



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 02:22 PM BST

PDB ID : 1C89
Title : NMR STRUCTURE OF INTRAMOLECULAR DIMER ANTIFREEZE
PROTEIN RD3, 40 SA STRUCTURES
Authors : Miura, K.; Tsuda, S.
Deposited on : 2000-05-04

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

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

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

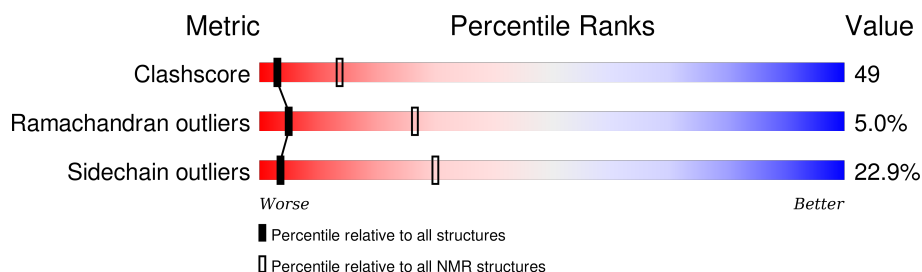
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	134	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 40 models. Model 17 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 40 as representative.

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:2-A:60 (59)	0.32	17
2	A:73-A:127 (55)	0.28	34

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 6 clusters and 1 single-model cluster was found.

Cluster number	Models
1	2, 4, 5, 10, 13, 15, 16, 18, 19, 22, 24, 26, 31, 33, 35, 36
2	1, 6, 8, 20, 27, 29, 32, 34
3	3, 7, 11, 14, 17, 30, 38, 40
4	28, 37, 39
5	21, 23
6	9, 25
Single-model clusters	12

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2068 atoms, of which 1062 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III.

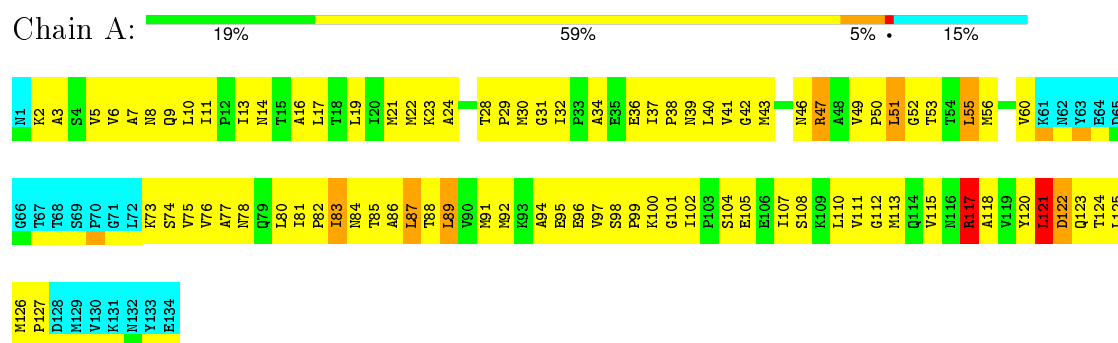
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	134	Total	C	H	N	O	S	0
			2068	637	1062	163	195	11	

4 Residue-property plots [i](#)

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA and DNA 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: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III

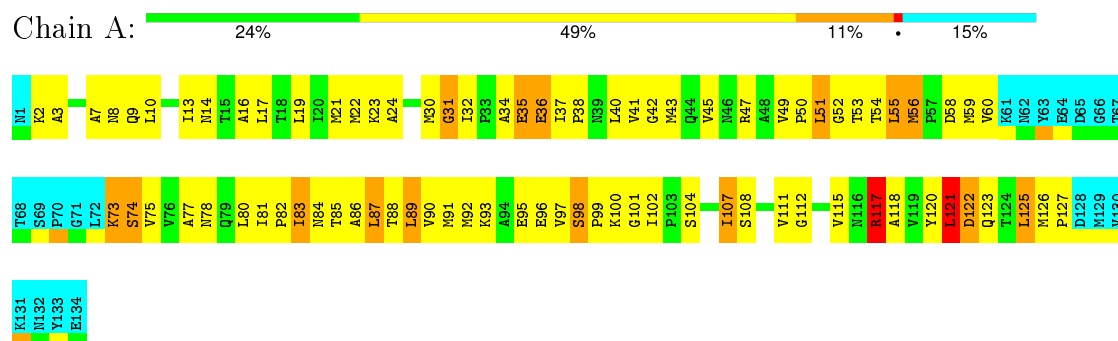


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

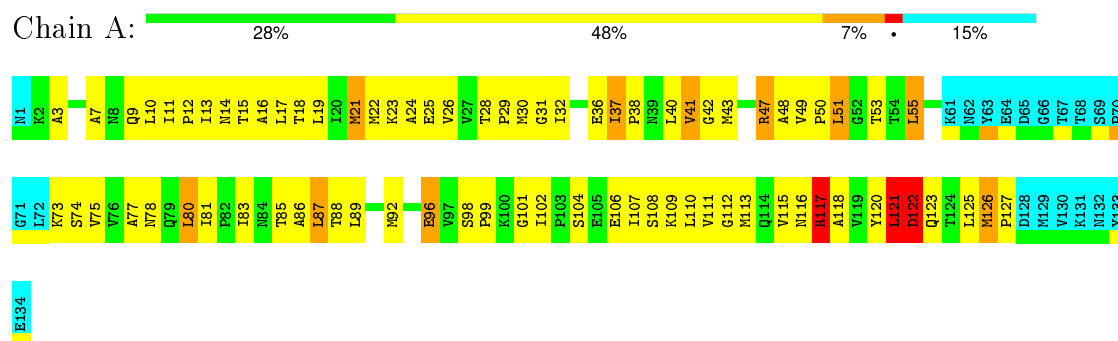
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



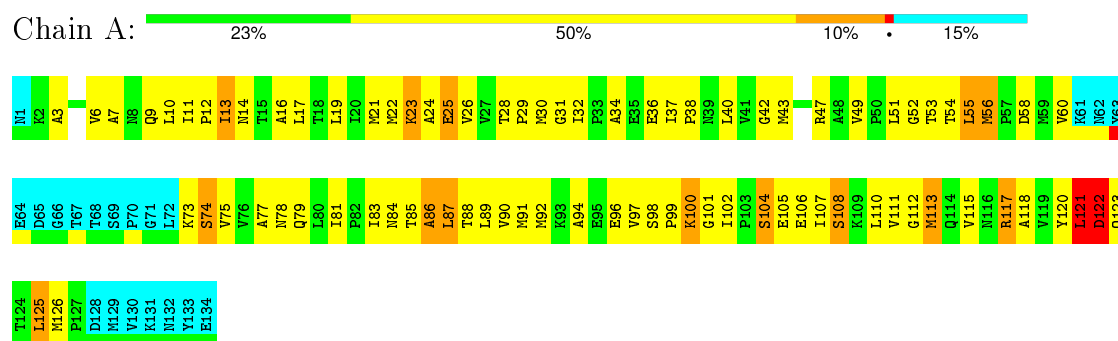
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



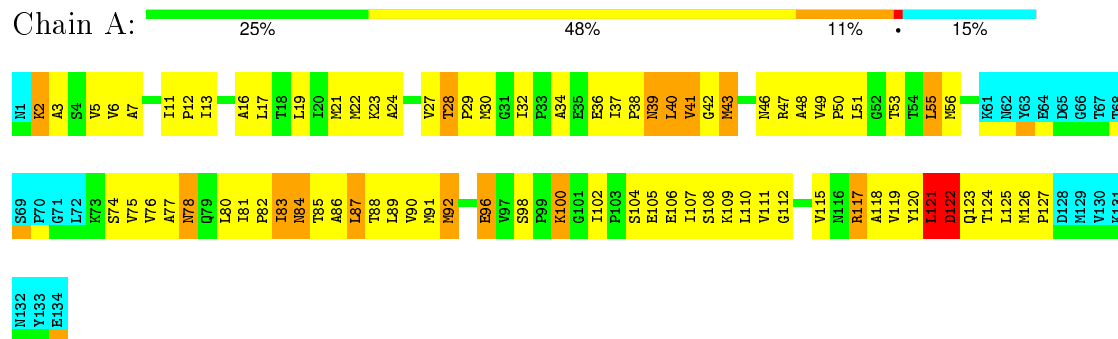
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



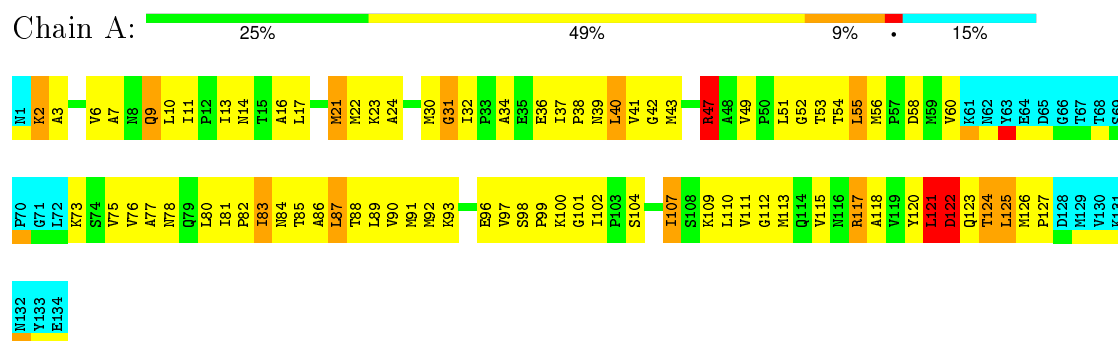
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



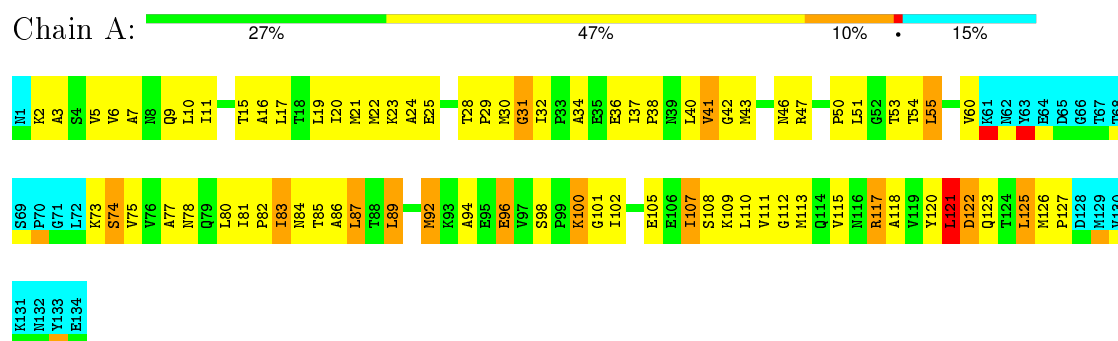
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



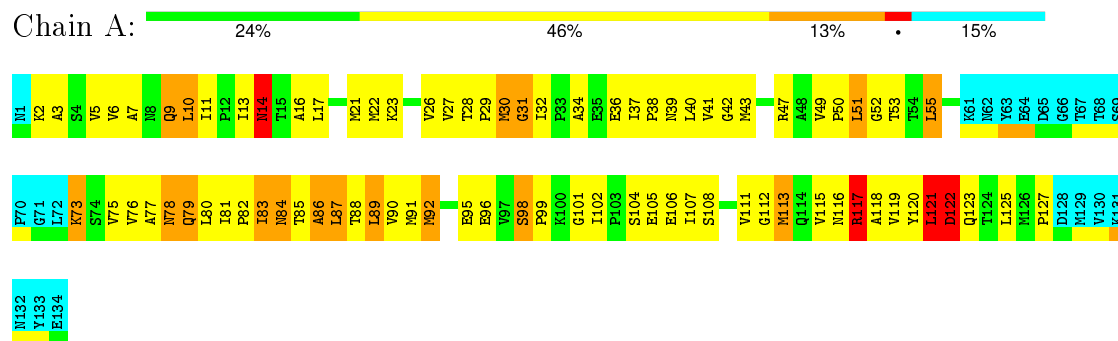
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



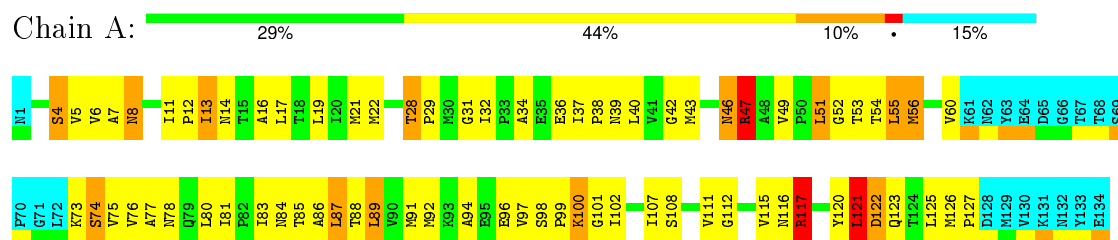
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



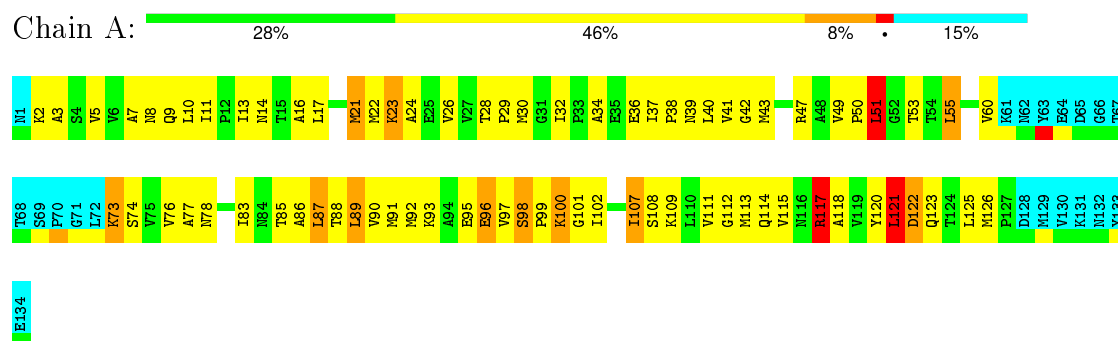
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



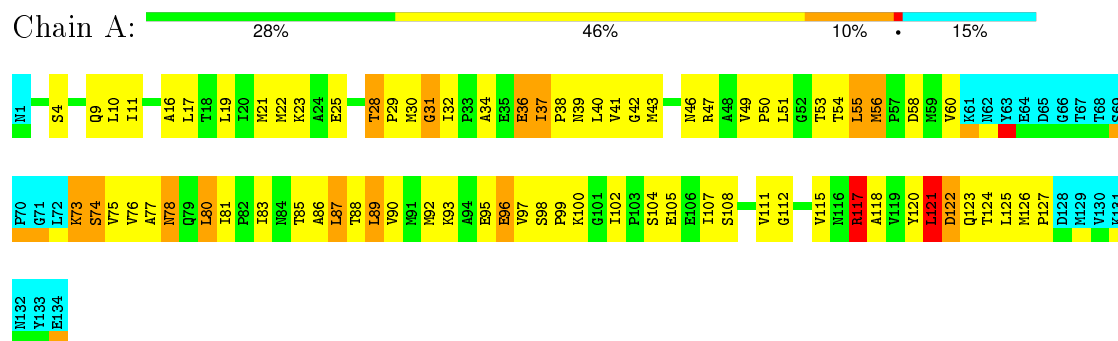
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



4.2.10 Score per residue for model 10

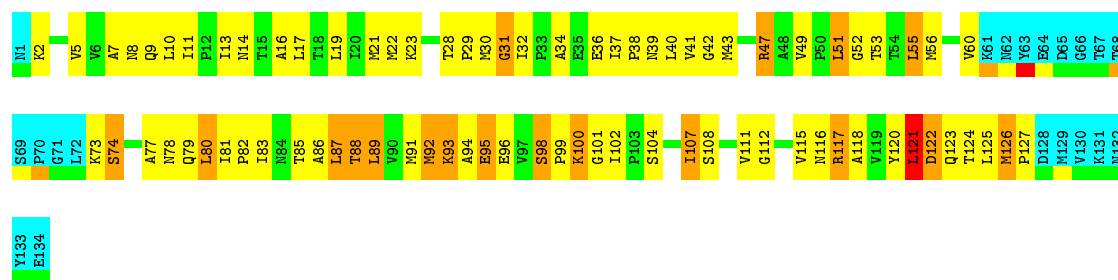
- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



4.2.11 Score per residue for model 11

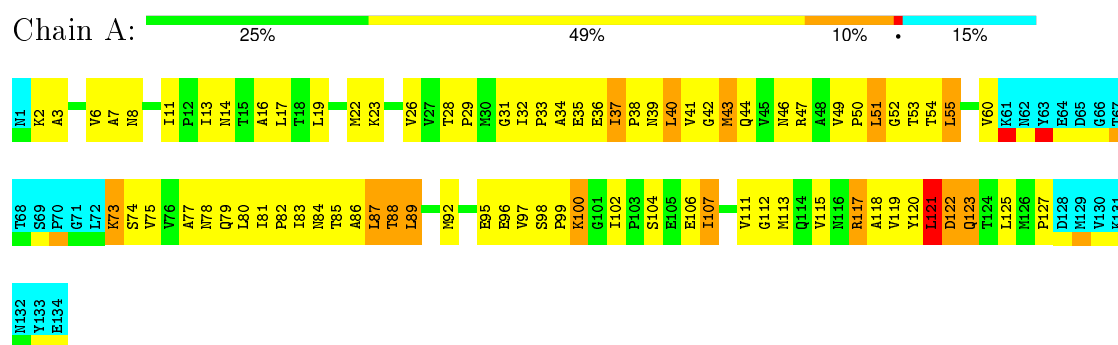
- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III





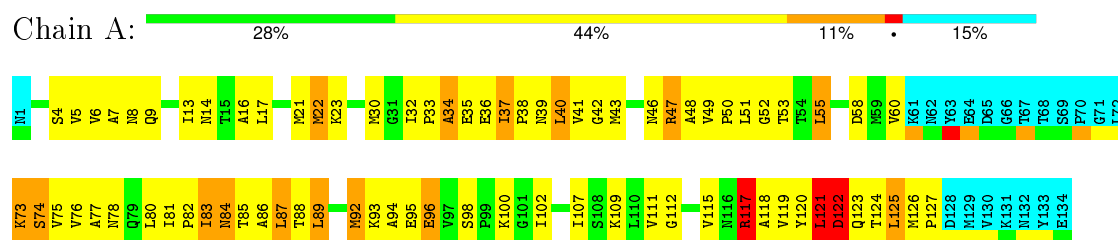
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



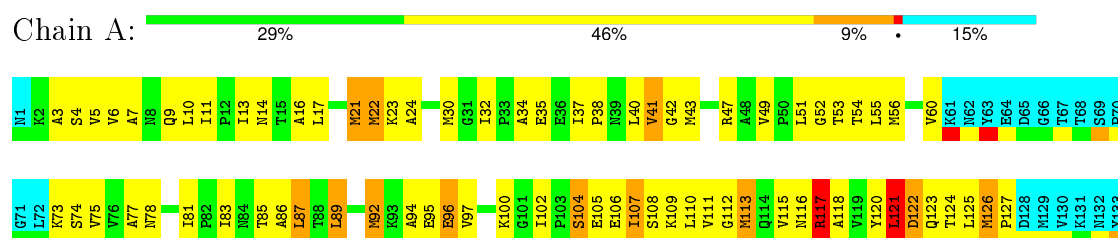
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



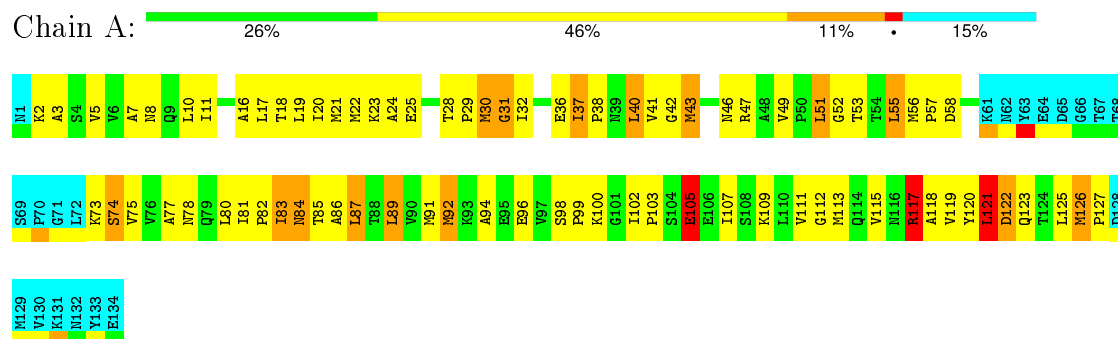
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



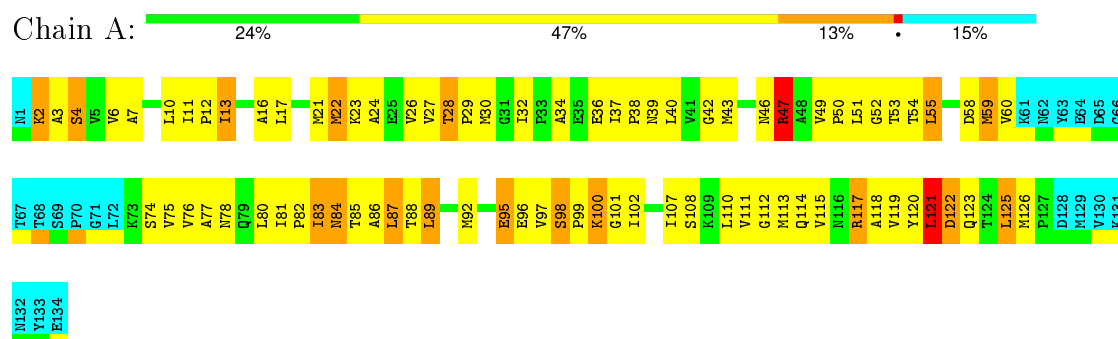
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



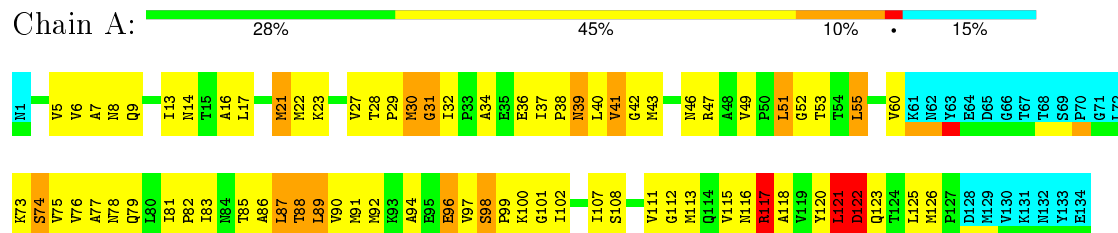
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



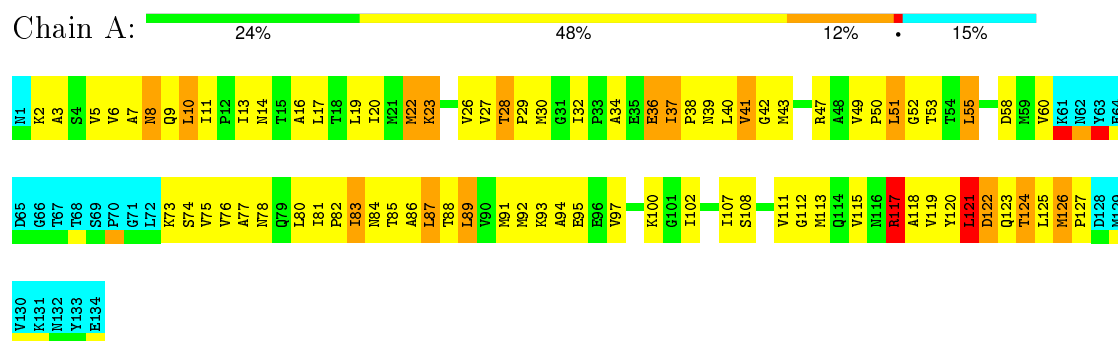
4.2.17 Score per residue for model 17 (medoid)

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



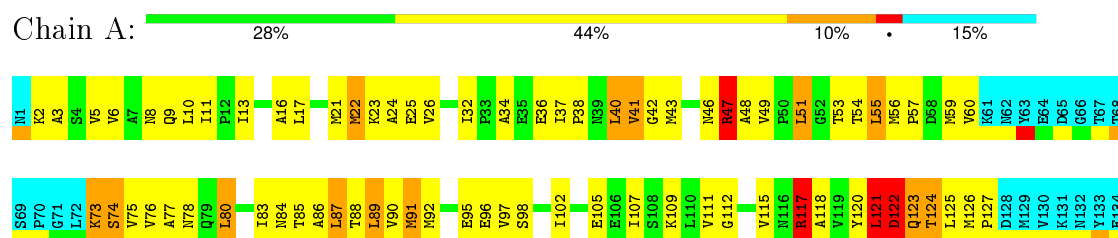
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



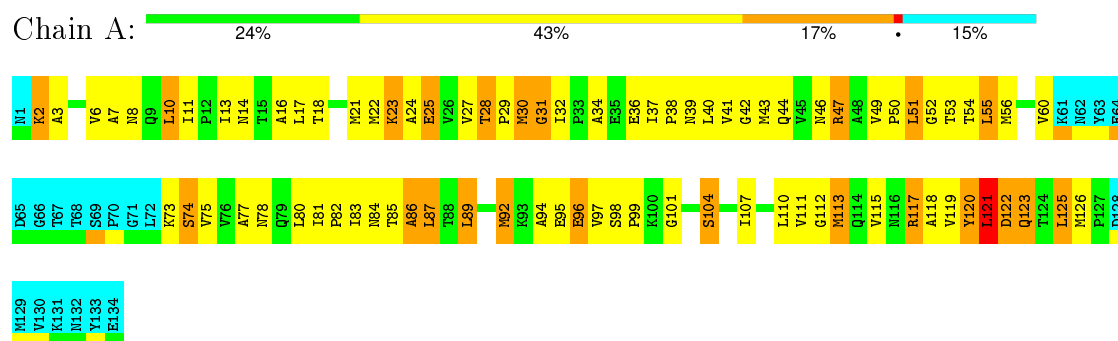
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



4.2.20 Score per residue for model 20

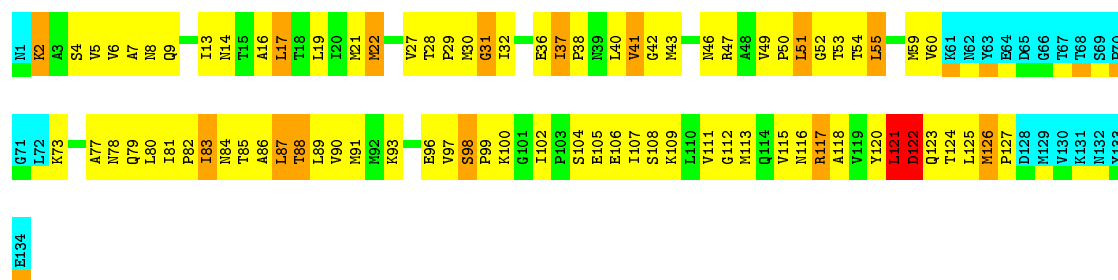
- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



4.2.21 Score per residue for model 21

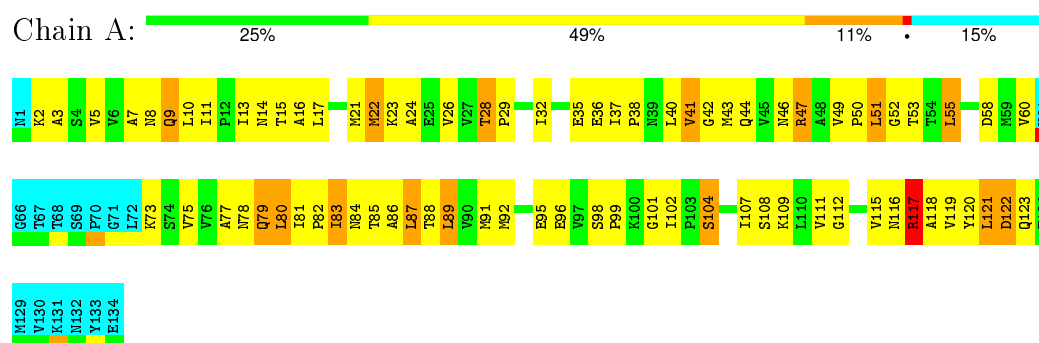
- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III





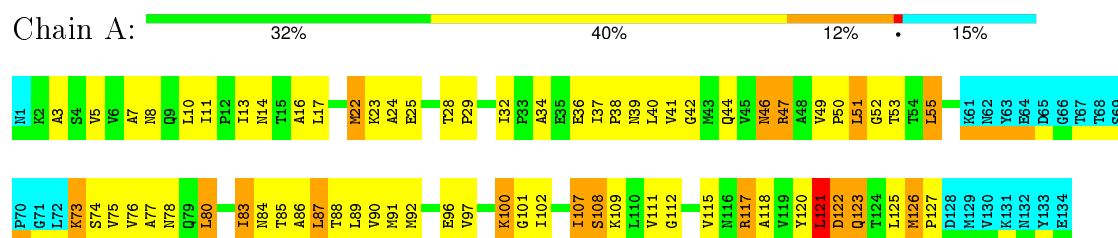
4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



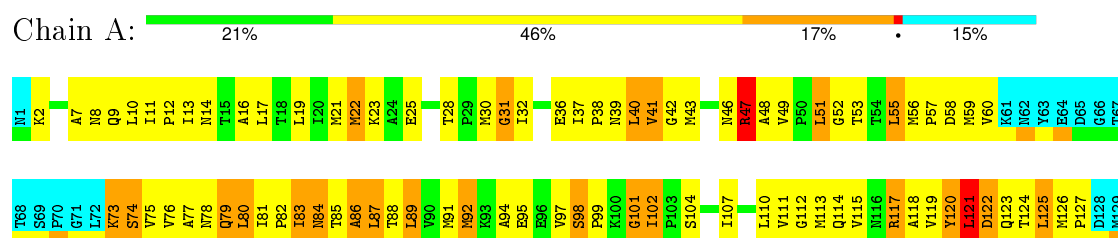
4.2.23 Score per residue for model 23

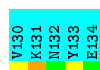
- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



4.2.24 Score per residue for model 24

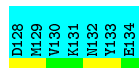
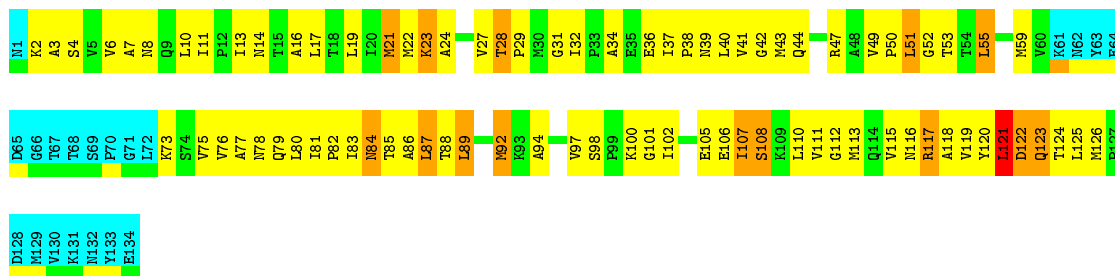
- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III





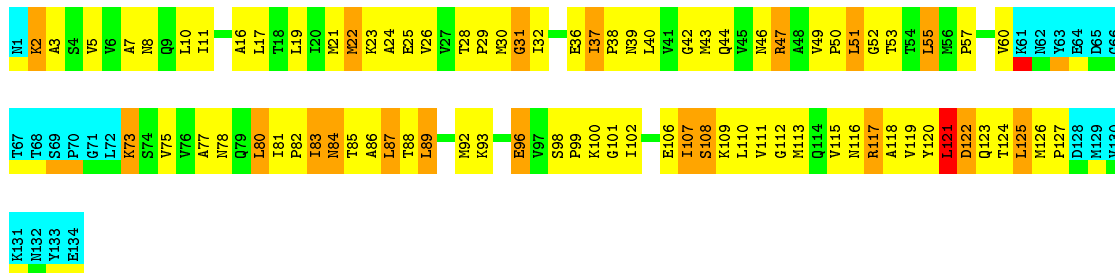
4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



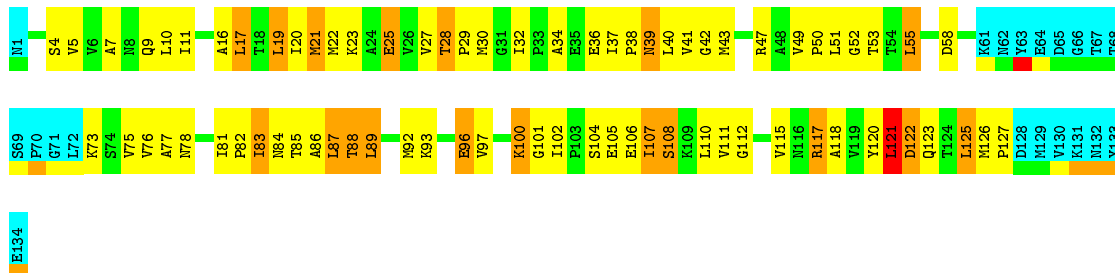
4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



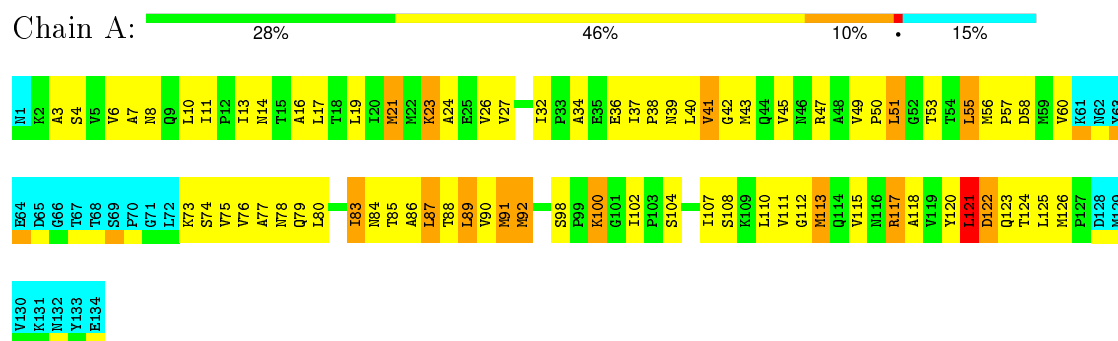
4.2.27 Score per residue for model 27

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



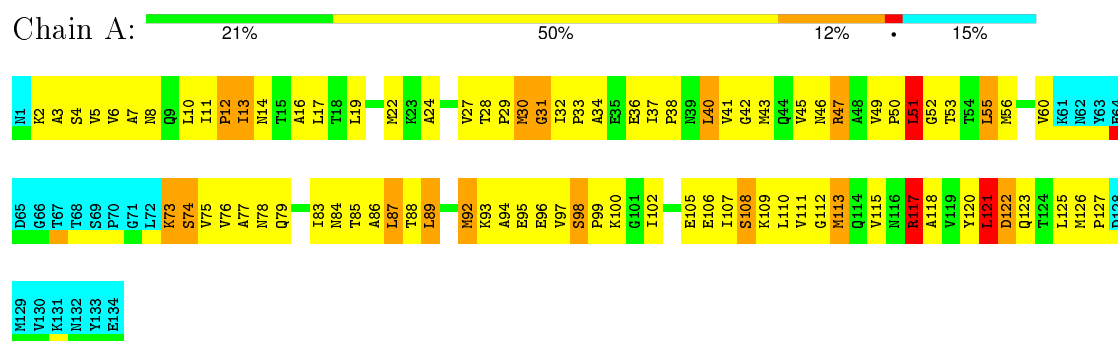
4.2.28 Score per residue for model 28

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



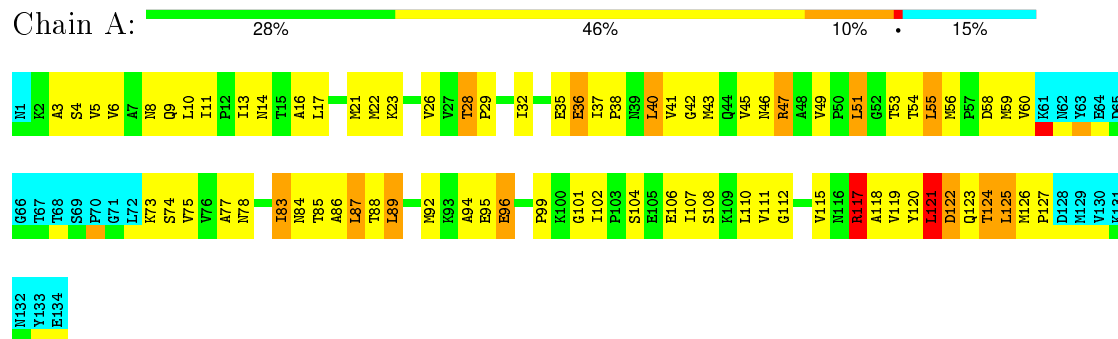
4.2.29 Score per residue for model 29

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



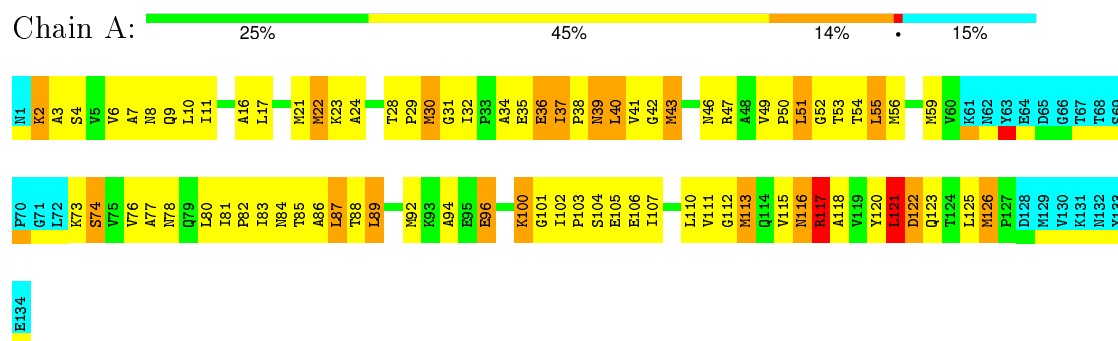
4.2.30 Score per residue for model 30

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



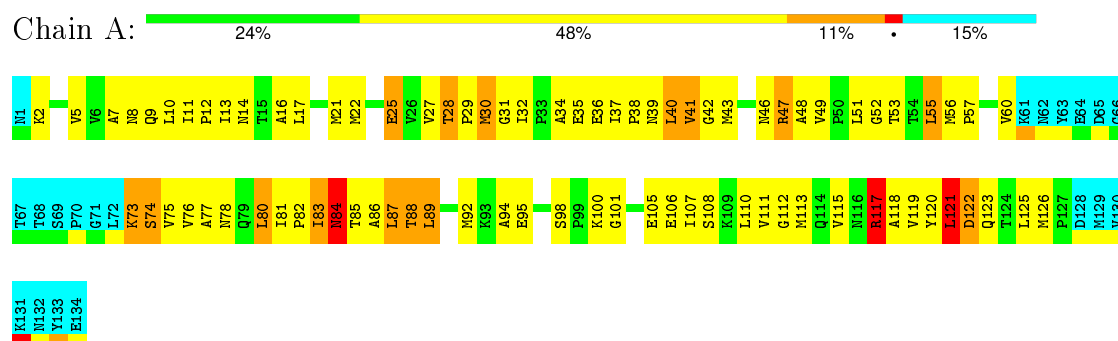
4.2.31 Score per residue for model 31

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



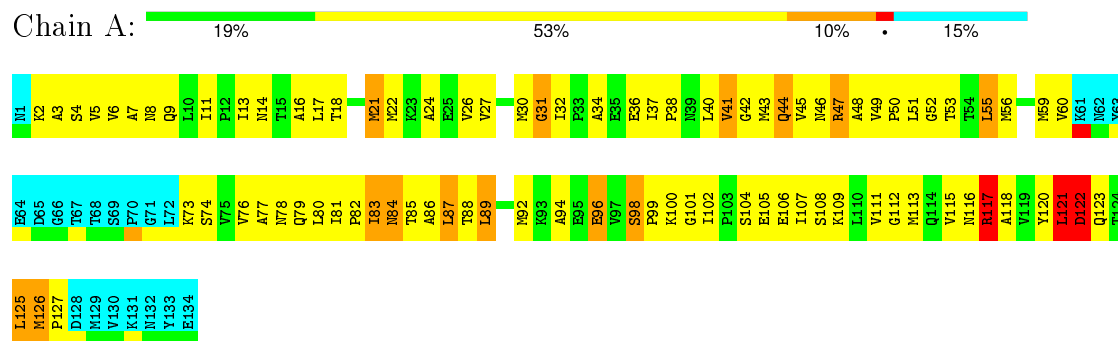
4.2.32 Score per residue for model 32

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



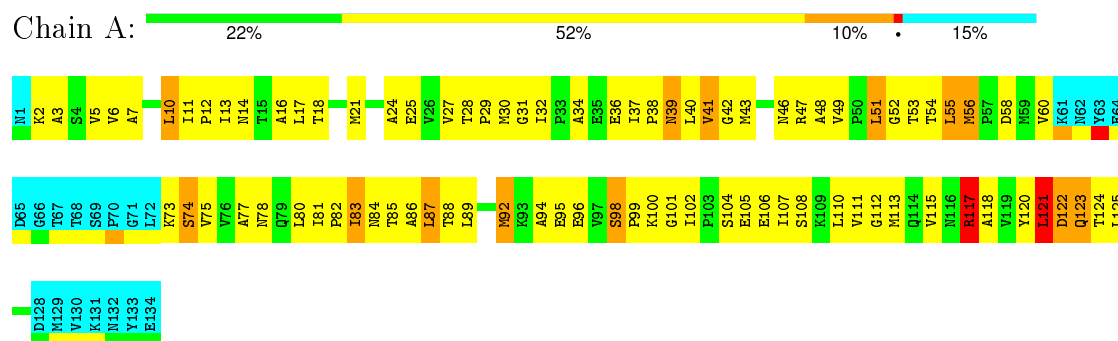
4.2.33 Score per residue for model 33

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



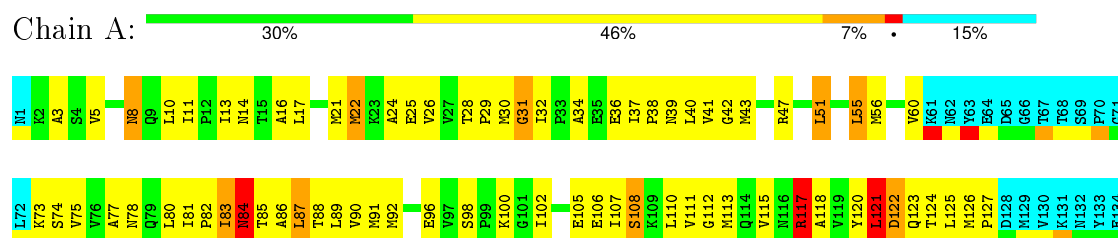
4.2.34 Score per residue for model 34

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



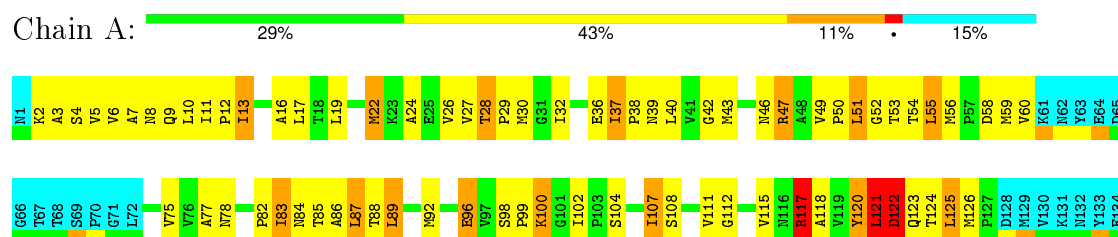
4.2.35 Score per residue for model 35

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



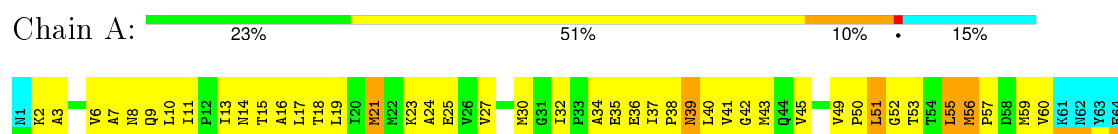
4.2.36 Score per residue for model 36

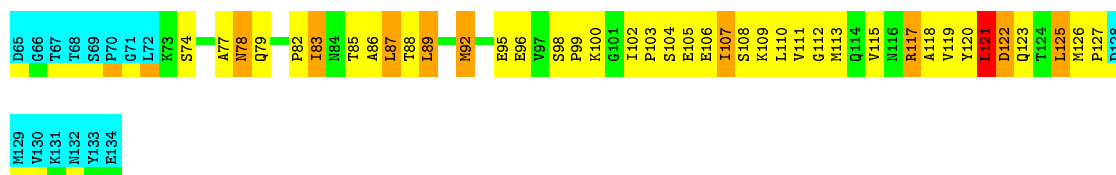
- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III



4.2.37 Score per residue for model 37

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III

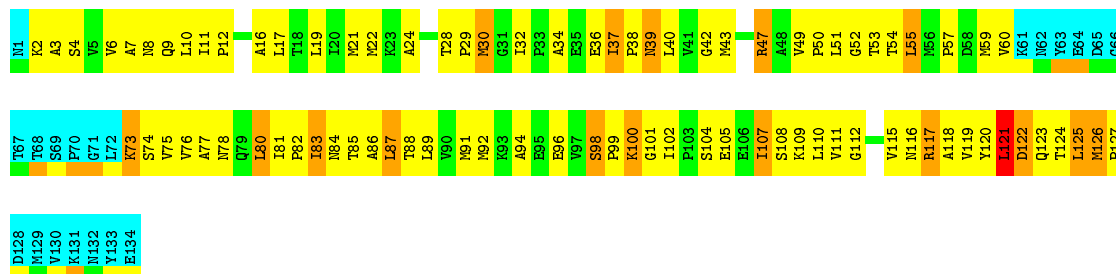




4.2.38 Score per residue for model 38

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III

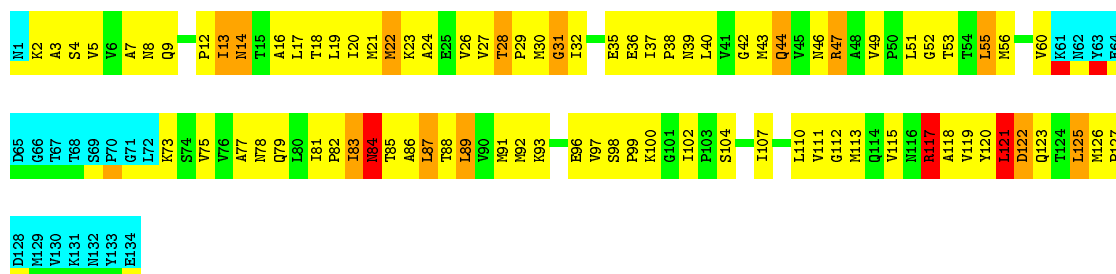
Chain A: 22% 51% 12% 15%



4.2.39 Score per residue for model 39

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III

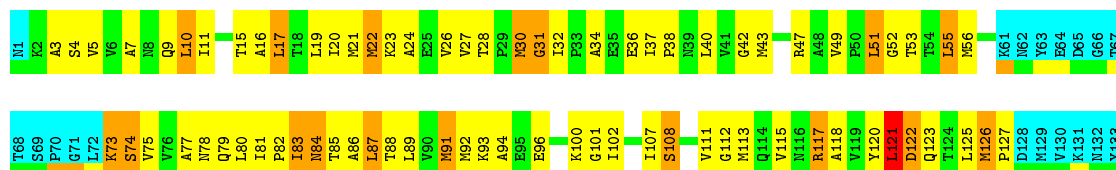
Chain A: 22% 51% 10% 15%



4.2.40 Score per residue for model 40

- Molecule 1: ANTIFREEZE PROTEIN TYPE III

Chain A: 29% 43% 13% 15%



E134

5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *SA*.

Of the 40 calculated structures, 40 were deposited, based on the following criterion: *AVERAGE*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	3.851
X-PLOR	structure solution	3.851

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

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	1.9±0.2
All	All	0	78

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	117	ARG	Sidechain	40
1	A	47	ARG	Sidechain	38

6.2 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 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	847	917	917	87±10
All	All	33880	36680	36680	3475

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 49.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:ILE:HD12	1:A:55:LEU:HD12	1.06	1.18	28	34
1:A:125:LEU:HD12	1:A:126:MET:N	0.96	1.75	13	35
1:A:107:ILE:O	1:A:111:VAL:HG23	0.96	1.60	6	40
1:A:81:ILE:HD11	1:A:92:MET:CE	0.95	1.92	6	1
1:A:87:LEU:HD12	1:A:92:MET:SD	0.95	2.01	11	10
1:A:83:ILE:CD1	1:A:118:ALA:HB2	0.94	1.92	7	5
1:A:36:GLU:CB	1:A:40:LEU:HD13	0.94	1.92	28	6
1:A:83:ILE:HD13	1:A:118:ALA:N	0.91	1.80	32	5
1:A:32:ILE:CD1	1:A:55:LEU:HD12	0.91	1.95	12	16
1:A:125:LEU:HD12	1:A:127:PRO:CD	0.90	1.95	5	1
1:A:49:VAL:HG13	1:A:53:THR:HG21	0.90	1.44	5	22
1:A:43:MET:HE2	1:A:60:VAL:HG11	0.89	1.42	37	3
1:A:80:LEU:HD12	1:A:121:LEU:HD23	0.88	1.46	38	8
1:A:80:LEU:HD13	1:A:81:ILE:N	0.88	1.83	12	5
1:A:40:LEU:O	1:A:40:LEU:HD22	0.88	1.68	5	3
1:A:102:ILE:HG13	1:A:125:LEU:HD11	0.88	1.45	24	1
1:A:11:ILE:HD13	1:A:17:LEU:CD2	0.86	1.99	16	9
1:A:11:ILE:HD13	1:A:17:LEU:HD21	0.86	1.45	19	4
1:A:10:LEU:HD23	1:A:10:LEU:O	0.86	1.69	10	3
1:A:36:GLU:HB2	1:A:40:LEU:HD13	0.85	1.47	28	5
1:A:43:MET:CE	1:A:60:VAL:HG11	0.85	2.01	32	5
1:A:6:VAL:HG21	1:A:27:VAL:CG2	0.85	2.02	37	13
1:A:49:VAL:CG1	1:A:53:THR:HG21	0.84	2.02	40	9
1:A:75:VAL:HG13	1:A:92:MET:SD	0.84	2.12	20	5
1:A:125:LEU:HD12	1:A:127:PRO:CG	0.84	2.02	5	1
1:A:49:VAL:HG13	1:A:53:THR:HB	0.84	1.49	9	7
1:A:37:ILE:O	1:A:41:VAL:HG23	0.83	1.73	33	24
1:A:119:VAL:HG13	1:A:123:GLN:CD	0.83	1.92	37	1
1:A:32:ILE:CG2	1:A:40:LEU:HD21	0.82	2.03	26	1
1:A:75:VAL:HG13	1:A:92:MET:HG3	0.82	1.48	26	3
1:A:76:VAL:HG21	1:A:97:VAL:HG21	0.82	1.48	18	3
1:A:83:ILE:HD11	1:A:118:ALA:HB2	0.82	1.50	7	2
1:A:10:LEU:O	1:A:10:LEU:HD23	0.82	1.74	26	9
1:A:43:MET:SD	1:A:55:LEU:HD21	0.82	2.15	40	3
1:A:11:ILE:HG21	1:A:17:LEU:HD21	0.82	1.50	23	3
1:A:102:ILE:HD11	1:A:127:PRO:HA	0.81	1.52	18	19
1:A:34:ALA:HB1	1:A:37:ILE:CG1	0.81	2.04	33	16
1:A:75:VAL:HG12	1:A:92:MET:SD	0.81	2.16	38	5
1:A:81:ILE:HG23	1:A:85:THR:HG21	0.80	1.52	38	15
1:A:36:GLU:O	1:A:40:LEU:HD23	0.80	1.77	6	4
1:A:76:VAL:HG22	1:A:124:THR:HA	0.80	1.51	5	2
1:A:7:ALA:CB	1:A:11:ILE:HD11	0.80	2.07	3	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:ILE:HG23	1:A:17:LEU:HD21	0.80	1.51	29	2
1:A:32:ILE:HD12	1:A:55:LEU:CD1	0.79	2.06	19	13
1:A:81:ILE:HD11	1:A:92:MET:HE2	0.79	1.54	6	1
1:A:11:ILE:CG2	1:A:17:LEU:HD21	0.78	2.09	14	2
1:A:17:LEU:HD12	1:A:43:MET:CG	0.78	2.08	40	12
1:A:75:VAL:HG11	1:A:92:MET:SD	0.78	2.19	35	12
1:A:82:PRO:C	1:A:83:ILE:HD12	0.78	1.99	22	5
1:A:75:VAL:HG23	1:A:102:ILE:O	0.78	1.79	16	6
1:A:40:LEU:HD12	1:A:43:MET:SD	0.78	2.19	6	3
1:A:102:ILE:HD12	1:A:125:LEU:HD11	0.77	1.54	13	12
1:A:8:ASN:O	1:A:51:LEU:HD23	0.77	1.80	17	22
1:A:102:ILE:CG1	1:A:125:LEU:HD11	0.77	2.08	24	1
1:A:102:ILE:HD12	1:A:127:PRO:HG2	0.77	1.54	5	1
1:A:92:MET:SD	1:A:107:ILE:HD11	0.77	2.19	18	2
1:A:6:VAL:HG13	1:A:54:THR:CA	0.77	2.10	34	13
1:A:102:ILE:HD11	1:A:127:PRO:CA	0.76	2.10	39	22
1:A:36:GLU:CB	1:A:40:LEU:HD23	0.76	2.11	8	5
1:A:75:VAL:HB	1:A:125:LEU:HD23	0.76	1.58	24	12
1:A:37:ILE:HG22	1:A:38:PRO:HD3	0.75	1.58	36	6
1:A:11:ILE:HD13	1:A:17:LEU:HD11	0.75	1.58	14	1
1:A:78:ASN:O	1:A:121:LEU:HD13	0.75	1.81	13	38
1:A:40:LEU:C	1:A:40:LEU:HD22	0.75	2.02	19	2
1:A:85:THR:O	1:A:87:LEU:HD23	0.74	1.80	24	14
1:A:55:LEU:CD2	1:A:60:VAL:HG21	0.74	2.11	1	2
1:A:11:ILE:HD12	1:A:17:LEU:CD2	0.74	2.12	29	2
1:A:83:ILE:HG22	1:A:84:ASN:OD1	0.74	1.83	29	4
1:A:40:LEU:HD21	1:A:43:MET:SD	0.74	2.23	24	2
1:A:13:ILE:O	1:A:13:ILE:HD12	0.74	1.83	8	2
1:A:40:LEU:HD22	1:A:40:LEU:C	0.74	2.03	5	1
1:A:32:ILE:HG21	1:A:40:LEU:HD21	0.73	1.60	26	4
1:A:5:VAL:HG22	1:A:34:ALA:HB2	0.73	1.60	13	1
1:A:102:ILE:O	1:A:125:LEU:HD21	0.72	1.84	5	1
1:A:119:VAL:HG13	1:A:123:GLN:NE2	0.72	1.99	37	1
1:A:13:ILE:HD12	1:A:13:ILE:O	0.72	1.85	39	2
1:A:34:ALA:HB1	1:A:37:ILE:HG13	0.71	1.61	33	9
1:A:13:ILE:HD12	1:A:13:ILE:C	0.71	2.05	28	2
1:A:40:LEU:CD1	1:A:55:LEU:HD11	0.71	2.15	11	1
1:A:87:LEU:HD12	1:A:92:MET:CE	0.71	2.15	1	2
1:A:16:ALA:HB1	1:A:42:GLY:HA2	0.71	1.63	39	16
1:A:54:THR:HG23	1:A:56:MET:SD	0.71	2.25	1	2
1:A:22:MET:HE3	1:A:40:LEU:HD21	0.71	1.61	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:VAL:HG13	1:A:53:THR:CB	0.70	2.15	9	9
1:A:75:VAL:O	1:A:125:LEU:HD23	0.70	1.87	5	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:17:LEU:HD23	0.70	2.16	6	2
1:A:5:VAL:HG13	1:A:22:MET:HG2	0.69	1.64	9	10
1:A:80:LEU:C	1:A:80:LEU:HD23	0.69	2.07	18	7
1:A:107:ILE:C	1:A:107:ILE:HD13	0.69	2.07	12	2
1:A:7:ALA:HB1	1:A:11:ILE:HD11	0.69	1.63	29	5
1:A:81:ILE:HD11	1:A:92:MET:HE1	0.69	1.65	6	1
1:A:6:VAL:HG13	1:A:54:THR:HA	0.68	1.64	34	9
1:A:76:VAL:HG21	1:A:97:VAL:HG11	0.68	1.64	16	4
1:A:115:VAL:HG22	1:A:117:ARG:H	0.68	1.48	5	35
1:A:81:ILE:HG23	1:A:85:THR:CG2	0.68	2.19	32	12
1:A:83:ILE:CG1	1:A:118:ALA:HB2	0.68	2.19	12	33
1:A:17:LEU:HD12	1:A:43:MET:HG3	0.68	1.65	21	4
1:A:40:LEU:HD23	1:A:41:VAL:N	0.68	2.04	29	1
1:A:6:VAL:HG13	1:A:54:THR:N	0.67	2.04	34	5
1:A:22:MET:CE	1:A:37:ILE:HD12	0.67	2.19	12	3
1:A:88:THR:HG23	1:A:112:GLY:HA2	0.67	1.67	27	9
1:A:80:LEU:HD23	1:A:80:LEU:C	0.67	2.10	8	3
1:A:88:THR:HG23	1:A:112:GLY:CA	0.67	2.19	11	8
1:A:10:LEU:HD23	1:A:10:LEU:C	0.67	2.10	9	4
1:A:76:VAL:HG13	1:A:123:GLN:O	0.67	1.89	4	11
1:A:11:ILE:CG2	1:A:15:THR:HG21	0.67	2.20	37	2
1:A:75:VAL:HG21	1:A:107:ILE:HD13	0.66	1.66	15	2
1:A:28:THR:HG22	1:A:30:MET:SD	0.66	2.31	6	2
1:A:3:ALA:HB1	1:A:24:ALA:O	0.66	1.91	19	24
1:A:50:PRO:HD2	1:A:53:THR:HG21	0.66	1.67	4	8
1:A:5:VAL:HG13	1:A:22:MET:HG3	0.65	1.67	21	6
1:A:36:GLU:HB2	1:A:40:LEU:HD23	0.65	1.67	8	2
1:A:81:ILE:HD12	1:A:85:THR:HG21	0.65	1.69	32	1
1:A:36:GLU:O	1:A:40:LEU:HD12	0.65	1.92	5	3
1:A:6:VAL:HG21	1:A:27:VAL:HG21	0.65	1.69	37	3
1:A:11:ILE:HD12	1:A:21:MET:CE	0.65	2.21	25	3
1:A:22:MET:SD	1:A:37:ILE:HD11	0.64	2.32	36	1
1:A:125:LEU:C	1:A:125:LEU:HD12	0.64	2.11	27	15
1:A:55:LEU:CD1	1:A:60:VAL:HG21	0.64	2.21	34	3
1:A:37:ILE:N	1:A:38:PRO:CD	0.64	2.61	2	33
1:A:88:THR:HG22	1:A:112:GLY:CA	0.64	2.22	16	15
1:A:125:LEU:HD12	1:A:125:LEU:C	0.64	2.12	30	5
1:A:32:ILE:HB	1:A:55:LEU:HD13	0.64	1.68	11	1
1:A:88:THR:OG1	1:A:90:VAL:HG22	0.64	1.93	1	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:ILE:CD1	1:A:17:LEU:HD21	0.63	2.22	16	3
1:A:43:MET:CE	1:A:55:LEU:HD21	0.63	2.24	21	1
1:A:55:LEU:HD21	1:A:60:VAL:HG21	0.63	1.68	1	1
1:A:83:ILE:HD13	1:A:118:ALA:HB2	0.63	1.65	7	1
1:A:40:LEU:HD23	1:A:40:LEU:C	0.63	2.14	29	1
1:A:102:ILE:HD11	1:A:127:PRO:N	0.63	2.09	40	8
1:A:120:TYR:CG	1:A:121:LEU:N	0.62	2.67	32	1
1:A:5:VAL:HG23	1:A:34:ALA:HB2	0.62	1.71	33	1
1:A:120:TYR:CD1	1:A:121:LEU:N	0.62	2.66	32	1
1:A:81:ILE:HD11	1:A:119:VAL:HG23	0.62	1.69	26	1
1:A:22:MET:HE2	1:A:37:ILE:HD12	0.62	1.69	12	3
1:A:102:ILE:CD1	1:A:102:ILE:N	0.62	2.62	6	1
1:A:87:LEU:HD12	1:A:92:MET:CG	0.62	2.24	22	2
1:A:102:ILE:HD12	1:A:127:PRO:CG	0.62	2.25	5	1
1:A:40:LEU:HD22	1:A:43:MET:CE	0.62	2.24	22	1
1:A:5:VAL:HG21	1:A:37:ILE:HD11	0.62	1.70	23	1
1:A:83:ILE:CD1	1:A:118:ALA:CB	0.62	2.78	35	2
1:A:89:LEU:HD23	1:A:111:VAL:HG13	0.62	1.71	28	2
1:A:81:ILE:CG2	1:A:85:THR:HG21	0.61	2.25	1	2
1:A:75:VAL:HG11	1:A:125:LEU:HD23	0.61	1.69	16	1
1:A:40:LEU:CD2	1:A:40:LEU:N	0.61	2.64	35	3
1:A:17:LEU:HD23	1:A:21:MET:SD	0.61	2.36	16	1
1:A:81:ILE:CD1	1:A:115:VAL:HG11	0.61	2.25	33	1
1:A:40:LEU:HD22	1:A:40:LEU:N	0.61	2.10	38	4
1:A:3:ALA:HA	1:A:26:VAL:HG22	0.61	1.73	28	9
1:A:36:GLU:HB3	1:A:40:LEU:HD13	0.61	1.71	28	2
1:A:75:VAL:CG1	1:A:125:LEU:HD23	0.61	2.25	16	1
1:A:102:ILE:CG1	1:A:125:LEU:CD1	0.61	2.78	24	1
1:A:11:ILE:HD13	1:A:17:LEU:CD1	0.61	2.26	14	1
1:A:121:LEU:O	1:A:123:GLN:N	0.61	2.33	22	40
1:A:5:VAL:HG13	1:A:22:MET:CG	0.61	2.26	7	11
1:A:13:ILE:HD11	1:A:48:ALA:HB2	0.61	1.71	33	2
1:A:75:VAL:HG21	1:A:107:ILE:HD11	0.61	1.73	24	2
1:A:80:LEU:O	1:A:80:LEU:HD23	0.61	1.96	18	4
1:A:92:MET:CE	1:A:107:ILE:HD11	0.61	2.25	7	2
1:A:75:VAL:HG22	1:A:104:SER:OG	0.60	1.96	20	3
1:A:43:MET:SD	1:A:55:LEU:HD11	0.60	2.37	16	3
1:A:125:LEU:HD12	1:A:127:PRO:HG3	0.60	1.72	5	1
1:A:89:LEU:HD23	1:A:111:VAL:CG1	0.60	2.27	28	9
1:A:16:ALA:HB1	1:A:42:GLY:CA	0.60	2.27	39	39
1:A:40:LEU:HD13	1:A:55:LEU:CD1	0.59	2.27	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:49:VAL:HG12	1:A:53:THR:CB	0.59	2.27	5	14
1:A:7:ALA:HB3	1:A:53:THR:HB	0.59	1.75	29	1
1:A:32:ILE:HG21	1:A:40:LEU:HD11	0.59	1.74	7	1
1:A:99:PRO:O	1:A:124:THR:HG21	0.59	1.97	26	2
1:A:5:VAL:CG2	1:A:34:ALA:HB2	0.59	2.27	33	2
1:A:3:ALA:CA	1:A:26:VAL:HG22	0.59	2.28	3	13
1:A:92:MET:HE1	1:A:94:ALA:HB2	0.59	1.73	25	1
1:A:49:VAL:CG1	1:A:53:THR:CG2	0.59	2.81	34	8
1:A:40:LEU:HD13	1:A:55:LEU:HD11	0.59	1.74	11	1
1:A:11:ILE:HD13	1:A:17:LEU:HD23	0.59	1.73	20	3
1:A:32:ILE:HD12	1:A:55:LEU:HD13	0.59	1.75	21	1
1:A:13:ILE:CD1	1:A:48:ALA:N	0.59	2.66	4	8
1:A:49:VAL:HG21	1:A:53:THR:HG23	0.59	1.75	29	1
1:A:5:VAL:HG22	1:A:37:ILE:HD11	0.58	1.73	6	2
1:A:5:VAL:HG12	1:A:55:LEU:HD23	0.58	1.73	22	1
1:A:36:GLU:CB	1:A:40:LEU:CD1	0.58	2.80	27	1
1:A:80:LEU:HD12	1:A:121:LEU:CD2	0.58	2.27	19	4
1:A:76:VAL:HG13	1:A:123:GLN:C	0.58	2.18	24	7
1:A:101:GLY:C	1:A:102:ILE:HD12	0.58	2.19	6	1
1:A:11:ILE:HG13	1:A:17:LEU:HD21	0.58	1.74	10	5
1:A:126:MET:N	1:A:127:PRO:CD	0.58	2.66	5	1
1:A:5:VAL:CG1	1:A:55:LEU:HD23	0.58	2.29	22	1
1:A:40:LEU:HD11	1:A:43:MET:CE	0.58	2.29	15	1
1:A:40:LEU:HD11	1:A:43:MET:HE1	0.58	1.73	15	1
1:A:34:ALA:HB1	1:A:37:ILE:HG12	0.58	1.74	13	5
1:A:107:ILE:C	1:A:111:VAL:HG23	0.58	2.18	38	9
1:A:36:GLU:CB	1:A:40:LEU:CD2	0.58	2.81	38	2
1:A:11:ILE:CD1	1:A:17:LEU:CD2	0.58	2.81	16	6
1:A:77:ALA:CB	1:A:119:VAL:HG11	0.58	2.29	13	1
1:A:80:LEU:HB2	1:A:121:LEU:HD22	0.57	1.76	21	4
1:A:11:ILE:HG23	1:A:15:THR:HG21	0.57	1.75	22	4
1:A:80:LEU:C	1:A:80:LEU:HD13	0.57	2.20	5	5
1:A:90:VAL:CG1	1:A:91:MET:N	0.57	2.68	3	5
1:A:95:GLU:CG	1:A:97:VAL:CG2	0.57	2.82	18	1
1:A:44:GLN:OE1	1:A:121:LEU:HD12	0.57	1.99	39	1
1:A:83:ILE:HG13	1:A:118:ALA:HB2	0.57	1.76	26	31
1:A:81:ILE:HD12	1:A:119:VAL:HB	0.57	1.76	22	3
1:A:81:ILE:O	1:A:81:ILE:HD12	0.57	1.99	26	1
1:A:40:LEU:O	1:A:43:MET:CG	0.57	2.53	18	17
1:A:81:ILE:HG23	1:A:85:THR:HB	0.57	1.77	35	3
1:A:40:LEU:HD23	1:A:40:LEU:H	0.57	1.60	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:3:ALA:HB1	1:A:24:ALA:C	0.57	2.20	5	14
1:A:32:ILE:HG21	1:A:40:LEU:CD1	0.57	2.30	22	2
1:A:40:LEU:HD12	1:A:40:LEU:N	0.57	2.14	27	1
1:A:89:LEU:HD23	1:A:111:VAL:HG11	0.56	1.75	1	7
1:A:11:ILE:HD12	1:A:21:MET:HE3	0.56	1.77	25	3
1:A:83:ILE:HD13	1:A:118:ALA:HA	0.56	1.74	35	1
1:A:22:MET:CE	1:A:40:LEU:HD21	0.56	2.30	19	1
1:A:40:LEU:HD13	1:A:41:VAL:N	0.56	2.15	5	3
1:A:76:VAL:CG2	1:A:97:VAL:HG21	0.56	2.26	18	1
1:A:40:LEU:CD1	1:A:43:MET:CE	0.56	2.83	15	2
1:A:88:THR:HG22	1:A:112:GLY:N	0.56	2.15	16	9
1:A:49:VAL:HG13	1:A:53:THR:CG2	0.56	2.29	22	5
1:A:45:VAL:HG11	1:A:49:VAL:HG21	0.56	1.75	30	3
1:A:11:ILE:HG12	1:A:17:LEU:HD21	0.56	1.76	40	1
1:A:76:VAL:HG11	1:A:95:GLU:OE2	0.56	2.00	9	2
1:A:13:ILE:HG22	1:A:14:ASN:ND2	0.56	2.15	1	2
1:A:87:LEU:HD12	1:A:92:MET:HG2	0.56	1.78	22	1
1:A:36:GLU:CG	1:A:40:LEU:HD12	0.56	2.30	7	2
1:A:107:ILE:CG2	1:A:108:SER:N	0.56	2.69	3	22
1:A:55:LEU:HD13	1:A:55:LEU:C	0.56	2.22	40	3
1:A:43:MET:CE	1:A:55:LEU:HD11	0.56	2.30	24	2
1:A:36:GLU:CG	1:A:40:LEU:CD1	0.56	2.84	10	1
1:A:83:ILE:HD13	1:A:118:ALA:CB	0.56	2.31	7	1
1:A:13:ILE:N	1:A:13:ILE:HD13	0.55	2.16	29	2
1:A:81:ILE:O	1:A:118:ALA:HB1	0.55	2.00	16	1
1:A:11:ILE:HD12	1:A:17:LEU:HD21	0.55	1.77	29	1
1:A:75:VAL:HG21	1:A:107:ILE:CD1	0.55	2.31	24	2
1:A:49:VAL:HG13	1:A:50:PRO:HD2	0.55	1.78	7	2
1:A:37:ILE:N	1:A:38:PRO:HD2	0.55	2.16	25	39
1:A:86:ALA:HB2	1:A:114:GLN:HG3	0.55	1.78	24	1
1:A:85:THR:H	1:A:115:VAL:HG12	0.55	1.61	39	3
1:A:36:GLU:HB3	1:A:40:LEU:HD23	0.55	1.77	8	1
1:A:87:LEU:CD1	1:A:92:MET:CE	0.55	2.85	40	2
1:A:90:VAL:HG13	1:A:91:MET:N	0.55	2.17	9	5
1:A:119:VAL:HG12	1:A:120:TYR:N	0.55	2.17	16	1
1:A:78:ASN:O	1:A:121:LEU:CD1	0.54	2.55	33	33
1:A:79:GLN:HA	1:A:121:LEU:CD1	0.54	2.32	22	1
1:A:37:ILE:O	1:A:41:VAL:CG2	0.54	2.55	11	28
1:A:37:ILE:CB	1:A:38:PRO:CD	0.54	2.85	5	15
1:A:102:ILE:HG12	1:A:125:LEU:HD11	0.54	1.79	6	1
1:A:40:LEU:HD12	1:A:43:MET:CE	0.54	2.32	36	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:88:THR:O	1:A:92:MET:CG	0.54	2.55	7	1
1:A:81:ILE:HG23	1:A:85:THR:CB	0.54	2.32	35	3
1:A:43:MET:HE2	1:A:55:LEU:HD21	0.54	1.78	21	1
1:A:90:VAL:HG23	1:A:91:MET:N	0.54	2.18	28	6
1:A:75:VAL:HG22	1:A:104:SER:HB2	0.54	1.77	28	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:22:MET:CE	0.54	2.32	27	1
1:A:81:ILE:CG2	1:A:85:THR:CG2	0.54	2.86	1	2
1:A:4:SER:O	1:A:6:VAL:HG23	0.54	2.03	16	4
1:A:32:ILE:HG22	1:A:40:LEU:HD21	0.54	1.77	26	1
1:A:107:ILE:HG23	1:A:108:SER:N	0.54	2.17	18	22
1:A:16:ALA:CB	1:A:42:GLY:O	0.54	2.55	18	25
1:A:8:ASN:OD1	1:A:8:ASN:N	0.54	2.41	28	1
1:A:81:ILE:HD11	1:A:91:MET:SD	0.54	2.43	40	2
1:A:56:MET:O	1:A:60:VAL:CG2	0.54	2.56	29	3
1:A:120:TYR:O	1:A:121:LEU:O	0.54	2.26	32	38
1:A:55:LEU:HD12	1:A:55:LEU:C	0.54	2.23	34	1
1:A:80:LEU:HD23	1:A:80:LEU:O	0.54	2.03	24	2
1:A:39:ASN:O	1:A:43:MET:CE	0.53	2.56	39	2
1:A:13:ILE:CD1	1:A:48:ALA:CA	0.53	2.87	24	3
1:A:40:LEU:HD12	1:A:43:MET:HE1	0.53	1.80	36	2
1:A:83:ILE:HD13	1:A:118:ALA:CA	0.53	2.32	35	2
1:A:49:VAL:CG1	1:A:53:THR:OG1	0.53	2.56	29	1
1:A:95:GLU:O	1:A:97:VAL:HG23	0.53	2.03	18	1
1:A:81:ILE:O	1:A:118:ALA:CB	0.53	2.56	16	1
1:A:125:LEU:HD12	1:A:126:MET:H	0.53	1.62	13	1
1:A:17:LEU:O	1:A:42:GLY:N	0.53	2.41	19	35
1:A:9:GLN:OE1	1:A:21:MET:CG	0.53	2.57	6	4
1:A:77:ALA:HB3	1:A:123:GLN:HG2	0.53	1.79	37	1
1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CD	0.53	2.71	3	1
1:A:117:ARG:CG	1:A:118:ALA:N	0.53	2.72	40	6
1:A:125:LEU:O	1:A:125:LEU:HG	0.53	2.02	5	2
1:A:85:THR:O	1:A:87:LEU:N	0.53	2.42	3	36
1:A:39:ASN:O	1:A:43:MET:HE2	0.53	2.03	25	2
1:A:75:VAL:CB	1:A:125:LEU:HD23	0.53	2.34	19	2
1:A:80:LEU:CD2	1:A:120:TYR:HA	0.53	2.34	15	5
1:A:82:PRO:O	1:A:83:ILE:C	0.53	2.46	4	20
1:A:87:LEU:HD12	1:A:92:MET:HE2	0.53	1.80	1	1
1:A:100:LYS:CG	1:A:100:LYS:O	0.53	2.56	4	3
1:A:83:ILE:CD1	1:A:118:ALA:N	0.53	2.66	32	2
1:A:32:ILE:CG2	1:A:36:GLU:OE2	0.53	2.57	7	1
1:A:100:LYS:CD	1:A:100:LYS:O	0.53	2.57	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:54:THR:HG23	1:A:56:MET:CG	0.53	2.34	10	1
1:A:96:GLU:CG	1:A:96:GLU:O	0.53	2.57	10	2
1:A:79:GLN:NE2	1:A:81:ILE:HG22	0.53	2.19	7	1
1:A:117:ARG:CZ	1:A:119:VAL:HG22	0.53	2.34	38	1
1:A:100:LYS:O	1:A:100:LYS:CD	0.53	2.57	27	2
1:A:87:LEU:O	1:A:112:GLY:N	0.52	2.42	28	34
1:A:110:LEU:O	1:A:113:MET:CG	0.52	2.57	26	6
1:A:49:VAL:CG1	1:A:53:THR:CB	0.52	2.87	5	10
1:A:88:THR:OG1	1:A:90:VAL:CG2	0.52	2.57	17	2
1:A:7:ALA:O	1:A:52:GLY:CA	0.52	2.57	5	27
1:A:56:MET:O	1:A:60:VAL:HG23	0.52	2.04	3	5
1:A:73:LYS:O	1:A:73:LYS:CD	0.52	2.57	26	1
1:A:10:LEU:HB2	1:A:51:LEU:HD12	0.52	1.79	18	6
1:A:107:ILE:O	1:A:111:VAL:N	0.52	2.43	26	20
1:A:81:ILE:O	1:A:119:VAL:N	0.52	2.42	39	2
1:A:73:LYS:CD	1:A:73:LYS:O	0.52	2.57	23	1
1:A:89:LEU:HD23	1:A:89:LEU:H	0.52	1.65	9	10
1:A:95:GLU:HG3	1:A:97:VAL:HG23	0.52	1.82	1	1
1:A:2:LYS:C	1:A:2:LYS:CD	0.52	2.78	16	2
1:A:94:ALA:HB2	1:A:104:SER:HB3	0.52	1.81	30	1
1:A:75:VAL:CG1	1:A:92:MET:SD	0.52	2.98	17	10
1:A:82:PRO:O	1:A:83:ILE:O	0.52	2.27	4	11
1:A:13:ILE:O	1:A:14:ASN:ND2	0.52	2.43	30	5
1:A:81:ILE:HD11	1:A:115:VAL:HG11	0.52	1.80	33	1
1:A:103:PRO:CG	1:A:105:GLU:OE2	0.52	2.58	15	1
1:A:95:GLU:HG3	1:A:97:VAL:CG2	0.52	2.35	18	2
1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:ASP:OD1	0.52	2.05	6	1
1:A:40:LEU:CD1	1:A:43:MET:SD	0.52	2.98	33	3
1:A:40:LEU:HD13	1:A:55:LEU:HD13	0.52	1.81	7	1
1:A:90:VAL:CG2	1:A:91:MET:N	0.52	2.72	19	4
1:A:5:VAL:HG22	1:A:22:MET:CE	0.52	2.34	36	1
1:A:5:VAL:O	1:A:55:LEU:CB	0.52	2.58	34	1
1:A:75:VAL:O	1:A:125:LEU:CD2	0.52	2.57	5	1
1:A:40:LEU:N	1:A:40:LEU:CD2	0.52	2.72	38	2
1:A:81:ILE:O	1:A:81:ILE:CG1	0.52	2.58	26	1
1:A:110:LEU:HA	1:A:113:MET:CG	0.52	2.35	35	4
1:A:2:LYS:CD	1:A:2:LYS:C	0.52	2.78	5	1
1:A:106:GLU:O	1:A:110:LEU:HD12	0.52	2.04	26	2
1:A:5:VAL:HG22	1:A:22:MET:HE3	0.52	1.81	36	1
1:A:102:ILE:HB	1:A:125:LEU:HD11	0.52	1.81	5	1
1:A:100:LYS:O	1:A:100:LYS:CG	0.51	2.58	8	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:77:ALA:HB1	1:A:81:ILE:HD11	0.51	1.82	4	1
1:A:73:LYS:HA	1:A:96:GLU:CA	0.51	2.34	12	4
1:A:102:ILE:HG12	1:A:125:LEU:CD1	0.51	2.34	24	1
1:A:105:GLU:OE1	1:A:105:GLU:N	0.51	2.43	15	1
1:A:87:LEU:CD1	1:A:92:MET:SD	0.51	2.98	36	9
1:A:90:VAL:HG23	1:A:91:MET:H	0.51	1.64	17	1
1:A:74:SER:O	1:A:95:GLU:N	0.51	2.44	29	5
1:A:102:ILE:HD12	1:A:102:ILE:N	0.51	2.20	6	1
1:A:78:ASN:ND2	1:A:122:ASP:OD1	0.51	2.44	13	1
1:A:40:LEU:O	1:A:43:MET:HG2	0.51	2.05	18	14
1:A:40:LEU:CD2	1:A:43:MET:SD	0.51	2.98	24	2
1:A:13:ILE:H	1:A:13:ILE:HD12	0.51	1.65	21	1
1:A:83:ILE:O	1:A:84:ASN:ND2	0.51	2.44	15	2
1:A:58:ASP:OD1	1:A:59:MET:N	0.51	2.43	16	2
1:A:13:ILE:O	1:A:13:ILE:CD1	0.51	2.57	3	2
1:A:13:ILE:CD1	1:A:13:ILE:O	0.51	2.57	39	1
1:A:44:GLN:OE1	1:A:44:GLN:N	0.51	2.44	25	1
1:A:44:GLN:OE1	1:A:121:LEU:CB	0.51	2.59	23	1
1:A:11:ILE:O	1:A:49:VAL:N	0.51	2.42	22	13
1:A:9:GLN:NE2	1:A:21:MET:SD	0.51	2.84	10	8
1:A:74:SER:N	1:A:95:GLU:O	0.51	2.44	1	3
1:A:83:ILE:HG13	1:A:118:ALA:CB	0.51	2.36	12	31
1:A:37:ILE:HB	1:A:38:PRO:CD	0.51	2.36	5	7
1:A:126:MET:N	1:A:127:PRO:HD3	0.51	2.21	5	1
1:A:32:ILE:HG21	1:A:40:LEU:HD13	0.51	1.82	22	1
1:A:36:GLU:HB3	1:A:40:LEU:CD1	0.51	2.35	27	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:21:MET:SD	0.51	2.99	35	1
1:A:36:GLU:O	1:A:39:ASN:N	0.51	2.43	34	17
1:A:102:ILE:HD12	1:A:125:LEU:CD1	0.51	2.31	13	5
1:A:81:ILE:O	1:A:81:ILE:CD1	0.51	2.59	26	1
1:A:105:GLU:CG	1:A:106:GLU:N	0.51	2.74	7	8
1:A:36:GLU:O	1:A:40:LEU:CD2	0.51	2.56	6	4
1:A:6:VAL:HG21	1:A:27:VAL:HG22	0.51	1.83	4	1
1:A:11:ILE:CG2	1:A:15:THR:CG2	0.50	2.89	37	2
1:A:8:ASN:OD1	1:A:9:GLN:N	0.50	2.44	13	2
1:A:43:MET:CE	1:A:122:ASP:CB	0.50	2.89	5	1
1:A:87:LEU:O	1:A:112:GLY:CA	0.50	2.59	28	18
1:A:75:VAL:CG1	1:A:92:MET:HG3	0.50	2.37	4	1
1:A:43:MET:HE1	1:A:122:ASP:CB	0.50	2.36	5	1
1:A:119:VAL:CG1	1:A:120:TYR:N	0.50	2.73	16	1
1:A:13:ILE:C	1:A:13:ILE:CD1	0.50	2.80	39	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:GLU:OE1	1:A:39:ASN:ND2	0.50	2.44	23	3
1:A:107:ILE:O	1:A:110:LEU:N	0.50	2.44	2	3
1:A:100:LYS:CD	1:A:100:LYS:N	0.50	2.75	28	1
1:A:80:LEU:O	1:A:81:ILE:HD13	0.50	2.06	20	2
1:A:13:ILE:CD1	1:A:13:ILE:C	0.50	2.79	28	2
1:A:30:MET:O	1:A:30:MET:CG	0.50	2.58	37	4
1:A:92:MET:N	1:A:92:MET:SD	0.50	2.85	6	1
1:A:78:ASN:ND2	1:A:79:GLN:N	0.50	2.60	22	1
1:A:36:GLU:OE1	1:A:39:ASN:CB	0.50	2.60	26	2
1:A:73:LYS:CD	1:A:73:LYS:C	0.50	2.80	23	1
1:A:43:MET:SD	1:A:55:LEU:CG	0.50	3.00	36	1
1:A:36:GLU:C	1:A:40:LEU:HD23	0.50	2.27	4	1
1:A:5:VAL:HG23	1:A:33:PRO:C	0.50	2.27	29	1
1:A:37:ILE:CG2	1:A:38:PRO:HD3	0.50	2.35	36	6
1:A:16:ALA:HB1	1:A:42:GLY:O	0.50	2.07	14	11
1:A:3:ALA:CB	1:A:24:ALA:O	0.50	2.59	19	4
1:A:75:VAL:CG2	1:A:102:ILE:O	0.50	2.57	16	1
1:A:40:LEU:HD11	1:A:55:LEU:HD11	0.50	1.84	13	2
1:A:50:PRO:CD	1:A:53:THR:OG1	0.50	2.60	36	8
1:A:2:LYS:HD2	1:A:2:LYS:N	0.50	2.21	21	2
1:A:74:SER:O	1:A:76:VAL:HG23	0.50	2.07	19	1
1:A:5:VAL:CG1	1:A:22:MET:SD	0.50	3.00	8	1
1:A:83:ILE:CD1	1:A:118:ALA:CA	0.50	2.90	35	1
1:A:117:ARG:CD	1:A:118:ALA:O	0.50	2.59	35	2
1:A:117:ARG:NH2	1:A:118:ALA:O	0.50	2.45	12	1
1:A:36:GLU:HG3	1:A:40:LEU:HD12	0.49	1.83	7	1
1:A:35:GLU:OE1	1:A:36:GLU:CG	0.49	2.60	1	1
1:A:43:MET:CE	1:A:122:ASP:HB2	0.49	2.36	5	1
1:A:23:LYS:CD	1:A:24:ALA:N	0.49	2.75	3	1
1:A:125:LEU:CD1	1:A:125:LEU:C	0.49	2.80	1	5
1:A:9:GLN:HG2	1:A:11:ILE:HD11	0.49	1.84	31	2
1:A:96:GLU:O	1:A:96:GLU:CG	0.49	2.60	20	2
1:A:29:PRO:O	1:A:31:GLY:N	0.49	2.44	39	2
1:A:23:LYS:CD	1:A:23:LYS:C	0.49	2.79	3	1
1:A:9:GLN:CD	1:A:21:MET:CG	0.49	2.80	17	7
1:A:13:ILE:CD1	1:A:47:ARG:C	0.49	2.80	2	5
1:A:40:LEU:CG	1:A:43:MET:SD	0.49	3.01	32	1
1:A:80:LEU:CD1	1:A:80:LEU:C	0.49	2.81	20	1
1:A:105:GLU:OE1	1:A:105:GLU:CA	0.49	2.60	15	1
1:A:13:ILE:HG22	1:A:47:ARG:C	0.49	2.27	16	2
1:A:11:ILE:CD1	1:A:21:MET:HE2	0.49	2.38	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:VAL:HG11	1:A:92:MET:CE	0.49	2.38	3	1
1:A:75:VAL:HG22	1:A:104:SER:HB3	0.49	1.83	4	1
1:A:36:GLU:HB2	1:A:40:LEU:CD2	0.49	2.37	38	3
1:A:81:ILE:O	1:A:118:ALA:CA	0.49	2.61	16	1
1:A:9:GLN:NE2	1:A:21:MET:HG2	0.49	2.22	30	1
1:A:80:LEU:C	1:A:80:LEU:CD1	0.49	2.81	31	4
1:A:110:LEU:CA	1:A:113:MET:HG3	0.49	2.38	37	3
1:A:87:LEU:HD21	1:A:113:MET:SD	0.49	2.48	28	1
1:A:13:ILE:C	1:A:14:ASN:ND2	0.49	2.66	13	5
1:A:25:GLU:OE1	1:A:27:VAL:HG11	0.49	2.07	32	1
1:A:40:LEU:CD1	1:A:43:MET:HE3	0.49	2.37	15	1
1:A:83:ILE:C	1:A:84:ASN:ND2	0.49	2.66	13	2
1:A:76:VAL:HG22	1:A:124:THR:CA	0.49	2.32	5	1
1:A:80:LEU:HD22	1:A:120:TYR:C	0.49	2.28	15	3
1:A:78:ASN:OD1	1:A:93:LYS:CE	0.49	2.61	9	1
1:A:76:VAL:CG2	1:A:97:VAL:HG11	0.49	2.36	16	2
1:A:102:ILE:HG12	1:A:125:LEU:HG	0.49	1.84	24	1
1:A:93:LYS:CD	1:A:93:LYS:C	0.49	2.80	11	1
1:A:92:MET:CE	1:A:104:SER:OG	0.49	2.61	14	2
1:A:36:GLU:HG3	1:A:40:LEU:CD1	0.49	2.38	7	2
1:A:73:LYS:O	1:A:73:LYS:CG	0.48	2.60	31	4
1:A:5:VAL:CG2	1:A:37:ILE:HD11	0.48	2.38	23	2
1:A:32:ILE:CD1	1:A:55:LEU:CD1	0.48	2.81	12	1
1:A:107:ILE:CD1	1:A:107:ILE:C	0.48	2.80	12	2
1:A:13:ILE:HD12	1:A:13:ILE:H	0.48	1.68	7	3
1:A:115:VAL:CG2	1:A:117:ARG:O	0.48	2.61	3	2
1:A:45:VAL:HG12	1:A:60:VAL:HG22	0.48	1.85	37	2
1:A:122:ASP:OD1	1:A:122:ASP:O	0.48	2.31	20	3
1:A:83:ILE:HG22	1:A:84:ASN:CG	0.48	2.29	20	2
1:A:107:ILE:HG22	1:A:111:VAL:CG2	0.48	2.38	24	1
1:A:78:ASN:ND2	1:A:122:ASP:OD2	0.48	2.45	11	1
1:A:25:GLU:OE1	1:A:27:VAL:CG1	0.48	2.61	20	2
1:A:49:VAL:CG1	1:A:53:THR:HB	0.48	2.38	20	11
1:A:9:GLN:NE2	1:A:21:MET:CB	0.48	2.76	38	1
1:A:36:GLU:HB2	1:A:40:LEU:CD1	0.48	2.38	27	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:41:VAL:HG21	0.48	2.38	29	2
1:A:76:VAL:CG1	1:A:123:GLN:O	0.48	2.62	29	2
1:A:13:ILE:HD13	1:A:48:ALA:HA	0.48	1.84	24	2
1:A:73:LYS:C	1:A:73:LYS:CD	0.48	2.80	26	1
1:A:100:LYS:HD3	1:A:100:LYS:N	0.48	2.24	4	1
1:A:80:LEU:C	1:A:80:LEU:CD2	0.48	2.82	28	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:VAL:HB	1:A:125:LEU:HD22	0.48	1.86	5	1
1:A:11:ILE:HD12	1:A:17:LEU:HD22	0.48	1.86	29	1
1:A:8:ASN:O	1:A:51:LEU:CD2	0.48	2.61	9	3
1:A:9:GLN:NE2	1:A:21:MET:HB3	0.48	2.23	38	1
1:A:81:ILE:CG1	1:A:119:VAL:HB	0.48	2.38	26	6
1:A:5:VAL:HG21	1:A:37:ILE:CD1	0.48	2.39	23	1
1:A:49:VAL:HG21	1:A:53:THR:CG2	0.48	2.38	29	1
1:A:5:VAL:CG1	1:A:22:MET:HG3	0.48	2.39	14	2
1:A:47:ARG:NH2	1:A:59:MET:SD	0.48	2.86	30	1
1:A:44:GLN:OE1	1:A:121:LEU:CG	0.48	2.61	39	2
1:A:40:LEU:C	1:A:40:LEU:CD2	0.48	2.76	19	2
1:A:76:VAL:HG21	1:A:95:GLU:CD	0.48	2.29	32	1
1:A:46:ASN:N	1:A:59:MET:O	0.47	2.46	36	1
1:A:50:PRO:O	1:A:51:LEU:O	0.47	2.31	9	2
1:A:81:ILE:HG22	1:A:85:THR:HB	0.47	1.84	25	1
1:A:81:ILE:CG2	1:A:85:THR:HB	0.47	2.39	13	13
1:A:14:ASN:OD1	1:A:14:ASN:O	0.47	2.32	25	7
1:A:77:ALA:O	1:A:121:LEU:O	0.47	2.32	34	7
1:A:36:GLU:HB3	1:A:40:LEU:CD2	0.47	2.38	38	1
1:A:17:LEU:HD12	1:A:43:MET:HG2	0.47	1.86	32	2
1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:HD22	0.47	2.24	18	1
1:A:103:PRO:O	1:A:105:GLU:OE1	0.47	2.33	31	1
1:A:77:ALA:HA	1:A:92:MET:HE3	0.47	1.86	6	1
1:A:5:VAL:O	1:A:55:LEU:HD23	0.47	2.09	14	2
1:A:40:LEU:CD2	1:A:40:LEU:O	0.47	2.56	19	1
1:A:14:ASN:CB	1:A:121:LEU:HG	0.47	2.39	9	1
1:A:14:ASN:O	1:A:14:ASN:OD1	0.47	2.32	13	10
1:A:84:ASN:OD1	1:A:84:ASN:O	0.47	2.33	13	3
1:A:83:ILE:HG13	1:A:118:ALA:CA	0.47	2.38	9	29
1:A:77:ALA:O	1:A:122:ASP:HA	0.47	2.10	24	40
1:A:34:ALA:CA	1:A:37:ILE:HG12	0.47	2.40	4	14
1:A:49:VAL:HG12	1:A:53:THR:HB	0.47	1.86	23	4
1:A:125:LEU:CD1	1:A:127:PRO:CG	0.47	2.88	5	1
1:A:34:ALA:HA	1:A:37:ILE:CG1	0.47	2.39	18	4
1:A:44:GLN:OE1	1:A:122:ASP:OD1	0.47	2.32	20	2
1:A:103:PRO:CG	1:A:105:GLU:OE1	0.47	2.62	37	1
1:A:105:GLU:HG3	1:A:106:GLU:N	0.47	2.24	34	10
1:A:89:LEU:O	1:A:92:MET:O	0.47	2.33	6	13
1:A:84:ASN:O	1:A:84:ASN:OD1	0.47	2.33	12	2
1:A:2:LYS:O	1:A:2:LYS:CD	0.47	2.63	5	1
1:A:83:ILE:HG12	1:A:118:ALA:N	0.47	2.25	3	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:80:LEU:CD2	1:A:80:LEU:C	0.47	2.82	8	3
1:A:55:LEU:CD1	1:A:55:LEU:C	0.47	2.83	40	2
1:A:77:ALA:HB2	1:A:92:MET:HE1	0.47	1.85	23	1
1:A:40:LEU:CD1	1:A:40:LEU:N	0.47	2.78	27	2
1:A:11:ILE:N	1:A:49:VAL:O	0.47	2.48	2	4
1:A:117:ARG:HD3	1:A:118:ALA:O	0.47	2.10	35	2
1:A:80:LEU:HD23	1:A:81:ILE:N	0.47	2.24	34	2
1:A:47:ARG:NE	1:A:59:MET:SD	0.47	2.88	38	1
1:A:87:LEU:CD2	1:A:115:VAL:CG1	0.47	2.93	29	1
1:A:9:GLN:NE2	1:A:21:MET:CG	0.47	2.78	30	2
1:A:81:ILE:HD12	1:A:119:VAL:CG2	0.47	2.39	16	1
1:A:83:ILE:HG22	1:A:84:ASN:HD22	0.47	1.70	22	1
1:A:5:VAL:CG1	1:A:22:MET:CG	0.47	2.93	14	3
1:A:5:VAL:CG2	1:A:34:ALA:CA	0.47	2.92	13	1
1:A:96:GLU:O	1:A:96:GLU:OE1	0.47	2.32	20	1
1:A:13:ILE:O	1:A:14:ASN:C	0.47	2.52	7	26
1:A:102:ILE:HD12	1:A:127:PRO:CD	0.47	2.40	5	1
1:A:7:ALA:O	1:A:52:GLY:N	0.47	2.48	23	6
1:A:81:ILE:HD12	1:A:119:VAL:CB	0.47	2.39	22	2
1:A:30:MET:CG	1:A:30:MET:O	0.47	2.62	9	3
1:A:100:LYS:O	1:A:100:LYS:HG2	0.47	2.10	4	5
1:A:13:ILE:HD12	1:A:14:ASN:HB2	0.47	1.86	28	1
1:A:40:LEU:O	1:A:40:LEU:CD2	0.47	2.55	5	2
1:A:78:ASN:OD1	1:A:91:MET:O	0.47	2.33	22	2
1:A:44:GLN:OE1	1:A:121:LEU:HB3	0.47	2.10	20	2
1:A:83:ILE:O	1:A:84:ASN:CG	0.47	2.53	5	5
1:A:30:MET:O	1:A:31:GLY:O	0.47	2.33	17	16
1:A:40:LEU:HA	1:A:43:MET:HG3	0.47	1.87	11	11
1:A:5:VAL:O	1:A:5:VAL:HG12	0.47	2.10	36	1
1:A:26:VAL:O	1:A:27:VAL:HG13	0.47	2.09	36	1
1:A:104:SER:O	1:A:104:SER:OG	0.47	2.33	27	2
1:A:78:ASN:OD1	1:A:79:GLN:NE2	0.47	2.48	24	1
1:A:77:ALA:CB	1:A:119:VAL:CG1	0.47	2.93	13	2
1:A:83:ILE:CG1	1:A:118:ALA:CB	0.47	2.92	30	1
1:A:20:ILE:HD12	1:A:20:ILE:H	0.46	1.69	15	4
1:A:13:ILE:H	1:A:13:ILE:HD13	0.46	1.70	36	1
1:A:40:LEU:HD23	1:A:43:MET:CE	0.46	2.41	31	1
1:A:105:GLU:HG2	1:A:106:GLU:N	0.46	2.26	31	1
1:A:102:ILE:HG12	1:A:125:LEU:CG	0.46	2.41	24	1
1:A:122:ASP:O	1:A:122:ASP:OD1	0.46	2.33	14	2
1:A:40:LEU:HB3	1:A:43:MET:CE	0.46	2.40	40	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:ILE:CG1	1:A:55:LEU:HD12	0.46	2.40	12	1
1:A:78:ASN:O	1:A:122:ASP:OD1	0.46	2.33	25	3
1:A:50:PRO:O	1:A:53:THR:OG1	0.46	2.33	31	12
1:A:78:ASN:OD1	1:A:93:LYS:HE3	0.46	2.10	9	1
1:A:115:VAL:HG23	1:A:117:ARG:O	0.46	2.10	3	3
1:A:89:LEU:HA	1:A:92:MET:CG	0.46	2.41	20	2
1:A:82:PRO:O	1:A:85:THR:OG1	0.46	2.33	12	3
1:A:117:ARG:CZ	1:A:117:ARG:HB3	0.46	2.41	6	1
1:A:22:MET:SD	1:A:37:ILE:HD12	0.46	2.50	24	1
1:A:20:ILE:H	1:A:20:ILE:HD12	0.46	1.71	39	2
1:A:33:PRO:O	1:A:35:GLU:N	0.46	2.49	13	2
1:A:46:ASN:OD1	1:A:59:MET:O	0.46	2.33	24	1
1:A:7:ALA:N	1:A:53:THR:O	0.46	2.48	37	2
1:A:37:ILE:O	1:A:41:VAL:CB	0.46	2.63	1	7
1:A:88:THR:OG1	1:A:90:VAL:HG12	0.46	2.11	4	3
1:A:36:GLU:OE2	1:A:39:ASN:ND2	0.46	2.48	4	1
1:A:2:LYS:CD	1:A:2:LYS:O	0.46	2.64	16	1
1:A:22:MET:HG3	1:A:37:ILE:HD11	0.46	1.88	22	1
1:A:107:ILE:O	1:A:111:VAL:CG2	0.46	2.56	3	2
1:A:60:VAL:HG12	1:A:60:VAL:O	0.46	2.11	28	1
1:A:78:ASN:OD1	1:A:122:ASP:OD2	0.46	2.34	19	3
1:A:97:VAL:HG22	1:A:98:SER:N	0.46	2.26	20	3
1:A:49:VAL:CG1	1:A:50:PRO:HD2	0.46	2.41	7	1
1:A:43:MET:SD	1:A:60:VAL:HG11	0.46	2.51	19	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:22:MET:HE3	0.46	1.88	27	1
1:A:18:THR:OG1	1:A:21:MET:SD	0.45	2.74	15	5
1:A:37:ILE:HB	1:A:38:PRO:HD3	0.45	1.87	5	13
1:A:43:MET:HE3	1:A:60:VAL:HG11	0.45	1.83	32	1
1:A:88:THR:O	1:A:92:MET:HG2	0.45	2.11	7	1
1:A:88:THR:CG2	1:A:112:GLY:CA	0.45	2.95	26	15
1:A:80:LEU:HD23	1:A:119:VAL:O	0.45	2.11	25	2
1:A:40:LEU:O	1:A:43:MET:SD	0.45	2.74	27	3
1:A:80:LEU:N	1:A:121:LEU:HD12	0.45	2.26	22	1
1:A:83:ILE:HG22	1:A:84:ASN:ND2	0.45	2.26	19	2
1:A:2:LYS:CD	1:A:2:LYS:N	0.45	2.80	26	2
1:A:13:ILE:C	1:A:13:ILE:HD12	0.45	2.31	39	1
1:A:81:ILE:HD13	1:A:87:LEU:HB3	0.45	1.89	3	1
1:A:47:ARG:CZ	1:A:59:MET:SD	0.45	3.05	38	1
1:A:81:ILE:O	1:A:118:ALA:HA	0.45	2.12	16	1
1:A:87:LEU:HD13	1:A:92:MET:CE	0.45	2.42	32	2
1:A:34:ALA:CB	1:A:37:ILE:HG12	0.45	2.41	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:LEU:CD2	1:A:10:LEU:C	0.45	2.81	9	3
1:A:125:LEU:C	1:A:125:LEU:CD1	0.45	2.81	13	2
1:A:107:ILE:CG2	1:A:111:VAL:CG2	0.45	2.95	24	1
1:A:80:LEU:HD12	1:A:120:TYR:CD1	0.45	2.46	24	1
1:A:100:LYS:O	1:A:100:LYS:HG3	0.45	2.12	18	3
1:A:13:ILE:O	1:A:14:ASN:CG	0.45	2.55	9	17
1:A:11:ILE:CD1	1:A:49:VAL:HB	0.45	2.42	40	2
1:A:9:GLN:OE1	1:A:21:MET:SD	0.45	2.74	11	4
1:A:36:GLU:HG2	1:A:40:LEU:HD12	0.45	1.88	10	1
1:A:120:TYR:CD1	1:A:120:TYR:N	0.45	2.81	21	1
1:A:40:LEU:HD11	1:A:55:LEU:CD1	0.45	2.41	13	1
1:A:32:ILE:HG21	1:A:40:LEU:CD2	0.45	2.42	25	1
1:A:42:GLY:O	1:A:44:GLN:OE1	0.45	2.34	25	1
1:A:8:ASN:N	1:A:21:MET:O	0.45	2.46	28	1
1:A:77:ALA:HA	1:A:92:MET:CE	0.45	2.41	6	1
1:A:97:VAL:CG1	1:A:124:THR:OG1	0.45	2.64	24	1
1:A:116:ASN:O	1:A:116:ASN:OD1	0.45	2.34	25	1
1:A:22:MET:SD	1:A:22:MET:O	0.45	2.74	1	4
1:A:2:LYS:O	1:A:2:LYS:HD2	0.45	2.12	5	2
1:A:44:GLN:OE1	1:A:121:LEU:CD1	0.45	2.64	39	1
1:A:80:LEU:HD21	1:A:120:TYR:HA	0.45	1.89	15	1
1:A:10:LEU:HB2	1:A:51:LEU:CD1	0.45	2.42	40	6
1:A:75:VAL:CG1	1:A:92:MET:HB3	0.45	2.41	5	2
1:A:101:GLY:HA3	1:A:125:LEU:O	0.45	2.12	24	5
1:A:16:ALA:CB	1:A:42:GLY:HA2	0.45	2.40	21	2
1:A:56:MET:SD	1:A:59:MET:SD	0.45	3.15	37	2
1:A:122:ASP:N	1:A:122:ASP:OD1	0.45	2.49	12	3
1:A:34:ALA:O	1:A:37:ILE:HG12	0.45	2.12	34	19
1:A:44:GLN:N	1:A:44:GLN:CD	0.45	2.70	25	1
1:A:36:GLU:O	1:A:37:ILE:C	0.45	2.56	28	22
1:A:81:ILE:CD1	1:A:119:VAL:HB	0.44	2.42	22	2
1:A:120:TYR:N	1:A:123:GLN:OE1	0.44	2.45	37	1
1:A:13:ILE:HD13	1:A:48:ALA:N	0.44	2.27	4	1
1:A:10:LEU:C	1:A:11:ILE:HD13	0.44	2.32	31	1
1:A:104:SER:HA	1:A:107:ILE:CG1	0.44	2.42	2	4
1:A:123:GLN:HG3	1:A:124:THR:N	0.44	2.28	18	5
1:A:54:THR:CG2	1:A:56:MET:SD	0.44	3.03	34	1
1:A:2:LYS:HD2	1:A:2:LYS:O	0.44	2.12	16	1
1:A:50:PRO:C	1:A:53:THR:HG1	0.44	2.15	22	2
1:A:106:GLU:CD	1:A:110:LEU:HD11	0.44	2.32	27	1
1:A:40:LEU:O	1:A:43:MET:HB3	0.44	2.13	3	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:ILE:N	1:A:83:ILE:HD13	0.44	2.26	35	1
1:A:12:PRO:O	1:A:45:VAL:HG21	0.44	2.13	29	1
1:A:43:MET:HE1	1:A:55:LEU:HD11	0.44	1.88	21	1
1:A:5:VAL:HG23	1:A:34:ALA:H	0.44	1.72	13	1
1:A:73:LYS:HD3	1:A:73:LYS:C	0.44	2.33	26	2
1:A:122:ASP:OD1	1:A:122:ASP:N	0.44	2.50	37	2
1:A:104:SER:O	1:A:107:ILE:HG22	0.44	2.12	37	2
1:A:9:GLN:CG	1:A:11:ILE:HD11	0.44	2.43	36	2
1:A:11:ILE:O	1:A:49:VAL:HB	0.44	2.13	37	4
1:A:36:GLU:O	1:A:40:LEU:N	0.44	2.41	37	5
1:A:40:LEU:HD13	1:A:40:LEU:C	0.44	2.33	5	1
1:A:98:SER:CB	1:A:99:PRO:HA	0.44	2.43	16	1
1:A:13:ILE:HD12	1:A:47:ARG:C	0.44	2.33	24	3
1:A:83:ILE:CG1	1:A:118:ALA:CA	0.44	2.95	30	1
1:A:73:LYS:CG	1:A:73:LYS:O	0.44	2.66	11	3
1:A:75:VAL:O	1:A:125:LEU:HB3	0.44	2.12	7	11
1:A:83:ILE:O	1:A:84:ASN:C	0.44	2.56	30	18
1:A:80:LEU:HB2	1:A:121:LEU:CD2	0.44	2.43	11	11
1:A:10:LEU:C	1:A:10:LEU:HD23	0.44	2.33	24	4
1:A:102:ILE:HB	1:A:125:LEU:CD2	0.44	2.43	12	14
1:A:8:ASN:CB	1:A:23:LYS:HG3	0.44	2.42	9	1
1:A:40:LEU:HD11	1:A:55:LEU:CG	0.44	2.43	29	1
1:A:13:ILE:HD13	1:A:13:ILE:H	0.44	1.72	16	1
1:A:117:ARG:HD3	1:A:118:ALA:N	0.44	2.27	13	1
1:A:73:LYS:O	1:A:73:LYS:HD2	0.44	2.13	23	2
1:A:22:MET:HE2	1:A:37:ILE:CD1	0.44	2.42	12	1
1:A:75:VAL:CG1	1:A:92:MET:HG2	0.44	2.43	13	3
1:A:106:GLU:HG3	1:A:110:LEU:CD1	0.44	2.43	4	2
1:A:75:VAL:HB	1:A:125:LEU:CD2	0.44	2.43	5	1
1:A:30:MET:O	1:A:30:MET:HG3	0.44	2.12	21	1
1:A:55:LEU:HD11	1:A:60:VAL:HG21	0.44	1.88	20	1
1:A:89:LEU:H	1:A:89:LEU:HD23	0.43	1.73	12	7
1:A:83:ILE:O	1:A:84:ASN:CB	0.43	2.64	25	3
1:A:110:LEU:HA	1:A:113:MET:HG3	0.43	1.89	37	3
1:A:9:GLN:OE1	1:A:21:MET:HG3	0.43	2.13	14	2
1:A:56:MET:CG	1:A:58:ASP:OD1	0.43	2.66	30	1
1:A:5:VAL:CG1	1:A:22:MET:HG2	0.43	2.41	23	2
1:A:106:GLU:OE2	1:A:110:LEU:CD1	0.43	2.65	27	1
1:A:74:SER:O	1:A:94:ALA:HA	0.43	2.13	29	18
1:A:92:MET:O	1:A:92:MET:HG3	0.43	2.13	25	1
1:A:40:LEU:HB3	1:A:43:MET:HE1	0.43	1.90	28	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:MET:HG3	1:A:21:MET:O	0.43	2.13	32	1
1:A:107:ILE:O	1:A:108:SER:C	0.43	2.56	27	9
1:A:7:ALA:HA	1:A:21:MET:O	0.43	2.13	28	7
1:A:100:LYS:HD3	1:A:100:LYS:O	0.43	2.13	4	1
1:A:82:PRO:C	1:A:83:ILE:CD1	0.43	2.82	33	2
1:A:78:ASN:O	1:A:121:LEU:HG	0.43	2.14	22	1
1:A:92:MET:HE2	1:A:104:SER:OG	0.43	2.14	20	2
1:A:110:LEU:CA	1:A:113:MET:CG	0.43	2.96	37	2
1:A:81:ILE:HB	1:A:85:THR:CB	0.43	2.43	7	1
1:A:44:GLN:NE2	1:A:122:ASP:CG	0.43	2.72	20	1
1:A:92:MET:C	1:A:92:MET:SD	0.43	2.97	25	4
1:A:96:GLU:O	1:A:96:GLU:HG3	0.43	2.14	20	2
1:A:9:GLN:OE1	1:A:21:MET:HG2	0.43	2.12	6	2
1:A:11:ILE:O	1:A:49:VAL:O	0.43	2.36	11	1
1:A:76:VAL:HA	1:A:123:GLN:O	0.43	2.13	7	1
1:A:88:THR:HA	1:A:111:VAL:HG13	0.43	1.90	1	3
1:A:93:LYS:O	1:A:95:GLU:OE2	0.43	2.37	1	1
1:A:10:LEU:N	1:A:51:LEU:HG	0.43	2.29	7	5
1:A:40:LEU:C	1:A:40:LEU:HD13	0.43	2.34	31	1
1:A:102:ILE:CG1	1:A:127:PRO:HD3	0.43	2.43	13	6
1:A:73:LYS:HB2	1:A:95:GLU:CA	0.43	2.44	7	1
1:A:28:THR:HA	1:A:29:PRO:C	0.43	2.34	26	28
1:A:7:ALA:O	1:A:52:GLY:HA2	0.43	2.14	33	27
1:A:76:VAL:CG1	1:A:95:GLU:OE2	0.43	2.66	9	1
1:A:33:PRO:O	1:A:34:ALA:C	0.43	2.57	12	2
1:A:17:LEU:CD2	1:A:21:MET:SD	0.43	3.07	8	1
1:A:15:THR:O	1:A:43:MET:O	0.43	2.36	40	1
1:A:36:GLU:C	1:A:38:PRO:HD2	0.43	2.34	30	6
1:A:22:MET:O	1:A:22:MET:CE	0.43	2.67	31	1
1:A:40:LEU:O	1:A:40:LEU:HG	0.43	2.13	11	4
1:A:79:GLN:O	1:A:121:LEU:HA	0.43	2.14	22	1
1:A:73:LYS:HG2	1:A:73:LYS:O	0.43	2.14	15	2
1:A:11:ILE:HB	1:A:49:VAL:HB	0.43	1.90	28	3
1:A:16:ALA:O	1:A:17:LEU:C	0.43	2.57	32	8
1:A:40:LEU:HG	1:A:40:LEU:O	0.43	2.13	34	2
1:A:26:VAL:HG12	1:A:26:VAL:O	0.43	2.13	30	2
1:A:86:ALA:HB2	1:A:114:GLN:CG	0.43	2.42	24	1
1:A:88:THR:O	1:A:92:MET:HG3	0.43	2.14	7	1
1:A:44:GLN:O	1:A:44:GLN:CD	0.43	2.57	33	1
1:A:8:ASN:ND2	1:A:23:LYS:HD2	0.43	2.29	28	1
1:A:29:PRO:HD2	1:A:54:THR:HG21	0.43	1.91	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:102:ILE:CD1	1:A:127:PRO:HD3	0.43	2.44	24	1
1:A:26:VAL:C	1:A:27:VAL:HG13	0.43	2.34	39	2
1:A:88:THR:HG22	1:A:111:VAL:CG1	0.43	2.44	12	1
1:A:11:ILE:HG13	1:A:17:LEU:CD2	0.43	2.44	28	6
1:A:98:SER:HA	1:A:99:PRO:C	0.43	2.35	24	24
1:A:32:ILE:HB	1:A:55:LEU:CD2	0.43	2.44	34	1
1:A:87:LEU:O	1:A:112:GLY:HA2	0.43	2.14	28	9
1:A:125:LEU:CD1	1:A:127:PRO:CD	0.43	2.85	5	1
1:A:7:ALA:CB	1:A:53:THR:HB	0.43	2.42	29	1
1:A:54:THR:HG23	1:A:56:MET:HG2	0.43	1.91	10	1
1:A:43:MET:O	1:A:43:MET:HG3	0.43	2.14	26	1
1:A:40:LEU:HD11	1:A:55:LEU:HG	0.43	1.91	30	1
1:A:92:MET:CE	1:A:125:LEU:HD22	0.43	2.44	33	1
1:A:8:ASN:HB2	1:A:23:LYS:CD	0.42	2.44	25	1
1:A:78:ASN:HA	1:A:122:ASP:OD1	0.42	2.14	19	2
1:A:34:ALA:HA	1:A:37:ILE:HG12	0.42	1.89	12	5
1:A:58:ASP:OD1	1:A:58:ASP:N	0.42	2.49	16	1
1:A:13:ILE:C	1:A:14:ASN:CG	0.42	2.78	7	1
1:A:78:ASN:CB	1:A:93:LYS:HG3	0.42	2.44	27	1
1:A:75:VAL:HG13	1:A:92:MET:CG	0.42	2.44	4	1
1:A:49:VAL:HG11	1:A:53:THR:OG1	0.42	2.13	29	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:21:MET:HE3	0.42	2.44	28	1
1:A:100:LYS:HD2	1:A:100:LYS:N	0.42	2.29	28	1
1:A:110:LEU:O	1:A:113:MET:HG2	0.42	2.15	31	6
1:A:9:GLN:CD	1:A:21:MET:HG2	0.42	2.34	7	3
1:A:13:ILE:CD1	1:A:48:ALA:HA	0.42	2.44	24	1
1:A:40:LEU:HD22	1:A:43:MET:HE1	0.42	1.88	22	1
1:A:43:MET:SD	1:A:55:LEU:HG	0.42	2.54	36	1
1:A:84:ASN:ND2	1:A:115:VAL:O	0.42	2.52	26	2
1:A:37:ILE:CB	1:A:38:PRO:HD3	0.42	2.45	4	2
1:A:11:ILE:HD13	1:A:17:LEU:HD22	0.42	1.90	38	1
1:A:8:ASN:N	1:A:8:ASN:OD1	0.42	2.53	39	1
1:A:100:LYS:HD2	1:A:100:LYS:O	0.42	2.15	12	1
1:A:37:ILE:O	1:A:41:VAL:HB	0.42	2.15	32	10
1:A:4:SER:O	1:A:24:ALA:HA	0.42	2.15	25	3
1:A:83:ILE:O	1:A:84:ASN:HB2	0.42	2.13	4	2
1:A:96:GLU:OE1	1:A:96:GLU:C	0.42	2.57	17	1
1:A:32:ILE:CG1	1:A:55:LEU:HB3	0.42	2.44	14	1
1:A:28:THR:HG22	1:A:30:MET:HE2	0.42	1.90	10	1
1:A:73:LYS:HA	1:A:95:GLU:O	0.42	2.14	19	1
1:A:11:ILE:O	1:A:49:VAL:CB	0.42	2.67	37	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:LEU:O	1:A:41:VAL:C	0.42	2.57	1	5
1:A:117:ARG:HG3	1:A:118:ALA:N	0.42	2.29	1	2
1:A:78:ASN:OD1	1:A:91:MET:C	0.42	2.57	22	1
1:A:92:MET:HE1	1:A:107:ILE:HD11	0.42	1.92	7	1
1:A:5:VAL:CG2	1:A:34:ALA:CB	0.42	2.98	13	1
1:A:81:ILE:O	1:A:81:ILE:HG13	0.42	2.15	26	1
1:A:44:GLN:OE1	1:A:121:LEU:HG	0.42	2.15	12	1
1:A:73:LYS:O	1:A:73:LYS:HG2	0.42	2.15	31	1
1:A:9:GLN:CD	1:A:21:MET:SD	0.42	2.97	22	6
1:A:88:THR:CG2	1:A:112:GLY:HA2	0.42	2.45	18	1
1:A:19:LEU:N	1:A:19:LEU:CD2	0.42	2.83	18	1
1:A:102:ILE:HD12	1:A:127:PRO:HD2	0.42	1.92	5	1
1:A:97:VAL:HG22	1:A:98:SER:H	0.42	1.75	21	1
1:A:18:THR:HG23	1:A:21:MET:HE3	0.42	1.92	39	1
1:A:92:MET:HE2	1:A:125:LEU:HD22	0.42	1.91	33	1
1:A:43:MET:HG3	1:A:43:MET:O	0.42	2.15	24	2
1:A:55:LEU:O	1:A:55:LEU:HG	0.42	2.15	34	1
1:A:115:VAL:CG2	1:A:117:ARG:HG3	0.42	2.45	30	2
1:A:78:ASN:OD1	1:A:122:ASP:OD1	0.42	2.38	19	1
1:A:50:PRO:HD2	1:A:53:THR:CG2	0.41	2.45	31	1
1:A:40:LEU:O	1:A:40:LEU:CG	0.41	2.68	11	1
1:A:92:MET:HG3	1:A:92:MET:O	0.41	2.13	14	1
1:A:8:ASN:OD1	1:A:23:LYS:CG	0.41	2.68	18	1
1:A:40:LEU:CB	1:A:43:MET:CE	0.41	2.97	40	1
1:A:75:VAL:CG1	1:A:92:MET:CG	0.41	2.98	4	1
1:A:102:ILE:HB	1:A:125:LEU:CD1	0.41	2.45	5	1
1:A:11:ILE:CG1	1:A:53:THR:OG1	0.41	2.68	29	1
1:A:56:MET:HB3	1:A:58:ASP:OD2	0.41	2.14	10	1
1:A:96:GLU:HG3	1:A:96:GLU:O	0.41	2.15	10	1
1:A:29:PRO:HG2	1:A:54:THR:HG21	0.41	1.92	8	1
1:A:92:MET:SD	1:A:92:MET:N	0.41	2.93	37	1
1:A:80:LEU:HG	1:A:120:TYR:HA	0.41	1.90	26	2
1:A:95:GLU:HG2	1:A:97:VAL:CG2	0.41	2.43	18	1
1:A:92:MET:SD	1:A:107:ILE:HG12	0.41	2.56	8	1
1:A:34:ALA:CB	1:A:37:ILE:CG1	0.41	2.90	33	1
1:A:37:ILE:HG22	1:A:38:PRO:N	0.41	2.31	12	1
1:A:50:PRO:HD2	1:A:53:THR:OG1	0.41	2.16	13	2
1:A:11:ILE:HD13	1:A:49:VAL:HB	0.41	1.91	34	1
1:A:102:ILE:O	1:A:125:LEU:CD2	0.41	2.65	5	1
1:A:93:LYS:HD3	1:A:93:LYS:C	0.41	2.36	11	1
1:A:40:LEU:HG	1:A:43:MET:SD	0.41	2.55	32	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:ILE:HB	1:A:119:VAL:CG1	0.41	2.45	12	2
1:A:17:LEU:N	1:A:42:GLY:HA2	0.41	2.31	19	1
1:A:56:MET:CE	1:A:59:MET:SD	0.41	3.08	37	1
1:A:22:MET:C	1:A:22:MET:SD	0.41	2.98	27	1
1:A:26:VAL:O	1:A:27:VAL:CG1	0.41	2.69	36	1
1:A:105:GLU:HG3	1:A:106:GLU:CG	0.41	2.46	33	2
1:A:11:ILE:HG13	1:A:53:THR:CB	0.41	2.45	29	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:21:MET:CE	0.41	2.96	31	1
1:A:106:GLU:OE1	1:A:110:LEU:HD11	0.41	2.16	2	1
1:A:96:GLU:C	1:A:96:GLU:OE1	0.41	2.59	27	2
1:A:56:MET:HB2	1:A:59:MET:SD	0.41	2.55	1	1
1:A:58:ASP:N	1:A:58:ASP:OD1	0.41	2.53	1	1
1:A:96:GLU:OE1	1:A:96:GLU:O	0.41	2.39	17	1
1:A:49:VAL:HB	1:A:53:THR:OG1	0.41	2.15	29	1
1:A:86:ALA:HB1	1:A:112:GLY:O	0.41	2.15	20	1
1:A:78:ASN:ND2	1:A:93:LYS:HG3	0.41	2.31	40	1
1:A:84:ASN:CG	1:A:84:ASN:O	0.41	2.59	15	1
1:A:13:ILE:HG22	1:A:14:ASN:N	0.41	2.31	9	2
1:A:107:ILE:HD13	1:A:108:SER:N	0.41	2.30	6	1
1:A:87:LEU:HD23	1:A:87:LEU:H	0.41	1.75	11	1
1:A:81:ILE:HG22	1:A:85:THR:CB	0.41	2.45	8	1
1:A:5:VAL:HG12	1:A:5:VAL:O	0.41	2.15	27	1
1:A:28:THR:CB	1:A:29:PRO:HA	0.41	2.45	25	2
1:A:50:PRO:HG2	1:A:53:THR:OG1	0.41	2.16	36	2
1:A:30:MET:HG3	1:A:30:MET:O	0.41	2.15	35	1
1:A:122:ASP:CG	1:A:122:ASP:O	0.41	2.59	9	1
1:A:75:VAL:CG2	1:A:104:SER:HB3	0.41	2.45	5	1
1:A:47:ARG:NH2	1:A:58:ASP:O	0.41	2.54	5	1
1:A:22:MET:SD	1:A:37:ILE:CD1	0.41	3.08	38	1
1:A:17:LEU:O	1:A:42:GLY:HA2	0.41	2.16	14	1
1:A:89:LEU:N	1:A:92:MET:HE2	0.41	2.30	7	1
1:A:8:ASN:HB3	1:A:23:LYS:CD	0.41	2.46	20	1
1:A:44:GLN:CD	1:A:44:GLN:C	0.41	2.79	33	1
1:A:36:GLU:O	1:A:40:LEU:HB3	0.41	2.16	12	1
1:A:76:VAL:HG21	1:A:97:VAL:CG2	0.41	2.45	9	1
1:A:6:VAL:CG1	1:A:54:THR:HA	0.41	2.43	34	1
1:A:3:ALA:HA	1:A:26:VAL:CG2	0.41	2.45	28	1
1:A:13:ILE:O	1:A:14:ASN:OD1	0.41	2.39	5	1
1:A:9:GLN:CD	1:A:21:MET:HG3	0.41	2.36	5	2
1:A:102:ILE:HD13	1:A:102:ILE:N	0.41	2.31	24	1
1:A:95:GLU:HG3	1:A:97:VAL:HG22	0.41	1.92	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:88:THR:O	1:A:89:LEU:C	0.41	2.59	7	1
1:A:75:VAL:CG1	1:A:92:MET:HB2	0.41	2.46	7	1
1:A:116:ASN:OD1	1:A:116:ASN:O	0.41	2.39	7	1
1:A:86:ALA:HA	1:A:113:MET:O	0.41	2.16	3	2
1:A:107:ILE:O	1:A:109:LYS:N	0.41	2.54	2	1
1:A:5:VAL:HG21	1:A:37:ILE:CG1	0.41	2.45	23	1
1:A:2:LYS:C	1:A:2:LYS:HD2	0.41	2.36	20	1
1:A:88:THR:O	1:A:92:MET:HB3	0.41	2.16	27	2
1:A:81:ILE:HB	1:A:119:VAL:HB	0.41	1.93	15	1
1:A:122:ASP:O	1:A:122:ASP:CG	0.41	2.59	34	1
1:A:8:ASN:CG	1:A:9:GLN:N	0.41	2.74	32	1
1:A:36:GLU:N	1:A:36:GLU:OE1	0.41	2.54	7	1
1:A:83:ILE:HD13	1:A:118:ALA:H	0.40	1.73	4	1
1:A:40:LEU:C	1:A:43:MET:HG2	0.40	2.37	5	2
1:A:5:VAL:CG2	1:A:33:PRO:O	0.40	2.69	29	1
1:A:40:LEU:N	1:A:40:LEU:CD1	0.40	2.84	31	1
1:A:83:ILE:HD13	1:A:117:ARG:C	0.40	2.32	32	1
1:A:9:GLN:HA	1:A:51:LEU:HD23	0.40	1.92	7	1
1:A:5:VAL:CG2	1:A:34:ALA:HA	0.40	2.45	9	1
1:A:22:MET:O	1:A:22:MET:SD	0.40	2.79	16	1
1:A:3:ALA:N	1:A:26:VAL:HG22	0.40	2.31	30	1
1:A:23:LYS:HD2	1:A:25:GLU:N	0.40	2.31	3	1
1:A:89:LEU:O	1:A:92:MET:HG3	0.40	2.16	28	1
1:A:75:VAL:O	1:A:125:LEU:CB	0.40	2.69	7	1
1:A:117:ARG:CD	1:A:117:ARG:C	0.40	2.89	30	1
1:A:16:ALA:HA	1:A:42:GLY:O	0.40	2.16	34	1
1:A:18:THR:OG1	1:A:21:MET:HG3	0.40	2.17	34	1
1:A:2:LYS:HD3	1:A:2:LYS:C	0.40	2.36	5	1
1:A:78:ASN:ND2	1:A:79:GLN:HB2	0.40	2.30	22	1
1:A:22:MET:HE1	1:A:37:ILE:HD12	0.40	1.92	10	1
1:A:110:LEU:O	1:A:113:MET:HB2	0.40	2.17	26	1
1:A:14:ASN:N	1:A:45:VAL:O	0.40	2.53	37	1
1:A:84:ASN:HA	1:A:115:VAL:O	0.40	2.17	4	1
1:A:123:GLN:NE2	1:A:124:THR:O	0.40	2.55	38	1
1:A:93:LYS:HD2	1:A:95:GLU:CG	0.40	2.46	11	1
1:A:5:VAL:HG23	1:A:34:ALA:N	0.40	2.31	13	1
1:A:16:ALA:HA	1:A:43:MET:O	0.40	2.16	19	1
1:A:113:MET:HG3	1:A:113:MET:O	0.40	2.17	33	1
1:A:73:LYS:HA	1:A:96:GLU:HA	0.40	1.93	12	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 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 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	114/134 (85%)	95±2 (84±2%)	13±3 (11±3%)	6±1 (5±1%)	5	26
All	All	4560/5360 (85%)	3812 (84%)	522 (11%)	226 (5%)	5	26

All 17 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	86	ALA	40
1	A	121	LEU	40
1	A	122	ASP	40
1	A	83	ILE	26
1	A	31	GLY	24
1	A	101	GLY	21
1	A	12	PRO	12
1	A	84	ASN	11
1	A	17	LEU	3
1	A	51	LEU	2
1	A	34	ALA	1
1	A	120	TYR	1
1	A	30	MET	1
1	A	105	GLU	1
1	A	14	ASN	1
1	A	35	GLU	1
1	A	41	VAL	1

6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	99/117 (85%)	76±3 (77±3%)	23±3 (23±3%)	3	30
All	All	3960/4680 (85%)	3053 (77%)	907 (23%)	3	30

All 62 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	51	LEU	40
1	A	89	LEU	40
1	A	87	LEU	40
1	A	55	LEU	39
1	A	121	LEU	39
1	A	23	LYS	31
1	A	100	LYS	29
1	A	73	LYS	27
1	A	74	SER	26
1	A	2	LYS	25
1	A	96	GLU	24
1	A	117	ARG	23
1	A	19	LEU	20
1	A	98	SER	20
1	A	22	MET	20
1	A	46	ASN	19
1	A	56	MET	19
1	A	30	MET	18
1	A	109	LYS	16
1	A	113	MET	16
1	A	125	LEU	16
1	A	10	LEU	16
1	A	47	ARG	15
1	A	41	VAL	15
1	A	79	GLN	15
1	A	28	THR	15
1	A	25	GLU	15
1	A	92	MET	14
1	A	107	ILE	14
1	A	104	SER	13
1	A	4	SER	13
1	A	126	MET	12
1	A	108	SER	11
1	A	122	ASP	11
1	A	37	ILE	11
1	A	40	LEU	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	39	ASN	11
1	A	21	MET	10
1	A	84	ASN	10
1	A	80	LEU	10
1	A	91	MET	9
1	A	93	LYS	9
1	A	58	ASP	9
1	A	124	THR	9
1	A	35	GLU	7
1	A	88	THR	7
1	A	116	ASN	6
1	A	123	GLN	6
1	A	13	ILE	6
1	A	36	GLU	6
1	A	105	GLU	5
1	A	59	MET	5
1	A	9	GLN	5
1	A	95	GLU	4
1	A	43	MET	4
1	A	78	ASN	4
1	A	44	GLN	4
1	A	8	ASN	4
1	A	120	TYR	3
1	A	14	ASN	3
1	A	114	GLN	2
1	A	102	ILE	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 carbohydrates 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