



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 28, 2026 – 04:20 AM UTC

PDB ID : 3RPB / pdb_00003rpb
Title : THE C2B-DOMAIN OF RABPHILIN: STRUCTURAL VARIATIONS IN A JANUS-FACED DOMAIN
Authors : Ubach, J.; Garcia, J.; Nittler, M.P.; Sudhof, T.C.; Rizo, J.
Deposited on : 1999-04-19

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

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

MolProbity	:	4-5-2 with Phenix2.0
Percentile statistics	:	20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.49

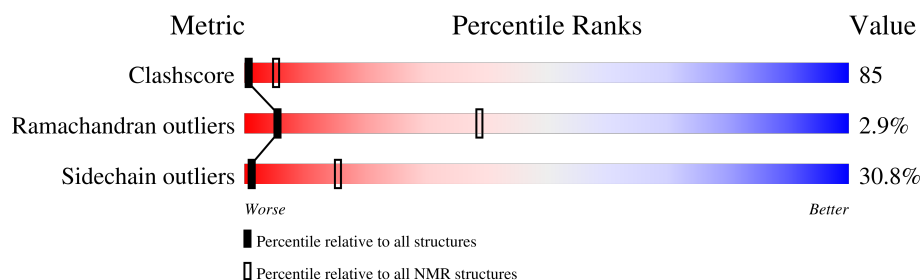
1 Overall quality at a glance

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	229148	14424
Ramachandran outliers	224038	12848
Sidechain outliers	223484	12823

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	140	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 10 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:542-A:585, A:592-A:650, A:654-A:677 (127)	0.35	10

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

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

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

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

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2302 atoms, of which 1159 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called RABPHILIN 3-A.

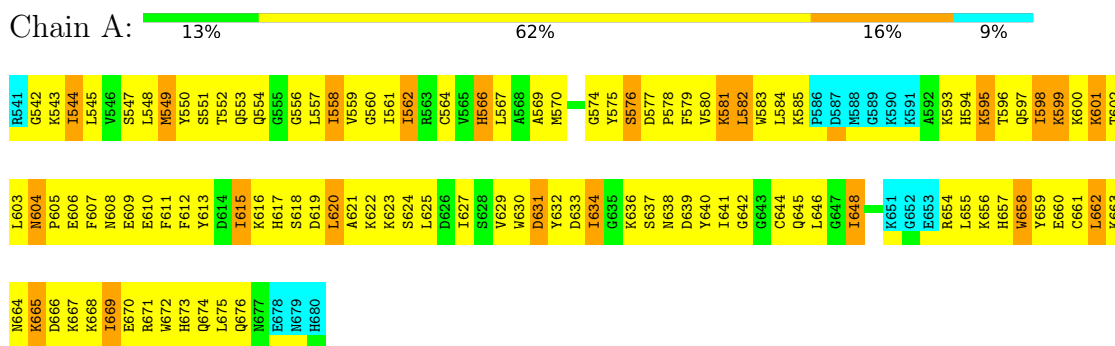
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	140	Total	C	H	N	O	S	0
			2302	731	1159	201	205	6	

4 Residue-property plots

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: RABPHILIN 3-A

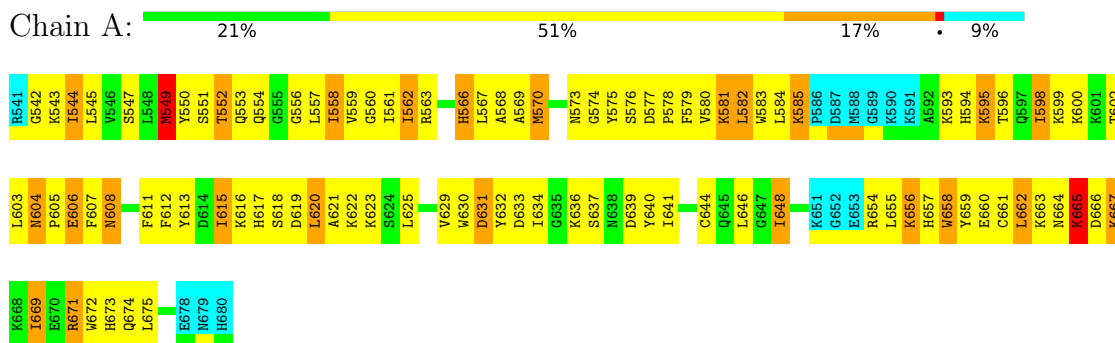


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

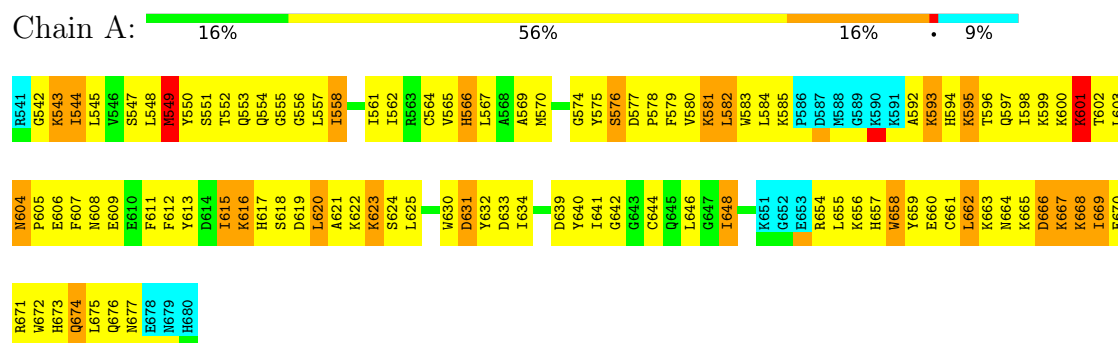
4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: RABPHILIN 3-A



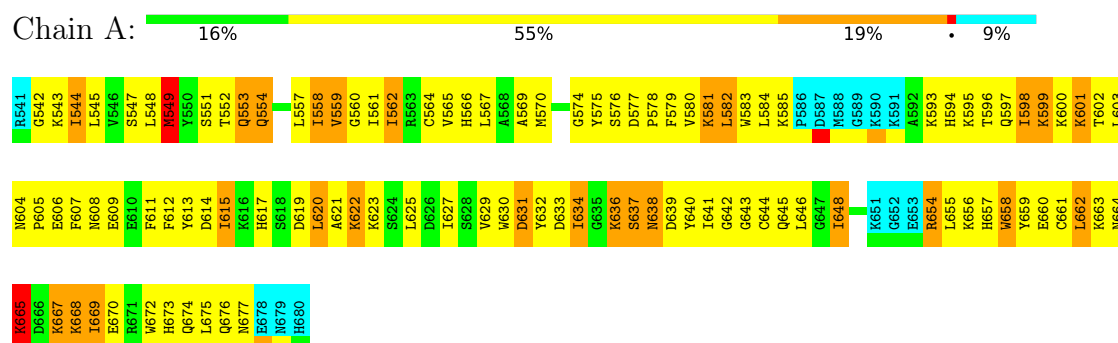
4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: RABPHILIN 3-A



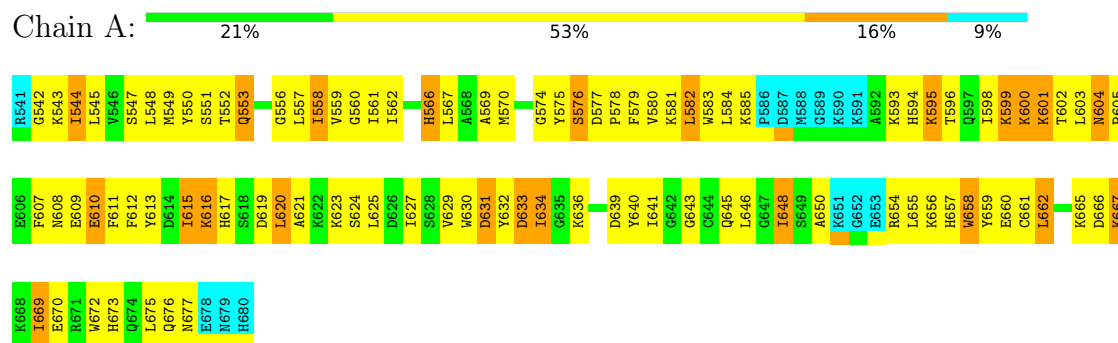
4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: RABPHILIN 3-A



4.2.4 Score per residue for model 4

• Molecule 1: RABPHILIN 3-A



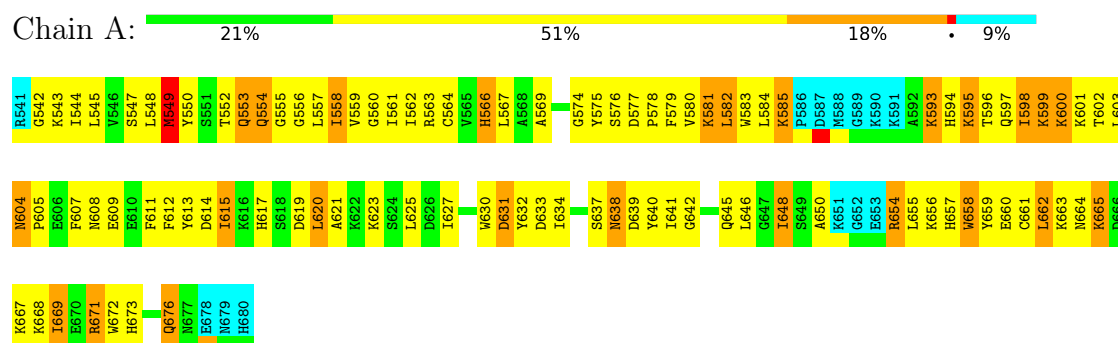
4.2.5 Score per residue for model 5

• Molecule 1: RABPHILIN 3-A



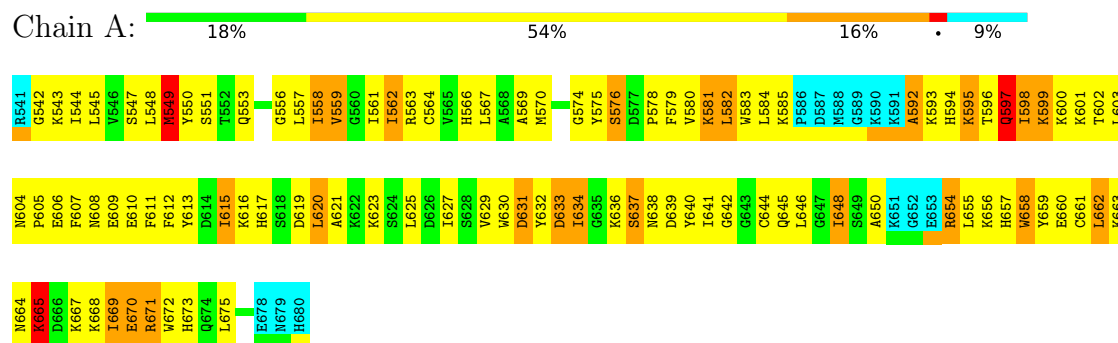
4.2.6 Score per residue for model 6

• Molecule 1: RABPHILIN 3-A



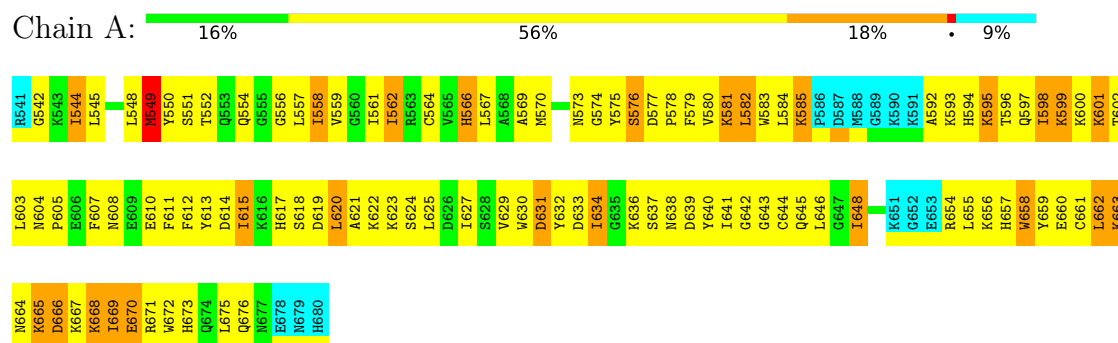
4.2.7 Score per residue for model 7

• Molecule 1: RABPHILIN 3-A



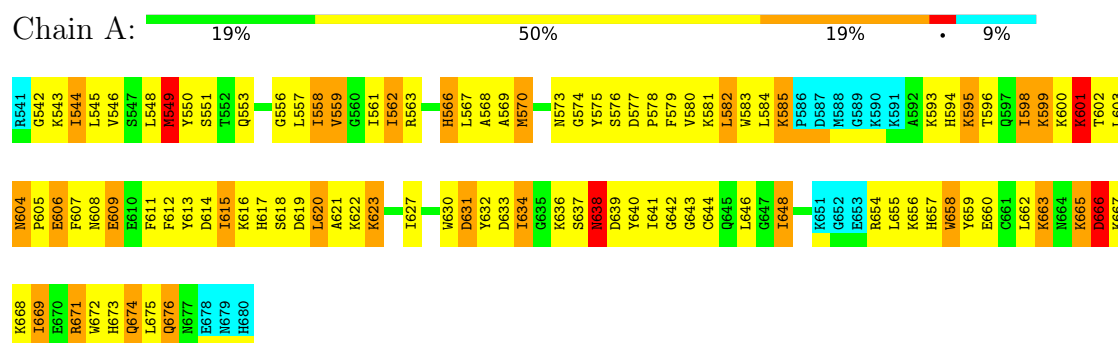
4.2.8 Score per residue for model 8

• Molecule 1: RABPHILIN 3-A



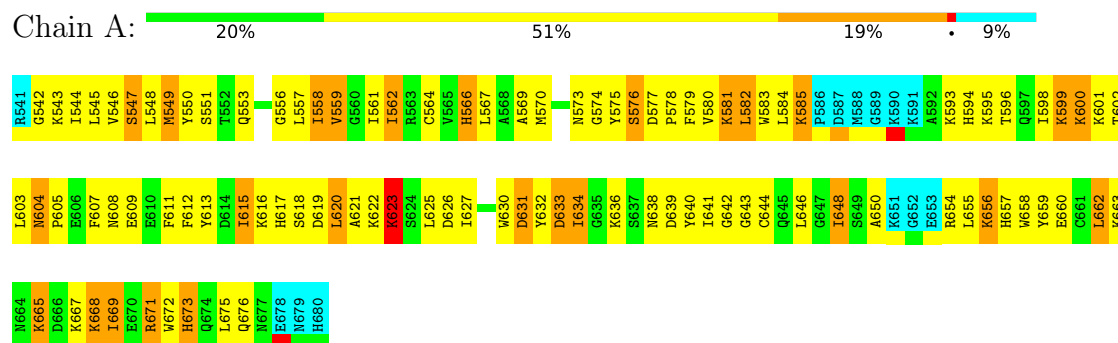
4.2.9 Score per residue for model 9

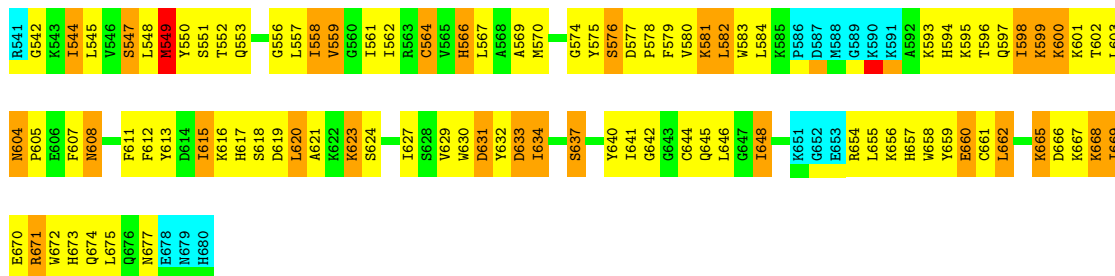
• Molecule 1: RABPHILIN 3-A



4.2.10 Score per residue for model 10 (medoid)

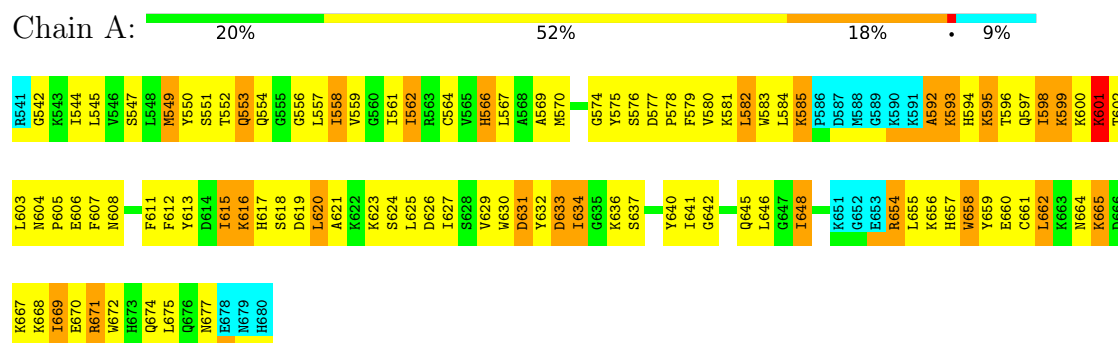
• Molecule 1: RABPHILIN 3-A





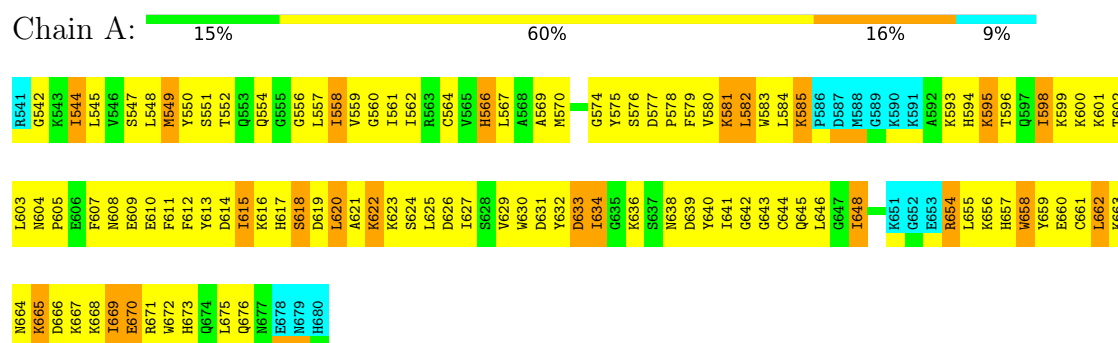
4.2.14 Score per residue for model 14

• Molecule 1: RABPHILIN 3-A



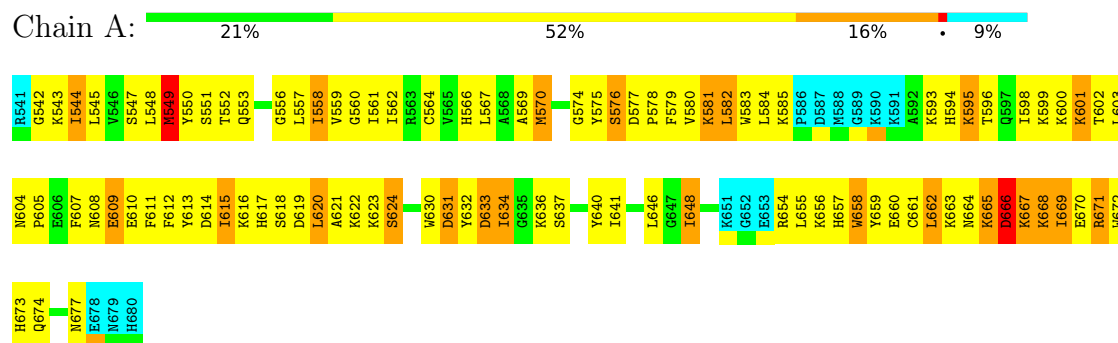
4.2.15 Score per residue for model 15

• Molecule 1: RABPHILIN 3-A



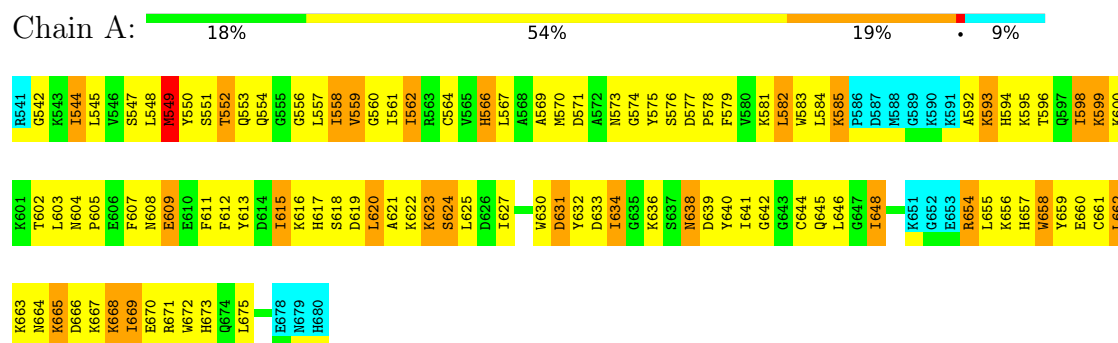
4.2.16 Score per residue for model 16

• Molecule 1: RABPHILIN 3-A



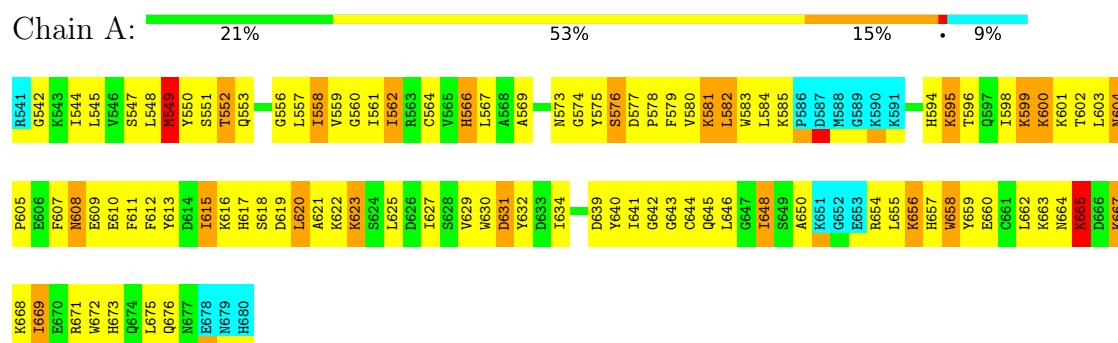
4.2.17 Score per residue for model 17

• Molecule 1: RABPHILIN 3-A



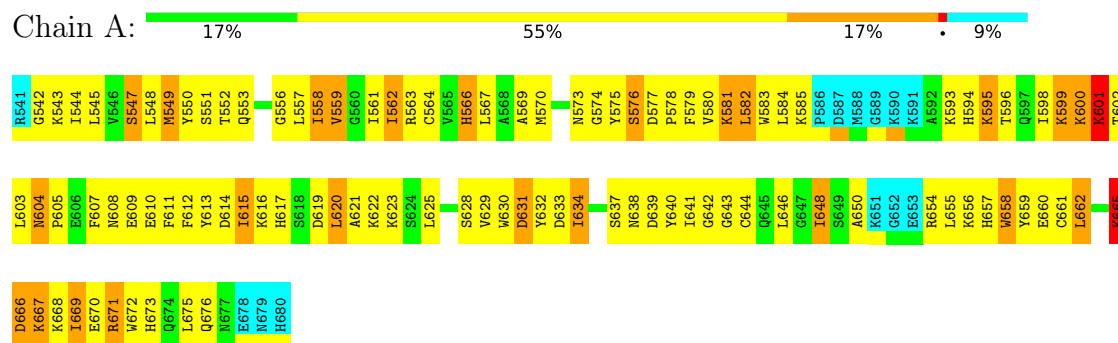
4.2.18 Score per residue for model 18

• Molecule 1: RABPHILIN 3-A



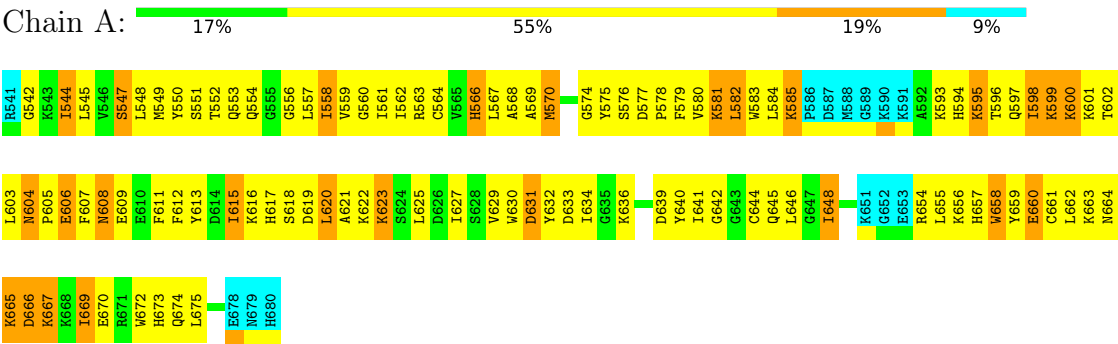
4.2.19 Score per residue for model 19

• Molecule 1: RABPHILIN 3-A



4.2.20 Score per residue for model 20

● Molecule 1: RABPHILIN 3-A



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the ? calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *LOWEST OVERALL ENERGY*.

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

Software name	Classification	Version
CNS	refinement	
CNS	structure solution	

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	1037	1053	1049	178±11
All	All	20740	21060	20980	3558

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 85.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:561:ILE:HD11	1:A:582:LEU:HD21	1.13	1.15	4	20
1:A:646:LEU:HD11	1:A:673:HIS:NE2	0.96	1.73	17	19
1:A:561:ILE:HD11	1:A:582:LEU:CD2	0.94	1.91	13	19
1:A:567:LEU:O	1:A:603:LEU:HD13	0.92	1.64	14	20
1:A:648:ILE:HD11	1:A:659:TYR:CE2	0.90	2.02	1	15
1:A:545:LEU:HD13	1:A:672:TRP:NE1	0.89	1.82	8	20
1:A:648:ILE:HD11	1:A:659:TYR:CD2	0.88	2.03	14	20
1:A:599:LYS:O	1:A:602:THR:HG22	0.87	1.69	19	20
1:A:545:LEU:HG	1:A:562:ILE:HD13	0.83	1.48	13	20
1:A:657:HIS:CD2	1:A:669:ILE:HG22	0.83	2.08	2	8
1:A:561:ILE:CD1	1:A:582:LEU:HD21	0.82	2.03	13	19
1:A:615:ILE:HD11	1:A:619:ASP:CB	0.81	2.05	2	20
1:A:545:LEU:HD13	1:A:672:TRP:CE2	0.81	2.10	3	20
1:A:564:CYS:SG	1:A:567:LEU:HD11	0.81	2.16	8	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:648:ILE:HA	1:A:655:LEU:HD12	0.80	1.51	4	20
1:A:558:ILE:HD13	1:A:612:PHE:CD1	0.77	2.14	6	20
1:A:631:ASP:HB2	1:A:641:ILE:HD11	0.75	1.58	15	12
1:A:584:LEU:HD11	1:A:623:LYS:HB2	0.75	1.57	17	2
1:A:559:VAL:HG11	1:A:582:LEU:HD22	0.74	1.60	14	13
1:A:561:ILE:HG22	1:A:607:PHE:HB2	0.74	1.60	17	9
1:A:598:ILE:HD12	1:A:632:TYR:CD2	0.74	2.17	6	14
1:A:561:ILE:HG21	1:A:596:THR:HG21	0.73	1.60	4	12
1:A:615:ILE:HD13	1:A:623:LYS:HD2	0.73	1.60	2	20
1:A:561:ILE:HG22	1:A:607:PHE:CB	0.73	2.14	5	7
1:A:570:MET:HE1	1:A:641:ILE:HG12	0.73	1.59	4	4
1:A:627:ILE:HD11	1:A:646:LEU:HD12	0.72	1.60	14	10
1:A:547:SER:HB3	1:A:562:ILE:HD11	0.72	1.60	5	9
1:A:558:ILE:HD13	1:A:612:PHE:HD1	0.71	1.45	6	20
1:A:615:ILE:HD11	1:A:619:ASP:HB2	0.71	1.62	17	20
1:A:648:ILE:O	1:A:655:LEU:HD13	0.71	1.86	1	20
1:A:602:THR:HG21	1:A:605:PRO:HB3	0.71	1.62	20	20
1:A:646:LEU:HD21	1:A:673:HIS:CE1	0.71	2.21	1	11
1:A:660:GLU:HB3	1:A:669:ILE:HD12	0.71	1.61	9	5
1:A:621:ALA:H	1:A:662:LEU:HD21	0.69	1.47	1	20
1:A:598:ILE:HG21	1:A:632:TYR:CG	0.69	2.23	4	20
1:A:621:ALA:O	1:A:648:ILE:HG22	0.69	1.87	16	20
1:A:542:GLY:H	1:A:675:LEU:HD12	0.69	1.48	3	1
1:A:545:LEU:HD13	1:A:672:TRP:CD1	0.69	2.23	8	20
1:A:576:SER:N	1:A:603:LEU:HD21	0.68	2.03	5	14
1:A:570:MET:HE3	1:A:631:ASP:OD2	0.67	1.89	12	1
1:A:615:ILE:HD13	1:A:623:LYS:CD	0.67	2.19	2	20
1:A:648:ILE:HG12	1:A:655:LEU:HD11	0.67	1.66	1	20
1:A:582:LEU:HD12	1:A:594:HIS:HB2	0.66	1.67	1	10
1:A:630:TRP:CH2	1:A:640:TYR:CD2	0.66	2.83	10	12
1:A:545:LEU:CG	1:A:562:ILE:HD13	0.66	2.20	4	20
1:A:580:VAL:HG22	1:A:629:VAL:HG22	0.66	1.66	4	7
1:A:545:LEU:HD12	1:A:671:ARG:O	0.65	1.91	18	2
1:A:615:ILE:HD13	1:A:623:LYS:CE	0.65	2.22	9	18
1:A:660:GLU:CD	1:A:669:ILE:HD12	0.65	2.16	1	1
1:A:615:ILE:HD13	1:A:623:LYS:HE3	0.65	1.67	9	8
1:A:657:HIS:CD2	1:A:671:ARG:CG	0.65	2.80	2	2
1:A:579:PHE:CE2	1:A:581:LYS:CE	0.65	2.80	7	6
1:A:615:ILE:HD13	1:A:623:LYS:NZ	0.65	2.07	16	9
1:A:615:ILE:HG23	1:A:620:LEU:CD2	0.65	2.22	5	20
1:A:648:ILE:CD1	1:A:659:TYR:CD2	0.64	2.79	20	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:596:THR:HG22	1:A:611:PHE:CE1	0.64	2.27	18	6
1:A:632:TYR:CD1	1:A:633:ASP:N	0.64	2.66	4	19
1:A:547:SER:HB2	1:A:562:ILE:HD11	0.64	1.69	13	2
1:A:657:HIS:CD2	1:A:669:ILE:CG2	0.64	2.81	3	11
1:A:581:LYS:CD	1:A:630:TRP:CD1	0.64	2.80	6	2
1:A:615:ILE:HG23	1:A:620:LEU:HD21	0.63	1.69	6	20
1:A:648:ILE:N	1:A:658:TRP:CD1	0.63	2.67	10	20
1:A:584:LEU:HD11	1:A:623:LYS:HB3	0.63	1.69	1	16
1:A:584:LEU:CB	1:A:613:TYR:CE2	0.63	2.81	2	19
1:A:578:PRO:HB3	1:A:641:ILE:HD12	0.62	1.71	20	10
1:A:615:ILE:HD11	1:A:619:ASP:HB3	0.62	1.69	2	20
1:A:559:VAL:CG1	1:A:582:LEU:HD22	0.62	2.24	14	6
1:A:642:GLY:O	1:A:675:LEU:HD22	0.62	1.94	15	13
1:A:580:VAL:HG23	1:A:607:PHE:CE2	0.61	2.30	11	10
1:A:648:ILE:HD11	1:A:659:TYR:CZ	0.61	2.30	6	8
1:A:583:TRP:CD1	1:A:583:TRP:C	0.61	2.77	8	20
1:A:648:ILE:CG1	1:A:659:TYR:CD2	0.60	2.84	18	17
1:A:559:VAL:HG21	1:A:613:TYR:CE1	0.60	2.31	11	15
1:A:584:LEU:HD11	1:A:623:LYS:CB	0.59	2.27	17	17
1:A:615:ILE:CG2	1:A:620:LEU:CD2	0.59	2.80	5	20
1:A:550:TYR:CE1	1:A:556:GLY:C	0.59	2.81	1	17
1:A:627:ILE:CD1	1:A:646:LEU:HD12	0.59	2.27	8	2
1:A:648:ILE:HD11	1:A:659:TYR:CG	0.59	2.32	10	16
1:A:579:PHE:CZ	1:A:581:LYS:CE	0.59	2.85	6	2
1:A:656:LYS:CG	1:A:657:HIS:N	0.58	2.66	13	7
1:A:621:ALA:N	1:A:662:LEU:HD21	0.58	2.13	1	20
1:A:657:HIS:CD2	1:A:669:ILE:HG21	0.58	2.33	4	3
1:A:580:VAL:HG23	1:A:607:PHE:CZ	0.58	2.33	11	12
1:A:579:PHE:CD1	1:A:630:TRP:O	0.58	2.57	5	18
1:A:629:VAL:CG2	1:A:675:LEU:HD21	0.58	2.29	18	6
1:A:567:LEU:HD12	1:A:578:PRO:CG	0.58	2.29	2	13
1:A:552:THR:CG2	1:A:665:LYS:CD	0.57	2.81	1	4
1:A:582:LEU:HD11	1:A:611:PHE:CE1	0.57	2.34	14	8
1:A:584:LEU:HB2	1:A:613:TYR:CE2	0.57	2.34	2	18
1:A:583:TRP:CD1	1:A:585:LYS:CD	0.57	2.86	14	1
1:A:660:GLU:CG	1:A:669:ILE:HD12	0.57	2.28	1	2
1:A:604:ASN:N	1:A:605:PRO:CD	0.57	2.67	13	20
1:A:545:LEU:CD1	1:A:672:TRP:CD1	0.57	2.87	8	15
1:A:598:ILE:CG2	1:A:632:TYR:CB	0.57	2.83	1	15
1:A:581:LYS:HD3	1:A:630:TRP:CD1	0.57	2.34	6	4
1:A:575:TYR:C	1:A:603:LEU:HD21	0.57	2.25	12	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:621:ALA:O	1:A:648:ILE:CG2	0.57	2.53	17	20
1:A:621:ALA:HB1	1:A:648:ILE:CD1	0.57	2.30	11	9
1:A:617:HIS:CD2	1:A:665:LYS:HE2	0.57	2.35	8	1
1:A:558:ILE:CD1	1:A:612:PHE:CD1	0.57	2.88	17	19
1:A:545:LEU:CD2	1:A:562:ILE:HD13	0.57	2.30	18	11
1:A:567:LEU:HD12	1:A:578:PRO:HG3	0.56	1.77	14	15
1:A:570:MET:HE2	1:A:641:ILE:HG12	0.56	1.77	9	2
1:A:600:LYS:NZ	1:A:632:TYR:CE1	0.56	2.72	12	1
1:A:552:THR:HG22	1:A:665:LYS:HD3	0.56	1.78	1	4
1:A:620:LEU:O	1:A:623:LYS:N	0.56	2.38	6	19
1:A:664:ASN:HB2	1:A:669:ILE:HD11	0.56	1.76	1	2
1:A:569:ALA:CB	1:A:574:GLY:C	0.56	2.79	16	20
1:A:575:TYR:HA	1:A:603:LEU:HD21	0.56	1.77	9	4
1:A:549:MET:HE2	1:A:666:ASP:O	0.56	2.01	16	2
1:A:648:ILE:HA	1:A:655:LEU:CD1	0.55	2.30	13	20
1:A:551:SER:OG	1:A:558:ILE:HD11	0.55	2.01	2	1
1:A:558:ILE:HG23	1:A:611:PHE:O	0.55	2.02	11	19
1:A:580:VAL:O	1:A:596:THR:HG23	0.55	2.02	14	16
1:A:584:LEU:HB3	1:A:613:TYR:CE2	0.55	2.36	17	12
1:A:548:LEU:N	1:A:669:ILE:O	0.55	2.40	7	7
1:A:569:ALA:HB1	1:A:575:TYR:N	0.55	2.17	15	11
1:A:648:ILE:O	1:A:655:LEU:CD1	0.55	2.54	10	20
1:A:657:HIS:CD2	1:A:671:ARG:HG3	0.55	2.35	2	1
1:A:660:GLU:HG3	1:A:669:ILE:CD1	0.55	2.31	6	13
1:A:570:MET:CG	1:A:631:ASP:CG	0.55	2.80	12	12
1:A:579:PHE:CZ	1:A:581:LYS:HE2	0.55	2.36	7	2
1:A:570:MET:SD	1:A:570:MET:N	0.55	2.79	20	3
1:A:581:LYS:HZ1	1:A:630:TRP:CD1	0.55	2.20	7	3
1:A:657:HIS:CE1	1:A:671:ARG:CG	0.55	2.90	6	1
1:A:662:LEU:O	1:A:665:LYS:CD	0.55	2.55	12	4
1:A:600:LYS:HE3	1:A:632:TYR:CE1	0.54	2.37	6	7
1:A:661:CYS:HA	1:A:669:ILE:HD11	0.54	1.79	12	2
1:A:545:LEU:HD12	1:A:671:ARG:C	0.54	2.28	18	1
1:A:579:PHE:CE2	1:A:581:LYS:HE2	0.54	2.35	7	2
1:A:627:ILE:H	1:A:627:ILE:HD12	0.54	1.62	18	2
1:A:600:LYS:HE2	1:A:632:TYR:CE1	0.54	2.38	11	2
1:A:631:ASP:OD2	1:A:639:ASP:CB	0.54	2.55	12	1
1:A:549:MET:O	1:A:558:ILE:CB	0.54	2.56	18	15
1:A:629:VAL:HG23	1:A:675:LEU:CD2	0.54	2.32	18	4
1:A:621:ALA:HB1	1:A:648:ILE:HD12	0.54	1.80	7	7
1:A:656:LYS:O	1:A:660:GLU:CG	0.54	2.56	7	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:659:TYR:O	1:A:662:LEU:N	0.54	2.39	8	20
1:A:660:GLU:CD	1:A:669:ILE:CD1	0.54	2.81	13	2
1:A:559:VAL:CG1	1:A:625:LEU:HD21	0.54	2.32	17	1
1:A:542:GLY:CA	1:A:566:HIS:O	0.54	2.56	3	20
1:A:549:MET:O	1:A:558:ILE:CG1	0.54	2.56	5	18
1:A:594:HIS:CD2	1:A:611:PHE:CD2	0.54	2.96	15	6
1:A:598:ILE:CG2	1:A:632:TYR:HB3	0.54	2.33	20	8
1:A:602:THR:C	1:A:603:LEU:HD23	0.54	2.28	8	10
1:A:580:VAL:CG2	1:A:607:PHE:CE2	0.54	2.91	11	5
1:A:581:LYS:HE3	1:A:630:TRP:CD1	0.54	2.38	7	7
1:A:585:LYS:CG	1:A:624:SER:OG	0.54	2.56	16	1
1:A:644:CYS:SG	1:A:673:HIS:CG	0.53	3.01	13	1
1:A:646:LEU:HD11	1:A:673:HIS:HE2	0.53	1.61	16	2
1:A:600:LYS:CE	1:A:632:TYR:CE1	0.53	2.91	6	2
1:A:575:TYR:CD2	1:A:602:THR:HA	0.53	2.39	12	19
1:A:581:LYS:CB	1:A:594:HIS:O	0.53	2.57	14	6
1:A:657:HIS:CD2	1:A:671:ARG:HG2	0.53	2.38	18	1
1:A:594:HIS:HB3	1:A:611:PHE:CE2	0.53	2.38	15	15
1:A:657:HIS:CE1	1:A:671:ARG:HG2	0.53	2.38	6	1
1:A:570:MET:SD	1:A:631:ASP:CB	0.53	2.97	16	1
1:A:598:ILE:HG21	1:A:632:TYR:CB	0.53	2.33	20	9
1:A:617:HIS:CD2	1:A:665:LYS:HD3	0.53	2.39	7	5
1:A:550:TYR:CE2	1:A:556:GLY:C	0.53	2.86	6	2
1:A:561:ILE:O	1:A:608:ASN:N	0.53	2.42	18	20
1:A:562:ILE:O	1:A:607:PHE:N	0.53	2.42	11	20
1:A:548:LEU:O	1:A:669:ILE:N	0.53	2.42	2	7
1:A:549:MET:CG	1:A:667:LYS:O	0.53	2.57	18	2
1:A:625:LEU:O	1:A:646:LEU:N	0.53	2.42	18	15
1:A:583:TRP:CE3	1:A:593:LYS:HE2	0.53	2.38	10	8
1:A:585:LYS:O	1:A:624:SER:N	0.53	2.42	17	1
1:A:558:ILE:CG2	1:A:610:GLU:OE1	0.53	2.57	4	1
1:A:668:LYS:O	1:A:668:LYS:CE	0.53	2.57	16	1
1:A:593:LYS:O	1:A:594:HIS:ND1	0.52	2.42	1	9
1:A:631:ASP:N	1:A:639:ASP:O	0.52	2.43	12	16
1:A:657:HIS:CG	1:A:671:ARG:HG2	0.52	2.39	7	4
1:A:610:GLU:N	1:A:610:GLU:CD	0.52	2.67	5	1
1:A:545:LEU:HD23	1:A:562:ILE:HG21	0.52	1.81	13	9
1:A:549:MET:O	1:A:558:ILE:N	0.52	2.42	8	18
1:A:632:TYR:HE1	1:A:634:ILE:HG23	0.52	1.64	5	11
1:A:595:LYS:CE	1:A:595:LYS:O	0.52	2.57	2	1
1:A:595:LYS:O	1:A:595:LYS:CD	0.52	2.57	14	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:665:LYS:O	1:A:667:LYS:N	0.52	2.42	2	5
1:A:661:CYS:O	1:A:665:LYS:NZ	0.52	2.42	8	1
1:A:629:VAL:HG23	1:A:675:LEU:HD21	0.52	1.82	18	4
1:A:630:TRP:CZ2	1:A:640:TYR:CD2	0.52	2.98	8	6
1:A:657:HIS:NE2	1:A:669:ILE:O	0.52	2.43	9	5
1:A:557:LEU:HD13	1:A:620:LEU:HD11	0.52	1.80	17	1
1:A:552:THR:CG2	1:A:665:LYS:HD2	0.52	2.35	1	4
1:A:548:LEU:CB	1:A:661:CYS:SG	0.52	2.98	16	3
1:A:630:TRP:CZ3	1:A:640:TYR:HB2	0.52	2.40	7	19
1:A:648:ILE:HD11	1:A:659:TYR:CD1	0.52	2.40	13	4
1:A:655:LEU:O	1:A:659:TYR:N	0.52	2.43	11	4
1:A:599:LYS:CG	1:A:605:PRO:HB2	0.52	2.35	17	5
1:A:628:SER:HB2	1:A:640:TYR:CZ	0.52	2.40	12	1
1:A:549:MET:SD	1:A:668:LYS:CB	0.52	2.98	12	1
1:A:655:LEU:O	1:A:659:TYR:CB	0.52	2.58	13	4
1:A:674:GLN:OE1	1:A:676:GLN:CG	0.52	2.57	2	1
1:A:579:PHE:CZ	1:A:630:TRP:HB2	0.51	2.40	18	18
1:A:567:LEU:CD1	1:A:578:PRO:CB	0.51	2.88	16	10
1:A:550:TYR:O	1:A:665:LYS:CB	0.51	2.57	8	1
1:A:579:PHE:CE1	1:A:630:TRP:HB2	0.51	2.40	4	11
1:A:671:ARG:HD2	1:A:673:HIS:CE1	0.51	2.40	7	4
1:A:597:GLN:CD	1:A:599:LYS:NZ	0.51	2.69	12	1
1:A:562:ILE:O	1:A:608:ASN:N	0.51	2.43	1	14
1:A:569:ALA:HB1	1:A:574:GLY:C	0.51	2.30	20	17
1:A:664:ASN:OD1	1:A:667:LYS:CD	0.51	2.58	3	2
1:A:559:VAL:HG21	1:A:613:TYR:HE1	0.51	1.65	11	7
1:A:584:LEU:CD2	1:A:615:ILE:HG21	0.51	2.36	17	8
1:A:547:SER:O	1:A:560:GLY:N	0.51	2.43	17	10
1:A:621:ALA:CB	1:A:648:ILE:HD12	0.51	2.35	4	10
1:A:610:GLU:CG	1:A:610:GLU:O	0.51	2.58	11	1
1:A:579:PHE:CE2	1:A:581:LYS:HD2	0.51	2.41	8	8
1:A:599:LYS:HD3	1:A:607:PHE:CD1	0.51	2.41	17	2
1:A:615:ILE:CG1	1:A:620:LEU:HD23	0.51	2.36	4	20
1:A:660:GLU:OE2	1:A:669:ILE:CG2	0.51	2.58	1	1
1:A:542:GLY:N	1:A:675:LEU:HD12	0.51	2.21	3	1
1:A:546:VAL:HB	1:A:673:HIS:CE1	0.51	2.41	10	1
1:A:599:LYS:HG2	1:A:607:PHE:CE1	0.51	2.41	1	1
1:A:656:LYS:HG3	1:A:657:HIS:N	0.51	2.20	13	5
1:A:633:ASP:CB	1:A:637:SER:O	0.51	2.58	14	2
1:A:670:GLU:N	1:A:670:GLU:OE1	0.51	2.43	13	1
1:A:544:ILE:HD11	1:A:561:ILE:HG23	0.50	1.81	8	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:615:ILE:CD1	1:A:619:ASP:HB2	0.50	2.35	12	20
1:A:660:GLU:HG3	1:A:669:ILE:HD12	0.50	1.81	1	4
1:A:630:TRP:CE3	1:A:640:TYR:HA	0.50	2.42	4	4
1:A:594:HIS:C	1:A:595:LYS:CD	0.50	2.84	6	5
1:A:600:LYS:HE2	1:A:632:TYR:CD1	0.50	2.41	12	1
1:A:567:LEU:CD1	1:A:578:PRO:CG	0.50	2.89	1	7
1:A:570:MET:N	1:A:576:SER:OG	0.50	2.43	10	9
1:A:582:LEU:O	1:A:594:HIS:N	0.50	2.44	13	5
1:A:665:LYS:HD2	1:A:665:LYS:N	0.50	2.21	8	1
1:A:549:MET:N	1:A:661:CYS:SG	0.50	2.84	14	1
1:A:563:ARG:NH2	1:A:606:GLU:OE1	0.50	2.44	9	1
1:A:621:ALA:HB2	1:A:662:LEU:HD22	0.50	1.83	5	11
1:A:581:LYS:HZ1	1:A:630:TRP:CG	0.50	2.24	7	1
1:A:583:TRP:CE3	1:A:593:LYS:HE3	0.50	2.41	12	3
1:A:545:LEU:O	1:A:562:ILE:HD12	0.50	2.06	5	2
1:A:548:LEU:HD12	1:A:658:TRP:HA	0.50	1.83	20	2
1:A:567:LEU:CD1	1:A:578:PRO:HG3	0.50	2.37	1	5
1:A:668:LYS:CE	1:A:670:GLU:OE1	0.50	2.60	3	2
1:A:569:ALA:HB1	1:A:575:TYR:O	0.50	2.07	16	11
1:A:662:LEU:O	1:A:665:LYS:CE	0.50	2.60	6	2
1:A:660:GLU:OE1	1:A:663:LYS:CD	0.50	2.60	18	1
1:A:617:HIS:CE1	1:A:665:LYS:HE2	0.50	2.42	1	4
1:A:659:TYR:O	1:A:660:GLU:C	0.49	2.55	8	18
1:A:564:CYS:SG	1:A:607:PHE:CE2	0.49	2.99	18	6
1:A:615:ILE:CD1	1:A:623:LYS:HE3	0.49	2.37	2	7
1:A:648:ILE:HG12	1:A:655:LEU:CD1	0.49	2.37	1	12
1:A:615:ILE:HD13	1:A:623:LYS:HZ2	0.49	1.67	16	2
1:A:666:ASP:N	1:A:666:ASP:OD1	0.49	2.45	20	2
1:A:657:HIS:O	1:A:660:GLU:HG2	0.49	2.07	1	2
1:A:615:ILE:HG12	1:A:620:LEU:HD23	0.49	1.84	9	18
1:A:583:TRP:CE3	1:A:585:LYS:HE3	0.49	2.42	9	1
1:A:583:TRP:CE3	1:A:593:LYS:CE	0.49	2.96	10	3
1:A:604:ASN:N	1:A:605:PRO:HD3	0.49	2.23	8	18
1:A:580:VAL:O	1:A:596:THR:N	0.49	2.46	10	2
1:A:614:ASP:O	1:A:614:ASP:CG	0.49	2.55	19	2
1:A:619:ASP:O	1:A:620:LEU:C	0.49	2.56	2	20
1:A:658:TRP:O	1:A:661:CYS:N	0.49	2.43	1	3
1:A:552:THR:OG1	1:A:553:GLN:NE2	0.49	2.45	4	1
1:A:657:HIS:ND1	1:A:671:ARG:HG2	0.49	2.23	5	6
1:A:617:HIS:CD2	1:A:665:LYS:CE	0.49	2.96	8	1
1:A:585:LYS:N	1:A:585:LYS:HD3	0.49	2.23	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:598:ILE:HG21	1:A:632:TYR:HB3	0.49	1.85	20	1
1:A:557:LEU:HG	1:A:558:ILE:N	0.49	2.23	16	18
1:A:570:MET:HG3	1:A:631:ASP:CG	0.49	2.33	12	6
1:A:583:TRP:CD2	1:A:593:LYS:HE3	0.49	2.43	12	2
1:A:632:TYR:CG	1:A:633:ASP:N	0.49	2.81	5	9
1:A:615:ILE:CD1	1:A:623:LYS:CE	0.49	2.91	18	7
1:A:604:ASN:N	1:A:604:ASN:ND2	0.49	2.61	18	1
1:A:545:LEU:HD23	1:A:562:ILE:CB	0.48	2.38	13	10
1:A:553:GLN:NE2	1:A:553:GLN:N	0.48	2.61	4	1
1:A:597:GLN:CD	1:A:599:LYS:CE	0.48	2.86	12	1
1:A:599:LYS:O	1:A:602:THR:CG2	0.48	2.57	20	2
1:A:631:ASP:O	1:A:631:ASP:OD1	0.48	2.31	12	2
1:A:664:ASN:O	1:A:667:LYS:O	0.48	2.32	14	8
1:A:547:SER:N	1:A:560:GLY:O	0.48	2.44	11	1
1:A:557:LEU:HD13	1:A:620:LEU:CD1	0.48	2.38	17	1
1:A:569:ALA:CB	1:A:574:GLY:O	0.48	2.61	4	4
1:A:660:GLU:O	1:A:663:LYS:N	0.48	2.46	9	2
1:A:544:ILE:HD13	1:A:544:ILE:C	0.48	2.33	11	1
1:A:600:LYS:HE3	1:A:634:ILE:CD1	0.48	2.39	16	1
1:A:602:THR:CG2	1:A:605:PRO:HB3	0.48	2.39	8	19
1:A:638:ASN:OD1	1:A:638:ASN:N	0.48	2.47	6	1
1:A:546:VAL:HG21	1:A:627:ILE:HG21	0.48	1.84	10	3
1:A:664:ASN:CB	1:A:667:LYS:HB2	0.48	2.38	18	3
1:A:648:ILE:HG13	1:A:659:TYR:CG	0.48	2.43	6	6
1:A:581:LYS:HG3	1:A:630:TRP:CD1	0.48	2.44	4	2
1:A:617:HIS:NE2	1:A:662:LEU:O	0.48	2.46	4	7
1:A:570:MET:HE2	1:A:641:ILE:CG1	0.48	2.39	9	1
1:A:577:ASP:N	1:A:578:PRO:CD	0.48	2.76	9	14
1:A:656:LYS:O	1:A:660:GLU:CD	0.48	2.57	10	6
1:A:549:MET:HG3	1:A:668:LYS:CA	0.48	2.39	16	5
1:A:550:TYR:CE1	1:A:620:LEU:HG	0.48	2.44	5	1
1:A:546:VAL:CG2	1:A:627:ILE:HG21	0.48	2.38	11	1
1:A:549:MET:SD	1:A:668:LYS:CA	0.48	3.02	12	1
1:A:657:HIS:HD2	1:A:669:ILE:HG22	0.48	1.69	18	1
1:A:545:LEU:HD23	1:A:562:ILE:CG2	0.48	2.38	13	5
1:A:545:LEU:HD13	1:A:672:TRP:CD2	0.48	2.43	9	1
1:A:599:LYS:CD	1:A:605:PRO:HB2	0.48	2.39	14	15
1:A:550:TYR:CE2	1:A:617:HIS:HB2	0.48	2.44	12	9
1:A:567:LEU:CD2	1:A:675:LEU:CD1	0.48	2.92	19	3
1:A:671:ARG:CD	1:A:672:TRP:O	0.48	2.62	14	2
1:A:550:TYR:CD1	1:A:557:LEU:HA	0.48	2.44	8	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:575:TYR:CA	1:A:603:LEU:HD21	0.48	2.39	9	4
1:A:625:LEU:N	1:A:646:LEU:O	0.48	2.43	20	4
1:A:583:TRP:CZ3	1:A:585:LYS:HE3	0.48	2.43	9	1
1:A:628:SER:HB2	1:A:640:TYR:CE2	0.48	2.43	12	1
1:A:599:LYS:O	1:A:600:LYS:C	0.48	2.56	20	2
1:A:664:ASN:OD1	1:A:667:LYS:CE	0.48	2.62	20	1
1:A:656:LYS:O	1:A:660:GLU:HG2	0.48	2.09	1	11
1:A:544:ILE:HD13	1:A:545:LEU:N	0.48	2.23	2	4
1:A:665:LYS:O	1:A:666:ASP:C	0.48	2.57	2	5
1:A:663:LYS:HG2	1:A:664:ASN:N	0.48	2.23	16	2
1:A:670:GLU:O	1:A:671:ARG:NE	0.48	2.47	11	1
1:A:607:PHE:O	1:A:608:ASN:CG	0.48	2.57	17	1
1:A:615:ILE:CD1	1:A:623:LYS:HD2	0.47	2.39	17	14
1:A:656:LYS:O	1:A:660:GLU:CB	0.47	2.61	11	11
1:A:554:GLN:OE1	1:A:612:PHE:CZ	0.47	2.67	8	1
1:A:657:HIS:CD2	1:A:669:ILE:HB	0.47	2.44	14	2
1:A:663:LYS:CG	1:A:664:ASN:OD1	0.47	2.61	2	1
1:A:567:LEU:CD2	1:A:675:LEU:HD11	0.47	2.40	3	3
1:A:599:LYS:HG2	1:A:605:PRO:CB	0.47	2.39	12	7
1:A:550:TYR:OH	1:A:555:GLY:C	0.47	2.57	6	1
1:A:631:ASP:O	1:A:639:ASP:N	0.47	2.46	11	2
1:A:656:LYS:C	1:A:660:GLU:OE1	0.47	2.57	11	2
1:A:670:GLU:CD	1:A:670:GLU:O	0.47	2.58	13	1
1:A:557:LEU:O	1:A:613:TYR:N	0.47	2.43	17	1
1:A:568:ALA:O	1:A:603:LEU:HD22	0.47	2.09	1	3
1:A:599:LYS:HB3	1:A:602:THR:CG2	0.47	2.39	16	10
1:A:593:LYS:HD2	1:A:593:LYS:N	0.47	2.24	17	1
1:A:567:LEU:HD13	1:A:578:PRO:CB	0.47	2.40	11	15
1:A:584:LEU:CD1	1:A:623:LYS:HB3	0.47	2.40	8	16
1:A:547:SER:CB	1:A:670:GLU:HG3	0.47	2.39	12	4
1:A:597:GLN:HG3	1:A:599:LYS:CE	0.47	2.39	3	3
1:A:643:GLY:O	1:A:676:GLN:N	0.47	2.42	3	9
1:A:657:HIS:CD2	1:A:657:HIS:C	0.47	2.92	9	5
1:A:664:ASN:O	1:A:665:LYS:C	0.47	2.57	20	5
1:A:658:TRP:O	1:A:659:TYR:C	0.47	2.57	18	7
1:A:549:MET:CG	1:A:668:LYS:HA	0.47	2.40	2	3
1:A:561:ILE:HG22	1:A:607:PHE:CG	0.47	2.44	5	4
1:A:657:HIS:NE2	1:A:669:ILE:HG22	0.47	2.24	2	2
1:A:630:TRP:CZ3	1:A:640:TYR:CG	0.47	3.02	4	1
1:A:634:ILE:N	1:A:634:ILE:HD13	0.47	2.25	13	9
1:A:638:ASN:C	1:A:639:ASP:OD1	0.47	2.58	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:600:LYS:HE2	1:A:634:ILE:HD12	0.47	1.86	10	2
1:A:583:TRP:CD2	1:A:585:LYS:HE3	0.47	2.45	9	1
1:A:626:ASP:OD1	1:A:626:ASP:C	0.47	2.58	10	2
1:A:617:HIS:CE1	1:A:665:LYS:HD3	0.47	2.44	17	1
1:A:627:ILE:HD12	1:A:627:ILE:N	0.47	2.23	18	2
1:A:631:ASP:OD2	1:A:639:ASP:HB2	0.47	2.10	12	1
1:A:585:LYS:CD	1:A:585:LYS:N	0.47	2.78	14	1
1:A:646:LEU:HD11	1:A:673:HIS:CE1	0.47	2.43	17	1
1:A:561:ILE:HD13	1:A:561:ILE:N	0.47	2.24	19	1
1:A:547:SER:CB	1:A:562:ILE:HD11	0.47	2.40	1	2
1:A:579:PHE:CE2	1:A:581:LYS:CD	0.47	2.98	6	1
1:A:617:HIS:NE2	1:A:665:LYS:HE2	0.47	2.25	3	6
1:A:552:THR:O	1:A:553:GLN:C	0.47	2.57	6	1
1:A:545:LEU:HG	1:A:562:ILE:CD1	0.47	2.40	10	4
1:A:577:ASP:O	1:A:632:TYR:N	0.46	2.44	1	7
1:A:578:PRO:HA	1:A:630:TRP:O	0.46	2.10	4	18
1:A:583:TRP:CG	1:A:593:LYS:HD3	0.46	2.45	4	2
1:A:621:ALA:HB1	1:A:648:ILE:HD13	0.46	1.88	5	3
1:A:550:TYR:CD2	1:A:557:LEU:HA	0.46	2.45	6	1
1:A:598:ILE:CD1	1:A:632:TYR:CD2	0.46	2.98	16	4
1:A:563:ARG:HG3	1:A:672:TRP:CH2	0.46	2.45	1	1
1:A:600:LYS:O	1:A:601:LYS:C	0.46	2.58	15	9
1:A:632:TYR:O	1:A:633:ASP:OD1	0.46	2.33	12	4
1:A:666:ASP:OD1	1:A:667:LYS:N	0.46	2.47	11	1
1:A:600:LYS:CE	1:A:634:ILE:HD12	0.46	2.40	16	1
1:A:562:ILE:HD11	1:A:670:GLU:HG2	0.46	1.85	17	1
1:A:552:THR:HG22	1:A:665:LYS:CD	0.46	2.39	1	2
1:A:658:TRP:O	1:A:661:CYS:HB3	0.46	2.10	19	12
1:A:648:ILE:HG13	1:A:659:TYR:CB	0.46	2.41	16	9
1:A:598:ILE:HG23	1:A:632:TYR:CB	0.46	2.40	16	3
1:A:630:TRP:CA	1:A:639:ASP:O	0.46	2.63	12	1
1:A:600:LYS:HD3	1:A:632:TYR:CD1	0.46	2.45	20	2
1:A:581:LYS:HA	1:A:594:HIS:O	0.46	2.11	8	18
1:A:576:SER:C	1:A:578:PRO:HD3	0.46	2.36	7	6
1:A:658:TRP:O	1:A:661:CYS:CB	0.46	2.63	2	7
1:A:676:GLN:HG3	1:A:677:ASN:N	0.46	2.25	3	1
1:A:583:TRP:CD1	1:A:585:LYS:HD3	0.46	2.45	14	1
1:A:583:TRP:CE2	1:A:585:LYS:HG2	0.46	2.45	1	1
1:A:547:SER:HA	1:A:669:ILE:O	0.46	2.11	19	14
1:A:631:ASP:OD1	1:A:633:ASP:OD1	0.46	2.34	12	1
1:A:549:MET:O	1:A:558:ILE:HG12	0.46	2.11	20	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:549:MET:HG2	1:A:667:LYS:O	0.46	2.11	18	9
1:A:674:GLN:NE2	1:A:675:LEU:O	0.46	2.48	2	1
1:A:570:MET:HE1	1:A:641:ILE:CG1	0.46	2.41	7	1
1:A:552:THR:HG22	1:A:665:LYS:HD2	0.46	1.86	17	2
1:A:583:TRP:CZ2	1:A:585:LYS:HG2	0.46	2.46	20	1
1:A:570:MET:HG2	1:A:631:ASP:CG	0.46	2.35	3	2
1:A:638:ASN:O	1:A:639:ASP:OD1	0.46	2.34	8	2
1:A:583:TRP:CZ2	1:A:585:LYS:HD3	0.46	2.46	7	1
1:A:656:LYS:O	1:A:660:GLU:OE1	0.46	2.33	19	3
1:A:663:LYS:HE2	1:A:664:ASN:ND2	0.46	2.25	16	1
1:A:607:PHE:C	1:A:608:ASN:OD1	0.46	2.59	17	1
1:A:552:THR:CG2	1:A:665:LYS:HD3	0.46	2.41	4	2
1:A:671:ARG:HD2	1:A:672:TRP:O	0.46	2.11	1	1
1:A:543:LYS:N	1:A:565:VAL:O	0.46	2.45	3	1
1:A:600:LYS:HE3	1:A:632:TYR:CD1	0.46	2.45	7	3
1:A:650:ALA:CB	1:A:654:ARG:HB2	0.46	2.41	6	3
1:A:662:LEU:O	1:A:665:LYS:HD3	0.46	2.10	9	3
1:A:600:LYS:CE	1:A:632:TYR:CD1	0.46	2.99	11	1
1:A:561:ILE:CG1	1:A:582:LEU:HD21	0.46	2.40	1	1
1:A:665:LYS:C	1:A:667:LYS:N	0.46	2.74	2	5
1:A:549:MET:SD	1:A:665:LYS:O	0.46	2.74	8	3
1:A:631:ASP:OD1	1:A:639:ASP:OD1	0.46	2.34	10	1
1:A:599:LYS:CB	1:A:605:PRO:HG3	0.46	2.40	18	4
1:A:596:THR:O	1:A:597:GLN:C	0.46	2.59	6	4
1:A:621:ALA:HB1	1:A:648:ILE:HG21	0.46	1.88	2	10
1:A:664:ASN:OD1	1:A:667:LYS:HD2	0.46	2.11	3	1
1:A:557:LEU:CD1	1:A:661:CYS:SG	0.46	3.04	20	1
1:A:620:LEU:O	1:A:621:ALA:C	0.45	2.59	6	13
1:A:576:SER:C	1:A:578:PRO:CD	0.45	2.89	2	6
1:A:601:LYS:O	1:A:602:THR:HB	0.45	2.11	13	7
1:A:599:LYS:CG	1:A:607:PHE:CE1	0.45	2.99	1	1
1:A:646:LEU:HD23	1:A:654:ARG:HB3	0.45	1.89	12	4
1:A:645:GLN:O	1:A:654:ARG:CD	0.45	2.63	4	2
1:A:662:LEU:O	1:A:665:LYS:HE2	0.45	2.11	13	1
1:A:660:GLU:OE1	1:A:669:ILE:CD1	0.45	2.65	1	1
1:A:645:GLN:O	1:A:654:ARG:HD2	0.45	2.11	18	11
1:A:671:ARG:CD	1:A:671:ARG:C	0.45	2.89	10	1
1:A:660:GLU:CD	1:A:669:ILE:HD13	0.45	2.37	13	1
1:A:559:VAL:HG11	1:A:625:LEU:HD21	0.45	1.88	17	1
1:A:595:LYS:O	1:A:595:LYS:CG	0.45	2.64	12	4
1:A:594:HIS:C	1:A:595:LYS:HD3	0.45	2.37	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:607:PHE:O	1:A:608:ASN:OD1	0.45	2.34	17	1
1:A:644:CYS:SG	1:A:674:GLN:O	0.45	2.74	2	1
1:A:561:ILE:HG13	1:A:596:THR:CG2	0.45	2.41	3	6
1:A:581:LYS:CE	1:A:630:TRP:CD1	0.45	2.99	7	3
1:A:594:HIS:CG	1:A:611:PHE:CE2	0.45	3.03	12	3
1:A:671:ARG:HD3	1:A:672:TRP:O	0.45	2.11	14	3
1:A:618:SER:O	1:A:622:LYS:CE	0.45	2.64	15	1
1:A:548:LEU:HB2	1:A:661:CYS:SG	0.45	2.50	16	1
1:A:549:MET:O	1:A:558:ILE:HB	0.45	2.12	18	5
1:A:583:TRP:HB2	1:A:593:LYS:CG	0.45	2.42	16	7
1:A:642:GLY:HA2	1:A:676:GLN:O	0.45	2.12	3	3
1:A:550:TYR:O	1:A:665:LYS:C	0.45	2.60	5	2
1:A:579:PHE:CE2	1:A:581:LYS:CG	0.45	3.00	6	1
1:A:599:LYS:HD2	1:A:599:LYS:N	0.45	2.27	17	1
1:A:633:ASP:OD2	1:A:639:ASP:OD2	0.45	2.34	3	1
1:A:630:TRP:CZ2	1:A:640:TYR:CE2	0.45	3.05	8	2
1:A:582:LEU:HD11	1:A:611:PHE:CZ	0.45	2.47	14	2
1:A:576:SER:N	1:A:603:LEU:CD2	0.45	2.78	5	5
1:A:620:LEU:O	1:A:623:LYS:HB2	0.45	2.12	1	9
1:A:674:GLN:OE1	1:A:676:GLN:HG3	0.45	2.12	2	1
1:A:580:VAL:CG1	1:A:627:ILE:CG2	0.45	2.95	13	2
1:A:646:LEU:CD2	1:A:654:ARG:HB3	0.44	2.43	1	3
1:A:547:SER:HB3	1:A:670:GLU:CG	0.44	2.42	2	2
1:A:630:TRP:CE3	1:A:640:TYR:CA	0.44	3.01	20	3
1:A:561:ILE:CG2	1:A:607:PHE:CD2	0.44	3.00	17	4
1:A:631:ASP:OD1	1:A:631:ASP:C	0.44	2.59	11	1
1:A:551:SER:O	1:A:555:GLY:N	0.44	2.50	2	1
1:A:561:ILE:HG22	1:A:607:PHE:CD2	0.44	2.47	18	12
1:A:610:GLU:O	1:A:610:GLU:HG3	0.44	2.12	11	1
1:A:580:VAL:HG11	1:A:627:ILE:CG2	0.44	2.43	13	1
1:A:620:LEU:O	1:A:623:LYS:CB	0.44	2.66	1	9
1:A:550:TYR:CD1	1:A:620:LEU:HD11	0.44	2.48	2	1
1:A:648:ILE:CG1	1:A:659:TYR:CG	0.44	3.00	6	6
1:A:655:LEU:O	1:A:659:TYR:HB3	0.44	2.12	12	6
1:A:656:LYS:O	1:A:660:GLU:HB3	0.44	2.13	6	14
1:A:577:ASP:OD1	1:A:601:LYS:N	0.44	2.44	4	2
1:A:582:LEU:O	1:A:593:LYS:HA	0.44	2.12	14	4
1:A:671:ARG:HD3	1:A:672:TRP:N	0.44	2.27	16	3
1:A:627:ILE:CD1	1:A:646:LEU:CD1	0.44	2.95	14	1
1:A:633:ASP:HB3	1:A:637:SER:O	0.44	2.12	14	1
1:A:648:ILE:HG13	1:A:659:TYR:HB2	0.44	1.88	17	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:577:ASP:CB	1:A:600:LYS:HA	0.44	2.42	5	7
1:A:581:LYS:HE3	1:A:630:TRP:NE1	0.44	2.28	4	1
1:A:621:ALA:O	1:A:648:ILE:HB	0.44	2.13	11	4
1:A:581:LYS:HG2	1:A:595:LYS:HG3	0.44	1.89	6	1
1:A:664:ASN:CG	1:A:667:LYS:HB2	0.44	2.38	18	2
1:A:581:LYS:CG	1:A:595:LYS:HG3	0.44	2.43	6	1
1:A:664:ASN:HB3	1:A:667:LYS:CG	0.44	2.42	2	1
1:A:548:LEU:HG	1:A:657:HIS:NE2	0.44	2.28	3	3
1:A:577:ASP:CB	1:A:632:TYR:HB3	0.44	2.42	4	5
1:A:600:LYS:HE3	1:A:634:ILE:HD12	0.44	1.88	16	1
1:A:549:MET:SD	1:A:666:ASP:O	0.44	2.75	17	1
1:A:668:LYS:N	1:A:668:LYS:HD3	0.44	2.26	3	1
1:A:554:GLN:HG3	1:A:555:GLY:N	0.44	2.28	6	1
1:A:593:LYS:N	1:A:593:LYS:CD	0.44	2.81	17	1
1:A:615:ILE:CD1	1:A:623:LYS:CD	0.44	2.95	2	4
1:A:634:ILE:O	1:A:636:LYS:HG2	0.44	2.12	3	1
1:A:615:ILE:HG13	1:A:616:LYS:N	0.44	2.27	14	3
1:A:662:LEU:O	1:A:665:LYS:HE3	0.44	2.12	6	4
1:A:615:ILE:CG2	1:A:620:LEU:HD23	0.44	2.43	19	3
1:A:629:VAL:CG2	1:A:675:LEU:CD2	0.44	2.95	18	3
1:A:542:GLY:O	1:A:675:LEU:CG	0.43	2.66	10	1
1:A:549:MET:CA	1:A:661:CYS:SG	0.43	3.06	14	1
1:A:595:LYS:O	1:A:595:LYS:HD2	0.43	2.13	16	1
1:A:616:LYS:O	1:A:619:ASP:N	0.43	2.46	13	5
1:A:584:LEU:CG	1:A:623:LYS:HB3	0.43	2.43	12	8
1:A:570:MET:CG	1:A:631:ASP:OD1	0.43	2.66	3	1
1:A:656:LYS:O	1:A:660:GLU:HB2	0.43	2.13	18	5
1:A:631:ASP:HB3	1:A:641:ILE:CG1	0.43	2.43	12	1
1:A:568:ALA:O	1:A:576:SER:OG	0.43	2.32	20	3
1:A:584:LEU:HD12	1:A:625:LEU:N	0.43	2.29	2	1
1:A:603:LEU:C	1:A:604:ASN:ND2	0.43	2.76	2	1
1:A:548:LEU:HB3	1:A:661:CYS:SG	0.43	2.53	5	7
1:A:561:ILE:O	1:A:607:PHE:HB2	0.43	2.14	6	4
1:A:581:LYS:HD3	1:A:595:LYS:CG	0.43	2.43	7	1
1:A:548:LEU:CD1	1:A:658:TRP:HA	0.43	2.43	18	3
1:A:638:ASN:C	1:A:638:ASN:OD1	0.43	2.61	12	1
1:A:596:THR:HG22	1:A:611:PHE:HE1	0.43	1.68	14	2
1:A:569:ALA:HA	1:A:575:TYR:O	0.43	2.13	12	3
1:A:578:PRO:HB3	1:A:641:ILE:CD1	0.43	2.44	18	10
1:A:617:HIS:NE2	1:A:665:LYS:HD3	0.43	2.29	2	5
1:A:561:ILE:HG13	1:A:596:THR:HG21	0.43	1.89	18	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:576:SER:HB2	1:A:603:LEU:CD2	0.43	2.44	17	6
1:A:595:LYS:O	1:A:595:LYS:HD3	0.43	2.13	20	3
1:A:630:TRP:CH2	1:A:640:TYR:CG	0.43	3.07	14	5
1:A:631:ASP:HB3	1:A:641:ILE:HD11	0.43	1.91	12	1
1:A:615:ILE:CD1	1:A:623:LYS:NZ	0.43	2.81	1	3
1:A:553:GLN:HG3	1:A:554:GLN:N	0.43	2.28	14	2
1:A:646:LEU:CD2	1:A:654:ARG:HA	0.43	2.43	3	1
1:A:569:ALA:HB2	1:A:603:LEU:HD11	0.43	1.89	7	1
1:A:581:LYS:NZ	1:A:630:TRP:CE2	0.43	2.84	12	1
1:A:644:CYS:SG	1:A:673:HIS:CB	0.43	3.07	13	1
1:A:563:ARG:CB	1:A:606:GLU:HA	0.43	2.44	7	3
1:A:561:ILE:N	1:A:609:GLU:O	0.43	2.52	17	11
1:A:662:LEU:O	1:A:665:LYS:HG3	0.43	2.14	6	1
1:A:574:GLY:O	1:A:603:LEU:HD11	0.43	2.13	12	1
1:A:661:CYS:HA	1:A:669:ILE:CD1	0.43	2.44	12	1
1:A:603:LEU:C	1:A:605:PRO:CD	0.43	2.92	13	1
1:A:550:TYR:CD1	1:A:556:GLY:O	0.43	2.72	17	3
1:A:549:MET:HG2	1:A:665:LYS:O	0.43	2.13	8	6
1:A:668:LYS:HG2	1:A:669:ILE:N	0.43	2.29	11	2
1:A:664:ASN:OD1	1:A:667:LYS:HE3	0.43	2.13	20	2
1:A:547:SER:HB2	1:A:670:GLU:CG	0.43	2.43	17	1
1:A:543:LYS:O	1:A:564:CYS:HA	0.43	2.13	3	1
1:A:669:ILE:HG22	1:A:670:GLU:N	0.43	2.29	4	2
1:A:597:GLN:CD	1:A:599:LYS:HZ1	0.43	2.20	12	1
1:A:543:LYS:CG	1:A:674:GLN:HA	0.43	2.44	3	2
1:A:569:ALA:CB	1:A:575:TYR:CA	0.43	2.97	4	4
1:A:660:GLU:CG	1:A:669:ILE:CD1	0.43	2.97	6	1
1:A:583:TRP:CE2	1:A:585:LYS:HE3	0.43	2.48	9	1
1:A:544:ILE:O	1:A:544:ILE:CG2	0.42	2.67	4	4
1:A:602:THR:O	1:A:603:LEU:HD23	0.42	2.14	10	2
1:A:559:VAL:CG2	1:A:613:TYR:CE1	0.42	3.02	11	1
1:A:550:TYR:CE1	1:A:617:HIS:HB2	0.42	2.49	15	1
1:A:543:LYS:HD2	1:A:565:VAL:HG23	0.42	1.90	2	1
1:A:550:TYR:O	1:A:665:LYS:HB3	0.42	2.14	16	5
1:A:621:ALA:HB3	1:A:622:LYS:HE2	0.42	1.91	3	1
1:A:621:ALA:CB	1:A:648:ILE:CD1	0.42	2.97	11	3
1:A:630:TRP:CZ3	1:A:640:TYR:CB	0.42	3.02	4	6
1:A:548:LEU:O	1:A:668:LYS:CA	0.42	2.67	8	1
1:A:583:TRP:CH2	1:A:585:LYS:HE3	0.42	2.49	9	1
1:A:617:HIS:NE2	1:A:665:LYS:HD2	0.42	2.29	9	2
1:A:630:TRP:HA	1:A:639:ASP:O	0.42	2.14	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:585:LYS:CD	1:A:624:SER:OG	0.42	2.67	16	1
1:A:638:ASN:O	1:A:639:ASP:CG	0.42	2.62	17	1
1:A:567:LEU:HG	1:A:603:LEU:O	0.42	2.14	20	7
1:A:581:LYS:HB3	1:A:594:HIS:O	0.42	2.15	2	5
1:A:674:GLN:O	1:A:674:GLN:HG3	0.42	2.13	2	1
1:A:632:TYR:O	1:A:633:ASP:CG	0.42	2.62	6	2
1:A:670:GLU:O	1:A:670:GLU:OE1	0.42	2.37	7	1
1:A:657:HIS:ND1	1:A:671:ARG:HB2	0.42	2.29	8	1
1:A:599:LYS:HG3	1:A:605:PRO:CG	0.42	2.44	16	2
1:A:547:SER:CB	1:A:670:GLU:CG	0.42	2.97	14	1
1:A:618:SER:O	1:A:622:LYS:HE3	0.42	2.15	15	1
1:A:576:SER:O	1:A:602:THR:N	0.42	2.47	8	3
1:A:569:ALA:HB2	1:A:574:GLY:C	0.42	2.39	9	1
1:A:671:ARG:HB2	1:A:671:ARG:NH1	0.42	2.30	19	1
1:A:660:GLU:HG3	1:A:661:CYS:N	0.42	2.29	1	1
1:A:542:GLY:O	1:A:675:LEU:HG	0.42	2.14	10	2
1:A:633:ASP:HB2	1:A:637:SER:O	0.42	2.14	13	4
1:A:594:HIS:C	1:A:595:LYS:HD2	0.42	2.39	7	1
1:A:671:ARG:O	1:A:673:HIS:CE1	0.42	2.72	10	1
1:A:630:TRP:HB3	1:A:639:ASP:O	0.42	2.14	12	1
1:A:664:ASN:CG	1:A:667:LYS:HD3	0.42	2.40	15	1
1:A:658:TRP:O	1:A:661:CYS:HB2	0.42	2.15	16	1
1:A:583:TRP:CD1	1:A:584:LEU:N	0.42	2.87	4	1
1:A:671:ARG:HD2	1:A:672:TRP:N	0.42	2.29	1	1
1:A:577:ASP:OD2	1:A:600:LYS:HD2	0.42	2.14	17	3
1:A:634:ILE:O	1:A:636:LYS:CG	0.42	2.67	3	1
1:A:599:LYS:HG2	1:A:605:PRO:HB2	0.42	1.91	20	2
1:A:548:LEU:O	1:A:668:LYS:HA	0.42	2.14	8	2
1:A:581:LYS:HZ1	1:A:630:TRP:NE1	0.42	2.12	3	1
1:A:648:ILE:CD1	1:A:659:TYR:CG	0.42	3.03	6	4
1:A:599:LYS:HG3	1:A:605:PRO:HB2	0.42	1.92	17	1
1:A:570:MET:HG3	1:A:631:ASP:OD1	0.42	2.15	3	2
1:A:542:GLY:HA3	1:A:567:LEU:HD23	0.42	1.90	5	1
1:A:583:TRP:CG	1:A:593:LYS:HG3	0.42	2.50	11	1
1:A:664:ASN:ND2	1:A:667:LYS:HD3	0.42	2.30	15	1
1:A:599:LYS:CG	1:A:605:PRO:CB	0.42	2.98	17	1
1:A:663:LYS:CG	1:A:664:ASN:ND2	0.42	2.82	8	1
1:A:583:TRP:O	1:A:626:ASP:N	0.42	2.50	14	1
1:A:668:LYS:C	1:A:669:ILE:HG12	0.42	2.40	17	1
1:A:664:ASN:OD1	1:A:667:LYS:HD3	0.42	2.15	20	1
1:A:659:TYR:C	1:A:661:CYS:N	0.41	2.76	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:663:LYS:HG3	1:A:664:ASN:OD1	0.41	2.16	2	1
1:A:559:VAL:O	1:A:611:PHE:N	0.41	2.43	4	1
1:A:548:LEU:O	1:A:549:MET:HB2	0.41	2.15	6	5
1:A:594:HIS:O	1:A:595:LYS:HG3	0.41	2.15	6	5
1:A:558:ILE:CG2	1:A:611:PHE:O	0.41	2.68	11	1
1:A:662:LEU:O	1:A:665:LYS:HD2	0.41	2.14	12	2
1:A:585:LYS:HG3	1:A:624:SER:OG	0.41	2.15	16	1
1:A:668:LYS:O	1:A:668:LYS:HE3	0.41	2.15	16	1
1:A:567:LEU:HD13	1:A:578:PRO:HB3	0.41	1.92	4	1
1:A:595:LYS:O	1:A:595:LYS:HE3	0.41	2.16	14	1
1:A:554:GLN:OE1	1:A:554:GLN:HA	0.41	2.15	1	1
1:A:557:LEU:CG	1:A:558:ILE:N	0.41	2.83	16	6
1:A:659:TYR:O	1:A:662:LEU:HB2	0.41	2.16	1	3
1:A:660:GLU:CD	1:A:669:ILE:CG2	0.41	2.93	1	1
1:A:670:GLU:O	1:A:670:GLU:HG2	0.41	2.16	11	1
1:A:631:ASP:OD2	1:A:639:ASP:HB3	0.41	2.15	12	1
1:A:547:SER:HB3	1:A:670:GLU:HG2	0.41	1.92	14	1
1:A:622:LYS:HD3	1:A:622:LYS:N	0.41	2.30	18	1
1:A:569:ALA:HA	1:A:576:SER:OG	0.41	2.15	1	4
1:A:665:LYS:N	1:A:665:LYS:HD3	0.41	2.31	10	1
1:A:668:LYS:O	1:A:668:LYS:HE2	0.41	2.16	10	1
1:A:671:ARG:HD3	1:A:672:TRP:C	0.41	2.41	10	1
1:A:629:VAL:HG21	1:A:675:LEU:HD21	0.41	1.92	11	1
1:A:569:ALA:CA	1:A:575:TYR:O	0.41	2.68	12	1
1:A:549:MET:HG3	1:A:667:LYS:C	0.41	2.40	20	1
1:A:557:LEU:HD12	1:A:558:ILE:H	0.41	1.75	14	6
1:A:620:LEU:CB	1:A:662:LEU:HD21	0.41	2.45	6	1
1:A:665:LYS:N	1:A:665:LYS:CD	0.41	2.83	8	1
1:A:664:ASN:O	1:A:665:LYS:O	0.41	2.38	20	1
1:A:544:ILE:O	1:A:544:ILE:HG23	0.41	2.14	4	2
1:A:570:MET:HG3	1:A:631:ASP:CB	0.41	2.46	9	1
1:A:547:SER:HB2	1:A:668:LYS:CD	0.41	2.46	12	1
1:A:663:LYS:CG	1:A:664:ASN:N	0.41	2.84	16	1
1:A:668:LYS:HE3	1:A:670:GLU:OE1	0.41	2.15	3	2
1:A:657:HIS:ND1	1:A:671:ARG:CG	0.41	2.84	14	2
1:A:570:MET:SD	1:A:639:ASP:HB3	0.41	2.56	15	3
1:A:549:MET:HG3	1:A:668:LYS:HA	0.41	1.93	11	2
1:A:542:GLY:O	1:A:675:LEU:HB2	0.41	2.16	12	1
1:A:671:ARG:HD2	1:A:673:HIS:ND1	0.41	2.31	12	1
1:A:597:GLN:CD	1:A:599:LYS:HE3	0.41	2.41	14	1
1:A:585:LYS:HD3	1:A:624:SER:OG	0.41	2.15	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:664:ASN:CG	1:A:667:LYS:CB	0.41	2.94	18	1
1:A:570:MET:HE3	1:A:576:SER:OG	0.41	2.15	2	2
1:A:550:TYR:CD2	1:A:665:LYS:HG2	0.41	2.51	20	1
1:A:600:LYS:O	1:A:601:LYS:HB2	0.40	2.16	4	2
1:A:595:LYS:HD3	1:A:595:LYS:O	0.40	2.16	9	1
1:A:657:HIS:CE1	1:A:673:HIS:CE1	0.40	3.09	10	1
1:A:561:ILE:O	1:A:609:GLU:N	0.40	2.49	11	1
1:A:631:ASP:HB2	1:A:641:ILE:CD1	0.40	2.40	15	1
1:A:579:PHE:CE2	1:A:581:LYS:HE3	0.40	2.51	17	1
1:A:584:LEU:CD1	1:A:623:LYS:CB	0.40	2.99	17	1
1:A:549:MET:SD	1:A:668:LYS:HG2	0.40	2.55	12	1
1:A:585:LYS:O	1:A:623:LYS:HA	0.40	2.15	17	1
1:A:554:GLN:OE1	1:A:554:GLN:CA	0.40	2.68	1	1
1:A:569:ALA:HB1	1:A:575:TYR:CA	0.40	2.45	4	1
1:A:664:ASN:O	1:A:667:LYS:N	0.40	2.54	11	2
1:A:547:SER:CA	1:A:669:ILE:O	0.40	2.69	10	1
1:A:670:GLU:C	1:A:671:ARG:HG2	0.40	2.41	2	2
1:A:582:LEU:HD12	1:A:594:HIS:CB	0.40	2.47	5	1
1:A:645:GLN:O	1:A:646:LEU:HD23	0.40	2.17	5	1
1:A:617:HIS:CD2	1:A:665:LYS:CD	0.40	3.05	7	1
1:A:543:LYS:HG2	1:A:674:GLN:HA	0.40	1.94	9	1
1:A:637:SER:O	1:A:638:ASN:O	0.40	2.40	9	1
1:A:595:LYS:CD	1:A:595:LYS:C	0.40	2.95	16	1
1:A:581:LYS:CA	1:A:594:HIS:O	0.40	2.70	2	2
1:A:667:LYS:HD2	1:A:668:LYS:O	0.40	2.17	2	1
1:A:616:LYS:O	1:A:617:HIS:C	0.40	2.64	4	1
1:A:542:GLY:HA2	1:A:566:HIS:O	0.40	2.16	7	1
1:A:601:LYS:O	1:A:601:LYS:HG2	0.40	2.16	19	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	127/140 (91%)	108±2 (85±2%)	15±2 (12±2%)	4±2 (3±1%)	5	39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
All	All	2540/2800 (91%)	2162 (85%)	304 (12%)	74 (3%)	5 39

All 11 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	549	MET	17
1	A	658	TRP	16
1	A	665	LYS	11
1	A	562	ILE	9
1	A	601	LYS	6
1	A	666	ASP	5
1	A	592	ALA	3
1	A	638	ASN	3
1	A	600	LYS	2
1	A	597	GLN	1
1	A	623	LYS	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	112/123 (91%)	78±3 (69±3%)	34±3 (31±3%)	1 15
All	All	2240/2460 (91%)	1551 (69%)	689 (31%)	1 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	544	ILE	20
1	A	558	ILE	20
1	A	582	LEU	20
1	A	595	LYS	20
1	A	615	ILE	20
1	A	620	LEU	20
1	A	634	ILE	20
1	A	648	ILE	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	669	ILE	20
1	A	631	ASP	19
1	A	551	SER	18
1	A	553	GLN	17
1	A	662	LEU	17
1	A	566	HIS	16
1	A	581	LYS	16
1	A	668	LYS	16
1	A	618	SER	15
1	A	636	LYS	15
1	A	599	LYS	15
1	A	585	LYS	13
1	A	622	LYS	13
1	A	644	CYS	13
1	A	598	ILE	12
1	A	671	ARG	12
1	A	576	SER	12
1	A	549	MET	11
1	A	552	THR	11
1	A	663	LYS	11
1	A	665	LYS	11
1	A	616	LYS	11
1	A	654	ARG	11
1	A	604	ASN	10
1	A	667	LYS	10
1	A	601	LYS	10
1	A	624	SER	10
1	A	559	VAL	10
1	A	543	LYS	9
1	A	637	SER	9
1	A	674	GLN	8
1	A	623	LYS	8
1	A	609	GLU	8
1	A	610	GLU	8
1	A	633	ASP	8
1	A	670	GLU	8
1	A	573	ASN	7
1	A	606	GLU	7
1	A	600	LYS	7
1	A	666	ASP	6
1	A	554	GLN	6
1	A	593	LYS	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	638	ASN	6
1	A	608	ASN	5
1	A	547	SER	5
1	A	570	MET	4
1	A	677	ASN	4
1	A	614	ASP	4
1	A	656	LYS	3
1	A	563	ARG	3
1	A	597	GLN	3
1	A	676	GLN	2
1	A	564	CYS	2
1	A	660	GLU	2
1	A	562	ILE	1
1	A	673	HIS	1
1	A	639	ASP	1
1	A	571	ASP	1
1	A	628	SER	1
1	A	645	GLN	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 oligosaccharides 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 ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided