



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 27, 2016 – 05:42 AM BST

PDB ID : 3RPB  
Title : THE C2B-DOMAIN OF RABPHILIN: STRUCTURAL VARIATIONS IN A JANUS-FACED DOMAIN  
Authors : Ubach, J.; Garcia, J.; Nittler, M.P.; Sudhof, T.C.; Rizo, J.  
Deposited on : 1999-04-19

This is a Full wwPDB NMR Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.  
We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto: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

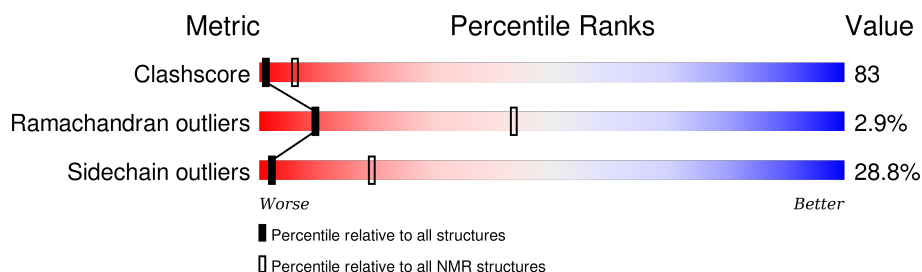
# 1 Overall quality at a glance

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  $\geq 3$ , 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	140	

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 10 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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:542-A:585, A:592-A:650, A:654-A:677 (127)	0.20	10

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

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

The models can be grouped into 4 clusters and 1 single-model cluster was found.

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

### 3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2302 atoms, of which 1159 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called RABPHILIN 3-A.

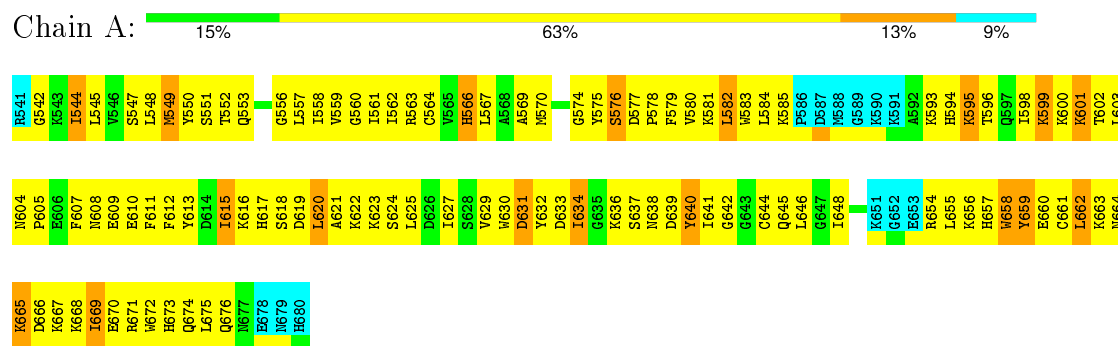
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	140	Total	C	H	N	O	S	0
			2302	731	1159	201	205	6	

## 4 Residue-property plots

### 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: RABPHILIN 3-A

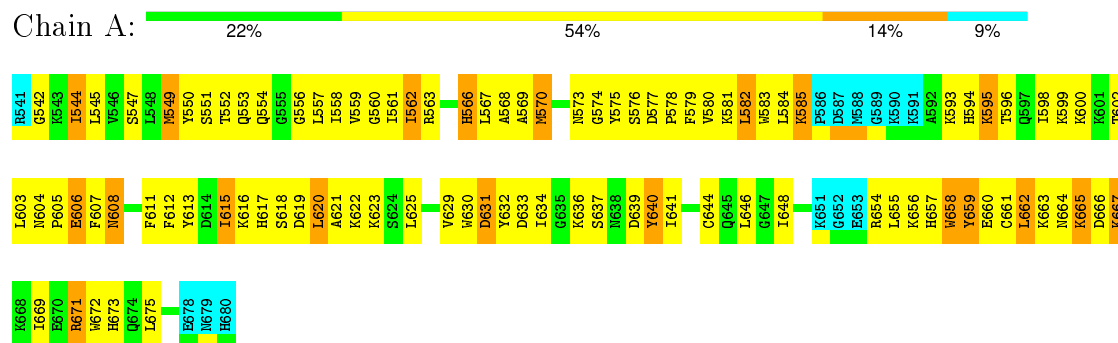


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

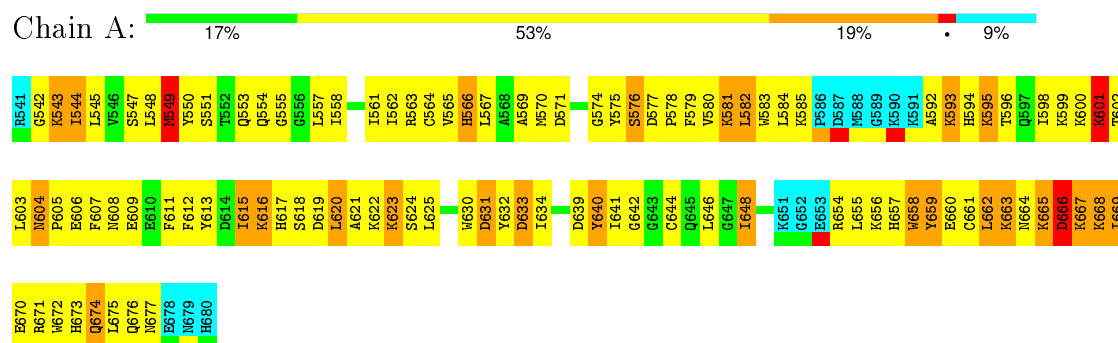
#### 4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: RABPHILIN 3-A



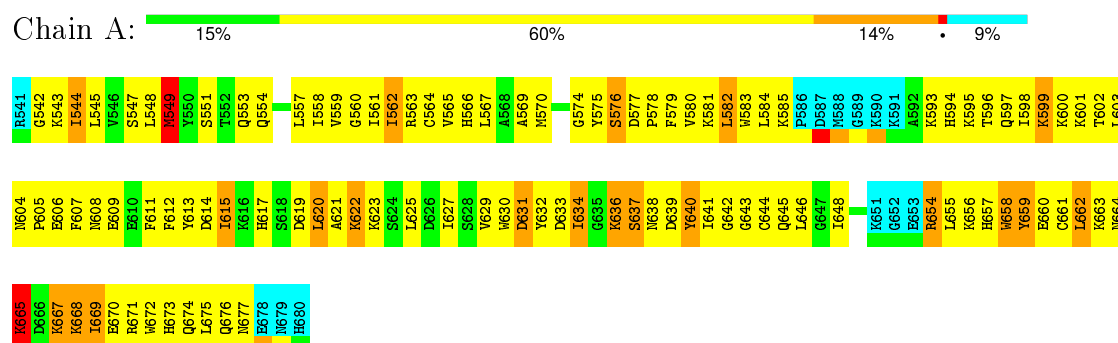
## 4.2.2 Score per residue for model 2

### • Molecule 1: RABPHILIN 3-A



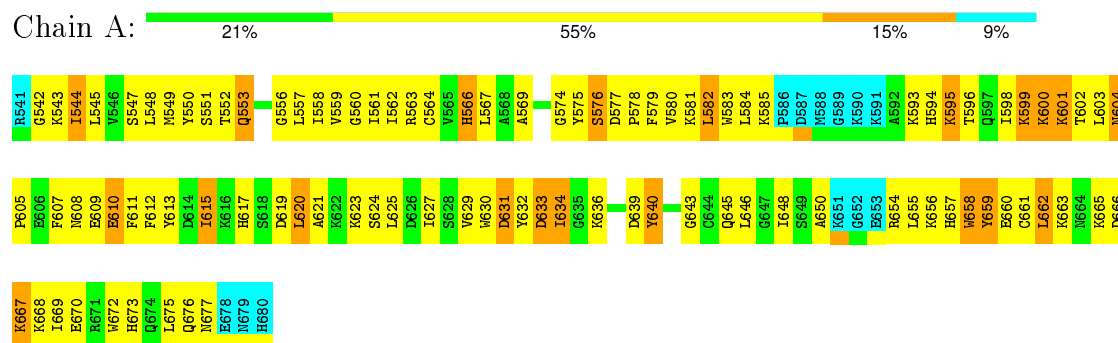
## 4.2.3 Score per residue for model 3

### • Molecule 1: RABPHILIN 3-A



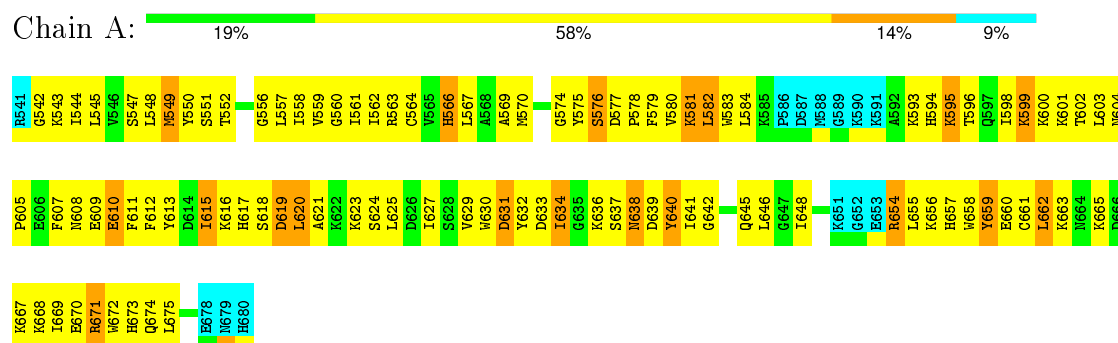
## 4.2.4 Score per residue for model 4

### • Molecule 1: RABPHILIN 3-A

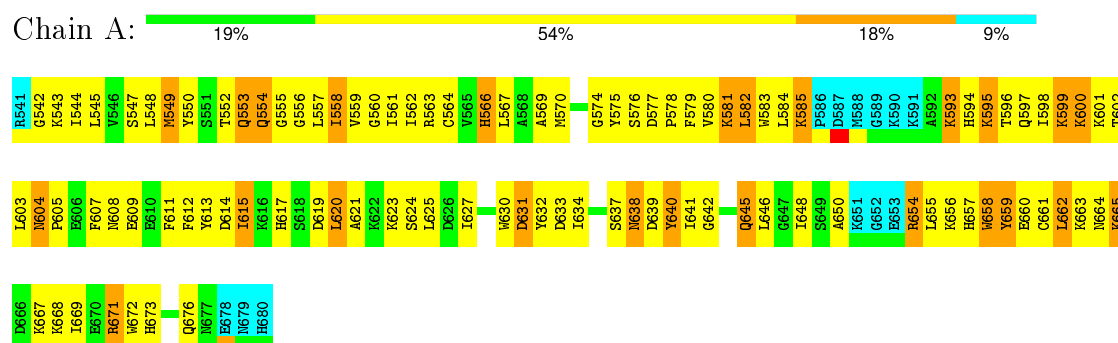


## 4.2.5 Score per residue for model 5

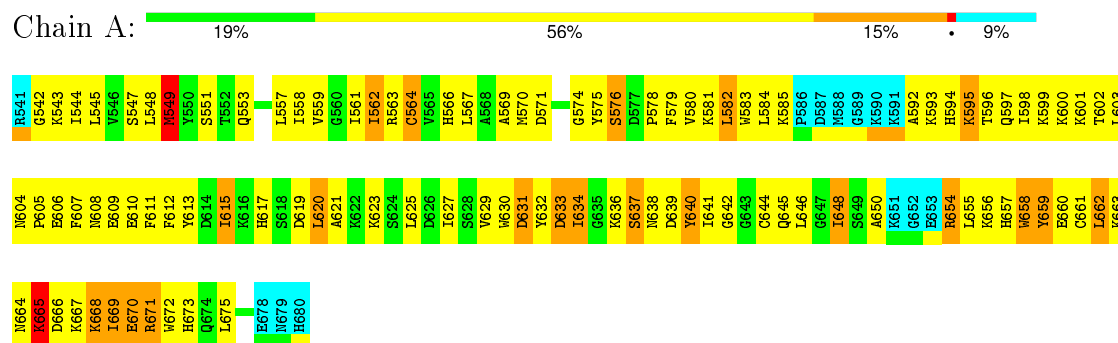
### • Molecule 1: RABPHILIN 3-A



### • Molecule 1: RABPHILIN 3-A

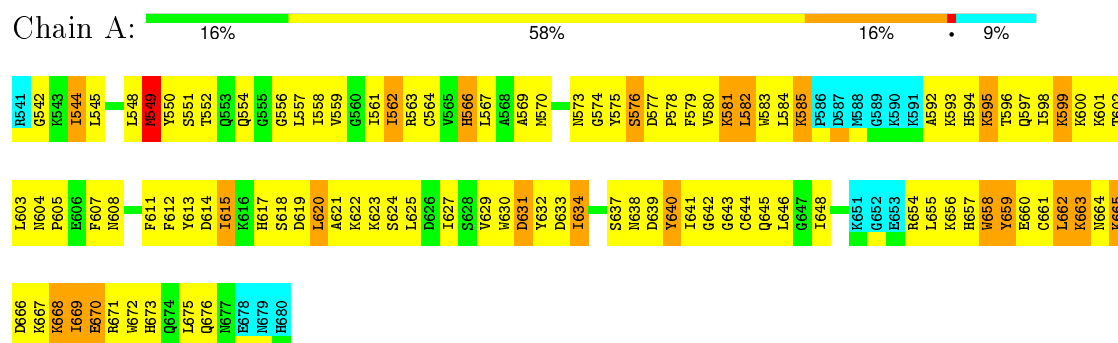


### • Molecule 1: RABPHILIN 3-A



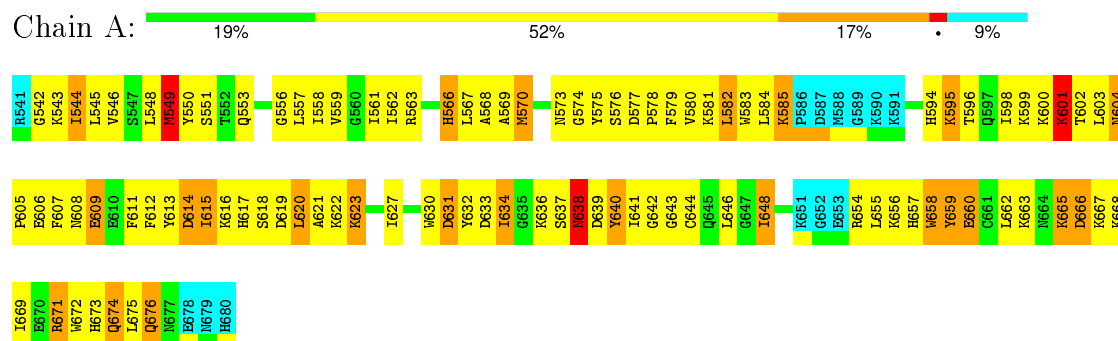
## 4.2.8 Score per residue for model 8

### • Molecule 1: RABPHILIN 3-A



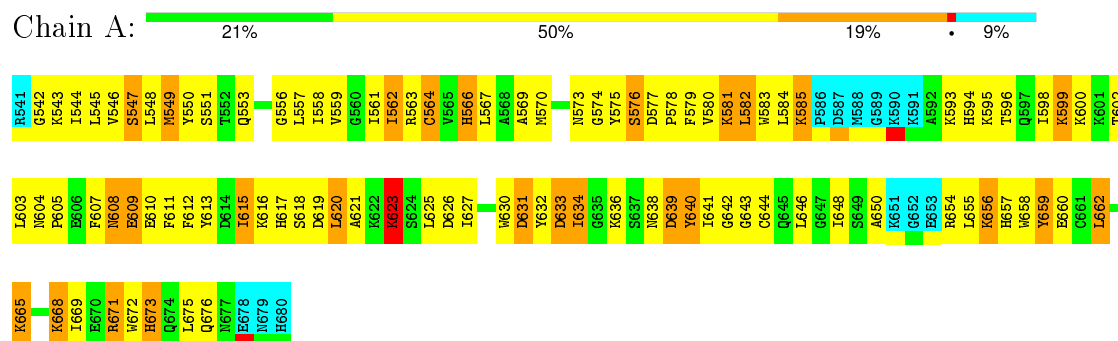
## 4.2.9 Score per residue for model 9

### • Molecule 1: RABPHILIN 3-A



## 4.2.10 Score per residue for model 10 (medoid)

### • Molecule 1: RABPHILIN 3-A

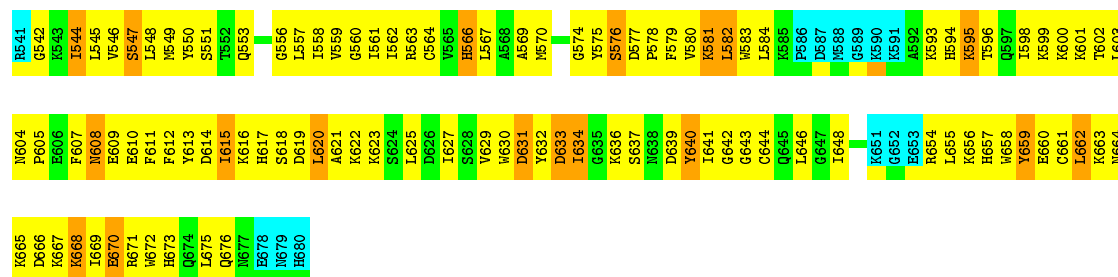




#### 4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: RABPHILIN 3-A

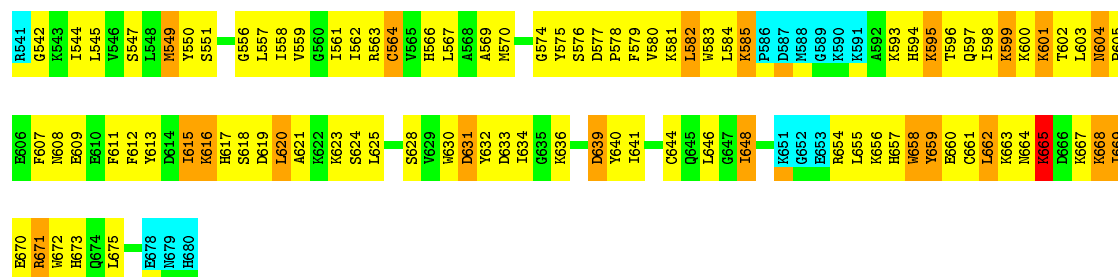
Chain A:  17% 61% 13% 9%



#### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: RABPHILIN 3-A

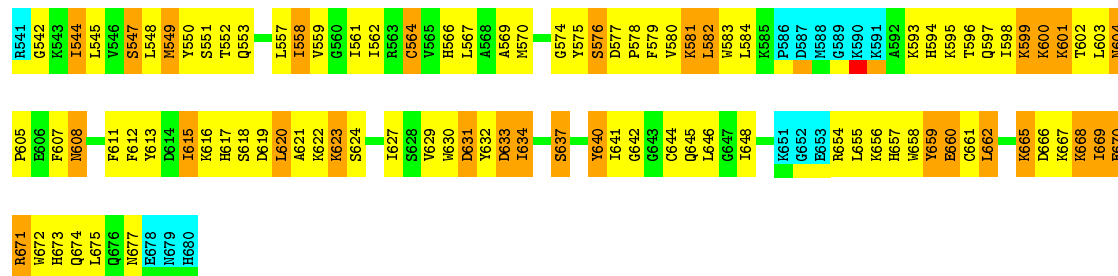
Chain A:  24% 51% 14% 9%



#### 4.2.13 Score per residue for model 13

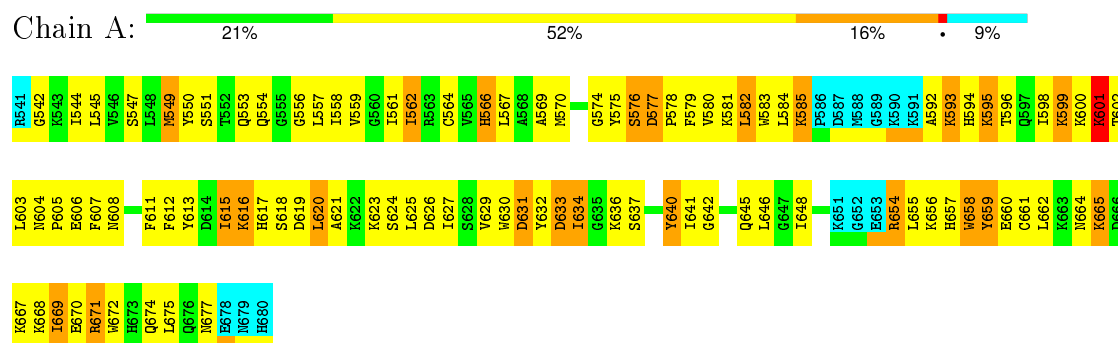
- Molecule 1: RABPHILIN 3-A

Chain A:  23% 47% 21% 9%



### 4.2.14 Score per residue for model 14

#### • Molecule 1: RABPHILIN 3-A



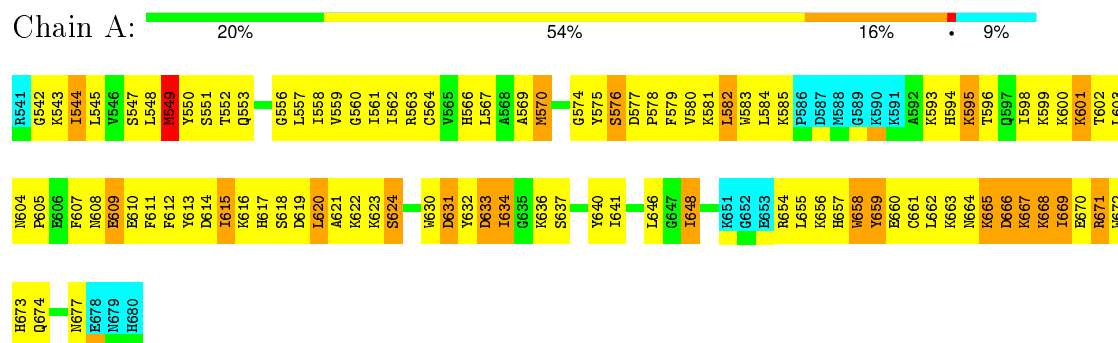
### 4.2.15 Score per residue for model 15

#### • Molecule 1: RABPHILIN 3-A



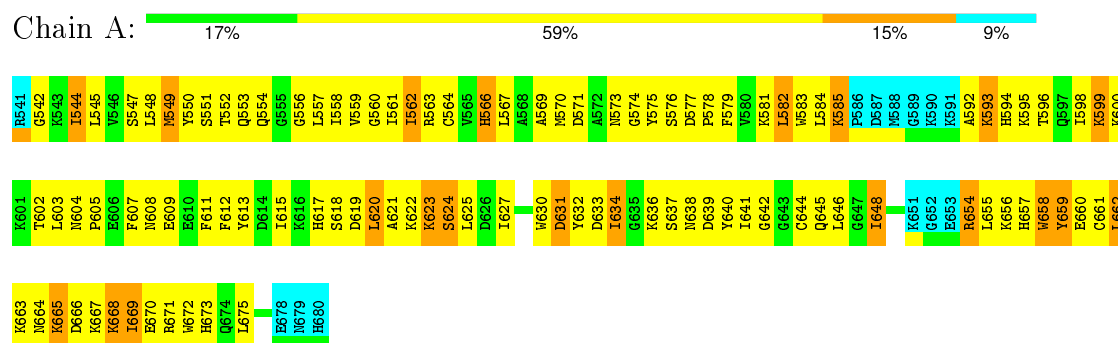
### 4.2.16 Score per residue for model 16

#### • Molecule 1: RABPHILIN 3-A



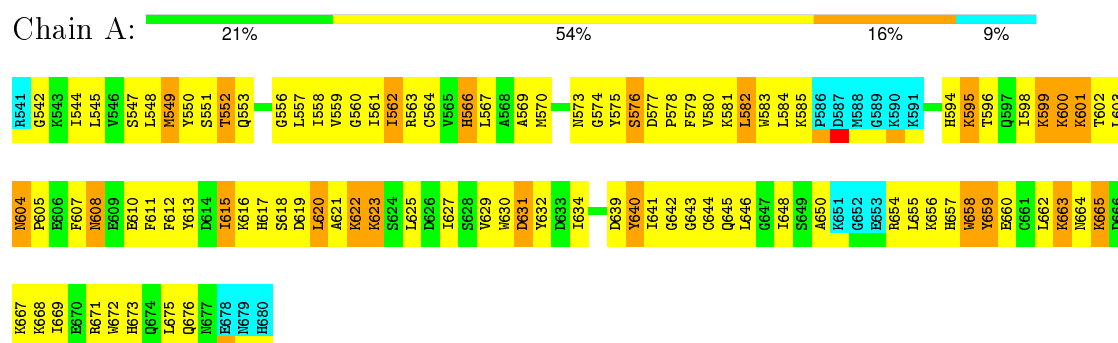
## 4.2.17 Score per residue for model 17

## • Molecule 1: RABPHILIN 3-A



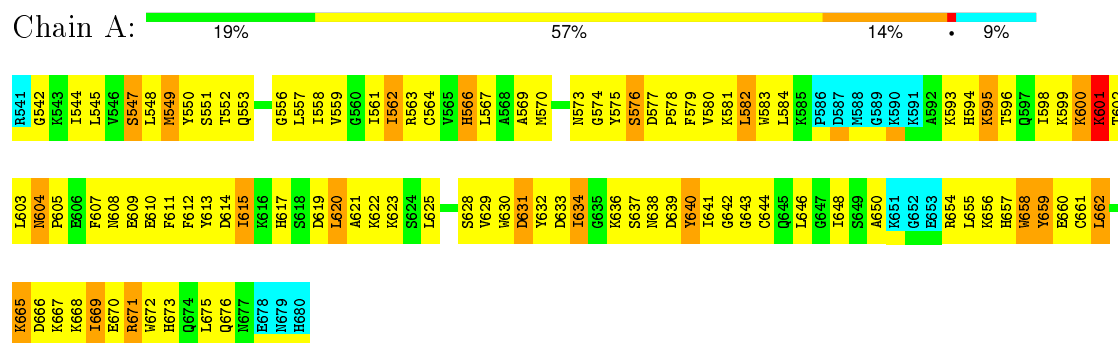
## 4.2.18 Score per residue for model 18

## • Molecule 1: RABPHILIN 3-A



## 4.2.19 Score per residue for model 19

## • Molecule 1: RABPHILIN 3-A



## 4.2.20 Score per residue for model 20

### ● Molecule 1: RABPHILIN 3-A



## 5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *TORSION ANGLE SIMULATED ANNEALING*.

Of the ? calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *LOWEST OVERALL ENERGY*.

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

Software name	Classification	Version
CNS	refinement	
CNS	structure solution	

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

## 6 Model quality ⓘ

### 6.1 Standard geometry ⓘ

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

### 6.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1037	1053	1049	172±11
All	All	20740	21060	20980	3445

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 83.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:561:ILE:HD11	1:A:582:LEU:HD21	1.13	1.15	4	20
1:A:646:LEU:HD11	1:A:673:HIS:NE2	0.96	1.73	17	19
1:A:561:ILE:HD11	1:A:582:LEU:CD2	0.94	1.91	13	19
1:A:567:LEU:O	1:A:603:LEU:HD13	0.92	1.64	14	20
1:A:648:ILE:HD11	1:A:659:TYR:CE2	0.90	2.02	1	15
1:A:545:LEU:HD13	1:A:672:TRP:NE1	0.89	1.82	8	20
1:A:648:ILE:HD11	1:A:659:TYR:CD2	0.88	2.03	14	20
1:A:599:LYS:O	1:A:602:THR:HG22	0.87	1.69	19	20
1:A:545:LEU:HG	1:A:562:ILE:HD13	0.83	1.48	13	20
1:A:657:HIS:CD2	1:A:669:ILE:HG22	0.83	2.08	2	8
1:A:561:ILE:CD1	1:A:582:LEU:HD21	0.82	2.03	13	19
1:A:615:ILE:HD11	1:A:619:ASP:CB	0.81	2.05	2	20
1:A:545:LEU:HD13	1:A:672:TRP:CE2	0.81	2.10	3	20
1:A:564:CYS:SG	1:A:567:LEU:HD11	0.81	2.16	8	17

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:648:ILE:HA	1:A:655:LEU:HD12	0.80	1.51	4	20
1:A:558:ILE:HD13	1:A:612:PHE:CD1	0.77	2.14	6	20
1:A:631:ASP:HB2	1:A:641:ILE:HD11	0.75	1.58	15	12
1:A:584:LEU:HD11	1:A:623:LYS:HB2	0.75	1.57	17	2
1:A:559:VAL:HG11	1:A:582:LEU:HD22	0.74	1.60	14	13
1:A:561:ILE:HG22	1:A:607:PHE:HB2	0.74	1.60	17	9
1:A:598:ILE:HD12	1:A:632:TYR:CD2	0.74	2.17	6	14
1:A:615:ILE:HD13	1:A:623:LYS:HD2	0.73	1.60	2	20
1:A:561:ILE:HG21	1:A:596:THR:HG21	0.73	1.60	4	12
1:A:561:ILE:HG22	1:A:607:PHE:CB	0.73	2.14	5	7
1:A:627:ILE:HD11	1:A:646:LEU:HD12	0.72	1.60	14	10
1:A:547:SER:HB3	1:A:562:ILE:HD11	0.72	1.60	5	9
1:A:558:ILE:HD13	1:A:612:PHE:HD1	0.71	1.45	6	20
1:A:648:ILE:O	1:A:655:LEU:HD13	0.71	1.86	1	20
1:A:615:ILE:HD11	1:A:619:ASP:HB2	0.71	1.62	17	20
1:A:602:THR:HG21	1:A:605:PRO:HB3	0.71	1.62	20	20
1:A:646:LEU:HD21	1:A:673:HIS:CE1	0.71	2.21	1	11
1:A:660:GLU:HB3	1:A:669:ILE:HD12	0.71	1.61	9	5
1:A:621:ALA:H	1:A:662:LEU:HD21	0.69	1.47	1	20
1:A:598:ILE:HG21	1:A:632:TYR:CG	0.69	2.23	4	20
1:A:621:ALA:O	1:A:648:ILE:HG22	0.69	1.87	17	20
1:A:542:GLY:H	1:A:675:LEU:HD12	0.69	1.48	3	1
1:A:545:LEU:HD13	1:A:672:TRP:CD1	0.69	2.23	8	20
1:A:576:SER:N	1:A:603:LEU:HD21	0.68	2.03	5	14
1:A:648:ILE:HG12	1:A:655:LEU:HD11	0.67	1.66	1	20
1:A:615:ILE:HD13	1:A:623:LYS:CD	0.67	2.19	2	20
1:A:582:LEU:HD12	1:A:594:HIS:HB2	0.66	1.67	1	10
1:A:630:TRP:CH2	1:A:640:TYR:CD2	0.66	2.83	10	12
1:A:545:LEU:CG	1:A:562:ILE:HD13	0.66	2.20	4	20
1:A:580:VAL:HG22	1:A:629:VAL:HG22	0.66	1.66	4	7
1:A:545:LEU:HD12	1:A:671:ARG:O	0.65	1.91	18	2
1:A:615:ILE:HD13	1:A:623:LYS:CE	0.65	2.22	9	18
1:A:615:ILE:HD13	1:A:623:LYS:HE3	0.65	1.67	9	8
1:A:579:PHE:CE2	1:A:581:LYS:CE	0.65	2.80	7	6
1:A:657:HIS:CD2	1:A:671:ARG:CG	0.65	2.80	2	2
1:A:615:ILE:HG23	1:A:620:LEU:CD2	0.65	2.22	5	20
1:A:615:ILE:HD13	1:A:623:LYS:NZ	0.65	2.07	16	9
1:A:648:ILE:CD1	1:A:659:TYR:CD2	0.64	2.79	20	14
1:A:596:THR:HG22	1:A:611:PHE:CE1	0.64	2.27	18	6
1:A:632:TYR:CD1	1:A:633:ASP:N	0.64	2.66	4	19
1:A:547:SER:HB2	1:A:562:ILE:HD11	0.64	1.69	13	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:657:HIS:CD2	1:A:669:ILE:CG2	0.64	2.81	3	11
1:A:581:LYS:CD	1:A:630:TRP:CD1	0.64	2.80	6	2
1:A:648:ILE:N	1:A:658:TRP:CD1	0.63	2.67	20	20
1:A:615:ILE:HG23	1:A:620:LEU:HD21	0.63	1.69	6	20
1:A:584:LEU:HD11	1:A:623:LYS:HB3	0.63	1.69	1	16
1:A:584:LEU:CB	1:A:613:TYR:CE2	0.63	2.81	2	19
1:A:578:PRO:HB3	1:A:641:ILE:HD12	0.62	1.71	20	10
1:A:615:ILE:HD11	1:A:619:ASP:HB3	0.62	1.69	2	20
1:A:559:VAL:CG1	1:A:582:LEU:HD22	0.62	2.24	14	6
1:A:642:GLY:O	1:A:675:LEU:HD22	0.62	1.94	15	13
1:A:580:VAL:HG23	1:A:607:PHE:CE2	0.61	2.30	11	10
1:A:648:ILE:HD11	1:A:659:TYR:CZ	0.61	2.30	6	8
1:A:660:GLU:CD	1:A:669:ILE:HD12	0.60	2.16	1	1
1:A:648:ILE:CG1	1:A:659:TYR:CD2	0.60	2.84	18	17
1:A:559:VAL:HG21	1:A:613:TYR:CE1	0.60	2.31	11	15
1:A:584:LEU:HD11	1:A:623:LYS:CB	0.59	2.27	17	17
1:A:615:ILE:CG2	1:A:620:LEU:CD2	0.59	2.80	5	20
1:A:627:ILE:CD1	1:A:646:LEU:HD12	0.59	2.27	8	2
1:A:648:ILE:HD11	1:A:659:TYR:CG	0.59	2.32	10	16
1:A:579:PHE:CZ	1:A:581:LYS:CE	0.59	2.85	6	2
1:A:656:LYS:CG	1:A:657:HIS:N	0.58	2.66	13	7
1:A:621:ALA:N	1:A:662:LEU:HD21	0.58	2.13	1	20
1:A:657:HIS:CD2	1:A:669:ILE:HG21	0.58	2.33	4	3
1:A:580:VAL:HG23	1:A:607:PHE:CZ	0.58	2.33	11	12
1:A:579:PHE:CD1	1:A:630:TRP:O	0.58	2.57	5	18
1:A:629:VAL:CG2	1:A:675:LEU:HD21	0.58	2.29	18	6
1:A:567:LEU:HD12	1:A:578:PRO:CG	0.58	2.29	2	13
1:A:582:LEU:HD11	1:A:611:PHE:CE1	0.57	2.34	14	8
1:A:584:LEU:HB2	1:A:613:TYR:CE2	0.57	2.34	2	18
1:A:552:THR:CG2	1:A:665:LYS:CD	0.57	2.81	1	4
1:A:583:TRP:CD1	1:A:585:LYS:CD	0.57	2.86	14	1
1:A:660:GLU:CG	1:A:669:ILE:HD12	0.57	2.28	1	2
1:A:604:ASN:N	1:A:605:PRO:CD	0.57	2.67	13	20
1:A:598:ILE:CG2	1:A:632:TYR:CB	0.57	2.83	1	15
1:A:545:LEU:CD1	1:A:672:TRP:CD1	0.57	2.87	8	15
1:A:581:LYS:HD3	1:A:630:TRP:CD1	0.57	2.34	6	4
1:A:621:ALA:O	1:A:648:ILE:CG2	0.57	2.53	17	20
1:A:617:HIS:CD2	1:A:665:LYS:HE2	0.57	2.35	8	1
1:A:621:ALA:HB1	1:A:648:ILE:CD1	0.57	2.30	11	9
1:A:558:ILE:CD1	1:A:612:PHE:CD1	0.57	2.88	17	19
1:A:545:LEU:CD2	1:A:562:ILE:HD13	0.57	2.30	18	11

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:567:LEU:HD12	1:A:578:PRO:HG3	0.56	1.77	14	15
1:A:600:LYS:NZ	1:A:632:TYR:CE1	0.56	2.72	12	1
1:A:583:TRP:CD1	1:A:583:TRP:C	0.56	2.77	8	9
1:A:552:THR:HG22	1:A:665:LYS:HD3	0.56	1.78	1	4
1:A:664:ASN:HB2	1:A:669:ILE:HD11	0.56	1.76	1	2
1:A:620:LEU:O	1:A:623:LYS:N	0.56	2.38	6	19
1:A:575:TYR:HA	1:A:603:LEU:HD21	0.56	1.77	9	4
1:A:648:ILE:HA	1:A:655:LEU:CD1	0.55	2.30	13	20
1:A:551:SER:OG	1:A:558:ILE:HD11	0.55	2.01	2	1
1:A:583:TRP:C	1:A:583:TRP:CD1	0.55	2.78	11	11
1:A:558:ILE:HG23	1:A:611:PHE:O	0.55	2.02	11	19
1:A:580:VAL:O	1:A:596:THR:HG23	0.55	2.02	14	16
1:A:584:LEU:HB3	1:A:613:TYR:CE2	0.55	2.36	17	12
1:A:548:LEU:N	1:A:669:ILE:O	0.55	2.40	7	7
1:A:569:ALA:HB1	1:A:575:TYR:N	0.55	2.17	15	11
1:A:648:ILE:O	1:A:655:LEU:CD1	0.55	2.54	10	20
1:A:660:GLU:HG3	1:A:669:ILE:CD1	0.55	2.31	6	13
1:A:657:HIS:CD2	1:A:671:ARG:HG3	0.55	2.35	2	1
1:A:579:PHE:CZ	1:A:581:LYS:HE2	0.55	2.36	7	2
1:A:570:MET:SD	1:A:570:MET:N	0.55	2.79	20	3
1:A:662:LEU:O	1:A:665:LYS:CD	0.55	2.55	12	4
1:A:657:HIS:CE1	1:A:671:ARG:CG	0.55	2.90	6	1
1:A:600:LYS:HE3	1:A:632:TYR:CE1	0.54	2.37	6	7
1:A:661:CYS:HA	1:A:669:ILE:HD11	0.54	1.79	12	2
1:A:627:ILE:HD12	1:A:627:ILE:H	0.54	1.62	18	2
1:A:579:PHE:CE2	1:A:581:LYS:HE2	0.54	2.35	7	2
1:A:550:TYR:CE1	1:A:556:GLY:C	0.54	2.81	1	14
1:A:600:LYS:HE2	1:A:632:TYR:CE1	0.54	2.38	11	2
1:A:631:ASP:OD2	1:A:639:ASP:CB	0.54	2.55	12	1
1:A:549:MET:O	1:A:558:ILE:CB	0.54	2.56	18	15
1:A:629:VAL:HG23	1:A:675:LEU:CD2	0.54	2.32	18	4
1:A:656:LYS:O	1:A:660:GLU:CG	0.54	2.56	7	16
1:A:621:ALA:HB1	1:A:648:ILE:HD12	0.54	1.80	7	7
1:A:659:TYR:O	1:A:662:LEU:N	0.54	2.39	8	20
1:A:559:VAL:CG1	1:A:625:LEU:HD21	0.54	2.32	17	1
1:A:549:MET:O	1:A:558:ILE:CG1	0.54	2.56	18	18
1:A:542:GLY:CA	1:A:566:HIS:O	0.54	2.56	17	20
1:A:594:HIS:CD2	1:A:611:PHE:CD2	0.54	2.96	15	6
1:A:598:ILE:CG2	1:A:632:TYR:HB3	0.54	2.33	20	8
1:A:580:VAL:CG2	1:A:607:PHE:CE2	0.54	2.91	11	5
1:A:581:LYS:HE3	1:A:630:TRP:CD1	0.54	2.38	7	7

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:585:LYS:CG	1:A:624:SER:OG	0.54	2.56	16	1
1:A:644:CYS:SG	1:A:673:HIS:CG	0.53	3.01	13	1
1:A:600:LYS:CE	1:A:632:TYR:CE1	0.53	2.91	6	2
1:A:575:TYR:CD2	1:A:602:THR:HA	0.53	2.39	12	19
1:A:581:LYS:CB	1:A:594:HIS:O	0.53	2.57	14	6
1:A:657:HIS:CD2	1:A:671:ARG:HG2	0.53	2.38	18	1
1:A:594:HIS:HB3	1:A:611:PHE:CE2	0.53	2.38	15	15
1:A:657:HIS:CE1	1:A:671:ARG:HG2	0.53	2.38	6	1
1:A:570:MET:SD	1:A:631:ASP:CB	0.53	2.97	16	1
1:A:598:ILE:HG21	1:A:632:TYR:CB	0.53	2.33	20	9
1:A:617:HIS:CD2	1:A:665:LYS:HD3	0.53	2.39	7	5
1:A:561:ILE:O	1:A:608:ASN:N	0.53	2.42	18	20
1:A:562:ILE:O	1:A:607:PHE:N	0.53	2.42	11	20
1:A:548:LEU:O	1:A:669:ILE:N	0.53	2.42	2	7
1:A:549:MET:CG	1:A:667:LYS:O	0.53	2.57	18	2
1:A:625:LEU:O	1:A:646:LEU:N	0.53	2.42	18	15
1:A:583:TRP:CE3	1:A:593:LYS:HE2	0.53	2.38	10	8
1:A:585:LYS:O	1:A:624:SER:N	0.53	2.42	17	1
1:A:668:LYS:CE	1:A:668:LYS:O	0.53	2.57	16	1
1:A:558:ILE:CG2	1:A:610:GLU:OE1	0.53	2.57	4	1
1:A:593:LYS:O	1:A:594:HIS:ND1	0.52	2.42	1	9
1:A:631:ASP:N	1:A:639:ASP:O	0.52	2.43	12	16
1:A:657:HIS:CG	1:A:671:ARG:HG2	0.52	2.39	7	4
1:A:545:LEU:HD23	1:A:562:ILE:HG21	0.52	1.81	13	9
1:A:549:MET:O	1:A:558:ILE:N	0.52	2.42	8	18
1:A:632:TYR:HE1	1:A:634:ILE:HG23	0.52	1.65	7	11
1:A:575:TYR:C	1:A:603:LEU:HD21	0.52	2.25	12	7
1:A:595:LYS:CD	1:A:595:LYS:O	0.52	2.57	14	5
1:A:661:CYS:O	1:A:665:LYS:NZ	0.52	2.42	8	1
1:A:665:LYS:O	1:A:667:LYS:N	0.52	2.42	2	5
1:A:595:LYS:O	1:A:595:LYS:CE	0.52	2.57	2	1
1:A:629:VAL:HG23	1:A:675:LEU:HD21	0.52	1.82	18	4
1:A:657:HIS:NE2	1:A:669:ILE:O	0.52	2.43	9	5
1:A:630:TRP:CZ2	1:A:640:TYR:CD2	0.52	2.98	8	6
1:A:557:LEU:HD13	1:A:620:LEU:HD11	0.52	1.80	17	1
1:A:552:THR:CG2	1:A:665:LYS:HD2	0.52	2.35	1	4
1:A:548:LEU:CB	1:A:661:CYS:SG	0.52	2.98	16	3
1:A:630:TRP:CZ3	1:A:640:TYR:HB2	0.52	2.40	7	19
1:A:599:LYS:CG	1:A:605:PRO:HB2	0.52	2.35	17	5
1:A:655:LEU:O	1:A:659:TYR:N	0.52	2.43	11	4
1:A:628:SER:HB2	1:A:640:TYR:CZ	0.52	2.40	12	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:648:ILE:HD11	1:A:659:TYR:CD1	0.52	2.40	13	4
1:A:549:MET:SD	1:A:668:LYS:CB	0.52	2.98	12	1
1:A:655:LEU:O	1:A:659:TYR:CB	0.52	2.58	13	4
1:A:674:GLN:OE1	1:A:676:GLN:CG	0.52	2.57	2	1
1:A:579:PHE:CZ	1:A:630:TRP:HB2	0.51	2.40	18	18
1:A:550:TYR:O	1:A:665:LYS:CB	0.51	2.57	8	1
1:A:567:LEU:CD1	1:A:578:PRO:CB	0.51	2.88	16	10
1:A:579:PHE:CE1	1:A:630:TRP:HB2	0.51	2.40	4	11
1:A:671:ARG:HD2	1:A:673:HIS:CE1	0.51	2.40	7	4
1:A:664:ASN:OD1	1:A:667:LYS:CD	0.51	2.58	3	2
1:A:562:ILE:O	1:A:608:ASN:N	0.51	2.43	1	14
1:A:559:VAL:HG21	1:A:613:TYR:HE1	0.51	1.65	11	7
1:A:584:LEU:CD2	1:A:615:ILE:HG21	0.51	2.36	17	8
1:A:569:ALA:CB	1:A:574:GLY:C	0.51	2.79	16	20
1:A:547:SER:O	1:A:560:GLY:N	0.51	2.43	17	10
1:A:621:ALA:CB	1:A:648:ILE:HD12	0.51	2.35	4	10
1:A:610:GLU:O	1:A:610:GLU:CG	0.51	2.58	11	1
1:A:579:PHE:CE2	1:A:581:LYS:HD2	0.51	2.41	8	8
1:A:599:LYS:HD3	1:A:607:PHE:CD1	0.51	2.41	17	2
1:A:615:ILE:CG1	1:A:620:LEU:HD23	0.51	2.36	4	20
1:A:546:VAL:HB	1:A:673:HIS:CE1	0.51	2.41	10	1
1:A:542:GLY:N	1:A:675:LEU:HD12	0.51	2.21	3	1
1:A:660:GLU:OE2	1:A:669:ILE:CG2	0.51	2.58	1	1
1:A:633:ASP:CB	1:A:637:SER:O	0.51	2.58	14	2
1:A:656:LYS:HG3	1:A:657:HIS:N	0.51	2.20	13	5
1:A:599:LYS:HG2	1:A:607:PHE:CE1	0.51	2.41	1	1
1:A:670:GLU:N	1:A:670:GLU:OE1	0.51	2.43	13	1
1:A:630:TRP:CE3	1:A:640:TYR:HA	0.50	2.42	4	4
1:A:615:ILE:CD1	1:A:619:ASP:HB2	0.50	2.35	12	20
1:A:544:ILE:HD11	1:A:561:ILE:HG23	0.50	1.81	8	5
1:A:600:LYS:HE2	1:A:632:TYR:CD1	0.50	2.41	12	1
1:A:660:GLU:HG3	1:A:669:ILE:HD12	0.50	1.81	1	4
1:A:582:LEU:O	1:A:594:HIS:N	0.50	2.44	13	5
1:A:665:LYS:N	1:A:665:LYS:HD2	0.50	2.21	8	1
1:A:570:MET:N	1:A:576:SER:OG	0.50	2.43	10	9
1:A:567:LEU:CD1	1:A:578:PRO:CG	0.50	2.89	1	7
1:A:549:MET:N	1:A:661:CYS:SG	0.50	2.84	14	1
1:A:563:ARG:NH2	1:A:606:GLU:OE1	0.50	2.44	9	1
1:A:621:ALA:HB2	1:A:662:LEU:HD22	0.50	1.83	5	11
1:A:583:TRP:CE3	1:A:593:LYS:HE3	0.50	2.41	12	3
1:A:595:LYS:O	1:A:595:LYS:CD	0.50	2.60	2	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:548:LEU:HD12	1:A:658:TRP:HA	0.50	1.83	20	2
1:A:545:LEU:O	1:A:562:ILE:HD12	0.50	2.06	5	2
1:A:567:LEU:CD1	1:A:578:PRO:HG3	0.50	2.37	1	5
1:A:668:LYS:CE	1:A:670:GLU:OE1	0.50	2.60	3	2
1:A:569:ALA:HB1	1:A:575:TYR:O	0.50	2.07	16	11
1:A:660:GLU:OE1	1:A:663:LYS:CD	0.50	2.60	18	1
1:A:662:LEU:O	1:A:665:LYS:CE	0.50	2.60	6	2
1:A:617:HIS:CE1	1:A:665:LYS:HE2	0.50	2.42	1	4
1:A:564:CYS:SG	1:A:607:PHE:CE2	0.49	2.99	18	6
1:A:570:MET:CG	1:A:631:ASP:CG	0.49	2.81	8	11
1:A:615:ILE:CD1	1:A:623:LYS:HE3	0.49	2.37	2	7
1:A:648:ILE:HG12	1:A:655:LEU:CD1	0.49	2.37	1	12
1:A:666:ASP:N	1:A:666:ASP:OD1	0.49	2.45	20	2
1:A:615:ILE:HG12	1:A:620:LEU:HD23	0.49	1.84	9	18
1:A:583:TRP:CE3	1:A:585:LYS:HE3	0.49	2.42	9	1
1:A:657:HIS:O	1:A:660:GLU:HG2	0.49	2.07	1	2
1:A:583:TRP:CE3	1:A:593:LYS:CE	0.49	2.96	10	3
1:A:604:ASN:N	1:A:605:PRO:HD3	0.49	2.23	8	18
1:A:545:LEU:HD12	1:A:671:ARG:C	0.49	2.28	18	1
1:A:580:VAL:O	1:A:596:THR:N	0.49	2.46	10	2
1:A:660:GLU:CD	1:A:669:ILE:CD1	0.49	2.81	13	2
1:A:602:THR:C	1:A:603:LEU:HD23	0.49	2.28	8	8
1:A:617:HIS:CD2	1:A:665:LYS:CE	0.49	2.96	8	1
1:A:657:HIS:ND1	1:A:671:ARG:HG2	0.49	2.23	5	6
1:A:658:TRP:O	1:A:661:CYS:N	0.49	2.43	1	3
1:A:552:THR:OG1	1:A:553:GLN:NE2	0.49	2.45	4	1
1:A:598:ILE:HG21	1:A:632:TYR:HB3	0.49	1.85	20	1
1:A:585:LYS:HD3	1:A:585:LYS:N	0.49	2.23	14	1
1:A:557:LEU:HG	1:A:558:ILE:N	0.49	2.23	16	18
1:A:632:TYR:CG	1:A:633:ASP:N	0.49	2.81	5	9
1:A:583:TRP:CD2	1:A:593:LYS:HE3	0.49	2.43	12	2
1:A:615:ILE:CD1	1:A:623:LYS:CE	0.49	2.91	18	7
1:A:604:ASN:N	1:A:604:ASN:ND2	0.49	2.61	18	1
1:A:599:LYS:O	1:A:602:THR:CG2	0.48	2.57	20	2
1:A:545:LEU:HD23	1:A:562:ILE:CB	0.48	2.38	13	10
1:A:553:GLN:NE2	1:A:553:GLN:N	0.48	2.61	4	1
1:A:664:ASN:O	1:A:667:LYS:O	0.48	2.32	14	8
1:A:547:SER:N	1:A:560:GLY:O	0.48	2.44	11	1
1:A:631:ASP:OD1	1:A:631:ASP:O	0.48	2.31	12	1
1:A:557:LEU:HD13	1:A:620:LEU:CD1	0.48	2.38	17	1
1:A:569:ALA:CB	1:A:574:GLY:O	0.48	2.61	4	4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:660:GLU:O	1:A:663:LYS:N	0.48	2.46	9	2
1:A:600:LYS:HE3	1:A:634:ILE:CD1	0.48	2.39	16	1
1:A:602:THR:CG2	1:A:605:PRO:HB3	0.48	2.39	8	19
1:A:546:VAL:HG21	1:A:627:ILE:HG21	0.48	1.84	10	3
1:A:664:ASN:CB	1:A:667:LYS:HB2	0.48	2.38	18	3
1:A:638:ASN:OD1	1:A:638:ASN:N	0.48	2.47	6	1
1:A:617:HIS:NE2	1:A:662:LEU:O	0.48	2.46	4	7
1:A:648:ILE:HG13	1:A:659:TYR:CG	0.48	2.43	6	6
1:A:581:LYS:HG3	1:A:630:TRP:CD1	0.48	2.44	4	2
1:A:550:TYR:CE2	1:A:556:GLY:C	0.48	2.86	6	1
1:A:577:ASP:N	1:A:578:PRO:CD	0.48	2.76	9	14
1:A:546:VAL:CG2	1:A:627:ILE:HG21	0.48	2.38	11	1
1:A:549:MET:HG3	1:A:668:LYS:CA	0.48	2.39	16	5
1:A:549:MET:SD	1:A:668:LYS:CA	0.48	3.02	12	1
1:A:657:HIS:HD2	1:A:669:ILE:HG22	0.48	1.69	18	1
1:A:550:TYR:CE1	1:A:620:LEU:HG	0.48	2.44	5	1
1:A:545:LEU:HD23	1:A:562:ILE:CG2	0.48	2.38	13	5
1:A:545:LEU:HD13	1:A:672:TRP:CD2	0.48	2.43	9	1
1:A:599:LYS:CD	1:A:605:PRO:HB2	0.48	2.39	14	15
1:A:550:TYR:CE2	1:A:617:HIS:HB2	0.48	2.44	12	9
1:A:567:LEU:CD2	1:A:675:LEU:CD1	0.48	2.92	19	3
1:A:671:ARG:CD	1:A:672:TRP:O	0.48	2.62	14	2
1:A:610:GLU:N	1:A:610:GLU:CD	0.48	2.67	5	1
1:A:575:TYR:CA	1:A:603:LEU:HD21	0.48	2.39	9	4
1:A:625:LEU:N	1:A:646:LEU:O	0.48	2.43	20	4
1:A:664:ASN:OD1	1:A:667:LYS:CE	0.48	2.62	20	1
1:A:550:TYR:CD1	1:A:557:LEU:HA	0.48	2.44	8	7
1:A:628:SER:HB2	1:A:640:TYR:CE2	0.48	2.43	12	1
1:A:583:TRP:CZ3	1:A:585:LYS:HE3	0.48	2.43	9	1
1:A:656:LYS:O	1:A:660:GLU:HG2	0.48	2.09	1	11
1:A:670:GLU:O	1:A:671:ARG:NE	0.48	2.47	11	1
1:A:663:LYS:HG2	1:A:664:ASN:N	0.48	2.23	16	2
1:A:544:ILE:HD13	1:A:545:LEU:N	0.48	2.23	2	4
1:A:615:ILE:CD1	1:A:623:LYS:HD2	0.47	2.39	17	14
1:A:554:GLN:OE1	1:A:612:PHE:CZ	0.47	2.67	8	1
1:A:657:HIS:CD2	1:A:669:ILE:HB	0.47	2.44	14	2
1:A:656:LYS:O	1:A:660:GLU:CB	0.47	2.61	11	11
1:A:599:LYS:HG2	1:A:605:PRO:CB	0.47	2.39	12	7
1:A:567:LEU:CD2	1:A:675:LEU:HD11	0.47	2.40	3	3
1:A:663:LYS:CG	1:A:664:ASN:OD1	0.47	2.61	2	1
1:A:631:ASP:O	1:A:639:ASP:N	0.47	2.46	11	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:557:LEU:O	1:A:613:TYR:N	0.47	2.43	17	1
1:A:568:ALA:O	1:A:603:LEU:HD22	0.47	2.09	20	3
1:A:599:LYS:HB3	1:A:602:THR:CG2	0.47	2.39	16	10
1:A:593:LYS:HD2	1:A:593:LYS:N	0.47	2.24	17	1
1:A:584:LEU:CD1	1:A:623:LYS:HB3	0.47	2.40	8	16
1:A:597:GLN:HG3	1:A:599:LYS:CE	0.47	2.39	3	3
1:A:643:GLY:O	1:A:676:GLN:N	0.47	2.42	3	9
1:A:567:LEU:HD13	1:A:578:PRO:CB	0.47	2.40	11	15
1:A:547:SER:CB	1:A:670:GLU:HG3	0.47	2.39	12	4
1:A:627:ILE:HD12	1:A:627:ILE:N	0.47	2.23	18	2
1:A:600:LYS:HE2	1:A:634:ILE:HD12	0.47	1.86	10	2
1:A:634:ILE:N	1:A:634:ILE:HD13	0.47	2.25	13	6
1:A:549:MET:CG	1:A:668:LYS:HA	0.47	2.40	2	3
1:A:561:ILE:HG22	1:A:607:PHE:CG	0.47	2.44	5	4
1:A:617:HIS:CE1	1:A:665:LYS:HD3	0.47	2.44	17	1
1:A:583:TRP:CD2	1:A:585:LYS:HE3	0.47	2.45	9	1
1:A:657:HIS:NE2	1:A:669:ILE:HG22	0.47	2.24	2	2
1:A:630:TRP:CZ3	1:A:640:TYR:CG	0.47	3.02	4	1
1:A:631:ASP:OD2	1:A:639:ASP:HB2	0.47	2.10	12	1
1:A:570:MET:HE1	1:A:641:ILE:HG12	0.47	1.87	7	4
1:A:646:LEU:HD11	1:A:673:HIS:CE1	0.47	2.43	17	1
1:A:561:ILE:N	1:A:561:ILE:HD13	0.47	2.24	19	1
1:A:585:LYS:CD	1:A:585:LYS:N	0.47	2.78	14	1
1:A:597:GLN:CD	1:A:599:LYS:NZ	0.47	2.69	12	1
1:A:547:SER:CB	1:A:562:ILE:HD11	0.47	2.40	1	2
1:A:579:PHE:CE2	1:A:581:LYS:CD	0.47	2.98	6	1
1:A:569:ALA:HB1	1:A:574:GLY:C	0.47	2.30	20	12
1:A:617:HIS:NE2	1:A:665:LYS:HE2	0.47	2.25	3	6
1:A:545:LEU:HG	1:A:562:ILE:CD1	0.47	2.40	10	4
1:A:577:ASP:O	1:A:632:TYR:N	0.46	2.43	20	7
1:A:578:PRO:HA	1:A:630:TRP:O	0.46	2.10	4	18
1:A:621:ALA:HB1	1:A:648:ILE:HD13	0.46	1.88	5	3
1:A:598:ILE:CD1	1:A:632:TYR:CD2	0.46	2.98	16	4
1:A:583:TRP:CG	1:A:593:LYS:HD3	0.46	2.45	4	2
1:A:550:TYR:CD2	1:A:557:LEU:HA	0.46	2.45	6	1
1:A:632:TYR:O	1:A:633:ASP:OD1	0.46	2.33	12	4
1:A:666:ASP:OD1	1:A:667:LYS:N	0.46	2.47	11	1
1:A:562:ILE:HD11	1:A:670:GLU:HG2	0.46	1.85	17	1
1:A:600:LYS:CE	1:A:634:ILE:HD12	0.46	2.40	16	1
1:A:563:ARG:HG3	1:A:672:TRP:CH2	0.46	2.45	1	1
1:A:600:LYS:HD3	1:A:632:TYR:CD1	0.46	2.45	20	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:658:TRP:O	1:A:661:CYS:HB3	0.46	2.10	19	12
1:A:630:TRP:CA	1:A:639:ASP:O	0.46	2.63	12	1
1:A:648:ILE:HG13	1:A:659:TYR:CB	0.46	2.40	17	9
1:A:552:THR:HG22	1:A:665:LYS:CD	0.46	2.39	1	2
1:A:598:ILE:HG23	1:A:632:TYR:CB	0.46	2.40	16	3
1:A:581:LYS:HA	1:A:594:HIS:O	0.46	2.11	8	18
1:A:658:TRP:O	1:A:661:CYS:CB	0.46	2.63	2	7
1:A:676:GLN:HG3	1:A:677:ASN:N	0.46	2.25	3	1
1:A:583:TRP:CD1	1:A:585:LYS:HD3	0.46	2.45	14	1
1:A:547:SER:HA	1:A:669:ILE:O	0.46	2.11	19	14
1:A:631:ASP:OD1	1:A:633:ASP:OD1	0.46	2.34	12	1
1:A:583:TRP:CE2	1:A:585:LYS:HG2	0.46	2.45	1	1
1:A:549:MET:O	1:A:558:ILE:HG12	0.46	2.11	20	17
1:A:583:TRP:CZ2	1:A:585:LYS:HG2	0.46	2.46	20	1
1:A:552:THR:HG22	1:A:665:LYS:HD2	0.46	1.86	17	2
1:A:549:MET:HG2	1:A:667:LYS:O	0.46	2.11	18	9
1:A:674:GLN:NE2	1:A:675:LEU:O	0.46	2.48	2	1
1:A:638:ASN:O	1:A:639:ASP:OD1	0.46	2.34	8	2
1:A:656:LYS:O	1:A:660:GLU:OE1	0.46	2.33	19	3
1:A:583:TRP:CZ2	1:A:585:LYS:HD3	0.46	2.46	7	1
1:A:663:LYS:HE2	1:A:664:ASN:ND2	0.46	2.25	16	1
1:A:600:LYS:CE	1:A:632:TYR:CD1	0.46	2.99	11	1
1:A:662:LEU:O	1:A:665:LYS:HD3	0.46	2.10	9	3
1:A:600:LYS:HE3	1:A:632:TYR:CD1	0.46	2.45	7	3
1:A:650:ALA:CB	1:A:654:ARG:HB2	0.46	2.41	6	3
1:A:543:LYS:N	1:A:565:VAL:O	0.46	2.45	3	1
1:A:671:ARG:HD2	1:A:672:TRP:O	0.46	2.11	1	1
1:A:552:THR:CG2	1:A:665:LYS:HD3	0.46	2.41	4	2
1:A:594:HIS:C	1:A:595:LYS:CD	0.46	2.84	6	2
1:A:549:MET:SD	1:A:665:LYS:O	0.46	2.74	8	3
1:A:631:ASP:OD1	1:A:639:ASP:OD1	0.46	2.34	10	1
1:A:561:ILE:CG1	1:A:582:LEU:HD21	0.46	2.40	1	1
1:A:557:LEU:CD1	1:A:661:CYS:SG	0.46	3.04	20	1
1:A:599:LYS:CB	1:A:605:PRO:HG3	0.46	2.40	18	4
1:A:621:ALA:HB1	1:A:648:ILE:HG21	0.46	1.88	2	10
1:A:664:ASN:OD1	1:A:667:LYS:HD2	0.46	2.11	3	1
1:A:601:LYS:O	1:A:602:THR:HB	0.45	2.11	13	8
1:A:646:LEU:HD23	1:A:654:ARG:HB3	0.45	1.89	12	4
1:A:645:GLN:O	1:A:654:ARG:CD	0.45	2.64	18	2
1:A:599:LYS:CG	1:A:607:PHE:CE1	0.45	2.99	1	1
1:A:662:LEU:O	1:A:665:LYS:HE2	0.45	2.11	13	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:645:GLN:O	1:A:654:ARG:HD2	0.45	2.11	18	11
1:A:559:VAL:HG11	1:A:625:LEU:HD21	0.45	1.88	17	1
1:A:660:GLU:OE1	1:A:669:ILE:CD1	0.45	2.65	1	1
1:A:595:LYS:CG	1:A:595:LYS:O	0.45	2.64	12	2
1:A:607:PHE:O	1:A:608:ASN:OD1	0.45	2.34	17	1
1:A:568:ALA:O	1:A:576:SER:OG	0.45	2.33	1	3
1:A:594:HIS:CG	1:A:611:PHE:CE2	0.45	3.03	12	3
1:A:561:ILE:HG13	1:A:596:THR:CG2	0.45	2.41	3	6
1:A:581:LYS:CE	1:A:630:TRP:CD1	0.45	2.99	7	3
1:A:671:ARG:HD3	1:A:672:TRP:O	0.45	2.11	14	3
1:A:615:ILE:HD13	1:A:623:LYS:HZ2	0.45	1.70	3	1
1:A:644:CYS:SG	1:A:674:GLN:O	0.45	2.74	2	1
1:A:659:TYR:O	1:A:660:GLU:C	0.45	2.55	8	10
1:A:548:LEU:HB2	1:A:661:CYS:SG	0.45	2.50	16	1
1:A:618:SER:O	1:A:622:LYS:CE	0.45	2.64	15	1
1:A:583:TRP:HB2	1:A:593:LYS:CG	0.45	2.42	16	7
1:A:549:MET:O	1:A:558:ILE:HB	0.45	2.12	18	5
1:A:599:LYS:HD2	1:A:599:LYS:N	0.45	2.27	17	1
1:A:642:GLY:HA2	1:A:676:GLN:O	0.45	2.12	3	3
1:A:579:PHE:CE2	1:A:581:LYS:CG	0.45	3.00	6	1
1:A:630:TRP:CZ2	1:A:640:TYR:CE2	0.45	3.05	8	2
1:A:582:LEU:HD11	1:A:611:PHE:CZ	0.45	2.47	14	2
1:A:633:ASP:OD2	1:A:639:ASP:OD2	0.45	2.34	3	1
1:A:576:SER:N	1:A:603:LEU:CD2	0.45	2.78	5	5
1:A:580:VAL:CG1	1:A:627:ILE:CG2	0.45	2.95	13	2
1:A:620:LEU:O	1:A:623:LYS:HB2	0.45	2.12	1	9
1:A:674:GLN:OE1	1:A:676:GLN:HG3	0.45	2.12	2	1
1:A:630:TRP:CE3	1:A:640:TYR:CA	0.44	3.01	20	3
1:A:561:ILE:CG2	1:A:607:PHE:CD2	0.44	3.00	17	4
1:A:646:LEU:CD2	1:A:654:ARG:HB3	0.44	2.43	1	3
1:A:547:SER:HB3	1:A:670:GLU:CG	0.44	2.42	2	2
1:A:561:ILE:HG22	1:A:607:PHE:CD2	0.44	2.47	18	12
1:A:610:GLU:HG3	1:A:610:GLU:O	0.44	2.12	11	1
1:A:595:LYS:O	1:A:595:LYS:CG	0.44	2.64	5	2
1:A:614:ASP:O	1:A:614:ASP:CG	0.44	2.55	19	1
1:A:551:SER:O	1:A:555:GLY:N	0.44	2.50	2	1
1:A:580:VAL:HG11	1:A:627:ILE:CG2	0.44	2.43	13	1
1:A:655:LEU:O	1:A:659:TYR:HB3	0.44	2.12	12	6
1:A:619:ASP:O	1:A:620:LEU:C	0.44	2.56	2	20
1:A:656:LYS:O	1:A:660:GLU:HB3	0.44	2.13	6	14
1:A:582:LEU:O	1:A:593:LYS:HA	0.44	2.12	14	4

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:671:ARG:HD3	1:A:672:TRP:N	0.44	2.27	16	3
1:A:620:LEU:O	1:A:623:LYS:CB	0.44	2.66	1	9
1:A:648:ILE:CG1	1:A:659:TYR:CG	0.44	3.00	6	6
1:A:577:ASP:OD1	1:A:601:LYS:N	0.44	2.44	4	2
1:A:550:TYR:CD1	1:A:620:LEU:HD11	0.44	2.48	2	1
1:A:627:ILE:CD1	1:A:646:LEU:CD1	0.44	2.95	14	1
1:A:633:ASP:HB3	1:A:637:SER:O	0.44	2.12	14	1
1:A:577:ASP:CB	1:A:600:LYS:HA	0.44	2.42	5	7
1:A:648:ILE:HG13	1:A:659:TYR:HB2	0.44	1.88	17	14
1:A:621:ALA:O	1:A:648:ILE:HB	0.44	2.13	11	4
1:A:581:LYS:HG2	1:A:595:LYS:HG3	0.44	1.89	6	1
1:A:581:LYS:HE3	1:A:630:TRP:NE1	0.44	2.28	4	1
1:A:570:MET:HG3	1:A:631:ASP:CG	0.44	2.33	12	6
1:A:581:LYS:CG	1:A:595:LYS:HG3	0.44	2.43	6	1
1:A:548:LEU:HG	1:A:657:HIS:NE2	0.44	2.28	3	3
1:A:577:ASP:CB	1:A:632:TYR:HB3	0.44	2.42	4	5
1:A:549:MET:SD	1:A:666:ASP:O	0.44	2.75	17	1
1:A:600:LYS:HE3	1:A:634:ILE:HD12	0.44	1.88	16	1
1:A:664:ASN:HB3	1:A:667:LYS:CG	0.44	2.42	2	1
1:A:593:LYS:CD	1:A:593:LYS:N	0.44	2.81	17	1
1:A:668:LYS:N	1:A:668:LYS:HD3	0.44	2.26	3	1
1:A:554:GLN:HG3	1:A:555:GLY:N	0.44	2.28	6	1
1:A:615:ILE:CD1	1:A:623:LYS:CD	0.44	2.95	9	4
1:A:634:ILE:O	1:A:636:LYS:HG2	0.44	2.12	3	1
1:A:544:ILE:C	1:A:544:ILE:HD13	0.44	2.33	11	1
1:A:615:ILE:CG2	1:A:620:LEU:HD23	0.44	2.43	19	3
1:A:629:VAL:CG2	1:A:675:LEU:CD2	0.44	2.95	18	3
1:A:615:ILE:HG13	1:A:616:LYS:N	0.44	2.27	14	3
1:A:662:LEU:O	1:A:665:LYS:HE3	0.44	2.12	6	4
1:A:597:GLN:CD	1:A:599:LYS:CE	0.43	2.86	12	1
1:A:542:GLY:O	1:A:675:LEU:CG	0.43	2.66	10	1
1:A:595:LYS:HD2	1:A:595:LYS:O	0.43	2.13	16	1
1:A:549:MET:CA	1:A:661:CYS:SG	0.43	3.06	14	1
1:A:656:LYS:O	1:A:660:GLU:HB2	0.43	2.13	18	5
1:A:584:LEU:CG	1:A:623:LYS:HB3	0.43	2.43	12	8
1:A:631:ASP:HB3	1:A:641:ILE:CG1	0.43	2.43	12	1
1:A:616:LYS:O	1:A:619:ASP:N	0.43	2.46	13	5
1:A:570:MET:CG	1:A:631:ASP:OD1	0.43	2.66	3	1
1:A:674:GLN:O	1:A:674:GLN:HG3	0.43	2.13	2	1
1:A:548:LEU:CD1	1:A:658:TRP:HA	0.43	2.43	18	3
1:A:548:LEU:HB3	1:A:661:CYS:SG	0.43	2.53	5	7

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:581:LYS:HD3	1:A:595:LYS:CG	0.43	2.43	7	1
1:A:656:LYS:O	1:A:660:GLU:CD	0.43	2.57	10	4
1:A:596:THR:HG22	1:A:611:PHE:HE1	0.43	1.68	14	2
1:A:561:ILE:O	1:A:607:PHE:HB2	0.43	2.14	6	4
1:A:584:LEU:HD12	1:A:625:LEU:N	0.43	2.29	2	1
1:A:630:TRP:CH2	1:A:640:TYR:CG	0.43	3.07	14	5
1:A:617:HIS:NE2	1:A:665:LYS:HD3	0.43	2.29	2	5
1:A:595:LYS:HD3	1:A:595:LYS:O	0.43	2.13	20	4
1:A:561:ILE:HG13	1:A:596:THR:HG21	0.43	1.89	18	4
1:A:569:ALA:HA	1:A:575:TYR:O	0.43	2.13	12	3
1:A:631:ASP:HB3	1:A:641:ILE:HD11	0.43	1.91	12	1
1:A:578:PRO:HB3	1:A:641:ILE:CD1	0.43	2.44	18	10
1:A:576:SER:HB2	1:A:603:LEU:CD2	0.43	2.44	17	6
1:A:550:TYR:OH	1:A:555:GLY:C	0.43	2.57	6	1
1:A:569:ALA:HB2	1:A:603:LEU:HD11	0.43	1.89	7	1
1:A:615:ILE:CD1	1:A:623:LYS:NZ	0.43	2.81	1	3
1:A:646:LEU:CD2	1:A:654:ARG:HA	0.43	2.43	3	1
1:A:553:GLN:HG3	1:A:554:GLN:N	0.43	2.28	14	2
1:A:644:CYS:SG	1:A:673:HIS:CB	0.43	3.07	13	1
1:A:599:LYS:O	1:A:600:LYS:C	0.43	2.56	20	1
1:A:561:ILE:N	1:A:609:GLU:O	0.43	2.52	17	11
1:A:563:ARG:CB	1:A:606:GLU:HA	0.43	2.44	7	3
1:A:574:GLY:O	1:A:603:LEU:HD11	0.43	2.13	12	1
1:A:661:CYS:HA	1:A:669:ILE:CD1	0.43	2.44	12	1
1:A:662:LEU:O	1:A:665:LYS:HG3	0.43	2.14	6	1
1:A:664:ASN:OD1	1:A:667:LYS:HE3	0.43	2.13	20	2
1:A:550:TYR:CD1	1:A:556:GLY:O	0.43	2.72	17	3
1:A:549:MET:HG2	1:A:665:LYS:O	0.43	2.13	8	6
1:A:668:LYS:HG2	1:A:669:ILE:N	0.43	2.29	11	2
1:A:634:ILE:HD13	1:A:634:ILE:N	0.43	2.29	17	3
1:A:547:SER:HB2	1:A:670:GLU:CG	0.43	2.43	17	1
1:A:607:PHE:O	1:A:608:ASN:CG	0.43	2.57	17	1
1:A:665:LYS:O	1:A:666:ASP:C	0.43	2.57	2	1
1:A:669:ILE:HG22	1:A:670:GLU:N	0.43	2.29	4	2
1:A:543:LYS:O	1:A:564:CYS:HA	0.43	2.13	3	1
1:A:543:LYS:CG	1:A:674:GLN:HA	0.43	2.44	9	2
1:A:569:ALA:CB	1:A:575:TYR:CA	0.43	2.97	4	4
1:A:583:TRP:CE2	1:A:585:LYS:HE3	0.43	2.48	9	1
1:A:660:GLU:CG	1:A:669:ILE:CD1	0.43	2.97	6	1
1:A:670:GLU:CD	1:A:670:GLU:O	0.43	2.58	13	1
1:A:559:VAL:CG2	1:A:613:TYR:CE1	0.42	3.02	11	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:656:LYS:C	1:A:660:GLU:OE1	0.42	2.57	11	1
1:A:602:THR:O	1:A:603:LEU:HD23	0.42	2.14	10	2
1:A:544:ILE:CG2	1:A:544:ILE:O	0.42	2.67	4	2
1:A:550:TYR:CE1	1:A:617:HIS:HB2	0.42	2.49	15	1
1:A:630:TRP:CZ3	1:A:640:TYR:CB	0.42	3.02	4	6
1:A:548:LEU:O	1:A:668:LYS:CA	0.42	2.67	8	1
1:A:621:ALA:CB	1:A:648:ILE:CD1	0.42	2.97	11	3
1:A:630:TRP:HA	1:A:639:ASP:O	0.42	2.14	12	1
1:A:617:HIS:NE2	1:A:665:LYS:HD2	0.42	2.29	9	2
1:A:583:TRP:CH2	1:A:585:LYS:HE3	0.42	2.49	9	1
1:A:550:TYR:O	1:A:665:LYS:HB3	0.42	2.14	16	5
1:A:585:LYS:CD	1:A:624:SER:OG	0.42	2.67	16	1
1:A:621:ALA:HB3	1:A:622:LYS:HE2	0.42	1.91	3	1
1:A:543:LYS:HD2	1:A:565:VAL:HG23	0.42	1.90	2	1
1:A:567:LEU:HG	1:A:603:LEU:O	0.42	2.14	20	7
1:A:581:LYS:HB3	1:A:594:HIS:O	0.42	2.15	2	5
1:A:657:HIS:C	1:A:657:HIS:CD2	0.42	2.92	20	2
1:A:664:ASN:O	1:A:665:LYS:C	0.42	2.57	20	3
1:A:657:HIS:ND1	1:A:671:ARG:HB2	0.42	2.29	8	1
1:A:599:LYS:HG3	1:A:605:PRO:CG	0.42	2.44	16	2
1:A:670:GLU:OE1	1:A:670:GLU:O	0.42	2.37	7	1
1:A:657:HIS:CD2	1:A:657:HIS:C	0.42	2.92	9	1
1:A:638:ASN:C	1:A:639:ASP:OD1	0.42	2.58	19	2
1:A:547:SER:CB	1:A:670:GLU:CG	0.42	2.97	14	1
1:A:618:SER:O	1:A:622:LYS:HE3	0.42	2.15	15	1
1:A:576:SER:O	1:A:602:THR:N	0.42	2.47	8	3
1:A:548:LEU:O	1:A:549:MET:HB2	0.42	2.15	6	6
1:A:671:ARG:HB2	1:A:671:ARG:NH1	0.42	2.30	19	1
1:A:630:TRP:HB3	1:A:639:ASP:O	0.42	2.14	12	1
1:A:633:ASP:HB2	1:A:637:SER:O	0.42	2.14	13	4
1:A:658:TRP:O	1:A:659:TYR:C	0.42	2.57	18	3
1:A:671:ARG:O	1:A:673:HIS:CE1	0.42	2.72	10	1
1:A:542:GLY:O	1:A:675:LEU:HG	0.42	2.14	10	2
1:A:626:ASP:OD1	1:A:626:ASP:C	0.42	2.58	10	2
1:A:658:TRP:O	1:A:661:CYS:HB2	0.42	2.15	16	1
1:A:660:GLU:HG3	1:A:661:CYS:N	0.42	2.29	1	1
1:A:583:TRP:CD1	1:A:584:LEU:N	0.42	2.87	4	1
1:A:599:LYS:HG2	1:A:605:PRO:HB2	0.42	1.91	20	2
1:A:600:LYS:O	1:A:601:LYS:C	0.42	2.57	14	5
1:A:577:ASP:OD2	1:A:600:LYS:HD2	0.42	2.14	17	3
1:A:634:ILE:O	1:A:636:LYS:CG	0.42	2.67	3	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:671:ARG:HD2	1:A:672:TRP:N	0.42	2.29	1	1
1:A:544:ILE:O	1:A:544:ILE:CG2	0.42	2.68	20	2
1:A:548:LEU:O	1:A:668:LYS:HA	0.42	2.14	8	2
1:A:648:ILE:CD1	1:A:659:TYR:CG	0.42	3.03	6	4
1:A:599:LYS:HG3	1:A:605:PRO:HB2	0.42	1.92	17	1
1:A:552:THR:O	1:A:553:GLN:C	0.42	2.57	6	1
1:A:583:TRP:CG	1:A:593:LYS:HG3	0.42	2.50	11	1
1:A:599:LYS:CG	1:A:605:PRO:CB	0.42	2.98	17	1
1:A:542:GLY:HA3	1:A:567:LEU:HD23	0.42	1.90	5	1
1:A:570:MET:HG3	1:A:631:ASP:OD1	0.42	2.15	3	2
1:A:664:ASN:ND2	1:A:667:LYS:HD3	0.42	2.30	15	1
1:A:664:ASN:OD1	1:A:667:LYS:HD3	0.42	2.15	20	1
1:A:663:LYS:CG	1:A:664:ASN:ND2	0.42	2.82	8	1
1:A:583:TRP:O	1:A:626:ASP:N	0.42	2.50	14	1
1:A:594:HIS:O	1:A:595:LYS:HG3	0.41	2.15	6	5
1:A:576:SER:C	1:A:578:PRO:HD3	0.41	2.36	7	4
1:A:558:ILE:CG2	1:A:611:PHE:O	0.41	2.68	11	1
1:A:662:LEU:O	1:A:665:LYS:HD2	0.41	2.14	12	2
1:A:668:LYS:HE3	1:A:668:LYS:O	0.41	2.15	16	1
1:A:585:LYS:HG3	1:A:624:SER:OG	0.41	2.15	16	1
1:A:663:LYS:HG3	1:A:664:ASN:OD1	0.41	2.16	2	1
1:A:559:VAL:O	1:A:611:PHE:N	0.41	2.43	4	1
1:A:595:LYS:HE3	1:A:595:LYS:O	0.41	2.16	14	1
1:A:567:LEU:HD13	1:A:578:PRO:HB3	0.41	1.92	4	1
1:A:670:GLU:O	1:A:670:GLU:HG2	0.41	2.16	11	1
1:A:631:ASP:OD2	1:A:639:ASP:HB3	0.41	2.15	12	1
1:A:622:LYS:HD3	1:A:622:LYS:N	0.41	2.30	18	1
1:A:557:LEU:CG	1:A:558:ILE:N	0.41	2.83	16	6
1:A:659:TYR:O	1:A:662:LEU:HB2	0.41	2.16	1	3
1:A:554:GLN:HA	1:A:554:GLN:OE1	0.41	2.15	1	1
1:A:547:SER:HB3	1:A:670:GLU:HG2	0.41	1.92	14	1
1:A:629:VAL:HG21	1:A:675:LEU:HD21	0.41	1.92	11	1
1:A:569:ALA:CA	1:A:575:TYR:O	0.41	2.68	12	1
1:A:569:ALA:HA	1:A:576:SER:OG	0.41	2.15	1	4
1:A:668:LYS:NZ	1:A:670:GLU:OE2	0.41	2.52	7	1
1:A:607:PHE:C	1:A:608:ASN:OD1	0.41	2.59	17	1
1:A:665:LYS:N	1:A:665:LYS:HD3	0.41	2.31	10	1
1:A:668:LYS:HE2	1:A:668:LYS:O	0.41	2.16	10	1
1:A:570:MET:HG2	1:A:631:ASP:CG	0.41	2.35	3	1
1:A:664:ASN:O	1:A:665:LYS:O	0.41	2.38	20	1
1:A:665:LYS:CD	1:A:665:LYS:N	0.41	2.83	8	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:557:LEU:HD12	1:A:558:ILE:H	0.41	1.75	14	6
1:A:620:LEU:CB	1:A:662:LEU:HD21	0.41	2.45	6	1
1:A:547:SER:HB2	1:A:668:LYS:CD	0.41	2.46	12	1
1:A:570:MET:HG3	1:A:631:ASP:CB	0.41	2.46	9	1
1:A:544:ILE:HG23	1:A:544:ILE:O	0.41	2.14	4	2
1:A:663:LYS:CG	1:A:664:ASN:N	0.41	2.84	16	1
1:A:665:LYS:C	1:A:667:LYS:N	0.41	2.74	2	1
1:A:631:ASP:O	1:A:631:ASP:OD1	0.41	2.39	2	1
1:A:596:THR:O	1:A:597:GLN:C	0.41	2.59	6	1
1:A:668:LYS:HE3	1:A:670:GLU:OE1	0.41	2.15	3	2
1:A:549:MET:HG3	1:A:668:LYS:HA	0.41	1.93	11	2
1:A:570:MET:SD	1:A:639:ASP:HB3	0.41	2.56	15	3
1:A:671:ARG:HD2	1:A:673:HIS:ND1	0.41	2.31	12	1
1:A:542:GLY:O	1:A:675:LEU:HB2	0.41	2.16	12	1
1:A:585:LYS:HD3	1:A:624:SER:OG	0.41	2.15	16	1
1:A:657:HIS:ND1	1:A:671:ARG:CG	0.41	2.84	14	2
1:A:576:SER:C	1:A:578:PRO:CD	0.41	2.89	2	1
1:A:620:LEU:O	1:A:621:ALA:C	0.41	2.59	6	1
1:A:585:LYS:HG3	1:A:624:SER:HG	0.41	1.75	6	1
1:A:550:TYR:CD2	1:A:665:LYS:HG2	0.41	2.51	20	1
1:A:600:LYS:O	1:A:601:LYS:HB2	0.40	2.16	4	2
1:A:561:ILE:O	1:A:609:GLU:N	0.40	2.49	11	1
1:A:584:LEU:CD1	1:A:623:LYS:CB	0.40	2.99	17	1
1:A:579:PHE:CE2	1:A:581:LYS:HE3	0.40	2.51	17	1
1:A:657:HIS:CE1	1:A:673:HIS:CE1	0.40	3.09	10	1
1:A:671:ARG:CD	1:A:671:ARG:C	0.40	2.89	10	1
1:A:660:GLU:CD	1:A:669:ILE:HD13	0.40	2.37	13	1
1:A:570:MET:HE3	1:A:576:SER:OG	0.40	2.16	15	1
1:A:631:ASP:HB2	1:A:641:ILE:CD1	0.40	2.40	15	1
1:A:594:HIS:C	1:A:595:LYS:HD3	0.40	2.37	11	1
1:A:549:MET:SD	1:A:668:LYS:HG2	0.40	2.55	12	1
1:A:585:LYS:O	1:A:623:LYS:HA	0.40	2.15	17	1
1:A:664:ASN:O	1:A:667:LYS:N	0.40	2.54	11	2
1:A:547:SER:CA	1:A:669:ILE:O	0.40	2.69	10	1
1:A:554:GLN:CA	1:A:554:GLN:OE1	0.40	2.68	1	1
1:A:569:ALA:HB1	1:A:575:TYR:CA	0.40	2.45	4	1
1:A:617:HIS:CD2	1:A:665:LYS:CD	0.40	3.05	7	1
1:A:543:LYS:HG2	1:A:674:GLN:HA	0.40	1.94	9	1
1:A:637:SER:O	1:A:638:ASN:O	0.40	2.40	9	1
1:A:582:LEU:HD12	1:A:594:HIS:CB	0.40	2.47	5	1
1:A:645:GLN:O	1:A:646:LEU:HD23	0.40	2.17	5	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:581:LYS:CA	1:A:594:HIS:O	0.40	2.70	20	2
1:A:542:GLY:HA2	1:A:566:HIS:O	0.40	2.16	7	1
1:A:550:TYR:O	1:A:665:LYS:C	0.40	2.60	5	1
1:A:601:LYS:HG2	1:A:601:LYS:O	0.40	2.16	19	1
1:A:667:LYS:HD2	1:A:668:LYS:O	0.40	2.17	2	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	127/140 (91%)	108±2 (85±2%)	15±2 (12±2%)	4±2 (3±1%)	9	43
All	All	2540/2800 (91%)	2162 (85%)	304 (12%)	74 (3%)	9	43

All 11 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	549	MET	17
1	A	658	TRP	16
1	A	665	LYS	11
1	A	562	ILE	9
1	A	601	LYS	6
1	A	666	ASP	5
1	A	638	ASN	3
1	A	592	ALA	3
1	A	600	LYS	2
1	A	623	LYS	1
1	A	597	GLN	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	112/123 (91%)	80±3 (71±3%)	32±3 (29±3%)	2	19
All	All	2240/2460 (91%)	1595 (71%)	645 (29%)	2	19

All 70 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	595	LYS	20
1	A	582	LEU	20
1	A	634	ILE	20
1	A	620	LEU	20
1	A	659	TYR	20
1	A	544	ILE	20
1	A	615	ILE	19
1	A	631	ASP	19
1	A	551	SER	18
1	A	668	LYS	17
1	A	640	TYR	17
1	A	566	HIS	15
1	A	576	SER	15
1	A	636	LYS	15
1	A	618	SER	15
1	A	662	LEU	15
1	A	601	LYS	14
1	A	553	GLN	14
1	A	563	ARG	14
1	A	663	LYS	13
1	A	622	LYS	13
1	A	671	ARG	13
1	A	644	CYS	13
1	A	599	LYS	12
1	A	585	LYS	11
1	A	669	ILE	11
1	A	654	ARG	10
1	A	665	LYS	10
1	A	637	SER	10
1	A	624	SER	10
1	A	604	ASN	9
1	A	670	GLU	9
1	A	633	ASP	9
1	A	581	LYS	9

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	610	GLU	8
1	A	666	ASP	8
1	A	623	LYS	7
1	A	674	GLN	7
1	A	609	GLU	7
1	A	543	LYS	7
1	A	573	ASN	7
1	A	667	LYS	7
1	A	648	ILE	7
1	A	616	LYS	7
1	A	564	CYS	6
1	A	549	MET	6
1	A	608	ASN	6
1	A	547	SER	5
1	A	638	ASN	5
1	A	614	ASP	5
1	A	606	GLU	5
1	A	554	GLN	5
1	A	600	LYS	4
1	A	552	THR	4
1	A	570	MET	4
1	A	677	ASN	4
1	A	593	LYS	4
1	A	571	ASP	3
1	A	660	GLU	3
1	A	639	ASP	2
1	A	619	ASP	2
1	A	558	ILE	2
1	A	597	GLN	2
1	A	656	LYS	1
1	A	577	ASP	1
1	A	628	SER	1
1	A	673	HIS	1
1	A	676	GLN	1
1	A	598	ILE	1
1	A	645	GLN	1

### 6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.



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

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

## 6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

## 6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

## 6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

## 6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

## 7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided