



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 05:59 PM BST

PDB ID : 1MYO
Title : SOLUTION STRUCTURE OF MYOTROPHIN, NMR, 44 STRUCTURES
Authors : Yang, Y.; Nanduri, S.; Sen, S.; Qin, J.
Deposited on : 1998-08-17

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

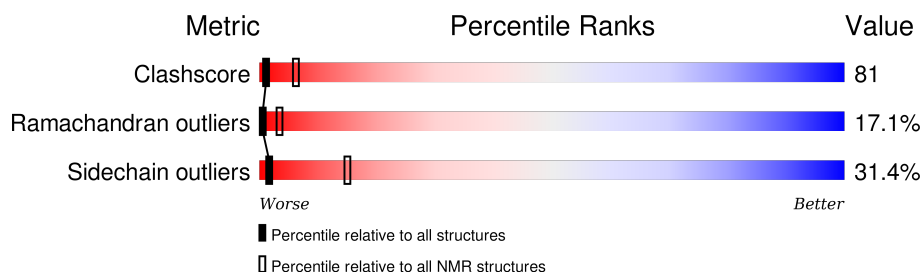
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

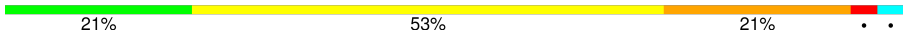
The overall completeness of chemical shifts assignment is 83%.

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	118	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 44 models. Model 38 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:4-A:118 (115)	0.30	38

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 10 clusters and 14 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	21, 24, 31, 35, 38, 42
2	3, 28, 30, 44
3	9, 10, 15, 34
4	1, 23, 36
5	2, 29, 32
6	6, 43
7	22, 26
8	14, 17
9	20, 27
10	18, 37
Single-model clusters	4; 5; 7; 8; 11; 12; 13; 16; 19; 25; 33; 39; 40; 41

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1815 atoms, of which 913 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called MYOTROPHIN.

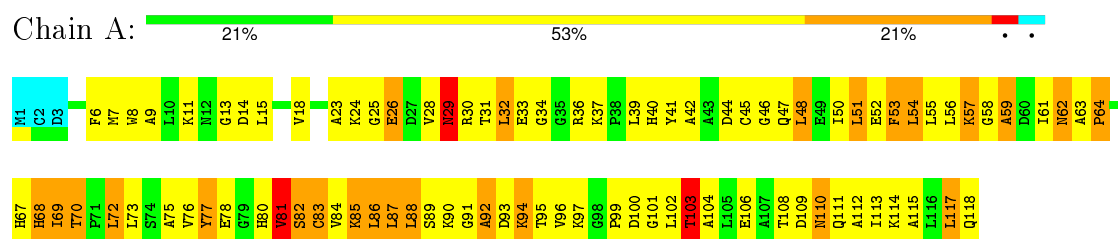
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	118	Total	C	H	N	O	S	0
			1815	570	913	152	175	5	

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: MYOTROPHIN

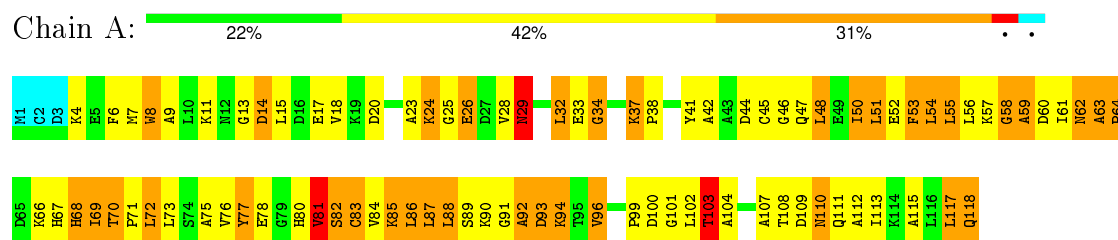


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

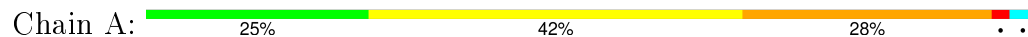
4.2.1 Score per residue for model 1

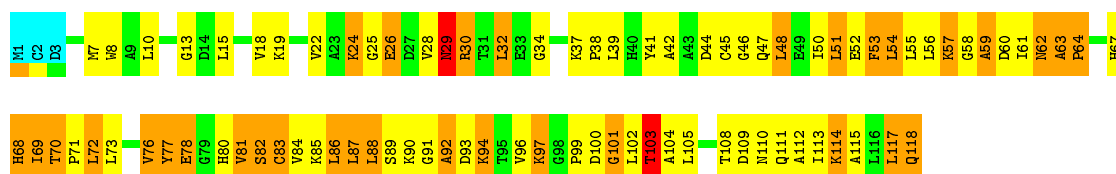
- Molecule 1: MYOTROPHIN



4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: MYOTROPHIN

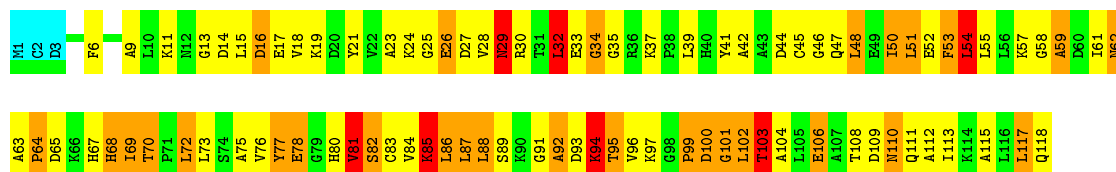




4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: MYOTROPHIN

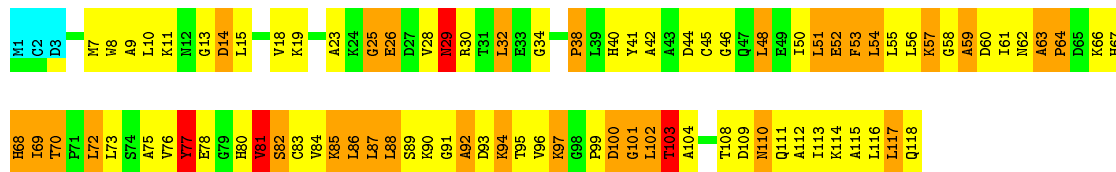
Chain A: 22% 45% 25% 6%



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: MYOTROPHIN

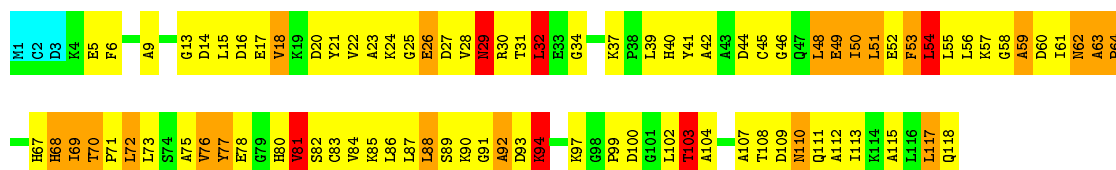
Chain A: 24% 44% 26%



4.2.5 Score per residue for model 5

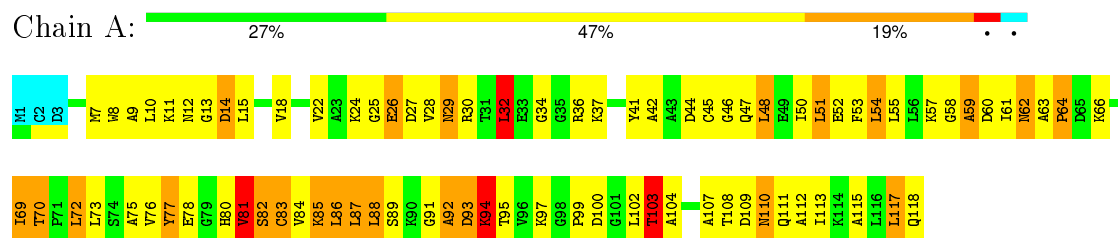
- Molecule 1: MYOTROPHIN

Chain A: 21% 53% 18% 5%



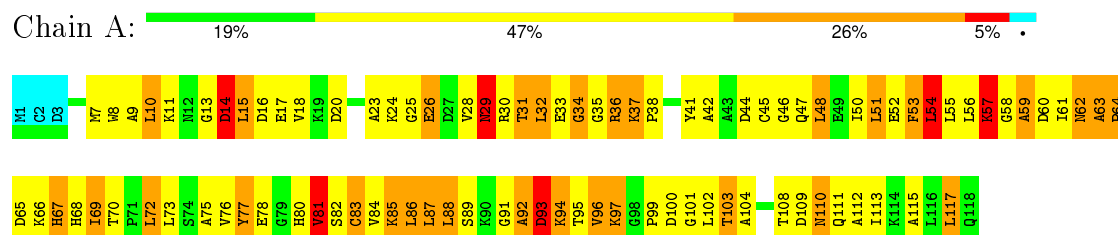
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: MYOTROPHIN



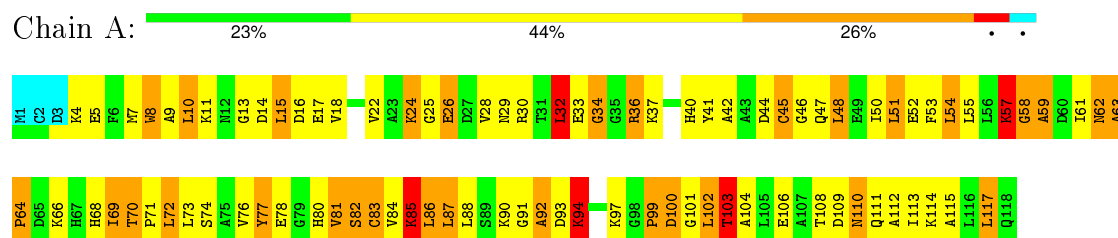
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: MYOTROPHIN



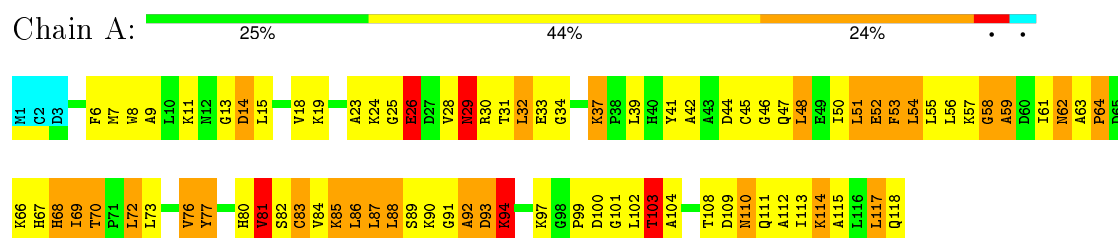
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: MYOTROPHIN



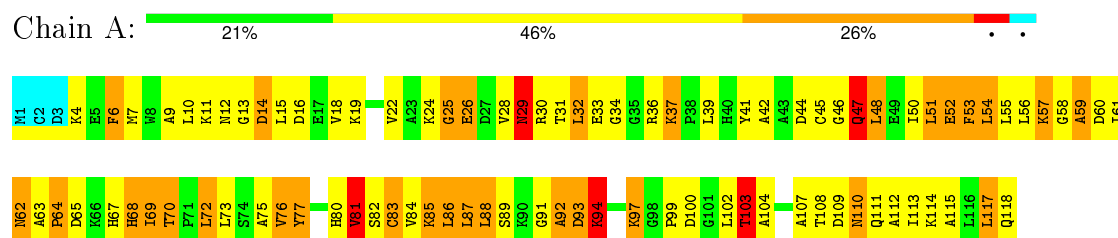
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: MYOTROPHIN



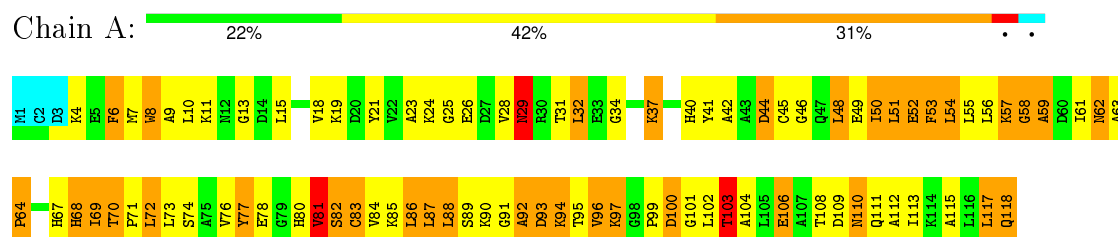
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: MYOTROPHIN



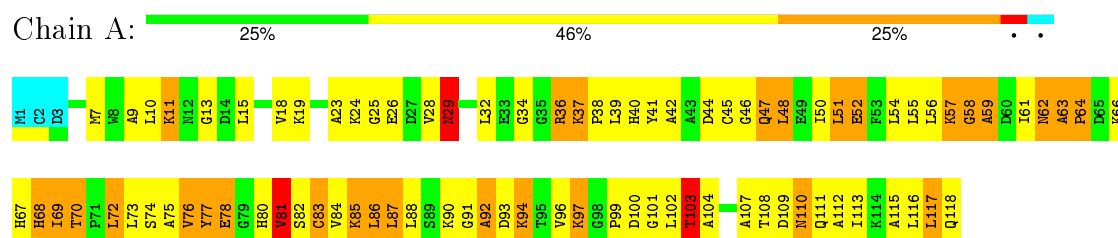
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: MYOTROPHIN



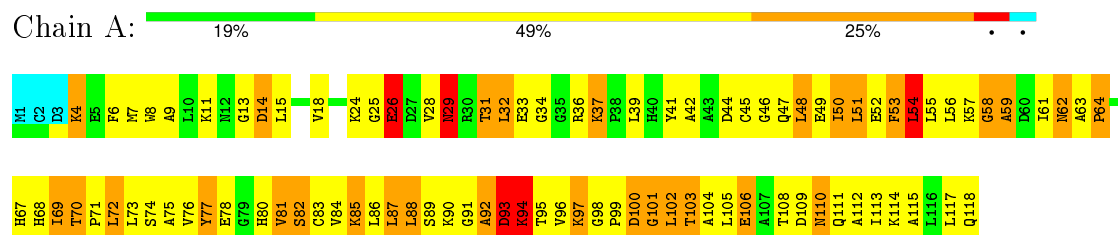
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: MYOTROPHIN



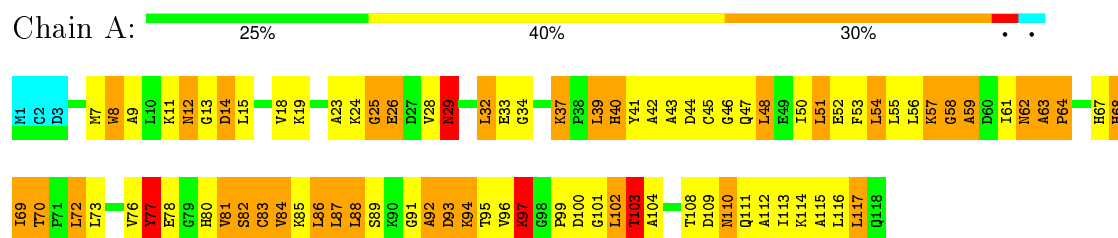
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: MYOTROPHIN



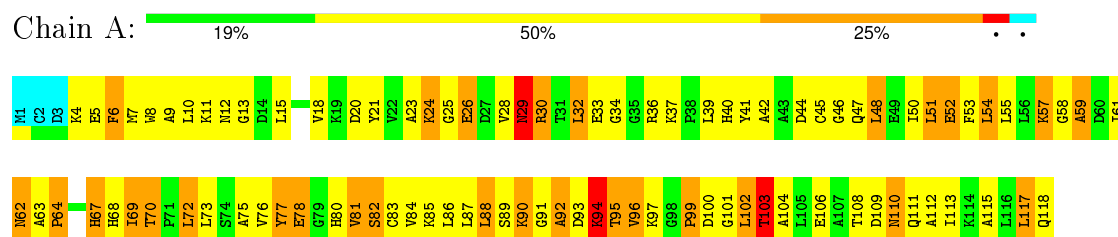
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: MYOTROPHIN



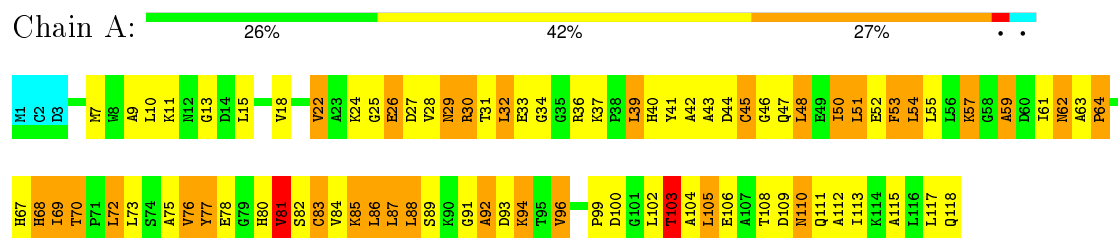
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: MYOTROPHIN



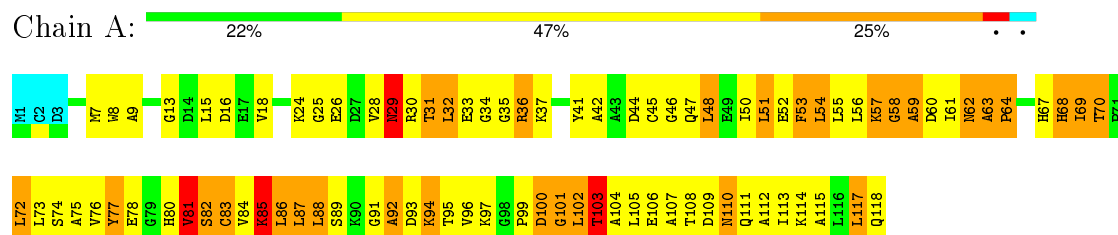
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: MYOTROPHIN



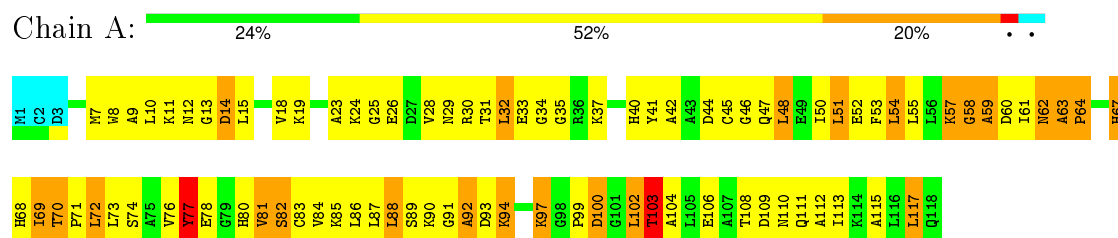
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: MYOTROPHIN



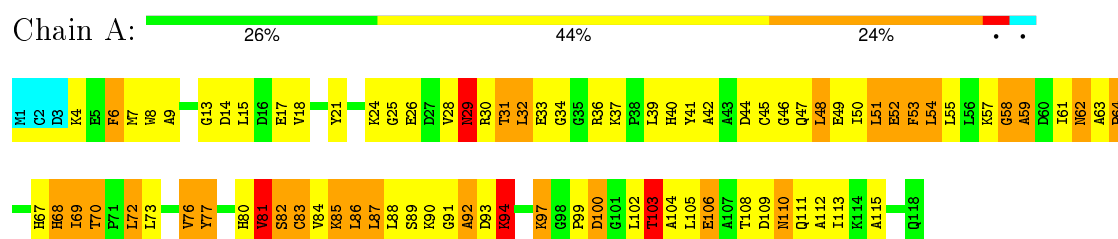
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: MYOTROPHIN



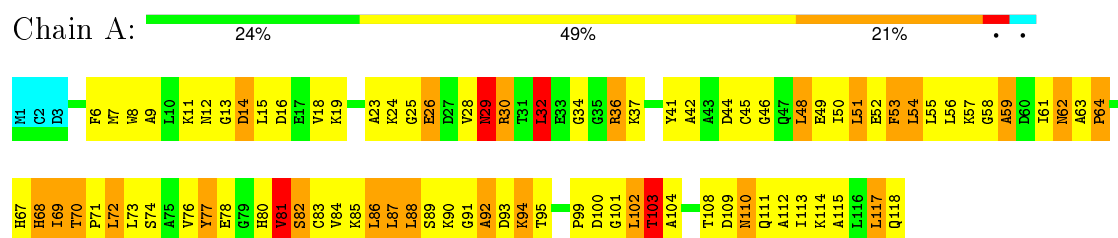
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: MYOTROPHIN



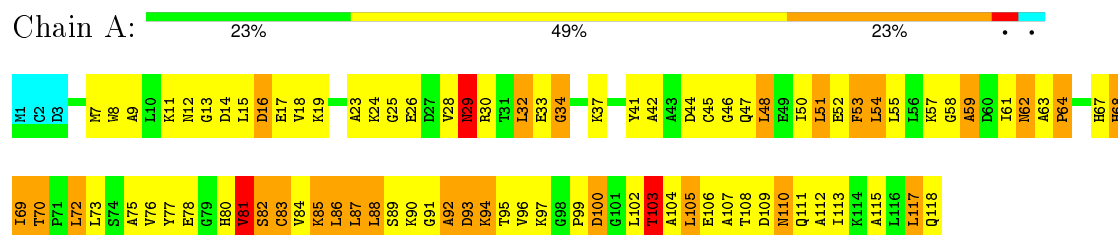
4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: MYOTROPHIN



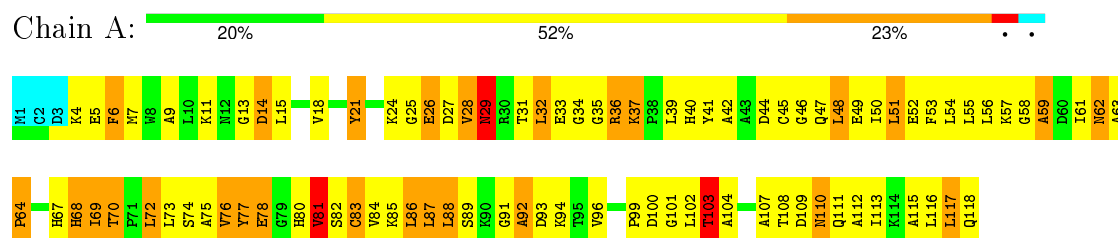
4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: MYOTROPHIN



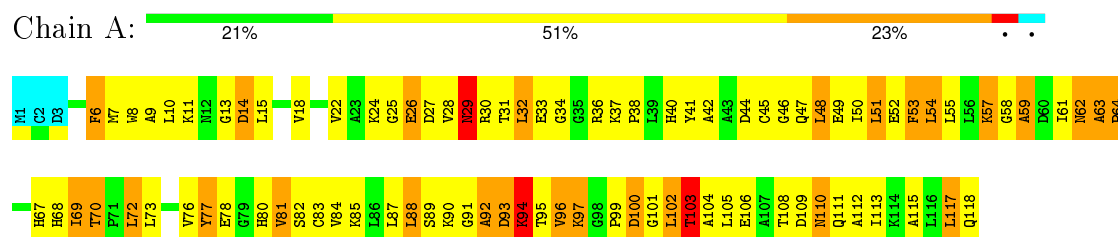
4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: MYOTROPHIN



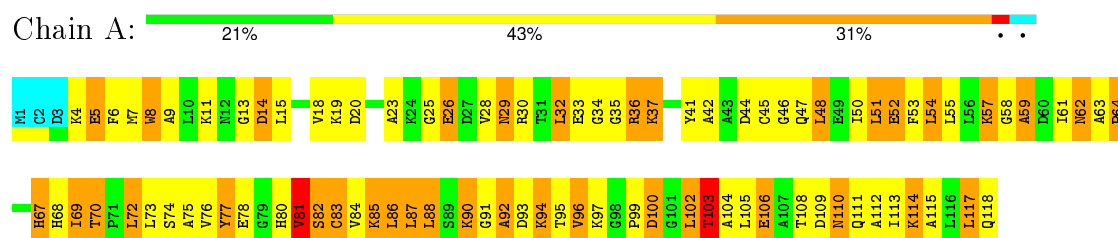
4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: MYOTROPHIN



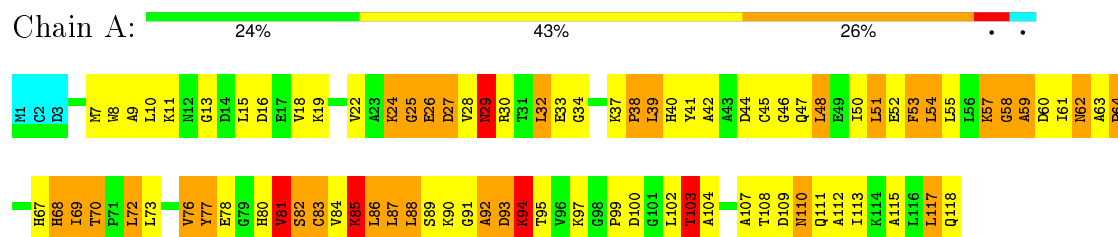
4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: MYOTROPHIN



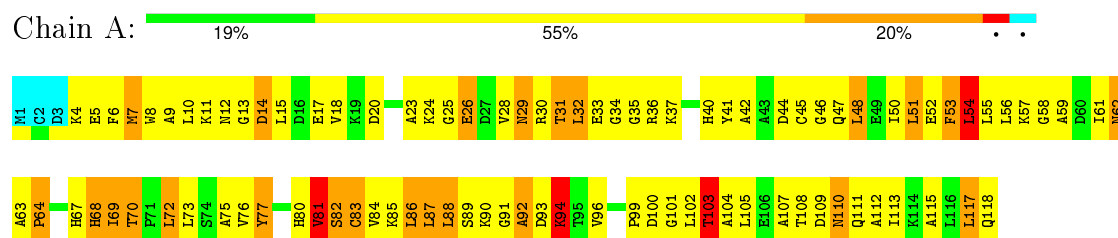
4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: MYOTROPHIN



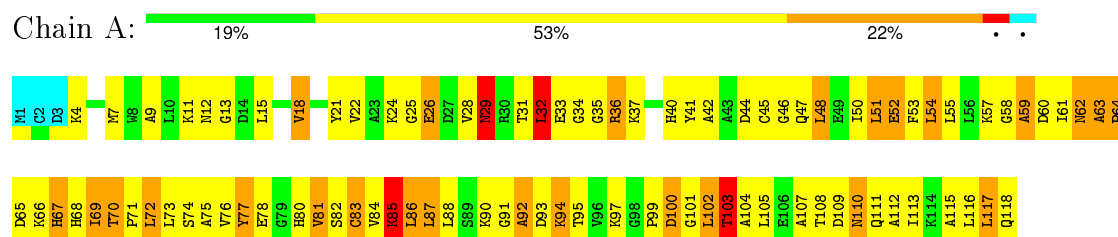
4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: MYOTROPHIN



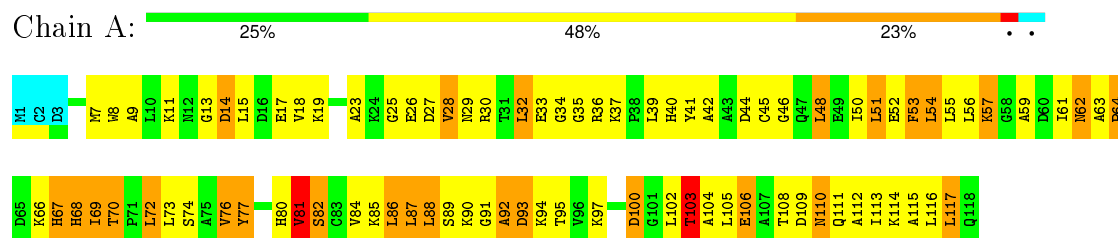
4.2.27 Score per residue for model 27

- Molecule 1: MYOTROPHIN



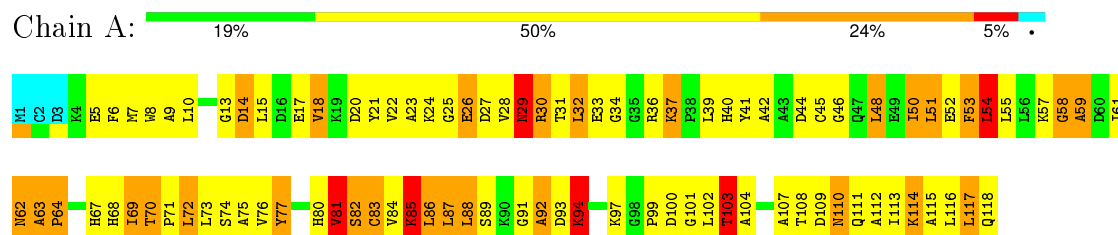
4.2.28 Score per residue for model 28

- Molecule 1: MYOTROPHIN



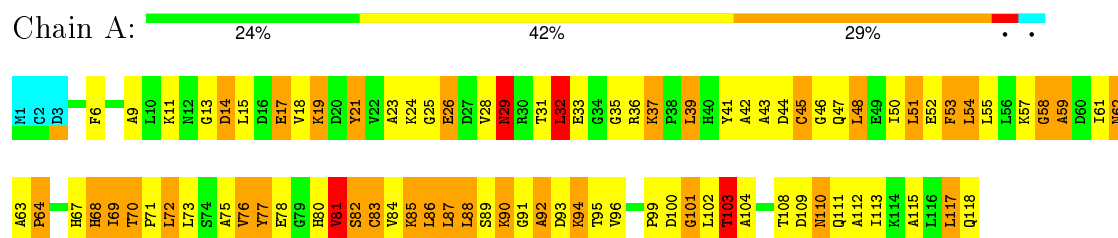
4.2.29 Score per residue for model 29

- Molecule 1: MYOTROPHIN



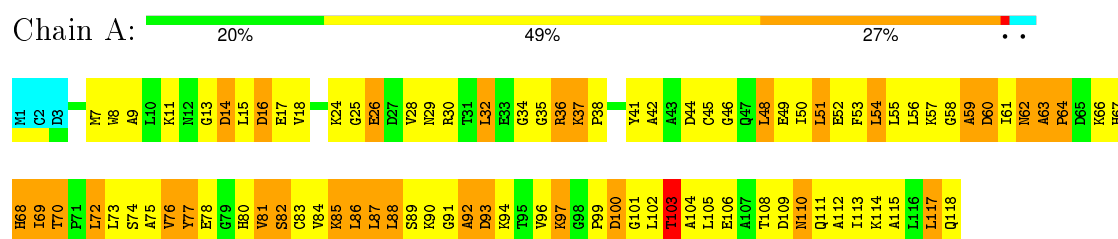
4.2.30 Score per residue for model 30

- Molecule 1: MYOTROPHIN



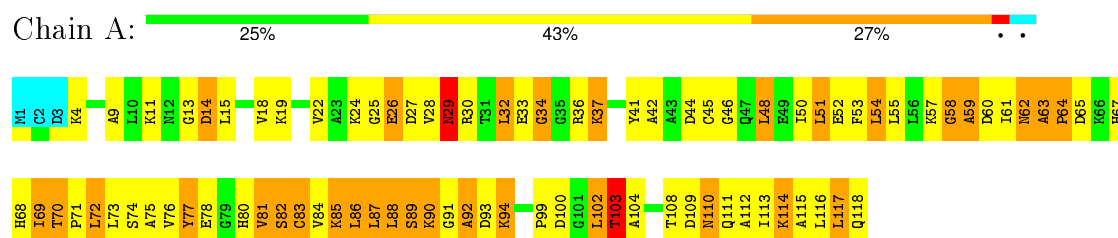
4.2.31 Score per residue for model 31

- Molecule 1: MYOTROPHIN



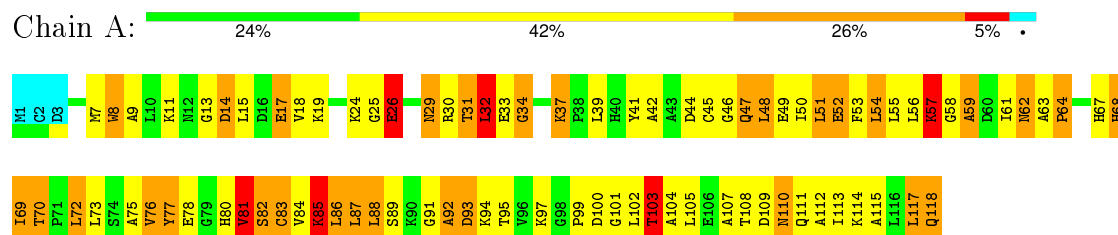
4.2.32 Score per residue for model 32

- Molecule 1: MYOTROPHIN



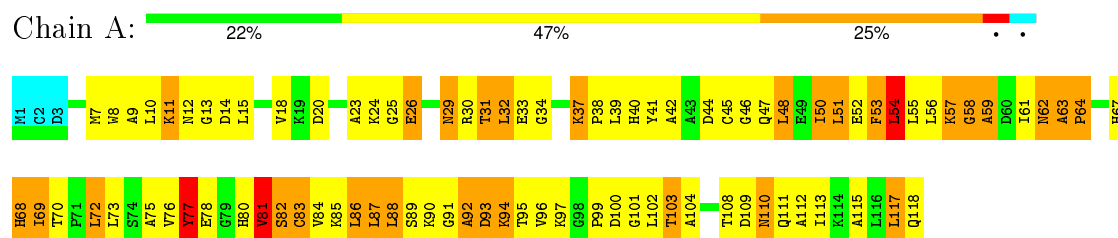
4.2.33 Score per residue for model 33

- Molecule 1: MYOTROPHIN



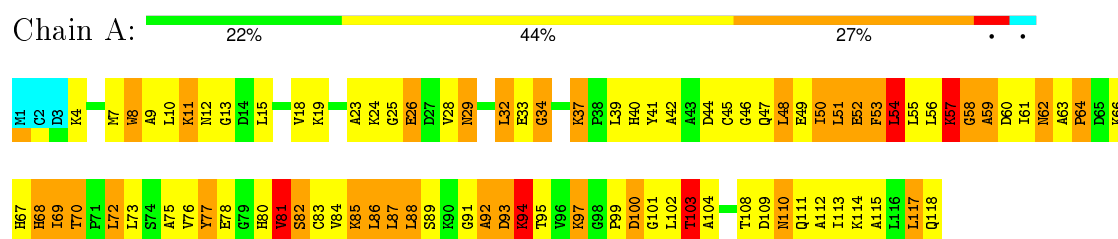
4.2.34 Score per residue for model 34

- Molecule 1: MYOTROPHIN



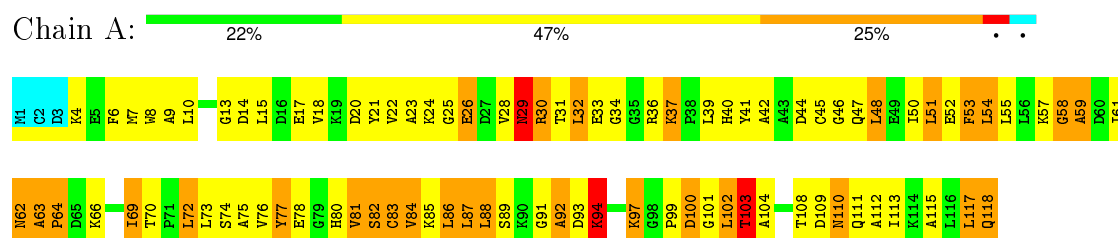
4.2.35 Score per residue for model 35

- Molecule 1: MYOTROPHIN



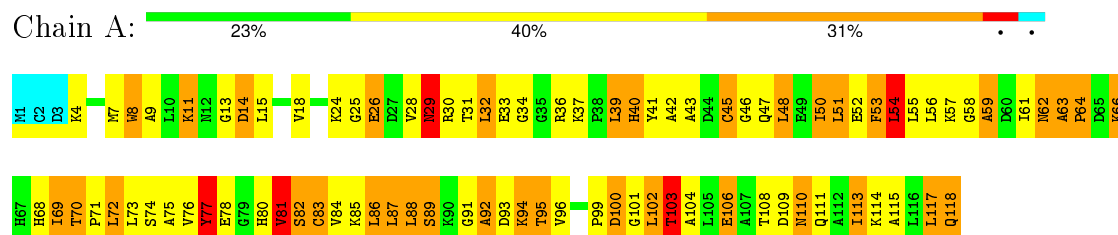
4.2.36 Score per residue for model 36

- Molecule 1: MYOTROPHIN



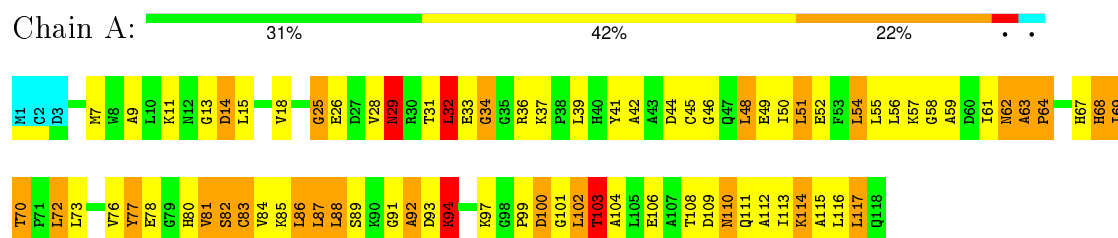
4.2.37 Score per residue for model 37

- Molecule 1: MYOTROPHIN



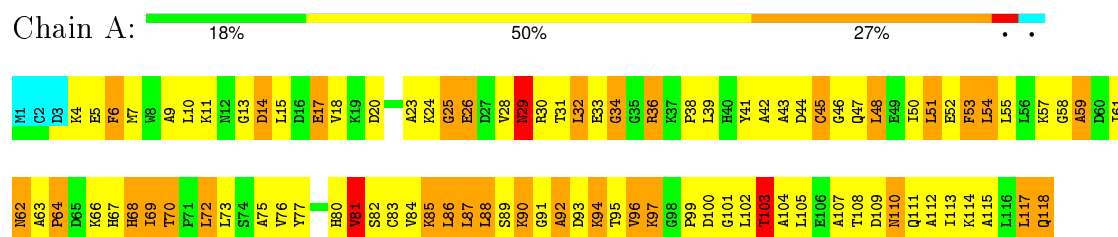
4.2.38 Score per residue for model 38 (medoid)

- Molecule 1: MYOTROPHIN



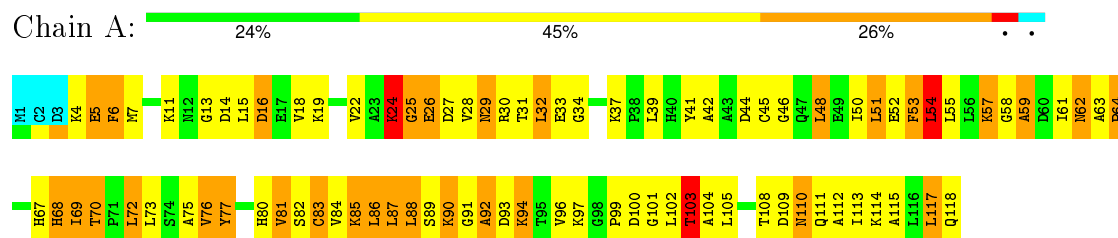
4.2.39 Score per residue for model 39

- Molecule 1: MYOTROPHIN



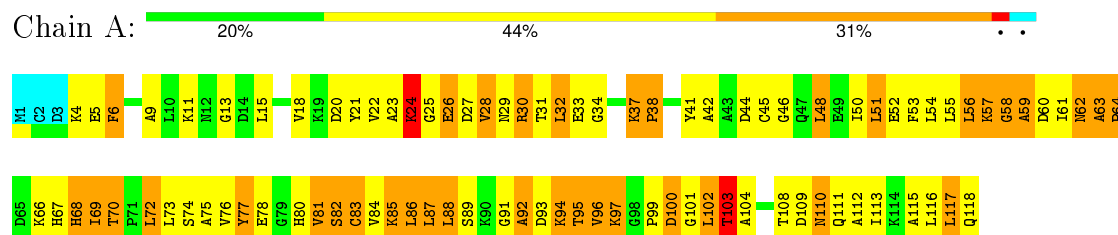
4.2.40 Score per residue for model 40

- Molecule 1: MYOTROPHIN



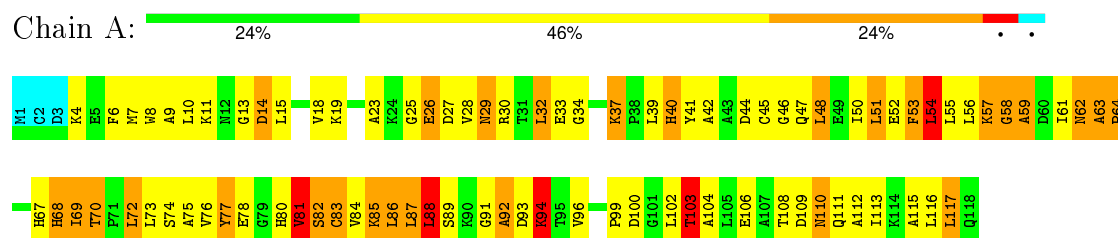
4.2.41 Score per residue for model 41

- Molecule 1: MYOTROPHIN



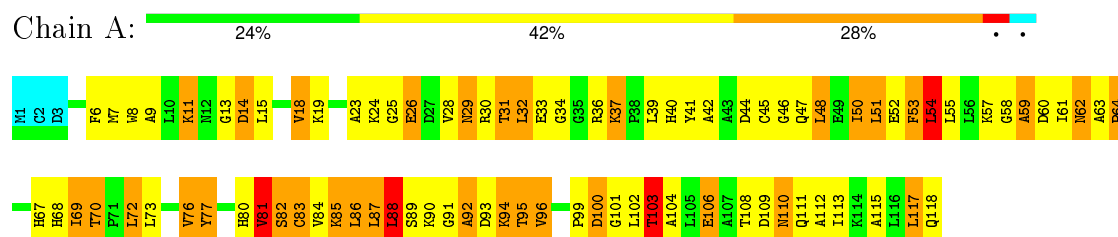
4.2.42 Score per residue for model 42

- Molecule 1: MYOTROPHIN



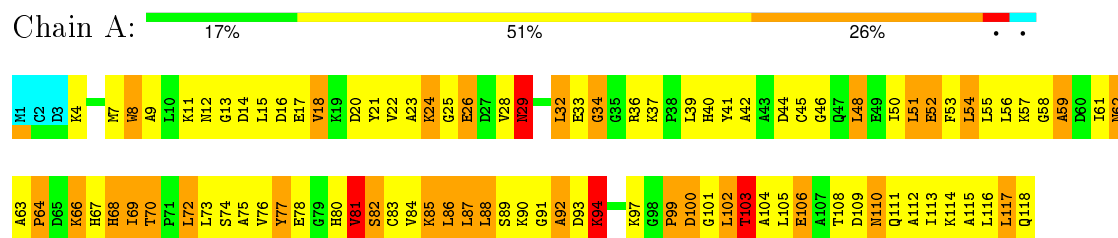
4.2.43 Score per residue for model 43

- Molecule 1: MYOTROPHIN



4.2.44 Score per residue for model 44

- Molecule 1: MYOTROPHIN



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *SIMULATED ANNEALING*.

Of the 90 calculated structures, 44 were deposited, based on the following criterion: *RESTRAINT VIOLATION*.

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

Software name	Classification	Version
XPLOR	structure solution	
XPLOR	refinement	

The following table shows chemical shift validation statistics as aggregates over all chemical shift files. Detailed validation can be found in section 7 of this report.

Chemical shift file(s)	BMRB entry 4224
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1313
Number of shifts mapped to atoms	1313
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	83%

No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 5$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the (average) root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.05±0.03	0±0/894 (0.0±0.0%)	0.94±0.03	0±0/1206 (0.0±0.0%)
All	All	1.05	1/39336 (0.0%)	0.94	0/53064 (0.0%)

All unique bond outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	38	PRO	CA-C	5.27	1.63	1.52	41	1

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	880	893	893	144±13
All	All	38720	39292	39292	6323

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 81.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:LEU:H	1:A:51:LEU:HD13	1.08	1.07	42	22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:LEU:HD13	1:A:51:LEU:H	1.07	1.10	15	22
1:A:61:ILE:HD11	1:A:92:ALA:HB2	1.06	1.25	44	44
1:A:86:LEU:O	1:A:86:LEU:HD22	1.02	1.52	40	12
1:A:86:LEU:HD22	1:A:86:LEU:O	1.02	1.54	20	12
1:A:117:LEU:O	1:A:117:LEU:HD12	0.99	1.55	28	13
1:A:117:LEU:HD12	1:A:117:LEU:O	0.98	1.58	22	10
1:A:32:LEU:HD13	1:A:32:LEU:H	0.98	1.17	39	13
1:A:32:LEU:HD22	1:A:33:GLU:N	0.97	1.74	1	20
1:A:72:LEU:HD22	1:A:72:LEU:H	0.97	1.19	18	8
1:A:72:LEU:H	1:A:72:LEU:HD22	0.93	1.24	32	8
1:A:32:LEU:N	1:A:36:ARG:HH12	0.93	1.59	7	1
1:A:72:LEU:HD13	1:A:72:LEU:N	0.91	1.80	16	23
1:A:14:ASP:O	1:A:16:ASP:N	0.89	2.05	7	2
1:A:72:LEU:N	1:A:72:LEU:HD13	0.89	1.82	28	21
1:A:110:ASN:HD21	1:A:113:ILE:HD12	0.88	1.27	13	5
1:A:103:THR:OG1	1:A:104:ALA:N	0.87	2.04	15	42
1:A:110:ASN:HD21	1:A:113:ILE:HD13	0.87	1.28	32	32
1:A:86:LEU:C	1:A:86:LEU:HD23	0.86	1.90	4	1
1:A:32:LEU:H	1:A:32:LEU:HD13	0.86	1.29	16	6
1:A:62:ASN:H	1:A:62:ASN:HD22	0.85	1.14	22	18
1:A:86:LEU:H	1:A:86:LEU:HD13	0.84	1.32	41	5
1:A:32:LEU:HD22	1:A:33:GLU:H	0.84	1.27	7	8
1:A:108:THR:HG21	1:A:110:ASN:ND2	0.84	1.87	26	37
1:A:51:LEU:N	1:A:51:LEU:HD13	0.84	1.88	1	23
1:A:86:LEU:HD13	1:A:87:LEU:N	0.84	1.87	28	24
1:A:86:LEU:HD13	1:A:86:LEU:H	0.83	1.32	3	9
1:A:86:LEU:HD13	1:A:86:LEU:C	0.83	1.92	34	18
1:A:80:HIS:O	1:A:82:SER:N	0.83	2.12	7	44
1:A:110:ASN:ND2	1:A:113:ILE:HD12	0.83	1.89	13	5
1:A:110:ASN:ND2	1:A:113:ILE:HD13	0.83	1.88	24	36
1:A:95:THR:HG22	1:A:103:THR:OG1	0.83	1.74	13	1
1:A:51:LEU:HD13	1:A:51:LEU:N	0.82	1.90	38	21
1:A:62:ASN:HD22	1:A:62:ASN:H	0.82	1.16	28	25
1:A:69:ILE:CD1	1:A:73:LEU:HD13	0.81	2.05	2	34
1:A:86:LEU:C	1:A:86:LEU:HD13	0.80	1.96	9	5
1:A:9:ALA:HB1	1:A:14:ASP:OD2	0.80	1.76	7	2
1:A:72:LEU:H	1:A:72:LEU:HD13	0.80	1.35	26	20
1:A:51:LEU:H	1:A:51:LEU:CD1	0.79	1.89	34	27
1:A:70:THR:OG1	1:A:72:LEU:CD2	0.79	2.31	34	44
1:A:102:LEU:O	1:A:103:THR:C	0.78	2.17	8	44
1:A:51:LEU:CD1	1:A:51:LEU:H	0.78	1.90	43	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:73:LEU:H	1:A:73:LEU:HD12	0.78	1.37	5	21
1:A:72:LEU:HD13	1:A:72:LEU:H	0.77	1.37	28	17
1:A:62:ASN:HD22	1:A:62:ASN:N	0.77	1.78	22	25
1:A:33:GLU:H	1:A:36:ARG:NH1	0.77	1.77	7	1
1:A:108:THR:HG21	1:A:110:ASN:HD21	0.76	1.40	26	34
1:A:70:THR:OG1	1:A:72:LEU:HD22	0.76	1.81	7	11
1:A:56:LEU:HD12	1:A:57:LYS:N	0.76	1.95	7	1
1:A:81:VAL:HG11	1:A:113:ILE:CG1	0.75	2.11	13	6
1:A:88:LEU:C	1:A:88:LEU:HD22	0.75	2.02	20	25
1:A:32:LEU:CD1	1:A:32:LEU:H	0.75	1.94	1	11
1:A:32:LEU:HD13	1:A:32:LEU:N	0.75	1.97	40	13
1:A:31:THR:HG22	1:A:36:ARG:NH2	0.75	1.97	7	1
1:A:104:ALA:HB2	1:A:113:ILE:HG22	0.75	1.59	13	3
1:A:72:LEU:CD2	1:A:72:LEU:H	0.74	1.96	36	3
1:A:72:LEU:H	1:A:72:LEU:CD2	0.74	1.96	18	7
1:A:72:LEU:N	1:A:72:LEU:HD22	0.74	1.98	36	7
1:A:32:LEU:H	1:A:32:LEU:CD1	0.73	1.96	16	9
1:A:103:THR:HG22	1:A:104:ALA:N	0.73	1.97	13	2
1:A:61:ILE:CD1	1:A:92:ALA:HB2	0.73	2.11	1	38
1:A:72:LEU:HD12	1:A:87:LEU:HD13	0.73	1.60	15	21
1:A:28:VAL:HG21	1:A:58:GLY:H	0.73	1.44	24	36
1:A:102:LEU:HD23	1:A:102:LEU:C	0.73	2.04	28	25
1:A:83:CYS:SG	1:A:84:VAL:N	0.72	2.62	3	9
1:A:81:VAL:O	1:A:84:VAL:HG22	0.72	1.84	12	33
1:A:88:LEU:HD22	1:A:88:LEU:C	0.72	2.04	34	15
1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:HD22	0.72	1.82	13	18
1:A:91:GLY:O	1:A:93:ASP:N	0.72	2.22	34	44
1:A:73:LEU:HD12	1:A:73:LEU:H	0.71	1.45	14	15
1:A:9:ALA:HB1	1:A:14:ASP:CG	0.71	2.05	7	2
1:A:72:LEU:HD22	1:A:72:LEU:N	0.71	1.99	18	3
1:A:28:VAL:O	1:A:28:VAL:HG23	0.71	1.86	16	3
1:A:32:LEU:HD13	1:A:41:TYR:CE1	0.71	2.21	44	17
1:A:36:ARG:N	1:A:36:ARG:NE	0.71	2.38	7	1
1:A:13:GLY:O	1:A:15:LEU:N	0.71	2.22	10	42
1:A:86:LEU:HD13	1:A:86:LEU:N	0.71	2.00	7	9
1:A:51:LEU:HD22	1:A:52:GLU:H	0.70	1.46	15	43
1:A:118:GLN:N	1:A:118:GLN:OE1	0.70	2.22	1	1
1:A:62:ASN:C	1:A:64:PRO:HD2	0.70	2.07	7	31
1:A:102:LEU:C	1:A:102:LEU:HD23	0.70	2.06	42	19
1:A:95:THR:HG22	1:A:95:THR:O	0.70	1.86	7	1
1:A:95:THR:O	1:A:95:THR:HG22	0.70	1.85	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:LEU:C	1:A:86:LEU:HD22	0.70	2.07	39	13
1:A:34:GLY:N	1:A:36:ARG:NH2	0.69	2.39	7	1
1:A:113:ILE:HD12	1:A:113:ILE:N	0.69	2.02	34	3
1:A:70:THR:OG1	1:A:72:LEU:HD23	0.69	1.87	18	10
1:A:55:LEU:O	1:A:55:LEU:HD23	0.69	1.88	33	18
1:A:113:ILE:N	1:A:113:ILE:HD12	0.69	2.03	38	3
1:A:63:ALA:N	1:A:64:PRO:HD2	0.68	2.02	7	40
1:A:54:LEU:C	1:A:54:LEU:HD22	0.68	2.08	24	3
1:A:6:PHE:CZ	1:A:21:TYR:CE2	0.68	2.81	19	2
1:A:19:LYS:O	1:A:23:ALA:HB2	0.68	1.88	42	15
1:A:33:GLU:N	1:A:36:ARG:NH1	0.68	2.41	7	1
1:A:48:LEU:O	1:A:51:LEU:HD21	0.68	1.89	1	44
1:A:34:GLY:C	1:A:36:ARG:HH21	0.68	1.91	7	1
1:A:86:LEU:HD22	1:A:86:LEU:C	0.68	2.09	29	15
1:A:81:VAL:HG11	1:A:113:ILE:HG13	0.68	1.65	4	6
1:A:69:ILE:HD13	1:A:70:THR:H	0.67	1.49	36	44
1:A:32:LEU:HD22	1:A:32:LEU:C	0.67	2.10	26	10
1:A:62:ASN:H	1:A:62:ASN:ND2	0.67	1.88	35	17
1:A:55:LEU:HD23	1:A:55:LEU:O	0.67	1.90	9	22
1:A:37:LYS:H	1:A:37:LYS:CD	0.67	2.02	33	6
1:A:72:LEU:CD1	1:A:72:LEU:N	0.67	2.57	17	14
1:A:47:GLN:NE2	1:A:47:GLN:N	0.67	2.44	13	10
1:A:92:ALA:O	1:A:93:ASP:C	0.66	2.31	28	44
1:A:32:LEU:C	1:A:32:LEU:HD22	0.66	2.11	10	4
1:A:32:LEU:N	1:A:32:LEU:HD13	0.66	2.04	15	7
1:A:36:ARG:NE	1:A:36:ARG:H	0.66	1.88	7	1
1:A:72:LEU:N	1:A:72:LEU:CD1	0.66	2.58	39	20
1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:HD13	0.66	2.05	19	5
1:A:62:ASN:ND2	1:A:62:ASN:H	0.66	1.87	24	11
1:A:42:ALA:O	1:A:51:LEU:HD12	0.66	1.90	42	28
1:A:54:LEU:CD1	1:A:54:LEU:N	0.66	2.59	3	10
1:A:62:ASN:N	1:A:62:ASN:ND2	0.66	2.43	43	17
1:A:84:VAL:HG23	1:A:85:LYS:N	0.66	2.06	23	43
1:A:108:THR:OG1	1:A:109:ASP:N	0.66	2.29	4	44
1:A:62:ASN:ND2	1:A:62:ASN:N	0.66	2.43	1	26
1:A:32:LEU:HD23	1:A:33:GLU:N	0.66	2.05	28	7
1:A:42:ALA:O	1:A:46:GLY:N	0.65	2.29	30	44
1:A:94:LYS:CE	1:A:95:THR:HG23	0.65	2.22	13	4
1:A:44:ASP:O	1:A:45:CYS:SG	0.65	2.53	1	35
1:A:110:ASN:ND2	1:A:110:ASN:O	0.65	2.30	9	12
1:A:15:LEU:O	1:A:15:LEU:HD13	0.65	1.92	3	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:ASN:ND2	1:A:63:ALA:H	0.65	1.89	23	27
1:A:110:ASN:O	1:A:110:ASN:ND2	0.65	2.29	21	23
1:A:54:LEU:HD22	1:A:54:LEU:C	0.65	2.13	39	9
1:A:117:LEU:CD1	1:A:117:LEU:O	0.65	2.44	44	7
1:A:7:MET:SD	1:A:32:LEU:HD23	0.65	2.32	1	7
1:A:86:LEU:CD1	1:A:86:LEU:H	0.64	2.04	7	6
1:A:15:LEU:HD13	1:A:15:LEU:O	0.64	1.92	30	15
1:A:73:LEU:HD12	1:A:73:LEU:N	0.64	2.08	5	13
1:A:86:LEU:H	1:A:86:LEU:CD1	0.64	2.05	41	8
1:A:53:PHE:CD2	1:A:54:LEU:N	0.64	2.65	16	7
1:A:55:LEU:HD22	1:A:90:LYS:NZ	0.64	2.07	1	2
1:A:9:ALA:C	1:A:14:ASP:OD1	0.64	2.35	7	2
1:A:95:THR:HG21	1:A:100:ASP:O	0.64	1.93	37	5
1:A:102:LEU:CD2	1:A:102:LEU:C	0.64	2.66	7	22
1:A:32:LEU:N	1:A:36:ARG:NH1	0.64	2.40	7	1
1:A:58:GLY:O	1:A:59:ALA:HB2	0.63	1.93	6	33
1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:CD1	0.63	2.61	40	17
1:A:62:ASN:HD22	1:A:63:ALA:H	0.63	1.37	35	20
1:A:46:GLY:O	1:A:48:LEU:N	0.63	2.31	10	37
1:A:76:VAL:HG13	1:A:113:ILE:HG12	0.63	1.70	7	29
1:A:32:LEU:HD21	1:A:41:TYR:CZ	0.63	2.28	23	5
1:A:6:PHE:CE2	1:A:30:ARG:NH1	0.63	2.67	15	1
1:A:92:ALA:O	1:A:94:LYS:N	0.62	2.32	7	6
1:A:113:ILE:CD1	1:A:113:ILE:N	0.62	2.62	14	3
1:A:6:PHE:CE1	1:A:30:ARG:NH2	0.62	2.67	20	2
1:A:86:LEU:CD2	1:A:86:LEU:O	0.62	2.44	21	11
1:A:113:ILE:N	1:A:113:ILE:CD1	0.62	2.61	34	3
1:A:102:LEU:C	1:A:102:LEU:CD2	0.62	2.68	33	22
1:A:80:HIS:C	1:A:82:SER:H	0.62	1.97	44	44
1:A:47:GLN:N	1:A:47:GLN:NE2	0.62	2.48	19	6
1:A:69:ILE:HD11	1:A:73:LEU:HD13	0.62	1.70	2	30
1:A:32:LEU:HD13	1:A:41:TYR:CD1	0.62	2.30	42	4
1:A:108:THR:HG23	1:A:114:LYS:HZ3	0.61	1.55	38	1
1:A:37:LYS:N	1:A:37:LYS:CD	0.61	2.63	13	6
1:A:35:GLY:N	1:A:36:ARG:HE	0.61	1.94	7	1
1:A:117:LEU:O	1:A:117:LEU:CD1	0.61	2.45	40	10
1:A:93:ASP:CG	1:A:96:VAL:HG23	0.61	2.16	23	3
1:A:88:LEU:HD13	1:A:88:LEU:N	0.61	2.11	1	16
1:A:25:GLY:O	1:A:26:GLU:O	0.60	2.19	7	31
1:A:15:LEU:HD13	1:A:15:LEU:C	0.60	2.16	11	19
1:A:48:LEU:HA	1:A:51:LEU:HD11	0.60	1.73	20	42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:102:LEU:O	1:A:105:LEU:N	0.60	2.33	16	9
1:A:61:ILE:HD11	1:A:92:ALA:CB	0.60	2.26	8	13
1:A:8:TRP:NE1	1:A:12:ASN:ND2	0.60	2.48	44	1
1:A:93:ASP:CG	1:A:94:LYS:H	0.60	2.00	23	2
1:A:46:GLY:C	1:A:48:LEU:N	0.60	2.55	19	44
1:A:86:LEU:O	1:A:86:LEU:CD2	0.60	2.44	34	9
1:A:67:HIS:O	1:A:69:ILE:N	0.60	2.35	26	34
1:A:37:LYS:NZ	1:A:60:ASP:CB	0.60	2.64	31	1
1:A:9:ALA:O	1:A:11:LYS:N	0.59	2.35	7	15
1:A:88:LEU:C	1:A:90:LYS:N	0.59	2.55	27	23
1:A:30:ARG:HH11	1:A:30:ARG:CG	0.59	2.09	29	4
1:A:86:LEU:CD2	1:A:86:LEU:C	0.59	2.65	4	10
1:A:110:ASN:N	1:A:110:ASN:ND2	0.59	2.47	14	3
1:A:67:HIS:N	1:A:67:HIS:ND1	0.59	2.49	35	2
1:A:108:THR:HG23	1:A:114:LYS:NZ	0.59	2.11	28	2
1:A:21:TYR:N	1:A:21:TYR:CD1	0.59	2.68	30	2
1:A:53:PHE:CG	1:A:54:LEU:N	0.59	2.70	20	14
1:A:37:LYS:CD	1:A:37:LYS:H	0.59	2.10	32	5
1:A:15:LEU:C	1:A:15:LEU:HD13	0.59	2.18	33	20
1:A:62:ASN:O	1:A:97:LYS:NZ	0.59	2.32	7	2
1:A:14:ASP:N	1:A:14:ASP:OD1	0.59	2.36	39	7
1:A:85:LYS:O	1:A:88:LEU:CD1	0.59	2.51	26	24
1:A:102:LEU:HD23	1:A:103:THR:O	0.59	1.98	17	19
1:A:104:ALA:HB1	1:A:113:ILE:HG22	0.59	1.74	15	8
1:A:28:VAL:C	1:A:29:ASN:ND2	0.59	2.56	28	27
1:A:69:ILE:CD1	1:A:70:THR:H	0.59	2.11	36	18
1:A:31:THR:HG23	1:A:36:ARG:H	0.59	1.57	37	5
1:A:95:THR:HG21	1:A:103:THR:OG1	0.59	1.98	34	1
1:A:73:LEU:N	1:A:73:LEU:HD12	0.58	2.13	38	18
1:A:33:GLU:OE2	1:A:36:ARG:NH2	0.58	2.36	36	2
1:A:70:THR:OG1	1:A:73:LEU:CD1	0.58	2.51	27	12
1:A:88:LEU:HD21	1:A:116:LEU:HD21	0.58	1.74	27	1
1:A:86:LEU:HD23	1:A:87:LEU:N	0.58	2.12	4	1
1:A:52:GLU:OE1	1:A:53:PHE:N	0.58	2.36	33	4
1:A:108:THR:CG2	1:A:110:ASN:ND2	0.58	2.67	34	29
1:A:41:TYR:CD1	1:A:41:TYR:N	0.58	2.71	6	30
1:A:14:ASP:O	1:A:15:LEU:C	0.58	2.41	7	3
1:A:32:LEU:HD11	1:A:41:TYR:CE1	0.58	2.34	23	4
1:A:73:LEU:O	1:A:77:TYR:CE2	0.58	2.56	34	25
1:A:67:HIS:O	1:A:68:HIS:CG	0.58	2.57	2	11
1:A:86:LEU:O	1:A:86:LEU:HD23	0.58	1.98	13	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:67:HIS:H	1:A:67:HIS:CD2	0.58	2.16	29	3
1:A:80:HIS:C	1:A:82:SER:N	0.58	2.57	25	44
1:A:32:LEU:N	1:A:36:ARG:O	0.58	2.37	27	10
1:A:34:GLY:N	1:A:36:ARG:CZ	0.58	2.66	7	1
1:A:112:ALA:O	1:A:115:ALA:HB3	0.57	1.99	10	43
1:A:117:LEU:O	1:A:118:GLN:C	0.57	2.43	33	7
1:A:117:LEU:C	1:A:117:LEU:HD12	0.57	2.19	1	3
1:A:44:ASP:C	1:A:45:CYS:SG	0.57	2.83	16	9
1:A:14:ASP:O	1:A:17:GLU:N	0.57	2.37	7	7
1:A:52:GLU:CD	1:A:86:LEU:HD21	0.57	2.19	24	2
1:A:86:LEU:C	1:A:86:LEU:CD2	0.57	2.72	7	11
1:A:13:GLY:N	1:A:47:GLN:HE21	0.57	1.96	8	2
1:A:102:LEU:O	1:A:104:ALA:N	0.57	2.37	13	14
1:A:62:ASN:O	1:A:63:ALA:C	0.57	2.42	1	44
1:A:13:GLY:CA	1:A:47:GLN:NE2	0.57	2.67	37	4
1:A:88:LEU:O	1:A:90:LYS:N	0.57	2.37	8	4
1:A:8:TRP:CH2	1:A:14:ASP:OD2	0.57	2.57	26	2
1:A:83:CYS:O	1:A:84:VAL:C	0.57	2.41	20	39
1:A:31:THR:CG2	1:A:36:ARG:NH2	0.57	2.68	7	1
1:A:52:GLU:CG	1:A:86:LEU:HD21	0.57	2.30	21	2
1:A:47:GLN:N	1:A:47:GLN:OE1	0.57	2.37	33	2
1:A:73:LEU:O	1:A:77:TYR:CE1	0.57	2.57	16	17
1:A:75:ALA:CB	1:A:83:CYS:SG	0.57	2.92	35	16
1:A:104:ALA:HB3	1:A:117:LEU:HD23	0.57	1.77	35	13
1:A:67:HIS:N	1:A:67:HIS:CD2	0.57	2.72	21	3
1:A:64:PRO:O	1:A:97:LYS:NZ	0.57	2.36	19	6
1:A:30:ARG:H	1:A:30:ARG:CD	0.57	2.13	2	1
1:A:110:ASN:H	1:A:110:ASN:ND2	0.56	1.97	14	3
1:A:78:GLU:OE2	1:A:80:HIS:CD2	0.56	2.58	41	11
1:A:103:THR:O	1:A:107:ALA:HB2	0.56	1.99	1	14
1:A:30:ARG:NH1	1:A:30:ARG:CG	0.56	2.66	29	4
1:A:42:ALA:C	1:A:51:LEU:HD12	0.56	2.20	4	35
1:A:4:LYS:O	1:A:7:MET:SD	0.56	2.64	22	4
1:A:104:ALA:O	1:A:114:LYS:NZ	0.56	2.38	40	3
1:A:88:LEU:N	1:A:88:LEU:HD13	0.56	2.15	31	17
1:A:88:LEU:C	1:A:90:LYS:H	0.56	2.04	8	6
1:A:36:ARG:CG	1:A:36:ARG:HH11	0.56	2.12	12	4
1:A:37:LYS:H	1:A:37:LYS:HD3	0.56	1.60	33	3
1:A:54:LEU:HD12	1:A:54:LEU:N	0.56	2.15	20	7
1:A:47:GLN:N	1:A:47:GLN:CD	0.56	2.59	10	9
1:A:14:ASP:OD1	1:A:14:ASP:N	0.56	2.39	32	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:LEU:C	1:A:86:LEU:CD1	0.56	2.72	24	2
1:A:36:ARG:O	1:A:36:ARG:NH1	0.56	2.39	7	1
1:A:28:VAL:HG23	1:A:28:VAL:O	0.56	2.00	12	4
1:A:72:LEU:CD1	1:A:72:LEU:H	0.56	2.12	17	8
1:A:28:VAL:O	1:A:29:ASN:ND2	0.56	2.39	41	3
1:A:115:ALA:O	1:A:118:GLN:CB	0.56	2.54	40	9
1:A:110:ASN:OD1	1:A:113:ILE:HD13	0.56	2.00	43	20
1:A:13:GLY:C	1:A:15:LEU:H	0.56	2.04	7	33
1:A:108:THR:OG1	1:A:110:ASN:ND2	0.55	2.39	16	3
1:A:68:HIS:O	1:A:68:HIS:ND1	0.55	2.37	15	5
1:A:46:GLY:C	1:A:48:LEU:H	0.55	2.03	19	41
1:A:26:GLU:CD	1:A:26:GLU:N	0.55	2.59	12	4
1:A:110:ASN:ND2	1:A:110:ASN:N	0.55	2.53	38	3
1:A:30:ARG:CB	1:A:30:ARG:CZ	0.55	2.85	26	1
1:A:18:VAL:O	1:A:21:TYR:CE1	0.55	2.59	5	3
1:A:87:LEU:O	1:A:89:SER:N	0.55	2.40	14	26
1:A:4:LYS:O	1:A:8:TRP:N	0.55	2.39	24	9
1:A:113:ILE:C	1:A:115:ALA:N	0.55	2.58	38	44
1:A:10:LEU:CD2	1:A:38:PRO:O	0.55	2.55	25	4
1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:HD12	0.55	2.17	25	7
1:A:53:PHE:O	1:A:55:LEU:N	0.55	2.40	3	16
1:A:40:HIS:CD2	1:A:44:ASP:OD2	0.55	2.60	15	2
1:A:70:THR:OG1	1:A:72:LEU:HD21	0.55	2.02	26	27
1:A:88:LEU:CD1	1:A:88:LEU:N	0.55	2.70	33	16
1:A:9:ALA:C	1:A:11:LYS:N	0.55	2.60	30	34
1:A:110:ASN:HD21	1:A:113:ILE:CD1	0.55	2.09	13	18
1:A:86:LEU:CD1	1:A:86:LEU:C	0.55	2.69	11	9
1:A:14:ASP:OD2	1:A:17:GLU:CB	0.55	2.55	7	2
1:A:31:THR:HG23	1:A:36:ARG:N	0.55	2.17	22	4
1:A:36:ARG:CG	1:A:36:ARG:NH1	0.55	2.67	12	6
1:A:106:GLU:O	1:A:106:GLU:CD	0.55	2.45	13	1
1:A:62:ASN:HD22	1:A:63:ALA:N	0.55	2.00	37	14
1:A:14:ASP:C	1:A:16:ASP:N	0.55	2.60	7	2
1:A:104:ALA:O	1:A:114:LYS:CE	0.55	2.54	40	2
1:A:15:LEU:HD11	1:A:19:LYS:NZ	0.55	2.16	42	1
1:A:111:GLN:O	1:A:111:GLN:CG	0.55	2.55	28	21
1:A:86:LEU:O	1:A:90:LYS:NZ	0.55	2.40	12	3
1:A:41:TYR:N	1:A:41:TYR:CD1	0.55	2.75	5	11
1:A:93:ASP:OD2	1:A:94:LYS:N	0.55	2.40	26	2
1:A:88:LEU:N	1:A:88:LEU:CD1	0.55	2.69	1	18
1:A:6:PHE:CE2	1:A:21:TYR:CD1	0.55	2.95	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:MET:O	1:A:9:ALA:N	0.54	2.41	18	22
1:A:104:ALA:CB	1:A:113:ILE:HG22	0.54	2.31	13	9
1:A:62:ASN:ND2	1:A:63:ALA:N	0.54	2.54	37	21
1:A:27:ASP:O	1:A:29:ASN:N	0.54	2.40	41	3
1:A:36:ARG:NH2	1:A:40:HIS:CG	0.54	2.75	26	1
1:A:100:ASP:O	1:A:102:LEU:N	0.54	2.41	17	18
1:A:28:VAL:C	1:A:29:ASN:HD22	0.54	2.05	38	27
1:A:44:ASP:O	1:A:78:GLU:OE2	0.54	2.25	1	9
1:A:37:LYS:NZ	1:A:60:ASP:OD2	0.54	2.40	25	1
1:A:117:LEU:O	1:A:118:GLN:O	0.54	2.25	35	3
1:A:40:HIS:NE2	1:A:44:ASP:OD2	0.54	2.40	4	4
1:A:40:HIS:ND1	1:A:74:SER:OG	0.54	2.41	36	2
1:A:96:VAL:CG1	1:A:96:VAL:O	0.54	2.55	34	10
1:A:76:VAL:HG13	1:A:113:ILE:CG1	0.54	2.33	15	23
1:A:55:LEU:C	1:A:55:LEU:HD23	0.54	2.23	21	13
1:A:68:HIS:O	1:A:68:HIS:CG	0.54	2.60	1	6
1:A:110:ASN:C	1:A:110:ASN:ND2	0.54	2.61	36	2
1:A:91:GLY:C	1:A:93:ASP:H	0.54	2.06	20	42
1:A:27:ASP:O	1:A:30:ARG:NH1	0.54	2.41	29	3
1:A:32:LEU:N	1:A:32:LEU:CD1	0.54	2.69	15	8
1:A:32:LEU:CD1	1:A:32:LEU:N	0.54	2.69	1	8
1:A:86:LEU:HD22	1:A:87:LEU:N	0.54	2.17	8	14
1:A:67:HIS:CD2	1:A:67:HIS:N	0.54	2.74	30	7
1:A:83:CYS:O	1:A:87:LEU:N	0.54	2.40	23	10
1:A:34:GLY:CA	1:A:36:ARG:HH21	0.54	2.15	7	1
1:A:9:ALA:C	1:A:11:LYS:H	0.54	2.07	20	25
1:A:30:ARG:O	1:A:32:LEU:N	0.54	2.41	17	7
1:A:96:VAL:O	1:A:96:VAL:HG13	0.54	2.03	11	3
1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:CD	0.54	2.60	9	1
1:A:113:ILE:H	1:A:113:ILE:CD1	0.54	2.16	37	6
1:A:111:GLN:CG	1:A:111:GLN:O	0.54	2.56	4	23
1:A:6:PHE:CE2	1:A:21:TYR:CE2	0.54	2.96	41	2
1:A:88:LEU:HD22	1:A:88:LEU:O	0.54	2.03	9	2
1:A:103:THR:CG2	1:A:104:ALA:N	0.54	2.67	13	2
1:A:95:THR:O	1:A:95:THR:CG2	0.54	2.55	11	1
1:A:70:THR:CB	1:A:72:LEU:CD2	0.53	2.86	18	8
1:A:71:PRO:O	1:A:74:SER:N	0.53	2.40	29	9
1:A:110:ASN:C	1:A:110:ASN:HD22	0.53	2.05	24	7
1:A:81:VAL:O	1:A:84:VAL:CG2	0.53	2.56	33	6
1:A:70:THR:C	1:A:72:LEU:HD22	0.53	2.24	27	7
1:A:60:ASP:OD1	1:A:60:ASP:O	0.53	2.26	31	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:88:LEU:CD2	1:A:88:LEU:C	0.53	2.77	24	19
1:A:84:VAL:CG2	1:A:85:LYS:N	0.53	2.71	31	33
1:A:32:LEU:CD2	1:A:33:GLU:N	0.53	2.70	28	7
1:A:100:ASP:OD1	1:A:101:GLY:N	0.53	2.41	8	5
1:A:54:LEU:N	1:A:54:LEU:HD13	0.53	2.18	23	12
1:A:88:LEU:C	1:A:88:LEU:CD2	0.53	2.76	20	21
1:A:33:GLU:CG	1:A:34:GLY:N	0.53	2.70	38	6
1:A:33:GLU:OE2	1:A:36:ARG:NE	0.53	2.41	19	3
1:A:115:ALA:O	1:A:118:GLN:OE1	0.53	2.26	1	1
1:A:78:GLU:OE2	1:A:80:HIS:CG	0.53	2.62	41	6
1:A:12:ASN:O	1:A:47:GLN:NE2	0.53	2.42	27	2
1:A:51:LEU:N	1:A:51:LEU:CD1	0.53	2.67	36	21
1:A:110:ASN:ND2	1:A:113:ILE:H	0.53	2.00	13	3
1:A:47:GLN:CD	1:A:47:GLN:N	0.53	2.62	15	14
1:A:108:THR:CG2	1:A:114:LYS:NZ	0.53	2.72	38	1
1:A:44:ASP:OD1	1:A:45:CYS:SG	0.53	2.67	16	10
1:A:12:ASN:ND2	1:A:14:ASP:OD2	0.53	2.40	44	1
1:A:76:VAL:O	1:A:78:GLU:N	0.53	2.42	14	10
1:A:64:PRO:CB	1:A:69:ILE:O	0.53	2.57	36	11
1:A:72:LEU:HG	1:A:92:ALA:HB1	0.53	1.81	8	6
1:A:52:GLU:OE2	1:A:90:LYS:NZ	0.53	2.42	12	3
1:A:67:HIS:ND1	1:A:67:HIS:N	0.53	2.56	1	4
1:A:48:LEU:O	1:A:51:LEU:CD2	0.53	2.57	40	26
1:A:55:LEU:HD22	1:A:90:LYS:CE	0.53	2.33	18	5
1:A:19:LYS:O	1:A:23:ALA:CB	0.53	2.56	42	10
1:A:8:TRP:CZ3	1:A:14:ASP:OD2	0.53	2.61	26	2
1:A:95:THR:HG23	1:A:103:THR:HG22	0.53	1.80	15	1
1:A:21:TYR:CD1	1:A:22:VAL:N	0.53	2.77	29	1
1:A:67:HIS:CD2	1:A:67:HIS:H	0.53	2.22	10	1
1:A:105:LEU:O	1:A:114:LYS:NZ	0.52	2.42	44	3
1:A:65:ASP:O	1:A:68:HIS:CE1	0.52	2.62	32	1
1:A:35:GLY:O	1:A:67:HIS:CE1	0.52	2.62	3	3
1:A:6:PHE:CZ	1:A:30:ARG:NH2	0.52	2.77	29	3
1:A:91:GLY:C	1:A:93:ASP:N	0.52	2.63	6	44
1:A:82:SER:O	1:A:86:LEU:CD1	0.52	2.57	31	11
1:A:86:LEU:HD23	1:A:86:LEU:O	0.52	2.04	15	1
1:A:87:LEU:C	1:A:89:SER:N	0.52	2.62	4	35
1:A:28:VAL:O	1:A:29:ASN:CG	0.52	2.47	16	4
1:A:21:TYR:CG	1:A:22:VAL:N	0.52	2.78	29	4
1:A:9:ALA:HB3	1:A:18:VAL:HG13	0.52	1.79	43	3
1:A:16:ASP:OD1	1:A:16:ASP:N	0.52	2.43	31	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:ASP:O	1:A:78:GLU:CD	0.52	2.48	1	2
1:A:27:ASP:OD2	1:A:30:ARG:NH2	0.52	2.41	6	2
1:A:18:VAL:O	1:A:21:TYR:CD1	0.52	2.62	44	3
1:A:78:GLU:O	1:A:78:GLU:CD	0.52	2.47	12	4
1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CD1	0.52	2.71	7	2
1:A:96:VAL:O	1:A:96:VAL:CG1	0.52	2.57	3	5
1:A:84:VAL:HG23	1:A:85:LYS:H	0.52	1.63	23	2
1:A:7:MET:CG	1:A:8:TRP:N	0.52	2.73	31	12
1:A:37:LYS:HZ2	1:A:60:ASP:CG	0.52	2.07	31	1
1:A:110:ASN:HD22	1:A:110:ASN:N	0.52	2.01	5	15
1:A:73:LEU:O	1:A:77:TYR:CD1	0.52	2.63	38	9
1:A:113:ILE:O	1:A:115:ALA:N	0.52	2.42	38	19
1:A:100:ASP:C	1:A:102:LEU:H	0.52	2.08	13	24
1:A:8:TRP:CD1	1:A:12:ASN:ND2	0.52	2.78	44	1
1:A:9:ALA:CB	1:A:14:ASP:CG	0.52	2.79	8	2
1:A:93:ASP:OD1	1:A:96:VAL:HG23	0.52	2.05	23	1
1:A:117:LEU:O	1:A:118:GLN:OXT	0.52	2.28	13	1
1:A:62:ASN:C	1:A:64:PRO:CD	0.52	2.79	7	6
1:A:88:LEU:O	1:A:88:LEU:HD22	0.52	2.04	22	4
1:A:73:LEU:O	1:A:77:TYR:CD2	0.51	2.64	34	11
1:A:51:LEU:CD1	1:A:51:LEU:N	0.51	2.66	25	13
1:A:40:HIS:O	1:A:44:ASP:CB	0.51	2.57	25	5
1:A:88:LEU:HD22	1:A:89:SER:N	0.51	2.19	1	6
1:A:37:LYS:O	1:A:39:LEU:N	0.51	2.43	25	2
1:A:115:ALA:O	1:A:118:GLN:NE2	0.51	2.43	39	2
1:A:17:GLU:N	1:A:17:GLU:OE1	0.51	2.43	39	4
1:A:110:ASN:ND2	1:A:110:ASN:H	0.51	2.03	37	3
1:A:55:LEU:HD22	1:A:90:LYS:HZ3	0.51	1.66	1	1
1:A:18:VAL:O	1:A:21:TYR:CE2	0.51	2.63	29	1
1:A:94:LYS:CE	1:A:103:THR:OG1	0.51	2.59	25	2
1:A:93:ASP:OD1	1:A:94:LYS:N	0.51	2.43	44	3
1:A:51:LEU:CD2	1:A:52:GLU:H	0.51	2.19	22	29
1:A:4:LYS:O	1:A:6:PHE:N	0.51	2.44	22	5
1:A:52:GLU:O	1:A:56:LEU:CB	0.51	2.58	14	1
1:A:110:ASN:N	1:A:110:ASN:HD22	0.51	2.03	14	11
1:A:33:GLU:O	1:A:33:GLU:CG	0.51	2.59	30	1
1:A:54:LEU:HD12	1:A:54:LEU:H	0.51	1.66	3	6
1:A:78:GLU:OE1	1:A:80:HIS:CD2	0.51	2.64	2	2
1:A:20:ASP:O	1:A:23:ALA:HB3	0.51	2.06	44	11
1:A:94:LYS:HE2	1:A:95:THR:HG23	0.51	1.81	13	2
1:A:118:GLN:NE2	1:A:118:GLN:C	0.51	2.63	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:GLY:O	1:A:26:GLU:C	0.51	2.49	12	42
1:A:76:VAL:HG13	1:A:113:ILE:HG21	0.51	1.83	4	5
1:A:118:GLN:CD	1:A:118:GLN:C	0.51	2.69	1	1
1:A:37:LYS:C	1:A:39:LEU:H	0.51	2.09	9	3
1:A:36:ARG:NH1	1:A:36:ARG:CG	0.51	2.71	24	4
1:A:31:THR:HG22	1:A:36:ARG:CZ	0.51	2.35	7	1
1:A:48:LEU:C	1:A:51:LEU:HD21	0.50	2.26	7	32
1:A:59:ALA:C	1:A:61:ILE:H	0.50	2.08	1	19
1:A:6:PHE:CZ	1:A:21:TYR:CD2	0.50	2.99	19	2
1:A:73:LEU:O	1:A:76:VAL:HG22	0.50	2.06	21	1
1:A:54:LEU:HD13	1:A:54:LEU:N	0.50	2.21	1	8
1:A:102:LEU:O	1:A:102:LEU:HD23	0.50	2.05	25	7
1:A:33:GLU:CD	1:A:34:GLY:N	0.50	2.65	1	3
1:A:86:LEU:CD1	1:A:86:LEU:N	0.50	2.72	12	3
1:A:30:ARG:NH1	1:A:30:ARG:HG2	0.50	2.21	42	3
1:A:26:GLU:OE1	1:A:26:GLU:N	0.50	2.45	12	1
1:A:113:ILE:O	1:A:116:LEU:N	0.50	2.45	38	4
1:A:44:ASP:OD1	1:A:74:SER:OG	0.50	2.28	28	2
1:A:78:GLU:CD	1:A:78:GLU:O	0.50	2.49	15	1
1:A:106:GLU:CG	1:A:106:GLU:O	0.50	2.59	21	5
1:A:103:THR:HG22	1:A:104:ALA:H	0.50	1.66	34	2
1:A:33:GLU:OE1	1:A:36:ARG:NH1	0.50	2.45	17	1
1:A:20:ASP:OD1	1:A:24:LYS:NZ	0.50	2.45	15	1
1:A:48:LEU:N	1:A:48:LEU:HD13	0.50	2.22	10	11
1:A:13:GLY:C	1:A:15:LEU:N	0.50	2.65	10	44
1:A:110:ASN:HD21	1:A:113:ILE:HB	0.50	1.67	1	7
1:A:37:LYS:CD	1:A:37:LYS:N	0.50	2.70	33	2
1:A:95:THR:OG1	1:A:103:THR:HG21	0.50	2.07	39	1
1:A:92:ALA:O	1:A:93:ASP:OD1	0.50	2.29	23	1
1:A:105:LEU:HA	1:A:114:LYS:HZ1	0.50	1.65	2	1
1:A:63:ALA:O	1:A:64:PRO:C	0.50	2.49	19	42
1:A:58:GLY:O	1:A:59:ALA:CB	0.50	2.60	21	16
1:A:40:HIS:CE1	1:A:44:ASP:OD2	0.50	2.65	34	4
1:A:53:PHE:C	1:A:55:LEU:N	0.50	2.66	7	15
1:A:110:ASN:CG	1:A:113:ILE:HD12	0.50	2.26	13	2
1:A:9:ALA:O	1:A:14:ASP:OD1	0.50	2.30	7	2
1:A:93:ASP:OD1	1:A:94:LYS:NZ	0.49	2.45	1	4
1:A:100:ASP:C	1:A:102:LEU:N	0.49	2.66	17	28
1:A:7:MET:C	1:A:9:ALA:N	0.49	2.65	18	20
1:A:115:ALA:O	1:A:118:GLN:CD	0.49	2.50	39	2
1:A:102:LEU:HD23	1:A:102:LEU:O	0.49	2.06	7	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:106:GLU:O	1:A:106:GLU:CG	0.49	2.59	42	4
1:A:53:PHE:C	1:A:55:LEU:H	0.49	2.10	7	13
1:A:103:THR:HG23	1:A:104:ALA:H	0.49	1.66	7	1
1:A:83:CYS:O	1:A:85:LYS:N	0.49	2.44	14	8
1:A:63:ALA:O	1:A:64:PRO:O	0.49	2.31	14	23
1:A:35:GLY:O	1:A:67:HIS:CD2	0.49	2.66	30	4
1:A:54:LEU:HD12	1:A:55:LEU:N	0.49	2.22	19	5
1:A:40:HIS:CE1	1:A:74:SER:OG	0.49	2.66	11	3
1:A:103:THR:HG23	1:A:104:ALA:N	0.49	2.23	7	1
1:A:93:ASP:OD2	1:A:96:VAL:N	0.49	2.45	34	2
1:A:5:GLU:N	1:A:5:GLU:OE1	0.49	2.45	40	1
1:A:54:LEU:H	1:A:54:LEU:HD12	0.49	1.67	43	3
1:A:19:LYS:O	1:A:23:ALA:N	0.49	2.45	9	7
1:A:67:HIS:C	1:A:69:ILE:N	0.49	2.65	24	26
1:A:27:ASP:CG	1:A:30:ARG:NH1	0.49	2.66	16	1
1:A:88:LEU:HD13	1:A:89:SER:N	0.49	2.21	9	5
1:A:37:LYS:HD3	1:A:37:LYS:H	0.49	1.67	22	3
1:A:94:LYS:HD2	1:A:103:THR:OG1	0.49	2.07	19	1
1:A:28:VAL:HG21	1:A:58:GLY:N	0.49	2.22	8	6
1:A:37:LYS:NZ	1:A:67:HIS:CE1	0.49	2.81	32	1
1:A:85:LYS:CG	1:A:86:LEU:N	0.49	2.75	28	1
1:A:53:PHE:O	1:A:56:LEU:HG	0.49	2.07	10	1
1:A:48:LEU:HD13	1:A:48:LEU:N	0.49	2.22	5	11
1:A:35:GLY:O	1:A:67:HIS:NE2	0.49	2.46	30	4
1:A:8:TRP:CG	1:A:8:TRP:O	0.49	2.65	29	1
1:A:68:HIS:ND1	1:A:68:HIS:O	0.49	2.46	31	2
1:A:118:GLN:C	1:A:118:GLN:NE2	0.49	2.66	9	3
1:A:93:ASP:CG	1:A:94:LYS:N	0.49	2.67	23	4
1:A:52:GLU:OE2	1:A:53:PHE:N	0.48	2.46	13	1
1:A:105:LEU:CD2	1:A:105:LEU:N	0.48	2.77	13	2
1:A:94:LYS:CE	1:A:94:LYS:O	0.48	2.61	19	7
1:A:26:GLU:O	1:A:27:ASP:OD1	0.48	2.31	5	3
1:A:21:TYR:CD1	1:A:21:TYR:N	0.48	2.79	3	1
1:A:47:GLN:CA	1:A:47:GLN:OE1	0.48	2.61	33	2
1:A:46:GLY:O	1:A:47:GLN:C	0.48	2.51	10	3
1:A:93:ASP:CG	1:A:94:LYS:NZ	0.48	2.66	21	2
1:A:67:HIS:O	1:A:68:HIS:CD2	0.48	2.66	2	1
1:A:110:ASN:HD22	1:A:110:ASN:C	0.48	2.12	26	4
1:A:51:LEU:HD23	1:A:83:CYS:SG	0.48	2.48	20	1
1:A:28:VAL:CG2	1:A:28:VAL:O	0.48	2.58	16	1
1:A:30:ARG:CZ	1:A:30:ARG:CB	0.48	2.91	24	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:118:GLN:OE1	1:A:118:GLN:CA	0.48	2.59	1	1
1:A:48:LEU:O	1:A:52:GLU:OE2	0.48	2.32	23	1
1:A:7:MET:C	1:A:9:ALA:H	0.48	2.12	9	13
1:A:61:ILE:CG2	1:A:62:ASN:HD22	0.48	2.21	4	1
1:A:13:GLY:CA	1:A:47:GLN:HE21	0.48	2.21	16	4
1:A:88:LEU:HD21	1:A:116:LEU:CD2	0.48	2.38	27	1
1:A:69:ILE:HG23	1:A:70:THR:N	0.48	2.23	11	6
1:A:25:GLY:O	1:A:26:GLU:OE2	0.48	2.31	7	5
1:A:63:ALA:O	1:A:65:ASP:OD2	0.48	2.32	7	2
1:A:32:LEU:C	1:A:32:LEU:HD23	0.48	2.29	24	3
1:A:68:HIS:CG	1:A:68:HIS:O	0.48	2.66	3	2
1:A:81:VAL:HG11	1:A:113:ILE:CD1	0.48	2.38	14	2
1:A:110:ASN:OD1	1:A:113:ILE:HD12	0.48	2.08	13	4
1:A:66:LYS:O	1:A:68:HIS:ND1	0.48	2.46	39	1
1:A:110:ASN:CG	1:A:113:ILE:HD13	0.48	2.28	32	7
1:A:71:PRO:O	1:A:74:SER:CB	0.48	2.62	32	3
1:A:95:THR:CG2	1:A:95:THR:O	0.48	2.57	7	1
1:A:57:LYS:O	1:A:58:GLY:O	0.47	2.32	41	7
1:A:102:LEU:HD23	1:A:103:THR:N	0.47	2.24	43	3
1:A:100:ASP:OD2	1:A:101:GLY:N	0.47	2.47	3	6
1:A:8:TRP:HE1	1:A:12:ASN:ND2	0.47	2.04	44	1
1:A:34:GLY:H	1:A:36:ARG:NE	0.47	2.07	7	1
1:A:44:ASP:OD2	1:A:78:GLU:OE1	0.47	2.33	21	6
1:A:95:THR:OG1	1:A:95:THR:O	0.47	2.30	43	1
1:A:16:ASP:N	1:A:16:ASP:OD1	0.47	2.46	20	1
1:A:40:HIS:CD2	1:A:74:SER:OG	0.47	2.67	44	2
1:A:32:LEU:C	1:A:32:LEU:CD2	0.47	2.83	18	3
1:A:40:HIS:ND1	1:A:40:HIS:C	0.47	2.65	14	1
1:A:59:ALA:HB1	1:A:61:ILE:HG22	0.47	1.86	16	2
1:A:72:LEU:H	1:A:72:LEU:CD1	0.47	2.12	43	12
1:A:108:THR:CG2	1:A:110:ASN:HD21	0.47	2.20	37	5
1:A:67:HIS:C	1:A:68:HIS:CG	0.47	2.88	18	8
1:A:32:LEU:CD2	1:A:32:LEU:C	0.47	2.81	10	5
1:A:40:HIS:C	1:A:40:HIS:ND1	0.47	2.68	23	1
1:A:109:ASP:N	1:A:114:LYS:HZ1	0.47	2.08	28	1
1:A:44:ASP:C	1:A:45:CYS:HG	0.47	2.13	16	3
1:A:67:HIS:C	1:A:68:HIS:ND1	0.47	2.68	27	1
1:A:81:VAL:C	1:A:84:VAL:HG22	0.47	2.30	12	7
1:A:70:THR:OG1	1:A:71:PRO:CD	0.47	2.63	2	3
1:A:95:THR:CG2	1:A:100:ASP:O	0.47	2.63	20	5
1:A:40:HIS:O	1:A:40:HIS:ND1	0.47	2.45	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:VAL:O	1:A:21:TYR:CD2	0.47	2.67	29	1
1:A:93:ASP:OD2	1:A:94:LYS:NZ	0.47	2.46	21	1
1:A:94:LYS:HE3	1:A:95:THR:HG23	0.47	1.85	13	1
1:A:80:HIS:O	1:A:81:VAL:C	0.47	2.52	41	42
1:A:10:LEU:H	1:A:10:LEU:HD12	0.47	1.70	8	3
1:A:67:HIS:O	1:A:68:HIS:C	0.47	2.54	11	37
1:A:106:GLU:HG3	1:A:106:GLU:O	0.47	2.08	28	2
1:A:52:GLU:CD	1:A:90:LYS:NZ	0.47	2.68	12	1
1:A:105:LEU:CD2	1:A:117:LEU:HD22	0.47	2.40	31	4
1:A:36:ARG:O	1:A:36:ARG:CZ	0.47	2.63	7	1
1:A:10:LEU:HD12	1:A:10:LEU:H	0.47	1.69	11	2
1:A:115:ALA:O	1:A:118:GLN:CG	0.47	2.63	31	3
1:A:17:GLU:OE1	1:A:17:GLU:N	0.47	2.48	30	1
1:A:88:LEU:O	1:A:91:GLY:N	0.46	2.47	8	3
1:A:115:ALA:O	1:A:118:GLN:HB3	0.46	2.10	12	5
1:A:62:ASN:O	1:A:64:PRO:N	0.46	2.48	1	2
1:A:94:LYS:CE	1:A:95:THR:OG1	0.46	2.63	3	2
1:A:26:GLU:OE1	1:A:26:GLU:O	0.46	2.33	14	3
1:A:8:TRP:O	1:A:8:TRP:CD1	0.46	2.69	44	2
1:A:83:CYS:O	1:A:86:LEU:HD13	0.46	2.11	30	4
1:A:55:LEU:HD13	1:A:90:LYS:CE	0.46	2.40	34	1
1:A:26:GLU:O	1:A:26:GLU:CD	0.46	2.54	7	1
1:A:32:LEU:HD23	1:A:32:LEU:C	0.46	2.31	29	3
1:A:83:CYS:O	1:A:86:LEU:CD1	0.46	2.63	30	3
1:A:6:PHE:CE1	1:A:21:TYR:CD2	0.46	3.03	19	1
1:A:106:GLU:OE2	1:A:106:GLU:O	0.46	2.33	19	1
1:A:22:VAL:C	1:A:24:LYS:N	0.46	2.69	41	2
1:A:47:GLN:OE1	1:A:47:GLN:N	0.46	2.48	15	1
1:A:50:ILE:O	1:A:54:LEU:HD12	0.46	2.10	35	4
1:A:64:PRO:CG	1:A:69:ILE:O	0.46	2.64	27	3
1:A:112:ALA:O	1:A:115:ALA:CB	0.46	2.64	28	14
1:A:55:LEU:HD23	1:A:55:LEU:C	0.46	2.31	7	4
1:A:54:LEU:H	1:A:54:LEU:CD1	0.46	2.23	11	6
1:A:44:ASP:OD1	1:A:78:GLU:OE1	0.46	2.34	35	2
1:A:69:ILE:HD11	1:A:73:LEU:HD22	0.46	1.88	16	5
1:A:101:GLY:O	1:A:102:LEU:C	0.46	2.53	15	23
1:A:40:HIS:O	1:A:44:ASP:N	0.46	2.43	25	2
1:A:108:THR:HG22	1:A:113:ILE:HG21	0.46	1.88	8	6
1:A:118:GLN:CD	1:A:118:GLN:OXT	0.46	2.55	35	1
1:A:10:LEU:HG	1:A:18:VAL:HG11	0.46	1.87	29	1
1:A:102:LEU:CD2	1:A:103:THR:O	0.46	2.63	36	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:31:THR:O	1:A:32:LEU:O	0.46	2.33	30	3
1:A:60:ASP:O	1:A:60:ASP:OD1	0.46	2.34	18	7
1:A:55:LEU:O	1:A:58:GLY:O	0.46	2.33	9	10
1:A:26:GLU:O	1:A:26:GLU:OE1	0.46	2.34	7	2
1:A:29:ASN:N	1:A:29:ASN:ND2	0.46	2.63	29	2
1:A:118:GLN:O	1:A:118:GLN:NE2	0.46	2.49	36	1
1:A:6:PHE:CE1	1:A:21:TYR:CE2	0.46	3.04	19	1
1:A:4:LYS:C	1:A:6:PHE:N	0.46	2.70	22	5
1:A:59:ALA:C	1:A:61:ILE:N	0.46	2.68	1	6
1:A:83:CYS:O	1:A:86:LEU:N	0.46	2.49	20	2
1:A:33:GLU:OE2	1:A:36:ARG:CZ	0.46	2.64	15	2
1:A:109:ASP:CA	1:A:114:LYS:HZ1	0.46	2.23	28	1
1:A:30:ARG:CG	1:A:30:ARG:NH1	0.45	2.78	20	3
1:A:6:PHE:CD1	1:A:6:PHE:C	0.45	2.88	10	1
1:A:106:GLU:O	1:A:106:GLU:OE2	0.45	2.34	43	1
1:A:12:ASN:O	1:A:14:ASP:OD1	0.45	2.34	26	1
1:A:41:TYR:O	1:A:45:CYS:N	0.45	2.48	41	4
1:A:49:GLU:O	1:A:52:GLU:OE1	0.45	2.33	23	4
1:A:96:VAL:HG13	1:A:96:VAL:O	0.45	2.12	7	1
1:A:30:ARG:HG2	1:A:30:ARG:NH1	0.45	2.27	40	3
1:A:108:THR:HG23	1:A:109:ASP:N	0.45	2.27	17	5
1:A:29:ASN:ND2	1:A:29:ASN:N	0.45	2.65	14	2
1:A:83:CYS:SG	1:A:87:LEU:HD12	0.45	2.51	11	1
1:A:6:PHE:CE2	1:A:21:TYR:CG	0.45	3.05	11	1
1:A:94:LYS:CD	1:A:103:THR:OG1	0.45	2.65	25	2
1:A:63:ALA:HB3	1:A:64:PRO:CD	0.45	2.41	1	8
1:A:37:LYS:HD2	1:A:37:LYS:H	0.45	1.72	43	2
1:A:30:ARG:HG3	1:A:30:ARG:HH11	0.45	1.71	33	2
1:A:55:LEU:HD22	1:A:90:LYS:HE3	0.45	1.87	15	1
1:A:44:ASP:OD1	1:A:78:GLU:OE2	0.45	2.34	30	9
1:A:7:MET:HA	1:A:10:LEU:HD12	0.45	1.87	39	1
1:A:36:ARG:HH11	1:A:36:ARG:CG	0.45	2.25	22	3
1:A:94:LYS:O	1:A:94:LYS:CE	0.45	2.64	15	3
1:A:75:ALA:O	1:A:78:GLU:CB	0.45	2.64	41	5
1:A:6:PHE:CD1	1:A:21:TYR:CD2	0.45	3.04	36	1
1:A:34:GLY:CA	1:A:36:ARG:NH2	0.45	2.79	7	1
1:A:52:GLU:OE1	1:A:52:GLU:C	0.45	2.55	11	1
1:A:36:ARG:CB	1:A:41:TYR:OH	0.45	2.65	39	1
1:A:26:GLU:CD	1:A:26:GLU:O	0.45	2.55	20	3
1:A:12:ASN:ND2	1:A:12:ASN:O	0.45	2.50	6	1
1:A:37:LYS:HZ3	1:A:60:ASP:CB	0.45	2.23	31	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:VAL:C	1:A:78:GLU:H	0.45	2.16	18	6
1:A:81:VAL:O	1:A:85:LYS:HG2	0.45	2.12	39	1
1:A:10:LEU:HD23	1:A:42:ALA:HB2	0.45	1.88	12	1
1:A:49:GLU:O	1:A:52:GLU:OE2	0.44	2.35	22	5
1:A:28:VAL:CG2	1:A:58:GLY:H	0.44	2.24	11	3
1:A:40:HIS:HD1	1:A:40:HIS:C	0.44	2.15	23	2
1:A:6:PHE:CE2	1:A:10:LEU:HD11	0.44	2.47	36	2
1:A:44:ASP:O	1:A:44:ASP:OD1	0.44	2.35	38	3
1:A:36:ARG:HG3	1:A:36:ARG:NH1	0.44	2.27	26	1
1:A:113:ILE:C	1:A:115:ALA:H	0.44	2.14	38	9
1:A:31:THR:CG2	1:A:36:ARG:H	0.44	2.25	22	2
1:A:67:HIS:O	1:A:68:HIS:ND1	0.44	2.51	14	3
1:A:8:TRP:CD2	1:A:11:LYS:NZ	0.44	2.86	34	1
1:A:64:PRO:O	1:A:65:ASP:OD1	0.44	2.36	27	1
1:A:106:GLU:O	1:A:106:GLU:HG3	0.44	2.11	42	3
1:A:103:THR:CG2	1:A:104:ALA:H	0.44	2.24	34	1
1:A:53:PHE:O	1:A:56:LEU:CB	0.44	2.65	41	1
1:A:66:LYS:O	1:A:68:HIS:CE1	0.44	2.70	37	1
1:A:114:LYS:O	1:A:117:LEU:CB	0.44	2.66	37	1
1:A:63:ALA:N	1:A:64:PRO:CD	0.44	2.80	42	2
1:A:31:THR:O	1:A:32:LEU:C	0.44	2.55	43	1
1:A:32:LEU:HD21	1:A:41:TYR:CE1	0.44	2.47	9	1
1:A:100:ASP:CG	1:A:101:GLY:N	0.44	2.71	11	2
1:A:52:GLU:O	1:A:56:LEU:HD13	0.44	2.12	11	1
1:A:86:LEU:CD2	1:A:90:LYS:NZ	0.44	2.81	5	1
1:A:72:LEU:HD12	1:A:87:LEU:CD1	0.44	2.42	1	2
1:A:87:LEU:C	1:A:89:SER:H	0.44	2.16	31	6
1:A:9:ALA:O	1:A:10:LEU:C	0.44	2.56	36	5
1:A:70:THR:OG1	1:A:71:PRO:HD2	0.44	2.12	1	1
1:A:118:GLN:OE1	1:A:118:GLN:O	0.44	2.35	13	1
1:A:30:ARG:HH11	1:A:30:ARG:HG2	0.44	1.73	7	2
1:A:31:THR:HG22	1:A:36:ARG:O	0.44	2.13	23	2
1:A:33:GLU:CD	1:A:36:ARG:NE	0.44	2.71	10	1
1:A:91:GLY:O	1:A:92:ALA:C	0.43	2.55	25	5
1:A:25:GLY:O	1:A:27:ASP:OD1	0.43	2.36	25	1
1:A:11:LYS:O	1:A:45:CYS:O	0.43	2.36	44	4
1:A:51:LEU:O	1:A:55:LEU:HB2	0.43	2.12	4	1
1:A:31:THR:OG1	1:A:31:THR:O	0.43	2.33	23	1
1:A:52:GLU:O	1:A:56:LEU:HG	0.43	2.13	42	1
1:A:22:VAL:CG2	1:A:28:VAL:CG1	0.43	2.96	32	1
1:A:40:HIS:CG	1:A:74:SER:HG	0.43	2.31	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:LEU:O	1:A:43:ALA:CB	0.43	2.66	39	5
1:A:40:HIS:O	1:A:44:ASP:OD1	0.43	2.36	11	3
1:A:114:LYS:O	1:A:117:LEU:N	0.43	2.49	32	2
1:A:8:TRP:CD1	1:A:8:TRP:O	0.43	2.72	8	3
1:A:33:GLU:N	1:A:36:ARG:CZ	0.43	2.82	7	1
1:A:93:ASP:CG	1:A:96:VAL:CG2	0.43	2.86	26	1
1:A:4:LYS:CB	1:A:4:LYS:NZ	0.43	2.82	32	1
1:A:60:ASP:C	1:A:62:ASN:N	0.43	2.72	1	3
1:A:5:GLU:O	1:A:5:GLU:OE1	0.43	2.36	24	1
1:A:19:LYS:HD3	1:A:53:PHE:CZ	0.43	2.48	33	1
1:A:52:GLU:CD	1:A:90:LYS:HZ2	0.43	2.17	12	1
1:A:24:LYS:CD	1:A:24:LYS:N	0.43	2.81	40	1
1:A:16:ASP:O	1:A:20:ASP:OD1	0.43	2.36	44	1
1:A:33:GLU:OE1	1:A:34:GLY:N	0.43	2.50	39	1
1:A:44:ASP:O	1:A:78:GLU:OE1	0.43	2.36	1	1
1:A:26:GLU:N	1:A:26:GLU:OE1	0.43	2.51	26	1
1:A:19:LYS:CE	1:A:53:PHE:CE1	0.43	3.01	10	3
1:A:27:ASP:OD2	1:A:30:ARG:NE	0.43	2.52	28	1
1:A:33:GLU:O	1:A:33:GLU:CD	0.43	2.57	25	1
1:A:64:PRO:C	1:A:97:LYS:NZ	0.43	2.72	19	1
1:A:32:LEU:HD13	1:A:36:ARG:NH1	0.43	2.28	7	1
1:A:78:GLU:O	1:A:78:GLU:OE1	0.43	2.36	15	1
1:A:75:ALA:O	1:A:76:VAL:C	0.43	2.56	7	24
1:A:50:ILE:O	1:A:51:LEU:C	0.43	2.55	11	7
1:A:63:ALA:O	1:A:65:ASP:OD1	0.43	2.36	3	1
1:A:117:LEU:C	1:A:117:LEU:CD1	0.43	2.86	1	1
1:A:30:ARG:N	1:A:30:ARG:CD	0.43	2.80	2	1
1:A:12:ASN:OD1	1:A:14:ASP:CG	0.43	2.57	44	1
1:A:8:TRP:HE1	1:A:12:ASN:HD22	0.43	1.56	44	1
1:A:100:ASP:CG	1:A:101:GLY:H	0.43	2.16	17	3
1:A:109:ASP:OD1	1:A:109:ASP:O	0.43	2.37	10	1
1:A:12:ASN:OD1	1:A:12:ASN:O	0.43	2.36	21	1
1:A:118:GLN:CD	1:A:118:GLN:O	0.43	2.57	13	1
1:A:106:GLU:CD	1:A:106:GLU:O	0.43	2.57	37	1
1:A:73:LEU:O	1:A:76:VAL:HB	0.43	2.13	25	1
1:A:73:LEU:CD1	1:A:73:LEU:H	0.43	2.23	14	1
1:A:110:ASN:OD1	1:A:113:ILE:CD1	0.43	2.67	30	2
1:A:56:LEU:O	1:A:57:LYS:O	0.43	2.36	34	4
1:A:8:TRP:NE1	1:A:12:ASN:OD1	0.43	2.52	15	1
1:A:19:LYS:CD	1:A:53:PHE:CE1	0.43	3.01	30	1
1:A:44:ASP:O	1:A:80:HIS:NE2	0.43	2.52	44	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:54:LEU:HD12	1:A:55:LEU:H	0.43	1.74	19	4
1:A:110:ASN:O	1:A:114:LYS:HG3	0.43	2.14	24	1
1:A:87:LEU:O	1:A:88:LEU:C	0.43	2.56	14	3
1:A:95:THR:HG22	1:A:103:THR:CB	0.43	2.43	13	1
1:A:80:HIS:C	1:A:81:VAL:CG2	0.42	2.87	1	10
1:A:9:ALA:CB	1:A:14:ASP:OD2	0.42	2.61	8	2
1:A:52:GLU:CB	1:A:86:LEU:HD21	0.42	2.43	20	1
1:A:76:VAL:HG23	1:A:77:TYR:N	0.42	2.28	21	1
1:A:44:ASP:CG	1:A:74:SER:HG	0.42	2.18	24	1
1:A:54:LEU:CD2	1:A:54:LEU:C	0.42	2.85	39	1
1:A:52:GLU:HB3	1:A:86:LEU:HD21	0.42	1.90	20	1
1:A:6:PHE:C	1:A:6:PHE:CD1	0.42	2.91	29	1
1:A:27:ASP:CG	1:A:30:ARG:NH2	0.42	2.72	32	1
1:A:44:ASP:CG	1:A:78:GLU:OE1	0.42	2.58	7	1
1:A:66:LYS:O	1:A:68:HIS:CD2	0.42	2.73	8	1
1:A:17:GLU:N	1:A:17:GLU:CD	0.42	2.72	30	1
1:A:11:LYS:CD	1:A:12:ASN:N	0.42	2.82	20	1
1:A:69:ILE:HD12	1:A:73:LEU:HD13	0.42	1.87	23	2
1:A:102:LEU:HG	1:A:106:GLU:CG	0.42	2.44	13	1
1:A:44:ASP:OD1	1:A:78:GLU:CD	0.42	2.58	7	2
1:A:54:LEU:HD13	1:A:55:LEU:N	0.42	2.30	13	6
1:A:60:ASP:O	1:A:62:ASN:N	0.42	2.52	1	3
1:A:95:THR:OG1	1:A:103:THR:CG2	0.42	2.66	39	1
1:A:37:LYS:HD2	1:A:37:LYS:O	0.42	2.15	43	1
1:A:61:ILE:HG23	1:A:62:ASN:HD22	0.42	1.75	4	1
1:A:44:ASP:OD1	1:A:44:ASP:N	0.42	2.51	11	1
1:A:19:LYS:CD	1:A:53:PHE:CZ	0.42	3.03	30	1
1:A:5:GLU:O	1:A:17:GLU:OE1	0.42	2.38	29	1
1:A:37:LYS:H	1:A:37:LYS:HD2	0.42	1.75	32	3
1:A:12:ASN:CB	1:A:14:ASP:OD1	0.42	2.68	14	1
1:A:52:GLU:C	1:A:52:GLU:OE1	0.42	2.58	9	2
1:A:72:LEU:CD1	1:A:87:LEU:HD13	0.42	2.40	15	1
1:A:99:PRO:HG2	1:A:102:LEU:HD12	0.42	1.89	44	4
1:A:5:GLU:OE1	1:A:17:GLU:OE1	0.42	2.37	5	1
1:A:5:GLU:OE1	1:A:17:GLU:OE2	0.42	2.37	5	1
1:A:68:HIS:O	1:A:97:LYS:O	0.42	2.38	35	1
1:A:32:LEU:CD1	1:A:41:TYR:CD1	0.42	3.03	38	2
1:A:21:TYR:CE1	1:A:30:ARG:NH2	0.42	2.88	29	1
1:A:24:LYS:N	1:A:24:LYS:CD	0.42	2.82	44	1
1:A:54:LEU:CD1	1:A:54:LEU:H	0.42	2.23	3	2
1:A:37:LYS:CD	1:A:37:LYS:O	0.42	2.68	43	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:95:THR:CG2	1:A:103:THR:OG1	0.42	2.67	34	1
1:A:76:VAL:HG12	1:A:77:TYR:N	0.41	2.30	25	1
1:A:73:LEU:H	1:A:73:LEU:CD1	0.41	2.16	5	1
1:A:44:ASP:OD1	1:A:44:ASP:O	0.41	2.38	19	2
1:A:9:ALA:HB1	1:A:14:ASP:OD1	0.41	2.15	7	1
1:A:51:LEU:O	1:A:54:LEU:CD1	0.41	2.68	11	1
1:A:32:LEU:HD21	1:A:41:TYR:OH	0.41	2.14	7	1
1:A:116:LEU:HD23	1:A:116:LEU:HA	0.41	1.75	42	3
1:A:37:LYS:C	1:A:39:LEU:N	0.41	2.74	9	1
1:A:84:VAL:HB	1:A:116:LEU:HD11	0.41	1.90	12	1
1:A:6:PHE:CZ	1:A:21:TYR:CB	0.41	3.03	11	1
1:A:69:ILE:HD13	1:A:70:THR:N	0.41	2.27	2	1
1:A:108:THR:HG23	1:A:114:LYS:HZ1	0.41	1.74	28	1
1:A:110:ASN:ND2	1:A:113:ILE:HB	0.41	2.30	42	1
1:A:11:LYS:C	1:A:13:GLY:H	0.41	2.19	15	1
1:A:85:LYS:C	1:A:87:LEU:H	0.41	2.19	7	1
1:A:49:GLU:O	1:A:52:GLU:CD	0.41	2.59	35	1
1:A:7:MET:SD	1:A:32:LEU:CD2	0.41	3.09	17	1
1:A:55:LEU:HD22	1:A:90:LYS:HD2	0.41	1.90	12	1
1:A:36:ARG:NH1	1:A:41:TYR:OH	0.41	2.53	30	1
1:A:22:VAL:O	1:A:57:LYS:NZ	0.41	2.54	16	1
1:A:88:LEU:O	1:A:89:SER:C	0.41	2.57	19	1
1:A:20:ASP:C	1:A:20:ASP:OD1	0.41	2.59	24	1
1:A:10:LEU:HD22	1:A:38:PRO:O	0.41	2.15	39	1
1:A:40:HIS:CE1	1:A:74:SER:HG	0.41	2.33	12	1
1:A:37:LYS:CB	1:A:38:PRO:CD	0.41	2.98	7	1
1:A:37:LYS:HD3	1:A:38:PRO:N	0.41	2.30	41	1
1:A:51:LEU:HD22	1:A:52:GLU:OE1	0.41	2.15	23	1
1:A:19:LYS:CG	1:A:53:PHE:CZ	0.41	3.04	43	1
1:A:4:LYS:O	1:A:5:GLU:C	0.41	2.59	15	1
1:A:22:VAL:CG2	1:A:57:LYS:HZ2	0.41	2.28	10	1
1:A:117:LEU:HD13	1:A:117:LEU:C	0.41	2.35	37	1
1:A:32:LEU:O	1:A:33:GLU:C	0.41	2.59	27	1
1:A:110:ASN:ND2	1:A:110:ASN:C	0.41	2.74	17	2
1:A:116:LEU:HA	1:A:116:LEU:HD23	0.41	1.78	22	3
1:A:15:LEU:CD1	1:A:15:LEU:C	0.41	2.88	3	1
1:A:56:LEU:HD12	1:A:56:LEU:C	0.41	2.36	17	1
1:A:92:ALA:C	1:A:93:ASP:OD1	0.41	2.59	26	1
1:A:52:GLU:HB3	1:A:86:LEU:HD11	0.41	1.92	20	1
1:A:54:LEU:C	1:A:54:LEU:CD2	0.41	2.89	38	2
1:A:61:ILE:CG2	1:A:62:ASN:N	0.41	2.84	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:5:GLU:CA	1:A:5:GLU:OE1	0.41	2.69	40	1
1:A:51:LEU:HD22	1:A:52:GLU:N	0.41	2.25	15	1
1:A:37:LYS:CD	1:A:37:LYS:C	0.41	2.88	29	1
1:A:108:THR:O	1:A:114:LYS:CE	0.41	2.68	10	1
1:A:37:LYS:NZ	1:A:37:LYS:HB2	0.41	2.31	31	1
1:A:116:LEU:C	1:A:118:GLN:H	0.41	2.19	44	1
1:A:27:ASP:OD1	1:A:30:ARG:NH2	0.41	2.54	32	1
1:A:118:GLN:OXT	1:A:118:GLN:CD	0.41	2.59	24	1
1:A:13:GLY:N	1:A:47:GLN:NE2	0.41	2.67	8	1
1:A:14:ASP:O	1:A:14:ASP:CG	0.41	2.59	8	1
1:A:108:THR:O	1:A:114:LYS:NZ	0.41	2.53	8	1
1:A:9:ALA:CA	1:A:14:ASP:OD1	0.40	2.69	7	1
1:A:41:TYR:O	1:A:45:CYS:SG	0.40	2.75	39	1
1:A:83:CYS:C	1:A:85:LYS:N	0.40	2.73	14	2
1:A:15:LEU:CD1	1:A:19:LYS:NZ	0.40	2.82	42	1
1:A:114:LYS:NZ	1:A:117:LEU:CD2	0.40	2.84	29	1
1:A:76:VAL:HG23	1:A:77:TYR:CD1	0.40	2.51	21	1
1:A:12:ASN:CG	1:A:14:ASP:OD1	0.40	2.59	44	1
1:A:8:TRP:CZ2	1:A:14:ASP:OD2	0.40	2.75	26	1
1:A:68:HIS:C	1:A:68:HIS:ND1	0.40	2.75	30	1
1:A:7:MET:HG2	1:A:8:TRP:N	0.40	2.31	29	1
1:A:101:GLY:O	1:A:105:LEU:HD12	0.40	2.16	31	1
1:A:73:LEU:CD2	1:A:103:THR:HA	0.40	2.47	13	1
1:A:98:GLY:O	1:A:99:PRO:C	0.40	2.58	13	1
1:A:94:LYS:NZ	1:A:103:THR:OG1	0.40	2.55	25	1
1:A:66:LYS:O	1:A:66:LYS:CD	0.40	2.70	44	1
1:A:32:LEU:HD22	1:A:41:TYR:CE1	0.40	2.51	5	1
1:A:101:GLY:O	1:A:103:THR:HG22	0.40	2.17	39	1
1:A:44:ASP:OD1	1:A:74:SER:O	0.40	2.40	22	1
1:A:7:MET:N	1:A:7:MET:SD	0.40	2.94	22	1
1:A:36:ARG:HH11	1:A:36:ARG:HG2	0.40	1.76	10	1
1:A:96:VAL:HG12	1:A:96:VAL:O	0.40	2.16	21	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	114/118 (97%)	61±2 (53±2%)	34±3 (30±2%)	20±2 (17±2%)	0	3
All	All	5016/5192 (97%)	2670 (53%)	1488 (30%)	858 (17%)	0	3

All 41 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	81	VAL	44
1	A	103	THR	44
1	A	64	PRO	44
1	A	57	LYS	44
1	A	92	ALA	44
1	A	59	ALA	44
1	A	34	GLY	43
1	A	99	PRO	42
1	A	29	ASN	41
1	A	53	PHE	40
1	A	24	LYS	39
1	A	94	LYS	37
1	A	26	GLU	36
1	A	68	HIS	30
1	A	100	ASP	30
1	A	97	LYS	29
1	A	32	LEU	24
1	A	85	LYS	24
1	A	63	ALA	21
1	A	58	GLY	19
1	A	102	LEU	18
1	A	93	ASP	15
1	A	76	VAL	15
1	A	8	TRP	13
1	A	54	LEU	12
1	A	31	THR	12
1	A	101	GLY	7
1	A	25	GLY	7
1	A	38	PRO	6
1	A	77	TYR	5
1	A	105	LEU	5
1	A	5	GLU	4
1	A	14	ASP	4
1	A	4	LYS	3
1	A	28	VAL	3
1	A	10	LEU	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	84	VAL	2
1	A	15	LEU	2
1	A	88	LEU	2
1	A	47	GLN	1
1	A	6	PHE	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	93/96 (97%)	64±3 (69±3%)	29±3 (31±3%)	2	15
All	All	4092/4224 (97%)	2808 (69%)	1284 (31%)	2	15

All 68 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	54	LEU	44
1	A	50	ILE	44
1	A	72	LEU	44
1	A	69	ILE	44
1	A	18	VAL	44
1	A	48	LEU	44
1	A	51	LEU	44
1	A	77	TYR	43
1	A	62	ASN	43
1	A	110	ASN	42
1	A	117	LEU	42
1	A	103	THR	41
1	A	70	THR	41
1	A	87	LEU	40
1	A	88	LEU	40
1	A	37	LYS	40
1	A	86	LEU	39
1	A	29	ASN	38
1	A	94	LYS	36
1	A	32	LEU	34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	82	SER	33
1	A	83	CYS	32
1	A	81	VAL	30
1	A	14	ASP	27
1	A	39	LEU	24
1	A	96	VAL	18
1	A	106	GLU	17
1	A	6	PHE	17
1	A	118	GLN	16
1	A	97	LYS	15
1	A	56	LEU	15
1	A	66	LYS	14
1	A	57	LYS	13
1	A	30	ARG	13
1	A	114	LYS	13
1	A	52	GLU	12
1	A	85	LYS	12
1	A	95	THR	11
1	A	36	ARG	10
1	A	90	LYS	10
1	A	45	CYS	9
1	A	11	LYS	7
1	A	31	THR	7
1	A	22	VAL	7
1	A	17	GLU	6
1	A	67	HIS	6
1	A	16	ASP	6
1	A	19	LYS	5
1	A	78	GLU	5
1	A	24	LYS	5
1	A	40	HIS	4
1	A	12	ASN	4
1	A	89	SER	4
1	A	5	GLU	3
1	A	49	GLU	3
1	A	74	SER	3
1	A	47	GLN	3
1	A	93	ASP	3
1	A	26	GLU	3
1	A	10	LEU	3
1	A	21	TYR	2
1	A	68	HIS	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	60	ASP	1
1	A	44	ASP	1
1	A	7	MET	1
1	A	27	ASP	1
1	A	55	LEU	1
1	A	113	ILE	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 [i](#)

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 83% for the well-defined parts and 82% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: BMRB entry 4224

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_1*

7.1.1 Bookkeeping [i](#)

The following table shows the results of parsing the chemical shift list and reports the number of nuclei with statistically unusual chemical shifts.

Total number of shifts	1313
Number of shifts mapped to atoms	1313
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	12

7.1.2 Chemical shift referencing [i](#)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction \pm precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	115	-0.20 ± 0.16	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	106	0.34 ± 0.10	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	0	—	—
^{15}N	111	0.97 ± 0.28	Should be applied

7.1.3 Completeness of resonance assignments [i](#)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 83%, i.e. 1137 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1368. 24 out of 25 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	449/567 (79%)	225/226 (100%)	114/230 (50%)	110/111 (99%)
Sidechain	637/719 (89%)	389/416 (94%)	241/278 (87%)	7/25 (28%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Aromatic	51/82 (62%)	27/44 (61%)	23/33 (70%)	1/5 (20%)
Overall	1137/1368 (83%)	641/686 (93%)	378/541 (70%)	118/141 (84%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 82%, i.e. 1144 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1398. 24 out of 25 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Backbone	453/582 (78%)	227/232 (98%)	115/236 (49%)	111/114 (97%)
Sidechain	640/734 (87%)	391/425 (92%)	242/284 (85%)	7/25 (28%)
Aromatic	51/82 (62%)	27/44 (61%)	23/33 (70%)	1/5 (20%)
Overall	1144/1398 (82%)	645/701 (92%)	380/553 (69%)	119/144 (83%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts ⓘ

The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

Mol	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	8	TRP	NE1	71.67	139.19 – 119.59	-29.4
1	A	47	GLN	NE2	64.10	120.91 – 102.81	-26.4
1	A	118	GLN	NE2	64.50	120.91 – 102.81	-26.2
1	A	111	GLN	NE2	65.00	120.91 – 102.81	-25.9
1	A	110	ASN	ND2	65.13	124.24 – 101.34	-20.8
1	A	12	ASN	ND2	65.31	124.24 – 101.34	-20.7
1	A	29	ASN	ND2	66.44	124.24 – 101.34	-20.2
1	A	62	ASN	ND2	67.16	124.24 – 101.34	-19.9
1	A	36	ARG	N	67.14	139.40 – 102.20	-14.4
1	A	68	HIS	CE1	120.70	149.70 – 125.30	-6.9
1	A	65	ASP	HB2	1.07	4.07 – 1.37	-6.1
1	A	8	TRP	CZ3	112.11	129.20 – 113.60	-6.0

7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots ⓘ

The image below reports *random coil index* values for the protein chains in the structure. The height of each bar gives a probability of a given residue to be disordered, as predicted from the available chemical shifts and the amino acid sequence. A value above 0.2 is an indication of significant predicted disorder. The colour of the bar shows whether the residue is in the well-defined core (black) or in the ill-defined residue ranges (cyan), as described in section 2 on ensemble composition.

Random coil index (RCI) for chain A:

