



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report i

Oct 11, 2021 – 08:13 PM EDT

PDB ID : 2IEM  
Title : Solution structure of an oxidized form (Cys51-Cys198) of E. coli Methionine Sulfoxide Reductase A (MsrA)  
Authors : Coudeville, N.; Antoine, M.; Bouquet-Bonnet, S.; Mutzenhardt, P.; Boschi-Muller, S.; Branlant, G.; Cung, M.T.  
Deposited on : 2006-09-19

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  
<https://www.wwpdb.org/validation/2017/NMRValidationReportHelp>  
with specific help available everywhere you see the i symbol.

---

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

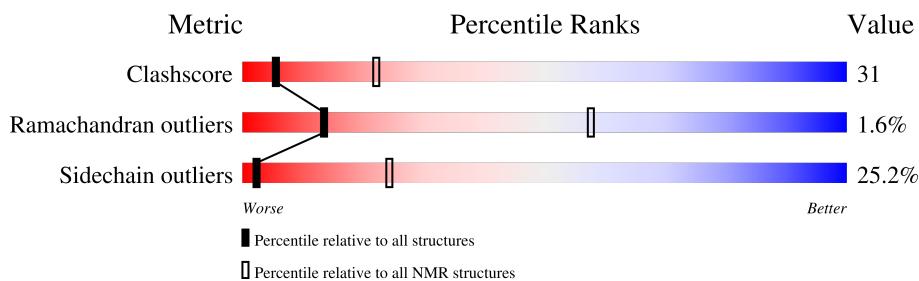
MolProbitiy : 4.02b-467  
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)  
RCI : v\_1n\_11\_5\_13\_A (Berjanski et al., 2005)  
PANAV : Wang et al. (2010)  
ShiftChecker : 2.23.2  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.23.2

# 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	158937	12864
Ramachandran outliers	154571	11451
Sidechain outliers	154315	11428

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 <=5%

Mol	Chain	Length	Quality of chain				
1	A	211		34%	38%	5%	23%

## 2 Ensemble composition and analysis i

This entry contains 20 models. Model 3 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *fewest violations*.

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:21-A:121, A:133-A:194 (163)	0.41	3

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

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

The models can be grouped into 2 clusters and 1 single-model cluster was found.

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

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

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3176 atoms, of which 1543 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Peptide methionine sulfoxide reductase msrA.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	211	3176	1031	1543	280	314	8	0

There are 2 discrepancies between the modelled and reference sequences:

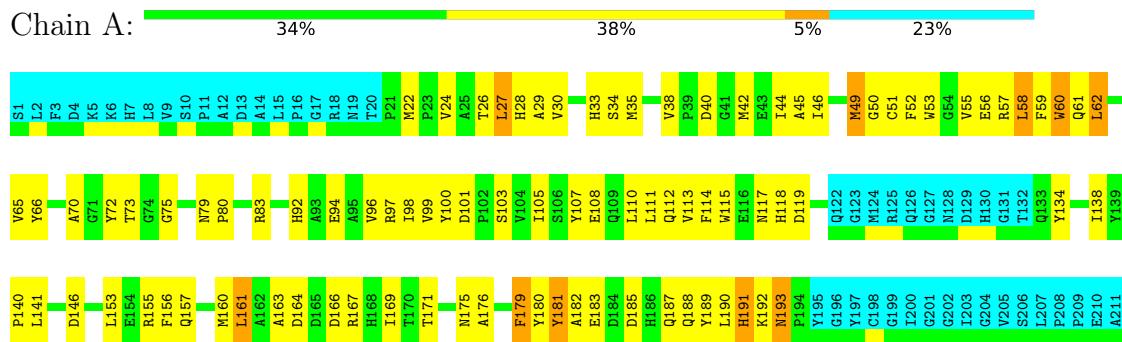
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	86	SER	CYS	engineered mutation	UNP P0A744
A	206	SER	CYS	engineered mutation	UNP P0A744

## 4 Residue-property plots (i)

### 4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

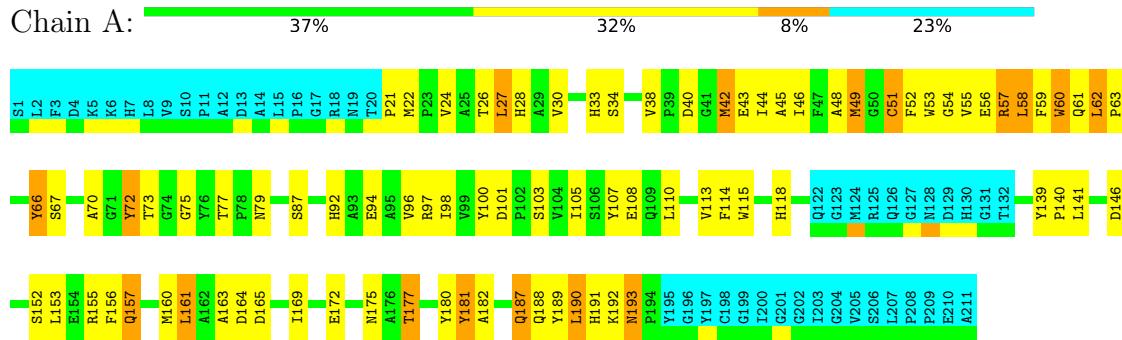
These plots are provided for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic is the same as shown in the summary in section 1 of this report. The second graphic shows the sequence where residues are colour-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. Stretches of 2 or more consecutive residues without any outliers are shown as green connectors. Residues which are classified as ill-defined in the NMR ensemble, are shown in cyan with an underline colour-coded according to the previous scheme. Residues which were present in the experimental sample, but not modelled in the final structure are shown in grey.

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA



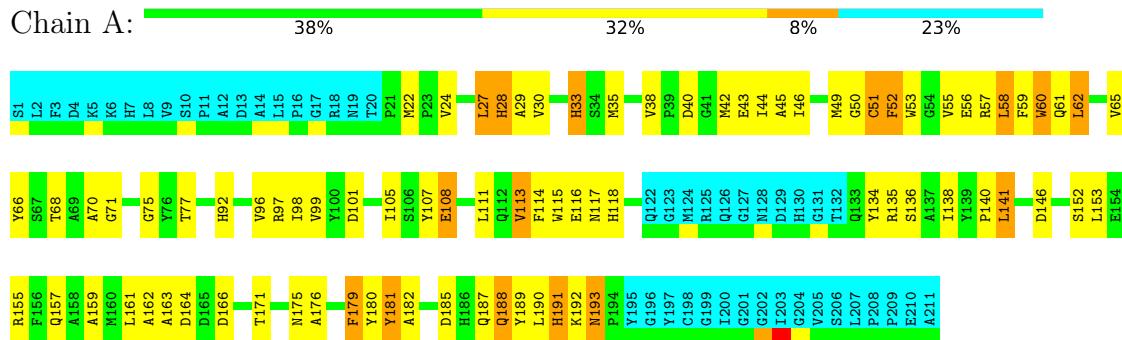
#### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA



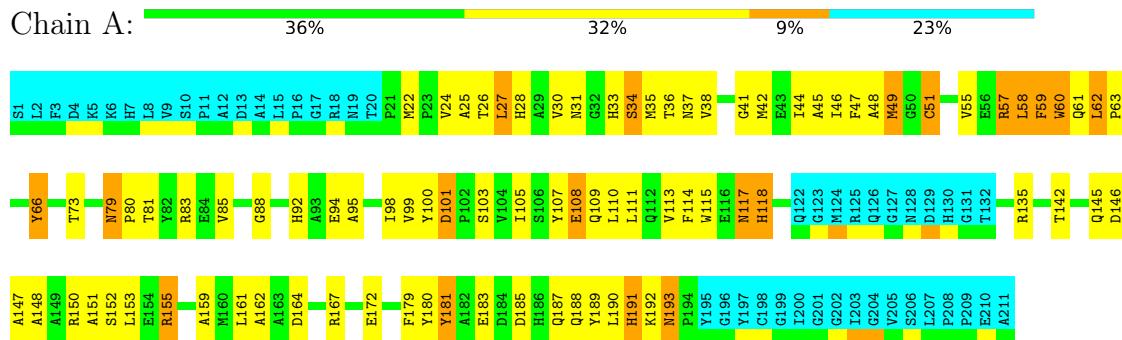
#### 4.2.3 Score per residue for model 3 (medoid)

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA



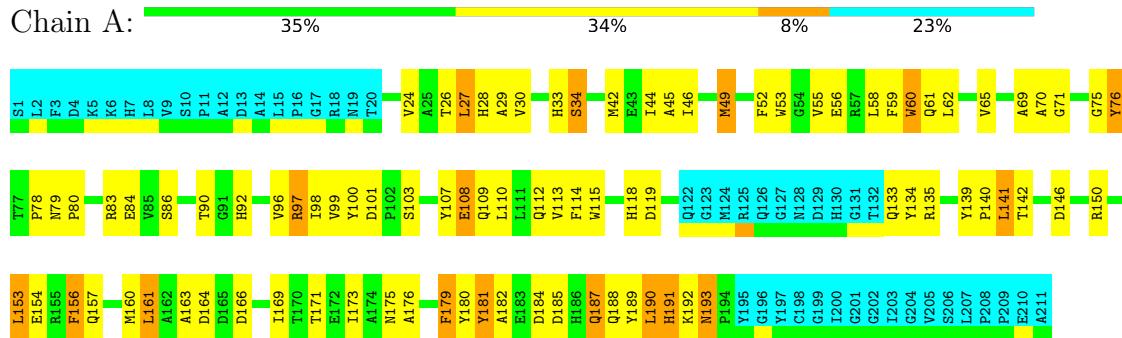
#### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA



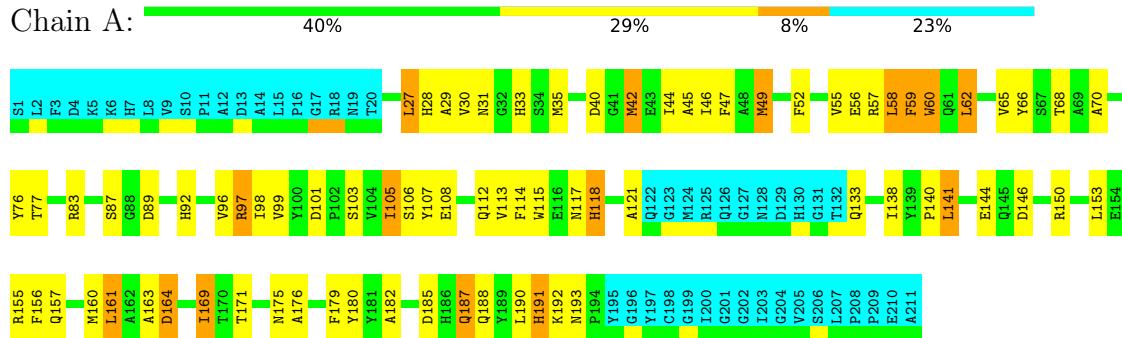
#### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA



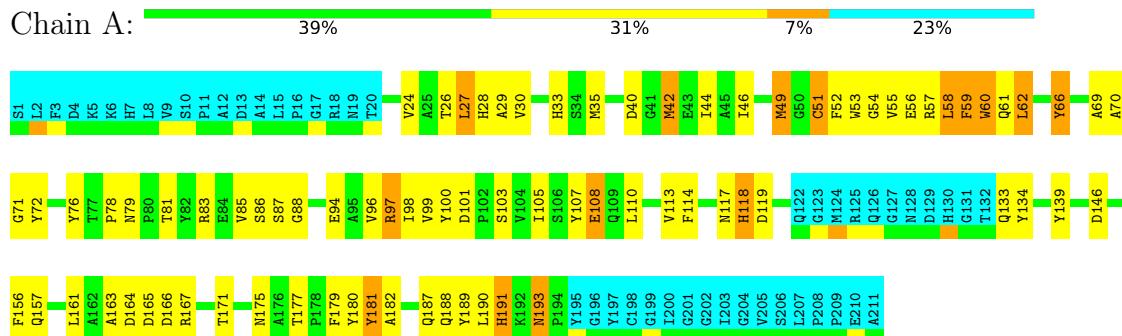
#### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA



#### 4.2.7 Score per residue for model 7

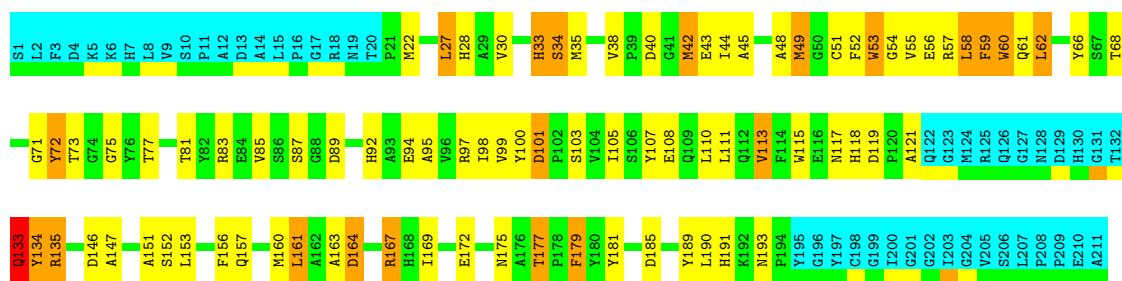
- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA



#### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA

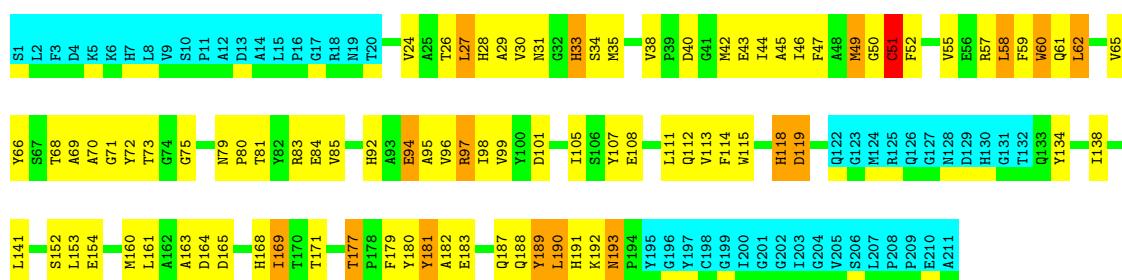
Chain A:



#### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA

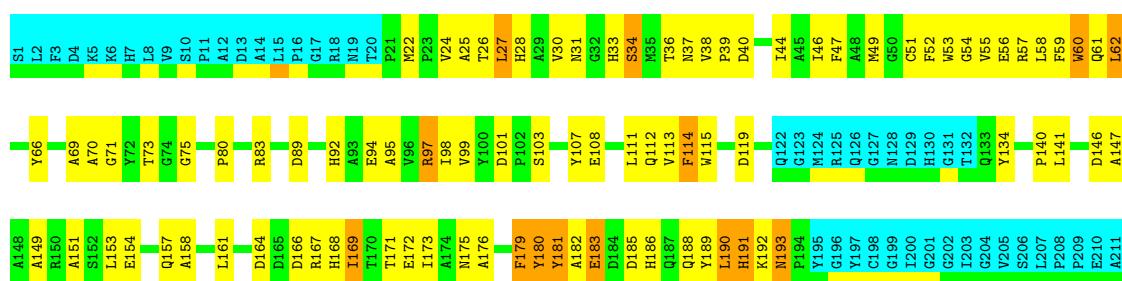
Chain A:



#### 4.2.10 Score per residue for model 10

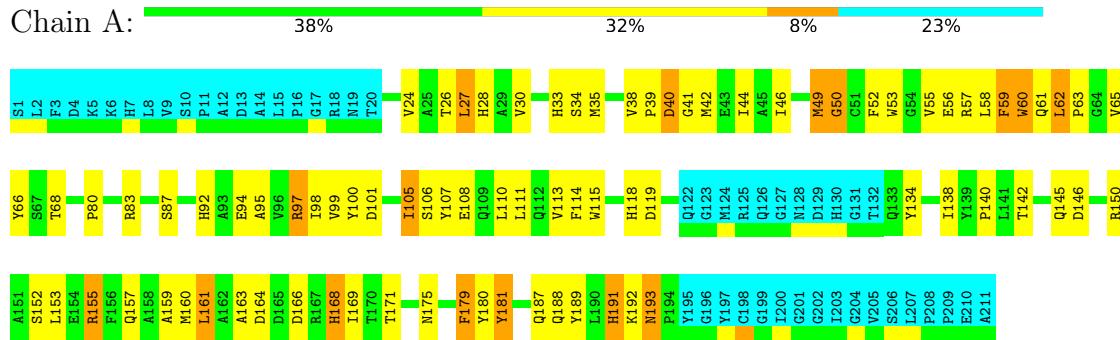
- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA

Chain A:



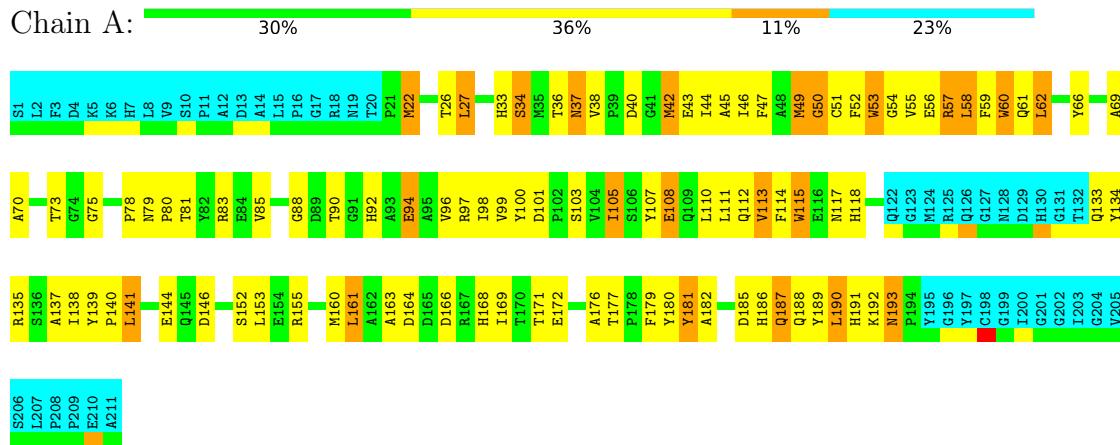
#### 4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA



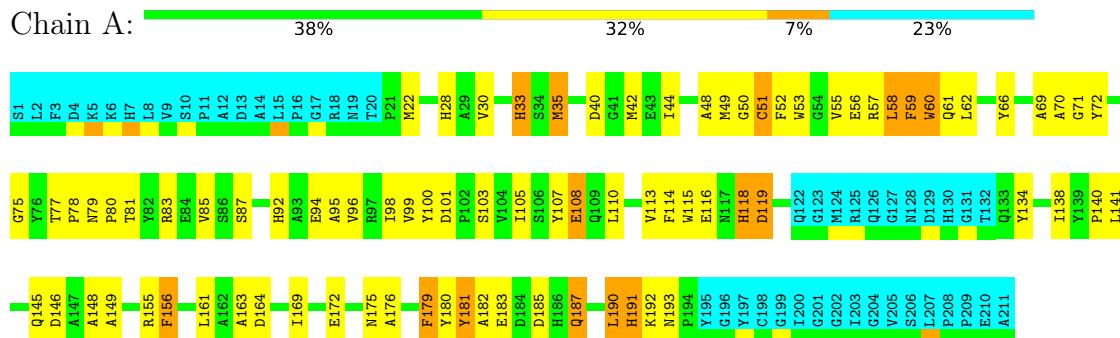
#### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA



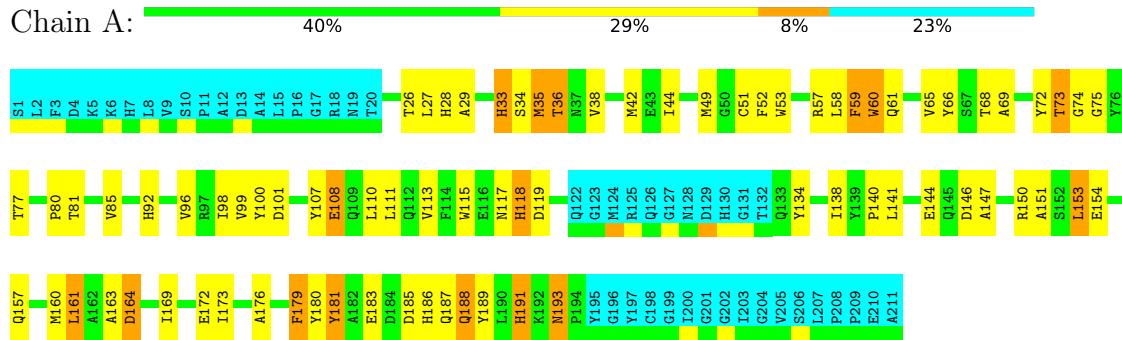
#### 4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA



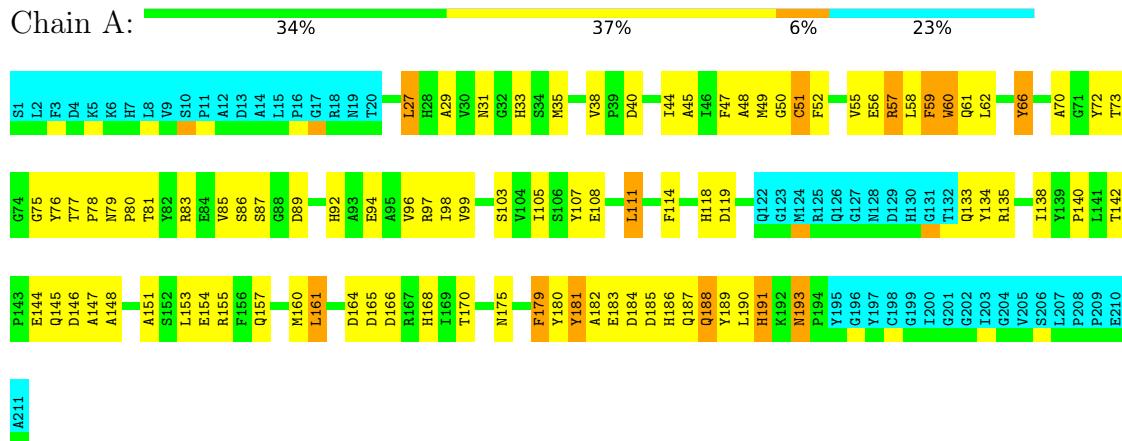
#### 4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA



#### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA



#### 4.2.16 Score per residue for model 16

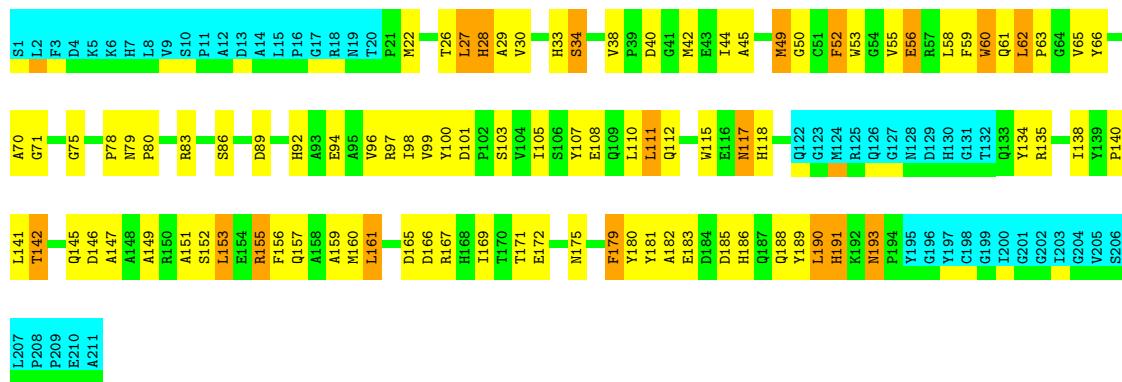
- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA



#### 4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA

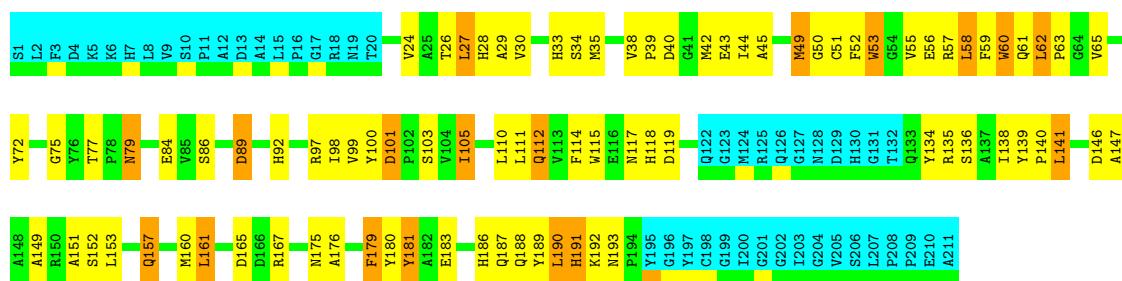
Chain A:



#### 4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA

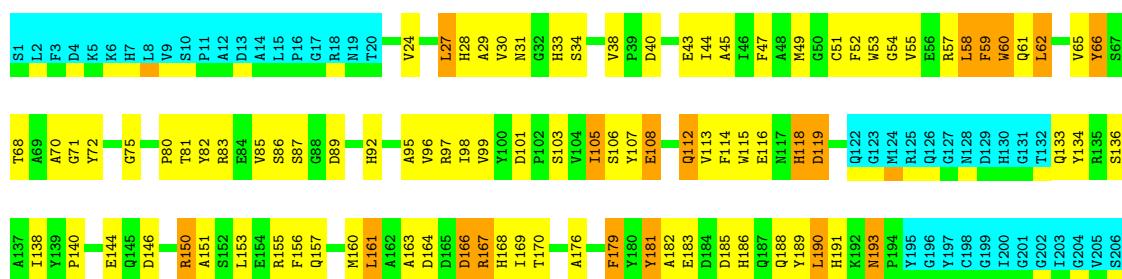
Chain A:



#### 4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA

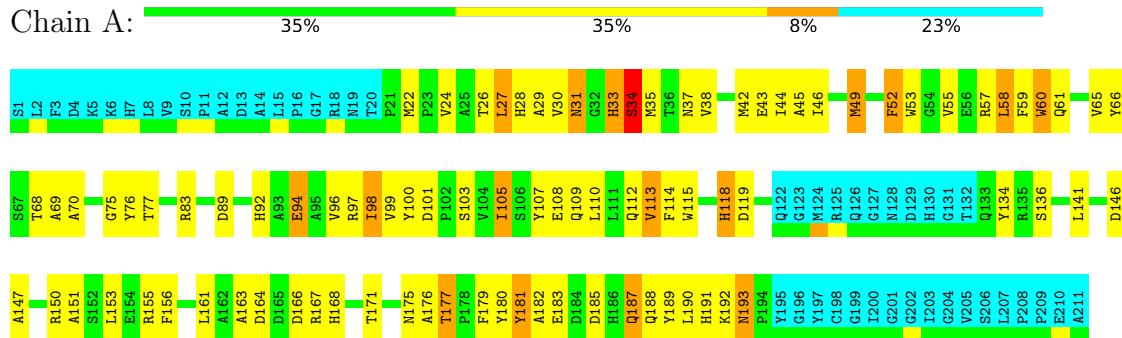
Chain A:



L207
P208
P209
E210
A211

#### 4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase msrA



## 5 Refinement protocol and experimental data overview i

Of the 200 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *target function*.

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

Software name	Classification	Version
DYANA	structure solution	
DYANA	refinement	

No chemical shift data was provided.

## 6 Model quality [\(i\)](#)

### 6.1 Standard geometry [\(i\)](#)

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 [\(i\)](#)

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	1284	1206	1187	77±12
All	All	25680	24120	23743	1531

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 31.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:VAL:HG11	1:A:60:TRP:CE2	1.00	1.92	2	11
1:A:62:LEU:HD11	1:A:113:VAL:HG11	0.99	1.31	5	3
1:A:30:VAL:HG11	1:A:60:TRP:CD2	0.95	1.96	8	13
1:A:140:PRO:O	1:A:176:ALA:HB2	0.94	1.62	14	8
1:A:38:VAL:HG21	1:A:44:ILE:HD11	0.93	1.39	1	12
1:A:153:LEU:HD11	1:A:171:THR:CG2	0.93	1.93	10	1
1:A:47:PHE:CZ	1:A:98:ILE:HD13	0.92	1.99	16	1
1:A:62:LEU:HD11	1:A:113:VAL:HG21	0.90	1.43	4	6
1:A:182:ALA:HB1	1:A:186:HIS:NE2	0.90	1.80	12	1
1:A:182:ALA:HB1	1:A:186:HIS:CE1	0.88	2.03	12	1
1:A:73:THR:HG21	1:A:179:PHE:CZ	0.87	2.03	12	3
1:A:47:PHE:CE2	1:A:59:PHE:CZ	0.84	2.66	16	1
1:A:46:ILE:HG21	1:A:179:PHE:CE2	0.83	2.08	12	3
1:A:69:ALA:HB1	1:A:181:TYR:CE1	0.83	2.08	7	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:77:THR:HG21	1:A:84:GLU:OE2	0.82	1.73	18	1
1:A:153:LEU:HD11	1:A:171:THR:HG21	0.82	1.49	10	1
1:A:26:THR:C	1:A:27:LEU:HD13	0.81	1.96	4	7
1:A:81:THR:O	1:A:85:VAL:HG23	0.81	1.76	4	9
1:A:53:TRP:CH2	1:A:189:TYR:CD2	0.80	2.69	12	1
1:A:55:VAL:HA	1:A:58:LEU:HD23	0.80	1.53	8	5
1:A:44:ILE:O	1:A:141:LEU:HD12	0.80	1.74	9	1
1:A:51:CYS:O	1:A:55:VAL:HG23	0.80	1.75	9	4
1:A:53:TRP:CH2	1:A:189:TYR:CD1	0.80	2.69	8	2
1:A:53:TRP:CZ3	1:A:189:TYR:CE1	0.79	2.71	3	6
1:A:29:ALA:HB3	1:A:188:GLN:OE1	0.79	1.77	18	9
1:A:69:ALA:HB1	1:A:187:GLN:OE1	0.79	1.78	14	1
1:A:70:ALA:HB3	1:A:187:GLN:OE1	0.78	1.78	7	4
1:A:141:LEU:HD22	1:A:176:ALA:CB	0.78	2.09	16	3
1:A:29:ALA:HB1	1:A:191:HIS:CE1	0.78	2.13	6	4
1:A:59:PHE:CZ	1:A:98:ILE:HG23	0.77	2.13	20	1
1:A:138:ILE:HG22	1:A:140:PRO:HD3	0.77	1.54	17	11
1:A:97:ARG:C	1:A:98:ILE:HD12	0.77	2.00	7	5
1:A:62:LEU:CD1	1:A:113:VAL:HG11	0.76	2.10	5	2
1:A:53:TRP:CZ2	1:A:189:TYR:CD2	0.76	2.74	12	2
1:A:52:PHE:CZ	1:A:70:ALA:HB1	0.75	2.16	9	3
1:A:62:LEU:HD13	1:A:63:PRO:HD2	0.73	1.60	18	3
1:A:53:TRP:CZ2	1:A:189:TYR:CG	0.73	2.76	8	1
1:A:29:ALA:HB3	1:A:188:GLN:CD	0.73	2.03	1	2
1:A:46:ILE:CG2	1:A:179:PHE:CE2	0.73	2.72	4	3
1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:HD23	0.72	1.98	17	1
1:A:59:PHE:CE2	1:A:98:ILE:HG23	0.72	2.20	20	1
1:A:29:ALA:HB3	1:A:188:GLN:HG3	0.72	1.61	3	1
1:A:44:ILE:CG1	1:A:99:VAL:HG22	0.71	2.15	9	17
1:A:70:ALA:HA	1:A:96:VAL:HG12	0.71	1.59	16	13
1:A:73:THR:HG21	1:A:179:PHE:CE2	0.71	2.19	12	2
1:A:30:VAL:HG22	1:A:191:HIS:ND1	0.71	1.99	5	3
1:A:47:PHE:CZ	1:A:59:PHE:CE1	0.71	2.78	16	1
1:A:190:LEU:HD23	1:A:193:ASN:O	0.71	1.85	16	1
1:A:52:PHE:CE1	1:A:96:VAL:CG1	0.71	2.74	9	1
1:A:105:ILE:HD11	1:A:110:LEU:CD1	0.71	2.15	18	1
1:A:100:TYR:CE2	1:A:110:LEU:CD1	0.71	2.74	11	11
1:A:153:LEU:C	1:A:153:LEU:HD23	0.71	2.07	14	12
1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:PHE:CE2	0.71	2.21	11	7
1:A:105:ILE:HD13	1:A:106:SER:N	0.71	2.00	11	4
1:A:114:PHE:CE2	1:A:138:ILE:HD11	0.71	2.21	9	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:53:TRP:HB3	1:A:190:LEU:HD23	0.70	1.62	18	5
1:A:53:TRP:CH2	1:A:189:TYR:CE2	0.70	2.79	12	2
1:A:30:VAL:HG22	1:A:191:HIS:CG	0.70	2.21	17	6
1:A:62:LEU:HD22	1:A:110:LEU:HD23	0.70	1.64	12	1
1:A:53:TRP:HE1	1:A:186:HIS:HD1	0.70	1.30	10	1
1:A:105:ILE:HD11	1:A:110:LEU:CD2	0.70	2.17	17	1
1:A:59:PHE:CE2	1:A:98:ILE:HD11	0.69	2.21	13	8
1:A:153:LEU:HD11	1:A:171:THR:HG23	0.69	1.63	20	3
1:A:59:PHE:CE2	1:A:98:ILE:CD1	0.69	2.75	6	3
1:A:52:PHE:CZ	1:A:53:TRP:CD1	0.69	2.80	7	1
1:A:59:PHE:CZ	1:A:98:ILE:CG2	0.69	2.75	20	1
1:A:169:ILE:HG13	1:A:171:THR:HG22	0.69	1.65	11	1
1:A:47:PHE:CE2	1:A:59:PHE:CE1	0.69	2.81	16	1
1:A:49:MET:HB3	1:A:55:VAL:HG21	0.68	1.66	18	6
1:A:59:PHE:CE2	1:A:98:ILE:HD13	0.68	2.23	6	2
1:A:53:TRP:CE3	1:A:189:TYR:CE1	0.67	2.83	3	2
1:A:49:MET:CB	1:A:55:VAL:HG21	0.67	2.19	11	6
1:A:107:TYR:CD1	1:A:108:GLU:N	0.67	2.63	16	16
1:A:58:LEU:HD12	1:A:58:LEU:O	0.67	1.88	12	4
1:A:147:ALA:O	1:A:151:ALA:HB2	0.67	1.90	18	7
1:A:98:ILE:HD12	1:A:98:ILE:N	0.66	2.06	16	5
1:A:100:TYR:CD1	1:A:105:ILE:HG23	0.66	2.26	4	7
1:A:97:ARG:NE	1:A:179:PHE:CD2	0.66	2.64	7	1
1:A:60:TRP:C	1:A:60:TRP:CD1	0.65	2.69	16	7
1:A:53:TRP:CH2	1:A:189:TYR:CE1	0.65	2.84	8	4
1:A:27:LEU:HD13	1:A:27:LEU:N	0.65	2.05	4	2
1:A:24:VAL:HG21	1:A:181:TYR:HB3	0.65	1.68	1	10
1:A:53:TRP:CE3	1:A:189:TYR:CD1	0.65	2.85	3	5
1:A:53:TRP:CD2	1:A:189:TYR:CD1	0.65	2.85	3	3
1:A:182:ALA:CB	1:A:186:HIS:CE1	0.65	2.79	12	1
1:A:142:THR:HG23	1:A:145:GLN:HB2	0.65	1.68	17	1
1:A:60:TRP:CZ2	1:A:61:GLN:NE2	0.65	2.64	9	2
1:A:115:TRP:CZ2	1:A:152:SER:CB	0.64	2.80	12	6
1:A:189:TYR:CE1	1:A:193:ASN:ND2	0.64	2.65	18	1
1:A:52:PHE:CD1	1:A:53:TRP:N	0.64	2.66	11	2
1:A:44:ILE:HG12	1:A:99:VAL:HG22	0.64	1.70	3	16
1:A:60:TRP:HA	1:A:65:VAL:HG11	0.64	1.70	6	2
1:A:73:THR:CB	1:A:179:PHE:CE1	0.64	2.81	4	2
1:A:52:PHE:CE1	1:A:96:VAL:HG13	0.64	2.26	9	1
1:A:71:GLY:HA2	1:A:182:ALA:HB2	0.63	1.70	16	4
1:A:53:TRP:CH2	1:A:189:TYR:CZ	0.63	2.87	19	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:TYR:CE1	1:A:186:HIS:CE1	0.63	2.87	19	1
1:A:49:MET:HB2	1:A:55:VAL:HG21	0.63	1.68	11	4
1:A:141:LEU:HD22	1:A:176:ALA:HB3	0.63	1.71	3	3
1:A:68:THR:HG23	1:A:98:ILE:HG13	0.63	1.70	16	1
1:A:35:MET:SD	1:A:69:ALA:HB2	0.63	2.34	13	1
1:A:59:PHE:O	1:A:65:VAL:HG21	0.63	1.94	17	8
1:A:161:LEU:HD23	1:A:168:HIS:NE2	0.63	2.09	12	1
1:A:52:PHE:CZ	1:A:96:VAL:CG1	0.62	2.82	9	1
1:A:30:VAL:HG23	1:A:188:GLN:HG2	0.62	1.72	7	1
1:A:115:TRP:HZ3	1:A:171:THR:HG21	0.62	1.54	17	1
1:A:30:VAL:HG22	1:A:191:HIS:CD2	0.62	2.30	4	1
1:A:29:ALA:HB2	1:A:188:GLN:OE1	0.62	1.95	15	1
1:A:26:THR:HG22	1:A:27:LEU:HD13	0.62	1.71	9	7
1:A:115:TRP:CZ3	1:A:171:THR:HG21	0.62	2.30	17	1
1:A:60:TRP:CZ2	1:A:61:GLN:OE1	0.61	2.54	8	1
1:A:73:THR:OG1	1:A:179:PHE:CE1	0.61	2.54	4	2
1:A:38:VAL:HG22	1:A:99:VAL:HG11	0.61	1.72	12	2
1:A:49:MET:HB3	1:A:55:VAL:HG11	0.61	1.73	5	1
1:A:24:VAL:HG11	1:A:181:TYR:CE1	0.61	2.30	16	1
1:A:142:THR:HG23	1:A:145:GLN:CB	0.61	2.25	17	1
1:A:49:MET:SD	1:A:114:PHE:CE2	0.60	2.94	6	2
1:A:26:THR:HG22	1:A:27:LEU:CD1	0.60	2.26	12	6
1:A:153:LEU:HD23	1:A:154:GLU:N	0.60	2.11	5	2
1:A:73:THR:CG2	1:A:179:PHE:CZ	0.60	2.84	12	2
1:A:189:TYR:CE2	1:A:193:ASN:OD1	0.60	2.54	12	1
1:A:179:PHE:C	1:A:179:PHE:CD1	0.60	2.75	5	9
1:A:118:HIS:CE1	1:A:119:ASP:O	0.60	2.55	8	8
1:A:22:MET:HE1	1:A:81:THR:HG23	0.60	1.73	12	1
1:A:59:PHE:CE2	1:A:65:VAL:HG22	0.60	2.32	20	1
1:A:33:HIS:CG	1:A:34:SER:N	0.60	2.70	16	10
1:A:49:MET:SD	1:A:114:PHE:CZ	0.60	2.95	20	1
1:A:62:LEU:HD11	1:A:113:VAL:CG1	0.59	2.21	5	1
1:A:57:ARG:HD3	1:A:190:LEU:HD13	0.59	1.72	16	1
1:A:179:PHE:CZ	1:A:181:TYR:CE1	0.59	2.90	17	1
1:A:33:HIS:CD2	1:A:34:SER:O	0.59	2.56	4	4
1:A:60:TRP:CE3	1:A:60:TRP:C	0.59	2.76	10	13
1:A:58:LEU:HD12	1:A:58:LEU:C	0.59	2.18	12	1
1:A:153:LEU:N	1:A:153:LEU:CD2	0.59	2.66	17	1
1:A:28:HIS:CE1	1:A:188:GLN:OE1	0.58	2.55	16	2
1:A:59:PHE:CZ	1:A:98:ILE:HD13	0.58	2.32	6	2
1:A:134:TYR:CD1	1:A:134:TYR:O	0.58	2.57	5	12

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:LEU:HD21	1:A:113:VAL:HG21	0.58	1.75	6	1
1:A:73:THR:HG23	1:A:95:ALA:HB3	0.58	1.74	10	1
1:A:52:PHE:CD1	1:A:94:GLU:CG	0.58	2.87	9	1
1:A:53:TRP:CZ3	1:A:189:TYR:CD1	0.58	2.92	19	2
1:A:105:ILE:HD11	1:A:109:GLN:CG	0.58	2.29	16	1
1:A:169:ILE:HD12	1:A:171:THR:CG2	0.58	2.29	5	1
1:A:49:MET:HB2	1:A:55:VAL:HG11	0.57	1.75	17	2
1:A:52:PHE:CZ	1:A:96:VAL:HG12	0.57	2.34	9	1
1:A:72:TYR:N	1:A:72:TYR:CD1	0.57	2.73	2	2
1:A:44:ILE:HG13	1:A:99:VAL:HG22	0.57	1.76	9	5
1:A:105:ILE:C	1:A:105:ILE:HD13	0.57	2.19	18	1
1:A:30:VAL:HG11	1:A:60:TRP:CE3	0.57	2.34	8	3
1:A:49:MET:SD	1:A:114:PHE:CD2	0.57	2.97	6	1
1:A:168:HIS:CE1	1:A:169:ILE:O	0.57	2.57	11	1
1:A:53:TRP:CZ2	1:A:189:TYR:CD1	0.57	2.93	18	2
1:A:24:VAL:HG21	1:A:181:TYR:CB	0.57	2.29	20	7
1:A:24:VAL:HG21	1:A:181:TYR:CG	0.57	2.35	16	1
1:A:187:GLN:C	1:A:188:GLN:HG2	0.56	2.21	18	3
1:A:51:CYS:CB	1:A:55:VAL:HG23	0.56	2.31	10	2
1:A:107:TYR:CD1	1:A:107:TYR:C	0.56	2.79	19	5
1:A:47:PHE:CZ	1:A:98:ILE:CD1	0.56	2.83	16	1
1:A:118:HIS:CD2	1:A:118:HIS:C	0.56	2.78	7	4
1:A:58:LEU:O	1:A:62:LEU:HD23	0.56	2.01	2	2
1:A:111:LEU:O	1:A:115:TRP:CD1	0.56	2.58	10	3
1:A:52:PHE:CE2	1:A:70:ALA:HB1	0.56	2.36	9	2
1:A:169:ILE:HD12	1:A:171:THR:HG22	0.56	1.75	5	1
1:A:97:ARG:CZ	1:A:179:PHE:CD2	0.56	2.88	7	1
1:A:30:VAL:CG1	1:A:60:TRP:CD2	0.56	2.83	8	3
1:A:22:MET:CE	1:A:81:THR:HG23	0.56	2.30	12	1
1:A:62:LEU:HD23	1:A:65:VAL:HG23	0.56	1.77	3	2
1:A:58:LEU:HD22	1:A:117:ASN:CG	0.56	2.21	4	2
1:A:72:TYR:CZ	1:A:182:ALA:HB1	0.56	2.36	13	2
1:A:189:TYR:C	1:A:189:TYR:CD1	0.55	2.80	9	2
1:A:52:PHE:N	1:A:52:PHE:CD1	0.55	2.74	1	10
1:A:100:TYR:CD2	1:A:110:LEU:HD11	0.55	2.36	12	6
1:A:52:PHE:HZ	1:A:70:ALA:HB1	0.55	1.61	9	1
1:A:97:ARG:NE	1:A:179:PHE:CG	0.55	2.75	7	1
1:A:59:PHE:CD2	1:A:65:VAL:CG2	0.55	2.90	20	1
1:A:183:GLU:CB	1:A:186:HIS:CD2	0.55	2.89	15	2
1:A:80:PRO:HG3	1:A:92:HIS:CD2	0.55	2.36	12	8
1:A:59:PHE:CD1	1:A:98:ILE:HG21	0.55	2.37	19	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:140:PRO:C	1:A:141:LEU:HD22	0.55	2.22	1	2
1:A:153:LEU:CD1	1:A:171:THR:HG23	0.55	2.32	5	2
1:A:179:PHE:CD1	1:A:179:PHE:O	0.55	2.60	18	3
1:A:111:LEU:O	1:A:115:TRP:CD2	0.55	2.60	11	4
1:A:153:LEU:HD23	1:A:153:LEU:O	0.55	2.02	15	7
1:A:58:LEU:CD2	1:A:117:ASN:ND2	0.55	2.69	6	2
1:A:59:PHE:HD1	1:A:65:VAL:HG21	0.55	1.62	19	1
1:A:191:HIS:CD2	1:A:192:LYS:N	0.55	2.75	16	3
1:A:30:VAL:HG21	1:A:60:TRP:CE2	0.55	2.37	13	2
1:A:72:TYR:CZ	1:A:182:ALA:CB	0.55	2.90	13	2
1:A:47:PHE:CD2	1:A:114:PHE:CE2	0.54	2.95	6	1
1:A:57:ARG:HA	1:A:60:TRP:CE3	0.54	2.37	16	4
1:A:42:MET:SD	1:A:66:TYR:CG	0.54	3.00	2	5
1:A:30:VAL:HG11	1:A:60:TRP:CG	0.54	2.37	9	3
1:A:141:LEU:CD1	1:A:176:ALA:HB3	0.54	2.32	20	1
1:A:47:PHE:CD2	1:A:59:PHE:CZ	0.54	2.96	4	1
1:A:62:LEU:CD1	1:A:113:VAL:HG21	0.54	2.28	4	1
1:A:97:ARG:CB	1:A:179:PHE:CZ	0.54	2.89	6	2
1:A:121:ALA:HB2	1:A:169:ILE:HG13	0.54	1.78	8	1
1:A:118:HIS:CE1	1:A:119:ASP:OD1	0.54	2.61	15	1
1:A:105:ILE:HD11	1:A:110:LEU:HG	0.54	1.80	17	1
1:A:115:TRP:CZ2	1:A:153:LEU:HD21	0.54	2.37	17	1
1:A:139:TYR:CD1	1:A:139:TYR:N	0.54	2.75	18	1
1:A:57:ARG:O	1:A:61:GLN:CG	0.54	2.55	9	8
1:A:59:PHE:CZ	1:A:114:PHE:CZ	0.54	2.96	10	1
1:A:111:LEU:HD23	1:A:112:GLN:N	0.54	2.17	17	1
1:A:121:ALA:HB1	1:A:168:HIS:O	0.53	2.04	1	1
1:A:28:HIS:CE1	1:A:188:GLN:CD	0.53	2.81	16	1
1:A:42:MET:CE	1:A:66:TYR:CG	0.53	2.91	20	1
1:A:30:VAL:CG1	1:A:60:TRP:CE2	0.53	2.83	7	6
1:A:30:VAL:CG2	1:A:191:HIS:CD2	0.53	2.91	4	1
1:A:60:TRP:CG	1:A:61:GLN:N	0.53	2.75	10	13
1:A:30:VAL:HG11	1:A:60:TRP:CZ2	0.53	2.38	7	4
1:A:141:LEU:CD2	1:A:176:ALA:HB3	0.53	2.33	3	2
1:A:82:TYR:CD1	1:A:186:HIS:NE2	0.53	2.77	19	1
1:A:183:GLU:HB3	1:A:186:HIS:CD2	0.53	2.38	15	6
1:A:113:VAL:HG22	1:A:117:ASN:HD21	0.53	1.63	12	1
1:A:27:LEU:HD22	1:A:27:LEU:N	0.53	2.19	20	11
1:A:46:ILE:HG22	1:A:139:TYR:CD2	0.53	2.38	7	3
1:A:100:TYR:CE2	1:A:110:LEU:HD11	0.53	2.39	11	5
1:A:72:TYR:CE2	1:A:182:ALA:HA	0.53	2.39	13	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:141:LEU:HD12	1:A:176:ALA:HB3	0.53	1.81	20	1
1:A:28:HIS:CD2	1:A:68:THR:O	0.53	2.61	16	6
1:A:98:ILE:N	1:A:98:ILE:CD1	0.53	2.71	16	3
1:A:115:TRP:CZ2	1:A:152:SER:OG	0.53	2.58	8	1
1:A:105:ILE:CD1	1:A:106:SER:O	0.53	2.57	19	2
1:A:73:THR:CG2	1:A:179:PHE:CE2	0.53	2.91	12	1
1:A:69:ALA:HB3	1:A:97:ARG:HB3	0.53	1.80	20	1
1:A:187:GLN:O	1:A:188:GLN:HG2	0.52	2.04	3	3
1:A:72:TYR:CZ	1:A:182:ALA:HA	0.52	2.39	13	2
1:A:115:TRP:CZ2	1:A:138:ILE:HD11	0.52	2.40	17	2
1:A:153:LEU:O	1:A:157:GLN:CB	0.52	2.57	17	1
1:A:52:PHE:CD1	1:A:94:GLU:HG3	0.52	2.39	9	1
1:A:105:ILE:HD11	1:A:110:LEU:CG	0.52	2.34	17	1
1:A:105:ILE:CD1	1:A:109:GLN:CD	0.52	2.78	16	1
1:A:97:ARG:HB2	1:A:179:PHE:CZ	0.52	2.40	6	5
1:A:59:PHE:CD2	1:A:98:ILE:CD1	0.52	2.92	9	2
1:A:59:PHE:CD2	1:A:98:ILE:HD11	0.52	2.40	9	1
1:A:154:GLU:O	1:A:158:ALA:CB	0.52	2.57	10	1
1:A:28:HIS:CE1	1:A:188:GLN:HG2	0.52	2.40	17	9
1:A:42:MET:HE2	1:A:66:TYR:HB2	0.52	1.80	3	1
1:A:69:ALA:HB3	1:A:97:ARG:HG2	0.52	1.82	5	1
1:A:111:LEU:O	1:A:115:TRP:CE2	0.52	2.63	12	1
1:A:115:TRP:CZ2	1:A:152:SER:HB2	0.52	2.40	3	6
1:A:53:TRP:O	1:A:57:ARG:CB	0.52	2.58	20	1
1:A:33:HIS:CD2	1:A:34:SER:N	0.52	2.78	18	2
1:A:30:VAL:CG2	1:A:191:HIS:CG	0.52	2.93	17	1
1:A:45:ALA:N	1:A:98:ILE:O	0.51	2.43	20	15
1:A:68:THR:HG22	1:A:98:ILE:HG23	0.51	1.81	9	1
1:A:60:TRP:CD2	1:A:61:GLN:N	0.51	2.78	11	12
1:A:62:LEU:HD23	1:A:63:PRO:HD2	0.51	1.81	4	2
1:A:58:LEU:C	1:A:58:LEU:HD12	0.51	2.25	7	1
1:A:105:ILE:HD11	1:A:110:LEU:HD21	0.51	1.82	17	1
1:A:48:ALA:HB1	1:A:94:GLU:O	0.51	2.06	15	5
1:A:60:TRP:CD2	1:A:60:TRP:C	0.51	2.84	1	13
1:A:193:ASN:ND2	1:A:193:ASN:N	0.51	2.58	12	4
1:A:28:HIS:NE2	1:A:188:GLN:NE2	0.51	2.59	11	4
1:A:65:VAL:HG13	1:A:98:ILE:HG23	0.51	1.83	9	1
1:A:59:PHE:CD2	1:A:98:ILE:HD13	0.51	2.41	19	1
1:A:29:ALA:CB	1:A:188:GLN:OE1	0.51	2.59	17	11
1:A:69:ALA:CB	1:A:181:TYR:CE1	0.51	2.90	7	1
1:A:168:HIS:CD2	1:A:168:HIS:O	0.51	2.64	10	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:79:ASN:N	1:A:80:PRO:HD3	0.51	2.21	12	2
1:A:105:ILE:HD11	1:A:110:LEU:HD11	0.51	1.81	18	1
1:A:69:ALA:CB	1:A:187:GLN:OE1	0.50	2.56	14	1
1:A:163:ALA:O	1:A:164:ASP:CB	0.50	2.60	9	14
1:A:49:MET:SD	1:A:114:PHE:CE1	0.50	3.04	9	1
1:A:38:VAL:HG13	1:A:42:MET:HB3	0.50	1.83	16	3
1:A:59:PHE:CE1	1:A:98:ILE:HG21	0.50	2.40	19	1
1:A:81:THR:O	1:A:85:VAL:CG2	0.50	2.60	1	2
1:A:153:LEU:C	1:A:153:LEU:CD2	0.50	2.80	1	11
1:A:80:PRO:CG	1:A:92:HIS:CD2	0.50	2.93	9	2
1:A:152:SER:O	1:A:156:PHE:CB	0.50	2.60	17	1
1:A:114:PHE:CE2	1:A:138:ILE:CD1	0.50	2.94	9	1
1:A:72:TYR:CE1	1:A:182:ALA:CB	0.50	2.94	13	2
1:A:45:ALA:HB1	1:A:47:PHE:CE2	0.50	2.41	15	1
1:A:59:PHE:O	1:A:65:VAL:CG2	0.50	2.60	5	4
1:A:111:LEU:HB3	1:A:115:TRP:CZ2	0.50	2.42	3	5
1:A:96:VAL:HG23	1:A:98:ILE:HD11	0.50	1.82	7	1
1:A:47:PHE:CG	1:A:114:PHE:CZ	0.50	2.99	10	1
1:A:170:THR:HG22	1:A:170:THR:O	0.50	2.06	19	1
1:A:48:ALA:CB	1:A:94:GLU:O	0.50	2.60	8	4
1:A:160:MET:HG3	1:A:161:LEU:N	0.50	2.21	19	11
1:A:97:ARG:CZ	1:A:179:PHE:CG	0.50	2.95	7	1
1:A:53:TRP:CH2	1:A:189:TYR:CG	0.50	2.99	8	1
1:A:188:GLN:O	1:A:188:GLN:CG	0.50	2.60	14	2
1:A:73:THR:CB	1:A:179:PHE:CZ	0.50	2.95	4	1
1:A:147:ALA:O	1:A:151:ALA:CB	0.50	2.59	18	5
1:A:56:GLU:O	1:A:60:TRP:CE3	0.50	2.65	15	2
1:A:57:ARG:NH2	1:A:61:GLN:NE2	0.50	2.60	20	1
1:A:115:TRP:HB3	1:A:156:PHE:CZ	0.49	2.42	5	1
1:A:118:HIS:CG	1:A:119:ASP:N	0.49	2.79	14	7
1:A:59:PHE:CD2	1:A:98:ILE:HG12	0.49	2.42	19	3
1:A:52:PHE:CG	1:A:94:GLU:OE1	0.49	2.65	11	1
1:A:60:TRP:CE3	1:A:60:TRP:O	0.49	2.66	20	8
1:A:60:TRP:CE2	1:A:61:GLN:HG2	0.49	2.43	9	11
1:A:97:ARG:CZ	1:A:99:VAL:HG21	0.49	2.38	6	1
1:A:54:GLY:HA2	1:A:190:LEU:HD23	0.49	1.84	7	1
1:A:71:GLY:N	1:A:97:ARG:NH2	0.49	2.60	7	1
1:A:72:TYR:CE1	1:A:85:VAL:HG11	0.49	2.42	9	2
1:A:59:PHE:CE2	1:A:98:ILE:HG12	0.49	2.42	20	1
1:A:73:THR:OG1	1:A:177:THR:CG2	0.49	2.60	8	2
1:A:76:TYR:C	1:A:76:TYR:CD1	0.49	2.85	5	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:153:LEU:HD13	1:A:173:ILE:HD11	0.49	1.84	14	2
1:A:97:ARG:HG3	1:A:179:PHE:CE1	0.49	2.43	6	1
1:A:69:ALA:O	1:A:96:VAL:HG13	0.49	2.07	14	1
1:A:51:CYS:HB3	1:A:55:VAL:HG23	0.49	1.83	2	3
1:A:56:GLU:OE1	1:A:70:ALA:HB2	0.49	2.07	2	1
1:A:97:ARG:HD2	1:A:179:PHE:CD1	0.49	2.42	7	1
1:A:52:PHE:CG	1:A:53:TRP:N	0.49	2.81	12	2
1:A:55:VAL:HG22	1:A:117:ASN:OD1	0.49	2.07	16	1
1:A:105:ILE:HD11	1:A:109:GLN:HG2	0.49	1.84	16	1
1:A:115:TRP:CH2	1:A:171:THR:HG21	0.49	2.42	5	1
1:A:66:TYR:N	1:A:99:VAL:O	0.49	2.44	20	8
1:A:42:MET:SD	1:A:66:TYR:CD1	0.49	3.06	2	2
1:A:52:PHE:O	1:A:56:GLU:CB	0.49	2.61	16	5
1:A:155:ARG:O	1:A:159:ALA:CB	0.49	2.61	4	1
1:A:57:ARG:CZ	1:A:61:GLN:CD	0.49	2.80	10	1
1:A:153:LEU:HD23	1:A:153:LEU:C	0.49	2.27	15	1
1:A:100:TYR:CE2	1:A:110:LEU:HD13	0.48	2.41	4	2
1:A:55:VAL:HG23	1:A:56:GLU:N	0.48	2.23	5	1
1:A:191:HIS:N	1:A:191:HIS:CD2	0.48	2.81	11	1
1:A:72:TYR:CE1	1:A:182:ALA:HB1	0.48	2.43	13	1
1:A:60:TRP:CH2	1:A:191:HIS:CB	0.48	2.95	16	1
1:A:54:GLY:O	1:A:58:LEU:CB	0.48	2.61	1	2
1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:PHE:CZ	0.48	2.43	17	2
1:A:75:GLY:HA3	1:A:92:HIS:CD2	0.48	2.44	15	7
1:A:97:ARG:HD3	1:A:99:VAL:HG23	0.48	1.84	6	1
1:A:111:LEU:CB	1:A:115:TRP:CZ2	0.48	2.95	18	1
1:A:157:GLN:O	1:A:160:MET:CG	0.48	2.61	17	11
1:A:38:VAL:HG13	1:A:39:PRO:HD2	0.48	1.85	18	1
1:A:53:TRP:CB	1:A:190:LEU:HD23	0.48	2.38	19	1
1:A:75:GLY:HA3	1:A:92:HIS:CG	0.48	2.43	12	13
1:A:52:PHE:CE1	1:A:70:ALA:HB1	0.48	2.43	10	1
1:A:169:ILE:CG1	1:A:171:THR:HG22	0.48	2.37	11	1
1:A:107:TYR:CE1	1:A:148:ALA:CB	0.48	2.96	15	2
1:A:58:LEU:HD22	1:A:117:ASN:HD22	0.48	1.68	8	1
1:A:161:LEU:HD22	1:A:165:ASP:O	0.48	2.09	16	1
1:A:51:CYS:O	1:A:55:VAL:CG2	0.48	2.57	9	1
1:A:42:MET:SD	1:A:101:ASP:CA	0.48	3.01	18	1
1:A:107:TYR:O	1:A:111:LEU:HD23	0.48	2.08	4	1
1:A:109:GLN:O	1:A:113:VAL:HG23	0.48	2.09	4	1
1:A:155:ARG:O	1:A:159:ALA:N	0.48	2.47	17	2
1:A:27:LEU:CB	1:A:33:HIS:C	0.48	2.82	3	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:59:PHE:CD1	1:A:98:ILE:HG12	0.48	2.44	7	6
1:A:57:ARG:O	1:A:61:GLN:CB	0.48	2.62	9	1
1:A:169:ILE:HG22	1:A:171:THR:HG23	0.48	1.85	9	1
1:A:30:VAL:CG1	1:A:60:TRP:CZ2	0.48	2.97	2	3
1:A:62:LEU:CD2	1:A:105:ILE:HD13	0.48	2.39	4	1
1:A:187:GLN:C	1:A:188:GLN:CG	0.48	2.82	12	3
1:A:97:ARG:CD	1:A:179:PHE:CD1	0.47	2.97	19	1
1:A:114:PHE:CE2	1:A:138:ILE:CG1	0.47	2.97	9	1
1:A:114:PHE:CZ	1:A:138:ILE:HG12	0.47	2.44	9	1
1:A:107:TYR:CG	1:A:108:GLU:N	0.47	2.83	16	4
1:A:28:HIS:CE1	1:A:188:GLN:CG	0.47	2.97	19	4
1:A:66:TYR:CB	1:A:99:VAL:O	0.47	2.63	10	1
1:A:46:ILE:HD13	1:A:177:THR:O	0.47	2.09	20	1
1:A:189:TYR:O	1:A:193:ASN:ND2	0.47	2.47	9	14
1:A:36:THR:HG23	1:A:37:ASN:N	0.47	2.25	10	3
1:A:80:PRO:HB3	1:A:92:HIS:CD2	0.47	2.44	11	4
1:A:115:TRP:HH2	1:A:171:THR:HG21	0.47	1.68	5	1
1:A:97:ARG:CZ	1:A:99:VAL:CG2	0.47	2.93	6	1
1:A:28:HIS:CE1	1:A:30:VAL:HB	0.47	2.44	20	14
1:A:114:PHE:O	1:A:118:HIS:N	0.47	2.47	16	10
1:A:73:THR:HB	1:A:179:PHE:CD1	0.47	2.45	4	1
1:A:50:GLY:O	1:A:52:PHE:N	0.47	2.48	9	2
1:A:46:ILE:O	1:A:47:PHE:CD1	0.47	2.68	12	2
1:A:54:GLY:O	1:A:57:ARG:CG	0.47	2.63	12	1
1:A:59:PHE:CG	1:A:98:ILE:HG12	0.47	2.44	11	14
1:A:24:VAL:HG11	1:A:181:TYR:CD1	0.47	2.45	2	2
1:A:97:ARG:NE	1:A:179:PHE:CD1	0.47	2.83	3	1
1:A:121:ALA:HB2	1:A:169:ILE:HG22	0.47	1.85	6	1
1:A:52:PHE:CE2	1:A:53:TRP:CD1	0.47	3.03	12	2
1:A:60:TRP:CZ2	1:A:61:GLN:HG2	0.47	2.45	11	1
1:A:81:THR:O	1:A:85:VAL:N	0.47	2.47	12	1
1:A:100:TYR:C	1:A:100:TYR:CD1	0.47	2.88	8	2
1:A:38:VAL:CG2	1:A:44:ILE:HD11	0.47	2.40	11	1
1:A:55:VAL:HG12	1:A:59:PHE:CD2	0.47	2.45	13	3
1:A:36:THR:OG1	1:A:181:TYR:OH	0.47	2.33	14	1
1:A:118:HIS:CD2	1:A:136:SER:CB	0.47	2.98	18	1
1:A:105:ILE:HD13	1:A:106:SER:O	0.47	2.09	19	2
1:A:24:VAL:CG2	1:A:182:ALA:O	0.47	2.63	7	1
1:A:177:THR:HG22	1:A:179:PHE:CE1	0.47	2.44	9	1
1:A:30:VAL:CG1	1:A:60:TRP:CE3	0.47	2.98	8	3
1:A:97:ARG:HB2	1:A:179:PHE:CE1	0.47	2.45	8	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:CYS:O	1:A:55:VAL:N	0.46	2.42	9	2
1:A:180:TYR:O	1:A:181:TYR:C	0.46	2.54	11	4
1:A:58:LEU:HD11	1:A:113:VAL:CG1	0.46	2.40	20	2
1:A:55:VAL:CG1	1:A:59:PHE:CE2	0.46	2.97	11	3
1:A:56:GLU:HG3	1:A:57:ARG:N	0.46	2.26	12	1
1:A:111:LEU:HD21	1:A:138:ILE:HD13	0.46	1.88	15	1
1:A:94:GLU:N	1:A:94:GLU:OE1	0.46	2.48	16	1
1:A:118:HIS:HD1	1:A:119:ASP:N	0.46	2.08	16	1
1:A:44:ILE:HG23	1:A:97:ARG:CG	0.46	2.39	10	2
1:A:88:GLY:CA	1:A:133:GLN:OE1	0.46	2.63	7	1
1:A:59:PHE:CD2	1:A:65:VAL:HG21	0.46	2.45	20	1
1:A:183:GLU:O	1:A:186:HIS:N	0.46	2.49	1	1
1:A:57:ARG:HA	1:A:60:TRP:CZ3	0.46	2.46	15	2
1:A:157:GLN:CD	1:A:169:ILE:HG21	0.46	2.31	10	1
1:A:42:MET:HE1	1:A:66:TYR:CD1	0.46	2.46	20	1
1:A:62:LEU:HD21	1:A:105:ILE:CD1	0.46	2.41	9	1
1:A:47:PHE:CD2	1:A:114:PHE:CZ	0.46	3.03	10	1
1:A:115:TRP:CH2	1:A:153:LEU:HG	0.46	2.45	10	1
1:A:28:HIS:CD2	1:A:188:GLN:NE2	0.46	2.84	11	1
1:A:35:MET:O	1:A:97:ARG:NH2	0.46	2.49	1	1
1:A:140:PRO:O	1:A:176:ALA:CB	0.46	2.59	10	1
1:A:166:ASP:O	1:A:168:HIS:N	0.46	2.48	19	2
1:A:42:MET:SD	1:A:101:ASP:CB	0.46	3.04	18	1
1:A:97:ARG:NH2	1:A:181:TYR:OH	0.46	2.49	1	1
1:A:76:TYR:CD1	1:A:76:TYR:N	0.46	2.83	7	2
1:A:53:TRP:CZ3	1:A:189:TYR:CZ	0.46	3.04	3	1
1:A:57:ARG:NH2	1:A:61:GLN:OE1	0.46	2.49	10	1
1:A:31:ASN:ND2	1:A:66:TYR:O	0.46	2.49	19	2
1:A:39:PRO:HG3	1:A:66:TYR:CE2	0.46	2.46	16	1
1:A:47:PHE:CZ	1:A:55:VAL:CG1	0.46	2.98	19	1
1:A:26:THR:O	1:A:35:MET:N	0.46	2.49	20	3
1:A:28:HIS:N	1:A:33:HIS:O	0.46	2.49	3	3
1:A:70:ALA:O	1:A:182:ALA:N	0.46	2.49	16	7
1:A:187:GLN:O	1:A:188:GLN:C	0.45	2.54	3	3
1:A:72:TYR:OH	1:A:182:ALA:HB1	0.45	2.11	13	2
1:A:46:ILE:HG21	1:A:179:PHE:CZ	0.45	2.45	4	1
1:A:57:ARG:NH1	1:A:61:GLN:OE1	0.45	2.50	11	1
1:A:28:HIS:NE2	1:A:68:THR:O	0.45	2.50	19	5
1:A:159:ALA:O	1:A:162:ALA:HB3	0.45	2.11	3	2
1:A:100:TYR:CD1	1:A:105:ILE:CG2	0.45	2.99	13	2
1:A:52:PHE:CZ	1:A:53:TRP:NE1	0.45	2.85	7	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:190:LEU:HD13	1:A:193:ASN:O	0.45	2.11	12	1
1:A:73:THR:OG1	1:A:74:GLY:N	0.45	2.50	14	2
1:A:27:LEU:N	1:A:27:LEU:CD1	0.45	2.76	4	2
1:A:36:THR:CG2	1:A:37:ASN:N	0.45	2.80	12	3
1:A:49:MET:HG3	1:A:114:PHE:CE1	0.45	2.46	5	1
1:A:81:THR:OG1	1:A:84:GLU:CB	0.45	2.65	9	1
1:A:108:GLU:HA	1:A:111:LEU:HD12	0.45	1.87	9	1
1:A:115:TRP:CE3	1:A:156:PHE:CE2	0.45	3.05	2	2
1:A:56:GLU:OE1	1:A:188:GLN:N	0.45	2.49	3	1
1:A:141:LEU:CD2	1:A:176:ALA:CB	0.45	2.95	3	1
1:A:100:TYR:CZ	1:A:110:LEU:CD1	0.45	3.00	4	2
1:A:53:TRP:CE2	1:A:189:TYR:CD2	0.45	3.05	11	1
1:A:72:TYR:CD2	1:A:85:VAL:HG21	0.45	2.47	15	1
1:A:53:TRP:NE1	1:A:186:HIS:O	0.45	2.50	17	1
1:A:118:HIS:NE2	1:A:136:SER:CB	0.45	2.79	3	1
1:A:52:PHE:CE1	1:A:53:TRP:CD1	0.45	3.04	18	1
1:A:77:THR:O	1:A:92:HIS:NE2	0.45	2.49	14	6
1:A:107:TYR:CE2	1:A:148:ALA:HB2	0.45	2.46	4	1
1:A:115:TRP:HB3	1:A:156:PHE:CE2	0.45	2.47	13	1
1:A:47:PHE:CE1	1:A:138:ILE:HG23	0.45	2.47	15	1
1:A:175:ASN:O	1:A:177:THR:N	0.45	2.50	20	1
1:A:42:MET:SD	1:A:66:TYR:CD2	0.45	3.10	7	1
1:A:44:ILE:CG2	1:A:97:ARG:CG	0.45	2.94	10	1
1:A:71:GLY:CA	1:A:179:PHE:CE2	0.45	3.00	13	1
1:A:118:HIS:NE2	1:A:119:ASP:O	0.45	2.50	19	1
1:A:153:LEU:HD21	1:A:169:ILE:HD11	0.44	1.89	1	1
1:A:101:ASP:OD1	1:A:101:ASP:N	0.44	2.51	8	1
1:A:28:HIS:CD2	1:A:67:SER:HB3	0.44	2.47	2	1
1:A:56:GLU:CD	1:A:70:ALA:HB2	0.44	2.32	2	1
1:A:113:VAL:O	1:A:117:ASN:N	0.44	2.50	3	2
1:A:57:ARG:HA	1:A:60:TRP:CE2	0.44	2.48	12	2
1:A:57:ARG:HE	1:A:190:LEU:HD12	0.44	1.73	19	1
1:A:179:PHE:CZ	1:A:181:TYR:HA	0.44	2.48	16	4
1:A:49:MET:CG	1:A:114:PHE:CE1	0.44	3.00	5	1
1:A:187:GLN:NE2	1:A:188:GLN:NE2	0.44	2.65	11	1
1:A:100:TYR:CD1	1:A:100:TYR:C	0.44	2.90	17	2
1:A:161:LEU:HD23	1:A:168:HIS:CD2	0.44	2.47	12	1
1:A:72:TYR:O	1:A:73:THR:CG2	0.44	2.66	15	1
1:A:58:LEU:CD2	1:A:117:ASN:CG	0.44	2.86	3	1
1:A:69:ALA:HB3	1:A:97:ARG:CG	0.44	2.43	9	1
1:A:153:LEU:HD12	1:A:173:ILE:HD11	0.44	1.90	10	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:65:VAL:HG11	1:A:68:THR:CG2	0.44	2.43	14	1
1:A:72:TYR:C	1:A:73:THR:HG23	0.44	2.33	15	1
1:A:86:SER:O	1:A:133:GLN:NE2	0.44	2.51	5	1
1:A:141:LEU:O	1:A:141:LEU:HD13	0.44	2.12	5	1
1:A:30:VAL:HG21	1:A:60:TRP:CD1	0.44	2.48	9	1
1:A:112:GLN:HA	1:A:115:TRP:CE3	0.44	2.47	12	3
1:A:47:PHE:CD2	1:A:114:PHE:CE1	0.44	3.05	10	1
1:A:47:PHE:HE1	1:A:138:ILE:HG23	0.44	1.72	15	1
1:A:49:MET:O	1:A:50:GLY:C	0.44	2.56	16	1
1:A:59:PHE:CD2	1:A:98:ILE:CG1	0.44	3.01	19	1
1:A:115:TRP:O	1:A:118:HIS:ND1	0.44	2.51	6	1
1:A:168:HIS:NE2	1:A:169:ILE:O	0.44	2.50	9	1
1:A:111:LEU:O	1:A:115:TRP:CG	0.44	2.71	12	1
1:A:118:HIS:ND1	1:A:119:ASP:O	0.44	2.50	16	1
1:A:138:ILE:HG21	1:A:149:ALA:HB1	0.44	1.90	18	1
1:A:28:HIS:NE2	1:A:188:GLN:CD	0.43	2.71	16	1
1:A:35:MET:O	1:A:97:ARG:NH1	0.43	2.51	20	1
1:A:59:PHE:CD2	1:A:65:VAL:CG1	0.43	3.00	20	1
1:A:115:TRP:CE2	1:A:152:SER:HB2	0.43	2.48	4	1
1:A:160:MET:O	1:A:163:ALA:HB3	0.43	2.13	5	3
1:A:142:THR:OG1	1:A:145:GLN:CG	0.43	2.66	11	2
1:A:137:ALA:HB3	1:A:139:TYR:CE1	0.43	2.49	12	1
1:A:45:ALA:HB3	1:A:98:ILE:HG22	0.43	1.88	20	1
1:A:105:ILE:CD1	1:A:109:GLN:HB2	0.43	2.43	20	1
1:A:97:ARG:HB2	1:A:179:PHE:CE2	0.43	2.48	6	1
1:A:145:GLN:O	1:A:149:ALA:N	0.43	2.50	13	1
1:A:45:ALA:O	1:A:98:ILE:N	0.43	2.52	17	4
1:A:51:CYS:O	1:A:55:VAL:HG21	0.43	2.13	15	1
1:A:149:ALA:O	1:A:152:SER:OG	0.43	2.36	17	1
1:A:49:MET:HG3	1:A:114:PHE:CE2	0.43	2.48	2	1
1:A:114:PHE:C	1:A:114:PHE:CD1	0.43	2.91	13	2
1:A:111:LEU:HB3	1:A:115:TRP:CE2	0.43	2.47	18	2
1:A:65:VAL:HG13	1:A:98:ILE:CG2	0.43	2.43	9	1
1:A:88:GLY:CA	1:A:133:GLN:NE2	0.43	2.81	12	1
1:A:42:MET:HG2	1:A:99:VAL:CG1	0.43	2.43	3	1
1:A:55:VAL:CG1	1:A:59:PHE:CZ	0.43	3.02	17	1
1:A:42:MET:CE	1:A:66:TYR:CD1	0.43	3.01	20	1
1:A:71:GLY:HA3	1:A:179:PHE:CE2	0.43	2.49	5	2
1:A:97:ARG:CZ	1:A:179:PHE:CB	0.43	2.96	7	1
1:A:52:PHE:CD2	1:A:53:TRP:N	0.43	2.87	12	1
1:A:105:ILE:HD11	1:A:109:GLN:CD	0.43	2.34	16	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:GLU:OE2	1:A:90:THR:CG2	0.43	2.67	5	1
1:A:58:LEU:HD22	1:A:117:ASN:ND2	0.43	2.28	6	2
1:A:54:GLY:O	1:A:58:LEU:N	0.43	2.51	19	2
1:A:153:LEU:CD1	1:A:173:ILE:HD11	0.43	2.44	10	1
1:A:72:TYR:CZ	1:A:182:ALA:CA	0.43	3.01	13	2
1:A:97:ARG:HD3	1:A:179:PHE:CD1	0.43	2.49	19	1
1:A:110:LEU:O	1:A:114:PHE:CB	0.43	2.67	5	1
1:A:107:TYR:CE1	1:A:108:GLU:HG3	0.43	2.49	5	1
1:A:57:ARG:HA	1:A:60:TRP:CH2	0.43	2.49	15	1
1:A:179:PHE:CE1	1:A:181:TYR:N	0.43	2.87	16	2
1:A:182:ALA:O	1:A:183:GLU:C	0.42	2.58	10	4
1:A:46:ILE:HD12	1:A:176:ALA:HB1	0.42	1.89	3	2
1:A:79:ASN:N	1:A:79:ASN:OD1	0.42	2.52	4	2
1:A:147:ALA:O	1:A:151:ALA:N	0.42	2.52	17	1
1:A:118:HIS:ND1	1:A:118:HIS:C	0.42	2.71	19	1
1:A:31:ASN:CG	1:A:66:TYR:O	0.42	2.58	20	4
1:A:49:MET:SD	1:A:114:PHE:CD1	0.42	3.12	16	2
1:A:97:ARG:CZ	1:A:179:PHE:HB2	0.42	2.44	7	1
1:A:59:PHE:CD1	1:A:65:VAL:HG21	0.42	2.45	19	1
1:A:57:ARG:HA	1:A:60:TRP:CD2	0.42	2.49	14	5
1:A:42:MET:CG	1:A:99:VAL:CG1	0.42	2.97	13	1
1:A:115:TRP:CZ3	1:A:156:PHE:CD2	0.42	3.07	20	1
1:A:152:SER:O	1:A:156:PHE:N	0.42	2.52	2	1
1:A:153:LEU:CD1	1:A:171:THR:CG2	0.42	2.83	10	1
1:A:79:ASN:N	1:A:80:PRO:CD	0.42	2.82	12	1
1:A:112:GLN:HG3	1:A:113:VAL:N	0.42	2.30	19	1
1:A:71:GLY:O	1:A:95:ALA:O	0.42	2.38	9	5
1:A:121:ALA:HB3	1:A:167:ARG:O	0.42	2.15	8	1
1:A:59:PHE:CE1	1:A:114:PHE:CE2	0.42	3.08	10	1
1:A:149:ALA:O	1:A:153:LEU:N	0.42	2.50	10	1
1:A:115:TRP:CE3	1:A:156:PHE:CZ	0.42	3.08	2	2
1:A:182:ALA:O	1:A:187:GLN:NE2	0.42	2.49	2	2
1:A:142:THR:OG1	1:A:145:GLN:CD	0.42	2.58	11	3
1:A:72:TYR:CE2	1:A:94:GLU:OE2	0.42	2.72	8	1
1:A:47:PHE:CB	1:A:114:PHE:CZ	0.42	3.02	10	1
1:A:69:ALA:O	1:A:179:PHE:CE2	0.42	2.73	10	1
1:A:107:TYR:HE2	1:A:148:ALA:HB2	0.42	1.73	4	1
1:A:189:TYR:CD1	1:A:189:TYR:C	0.42	2.92	7	1
1:A:114:PHE:CZ	1:A:138:ILE:CG1	0.42	3.03	9	1
1:A:115:TRP:HB3	1:A:156:PHE:CE1	0.42	2.50	19	1
1:A:52:PHE:CD1	1:A:52:PHE:C	0.42	2.92	8	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:42:MET:HE2	1:A:101:ASP:OD1	0.42	2.15	11	1
1:A:95:ALA:CB	1:A:179:PHE:CZ	0.42	3.02	11	1
1:A:105:ILE:HD13	1:A:106:SER:H	0.42	1.72	11	1
1:A:97:ARG:CZ	1:A:181:TYR:OH	0.42	2.67	12	1
1:A:29:ALA:CB	1:A:188:GLN:HG3	0.42	2.45	14	1
1:A:44:ILE:HG13	1:A:99:VAL:HG13	0.42	1.91	15	1
1:A:78:PRO:O	1:A:79:ASN:CG	0.42	2.58	15	1
1:A:105:ILE:CD1	1:A:109:GLN:HG2	0.42	2.45	16	1
1:A:160:MET:C	1:A:160:MET:SD	0.42	2.98	16	1
1:A:53:TRP:CG	1:A:189:TYR:HB3	0.42	2.50	5	2
1:A:62:LEU:CD2	1:A:105:ILE:CD1	0.42	2.97	15	1
1:A:180:TYR:O	1:A:181:TYR:O	0.41	2.37	15	7
1:A:57:ARG:HG3	1:A:60:TRP:CZ2	0.41	2.50	6	1
1:A:55:VAL:O	1:A:58:LEU:N	0.41	2.53	12	1
1:A:111:LEU:HD23	1:A:111:LEU:C	0.41	2.36	17	1
1:A:58:LEU:HD22	1:A:117:ASN:OD1	0.41	2.15	4	1
1:A:97:ARG:NH1	1:A:181:TYR:OH	0.41	2.53	12	1
1:A:57:ARG:CG	1:A:60:TRP:CZ2	0.41	3.03	14	1
1:A:189:TYR:CZ	1:A:193:ASN:ND2	0.41	2.87	18	1
1:A:24:VAL:HG11	1:A:181:TYR:CD2	0.41	2.51	4	1
1:A:76:TYR:CD1	1:A:76:TYR:O	0.41	2.74	6	1
1:A:60:TRP:CH2	1:A:61:GLN:OE1	0.41	2.74	8	1
1:A:183:GLU:HB2	1:A:186:HIS:CD2	0.41	2.51	15	1
1:A:71:GLY:CA	1:A:180:TYR:O	0.41	2.67	17	1
1:A:42:MET:SD	1:A:101:ASP:OD1	0.41	2.79	18	1
1:A:105:ILE:C	1:A:105:ILE:CD1	0.41	2.86	18	1
1:A:55:VAL:CG2	1:A:56:GLU:N	0.41	2.83	5	1
1:A:169:ILE:HD13	1:A:169:ILE:N	0.41	2.31	10	1
1:A:53:TRP:CE2	1:A:189:TYR:HB3	0.41	2.51	17	1
1:A:85:VAL:HG12	1:A:133:GLN:HG2	0.41	1.90	19	1
1:A:42:MET:SD	1:A:100:TYR:O	0.41	2.79	20	1
1:A:29:ALA:CB	1:A:188:GLN:CD	0.41	2.82	1	1
1:A:41:GLY:O	1:A:101:ASP:OD1	0.41	2.38	11	2
1:A:59:PHE:CE1	1:A:114:PHE:CZ	0.41	3.09	10	1
1:A:56:GLU:OE2	1:A:70:ALA:N	0.41	2.53	13	1
1:A:94:GLU:OE1	1:A:94:GLU:O	0.41	2.39	16	1
1:A:78:PRO:O	1:A:79:ASN:C	0.41	2.58	12	5
1:A:94:GLU:N	1:A:133:GLN:O	0.41	2.54	8	1
1:A:72:TYR:C	1:A:73:THR:CG2	0.41	2.89	15	1
1:A:49:MET:O	1:A:94:GLU:OE1	0.41	2.39	20	1
1:A:33:HIS:O	1:A:34:SER:C	0.41	2.59	8	4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:98:ILE:HG22	1:A:100:TYR:HD2	0.41	1.75	7	1
1:A:45:ALA:HB1	1:A:47:PHE:HE1	0.41	1.76	9	1
1:A:39:PRO:O	1:A:40:ASP:C	0.41	2.59	11	2
1:A:73:THR:HB	1:A:179:PHE:CE1	0.41	2.49	4	1
1:A:31:ASN:OD1	1:A:66:TYR:O	0.41	2.39	10	1
1:A:193:ASN:N	1:A:193:ASN:HD22	0.40	2.14	7	1
1:A:50:GLY:O	1:A:94:GLU:OE1	0.40	2.39	12	1
1:A:60:TRP:C	1:A:62:LEU:N	0.40	2.74	19	1
1:A:153:LEU:HD13	1:A:173:ILE:CD1	0.40	2.47	5	1
1:A:69:ALA:HB3	1:A:97:ARG:HD3	0.40	1.94	12	1
1:A:71:GLY:N	1:A:179:PHE:CE2	0.40	2.90	13	1
1:A:49:MET:O	1:A:94:GLU:OE2	0.40	2.40	4	1
1:A:46:ILE:HG23	1:A:179:PHE:CE1	0.40	2.52	11	1
1:A:42:MET:SD	1:A:100:TYR:C	0.40	2.99	18	2
1:A:112:GLN:OE1	1:A:112:GLN:O	0.40	2.38	19	1
1:A:150:ARG:HG3	1:A:151:ALA:N	0.40	2.31	19	1
1:A:80:PRO:HG3	1:A:92:HIS:CE1	0.40	2.51	5	1
1:A:115:TRP:CH2	1:A:156:PHE:HB2	0.40	2.51	6	1
1:A:187:GLN:NE2	1:A:187:GLN:HA	0.40	2.30	15	1
1:A:84:GLU:HB3	1:A:90:THR:CG2	0.40	2.46	16	1
1:A:190:LEU:O	1:A:193:ASN:O	0.40	2.39	16	1
1:A:53:TRP:CE2	1:A:189:TYR:CB	0.40	3.04	17	1
1:A:111:LEU:HB2	1:A:115:TRP:CZ2	0.40	2.52	18	1
1:A:58:LEU:O	1:A:58:LEU:HD12	0.40	2.16	3	1
1:A:95:ALA:CB	1:A:179:PHE:CE2	0.40	3.05	4	1
1:A:105:ILE:HD11	1:A:109:GLN:HB3	0.40	1.94	4	1
1:A:42:MET:SD	1:A:101:ASP:CG	0.40	2.99	16	1
1:A:49:MET:CE	1:A:117:ASN:HB3	0.40	2.46	17	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	163/211 (77%)	150±2 (92±1%)	11±3 (7±2%)	3±1 (2±1%)	13 57

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
All	All	3260/4220 (77%)	2992 (92%)	217 (7%)	51 (2%)	13 57

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	181	TYR	17
1	A	175	ASN	13
1	A	50	GLY	9
1	A	25	ALA	3
1	A	28	HIS	2
1	A	187	GLN	2
1	A	133	GLN	1
1	A	51	CYS	1
1	A	136	SER	1
1	A	167	ARG	1
1	A	34	SER	1

### 6.3.2 Protein sidechains [\(1\)](#)

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	132/168 (79%)	99±3 (75±3%)	33±3 (25±3%)	2 24
All	All	2640/3360 (79%)	1975 (75%)	665 (25%)	2 24

All 91 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	60	TRP	20
1	A	161	LEU	20
1	A	191	HIS	20
1	A	27	LEU	19
1	A	49	MET	19
1	A	146	ASP	19
1	A	193	ASN	19
1	A	58	LEU	19

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	101	ASP	18
1	A	40	ASP	15
1	A	83	ARG	15
1	A	185	ASP	15
1	A	190	LEU	15
1	A	103	SER	15
1	A	62	LEU	14
1	A	35	MET	13
1	A	155	ARG	13
1	A	179	PHE	13
1	A	22	MET	11
1	A	51	CYS	10
1	A	166	ASP	10
1	A	169	ILE	10
1	A	118	HIS	10
1	A	192	LYS	10
1	A	141	LEU	10
1	A	33	HIS	9
1	A	34	SER	9
1	A	43	GLU	9
1	A	167	ARG	9
1	A	42	MET	9
1	A	172	GLU	9
1	A	59	PHE	9
1	A	112	GLN	8
1	A	150	ARG	8
1	A	87	SER	8
1	A	105	ILE	8
1	A	108	GLU	8
1	A	135	ARG	8
1	A	164	ASP	7
1	A	66	TYR	7
1	A	180	TYR	7
1	A	113	VAL	7
1	A	97	ARG	7
1	A	94	GLU	7
1	A	57	ARG	6
1	A	119	ASP	6
1	A	165	ASP	6
1	A	177	THR	6
1	A	187	GLN	6
1	A	144	GLU	6

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	56	GLU	6
1	A	116	GLU	5
1	A	117	ASN	5
1	A	183	GLU	5
1	A	72	TYR	5
1	A	86	SER	5
1	A	89	ASP	5
1	A	52	PHE	4
1	A	188	GLN	4
1	A	157	GLN	4
1	A	156	PHE	4
1	A	37	ASN	3
1	A	184	ASP	3
1	A	79	ASN	3
1	A	61	GLN	3
1	A	153	LEU	3
1	A	53	TRP	3
1	A	168	HIS	3
1	A	171	THR	2
1	A	142	THR	2
1	A	31	ASN	2
1	A	154	GLU	2
1	A	115	TRP	2
1	A	73	THR	2
1	A	111	LEU	2
1	A	136	SER	2
1	A	77	THR	1
1	A	76	TYR	1
1	A	109	GLN	1
1	A	68	THR	1
1	A	181	TYR	1
1	A	133	GLN	1
1	A	134	TYR	1
1	A	175	ASN	1
1	A	189	TYR	1
1	A	114	PHE	1
1	A	90	THR	1
1	A	160	MET	1
1	A	36	THR	1
1	A	47	PHE	1
1	A	98	ILE	1

### 6.3.3 RNA [\(i\)](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

### 6.5 Carbohydrates [\(i\)](#)

There are no monosaccharides 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 [\(i\)](#)

No chemical shift data were provided