



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 12, 2017 – 10:26 pm GMT

PDB ID : 2JUL  
Title : NMR Structure of DREAM  
Authors : Ames, J.  
Deposited on : 2007-08-30

This is a Full wwPDB NMR Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.

We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto: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

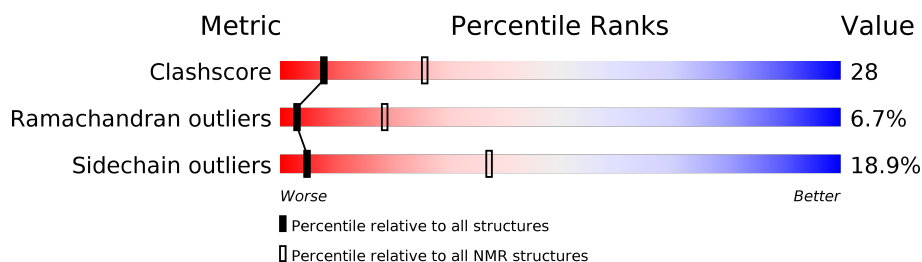
# 1 Overall quality at a glance

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  $\geq 3$ , 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	256	

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 15 models. Model 3 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *closest to the average*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:79-A:199, A:210-A:256 (168)	0.87	3

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

### 3 Entry composition [i](#)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2905 atoms, of which 1425 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Calsenilin.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	181	Total	C	H	N	O	S	0
			2903	944	1425	241	283	10	

- Molecule 2 is CALCIUM ION (three-letter code: CA) (formula: Ca).

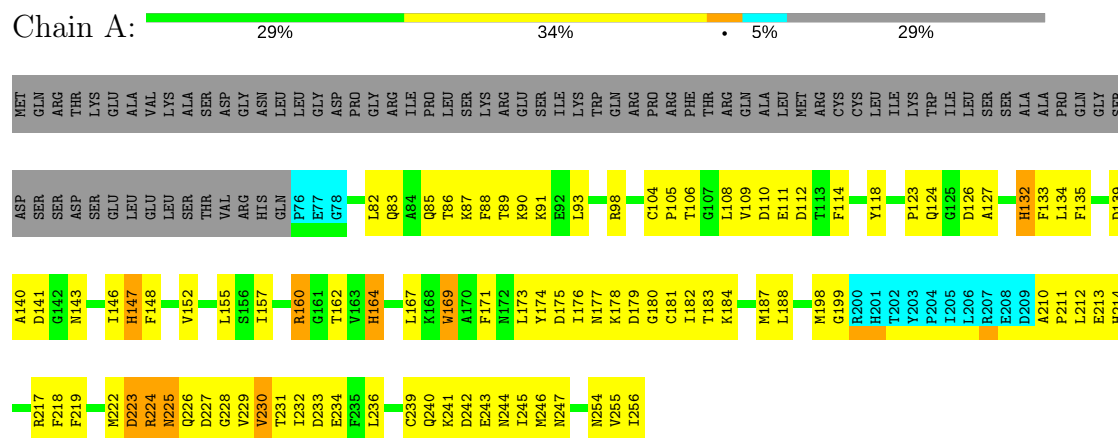
Mol	Chain	Residues	Atoms	
2	A	2	Total	Ca
			2	2

## 4 Residue-property plots

### 4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA 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: Calsenilin

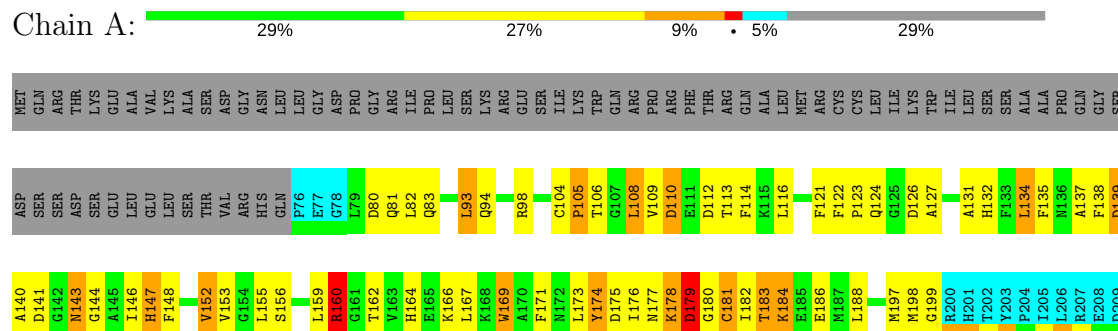


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

#### 4.2.1 Score per residue for model 1

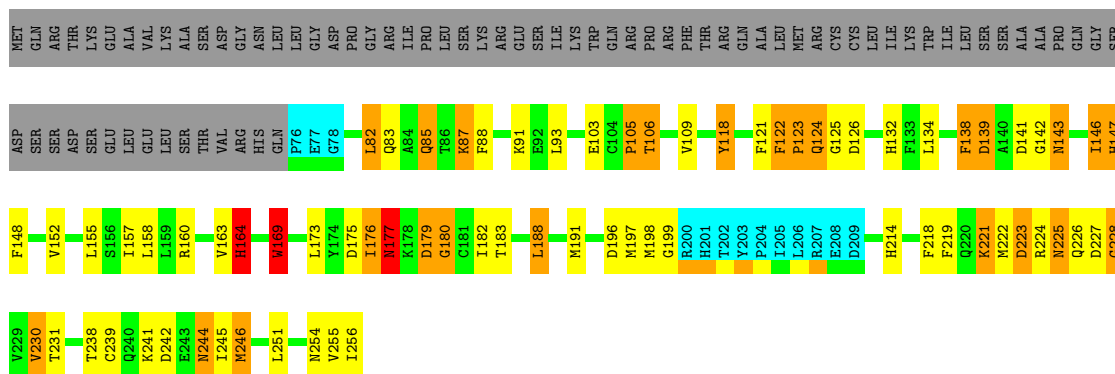
- Molecule 1: Calsenilin





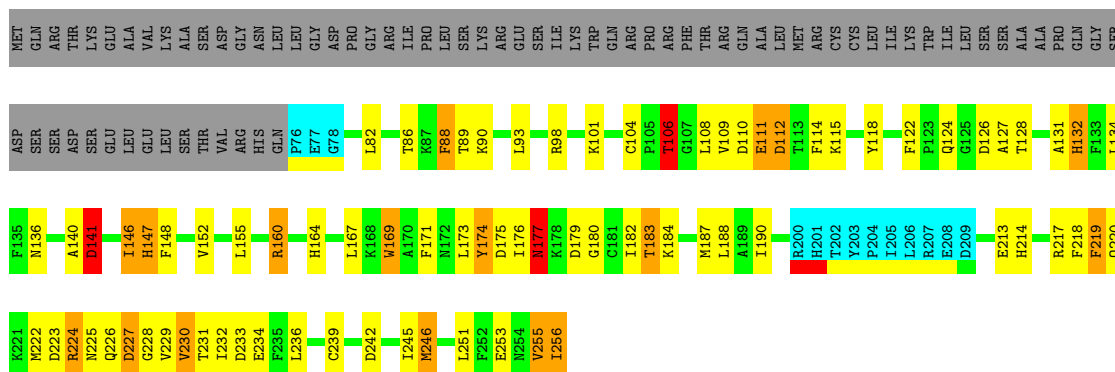
#### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Calsenilin



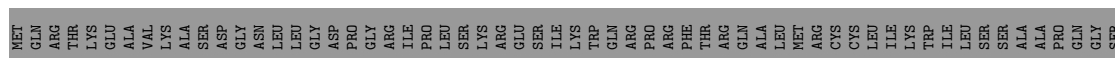
#### 4.2.3 Score per residue for model 3 (medoid)

- Molecule 1: Calsenilin

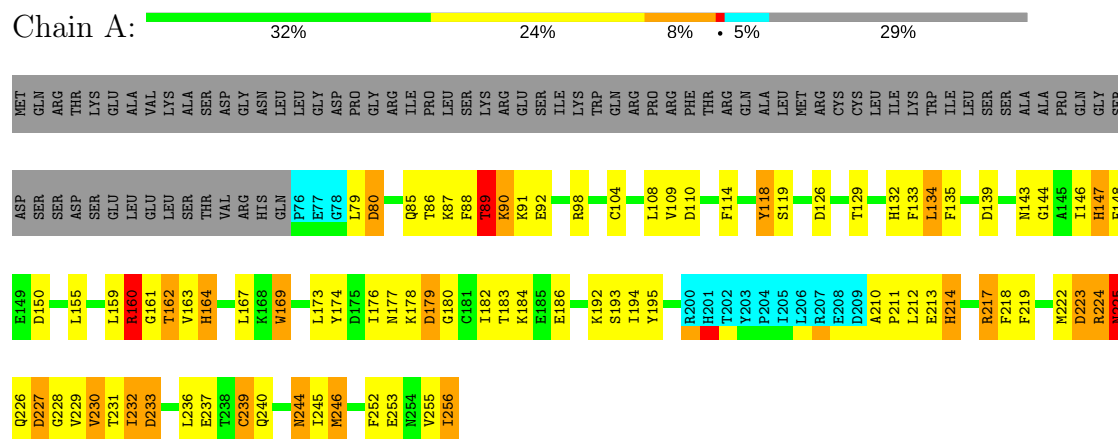


#### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Calsenilin

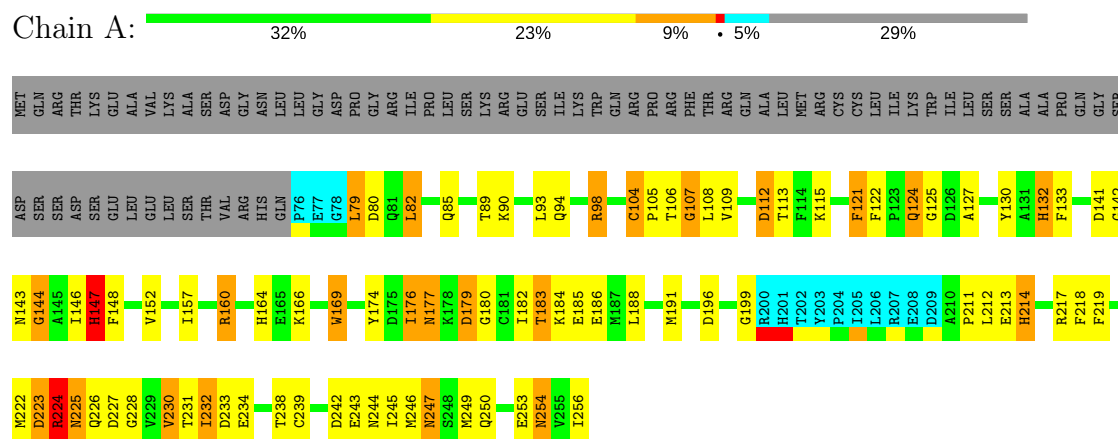






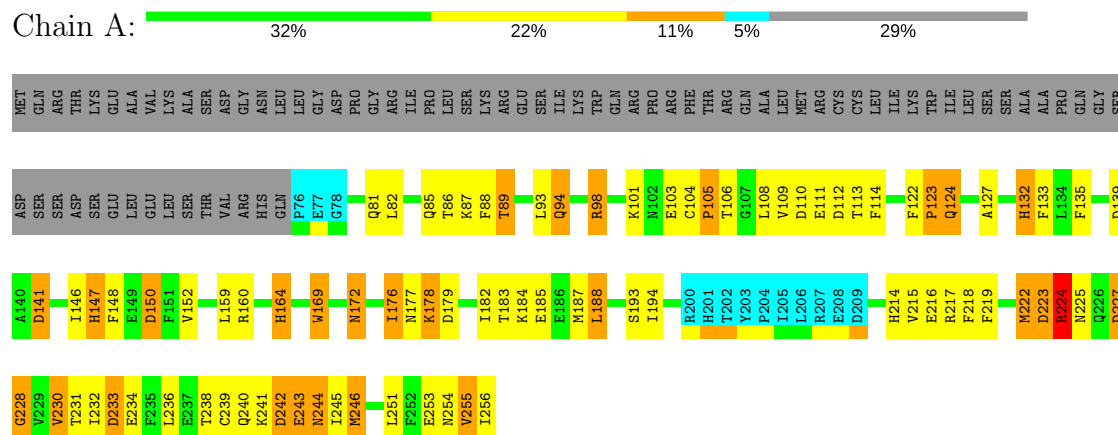
#### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Calsenilin



#### 4.2.9 Score per residue for model 9

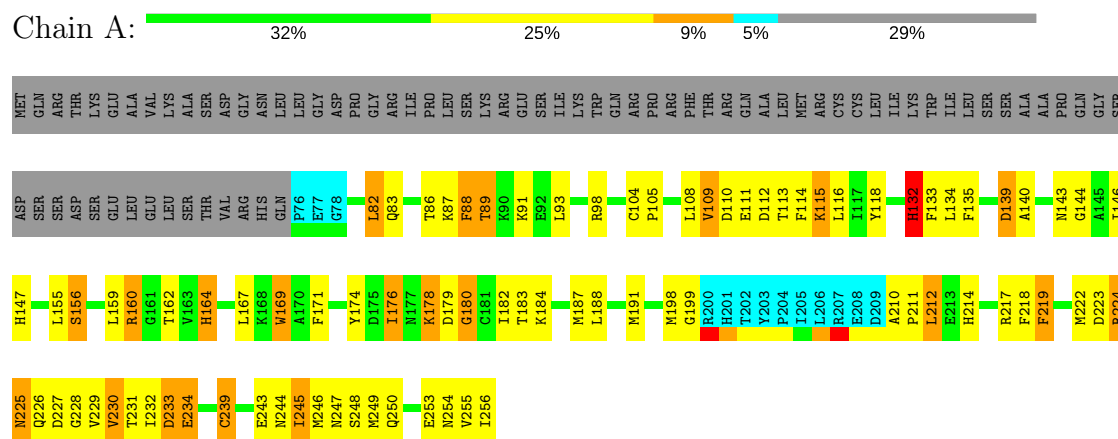
- Molecule 1: Calsenilin





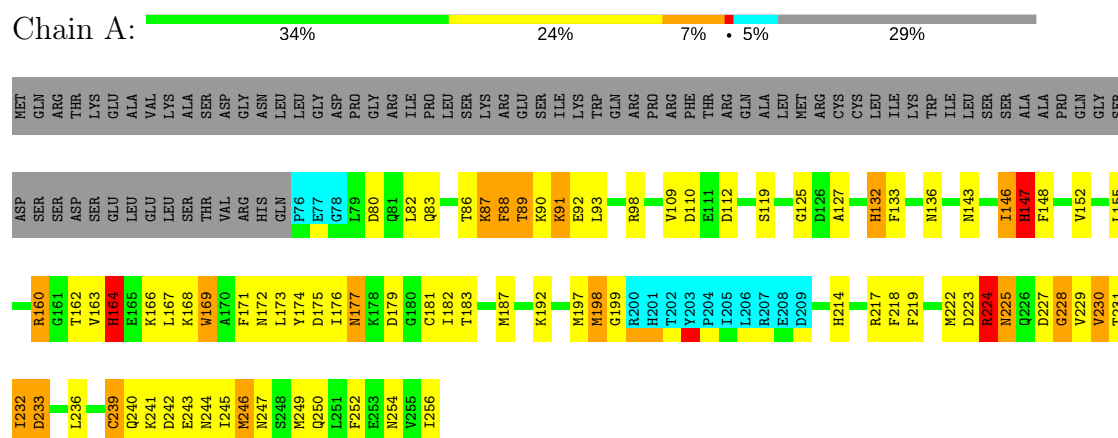
### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Calsenilin



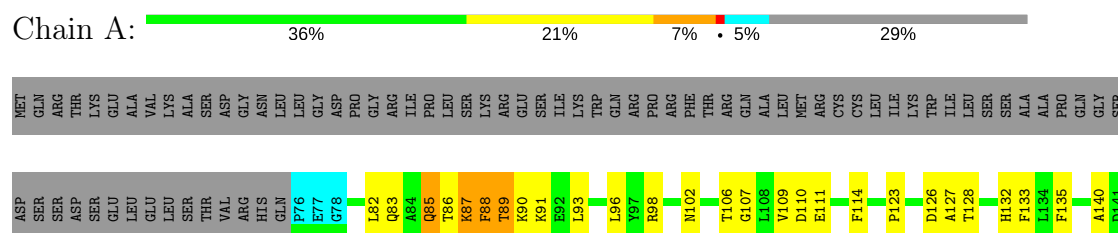
### 4.2.11 Score per residue for model 11

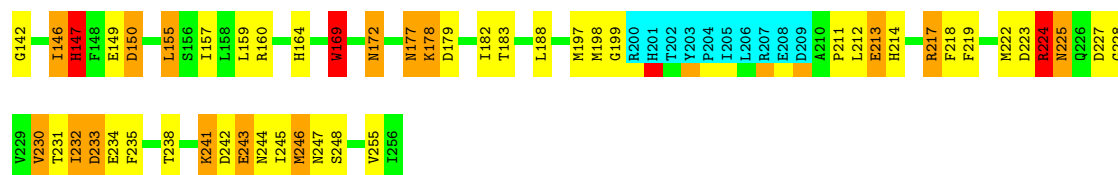
- Molecule 1: Calsenilin



### 4.2.12 Score per residue for model 12

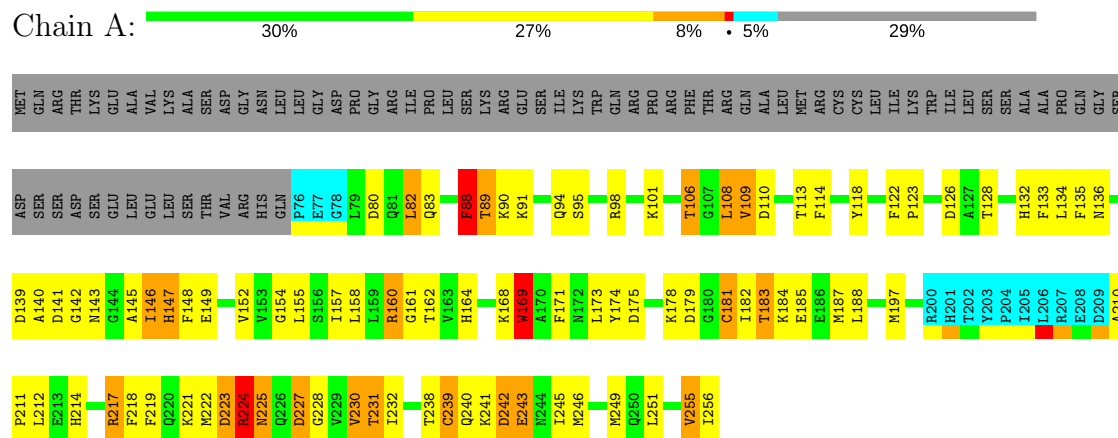
- Molecule 1: Calsenilin





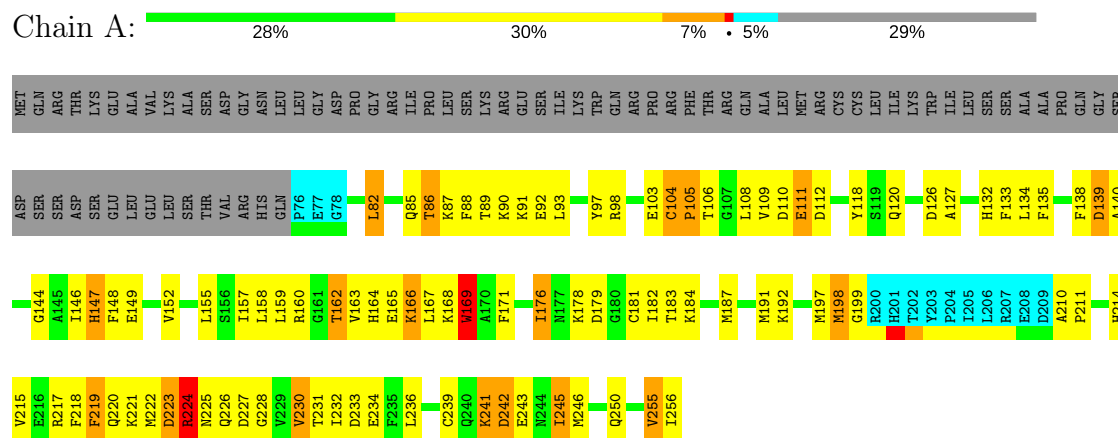
#### 4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Calsenilin



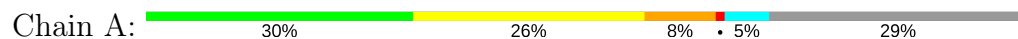
#### 4.2.14 Score per residue for model 14

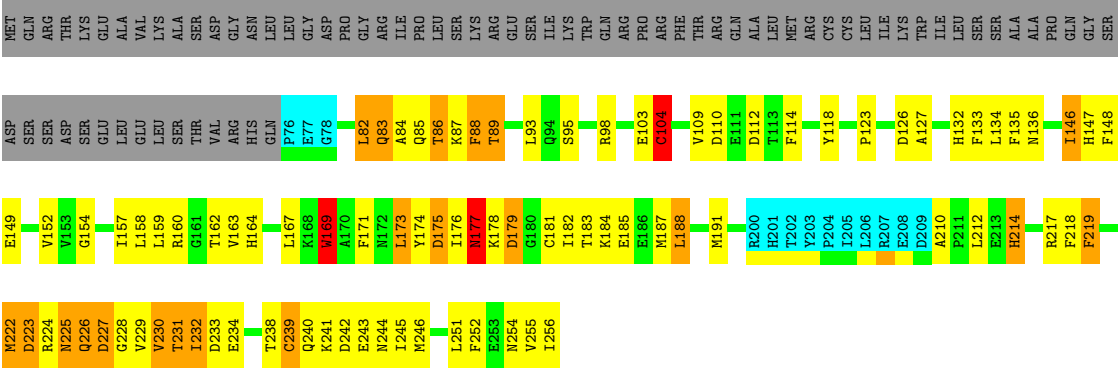
- Molecule 1: Calsenilin



#### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Calsenilin





## 5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

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

Of the 50 calculated structures, 15 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	3.1

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: CA

The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with  $|Z| > 5$  is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the (average) root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.02±0.00	5±0/1395 (0.4±0.0%)	1.13±0.00	5±0/1876 (0.3±0.0%)
All	All	1.02	75/20925 (0.4%)	1.13	75/28140 (0.3%)

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	3.7±0.6
All	All	0	56

All unique bond outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	169	TRP	CG-CD2	-6.81	1.32	1.43	13	15
1	A	147	HIS	CG-ND1	-6.21	1.25	1.38	14	15
1	A	164	HIS	CG-ND1	-6.21	1.25	1.38	7	15
1	A	132	HIS	CG-ND1	-6.18	1.25	1.38	7	15
1	A	214	HIS	CG-ND1	-6.17	1.25	1.38	12	15

All unique angle outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	169	TRP	NE1-CE2-CZ2	8.50	139.75	130.40	13	15
1	A	169	TRP	NE1-CE2-CD2	-7.22	100.08	107.30	13	15
1	A	169	TRP	CG-CD1-NE1	-6.35	103.75	110.10	13	15

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	169	TRP	CD1-CG-CD2	6.08	111.17	106.30	13	15
1	A	169	TRP	CD1-NE1-CE2	5.84	114.26	109.00	9	15

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	224	ARG	Sidechain	15
1	A	160	ARG	Sidechain	14
1	A	217	ARG	Sidechain	14
1	A	98	ARG	Sidechain	13

## 6.2 Too-close contacts [i](#)

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	1367	1321	1321	76±11
All	All	20535	19815	19814	1140

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 28.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:176:ILE:H	1:A:176:ILE:HD12	0.94	1.17	10	1
1:A:176:ILE:N	1:A:176:ILE:HD12	0.88	1.83	10	2
1:A:245:ILE:HG23	1:A:246:MET:H	0.82	1.34	4	3
1:A:106:THR:HG22	1:A:107:GLY:H	0.79	1.35	8	1
1:A:104:CYS:N	1:A:105:PRO:CD	0.79	2.46	9	3
1:A:147:HIS:ND1	1:A:147:HIS:N	0.78	2.30	12	2
1:A:218:PHE:CE2	1:A:246:MET:SD	0.78	2.77	2	1
1:A:244:ASN:HD22	1:A:244:ASN:H	0.78	1.22	7	1
1:A:245:ILE:HG23	1:A:246:MET:N	0.77	1.93	2	12
1:A:218:PHE:CZ	1:A:246:MET:CE	0.76	2.68	2	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:173:LEU:HD13	1:A:173:LEU:C	0.76	2.00	13	1
1:A:222:MET:SD	1:A:238:THR:HG21	0.75	2.22	12	2
1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:HD22	0.75	1.41	7	1
1:A:108:LEU:C	1:A:108:LEU:HD12	0.75	2.02	10	1
1:A:148:PHE:O	1:A:152:VAL:HG23	0.75	1.80	13	6
1:A:218:PHE:CZ	1:A:246:MET:SD	0.74	2.80	2	1
1:A:108:LEU:CD1	1:A:147:HIS:CE1	0.74	2.70	14	1
1:A:88:PHE:CD1	1:A:88:PHE:N	0.73	2.57	11	1
1:A:244:ASN:H	1:A:244:ASN:ND2	0.73	1.81	7	2
1:A:244:ASN:N	1:A:244:ASN:ND2	0.73	2.34	7	1
1:A:182:ILE:HB	1:A:230:VAL:HG13	0.72	1.59	1	15
1:A:108:LEU:HD11	1:A:147:HIS:CE1	0.72	2.19	9	2
1:A:176:ILE:HD13	1:A:176:ILE:H	0.72	1.43	14	1
1:A:176:ILE:HD12	1:A:176:ILE:N	0.72	1.99	1	2
1:A:188:LEU:HD13	1:A:188:LEU:C	0.71	2.05	6	1
1:A:79:LEU:N	1:A:79:LEU:HD22	0.71	1.99	7	1
1:A:106:THR:HG22	1:A:107:GLY:N	0.70	2.01	8	1
1:A:108:LEU:H	1:A:108:LEU:HD13	0.70	1.45	4	1
1:A:108:LEU:CD1	1:A:108:LEU:N	0.70	2.54	4	1
1:A:238:THR:HG22	1:A:246:MET:SD	0.69	2.27	9	1
1:A:108:LEU:HD22	1:A:108:LEU:C	0.69	2.07	4	1
1:A:108:LEU:HD13	1:A:108:LEU:N	0.69	2.01	4	1
1:A:219:PHE:CE2	1:A:223:ASP:CG	0.69	2.66	1	2
1:A:182:ILE:CB	1:A:230:VAL:HG13	0.69	2.18	1	15
1:A:176:ILE:N	1:A:176:ILE:CD1	0.69	2.55	10	2
1:A:155:LEU:O	1:A:155:LEU:HD13	0.69	1.88	13	1
1:A:116:LEU:O	1:A:116:LEU:HD23	0.68	1.88	10	1
1:A:174:TYR:CZ	1:A:249:MET:SD	0.68	2.87	4	1
1:A:187:MET:SD	1:A:218:PHE:CD2	0.68	2.86	9	1
1:A:244:ASN:N	1:A:244:ASN:HD22	0.68	1.86	7	1
1:A:176:ILE:CD1	1:A:176:ILE:H	0.68	2.00	14	1
1:A:222:MET:SD	1:A:238:THR:CG2	0.68	2.81	12	2
1:A:244:ASN:HD22	1:A:245:ILE:H	0.68	1.32	7	1
1:A:147:HIS:CD2	1:A:148:PHE:H	0.67	2.06	7	1
1:A:225:ASN:ND2	1:A:227:ASP:CG	0.67	2.47	6	4
1:A:176:ILE:H	1:A:176:ILE:CD1	0.67	2.00	10	1
1:A:79:LEU:H	1:A:79:LEU:CD2	0.67	2.02	7	1
1:A:122:PHE:CE2	1:A:197:MET:SD	0.67	2.87	13	1
1:A:103:GLU:CD	1:A:113:THR:HG21	0.67	2.10	6	1
1:A:218:PHE:CE1	1:A:222:MET:CE	0.67	2.77	9	1
1:A:222:MET:SD	1:A:246:MET:CE	0.67	2.83	12	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:183:THR:OG1	1:A:229:VAL:HG12	0.67	1.88	5	2
1:A:239:CYS:SG	1:A:240:GLN:N	0.67	2.68	5	2
1:A:108:LEU:HD12	1:A:108:LEU:O	0.67	1.89	1	2
1:A:176:ILE:HD13	1:A:176:ILE:N	0.66	2.05	14	2
1:A:160:ARG:HH11	1:A:161:GLY:N	0.66	1.88	13	1
1:A:219:PHE:CZ	1:A:223:ASP:CG	0.66	2.69	10	2
1:A:147:HIS:N	1:A:147:HIS:ND1	0.66	2.42	4	2
1:A:227:ASP:OD1	1:A:228:GLY:N	0.66	2.29	5	12
1:A:174:TYR:CE2	1:A:249:MET:SD	0.66	2.88	4	1
1:A:245:ILE:CG2	1:A:246:MET:N	0.66	2.59	10	13
1:A:256:ILE:HD13	1:A:256:ILE:H	0.66	1.50	7	1
1:A:225:ASN:ND2	1:A:234:GLU:OE1	0.66	2.29	9	5
1:A:184:LYS:NZ	1:A:219:PHE:CD2	0.66	2.62	14	1
1:A:118:TYR:CE1	1:A:134:LEU:CD1	0.65	2.79	15	2
1:A:225:ASN:ND2	1:A:234:GLU:CD	0.65	2.49	12	5
1:A:256:ILE:N	1:A:256:ILE:HD13	0.65	2.06	3	1
1:A:86:THR:HG21	1:A:152:VAL:HG12	0.65	1.66	3	1
1:A:244:ASN:ND2	1:A:245:ILE:H	0.65	1.90	7	1
1:A:256:ILE:CD1	1:A:256:ILE:N	0.65	2.60	7	1
1:A:147:HIS:CG	1:A:148:PHE:H	0.64	2.11	1	2
1:A:223:ASP:C	1:A:225:ASN:ND2	0.64	2.51	8	1
1:A:219:PHE:CE1	1:A:223:ASP:OD2	0.64	2.51	10	1
1:A:222:MET:SD	1:A:246:MET:SD	0.64	2.96	12	1
1:A:255:VAL:O	1:A:255:VAL:HG22	0.64	1.92	14	1
1:A:255:VAL:HG13	1:A:255:VAL:O	0.64	1.93	3	1
1:A:256:ILE:N	1:A:256:ILE:CD1	0.64	2.61	3	2
1:A:198:MET:SD	1:A:199:GLY:N	0.64	2.70	14	1
1:A:245:ILE:CG2	1:A:246:MET:H	0.64	2.05	2	4
1:A:232:ILE:CG2	1:A:233:ASP:N	0.64	2.61	3	2
1:A:179:ASP:OD1	1:A:180:GLY:N	0.64	2.31	1	4
1:A:133:PHE:CD1	1:A:133:PHE:N	0.64	2.63	15	4
1:A:162:THR:HG22	1:A:163:VAL:N	0.64	2.08	11	2
1:A:219:PHE:CD1	1:A:223:ASP:OD2	0.63	2.50	10	1
1:A:176:ILE:CD1	1:A:176:ILE:N	0.63	2.61	6	2
1:A:225:ASN:ND2	1:A:234:GLU:OE2	0.63	2.32	6	5
1:A:177:ASN:ND2	1:A:179:ASP:OD1	0.63	2.32	8	1
1:A:225:ASN:ND2	1:A:227:ASP:OD1	0.63	2.32	9	3
1:A:147:HIS:CG	1:A:148:PHE:N	0.62	2.66	13	2
1:A:225:ASN:ND2	1:A:227:ASP:OD2	0.62	2.32	9	3
1:A:227:ASP:N	1:A:227:ASP:OD1	0.62	2.32	4	1
1:A:224:ARG:N	1:A:234:GLU:OE1	0.62	2.32	5	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:227:ASP:OD2	1:A:228:GLY:N	0.62	2.32	11	2
1:A:148:PHE:CE2	1:A:152:VAL:CG2	0.62	2.83	2	2
1:A:187:MET:CE	1:A:218:PHE:CD1	0.62	2.83	11	5
1:A:149:GLU:OE1	1:A:150:ASP:N	0.62	2.33	6	1
1:A:222:MET:SD	1:A:238:THR:CB	0.61	2.88	8	5
1:A:118:TYR:CZ	1:A:134:LEU:CD1	0.61	2.82	10	3
1:A:174:TYR:OH	1:A:249:MET:SD	0.61	2.58	5	1
1:A:222:MET:SD	1:A:238:THR:OG1	0.61	2.58	8	3
1:A:184:LYS:N	1:A:219:PHE:CE1	0.61	2.68	6	6
1:A:160:ARG:NH1	1:A:161:GLY:CA	0.61	2.63	13	1
1:A:86:THR:HG21	1:A:152:VAL:CG1	0.61	2.25	3	1
1:A:179:ASP:CG	1:A:180:GLY:N	0.61	2.53	5	3
1:A:256:ILE:HD12	1:A:256:ILE:N	0.61	2.10	1	1
1:A:133:PHE:N	1:A:133:PHE:CD1	0.61	2.68	4	8
1:A:191:MET:SD	1:A:215:VAL:HG22	0.61	2.35	14	1
1:A:139:ASP:OD1	1:A:139:ASP:N	0.61	2.33	2	2
1:A:212:LEU:CD2	1:A:212:LEU:N	0.61	2.64	6	1
1:A:245:ILE:CG2	1:A:246:MET:SD	0.61	2.89	9	1
1:A:256:ILE:CD1	1:A:256:ILE:H	0.61	2.09	7	1
1:A:127:ALA:HB2	1:A:197:MET:SD	0.61	2.36	14	1
1:A:224:ARG:N	1:A:234:GLU:OE2	0.61	2.34	9	1
1:A:171:PHE:CD1	1:A:171:PHE:C	0.60	2.74	5	6
1:A:225:ASN:HD22	1:A:225:ASN:N	0.60	1.92	13	1
1:A:223:ASP:CG	1:A:224:ARG:N	0.60	2.55	3	4
1:A:91:LYS:CG	1:A:92:GLU:N	0.60	2.64	11	1
1:A:89:THR:OG1	1:A:90:LYS:N	0.60	2.34	11	2
1:A:233:ASP:OD1	1:A:234:GLU:N	0.59	2.35	3	1
1:A:111:GLU:OE2	1:A:132:HIS:CD2	0.59	2.55	9	1
1:A:163:VAL:HG13	1:A:164:HIS:N	0.59	2.11	2	1
1:A:159:LEU:C	1:A:159:LEU:HD23	0.59	2.17	1	1
1:A:141:ASP:OD1	1:A:141:ASP:N	0.59	2.35	2	3
1:A:179:ASP:OD1	1:A:181:CYS:SG	0.59	2.61	15	1
1:A:104:CYS:N	1:A:105:PRO:HD2	0.59	2.12	9	3
1:A:139:ASP:OD1	1:A:140:ALA:N	0.59	2.35	1	2
1:A:225:ASN:HD21	1:A:227:ASP:CG	0.59	2.00	6	2
1:A:110:ASP:OD1	1:A:111:GLU:N	0.59	2.36	5	2
1:A:242:ASP:OD1	1:A:243:GLU:N	0.59	2.35	4	3
1:A:179:ASP:OD1	1:A:181:CYS:N	0.59	2.31	1	1
1:A:110:ASP:OD1	1:A:110:ASP:N	0.59	2.33	3	1
1:A:124:GLN:CD	1:A:125:GLY:H	0.58	2.01	6	1
1:A:225:ASN:HD21	1:A:234:GLU:CD	0.58	2.01	1	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:242:ASP:OD2	1:A:245:ILE:N	0.58	2.36	1	1
1:A:223:ASP:CG	1:A:224:ARG:H	0.58	2.02	12	4
1:A:226:GLN:CD	1:A:226:GLN:N	0.58	2.57	3	2
1:A:118:TYR:OH	1:A:134:LEU:CD1	0.58	2.52	7	1
1:A:232:ILE:HG23	1:A:233:ASP:N	0.58	2.13	3	2
1:A:213:GLU:CG	1:A:214:HIS:N	0.58	2.66	7	1
1:A:176:ILE:CG1	1:A:177:ASN:N	0.58	2.66	5	2
1:A:177:ASN:ND2	1:A:177:ASN:N	0.58	2.48	3	1
1:A:165:GLU:N	1:A:165:GLU:CD	0.58	2.57	14	1
1:A:256:ILE:HD13	1:A:256:ILE:N	0.58	2.13	7	1
1:A:245:ILE:HG22	1:A:246:MET:N	0.58	2.12	1	2
1:A:111:GLU:OE2	1:A:132:HIS:ND1	0.58	2.37	10	1
1:A:225:ASN:ND2	1:A:225:ASN:N	0.58	2.52	13	3
1:A:162:THR:OG1	1:A:163:VAL:N	0.57	2.33	7	2
1:A:104:CYS:O	1:A:106:THR:HG22	0.57	2.00	3	1
1:A:182:ILE:HD12	1:A:230:VAL:HG22	0.57	1.75	15	7
1:A:179:ASP:N	1:A:179:ASP:OD1	0.57	2.35	14	1
1:A:222:MET:SD	1:A:230:VAL:CG2	0.57	2.92	10	3
1:A:218:PHE:CE2	1:A:246:MET:CE	0.57	2.88	6	6
1:A:241:LYS:O	1:A:243:GLU:N	0.57	2.38	13	4
1:A:254:ASN:C	1:A:254:ASN:HD22	0.57	2.03	8	1
1:A:182:ILE:O	1:A:229:VAL:HG13	0.57	2.00	15	1
1:A:93:LEU:O	1:A:93:LEU:HD23	0.57	1.99	8	3
1:A:160:ARG:C	1:A:160:ARG:HE	0.57	2.03	7	1
1:A:173:LEU:CD1	1:A:173:LEU:C	0.57	2.73	13	1
1:A:167:LEU:HD13	1:A:239:CYS:SG	0.56	2.40	15	6
1:A:217:ARG:CZ	1:A:220:GLN:HE21	0.56	2.14	6	1
1:A:108:LEU:CD1	1:A:147:HIS:NE2	0.56	2.68	14	1
1:A:247:ASN:ND2	1:A:247:ASN:C	0.56	2.59	8	1
1:A:174:TYR:CD1	1:A:174:TYR:N	0.56	2.71	1	4
1:A:155:LEU:HD13	1:A:155:LEU:C	0.56	2.21	13	1
1:A:122:PHE:C	1:A:124:GLN:H	0.56	2.03	2	3
1:A:85:GLN:C	1:A:87:LYS:H	0.56	2.04	7	1
1:A:242:ASP:OD1	1:A:242:ASP:N	0.56	2.36	2	1
1:A:231:THR:O	1:A:233:ASP:N	0.56	2.39	8	9
1:A:142:GLY:C	1:A:143:ASN:ND2	0.55	2.59	13	1
1:A:226:GLN:O	1:A:228:GLY:N	0.55	2.38	15	2
1:A:83:GLN:NE2	1:A:83:GLN:O	0.55	2.39	15	1
1:A:255:VAL:HG23	1:A:256:ILE:H	0.55	1.60	4	1
1:A:182:ILE:HG22	1:A:183:THR:N	0.55	2.17	6	15
1:A:110:ASP:N	1:A:110:ASP:OD1	0.55	2.39	1	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:254:ASN:N	1:A:254:ASN:HD22	0.55	1.97	10	1
1:A:103:GLU:C	1:A:104:CYS:SG	0.55	2.84	5	3
1:A:103:GLU:OE2	1:A:113:THR:HG21	0.55	2.00	6	1
1:A:231:THR:C	1:A:233:ASP:N	0.55	2.60	8	8
1:A:241:LYS:C	1:A:243:GLU:H	0.55	2.04	13	2
1:A:244:ASN:HD22	1:A:244:ASN:N	0.55	2.00	6	1
1:A:106:THR:CG2	1:A:107:GLY:H	0.55	2.11	8	1
1:A:121:PHE:O	1:A:122:PHE:CG	0.55	2.60	8	1
1:A:176:ILE:CG2	1:A:177:ASN:ND2	0.55	2.70	7	1
1:A:225:ASN:C	1:A:225:ASN:HD22	0.55	2.05	11	2
1:A:129:THR:HG22	1:A:133:PHE:CZ	0.55	2.36	4	2
1:A:124:GLN:CD	1:A:125:GLY:N	0.55	2.60	6	1
1:A:182:ILE:CG2	1:A:183:THR:N	0.54	2.70	6	15
1:A:79:LEU:N	1:A:79:LEU:CD2	0.54	2.67	7	1
1:A:225:ASN:ND2	1:A:225:ASN:O	0.54	2.40	13	1
1:A:177:ASN:C	1:A:177:ASN:ND2	0.54	2.60	15	1
1:A:164:HIS:HD1	1:A:164:HIS:C	0.54	2.04	11	1
1:A:172:ASN:C	1:A:172:ASN:HD22	0.54	2.04	12	1
1:A:182:ILE:CG2	1:A:230:VAL:HG13	0.54	2.33	1	10
1:A:126:ASP:O	1:A:127:ALA:HB3	0.54	2.01	14	4
1:A:218:PHE:CE1	1:A:222:MET:HE2	0.54	2.36	9	1
1:A:244:ASN:HD22	1:A:245:ILE:N	0.54	2.01	7	2
1:A:163:VAL:CG1	1:A:164:HIS:N	0.54	2.70	2	2
1:A:160:ARG:NH1	1:A:161:GLY:N	0.54	2.56	13	1
1:A:159:LEU:HD23	1:A:159:LEU:C	0.54	2.24	10	1
1:A:88:PHE:C	1:A:89:THR:HG22	0.54	2.23	7	1
1:A:249:MET:SD	1:A:249:MET:C	0.54	2.86	13	1
1:A:219:PHE:CE2	1:A:223:ASP:OD2	0.54	2.61	1	1
1:A:106:THR:CG2	1:A:107:GLY:N	0.54	2.71	8	2
1:A:179:ASP:CG	1:A:180:GLY:H	0.54	2.06	10	2
1:A:222:MET:SD	1:A:230:VAL:HG21	0.53	2.43	1	4
1:A:89:THR:O	1:A:91:LYS:N	0.53	2.41	7	5
1:A:223:ASP:O	1:A:225:ASN:ND2	0.53	2.41	13	3
1:A:225:ASN:C	1:A:227:ASP:H	0.53	2.06	8	3
1:A:160:ARG:C	1:A:160:ARG:NE	0.53	2.62	7	1
1:A:179:ASP:CG	1:A:181:CYS:SG	0.53	2.87	14	2
1:A:149:GLU:CG	1:A:150:ASP:N	0.53	2.71	12	1
1:A:111:GLU:OE2	1:A:132:HIS:CE1	0.53	2.62	4	2
1:A:223:ASP:O	1:A:225:ASN:N	0.53	2.42	13	3
1:A:255:VAL:O	1:A:255:VAL:HG13	0.53	2.02	7	1
1:A:157:ILE:HG21	1:A:169:TRP:CD1	0.53	2.38	13	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:CYS:C	1:A:106:THR:H	0.53	2.06	5	2
1:A:158:LEU:HD11	1:A:169:TRP:CZ3	0.53	2.38	13	1
1:A:218:PHE:CE2	1:A:246:MET:HE1	0.53	2.38	6	1
1:A:149:GLU:CD	1:A:150:ASP:N	0.53	2.62	12	1
1:A:133:PHE:CE1	1:A:176:ILE:HD12	0.53	2.39	4	1
1:A:179:ASP:OD2	1:A:181:CYS:SG	0.53	2.67	14	3
1:A:212:LEU:N	1:A:212:LEU:HD22	0.53	2.18	6	1
1:A:122:PHE:O	1:A:124:GLN:N	0.53	2.41	2	1
1:A:85:GLN:O	1:A:87:LYS:N	0.53	2.42	14	3
1:A:197:MET:O	1:A:199:GLY:N	0.53	2.42	12	3
1:A:83:GLN:NE2	1:A:88:PHE:O	0.53	2.41	13	2
1:A:224:ARG:C	1:A:225:ASN:ND2	0.53	2.62	8	1
1:A:210:ALA:C	1:A:212:LEU:H	0.53	2.06	13	6
1:A:193:SER:OG	1:A:194:ILE:N	0.53	2.41	7	2
1:A:162:THR:HG23	1:A:163:VAL:N	0.53	2.18	7	1
1:A:108:LEU:HD22	1:A:108:LEU:O	0.52	2.04	4	1
1:A:148:PHE:CE2	1:A:152:VAL:HG21	0.52	2.39	8	2
1:A:187:MET:HG2	1:A:215:VAL:HG22	0.52	1.79	9	1
1:A:96:LEU:HD21	1:A:155:LEU:HG	0.52	1.80	12	1
1:A:108:LEU:C	1:A:108:LEU:CD1	0.52	2.75	10	1
1:A:222:MET:O	1:A:224:ARG:N	0.52	2.42	7	4
1:A:242:ASP:O	1:A:244:ASN:N	0.52	2.42	12	3
1:A:224:ARG:C	1:A:224:ARG:CD	0.52	2.78	6	1
1:A:179:ASP:OD2	1:A:181:CYS:N	0.52	2.39	5	1
1:A:83:GLN:CD	1:A:83:GLN:C	0.52	2.68	15	2
1:A:242:ASP:CG	1:A:243:GLU:N	0.52	2.62	1	1
1:A:210:ALA:O	1:A:212:LEU:N	0.52	2.42	13	2
1:A:121:PHE:CG	1:A:121:PHE:O	0.52	2.61	1	1
1:A:253:GLU:O	1:A:255:VAL:N	0.52	2.43	9	1
1:A:223:ASP:C	1:A:234:GLU:OE2	0.52	2.48	9	1
1:A:110:ASP:O	1:A:112:ASP:N	0.52	2.42	14	2
1:A:256:ILE:O	1:A:256:ILE:HG23	0.52	2.03	8	1
1:A:177:ASN:HD21	1:A:186:GLU:CD	0.52	2.08	7	1
1:A:142:GLY:O	1:A:144:GLY:N	0.52	2.42	8	1
1:A:243:GLU:C	1:A:245:ILE:H	0.52	2.09	15	1
1:A:83:GLN:NE2	1:A:83:GLN:C	0.52	2.62	15	1
1:A:248:SER:OG	1:A:249:MET:N	0.52	2.43	10	1
1:A:253:GLU:C	1:A:255:VAL:N	0.52	2.63	9	2
1:A:173:LEU:O	1:A:175:ASP:N	0.52	2.42	1	6
1:A:143:ASN:OD1	1:A:144:GLY:N	0.52	2.42	1	1
1:A:183:THR:HG22	1:A:186:GLU:OE1	0.52	2.05	8	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:179:ASP:C	1:A:181:CYS:H	0.52	2.09	11	1
1:A:222:MET:SD	1:A:234:GLU:O	0.52	2.68	5	4
1:A:156:SER:OG	1:A:160:ARG:NH1	0.52	2.43	6	1
1:A:224:ARG:C	1:A:225:ASN:CG	0.51	2.68	10	2
1:A:227:ASP:C	1:A:227:ASP:OD1	0.51	2.49	13	3
1:A:138:PHE:C	1:A:140:ALA:H	0.51	2.08	6	1
1:A:122:PHE:C	1:A:124:GLN:N	0.51	2.64	2	2
1:A:256:ILE:O	1:A:256:ILE:HG22	0.51	2.05	5	1
1:A:177:ASN:N	1:A:177:ASN:OD1	0.51	2.42	12	3
1:A:108:LEU:O	1:A:108:LEU:HD12	0.51	2.04	13	2
1:A:225:ASN:C	1:A:227:ASP:N	0.51	2.64	8	4
1:A:110:ASP:C	1:A:112:ASP:N	0.51	2.64	14	2
1:A:197:MET:C	1:A:199:GLY:H	0.51	2.08	11	1
1:A:94:GLN:NE2	1:A:94:GLN:O	0.51	2.44	9	1
1:A:82:LEU:CD1	1:A:86:THR:OG1	0.51	2.59	4	2
1:A:224:ARG:NH2	1:A:237:GLU:OE2	0.51	2.40	7	1
1:A:162:THR:CG2	1:A:163:VAL:N	0.51	2.73	11	2
1:A:138:PHE:C	1:A:140:ALA:N	0.51	2.64	6	1
1:A:83:GLN:O	1:A:87:LYS:N	0.51	2.42	2	1
1:A:85:GLN:O	1:A:85:GLN:NE2	0.51	2.44	2	1
1:A:139:ASP:CG	1:A:140:ALA:N	0.51	2.63	14	1
1:A:226:GLN:N	1:A:226:GLN:CD	0.51	2.63	2	1
1:A:177:ASN:ND2	1:A:177:ASN:O	0.51	2.43	4	1
1:A:218:PHE:CZ	1:A:246:MET:HE3	0.51	2.40	2	3
1:A:138:PHE:O	1:A:140:ALA:N	0.51	2.43	6	1
1:A:183:THR:O	1:A:185:GLU:N	0.51	2.43	8	1
1:A:243:GLU:OE2	1:A:247:ASN:ND2	0.51	2.43	12	1
1:A:87:LYS:O	1:A:88:PHE:CD2	0.51	2.64	4	2
1:A:249:MET:SD	1:A:249:MET:O	0.51	2.69	13	1
1:A:149:GLU:C	1:A:149:GLU:CD	0.51	2.69	12	1
1:A:219:PHE:CZ	1:A:223:ASP:OD1	0.50	2.64	10	2
1:A:213:GLU:CG	1:A:214:HIS:H	0.50	2.19	7	1
1:A:167:LEU:CD1	1:A:239:CYS:SG	0.50	3.00	10	3
1:A:249:MET:SD	1:A:253:GLU:OE2	0.50	2.69	10	1
1:A:158:LEU:N	1:A:158:LEU:HD12	0.50	2.21	15	1
1:A:240:GLN:C	1:A:242:ASP:H	0.50	2.08	15	2
1:A:225:ASN:CG	1:A:227:ASP:OD2	0.50	2.49	1	3
1:A:173:LEU:C	1:A:175:ASP:H	0.50	2.08	3	2
1:A:171:PHE:CZ	1:A:232:ILE:N	0.50	2.79	6	1
1:A:106:THR:O	1:A:108:LEU:N	0.50	2.43	8	1
1:A:109:VAL:CG1	1:A:146:ILE:HD12	0.50	2.36	2	4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CD	0.50	2.64	3	1
1:A:176:ILE:HG23	1:A:177:ASN:ND2	0.50	2.21	7	1
1:A:82:LEU:HD23	1:A:86:THR:OG1	0.50	2.06	15	1
1:A:225:ASN:O	1:A:227:ASP:N	0.50	2.45	8	3
1:A:218:PHE:C	1:A:218:PHE:CD1	0.50	2.84	6	4
1:A:164:HIS:ND1	1:A:164:HIS:C	0.50	2.63	11	1
1:A:104:CYS:O	1:A:106:THR:N	0.50	2.45	5	2
1:A:141:ASP:N	1:A:141:ASP:OD1	0.50	2.44	8	2
1:A:238:THR:CG2	1:A:246:MET:SD	0.50	2.99	9	1
1:A:143:ASN:N	1:A:143:ASN:OD1	0.50	2.45	11	2
1:A:139:ASP:C	1:A:139:ASP:OD1	0.50	2.50	1	2
1:A:165:GLU:N	1:A:165:GLU:OE1	0.50	2.42	14	1
1:A:223:ASP:CA	1:A:234:GLU:OE1	0.50	2.60	14	1
1:A:157:ILE:O	1:A:166:LYS:NZ	0.50	2.44	8	1
1:A:156:SER:O	1:A:160:ARG:N	0.50	2.45	10	1
1:A:242:ASP:OD1	1:A:244:ASN:ND2	0.50	2.44	11	1
1:A:227:ASP:CG	1:A:228:GLY:H	0.50	2.07	15	2
1:A:225:ASN:CG	1:A:234:GLU:OE2	0.50	2.50	3	4
1:A:188:LEU:C	1:A:188:LEU:CD1	0.50	2.78	6	1
1:A:112:ASP:CG	1:A:113:THR:N	0.50	2.64	8	1
1:A:178:LYS:NZ	1:A:178:LYS:CB	0.50	2.75	12	1
1:A:138:PHE:C	1:A:139:ASP:OD1	0.49	2.51	4	1
1:A:89:THR:C	1:A:91:LYS:N	0.49	2.64	7	3
1:A:242:ASP:OD1	1:A:242:ASP:C	0.49	2.50	1	1
1:A:174:TYR:N	1:A:174:TYR:CD1	0.49	2.77	3	1
1:A:123:PRO:O	1:A:124:GLN:CB	0.49	2.59	2	1
1:A:249:MET:CG	1:A:253:GLU:OE2	0.49	2.60	10	1
1:A:217:ARG:CZ	1:A:220:GLN:NE2	0.49	2.75	6	1
1:A:125:GLY:O	1:A:127:ALA:N	0.49	2.43	5	2
1:A:227:ASP:OD1	1:A:227:ASP:C	0.49	2.50	6	3
1:A:183:THR:C	1:A:185:GLU:N	0.49	2.66	8	1
1:A:187:MET:HE2	1:A:218:PHE:CD1	0.49	2.43	15	2
1:A:127:ALA:O	1:A:131:ALA:N	0.49	2.43	3	2
1:A:168:LYS:O	1:A:172:ASN:ND2	0.49	2.46	11	1
1:A:187:MET:HE1	1:A:218:PHE:CD1	0.49	2.43	14	4
1:A:167:LEU:HD22	1:A:236:LEU:HD12	0.49	1.83	1	1
1:A:197:MET:C	1:A:199:GLY:N	0.49	2.65	11	1
1:A:115:LYS:NZ	1:A:128:THR:OG1	0.49	2.33	3	1
1:A:182:ILE:N	1:A:230:VAL:O	0.49	2.43	15	2
1:A:85:GLN:C	1:A:86:THR:OG1	0.49	2.51	15	1
1:A:242:ASP:C	1:A:243:GLU:OE1	0.49	2.51	4	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:236:LEU:HD12	1:A:240:GLN:HE21	0.49	1.68	7	1
1:A:236:LEU:O	1:A:240:GLN:CG	0.49	2.61	11	1
1:A:91:LYS:HG3	1:A:92:GLU:N	0.49	2.23	11	1
1:A:218:PHE:CZ	1:A:246:MET:HE1	0.49	2.43	6	1
1:A:216:GLU:C	1:A:216:GLU:OE1	0.49	2.51	9	1
1:A:139:ASP:OD1	1:A:139:ASP:C	0.49	2.51	10	1
1:A:170:ALA:O	1:A:174:TYR:CD2	0.48	2.66	4	2
1:A:239:CYS:SG	1:A:246:MET:CB	0.48	3.01	4	2
1:A:225:ASN:HD21	1:A:228:GLY:N	0.48	2.06	11	1
1:A:124:GLN:NE2	1:A:125:GLY:H	0.48	2.05	6	1
1:A:256:ILE:O	1:A:256:ILE:CG2	0.48	2.61	8	1
1:A:157:ILE:HD13	1:A:169:TRP:CD1	0.48	2.43	2	1
1:A:109:VAL:CG2	1:A:110:ASP:N	0.48	2.75	3	9
1:A:177:ASN:CG	1:A:179:ASP:OD2	0.48	2.51	8	2
1:A:167:LEU:HD22	1:A:236:LEU:CD1	0.48	2.39	1	1
1:A:171:PHE:CE1	1:A:175:ASP:OD2	0.48	2.66	3	1
1:A:211:PRO:O	1:A:213:GLU:N	0.48	2.47	8	2
1:A:224:ARG:HE	1:A:225:ASN:N	0.48	2.07	12	1
1:A:242:ASP:OD1	1:A:247:ASN:ND2	0.48	2.45	1	1
1:A:155:LEU:C	1:A:155:LEU:HD13	0.48	2.29	14	1
1:A:167:LEU:CD2	1:A:239:CYS:SG	0.48	3.01	3	1
1:A:243:GLU:N	1:A:243:GLU:OE1	0.48	2.47	4	1
1:A:225:ASN:ND2	1:A:227:ASP:H	0.48	2.06	11	1
1:A:126:ASP:O	1:A:128:THR:N	0.48	2.45	13	1
1:A:242:ASP:O	1:A:243:GLU:C	0.48	2.51	6	3
1:A:225:ASN:CG	1:A:227:ASP:CG	0.48	2.72	2	1
1:A:177:ASN:H	1:A:177:ASN:ND2	0.48	2.06	1	2
1:A:139:ASP:CG	1:A:143:ASN:ND2	0.48	2.67	6	1
1:A:244:ASN:ND2	1:A:244:ASN:N	0.48	2.61	6	1
1:A:135:PHE:O	1:A:135:PHE:CD1	0.48	2.67	9	1
1:A:150:ASP:OD1	1:A:150:ASP:N	0.48	2.47	9	1
1:A:167:LEU:HD22	1:A:239:CYS:SG	0.48	2.49	5	1
1:A:149:GLU:OE1	1:A:149:GLU:C	0.48	2.52	6	1
1:A:243:GLU:H	1:A:243:GLU:CD	0.47	2.12	6	1
1:A:242:ASP:C	1:A:242:ASP:OD1	0.47	2.52	4	1
1:A:198:MET:SD	1:A:198:MET:C	0.47	2.93	14	1
1:A:103:GLU:O	1:A:104:CYS:CB	0.47	2.61	5	3
1:A:191:MET:SD	1:A:215:VAL:CG2	0.47	3.01	14	1
1:A:111:GLU:OE2	1:A:132:HIS:CG	0.47	2.67	9	1
1:A:125:GLY:O	1:A:126:ASP:CB	0.47	2.60	2	1
1:A:256:ILE:OXT	1:A:256:ILE:HG23	0.47	2.10	10	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:177:ASN:O	1:A:178:LYS:CB	0.47	2.62	4	1
1:A:187:MET:HG3	1:A:215:VAL:HG22	0.47	1.86	6	1
1:A:109:VAL:HG13	1:A:146:ILE:HD12	0.47	1.84	3	1
1:A:222:MET:SD	1:A:246:MET:HE2	0.47	2.49	2	1
1:A:210:ALA:N	1:A:211:PRO:HD3	0.47	2.24	1	5
1:A:162:THR:HG22	1:A:163:VAL:H	0.47	1.70	11	1
1:A:160:ARG:HH11	1:A:161:GLY:H	0.47	1.53	13	1
1:A:188:LEU:HD13	1:A:188:LEU:O	0.47	2.08	6	2
1:A:105:PRO:C	1:A:106:THR:OG1	0.47	2.51	2	1
1:A:82:LEU:CD2	1:A:86:THR:OG1	0.47	2.62	15	1
1:A:127:ALA:O	1:A:131:ALA:HB2	0.47	2.08	1	2
1:A:252:PHE:CD1	1:A:252:PHE:O	0.47	2.68	11	1
1:A:139:ASP:N	1:A:139:ASP:OD1	0.47	2.46	13	1
1:A:240:GLN:C	1:A:242:ASP:N	0.47	2.67	15	1
1:A:224:ARG:C	1:A:226:GLN:H	0.47	2.12	6	1
1:A:176:ILE:HG23	1:A:177:ASN:N	0.47	2.24	7	1
1:A:162:THR:C	1:A:165:GLU:OE2	0.47	2.53	14	1
1:A:111:GLU:OE2	1:A:112:ASP:OD1	0.47	2.33	3	1
1:A:104:CYS:H	1:A:105:PRO:CD	0.47	2.20	9	1
1:A:254:ASN:N	1:A:254:ASN:ND2	0.47	2.63	10	1
1:A:232:ILE:H	1:A:232:ILE:HD12	0.47	1.70	4	1
1:A:218:PHE:CE2	1:A:246:MET:HE2	0.47	2.45	7	2
1:A:91:LYS:CG	1:A:92:GLU:H	0.47	2.23	11	1
1:A:176:ILE:CG2	1:A:177:ASN:HD22	0.47	2.23	7	1
1:A:224:ARG:NE	1:A:224:ARG:CA	0.47	2.76	13	1
1:A:177:ASN:CG	1:A:178:LYS:N	0.47	2.67	15	1
1:A:103:GLU:O	1:A:104:CYS:SG	0.47	2.73	5	2
1:A:142:GLY:O	1:A:143:ASN:CB	0.47	2.62	2	1
1:A:245:ILE:HG22	1:A:246:MET:H	0.47	1.70	10	1
1:A:218:PHE:CZ	1:A:246:MET:HE2	0.46	2.45	4	2
1:A:126:ASP:OD1	1:A:126:ASP:N	0.46	2.48	13	1
1:A:179:ASP:C	1:A:179:ASP:OD1	0.46	2.53	1	2
1:A:101:LYS:O	1:A:104:CYS:N	0.46	2.42	6	1
1:A:188:LEU:O	1:A:188:LEU:HD13	0.46	2.10	9	2
1:A:197:MET:CE	1:A:256:ILE:CD1	0.46	2.93	2	1
1:A:135:PHE:CD1	1:A:135:PHE:C	0.46	2.88	4	4
1:A:140:ALA:O	1:A:142:GLY:N	0.46	2.49	13	1
1:A:127:ALA:CB	1:A:197:MET:SD	0.46	3.04	14	1
1:A:158:LEU:N	1:A:158:LEU:HD22	0.46	2.26	13	1
1:A:104:CYS:CB	1:A:105:PRO:CD	0.46	2.94	14	1
1:A:109:VAL:CG1	1:A:146:ILE:CD1	0.46	2.93	2	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:222:MET:O	1:A:223:ASP:C	0.46	2.54	13	10
1:A:167:LEU:CD2	1:A:236:LEU:HD12	0.46	2.40	1	1
1:A:130:TYR:OH	1:A:253:GLU:OE1	0.46	2.32	8	1
1:A:174:TYR:HH	1:A:249:MET:CG	0.46	2.24	8	1
1:A:213:GLU:HG3	1:A:214:HIS:N	0.46	2.26	7	2
1:A:118:TYR:CE1	1:A:134:LEU:HD13	0.46	2.46	10	3
1:A:83:GLN:HG3	1:A:84:ALA:N	0.46	2.26	15	1
1:A:223:ASP:O	1:A:224:ARG:CB	0.46	2.64	14	2
1:A:139:ASP:OD1	1:A:143:ASN:ND2	0.46	2.48	6	1
1:A:86:THR:O	1:A:88:PHE:N	0.46	2.49	10	1
1:A:223:ASP:C	1:A:223:ASP:OD1	0.46	2.55	7	1
1:A:244:ASN:ND2	1:A:245:ILE:N	0.46	2.63	7	1
1:A:85:GLN:C	1:A:87:LYS:N	0.46	2.69	7	1
1:A:255:VAL:CG1	1:A:256:ILE:N	0.46	2.78	13	1
1:A:231:THR:HG1	1:A:233:ASP:CG	0.46	2.13	3	1
1:A:185:GLU:O	1:A:188:LEU:N	0.46	2.46	15	1
1:A:255:VAL:O	1:A:255:VAL:HG23	0.46	2.10	15	1
1:A:156:SER:OG	1:A:160:ARG:CZ	0.46	2.64	6	1
1:A:126:ASP:OD2	1:A:196:ASP:OD1	0.46	2.33	2	1
1:A:224:ARG:O	1:A:225:ASN:ND2	0.46	2.49	10	1
1:A:225:ASN:C	1:A:227:ASP:OD1	0.45	2.55	4	1
1:A:135:PHE:C	1:A:135:PHE:CD1	0.45	2.88	1	3
1:A:122:PHE:N	1:A:123:PRO:HD3	0.45	2.26	9	2
1:A:176:ILE:HG13	1:A:177:ASN:H	0.45	1.71	7	1
1:A:173:LEU:HD13	1:A:173:LEU:O	0.45	2.11	13	1
1:A:93:LEU:O	1:A:93:LEU:HD13	0.45	2.11	1	1
1:A:255:VAL:O	1:A:255:VAL:CG2	0.45	2.64	14	1
1:A:122:PHE:CG	1:A:123:PRO:HD2	0.45	2.46	2	1
1:A:108:LEU:HD23	1:A:147:HIS:CG	0.45	2.46	7	1
1:A:251:LEU:CD2	1:A:251:LEU:N	0.45	2.80	2	1
1:A:104:CYS:N	1:A:105:PRO:HD3	0.45	2.27	4	2
1:A:87:LYS:HG3	1:A:88:PHE:N	0.45	2.26	11	1
1:A:110:ASP:CG	1:A:113:THR:OG1	0.45	2.55	1	1
1:A:254:ASN:O	1:A:255:VAL:C	0.45	2.55	2	2
1:A:183:THR:HG1	1:A:229:VAL:HG12	0.45	1.70	5	1
1:A:82:LEU:HD13	1:A:82:LEU:O	0.45	2.10	10	2
1:A:176:ILE:HG23	1:A:177:ASN:HD22	0.45	1.72	7	1
1:A:249:MET:SD	1:A:250:GLN:N	0.45	2.89	11	1
1:A:154:GLY:O	1:A:157:ILE:N	0.45	2.50	5	3
1:A:183:THR:HG22	1:A:184:LYS:N	0.45	2.26	10	1
1:A:255:VAL:HG13	1:A:256:ILE:N	0.45	2.25	13	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:227:ASP:O	1:A:229:VAL:N	0.45	2.48	1	3
1:A:121:PHE:O	1:A:122:PHE:CD2	0.45	2.70	8	1
1:A:235:PHE:C	1:A:235:PHE:CD1	0.45	2.90	4	1
1:A:126:ASP:C	1:A:128:THR:H	0.45	2.15	6	2
1:A:94:GLN:O	1:A:98:ARG:N	0.45	2.42	8	1
1:A:158:LEU:N	1:A:158:LEU:CD1	0.44	2.80	15	2
1:A:240:GLN:O	1:A:242:ASP:N	0.44	2.50	15	1
1:A:167:LEU:CD2	1:A:236:LEU:CD1	0.44	2.95	1	1
1:A:172:ASN:C	1:A:172:ASN:ND2	0.44	2.70	12	1
1:A:132:HIS:O	1:A:132:HIS:ND1	0.44	2.51	5	1
1:A:218:PHE:CD1	1:A:218:PHE:C	0.44	2.91	13	2
1:A:242:ASP:N	1:A:242:ASP:OD1	0.44	2.47	12	1
1:A:87:LYS:N	1:A:160:ARG:HH12	0.44	2.10	11	1
1:A:143:ASN:C	1:A:145:ALA:N	0.44	2.70	13	1
1:A:232:ILE:O	1:A:236:LEU:N	0.44	2.47	3	1
1:A:105:PRO:O	1:A:106:THR:CB	0.44	2.65	2	1
1:A:222:MET:C	1:A:224:ARG:N	0.44	2.69	9	1
1:A:162:THR:HG23	1:A:164:HIS:H	0.44	1.72	7	1
1:A:247:ASN:C	1:A:247:ASN:HD22	0.44	2.15	8	1
1:A:108:LEU:C	1:A:108:LEU:CD2	0.44	2.80	4	1
1:A:159:LEU:O	1:A:161:GLY:N	0.44	2.49	7	1
1:A:241:LYS:O	1:A:242:ASP:CB	0.44	2.65	14	1
1:A:88:PHE:CD2	1:A:89:THR:HG22	0.44	2.48	3	1
1:A:231:THR:O	1:A:232:ILE:C	0.44	2.56	7	12
1:A:255:VAL:O	1:A:255:VAL:CG1	0.44	2.65	7	1
1:A:149:GLU:O	1:A:152:VAL:N	0.44	2.51	14	1
1:A:166:LYS:NZ	1:A:250:GLN:HE22	0.44	2.11	14	1
1:A:172:ASN:HD22	1:A:172:ASN:C	0.44	2.16	9	1
1:A:225:ASN:CG	1:A:227:ASP:OD1	0.44	2.56	2	1
1:A:132:HIS:ND1	1:A:132:HIS:C	0.44	2.68	5	1
1:A:179:ASP:OD1	1:A:179:ASP:N	0.43	2.50	4	1
1:A:225:ASN:OD1	1:A:225:ASN:N	0.43	2.50	1	1
1:A:109:VAL:HG22	1:A:110:ASP:N	0.43	2.27	3	2
1:A:222:MET:HG3	1:A:223:ASP:N	0.43	2.27	13	1
1:A:159:LEU:CD2	1:A:159:LEU:C	0.43	2.86	1	1
1:A:104:CYS:C	1:A:106:THR:N	0.43	2.71	5	2
1:A:225:ASN:CG	1:A:234:GLU:CD	0.43	2.77	6	1
1:A:244:ASN:OD1	1:A:244:ASN:N	0.43	2.50	9	1
1:A:245:ILE:HG23	1:A:246:MET:SD	0.43	2.53	9	1
1:A:160:ARG:CA	1:A:160:ARG:HE	0.43	2.27	7	1
1:A:241:LYS:C	1:A:243:GLU:N	0.43	2.71	13	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:184:LYS:HG3	1:A:219:PHE:CE2	0.43	2.49	3	1
1:A:256:ILE:H	1:A:256:ILE:CD1	0.43	2.26	3	1
1:A:106:THR:C	1:A:108:LEU:H	0.43	2.16	9	1
1:A:224:ARG:CA	1:A:224:ARG:NE	0.43	2.82	12	1
1:A:210:ALA:C	1:A:212:LEU:N	0.43	2.72	13	3
1:A:177:ASN:HD22	1:A:177:ASN:C	0.43	2.16	15	1
1:A:127:ALA:O	1:A:131:ALA:CB	0.43	2.66	3	1
1:A:173:LEU:C	1:A:175:ASP:N	0.43	2.71	3	1
1:A:221:LYS:O	1:A:221:LYS:NZ	0.43	2.52	2	1
1:A:210:ALA:N	1:A:211:PRO:CD	0.43	2.81	1	3
1:A:162:THR:O	1:A:164:HIS:N	0.43	2.52	4	2
1:A:135:PHE:CE2	1:A:146:ILE:HG12	0.43	2.49	15	3
1:A:255:VAL:O	1:A:256:ILE:C	0.43	2.57	6	2
1:A:255:VAL:HG12	1:A:256:ILE:N	0.43	2.28	9	1
1:A:227:ASP:CG	1:A:228:GLY:N	0.43	2.72	11	1
1:A:225:ASN:OD1	1:A:234:GLU:OE2	0.43	2.37	5	1
1:A:80:ASP:C	1:A:80:ASP:OD1	0.43	2.57	7	1
1:A:225:ASN:ND2	1:A:227:ASP:N	0.43	2.67	11	1
1:A:171:PHE:CD1	1:A:171:PHE:O	0.43	2.72	3	3
1:A:83:GLN:CG	1:A:84:ALA:N	0.43	2.81	15	1
1:A:108:LEU:HD12	1:A:147:HIS:CE1	0.43	2.48	14	1
1:A:156:SER:O	1:A:160:ARG:NE	0.43	2.44	6	1
1:A:211:PRO:C	1:A:213:GLU:N	0.43	2.71	8	2
1:A:225:ASN:HD22	1:A:234:GLU:CD	0.43	2.17	12	1
1:A:177:ASN:O	1:A:179:ASP:N	0.43	2.52	5	1
1:A:187:MET:HE1	1:A:218:PHE:CE1	0.43	2.49	4	1
1:A:171:PHE:C	1:A:171:PHE:CD1	0.43	2.91	15	2
1:A:93:LEU:O	1:A:97:TYR:N	0.43	2.43	14	1
1:A:219:PHE:CG	1:A:223:ASP:OD2	0.43	2.72	10	1
1:A:226:GLN:C	1:A:228:GLY:N	0.43	2.69	1	1
1:A:112:ASP:OD1	1:A:113:THR:N	0.43	2.52	8	1
1:A:224:ARG:O	1:A:225:ASN:C	0.43	2.58	3	1
1:A:253:GLU:C	1:A:255:VAL:H	0.43	2.15	9	1
1:A:88:PHE:O	1:A:89:THR:C	0.43	2.57	9	1
1:A:112:ASP:OD1	1:A:112:ASP:C	0.42	2.56	8	1
1:A:213:GLU:OE1	1:A:213:GLU:C	0.42	2.58	12	1
1:A:162:THR:C	1:A:164:HIS:N	0.42	2.72	10	2
1:A:187:MET:CE	1:A:218:PHE:CE1	0.42	3.02	11	2
1:A:93:LEU:HD23	1:A:93:LEU:O	0.42	2.14	11	1
1:A:160:ARG:NH1	1:A:161:GLY:C	0.42	2.72	13	1
1:A:108:LEU:HD12	1:A:147:HIS:CD2	0.42	2.48	14	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:223:ASP:OD1	1:A:224:ARG:N	0.42	2.52	3	1
1:A:187:MET:CG	1:A:215:VAL:HG13	0.42	2.45	5	1
1:A:89:THR:HG23	1:A:92:GLU:HB2	0.42	1.90	11	1
1:A:82:LEU:O	1:A:82:LEU:HD13	0.42	2.15	13	1
1:A:176:ILE:HG22	1:A:177:ASN:N	0.42	2.29	9	1
1:A:194:ILE:HG21	1:A:252:PHE:HE2	0.42	1.75	4	1
1:A:239:CYS:SG	1:A:246:MET:HB3	0.42	2.54	4	2
1:A:176:ILE:O	1:A:177:ASN:CG	0.42	2.58	7	1
1:A:88:PHE:O	1:A:89:THR:CB	0.42	2.67	7	1
1:A:152:VAL:CG1	1:A:153:VAL:N	0.42	2.82	1	1
1:A:187:MET:HE3	1:A:218:PHE:CD1	0.42	2.49	6	1
1:A:231:THR:HG22	1:A:232:ILE:N	0.42	2.28	8	1
1:A:246:MET:SD	1:A:249:MET:HE2	0.42	2.55	8	1
1:A:254:ASN:C	1:A:254:ASN:ND2	0.42	2.73	8	1
1:A:147:HIS:CD2	1:A:148:PHE:N	0.42	2.83	7	1
1:A:87:LYS:CG	1:A:88:PHE:N	0.42	2.82	11	1
1:A:210:ALA:HB1	1:A:211:PRO:HD2	0.42	1.91	14	1
1:A:147:HIS:N	1:A:147:HIS:CD2	0.42	2.87	3	1
1:A:178:LYS:NZ	1:A:178:LYS:HB2	0.42	2.30	12	1
1:A:149:GLU:OE2	1:A:149:GLU:C	0.42	2.58	13	1
1:A:222:MET:CG	1:A:223:ASP:H	0.42	2.28	13	1
1:A:171:PHE:CE2	1:A:232:ILE:HA	0.42	2.50	15	1
1:A:108:LEU:HD12	1:A:108:LEU:C	0.42	2.35	1	1
1:A:134:LEU:O	1:A:137:ALA:HB3	0.42	2.14	1	1
1:A:183:THR:CG2	1:A:184:LYS:N	0.42	2.82	10	1
1:A:184:LYS:HG3	1:A:185:GLU:N	0.42	2.29	4	2
1:A:173:LEU:HD23	1:A:173:LEU:C	0.42	2.34	7	1
1:A:83:GLN:NE2	1:A:89:THR:HA	0.42	2.29	15	1
1:A:140:ALA:C	1:A:141:ASP:CG	0.42	2.78	5	1
1:A:82:LEU:HD21	1:A:86:THR:OG1	0.42	2.15	14	1
1:A:176:ILE:N	1:A:176:ILE:HD13	0.42	2.30	8	1
1:A:111:GLU:HB2	1:A:135:PHE:CD2	0.42	2.49	14	1
1:A:231:THR:C	1:A:233:ASP:H	0.42	2.16	8	1
1:A:245:ILE:HG22	1:A:246:MET:SD	0.42	2.55	9	1
1:A:176:ILE:HG13	1:A:177:ASN:N	0.42	2.27	5	1
1:A:183:THR:OG1	1:A:229:VAL:HG22	0.42	2.14	7	1
1:A:162:THR:CG2	1:A:163:VAL:H	0.42	2.28	11	1
1:A:225:ASN:N	1:A:225:ASN:OD1	0.42	2.53	6	1
1:A:244:ASN:ND2	1:A:244:ASN:O	0.42	2.53	2	1
1:A:243:GLU:C	1:A:245:ILE:N	0.41	2.73	15	1
1:A:173:LEU:HD23	1:A:173:LEU:O	0.41	2.15	7	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:133:PHE:CD1	1:A:176:ILE:HD12	0.41	2.50	15	1
1:A:218:PHE:CZ	1:A:222:MET:CE	0.41	3.02	15	1
1:A:226:GLN:O	1:A:227:ASP:CG	0.41	2.59	15	1
1:A:256:ILE:HG23	1:A:256:ILE:O	0.41	2.14	15	1
1:A:223:ASP:OD2	1:A:228:GLY:O	0.41	2.38	1	1
1:A:244:ASN:ND2	1:A:244:ASN:C	0.41	2.74	1	1
1:A:221:LYS:NZ	1:A:241:LYS:NZ	0.41	2.68	14	1
1:A:245:ILE:C	1:A:245:ILE:CD1	0.41	2.88	14	1
1:A:182:ILE:HB	1:A:230:VAL:CG1	0.41	2.45	9	3
1:A:143:ASN:C	1:A:145:ALA:H	0.41	2.19	13	1
1:A:226:GLN:O	1:A:227:ASP:C	0.41	2.59	15	1
1:A:183:THR:HG23	1:A:186:GLU:H	0.41	1.75	1	1
1:A:160:ARG:O	1:A:160:ARG:CD	0.41	2.68	1	1
1:A:226:GLN:N	1:A:226:GLN:OE1	0.41	2.53	2	1
1:A:87:LYS:O	1:A:88:PHE:CG	0.41	2.74	4	1
1:A:227:ASP:OD2	1:A:229:VAL:CG2	0.41	2.68	6	1
1:A:227:ASP:OD2	1:A:229:VAL:HG23	0.41	2.14	3	1
1:A:149:GLU:CD	1:A:149:GLU:C	0.41	2.78	13	1
1:A:108:LEU:HG	1:A:109:VAL:N	0.41	2.30	14	1
1:A:256:ILE:HG23	1:A:256:ILE:OXT	0.41	2.16	14	1
1:A:89:THR:O	1:A:90:LYS:C	0.41	2.57	8	3
1:A:79:LEU:O	1:A:82:LEU:N	0.41	2.54	8	1
1:A:172:ASN:ND2	1:A:172:ASN:C	0.41	2.74	9	1
1:A:219:PHE:CZ	1:A:223:ASP:OD2	0.41	2.72	10	1
1:A:179:ASP:C	1:A:181:CYS:N	0.41	2.74	11	1
1:A:80:ASP:OD1	1:A:80:ASP:N	0.41	2.54	11	1
1:A:160:ARG:C	1:A:160:ARG:CD	0.41	2.89	6	1
1:A:224:ARG:C	1:A:226:GLN:N	0.41	2.74	6	1
1:A:110:ASP:O	1:A:111:GLU:C	0.41	2.59	9	1
1:A:172:ASN:ND2	1:A:172:ASN:O	0.41	2.54	9	1
1:A:178:LYS:CD	1:A:178:LYS:N	0.41	2.83	9	1
1:A:224:ARG:NE	1:A:224:ARG:HA	0.41	2.30	12	1
1:A:140:ALA:C	1:A:141:ASP:OD2	0.41	2.59	5	1
1:A:135:PHE:O	1:A:138:PHE:N	0.41	2.53	14	1
1:A:244:ASN:O	1:A:247:ASN:N	0.41	2.49	6	1
1:A:93:LEU:HD23	1:A:93:LEU:C	0.41	2.36	8	1
1:A:177:ASN:N	1:A:177:ASN:HD22	0.41	2.14	3	1
1:A:110:ASP:O	1:A:113:THR:N	0.41	2.54	9	1
1:A:115:LYS:C	1:A:115:LYS:CD	0.41	2.89	10	1
1:A:212:LEU:O	1:A:214:HIS:N	0.41	2.54	5	1
1:A:173:LEU:CD2	1:A:173:LEU:C	0.41	2.89	7	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:173:LEU:HD12	1:A:174:TYR:CD1	0.41	2.50	13	1
1:A:222:MET:HG3	1:A:223:ASP:H	0.41	1.76	8	2
1:A:178:LYS:O	1:A:179:ASP:CG	0.41	2.58	1	1
1:A:126:ASP:O	1:A:127:ALA:CB	0.41	2.69	1	2
1:A:134:LEU:HD13	1:A:134:LEU:C	0.41	2.36	6	1
1:A:97:TYR:O	1:A:101:LYS:N	0.41	2.49	6	1
1:A:135:PHE:CZ	1:A:146:ILE:HG12	0.41	2.50	12	1
1:A:110:ASP:C	1:A:112:ASP:H	0.41	2.20	5	1
1:A:89:THR:HG23	1:A:92:GLU:H	0.41	1.74	7	1
1:A:166:LYS:HD3	1:A:250:GLN:NE2	0.41	2.30	11	1
1:A:217:ARG:HG3	1:A:217:ARG:NH1	0.41	2.31	13	1
1:A:148:PHE:CD1	1:A:148:PHE:O	0.41	2.74	1	1
1:A:104:CYS:SG	1:A:105:PRO:HD3	0.41	2.55	14	1
1:A:218:PHE:CD1	1:A:218:PHE:O	0.40	2.74	7	1
1:A:225:ASN:ND2	1:A:225:ASN:C	0.40	2.74	11	1
1:A:118:TYR:CZ	1:A:134:LEU:HD13	0.40	2.51	13	1
1:A:226:GLN:C	1:A:227:ASP:CG	0.40	2.79	15	1
1:A:122:PHE:N	1:A:123:PRO:CD	0.40	2.83	9	1
1:A:82:LEU:HD13	1:A:82:LEU:C	0.40	2.37	10	1
1:A:177:ASN:O	1:A:177:ASN:CG	0.40	2.59	4	1
1:A:225:ASN:OD1	1:A:227:ASP:OD1	0.40	2.38	4	2
1:A:135:PHE:CE1	1:A:139:ASP:HB2	0.40	2.51	7	1
1:A:138:PHE:O	1:A:139:ASP:CB	0.40	2.70	1	1
1:A:166:LYS:NZ	1:A:250:GLN:NE2	0.40	2.69	14	1
1:A:254:ASN:ND2	1:A:254:ASN:O	0.40	2.54	6	1
1:A:124:GLN:HG3	1:A:125:GLY:N	0.40	2.31	8	1
1:A:149:GLU:HG3	1:A:150:ASP:N	0.40	2.31	12	1
1:A:221:LYS:CA	1:A:221:LYS:HZ3	0.40	2.28	2	1
1:A:160:ARG:HH12	1:A:161:GLY:CA	0.40	2.28	13	1
1:A:158:LEU:HD21	1:A:169:TRP:CZ2	0.40	2.52	13	1
1:A:103:GLU:O	1:A:104:CYS:C	0.40	2.58	14	1
1:A:217:ARG:NH2	1:A:220:GLN:NE2	0.40	2.69	6	1
1:A:231:THR:OG1	1:A:233:ASP:OD2	0.40	2.39	3	1
1:A:138:PHE:C	1:A:139:ASP:CG	0.40	2.80	2	1
1:A:232:ILE:H	1:A:232:ILE:CD1	0.40	2.30	4	1
1:A:243:GLU:N	1:A:243:GLU:CD	0.40	2.75	4	1
1:A:129:THR:HG22	1:A:133:PHE:CE2	0.40	2.51	6	1
1:A:104:CYS:H	1:A:105:PRO:HD3	0.40	1.74	9	1
1:A:178:LYS:O	1:A:179:ASP:C	0.40	2.59	10	1
1:A:110:ASP:CG	1:A:111:GLU:N	0.40	2.75	5	1
1:A:118:TYR:CZ	1:A:134:LEU:HD11	0.40	2.52	14	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:108:LEU:HD11	1:A:147:HIS:NE2	0.40	2.32	9	1
1:A:236:LEU:CD2	1:A:240:GLN:NE2	0.40	2.85	9	1
1:A:212:LEU:O	1:A:213:GLU:C	0.40	2.60	5	1
1:A:219:PHE:CE2	1:A:223:ASP:HB2	0.40	2.52	5	1

## 6.3 Torsion angles [i](#)

### 6.3.1 Protein backbone [i](#)

In the following table, the Percentiles column shows the percent Ramachandran outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all NMR entries. The Analysed column shows the number of residues for which the backbone conformation was analysed and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	167/256 (65%)	130±3 (78±2%)	26±4 (16±2%)	11±3 (7±2%)	3	18
All	All	2505/3840 (65%)	1946 (78%)	390 (16%)	169 (7%)	3	18

All 50 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	232	ILE	8
1	A	243	GLU	8
1	A	223	ASP	8
1	A	105	PRO	7
1	A	88	PHE	6
1	A	224	ARG	6
1	A	255	VAL	6
1	A	123	PRO	6
1	A	244	ASN	5
1	A	179	ASP	5
1	A	242	ASP	5
1	A	174	TYR	4
1	A	85	GLN	4
1	A	241	LYS	4
1	A	144	GLY	4
1	A	178	LYS	4
1	A	226	GLN	4
1	A	87	LYS	4

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	225	ASN	4
1	A	211	PRO	3
1	A	90	LYS	3
1	A	127	ALA	3
1	A	227	ASP	3
1	A	177	ASN	3
1	A	198	MET	3
1	A	104	CYS	3
1	A	254	ASN	3
1	A	228	GLY	3
1	A	143	ASN	3
1	A	86	THR	3
1	A	180	GLY	3
1	A	124	GLN	3
1	A	106	THR	2
1	A	89	THR	2
1	A	140	ALA	2
1	A	222	MET	2
1	A	176	ILE	2
1	A	199	GLY	2
1	A	212	LEU	2
1	A	111	GLU	2
1	A	162	THR	2
1	A	126	ASP	2
1	A	139	ASP	1
1	A	142	GLY	1
1	A	138	PHE	1
1	A	161	GLY	1
1	A	103	GLU	1
1	A	107	GLY	1
1	A	141	ASP	1
1	A	184	LYS	1

### 6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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	149/227 (66%)	121±3 (81±2%)	28±3 (19±2%)	<b>5</b> 37

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
All	All	2235/3405 (66%)	1812 (81%)	423 (19%)	5 37

All 117 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	230	VAL	15
1	A	146	ILE	15
1	A	169	TRP	15
1	A	82	LEU	12
1	A	219	PHE	11
1	A	239	CYS	10
1	A	188	LEU	9
1	A	155	LEU	9
1	A	225	ASN	9
1	A	114	PHE	8
1	A	93	LEU	8
1	A	112	ASP	7
1	A	89	THR	7
1	A	246	MET	7
1	A	88	PHE	7
1	A	139	ASP	6
1	A	109	VAL	6
1	A	104	CYS	6
1	A	177	ASN	6
1	A	132	HIS	6
1	A	160	ARG	5
1	A	179	ASP	5
1	A	178	LYS	5
1	A	106	THR	5
1	A	108	LEU	5
1	A	224	ARG	5
1	A	244	ASN	5
1	A	147	HIS	5
1	A	233	ASP	5
1	A	136	ASN	5
1	A	227	ASP	4
1	A	191	MET	4
1	A	212	LEU	4
1	A	159	LEU	4
1	A	221	LYS	4
1	A	118	TYR	4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	183	THR	4
1	A	231	THR	4
1	A	141	ASP	4
1	A	80	ASP	4
1	A	217	ARG	4
1	A	247	ASN	4
1	A	150	ASP	4
1	A	176	ILE	4
1	A	251	LEU	4
1	A	213	GLU	4
1	A	83	GLN	3
1	A	110	ASP	3
1	A	94	GLN	3
1	A	192	LYS	3
1	A	164	HIS	3
1	A	95	SER	3
1	A	134	LEU	3
1	A	86	THR	3
1	A	236	LEU	3
1	A	198	MET	3
1	A	98	ARG	3
1	A	87	LYS	3
1	A	156	SER	3
1	A	256	ILE	3
1	A	101	LYS	3
1	A	91	LYS	3
1	A	115	LYS	3
1	A	162	THR	3
1	A	166	LYS	2
1	A	237	GLU	2
1	A	214	HIS	2
1	A	245	ILE	2
1	A	113	THR	2
1	A	124	GLN	2
1	A	242	ASP	2
1	A	250	GLN	2
1	A	181	CYS	2
1	A	226	GLN	2
1	A	240	GLN	2
1	A	241	LYS	2
1	A	254	ASN	2
1	A	121	PHE	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	220	GLN	2
1	A	172	ASN	2
1	A	126	ASP	2
1	A	195	TYR	2
1	A	168	LYS	2
1	A	143	ASN	2
1	A	252	PHE	2
1	A	119	SER	2
1	A	184	LYS	2
1	A	158	LEU	1
1	A	248	SER	1
1	A	116	LEU	1
1	A	120	GLN	1
1	A	173	LEU	1
1	A	234	GLU	1
1	A	90	LYS	1
1	A	85	GLN	1
1	A	232	ILE	1
1	A	92	GLU	1
1	A	102	ASN	1
1	A	149	GLU	1
1	A	253	GLU	1
1	A	123	PRO	1
1	A	128	THR	1
1	A	196	ASP	1
1	A	249	MET	1
1	A	194	ILE	1
1	A	157	ILE	1
1	A	122	PHE	1
1	A	235	PHE	1
1	A	185	GLU	1
1	A	175	ASP	1
1	A	79	LEU	1
1	A	152	VAL	1
1	A	81	GLN	1
1	A	103	GLU	1
1	A	129	THR	1
1	A	190	ILE	1
1	A	111	GLU	1

### 6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

### 6.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains [i](#)

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

### 6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

### 6.6 Ligand geometry [i](#)

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

### 6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

### 6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

## 7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided