



wwPDB X-ray Structure Validation Summary Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 05:59 PM UTC

PDB ID : 1GAX / pdb_00001gax
Title : CRYSTAL STRUCTURE OF THERMUS THERMOPHILUS VALYL-
TRNA SYNTHETASE COMPLEXED WITH TRNA(VAL) AND VALYL-
ADENYLATE ANALOGUE
Authors : Fukai, S.; Nureki, O.; Sekine, S.; Shimada, A.; Tao, J.; Vassylyev, D.G.;
Yokoyama, S.; RIKEN Structural Genomics/Proteomics Initiative (RSGI)
Deposited on : 2000-06-23
Resolution : 2.90 Å(reported)

This is a wwPDB X-ray Structure Validation Summary 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/XrayValidationReportHelp>

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
Mogul	:	2022.3.0, CSD as543be (2022)
Xtriage (Phenix)	:	NOT EXECUTED
EDS	:	NOT EXECUTED
Buster-report	:	wwPDB partial adaption of 1.1.7 (2018)
Percentile statistics	:	20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.49

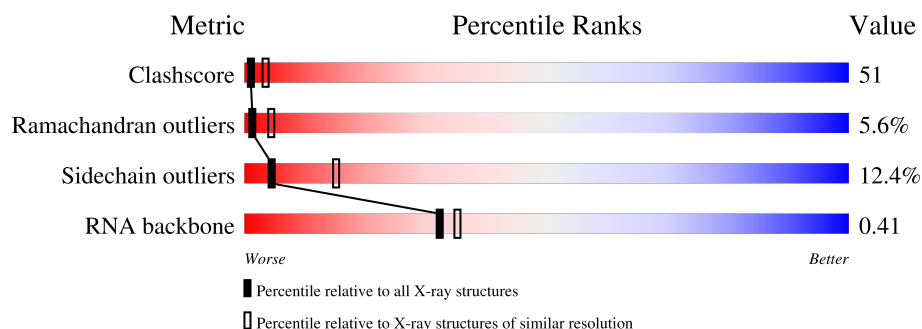
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 2.90 Å.

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)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
Clashscore	190562	2690 (2.90-2.90)
Ramachandran outliers	187476	2623 (2.90-2.90)
Sidechain outliers	187428	2625 (2.90-2.90)
RNA backbone	3983	1120 (3.10-2.70)

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the electron density. The red, orange, yellow and green segments of the lower bar indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria respectively. 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 $\leq 5\%$.

Note EDS was not executed.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	C	75	27% 39% 28% 7%
1	D	75	25% 43% 27% 5%
2	A	862	34% 52% 12% .
2	B	862	33% 52% 14% .

2 Entry composition

There are 5 unique types of molecules in this entry. The entry contains 17368 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

In the tables below, the ZeroOcc column contains the number of atoms modelled with zero occupancy, the AltConf column contains the number of residues with at least one atom in alternate conformation and the Trace column contains the number of residues modelled with at most 2 atoms.

- Molecule 1 is a RNA chain called TRNA(VAL).

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
1	C	75	Total	C	N	O	P	0	0	0
			1603	714	293	521	75			
1	D	75	Total	C	N	O	P	0	0	0
			1603	714	293	521	75			

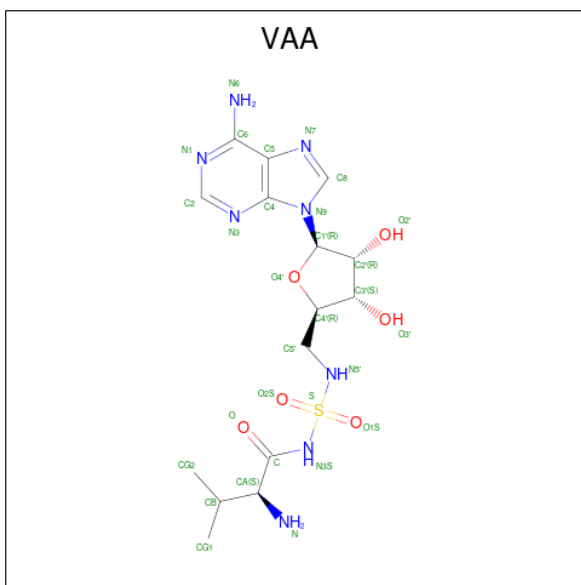
- Molecule 2 is a protein called VALYL-TRNA SYNTHETASE.

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf	Trace
2	A	862	Total	C	N	O	S	0	0	0
			6970	4449	1228	1266	27			
2	B	862	Total	C	N	O	S	0	0	0
			6970	4449	1228	1266	27			

- Molecule 3 is ZINC ION (CCD ID: ZN) (formula: Zn).

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	A	2	Total	Zn	0	0
			2	2		
3	B	2	Total	Zn	0	0
			2	2		

- Molecule 4 is N-[VALINYLYL]-N'-[ADENOSYL]-DIAMINOSUFONE (CCD ID: VAA) (formula: C₁₅H₂₄N₈O₆S).



Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
4	A	1	Total 30	C 15	N 8	O 6	S 1	0	0
4	B	1	Total 30	C 15	N 8	O 6	S 1	0	0

- Molecule 5 is water.

Mol	Chain	Residues	Atoms	ZeroOcc	AltConf
5	C	19	Total O 19 19	0	0
5	D	11	Total O 11 11	0	0
5	A	67	Total O 67 67	0	0
5	B	61	Total O 61 61	0	0

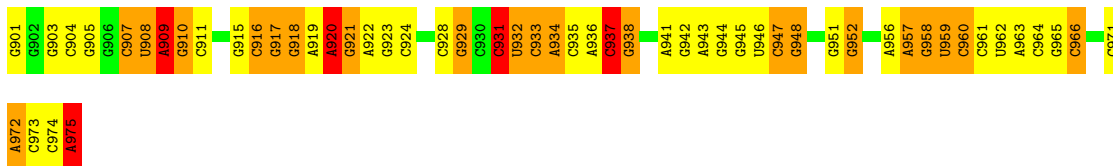
3 Residue-property plots [i](#)

These plots are drawn for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of the various outlier classes displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry. Residues are color-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 outlier are shown as a green connector. Residues present in the sample, but not in the model, are shown in grey.

Note EDS was not executed.

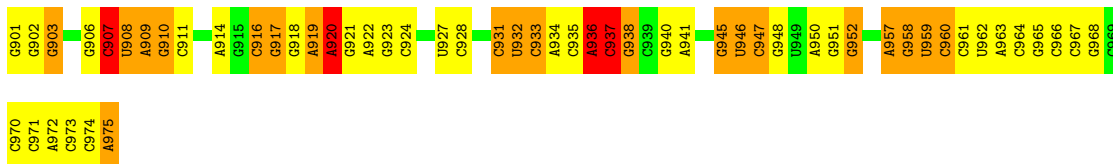
• Molecule 1: TRNA(VAL)

Chain C: 27% 39% 28% 7%



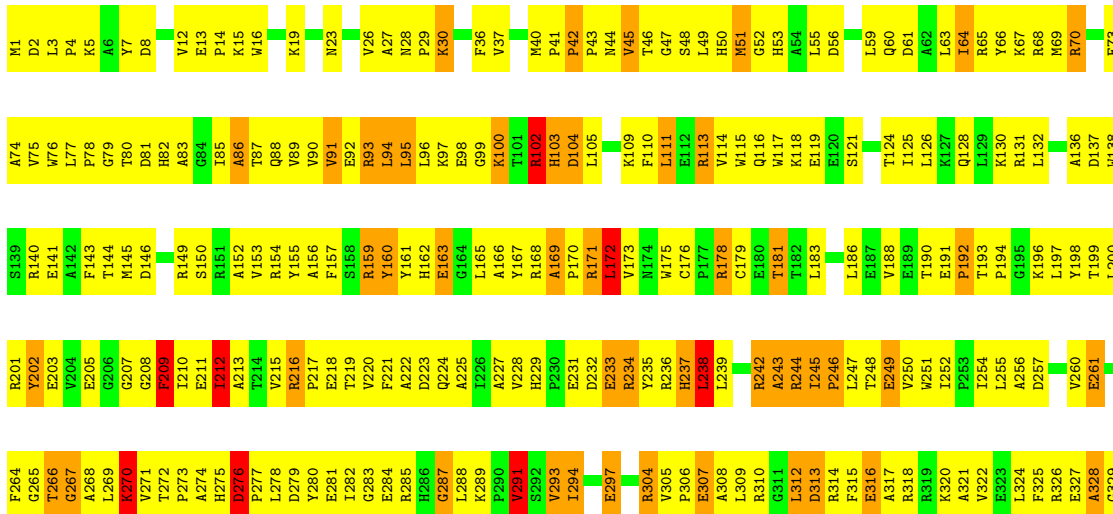
• Molecule 1: TRNA(VAL)

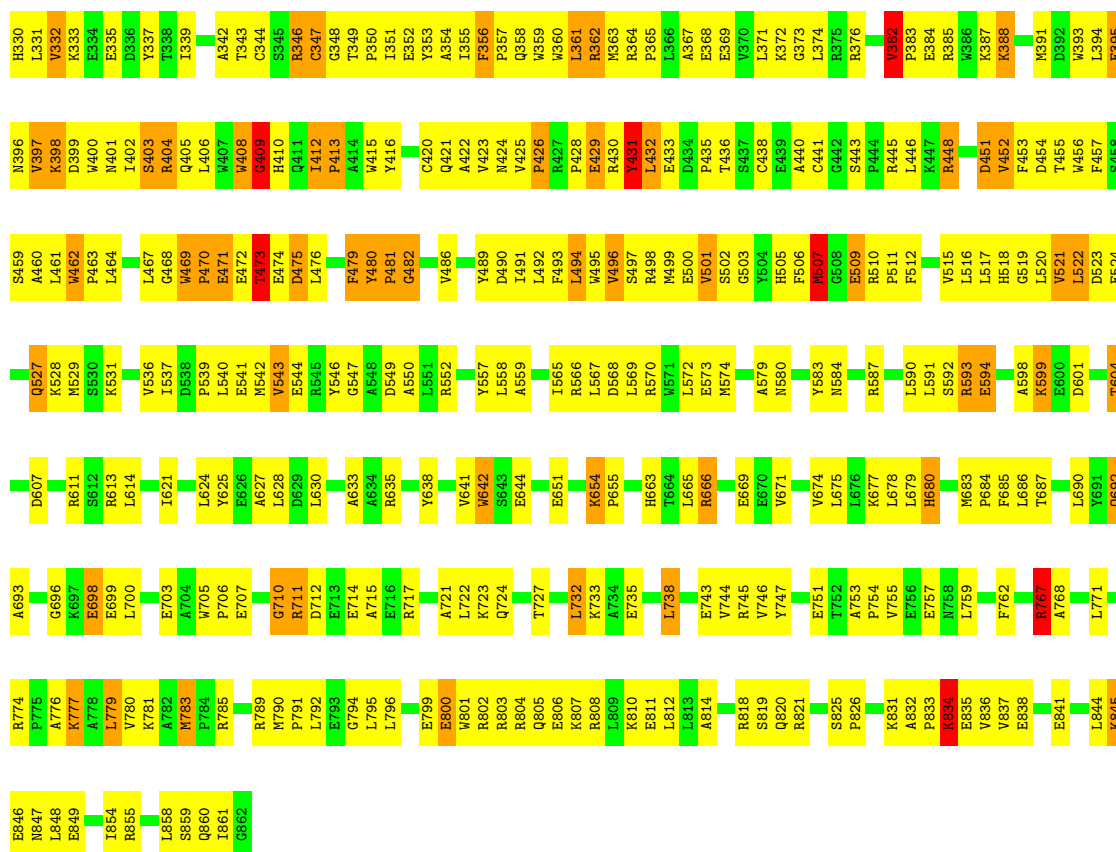
Chain D: 25% 43% 27% 5%



• Molecule 2: VALYL-TRNA SYNTHETASE

Chain A: 34% 52% 12%





L624	Y625	E526	A627	L628	A633	A634	R635	E639	L640	V641	E644	F645	C646	Y649	L650	E651	K654	P655	A656	L657	N661	A662	H663	T664	L665	R666	T667	L668	E669	E670	V671	L675	L676	K677	L678	L679	H680	P681	M682	M683	P684	F685	L686	T687	S688	E689	L690	Y691	Q692	A693	G696																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																						
K697	E698	E699	L700	W705	P706	E707	P708	G709	G710	R711	D712	E713	A714	A715	E716	R717	A721	L722	K723	Q724	A725	V726	T727	R730	A731	L732	K733	A734	E735	A736	G737	L738	P739	P740	V744	R745	E751	T752	A753	P754	V755	L759	R763	R767	L770	L771	P772	E773	R774	G775																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
K777	A778	L779	V780	K781	A782	M783	P784	R785	V786	R789	M790	P791	L792	L795	L796	D797	V798	E799	E800	W801	R802	R803	R804	Q805	E806	K807	R808	L809	K810	E811	L812	L813	E817	R818	S819	Q820	R821	K822	L823	A824	G827	F828	R829	E830	K831	A832	P833	K834	E835	V836	W837	E838	A839	E840	E841																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																		
A842	R843	L844	K845	E849	I854	R855	L858	S859	Q860	I861	G862	L837	D838	E839	F840	A841	D842	E843	V844	L845	T846	V847	L848	T849	G850	F851	L852	F853	V854	S855	G856	Y857	E858	E859	E860	P861	F862	D863	L864	P865	M866	D867	R868	F869	M870	R871	L872	S873	E874	K875	D876	L877	P878	M879	D880	F881	L882	V883	E884	L885	F886	D887	E888	L889	P890	M891	D892	F893	E894	E895	E896	E897	E898	E899	E900	E901	E902	E903	E904	E905	E906	E907	E908	E909	E910	E911	E912	E913	E914	E915	E916	E917	E918	E919	E920	E921	E922	E923	E924	E925	E926	E927	E928	E929	E930	E931	E932	E933	E934	E935	E936	E937	E938	E939	E940	E941	E942	E943	E944	E945	E946	E947	E948	E949	E950	E951	E952	E953	E954	E955	E956	E957	E958	E959	E960	E961	E962	E963	E964	E965	E966	E967	E968	E969	E970	E971	E972	E973	E974	E975	E976	E977	E978	E979	E980	E981	E982	E983	E984	E985	E986	E987	E988	E989	E990	E991	E992	E993	E994	E995	E996	E997	E998	E999	E1000	E1001	E1002	E1003	E1004	E1005	E1006	E1007	E1008	E1009	E1010	E1011	E1012	E1013	E1014	E1015	E1016	E1017	E1018	E1019	E1020	E1021	E1022	E1023	E1024	E1025	E1026	E1027	E1028	E1029	E1030	E1031	E1032	E1033	E1034	E1035	E1036	E1037	E1038	E1039	E1040	E1041	E1042	E1043	E1044	E1045	E1046	E1047	E1048	E1049	E1050	E1051	E1052	E1053	E1054	E1055	E1056	E1057	E1058	E1059	E1060	E1061	E1062	E1063	E1064	E1065	E1066	E1067	E1068	E1069	E1070	E1071	E1072	E1073	E1074	E1075	E1076	E1077	E1078	E1079	E1080	E1081	E1082	E1083	E1084	E1085	E1086	E1087	E1088	E1089	E1090	E1091	E1092	E1093	E1094	E1095	E1096	E1097	E1098	E1099	E1100	E1101	E1102	E1103	E1104	E1105	E1106	E1107	E1108	E1109	E1110	E1111	E1112	E1113	E1114	E1115	E1116	E1117	E1118	E1119	E1120	E1121	E1122	E1123	E1124	E1125	E1126	E1127	E1128	E1129	E1130	E1131	E1132	E1133	E1134	E1135	E1136	E1137	E1138	E1139	E1140	E1141	E1142	E1143	E1144	E1145	E1146	E1147	E1148	E1149	E1150	E1151	E1152	E1153	E1154	E1155	E1156	E1157	E1158	E1159	E1160	E1161	E1162	E1163	E1164	E1165	E1166	E1167	E1168	E1169	E1170	E1171	E1172	E1173	E1174	E1175	E1176	E1177	E1178	E1179	E1180	E1181	E1182	E1183	E1184	E1185	E1186	E1187	E1188	E1189	E1190	E1191	E1192	E1193	E1194	E1195	E1196	E1197	E1198	E1199	E1200	E1201	E1202	E1203	E1204	E1205	E1206	E1207	E1208	E1209	E1210	E1211	E1212	E1213	E1214	E1215	E1216	E1217	E1218	E1219	E1220	E1221	E1222	E1223	E1224	E1225	E1226	E1227	E1228	E1229	E1230	E1231	E1232	E1233	E1234	E1235	E1236	E1237	E1238	E1239	E1240	E1241	E1242	E1243	E1244	E1245	E1246	E1247	E1248	E1249	E1250	E1251	E1252	E1253	E1254	E1255	E1256	E1257	E1258	E1259	E1260	E1261	E1262	E1263	E1264	E1265	E1266	E1267	E1268	E1269	E1270	E1271	E1272	E1273	E1274	E1275	E1276	E1277	E1278	E1279	E1280	E1281	E1282	E1283	E1284	E1285	E1286	E1287	E1288	E1289	E1290	E1291	E1292	E1293	E1294	E1295	E1296	E1297	E1298	E1299	E1300	E1301	E1302	E1303	E1304	E1305	E1306	E1307	E1308	E1309	E1310	E1311	E1312	E1313	E1314	E1315	E1316	E1317	E1318	E1319	E1320	E1321	E1322	E1323	E1324	E1325	E1326	E1327	E1328	E1329	E1330	E1331	E1332	E1333	E1334	E1335	E1336	E1337	E1338	E1339	E1340	E1341	E1342	E1343	E1344	E1345	E1346	E1347	E1348	E1349	E1350	E1351	E1352	E1353	E1354	E1355	E1356	E1357	E1358	E1359	E1360	E1361	E1362	E1363	E1364	E1365	E1366	E1367	E1368	E1369	E1370	E1371	E1372	E1373	E1374	E1375	E1376	E1377	E1378	E1379	E1380	E1381	E1382	E1383	E1384	E1385	E1386	E1387	E1388	E1389	E1390	E1391	E1392	E1393	E1394	E1395	E1396	E1397	E1398	E1399	E1400	E1401	E1402	E1403	E1404	E1405	E1406	E1407	E1408	E1409	E1410	E1411	E1412	E1413	E1414	E1415	E1416	E1417	E1418	E1419	E1420	E1421	E1422	E1423	E1424	E1425	E1426	E1427	E1428	E1429	E1430	E1431	E1432	E1433	E1434	E1435	E1436	E1437	E1438	E1439	E1440	E1441	E1442	E1443	E1444	E1445	E1446	E1447	E1448	E1449	E1450	E1451	E1452	E1453	E1454	E1455	E1456	E1457	E1458	E1459	E1460	E1461	E1462	E1463	E1464	E1465	E1466	E1467	E1468	E1469	E1470	E1471	E1472	E1473	E1474	E1475	E1476	E1477	E1478	E1479	E1480	E1481	E1482	E1483	E1484	E1485	E1486	E1487	E1488	E1489	E1490	E1491	E1492	E1493	E1494	E1495	E1496	E1497	E1498	E1499	E1500	E1501	E1502	E1503	E1504	E1505	E1506	E1507	E1508	E1509	E1510	E1511	E1512	E1513	E1514	E1515	E1516	E1517	E1518	E1519	E1520	E1521	E1522	E1523	E1524	E1525	E1526	E1527	E1528	E1529	E1530	E1531	E1532	E1533	E1534	E1535	E1536	E1537	E1538	E1539	E1540	E1541	E1542	E1543	E1544	E1545	E1546	E1547	E1548	E1549	E1550	E1551	E1552	E1553	E1554	E1555	E1556	E1557	E1558	E1559	E1560	E1561	E1562	E1563	E1564	E1565	E1566	E1567	E1568	E1569	E1570	E1571	E1572	E1573	E1574	E1575	E1576	E1577	E1578	E1579	E1580	E1581	E1582	E1583	E1584	E1585	E1586	E1587	E1588	E1589	E1590	E1591	E1592	E1593	E1594	E1595	E1596	E1597	E1598	E1599	E1600	E1601	E1602	E1603	E1604	E1605	E1606	E1607	E1608	E1609	E1610	E1611	E1612	E1613	E1614	E1615	E1616	E1617	E1618	E1619	E1620	E1621	E1622	E1623	E1624	E1625	E1626	E1627	E1628	E1629	E1630	E1631	E1632	E1633	E1634	E1635	E1636	E1637	E1638	E1639	E1640	E1641	E1642	E1643	E1644	E1645	E1646	E1647	E1648	E1649	E1650	E1651	E1652	E1653	E1654	E1655	E1656	E1657	E1658	E1659	E1660	E1661	E1662	E1663	E1664	E1665	E1666	E1667	E1668	E1669	E1670	E1671	E1672	E1673	E1674	E1675	E1676	E1677	E1678	E1679	E1680	E1681	E1682	E1683	E1684	E1685	E1686	E1687	E1688	E1689	E1690	E1691	E1692	E1693	E1694	E1695	E1696	E1697	E1698	E1699	E1700	E1701	E1702	E1703	E1704	E1705	E1706	E1707	E1708	E1709	E1710	E1711	E1712	E1713	E1714	E1715	E1716	E1717	E1718	E1719	E1720	E1721	E1722	E1723	E1724	E1725	E1726	E1727	E1728	E1729	E1730	E1731	E1732	E1733	E1734	E1735	E1736	E1737	E1738	E1739	E1740	E1741	E1742	E1743	E1744	E1745	E1746	E1747	E1748	E1749	E1750	E1751	E1752	E1753	E1754	E1755	E1756	E1757	E1758	E1759	E1760	E1761	E1762	E1763	E1764	E1765	E1766	E1767	E1768	E1769	E1770	E1771	E1772	E1773	E1774	E1775	E1776	E1777	E1778	E1779	E1780	E1781	E1782	E1783	E1784	E1785	E1786	E1787	E1788	E1789	E1790	E1791	E1792	E1793	E1794	E1795	E1796	E1797	E1798	E1799	E1800	E1801	E1802	E1803	E1804	E1805	E1806	E1807	E1808	E1809	E1810	E1811	E1812	E1813	E1814	E1815	E1816	E1817	E1818	E1819	E1820	E1821	E1822	E1823	E1824	E1825	E1826	E1827	E1828	E1829	E1830	E1831	E1832	E1833	E1834	E1835	E1836	E1837	E1838	E1839	E1840	E1841	E1842	E1843	E1844	E1845	E1846	E1847	E1848	E1849	E1850	E1851	E1852	E1853	E1854	E1855	E1856	E1857	E1858	E1859	E1860	E1861	E1862	E1863	E1864	E1865	E1866	E1867	E1868	E1869	E1870	E1871	E1872	E1873	E1874	E1875	E1876	E1877	E1878	E1879	E1880	E1881	E1882	E1883	E1884	E1885	E1886	E1887	E1888	E1889	E1890	E1891	E1892	E1893	E1894	E1895	E1896	E1897	E1898	E1899	E1900	E1901	E1902	E1903	E1904	E1905	E1906	E1907	E1908	E1909	E1910	E1911	E1912	E1913	E1914	E1915	E1916	E1917	E1918	E1919	E1920	E1921	E1922	E1923	E1924	E1925	E1926	E1927	E1928	E1929	E1930	E1931	E1932	E1933	E1934	E1935	E1936	E1937	E1938	E1939	E1940	E1941	E1942	E1943	E1944	E1945	E1946	E1947	E1948	E1949	E1950	E1951	E1952	E1953	E1954	E1955	E1956	E1957	E1958	E1959	E1960	E1961	E1962	E1963	E1964	E1965	E1966	E1967	E1968	E1969	E1970	E1971	E1972	E1973	E1974	E1975	E1976	E1977	E1978	E1979	E1980	E1981	E1982	E1983	E1984	E1985	E1986	E1987	E1988	E1989	E1990	E1991	E1992	E1993	E1994	E1995	E1996	E1997	E1998	E1999	E2000	E2001	E2002	E2003	E2004	E2005	E2006	E2007	E2008	E2009	E2010	E2011	E2012	E2013	E2014	E2015	E2016	E2017	E2018	E2019	E2020	E2021	E2022	E2023	E2024	E2025	E2026	E2027	E2028	E2029	E2030	E2031	E2032	E2033	E2034	E2035	E2036	E2037	E2038	E2039	E2040	E2041	E2042	E2043	E2044	E2045	E2046	E2047	E2048	E2049	E2050	E2051	E2052	E2053	E2054	E2055	E2056	E2057	E2058	E2059	E2060	E2061	E2062	E2063	E2064	E2065	E2066

4 Data and refinement statistics

Xtriage (Phenix) and EDS were not executed - this section is therefore incomplete.

Property	Value	Source
Space group	P 42 21 2	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	411.81Å 411.81Å 81.97Å 90.00° 90.00° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	30.00 – 2.90	Depositor
% Data completeness (in resolution range)	96.5 (30.00-2.90)	Depositor
R_{merge}	0.10	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
Refinement program	CNS	Depositor
R, R_{free}	0.245 , 0.272	Depositor
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
Total number of atoms	17368	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	52.0	wwPDB-VP

5 Model quality [i](#)

5.1 Standard geometry [i](#)

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: VAA, ZN

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	C	0.38	0/1791	0.84	7/2789 (0.3%)
1	D	0.38	0/1791	0.83	5/2789 (0.2%)
2	A	0.52	0/7143	1.06	53/9678 (0.5%)
2	B	0.52	0/7143	1.07	52/9678 (0.5%)
All	All	0.49	0/17868	1.02	117/24934 (0.5%)

There are no bond length outliers.

The worst 5 of 117 bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	B	382	VAL	CA-C-N	-13.53	106.56	119.82
2	B	382	VAL	C-N-CA	-13.53	106.56	119.82
2	A	238	LEU	N-CA-C	-10.44	98.11	112.30
2	B	238	LEU	N-CA-C	-9.82	97.71	112.54
2	A	244	ARG	N-CA-C	-8.54	98.74	110.35

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

5.2 Too-close contacts [i](#)

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in the 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 within the asymmetric unit, whereas Symm-Clashes lists symmetry-related clashes.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	C	1603	0	816	66	0
1	D	1603	0	816	67	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
2	A	6970	0	6943	769	0
2	B	6970	0	6942	798	0
3	A	2	0	0	0	0
3	B	2	0	0	0	0
4	A	30	0	24	3	0
4	B	30	0	24	4	0
5	A	67	0	0	13	0
5	B	61	0	0	17	0
5	C	19	0	0	0	0
5	D	11	0	0	1	0
All	All	17368	0	15565	1659	0

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 51.

The worst 5 of 1659 close contacts within the same asymmetric unit are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:777:LYS:HE3	2:B:777:LYS:H	1.06	1.18
2:B:201:ARG:HE	2:B:211:GLU:HB3	1.02	1.17
2:A:102:ARG:HH21	2:A:104:ASP:HA	1.04	1.16
2:A:382:VAL:HG11	2:A:516:LEU:HD12	1.19	1.16
2:A:28:ASN:HD21	2:A:30:LYS:HG2	1.05	1.13

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles [i](#)

5.3.1 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 X-ray entries followed by that with respect to entries of similar resolution.

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
2	A	860/862 (100%)	676 (79%)	139 (16%)	45 (5%)	1 5
2	B	860/862 (100%)	652 (76%)	156 (18%)	52 (6%)	1 4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
All	All	1720/1724 (100%)	1328 (77%)	295 (17%)	97 (6%)	1 4

5 of 97 Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
2	A	94	LEU
2	A	103	HIS
2	A	104	ASP
2	A	234	ARG
2	A	312	LEU

5.3.2 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 X-ray entries followed by that with respect to entries of similar resolution.

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
2	A	724/724 (100%)	632 (87%)	92 (13%)	4 14
2	B	724/724 (100%)	636 (88%)	88 (12%)	5 16
All	All	1448/1448 (100%)	1268 (88%)	180 (12%)	4 15

5 of 180 residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
2	B	209	PHE
2	B	421	GLN
2	B	231	GLU
2	B	284	GLU
2	B	477	LYS

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. 5 of 36 such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
2	B	580	ASN
2	B	820	GLN
2	B	584	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
2	B	692	GLN
2	A	527	GLN

5.3.3 RNA [i](#)

Mol	Chain	Analysed	Backbone Outliers	Pucker Outliers
1	C	74/75 (98%)	28 (37%)	10 (13%)
1	D	74/75 (98%)	27 (36%)	7 (9%)
All	All	148/150 (98%)	55 (37%)	17 (11%)

5 of 55 RNA backbone outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	C	903	G
1	C	907	C
1	C	908	U
1	C	909	A
1	C	910	G

5 of 17 RNA pucker outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	D	947	C
1	D	959	U
1	C	947	C
1	C	957	A
1	C	959	U

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

Of 6 ligands modelled in this entry, 4 are monoatomic - leaving 2 for Mogul analysis.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds (or angles) for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds (or angles) that are observed in the model and the number of bonds (or angles) that are defined in the Chemical Component Dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
4	VAA	A	990	-	31,32,32	3.19	10 (32%)	42,48,48	1.65	7 (16%)
4	VAA	B	1990	-	31,32,32	3.04	10 (32%)	42,48,48	1.55	6 (14%)

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the Chemical Component Dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
4	VAA	A	990	-	-	5/23/39/39	0/3/3/3
4	VAA	B	1990	-	-	1/23/39/39	0/3/3/3

The worst 5 of 20 bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
4	A	990	VAA	C5'-N5'	-10.11	1.31	1.47
4	B	1990	VAA	C5'-N5'	-9.08	1.33	1.47
4	B	1990	VAA	S-N5'	7.28	1.69	1.61
4	A	990	VAA	O1S-S	6.74	1.52	1.43
4	A	990	VAA	S-N5'	6.58	1.69	1.61

The worst 5 of 13 bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
4	A	990	VAA	O2S-S-O1S	-6.33	111.01	120.34
4	B	1990	VAA	O2S-S-O1S	-5.51	112.23	120.34
4	B	1990	VAA	C1'-N9-C8	3.30	134.41	127.09
4	A	990	VAA	C1'-N9-C8	2.99	133.74	127.09
4	B	1990	VAA	O1S-S-N5'	-2.89	101.73	106.77

There are no chirality outliers.

5 of 6 torsion outliers are listed below:

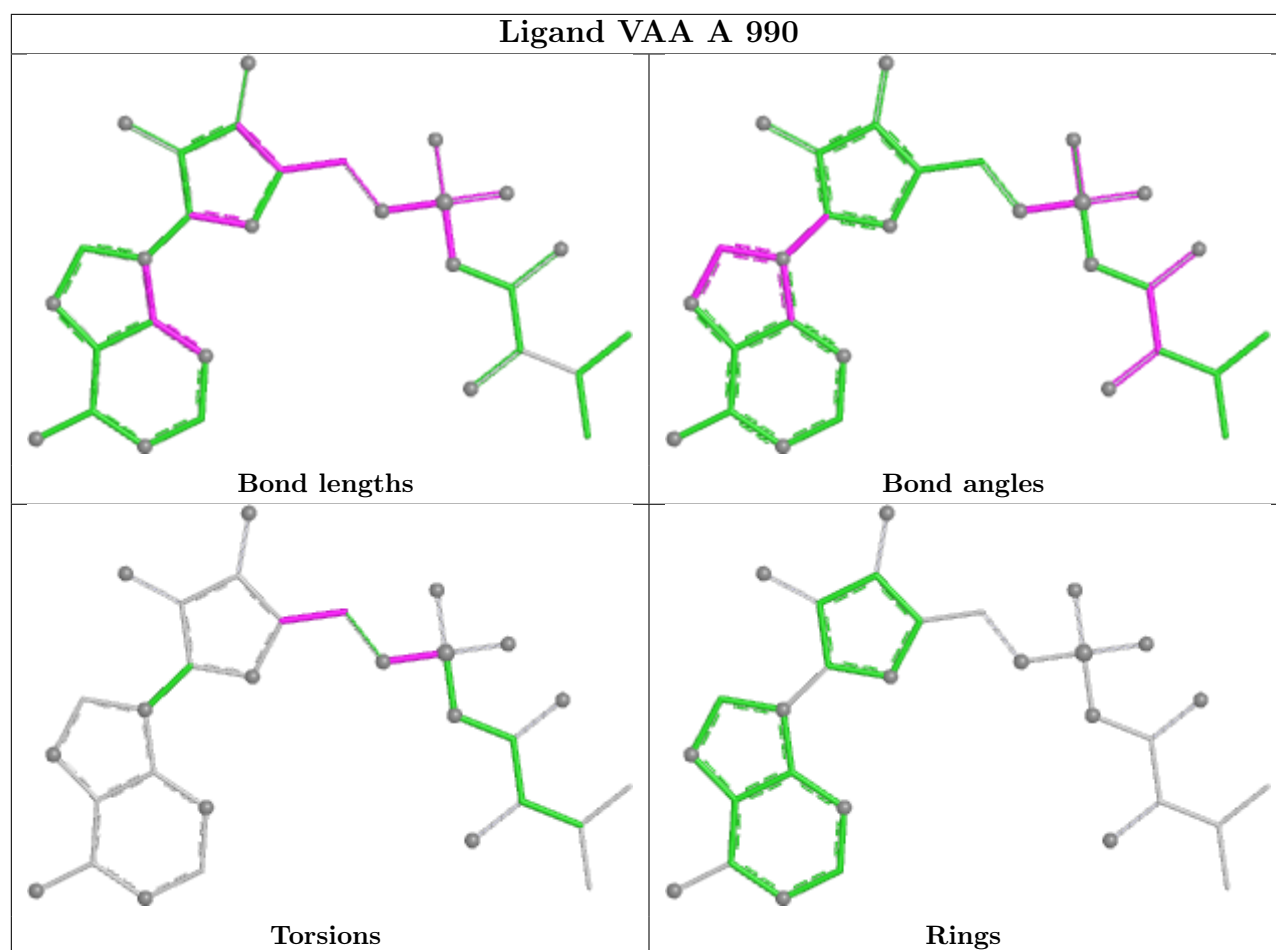
Mol	Chain	Res	Type	Atoms
4	A	990	VAA	C5'-N5'-S-O1S
4	A	990	VAA	O4'-C4'-C5'-N5'
4	A	990	VAA	C5'-N5'-S-O2S
4	A	990	VAA	C5'-N5'-S-N3S
4	B	1990	VAA	N3S-C-CA-CB

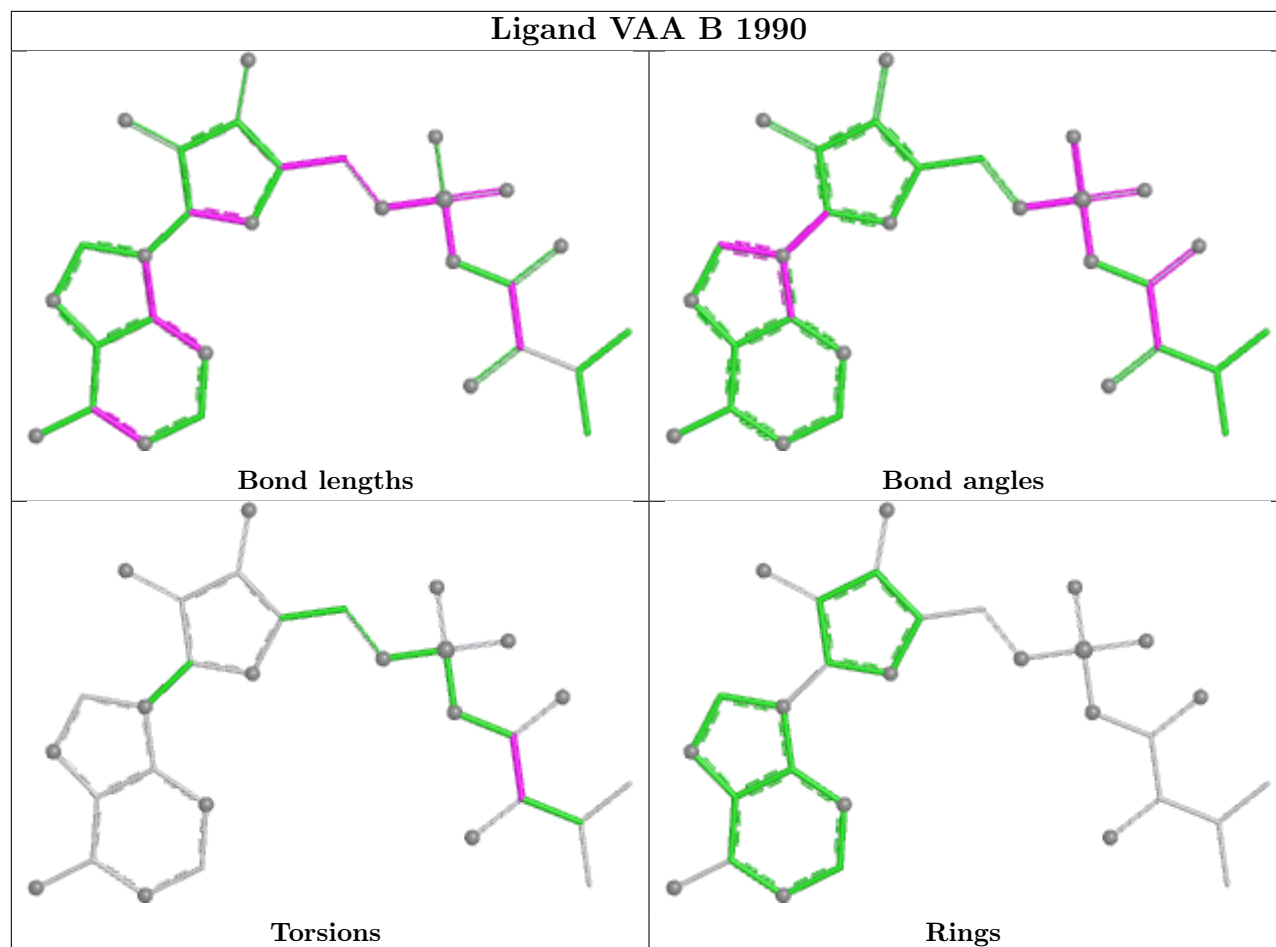
There are no ring outliers.

2 monomers are involved in 7 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
4	A	990	VAA	3	0
4	B	1990	VAA	4	0

The following is a two-dimensional graphical depiction of Mogul quality analysis of bond lengths, bond angles, torsion angles, and ring geometry for all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the validation Tables will also be included. For torsion angles, if less than 5% of the Mogul distribution of torsion angles is within 10 degrees of the torsion angle in question, then that torsion angle is considered an outlier. Any bond that is central to one or more torsion angles identified as an outlier by Mogul will be highlighted in the graph. For rings, the root-mean-square deviation (RMSD) between the ring in question and similar rings identified by Mogul is calculated over all ring torsion angles. If the average RMSD is greater than 60 degrees and the minimal RMSD between the ring in question and any Mogul-identified rings is also greater than 60 degrees, then that ring is considered an outlier. The outliers are highlighted in purple. The color gray indicates Mogul did not find sufficient equivalents in the CSD to analyse the geometry.





5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data [i](#)

6.1 Protein, DNA and RNA chains [i](#)

EDS was not executed - this section is therefore empty.

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

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.3 Carbohydrates [i](#)

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.4 Ligands [i](#)

EDS was not executed - this section is therefore empty.

6.5 Other polymers [i](#)

EDS was not executed - this section is therefore empty.