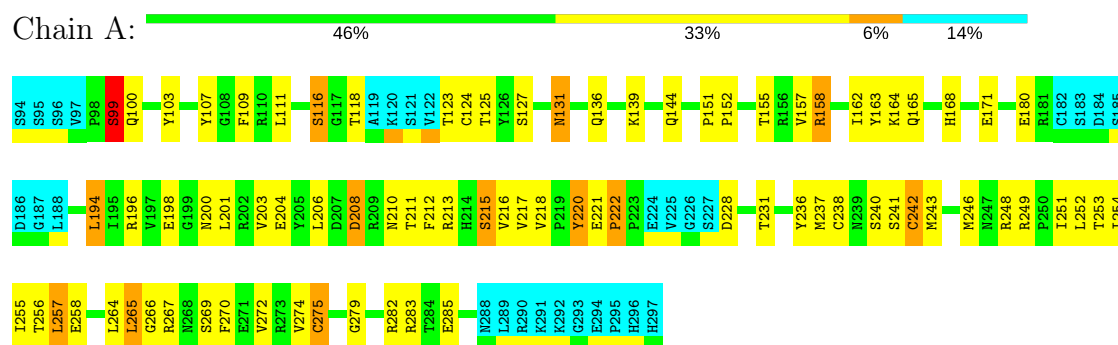
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



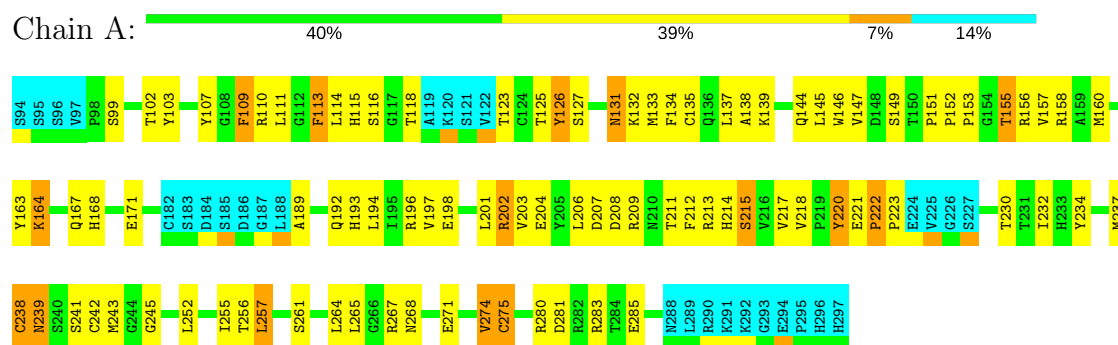
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



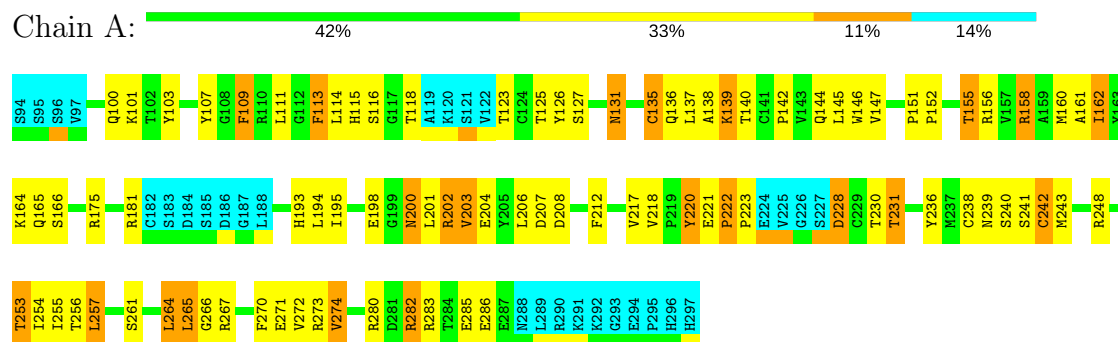
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



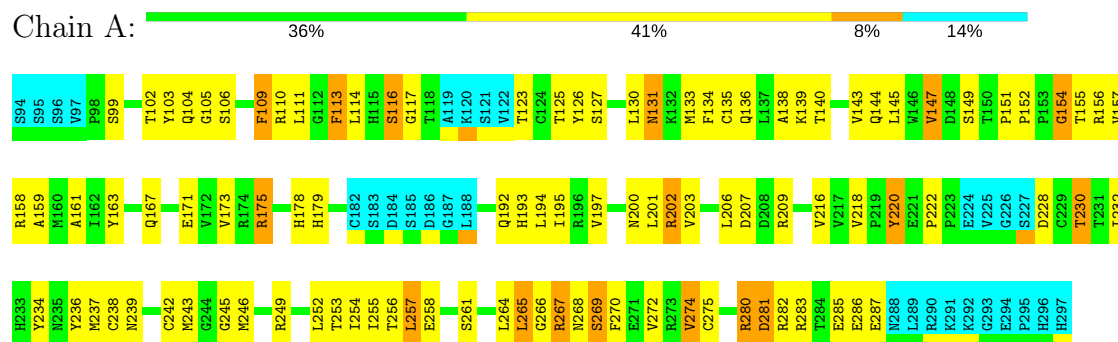
4.2.8 Score per residue for model 8

• Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



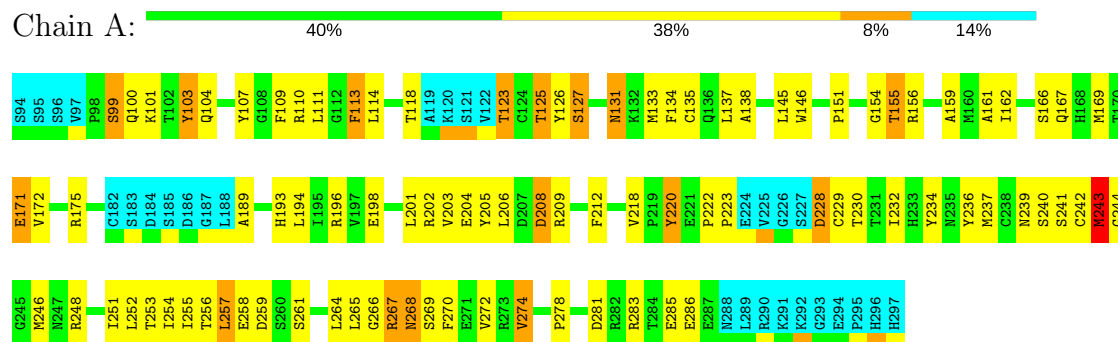
4.2.11 Score per residue for model 11 (medoid)

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



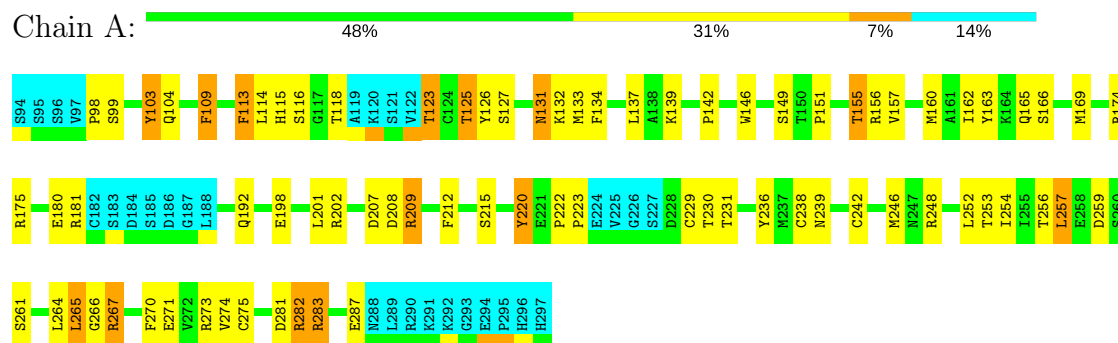
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



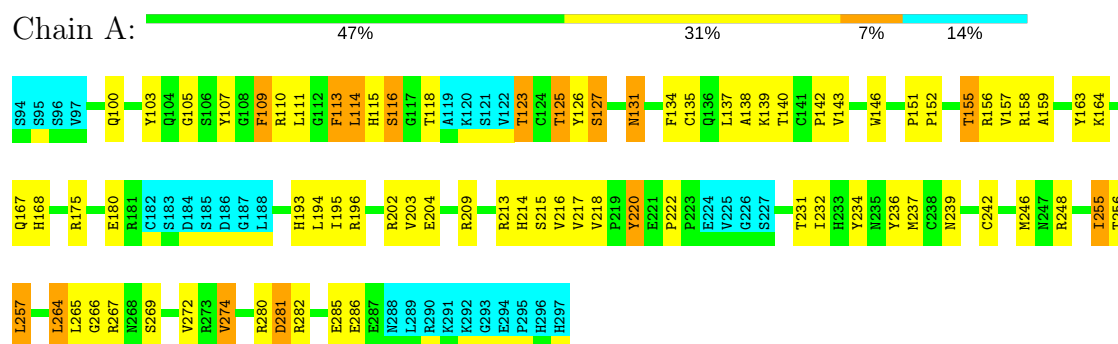
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



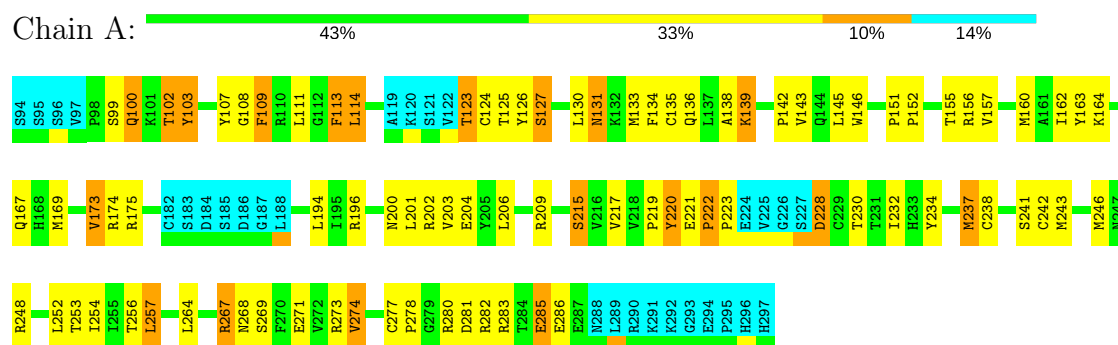
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



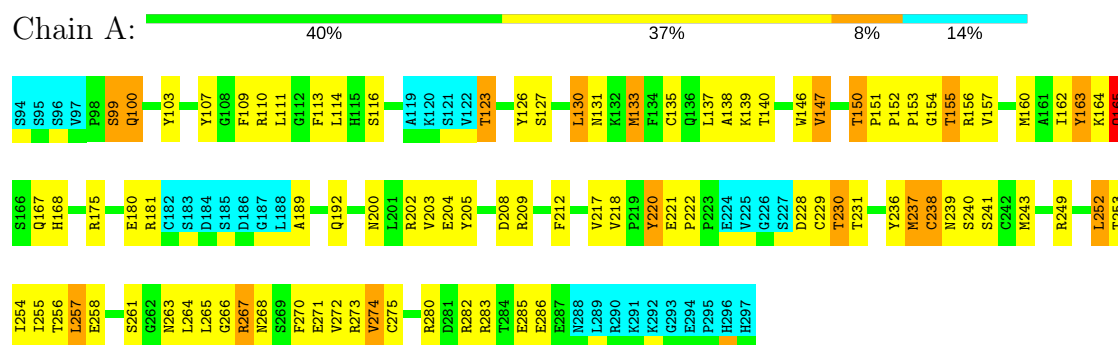
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



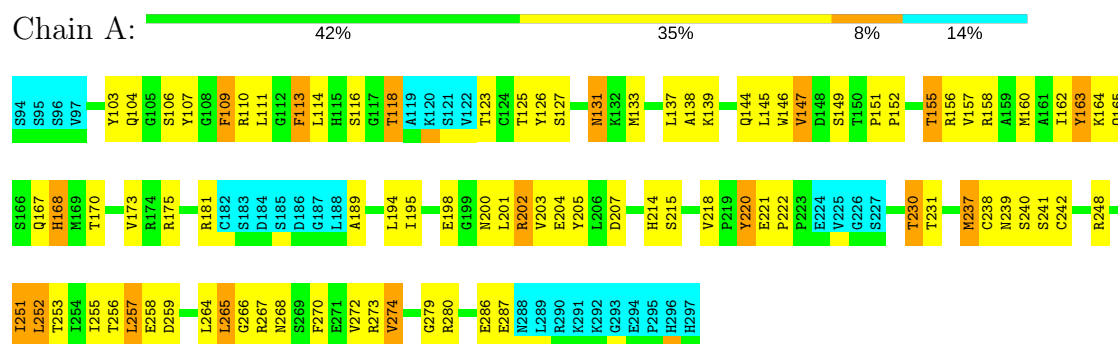
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



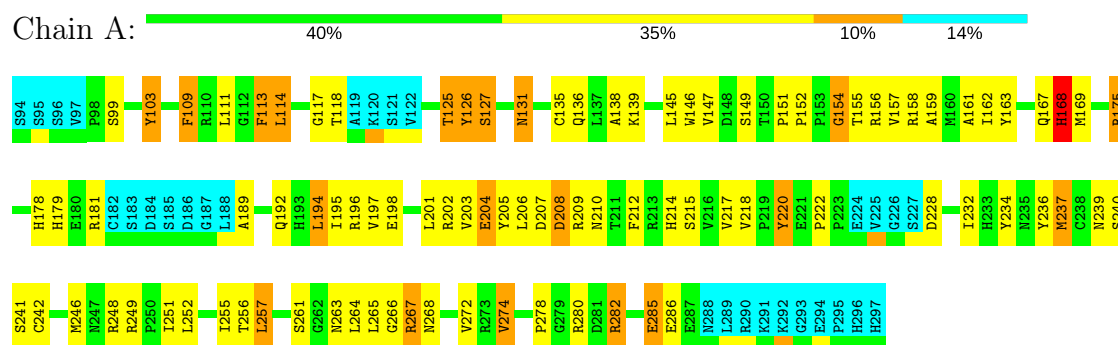
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



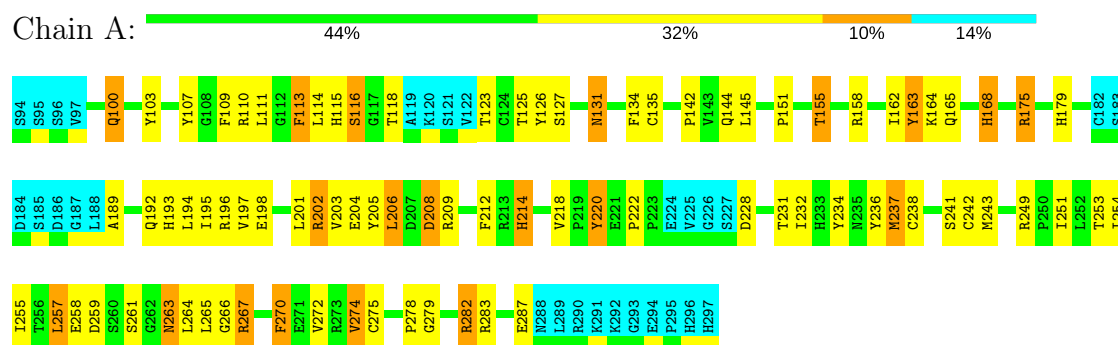
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



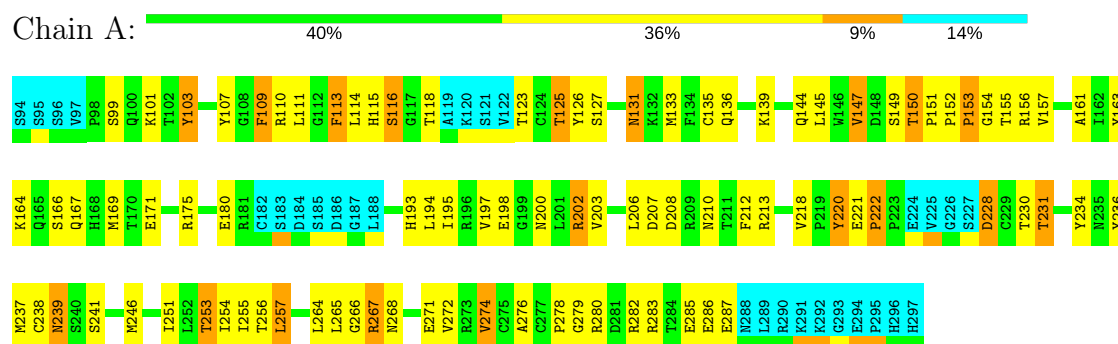
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



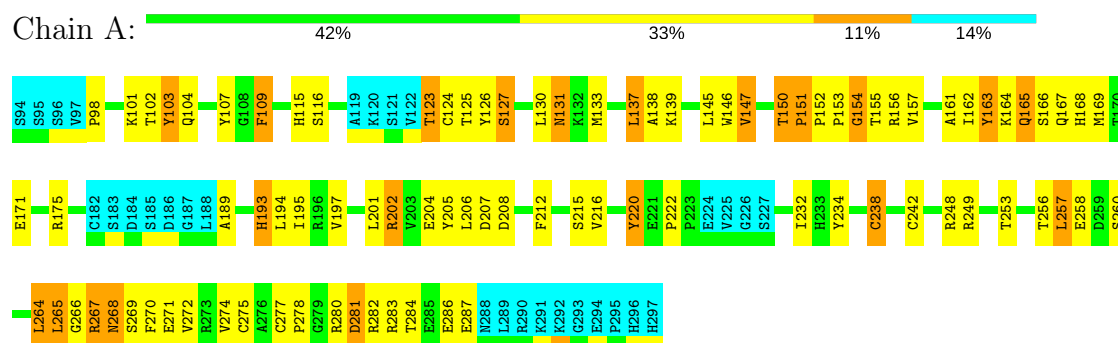
4.2.20 Score per residue for model 20

• Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



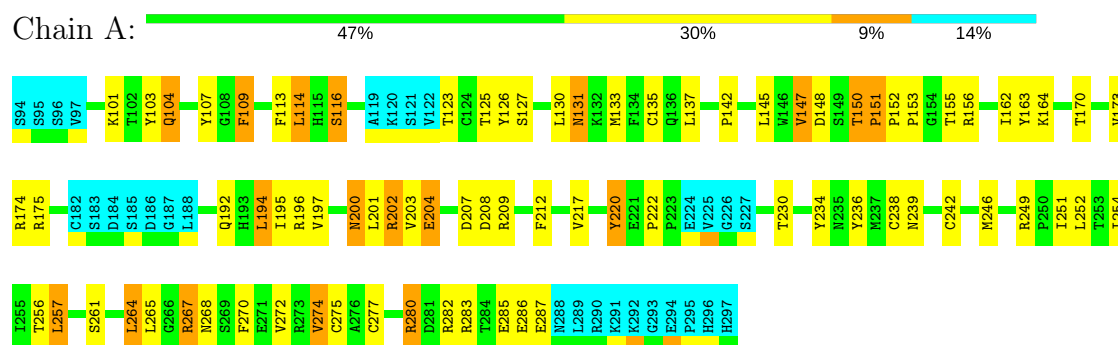
4.2.21 Score per residue for model 21

• Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



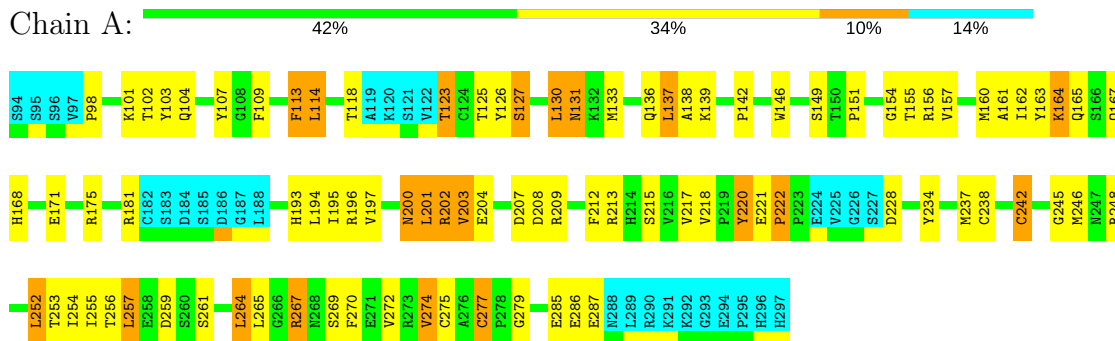
4.2.22 Score per residue for model 22

• Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



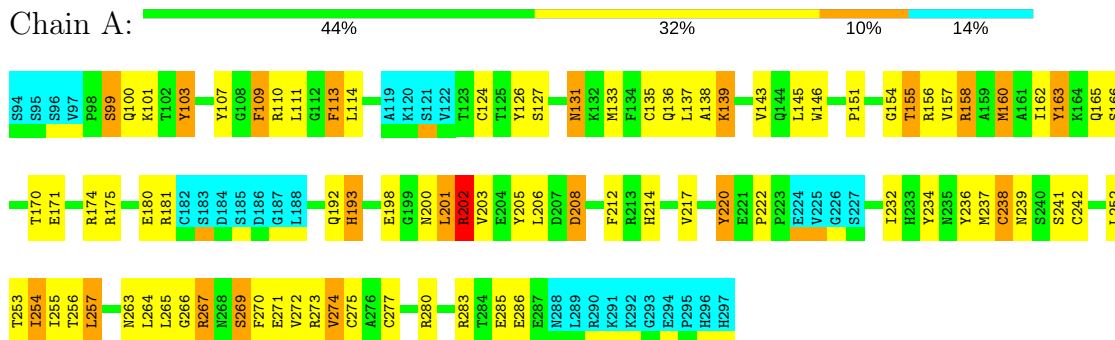
4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



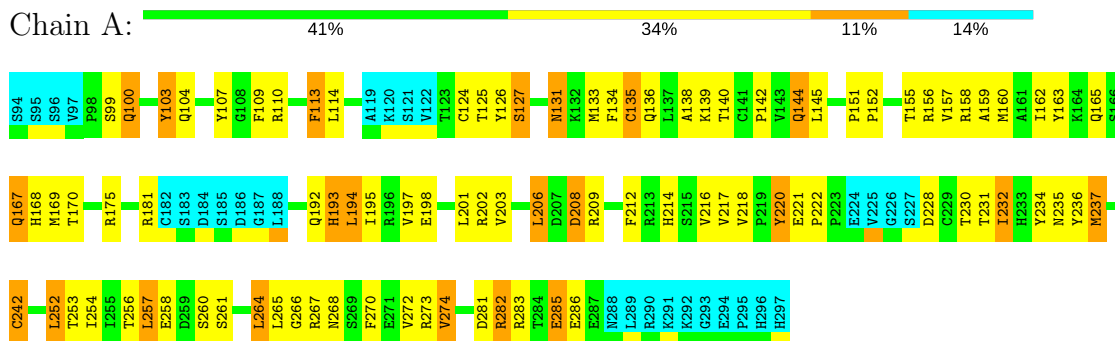
4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



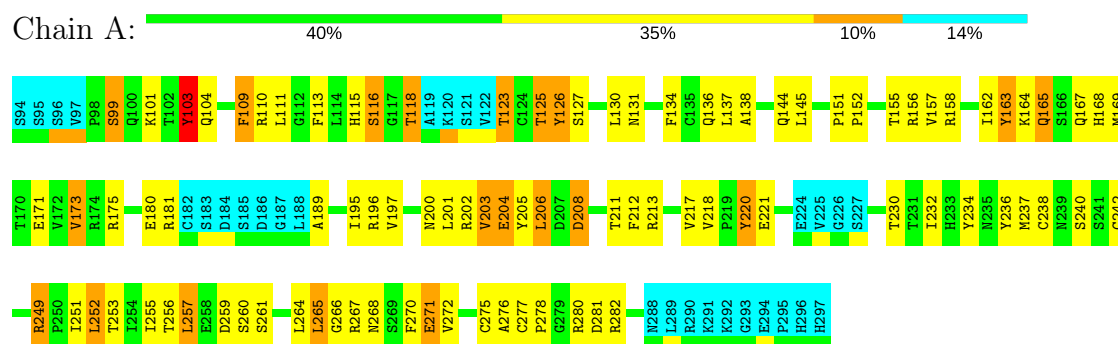
4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



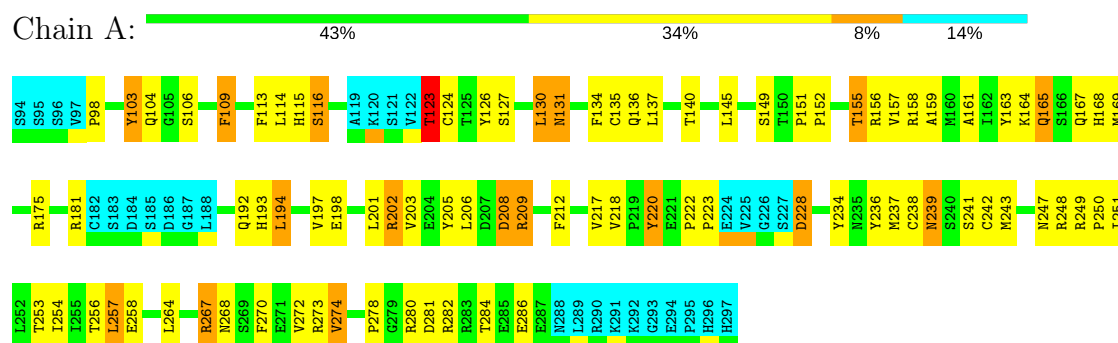
4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



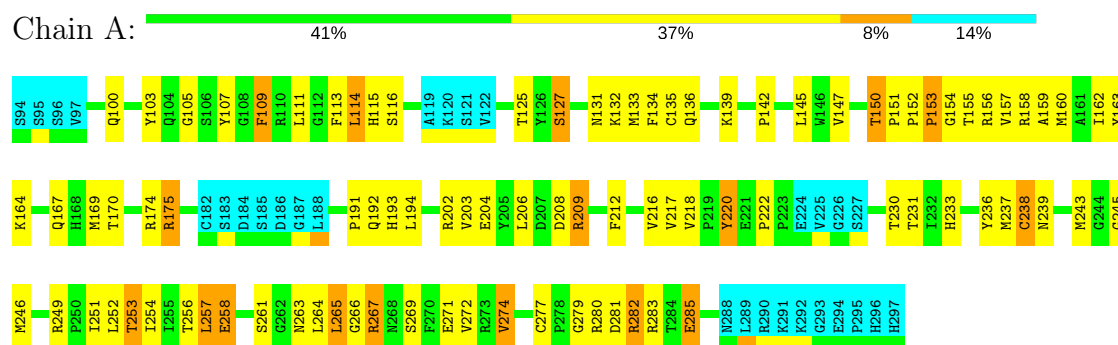
4.2.27 Score per residue for model 27

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



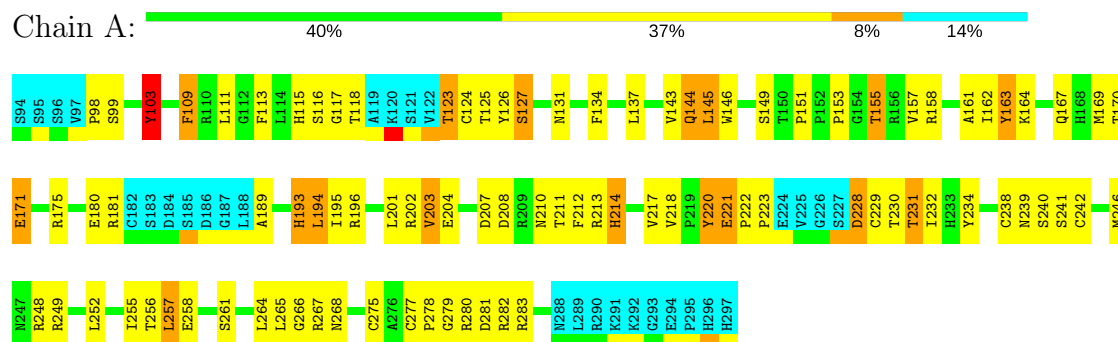
4.2.28 Score per residue for model 28

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



4.2.29 Score per residue for model 29

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



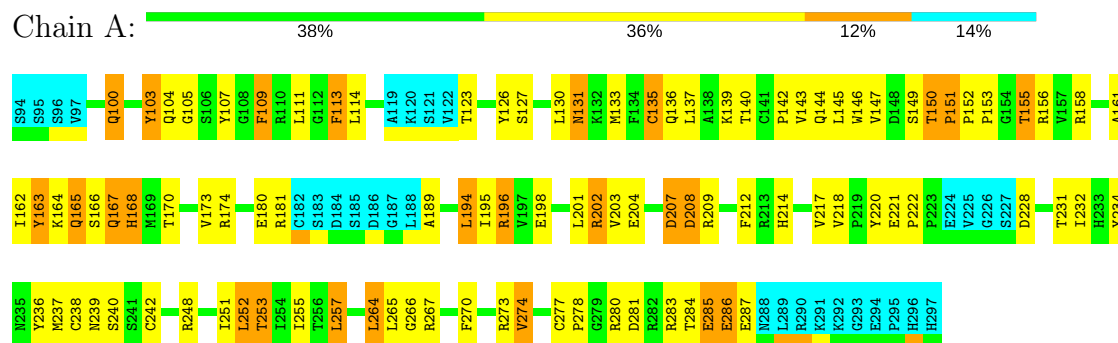
4.2.30 Score per residue for model 30

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



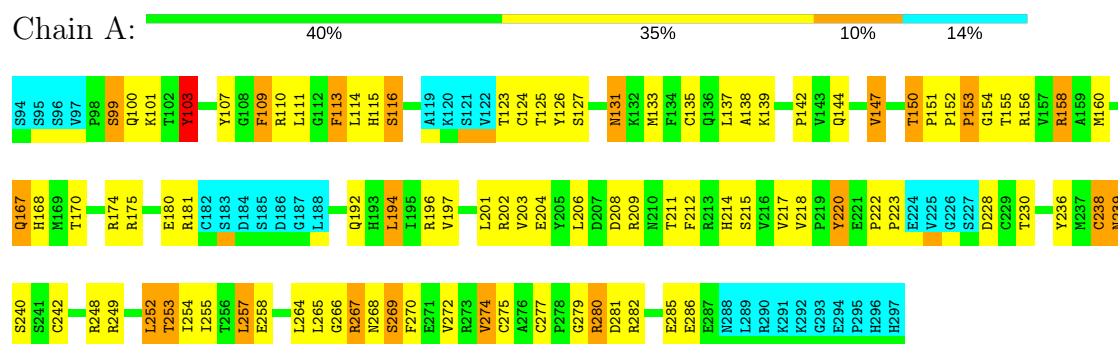
4.2.31 Score per residue for model 31

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



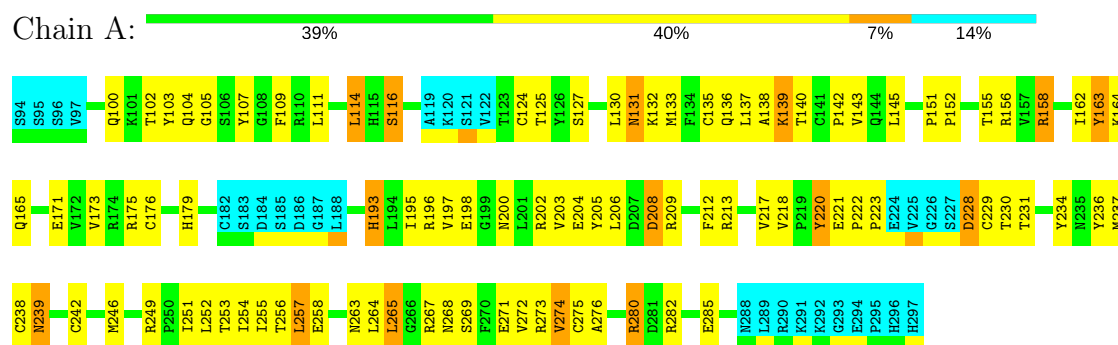
4.2.32 Score per residue for model 32

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



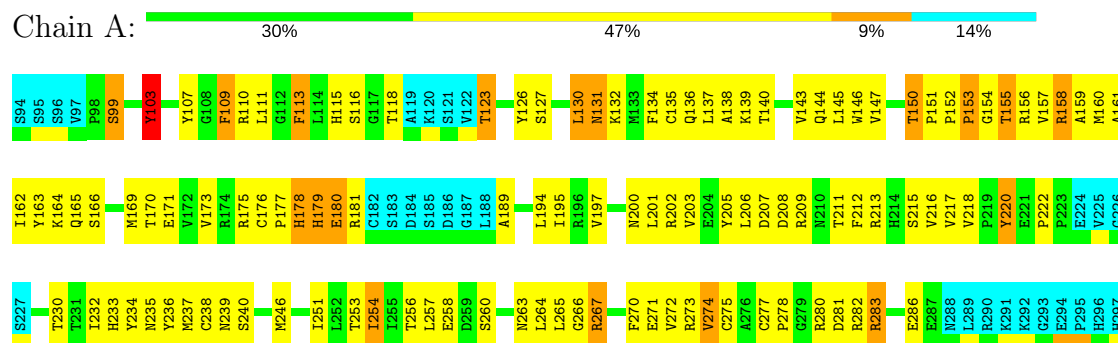
4.2.33 Score per residue for model 33

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



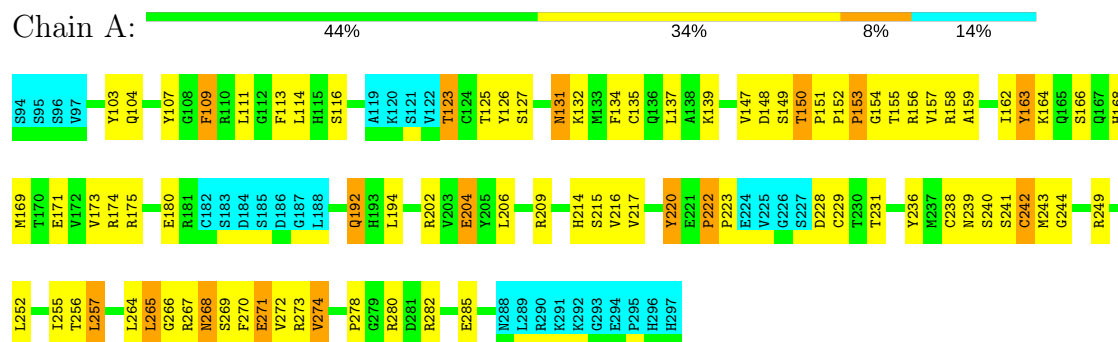
4.2.34 Score per residue for model 34

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



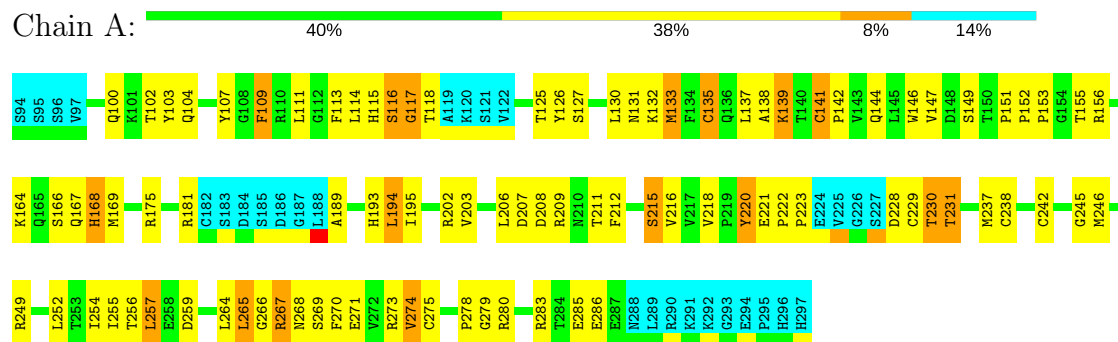
4.2.35 Score per residue for model 35

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



4.2.36 Score per residue for model 36

- Molecule 1: Cellular tumor antigen p53



5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

The models were refined using the following method: *torsion angle dynamics*.

Of the 50 calculated structures, 36 were deposited, based on the following criterion: *structures with the least restraint violations*.

The authors did not provide any information on software used for structure solution, optimization or refinement.

No chemical shift data was provided. No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.

6 Model quality ⓘ

6.1 Standard geometry ⓘ

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

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	1395	1367	1358	61±11
All	All	50256	49212	48888	2204

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 22.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:155:THR:HG21	1:A:257:LEU:HD23	1.07	1.25	32	30
1:A:161:ALA:HB2	1:A:195:ILE:HD11	1.06	1.27	34	12
1:A:162:ILE:HD11	1:A:254:ILE:HD11	1.00	1.02	2	4
1:A:145:LEU:HD21	1:A:157:VAL:HG11	0.92	1.42	1	5
1:A:111:LEU:HD21	1:A:255:ILE:HD12	0.90	1.41	7	4
1:A:145:LEU:HD13	1:A:232:ILE:HD12	0.88	1.44	11	5
1:A:103:TYR:CE1	1:A:264:LEU:HD23	0.88	2.02	34	4
1:A:162:ILE:HD11	1:A:254:ILE:CD1	0.87	1.97	2	5
1:A:155:THR:HG21	1:A:257:LEU:CD2	0.87	1.99	32	22
1:A:236:TYR:CE2	1:A:272:VAL:HG21	0.87	2.04	35	10
1:A:103:TYR:CD1	1:A:264:LEU:HD23	0.87	2.05	28	3
1:A:265:LEU:HD22	1:A:266:GLY:N	0.86	1.85	11	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:206:LEU:HD11	1:A:217:VAL:HG13	0.86	1.45	33	1
1:A:145:LEU:HD22	1:A:232:ILE:HD11	0.85	1.48	29	2
1:A:203:VAL:CG1	1:A:218:VAL:HG12	0.84	2.02	12	6
1:A:257:LEU:O	1:A:265:LEU:HD13	0.84	1.72	35	7
1:A:107:TYR:CG	1:A:265:LEU:HD23	0.83	2.08	36	4
1:A:111:LEU:HD22	1:A:255:ILE:HD13	0.83	1.46	3	4
1:A:251:ILE:HG23	1:A:272:VAL:HG13	0.82	1.51	22	6
1:A:197:VAL:HG22	1:A:234:TYR:CE1	0.82	2.10	23	7
1:A:236:TYR:CE2	1:A:272:VAL:HG11	0.82	2.08	11	16
1:A:158:ARG:CG	1:A:217:VAL:HG12	0.82	2.04	34	6
1:A:111:LEU:HD11	1:A:255:ILE:CG2	0.81	2.05	14	1
1:A:162:ILE:HD11	1:A:252:LEU:HD22	0.81	1.52	18	3
1:A:189:ALA:HB2	1:A:205:TYR:CE2	0.80	2.11	12	3
1:A:107:TYR:CD2	1:A:265:LEU:HD23	0.80	2.12	35	1
1:A:203:VAL:HG12	1:A:218:VAL:HG12	0.80	1.53	12	6
1:A:103:TYR:CE2	1:A:264:LEU:HD23	0.79	2.12	20	2
1:A:155:THR:O	1:A:220:TYR:HB2	0.79	1.77	35	36
1:A:200:ASN:ND2	1:A:203:VAL:HG21	0.78	1.94	24	4
1:A:150:THR:HG22	1:A:152:PRO:CD	0.78	2.08	30	10
1:A:107:TYR:CE2	1:A:265:LEU:HD11	0.78	2.13	31	4
1:A:163:TYR:OH	1:A:173:VAL:HG13	0.78	1.78	26	1
1:A:116:SER:OG	1:A:125:THR:HG22	0.78	1.78	33	2
1:A:137:LEU:HD22	1:A:239:ASN:OD1	0.77	1.78	4	4
1:A:251:ILE:C	1:A:252:LEU:HD13	0.77	1.99	26	3
1:A:189:ALA:HB2	1:A:205:TYR:OH	0.77	1.79	5	10
1:A:256:THR:HG23	1:A:267:ARG:HG3	0.77	1.55	35	7
1:A:158:ARG:HG3	1:A:217:VAL:HG12	0.77	1.56	34	3
1:A:102:THR:HG23	1:A:268:ASN:HB3	0.77	1.57	11	2
1:A:102:THR:HG22	1:A:268:ASN:OD1	0.77	1.80	15	1
1:A:107:TYR:CD2	1:A:265:LEU:HD21	0.76	2.15	31	6
1:A:158:ARG:HB3	1:A:217:VAL:HG12	0.76	1.57	18	5
1:A:115:HIS:CE1	1:A:125:THR:HG23	0.76	2.16	28	2
1:A:145:LEU:HB2	1:A:230:THR:HG23	0.76	1.54	11	3
1:A:114:LEU:HD12	1:A:142:PRO:HB2	0.75	1.58	31	3
1:A:206:LEU:HD11	1:A:217:VAL:CG1	0.75	2.11	27	2
1:A:204:GLU:O	1:A:217:VAL:HG22	0.75	1.82	32	12
1:A:159:ALA:HB3	1:A:216:VAL:CG1	0.75	2.11	34	7
1:A:137:LEU:HD22	1:A:137:LEU:O	0.75	1.81	9	1
1:A:99:SER:CB	1:A:254:ILE:HG21	0.75	2.12	6	1
1:A:200:ASN:O	1:A:201:LEU:HD22	0.75	1.81	11	3
1:A:162:ILE:CG1	1:A:254:ILE:HD11	0.74	2.12	34	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:107:TYR:CG	1:A:265:LEU:HD13	0.74	2.17	21	11
1:A:107:TYR:CD1	1:A:265:LEU:HD23	0.74	2.18	36	1
1:A:256:THR:HG23	1:A:267:ARG:CB	0.74	2.12	15	8
1:A:162:ILE:HD12	1:A:252:LEU:HD23	0.74	1.59	3	2
1:A:252:LEU:HD12	1:A:269:SER:OG	0.74	1.83	30	1
1:A:145:LEU:HD22	1:A:232:ILE:CD1	0.74	2.12	29	2
1:A:100:GLN:CG	1:A:254:ILE:HD13	0.73	2.12	5	1
1:A:111:LEU:HD12	1:A:111:LEU:O	0.73	1.83	2	2
1:A:220:TYR:CE1	1:A:257:LEU:HD21	0.73	2.19	20	18
1:A:114:LEU:HD12	1:A:142:PRO:HB3	0.73	1.61	36	1
1:A:144:GLN:OE1	1:A:231:THR:HG23	0.73	1.83	31	1
1:A:231:THR:HG22	1:A:233:HIS:CE1	0.73	2.19	28	1
1:A:111:LEU:HD21	1:A:255:ILE:CD1	0.73	2.13	32	5
1:A:116:SER:HG	1:A:125:THR:HG22	0.72	1.42	33	1
1:A:222:PRO:HB2	1:A:223:PRO:HD3	0.72	1.61	32	6
1:A:162:ILE:CD1	1:A:254:ILE:HD11	0.72	2.14	34	6
1:A:220:TYR:CZ	1:A:257:LEU:HD21	0.72	2.19	12	27
1:A:163:TYR:CE1	1:A:173:VAL:HG22	0.72	2.19	11	2
1:A:221:GLU:O	1:A:230:THR:HG22	0.72	1.84	25	2
1:A:206:LEU:HD21	1:A:217:VAL:HG13	0.72	1.60	24	3
1:A:111:LEU:HD13	1:A:255:ILE:HD12	0.72	1.61	6	4
1:A:158:ARG:HG2	1:A:217:VAL:HG12	0.72	1.62	14	13
1:A:203:VAL:HG12	1:A:218:VAL:HA	0.72	1.60	28	20
1:A:220:TYR:OH	1:A:257:LEU:HD21	0.72	1.85	8	14
1:A:256:THR:HG23	1:A:267:ARG:HB3	0.72	1.61	10	7
1:A:111:LEU:HD22	1:A:143:VAL:HG12	0.71	1.62	33	2
1:A:114:LEU:HD21	1:A:142:PRO:HB2	0.71	1.62	23	6
1:A:264:LEU:HD21	1:A:267:ARG:HG2	0.71	1.62	21	8
1:A:252:LEU:HD22	1:A:252:LEU:O	0.71	1.86	23	1
1:A:135:CYS:SG	1:A:274:VAL:HG13	0.71	2.25	15	24
1:A:236:TYR:CD2	1:A:272:VAL:HG11	0.71	2.20	33	3
1:A:160:MET:O	1:A:254:ILE:HD12	0.71	1.86	24	2
1:A:111:LEU:CD1	1:A:255:ILE:HD13	0.71	2.15	33	3
1:A:264:LEU:HD23	1:A:267:ARG:CD	0.71	2.16	25	1
1:A:162:ILE:HG13	1:A:254:ILE:HD11	0.71	1.61	24	2
1:A:251:ILE:HG23	1:A:272:VAL:CG2	0.71	2.16	6	1
1:A:252:LEU:O	1:A:252:LEU:HD22	0.71	1.86	25	1
1:A:155:THR:CG2	1:A:257:LEU:HD23	0.70	2.13	30	9
1:A:109:PHE:HB2	1:A:147:VAL:HG13	0.70	1.64	20	15
1:A:109:PHE:CD2	1:A:257:LEU:HD23	0.70	2.21	25	3
1:A:151:PRO:N	1:A:152:PRO:HD3	0.70	2.02	34	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:256:THR:HG22	1:A:267:ARG:CG	0.70	2.17	4	7
1:A:155:THR:HG21	1:A:257:LEU:HD12	0.70	1.62	27	2
1:A:162:ILE:HG22	1:A:252:LEU:O	0.69	1.88	26	1
1:A:252:LEU:HD12	1:A:271:GLU:CD	0.69	2.07	3	1
1:A:137:LEU:HD13	1:A:239:ASN:CG	0.69	2.08	10	1
1:A:194:LEU:HD21	1:A:238:CYS:CB	0.69	2.16	32	1
1:A:144:GLN:CG	1:A:231:THR:HG23	0.69	2.18	8	2
1:A:161:ALA:HB2	1:A:195:ILE:CD1	0.69	2.17	18	4
1:A:123:THR:HG22	1:A:139:LYS:HD2	0.68	1.63	1	1
1:A:145:LEU:HD23	1:A:157:VAL:HG21	0.68	1.64	34	1
1:A:111:LEU:HD12	1:A:143:VAL:HG12	0.68	1.65	15	1
1:A:116:SER:OG	1:A:125:THR:HG23	0.68	1.87	21	1
1:A:236:TYR:OH	1:A:272:VAL:HG21	0.68	1.89	18	2
1:A:161:ALA:HB1	1:A:251:ILE:HD11	0.68	1.64	27	4
1:A:145:LEU:HD11	1:A:232:ILE:HD12	0.68	1.62	24	5
1:A:251:ILE:HG23	1:A:272:VAL:CG1	0.68	2.18	20	5
1:A:270:PHE:CE2	1:A:272:VAL:HG22	0.67	2.24	27	6
1:A:252:LEU:N	1:A:252:LEU:HD13	0.67	2.04	23	2
1:A:264:LEU:HD21	1:A:267:ARG:HB3	0.67	1.67	23	2
1:A:265:LEU:HD22	1:A:265:LEU:C	0.67	2.10	36	4
1:A:137:LEU:HD13	1:A:239:ASN:HB3	0.67	1.66	17	1
1:A:137:LEU:O	1:A:137:LEU:HD22	0.67	1.90	23	1
1:A:114:LEU:HD12	1:A:114:LEU:O	0.67	1.89	19	4
1:A:114:LEU:HD12	1:A:142:PRO:HG2	0.67	1.66	33	3
1:A:145:LEU:CD1	1:A:232:ILE:HD12	0.67	2.20	26	8
1:A:163:TYR:CE2	1:A:173:VAL:HG12	0.67	2.25	35	2
1:A:157:VAL:O	1:A:218:VAL:HG22	0.67	1.88	1	2
1:A:155:THR:O	1:A:220:TYR:CB	0.67	2.43	31	2
1:A:161:ALA:O	1:A:162:ILE:HD13	0.66	1.91	23	1
1:A:164:LYS:HB2	1:A:252:LEU:HD23	0.66	1.65	33	1
1:A:111:LEU:HD22	1:A:255:ILE:HD12	0.66	1.66	8	1
1:A:150:THR:C	1:A:152:PRO:HD2	0.66	2.09	30	5
1:A:256:THR:HG22	1:A:267:ARG:HG2	0.66	1.66	27	7
1:A:151:PRO:HB2	1:A:220:TYR:CE2	0.66	2.26	9	32
1:A:114:LEU:O	1:A:114:LEU:HD12	0.66	1.90	11	3
1:A:118:THR:HG21	1:A:279:GLY:HA3	0.66	1.67	1	1
1:A:114:LEU:HD12	1:A:142:PRO:CB	0.66	2.19	8	2
1:A:251:ILE:HG23	1:A:272:VAL:HG23	0.66	1.67	6	1
1:A:111:LEU:CD1	1:A:255:ILE:HD12	0.66	2.20	6	2
1:A:111:LEU:CD2	1:A:255:ILE:HD13	0.66	2.19	16	2
1:A:133:MET:SD	1:A:272:VAL:HG12	0.66	2.30	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:157:VAL:O	1:A:218:VAL:HG12	0.66	1.90	25	1
1:A:200:ASN:C	1:A:201:LEU:HD22	0.66	2.11	34	1
1:A:109:PHE:CE2	1:A:257:LEU:HD13	0.66	2.26	22	8
1:A:189:ALA:HB2	1:A:205:TYR:CZ	0.66	2.26	12	6
1:A:264:LEU:HD21	1:A:267:ARG:NE	0.66	2.06	34	2
1:A:254:ILE:HG23	1:A:269:SER:HB2	0.66	1.67	2	1
1:A:107:TYR:CD2	1:A:265:LEU:HD13	0.65	2.25	20	11
1:A:125:THR:HG21	1:A:282:ARG:CB	0.65	2.21	28	4
1:A:164:LYS:HB2	1:A:252:LEU:HD13	0.65	1.66	28	1
1:A:99:SER:HB3	1:A:254:ILE:HD13	0.65	1.67	12	2
1:A:254:ILE:HD12	1:A:269:SER:CB	0.65	2.22	5	1
1:A:151:PRO:HB2	1:A:220:TYR:HE2	0.65	1.51	8	3
1:A:256:THR:HB	1:A:264:LEU:HD11	0.65	1.67	26	5
1:A:114:LEU:HD21	1:A:142:PRO:CB	0.65	2.22	25	4
1:A:194:LEU:N	1:A:194:LEU:HD13	0.65	2.07	29	2
1:A:256:THR:HG23	1:A:267:ARG:CG	0.65	2.22	6	7
1:A:109:PHE:CD2	1:A:257:LEU:CD2	0.65	2.80	1	3
1:A:164:LYS:HD2	1:A:252:LEU:HD22	0.65	1.67	7	1
1:A:163:TYR:HB3	1:A:251:ILE:HG22	0.65	1.67	9	1
1:A:161:ALA:C	1:A:162:ILE:HD13	0.64	2.12	23	1
1:A:111:LEU:CD2	1:A:255:ILE:HD12	0.64	2.22	18	4
1:A:206:LEU:HD12	1:A:215:SER:OG	0.64	1.92	18	2
1:A:138:ALA:HB2	1:A:237:MET:CE	0.64	2.22	18	7
1:A:164:LYS:CG	1:A:252:LEU:HD12	0.64	2.22	23	1
1:A:123:THR:HG23	1:A:139:LYS:HG2	0.64	1.67	9	1
1:A:254:ILE:HD12	1:A:269:SER:HB2	0.64	1.68	5	2
1:A:107:TYR:CE2	1:A:265:LEU:HD21	0.64	2.27	8	4
1:A:114:LEU:HD21	1:A:142:PRO:CG	0.64	2.23	15	2
1:A:151:PRO:N	1:A:152:PRO:CD	0.64	2.59	35	10
1:A:264:LEU:HD21	1:A:267:ARG:HD3	0.64	1.68	31	4
1:A:194:LEU:HD23	1:A:195:ILE:HG23	0.64	1.69	10	1
1:A:163:TYR:CZ	1:A:173:VAL:HG13	0.64	2.28	26	1
1:A:150:THR:HG22	1:A:152:PRO:CG	0.64	2.22	35	9
1:A:264:LEU:HD21	1:A:267:ARG:CD	0.63	2.22	36	2
1:A:206:LEU:HD12	1:A:215:SER:HB2	0.63	1.68	1	4
1:A:264:LEU:HD23	1:A:267:ARG:HD2	0.63	1.68	25	1
1:A:111:LEU:HD23	1:A:268:ASN:OD1	0.63	1.93	3	1
1:A:200:ASN:ND2	1:A:203:VAL:HG13	0.63	2.09	8	2
1:A:254:ILE:HD12	1:A:268:ASN:O	0.63	1.94	30	1
1:A:256:THR:HG23	1:A:267:ARG:HB2	0.63	1.70	9	8
1:A:256:THR:HG22	1:A:267:ARG:HB2	0.62	1.68	16	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:201:LEU:N	1:A:201:LEU:HD13	0.62	2.09	24	1
1:A:145:LEU:HD23	1:A:257:LEU:HD11	0.62	1.70	28	3
1:A:267:ARG:HG3	1:A:267:ARG:O	0.62	1.94	36	2
1:A:162:ILE:HD11	1:A:252:LEU:HD23	0.62	1.71	6	1
1:A:200:ASN:CG	1:A:218:VAL:HG23	0.62	2.15	26	1
1:A:109:PHE:CE2	1:A:257:LEU:HD23	0.62	2.29	27	3
1:A:164:LYS:HB2	1:A:252:LEU:HD21	0.62	1.70	3	1
1:A:236:TYR:CZ	1:A:272:VAL:HG21	0.62	2.30	18	2
1:A:144:GLN:HG2	1:A:231:THR:HG23	0.62	1.72	8	2
1:A:162:ILE:CD1	1:A:252:LEU:HD23	0.62	2.24	3	1
1:A:258:GLU:HG2	1:A:264:LEU:HD12	0.62	1.70	19	3
1:A:195:ILE:HG22	1:A:236:TYR:CD1	0.62	2.30	14	1
1:A:107:TYR:CZ	1:A:265:LEU:HD11	0.61	2.29	33	1
1:A:111:LEU:HD22	1:A:143:VAL:CG1	0.61	2.24	33	2
1:A:200:ASN:ND2	1:A:203:VAL:HG11	0.61	2.10	6	2
1:A:159:ALA:HB2	1:A:234:TYR:OH	0.61	1.96	12	4
1:A:163:TYR:CE2	1:A:173:VAL:HG13	0.61	2.31	26	1
1:A:194:LEU:HD22	1:A:194:LEU:N	0.61	2.11	22	3
1:A:194:LEU:HD13	1:A:194:LEU:N	0.60	2.11	3	2
1:A:137:LEU:HD13	1:A:239:ASN:HB2	0.60	1.72	13	3
1:A:130:LEU:HD22	1:A:132:LYS:HE3	0.60	1.72	34	1
1:A:239:ASN:HA	1:A:274:VAL:HG23	0.60	1.74	3	18
1:A:194:LEU:HD21	1:A:238:CYS:HB2	0.60	1.73	32	1
1:A:102:THR:HG22	1:A:268:ASN:HB2	0.60	1.72	7	1
1:A:252:LEU:N	1:A:252:LEU:HD22	0.60	2.12	3	3
1:A:158:ARG:CB	1:A:217:VAL:HG12	0.60	2.27	6	3
1:A:252:LEU:HD12	1:A:270:PHE:O	0.60	1.96	22	1
1:A:175:ARG:HB3	1:A:192:GLN:HA	0.60	1.73	13	2
1:A:193:HIS:CD2	1:A:195:ILE:HG22	0.60	2.32	36	2
1:A:151:PRO:O	1:A:220:TYR:CE2	0.59	2.55	16	10
1:A:111:LEU:HD11	1:A:255:ILE:HB	0.59	1.73	33	4
1:A:100:GLN:HG3	1:A:254:ILE:HD13	0.59	1.71	5	1
1:A:157:VAL:HA	1:A:256:THR:O	0.59	1.97	7	26
1:A:137:LEU:HD13	1:A:239:ASN:OD1	0.59	1.98	27	2
1:A:137:LEU:HD22	1:A:137:LEU:C	0.59	2.17	23	2
1:A:236:TYR:OH	1:A:253:THR:HG21	0.59	1.98	20	10
1:A:206:LEU:HD12	1:A:206:LEU:N	0.59	2.13	20	1
1:A:156:ARG:NH2	1:A:217:VAL:HG11	0.59	2.12	22	2
1:A:137:LEU:O	1:A:138:ALA:HB3	0.59	1.97	9	19
1:A:252:LEU:HD21	1:A:269:SER:HB2	0.59	1.74	11	3
1:A:159:ALA:HB3	1:A:216:VAL:HG12	0.58	1.74	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:254:ILE:HG22	1:A:269:SER:CB	0.58	2.28	36	1
1:A:264:LEU:HD11	1:A:267:ARG:HG2	0.58	1.75	10	2
1:A:125:THR:HG21	1:A:282:ARG:HD3	0.58	1.74	25	1
1:A:194:LEU:HD12	1:A:195:ILE:HG23	0.58	1.74	17	1
1:A:251:ILE:CG2	1:A:272:VAL:HG13	0.58	2.28	22	4
1:A:221:GLU:O	1:A:230:THR:HG23	0.58	1.97	29	6
1:A:107:TYR:CZ	1:A:265:LEU:HD22	0.58	2.34	1	2
1:A:107:TYR:CE2	1:A:265:LEU:HD23	0.58	2.33	34	1
1:A:197:VAL:HG12	1:A:234:TYR:CE2	0.58	2.33	26	1
1:A:152:PRO:N	1:A:153:PRO:CD	0.58	2.67	22	9
1:A:103:TYR:CD2	1:A:264:LEU:HD23	0.58	2.33	17	3
1:A:160:MET:O	1:A:253:THR:HG23	0.58	1.99	25	2
1:A:255:ILE:HD11	1:A:270:PHE:CE1	0.58	2.32	35	6
1:A:265:LEU:C	1:A:265:LEU:HD22	0.58	2.17	6	3
1:A:264:LEU:HD21	1:A:267:ARG:CZ	0.58	2.29	26	1
1:A:125:THR:HG21	1:A:282:ARG:HB3	0.58	1.73	28	1
1:A:206:LEU:HD12	1:A:215:SER:HB3	0.58	1.76	6	3
1:A:109:PHE:CD1	1:A:109:PHE:C	0.58	2.77	20	2
1:A:254:ILE:HG23	1:A:268:ASN:O	0.58	1.98	16	1
1:A:264:LEU:HD21	1:A:267:ARG:CG	0.58	2.28	21	1
1:A:252:LEU:HD23	1:A:270:PHE:O	0.58	1.98	5	1
1:A:99:SER:HB2	1:A:254:ILE:HG21	0.58	1.74	6	1
1:A:220:TYR:CE1	1:A:257:LEU:HD11	0.58	2.34	34	1
1:A:150:THR:HG22	1:A:152:PRO:HD3	0.57	1.76	30	9
1:A:144:GLN:HG3	1:A:231:THR:HG22	0.57	1.76	25	1
1:A:164:LYS:CB	1:A:252:LEU:HD21	0.57	2.28	3	1
1:A:201:LEU:HD12	1:A:202:ARG:HB2	0.57	1.74	10	1
1:A:194:LEU:HD12	1:A:195:ILE:N	0.57	2.13	31	1
1:A:164:LYS:HG3	1:A:252:LEU:HD12	0.57	1.75	23	1
1:A:111:LEU:HD11	1:A:255:ILE:HD13	0.57	1.75	5	2
1:A:162:ILE:HG21	1:A:254:ILE:HD11	0.57	1.76	28	1
1:A:254:ILE:HG23	1:A:269:SER:HB3	0.57	1.77	6	4
1:A:99:SER:HB3	1:A:254:ILE:HG21	0.57	1.75	6	1
1:A:145:LEU:CD2	1:A:157:VAL:HG21	0.57	2.29	34	2
1:A:147:VAL:HG21	1:A:151:PRO:HG3	0.57	1.76	28	5
1:A:251:ILE:O	1:A:252:LEU:HD13	0.57	1.99	26	2
1:A:206:LEU:N	1:A:206:LEU:HD12	0.57	2.14	25	1
1:A:138:ALA:HB2	1:A:237:MET:HE1	0.56	1.77	18	2
1:A:109:PHE:HA	1:A:146:TRP:O	0.56	1.99	23	16
1:A:255:ILE:N	1:A:255:ILE:HD12	0.56	2.15	33	4
1:A:143:VAL:HG11	1:A:255:ILE:CD1	0.56	2.30	29	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:113:PHE:CE2	1:A:126:TYR:CE1	0.56	2.94	5	2
1:A:151:PRO:CD	1:A:152:PRO:HD3	0.56	2.30	34	6
1:A:123:THR:HG22	1:A:139:LYS:HE3	0.56	1.77	16	1
1:A:125:THR:HG22	1:A:282:ARG:HD3	0.56	1.76	14	1
1:A:163:TYR:CE1	1:A:173:VAL:HG21	0.56	2.35	34	1
1:A:140:THR:HG22	1:A:235:ASN:HD21	0.56	1.61	34	1
1:A:143:VAL:HG21	1:A:234:TYR:CD2	0.56	2.35	31	7
1:A:284:THR:HG23	1:A:285:GLU:OE1	0.56	2.01	31	1
1:A:146:TRP:CE3	1:A:229:CYS:SG	0.56	2.99	16	4
1:A:164:LYS:HD3	1:A:252:LEU:HD22	0.56	1.78	28	1
1:A:163:TYR:N	1:A:163:TYR:CD1	0.56	2.74	26	1
1:A:203:VAL:HG12	1:A:217:VAL:O	0.56	2.01	23	2
1:A:125:THR:HG21	1:A:279:GLY:HA2	0.56	1.75	19	2
1:A:194:LEU:HD23	1:A:238:CYS:HB2	0.55	1.78	21	2
1:A:257:LEU:HD23	1:A:265:LEU:HD21	0.55	1.78	19	7
1:A:221:GLU:O	1:A:222:PRO:O	0.55	2.24	6	6
1:A:252:LEU:N	1:A:252:LEU:HD12	0.55	2.15	9	1
1:A:152:PRO:O	1:A:154:GLY:N	0.55	2.39	30	11
1:A:164:LYS:CB	1:A:252:LEU:HD12	0.55	2.31	23	1
1:A:145:LEU:CB	1:A:230:THR:HG23	0.55	2.29	11	1
1:A:127:SER:O	1:A:131:ASN:N	0.55	2.39	28	35
1:A:252:LEU:HD22	1:A:252:LEU:C	0.55	2.21	25	1
1:A:257:LEU:HB2	1:A:266:GLY:O	0.55	2.02	35	16
1:A:138:ALA:HB2	1:A:237:MET:HE3	0.55	1.78	11	4
1:A:125:THR:HG21	1:A:282:ARG:HG2	0.55	1.76	10	3
1:A:256:THR:HG22	1:A:258:GLU:HG3	0.55	1.77	30	1
1:A:152:PRO:N	1:A:153:PRO:HD2	0.55	2.17	32	8
1:A:155:THR:HB	1:A:220:TYR:CG	0.55	2.36	33	6
1:A:155:THR:HG21	1:A:265:LEU:HD21	0.55	1.78	16	5
1:A:125:THR:HG23	1:A:282:ARG:HB2	0.55	1.77	19	1
1:A:123:THR:HG21	1:A:139:LYS:HE3	0.54	1.80	6	2
1:A:256:THR:HG23	1:A:267:ARG:CD	0.54	2.32	7	1
1:A:155:THR:HG21	1:A:257:LEU:CD1	0.54	2.32	27	3
1:A:197:VAL:HG13	1:A:232:ILE:CG2	0.54	2.32	11	1
1:A:111:LEU:HD11	1:A:255:ILE:HG22	0.54	1.77	14	1
1:A:201:LEU:HD23	1:A:201:LEU:N	0.54	2.16	15	1
1:A:102:THR:HG23	1:A:268:ASN:OD1	0.54	2.02	21	1
1:A:162:ILE:HD11	1:A:252:LEU:CB	0.54	2.32	5	1
1:A:194:LEU:N	1:A:194:LEU:HD12	0.54	2.18	21	1
1:A:163:TYR:CD1	1:A:251:ILE:HG22	0.54	2.37	10	2
1:A:118:THR:HG22	1:A:125:THR:HG21	0.54	1.78	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:118:THR:HG21	1:A:283:ARG:HB3	0.54	1.80	34	1
1:A:252:LEU:HD12	1:A:270:PHE:C	0.54	2.22	32	3
1:A:162:ILE:HG12	1:A:254:ILE:HD11	0.54	1.78	8	3
1:A:162:ILE:HB	1:A:252:LEU:HD21	0.54	1.79	23	1
1:A:130:LEU:HD22	1:A:130:LEU:N	0.54	2.18	22	2
1:A:222:PRO:HB2	1:A:223:PRO:CD	0.54	2.32	32	1
1:A:264:LEU:HD21	1:A:267:ARG:NH1	0.54	2.18	27	1
1:A:114:LEU:HD21	1:A:124:CYS:HB2	0.54	1.79	9	1
1:A:258:GLU:OE2	1:A:264:LEU:HD12	0.53	2.03	21	2
1:A:113:PHE:N	1:A:113:PHE:CD1	0.53	2.75	14	2
1:A:143:VAL:HG11	1:A:255:ILE:HD11	0.53	1.78	29	1
1:A:280:ARG:O	1:A:284:THR:HG23	0.53	2.02	27	1
1:A:145:LEU:HD13	1:A:232:ILE:CG1	0.53	2.33	12	1
1:A:201:LEU:HD21	1:A:219:PRO:HG2	0.53	1.79	15	1
1:A:155:THR:HG22	1:A:258:GLU:O	0.53	2.04	4	7
1:A:111:LEU:HD12	1:A:143:VAL:CG1	0.53	2.32	15	1
1:A:111:LEU:HD21	1:A:255:ILE:HG21	0.53	1.80	14	1
1:A:107:TYR:CZ	1:A:265:LEU:HD21	0.53	2.38	8	1
1:A:152:PRO:O	1:A:155:THR:OG1	0.53	2.26	27	6
1:A:107:TYR:CE1	1:A:265:LEU:HD11	0.53	2.38	33	1
1:A:206:LEU:HD22	1:A:206:LEU:N	0.53	2.18	12	4
1:A:163:TYR:OH	1:A:173:VAL:HG21	0.53	2.04	34	1
1:A:270:PHE:CE2	1:A:272:VAL:HG12	0.53	2.38	23	2
1:A:252:LEU:O	1:A:252:LEU:HD12	0.53	2.04	24	1
1:A:197:VAL:HG11	1:A:232:ILE:HD11	0.53	1.80	21	1
1:A:111:LEU:HD13	1:A:268:ASN:OD1	0.53	2.04	7	2
1:A:252:LEU:H	1:A:252:LEU:HD22	0.53	1.63	3	1
1:A:254:ILE:HD11	1:A:267:ARG:HD3	0.52	1.78	20	1
1:A:203:VAL:HG11	1:A:218:VAL:HG12	0.52	1.80	12	1
1:A:252:LEU:HD12	1:A:271:GLU:OE1	0.52	2.03	3	2
1:A:201:LEU:HD23	1:A:201:LEU:H	0.52	1.63	15	1
1:A:158:ARG:NH1	1:A:256:THR:HG21	0.52	2.19	6	1
1:A:137:LEU:O	1:A:138:ALA:CB	0.52	2.57	9	8
1:A:162:ILE:CD1	1:A:252:LEU:HD22	0.52	2.32	18	1
1:A:258:GLU:CG	1:A:264:LEU:HD12	0.52	2.35	16	1
1:A:201:LEU:HD22	1:A:202:ARG:N	0.52	2.20	24	1
1:A:164:LYS:O	1:A:168:HIS:CD2	0.52	2.62	17	1
1:A:150:THR:C	1:A:152:PRO:CD	0.52	2.77	35	9
1:A:194:LEU:HD11	1:A:238:CYS:HB2	0.52	1.82	32	1
1:A:151:PRO:N	1:A:152:PRO:HD2	0.52	2.19	30	1
1:A:254:ILE:HD13	1:A:269:SER:HB2	0.52	1.81	30	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:SER:CB	1:A:254:ILE:HD13	0.52	2.33	12	1
1:A:179:HIS:C	1:A:179:HIS:CD2	0.52	2.83	34	1
1:A:252:LEU:HD12	1:A:252:LEU:O	0.52	2.04	33	1
1:A:145:LEU:HD13	1:A:232:ILE:HG12	0.52	1.82	12	2
1:A:255:ILE:HD12	1:A:255:ILE:N	0.52	2.19	24	3
1:A:264:LEU:O	1:A:264:LEU:HG	0.52	2.03	14	1
1:A:109:PHE:CG	1:A:266:GLY:HA3	0.52	2.40	25	1
1:A:144:GLN:HG3	1:A:231:THR:HG23	0.52	1.80	29	2
1:A:252:LEU:HD21	1:A:269:SER:CB	0.52	2.35	11	3
1:A:236:TYR:HE2	1:A:272:VAL:HG21	0.52	1.59	16	1
1:A:201:LEU:HD23	1:A:201:LEU:O	0.52	2.05	19	2
1:A:163:TYR:CZ	1:A:173:VAL:HG21	0.52	2.40	34	1
1:A:135:CYS:N	1:A:278:PRO:HB3	0.52	2.20	34	7
1:A:264:LEU:HD21	1:A:267:ARG:CB	0.52	2.33	23	2
1:A:195:ILE:O	1:A:195:ILE:HG23	0.52	2.03	19	1
1:A:157:VAL:HG13	1:A:256:THR:C	0.52	2.25	25	1
1:A:195:ILE:HG22	1:A:236:TYR:CE1	0.52	2.40	14	1
1:A:153:PRO:O	1:A:154:GLY:C	0.52	2.48	30	1
1:A:222:PRO:CB	1:A:223:PRO:HD3	0.52	2.35	27	4
1:A:155:THR:HG23	1:A:258:GLU:O	0.52	2.05	21	3
1:A:256:THR:HG22	1:A:258:GLU:CG	0.51	2.36	30	1
1:A:125:THR:HG22	1:A:282:ARG:HD2	0.51	1.82	4	1
1:A:113:PHE:CD2	1:A:126:TYR:CD1	0.51	2.98	18	2
1:A:203:VAL:HG12	1:A:218:VAL:CG1	0.51	2.31	6	1
1:A:194:LEU:HD13	1:A:194:LEU:H	0.51	1.65	27	4
1:A:254:ILE:O	1:A:254:ILE:HG23	0.51	2.06	27	5
1:A:145:LEU:HD23	1:A:257:LEU:HD12	0.51	1.82	4	1
1:A:135:CYS:O	1:A:274:VAL:HA	0.51	2.06	8	6
1:A:256:THR:CG2	1:A:264:LEU:HD11	0.51	2.35	33	1
1:A:208:ASP:O	1:A:212:PHE:HA	0.51	2.06	25	15
1:A:111:LEU:HD12	1:A:268:ASN:HB2	0.51	1.80	35	2
1:A:163:TYR:CZ	1:A:173:VAL:HG22	0.51	2.40	15	1
1:A:254:ILE:HG21	1:A:267:ARG:NH2	0.51	2.20	11	1
1:A:195:ILE:HG23	1:A:236:TYR:HE1	0.51	1.66	20	1
1:A:107:TYR:CG	1:A:265:LEU:HD21	0.51	2.40	12	2
1:A:254:ILE:HD11	1:A:267:ARG:CD	0.51	2.36	30	2
1:A:251:ILE:HG23	1:A:272:VAL:HB	0.51	1.83	18	2
1:A:222:PRO:N	1:A:223:PRO:CD	0.51	2.73	29	1
1:A:210:ASN:OD1	1:A:211:THR:HG23	0.51	2.05	1	1
1:A:252:LEU:H	1:A:252:LEU:HD13	0.51	1.62	23	2
1:A:155:THR:HG21	1:A:257:LEU:CG	0.51	2.35	32	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:111:LEU:HD21	1:A:255:ILE:CG1	0.51	2.35	12	2
1:A:159:ALA:HB3	1:A:216:VAL:HG13	0.51	1.83	34	3
1:A:115:HIS:CE1	1:A:117:GLY:N	0.51	2.79	29	1
1:A:126:TYR:CD1	1:A:133:MET:HB2	0.51	2.41	16	1
1:A:100:GLN:HG2	1:A:162:ILE:HD13	0.51	1.83	28	1
1:A:137:LEU:HD22	1:A:239:ASN:CG	0.51	2.26	34	1
1:A:111:LEU:HD11	1:A:143:VAL:CG1	0.51	2.36	34	1
1:A:203:VAL:HG12	1:A:218:VAL:CA	0.51	2.36	33	6
1:A:172:VAL:O	1:A:172:VAL:HG13	0.50	2.07	12	1
1:A:107:TYR:OH	1:A:265:LEU:HD22	0.50	2.06	1	1
1:A:111:LEU:HD11	1:A:255:ILE:HG21	0.50	1.78	14	1
1:A:257:LEU:O	1:A:257:LEU:HG	0.50	2.06	1	1
1:A:254:ILE:HG22	1:A:269:SER:HB3	0.50	1.83	36	1
1:A:272:VAL:HG23	1:A:272:VAL:O	0.50	2.07	6	3
1:A:103:TYR:HE1	1:A:264:LEU:HD23	0.50	1.58	34	2
1:A:236:TYR:CZ	1:A:272:VAL:HG11	0.50	2.42	16	2
1:A:197:VAL:HG11	1:A:200:ASN:OD1	0.50	2.06	22	2
1:A:206:LEU:CD1	1:A:217:VAL:HG13	0.50	2.30	33	1
1:A:194:LEU:HD21	1:A:238:CYS:HB3	0.50	1.81	32	1
1:A:134:PHE:CD1	1:A:281:ASP:HB3	0.50	2.41	12	5
1:A:111:LEU:HD21	1:A:255:ILE:HD13	0.50	1.82	16	3
1:A:162:ILE:HG22	1:A:171:GLU:HG3	0.50	1.83	12	1
1:A:164:LYS:CD	1:A:168:HIS:CD2	0.50	2.95	17	1
1:A:254:ILE:HD12	1:A:254:ILE:N	0.50	2.21	34	1
1:A:137:LEU:O	1:A:137:LEU:HD13	0.49	2.06	23	1
1:A:100:GLN:HE22	1:A:162:ILE:HD11	0.49	1.65	33	1
1:A:162:ILE:CG2	1:A:163:TYR:N	0.49	2.75	15	2
1:A:252:LEU:N	1:A:252:LEU:CD1	0.49	2.75	23	1
1:A:236:TYR:CD2	1:A:272:VAL:HG21	0.49	2.42	20	1
1:A:252:LEU:HD12	1:A:271:GLU:OE2	0.49	2.07	35	1
1:A:254:ILE:CD1	1:A:256:THR:HG23	0.49	2.37	36	1
1:A:264:LEU:HD11	1:A:267:ARG:CB	0.49	2.37	13	2
1:A:256:THR:HG23	1:A:264:LEU:HD11	0.49	1.83	28	1
1:A:114:LEU:HD21	1:A:142:PRO:HG3	0.49	1.84	13	2
1:A:197:VAL:HG22	1:A:234:TYR:HE1	0.49	1.67	34	1
1:A:263:ASN:O	1:A:265:LEU:HD13	0.49	2.07	34	1
1:A:193:HIS:CE1	1:A:205:TYR:CD1	0.49	3.00	33	4
1:A:193:HIS:CE1	1:A:214:HIS:CD2	0.49	3.00	29	1
1:A:195:ILE:HG23	1:A:195:ILE:O	0.49	2.06	31	1
1:A:157:VAL:HB	1:A:218:VAL:HG22	0.49	1.84	14	1
1:A:194:LEU:H	1:A:194:LEU:HD13	0.49	1.67	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:202:ARG:O	1:A:202:ARG:CG	0.49	2.61	19	4
1:A:193:HIS:CD2	1:A:205:TYR:CD1	0.49	3.01	24	1
1:A:264:LEU:HG	1:A:267:ARG:HB3	0.49	1.85	25	1
1:A:201:LEU:HD13	1:A:201:LEU:C	0.49	2.27	30	1
1:A:254:ILE:HG21	1:A:267:ARG:HH21	0.49	1.67	11	1
1:A:175:ARG:NE	1:A:191:PRO:O	0.49	2.45	28	1
1:A:222:PRO:CB	1:A:223:PRO:CD	0.49	2.91	35	1
1:A:251:ILE:CG2	1:A:272:VAL:HG23	0.49	2.37	6	1
1:A:251:ILE:C	1:A:252:LEU:HD12	0.49	2.28	28	1
1:A:137:LEU:N	1:A:274:VAL:HG12	0.49	2.23	23	2
1:A:222:PRO:N	1:A:223:PRO:HD2	0.49	2.22	29	1
1:A:265:LEU:HD12	1:A:265:LEU:C	0.49	2.28	16	3
1:A:264:LEU:HD11	1:A:267:ARG:HD3	0.49	1.85	8	1
1:A:167:GLN:C	1:A:168:HIS:CG	0.48	2.86	31	5
1:A:254:ILE:HG23	1:A:269:SER:OG	0.48	2.08	3	1
1:A:109:PHE:CE1	1:A:257:LEU:HD13	0.48	2.42	6	2
1:A:151:PRO:HG2	1:A:220:TYR:OH	0.48	2.08	35	6
1:A:163:TYR:CD1	1:A:171:GLU:O	0.48	2.67	23	2
1:A:109:PHE:CE2	1:A:145:LEU:HD23	0.48	2.42	7	1
1:A:194:LEU:H	1:A:194:LEU:HD22	0.48	1.69	36	3
1:A:265:LEU:HD23	1:A:265:LEU:C	0.48	2.29	31	1
1:A:109:PHE:CB	1:A:147:VAL:HG13	0.48	2.38	28	5
1:A:109:PHE:CE2	1:A:257:LEU:CD1	0.48	2.96	16	4
1:A:151:PRO:CG	1:A:220:TYR:OH	0.48	2.61	34	6
1:A:264:LEU:HD11	1:A:267:ARG:HG3	0.48	1.84	35	2
1:A:146:TRP:HE3	1:A:229:CYS:HG	0.48	1.46	12	2
1:A:236:TYR:HE2	1:A:272:VAL:HG11	0.48	1.68	9	3
1:A:257:LEU:O	1:A:265:LEU:CD1	0.48	2.61	36	1
1:A:162:ILE:HG22	1:A:163:TYR:N	0.48	2.23	22	3
1:A:164:LYS:N	1:A:252:LEU:HD21	0.48	2.24	3	1
1:A:265:LEU:C	1:A:265:LEU:HD12	0.48	2.29	21	2
1:A:145:LEU:HD22	1:A:230:THR:HB	0.48	1.85	17	2
1:A:151:PRO:C	1:A:153:PRO:HD2	0.48	2.29	22	4
1:A:107:TYR:CG	1:A:265:LEU:CD1	0.48	2.96	2	4
1:A:163:TYR:CE1	1:A:251:ILE:CG2	0.48	2.97	19	2
1:A:111:LEU:HD13	1:A:255:ILE:CD1	0.48	2.39	29	2
1:A:175:ARG:CG	1:A:192:GLN:HA	0.48	2.38	18	2
1:A:103:TYR:N	1:A:268:ASN:OD1	0.48	2.47	25	2
1:A:125:THR:HG21	1:A:282:ARG:HB2	0.48	1.85	21	1
1:A:195:ILE:HG22	1:A:236:TYR:CE2	0.48	2.43	10	1
1:A:125:THR:HG21	1:A:282:ARG:CG	0.47	2.38	28	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:107:TYR:CE2	1:A:265:LEU:CD2	0.47	2.97	34	1
1:A:115:HIS:ND1	1:A:116:SER:N	0.47	2.62	13	8
1:A:109:PHE:CD1	1:A:268:ASN:ND2	0.47	2.82	4	2
1:A:100:GLN:CG	1:A:162:ILE:HD13	0.47	2.38	28	1
1:A:157:VAL:HG22	1:A:257:LEU:CD1	0.47	2.39	34	1
1:A:275:CYS:O	1:A:276:ALA:HB3	0.47	2.09	3	2
1:A:123:THR:HG22	1:A:139:LYS:CD	0.47	2.35	1	2
1:A:113:PHE:CD2	1:A:126:TYR:CE1	0.47	3.02	5	1
1:A:252:LEU:HD12	1:A:252:LEU:H	0.47	1.68	9	1
1:A:111:LEU:HD11	1:A:268:ASN:OD1	0.47	2.09	30	1
1:A:152:PRO:O	1:A:220:TYR:CD2	0.47	2.67	17	5
1:A:256:THR:HG23	1:A:267:ARG:HD2	0.47	1.85	7	1
1:A:146:TRP:CD2	1:A:229:CYS:SG	0.47	3.07	16	1
1:A:163:TYR:OH	1:A:173:VAL:HG23	0.47	2.10	10	1
1:A:257:LEU:HG	1:A:257:LEU:O	0.47	2.10	27	1
1:A:272:VAL:O	1:A:272:VAL:HG13	0.47	2.09	9	2
1:A:162:ILE:HG23	1:A:252:LEU:HD23	0.47	1.86	26	1
1:A:117:GLY:O	1:A:125:THR:HG21	0.47	2.09	11	1
1:A:257:LEU:HD22	1:A:265:LEU:HD22	0.47	1.86	30	1
1:A:109:PHE:CE2	1:A:266:GLY:O	0.47	2.68	32	6
1:A:126:TYR:CD1	1:A:126:TYR:O	0.47	2.68	26	2
1:A:109:PHE:C	1:A:109:PHE:CD1	0.47	2.88	34	4
1:A:137:LEU:HD22	1:A:239:ASN:ND2	0.47	2.25	35	2
1:A:157:VAL:HG22	1:A:257:LEU:HB2	0.47	1.85	25	2
1:A:238:CYS:O	1:A:274:VAL:HG21	0.47	2.09	9	1
1:A:145:LEU:HD23	1:A:257:LEU:CD1	0.47	2.40	12	5
1:A:258:GLU:HA	1:A:265:LEU:HD12	0.47	1.86	1	1
1:A:103:TYR:HB2	1:A:267:ARG:H	0.47	1.69	31	4
1:A:280:ARG:O	1:A:284:THR:HG22	0.47	2.10	2	1
1:A:275:CYS:O	1:A:277:CYS:N	0.47	2.47	23	1
1:A:200:ASN:OD1	1:A:203:VAL:HG11	0.47	2.09	24	2
1:A:252:LEU:C	1:A:252:LEU:HD12	0.47	2.29	33	1
1:A:109:PHE:CE2	1:A:257:LEU:HD12	0.47	2.45	16	2
1:A:163:TYR:CE1	1:A:173:VAL:CG1	0.47	2.98	31	1
1:A:111:LEU:HD11	1:A:143:VAL:HG12	0.47	1.86	34	1
1:A:109:PHE:CE1	1:A:266:GLY:O	0.47	2.68	21	13
1:A:255:ILE:HD11	1:A:270:PHE:HE1	0.47	1.70	31	2
1:A:162:ILE:HB	1:A:252:LEU:HD11	0.47	1.86	25	1
1:A:264:LEU:HD23	1:A:267:ARG:HD3	0.47	1.85	25	1
1:A:151:PRO:HB2	1:A:220:TYR:OH	0.46	2.10	1	13
1:A:202:ARG:CG	1:A:202:ARG:O	0.46	2.64	27	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:155:THR:OG1	1:A:220:TYR:CE2	0.46	2.67	8	6
1:A:111:LEU:HD11	1:A:255:ILE:CG1	0.46	2.40	5	2
1:A:137:LEU:HD21	1:A:239:ASN:HB3	0.46	1.87	22	1
1:A:195:ILE:HG22	1:A:236:TYR:CD2	0.46	2.45	10	1
1:A:102:THR:HG23	1:A:268:ASN:CG	0.46	2.30	21	1
1:A:147:VAL:HG21	1:A:151:PRO:CG	0.46	2.41	9	1
1:A:107:TYR:CE1	1:A:265:LEU:HD22	0.46	2.45	25	1
1:A:107:TYR:HB3	1:A:147:VAL:HG12	0.46	1.86	20	1
1:A:143:VAL:HG21	1:A:234:TYR:HD2	0.46	1.69	31	1
1:A:111:LEU:HD11	1:A:255:ILE:CD1	0.46	2.40	5	1
1:A:206:LEU:HD21	1:A:217:VAL:CG1	0.46	2.37	24	1
1:A:173:VAL:O	1:A:173:VAL:HG13	0.46	2.09	30	1
1:A:123:THR:HG22	1:A:136:GLN:OE1	0.46	2.10	34	2
1:A:197:VAL:CG1	1:A:234:TYR:CE2	0.46	2.98	26	1
1:A:134:PHE:CD1	1:A:281:ASP:CB	0.46	2.99	27	2
1:A:163:TYR:CE2	1:A:173:VAL:CG1	0.46	2.99	33	2
1:A:254:ILE:HG23	1:A:254:ILE:O	0.46	2.11	12	2
1:A:252:LEU:HD11	1:A:271:GLU:HG2	0.46	1.87	7	2
1:A:206:LEU:N	1:A:206:LEU:HD22	0.46	2.26	24	2
1:A:254:ILE:N	1:A:254:ILE:HD12	0.46	2.26	24	1
1:A:109:PHE:CE2	1:A:257:LEU:CD2	0.46	2.99	1	2
1:A:270:PHE:CE2	1:A:272:VAL:CG1	0.46	2.98	35	4
1:A:114:LEU:HD21	1:A:142:PRO:HG2	0.46	1.88	15	1
1:A:155:THR:HB	1:A:220:TYR:CD1	0.46	2.46	8	6
1:A:109:PHE:CG	1:A:266:GLY:CA	0.46	2.98	25	1
1:A:137:LEU:HD11	1:A:238:CYS:N	0.46	2.25	8	2
1:A:193:HIS:NE2	1:A:205:TYR:CD1	0.46	2.84	33	2
1:A:162:ILE:HG22	1:A:163:TYR:H	0.46	1.70	16	4
1:A:116:SER:HG	1:A:125:THR:HA	0.46	1.71	2	1
1:A:162:ILE:CG1	1:A:163:TYR:N	0.46	2.78	26	1
1:A:107:TYR:CB	1:A:265:LEU:HD23	0.46	2.40	6	1
1:A:195:ILE:HG23	1:A:236:TYR:CE1	0.46	2.46	20	1
1:A:109:PHE:CD1	1:A:266:GLY:CA	0.46	2.99	25	2
1:A:151:PRO:HD2	1:A:152:PRO:HD3	0.46	1.88	34	3
1:A:252:LEU:HD11	1:A:271:GLU:CG	0.46	2.41	7	1
1:A:254:ILE:HD12	1:A:256:THR:HG23	0.46	1.87	36	1
1:A:163:TYR:CD1	1:A:165:GLN:CG	0.46	2.98	16	1
1:A:216:VAL:HG13	1:A:216:VAL:O	0.46	2.11	14	3
1:A:109:PHE:HB3	1:A:266:GLY:HA3	0.46	1.88	34	1
1:A:208:ASP:O	1:A:212:PHE:N	0.46	2.49	33	15
1:A:162:ILE:C	1:A:162:ILE:HD12	0.46	2.31	21	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:151:PRO:O	1:A:220:TYR:CD2	0.46	2.69	22	3
1:A:109:PHE:CE1	1:A:266:GLY:C	0.46	2.90	1	2
1:A:220:TYR:HE1	1:A:257:LEU:HD11	0.46	1.71	19	2
1:A:102:THR:HG23	1:A:104:GLN:OE1	0.46	2.11	36	1
1:A:168:HIS:CD2	1:A:249:ARG:NH1	0.46	2.84	5	2
1:A:265:LEU:HD13	1:A:265:LEU:H	0.46	1.71	5	1
1:A:111:LEU:HD13	1:A:255:ILE:HD13	0.46	1.86	24	2
1:A:265:LEU:C	1:A:265:LEU:CD2	0.46	2.85	6	1
1:A:264:LEU:HG	1:A:267:ARG:HB2	0.46	1.88	6	1
1:A:109:PHE:HE2	1:A:145:LEU:HD23	0.46	1.71	27	2
1:A:194:LEU:HD22	1:A:194:LEU:H	0.46	1.71	27	1
1:A:155:THR:OG1	1:A:220:TYR:CD1	0.46	2.69	35	1
1:A:265:LEU:CD2	1:A:265:LEU:C	0.46	2.84	35	4
1:A:155:THR:N	1:A:220:TYR:HB2	0.46	2.25	12	7
1:A:264:LEU:O	1:A:264:LEU:HD23	0.46	2.12	6	1
1:A:145:LEU:HD12	1:A:145:LEU:N	0.46	2.26	28	2
1:A:193:HIS:CE1	1:A:214:HIS:CG	0.46	3.04	19	1
1:A:167:GLN:O	1:A:168:HIS:CG	0.45	2.69	32	7
1:A:200:ASN:OD1	1:A:203:VAL:HG13	0.45	2.11	26	1
1:A:107:TYR:CD2	1:A:265:LEU:CD2	0.45	3.00	4	2
1:A:281:ASP:HA	1:A:284:THR:HG22	0.45	1.89	21	2
1:A:103:TYR:O	1:A:103:TYR:CD2	0.45	2.69	33	1
1:A:251:ILE:HG13	1:A:272:VAL:HG23	0.45	1.87	3	1
1:A:194:LEU:HD23	1:A:195:ILE:HG13	0.45	1.88	22	1
1:A:193:HIS:ND1	1:A:205:TYR:CD1	0.45	2.85	10	1
1:A:111:LEU:HD11	1:A:255:ILE:CB	0.45	2.40	33	1
1:A:109:PHE:CE2	1:A:268:ASN:ND2	0.45	2.85	36	1
1:A:197:VAL:HG12	1:A:200:ASN:OD1	0.45	2.11	5	1
1:A:162:ILE:HD12	1:A:252:LEU:HD11	0.45	1.89	24	1
1:A:163:TYR:O	1:A:169:MET:HB3	0.45	2.11	34	1
1:A:189:ALA:HB3	1:A:196:ARG:HG3	0.45	1.87	26	1
1:A:163:TYR:CD2	1:A:249:ARG:CZ	0.45	3.00	18	1
1:A:111:LEU:CD1	1:A:113:PHE:CZ	0.45	2.99	3	1
1:A:109:PHE:CZ	1:A:257:LEU:HD13	0.45	2.46	28	1
1:A:197:VAL:CG1	1:A:234:TYR:CE1	0.45	2.99	19	1
1:A:163:TYR:CD1	1:A:173:VAL:HB	0.45	2.45	17	1
1:A:162:ILE:HG12	1:A:163:TYR:N	0.45	2.26	26	1
1:A:256:THR:CG2	1:A:267:ARG:CG	0.45	2.94	3	5
1:A:270:PHE:CZ	1:A:272:VAL:CG1	0.45	3.00	23	1
1:A:162:ILE:HD12	1:A:254:ILE:HD11	0.45	1.88	22	1
1:A:163:TYR:CD2	1:A:249:ARG:NH1	0.45	2.84	26	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:196:ARG:O	1:A:234:TYR:HA	0.45	2.12	33	3
1:A:168:HIS:N	1:A:168:HIS:CD2	0.45	2.84	18	1
1:A:197:VAL:HG23	1:A:200:ASN:HD21	0.45	1.72	3	1
1:A:195:ILE:CG2	1:A:236:TYR:CE2	0.45	3.00	10	1
1:A:179:HIS:CD2	1:A:237:MET:CE	0.45	3.00	19	1
1:A:272:VAL:HG13	1:A:272:VAL:O	0.45	2.11	32	4
1:A:134:PHE:CD2	1:A:281:ASP:CB	0.45	3.00	26	2
1:A:150:THR:C	1:A:152:PRO:HD3	0.45	2.32	35	2
1:A:163:TYR:CD1	1:A:251:ILE:CG2	0.45	3.00	10	2
1:A:118:THR:HG21	1:A:279:GLY:CA	0.45	2.38	1	1
1:A:176:CYS:CB	1:A:178:HIS:CE1	0.45	3.00	4	2
1:A:158:ARG:CD	1:A:206:LEU:HD12	0.45	2.41	35	1
1:A:155:THR:OG1	1:A:220:TYR:CD2	0.45	2.70	34	2
1:A:126:TYR:CG	1:A:126:TYR:O	0.45	2.69	21	4
1:A:136:GLN:HB3	1:A:276:ALA:O	0.45	2.11	33	1
1:A:145:LEU:CD2	1:A:157:VAL:HG11	0.45	2.30	1	1
1:A:145:LEU:HD21	1:A:157:VAL:HG21	0.45	1.87	18	1
1:A:140:THR:HG22	1:A:142:PRO:HD3	0.45	1.87	3	1
1:A:152:PRO:CD	1:A:153:PRO:HD3	0.45	2.41	31	2
1:A:254:ILE:H	1:A:254:ILE:HD12	0.45	1.71	34	2
1:A:168:HIS:CD2	1:A:249:ARG:NE	0.45	2.85	6	1
1:A:194:LEU:CD2	1:A:195:ILE:HG23	0.45	2.39	10	1
1:A:107:TYR:CE2	1:A:265:LEU:CD1	0.45	2.98	30	2
1:A:276:ALA:O	1:A:278:PRO:HD3	0.45	2.12	20	3
1:A:168:HIS:CG	1:A:249:ARG:NE	0.45	2.85	27	1
1:A:222:PRO:CD	1:A:223:PRO:HD3	0.45	2.42	33	2
1:A:107:TYR:CE1	1:A:265:LEU:CD1	0.45	3.00	33	1
1:A:194:LEU:N	1:A:194:LEU:CD1	0.45	2.78	29	1
1:A:207:ASP:OD1	1:A:214:HIS:CD2	0.45	2.70	31	1
1:A:163:TYR:CE1	1:A:173:VAL:CG2	0.45	3.00	15	2
1:A:267:ARG:O	1:A:267:ARG:HG3	0.45	2.12	5	1
1:A:163:TYR:CG	1:A:165:GLN:NE2	0.44	2.86	21	1
1:A:193:HIS:NE2	1:A:195:ILE:HG22	0.44	2.28	36	1
1:A:178:HIS:CD2	1:A:179:HIS:N	0.44	2.85	11	2
1:A:168:HIS:CG	1:A:249:ARG:NH1	0.44	2.85	10	1
1:A:218:VAL:HG11	1:A:232:ILE:HD13	0.44	1.89	30	1
1:A:163:TYR:CD2	1:A:171:GLU:O	0.44	2.71	7	3
1:A:136:GLN:HG3	1:A:139:LYS:HB2	0.44	1.88	2	1
1:A:100:GLN:HA	1:A:254:ILE:HD12	0.44	1.88	15	1
1:A:137:LEU:HD11	1:A:239:ASN:HB3	0.44	1.87	22	1
1:A:113:PHE:CE1	1:A:270:PHE:CD2	0.44	3.05	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:159:ALA:O	1:A:216:VAL:HG12	0.44	2.13	25	1
1:A:144:GLN:CG	1:A:231:THR:HG22	0.44	2.42	25	1
1:A:176:CYS:CB	1:A:178:HIS:NE2	0.44	2.81	34	1
1:A:232:ILE:CG2	1:A:234:TYR:CE1	0.44	3.00	14	2
1:A:254:ILE:HD11	1:A:267:ARG:NE	0.44	2.28	27	1
1:A:200:ASN:HD21	1:A:218:VAL:HG23	0.44	1.71	23	1
1:A:162:ILE:HD11	1:A:252:LEU:CD2	0.44	2.40	35	2
1:A:264:LEU:HD23	1:A:264:LEU:C	0.44	2.33	7	2
1:A:126:TYR:O	1:A:126:TYR:CG	0.44	2.69	17	2
1:A:173:VAL:O	1:A:194:LEU:HD11	0.44	2.12	30	1
1:A:115:HIS:CB	1:A:126:TYR:CD1	0.44	3.00	26	1
1:A:115:HIS:CG	1:A:116:SER:N	0.44	2.85	21	9
1:A:168:HIS:CG	1:A:249:ARG:CZ	0.44	3.00	35	1
1:A:111:LEU:HD21	1:A:268:ASN:OD1	0.44	2.11	29	1
1:A:118:THR:CG2	1:A:125:THR:HG21	0.44	2.41	7	2
1:A:162:ILE:CD1	1:A:254:ILE:CD1	0.44	2.95	16	1
1:A:254:ILE:HD12	1:A:254:ILE:O	0.44	2.13	36	1
1:A:113:PHE:O	1:A:126:TYR:CE2	0.44	2.71	7	6
1:A:195:ILE:HD11	1:A:234:TYR:CD2	0.44	2.48	26	1
1:A:131:ASN:ND2	1:A:131:ASN:O	0.44	2.51	36	2
1:A:175:ARG:NH1	1:A:194:LEU:CB	0.44	2.80	28	1
1:A:223:PRO:HB3	1:A:229:CYS:N	0.44	2.28	13	1
1:A:200:ASN:ND2	1:A:203:VAL:HG22	0.44	2.28	23	1
1:A:282:ARG:HG3	1:A:283:ARG:N	0.44	2.28	10	4
1:A:206:LEU:N	1:A:206:LEU:CD2	0.44	2.81	5	2
1:A:145:LEU:HD13	1:A:232:ILE:HD11	0.44	1.90	25	1
1:A:205:TYR:CE1	1:A:216:VAL:CG2	0.44	3.00	21	1
1:A:107:TYR:CD2	1:A:149:SER:OG	0.44	2.71	35	2
1:A:113:PHE:O	1:A:126:TYR:CE1	0.44	2.71	24	4
1:A:118:THR:HG21	1:A:279:GLY:HA2	0.44	1.88	17	1
1:A:110:ARG:HA	1:A:268:ASN:ND2	0.44	2.28	25	1
1:A:137:LEU:HD13	1:A:239:ASN:N	0.44	2.27	30	1
1:A:194:LEU:HD23	1:A:238:CYS:CB	0.44	2.43	21	1
1:A:100:GLN:NE2	1:A:162:ILE:HD11	0.44	2.27	33	1
1:A:133:MET:HG3	1:A:272:VAL:HA	0.44	1.89	16	1
1:A:267:ARG:O	1:A:267:ARG:CG	0.44	2.66	8	3
1:A:176:CYS:HB2	1:A:179:HIS:HB2	0.43	1.89	33	1
1:A:264:LEU:HD21	1:A:267:ARG:HH11	0.43	1.73	19	1
1:A:113:PHE:O	1:A:126:TYR:CD2	0.43	2.71	15	5
1:A:109:PHE:O	1:A:268:ASN:ND2	0.43	2.52	26	1
1:A:103:TYR:CE1	1:A:264:LEU:HD22	0.43	2.48	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:193:HIS:CE1	1:A:195:ILE:CG2	0.43	3.01	36	1
1:A:252:LEU:CD2	1:A:252:LEU:N	0.43	2.81	3	2
1:A:251:ILE:HG23	1:A:272:VAL:O	0.43	2.13	17	1
1:A:103:TYR:HE2	1:A:264:LEU:HD23	0.43	1.72	27	1
1:A:216:VAL:O	1:A:216:VAL:HG13	0.43	2.13	9	4
1:A:164:LYS:HB2	1:A:252:LEU:HD11	0.43	1.90	3	1
1:A:168:HIS:CD2	1:A:168:HIS:N	0.43	2.85	3	1
1:A:174:ARG:HG3	1:A:175:ARG:N	0.43	2.28	22	1
1:A:264:LEU:C	1:A:264:LEU:HD23	0.43	2.33	6	1
1:A:179:HIS:CD2	1:A:180:GLU:N	0.43	2.86	34	1
1:A:253:THR:HB	1:A:270:PHE:CE1	0.43	2.48	26	2
1:A:136:GLN:HB2	1:A:139:LYS:HB2	0.43	1.89	15	1
1:A:114:LEU:C	1:A:114:LEU:HD12	0.43	2.34	11	1
1:A:252:LEU:HD13	1:A:252:LEU:N	0.43	2.28	26	1
1:A:193:HIS:CD2	1:A:205:TYR:CG	0.43	3.06	33	1
1:A:103:TYR:CD2	1:A:264:LEU:HD22	0.43	2.49	29	1
1:A:136:GLN:CG	1:A:139:LYS:CG	0.43	2.97	8	1
1:A:200:ASN:ND2	1:A:218:VAL:CG2	0.43	2.81	33	4
1:A:206:LEU:HD11	1:A:217:VAL:HG11	0.43	1.86	27	1
1:A:145:LEU:N	1:A:145:LEU:CD1	0.43	2.82	17	1
1:A:264:LEU:HD21	1:A:267:ARG:HE	0.43	1.72	34	1
1:A:145:LEU:N	1:A:145:LEU:HD12	0.43	2.29	17	2
1:A:103:TYR:CZ	1:A:264:LEU:O	0.43	2.72	26	1
1:A:194:LEU:HD23	1:A:194:LEU:H	0.43	1.72	34	2
1:A:242:CYS:O	1:A:243:MET:CG	0.43	2.66	35	1
1:A:164:LYS:CB	1:A:252:LEU:HD13	0.43	2.41	28	1
1:A:137:LEU:N	1:A:274:VAL:CG1	0.43	2.82	9	1
1:A:160:MET:HB3	1:A:254:ILE:HD13	0.43	1.90	34	1
1:A:123:THR:O	1:A:278:PRO:CB	0.43	2.67	12	3
1:A:113:PHE:HB2	1:A:126:TYR:CD2	0.43	2.49	12	1
1:A:162:ILE:HD11	1:A:252:LEU:HB2	0.43	1.90	5	1
1:A:123:THR:O	1:A:278:PRO:CG	0.43	2.67	9	2
1:A:157:VAL:CG1	1:A:255:ILE:HG23	0.43	2.43	24	3
1:A:246:MET:O	1:A:249:ARG:HB2	0.43	2.12	36	1
1:A:123:THR:HG22	1:A:139:LYS:HD3	0.43	1.91	2	1
1:A:193:HIS:NE2	1:A:214:HIS:CD2	0.43	2.87	14	1
1:A:256:THR:HG22	1:A:267:ARG:HG3	0.43	1.90	4	1
1:A:107:TYR:O	1:A:108:GLY:C	0.43	2.57	15	1
1:A:264:LEU:HD23	1:A:267:ARG:HB2	0.42	1.91	4	1
1:A:145:LEU:HB2	1:A:230:THR:HB	0.42	1.90	33	1
1:A:114:LEU:N	1:A:114:LEU:HD12	0.42	2.29	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:200:ASN:ND2	1:A:203:VAL:CG1	0.42	2.80	6	1
1:A:137:LEU:N	1:A:137:LEU:CD1	0.42	2.81	9	1
1:A:209:ARG:O	1:A:212:PHE:CE1	0.42	2.72	28	3
1:A:164:LYS:HB2	1:A:252:LEU:HD12	0.42	1.91	5	1
1:A:107:TYR:CE1	1:A:265:LEU:HG	0.42	2.49	34	3
1:A:256:THR:CG2	1:A:267:ARG:HG3	0.42	2.44	4	2
1:A:239:ASN:OD1	1:A:240:SER:N	0.42	2.52	18	1
1:A:114:LEU:O	1:A:126:TYR:CD2	0.42	2.72	16	1
1:A:100:GLN:HG2	1:A:254:ILE:HD13	0.42	1.89	5	1
1:A:222:PRO:HB3	1:A:223:PRO:HD2	0.42	1.91	8	1
1:A:109:PHE:CZ	1:A:257:LEU:HD12	0.42	2.49	16	1
1:A:113:PHE:HB2	1:A:126:TYR:CD1	0.42	2.49	9	1
1:A:202:ARG:HG3	1:A:202:ARG:O	0.42	2.13	32	1
1:A:257:LEU:O	1:A:265:LEU:HG	0.42	2.14	16	2
1:A:206:LEU:CD1	1:A:206:LEU:N	0.42	2.83	20	1
1:A:218:VAL:O	1:A:218:VAL:HG13	0.42	2.15	20	2
1:A:125:THR:HG23	1:A:134:PHE:HB2	0.42	1.92	35	1
1:A:200:ASN:CG	1:A:203:VAL:HG11	0.42	2.35	24	1
1:A:204:GLU:HB2	1:A:217:VAL:HG23	0.42	1.92	30	1
1:A:195:ILE:CD1	1:A:236:TYR:CZ	0.42	3.03	33	1
1:A:103:TYR:CD1	1:A:264:LEU:HD22	0.42	2.49	7	1
1:A:254:ILE:HG23	1:A:269:SER:CB	0.42	2.45	24	1
1:A:115:HIS:CD2	1:A:125:THR:HG22	0.42	2.50	13	1
1:A:177:PRO:O	1:A:181:ARG:HG2	0.42	2.15	34	1
1:A:115:HIS:CE1	1:A:116:SER:O	0.42	2.72	26	1
1:A:111:LEU:HD13	1:A:268:ASN:HB2	0.42	1.92	12	1
1:A:201:LEU:HD22	1:A:221:GLU:CD	0.42	2.35	31	1
1:A:252:LEU:HD12	1:A:271:GLU:HG3	0.42	1.91	26	1
1:A:270:PHE:C	1:A:270:PHE:CD1	0.42	2.93	12	1
1:A:109:PHE:HB2	1:A:147:VAL:HA	0.42	1.91	7	1
1:A:109:PHE:CD2	1:A:146:TRP:O	0.42	2.73	34	3
1:A:256:THR:OG1	1:A:264:LEU:HD11	0.42	2.15	25	1
1:A:243:MET:HE3	1:A:244:GLY:N	0.41	2.29	12	1
1:A:137:LEU:HD22	1:A:239:ASN:HD22	0.41	1.75	16	1
1:A:158:ARG:CD	1:A:160:MET:CE	0.41	2.98	5	1
1:A:200:ASN:CG	1:A:218:VAL:HG21	0.41	2.35	34	1
1:A:117:GLY:O	1:A:125:THR:HG22	0.41	2.15	36	1
1:A:189:ALA:HB1	1:A:196:ARG:HG2	0.41	1.91	31	1
1:A:134:PHE:C	1:A:278:PRO:HB3	0.41	2.34	15	1
1:A:111:LEU:HD21	1:A:255:ILE:HG12	0.41	1.91	11	1
1:A:111:LEU:HA	1:A:144:GLN:O	0.41	2.15	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:258:GLU:HB3	1:A:264:LEU:HD12	0.41	1.92	25	1
1:A:163:TYR:CZ	1:A:171:GLU:O	0.41	2.72	26	1
1:A:256:THR:CG2	1:A:267:ARG:HG2	0.41	2.40	27	1
1:A:145:LEU:HB2	1:A:230:THR:O	0.41	2.15	29	1
1:A:135:CYS:HA	1:A:278:PRO:HB3	0.41	1.91	36	1
1:A:163:TYR:CE1	1:A:249:ARG:HB3	0.41	2.50	16	1
1:A:136:GLN:CG	1:A:139:LYS:HB2	0.41	2.46	24	1
1:A:263:ASN:ND2	1:A:263:ASN:N	0.41	2.68	19	1
1:A:194:LEU:HD13	1:A:195:ILE:HG13	0.41	1.92	18	1
1:A:113:PHE:O	1:A:126:TYR:CD1	0.41	2.73	11	1
1:A:134:PHE:CD1	1:A:281:ASP:OD2	0.41	2.74	11	1
1:A:194:LEU:CD2	1:A:194:LEU:N	0.41	2.82	22	1
1:A:137:LEU:HD13	1:A:137:LEU:O	0.41	2.15	9	1
1:A:255:ILE:CD1	1:A:270:PHE:CE1	0.41	3.04	19	1
1:A:267:ARG:CG	1:A:267:ARG:O	0.41	2.69	32	4
1:A:258:GLU:CG	1:A:264:LEU:CD1	0.41	2.99	16	1
1:A:134:PHE:CE1	1:A:281:ASP:OD2	0.41	2.74	11	1
1:A:192:GLN:O	1:A:214:HIS:CE1	0.41	2.73	32	1
1:A:137:LEU:O	1:A:137:LEU:CD2	0.41	2.64	9	1
1:A:189:ALA:CB	1:A:205:TYR:CZ	0.41	3.02	19	1
1:A:264:LEU:CD2	1:A:267:ARG:HG2	0.41	2.45	13	1
1:A:253:THR:O	1:A:270:PHE:CD1	0.41	2.74	34	1
1:A:107:TYR:CG	1:A:149:SER:OG	0.41	2.71	35	1
1:A:102:THR:HG23	1:A:268:ASN:CB	0.41	2.39	11	2
1:A:134:PHE:CE1	1:A:281:ASP:OD1	0.41	2.73	14	3
1:A:163:TYR:O	1:A:169:MET:CB	0.41	2.68	18	1
1:A:107:TYR:CD1	1:A:265:LEU:HD13	0.41	2.50	2	1
1:A:138:ALA:N	1:A:236:TYR:O	0.41	2.52	9	1
1:A:163:TYR:CD2	1:A:250:PRO:O	0.41	2.74	27	1
1:A:123:THR:O	1:A:278:PRO:HG2	0.41	2.16	35	1
1:A:155:THR:OG1	1:A:220:TYR:CZ	0.41	2.74	16	1
1:A:254:ILE:HD12	1:A:268:ASN:C	0.41	2.36	30	1
1:A:114:LEU:O	1:A:126:TYR:CE1	0.41	2.74	36	1
1:A:155:THR:O	1:A:220:TYR:HB3	0.41	2.13	31	1
1:A:155:THR:HG23	1:A:258:GLU:N	0.41	2.31	32	1
1:A:200:ASN:OD1	1:A:203:VAL:CG1	0.41	2.69	22	1
1:A:165:GLN:O	1:A:165:GLN:CG	0.41	2.69	21	1
1:A:163:TYR:CE1	1:A:171:GLU:O	0.41	2.74	20	1
1:A:107:TYR:N	1:A:107:TYR:CD1	0.41	2.88	33	1
1:A:136:GLN:O	1:A:139:LYS:HB2	0.41	2.16	33	1
1:A:255:ILE:N	1:A:255:ILE:CD1	0.41	2.84	33	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:125:THR:CG2	1:A:278:PRO:O	0.41	2.69	29	1
1:A:265:LEU:C	1:A:265:LEU:HD23	0.41	2.36	12	1
1:A:265:LEU:HD12	1:A:266:GLY:N	0.41	2.30	16	1
1:A:113:PHE:HB3	1:A:126:TYR:CB	0.41	2.45	16	1
1:A:258:GLU:HA	1:A:263:ASN:O	0.41	2.16	16	1
1:A:193:HIS:CD2	1:A:214:HIS:CE1	0.41	3.09	3	1
1:A:206:LEU:CD2	1:A:217:VAL:HG13	0.41	2.41	24	1
1:A:125:THR:HG21	1:A:279:GLY:CA	0.41	2.46	6	1
1:A:136:GLN:C	1:A:274:VAL:HG12	0.41	2.36	28	1
1:A:113:PHE:CD1	1:A:126:TYR:CE1	0.41	3.08	8	1
1:A:276:ALA:O	1:A:278:PRO:CD	0.41	2.69	30	1
1:A:115:HIS:CE1	1:A:125:THR:HG22	0.41	2.51	26	1
1:A:150:THR:HG22	1:A:152:PRO:HG3	0.41	1.91	21	1
1:A:137:LEU:CD2	1:A:137:LEU:C	0.41	2.89	23	1
1:A:139:LYS:HE2	1:A:141:CYS:SG	0.41	2.56	36	1
1:A:164:LYS:O	1:A:166:SER:N	0.41	2.54	31	1
1:A:130:LEU:HD13	1:A:285:GLU:OE2	0.41	2.16	11	1
1:A:259:ASP:CB	1:A:263:ASN:OD1	0.41	2.69	19	1
1:A:123:THR:O	1:A:278:PRO:HG3	0.41	2.16	19	1
1:A:264:LEU:HD23	1:A:267:ARG:CB	0.40	2.46	4	1
1:A:192:GLN:NE2	1:A:214:HIS:NE2	0.40	2.69	35	1
1:A:109:PHE:CE1	1:A:268:ASN:OD1	0.40	2.74	1	1
1:A:113:PHE:CG	1:A:133:MET:SD	0.40	3.14	36	1
1:A:145:LEU:CD1	1:A:232:ILE:CD1	0.40	2.99	24	1
1:A:151:PRO:CB	1:A:220:TYR:OH	0.40	2.69	24	2
1:A:125:THR:CG2	1:A:282:ARG:CB	0.40	2.98	22	1
1:A:143:VAL:CG2	1:A:234:TYR:CD2	0.40	3.04	9	1
1:A:209:ARG:HA	1:A:212:PHE:CE1	0.40	2.52	13	1
1:A:264:LEU:CD2	1:A:267:ARG:CZ	0.40	2.98	26	1
1:A:114:LEU:N	1:A:114:LEU:HD22	0.40	2.32	35	1
1:A:222:PRO:CD	1:A:223:PRO:CD	0.40	2.99	29	1
1:A:133:MET:SD	1:A:270:PHE:CD1	0.40	3.14	12	1
1:A:209:ARG:O	1:A:212:PHE:CZ	0.40	2.74	31	1
1:A:160:MET:O	1:A:253:THR:HA	0.40	2.16	24	2
1:A:116:SER:HB3	1:A:124:CYS:O	0.40	2.16	6	1
1:A:134:PHE:C	1:A:278:PRO:CB	0.40	2.90	19	1
1:A:175:ARG:HD3	1:A:192:GLN:HA	0.40	1.93	19	1
1:A:256:THR:HG21	1:A:258:GLU:OE2	0.40	2.15	17	1
1:A:126:TYR:CD1	1:A:127:SER:N	0.40	2.89	34	1
1:A:109:PHE:CD1	1:A:266:GLY:HA3	0.40	2.51	34	1
1:A:259:ASP:OD1	1:A:263:ASN:N	0.40	2.54	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:134:PHE:CE1	1:A:285:GLU:OE2	0.40	2.73	25	1
1:A:156:ARG:NH2	1:A:217:VAL:CG2	0.40	2.84	34	1
1:A:162:ILE:HD11	1:A:254:ILE:CG1	0.40	2.46	34	1
1:A:124:CYS:HA	1:A:134:PHE:O	0.40	2.15	27	1
1:A:281:ASP:O	1:A:285:GLU:HB2	0.40	2.17	7	2
1:A:109:PHE:O	1:A:109:PHE:CD1	0.40	2.75	1	1
1:A:126:TYR:CD1	1:A:126:TYR:N	0.40	2.88	16	1
1:A:165:GLN:O	1:A:165:GLN:NE2	0.40	2.54	16	1
1:A:253:THR:N	1:A:270:PHE:O	0.40	2.54	11	1
1:A:206:LEU:HD23	1:A:206:LEU:N	0.40	2.31	19	1
1:A:155:THR:CG2	1:A:258:GLU:O	0.40	2.69	4	1
1:A:155:THR:OG1	1:A:257:LEU:CD2	0.40	2.70	35	1
1:A:162:ILE:HD11	1:A:252:LEU:HD11	0.40	1.94	33	1
1:A:239:ASN:ND2	1:A:242:CYS:N	0.40	2.70	12	1
1:A:246:MET:CG	1:A:249:ARG:O	0.40	2.69	36	1
1:A:164:LYS:HD2	1:A:168:HIS:CD2	0.40	2.51	17	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	175/204 (86%)	149±3 (85±2%)	21±3 (12±1%)	6±2 (3±1%)	8	39
All	All	6300/7344 (86%)	5349 (85%)	746 (12%)	205 (3%)	8	39

All 27 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	222	PRO	28
1	A	242	CYS	25
1	A	207	ASP	16
1	A	228	ASP	13
1	A	154	GLY	11
1	A	275	CYS	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	153	PRO	10
1	A	103	TYR	8
1	A	202	ARG	8
1	A	98	PRO	7
1	A	100	GLN	7
1	A	99	SER	6
1	A	104	GLN	6
1	A	245	GLY	6
1	A	238	CYS	6
1	A	165	GLN	5
1	A	168	HIS	5
1	A	105	GLY	5
1	A	152	PRO	4
1	A	116	SER	4
1	A	151	PRO	3
1	A	123	THR	3
1	A	243	MET	2
1	A	117	GLY	2
1	A	244	GLY	2
1	A	266	GLY	1
1	A	171	GLU	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	158/183 (86%)	113±4 (71±2%)	45±4 (29±2%)	2	19
All	All	5688/6588 (86%)	4058 (71%)	1630 (29%)	2	19

All 129 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	257	LEU	35
1	A	220	TYR	35
1	A	274	VAL	34
1	A	103	TYR	32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	131	ASN	32
1	A	202	ARG	32
1	A	238	CYS	31
1	A	156	ARG	30
1	A	175	ARG	30
1	A	109	PHE	27
1	A	280	ARG	26
1	A	282	ARG	25
1	A	194	LEU	25
1	A	237	MET	25
1	A	139	LYS	24
1	A	286	GLU	24
1	A	113	PHE	24
1	A	133	MET	23
1	A	209	ARG	23
1	A	267	ARG	23
1	A	164	LYS	22
1	A	283	ARG	21
1	A	163	TYR	21
1	A	165	GLN	20
1	A	181	ARG	20
1	A	253	THR	19
1	A	155	THR	19
1	A	201	LEU	19
1	A	246	MET	18
1	A	123	THR	18
1	A	271	GLU	17
1	A	230	THR	17
1	A	261	SER	17
1	A	248	ARG	17
1	A	273	ARG	17
1	A	241	SER	17
1	A	99	SER	16
1	A	204	GLU	16
1	A	285	GLU	16
1	A	198	GLU	16
1	A	231	THR	15
1	A	149	SER	15
1	A	101	LYS	15
1	A	265	LEU	15
1	A	193	HIS	15
1	A	110	ARG	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	169	MET	15
1	A	208	ASP	14
1	A	125	THR	14
1	A	167	GLN	14
1	A	116	SER	14
1	A	228	ASP	14
1	A	243	MET	14
1	A	180	GLU	14
1	A	213	ARG	14
1	A	196	ARG	13
1	A	277	CYS	13
1	A	240	SER	13
1	A	160	MET	12
1	A	114	LEU	12
1	A	192	GLN	12
1	A	166	SER	12
1	A	100	GLN	12
1	A	158	ARG	12
1	A	171	GLU	12
1	A	252	LEU	12
1	A	144	GLN	12
1	A	147	VAL	12
1	A	104	GLN	11
1	A	170	THR	11
1	A	127	SER	11
1	A	268	ASN	11
1	A	264	LEU	11
1	A	215	SER	11
1	A	287	GLU	10
1	A	242	CYS	10
1	A	150	THR	10
1	A	140	THR	10
1	A	136	GLN	10
1	A	249	ARG	10
1	A	214	HIS	9
1	A	130	LEU	9
1	A	132	LYS	9
1	A	275	CYS	9
1	A	269	SER	9
1	A	239	ASN	8
1	A	259	ASP	8
1	A	211	THR	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	135	CYS	8
1	A	126	TYR	7
1	A	281	ASP	7
1	A	263	ASN	7
1	A	174	ARG	7
1	A	124	CYS	7
1	A	260	SER	6
1	A	258	GLU	6
1	A	200	ASN	5
1	A	162	ILE	5
1	A	168	HIS	5
1	A	210	ASN	5
1	A	197	VAL	4
1	A	106	SER	4
1	A	111	LEU	4
1	A	206	LEU	4
1	A	203	VAL	4
1	A	254	ILE	3
1	A	137	LEU	3
1	A	148	ASP	3
1	A	173	VAL	3
1	A	118	THR	3
1	A	102	THR	3
1	A	115	HIS	3
1	A	221	GLU	2
1	A	247	ASN	2
1	A	270	PHE	2
1	A	251	ILE	1
1	A	179	HIS	1
1	A	217	VAL	1
1	A	218	VAL	1
1	A	212	PHE	1
1	A	235	ASN	1
1	A	232	ILE	1
1	A	207	ASP	1
1	A	255	ILE	1
1	A	145	LEU	1
1	A	256	THR	1
1	A	233	HIS	1
1	A	141	CYS	1
1	A	178	HIS	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](#)

Of 1 ligands modelled in this entry, 1 is monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided