



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2022 – 01:06 PM EST

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

<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:

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 : 2.27  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.27

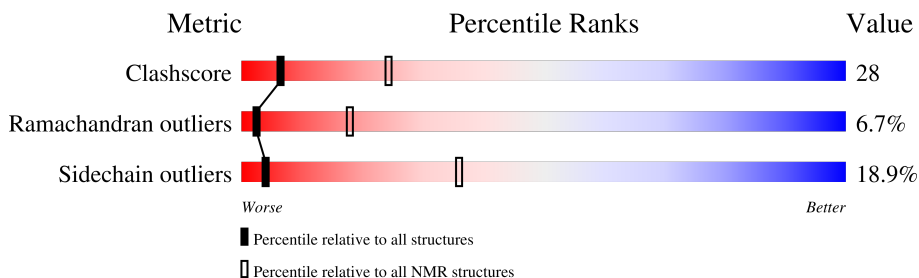
# 1 Overall quality at a glance

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  $\geq 3$ , 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	 29%      34%      • 5%      29%

## 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

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
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	181	2903	944	1425	241	283	10	0

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

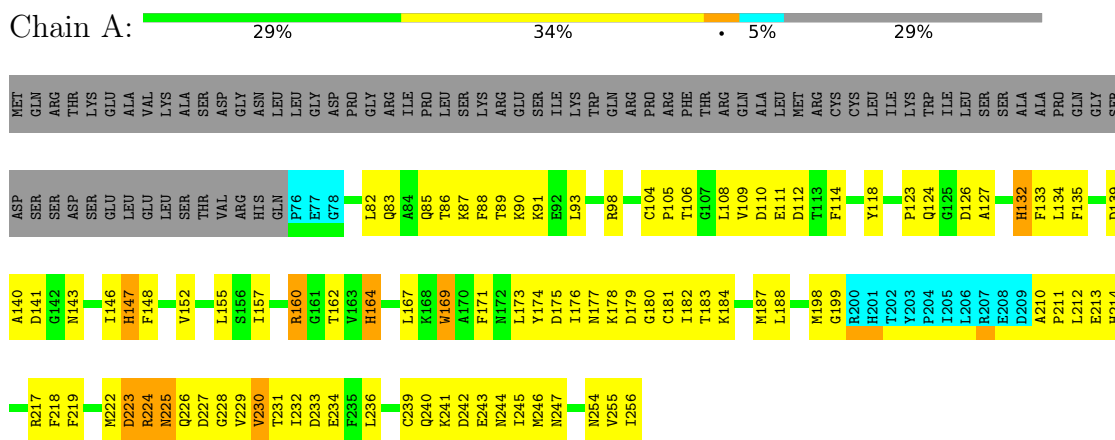
Mol	Chain	Residues	Atoms	
2	A	2	Total	Ca
			2	2

## 4 Residue-property plots

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

These plots are provided for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic is the same as shown in the summary in section 1 of this report. The second graphic shows the sequence where residues are colour-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. Stretches of 2 or more consecutive residues without any outliers are shown as green connectors. Residues which are classified as ill-defined in the NMR ensemble, are shown in cyan with an underline colour-coded according to the previous scheme. Residues which were present in the experimental sample, but not modelled in the final structure are shown in grey.

- Molecule 1: Calsenilin

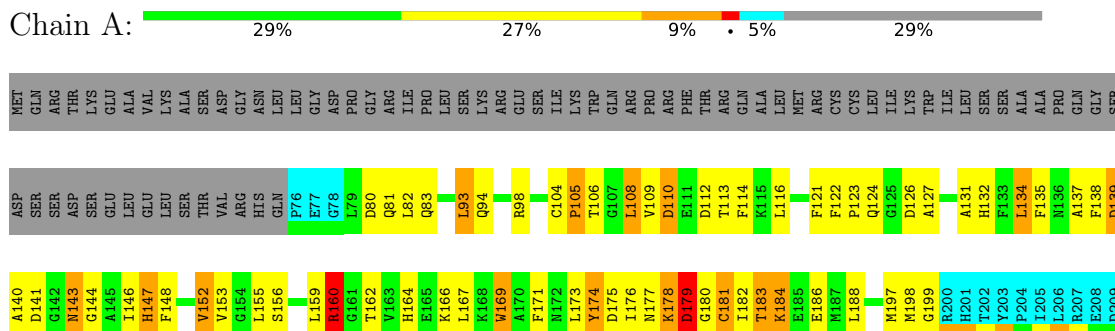


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

#### 4.2.1 Score per residue for model 1

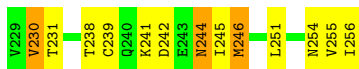
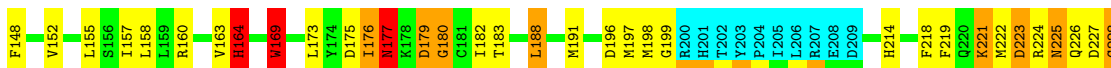
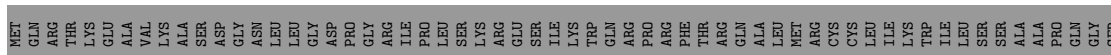
- Molecule 1: Calsenilin





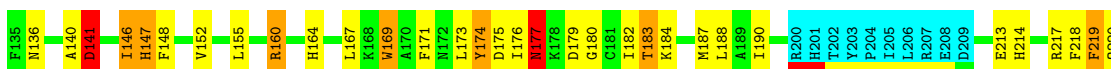
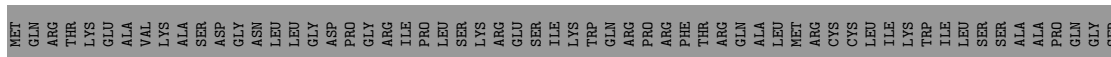
#### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Calsenilin



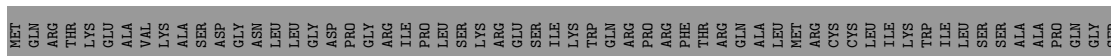
#### 4.2.3 Score per residue for model 3 (medoid)

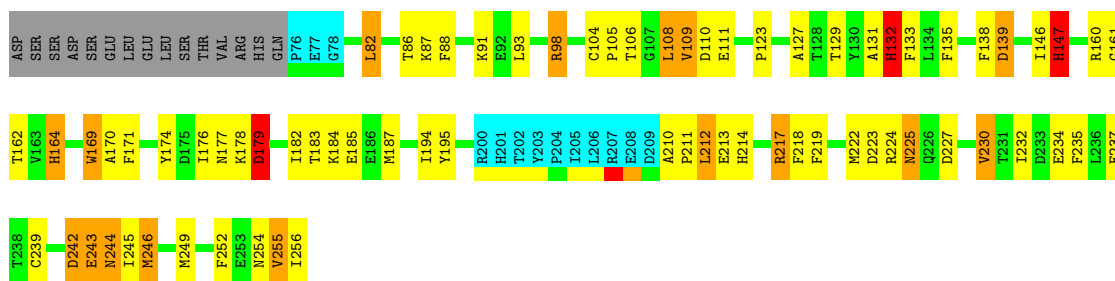
- Molecule 1: Calsenilin



#### 4.2.4 Score per residue for model 4

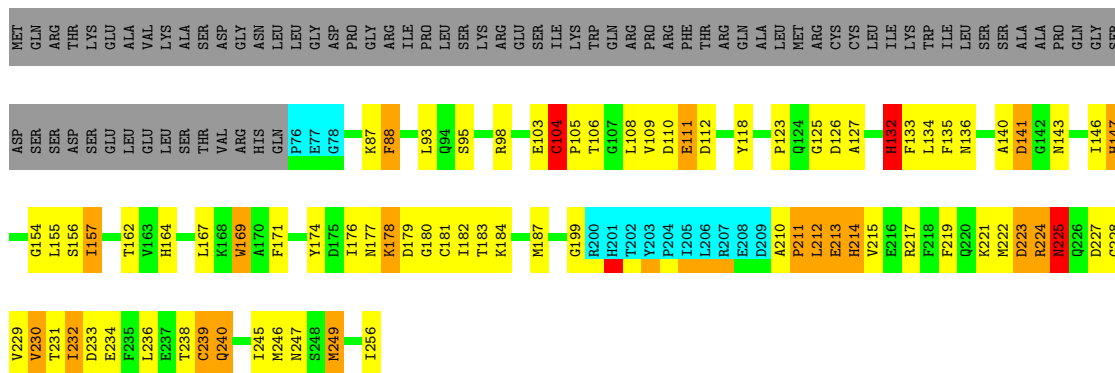
- Molecule 1: Calsenilin





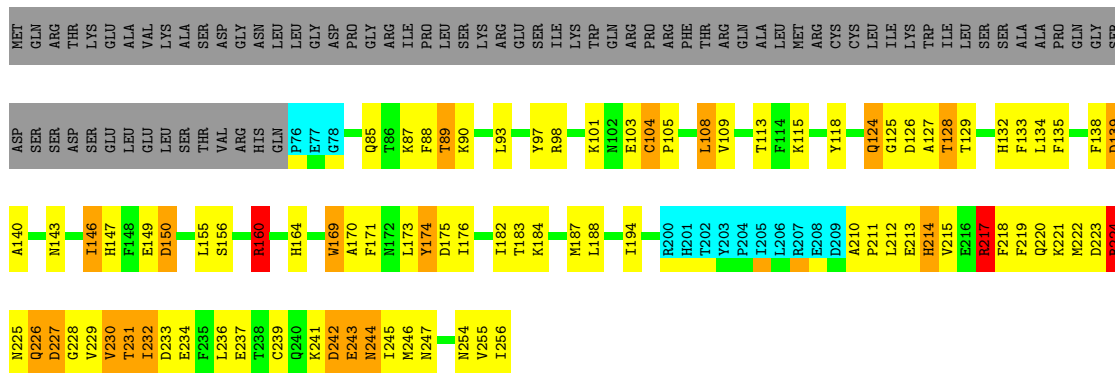
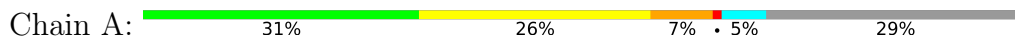
#### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Calsenilin



#### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Calsenilin



#### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Calsenilin









MET	ASP	E149	M222
GLN	SER	V152	D223
ARG	SER	V153	R224
THR	ASP	G154	M225
LYS	SER	I157	Q226
GLU	GLU	L158	D227
ALA	LEU	L159	C228
VAL	LEU	R160	V229
LYS	SER	G161	V230
ALA	THR	T162	T231
SER	VAL	V163	I232
ASP	ARG	H164	D233
GLY	HIS	L167	E234
ASN	GLN	K168	T238
LEU	P776	M169	C239
LEU	E777	A170	Q240
GLY	G778	F171	K241
ASP	L82	M172	D242
PRO	Q83	L173	E243
GLY	A84	Y174	M244
ARG	Q85	D175	L245
ILE	T86	I176	M246
PRO	K87	M177	L251
LEU	F88	K178	F252
SER	T89	G180	E253
LEU	L93	I182	M254
ILE	Q94	T183	V255
LYS	S95	K184	L256
TRP	R98	E185	
GLN	E103	E186	
ARG	C104	M187	
PRO	V109	L188	
ARG	D110	M191	
THR	E111	R200	
ARG	D112	T202	
GLN	T113	Y203	
ALA	F114	P204	
LEU	Y118	I205	
LEU	P123	L206	
MET	D126	R207	
ARG	A127	E208	
CYS	H132	D209	
CYS	F133	A210	
LEU	L134	P211	
LEU	F135	L212	
ILE	F136	E213	
LYS	N136	H214	
TRP	I146	R217	
TRP	H147	F218	
ILE	F148	F219	
LEU			
LEU			
SER			
SER			
ALA			
ALA			
PRO			
GLM			
GLY			
SER			

## 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.

## 6 Model quality i

### 6.1 Standard geometry i

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:HD12	1:A:176:ILE:H	0.94	1.17	10	1
1:A:176:ILE:HD12	1:A:176:ILE:N	0.88	1.83	10	4
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:N	1:A:147:HIS:ND1	0.78	2.30	12	3
1:A:218:PHE:CE2	1:A:246:MET:SD	0.78	2.77	2	1
1:A:244:ASN:H	1:A:244:ASN:HD22	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:C	1:A:173:LEU:HD13	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:HD22	1:A:79:LEU:H	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:ND2	1:A:244:ASN:N	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:H	1:A:176:ILE:HD13	0.72	1.43	14	1
1:A:188:LEU:C	1:A:188:LEU:HD13	0.71	2.05	6	1
1:A:79:LEU:HD22	1:A:79:LEU:N	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:C	1:A:108:LEU:HD22	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	3
1:A:155:LEU:O	1:A:155:LEU:HD13	0.69	1.88	13	1
1:A:116:LEU:HD23	1:A:116:LEU:O	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:HD22	1:A:244:ASN:N	0.68	1.86	7	2
1:A:176:ILE:H	1:A:176:ILE:CD1	0.68	2.00	14	2
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: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
1:A:108:LEU:HD12	1:A:108:LEU:O	0.67	1.89	1	4
1:A:183:THR:OG1	1:A:229:VAL:HG12	0.67	1.88	5	2

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:239:CYS:SG	1:A:240:GLN:N	0.67	2.68	5	2
1:A:176:ILE:HD13	1:A:176:ILE:N	0.66	2.05	14	1
1:A:219:PHE:CZ	1:A:223:ASP:CG	0.66	2.69	10	2
1:A:160:ARG:HH11	1:A:161:GLY:N	0.66	1.88	13	1
1:A:227:ASP:OD1	1:A:228:GLY:N	0.66	2.29	5	12
1:A:245:ILE:CG2	1:A:246:MET:N	0.66	2.59	10	13
1:A:174:TYR:CE2	1:A:249:MET:SD	0.66	2.88	4	1
1:A:256:ILE:H	1:A:256:ILE:HD13	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:225:ASN:ND2	1:A:234:GLU:CD	0.65	2.49	12	5
1:A:118:TYR:CE1	1:A:134:LEU:CD1	0.65	2.79	15	2
1:A:256:ILE:HD13	1:A:256:ILE:N	0.65	2.06	3	2
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:HG13	0.64	1.93	3	2
1:A:255:VAL:O	1:A:255:VAL:HG22	0.64	1.92	14	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:232:ILE:CG2	1:A:233:ASP:N	0.64	2.61	3	2
1:A:245:ILE:CG2	1:A:246:MET:H	0.64	2.05	2	4
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	12
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: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
1:A:148:PHE:CE2	1:A:152:VAL:CG2	0.62	2.83	2	2
1:A:227:ASP:OD2	1:A:228:GLY:N	0.62	2.32	11	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

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
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:184:LYS:N	1:A:219:PHE:CE1	0.61	2.68	6	6
1:A:222:MET:SD	1:A:238:THR:OG1	0.61	2.58	8	3
1:A:86:THR:HG21	1:A:152:VAL:CG1	0.61	2.25	3	1
1:A:160:ARG:NH1	1:A:161:GLY:CA	0.61	2.63	13	1
1:A:256:ILE:HD12	1:A:256:ILE:N	0.61	2.10	1	1
1:A:179:ASP:CG	1:A:180:GLY:N	0.61	2.53	5	3
1:A:191:MET:SD	1:A:215:VAL:HG22	0.61	2.35	14	1
1:A:139:ASP:N	1:A:139:ASP:OD1	0.61	2.33	2	2
1:A:212:LEU:N	1:A:212:LEU:CD2	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:H	1:A:256:ILE:CD1	0.61	2.09	7	1
1:A:224:ARG:N	1:A:234:GLU:OE2	0.61	2.34	9	1
1:A:127:ALA:HB2	1:A:197:MET:SD	0.61	2.36	14	1
1:A:171:PHE:C	1:A:171:PHE:CD1	0.60	2.74	5	8
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:163:VAL:HG13	1:A:164:HIS:N	0.59	2.11	2	1
1:A:111:GLU:OE2	1:A:132:HIS:CD2	0.59	2.55	9	1
1:A:141:ASP:OD1	1:A:141:ASP:N	0.59	2.35	2	5
1:A:159:LEU:C	1:A:159:LEU:HD23	0.59	2.17	1	2
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:110:ASP:N	1:A:110:ASP:OD1	0.59	2.33	3	3
1:A:179:ASP:OD1	1:A:181:CYS:N	0.59	2.31	1	1
1:A:242:ASP:OD1	1:A:243:GLU:N	0.59	2.35	4	3
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
1:A:242:ASP:OD2	1:A:245:ILE:N	0.58	2.36	1	1
1:A:226:GLN:N	1:A:226:GLN:CD	0.58	2.57	3	3
1:A:223:ASP:CG	1:A:224:ARG:H	0.58	2.02	12	4
1:A:232:ILE:HG23	1:A:233:ASP:N	0.58	2.13	3	2
1:A:118:TYR:OH	1:A:134:LEU:CD1	0.58	2.52	7	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:176:ILE:CG1	1:A:177:ASN:N	0.58	2.66	5	2
1:A:213:GLU:CG	1:A:214:HIS:N	0.58	2.66	7	1
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: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:N	1:A:225:ASN:ND2	0.58	2.52	13	1
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:93:LEU:O	1:A:93:LEU:HD23	0.57	1.99	8	4
1:A:182:ILE:O	1:A:229:VAL:HG13	0.57	2.00	15	1
1:A:160:ARG:C	1:A:160:ARG:HE	0.57	2.03	7	1
1:A:173:LEU:C	1:A:173:LEU:CD1	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:247:ASN:ND2	1:A:247:ASN:C	0.56	2.59	8	1
1:A:108:LEU:CD1	1:A:147:HIS:NE2	0.56	2.68	14	1
1:A:174:TYR:CD1	1:A:174:TYR:N	0.56	2.71	1	3
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:242:ASP:OD1	1:A:242:ASP:N	0.56	2.36	2	2
1:A:85:GLN:C	1:A:87:LYS:H	0.56	2.04	7	1
1:A:231:THR:O	1:A:233:ASP:N	0.56	2.39	8	9
1:A:226:GLN:O	1:A:228:GLY:N	0.55	2.38	15	2
1:A:142:GLY:C	1:A:143:ASN:ND2	0.55	2.59	13	1
1:A:83:GLN:O	1:A:83:GLN:NE2	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:254:ASN:HD22	1:A:254:ASN:N	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: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:241:LYS:C	1:A:243:GLU:H	0.55	2.04	13	2

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:225:ASN:C	1:A:225:ASN:HD22	0.55	2.05	11	2
1:A:176:ILE:CG2	1:A:177:ASN:ND2	0.55	2.70	7	1
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:172:ASN:C	1:A:172:ASN:HD22	0.54	2.04	12	2
1:A:164:HIS:HD1	1:A:164:HIS:C	0.54	2.04	11	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:163:VAL:CG1	1:A:164:HIS:N	0.54	2.70	2	2
1:A:244:ASN:HD22	1:A:245:ILE:N	0.54	2.01	7	2
1:A:160:ARG:NH1	1:A:161:GLY:N	0.54	2.56	13	1
1:A:88:PHE:C	1:A:89:THR:HG22	0.54	2.23	7	1
1:A:249:MET:C	1:A:249:MET:SD	0.54	2.86	13	1
1:A:219:PHE:CE2	1:A:223:ASP:OD2	0.54	2.61	1	1
1:A:179:ASP:CG	1:A:180:GLY:H	0.54	2.06	10	2
1:A:106:THR:CG2	1:A:107:GLY:N	0.54	2.71	8	2
1:A:222:MET:SD	1:A:230:VAL:HG21	0.53	2.43	1	4
1:A:225:ASN:C	1:A:227:ASP:H	0.53	2.06	8	3
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:160:ARG:C	1:A:160:ARG:NE	0.53	2.62	7	1
1:A:149:GLU:CG	1:A:150:ASP:N	0.53	2.71	12	1
1:A:179:ASP:CG	1:A:181:CYS:SG	0.53	2.87	14	2
1:A:104:CYS:C	1:A:106:THR:H	0.53	2.06	5	2
1:A:157:ILE:HG21	1:A:169:TRP:CD1	0.53	2.38	13	5
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: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:158:LEU:HD11	1:A:169:TRP:CZ3	0.53	2.38	13	1
1:A:122:PHE:O	1:A:124:GLN:N	0.53	2.41	2	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:197:MET:O	1:A:199:GLY:N	0.53	2.42	12	3
1:A:85:GLN:O	1:A:87:LYS:N	0.53	2.42	14	3

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:224:ARG:C	1:A:225:ASN:ND2	0.53	2.62	8	1
1:A:83:GLN:NE2	1:A:88:PHE:O	0.53	2.41	13	2
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:225:ASN:ND2	1:A:225:ASN:N	0.53	2.55	2	2
1:A:162:THR:HG23	1:A:163:VAL:N	0.53	2.18	7	1
1:A:147:HIS:ND1	1:A:147:HIS:N	0.53	2.56	11	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:108:LEU:C	1:A:108:LEU:CD1	0.52	2.75	10	1
1:A:96:LEU:HD21	1:A:155:LEU:HG	0.52	1.80	12	1
1:A:179:ASP:OD2	1:A:181:CYS:N	0.52	2.39	5	1
1:A:224:ARG:CD	1:A:224:ARG:C	0.52	2.78	6	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:83:GLN:C	1:A:83:GLN:CD	0.52	2.68	15	2
1:A:242:ASP:CG	1:A:243:GLU:N	0.52	2.62	1	1
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:210:ALA:O	1:A:212:LEU:N	0.52	2.42	13	2
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	5	2
1:A:256:ILE:O	1:A:256:ILE:HG23	0.52	2.03	8	2
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:248:SER:OG	1:A:249:MET:N	0.52	2.43	10	1
1:A:83:GLN:NE2	1:A:83:GLN:C	0.52	2.62	15	1
1:A:243:GLU:C	1:A:245:ILE:H	0.52	2.09	15	1
1:A:143:ASN:OD1	1:A:144:GLY:N	0.52	2.42	1	1
1:A:173:LEU:O	1:A:175:ASP:N	0.52	2.42	1	6
1:A:253:GLU:C	1:A:255:VAL:N	0.52	2.63	9	2
1:A:183:THR:HG22	1:A:186:GLU:OE1	0.52	2.05	8	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:179:ASP:C	1:A:181:CYS:H	0.52	2.09	11	1
1:A:227:ASP:OD1	1:A:227:ASP:C	0.51	2.49	13	6
1:A:138:PHE:C	1:A:140:ALA:H	0.51	2.08	6	1
1:A:224:ARG:C	1:A:225:ASN:CG	0.51	2.68	10	2
1:A:122:PHE:C	1:A:124:GLN:N	0.51	2.64	2	2
1:A:256:ILE:HG22	1:A:256:ILE:O	0.51	2.05	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:177:ASN:OD1	1:A:177:ASN:N	0.51	2.42	12	2
1:A:110:ASP:C	1:A:112:ASP:N	0.51	2.64	14	2
1:A:225:ASN:C	1:A:227:ASP:N	0.51	2.64	8	4
1:A:94:GLN:O	1:A:94:GLN:NE2	0.51	2.44	9	1
1:A:197:MET:C	1:A:199:GLY:H	0.51	2.08	11	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:82:LEU:CD1	1:A:86:THR:OG1	0.51	2.59	4	2
1:A:138:PHE:C	1:A:140:ALA:N	0.51	2.64	6	1
1:A:162:THR:CG2	1:A:163:VAL:N	0.51	2.73	11	2
1:A:224:ARG:NH2	1:A:237:GLU:OE2	0.51	2.40	7	1
1:A:139:ASP:CG	1:A:140:ALA:N	0.51	2.63	14	1
1:A:218:PHE:CZ	1:A:246:MET:HE3	0.51	2.40	2	3
1:A:177:ASN:O	1:A:177:ASN:ND2	0.51	2.43	4	1
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:CD	1:A:149:GLU:C	0.51	2.69	12	1
1:A:219:PHE:CZ	1:A:223:ASP:OD1	0.50	2.64	10	2
1:A:167:LEU:CD1	1:A:239:CYS:SG	0.50	3.00	10	3
1:A:213:GLU:CG	1:A:214:HIS:H	0.50	2.19	7	1
1:A:249:MET:SD	1:A:253:GLU:OE2	0.50	2.69	10	1
1:A:173:LEU:C	1:A:175:ASP:H	0.50	2.08	3	2
1:A:225:ASN:CG	1:A:227:ASP:OD2	0.50	2.49	1	3
1:A:240:GLN:C	1:A:242:ASP:H	0.50	2.08	15	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:158:LEU:HD12	1:A:158:LEU:N	0.50	2.21	15	1
1:A:109:VAL:CG1	1:A:146:ILE:HD12	0.50	2.36	2	4
1:A:111:GLU:N	1:A:111:GLU:CD	0.50	2.64	3	1
1:A:225:ASN:O	1:A:227:ASP:N	0.50	2.45	8	3
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:104:CYS:O	1:A:106:THR:N	0.50	2.45	5	2
1:A:218:PHE:CD1	1:A:218:PHE:C	0.50	2.84	6	6
1:A:238:THR:CG2	1:A:246:MET:SD	0.50	2.99	9	1
1:A:164:HIS:C	1:A:164:HIS:ND1	0.50	2.63	11	1
1:A:139:ASP:OD1	1:A:139:ASP:C	0.50	2.50	1	3
1:A:157:ILE:O	1:A:166:LYS:NZ	0.50	2.44	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:156:SER:O	1:A:160:ARG:N	0.50	2.45	10	1
1:A:143:ASN:OD1	1:A:143:ASN:N	0.50	2.45	11	1
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:225:ASN:CG	1:A:234:GLU:OE2	0.50	2.50	3	4
1:A:227:ASP:CG	1:A:228:GLY:H	0.50	2.07	15	2
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:242:ASP:OD1	1:A:244:ASN:ND2	0.50	2.44	11	1
1:A:178:LYS:CB	1:A:178:LYS:NZ	0.50	2.75	12	1
1:A:242:ASP:OD1	1:A:242:ASP:C	0.49	2.50	1	2
1:A:123:PRO:O	1:A:124:GLN:CB	0.49	2.59	2	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: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: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:167:LEU:HD22	1:A:236:LEU:HD12	0.49	1.83	1	1
1:A:127:ALA:O	1:A:131:ALA:N	0.49	2.43	3	2
1:A:187:MET:HE1	1:A:218:PHE:CD1	0.49	2.43	14	4
1:A:168:LYS:O	1:A:172:ASN:ND2	0.49	2.46	11	1
1:A:115:LYS:NZ	1:A:128:THR:OG1	0.49	2.33	3	1
1:A:197:MET:C	1:A:199:GLY:N	0.49	2.65	11	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:176:ILE:CD1	1:A:176:ILE:N	0.49	2.68	14	1
1:A:242:ASP:C	1:A:243:GLU:OE1	0.49	2.51	4	1
1:A:218:PHE:CZ	1:A:246:MET:HE1	0.49	2.43	6	1
1:A:236:LEU:HD12	1:A:240:GLN:HE21	0.49	1.68	7	1
1:A:216:GLU:C	1:A:216:GLU:OE1	0.49	2.51	9	1
1:A:91:LYS:HG3	1:A:92:GLU:N	0.49	2.23	11	1
1:A:236:LEU:O	1:A:240:GLN:CG	0.49	2.61	11	1
1:A:239:CYS:SG	1:A:246:MET:CB	0.48	3.01	4	2
1:A:170:ALA:O	1:A:174:TYR:CD2	0.48	2.66	4	2
1:A:225:ASN:HD21	1:A:228:GLY:N	0.48	2.06	11	1
1:A:157:ILE:HD13	1:A:169:TRP:CD1	0.48	2.43	2	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:109:VAL:CG2	1:A:110:ASP:N	0.48	2.75	3	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
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:177:ASN:CG	1:A:179:ASP:OD2	0.48	2.51	8	2
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:167:LEU:CD2	1:A:239:CYS:SG	0.48	3.01	3	1
1:A:155:LEU:C	1:A:155:LEU:HD13	0.48	2.29	14	1
1:A:243:GLU:N	1:A:243:GLU:OE1	0.48	2.47	4	1
1:A:225:ASN:CG	1:A:227:ASP:CG	0.48	2.72	2	1
1:A:242:ASP:O	1:A:243:GLU:C	0.48	2.51	6	3
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:177:ASN:ND2	1:A:177:ASN:H	0.48	2.06	1	2
1:A:167:LEU:HD22	1:A:239:CYS:SG	0.48	2.49	5	1
1:A:139:ASP:CG	1:A:143:ASN:ND2	0.48	2.67	6	1
1:A:244:ASN:N	1:A:244:ASN:ND2	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:N	1:A:150:ASP:OD1	0.48	2.47	9	1
1:A:149:GLU:OE1	1:A:149:GLU:C	0.48	2.52	6	1
1:A:143:ASN:N	1:A:143:ASN:OD1	0.48	2.47	10	1
1:A:243:GLU:H	1:A:243:GLU:CD	0.47	2.12	6	1
1:A:198:MET:SD	1:A:198:MET:C	0.47	2.93	14	1
1:A:125:GLY:O	1:A:126:ASP:CB	0.47	2.60	2	1
1:A:103:GLU:O	1:A:104:CYS:CB	0.47	2.61	5	3
1:A:111:GLU:OE2	1:A:132:HIS:CG	0.47	2.67	9	1
1:A:256:ILE:OXT	1:A:256:ILE:HG23	0.47	2.10	10	2
1:A:191:MET:SD	1:A:215:VAL:CG2	0.47	3.01	14	1
1:A:222:MET:SD	1:A:246:MET:HE2	0.47	2.49	2	1
1:A:109:VAL:HG13	1:A:146:ILE:HD12	0.47	1.84	3	1
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:210:ALA:N	1:A:211:PRO:HD3	0.47	2.24	1	5
1:A:105:PRO:C	1:A:106:THR:OG1	0.47	2.51	2	1
1:A:188:LEU:HD13	1:A:188:LEU:O	0.47	2.08	6	4
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:127:ALA:O	1:A:131:ALA:HB2	0.47	2.08	1	2
1:A:82:LEU:CD2	1:A:86:THR:OG1	0.47	2.62	15	1
1:A:224:ARG:C	1:A:226:GLN:H	0.47	2.12	6	1
1:A:252:PHE:CD1	1:A:252:PHE:O	0.47	2.68	11	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:240:GLN:C	1:A:242:ASP:N	0.47	2.67	15	1
1:A:111:GLU:OE2	1:A:112:ASP:OD1	0.47	2.33	3	1
1:A:176:ILE:HG23	1:A:177:ASN:N	0.47	2.24	7	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:162:THR:C	1:A:165:GLU:OE2	0.47	2.53	14	1
1:A:232:ILE:HD12	1:A:232:ILE:H	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:142:GLY:O	1:A:143:ASN:CB	0.47	2.62	2	1
1:A:103:GLU:O	1:A:104:CYS:SG	0.47	2.73	5	2
1:A:176:ILE:CG2	1:A:177:ASN:HD22	0.47	2.23	7	1
1:A:245:ILE:HG22	1:A:246:MET:H	0.47	1.70	10	1
1:A:224:ARG:NE	1:A:224:ARG:CA	0.47	2.76	13	2
1:A:177:ASN:CG	1:A:178:LYS:N	0.47	2.67	15	1
1:A:179:ASP:OD1	1:A:179:ASP:C	0.46	2.53	1	2
1:A:197:MET:CE	1:A:256:ILE:CD1	0.46	2.93	2	1
1:A:218:PHE:CZ	1:A:246:MET:HE2	0.46	2.45	4	2
1:A:101:LYS:O	1:A:104:CYS:N	0.46	2.42	6	1
1:A:126:ASP:OD1	1:A:126:ASP:N	0.46	2.48	13	1
1:A:135:PHE:C	1:A:135:PHE:CD1	0.46	2.88	4	5
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:HD22	1:A:158:LEU:N	0.46	2.26	13	1
1:A:109:VAL:CG1	1:A:146:ILE:CD1	0.46	2.93	2	1
1:A:104:CYS:CB	1:A:105:PRO:CD	0.46	2.94	14	1
1:A:167:LEU:CD2	1:A:236:LEU:HD12	0.46	2.40	1	1
1:A:222:MET:O	1:A:223:ASP:C	0.46	2.54	13	10
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:118:TYR:CE1	1:A:134:LEU:HD13	0.46	2.46	10	3
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:213:GLU:HG3	1:A:214:HIS:N	0.46	2.26	7	2
1:A:86:THR:O	1:A:88:PHE:N	0.46	2.49	10	1
1:A:83:GLN:HG3	1:A:84:ALA:N	0.46	2.26	15	1
1:A:231:THR:HG1	1:A:233:ASP:CG	0.46	2.13	3	1
1:A:85:GLN:C	1:A:87:LYS:N	0.46	2.69	7	1
1:A:223:ASP:OD1	1:A:223:ASP:C	0.46	2.55	7	1
1:A:244:ASN:ND2	1:A:245:ILE:N	0.46	2.63	7	1
1:A:135:PHE:CD1	1:A:135:PHE:C	0.46	2.89	9	2

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:255:VAL:CG1	1:A:256:ILE:N	0.46	2.78	13	1
1:A:126:ASP:OD2	1:A:196:ASP:OD1	0.46	2.33	2	1
1:A:156:SER:OG	1:A:160:ARG:CZ	0.46	2.64	6	1
1:A:224:ARG:O	1:A:225:ASN:ND2	0.46	2.49	10	1
1:A:185:GLU:O	1:A:188:LEU:N	0.46	2.46	15	1
1:A:255:VAL:HG23	1:A:255:VAL:O	0.46	2.10	15	1
1:A:122:PHE:N	1:A:123:PRO:HD3	0.45	2.26	9	2
1:A:139:ASP:OD1	1:A:139:ASP:N	0.45	2.48	4	1
1:A:225:ASN:C	1:A:227:ASP:OD1	0.45	2.55	4	1
1:A:93:LEU:HD13	1:A:93:LEU:O	0.45	2.11	1	1
1:A:122:PHE:CG	1:A:123:PRO:HD2	0.45	2.46	2	1
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:255:VAL:O	1:A:255:VAL:CG2	0.45	2.64	14	1
1:A:251:LEU:N	1:A:251:LEU:CD2	0.45	2.80	2	1
1:A:108:LEU:HD23	1:A:147:HIS:CG	0.45	2.46	7	1
1:A:104:CYS:N	1:A:105:PRO:HD3	0.45	2.27	4	2
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:87:LYS:HG3	1:A:88:PHE:N	0.45	2.26	11	1
1:A:183:THR:HG1	1:A:229:VAL:HG12	0.45	1.70	5	1
1:A:82:LEU:O	1:A:82:LEU:HD13	0.45	2.10	10	3
1:A:154:GLY:O	1:A:157:ILE:N	0.45	2.50	5	3
1:A:176:ILE:HG23	1:A:177:ASN:HD22	0.45	1.72	7	1
1:A:183:THR:HG22	1:A:184:LYS:N	0.45	2.26	10	1
1:A:249:MET:SD	1:A:250:GLN:N	0.45	2.89	11	1
1:A:255:VAL:HG13	1:A:256:ILE:N	0.45	2.25	13	1
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:167:LEU:CD2	1:A:236:LEU:CD1	0.44	2.95	1	1
1:A:158:LEU:N	1:A:158:LEU:CD1	0.44	2.80	15	2
1:A:132:HIS:O	1:A:132:HIS:ND1	0.44	2.51	5	1
1:A:172:ASN:C	1:A:172:ASN:ND2	0.44	2.70	12	2
1:A:240:GLN:O	1:A:242:ASP:N	0.44	2.50	15	1
1:A:105:PRO:O	1:A:106:THR:CB	0.44	2.65	2	1
1:A:232:ILE:O	1:A:236:LEU:N	0.44	2.47	3	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

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
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:88:PHE:CD2	1:A:89:THR:HG22	0.44	2.48	3	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:231:THR:O	1:A:232:ILE:C	0.44	2.56	7	12
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: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: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:179:ASP:OD1	1:A:179:ASP:N	0.43	2.50	4	1
1:A:104:CYS:C	1:A:106:THR:N	0.43	2.71	5	2
1:A:159:LEU:C	1:A:159:LEU:CD2	0.43	2.86	1	1
1:A:225:ASN:CG	1:A:234:GLU:CD	0.43	2.77	6	1
1:A:244:ASN:N	1:A:244:ASN:OD1	0.43	2.50	9	1
1:A:245:ILE:HG23	1:A:246:MET:SD	0.43	2.53	9	1
1:A:222:MET:HG3	1:A:223:ASP:N	0.43	2.27	13	1
1:A:184:LYS:HG3	1:A:219:PHE:CE2	0.43	2.49	3	1
1:A:256:ILE:CD1	1:A:256:ILE:H	0.43	2.26	3	1
1:A:160:ARG:HE	1:A:160:ARG:CA	0.43	2.27	7	1
1:A:106:THR:C	1:A:108:LEU:H	0.43	2.16	9	1
1:A:241:LYS:C	1:A:243:GLU:N	0.43	2.71	13	1
1:A:221:LYS:O	1:A:221:LYS:NZ	0.43	2.52	2	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:210:ALA:C	1:A:212:LEU:N	0.43	2.72	13	3
1:A:177:ASN:C	1:A:177:ASN:HD22	0.43	2.16	15	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:225:ASN:OD1	1:A:234:GLU:OE2	0.43	2.37	5	1
1:A:227:ASP:CG	1:A:228:GLY:N	0.43	2.72	11	1
1:A:171:PHE:CD1	1:A:171:PHE:O	0.43	2.72	3	3
1:A:177:ASN:O	1:A:179:ASP:N	0.43	2.52	5	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:156:SER:O	1:A:160:ARG:NE	0.43	2.44	6	1
1:A:80:ASP:OD1	1:A:80:ASP:C	0.43	2.57	7	1
1:A:174:TYR:N	1:A:174:TYR:CD1	0.43	2.86	7	2
1:A:211:PRO:C	1:A:213:GLU:N	0.43	2.71	8	2
1:A:225:ASN:ND2	1:A:227:ASP:N	0.43	2.67	11	1
1:A:225:ASN:HD22	1:A:234:GLU:CD	0.43	2.17	12	1
1:A:108:LEU:HD12	1:A:147:HIS:CE1	0.43	2.48	14	1
1:A:83:GLN:CG	1:A:84:ALA:N	0.43	2.81	15	1
1:A:187:MET:HE1	1:A:218:PHE:CE1	0.43	2.49	4	1
1:A:219:PHE:CG	1:A:223:ASP:OD2	0.43	2.72	10	1
1:A:93:LEU:O	1:A:97:TYR:N	0.43	2.43	14	1
1:A:226:GLN:C	1:A:228:GLY:N	0.43	2.69	1	1
1:A:224:ARG:O	1:A:225:ASN:C	0.43	2.58	3	1
1:A:112:ASP:OD1	1:A:113:THR:N	0.43	2.52	8	1
1:A:88:PHE:O	1:A:89:THR:C	0.43	2.57	9	1
1:A:253:GLU:C	1:A:255:VAL:H	0.43	2.15	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:223:ASP:OD1	1:A:224:ARG:N	0.42	2.52	3	1
1:A:162:THR:C	1:A:164:HIS:N	0.42	2.72	10	2
1:A:108:LEU:HD12	1:A:147:HIS:CD2	0.42	2.48	14	2
1:A:187:MET:CG	1:A:215:VAL:HG13	0.42	2.45	5	1
1:A:187:MET:CE	1:A:218:PHE:CE1	0.42	3.02	11	2
1:A:160:ARG:NH1	1:A:161:GLY:C	0.42	2.72	13	1
1:A:176:ILE:HG22	1:A:177:ASN:N	0.42	2.29	9	1
1:A:89:THR:HG23	1:A:92:GLU:HB2	0.42	1.90	11	1
1:A:152:VAL:CG1	1:A:153:VAL:N	0.42	2.82	1	1
1:A:239:CYS:SG	1:A:246:MET:HB3	0.42	2.54	4	2
1:A:194:ILE:HG21	1:A:252:PHE:HE2	0.42	1.75	4	1
1:A:187:MET:HE3	1:A:218:PHE:CD1	0.42	2.49	6	1
1:A:88:PHE:O	1:A:89:THR:CB	0.42	2.67	7	1
1:A:176:ILE:O	1:A:177:ASN:CG	0.42	2.58	7	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:147:HIS:N	0.42	2.87	3	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:178:LYS:NZ	1:A:178:LYS:HB2	0.42	2.30	12	1
1:A:210:ALA:HB1	1:A:211:PRO:HD2	0.42	1.91	14	1
1:A:108:LEU:HD12	1:A:108:LEU:C	0.42	2.35	1	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
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: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:184:LYS:HG3	1:A:185:GLU:N	0.42	2.29	4	2
1:A:140:ALA:C	1:A:141:ASP:CG	0.42	2.78	5	1
1:A:173:LEU:C	1:A:173:LEU:HD23	0.42	2.34	7	1
1:A:83:GLN:NE2	1:A:89:THR:HA	0.42	2.29	15	1
1:A:176:ILE:N	1:A:176:ILE:HD13	0.42	2.30	8	2
1:A:82:LEU:HD21	1:A:86:THR:OG1	0.42	2.15	14	1
1:A:176:ILE:HG13	1:A:177:ASN:N	0.42	2.27	5	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:111:GLU:HB2	1:A:135:PHE:CD2	0.42	2.49	14	1
1:A:244:ASN:ND2	1:A:244:ASN:O	0.42	2.53	2	1
1:A:225:ASN:N	1:A:225:ASN:OD1	0.42	2.53	6	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:243:GLU:C	1:A:245:ILE:N	0.41	2.73	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:173:LEU:HD23	1:A:173:LEU:O	0.41	2.15	7	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: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:183:THR:HG23	1:A:186:GLU:H	0.41	1.75	1	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: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:227:ASP:OD2	1:A:229:VAL:HG23	0.41	2.14	3	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: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:219:PHE:CZ	1:A:223:ASP:OD2	0.41	2.72	10	1
1:A:149:GLU:C	1:A:149:GLU:CD	0.41	2.78	13	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:108:LEU:HG	1:A:109:VAL:N	0.41	2.30	14	1
1:A:140:ALA:C	1:A:141:ASP:OD2	0.41	2.59	5	1
1:A:160:ARG:CD	1:A:160:ARG:C	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:80:ASP:N	1:A:80:ASP:OD1	0.41	2.54	11	1
1:A:179:ASP:C	1:A:181:CYS:N	0.41	2.74	11	1
1:A:224:ARG:NE	1:A:224:ARG:HA	0.41	2.30	12	1
1:A:177:ASN:N	1:A:177:ASN:HD22	0.41	2.14	3	1
1:A:212:LEU:O	1:A:214:HIS:N	0.41	2.54	5	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:110:ASP:O	1:A:113:THR:N	0.41	2.54	9	1
1:A:115:LYS:CD	1:A:115:LYS:C	0.41	2.89	10	1
1:A:135:PHE:O	1:A:138:PHE:N	0.41	2.53	14	1
1:A:126:ASP:O	1:A:127:ALA:CB	0.41	2.69	1	2
1:A:178:LYS:O	1:A:179:ASP:CG	0.41	2.58	1	1
1:A:110:ASP:C	1:A:112:ASP:H	0.41	2.20	5	1
1:A:97:TYR:O	1:A:101:LYS:N	0.41	2.49	6	1
1:A:134:LEU:HD13	1:A:134:LEU:C	0.41	2.36	6	1
1:A:173:LEU:C	1:A:173:LEU:CD2	0.41	2.89	7	1
1:A:222:MET:HG3	1:A:223:ASP:H	0.41	1.76	8	2
1:A:135:PHE:CZ	1:A:146:ILE:HG12	0.41	2.50	12	1
1:A:173:LEU:HD12	1:A:174:TYR:CD1	0.41	2.50	13	1
1:A:148:PHE:CD1	1:A:148:PHE:O	0.41	2.74	1	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: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: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:225:ASN:C	1:A:225:ASN:ND2	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:138:PHE:O	1:A:139:ASP:CB	0.40	2.70	1	1
1:A:221:LYS:CA	1:A:221:LYS:HZ3	0.40	2.28	2	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

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:254:ASN:ND2	1:A:254:ASN:O	0.40	2.54	6	1
1:A:135:PHE:CE1	1:A:139:ASP:HB2	0.40	2.51	7	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:166:LYS:NZ	1:A:250:GLN:NE2	0.40	2.69	14	1
1:A:138:PHE:C	1:A:139:ASP:CG	0.40	2.80	2	1
1:A:231:THR:OG1	1:A:233:ASP:OD2	0.40	2.39	3	1
1:A:217:ARG:NH2	1:A:220:GLN:NE2	0.40	2.69	6	1
1:A:177:ASN:N	1:A:177:ASN:OD1	0.40	2.54	11	1
1:A:158:LEU:HD21	1:A:169:TRP:CZ2	0.40	2.52	13	1
1:A:160:ARG:HH12	1:A:161:GLY:CA	0.40	2.28	13	1
1:A:103:GLU:O	1:A:104:CYS:C	0.40	2.58	14	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:110:ASP:CG	1:A:111:GLU:N	0.40	2.75	5	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: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
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:118:TYR:CZ	1:A:134:LEU:HD11	0.40	2.52	14	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%)	2	18
All	All	2505/3840 (65%)	1946 (78%)	390 (16%)	169 (7%)	2	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	223	ASP	8
1	A	243	GLU	8
1	A	232	ILE	8
1	A	105	PRO	7
1	A	224	ARG	6
1	A	123	PRO	6
1	A	88	PHE	6
1	A	255	VAL	6
1	A	179	ASP	5
1	A	244	ASN	5
1	A	242	ASP	5
1	A	174	TYR	4
1	A	178	LYS	4
1	A	225	ASN	4
1	A	85	GLN	4
1	A	87	LYS	4
1	A	226	GLN	4
1	A	144	GLY	4
1	A	241	LYS	4
1	A	143	ASN	3
1	A	198	MET	3
1	A	227	ASP	3
1	A	124	GLN	3
1	A	177	ASN	3
1	A	180	GLY	3
1	A	228	GLY	3
1	A	104	CYS	3
1	A	211	PRO	3
1	A	86	THR	3
1	A	90	LYS	3
1	A	127	ALA	3
1	A	254	ASN	3
1	A	176	ILE	2
1	A	199	GLY	2
1	A	106	THR	2
1	A	126	ASP	2
1	A	140	ALA	2
1	A	111	GLU	2
1	A	89	THR	2
1	A	162	THR	2
1	A	212	LEU	2
1	A	222	MET	2
1	A	103	GLU	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	138	PHE	1
1	A	141	ASP	1
1	A	161	GLY	1
1	A	139	ASP	1
1	A	107	GLY	1
1	A	184	LYS	1
1	A	142	GLY	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%)	4	36
All	All	2235/3405 (66%)	1812 (81%)	423 (19%)	4	36

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	146	ILE	15
1	A	169	TRP	15
1	A	230	VAL	15
1	A	82	LEU	12
1	A	219	PHE	11
1	A	239	CYS	10
1	A	155	LEU	9
1	A	188	LEU	9
1	A	225	ASN	9
1	A	93	LEU	8
1	A	114	PHE	8
1	A	112	ASP	7
1	A	88	PHE	7
1	A	246	MET	7
1	A	89	THR	7
1	A	139	ASP	6
1	A	177	ASN	6
1	A	132	HIS	6

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	109	VAL	6
1	A	104	CYS	6
1	A	108	LEU	5
1	A	160	ARG	5
1	A	179	ASP	5
1	A	224	ARG	5
1	A	244	ASN	5
1	A	106	THR	5
1	A	147	HIS	5
1	A	136	ASN	5
1	A	178	LYS	5
1	A	233	ASP	5
1	A	80	ASP	4
1	A	183	THR	4
1	A	118	TYR	4
1	A	176	ILE	4
1	A	191	MET	4
1	A	221	LYS	4
1	A	231	THR	4
1	A	141	ASP	4
1	A	213	GLU	4
1	A	227	ASP	4
1	A	251	LEU	4
1	A	212	LEU	4
1	A	217	ARG	4
1	A	247	ASN	4
1	A	150	ASP	4
1	A	159	LEU	4
1	A	94	GLN	3
1	A	110	ASP	3
1	A	134	LEU	3
1	A	156	SER	3
1	A	162	THR	3
1	A	87	LYS	3
1	A	91	LYS	3
1	A	164	HIS	3
1	A	101	LYS	3
1	A	256	ILE	3
1	A	98	ARG	3
1	A	95	SER	3
1	A	236	LEU	3
1	A	115	LYS	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	192	LYS	3
1	A	86	THR	3
1	A	198	MET	3
1	A	83	GLN	3
1	A	124	GLN	2
1	A	166	LYS	2
1	A	181	CYS	2
1	A	184	LYS	2
1	A	226	GLN	2
1	A	240	GLN	2
1	A	242	ASP	2
1	A	121	PHE	2
1	A	143	ASN	2
1	A	241	LYS	2
1	A	220	GLN	2
1	A	195	TYR	2
1	A	237	GLU	2
1	A	254	ASN	2
1	A	126	ASP	2
1	A	119	SER	2
1	A	252	PHE	2
1	A	214	HIS	2
1	A	250	GLN	2
1	A	172	ASN	2
1	A	113	THR	2
1	A	245	ILE	2
1	A	168	LYS	2
1	A	81	GLN	1
1	A	116	LEU	1
1	A	152	VAL	1
1	A	232	ILE	1
1	A	85	GLN	1
1	A	122	PHE	1
1	A	111	GLU	1
1	A	190	ILE	1
1	A	253	GLU	1
1	A	157	ILE	1
1	A	249	MET	1
1	A	128	THR	1
1	A	194	ILE	1
1	A	90	LYS	1
1	A	129	THR	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	79	LEU	1
1	A	196	ASP	1
1	A	103	GLU	1
1	A	123	PRO	1
1	A	185	GLU	1
1	A	234	GLU	1
1	A	102	ASN	1
1	A	235	PHE	1
1	A	248	SER	1
1	A	92	GLU	1
1	A	120	GLN	1
1	A	158	LEU	1
1	A	149	GLU	1
1	A	173	LEU	1
1	A	175	ASP	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 monosaccharides 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