



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 05:33 AM UTC

PDB ID : 1TP4 / pdb_00001tp4
Title : Solution structure of the XPC binding domain of hHR23A protein
Authors : Kamionka, M.; Feigon, J.
Deposited on : 2004-06-15

This is a Full wwPDB NMR Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

A user guide is available at

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/NMRValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

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

MolProbity : 4-5-2 with Phenix2.0
Percentile statistics : 20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
wwPDB-RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker : v1.2
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.49

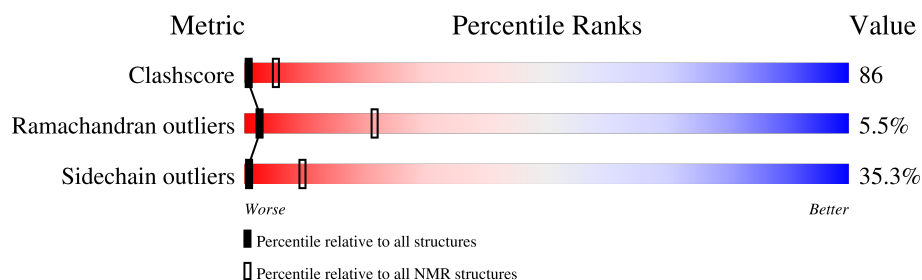
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	229148	14424
Ramachandran outliers	224038	12848
Sidechain outliers	223484	12823

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	97	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 25 models. Model 8 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

The following residues are included in the computation of the global validation metrics.

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:232-A:286 (55)	0.51	8

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 1 clusters and 2 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 24, 25
Single-model clusters	1; 23

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 980 atoms, of which 489 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called UV excision repair protein RAD23 homolog A.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	59	Total	C	H	N	O	S	0
			980	309	489	90	90	2	

There are 2 discrepancies between the modelled and reference sequences:

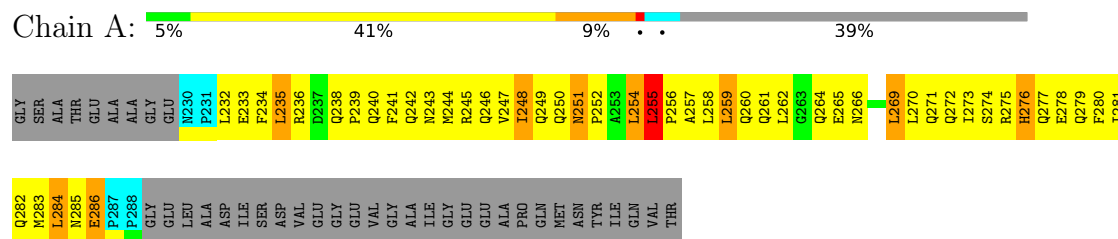
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	221	GLY	-	cloning artifact	UNP P54725
A	222	SER	-	cloning artifact	UNP P54725

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: UV excision repair protein RAD23 homolog A

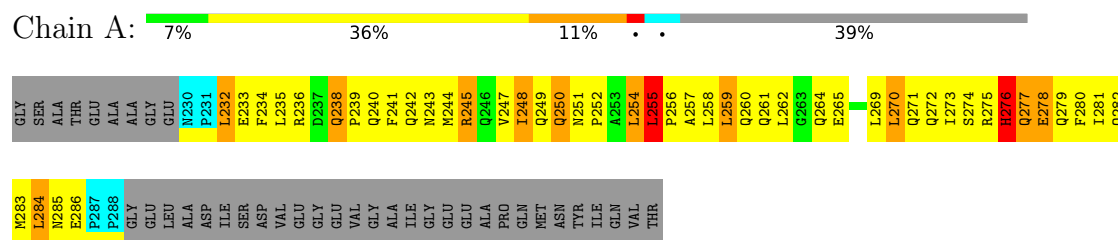


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

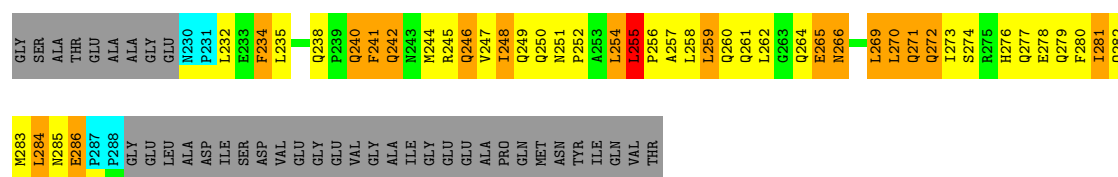
- Molecule 1: UV excision repair protein RAD23 homolog A



4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: UV excision repair protein RAD23 homolog A

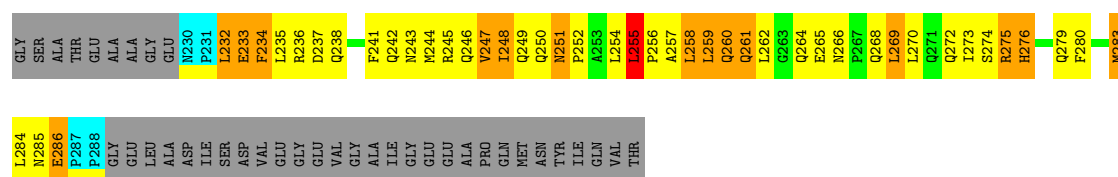




4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: UV excision repair protein RAD23 homolog A

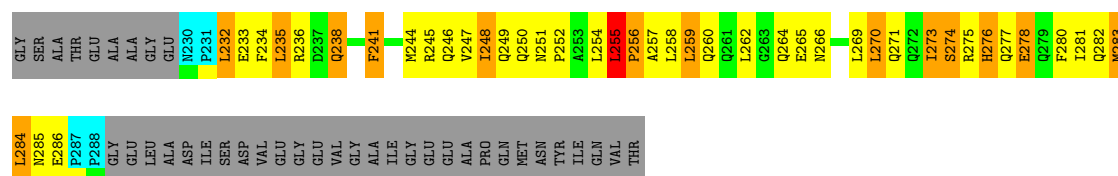
Chain A: 10% 30% 15% . . 39%



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: UV excision repair protein RAD23 homolog A

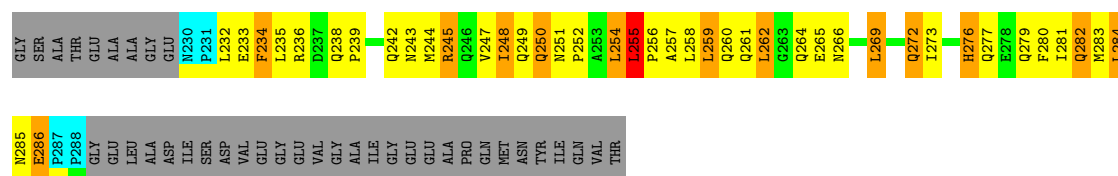
Chain A: 12% 29% 14% . . 39%



4.2.5 Score per residue for model 5

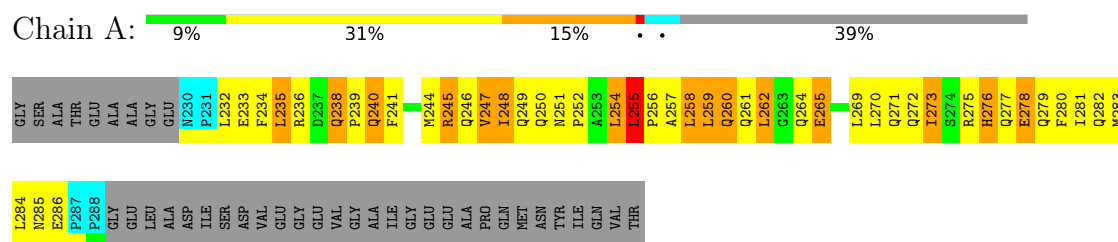
- Molecule 1: UV excision repair protein RAD23 homolog A

Chain A: 13% 29% 13% . . 39%



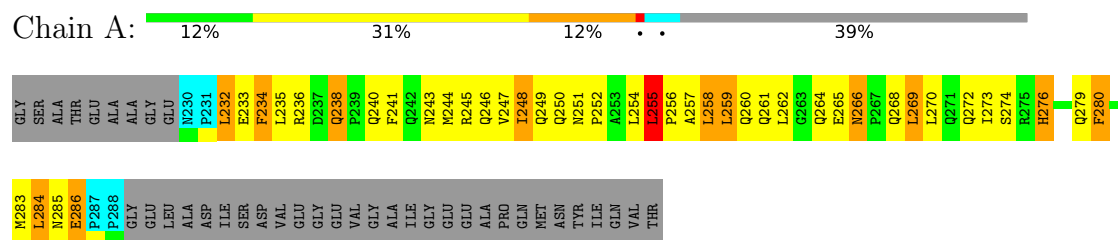
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: UV excision repair protein RAD23 homolog A



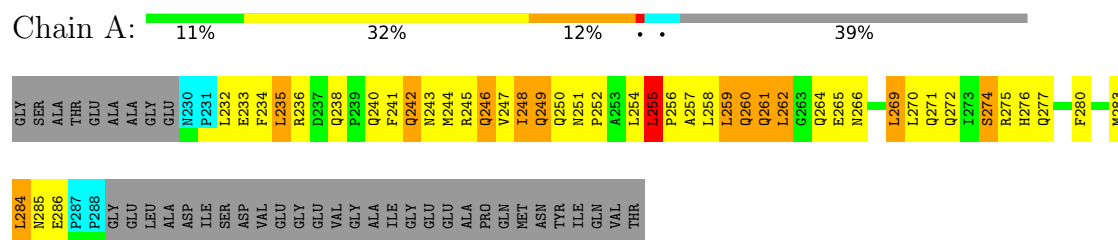
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: UV excision repair protein RAD23 homolog A



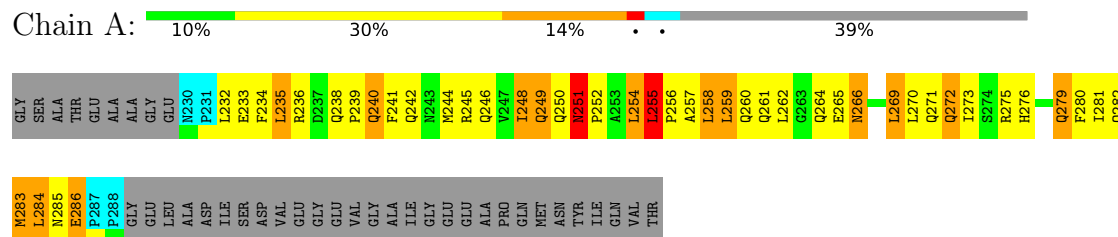
4.2.8 Score per residue for model 8 (medoid)

- Molecule 1: UV excision repair protein RAD23 homolog A



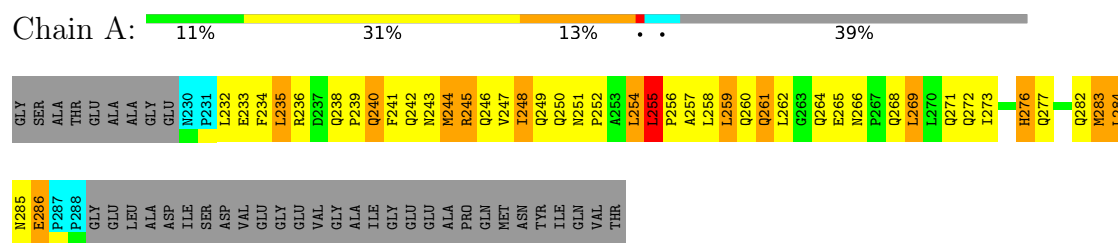
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: UV excision repair protein RAD23 homolog A



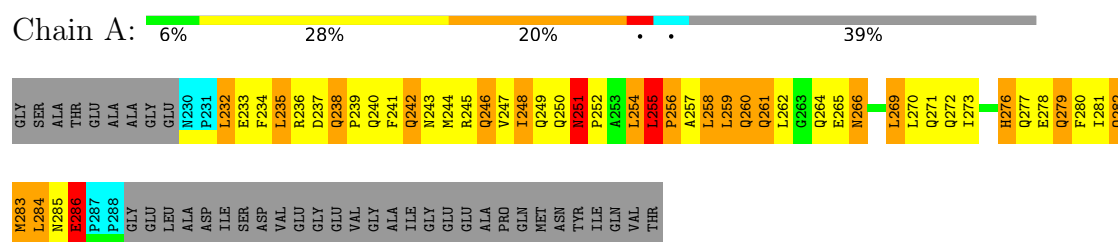
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: UV excision repair protein RAD23 homolog A



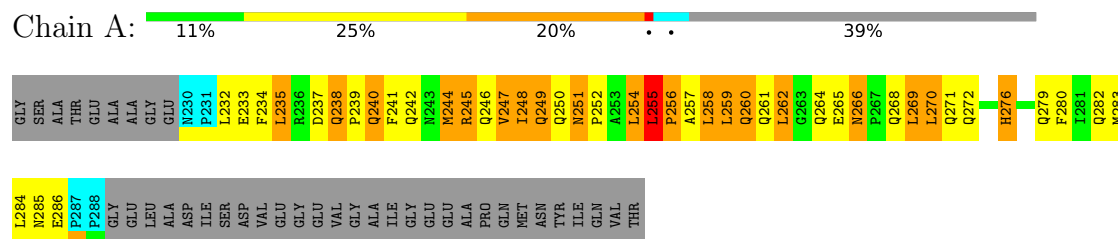
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: UV excision repair protein RAD23 homolog A



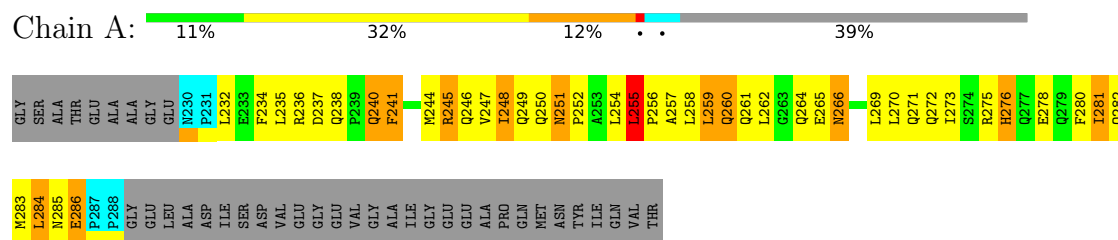
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: UV excision repair protein RAD23 homolog A



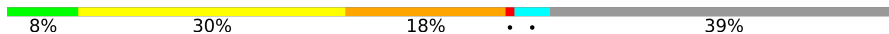
4.2.13 Score per residue for model 13

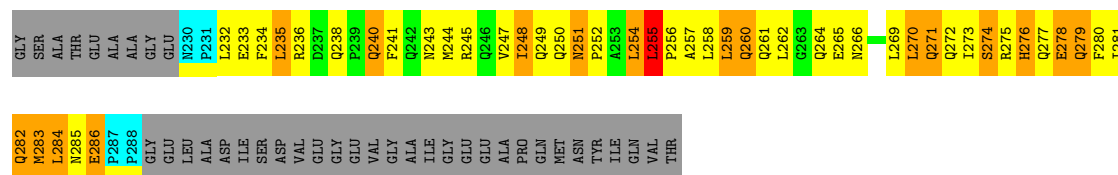
- Molecule 1: UV excision repair protein RAD23 homolog A



4.2.14 Score per residue for model 14

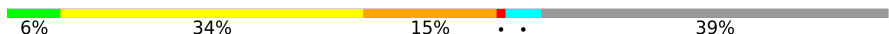
- Molecule 1: UV excision repair protein RAD23 homolog A

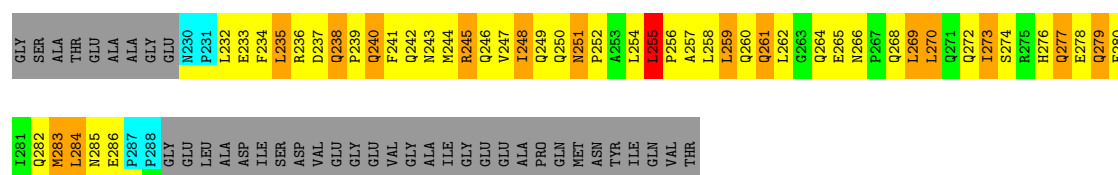
Chain A: 



4.2.15 Score per residue for model 15

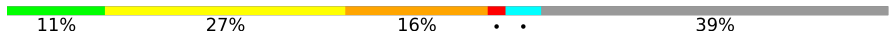
- Molecule 1: UV excision repair protein RAD23 homolog A

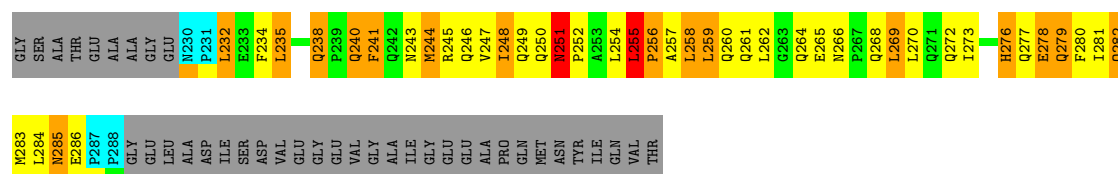
Chain A: 



4.2.16 Score per residue for model 16

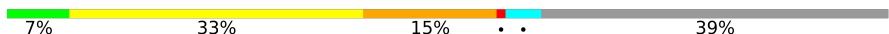
- Molecule 1: UV excision repair protein RAD23 homolog A

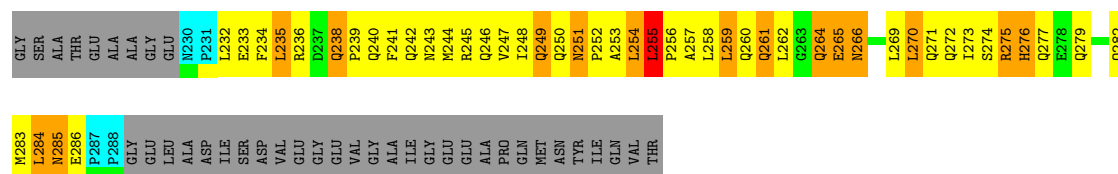
Chain A: 



4.2.17 Score per residue for model 17

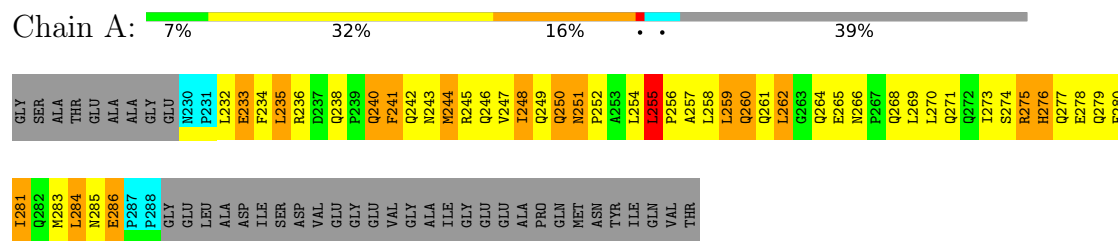
- Molecule 1: UV excision repair protein RAD23 homolog A

Chain A: 



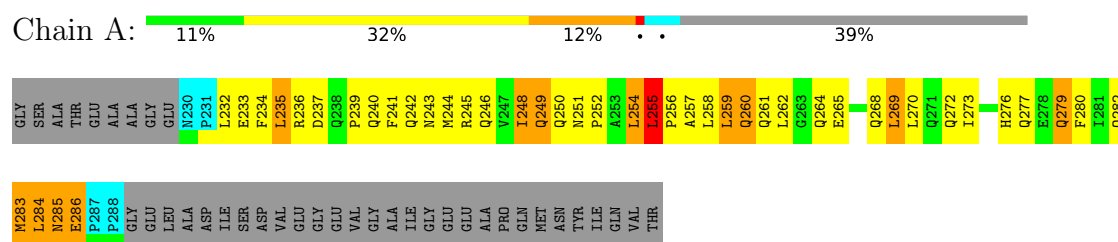
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: UV excision repair protein RAD23 homolog A



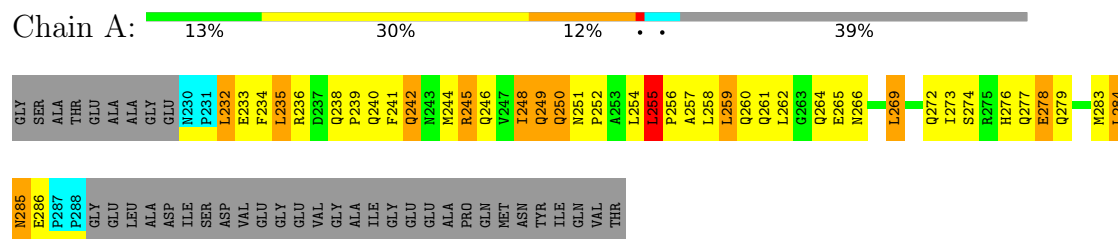
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: UV excision repair protein RAD23 homolog A



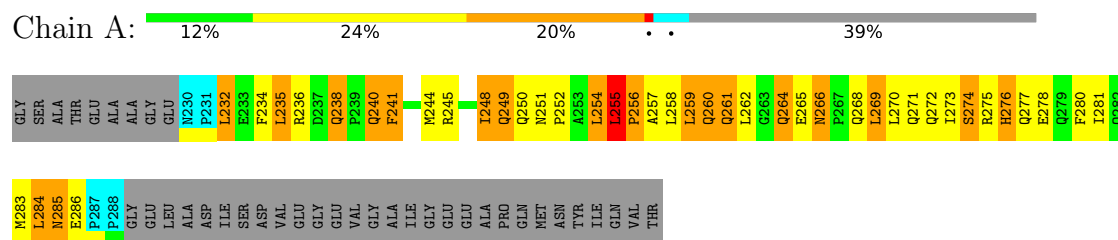
4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: UV excision repair protein RAD23 homolog A



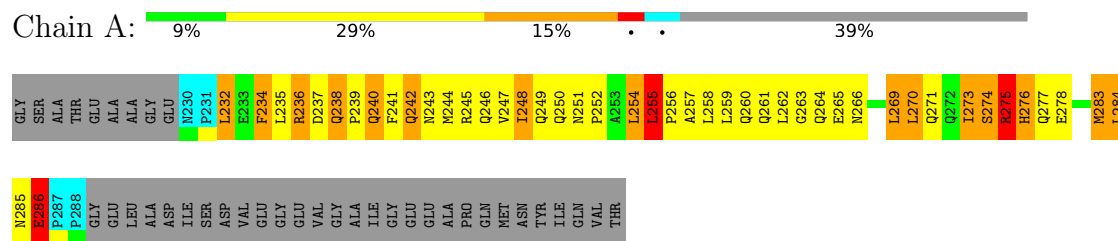
4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: UV excision repair protein RAD23 homolog A



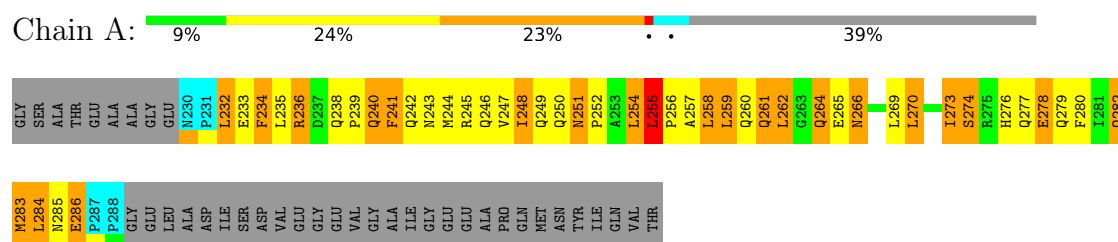
4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: UV excision repair protein RAD23 homolog A



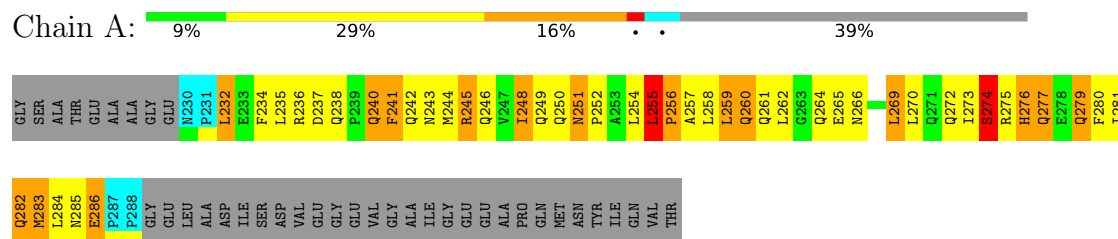
4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: UV excision repair protein RAD23 homolog A



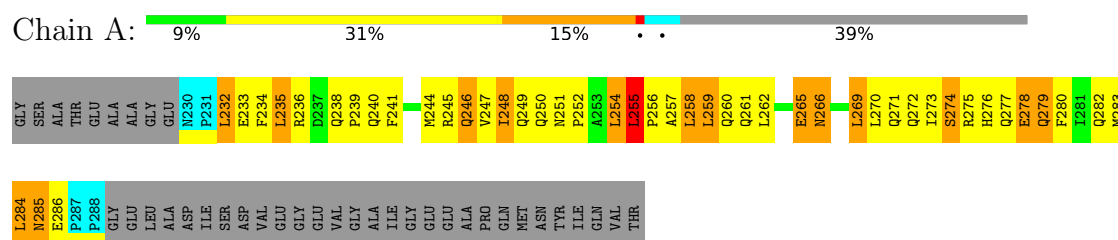
4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: UV excision repair protein RAD23 homolog A



4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: UV excision repair protein RAD23 homolog A



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *distance geometry*.

Of the 100 calculated structures, 25 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	structure solution	3.1
X-PLOR	refinement	3.1

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	462	462	461	79±11
All	All	11550	11550	11525	1977

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 86.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:235:LEU:HD21	1:A:262:LEU:HD23	1.10	1.21	3	2
1:A:234:PHE:CZ	1:A:235:LEU:HD23	1.03	1.89	6	6
1:A:270:LEU:HD13	1:A:271:GLN:N	0.97	1.74	4	1
1:A:269:LEU:HD23	1:A:273:ILE:HD11	0.96	1.33	2	8
1:A:259:LEU:HD13	1:A:260:GLN:N	0.94	1.77	17	7
1:A:262:LEU:O	1:A:269:LEU:HD23	0.93	1.62	6	11
1:A:256:PRO:HG2	1:A:284:LEU:HD11	0.92	1.41	23	4
1:A:244:MET:HE1	1:A:280:PHE:CE1	0.92	2.00	15	2
1:A:244:MET:HE1	1:A:280:PHE:CZ	0.92	2.00	23	8
1:A:256:PRO:HB3	1:A:284:LEU:HD21	0.91	1.41	23	14
1:A:256:PRO:HG3	1:A:284:LEU:HD11	0.90	1.44	22	18
1:A:234:PHE:CD2	1:A:235:LEU:HD12	0.90	2.02	22	5
1:A:262:LEU:O	1:A:269:LEU:HD22	0.88	1.68	22	13
1:A:256:PRO:CG	1:A:284:LEU:HD11	0.88	1.99	8	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:280:PHE:O	1:A:283:MET:HE3	0.88	1.68	2	2
1:A:245:ARG:HD2	1:A:284:LEU:HD22	0.87	1.47	25	1
1:A:254:LEU:O	1:A:255:LEU:HD23	0.85	1.70	20	3
1:A:259:LEU:HD22	1:A:259:LEU:O	0.85	1.70	11	22
1:A:284:LEU:HD13	1:A:284:LEU:O	0.85	1.70	16	10
1:A:235:LEU:HD21	1:A:262:LEU:CD2	0.85	2.01	5	2
1:A:232:LEU:HD21	1:A:235:LEU:HD21	0.84	1.47	23	1
1:A:235:LEU:HD21	1:A:262:LEU:CD1	0.84	2.01	2	2
1:A:255:LEU:HD22	1:A:256:PRO:HD2	0.84	1.49	21	8
1:A:235:LEU:HD12	1:A:280:PHE:CE2	0.82	2.08	9	1
1:A:243:ASN:O	1:A:247:VAL:HG13	0.81	1.74	3	2
1:A:235:LEU:HD13	1:A:240:GLN:HG2	0.81	1.50	6	1
1:A:235:LEU:HD21	1:A:262:LEU:HD13	0.81	1.49	22	3
1:A:232:LEU:HD12	1:A:276:HIS:CB	0.81	2.05	18	4
1:A:235:LEU:HD12	1:A:236:ARG:N	0.80	1.92	23	1
1:A:255:LEU:HD13	1:A:256:PRO:N	0.80	1.91	25	6
1:A:273:ILE:HG23	1:A:276:HIS:CE1	0.79	2.12	4	1
1:A:259:LEU:HD23	1:A:259:LEU:O	0.79	1.75	22	1
1:A:247:VAL:HG22	1:A:254:LEU:HD21	0.79	1.52	12	2
1:A:256:PRO:CB	1:A:284:LEU:HD11	0.79	2.07	17	1
1:A:256:PRO:CB	1:A:284:LEU:HD21	0.78	2.08	6	5
1:A:255:LEU:HD22	1:A:256:PRO:CD	0.78	2.08	4	4
1:A:232:LEU:HD21	1:A:273:ILE:HG12	0.78	1.56	6	2
1:A:255:LEU:C	1:A:255:LEU:HD13	0.77	2.05	21	5
1:A:255:LEU:HD13	1:A:255:LEU:O	0.75	1.81	16	2
1:A:255:LEU:HD12	1:A:256:PRO:HD2	0.74	1.56	22	13
1:A:270:LEU:HD22	1:A:270:LEU:C	0.73	2.08	4	1
1:A:259:LEU:C	1:A:259:LEU:HD13	0.73	2.08	7	16
1:A:258:LEU:O	1:A:262:LEU:HD13	0.73	1.83	24	5
1:A:277:GLN:OE1	1:A:281:ILE:HD11	0.73	1.84	5	2
1:A:266:ASN:HB2	1:A:269:LEU:HD13	0.73	1.60	7	9
1:A:235:LEU:HD21	1:A:262:LEU:HD12	0.72	1.58	2	1
1:A:235:LEU:HD13	1:A:240:GLN:HB3	0.71	1.60	14	3
1:A:270:LEU:C	1:A:270:LEU:HD12	0.71	2.11	15	2
1:A:259:LEU:HD22	1:A:259:LEU:C	0.71	2.11	6	10
1:A:232:LEU:HD12	1:A:276:HIS:HB2	0.71	1.62	18	4
1:A:247:VAL:CG2	1:A:254:LEU:HD21	0.71	2.15	12	1
1:A:262:LEU:CD1	1:A:269:LEU:HD21	0.71	2.15	23	1
1:A:269:LEU:C	1:A:273:ILE:HD12	0.70	2.11	5	2
1:A:259:LEU:HD13	1:A:259:LEU:C	0.70	2.09	17	4
1:A:232:LEU:HD23	1:A:273:ILE:HG12	0.70	1.62	1	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:244:MET:HE3	1:A:258:LEU:HB2	0.70	1.63	8	5
1:A:269:LEU:HD23	1:A:270:LEU:N	0.69	2.01	22	1
1:A:248:ILE:HG21	1:A:255:LEU:C	0.69	2.13	17	16
1:A:235:LEU:HD13	1:A:240:GLN:CG	0.69	2.18	6	4
1:A:234:PHE:CE2	1:A:235:LEU:HD12	0.69	2.23	3	5
1:A:276:HIS:CD2	1:A:280:PHE:CG	0.68	2.81	4	1
1:A:244:MET:HE2	1:A:258:LEU:HB3	0.67	1.66	16	2
1:A:255:LEU:HD13	1:A:255:LEU:C	0.67	2.14	6	3
1:A:270:LEU:HD23	1:A:271:GLN:N	0.67	2.04	22	1
1:A:234:PHE:CE2	1:A:235:LEU:HD23	0.66	2.25	16	5
1:A:244:MET:HB3	1:A:248:ILE:HD12	0.66	1.66	17	1
1:A:234:PHE:HD2	1:A:235:LEU:HD12	0.66	1.51	22	1
1:A:232:LEU:HD23	1:A:273:ILE:HG13	0.66	1.66	4	1
1:A:259:LEU:HD23	1:A:259:LEU:C	0.66	2.16	22	1
1:A:232:LEU:HD21	1:A:273:ILE:HG23	0.66	1.66	14	3
1:A:256:PRO:HB3	1:A:284:LEU:HD11	0.66	1.68	17	1
1:A:232:LEU:HD13	1:A:235:LEU:HB3	0.65	1.67	20	2
1:A:234:PHE:CE2	1:A:235:LEU:HD13	0.65	2.26	21	1
1:A:234:PHE:CE2	1:A:235:LEU:CD1	0.65	2.80	5	5
1:A:269:LEU:C	1:A:269:LEU:HD12	0.64	2.17	15	1
1:A:269:LEU:HD12	1:A:269:LEU:O	0.64	1.91	15	1
1:A:270:LEU:HD22	1:A:270:LEU:O	0.64	1.93	4	1
1:A:234:PHE:CG	1:A:235:LEU:N	0.64	2.65	23	6
1:A:244:MET:HE1	1:A:280:PHE:HZ	0.64	1.53	5	3
1:A:232:LEU:HD11	1:A:276:HIS:CD2	0.64	2.26	4	1
1:A:270:LEU:HD13	1:A:271:GLN:H	0.64	1.52	4	1
1:A:232:LEU:CD1	1:A:276:HIS:CG	0.64	2.80	23	1
1:A:236:ARG:CD	1:A:276:HIS:CG	0.64	2.80	22	3
1:A:232:LEU:HD12	1:A:273:ILE:HA	0.64	1.69	22	1
1:A:262:LEU:HD12	1:A:269:LEU:HD21	0.63	1.69	23	1
1:A:273:ILE:HG22	1:A:276:HIS:CD2	0.63	2.29	1	1
1:A:276:HIS:CD2	1:A:280:PHE:CD1	0.63	2.87	4	1
1:A:245:ARG:CD	1:A:284:LEU:HD22	0.63	2.23	25	1
1:A:269:LEU:HD21	1:A:273:ILE:HD12	0.62	1.71	22	1
1:A:254:LEU:N	1:A:254:LEU:HD23	0.62	2.10	1	3
1:A:232:LEU:HD11	1:A:276:HIS:HD2	0.62	1.52	4	1
1:A:276:HIS:CD2	1:A:279:GLN:CB	0.62	2.83	24	4
1:A:236:ARG:CZ	1:A:276:HIS:CD2	0.61	2.82	10	2
1:A:235:LEU:HD13	1:A:235:LEU:O	0.61	1.94	24	2
1:A:232:LEU:HD12	1:A:236:ARG:HG3	0.61	1.72	4	3
1:A:235:LEU:HD13	1:A:240:GLN:CB	0.61	2.25	17	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:236:ARG:NE	1:A:276:HIS:CD2	0.61	2.69	10	3
1:A:232:LEU:CD2	1:A:235:LEU:HD21	0.61	2.24	23	1
1:A:262:LEU:C	1:A:269:LEU:HD22	0.61	2.21	3	5
1:A:235:LEU:CD2	1:A:262:LEU:HD13	0.60	2.24	22	2
1:A:234:PHE:CD2	1:A:235:LEU:HD13	0.60	2.31	21	1
1:A:234:PHE:C	1:A:234:PHE:CD1	0.59	2.80	5	6
1:A:255:LEU:HD22	1:A:256:PRO:N	0.59	2.12	4	2
1:A:234:PHE:CD1	1:A:235:LEU:HD23	0.59	2.32	13	1
1:A:255:LEU:HD12	1:A:256:PRO:CD	0.59	2.27	17	7
1:A:245:ARG:O	1:A:249:GLN:CB	0.59	2.50	17	25
1:A:255:LEU:C	1:A:255:LEU:CD1	0.59	2.75	24	8
1:A:255:LEU:O	1:A:257:ALA:N	0.59	2.35	4	10
1:A:284:LEU:HD13	1:A:284:LEU:C	0.59	2.23	16	3
1:A:276:HIS:CD2	1:A:279:GLN:CD	0.59	2.81	14	1
1:A:269:LEU:O	1:A:273:ILE:HD12	0.59	1.98	3	2
1:A:232:LEU:CD2	1:A:235:LEU:HD22	0.58	2.28	3	4
1:A:235:LEU:HD12	1:A:280:PHE:CZ	0.58	2.32	9	1
1:A:278:GLU:HA	1:A:281:ILE:HD11	0.58	1.75	13	1
1:A:246:GLN:CG	1:A:247:VAL:N	0.58	2.66	11	3
1:A:235:LEU:HD21	1:A:240:GLN:CD	0.58	2.22	24	1
1:A:280:PHE:CD1	1:A:280:PHE:C	0.58	2.81	3	4
1:A:245:ARG:CZ	1:A:283:MET:CG	0.58	2.81	14	1
1:A:262:LEU:CD1	1:A:269:LEU:CD2	0.58	2.81	23	1
1:A:238:GLN:O	1:A:241:PHE:CE2	0.58	2.57	18	15
1:A:236:ARG:O	1:A:241:PHE:CD1	0.58	2.56	1	1
1:A:235:LEU:CD2	1:A:262:LEU:CD1	0.58	2.82	2	1
1:A:241:PHE:HB2	1:A:283:MET:HE2	0.58	1.75	1	1
1:A:238:GLN:O	1:A:241:PHE:CZ	0.58	2.57	9	7
1:A:236:ARG:HD2	1:A:276:HIS:CG	0.58	2.34	22	4
1:A:273:ILE:CG2	1:A:276:HIS:CD2	0.58	2.87	1	1
1:A:239:PRO:O	1:A:243:ASN:N	0.57	2.35	1	3
1:A:245:ARG:NE	1:A:284:LEU:O	0.57	2.37	1	2
1:A:236:ARG:O	1:A:241:PHE:CE1	0.57	2.57	1	1
1:A:248:ILE:HD13	1:A:256:PRO:HA	0.57	1.75	17	1
1:A:254:LEU:N	1:A:254:LEU:CD2	0.57	2.67	23	4
1:A:257:ALA:O	1:A:260:GLN:N	0.57	2.38	17	21
1:A:251:ASN:O	1:A:254:LEU:HD23	0.57	2.00	11	1
1:A:248:ILE:CG2	1:A:255:LEU:C	0.57	2.78	14	16
1:A:276:HIS:NE2	1:A:280:PHE:CG	0.57	2.73	4	1
1:A:241:PHE:CD1	1:A:283:MET:SD	0.57	2.98	15	2
1:A:248:ILE:HG21	1:A:256:PRO:N	0.56	2.15	9	19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:247:VAL:HG22	1:A:254:LEU:CD2	0.56	2.30	6	1
1:A:262:LEU:HD12	1:A:269:LEU:CD2	0.56	2.30	23	1
1:A:235:LEU:HD11	1:A:262:LEU:CD2	0.56	2.31	22	1
1:A:250:GLN:O	1:A:252:PRO:CD	0.56	2.53	17	25
1:A:276:HIS:CD2	1:A:279:GLN:HB3	0.56	2.36	24	3
1:A:235:LEU:HD21	1:A:240:GLN:CG	0.56	2.30	24	1
1:A:235:LEU:HD21	1:A:262:LEU:HD21	0.56	1.78	5	1
1:A:248:ILE:HD12	1:A:256:PRO:HB3	0.56	1.77	12	6
1:A:232:LEU:HD11	1:A:273:ILE:HG23	0.56	1.78	19	3
1:A:248:ILE:HD13	1:A:256:PRO:HB3	0.56	1.77	14	1
1:A:244:MET:C	1:A:248:ILE:CD1	0.55	2.80	9	18
1:A:232:LEU:HD12	1:A:276:HIS:HB3	0.55	1.74	18	1
1:A:236:ARG:HG2	1:A:276:HIS:CD2	0.55	2.36	21	5
1:A:276:HIS:CD2	1:A:280:PHE:CB	0.55	2.89	4	1
1:A:235:LEU:CD2	1:A:262:LEU:HD21	0.55	2.32	18	1
1:A:235:LEU:CD2	1:A:262:LEU:HD12	0.55	2.30	2	1
1:A:238:GLN:O	1:A:241:PHE:CE1	0.55	2.59	11	5
1:A:245:ARG:CG	1:A:246:GLN:N	0.55	2.70	17	1
1:A:254:LEU:HD22	1:A:254:LEU:N	0.54	2.17	20	2
1:A:235:LEU:CD1	1:A:240:GLN:CD	0.54	2.80	6	1
1:A:232:LEU:HD13	1:A:276:HIS:CG	0.54	2.37	23	1
1:A:276:HIS:CD2	1:A:280:PHE:HB2	0.54	2.37	4	1
1:A:259:LEU:C	1:A:259:LEU:CD2	0.54	2.80	22	1
1:A:259:LEU:C	1:A:259:LEU:CD1	0.54	2.81	14	17
1:A:276:HIS:O	1:A:277:GLN:CB	0.54	2.55	1	1
1:A:234:PHE:CZ	1:A:235:LEU:CD2	0.54	2.81	6	3
1:A:262:LEU:O	1:A:269:LEU:CD2	0.54	2.56	11	22
1:A:244:MET:O	1:A:248:ILE:CG1	0.54	2.55	14	2
1:A:241:PHE:CG	1:A:242:GLN:N	0.54	2.76	1	1
1:A:276:HIS:O	1:A:280:PHE:CB	0.54	2.56	4	2
1:A:245:ARG:O	1:A:249:GLN:CG	0.54	2.56	8	1
1:A:241:PHE:CD2	1:A:242:GLN:N	0.54	2.76	1	2
1:A:236:ARG:CG	1:A:276:HIS:CD2	0.54	2.91	21	1
1:A:235:LEU:HD22	1:A:240:GLN:CB	0.53	2.32	1	1
1:A:259:LEU:O	1:A:259:LEU:CD2	0.53	2.57	24	3
1:A:254:LEU:HD13	1:A:254:LEU:N	0.53	2.18	17	1
1:A:269:LEU:O	1:A:273:ILE:CG1	0.53	2.57	5	6
1:A:275:ARG:C	1:A:275:ARG:NE	0.53	2.67	18	1
1:A:244:MET:O	1:A:248:ILE:CD1	0.53	2.57	3	15
1:A:277:GLN:O	1:A:281:ILE:CG1	0.53	2.56	1	4
1:A:260:GLN:O	1:A:264:GLN:CG	0.53	2.57	6	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:278:GLU:O	1:A:282:GLN:CG	0.53	2.57	14	1
1:A:235:LEU:CD2	1:A:262:LEU:HD23	0.53	2.15	3	2
1:A:243:ASN:O	1:A:246:GLN:CG	0.53	2.57	3	1
1:A:283:MET:O	1:A:286:GLU:N	0.53	2.41	3	16
1:A:250:GLN:C	1:A:252:PRO:HD3	0.53	2.29	12	25
1:A:248:ILE:O	1:A:252:PRO:CA	0.53	2.57	11	10
1:A:270:LEU:HD13	1:A:270:LEU:C	0.53	2.28	4	1
1:A:266:ASN:CB	1:A:269:LEU:HD13	0.53	2.31	7	2
1:A:240:GLN:CD	1:A:241:PHE:N	0.53	2.67	2	2
1:A:245:ARG:CD	1:A:283:MET:O	0.53	2.57	10	5
1:A:273:ILE:HG22	1:A:276:HIS:CG	0.53	2.39	1	1
1:A:232:LEU:HD23	1:A:273:ILE:CG1	0.53	2.33	3	2
1:A:276:HIS:O	1:A:280:PHE:N	0.53	2.42	23	6
1:A:245:ARG:NH1	1:A:284:LEU:O	0.53	2.42	18	1
1:A:242:GLN:O	1:A:246:GLN:CG	0.53	2.57	22	3
1:A:265:GLU:OE1	1:A:265:GLU:CA	0.52	2.57	2	7
1:A:247:VAL:CG2	1:A:248:ILE:N	0.52	2.72	14	6
1:A:276:HIS:CD2	1:A:276:HIS:N	0.52	2.78	22	1
1:A:249:GLN:OE1	1:A:250:GLN:CG	0.52	2.57	19	1
1:A:244:MET:C	1:A:248:ILE:HD11	0.52	2.29	6	7
1:A:276:HIS:CD2	1:A:279:GLN:HB2	0.52	2.39	25	3
1:A:235:LEU:HD12	1:A:280:PHE:CE1	0.52	2.39	13	1
1:A:232:LEU:HD13	1:A:235:LEU:CB	0.52	2.34	20	1
1:A:276:HIS:ND1	1:A:279:GLN:CB	0.52	2.72	12	2
1:A:235:LEU:HD13	1:A:240:GLN:HG3	0.52	1.82	17	1
1:A:247:VAL:O	1:A:251:ASN:CB	0.52	2.57	18	1
1:A:244:MET:SD	1:A:258:LEU:CB	0.52	2.98	1	7
1:A:244:MET:HG2	1:A:258:LEU:CG	0.52	2.35	24	18
1:A:244:MET:HG2	1:A:258:LEU:HD23	0.52	1.82	13	7
1:A:245:ARG:CZ	1:A:284:LEU:O	0.52	2.58	18	1
1:A:235:LEU:HD22	1:A:240:GLN:CG	0.52	2.35	1	1
1:A:235:LEU:HD13	1:A:240:GLN:HB2	0.52	1.82	8	2
1:A:243:ASN:O	1:A:247:VAL:HG22	0.52	2.05	17	1
1:A:285:ASN:O	1:A:286:GLU:C	0.52	2.53	21	25
1:A:244:MET:CB	1:A:258:LEU:HD23	0.52	2.34	3	2
1:A:270:LEU:C	1:A:270:LEU:CD1	0.52	2.83	12	3
1:A:247:VAL:HG23	1:A:248:ILE:N	0.51	2.21	16	11
1:A:232:LEU:HD12	1:A:276:HIS:CG	0.51	2.41	23	1
1:A:234:PHE:CE2	1:A:235:LEU:HD11	0.51	2.40	2	2
1:A:235:LEU:HD22	1:A:240:GLN:OE1	0.51	2.05	25	1
1:A:266:ASN:O	1:A:269:LEU:N	0.51	2.44	4	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:269:LEU:CD2	1:A:273:ILE:HD11	0.51	2.23	2	1
1:A:233:GLU:HG3	1:A:234:PHE:N	0.51	2.21	14	1
1:A:275:ARG:NE	1:A:275:ARG:CA	0.51	2.72	22	1
1:A:232:LEU:O	1:A:235:LEU:N	0.51	2.43	5	7
1:A:276:HIS:ND1	1:A:276:HIS:C	0.51	2.68	4	1
1:A:245:ARG:NH2	1:A:280:PHE:O	0.51	2.42	25	2
1:A:232:LEU:HD23	1:A:273:ILE:HA	0.51	1.82	21	1
1:A:244:MET:HB3	1:A:258:LEU:HD23	0.51	1.82	3	2
1:A:234:PHE:CD1	1:A:235:LEU:N	0.51	2.79	23	4
1:A:273:ILE:O	1:A:276:HIS:ND1	0.51	2.43	1	1
1:A:259:LEU:HD23	1:A:280:PHE:CE2	0.51	2.41	6	2
1:A:236:ARG:CD	1:A:276:HIS:CD2	0.51	2.94	18	2
1:A:277:GLN:O	1:A:281:ILE:HD12	0.51	2.05	11	1
1:A:276:HIS:NE2	1:A:279:GLN:OE1	0.51	2.43	16	1
1:A:244:MET:O	1:A:248:ILE:HG12	0.51	2.05	14	19
1:A:250:GLN:O	1:A:252:PRO:HD3	0.51	2.06	19	25
1:A:276:HIS:CG	1:A:277:GLN:N	0.51	2.76	1	1
1:A:286:GLU:CG	1:A:286:GLU:O	0.51	2.58	18	1
1:A:269:LEU:O	1:A:273:ILE:CD1	0.51	2.59	3	2
1:A:259:LEU:O	1:A:259:LEU:HD22	0.51	2.05	24	2
1:A:269:LEU:HD21	1:A:273:ILE:CD1	0.51	2.35	22	1
1:A:241:PHE:CD1	1:A:242:GLN:N	0.51	2.79	8	3
1:A:246:GLN:OE1	1:A:246:GLN:CA	0.51	2.59	16	1
1:A:251:ASN:N	1:A:251:ASN:OD1	0.51	2.43	16	1
1:A:241:PHE:O	1:A:245:ARG:CG	0.51	2.59	23	1
1:A:259:LEU:HB2	1:A:280:PHE:CZ	0.50	2.41	1	3
1:A:255:LEU:HD13	1:A:256:PRO:CD	0.50	2.36	25	3
1:A:254:LEU:H	1:A:254:LEU:HD22	0.50	1.65	17	1
1:A:232:LEU:HD22	1:A:235:LEU:HD22	0.50	1.82	3	1
1:A:259:LEU:HD13	1:A:260:GLN:CA	0.50	2.37	17	3
1:A:249:GLN:OE1	1:A:249:GLN:CA	0.50	2.59	12	3
1:A:258:LEU:HD22	1:A:258:LEU:H	0.50	1.66	15	8
1:A:276:HIS:CE1	1:A:279:GLN:OE1	0.50	2.65	3	1
1:A:245:ARG:O	1:A:249:GLN:HB2	0.50	2.07	9	24
1:A:276:HIS:CG	1:A:280:PHE:HB2	0.50	2.41	4	1
1:A:259:LEU:CD1	1:A:260:GLN:N	0.50	2.66	17	1
1:A:245:ARG:CG	1:A:283:MET:O	0.50	2.60	15	3
1:A:273:ILE:O	1:A:276:HIS:N	0.50	2.45	4	1
1:A:242:GLN:O	1:A:243:ASN:C	0.50	2.54	3	5
1:A:262:LEU:C	1:A:269:LEU:HD23	0.50	2.30	1	2
1:A:241:PHE:CB	1:A:283:MET:SD	0.50	3.00	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:276:HIS:O	1:A:277:GLN:C	0.50	2.55	23	8
1:A:238:GLN:O	1:A:241:PHE:CD1	0.50	2.65	1	1
1:A:278:GLU:O	1:A:282:GLN:CB	0.50	2.60	4	4
1:A:245:ARG:CZ	1:A:283:MET:HG3	0.50	2.36	14	1
1:A:236:ARG:HG2	1:A:276:HIS:CG	0.50	2.42	25	1
1:A:248:ILE:HG21	1:A:256:PRO:CD	0.49	2.37	21	4
1:A:240:GLN:NE2	1:A:244:MET:SD	0.49	2.85	11	2
1:A:273:ILE:O	1:A:275:ARG:N	0.49	2.46	22	4
1:A:245:ARG:NE	1:A:286:GLU:HG2	0.49	2.23	12	2
1:A:245:ARG:CZ	1:A:283:MET:HG2	0.49	2.37	14	2
1:A:286:GLU:OE1	1:A:286:GLU:CA	0.49	2.59	4	2
1:A:232:LEU:CD2	1:A:235:LEU:HB2	0.49	2.37	22	2
1:A:236:ARG:HD2	1:A:276:HIS:CD2	0.49	2.42	18	1
1:A:232:LEU:HD13	1:A:276:HIS:HB3	0.49	1.84	19	1
1:A:240:GLN:N	1:A:240:GLN:OE1	0.49	2.44	22	1
1:A:241:PHE:CD1	1:A:283:MET:HG3	0.49	2.42	20	1
1:A:241:PHE:O	1:A:245:ARG:CD	0.49	2.60	23	2
1:A:244:MET:HE2	1:A:258:LEU:HG	0.49	1.84	20	2
1:A:235:LEU:HD13	1:A:240:GLN:CD	0.49	2.32	6	1
1:A:235:LEU:HD21	1:A:262:LEU:HG	0.49	1.83	7	1
1:A:245:ARG:NE	1:A:283:MET:CG	0.49	2.75	14	1
1:A:232:LEU:HD23	1:A:235:LEU:HB3	0.49	1.84	24	2
1:A:232:LEU:HB3	1:A:276:HIS:CG	0.49	2.42	20	1
1:A:265:GLU:CD	1:A:265:GLU:C	0.49	2.81	20	22
1:A:279:GLN:O	1:A:282:GLN:N	0.49	2.45	19	5
1:A:248:ILE:O	1:A:252:PRO:N	0.49	2.46	3	4
1:A:276:HIS:CE1	1:A:279:GLN:HG2	0.49	2.43	7	3
1:A:276:HIS:NE2	1:A:279:GLN:CB	0.49	2.76	9	1
1:A:233:GLU:CG	1:A:234:PHE:N	0.49	2.75	14	1
1:A:239:PRO:O	1:A:242:GLN:CG	0.49	2.61	15	1
1:A:240:GLN:OE1	1:A:244:MET:HE3	0.49	2.07	20	1
1:A:240:GLN:OE1	1:A:241:PHE:N	0.49	2.45	2	1
1:A:249:GLN:CD	1:A:249:GLN:C	0.49	2.81	20	2
1:A:246:GLN:CD	1:A:246:GLN:C	0.49	2.81	16	1
1:A:273:ILE:O	1:A:277:GLN:N	0.49	2.46	20	1
1:A:232:LEU:HD23	1:A:262:LEU:CD1	0.49	2.38	23	1
1:A:246:GLN:HG3	1:A:247:VAL:N	0.49	2.21	8	3
1:A:269:LEU:CD2	1:A:273:ILE:HD12	0.49	2.37	22	1
1:A:246:GLN:NE2	1:A:250:GLN:OE1	0.49	2.46	25	1
1:A:261:GLN:O	1:A:265:GLU:CB	0.49	2.61	17	22
1:A:235:LEU:HD23	1:A:280:PHE:CZ	0.49	2.43	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:259:LEU:CD2	1:A:259:LEU:C	0.49	2.85	24	3
1:A:254:LEU:HD13	1:A:254:LEU:H	0.49	1.66	17	1
1:A:235:LEU:HD11	1:A:262:LEU:HD22	0.49	1.84	22	1
1:A:280:PHE:CD1	1:A:283:MET:CE	0.48	2.96	1	2
1:A:232:LEU:CD2	1:A:273:ILE:HG12	0.48	2.38	3	4
1:A:238:GLN:CG	1:A:239:PRO:HD2	0.48	2.38	23	4
1:A:244:MET:O	1:A:245:ARG:C	0.48	2.56	14	6
1:A:286:GLU:C	1:A:286:GLU:CD	0.48	2.80	18	6
1:A:276:HIS:ND1	1:A:279:GLN:HB2	0.48	2.23	12	1
1:A:266:ASN:HB2	1:A:269:LEU:CB	0.48	2.38	22	1
1:A:255:LEU:HG	1:A:256:PRO:N	0.48	2.23	18	2
1:A:276:HIS:ND1	1:A:279:GLN:HB3	0.48	2.23	14	4
1:A:245:ARG:CD	1:A:286:GLU:HB3	0.48	2.38	13	3
1:A:275:ARG:HB3	1:A:276:HIS:CD2	0.48	2.43	22	1
1:A:238:GLN:CB	1:A:239:PRO:HD2	0.48	2.39	23	1
1:A:245:ARG:N	1:A:245:ARG:HD3	0.48	2.23	25	1
1:A:232:LEU:HD12	1:A:236:ARG:CD	0.48	2.38	3	1
1:A:255:LEU:CB	1:A:256:PRO:CD	0.48	2.91	3	6
1:A:268:GLN:O	1:A:272:GLN:NE2	0.48	2.44	19	1
1:A:273:ILE:O	1:A:274:SER:C	0.48	2.57	22	6
1:A:245:ARG:HG3	1:A:246:GLN:N	0.48	2.21	17	1
1:A:232:LEU:HD21	1:A:235:LEU:HD22	0.48	1.84	22	1
1:A:238:GLN:CB	1:A:239:PRO:CD	0.48	2.91	23	1
1:A:276:HIS:CE1	1:A:279:GLN:CB	0.48	2.96	12	2
1:A:232:LEU:CD1	1:A:276:HIS:HB2	0.48	2.39	23	2
1:A:245:ARG:NH1	1:A:283:MET:HG3	0.48	2.23	4	1
1:A:238:GLN:NE2	1:A:240:GLN:OE1	0.48	2.46	9	1
1:A:248:ILE:HD13	1:A:256:PRO:CB	0.48	2.38	14	1
1:A:245:ARG:O	1:A:249:GLN:N	0.48	2.46	1	1
1:A:250:GLN:O	1:A:252:PRO:HD2	0.48	2.09	17	1
1:A:277:GLN:OE1	1:A:281:ILE:CD1	0.48	2.59	5	1
1:A:285:ASN:O	1:A:286:GLU:O	0.48	2.32	22	3
1:A:245:ARG:NH1	1:A:246:GLN:HG2	0.48	2.23	24	1
1:A:245:ARG:HG2	1:A:284:LEU:C	0.48	2.34	1	1
1:A:254:LEU:O	1:A:255:LEU:O	0.48	2.32	9	25
1:A:232:LEU:O	1:A:233:GLU:C	0.48	2.57	4	16
1:A:260:GLN:O	1:A:264:GLN:CB	0.48	2.62	13	12
1:A:234:PHE:CE1	1:A:235:LEU:HD23	0.48	2.44	13	4
1:A:285:ASN:OD1	1:A:285:ASN:N	0.48	2.47	20	1
1:A:242:GLN:OE1	1:A:242:GLN:C	0.47	2.57	8	1
1:A:257:ALA:O	1:A:258:LEU:C	0.47	2.57	6	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:236:ARG:HD2	1:A:276:HIS:CB	0.47	2.39	20	1
1:A:264:GLN:O	1:A:265:GLU:C	0.47	2.57	3	18
1:A:245:ARG:NH1	1:A:283:MET:SD	0.47	2.88	9	1
1:A:271:GLN:OE1	1:A:271:GLN:CA	0.47	2.62	12	1
1:A:245:ARG:HD2	1:A:283:MET:CB	0.47	2.39	23	1
1:A:277:GLN:O	1:A:278:GLU:C	0.47	2.57	6	4
1:A:286:GLU:CD	1:A:286:GLU:O	0.47	2.57	15	1
1:A:249:GLN:CD	1:A:286:GLU:OE2	0.47	2.58	1	1
1:A:236:ARG:HG2	1:A:276:HIS:CE1	0.47	2.44	18	3
1:A:269:LEU:O	1:A:272:GLN:N	0.47	2.47	15	1
1:A:232:LEU:HB3	1:A:276:HIS:CE1	0.47	2.44	23	2
1:A:244:MET:CG	1:A:258:LEU:HG	0.47	2.40	1	4
1:A:279:GLN:O	1:A:280:PHE:C	0.47	2.57	2	8
1:A:285:ASN:OD1	1:A:285:ASN:C	0.47	2.58	2	1
1:A:243:ASN:O	1:A:246:GLN:HG2	0.47	2.10	3	1
1:A:248:ILE:HG21	1:A:256:PRO:HD3	0.47	1.87	24	3
1:A:248:ILE:HD12	1:A:256:PRO:CB	0.47	2.39	21	8
1:A:245:ARG:O	1:A:286:GLU:OE1	0.47	2.33	14	1
1:A:286:GLU:N	1:A:286:GLU:OE1	0.47	2.48	19	1
1:A:235:LEU:HD13	1:A:235:LEU:C	0.47	2.35	24	2
1:A:259:LEU:CD1	1:A:260:GLN:OE1	0.47	2.62	1	1
1:A:234:PHE:CZ	1:A:235:LEU:CD1	0.47	2.98	5	2
1:A:242:GLN:OE1	1:A:243:ASN:N	0.47	2.47	10	1
1:A:244:MET:HE1	1:A:280:PHE:CE2	0.47	2.44	24	2
1:A:232:LEU:HB3	1:A:276:HIS:CB	0.47	2.40	20	1
1:A:246:GLN:C	1:A:246:GLN:OE1	0.47	2.57	12	1
1:A:245:ARG:HD2	1:A:286:GLU:CB	0.47	2.40	13	2
1:A:281:ILE:N	1:A:281:ILE:HD13	0.47	2.24	2	1
1:A:286:GLU:C	1:A:286:GLU:OE1	0.47	2.57	2	2
1:A:234:PHE:CD1	1:A:234:PHE:C	0.47	2.92	23	1
1:A:242:GLN:HG3	1:A:245:ARG:NH1	0.47	2.25	24	1
1:A:270:LEU:O	1:A:271:GLN:C	0.46	2.58	21	8
1:A:232:LEU:O	1:A:236:ARG:N	0.46	2.43	19	6
1:A:270:LEU:C	1:A:270:LEU:CD2	0.46	2.79	4	1
1:A:269:LEU:O	1:A:270:LEU:C	0.46	2.58	1	8
1:A:278:GLU:O	1:A:282:GLN:HB2	0.46	2.10	4	7
1:A:244:MET:HG2	1:A:258:LEU:CB	0.46	2.41	21	15
1:A:245:ARG:N	1:A:248:ILE:HD11	0.46	2.25	20	7
1:A:277:GLN:CD	1:A:277:GLN:C	0.46	2.84	25	1
1:A:261:GLN:O	1:A:265:GLU:HB3	0.46	2.11	18	16
1:A:285:ASN:O	1:A:285:ASN:OD1	0.46	2.33	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:232:LEU:CD2	1:A:235:LEU:HB3	0.46	2.41	15	3
1:A:264:GLN:CG	1:A:265:GLU:N	0.46	2.78	10	1
1:A:232:LEU:CD1	1:A:273:ILE:HA	0.46	2.40	22	1
1:A:262:LEU:HD22	1:A:269:LEU:HD21	0.46	1.88	4	1
1:A:245:ARG:HG3	1:A:283:MET:O	0.46	2.10	15	5
1:A:286:GLU:OE1	1:A:286:GLU:O	0.46	2.34	9	2
1:A:276:HIS:O	1:A:279:GLN:N	0.46	2.49	25	2
1:A:232:LEU:HD23	1:A:235:LEU:HB2	0.46	1.87	5	2
1:A:277:GLN:O	1:A:281:ILE:CD1	0.46	2.63	11	1
1:A:255:LEU:HG	1:A:256:PRO:CD	0.46	2.40	18	1
1:A:232:LEU:CD1	1:A:235:LEU:HB3	0.46	2.41	20	1
1:A:236:ARG:HG2	1:A:276:HIS:ND1	0.46	2.26	11	5
1:A:273:ILE:C	1:A:275:ARG:N	0.46	2.73	25	6
1:A:276:HIS:NE2	1:A:279:GLN:HB3	0.46	2.26	25	2
1:A:240:GLN:O	1:A:244:MET:SD	0.46	2.74	12	13
1:A:245:ARG:O	1:A:245:ARG:HD2	0.46	2.10	1	1
1:A:284:LEU:C	1:A:284:LEU:CD1	0.46	2.89	16	1
1:A:249:GLN:OE1	1:A:250:GLN:HG2	0.46	2.11	19	1
1:A:265:GLU:OE2	1:A:265:GLU:C	0.46	2.58	24	1
1:A:240:GLN:CG	1:A:244:MET:SD	0.46	3.03	21	1
1:A:244:MET:HE3	1:A:258:LEU:CB	0.46	2.41	9	2
1:A:235:LEU:HD21	1:A:240:GLN:HG2	0.46	1.86	10	1
1:A:244:MET:HB3	1:A:248:ILE:CD1	0.46	2.40	17	1
1:A:232:LEU:CD1	1:A:236:ARG:HG3	0.46	2.41	3	6
1:A:240:GLN:OE1	1:A:241:PHE:CA	0.46	2.63	2	1
1:A:255:LEU:HB2	1:A:256:PRO:CD	0.46	2.40	23	2
1:A:285:ASN:O	1:A:285:ASN:ND2	0.46	2.49	11	1
1:A:245:ARG:HD3	1:A:286:GLU:CB	0.46	2.40	18	1
1:A:263:GLY:HA2	1:A:269:LEU:CD2	0.46	2.41	22	1
1:A:244:MET:O	1:A:246:GLN:N	0.45	2.50	6	5
1:A:264:GLN:CD	1:A:264:GLN:C	0.45	2.84	18	1
1:A:255:LEU:CD1	1:A:256:PRO:HD2	0.45	2.39	7	4
1:A:278:GLU:HG3	1:A:279:GLN:N	0.45	2.26	2	1
1:A:246:GLN:OE1	1:A:246:GLN:O	0.45	2.34	12	1
1:A:248:ILE:CD1	1:A:256:PRO:HB3	0.45	2.41	14	1
1:A:244:MET:CE	1:A:280:PHE:CE1	0.45	2.89	15	1
1:A:235:LEU:HD11	1:A:280:PHE:CE1	0.45	2.46	24	1
1:A:245:ARG:CG	1:A:286:GLU:HB2	0.45	2.42	12	2
1:A:262:LEU:HB3	1:A:269:LEU:CD2	0.45	2.41	24	4
1:A:280:PHE:O	1:A:283:MET:CE	0.45	2.57	1	2
1:A:248:ILE:CG2	1:A:256:PRO:HD3	0.45	2.42	16	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:265:GLU:C	1:A:265:GLU:OE2	0.45	2.59	1	2
1:A:265:GLU:C	1:A:265:GLU:CD	0.45	2.81	7	2
1:A:277:GLN:HG3	1:A:281:ILE:HD11	0.45	1.88	21	1
1:A:283:MET:O	1:A:284:LEU:C	0.45	2.59	3	11
1:A:281:ILE:O	1:A:285:ASN:OD1	0.45	2.35	11	1
1:A:232:LEU:HG	1:A:273:ILE:CG1	0.45	2.42	22	3
1:A:235:LEU:CD1	1:A:240:GLN:CB	0.45	2.95	17	2
1:A:260:GLN:O	1:A:264:GLN:HB3	0.45	2.12	20	14
1:A:232:LEU:HD23	1:A:235:LEU:HD22	0.45	1.88	2	2
1:A:245:ARG:HD2	1:A:283:MET:O	0.45	2.11	22	10
1:A:245:ARG:CZ	1:A:286:GLU:OE1	0.45	2.64	17	2
1:A:232:LEU:CD1	1:A:276:HIS:CB	0.45	2.95	23	2
1:A:244:MET:O	1:A:248:ILE:HG13	0.45	2.11	17	1
1:A:234:PHE:O	1:A:235:LEU:C	0.45	2.60	22	1
1:A:260:GLN:O	1:A:264:GLN:HG3	0.45	2.12	3	4
1:A:239:PRO:O	1:A:243:ASN:CB	0.45	2.65	5	1
1:A:235:LEU:CD1	1:A:240:GLN:HB2	0.45	2.42	8	1
1:A:249:GLN:CD	1:A:286:GLU:O	0.45	2.60	8	1
1:A:245:ARG:CD	1:A:286:GLU:HG2	0.45	2.41	12	1
1:A:245:ARG:NH2	1:A:249:GLN:HA	0.45	2.26	18	1
1:A:238:GLN:HG2	1:A:239:PRO:CD	0.45	2.41	23	1
1:A:241:PHE:O	1:A:283:MET:SD	0.45	2.74	1	1
1:A:276:HIS:O	1:A:277:GLN:HB2	0.45	2.12	1	1
1:A:242:GLN:O	1:A:246:GLN:HG3	0.45	2.12	22	2
1:A:232:LEU:CD2	1:A:273:ILE:CG1	0.45	2.94	4	1
1:A:283:MET:C	1:A:285:ASN:N	0.45	2.75	12	6
1:A:242:GLN:O	1:A:246:GLN:HG2	0.45	2.11	9	1
1:A:244:MET:C	1:A:246:GLN:N	0.45	2.75	12	6
1:A:277:GLN:HG2	1:A:281:ILE:CD1	0.45	2.42	11	1
1:A:234:PHE:CD2	1:A:235:LEU:HD23	0.45	2.46	16	1
1:A:254:LEU:N	1:A:254:LEU:HD22	0.45	2.26	17	2
1:A:275:ARG:CZ	1:A:275:ARG:HB2	0.45	2.42	18	1
1:A:232:LEU:CD2	1:A:262:LEU:HG	0.45	2.42	23	1
1:A:245:ARG:NH2	1:A:280:PHE:CD1	0.45	2.84	25	1
1:A:245:ARG:HA	1:A:248:ILE:HD11	0.44	1.87	12	11
1:A:232:LEU:HB2	1:A:236:ARG:CD	0.44	2.42	18	1
1:A:245:ARG:NE	1:A:283:MET:O	0.44	2.49	23	1
1:A:245:ARG:CD	1:A:284:LEU:HA	0.44	2.42	25	1
1:A:232:LEU:HD12	1:A:236:ARG:CG	0.44	2.42	4	1
1:A:232:LEU:CD1	1:A:276:HIS:CD2	0.44	3.00	4	1
1:A:249:GLN:HG3	1:A:250:GLN:N	0.44	2.27	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:234:PHE:CE2	1:A:235:LEU:CD2	0.44	3.00	6	1
1:A:241:PHE:O	1:A:245:ARG:HB3	0.44	2.11	13	3
1:A:278:GLU:O	1:A:282:GLN:HG3	0.44	2.12	14	1
1:A:239:PRO:O	1:A:242:GLN:HG3	0.44	2.11	15	1
1:A:245:ARG:CG	1:A:284:LEU:HA	0.44	2.41	16	1
1:A:234:PHE:O	1:A:237:ASP:N	0.44	2.49	22	1
1:A:235:LEU:CA	1:A:240:GLN:HG2	0.44	2.42	2	1
1:A:277:GLN:O	1:A:281:ILE:HB	0.44	2.13	4	2
1:A:254:LEU:O	1:A:255:LEU:CD2	0.44	2.57	20	2
1:A:232:LEU:HD13	1:A:276:HIS:CB	0.44	2.42	24	2
1:A:245:ARG:NE	1:A:283:MET:HB3	0.44	2.26	23	1
1:A:259:LEU:HB2	1:A:280:PHE:CE1	0.44	2.48	25	1
1:A:235:LEU:CD2	1:A:262:LEU:CD2	0.44	2.86	5	2
1:A:245:ARG:HD3	1:A:286:GLU:CG	0.44	2.43	18	1
1:A:275:ARG:HG3	1:A:276:HIS:N	0.44	2.28	18	1
1:A:235:LEU:CB	1:A:240:GLN:HG2	0.44	2.43	23	1
1:A:248:ILE:HG22	1:A:255:LEU:C	0.44	2.38	23	1
1:A:273:ILE:CG2	1:A:276:HIS:CE1	0.44	2.94	4	1
1:A:277:GLN:O	1:A:281:ILE:HG13	0.44	2.13	18	2
1:A:232:LEU:HD12	1:A:273:ILE:O	0.44	2.13	15	1
1:A:248:ILE:HD12	1:A:256:PRO:CG	0.44	2.42	21	1
1:A:232:LEU:CD2	1:A:235:LEU:CD2	0.44	2.96	23	1
1:A:277:GLN:CG	1:A:278:GLU:N	0.44	2.80	4	1
1:A:248:ILE:HG21	1:A:256:PRO:CA	0.44	2.43	16	4
1:A:241:PHE:HB2	1:A:283:MET:CB	0.44	2.43	24	2
1:A:256:PRO:CG	1:A:284:LEU:HD13	0.44	2.43	14	1
1:A:244:MET:HG2	1:A:258:LEU:CD2	0.44	2.43	5	3
1:A:241:PHE:O	1:A:245:ARG:HD3	0.44	2.12	14	3
1:A:241:PHE:HA	1:A:245:ARG:NH1	0.44	2.28	16	1
1:A:243:ASN:O	1:A:246:GLN:N	0.44	2.50	18	1
1:A:241:PHE:C	1:A:245:ARG:HD3	0.44	2.38	23	1
1:A:234:PHE:O	1:A:238:GLN:N	0.44	2.42	22	1
1:A:261:GLN:HA	1:A:264:GLN:CG	0.43	2.43	2	2
1:A:266:ASN:CB	1:A:269:LEU:HB2	0.43	2.43	7	13
1:A:239:PRO:O	1:A:243:ASN:HB2	0.43	2.12	5	2
1:A:244:MET:SD	1:A:258:LEU:HB2	0.43	2.53	24	6
1:A:240:GLN:HG3	1:A:244:MET:SD	0.43	2.53	21	1
1:A:245:ARG:O	1:A:245:ARG:HD3	0.43	2.12	15	1
1:A:245:ARG:CD	1:A:286:GLU:HB2	0.43	2.43	10	2
1:A:262:LEU:CA	1:A:269:LEU:HD22	0.43	2.44	3	1
1:A:242:GLN:HA	1:A:245:ARG:NE	0.43	2.28	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:276:HIS:O	1:A:280:PHE:HB3	0.43	2.12	4	2
1:A:242:GLN:HG3	1:A:243:ASN:N	0.43	2.28	15	2
1:A:242:GLN:HG3	1:A:245:ARG:NE	0.43	2.28	11	1
1:A:276:HIS:CG	1:A:279:GLN:HB2	0.43	2.49	12	2
1:A:248:ILE:O	1:A:252:PRO:CB	0.43	2.67	25	4
1:A:245:ARG:NE	1:A:286:GLU:CG	0.43	2.82	12	1
1:A:237:ASP:OD1	1:A:237:ASP:C	0.43	2.60	13	1
1:A:251:ASN:O	1:A:253:ALA:N	0.43	2.47	17	1
1:A:232:LEU:CD2	1:A:273:ILE:HA	0.43	2.44	18	1
1:A:248:ILE:CB	1:A:256:PRO:HD3	0.43	2.44	4	1
1:A:245:ARG:NE	1:A:245:ARG:HA	0.43	2.28	5	1
1:A:232:LEU:HB3	1:A:235:LEU:CB	0.43	2.44	14	1
1:A:244:MET:CE	1:A:258:LEU:HB3	0.43	2.41	16	1
1:A:245:ARG:NH1	1:A:249:GLN:HA	0.43	2.28	1	1
1:A:269:LEU:O	1:A:273:ILE:HG13	0.43	2.14	24	6
1:A:260:GLN:O	1:A:264:GLN:HG2	0.43	2.13	9	1
1:A:249:GLN:OE1	1:A:249:GLN:C	0.43	2.62	12	1
1:A:276:HIS:CE1	1:A:279:GLN:HB3	0.43	2.48	17	1
1:A:245:ARG:CZ	1:A:283:MET:HB3	0.43	2.44	23	1
1:A:273:ILE:O	1:A:276:HIS:CG	0.43	2.72	1	1
1:A:272:GLN:C	1:A:274:SER:N	0.43	2.76	14	3
1:A:235:LEU:CD1	1:A:280:PHE:CZ	0.43	3.01	9	1
1:A:241:PHE:HB2	1:A:283:MET:CG	0.43	2.44	15	1
1:A:286:GLU:O	1:A:286:GLU:HG3	0.43	2.14	18	1
1:A:265:GLU:OE1	1:A:265:GLU:C	0.43	2.61	25	2
1:A:244:MET:CG	1:A:258:LEU:CG	0.43	2.96	5	1
1:A:245:ARG:CG	1:A:286:GLU:HB3	0.43	2.44	13	2
1:A:276:HIS:CD2	1:A:279:GLN:OE1	0.43	2.72	16	1
1:A:249:GLN:HB2	1:A:286:GLU:OE2	0.42	2.14	1	1
1:A:232:LEU:HB3	1:A:276:HIS:ND1	0.42	2.29	22	2
1:A:275:ARG:NE	1:A:275:ARG:HA	0.42	2.29	22	1
1:A:244:MET:HG2	1:A:258:LEU:HG	0.42	1.90	25	1
1:A:269:LEU:HD11	1:A:273:ILE:HG13	0.42	1.91	15	1
1:A:235:LEU:O	1:A:240:GLN:HG3	0.42	2.13	2	1
1:A:286:GLU:OE1	1:A:286:GLU:HA	0.42	2.14	4	1
1:A:243:ASN:C	1:A:246:GLN:HG2	0.42	2.39	3	1
1:A:258:LEU:N	1:A:258:LEU:CD2	0.42	2.83	10	1
1:A:277:GLN:HG3	1:A:281:ILE:CD1	0.42	2.45	21	1
1:A:277:GLN:NE2	1:A:278:GLU:CA	0.42	2.82	25	1
1:A:244:MET:SD	1:A:258:LEU:HB3	0.42	2.55	7	3
1:A:238:GLN:NE2	1:A:239:PRO:HD2	0.42	2.30	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:250:GLN:C	1:A:252:PRO:CD	0.42	2.93	17	1
1:A:248:ILE:O	1:A:252:PRO:HB3	0.42	2.14	25	5
1:A:260:GLN:O	1:A:264:GLN:HB2	0.42	2.15	23	7
1:A:240:GLN:C	1:A:244:MET:SD	0.42	3.02	12	2
1:A:286:GLU:O	1:A:286:GLU:CD	0.42	2.62	18	1
1:A:245:ARG:CZ	1:A:248:ILE:HG13	0.42	2.45	5	1
1:A:234:PHE:O	1:A:238:GLN:HG3	0.42	2.15	22	1
1:A:232:LEU:HG	1:A:273:ILE:CD1	0.42	2.44	23	1
1:A:239:PRO:O	1:A:240:GLN:C	0.42	2.61	1	8
1:A:283:MET:SD	1:A:284:LEU:N	0.42	2.93	2	2
1:A:244:MET:O	1:A:247:VAL:HG22	0.42	2.15	3	2
1:A:242:GLN:HG2	1:A:245:ARG:NH2	0.42	2.30	12	1
1:A:277:GLN:O	1:A:281:ILE:CB	0.42	2.68	1	2
1:A:269:LEU:HG	1:A:273:ILE:CD1	0.42	2.44	18	1
1:A:238:GLN:HB2	1:A:240:GLN:OE1	0.42	2.15	25	1
1:A:254:LEU:C	1:A:255:LEU:O	0.41	2.63	3	6
1:A:244:MET:HE1	1:A:280:PHE:HE1	0.41	1.75	6	1
1:A:272:GLN:OE1	1:A:272:GLN:N	0.41	2.52	7	1
1:A:245:ARG:CB	1:A:284:LEU:HA	0.41	2.45	22	3
1:A:245:ARG:HB3	1:A:286:GLU:CB	0.41	2.44	16	1
1:A:245:ARG:HB3	1:A:286:GLU:CG	0.41	2.44	23	2
1:A:241:PHE:HA	1:A:245:ARG:CZ	0.41	2.45	25	1
1:A:235:LEU:HD11	1:A:244:MET:HE1	0.41	1.91	16	1
1:A:270:LEU:O	1:A:273:ILE:HB	0.41	2.15	22	1
1:A:279:GLN:O	1:A:282:GLN:HB3	0.41	2.15	25	1
1:A:245:ARG:NH2	1:A:248:ILE:HG13	0.41	2.30	5	1
1:A:279:GLN:O	1:A:282:GLN:CB	0.41	2.68	15	3
1:A:276:HIS:O	1:A:280:PHE:HB2	0.41	2.15	9	2
1:A:236:ARG:HD3	1:A:276:HIS:ND1	0.41	2.30	20	1
1:A:262:LEU:HB3	1:A:269:LEU:HD23	0.41	1.92	24	1
1:A:245:ARG:NH1	1:A:283:MET:CG	0.41	2.83	4	1
1:A:242:GLN:HA	1:A:245:ARG:CD	0.41	2.45	2	1
1:A:244:MET:O	1:A:248:ILE:HD13	0.41	2.16	15	2
1:A:234:PHE:O	1:A:238:GLN:CG	0.41	2.69	13	1
1:A:235:LEU:HD23	1:A:262:LEU:HD21	0.41	1.93	18	1
1:A:232:LEU:HB3	1:A:236:ARG:CD	0.41	2.46	8	1
1:A:249:GLN:CD	1:A:250:GLN:HG3	0.41	2.40	9	1
1:A:281:ILE:O	1:A:285:ASN:ND2	0.41	2.54	9	1
1:A:245:ARG:CD	1:A:286:GLU:CG	0.41	2.99	12	1
1:A:268:GLN:O	1:A:269:LEU:C	0.41	2.64	16	1
1:A:235:LEU:CD1	1:A:240:GLN:HG3	0.41	2.45	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:240:GLN:OE1	1:A:240:GLN:CA	0.41	2.67	22	1
1:A:271:GLN:O	1:A:274:SER:HB2	0.41	2.15	8	1
1:A:271:GLN:OE1	1:A:271:GLN:HA	0.41	2.15	12	1
1:A:276:HIS:CE1	1:A:279:GLN:CG	0.41	3.03	14	2
1:A:275:ARG:HB2	1:A:275:ARG:NH1	0.41	2.30	18	1
1:A:238:GLN:HB3	1:A:239:PRO:HD2	0.41	1.93	22	1
1:A:235:LEU:HD12	1:A:235:LEU:C	0.41	2.38	23	1
1:A:241:PHE:O	1:A:245:ARG:HG3	0.41	2.16	23	1
1:A:254:LEU:O	1:A:255:LEU:HG	0.41	2.16	1	2
1:A:233:GLU:OE1	1:A:236:ARG:NH1	0.41	2.53	8	1
1:A:245:ARG:HD2	1:A:286:GLU:HB3	0.41	1.93	15	1
1:A:245:ARG:HD3	1:A:286:GLU:HB3	0.41	1.93	18	1
1:A:286:GLU:HA	1:A:286:GLU:OE1	0.41	2.16	3	1
1:A:245:ARG:NE	1:A:283:MET:HG2	0.41	2.31	14	1
1:A:277:GLN:O	1:A:281:ILE:HG12	0.41	2.15	18	1
1:A:259:LEU:HD13	1:A:259:LEU:O	0.41	2.15	9	2
1:A:232:LEU:HG	1:A:273:ILE:HG12	0.41	1.93	22	1
1:A:262:LEU:C	1:A:269:LEU:CD2	0.41	2.94	24	1
1:A:268:GLN:O	1:A:272:GLN:OE1	0.40	2.39	7	1
1:A:246:GLN:OE1	1:A:246:GLN:HA	0.40	2.16	16	1
1:A:281:ILE:HG13	1:A:282:GLN:N	0.40	2.31	16	1
1:A:266:ASN:HB2	1:A:269:LEU:HB3	0.40	1.93	22	1
1:A:232:LEU:HD22	1:A:232:LEU:O	0.40	2.15	23	1
1:A:232:LEU:HD22	1:A:235:LEU:CG	0.40	2.45	23	1
1:A:241:PHE:O	1:A:245:ARG:HB2	0.40	2.16	25	1
1:A:245:ARG:CD	1:A:283:MET:HG2	0.40	2.46	14	1
1:A:255:LEU:HD22	1:A:256:PRO:CG	0.40	2.46	4	1
1:A:281:ILE:O	1:A:282:GLN:C	0.40	2.62	6	1
1:A:251:ASN:OD1	1:A:251:ASN:N	0.40	2.54	9	1
1:A:245:ARG:C	1:A:286:GLU:OE1	0.40	2.64	14	1
1:A:232:LEU:CD1	1:A:273:ILE:O	0.40	2.70	15	1
1:A:256:PRO:CG	1:A:284:LEU:CD1	0.40	2.88	17	1
1:A:245:ARG:HD2	1:A:284:LEU:C	0.40	2.41	18	1
1:A:245:ARG:NH1	1:A:286:GLU:HB2	0.40	2.31	22	1
1:A:282:GLN:O	1:A:285:ASN:OD1	0.40	2.39	2	1
1:A:244:MET:HG2	1:A:258:LEU:HB2	0.40	1.91	5	1
1:A:235:LEU:CD1	1:A:240:GLN:HB3	0.40	2.40	14	1
1:A:240:GLN:CA	1:A:244:MET:HE3	0.40	2.46	22	1
1:A:235:LEU:C	1:A:235:LEU:CD1	0.40	2.95	23	1
1:A:232:LEU:HD13	1:A:276:HIS:HB2	0.40	1.94	24	1
1:A:280:PHE:O	1:A:283:MET:HG3	0.40	2.16	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:244:MET:CE	1:A:258:LEU:HB2	0.40	2.41	8	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	55/97 (57%)	38±2 (68±4%)	14±2 (26±4%)	3±1 (6±2%)	2	21
All	All	1375/2425 (57%)	938 (68%)	361 (26%)	76 (6%)	2	21

All 10 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	251	ASN	25
1	A	255	LEU	25
1	A	286	GLU	6
1	A	256	PRO	6
1	A	245	ARG	5
1	A	274	SER	4
1	A	275	ARG	2
1	A	276	HIS	1
1	A	277	GLN	1
1	A	232	LEU	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	52/82 (63%)	34±3 (65±6%)	18±3 (35±6%)	1 9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
All	All	1300/2050 (63%)	841 (65%)	459 (35%)	1 9

All 48 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	255	LEU	25
1	A	248	ILE	24
1	A	259	LEU	24
1	A	284	LEU	22
1	A	276	HIS	19
1	A	269	LEU	17
1	A	270	LEU	16
1	A	235	LEU	16
1	A	254	LEU	15
1	A	240	GLN	15
1	A	238	GLN	13
1	A	232	LEU	11
1	A	278	GLU	11
1	A	266	ASN	11
1	A	260	GLN	11
1	A	274	SER	11
1	A	283	MET	11
1	A	279	GLN	10
1	A	241	PHE	10
1	A	251	ASN	10
1	A	286	GLU	10
1	A	258	LEU	9
1	A	261	GLN	9
1	A	282	GLN	9
1	A	275	ARG	9
1	A	246	GLN	8
1	A	247	VAL	7
1	A	277	GLN	7
1	A	249	GLN	7
1	A	271	GLN	6
1	A	234	PHE	6
1	A	242	GLN	6
1	A	237	ASP	6
1	A	268	GLN	6
1	A	262	LEU	6
1	A	285	ASN	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	273	ILE	5
1	A	245	ARG	4
1	A	250	GLN	4
1	A	265	GLU	4
1	A	281	ILE	4
1	A	243	ASN	4
1	A	244	MET	4
1	A	272	GLN	3
1	A	264	GLN	3
1	A	233	GLU	2
1	A	236	ARG	2
1	A	280	PHE	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry ⓘ

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers ⓘ

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided