



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2022 – 02:34 PM EST

PDB ID : 2K18
Title : Solution structure of bb' domains of human protein disulfide isomerase
Authors : Denisov, A.Y.; Maattanen, P.; Dabrowski, C.; Kozlov, G.; Thomas, D.Y.;
Gehring, K.
Deposited on : 2008-02-22

This is a Full wwPDB NMR Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

A user guide is available at

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/NMRValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

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

MolProbity : 4.02b-467
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
ShiftChecker : 2.27
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.27

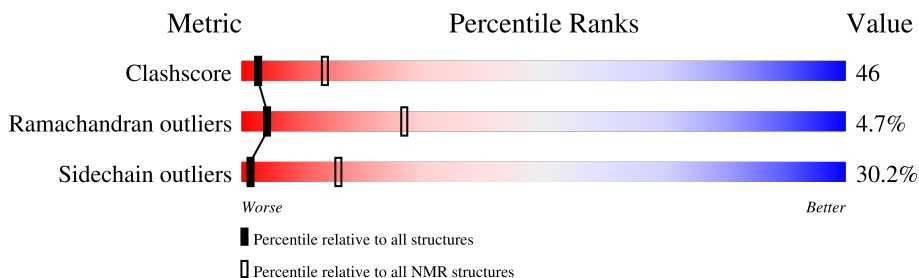
1 Overall quality at a glance

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	158937	12864
Ramachandran outliers	154571	11451
Sidechain outliers	154315	11428

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	228	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 10 models. Model 7 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:6-A:133, A:148-A:191, A:196-A:221 (198)	0.48	7

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. No single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3588 atoms, of which 1785 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Protein disulfide-isomerase.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	228	3588	1158	1785	287	354	4	0

There are 5 discrepancies between the modelled and reference sequences:

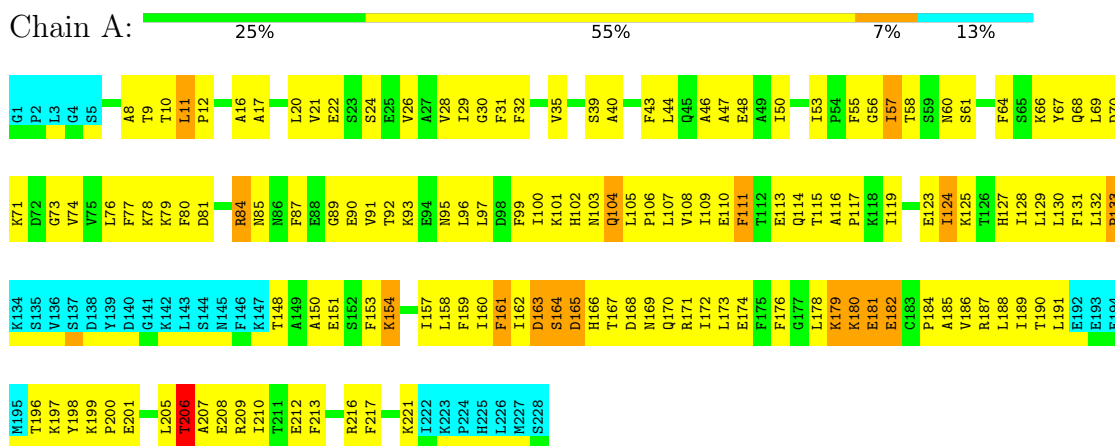
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1	GLY	-	expression tag	UNP P07237
A	2	PRO	-	expression tag	UNP P07237
A	3	LEU	-	expression tag	UNP P07237
A	4	GLY	-	expression tag	UNP P07237
A	5	SER	-	expression tag	UNP P07237

4 Residue-property plots [i](#)

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: Protein disulfide-isomerase

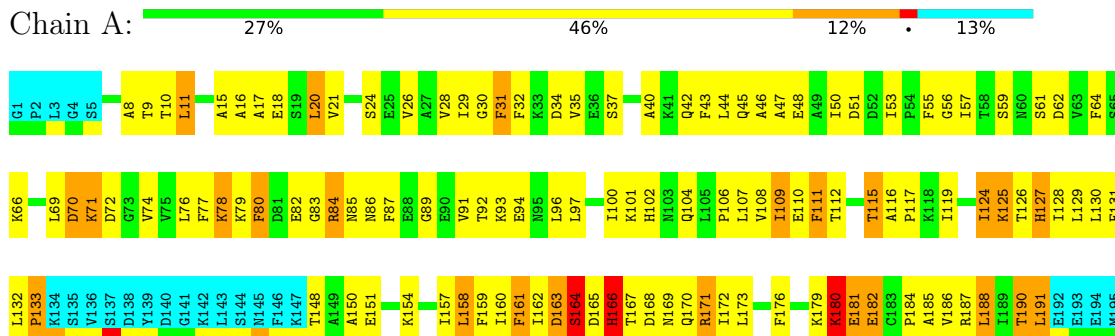


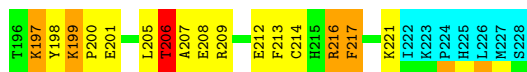
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

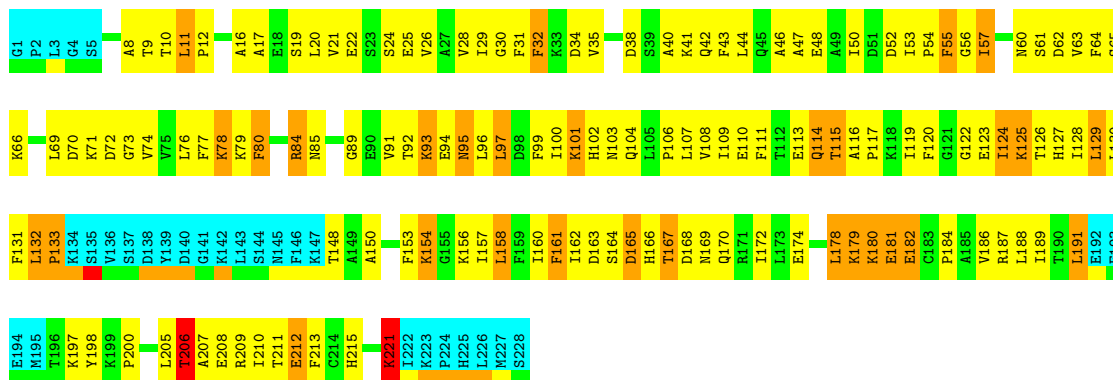
- Molecule 1: Protein disulfide-isomerase





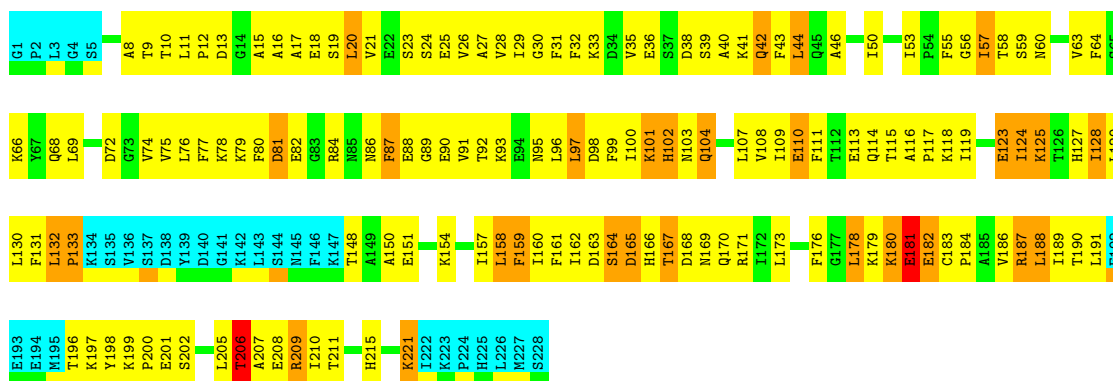
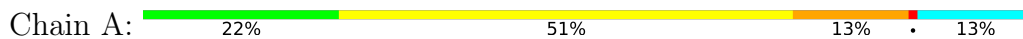
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Protein disulfide-isomerase



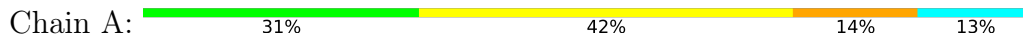
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Protein disulfide-isomerase



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Protein disulfide-isomerase

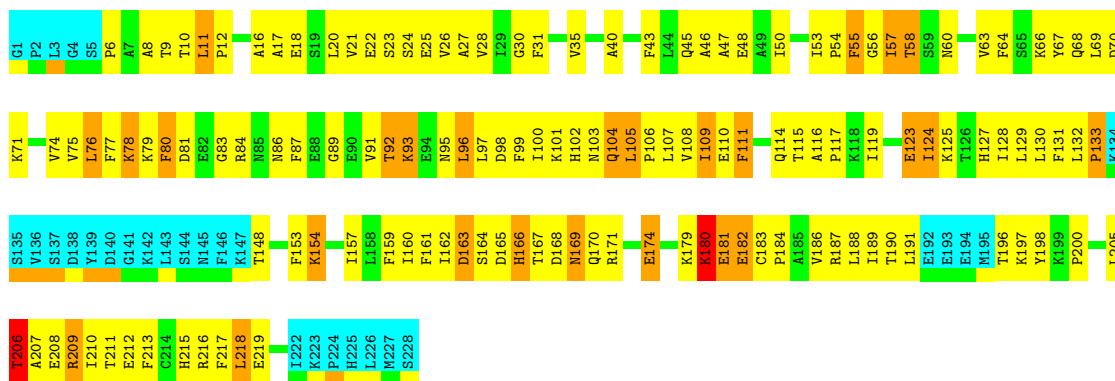




4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Protein disulfide-isomerase

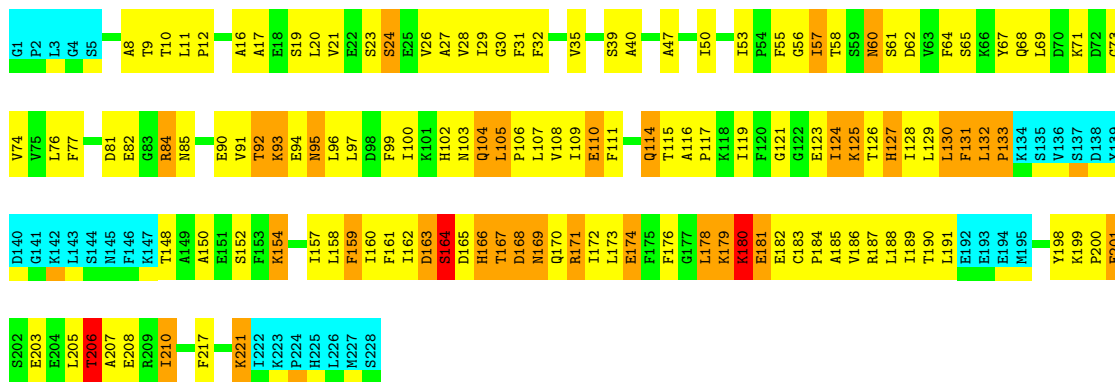
Chain A: 26% 49% 11% 13%



4.2.6 Score per residue for model 6

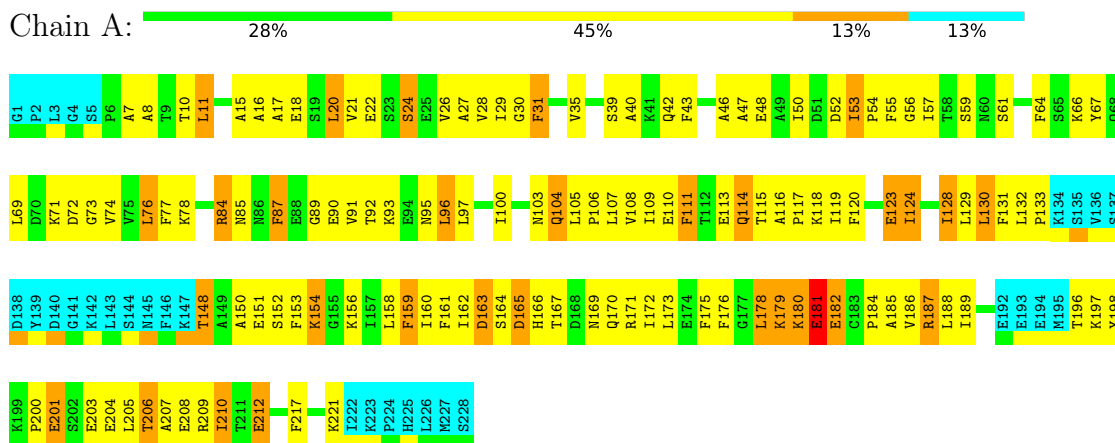
- Molecule 1: Protein disulfide-isomerase

Chain A: 29% 42% 14% 13%



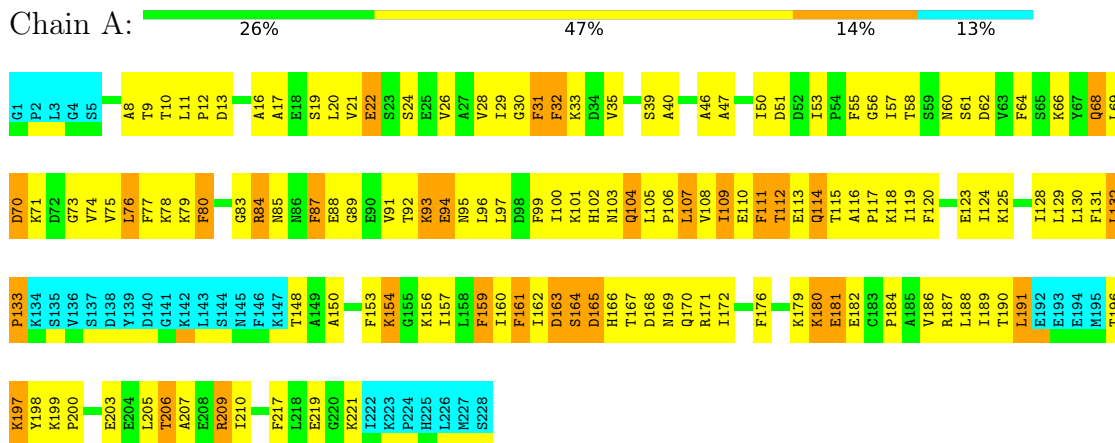
4.2.7 Score per residue for model 7 (medoid)

- Molecule 1: Protein disulfide-isomerase



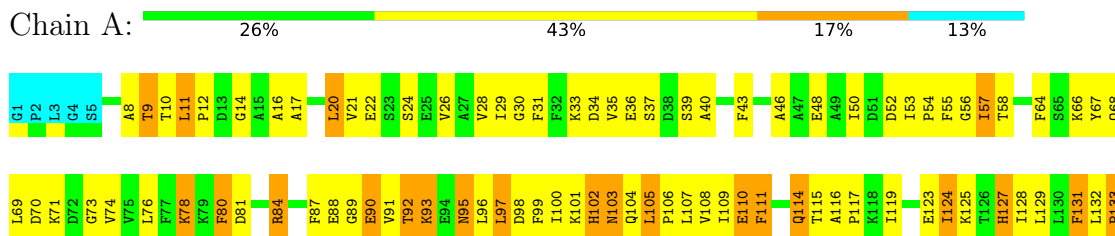
4.2.8 Score per residue for model 8

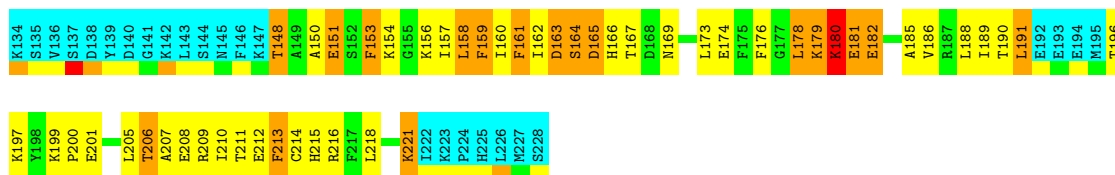
- Molecule 1: Protein disulfide-isomerase



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Protein disulfide-isomerase

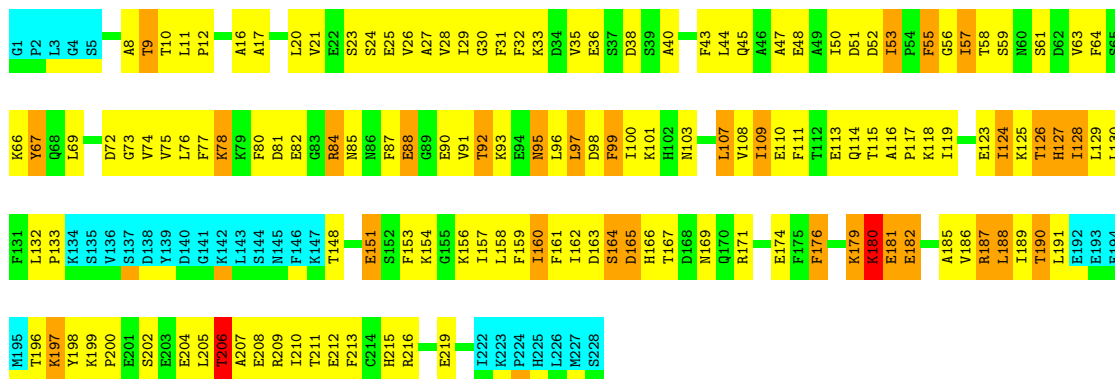




4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Protein disulfide-isomerase

Chain A: 25% 48% 13% 13%



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 200 calculated structures, 10 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy and the least restraint violations*.

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

Software name	Classification	Version
CNS	refinement	1.1

No chemical shift data was provided.

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	1571	1555	1555	143±11
All	All	15710	15550	15550	1428

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 46.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:LEU:HD13	1:A:17:ALA:HB2	1.07	1.25	2	8
1:A:8:ALA:HB1	1:A:57:ILE:HD11	1.05	1.21	2	10
1:A:50:ILE:HG21	1:A:97:LEU:HD11	1.01	1.31	2	1
1:A:10:THR:HG22	1:A:57:ILE:HB	0.97	1.32	7	6
1:A:107:LEU:HD22	1:A:150:ALA:HB1	0.94	1.38	1	3
1:A:53:ILE:HD12	1:A:104:GLN:HG3	0.88	1.44	2	6
1:A:28:VAL:HB	1:A:76:LEU:HG	0.88	1.45	8	3
1:A:169:ASN:HA	1:A:172:ILE:HD12	0.86	1.47	8	2
1:A:132:LEU:HD13	1:A:133:PRO:HD2	0.86	1.48	2	2
1:A:128:ILE:HG23	1:A:157:ILE:HD11	0.86	1.47	5	7
1:A:107:LEU:HD11	1:A:150:ALA:HB1	0.85	1.45	6	2
1:A:46:ALA:CB	1:A:96:LEU:HD21	0.84	2.03	5	7
1:A:20:LEU:HD11	1:A:29:ILE:HD11	0.84	1.48	6	2
1:A:132:LEU:HD23	1:A:133:PRO:HD2	0.83	1.47	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:PHE:CD1	1:A:96:LEU:HD22	0.82	2.08	3	5
1:A:186:VAL:O	1:A:200:PRO:HD3	0.81	1.76	8	7
1:A:199:LYS:HG3	1:A:200:PRO:HD2	0.80	1.52	9	4
1:A:81:ASP:OD1	1:A:107:LEU:HD13	0.80	1.77	3	2
1:A:165:ASP:HB3	1:A:169:ASN:HB2	0.80	1.52	10	7
1:A:60:ASN:HB2	1:A:63:VAL:HG23	0.80	1.52	5	1
1:A:76:LEU:HD12	1:A:85:ASN:O	0.80	1.75	10	1
1:A:111:PHE:HB2	1:A:162:ILE:HG22	0.80	1.52	9	3
1:A:93:LYS:HA	1:A:96:LEU:HD23	0.79	1.55	7	4
1:A:10:THR:C	1:A:11:LEU:HD13	0.78	1.99	1	2
1:A:170:GLN:O	1:A:173:LEU:HG	0.78	1.78	6	3
1:A:129:LEU:HD21	1:A:162:ILE:HD13	0.77	1.57	1	1
1:A:11:LEU:HD21	1:A:20:LEU:CD2	0.77	2.10	7	2
1:A:108:VAL:HG13	1:A:159:PHE:O	0.77	1.80	7	1
1:A:28:VAL:HG22	1:A:76:LEU:HG	0.76	1.57	2	3
1:A:111:PHE:CB	1:A:162:ILE:HG22	0.75	2.11	6	2
1:A:60:ASN:HB3	1:A:63:VAL:HG23	0.74	1.56	2	3
1:A:46:ALA:HB3	1:A:96:LEU:HD21	0.74	1.58	7	3
1:A:109:ILE:O	1:A:160:ILE:HG12	0.74	1.81	4	1
1:A:11:LEU:HD21	1:A:20:LEU:HD23	0.74	1.58	7	2
1:A:131:PHE:CD2	1:A:184:PRO:HA	0.74	2.18	2	4
1:A:131:PHE:CD1	1:A:184:PRO:HA	0.74	2.18	7	2
1:A:109:ILE:HG22	1:A:160:ILE:HG22	0.74	1.59	7	2
1:A:26:VAL:HB	1:A:78:LYS:HE3	0.74	1.58	5	1
1:A:9:THR:HG23	1:A:20:LEU:HD22	0.73	1.60	1	1
1:A:76:LEU:O	1:A:84:ARG:HA	0.73	1.83	5	10
1:A:107:LEU:HD23	1:A:108:VAL:HG13	0.73	1.61	8	1
1:A:179:LYS:O	1:A:182:GLU:N	0.72	2.21	2	10
1:A:30:GLY:O	1:A:57:ILE:HG22	0.72	1.83	3	2
1:A:170:GLN:HA	1:A:173:LEU:HD12	0.72	1.60	1	1
1:A:8:ALA:HA	1:A:55:PHE:O	0.72	1.84	5	10
1:A:115:THR:O	1:A:119:ILE:HG12	0.72	1.84	1	4
1:A:43:PHE:CZ	1:A:74:VAL:HG11	0.72	2.19	2	4
1:A:8:ALA:HB1	1:A:57:ILE:CD1	0.72	2.12	2	6
1:A:165:ASP:CB	1:A:169:ASN:HB2	0.72	2.15	7	7
1:A:125:LYS:H	1:A:191:LEU:HB3	0.72	1.43	4	4
1:A:11:LEU:HG	1:A:17:ALA:HA	0.71	1.60	7	2
1:A:185:ALA:HB1	1:A:200:PRO:HG3	0.71	1.62	7	5
1:A:76:LEU:HD22	1:A:103:ASN:CB	0.71	2.16	10	1
1:A:115:THR:O	1:A:119:ILE:HG13	0.71	1.85	6	6
1:A:56:GLY:C	1:A:57:ILE:HD13	0.71	2.05	2	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:THR:HG22	1:A:57:ILE:O	0.70	1.85	2	1
1:A:8:ALA:CB	1:A:57:ILE:HD11	0.70	2.12	10	3
1:A:188:LEU:HD21	1:A:213:PHE:HB3	0.70	1.62	2	1
1:A:129:LEU:HD21	1:A:162:ILE:HG12	0.70	1.62	6	1
1:A:50:ILE:HD11	1:A:55:PHE:CE1	0.70	2.22	7	1
1:A:55:PHE:HE2	1:A:100:ILE:HG21	0.70	1.46	4	3
1:A:128:ILE:HG22	1:A:188:LEU:HG	0.69	1.64	3	2
1:A:128:ILE:CG2	1:A:188:LEU:HD12	0.69	2.18	5	3
1:A:9:THR:HG21	1:A:20:LEU:HB2	0.69	1.62	1	3
1:A:11:LEU:HB3	1:A:16:ALA:HB3	0.69	1.63	1	2
1:A:30:GLY:HA3	1:A:74:VAL:HG22	0.69	1.61	5	8
1:A:129:LEU:HD21	1:A:162:ILE:CG2	0.69	2.16	9	5
1:A:128:ILE:CG2	1:A:157:ILE:HD11	0.69	2.18	3	3
1:A:186:VAL:HG13	1:A:213:PHE:CE2	0.69	2.23	5	2
1:A:127:HIS:HB2	1:A:160:ILE:HD11	0.69	1.65	5	1
1:A:43:PHE:HD1	1:A:96:LEU:HD22	0.68	1.44	5	4
1:A:77:PHE:HA	1:A:83:GLY:O	0.68	1.88	1	4
1:A:109:ILE:HD12	1:A:115:THR:HG23	0.68	1.65	4	2
1:A:30:GLY:CA	1:A:74:VAL:HG22	0.68	2.18	2	9
1:A:111:PHE:CG	1:A:162:ILE:HD12	0.68	2.23	3	2
1:A:107:LEU:HD21	1:A:154:LYS:HG3	0.67	1.63	7	1
1:A:129:LEU:HA	1:A:160:ILE:HG13	0.67	1.65	1	5
1:A:50:ILE:HD13	1:A:97:LEU:CD1	0.67	2.18	2	1
1:A:131:PHE:HA	1:A:162:ILE:CG2	0.67	2.20	3	6
1:A:46:ALA:HB1	1:A:97:LEU:HD13	0.67	1.66	1	1
1:A:46:ALA:HB1	1:A:96:LEU:HD11	0.67	1.65	2	3
1:A:131:PHE:HA	1:A:162:ILE:HG13	0.67	1.65	9	2
1:A:50:ILE:O	1:A:50:ILE:HG13	0.67	1.90	7	9
1:A:127:HIS:HB3	1:A:158:LEU:HG	0.66	1.67	2	2
1:A:29:ILE:HA	1:A:56:GLY:O	0.66	1.90	3	5
1:A:76:LEU:HD13	1:A:103:ASN:HB3	0.66	1.67	4	2
1:A:173:LEU:HD13	1:A:178:LEU:O	0.66	1.89	4	3
1:A:39:SER:OG	1:A:91:VAL:HG21	0.66	1.89	6	3
1:A:127:HIS:HB2	1:A:160:ILE:CD1	0.66	2.21	10	2
1:A:101:LYS:HA	1:A:104:GLN:HG2	0.66	1.68	3	1
1:A:129:LEU:HD21	1:A:162:ILE:HG21	0.66	1.67	9	2
1:A:110:GLU:HB3	1:A:161:PHE:CE2	0.66	2.25	10	5
1:A:64:PHE:HB3	1:A:69:LEU:O	0.66	1.91	2	9
1:A:162:ILE:HD11	1:A:169:ASN:HD21	0.66	1.51	2	2
1:A:28:VAL:HG22	1:A:76:LEU:HD13	0.66	1.67	7	1
1:A:10:THR:CG2	1:A:57:ILE:HB	0.65	2.21	6	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:187:ARG:HG3	1:A:198:TYR:O	0.65	1.91	1	1
1:A:133:PRO:HA	1:A:164:SER:HB3	0.65	1.67	5	3
1:A:123:GLU:O	1:A:124:ILE:HG13	0.65	1.90	10	4
1:A:127:HIS:HB2	1:A:160:ILE:HD12	0.65	1.69	10	1
1:A:110:GLU:HA	1:A:161:PHE:O	0.65	1.92	7	4
1:A:87:PHE:CE2	1:A:96:LEU:HA	0.65	2.27	8	3
1:A:131:PHE:HB2	1:A:162:ILE:HD11	0.65	1.66	1	1
1:A:208:GLU:O	1:A:212:GLU:HB2	0.65	1.91	7	6
1:A:87:PHE:HE2	1:A:96:LEU:HA	0.65	1.52	9	2
1:A:128:ILE:HD11	1:A:186:VAL:HG23	0.65	1.69	10	1
1:A:50:ILE:HG13	1:A:55:PHE:HZ	0.65	1.52	10	2
1:A:30:GLY:CA	1:A:74:VAL:HG13	0.65	2.21	3	10
1:A:96:LEU:O	1:A:100:ILE:HG12	0.65	1.91	5	5
1:A:131:PHE:HA	1:A:162:ILE:CG1	0.65	2.22	1	3
1:A:17:ALA:O	1:A:21:VAL:HG23	0.65	1.92	6	8
1:A:43:PHE:CE1	1:A:96:LEU:HD22	0.65	2.26	3	1
1:A:129:LEU:HD11	1:A:162:ILE:HB	0.65	1.69	10	1
1:A:112:THR:HG23	1:A:114:GLN:HG3	0.64	1.69	8	1
1:A:110:GLU:HB3	1:A:161:PHE:CZ	0.64	2.28	7	1
1:A:207:ALA:HA	1:A:210:ILE:HG12	0.64	1.68	10	4
1:A:28:VAL:HG21	1:A:100:ILE:HG23	0.64	1.70	3	1
1:A:93:LYS:O	1:A:97:LEU:HG	0.64	1.92	7	1
1:A:165:ASP:HB2	1:A:169:ASN:HB2	0.64	1.69	7	1
1:A:205:LEU:HB3	1:A:208:GLU:HB2	0.64	1.70	5	3
1:A:186:VAL:HB	1:A:209:ARG:NH1	0.64	2.08	5	1
1:A:169:ASN:CG	1:A:172:ILE:HD12	0.64	2.12	1	1
1:A:188:LEU:HD23	1:A:198:TYR:CD1	0.64	2.28	1	1
1:A:209:ARG:HG2	1:A:213:PHE:CZ	0.64	2.28	2	1
1:A:170:GLN:NE2	1:A:173:LEU:HD21	0.64	2.08	4	1
1:A:28:VAL:HG21	1:A:76:LEU:HD23	0.64	1.70	10	1
1:A:29:ILE:HG23	1:A:56:GLY:C	0.63	2.14	8	6
1:A:35:VAL:HG13	1:A:40:ALA:HB1	0.63	1.70	5	3
1:A:57:ILE:N	1:A:57:ILE:HD12	0.63	2.08	6	2
1:A:11:LEU:HD13	1:A:11:LEU:N	0.63	2.08	1	2
1:A:185:ALA:HB1	1:A:200:PRO:CG	0.63	2.23	7	4
1:A:28:VAL:HG13	1:A:76:LEU:HA	0.63	1.70	10	6
1:A:129:LEU:HA	1:A:160:ILE:HG23	0.63	1.69	4	1
1:A:188:LEU:HB3	1:A:198:TYR:HB3	0.63	1.69	5	2
1:A:76:LEU:HD22	1:A:103:ASN:HB3	0.63	1.71	10	1
1:A:186:VAL:HG11	1:A:213:PHE:CE2	0.63	2.29	10	1
1:A:108:VAL:HG12	1:A:159:PHE:O	0.62	1.94	5	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:132:LEU:HD12	1:A:133:PRO:HD2	0.62	1.71	5	1
1:A:10:THR:HG23	1:A:57:ILE:HG12	0.62	1.69	2	1
1:A:188:LEU:HD21	1:A:213:PHE:CD2	0.62	2.29	1	1
1:A:99:PHE:O	1:A:103:ASN:HB2	0.62	1.94	4	5
1:A:207:ALA:O	1:A:210:ILE:HG13	0.62	1.94	6	8
1:A:133:PRO:HA	1:A:164:SER:OG	0.62	1.94	2	1
1:A:128:ILE:HD13	1:A:129:LEU:N	0.62	2.08	7	2
1:A:11:LEU:HB3	1:A:16:ALA:CB	0.62	2.24	7	2
1:A:93:LYS:HA	1:A:96:LEU:CD2	0.62	2.24	5	6
1:A:109:ILE:O	1:A:160:ILE:HG23	0.62	1.95	9	3
1:A:28:VAL:HG22	1:A:76:LEU:CD1	0.62	2.25	7	1
1:A:108:VAL:HG12	1:A:161:PHE:HD1	0.62	1.55	7	1
1:A:165:ASP:O	1:A:169:ASN:HB2	0.61	1.94	3	5
1:A:151:GLU:O	1:A:154:LYS:HG2	0.61	1.95	1	3
1:A:111:PHE:HD2	1:A:129:LEU:HD11	0.61	1.53	7	1
1:A:28:VAL:HG23	1:A:76:LEU:HA	0.61	1.72	8	4
1:A:31:PHE:CE2	1:A:69:LEU:HD12	0.61	2.29	7	1
1:A:189:ILE:HD13	1:A:197:LYS:HE3	0.61	1.72	3	1
1:A:216:ARG:HG2	1:A:221:LYS:HD2	0.61	1.72	4	1
1:A:124:ILE:O	1:A:124:ILE:HG13	0.61	1.95	6	7
1:A:178:LEU:CD2	1:A:182:GLU:HA	0.61	2.25	2	1
1:A:128:ILE:HG22	1:A:188:LEU:HD12	0.61	1.72	5	1
1:A:92:THR:O	1:A:96:LEU:HB3	0.61	1.96	7	5
1:A:26:VAL:HG11	1:A:104:GLN:HG2	0.61	1.70	8	3
1:A:178:LEU:HD23	1:A:182:GLU:HA	0.61	1.73	7	3
1:A:127:HIS:ND1	1:A:158:LEU:HB3	0.61	2.10	4	1
1:A:20:LEU:CD1	1:A:29:ILE:HD11	0.61	2.22	6	1
1:A:52:ASP:OD1	1:A:53:ILE:HG22	0.61	1.95	9	1
1:A:17:ALA:O	1:A:20:LEU:HG	0.61	1.96	8	6
1:A:199:LYS:CG	1:A:200:PRO:HD2	0.61	2.26	3	2
1:A:130:LEU:O	1:A:162:ILE:HG22	0.60	1.95	4	1
1:A:111:PHE:HB3	1:A:162:ILE:HG22	0.60	1.70	6	1
1:A:26:VAL:HG11	1:A:104:GLN:CG	0.60	2.27	6	2
1:A:105:LEU:HG	1:A:106:PRO:HD2	0.60	1.71	5	2
1:A:128:ILE:HB	1:A:188:LEU:HD12	0.60	1.72	7	2
1:A:107:LEU:HD11	1:A:150:ALA:CB	0.60	2.24	6	1
1:A:46:ALA:HB1	1:A:97:LEU:CD1	0.60	2.26	1	2
1:A:30:GLY:HA2	1:A:74:VAL:HA	0.60	1.74	5	9
1:A:106:PRO:O	1:A:158:LEU:HD11	0.60	1.97	6	1
1:A:50:ILE:HD12	1:A:52:ASP:OD1	0.60	1.97	2	1
1:A:10:THR:HG22	1:A:57:ILE:HG12	0.60	1.74	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:107:LEU:HD21	1:A:154:LYS:HA	0.59	1.74	10	1
1:A:153:PHE:HB3	1:A:157:ILE:HG22	0.59	1.74	10	1
1:A:55:PHE:CZ	1:A:100:ILE:HG21	0.59	2.32	3	2
1:A:19:SER:O	1:A:22:GLU:HG3	0.59	1.96	8	1
1:A:111:PHE:CD2	1:A:162:ILE:HD12	0.59	2.31	5	2
1:A:12:PRO:HD2	1:A:16:ALA:CB	0.59	2.27	5	8
1:A:165:ASP:HB3	1:A:169:ASN:CB	0.59	2.28	6	2
1:A:47:ALA:HB1	1:A:55:PHE:HB2	0.59	1.73	7	1
1:A:35:VAL:HA	1:A:40:ALA:CB	0.59	2.28	7	10
1:A:119:ILE:O	1:A:121:GLY:N	0.59	2.36	4	1
1:A:111:PHE:HB3	1:A:162:ILE:HG13	0.59	1.73	10	3
1:A:121:GLY:O	1:A:191:LEU:HD21	0.59	1.97	6	1
1:A:26:VAL:O	1:A:53:ILE:HG13	0.59	1.98	1	5
1:A:80:PHE:CE1	1:A:106:PRO:HB3	0.59	2.33	9	5
1:A:28:VAL:HG22	1:A:76:LEU:CG	0.59	2.28	6	4
1:A:26:VAL:CB	1:A:78:LYS:HE3	0.58	2.28	5	1
1:A:131:PHE:HA	1:A:162:ILE:HG12	0.58	1.73	1	1
1:A:131:PHE:HD2	1:A:184:PRO:HA	0.58	1.53	5	4
1:A:76:LEU:HD23	1:A:77:PHE:N	0.58	2.13	3	2
1:A:78:LYS:HD2	1:A:103:ASN:O	0.58	1.98	3	1
1:A:129:LEU:HD11	1:A:162:ILE:HG21	0.58	1.74	6	2
1:A:28:VAL:CB	1:A:76:LEU:HG	0.58	2.27	8	2
1:A:26:VAL:HG13	1:A:77:PHE:O	0.58	1.99	4	3
1:A:53:ILE:O	1:A:55:PHE:CE1	0.58	2.56	5	8
1:A:24:SER:OG	1:A:54:PRO:HG2	0.58	1.97	5	3
1:A:26:VAL:HG23	1:A:78:LYS:HG2	0.58	1.74	9	1
1:A:10:THR:CG2	1:A:57:ILE:HG12	0.58	2.28	3	3
1:A:87:PHE:HZ	1:A:100:ILE:HG23	0.58	1.58	9	1
1:A:109:ILE:HG12	1:A:115:THR:HG23	0.58	1.76	2	1
1:A:15:ALA:O	1:A:18:GLU:HG2	0.58	1.99	1	2
1:A:28:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HD12	0.58	1.74	3	2
1:A:126:THR:O	1:A:157:ILE:HG13	0.58	1.99	2	4
1:A:28:VAL:HG13	1:A:76:LEU:CA	0.58	2.29	6	5
1:A:169:ASN:ND2	1:A:172:ILE:HG13	0.58	2.13	2	2
1:A:133:PRO:O	1:A:164:SER:HB2	0.57	1.99	1	1
1:A:7:ALA:HB3	1:A:48:GLU:HA	0.57	1.76	7	1
1:A:205:LEU:HG	1:A:206:THR:N	0.57	2.14	4	8
1:A:56:GLY:C	1:A:57:ILE:HD12	0.57	2.20	1	2
1:A:200:PRO:O	1:A:201:GLU:HG3	0.57	1.99	7	1
1:A:178:LEU:HD22	1:A:182:GLU:HA	0.57	1.77	2	1
1:A:28:VAL:HG22	1:A:76:LEU:HB3	0.57	1.74	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:VAL:HG12	1:A:53:ILE:HD11	0.57	1.74	4	4
1:A:125:LYS:HB3	1:A:127:HIS:CE1	0.57	2.35	3	1
1:A:76:LEU:HD12	1:A:77:PHE:N	0.57	2.14	7	1
1:A:53:ILE:HD13	1:A:54:PRO:O	0.57	2.00	7	1
1:A:179:LYS:O	1:A:181:GLU:N	0.56	2.38	6	10
1:A:189:ILE:HD12	1:A:196:THR:O	0.56	2.00	3	1
1:A:11:LEU:HD22	1:A:17:ALA:HA	0.56	1.74	6	3
1:A:50:ILE:HD13	1:A:97:LEU:HD11	0.56	1.76	2	1
1:A:87:PHE:CZ	1:A:96:LEU:HA	0.56	2.35	3	1
1:A:26:VAL:HG23	1:A:77:PHE:O	0.56	2.00	6	1
1:A:109:ILE:HD12	1:A:115:THR:CG2	0.56	2.29	3	2
1:A:128:ILE:HB	1:A:188:LEU:HD13	0.56	1.76	4	1
1:A:171:ARG:NH2	1:A:174:GLU:HB3	0.56	2.15	6	1
1:A:162:ILE:HD11	1:A:169:ASN:ND2	0.56	2.15	2	1
1:A:108:VAL:HB	1:A:161:PHE:HE1	0.56	1.60	5	2
1:A:29:ILE:HD12	1:A:29:ILE:N	0.56	2.16	2	1
1:A:31:PHE:HB2	1:A:73:GLY:O	0.56	2.00	4	7
1:A:50:ILE:HG21	1:A:97:LEU:HG	0.56	1.75	6	1
1:A:39:SER:HB3	1:A:91:VAL:HG21	0.56	1.77	3	1
1:A:132:LEU:HD21	1:A:161:PHE:HB2	0.56	1.77	7	2
1:A:76:LEU:CD1	1:A:85:ASN:HB3	0.56	2.29	10	1
1:A:205:LEU:H	1:A:208:GLU:HB2	0.56	1.59	2	1
1:A:95:ASN:O	1:A:99:PHE:HB2	0.56	2.00	10	2
1:A:50:ILE:HB	1:A:52:ASP:OD1	0.56	2.01	2	1
1:A:129:LEU:HB2	1:A:160:ILE:HD11	0.56	1.76	6	4
1:A:170:GLN:HA	1:A:173:LEU:HD23	0.56	1.77	4	3
1:A:108:VAL:HB	1:A:161:PHE:CE1	0.56	2.36	5	1
1:A:171:ARG:O	1:A:174:GLU:HG3	0.56	2.00	5	1
1:A:47:ALA:HB1	1:A:55:PHE:CB	0.56	2.31	7	1
1:A:92:THR:HB	1:A:95:ASN:HB2	0.55	1.77	2	3
1:A:128:ILE:HD13	1:A:128:ILE:C	0.55	2.21	4	3
1:A:206:THR:HG23	1:A:207:ALA:H	0.55	1.60	6	5
1:A:107:LEU:CD1	1:A:150:ALA:HB1	0.55	2.26	6	1
1:A:30:GLY:HA2	1:A:74:VAL:HG13	0.55	1.78	3	7
1:A:205:LEU:O	1:A:209:ARG:N	0.55	2.39	7	7
1:A:148:THR:O	1:A:151:GLU:HG3	0.55	2.01	9	1
1:A:127:HIS:CD2	1:A:158:LEU:HB3	0.55	2.36	6	2
1:A:92:THR:O	1:A:96:LEU:HG	0.55	2.01	10	3
1:A:50:ILE:HG21	1:A:97:LEU:CD1	0.55	2.21	2	1
1:A:186:VAL:HG11	1:A:213:PHE:CZ	0.55	2.37	2	1
1:A:28:VAL:CG2	1:A:76:LEU:HD13	0.55	2.31	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:VAL:O	1:A:40:ALA:HB3	0.55	2.02	5	7
1:A:131:PHE:CE2	1:A:185:ALA:HB3	0.55	2.37	6	3
1:A:166:HIS:CD2	1:A:167:THR:HG23	0.55	2.37	5	1
1:A:55:PHE:CE2	1:A:100:ILE:HD13	0.55	2.37	6	1
1:A:27:ALA:HA	1:A:53:ILE:HD11	0.55	1.77	7	1
1:A:108:VAL:HG12	1:A:161:PHE:CD1	0.55	2.38	7	1
1:A:111:PHE:CD2	1:A:129:LEU:HD11	0.54	2.37	3	1
1:A:87:PHE:CZ	1:A:100:ILE:HG23	0.54	2.37	9	1
1:A:67:TYR:HB3	1:A:69:LEU:CD1	0.54	2.32	10	1
1:A:29:ILE:HD12	1:A:77:PHE:CD1	0.54	2.37	8	2
1:A:109:ILE:CG2	1:A:160:ILE:HG22	0.54	2.30	7	1
1:A:173:LEU:CD1	1:A:178:LEU:HB3	0.54	2.31	3	1
1:A:130:LEU:HD11	1:A:210:ILE:HG22	0.54	1.80	4	1
1:A:107:LEU:HD21	1:A:150:ALA:CB	0.54	2.33	6	1
1:A:204:GLU:N	1:A:209:ARG:HG3	0.54	2.17	10	1
1:A:131:PHE:HB2	1:A:184:PRO:HA	0.54	1.79	6	1
1:A:29:ILE:HD12	1:A:77:PHE:CE1	0.54	2.37	3	3
1:A:160:ILE:HD13	1:A:161:PHE:N	0.54	2.17	4	1
1:A:132:LEU:CD2	1:A:133:PRO:HD2	0.54	2.27	8	1
1:A:206:THR:O	1:A:209:ARG:HG3	0.54	2.02	5	1
1:A:111:PHE:HE1	1:A:119:ILE:CD1	0.54	2.16	8	1
1:A:50:ILE:HG13	1:A:50:ILE:O	0.54	2.01	10	1
1:A:93:LYS:O	1:A:96:LEU:HG	0.54	2.01	5	6
1:A:188:LEU:HD12	1:A:188:LEU:N	0.54	2.17	2	2
1:A:29:ILE:O	1:A:74:VAL:HG13	0.54	2.03	6	8
1:A:47:ALA:HB1	1:A:55:PHE:CD1	0.54	2.37	5	6
1:A:109:ILE:CD1	1:A:160:ILE:HG22	0.54	2.32	1	1
1:A:128:ILE:CB	1:A:188:LEU:HD12	0.54	2.33	1	2
1:A:117:PRO:HA	1:A:120:PHE:CD2	0.54	2.38	2	1
1:A:130:LEU:HD23	1:A:132:LEU:HD23	0.54	1.78	2	1
1:A:92:THR:OG1	1:A:95:ASN:HB2	0.54	2.01	5	1
1:A:169:ASN:OD1	1:A:172:ILE:HB	0.54	2.03	7	1
1:A:50:ILE:HD13	1:A:97:LEU:HG	0.54	1.80	9	2
1:A:50:ILE:CG2	1:A:97:LEU:HD21	0.53	2.33	3	2
1:A:128:ILE:CG2	1:A:188:LEU:HG	0.53	2.33	9	1
1:A:110:GLU:HB2	1:A:161:PHE:CE2	0.53	2.38	1	4
1:A:125:LYS:H	1:A:191:LEU:HB2	0.53	1.62	3	1
1:A:11:LEU:HG	1:A:17:ALA:CA	0.53	2.32	7	2
1:A:128:ILE:CG2	1:A:188:LEU:HD23	0.53	2.34	6	1
1:A:210:ILE:HG13	1:A:211:THR:N	0.53	2.18	10	5
1:A:161:PHE:CD1	1:A:161:PHE:N	0.53	2.76	8	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:207:ALA:HA	1:A:210:ILE:CG1	0.53	2.34	4	3
1:A:132:LEU:HD13	1:A:133:PRO:CD	0.53	2.31	6	1
1:A:199:LYS:HG3	1:A:200:PRO:CD	0.53	2.30	9	2
1:A:50:ILE:HD13	1:A:97:LEU:HD23	0.53	1.81	5	1
1:A:161:PHE:N	1:A:161:PHE:CD1	0.53	2.77	4	1
1:A:129:LEU:HD11	1:A:162:ILE:CG2	0.53	2.33	1	3
1:A:188:LEU:HD21	1:A:213:PHE:CB	0.53	2.32	2	1
1:A:132:LEU:CD2	1:A:161:PHE:HB2	0.53	2.34	7	2
1:A:153:PHE:HB3	1:A:157:ILE:CG2	0.53	2.33	10	1
1:A:179:LYS:O	1:A:180:LYS:C	0.53	2.47	2	10
1:A:11:LEU:CD1	1:A:17:ALA:HB2	0.53	2.30	6	2
1:A:125:LYS:O	1:A:191:LEU:HB2	0.53	2.03	9	1
1:A:9:THR:CG2	1:A:20:LEU:HD22	0.52	2.33	1	1
1:A:57:ILE:HD12	1:A:57:ILE:N	0.52	2.20	1	2
1:A:108:VAL:HG23	1:A:159:PHE:O	0.52	2.04	10	1
1:A:26:VAL:CG1	1:A:78:LYS:HG3	0.52	2.34	1	1
1:A:131:PHE:HA	1:A:162:ILE:HG22	0.52	1.81	5	3
1:A:107:LEU:HD21	1:A:150:ALA:HB2	0.52	1.79	6	1
1:A:55:PHE:CD1	1:A:55:PHE:N	0.52	2.78	10	7
1:A:131:PHE:CE1	1:A:164:SER:HA	0.52	2.40	2	1
1:A:28:VAL:HG23	1:A:76:LEU:CA	0.52	2.34	8	4
1:A:28:VAL:HG21	1:A:100:ILE:CG2	0.52	2.35	3	1
1:A:11:LEU:HD22	1:A:11:LEU:N	0.52	2.19	7	1
1:A:109:ILE:N	1:A:109:ILE:HD13	0.52	2.20	1	1
1:A:128:ILE:CG1	1:A:188:LEU:HD13	0.52	2.35	4	1
1:A:173:LEU:HD22	1:A:182:GLU:OE2	0.52	2.03	4	1
1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:PHE:CE1	0.52	2.39	6	1
1:A:107:LEU:O	1:A:108:VAL:HG13	0.52	2.03	5	1
1:A:178:LEU:HB3	1:A:182:GLU:OE2	0.52	2.05	6	1
1:A:131:PHE:CE1	1:A:184:PRO:HA	0.51	2.39	7	2
1:A:162:ILE:HD11	1:A:169:ASN:OD1	0.51	2.05	8	1
1:A:32:PHE:O	1:A:59:SER:HB2	0.51	2.04	10	1
1:A:129:LEU:O	1:A:187:ARG:HG3	0.51	2.05	4	1
1:A:186:VAL:O	1:A:200:PRO:CD	0.51	2.55	8	5
1:A:129:LEU:HD21	1:A:162:ILE:CD1	0.51	2.34	1	1
1:A:53:ILE:O	1:A:55:PHE:CZ	0.51	2.64	4	4
1:A:107:LEU:HG	1:A:150:ALA:HB1	0.51	1.81	2	1
1:A:96:LEU:O	1:A:100:ILE:HG13	0.51	2.05	6	2
1:A:60:ASN:HB2	1:A:63:VAL:CG2	0.51	2.33	5	1
1:A:105:LEU:HG	1:A:106:PRO:CD	0.51	2.36	5	1
1:A:167:THR:HG23	1:A:168:ASP:H	0.51	1.66	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:131:PHE:CD2	1:A:185:ALA:HB3	0.51	2.40	4	2
1:A:221:LYS:HA	1:A:221:LYS:HE2	0.51	1.82	4	1
1:A:87:PHE:CZ	1:A:99:PHE:HB3	0.51	2.41	9	2
1:A:129:LEU:HD22	1:A:187:ARG:HH12	0.51	1.65	7	1
1:A:111:PHE:CD2	1:A:162:ILE:HG22	0.51	2.40	1	1
1:A:206:THR:OG1	1:A:207:ALA:N	0.51	2.43	9	4
1:A:169:ASN:OD1	1:A:172:ILE:HD13	0.51	2.05	8	1
1:A:11:LEU:HD22	1:A:11:LEU:H	0.50	1.67	7	2
1:A:132:LEU:O	1:A:132:LEU:HG	0.50	2.06	9	1
1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:HD22	0.50	2.22	1	1
1:A:101:LYS:HD2	1:A:102:HIS:ND1	0.50	2.22	3	1
1:A:91:VAL:O	1:A:91:VAL:HG23	0.50	2.06	1	9
1:A:50:ILE:HG13	1:A:55:PHE:CZ	0.50	2.37	10	3
1:A:128:ILE:CB	1:A:188:LEU:HD13	0.50	2.37	4	1
1:A:165:ASP:O	1:A:167:THR:N	0.50	2.44	3	10
1:A:60:ASN:HB3	1:A:63:VAL:CG2	0.50	2.33	2	1
1:A:189:ILE:HD13	1:A:189:ILE:N	0.50	2.22	4	1
1:A:187:ARG:NH2	1:A:189:ILE:HB	0.50	2.22	2	2
1:A:31:PHE:CD1	1:A:58:THR:HG23	0.50	2.42	6	1
1:A:9:THR:O	1:A:56:GLY:HA2	0.50	2.06	6	7
1:A:107:LEU:O	1:A:158:LEU:HG	0.50	2.06	3	1
1:A:53:ILE:HB	1:A:104:GLN:NE2	0.50	2.22	7	1
1:A:74:VAL:HG12	1:A:87:PHE:CE1	0.50	2.42	4	1
1:A:26:VAL:HG22	1:A:53:ILE:HD11	0.50	1.82	6	1
1:A:28:VAL:CG1	1:A:55:PHE:CD2	0.49	2.95	1	3
1:A:26:VAL:HG13	1:A:78:LYS:HG2	0.49	1.81	7	1
1:A:125:LYS:HD2	1:A:158:LEU:HD21	0.49	1.83	1	1
1:A:58:THR:CG2	1:A:63:VAL:HG11	0.49	2.37	5	1
1:A:198:TYR:HE1	1:A:213:PHE:CD2	0.49	2.24	5	1
1:A:169:ASN:O	1:A:173:LEU:HG	0.49	2.07	9	1
1:A:107:LEU:CD2	1:A:150:ALA:HB1	0.49	2.36	3	2
1:A:131:PHE:CZ	1:A:187:ARG:HG2	0.49	2.42	4	1
1:A:186:VAL:HG13	1:A:200:PRO:CG	0.49	2.38	2	1
1:A:186:VAL:CG1	1:A:213:PHE:CE2	0.49	2.95	5	1
1:A:124:ILE:HA	1:A:191:LEU:O	0.49	2.07	6	1
1:A:58:THR:HG23	1:A:64:PHE:HE1	0.49	1.67	8	1
1:A:87:PHE:CZ	1:A:99:PHE:CB	0.49	2.95	3	1
1:A:109:ILE:HD11	1:A:119:ILE:HD11	0.49	1.85	4	1
1:A:128:ILE:O	1:A:160:ILE:HG22	0.49	2.07	4	1
1:A:131:PHE:CE2	1:A:184:PRO:HA	0.49	2.43	2	1
1:A:15:ALA:O	1:A:18:GLU:HG3	0.49	2.07	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:42:GLN:O	1:A:93:LYS:HD3	0.49	2.07	7	1
1:A:85:ASN:HB3	1:A:103:ASN:HD22	0.49	1.67	8	1
1:A:46:ALA:CB	1:A:96:LEU:HD11	0.49	2.36	2	1
1:A:153:PHE:CZ	1:A:218:LEU:HD13	0.49	2.42	5	1
1:A:31:PHE:HB3	1:A:64:PHE:HE1	0.49	1.68	6	1
1:A:165:ASP:OD2	1:A:168:ASP:HB2	0.49	2.08	6	1
1:A:76:LEU:HD13	1:A:85:ASN:HB3	0.49	1.83	10	1
1:A:129:LEU:HD22	1:A:131:PHE:HE1	0.49	1.68	6	1
1:A:9:THR:CG2	1:A:20:LEU:HB2	0.49	2.38	8	1
1:A:186:VAL:HG13	1:A:200:PRO:HG3	0.48	1.82	2	1
1:A:133:PRO:HD3	1:A:184:PRO:HG3	0.48	1.84	6	1
1:A:191:LEU:O	1:A:191:LEU:HG	0.48	2.07	6	1
1:A:127:HIS:O	1:A:189:ILE:HD12	0.48	2.08	10	1
1:A:125:LYS:CD	1:A:158:LEU:HD21	0.48	2.37	1	1
1:A:80:PHE:CZ	1:A:106:PRO:HB3	0.48	2.44	9	2
1:A:125:LYS:O	1:A:191:LEU:HD12	0.48	2.08	3	1
1:A:12:PRO:HD2	1:A:16:ALA:HB1	0.48	1.85	5	2
1:A:62:ASP:HB3	1:A:66:LYS:NZ	0.48	2.22	1	1
1:A:96:LEU:HD12	1:A:96:LEU:C	0.48	2.29	3	5
1:A:12:PRO:HA	1:A:60:ASN:OD1	0.48	2.08	5	1
1:A:205:LEU:O	1:A:206:THR:C	0.48	2.52	2	5
1:A:75:VAL:HG22	1:A:86:ASN:CG	0.48	2.28	5	1
1:A:127:HIS:ND1	1:A:189:ILE:HB	0.48	2.23	10	1
1:A:107:LEU:HG	1:A:150:ALA:CB	0.48	2.39	2	1
1:A:114:GLN:O	1:A:117:PRO:HG2	0.48	2.08	6	7
1:A:9:THR:HG21	1:A:20:LEU:CB	0.48	2.36	1	1
1:A:97:LEU:HA	1:A:100:ILE:HD11	0.48	1.84	2	1
1:A:128:ILE:HG21	1:A:188:LEU:HD23	0.48	1.86	6	1
1:A:21:VAL:O	1:A:24:SER:O	0.48	2.32	1	9
1:A:41:LYS:NZ	1:A:44:LEU:HD12	0.48	2.23	3	1
1:A:106:PRO:HG2	1:A:109:ILE:CG2	0.48	2.38	4	1
1:A:163:ASP:O	1:A:164:SER:C	0.48	2.52	1	10
1:A:204:GLU:HB2	1:A:209:ARG:HG3	0.48	1.84	7	1
1:A:125:LYS:H	1:A:191:LEU:HD12	0.48	1.68	10	1
1:A:188:LEU:HD22	1:A:188:LEU:N	0.48	2.23	1	1
1:A:31:PHE:CE2	1:A:69:LEU:CD1	0.48	2.97	4	1
1:A:68:GLN:O	1:A:69:LEU:HD23	0.48	2.09	8	1
1:A:55:PHE:CZ	1:A:100:ILE:HG13	0.48	2.44	7	1
1:A:180:LYS:C	1:A:182:GLU:H	0.47	2.12	7	10
1:A:109:ILE:CG1	1:A:115:THR:HG23	0.47	2.38	2	1
1:A:76:LEU:HD13	1:A:103:ASN:OD1	0.47	2.09	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:LEU:CD2	1:A:20:LEU:HD23	0.47	2.34	7	2
1:A:102:HIS:HE1	1:A:122:GLY:O	0.47	1.92	2	1
1:A:187:ARG:HG2	1:A:198:TYR:O	0.47	2.08	2	2
1:A:29:ILE:HD12	1:A:77:PHE:CZ	0.47	2.43	3	1
1:A:187:ARG:N	1:A:187:ARG:HD3	0.47	2.24	3	1
1:A:35:VAL:HG23	1:A:40:ALA:HB1	0.47	1.86	10	1
1:A:107:LEU:HG	1:A:158:LEU:HD22	0.47	1.86	10	1
1:A:190:THR:HB	1:A:196:THR:HB	0.47	1.84	10	1
1:A:53:ILE:O	1:A:53:ILE:HG23	0.47	2.09	6	8
1:A:169:ASN:OD1	1:A:172:ILE:HD12	0.47	2.10	1	1
1:A:31:PHE:HB3	1:A:64:PHE:CZ	0.47	2.45	10	3
1:A:76:LEU:HD12	1:A:100:ILE:HA	0.47	1.87	8	1
1:A:165:ASP:C	1:A:167:THR:H	0.47	2.12	6	7
1:A:129:LEU:HB3	1:A:187:ARG:HD2	0.47	1.86	4	1
1:A:28:VAL:N	1:A:53:ILE:HD11	0.47	2.25	7	1
1:A:100:ILE:HD12	1:A:101:LYS:N	0.47	2.25	9	1
1:A:125:LYS:HG2	1:A:158:LEU:HD21	0.47	1.86	2	1
1:A:26:VAL:CG2	1:A:78:LYS:HE3	0.47	2.40	5	1
1:A:129:LEU:HD23	1:A:130:LEU:N	0.47	2.24	7	2
1:A:170:GLN:HG3	1:A:171:ARG:N	0.47	2.25	1	1
1:A:38:ASP:O	1:A:42:GLN:HG3	0.47	2.09	2	1
1:A:30:GLY:O	1:A:57:ILE:HA	0.47	2.09	7	2
1:A:110:GLU:HG2	1:A:161:PHE:CD2	0.47	2.45	6	1
1:A:75:VAL:HG13	1:A:85:ASN:C	0.47	2.30	8	1
1:A:50:ILE:HG21	1:A:97:LEU:HD21	0.47	1.85	9	1
1:A:179:LYS:HB3	1:A:180:LYS:HD3	0.47	1.86	10	1
1:A:198:TYR:CE1	1:A:199:LYS:O	0.47	2.68	1	1
1:A:109:ILE:CD1	1:A:115:THR:HG23	0.47	2.39	3	1
1:A:188:LEU:HD21	1:A:213:PHE:CG	0.47	2.45	1	1
1:A:43:PHE:HZ	1:A:74:VAL:HG11	0.47	1.64	2	1
1:A:28:VAL:HG13	1:A:76:LEU:CB	0.47	2.40	2	1
1:A:187:ARG:HH11	1:A:189:ILE:HD12	0.47	1.69	4	1
1:A:160:ILE:N	1:A:160:ILE:HD13	0.47	2.25	10	1
1:A:173:LEU:HD13	1:A:178:LEU:HB3	0.46	1.87	3	1
1:A:169:ASN:CG	1:A:172:ILE:HG21	0.46	2.31	4	1
1:A:129:LEU:C	1:A:129:LEU:HD13	0.46	2.30	5	1
1:A:105:LEU:HD13	1:A:106:PRO:HD2	0.46	1.85	9	2
1:A:53:ILE:HD13	1:A:53:ILE:C	0.46	2.30	7	1
1:A:26:VAL:HG12	1:A:53:ILE:CD1	0.46	2.40	4	2
1:A:116:ALA:N	1:A:117:PRO:HD2	0.46	2.25	2	10
1:A:127:HIS:HB3	1:A:158:LEU:CG	0.46	2.38	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:ALA:O	1:A:77:PHE:HB2	0.46	2.10	6	4
1:A:157:ILE:HG23	1:A:159:PHE:CE1	0.46	2.45	8	1
1:A:28:VAL:O	1:A:55:PHE:HA	0.46	2.10	10	3
1:A:165:ASP:O	1:A:169:ASN:HB3	0.46	2.11	8	2
1:A:28:VAL:CG2	1:A:76:LEU:HD12	0.46	2.41	4	2
1:A:210:ILE:HG13	1:A:211:THR:H	0.46	1.70	10	2
1:A:107:LEU:HD23	1:A:150:ALA:HB1	0.46	1.87	3	1
1:A:129:LEU:HD12	1:A:160:ILE:HD12	0.46	1.87	4	1
1:A:209:ARG:O	1:A:213:PHE:CD1	0.46	2.68	5	1
1:A:39:SER:CB	1:A:91:VAL:HG21	0.46	2.40	9	2
1:A:129:LEU:HA	1:A:160:ILE:O	0.46	2.09	10	1
1:A:200:PRO:CB	1:A:213:PHE:CE1	0.46	2.99	2	1
1:A:50:ILE:HD11	1:A:55:PHE:CZ	0.46	2.45	3	2
1:A:81:ASP:OD2	1:A:106:PRO:HA	0.46	2.11	9	1
1:A:100:ILE:HG13	1:A:101:LYS:N	0.46	2.26	2	1
1:A:129:LEU:HA	1:A:160:ILE:CG1	0.46	2.39	6	1
1:A:169:ASN:CG	1:A:172:ILE:HD13	0.46	2.31	6	1
1:A:50:ILE:HG21	1:A:97:LEU:HD22	0.46	1.87	7	1
1:A:18:GLU:O	1:A:22:GLU:HG3	0.46	2.11	5	1
1:A:205:LEU:O	1:A:209:ARG:HB2	0.46	2.11	3	3
1:A:26:VAL:HG13	1:A:53:ILE:HG13	0.46	1.87	6	1
1:A:93:LYS:HA	1:A:96:LEU:HD12	0.46	1.88	6	1
1:A:124:ILE:HG13	1:A:124:ILE:O	0.46	2.10	9	2
1:A:26:VAL:HG13	1:A:78:LYS:HA	0.46	1.87	10	1
1:A:26:VAL:HG13	1:A:78:LYS:HG3	0.46	1.86	1	1
1:A:131:PHE:HA	1:A:162:ILE:HG23	0.46	1.87	3	1
1:A:110:GLU:N	1:A:161:PHE:CE1	0.46	2.84	7	1
1:A:39:SER:HB2	1:A:91:VAL:HG21	0.46	1.88	9	1
1:A:10:THR:HA	1:A:57:ILE:O	0.46	2.11	10	2
1:A:28:VAL:HG22	1:A:76:LEU:HD12	0.46	1.86	4	1
1:A:163:ASP:HB3	1:A:165:ASP:OD1	0.46	2.11	7	1
1:A:53:ILE:CD1	1:A:104:GLN:HG3	0.45	2.31	8	2
1:A:123:GLU:O	1:A:124:ILE:CG1	0.45	2.64	6	5
1:A:76:LEU:HD23	1:A:103:ASN:HB3	0.45	1.86	7	1
1:A:11:LEU:HB3	1:A:20:LEU:CD2	0.45	2.42	10	1
1:A:76:LEU:HD13	1:A:103:ASN:CB	0.45	2.37	6	1
1:A:131:PHE:HB3	1:A:162:ILE:HD11	0.45	1.88	6	1
1:A:159:PHE:CD1	1:A:159:PHE:N	0.45	2.85	10	4
1:A:55:PHE:CE2	1:A:100:ILE:HG21	0.45	2.41	6	1
1:A:76:LEU:C	1:A:76:LEU:HD23	0.45	2.32	6	1
1:A:87:PHE:CD2	1:A:99:PHE:CD2	0.45	3.04	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:209:ARG:O	1:A:213:PHE:CD2	0.45	2.69	2	1
1:A:189:ILE:HD13	1:A:197:LYS:HG2	0.45	1.88	3	1
1:A:60:ASN:HD22	1:A:61:SER:N	0.45	2.10	6	1
1:A:77:PHE:N	1:A:77:PHE:CD1	0.45	2.85	3	1
1:A:115:THR:HG22	1:A:119:ILE:HD11	0.45	1.88	5	1
1:A:164:SER:O	1:A:165:ASP:C	0.45	2.55	9	5
1:A:46:ALA:HB2	1:A:96:LEU:HD21	0.45	1.87	2	1
1:A:43:PHE:CD1	1:A:96:LEU:CD2	0.45	2.93	3	1
1:A:212:GLU:O	1:A:216:ARG:HG2	0.45	2.11	10	1
1:A:11:LEU:CG	1:A:17:ALA:HA	0.45	2.35	7	2
1:A:20:LEU:HD21	1:A:29:ILE:HD11	0.45	1.88	1	1
1:A:186:VAL:HG21	1:A:213:PHE:CE2	0.45	2.47	2	1
1:A:127:HIS:HE2	1:A:160:ILE:HB	0.45	1.72	4	1
1:A:104:GLN:O	1:A:104:GLN:HG2	0.45	2.11	5	2
1:A:10:THR:HG22	1:A:57:ILE:CB	0.45	2.35	6	2
1:A:128:ILE:HD11	1:A:186:VAL:CG2	0.45	2.41	10	1
1:A:165:ASP:C	1:A:167:THR:N	0.45	2.70	6	10
1:A:129:LEU:HB3	1:A:187:ARG:HD3	0.45	1.88	6	1
1:A:186:VAL:O	1:A:200:PRO:HB3	0.45	2.12	6	1
1:A:10:THR:HG23	1:A:57:ILE:HD13	0.45	1.89	9	1
1:A:209:ARG:CD	1:A:213:PHE:HE2	0.45	2.25	10	1
1:A:169:ASN:O	1:A:172:ILE:HG22	0.45	2.12	4	1
1:A:76:LEU:CD2	1:A:103:ASN:HB3	0.45	2.42	7	1
1:A:205:LEU:HB3	1:A:208:GLU:CB	0.45	2.42	7	2
1:A:31:PHE:CD1	1:A:31:PHE:N	0.45	2.85	8	2
1:A:129:LEU:HD23	1:A:129:LEU:C	0.45	2.32	6	1
1:A:42:GLN:HA	1:A:42:GLN:OE1	0.44	2.12	1	1
1:A:176:PHE:CE1	1:A:187:ARG:HD2	0.44	2.47	1	1
1:A:129:LEU:HD13	1:A:130:LEU:N	0.44	2.26	5	1
1:A:50:ILE:CG2	1:A:97:LEU:HD22	0.44	2.42	7	1
1:A:97:LEU:O	1:A:101:LYS:HB2	0.44	2.11	10	1
1:A:28:VAL:HG11	1:A:100:ILE:CD1	0.44	2.43	3	1
1:A:58:THR:HG21	1:A:63:VAL:HG11	0.44	1.88	3	2
1:A:76:LEU:HB3	1:A:85:ASN:HB2	0.44	1.89	6	2
1:A:99:PHE:CE2	1:A:103:ASN:OD1	0.44	2.71	9	1
1:A:124:ILE:HA	1:A:191:LEU:HD22	0.44	1.89	1	1
1:A:128:ILE:HG12	1:A:187:ARG:O	0.44	2.12	4	2
1:A:216:ARG:HE	1:A:221:LYS:HD3	0.44	1.72	4	1
1:A:11:LEU:HD22	1:A:17:ALA:CA	0.44	2.42	6	2
1:A:93:LYS:HG2	1:A:94:GLU:OE1	0.44	2.12	6	1
1:A:96:LEU:HG	1:A:97:LEU:N	0.44	2.27	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:205:LEU:HB3	1:A:208:GLU:HB3	0.44	1.89	10	2
1:A:200:PRO:HB3	1:A:213:PHE:CE2	0.44	2.47	5	1
1:A:87:PHE:CE2	1:A:99:PHE:HB3	0.44	2.48	9	1
1:A:75:VAL:HG13	1:A:77:PHE:CE1	0.43	2.48	10	1
1:A:92:THR:HB	1:A:95:ASN:HB3	0.43	1.90	3	1
1:A:125:LYS:HB3	1:A:127:HIS:HE1	0.43	1.70	3	1
1:A:153:PHE:HZ	1:A:218:LEU:HD22	0.43	1.73	9	1
1:A:188:LEU:HD11	1:A:213:PHE:CD2	0.43	2.48	9	1
1:A:31:PHE:HA	1:A:58:THR:OG1	0.43	2.12	9	1
1:A:176:PHE:CD2	1:A:178:LEU:HD12	0.43	2.48	9	1
1:A:166:HIS:CE1	1:A:167:THR:HG23	0.43	2.48	1	1
1:A:116:ALA:O	1:A:120:PHE:CE1	0.43	2.72	2	1
1:A:163:ASP:O	1:A:165:ASP:N	0.43	2.52	3	1
1:A:126:THR:O	1:A:127:HIS:ND1	0.43	2.52	6	1
1:A:116:ALA:O	1:A:120:PHE:CD1	0.43	2.72	8	2
1:A:129:LEU:HB2	1:A:189:ILE:HD11	0.43	1.89	8	1
1:A:50:ILE:HD13	1:A:97:LEU:HD13	0.43	1.87	2	1
1:A:130:LEU:HD12	1:A:186:VAL:HG22	0.43	1.90	3	1
1:A:9:THR:O	1:A:56:GLY:CA	0.43	2.66	6	1
1:A:11:LEU:HD22	1:A:17:ALA:CB	0.43	2.43	8	3
1:A:128:ILE:O	1:A:160:ILE:HG12	0.43	2.13	6	1
1:A:173:LEU:HB2	1:A:182:GLU:OE2	0.43	2.13	6	1
1:A:50:ILE:HD12	1:A:52:ASP:OD2	0.43	2.13	9	1
1:A:109:ILE:HG12	1:A:160:ILE:HG22	0.43	1.91	1	1
1:A:100:ILE:O	1:A:104:GLN:N	0.43	2.51	3	1
1:A:128:ILE:HD11	1:A:159:PHE:CD2	0.43	2.48	5	1
1:A:28:VAL:HG22	1:A:76:LEU:HB2	0.43	1.90	7	1
1:A:189:ILE:N	1:A:189:ILE:HD12	0.43	2.28	7	1
1:A:188:LEU:CD2	1:A:198:TYR:CD1	0.43	3.01	1	1
1:A:97:LEU:HA	1:A:100:ILE:CD1	0.43	2.44	2	1
1:A:17:ALA:HA	1:A:20:LEU:HD23	0.43	1.91	9	2
1:A:31:PHE:HE2	1:A:63:VAL:HG12	0.43	1.73	3	1
1:A:109:ILE:N	1:A:161:PHE:CE1	0.43	2.87	5	4
1:A:127:HIS:CE1	1:A:189:ILE:HB	0.43	2.48	5	2
1:A:105:LEU:HD23	1:A:106:PRO:O	0.43	2.12	8	1
1:A:111:PHE:HE1	1:A:119:ILE:HD11	0.43	1.73	8	1
1:A:109:ILE:HG13	1:A:110:GLU:N	0.43	2.29	10	1
1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CD1	0.43	2.76	1	1
1:A:127:HIS:CB	1:A:158:LEU:HG	0.43	2.42	1	1
1:A:129:LEU:HB3	1:A:187:ARG:NH1	0.43	2.28	7	1
1:A:154:LYS:O	1:A:154:LYS:HG3	0.43	2.14	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:VAL:CG2	1:A:76:LEU:HD23	0.43	2.41	10	1
1:A:96:LEU:HD12	1:A:97:LEU:N	0.43	2.29	3	1
1:A:170:GLN:HA	1:A:173:LEU:CD2	0.43	2.44	4	1
1:A:11:LEU:CD2	1:A:20:LEU:HD21	0.43	2.42	10	1
1:A:129:LEU:CA	1:A:160:ILE:HG23	0.42	2.40	4	1
1:A:43:PHE:HE1	1:A:96:LEU:HD13	0.42	1.73	7	1
1:A:132:LEU:CD1	1:A:133:PRO:HD2	0.42	2.42	5	1
1:A:93:LYS:HG2	1:A:94:GLU:N	0.42	2.28	8	1
1:A:111:PHE:CB	1:A:162:ILE:HG13	0.42	2.44	10	1
1:A:57:ILE:HD13	1:A:57:ILE:N	0.42	2.29	2	2
1:A:122:GLY:O	1:A:123:GLU:HB3	0.42	2.14	2	1
1:A:50:ILE:HD11	1:A:55:PHE:HZ	0.42	1.74	9	1
1:A:20:LEU:HD21	1:A:29:ILE:CD1	0.42	2.44	1	1
1:A:75:VAL:HG11	1:A:84:ARG:HB3	0.42	1.91	3	1
1:A:28:VAL:HG22	1:A:76:LEU:CB	0.42	2.44	7	1
1:A:60:ASN:OD1	1:A:62:ASP:HB2	0.42	2.13	8	1
1:A:50:ILE:HB	1:A:52:ASP:OD2	0.42	2.15	9	1
1:A:10:THR:HG22	1:A:57:ILE:C	0.42	2.35	2	1
1:A:171:ARG:HG3	1:A:172:ILE:N	0.42	2.29	4	1
1:A:75:VAL:HG13	1:A:86:ASN:N	0.42	2.30	5	1
1:A:88:GLU:HA	1:A:88:GLU:OE1	0.42	2.15	10	1
1:A:128:ILE:HG22	1:A:188:LEU:HB3	0.42	1.91	1	1
1:A:31:PHE:CD2	1:A:64:PHE:CE1	0.42	3.07	5	1
1:A:53:ILE:HG21	1:A:100:ILE:CG2	0.42	2.45	1	2
1:A:50:ILE:HG23	1:A:97:LEU:HD22	0.42	1.92	4	1
1:A:20:LEU:C	1:A:20:LEU:HD12	0.42	2.35	7	1
1:A:32:PHE:HZ	1:A:39:SER:HG	0.42	1.54	8	1
1:A:205:LEU:HG	1:A:206:THR:HG22	0.42	1.92	2	1
1:A:58:THR:OG1	1:A:63:VAL:HG21	0.42	2.14	3	1
1:A:165:ASP:O	1:A:169:ASN:CB	0.42	2.68	10	2
1:A:107:LEU:O	1:A:158:LEU:HD13	0.42	2.14	9	1
1:A:176:PHE:HE1	1:A:199:LYS:HE2	0.42	1.74	10	1
1:A:99:PHE:CD2	1:A:103:ASN:OD1	0.42	2.73	2	1
1:A:114:GLN:O	1:A:117:PRO:HD2	0.42	2.15	5	1
1:A:87:PHE:HA	1:A:99:PHE:CE2	0.42	2.50	8	1
1:A:127:HIS:CD2	1:A:189:ILE:HB	0.42	2.49	9	1
1:A:85:ASN:ND2	1:A:103:ASN:ND2	0.41	2.68	2	1
1:A:129:LEU:HD22	1:A:187:ARG:NE	0.41	2.30	4	1
1:A:98:ASP:O	1:A:102:HIS:HB2	0.41	2.14	9	1
1:A:111:PHE:HD2	1:A:129:LEU:CD1	0.41	2.27	7	1
1:A:203:GLU:O	1:A:203:GLU:HG2	0.41	2.14	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:203:GLU:O	1:A:203:GLU:HG3	0.41	2.15	8	1
1:A:108:VAL:HA	1:A:159:PHE:O	0.41	2.15	10	1
1:A:32:PHE:O	1:A:59:SER:HB3	0.41	2.15	1	1
1:A:165:ASP:HB2	1:A:169:ASN:CG	0.41	2.36	1	1
1:A:190:THR:HG21	1:A:217:PHE:CZ	0.41	2.50	1	1
1:A:158:LEU:N	1:A:158:LEU:HD23	0.41	2.30	2	1
1:A:175:PHE:CZ	1:A:197:LYS:HE3	0.41	2.50	4	1
1:A:70:ASP:C	1:A:71:LYS:HG2	0.41	2.35	8	1
1:A:90:GLU:HG2	1:A:90:GLU:O	0.41	2.15	9	1
1:A:216:ARG:O	1:A:221:LYS:HB2	0.41	2.15	9	2
1:A:157:ILE:HG23	1:A:159:PHE:HE1	0.41	1.73	8	1
1:A:208:GLU:O	1:A:212:GLU:HG2	0.41	2.15	9	1
1:A:32:PHE:HA	1:A:72:ASP:OD1	0.41	2.15	2	1
1:A:78:LYS:HG3	1:A:80:PHE:O	0.41	2.16	2	1
1:A:114:GLN:C	1:A:117:PRO:HD2	0.41	2.36	5	3
1:A:189:ILE:HD13	1:A:197:LYS:CE	0.41	2.43	3	1
1:A:149:ALA:CB	1:A:210:ILE:CD1	0.41	2.98	4	1
1:A:105:LEU:HD23	1:A:158:LEU:CD1	0.41	2.45	7	1
1:A:179:LYS:N	1:A:179:LYS:HD3	0.41	2.29	7	1
1:A:160:ILE:HD12	1:A:160:ILE:N	0.41	2.31	9	1
1:A:160:ILE:HD13	1:A:160:ILE:H	0.41	1.75	10	1
1:A:128:ILE:HG13	1:A:159:PHE:HA	0.41	1.90	8	2
1:A:50:ILE:CD1	1:A:97:LEU:HD23	0.41	2.46	5	1
1:A:205:LEU:O	1:A:209:ARG:CB	0.41	2.69	10	1
1:A:127:HIS:O	1:A:189:ILE:HG22	0.41	2.16	3	1
1:A:173:LEU:C	1:A:173:LEU:HD12	0.41	2.36	4	1
1:A:28:VAL:HB	1:A:76:LEU:HD12	0.41	1.91	9	1
1:A:30:GLY:N	1:A:56:GLY:O	0.41	2.52	8	2
1:A:154:LYS:HD2	1:A:154:LYS:C	0.41	2.36	5	1
1:A:28:VAL:O	1:A:56:GLY:N	0.41	2.51	7	1
1:A:150:ALA:O	1:A:154:LYS:N	0.41	2.54	8	3
1:A:98:ASP:O	1:A:101:LYS:HG3	0.41	2.16	3	1
1:A:50:ILE:CD1	1:A:101:LYS:HE3	0.41	2.46	5	1
1:A:61:SER:HA	1:A:64:PHE:HD2	0.41	1.76	6	1
1:A:110:GLU:CB	1:A:161:PHE:CE2	0.41	3.04	6	1
1:A:29:ILE:HG23	1:A:57:ILE:N	0.41	2.31	8	1
1:A:53:ILE:O	1:A:55:PHE:CD1	0.41	2.74	9	1
1:A:87:PHE:CD1	1:A:88:GLU:N	0.41	2.88	10	1
1:A:70:ASP:O	1:A:71:LYS:HG2	0.41	2.17	1	1
1:A:35:VAL:HG22	1:A:35:VAL:O	0.41	2.15	3	1
1:A:76:LEU:HD23	1:A:77:PHE:H	0.41	1.73	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:188:LEU:O	1:A:198:TYR:N	0.41	2.53	3	2
1:A:128:ILE:C	1:A:128:ILE:CD1	0.41	2.90	4	1
1:A:200:PRO:HA	1:A:213:PHE:HE2	0.41	1.75	4	1
1:A:81:ASP:OD1	1:A:107:LEU:HG	0.40	2.15	5	1
1:A:187:ARG:NH1	1:A:187:ARG:HB3	0.40	2.32	7	1
1:A:132:LEU:CD1	1:A:161:PHE:HB2	0.40	2.45	1	1
1:A:176:PHE:CE1	1:A:199:LYS:HE2	0.40	2.51	10	1
1:A:197:LYS:NZ	1:A:197:LYS:HB3	0.40	2.31	1	1
1:A:50:ILE:O	1:A:50:ILE:CG1	0.40	2.68	5	1
1:A:107:LEU:CD2	1:A:150:ALA:HB3	0.40	2.47	2	1
1:A:42:GLN:HA	1:A:42:GLN:HE21	0.40	1.76	3	1
1:A:125:LYS:O	1:A:191:LEU:HB3	0.40	2.16	6	1
1:A:131:PHE:CB	1:A:162:ILE:HD11	0.40	2.46	6	1
1:A:14:GLY:O	1:A:17:ALA:HB3	0.40	2.16	9	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	198/228 (87%)	171±2 (86±1%)	18±3 (9±1%)	9±1 (5±1%)	4	27
All	All	1980/2280 (87%)	1707 (86%)	179 (9%)	94 (5%)	4	27

All 17 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	124	ILE	10
1	A	166	HIS	10
1	A	180	LYS	10
1	A	181	GLU	10
1	A	206	THR	10
1	A	133	PRO	9
1	A	89	GLY	7
1	A	164	SER	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	72	ASP	4
1	A	221	LYS	4
1	A	70	ASP	3
1	A	81	ASP	3
1	A	201	GLU	3
1	A	165	ASP	2
1	A	120	PHE	1
1	A	6	PRO	1
1	A	88	GLU	1

6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	172/199 (86%)	120±3 (70±1%)	52±3 (30±1%)	1 16
All	All	1720/1990 (86%)	1201 (70%)	519 (30%)	1 16

All 133 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	148	THR	9
1	A	80	PHE	8
1	A	84	ARG	8
1	A	66	LYS	8
1	A	71	LYS	7
1	A	78	LYS	7
1	A	104	GLN	7
1	A	125	LYS	7
1	A	182	GLU	7
1	A	190	THR	7
1	A	197	LYS	7
1	A	57	ILE	7
1	A	154	LYS	7
1	A	11	LEU	6
1	A	79	LYS	6
1	A	102	HIS	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	111	PHE	6
1	A	163	ASP	6
1	A	171	ARG	6
1	A	191	LEU	6
1	A	206	THR	6
1	A	93	LYS	6
1	A	113	GLU	6
1	A	114	GLN	6
1	A	178	LEU	6
1	A	221	LYS	6
1	A	68	GLN	6
1	A	176	PHE	6
1	A	187	ARG	6
1	A	44	LEU	5
1	A	48	GLU	5
1	A	61	SER	5
1	A	82	GLU	5
1	A	87	PHE	5
1	A	101	LYS	5
1	A	161	PHE	5
1	A	180	LYS	5
1	A	201	GLU	5
1	A	95	ASN	5
1	A	156	LYS	5
1	A	170	GLN	5
1	A	174	GLU	5
1	A	179	LYS	5
1	A	215	HIS	5
1	A	90	GLU	5
1	A	123	GLU	5
1	A	159	PHE	5
1	A	92	THR	5
1	A	130	LEU	5
1	A	67	TYR	5
1	A	20	LEU	4
1	A	109	ILE	4
1	A	127	HIS	4
1	A	158	LEU	4
1	A	164	SER	4
1	A	168	ASP	4
1	A	217	PHE	4
1	A	19	SER	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	22	GLU	4
1	A	25	GLU	4
1	A	32	PHE	4
1	A	55	PHE	4
1	A	97	LEU	4
1	A	132	LEU	4
1	A	153	PHE	4
1	A	165	ASP	4
1	A	167	THR	4
1	A	23	SER	4
1	A	24	SER	4
1	A	33	LYS	4
1	A	118	LYS	4
1	A	128	ILE	4
1	A	151	GLU	4
1	A	183	CYS	4
1	A	31	PHE	3
1	A	34	ASP	3
1	A	45	GLN	3
1	A	51	ASP	3
1	A	94	GLU	3
1	A	188	LEU	3
1	A	214	CYS	3
1	A	216	ARG	3
1	A	13	ASP	3
1	A	36	GLU	3
1	A	88	GLU	3
1	A	110	GLU	3
1	A	209	ARG	3
1	A	52	ASP	3
1	A	98	ASP	3
1	A	169	ASN	3
1	A	9	THR	3
1	A	76	LEU	3
1	A	105	LEU	3
1	A	196	THR	3
1	A	219	GLU	3
1	A	37	SER	2
1	A	70	ASP	2
1	A	85	ASN	2
1	A	86	ASN	2
1	A	112	THR	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	115	THR	2
1	A	166	HIS	2
1	A	199	LYS	2
1	A	62	ASP	2
1	A	65	SER	2
1	A	212	GLU	2
1	A	38	ASP	2
1	A	59	SER	2
1	A	181	GLU	2
1	A	202	SER	2
1	A	208	GLU	2
1	A	99	PHE	2
1	A	103	ASN	2
1	A	160	ILE	2
1	A	96	LEU	2
1	A	131	PHE	2
1	A	152	SER	2
1	A	210	ILE	2
1	A	53	ILE	2
1	A	107	LEU	2
1	A	41	LYS	1
1	A	129	LEU	1
1	A	42	GLN	1
1	A	18	GLU	1
1	A	39	SER	1
1	A	189	ILE	1
1	A	58	THR	1
1	A	218	LEU	1
1	A	60	ASN	1
1	A	203	GLU	1
1	A	175	PHE	1
1	A	213	PHE	1
1	A	126	THR	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided