



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 02:33 PM BST

PDB ID : 1EZO
Title : GLOBAL FOLD OF MALTODEXTRIN BINDING PROTEIN COM-
PLEXED WITH BETA-CYCLODEXTRIN
Authors : Mueller, G.A.; Choy, W.Y.; Yang, D.; Forman-Kay, J.D.; Venters, R.A.; Kay,
L.E.
Deposited on : 2000-05-11

This is a Full wwPDB NMR Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.
We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org
A user guide is available at
<http://wwpdb.org/validation/2016/NMRValidationReportHelp>
with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

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

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)
NmrClust : Kelley et al. (1996)
MolProbity : 4.02b-467
Mogul : unknown
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)
RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
ShiftChecker : rb-20027457
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : rb-20027457

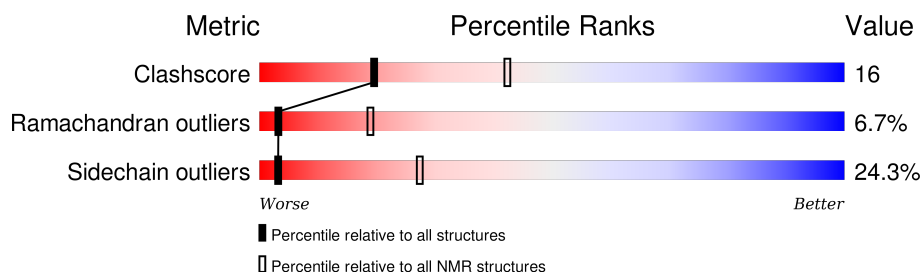
1 Overall quality at a glance

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	114402	11133
Ramachandran outliers	111179	9975
Sidechain outliers	111093	9958

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the experimental data. The red, orange, yellow and green segments indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. A cyan segment indicates the fraction of residues that are not part of the well-defined cores, and a grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions $\leq 5\%$

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	370	

2 Ensemble composition and analysis ⓘ

This entry contains 10 models. Model 9 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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:4-A:168, A:182-A:229, A:242-A:370 (342)	2.48	9

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. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	2, 3, 4, 5, 8, 9, 10
2	1, 6, 7

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 5735 atoms, of which 2858 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called MALTOSE-BINDING PERIPLASMIC PROTEIN.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	370	Total	C	H	N	O	S	0
			5735	1851	2858	469	551	6	

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

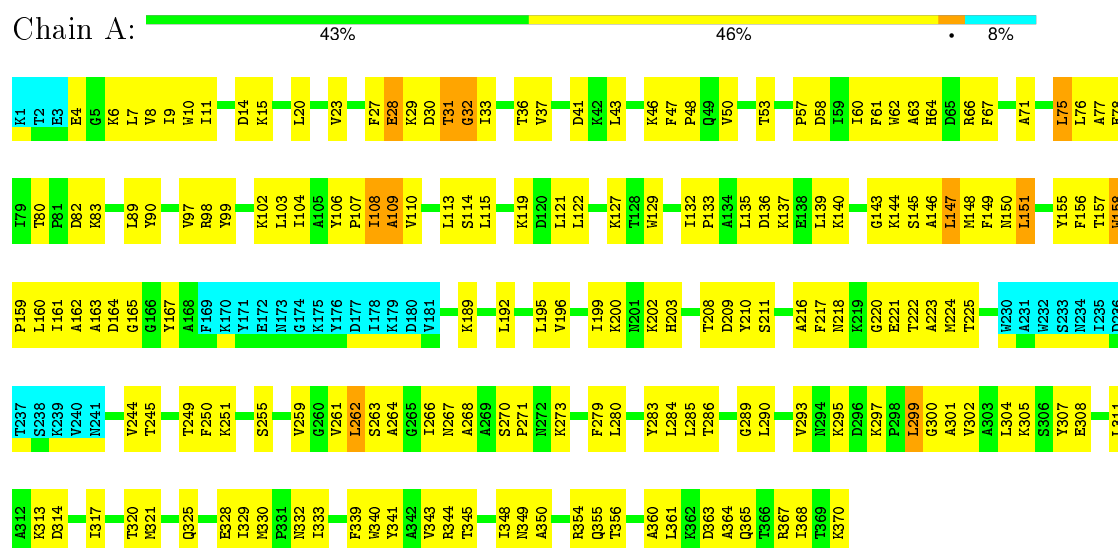
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	2	THR	ILE	ENGINEERED	UNP P02928

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

• Molecule 1: MALTOSE-BINDING PERIPLASMIC PROTEIN

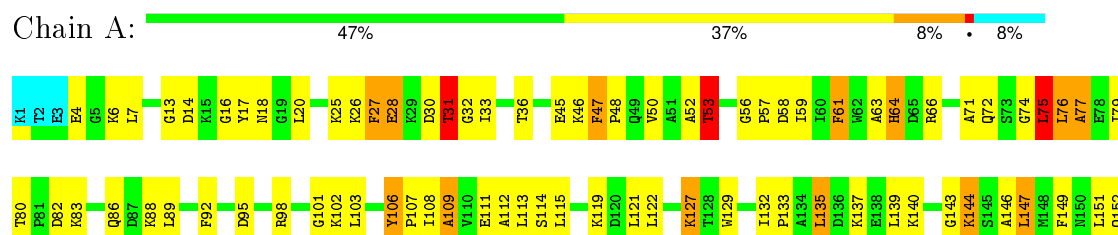


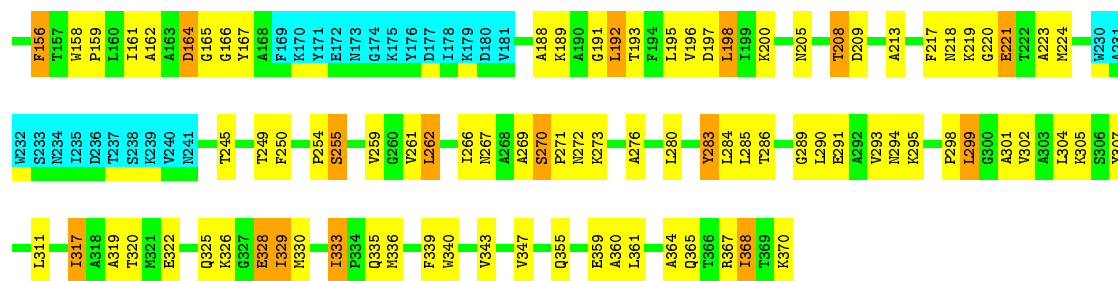
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

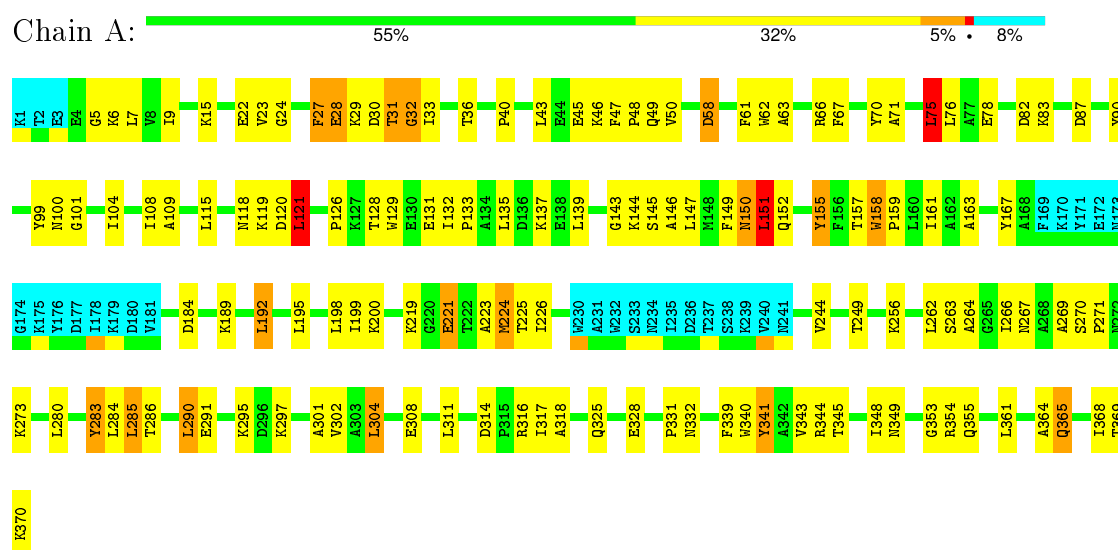
• Molecule 1: MALTOSE-BINDING PERIPLASMIC PROTEIN





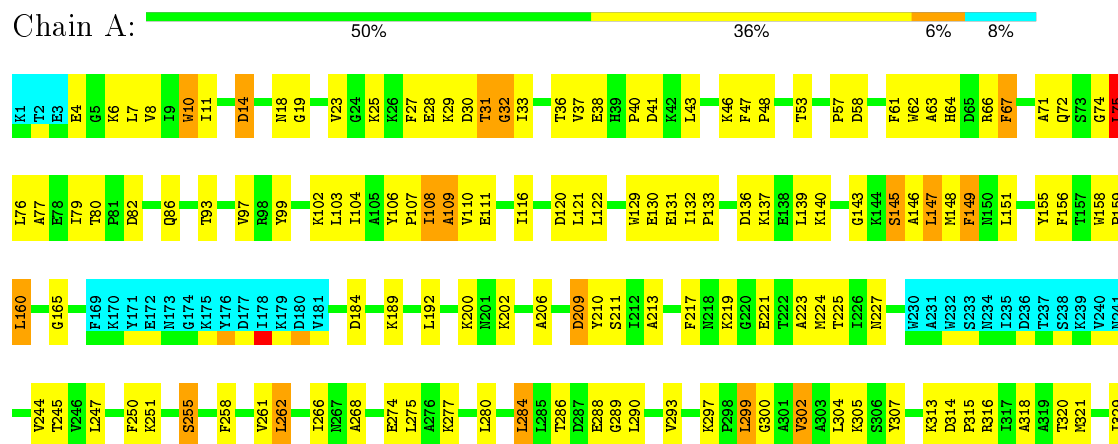
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: MALTOSE-BINDING PERIPLASMIC PROTEIN



4.2.3 Score per residue for model 3

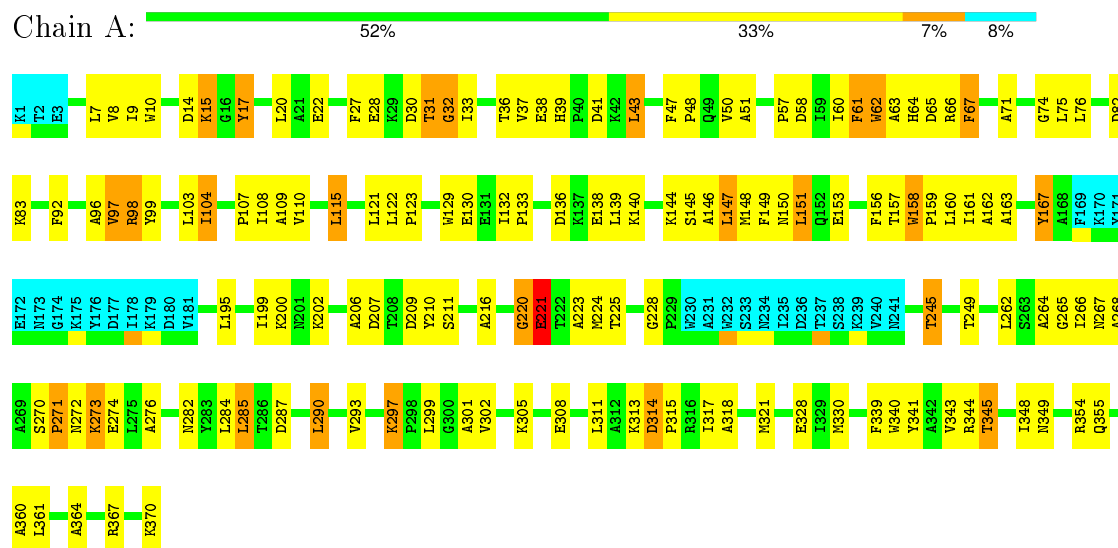
- Molecule 1: MALTOSE-BINDING PERIPLASMIC PROTEIN





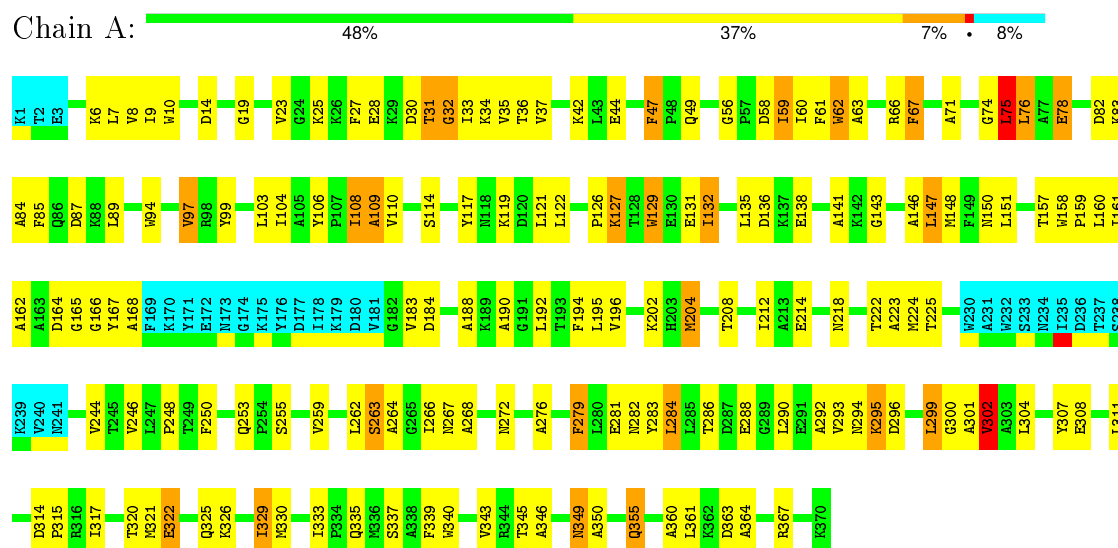
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: MALTOSE-BINDING PERIPLASMIC PROTEIN



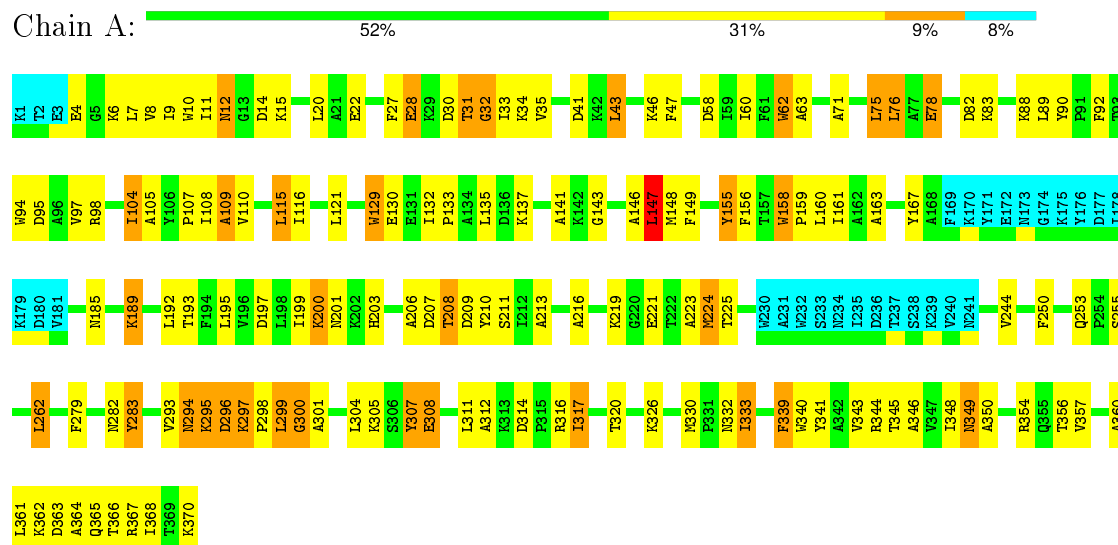
4.2.6 Score per residue for model 6

• Molecule 1: MALTOSE-BINDING PERIPLASMIC PROTEIN



4.2.7 Score per residue for model 7

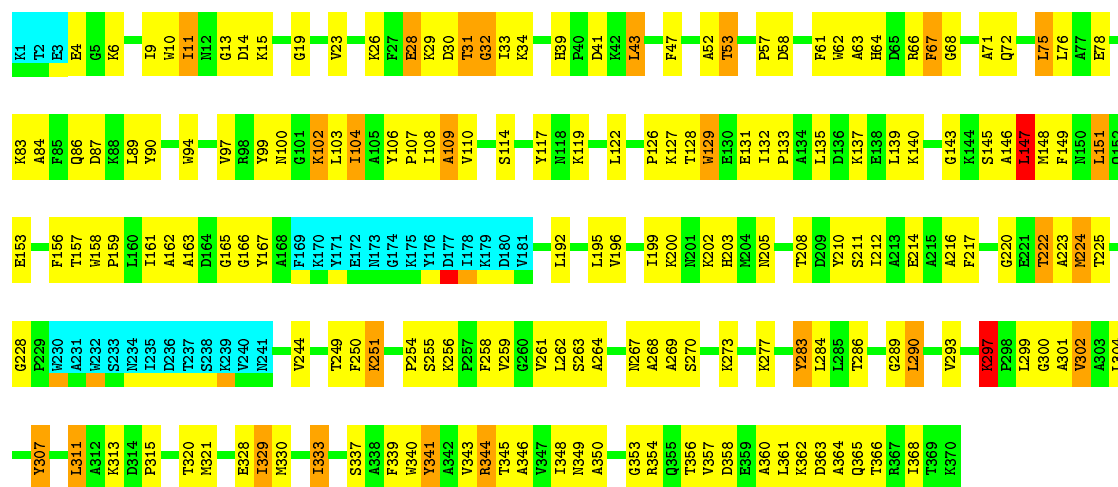
• Molecule 1: MALTOSE-BINDING PERIPLASMIC PROTEIN



4.2.8 Score per residue for model 8

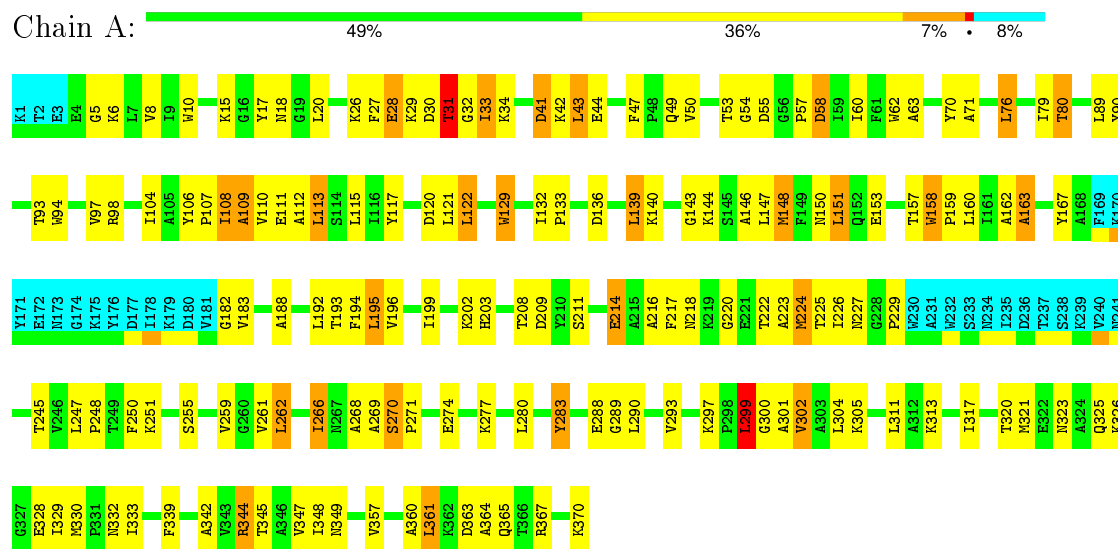
• Molecule 1: MALTOSE-BINDING PERIPLASMIC PROTEIN





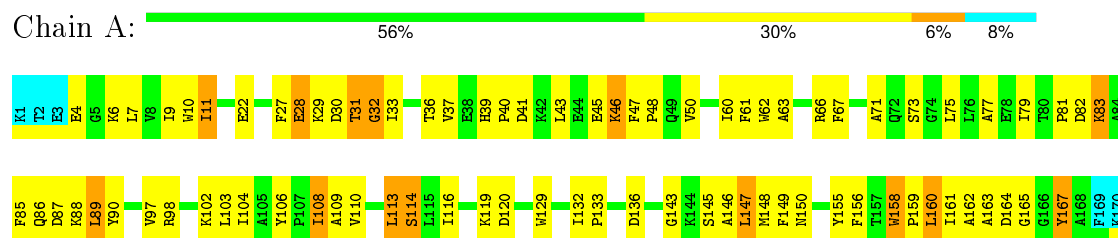
4.2.9 Score per residue for model 9 (medoid)

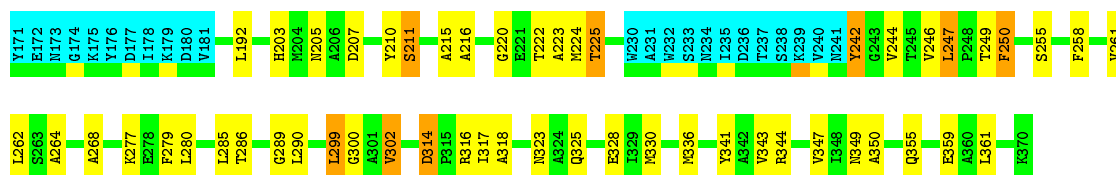
- Molecule 1: MALTOSE-BINDING PERIPLASMIC PROTEIN



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: MALTOSE-BINDING PERIPLASMIC PROTEIN





5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *simulated annealing from extended coordinates, torsion angle dynamics, and finish with cartesian dynamics.*

Of the 384 calculated structures, 10 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
CNS	structure solution	0.5
CNS	refinement	0.5

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

6 Model quality ⓘ

6.1 Standard geometry ⓘ

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts ⓘ

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in each chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen atoms added and optimized by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes averaged over the ensemble.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	2638	2630	2627	86±7
All	All	26380	26300	26270	863

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 16.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:208:THR:HG22	1:A:213:ALA:HB2	0.95	1.36	7	2
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:HD23	0.94	1.37	6	1
1:A:146:ALA:HB1	1:A:223:ALA:HB3	0.89	1.45	2	2
1:A:157:THR:HG23	1:A:195:LEU:HD13	0.87	1.42	4	1
1:A:110:VAL:HG21	1:A:302:VAL:HG12	0.84	1.48	8	1
1:A:293:VAL:HG13	1:A:297:LYS:CB	0.83	2.02	4	1
1:A:217:PHE:CG	1:A:225:THR:HG23	0.82	2.08	5	1
1:A:109:ALA:CB	1:A:262:LEU:HD23	0.82	2.04	1	1
1:A:129:TRP:CE3	1:A:132:ILE:HD12	0.82	2.09	2	2
1:A:108:ILE:HD12	1:A:285:LEU:HD21	0.81	1.51	1	1
1:A:10:TRP:CB	1:A:60:ILE:HG22	0.81	2.06	9	1
1:A:299:LEU:HD22	1:A:300:GLY:N	0.80	1.91	9	1
1:A:32:GLY:O	1:A:33:ILE:HD13	0.80	1.76	5	7
1:A:149:PHE:CD2	1:A:226:ILE:HD13	0.80	2.11	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:VAL:HG22	1:A:320:THR:HG21	0.80	1.52	6	1
1:A:342:ALA:O	1:A:345:THR:HG22	0.79	1.78	9	1
1:A:90:TYR:O	1:A:93:THR:HG22	0.79	1.78	9	2
1:A:31:THR:O	1:A:31:THR:HG22	0.78	1.79	10	2
1:A:27:PHE:O	1:A:33:ILE:HD13	0.77	1.79	2	2
1:A:266:ILE:HD13	1:A:276:ALA:HB1	0.77	1.56	6	1
1:A:247:LEU:HD13	1:A:255:SER:CB	0.77	2.09	3	1
1:A:31:THR:HG22	1:A:31:THR:O	0.77	1.79	3	1
1:A:71:ALA:CB	1:A:76:LEU:HD23	0.77	2.10	6	1
1:A:28:GLU:OE2	1:A:35:VAL:HG22	0.76	1.80	6	1
1:A:116:ILE:HD11	1:A:242:TYR:CD1	0.76	2.15	10	1
1:A:157:THR:O	1:A:161:ILE:HG22	0.76	1.81	6	2
1:A:109:ALA:HB3	1:A:262:LEU:HB2	0.74	1.58	6	8
1:A:110:VAL:HG11	1:A:320:THR:HG21	0.74	1.59	3	1
1:A:107:PRO:O	1:A:108:ILE:HD13	0.73	1.84	1	3
1:A:146:ALA:HA	1:A:223:ALA:HB3	0.73	1.60	3	7
1:A:302:VAL:HG21	1:A:311:LEU:HD12	0.73	1.59	8	1
1:A:93:THR:HG23	1:A:94:TRP:CD1	0.73	2.19	9	1
1:A:139:LEU:HD13	1:A:145:SER:CB	0.73	2.14	8	1
1:A:27:PHE:CG	1:A:33:ILE:HG21	0.72	2.19	1	2
1:A:360:ALA:O	1:A:364:ALA:HB2	0.72	1.85	5	6
1:A:19:GLY:O	1:A:23:VAL:HG23	0.72	1.84	8	3
1:A:339:PHE:O	1:A:343:VAL:HG23	0.72	1.85	1	4
1:A:97:VAL:HG11	1:A:107:PRO:HD3	0.72	1.61	5	3
1:A:344:ARG:O	1:A:348:ILE:HG22	0.71	1.85	8	5
1:A:314:ASP:HB3	1:A:317:ILE:HG22	0.71	1.60	2	2
1:A:167:TYR:CZ	1:A:343:VAL:HG21	0.71	2.20	5	1
1:A:307:TYR:O	1:A:311:LEU:HD13	0.71	1.86	5	1
1:A:97:VAL:HG21	1:A:105:ALA:O	0.71	1.86	7	1
1:A:139:LEU:CD1	1:A:146:ALA:HB2	0.70	2.16	5	2
1:A:116:ILE:HG22	1:A:225:THR:O	0.70	1.87	10	1
1:A:146:ALA:CB	1:A:223:ALA:HB3	0.70	2.16	6	3
1:A:75:LEU:O	1:A:76:LEU:HD22	0.69	1.86	5	2
1:A:61:PHE:CE2	1:A:264:ALA:HB2	0.69	2.22	10	2
1:A:67:PHE:O	1:A:71:ALA:HB3	0.69	1.87	10	6
1:A:296:ASP:O	1:A:299:LEU:HD23	0.69	1.88	7	1
1:A:297:LYS:O	1:A:299:LEU:HD23	0.69	1.87	5	1
1:A:77:ALA:HB3	1:A:266:ILE:HG23	0.69	1.63	5	1
1:A:146:ALA:CA	1:A:223:ALA:HB3	0.69	2.18	6	7
1:A:129:TRP:CZ3	1:A:132:ILE:HD13	0.69	2.22	8	1
1:A:339:PHE:O	1:A:343:VAL:HG12	0.69	1.88	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:344:ARG:HG3	1:A:348:ILE:HD12	0.68	1.65	4	1
1:A:117:TYR:HB3	1:A:122:LEU:HD22	0.68	1.64	9	1
1:A:109:ALA:HB2	1:A:262:LEU:HD23	0.68	1.66	1	1
1:A:301:ALA:HB3	1:A:317:ILE:HD12	0.68	1.65	6	1
1:A:193:THR:HB	1:A:357:VAL:HG21	0.67	1.65	9	1
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:HG23	0.67	1.90	9	2
1:A:295:LYS:O	1:A:299:LEU:HD21	0.67	1.90	6	1
1:A:10:TRP:HB2	1:A:60:ILE:HG22	0.67	1.65	9	1
1:A:76:LEU:O	1:A:76:LEU:HD12	0.67	1.89	6	1
1:A:157:THR:HG23	1:A:195:LEU:CD1	0.67	2.18	4	1
1:A:8:VAL:HG23	1:A:57:PRO:HB2	0.67	1.67	3	2
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:CD2	0.67	2.19	6	2
1:A:247:LEU:HD13	1:A:247:LEU:N	0.67	2.05	10	1
1:A:339:PHE:O	1:A:343:VAL:HG22	0.67	1.90	7	1
1:A:110:VAL:HG11	1:A:317:ILE:HG12	0.67	1.64	7	1
1:A:188:ALA:O	1:A:192:LEU:HD23	0.67	1.90	9	1
1:A:10:TRP:CZ3	1:A:43:LEU:HD22	0.67	2.25	8	1
1:A:266:ILE:CD1	1:A:276:ALA:HB1	0.67	2.20	6	1
1:A:341:TYR:O	1:A:345:THR:HG23	0.66	1.90	2	1
1:A:84:ALA:HB1	1:A:94:TRP:CH2	0.66	2.25	6	1
1:A:192:LEU:O	1:A:196:VAL:HG23	0.66	1.90	6	2
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:HD22	0.66	1.68	4	1
1:A:284:LEU:HD21	1:A:297:LYS:NZ	0.66	2.06	4	1
1:A:284:LEU:O	1:A:290:LEU:HD13	0.66	1.90	6	1
1:A:192:LEU:O	1:A:196:VAL:HG12	0.66	1.91	5	2
1:A:299:LEU:HD12	1:A:300:GLY:N	0.65	2.06	6	4
1:A:317:ILE:O	1:A:320:THR:HG22	0.65	1.91	7	1
1:A:23:VAL:HG12	1:A:27:PHE:CE2	0.65	2.27	5	1
1:A:98:ARG:CZ	1:A:103:LEU:HD11	0.65	2.22	4	1
1:A:6:LYS:C	1:A:7:LEU:HD22	0.65	2.11	3	2
1:A:158:TRP:CE2	1:A:343:VAL:HG13	0.65	2.27	2	1
1:A:293:VAL:HG13	1:A:297:LYS:HG3	0.65	1.69	3	1
1:A:266:ILE:HD11	1:A:273:LYS:CD	0.64	2.23	4	1
1:A:10:TRP:HB2	1:A:60:ILE:HG23	0.64	1.68	6	2
1:A:293:VAL:HG13	1:A:297:LYS:HB3	0.64	1.66	4	1
1:A:293:VAL:HG13	1:A:297:LYS:HB2	0.64	1.68	4	1
1:A:283:TYR:C	1:A:284:LEU:HD22	0.64	2.13	8	1
1:A:303:ALA:HB3	1:A:306:SER:HB2	0.64	1.67	5	1
1:A:317:ILE:O	1:A:317:ILE:HD13	0.64	1.92	7	1
1:A:31:THR:O	1:A:31:THR:CG2	0.64	2.46	10	2
1:A:249:THR:HG22	1:A:254:PRO:HD3	0.64	1.67	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:135:LEU:O	1:A:139:LEU:HD23	0.64	1.92	1	2
1:A:290:LEU:HD21	1:A:307:TYR:OH	0.64	1.91	8	1
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:OG1	0.64	2.14	3	3
1:A:109:ALA:HB3	1:A:262:LEU:CB	0.63	2.23	6	3
1:A:46:LYS:O	1:A:50:VAL:HG12	0.63	1.93	2	1
1:A:87:ASP:OD2	1:A:89:LEU:HD12	0.63	1.92	6	1
1:A:151:LEU:HB2	1:A:208:THR:HG21	0.63	1.69	8	1
1:A:216:ALA:HB1	1:A:224:MET:SD	0.63	2.33	8	1
1:A:217:PHE:CE1	1:A:225:THR:HG21	0.63	2.29	8	1
1:A:184:ASP:HA	1:A:361:LEU:HD22	0.63	1.69	2	1
1:A:160:LEU:HD13	1:A:195:LEU:CD2	0.63	2.24	4	1
1:A:217:PHE:CD1	1:A:225:THR:HG23	0.62	2.28	5	1
1:A:31:THR:CG2	1:A:31:THR:O	0.62	2.46	3	1
1:A:189:LYS:O	1:A:193:THR:HG23	0.62	1.94	7	2
1:A:244:VAL:HG11	1:A:315:PRO:HA	0.62	1.71	6	1
1:A:71:ALA:HB3	1:A:76:LEU:HD12	0.62	1.70	1	1
1:A:129:TRP:CE3	1:A:132:ILE:HD11	0.62	2.30	6	1
1:A:52:ALA:O	1:A:53:THR:HG23	0.62	1.95	8	3
1:A:110:VAL:CG2	1:A:302:VAL:HG12	0.62	2.25	8	1
1:A:346:ALA:O	1:A:350:ALA:HB2	0.61	1.94	6	4
1:A:161:ILE:HD13	1:A:192:LEU:HD22	0.61	1.71	1	1
1:A:151:LEU:HD12	1:A:208:THR:HG23	0.61	1.70	6	1
1:A:314:ASP:O	1:A:318:ALA:HB2	0.61	1.94	3	3
1:A:311:LEU:O	1:A:317:ILE:HD11	0.61	1.96	1	1
1:A:8:VAL:HG23	1:A:57:PRO:HG2	0.61	1.72	5	2
1:A:136:ASP:OD1	1:A:146:ALA:HB3	0.61	1.96	9	1
1:A:109:ALA:HB3	1:A:262:LEU:HD23	0.61	1.72	1	1
1:A:76:LEU:HD11	1:A:265:GLY:HA3	0.61	1.73	5	1
1:A:196:VAL:HG11	1:A:357:VAL:HG21	0.61	1.73	5	1
1:A:104:ILE:HD12	1:A:104:ILE:O	0.61	1.96	5	1
1:A:10:TRP:CE3	1:A:43:LEU:HD22	0.61	2.31	8	1
1:A:110:VAL:CG1	1:A:320:THR:HG21	0.61	2.26	3	1
1:A:158:TRP:CZ2	1:A:343:VAL:HG13	0.60	2.32	2	1
1:A:78:GLU:HA	1:A:104:ILE:HG22	0.60	1.71	7	2
1:A:106:TYR:CE1	1:A:285:LEU:HD11	0.60	2.31	10	1
1:A:244:VAL:HG21	1:A:315:PRO:HB3	0.60	1.73	3	1
1:A:301:ALA:HB3	1:A:317:ILE:CG2	0.60	2.27	1	1
1:A:283:TYR:O	1:A:284:LEU:HD22	0.60	1.95	8	1
1:A:332:ASN:C	1:A:333:ILE:HD12	0.60	2.17	7	1
1:A:71:ALA:HB2	1:A:76:LEU:HD12	0.60	1.72	9	1
1:A:109:ALA:HB2	1:A:262:LEU:HD12	0.60	1.73	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:364:ALA:O	1:A:368:ILE:HG22	0.59	1.96	2	2
1:A:158:TRP:O	1:A:162:ALA:HB2	0.59	1.97	5	6
1:A:7:LEU:HD22	1:A:279:PHE:CE1	0.59	2.32	6	1
1:A:314:ASP:CB	1:A:317:ILE:HG22	0.59	2.27	2	2
1:A:108:ILE:O	1:A:109:ALA:HB2	0.59	1.98	9	4
1:A:289:GLY:O	1:A:293:VAL:HG13	0.59	1.96	9	1
1:A:108:ILE:HD12	1:A:108:ILE:O	0.59	1.98	2	1
1:A:247:LEU:H	1:A:247:LEU:HD22	0.59	1.58	10	1
1:A:299:LEU:N	1:A:299:LEU:HD13	0.59	2.13	9	1
1:A:189:LYS:HG3	1:A:361:LEU:HD11	0.58	1.75	2	1
1:A:266:ILE:CG2	1:A:269:ALA:HB2	0.58	2.28	2	1
1:A:132:ILE:HG22	1:A:136:ASP:OD1	0.58	1.97	10	1
1:A:6:LYS:O	1:A:7:LEU:HD22	0.58	1.98	7	1
1:A:285:LEU:O	1:A:290:LEU:HD13	0.58	1.98	2	1
1:A:286:THR:HG23	1:A:289:GLY:H	0.58	1.57	1	4
1:A:6:LYS:C	1:A:7:LEU:HD12	0.58	2.19	10	2
1:A:132:ILE:HG22	1:A:133:PRO:HD3	0.58	1.76	1	3
1:A:10:TRP:HB3	1:A:60:ILE:HG22	0.58	1.74	9	1
1:A:266:ILE:HD13	1:A:266:ILE:N	0.58	2.14	9	1
1:A:87:ASP:OD1	1:A:304:LEU:HD21	0.58	1.97	2	1
1:A:192:LEU:O	1:A:196:VAL:HG22	0.58	1.98	9	1
1:A:132:ILE:N	1:A:133:PRO:CD	0.58	2.66	4	6
1:A:111:GLU:HA	1:A:320:THR:HG21	0.58	1.75	9	1
1:A:78:GLU:CA	1:A:104:ILE:HG22	0.58	2.29	7	1
1:A:285:LEU:O	1:A:290:LEU:HD22	0.57	1.98	2	1
1:A:132:ILE:HD11	1:A:147:LEU:HB3	0.57	1.75	8	1
1:A:247:LEU:HD13	1:A:255:SER:HB3	0.57	1.75	3	1
1:A:11:ILE:HG21	1:A:14:ASP:HB2	0.57	1.76	3	1
1:A:357:VAL:HG12	1:A:361:LEU:CD1	0.57	2.28	7	1
1:A:107:PRO:CB	1:A:261:VAL:HG21	0.57	2.30	9	1
1:A:246:VAL:C	1:A:247:LEU:HD13	0.57	2.19	10	1
1:A:259:VAL:HB	1:A:329:ILE:HG22	0.57	1.74	6	1
1:A:357:VAL:HG12	1:A:361:LEU:HD12	0.57	1.76	7	1
1:A:344:ARG:HG2	1:A:348:ILE:HD12	0.57	1.77	7	1
1:A:129:TRP:CD2	1:A:132:ILE:HD12	0.57	2.34	10	1
1:A:304:LEU:N	1:A:304:LEU:HD23	0.57	2.14	5	1
1:A:110:VAL:HG13	1:A:110:VAL:O	0.57	2.00	9	2
1:A:362:LYS:O	1:A:366:THR:HG22	0.57	2.00	7	1
1:A:299:LEU:HD23	1:A:299:LEU:N	0.57	2.15	1	1
1:A:151:LEU:CD1	1:A:208:THR:HG21	0.56	2.29	9	1
1:A:47:PHE:CZ	1:A:60:ILE:HD11	0.56	2.35	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:33:ILE:HD12	1:A:33:ILE:N	0.56	2.15	2	1
1:A:113:LEU:HD22	1:A:113:LEU:C	0.56	2.20	10	1
1:A:311:LEU:HD11	1:A:317:ILE:CB	0.56	2.30	9	1
1:A:302:VAL:O	1:A:302:VAL:HG13	0.56	1.99	8	1
1:A:104:ILE:N	1:A:104:ILE:HD13	0.56	2.14	8	2
1:A:280:LEU:HD12	1:A:281:GLU:N	0.56	2.16	5	1
1:A:9:ILE:HD12	1:A:9:ILE:N	0.56	2.15	8	1
1:A:365:GLN:O	1:A:369:THR:HG23	0.56	2.00	2	2
1:A:77:ALA:HB2	1:A:268:ALA:HA	0.56	1.76	5	2
1:A:139:LEU:HD13	1:A:145:SER:HB2	0.56	1.78	8	1
1:A:329:ILE:HG23	1:A:329:ILE:O	0.56	2.01	5	2
1:A:126:PRO:HG2	1:A:128:THR:HG22	0.56	1.77	2	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:HB2	0.56	1.78	7	2
1:A:110:VAL:HG21	1:A:317:ILE:CD1	0.55	2.31	10	1
1:A:333:ILE:O	1:A:333:ILE:HG23	0.55	2.00	1	1
1:A:17:TYR:CE2	1:A:37:VAL:HG13	0.55	2.36	4	1
1:A:61:PHE:CD2	1:A:264:ALA:HB2	0.55	2.35	10	2
1:A:62:TRP:N	1:A:262:LEU:HD23	0.55	2.17	5	1
1:A:75:LEU:C	1:A:76:LEU:HD22	0.55	2.22	2	1
1:A:116:ILE:HB	1:A:244:VAL:HG12	0.55	1.79	10	1
1:A:332:ASN:O	1:A:333:ILE:HG23	0.55	2.02	3	1
1:A:212:ILE:HD12	1:A:212:ILE:N	0.55	2.16	6	1
1:A:8:VAL:HG23	1:A:57:PRO:CG	0.55	2.32	9	1
1:A:71:ALA:HA	1:A:76:LEU:HD23	0.55	1.78	2	1
1:A:290:LEU:O	1:A:293:VAL:HG22	0.55	2.02	9	1
1:A:109:ALA:CB	1:A:262:LEU:HD12	0.55	2.31	10	1
1:A:10:TRP:CD2	1:A:43:LEU:HD13	0.55	2.37	8	1
1:A:76:LEU:HD22	1:A:104:ILE:O	0.55	2.02	9	1
1:A:104:ILE:HD13	1:A:104:ILE:N	0.54	2.16	7	1
1:A:145:SER:HB2	1:A:222:THR:HG22	0.54	1.79	10	1
1:A:132:ILE:HB	1:A:133:PRO:HD3	0.54	1.78	9	3
1:A:121:LEU:HD12	1:A:121:LEU:O	0.54	2.02	6	2
1:A:32:GLY:C	1:A:33:ILE:HD13	0.54	2.21	5	2
1:A:10:TRP:CE3	1:A:43:LEU:HD12	0.54	2.37	4	1
1:A:129:TRP:CE3	1:A:132:ILE:HG21	0.54	2.38	8	2
1:A:76:LEU:C	1:A:268:ALA:HB2	0.54	2.23	6	1
1:A:329:ILE:HD13	1:A:329:ILE:C	0.54	2.22	5	1
1:A:104:ILE:H	1:A:104:ILE:HD13	0.54	1.63	7	1
1:A:266:ILE:HG23	1:A:266:ILE:O	0.54	2.02	3	1
1:A:246:VAL:HG21	1:A:323:ASN:HB2	0.54	1.78	10	1
1:A:9:ILE:N	1:A:9:ILE:HD12	0.54	2.18	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:311:LEU:HD13	1:A:317:ILE:CD1	0.54	2.33	4	1
1:A:8:VAL:HG23	1:A:8:VAL:O	0.53	2.03	7	1
1:A:139:LEU:HD13	1:A:145:SER:HB3	0.53	1.80	8	1
1:A:299:LEU:N	1:A:299:LEU:HD22	0.53	2.19	8	1
1:A:151:LEU:CB	1:A:208:THR:HG21	0.53	2.33	8	1
1:A:7:LEU:CD1	1:A:276:ALA:HB1	0.53	2.33	4	1
1:A:114:SER:OG	1:A:319:ALA:HB1	0.53	2.02	1	1
1:A:40:PRO:O	1:A:43:LEU:HD23	0.53	2.02	2	1
1:A:115:LEU:HD13	1:A:116:ILE:N	0.53	2.17	7	1
1:A:8:VAL:HG13	1:A:8:VAL:O	0.53	2.03	4	1
1:A:151:LEU:CD1	1:A:199:ILE:HG21	0.53	2.34	2	1
1:A:208:THR:CG2	1:A:213:ALA:HB2	0.53	2.32	1	2
1:A:76:LEU:HD23	1:A:104:ILE:O	0.53	2.03	3	1
1:A:47:PHE:CZ	1:A:75:LEU:HD22	0.53	2.39	3	1
1:A:304:LEU:HD13	1:A:307:TYR:CD2	0.53	2.38	3	1
1:A:110:VAL:HG23	1:A:259:VAL:CG2	0.53	2.34	5	1
1:A:27:PHE:CD1	1:A:33:ILE:HG21	0.53	2.39	1	2
1:A:116:ILE:HG22	1:A:244:VAL:HG22	0.53	1.79	7	1
1:A:262:LEU:HD12	1:A:262:LEU:C	0.53	2.24	1	1
1:A:104:ILE:O	1:A:104:ILE:HG22	0.53	2.04	3	1
1:A:135:LEU:O	1:A:139:LEU:HD12	0.53	2.04	5	1
1:A:50:VAL:HG12	1:A:50:VAL:O	0.53	2.04	4	1
1:A:116:ILE:HD12	1:A:225:THR:O	0.53	2.04	3	1
1:A:167:TYR:HA	1:A:183:VAL:HG12	0.52	1.79	5	1
1:A:14:ASP:O	1:A:299:LEU:HD22	0.52	2.03	5	1
1:A:108:ILE:O	1:A:108:ILE:HG22	0.52	2.05	7	1
1:A:266:ILE:HD11	1:A:273:LYS:HB3	0.52	1.79	4	1
1:A:158:TRP:O	1:A:162:ALA:HB3	0.52	2.03	8	1
1:A:167:TYR:OH	1:A:343:VAL:HG11	0.52	2.04	6	1
1:A:147:LEU:N	1:A:147:LEU:HD23	0.52	2.19	10	1
1:A:110:VAL:HG23	1:A:110:VAL:O	0.52	2.05	10	1
1:A:343:VAL:O	1:A:347:VAL:HG23	0.52	2.03	10	2
1:A:11:ILE:H	1:A:11:ILE:HD13	0.52	1.64	10	1
1:A:11:ILE:HD13	1:A:11:ILE:N	0.52	2.19	10	1
1:A:129:TRP:CH2	1:A:132:ILE:HD13	0.52	2.40	8	1
1:A:37:VAL:HG13	1:A:37:VAL:O	0.52	2.05	3	1
1:A:308:GLU:O	1:A:312:ALA:HB3	0.52	2.04	7	1
1:A:342:ALA:HB1	1:A:364:ALA:HB1	0.52	1.82	3	1
1:A:266:ILE:HD13	1:A:266:ILE:H	0.52	1.65	9	1
1:A:192:LEU:HD13	1:A:192:LEU:O	0.51	2.05	1	2
1:A:104:ILE:HD13	1:A:104:ILE:H	0.51	1.64	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:LEU:C	1:A:89:LEU:HD12	0.51	2.26	10	1
1:A:156:PHE:O	1:A:160:LEU:HD23	0.51	2.06	5	1
1:A:112:ALA:HB3	1:A:320:THR:HG22	0.51	1.82	1	1
1:A:246:VAL:HG21	1:A:322:GLU:HB3	0.51	1.82	6	1
1:A:290:LEU:O	1:A:290:LEU:HD13	0.51	2.06	4	1
1:A:299:LEU:N	1:A:299:LEU:CD1	0.51	2.73	9	1
1:A:301:ALA:O	1:A:302:VAL:HG13	0.51	2.06	9	2
1:A:46:LYS:O	1:A:50:VAL:HG22	0.51	2.05	5	2
1:A:148:MET:SD	1:A:222:THR:HG21	0.51	2.46	9	1
1:A:76:LEU:HD23	1:A:104:ILE:HB	0.51	1.83	8	1
1:A:184:ASP:OD1	1:A:364:ALA:HB3	0.51	2.06	6	1
1:A:118:ASN:CB	1:A:121:LEU:HD21	0.51	2.36	2	1
1:A:98:ARG:NH2	1:A:103:LEU:HD11	0.51	2.20	4	1
1:A:302:VAL:HG23	1:A:302:VAL:O	0.51	2.05	4	1
1:A:183:VAL:O	1:A:183:VAL:HG22	0.51	2.04	9	1
1:A:259:VAL:HG13	1:A:328:GLU:O	0.51	2.06	1	1
1:A:9:ILE:HD13	1:A:20:LEU:HD22	0.51	1.82	4	1
1:A:363:ASP:O	1:A:366:THR:HG22	0.51	2.05	8	1
1:A:84:ALA:HB1	1:A:94:TRP:CZ2	0.51	2.40	6	2
1:A:266:ILE:HG21	1:A:269:ALA:HB2	0.51	1.81	2	1
1:A:8:VAL:HG12	1:A:57:PRO:HB2	0.51	1.83	4	1
1:A:149:PHE:CE1	1:A:217:PHE:CG	0.51	2.99	3	1
1:A:291:GLU:OE1	1:A:311:LEU:HD11	0.51	2.05	2	1
1:A:266:ILE:HD11	1:A:273:LYS:CB	0.51	2.36	4	1
1:A:157:THR:HB	1:A:161:ILE:HD12	0.51	1.82	8	1
1:A:10:TRP:NE1	1:A:43:LEU:HD22	0.50	2.21	3	1
1:A:110:VAL:CG2	1:A:320:THR:HG21	0.50	2.30	6	1
1:A:161:ILE:HD11	1:A:195:LEU:HD12	0.50	1.81	1	1
1:A:97:VAL:HG23	1:A:103:LEU:HD23	0.50	1.82	3	1
1:A:156:PHE:O	1:A:160:LEU:HD12	0.50	2.05	3	1
1:A:283:TYR:HB3	1:A:284:LEU:HD12	0.50	1.83	2	1
1:A:104:ILE:HG22	1:A:104:ILE:O	0.50	2.07	2	1
1:A:150:ASN:ND2	1:A:226:ILE:HG21	0.50	2.21	2	1
1:A:110:VAL:O	1:A:110:VAL:HG13	0.50	2.07	7	1
1:A:108:ILE:HG22	1:A:108:ILE:O	0.50	2.05	9	2
1:A:209:ASP:O	1:A:213:ALA:HB3	0.50	2.05	3	2
1:A:97:VAL:HG13	1:A:97:VAL:O	0.50	2.06	7	1
1:A:155:TYR:CD2	1:A:258:PHE:CE2	0.50	2.99	10	1
1:A:155:TYR:CD2	1:A:258:PHE:CD2	0.50	2.99	10	1
1:A:135:LEU:HD22	1:A:146:ALA:HB3	0.50	1.83	8	1
1:A:93:THR:O	1:A:97:VAL:HG22	0.50	2.06	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:TRP:CH2	1:A:43:LEU:HD13	0.50	2.42	7	1
1:A:117:TYR:HB3	1:A:223:ALA:HB2	0.50	1.84	8	1
1:A:60:ILE:HD11	1:A:62:TRP:CZ3	0.50	2.41	7	1
1:A:76:LEU:HD22	1:A:104:ILE:C	0.50	2.26	9	1
1:A:226:ILE:O	1:A:226:ILE:HG23	0.50	2.07	2	1
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:CG2	0.50	2.59	1	2
1:A:64:HIS:HB3	1:A:261:VAL:HG13	0.50	1.82	3	1
1:A:113:LEU:O	1:A:113:LEU:HD12	0.50	2.06	5	1
1:A:139:LEU:HD12	1:A:146:ALA:HB2	0.50	1.83	9	2
1:A:76:LEU:HD13	1:A:104:ILE:O	0.50	2.07	9	1
1:A:149:PHE:CE2	1:A:156:PHE:CZ	0.50	3.00	1	1
1:A:109:ALA:CB	1:A:262:LEU:HD22	0.50	2.37	4	1
1:A:302:VAL:HG13	1:A:302:VAL:O	0.50	2.06	3	2
1:A:10:TRP:HB3	1:A:60:ILE:HG23	0.50	1.84	10	1
1:A:167:TYR:OH	1:A:343:VAL:HG21	0.50	2.07	6	1
1:A:145:SER:O	1:A:222:THR:HG21	0.49	2.06	8	1
1:A:151:LEU:HD21	1:A:199:ILE:HG12	0.49	1.83	8	1
1:A:27:PHE:HB3	1:A:33:ILE:HG21	0.49	1.84	7	6
1:A:267:ASN:O	1:A:268:ALA:HB3	0.49	2.07	4	1
1:A:117:TYR:CB	1:A:122:LEU:HD22	0.49	2.36	9	1
1:A:301:ALA:CB	1:A:317:ILE:HD12	0.49	2.36	6	1
1:A:61:PHE:CE2	1:A:264:ALA:HB1	0.49	2.41	6	1
1:A:129:TRP:CD2	1:A:250:PHE:CE2	0.49	3.00	10	1
1:A:109:ALA:O	1:A:261:VAL:HG12	0.49	2.08	10	1
1:A:39:HIS:O	1:A:43:LEU:HD22	0.49	2.08	10	1
1:A:156:PHE:CE2	1:A:157:THR:HG23	0.49	2.42	8	1
1:A:163:ALA:HB2	1:A:250:PHE:CZ	0.49	2.43	9	1
1:A:6:LYS:O	1:A:7:LEU:HD12	0.49	2.08	10	1
1:A:27:PHE:CE2	1:A:283:TYR:CE2	0.49	3.00	1	1
1:A:8:VAL:O	1:A:59:ILE:HG23	0.49	2.07	6	1
1:A:8:VAL:HG23	1:A:57:PRO:CB	0.49	2.38	9	2
1:A:106:TYR:HD2	1:A:108:ILE:HD11	0.49	1.66	1	1
1:A:131:GLU:O	1:A:135:LEU:HD13	0.49	2.06	6	1
1:A:244:VAL:HG13	1:A:244:VAL:O	0.49	2.07	2	1
1:A:311:LEU:HD11	1:A:317:ILE:HB	0.49	1.84	9	1
1:A:299:LEU:HD22	1:A:299:LEU:C	0.49	2.27	9	1
1:A:129:TRP:CE2	1:A:250:PHE:CE2	0.49	3.01	8	2
1:A:266:ILE:HG13	1:A:276:ALA:HB1	0.49	1.84	1	1
1:A:113:LEU:HD13	1:A:226:ILE:CG2	0.49	2.38	5	1
1:A:47:PHE:O	1:A:51:ALA:HB2	0.49	2.07	4	1
1:A:357:VAL:HB	1:A:361:LEU:HD23	0.49	1.85	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:VAL:HB	1:A:302:VAL:HG22	0.49	1.84	4	1
1:A:43:LEU:O	1:A:43:LEU:HD13	0.49	2.07	9	1
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:CB	0.48	2.61	2	10
1:A:129:TRP:CE2	1:A:250:PHE:CZ	0.48	3.01	8	1
1:A:76:LEU:HD23	1:A:77:ALA:H	0.48	1.68	1	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:317:ILE:HB	0.48	1.85	2	1
1:A:28:GLU:CB	1:A:33:ILE:O	0.48	2.61	4	5
1:A:150:ASN:CG	1:A:226:ILE:HG21	0.48	2.28	2	1
1:A:160:LEU:HD21	1:A:250:PHE:CZ	0.48	2.43	10	1
1:A:166:GLY:O	1:A:188:ALA:HB2	0.48	2.07	1	1
1:A:96:ALA:O	1:A:97:VAL:HG13	0.48	2.09	4	1
1:A:148:MET:HB3	1:A:216:ALA:HB1	0.48	1.83	4	1
1:A:190:ALA:HB1	1:A:194:PHE:CE1	0.48	2.43	6	1
1:A:208:THR:HG23	1:A:208:THR:O	0.48	2.08	5	1
1:A:27:PHE:CE2	1:A:283:TYR:CD2	0.48	3.02	1	1
1:A:109:ALA:N	1:A:302:VAL:HG21	0.48	2.22	6	1
1:A:85:PHE:CE2	1:A:89:LEU:HD22	0.48	2.44	5	1
1:A:139:LEU:HG	1:A:146:ALA:HB2	0.48	1.85	2	1
1:A:158:TRP:CD1	1:A:167:TYR:CD2	0.48	3.00	6	1
1:A:19:GLY:CA	1:A:293:VAL:HG13	0.48	2.38	6	1
1:A:30:ASP:O	1:A:31:THR:HB	0.48	2.08	5	5
1:A:311:LEU:O	1:A:317:ILE:HG21	0.48	2.09	2	1
1:A:314:ASP:O	1:A:318:ALA:HB3	0.48	2.09	4	1
1:A:329:ILE:O	1:A:329:ILE:HG23	0.48	2.08	8	3
1:A:272:ASN:O	1:A:276:ALA:HB2	0.48	2.09	1	2
1:A:317:ILE:HD13	1:A:317:ILE:C	0.48	2.28	7	1
1:A:311:LEU:HD11	1:A:317:ILE:CG2	0.48	2.39	9	1
1:A:115:LEU:HD11	1:A:224:MET:HG2	0.48	1.85	9	1
1:A:114:SER:HB3	1:A:244:VAL:HG13	0.48	1.86	8	1
1:A:108:ILE:O	1:A:109:ALA:CB	0.47	2.61	9	1
1:A:129:TRP:CD1	1:A:250:PHE:CD2	0.47	3.02	10	1
1:A:27:PHE:CE2	1:A:283:TYR:CE1	0.47	3.02	2	1
1:A:28:GLU:HA	1:A:33:ILE:H	0.47	1.69	1	3
1:A:208:THR:HG22	1:A:213:ALA:CB	0.47	2.37	1	2
1:A:139:LEU:HD13	1:A:145:SER:O	0.47	2.09	4	1
1:A:61:PHE:CD1	1:A:61:PHE:N	0.47	2.82	4	1
1:A:10:TRP:CB	1:A:60:ILE:HG23	0.47	2.36	6	2
1:A:311:LEU:C	1:A:311:LEU:HD12	0.47	2.29	4	1
1:A:106:TYR:CE1	1:A:108:ILE:HD11	0.47	2.44	9	1
1:A:76:LEU:HD23	1:A:77:ALA:N	0.47	2.24	1	1
1:A:47:PHE:HZ	1:A:75:LEU:HD22	0.47	1.69	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:GLU:N	1:A:33:ILE:HB	0.47	2.24	4	4
1:A:37:VAL:O	1:A:37:VAL:HG13	0.47	2.08	10	1
1:A:97:VAL:O	1:A:97:VAL:HG12	0.47	2.10	6	1
1:A:342:ALA:HB1	1:A:367:ARG:NH1	0.47	2.24	5	1
1:A:302:VAL:HG11	1:A:304:LEU:HD12	0.47	1.86	2	1
1:A:120:ASP:C	1:A:121:LEU:HD23	0.47	2.30	2	1
1:A:299:LEU:HD12	1:A:299:LEU:C	0.47	2.30	7	1
1:A:329:ILE:HD13	1:A:329:ILE:N	0.47	2.24	6	1
1:A:74:GLY:O	1:A:75:LEU:HD12	0.47	2.10	6	1
1:A:360:ALA:O	1:A:364:ALA:CB	0.47	2.62	8	3
1:A:193:THR:CB	1:A:357:VAL:HG21	0.47	2.37	9	1
1:A:97:VAL:HG23	1:A:97:VAL:O	0.47	2.10	8	1
1:A:161:ILE:CD1	1:A:195:LEU:HD12	0.47	2.39	1	1
1:A:107:PRO:HB2	1:A:261:VAL:HG21	0.47	1.86	9	1
1:A:216:ALA:O	1:A:220:GLY:N	0.47	2.47	10	3
1:A:122:LEU:CD2	1:A:135:LEU:HD23	0.47	2.39	6	1
1:A:160:LEU:HD23	1:A:195:LEU:HG	0.47	1.87	6	1
1:A:106:TYR:CD1	1:A:108:ILE:HD11	0.47	2.45	9	1
1:A:246:VAL:HG21	1:A:323:ASN:CB	0.47	2.39	10	1
1:A:10:TRP:CD1	1:A:43:LEU:HD23	0.47	2.45	9	1
1:A:71:ALA:HB2	1:A:76:LEU:CD1	0.47	2.40	9	1
1:A:192:LEU:HD13	1:A:357:VAL:HG12	0.47	1.87	8	1
1:A:151:LEU:CD2	1:A:203:HIS:CD2	0.46	2.99	5	1
1:A:161:ILE:CG2	1:A:195:LEU:HD13	0.46	2.40	7	1
1:A:210:TYR:CD1	1:A:211:SER:N	0.46	2.83	3	4
1:A:347:VAL:HG23	1:A:348:ILE:N	0.46	2.25	9	1
1:A:160:LEU:HD23	1:A:195:LEU:CG	0.46	2.40	6	1
1:A:217:PHE:CD1	1:A:218:ASN:N	0.46	2.83	5	2
1:A:259:VAL:HG22	1:A:328:GLU:O	0.46	2.11	1	2
1:A:355:GLN:O	1:A:356:THR:HG23	0.46	2.10	3	1
1:A:161:ILE:HD11	1:A:167:TYR:CD1	0.46	2.46	5	1
1:A:147:LEU:C	1:A:147:LEU:HD12	0.46	2.31	4	1
1:A:129:TRP:O	1:A:132:ILE:HG13	0.46	2.11	6	1
1:A:275:LEU:HD23	1:A:279:PHE:CE1	0.46	2.45	5	1
1:A:97:VAL:HG21	1:A:107:PRO:HD3	0.46	1.86	4	1
1:A:247:LEU:HD13	1:A:255:SER:HB2	0.46	1.82	3	1
1:A:129:TRP:CE3	1:A:132:ILE:CD1	0.46	2.98	6	1
1:A:217:PHE:CB	1:A:225:THR:HG23	0.46	2.41	5	1
1:A:311:LEU:HD21	1:A:317:ILE:HB	0.46	1.86	9	1
1:A:7:LEU:HD23	1:A:57:PRO:HB3	0.46	1.87	1	1
1:A:196:VAL:HG11	1:A:357:VAL:CG2	0.46	2.41	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:280:LEU:HD12	1:A:280:LEU:C	0.46	2.31	5	1
1:A:75:LEU:HD12	1:A:75:LEU:O	0.46	2.10	2	1
1:A:129:TRP:NE1	1:A:250:PHE:CZ	0.46	2.84	8	1
1:A:47:PHE:N	1:A:48:PRO:HD2	0.46	2.25	3	4
1:A:344:ARG:O	1:A:348:ILE:N	0.46	2.48	9	2
1:A:361:LEU:HD13	1:A:361:LEU:O	0.46	2.11	9	1
1:A:27:PHE:CE2	1:A:283:TYR:CD1	0.46	3.04	2	1
1:A:158:TRP:N	1:A:159:PRO:HD2	0.46	2.26	4	8
1:A:160:LEU:CD2	1:A:250:PHE:CZ	0.46	2.99	10	1
1:A:61:PHE:N	1:A:61:PHE:CD1	0.46	2.83	10	1
1:A:98:ARG:NE	1:A:103:LEU:HD11	0.45	2.26	4	1
1:A:302:VAL:HG21	1:A:311:LEU:CD1	0.45	2.36	8	1
1:A:9:ILE:HD13	1:A:20:LEU:HD21	0.45	1.88	7	1
1:A:167:TYR:OH	1:A:361:LEU:HD21	0.45	2.10	10	1
1:A:77:ALA:HB1	1:A:269:ALA:HB2	0.45	1.87	1	1
1:A:17:TYR:CE2	1:A:37:VAL:CG1	0.45	3.00	4	1
1:A:151:LEU:HD23	1:A:199:ILE:HG12	0.45	1.86	4	1
1:A:61:PHE:CE2	1:A:264:ALA:CB	0.45	2.98	10	1
1:A:9:ILE:HG23	1:A:61:PHE:HE1	0.45	1.72	10	1
1:A:246:VAL:HG21	1:A:323:ASN:CG	0.45	2.32	10	1
1:A:137:LYS:O	1:A:141:ALA:HB2	0.45	2.11	7	1
1:A:83:LYS:O	1:A:87:ASP:HB3	0.45	2.12	10	1
1:A:138:GLU:O	1:A:141:ALA:HB3	0.45	2.12	6	1
1:A:311:LEU:HD11	1:A:317:ILE:HG21	0.45	1.88	9	1
1:A:67:PHE:CD2	1:A:71:ALA:CB	0.45	3.00	3	1
1:A:217:PHE:CD1	1:A:225:THR:CG2	0.45	2.99	5	1
1:A:297:LYS:N	1:A:298:PRO:HD2	0.45	2.26	7	1
1:A:67:PHE:CZ	1:A:265:GLY:N	0.45	2.85	4	1
1:A:259:VAL:HG23	1:A:329:ILE:HG13	0.45	1.88	9	1
1:A:10:TRP:CG	1:A:43:LEU:HD13	0.45	2.46	8	1
1:A:341:TYR:O	1:A:345:THR:HG22	0.45	2.10	8	1
1:A:64:HIS:CD2	1:A:261:VAL:CG2	0.45	2.99	1	1
1:A:59:ILE:HG23	1:A:59:ILE:O	0.45	2.11	1	1
1:A:129:TRP:CD1	1:A:132:ILE:CD1	0.45	3.00	7	1
1:A:304:LEU:HD22	1:A:307:TYR:HB3	0.45	1.88	7	1
1:A:50:VAL:HG23	1:A:54:GLY:HA3	0.45	1.89	9	1
1:A:64:HIS:CE1	1:A:261:VAL:CG2	0.45	3.00	8	1
1:A:76:LEU:HD13	1:A:104:ILE:HB	0.45	1.87	6	1
1:A:202:LYS:CE	1:A:203:HIS:CD2	0.45	2.99	5	1
1:A:317:ILE:HG22	1:A:321:MET:CE	0.45	2.41	5	1
1:A:163:ALA:HB1	1:A:253:GLN:HB2	0.45	1.89	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:160:LEU:HD13	1:A:195:LEU:HD21	0.45	1.88	4	1
1:A:300:GLY:O	1:A:301:ALA:HB2	0.45	2.12	9	1
1:A:85:PHE:CD2	1:A:86:GLN:N	0.45	2.85	10	1
1:A:301:ALA:HB3	1:A:317:ILE:HG23	0.45	1.87	6	2
1:A:161:ILE:HG21	1:A:167:TYR:CD1	0.45	2.46	6	1
1:A:301:ALA:HB1	1:A:308:GLU:HG3	0.45	1.89	6	1
1:A:9:ILE:CG2	1:A:61:PHE:CE2	0.45	3.00	8	1
1:A:301:ALA:HB1	1:A:311:LEU:CD2	0.45	2.42	1	1
1:A:151:LEU:HD12	1:A:208:THR:HG21	0.44	1.88	9	1
1:A:116:ILE:O	1:A:225:THR:HG23	0.44	2.12	7	1
1:A:217:PHE:CE1	1:A:225:THR:CG2	0.44	2.99	8	1
1:A:302:VAL:CG2	1:A:304:LEU:HD23	0.44	2.42	1	1
1:A:94:TRP:CE3	1:A:95:ASP:N	0.44	2.85	7	1
1:A:10:TRP:CD1	1:A:43:LEU:CD2	0.44	3.00	9	1
1:A:161:ILE:O	1:A:161:ILE:HG22	0.44	2.11	1	1
1:A:97:VAL:O	1:A:97:VAL:HG23	0.44	2.11	5	1
1:A:247:LEU:N	1:A:247:LEU:HD22	0.44	2.26	10	1
1:A:161:ILE:HG22	1:A:166:GLY:HA3	0.44	1.87	8	1
1:A:20:LEU:HD22	1:A:37:VAL:HG11	0.44	1.88	5	1
1:A:146:ALA:O	1:A:147:LEU:HD23	0.44	2.13	7	1
1:A:115:LEU:HD13	1:A:116:ILE:H	0.44	1.72	7	1
1:A:10:TRP:CZ2	1:A:43:LEU:HD13	0.44	2.48	7	1
1:A:349:ASN:OD1	1:A:350:ALA:N	0.44	2.51	10	1
1:A:77:ALA:CB	1:A:269:ALA:HB2	0.44	2.42	1	1
1:A:62:TRP:O	1:A:263:SER:N	0.44	2.48	6	3
1:A:7:LEU:HD21	1:A:276:ALA:CB	0.44	2.43	4	1
1:A:17:TYR:CD1	1:A:18:ASN:N	0.44	2.85	9	2
1:A:356:THR:HG23	1:A:358:ASP:H	0.44	1.72	8	1
1:A:280:LEU:O	1:A:280:LEU:HD23	0.44	2.13	3	1
1:A:346:ALA:HB1	1:A:360:ALA:HB1	0.44	1.89	5	1
1:A:121:LEU:HD11	1:A:221:GLU:O	0.44	2.13	5	1
1:A:132:ILE:CG2	1:A:133:PRO:HD3	0.44	2.43	4	1
1:A:77:ALA:HB2	1:A:268:ALA:CB	0.44	2.43	10	1
1:A:333:ILE:HD12	1:A:335:GLN:HB2	0.44	1.89	6	1
1:A:32:GLY:C	1:A:33:ILE:HD12	0.44	2.33	2	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:76:LEU:CB	0.44	2.42	7	1
1:A:112:ALA:O	1:A:113:LEU:CB	0.44	2.65	9	1
1:A:161:ILE:HG23	1:A:191:GLY:HA3	0.44	1.90	1	1
1:A:288:GLU:O	1:A:292:ALA:HB3	0.44	2.12	6	1
1:A:64:HIS:CE1	1:A:330:MET:CE	0.44	3.00	8	1
1:A:61:PHE:HD1	1:A:262:LEU:HD13	0.44	1.72	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:77:ALA:HB3	1:A:268:ALA:HB3	0.44	1.90	3	1
1:A:107:PRO:CB	1:A:261:VAL:CG2	0.43	2.95	9	1
1:A:302:VAL:HG22	1:A:302:VAL:O	0.43	2.13	10	1
1:A:365:GLN:HA	1:A:368:ILE:HD12	0.43	1.90	8	1
1:A:23:VAL:HG12	1:A:27:PHE:HE2	0.43	1.70	5	1
1:A:299:LEU:HD22	1:A:299:LEU:N	0.43	2.28	4	1
1:A:79:ILE:HG22	1:A:80:THR:N	0.43	2.29	3	3
1:A:303:ALA:HB3	1:A:306:SER:CB	0.43	2.41	5	1
1:A:27:PHE:O	1:A:33:ILE:HD12	0.43	2.13	9	1
1:A:211:SER:O	1:A:215:ALA:HB2	0.43	2.14	10	1
1:A:339:PHE:CZ	1:A:368:ILE:CD1	0.43	3.01	7	1
1:A:129:TRP:CG	1:A:132:ILE:HD12	0.43	2.48	7	2
1:A:75:LEU:O	1:A:75:LEU:HD12	0.43	2.13	1	1
1:A:129:TRP:CD1	1:A:132:ILE:HD12	0.43	2.49	7	1
1:A:161:ILE:HG22	1:A:161:ILE:O	0.43	2.13	10	1
1:A:116:ILE:HD11	1:A:227:ASN:HB2	0.43	1.89	3	1
1:A:210:TYR:CD2	1:A:211:SER:N	0.43	2.87	4	1
1:A:16:GLY:O	1:A:20:LEU:HD23	0.43	2.13	1	1
1:A:258:PHE:CZ	1:A:330:MET:CE	0.43	3.02	3	1
1:A:266:ILE:HG22	1:A:267:ASN:N	0.43	2.29	1	3
1:A:149:PHE:O	1:A:149:PHE:CD2	0.43	2.72	2	1
1:A:9:ILE:HG21	1:A:20:LEU:HD21	0.43	1.91	7	1
1:A:301:ALA:O	1:A:317:ILE:HD12	0.43	2.13	4	1
1:A:196:VAL:HG13	1:A:197:ASP:N	0.43	2.28	1	1
1:A:301:ALA:HB3	1:A:317:ILE:HG21	0.43	1.89	1	1
1:A:195:LEU:O	1:A:199:ILE:HG22	0.43	2.14	5	1
1:A:7:LEU:HB2	1:A:35:VAL:HG12	0.43	1.91	7	1
1:A:132:ILE:N	1:A:133:PRO:HD3	0.43	2.28	4	1
1:A:115:LEU:HD12	1:A:245:THR:OG1	0.43	2.14	4	1
1:A:9:ILE:HG23	1:A:61:PHE:CE1	0.43	2.49	10	1
1:A:76:LEU:HD12	1:A:267:ASN:HB3	0.43	1.91	8	1
1:A:197:ASP:OD1	1:A:198:LEU:N	0.43	2.51	1	1
1:A:158:TRP:O	1:A:162:ALA:CB	0.43	2.67	5	1
1:A:203:HIS:CD2	1:A:207:ASP:CB	0.43	3.02	7	1
1:A:61:PHE:HB3	1:A:264:ALA:HB2	0.43	1.91	4	1
1:A:293:VAL:HG13	1:A:294:ASN:N	0.43	2.28	1	1
1:A:27:PHE:CE1	1:A:283:TYR:CD2	0.42	3.06	5	1
1:A:293:VAL:O	1:A:294:ASN:C	0.42	2.58	7	1
1:A:62:TRP:CG	1:A:62:TRP:O	0.42	2.72	4	1
1:A:162:ALA:O	1:A:164:ASP:N	0.42	2.52	10	1
1:A:113:LEU:HD12	1:A:113:LEU:C	0.42	2.34	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:132:ILE:HG21	1:A:147:LEU:HD21	0.42	1.90	7	1
1:A:28:GLU:HB2	1:A:33:ILE:O	0.42	2.13	8	1
1:A:31:THR:O	1:A:31:THR:OG1	0.42	2.37	7	2
1:A:220:GLY:O	1:A:221:GLU:CB	0.42	2.68	4	1
1:A:113:LEU:HD12	1:A:323:ASN:CG	0.42	2.34	9	1
1:A:11:ILE:HD11	1:A:15:LYS:HB2	0.42	1.91	8	1
1:A:158:TRP:NE1	1:A:167:TYR:CE2	0.42	2.87	5	1
1:A:9:ILE:HG21	1:A:20:LEU:CD2	0.42	2.44	7	1
1:A:266:ILE:N	1:A:266:ILE:CD1	0.42	2.83	9	1
1:A:298:PRO:C	1:A:299:LEU:HD23	0.42	2.35	1	1
1:A:350:ALA:O	1:A:355:GLN:N	0.42	2.52	6	1
1:A:275:LEU:CD2	1:A:279:PHE:CE1	0.42	3.03	5	1
1:A:148:MET:SD	1:A:216:ALA:HB3	0.42	2.55	7	1
1:A:195:LEU:O	1:A:199:ILE:HG23	0.42	2.14	9	1
1:A:113:LEU:HD22	1:A:114:SER:N	0.42	2.30	10	1
1:A:304:LEU:CD2	1:A:304:LEU:N	0.42	2.83	5	1
1:A:345:THR:O	1:A:349:ASN:CB	0.42	2.67	4	4
1:A:160:LEU:HD22	1:A:255:SER:HB3	0.42	1.89	7	1
1:A:199:ILE:HD12	1:A:200:LYS:N	0.42	2.29	7	1
1:A:158:TRP:CB	1:A:159:PRO:HD3	0.42	2.45	10	1
1:A:79:ILE:HG22	1:A:277:LYS:CE	0.42	2.45	10	1
1:A:365:GLN:O	1:A:368:ILE:HD12	0.42	2.15	3	1
1:A:104:ILE:N	1:A:104:ILE:CD1	0.42	2.83	4	2
1:A:146:ALA:O	1:A:147:LEU:HB3	0.42	2.15	10	1
1:A:19:GLY:HA3	1:A:293:VAL:HG13	0.42	1.92	6	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:10:TRP:CZ3	0.42	3.03	3	1
1:A:146:ALA:HB1	1:A:223:ALA:CB	0.42	2.43	6	1
1:A:77:ALA:HB2	1:A:268:ALA:CA	0.41	2.43	10	1
1:A:61:PHE:CD1	1:A:262:LEU:HD13	0.41	2.50	1	1
1:A:149:PHE:CG	1:A:226:ILE:HD13	0.41	2.48	5	1
1:A:308:GLU:OE2	1:A:311:LEU:HD21	0.41	2.15	4	1
1:A:61:PHE:CD1	1:A:264:ALA:HB1	0.41	2.49	8	1
1:A:46:LYS:O	1:A:50:VAL:HG23	0.41	2.15	1	1
1:A:339:PHE:CD1	1:A:339:PHE:O	0.41	2.73	3	1
1:A:78:GLU:HG3	1:A:104:ILE:HG22	0.41	1.92	6	1
1:A:301:ALA:HB2	1:A:311:LEU:CB	0.41	2.46	6	1
1:A:62:TRP:CD1	1:A:62:TRP:O	0.41	2.74	4	1
1:A:286:THR:O	1:A:290:LEU:N	0.41	2.53	6	1
1:A:28:GLU:HB3	1:A:33:ILE:O	0.41	2.14	1	3
1:A:297:LYS:N	1:A:298:PRO:CD	0.41	2.83	7	1
1:A:11:ILE:HG22	1:A:12:ASN:N	0.41	2.31	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:ALA:CB	1:A:94:TRP:CZ2	0.41	3.03	6	1
1:A:363:ASP:OD1	1:A:364:ALA:N	0.41	2.54	9	1
1:A:139:LEU:HD12	1:A:144:LYS:CB	0.41	2.46	1	1
1:A:30:ASP:C	1:A:31:THR:HG22	0.41	2.35	2	3
1:A:270:SER:CB	1:A:271:PRO:CD	0.41	2.99	2	2
1:A:161:ILE:HD11	1:A:188:ALA:HA	0.41	1.92	6	1
1:A:129:TRP:CZ3	1:A:132:ILE:HD12	0.41	2.49	2	1
1:A:151:LEU:HD12	1:A:199:ILE:HG21	0.41	1.93	2	1
1:A:250:PHE:CE1	1:A:253:GLN:O	0.41	2.74	7	1
1:A:139:LEU:HD13	1:A:145:SER:C	0.41	2.36	3	2
1:A:148:MET:CB	1:A:216:ALA:CB	0.41	2.98	9	1
1:A:290:LEU:HD23	1:A:302:VAL:CG2	0.41	2.46	2	1
1:A:64:HIS:CD2	1:A:97:VAL:CG1	0.41	3.03	4	1
1:A:270:SER:N	1:A:271:PRO:HD2	0.41	2.31	4	1
1:A:214:GLU:O	1:A:218:ASN:N	0.41	2.54	9	1
1:A:110:VAL:HG11	1:A:302:VAL:HG12	0.41	1.92	10	1
1:A:64:HIS:NE2	1:A:97:VAL:HG12	0.41	2.31	8	1
1:A:190:ALA:O	1:A:194:PHE:CD1	0.41	2.74	6	1
1:A:118:ASN:HB3	1:A:121:LEU:HD21	0.41	1.93	2	1
1:A:282:ASN:O	1:A:283:TYR:CD2	0.41	2.74	7	1
1:A:123:PRO:HG3	1:A:223:ALA:HB2	0.41	1.93	4	1
1:A:344:ARG:CD	1:A:345:THR:N	0.41	2.84	9	1
1:A:117:TYR:CD1	1:A:117:TYR:O	0.41	2.74	9	1
1:A:193:THR:CA	1:A:357:VAL:HG21	0.41	2.46	9	1
1:A:81:PRO:HD2	1:A:103:LEU:HD13	0.41	1.92	10	1
1:A:23:VAL:HG12	1:A:282:ASN:ND2	0.41	2.31	6	1
1:A:9:ILE:HB	1:A:37:VAL:HG12	0.41	1.90	6	1
1:A:250:PHE:O	1:A:250:PHE:CD2	0.41	2.74	3	2
1:A:150:ASN:OD1	1:A:156:PHE:CZ	0.41	2.74	10	1
1:A:330:MET:CB	1:A:331:PRO:CD	0.41	2.99	3	1
1:A:23:VAL:HG23	1:A:24:GLY:N	0.40	2.32	2	1
1:A:47:PHE:CB	1:A:48:PRO:CD	0.40	2.99	2	1
1:A:293:VAL:O	1:A:295:LYS:N	0.40	2.54	7	1
1:A:60:ILE:O	1:A:67:PHE:CE1	0.40	2.74	4	1
1:A:211:SER:O	1:A:214:GLU:CG	0.40	2.69	9	1
1:A:217:PHE:CE1	1:A:226:ILE:O	0.40	2.74	9	1
1:A:64:HIS:CE1	1:A:330:MET:HE1	0.40	2.51	8	1
1:A:164:ASP:OD1	1:A:250:PHE:CD1	0.40	2.74	1	1
1:A:194:PHE:CZ	1:A:250:PHE:CZ	0.40	3.09	5	1
1:A:149:PHE:CG	1:A:149:PHE:O	0.40	2.74	2	1
1:A:311:LEU:HD13	1:A:317:ILE:HG12	0.40	1.91	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:67:PHE:CE1	1:A:104:ILE:O	0.40	2.74	10	1
1:A:84:ALA:O	1:A:87:ASP:OD1	0.40	2.40	8	1
1:A:337:SER:O	1:A:340:TRP:CE3	0.40	2.74	3	1
1:A:348:ILE:CG2	1:A:349:ASN:N	0.40	2.84	9	1
1:A:293:VAL:O	1:A:297:LYS:N	0.40	2.54	8	1
1:A:102:LYS:O	1:A:103:LEU:HD12	0.40	2.17	8	1
1:A:108:ILE:HD11	1:A:284:LEU:HB3	0.40	1.94	3	1
1:A:156:PHE:N	1:A:156:PHE:CD1	0.40	2.90	5	1
1:A:106:TYR:CZ	1:A:264:ALA:O	0.40	2.75	5	1
1:A:270:SER:N	1:A:271:PRO:CD	0.40	2.85	9	1
1:A:10:TRP:HE3	1:A:60:ILE:HD13	0.40	1.75	10	1
1:A:216:ALA:O	1:A:220:GLY:CA	0.40	2.69	10	1
1:A:110:VAL:HG22	1:A:301:ALA:CA	0.40	2.46	8	1
1:A:299:LEU:CD2	1:A:299:LEU:N	0.40	2.85	1	1
1:A:184:ASP:OD2	1:A:339:PHE:CD2	0.40	2.75	3	1
1:A:67:PHE:CE1	1:A:263:SER:O	0.40	2.74	5	1
1:A:153:GLU:O	1:A:156:PHE:CD1	0.40	2.75	5	1
1:A:333:ILE:HG23	1:A:333:ILE:O	0.40	2.16	5	1
1:A:20:LEU:HD12	1:A:297:LYS:CE	0.40	2.47	4	1
1:A:209:ASP:OD1	1:A:211:SER:N	0.40	2.55	4	1
1:A:311:LEU:HD23	1:A:311:LEU:O	0.40	2.16	9	1
1:A:210:TYR:O	1:A:214:GLU:CB	0.40	2.70	8	1
1:A:10:TRP:CH2	1:A:38:GLU:HB3	0.40	2.52	3	1
1:A:129:TRP:HA	1:A:129:TRP:CE3	0.40	2.51	6	1

6.3 Torsion angles ⓘ

6.3.1 Protein backbone ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	341/370 (92%)	271±4 (79±1%)	47±3 (14±1%)	23±3 (7±1%)	3	19
All	All	3410/3700 (92%)	2707 (79%)	473 (14%)	230 (7%)	3	19

All 77 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	32	GLY	10
1	A	31	THR	10
1	A	63	ALA	10
1	A	58	ASP	9
1	A	143	GLY	9
1	A	147	LEU	8
1	A	75	LEU	8
1	A	163	ALA	7
1	A	109	ALA	7
1	A	108	ILE	6
1	A	41	ASP	6
1	A	302	VAL	6
1	A	299	LEU	5
1	A	255	SER	5
1	A	165	GLY	5
1	A	333	ILE	4
1	A	97	VAL	4
1	A	150	ASN	4
1	A	221	GLU	4
1	A	155	TYR	3
1	A	167	TYR	3
1	A	331	PRO	3
1	A	224	MET	3
1	A	74	GLY	3
1	A	82	ASP	3
1	A	283	TYR	3
1	A	220	GLY	3
1	A	206	ALA	3
1	A	127	LYS	3
1	A	269	ALA	2
1	A	315	PRO	2
1	A	205	ASN	2
1	A	13	GLY	2
1	A	248	PRO	2
1	A	285	LEU	2
1	A	268	ALA	2
1	A	101	GLY	2
1	A	354	ARG	2
1	A	53	THR	2
1	A	166	GLY	2
1	A	5	GLY	2
1	A	332	ASN	2
1	A	228	GLY	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	151	LEU	2
1	A	121	LEU	2
1	A	40	PRO	2
1	A	120	ASP	2
1	A	56	GLY	2
1	A	4	GLU	2
1	A	15	LYS	2
1	A	300	GLY	2
1	A	353	GLY	2
1	A	14	ASP	2
1	A	126	PRO	2
1	A	296	ASP	1
1	A	113	LEU	1
1	A	284	LEU	1
1	A	168	ALA	1
1	A	271	PRO	1
1	A	183	VAL	1
1	A	207	ASP	1
1	A	57	PRO	1
1	A	68	GLY	1
1	A	89	LEU	1
1	A	294	ASN	1
1	A	304	LEU	1
1	A	204	MET	1
1	A	12	ASN	1
1	A	229	PRO	1
1	A	297	LYS	1
1	A	301	ALA	1
1	A	313	LYS	1
1	A	55	ASP	1
1	A	105	ALA	1
1	A	251	LYS	1
1	A	182	GLY	1
1	A	77	ALA	1

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	271/297 (91%)	205±8 (76±3%)	66±8 (24±3%)	3	27
All	All	2710/2970 (91%)	2052 (76%)	658 (24%)	3	27

All 208 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	224	MET	9
1	A	83	LYS	8
1	A	66	ARG	8
1	A	340	TRP	8
1	A	129	TRP	7
1	A	62	TRP	7
1	A	36	THR	7
1	A	355	GLN	7
1	A	151	LEU	7
1	A	28	GLU	7
1	A	75	LEU	7
1	A	330	MET	7
1	A	147	LEU	7
1	A	98	ARG	6
1	A	328	GLU	6
1	A	29	LYS	6
1	A	200	LYS	6
1	A	149	PHE	6
1	A	290	LEU	6
1	A	119	LYS	6
1	A	221	GLU	6
1	A	158	TRP	6
1	A	47	PHE	6
1	A	225	THR	6
1	A	341	TYR	6
1	A	122	LEU	6
1	A	202	LYS	6
1	A	148	MET	6
1	A	321	MET	5
1	A	167	TYR	5
1	A	99	TYR	5
1	A	305	LYS	5
1	A	192	LEU	5
1	A	245	THR	5
1	A	140	LYS	5
1	A	304	LEU	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	314	ASP	5
1	A	297	LYS	5
1	A	325	GLN	5
1	A	89	LEU	5
1	A	367	ARG	5
1	A	262	LEU	5
1	A	121	LEU	5
1	A	370	LYS	5
1	A	361	LEU	5
1	A	144	LYS	5
1	A	34	LYS	4
1	A	316	ARG	4
1	A	6	LYS	4
1	A	365	GLN	4
1	A	14	ASP	4
1	A	137	LYS	4
1	A	22	GLU	4
1	A	295	LYS	4
1	A	349	ASN	4
1	A	43	LEU	4
1	A	72	GLN	4
1	A	326	LYS	4
1	A	76	LEU	4
1	A	130	GLU	4
1	A	344	ARG	4
1	A	195	LEU	4
1	A	283	TYR	4
1	A	313	LYS	4
1	A	219	LYS	4
1	A	67	PHE	4
1	A	90	TYR	4
1	A	115	LEU	4
1	A	82	ASP	4
1	A	307	TYR	4
1	A	251	LYS	4
1	A	249	THR	4
1	A	26	LYS	4
1	A	273	LYS	4
1	A	53	THR	4
1	A	102	LYS	4
1	A	106	TYR	4
1	A	329	ILE	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	280	LEU	4
1	A	131	GLU	3
1	A	209	ASP	3
1	A	222	THR	3
1	A	45	GLU	3
1	A	92	PHE	3
1	A	274	GLU	3
1	A	156	PHE	3
1	A	4	GLU	3
1	A	78	GLU	3
1	A	160	LEU	3
1	A	136	ASP	3
1	A	339	PHE	3
1	A	114	SER	3
1	A	44	GLU	3
1	A	46	LYS	3
1	A	104	ILE	3
1	A	164	ASP	3
1	A	277	LYS	3
1	A	86	GLN	3
1	A	363	ASP	3
1	A	203	HIS	3
1	A	336	MET	3
1	A	153	GLU	3
1	A	61	PHE	3
1	A	111	GLU	3
1	A	299	LEU	3
1	A	88	LYS	3
1	A	270	SER	3
1	A	49	GLN	3
1	A	356	THR	3
1	A	41	ASP	3
1	A	279	PHE	3
1	A	25	LYS	3
1	A	15	LYS	3
1	A	354	ARG	3
1	A	198	LEU	3
1	A	39	HIS	2
1	A	113	LEU	2
1	A	284	LEU	2
1	A	127	LYS	2
1	A	247	LEU	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	10	TRP	2
1	A	70	TYR	2
1	A	214	GLU	2
1	A	103	LEU	2
1	A	201	ASN	2
1	A	42	LYS	2
1	A	80	THR	2
1	A	308	GLU	2
1	A	311	LEU	2
1	A	27	PHE	2
1	A	18	ASN	2
1	A	189	LYS	2
1	A	288	GLU	2
1	A	255	SER	2
1	A	359	GLU	2
1	A	317	ILE	2
1	A	33	ILE	2
1	A	263	SER	2
1	A	208	THR	2
1	A	138	GLU	2
1	A	31	THR	2
1	A	11	ILE	2
1	A	128	THR	2
1	A	322	GLU	2
1	A	194	PHE	2
1	A	337	SER	2
1	A	58	ASP	2
1	A	335	GLN	2
1	A	362	LYS	2
1	A	135	LEU	2
1	A	157	THR	2
1	A	286	THR	2
1	A	218	ASN	2
1	A	155	TYR	2
1	A	256	LYS	2
1	A	108	ILE	2
1	A	275	LEU	2
1	A	145	SER	2
1	A	287	ASP	2
1	A	150	ASN	2
1	A	100	ASN	2
1	A	204	MET	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	152	GLN	2
1	A	250	PHE	2
1	A	291	GLU	1
1	A	212	ILE	1
1	A	205	ASN	1
1	A	20	LEU	1
1	A	139	LEU	1
1	A	38	GLU	1
1	A	185	ASN	1
1	A	116	ILE	1
1	A	332	ASN	1
1	A	296	ASP	1
1	A	368	ILE	1
1	A	199	ILE	1
1	A	320	THR	1
1	A	369	THR	1
1	A	211	SER	1
1	A	227	ASN	1
1	A	333	ILE	1
1	A	282	ASN	1
1	A	294	ASN	1
1	A	117	TYR	1
1	A	120	ASP	1
1	A	302	VAL	1
1	A	197	ASP	1
1	A	132	ILE	1
1	A	253	GLN	1
1	A	258	PHE	1
1	A	73	SER	1
1	A	85	PHE	1
1	A	207	ASP	1
1	A	93	THR	1
1	A	242	TYR	1
1	A	59	ILE	1
1	A	272	ASN	1
1	A	17	TYR	1
1	A	55	ASP	1
1	A	281	GLU	1
1	A	64	HIS	1
1	A	161	ILE	1
1	A	345	THR	1
1	A	30	ASP	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	285	LEU	1
1	A	266	ILE	1
1	A	65	ASP	1
1	A	95	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 carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided