



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

May 28, 2020 – 10:41 pm BST

PDB ID : 2KRE
Title : Solution structure of E4B/UFD2A U-Box domain
Authors : Nomine, Y.; Wasielewski, E.; Botuyan, M.; Mer, G.
Deposited on : 2009-12-16

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

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/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 : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
ShiftChecker : 2.11
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.11

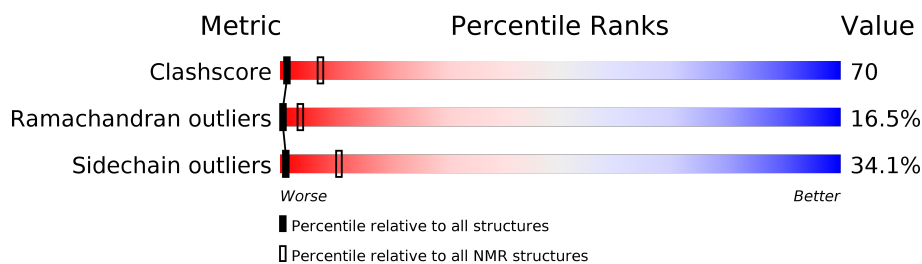
1 Overall quality at a glance

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	158937	12864
Ramachandran outliers	154571	11451
Sidechain outliers	154315	11428

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	100	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 2 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:1228-A:1294 (67)	0.48	2

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 3 clusters and 4 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1600 atoms, of which 792 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Ubiquitin conjugation factor E4 B.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	100	1600	501	792	141	161	5	0

There are 5 discrepancies between the modelled and reference sequences:

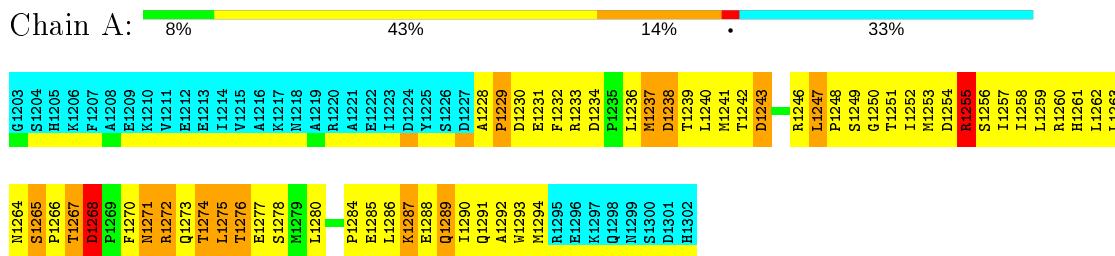
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1203	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP O95155
A	1204	SER	-	EXPRESSION TAG	UNP O95155
A	1205	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP O95155
A	1206	LYS	-	EXPRESSION TAG	UNP O95155
A	1207	PHE	-	EXPRESSION TAG	UNP O95155

4 Residue-property plots [i](#)

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: Ubiquitin conjugation factor E4 B

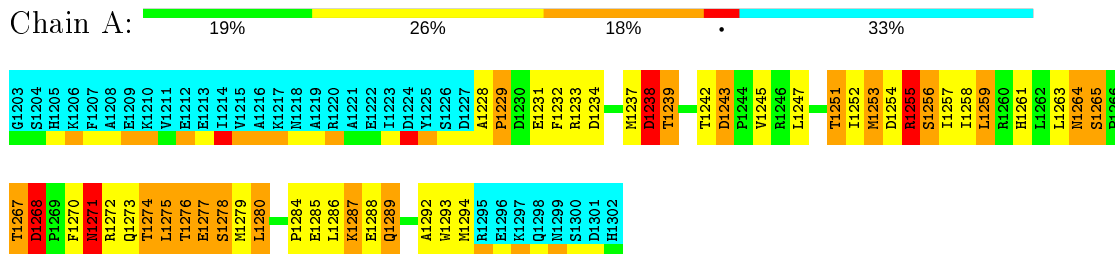


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

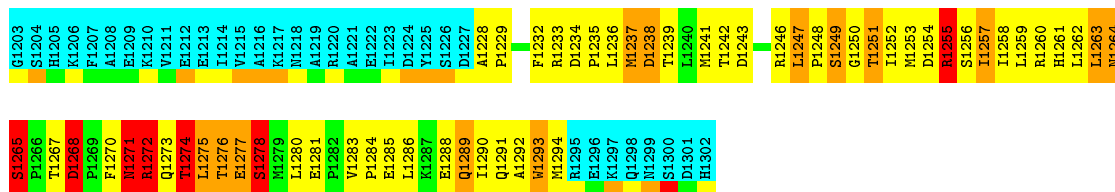
- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



4.2.2 Score per residue for model 2 (medoid)

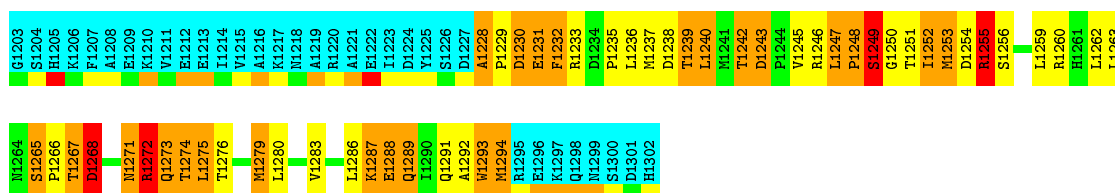
- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B





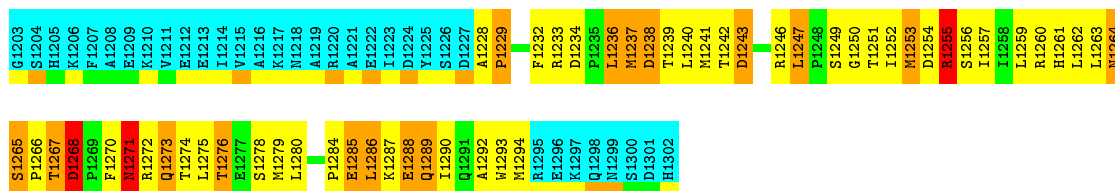
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



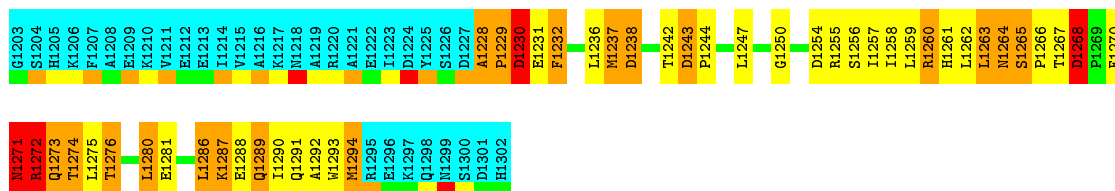
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



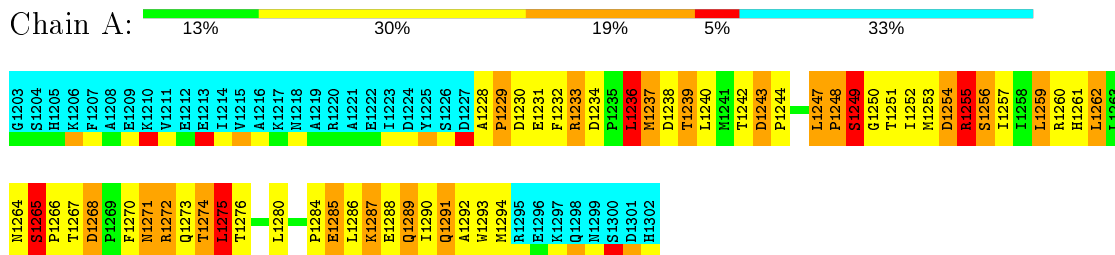
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



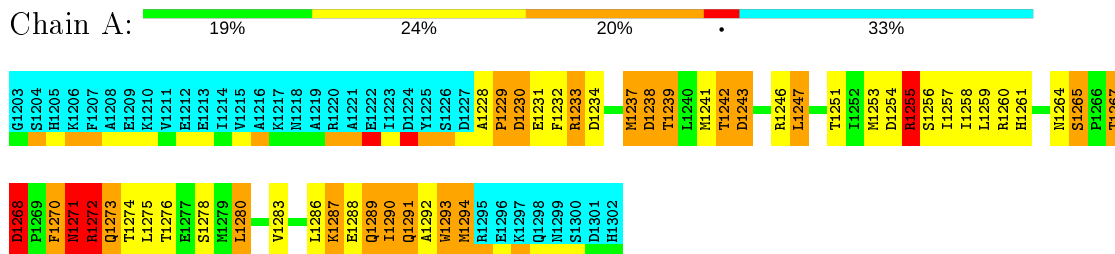
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



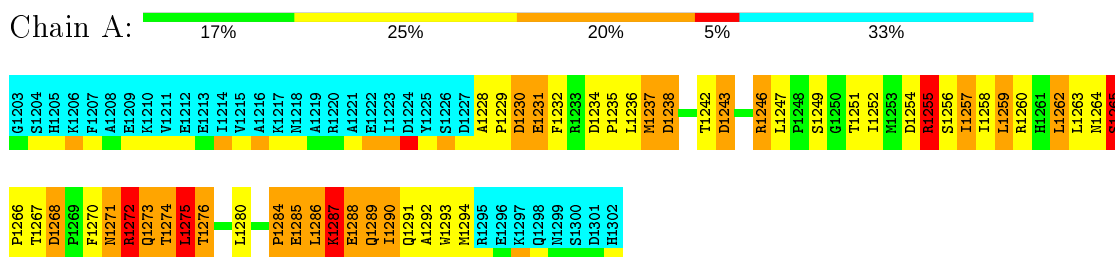
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



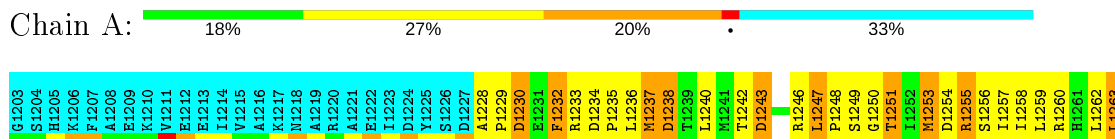
4.2.8 Score per residue for model 8

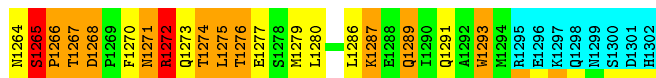
- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



4.2.9 Score per residue for model 9

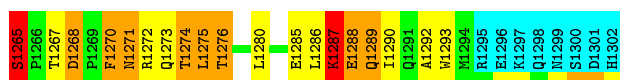
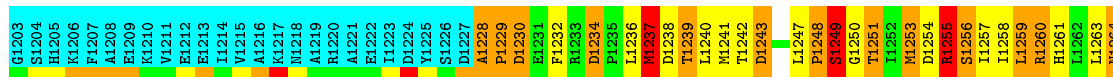
- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B





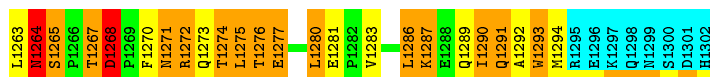
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



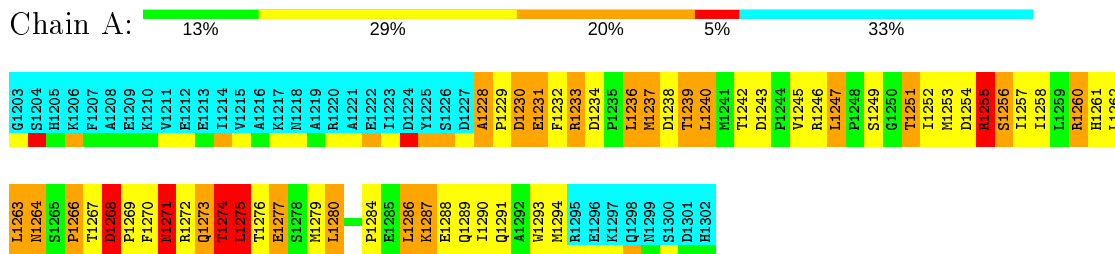
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



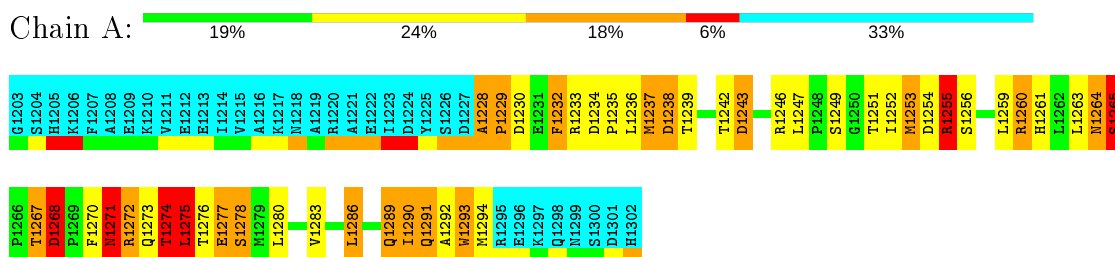
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



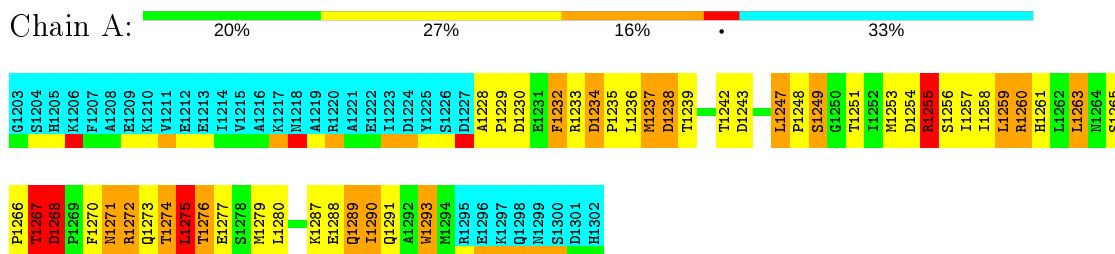
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



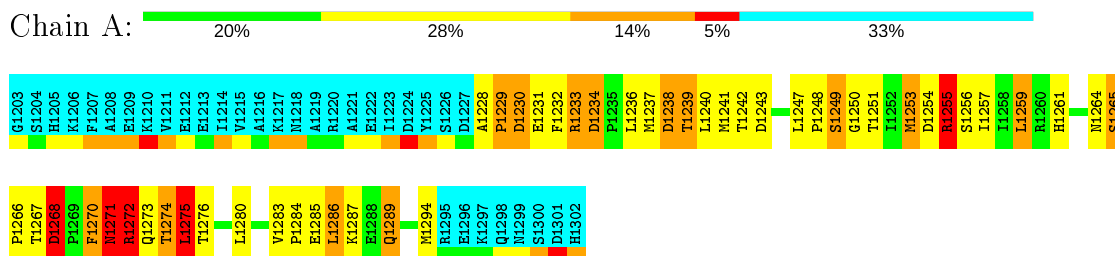
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



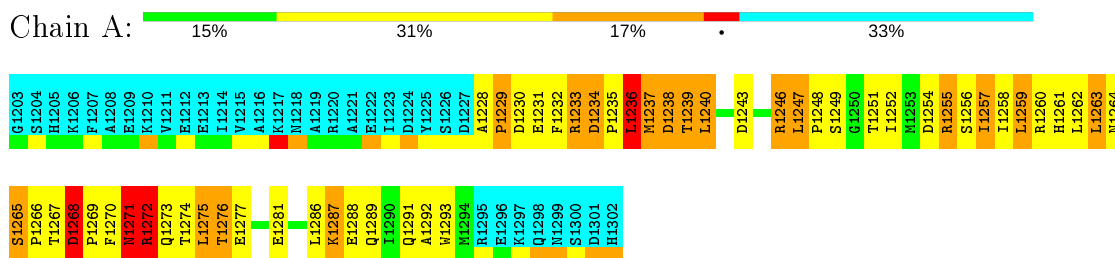
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



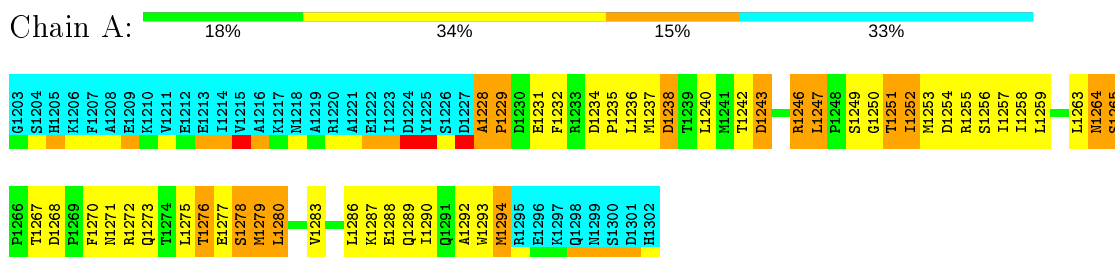
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



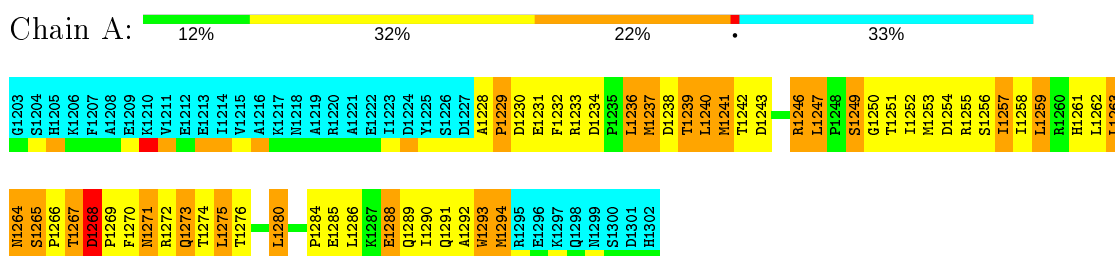
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



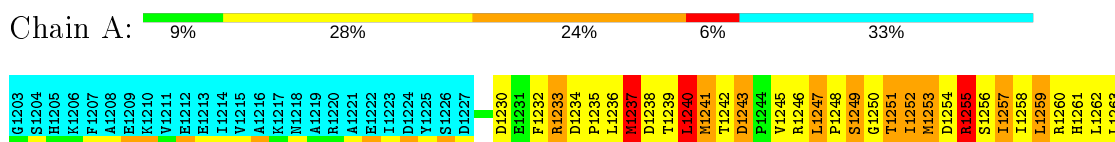
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Ubiquitin conjugation factor E4 B



M1264
S1265
P1266
T1267
D1268
P1269
F1270
M1271
R1272
Q1273
T1274
L1275
T1276
E1277
S1278
M1279
L1280
E1281
P1282
V1283
L1286
K1287
E1288
Q1289
L1290
Q1291
A1292
W1293
M1294
R1295
E1296
R1297
Q1298
M1299
S1300
D1301
H1302

5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 100 calculated structures, 20 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
XPLOR-NIH	refinement	2.11.1
CYANA	structure solution	2.1

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 i

6.1 Standard geometry i

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 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	540	540	540	76±11
All	All	10800	10800	10800	1519

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 70.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1286:LEU:HD13	1:A:1287:LYS:N	1.03	1.66	11	1
1:A:1247:LEU:HD13	1:A:1247:LEU:N	1.00	1.71	20	5
1:A:1247:LEU:N	1:A:1247:LEU:HD13	0.98	1.70	19	3
1:A:1247:LEU:HD23	1:A:1247:LEU:O	0.94	1.63	12	2
1:A:1247:LEU:H	1:A:1247:LEU:HD22	0.93	1.17	18	6
1:A:1286:LEU:O	1:A:1286:LEU:HD22	0.92	1.64	11	1
1:A:1247:LEU:N	1:A:1247:LEU:HD22	0.92	1.80	18	4
1:A:1247:LEU:HD11	1:A:1253:MET:SD	0.89	2.07	4	3
1:A:1280:LEU:N	1:A:1280:LEU:HD13	0.88	1.81	13	2
1:A:1280:LEU:H	1:A:1280:LEU:HD13	0.88	1.25	18	3
1:A:1228:ALA:HB2	1:A:1293:TRP:CH2	0.86	2.06	14	5
1:A:1280:LEU:H	1:A:1280:LEU:HD22	0.85	1.31	13	1
1:A:1247:LEU:HD22	1:A:1247:LEU:H	0.84	1.30	13	2
1:A:1237:MET:SD	1:A:1239:THR:N	0.84	2.51	17	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1242:THR:HG22	1:A:1254:ASP:OD2	0.83	1.73	2	3
1:A:1280:LEU:HD22	1:A:1280:LEU:C	0.83	1.94	20	3
1:A:1242:THR:HG23	1:A:1243:ASP:OD1	0.82	1.74	4	1
1:A:1286:LEU:HD23	1:A:1286:LEU:N	0.81	1.91	13	1
1:A:1247:LEU:O	1:A:1247:LEU:HD23	0.81	1.75	2	1
1:A:1286:LEU:H	1:A:1286:LEU:HD23	0.81	1.36	13	2
1:A:1280:LEU:HD13	1:A:1280:LEU:N	0.80	1.91	18	3
1:A:1232:PHE:CZ	1:A:1289:GLN:NE2	0.80	2.50	14	13
1:A:1236:LEU:O	1:A:1236:LEU:HD12	0.80	1.76	13	2
1:A:1286:LEU:N	1:A:1286:LEU:HD23	0.79	1.92	14	1
1:A:1247:LEU:CD1	1:A:1247:LEU:N	0.78	2.46	20	6
1:A:1289:GLN:NE2	1:A:1290:ILE:N	0.77	2.32	2	2
1:A:1262:LEU:HD12	1:A:1263:LEU:N	0.77	1.94	17	6
1:A:1236:LEU:C	1:A:1236:LEU:HD12	0.76	2.00	13	3
1:A:1246:ARG:C	1:A:1247:LEU:HD13	0.76	2.01	9	7
1:A:1275:LEU:HD13	1:A:1275:LEU:C	0.75	2.01	4	2
1:A:1237:MET:SD	1:A:1239:THR:CB	0.75	2.74	17	3
1:A:1252:ILE:N	1:A:1252:ILE:HD12	0.74	1.96	1	1
1:A:1286:LEU:HD22	1:A:1286:LEU:C	0.74	2.01	11	1
1:A:1231:GLU:N	1:A:1233:ARG:HE	0.74	1.81	16	1
1:A:1273:GLN:O	1:A:1275:LEU:N	0.73	2.21	8	12
1:A:1247:LEU:HD22	1:A:1247:LEU:N	0.73	1.97	8	5
1:A:1280:LEU:C	1:A:1280:LEU:HD12	0.73	2.04	8	2
1:A:1228:ALA:HB1	1:A:1229:PRO:CD	0.73	2.13	19	10
1:A:1232:PHE:CE1	1:A:1289:GLN:NE2	0.73	2.57	19	6
1:A:1249:SER:CB	1:A:1271:ASN:ND2	0.72	2.52	19	3
1:A:1238:ASP:N	1:A:1238:ASP:OD1	0.72	2.23	16	1
1:A:1247:LEU:HD12	1:A:1247:LEU:O	0.71	1.85	7	1
1:A:1234:ASP:OD1	1:A:1238:ASP:N	0.71	2.23	11	1
1:A:1237:MET:SD	1:A:1237:MET:O	0.71	2.48	16	1
1:A:1280:LEU:N	1:A:1280:LEU:CD1	0.71	2.52	13	5
1:A:1236:LEU:HD23	1:A:1257:ILE:CG2	0.71	2.16	12	1
1:A:1254:ASP:O	1:A:1256:SER:N	0.71	2.24	13	17
1:A:1243:ASP:N	1:A:1243:ASP:OD1	0.71	2.23	3	3
1:A:1232:PHE:H	1:A:1233:ARG:NH2	0.71	1.84	13	1
1:A:1228:ALA:HB1	1:A:1229:PRO:HD2	0.70	1.61	14	11
1:A:1239:THR:O	1:A:1241:MET:N	0.70	2.24	20	4
1:A:1264:ASN:HD22	1:A:1264:ASN:H	0.70	1.28	1	3
1:A:1289:GLN:O	1:A:1292:ALA:HB3	0.70	1.86	10	7
1:A:1286:LEU:HD13	1:A:1286:LEU:C	0.70	2.06	11	1
1:A:1236:LEU:HD23	1:A:1257:ILE:HG21	0.70	1.62	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1258:ILE:HG23	1:A:1275:LEU:HD21	0.70	1.62	20	2
1:A:1271:ASN:OD1	1:A:1271:ASN:N	0.70	2.23	13	2
1:A:1234:ASP:OD1	1:A:1236:LEU:N	0.70	2.25	10	9
1:A:1280:LEU:N	1:A:1280:LEU:HD22	0.70	2.02	13	1
1:A:1228:ALA:O	1:A:1233:ARG:NH1	0.69	2.24	13	2
1:A:1237:MET:SD	1:A:1257:ILE:HD12	0.69	2.27	16	3
1:A:1280:LEU:HD12	1:A:1280:LEU:H	0.69	1.48	1	1
1:A:1248:PRO:O	1:A:1250:GLY:N	0.69	2.25	2	8
1:A:1290:ILE:O	1:A:1292:ALA:N	0.69	2.26	14	5
1:A:1247:LEU:C	1:A:1247:LEU:HD23	0.69	2.05	12	1
1:A:1255:ARG:O	1:A:1255:ARG:NE	0.69	2.26	4	1
1:A:1247:LEU:H	1:A:1247:LEU:CD2	0.69	1.99	18	4
1:A:1242:THR:O	1:A:1287:LYS:NZ	0.69	2.25	3	3
1:A:1232:PHE:CE1	1:A:1289:GLN:OE1	0.69	2.45	3	4
1:A:1234:ASP:OD1	1:A:1237:MET:N	0.69	2.26	16	2
1:A:1228:ALA:O	1:A:1230:ASP:N	0.68	2.26	10	4
1:A:1261:HIS:NE2	1:A:1267:THR:O	0.68	2.26	4	7
1:A:1233:ARG:NE	1:A:1233:ARG:O	0.68	2.25	6	1
1:A:1253:MET:SD	1:A:1253:MET:N	0.68	2.66	1	3
1:A:1242:THR:N	1:A:1254:ASP:OD2	0.68	2.26	5	6
1:A:1232:PHE:H	1:A:1233:ARG:HH21	0.68	1.31	13	1
1:A:1249:SER:OG	1:A:1271:ASN:ND2	0.68	2.27	4	4
1:A:1258:ILE:HG23	1:A:1275:LEU:HD13	0.68	1.65	19	1
1:A:1275:LEU:HD13	1:A:1276:THR:N	0.68	2.03	10	8
1:A:1280:LEU:H	1:A:1280:LEU:CD1	0.68	2.01	11	6
1:A:1247:LEU:CD2	1:A:1247:LEU:H	0.68	1.98	13	2
1:A:1243:ASP:N	1:A:1254:ASP:OD1	0.67	2.28	7	1
1:A:1280:LEU:H	1:A:1280:LEU:CD2	0.67	1.94	13	1
1:A:1238:ASP:OD1	1:A:1239:THR:N	0.67	2.27	19	1
1:A:1237:MET:SD	1:A:1239:THR:OG1	0.67	2.50	17	3
1:A:1237:MET:SD	1:A:1237:MET:C	0.67	2.72	12	3
1:A:1232:PHE:CD1	1:A:1232:PHE:N	0.67	2.62	11	10
1:A:1253:MET:SD	1:A:1258:ILE:HD11	0.67	2.30	18	4
1:A:1268:ASP:OD1	1:A:1270:PHE:N	0.67	2.27	4	13
1:A:1266:PRO:O	1:A:1268:ASP:N	0.67	2.27	15	1
1:A:1256:SER:O	1:A:1259:LEU:N	0.67	2.28	8	12
1:A:1254:ASP:OD1	1:A:1257:ILE:N	0.67	2.27	6	1
1:A:1284:PRO:O	1:A:1286:LEU:N	0.67	2.28	4	7
1:A:1259:LEU:O	1:A:1262:LEU:HD11	0.67	1.89	17	1
1:A:1253:MET:N	1:A:1253:MET:SD	0.67	2.68	14	3
1:A:1247:LEU:N	1:A:1247:LEU:CD2	0.67	2.54	18	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1253:MET:SD	1:A:1253:MET:C	0.67	2.73	10	1
1:A:1242:THR:N	1:A:1254:ASP:OD1	0.66	2.28	12	2
1:A:1229:PRO:O	1:A:1231:GLU:N	0.66	2.29	13	4
1:A:1236:LEU:O	1:A:1238:ASP:N	0.66	2.28	6	4
1:A:1247:LEU:HD11	1:A:1253:MET:CG	0.66	2.21	19	1
1:A:1251:THR:HG22	1:A:1252:ILE:H	0.66	1.51	4	2
1:A:1271:ASN:C	1:A:1271:ASN:ND2	0.66	2.48	17	1
1:A:1247:LEU:HD23	1:A:1253:MET:CE	0.66	2.21	10	1
1:A:1238:ASP:C	1:A:1239:THR:HG23	0.66	2.10	19	1
1:A:1232:PHE:CE2	1:A:1289:GLN:NE2	0.66	2.64	8	3
1:A:1247:LEU:HD11	1:A:1253:MET:CE	0.66	2.21	11	2
1:A:1237:MET:CE	1:A:1257:ILE:HG21	0.66	2.21	1	1
1:A:1247:LEU:HD23	1:A:1247:LEU:C	0.66	2.11	2	2
1:A:1260:ARG:O	1:A:1263:LEU:N	0.66	2.27	17	5
1:A:1251:THR:HG22	1:A:1252:ILE:N	0.66	2.07	4	4
1:A:1264:ASN:OD1	1:A:1265:SER:N	0.65	2.29	12	1
1:A:1289:GLN:O	1:A:1292:ALA:N	0.65	2.29	20	3
1:A:1274:THR:CG2	1:A:1275:LEU:N	0.65	2.60	13	1
1:A:1268:ASP:OD1	1:A:1272:ARG:N	0.65	2.29	6	7
1:A:1252:ILE:N	1:A:1252:ILE:CD1	0.65	2.59	1	2
1:A:1261:HIS:CE1	1:A:1265:SER:HG	0.65	2.09	5	1
1:A:1287:LYS:O	1:A:1290:ILE:N	0.65	2.29	8	6
1:A:1268:ASP:CB	1:A:1273:GLN:HE22	0.64	2.05	7	1
1:A:1232:PHE:N	1:A:1232:PHE:CD1	0.64	2.62	5	5
1:A:1252:ILE:C	1:A:1253:MET:SD	0.64	2.76	4	4
1:A:1271:ASN:O	1:A:1273:GLN:N	0.64	2.31	14	7
1:A:1289:GLN:NE2	1:A:1289:GLN:O	0.64	2.30	14	5
1:A:1237:MET:O	1:A:1237:MET:CG	0.64	2.46	16	1
1:A:1254:ASP:OD1	1:A:1256:SER:CB	0.64	2.45	6	2
1:A:1243:ASP:OD1	1:A:1243:ASP:N	0.64	2.29	8	1
1:A:1247:LEU:HD23	1:A:1253:MET:SD	0.64	2.32	14	1
1:A:1230:ASP:C	1:A:1233:ARG:NE	0.64	2.51	16	1
1:A:1237:MET:SD	1:A:1257:ILE:CD1	0.64	2.86	18	4
1:A:1230:ASP:OD1	1:A:1230:ASP:N	0.64	2.30	9	1
1:A:1234:ASP:OD1	1:A:1234:ASP:O	0.64	2.16	11	1
1:A:1236:LEU:HD21	1:A:1257:ILE:HG21	0.64	1.67	4	2
1:A:1289:GLN:C	1:A:1289:GLN:HE21	0.64	1.96	14	1
1:A:1247:LEU:HD21	1:A:1249:SER:HB3	0.63	1.67	12	2
1:A:1256:SER:O	1:A:1258:ILE:N	0.63	2.31	12	9
1:A:1247:LEU:CD2	1:A:1247:LEU:N	0.63	2.60	8	3
1:A:1252:ILE:HD12	1:A:1252:ILE:N	0.63	2.08	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1289:GLN:O	1:A:1289:GLN:NE2	0.63	2.32	1	1
1:A:1234:ASP:OD2	1:A:1253:MET:CB	0.63	2.46	19	3
1:A:1270:PHE:O	1:A:1271:ASN:C	0.63	2.36	7	3
1:A:1247:LEU:HD12	1:A:1275:LEU:CD2	0.63	2.24	6	2
1:A:1247:LEU:N	1:A:1247:LEU:CD1	0.63	2.47	9	1
1:A:1249:SER:CB	1:A:1271:ASN:HD21	0.62	2.07	13	2
1:A:1246:ARG:C	1:A:1247:LEU:HD23	0.62	2.14	11	1
1:A:1264:ASN:O	1:A:1265:SER:CB	0.62	2.46	5	11
1:A:1245:VAL:C	1:A:1252:ILE:HD13	0.62	2.13	3	2
1:A:1271:ASN:O	1:A:1272:ARG:O	0.62	2.17	17	2
1:A:1270:PHE:O	1:A:1271:ASN:CB	0.62	2.46	9	5
1:A:1238:ASP:O	1:A:1239:THR:O	0.62	2.16	16	1
1:A:1237:MET:HE1	1:A:1257:ILE:HG21	0.62	1.69	1	1
1:A:1256:SER:OG	1:A:1257:ILE:N	0.62	2.32	16	4
1:A:1280:LEU:CD2	1:A:1280:LEU:C	0.62	2.68	11	4
1:A:1271:ASN:ND2	1:A:1273:GLN:HE21	0.62	1.93	9	1
1:A:1242:THR:HG23	1:A:1243:ASP:CG	0.62	2.16	4	1
1:A:1237:MET:SD	1:A:1257:ILE:HD11	0.62	2.34	18	2
1:A:1260:ARG:O	1:A:1264:ASN:ND2	0.61	2.33	8	2
1:A:1280:LEU:N	1:A:1280:LEU:HD23	0.61	2.10	14	1
1:A:1254:ASP:C	1:A:1256:SER:N	0.61	2.53	15	19
1:A:1228:ALA:HB3	1:A:1233:ARG:NH2	0.61	2.10	7	1
1:A:1271:ASN:OD1	1:A:1273:GLN:N	0.61	2.31	15	2
1:A:1264:ASN:ND2	1:A:1264:ASN:H	0.61	1.94	1	2
1:A:1280:LEU:HD12	1:A:1280:LEU:O	0.61	1.96	19	1
1:A:1228:ALA:O	1:A:1229:PRO:O	0.61	2.19	17	6
1:A:1289:GLN:HE21	1:A:1290:ILE:N	0.61	1.91	5	2
1:A:1231:GLU:N	1:A:1233:ARG:NE	0.61	2.49	16	1
1:A:1270:PHE:O	1:A:1272:ARG:N	0.61	2.34	1	8
1:A:1270:PHE:O	1:A:1271:ASN:CG	0.61	2.38	15	5
1:A:1238:ASP:O	1:A:1239:THR:C	0.60	2.40	16	1
1:A:1272:ARG:CG	1:A:1272:ARG:O	0.60	2.49	17	1
1:A:1243:ASP:OD1	1:A:1254:ASP:OD1	0.60	2.19	3	7
1:A:1232:PHE:CD1	1:A:1289:GLN:NE2	0.60	2.69	2	1
1:A:1247:LEU:HD21	1:A:1253:MET:CE	0.60	2.27	9	1
1:A:1236:LEU:C	1:A:1236:LEU:CD1	0.60	2.68	13	1
1:A:1292:ALA:O	1:A:1294:MET:N	0.60	2.35	20	1
1:A:1289:GLN:NE2	1:A:1289:GLN:C	0.60	2.54	14	4
1:A:1266:PRO:O	1:A:1274:THR:O	0.60	2.20	6	6
1:A:1271:ASN:C	1:A:1271:ASN:HD22	0.60	2.00	17	1
1:A:1261:HIS:ND1	1:A:1265:SER:OG	0.60	2.31	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1294:MET:SD	1:A:1294:MET:C	0.60	2.80	18	3
1:A:1280:LEU:H	1:A:1280:LEU:HD12	0.60	1.56	7	1
1:A:1234:ASP:CG	1:A:1237:MET:SD	0.60	2.80	8	1
1:A:1232:PHE:N	1:A:1233:ARG:HH21	0.60	1.94	13	1
1:A:1271:ASN:C	1:A:1271:ASN:OD1	0.60	2.40	18	2
1:A:1234:ASP:CB	1:A:1238:ASP:CG	0.60	2.70	16	3
1:A:1234:ASP:O	1:A:1236:LEU:N	0.60	2.35	2	2
1:A:1243:ASP:OD1	1:A:1255:ARG:N	0.60	2.35	15	1
1:A:1263:LEU:HD12	1:A:1263:LEU:O	0.60	1.97	15	1
1:A:1271:ASN:O	1:A:1272:ARG:C	0.59	2.41	5	9
1:A:1234:ASP:C	1:A:1234:ASP:OD1	0.59	2.39	20	7
1:A:1263:LEU:C	1:A:1263:LEU:HD23	0.59	2.18	4	1
1:A:1262:LEU:O	1:A:1264:ASN:N	0.59	2.35	8	1
1:A:1274:THR:O	1:A:1275:LEU:C	0.59	2.39	13	2
1:A:1230:ASP:OD1	1:A:1233:ARG:NH1	0.59	2.35	3	1
1:A:1232:PHE:CZ	1:A:1289:GLN:OE1	0.59	2.55	3	2
1:A:1242:THR:OG1	1:A:1254:ASP:OD2	0.59	2.20	20	4
1:A:1268:ASP:HB3	1:A:1275:LEU:HD23	0.59	1.74	15	1
1:A:1237:MET:O	1:A:1238:ASP:OD1	0.59	2.20	5	6
1:A:1264:ASN:N	1:A:1264:ASN:HD22	0.59	1.95	11	1
1:A:1294:MET:SD	1:A:1294:MET:O	0.59	2.61	18	1
1:A:1243:ASP:OD2	1:A:1255:ARG:N	0.59	2.36	1	1
1:A:1273:GLN:O	1:A:1274:THR:C	0.59	2.40	3	7
1:A:1264:ASN:ND2	1:A:1264:ASN:O	0.59	2.33	4	1
1:A:1247:LEU:HD21	1:A:1251:THR:HB	0.59	1.73	10	1
1:A:1231:GLU:OE2	1:A:1232:PHE:CZ	0.59	2.56	11	1
1:A:1268:ASP:OD1	1:A:1268:ASP:C	0.59	2.41	10	2
1:A:1268:ASP:OD1	1:A:1271:ASN:N	0.59	2.35	20	5
1:A:1267:THR:O	1:A:1268:ASP:O	0.59	2.21	12	16
1:A:1274:THR:O	1:A:1275:LEU:O	0.59	2.21	6	5
1:A:1232:PHE:O	1:A:1241:MET:CE	0.59	2.51	10	2
1:A:1251:THR:O	1:A:1253:MET:SD	0.58	2.61	1	2
1:A:1230:ASP:O	1:A:1231:GLU:OE1	0.58	2.21	8	1
1:A:1268:ASP:OD1	1:A:1270:PHE:O	0.58	2.20	17	3
1:A:1247:LEU:HD11	1:A:1253:MET:HG2	0.58	1.75	19	1
1:A:1238:ASP:OD1	1:A:1239:THR:O	0.58	2.21	20	2
1:A:1270:PHE:O	1:A:1271:ASN:O	0.58	2.21	12	3
1:A:1236:LEU:O	1:A:1238:ASP:OD2	0.58	2.21	5	1
1:A:1262:LEU:C	1:A:1262:LEU:HD12	0.58	2.19	20	3
1:A:1244:PRO:HG2	1:A:1286:LEU:HD11	0.58	1.73	11	1
1:A:1284:PRO:O	1:A:1288:GLU:OE1	0.58	2.21	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1273:GLN:NE2	1:A:1275:LEU:H	0.58	1.95	20	1
1:A:1254:ASP:OD1	1:A:1256:SER:OG	0.58	2.22	17	2
1:A:1287:LYS:O	1:A:1291:GLN:OE1	0.58	2.22	7	1
1:A:1259:LEU:O	1:A:1262:LEU:CD1	0.58	2.50	17	1
1:A:1242:THR:OG1	1:A:1243:ASP:OD1	0.58	2.19	3	6
1:A:1238:ASP:OD1	1:A:1238:ASP:C	0.58	2.41	20	5
1:A:1232:PHE:CG	1:A:1289:GLN:NE2	0.58	2.72	2	1
1:A:1265:SER:O	1:A:1267:THR:N	0.58	2.37	9	5
1:A:1254:ASP:OD1	1:A:1256:SER:N	0.58	2.37	6	1
1:A:1243:ASP:OD1	1:A:1256:SER:OG	0.58	2.21	7	1
1:A:1271:ASN:OD1	1:A:1273:GLN:NE2	0.58	2.37	7	1
1:A:1234:ASP:OD1	1:A:1235:PRO:N	0.58	2.36	20	6
1:A:1280:LEU:O	1:A:1280:LEU:HD12	0.58	1.97	8	2
1:A:1268:ASP:OD2	1:A:1271:ASN:OD1	0.58	2.22	12	2
1:A:1261:HIS:O	1:A:1265:SER:O	0.58	2.21	2	3
1:A:1243:ASP:OD2	1:A:1254:ASP:OD1	0.58	2.20	10	8
1:A:1232:PHE:CE1	1:A:1289:GLN:CD	0.58	2.76	8	3
1:A:1243:ASP:C	1:A:1243:ASP:OD1	0.58	2.42	11	2
1:A:1255:ARG:C	1:A:1255:ARG:CD	0.58	2.72	7	1
1:A:1270:PHE:O	1:A:1271:ASN:OD1	0.58	2.21	17	2
1:A:1268:ASP:OD1	1:A:1271:ASN:OD1	0.57	2.22	10	2
1:A:1238:ASP:O	1:A:1238:ASP:OD1	0.57	2.22	10	3
1:A:1289:GLN:C	1:A:1289:GLN:NE2	0.57	2.57	1	2
1:A:1238:ASP:O	1:A:1238:ASP:OD2	0.57	2.22	17	2
1:A:1233:ARG:N	1:A:1233:ARG:NE	0.57	2.53	13	1
1:A:1232:PHE:O	1:A:1241:MET:HE2	0.57	1.99	10	3
1:A:1261:HIS:O	1:A:1264:ASN:OD1	0.57	2.22	20	2
1:A:1238:ASP:OD2	1:A:1241:MET:CG	0.57	2.52	19	2
1:A:1266:PRO:C	1:A:1274:THR:O	0.57	2.42	3	2
1:A:1273:GLN:OE1	1:A:1273:GLN:O	0.57	2.21	7	1
1:A:1283:VAL:O	1:A:1286:LEU:HD12	0.57	1.99	11	1
1:A:1280:LEU:HD12	1:A:1280:LEU:C	0.57	2.20	19	2
1:A:1231:GLU:CD	1:A:1232:PHE:CE1	0.57	2.78	11	1
1:A:1260:ARG:O	1:A:1263:LEU:CB	0.57	2.52	4	3
1:A:1277:GLU:O	1:A:1279:MET:N	0.57	2.38	9	1
1:A:1276:THR:O	1:A:1280:LEU:HD13	0.57	2.00	4	1
1:A:1247:LEU:HD13	1:A:1247:LEU:H	0.57	1.58	13	1
1:A:1238:ASP:OD1	1:A:1238:ASP:O	0.57	2.23	2	2
1:A:1229:PRO:O	1:A:1230:ASP:C	0.57	2.42	10	5
1:A:1254:ASP:C	1:A:1256:SER:H	0.57	2.02	15	15
1:A:1261:HIS:CE1	1:A:1265:SER:OG	0.57	2.57	5	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1243:ASP:O	1:A:1243:ASP:OD1	0.57	2.22	15	2
1:A:1268:ASP:CG	1:A:1270:PHE:H	0.56	2.03	5	8
1:A:1248:PRO:C	1:A:1250:GLY:N	0.56	2.59	2	8
1:A:1242:THR:C	1:A:1243:ASP:OD1	0.56	2.43	20	5
1:A:1237:MET:O	1:A:1238:ASP:CB	0.56	2.53	18	2
1:A:1267:THR:O	1:A:1268:ASP:C	0.56	2.43	1	18
1:A:1237:MET:C	1:A:1239:THR:N	0.56	2.59	1	2
1:A:1276:THR:O	1:A:1280:LEU:CD1	0.56	2.54	4	1
1:A:1251:THR:CG2	1:A:1252:ILE:N	0.56	2.68	19	3
1:A:1254:ASP:OD2	1:A:1256:SER:OG	0.56	2.22	6	1
1:A:1294:MET:C	1:A:1294:MET:SD	0.56	2.83	6	1
1:A:1237:MET:SD	1:A:1257:ILE:HG21	0.56	2.39	7	1
1:A:1268:ASP:CG	1:A:1271:ASN:ND2	0.56	2.59	12	1
1:A:1240:LEU:O	1:A:1241:MET:C	0.56	2.43	20	3
1:A:1271:ASN:OD1	1:A:1273:GLN:CB	0.56	2.54	15	1
1:A:1232:PHE:CD1	1:A:1289:GLN:CD	0.56	2.78	2	1
1:A:1232:PHE:CZ	1:A:1289:GLN:CD	0.56	2.79	3	4
1:A:1276:THR:O	1:A:1280:LEU:CD2	0.56	2.52	15	1
1:A:1243:ASP:OD1	1:A:1243:ASP:C	0.56	2.43	19	3
1:A:1283:VAL:HG13	1:A:1283:VAL:O	0.56	2.01	2	1
1:A:1275:LEU:HD13	1:A:1276:THR:H	0.56	1.59	2	1
1:A:1243:ASP:OD1	1:A:1254:ASP:OD2	0.56	2.23	12	2
1:A:1247:LEU:C	1:A:1247:LEU:CD2	0.56	2.71	12	1
1:A:1279:MET:SD	1:A:1279:MET:N	0.56	2.79	18	1
1:A:1245:VAL:O	1:A:1252:ILE:HD13	0.56	2.01	3	2
1:A:1264:ASN:O	1:A:1265:SER:OG	0.56	2.23	5	8
1:A:1238:ASP:C	1:A:1238:ASP:OD1	0.56	2.43	9	2
1:A:1240:LEU:O	1:A:1241:MET:O	0.56	2.23	20	1
1:A:1252:ILE:HD11	1:A:1283:VAL:CG2	0.56	2.30	3	1
1:A:1264:ASN:ND2	1:A:1264:ASN:N	0.56	2.54	1	1
1:A:1284:PRO:C	1:A:1286:LEU:N	0.56	2.59	6	8
1:A:1290:ILE:C	1:A:1292:ALA:N	0.56	2.58	14	5
1:A:1234:ASP:CG	1:A:1238:ASP:CG	0.56	2.64	16	1
1:A:1237:MET:O	1:A:1238:ASP:CG	0.56	2.44	12	7
1:A:1243:ASP:OD2	1:A:1255:ARG:NE	0.56	2.39	19	1
1:A:1243:ASP:CG	1:A:1254:ASP:OD1	0.55	2.45	8	5
1:A:1256:SER:C	1:A:1258:ILE:N	0.55	2.57	12	10
1:A:1249:SER:OG	1:A:1271:ASN:CG	0.55	2.45	6	5
1:A:1262:LEU:C	1:A:1264:ASN:H	0.55	2.05	8	1
1:A:1234:ASP:O	1:A:1238:ASP:N	0.55	2.38	1	4
1:A:1228:ALA:HB2	1:A:1293:TRP:CZ3	0.55	2.36	13	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1247:LEU:H	1:A:1247:LEU:HD13	0.55	1.56	20	2
1:A:1284:PRO:C	1:A:1286:LEU:H	0.55	2.05	6	3
1:A:1243:ASP:OD2	1:A:1256:SER:OG	0.55	2.25	9	2
1:A:1234:ASP:CG	1:A:1238:ASP:OD1	0.55	2.44	16	1
1:A:1234:ASP:N	1:A:1238:ASP:OD1	0.55	2.28	19	1
1:A:1275:LEU:C	1:A:1275:LEU:CD1	0.55	2.73	4	3
1:A:1267:THR:O	1:A:1267:THR:OG1	0.55	2.24	19	1
1:A:1257:ILE:HG22	1:A:1257:ILE:O	0.55	2.01	13	1
1:A:1261:HIS:O	1:A:1265:SER:C	0.55	2.44	10	2
1:A:1266:PRO:C	1:A:1267:THR:HG22	0.55	2.22	3	1
1:A:1268:ASP:N	1:A:1273:GLN:O	0.55	2.39	18	4
1:A:1239:THR:O	1:A:1240:LEU:O	0.55	2.24	17	1
1:A:1248:PRO:O	1:A:1249:SER:C	0.55	2.44	6	6
1:A:1285:GLU:O	1:A:1285:GLU:CD	0.55	2.44	4	1
1:A:1261:HIS:CE1	1:A:1265:SER:O	0.55	2.60	6	1
1:A:1228:ALA:H	1:A:1233:ARG:NH2	0.55	2.00	9	1
1:A:1247:LEU:HD22	1:A:1251:THR:O	0.55	2.02	20	5
1:A:1289:GLN:HE21	1:A:1289:GLN:C	0.55	2.05	2	1
1:A:1268:ASP:C	1:A:1268:ASP:OD1	0.55	2.45	9	7
1:A:1270:PHE:C	1:A:1271:ASN:CG	0.55	2.66	8	1
1:A:1286:LEU:H	1:A:1286:LEU:CD2	0.55	2.06	13	2
1:A:1273:GLN:C	1:A:1275:LEU:N	0.54	2.58	8	5
1:A:1234:ASP:OD1	1:A:1237:MET:CE	0.54	2.55	12	1
1:A:1261:HIS:O	1:A:1264:ASN:CG	0.54	2.45	13	1
1:A:1287:LYS:O	1:A:1289:GLN:N	0.54	2.40	4	1
1:A:1252:ILE:HG22	1:A:1253:MET:N	0.54	2.16	13	3
1:A:1237:MET:O	1:A:1239:THR:N	0.54	2.40	1	2
1:A:1256:SER:C	1:A:1258:ILE:H	0.54	2.04	12	4
1:A:1234:ASP:OD1	1:A:1234:ASP:C	0.54	2.45	11	4
1:A:1264:ASN:OD1	1:A:1264:ASN:C	0.54	2.46	7	2
1:A:1270:PHE:C	1:A:1272:ARG:H	0.54	2.06	5	7
1:A:1236:LEU:C	1:A:1238:ASP:N	0.54	2.59	6	4
1:A:1287:LYS:C	1:A:1291:GLN:OE1	0.54	2.46	7	1
1:A:1246:ARG:C	1:A:1247:LEU:HD22	0.54	2.23	8	1
1:A:1237:MET:SD	1:A:1239:THR:CA	0.54	2.95	17	1
1:A:1272:ARG:HH11	1:A:1272:ARG:CG	0.54	2.14	17	1
1:A:1287:LYS:O	1:A:1288:GLU:C	0.54	2.45	13	11
1:A:1248:PRO:C	1:A:1250:GLY:H	0.54	2.06	10	4
1:A:1243:ASP:OD1	1:A:1254:ASP:CG	0.54	2.46	5	1
1:A:1228:ALA:CB	1:A:1229:PRO:CD	0.54	2.86	14	7
1:A:1239:THR:O	1:A:1240:LEU:C	0.54	2.45	17	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1237:MET:C	1:A:1238:ASP:CG	0.54	2.66	4	6
1:A:1263:LEU:C	1:A:1263:LEU:HD12	0.54	2.23	15	1
1:A:1247:LEU:HD12	1:A:1253:MET:CE	0.54	2.33	1	1
1:A:1245:VAL:HG21	1:A:1255:ARG:HG2	0.54	1.79	13	2
1:A:1251:THR:C	1:A:1252:ILE:HD12	0.53	2.23	1	2
1:A:1277:GLU:C	1:A:1279:MET:H	0.53	2.05	9	5
1:A:1237:MET:SD	1:A:1257:ILE:CG2	0.53	2.97	7	1
1:A:1237:MET:C	1:A:1238:ASP:OD1	0.53	2.47	5	2
1:A:1234:ASP:CG	1:A:1236:LEU:H	0.53	2.05	16	2
1:A:1265:SER:OG	1:A:1265:SER:O	0.53	2.23	14	1
1:A:1280:LEU:N	1:A:1280:LEU:CD2	0.53	2.72	14	1
1:A:1268:ASP:OD2	1:A:1271:ASN:CG	0.53	2.47	12	1
1:A:1252:ILE:CG2	1:A:1253:MET:N	0.53	2.72	13	4
1:A:1274:THR:O	1:A:1275:LEU:CB	0.53	2.57	3	1
1:A:1261:HIS:CE1	1:A:1265:SER:CB	0.53	2.91	5	1
1:A:1273:GLN:C	1:A:1275:LEU:H	0.53	2.07	16	4
1:A:1236:LEU:C	1:A:1238:ASP:H	0.53	2.06	11	4
1:A:1262:LEU:C	1:A:1264:ASN:N	0.53	2.60	8	2
1:A:1283:VAL:HG12	1:A:1283:VAL:O	0.53	2.02	20	1
1:A:1265:SER:C	1:A:1267:THR:H	0.53	2.06	4	3
1:A:1245:VAL:N	1:A:1253:MET:O	0.53	2.36	3	1
1:A:1276:THR:HG23	1:A:1279:MET:CB	0.53	2.34	13	1
1:A:1264:ASN:C	1:A:1264:ASN:HD22	0.53	2.07	4	1
1:A:1277:GLU:HA	1:A:1280:LEU:HD21	0.53	1.80	13	1
1:A:1234:ASP:CB	1:A:1237:MET:SD	0.53	2.97	8	1
1:A:1237:MET:C	1:A:1239:THR:H	0.53	2.06	1	1
1:A:1236:LEU:HD22	1:A:1269:PRO:CB	0.53	2.34	13	1
1:A:1247:LEU:CD1	1:A:1247:LEU:H	0.52	2.17	13	1
1:A:1266:PRO:O	1:A:1267:THR:CG2	0.52	2.56	13	1
1:A:1266:PRO:O	1:A:1267:THR:HG23	0.52	2.04	13	1
1:A:1255:ARG:C	1:A:1255:ARG:HE	0.52	2.07	4	1
1:A:1280:LEU:N	1:A:1280:LEU:HD12	0.52	2.19	7	1
1:A:1233:ARG:NE	1:A:1233:ARG:CA	0.52	2.73	13	1
1:A:1232:PHE:N	1:A:1233:ARG:NH2	0.52	2.54	13	1
1:A:1272:ARG:CG	1:A:1272:ARG:NH1	0.52	2.70	17	1
1:A:1270:PHE:O	1:A:1271:ASN:ND2	0.52	2.43	15	2
1:A:1286:LEU:CD2	1:A:1286:LEU:C	0.52	2.72	11	1
1:A:1277:GLU:CD	1:A:1277:GLU:H	0.52	1.99	2	1
1:A:1234:ASP:C	1:A:1236:LEU:H	0.52	2.08	2	1
1:A:1268:ASP:CA	1:A:1275:LEU:HD13	0.52	2.35	3	1
1:A:1254:ASP:O	1:A:1257:ILE:N	0.52	2.39	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1247:LEU:HD23	1:A:1253:MET:HE1	0.52	1.80	10	1
1:A:1242:THR:C	1:A:1243:ASP:CG	0.52	2.69	14	1
1:A:1238:ASP:O	1:A:1238:ASP:CG	0.52	2.46	17	1
1:A:1229:PRO:C	1:A:1231:GLU:H	0.51	2.09	5	1
1:A:1244:PRO:CG	1:A:1286:LEU:HD11	0.51	2.36	11	1
1:A:1273:GLN:O	1:A:1274:THR:CB	0.51	2.58	13	1
1:A:1228:ALA:CB	1:A:1293:TRP:CH2	0.51	2.93	12	4
1:A:1275:LEU:CD1	1:A:1275:LEU:C	0.51	2.79	7	2
1:A:1284:PRO:O	1:A:1287:LYS:N	0.51	2.44	8	2
1:A:1256:SER:O	1:A:1257:ILE:C	0.51	2.48	5	5
1:A:1288:GLU:O	1:A:1289:GLN:C	0.51	2.48	12	2
1:A:1290:ILE:HG22	1:A:1291:GLN:N	0.51	2.19	8	3
1:A:1247:LEU:CB	1:A:1248:PRO:CD	0.51	2.88	11	1
1:A:1238:ASP:OD2	1:A:1241:MET:HG3	0.51	2.06	20	2
1:A:1280:LEU:HD22	1:A:1280:LEU:O	0.51	2.04	11	1
1:A:1270:PHE:CD1	1:A:1270:PHE:N	0.51	2.72	19	1
1:A:1268:ASP:CB	1:A:1273:GLN:NE2	0.51	2.73	7	1
1:A:1237:MET:O	1:A:1238:ASP:C	0.51	2.49	11	1
1:A:1264:ASN:HD22	1:A:1264:ASN:N	0.51	1.94	1	2
1:A:1283:VAL:O	1:A:1286:LEU:CD1	0.51	2.59	11	1
1:A:1289:GLN:CD	1:A:1289:GLN:C	0.50	2.68	13	2
1:A:1271:ASN:C	1:A:1272:ARG:CG	0.50	2.79	7	1
1:A:1286:LEU:CD1	1:A:1286:LEU:C	0.50	2.75	11	1
1:A:1237:MET:O	1:A:1238:ASP:OD2	0.50	2.29	2	2
1:A:1252:ILE:HD11	1:A:1283:VAL:HG21	0.50	1.81	3	2
1:A:1287:LYS:NZ	1:A:1291:GLN:NE2	0.50	2.59	5	1
1:A:1254:ASP:OD1	1:A:1256:SER:CA	0.50	2.59	6	1
1:A:1255:ARG:O	1:A:1259:LEU:HD23	0.50	2.05	6	1
1:A:1247:LEU:HD21	1:A:1249:SER:CB	0.50	2.37	12	1
1:A:1275:LEU:CD1	1:A:1276:THR:O	0.50	2.59	10	1
1:A:1242:THR:H	1:A:1254:ASP:CG	0.50	2.08	14	1
1:A:1287:LYS:HZ3	1:A:1287:LYS:HB3	0.50	1.67	5	1
1:A:1276:THR:HG23	1:A:1279:MET:HB2	0.50	1.84	13	2
1:A:1259:LEU:C	1:A:1259:LEU:CD1	0.50	2.79	15	1
1:A:1255:ARG:HH21	1:A:1280:LEU:CD2	0.50	2.20	16	1
1:A:1242:THR:CB	1:A:1254:ASP:OD2	0.50	2.60	20	1
1:A:1264:ASN:C	1:A:1264:ASN:ND2	0.50	2.65	4	1
1:A:1271:ASN:O	1:A:1272:ARG:CB	0.50	2.59	7	2
1:A:1280:LEU:CD1	1:A:1280:LEU:C	0.50	2.77	8	2
1:A:1293:TRP:CE3	1:A:1294:MET:N	0.50	2.79	12	3
1:A:1275:LEU:C	1:A:1275:LEU:HD13	0.50	2.27	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1271:ASN:C	1:A:1273:GLN:N	0.50	2.65	14	2
1:A:1264:ASN:N	1:A:1264:ASN:ND2	0.50	2.59	10	2
1:A:1289:GLN:O	1:A:1290:ILE:C	0.50	2.49	20	2
1:A:1230:ASP:C	1:A:1233:ARG:HE	0.50	2.09	16	1
1:A:1231:GLU:C	1:A:1233:ARG:H	0.49	2.10	3	3
1:A:1275:LEU:HD23	1:A:1276:THR:N	0.49	2.22	12	2
1:A:1246:ARG:HH21	1:A:1283:VAL:HG11	0.49	1.68	7	1
1:A:1286:LEU:CD2	1:A:1286:LEU:N	0.49	2.63	13	2
1:A:1238:ASP:C	1:A:1239:THR:CG2	0.49	2.79	19	1
1:A:1267:THR:OG1	1:A:1267:THR:O	0.49	2.28	15	3
1:A:1247:LEU:HD23	1:A:1275:LEU:HD21	0.49	1.84	16	1
1:A:1277:GLU:O	1:A:1277:GLU:OE1	0.49	2.31	14	1
1:A:1270:PHE:C	1:A:1272:ARG:N	0.49	2.64	19	8
1:A:1229:PRO:C	1:A:1230:ASP:OD1	0.49	2.51	11	1
1:A:1236:LEU:HD22	1:A:1269:PRO:HB2	0.49	1.84	13	1
1:A:1242:THR:HG23	1:A:1254:ASP:OD2	0.49	2.08	20	1
1:A:1230:ASP:O	1:A:1230:ASP:CG	0.49	2.48	3	3
1:A:1284:PRO:O	1:A:1285:GLU:C	0.49	2.51	8	2
1:A:1247:LEU:HD21	1:A:1253:MET:HE2	0.49	1.83	9	1
1:A:1247:LEU:CD2	1:A:1251:THR:O	0.49	2.61	18	2
1:A:1266:PRO:C	1:A:1267:THR:CG2	0.49	2.81	3	2
1:A:1266:PRO:O	1:A:1274:THR:C	0.49	2.51	12	3
1:A:1264:ASN:CG	1:A:1265:SER:N	0.49	2.65	12	1
1:A:1247:LEU:CD2	1:A:1253:MET:SD	0.49	3.01	14	1
1:A:1232:PHE:CD1	1:A:1289:GLN:OE1	0.48	2.66	2	1
1:A:1280:LEU:HD22	1:A:1281:GLU:N	0.48	2.23	20	2
1:A:1247:LEU:CD2	1:A:1251:THR:H	0.48	2.21	12	3
1:A:1266:PRO:O	1:A:1275:LEU:N	0.48	2.46	17	1
1:A:1236:LEU:HG	1:A:1237:MET:N	0.48	2.22	18	11
1:A:1273:GLN:O	1:A:1274:THR:O	0.48	2.32	10	1
1:A:1271:ASN:OD1	1:A:1272:ARG:N	0.48	2.47	18	2
1:A:1237:MET:CG	1:A:1237:MET:O	0.48	2.61	19	3
1:A:1234:ASP:C	1:A:1236:LEU:N	0.48	2.66	2	1
1:A:1268:ASP:OD1	1:A:1275:LEU:CD2	0.48	2.62	8	1
1:A:1265:SER:N	1:A:1266:PRO:CD	0.48	2.76	9	1
1:A:1289:GLN:O	1:A:1292:ALA:CB	0.48	2.61	20	2
1:A:1259:LEU:C	1:A:1259:LEU:HD13	0.48	2.28	15	1
1:A:1236:LEU:HD22	1:A:1269:PRO:HG3	0.48	1.84	17	1
1:A:1253:MET:CG	1:A:1254:ASP:N	0.48	2.76	18	2
1:A:1246:ARG:HE	1:A:1246:ARG:C	0.48	2.11	12	1
1:A:1237:MET:O	1:A:1237:MET:HG2	0.48	2.07	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1258:ILE:HD12	1:A:1275:LEU:CD1	0.48	2.38	19	1
1:A:1268:ASP:OD1	1:A:1270:PHE:C	0.48	2.52	4	6
1:A:1288:GLU:O	1:A:1292:ALA:CB	0.48	2.62	19	1
1:A:1254:ASP:O	1:A:1255:ARG:C	0.48	2.52	12	10
1:A:1246:ARG:HA	1:A:1252:ILE:HD13	0.48	1.86	11	1
1:A:1258:ILE:O	1:A:1259:LEU:C	0.48	2.53	5	1
1:A:1246:ARG:N	1:A:1281:GLU:O	0.47	2.42	17	3
1:A:1264:ASN:C	1:A:1265:SER:OG	0.47	2.52	5	2
1:A:1268:ASP:CB	1:A:1271:ASN:ND2	0.47	2.77	12	1
1:A:1234:ASP:OD2	1:A:1236:LEU:HD11	0.47	2.09	6	1
1:A:1280:LEU:CD2	1:A:1280:LEU:H	0.47	2.22	14	1
1:A:1253:MET:HG3	1:A:1254:ASP:N	0.47	2.24	18	1
1:A:1247:LEU:HD21	1:A:1253:MET:SD	0.47	2.49	3	3
1:A:1257:ILE:O	1:A:1257:ILE:HG22	0.47	2.09	12	2
1:A:1276:THR:O	1:A:1280:LEU:HD23	0.47	2.09	15	1
1:A:1280:LEU:O	1:A:1280:LEU:HD22	0.47	2.10	18	3
1:A:1249:SER:HG	1:A:1251:THR:HG1	0.47	1.46	20	1
1:A:1232:PHE:CD2	1:A:1289:GLN:NE2	0.47	2.83	2	1
1:A:1237:MET:SD	1:A:1239:THR:HB	0.47	2.48	12	3
1:A:1290:ILE:C	1:A:1292:ALA:H	0.47	2.12	14	3
1:A:1288:GLU:O	1:A:1292:ALA:HB2	0.47	2.10	19	1
1:A:1289:GLN:C	1:A:1289:GLN:CD	0.47	2.73	20	1
1:A:1277:GLU:O	1:A:1278:SER:OG	0.47	2.22	14	1
1:A:1249:SER:O	1:A:1271:ASN:ND2	0.47	2.48	3	1
1:A:1253:MET:HG2	1:A:1254:ASP:N	0.47	2.25	10	1
1:A:1232:PHE:C	1:A:1241:MET:CE	0.46	2.84	4	1
1:A:1268:ASP:HA	1:A:1275:LEU:HD23	0.46	1.86	13	1
1:A:1262:LEU:HD12	1:A:1262:LEU:C	0.46	2.30	4	2
1:A:1233:ARG:N	1:A:1241:MET:HE3	0.46	2.25	20	1
1:A:1265:SER:C	1:A:1267:THR:N	0.46	2.69	5	3
1:A:1280:LEU:CD1	1:A:1280:LEU:N	0.46	2.63	18	2
1:A:1272:ARG:O	1:A:1272:ARG:CG	0.46	2.64	8	2
1:A:1292:ALA:C	1:A:1294:MET:N	0.46	2.68	20	1
1:A:1228:ALA:C	1:A:1233:ARG:HH22	0.46	2.14	7	1
1:A:1236:LEU:HD12	1:A:1236:LEU:O	0.46	2.11	9	1
1:A:1264:ASN:OD1	1:A:1265:SER:OG	0.46	2.23	12	1
1:A:1236:LEU:CD2	1:A:1269:PRO:CB	0.46	2.94	13	1
1:A:1247:LEU:O	1:A:1250:GLY:N	0.46	2.38	4	1
1:A:1244:PRO:CB	1:A:1286:LEU:HD11	0.46	2.41	5	1
1:A:1275:LEU:CD1	1:A:1276:THR:N	0.46	2.79	2	1
1:A:1255:ARG:NH1	1:A:1277:GLU:OE2	0.46	2.49	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1247:LEU:HD13	1:A:1275:LEU:HD21	0.46	1.88	15	1
1:A:1231:GLU:C	1:A:1233:ARG:N	0.45	2.70	1	2
1:A:1247:LEU:HD11	1:A:1253:MET:HE3	0.45	1.88	11	1
1:A:1268:ASP:OD2	1:A:1270:PHE:N	0.45	2.49	12	1
1:A:1271:ASN:ND2	1:A:1272:ARG:H	0.45	2.09	12	1
1:A:1233:ARG:N	1:A:1241:MET:CE	0.45	2.79	20	1
1:A:1251:THR:CG2	1:A:1252:ILE:H	0.45	2.23	4	1
1:A:1236:LEU:HD12	1:A:1236:LEU:C	0.45	2.32	5	1
1:A:1229:PRO:C	1:A:1230:ASP:CG	0.45	2.75	9	1
1:A:1230:ASP:OD1	1:A:1233:ARG:NH2	0.45	2.49	12	1
1:A:1237:MET:SD	1:A:1238:ASP:N	0.45	2.89	12	1
1:A:1237:MET:SD	1:A:1257:ILE:HG13	0.45	2.51	18	3
1:A:1286:LEU:O	1:A:1287:LYS:C	0.45	2.53	12	6
1:A:1234:ASP:OD1	1:A:1236:LEU:C	0.45	2.55	10	2
1:A:1274:THR:HG22	1:A:1275:LEU:N	0.45	2.25	13	2
1:A:1283:VAL:HG23	1:A:1283:VAL:O	0.45	2.10	16	1
1:A:1270:PHE:O	1:A:1271:ASN:HB3	0.45	2.11	9	2
1:A:1284:PRO:O	1:A:1288:GLU:CD	0.45	2.55	13	1
1:A:1277:GLU:HA	1:A:1280:LEU:HD23	0.45	1.88	15	1
1:A:1271:ASN:ND2	1:A:1273:GLN:HG3	0.45	2.26	18	1
1:A:1242:THR:O	1:A:1243:ASP:OD1	0.45	2.34	20	1
1:A:1234:ASP:HB3	1:A:1237:MET:SD	0.45	2.52	8	1
1:A:1287:LYS:NZ	1:A:1291:GLN:HE22	0.45	2.10	5	1
1:A:1254:ASP:OD1	1:A:1254:ASP:O	0.45	2.35	6	1
1:A:1249:SER:OG	1:A:1249:SER:O	0.45	2.30	11	1
1:A:1247:LEU:HD23	1:A:1247:LEU:N	0.45	2.26	15	1
1:A:1231:GLU:O	1:A:1233:ARG:N	0.45	2.50	3	1
1:A:1268:ASP:HB2	1:A:1275:LEU:HD23	0.45	1.87	10	1
1:A:1277:GLU:O	1:A:1278:SER:CB	0.44	2.65	2	1
1:A:1236:LEU:CD2	1:A:1257:ILE:HG21	0.44	2.42	4	1
1:A:1277:GLU:C	1:A:1279:MET:N	0.44	2.71	18	3
1:A:1280:LEU:O	1:A:1280:LEU:HD23	0.44	2.12	12	1
1:A:1231:GLU:C	1:A:1232:PHE:CD1	0.44	2.90	17	1
1:A:1254:ASP:CG	1:A:1256:SER:OG	0.44	2.56	6	2
1:A:1233:ARG:N	1:A:1233:ARG:HE	0.44	2.09	13	1
1:A:1253:MET:SD	1:A:1270:PHE:CE2	0.44	3.10	18	1
1:A:1266:PRO:C	1:A:1267:THR:HG23	0.44	2.33	13	1
1:A:1268:ASP:N	1:A:1275:LEU:HB2	0.44	2.27	18	2
1:A:1230:ASP:O	1:A:1233:ARG:NH2	0.44	2.51	16	1
1:A:1280:LEU:HD22	1:A:1280:LEU:N	0.44	2.26	18	1
1:A:1267:THR:N	1:A:1275:LEU:HB2	0.44	2.28	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1273:GLN:O	1:A:1274:THR:HB	0.44	2.12	13	1
1:A:1263:LEU:C	1:A:1263:LEU:CD1	0.44	2.86	15	1
1:A:1260:ARG:O	1:A:1261:HIS:C	0.44	2.54	17	3
1:A:1242:THR:CG2	1:A:1254:ASP:OD2	0.43	2.66	7	1
1:A:1247:LEU:CD1	1:A:1253:MET:CE	0.43	2.96	15	2
1:A:1268:ASP:HB3	1:A:1273:GLN:H	0.43	1.73	12	1
1:A:1230:ASP:C	1:A:1230:ASP:OD1	0.43	2.56	19	1
1:A:1247:LEU:CD2	1:A:1247:LEU:C	0.43	2.77	2	1
1:A:1272:ARG:N	1:A:1272:ARG:CD	0.43	2.80	2	1
1:A:1239:THR:OG1	1:A:1240:LEU:N	0.43	2.51	19	2
1:A:1278:SER:N	1:A:1280:LEU:HD12	0.43	2.28	20	1
1:A:1247:LEU:HD12	1:A:1275:LEU:HD21	0.43	1.89	2	2
1:A:1261:HIS:CE1	1:A:1265:SER:HB2	0.43	2.47	5	1
1:A:1260:ARG:CD	1:A:1260:ARG:H	0.43	2.26	10	1
1:A:1271:ASN:ND2	1:A:1273:GLN:CG	0.43	2.82	18	1
1:A:1279:MET:O	1:A:1279:MET:CG	0.43	2.67	3	1
1:A:1249:SER:CB	1:A:1271:ASN:HD22	0.43	2.26	15	2
1:A:1290:ILE:O	1:A:1291:GLN:C	0.43	2.57	11	2
1:A:1233:ARG:O	1:A:1234:ASP:C	0.43	2.57	13	2
1:A:1254:ASP:C	1:A:1254:ASP:OD1	0.43	2.54	17	1
1:A:1258:ILE:CG2	1:A:1275:LEU:HD21	0.43	2.41	20	1
1:A:1238:ASP:CG	1:A:1238:ASP:O	0.43	2.57	2	1
1:A:1288:GLU:CG	1:A:1289:GLN:N	0.43	2.81	4	1
1:A:1233:ARG:HB2	1:A:1239:THR:N	0.43	2.29	17	1
1:A:1268:ASP:HB3	1:A:1273:GLN:NE2	0.43	2.28	7	1
1:A:1271:ASN:N	1:A:1271:ASN:OD1	0.43	2.52	20	1
1:A:1287:LYS:CG	1:A:1288:GLU:N	0.42	2.81	10	1
1:A:1259:LEU:O	1:A:1259:LEU:HD13	0.42	2.13	15	1
1:A:1250:GLY:O	1:A:1251:THR:OG1	0.42	2.34	19	1
1:A:1247:LEU:HD12	1:A:1247:LEU:C	0.42	2.34	7	1
1:A:1249:SER:HB3	1:A:1271:ASN:ND2	0.42	2.30	10	1
1:A:1272:ARG:O	1:A:1273:GLN:CB	0.42	2.67	13	1
1:A:1289:GLN:HG3	1:A:1290:ILE:N	0.42	2.28	14	1
1:A:1234:ASP:OD1	1:A:1236:LEU:CA	0.42	2.67	10	1
1:A:1268:ASP:HB3	1:A:1273:GLN:N	0.42	2.30	12	1
1:A:1235:PRO:CG	1:A:1252:ILE:O	0.42	2.67	3	2
1:A:1268:ASP:OD1	1:A:1275:LEU:HD23	0.42	2.15	8	1
1:A:1270:PHE:C	1:A:1271:ASN:OD1	0.42	2.57	10	1
1:A:1235:PRO:CD	1:A:1252:ILE:O	0.42	2.68	17	1
1:A:1278:SER:OG	1:A:1279:MET:SD	0.42	2.73	18	1
1:A:1233:ARG:CG	1:A:1233:ARG:O	0.42	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:1258:ILE:HD13	1:A:1258:ILE:N	0.42	2.29	5	1
1:A:1233:ARG:NH1	1:A:1240:LEU:HA	0.42	2.30	19	1
1:A:1277:GLU:C	1:A:1278:SER:OG	0.42	2.57	1	1
1:A:1288:GLU:HG3	1:A:1289:GLN:N	0.42	2.30	4	1
1:A:1237:MET:N	1:A:1237:MET:HE2	0.42	2.29	7	1
1:A:1277:GLU:CG	1:A:1278:SER:N	0.42	2.82	18	1
1:A:1233:ARG:HH12	1:A:1240:LEU:CG	0.42	2.28	9	1
1:A:1262:LEU:CD1	1:A:1262:LEU:C	0.42	2.88	17	1
1:A:1247:LEU:HD21	1:A:1253:MET:HE1	0.42	1.92	13	1
1:A:1243:ASP:OD2	1:A:1255:ARG:CG	0.41	2.68	3	1
1:A:1263:LEU:C	1:A:1263:LEU:CD2	0.41	2.88	4	1
1:A:1230:ASP:N	1:A:1230:ASP:OD1	0.41	2.52	5	1
1:A:1244:PRO:HG2	1:A:1287:LYS:NZ	0.41	2.30	6	1
1:A:1228:ALA:O	1:A:1229:PRO:C	0.41	2.59	11	1
1:A:1266:PRO:O	1:A:1267:THR:C	0.41	2.57	15	1
1:A:1247:LEU:CD1	1:A:1253:MET:SD	0.41	2.96	4	1
1:A:1262:LEU:O	1:A:1263:LEU:C	0.41	2.58	5	2
1:A:1293:TRP:CZ3	1:A:1294:MET:HB3	0.41	2.49	19	2
1:A:1268:ASP:CB	1:A:1275:LEU:HD23	0.41	2.45	16	1
1:A:1257:ILE:HD13	1:A:1260:ARG:NH2	0.41	2.30	15	1
1:A:1280:LEU:C	1:A:1280:LEU:HD22	0.41	2.35	18	1
1:A:1242:THR:CG2	1:A:1256:SER:OG	0.41	2.69	19	1
1:A:1292:ALA:O	1:A:1293:TRP:C	0.41	2.57	8	2
1:A:1243:ASP:CG	1:A:1243:ASP:O	0.41	2.58	11	1
1:A:1258:ILE:HD12	1:A:1275:LEU:HD21	0.41	1.92	18	1
1:A:1266:PRO:O	1:A:1267:THR:HG22	0.41	2.14	3	1
1:A:1236:LEU:HD21	1:A:1257:ILE:CG2	0.41	2.45	17	1
1:A:1259:LEU:O	1:A:1262:LEU:CG	0.41	2.69	17	1
1:A:1261:HIS:CE1	1:A:1267:THR:O	0.41	2.73	6	1
1:A:1234:ASP:OD2	1:A:1237:MET:CE	0.41	2.68	7	1
1:A:1253:MET:SD	1:A:1258:ILE:HG13	0.41	2.55	11	1
1:A:1260:ARG:O	1:A:1264:ASN:OD1	0.41	2.38	14	1
1:A:1264:ASN:CG	1:A:1264:ASN:O	0.41	2.58	2	1
1:A:1236:LEU:O	1:A:1237:MET:C	0.41	2.59	6	1
1:A:1262:LEU:HD23	1:A:1262:LEU:N	0.41	2.31	6	1
1:A:1287:LYS:HE3	1:A:1291:GLN:NE2	0.41	2.31	7	1
1:A:1280:LEU:C	1:A:1280:LEU:CD1	0.41	2.89	9	1
1:A:1228:ALA:HA	1:A:1293:TRP:CH2	0.41	2.50	13	1
1:A:1257:ILE:O	1:A:1257:ILE:CG2	0.41	2.68	13	1
1:A:1235:PRO:HB2	1:A:1270:PHE:CE2	0.41	2.50	15	1
1:A:1237:MET:SD	1:A:1257:ILE:CG1	0.41	3.08	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:1238:ASP:O	1:A:1239:THR:HG23	0.41	2.15	19	1
1:A:1236:LEU:HD11	1:A:1257:ILE:HG21	0.41	1.93	4	1
1:A:1273:GLN:O	1:A:1274:THR:HG22	0.41	2.15	13	1
1:A:1293:TRP:CD2	1:A:1293:TRP:C	0.41	2.94	13	1
1:A:1247:LEU:HD11	1:A:1253:MET:HE2	0.41	1.93	15	1
1:A:1238:ASP:OD2	1:A:1241:MET:HG2	0.41	2.15	19	1
1:A:1255:ARG:CD	1:A:1255:ARG:C	0.41	2.88	2	1
1:A:1249:SER:OG	1:A:1271:ASN:OD1	0.41	2.38	12	1
1:A:1246:ARG:O	1:A:1247:LEU:HD23	0.41	2.16	11	1
1:A:1236:LEU:HB2	1:A:1270:PHE:CZ	0.40	2.51	5	1
1:A:1271:ASN:O	1:A:1272:ARG:CG	0.40	2.68	7	1
1:A:1269:PRO:HG2	1:A:1270:PHE:CE1	0.40	2.51	19	1
1:A:1236:LEU:CD2	1:A:1269:PRO:HB3	0.40	2.46	13	1
1:A:1233:ARG:HD3	1:A:1233:ARG:N	0.40	2.32	16	1
1:A:1234:ASP:OD2	1:A:1237:MET:HE2	0.40	2.16	17	1
1:A:1247:LEU:CB	1:A:1248:PRO:HD2	0.40	2.47	17	1
1:A:1244:PRO:CG	1:A:1287:LYS:HE2	0.40	2.46	6	1
1:A:1230:ASP:C	1:A:1233:ARG:CZ	0.40	2.89	16	1
1:A:1272:ARG:HG2	1:A:1272:ARG:NH1	0.40	2.31	17	1
1:A:1234:ASP:HB3	1:A:1238:ASP:CG	0.40	2.37	19	1
1:A:1239:THR:O	1:A:1239:THR:CG2	0.40	2.69	7	1
1:A:1268:ASP:HB2	1:A:1273:GLN:HE22	0.40	1.77	7	1
1:A:1249:SER:HB2	1:A:1271:ASN:ND2	0.40	2.32	8	1
1:A:1261:HIS:O	1:A:1265:SER:N	0.40	2.47	15	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	67/100 (67%)	41±4 (61±5%)	15±3 (23±5%)	11±3 (16±5%)	0 3
All	All	1340/2000 (67%)	813 (61%)	306 (23%)	221 (16%)	0 3

All 38 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	1265	SER	17
1	A	1255	ARG	17
1	A	1268	ASP	16
1	A	1271	ASN	16
1	A	1274	THR	16
1	A	1272	ARG	14
1	A	1229	PRO	11
1	A	1275	LEU	9
1	A	1290	ILE	8
1	A	1230	ASP	8
1	A	1249	SER	8
1	A	1257	ILE	7
1	A	1285	GLU	7
1	A	1228	ALA	6
1	A	1288	GLU	6
1	A	1231	GLU	5
1	A	1291	GLN	5
1	A	1266	PRO	5
1	A	1237	MET	5
1	A	1240	LEU	5
1	A	1236	LEU	4
1	A	1287	LYS	3
1	A	1241	MET	2
1	A	1270	PHE	2
1	A	1235	PRO	2
1	A	1250	GLY	2
1	A	1284	PRO	2
1	A	1278	SER	2
1	A	1232	PHE	2
1	A	1293	TRP	1
1	A	1264	ASN	1
1	A	1277	GLU	1
1	A	1238	ASP	1
1	A	1267	THR	1
1	A	1239	THR	1
1	A	1273	GLN	1
1	A	1263	LEU	1
1	A	1248	PRO	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	64/92 (70%)	42±3 (66±5%)	22±3 (34±5%)	1	10
All	All	1280/1840 (70%)	843 (66%)	437 (34%)	1	10

All 51 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	1276	THR	19
1	A	1255	ARG	19
1	A	1268	ASP	18
1	A	1289	GLN	16
1	A	1293	TRP	14
1	A	1243	ASP	14
1	A	1247	LEU	14
1	A	1259	LEU	14
1	A	1286	LEU	14
1	A	1275	LEU	13
1	A	1238	ASP	13
1	A	1237	MET	13
1	A	1271	ASN	12
1	A	1251	THR	12
1	A	1280	LEU	12
1	A	1260	ARG	11
1	A	1287	LYS	11
1	A	1239	THR	11
1	A	1264	ASN	11
1	A	1267	THR	10
1	A	1263	LEU	10
1	A	1233	ARG	9
1	A	1272	ARG	9
1	A	1294	MET	9
1	A	1253	MET	9
1	A	1273	GLN	8
1	A	1274	THR	8
1	A	1265	SER	7
1	A	1249	SER	7
1	A	1230	ASP	7
1	A	1240	LEU	7
1	A	1288	GLU	7
1	A	1246	ARG	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	1278	SER	7
1	A	1234	ASP	6
1	A	1277	GLU	6
1	A	1242	THR	6
1	A	1236	LEU	6
1	A	1232	PHE	5
1	A	1256	SER	4
1	A	1279	MET	3
1	A	1231	GLU	3
1	A	1285	GLU	3
1	A	1262	LEU	3
1	A	1252	ILE	3
1	A	1248	PRO	2
1	A	1283	VAL	1
1	A	1290	ILE	1
1	A	1270	PHE	1
1	A	1254	ASP	1
1	A	1281	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](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided