



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 10:00 AM UTC

PDB ID : 2L26 / pdb_00002l26
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

<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

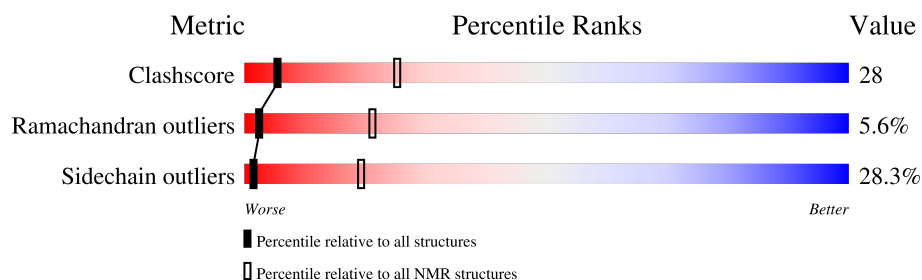
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

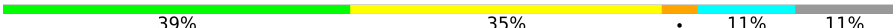
The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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	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)	0.99	9
2	A:208-A:223, A:237-A:265, A:270-A:326 (102)	1.57	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...

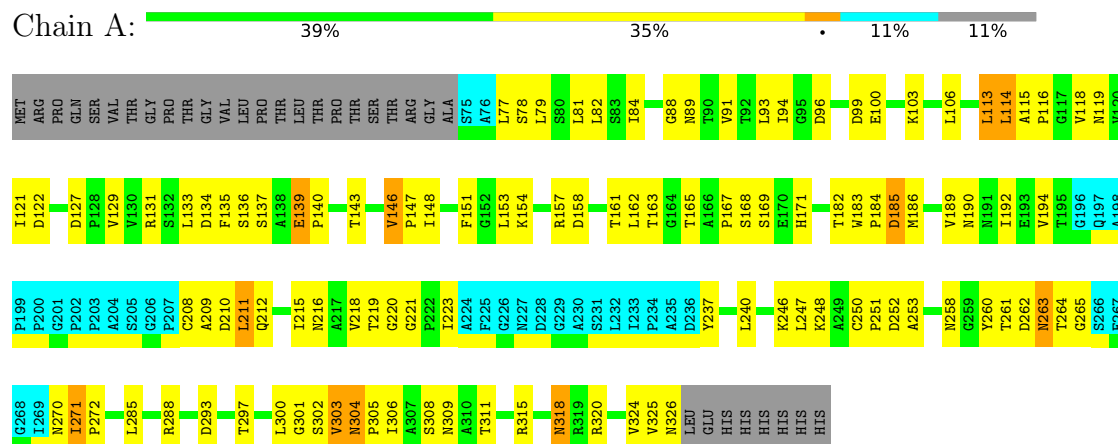
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	334	HIS	-	expression tag	UNP P65593

4 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: Uncharacterized protein Rv0899/MT0922

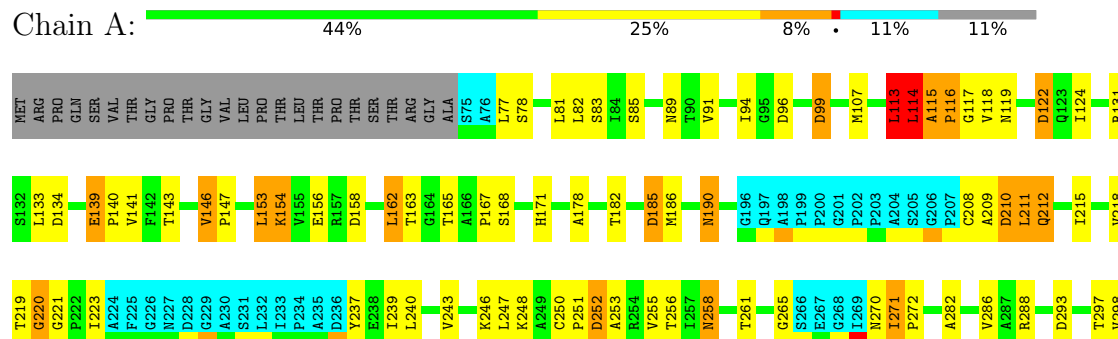


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

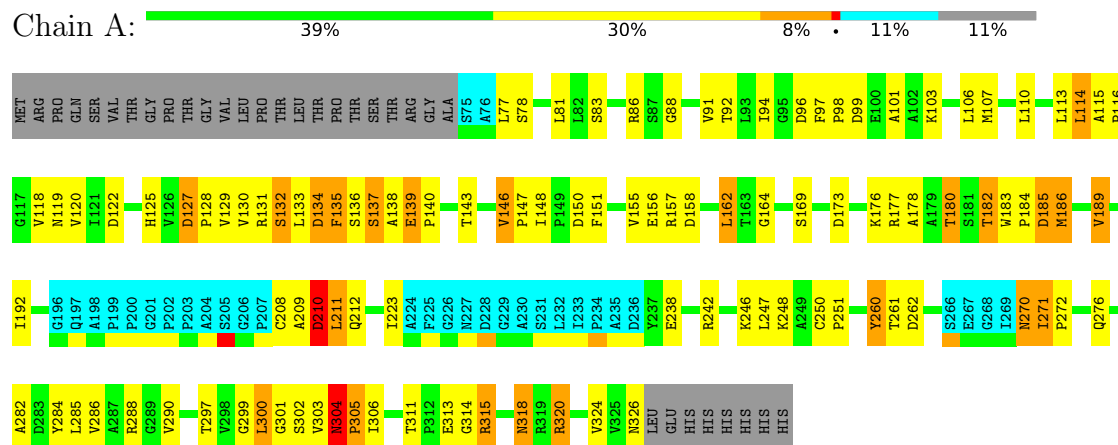
- Molecule 1: Uncharacterized protein Rv0899/MT0922





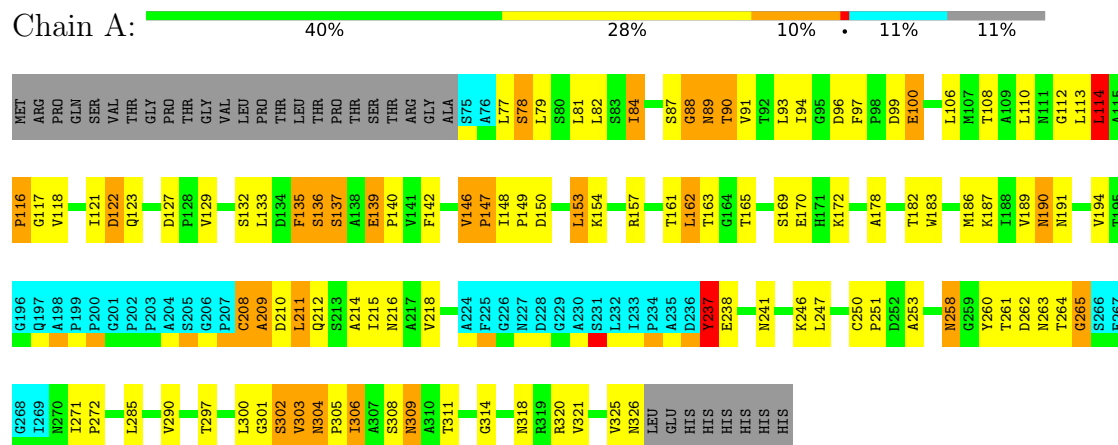
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Uncharacterized protein Rv0899/MT0922



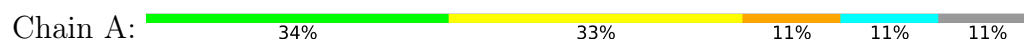
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Uncharacterized protein Rv0899/MT0922



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Uncharacterized protein Rv0899/MT0922

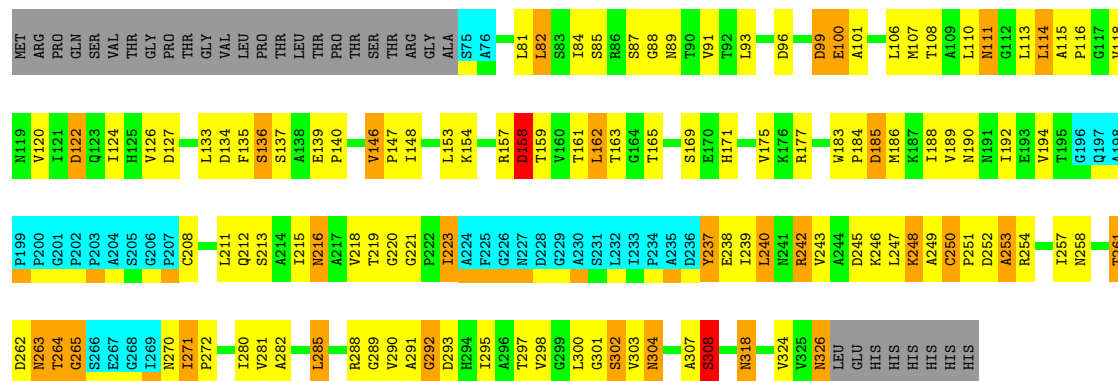




4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Uncharacterized protein Rv0899/MT0922

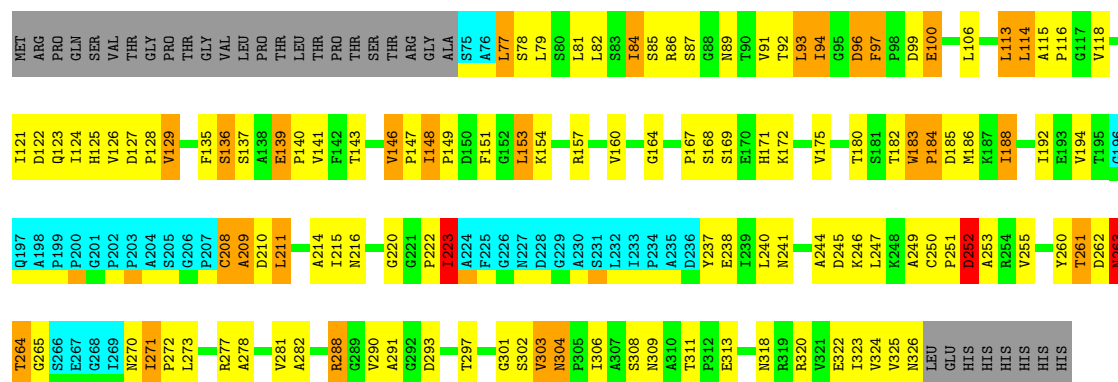
Chain A: 36% 31% 10% 11% 11%



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Uncharacterized protein Rv0899/MT0922

Chain A: 34% 33% 10% 11% 11%



4.2.9 Score per residue for model 9 (medoid)

- Molecule 1: Uncharacterized protein Rv0899/MT0922

Chain A: 44% 25% 8% 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.

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	92±11
All	All	16260	16560	16560	916

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 28.

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:HD22	1:A:162:LEU:H	1.04	1.12	7	1
1:A:223:ILE:HD12	1:A:223:ILE:H	0.96	1.19	2	1
1:A:162:LEU:HD13	1:A:162:LEU:N	0.88	1.82	7	1
1:A:161:THR:C	1:A:162:LEU:HD13	0.87	1.95	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: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:HD12	1:A:188:ILE:N	0.76	1.95	8	2
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:318:ASN:ND2	1:A:319:ARG:N	0.74	2.36	6	2
1:A:133:LEU:HD21	1:A:183:TRP:CE2	0.74	2.18	2	3
1:A:271:ILE:HD12	1:A:271:ILE:C	0.74	2.07	6	1
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:151:PHE:CD1	1:A:151:PHE:C	0.70	2.70	5	4
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: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:247:LEU:HD13	1:A:285:LEU:HD22	0.69	1.64	9	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:HG13	1:A:129:VAL:O	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	2
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:114:LEU:C	1:A:114:LEU:HD23	0.68	2.14	9	3
1:A:129:VAL:O	1:A:131:ARG:NE	0.68	2.27	6	1
1:A:270:ASN:ND2	1:A:315:ARG:NH1	0.68	2.42	1	1
1:A:166:ALA:O	1:A:194:VAL:HG12	0.68	1.89	5	1
1:A:209:ALA:O	1:A:211:LEU:N	0.68	2.27	1	3
1:A:115:ALA:HB1	1:A:116:PRO:HD2	0.68	1.66	2	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
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
1:A:97:PHE:CD2	1:A:132:SER:OG	0.67	2.48	2	2
1:A:212:GLN:CD	1:A:213:SER:N	0.67	2.52	7	1
1:A:111:ASN:ND2	1:A:112:GLY:N	0.67	2.42	6	1
1:A:262:ASP:N	1:A:318:ASN:OD1	0.67	2.28	9	1
1:A:222:PRO:C	1:A:223:ILE:HG22	0.66	2.15	8	1
1:A:97:PHE:CE2	1:A:124:ILE:HG21	0.66	2.25	8	1
1:A:208:CYS:SG	1:A:208:CYS:O	0.66	2.53	4	3
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:223:ILE:HD12	1:A:223:ILE:N	0.65	2.01	2	1
1:A:148:ILE:HG23	1:A:148:ILE:O	0.65	1.92	8	1
1:A:262:ASP:OD1	1:A:318:ASN:ND2	0.65	2.29	9	1
1:A:293:ASP:N	1:A:293:ASP:OD1	0.65	2.28	4	2
1:A:270:ASN:ND2	1:A:270:ASN:N	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:O	1:A:194:VAL:HG23	0.64	1.93	7	4
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:251:PRO:C	1:A:253:ALA:N	0.64	2.53	4	7
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:162:LEU:N	1:A:162:LEU:CD1	0.63	2.52	7	3
1:A:304:ASN:N	1:A:305:PRO:CD	0.63	2.60	3	5
1:A:186:MET:SD	1:A:186:MET:O	0.63	2.57	9	1
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:318:ASN:ND2	1:A:318:ASN:C	0.63	2.55	6	3
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:135:PHE:O	1:A:136:SER:C	0.63	2.42	5	7
1:A:126:VAL:O	1:A:126:VAL:HG13	0.62	1.94	8	2
1:A:139:GLU:N	1:A:140:PRO:CD	0.62	2.62	10	7
1:A:219:THR:O	1:A:220:GLY:C	0.62	2.42	1	1
1:A:301:GLY:O	1:A:302:SER:OG	0.62	2.12	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:111:ASN:ND2	1:A:111:ASN:C	0.62	2.57	7	2
1:A:79:LEU:HD12	1:A:79:LEU:N	0.62	2.10	8	1
1:A:116:PRO:C	1:A:118:VAL:N	0.62	2.57	4	7
1:A:271:ILE:CD1	1:A:299:GLY:O	0.62	2.47	10	1
1:A:211:LEU:H	1:A:211:LEU:CD2	0.62	2.08	3	1
1:A:83:SER:C	1:A:84:ILE:HD13	0.61	2.18	4	1
1:A:253:ALA:HB1	1:A:326:ASN:C	0.61	2.19	3	6
1:A:190:ASN:HD22	1:A:190:ASN:H	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:184:PRO:C	1:A:186:MET:N	0.61	2.58	9	7
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:253:ALA:CB	1:A:326:ASN:C	0.61	2.74	10	5
1:A:133:LEU:HD21	1:A:183:TRP:CZ2	0.61	2.31	7	2
1:A:252:ASP:OD1	1:A:253:ALA:N	0.61	2.34	10	1
1:A:264:THR:OG1	1:A:265:GLY:N	0.61	2.31	10	1
1:A:116:PRO:C	1:A:118:VAL:H	0.61	2.04	1	6
1:A:115:ALA:O	1:A:118:VAL:CG2	0.61	2.49	2	1
1:A:209:ALA:C	1:A:211:LEU:N	0.60	2.58	1	3
1:A:179:ALA:O	1:A:183:TRP:N	0.60	2.34	6	2
1:A:326:ASN:N	1:A:326:ASN:OD1	0.60	2.32	7	1
1:A:135:PHE:N	1:A:135:PHE:CD1	0.60	2.68	2	1
1:A:93:LEU:HD23	1:A:94:ILE:N	0.60	2.11	9	3
1:A:208:CYS:O	1:A:209:ALA:C	0.60	2.44	8	2
1:A:302:SER:O	1:A:303:VAL:O	0.60	2.19	9	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:113:LEU:O	1:A:114:LEU:C	0.60	2.43	2	7
1:A:156:GLU:O	1:A:157:ARG:C	0.60	2.45	5	2
1:A:99:ASP:N	1:A:99:ASP:OD1	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:262:ASP:CG	1:A:318:ASN:CG	0.60	2.70	9	1
1:A:87:SER:O	1:A:90:THR:CB	0.60	2.50	3	1
1:A:95:GLY:C	1:A:96:ASP:OD1	0.60	2.45	10	2
1:A:183:TRP:O	1:A:185:ASP:N	0.59	2.32	8	2
1:A:264:THR:O	1:A:265:GLY:C	0.59	2.45	10	2
1:A:211:LEU:O	1:A:215:ILE:CG2	0.59	2.50	3	2
1:A:193:GLU:CD	1:A:193:GLU:O	0.59	2.46	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:264:THR:HG22	1:A:265:GLY:N	0.59	2.13	9	2
1:A:113:LEU:HD13	1:A:113:LEU:O	0.59	1.97	6	1
1:A:261:THR:O	1:A:318:ASN:ND2	0.59	2.35	7	1
1:A:300:LEU:H	1:A:300:LEU:HD12	0.59	1.57	1	1
1:A:216:ASN:ND2	1:A:216:ASN:C	0.59	2.59	3	1
1:A:208:CYS:O	1:A:209:ALA:O	0.59	2.21	3	4
1:A:302:SER:O	1:A:303:VAL:C	0.59	2.46	4	2
1:A:86:ARG:C	1:A:149:PRO:O	0.59	2.46	4	1
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:184:PRO:C	1:A:186:MET:H	0.58	2.07	9	4
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:252:ASP:OD1	1:A:252:ASP:N	0.58	2.32	8	1
1:A:158:ASP:CG	1:A:158:ASP:O	0.58	2.46	1	1
1:A:260:TYR:O	1:A:318:ASN:O	0.58	2.22	4	6
1:A:277:ARG:NH1	1:A:319:ARG:CZ	0.58	2.67	10	1
1:A:301:GLY:O	1:A:302:SER:C	0.58	2.47	2	4
1:A:79:LEU:N	1:A:79:LEU:CD1	0.58	2.67	8	1
1:A:145:SER:OG	1:A:151:PHE:CE2	0.58	2.57	9	1
1:A:178:ALA:O	1:A:182:THR:OG1	0.58	2.22	2	3
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:88:GLY:C	1:A:90:THR:H	0.58	2.07	3	2
1:A:262:ASP:O	1:A:303:VAL:O	0.58	2.22	6	1
1:A:249:ALA:O	1:A:252:ASP:OD1	0.58	2.22	8	1
1:A:208:CYS:HA	1:A:211:LEU:HD12	0.57	1.75	1	1
1:A:304:ASN:C	1:A:306:ILE:H	0.57	2.06	2	1
1:A:300:LEU:O	1:A:301:GLY:O	0.57	2.22	5	1
1:A:305:PRO:O	1:A:306:ILE:C	0.57	2.48	1	1
1:A:135:PHE:O	1:A:137:SER:N	0.57	2.38	5	3
1:A:243:VAL:HG12	1:A:247:LEU:HD13	0.57	1.76	10	1
1:A:309:ASN:HD22	1:A:309:ASN:C	0.57	2.06	10	1
1:A:209:ALA:O	1:A:210:ASP:C	0.57	2.47	3	6
1:A:211:LEU:CB	1:A:245:ASP:O	0.57	2.52	7	1
1:A:210:ASP:N	1:A:210:ASP:OD1	0.57	2.38	2	1
1:A:315:ARG:CZ	1:A:319:ARG:NH2	0.57	2.68	4	1
1:A:212:GLN:CD	1:A:212:GLN:C	0.57	2.71	3	2
1:A:216:ASN:ND2	1:A:216:ASN:O	0.56	2.38	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:156:GLU:O	1:A:158:ASP:N	0.56	2.38	5	3
1:A:299:GLY:O	1:A:301:GLY:N	0.56	2.38	4	1
1:A:264:THR:O	1:A:270:ASN:OD1	0.56	2.22	5	1
1:A:81:LEU:HD23	1:A:82:LEU:N	0.56	2.15	7	1
1:A:237:TYR:O	1:A:241:ASN:OD1	0.56	2.23	3	1
1:A:258:ASN:OD1	1:A:258:ASN:N	0.56	2.38	1	1
1:A:127:ASP:C	1:A:129:VAL:H	0.56	2.08	2	1
1:A:241:ASN:OD1	1:A:241:ASN:C	0.56	2.48	5	1
1:A:162:LEU:N	1:A:162:LEU:CD2	0.56	2.58	7	1
1:A:262:ASP:CG	1:A:309:ASN:OD1	0.56	2.49	9	1
1:A:216:ASN:O	1:A:220:GLY:N	0.56	2.38	9	5
1:A:184:PRO:O	1:A:185:ASP:C	0.56	2.48	7	6
1:A:97:PHE:CE2	1:A:124:ILE:CG2	0.56	2.89	8	1
1:A:263:ASN:O	1:A:264:THR:OG1	0.56	2.22	10	1
1:A:252:ASP:OD1	1:A:252:ASP:C	0.56	2.48	6	2
1:A:270:ASN:OD1	1:A:271:ILE:N	0.56	2.38	8	1
1:A:303:VAL:O	1:A:304:ASN:C	0.56	2.47	1	3
1:A:219:THR:C	1:A:221:GLY:H	0.56	2.08	5	5
1:A:291:ALA:C	1:A:293:ASP:H	0.56	2.09	10	5
1:A:262:ASP:CG	1:A:263:ASN:H	0.56	2.08	6	2
1:A:326:ASN:O	1:A:326:ASN:ND2	0.56	2.38	9	1
1:A:140:PRO:O	1:A:143:THR:OG1	0.56	2.24	6	4
1:A:81:LEU:H	1:A:81:LEU:CD2	0.56	2.13	9	1
1:A:183:TRP:C	1:A:185:ASP:H	0.55	2.09	4	3
1:A:190:ASN:ND2	1:A:190:ASN:H	0.55	1.99	9	2
1:A:262:ASP:OD2	1:A:309:ASN:OD1	0.55	2.25	9	1
1:A:251:PRO:C	1:A:253:ALA:H	0.55	2.07	4	5
1:A:262:ASP:OD1	1:A:262:ASP:C	0.55	2.50	4	1
1:A:326:ASN:O	1:A:326:ASN:OD1	0.55	2.24	2	1
1:A:292:GLY:O	1:A:295:ILE:HG22	0.55	2.00	5	1
1:A:263:ASN:CG	1:A:264:THR:N	0.55	2.63	9	1
1:A:247:LEU:HD21	1:A:285:LEU:HD13	0.55	1.79	4	1
1:A:122:ASP:CG	1:A:122:ASP:O	0.55	2.49	8	1
1:A:115:ALA:O	1:A:118:VAL:HG12	0.55	2.02	6	2
1:A:263:ASN:O	1:A:264:THR:C	0.55	2.50	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:107:MET:C	1:A:107:MET:SD	0.55	2.90	10	1
1:A:251:PRO:O	1:A:252:ASP:C	0.54	2.49	10	4
1:A:151:PHE:CD1	1:A:152:GLY:N	0.54	2.74	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:304:ASN:O	1:A:306:ILE:N	0.54	2.40	2	1
1:A:99:ASP:OD1	1:A:100:GLU:N	0.54	2.40	3	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:135:PHE:HA	1:A:138:ALA:HB3	0.54	1.78	4	1
1:A:148:ILE:O	1:A:148:ILE:HG22	0.54	2.02	5	1
1:A:111:ASN:HD22	1:A:112:GLY:N	0.54	1.99	6	1
1:A:299:GLY:O	1:A:300:LEU:C	0.54	2.49	9	2
1:A:212:GLN:OE1	1:A:212:GLN:C	0.54	2.51	7	1
1:A:88:GLY:N	1:A:150:ASP:OD1	0.54	2.40	2	1
1:A:78:SER:O	1:A:79:LEU:HD23	0.54	2.02	3	1
1:A:114:LEU:C	1:A:114:LEU:CD2	0.54	2.81	5	3
1:A:309:ASN:HD22	1:A:309:ASN:N	0.54	2.00	5	1
1:A:262:ASP:O	1:A:262:ASP:OD1	0.54	2.24	8	1
1:A:244:ALA:HB1	1:A:288:ARG:HG2	0.54	1.79	9	2
1:A:263:ASN:C	1:A:265:GLY:H	0.54	2.11	7	1
1:A:113:LEU:HD23	1:A:113:LEU:O	0.54	2.02	5	1
1:A:157:ARG:C	1:A:159:THR:H	0.54	2.10	7	2
1:A:139:GLU:O	1:A:143:THR:HG23	0.54	2.03	2	2
1:A:190:ASN:CG	1:A:190:ASN:O	0.54	2.50	3	1
1:A:261:THR:C	1:A:318:ASN:OD1	0.54	2.51	9	2
1:A:262:ASP:OD1	1:A:262:ASP:N	0.54	2.39	6	1
1:A:98:PRO:O	1:A:99:ASP:OD1	0.54	2.25	2	1
1:A:308:SER:O	1:A:309:ASN:C	0.54	2.49	5	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:291:ALA:C	1:A:293:ASP:N	0.53	2.64	7	5
1:A:180:THR:O	1:A:185:ASP:CB	0.53	2.56	8	1
1:A:209:ALA:C	1:A:211:LEU:H	0.53	2.11	2	3
1:A:87:SER:O	1:A:88:GLY:C	0.53	2.50	3	2
1:A:150:ASP:OD2	1:A:165:THR:O	0.53	2.26	3	1
1:A:215:ILE:HG21	1:A:325:VAL:HG11	0.53	1.80	5	1
1:A:128:PRO:O	1:A:129:VAL:CG2	0.53	2.56	8	1
1:A:129:VAL:O	1:A:130:VAL:O	0.53	2.27	5	1
1:A:270:ASN:ND2	1:A:270:ASN:H	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:81:LEU:H	1:A:81:LEU:HD23	0.53	1.64	9	1
1:A:285:LEU:O	1:A:290:VAL:HG23	0.53	2.03	3	3
1:A:161:THR:HG23	1:A:189:VAL:HG23	0.53	1.81	5	1
1:A:309:ASN:CG	1:A:309:ASN:O	0.53	2.52	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:308:SER:OG	1:A:309:ASN:N	0.53	2.40	10	1
1:A:280:ILE:CG2	1:A:281:VAL:N	0.53	2.71	7	1
1:A:122:ASP:OD1	1:A:122:ASP:N	0.53	2.40	7	3
1:A:315:ARG:O	1:A:318:ASN:OD1	0.53	2.26	2	1
1:A:218:VAL:HG21	1:A:246:LYS:NZ	0.53	2.19	1	1
1:A:260:TYR:CD1	1:A:260:TYR:N	0.53	2.76	10	1
1:A:133:LEU:HD21	1:A:183:TRP:CD1	0.53	2.39	4	1
1:A:300:LEU:N	1:A:300:LEU:HD12	0.53	2.18	5	1
1:A:261:THR:O	1:A:318:ASN:CG	0.53	2.51	8	1
1:A:318:ASN:HD22	1:A:318:ASN:C	0.53	2.12	1	1
1:A:113:LEU:HD13	1:A:113:LEU:C	0.53	2.29	6	1
1:A:271:ILE:HG23	1:A:272:PRO:HD3	0.52	1.81	6	1
1:A:106:LEU:HD23	1:A:106:LEU:O	0.52	2.04	10	2
1:A:291:ALA:O	1:A:293:ASP:N	0.52	2.43	7	1
1:A:135:PHE:CD1	1:A:135:PHE:N	0.52	2.75	10	2
1:A:161:THR:CG2	1:A:191:ASN:HD22	0.52	2.17	3	1
1:A:271:ILE:C	1:A:271:ILE:CD1	0.52	2.74	6	1
1:A:100:GLU:N	1:A:100:GLU:OE1	0.52	2.41	8	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:212:GLN:H	1:A:212:GLN:CD	0.52	2.10	1	1
1:A:277:ARG:O	1:A:281:VAL:HG23	0.52	2.04	4	1
1:A:248:LYS:C	1:A:250:CYS:H	0.52	2.11	7	2
1:A:182:THR:HG22	1:A:183:TRP:N	0.52	2.20	4	2
1:A:301:GLY:O	1:A:302:SER:O	0.52	2.27	10	1
1:A:85:SER:O	1:A:92:THR:O	0.52	2.27	5	1
1:A:262:ASP:OD1	1:A:309:ASN:OD1	0.52	2.27	9	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:119:ASN:N	1:A:119:ASN:OD1	0.52	2.43	5	1
1:A:302:SER:C	1:A:303:VAL:CG2	0.52	2.83	8	1
1:A:193:GLU:CD	1:A:193:GLU:C	0.52	2.78	5	1
1:A:261:THR:C	1:A:318:ASN:ND2	0.52	2.68	7	1
1:A:212:GLN:OE1	1:A:212:GLN:N	0.52	2.42	1	1
1:A:219:THR:O	1:A:221:GLY:N	0.52	2.43	1	4
1:A:211:LEU:HD23	1:A:211:LEU:H	0.51	1.59	3	1
1:A:137:SER:O	1:A:137:SER:OG	0.51	2.25	5	1
1:A:247:LEU:HD23	1:A:247:LEU:C	0.51	2.30	7	1
1:A:148:ILE:C	1:A:150:ASP:H	0.51	2.13	3	1
1:A:277:ARG:NH1	1:A:319:ARG:NH2	0.51	2.59	10	1
1:A:113:LEU:O	1:A:114:LEU:CB	0.51	2.58	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:271:ILE:N	1:A:272:PRO:HD2	0.51	2.21	8	8
1:A:113:LEU:O	1:A:113:LEU:HD23	0.51	2.05	2	1
1:A:210:ASP:O	1:A:214:ALA:N	0.51	2.37	3	3
1:A:262:ASP:CG	1:A:263:ASN:N	0.51	2.64	5	3
1:A:262:ASP:O	1:A:264:THR:N	0.51	2.44	9	1
1:A:319:ARG:O	1:A:320:ARG:NE	0.51	2.44	1	1
1:A:302:SER:C	1:A:303:VAL:HG13	0.51	2.29	9	1
1:A:146:VAL:N	1:A:147:PRO:HD2	0.50	2.22	8	8
1:A:141:VAL:O	1:A:145:SER:OG	0.50	2.28	5	1
1:A:88:GLY:C	1:A:90:THR:N	0.50	2.65	3	2
1:A:190:ASN:O	1:A:190:ASN:ND2	0.50	2.44	3	1
1:A:211:LEU:HD13	1:A:326:ASN:O	0.50	2.06	4	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:216:ASN:C	1:A:216:ASN:HD22	0.50	2.13	3	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: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:100:GLU:C	1:A:100:GLU:OE1	0.50	2.54	7	1
1:A:301:GLY:O	1:A:303:VAL:N	0.50	2.45	7	1
1:A:211:LEU:O	1:A:215:ILE:N	0.50	2.41	9	1
1:A:300:LEU:CD2	1:A:300:LEU:N	0.49	2.75	10	1
1:A:208:CYS:O	1:A:211:LEU:HD23	0.49	2.07	8	1
1:A:165:THR:HG22	1:A:193:GLU:O	0.49	2.08	9	1
1:A:212:GLN:CD	1:A:212:GLN:O	0.49	2.55	3	1
1:A:215:ILE:O	1:A:218:VAL:HG12	0.49	2.07	10	1
1:A:260:TYR:CE1	1:A:300:LEU:CD1	0.49	2.96	4	1
1:A:115:ALA:CB	1:A:116:PRO:CD	0.49	2.87	2	1
1:A:113:LEU:C	1:A:113:LEU:CD1	0.49	2.85	6	1
1:A:152:GLY:N	1:A:163:THR:O	0.49	2.46	9	1
1:A:215:ILE:CG2	1:A:216:ASN:N	0.49	2.75	10	4
1:A:158:ASP:C	1:A:185:ASP:OD2	0.49	2.56	7	2
1:A:260:TYR:C	1:A:260:TYR:CD1	0.49	2.86	3	1
1:A:219:THR:C	1:A:221:GLY:N	0.49	2.71	10	4
1:A:125:HIS:ND1	1:A:125:HIS:N	0.49	2.60	6	1
1:A:115:ALA:N	1:A:116:PRO:CD	0.49	2.76	1	1
1:A:270:ASN:HD22	1:A:315:ARG:NH1	0.49	2.06	1	1
1:A:323:ILE:N	1:A:323:ILE:CD1	0.49	2.76	6	1
1:A:263:ASN:C	1:A:263:ASN:ND2	0.49	2.71	10	1
1:A:121:ILE:C	1:A:122:ASP:OD1	0.48	2.57	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:146:VAL:C	1:A:148:ILE:H	0.48	2.15	3	2
1:A:300:LEU:O	1:A:301:GLY:C	0.48	2.56	5	1
1:A:256:THR:HG22	1:A:258:ASN:HD21	0.48	1.68	6	1
1:A:99:ASP:C	1:A:101:ALA:N	0.48	2.71	2	2
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:162:LEU:C	1:A:162:LEU:HD23	0.48	2.34	10	1
1:A:96:ASP:OD1	1:A:96:ASP:N	0.48	2.42	10	3
1:A:92:THR:HG22	1:A:94:ILE:CD1	0.48	2.38	5	1
1:A:127:ASP:O	1:A:128:PRO:C	0.48	2.56	5	1
1:A:271:ILE:HD11	1:A:299:GLY:O	0.48	2.07	10	1
1:A:162:LEU:N	1:A:162:LEU:HD23	0.48	2.23	3	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:91:VAL:O	1:A:91:VAL:CG2	0.48	2.61	2	1
1:A:173:ASP:OD1	1:A:173:ASP:C	0.48	2.57	10	2
1:A:211:LEU:CD1	1:A:211:LEU:H	0.48	2.17	4	1
1:A:241:ASN:OD1	1:A:241:ASN:O	0.48	2.32	5	1
1:A:81:LEU:HD23	1:A:81:LEU:N	0.48	2.23	9	1
1:A:240:LEU:C	1:A:240:LEU:HD23	0.48	2.33	4	1
1:A:185:ASP:C	1:A:185:ASP:OD1	0.48	2.56	7	1
1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:OD1	0.48	2.47	8	1
1:A:277:ARG:O	1:A:281:VAL:HG22	0.48	2.09	8	1
1:A:262:ASP:OD1	1:A:318:ASN:OD1	0.48	2.31	10	1
1:A:190:ASN:OD1	1:A:190:ASN:C	0.48	2.55	7	1
1:A:244:ALA:HB1	1:A:288:ARG:HG3	0.48	1.85	8	2
1:A:262:ASP:O	1:A:263:ASN:C	0.48	2.57	9	2
1:A:115:ALA:N	1:A:116:PRO:HD2	0.48	2.24	1	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:264:THR:O	1:A:265:GLY:O	0.48	2.32	7	1
1:A:277:ARG:O	1:A:280:ILE:CG1	0.48	2.62	10	1
1:A:246:LYS:CB	1:A:246:LYS:NZ	0.47	2.77	3	1
1:A:211:LEU:HD12	1:A:326:ASN:O	0.47	2.09	8	1
1:A:218:VAL:CG1	1:A:219:THR:N	0.47	2.76	5	1
1:A:153:LEU:HD23	1:A:154:LYS:N	0.47	2.23	1	1
1:A:103:LYS:NZ	1:A:122:ASP:OD2	0.47	2.47	5	1
1:A:133:LEU:O	1:A:135:PHE:CE2	0.47	2.67	7	2
1:A:120:VAL:O	1:A:120:VAL:HG13	0.47	2.09	7	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:LEU:HD12	1:A:110:LEU:C	0.47	2.34	10	1
1:A:151:PHE:CD1	1:A:151:PHE:O	0.47	2.67	2	2
1:A:135:PHE:C	1:A:137:SER:N	0.47	2.72	3	3
1:A:295:ILE:O	1:A:295:ILE:CG2	0.47	2.62	6	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:129:VAL:O	1:A:129:VAL:CG1	0.47	2.60	5	1
1:A:240:LEU:O	1:A:288:ARG:NE	0.47	2.45	5	1
1:A:272:PRO:O	1:A:276:GLN:CB	0.47	2.62	5	1
1:A:309:ASN:C	1:A:309:ASN:ND2	0.47	2.73	10	1
1:A:270:ASN:N	1:A:270:ASN:HD22	0.47	2.06	5	1
1:A:252:ASP:OD2	1:A:326:ASN:CB	0.47	2.63	7	1
1:A:262:ASP:CG	1:A:318:ASN:ND2	0.47	2.73	9	1
1:A:309:ASN:HD21	1:A:315:ARG:NH2	0.47	2.06	9	1
1:A:300:LEU:N	1:A:300:LEU:HD22	0.47	2.25	10	1
1:A:148:ILE:C	1:A:150:ASP:N	0.47	2.73	3	1
1:A:263:ASN:O	1:A:270:ASN:CG	0.47	2.58	5	1
1:A:301:GLY:C	1:A:303:VAL:N	0.47	2.70	7	1
1:A:237:TYR:O	1:A:237:TYR:CD1	0.47	2.68	8	1
1:A:285:LEU:O	1:A:290:VAL:CG2	0.46	2.64	7	2
1:A:246:LYS:O	1:A:249:ALA:CB	0.46	2.62	5	2
1:A:148:ILE:HD11	1:A:171:HIS:CE1	0.46	2.45	6	1
1:A:129:VAL:HG13	1:A:130:VAL:N	0.46	2.25	10	1
1:A:161:THR:HG22	1:A:189:VAL:CB	0.46	2.41	10	1
1:A:133:LEU:CD2	1:A:183:TRP:CE2	0.46	2.96	2	1
1:A:161:THR:HG23	1:A:189:VAL:HB	0.46	1.87	6	2
1:A:304:ASN:N	1:A:305:PRO:HD2	0.46	2.22	3	1
1:A:81:LEU:HD12	1:A:81:LEU:H	0.46	1.69	6	1
1:A:256:THR:HB	1:A:324:VAL:HG23	0.46	1.88	9	1
1:A:115:ALA:HB3	1:A:116:PRO:HD3	0.46	1.88	1	1
1:A:304:ASN:C	1:A:306:ILE:N	0.46	2.72	2	1
1:A:247:LEU:O	1:A:251:PRO:HD3	0.46	2.11	10	2
1:A:304:ASN:C	1:A:304:ASN:HD22	0.46	2.18	4	1
1:A:208:CYS:O	1:A:208:CYS:SG	0.46	2.73	8	2
1:A:93:LEU:O	1:A:123:GLN:N	0.46	2.47	4	1
1:A:81:LEU:H	1:A:81:LEU:CD1	0.46	2.23	6	1
1:A:84:ILE:CG2	1:A:153:LEU:O	0.46	2.64	8	1
1:A:128:PRO:C	1:A:129:VAL:HG23	0.46	2.36	8	1
1:A:291:ALA:O	1:A:294:HIS:ND1	0.46	2.49	10	1
1:A:127:ASP:C	1:A:129:VAL:N	0.46	2.74	2	1
1:A:77:LEU:C	1:A:78:SER:OG	0.46	2.59	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:194:VAL:O	1:A:194:VAL:CG2	0.46	2.64	6	3
1:A:185:ASP:O	1:A:185:ASP:OD1	0.46	2.32	7	1
1:A:148:ILE:O	1:A:148:ILE:CG2	0.46	2.62	8	1
1:A:250:CYS:SG	1:A:325:VAL:HG11	0.46	2.50	9	1
1:A:260:TYR:CD2	1:A:320:ARG:NH2	0.46	2.84	2	1
1:A:270:ASN:CG	1:A:271:ILE:N	0.46	2.74	8	1
1:A:115:ALA:O	1:A:118:VAL:O	0.45	2.34	1	1
1:A:137:SER:O	1:A:138:ALA:HB3	0.45	2.11	2	1
1:A:134:ASP:OD1	1:A:134:ASP:N	0.45	2.50	2	2
1:A:127:ASP:HB3	1:A:130:VAL:HG13	0.45	1.87	5	1
1:A:161:THR:C	1:A:162:LEU:HD12	0.45	2.36	6	1
1:A:145:SER:OG	1:A:151:PHE:CD2	0.45	2.63	9	1
1:A:314:GLY:O	1:A:318:ASN:ND2	0.45	2.50	3	1
1:A:162:LEU:HD23	1:A:163:THR:N	0.45	2.26	10	1
1:A:215:ILE:HD11	1:A:243:VAL:HG13	0.45	1.89	1	1
1:A:261:THR:CG2	1:A:270:ASN:OD1	0.45	2.65	2	1
1:A:211:LEU:O	1:A:211:LEU:HD13	0.45	2.10	5	1
1:A:271:ILE:HD13	1:A:301:GLY:HA2	0.45	1.89	6	1
1:A:134:ASP:OD1	1:A:134:ASP:C	0.45	2.60	9	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:81:LEU:HD12	1:A:81:LEU:C	0.45	2.37	4	1
1:A:301:GLY:O	1:A:302:SER:HB2	0.45	2.10	4	1
1:A:250:CYS:N	1:A:251:PRO:HD3	0.45	2.25	8	2
1:A:88:GLY:H	1:A:150:ASP:CG	0.45	2.20	2	1
1:A:185:ASP:C	1:A:187:LYS:H	0.45	2.20	9	1
1:A:107:MET:O	1:A:111:ASN:N	0.45	2.50	10	1
1:A:315:ARG:HH11	1:A:315:ARG:CG	0.45	2.25	1	1
1:A:121:ILE:O	1:A:122:ASP:OD1	0.45	2.35	4	1
1:A:309:ASN:N	1:A:309:ASN:ND2	0.45	2.65	5	1
1:A:247:LEU:CD2	1:A:285:LEU:HD13	0.45	2.42	4	1
1:A:264:THR:OG1	1:A:309:ASN:CG	0.45	2.60	9	1
1:A:240:LEU:HD23	1:A:240:LEU:O	0.44	2.12	4	1
1:A:89:ASN:O	1:A:118:VAL:HG13	0.44	2.12	5	1
1:A:88:GLY:N	1:A:149:PRO:O	0.44	2.50	10	1
1:A:277:ARG:HH11	1:A:319:ARG:NH2	0.44	2.10	10	1
1:A:301:GLY:C	1:A:303:VAL:H	0.44	2.19	1	1
1:A:304:ASN:O	1:A:304:ASN:ND2	0.44	2.49	4	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:111:ASN:OD1	1:A:111:ASN:C	0.44	2.59	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:LEU:HD23	1:A:84:ILE:HD11	0.44	1.88	4	1
1:A:183:TRP:C	1:A:185:ASP:N	0.44	2.75	4	2
1:A:212:GLN:OE1	1:A:213:SER:N	0.44	2.50	7	1
1:A:313:GLU:CD	1:A:313:GLU:C	0.44	2.86	8	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:97:PHE:C	1:A:130:VAL:CG2	0.44	2.91	10	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:209:ALA:C	1:A:210:ASP:CG	0.44	2.85	6	1
1:A:157:ARG:C	1:A:159:THR:N	0.44	2.75	7	1
1:A:99:ASP:C	1:A:100:GLU:OE1	0.44	2.61	8	1
1:A:81:LEU:CD2	1:A:81:LEU:N	0.44	2.81	9	1
1:A:129:VAL:CG1	1:A:130:VAL:N	0.44	2.81	10	1
1:A:271:ILE:HG23	1:A:272:PRO:CD	0.44	2.43	6	1
1:A:248:LYS:O	1:A:250:CYS:SG	0.44	2.76	7	1
1:A:263:ASN:O	1:A:270:ASN:ND2	0.43	2.50	5	1
1:A:323:ILE:HD12	1:A:323:ILE:N	0.43	2.28	9	1
1:A:141:VAL:HG23	1:A:182:THR:OG1	0.43	2.13	4	1
1:A:87:SER:N	1:A:90:THR:O	0.43	2.45	5	1
1:A:249:ALA:O	1:A:252:ASP:N	0.43	2.44	5	1
1:A:260:TYR:OH	1:A:320:ARG:NE	0.43	2.48	6	1
1:A:146:VAL:C	1:A:148:ILE:N	0.43	2.76	7	1
1:A:86:ARG:HG2	1:A:91:VAL:HG13	0.43	1.89	8	1
1:A:263:ASN:ND2	1:A:265:GLY:O	0.43	2.51	9	1
1:A:313:GLU:CG	1:A:314:GLY:N	0.43	2.81	2	1
1:A:158:ASP:O	1:A:186:MET:SD	0.43	2.76	5	1
1:A:300:LEU:N	1:A:300:LEU:CD1	0.43	2.81	5	1
1:A:79:LEU:HD11	1:A:132:SER:C	0.43	2.39	6	1
1:A:148:ILE:O	1:A:150:ASP:N	0.43	2.51	3	1
1:A:301:GLY:O	1:A:304:ASN:N	0.43	2.50	7	1
1:A:259:GLY:C	1:A:260:TYR:CD1	0.43	2.96	10	1
1:A:223:ILE:CD1	1:A:223:ILE:N	0.43	2.73	2	1
1:A:260:TYR:HB2	1:A:303:VAL:HG11	0.43	1.90	6	1
1:A:280:ILE:HG23	1:A:281:VAL:N	0.43	2.29	7	1
1:A:212:GLN:O	1:A:216:ASN:OD1	0.43	2.36	4	1
1:A:129:VAL:C	1:A:130:VAL:O	0.43	2.62	5	1
1:A:248:LYS:C	1:A:250:CYS:SG	0.43	3.02	7	1
1:A:263:ASN:C	1:A:265:GLY:N	0.43	2.76	7	1
1:A:248:LYS:C	1:A:250:CYS:N	0.43	2.75	7	2
1:A:253:ALA:HB3	1:A:326:ASN:O	0.43	2.14	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:282:ALA:O	1:A:286:VAL:CG2	0.43	2.58	1	1
1:A:86:ARG:NH2	1:A:110:LEU:HD21	0.43	2.28	2	1
1:A:139:GLU:CB	1:A:140:PRO:CD	0.43	2.97	3	3
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:150:ASP:OD1	1:A:150:ASP:O	0.43	2.36	10	1
1:A:141:VAL:HG13	1:A:178:ALA:HB1	0.43	1.91	1	1
1:A:243:VAL:HG13	1:A:285:LEU:HD13	0.43	1.90	5	1
1:A:135:PHE:O	1:A:138:ALA:CB	0.43	2.67	6	1
1:A:158:ASP:OD1	1:A:186:MET:SD	0.42	2.77	1	1
1:A:261:THR:CG2	1:A:263:ASN:OD1	0.42	2.67	5	1
1:A:158:ASP:OD1	1:A:158:ASP:N	0.42	2.46	6	1
1:A:278:ALA:O	1:A:282:ALA:HB2	0.42	2.14	8	1
1:A:86:ARG:NH1	1:A:148:ILE:O	0.42	2.50	10	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:315:ARG:NH1	1:A:315:ARG:CG	0.42	2.79	1	1
1:A:176:LYS:O	1:A:180:THR:OG1	0.42	2.36	2	1
1:A:79:LEU:HD13	1:A:133:LEU:HD12	0.42	1.91	9	1
1:A:299:GLY:C	1:A:300:LEU:HD22	0.42	2.39	10	1
1:A:141:VAL:CG2	1:A:182:THR:OG1	0.42	2.67	8	2
1:A:322:GLU:C	1:A:323:ILE:HD13	0.42	2.39	6	1
1:A:247:LEU:HD11	1:A:289:GLY:C	0.42	2.39	7	1
1:A:222:PRO:C	1:A:223:ILE:CG2	0.42	2.84	8	1
1:A:260:TYR:C	1:A:318:ASN:O	0.42	2.62	8	1
1:A:309:ASN:HD21	1:A:315:ARG:NE	0.42	2.11	9	1
1:A:146:VAL:N	1:A:147:PRO:HD3	0.42	2.28	3	1
1:A:293:ASP:O	1:A:293:ASP:OD1	0.42	2.38	6	1
1:A:110:LEU:C	1:A:112:GLY:N	0.42	2.76	3	1
1:A:300:LEU:HB3	1:A:303:VAL:HG23	0.42	1.91	4	1
1:A:133:LEU:O	1:A:135:PHE:CD2	0.42	2.72	5	1
1:A:169:SER:O	1:A:172:LYS:CG	0.42	2.68	8	1
1:A:176:LYS:HG3	1:A:177:ARG:N	0.41	2.29	2	1
1:A:211:LEU:HD12	1:A:211:LEU:N	0.41	2.30	4	1
1:A:156:GLU:C	1:A:158:ASP:N	0.41	2.77	5	1
1:A:166:ALA:O	1:A:194:VAL:CG1	0.41	2.64	5	1
1:A:81:LEU:HD23	1:A:81:LEU:C	0.41	2.40	7	1
1:A:137:SER:OG	1:A:182:THR:HG23	0.41	2.14	9	1
1:A:137:SER:C	1:A:139:GLU:H	0.41	2.23	2	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:247:LEU:HD23	1:A:290:VAL:HG21	0.41	1.91	8	1
1:A:147:PRO:O	1:A:148:ILE:HD13	0.41	2.16	2	1
1:A:84:ILE:O	1:A:84:ILE:CG1	0.41	2.68	3	1
1:A:96:ASP:O	1:A:96:ASP:OD1	0.41	2.39	7	1
1:A:111:ASN:OD1	1:A:111:ASN:O	0.41	2.38	10	1
1:A:99:ASP:O	1:A:101:ALA:N	0.41	2.53	2	1
1:A:307:ALA:C	1:A:308:SER:O	0.41	2.62	7	1
1:A:79:LEU:HD13	1:A:133:LEU:CD1	0.41	2.45	4	1
1:A:250:CYS:HA	1:A:253:ALA:HB2	0.41	1.93	7	1
1:A:180:THR:O	1:A:185:ASP:CG	0.41	2.64	8	1
1:A:254:ARG:O	1:A:326:ASN:N	0.41	2.45	9	1
1:A:218:VAL:HG21	1:A:246:LYS:HZ3	0.41	1.75	1	1
1:A:78:SER:O	1:A:131:ARG:CB	0.41	2.69	2	1
1:A:302:SER:C	1:A:303:VAL:HG22	0.41	2.41	8	1
1:A:299:GLY:O	1:A:300:LEU:O	0.41	2.39	2	1
1:A:113:LEU:HD21	1:A:118:VAL:HG11	0.41	1.92	5	1
1:A:212:GLN:HG3	1:A:213:SER:N	0.41	2.31	6	1
1:A:248:LYS:CG	1:A:249:ALA:N	0.41	2.84	4	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
1:A:248:LYS:N	1:A:248:LYS:CD	0.41	2.84	5	1
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:303:VAL:O	1:A:303:VAL:CG2	0.41	2.65	9	1
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:216:ASN:O	1:A:220:GLY:CA	0.41	2.69	6	1
1:A:292:GLY:HA2	1:A:295:ILE:HD12	0.41	1.93	7	1
1:A:315:ARG:NH1	1:A:315:ARG:HG3	0.40	2.31	1	1
1:A:162:LEU:HD12	1:A:189:VAL:O	0.40	2.16	2	1
1:A:262:ASP:OD1	1:A:263:ASN:N	0.40	2.55	4	1
1:A:212:GLN:CD	1:A:212:GLN:H	0.40	2.24	5	1
1:A:249:ALA:O	1:A:250:CYS:C	0.40	2.64	5	1
1:A:162:LEU:HD12	1:A:162:LEU:H	0.40	1.76	1	1
1:A:150:ASP:N	1:A:150:ASP:OD1	0.40	2.53	3	1
1:A:135:PHE:O	1:A:139:GLU:N	0.40	2.54	4	1
1:A:99:ASP:C	1:A:101:ALA:H	0.40	2.23	7	1
1:A:115:ALA:O	1:A:118:VAL:HG22	0.40	2.15	2	1
1:A:308:SER:C	1:A:310:ALA:H	0.40	2.23	4	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:114:LEU:O	1:A:115:ALA:HB2	0.40	2.16	1	1
1:A:281:VAL:HG23	1:A:282:ALA:N	0.40	2.31	7	1
1:A:249:ALA:C	1:A:251:PRO:HD2	0.40	2.42	8	1
1:A:314:GLY:O	1:A:318:ASN:N	0.40	2.49	9	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%)	22±3 (10±2%)	12±4 (6±2%)	2	21
All	All	2200/2840 (77%)	1851 (84%)	225 (10%)	124 (6%)	2	21

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	114	LEU	6
1	A	185	ASP	6
1	A	116	PRO	5
1	A	303	VAL	5
1	A	129	VAL	5
1	A	136	SER	5
1	A	157	ARG	5
1	A	263	ASN	5
1	A	223	ILE	4
1	A	252	ASP	4
1	A	208	CYS	4
1	A	209	ALA	4
1	A	264	THR	4
1	A	265	GLY	4
1	A	301	GLY	4
1	A	302	SER	4
1	A	117	GLY	3
1	A	210	ASP	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	306	ILE	3
1	A	128	PRO	3
1	A	237	TYR	3
1	A	310	ALA	2
1	A	300	LEU	2
1	A	304	ASN	2
1	A	305	PRO	2
1	A	167	PRO	2
1	A	184	PRO	2
1	A	253	ALA	2
1	A	292	GLY	2
1	A	308	SER	2
1	A	99	ASP	1
1	A	113	LEU	1
1	A	115	ALA	1
1	A	220	GLY	1
1	A	186	MET	1
1	A	88	GLY	1
1	A	89	ASN	1
1	A	147	PRO	1
1	A	149	PRO	1
1	A	130	VAL	1
1	A	262	ASP	1
1	A	158	ASP	1
1	A	77	LEU	1
1	A	78	SER	1
1	A	183	TRP	1
1	A	137	SER	1
1	A	309	ASN	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%)	128±4 (72±2%)	51±4 (28±2%)	1	19
All	All	1790/2260 (79%)	1283 (72%)	507 (28%)	1	19

All 143 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	146	VAL	9
1	A	297	THR	9
1	A	311	THR	9
1	A	82	LEU	8
1	A	154	LYS	8
1	A	271	ILE	8
1	A	81	LEU	7
1	A	96	ASP	7
1	A	134	ASP	7
1	A	139	GLU	7
1	A	211	LEU	7
1	A	247	LEU	7
1	A	288	ARG	7
1	A	318	ASN	7
1	A	304	ASN	7
1	A	99	ASP	6
1	A	113	LEU	6
1	A	119	ASN	6
1	A	122	ASP	6
1	A	153	LEU	6
1	A	162	LEU	6
1	A	168	SER	6
1	A	258	ASN	6
1	A	127	ASP	6
1	A	135	PHE	6
1	A	169	SER	6
1	A	324	VAL	6
1	A	78	SER	5
1	A	91	VAL	5
1	A	114	LEU	5
1	A	190	ASN	5
1	A	212	GLN	5
1	A	261	THR	5
1	A	308	SER	5
1	A	320	ARG	5
1	A	103	LYS	5
1	A	137	SER	5
1	A	325	VAL	5
1	A	93	LEU	5
1	A	121	ILE	5
1	A	192	ILE	5
1	A	77	LEU	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	83	SER	4
1	A	85	SER	4
1	A	89	ASN	4
1	A	107	MET	4
1	A	124	ILE	4
1	A	163	THR	4
1	A	239	ILE	4
1	A	240	LEU	4
1	A	248	LYS	4
1	A	255	VAL	4
1	A	293	ASP	4
1	A	106	LEU	4
1	A	125	HIS	4
1	A	158	ASP	4
1	A	182	THR	4
1	A	242	ARG	4
1	A	84	ILE	4
1	A	100	GLU	4
1	A	108	THR	4
1	A	186	MET	4
1	A	263	ASN	4
1	A	274	SER	4
1	A	94	ILE	3
1	A	131	ARG	3
1	A	133	LEU	3
1	A	165	THR	3
1	A	298	VAL	3
1	A	300	LEU	3
1	A	92	THR	3
1	A	120	VAL	3
1	A	180	THR	3
1	A	210	ASP	3
1	A	270	ASN	3
1	A	172	LYS	3
1	A	237	TYR	3
1	A	309	ASN	3
1	A	321	VAL	3
1	A	126	VAL	3
1	A	159	THR	3
1	A	241	ASN	3
1	A	313	GLU	3
1	A	145	SER	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	215	ILE	3
1	A	250	CYS	3
1	A	273	LEU	3
1	A	279	LYS	3
1	A	323	ILE	3
1	A	264	THR	3
1	A	303	VAL	3
1	A	171	HIS	2
1	A	185	ASP	2
1	A	315	ARG	2
1	A	132	SER	2
1	A	238	GLU	2
1	A	246	LYS	2
1	A	260	TYR	2
1	A	284	TYR	2
1	A	90	THR	2
1	A	123	GLN	2
1	A	170	GLU	2
1	A	191	ASN	2
1	A	195	THR	2
1	A	317	LYS	2
1	A	322	GLU	2
1	A	218	VAL	2
1	A	283	ASP	2
1	A	111	ASN	2
1	A	148	ILE	2
1	A	216	ASN	2
1	A	252	ASP	2
1	A	188	ILE	2
1	A	223	ILE	2
1	A	326	ASN	2
1	A	245	ASP	2
1	A	254	ARG	2
1	A	156	GLU	1
1	A	130	VAL	1
1	A	155	VAL	1
1	A	189	VAL	1
1	A	208	CYS	1
1	A	276	GLN	1
1	A	187	LYS	1
1	A	194	VAL	1
1	A	306	ILE	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	161	THR	1
1	A	277	ARG	1
1	A	294	HIS	1
1	A	118	VAL	1
1	A	150	ASP	1
1	A	319	ARG	1
1	A	177	ARG	1
1	A	257	ILE	1
1	A	285	LEU	1
1	A	87	SER	1
1	A	97	PHE	1
1	A	151	PHE	1
1	A	160	VAL	1
1	A	80	SER	1
1	A	181	SER	1
1	A	219	THR	1
1	A	262	ASP	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided