Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

May 7, 2024 – 01:39 pm BST

PDB ID	:	1H2O
Title	:	SOLUTION STRUCTURE OF THE MAJOR CHERRY ALLERGEN PRU AV 1 MUTANT E45W
Authors	:	Neudecker, P.; Lehmann, K.; Nerkamp, J.; Schweimer, K.; Sticht, H.; Boehm, M.; Scheurer, S.; Vieths, S.; Roesch, P.
Deposited on	:	2002-08-12

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 (i) symbol.

The types of validation reports are described at
http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types.

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

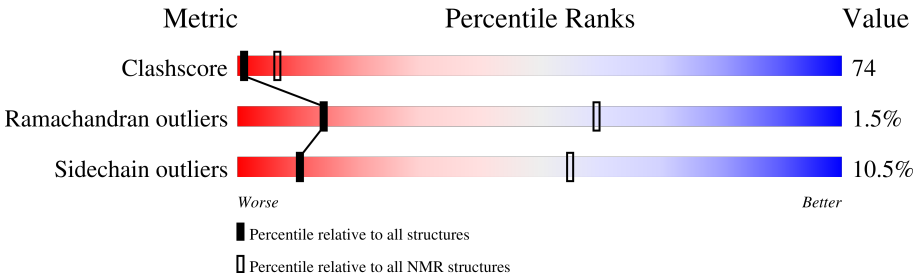
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.36.2

1 Overall quality at a glance (i)

The following experimental techniques were used to determine the structure:
SOLUTION NMR

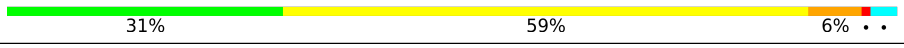
The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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 <=5%

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	159	

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 24 models. Model 23 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative.

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:1-A:59, A:64-A:159 (155)	0.64	23

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 2 clusters and 1 single-model cluster was found.

Cluster number	Models
1	1, 4, 5, 7, 8, 9, 10, 11, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 22, 23
2	2, 3, 6, 12, 20, 21, 24
Single-model clusters	13

3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2477 atoms, of which 1231 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called MAJOR ALLERGEN PRU AV 1.

Mol	Chain	Residues	Atoms					Trace
			Total	C	H	N	O	
1	A	159	2477	801	1231	200	245	0

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	45	TRP	GLU	engineered mutation	UNP O24248

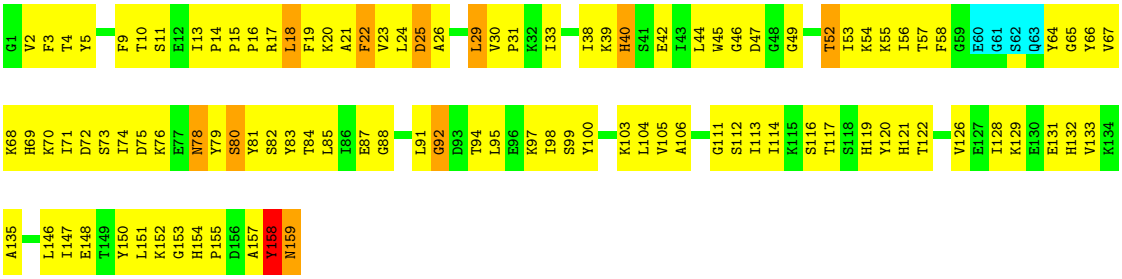
4 Residue-property plots (i)

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: MAJOR ALLERGEN PRU AV 1

Chain A: 31% 59% 6% • •



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: MAJOR ALLERGEN PRU AV 1

Chain A: 33% 57% 8% • •

4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: MAJOR ALLERGEN PRU AV 1

Chain A: 31% 59% 7% • •

4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: MAJOR ALLERGEN PRU AV 1

Chain A: 33% 57% 7% • •

4.2.4 Score per residue for model 4

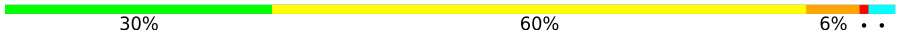
• Molecule 1: MAJOR ALLERGEN PRU AV 1

Chain A: 31% 60% 6% • •

4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: MAJOR ALLERGEN PRU AV 1

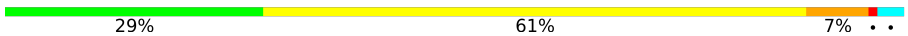
Chain A:



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: MAJOR ALLERGEN PRU AV 1

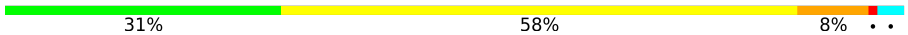
Chain A:

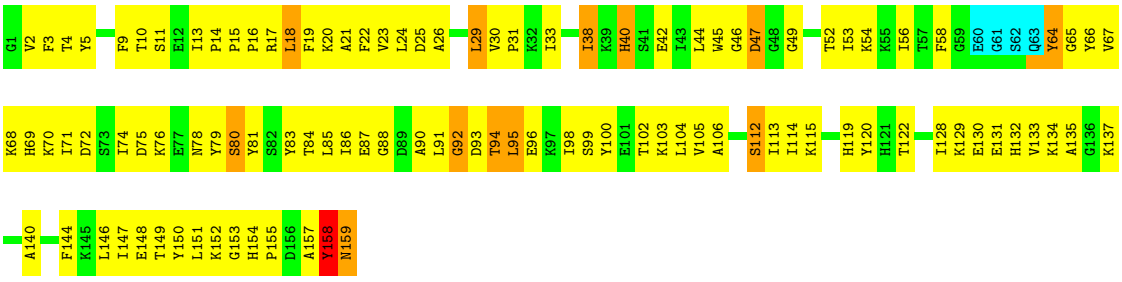


4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: MAJOR ALLERGEN PRU AV 1

Chain A:





4.2.8 Score per residue for model 8

• Molecule 1: MAJOR ALLERGEN PRU AV 1

Chain A: 30% 60% 7% • •

G1 V2 F3 T4 Y5 E6 S7 E8 F9 T10 S11 E12 I13 P14 P15 P16 R17 L18 F19 K20 A21 F22 V23 L24 D25 A26 D27 N28 L29 V30 P31 K32 I33 I38 K39 H40 S41 E42 I43 L44 W45 G46 D47 G48 G49 T52 I53 K54 K55 I56 T57 F58 G59 E60 G61 S62 Q63 Y64

G65 Y66 V67 K68 H69 K70 I71 D75 N78 Y79 S80 Y81 S82 Y83 T84 L85 I86 E87 G88 D89 A90 L91 G92 D93 T94 L95 E96 K97 I98 S99 Y100 L104 V105 A106 G111 S112 I113 I114 K115 S116 T117 S118 H119 Y120 H121 T122 N125 V126 E127 I128 K129 E130 E131 H132 V133

K134 A135 G136 K137 L146 I147 E148 T149 Y150 L151 K152 G153 H154 P155 D156 A157 Y158 N159

4.2.9 Score per residue for model 9

• Molecule 1: MAJOR ALLERGEN PRU AV 1

Chain A: 30% 59% 8% • •

G1 V2 F3 T4 Y5 F9 T10 S11 E12 I13 P14 P15 P16 R17 L18 F19 K20 A21 F22 Y23 L24 D25 A26 D27 N28 L29 V30 P31 K32 I33 A34 A37 I38 K39 H40 S41 E42 I43 L44 W45 G46 D47 G48 G49 T52 I53 K54 K55 I56 T57 F58 G59 E60 G61 S62 Q63 Y64

G65 Y66 V67 K68 H69 K70 I71 D72 S73 I74 D75 K76 E77 N78 Y79 S80 Y81 S82 Y83 T84 L85 I86 E87 G88 L91 G92 D93 T94 L95 E96 K97 I98 S99 Y100 E101 T102 K103 L104 V105 A106 S107 G111 S112 I113 I114 K115 S116 T117 S118 H119 Y120 H121 T122 I128 K129 E130 E131

H132 V133 L146 I147 E148 T149 Y150 L151 K152 G153 H154 P155 D156 A157 Y158 N159

4.2.10 Score per residue for model 10

• Molecule 1: MAJOR ALLERGEN PRU AV 1

Chain A: 35% 55% 6% • •

G1 V2 F3 T4 Y5 E6 S7 E8 F9 T10 S11 E12 I13 P14 P15 P16 R17 L18 F19 K20 A21 F22 V23 L24 D25 A26 L29 V30 P31 K32 I33 I38 K39 H40 S41 E42 I43 L44 W45 G46 D47 G48 G49 T52 I53 K54 K55 I56 T57 F58 G59 E60 G61 S62 Q63 Y64 G65

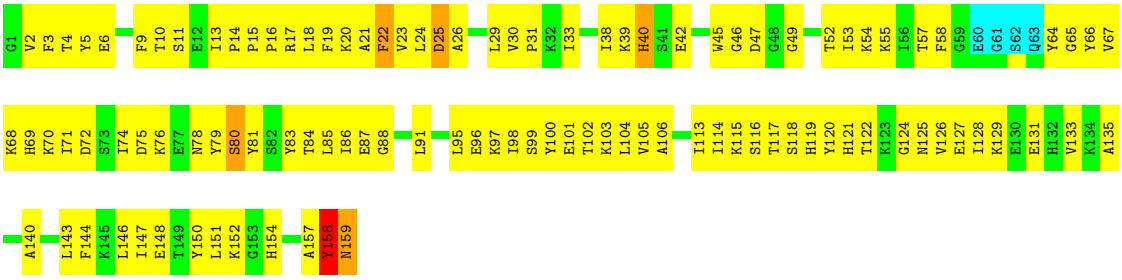
Y66 V67 K68 H69 K70 I71 D72 D75 K76 E77 N78 Y79 S80 Y81 S82 Y83 T84 L85 I86 E87 G88 D89 A90 L91 G92 L95 E96 K97 I98 S99 Y100 L104 V105 A106 S112 I113 I114 K115 S116 T117 S118 H119 Y120 H121 T122 I128 K129 H132 V133 A140 F144 K145

L146 I147 E148 T149 Y150 L151 K152 G153 H154 P155 D156 A157 Y158 N159

4.2.11 Score per residue for model 11

• Molecule 1: MAJOR ALLERGEN PRU AV 1

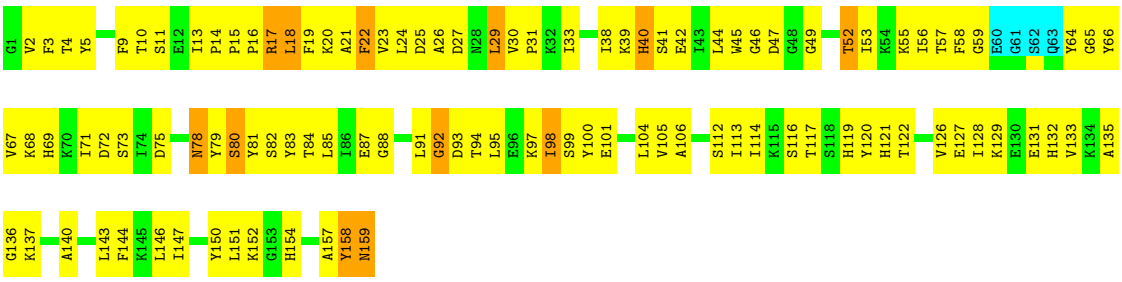
Chain A: 30% 64%



4.2.12 Score per residue for model 12

• Molecule 1: MAJOR ALLERGEN PRU AV 1

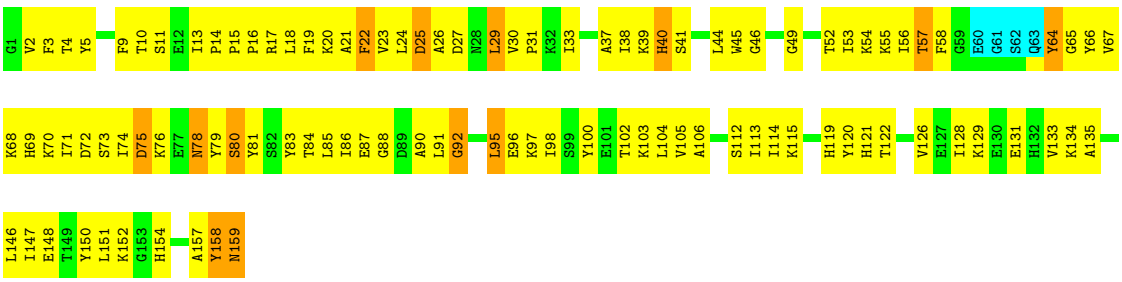
Chain A: 30% 60% 8%



4.2.13 Score per residue for model 13

• Molecule 1: MAJOR ALLERGEN PRU AV 1

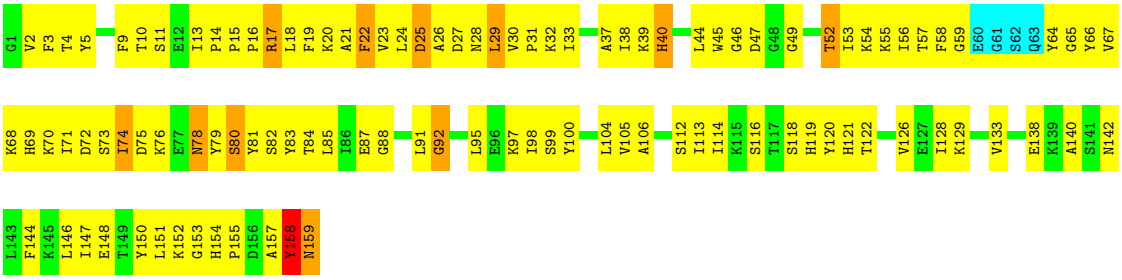
Chain A: 33% 57% 8%



4.2.14 Score per residue for model 14

• Molecule 1: MAJOR ALLERGEN PRU AV 1

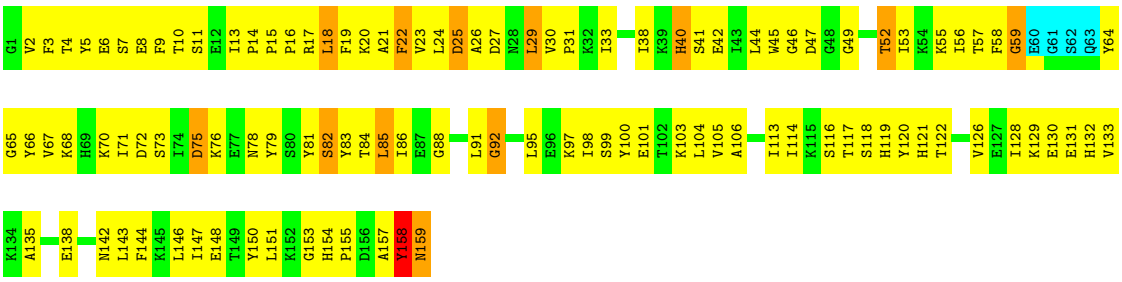
Chain A: 30% 60% 7% • •



4.2.15 Score per residue for model 15

• Molecule 1: MAJOR ALLERGEN PRU AV 1

Chain A: 29% 60% 8% • •



4.2.16 Score per residue for model 16

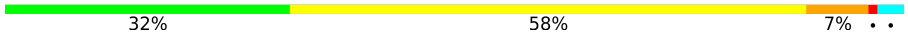
• Molecule 1: MAJOR ALLERGEN PRU AV 1

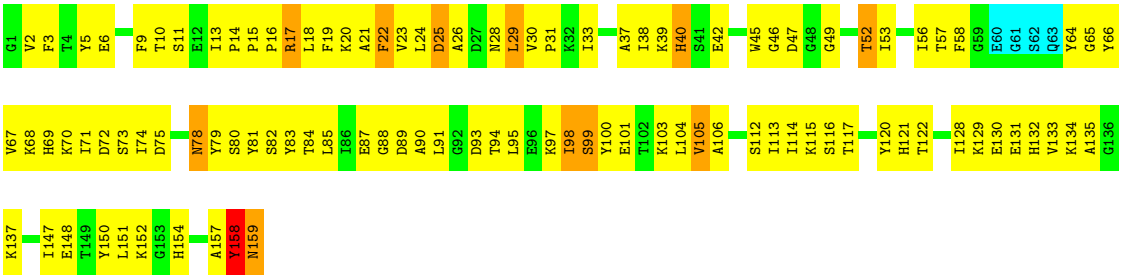
Chain A: 33% 57% 6% • •

4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: MAJOR ALLERGEN PRU AV 1

Chain A:

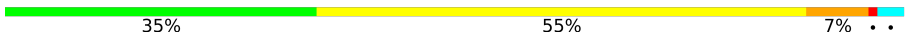


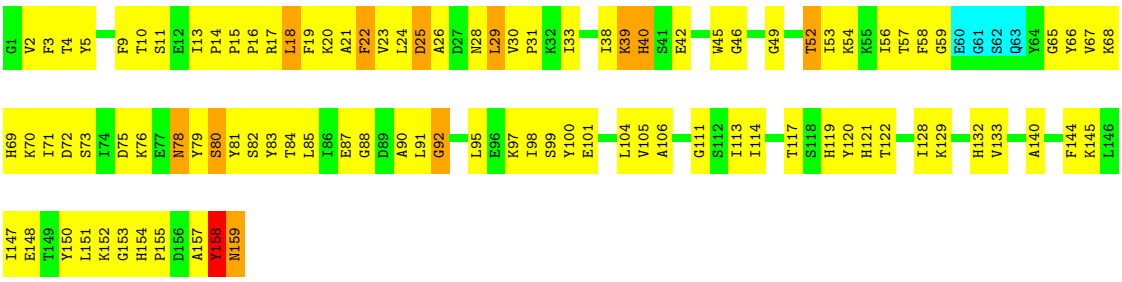


4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: MAJOR ALLERGEN PRU AV 1

Chain A:

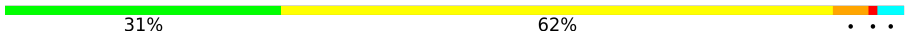




4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: MAJOR ALLERGEN PRU AV 1

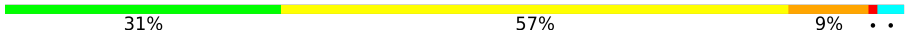
Chain A:



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: MAJOR ALLERGEN PRU AV 1

Chain A:



4.2.21 Score per residue for model 21

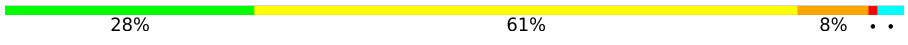
- Molecule 1: MAJOR ALLERGEN PRU AV 1

Chain A:

4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: MAJOR ALLERGEN PRU AV 1

Chain A:



4.2.23 Score per residue for model 23 (medoid)

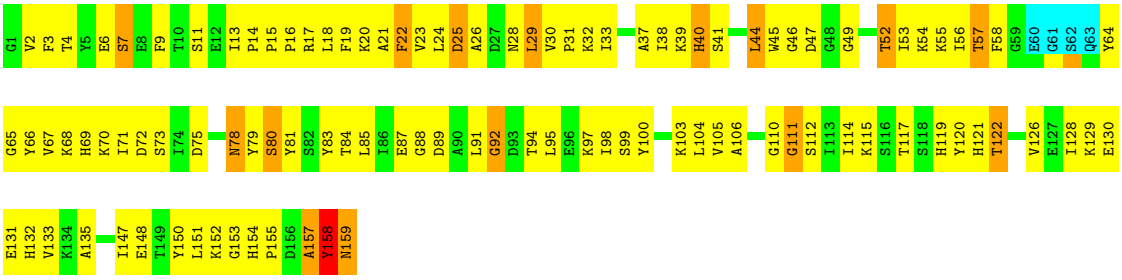
- Molecule 1: MAJOR ALLERGEN PRU AV 1

Chain A: 40% 51% 6% • •

4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: MAJOR ALLERGEN PRU AV 1

Chain A: 31% 57% 9% • •



5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

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

Of the 60 calculated structures, 24 were deposited, based on the following criterion: *LOWEST ENERGY*.

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

Software name	Classification	Version
Xplor-NIH	refinement	1.2.1
NDEE	structure solution	
NMRView	structure solution	5.0.4
Xplor-NIH	structure solution	1.2.1

No chemical shift data was provided.

6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

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

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	0.4±0.5
All	All	0	10

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	17	ARG	Sidechain	10

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	1218	1209	1209	180±12
All	All	29232	29016	29016	4332

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 74.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:LEU:HD23	1:A:147:ILE:HG21	1.08	1.19	1	6
1:A:5:TYR:CE1	1:A:133:VAL:HG21	1.07	1.85	23	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:151:LEU:HD21	1:A:158:TYR:CE2	1.06	1.86	23	7
1:A:21:ALA:HB2	1:A:158:TYR:CZ	1.06	1.85	8	19
1:A:23:VAL:HG11	1:A:74:ILE:HD12	1.05	1.16	22	4
1:A:30:VAL:HG21	1:A:38:ILE:HD13	1.04	1.27	12	5
1:A:5:TYR:CE2	1:A:133:VAL:HG21	1.03	1.88	17	6
1:A:151:LEU:HD21	1:A:158:TYR:CE1	1.03	1.88	12	17
1:A:23:VAL:HG11	1:A:74:ILE:CD1	1.01	1.86	22	4
1:A:18:LEU:HD23	1:A:147:ILE:CG2	0.99	1.86	21	7
1:A:30:VAL:CG1	1:A:38:ILE:HD13	0.99	1.87	1	13
1:A:30:VAL:HG11	1:A:38:ILE:HD13	0.98	1.30	1	13
1:A:21:ALA:HB2	1:A:158:TYR:CE2	0.98	1.93	6	9
1:A:95:LEU:HD21	1:A:128:ILE:CD1	0.97	1.88	15	16
1:A:18:LEU:CD2	1:A:147:ILE:HG21	0.97	1.90	21	7
1:A:21:ALA:HB2	1:A:158:TYR:CE1	0.96	1.94	7	15
1:A:22:PHE:O	1:A:26:ALA:HB2	0.95	1.61	8	24
1:A:95:LEU:HD21	1:A:128:ILE:CG1	0.94	1.91	17	9
1:A:5:TYR:CE1	1:A:133:VAL:HG11	0.93	1.99	5	6
1:A:2:VAL:HG23	1:A:120:TYR:C	0.93	1.84	12	8
1:A:90:ALA:HB1	1:A:132:HIS:NE2	0.92	1.78	8	5
1:A:95:LEU:HD11	1:A:128:ILE:CD1	0.92	1.94	24	2
1:A:84:THR:HG23	1:A:98:ILE:O	0.91	1.66	15	22
1:A:6:GLU:CG	1:A:117:THR:HG23	0.91	1.95	8	3
1:A:131:GLU:O	1:A:135:ALA:HB3	0.90	1.67	3	9
1:A:69:HIS:CD2	1:A:85:LEU:HD13	0.90	2.01	13	12
1:A:4:THR:HG23	1:A:119:HIS:CE1	0.88	2.03	10	22
1:A:37:ALA:C	1:A:38:ILE:HD12	0.88	1.89	3	9
1:A:5:TYR:CD1	1:A:133:VAL:HG21	0.88	2.02	23	1
1:A:18:LEU:O	1:A:18:LEU:HD22	0.88	1.69	1	7
1:A:95:LEU:HD23	1:A:122:THR:HG23	0.87	1.43	19	13
1:A:17:ARG:NE	1:A:151:LEU:HD22	0.86	1.85	14	2
1:A:2:VAL:HG11	1:A:121:HIS:CE1	0.85	2.05	22	7
1:A:53:ILE:HG21	1:A:68:LYS:HE2	0.85	1.47	13	2
1:A:2:VAL:HG13	1:A:120:TYR:O	0.84	1.72	8	9
1:A:5:TYR:CZ	1:A:133:VAL:HG22	0.84	2.06	12	2
1:A:79:TYR:O	1:A:104:LEU:HD12	0.84	1.72	13	16
1:A:95:LEU:HD21	1:A:128:ILE:HD11	0.83	1.50	9	14
1:A:69:HIS:NE2	1:A:85:LEU:HD22	0.83	1.87	13	8
1:A:6:GLU:HG3	1:A:117:THR:HG23	0.83	1.49	8	2
1:A:2:VAL:HG23	1:A:120:TYR:O	0.83	1.73	22	8
1:A:5:TYR:CD2	1:A:133:VAL:HG21	0.83	2.07	13	5
1:A:13:ILE:HD13	1:A:148:GLU:HB3	0.83	1.50	14	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:95:LEU:HD23	1:A:122:THR:CG2	0.82	2.04	3	13
1:A:70:LYS:HE3	1:A:86:ILE:HD13	0.82	1.49	10	1
1:A:29:LEU:HD21	1:A:158:TYR:CZ	0.82	2.10	13	5
1:A:67:VAL:HG12	1:A:88:GLY:HA2	0.82	1.52	20	24
1:A:22:PHE:CE1	1:A:147:ILE:HD11	0.81	2.09	11	24
1:A:90:ALA:HB1	1:A:132:HIS:CE1	0.81	2.10	10	3
1:A:29:LEU:HD21	1:A:158:TYR:OH	0.81	1.75	6	6
1:A:44:LEU:HD22	1:A:55:LYS:CE	0.80	2.06	8	2
1:A:45:TRP:CG	1:A:53:ILE:HD12	0.79	2.12	4	22
1:A:30:VAL:CG2	1:A:38:ILE:HD13	0.79	2.07	12	2
1:A:95:LEU:HD21	1:A:128:ILE:HG13	0.79	1.54	8	7
1:A:54:LYS:CE	1:A:71:ILE:HD11	0.79	2.08	22	6
1:A:5:TYR:CD1	1:A:133:VAL:HG11	0.78	2.14	5	4
1:A:54:LYS:HE3	1:A:71:ILE:HD11	0.78	1.55	24	5
1:A:85:LEU:HD21	1:A:91:LEU:HD11	0.77	1.55	22	1
1:A:21:ALA:HB1	1:A:29:LEU:HG	0.77	1.53	1	18
1:A:104:LEU:HD23	1:A:114:ILE:HG12	0.77	1.54	13	21
1:A:21:ALA:HB1	1:A:29:LEU:CG	0.77	2.10	9	14
1:A:73:SER:C	1:A:74:ILE:HD12	0.77	1.98	17	4
1:A:33:ILE:HG21	1:A:146:LEU:HB3	0.76	1.56	8	6
1:A:98:ILE:HG21	1:A:100:TYR:CE2	0.76	2.16	15	22
1:A:33:ILE:CG2	1:A:146:LEU:HD22	0.76	2.10	11	3
1:A:10:THR:HG22	1:A:113:ILE:HA	0.75	1.56	4	21
1:A:17:ARG:HG2	1:A:151:LEU:HD13	0.75	1.58	9	3
1:A:53:ILE:HG21	1:A:68:LYS:CE	0.74	2.12	13	2
1:A:25:ASP:HB3	1:A:29:LEU:HD23	0.73	1.60	13	3
1:A:67:VAL:HG12	1:A:88:GLY:CA	0.73	2.13	5	23
1:A:69:HIS:CD2	1:A:85:LEU:HD12	0.73	2.18	22	6
1:A:13:ILE:HD11	1:A:152:LYS:HB2	0.73	1.59	16	15
1:A:143:LEU:HA	1:A:146:LEU:HD12	0.73	1.60	11	6
1:A:3:PHE:CE1	1:A:128:ILE:HD12	0.72	2.19	23	12
1:A:18:LEU:C	1:A:18:LEU:HD23	0.71	2.05	14	16
1:A:33:ILE:HG22	1:A:146:LEU:HD22	0.71	1.63	11	1
1:A:21:ALA:HB2	1:A:158:TYR:HE1	0.71	1.45	10	2
1:A:5:TYR:CE2	1:A:133:VAL:HG11	0.71	2.20	22	1
1:A:95:LEU:HD12	1:A:96:GLU:N	0.71	2.00	13	3
1:A:17:ARG:HB3	1:A:151:LEU:HD13	0.71	1.62	21	8
1:A:18:LEU:C	1:A:18:LEU:HD13	0.70	2.07	6	7
1:A:120:TYR:HB3	1:A:128:ILE:HD11	0.70	1.63	6	2
1:A:95:LEU:CD2	1:A:128:ILE:HD11	0.70	2.16	17	12
1:A:30:VAL:HG22	1:A:31:PRO:HD3	0.70	1.61	17	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:3:PHE:CE2	1:A:128:ILE:HD12	0.70	2.21	6	1
1:A:44:LEU:HD22	1:A:55:LYS:HE3	0.70	1.62	8	2
1:A:3:PHE:CD1	1:A:128:ILE:HD12	0.70	2.21	18	6
1:A:23:VAL:HG13	1:A:81:TYR:CE1	0.70	2.21	3	20
1:A:13:ILE:N	1:A:13:ILE:HD12	0.70	2.02	13	2
1:A:81:TYR:CE2	1:A:83:TYR:CD1	0.70	2.80	23	24
1:A:24:LEU:HD12	1:A:24:LEU:N	0.70	2.02	12	22
1:A:18:LEU:HG	1:A:147:ILE:HG21	0.69	1.64	11	7
1:A:30:VAL:HG12	1:A:31:PRO:HD3	0.69	1.63	23	5
1:A:21:ALA:C	1:A:29:LEU:HD12	0.69	2.08	18	2
1:A:45:TRP:CD1	1:A:53:ILE:HD12	0.69	2.23	15	20
1:A:95:LEU:HD12	1:A:96:GLU:H	0.69	1.47	7	3
1:A:13:ILE:HG21	1:A:151:LEU:HD12	0.68	1.63	15	11
1:A:29:LEU:HD23	1:A:158:TYR:OH	0.68	1.87	10	2
1:A:117:THR:HG22	1:A:119:HIS:NE2	0.68	2.04	20	8
1:A:17:ARG:HG2	1:A:151:LEU:HD22	0.68	1.65	7	1
1:A:64:TYR:CE1	1:A:66:TYR:CE2	0.67	2.81	20	1
1:A:94:THR:O	1:A:126:VAL:HG21	0.67	1.90	16	5
1:A:21:ALA:CB	1:A:158:TYR:CZ	0.67	2.75	18	16
1:A:68:LYS:HD3	1:A:86:ILE:HD11	0.67	1.66	13	2
1:A:30:VAL:N	1:A:31:PRO:CD	0.67	2.58	5	24
1:A:23:VAL:HG13	1:A:81:TYR:CD1	0.66	2.25	14	6
1:A:13:ILE:HG23	1:A:14:PRO:HD2	0.66	1.68	15	24
1:A:67:VAL:HB	1:A:85:LEU:HD11	0.66	1.68	22	2
1:A:13:ILE:HD13	1:A:148:GLU:CB	0.66	2.21	13	3
1:A:85:LEU:HD11	1:A:87:GLU:O	0.66	1.90	2	12
1:A:120:TYR:CB	1:A:128:ILE:HD11	0.66	2.21	4	2
1:A:5:TYR:CE1	1:A:133:VAL:CG2	0.65	2.80	15	5
1:A:22:PHE:CE1	1:A:147:ILE:CD1	0.65	2.80	18	24
1:A:93:ASP:O	1:A:94:THR:HG23	0.65	1.91	4	2
1:A:4:THR:HG23	1:A:119:HIS:HE1	0.65	1.50	9	10
1:A:21:ALA:CB	1:A:158:TYR:CE1	0.65	2.78	14	3
1:A:9:PHE:CZ	1:A:144:PHE:CD2	0.65	2.84	18	1
1:A:92:GLY:O	1:A:94:THR:HG23	0.65	1.90	5	1
1:A:64:TYR:CD1	1:A:66:TYR:CE2	0.65	2.85	20	1
1:A:3:PHE:CE1	1:A:128:ILE:CD1	0.65	2.80	5	6
1:A:68:LYS:O	1:A:85:LEU:HD12	0.65	1.92	24	8
1:A:69:HIS:HD2	1:A:85:LEU:HD13	0.65	1.47	7	8
1:A:18:LEU:HD12	1:A:18:LEU:N	0.65	2.06	13	1
1:A:5:TYR:CE1	1:A:133:VAL:HG23	0.65	2.27	15	5
1:A:3:PHE:CD1	1:A:128:ILE:CD1	0.65	2.80	4	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:HIS:CD2	1:A:85:LEU:CD1	0.65	2.80	12	14
1:A:9:PHE:CD1	1:A:9:PHE:N	0.64	2.65	21	24
1:A:98:ILE:CG2	1:A:100:TYR:CE2	0.64	2.80	11	23
1:A:38:ILE:HG23	1:A:57:THR:O	0.64	1.91	22	5
1:A:29:LEU:CD1	1:A:33:ILE:HD11	0.64	2.22	2	8
1:A:83:TYR:CE2	1:A:100:TYR:CB	0.64	2.80	4	24
1:A:151:LEU:HD21	1:A:158:TYR:HE2	0.64	1.46	4	6
1:A:85:LEU:CD2	1:A:91:LEU:HD11	0.64	2.22	22	1
1:A:22:PHE:CD1	1:A:147:ILE:CD1	0.64	2.81	9	7
1:A:2:VAL:CG1	1:A:121:HIS:CE1	0.64	2.81	5	5
1:A:5:TYR:CZ	1:A:133:VAL:CG2	0.64	2.81	20	10
1:A:18:LEU:HA	1:A:151:LEU:HD11	0.64	1.70	7	2
1:A:95:LEU:CD2	1:A:122:THR:HG23	0.64	2.22	19	8
1:A:5:TYR:CD1	1:A:133:VAL:CG1	0.64	2.81	16	7
1:A:139:LYS:O	1:A:143:LEU:HD12	0.64	1.92	19	3
1:A:95:LEU:HD13	1:A:120:TYR:CD2	0.64	2.28	5	2
1:A:15:PRO:N	1:A:16:PRO:HD2	0.63	2.08	17	24
1:A:95:LEU:N	1:A:95:LEU:CD2	0.63	2.61	1	4
1:A:5:TYR:CD2	1:A:133:VAL:CG1	0.63	2.81	22	1
1:A:5:TYR:CD1	1:A:133:VAL:CG2	0.63	2.81	23	1
1:A:5:TYR:CE2	1:A:133:VAL:CG2	0.63	2.81	8	3
1:A:9:PHE:CZ	1:A:114:ILE:CG2	0.63	2.81	14	14
1:A:5:TYR:CE1	1:A:133:VAL:CG1	0.63	2.81	18	4
1:A:22:PHE:N	1:A:29:LEU:HD12	0.63	2.08	14	2
1:A:151:LEU:HD23	1:A:157:ALA:HB3	0.63	1.69	11	19
1:A:83:TYR:CD1	1:A:83:TYR:N	0.63	2.66	15	24
1:A:18:LEU:HD23	1:A:147:ILE:HG22	0.63	1.71	6	2
1:A:154:HIS:CD2	1:A:154:HIS:N	0.63	2.67	8	23
1:A:57:THR:HG22	1:A:66:TYR:HB3	0.63	1.69	2	3
1:A:5:TYR:CZ	1:A:133:VAL:HG21	0.62	2.29	17	16
1:A:9:PHE:CE2	1:A:114:ILE:CG2	0.62	2.82	24	20
1:A:88:GLY:N	1:A:91:LEU:HD12	0.62	2.08	15	5
1:A:4:THR:HG23	1:A:119:HIS:ND1	0.62	2.08	10	8
1:A:5:TYR:CD2	1:A:133:VAL:CG2	0.62	2.81	13	6
1:A:17:ARG:CG	1:A:151:LEU:HD22	0.62	2.25	7	1
1:A:17:ARG:HE	1:A:151:LEU:HD22	0.62	1.52	14	1
1:A:157:ALA:C	1:A:158:TYR:CG	0.61	2.73	24	24
1:A:15:PRO:N	1:A:16:PRO:CD	0.61	2.63	14	24
1:A:29:LEU:HD11	1:A:33:ILE:HD11	0.61	1.71	2	1
1:A:5:TYR:CD1	1:A:133:VAL:HG13	0.61	2.30	16	3
1:A:91:LEU:CD2	1:A:95:LEU:HD21	0.61	2.25	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:151:LEU:HD21	1:A:158:TYR:HE1	0.61	1.52	11	15
1:A:29:LEU:HD21	1:A:150:TYR:CE2	0.61	2.30	2	6
1:A:58:PHE:CD2	1:A:65:GLY:O	0.61	2.54	20	17
1:A:3:PHE:CZ	1:A:128:ILE:HD12	0.61	2.30	5	7
1:A:157:ALA:O	1:A:158:TYR:CD2	0.61	2.54	24	7
1:A:95:LEU:HD22	1:A:120:TYR:HB3	0.61	1.70	16	4
1:A:29:LEU:HD21	1:A:158:TYR:CE2	0.61	2.31	16	6
1:A:15:PRO:CD	1:A:16:PRO:CD	0.60	2.79	24	23
1:A:22:PHE:CD1	1:A:147:ILE:HD13	0.60	2.31	19	8
1:A:95:LEU:HA	1:A:122:THR:HG22	0.60	1.73	13	1
1:A:3:PHE:CD1	1:A:3:PHE:N	0.60	2.69	14	18
1:A:120:TYR:CD1	1:A:120:TYR:N	0.60	2.67	15	9
1:A:95:LEU:HD22	1:A:122:THR:HG22	0.60	1.72	18	2
1:A:91:LEU:HD22	1:A:98:ILE:CD1	0.60	2.27	12	2
1:A:69:HIS:NE2	1:A:85:LEU:HD13	0.60	2.12	10	8
1:A:144:PHE:HA	1:A:147:ILE:HD12	0.60	1.73	11	4
1:A:21:ALA:CB	1:A:158:TYR:CE2	0.60	2.81	6	3
1:A:18:LEU:N	1:A:18:LEU:CD1	0.60	2.64	13	1
1:A:17:ARG:CB	1:A:151:LEU:HD13	0.60	2.27	17	7
1:A:157:ALA:O	1:A:158:TYR:CD1	0.59	2.55	7	17
1:A:150:TYR:O	1:A:154:HIS:CD2	0.59	2.55	8	23
1:A:5:TYR:CD2	1:A:133:VAL:HG11	0.59	2.31	22	1
1:A:29:LEU:HD13	1:A:33:ILE:HD11	0.59	1.74	16	3
1:A:44:LEU:HD13	1:A:55:LYS:HD2	0.59	1.73	16	1
1:A:38:ILE:HD12	1:A:38:ILE:N	0.59	2.12	19	9
1:A:95:LEU:H	1:A:95:LEU:HD22	0.59	1.58	4	1
1:A:95:LEU:HD22	1:A:95:LEU:N	0.59	2.12	4	1
1:A:17:ARG:NE	1:A:159:ASN:CB	0.59	2.66	14	11
1:A:29:LEU:CD1	1:A:33:ILE:CD1	0.59	2.80	2	7
1:A:157:ALA:O	1:A:159:ASN:N	0.59	2.34	24	23
1:A:91:LEU:CD2	1:A:98:ILE:CD1	0.59	2.80	9	2
1:A:38:ILE:CG1	1:A:56:ILE:CG2	0.59	2.81	14	7
1:A:17:ARG:HH21	1:A:157:ALA:HB3	0.59	1.58	1	5
1:A:21:ALA:HB2	1:A:158:TYR:OH	0.59	1.98	8	2
1:A:122:THR:HG21	1:A:126:VAL:O	0.59	1.98	11	2
1:A:33:ILE:HD11	1:A:150:TYR:CD1	0.59	2.33	1	5
1:A:117:THR:CG2	1:A:119:HIS:CE1	0.58	2.86	15	2
1:A:29:LEU:CD1	1:A:33:ILE:HD12	0.58	2.26	1	2
1:A:6:GLU:CG	1:A:7:SER:N	0.58	2.66	24	1
1:A:58:PHE:CG	1:A:65:GLY:O	0.58	2.56	20	6
1:A:64:TYR:CD1	1:A:66:TYR:CD2	0.58	2.91	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:95:LEU:HD23	1:A:122:THR:HG22	0.58	1.74	21	6
1:A:34:ALA:HB2	1:A:146:LEU:HD13	0.58	1.75	9	2
1:A:34:ALA:CB	1:A:146:LEU:HD13	0.58	2.28	9	1
1:A:18:LEU:HD22	1:A:18:LEU:C	0.58	2.18	1	7
1:A:83:TYR:CE2	1:A:100:TYR:CG	0.58	2.92	9	1
1:A:3:PHE:CG	1:A:128:ILE:HD13	0.58	2.34	1	7
1:A:85:LEU:HD22	1:A:87:GLU:O	0.58	1.97	8	1
1:A:70:LYS:CE	1:A:86:ILE:CG2	0.58	2.82	9	1
1:A:64:TYR:CD1	1:A:64:TYR:O	0.58	2.57	2	2
1:A:95:LEU:CD2	1:A:122:THR:CG2	0.58	2.81	3	6
1:A:9:PHE:CE2	1:A:114:ILE:HG21	0.57	2.34	5	16
1:A:90:ALA:O	1:A:132:HIS:CE1	0.57	2.57	18	4
1:A:150:TYR:CD2	1:A:158:TYR:OH	0.57	2.54	11	13
1:A:95:LEU:HD11	1:A:128:ILE:HG13	0.57	1.74	4	2
1:A:150:TYR:CE2	1:A:158:TYR:OH	0.57	2.56	6	9
1:A:17:ARG:O	1:A:158:TYR:CE1	0.57	2.57	8	9
1:A:40:HIS:C	1:A:40:HIS:CD2	0.57	2.77	2	18
1:A:17:ARG:NH2	1:A:157:ALA:HB3	0.57	2.13	3	7
1:A:140:ALA:O	1:A:144:PHE:CD2	0.57	2.57	18	8
1:A:95:LEU:CD1	1:A:122:THR:CG2	0.57	2.82	4	1
1:A:73:SER:O	1:A:74:ILE:HD12	0.57	1.99	17	3
1:A:6:GLU:HG2	1:A:117:THR:HG23	0.57	1.72	17	2
1:A:150:TYR:O	1:A:154:HIS:CG	0.57	2.57	11	1
1:A:24:LEU:HD21	1:A:76:LYS:NZ	0.57	2.14	19	1
1:A:9:PHE:HE1	1:A:116:SER:HG	0.57	1.43	5	1
1:A:71:ILE:HG23	1:A:74:ILE:HD11	0.57	1.74	17	1
1:A:44:LEU:HD11	1:A:55:LYS:HB2	0.57	1.75	12	4
1:A:140:ALA:O	1:A:144:PHE:CD1	0.57	2.58	19	1
1:A:95:LEU:N	1:A:95:LEU:HD22	0.57	2.14	18	2
1:A:22:PHE:CE2	1:A:144:PHE:CE1	0.56	2.93	1	2
1:A:19:PHE:CZ	1:A:74:ILE:HD11	0.56	2.35	11	2
1:A:81:TYR:CD2	1:A:83:TYR:CE1	0.56	2.93	15	4
1:A:94:THR:HB	1:A:126:VAL:HG21	0.56	1.77	12	1
1:A:38:ILE:HD13	1:A:56:ILE:CG2	0.56	2.30	20	1
1:A:98:ILE:HG21	1:A:100:TYR:HE2	0.56	1.60	11	15
1:A:128:ILE:HG22	1:A:129:LYS:N	0.56	2.15	23	24
1:A:151:LEU:HD21	1:A:158:TYR:CZ	0.56	2.35	18	12
1:A:25:ASP:OD2	1:A:158:TYR:CE2	0.56	2.57	10	1
1:A:30:VAL:N	1:A:31:PRO:HD2	0.56	2.15	4	24
1:A:66:TYR:C	1:A:66:TYR:CD1	0.56	2.79	8	24
1:A:58:PHE:HE2	1:A:67:VAL:HG13	0.56	1.61	8	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:LEU:CD2	1:A:95:LEU:CD2	0.56	2.84	10	3
1:A:83:TYR:CE2	1:A:100:TYR:HB3	0.56	2.36	8	11
1:A:30:VAL:HG11	1:A:38:ILE:CD1	0.56	2.27	14	2
1:A:58:PHE:N	1:A:65:GLY:O	0.56	2.38	20	23
1:A:83:TYR:CZ	1:A:100:TYR:HB3	0.56	2.35	14	24
1:A:91:LEU:HD23	1:A:95:LEU:CD2	0.56	2.31	7	3
1:A:75:ASP:O	1:A:79:TYR:N	0.56	2.39	2	23
1:A:151:LEU:CD2	1:A:157:ALA:HB3	0.56	2.31	11	12
1:A:91:LEU:HD22	1:A:98:ILE:HD12	0.56	1.78	12	2
1:A:25:ASP:OD2	1:A:158:TYR:CD2	0.56	2.57	13	2
1:A:23:VAL:CG1	1:A:74:ILE:HD12	0.56	2.18	2	2
1:A:91:LEU:C	1:A:91:LEU:HD12	0.56	2.21	11	2
1:A:3:PHE:CG	1:A:128:ILE:CD1	0.55	2.89	4	2
1:A:5:TYR:CE1	1:A:133:VAL:HG13	0.55	2.36	12	1
1:A:79:TYR:HB3	1:A:104:LEU:HD12	0.55	1.77	16	1
1:A:107:SER:HA	1:A:113:ILE:HD11	0.55	1.77	20	1
1:A:24:LEU:N	1:A:24:LEU:CD1	0.55	2.69	12	19
1:A:95:LEU:CD2	1:A:128:ILE:CD1	0.55	2.82	3	2
1:A:18:LEU:HD13	1:A:19:PHE:N	0.55	2.16	15	7
1:A:95:LEU:HD11	1:A:128:ILE:HG12	0.55	1.78	6	1
1:A:64:TYR:CD1	1:A:64:TYR:C	0.55	2.79	14	3
1:A:18:LEU:CD2	1:A:147:ILE:CG2	0.55	2.84	6	1
1:A:5:TYR:CG	1:A:133:VAL:HG13	0.55	2.37	16	4
1:A:2:VAL:HG22	1:A:121:HIS:ND1	0.55	2.16	2	3
1:A:20:LYS:HG2	1:A:24:LEU:HD22	0.55	1.78	7	4
1:A:30:VAL:HG12	1:A:38:ILE:HD13	0.55	1.78	15	2
1:A:6:GLU:CG	1:A:117:THR:CG2	0.55	2.81	8	2
1:A:2:VAL:HA	1:A:120:TYR:O	0.55	2.02	23	14
1:A:58:PHE:CE2	1:A:67:VAL:HG13	0.55	2.37	18	7
1:A:133:VAL:HG22	1:A:137:LYS:NZ	0.55	2.16	8	2
1:A:40:HIS:CG	1:A:41:SER:N	0.55	2.74	13	2
1:A:151:LEU:CD2	1:A:158:TYR:CE2	0.55	2.90	9	3
1:A:30:VAL:HG11	1:A:38:ILE:HD12	0.55	1.79	20	1
1:A:33:ILE:HD13	1:A:147:ILE:HA	0.54	1.78	22	3
1:A:18:LEU:HD22	1:A:104:LEU:CD2	0.54	2.32	11	3
1:A:13:ILE:N	1:A:13:ILE:CD1	0.54	2.69	13	1
1:A:44:LEU:HD13	1:A:55:LYS:HE3	0.54	1.79	13	2
1:A:5:TYR:CZ	1:A:133:VAL:HG11	0.54	2.37	22	3
1:A:94:THR:HG22	1:A:126:VAL:HG11	0.54	1.79	12	1
1:A:30:VAL:HG23	1:A:38:ILE:HB	0.54	1.79	3	2
1:A:13:ILE:HD11	1:A:152:LYS:HA	0.54	1.80	20	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:PHE:CZ	1:A:147:ILE:HD11	0.54	2.38	14	2
1:A:29:LEU:HD21	1:A:158:TYR:CE1	0.54	2.38	17	3
1:A:44:LEU:HD13	1:A:55:LYS:CD	0.54	2.32	16	1
1:A:55:LYS:CE	1:A:66:TYR:CE1	0.54	2.91	20	1
1:A:11:SER:OG	1:A:114:ILE:HD11	0.54	2.03	24	1
1:A:10:THR:HG22	1:A:113:ILE:CA	0.54	2.32	7	14
1:A:24:LEU:HD21	1:A:76:LYS:HZ3	0.54	1.63	19	1
1:A:55:LYS:HE2	1:A:66:TYR:CD1	0.54	2.38	20	1
1:A:71:ILE:CD1	1:A:81:TYR:OH	0.54	2.56	19	24
1:A:100:TYR:CE1	1:A:118:SER:OG	0.54	2.58	2	1
1:A:17:ARG:CZ	1:A:159:ASN:CB	0.54	2.86	11	7
1:A:33:ILE:HG12	1:A:150:TYR:CD1	0.54	2.38	13	18
1:A:4:THR:O	1:A:5:TYR:CD1	0.54	2.61	6	2
1:A:15:PRO:CD	1:A:16:PRO:HD2	0.54	2.33	17	23
1:A:128:ILE:CG2	1:A:129:LYS:N	0.54	2.71	16	20
1:A:9:PHE:CE2	1:A:114:ILE:HB	0.53	2.39	11	24
1:A:29:LEU:CD2	1:A:158:TYR:OH	0.53	2.56	7	3
1:A:151:LEU:HD23	1:A:157:ALA:CB	0.53	2.33	24	9
1:A:29:LEU:CD2	1:A:33:ILE:HD11	0.53	2.33	14	2
1:A:82:SER:OG	1:A:101:GLU:CG	0.53	2.56	20	1
1:A:68:LYS:O	1:A:85:LEU:CD1	0.53	2.56	9	8
1:A:2:VAL:CG2	1:A:120:TYR:O	0.53	2.54	22	4
1:A:40:HIS:CD2	1:A:40:HIS:C	0.53	2.81	11	1
1:A:148:GLU:O	1:A:152:LYS:CB	0.53	2.56	13	1
1:A:95:LEU:CD1	1:A:128:ILE:CD1	0.53	2.80	24	1
1:A:3:PHE:CD1	1:A:128:ILE:HD13	0.53	2.37	17	5
1:A:68:LYS:CD	1:A:87:GLU:OE1	0.53	2.57	21	13
1:A:9:PHE:CZ	1:A:114:ILE:HG22	0.53	2.37	20	12
1:A:20:LYS:O	1:A:25:ASP:N	0.53	2.41	8	12
1:A:157:ALA:HB1	1:A:158:TYR:CZ	0.53	2.38	8	14
1:A:5:TYR:CE1	1:A:133:VAL:HG22	0.53	2.39	12	1
1:A:25:ASP:O	1:A:29:LEU:HD23	0.53	2.04	22	2
1:A:58:PHE:CZ	1:A:67:VAL:HG22	0.53	2.39	5	13
1:A:49:GLY:O	1:A:71:ILE:HG21	0.53	2.03	9	23
1:A:95:LEU:HD11	1:A:128:ILE:CG1	0.53	2.33	8	2
1:A:74:ILE:CG1	1:A:80:SER:O	0.53	2.57	22	4
1:A:29:LEU:CD2	1:A:150:TYR:CZ	0.53	2.92	8	3
1:A:122:THR:OG1	1:A:126:VAL:HG23	0.53	2.04	12	1
1:A:11:SER:O	1:A:112:SER:N	0.53	2.42	8	7
1:A:17:ARG:NH2	1:A:154:HIS:O	0.53	2.41	14	2
1:A:17:ARG:O	1:A:158:TYR:CE2	0.53	2.62	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:3:PHE:HD2	1:A:5:TYR:HH	0.53	1.45	23	1
1:A:11:SER:OG	1:A:148:GLU:CG	0.52	2.58	20	7
1:A:103:LYS:N	1:A:115:LYS:O	0.52	2.43	4	10
1:A:19:PHE:CD1	1:A:79:TYR:HA	0.52	2.39	13	10
1:A:28:ASN:O	1:A:32:LYS:CG	0.52	2.57	20	5
1:A:95:LEU:CD1	1:A:122:THR:HG22	0.52	2.34	4	1
1:A:30:VAL:CG1	1:A:31:PRO:HD3	0.52	2.34	23	5
1:A:120:TYR:HB3	1:A:128:ILE:CD1	0.52	2.34	22	2
1:A:29:LEU:CD2	1:A:33:ILE:CD1	0.52	2.86	14	2
1:A:11:SER:CB	1:A:114:ILE:HD11	0.52	2.34	24	1
1:A:16:PRO:HB3	1:A:79:TYR:CE1	0.52	2.39	16	6
1:A:85:LEU:HD23	1:A:98:ILE:HG13	0.52	1.80	4	6
1:A:128:ILE:CG2	1:A:133:VAL:HG23	0.52	2.35	5	4
1:A:68:LYS:NZ	1:A:87:GLU:OE1	0.52	2.43	17	5
1:A:68:LYS:CE	1:A:87:GLU:OE1	0.52	2.57	21	11
1:A:5:TYR:CD1	1:A:133:VAL:HG23	0.52	2.40	2	3
1:A:101:GLU:N	1:A:117:THR:O	0.52	2.42	18	6
1:A:95:LEU:HD22	1:A:120:TYR:CD2	0.52	2.40	10	1
1:A:18:LEU:O	1:A:22:PHE:N	0.52	2.40	13	1
1:A:25:ASP:O	1:A:29:LEU:N	0.52	2.42	18	3
1:A:128:ILE:HG21	1:A:133:VAL:HG23	0.52	1.80	5	1
1:A:2:VAL:HG21	1:A:121:HIS:CE1	0.52	2.40	22	4
1:A:139:LYS:O	1:A:143:LEU:CD1	0.52	2.57	19	1
1:A:84:THR:CG2	1:A:98:ILE:O	0.52	2.58	14	4
1:A:39:LYS:N	1:A:57:THR:O	0.52	2.43	17	13
1:A:86:ILE:O	1:A:91:LEU:CD1	0.52	2.57	13	2
1:A:3:PHE:CG	1:A:128:ILE:HG12	0.52	2.40	20	2
1:A:5:TYR:CE2	1:A:133:VAL:CG1	0.52	2.93	22	1
1:A:29:LEU:HD11	1:A:33:ILE:CD1	0.52	2.35	7	2
1:A:85:LEU:HB3	1:A:98:ILE:CG2	0.52	2.35	12	15
1:A:49:GLY:O	1:A:71:ILE:CG2	0.52	2.57	11	18
1:A:96:GLU:OE1	1:A:123:LYS:N	0.52	2.43	6	1
1:A:21:ALA:HB1	1:A:29:LEU:CD1	0.52	2.34	14	3
1:A:119:HIS:C	1:A:120:TYR:CD1	0.52	2.83	4	5
1:A:17:ARG:NH1	1:A:159:ASN:OD1	0.52	2.43	22	5
1:A:17:ARG:NH2	1:A:159:ASN:OXT	0.52	2.43	10	1
1:A:38:ILE:HG13	1:A:56:ILE:CG2	0.52	2.35	14	4
1:A:95:LEU:HD21	1:A:128:ILE:HD13	0.52	1.79	3	1
1:A:64:TYR:CE2	1:A:66:TYR:CD2	0.52	2.98	8	1
1:A:17:ARG:CZ	1:A:159:ASN:OXT	0.52	2.58	10	1
1:A:28:ASN:O	1:A:32:LYS:CB	0.52	2.58	22	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:LEU:HD23	1:A:19:PHE:N	0.51	2.20	8	11
1:A:131:GLU:O	1:A:135:ALA:N	0.51	2.43	12	2
1:A:27:ASP:O	1:A:31:PRO:CG	0.51	2.57	9	1
1:A:79:TYR:N	1:A:79:TYR:CD1	0.51	2.72	6	13
1:A:155:PRO:O	1:A:159:ASN:ND2	0.51	2.43	7	13
1:A:3:PHE:HB3	1:A:5:TYR:CZ	0.51	2.40	23	7
1:A:25:ASP:O	1:A:28:ASN:ND2	0.51	2.43	8	1
1:A:6:GLU:HG2	1:A:7:SER:N	0.51	2.19	24	1
1:A:17:ARG:CZ	1:A:151:LEU:HD22	0.51	2.36	5	3
1:A:38:ILE:N	1:A:38:ILE:CD1	0.51	2.73	21	5
1:A:5:TYR:CD2	1:A:120:TYR:CE2	0.51	2.98	15	1
1:A:17:ARG:NE	1:A:159:ASN:HB2	0.51	2.21	11	17
1:A:21:ALA:CB	1:A:158:TYR:OH	0.51	2.59	8	2
1:A:81:TYR:O	1:A:102:THR:N	0.51	2.41	11	7
1:A:101:GLU:O	1:A:117:THR:N	0.51	2.43	18	7
1:A:143:LEU:HD13	1:A:143:LEU:O	0.51	2.06	23	1
1:A:44:LEU:HD23	1:A:55:LYS:CB	0.51	2.35	24	1
1:A:3:PHE:HB3	1:A:5:TYR:CE2	0.51	2.40	22	16
1:A:38:ILE:HG12	1:A:56:ILE:CG2	0.51	2.35	7	17
1:A:128:ILE:HD12	1:A:128:ILE:H	0.51	1.64	1	3
1:A:15:PRO:CD	1:A:16:PRO:HD3	0.51	2.36	14	10
1:A:131:GLU:O	1:A:135:ALA:CB	0.51	2.59	4	11
1:A:95:LEU:CD2	1:A:128:ILE:CG1	0.51	2.85	8	2
1:A:17:ARG:NH2	1:A:158:TYR:O	0.51	2.44	12	1
1:A:3:PHE:HB2	1:A:120:TYR:CD2	0.51	2.41	15	1
1:A:104:LEU:HD23	1:A:114:ILE:HG23	0.51	1.82	16	1
1:A:126:VAL:O	1:A:127:GLU:CG	0.51	2.59	4	1
1:A:94:THR:O	1:A:126:VAL:CG2	0.51	2.59	16	3
1:A:117:THR:HG22	1:A:119:HIS:CE1	0.51	2.41	8	3
1:A:95:LEU:CA	1:A:122:THR:HG22	0.51	2.36	13	1
1:A:3:PHE:CD1	1:A:128:ILE:HG12	0.51	2.40	20	2
1:A:5:TYR:CE2	1:A:120:TYR:CE2	0.51	2.99	15	1
1:A:17:ARG:NH2	1:A:151:LEU:HD22	0.51	2.21	8	2
1:A:17:ARG:CZ	1:A:159:ASN:HA	0.51	2.36	23	4
1:A:139:LYS:CG	1:A:140:ALA:N	0.51	2.73	6	1
1:A:122:THR:OG1	1:A:126:VAL:CG2	0.51	2.59	12	1
1:A:104:LEU:C	1:A:105:VAL:CG2	0.51	2.79	17	23
1:A:105:VAL:HG12	1:A:106:ALA:H	0.51	1.66	18	24
1:A:150:TYR:HE2	1:A:157:ALA:HB1	0.51	1.66	12	12
1:A:18:LEU:HD13	1:A:148:GLU:OE2	0.51	2.06	7	1
1:A:118:SER:C	1:A:119:HIS:CG	0.51	2.85	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:2:VAL:HG23	1:A:121:HIS:N	0.51	2.20	20	5
1:A:13:ILE:HD13	1:A:148:GLU:CA	0.51	2.36	13	1
1:A:3:PHE:HE2	1:A:128:ILE:HD12	0.51	1.62	6	1
1:A:130:GLU:O	1:A:134:LYS:CB	0.51	2.59	23	2
1:A:138:GLU:O	1:A:142:ASN:ND2	0.50	2.44	4	4
1:A:13:ILE:HD12	1:A:13:ILE:H	0.50	1.66	18	5
1:A:21:ALA:O	1:A:26:ALA:N	0.50	2.44	14	4
1:A:3:PHE:CD2	1:A:128:ILE:HD12	0.50	2.41	6	1
1:A:85:LEU:CB	1:A:98:ILE:HB	0.50	2.37	15	2
1:A:58:PHE:CB	1:A:65:GLY:O	0.50	2.59	20	12
1:A:3:PHE:HB2	1:A:5:TYR:CE2	0.50	2.41	6	1
1:A:120:TYR:CD2	1:A:128:ILE:HG13	0.50	2.41	24	3
1:A:18:LEU:C	1:A:18:LEU:CD1	0.50	2.80	21	7
1:A:13:ILE:HG21	1:A:151:LEU:HB2	0.50	1.84	8	3
1:A:19:PHE:CZ	1:A:74:ILE:CD1	0.50	2.94	13	2
1:A:131:GLU:O	1:A:136:GLY:N	0.50	2.43	12	1
1:A:54:LYS:HE2	1:A:71:ILE:HD11	0.50	1.82	22	3
1:A:129:LYS:O	1:A:132:HIS:N	0.50	2.43	19	11
1:A:103:LYS:O	1:A:115:LYS:N	0.50	2.42	24	6
1:A:3:PHE:CD2	1:A:128:ILE:HG12	0.50	2.42	15	2
1:A:13:ILE:CG1	1:A:152:LYS:HG3	0.50	2.37	19	1
1:A:57:THR:HG22	1:A:66:TYR:CB	0.50	2.36	2	1
1:A:120:TYR:HB2	1:A:128:ILE:HD11	0.50	1.83	4	1
1:A:73:SER:N	1:A:82:SER:OG	0.50	2.45	9	1
1:A:40:HIS:CD2	1:A:57:THR:OG1	0.50	2.64	13	2
1:A:13:ILE:HG12	1:A:152:LYS:CG	0.50	2.37	19	1
1:A:85:LEU:HB2	1:A:98:ILE:CG2	0.50	2.37	15	2
1:A:19:PHE:CE2	1:A:76:LYS:HA	0.50	2.41	13	15
1:A:91:LEU:HD13	1:A:96:GLU:O	0.50	2.07	4	2
1:A:18:LEU:CD1	1:A:148:GLU:OE2	0.50	2.60	7	1
1:A:3:PHE:CE2	1:A:128:ILE:HG12	0.50	2.42	15	1
1:A:39:LYS:CB	1:A:59:GLY:O	0.50	2.60	20	1
1:A:21:ALA:HA	1:A:25:ASP:CB	0.49	2.36	18	17
1:A:75:ASP:HB2	1:A:80:SER:HB2	0.49	1.83	19	2
1:A:75:ASP:HB2	1:A:80:SER:CB	0.49	2.37	21	16
1:A:13:ILE:HG21	1:A:151:LEU:CD1	0.49	2.36	15	5
1:A:72:ASP:N	1:A:82:SER:O	0.49	2.42	14	7
1:A:13:ILE:HD11	1:A:152:LYS:CB	0.49	2.37	12	2
1:A:150:TYR:CE2	1:A:157:ALA:HB1	0.49	2.43	18	9
1:A:29:LEU:HD11	1:A:147:ILE:HG23	0.49	1.84	14	1
1:A:79:TYR:O	1:A:104:LEU:N	0.49	2.45	20	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:LEU:CD2	1:A:98:ILE:HG13	0.49	2.38	22	2
1:A:133:VAL:O	1:A:137:LYS:CE	0.49	2.61	12	2
1:A:151:LEU:CD2	1:A:158:TYR:CE1	0.49	2.82	12	6
1:A:40:HIS:CE1	1:A:42:GLU:HB2	0.49	2.43	17	15
1:A:39:LYS:O	1:A:40:HIS:CB	0.49	2.60	13	6
1:A:157:ALA:O	1:A:158:TYR:C	0.49	2.51	10	23
1:A:14:PRO:HG2	1:A:17:ARG:CG	0.49	2.38	10	8
1:A:159:ASN:C	1:A:159:ASN:ND2	0.49	2.66	10	15
1:A:53:ILE:CG2	1:A:68:LYS:HG2	0.49	2.37	13	1
1:A:87:GLU:C	1:A:91:LEU:CD1	0.49	2.81	7	3
1:A:45:TRP:CG	1:A:53:ILE:CD1	0.49	2.92	4	3
1:A:70:LYS:CE	1:A:86:ILE:HD13	0.49	2.32	10	1
1:A:55:LYS:HE3	1:A:66:TYR:CE1	0.49	2.42	20	1
1:A:133:VAL:HG13	1:A:134:LYS:N	0.49	2.22	1	6
1:A:159:ASN:ND2	1:A:159:ASN:O	0.49	2.45	21	5
1:A:13:ILE:CG2	1:A:18:LEU:CD1	0.49	2.91	13	1
1:A:58:PHE:CD2	1:A:66:TYR:N	0.49	2.80	18	1
1:A:33:ILE:HD11	1:A:150:TYR:CG	0.49	2.42	1	3
1:A:23:VAL:CG1	1:A:81:TYR:CD1	0.49	2.95	11	4
1:A:28:ASN:O	1:A:32:LYS:CD	0.49	2.60	8	2
1:A:95:LEU:HD13	1:A:122:THR:HG22	0.49	1.83	4	1
1:A:139:LYS:HG3	1:A:140:ALA:N	0.49	2.23	6	1
1:A:9:PHE:CZ	1:A:144:PHE:CE2	0.49	3.00	18	1
1:A:39:LYS:HG2	1:A:59:GLY:N	0.48	2.23	2	1
1:A:37:ALA:O	1:A:38:ILE:HD12	0.48	2.05	3	1
1:A:56:ILE:HD12	1:A:69:HIS:CE1	0.48	2.43	22	2
1:A:5:TYR:CZ	1:A:133:VAL:HG23	0.48	2.43	20	1
1:A:11:SER:CB	1:A:148:GLU:CD	0.48	2.82	18	6
1:A:83:TYR:CZ	1:A:100:TYR:CB	0.48	2.96	14	5
1:A:155:PRO:HA	1:A:159:ASN:ND2	0.48	2.23	7	1
1:A:93:ASP:OD1	1:A:94:THR:HG23	0.48	2.08	9	3
1:A:18:LEU:HD22	1:A:104:LEU:HD22	0.48	1.86	11	2
1:A:17:ARG:NH2	1:A:159:ASN:HA	0.48	2.23	23	2
1:A:3:PHE:CD2	1:A:5:TYR:OH	0.48	2.65	23	1
1:A:40:HIS:O	1:A:57:THR:OG1	0.48	2.32	13	12
1:A:78:ASN:O	1:A:79:TYR:CB	0.48	2.61	7	12
1:A:85:LEU:HD12	1:A:100:TYR:HE2	0.48	1.69	15	2
1:A:3:PHE:CB	1:A:5:TYR:CE2	0.48	2.96	22	1
1:A:107:SER:CB	1:A:108:PRO:HD2	0.48	2.38	22	1
1:A:56:ILE:CD1	1:A:69:HIS:CE1	0.48	2.97	17	1
1:A:22:PHE:CZ	1:A:144:PHE:CE1	0.48	3.02	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:GLU:O	1:A:91:LEU:HD11	0.48	2.08	23	1
1:A:105:VAL:N	1:A:113:ILE:O	0.48	2.45	13	5
1:A:44:LEU:HD13	1:A:55:LYS:CE	0.48	2.38	13	1
1:A:29:LEU:HD21	1:A:33:ILE:HD11	0.48	1.85	14	1
1:A:3:PHE:CZ	1:A:128:ILE:HG12	0.48	2.44	15	1
1:A:33:ILE:CD1	1:A:150:TYR:HB2	0.48	2.39	20	1
1:A:70:LYS:O	1:A:84:THR:N	0.48	2.44	23	1
1:A:159:ASN:ND2	1:A:159:ASN:C	0.48	2.66	7	9
1:A:23:VAL:HB	1:A:24:LEU:HD12	0.48	1.86	15	12
1:A:17:ARG:NE	1:A:151:LEU:CD2	0.48	2.70	14	1
1:A:91:LEU:O	1:A:92:GLY:O	0.48	2.32	9	19
1:A:40:HIS:CD2	1:A:40:HIS:O	0.48	2.67	23	6
1:A:98:ILE:HD13	1:A:120:TYR:HA	0.48	1.85	13	3
1:A:6:GLU:HG2	1:A:117:THR:CG2	0.48	2.39	17	2
1:A:125:ASN:O	1:A:125:ASN:ND2	0.48	2.47	8	1
1:A:95:LEU:HB2	1:A:128:ILE:CG1	0.48	2.39	10	1
1:A:5:TYR:CE2	1:A:133:VAL:HG22	0.48	2.44	12	4
1:A:89:ASP:OD1	1:A:90:ALA:N	0.48	2.47	17	1
1:A:128:ILE:HG21	1:A:133:VAL:CG2	0.47	2.39	22	3
1:A:83:TYR:O	1:A:100:TYR:N	0.47	2.46	9	1
1:A:42:GLU:O	1:A:44:LEU:HD12	0.47	2.09	23	1
1:A:29:LEU:HD13	1:A:33:ILE:CD1	0.47	2.38	13	7
1:A:91:LEU:O	1:A:95:LEU:O	0.47	2.32	11	3
1:A:2:VAL:HB	1:A:121:HIS:CG	0.47	2.44	24	2
1:A:70:LYS:CE	1:A:86:ILE:HG21	0.47	2.39	9	2
1:A:29:LEU:O	1:A:29:LEU:HD13	0.47	2.09	7	4
1:A:64:TYR:O	1:A:64:TYR:CG	0.47	2.67	2	1
1:A:38:ILE:CG2	1:A:40:HIS:O	0.47	2.63	13	1
1:A:7:SER:O	1:A:8:GLU:CG	0.47	2.62	1	5
1:A:13:ILE:CD1	1:A:148:GLU:O	0.47	2.62	18	2
1:A:56:ILE:HG22	1:A:58:PHE:CE1	0.47	2.45	20	1
1:A:15:PRO:HD2	1:A:16:PRO:CD	0.47	2.40	10	22
1:A:124:GLY:O	1:A:125:ASN:CB	0.47	2.61	22	3
1:A:100:TYR:CD1	1:A:118:SER:CB	0.47	2.97	11	2
1:A:7:SER:C	1:A:8:GLU:CG	0.47	2.82	15	4
1:A:22:PHE:CE2	1:A:144:PHE:CZ	0.47	3.02	1	1
1:A:120:TYR:CB	1:A:128:ILE:CD1	0.47	2.93	6	3
1:A:127:GLU:OE1	1:A:127:GLU:N	0.47	2.48	11	1
1:A:127:GLU:N	1:A:127:GLU:CD	0.47	2.68	11	1
1:A:55:LYS:CD	1:A:68:LYS:HD3	0.47	2.40	20	1
1:A:2:VAL:HG21	1:A:121:HIS:NE2	0.47	2.25	22	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:SER:OG	1:A:112:SER:OG	0.47	2.33	24	1
1:A:64:TYR:CD2	1:A:66:TYR:CD2	0.47	3.03	1	2
1:A:128:ILE:HD12	1:A:128:ILE:N	0.47	2.25	1	2
1:A:16:PRO:HB3	1:A:79:TYR:CZ	0.47	2.45	7	10
1:A:18:LEU:C	1:A:18:LEU:CD2	0.47	2.80	8	9
1:A:5:TYR:OH	1:A:133:VAL:HG21	0.47	2.10	14	2
1:A:9:PHE:CZ	1:A:144:PHE:CG	0.47	3.03	15	2
1:A:13:ILE:CG1	1:A:152:LYS:CG	0.47	2.93	19	1
1:A:72:ASP:OD2	1:A:84:THR:OG1	0.47	2.32	13	10
1:A:81:TYR:CE2	1:A:83:TYR:CE1	0.47	3.03	10	9
1:A:150:TYR:CE2	1:A:157:ALA:CB	0.47	2.98	9	9
1:A:2:VAL:HB	1:A:121:HIS:ND1	0.47	2.25	24	8
1:A:110:GLY:O	1:A:111:GLY:O	0.46	2.33	16	4
1:A:52:THR:O	1:A:70:LYS:HA	0.46	2.10	6	22
1:A:91:LEU:HD23	1:A:95:LEU:HD21	0.46	1.88	13	2
1:A:157:ALA:C	1:A:158:TYR:CD1	0.46	2.89	7	2
1:A:107:SER:OG	1:A:111:GLY:O	0.46	2.33	20	2
1:A:94:THR:CB	1:A:126:VAL:HG21	0.46	2.39	12	1
1:A:19:PHE:CZ	1:A:76:LYS:HA	0.46	2.45	15	1
1:A:95:LEU:HD11	1:A:120:TYR:HD2	0.46	1.70	22	1
1:A:9:PHE:CE2	1:A:114:ILE:CB	0.46	2.98	8	15
1:A:131:GLU:HG3	1:A:135:ALA:CB	0.46	2.40	6	1
1:A:97:LYS:O	1:A:121:HIS:HB2	0.46	2.10	17	19
1:A:30:VAL:CG2	1:A:38:ILE:HB	0.46	2.40	3	1
1:A:11:SER:N	1:A:112:SER:O	0.46	2.48	5	5
1:A:71:ILE:HD13	1:A:81:TYR:OH	0.46	2.10	11	4
1:A:14:PRO:HG3	1:A:17:ARG:CZ	0.46	2.41	9	1
1:A:100:TYR:CE1	1:A:118:SER:CB	0.46	2.98	11	1
1:A:15:PRO:O	1:A:19:PHE:HB2	0.46	2.11	21	18
1:A:72:ASP:O	1:A:73:SER:OG	0.46	2.33	18	5
1:A:40:HIS:N	1:A:57:THR:OG1	0.46	2.48	8	4
1:A:74:ILE:HG12	1:A:80:SER:O	0.46	2.11	13	3
1:A:45:TRP:HB2	1:A:53:ILE:N	0.46	2.26	18	13
1:A:94:THR:O	1:A:122:THR:HG22	0.46	2.10	19	4
1:A:19:PHE:CE1	1:A:79:TYR:HA	0.46	2.46	13	3
1:A:91:LEU:O	1:A:95:LEU:N	0.46	2.48	17	1
1:A:9:PHE:CD2	1:A:114:ILE:HB	0.46	2.45	9	9
1:A:79:TYR:HB3	1:A:104:LEU:HB2	0.46	1.86	16	3
1:A:13:ILE:CG2	1:A:14:PRO:HD2	0.46	2.40	7	19
1:A:30:VAL:CG2	1:A:31:PRO:HD3	0.46	2.39	13	4
1:A:95:LEU:CD2	1:A:128:ILE:HG13	0.46	2.36	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:LEU:CD2	1:A:55:LYS:HE3	0.46	2.39	13	2
1:A:10:THR:CG2	1:A:113:ILE:HG23	0.46	2.41	15	1
1:A:40:HIS:CD2	1:A:41:SER:N	0.46	2.84	20	1
1:A:55:LYS:CD	1:A:68:LYS:CD	0.46	2.94	20	1
1:A:64:TYR:CE1	1:A:66:TYR:CD2	0.46	3.03	20	1
1:A:91:LEU:HD21	1:A:98:ILE:HG13	0.46	1.87	22	2
1:A:42:GLU:O	1:A:44:LEU:CD1	0.46	2.64	23	1
1:A:85:LEU:HD12	1:A:86:ILE:N	0.46	2.25	13	4
1:A:38:ILE:HA	1:A:57:THR:O	0.46	2.11	16	16
1:A:128:ILE:CG2	1:A:132:HIS:HB3	0.46	2.41	6	2
1:A:5:TYR:CE2	1:A:133:VAL:HG23	0.46	2.46	20	1
1:A:38:ILE:HG12	1:A:58:PHE:CE1	0.46	2.46	20	1
1:A:11:SER:HB3	1:A:114:ILE:HD11	0.46	1.88	24	1
1:A:2:VAL:HG13	1:A:121:HIS:CE1	0.46	2.45	2	2
1:A:1:GLY:O	1:A:122:THR:OG1	0.46	2.33	8	1
1:A:93:ASP:OD1	1:A:93:ASP:N	0.46	2.48	8	1
1:A:3:PHE:N	1:A:120:TYR:O	0.46	2.46	16	2
1:A:29:LEU:HD22	1:A:33:ILE:CD1	0.46	2.40	14	1
1:A:78:ASN:O	1:A:79:TYR:HB2	0.46	2.11	20	22
1:A:122:THR:HB	1:A:126:VAL:CG2	0.46	2.41	22	7
1:A:29:LEU:N	1:A:31:PRO:HD2	0.46	2.26	23	9
1:A:33:ILE:HD13	1:A:150:TYR:HB2	0.46	1.88	20	2
1:A:13:ILE:CG2	1:A:18:LEU:HD11	0.46	2.40	13	1
1:A:53:ILE:CG2	1:A:68:LYS:CG	0.46	2.94	13	1
1:A:52:THR:CG2	1:A:53:ILE:N	0.45	2.79	5	11
1:A:122:THR:HB	1:A:126:VAL:HG23	0.45	1.89	22	3
1:A:17:ARG:CZ	1:A:159:ASN:HB3	0.45	2.41	11	4
1:A:27:ASP:OD1	1:A:41:SER:O	0.45	2.34	12	1
1:A:39:LYS:HG3	1:A:59:GLY:CA	0.45	2.41	2	1
1:A:18:LEU:HG	1:A:147:ILE:CG2	0.45	2.42	8	5
1:A:44:LEU:HD12	1:A:55:LYS:HB2	0.45	1.89	4	1
1:A:17:ARG:HG2	1:A:17:ARG:NH1	0.45	2.26	13	1
1:A:71:ILE:CG2	1:A:74:ILE:HD11	0.45	2.41	17	1
1:A:2:VAL:CG2	1:A:121:HIS:ND1	0.45	2.79	21	1
1:A:79:TYR:CB	1:A:104:LEU:HB2	0.45	2.41	13	8
1:A:2:VAL:CG1	1:A:120:TYR:O	0.45	2.57	15	2
1:A:21:ALA:O	1:A:25:ASP:O	0.45	2.34	9	2
1:A:13:ILE:CG2	1:A:151:LEU:HD12	0.45	2.37	21	1
1:A:45:TRP:HB2	1:A:53:ILE:CG1	0.45	2.42	20	8
1:A:126:VAL:C	1:A:127:GLU:CG	0.45	2.85	4	1
1:A:17:ARG:CD	1:A:159:ASN:HB2	0.45	2.41	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:5:TYR:CD1	1:A:137:LYS:HE2	0.45	2.47	17	1
1:A:75:ASP:HB3	1:A:78:ASN:OD1	0.45	2.11	21	2
1:A:17:ARG:NH2	1:A:159:ASN:HB3	0.45	2.27	18	4
1:A:95:LEU:CD1	1:A:96:GLU:N	0.45	2.76	13	3
1:A:71:ILE:CG2	1:A:74:ILE:CD1	0.45	2.95	17	1
1:A:117:THR:HG22	1:A:119:HIS:HE2	0.45	1.71	20	1
1:A:89:ASP:N	1:A:89:ASP:OD1	0.45	2.49	24	1
1:A:93:ASP:O	1:A:94:THR:CG2	0.45	2.65	17	2
1:A:85:LEU:HD23	1:A:91:LEU:HD21	0.45	1.88	21	1
1:A:122:THR:CG2	1:A:126:VAL:HG23	0.45	2.42	5	6
1:A:131:GLU:O	1:A:135:ALA:HB2	0.45	2.12	8	6
1:A:147:ILE:O	1:A:150:TYR:HB3	0.45	2.12	1	9
1:A:28:ASN:O	1:A:32:LYS:HB2	0.45	2.12	22	3
1:A:79:TYR:O	1:A:104:LEU:CD1	0.45	2.58	13	1
1:A:11:SER:HB2	1:A:148:GLU:CG	0.45	2.41	18	1
1:A:15:PRO:HG2	1:A:16:PRO:HD3	0.45	1.88	13	12
1:A:45:TRP:O	1:A:46:GLY:C	0.45	2.55	14	24
1:A:45:TRP:O	1:A:52:THR:HG23	0.45	2.12	2	6
1:A:9:PHE:CZ	1:A:116:SER:OG	0.45	2.70	12	2
1:A:17:ARG:C	1:A:151:LEU:CD1	0.45	2.85	10	1
1:A:82:SER:OG	1:A:101:GLU:HG2	0.45	2.11	20	1
1:A:130:GLU:O	1:A:134:LYS:HB3	0.45	2.12	23	2
1:A:156:ASP:OD1	1:A:157:ALA:N	0.45	2.50	9	1
1:A:100:TYR:CD1	1:A:118:SER:HB2	0.45	2.47	11	1
1:A:107:SER:HB3	1:A:113:ILE:CG1	0.45	2.41	20	1
1:A:130:GLU:HA	1:A:133:VAL:CG1	0.45	2.41	21	1
1:A:3:PHE:CE1	1:A:128:ILE:HG12	0.45	2.46	15	1
1:A:13:ILE:HG12	1:A:152:LYS:HG3	0.45	1.88	19	1
1:A:21:ALA:O	1:A:25:ASP:C	0.44	2.56	9	8
1:A:3:PHE:O	1:A:119:HIS:HA	0.44	2.12	15	1
1:A:3:PHE:CD2	1:A:128:ILE:CD1	0.44	3.00	6	1
1:A:28:ASN:O	1:A:32:LYS:HD3	0.44	2.12	8	1
1:A:72:ASP:HB2	1:A:83:TYR:CA	0.44	2.43	14	1
1:A:10:THR:HG22	1:A:113:ILE:HG12	0.44	1.88	16	2
1:A:73:SER:OG	1:A:82:SER:HB2	0.44	2.12	15	4
1:A:118:SER:C	1:A:119:HIS:CD2	0.44	2.91	4	1
1:A:9:PHE:CE1	1:A:116:SER:OG	0.44	2.70	12	2
1:A:15:PRO:O	1:A:19:PHE:CB	0.44	2.66	17	1
1:A:44:LEU:CD1	1:A:55:LYS:HB2	0.44	2.42	14	10
1:A:54:LYS:NZ	1:A:71:ILE:HD11	0.44	2.27	1	1
1:A:67:VAL:HG12	1:A:87:GLU:O	0.44	2.13	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:72:ASP:HB2	1:A:83:TYR:HA	0.44	1.89	14	4
1:A:104:LEU:CD2	1:A:114:ILE:HG12	0.44	2.43	22	5
1:A:13:ILE:HG13	1:A:148:GLU:O	0.44	2.13	17	6
1:A:5:TYR:CZ	1:A:133:VAL:CG1	0.44	3.00	18	1
1:A:55:LYS:HD3	1:A:68:LYS:CD	0.44	2.42	20	1
1:A:3:PHE:CG	1:A:128:ILE:CG1	0.44	3.01	15	1
1:A:17:ARG:CZ	1:A:159:ASN:OD1	0.44	2.65	4	2
1:A:2:VAL:HG21	1:A:121:HIS:CD2	0.44	2.48	20	3
1:A:13:ILE:HG22	1:A:18:LEU:CD1	0.44	2.43	13	1
1:A:58:PHE:HB2	1:A:65:GLY:O	0.44	2.13	4	17
1:A:78:ASN:ND2	1:A:78:ASN:N	0.44	2.65	13	7
1:A:15:PRO:HD3	1:A:112:SER:CB	0.44	2.43	7	11
1:A:70:LYS:O	1:A:71:ILE:C	0.44	2.56	7	3
1:A:33:ILE:CG2	1:A:146:LEU:CD2	0.44	2.91	11	1
1:A:78:ASN:C	1:A:79:TYR:CD2	0.44	2.92	15	1
1:A:38:ILE:HD13	1:A:56:ILE:HG23	0.44	1.88	20	1
1:A:108:PRO:O	1:A:109:SER:OG	0.44	2.33	22	1
1:A:147:ILE:O	1:A:150:TYR:N	0.43	2.50	15	3
1:A:70:LYS:HE2	1:A:86:ILE:CG2	0.43	2.42	9	1
1:A:11:SER:HB3	1:A:148:GLU:OE2	0.43	2.13	16	2
1:A:97:LYS:O	1:A:121:HIS:CD2	0.43	2.71	18	1
1:A:85:LEU:HB3	1:A:98:ILE:HB	0.43	1.90	8	3
1:A:13:ILE:HD11	1:A:152:LYS:HD2	0.43	1.89	14	1
1:A:27:ASP:O	1:A:31:PRO:HG2	0.43	2.13	19	2
1:A:25:ASP:O	1:A:29:LEU:HB2	0.43	2.13	2	4
1:A:90:ALA:O	1:A:91:LEU:C	0.43	2.57	7	3
1:A:58:PHE:O	1:A:59:GLY:C	0.43	2.57	14	3
1:A:88:GLY:O	1:A:90:ALA:N	0.43	2.51	17	1
1:A:95:LEU:CD1	1:A:122:THR:HG23	0.43	2.44	4	1
1:A:47:ASP:O	1:A:47:ASP:CG	0.43	2.57	9	4
1:A:78:ASN:OD1	1:A:80:SER:OG	0.43	2.29	21	1
1:A:129:LYS:O	1:A:130:GLU:C	0.43	2.57	6	11
1:A:33:ILE:CD1	1:A:147:ILE:HG12	0.43	2.44	4	2
1:A:72:ASP:OD2	1:A:83:TYR:C	0.43	2.57	24	13
1:A:28:ASN:O	1:A:32:LYS:HG3	0.43	2.12	20	2
1:A:91:LEU:HG	1:A:92:GLY:N	0.43	2.28	4	1
1:A:13:ILE:HD11	1:A:152:LYS:CA	0.43	2.44	20	1
1:A:29:LEU:HD21	1:A:150:TYR:CZ	0.43	2.48	1	1
1:A:33:ILE:CG2	1:A:146:LEU:HB3	0.43	2.43	4	4
1:A:8:GLU:N	1:A:8:GLU:OE1	0.43	2.51	8	1
1:A:30:VAL:CG1	1:A:38:ILE:HD12	0.43	2.44	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:ASP:N	1:A:80:SER:O	0.43	2.47	22	1
1:A:108:PRO:C	1:A:109:SER:OG	0.43	2.57	22	1
1:A:126:VAL:O	1:A:127:GLU:HG2	0.43	2.13	4	1
1:A:149:THR:O	1:A:150:TYR:C	0.43	2.58	4	2
1:A:13:ILE:CD1	1:A:152:LYS:HB2	0.43	2.43	6	3
1:A:47:ASP:N	1:A:52:THR:OG1	0.43	2.52	6	2
1:A:107:SER:OG	1:A:111:GLY:C	0.43	2.57	9	1
1:A:95:LEU:HD21	1:A:128:ILE:HG12	0.43	1.84	11	1
1:A:17:ARG:NH2	1:A:20:LYS:HD2	0.43	2.29	12	1
1:A:75:ASP:CG	1:A:78:ASN:OD1	0.43	2.56	21	2
1:A:78:ASN:ND2	1:A:78:ASN:H	0.43	2.11	19	2
1:A:85:LEU:O	1:A:98:ILE:HB	0.43	2.14	24	9
1:A:7:SER:O	1:A:8:GLU:HG2	0.43	2.14	6	3
1:A:9:PHE:CZ	1:A:114:ILE:HG21	0.43	2.49	8	1
1:A:65:GLY:O	1:A:66:TYR:HB3	0.43	2.14	8	3
1:A:69:HIS:NE2	1:A:85:LEU:CD1	0.43	2.82	17	1
1:A:38:ILE:CD1	1:A:56:ILE:HG21	0.43	2.43	20	1
1:A:15:PRO:HD2	1:A:16:PRO:HD2	0.43	1.91	21	14
1:A:55:LYS:HA	1:A:67:VAL:O	0.43	2.14	11	4
1:A:68:LYS:HE3	1:A:87:GLU:OE1	0.43	2.14	14	2
1:A:18:LEU:O	1:A:22:PHE:HB2	0.43	2.13	13	1
1:A:81:TYR:CD2	1:A:83:TYR:CD1	0.43	3.06	21	2
1:A:157:ALA:O	1:A:158:TYR:CG	0.43	2.72	24	1
1:A:157:ALA:C	1:A:159:ASN:N	0.42	2.72	7	2
1:A:153:GLY:O	1:A:155:PRO:HD3	0.42	2.13	7	14
1:A:19:PHE:CE1	1:A:80:SER:N	0.42	2.87	6	2
1:A:11:SER:O	1:A:111:GLY:HA3	0.42	2.13	8	1
1:A:68:LYS:CD	1:A:86:ILE:HD11	0.42	2.44	15	1
1:A:29:LEU:O	1:A:33:ILE:CG1	0.42	2.67	19	1
1:A:11:SER:OG	1:A:148:GLU:CD	0.42	2.58	4	4
1:A:20:LYS:O	1:A:24:LEU:HB2	0.42	2.14	11	12
1:A:83:TYR:CE2	1:A:100:TYR:HB2	0.42	2.49	5	1
1:A:21:ALA:CB	1:A:29:LEU:HG	0.42	2.39	9	1
1:A:13:ILE:HD11	1:A:152:LYS:HG3	0.42	1.90	12	1
1:A:94:THR:HB	1:A:126:VAL:CG2	0.42	2.42	12	1
1:A:79:TYR:HB3	1:A:104:LEU:CD1	0.42	2.44	16	1
1:A:5:TYR:CD1	1:A:137:LYS:CE	0.42	3.02	17	1
1:A:38:ILE:HG12	1:A:58:PHE:CD1	0.42	2.48	20	1
1:A:73:SER:O	1:A:82:SER:N	0.42	2.51	22	1
1:A:21:ALA:HA	1:A:25:ASP:HB2	0.42	1.91	2	7
1:A:45:TRP:HB2	1:A:53:ILE:CB	0.42	2.44	24	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:ILE:CG1	1:A:87:GLU:N	0.42	2.82	2	1
1:A:145:LYS:O	1:A:145:LYS:HG2	0.42	2.14	18	2
1:A:159:ASN:ND2	1:A:159:ASN:OXT	0.42	2.53	7	1
1:A:128:ILE:CG2	1:A:132:HIS:HB2	0.42	2.45	12	1
1:A:49:GLY:O	1:A:71:ILE:CB	0.42	2.68	22	3
1:A:5:TYR:O	1:A:118:SER:N	0.42	2.52	14	1
1:A:13:ILE:CG1	1:A:152:LYS:HB2	0.42	2.45	6	4
1:A:14:PRO:HG2	1:A:17:ARG:CB	0.42	2.44	7	2
1:A:27:ASP:O	1:A:31:PRO:HG3	0.42	2.14	14	4
1:A:6:GLU:CD	1:A:117:THR:OG1	0.42	2.57	15	1
1:A:100:TYR:CE1	1:A:118:SER:HB3	0.42	2.49	15	1
1:A:28:ASN:HA	1:A:31:PRO:HG2	0.42	1.92	17	2
1:A:75:ASP:CB	1:A:78:ASN:OD1	0.42	2.68	21	2
1:A:38:ILE:CD1	1:A:56:ILE:CG2	0.42	2.97	20	1
1:A:40:HIS:HB3	1:A:57:THR:OG1	0.42	2.14	20	1
1:A:24:LEU:HD12	1:A:24:LEU:H	0.42	1.74	23	1
1:A:95:LEU:HD11	1:A:128:ILE:HD11	0.42	1.86	24	1
1:A:15:PRO:CG	1:A:16:PRO:HD3	0.42	2.45	4	4
1:A:126:VAL:C	1:A:127:GLU:HG3	0.42	2.35	4	1
1:A:75:ASP:HB2	1:A:80:SER:OG	0.42	2.14	22	1
1:A:151:LEU:CD2	1:A:157:ALA:CB	0.42	2.97	1	2
1:A:23:VAL:HG21	1:A:74:ILE:HD11	0.42	1.89	2	1
1:A:85:LEU:HB2	1:A:98:ILE:HG21	0.42	1.90	15	2
1:A:150:TYR:O	1:A:154:HIS:CB	0.42	2.67	11	1
1:A:17:ARG:NE	1:A:17:ARG:HA	0.42	2.29	13	1
1:A:54:LYS:O	1:A:68:LYS:HA	0.42	2.14	21	3
1:A:137:LYS:O	1:A:141:SER:OG	0.42	2.34	22	1
1:A:101:GLU:CB	1:A:117:THR:HB	0.42	2.44	6	1
1:A:78:ASN:C	1:A:79:TYR:CG	0.42	2.91	7	2
1:A:72:ASP:N	1:A:83:TYR:HA	0.42	2.30	14	2
1:A:99:SER:HG	1:A:121:HIS:HE2	0.42	1.57	17	1
1:A:95:LEU:CD1	1:A:120:TYR:CD2	0.42	3.03	23	1
1:A:22:PHE:HE1	1:A:147:ILE:HD11	0.42	1.74	13	2
1:A:49:GLY:O	1:A:71:ILE:HB	0.42	2.14	19	9
1:A:44:LEU:N	1:A:53:ILE:O	0.42	2.43	7	2
1:A:87:GLU:C	1:A:91:LEU:HD11	0.42	2.34	7	1
1:A:91:LEU:CD2	1:A:98:ILE:HD12	0.42	2.45	9	1
1:A:117:THR:CG2	1:A:119:HIS:NE2	0.42	2.82	15	1
1:A:4:THR:O	1:A:4:THR:HG22	0.42	2.14	20	1
1:A:53:ILE:HA	1:A:69:HIS:O	0.42	2.15	1	4
1:A:138:GLU:O	1:A:142:ASN:CG	0.42	2.57	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:GLU:HG2	1:A:97:LYS:N	0.42	2.30	23	3
1:A:85:LEU:CD2	1:A:91:LEU:HD21	0.42	2.45	21	2
1:A:98:ILE:CD1	1:A:120:TYR:HA	0.42	2.44	11	3
1:A:29:LEU:O	1:A:33:ILE:HG13	0.42	2.15	19	1
1:A:14:PRO:CG	1:A:17:ARG:HD3	0.42	2.45	16	3
1:A:95:LEU:CD1	1:A:128:ILE:HG13	0.42	2.43	4	1
1:A:17:ARG:HG2	1:A:151:LEU:CD2	0.41	2.39	7	1
1:A:100:TYR:CE1	1:A:118:SER:HB2	0.41	2.49	11	1
1:A:6:GLU:HG2	1:A:117:THR:OG1	0.41	2.15	15	1
1:A:88:GLY:O	1:A:91:LEU:HG	0.41	2.15	18	1
1:A:40:HIS:CB	1:A:57:THR:OG1	0.41	2.68	20	1
1:A:11:SER:HB3	1:A:114:ILE:CD1	0.41	2.45	24	1
1:A:21:ALA:O	1:A:29:LEU:HG	0.41	2.15	7	2
1:A:91:LEU:O	1:A:92:GLY:C	0.41	2.58	7	3
1:A:148:GLU:O	1:A:152:LYS:HB2	0.41	2.15	14	3
1:A:39:LYS:HB2	1:A:59:GLY:N	0.41	2.30	12	1
1:A:2:VAL:CB	1:A:121:HIS:ND1	0.41	2.84	22	1
1:A:25:ASP:OD2	1:A:158:TYR:CD1	0.41	2.72	24	1
1:A:68:LYS:O	1:A:85:LEU:HD23	0.41	2.15	8	1
1:A:85:LEU:HD12	1:A:100:TYR:CE2	0.41	2.50	15	2
1:A:21:ALA:HB1	1:A:29:LEU:HD11	0.41	1.92	9	1
1:A:17:ARG:NH1	1:A:151:LEU:O	0.41	2.53	14	1
1:A:27:ASP:HA	1:A:41:SER:CB	0.41	2.45	15	1
1:A:23:VAL:HG11	1:A:74:ILE:HG12	0.41	1.93	19	1
1:A:22:PHE:CE1	1:A:147:ILE:HD13	0.41	2.50	20	1
1:A:11:SER:OG	1:A:148:GLU:HG2	0.41	2.16	1	2
1:A:24:LEU:N	1:A:24:LEU:HD12	0.41	2.30	1	1
1:A:11:SER:HB3	1:A:148:GLU:CD	0.41	2.35	2	3
1:A:13:ILE:CG2	1:A:151:LEU:HB2	0.41	2.45	8	1
1:A:122:THR:CG2	1:A:126:VAL:O	0.41	2.67	11	1
1:A:6:GLU:OE2	1:A:117:THR:OG1	0.41	2.35	15	1
1:A:88:GLY:O	1:A:89:ASP:C	0.41	2.58	17	1
1:A:17:ARG:HG2	1:A:151:LEU:CD1	0.41	2.45	7	1
1:A:133:VAL:HG13	1:A:134:LYS:HG3	0.41	1.91	21	1
1:A:108:PRO:O	1:A:109:SER:C	0.41	2.59	22	1
1:A:73:SER:OG	1:A:82:SER:CB	0.41	2.69	1	1
1:A:150:TYR:O	1:A:154:HIS:HB2	0.41	2.16	4	5
1:A:40:HIS:NE2	1:A:42:GLU:HB2	0.41	2.31	8	1
1:A:52:THR:O	1:A:71:ILE:N	0.41	2.53	16	1
1:A:95:LEU:HD13	1:A:122:THR:HG23	0.41	1.92	18	1
1:A:68:LYS:HD2	1:A:87:GLU:OE1	0.41	2.15	4	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:ASP:C	1:A:93:ASP:OD1	0.41	2.58	7	1
1:A:150:TYR:O	1:A:154:HIS:N	0.41	2.50	7	1
1:A:20:LYS:HA	1:A:24:LEU:HB2	0.41	1.92	11	1
1:A:85:LEU:CB	1:A:98:ILE:CG2	0.41	2.99	12	1
1:A:75:ASP:HB3	1:A:78:ASN:CG	0.41	2.36	19	1
1:A:55:LYS:CE	1:A:66:TYR:CD1	0.41	3.03	20	1
1:A:33:ILE:CD1	1:A:147:ILE:HA	0.41	2.45	22	1
1:A:57:THR:HA	1:A:66:TYR:CB	0.41	2.46	15	1
1:A:2:VAL:CA	1:A:120:TYR:O	0.41	2.68	23	2
1:A:14:PRO:CG	1:A:17:ARG:HG3	0.41	2.45	22	1
1:A:94:THR:O	1:A:122:THR:HA	0.41	2.15	22	1
1:A:72:ASP:O	1:A:73:SER:HB3	0.41	2.16	13	2
1:A:68:LYS:HG3	1:A:87:GLU:OE1	0.41	2.16	5	1
1:A:14:PRO:CG	1:A:17:ARG:CD	0.41	2.98	10	1
1:A:131:GLU:C	1:A:135:ALA:HB3	0.41	2.36	12	1
1:A:14:PRO:HB2	1:A:16:PRO:HD2	0.41	1.92	13	1
1:A:29:LEU:HD13	1:A:33:ILE:HD12	0.41	1.93	13	1
1:A:124:GLY:O	1:A:125:ASN:HB3	0.41	2.16	22	1
1:A:13:ILE:HG12	1:A:148:GLU:O	0.41	2.16	4	2
1:A:96:GLU:OE2	1:A:123:LYS:HB3	0.41	2.16	6	1
1:A:54:LYS:HE3	1:A:71:ILE:CD1	0.41	2.46	11	1
1:A:3:PHE:CZ	1:A:127:GLU:HA	0.41	2.51	12	1
1:A:27:ASP:HA	1:A:41:SER:OG	0.41	2.15	15	1
1:A:18:LEU:O	1:A:21:ALA:HB3	0.41	2.16	18	1
1:A:14:PRO:HG2	1:A:17:ARG:HG3	0.41	1.93	22	1
1:A:143:LEU:HD13	1:A:143:LEU:C	0.41	2.36	23	1
1:A:95:LEU:HD11	1:A:128:ILE:HD13	0.41	1.85	24	1
1:A:138:GLU:O	1:A:142:ASN:HB2	0.40	2.16	19	2
1:A:11:SER:HB2	1:A:148:GLU:CD	0.40	2.37	9	1
1:A:158:TYR:CD1	1:A:158:TYR:N	0.40	2.89	9	1
1:A:97:LYS:CB	1:A:121:HIS:HB2	0.40	2.46	13	1
1:A:26:ALA:HA	1:A:29:LEU:HB2	0.40	1.93	16	1
1:A:25:ASP:O	1:A:28:ASN:N	0.40	2.49	18	1
1:A:119:HIS:CD2	1:A:119:HIS:N	0.40	2.88	4	1
1:A:91:LEU:HD12	1:A:91:LEU:O	0.40	2.15	11	1
1:A:11:SER:OG	1:A:148:GLU:HB3	0.40	2.16	15	1
1:A:56:ILE:O	1:A:66:TYR:HB2	0.40	2.16	20	1
1:A:7:SER:C	1:A:8:GLU:HG3	0.40	2.37	1	2
1:A:39:LYS:HG3	1:A:59:GLY:HA3	0.40	1.92	2	1
1:A:11:SER:O	1:A:111:GLY:CA	0.40	2.69	8	1
1:A:18:LEU:N	1:A:151:LEU:CD1	0.40	2.84	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:PRO:C	1:A:16:PRO:HD2	0.40	2.37	14	1
1:A:79:TYR:O	1:A:104:LEU:HB2	0.40	2.16	17	1
1:A:39:LYS:NZ	1:A:58:PHE:O	0.40	2.51	18	1
1:A:91:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB2	0.40	1.93	22	1
1:A:67:VAL:CB	1:A:87:GLU:O	0.40	2.70	4	1
1:A:72:ASP:HB2	1:A:82:SER:OG	0.40	2.16	9	1
1:A:6:GLU:HB3	1:A:117:THR:HG23	0.40	1.92	11	1
1:A:91:LEU:C	1:A:91:LEU:CD1	0.40	2.88	11	1
1:A:93:ASP:OD1	1:A:93:ASP:C	0.40	2.60	12	1
1:A:130:GLU:O	1:A:134:LYS:HB2	0.40	2.17	17	1
1:A:82:SER:OG	1:A:101:GLU:HG3	0.40	2.17	20	1
1:A:91:LEU:O	1:A:95:LEU:HB2	0.40	2.16	22	1
1:A:29:LEU:HD13	1:A:29:LEU:C	0.40	2.37	2	1
1:A:148:GLU:O	1:A:152:LYS:HB3	0.40	2.17	13	1
1:A:67:VAL:CG1	1:A:88:GLY:HA2	0.40	2.39	22	1
1:A:29:LEU:C	1:A:31:PRO:HD2	0.40	2.37	23	1
1:A:95:LEU:HD11	1:A:128:ILE:HD12	0.40	1.85	24	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	153/159 (96%)	135±2 (88±1%)	16±2 (10±1%)	2±1 (1±0%)	14	59
All	All	3672/3816 (96%)	3246 (88%)	372 (10%)	54 (1%)	14	59

All 6 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	158	TYR	24
1	A	92	GLY	19
1	A	111	GLY	7
1	A	105	VAL	2
1	A	59	GLY	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	157	ALA	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	132/135 (98%)	118±2 (90±2%)	14±2 (10±2%)	10 55
All	All	3168/3240 (98%)	2836 (90%)	332 (10%)	10 55

All 37 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	40	HIS	24
1	A	159	ASN	24
1	A	29	LEU	22
1	A	99	SER	22
1	A	158	TYR	22
1	A	22	PHE	21
1	A	80	SER	21
1	A	52	THR	19
1	A	25	ASP	18
1	A	78	ASN	18
1	A	64	TYR	18
1	A	47	ASP	17
1	A	18	LEU	15
1	A	116	SER	13
1	A	103	LYS	7
1	A	82	SER	5
1	A	122	THR	5
1	A	74	ILE	5
1	A	57	THR	4
1	A	95	LEU	3
1	A	85	LEU	3
1	A	98	ILE	3
1	A	54	LYS	3
1	A	75	ASP	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	73	SER	2
1	A	112	SER	2
1	A	107	SER	2
1	A	7	SER	2
1	A	38	ILE	1
1	A	94	THR	1
1	A	125	ASN	1
1	A	11	SER	1
1	A	39	LYS	1
1	A	68	LYS	1
1	A	143	LEU	1
1	A	41	SER	1
1	A	44	LEU	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)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers (i)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues (i)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation (i)

No chemical shift data were provided