



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 25, 2026 – 02:13 PM UTC

PDB ID : 2KSV / pdb_00002ksv
Title : The NMR structure of protein-glutaminase from Chryseobacterium proteolyticum
Authors : Kumeta, H.; Miwa, N.; Ogura, K.; Kai, Y.; Mizukoshi, T.; Shimba, N.; Suzuki, E.; Inagaki, F.
Deposited on : 2010-01-14

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

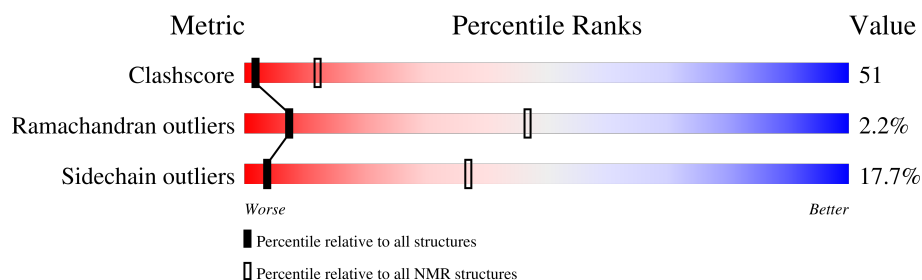
1 Overall quality at a glance

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	185	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 6 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:136-A:207, A:212-A:318 (179)	0.41	6

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

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

The models can be grouped into 4 clusters. No single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2717 atoms, of which 1329 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Protein-glutaminase.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	185	Total	C	H	N	O	S	0
			2717	865	1329	236	274	13	

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: Protein-glutaminase

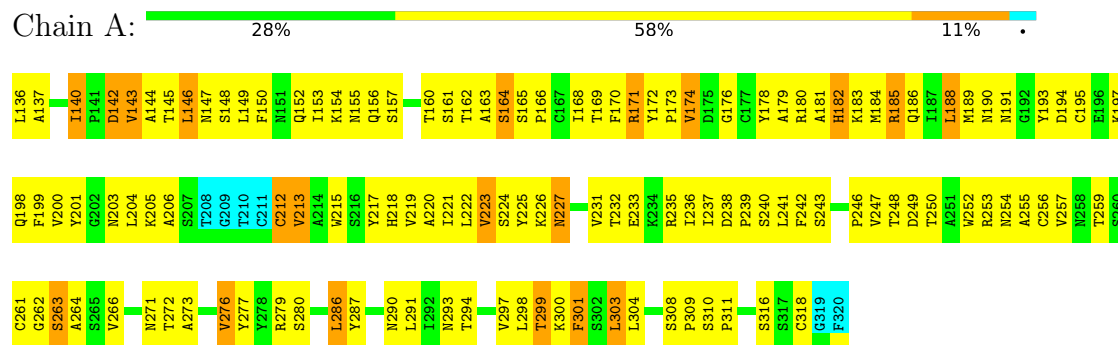


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

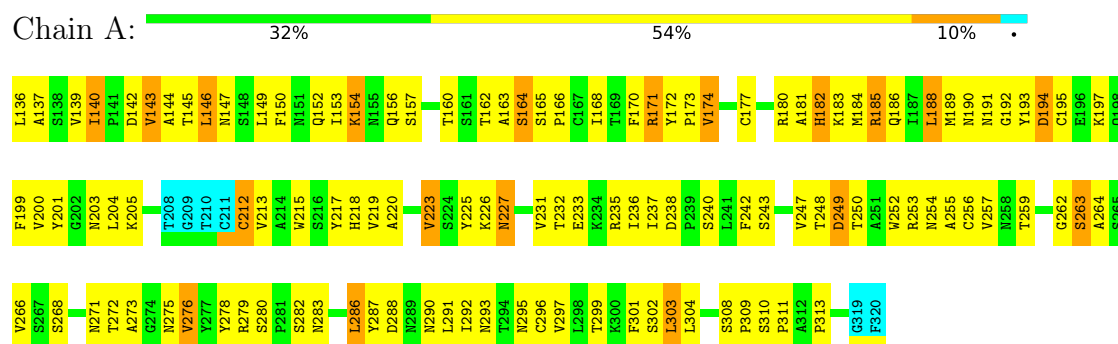
4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: Protein-glutaminase



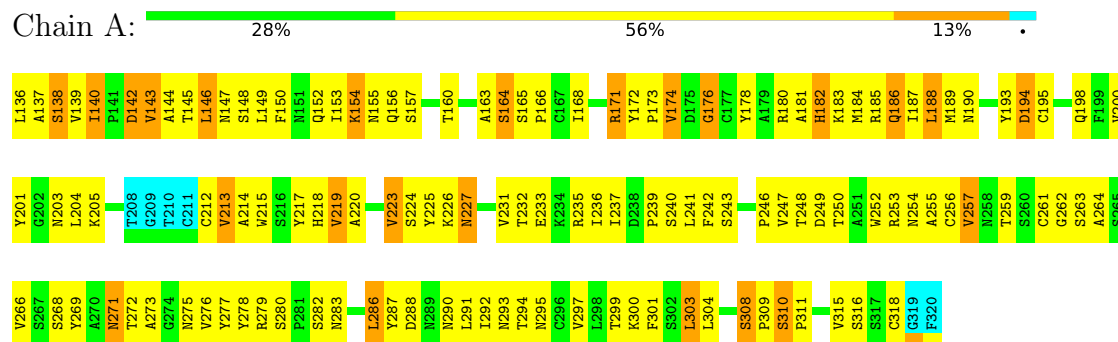
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Protein-glutaminase



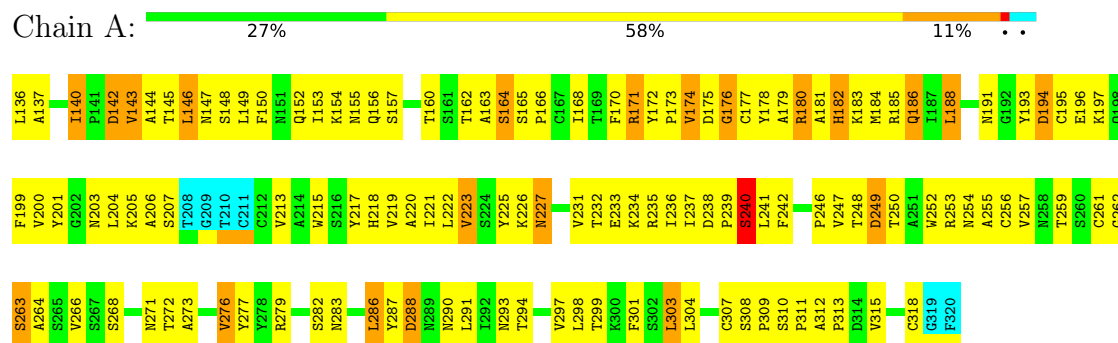
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Protein-glutaminase



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Protein-glutaminase



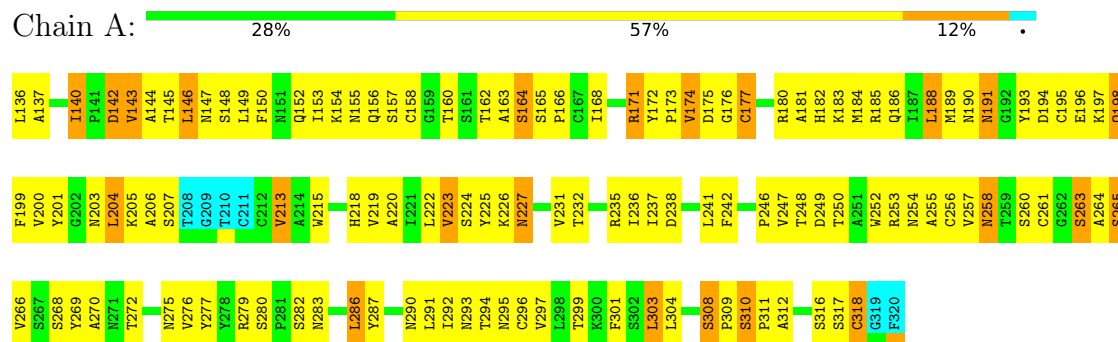
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Protein-glutaminase



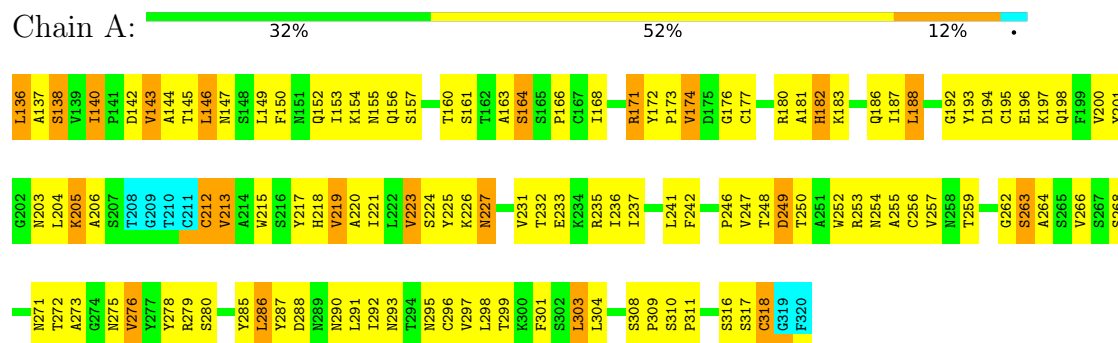
4.2.6 Score per residue for model 6 (medoid)

- Molecule 1: Protein-glutaminase



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Protein-glutaminase



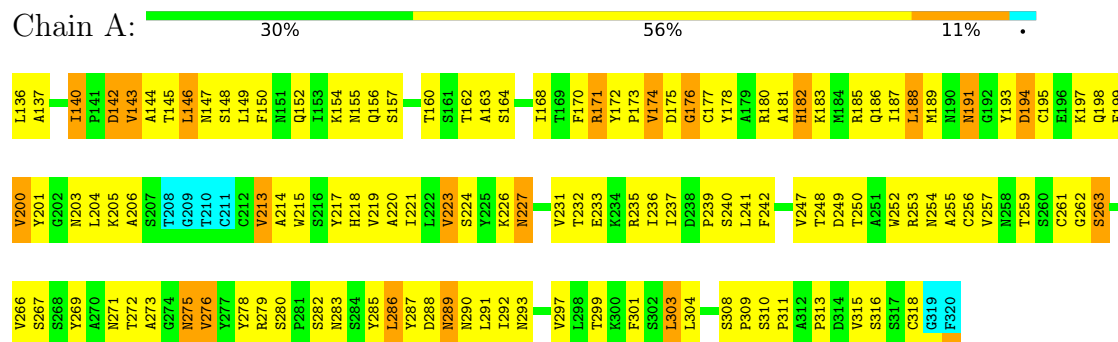
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Protein-glutaminase



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Protein-glutaminase



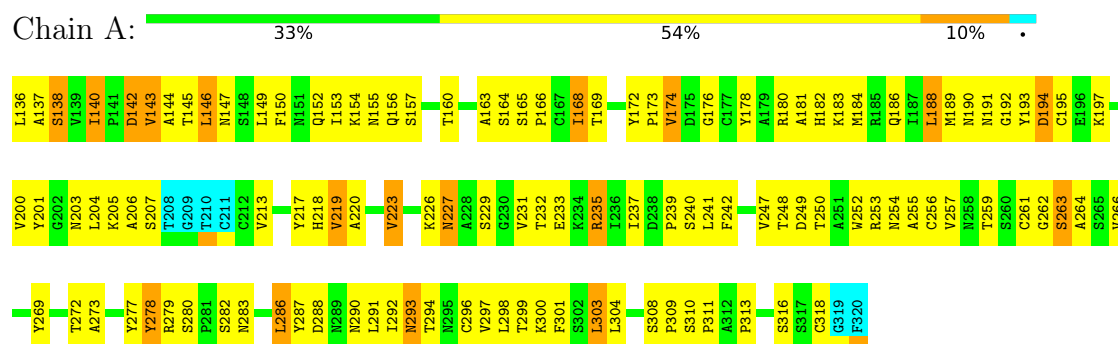
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Protein-glutaminase



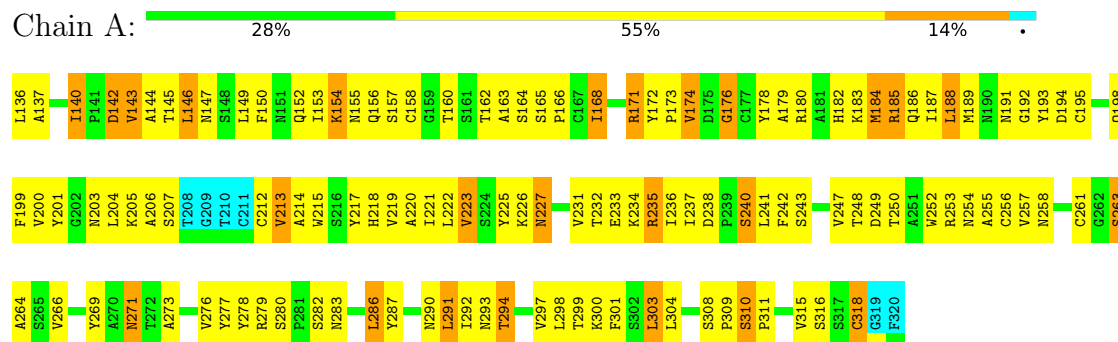
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Protein-glutaminase



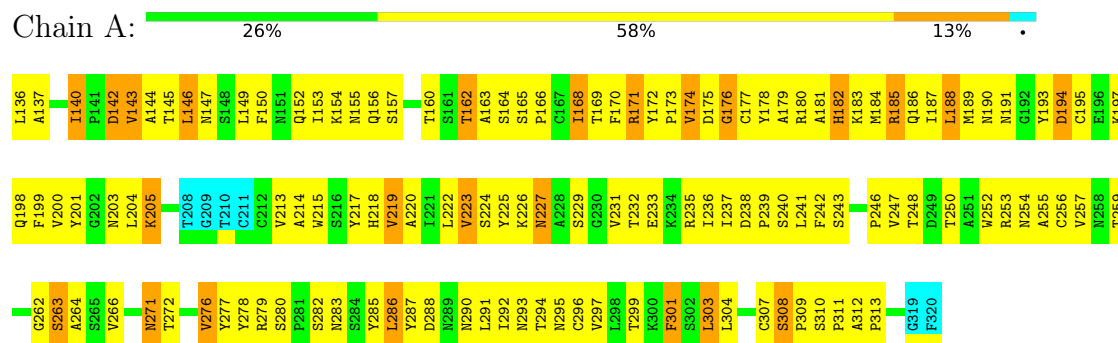
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Protein-glutaminase



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Protein-glutaminase



4.2.14 Score per residue for model 14

• Molecule 1: Protein-glutaminase



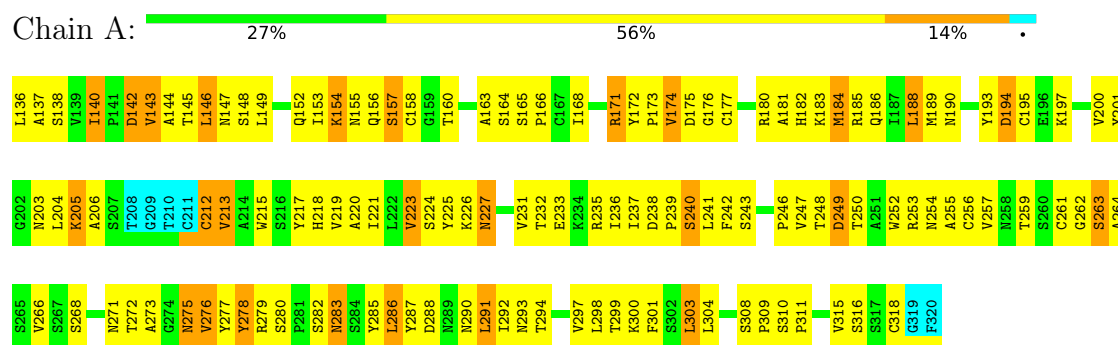
4.2.17 Score per residue for model 17

• Molecule 1: Protein-glutaminase



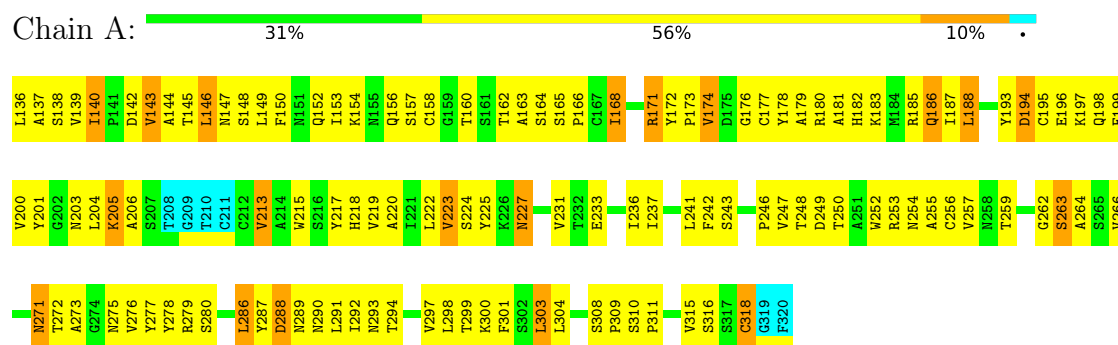
4.2.18 Score per residue for model 18

• Molecule 1: Protein-glutaminase



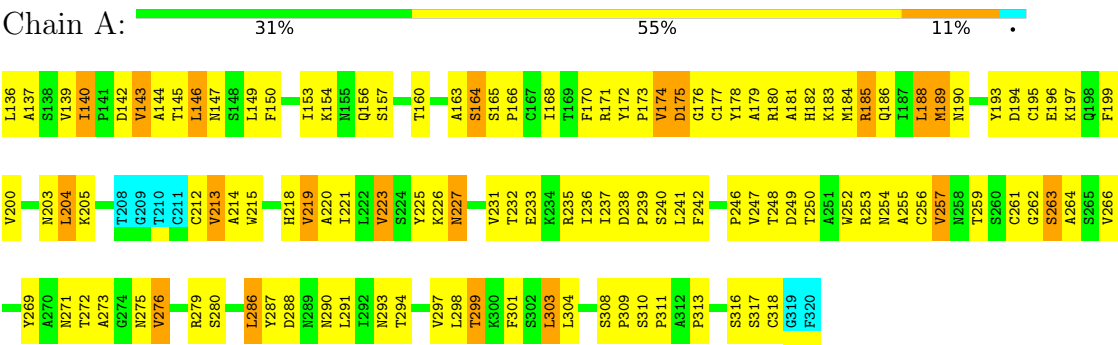
4.2.19 Score per residue for model 19

• Molecule 1: Protein-glutaminase



4.2.20 Score per residue for model 20

● Molecule 1: Protein-glutaminase



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *simulated annealing, torsion angle dynamics*.

Of the 100 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *target function*.

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

Software name	Classification	Version
TALOS	geometry optimization	
CYANA	structure solution	2.1
CYANA	refinement	2.1

No chemical shift data was provided.

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1349	1296	1298	135±8
All	All	26980	25920	25960	2700

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.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:206:ALA:HB3	1:A:213:VAL:HG23	1.07	1.23	12	13
1:A:140:ILE:HD11	1:A:149:LEU:HD12	1.00	1.32	3	20
1:A:153:ILE:HD11	1:A:188:LEU:HD12	0.97	1.36	20	16
1:A:153:ILE:HD11	1:A:188:LEU:CD1	0.89	1.96	2	5
1:A:140:ILE:HD11	1:A:149:LEU:CD1	0.85	2.01	3	20
1:A:168:ILE:HD11	1:A:183:LYS:CB	0.85	2.00	8	14
1:A:301:PHE:CD1	1:A:304:LEU:HD12	0.84	2.08	14	18
1:A:293:ASN:O	1:A:297:VAL:HG23	0.82	1.74	18	19
1:A:198:GLN:NE2	1:A:222:LEU:HD13	0.82	1.89	1	3
1:A:242:PHE:CZ	1:A:255:ALA:HB2	0.82	2.10	10	19
1:A:198:GLN:O	1:A:219:VAL:HG23	0.81	1.76	6	3
1:A:188:LEU:HD22	1:A:195:CYS:HB3	0.80	1.54	11	20
1:A:288:ASP:HB3	1:A:291:LEU:HD13	0.79	1.54	9	7
1:A:160:THR:OG1	1:A:163:ALA:HB2	0.78	1.79	10	19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:203:ASN:C	1:A:204:LEU:HD23	0.78	2.03	20	20
1:A:136:LEU:HD23	1:A:194:ASP:HB2	0.77	1.55	15	15
1:A:253:ARG:O	1:A:257:VAL:HG13	0.77	1.80	16	17
1:A:303:LEU:HD22	1:A:303:LEU:C	0.77	2.05	15	12
1:A:242:PHE:CE2	1:A:247:VAL:HG21	0.77	2.15	15	16
1:A:139:VAL:HG23	1:A:224:SER:HB3	0.76	1.56	14	2
1:A:137:ALA:HB3	1:A:193:TYR:CD1	0.75	2.17	7	16
1:A:185:ARG:CZ	1:A:189:MET:HE3	0.75	2.12	15	3
1:A:168:ILE:HG23	1:A:180:ARG:HG2	0.74	1.59	19	2
1:A:198:GLN:OE1	1:A:236:ILE:HD11	0.73	1.83	13	4
1:A:304:LEU:HD22	1:A:309:PRO:CD	0.73	2.13	8	20
1:A:168:ILE:HD11	1:A:183:LYS:HB3	0.72	1.61	8	8
1:A:168:ILE:HA	1:A:298:LEU:HD22	0.72	1.61	20	7
1:A:200:VAL:CG2	1:A:266:VAL:HG23	0.72	2.14	6	16
1:A:254:ASN:HA	1:A:257:VAL:HG22	0.72	1.62	11	20
1:A:273:ALA:HB3	1:A:276:VAL:HG23	0.72	1.62	2	16
1:A:200:VAL:HG13	1:A:266:VAL:HG23	0.71	1.62	9	1
1:A:172:TYR:CE2	1:A:304:LEU:HD13	0.71	2.20	16	9
1:A:160:THR:HG1	1:A:163:ALA:HB2	0.71	1.45	10	5
1:A:149:LEU:HD13	1:A:188:LEU:HG	0.71	1.63	20	5
1:A:145:THR:HG21	1:A:193:TYR:CZ	0.70	2.20	15	20
1:A:146:LEU:CD1	1:A:223:VAL:HG21	0.70	2.17	12	20
1:A:182:HIS:CD2	1:A:291:LEU:CD1	0.70	2.74	16	20
1:A:177:CYS:SG	1:A:219:VAL:HG12	0.70	2.26	8	9
1:A:184:MET:HE1	1:A:238:ASP:OD1	0.70	1.86	20	2
1:A:172:TYR:CZ	1:A:304:LEU:HD13	0.69	2.22	8	19
1:A:200:VAL:HG23	1:A:269:TYR:HB3	0.69	1.62	20	3
1:A:237:ILE:HG22	1:A:237:ILE:O	0.69	1.88	15	20
1:A:220:ALA:CB	1:A:252:TRP:CZ2	0.68	2.77	11	20
1:A:300:LYS:HE2	1:A:315:VAL:HG12	0.68	1.65	16	6
1:A:136:LEU:HD23	1:A:194:ASP:HB3	0.68	1.66	11	4
1:A:139:VAL:HG23	1:A:224:SER:CB	0.68	2.19	14	2
1:A:168:ILE:HG21	1:A:170:PHE:CE1	0.67	2.24	5	2
1:A:185:ARG:NH1	1:A:189:MET:HE3	0.67	2.04	12	5
1:A:205:LYS:HE3	1:A:214:ALA:HB2	0.67	1.66	17	2
1:A:304:LEU:HD22	1:A:309:PRO:HD2	0.67	1.66	5	17
1:A:168:ILE:HD11	1:A:183:LYS:HB2	0.67	1.67	16	7
1:A:199:PHE:CE1	1:A:219:VAL:HG21	0.66	2.25	8	3
1:A:206:ALA:HB3	1:A:213:VAL:CG2	0.66	2.13	12	3
1:A:197:LYS:HE2	1:A:221:ILE:HG22	0.66	1.66	14	11
1:A:174:VAL:HG13	1:A:310:SER:OG	0.65	1.91	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:257:VAL:HG11	1:A:266:VAL:HG23	0.65	1.68	8	3
1:A:297:VAL:HG13	1:A:301:PHE:CE2	0.65	2.27	13	3
1:A:242:PHE:CG	1:A:247:VAL:HG11	0.65	2.27	5	13
1:A:168:ILE:CG2	1:A:170:PHE:CE1	0.65	2.80	5	1
1:A:168:ILE:HG21	1:A:180:ARG:CB	0.65	2.22	9	2
1:A:182:HIS:CD2	1:A:291:LEU:HD11	0.64	2.27	10	17
1:A:242:PHE:CZ	1:A:255:ALA:CB	0.64	2.80	10	2
1:A:168:ILE:HG21	1:A:170:PHE:CZ	0.64	2.26	1	2
1:A:168:ILE:CG2	1:A:170:PHE:CZ	0.64	2.80	1	1
1:A:238:ASP:OD1	1:A:241:LEU:HD12	0.63	1.93	5	3
1:A:178:TYR:CD1	1:A:179:ALA:N	0.63	2.66	13	12
1:A:286:LEU:C	1:A:287:TYR:CD1	0.63	2.76	15	5
1:A:220:ALA:HB3	1:A:252:TRP:CZ2	0.63	2.29	18	19
1:A:185:ARG:HH21	1:A:275:ASN:CG	0.62	2.02	9	1
1:A:242:PHE:CD2	1:A:247:VAL:HG11	0.62	2.29	5	5
1:A:291:LEU:HD12	1:A:294:THR:HG21	0.62	1.70	12	3
1:A:183:LYS:NZ	1:A:186:GLN:HE22	0.62	1.92	2	7
1:A:180:ARG:HH21	1:A:239:PRO:HD2	0.62	1.53	1	1
1:A:146:LEU:HD11	1:A:223:VAL:HG21	0.61	1.72	13	16
1:A:278:TYR:C	1:A:278:TYR:CD1	0.61	2.75	18	3
1:A:205:LYS:NZ	1:A:214:ALA:HB2	0.61	2.10	9	1
1:A:153:ILE:HG21	1:A:184:MET:SD	0.61	2.36	5	5
1:A:301:PHE:CD1	1:A:301:PHE:N	0.61	2.67	5	20
1:A:172:TYR:OH	1:A:304:LEU:HD13	0.61	1.96	9	3
1:A:177:CYS:SG	1:A:218:HIS:CE1	0.60	2.94	16	2
1:A:303:LEU:HD22	1:A:304:LEU:N	0.60	2.11	12	8
1:A:286:LEU:O	1:A:287:TYR:CD1	0.60	2.55	8	7
1:A:236:ILE:HG21	1:A:252:TRP:CD1	0.60	2.32	18	18
1:A:136:LEU:HD23	1:A:194:ASP:CB	0.60	2.26	14	3
1:A:242:PHE:CE2	1:A:255:ALA:HB2	0.60	2.31	11	13
1:A:278:TYR:CE1	1:A:279:ARG:O	0.60	2.55	9	7
1:A:172:TYR:CE1	1:A:174:VAL:HG21	0.59	2.31	1	20
1:A:236:ILE:HG21	1:A:252:TRP:CG	0.59	2.32	18	11
1:A:182:HIS:N	1:A:197:LYS:HZ3	0.59	1.95	11	1
1:A:200:VAL:HG23	1:A:268:SER:O	0.59	1.96	6	8
1:A:150:PHE:HB2	1:A:237:ILE:HD12	0.59	1.75	15	19
1:A:205:LYS:HE2	1:A:214:ALA:HB2	0.59	1.74	13	3
1:A:168:ILE:CG2	1:A:170:PHE:CE2	0.59	2.85	17	2
1:A:198:GLN:HE22	1:A:222:LEU:HD13	0.59	1.57	5	2
1:A:173:PRO:O	1:A:213:VAL:HG11	0.59	1.97	14	3
1:A:218:HIS:CD2	1:A:252:TRP:CZ2	0.59	2.90	6	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:257:VAL:O	1:A:264:ALA:HB3	0.58	1.98	6	18
1:A:277:TYR:CD2	1:A:288:ASP:OD2	0.58	2.56	15	1
1:A:156:GLN:O	1:A:163:ALA:HB1	0.58	1.97	11	7
1:A:188:LEU:HD23	1:A:193:TYR:O	0.58	1.99	14	7
1:A:180:ARG:HH21	1:A:239:PRO:HG2	0.58	1.59	18	2
1:A:220:ALA:HB2	1:A:252:TRP:CZ2	0.58	2.33	12	16
1:A:242:PHE:CD1	1:A:247:VAL:HG11	0.58	2.33	2	16
1:A:276:VAL:HG21	1:A:285:TYR:CD1	0.57	2.34	13	1
1:A:185:ARG:HH21	1:A:275:ASN:N	0.57	1.97	14	1
1:A:278:TYR:CE2	1:A:279:ARG:O	0.57	2.57	2	1
1:A:257:VAL:CG1	1:A:266:VAL:HG23	0.57	2.29	8	3
1:A:271:ASN:C	1:A:271:ASN:ND2	0.57	2.62	19	8
1:A:145:THR:HG21	1:A:193:TYR:OH	0.57	1.99	15	8
1:A:271:ASN:O	1:A:272:THR:HG23	0.57	1.99	9	6
1:A:172:TYR:O	1:A:172:TYR:CG	0.57	2.58	19	15
1:A:273:ALA:HB3	1:A:276:VAL:CG2	0.57	2.29	17	4
1:A:278:TYR:CD1	1:A:279:ARG:N	0.56	2.73	9	4
1:A:277:TYR:CE1	1:A:294:THR:OG1	0.56	2.59	10	7
1:A:174:VAL:O	1:A:215:TRP:CD1	0.56	2.59	16	9
1:A:201:TYR:CD1	1:A:201:TYR:N	0.56	2.73	9	16
1:A:291:LEU:HD22	1:A:291:LEU:N	0.55	2.16	18	15
1:A:286:LEU:O	1:A:287:TYR:CG	0.55	2.60	13	18
1:A:303:LEU:C	1:A:303:LEU:CD2	0.55	2.80	9	12
1:A:136:LEU:HD21	1:A:189:MET:HG2	0.55	1.77	11	5
1:A:272:THR:HG21	1:A:279:ARG:HD2	0.54	1.79	9	9
1:A:185:ARG:NH1	1:A:189:MET:CE	0.54	2.71	20	2
1:A:223:VAL:HG22	1:A:235:ARG:HB3	0.54	1.80	8	19
1:A:167:CYS:O	1:A:298:LEU:HD13	0.54	2.03	16	1
1:A:178:TYR:O	1:A:181:ALA:HB3	0.54	2.02	1	4
1:A:200:VAL:HG21	1:A:253:ARG:CG	0.53	2.33	3	2
1:A:170:PHE:CD1	1:A:180:ARG:NH2	0.53	2.77	4	1
1:A:218:HIS:CG	1:A:219:VAL:N	0.53	2.77	20	15
1:A:242:PHE:CE2	1:A:255:ALA:CB	0.53	2.91	7	12
1:A:172:TYR:CE2	1:A:304:LEU:CD1	0.53	2.91	16	8
1:A:286:LEU:C	1:A:287:TYR:CG	0.53	2.87	16	19
1:A:149:LEU:HD13	1:A:188:LEU:CG	0.53	2.32	15	2
1:A:146:LEU:CD1	1:A:223:VAL:CG2	0.53	2.86	1	17
1:A:181:ALA:C	1:A:197:LYS:HZ3	0.53	2.12	11	1
1:A:286:LEU:C	1:A:287:TYR:CD2	0.53	2.86	19	8
1:A:291:LEU:HD12	1:A:294:THR:CG2	0.53	2.34	12	1
1:A:278:TYR:CG	1:A:279:ARG:N	0.53	2.77	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:304:LEU:HD22	1:A:309:PRO:HD3	0.53	1.81	12	17
1:A:217:TYR:O	1:A:217:TYR:CG	0.52	2.62	15	5
1:A:278:TYR:CZ	1:A:279:ARG:O	0.52	2.63	15	2
1:A:143:VAL:CG1	1:A:147:ASN:ND2	0.52	2.72	2	20
1:A:179:ALA:HB2	1:A:297:VAL:HG11	0.52	1.81	19	1
1:A:241:LEU:HD13	1:A:252:TRP:CD1	0.52	2.40	4	1
1:A:181:ALA:C	1:A:197:LYS:NZ	0.52	2.68	6	10
1:A:175:ASP:OD2	1:A:312:ALA:HB2	0.52	2.04	13	1
1:A:237:ILE:O	1:A:237:ILE:CG2	0.52	2.58	11	20
1:A:297:VAL:CG1	1:A:301:PHE:CE2	0.52	2.92	13	2
1:A:277:TYR:CD1	1:A:277:TYR:C	0.52	2.87	19	2
1:A:271:ASN:C	1:A:272:THR:CG2	0.52	2.82	3	5
1:A:169:THR:HG21	1:A:301:PHE:O	0.52	2.05	5	4
1:A:200:VAL:CG2	1:A:266:VAL:CG2	0.52	2.88	4	15
1:A:200:VAL:HG22	1:A:266:VAL:HG23	0.51	1.83	6	16
1:A:223:VAL:HG11	1:A:237:ILE:HG13	0.51	1.81	7	20
1:A:157:SER:OG	1:A:160:THR:HG23	0.51	2.05	11	1
1:A:180:ARG:NH2	1:A:240:SER:CB	0.51	2.73	17	2
1:A:168:ILE:HG23	1:A:180:ARG:HB3	0.51	1.82	16	11
1:A:200:VAL:HG13	1:A:204:LEU:HD11	0.51	1.83	13	4
1:A:221:ILE:HD11	1:A:237:ILE:HB	0.51	1.82	16	4
1:A:217:TYR:CG	1:A:217:TYR:O	0.51	2.63	19	12
1:A:286:LEU:HD13	1:A:287:TYR:H	0.51	1.65	8	2
1:A:200:VAL:C	1:A:201:TYR:CD1	0.51	2.89	9	1
1:A:175:ASP:O	1:A:177:CYS:N	0.51	2.44	16	2
1:A:143:VAL:HG23	1:A:225:TYR:CD2	0.51	2.41	14	10
1:A:289:ASN:ND2	1:A:289:ASN:C	0.50	2.69	9	1
1:A:205:LYS:HZ1	1:A:214:ALA:HB2	0.50	1.66	9	1
1:A:276:VAL:CG1	1:A:276:VAL:O	0.50	2.59	13	1
1:A:174:VAL:HG13	1:A:310:SER:HB2	0.50	1.81	20	1
1:A:168:ILE:HB	1:A:170:PHE:CE2	0.50	2.42	1	1
1:A:218:HIS:CE1	1:A:219:VAL:O	0.50	2.64	12	4
1:A:185:ARG:CB	1:A:195:CYS:SG	0.50	3.00	20	2
1:A:140:ILE:CG2	1:A:142:ASP:O	0.50	2.60	4	14
1:A:180:ARG:NH2	1:A:240:SER:N	0.50	2.60	1	1
1:A:282:SER:O	1:A:283:ASN:CB	0.50	2.60	13	15
1:A:238:ASP:OD1	1:A:241:LEU:CD1	0.50	2.60	5	2
1:A:137:ALA:CB	1:A:193:TYR:CD1	0.50	2.92	8	3
1:A:293:ASN:O	1:A:297:VAL:CG2	0.50	2.60	13	16
1:A:183:LYS:HG3	1:A:298:LEU:HD11	0.50	1.84	14	2
1:A:170:PHE:CE1	1:A:180:ARG:NH2	0.50	2.77	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:198:GLN:HE22	1:A:222:LEU:HD22	0.50	1.67	6	1
1:A:182:HIS:N	1:A:197:LYS:NZ	0.50	2.59	11	2
1:A:136:LEU:HD11	1:A:193:TYR:N	0.50	2.22	10	3
1:A:152:GLN:NE2	1:A:191:ASN:ND2	0.50	2.60	4	5
1:A:173:PRO:C	1:A:174:VAL:CG2	0.50	2.85	20	20
1:A:178:TYR:HB3	1:A:219:VAL:HG11	0.50	1.82	1	5
1:A:248:THR:C	1:A:250:THR:N	0.50	2.70	5	20
1:A:138:SER:CB	1:A:194:ASP:OD2	0.50	2.60	11	1
1:A:225:TYR:CE1	1:A:235:ARG:HD3	0.49	2.42	16	8
1:A:137:ALA:HB3	1:A:193:TYR:CD2	0.49	2.41	3	3
1:A:138:SER:HG	1:A:194:ASP:CG	0.49	2.15	7	1
1:A:271:ASN:CG	1:A:272:THR:N	0.49	2.69	19	1
1:A:149:LEU:HD13	1:A:188:LEU:CD2	0.49	2.37	20	2
1:A:170:PHE:CE1	1:A:239:PRO:HG2	0.49	2.42	4	3
1:A:177:CYS:SG	1:A:219:VAL:CG1	0.49	3.00	7	8
1:A:289:ASN:ND2	1:A:290:ASN:N	0.49	2.60	9	1
1:A:289:ASN:CG	1:A:290:ASN:N	0.49	2.70	9	1
1:A:184:MET:HE3	1:A:221:ILE:HG12	0.49	1.84	8	3
1:A:185:ARG:NH2	1:A:275:ASN:N	0.49	2.59	14	1
1:A:217:TYR:O	1:A:217:TYR:CD2	0.49	2.65	19	1
1:A:269:TYR:C	1:A:269:TYR:CD1	0.49	2.90	3	1
1:A:301:PHE:CE1	1:A:315:VAL:HG11	0.49	2.42	9	1
1:A:197:LYS:CG	1:A:273:ALA:O	0.49	2.61	11	2
1:A:308:SER:HA	1:A:309:PRO:C	0.49	2.33	15	20
1:A:158:CYS:HB3	1:A:171:ARG:HH21	0.49	1.67	8	1
1:A:257:VAL:O	1:A:264:ALA:CB	0.49	2.60	16	7
1:A:272:THR:HG22	1:A:285:TYR:CZ	0.49	2.43	15	1
1:A:138:SER:CB	1:A:194:ASP:OD1	0.49	2.60	3	1
1:A:241:LEU:HD13	1:A:256:CYS:SG	0.49	2.48	12	1
1:A:175:ASP:OD1	1:A:312:ALA:HB2	0.48	2.08	6	1
1:A:197:LYS:CE	1:A:221:ILE:HG22	0.48	2.37	1	4
1:A:162:THR:O	1:A:162:THR:HG22	0.48	2.08	10	10
1:A:199:PHE:CD2	1:A:279:ARG:HB3	0.48	2.43	10	6
1:A:185:ARG:CD	1:A:185:ARG:C	0.48	2.86	16	1
1:A:172:TYR:CD2	1:A:301:PHE:HB3	0.48	2.44	10	13
1:A:205:LYS:N	1:A:256:CYS:O	0.48	2.46	20	20
1:A:259:THR:O	1:A:262:GLY:N	0.48	2.47	17	18
1:A:180:ARG:CZ	1:A:240:SER:OG	0.48	2.60	13	1
1:A:146:LEU:HD12	1:A:223:VAL:HG21	0.48	1.85	9	10
1:A:303:LEU:CD2	1:A:303:LEU:C	0.48	2.86	4	8
1:A:205:LYS:CE	1:A:214:ALA:HB2	0.48	2.39	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:242:PHE:CD2	1:A:247:VAL:HG21	0.48	2.43	15	1
1:A:199:PHE:CD1	1:A:279:ARG:HB3	0.48	2.44	2	8
1:A:239:PRO:O	1:A:240:SER:C	0.48	2.56	16	6
1:A:185:ARG:CZ	1:A:189:MET:CE	0.48	2.91	9	2
1:A:271:ASN:C	1:A:272:THR:HG23	0.48	2.33	16	5
1:A:316:SER:C	1:A:318:CYS:N	0.48	2.71	16	16
1:A:149:LEU:O	1:A:153:ILE:HD12	0.48	2.09	3	2
1:A:170:PHE:CD1	1:A:170:PHE:C	0.48	2.91	13	3
1:A:220:ALA:CB	1:A:252:TRP:CE2	0.48	2.97	11	3
1:A:239:PRO:C	1:A:241:LEU:N	0.48	2.70	4	10
1:A:222:LEU:HD11	1:A:234:LYS:HB3	0.48	1.84	8	4
1:A:218:HIS:NE2	1:A:241:LEU:HD11	0.48	2.24	19	3
1:A:242:PHE:CE1	1:A:255:ALA:CB	0.48	2.97	10	1
1:A:170:PHE:CE2	1:A:239:PRO:HG2	0.48	2.44	9	2
1:A:291:LEU:N	1:A:291:LEU:CD2	0.48	2.77	18	3
1:A:206:ALA:N	1:A:258:ASN:OD1	0.48	2.47	12	1
1:A:179:ALA:HB1	1:A:294:THR:HA	0.48	1.85	17	1
1:A:180:ARG:O	1:A:183:LYS:N	0.47	2.47	10	18
1:A:252:TRP:CE3	1:A:253:ARG:HD3	0.47	2.44	11	20
1:A:303:LEU:H	1:A:303:LEU:HD13	0.47	1.69	12	8
1:A:219:VAL:CG2	1:A:220:ALA:N	0.47	2.77	16	2
1:A:238:ASP:OD1	1:A:241:LEU:CG	0.47	2.62	5	3
1:A:199:PHE:CE1	1:A:219:VAL:CG2	0.47	2.98	13	2
1:A:310:SER:HA	1:A:311:PRO:C	0.47	2.34	5	20
1:A:279:ARG:HG3	1:A:285:TYR:CE1	0.47	2.44	18	3
1:A:150:PHE:CE1	1:A:154:LYS:HD3	0.47	2.44	3	1
1:A:301:PHE:CZ	1:A:312:ALA:HB1	0.47	2.44	4	1
1:A:143:VAL:O	1:A:146:LEU:N	0.47	2.48	11	20
1:A:185:ARG:NH2	1:A:275:ASN:CA	0.47	2.78	14	1
1:A:204:LEU:HD23	1:A:204:LEU:N	0.47	2.23	6	13
1:A:241:LEU:CD1	1:A:252:TRP:CD1	0.47	2.97	1	4
1:A:277:TYR:CE2	1:A:293:ASN:HB3	0.47	2.44	12	3
1:A:205:LYS:C	1:A:258:ASN:OD1	0.47	2.58	12	1
1:A:225:TYR:CE1	1:A:235:ARG:HB2	0.47	2.45	14	11
1:A:242:PHE:CE1	1:A:247:VAL:HG11	0.47	2.44	16	3
1:A:301:PHE:CE1	1:A:313:PRO:HD2	0.47	2.45	4	8
1:A:138:SER:CA	1:A:194:ASP:OD2	0.46	2.63	7	1
1:A:181:ALA:HB1	1:A:197:LYS:NZ	0.46	2.25	15	3
1:A:206:ALA:CB	1:A:213:VAL:HG23	0.46	2.17	12	1
1:A:140:ILE:N	1:A:224:SER:O	0.46	2.49	7	9
1:A:172:TYR:CE2	1:A:301:PHE:HB3	0.46	2.46	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:298:LEU:C	1:A:300:LYS:N	0.46	2.73	19	5
1:A:223:VAL:HG11	1:A:237:ILE:CG1	0.46	2.40	15	8
1:A:304:LEU:CD2	1:A:309:PRO:CD	0.46	2.93	12	11
1:A:170:PHE:CE2	1:A:239:PRO:CG	0.46	2.99	9	1
1:A:185:ARG:NH2	1:A:275:ASN:CG	0.46	2.71	9	1
1:A:220:ALA:HB2	1:A:252:TRP:CE2	0.46	2.44	11	3
1:A:180:ARG:O	1:A:181:ALA:C	0.46	2.58	6	13
1:A:171:ARG:NH1	1:A:304:LEU:O	0.46	2.49	7	11
1:A:188:LEU:HD23	1:A:193:TYR:C	0.46	2.35	3	2
1:A:259:THR:C	1:A:261:CYS:N	0.46	2.73	3	11
1:A:259:THR:CB	1:A:262:GLY:O	0.46	2.63	17	4
1:A:272:THR:CG2	1:A:279:ARG:CD	0.46	2.93	7	1
1:A:157:SER:HB3	1:A:170:PHE:CD2	0.46	2.45	20	1
1:A:171:ARG:CD	1:A:171:ARG:C	0.46	2.89	1	14
1:A:248:THR:O	1:A:249:ASP:C	0.46	2.59	18	14
1:A:235:ARG:NH1	1:A:248:THR:HG22	0.46	2.26	7	1
1:A:157:SER:HB3	1:A:170:PHE:CE2	0.46	2.46	20	2
1:A:246:PRO:C	1:A:247:VAL:CG1	0.46	2.89	1	12
1:A:156:GLN:O	1:A:157:SER:C	0.46	2.57	18	20
1:A:203:ASN:ND2	1:A:263:SER:O	0.46	2.49	6	19
1:A:178:TYR:OH	1:A:297:VAL:HG21	0.46	2.11	17	1
1:A:149:LEU:HD22	1:A:188:LEU:HG	0.45	1.88	1	4
1:A:170:PHE:CD1	1:A:180:ARG:CZ	0.45	2.99	1	1
1:A:174:VAL:O	1:A:215:TRP:NE1	0.45	2.49	3	18
1:A:183:LYS:O	1:A:186:GLN:N	0.45	2.49	3	10
1:A:176:GLY:HA2	1:A:178:TYR:CE2	0.45	2.46	14	6
1:A:267:SER:C	1:A:268:SER:OG	0.45	2.59	17	1
1:A:212:CYS:SG	1:A:213:VAL:N	0.45	2.89	12	3
1:A:290:ASN:O	1:A:291:LEU:C	0.45	2.59	6	15
1:A:316:SER:O	1:A:317:SER:C	0.45	2.59	8	5
1:A:288:ASP:OD1	1:A:294:THR:N	0.45	2.50	11	2
1:A:183:LYS:C	1:A:185:ARG:N	0.45	2.74	12	4
1:A:181:ALA:O	1:A:182:HIS:C	0.45	2.60	6	4
1:A:200:VAL:CG1	1:A:201:TYR:N	0.45	2.80	9	1
1:A:199:PHE:CE1	1:A:219:VAL:HB	0.45	2.47	12	1
1:A:201:TYR:OH	1:A:279:ARG:NH1	0.45	2.50	16	14
1:A:249:ASP:O	1:A:253:ARG:NE	0.45	2.50	16	9
1:A:189:MET:O	1:A:192:GLY:N	0.45	2.50	14	4
1:A:160:THR:OG1	1:A:163:ALA:CB	0.45	2.60	13	4
1:A:185:ARG:HH11	1:A:189:MET:HE3	0.45	1.67	12	1
1:A:194:ASP:OD2	1:A:194:ASP:C	0.45	2.60	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:152:GLN:CB	1:A:187:ILE:CG2	0.45	2.94	16	6
1:A:162:THR:O	1:A:162:THR:CG2	0.45	2.65	13	2
1:A:178:TYR:O	1:A:179:ALA:C	0.45	2.60	1	3
1:A:185:ARG:NH2	1:A:194:ASP:OD1	0.45	2.50	12	2
1:A:146:LEU:HD21	1:A:246:PRO:CG	0.45	2.42	18	2
1:A:152:GLN:NE2	1:A:191:ASN:OD1	0.45	2.49	6	2
1:A:271:ASN:O	1:A:272:THR:CG2	0.45	2.64	16	3
1:A:180:ARG:CZ	1:A:240:SER:CB	0.45	2.95	10	1
1:A:185:ARG:NH2	1:A:275:ASN:OD1	0.45	2.50	10	1
1:A:181:ALA:O	1:A:184:MET:N	0.45	2.50	20	4
1:A:180:ARG:NH1	1:A:240:SER:OG	0.45	2.50	10	7
1:A:204:LEU:C	1:A:256:CYS:O	0.45	2.60	16	12
1:A:257:VAL:O	1:A:258:ASN:C	0.45	2.60	6	1
1:A:249:ASP:N	1:A:249:ASP:OD1	0.45	2.50	8	1
1:A:301:PHE:CZ	1:A:315:VAL:HG11	0.45	2.47	9	2
1:A:192:GLY:C	1:A:193:TYR:CD2	0.45	2.94	10	1
1:A:258:ASN:O	1:A:258:ASN:CG	0.45	2.60	12	1
1:A:149:LEU:HD21	1:A:193:TYR:CD2	0.45	2.47	16	3
1:A:171:ARG:NH1	1:A:302:SER:O	0.45	2.50	2	1
1:A:204:LEU:HD12	1:A:218:HIS:CB	0.45	2.42	9	5
1:A:238:ASP:CG	1:A:238:ASP:O	0.45	2.59	6	1
1:A:296:CYS:O	1:A:297:VAL:C	0.45	2.60	17	7
1:A:184:MET:CB	1:A:221:ILE:HD13	0.45	2.41	8	2
1:A:177:CYS:CB	1:A:219:VAL:HG13	0.45	2.42	19	1
1:A:178:TYR:N	1:A:219:VAL:HG11	0.45	2.27	19	1
1:A:168:ILE:CG2	1:A:180:ARG:HB3	0.45	2.42	20	8
1:A:182:HIS:NE2	1:A:288:ASP:O	0.45	2.50	3	7
1:A:200:VAL:HG22	1:A:269:TYR:HB3	0.45	1.88	9	1
1:A:152:GLN:O	1:A:155:ASN:N	0.45	2.50	10	15
1:A:298:LEU:O	1:A:301:PHE:N	0.45	2.50	20	7
1:A:275:ASN:OD1	1:A:276:VAL:N	0.45	2.50	7	1
1:A:168:ILE:CG2	1:A:180:ARG:NH1	0.45	2.79	12	1
1:A:218:HIS:CD2	1:A:241:LEU:HD11	0.45	2.47	19	1
1:A:143:VAL:O	1:A:144:ALA:C	0.44	2.60	9	20
1:A:192:GLY:C	1:A:193:TYR:CD1	0.44	2.95	11	3
1:A:173:PRO:C	1:A:174:VAL:HG23	0.44	2.37	3	13
1:A:169:THR:HG21	1:A:301:PHE:HB2	0.44	1.90	11	1
1:A:252:TRP:O	1:A:255:ALA:N	0.44	2.50	10	3
1:A:184:MET:HB3	1:A:221:ILE:HD13	0.44	1.89	20	2
1:A:185:ARG:NH1	1:A:189:MET:SD	0.44	2.90	18	1
1:A:220:ALA:CB	1:A:236:ILE:HD12	0.44	2.42	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:249:ASP:OD1	1:A:249:ASP:N	0.44	2.51	2	1
1:A:185:ARG:CG	1:A:195:CYS:SG	0.44	3.05	3	1
1:A:212:CYS:O	1:A:213:VAL:HG13	0.44	2.12	3	1
1:A:174:VAL:CG1	1:A:310:SER:OG	0.44	2.63	4	1
1:A:175:ASP:O	1:A:176:GLY:C	0.44	2.59	16	5
1:A:184:MET:HE1	1:A:238:ASP:OD2	0.44	2.13	13	2
1:A:198:GLN:OE1	1:A:270:ALA:C	0.44	2.60	6	1
1:A:286:LEU:O	1:A:287:TYR:CD2	0.44	2.69	19	2
1:A:276:VAL:CG2	1:A:285:TYR:CD1	0.44	3.00	7	1
1:A:258:ASN:ND2	1:A:260:SER:CB	0.44	2.81	17	1
1:A:174:VAL:HG13	1:A:310:SER:HB3	0.44	1.87	1	1
1:A:187:ILE:O	1:A:190:ASN:N	0.44	2.51	10	1
1:A:170:PHE:CE1	1:A:180:ARG:CZ	0.44	3.01	1	1
1:A:226:LYS:CE	1:A:232:THR:OG1	0.44	2.66	8	17
1:A:236:ILE:HG22	1:A:238:ASP:OD2	0.44	2.13	5	2
1:A:200:VAL:CG2	1:A:268:SER:O	0.44	2.66	6	2
1:A:220:ALA:CB	1:A:238:ASP:CG	0.44	2.91	1	1
1:A:271:ASN:ND2	1:A:271:ASN:C	0.44	2.75	7	5
1:A:253:ARG:NH1	1:A:269:TYR:CG	0.44	2.86	20	2
1:A:278:TYR:CD1	1:A:278:TYR:C	0.44	2.95	13	1
1:A:185:ARG:NH2	1:A:194:ASP:OD2	0.44	2.51	2	1
1:A:194:ASP:OD1	1:A:194:ASP:C	0.44	2.60	2	2
1:A:203:ASN:O	1:A:204:LEU:HD23	0.44	2.13	20	6
1:A:238:ASP:OD1	1:A:240:SER:CB	0.44	2.65	2	1
1:A:206:ALA:O	1:A:213:VAL:N	0.44	2.51	8	1
1:A:200:VAL:HG22	1:A:269:TYR:CB	0.44	2.43	9	1
1:A:294:THR:O	1:A:297:VAL:N	0.44	2.51	20	3
1:A:165:SER:HA	1:A:166:PRO:C	0.43	2.38	3	18
1:A:316:SER:O	1:A:318:CYS:N	0.43	2.51	8	4
1:A:292:ILE:O	1:A:296:CYS:CB	0.43	2.66	6	5
1:A:185:ARG:NH1	1:A:275:ASN:OD1	0.43	2.52	3	1
1:A:239:PRO:O	1:A:241:LEU:N	0.43	2.51	20	3
1:A:177:CYS:O	1:A:180:ARG:CG	0.43	2.65	20	1
1:A:303:LEU:HD22	1:A:303:LEU:O	0.43	2.12	14	6
1:A:157:SER:HA	1:A:170:PHE:CD2	0.43	2.48	5	1
1:A:294:THR:C	1:A:296:CYS:N	0.43	2.75	10	2
1:A:206:ALA:O	1:A:213:VAL:HG22	0.43	2.13	8	2
1:A:246:PRO:C	1:A:247:VAL:HG13	0.43	2.37	6	6
1:A:145:THR:HG21	1:A:193:TYR:CE2	0.43	2.47	6	3
1:A:157:SER:O	1:A:158:CYS:C	0.43	2.61	14	3
1:A:227:ASN:OD1	1:A:233:GLU:CG	0.43	2.67	15	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:248:THR:O	1:A:250:THR:N	0.43	2.52	5	8
1:A:152:GLN:C	1:A:154:LYS:N	0.43	2.75	3	5
1:A:204:LEU:HD12	1:A:218:HIS:N	0.43	2.28	3	9
1:A:168:ILE:HG21	1:A:180:ARG:HB2	0.43	1.86	9	1
1:A:201:TYR:O	1:A:267:SER:N	0.43	2.52	9	1
1:A:188:LEU:HD22	1:A:195:CYS:CB	0.43	2.41	14	1
1:A:183:LYS:O	1:A:184:MET:C	0.43	2.61	5	10
1:A:166:PRO:CG	1:A:295:ASN:O	0.43	2.66	10	8
1:A:186:GLN:CG	1:A:187:ILE:HD13	0.43	2.43	3	1
1:A:136:LEU:C	1:A:192:GLY:O	0.43	2.62	7	1
1:A:242:PHE:HZ	1:A:255:ALA:HB2	0.43	1.69	10	1
1:A:264:ALA:C	1:A:265:SER:OG	0.43	2.62	5	2
1:A:289:ASN:H	1:A:289:ASN:ND2	0.43	2.11	10	1
1:A:220:ALA:HB3	1:A:236:ILE:HD12	0.43	1.91	2	1
1:A:252:TRP:O	1:A:253:ARG:C	0.43	2.62	3	3
1:A:205:LYS:NZ	1:A:261:CYS:SG	0.43	2.90	1	2
1:A:227:ASN:OD1	1:A:231:VAL:O	0.43	2.37	15	20
1:A:269:TYR:CD1	1:A:269:TYR:C	0.43	2.97	12	3
1:A:272:THR:HG21	1:A:279:ARG:CD	0.43	2.43	13	2
1:A:168:ILE:CG2	1:A:180:ARG:CB	0.43	2.95	9	1
1:A:278:TYR:CE1	1:A:279:ARG:C	0.43	2.97	9	1
1:A:187:ILE:O	1:A:188:LEU:C	0.43	2.60	10	1
1:A:200:VAL:HG12	1:A:218:HIS:O	0.42	2.13	16	2
1:A:170:PHE:CD1	1:A:239:PRO:HG2	0.42	2.49	4	1
1:A:180:ARG:CZ	1:A:240:SER:HB2	0.42	2.44	10	2
1:A:206:ALA:O	1:A:213:VAL:CG2	0.42	2.67	6	1
1:A:317:SER:C	1:A:318:CYS:O	0.42	2.62	7	2
1:A:199:PHE:CD1	1:A:219:VAL:HB	0.42	2.48	12	1
1:A:238:ASP:OD2	1:A:238:ASP:O	0.42	2.38	5	2
1:A:291:LEU:HD12	1:A:294:THR:CB	0.42	2.45	12	1
1:A:152:GLN:HB3	1:A:187:ILE:CG2	0.42	2.45	7	2
1:A:242:PHE:CE2	1:A:247:VAL:HG11	0.42	2.50	10	1
1:A:241:LEU:CD1	1:A:256:CYS:SG	0.42	3.07	12	2
1:A:158:CYS:SG	1:A:168:ILE:C	0.42	3.02	18	1
1:A:185:ARG:CZ	1:A:189:MET:SD	0.42	3.07	18	1
1:A:219:VAL:HG22	1:A:220:ALA:N	0.42	2.30	15	2
1:A:258:ASN:OD1	1:A:260:SER:CB	0.42	2.68	6	1
1:A:214:ALA:C	1:A:215:TRP:CD1	0.42	2.98	12	1
1:A:258:ASN:OD1	1:A:258:ASN:O	0.42	2.37	12	1
1:A:238:ASP:O	1:A:238:ASP:OD1	0.42	2.37	16	1
1:A:238:ASP:O	1:A:238:ASP:OD2	0.42	2.37	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:272:THR:CG2	1:A:279:ARG:HD2	0.42	2.43	7	1
1:A:168:ILE:HB	1:A:170:PHE:CE1	0.42	2.50	15	1
1:A:307:CYS:O	1:A:310:SER:CB	0.42	2.68	15	1
1:A:152:GLN:HB2	1:A:187:ILE:CG2	0.42	2.45	16	1
1:A:154:LYS:CE	1:A:243:SER:O	0.42	2.68	18	1
1:A:157:SER:HA	1:A:170:PHE:CE2	0.42	2.50	5	1
1:A:149:LEU:CD2	1:A:191:ASN:HB3	0.42	2.45	11	2
1:A:183:LYS:O	1:A:185:ARG:N	0.42	2.53	12	2
1:A:177:CYS:HB3	1:A:219:VAL:HG13	0.42	1.90	19	1
1:A:148:SER:O	1:A:149:LEU:C	0.42	2.62	5	10
1:A:198:GLN:OE1	1:A:252:TRP:CZ3	0.42	2.73	3	1
1:A:175:ASP:CG	1:A:176:GLY:N	0.42	2.78	13	2
1:A:204:LEU:CA	1:A:256:CYS:O	0.42	2.68	20	4
1:A:150:PHE:CG	1:A:237:ILE:HG23	0.41	2.50	5	1
1:A:180:ARG:CG	1:A:181:ALA:N	0.41	2.82	9	1
1:A:275:ASN:OD1	1:A:275:ASN:N	0.41	2.53	18	2
1:A:169:THR:O	1:A:169:THR:OG1	0.41	2.38	13	1
1:A:178:TYR:CE1	1:A:277:TYR:OH	0.41	2.73	17	1
1:A:179:ALA:CB	1:A:297:VAL:HG11	0.41	2.45	19	1
1:A:250:THR:C	1:A:252:TRP:N	0.41	2.78	11	3
1:A:257:VAL:HA	1:A:264:ALA:HB1	0.41	1.91	17	5
1:A:178:TYR:CG	1:A:179:ALA:N	0.41	2.89	20	1
1:A:143:VAL:CG2	1:A:225:TYR:CD2	0.41	3.03	14	1
1:A:197:LYS:O	1:A:271:ASN:OD1	0.41	2.38	19	1
1:A:298:LEU:O	1:A:299:THR:C	0.41	2.64	1	2
1:A:200:VAL:HG21	1:A:253:ARG:HG2	0.41	1.93	3	1
1:A:205:LYS:O	1:A:256:CYS:O	0.41	2.38	20	6
1:A:277:TYR:CZ	1:A:293:ASN:HB3	0.41	2.51	3	1
1:A:204:LEU:CD1	1:A:218:HIS:HB3	0.41	2.45	9	3
1:A:183:LYS:NZ	1:A:186:GLN:NE2	0.41	2.67	8	1
1:A:191:ASN:ND2	1:A:193:TYR:CE2	0.41	2.88	13	1
1:A:196:GLU:O	1:A:222:LEU:N	0.41	2.53	4	2
1:A:185:ARG:CZ	1:A:185:ARG:HB2	0.41	2.46	15	1
1:A:170:PHE:CD2	1:A:180:ARG:NH2	0.41	2.88	15	1
1:A:139:VAL:HG22	1:A:224:SER:HB3	0.41	1.93	3	1
1:A:207:SER:CB	1:A:261:CYS:SG	0.41	3.09	6	1
1:A:168:ILE:CD1	1:A:183:LYS:CB	0.41	2.99	20	1
1:A:182:HIS:CD2	1:A:288:ASP:HB2	0.41	2.50	20	1
1:A:170:PHE:CE2	1:A:180:ARG:NH2	0.41	2.88	15	1
1:A:183:LYS:CE	1:A:186:GLN:NE2	0.41	2.84	2	1
1:A:206:ALA:O	1:A:261:CYS:SG	0.41	2.79	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:304:LEU:CD2	1:A:309:PRO:HD2	0.41	2.44	5	1
1:A:145:THR:CG2	1:A:193:TYR:CE2	0.41	3.04	6	1
1:A:158:CYS:SG	1:A:168:ILE:O	0.41	2.79	19	4
1:A:139:VAL:HG22	1:A:224:SER:HB2	0.41	1.92	8	2
1:A:205:LYS:CE	1:A:261:CYS:SG	0.41	3.08	12	1
1:A:170:PHE:CD1	1:A:180:ARG:NH1	0.41	2.89	17	1
1:A:180:ARG:NH2	1:A:240:SER:OG	0.41	2.54	17	1
1:A:154:LYS:NZ	1:A:243:SER:O	0.41	2.54	18	1
1:A:179:ALA:O	1:A:180:ARG:C	0.41	2.64	20	1
1:A:149:LEU:CD2	1:A:191:ASN:CB	0.41	2.98	2	1
1:A:227:ASN:OD1	1:A:227:ASN:N	0.41	2.54	6	6
1:A:198:GLN:NE2	1:A:252:TRP:CZ3	0.41	2.88	15	1
1:A:236:ILE:CG2	1:A:238:ASP:OD2	0.40	2.69	6	1
1:A:307:CYS:O	1:A:310:SER:OG	0.40	2.39	8	1
1:A:194:ASP:O	1:A:194:ASP:CG	0.40	2.63	11	1
1:A:186:GLN:HG3	1:A:187:ILE:HD13	0.40	1.92	12	1
1:A:185:ARG:CD	1:A:189:MET:SD	0.40	3.09	16	1
1:A:152:GLN:NE2	1:A:191:ASN:HD22	0.40	2.14	4	2
1:A:162:THR:HG22	1:A:162:THR:O	0.40	2.16	2	1
1:A:275:ASN:O	1:A:276:VAL:C	0.40	2.65	9	2
1:A:180:ARG:NH1	1:A:240:SER:CB	0.40	2.85	18	1
1:A:189:MET:O	1:A:190:ASN:C	0.40	2.63	3	1
1:A:194:ASP:OD1	1:A:194:ASP:O	0.40	2.40	11	1
1:A:185:ARG:HD2	1:A:189:MET:HE3	0.40	1.93	13	1
1:A:172:TYR:OH	1:A:309:PRO:O	0.40	2.39	14	1
1:A:204:LEU:HA	1:A:256:CYS:O	0.40	2.17	20	1
1:A:241:LEU:HD12	1:A:252:TRP:CD1	0.40	2.51	1	1
1:A:140:ILE:HG12	1:A:145:THR:HG22	0.40	1.92	3	1
1:A:315:VAL:O	1:A:318:CYS:SG	0.40	2.80	4	1
1:A:218:HIS:NE2	1:A:252:TRP:NE1	0.40	2.68	6	1
1:A:169:THR:HB	1:A:171:ARG:NH1	0.40	2.32	8	1
1:A:184:MET:O	1:A:187:ILE:N	0.40	2.54	13	1
1:A:242:PHE:CG	1:A:247:VAL:CG1	0.40	3.04	15	1
1:A:316:SER:O	1:A:318:CYS:O	0.40	2.40	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	178/185 (96%)	147±3 (83±2%)	27±4 (15±2%)	4±1 (2±1%)	7	47
All	All	3560/3700 (96%)	2948 (83%)	533 (15%)	79 (2%)	7	47

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	164	SER	20
1	A	174	VAL	20
1	A	176	GLY	15
1	A	276	VAL	10
1	A	318	CYS	6
1	A	258	ASN	2
1	A	184	MET	2
1	A	240	SER	1
1	A	177	CYS	1
1	A	317	SER	1
1	A	157	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	155/159 (97%)	128±3 (82±2%)	27±3 (18±2%)	4	37
All	All	3100/3180 (97%)	2551 (82%)	549 (18%)	4	37

All 72 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	140	ILE	20
1	A	142	ASP	20
1	A	143	VAL	20
1	A	146	LEU	20
1	A	154	LYS	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	188	LEU	20
1	A	223	VAL	20
1	A	227	ASN	20
1	A	263	SER	20
1	A	286	LEU	20
1	A	299	THR	20
1	A	303	LEU	20
1	A	171	ARG	19
1	A	280	SER	19
1	A	213	VAL	16
1	A	182	HIS	14
1	A	190	ASN	14
1	A	164	SER	13
1	A	185	ARG	13
1	A	194	ASP	13
1	A	186	GLN	12
1	A	212	CYS	11
1	A	243	SER	9
1	A	219	VAL	9
1	A	275	ASN	8
1	A	240	SER	7
1	A	139	VAL	6
1	A	249	ASP	6
1	A	196	GLU	6
1	A	229	SER	6
1	A	301	PHE	5
1	A	138	SER	5
1	A	271	ASN	5
1	A	310	SER	5
1	A	180	ARG	5
1	A	207	SER	5
1	A	205	LYS	5
1	A	168	ILE	5
1	A	308	SER	4
1	A	288	ASP	4
1	A	204	LEU	4
1	A	290	ASN	4
1	A	307	CYS	3
1	A	224	SER	3
1	A	294	THR	3
1	A	289	ASN	3
1	A	161	SER	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	257	VAL	2
1	A	268	SER	2
1	A	260	SER	2
1	A	265	SER	2
1	A	191	ASN	2
1	A	272	THR	2
1	A	235	ARG	2
1	A	278	TYR	2
1	A	238	ASP	2
1	A	291	LEU	2
1	A	162	THR	2
1	A	318	CYS	2
1	A	175	ASP	2
1	A	316	SER	1
1	A	198	GLN	1
1	A	136	LEU	1
1	A	183	LYS	1
1	A	200	VAL	1
1	A	293	ASN	1
1	A	276	VAL	1
1	A	247	VAL	1
1	A	241	LEU	1
1	A	266	VAL	1
1	A	283	ASN	1
1	A	189	MET	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

6.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains ⓘ

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

6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers

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