



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 27, 2016 – 12:27 AM BST

PDB ID : 2L26
Title : Rv0899 from Mycobacterium tuberculosis contains two separated domains
Authors : Shi, C.; Li, J.; Gao, Y.; Wu, K.; Huang, H.; Tian, C.
Deposited on : 2010-08-12

This is a Full wwPDB NMR Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.
We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org
A user guide is available at
<http://wwpdb.org/validation/2016/NMRValidationReportHelp>
with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

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

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)
NmrClust : Kelley et al. (1996)
MolProbity : 4.02b-467
Mogul : unknown
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)
RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
ShiftChecker : rb-20027457
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : rb-20027457

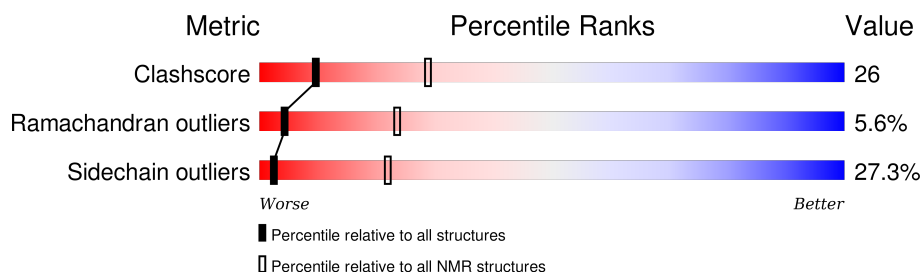
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

Percentile scores (ranging between 0-100) for global validation metrics of the entry are shown in the following graphic. The table shows the number of entries on which the scores are based.



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	114402	11133
Ramachandran outliers	111179	9975
Sidechain outliers	111093	9958

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	284	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 10 models. Model 9 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:77-A:195 (119)	0.57	9
2	A:208-A:223, A:237-A:265, A:270-A:326 (102)	0.91	4

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 2 clusters and 3 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 3, 4, 10
2	5, 8
Single-model clusters	6; 7; 9

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3659 atoms, of which 1836 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Uncharacterized protein Rv0899/MT0922.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	252	Total	C	H	N	O	S	0
			3659	1136	1836	320	363	4	

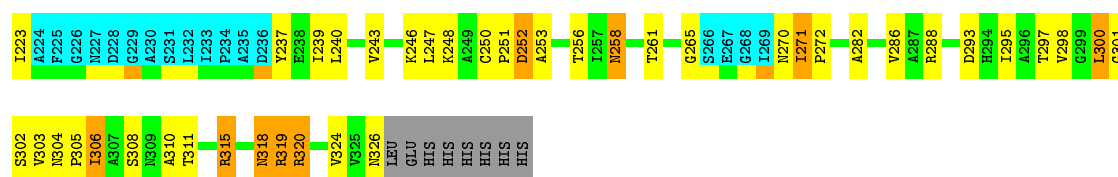
There are 32 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	51	MET	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	52	ARG	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	53	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	54	GLN	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	55	SER	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	56	VAL	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	57	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	58	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	59	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	60	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	61	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	62	VAL	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	63	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	64	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	65	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	66	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	67	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	68	PRO	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	69	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	70	SER	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	71	THR	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	72	ARG	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	73	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	74	ALA	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	327	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	328	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	329	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	330	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	331	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	332	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593
A	333	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593

Continued on next page...

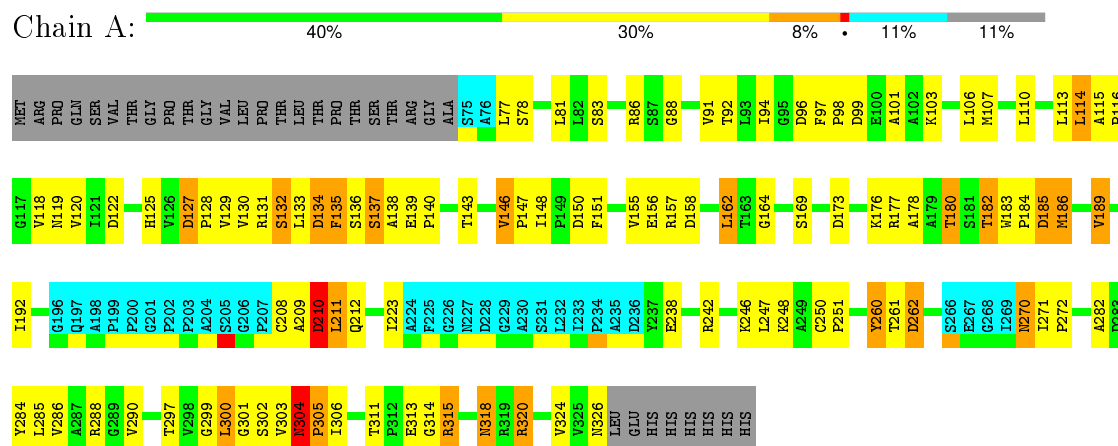
Continued from previous page...

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	334	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P65593



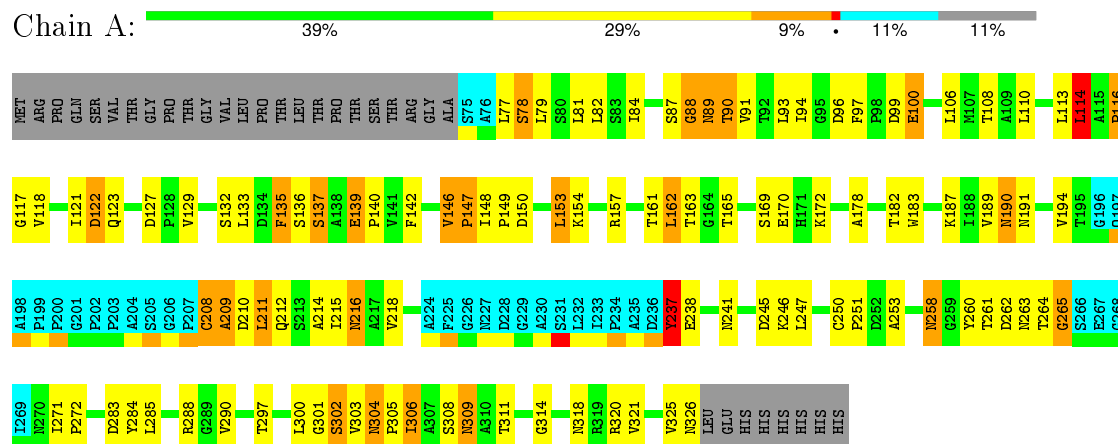
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Uncharacterized protein Rv0899/MT0922



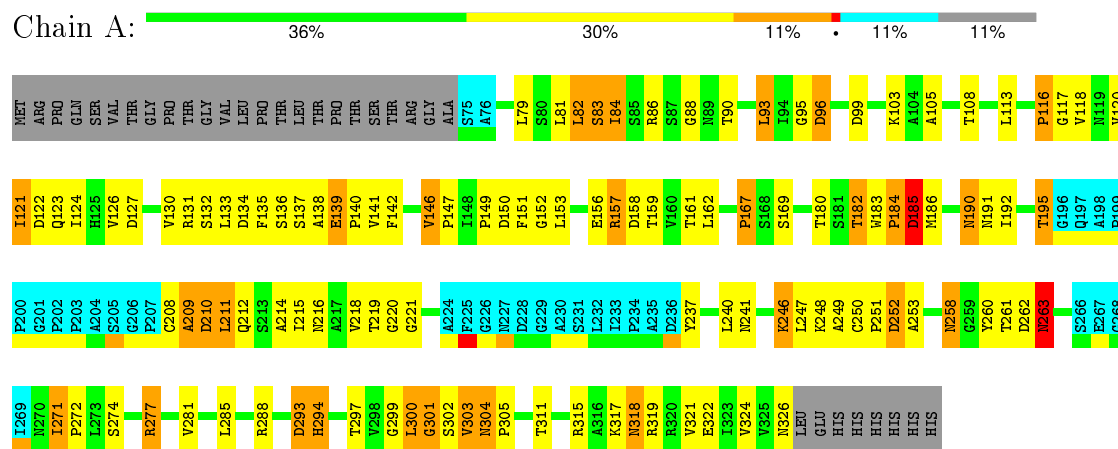
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Uncharacterized protein Rv0899/MT0922



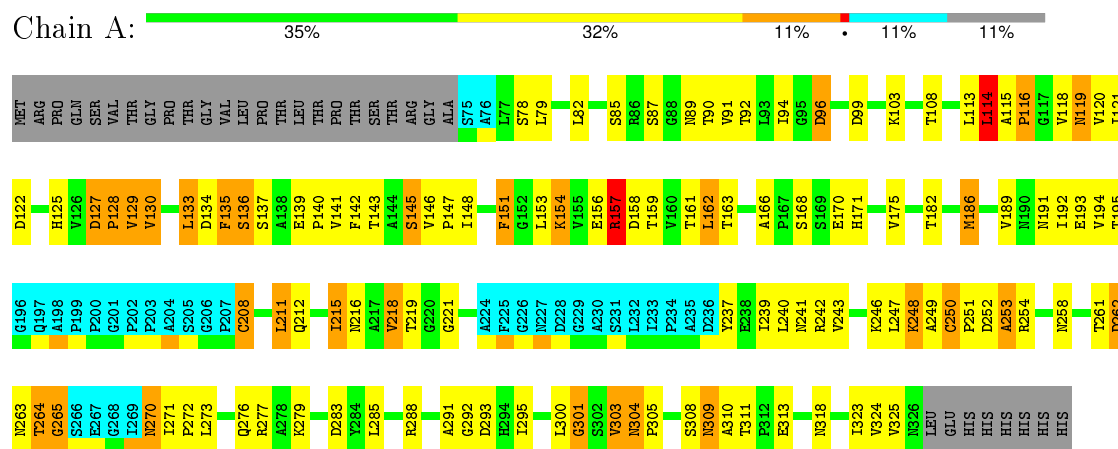
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Uncharacterized protein Rv0899/MT0922



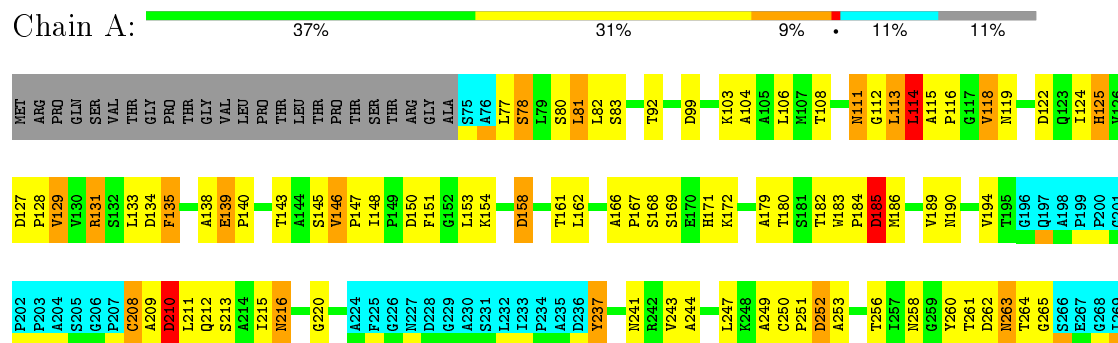
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Uncharacterized protein Rv0899/MT0922



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Uncharacterized protein Rv0899/MT0922

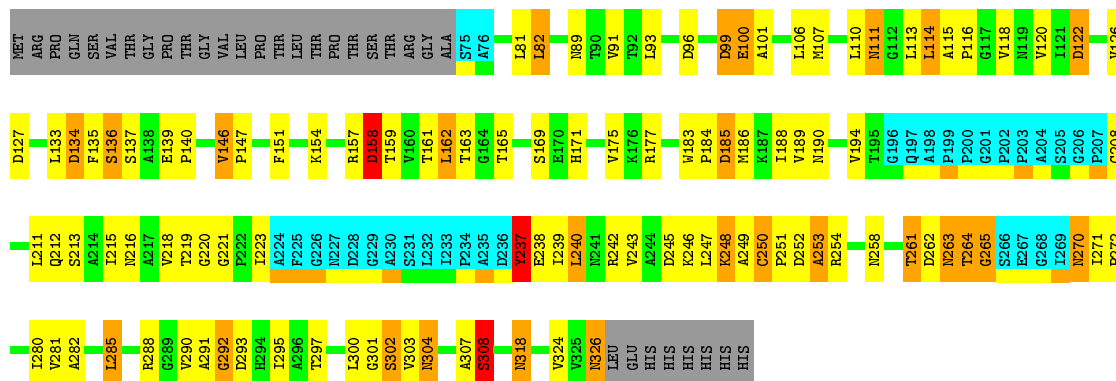




4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Uncharacterized protein Rv0899/MT0922

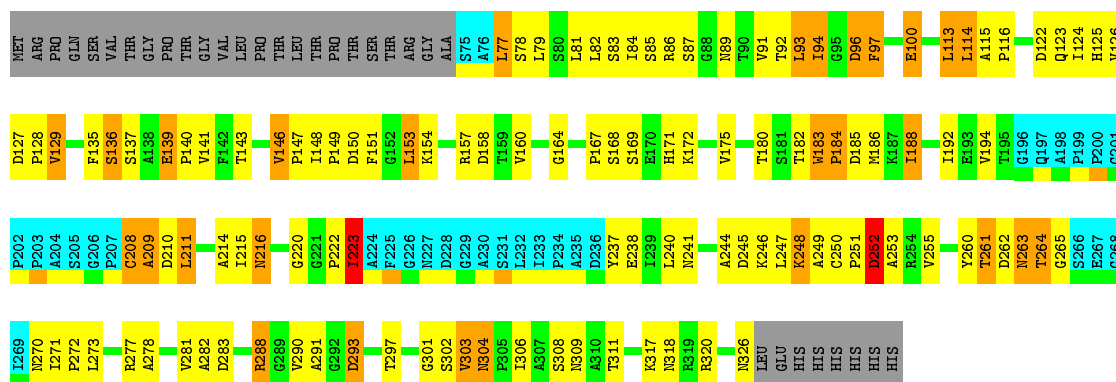
Chain A: 39% 28% 9% 11% 11%



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Uncharacterized protein Rv0899/MT0922

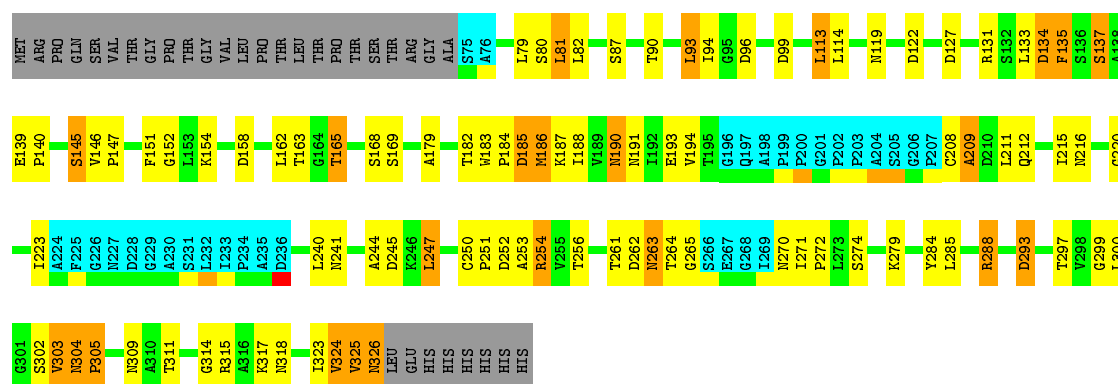
Chain A: 35% 32% 10% 11% 11%



4.2.9 Score per residue for model 9 (medoid)

- Molecule 1: Uncharacterized protein Rv0899/MT0922

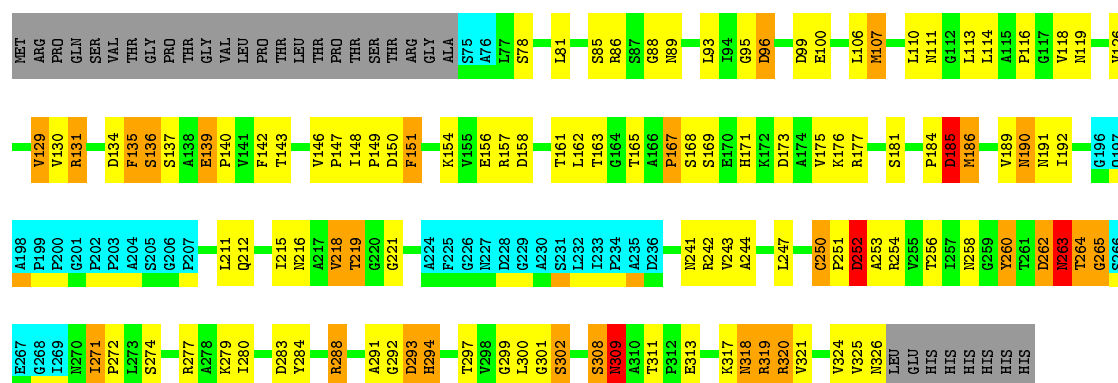
Chain A: 44% 26% 8% 11% 11%



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Uncharacterized protein Rv0899/MT0922

Chain A: 37% 30% 10% 11% 11%



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*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR NIH	refinement	2.25

No chemical shift data was provided. No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.

6 Model quality ⓘ

6.1 Standard geometry ⓘ

There are no covalent bond-length or bond-angle outliers.

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1626	1656	1656	85±8
All	All	16260	16560	16560	851

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 26.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:162:LEU:H	1:A:162:LEU:HD22	1.04	1.12	7	1
1:A:223:ILE:H	1:A:223:ILE:HD12	0.96	1.19	2	1
1:A:162:LEU:N	1:A:162:LEU:HD13	0.88	1.82	7	1
1:A:162:LEU:H	1:A:162:LEU:HD12	0.84	1.29	2	1
1:A:162:LEU:HD12	1:A:162:LEU:N	0.83	1.88	6	2
1:A:291:ALA:HB3	1:A:294:HIS:NE2	0.83	1.88	10	1
1:A:271:ILE:HD12	1:A:271:ILE:O	0.83	1.73	6	1
1:A:161:THR:C	1:A:162:LEU:HD13	0.82	1.95	7	1
1:A:162:LEU:HD22	1:A:162:LEU:N	0.81	1.91	7	1
1:A:282:ALA:O	1:A:286:VAL:HG23	0.80	1.76	1	3
1:A:291:ALA:HB3	1:A:294:HIS:CE1	0.78	2.14	10	1
1:A:188:ILE:N	1:A:188:ILE:HD12	0.76	1.95	8	1
1:A:89:ASN:O	1:A:118:VAL:HG23	0.75	1.81	7	1
1:A:164:GLY:O	1:A:192:ILE:HG23	0.75	1.82	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:188:ILE:HD12	1:A:188:ILE:H	0.75	1.39	8	1
1:A:171:HIS:O	1:A:175:VAL:HG23	0.74	1.83	8	4
1:A:146:VAL:N	1:A:147:PRO:CD	0.74	2.50	5	10
1:A:133:LEU:HD21	1:A:183:TRP:CE2	0.74	2.18	2	3
1:A:318:ASN:ND2	1:A:319:ARG:N	0.74	2.36	6	2
1:A:247:LEU:O	1:A:247:LEU:HD23	0.73	1.82	7	1
1:A:81:LEU:HD12	1:A:81:LEU:O	0.73	1.82	4	1
1:A:318:ASN:HD22	1:A:319:ARG:N	0.73	1.81	6	2
1:A:214:ALA:O	1:A:218:VAL:HG23	0.72	1.83	4	2
1:A:250:CYS:N	1:A:251:PRO:CD	0.72	2.53	8	10
1:A:237:TYR:CD1	1:A:238:GLU:N	0.71	2.58	7	1
1:A:115:ALA:HB1	1:A:116:PRO:CD	0.70	2.16	2	2
1:A:211:LEU:HD23	1:A:211:LEU:N	0.70	2.01	3	2
1:A:256:THR:HG22	1:A:258:ASN:ND2	0.70	2.02	6	1
1:A:105:ALA:HB1	1:A:135:PHE:CE1	0.70	2.21	4	1
1:A:251:PRO:O	1:A:253:ALA:N	0.69	2.25	10	5
1:A:208:CYS:SG	1:A:246:LYS:O	0.69	2.51	3	1
1:A:271:ILE:HD12	1:A:271:ILE:C	0.69	2.07	6	1
1:A:247:LEU:HD13	1:A:285:LEU:HD22	0.69	1.64	9	1
1:A:223:ILE:H	1:A:223:ILE:CD1	0.69	1.99	2	1
1:A:208:CYS:SG	1:A:250:CYS:N	0.69	2.65	3	1
1:A:260:TYR:CE1	1:A:261:THR:O	0.69	2.46	3	1
1:A:291:ALA:O	1:A:294:HIS:CE1	0.69	2.46	10	1
1:A:249:ALA:O	1:A:253:ALA:N	0.68	2.26	7	2
1:A:315:ARG:O	1:A:318:ASN:ND2	0.68	2.26	6	2
1:A:129:VAL:O	1:A:129:VAL:HG13	0.68	1.89	5	1
1:A:247:LEU:O	1:A:251:PRO:CD	0.68	2.42	10	1
1:A:246:LYS:O	1:A:250:CYS:SG	0.68	2.52	8	2
1:A:258:ASN:N	1:A:258:ASN:OD1	0.68	2.26	3	1
1:A:300:LEU:O	1:A:302:SER:N	0.68	2.27	3	2
1:A:97:PHE:CE2	1:A:132:SER:OG	0.68	2.47	2	2
1:A:261:THR:HG23	1:A:262:ASP:N	0.68	2.04	3	1
1:A:129:VAL:O	1:A:131:ARG:NE	0.68	2.27	6	1
1:A:166:ALA:O	1:A:194:VAL:HG12	0.68	1.89	5	1
1:A:270:ASN:ND2	1:A:315:ARG:NH1	0.68	2.42	1	1
1:A:115:ALA:HB1	1:A:116:PRO:HD2	0.68	1.66	2	3
1:A:209:ALA:O	1:A:211:LEU:N	0.68	2.27	1	3
1:A:317:LYS:O	1:A:320:ARG:NH1	0.67	2.28	10	1
1:A:184:PRO:O	1:A:186:MET:N	0.67	2.27	9	6
1:A:116:PRO:O	1:A:118:VAL:N	0.67	2.27	4	3
1:A:263:ASN:O	1:A:265:GLY:N	0.67	2.27	8	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:97:PHE:CD2	1:A:132:SER:OG	0.67	2.48	2	2
1:A:262:ASP:N	1:A:318:ASN:OD1	0.67	2.28	9	1
1:A:111:ASN:ND2	1:A:112:GLY:N	0.67	2.42	6	1
1:A:258:ASN:OD1	1:A:258:ASN:N	0.66	2.27	4	2
1:A:97:PHE:CE2	1:A:124:ILE:HG21	0.66	2.25	8	1
1:A:208:CYS:O	1:A:208:CYS:SG	0.66	2.53	4	2
1:A:142:PHE:O	1:A:146:VAL:HG23	0.66	1.91	5	3
1:A:141:VAL:HG21	1:A:182:THR:OG1	0.65	1.90	1	1
1:A:294:HIS:ND1	1:A:294:HIS:N	0.65	2.44	4	1
1:A:151:PHE:C	1:A:151:PHE:CD1	0.65	2.70	5	3
1:A:223:ILE:HD12	1:A:223:ILE:N	0.65	2.01	2	1
1:A:262:ASP:OD1	1:A:318:ASN:ND2	0.65	2.29	9	1
1:A:148:ILE:HG23	1:A:148:ILE:O	0.65	1.92	8	1
1:A:293:ASP:N	1:A:293:ASP:OD1	0.65	2.28	4	2
1:A:270:ASN:N	1:A:270:ASN:ND2	0.65	2.41	5	1
1:A:128:PRO:O	1:A:129:VAL:HG23	0.65	1.92	8	1
1:A:309:ASN:OD1	1:A:309:ASN:N	0.64	2.28	3	2
1:A:194:VAL:HG23	1:A:194:VAL:O	0.64	1.93	7	3
1:A:303:VAL:HG12	1:A:304:ASN:N	0.64	2.07	5	1
1:A:247:LEU:CD1	1:A:288:ARG:O	0.64	2.46	7	1
1:A:97:PHE:CD1	1:A:97:PHE:N	0.64	2.65	8	1
1:A:79:LEU:HD12	1:A:157:ARG:O	0.64	1.92	4	1
1:A:252:ASP:O	1:A:254:ARG:N	0.63	2.31	7	2
1:A:185:ASP:O	1:A:186:MET:CB	0.63	2.47	2	6
1:A:186:MET:SD	1:A:186:MET:O	0.63	2.57	9	1
1:A:114:LEU:C	1:A:114:LEU:HD23	0.63	2.14	9	2
1:A:304:ASN:N	1:A:305:PRO:CD	0.63	2.60	3	5
1:A:162:LEU:N	1:A:162:LEU:CD1	0.63	2.52	7	2
1:A:253:ALA:CB	1:A:326:ASN:O	0.63	2.47	8	4
1:A:115:ALA:O	1:A:116:PRO:O	0.63	2.16	1	2
1:A:264:THR:OG1	1:A:265:GLY:N	0.63	2.31	10	1
1:A:222:PRO:C	1:A:223:ILE:HG22	0.63	2.15	8	1
1:A:210:ASP:O	1:A:214:ALA:HB3	0.63	1.94	3	3
1:A:262:ASP:O	1:A:303:VAL:N	0.63	2.32	6	1
1:A:127:ASP:O	1:A:129:VAL:N	0.63	2.31	6	3
1:A:126:VAL:O	1:A:126:VAL:HG13	0.62	1.94	8	1
1:A:139:GLU:N	1:A:140:PRO:CD	0.62	2.62	10	7
1:A:212:GLN:CD	1:A:213:SER:N	0.62	2.52	7	1
1:A:301:GLY:O	1:A:302:SER:OG	0.62	2.12	1	1
1:A:79:LEU:N	1:A:79:LEU:HD12	0.62	2.10	8	1
1:A:271:ILE:CD1	1:A:299:GLY:O	0.62	2.47	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:151:PHE:CD1	1:A:151:PHE:C	0.62	2.72	2	1
1:A:211:LEU:CD2	1:A:211:LEU:H	0.62	2.08	3	1
1:A:190:ASN:H	1:A:190:ASN:HD22	0.61	1.39	4	1
1:A:211:LEU:O	1:A:215:ILE:HG22	0.61	1.95	3	2
1:A:237:TYR:CD1	1:A:237:TYR:N	0.61	2.67	6	1
1:A:309:ASN:HD21	1:A:315:ARG:CZ	0.61	2.09	9	1
1:A:161:THR:HG22	1:A:189:VAL:HB	0.61	1.72	10	1
1:A:162:LEU:CD1	1:A:162:LEU:N	0.61	2.61	6	1
1:A:252:ASP:OD1	1:A:253:ALA:N	0.61	2.34	10	1
1:A:251:PRO:C	1:A:253:ALA:N	0.61	2.53	4	5
1:A:133:LEU:HD21	1:A:183:TRP:CZ2	0.61	2.31	7	2
1:A:194:VAL:O	1:A:194:VAL:HG23	0.61	1.96	9	1
1:A:115:ALA:O	1:A:118:VAL:CG2	0.61	2.49	2	1
1:A:326:ASN:N	1:A:326:ASN:OD1	0.60	2.32	7	1
1:A:179:ALA:O	1:A:183:TRP:N	0.60	2.34	6	2
1:A:302:SER:O	1:A:303:VAL:O	0.60	2.19	9	1
1:A:93:LEU:HD23	1:A:94:ILE:N	0.60	2.11	9	3
1:A:135:PHE:N	1:A:135:PHE:CD1	0.60	2.68	2	2
1:A:252:ASP:OD1	1:A:252:ASP:N	0.60	2.32	8	1
1:A:318:ASN:ND2	1:A:318:ASN:O	0.60	2.34	5	1
1:A:270:ASN:ND2	1:A:315:ARG:HH11	0.60	1.93	1	1
1:A:99:ASP:OD1	1:A:99:ASP:N	0.60	2.35	6	1
1:A:115:ALA:O	1:A:118:VAL:CG1	0.60	2.49	6	2
1:A:188:ILE:N	1:A:188:ILE:CD1	0.60	2.62	8	1
1:A:210:ASP:O	1:A:214:ALA:CB	0.60	2.49	3	3
1:A:87:SER:O	1:A:90:THR:CB	0.60	2.50	3	1
1:A:183:TRP:O	1:A:185:ASP:N	0.59	2.32	8	2
1:A:264:THR:HG22	1:A:265:GLY:N	0.59	2.13	9	2
1:A:211:LEU:O	1:A:215:ILE:CG2	0.59	2.50	3	2
1:A:261:THR:O	1:A:318:ASN:ND2	0.59	2.35	7	1
1:A:113:LEU:O	1:A:113:LEU:HD13	0.59	1.97	6	1
1:A:300:LEU:HD12	1:A:300:LEU:H	0.59	1.57	1	1
1:A:208:CYS:O	1:A:209:ALA:O	0.59	2.21	3	4
1:A:142:PHE:O	1:A:146:VAL:N	0.59	2.36	10	1
1:A:251:PRO:O	1:A:253:ALA:O	0.58	2.21	10	4
1:A:211:LEU:N	1:A:211:LEU:CD2	0.58	2.65	3	1
1:A:87:SER:O	1:A:88:GLY:O	0.58	2.20	3	1
1:A:91:VAL:O	1:A:91:VAL:HG23	0.58	1.97	2	2
1:A:83:SER:O	1:A:84:ILE:HD13	0.58	1.98	4	1
1:A:318:ASN:ND2	1:A:318:ASN:C	0.58	2.55	6	2
1:A:135:PHE:O	1:A:136:SER:C	0.58	2.42	5	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:277:ARG:NH1	1:A:319:ARG:CZ	0.58	2.67	10	1
1:A:260:TYR:O	1:A:318:ASN:O	0.58	2.22	4	6
1:A:145:SER:OG	1:A:151:PHE:CE2	0.58	2.57	9	1
1:A:79:LEU:CD1	1:A:79:LEU:N	0.58	2.67	8	1
1:A:178:ALA:O	1:A:182:THR:OG1	0.58	2.22	2	3
1:A:249:ALA:O	1:A:252:ASP:OD1	0.58	2.22	8	1
1:A:87:SER:O	1:A:90:THR:OG1	0.58	2.20	3	1
1:A:88:GLY:O	1:A:90:THR:N	0.58	2.37	3	1
1:A:262:ASP:O	1:A:303:VAL:O	0.58	2.22	6	1
1:A:208:CYS:HA	1:A:211:LEU:HD12	0.57	1.75	1	1
1:A:219:THR:O	1:A:220:GLY:C	0.57	2.42	1	1
1:A:300:LEU:O	1:A:301:GLY:O	0.57	2.22	5	1
1:A:111:ASN:C	1:A:111:ASN:ND2	0.57	2.57	7	2
1:A:135:PHE:O	1:A:137:SER:N	0.57	2.38	5	3
1:A:116:PRO:C	1:A:118:VAL:N	0.57	2.57	4	4
1:A:243:VAL:HG12	1:A:247:LEU:HD13	0.57	1.76	10	1
1:A:211:LEU:CB	1:A:245:ASP:O	0.57	2.52	7	1
1:A:210:ASP:OD1	1:A:210:ASP:N	0.57	2.38	2	1
1:A:315:ARG:CZ	1:A:319:ARG:NH2	0.57	2.68	4	1
1:A:83:SER:C	1:A:84:ILE:HD13	0.57	2.18	4	1
1:A:253:ALA:HB1	1:A:326:ASN:C	0.56	2.19	3	6
1:A:264:THR:O	1:A:270:ASN:OD1	0.56	2.22	5	1
1:A:156:GLU:O	1:A:158:ASP:N	0.56	2.38	5	3
1:A:81:LEU:HD23	1:A:82:LEU:N	0.56	2.15	7	1
1:A:299:GLY:O	1:A:301:GLY:N	0.56	2.38	4	1
1:A:216:ASN:O	1:A:216:ASN:ND2	0.56	2.38	3	1
1:A:184:PRO:C	1:A:186:MET:N	0.56	2.58	9	7
1:A:237:TYR:O	1:A:241:ASN:OD1	0.56	2.23	3	1
1:A:253:ALA:CB	1:A:326:ASN:C	0.56	2.74	10	5
1:A:162:LEU:N	1:A:162:LEU:CD2	0.56	2.58	7	1
1:A:216:ASN:O	1:A:220:GLY:N	0.56	2.38	9	5
1:A:116:PRO:C	1:A:118:VAL:H	0.56	2.04	1	5
1:A:263:ASN:O	1:A:264:THR:OG1	0.56	2.22	10	1
1:A:97:PHE:CE2	1:A:124:ILE:CG2	0.56	2.89	8	1
1:A:209:ALA:C	1:A:211:LEU:N	0.56	2.59	2	3
1:A:270:ASN:OD1	1:A:271:ILE:N	0.56	2.38	8	1
1:A:326:ASN:ND2	1:A:326:ASN:O	0.56	2.38	9	1
1:A:208:CYS:O	1:A:209:ALA:C	0.56	2.44	8	2
1:A:81:LEU:CD2	1:A:81:LEU:H	0.56	2.13	9	1
1:A:140:PRO:O	1:A:143:THR:OG1	0.56	2.24	6	4
1:A:262:ASP:OD2	1:A:309:ASN:OD1	0.55	2.25	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:113:LEU:O	1:A:114:LEU:C	0.55	2.43	2	6
1:A:190:ASN:ND2	1:A:190:ASN:H	0.55	1.99	9	1
1:A:156:GLU:O	1:A:157:ARG:C	0.55	2.45	5	2
1:A:292:GLY:O	1:A:295:ILE:HG22	0.55	2.00	5	1
1:A:95:GLY:C	1:A:96:ASP:OD1	0.55	2.45	10	2
1:A:326:ASN:O	1:A:326:ASN:OD1	0.55	2.24	2	1
1:A:247:LEU:HD21	1:A:285:LEU:HD13	0.55	1.79	4	1
1:A:264:THR:O	1:A:265:GLY:C	0.55	2.45	10	2
1:A:115:ALA:O	1:A:118:VAL:HG12	0.55	2.02	6	2
1:A:193:GLU:O	1:A:193:GLU:CD	0.55	2.46	5	1
1:A:190:ASN:OD1	1:A:190:ASN:N	0.55	2.36	6	2
1:A:303:VAL:CG2	1:A:304:ASN:N	0.55	2.70	6	1
1:A:323:ILE:N	1:A:323:ILE:HD13	0.55	2.17	6	1
1:A:151:PHE:CD1	1:A:152:GLY:N	0.54	2.74	4	1
1:A:304:ASN:O	1:A:306:ILE:N	0.54	2.40	2	1
1:A:262:ASP:OD1	1:A:270:ASN:OD1	0.54	2.25	7	1
1:A:307:ALA:O	1:A:308:SER:O	0.54	2.24	7	1
1:A:99:ASP:OD1	1:A:100:GLU:N	0.54	2.40	3	1
1:A:148:ILE:O	1:A:148:ILE:HG22	0.54	2.02	5	1
1:A:135:PHE:HA	1:A:138:ALA:HB3	0.54	1.78	4	1
1:A:216:ASN:C	1:A:216:ASN:ND2	0.54	2.59	3	1
1:A:111:ASN:HD22	1:A:112:GLY:N	0.54	1.99	6	1
1:A:302:SER:O	1:A:303:VAL:C	0.54	2.46	4	1
1:A:88:GLY:N	1:A:150:ASP:OD1	0.54	2.40	2	1
1:A:309:ASN:N	1:A:309:ASN:HD22	0.54	2.00	5	1
1:A:262:ASP:O	1:A:262:ASP:OD1	0.54	2.24	8	1
1:A:78:SER:O	1:A:79:LEU:HD23	0.54	2.02	3	1
1:A:244:ALA:HB1	1:A:288:ARG:HG2	0.54	1.79	9	2
1:A:113:LEU:O	1:A:113:LEU:HD23	0.54	2.02	5	2
1:A:86:ARG:C	1:A:149:PRO:O	0.54	2.46	4	1
1:A:184:PRO:C	1:A:186:MET:H	0.54	2.07	9	4
1:A:139:GLU:O	1:A:143:THR:HG23	0.54	2.03	2	2
1:A:262:ASP:OD1	1:A:262:ASP:N	0.54	2.39	6	1
1:A:304:ASN:C	1:A:306:ILE:H	0.54	2.06	2	1
1:A:98:PRO:O	1:A:99:ASP:OD1	0.54	2.25	2	1
1:A:126:VAL:O	1:A:126:VAL:CG1	0.54	2.56	8	1
1:A:185:ASP:N	1:A:185:ASP:OD1	0.53	2.39	1	1
1:A:180:THR:O	1:A:185:ASP:CB	0.53	2.56	8	1
1:A:309:ASN:HD22	1:A:309:ASN:C	0.53	2.06	10	1
1:A:215:ILE:HG21	1:A:325:VAL:HG11	0.53	1.80	5	1
1:A:122:ASP:OD1	1:A:122:ASP:N	0.53	2.40	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:158:ASP:O	1:A:158:ASP:CG	0.53	2.46	1	1
1:A:128:PRO:O	1:A:129:VAL:CG2	0.53	2.56	8	1
1:A:150:ASP:OD2	1:A:165:THR:O	0.53	2.26	3	1
1:A:81:LEU:HD23	1:A:81:LEU:H	0.53	1.64	9	1
1:A:129:VAL:O	1:A:130:VAL:O	0.53	2.27	5	1
1:A:270:ASN:H	1:A:270:ASN:ND2	0.53	2.00	5	1
1:A:183:TRP:CB	1:A:184:PRO:CD	0.53	2.86	8	1
1:A:303:VAL:O	1:A:304:ASN:O	0.53	2.26	8	1
1:A:161:THR:HG23	1:A:189:VAL:HG23	0.53	1.81	5	1
1:A:308:SER:OG	1:A:309:ASN:N	0.53	2.40	10	1
1:A:301:GLY:O	1:A:302:SER:C	0.53	2.47	2	3
1:A:285:LEU:O	1:A:290:VAL:HG23	0.53	2.03	3	3
1:A:280:ILE:CG2	1:A:281:VAL:N	0.53	2.71	7	1
1:A:315:ARG:O	1:A:318:ASN:OD1	0.53	2.26	2	1
1:A:88:GLY:C	1:A:90:THR:H	0.53	2.07	3	2
1:A:260:TYR:CD1	1:A:260:TYR:N	0.53	2.76	10	1
1:A:218:VAL:HG21	1:A:246:LYS:NZ	0.53	2.19	1	1
1:A:300:LEU:N	1:A:300:LEU:HD12	0.53	2.18	5	1
1:A:305:PRO:O	1:A:306:ILE:C	0.53	2.48	1	1
1:A:133:LEU:HD21	1:A:183:TRP:CD1	0.53	2.39	4	1
1:A:208:CYS:SG	1:A:208:CYS:O	0.53	2.67	6	3
1:A:106:LEU:O	1:A:106:LEU:HD23	0.52	2.04	10	2
1:A:291:ALA:O	1:A:293:ASP:N	0.52	2.43	7	1
1:A:209:ALA:O	1:A:210:ASP:C	0.52	2.47	3	4
1:A:271:ILE:HG23	1:A:272:PRO:HD3	0.52	1.81	6	1
1:A:100:GLU:OE1	1:A:100:GLU:N	0.52	2.41	8	1
1:A:161:THR:CG2	1:A:191:ASN:HD22	0.52	2.17	3	1
1:A:162:LEU:HD22	1:A:189:VAL:O	0.52	2.04	7	1
1:A:84:ILE:HG22	1:A:153:LEU:O	0.52	2.03	8	1
1:A:277:ARG:O	1:A:281:VAL:HG23	0.52	2.04	4	1
1:A:301:GLY:O	1:A:302:SER:O	0.52	2.27	10	1
1:A:182:THR:HG22	1:A:183:TRP:N	0.52	2.20	4	2
1:A:262:ASP:OD1	1:A:309:ASN:OD1	0.52	2.27	9	1
1:A:85:SER:O	1:A:92:THR:O	0.52	2.27	5	1
1:A:119:ASN:OD1	1:A:119:ASN:N	0.52	2.43	5	1
1:A:113:LEU:O	1:A:114:LEU:CG	0.52	2.58	1	1
1:A:96:ASP:HB3	1:A:130:VAL:HG21	0.52	1.82	4	1
1:A:262:ASP:CG	1:A:309:ASN:OD1	0.52	2.49	9	1
1:A:241:ASN:OD1	1:A:241:ASN:C	0.52	2.48	5	1
1:A:219:THR:O	1:A:221:GLY:N	0.52	2.43	1	4
1:A:127:ASP:C	1:A:129:VAL:H	0.52	2.08	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:212:GLN:OE1	1:A:212:GLN:N	0.52	2.42	1	1
1:A:137:SER:O	1:A:137:SER:OG	0.51	2.25	5	1
1:A:211:LEU:HD23	1:A:211:LEU:H	0.51	1.59	3	1
1:A:184:PRO:O	1:A:185:ASP:C	0.51	2.48	7	5
1:A:252:ASP:OD1	1:A:252:ASP:C	0.51	2.48	6	2
1:A:277:ARG:NH1	1:A:319:ARG:NH2	0.51	2.59	10	1
1:A:262:ASP:CG	1:A:263:ASN:N	0.51	2.64	5	3
1:A:219:THR:C	1:A:221:GLY:H	0.51	2.08	5	4
1:A:291:ALA:C	1:A:293:ASP:H	0.51	2.09	10	5
1:A:113:LEU:O	1:A:114:LEU:CB	0.51	2.58	1	1
1:A:303:VAL:O	1:A:304:ASN:C	0.51	2.47	1	3
1:A:271:ILE:N	1:A:272:PRO:HD2	0.51	2.21	8	8
1:A:126:VAL:HG13	1:A:126:VAL:O	0.51	2.05	7	1
1:A:210:ASP:O	1:A:214:ALA:N	0.51	2.37	3	3
1:A:262:ASP:O	1:A:264:THR:N	0.51	2.44	9	1
1:A:183:TRP:C	1:A:185:ASP:H	0.51	2.09	4	2
1:A:262:ASP:CG	1:A:263:ASN:H	0.51	2.08	6	2
1:A:319:ARG:O	1:A:320:ARG:NE	0.51	2.44	1	1
1:A:263:ASN:CG	1:A:264:THR:N	0.50	2.63	9	1
1:A:146:VAL:N	1:A:147:PRO:HD2	0.50	2.22	8	8
1:A:251:PRO:C	1:A:253:ALA:H	0.50	2.07	4	4
1:A:141:VAL:O	1:A:145:SER:OG	0.50	2.28	5	1
1:A:262:ASP:C	1:A:262:ASP:OD1	0.50	2.50	4	1
1:A:262:ASP:CG	1:A:318:ASN:CG	0.50	2.70	9	1
1:A:211:LEU:HD13	1:A:326:ASN:O	0.50	2.06	4	1
1:A:88:GLY:C	1:A:90:THR:N	0.50	2.65	3	2
1:A:190:ASN:ND2	1:A:190:ASN:O	0.50	2.44	3	1
1:A:122:ASP:O	1:A:122:ASP:CG	0.50	2.49	8	1
1:A:295:ILE:O	1:A:295:ILE:HG23	0.50	2.07	6	1
1:A:261:THR:OG1	1:A:262:ASP:N	0.50	2.43	6	2
1:A:263:ASN:O	1:A:264:THR:C	0.50	2.50	5	1
1:A:107:MET:C	1:A:107:MET:SD	0.50	2.90	10	1
1:A:162:LEU:H	1:A:162:LEU:CD2	0.50	1.96	7	1
1:A:240:LEU:O	1:A:243:VAL:CG2	0.50	2.60	7	1
1:A:261:THR:C	1:A:318:ASN:OD1	0.50	2.51	9	1
1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:OD1	0.50	2.42	10	4
1:A:251:PRO:O	1:A:252:ASP:C	0.50	2.49	10	4
1:A:256:THR:O	1:A:324:VAL:HG22	0.50	2.07	6	3
1:A:104:ALA:O	1:A:108:THR:OG1	0.50	2.29	6	1
1:A:211:LEU:O	1:A:215:ILE:N	0.50	2.41	9	1
1:A:301:GLY:O	1:A:303:VAL:N	0.50	2.45	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:300:LEU:N	1:A:300:LEU:CD2	0.49	2.75	10	1
1:A:212:GLN:C	1:A:212:GLN:OE1	0.49	2.51	7	1
1:A:165:THR:HG22	1:A:193:GLU:O	0.49	2.08	9	1
1:A:299:GLY:O	1:A:300:LEU:C	0.49	2.49	9	2
1:A:208:CYS:O	1:A:211:LEU:HD23	0.49	2.07	8	1
1:A:215:ILE:O	1:A:218:VAL:HG12	0.49	2.07	10	1
1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:OD1	0.49	2.45	1	2
1:A:263:ASN:C	1:A:265:GLY:H	0.49	2.11	7	1
1:A:260:TYR:CE1	1:A:300:LEU:CD1	0.49	2.96	4	1
1:A:308:SER:O	1:A:309:ASN:C	0.49	2.49	5	1
1:A:114:LEU:CD2	1:A:114:LEU:C	0.49	2.81	5	1
1:A:115:ALA:CB	1:A:116:PRO:CD	0.49	2.87	2	1
1:A:152:GLY:N	1:A:163:THR:O	0.49	2.46	9	1
1:A:157:ARG:C	1:A:159:THR:H	0.49	2.10	7	1
1:A:215:ILE:CG2	1:A:216:ASN:N	0.49	2.75	10	5
1:A:291:ALA:C	1:A:293:ASP:N	0.49	2.64	7	3
1:A:190:ASN:O	1:A:190:ASN:CG	0.49	2.50	3	1
1:A:125:HIS:ND1	1:A:125:HIS:N	0.49	2.60	6	1
1:A:209:ALA:C	1:A:211:LEU:H	0.49	2.11	2	2
1:A:270:ASN:HD22	1:A:315:ARG:NH1	0.49	2.06	1	1
1:A:115:ALA:N	1:A:116:PRO:CD	0.49	2.76	1	1
1:A:323:ILE:N	1:A:323:ILE:CD1	0.49	2.76	6	1
1:A:87:SER:O	1:A:88:GLY:C	0.48	2.50	3	1
1:A:256:THR:HG22	1:A:258:ASN:HD21	0.48	1.68	6	1
1:A:271:ILE:N	1:A:272:PRO:CD	0.48	2.76	10	2
1:A:218:VAL:CG1	1:A:242:ARG:HH11	0.48	2.21	7	1
1:A:309:ASN:O	1:A:309:ASN:CG	0.48	2.52	6	1
1:A:92:THR:HG22	1:A:94:ILE:CD1	0.48	2.38	5	1
1:A:271:ILE:HD11	1:A:299:GLY:O	0.48	2.07	10	1
1:A:240:LEU:O	1:A:243:VAL:HG22	0.48	2.09	7	1
1:A:97:PHE:CD2	1:A:124:ILE:HG21	0.48	2.43	8	1
1:A:162:LEU:HD23	1:A:162:LEU:N	0.48	2.23	3	1
1:A:81:LEU:HD23	1:A:81:LEU:N	0.48	2.23	9	1
1:A:241:ASN:OD1	1:A:241:ASN:O	0.48	2.32	5	1
1:A:91:VAL:O	1:A:91:VAL:CG2	0.48	2.61	2	1
1:A:211:LEU:H	1:A:211:LEU:CD1	0.48	2.17	4	1
1:A:135:PHE:CD1	1:A:135:PHE:N	0.48	2.78	9	1
1:A:262:ASP:OD1	1:A:318:ASN:OD1	0.48	2.31	10	1
1:A:261:THR:O	1:A:318:ASN:CG	0.48	2.51	8	1
1:A:277:ARG:O	1:A:281:VAL:HG22	0.48	2.09	8	1
1:A:244:ALA:HB1	1:A:288:ARG:HG3	0.48	1.85	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:318:ASN:C	1:A:318:ASN:HD22	0.48	2.12	1	1
1:A:113:LEU:C	1:A:113:LEU:HD13	0.48	2.29	6	1
1:A:115:ALA:N	1:A:116:PRO:HD2	0.48	2.24	1	1
1:A:277:ARG:O	1:A:280:ILE:CG1	0.48	2.62	10	1
1:A:264:THR:O	1:A:265:GLY:O	0.48	2.32	7	1
1:A:256:THR:O	1:A:324:VAL:CG2	0.48	2.62	1	1
1:A:261:THR:HG23	1:A:262:ASP:O	0.48	2.09	3	1
1:A:248:LYS:C	1:A:250:CYS:H	0.47	2.11	7	2
1:A:211:LEU:HD12	1:A:326:ASN:O	0.47	2.09	8	1
1:A:246:LYS:NZ	1:A:246:LYS:CB	0.47	2.77	3	1
1:A:271:ILE:C	1:A:271:ILE:CD1	0.47	2.74	6	1
1:A:218:VAL:CG1	1:A:219:THR:N	0.47	2.76	5	1
1:A:133:LEU:O	1:A:135:PHE:CE2	0.47	2.67	7	2
1:A:103:LYS:NZ	1:A:122:ASP:OD2	0.47	2.47	5	1
1:A:120:VAL:O	1:A:120:VAL:HG13	0.47	2.09	7	1
1:A:153:LEU:HD23	1:A:154:LYS:N	0.47	2.23	1	1
1:A:86:ARG:CB	1:A:149:PRO:O	0.47	2.63	8	1
1:A:133:LEU:HD21	1:A:183:TRP:NE1	0.47	2.24	2	2
1:A:212:GLN:CD	1:A:212:GLN:H	0.47	2.10	1	1
1:A:151:PHE:CD1	1:A:151:PHE:O	0.47	2.67	2	1
1:A:302:SER:C	1:A:303:VAL:CG2	0.47	2.83	8	1
1:A:295:ILE:CG2	1:A:295:ILE:O	0.47	2.62	6	1
1:A:129:VAL:O	1:A:129:VAL:CG1	0.47	2.60	5	1
1:A:272:PRO:O	1:A:276:GLN:CB	0.47	2.62	5	1
1:A:240:LEU:O	1:A:288:ARG:NE	0.47	2.45	5	1
1:A:261:THR:C	1:A:318:ASN:ND2	0.47	2.68	7	1
1:A:110:LEU:O	1:A:113:LEU:N	0.47	2.42	3	2
1:A:211:LEU:H	1:A:211:LEU:HD12	0.47	1.68	4	1
1:A:309:ASN:HD21	1:A:315:ARG:NH2	0.47	2.06	9	1
1:A:270:ASN:N	1:A:270:ASN:HD22	0.47	2.06	5	1
1:A:300:LEU:N	1:A:300:LEU:HD22	0.47	2.25	10	1
1:A:252:ASP:OD2	1:A:326:ASN:CB	0.47	2.63	7	1
1:A:114:LEU:HD23	1:A:114:LEU:C	0.47	2.31	10	1
1:A:247:LEU:C	1:A:247:LEU:HD23	0.47	2.30	7	1
1:A:148:ILE:C	1:A:150:ASP:H	0.47	2.13	3	1
1:A:237:TYR:CD1	1:A:237:TYR:O	0.47	2.68	8	1
1:A:246:LYS:O	1:A:249:ALA:CB	0.46	2.62	5	2
1:A:161:THR:HG22	1:A:189:VAL:CB	0.46	2.41	10	1
1:A:129:VAL:HG13	1:A:130:VAL:N	0.46	2.25	10	1
1:A:285:LEU:O	1:A:290:VAL:CG2	0.46	2.64	7	2
1:A:148:ILE:HD11	1:A:171:HIS:CE1	0.46	2.45	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:256:THR:HB	1:A:324:VAL:HG23	0.46	1.88	9	1
1:A:133:LEU:CD2	1:A:183:TRP:CE2	0.46	2.96	2	1
1:A:304:ASN:N	1:A:305:PRO:HD2	0.46	2.22	3	1
1:A:161:THR:HG23	1:A:189:VAL:HB	0.46	1.87	6	2
1:A:81:LEU:HD12	1:A:81:LEU:H	0.46	1.69	6	1
1:A:115:ALA:HB3	1:A:116:PRO:HD3	0.46	1.88	1	1
1:A:302:SER:C	1:A:303:VAL:HG13	0.46	2.29	9	1
1:A:247:LEU:O	1:A:251:PRO:HD3	0.46	2.11	10	2
1:A:291:ALA:O	1:A:294:HIS:ND1	0.46	2.49	10	1
1:A:84:ILE:CG2	1:A:153:LEU:O	0.46	2.64	8	1
1:A:93:LEU:O	1:A:123:GLN:N	0.46	2.47	4	1
1:A:212:GLN:C	1:A:212:GLN:CD	0.46	2.71	3	1
1:A:81:LEU:H	1:A:81:LEU:CD1	0.46	2.23	6	1
1:A:250:CYS:SG	1:A:325:VAL:HG11	0.46	2.50	9	1
1:A:151:PHE:O	1:A:151:PHE:CD1	0.46	2.69	9	1
1:A:194:VAL:CG2	1:A:194:VAL:O	0.46	2.64	6	2
1:A:185:ASP:O	1:A:185:ASP:OD1	0.46	2.32	7	1
1:A:148:ILE:CG2	1:A:148:ILE:O	0.46	2.62	8	1
1:A:195:THR:O	1:A:195:THR:OG1	0.46	2.28	4	1
1:A:260:TYR:CD2	1:A:320:ARG:NH2	0.46	2.84	2	1
1:A:137:SER:O	1:A:138:ALA:HB3	0.45	2.11	2	1
1:A:115:ALA:O	1:A:118:VAL:O	0.45	2.34	1	1
1:A:145:SER:OG	1:A:151:PHE:CD2	0.45	2.63	9	1
1:A:127:ASP:HB3	1:A:130:VAL:HG13	0.45	1.87	5	1
1:A:134:ASP:OD1	1:A:134:ASP:N	0.45	2.50	2	2
1:A:114:LEU:C	1:A:114:LEU:CD2	0.45	2.85	9	1
1:A:162:LEU:HD23	1:A:163:THR:N	0.45	2.26	10	1
1:A:216:ASN:C	1:A:216:ASN:HD22	0.45	2.13	3	1
1:A:314:GLY:O	1:A:318:ASN:ND2	0.45	2.50	3	1
1:A:211:LEU:O	1:A:211:LEU:HD13	0.45	2.10	5	1
1:A:261:THR:CG2	1:A:270:ASN:OD1	0.45	2.65	2	1
1:A:100:GLU:OE1	1:A:100:GLU:C	0.45	2.54	7	1
1:A:215:ILE:HD11	1:A:243:VAL:HG13	0.45	1.89	1	1
1:A:271:ILE:HD13	1:A:301:GLY:HA2	0.45	1.89	6	1
1:A:211:LEU:HD23	1:A:211:LEU:O	0.45	2.11	1	1
1:A:84:ILE:HD11	1:A:153:LEU:HB2	0.45	1.87	3	1
1:A:301:GLY:O	1:A:302:SER:HB2	0.45	2.10	4	1
1:A:303:VAL:O	1:A:303:VAL:CG2	0.45	2.65	9	1
1:A:250:CYS:N	1:A:251:PRO:HD3	0.45	2.25	8	2
1:A:107:MET:O	1:A:111:ASN:N	0.45	2.50	10	1
1:A:309:ASN:ND2	1:A:309:ASN:N	0.45	2.65	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:315:ARG:CG	1:A:315:ARG:HH11	0.45	2.25	1	1
1:A:121:ILE:O	1:A:122:ASP:OD1	0.45	2.35	4	1
1:A:212:GLN:CD	1:A:212:GLN:O	0.45	2.55	3	1
1:A:247:LEU:CD2	1:A:285:LEU:HD13	0.45	2.42	4	1
1:A:89:ASN:O	1:A:118:VAL:HG13	0.44	2.12	5	1
1:A:277:ARG:HH11	1:A:319:ARG:NH2	0.44	2.10	10	1
1:A:88:GLY:N	1:A:149:PRO:O	0.44	2.50	10	1
1:A:158:ASP:C	1:A:185:ASP:OD2	0.44	2.56	7	1
1:A:240:LEU:O	1:A:240:LEU:HD23	0.44	2.12	4	1
1:A:194:VAL:O	1:A:194:VAL:CG2	0.44	2.66	9	1
1:A:113:LEU:CD1	1:A:113:LEU:C	0.44	2.85	6	1
1:A:243:VAL:CG1	1:A:285:LEU:HD13	0.44	2.43	5	1
1:A:222:PRO:O	1:A:223:ILE:CB	0.44	2.64	8	1
1:A:304:ASN:ND2	1:A:304:ASN:O	0.44	2.49	4	1
1:A:163:THR:OG1	1:A:191:ASN:CB	0.44	2.65	9	1
1:A:304:ASN:N	1:A:305:PRO:HD3	0.44	2.27	9	1
1:A:212:GLN:OE1	1:A:213:SER:N	0.44	2.50	7	1
1:A:82:LEU:HD23	1:A:84:ILE:HD11	0.44	1.88	4	1
1:A:260:TYR:CD1	1:A:260:TYR:C	0.44	2.86	3	1
1:A:250:CYS:N	1:A:251:PRO:HD2	0.44	2.27	10	4
1:A:139:GLU:N	1:A:140:PRO:HD2	0.44	2.27	9	5
1:A:81:LEU:CD2	1:A:81:LEU:N	0.44	2.81	9	1
1:A:263:ASN:C	1:A:263:ASN:ND2	0.44	2.71	10	1
1:A:129:VAL:CG1	1:A:130:VAL:N	0.44	2.81	10	1
1:A:146:VAL:C	1:A:148:ILE:H	0.44	2.15	3	1
1:A:219:THR:C	1:A:221:GLY:N	0.44	2.71	10	2
1:A:271:ILE:HG23	1:A:272:PRO:CD	0.44	2.43	6	1
1:A:300:LEU:O	1:A:301:GLY:C	0.44	2.56	5	1
1:A:248:LYS:O	1:A:250:CYS:SG	0.44	2.76	7	1
1:A:323:ILE:N	1:A:323:ILE:HD12	0.43	2.28	9	1
1:A:263:ASN:O	1:A:270:ASN:ND2	0.43	2.50	5	1
1:A:121:ILE:C	1:A:122:ASP:OD1	0.43	2.57	3	1
1:A:263:ASN:ND2	1:A:265:GLY:O	0.43	2.51	9	1
1:A:127:ASP:O	1:A:128:PRO:C	0.43	2.56	5	1
1:A:249:ALA:O	1:A:252:ASP:N	0.43	2.44	5	1
1:A:87:SER:N	1:A:90:THR:O	0.43	2.45	5	1
1:A:301:GLY:C	1:A:303:VAL:N	0.43	2.70	7	1
1:A:86:ARG:HG2	1:A:91:VAL:HG13	0.43	1.89	8	1
1:A:141:VAL:HG23	1:A:182:THR:OG1	0.43	2.13	4	1
1:A:260:TYR:OH	1:A:320:ARG:NE	0.43	2.48	6	1
1:A:300:LEU:N	1:A:300:LEU:CD1	0.43	2.81	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:158:ASP:O	1:A:186:MET:SD	0.43	2.76	5	1
1:A:173:ASP:OD1	1:A:173:ASP:C	0.43	2.57	10	2
1:A:99:ASP:C	1:A:101:ALA:N	0.43	2.72	7	2
1:A:313:GLU:CG	1:A:314:GLY:N	0.43	2.81	2	1
1:A:190:ASN:OD1	1:A:190:ASN:C	0.43	2.55	7	1
1:A:185:ASP:C	1:A:185:ASP:OD1	0.43	2.56	7	1
1:A:301:GLY:O	1:A:304:ASN:N	0.43	2.50	7	1
1:A:240:LEU:HD23	1:A:240:LEU:C	0.43	2.33	4	1
1:A:148:ILE:O	1:A:150:ASP:N	0.43	2.51	3	1
1:A:262:ASP:O	1:A:263:ASN:C	0.43	2.57	9	1
1:A:223:ILE:CD1	1:A:223:ILE:N	0.43	2.73	2	1
1:A:280:ILE:HG23	1:A:281:VAL:N	0.43	2.29	7	1
1:A:260:TYR:HB2	1:A:303:VAL:HG11	0.43	1.90	6	1
1:A:162:LEU:C	1:A:162:LEU:HD23	0.43	2.34	10	1
1:A:190:ASN:H	1:A:190:ASN:ND2	0.43	2.11	1	1
1:A:212:GLN:O	1:A:216:ASN:OD1	0.43	2.36	4	1
1:A:139:GLU:CB	1:A:140:PRO:CD	0.43	2.97	3	3
1:A:253:ALA:HB3	1:A:326:ASN:O	0.43	2.14	10	3
1:A:150:ASP:OD1	1:A:150:ASP:O	0.43	2.36	10	1
1:A:110:LEU:C	1:A:110:LEU:HD12	0.43	2.34	10	1
1:A:86:ARG:NH2	1:A:110:LEU:HD21	0.43	2.28	2	1
1:A:282:ALA:O	1:A:286:VAL:CG2	0.43	2.58	1	1
1:A:260:TYR:CD1	1:A:300:LEU:HD12	0.43	2.49	4	1
1:A:111:ASN:HD22	1:A:112:GLY:H	0.43	1.57	6	1
1:A:243:VAL:HG13	1:A:285:LEU:HD13	0.43	1.90	5	1
1:A:141:VAL:HG13	1:A:178:ALA:HB1	0.43	1.91	1	1
1:A:135:PHE:O	1:A:138:ALA:CB	0.43	2.67	6	1
1:A:261:THR:CG2	1:A:263:ASN:OD1	0.42	2.67	5	1
1:A:131:ARG:N	1:A:131:ARG:CD	0.42	2.82	10	1
1:A:148:ILE:HG21	1:A:165:THR:O	0.42	2.14	10	1
1:A:86:ARG:NH1	1:A:148:ILE:O	0.42	2.50	10	1
1:A:158:ASP:OD1	1:A:186:MET:SD	0.42	2.77	1	1
1:A:278:ALA:O	1:A:282:ALA:HB2	0.42	2.14	8	1
1:A:158:ASP:OD1	1:A:158:ASP:N	0.42	2.46	6	1
1:A:79:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HD12	0.42	1.91	9	1
1:A:176:LYS:O	1:A:180:THR:OG1	0.42	2.36	2	1
1:A:315:ARG:CG	1:A:315:ARG:NH1	0.42	2.79	1	1
1:A:135:PHE:C	1:A:137:SER:N	0.42	2.72	3	1
1:A:309:ASN:HD21	1:A:315:ARG:NE	0.42	2.11	9	1
1:A:141:VAL:CG2	1:A:182:THR:OG1	0.42	2.67	8	2
1:A:264:THR:CG2	1:A:265:GLY:N	0.42	2.83	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:193:GLU:CD	1:A:193:GLU:C	0.42	2.78	5	1
1:A:309:ASN:ND2	1:A:309:ASN:C	0.42	2.73	10	1
1:A:146:VAL:N	1:A:147:PRO:HD3	0.42	2.28	3	1
1:A:263:ASN:O	1:A:270:ASN:CG	0.42	2.58	5	1
1:A:148:ILE:C	1:A:150:ASP:N	0.42	2.73	3	1
1:A:293:ASP:O	1:A:293:ASP:OD1	0.42	2.38	6	1
1:A:133:LEU:O	1:A:135:PHE:CD2	0.42	2.72	5	1
1:A:304:ASN:C	1:A:306:ILE:N	0.42	2.72	2	1
1:A:300:LEU:HB3	1:A:303:VAL:HG23	0.42	1.91	4	1
1:A:169:SER:O	1:A:172:LYS:CG	0.42	2.68	8	1
1:A:137:SER:OG	1:A:182:THR:HG23	0.41	2.14	9	1
1:A:166:ALA:O	1:A:194:VAL:CG1	0.41	2.64	5	1
1:A:176:LYS:HG3	1:A:177:ARG:N	0.41	2.29	2	1
1:A:211:LEU:N	1:A:211:LEU:HD12	0.41	2.30	4	1
1:A:262:ASP:CG	1:A:318:ASN:ND2	0.41	2.73	9	1
1:A:188:ILE:HD12	1:A:188:ILE:N	0.41	2.31	9	1
1:A:153:LEU:HD13	1:A:162:LEU:CD2	0.41	2.44	5	1
1:A:115:ALA:H	1:A:116:PRO:HD2	0.41	1.74	1	1
1:A:247:LEU:HD23	1:A:290:VAL:HG21	0.41	1.91	8	1
1:A:303:VAL:CG1	1:A:304:ASN:N	0.41	2.75	5	1
1:A:111:ASN:O	1:A:111:ASN:OD1	0.41	2.38	10	1
1:A:147:PRO:O	1:A:148:ILE:HD13	0.41	2.16	2	1
1:A:96:ASP:OD1	1:A:96:ASP:O	0.41	2.39	7	1
1:A:270:ASN:CG	1:A:271:ILE:N	0.41	2.74	8	1
1:A:304:ASN:C	1:A:304:ASN:HD22	0.41	2.18	4	1
1:A:84:ILE:CG1	1:A:84:ILE:O	0.41	2.68	3	1
1:A:99:ASP:O	1:A:101:ALA:N	0.41	2.53	2	1
1:A:254:ARG:O	1:A:326:ASN:N	0.41	2.45	9	1
1:A:111:ASN:OD1	1:A:111:ASN:C	0.41	2.59	10	1
1:A:250:CYS:HA	1:A:253:ALA:HB2	0.41	1.93	7	1
1:A:295:ILE:O	1:A:295:ILE:CG2	0.41	2.69	1	1
1:A:128:PRO:C	1:A:129:VAL:HG23	0.41	2.36	8	1
1:A:79:LEU:HD13	1:A:133:LEU:CD1	0.41	2.45	4	1
1:A:77:LEU:C	1:A:78:SER:OG	0.41	2.59	6	1
1:A:78:SER:O	1:A:131:ARG:CB	0.41	2.69	2	1
1:A:113:LEU:HD21	1:A:118:VAL:HG11	0.41	1.92	5	1
1:A:299:GLY:O	1:A:300:LEU:O	0.41	2.39	2	1
1:A:212:GLN:HG3	1:A:213:SER:N	0.41	2.31	6	1
1:A:248:LYS:CD	1:A:248:LYS:N	0.41	2.84	5	1
1:A:153:LEU:HD12	1:A:154:LYS:N	0.41	2.30	5	1
1:A:191:ASN:HD22	1:A:191:ASN:N	0.41	2.13	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:129:VAL:O	1:A:131:ARG:CD	0.41	2.69	10	1
1:A:176:LYS:CG	1:A:177:ARG:N	0.41	2.84	10	1
1:A:248:LYS:CG	1:A:249:ALA:N	0.41	2.83	8	2
1:A:212:GLN:CG	1:A:213:SER:N	0.41	2.84	6	1
1:A:215:ILE:CD1	1:A:243:VAL:HG22	0.41	2.46	6	1
1:A:292:GLY:HA2	1:A:295:ILE:HD12	0.41	1.93	7	1
1:A:216:ASN:O	1:A:220:GLY:CA	0.41	2.69	6	1
1:A:134:ASP:OD1	1:A:134:ASP:C	0.40	2.60	9	1
1:A:162:LEU:HD12	1:A:189:VAL:O	0.40	2.16	2	1
1:A:315:ARG:HG3	1:A:315:ARG:NH1	0.40	2.31	1	1
1:A:262:ASP:OD1	1:A:263:ASN:N	0.40	2.55	4	1
1:A:162:LEU:HD12	1:A:162:LEU:H	0.40	1.76	1	1
1:A:135:PHE:O	1:A:139:GLU:N	0.40	2.54	4	1
1:A:150:ASP:N	1:A:150:ASP:OD1	0.40	2.53	3	1
1:A:115:ALA:O	1:A:118:VAL:HG22	0.40	2.15	2	1
1:A:118:VAL:O	1:A:118:VAL:HG13	0.40	2.16	7	1
1:A:180:THR:O	1:A:185:ASP:CA	0.40	2.70	8	1
1:A:314:GLY:O	1:A:318:ASN:N	0.40	2.49	9	1
1:A:281:VAL:HG23	1:A:282:ALA:N	0.40	2.31	7	1
1:A:114:LEU:O	1:A:115:ALA:HB2	0.40	2.16	1	1
1:A:185:ASP:C	1:A:187:LYS:H	0.40	2.20	9	1
1:A:88:GLY:H	1:A:150:ASP:CG	0.40	2.20	2	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	220/284 (77%)	185±5 (84±2%)	23±3 (10±2%)	12±4 (6±2%)	4	23
All	All	2200/2840 (77%)	1851 (84%)	225 (10%)	124 (6%)	4	23

All 47 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	185	ASP	6
1	A	114	LEU	6
1	A	129	VAL	5
1	A	157	ARG	5
1	A	263	ASN	5
1	A	136	SER	5
1	A	116	PRO	5
1	A	303	VAL	5
1	A	208	CYS	4
1	A	302	SER	4
1	A	209	ALA	4
1	A	301	GLY	4
1	A	252	ASP	4
1	A	265	GLY	4
1	A	223	ILE	4
1	A	264	THR	4
1	A	237	TYR	3
1	A	210	ASP	3
1	A	306	ILE	3
1	A	128	PRO	3
1	A	117	GLY	3
1	A	253	ALA	2
1	A	300	LEU	2
1	A	184	PRO	2
1	A	305	PRO	2
1	A	308	SER	2
1	A	292	GLY	2
1	A	167	PRO	2
1	A	310	ALA	2
1	A	304	ASN	2
1	A	220	GLY	1
1	A	149	PRO	1
1	A	262	ASP	1
1	A	183	TRP	1
1	A	115	ALA	1
1	A	89	ASN	1
1	A	309	ASN	1
1	A	113	LEU	1
1	A	99	ASP	1
1	A	158	ASP	1
1	A	186	MET	1
1	A	88	GLY	1
1	A	78	SER	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	130	VAL	1
1	A	147	PRO	1
1	A	77	LEU	1
1	A	137	SER	1

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	179/226 (79%)	130±5 (73±3%)	49±5 (27±3%)	2	22
All	All	1790/2260 (79%)	1302 (73%)	488 (27%)	2	22

All 141 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	311	THR	9
1	A	297	THR	8
1	A	288	ARG	8
1	A	134	ASP	8
1	A	154	LYS	8
1	A	82	LEU	8
1	A	96	ASP	8
1	A	304	ASN	7
1	A	169	SER	7
1	A	211	LEU	7
1	A	162	LEU	7
1	A	81	LEU	7
1	A	139	GLU	6
1	A	127	ASP	6
1	A	119	ASN	6
1	A	122	ASP	6
1	A	168	SER	6
1	A	247	LEU	6
1	A	99	ASP	6
1	A	258	ASN	6
1	A	135	PHE	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	318	ASN	6
1	A	146	VAL	6
1	A	137	SER	5
1	A	78	SER	5
1	A	153	LEU	5
1	A	131	ARG	5
1	A	151	PHE	5
1	A	93	LEU	5
1	A	190	ASN	5
1	A	248	LYS	5
1	A	293	ASP	5
1	A	308	SER	5
1	A	320	ARG	5
1	A	324	VAL	5
1	A	212	GLN	5
1	A	113	LEU	5
1	A	114	LEU	5
1	A	158	ASP	5
1	A	83	SER	5
1	A	241	ASN	5
1	A	270	ASN	4
1	A	283	ASP	4
1	A	240	LEU	4
1	A	125	HIS	4
1	A	284	TYR	4
1	A	274	SER	4
1	A	185	ASP	4
1	A	182	THR	4
1	A	237	TYR	4
1	A	317	LYS	4
1	A	325	VAL	4
1	A	261	THR	4
1	A	252	ASP	4
1	A	100	GLU	4
1	A	163	THR	4
1	A	89	ASN	4
1	A	271	ILE	4
1	A	107	MET	3
1	A	321	VAL	3
1	A	165	THR	3
1	A	309	ASN	3
1	A	94	ILE	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	145	SER	3
1	A	210	ASP	3
1	A	319	ARG	3
1	A	108	THR	3
1	A	216	ASN	3
1	A	103	LYS	3
1	A	77	LEU	3
1	A	242	ARG	3
1	A	250	CYS	3
1	A	106	LEU	3
1	A	279	LYS	3
1	A	150	ASP	3
1	A	133	LEU	3
1	A	124	ILE	3
1	A	92	THR	3
1	A	263	ASN	3
1	A	85	SER	3
1	A	300	LEU	3
1	A	120	VAL	3
1	A	239	ILE	3
1	A	245	ASP	3
1	A	180	THR	3
1	A	186	MET	3
1	A	192	ILE	3
1	A	111	ASN	2
1	A	123	GLN	2
1	A	87	SER	2
1	A	188	ILE	2
1	A	313	GLU	2
1	A	326	ASN	2
1	A	80	SER	2
1	A	323	ILE	2
1	A	218	VAL	2
1	A	264	THR	2
1	A	262	ASP	2
1	A	195	THR	2
1	A	126	VAL	2
1	A	277	ARG	2
1	A	315	ARG	2
1	A	170	GLU	2
1	A	90	THR	2
1	A	172	LYS	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	273	LEU	2
1	A	132	SER	2
1	A	121	ILE	2
1	A	260	TYR	2
1	A	254	ARG	2
1	A	91	VAL	2
1	A	215	ILE	2
1	A	159	THR	2
1	A	294	HIS	2
1	A	191	ASN	2
1	A	246	LYS	2
1	A	238	GLU	2
1	A	303	VAL	2
1	A	161	THR	1
1	A	156	GLU	1
1	A	194	VAL	1
1	A	187	LYS	1
1	A	157	ARG	1
1	A	255	VAL	1
1	A	306	ILE	1
1	A	97	PHE	1
1	A	223	ILE	1
1	A	130	VAL	1
1	A	177	ARG	1
1	A	322	GLU	1
1	A	160	VAL	1
1	A	189	VAL	1
1	A	219	THR	1
1	A	285	LEU	1
1	A	181	SER	1
1	A	118	VAL	1
1	A	155	VAL	1
1	A	171	HIS	1
1	A	84	ILE	1
1	A	208	CYS	1
1	A	298	VAL	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided