



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 02:39 PM BST

PDB ID : 1GE9
Title : SOLUTION STRUCTURE OF THE RIBOSOME RECYCLING FACTOR
Authors : Yoshida, T.; Uchiyama, S.; Nakano, H.; Kashimori, H.; Kijima, H.; Ohshima, T.; Saihara, Y.; Ishino, T.; Shimahara, T.; Yoshida, T.; Yokose, K.; Ohkubo, T.; Kaji, A.; Kobayashi, Y.
Deposited on : 2000-10-19

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

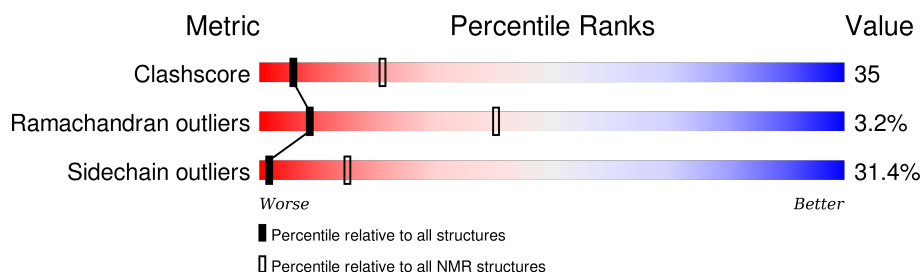
1 Overall quality at a glance

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	184	<div> <div>33%</div> <div>57%</div> <div>8% ..</div> </div>

2 Ensemble composition and analysis ⓘ

This entry contains 15 models. Model 2 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:3-A:184 (182)	1.05	2

Ill-defined regions of proteins are excluded from the global statistics.

Ligands and non-protein polymers are included in the analysis.

The models can be grouped into 3 clusters. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 3, 5, 6, 7, 12, 13, 14, 15
2	2, 8, 9, 10
3	4, 11

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3087 atoms, of which 1579 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called RIBOSOME RECYCLING FACTOR.

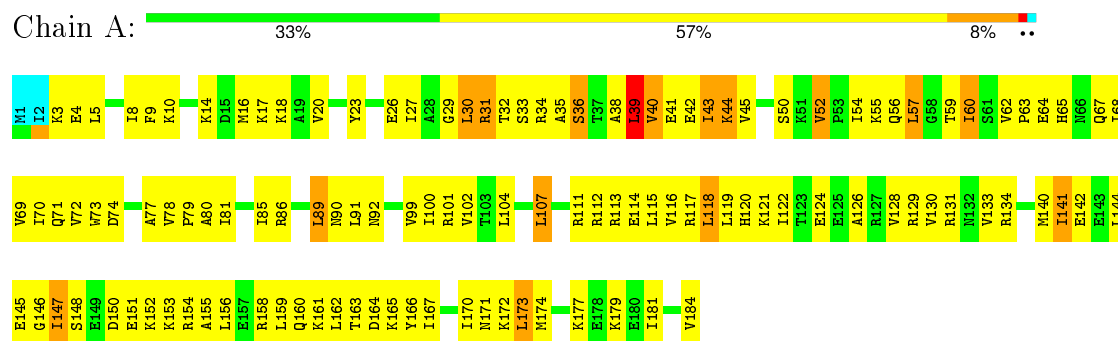
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	184	Total	C	H	N	O	S	0
			3087	946	1579	267	290	5	

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: RIBOSOME RECYCLING FACTOR

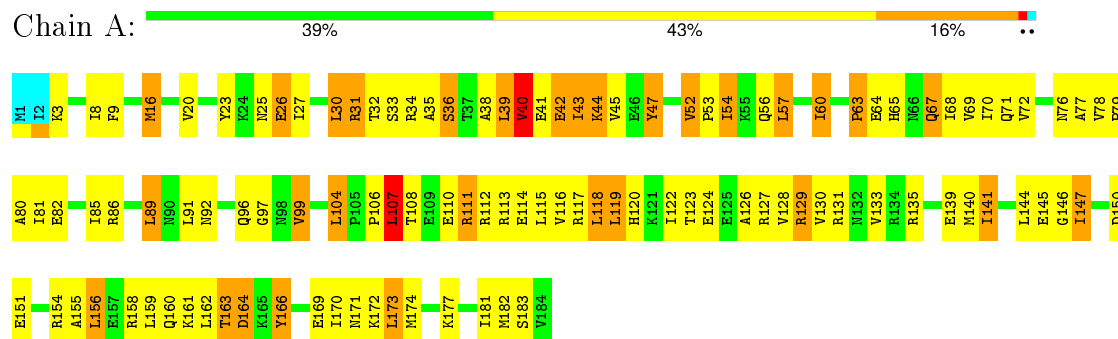


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

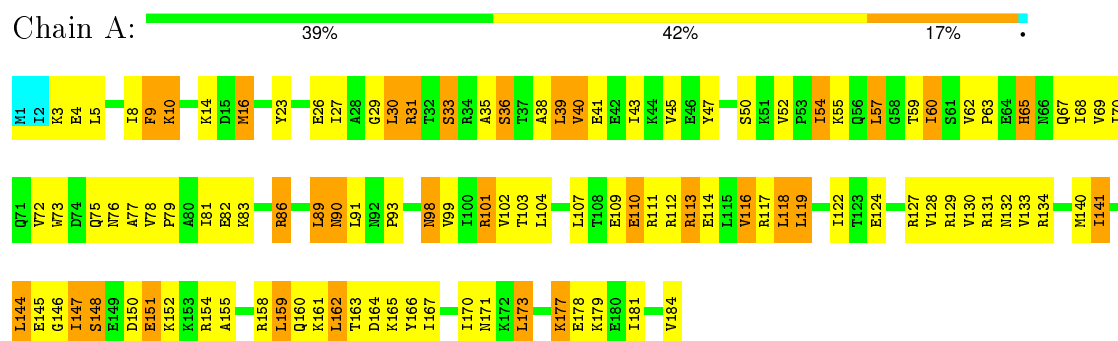
4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: RIBOSOME RECYCLING FACTOR



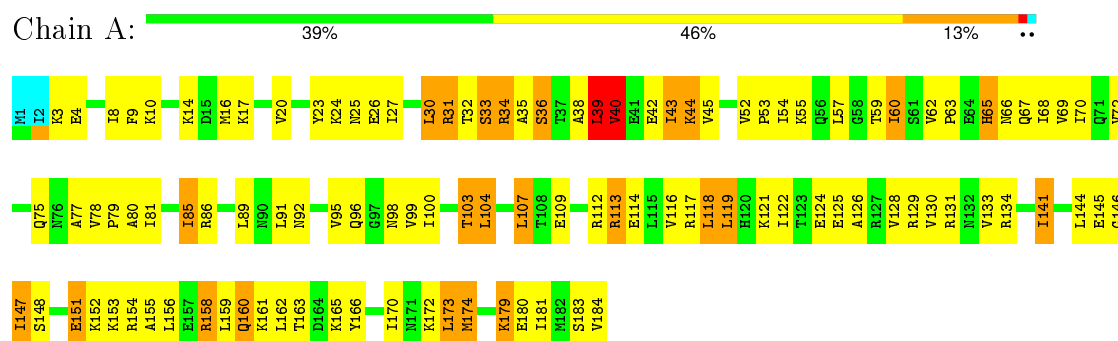
4.2.5 Score per residue for model 5

• Molecule 1: RIBOSOME RECYCLING FACTOR



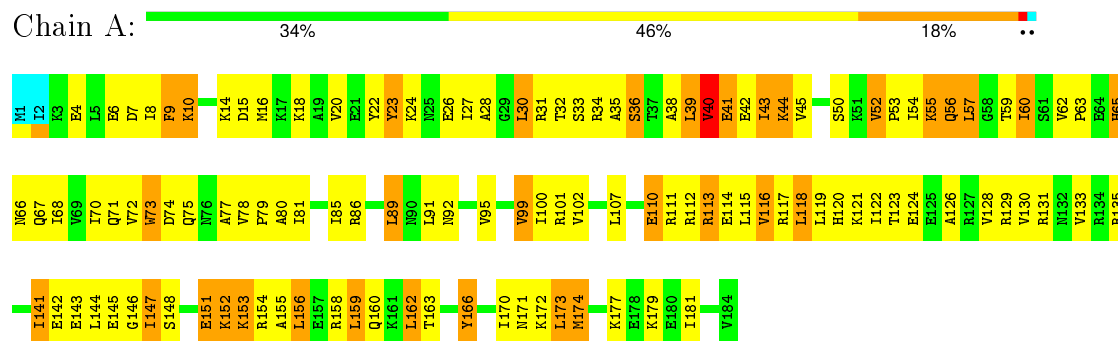
4.2.6 Score per residue for model 6

• Molecule 1: RIBOSOME RECYCLING FACTOR



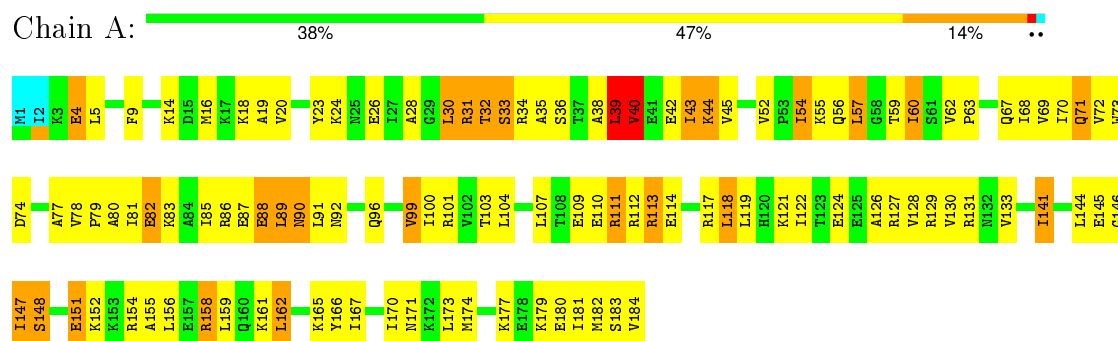
4.2.7 Score per residue for model 7

• Molecule 1: RIBOSOME RECYCLING FACTOR



4.2.8 Score per residue for model 8

• Molecule 1: RIBOSOME RECYCLING FACTOR



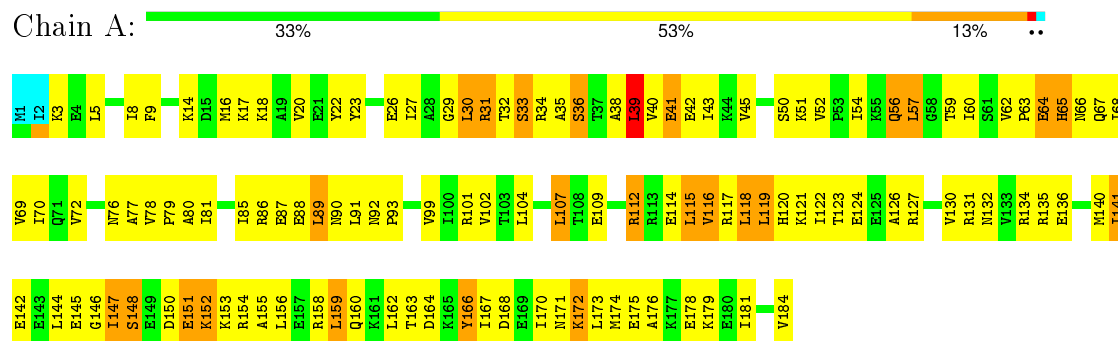
4.2.9 Score per residue for model 9

• Molecule 1: RIBOSOME RECYCLING FACTOR



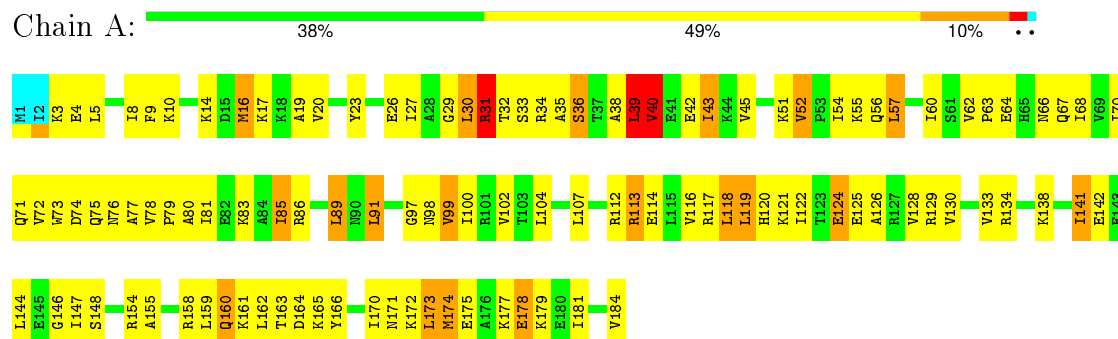
4.2.10 Score per residue for model 10

• Molecule 1: RIBOSOME RECYCLING FACTOR



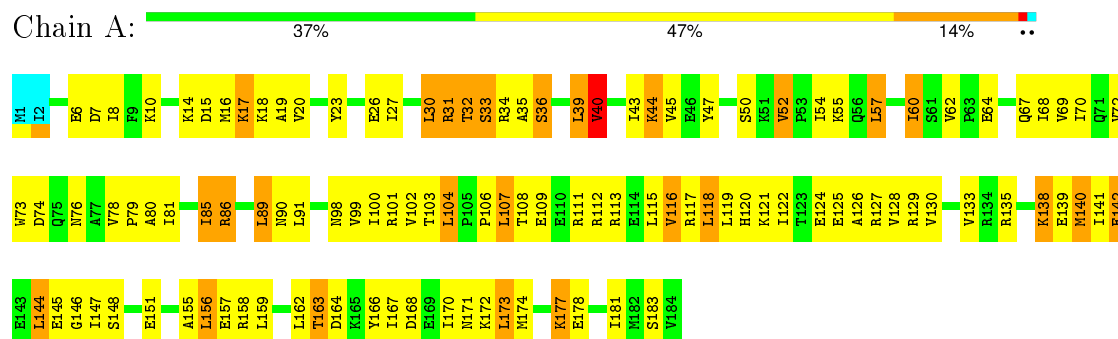
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: RIBOSOME RECYCLING FACTOR



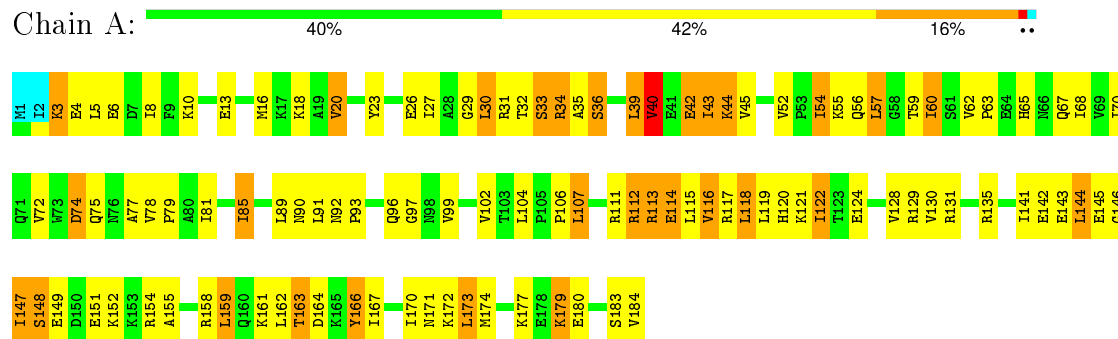
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: RIBOSOME RECYCLING FACTOR



4.2.13 Score per residue for model 13

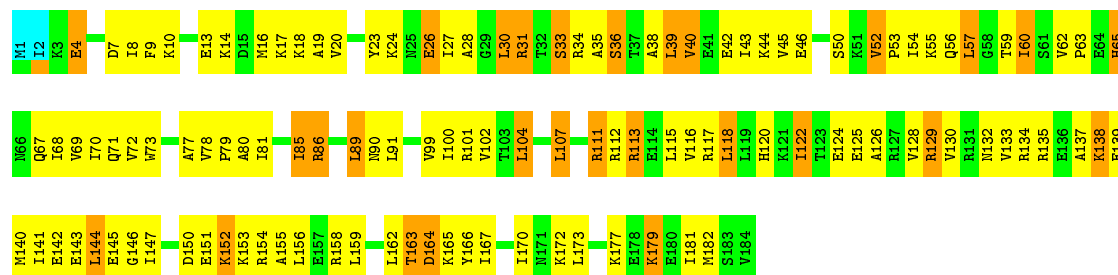
- Molecule 1: RIBOSOME RECYCLING FACTOR



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: RIBOSOME RECYCLING FACTOR

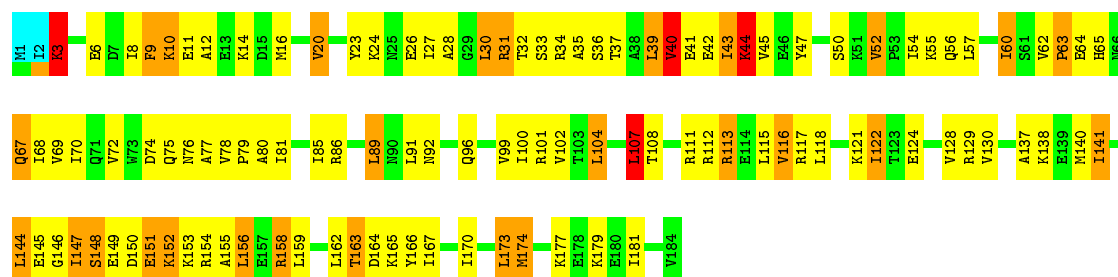
Chain A: 35% 49% 15%



4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: RIBOSOME RECYCLING FACTOR

Chain A:  38% 44% 15% ..



5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

The models were refined using the following method: *torsion angle dynamics*.

Of the 100 calculated structures, 15 were deposited, based on the following criterion: *target function*.

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

Software name	Classification	Version
CNS	structure solution	0.9
CNS	refinement	0.9

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	1492	1557	1555	106±11
All	All	22380	23355	23325	1584

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 35.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:ILE:HG22	1:A:70:ILE:HG23	1.09	1.16	15	13
1:A:72:VAL:HG22	1:A:81:ILE:HD12	1.09	1.20	9	7
1:A:40:VAL:HG11	1:A:43:ILE:HD13	1.03	1.28	2	3
1:A:40:VAL:HG22	1:A:89:LEU:HD11	1.00	1.33	9	2
1:A:27:ILE:HG23	1:A:119:LEU:HD11	0.97	1.37	1	2
1:A:30:LEU:HD23	1:A:118:LEU:HD23	0.96	1.31	9	3
1:A:45:VAL:HG23	1:A:80:ALA:HB3	0.96	1.38	1	12
1:A:162:LEU:HD13	1:A:163:THR:N	0.95	1.76	5	1
1:A:116:VAL:HG23	1:A:181:ILE:HG21	0.93	1.39	3	3
1:A:31:ARG:CB	1:A:39:LEU:HD22	0.93	1.93	15	1
1:A:26:GLU:O	1:A:30:LEU:HD12	0.93	1.61	6	12
1:A:30:LEU:HD21	1:A:118:LEU:HD23	0.92	1.41	8	10
1:A:8:ILE:HG21	1:A:141:ILE:HD11	0.91	1.41	12	1
1:A:23:TYR:CE1	1:A:27:ILE:HD11	0.90	2.01	1	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:130:VAL:HG21	1:A:166:TYR:CZ	0.88	2.04	10	4
1:A:43:ILE:HG21	1:A:81:ILE:HG23	0.87	1.42	4	5
1:A:40:VAL:CG1	1:A:43:ILE:HD11	0.87	2.00	5	10
1:A:45:VAL:HG21	1:A:77:ALA:HB1	0.84	1.46	13	8
1:A:144:LEU:HD22	1:A:144:LEU:O	0.84	1.71	5	1
1:A:43:ILE:HG21	1:A:54:ILE:HD11	0.84	1.47	7	3
1:A:130:VAL:HG21	1:A:166:TYR:CE1	0.83	2.08	10	3
1:A:162:LEU:HD12	1:A:163:THR:N	0.83	1.88	3	4
1:A:89:LEU:HD23	1:A:102:VAL:HG11	0.83	1.50	15	3
1:A:62:VAL:HG13	1:A:67:GLN:O	0.83	1.74	4	14
1:A:89:LEU:CD2	1:A:102:VAL:HG11	0.82	2.05	15	5
1:A:72:VAL:CG2	1:A:81:ILE:HD12	0.82	2.05	9	7
1:A:72:VAL:HG11	1:A:77:ALA:HB3	0.81	1.50	6	8
1:A:35:ALA:HB3	1:A:65:HIS:O	0.81	1.75	14	7
1:A:130:VAL:HG21	1:A:166:TYR:CE2	0.81	2.11	13	3
1:A:130:VAL:HG11	1:A:166:TYR:CE2	0.80	2.11	10	1
1:A:70:ILE:HG21	1:A:81:ILE:HG21	0.80	1.51	3	2
1:A:40:VAL:HG11	1:A:43:ILE:CD1	0.80	2.06	8	9
1:A:129:ARG:O	1:A:133:VAL:HG23	0.80	1.77	14	9
1:A:180:GLU:O	1:A:184:VAL:HG12	0.80	1.76	4	3
1:A:30:LEU:CD2	1:A:118:LEU:HD23	0.79	2.07	10	5
1:A:106:PRO:O	1:A:108:THR:HG23	0.79	1.77	12	2
1:A:160:GLN:O	1:A:163:THR:HG22	0.79	1.77	5	6
1:A:23:TYR:CE1	1:A:122:ILE:HG22	0.79	2.12	12	4
1:A:89:LEU:HB3	1:A:91:LEU:HD12	0.79	1.53	6	9
1:A:30:LEU:HD21	1:A:118:LEU:CD2	0.79	2.07	3	8
1:A:33:SER:O	1:A:104:LEU:HD23	0.79	1.78	5	3
1:A:45:VAL:HG23	1:A:80:ALA:CB	0.79	2.07	7	11
1:A:16:MET:O	1:A:20:VAL:HG22	0.79	1.78	11	8
1:A:89:LEU:HD22	1:A:102:VAL:HG11	0.78	1.53	12	5
1:A:124:GLU:O	1:A:128:VAL:HG23	0.78	1.77	6	13
1:A:8:ILE:CG2	1:A:159:LEU:HD21	0.78	2.08	3	2
1:A:123:THR:HG23	1:A:170:ILE:HD11	0.78	1.53	10	2
1:A:72:VAL:HG22	1:A:81:ILE:CD1	0.78	2.08	4	6
1:A:5:LEU:HD11	1:A:9:PHE:CZ	0.78	2.14	8	2
1:A:40:VAL:HG13	1:A:89:LEU:HD12	0.77	1.53	9	3
1:A:126:ALA:HB3	1:A:170:ILE:HD12	0.77	1.56	8	4
1:A:43:ILE:CG2	1:A:81:ILE:HG23	0.77	2.10	3	4
1:A:112:ARG:O	1:A:116:VAL:HG22	0.77	1.80	14	3
1:A:20:VAL:HG23	1:A:166:TYR:CE2	0.77	2.15	14	2
1:A:36:SER:O	1:A:39:LEU:HD21	0.76	1.81	4	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:VAL:HG22	1:A:89:LEU:CD1	0.76	2.10	10	4
1:A:67:GLN:OE1	1:A:69:VAL:HG22	0.76	1.80	1	2
1:A:38:ALA:O	1:A:40:VAL:N	0.76	2.18	11	8
1:A:147:ILE:HD12	1:A:151:GLU:HB3	0.75	1.58	12	1
1:A:20:VAL:HG23	1:A:166:TYR:CZ	0.75	2.17	15	2
1:A:33:SER:CB	1:A:107:LEU:HD21	0.75	2.12	14	2
1:A:72:VAL:CG2	1:A:81:ILE:HD11	0.75	2.12	8	5
1:A:35:ALA:HB1	1:A:68:ILE:CG1	0.75	2.12	7	10
1:A:40:VAL:HB	1:A:43:ILE:HD11	0.75	1.56	14	3
1:A:45:VAL:HG12	1:A:52:VAL:O	0.74	1.81	11	10
1:A:20:VAL:HG13	1:A:166:TYR:CE2	0.74	2.16	12	3
1:A:145:GLU:HB3	1:A:147:ILE:HG23	0.74	1.57	12	1
1:A:162:LEU:HD13	1:A:162:LEU:C	0.74	2.03	5	1
1:A:148:SER:O	1:A:152:LYS:HB3	0.74	1.82	10	4
1:A:130:VAL:HG22	1:A:166:TYR:CD2	0.74	2.16	1	1
1:A:23:TYR:CZ	1:A:27:ILE:HD11	0.74	2.17	12	5
1:A:144:LEU:HD23	1:A:144:LEU:C	0.74	2.01	12	1
1:A:173:LEU:HD23	1:A:174:MET:N	0.74	1.98	6	5
1:A:72:VAL:HG21	1:A:81:ILE:HD11	0.73	1.60	11	4
1:A:60:ILE:CG2	1:A:70:ILE:HG23	0.73	2.10	5	11
1:A:30:LEU:HD13	1:A:119:LEU:HD12	0.73	1.60	5	4
1:A:34:ARG:C	1:A:104:LEU:HD22	0.73	2.03	15	1
1:A:104:LEU:N	1:A:104:LEU:HD13	0.72	1.99	6	2
1:A:72:VAL:HG21	1:A:81:ILE:HD12	0.72	1.59	7	2
1:A:28:ALA:O	1:A:39:LEU:O	0.72	2.08	15	1
1:A:116:VAL:CG2	1:A:181:ILE:HG21	0.72	2.15	15	3
1:A:33:SER:HB2	1:A:107:LEU:HD21	0.72	1.60	14	1
1:A:30:LEU:O	1:A:30:LEU:HD13	0.72	1.84	15	1
1:A:23:TYR:OH	1:A:173:LEU:HD21	0.72	1.85	2	6
1:A:8:ILE:CG2	1:A:141:ILE:HD11	0.71	2.15	12	1
1:A:16:MET:SD	1:A:162:LEU:HD23	0.71	2.24	8	2
1:A:45:VAL:CG2	1:A:80:ALA:HB3	0.71	2.14	1	11
1:A:116:VAL:HG23	1:A:181:ILE:CG2	0.71	2.15	15	2
1:A:93:PRO:HB3	1:A:102:VAL:HG22	0.71	1.62	10	7
1:A:31:ARG:HB2	1:A:39:LEU:HB3	0.70	1.61	15	1
1:A:35:ALA:HB1	1:A:68:ILE:HG12	0.70	1.63	11	9
1:A:43:ILE:HG21	1:A:81:ILE:CG2	0.70	2.17	4	1
1:A:145:GLU:HB2	1:A:147:ILE:HG23	0.70	1.63	14	1
1:A:113:ARG:HD3	1:A:114:GLU:N	0.70	2.00	6	3
1:A:43:ILE:CG2	1:A:54:ILE:HD11	0.70	2.16	7	3
1:A:155:ALA:O	1:A:159:LEU:HD23	0.70	1.87	14	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:VAL:HG12	1:A:64:GLU:O	0.70	1.87	12	1
1:A:147:ILE:O	1:A:147:ILE:HD12	0.69	1.86	11	1
1:A:119:LEU:HD23	1:A:174:MET:CE	0.69	2.17	10	3
1:A:35:ALA:HB1	1:A:68:ILE:HG13	0.69	1.64	7	2
1:A:37:THR:HG23	1:A:62:VAL:CG2	0.69	2.16	15	1
1:A:130:VAL:HG21	1:A:166:TYR:CD2	0.69	2.22	5	2
1:A:72:VAL:CG1	1:A:77:ALA:HB3	0.69	2.17	1	7
1:A:23:TYR:CZ	1:A:173:LEU:HD21	0.69	2.22	7	5
1:A:126:ALA:CB	1:A:170:ILE:HD12	0.69	2.16	9	7
1:A:144:LEU:HD22	1:A:144:LEU:C	0.69	2.08	5	1
1:A:70:ILE:CD1	1:A:85:ILE:HD13	0.69	2.17	11	2
1:A:107:LEU:HD23	1:A:111:ARG:HB3	0.69	1.65	14	2
1:A:119:LEU:HD23	1:A:174:MET:HE3	0.68	1.65	10	1
1:A:72:VAL:HG21	1:A:78:VAL:HA	0.68	1.65	9	3
1:A:116:VAL:HG12	1:A:181:ILE:HG21	0.68	1.63	1	1
1:A:72:VAL:HG11	1:A:77:ALA:CB	0.68	2.18	6	5
1:A:89:LEU:HD23	1:A:91:LEU:CD1	0.68	2.17	12	8
1:A:33:SER:O	1:A:104:LEU:HD22	0.68	1.89	9	2
1:A:30:LEU:HD11	1:A:122:ILE:HG13	0.68	1.64	10	3
1:A:5:LEU:HD11	1:A:158:ARG:HG3	0.68	1.66	5	1
1:A:89:LEU:HD23	1:A:91:LEU:HD12	0.67	1.63	12	2
1:A:30:LEU:O	1:A:30:LEU:HD22	0.67	1.90	15	1
1:A:119:LEU:HD23	1:A:174:MET:HE2	0.67	1.66	4	1
1:A:71:GLN:HG2	1:A:99:VAL:HG12	0.67	1.66	1	3
1:A:152:LYS:O	1:A:156:LEU:HD13	0.67	1.89	8	3
1:A:139:GLU:O	1:A:142:GLU:HG2	0.67	1.87	14	1
1:A:23:TYR:CE2	1:A:173:LEU:HD21	0.67	2.24	7	7
1:A:141:ILE:HG21	1:A:152:LYS:HA	0.67	1.66	15	3
1:A:4:GLU:CB	1:A:144:LEU:HD11	0.67	2.19	7	1
1:A:112:ARG:NH1	1:A:184:VAL:HG12	0.67	2.04	11	1
1:A:27:ILE:HD11	1:A:122:ILE:HG21	0.67	1.67	14	5
1:A:57:LEU:HD12	1:A:77:ALA:HB2	0.66	1.65	1	2
1:A:130:VAL:HG11	1:A:166:TYR:CD2	0.66	2.25	10	1
1:A:30:LEU:HD13	1:A:119:LEU:CD1	0.66	2.20	12	5
1:A:152:LYS:HD3	1:A:156:LEU:HD13	0.66	1.68	14	1
1:A:31:ARG:NH2	1:A:91:LEU:HD11	0.66	2.05	10	1
1:A:40:VAL:HG11	1:A:43:ILE:HD11	0.65	1.68	13	9
1:A:107:LEU:HD22	1:A:111:ARG:HB3	0.65	1.68	7	2
1:A:4:GLU:OE1	1:A:144:LEU:HD22	0.65	1.91	2	1
1:A:126:ALA:O	1:A:130:VAL:HG23	0.65	1.92	10	3
1:A:88:GLU:CG	1:A:89:LEU:HD13	0.65	2.20	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:VAL:HA	1:A:81:ILE:HD12	0.65	1.67	2	5
1:A:13:GLU:HB3	1:A:162:LEU:HD21	0.65	1.67	13	1
1:A:104:LEU:HD13	1:A:104:LEU:N	0.65	2.07	1	1
1:A:36:SER:O	1:A:39:LEU:CD2	0.64	2.46	4	14
1:A:69:VAL:HG13	1:A:101:ARG:HG2	0.64	1.69	10	1
1:A:32:THR:HG23	1:A:115:LEU:HG	0.64	1.68	9	2
1:A:72:VAL:HG12	1:A:73:TRP:H	0.64	1.53	4	2
1:A:110:GLU:O	1:A:113:ARG:HD2	0.64	1.92	7	3
1:A:23:TYR:CD1	1:A:122:ILE:HG22	0.64	2.28	4	15
1:A:113:ARG:C	1:A:113:ARG:HD3	0.64	2.14	5	3
1:A:35:ALA:HB2	1:A:66:ASN:C	0.63	2.14	11	2
1:A:40:VAL:CB	1:A:43:ILE:HD11	0.63	2.23	14	8
1:A:31:ARG:HB2	1:A:39:LEU:HD22	0.63	1.69	15	1
1:A:36:SER:O	1:A:68:ILE:HD13	0.63	1.94	11	3
1:A:4:GLU:CG	1:A:144:LEU:HD13	0.63	2.24	8	1
1:A:4:GLU:HG2	1:A:144:LEU:HD13	0.62	1.70	8	1
1:A:130:VAL:HG21	1:A:166:TYR:CD1	0.62	2.29	6	6
1:A:5:LEU:HD21	1:A:9:PHE:CZ	0.62	2.30	10	2
1:A:4:GLU:HG2	1:A:144:LEU:HD11	0.62	1.72	7	2
1:A:78:VAL:HG12	1:A:82:GLU:OE2	0.62	1.93	5	1
1:A:39:LEU:HD23	1:A:39:LEU:H	0.62	1.55	15	3
1:A:162:LEU:O	1:A:162:LEU:HD22	0.61	1.95	5	1
1:A:170:ILE:HA	1:A:173:LEU:HD23	0.61	1.72	7	2
1:A:31:ARG:C	1:A:31:ARG:HD3	0.61	2.14	15	1
1:A:32:THR:HG21	1:A:181:ILE:HA	0.61	1.71	15	1
1:A:137:ALA:CB	1:A:159:LEU:HD11	0.61	2.26	15	1
1:A:126:ALA:HB1	1:A:166:TYR:OH	0.61	1.96	12	1
1:A:33:SER:HB2	1:A:107:LEU:HD12	0.61	1.71	8	1
1:A:122:ILE:HD13	1:A:122:ILE:N	0.61	2.11	13	2
1:A:122:ILE:N	1:A:122:ILE:HD13	0.60	2.10	15	2
1:A:42:GLU:O	1:A:44:LYS:N	0.60	2.34	6	7
1:A:54:ILE:HD11	1:A:81:ILE:HG12	0.60	1.71	12	2
1:A:37:THR:HG22	1:A:68:ILE:HG23	0.60	1.73	15	1
1:A:89:LEU:HB2	1:A:91:LEU:HD12	0.60	1.71	8	1
1:A:159:LEU:HD13	1:A:162:LEU:HD21	0.60	1.74	4	3
1:A:72:VAL:HG11	1:A:78:VAL:CG2	0.60	2.27	12	2
1:A:69:VAL:HG22	1:A:101:ARG:HG3	0.60	1.73	9	1
1:A:88:GLU:HG3	1:A:89:LEU:HD13	0.60	1.74	8	1
1:A:125:GLU:O	1:A:128:VAL:HG23	0.60	1.97	4	1
1:A:140:MET:O	1:A:144:LEU:HB2	0.60	1.96	14	1
1:A:40:VAL:O	1:A:41:GLU:CB	0.59	2.50	3	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:70:ILE:HD11	1:A:85:ILE:HD13	0.59	1.73	11	1
1:A:57:LEU:HD12	1:A:77:ALA:CB	0.59	2.27	1	2
1:A:45:VAL:HG21	1:A:77:ALA:CB	0.59	2.27	13	1
1:A:113:ARG:CD	1:A:114:GLU:N	0.59	2.66	5	2
1:A:32:THR:HG23	1:A:115:LEU:CG	0.59	2.27	9	2
1:A:37:THR:HG21	1:A:60:ILE:HG13	0.59	1.75	3	1
1:A:40:VAL:HG13	1:A:89:LEU:CD1	0.59	2.28	11	3
1:A:158:ARG:O	1:A:162:LEU:HG	0.59	1.97	6	4
1:A:147:ILE:HD13	1:A:147:ILE:N	0.58	2.12	5	8
1:A:107:LEU:HD13	1:A:184:VAL:HG11	0.58	1.73	13	1
1:A:104:LEU:H	1:A:104:LEU:HD22	0.58	1.59	1	2
1:A:37:THR:HG23	1:A:62:VAL:HG23	0.58	1.75	15	1
1:A:112:ARG:HH11	1:A:184:VAL:HG12	0.58	1.59	11	1
1:A:69:VAL:HG13	1:A:100:ILE:O	0.58	1.97	12	3
1:A:32:THR:HG23	1:A:115:LEU:HD21	0.58	1.76	3	1
1:A:40:VAL:HG11	1:A:43:ILE:CG1	0.58	2.28	9	2
1:A:118:LEU:O	1:A:122:ILE:HG12	0.58	1.99	5	10
1:A:166:TYR:O	1:A:170:ILE:HG22	0.58	1.97	5	7
1:A:140:MET:O	1:A:144:LEU:CB	0.58	2.52	12	1
1:A:29:GLY:HA2	1:A:39:LEU:O	0.58	1.98	5	2
1:A:5:LEU:HD13	1:A:155:ALA:HA	0.58	1.74	5	3
1:A:33:SER:OG	1:A:107:LEU:HD23	0.58	1.99	10	1
1:A:69:VAL:HG22	1:A:101:ARG:CG	0.58	2.29	9	1
1:A:147:ILE:N	1:A:147:ILE:HD13	0.57	2.14	3	4
1:A:8:ILE:HG21	1:A:159:LEU:HD21	0.57	1.75	14	2
1:A:31:ARG:HD3	1:A:91:LEU:HD11	0.57	1.76	4	1
1:A:4:GLU:CG	1:A:144:LEU:HD11	0.57	2.29	7	1
1:A:39:LEU:HD11	1:A:68:ILE:CD1	0.57	2.29	2	2
1:A:68:ILE:HD12	1:A:89:LEU:HD21	0.57	1.75	15	3
1:A:35:ALA:HA	1:A:68:ILE:HD11	0.57	1.75	14	9
1:A:85:ILE:HG13	1:A:89:LEU:HD11	0.57	1.75	8	1
1:A:177:LYS:HG2	1:A:181:ILE:HD11	0.57	1.74	4	1
1:A:141:ILE:HG22	1:A:148:SER:HB2	0.57	1.75	9	1
1:A:178:GLU:HA	1:A:181:ILE:HD12	0.57	1.74	10	2
1:A:28:ALA:O	1:A:39:LEU:HA	0.57	2.00	7	2
1:A:112:ARG:O	1:A:116:VAL:HG13	0.57	1.99	1	1
1:A:31:ARG:O	1:A:115:LEU:HD11	0.56	2.00	14	3
1:A:33:SER:C	1:A:104:LEU:HD22	0.56	2.20	14	1
1:A:33:SER:HB3	1:A:107:LEU:HD12	0.56	1.77	7	1
1:A:31:ARG:CG	1:A:39:LEU:HD22	0.56	2.29	15	1
1:A:119:LEU:HD21	1:A:177:LYS:HG2	0.56	1.78	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:LEU:C	1:A:30:LEU:HD22	0.56	2.21	15	1
1:A:116:VAL:CG1	1:A:181:ILE:HG21	0.56	2.29	1	1
1:A:112:ARG:NH2	1:A:184:VAL:HG13	0.56	2.16	10	1
1:A:72:VAL:HG11	1:A:78:VAL:HG22	0.56	1.76	12	1
1:A:70:ILE:HG13	1:A:85:ILE:HD13	0.56	1.76	14	2
1:A:35:ALA:HA	1:A:104:LEU:HD13	0.56	1.78	15	1
1:A:110:GLU:O	1:A:113:ARG:CD	0.56	2.54	8	1
1:A:158:ARG:O	1:A:162:LEU:HD13	0.56	2.01	2	4
1:A:30:LEU:CD2	1:A:118:LEU:HD22	0.56	2.31	13	1
1:A:5:LEU:HD21	1:A:9:PHE:CE2	0.56	2.36	10	1
1:A:23:TYR:HD1	1:A:122:ILE:HG22	0.55	1.61	14	5
1:A:54:ILE:HG22	1:A:54:ILE:O	0.55	2.02	2	3
1:A:78:VAL:HG12	1:A:95:VAL:HG11	0.55	1.78	6	1
1:A:8:ILE:HG12	1:A:141:ILE:HD11	0.55	1.78	13	1
1:A:119:LEU:HD23	1:A:177:LYS:HD3	0.55	1.77	12	1
1:A:27:ILE:CD1	1:A:122:ILE:HG21	0.55	2.31	14	2
1:A:155:ALA:O	1:A:159:LEU:HG	0.55	2.00	13	4
1:A:70:ILE:HD11	1:A:85:ILE:CD1	0.55	2.31	11	1
1:A:69:VAL:HG13	1:A:101:ARG:HD3	0.55	1.77	5	1
1:A:71:GLN:HG3	1:A:99:VAL:HG13	0.55	1.75	3	1
1:A:60:ILE:HG22	1:A:70:ILE:CG2	0.55	2.11	15	2
1:A:40:VAL:CG1	1:A:43:ILE:HD13	0.55	2.19	8	3
1:A:60:ILE:HG22	1:A:70:ILE:CD1	0.55	2.32	14	5
1:A:124:GLU:O	1:A:128:VAL:HG22	0.55	2.01	4	1
1:A:35:ALA:CB	1:A:67:GLN:N	0.55	2.70	9	10
1:A:33:SER:C	1:A:104:LEU:HD23	0.55	2.22	10	3
1:A:152:LYS:O	1:A:156:LEU:HD22	0.55	2.02	2	2
1:A:33:SER:CB	1:A:107:LEU:HD12	0.55	2.32	7	2
1:A:29:GLY:CA	1:A:39:LEU:HA	0.55	2.32	4	4
1:A:107:LEU:HD22	1:A:111:ARG:CB	0.55	2.32	8	2
1:A:26:GLU:O	1:A:30:LEU:N	0.54	2.40	11	3
1:A:103:THR:C	1:A:104:LEU:HD13	0.54	2.23	6	1
1:A:86:ARG:O	1:A:90:ASN:HA	0.54	2.02	8	3
1:A:72:VAL:HB	1:A:78:VAL:HG22	0.54	1.77	7	3
1:A:107:LEU:N	1:A:107:LEU:CD2	0.54	2.69	1	1
1:A:138:LYS:HD3	1:A:156:LEU:HD11	0.54	1.79	15	2
1:A:15:ASP:OD2	1:A:133:VAL:HG22	0.54	2.03	7	1
1:A:4:GLU:HB3	1:A:144:LEU:HD11	0.54	1.78	7	1
1:A:72:VAL:HG12	1:A:74:ASP:H	0.54	1.62	11	3
1:A:162:LEU:HD12	1:A:163:THR:H	0.54	1.63	3	2
1:A:85:ILE:HG13	1:A:89:LEU:HD13	0.54	1.79	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:THR:HG22	1:A:107:LEU:CD2	0.54	2.33	15	1
1:A:29:GLY:HA2	1:A:39:LEU:HA	0.54	1.80	13	3
1:A:5:LEU:HD11	1:A:158:ARG:HG2	0.54	1.80	13	1
1:A:16:MET:SD	1:A:133:VAL:HG21	0.54	2.43	1	1
1:A:173:LEU:HD12	1:A:174:MET:N	0.54	2.17	8	1
1:A:119:LEU:HA	1:A:122:ILE:HG12	0.54	1.80	2	9
1:A:126:ALA:HB1	1:A:166:TYR:HE1	0.54	1.63	14	1
1:A:32:THR:HG22	1:A:107:LEU:HD21	0.54	1.78	15	1
1:A:39:LEU:HD12	1:A:89:LEU:HD11	0.54	1.78	4	2
1:A:95:VAL:HG13	1:A:99:VAL:O	0.54	2.02	7	1
1:A:27:ILE:HD11	1:A:122:ILE:CG2	0.53	2.33	4	2
1:A:54:ILE:HG21	1:A:60:ILE:HG23	0.53	1.79	3	1
1:A:59:THR:O	1:A:59:THR:HG23	0.53	2.03	7	1
1:A:32:THR:HG22	1:A:34:ARG:H	0.53	1.63	6	1
1:A:8:ILE:CG1	1:A:141:ILE:HD11	0.53	2.33	13	1
1:A:152:LYS:HG3	1:A:156:LEU:HD22	0.53	1.80	15	1
1:A:23:TYR:HE1	1:A:122:ILE:HG22	0.53	1.58	12	1
1:A:145:GLU:CB	1:A:147:ILE:HG23	0.53	2.31	12	2
1:A:139:GLU:O	1:A:142:GLU:HG3	0.53	2.03	12	1
1:A:166:TYR:CE1	1:A:167:ILE:HD13	0.53	2.38	4	1
1:A:45:VAL:HG11	1:A:54:ILE:HD13	0.53	1.81	8	2
1:A:141:ILE:N	1:A:141:ILE:HD13	0.53	2.17	14	10
1:A:43:ILE:HG22	1:A:54:ILE:HD11	0.53	1.81	9	2
1:A:141:ILE:HD13	1:A:141:ILE:N	0.53	2.19	3	4
1:A:114:GLU:O	1:A:118:LEU:HD12	0.53	2.04	13	1
1:A:155:ALA:O	1:A:159:LEU:CD2	0.53	2.56	9	9
1:A:104:LEU:N	1:A:104:LEU:HD12	0.53	2.18	11	2
1:A:45:VAL:HG21	1:A:81:ILE:CG1	0.53	2.34	14	1
1:A:145:GLU:O	1:A:147:ILE:HD13	0.52	2.04	7	10
1:A:8:ILE:HG22	1:A:159:LEU:HD21	0.52	1.80	14	5
1:A:27:ILE:HG21	1:A:173:LEU:HD13	0.52	1.80	14	1
1:A:107:LEU:HD22	1:A:111:ARG:HG2	0.52	1.81	8	1
1:A:35:ALA:HB2	1:A:104:LEU:HD21	0.52	1.82	12	2
1:A:159:LEU:N	1:A:159:LEU:HD23	0.52	2.20	12	1
1:A:20:VAL:HG12	1:A:166:TYR:CE1	0.52	2.39	1	1
1:A:54:ILE:O	1:A:57:LEU:N	0.52	2.42	7	1
1:A:121:LYS:CG	1:A:122:ILE:HD13	0.52	2.35	4	1
1:A:113:ARG:C	1:A:113:ARG:CD	0.52	2.78	5	1
1:A:38:ALA:O	1:A:39:LEU:C	0.52	2.47	9	12
1:A:19:ALA:O	1:A:23:TYR:HB3	0.52	2.04	11	3
1:A:115:LEU:HB3	1:A:181:ILE:HD13	0.52	1.79	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:ILE:HG23	1:A:86:ARG:N	0.52	2.20	8	11
1:A:151:GLU:O	1:A:155:ALA:CB	0.52	2.58	2	12
1:A:5:LEU:HD22	1:A:154:ARG:HB3	0.52	1.81	11	1
1:A:43:ILE:N	1:A:43:ILE:HD12	0.52	2.19	9	1
1:A:40:VAL:HB	1:A:43:ILE:HD13	0.52	1.81	4	1
1:A:60:ILE:HG22	1:A:70:ILE:HD12	0.52	1.82	5	1
1:A:104:LEU:HD12	1:A:104:LEU:N	0.51	2.21	2	1
1:A:140:MET:O	1:A:144:LEU:HB3	0.51	2.05	12	1
1:A:27:ILE:HG21	1:A:173:LEU:CD1	0.51	2.35	14	1
1:A:8:ILE:HD12	1:A:140:MET:HB3	0.51	1.82	4	2
1:A:31:ARG:NH1	1:A:107:LEU:HD11	0.51	2.21	8	1
1:A:107:LEU:HD22	1:A:111:ARG:CG	0.51	2.34	8	1
1:A:30:LEU:O	1:A:32:THR:N	0.51	2.44	8	4
1:A:32:THR:HA	1:A:115:LEU:HD11	0.51	1.82	13	2
1:A:170:ILE:HG23	1:A:171:ASN:N	0.51	2.21	7	12
1:A:146:GLY:O	1:A:147:ILE:HG23	0.51	2.06	11	1
1:A:128:VAL:HG12	1:A:132:ASN:ND2	0.51	2.21	5	2
1:A:126:ALA:HB1	1:A:166:TYR:CE1	0.51	2.40	14	1
1:A:43:ILE:HD12	1:A:85:ILE:HD12	0.51	1.80	11	1
1:A:43:ILE:O	1:A:44:LYS:C	0.51	2.49	4	1
1:A:147:ILE:CD1	1:A:147:ILE:O	0.51	2.58	11	1
1:A:107:LEU:CD1	1:A:184:VAL:HG11	0.51	2.36	13	1
1:A:35:ALA:HB1	1:A:67:GLN:C	0.51	2.26	9	5
1:A:68:ILE:O	1:A:102:VAL:HG23	0.51	2.06	14	1
1:A:40:VAL:HB	1:A:43:ILE:CD1	0.51	2.36	4	2
1:A:4:GLU:O	1:A:8:ILE:HD12	0.51	2.07	11	2
1:A:107:LEU:H	1:A:107:LEU:CD2	0.51	2.19	1	1
1:A:86:ARG:O	1:A:90:ASN:N	0.50	2.43	14	5
1:A:54:ILE:HD12	1:A:81:ILE:HD13	0.50	1.82	7	2
1:A:31:ARG:HB3	1:A:39:LEU:HD22	0.50	1.77	15	1
1:A:4:GLU:CB	1:A:144:LEU:HD13	0.50	2.37	8	2
1:A:126:ALA:HB3	1:A:170:ILE:CD1	0.50	2.37	6	3
1:A:60:ILE:HG22	1:A:70:ILE:HD13	0.50	1.83	14	3
1:A:40:VAL:HG11	1:A:43:ILE:HG13	0.50	1.81	9	2
1:A:89:LEU:HD13	1:A:89:LEU:N	0.50	2.21	8	1
1:A:23:TYR:CD1	1:A:27:ILE:HD11	0.50	2.39	11	1
1:A:184:VAL:HG22	1:A:184:VAL:O	0.50	2.06	13	1
1:A:60:ILE:HG22	1:A:70:ILE:HG13	0.50	1.83	3	1
1:A:116:VAL:HG11	1:A:182:MET:CE	0.50	2.36	1	1
1:A:26:GLU:O	1:A:30:LEU:CD1	0.50	2.52	8	4
1:A:81:ILE:O	1:A:85:ILE:HG22	0.50	2.07	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:THR:HA	1:A:115:LEU:HD21	0.50	1.84	2	3
1:A:70:ILE:HD13	1:A:85:ILE:HD13	0.50	1.84	3	2
1:A:144:LEU:C	1:A:146:GLY:H	0.50	2.10	12	4
1:A:20:VAL:CG1	1:A:166:TYR:CE2	0.50	2.94	12	1
1:A:59:THR:HG23	1:A:59:THR:O	0.49	2.07	8	2
1:A:35:ALA:O	1:A:62:VAL:HG21	0.49	2.06	2	2
1:A:31:ARG:CD	1:A:91:LEU:HD11	0.49	2.37	4	1
1:A:78:VAL:CG1	1:A:95:VAL:HG11	0.49	2.37	6	1
1:A:152:LYS:CD	1:A:156:LEU:HD13	0.49	2.35	14	1
1:A:114:GLU:HG2	1:A:118:LEU:HD13	0.49	1.83	8	1
1:A:181:ILE:O	1:A:184:VAL:HG22	0.49	2.07	5	1
1:A:30:LEU:HD21	1:A:118:LEU:HD22	0.49	1.84	3	2
1:A:147:ILE:HD12	1:A:151:GLU:CB	0.49	2.35	12	1
1:A:27:ILE:HG23	1:A:122:ILE:HG21	0.49	1.83	3	1
1:A:173:LEU:C	1:A:173:LEU:HD12	0.49	2.28	8	1
1:A:43:ILE:HG21	1:A:54:ILE:HG13	0.49	1.84	14	1
1:A:5:LEU:HD12	1:A:155:ALA:HB2	0.49	1.84	10	1
1:A:113:ARG:HD2	1:A:114:GLU:N	0.49	2.23	5	2
1:A:113:ARG:O	1:A:117:ARG:HB2	0.49	2.08	13	1
1:A:144:LEU:HD23	1:A:145:GLU:HB2	0.49	1.84	12	1
1:A:113:ARG:CD	1:A:113:ARG:C	0.49	2.80	7	1
1:A:115:LEU:N	1:A:115:LEU:HD22	0.49	2.23	15	1
1:A:95:VAL:HG22	1:A:100:ILE:HG23	0.49	1.84	2	3
1:A:181:ILE:O	1:A:184:VAL:HG13	0.49	2.07	6	1
1:A:72:VAL:HG11	1:A:77:ALA:C	0.49	2.28	13	2
1:A:167:ILE:O	1:A:170:ILE:HG22	0.49	2.08	15	3
1:A:16:MET:HE2	1:A:162:LEU:HD23	0.49	1.84	9	1
1:A:147:ILE:CD1	1:A:147:ILE:N	0.48	2.76	5	6
1:A:17:LYS:HG3	1:A:18:LYS:N	0.48	2.23	12	1
1:A:126:ALA:HB1	1:A:166:TYR:HE2	0.48	1.68	7	1
1:A:45:VAL:HG21	1:A:81:ILE:HG13	0.48	1.84	14	4
1:A:89:LEU:O	1:A:91:LEU:HD12	0.48	2.08	13	3
1:A:60:ILE:H	1:A:60:ILE:HD13	0.48	1.69	15	2
1:A:106:PRO:O	1:A:108:THR:N	0.48	2.46	12	1
1:A:144:LEU:CD2	1:A:144:LEU:C	0.48	2.77	12	2
1:A:69:VAL:HG13	1:A:101:ARG:HG3	0.48	1.85	9	1
1:A:162:LEU:CD1	1:A:162:LEU:C	0.48	2.78	5	1
1:A:33:SER:CB	1:A:107:LEU:HD23	0.48	2.39	6	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:70:ILE:HD12	0.48	2.39	5	2
1:A:137:ALA:HB1	1:A:159:LEU:HD21	0.48	1.84	15	1
1:A:78:VAL:N	1:A:79:PRO:CD	0.48	2.77	13	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:TYR:CD2	1:A:57:LEU:HD21	0.48	2.44	12	1
1:A:31:ARG:HH21	1:A:91:LEU:HD11	0.48	1.67	10	1
1:A:47:TYR:CD2	1:A:57:LEU:HD11	0.48	2.43	1	1
1:A:72:VAL:HG23	1:A:81:ILE:HD11	0.48	1.84	8	1
1:A:23:TYR:OH	1:A:173:LEU:HD11	0.48	2.09	8	1
1:A:31:ARG:N	1:A:31:ARG:CD	0.48	2.77	5	4
1:A:144:LEU:HD23	1:A:144:LEU:O	0.48	2.09	12	1
1:A:72:VAL:HG13	1:A:81:ILE:CD1	0.48	2.39	12	1
1:A:130:VAL:CG2	1:A:166:TYR:CE1	0.48	2.96	9	5
1:A:166:TYR:CE2	1:A:167:ILE:HD13	0.48	2.43	13	1
1:A:8:ILE:HD13	1:A:11:GLU:OE2	0.48	2.09	3	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:60:ILE:H	0.48	1.69	1	1
1:A:174:MET:HA	1:A:177:LYS:CG	0.48	2.39	12	1
1:A:173:LEU:HD12	1:A:173:LEU:C	0.48	2.29	14	1
1:A:148:SER:O	1:A:152:LYS:HB2	0.47	2.09	8	6
1:A:54:ILE:HD13	1:A:54:ILE:N	0.47	2.24	11	1
1:A:34:ARG:HB2	1:A:107:LEU:HD11	0.47	1.86	13	1
1:A:56:GLN:O	1:A:57:LEU:HD22	0.47	2.09	10	2
1:A:37:THR:CG2	1:A:62:VAL:HG23	0.47	2.38	15	1
1:A:113:ARG:CD	1:A:113:ARG:N	0.47	2.77	8	1
1:A:130:VAL:CG2	1:A:166:TYR:CD1	0.47	2.97	6	4
1:A:116:VAL:O	1:A:120:HIS:CG	0.47	2.67	13	7
1:A:23:TYR:CE2	1:A:173:LEU:HD23	0.47	2.44	1	1
1:A:45:VAL:HG11	1:A:54:ILE:CD1	0.47	2.39	8	2
1:A:151:GLU:O	1:A:155:ALA:HB3	0.47	2.08	7	2
1:A:43:ILE:HG22	1:A:81:ILE:HG23	0.47	1.81	3	1
1:A:47:TYR:HD2	1:A:57:LEU:HD11	0.47	1.69	1	1
1:A:167:ILE:HG22	1:A:171:ASN:ND2	0.47	2.24	8	1
1:A:9:PHE:CD1	1:A:10:LYS:N	0.47	2.83	7	4
1:A:107:LEU:HD13	1:A:184:VAL:CG1	0.47	2.39	13	1
1:A:43:ILE:HD12	1:A:43:ILE:N	0.47	2.24	10	1
1:A:27:ILE:HD13	1:A:173:LEU:HD11	0.47	1.86	15	1
1:A:16:MET:HG2	1:A:133:VAL:HG21	0.47	1.85	11	1
1:A:38:ALA:C	1:A:40:VAL:N	0.47	2.68	11	2
1:A:8:ILE:HD12	1:A:141:ILE:CD1	0.47	2.39	5	3
1:A:5:LEU:CG	1:A:9:PHE:CZ	0.47	2.97	10	1
1:A:104:LEU:N	1:A:104:LEU:CD1	0.47	2.78	1	2
1:A:63:PRO:HD3	1:A:69:VAL:HG23	0.47	1.86	15	2
1:A:30:LEU:HD13	1:A:119:LEU:HD11	0.47	1.86	12	1
1:A:123:THR:HG21	1:A:174:MET:CE	0.47	2.40	7	1
1:A:82:GLU:OE1	1:A:95:VAL:HG21	0.47	2.10	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:166:TYR:CE2	1:A:167:ILE:CD1	0.47	2.97	10	1
1:A:40:VAL:HG21	1:A:43:ILE:HD11	0.47	1.86	3	1
1:A:57:LEU:CD1	1:A:77:ALA:HB2	0.47	2.39	1	1
1:A:93:PRO:CB	1:A:102:VAL:HG22	0.47	2.40	9	3
1:A:15:ASP:OD1	1:A:133:VAL:HG22	0.47	2.09	12	1
1:A:158:ARG:O	1:A:162:LEU:CG	0.47	2.63	6	1
1:A:147:ILE:N	1:A:147:ILE:CD1	0.47	2.78	3	6
1:A:114:GLU:O	1:A:118:LEU:HB2	0.47	2.11	8	2
1:A:4:GLU:HB3	1:A:144:LEU:HD13	0.47	1.87	8	1
1:A:121:LYS:HG2	1:A:122:ILE:HD13	0.46	1.87	4	1
1:A:116:VAL:HG13	1:A:181:ILE:CG2	0.46	2.40	4	1
1:A:40:VAL:CG1	1:A:43:ILE:CD1	0.46	2.94	15	7
1:A:43:ILE:HB	1:A:54:ILE:CG1	0.46	2.40	8	3
1:A:29:GLY:O	1:A:39:LEU:HB3	0.46	2.11	4	1
1:A:35:ALA:HB2	1:A:67:GLN:N	0.46	2.26	11	1
1:A:72:VAL:CB	1:A:78:VAL:HG22	0.46	2.40	14	2
1:A:30:LEU:O	1:A:30:LEU:CD1	0.46	2.61	15	1
1:A:54:ILE:O	1:A:54:ILE:HG22	0.46	2.09	13	1
1:A:36:SER:CB	1:A:39:LEU:CD2	0.46	2.93	9	3
1:A:32:THR:HA	1:A:115:LEU:HG	0.46	1.87	15	2
1:A:171:ASN:OD1	1:A:172:LYS:N	0.46	2.49	9	3
1:A:9:PHE:CE2	1:A:158:ARG:CD	0.46	2.98	9	1
1:A:39:LEU:HG	1:A:40:VAL:N	0.46	2.26	10	2
1:A:20:VAL:CG1	1:A:166:TYR:CD1	0.46	2.98	1	1
1:A:141:ILE:HG23	1:A:151:GLU:HB3	0.46	1.86	9	1
1:A:29:GLY:O	1:A:39:LEU:HA	0.46	2.11	11	1
1:A:77:ALA:O	1:A:81:ILE:HD12	0.46	2.11	1	2
1:A:72:VAL:O	1:A:73:TRP:C	0.46	2.54	7	1
1:A:88:GLU:CG	1:A:89:LEU:CD1	0.46	2.93	8	1
1:A:34:ARG:NH1	1:A:107:LEU:HD13	0.46	2.26	6	1
1:A:55:LYS:O	1:A:56:GLN:HB2	0.46	2.11	7	1
1:A:141:ILE:HG21	1:A:152:LYS:CA	0.46	2.37	15	1
1:A:177:LYS:O	1:A:181:ILE:N	0.46	2.41	8	1
1:A:62:VAL:HG11	1:A:65:HIS:HA	0.46	1.87	3	4
1:A:35:ALA:CB	1:A:68:ILE:HG12	0.46	2.39	11	1
1:A:107:LEU:HD23	1:A:111:ARG:CB	0.46	2.40	14	1
1:A:138:LYS:O	1:A:142:GLU:HB3	0.46	2.11	14	1
1:A:5:LEU:CD2	1:A:9:PHE:CZ	0.46	2.99	10	1
1:A:122:ILE:CD1	1:A:122:ILE:N	0.46	2.79	15	1
1:A:71:GLN:CG	1:A:99:VAL:HG12	0.46	2.40	1	1
1:A:109:GLU:O	1:A:113:ARG:HD2	0.46	2.11	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:LEU:O	1:A:72:VAL:HG13	0.46	2.11	2	1
1:A:144:LEU:HD12	1:A:151:GLU:OE1	0.46	2.11	2	1
1:A:104:LEU:HD22	1:A:104:LEU:H	0.46	1.70	12	1
1:A:69:VAL:HA	1:A:100:ILE:O	0.45	2.11	6	3
1:A:19:ALA:HB2	1:A:129:ARG:HG2	0.45	1.89	14	1
1:A:85:ILE:O	1:A:89:LEU:HD22	0.45	2.11	8	1
1:A:78:VAL:HB	1:A:79:PRO:HD3	0.45	1.88	14	7
1:A:23:TYR:CZ	1:A:27:ILE:CD1	0.45	2.99	6	2
1:A:146:GLY:O	1:A:147:ILE:CG2	0.45	2.65	15	12
1:A:163:THR:CG2	1:A:164:ASP:N	0.45	2.78	15	5
1:A:72:VAL:HG12	1:A:73:TRP:N	0.45	2.27	14	1
1:A:107:LEU:HA	1:A:111:ARG:CB	0.45	2.41	1	1
1:A:9:PHE:CD1	1:A:9:PHE:C	0.45	2.89	7	4
1:A:20:VAL:CG2	1:A:166:TYR:CE2	0.45	2.97	15	2
1:A:18:LYS:HG3	1:A:19:ALA:N	0.45	2.26	4	1
1:A:45:VAL:CG2	1:A:77:ALA:HB1	0.45	2.42	5	1
1:A:16:MET:SD	1:A:133:VAL:HG11	0.45	2.52	1	1
1:A:9:PHE:CZ	1:A:158:ARG:CB	0.45	2.99	8	1
1:A:179:LYS:O	1:A:183:SER:CB	0.45	2.64	13	2
1:A:72:VAL:CG1	1:A:78:VAL:HG22	0.45	2.39	12	1
1:A:52:VAL:HG12	1:A:53:PRO:HD2	0.45	1.89	7	3
1:A:139:GLU:HA	1:A:142:GLU:HG2	0.45	1.89	12	2
1:A:72:VAL:CG2	1:A:81:ILE:CD1	0.45	2.95	7	1
1:A:5:LEU:CD1	1:A:9:PHE:CZ	0.45	3.00	10	1
1:A:85:ILE:CG2	1:A:86:ARG:N	0.45	2.80	11	8
1:A:174:MET:O	1:A:177:LYS:HG3	0.45	2.12	12	1
1:A:23:TYR:HH	1:A:173:LEU:HD21	0.45	1.72	9	1
1:A:177:LYS:CG	1:A:181:ILE:HD11	0.45	2.42	4	1
1:A:72:VAL:HG12	1:A:74:ASP:O	0.45	2.11	13	1
1:A:4:GLU:O	1:A:8:ILE:HG12	0.44	2.12	14	1
1:A:20:VAL:HG13	1:A:166:TYR:CZ	0.44	2.47	8	1
1:A:112:ARG:NH1	1:A:184:VAL:HG13	0.44	2.27	8	1
1:A:152:LYS:CG	1:A:153:LYS:N	0.44	2.81	9	4
1:A:34:ARG:NH1	1:A:65:HIS:CE1	0.44	2.85	7	1
1:A:162:LEU:HD22	1:A:162:LEU:C	0.44	2.33	5	1
1:A:159:LEU:HD23	1:A:159:LEU:N	0.44	2.26	13	1
1:A:122:ILE:N	1:A:122:ILE:CD1	0.44	2.79	13	1
1:A:54:ILE:CD1	1:A:81:ILE:HD13	0.44	2.42	14	2
1:A:24:LYS:HA	1:A:27:ILE:HD12	0.44	1.88	15	1
1:A:113:ARG:O	1:A:117:ARG:HG2	0.44	2.12	15	1
1:A:27:ILE:HA	1:A:30:LEU:HD12	0.44	1.88	13	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:4:GLU:HG2	1:A:144:LEU:HD21	0.44	1.90	13	1
1:A:42:GLU:O	1:A:43:ILE:C	0.44	2.56	3	1
1:A:119:LEU:HA	1:A:122:ILE:CG1	0.44	2.42	7	1
1:A:27:ILE:HA	1:A:30:LEU:CD1	0.44	2.42	15	1
1:A:144:LEU:C	1:A:146:GLY:N	0.44	2.71	14	5
1:A:33:SER:CB	1:A:107:LEU:CD2	0.44	2.95	6	3
1:A:62:VAL:CG1	1:A:64:GLU:O	0.44	2.62	12	1
1:A:40:VAL:HG13	1:A:88:GLU:HG2	0.44	1.90	8	1
1:A:81:ILE:CG2	1:A:100:ILE:HD13	0.44	2.42	15	1
1:A:19:ALA:HB1	1:A:129:ARG:HD3	0.44	1.89	8	1
1:A:33:SER:CB	1:A:107:LEU:CD1	0.44	2.96	11	2
1:A:91:LEU:HD11	1:A:104:LEU:HD21	0.44	1.88	8	1
1:A:179:LYS:O	1:A:180:GLU:C	0.44	2.56	6	1
1:A:113:ARG:HA	1:A:116:VAL:CG2	0.44	2.43	14	2
1:A:59:THR:HG22	1:A:71:GLN:O	0.44	2.13	7	1
1:A:30:LEU:CD2	1:A:118:LEU:CD2	0.44	2.96	4	2
1:A:119:LEU:HD23	1:A:174:MET:SD	0.44	2.52	9	1
1:A:69:VAL:HG13	1:A:101:ARG:CD	0.44	2.43	5	1
1:A:57:LEU:O	1:A:73:TRP:CG	0.44	2.71	5	1
1:A:23:TYR:CD1	1:A:122:ILE:CG2	0.44	3.01	12	1
1:A:60:ILE:O	1:A:60:ILE:HG12	0.44	2.12	7	2
1:A:9:PHE:CG	1:A:10:LYS:N	0.44	2.86	7	2
1:A:71:GLN:HB2	1:A:99:VAL:HG13	0.44	1.90	8	1
1:A:89:LEU:HD23	1:A:91:LEU:HD13	0.43	1.88	9	4
1:A:64:GLU:O	1:A:66:ASN:N	0.43	2.50	10	1
1:A:31:ARG:HB2	1:A:39:LEU:CD2	0.43	2.42	15	1
1:A:89:LEU:HD22	1:A:89:LEU:H	0.43	1.73	8	1
1:A:26:GLU:C	1:A:30:LEU:HD12	0.43	2.33	9	1
1:A:173:LEU:HD23	1:A:173:LEU:C	0.43	2.33	6	1
1:A:27:ILE:HG22	1:A:177:LYS:HG3	0.43	1.91	14	1
1:A:137:ALA:O	1:A:141:ILE:HG12	0.43	2.13	14	1
1:A:177:LYS:O	1:A:181:ILE:HD12	0.43	2.12	7	1
1:A:116:VAL:HG12	1:A:117:ARG:N	0.43	2.27	6	1
1:A:18:LYS:O	1:A:22:TYR:CD2	0.43	2.72	7	2
1:A:27:ILE:HD11	1:A:122:ILE:CB	0.43	2.43	4	1
1:A:5:LEU:CD2	1:A:9:PHE:CE2	0.43	3.01	10	1
1:A:20:VAL:CG1	1:A:166:TYR:CE1	0.43	3.01	1	1
1:A:6:GLU:HA	1:A:9:PHE:CD2	0.43	2.49	7	2
1:A:107:LEU:O	1:A:112:ARG:NE	0.43	2.51	13	1
1:A:142:GLU:HG3	1:A:143:GLU:N	0.43	2.29	13	1
1:A:16:MET:HE3	1:A:162:LEU:O	0.43	2.13	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:156:LEU:O	1:A:160:GLN:N	0.43	2.50	7	3
1:A:144:LEU:O	1:A:146:GLY:N	0.43	2.46	5	1
1:A:29:GLY:O	1:A:39:LEU:CB	0.43	2.67	11	1
1:A:8:ILE:CD1	1:A:141:ILE:CD1	0.43	2.97	14	1
1:A:40:VAL:HG12	1:A:88:GLU:HB3	0.43	1.91	10	1
1:A:107:LEU:O	1:A:112:ARG:NH2	0.43	2.52	15	1
1:A:132:ASN:O	1:A:136:GLU:CB	0.43	2.67	10	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:70:ILE:CD1	0.43	2.97	1	3
1:A:35:ALA:CB	1:A:68:ILE:CG1	0.43	2.97	12	1
1:A:45:VAL:CG2	1:A:81:ILE:CG1	0.43	2.97	14	2
1:A:118:LEU:O	1:A:122:ILE:CD1	0.43	2.67	3	3
1:A:60:ILE:CG2	1:A:70:ILE:HG13	0.43	2.44	3	1
1:A:33:SER:HB3	1:A:107:LEU:HD13	0.43	1.90	3	1
1:A:33:SER:CB	1:A:111:ARG:CD	0.43	2.97	1	1
1:A:113:ARG:H	1:A:113:ARG:CD	0.43	2.26	8	1
1:A:20:VAL:HA	1:A:23:TYR:HB3	0.43	1.91	2	1
1:A:45:VAL:CG2	1:A:81:ILE:HG13	0.43	2.44	10	1
1:A:26:GLU:OE1	1:A:122:ILE:HD12	0.43	2.14	7	1
1:A:16:MET:HE2	1:A:162:LEU:HD13	0.42	1.91	6	1
1:A:43:ILE:HB	1:A:54:ILE:HG12	0.42	1.90	14	4
1:A:148:SER:O	1:A:152:LYS:CG	0.42	2.67	3	2
1:A:16:MET:HE3	1:A:166:TYR:HB2	0.42	1.90	6	1
1:A:91:LEU:HD22	1:A:104:LEU:HA	0.42	1.91	12	1
1:A:33:SER:HB3	1:A:107:LEU:HD11	0.42	1.89	14	1
1:A:58:GLY:HA3	1:A:72:VAL:HA	0.42	1.90	3	1
1:A:15:ASP:O	1:A:18:LYS:HG2	0.42	2.13	4	1
1:A:8:ILE:HD12	1:A:140:MET:HB2	0.42	1.90	10	1
1:A:31:ARG:HH21	1:A:91:LEU:HD21	0.42	1.73	8	1
1:A:40:VAL:O	1:A:41:GLU:HB2	0.42	2.13	10	1
1:A:33:SER:HA	1:A:107:LEU:CD1	0.42	2.44	3	1
1:A:33:SER:HB3	1:A:111:ARG:CD	0.42	2.44	1	1
1:A:72:VAL:HG23	1:A:81:ILE:CD1	0.42	2.45	8	1
1:A:130:VAL:CG2	1:A:166:TYR:CZ	0.42	3.03	4	1
1:A:113:ARG:O	1:A:116:VAL:CG2	0.42	2.68	11	1
1:A:160:GLN:HA	1:A:163:THR:HG22	0.42	1.92	7	2
1:A:162:LEU:C	1:A:162:LEU:HD12	0.42	2.35	6	1
1:A:31:ARG:CD	1:A:31:ARG:N	0.42	2.82	12	1
1:A:40:VAL:O	1:A:41:GLU:CG	0.42	2.68	10	1
1:A:173:LEU:HG	1:A:174:MET:N	0.42	2.30	7	1
1:A:82:GLU:HA	1:A:85:ILE:HG22	0.42	1.90	8	1
1:A:57:LEU:O	1:A:73:TRP:CE3	0.42	2.72	11	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:4:GLU:HB3	1:A:144:LEU:HD12	0.42	1.92	14	1
1:A:34:ARG:CA	1:A:104:LEU:HD22	0.42	2.44	15	1
1:A:30:LEU:CD1	1:A:119:LEU:HD12	0.42	2.41	5	1
1:A:136:GLU:O	1:A:140:MET:N	0.42	2.52	9	1
1:A:47:TYR:CG	1:A:57:LEU:HD21	0.42	2.50	5	1
1:A:65:HIS:CD2	1:A:65:HIS:N	0.42	2.87	13	1
1:A:62:VAL:HG12	1:A:65:HIS:H	0.42	1.74	3	3
1:A:117:ARG:O	1:A:121:LYS:N	0.42	2.53	3	1
1:A:106:PRO:O	1:A:107:LEU:C	0.42	2.58	13	1
1:A:34:ARG:N	1:A:107:LEU:HD21	0.42	2.30	12	1
1:A:155:ALA:O	1:A:159:LEU:HD12	0.42	2.15	3	1
1:A:167:ILE:O	1:A:170:ILE:CG2	0.42	2.67	15	1
1:A:78:VAL:CG1	1:A:95:VAL:CG1	0.42	2.98	6	1
1:A:168:ASP:O	1:A:171:ASN:OD1	0.42	2.37	10	1
1:A:60:ILE:HG12	1:A:60:ILE:O	0.42	2.14	15	1
1:A:71:GLN:CG	1:A:99:VAL:HG13	0.41	2.45	3	1
1:A:107:LEU:N	1:A:107:LEU:HD23	0.41	2.30	1	1
1:A:39:LEU:HD11	1:A:68:ILE:HD11	0.41	1.91	2	1
1:A:170:ILE:HG23	1:A:171:ASN:H	0.41	1.75	11	1
1:A:70:ILE:HB	1:A:100:ILE:HD12	0.41	1.92	14	1
1:A:70:ILE:N	1:A:100:ILE:O	0.41	2.53	7	1
1:A:30:LEU:O	1:A:30:LEU:CD2	0.41	2.64	15	1
1:A:16:MET:SD	1:A:130:VAL:HG13	0.41	2.55	4	1
1:A:39:LEU:H	1:A:39:LEU:HD23	0.41	1.75	3	2
1:A:112:ARG:O	1:A:116:VAL:HB	0.41	2.15	13	2
1:A:142:GLU:CG	1:A:143:GLU:N	0.41	2.83	14	1
1:A:115:LEU:N	1:A:115:LEU:CD2	0.41	2.83	15	1
1:A:31:ARG:HD3	1:A:32:THR:N	0.41	2.30	15	1
1:A:5:LEU:HD11	1:A:9:PHE:CE1	0.41	2.51	9	1
1:A:107:LEU:HB3	1:A:111:ARG:HB3	0.41	1.91	2	1
1:A:38:ALA:O	1:A:41:GLU:N	0.41	2.54	3	1
1:A:75:GLN:HA	1:A:78:VAL:CG2	0.41	2.45	13	1
1:A:8:ILE:HD13	1:A:141:ILE:CD1	0.41	2.45	13	1
1:A:59:THR:HG23	1:A:71:GLN:HB3	0.41	1.93	14	1
1:A:47:TYR:CB	1:A:52:VAL:CG2	0.41	2.99	15	1
1:A:130:VAL:CG2	1:A:166:TYR:CD2	0.41	2.98	1	1
1:A:170:ILE:CG2	1:A:171:ASN:N	0.41	2.83	5	1
1:A:37:THR:CG2	1:A:68:ILE:HG23	0.41	2.45	15	1
1:A:179:LYS:O	1:A:182:MET:N	0.41	2.54	14	2
1:A:70:ILE:O	1:A:100:ILE:HD12	0.41	2.16	6	1
1:A:159:LEU:O	1:A:163:THR:HB	0.41	2.15	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:126:ALA:CB	1:A:170:ILE:CD1	0.41	2.98	11	1
1:A:40:VAL:CG1	1:A:89:LEU:HD12	0.41	2.43	11	1
1:A:23:TYR:CE2	1:A:27:ILE:CD1	0.41	3.04	6	1
1:A:43:ILE:O	1:A:43:ILE:HG22	0.41	2.16	14	1
1:A:43:ILE:HG21	1:A:54:ILE:CG1	0.41	2.46	14	1
1:A:46:GLU:H	1:A:80:ALA:HB1	0.41	1.76	14	1
1:A:43:ILE:HG22	1:A:43:ILE:O	0.41	2.16	10	1
1:A:83:LYS:O	1:A:87:GLU:CG	0.41	2.69	8	1
1:A:72:VAL:HG21	1:A:78:VAL:CA	0.41	2.42	4	1
1:A:78:VAL:CG2	1:A:98:ASN:ND2	0.41	2.84	5	1
1:A:57:LEU:O	1:A:73:TRP:CD2	0.41	2.73	14	1
1:A:72:VAL:CG2	1:A:100:ILE:HD11	0.41	2.45	15	1
1:A:11:GLU:HG3	1:A:12:ALA:N	0.41	2.31	15	1
1:A:23:TYR:O	1:A:27:ILE:HG12	0.41	2.16	9	1
1:A:166:TYR:CD2	1:A:167:ILE:HD13	0.41	2.51	5	1
1:A:72:VAL:HG11	1:A:78:VAL:N	0.40	2.31	13	1
1:A:167:ILE:CG2	1:A:171:ASN:ND2	0.40	2.84	8	2
1:A:75:GLN:HA	1:A:78:VAL:HG23	0.40	1.93	7	1
1:A:160:GLN:O	1:A:163:THR:CG2	0.40	2.69	7	1
1:A:40:VAL:CG1	1:A:89:LEU:CD1	0.40	2.99	11	2
1:A:31:ARG:CD	1:A:31:ARG:H	0.40	2.29	6	1
1:A:8:ILE:HG13	1:A:141:ILE:HD12	0.40	1.93	12	1
1:A:116:VAL:O	1:A:120:HIS:CD2	0.40	2.74	14	1
1:A:43:ILE:O	1:A:45:VAL:N	0.40	2.54	15	1
1:A:9:PHE:CE1	1:A:158:ARG:CB	0.40	3.04	8	1
1:A:24:LYS:O	1:A:28:ALA:N	0.40	2.51	8	1
1:A:16:MET:CE	1:A:166:TYR:CB	0.40	2.99	5	1
1:A:31:ARG:HE	1:A:91:LEU:HD11	0.40	1.75	11	1
1:A:36:SER:HB2	1:A:39:LEU:HD23	0.40	1.92	10	1
1:A:54:ILE:CD1	1:A:81:ILE:CD1	0.40	2.99	10	1
1:A:114:GLU:O	1:A:118:LEU:N	0.40	2.54	4	2
1:A:176:ALA:O	1:A:179:LYS:CG	0.40	2.70	10	1
1:A:32:THR:HG23	1:A:115:LEU:CD2	0.40	2.44	3	1
1:A:55:LYS:O	1:A:56:GLN:CB	0.40	2.68	7	1
1:A:63:PRO:CG	1:A:67:GLN:NE2	0.40	2.84	15	1
1:A:67:GLN:CG	1:A:102:VAL:O	0.40	2.69	11	1
1:A:77:ALA:O	1:A:81:ILE:CD1	0.40	2.70	13	1
1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:GLU:HG2	0.40	1.93	14	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	181/184 (98%)	163±2 (90±1%)	13±3 (7±1%)	6±1 (3±1%)	8	40
All	All	2715/2760 (98%)	2441 (90%)	188 (7%)	86 (3%)	8	40

All 21 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	63	PRO	13
1	A	40	VAL	9
1	A	39	LEU	8
1	A	43	ILE	8
1	A	44	LYS	8
1	A	107	LEU	6
1	A	31	ARG	6
1	A	54	ILE	6
1	A	3	LYS	3
1	A	41	GLU	3
1	A	53	PRO	3
1	A	97	GLY	3
1	A	42	GLU	2
1	A	55	LYS	1
1	A	73	TRP	1
1	A	108	THR	1
1	A	65	HIS	1
1	A	64	GLU	1
1	A	98	ASN	1
1	A	183	SER	1
1	A	72	VAL	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	165/167 (99%)	113±5 (69±3%)	52±5 (31±3%)	2	15
All	All	2475/2505 (99%)	1699 (69%)	776 (31%)	2	15

All 127 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	118	LEU	15
1	A	39	LEU	15
1	A	30	LEU	15
1	A	99	VAL	15
1	A	57	LEU	14
1	A	52	VAL	14
1	A	89	LEU	13
1	A	173	LEU	13
1	A	147	ILE	12
1	A	31	ARG	12
1	A	14	LYS	12
1	A	141	ILE	12
1	A	10	LYS	12
1	A	36	SER	12
1	A	117	ARG	12
1	A	131	ARG	11
1	A	40	VAL	11
1	A	113	ARG	11
1	A	60	ILE	11
1	A	144	LEU	11
1	A	121	LYS	11
1	A	56	GLN	11
1	A	179	LYS	10
1	A	33	SER	10
1	A	154	ARG	10
1	A	111	ARG	10
1	A	92	ASN	10
1	A	151	GLU	9
1	A	172	LYS	9
1	A	3	LYS	9
1	A	158	ARG	9
1	A	9	PHE	9
1	A	116	VAL	9
1	A	55	LYS	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	148	SER	9
1	A	150	ASP	8
1	A	165	LYS	8
1	A	50	SER	8
1	A	162	LEU	8
1	A	161	LYS	8
1	A	134	ARG	8
1	A	34	ARG	7
1	A	177	LYS	7
1	A	17	LYS	7
1	A	76	ASN	7
1	A	129	ARG	7
1	A	44	LYS	7
1	A	164	ASP	6
1	A	96	GLN	6
1	A	127	ARG	6
1	A	174	MET	6
1	A	156	LEU	6
1	A	65	HIS	6
1	A	159	LEU	6
1	A	135	ARG	6
1	A	119	LEU	6
1	A	101	ARG	6
1	A	125	GLU	6
1	A	103	THR	6
1	A	124	GLU	5
1	A	142	GLU	5
1	A	59	THR	5
1	A	4	GLU	5
1	A	75	GLN	5
1	A	85	ILE	5
1	A	90	ASN	5
1	A	166	TYR	5
1	A	42	GLU	5
1	A	152	LYS	5
1	A	104	LEU	5
1	A	18	LYS	5
1	A	74	ASP	5
1	A	109	GLU	5
1	A	16	MET	5
1	A	107	LEU	5
1	A	64	GLU	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	153	LYS	5
1	A	86	ARG	5
1	A	163	THR	5
1	A	114	GLU	5
1	A	32	THR	4
1	A	20	VAL	4
1	A	41	GLU	4
1	A	183	SER	4
1	A	24	LYS	4
1	A	7	ASP	4
1	A	140	MET	4
1	A	112	ARG	4
1	A	110	GLU	4
1	A	138	LYS	3
1	A	178	GLU	3
1	A	82	GLU	3
1	A	145	GLU	3
1	A	98	ASN	3
1	A	6	GLU	3
1	A	122	ILE	3
1	A	51	LYS	3
1	A	83	LYS	3
1	A	175	GLU	3
1	A	180	GLU	3
1	A	13	GLU	2
1	A	46	GLU	2
1	A	26	GLU	2
1	A	87	GLU	2
1	A	160	GLN	2
1	A	91	LEU	2
1	A	169	GLU	2
1	A	149	GLU	2
1	A	168	ASP	2
1	A	43	ILE	2
1	A	25	ASN	2
1	A	67	GLN	2
1	A	100	ILE	2
1	A	157	GLU	2
1	A	115	LEU	2
1	A	66	ASN	2
1	A	15	ASP	1
1	A	71	GLN	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	181	ILE	1
1	A	182	MET	1
1	A	128	VAL	1
1	A	61	SER	1
1	A	143	GLU	1
1	A	47	TYR	1
1	A	88	GLU	1
1	A	23	TYR	1
1	A	139	GLU	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided