



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 03:30 PM BST

PDB ID : 1JQR
Title : NMR structure of the African swine fever virus DNA polymerase X
Authors : Byeon, I.-J.L.; Su, M.-I.; Showalter, A.K.; Tsai, M.-D.
Deposited on : 2001-08-08

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

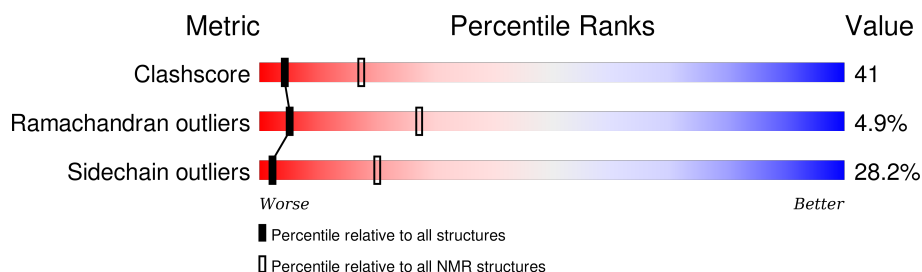
1 Overall quality at a glance

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	174	<div> <div>36%</div> <div>55%</div> <div>9%</div> <div>.</div> </div>

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 21 models. Model 1 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:1-A:174 (174)	0.29	1

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

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

The models can be grouped into 4 clusters and 1 single-model cluster was found.

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

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3004 atoms, of which 1570 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called DNA POLYMERASE BETA-LIKE.

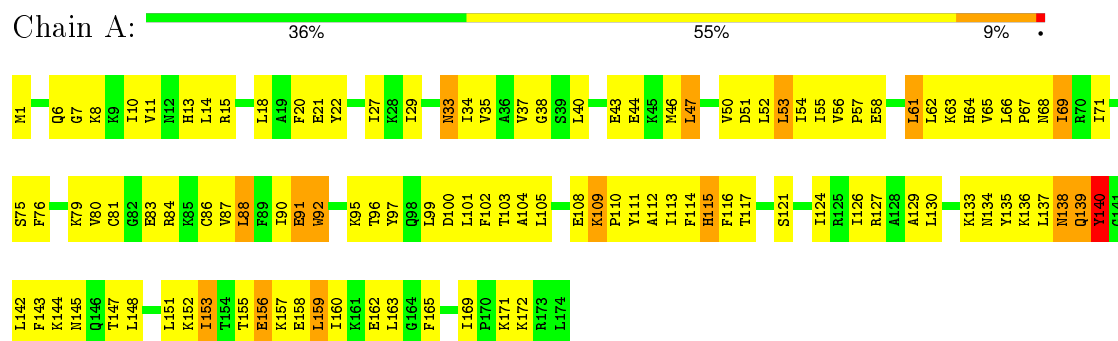
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	174	Total	C	H	N	O	S	0
			3004	943	1570	248	239	4	

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: DNA POLYMERASE BETA-LIKE

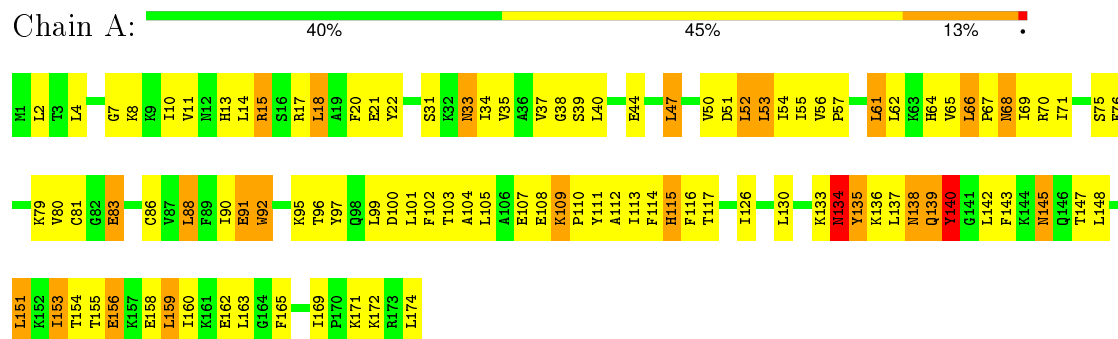


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

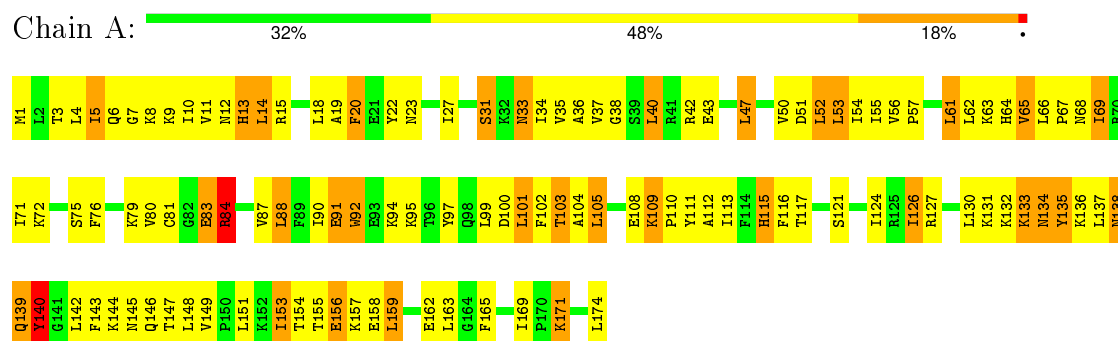
4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

• Molecule 1: DNA POLYMERASE BETA-LIKE



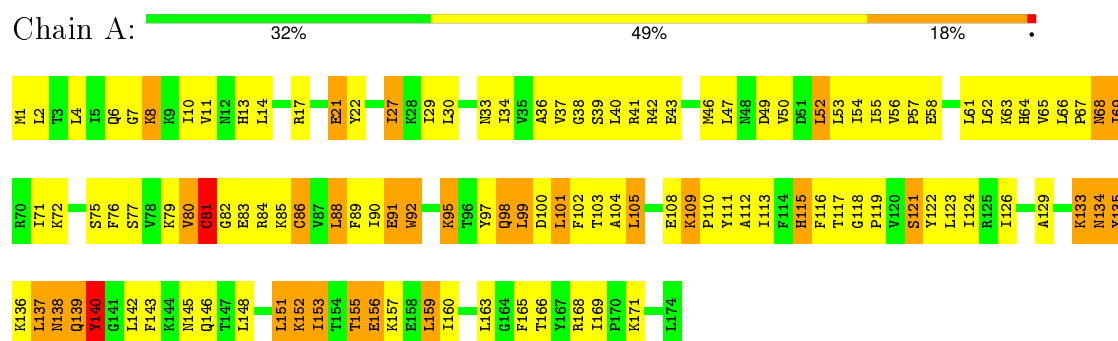
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: DNA POLYMERASE BETA-LIKE



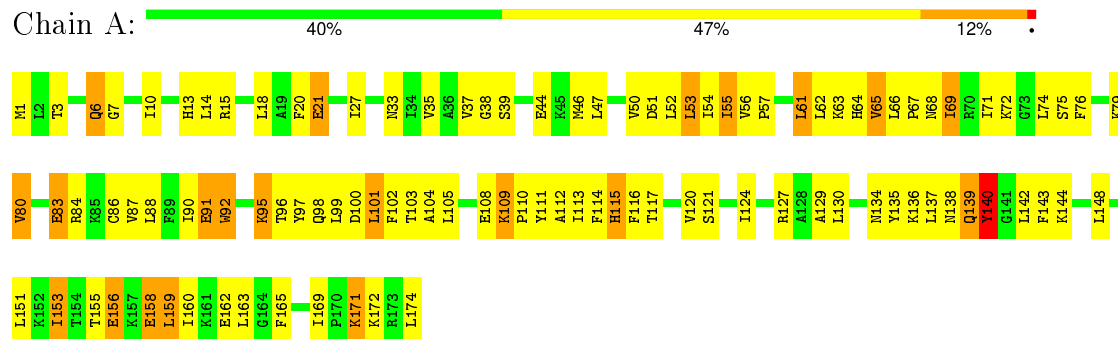
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: DNA POLYMERASE BETA-LIKE



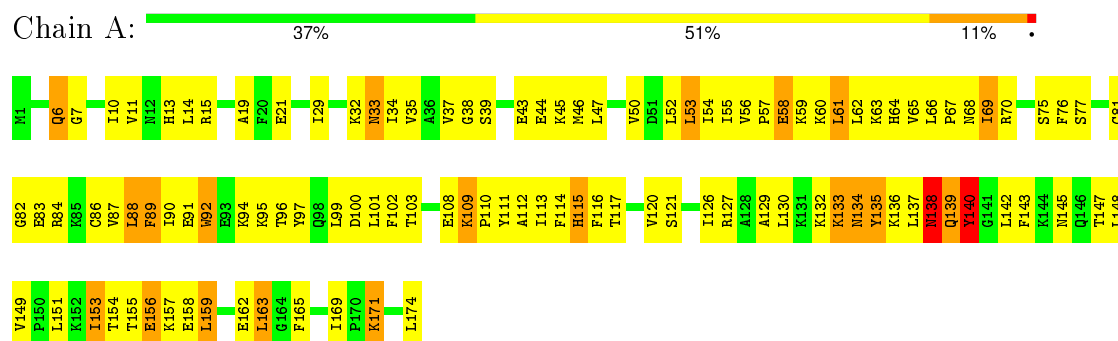
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: DNA POLYMERASE BETA-LIKE



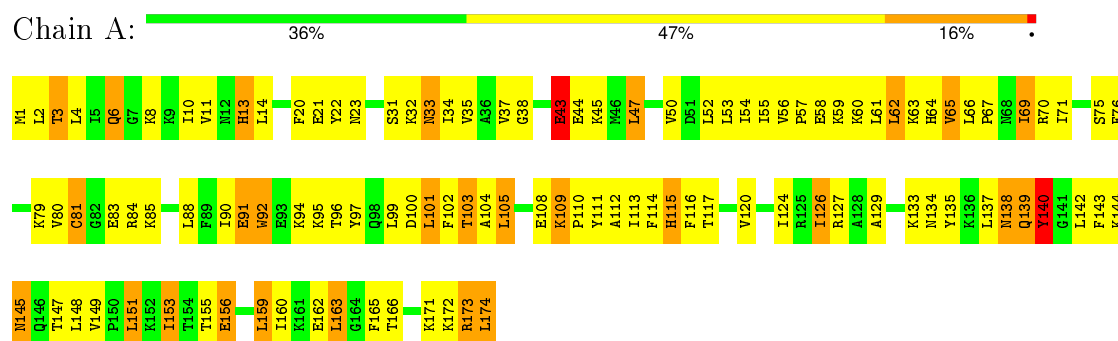
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: DNA POLYMERASE BETA-LIKE



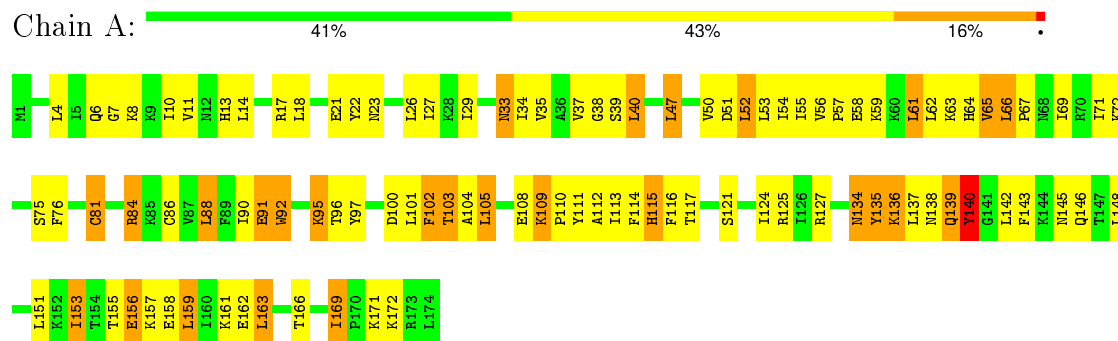
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: DNA POLYMERASE BETA-LIKE



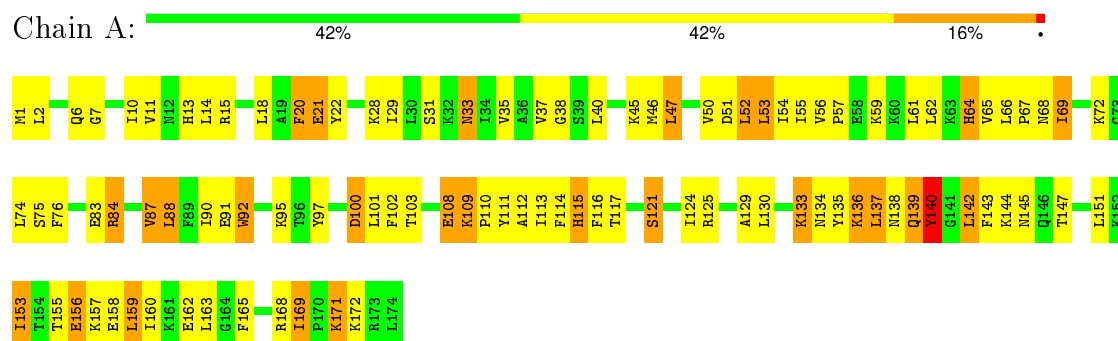
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: DNA POLYMERASE BETA-LIKE



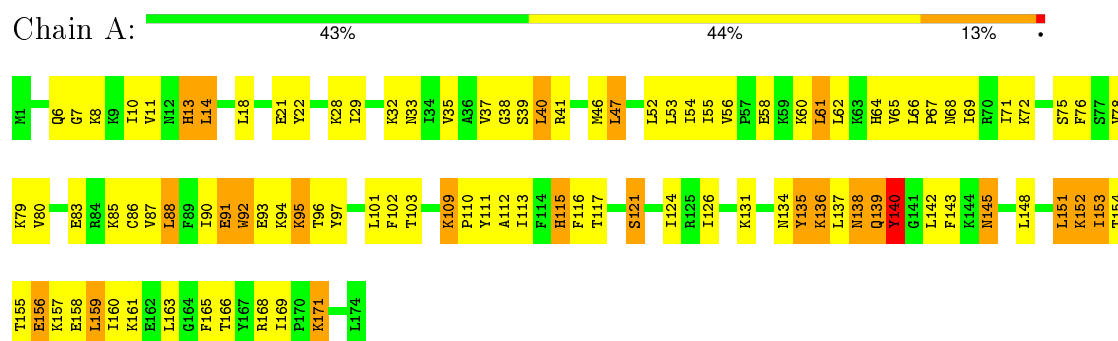
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: DNA POLYMERASE BETA-LIKE



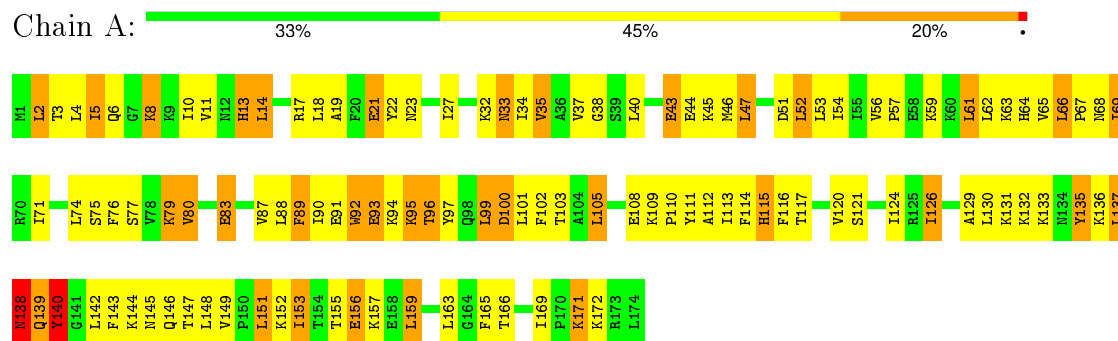
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: DNA POLYMERASE BETA-LIKE



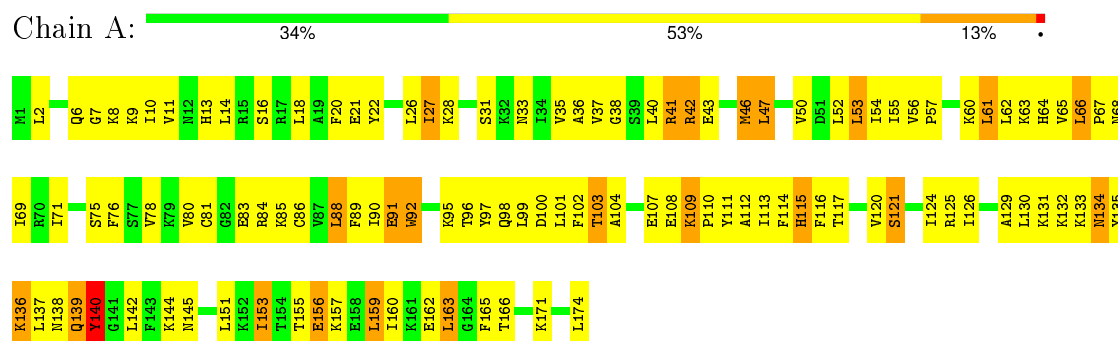
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: DNA POLYMERASE BETA-LIKE



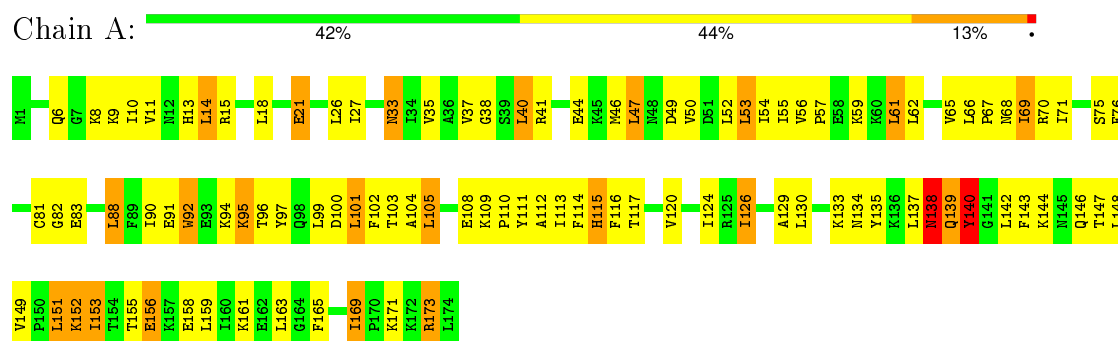
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: DNA POLYMERASE BETA-LIKE



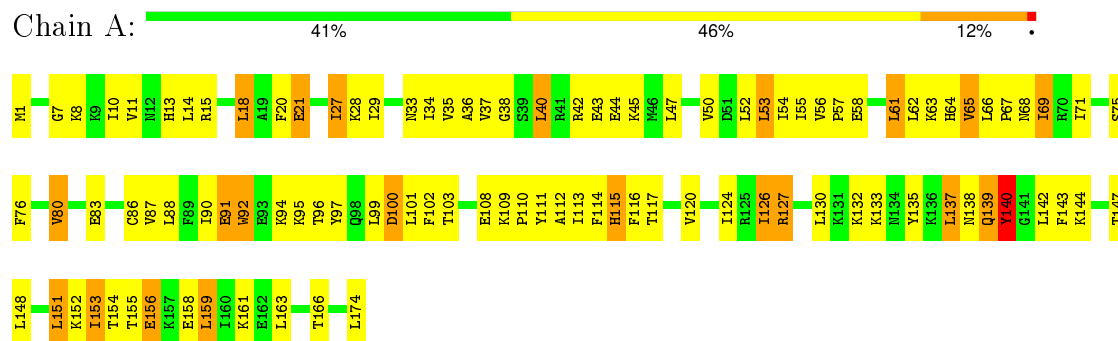
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: DNA POLYMERASE BETA-LIKE



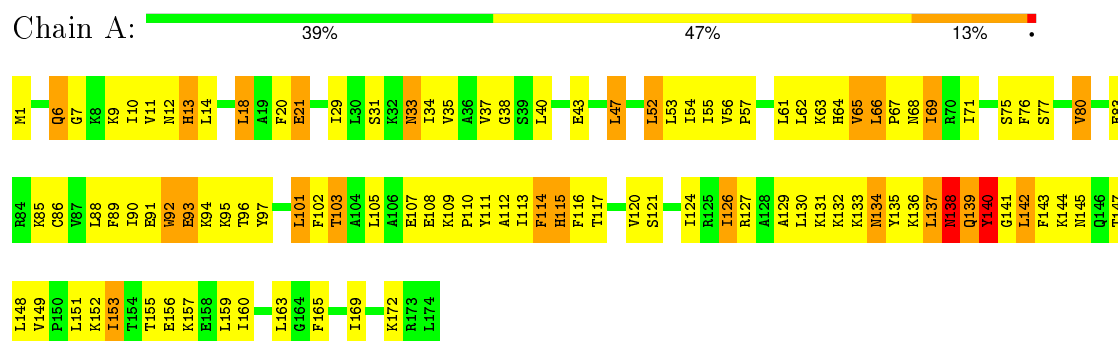
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: DNA POLYMERASE BETA-LIKE



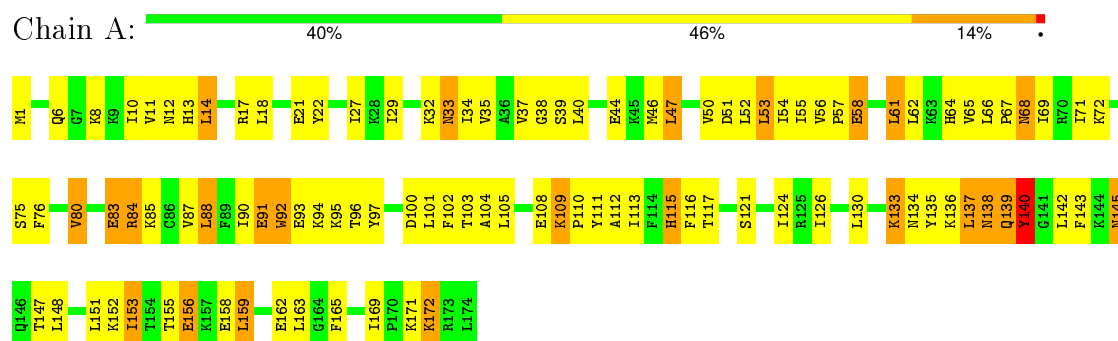
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: DNA POLYMERASE BETA-LIKE



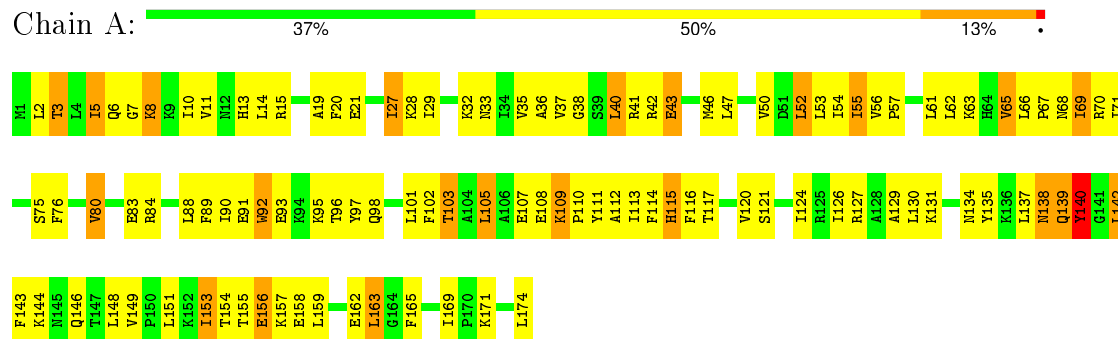
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: DNA POLYMERASE BETA-LIKE



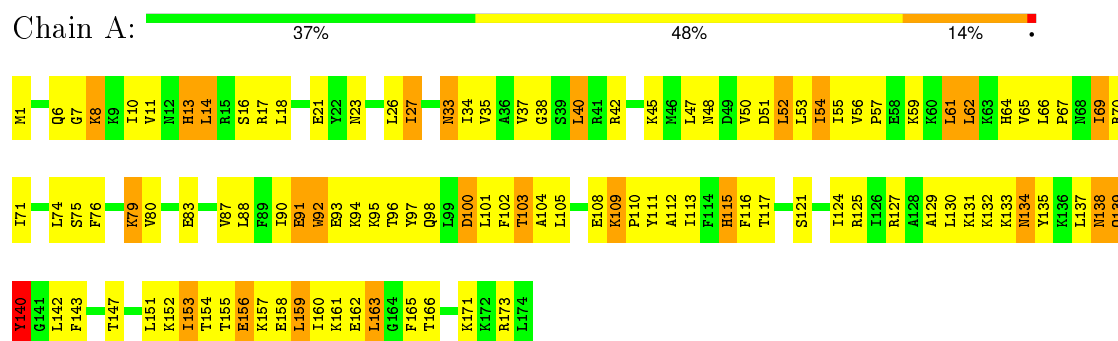
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: DNA POLYMERASE BETA-LIKE



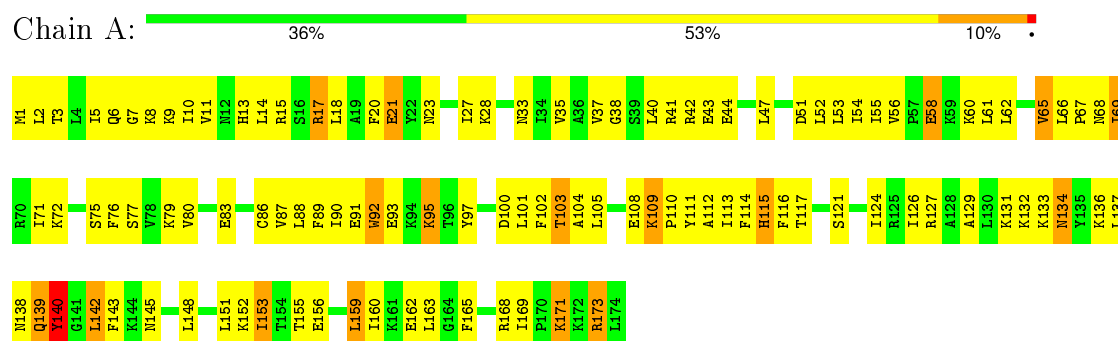
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: DNA POLYMERASE BETA-LIKE



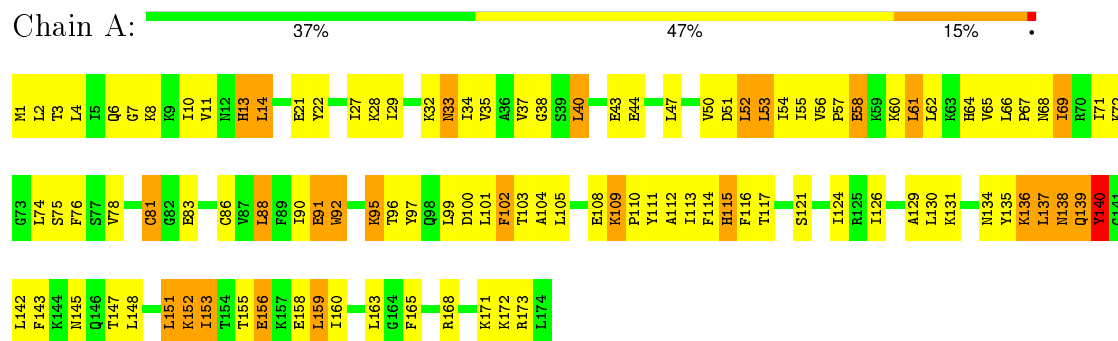
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: DNA POLYMERASE BETA-LIKE



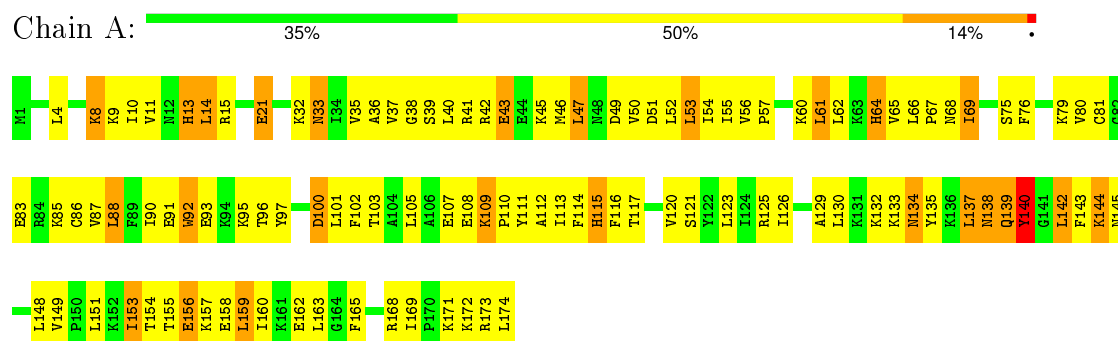
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: DNA POLYMERASE BETA-LIKE



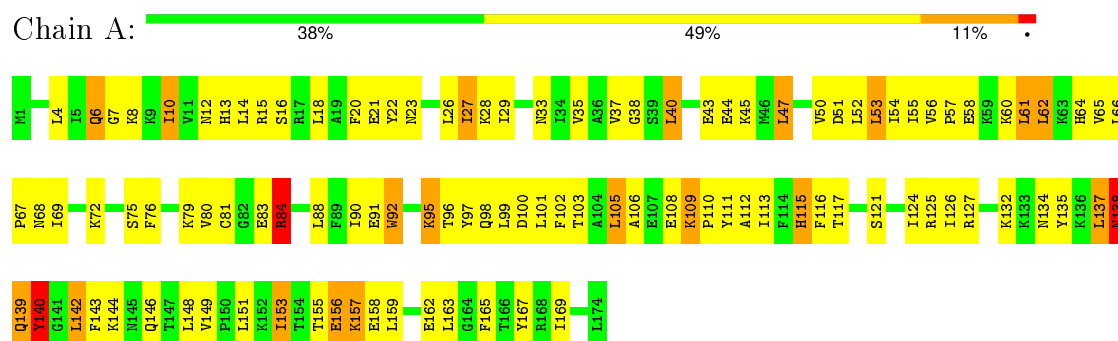
4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: DNA POLYMERASE BETA-LIKE



4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: DNA POLYMERASE BETA-LIKE



5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

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

Of the 80 calculated structures, 21 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	structure solution	3.851
X-PLOR	refinement	3.851

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	1434	1570	1567	122±9
All	All	30114	32970	32907	2562

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 41.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:LEU:HD13	1:A:101:LEU:HD11	1.06	1.17	14	3
1:A:142:LEU:HD23	1:A:151:LEU:HD13	1.01	1.28	1	6
1:A:66:LEU:HD13	1:A:101:LEU:HD22	1.01	1.32	9	2
1:A:66:LEU:HD23	1:A:101:LEU:HD11	0.97	1.33	4	1
1:A:62:LEU:HD13	1:A:105:LEU:HD22	0.91	1.41	17	4
1:A:53:LEU:HD23	1:A:113:ILE:HG23	0.90	1.44	2	7
1:A:111:TYR:CE2	1:A:159:LEU:HD23	0.89	2.02	9	1
1:A:40:LEU:HD13	1:A:47:LEU:HD22	0.88	1.42	11	1
1:A:135:TYR:CE1	1:A:142:LEU:HD21	0.87	2.03	19	9
1:A:35:VAL:HG11	1:A:113:ILE:HD13	0.87	1.45	1	16
1:A:135:TYR:CE1	1:A:142:LEU:HD11	0.87	2.04	16	2
1:A:135:TYR:CD1	1:A:142:LEU:HD11	0.87	2.05	7	10
1:A:56:VAL:HG22	1:A:65:VAL:HG21	0.86	1.47	2	6
1:A:135:TYR:CD1	1:A:142:LEU:HD21	0.85	2.05	13	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:135:TYR:CE2	1:A:142:LEU:HD21	0.84	2.08	15	1
1:A:61:LEU:O	1:A:65:VAL:HG23	0.83	1.73	8	6
1:A:88:LEU:CD2	1:A:101:LEU:HD23	0.82	2.04	1	12
1:A:40:LEU:HD13	1:A:47:LEU:HD11	0.81	1.48	14	2
1:A:159:LEU:O	1:A:163:LEU:HD13	0.81	1.74	15	7
1:A:142:LEU:CD2	1:A:151:LEU:HD13	0.81	2.06	6	5
1:A:66:LEU:HD22	1:A:101:LEU:HD13	0.81	1.52	19	2
1:A:38:GLY:O	1:A:117:THR:HG23	0.81	1.75	18	21
1:A:61:LEU:CD1	1:A:65:VAL:HG13	0.81	2.06	2	1
1:A:142:LEU:HD23	1:A:163:LEU:HD21	0.80	1.53	14	2
1:A:151:LEU:HD21	1:A:162:GLU:CB	0.80	2.06	21	13
1:A:151:LEU:O	1:A:151:LEU:HD13	0.80	1.76	9	4
1:A:104:ALA:HB1	1:A:108:GLU:HG3	0.80	1.53	11	11
1:A:137:LEU:HD13	1:A:163:LEU:CD1	0.80	2.06	12	1
1:A:53:LEU:HD23	1:A:102:PHE:CE2	0.80	2.11	14	11
1:A:66:LEU:O	1:A:69:ILE:HG22	0.79	1.77	12	10
1:A:88:LEU:HD21	1:A:101:LEU:HD23	0.78	1.55	11	9
1:A:56:VAL:CG2	1:A:65:VAL:HG21	0.78	2.08	2	2
1:A:34:ILE:HG23	1:A:52:LEU:HD11	0.78	1.55	19	7
1:A:151:LEU:HD13	1:A:151:LEU:O	0.78	1.78	10	2
1:A:130:LEU:HD22	1:A:163:LEU:HD23	0.77	1.54	1	2
1:A:55:ILE:HD12	1:A:109:LYS:CG	0.77	2.10	9	11
1:A:142:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HD11	0.77	1.55	11	5
1:A:159:LEU:O	1:A:159:LEU:HD22	0.77	1.79	9	1
1:A:76:PHE:CB	1:A:90:ILE:HG22	0.77	2.10	13	21
1:A:142:LEU:HD13	1:A:163:LEU:CD1	0.77	2.09	11	7
1:A:111:TYR:OH	1:A:151:LEU:HD22	0.77	1.80	16	7
1:A:53:LEU:HD23	1:A:102:PHE:CZ	0.76	2.15	18	12
1:A:159:LEU:HD13	1:A:160:ILE:N	0.76	1.95	9	1
1:A:169:ILE:HD12	1:A:171:LYS:CG	0.76	2.09	10	8
1:A:61:LEU:HD23	1:A:65:VAL:CG1	0.76	2.10	17	3
1:A:52:LEU:HD13	1:A:53:LEU:N	0.76	1.96	13	16
1:A:66:LEU:HD22	1:A:83:GLU:O	0.76	1.81	18	4
1:A:111:TYR:CE1	1:A:159:LEU:HD13	0.75	2.16	17	6
1:A:62:LEU:HD22	1:A:105:LEU:HD21	0.75	1.56	19	1
1:A:88:LEU:HD22	1:A:101:LEU:HD23	0.75	1.58	17	4
1:A:66:LEU:HD21	1:A:103:THR:HG23	0.75	1.57	19	2
1:A:66:LEU:HD13	1:A:101:LEU:CD1	0.75	2.06	14	3
1:A:53:LEU:HD22	1:A:102:PHE:CZ	0.75	2.15	3	7
1:A:79:LYS:HG2	1:A:80:VAL:HG23	0.75	1.58	6	7
1:A:71:ILE:HD12	1:A:76:PHE:HB3	0.75	1.58	18	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:LEU:HD11	1:A:86:CYS:SG	0.74	2.23	4	3
1:A:61:LEU:O	1:A:65:VAL:HG22	0.74	1.83	19	7
1:A:56:VAL:HG11	1:A:62:LEU:CA	0.74	2.12	12	18
1:A:54:ILE:HD12	1:A:101:LEU:HD13	0.74	1.59	4	2
1:A:2:LEU:HD11	1:A:47:LEU:HD11	0.74	1.57	8	3
1:A:56:VAL:HG11	1:A:62:LEU:N	0.74	1.96	10	21
1:A:135:TYR:CG	1:A:142:LEU:HD21	0.73	2.18	21	5
1:A:40:LEU:HD13	1:A:47:LEU:HD13	0.73	1.59	3	1
1:A:111:TYR:HA	1:A:159:LEU:HD22	0.73	1.58	1	19
1:A:137:LEU:O	1:A:137:LEU:HD12	0.73	1.83	6	2
1:A:58:GLU:HB2	1:A:61:LEU:HD13	0.73	1.61	5	2
1:A:66:LEU:HD11	1:A:103:THR:CG2	0.73	2.14	11	1
1:A:35:VAL:HB	1:A:113:ILE:HG21	0.73	1.58	7	19
1:A:56:VAL:HG11	1:A:62:LEU:HA	0.72	1.61	12	13
1:A:92:TRP:CD1	1:A:97:TYR:CE2	0.72	2.77	10	2
1:A:66:LEU:HD12	1:A:101:LEU:HD11	0.72	1.60	12	3
1:A:87:VAL:HG13	1:A:100:ASP:OD2	0.72	1.84	10	3
1:A:66:LEU:CD1	1:A:101:LEU:HD11	0.71	2.15	12	2
1:A:101:LEU:HD22	1:A:102:PHE:N	0.71	1.99	2	1
1:A:143:PHE:CZ	1:A:148:LEU:HD13	0.71	2.20	4	2
1:A:61:LEU:HD23	1:A:65:VAL:HG22	0.71	1.62	1	1
1:A:62:LEU:HD22	1:A:105:LEU:CD2	0.70	2.15	19	4
1:A:111:TYR:CD1	1:A:159:LEU:HD13	0.70	2.21	20	6
1:A:151:LEU:HD21	1:A:162:GLU:HB2	0.70	1.62	7	7
1:A:47:LEU:HD21	1:A:50:VAL:HG22	0.70	1.64	5	1
1:A:54:ILE:CD1	1:A:101:LEU:HD13	0.70	2.16	4	3
1:A:143:PHE:CZ	1:A:148:LEU:HD12	0.69	2.22	6	8
1:A:104:ALA:HB1	1:A:108:GLU:CG	0.69	2.16	6	8
1:A:136:LYS:O	1:A:142:LEU:HD12	0.69	1.87	1	8
1:A:66:LEU:CD2	1:A:101:LEU:HD11	0.69	2.15	4	1
1:A:114:PHE:CD2	1:A:159:LEU:HD21	0.69	2.23	4	1
1:A:53:LEU:HD13	1:A:102:PHE:CE2	0.69	2.23	20	6
1:A:88:LEU:O	1:A:88:LEU:HD22	0.69	1.87	7	1
1:A:62:LEU:HD13	1:A:105:LEU:CD2	0.69	2.18	17	4
1:A:66:LEU:HD13	1:A:101:LEU:CD2	0.69	2.14	9	2
1:A:142:LEU:HD12	1:A:163:LEU:CD2	0.69	2.18	19	3
1:A:61:LEU:HD23	1:A:65:VAL:CG2	0.69	2.18	1	1
1:A:169:ILE:HD12	1:A:171:LYS:HG3	0.69	1.64	5	2
1:A:66:LEU:HD22	1:A:101:LEU:CD1	0.69	2.18	19	1
1:A:142:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HD21	0.69	1.64	4	2
1:A:130:LEU:HD22	1:A:163:LEU:HD12	0.68	1.65	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HD22	0.68	1.65	13	4
1:A:156:GLU:OE1	1:A:159:LEU:HD23	0.68	1.89	6	1
1:A:130:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HD22	0.68	1.65	12	1
1:A:40:LEU:HD22	1:A:47:LEU:CD1	0.68	2.19	3	2
1:A:47:LEU:HD12	1:A:50:VAL:HG22	0.68	1.65	6	3
1:A:65:VAL:HG12	1:A:66:LEU:HD23	0.68	1.65	7	1
1:A:142:LEU:HD22	1:A:143:PHE:N	0.67	2.04	16	8
1:A:62:LEU:O	1:A:66:LEU:HD21	0.67	1.89	7	1
1:A:66:LEU:HD21	1:A:86:CYS:SG	0.67	2.29	20	5
1:A:89:PHE:CE1	1:A:96:THR:HG22	0.67	2.24	5	1
1:A:66:LEU:HD22	1:A:103:THR:OG1	0.67	1.89	7	1
1:A:66:LEU:HD21	1:A:103:THR:CG2	0.67	2.19	19	3
1:A:87:VAL:HG13	1:A:100:ASP:OD1	0.67	1.89	5	6
1:A:142:LEU:HD13	1:A:142:LEU:O	0.67	1.89	21	4
1:A:142:LEU:CD2	1:A:151:LEU:HD22	0.67	2.20	4	1
1:A:53:LEU:HD22	1:A:54:ILE:N	0.67	2.04	4	13
1:A:29:ILE:HD11	1:A:69:ILE:CD1	0.66	2.20	13	7
1:A:137:LEU:HD23	1:A:163:LEU:CD2	0.66	2.18	6	4
1:A:2:LEU:HD11	1:A:97:TYR:CD2	0.66	2.25	11	1
1:A:47:LEU:CD1	1:A:50:VAL:HG22	0.66	2.21	2	8
1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:HD13	0.66	2.04	21	1
1:A:55:ILE:HD12	1:A:109:LYS:HG3	0.66	1.65	9	7
1:A:47:LEU:HD12	1:A:49:ASP:O	0.66	1.90	20	1
1:A:55:ILE:HD12	1:A:109:LYS:HB3	0.66	1.67	21	1
1:A:4:LEU:HD12	1:A:40:LEU:HD12	0.66	1.67	1	1
1:A:10:ILE:HD11	1:A:97:TYR:CE2	0.66	2.26	10	2
1:A:66:LEU:HD13	1:A:83:GLU:O	0.66	1.91	20	4
1:A:62:LEU:O	1:A:62:LEU:HD13	0.65	1.91	11	1
1:A:88:LEU:HD13	1:A:88:LEU:N	0.65	2.06	7	1
1:A:151:LEU:HD22	1:A:151:LEU:C	0.65	2.11	13	4
1:A:29:ILE:HD11	1:A:69:ILE:HD11	0.65	1.68	9	7
1:A:159:LEU:C	1:A:159:LEU:HD22	0.65	2.12	9	1
1:A:61:LEU:HD23	1:A:65:VAL:HG13	0.65	1.66	17	1
1:A:142:LEU:HD23	1:A:163:LEU:CD2	0.64	2.22	8	3
1:A:62:LEU:HD13	1:A:62:LEU:O	0.64	1.91	13	2
1:A:112:ALA:HB2	1:A:139:GLN:CB	0.64	2.21	7	9
1:A:35:VAL:CB	1:A:113:ILE:HG21	0.64	2.22	13	3
1:A:135:TYR:CG	1:A:142:LEU:HD11	0.64	2.27	6	10
1:A:40:LEU:CD2	1:A:50:VAL:HG13	0.64	2.22	20	4
1:A:62:LEU:HD22	1:A:105:LEU:HD23	0.64	1.68	12	1
1:A:120:VAL:HG12	1:A:124:ILE:HD11	0.64	1.69	13	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:130:LEU:HD22	1:A:163:LEU:HD22	0.63	1.70	19	6
1:A:7:GLY:O	1:A:11:VAL:HG23	0.63	1.93	14	7
1:A:40:LEU:HD22	1:A:50:VAL:HG13	0.63	1.68	20	3
1:A:66:LEU:HD23	1:A:83:GLU:O	0.63	1.92	16	4
1:A:66:LEU:HD21	1:A:103:THR:OG1	0.63	1.93	15	2
1:A:53:LEU:HD12	1:A:113:ILE:HG23	0.63	1.68	19	3
1:A:111:TYR:OH	1:A:151:LEU:HD12	0.63	1.92	17	1
1:A:66:LEU:HD11	1:A:103:THR:OG1	0.63	1.94	15	4
1:A:66:LEU:HD23	1:A:101:LEU:CD1	0.63	2.22	10	1
1:A:64:HIS:O	1:A:68:ASN:ND2	0.63	2.32	5	4
1:A:36:ALA:HB1	1:A:40:LEU:HB3	0.62	1.69	13	3
1:A:137:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HD11	0.62	1.71	12	1
1:A:66:LEU:HD21	1:A:86:CYS:HB2	0.62	1.71	5	2
1:A:137:LEU:HD22	1:A:159:LEU:CD1	0.62	2.24	17	5
1:A:40:LEU:HG	1:A:47:LEU:HD11	0.62	1.72	12	1
1:A:142:LEU:CD1	1:A:163:LEU:HD23	0.62	2.23	13	3
1:A:130:LEU:HD13	1:A:163:LEU:CD2	0.62	2.24	1	1
1:A:66:LEU:O	1:A:66:LEU:HD12	0.62	1.95	16	2
1:A:2:LEU:HD13	1:A:3:THR:N	0.62	2.08	16	1
1:A:66:LEU:CD2	1:A:101:LEU:HD21	0.62	2.25	4	1
1:A:40:LEU:HD22	1:A:47:LEU:HD13	0.61	1.72	3	2
1:A:110:PRO:CG	1:A:153:ILE:HD12	0.61	2.26	10	14
1:A:136:LYS:O	1:A:142:LEU:HD22	0.61	1.95	2	3
1:A:62:LEU:HD12	1:A:105:LEU:HD21	0.61	1.71	6	1
1:A:17:ARG:O	1:A:18:LEU:HD22	0.61	1.95	18	1
1:A:58:GLU:HB2	1:A:61:LEU:HD12	0.61	1.72	18	1
1:A:58:GLU:CB	1:A:61:LEU:HD13	0.61	2.25	5	2
1:A:53:LEU:HD13	1:A:102:PHE:CZ	0.61	2.31	3	6
1:A:102:PHE:CZ	1:A:116:PHE:CD2	0.61	2.88	3	21
1:A:20:PHE:CG	1:A:65:VAL:HG22	0.60	2.31	18	3
1:A:56:VAL:HG22	1:A:65:VAL:HG11	0.60	1.72	14	4
1:A:34:ILE:CG2	1:A:52:LEU:HD21	0.60	2.26	13	2
1:A:137:LEU:HB3	1:A:163:LEU:HD21	0.60	1.74	2	5
1:A:159:LEU:O	1:A:163:LEU:HD23	0.60	1.96	16	2
1:A:35:VAL:CG1	1:A:113:ILE:HG21	0.60	2.26	13	1
1:A:66:LEU:HD11	1:A:103:THR:HG23	0.60	1.74	11	1
1:A:61:LEU:HG	1:A:65:VAL:HG13	0.60	1.73	20	1
1:A:53:LEU:HD13	1:A:55:ILE:CD1	0.60	2.26	19	12
1:A:69:ILE:O	1:A:69:ILE:HG23	0.60	1.97	2	14
1:A:19:ALA:HB1	1:A:27:ILE:O	0.60	1.97	2	1
1:A:112:ALA:HA	1:A:115:HIS:CD2	0.60	2.31	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:111:TYR:OH	1:A:151:LEU:HD23	0.60	1.96	15	4
1:A:76:PHE:HA	1:A:90:ILE:HG22	0.59	1.73	3	18
1:A:101:LEU:HD23	1:A:102:PHE:N	0.59	2.11	9	2
1:A:151:LEU:HD22	1:A:152:LYS:N	0.59	2.12	9	6
1:A:56:VAL:HG13	1:A:61:LEU:HB3	0.59	1.73	14	9
1:A:137:LEU:HD22	1:A:137:LEU:C	0.59	2.17	21	1
1:A:88:LEU:HD23	1:A:90:ILE:HG23	0.59	1.73	7	1
1:A:55:ILE:N	1:A:55:ILE:HD13	0.59	2.12	6	6
1:A:137:LEU:HD12	1:A:159:LEU:HD13	0.59	1.74	12	1
1:A:137:LEU:HD23	1:A:163:LEU:HD22	0.59	1.74	1	1
1:A:130:LEU:HD22	1:A:163:LEU:CD1	0.59	2.28	17	1
1:A:88:LEU:HD12	1:A:90:ILE:CG2	0.58	2.28	19	8
1:A:142:LEU:HD23	1:A:163:LEU:CD1	0.58	2.28	16	2
1:A:76:PHE:CA	1:A:90:ILE:HG22	0.58	2.29	11	20
1:A:40:LEU:HD12	1:A:50:VAL:HG23	0.58	1.75	17	1
1:A:142:LEU:HD12	1:A:163:LEU:HD23	0.58	1.73	13	3
1:A:55:ILE:HG23	1:A:109:LYS:HB2	0.58	1.76	8	9
1:A:36:ALA:HB3	1:A:41:ARG:HD2	0.58	1.76	11	3
1:A:4:LEU:HD21	1:A:43:GLU:HG2	0.58	1.74	6	1
1:A:88:LEU:HD12	1:A:90:ILE:HG23	0.58	1.74	9	7
1:A:121:SER:O	1:A:124:ILE:HG22	0.57	1.99	16	11
1:A:89:PHE:CD1	1:A:96:THR:HG22	0.57	2.35	5	1
1:A:56:VAL:HG12	1:A:58:GLU:O	0.57	1.99	9	3
1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:HD12	0.57	2.13	15	1
1:A:4:LEU:HA	1:A:47:LEU:HD21	0.57	1.74	7	1
1:A:112:ALA:HB2	1:A:139:GLN:HB2	0.57	1.76	7	1
1:A:50:VAL:O	1:A:50:VAL:HG13	0.57	1.98	3	1
1:A:69:ILE:HG23	1:A:69:ILE:O	0.57	1.99	21	7
1:A:55:ILE:HD13	1:A:55:ILE:N	0.57	2.14	1	8
1:A:66:LEU:HD12	1:A:101:LEU:CD1	0.57	2.30	11	2
1:A:137:LEU:HD22	1:A:137:LEU:O	0.57	1.99	21	1
1:A:40:LEU:CD1	1:A:50:VAL:HG13	0.57	2.29	19	3
1:A:92:TRP:N	1:A:95:LYS:O	0.57	2.38	10	15
1:A:130:LEU:HD22	1:A:163:LEU:CD2	0.57	2.28	1	1
1:A:2:LEU:HD23	1:A:47:LEU:HD21	0.57	1.75	3	1
1:A:15:ARG:NE	1:A:34:ILE:HD11	0.57	2.15	2	1
1:A:50:VAL:HG12	1:A:98:GLN:O	0.57	1.99	16	3
1:A:142:LEU:HG	1:A:151:LEU:HD13	0.57	1.77	16	6
1:A:27:ILE:HD13	1:A:27:ILE:N	0.57	2.15	11	4
1:A:151:LEU:HD11	1:A:162:GLU:CB	0.57	2.30	17	1
1:A:153:ILE:CG2	1:A:153:ILE:O	0.56	2.52	4	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:LEU:HD22	1:A:103:THR:CB	0.56	2.30	7	1
1:A:121:SER:HA	1:A:124:ILE:HD12	0.56	1.76	17	2
1:A:101:LEU:O	1:A:101:LEU:HD12	0.56	1.99	8	5
1:A:50:VAL:HG13	1:A:50:VAL:O	0.56	2.01	4	4
1:A:114:PHE:CD1	1:A:137:LEU:HD11	0.56	2.36	14	1
1:A:111:TYR:CZ	1:A:159:LEU:HD23	0.56	2.35	9	1
1:A:101:LEU:HD12	1:A:101:LEU:O	0.56	1.99	13	4
1:A:151:LEU:HD21	1:A:162:GLU:HB3	0.56	1.77	1	9
1:A:143:PHE:CE1	1:A:148:LEU:HD13	0.56	2.35	4	2
1:A:142:LEU:HD22	1:A:163:LEU:CD1	0.56	2.30	6	1
1:A:40:LEU:HG	1:A:47:LEU:HD22	0.56	1.77	19	1
1:A:92:TRP:O	1:A:92:TRP:CD1	0.56	2.59	21	11
1:A:71:ILE:HD12	1:A:76:PHE:CB	0.56	2.30	7	8
1:A:102:PHE:CE1	1:A:116:PHE:CE2	0.56	2.94	19	17
1:A:153:ILE:O	1:A:153:ILE:CG2	0.56	2.53	19	10
1:A:113:ILE:HD11	1:A:156:GLU:HG3	0.56	1.78	8	9
1:A:66:LEU:N	1:A:67:PRO:HD2	0.56	2.16	12	15
1:A:4:LEU:HD21	1:A:43:GLU:CG	0.56	2.31	3	3
1:A:66:LEU:HD13	1:A:101:LEU:HD21	0.56	1.76	5	1
1:A:142:LEU:HD13	1:A:163:LEU:CG	0.56	2.30	5	5
1:A:114:PHE:CD2	1:A:160:ILE:HD11	0.56	2.35	14	2
1:A:61:LEU:HD12	1:A:65:VAL:CG2	0.56	2.31	21	2
1:A:115:HIS:CD2	1:A:139:GLN:H	0.56	2.19	6	1
1:A:169:ILE:HD13	1:A:171:LYS:HG3	0.56	1.78	12	1
1:A:92:TRP:CD1	1:A:92:TRP:O	0.55	2.59	13	10
1:A:142:LEU:HD13	1:A:163:LEU:CD2	0.55	2.31	4	2
1:A:55:ILE:HD12	1:A:109:LYS:HB2	0.55	1.79	5	4
1:A:40:LEU:CD2	1:A:47:LEU:HD13	0.55	2.32	2	2
1:A:40:LEU:HD12	1:A:47:LEU:HD21	0.55	1.77	9	1
1:A:40:LEU:HD12	1:A:50:VAL:HG13	0.55	1.77	19	2
1:A:56:VAL:HG11	1:A:61:LEU:C	0.55	2.21	16	7
1:A:130:LEU:CD2	1:A:163:LEU:HD23	0.55	2.32	15	1
1:A:90:ILE:CD1	1:A:99:LEU:HD12	0.55	2.32	3	1
1:A:102:PHE:CZ	1:A:116:PHE:CE2	0.55	2.94	8	20
1:A:18:LEU:HD12	1:A:69:ILE:HD11	0.55	1.79	13	1
1:A:142:LEU:HD12	1:A:151:LEU:HB2	0.55	1.79	14	1
1:A:76:PHE:HB3	1:A:90:ILE:HG22	0.55	1.79	7	3
1:A:142:LEU:HD23	1:A:163:LEU:HD11	0.55	1.79	16	2
1:A:80:VAL:HG13	1:A:80:VAL:O	0.55	2.02	10	4
1:A:17:ARG:HG2	1:A:74:LEU:HD13	0.55	1.79	10	1
1:A:115:HIS:ND1	1:A:115:HIS:O	0.55	2.40	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:169:ILE:O	1:A:169:ILE:HD12	0.54	2.03	12	1
1:A:76:PHE:HB2	1:A:90:ILE:HG22	0.54	1.80	10	12
1:A:169:ILE:HD12	1:A:171:LYS:CD	0.54	2.33	18	4
1:A:55:ILE:HD12	1:A:109:LYS:HG2	0.54	1.79	9	4
1:A:66:LEU:HD23	1:A:67:PRO:N	0.54	2.18	3	3
1:A:101:LEU:HD13	1:A:101:LEU:O	0.54	2.01	2	1
1:A:169:ILE:HD11	1:A:172:LYS:HD2	0.54	1.80	15	1
1:A:108:GLU:O	1:A:112:ALA:CB	0.54	2.56	6	15
1:A:8:LYS:O	1:A:11:VAL:HG12	0.54	2.02	10	5
1:A:53:LEU:HD12	1:A:54:ILE:N	0.54	2.17	20	6
1:A:18:LEU:HB3	1:A:29:ILE:HD12	0.54	1.80	8	4
1:A:13:HIS:CD2	1:A:14:LEU:N	0.54	2.76	16	21
1:A:142:LEU:C	1:A:142:LEU:HD13	0.54	2.22	17	5
1:A:66:LEU:HD12	1:A:66:LEU:O	0.54	2.02	5	2
1:A:142:LEU:HD23	1:A:151:LEU:HD22	0.53	1.79	4	1
1:A:79:LYS:HG3	1:A:80:VAL:HG12	0.53	1.79	10	1
1:A:138:ASN:O	1:A:139:GLN:C	0.53	2.47	14	21
1:A:10:ILE:CD1	1:A:97:TYR:CE2	0.53	2.91	10	2
1:A:101:LEU:C	1:A:101:LEU:HD23	0.53	2.24	16	2
1:A:47:LEU:O	1:A:47:LEU:HD22	0.53	2.02	21	1
1:A:137:LEU:HD22	1:A:159:LEU:HD11	0.53	1.79	17	1
1:A:66:LEU:CD1	1:A:101:LEU:HD21	0.53	2.33	14	2
1:A:54:ILE:HB	1:A:103:THR:HG22	0.53	1.79	3	18
1:A:13:HIS:CE1	1:A:92:TRP:CZ3	0.53	2.97	10	14
1:A:80:VAL:O	1:A:80:VAL:HG13	0.53	2.03	20	3
1:A:137:LEU:HD22	1:A:159:LEU:HD21	0.53	1.79	9	1
1:A:169:ILE:HD13	1:A:171:LYS:CG	0.53	2.34	12	1
1:A:22:TYR:CE1	1:A:64:HIS:CD2	0.53	2.96	21	7
1:A:144:LYS:CB	1:A:149:VAL:HG21	0.53	2.34	6	3
1:A:37:VAL:HG22	1:A:51:ASP:O	0.53	2.03	4	11
1:A:66:LEU:HD22	1:A:83:GLU:C	0.53	2.24	1	2
1:A:142:LEU:HD13	1:A:142:LEU:C	0.53	2.24	20	3
1:A:120:VAL:O	1:A:124:ILE:HD12	0.53	2.03	14	3
1:A:40:LEU:HB2	1:A:47:LEU:HD13	0.53	1.80	20	1
1:A:27:ILE:N	1:A:27:ILE:HD13	0.53	2.18	21	2
1:A:20:PHE:HB3	1:A:65:VAL:HG13	0.52	1.80	1	1
1:A:92:TRP:CD1	1:A:97:TYR:CE1	0.52	2.97	8	19
1:A:53:LEU:HD22	1:A:102:PHE:HZ	0.52	1.63	20	6
1:A:113:ILE:HD11	1:A:156:GLU:CG	0.52	2.34	16	7
1:A:47:LEU:CD2	1:A:50:VAL:HG22	0.52	2.33	5	1
1:A:130:LEU:HD11	1:A:163:LEU:HD23	0.52	1.81	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:108:GLU:O	1:A:112:ALA:HB3	0.52	2.03	6	9
1:A:35:VAL:HG11	1:A:113:ILE:CD1	0.52	2.32	6	4
1:A:142:LEU:HD12	1:A:143:PHE:N	0.52	2.20	4	2
1:A:130:LEU:HD11	1:A:137:LEU:HD22	0.52	1.79	12	1
1:A:151:LEU:HD22	1:A:152:LYS:C	0.52	2.25	12	6
1:A:153:ILE:HA	1:A:158:GLU:HB3	0.52	1.82	19	2
1:A:127:ARG:HA	1:A:130:LEU:HD12	0.52	1.80	13	1
1:A:126:ILE:HD13	1:A:165:PHE:CZ	0.52	2.40	21	3
1:A:47:LEU:HD11	1:A:50:VAL:HG22	0.52	1.80	20	1
1:A:47:LEU:HD13	1:A:50:VAL:HG22	0.52	1.82	19	1
1:A:126:ILE:CG2	1:A:130:LEU:HD11	0.52	2.34	13	1
1:A:22:TYR:CD1	1:A:64:HIS:CD2	0.52	2.98	2	1
1:A:151:LEU:HD11	1:A:162:GLU:HB3	0.52	1.82	21	4
1:A:135:TYR:HB3	1:A:142:LEU:HD11	0.52	1.82	11	3
1:A:151:LEU:HD13	1:A:151:LEU:C	0.52	2.24	9	3
1:A:153:ILE:O	1:A:153:ILE:HG23	0.52	2.04	19	10
1:A:13:HIS:ND1	1:A:92:TRP:CZ3	0.52	2.78	12	21
1:A:21:GLU:N	1:A:68:ASN:O	0.52	2.41	18	14
1:A:111:TYR:O	1:A:115:HIS:CE1	0.52	2.63	6	1
1:A:137:LEU:HD23	1:A:163:LEU:HD21	0.52	1.81	6	1
1:A:137:LEU:HD22	1:A:163:LEU:CD1	0.52	2.34	4	3
1:A:130:LEU:CD1	1:A:163:LEU:HD23	0.52	2.35	11	1
1:A:142:LEU:HD22	1:A:151:LEU:HD13	0.52	1.81	6	1
1:A:62:LEU:HD21	1:A:84:ARG:CZ	0.52	2.34	16	1
1:A:2:LEU:HD13	1:A:3:THR:O	0.51	2.05	16	1
1:A:169:ILE:HD12	1:A:171:LYS:HB3	0.51	1.80	8	1
1:A:138:ASN:O	1:A:140:TYR:N	0.51	2.44	6	21
1:A:33:ASN:OD1	1:A:33:ASN:N	0.51	2.43	12	9
1:A:53:LEU:HD12	1:A:113:ILE:CG2	0.51	2.34	19	2
1:A:76:PHE:HB2	1:A:88:LEU:HD12	0.51	1.82	21	4
1:A:137:LEU:HB3	1:A:163:LEU:HD11	0.51	1.82	21	1
1:A:110:PRO:HG3	1:A:153:ILE:HD12	0.51	1.80	10	3
1:A:144:LYS:HB3	1:A:149:VAL:HG21	0.51	1.83	10	4
1:A:137:LEU:CB	1:A:163:LEU:HD11	0.51	2.35	21	1
1:A:37:VAL:HG23	1:A:51:ASP:HB2	0.51	1.81	7	1
1:A:153:ILE:HD11	1:A:159:LEU:H	0.51	1.66	9	11
1:A:61:LEU:HD11	1:A:65:VAL:HG13	0.51	1.83	2	1
1:A:159:LEU:C	1:A:159:LEU:HD12	0.51	2.25	6	7
1:A:114:PHE:CE1	1:A:137:LEU:HD11	0.51	2.41	12	2
1:A:6:GLN:O	1:A:10:ILE:HG13	0.51	2.04	2	16
1:A:78:VAL:O	1:A:78:VAL:HG13	0.51	2.06	11	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:126:ILE:HD13	1:A:165:PHE:CE2	0.51	2.41	18	4
1:A:137:LEU:HD23	1:A:163:LEU:HD23	0.50	1.82	2	1
1:A:40:LEU:HD13	1:A:47:LEU:CD1	0.50	2.29	14	1
1:A:151:LEU:C	1:A:151:LEU:HD22	0.50	2.26	3	2
1:A:130:LEU:CD1	1:A:137:LEU:HD22	0.50	2.36	12	1
1:A:137:LEU:HD13	1:A:159:LEU:HD13	0.50	1.84	14	1
1:A:58:GLU:HB3	1:A:61:LEU:HD12	0.50	1.82	15	1
1:A:92:TRP:HD1	1:A:97:TYR:CE1	0.50	2.24	7	19
1:A:169:ILE:HD12	1:A:171:LYS:HG2	0.50	1.84	18	3
1:A:142:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HG	0.50	1.82	9	2
1:A:130:LEU:CD2	1:A:163:LEU:HD12	0.50	2.37	17	1
1:A:114:PHE:CB	1:A:159:LEU:HD21	0.50	2.37	1	6
1:A:56:VAL:HG21	1:A:62:LEU:HA	0.50	1.83	10	3
1:A:126:ILE:HG23	1:A:130:LEU:HD11	0.50	1.83	13	2
1:A:53:LEU:CD2	1:A:113:ILE:HG23	0.50	2.29	2	1
1:A:169:ILE:N	1:A:169:ILE:HD13	0.50	2.22	7	1
1:A:83:GLU:O	1:A:84:ARG:CB	0.50	2.59	21	5
1:A:2:LEU:HD12	1:A:3:THR:O	0.50	2.06	6	3
1:A:111:TYR:CE1	1:A:141:GLY:HA2	0.50	2.42	14	1
1:A:66:LEU:CD1	1:A:101:LEU:HD22	0.50	2.37	16	1
1:A:153:ILE:HD11	1:A:159:LEU:N	0.50	2.21	9	13
1:A:90:ILE:HD13	1:A:99:LEU:CD2	0.50	2.37	4	2
1:A:62:LEU:C	1:A:62:LEU:HD13	0.49	2.28	11	3
1:A:101:LEU:C	1:A:101:LEU:HD12	0.49	2.28	18	5
1:A:18:LEU:HD22	1:A:69:ILE:HD11	0.49	1.83	17	1
1:A:66:LEU:CD1	1:A:101:LEU:HD13	0.49	2.37	9	1
1:A:114:PHE:CG	1:A:159:LEU:HD21	0.49	2.42	4	2
1:A:53:LEU:HD13	1:A:55:ILE:HD13	0.49	1.83	11	8
1:A:99:LEU:HD13	1:A:99:LEU:C	0.49	2.28	19	1
1:A:66:LEU:HD13	1:A:84:ARG:N	0.49	2.22	2	1
1:A:142:LEU:HD23	1:A:163:LEU:HD23	0.49	1.84	21	1
1:A:169:ILE:HD12	1:A:171:LYS:HD3	0.49	1.85	1	1
1:A:47:LEU:HD23	1:A:47:LEU:H	0.49	1.66	3	1
1:A:22:TYR:CD2	1:A:61:LEU:HD21	0.49	2.42	8	1
1:A:159:LEU:O	1:A:163:LEU:HD12	0.49	2.08	12	4
1:A:65:VAL:O	1:A:69:ILE:HB	0.49	2.08	9	1
1:A:144:LYS:HB2	1:A:149:VAL:HG21	0.49	1.84	16	1
1:A:37:VAL:HB	1:A:116:PHE:CD1	0.49	2.43	3	20
1:A:142:LEU:O	1:A:142:LEU:HD13	0.49	2.08	8	2
1:A:153:ILE:HG23	1:A:153:ILE:O	0.49	2.08	8	10
1:A:142:LEU:HD23	1:A:142:LEU:O	0.48	2.08	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:159:LEU:HD12	1:A:159:LEU:C	0.48	2.29	19	8
1:A:129:ALA:CB	1:A:165:PHE:CE1	0.48	2.97	6	11
1:A:111:TYR:CE1	1:A:153:ILE:HG21	0.48	2.43	14	1
1:A:88:LEU:CD1	1:A:88:LEU:N	0.48	2.77	7	1
1:A:153:ILE:HG12	1:A:159:LEU:N	0.48	2.23	19	20
1:A:120:VAL:HG13	1:A:121:SER:N	0.48	2.24	20	2
1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:CD1	0.48	2.76	21	1
1:A:61:LEU:O	1:A:65:VAL:N	0.48	2.46	14	2
1:A:66:LEU:HD13	1:A:66:LEU:C	0.48	2.28	4	1
1:A:142:LEU:HB2	1:A:163:LEU:HD21	0.48	1.85	7	2
1:A:111:TYR:CE1	1:A:159:LEU:HB2	0.48	2.43	6	10
1:A:2:LEU:HD22	1:A:10:ILE:HD12	0.48	1.85	19	1
1:A:2:LEU:HD11	1:A:7:GLY:N	0.48	2.23	16	1
1:A:151:LEU:C	1:A:151:LEU:HD13	0.48	2.28	3	2
1:A:61:LEU:O	1:A:61:LEU:HD13	0.48	2.09	2	1
1:A:135:TYR:CD1	1:A:142:LEU:CD1	0.48	2.97	1	3
1:A:10:ILE:CD1	1:A:97:TYR:CD2	0.48	2.97	14	2
1:A:62:LEU:HD21	1:A:83:GLU:OE2	0.48	2.08	21	1
1:A:92:TRP:NE1	1:A:97:TYR:CE2	0.48	2.82	14	2
1:A:143:PHE:CE1	1:A:148:LEU:CD1	0.48	2.97	4	2
1:A:20:PHE:CG	1:A:65:VAL:CG2	0.48	2.97	18	2
1:A:77:SER:CB	1:A:89:PHE:CZ	0.48	2.97	18	3
1:A:142:LEU:HD22	1:A:163:LEU:HD12	0.47	1.86	6	2
1:A:101:LEU:HD23	1:A:101:LEU:C	0.47	2.30	7	1
1:A:40:LEU:HG	1:A:50:VAL:HG13	0.47	1.85	21	1
1:A:115:HIS:C	1:A:115:HIS:CD2	0.47	2.88	18	10
1:A:66:LEU:HD11	1:A:85:LYS:C	0.47	2.29	3	1
1:A:40:LEU:CD1	1:A:47:LEU:HD13	0.47	2.33	3	1
1:A:115:HIS:CD2	1:A:115:HIS:C	0.47	2.88	19	9
1:A:101:LEU:HD13	1:A:101:LEU:C	0.47	2.30	2	1
1:A:66:LEU:HD22	1:A:66:LEU:H	0.47	1.69	11	1
1:A:115:HIS:CG	1:A:115:HIS:O	0.47	2.67	15	12
1:A:101:LEU:HD22	1:A:101:LEU:C	0.47	2.30	2	1
1:A:135:TYR:CB	1:A:142:LEU:HD11	0.47	2.39	6	3
1:A:66:LEU:C	1:A:66:LEU:HD23	0.47	2.30	20	2
1:A:69:ILE:CG2	1:A:69:ILE:O	0.47	2.63	9	5
1:A:153:ILE:CG1	1:A:159:LEU:N	0.47	2.78	16	21
1:A:115:HIS:O	1:A:115:HIS:CG	0.47	2.68	13	8
1:A:130:LEU:HD11	1:A:137:LEU:HD23	0.47	1.86	11	1
1:A:54:ILE:HD12	1:A:101:LEU:HD21	0.47	1.87	16	1
1:A:8:LYS:O	1:A:11:VAL:HG22	0.47	2.10	17	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:135:TYR:CE1	1:A:142:LEU:CD2	0.47	2.97	9	4
1:A:2:LEU:HD11	1:A:97:TYR:HD2	0.47	1.67	11	1
1:A:54:ILE:HD12	1:A:101:LEU:CD1	0.47	2.35	4	1
1:A:101:LEU:HD12	1:A:101:LEU:C	0.47	2.30	13	9
1:A:109:LYS:O	1:A:113:ILE:CG1	0.47	2.63	14	13
1:A:142:LEU:CG	1:A:151:LEU:HD13	0.47	2.40	8	2
1:A:53:LEU:C	1:A:53:LEU:HD22	0.47	2.29	4	1
1:A:142:LEU:C	1:A:142:LEU:HD22	0.47	2.29	21	1
1:A:135:TYR:CD2	1:A:142:LEU:HD21	0.47	2.45	15	2
1:A:90:ILE:HD11	1:A:99:LEU:HD12	0.47	1.87	10	1
1:A:47:LEU:N	1:A:47:LEU:HD23	0.47	2.25	6	3
1:A:169:ILE:HD11	1:A:172:LYS:HB2	0.47	1.86	7	1
1:A:129:ALA:CB	1:A:165:PHE:CD1	0.47	2.98	19	11
1:A:137:LEU:HD12	1:A:137:LEU:C	0.47	2.30	2	5
1:A:142:LEU:HD22	1:A:151:LEU:HD22	0.47	1.87	15	1
1:A:104:ALA:HB1	1:A:108:GLU:OE1	0.47	2.10	18	1
1:A:53:LEU:CD2	1:A:102:PHE:CE2	0.46	2.98	11	9
1:A:13:HIS:CE1	1:A:92:TRP:CE3	0.46	3.02	14	2
1:A:91:GLU:HA	1:A:95:LYS:O	0.46	2.10	14	6
1:A:33:ASN:O	1:A:34:ILE:HD13	0.46	2.10	17	2
1:A:56:VAL:HG23	1:A:103:THR:HB	0.46	1.87	15	1
1:A:79:LYS:CG	1:A:80:VAL:HG23	0.46	2.37	6	1
1:A:66:LEU:N	1:A:67:PRO:CD	0.46	2.78	19	13
1:A:66:LEU:HD22	1:A:83:GLU:CA	0.46	2.40	3	2
1:A:66:LEU:HD13	1:A:84:ARG:H	0.46	1.70	2	2
1:A:153:ILE:CG1	1:A:159:LEU:CA	0.46	2.94	4	20
1:A:112:ALA:O	1:A:116:PHE:HB2	0.46	2.11	18	8
1:A:106:ALA:O	1:A:109:LYS:CG	0.46	2.63	21	1
1:A:159:LEU:HG	1:A:160:ILE:N	0.46	2.26	4	10
1:A:126:ILE:CD1	1:A:165:PHE:CE2	0.46	2.98	11	11
1:A:69:ILE:O	1:A:69:ILE:CG2	0.46	2.63	11	4
1:A:56:VAL:HG22	1:A:65:VAL:CG1	0.46	2.41	14	2
1:A:66:LEU:HD23	1:A:66:LEU:C	0.46	2.31	3	2
1:A:53:LEU:CG	1:A:102:PHE:CZ	0.46	2.99	15	8
1:A:2:LEU:CD1	1:A:97:TYR:CZ	0.46	2.99	10	1
1:A:37:VAL:CG2	1:A:116:PHE:CD1	0.46	2.99	2	1
1:A:137:LEU:HD12	1:A:159:LEU:CD1	0.46	2.41	12	1
1:A:113:ILE:HD12	1:A:114:PHE:N	0.46	2.26	14	6
1:A:53:LEU:HD22	1:A:53:LEU:C	0.46	2.31	19	1
1:A:109:LYS:N	1:A:110:PRO:HD2	0.46	2.26	12	19
1:A:5:ILE:HG23	1:A:6:GLN:N	0.46	2.26	16	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:LEU:CD2	1:A:102:PHE:CZ	0.46	2.99	6	6
1:A:142:LEU:HD22	1:A:163:LEU:HD22	0.46	1.88	7	1
1:A:4:LEU:HD12	1:A:40:LEU:HD23	0.46	1.87	19	1
1:A:64:HIS:CE1	1:A:68:ASN:ND2	0.46	2.84	4	2
1:A:142:LEU:HD23	1:A:142:LEU:C	0.46	2.30	13	1
1:A:143:PHE:CZ	1:A:148:LEU:CD1	0.46	2.99	7	5
1:A:19:ALA:C	1:A:69:ILE:HD12	0.46	2.31	5	2
1:A:22:TYR:CD1	1:A:64:HIS:NE2	0.45	2.84	19	4
1:A:33:ASN:N	1:A:33:ASN:OD1	0.45	2.48	10	4
1:A:66:LEU:C	1:A:66:LEU:HD12	0.45	2.32	16	2
1:A:142:LEU:HD22	1:A:142:LEU:C	0.45	2.31	14	1
1:A:4:LEU:HD22	1:A:44:GLU:O	0.45	2.11	10	2
1:A:129:ALA:HB1	1:A:165:PHE:CD1	0.45	2.46	6	3
1:A:159:LEU:HD12	1:A:163:LEU:CD1	0.45	2.41	4	1
1:A:112:ALA:HB2	1:A:139:GLN:HG3	0.45	1.88	17	1
1:A:159:LEU:O	1:A:163:LEU:HD22	0.45	2.10	5	1
1:A:18:LEU:HG	1:A:69:ILE:HD11	0.45	1.88	12	2
1:A:126:ILE:HG21	1:A:137:LEU:HD21	0.45	1.88	12	1
1:A:15:ARG:HG3	1:A:34:ILE:HD12	0.45	1.87	1	1
1:A:174:LEU:O	1:A:174:LEU:HD12	0.45	2.12	1	1
1:A:66:LEU:O	1:A:66:LEU:HD22	0.45	2.12	4	1
1:A:108:GLU:HB3	1:A:140:TYR:N	0.45	2.27	3	7
1:A:20:PHE:CD1	1:A:20:PHE:N	0.45	2.85	2	2
1:A:61:LEU:HD12	1:A:65:VAL:HG22	0.45	1.87	11	2
1:A:56:VAL:CG1	1:A:61:LEU:CB	0.45	2.95	6	3
1:A:139:GLN:O	1:A:139:GLN:HG3	0.45	2.12	7	1
1:A:42:ARG:O	1:A:43:GLU:C	0.45	2.55	3	4
1:A:53:LEU:HD23	1:A:113:ILE:CG2	0.45	2.33	21	1
1:A:65:VAL:CG1	1:A:66:LEU:N	0.45	2.80	14	3
1:A:90:ILE:HD11	1:A:99:LEU:CD1	0.45	2.42	10	1
1:A:20:PHE:CD2	1:A:65:VAL:CG2	0.44	3.00	4	3
1:A:20:PHE:CE2	1:A:27:ILE:CG1	0.44	3.00	11	2
1:A:109:LYS:N	1:A:110:PRO:CD	0.44	2.81	15	21
1:A:120:VAL:HG23	1:A:121:SER:N	0.44	2.27	14	5
1:A:144:LYS:HB2	1:A:149:VAL:HG11	0.44	1.88	14	2
1:A:71:ILE:HD12	1:A:76:PHE:CG	0.44	2.48	11	2
1:A:88:LEU:HD23	1:A:99:LEU:O	0.44	2.12	10	1
1:A:142:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HD13	0.44	1.88	7	1
1:A:88:LEU:HD23	1:A:90:ILE:CG2	0.44	2.41	7	1
1:A:53:LEU:CD1	1:A:55:ILE:CD1	0.44	2.95	16	14
1:A:174:LEU:C	1:A:174:LEU:HD12	0.44	2.33	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:119:PRO:O	1:A:123:LEU:HD12	0.44	2.13	3	1
1:A:174:LEU:O	1:A:174:LEU:HD13	0.44	2.13	6	1
1:A:14:LEU:HD12	1:A:18:LEU:HD12	0.44	1.89	17	1
1:A:26:LEU:HD12	1:A:26:LEU:N	0.44	2.27	21	1
1:A:22:TYR:CE2	1:A:61:LEU:CD2	0.44	3.01	8	1
1:A:53:LEU:HD13	1:A:102:PHE:CD2	0.44	2.48	3	1
1:A:13:HIS:CD2	1:A:13:HIS:C	0.44	2.91	3	10
1:A:20:PHE:CG	1:A:65:VAL:HG13	0.44	2.48	1	1
1:A:157:LYS:CG	1:A:167:TYR:CE1	0.44	3.00	21	1
1:A:62:LEU:O	1:A:66:LEU:HD11	0.44	2.13	7	1
1:A:62:LEU:HD23	1:A:62:LEU:O	0.44	2.12	6	1
1:A:47:LEU:HD22	1:A:49:ASP:O	0.44	2.12	12	1
1:A:107:GLU:O	1:A:111:TYR:CD1	0.43	2.71	14	1
1:A:80:VAL:HG22	1:A:87:VAL:HB	0.43	1.90	4	1
1:A:54:ILE:HD11	1:A:101:LEU:HD13	0.43	1.90	6	1
1:A:13:HIS:C	1:A:13:HIS:CD2	0.43	2.90	19	11
1:A:20:PHE:N	1:A:20:PHE:CD1	0.43	2.86	8	2
1:A:61:LEU:HD12	1:A:65:VAL:HG13	0.43	1.85	2	1
1:A:15:ARG:HB2	1:A:34:ILE:HD12	0.43	1.89	5	1
1:A:92:TRP:CE2	1:A:93:GLU:HG3	0.43	2.48	14	7
1:A:142:LEU:HD22	1:A:163:LEU:HD23	0.43	1.89	4	1
1:A:19:ALA:O	1:A:69:ILE:HD12	0.43	2.13	16	2
1:A:6:GLN:O	1:A:9:LYS:CG	0.43	2.66	2	1
1:A:61:LEU:O	1:A:65:VAL:HG13	0.43	2.13	5	1
1:A:77:SER:CB	1:A:89:PHE:CE2	0.43	3.01	3	3
1:A:137:LEU:HD22	1:A:163:LEU:HD11	0.43	1.89	4	1
1:A:108:GLU:HB2	1:A:139:GLN:HA	0.43	1.89	17	2
1:A:111:TYR:CE2	1:A:151:LEU:HD11	0.43	2.48	19	2
1:A:53:LEU:HB2	1:A:102:PHE:CZ	0.43	2.48	20	5
1:A:159:LEU:C	1:A:159:LEU:HD13	0.43	2.33	9	1
1:A:53:LEU:HD23	1:A:102:PHE:CD2	0.43	2.49	11	2
1:A:91:GLU:CA	1:A:95:LYS:O	0.43	2.67	21	17
1:A:159:LEU:HD13	1:A:160:ILE:CG1	0.43	2.44	9	1
1:A:66:LEU:HD11	1:A:86:CYS:HB2	0.43	1.90	9	1
1:A:77:SER:O	1:A:88:LEU:HB2	0.43	2.14	18	4
1:A:2:LEU:HD21	1:A:7:GLY:CA	0.43	2.43	3	1
1:A:10:ILE:HA	1:A:13:HIS:ND1	0.43	2.29	21	18
1:A:137:LEU:CD2	1:A:163:LEU:CD1	0.43	2.96	4	3
1:A:18:LEU:HD21	1:A:54:ILE:HD11	0.43	1.90	2	1
1:A:37:VAL:HG21	1:A:116:PHE:CD1	0.43	2.49	2	1
1:A:139:GLN:O	1:A:140:TYR:CG	0.43	2.72	2	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:ALA:HB1	1:A:108:GLU:CD	0.43	2.33	18	1
1:A:142:LEU:HD22	1:A:143:PHE:H	0.43	1.74	2	1
1:A:20:PHE:CD2	1:A:65:VAL:HG23	0.43	2.48	4	2
1:A:111:TYR:CA	1:A:159:LEU:HD22	0.43	2.43	14	1
1:A:111:TYR:CE1	1:A:159:LEU:CD1	0.43	2.99	4	1
1:A:114:PHE:CD2	1:A:173:ARG:NH2	0.43	2.86	12	1
1:A:7:GLY:O	1:A:10:ILE:HB	0.43	2.13	21	12
1:A:53:LEU:HB2	1:A:102:PHE:CE1	0.43	2.48	16	7
1:A:111:TYR:CD1	1:A:137:LEU:HB2	0.43	2.49	3	5
1:A:26:LEU:CD1	1:A:26:LEU:N	0.43	2.82	21	1
1:A:66:LEU:HD13	1:A:103:THR:OG1	0.43	2.14	18	1
1:A:142:LEU:HD23	1:A:151:LEU:HB2	0.43	1.90	7	1
1:A:4:LEU:CD1	1:A:40:LEU:HD23	0.43	2.44	7	1
1:A:101:LEU:HD12	1:A:102:PHE:N	0.43	2.29	6	1
1:A:143:PHE:CE2	1:A:148:LEU:HB2	0.43	2.49	1	17
1:A:66:LEU:HG	1:A:101:LEU:HD11	0.43	1.90	13	2
1:A:139:GLN:O	1:A:140:TYR:CD2	0.42	2.72	9	4
1:A:89:PHE:CD1	1:A:96:THR:CG2	0.42	3.01	5	1
1:A:20:PHE:CE2	1:A:27:ILE:HG13	0.42	2.49	11	1
1:A:109:LYS:HG3	1:A:110:PRO:HD3	0.42	1.90	21	1
1:A:13:HIS:NE2	1:A:14:LEU:CD2	0.42	2.82	17	4
1:A:91:GLU:HA	1:A:96:THR:HA	0.42	1.91	14	2
1:A:137:LEU:CD1	1:A:137:LEU:H	0.42	2.28	21	1
1:A:151:LEU:HD22	1:A:152:LYS:O	0.42	2.14	19	4
1:A:133:LYS:O	1:A:134:ASN:CB	0.42	2.67	20	10
1:A:20:PHE:CB	1:A:65:VAL:HG13	0.42	2.43	1	1
1:A:135:TYR:CZ	1:A:142:LEU:HD21	0.42	2.50	5	3
1:A:139:GLN:O	1:A:139:GLN:CG	0.42	2.68	7	1
1:A:37:VAL:CG1	1:A:116:PHE:HB3	0.42	2.43	7	6
1:A:89:PHE:CE2	1:A:98:GLN:OE1	0.42	2.72	16	1
1:A:74:LEU:HD23	1:A:92:TRP:HB3	0.42	1.90	19	3
1:A:31:SER:O	1:A:34:ILE:CG1	0.42	2.68	2	2
1:A:143:PHE:CE1	1:A:148:LEU:HG	0.42	2.50	6	4
1:A:156:GLU:O	1:A:159:LEU:HD23	0.42	2.15	21	2
1:A:2:LEU:HD13	1:A:7:GLY:N	0.42	2.30	19	1
1:A:66:LEU:HD12	1:A:66:LEU:C	0.42	2.35	14	1
1:A:137:LEU:C	1:A:137:LEU:HD12	0.42	2.35	14	2
1:A:14:LEU:HD12	1:A:18:LEU:HD22	0.42	1.90	15	1
1:A:22:TYR:CE2	1:A:61:LEU:HD21	0.42	2.49	8	1
1:A:55:ILE:CD1	1:A:109:LYS:CG	0.42	2.98	8	2
1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CD1	0.42	2.83	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:ILE:CD1	1:A:109:LYS:HG3	0.42	2.42	6	2
1:A:14:LEU:CD1	1:A:18:LEU:HD12	0.42	2.45	10	1
1:A:89:PHE:CD1	1:A:89:PHE:N	0.42	2.85	10	1
1:A:137:LEU:CD2	1:A:163:LEU:CD2	0.41	2.98	9	2
1:A:108:GLU:OE2	1:A:140:TYR:CD1	0.41	2.73	16	2
1:A:37:VAL:HG11	1:A:116:PHE:CG	0.41	2.49	16	1
1:A:63:LYS:O	1:A:67:PRO:CG	0.41	2.67	3	2
1:A:134:ASN:OD1	1:A:134:ASN:N	0.41	2.53	1	1
1:A:53:LEU:CD1	1:A:55:ILE:HD13	0.41	2.45	14	2
1:A:56:VAL:CG1	1:A:61:LEU:HB3	0.41	2.45	14	1
1:A:136:LYS:N	1:A:143:PHE:O	0.41	2.52	10	2
1:A:126:ILE:CD1	1:A:165:PHE:CE1	0.41	3.04	2	1
1:A:137:LEU:CD2	1:A:137:LEU:C	0.41	2.89	21	1
1:A:88:LEU:C	1:A:88:LEU:HD22	0.41	2.36	7	1
1:A:20:PHE:CE2	1:A:27:ILE:HB	0.41	2.51	4	1
1:A:14:LEU:CD1	1:A:18:LEU:HD13	0.41	2.46	15	1
1:A:53:LEU:HD21	1:A:104:ALA:CB	0.41	2.46	18	1
1:A:35:VAL:HG11	1:A:113:ILE:CG1	0.41	2.46	7	1
1:A:137:LEU:HD12	1:A:137:LEU:O	0.41	2.16	7	1
1:A:2:LEU:CD1	1:A:3:THR:O	0.41	2.69	16	1
1:A:130:LEU:CB	1:A:135:TYR:O	0.41	2.68	2	4
1:A:89:PHE:CD2	1:A:98:GLN:OE1	0.41	2.74	11	1
1:A:4:LEU:HA	1:A:47:LEU:HD11	0.41	1.91	21	1
1:A:143:PHE:HZ	1:A:148:LEU:HD12	0.41	1.71	18	1
1:A:66:LEU:HD12	1:A:83:GLU:O	0.41	2.16	17	1
1:A:112:ALA:CB	1:A:139:GLN:HB3	0.41	2.45	19	3
1:A:37:VAL:HB	1:A:116:PHE:HB3	0.41	1.92	14	3
1:A:92:TRP:CD2	1:A:93:GLU:HG3	0.41	2.50	14	2
1:A:130:LEU:HD22	1:A:163:LEU:HB3	0.41	1.91	12	1
1:A:139:GLN:CG	1:A:139:GLN:O	0.41	2.68	19	1
1:A:53:LEU:HD22	1:A:102:PHE:CE2	0.41	2.50	3	2
1:A:14:LEU:O	1:A:18:LEU:HD12	0.41	2.15	14	1
1:A:62:LEU:O	1:A:66:LEU:HD12	0.41	2.15	15	1
1:A:143:PHE:CZ	1:A:148:LEU:CG	0.41	3.03	7	1
1:A:22:TYR:CE1	1:A:64:HIS:NE2	0.41	2.88	8	1
1:A:114:PHE:CE1	1:A:137:LEU:HD21	0.41	2.51	13	1
1:A:120:VAL:CG1	1:A:121:SER:N	0.41	2.84	20	2
1:A:90:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HD12	0.41	1.92	3	1
1:A:137:LEU:CD1	1:A:159:LEU:CD1	0.41	2.99	12	1
1:A:13:HIS:NE2	1:A:14:LEU:HD22	0.41	2.31	19	1
1:A:29:ILE:CD1	1:A:69:ILE:HD11	0.41	2.45	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:LEU:CD1	1:A:105:LEU:HD22	0.41	2.46	2	1
1:A:90:ILE:CD1	1:A:99:LEU:HD22	0.41	2.45	11	1
1:A:111:TYR:CD2	1:A:137:LEU:HB2	0.41	2.50	16	1
1:A:111:TYR:HH	1:A:151:LEU:HD22	0.41	1.73	16	1
1:A:169:ILE:CD1	1:A:171:LYS:CG	0.41	2.99	1	1
1:A:47:LEU:CD2	1:A:47:LEU:O	0.41	2.69	21	1
1:A:58:GLU:CB	1:A:61:LEU:HD12	0.41	2.46	15	1
1:A:77:SER:HB2	1:A:89:PHE:CE2	0.41	2.51	18	1
1:A:115:HIS:ND1	1:A:137:LEU:HD13	0.41	2.31	6	1
1:A:62:LEU:CD1	1:A:105:LEU:CD2	0.41	2.99	6	1
1:A:63:LYS:O	1:A:67:PRO:HG3	0.40	2.16	11	1
1:A:111:TYR:CE2	1:A:137:LEU:HB2	0.40	2.51	16	2
1:A:22:TYR:CD2	1:A:23:ASN:OD1	0.40	2.74	6	1
1:A:159:LEU:C	1:A:159:LEU:CD2	0.40	2.83	9	1
1:A:79:LYS:HB2	1:A:89:PHE:CZ	0.40	2.52	10	1
1:A:81:CYS:HA	1:A:86:CYS:HA	0.40	1.93	3	1
1:A:61:LEU:CD2	1:A:65:VAL:CG2	0.40	2.98	7	1
1:A:55:ILE:N	1:A:55:ILE:CD1	0.40	2.80	12	1
1:A:18:LEU:HD23	1:A:69:ILE:HD11	0.40	1.93	1	1
1:A:53:LEU:HG	1:A:102:PHE:CZ	0.40	2.51	5	1
1:A:37:VAL:HG23	1:A:51:ASP:CB	0.40	2.46	18	1
1:A:56:VAL:HG21	1:A:66:LEU:CD2	0.40	2.46	7	1
1:A:66:LEU:HB3	1:A:67:PRO:HD3	0.40	1.92	6	1
1:A:151:LEU:CD2	1:A:151:LEU:C	0.40	2.84	13	1
1:A:143:PHE:CZ	1:A:148:LEU:HG	0.40	2.51	5	1
1:A:115:HIS:HB2	1:A:123:LEU:HD21	0.40	1.92	20	1
1:A:92:TRP:CD1	1:A:92:TRP:C	0.40	2.95	10	1
1:A:109:LYS:HG2	1:A:110:PRO:N	0.40	2.29	15	1
1:A:77:SER:HB3	1:A:89:PHE:CZ	0.40	2.52	18	1
1:A:88:LEU:HD13	1:A:88:LEU:H	0.40	1.73	7	1
1:A:108:GLU:OE2	1:A:140:TYR:CG	0.40	2.75	5	1
1:A:149:VAL:HG13	1:A:149:VAL:O	0.40	2.17	5	1
1:A:118:GLY:O	1:A:122:TYR:CD2	0.40	2.75	3	1
1:A:61:LEU:HD23	1:A:65:VAL:HG12	0.40	1.88	17	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	172/174 (99%)	148±2 (86±1%)	15±2 (9±1%)	8±2 (5±1%)	5	27
All	All	3612/3654 (99%)	3116 (86%)	318 (9%)	178 (5%)	5	27

All 19 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	140	TYR	21
1	A	155	THR	21
1	A	139	GLN	21
1	A	156	GLU	20
1	A	57	PRO	19
1	A	134	ASN	16
1	A	145	ASN	9
1	A	43	GLU	9
1	A	138	ASN	9
1	A	80	VAL	8
1	A	84	ARG	5
1	A	81	CYS	4
1	A	105	LEU	4
1	A	173	ARG	3
1	A	46	MET	3
1	A	82	GLY	3
1	A	83	GLU	1
1	A	23	ASN	1
1	A	146	GLN	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	159/159 (100%)	114±4 (72±3%)	45±4 (28±3%)	2	20
All	All	3339/3339 (100%)	2396 (72%)	943 (28%)	2	20

All 122 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	92	TRP	21
1	A	153	ILE	21
1	A	115	HIS	21
1	A	33	ASN	21
1	A	75	SER	21
1	A	140	TYR	21
1	A	159	LEU	17
1	A	109	LYS	17
1	A	47	LEU	16
1	A	88	LEU	16
1	A	21	GLU	15
1	A	96	THR	15
1	A	61	LEU	15
1	A	69	ILE	15
1	A	171	LYS	15
1	A	52	LEU	14
1	A	100	ASP	14
1	A	91	GLU	14
1	A	158	GLU	14
1	A	157	LYS	13
1	A	27	ILE	12
1	A	147	THR	12
1	A	53	LEU	12
1	A	1	MET	11
1	A	105	LEU	11
1	A	81	CYS	11
1	A	127	ARG	11
1	A	40	LEU	11
1	A	138	ASN	11
1	A	132	LYS	10
1	A	72	LYS	10
1	A	133	LYS	10
1	A	145	ASN	10
1	A	94	LYS	10
1	A	8	LYS	10
1	A	15	ARG	9
1	A	131	LYS	9
1	A	137	LEU	9
1	A	44	GLU	9
1	A	95	LYS	9
1	A	172	LYS	9
1	A	46	MET	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	166	THR	8
1	A	152	LYS	8
1	A	60	LYS	8
1	A	65	VAL	8
1	A	103	THR	8
1	A	39	SER	8
1	A	13	HIS	8
1	A	58	GLU	8
1	A	14	LEU	8
1	A	154	THR	8
1	A	63	LYS	8
1	A	45	LYS	8
1	A	32	LYS	8
1	A	151	LEU	8
1	A	28	LYS	8
1	A	136	LYS	7
1	A	84	ARG	7
1	A	169	ILE	7
1	A	135	TYR	7
1	A	59	LYS	7
1	A	174	LEU	7
1	A	83	GLU	7
1	A	163	LEU	7
1	A	70	ARG	6
1	A	146	GLN	6
1	A	168	ARG	6
1	A	125	ARG	6
1	A	142	LEU	6
1	A	101	LEU	6
1	A	99	LEU	6
1	A	85	LYS	6
1	A	17	ARG	6
1	A	126	ILE	6
1	A	6	GLN	6
1	A	68	ASN	6
1	A	23	ASN	5
1	A	41	ARG	5
1	A	66	LEU	5
1	A	42	ARG	5
1	A	31	SER	5
1	A	161	LYS	5
1	A	64	HIS	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	144	LYS	5
1	A	3	THR	5
1	A	173	ARG	5
1	A	79	LYS	5
1	A	9	LYS	5
1	A	26	LEU	4
1	A	86	CYS	4
1	A	156	GLU	4
1	A	121	SER	4
1	A	12	ASN	4
1	A	107	GLU	4
1	A	18	LEU	4
1	A	98	GLN	3
1	A	5	ILE	3
1	A	16	SER	3
1	A	134	ASN	3
1	A	62	LEU	3
1	A	43	GLU	3
1	A	55	ILE	2
1	A	4	LEU	2
1	A	102	PHE	2
1	A	93	GLU	2
1	A	20	PHE	2
1	A	87	VAL	2
1	A	89	PHE	2
1	A	35	VAL	2
1	A	22	TYR	1
1	A	49	ASP	1
1	A	155	THR	1
1	A	51	ASP	1
1	A	2	LEU	1
1	A	54	ILE	1
1	A	74	LEU	1
1	A	30	LEU	1
1	A	108	GLU	1
1	A	10	ILE	1
1	A	48	ASN	1
1	A	114	PHE	1

6.3.3 RNA ⓘ

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