



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Jun 3, 2020 – 06:39 am BST

PDB ID : 2L90
Title : Solution structure of murine myristoylated msrA
Authors : Gruschus, J.M.; Lim, J.; Piszczek, G.; Levine, R.L.; Tjandra, N.
Deposited on : 2011-01-27

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

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)
NmrClust : Kelley et al. (1996)
MolProbity : 4.02b-467
Mogul : 1.8.5 (274361), CSD as541be (2020)
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 : 2.11
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.11

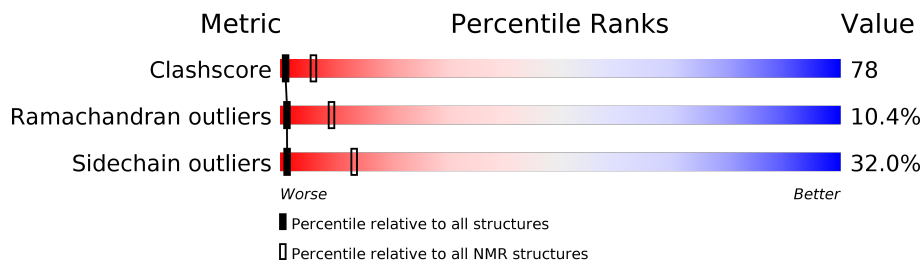
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 39%.

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 $\leq 5\%$

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	212	

2 Ensemble composition and analysis i

This entry contains 21 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:28-A:35, A:42-A:223 (190)	0.60	1

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. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 18, 19, 20
2	17, 21

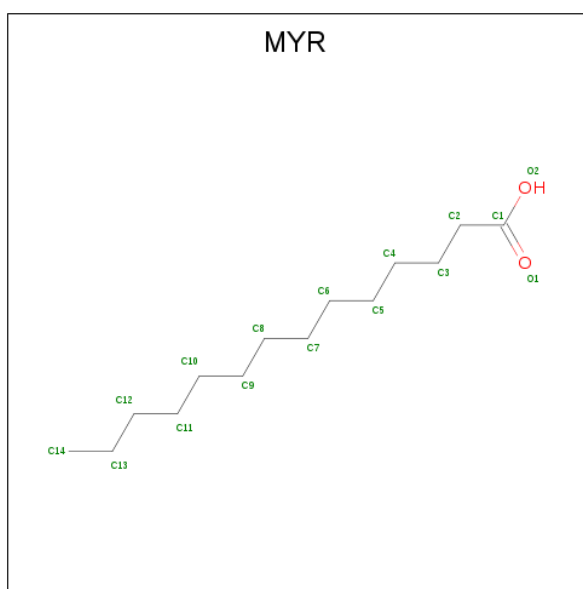
3 Entry composition [i](#)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 3282 atoms, of which 1609 are hydrogens and 0 are deuteriums.

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

Mol	Chain	Residues	Atoms					Trace	
			Total	C	H	N	O		S
1	A	212	3240	1047	1582	289	313	9	1

- Molecule 2 is MYRISTIC ACID (three-letter code: MYR) (formula: C₁₄H₂₈O₂).



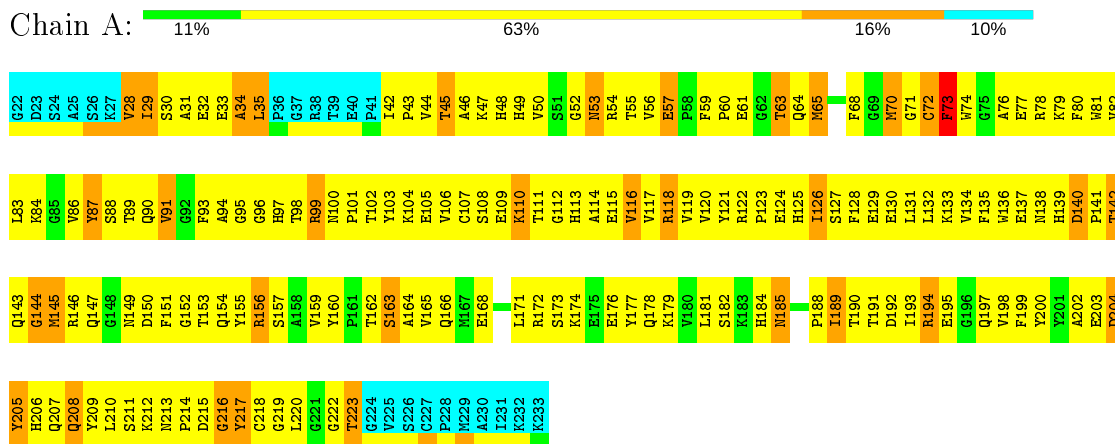
Mol	Chain	Residues	Atoms			
			Total	C	H	O
2	A	1	42	14	27	1

4 Residue-property plots [i](#)

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase

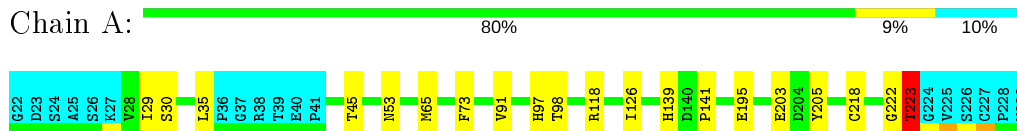


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

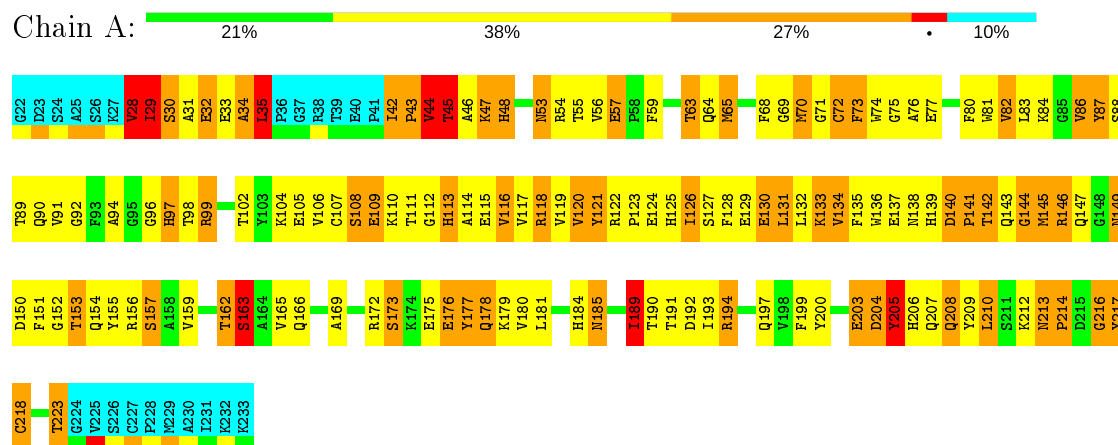
4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase



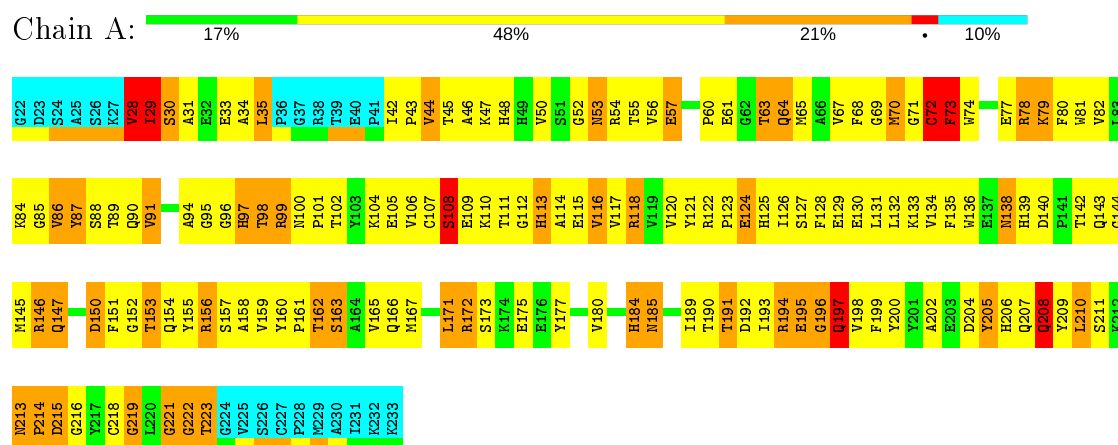
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase



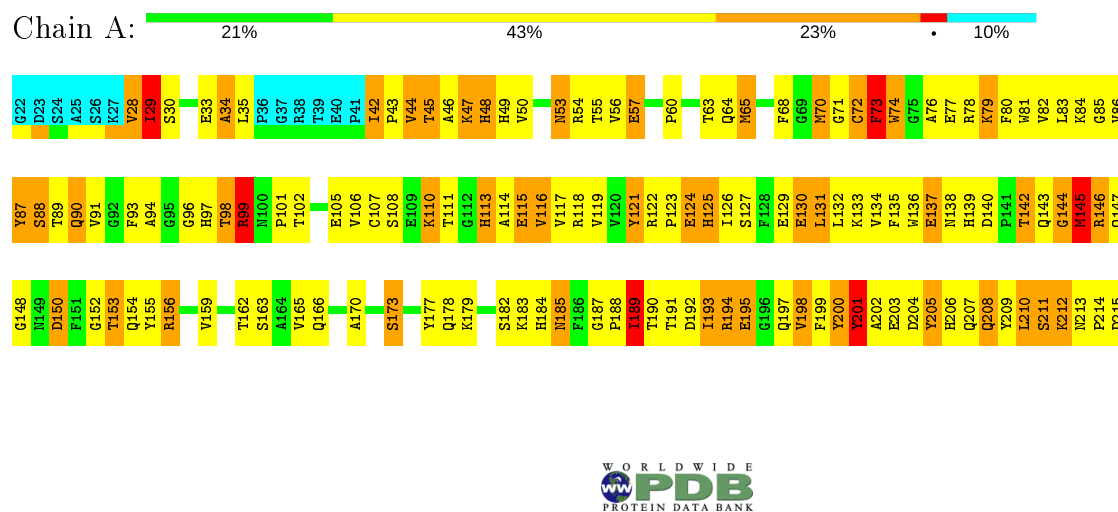
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase



4.2.4 Score per residue for model 4

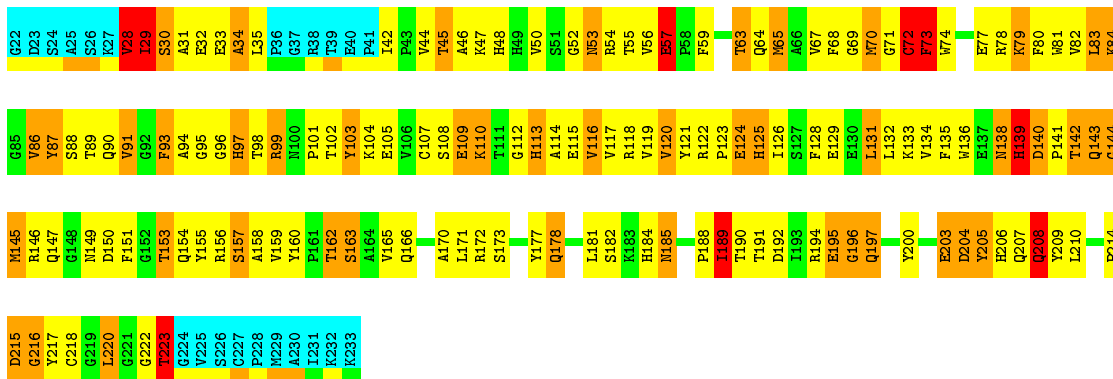
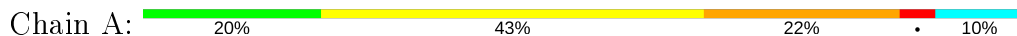
- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase





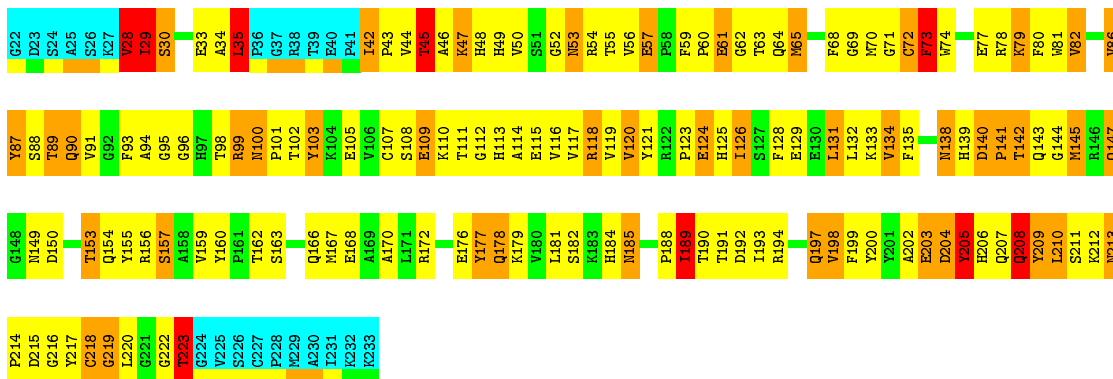
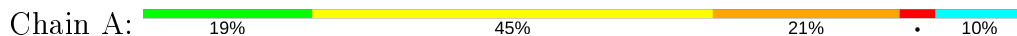
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase



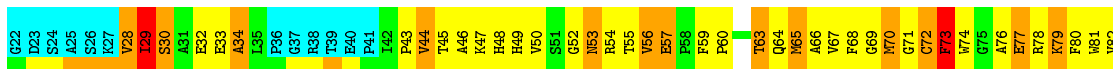
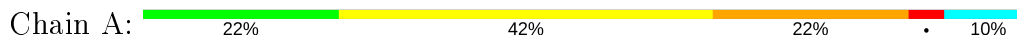
4.2.6 Score per residue for model 6

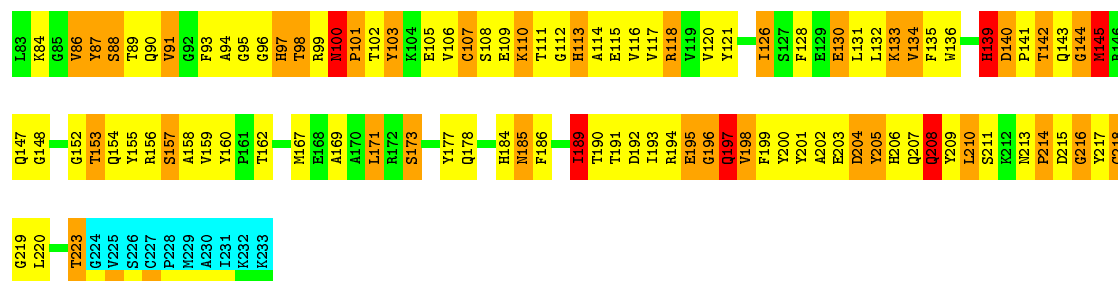
- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase

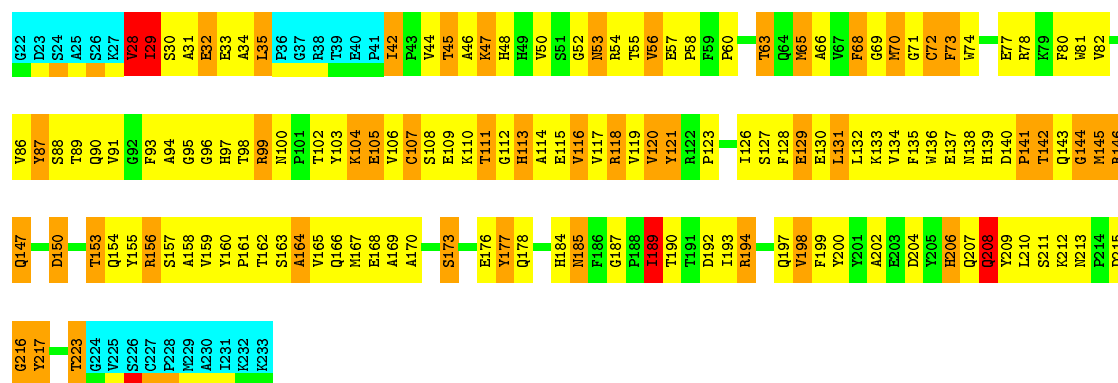




4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase

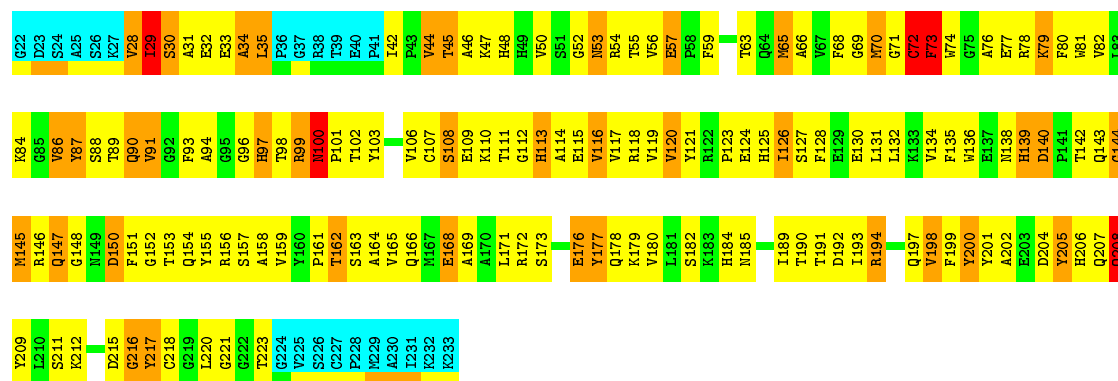
Chain A: 22% 45% 21% 10%



4.2.9 Score per residue for model 9

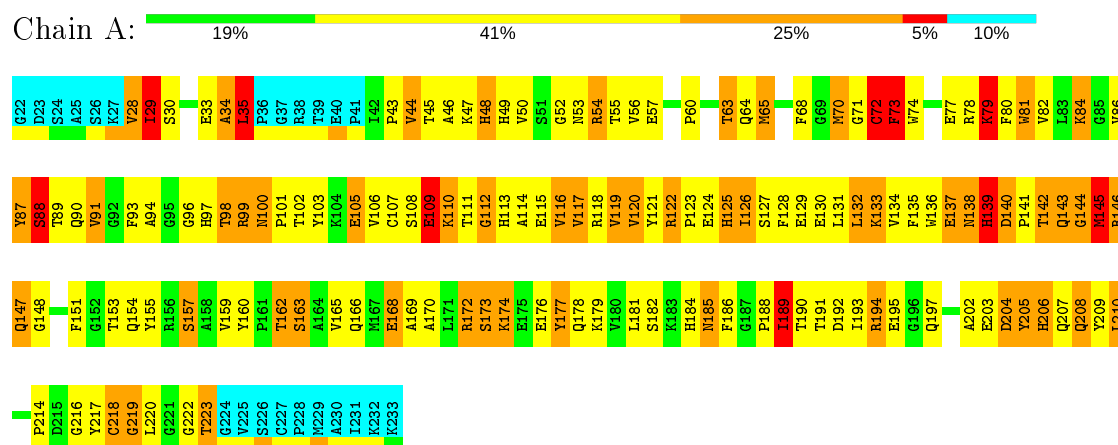
- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase

Chain A: 19% 50% 18% 10%



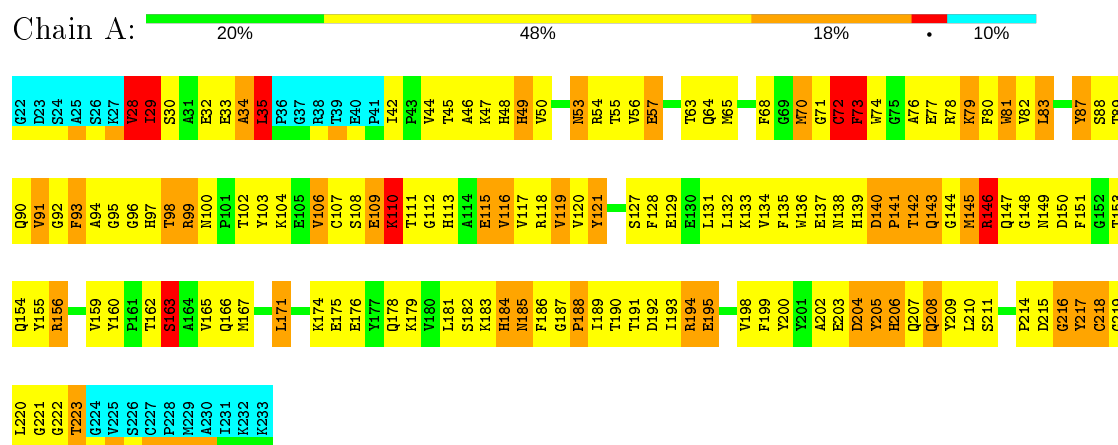
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase



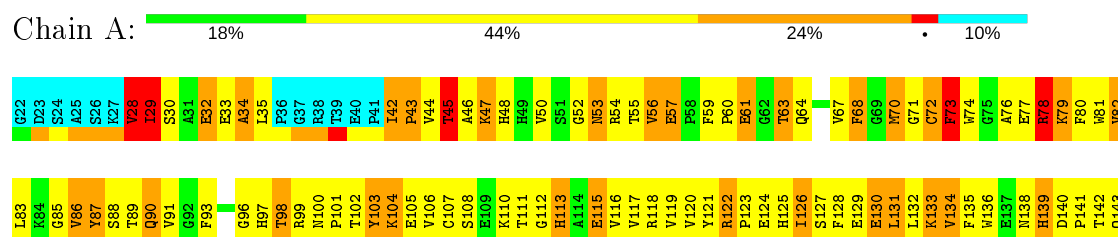
4.2.11 Score per residue for model 11

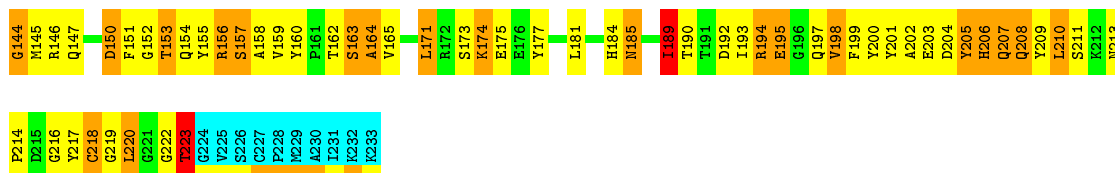
- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase

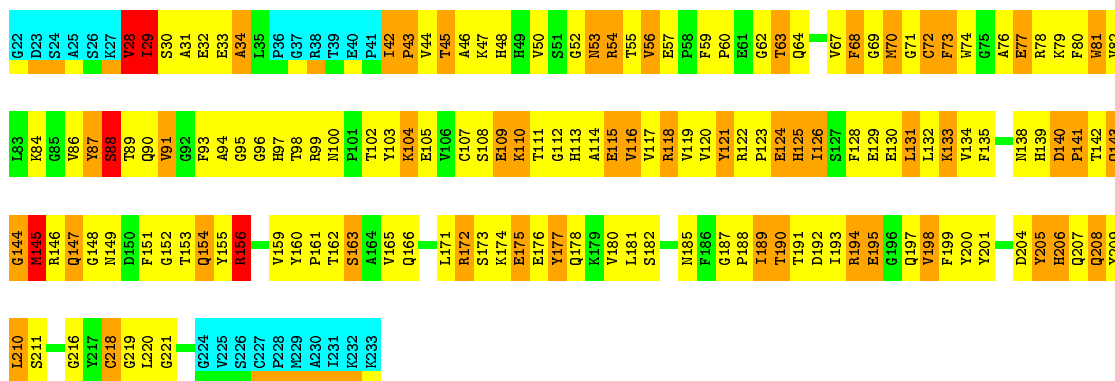




4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase

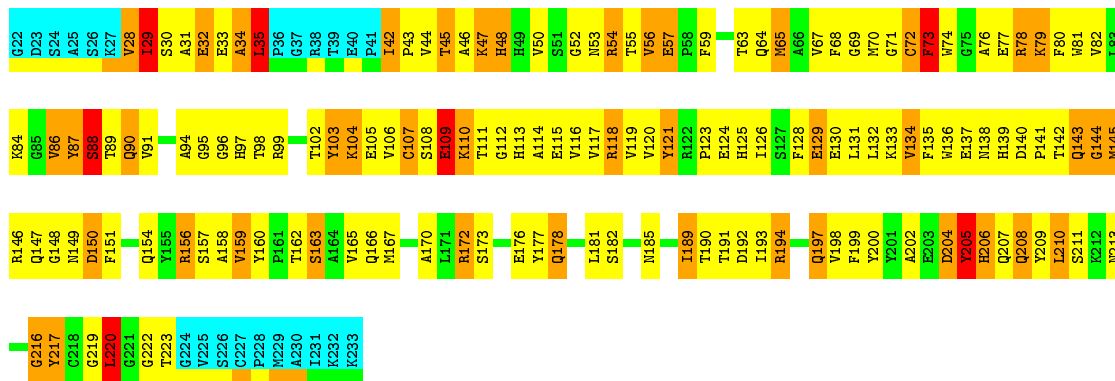
Chain A: 18% 47% 23% 10%



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase

Chain A: 20% 46% 20% 10%



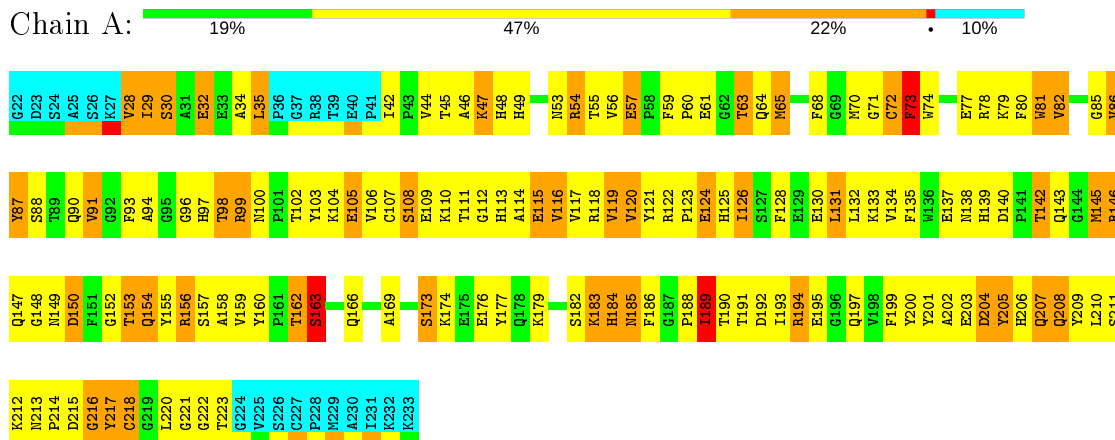
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase

Chain A: 19% 42% 24% 10%

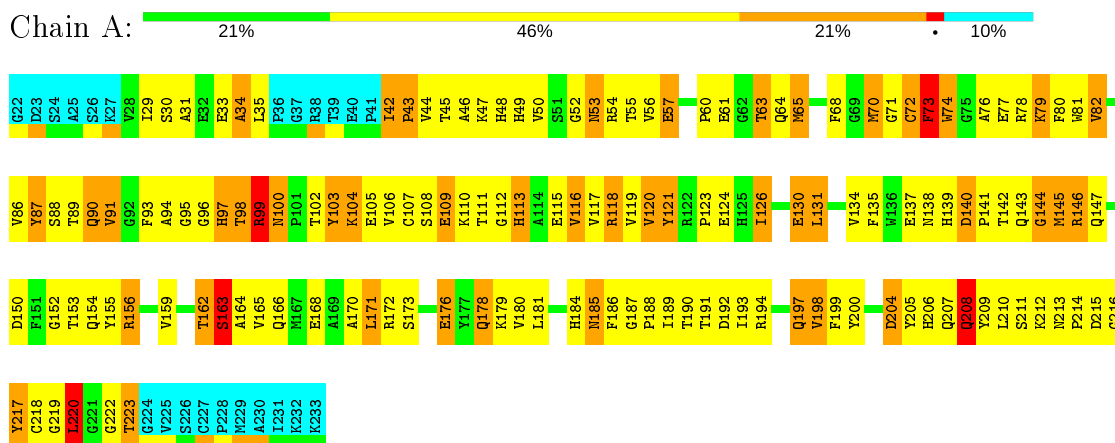
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase



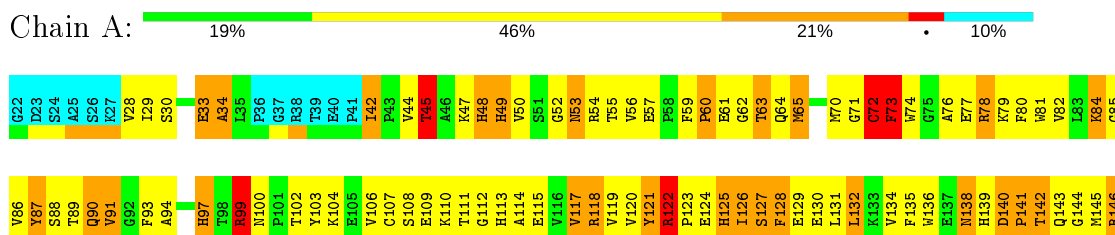
4.2.19 Score per residue for model 19

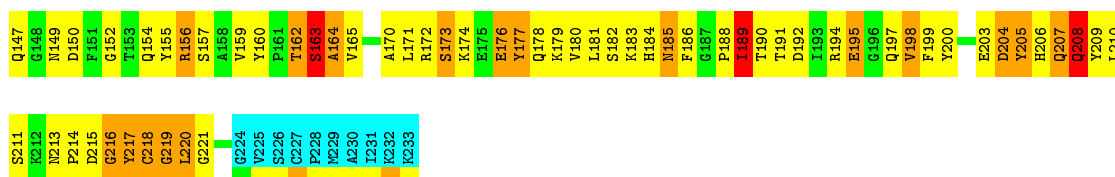
- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase



4.2.20 Score per residue for model 20

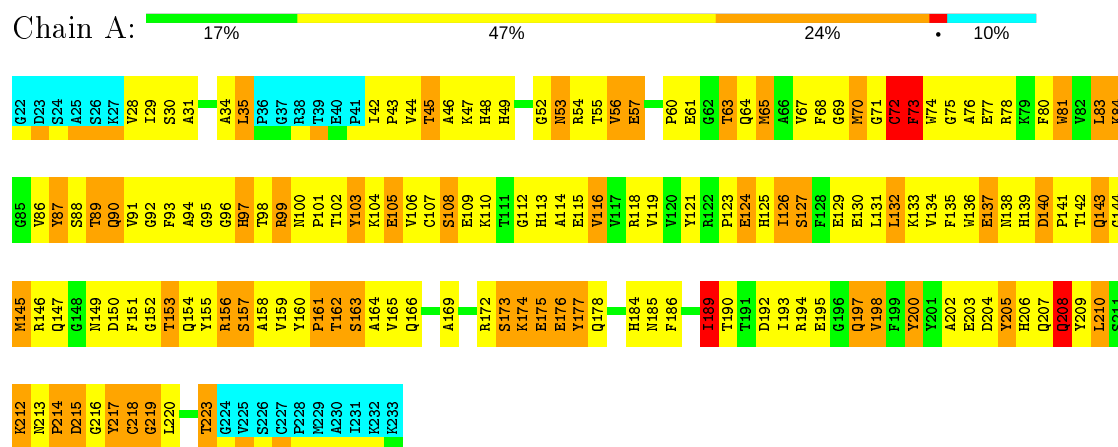
- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase





4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: Peptide methionine sulfoxide reductase



5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

The models were refined using the following method: *simulated annealing*.

Of the 200 calculated structures, 21 were deposited, based on the following criterion: ?.

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

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

The following table shows chemical shift validation statistics as aggregates over all chemical shift files. Detailed validation can be found in section 6 of this report.

Chemical shift file(s)	input_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1010
Number of shifts mapped to atoms	1010
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	39%

No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.

COVALENT-GEOMETRY INFOmissingINFO

5.1 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	1514	1437	1437	235±54
2	A	15	27	27	1±2
All	All	32109	30744	30744	4934

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 79.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:196:GLY:O	1:A:197:GLN:NE2	1.24	1.69	3	2
1:A:131:LEU:HD23	1:A:131:LEU:H	1.10	1.05	15	5
1:A:121:TYR:CD2	1:A:131:LEU:HD22	1.04	1.86	4	4
1:A:131:LEU:H	1:A:131:LEU:HD12	1.03	1.13	19	4
1:A:131:LEU:HD22	1:A:131:LEU:H	1.01	1.16	13	1
1:A:68:PHE:O	1:A:117:VAL:HG22	1.00	1.57	6	9
1:A:106:VAL:HG12	1:A:111:THR:HG21	1.00	1.30	15	3
1:A:160:TYR:CG	1:A:198:VAL:HG21	0.98	1.92	21	1
1:A:98:THR:HG22	1:A:100:ASN:HD21	0.97	1.19	7	1
1:A:122:ARG:N	1:A:123:PRO:CD	0.97	2.28	10	3
1:A:128:PHE:CZ	1:A:132:LEU:HD11	0.96	1.95	8	6
1:A:89:THR:HG22	1:A:119:VAL:HG12	0.96	1.37	11	2
1:A:156:ARG:HH21	2:A:21:MYR:C13	0.95	1.73	20	1
1:A:91:VAL:HG12	1:A:117:VAL:HG22	0.94	1.35	16	1
1:A:28:VAL:O	1:A:29:ILE:O	0.94	1.84	8	13
1:A:122:ARG:H	1:A:123:PRO:CD	0.94	1.74	20	3
1:A:106:VAL:HG12	1:A:111:THR:OG1	0.93	1.63	10	8
1:A:35:LEU:N	1:A:35:LEU:HD13	0.93	1.79	17	3
1:A:139:HIS:O	1:A:223:THR:HG23	0.92	1.63	10	6
1:A:122:ARG:N	1:A:123:PRO:HD3	0.92	1.76	15	1
1:A:114:ALA:HB2	1:A:156:ARG:NH2	0.92	1.79	5	1
1:A:74:TRP:O	1:A:210:LEU:HD11	0.91	1.64	11	4
1:A:50:VAL:HG22	1:A:211:SER:OG	0.89	1.68	19	5
1:A:100:ASN:N	1:A:100:ASN:ND2	0.89	2.19	17	3
1:A:94:ALA:C	1:A:113:HIS:HD1	0.89	1.70	14	4
1:A:131:LEU:H	1:A:131:LEU:HD23	0.88	1.28	8	1
1:A:102:THR:O	1:A:106:VAL:HG13	0.87	1.69	7	2
1:A:142:THR:O	1:A:142:THR:HG23	0.86	1.69	13	2
1:A:31:ALA:HB2	1:A:97:HIS:ND1	0.86	1.85	16	3
1:A:48:HIS:CE1	1:A:89:THR:HG1	0.86	1.89	6	2
1:A:207:GLN:O	1:A:209:TYR:N	0.85	2.08	15	20
1:A:121:TYR:CD2	1:A:131:LEU:HD21	0.85	2.06	13	4
1:A:74:TRP:O	1:A:210:LEU:HD21	0.85	1.71	20	4
1:A:80:PHE:CD2	1:A:119:VAL:HG21	0.85	2.06	6	3
1:A:43:PRO:O	1:A:44:VAL:HG13	0.85	1.70	4	6
1:A:128:PHE:CE2	1:A:132:LEU:HD11	0.85	2.07	5	6
1:A:122:ARG:N	1:A:123:PRO:HD2	0.85	1.85	10	2
1:A:121:TYR:CZ	1:A:131:LEU:HD22	0.85	2.06	11	2
1:A:131:LEU:CD2	1:A:131:LEU:H	0.84	1.85	16	4
1:A:70:MET:SD	1:A:76:ALA:HB2	0.84	2.12	21	2
1:A:131:LEU:HD23	1:A:131:LEU:N	0.84	1.87	4	4
1:A:122:ARG:H	1:A:123:PRO:HD3	0.84	1.26	15	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:196:GLY:O	1:A:197:GLN:CD	0.83	2.15	3	2
1:A:136:TRP:O	1:A:223:THR:HG21	0.83	1.73	15	4
1:A:35:LEU:HD23	1:A:105:GLU:OE1	0.83	1.74	3	1
1:A:121:TYR:CG	1:A:131:LEU:HD21	0.82	2.08	19	1
1:A:106:VAL:HG12	1:A:111:THR:CG2	0.82	2.05	15	3
1:A:131:LEU:N	1:A:131:LEU:HD12	0.82	1.90	19	3
1:A:132:LEU:HD12	1:A:132:LEU:C	0.82	1.95	17	1
1:A:142:THR:HG22	1:A:189:ILE:HG22	0.82	1.49	8	7
1:A:46:ALA:O	1:A:55:THR:HG23	0.82	1.75	21	2
1:A:154:GLN:NE2	1:A:155:TYR:CE2	0.81	2.48	8	12
1:A:132:LEU:C	1:A:132:LEU:HD12	0.81	1.95	7	3
1:A:100:ASN:H	1:A:100:ASN:HD22	0.81	1.19	17	1
1:A:143:GLN:NE2	1:A:147:GLN:NE2	0.81	2.28	14	1
1:A:72:CYS:SG	1:A:74:TRP:CD2	0.81	2.74	11	3
1:A:135:PHE:CE1	1:A:139:HIS:CD2	0.81	2.69	21	7
1:A:100:ASN:ND2	1:A:100:ASN:H	0.81	1.69	17	1
1:A:121:TYR:CG	1:A:131:LEU:HD22	0.81	2.09	16	3
1:A:64:GLN:NE2	1:A:121:TYR:H	0.81	1.74	3	1
1:A:135:PHE:CZ	1:A:139:HIS:NE2	0.81	2.49	19	7
1:A:195:GLU:O	1:A:197:GLN:N	0.81	2.14	3	3
1:A:78:ARG:O	1:A:82:VAL:HG13	0.80	1.76	5	14
1:A:64:GLN:N	1:A:121:TYR:O	0.80	2.15	20	3
1:A:134:VAL:O	1:A:138:ASN:ND2	0.80	2.15	10	16
1:A:135:PHE:CE1	1:A:139:HIS:NE2	0.80	2.50	4	10
1:A:73:PHE:CZ	1:A:206:HIS:ND1	0.80	2.49	7	5
1:A:55:THR:O	1:A:56:VAL:HG13	0.80	1.76	20	8
1:A:135:PHE:CZ	1:A:139:HIS:CE1	0.80	2.69	3	4
1:A:59:PHE:CZ	1:A:118:ARG:NH2	0.80	2.50	18	7
1:A:91:VAL:HG12	1:A:117:VAL:HG12	0.80	1.53	4	5
1:A:187:GLY:N	1:A:188:PRO:CD	0.79	2.45	19	1
1:A:219:GLY:O	1:A:220:LEU:HD12	0.79	1.77	15	1
1:A:118:ARG:NH1	1:A:201:TYR:CZ	0.79	2.50	4	1
1:A:135:PHE:CE1	1:A:139:HIS:CE1	0.79	2.70	7	3
1:A:35:LEU:HD21	1:A:110:LYS:CG	0.79	2.07	15	2
1:A:217:TYR:CG	1:A:218:CYS:N	0.79	2.51	19	6
1:A:209:TYR:CD2	1:A:213:ASN:ND2	0.79	2.51	8	1
1:A:205:TYR:CD1	1:A:205:TYR:N	0.79	2.51	21	2
1:A:49:HIS:N	1:A:49:HIS:ND1	0.79	2.30	20	1
1:A:72:CYS:SG	1:A:74:TRP:CE3	0.79	2.75	7	8
1:A:131:LEU:HD22	1:A:131:LEU:N	0.79	1.93	13	1
1:A:103:TYR:CD2	1:A:206:HIS:NE2	0.79	2.51	17	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:73:PHE:CE1	1:A:206:HIS:ND1	0.79	2.51	9	12
1:A:59:PHE:CZ	1:A:118:ARG:NH1	0.79	2.51	7	1
1:A:45:THR:O	1:A:45:THR:HG23	0.79	1.75	16	7
1:A:131:LEU:N	1:A:131:LEU:HD23	0.79	1.92	8	4
1:A:72:CYS:SG	1:A:74:TRP:CZ3	0.78	2.76	16	4
1:A:118:ARG:NH1	1:A:201:TYR:CE1	0.78	2.51	4	1
1:A:74:TRP:CZ2	1:A:206:HIS:CE1	0.78	2.71	10	3
1:A:59:PHE:CE2	1:A:118:ARG:NH2	0.78	2.51	6	6
1:A:35:LEU:HD22	1:A:110:LYS:O	0.78	1.77	8	4
1:A:98:THR:HG22	1:A:100:ASN:ND2	0.78	1.92	7	1
1:A:73:PHE:N	1:A:73:PHE:CD1	0.78	2.50	9	6
1:A:194:ARG:NE	1:A:197:GLN:NE2	0.78	2.31	10	1
1:A:103:TYR:CG	1:A:206:HIS:CE1	0.78	2.72	10	8
1:A:70:MET:SD	1:A:76:ALA:HB1	0.78	2.18	19	4
1:A:121:TYR:CE1	1:A:131:LEU:HD22	0.78	2.14	11	2
1:A:70:MET:SD	1:A:139:HIS:CE1	0.78	2.77	8	4
1:A:28:VAL:C	1:A:29:ILE:HD13	0.78	1.99	8	1
1:A:48:HIS:NE2	1:A:208:GLN:NE2	0.78	2.31	4	2
1:A:65:MET:SD	1:A:65:MET:N	0.77	2.57	7	8
1:A:45:THR:HG23	1:A:45:THR:O	0.77	1.79	9	4
1:A:100:ASN:N	1:A:100:ASN:HD22	0.77	1.78	7	3
1:A:64:GLN:NE2	1:A:128:PHE:CD1	0.77	2.52	15	1
1:A:131:LEU:HD12	1:A:131:LEU:H	0.77	1.39	6	1
1:A:131:LEU:H	1:A:131:LEU:CD1	0.77	1.89	19	3
1:A:88:SER:O	1:A:89:THR:HG23	0.77	1.78	5	7
1:A:72:CYS:O	1:A:74:TRP:N	0.77	2.17	14	17
1:A:156:ARG:HH21	2:A:21:MYR:H132	0.77	1.37	20	1
1:A:195:GLU:O	1:A:196:GLY:C	0.77	2.22	3	3
1:A:118:ARG:CD	1:A:199:PHE:CZ	0.77	2.68	12	3
1:A:209:TYR:CD1	1:A:213:ASN:ND2	0.77	2.52	4	1
1:A:135:PHE:O	1:A:139:HIS:ND1	0.77	2.18	11	16
1:A:135:PHE:O	1:A:139:HIS:CE1	0.77	2.38	13	3
1:A:50:VAL:HG21	1:A:81:TRP:CG	0.77	2.14	6	1
1:A:123:PRO:C	1:A:125:HIS:H	0.76	1.80	15	6
1:A:94:ALA:HB1	1:A:198:VAL:HG13	0.76	1.57	21	1
1:A:65:MET:N	1:A:65:MET:SD	0.76	2.58	19	7
1:A:218:CYS:SG	1:A:219:GLY:N	0.76	2.58	17	4
1:A:34:ALA:HB2	1:A:97:HIS:NE2	0.76	1.96	7	1
1:A:160:TYR:CD1	1:A:198:VAL:HG21	0.76	2.15	21	1
1:A:76:ALA:O	1:A:80:PHE:CD1	0.76	2.38	14	12
1:A:156:ARG:NH2	1:A:194:ARG:NH2	0.76	2.33	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:VAL:HG13	1:A:28:VAL:O	0.76	1.80	15	7
1:A:96:GLY:N	1:A:113:HIS:ND1	0.75	2.35	5	14
1:A:59:PHE:CE1	1:A:118:ARG:NH2	0.75	2.53	7	1
1:A:210:LEU:HD22	1:A:216:GLY:O	0.75	1.82	19	2
1:A:91:VAL:CG1	1:A:117:VAL:HG22	0.75	2.12	16	2
1:A:118:ARG:HH22	1:A:120:VAL:N	0.75	1.80	8	1
1:A:184:HIS:O	1:A:185:ASN:ND2	0.75	2.20	16	2
1:A:74:TRP:NE1	1:A:209:TYR:CE1	0.74	2.55	6	1
1:A:138:ASN:O	1:A:139:HIS:ND1	0.74	2.21	11	9
1:A:194:ARG:HE	1:A:197:GLN:NE2	0.74	1.80	10	1
1:A:198:VAL:CG1	1:A:200:TYR:CE2	0.74	2.70	6	3
1:A:184:HIS:CD2	1:A:186:PHE:CE2	0.74	2.76	11	1
1:A:31:ALA:HB1	1:A:97:HIS:CE1	0.74	2.18	14	1
1:A:123:PRO:C	1:A:125:HIS:N	0.74	2.40	15	11
1:A:53:ASN:OD1	1:A:54:ARG:N	0.74	2.21	21	16
1:A:72:CYS:SG	1:A:72:CYS:O	0.74	2.45	20	2
1:A:145:MET:SD	1:A:145:MET:O	0.74	2.46	13	5
1:A:184:HIS:CD2	1:A:186:PHE:CD2	0.74	2.75	11	1
1:A:217:TYR:CD2	1:A:218:CYS:N	0.74	2.56	18	4
1:A:143:GLN:OE1	1:A:143:GLN:N	0.74	2.20	13	1
1:A:205:TYR:O	1:A:205:TYR:CD1	0.74	2.41	14	1
1:A:80:PHE:CZ	1:A:134:VAL:CG1	0.73	2.70	7	13
1:A:131:LEU:HD12	1:A:131:LEU:N	0.73	1.98	9	3
1:A:97:HIS:O	1:A:97:HIS:CD2	0.73	2.40	8	3
1:A:140:ASP:O	1:A:142:THR:N	0.73	2.21	20	3
1:A:131:LEU:H	1:A:131:LEU:CD2	0.73	1.86	15	2
1:A:121:TYR:CE2	1:A:128:PHE:N	0.73	2.56	10	1
1:A:156:ARG:HH21	2:A:21:MYR:H131	0.73	1.43	20	1
1:A:98:THR:CG2	1:A:99:ARG:NH1	0.73	2.52	19	1
1:A:136:TRP:CG	1:A:177:TYR:CZ	0.73	2.75	7	1
1:A:119:VAL:O	1:A:121:TYR:CE1	0.73	2.41	4	1
1:A:73:PHE:CD1	1:A:73:PHE:N	0.73	2.52	10	13
1:A:60:PRO:O	1:A:63:THR:HG23	0.73	1.83	15	1
1:A:94:ALA:N	1:A:113:HIS:ND1	0.73	2.36	13	5
1:A:74:TRP:CD1	1:A:209:TYR:OH	0.73	2.42	6	2
1:A:159:VAL:HG23	1:A:191:THR:CG2	0.73	2.12	11	9
1:A:218:CYS:O	1:A:219:GLY:O	0.73	2.06	10	5
1:A:78:ARG:CB	1:A:210:LEU:HD13	0.73	2.13	11	1
1:A:34:ALA:HB3	1:A:97:HIS:NE2	0.72	1.99	13	3
1:A:121:TYR:CG	1:A:131:LEU:HD11	0.72	2.19	8	2
1:A:71:GLY:O	1:A:72:CYS:CB	0.72	2.38	18	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:143:GLN:OE1	1:A:148:GLY:N	0.72	2.23	7	2
1:A:203:GLU:OE2	1:A:204:ASP:N	0.72	2.23	6	1
1:A:34:ALA:C	1:A:35:LEU:HD13	0.72	2.04	17	1
1:A:74:TRP:CD1	1:A:209:TYR:CZ	0.72	2.78	6	2
1:A:205:TYR:CG	1:A:205:TYR:O	0.72	2.43	14	1
1:A:42:ILE:N	1:A:43:PRO:CD	0.72	2.52	4	2
1:A:34:ALA:HB1	1:A:110:LYS:O	0.72	1.85	13	2
1:A:71:GLY:O	1:A:72:CYS:C	0.72	2.28	19	14
1:A:35:LEU:CB	1:A:98:THR:HG23	0.72	2.15	5	2
1:A:70:MET:SD	1:A:70:MET:N	0.72	2.63	7	1
1:A:127:SER:H	1:A:130:GLU:CD	0.71	1.89	21	1
1:A:68:PHE:CE2	1:A:131:LEU:O	0.71	2.44	17	4
1:A:74:TRP:CG	1:A:209:TYR:OH	0.71	2.43	16	3
1:A:121:TYR:CD1	1:A:121:TYR:N	0.71	2.57	11	5
1:A:103:TYR:CG	1:A:104:LYS:N	0.71	2.57	14	3
1:A:208:GLN:H	1:A:208:GLN:CD	0.71	1.85	6	7
1:A:48:HIS:NE2	1:A:208:GLN:CG	0.71	2.54	18	5
1:A:106:VAL:HG12	1:A:111:THR:CB	0.71	2.16	16	5
1:A:203:GLU:OE2	1:A:205:TYR:CD1	0.71	2.44	6	1
1:A:99:ARG:O	1:A:101:PRO:N	0.71	2.23	9	2
1:A:156:ARG:NH2	1:A:194:ARG:HH22	0.71	1.81	7	3
1:A:184:HIS:O	1:A:184:HIS:CD2	0.71	2.43	11	1
1:A:136:TRP:CZ2	1:A:173:SER:CA	0.71	2.74	20	1
1:A:53:ASN:ND2	1:A:87:TYR:O	0.71	2.24	4	14
1:A:91:VAL:CG1	1:A:117:VAL:HG12	0.71	2.15	11	4
1:A:141:PRO:O	1:A:190:THR:N	0.71	2.24	21	6
1:A:142:THR:OG1	1:A:190:THR:N	0.71	2.23	17	3
1:A:142:THR:O	1:A:144:GLY:N	0.71	2.23	11	3
1:A:94:ALA:O	1:A:113:HIS:ND1	0.71	2.24	16	13
1:A:78:ARG:HB2	1:A:210:LEU:HD13	0.71	1.62	11	1
1:A:143:GLN:NE2	1:A:147:GLN:CD	0.71	2.44	14	1
1:A:99:ARG:O	1:A:200:TYR:CZ	0.71	2.44	18	8
1:A:103:TYR:CD1	1:A:206:HIS:CE1	0.71	2.79	7	3
1:A:123:PRO:O	1:A:125:HIS:N	0.70	2.24	15	10
1:A:209:TYR:CG	1:A:213:ASN:ND2	0.70	2.58	4	2
1:A:185:ASN:ND2	1:A:185:ASN:C	0.70	2.44	18	1
1:A:100:ASN:ND2	1:A:100:ASN:N	0.70	2.33	7	1
1:A:116:VAL:HG11	1:A:160:TYR:CE2	0.70	2.21	6	7
1:A:68:PHE:CZ	1:A:131:LEU:O	0.70	2.43	13	13
1:A:103:TYR:CG	1:A:206:HIS:NE2	0.70	2.59	18	3
1:A:106:VAL:O	1:A:108:SER:N	0.70	2.25	15	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:154:GLN:N	1:A:154:GLN:OE1	0.70	2.24	8	6
1:A:203:GLU:OE2	1:A:205:TYR:CE1	0.70	2.44	6	1
1:A:69:GLY:CA	1:A:116:VAL:HG12	0.70	2.16	21	4
1:A:150:ASP:OD1	1:A:150:ASP:N	0.70	2.25	9	2
1:A:203:GLU:OE1	1:A:204:ASP:N	0.70	2.24	17	3
1:A:73:PHE:CZ	1:A:115:GLU:OE1	0.70	2.44	2	5
1:A:97:HIS:CG	1:A:97:HIS:O	0.70	2.44	10	2
1:A:128:PHE:HA	1:A:131:LEU:HD21	0.70	1.61	15	2
1:A:198:VAL:HG11	1:A:200:TYR:CZ	0.70	2.22	15	2
1:A:70:MET:O	1:A:147:GLN:NE2	0.70	2.24	12	2
1:A:35:LEU:HD21	1:A:110:LYS:HG3	0.70	1.60	15	1
1:A:76:ALA:O	1:A:80:PHE:CE1	0.70	2.45	7	10
1:A:97:HIS:CD2	1:A:97:HIS:O	0.70	2.45	10	3
1:A:121:TYR:CD1	1:A:131:LEU:HD11	0.70	2.22	14	2
1:A:88:SER:OG	1:A:90:GLN:NE2	0.70	2.24	13	7
1:A:185:ASN:C	1:A:185:ASN:ND2	0.70	2.45	16	1
1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:HD13	0.70	2.02	21	1
1:A:99:ARG:O	1:A:200:TYR:CE1	0.70	2.45	12	3
1:A:143:GLN:N	1:A:190:THR:OG1	0.70	2.25	12	5
1:A:139:HIS:O	1:A:223:THR:N	0.69	2.25	11	3
1:A:48:HIS:NE2	1:A:89:THR:OG1	0.69	2.25	2	8
1:A:93:PHE:CE2	1:A:101:PRO:O	0.69	2.45	10	3
1:A:107:CYS:SG	1:A:108:SER:N	0.69	2.64	18	3
1:A:56:VAL:HG12	1:A:201:TYR:CZ	0.69	2.21	12	1
1:A:96:GLY:CA	1:A:113:HIS:ND1	0.69	2.56	5	8
1:A:32:GLU:OE2	1:A:33:GLU:N	0.69	2.25	8	1
1:A:99:ARG:O	1:A:200:TYR:CD1	0.69	2.45	12	1
1:A:99:ARG:NE	1:A:100:ASN:HD22	0.69	1.85	9	1
1:A:209:TYR:CZ	1:A:213:ASN:OD1	0.69	2.45	17	3
1:A:208:GLN:CD	1:A:208:GLN:H	0.69	1.91	20	6
1:A:197:GLN:N	1:A:197:GLN:OE1	0.69	2.26	10	2
1:A:73:PHE:CG	1:A:115:GLU:OE2	0.69	2.45	10	1
1:A:143:GLN:CD	1:A:143:GLN:N	0.69	2.44	13	1
1:A:159:VAL:HG13	1:A:191:THR:CG2	0.69	2.17	5	5
1:A:48:HIS:CG	1:A:88:SER:OG	0.69	2.46	5	3
1:A:192:ASP:OD1	1:A:194:ARG:NH1	0.69	2.25	8	7
1:A:71:GLY:N	1:A:147:GLN:OE1	0.69	2.26	13	2
1:A:135:PHE:CD1	1:A:139:HIS:NE2	0.69	2.60	6	3
1:A:154:GLN:O	1:A:155:TYR:CD1	0.69	2.46	12	3
1:A:151:PHE:CD1	1:A:151:PHE:O	0.69	2.46	3	4
1:A:98:THR:O	1:A:99:ARG:O	0.69	2.11	9	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:192:ASP:OD2	1:A:194:ARG:NH2	0.69	2.25	8	7
1:A:99:ARG:CD	1:A:99:ARG:H	0.69	2.01	19	2
1:A:97:HIS:O	1:A:97:HIS:CG	0.69	2.44	14	4
1:A:74:TRP:CD2	1:A:209:TYR:OH	0.69	2.45	6	1
1:A:73:PHE:CD1	1:A:115:GLU:OE1	0.69	2.46	3	2
1:A:99:ARG:O	1:A:200:TYR:CG	0.69	2.46	12	1
1:A:48:HIS:CD2	1:A:208:GLN:NE2	0.69	2.60	4	6
1:A:64:GLN:CB	1:A:121:TYR:O	0.69	2.40	20	1
1:A:85:GLY:O	1:A:123:PRO:CG	0.69	2.41	15	1
1:A:70:MET:SD	1:A:76:ALA:CB	0.69	2.81	13	4
1:A:89:THR:O	1:A:208:GLN:NE2	0.69	2.26	21	4
1:A:78:ARG:O	1:A:80:PHE:N	0.69	2.26	19	15
1:A:121:TYR:CD1	1:A:131:LEU:HD21	0.69	2.23	19	3
1:A:103:TYR:CZ	1:A:155:TYR:OH	0.69	2.46	8	1
1:A:90:GLN:OE1	1:A:118:ARG:NH2	0.69	2.24	13	1
1:A:99:ARG:O	1:A:200:TYR:CE2	0.69	2.46	12	4
1:A:115:GLU:OE1	1:A:155:TYR:CE1	0.69	2.46	7	1
1:A:65:MET:SD	1:A:118:ARG:NH2	0.69	2.65	11	1
1:A:77:GLU:OE1	1:A:91:VAL:HG13	0.69	1.87	21	3
1:A:124:GLU:OE2	1:A:125:HIS:CD2	0.69	2.46	21	1
1:A:119:VAL:O	1:A:121:TYR:CZ	0.69	2.46	4	1
1:A:106:VAL:O	1:A:109:GLU:N	0.69	2.26	10	5
1:A:71:GLY:O	1:A:73:PHE:N	0.69	2.26	15	8
1:A:73:PHE:CE1	1:A:115:GLU:OE1	0.69	2.45	3	7
1:A:28:VAL:O	1:A:28:VAL:HG12	0.69	1.86	18	4
1:A:180:VAL:O	1:A:184:HIS:CE1	0.69	2.46	3	1
1:A:74:TRP:NE1	1:A:209:TYR:CZ	0.69	2.60	6	1
1:A:73:PHE:CE2	1:A:115:GLU:OE1	0.68	2.45	14	2
1:A:124:GLU:OE2	1:A:124:GLU:N	0.68	2.26	17	1
1:A:73:PHE:CZ	1:A:115:GLU:OE2	0.68	2.46	3	8
1:A:108:SER:O	1:A:110:LYS:N	0.68	2.25	10	9
1:A:48:HIS:CE1	1:A:89:THR:OG1	0.68	2.46	21	5
1:A:87:TYR:CE2	1:A:88:SER:OG	0.68	2.46	6	1
1:A:99:ARG:O	1:A:200:TYR:CD2	0.68	2.46	12	1
1:A:34:ALA:HB2	1:A:97:HIS:CE1	0.68	2.23	18	1
1:A:67:VAL:O	1:A:68:PHE:CD1	0.68	2.46	3	2
1:A:54:ARG:NE	1:A:57:GLU:O	0.68	2.26	2	1
1:A:109:GLU:O	1:A:111:THR:N	0.68	2.27	14	4
1:A:154:GLN:OE1	1:A:155:TYR:CE2	0.68	2.46	18	2
1:A:98:THR:CG2	1:A:100:ASN:ND2	0.68	2.56	7	1
1:A:192:ASP:OD2	1:A:194:ARG:NH1	0.68	2.27	10	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:147:GLN:OE1	1:A:148:GLY:N	0.68	2.26	14	1
1:A:192:ASP:OD2	1:A:194:ARG:CZ	0.68	2.42	8	9
1:A:103:TYR:CE2	1:A:155:TYR:OH	0.68	2.45	8	1
1:A:156:ARG:NH2	1:A:192:ASP:OD2	0.68	2.26	2	3
1:A:208:GLN:N	1:A:208:GLN:OE1	0.68	2.26	7	4
1:A:142:THR:CG2	1:A:142:THR:O	0.68	2.42	13	2
1:A:73:PHE:N	1:A:115:GLU:OE1	0.68	2.27	4	1
1:A:62:GLY:O	1:A:122:ARG:NE	0.68	2.27	20	1
1:A:91:VAL:HG23	1:A:207:GLN:CD	0.68	2.09	11	9
1:A:115:GLU:OE1	1:A:115:GLU:N	0.68	2.27	16	1
1:A:31:ALA:CB	1:A:97:HIS:ND1	0.68	2.56	2	1
1:A:178:GLN:NE2	1:A:182:SER:OG	0.68	2.27	15	1
1:A:160:TYR:OH	1:A:194:ARG:NH2	0.68	2.27	6	1
1:A:72:CYS:N	1:A:150:ASP:OD2	0.68	2.27	6	2
1:A:185:ASN:HD22	1:A:185:ASN:C	0.68	1.92	18	1
1:A:64:GLN:OE1	1:A:65:MET:N	0.68	2.27	18	3
1:A:144:GLY:O	1:A:156:ARG:NH1	0.68	2.26	21	2
1:A:174:LYS:HZ3	1:A:175:GLU:N	0.68	1.87	21	1
1:A:48:HIS:O	1:A:52:GLY:N	0.68	2.26	12	14
1:A:208:GLN:OE1	1:A:208:GLN:N	0.68	2.27	8	5
1:A:144:GLY:N	1:A:190:THR:OG1	0.68	2.26	3	5
1:A:108:SER:O	1:A:109:GLU:CG	0.68	2.41	11	3
1:A:197:GLN:O	1:A:199:PHE:N	0.68	2.27	7	1
1:A:73:PHE:CE2	1:A:115:GLU:CD	0.68	2.68	2	1
1:A:35:LEU:HD21	1:A:110:LYS:HG2	0.68	1.66	8	2
1:A:124:GLU:OE2	1:A:125:HIS:CE1	0.68	2.47	21	1
1:A:76:ALA:CB	1:A:117:VAL:HG21	0.68	2.19	14	3
1:A:150:ASP:OD1	1:A:155:TYR:CE2	0.68	2.46	8	1
1:A:194:ARG:O	1:A:197:GLN:NE2	0.68	2.27	13	2
1:A:118:ARG:NH1	1:A:201:TYR:OH	0.68	2.26	15	5
1:A:78:ARG:NH1	1:A:214:PRO:O	0.68	2.27	12	3
1:A:153:THR:O	1:A:156:ARG:NH1	0.68	2.27	5	3
1:A:80:PHE:CZ	1:A:134:VAL:HG12	0.67	2.24	21	11
1:A:192:ASP:OD1	1:A:194:ARG:NE	0.67	2.27	9	5
1:A:44:VAL:HG12	1:A:204:ASP:N	0.67	2.03	18	7
1:A:142:THR:N	1:A:143:GLN:OE1	0.67	2.27	13	1
1:A:185:ASN:O	1:A:185:ASN:ND2	0.67	2.26	16	1
1:A:124:GLU:OE1	1:A:125:HIS:ND1	0.67	2.27	21	1
1:A:129:GLU:O	1:A:132:LEU:CD2	0.67	2.43	20	1
1:A:117:VAL:HG23	1:A:117:VAL:O	0.67	1.87	3	2
1:A:168:GLU:O	1:A:172:ARG:NH1	0.67	2.27	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:156:ARG:NH1	1:A:190:THR:O	0.67	2.27	14	2
1:A:178:GLN:OE1	1:A:189:ILE:HG23	0.67	1.89	4	2
1:A:137:GLU:OE1	1:A:137:GLU:N	0.67	2.27	4	2
1:A:185:ASN:C	1:A:185:ASN:HD22	0.67	1.92	16	1
1:A:80:PHE:CE2	1:A:134:VAL:CG1	0.67	2.77	4	5
1:A:48:HIS:NE2	1:A:89:THR:O	0.67	2.26	5	2
1:A:91:VAL:O	1:A:207:GLN:NE2	0.67	2.27	15	10
1:A:44:VAL:O	1:A:46:ALA:N	0.67	2.27	6	8
1:A:91:VAL:N	1:A:207:GLN:OE1	0.67	2.27	4	12
1:A:77:GLU:OE2	1:A:90:GLN:N	0.67	2.27	19	4
1:A:145:MET:O	1:A:152:GLY:CA	0.67	2.42	12	2
1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:OE1	0.67	2.27	18	1
1:A:121:TYR:CD2	1:A:131:LEU:HD13	0.67	2.24	11	2
1:A:64:GLN:NE2	1:A:121:TYR:N	0.67	2.42	3	1
1:A:94:ALA:O	1:A:114:ALA:N	0.67	2.27	17	12
1:A:157:SER:OG	1:A:190:THR:HG23	0.67	1.89	18	3
1:A:140:ASP:CG	1:A:143:GLN:NE2	0.67	2.48	11	4
1:A:192:ASP:OD2	1:A:194:ARG:NE	0.67	2.27	12	2
1:A:209:TYR:O	1:A:213:ASN:ND2	0.67	2.27	4	2
1:A:205:TYR:O	1:A:209:TYR:CE2	0.67	2.48	6	3
1:A:160:TYR:CD2	1:A:198:VAL:HG11	0.67	2.24	21	1
1:A:49:HIS:CD2	1:A:212:LYS:HZ2	0.67	2.07	15	1
1:A:65:MET:O	1:A:65:MET:SD	0.67	2.53	14	2
1:A:185:ASN:ND2	1:A:185:ASN:O	0.67	2.27	18	1
1:A:154:GLN:CD	1:A:155:TYR:CZ	0.67	2.68	3	4
1:A:45:THR:OG1	1:A:49:HIS:NE2	0.67	2.27	20	1
1:A:103:TYR:CD1	1:A:115:GLU:OE2	0.67	2.47	15	1
1:A:139:HIS:C	1:A:139:HIS:ND1	0.67	2.45	10	2
1:A:70:MET:CG	1:A:71:GLY:N	0.67	2.57	20	3
1:A:143:GLN:O	1:A:143:GLN:CG	0.67	2.42	6	1
1:A:107:CYS:O	1:A:109:GLU:N	0.67	2.28	9	6
1:A:168:GLU:OE2	1:A:169:ALA:N	0.67	2.28	9	1
1:A:145:MET:O	1:A:145:MET:SD	0.67	2.53	15	3
1:A:145:MET:CG	1:A:145:MET:O	0.67	2.43	13	1
1:A:115:GLU:CD	1:A:115:GLU:N	0.67	2.48	16	1
1:A:145:MET:O	1:A:152:GLY:N	0.67	2.28	12	2
1:A:45:THR:N	1:A:204:ASP:OD2	0.67	2.27	18	1
1:A:72:CYS:SG	1:A:74:TRP:CG	0.67	2.88	11	2
1:A:149:ASN:H	1:A:220:LEU:HD11	0.67	1.49	20	1
1:A:192:ASP:O	1:A:193:ILE:HD13	0.67	1.90	17	1
1:A:216:GLY:O	1:A:218:CYS:N	0.67	2.27	16	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:203:GLU:H	1:A:203:GLU:CD	0.67	1.91	10	1
1:A:70:MET:N	1:A:115:GLU:OE2	0.67	2.27	11	1
1:A:208:GLN:CD	1:A:208:GLN:N	0.66	2.48	20	7
1:A:213:ASN:O	1:A:215:ASP:N	0.66	2.27	20	9
1:A:216:GLY:O	1:A:217:TYR:O	0.66	2.12	20	6
1:A:150:ASP:OD1	1:A:155:TYR:CZ	0.66	2.47	8	1
1:A:120:VAL:C	1:A:121:TYR:CD1	0.66	2.68	18	4
1:A:210:LEU:HD22	1:A:218:CYS:SG	0.66	2.30	4	1
1:A:64:GLN:N	1:A:64:GLN:OE1	0.66	2.27	17	2
1:A:108:SER:O	1:A:109:GLU:CB	0.66	2.43	5	5
1:A:72:CYS:SG	1:A:103:TYR:OH	0.66	2.53	15	1
1:A:97:HIS:N	1:A:97:HIS:ND1	0.66	2.39	21	2
1:A:159:VAL:N	1:A:192:ASP:O	0.66	2.27	10	11
1:A:203:GLU:CD	1:A:204:ASP:N	0.66	2.49	2	3
1:A:77:GLU:OE2	1:A:119:VAL:HG13	0.66	1.91	11	1
1:A:121:TYR:CD2	1:A:131:LEU:HD12	0.66	2.26	2	1
1:A:114:ALA:CB	1:A:156:ARG:HH12	0.66	2.02	20	2
1:A:73:PHE:CE1	1:A:103:TYR:CD2	0.66	2.84	15	1
1:A:195:GLU:CD	1:A:195:GLU:H	0.66	1.94	3	7
1:A:99:ARG:C	1:A:100:ASN:ND2	0.66	2.48	7	2
1:A:209:TYR:CZ	1:A:213:ASN:CG	0.66	2.69	14	3
1:A:73:PHE:CZ	1:A:115:GLU:CD	0.66	2.69	20	8
1:A:118:ARG:CZ	1:A:118:ARG:C	0.66	2.64	8	1
1:A:64:GLN:HE21	1:A:121:TYR:H	0.66	1.30	3	1
1:A:65:MET:SD	1:A:65:MET:O	0.66	2.53	17	1
1:A:73:PHE:HB2	1:A:91:VAL:HG11	0.66	1.67	6	4
1:A:136:TRP:CB	1:A:177:TYR:CE2	0.66	2.79	17	1
1:A:121:TYR:N	1:A:121:TYR:CD1	0.66	2.63	2	3
1:A:115:GLU:N	1:A:115:GLU:CD	0.66	2.48	12	1
1:A:140:ASP:OD2	1:A:143:GLN:NE2	0.66	2.29	3	3
1:A:91:VAL:HG12	1:A:117:VAL:HA	0.66	1.66	2	7
1:A:72:CYS:SG	1:A:74:TRP:CH2	0.66	2.89	16	1
1:A:203:GLU:OE1	1:A:205:TYR:CZ	0.66	2.49	6	1
1:A:139:HIS:NE2	1:A:157:SER:OG	0.66	2.27	9	1
1:A:163:SER:O	1:A:165:VAL:N	0.66	2.29	12	9
1:A:143:GLN:HE22	1:A:147:GLN:CD	0.66	1.95	14	1
1:A:119:VAL:HG21	1:A:131:LEU:HD23	0.66	1.67	20	1
1:A:73:PHE:CD2	1:A:115:GLU:OE1	0.66	2.48	10	2
1:A:73:PHE:CD1	1:A:115:GLU:OE2	0.66	2.49	10	1
1:A:203:GLU:CD	1:A:205:TYR:CE2	0.66	2.69	6	1
1:A:114:ALA:HB2	1:A:156:ARG:HH12	0.66	1.49	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:192:ASP:CG	1:A:194:ARG:NH1	0.65	2.50	21	8
1:A:93:PHE:N	1:A:200:TYR:O	0.65	2.29	6	11
1:A:44:VAL:CG1	1:A:202:ALA:O	0.65	2.44	3	9
1:A:32:GLU:CD	1:A:32:GLU:N	0.65	2.49	14	2
1:A:195:GLU:CD	1:A:195:GLU:N	0.65	2.50	4	5
1:A:72:CYS:SG	1:A:150:ASP:OD2	0.65	2.53	12	1
1:A:103:TYR:CE2	1:A:206:HIS:NE2	0.65	2.65	17	1
1:A:94:ALA:C	1:A:113:HIS:ND1	0.65	2.48	17	12
1:A:102:THR:OG1	1:A:105:GLU:CG	0.65	2.44	13	8
1:A:126:ILE:HD11	1:A:130:GLU:HB3	0.65	1.67	8	1
1:A:123:PRO:HG2	1:A:126:ILE:H	0.65	1.49	10	2
1:A:35:LEU:O	1:A:98:THR:CG2	0.65	2.44	10	3
1:A:56:VAL:HG12	1:A:201:TYR:OH	0.65	1.90	12	1
1:A:103:TYR:CE1	1:A:115:GLU:CD	0.65	2.70	15	1
1:A:121:TYR:HB2	1:A:126:ILE:HG22	0.65	1.68	10	1
1:A:146:ARG:CZ	1:A:148:GLY:O	0.65	2.45	4	1
1:A:34:ALA:HB3	1:A:97:HIS:CD2	0.65	2.27	17	1
1:A:154:GLN:OE1	1:A:154:GLN:N	0.65	2.30	5	5
1:A:64:GLN:O	1:A:121:TYR:N	0.65	2.27	10	4
1:A:121:TYR:CD1	1:A:131:LEU:CD2	0.65	2.79	18	1
1:A:108:SER:C	1:A:110:LYS:H	0.65	1.94	10	10
1:A:90:GLN:OE1	1:A:118:ARG:CZ	0.65	2.45	13	1
1:A:81:TRP:CH2	1:A:210:LEU:HD12	0.65	2.26	16	1
1:A:203:GLU:OE2	1:A:205:TYR:CE2	0.65	2.50	21	1
1:A:165:VAL:O	1:A:168:GLU:CG	0.65	2.45	17	1
1:A:207:GLN:C	1:A:209:TYR:H	0.65	1.94	21	20
1:A:132:LEU:HD12	1:A:133:LYS:N	0.65	2.07	16	3
1:A:91:VAL:HG23	1:A:207:GLN:OE1	0.65	1.90	11	12
1:A:74:TRP:O	1:A:210:LEU:CD1	0.65	2.45	14	11
1:A:192:ASP:OD2	1:A:194:ARG:CG	0.65	2.45	12	1
1:A:146:ARG:CD	1:A:146:ARG:C	0.65	2.65	3	2
1:A:169:ALA:O	1:A:173:SER:N	0.65	2.30	17	3
1:A:94:ALA:HB3	1:A:116:VAL:HG21	0.65	1.69	5	7
1:A:135:PHE:O	1:A:139:HIS:CG	0.65	2.49	11	5
1:A:48:HIS:CD2	1:A:208:GLN:HE21	0.65	2.10	4	1
1:A:108:SER:OG	1:A:110:LYS:CD	0.65	2.45	15	1
1:A:73:PHE:CD2	1:A:115:GLU:CD	0.65	2.70	10	1
1:A:98:THR:O	1:A:99:ARG:C	0.65	2.33	21	6
1:A:124:GLU:CD	1:A:124:GLU:H	0.65	1.96	2	2
1:A:121:TYR:CD2	1:A:131:LEU:HD11	0.65	2.27	9	3
1:A:139:HIS:CG	1:A:140:ASP:N	0.65	2.62	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:205:TYR:N	1:A:205:TYR:CD1	0.65	2.62	10	3
1:A:114:ALA:O	1:A:116:VAL:HG22	0.65	1.92	2	5
1:A:70:MET:CB	1:A:139:HIS:NE2	0.65	2.60	20	4
1:A:218:CYS:SG	1:A:218:CYS:O	0.65	2.54	5	2
1:A:98:THR:CG2	1:A:100:ASN:HD21	0.65	2.01	7	1
1:A:102:THR:C	1:A:106:VAL:HG13	0.65	2.12	7	1
1:A:139:HIS:O	1:A:223:THR:CG2	0.65	2.45	18	8
1:A:89:THR:C	1:A:90:GLN:NE2	0.65	2.50	2	6
1:A:195:GLU:OE1	1:A:195:GLU:N	0.65	2.30	4	3
1:A:196:GLY:O	1:A:197:GLN:CB	0.65	2.45	7	2
1:A:154:GLN:NE2	1:A:155:TYR:OH	0.65	2.31	3	3
1:A:100:ASN:O	1:A:101:PRO:O	0.64	2.14	15	3
1:A:195:GLU:N	1:A:195:GLU:CD	0.64	2.50	13	5
1:A:83:LEU:C	1:A:84:LYS:HZ1	0.64	1.95	5	1
1:A:34:ALA:CB	1:A:97:HIS:CD2	0.64	2.79	7	1
1:A:184:HIS:C	1:A:184:HIS:CD2	0.64	2.68	11	1
1:A:64:GLN:CA	1:A:121:TYR:O	0.64	2.45	20	1
1:A:48:HIS:NE2	1:A:208:GLN:CD	0.64	2.50	18	5
1:A:144:GLY:CA	1:A:190:THR:HG21	0.64	2.21	13	4
1:A:203:GLU:OE2	1:A:205:TYR:CD2	0.64	2.50	21	1
1:A:65:MET:O	1:A:162:THR:HG23	0.64	1.92	2	1
1:A:172:ARG:O	1:A:176:GLU:CG	0.64	2.45	14	3
1:A:34:ALA:CB	1:A:110:LYS:O	0.64	2.45	14	4
1:A:145:MET:O	1:A:152:GLY:O	0.64	2.16	20	7
1:A:192:ASP:CG	1:A:194:ARG:NH2	0.64	2.50	5	3
1:A:203:GLU:CD	1:A:205:TYR:CZ	0.64	2.70	6	1
1:A:50:VAL:HG21	1:A:81:TRP:CD2	0.64	2.27	6	2
1:A:197:GLN:O	1:A:198:VAL:CB	0.64	2.46	21	1
1:A:103:TYR:CD1	1:A:115:GLU:CD	0.64	2.70	15	1
1:A:105:GLU:O	1:A:110:LYS:NZ	0.64	2.30	17	1
1:A:197:GLN:H	1:A:197:GLN:CD	0.64	1.95	5	2
1:A:176:GLU:OE2	1:A:177:TYR:CD2	0.64	2.51	17	1
1:A:124:GLU:H	1:A:124:GLU:CD	0.64	1.96	6	3
1:A:139:HIS:O	1:A:222:GLY:CA	0.64	2.45	14	2
1:A:151:PHE:CG	1:A:151:PHE:O	0.64	2.49	3	2
1:A:210:LEU:HD13	1:A:216:GLY:O	0.64	1.92	19	2
1:A:55:THR:C	1:A:56:VAL:HG22	0.64	2.13	15	4
1:A:168:GLU:CD	1:A:169:ALA:N	0.64	2.50	9	1
1:A:122:ARG:CG	1:A:122:ARG:O	0.64	2.46	12	1
1:A:98:THR:C	1:A:100:ASN:HD22	0.64	1.96	7	1
1:A:83:LEU:HD11	1:A:134:VAL:HG21	0.64	1.69	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:212:LYS:CB	1:A:212:LYS:NZ	0.64	2.60	17	1
1:A:115:GLU:CG	1:A:154:GLN:O	0.64	2.46	14	3
1:A:48:HIS:CD2	1:A:208:GLN:CD	0.64	2.71	16	4
1:A:70:MET:O	1:A:155:TYR:O	0.64	2.15	15	2
1:A:103:TYR:CD1	1:A:103:TYR:O	0.64	2.51	5	1
1:A:42:ILE:O	1:A:42:ILE:CG1	0.64	2.46	6	1
1:A:192:ASP:OD2	1:A:194:ARG:CD	0.64	2.46	12	1
1:A:71:GLY:N	1:A:115:GLU:OE2	0.64	2.30	11	1
1:A:77:GLU:OE2	1:A:208:GLN:NE2	0.64	2.31	20	1
1:A:209:TYR:CE1	1:A:213:ASN:OD1	0.63	2.51	17	1
1:A:31:ALA:O	1:A:97:HIS:CD2	0.63	2.51	17	1
1:A:154:GLN:NE2	1:A:155:TYR:CZ	0.63	2.66	3	5
1:A:184:HIS:O	1:A:184:HIS:CG	0.63	2.51	11	1
1:A:49:HIS:CG	1:A:212:LYS:CE	0.63	2.81	21	1
1:A:61:GLU:O	1:A:122:ARG:NE	0.63	2.31	20	1
1:A:96:GLY:H	1:A:113:HIS:CE1	0.63	2.11	21	5
1:A:171:LEU:C	1:A:171:LEU:HD12	0.63	2.13	13	1
1:A:128:PHE:CZ	1:A:132:LEU:HD23	0.63	2.28	16	1
1:A:77:GLU:CD	1:A:78:ARG:N	0.63	2.50	18	1
1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:OE2	0.63	2.30	21	1
1:A:94:ALA:CB	1:A:198:VAL:HG13	0.63	2.23	21	1
1:A:42:ILE:CG1	1:A:42:ILE:O	0.63	2.47	20	1
1:A:192:ASP:OD1	1:A:194:ARG:CZ	0.63	2.46	4	6
1:A:112:GLY:O	2:A:21:MYR:C14	0.63	2.46	8	2
1:A:81:TRP:CZ2	1:A:211:SER:OG	0.63	2.47	13	1
1:A:219:GLY:C	1:A:220:LEU:HD12	0.63	2.14	11	1
1:A:45:THR:O	1:A:45:THR:CG2	0.63	2.47	16	6
1:A:192:ASP:OD1	1:A:194:ARG:CD	0.63	2.46	11	3
1:A:153:THR:O	1:A:156:ARG:CD	0.63	2.47	2	3
1:A:210:LEU:O	1:A:214:PRO:N	0.63	2.32	7	2
1:A:198:VAL:HG13	1:A:198:VAL:O	0.63	1.91	7	3
1:A:70:MET:CG	1:A:71:GLY:H	0.63	2.07	13	2
1:A:74:TRP:CE2	1:A:209:TYR:OH	0.63	2.46	6	1
1:A:219:GLY:O	1:A:220:LEU:CG	0.63	2.46	19	1
1:A:104:LYS:O	1:A:107:CYS:SG	0.63	2.54	5	3
1:A:77:GLU:OE2	1:A:90:GLN:CA	0.63	2.47	13	2
1:A:84:LYS:CA	1:A:84:LYS:NZ	0.63	2.62	5	1
1:A:139:HIS:ND1	1:A:139:HIS:O	0.63	2.31	9	2
1:A:196:GLY:O	1:A:197:GLN:HB3	0.63	1.92	7	1
1:A:140:ASP:CG	1:A:143:GLN:HE21	0.63	1.96	2	2
1:A:95:GLY:O	1:A:112:GLY:O	0.63	2.17	21	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:215:ASP:O	1:A:217:TYR:N	0.63	2.32	11	8
1:A:64:GLN:OE1	1:A:64:GLN:N	0.63	2.31	5	5
1:A:99:ARG:O	1:A:100:ASN:C	0.63	2.36	9	2
1:A:84:LYS:N	1:A:84:LYS:NZ	0.63	2.47	5	1
1:A:178:GLN:OE1	1:A:189:ILE:CG1	0.63	2.47	9	3
1:A:103:TYR:O	1:A:107:CYS:SG	0.63	2.56	21	2
1:A:87:TYR:CD1	1:A:120:VAL:HG22	0.63	2.28	15	1
1:A:73:PHE:CD1	1:A:206:HIS:ND1	0.63	2.64	19	4
1:A:83:LEU:C	1:A:83:LEU:HD12	0.63	2.15	16	3
1:A:137:GLU:CD	1:A:137:GLU:N	0.63	2.52	4	1
1:A:28:VAL:O	1:A:28:VAL:HG13	0.63	1.92	12	3
1:A:93:PHE:CD2	1:A:101:PRO:O	0.63	2.52	5	3
1:A:145:MET:SD	1:A:145:MET:C	0.63	2.77	5	3
1:A:44:VAL:O	1:A:45:THR:C	0.63	2.36	4	5
1:A:115:GLU:N	1:A:115:GLU:OE1	0.63	2.32	12	1
1:A:128:PHE:O	1:A:128:PHE:CD1	0.63	2.51	7	1
1:A:83:LEU:C	1:A:83:LEU:CD1	0.63	2.68	11	2
1:A:159:VAL:CG1	1:A:191:THR:CG2	0.62	2.77	14	2
1:A:192:ASP:CG	1:A:194:ARG:CZ	0.62	2.67	16	5
1:A:219:GLY:O	1:A:220:LEU:CB	0.62	2.47	19	5
1:A:178:GLN:NE2	1:A:187:GLY:O	0.62	2.30	4	4
1:A:57:GLU:H	1:A:57:GLU:CD	0.62	1.97	5	2
1:A:126:ILE:HD11	1:A:130:GLU:CB	0.62	2.22	8	1
1:A:122:ARG:O	1:A:122:ARG:CG	0.62	2.47	5	1
1:A:64:GLN:HE22	1:A:121:TYR:CA	0.62	2.06	3	1
1:A:46:ALA:O	1:A:55:THR:OG1	0.62	2.17	5	16
1:A:154:GLN:CD	1:A:154:GLN:H	0.62	1.98	18	4
1:A:215:ASP:OD2	1:A:217:TYR:CE1	0.62	2.52	6	1
1:A:149:ASN:N	1:A:149:ASN:OD1	0.62	2.30	14	1
1:A:143:GLN:O	1:A:144:GLY:O	0.62	2.16	9	11
1:A:103:TYR:CB	1:A:206:HIS:CE1	0.62	2.82	8	4
1:A:91:VAL:HG21	1:A:206:HIS:O	0.62	1.93	13	11
1:A:83:LEU:CD1	1:A:83:LEU:C	0.62	2.68	16	1
1:A:49:HIS:CE1	1:A:212:LYS:HZ2	0.62	2.12	15	1
1:A:32:GLU:OE2	1:A:33:GLU:CB	0.62	2.47	8	1
1:A:74:TRP:C	1:A:210:LEU:CD1	0.62	2.68	12	3
1:A:121:TYR:CE2	1:A:131:LEU:HD13	0.62	2.29	11	2
1:A:209:TYR:O	1:A:213:ASN:N	0.62	2.32	21	2
1:A:100:ASN:OD1	1:A:113:HIS:NE2	0.62	2.32	17	1
1:A:103:TYR:CD1	1:A:103:TYR:C	0.62	2.69	19	6
1:A:157:SER:O	1:A:192:ASP:N	0.62	2.33	2	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:33:GLU:O	1:A:34:ALA:O	0.62	2.17	7	11
1:A:70:MET:O	1:A:156:ARG:O	0.62	2.18	8	4
1:A:209:TYR:C	1:A:209:TYR:CD1	0.62	2.72	18	4
1:A:81:TRP:CE2	1:A:211:SER:OG	0.62	2.46	4	1
1:A:196:GLY:O	1:A:197:GLN:CG	0.62	2.48	3	1
1:A:216:GLY:O	1:A:217:TYR:C	0.62	2.38	4	5
1:A:118:ARG:HD2	1:A:199:PHE:CZ	0.62	2.30	12	5
1:A:54:ARG:O	1:A:87:TYR:OH	0.62	2.18	15	18
1:A:143:GLN:HE22	1:A:147:GLN:NE2	0.61	1.92	14	1
1:A:28:VAL:O	1:A:29:ILE:HD13	0.61	1.94	8	1
1:A:106:VAL:CG1	1:A:111:THR:OG1	0.61	2.46	10	4
1:A:140:ASP:OD1	1:A:140:ASP:N	0.61	2.32	13	2
1:A:77:GLU:OE2	1:A:91:VAL:HG13	0.61	1.95	5	2
1:A:28:VAL:O	1:A:28:VAL:CG1	0.61	2.47	15	5
1:A:140:ASP:OD1	1:A:142:THR:N	0.61	2.32	12	1
1:A:127:SER:O	1:A:130:GLU:OE2	0.61	2.17	21	1
1:A:136:TRP:CG	1:A:177:TYR:CE2	0.61	2.87	21	1
1:A:136:TRP:NE1	1:A:173:SER:OG	0.61	2.33	7	2
1:A:50:VAL:HG22	1:A:211:SER:CB	0.61	2.25	19	3
1:A:54:ARG:CB	1:A:87:TYR:OH	0.61	2.48	9	5
1:A:129:GLU:O	1:A:133:LYS:N	0.61	2.32	13	5
1:A:145:MET:C	1:A:145:MET:SD	0.61	2.79	19	1
1:A:134:VAL:O	1:A:138:ASN:OD1	0.61	2.19	21	12
1:A:140:ASP:OD1	1:A:147:GLN:NE2	0.61	2.33	16	1
1:A:156:ARG:HH22	1:A:192:ASP:CB	0.61	2.08	9	1
1:A:100:ASN:CB	1:A:101:PRO:CD	0.61	2.79	7	2
1:A:134:VAL:O	1:A:138:ASN:CG	0.61	2.39	5	13
1:A:121:TYR:CG	1:A:131:LEU:CD2	0.61	2.84	19	1
1:A:143:GLN:O	1:A:146:ARG:O	0.61	2.17	2	3
1:A:198:VAL:HG11	1:A:200:TYR:CE2	0.61	2.31	15	2
1:A:209:TYR:CE2	1:A:217:TYR:OH	0.61	2.52	14	1
1:A:155:TYR:O	1:A:156:ARG:O	0.61	2.18	13	2
1:A:73:PHE:CE1	1:A:115:GLU:OE2	0.61	2.54	6	3
1:A:163:SER:C	1:A:165:VAL:N	0.61	2.51	12	17
1:A:43:PRO:O	1:A:44:VAL:CG1	0.61	2.49	4	6
1:A:89:THR:C	1:A:90:GLN:HE21	0.61	1.99	14	2
1:A:208:GLN:O	1:A:210:LEU:N	0.61	2.34	6	1
1:A:139:HIS:O	1:A:139:HIS:ND1	0.61	2.33	15	1
1:A:126:ILE:HG22	1:A:130:GLU:CD	0.61	2.15	3	1
1:A:157:SER:OG	1:A:190:THR:O	0.61	2.18	14	5
1:A:163:SER:OG	1:A:164:ALA:N	0.61	2.34	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:ILE:HG21	1:A:109:GLU:O	0.61	1.95	13	4
1:A:209:TYR:CE1	1:A:213:ASN:CG	0.61	2.75	17	1
1:A:54:ARG:C	1:A:87:TYR:OH	0.61	2.40	4	16
1:A:208:GLN:CA	1:A:208:GLN:OE1	0.61	2.48	20	7
1:A:140:ASP:O	1:A:143:GLN:OE1	0.61	2.19	9	2
1:A:216:GLY:O	1:A:218:CYS:SG	0.61	2.57	4	1
1:A:45:THR:CG2	1:A:45:THR:O	0.60	2.49	18	5
1:A:128:PHE:CE1	1:A:132:LEU:CD1	0.60	2.84	3	3
1:A:157:SER:OG	1:A:190:THR:CG2	0.60	2.48	6	3
1:A:119:VAL:HG23	1:A:121:TYR:OH	0.60	1.96	4	1
1:A:106:VAL:C	1:A:108:SER:N	0.60	2.53	16	6
1:A:209:TYR:CD2	1:A:217:TYR:OH	0.60	2.52	14	1
1:A:136:TRP:O	1:A:223:THR:CG2	0.60	2.47	12	2
1:A:70:MET:C	1:A:147:GLN:OE1	0.60	2.39	13	3
1:A:185:ASN:ND2	1:A:186:PHE:CD2	0.60	2.69	18	1
1:A:76:ALA:HB1	1:A:117:VAL:HG21	0.60	1.72	13	3
1:A:124:GLU:OE2	1:A:125:HIS:NE2	0.60	2.34	21	1
1:A:35:LEU:HD13	1:A:110:LYS:CB	0.60	2.25	3	1
1:A:70:MET:O	1:A:147:GLN:OE1	0.60	2.18	17	3
1:A:104:LYS:O	1:A:104:LYS:CD	0.60	2.49	19	3
1:A:209:TYR:CE2	1:A:213:ASN:CB	0.60	2.85	21	2
1:A:209:TYR:CD1	1:A:209:TYR:C	0.60	2.75	20	3
1:A:91:VAL:HG13	1:A:117:VAL:HG13	0.60	1.72	9	1
1:A:47:LYS:O	1:A:48:HIS:C	0.60	2.40	17	20
1:A:133:LYS:CB	1:A:133:LYS:NZ	0.60	2.65	10	1
1:A:144:GLY:N	1:A:190:THR:HG21	0.60	2.11	6	6
1:A:130:GLU:O	1:A:131:LEU:C	0.60	2.39	18	10
1:A:103:TYR:C	1:A:103:TYR:CD1	0.60	2.75	14	3
1:A:126:ILE:HD11	1:A:130:GLU:CG	0.60	2.27	2	2
1:A:203:GLU:OE2	1:A:204:ASP:CB	0.60	2.50	6	1
1:A:50:VAL:HG22	1:A:211:SER:HB2	0.60	1.74	9	1
1:A:142:THR:OG1	1:A:188:PRO:O	0.60	2.18	11	1
1:A:57:GLU:CD	1:A:57:GLU:H	0.60	2.00	6	2
1:A:89:THR:O	1:A:90:GLN:OE1	0.60	2.20	8	1
1:A:77:GLU:O	1:A:77:GLU:OE1	0.60	2.19	7	1
1:A:142:THR:HG23	1:A:142:THR:O	0.60	1.95	11	1
1:A:146:ARG:HB2	1:A:152:GLY:H	0.60	1.56	2	1
1:A:156:ARG:HH11	1:A:156:ARG:CG	0.60	2.09	20	1
1:A:143:GLN:CA	1:A:190:THR:OG1	0.60	2.50	3	1
1:A:137:GLU:O	1:A:223:THR:OG1	0.60	2.19	18	2
1:A:99:ARG:C	1:A:100:ASN:HD22	0.60	2.00	15	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:LEU:HD12	1:A:83:LEU:O	0.60	1.97	5	2
1:A:118:ARG:NH2	1:A:120:VAL:HG12	0.60	2.12	7	1
1:A:140:ASP:O	1:A:140:ASP:OD2	0.60	2.20	2	2
1:A:97:HIS:C	1:A:97:HIS:CD2	0.60	2.73	14	1
1:A:31:ALA:HB2	1:A:97:HIS:CE1	0.60	2.32	19	2
1:A:118:ARG:CG	1:A:118:ARG:O	0.60	2.50	10	1
1:A:147:GLN:O	1:A:150:ASP:OD1	0.60	2.20	9	2
1:A:34:ALA:HB2	1:A:97:HIS:CD2	0.60	2.31	7	3
1:A:156:ARG:HH22	1:A:194:ARG:HH22	0.60	1.38	2	2
1:A:157:SER:OG	1:A:191:THR:HG23	0.60	1.97	2	1
1:A:140:ASP:CG	1:A:143:GLN:HE22	0.59	2.00	17	3
1:A:174:LYS:CG	1:A:175:GLU:N	0.59	2.65	17	1
1:A:82:VAL:HG23	1:A:82:VAL:O	0.59	1.96	12	5
1:A:119:VAL:HG23	1:A:119:VAL:O	0.59	1.96	19	3
1:A:154:GLN:CG	1:A:155:TYR:CZ	0.59	2.85	6	1
1:A:107:CYS:C	1:A:109:GLU:N	0.59	2.54	9	6
1:A:57:GLU:OE1	1:A:57:GLU:N	0.59	2.35	7	1
1:A:175:GLU:CG	1:A:176:GLU:N	0.59	2.65	2	1
1:A:141:PRO:CG	1:A:186:PHE:CZ	0.59	2.86	17	1
1:A:82:VAL:O	1:A:82:VAL:HG23	0.59	1.96	2	5
1:A:90:GLN:O	1:A:118:ARG:N	0.59	2.34	2	4
1:A:219:GLY:O	1:A:220:LEU:CD1	0.59	2.50	14	1
1:A:117:VAL:O	1:A:117:VAL:HG23	0.59	1.97	8	4
1:A:77:GLU:OE2	1:A:208:GLN:OE1	0.59	2.20	7	4
1:A:117:VAL:CG2	1:A:117:VAL:O	0.59	2.50	3	3
1:A:86:VAL:CG2	1:A:121:TYR:CE1	0.59	2.84	9	2
1:A:180:VAL:O	1:A:184:HIS:NE2	0.59	2.35	3	1
1:A:61:GLU:CD	1:A:61:GLU:H	0.59	1.99	16	1
1:A:69:GLY:O	1:A:156:ARG:O	0.59	2.20	21	3
1:A:103:TYR:CG	1:A:115:GLU:OE2	0.59	2.56	15	1
1:A:105:GLU:C	1:A:110:LYS:HZ1	0.59	1.99	17	1
1:A:195:GLU:O	1:A:197:GLN:OE1	0.59	2.21	17	4
1:A:42:ILE:CG2	1:A:201:TYR:O	0.59	2.51	17	1
1:A:117:VAL:O	1:A:117:VAL:CG2	0.59	2.50	8	2
1:A:105:GLU:HG3	1:A:106:VAL:N	0.59	2.13	8	1
1:A:60:PRO:CG	1:A:87:TYR:CD2	0.59	2.86	16	4
1:A:177:TYR:CD1	1:A:181:LEU:CD1	0.59	2.86	13	1
1:A:209:TYR:CD1	1:A:210:LEU:N	0.59	2.71	16	4
1:A:74:TRP:O	1:A:77:GLU:OE1	0.59	2.20	18	1
1:A:148:GLY:HA3	1:A:220:LEU:HD12	0.59	1.75	4	1
1:A:63:THR:O	1:A:65:MET:SD	0.59	2.60	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:154:GLN:H	1:A:154:GLN:CD	0.59	2.00	17	2
1:A:60:PRO:O	1:A:63:THR:OG1	0.59	2.20	8	11
1:A:34:ALA:O	1:A:35:LEU:O	0.59	2.20	14	5
1:A:194:ARG:HE	1:A:197:GLN:HE22	0.59	1.39	10	1
1:A:57:GLU:CD	1:A:57:GLU:N	0.59	2.55	7	3
1:A:142:THR:O	1:A:190:THR:OG1	0.59	2.20	17	1
1:A:102:THR:OG1	1:A:105:GLU:OE1	0.59	2.21	10	1
1:A:93:PHE:CZ	1:A:202:ALA:HB2	0.59	2.33	4	1
1:A:91:VAL:HG22	1:A:207:GLN:OE1	0.59	1.98	2	1
1:A:169:ALA:O	1:A:173:SER:OG	0.59	2.20	21	7
1:A:35:LEU:CD1	1:A:35:LEU:N	0.59	2.55	17	1
1:A:72:CYS:C	1:A:74:TRP:H	0.59	2.00	14	17
1:A:123:PRO:O	1:A:126:ILE:O	0.59	2.20	19	5
1:A:115:GLU:O	1:A:115:GLU:OE2	0.59	2.21	4	3
1:A:103:TYR:CB	1:A:206:HIS:NE2	0.59	2.66	10	2
1:A:129:GLU:O	1:A:133:LYS:CB	0.59	2.50	6	3
1:A:64:GLN:NE2	1:A:166:GLN:HE22	0.59	1.96	18	2
1:A:126:ILE:HD13	1:A:130:GLU:HG2	0.59	1.75	7	2
1:A:197:GLN:O	1:A:198:VAL:O	0.59	2.21	13	5
1:A:28:VAL:CG1	1:A:28:VAL:O	0.59	2.51	13	5
1:A:114:ALA:CB	1:A:156:ARG:NH1	0.59	2.65	20	1
1:A:129:GLU:OE1	1:A:129:GLU:O	0.58	2.21	8	2
1:A:146:ARG:O	1:A:147:GLN:OE1	0.58	2.21	19	3
1:A:49:HIS:NE2	1:A:212:LYS:NZ	0.58	2.48	15	1
1:A:208:GLN:O	1:A:211:SER:N	0.58	2.35	19	10
1:A:121:TYR:CE2	1:A:131:LEU:HD11	0.58	2.33	6	3
1:A:142:THR:O	1:A:142:THR:OG1	0.58	2.21	18	3
1:A:77:GLU:OE1	1:A:208:GLN:OE1	0.58	2.21	20	1
1:A:49:HIS:CE1	1:A:212:LYS:NZ	0.58	2.71	15	1
1:A:70:MET:HE2	1:A:135:PHE:CZ	0.58	2.33	14	1
1:A:77:GLU:OE2	1:A:90:GLN:O	0.58	2.22	12	5
1:A:159:VAL:O	1:A:159:VAL:CG2	0.58	2.51	16	4
1:A:62:GLY:O	1:A:123:PRO:CD	0.58	2.52	6	1
1:A:64:GLN:OE1	1:A:123:PRO:CG	0.58	2.51	4	1
1:A:140:ASP:O	1:A:147:GLN:OE1	0.58	2.22	2	1
1:A:137:GLU:O	1:A:222:GLY:O	0.58	2.22	14	1
1:A:143:GLN:HE22	1:A:147:GLN:CB	0.58	2.12	14	1
1:A:33:GLU:O	1:A:34:ALA:C	0.58	2.42	11	9
1:A:198:VAL:HG23	1:A:199:PHE:N	0.58	2.13	19	1
1:A:209:TYR:CZ	1:A:213:ASN:CB	0.58	2.86	21	2
1:A:126:ILE:CD1	1:A:130:GLU:CD	0.58	2.72	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:LEU:HD21	1:A:110:LYS:HB3	0.58	1.74	21	1
1:A:197:GLN:O	1:A:198:VAL:HB	0.58	1.99	21	1
1:A:143:GLN:OE1	1:A:147:GLN:OE1	0.58	2.21	7	1
1:A:133:LYS:O	1:A:137:GLU:OE2	0.58	2.22	4	1
1:A:105:GLU:O	1:A:108:SER:OG	0.58	2.21	3	1
1:A:132:LEU:HD23	1:A:133:LYS:H	0.58	1.57	10	1
1:A:64:GLN:CB	1:A:121:TYR:CE1	0.58	2.87	10	1
1:A:188:PRO:O	1:A:189:ILE:O	0.58	2.22	4	7
1:A:103:TYR:O	1:A:107:CYS:CB	0.58	2.52	16	1
1:A:178:GLN:OE1	1:A:182:SER:CB	0.58	2.51	15	2
1:A:80:PHE:CB	1:A:119:VAL:HG11	0.58	2.27	18	1
1:A:201:TYR:CD1	1:A:201:TYR:N	0.58	2.72	4	1
1:A:121:TYR:CG	1:A:131:LEU:HD12	0.58	2.33	2	1
1:A:138:ASN:O	1:A:221:GLY:O	0.58	2.21	20	1
1:A:147:GLN:OE1	1:A:155:TYR:O	0.58	2.21	20	1
1:A:136:TRP:CZ2	1:A:173:SER:HA	0.58	2.34	20	1
1:A:70:MET:SD	1:A:157:SER:CB	0.58	2.92	14	1
1:A:115:GLU:OE2	1:A:115:GLU:O	0.58	2.22	16	1
1:A:114:ALA:HB2	1:A:156:ARG:HH21	0.58	1.54	5	1
1:A:192:ASP:CG	1:A:194:ARG:HH21	0.58	2.01	20	2
1:A:121:TYR:CE2	1:A:131:LEU:HD22	0.58	2.34	11	3
1:A:140:ASP:OD2	1:A:143:GLN:OE1	0.58	2.22	11	2
1:A:118:ARG:CZ	1:A:201:TYR:OH	0.58	2.52	15	1
1:A:195:GLU:OE1	1:A:195:GLU:O	0.58	2.21	3	1
1:A:71:GLY:O	1:A:72:CYS:O	0.58	2.22	19	1
1:A:126:ILE:HD13	1:A:130:GLU:HG3	0.58	1.74	10	2
1:A:205:TYR:O	1:A:209:TYR:CD2	0.58	2.56	6	3
1:A:192:ASP:CG	1:A:194:ARG:HH12	0.58	2.01	3	1
1:A:78:ARG:C	1:A:80:PHE:H	0.58	2.01	13	11
1:A:145:MET:O	1:A:145:MET:CG	0.58	2.51	15	2
1:A:42:ILE:O	1:A:43:PRO:O	0.58	2.22	12	4
1:A:107:CYS:C	1:A:109:GLU:H	0.58	2.02	9	7
1:A:172:ARG:O	1:A:176:GLU:OE2	0.58	2.22	9	1
1:A:160:TYR:CB	1:A:197:GLN:NE2	0.58	2.66	7	1
1:A:85:GLY:O	1:A:123:PRO:HG3	0.58	1.99	15	1
1:A:87:TYR:CE1	1:A:88:SER:OG	0.58	2.57	7	10
1:A:139:HIS:O	1:A:222:GLY:O	0.58	2.22	19	1
1:A:166:GLN:O	1:A:170:ALA:CB	0.58	2.52	10	2
1:A:218:CYS:O	1:A:219:GLY:C	0.58	2.41	10	4
1:A:178:GLN:HE22	1:A:187:GLY:C	0.58	2.02	13	1
1:A:178:GLN:O	1:A:182:SER:OG	0.58	2.22	6	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:115:GLU:OE2	1:A:156:ARG:O	0.58	2.21	12	1
1:A:77:GLU:OE1	1:A:90:GLN:O	0.58	2.22	11	1
1:A:90:GLN:N	1:A:90:GLN:CD	0.58	2.56	20	2
1:A:176:GLU:O	1:A:176:GLU:OE1	0.58	2.22	20	2
1:A:136:TRP:CZ2	1:A:173:SER:N	0.58	2.72	20	1
1:A:203:GLU:OE1	1:A:205:TYR:OH	0.57	2.21	12	2
1:A:221:GLY:O	1:A:222:GLY:C	0.57	2.41	3	1
1:A:100:ASN:CG	1:A:113:HIS:HE2	0.57	2.01	17	1
1:A:109:GLU:OE2	1:A:153:THR:OG1	0.57	2.21	17	1
1:A:46:ALA:O	1:A:55:THR:N	0.57	2.37	13	10
1:A:42:ILE:HG23	1:A:100:ASN:OD1	0.57	1.98	8	1
1:A:99:ARG:O	1:A:101:PRO:CD	0.57	2.53	9	3
1:A:101:PRO:CG	1:A:113:HIS:CD2	0.57	2.87	3	2
1:A:140:ASP:OD1	1:A:223:THR:OG1	0.57	2.22	9	1
1:A:127:SER:OG	1:A:128:PHE:N	0.57	2.36	15	2
1:A:205:TYR:CE1	1:A:209:TYR:CE1	0.57	2.93	17	5
1:A:55:THR:C	1:A:56:VAL:HG12	0.57	2.18	21	2
1:A:56:VAL:O	1:A:58:PRO:O	0.57	2.21	8	1
1:A:150:ASP:OD2	1:A:155:TYR:CD1	0.57	2.57	18	1
1:A:77:GLU:OE2	1:A:89:THR:OG1	0.57	2.22	20	3
1:A:62:GLY:O	1:A:122:ARG:CD	0.57	2.52	20	1
1:A:90:GLN:OE1	1:A:118:ARG:O	0.57	2.22	20	1
1:A:121:TYR:CD2	1:A:126:ILE:CG2	0.57	2.87	15	1
1:A:143:GLN:H	1:A:143:GLN:CD	0.57	2.01	13	1
1:A:74:TRP:HE1	1:A:210:LEU:CB	0.57	2.12	6	1
1:A:136:TRP:O	1:A:223:THR:CB	0.57	2.52	7	2
1:A:70:MET:SD	1:A:135:PHE:CD1	0.57	2.97	9	1
1:A:204:ASP:O	1:A:206:HIS:N	0.57	2.36	2	4
1:A:81:TRP:CZ3	1:A:208:GLN:HA	0.57	2.35	16	15
1:A:176:GLU:CG	1:A:177:TYR:N	0.57	2.67	16	4
1:A:77:GLU:O	1:A:77:GLU:CD	0.57	2.43	8	2
1:A:79:LYS:O	1:A:82:VAL:HG22	0.57	2.00	6	4
1:A:115:GLU:CD	1:A:156:ARG:O	0.57	2.42	12	1
1:A:147:GLN:O	1:A:150:ASP:OD2	0.57	2.22	3	1
1:A:99:ARG:HH21	1:A:100:ASN:C	0.57	2.03	19	1
1:A:89:THR:C	1:A:90:GLN:OE1	0.57	2.43	21	2
1:A:71:GLY:O	1:A:72:CYS:HB3	0.57	2.00	18	6
1:A:123:PRO:O	1:A:124:GLU:CB	0.57	2.52	10	2
1:A:77:GLU:O	1:A:77:GLU:OE2	0.57	2.22	10	2
1:A:134:VAL:HG13	1:A:138:ASN:ND2	0.57	2.15	13	1
1:A:128:PHE:CE1	1:A:132:LEU:HD11	0.57	2.34	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:THR:O	1:A:56:VAL:CG1	0.57	2.52	10	7
1:A:204:ASP:OD1	1:A:204:ASP:N	0.57	2.37	14	2
1:A:128:PHE:CE2	1:A:132:LEU:CD1	0.57	2.88	2	4
1:A:70:MET:SD	1:A:139:HIS:CG	0.57	2.97	9	1
1:A:100:ASN:O	1:A:105:GLU:OE1	0.57	2.22	21	1
1:A:64:GLN:O	1:A:121:TYR:O	0.57	2.22	20	1
1:A:196:GLY:C	1:A:197:GLN:CG	0.57	2.72	3	1
1:A:31:ALA:CB	1:A:97:HIS:CE1	0.57	2.88	19	3
1:A:121:TYR:CD2	1:A:131:LEU:CD2	0.57	2.88	12	2
1:A:203:GLU:CD	1:A:204:ASP:H	0.57	2.02	6	2
1:A:48:HIS:N	1:A:55:THR:HG23	0.57	2.14	4	2
1:A:208:GLN:OE1	1:A:208:GLN:CA	0.57	2.53	8	5
1:A:128:PHE:CZ	1:A:132:LEU:CD2	0.57	2.88	12	2
1:A:70:MET:O	1:A:147:GLN:CD	0.57	2.42	12	3
1:A:147:GLN:OE1	1:A:157:SER:N	0.57	2.37	18	1
1:A:136:TRP:CG	1:A:177:TYR:CD2	0.57	2.92	17	1
1:A:81:TRP:CE3	1:A:208:GLN:OE1	0.57	2.57	14	1
1:A:56:VAL:O	1:A:57:GLU:O	0.57	2.22	5	14
1:A:162:THR:O	1:A:163:SER:OG	0.57	2.22	10	2
1:A:99:ARG:CD	1:A:100:ASN:ND2	0.57	2.67	9	1
1:A:167:MET:O	1:A:171:LEU:HD12	0.57	2.00	11	1
1:A:132:LEU:HD23	1:A:173:SER:HB3	0.57	1.76	4	1
1:A:32:GLU:N	1:A:32:GLU:OE1	0.57	2.38	2	1
1:A:178:GLN:OE1	1:A:182:SER:OG	0.57	2.22	15	1
1:A:139:HIS:O	1:A:223:THR:OG1	0.56	2.22	17	3
1:A:93:PHE:CD1	1:A:93:PHE:N	0.56	2.72	17	4
1:A:106:VAL:O	1:A:107:CYS:C	0.56	2.44	8	7
1:A:222:GLY:O	1:A:223:THR:OG1	0.56	2.22	14	2
1:A:121:TYR:CG	1:A:131:LEU:CD1	0.56	2.88	2	3
1:A:32:GLU:O	1:A:32:GLU:OE2	0.56	2.23	12	1
1:A:103:TYR:CD2	1:A:206:HIS:CE1	0.56	2.93	17	2
1:A:130:GLU:CD	1:A:130:GLU:C	0.56	2.64	19	3
1:A:163:SER:C	1:A:165:VAL:H	0.56	2.04	15	7
1:A:80:PHE:CE1	1:A:134:VAL:HG12	0.56	2.34	13	3
1:A:72:CYS:H	1:A:150:ASP:CG	0.56	2.03	11	2
1:A:56:VAL:CG1	1:A:201:TYR:CZ	0.56	2.89	12	2
1:A:87:TYR:CD1	1:A:88:SER:N	0.56	2.73	10	16
1:A:109:GLU:C	1:A:111:THR:H	0.56	2.04	11	2
1:A:72:CYS:SG	1:A:73:PHE:N	0.56	2.78	8	1
1:A:80:PHE:CE2	1:A:134:VAL:HG12	0.56	2.35	10	2
1:A:145:MET:O	1:A:152:GLY:C	0.56	2.43	12	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:ALA:CB	1:A:97:HIS:NE2	0.56	2.68	7	2
1:A:128:PHE:CD1	1:A:128:PHE:C	0.56	2.77	20	1
1:A:180:VAL:O	1:A:184:HIS:CD2	0.56	2.58	20	1
1:A:70:MET:HB2	1:A:139:HIS:NE2	0.56	2.15	20	1
1:A:35:LEU:HD22	1:A:108:SER:OG	0.56	2.00	3	1
1:A:33:GLU:CG	1:A:110:LYS:NZ	0.56	2.69	3	1
1:A:213:ASN:C	1:A:215:ASP:H	0.56	2.03	20	9
1:A:90:GLN:N	1:A:90:GLN:NE2	0.56	2.53	14	2
1:A:83:LEU:C	1:A:84:LYS:NZ	0.56	2.59	5	1
1:A:153:THR:HG23	1:A:153:THR:O	0.56	2.00	18	2
1:A:64:GLN:CD	1:A:65:MET:H	0.56	2.04	7	1
1:A:148:GLY:CA	1:A:220:LEU:HD12	0.56	2.30	4	1
1:A:69:GLY:O	1:A:139:HIS:CD2	0.56	2.58	2	1
1:A:76:ALA:O	1:A:80:PHE:CG	0.56	2.58	14	1
1:A:108:SER:OG	1:A:109:GLU:N	0.56	2.37	11	5
1:A:153:THR:OG1	1:A:156:ARG:NH1	0.56	2.39	5	1
1:A:156:ARG:HH22	1:A:192:ASP:CG	0.56	2.04	4	3
1:A:210:LEU:CD2	1:A:218:CYS:SG	0.56	2.93	4	1
1:A:209:TYR:OH	1:A:213:ASN:OD1	0.56	2.22	15	4
1:A:207:GLN:C	1:A:209:TYR:N	0.56	2.58	18	18
1:A:73:PHE:CG	1:A:115:GLU:OE1	0.56	2.59	14	2
1:A:128:PHE:CZ	1:A:132:LEU:CD1	0.56	2.88	13	5
1:A:209:TYR:CE1	1:A:217:TYR:OH	0.56	2.50	16	1
1:A:165:VAL:O	1:A:168:GLU:OE2	0.56	2.22	9	1
1:A:198:VAL:HG12	1:A:198:VAL:O	0.56	1.99	21	1
1:A:146:ARG:CB	1:A:152:GLY:H	0.56	2.13	2	1
1:A:128:PHE:O	1:A:130:GLU:N	0.56	2.39	12	3
1:A:111:THR:O	1:A:112:GLY:C	0.56	2.42	10	10
1:A:160:TYR:CD2	1:A:198:VAL:HG21	0.56	2.33	21	1
1:A:77:GLU:OE2	1:A:89:THR:O	0.56	2.24	21	2
1:A:54:ARG:C	1:A:87:TYR:HH	0.56	2.03	5	12
1:A:77:GLU:OE2	1:A:90:GLN:C	0.56	2.45	5	2
1:A:50:VAL:HG11	1:A:81:TRP:HB2	0.56	1.78	6	2
1:A:147:GLN:OE1	1:A:156:ARG:C	0.56	2.44	18	1
1:A:156:ARG:CG	1:A:156:ARG:NH1	0.56	2.66	20	1
1:A:167:MET:CG	1:A:171:LEU:HD22	0.56	2.31	17	1
1:A:80:PHE:CE1	1:A:134:VAL:CG1	0.56	2.89	13	6
1:A:162:THR:OG1	1:A:166:GLN:OE1	0.56	2.22	5	1
1:A:139:HIS:O	1:A:139:HIS:CG	0.56	2.58	18	2
1:A:89:THR:CG2	1:A:119:VAL:HG12	0.56	2.23	11	1
1:A:203:GLU:OE1	1:A:206:HIS:CD2	0.56	2.59	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:GLY:O	1:A:122:ARG:CB	0.56	2.54	20	1
1:A:64:GLN:HE22	1:A:121:TYR:C	0.56	2.04	3	1
1:A:132:LEU:C	1:A:132:LEU:CD1	0.56	2.70	7	3
1:A:142:THR:C	1:A:190:THR:OG1	0.56	2.44	13	4
1:A:143:GLN:NE2	1:A:147:GLN:HA	0.56	2.16	14	1
1:A:77:GLU:OE1	1:A:90:GLN:CA	0.56	2.54	19	1
1:A:121:TYR:O	1:A:121:TYR:CD1	0.56	2.59	10	1
1:A:89:THR:O	1:A:90:GLN:NE2	0.56	2.38	16	2
1:A:132:LEU:O	1:A:132:LEU:HD12	0.56	2.01	21	1
1:A:81:TRP:CD1	1:A:81:TRP:C	0.55	2.79	16	8
1:A:68:PHE:CZ	1:A:131:LEU:C	0.55	2.79	18	3
1:A:71:GLY:N	1:A:147:GLN:HB3	0.55	2.16	8	1
1:A:83:LEU:O	1:A:83:LEU:HD12	0.55	2.01	15	2
1:A:147:GLN:N	1:A:155:TYR:O	0.55	2.39	3	1
1:A:213:ASN:O	1:A:215:ASP:OD1	0.55	2.23	3	1
1:A:105:GLU:C	1:A:110:LYS:NZ	0.55	2.60	17	1
1:A:88:SER:OG	1:A:89:THR:N	0.55	2.37	10	4
1:A:197:GLN:O	1:A:198:VAL:C	0.55	2.44	4	9
1:A:48:HIS:CD2	1:A:89:THR:O	0.55	2.58	19	3
1:A:73:PHE:O	1:A:77:GLU:CB	0.55	2.53	10	1
1:A:121:TYR:CD1	1:A:121:TYR:C	0.55	2.79	6	2
1:A:143:GLN:C	1:A:190:THR:OG1	0.55	2.45	12	2
1:A:121:TYR:CD1	1:A:131:LEU:CD1	0.55	2.89	14	1
1:A:138:ASN:C	1:A:139:HIS:ND1	0.55	2.59	14	3
1:A:160:TYR:N	1:A:160:TYR:CD1	0.55	2.71	14	5
1:A:70:MET:SD	1:A:139:HIS:NE2	0.55	2.79	11	3
1:A:133:LYS:HZ3	1:A:133:LYS:HB3	0.55	1.61	10	1
1:A:97:HIS:CD2	1:A:97:HIS:C	0.55	2.80	10	1
1:A:50:VAL:HG21	1:A:81:TRP:CB	0.55	2.29	6	1
1:A:136:TRP:CZ2	1:A:173:SER:O	0.55	2.59	3	2
1:A:191:THR:HG22	1:A:193:ILE:HD11	0.55	1.76	17	2
1:A:154:GLN:NE2	1:A:155:TYR:CD2	0.55	2.74	8	2
1:A:194:ARG:NE	1:A:197:GLN:HE21	0.55	1.98	10	1
1:A:73:PHE:CD2	1:A:115:GLU:OE2	0.55	2.59	10	1
1:A:195:GLU:H	1:A:195:GLU:CD	0.55	2.03	13	2
1:A:106:VAL:HG11	1:A:113:HIS:CD2	0.55	2.37	4	2
1:A:198:VAL:HG21	1:A:200:TYR:CZ	0.55	2.36	12	1
1:A:97:HIS:NE2	1:A:110:LYS:O	0.55	2.33	7	1
1:A:149:ASN:H	1:A:220:LEU:CD1	0.55	2.14	20	1
1:A:124:GLU:CD	1:A:124:GLU:N	0.55	2.60	17	2
1:A:128:PHE:CE1	1:A:132:LEU:CD2	0.55	2.90	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:79:LYS:O	1:A:134:VAL:HG21	0.55	2.02	9	1
1:A:99:ARG:N	1:A:100:ASN:ND2	0.55	2.55	7	1
1:A:99:ARG:O	1:A:200:TYR:OH	0.55	2.22	2	2
1:A:140:ASP:O	1:A:140:ASP:CG	0.55	2.43	20	2
1:A:126:ILE:HD13	1:A:130:GLU:CG	0.55	2.31	15	3
1:A:146:ARG:C	1:A:155:TYR:O	0.55	2.45	12	2
1:A:70:MET:C	1:A:115:GLU:OE2	0.55	2.45	11	1
1:A:145:MET:O	1:A:146:ARG:CD	0.55	2.54	20	1
1:A:158:ALA:CB	1:A:160:TYR:OH	0.55	2.55	3	1
1:A:194:ARG:CG	1:A:195:GLU:OE2	0.55	2.54	3	1
1:A:205:TYR:C	1:A:205:TYR:CD1	0.55	2.80	14	1
1:A:103:TYR:CE1	1:A:155:TYR:OH	0.55	2.60	19	1
1:A:115:GLU:OE1	1:A:115:GLU:C	0.55	2.46	11	2
1:A:35:LEU:HB2	1:A:98:THR:HG23	0.55	1.78	5	3
1:A:46:ALA:C	1:A:55:THR:OG1	0.55	2.45	7	3
1:A:115:GLU:OE2	1:A:115:GLU:C	0.55	2.45	18	2
1:A:69:GLY:HA3	1:A:116:VAL:HG12	0.55	1.77	7	2
1:A:97:HIS:HD1	1:A:97:HIS:H	0.55	1.45	21	1
1:A:126:ILE:HG22	1:A:130:GLU:OE2	0.55	2.01	3	1
1:A:128:PHE:CD1	1:A:128:PHE:O	0.55	2.60	20	2
1:A:218:CYS:O	1:A:220:LEU:CD1	0.55	2.55	6	1
1:A:143:GLN:CG	1:A:143:GLN:O	0.55	2.55	9	1
1:A:60:PRO:O	1:A:63:THR:CG2	0.55	2.54	15	1
1:A:176:GLU:OE2	1:A:177:TYR:CA	0.54	2.55	17	1
1:A:142:THR:OG1	1:A:189:ILE:C	0.54	2.46	17	1
1:A:196:GLY:C	1:A:197:GLN:OE1	0.54	2.45	17	1
1:A:106:VAL:C	1:A:108:SER:H	0.54	2.06	4	5
1:A:219:GLY:O	1:A:220:LEU:HD13	0.54	2.02	14	1
1:A:56:VAL:O	1:A:57:GLU:C	0.54	2.45	15	19
1:A:88:SER:O	1:A:89:THR:CG2	0.54	2.55	19	10
1:A:77:GLU:OE1	1:A:90:GLN:C	0.54	2.46	19	1
1:A:176:GLU:C	1:A:176:GLU:OE1	0.54	2.46	2	3
1:A:115:GLU:CD	1:A:115:GLU:O	0.54	2.45	11	3
1:A:63:THR:C	1:A:64:GLN:OE1	0.54	2.46	4	5
1:A:77:GLU:CD	1:A:208:GLN:NE2	0.54	2.61	16	1
1:A:98:THR:CB	1:A:100:ASN:ND2	0.54	2.70	7	1
1:A:222:GLY:O	1:A:223:THR:C	0.54	2.45	16	5
1:A:145:MET:C	1:A:152:GLY:O	0.54	2.46	12	1
1:A:81:TRP:C	1:A:81:TRP:CD1	0.54	2.80	2	12
1:A:142:THR:OG1	1:A:142:THR:O	0.54	2.20	5	3
1:A:45:THR:OG1	1:A:204:ASP:OD1	0.54	2.22	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:140:ASP:CG	1:A:223:THR:OG1	0.54	2.46	9	1
1:A:137:GLU:OE1	1:A:137:GLU:CA	0.54	2.55	4	1
1:A:77:GLU:OE2	1:A:89:THR:C	0.54	2.46	4	1
1:A:78:ARG:C	1:A:80:PHE:N	0.54	2.61	16	12
1:A:115:GLU:O	1:A:115:GLU:CD	0.54	2.46	19	3
1:A:123:PRO:O	1:A:124:GLU:C	0.54	2.46	13	10
1:A:111:THR:O	1:A:113:HIS:N	0.54	2.40	10	3
1:A:135:PHE:CD1	1:A:139:HIS:CE1	0.54	2.95	16	3
1:A:172:ARG:O	1:A:176:GLU:CD	0.54	2.46	9	1
1:A:150:ASP:CB	1:A:155:TYR:CG	0.54	2.91	11	1
1:A:84:LYS:CD	1:A:84:LYS:C	0.54	2.75	21	1
1:A:70:MET:CG	1:A:139:HIS:CE1	0.54	2.91	2	1
1:A:99:ARG:HE	1:A:100:ASN:H	0.54	1.45	19	1
1:A:143:GLN:OE1	1:A:147:GLN:CD	0.54	2.45	8	1
1:A:164:ALA:O	1:A:168:GLU:OE1	0.54	2.25	16	1
1:A:74:TRP:NE1	1:A:209:TYR:OH	0.54	2.39	6	1
1:A:87:TYR:CD2	1:A:88:SER:N	0.54	2.76	6	4
1:A:157:SER:O	1:A:191:THR:OG1	0.54	2.24	3	1
1:A:67:VAL:O	1:A:67:VAL:HG12	0.54	2.02	14	1
1:A:189:ILE:O	1:A:189:ILE:HD12	0.54	2.02	19	1
1:A:194:ARG:C	1:A:195:GLU:OE2	0.54	2.46	10	1
1:A:90:GLN:OE1	1:A:118:ARG:NH1	0.54	2.40	13	1
1:A:144:GLY:HA2	1:A:190:THR:HG21	0.54	1.78	9	3
1:A:194:ARG:HH12	2:A:21:MYR:C10	0.54	2.16	16	1
1:A:108:SER:O	1:A:109:GLU:CD	0.54	2.46	11	3
1:A:177:TYR:CD2	1:A:181:LEU:HD11	0.54	2.37	6	1
1:A:64:GLN:CD	1:A:65:MET:N	0.54	2.61	7	2
1:A:127:SER:O	1:A:130:GLU:HG2	0.54	2.03	21	1
1:A:84:LYS:CD	1:A:84:LYS:O	0.54	2.55	21	1
1:A:97:HIS:HD1	1:A:97:HIS:N	0.54	2.01	21	1
1:A:64:GLN:C	1:A:65:MET:SD	0.54	2.86	4	1
1:A:65:MET:SD	1:A:162:THR:HG21	0.54	2.42	2	1
1:A:159:VAL:O	1:A:159:VAL:HG23	0.54	2.01	16	4
1:A:121:TYR:CZ	1:A:131:LEU:HB3	0.54	2.38	5	2
1:A:77:GLU:OE2	1:A:117:VAL:HG13	0.54	2.03	9	1
1:A:136:TRP:O	1:A:223:THR:OG1	0.54	2.26	7	1
1:A:77:GLU:OE2	1:A:208:GLN:CD	0.54	2.46	20	1
1:A:144:GLY:CA	1:A:190:THR:O	0.54	2.55	3	1
1:A:94:ALA:CA	1:A:113:HIS:ND1	0.54	2.71	13	6
1:A:136:TRP:NE1	1:A:173:SER:HB2	0.54	2.18	20	3
1:A:124:GLU:O	1:A:124:GLU:OE2	0.54	2.26	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:203:GLU:OE2	1:A:205:TYR:N	0.54	2.37	6	1
1:A:174:LYS:NZ	1:A:175:GLU:N	0.54	2.55	21	1
1:A:91:VAL:HG12	1:A:117:VAL:CA	0.54	2.32	2	1
1:A:194:ARG:C	1:A:197:GLN:OE1	0.54	2.46	20	1
1:A:176:GLU:CA	1:A:176:GLU:OE1	0.54	2.55	19	1
1:A:146:ARG:NH2	1:A:149:ASN:OD1	0.54	2.41	13	1
1:A:147:GLN:O	1:A:150:ASP:O	0.54	2.26	12	1
1:A:74:TRP:NE1	1:A:205:TYR:O	0.54	2.40	4	2
1:A:102:THR:O	1:A:106:VAL:CG1	0.54	2.52	7	1
1:A:127:SER:C	1:A:130:GLU:OE2	0.54	2.46	21	1
1:A:114:ALA:HB2	1:A:156:ARG:NH1	0.54	2.17	20	1
1:A:61:GLU:O	1:A:61:GLU:CD	0.54	2.46	3	1
1:A:209:TYR:CE1	1:A:213:ASN:CB	0.54	2.90	19	2
1:A:143:GLN:NE2	1:A:147:GLN:OE1	0.54	2.41	8	1
1:A:203:GLU:OE2	1:A:206:HIS:CD2	0.54	2.61	7	3
1:A:140:ASP:OD1	1:A:143:GLN:OE1	0.54	2.26	3	2
1:A:136:TRP:CB	1:A:177:TYR:CZ	0.54	2.90	7	1
1:A:214:PRO:O	1:A:216:GLY:N	0.54	2.41	21	1
1:A:140:ASP:CG	1:A:143:GLN:OE1	0.54	2.46	3	1
1:A:126:ILE:O	1:A:126:ILE:HG22	0.53	2.01	13	2
1:A:114:ALA:O	1:A:116:VAL:HG13	0.53	2.03	16	1
1:A:217:TYR:O	1:A:217:TYR:CD2	0.53	2.61	12	1
1:A:99:ARG:CG	1:A:200:TYR:OH	0.53	2.56	7	1
1:A:64:GLN:NE2	1:A:65:MET:O	0.53	2.41	7	2
1:A:32:GLU:CD	1:A:32:GLU:H	0.53	2.07	11	1
1:A:65:MET:O	1:A:162:THR:HG21	0.53	2.02	3	2
1:A:156:ARG:NH2	2:A:21:MYR:H131	0.53	2.16	20	1
1:A:108:SER:O	1:A:109:GLU:HB3	0.53	2.01	16	2
1:A:115:GLU:CD	1:A:115:GLU:C	0.53	2.66	13	2
1:A:133:LYS:CB	1:A:133:LYS:HZ3	0.53	2.16	10	1
1:A:209:TYR:O	1:A:211:SER:N	0.53	2.41	16	2
1:A:149:ASN:CG	1:A:149:ASN:O	0.53	2.46	5	1
1:A:181:LEU:C	1:A:183:LYS:H	0.53	2.07	11	2
1:A:119:VAL:CG2	1:A:131:LEU:HD23	0.53	2.32	20	1
1:A:184:HIS:O	1:A:186:PHE:CE2	0.53	2.60	21	2
1:A:48:HIS:CD2	1:A:208:GLN:CG	0.53	2.92	10	6
1:A:70:MET:SD	1:A:157:SER:HB3	0.53	2.43	14	1
1:A:176:GLU:O	1:A:180:VAL:HG23	0.53	2.02	2	3
1:A:54:ARG:O	1:A:87:TYR:CZ	0.53	2.62	8	3
1:A:64:GLN:OE1	1:A:64:GLN:CA	0.53	2.56	11	2
1:A:184:HIS:CG	1:A:186:PHE:CE2	0.53	2.96	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:127:SER:N	1:A:130:GLU:CD	0.53	2.61	21	1
1:A:45:THR:CB	1:A:49:HIS:NE2	0.53	2.72	20	1
1:A:146:ARG:CD	1:A:146:ARG:O	0.53	2.57	3	1
1:A:139:HIS:ND1	1:A:140:ASP:N	0.53	2.56	10	1
1:A:45:THR:O	1:A:55:THR:OG1	0.53	2.21	13	2
1:A:156:ARG:HD2	1:A:158:ALA:HB2	0.53	1.80	12	1
1:A:44:VAL:HG11	1:A:203:GLU:HA	0.53	1.79	4	1
1:A:121:TYR:C	1:A:121:TYR:CD1	0.53	2.81	17	2
1:A:105:GLU:CG	1:A:106:VAL:N	0.53	2.71	8	2
1:A:118:ARG:HH22	1:A:119:VAL:C	0.53	2.06	8	1
1:A:126:ILE:CG1	1:A:127:SER:N	0.53	2.72	8	1
1:A:140:ASP:OD2	1:A:143:GLN:CG	0.53	2.56	8	2
1:A:126:ILE:HD12	1:A:131:LEU:HD11	0.53	1.81	20	1
1:A:196:GLY:C	1:A:197:GLN:HG2	0.53	2.24	3	1
1:A:208:GLN:O	1:A:209:TYR:C	0.53	2.45	2	18
1:A:78:ARG:O	1:A:79:LYS:C	0.53	2.47	12	4
1:A:203:GLU:CD	1:A:203:GLU:H	0.53	2.07	16	1
1:A:151:PHE:CD2	1:A:151:PHE:O	0.53	2.61	14	1
1:A:34:ALA:O	1:A:35:LEU:C	0.53	2.46	14	5
1:A:33:GLU:O	1:A:35:LEU:N	0.53	2.40	10	1
1:A:195:GLU:N	1:A:195:GLU:OE1	0.53	2.42	13	2
1:A:131:LEU:N	1:A:131:LEU:CD2	0.53	2.61	16	1
1:A:84:LYS:O	1:A:126:ILE:CG1	0.53	2.57	9	2
1:A:145:MET:O	1:A:145:MET:HG2	0.53	2.04	13	1
1:A:70:MET:CE	1:A:135:PHE:CZ	0.53	2.92	14	1
1:A:194:ARG:CZ	1:A:197:GLN:HE21	0.53	2.17	10	1
1:A:215:ASP:OD1	1:A:215:ASP:C	0.53	2.47	16	1
1:A:74:TRP:O	1:A:210:LEU:CD2	0.53	2.57	5	2
1:A:127:SER:O	1:A:130:GLU:CD	0.53	2.46	21	1
1:A:138:ASN:OD1	1:A:139:HIS:CE1	0.53	2.62	14	1
1:A:109:GLU:C	1:A:111:THR:N	0.53	2.63	11	2
1:A:66:ALA:HB2	1:A:166:GLN:HE22	0.53	1.63	8	2
1:A:140:ASP:C	1:A:142:THR:H	0.52	2.07	8	3
1:A:80:PHE:CD2	1:A:119:VAL:CG2	0.52	2.88	6	1
1:A:70:MET:HG2	1:A:71:GLY:N	0.52	2.19	20	2
1:A:74:TRP:O	1:A:210:LEU:HD13	0.52	2.04	7	1
1:A:151:PHE:CD1	1:A:151:PHE:C	0.52	2.83	11	1
1:A:64:GLN:HE21	1:A:166:GLN:HE21	0.52	1.47	2	1
1:A:161:PRO:O	1:A:197:GLN:NE2	0.52	2.43	3	1
1:A:203:GLU:CD	1:A:205:TYR:H	0.52	2.06	5	3
1:A:138:ASN:C	1:A:139:HIS:HD1	0.52	2.08	20	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:128:PHE:CE1	1:A:131:LEU:HD11	0.52	2.39	5	1
1:A:128:PHE:CZ	1:A:132:LEU:HD21	0.52	2.39	18	2
1:A:213:ASN:N	1:A:214:PRO:CD	0.52	2.72	2	1
1:A:75:GLY:N	1:A:217:TYR:OH	0.52	2.41	2	1
1:A:198:VAL:CG1	1:A:200:TYR:CZ	0.52	2.92	15	1
1:A:128:PHE:C	1:A:130:GLU:N	0.52	2.60	12	3
1:A:28:VAL:O	1:A:29:ILE:C	0.52	2.46	10	13
1:A:208:GLN:N	1:A:208:GLN:CD	0.52	2.62	13	7
1:A:32:GLU:O	1:A:32:GLU:OE1	0.52	2.28	13	1
1:A:96:GLY:CA	1:A:113:HIS:CE1	0.52	2.92	11	1
1:A:91:VAL:CG2	1:A:206:HIS:O	0.52	2.57	2	9
1:A:121:TYR:CB	1:A:131:LEU:HD11	0.52	2.34	13	1
1:A:154:GLN:OE1	1:A:155:TYR:CD2	0.52	2.63	18	2
1:A:98:THR:C	1:A:99:ARG:O	0.52	2.47	9	1
1:A:98:THR:C	1:A:100:ASN:ND2	0.52	2.62	7	1
1:A:150:ASP:C	1:A:150:ASP:OD1	0.52	2.46	21	1
1:A:143:GLN:O	1:A:147:GLN:OE1	0.52	2.28	4	1
1:A:142:THR:C	1:A:190:THR:HG1	0.52	2.06	17	1
1:A:184:HIS:O	1:A:186:PHE:CD2	0.52	2.62	21	3
1:A:204:ASP:C	1:A:206:HIS:N	0.52	2.63	2	4
1:A:70:MET:CB	1:A:157:SER:HA	0.52	2.34	14	1
1:A:140:ASP:C	1:A:140:ASP:OD1	0.52	2.47	8	1
1:A:115:GLU:CG	1:A:115:GLU:O	0.52	2.57	11	3
1:A:119:VAL:HG23	1:A:121:TYR:CZ	0.52	2.38	4	1
1:A:61:GLU:O	1:A:122:ARG:CD	0.52	2.57	20	1
1:A:96:GLY:N	1:A:113:HIS:CE1	0.52	2.78	6	5
1:A:143:GLN:CD	1:A:148:GLY:H	0.52	2.08	10	1
1:A:131:LEU:CD2	1:A:131:LEU:N	0.52	2.57	4	2
1:A:144:GLY:H	1:A:190:THR:HG21	0.52	1.65	16	3
1:A:145:MET:N	1:A:145:MET:SD	0.52	2.82	18	1
1:A:139:HIS:O	1:A:223:THR:CB	0.52	2.58	17	2
1:A:131:LEU:CD1	1:A:131:LEU:N	0.52	2.72	20	3
1:A:158:ALA:HB1	1:A:160:TYR:CE1	0.52	2.39	7	1
1:A:144:GLY:O	1:A:156:ARG:CG	0.52	2.58	17	1
1:A:124:GLU:N	1:A:124:GLU:CD	0.52	2.63	14	3
1:A:77:GLU:OE1	1:A:119:VAL:HG11	0.52	2.04	8	1
1:A:73:PHE:CG	1:A:115:GLU:CD	0.52	2.83	10	1
1:A:160:TYR:CG	1:A:197:GLN:NE2	0.52	2.77	20	2
1:A:101:PRO:CG	1:A:113:HIS:NE2	0.52	2.73	4	3
1:A:100:ASN:HB3	1:A:101:PRO:CD	0.52	2.35	15	2
1:A:137:GLU:O	1:A:137:GLU:OE2	0.52	2.28	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:42:ILE:HG21	1:A:201:TYR:O	0.52	2.05	17	1
1:A:108:SER:C	1:A:110:LYS:N	0.52	2.62	10	9
1:A:91:VAL:CG2	1:A:207:GLN:OE1	0.52	2.58	2	16
1:A:130:GLU:O	1:A:133:LYS:N	0.52	2.43	14	6
1:A:53:ASN:CG	1:A:54:ARG:N	0.52	2.63	6	15
1:A:126:ILE:CD1	1:A:130:GLU:CB	0.52	2.87	15	2
1:A:68:PHE:CD2	1:A:135:PHE:CB	0.52	2.93	5	1
1:A:181:LEU:N	1:A:181:LEU:CD2	0.52	2.73	20	3
1:A:208:GLN:O	1:A:211:SER:OG	0.52	2.22	18	2
1:A:139:HIS:H	1:A:223:THR:CG2	0.52	2.18	18	1
1:A:189:ILE:CG2	1:A:191:THR:OG1	0.52	2.58	9	1
1:A:33:GLU:O	1:A:110:LYS:NZ	0.52	2.39	20	1
1:A:72:CYS:C	1:A:74:TRP:N	0.52	2.63	9	14
1:A:87:TYR:CE1	1:A:88:SER:CB	0.52	2.93	11	12
1:A:178:GLN:OE1	1:A:189:ILE:CG2	0.52	2.58	8	1
1:A:114:ALA:CB	1:A:160:TYR:OH	0.52	2.58	3	3
1:A:94:ALA:HB1	1:A:198:VAL:O	0.52	2.05	16	2
1:A:181:LEU:O	1:A:183:LYS:N	0.52	2.43	11	2
1:A:93:PHE:N	1:A:93:PHE:CD1	0.52	2.76	11	1
1:A:141:PRO:HD3	1:A:223:THR:HG23	0.52	1.82	1	1
1:A:192:ASP:OD1	1:A:194:ARG:NH2	0.51	2.43	8	2
1:A:220:LEU:HD23	1:A:220:LEU:N	0.51	2.19	16	1
1:A:192:ASP:CG	1:A:194:ARG:HH11	0.51	2.08	21	1
1:A:116:VAL:HG11	1:A:160:TYR:CE1	0.51	2.40	3	1
1:A:64:GLN:NE2	1:A:121:TYR:O	0.51	2.43	3	1
1:A:139:HIS:NE2	1:A:157:SER:CB	0.51	2.73	3	1
1:A:122:ARG:C	1:A:124:GLU:OE2	0.51	2.48	17	1
1:A:160:TYR:CD2	1:A:197:GLN:NE2	0.51	2.78	14	1
1:A:135:PHE:CZ	1:A:159:VAL:CG2	0.51	2.93	13	1
1:A:207:GLN:HB3	1:A:208:GLN:OE1	0.51	2.05	6	1
1:A:42:ILE:HD13	1:A:42:ILE:N	0.51	2.21	4	1
1:A:95:GLY:O	1:A:194:ARG:NH2	0.51	2.40	3	1
1:A:176:GLU:C	1:A:176:GLU:CD	0.51	2.69	20	3
1:A:96:GLY:HA3	1:A:113:HIS:ND1	0.51	2.20	7	10
1:A:158:ALA:HB1	1:A:160:TYR:CZ	0.51	2.40	7	2
1:A:136:TRP:HE1	1:A:173:SER:HG	0.51	1.41	7	1
1:A:50:VAL:HG11	1:A:81:TRP:CD1	0.51	2.41	7	1
1:A:127:SER:O	1:A:130:GLU:CG	0.51	2.58	21	1
1:A:94:ALA:CA	1:A:113:HIS:HD1	0.51	2.18	20	2
1:A:190:THR:O	1:A:191:THR:C	0.51	2.49	6	7
1:A:166:GLN:O	1:A:170:ALA:HB2	0.51	2.05	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:204:ASP:N	1:A:204:ASP:OD1	0.51	2.43	10	1
1:A:142:THR:HG22	1:A:189:ILE:HA	0.51	1.82	16	1
1:A:177:TYR:CD2	1:A:181:LEU:CD2	0.51	2.93	12	1
1:A:136:TRP:CB	1:A:177:TYR:OH	0.51	2.58	7	1
1:A:93:PHE:CE1	1:A:202:ALA:HB2	0.51	2.41	11	2
1:A:90:GLN:OE1	1:A:90:GLN:N	0.51	2.43	21	1
1:A:171:LEU:HD23	1:A:171:LEU:C	0.51	2.26	3	1
1:A:126:ILE:HD11	1:A:130:GLU:HG3	0.51	1.82	2	2
1:A:192:ASP:OD1	1:A:194:ARG:CG	0.51	2.59	11	3
1:A:70:MET:CG	1:A:139:HIS:NE2	0.51	2.74	20	2
1:A:205:TYR:CE1	1:A:209:TYR:CE2	0.51	2.98	18	1
1:A:73:PHE:CE2	1:A:115:GLU:CG	0.51	2.93	7	1
1:A:78:ARG:CG	1:A:79:LYS:N	0.51	2.72	14	4
1:A:98:THR:HG22	1:A:99:ARG:NH1	0.51	2.19	19	1
1:A:143:GLN:CB	1:A:146:ARG:O	0.51	2.58	8	3
1:A:151:PHE:O	1:A:151:PHE:CG	0.51	2.64	11	2
1:A:80:PHE:CE1	1:A:134:VAL:HG11	0.51	2.40	12	1
1:A:32:GLU:OE1	1:A:32:GLU:N	0.51	2.44	18	1
1:A:156:ARG:NH1	2:A:21:MYR:C8	0.51	2.74	17	1
1:A:203:GLU:OE2	1:A:204:ASP:CA	0.51	2.57	6	1
1:A:59:PHE:CE2	1:A:120:VAL:CG2	0.51	2.94	12	1
1:A:100:ASN:CB	1:A:101:PRO:HD2	0.51	2.36	15	2
1:A:35:LEU:HD13	1:A:110:LYS:HB2	0.51	1.82	3	1
1:A:159:VAL:HG23	1:A:159:VAL:O	0.51	2.06	7	2
1:A:184:HIS:NE2	1:A:186:PHE:CE1	0.51	2.79	11	1
1:A:90:GLN:O	1:A:91:VAL:HG13	0.51	2.06	4	1
1:A:44:VAL:HG11	1:A:202:ALA:O	0.51	2.06	17	6
1:A:74:TRP:HB3	1:A:210:LEU:HD11	0.51	1.83	17	1
1:A:162:THR:C	1:A:163:SER:OG	0.51	2.49	10	4
1:A:143:GLN:C	1:A:145:MET:H	0.51	2.08	16	2
1:A:192:ASP:C	1:A:193:ILE:HD12	0.51	2.26	18	1
1:A:156:ARG:NH2	2:A:21:MYR:H132	0.51	2.17	20	1
1:A:131:LEU:N	1:A:131:LEU:CD1	0.51	2.62	19	1
1:A:144:GLY:O	1:A:146:ARG:N	0.51	2.43	10	6
1:A:77:GLU:OE1	1:A:91:VAL:HG22	0.51	2.05	10	1
1:A:61:GLU:N	1:A:61:GLU:CD	0.51	2.63	16	1
1:A:80:PHE:HB3	1:A:119:VAL:HG11	0.51	1.81	18	1
1:A:80:PHE:CE1	1:A:134:VAL:HG13	0.50	2.41	14	2
1:A:143:GLN:HE22	1:A:147:GLN:HB2	0.50	1.65	14	1
1:A:123:PRO:O	1:A:126:ILE:N	0.50	2.41	3	2
1:A:93:PHE:CE1	1:A:106:VAL:HG21	0.50	2.41	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:159:VAL:HG13	1:A:191:THR:HG23	0.50	1.81	15	3
1:A:124:GLU:O	1:A:125:HIS:ND1	0.50	2.44	6	1
1:A:154:GLN:CD	1:A:154:GLN:N	0.50	2.64	18	1
1:A:32:GLU:H	1:A:32:GLU:CD	0.50	2.09	7	1
1:A:91:VAL:HG12	1:A:117:VAL:CB	0.50	2.37	2	1
1:A:121:TYR:HB2	1:A:131:LEU:HD21	0.50	1.81	3	1
1:A:46:ALA:HA	1:A:55:THR:OG1	0.50	2.07	13	17
1:A:56:VAL:HG23	1:A:57:GLU:N	0.50	2.21	8	1
1:A:98:THR:HG22	1:A:99:ARG:H	0.50	1.65	6	1
1:A:66:ALA:CB	1:A:131:LEU:HD13	0.50	2.35	7	1
1:A:116:VAL:CG1	1:A:160:TYR:CE1	0.50	2.94	3	1
1:A:120:VAL:HG23	1:A:121:TYR:N	0.50	2.21	19	1
1:A:178:GLN:CD	1:A:178:GLN:C	0.50	2.69	19	2
1:A:118:ARG:C	1:A:118:ARG:CD	0.50	2.80	5	1
1:A:80:PHE:CE2	1:A:119:VAL:HG21	0.50	2.41	6	1
1:A:28:VAL:CG2	1:A:145:MET:SD	0.50	2.99	9	1
1:A:159:VAL:HG23	1:A:191:THR:HG23	0.50	1.82	11	2
1:A:55:THR:C	1:A:56:VAL:CG2	0.50	2.79	15	2
1:A:156:ARG:NE	1:A:194:ARG:HH22	0.50	2.04	20	1
1:A:166:GLN:O	1:A:170:ALA:N	0.50	2.41	8	7
1:A:48:HIS:CD2	1:A:88:SER:OG	0.50	2.63	5	1
1:A:214:PRO:C	1:A:216:GLY:H	0.50	2.09	21	2
1:A:87:TYR:CE2	1:A:88:SER:CB	0.50	2.95	6	2
1:A:197:GLN:C	1:A:198:VAL:HG23	0.50	2.25	21	1
1:A:64:GLN:O	1:A:121:TYR:CD1	0.50	2.65	20	1
1:A:138:ASN:C	1:A:221:GLY:O	0.50	2.50	20	1
1:A:187:GLY:N	1:A:188:PRO:HD3	0.50	2.21	19	1
1:A:72:CYS:C	1:A:115:GLU:CD	0.50	2.69	8	1
1:A:118:ARG:HH12	1:A:119:VAL:C	0.50	2.10	8	1
1:A:140:ASP:OD1	1:A:221:GLY:O	0.50	2.29	18	1
1:A:141:PRO:O	1:A:190:THR:OG1	0.50	2.20	19	2
1:A:70:MET:CE	1:A:138:ASN:OD1	0.50	2.60	10	2
1:A:118:ARG:HH22	1:A:119:VAL:CA	0.50	2.19	8	1
1:A:50:VAL:CG2	1:A:81:TRP:CD2	0.50	2.95	6	1
1:A:59:PHE:CE2	1:A:118:ARG:NH1	0.50	2.80	2	1
1:A:83:LEU:HD12	1:A:131:LEU:HD21	0.50	1.84	2	1
1:A:178:GLN:O	1:A:182:SER:CB	0.50	2.60	14	6
1:A:115:GLU:O	1:A:115:GLU:CG	0.50	2.59	16	3
1:A:174:LYS:NZ	1:A:189:ILE:CD1	0.50	2.75	10	1
1:A:181:LEU:N	1:A:181:LEU:HD22	0.50	2.22	20	2
1:A:55:THR:CB	1:A:90:GLN:OE1	0.50	2.60	12	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:130:GLU:OE2	1:A:130:GLU:N	0.50	2.44	4	2
1:A:64:GLN:OE1	1:A:123:PRO:CD	0.50	2.60	4	2
1:A:136:TRP:CE3	1:A:177:TYR:CD2	0.50	2.98	7	1
1:A:197:GLN:O	1:A:198:VAL:CG2	0.50	2.59	21	1
1:A:195:GLU:N	1:A:197:GLN:OE1	0.50	2.45	20	1
1:A:157:SER:O	1:A:191:THR:CB	0.50	2.60	3	1
1:A:176:GLU:CD	1:A:176:GLU:C	0.50	2.69	17	2
1:A:80:PHE:CE2	1:A:134:VAL:HG11	0.50	2.41	4	4
1:A:130:GLU:CD	1:A:130:GLU:N	0.50	2.64	12	3
1:A:215:ASP:C	1:A:215:ASP:OD1	0.50	2.49	9	1
1:A:128:PHE:CZ	1:A:131:LEU:HD11	0.50	2.41	7	1
1:A:92:GLY:CA	1:A:200:TYR:O	0.50	2.60	21	2
1:A:35:LEU:HD23	1:A:105:GLU:CD	0.50	2.27	3	1
1:A:69:GLY:N	1:A:116:VAL:HG12	0.50	2.22	8	1
1:A:70:MET:HB3	1:A:139:HIS:CE1	0.50	2.41	13	3
1:A:74:TRP:CD1	1:A:209:TYR:CE2	0.50	3.00	16	2
1:A:128:PHE:CE2	1:A:132:LEU:HD22	0.50	2.41	6	1
1:A:203:GLU:CB	1:A:205:TYR:CE2	0.50	2.94	12	2
1:A:73:PHE:O	1:A:206:HIS:O	0.50	2.30	18	1
1:A:77:GLU:CD	1:A:89:THR:OG1	0.50	2.50	7	1
1:A:35:LEU:HD13	1:A:105:GLU:OE1	0.49	2.07	19	1
1:A:135:PHE:CD1	1:A:139:HIS:CD2	0.49	3.00	6	2
1:A:128:PHE:CE1	1:A:132:LEU:HD21	0.49	2.42	12	1
1:A:143:GLN:OE1	1:A:147:GLN:C	0.49	2.51	7	1
1:A:140:ASP:OD2	1:A:143:GLN:CD	0.49	2.50	3	2
1:A:146:ARG:HB2	1:A:152:GLY:N	0.49	2.21	2	1
1:A:160:TYR:CE1	1:A:192:ASP:OD2	0.49	2.65	14	1
1:A:53:ASN:CG	1:A:54:ARG:H	0.49	2.10	6	9
1:A:80:PHE:N	1:A:80:PHE:CD1	0.49	2.80	11	3
1:A:160:TYR:HB2	1:A:197:GLN:NE2	0.49	2.22	7	1
1:A:44:VAL:HG12	1:A:204:ASP:CA	0.49	2.37	20	1
1:A:118:ARG:NH2	1:A:119:VAL:CA	0.49	2.75	8	1
1:A:129:GLU:OE1	1:A:129:GLU:CA	0.49	2.60	8	1
1:A:142:THR:CG2	1:A:181:LEU:HD13	0.49	2.37	10	1
1:A:184:HIS:N	1:A:184:HIS:CD2	0.49	2.78	16	2
1:A:128:PHE:C	1:A:128:PHE:CD1	0.49	2.86	7	1
1:A:197:GLN:O	1:A:198:VAL:HG23	0.49	2.07	21	1
1:A:70:MET:SD	1:A:140:ASP:O	0.49	2.71	14	1
1:A:172:ARG:O	1:A:176:GLU:CB	0.49	2.60	14	1
1:A:86:VAL:HG12	1:A:86:VAL:O	0.49	2.07	2	2
1:A:203:GLU:CG	1:A:204:ASP:N	0.49	2.75	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:VAL:HG22	1:A:120:VAL:O	0.49	2.07	16	6
1:A:99:ARG:NE	1:A:100:ASN:ND2	0.49	2.59	9	1
1:A:97:HIS:CE1	1:A:111:THR:C	0.49	2.85	7	1
1:A:130:GLU:O	1:A:130:GLU:OE2	0.49	2.30	7	2
1:A:93:PHE:CE1	1:A:202:ALA:CB	0.49	2.96	11	2
1:A:63:THR:CG2	1:A:120:VAL:CG2	0.49	2.90	2	1
1:A:146:ARG:CA	1:A:152:GLY:H	0.49	2.20	2	1
1:A:114:ALA:O	1:A:115:GLU:C	0.49	2.49	15	1
1:A:81:TRP:CZ3	1:A:208:GLN:OE1	0.49	2.65	14	1
1:A:70:MET:CG	1:A:76:ALA:HB1	0.49	2.36	19	1
1:A:84:LYS:HZ1	1:A:84:LYS:CA	0.49	2.21	5	1
1:A:74:TRP:HE1	1:A:210:LEU:HB3	0.49	1.66	6	1
1:A:198:VAL:CG2	1:A:200:TYR:CZ	0.49	2.95	12	1
1:A:32:GLU:N	1:A:32:GLU:CD	0.49	2.66	7	2
1:A:99:ARG:N	1:A:100:ASN:HD22	0.49	2.05	7	1
1:A:189:ILE:O	1:A:189:ILE:HG22	0.49	2.06	11	2
1:A:203:GLU:HG3	1:A:204:ASP:N	0.49	2.22	15	1
1:A:136:TRP:O	1:A:138:ASN:N	0.49	2.46	17	2
1:A:104:LYS:C	1:A:104:LYS:CD	0.49	2.80	15	2
1:A:140:ASP:O	1:A:141:PRO:O	0.49	2.30	13	1
1:A:108:SER:O	1:A:109:GLU:HB2	0.49	2.07	5	3
1:A:139:HIS:O	1:A:222:GLY:C	0.49	2.51	14	1
1:A:78:ARG:HH12	1:A:215:ASP:C	0.49	2.11	16	1
1:A:85:GLY:O	1:A:122:ARG:CG	0.49	2.61	12	4
1:A:154:GLN:CD	1:A:155:TYR:CE2	0.49	2.86	9	2
1:A:118:ARG:O	1:A:118:ARG:HG3	0.49	2.08	4	4
1:A:159:VAL:O	1:A:159:VAL:HG22	0.49	2.06	14	1
1:A:192:ASP:CG	1:A:194:ARG:NE	0.49	2.65	14	1
1:A:80:PHE:CZ	1:A:134:VAL:HG13	0.49	2.43	16	3
1:A:98:THR:HG22	1:A:99:ARG:N	0.49	2.23	8	1
1:A:34:ALA:HB1	1:A:98:THR:OG1	0.49	2.08	6	1
1:A:64:GLN:NE2	1:A:166:GLN:NE2	0.49	2.60	18	2
1:A:121:TYR:CD2	1:A:131:LEU:CD1	0.49	2.96	9	2
1:A:77:GLU:CD	1:A:208:GLN:OE1	0.49	2.51	20	1
1:A:178:GLN:CD	1:A:182:SER:OG	0.49	2.51	15	1
1:A:72:CYS:H	1:A:115:GLU:CD	0.49	2.11	8	1
1:A:68:PHE:O	1:A:117:VAL:N	0.49	2.43	6	3
1:A:134:VAL:CG1	1:A:138:ASN:ND2	0.49	2.76	13	1
1:A:77:GLU:OE1	1:A:208:GLN:NE2	0.49	2.46	16	1
1:A:70:MET:HB3	1:A:147:GLN:NE2	0.48	2.22	8	1
1:A:142:THR:HG22	1:A:181:LEU:HD13	0.48	1.84	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:197:GLN:OE1	1:A:197:GLN:N	0.48	2.46	18	1
1:A:70:MET:O	1:A:147:GLN:CB	0.48	2.61	18	1
1:A:91:VAL:HG12	1:A:117:VAL:CG1	0.48	2.34	4	1
1:A:219:GLY:O	1:A:220:LEU:HD23	0.48	2.08	19	1
1:A:135:PHE:CZ	1:A:159:VAL:HG22	0.48	2.43	13	2
1:A:128:PHE:CE2	1:A:132:LEU:CD2	0.48	2.97	6	1
1:A:143:GLN:NE2	1:A:147:GLN:HB2	0.48	2.22	9	1
1:A:156:ARG:CB	1:A:156:ARG:NH1	0.48	2.77	9	1
1:A:160:TYR:OH	1:A:194:ARG:NH1	0.48	2.46	7	1
1:A:77:GLU:OE2	1:A:119:VAL:CG1	0.48	2.61	11	1
1:A:176:GLU:OE2	1:A:177:TYR:N	0.48	2.46	17	1
1:A:142:THR:HG22	1:A:189:ILE:CG2	0.48	2.36	14	3
1:A:107:CYS:O	1:A:154:GLN:NE2	0.48	2.46	10	1
1:A:77:GLU:CD	1:A:77:GLU:O	0.48	2.51	10	1
1:A:139:HIS:O	1:A:141:PRO:CD	0.48	2.60	2	2
1:A:69:GLY:O	1:A:158:ALA:N	0.48	2.46	7	4
1:A:74:TRP:C	1:A:210:LEU:HD11	0.48	2.28	3	2
1:A:170:ALA:O	1:A:173:SER:OG	0.48	2.29	4	2
1:A:121:TYR:HB3	1:A:131:LEU:HD11	0.48	1.83	13	1
1:A:154:GLN:HG3	1:A:155:TYR:CZ	0.48	2.44	6	1
1:A:159:VAL:CG2	1:A:159:VAL:O	0.48	2.61	7	2
1:A:76:ALA:HB3	1:A:117:VAL:HG21	0.48	1.84	14	1
1:A:71:GLY:O	1:A:72:CYS:HB2	0.48	2.09	8	3
1:A:204:ASP:O	1:A:204:ASP:OD1	0.48	2.32	16	1
1:A:181:LEU:C	1:A:183:LYS:N	0.48	2.64	11	3
1:A:44:VAL:CG2	1:A:202:ALA:O	0.48	2.62	12	1
1:A:150:ASP:OD2	1:A:155:TYR:CE1	0.48	2.66	18	1
1:A:209:TYR:CE2	1:A:213:ASN:HB2	0.48	2.44	21	2
1:A:70:MET:HA	1:A:139:HIS:NE2	0.48	2.24	13	2
1:A:62:GLY:O	1:A:64:GLN:OE1	0.48	2.32	13	1
1:A:136:TRP:CE3	1:A:177:TYR:CD1	0.48	3.00	12	1
1:A:113:HIS:O	1:A:153:THR:O	0.48	2.31	4	2
1:A:121:TYR:CZ	1:A:131:LEU:CB	0.48	2.96	7	1
1:A:210:LEU:N	1:A:210:LEU:HD23	0.48	2.24	7	1
1:A:191:THR:CG2	1:A:192:ASP:N	0.48	2.76	3	1
1:A:136:TRP:HB3	1:A:177:TYR:CE2	0.48	2.44	17	1
1:A:205:TYR:CE1	1:A:209:TYR:CZ	0.48	3.01	17	1
1:A:144:GLY:C	1:A:146:ARG:H	0.48	2.12	10	3
1:A:89:THR:C	1:A:90:GLN:CD	0.48	2.72	12	3
1:A:144:GLY:CA	1:A:190:THR:OG1	0.48	2.62	16	2
1:A:198:VAL:CG1	1:A:198:VAL:O	0.48	2.61	3	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:118:ARG:NH1	1:A:119:VAL:N	0.48	2.61	8	1
1:A:132:LEU:HD23	1:A:133:LYS:N	0.48	2.24	10	1
1:A:70:MET:SD	1:A:138:ASN:O	0.48	2.72	10	1
1:A:171:LEU:CD1	1:A:171:LEU:C	0.48	2.81	13	1
1:A:155:TYR:O	1:A:156:ARG:C	0.48	2.51	15	2
1:A:154:GLN:HG2	1:A:155:TYR:CZ	0.48	2.44	6	2
1:A:121:TYR:CE2	1:A:131:LEU:HB3	0.48	2.44	7	2
1:A:153:THR:OG1	2:A:21:MYR:C13	0.48	2.62	7	1
1:A:108:SER:O	1:A:109:GLU:OE2	0.48	2.31	11	1
1:A:146:ARG:NE	1:A:148:GLY:O	0.48	2.46	11	1
1:A:132:LEU:HD23	1:A:173:SER:CB	0.48	2.39	4	1
1:A:209:TYR:C	1:A:213:ASN:HD22	0.48	2.12	4	1
1:A:144:GLY:O	1:A:156:ARG:CB	0.48	2.62	17	2
1:A:195:GLU:OE1	1:A:195:GLU:C	0.48	2.51	11	2
1:A:72:CYS:C	1:A:115:GLU:OE1	0.48	2.52	8	1
1:A:121:TYR:CB	1:A:126:ILE:HG22	0.48	2.37	10	1
1:A:46:ALA:CA	1:A:55:THR:OG1	0.48	2.61	13	3
1:A:77:GLU:OE2	1:A:81:TRP:CZ3	0.48	2.67	18	1
1:A:79:LYS:O	1:A:134:VAL:CG2	0.48	2.62	9	1
1:A:123:PRO:N	1:A:124:GLU:OE2	0.48	2.47	17	1
1:A:28:VAL:C	1:A:29:ILE:O	0.48	2.53	14	11
1:A:42:ILE:CG2	1:A:100:ASN:OD1	0.48	2.62	8	1
1:A:143:GLN:O	1:A:145:MET:N	0.48	2.47	16	1
1:A:81:TRP:HB3	1:A:89:THR:HG21	0.48	1.85	5	4
1:A:204:ASP:C	1:A:206:HIS:H	0.47	2.11	2	3
1:A:162:THR:O	1:A:163:SER:CB	0.47	2.62	15	4
1:A:140:ASP:C	1:A:142:THR:N	0.47	2.67	20	2
1:A:29:ILE:O	1:A:29:ILE:HD13	0.47	2.08	10	2
1:A:102:THR:HG22	1:A:105:GLU:HG3	0.47	1.86	16	1
1:A:121:TYR:CE2	1:A:131:LEU:HB2	0.47	2.44	2	1
1:A:168:GLU:OE1	1:A:172:ARG:NH1	0.47	2.47	15	1
1:A:42:ILE:N	1:A:43:PRO:HD3	0.47	2.23	14	2
1:A:187:GLY:H	1:A:188:PRO:CD	0.47	2.21	19	1
1:A:49:HIS:CD2	1:A:211:SER:OG	0.47	2.67	6	1
1:A:118:ARG:HD3	1:A:199:PHE:CZ	0.47	2.42	12	1
1:A:98:THR:CG2	1:A:99:ARG:N	0.47	2.76	9	1
1:A:77:GLU:OE1	1:A:91:VAL:CG1	0.47	2.61	21	1
1:A:118:ARG:NH1	1:A:201:TYR:HH	0.47	2.07	15	1
1:A:140:ASP:CB	1:A:143:GLN:NE2	0.47	2.78	17	3
1:A:130:GLU:OE1	1:A:130:GLU:O	0.47	2.32	19	1
1:A:73:PHE:HD1	1:A:206:HIS:HD1	0.47	1.46	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:213:ASN:C	1:A:215:ASP:N	0.47	2.67	7	6
1:A:209:TYR:C	1:A:211:SER:N	0.47	2.68	11	2
1:A:65:MET:O	1:A:162:THR:CG2	0.47	2.63	5	4
1:A:84:LYS:HZ1	1:A:84:LYS:N	0.47	2.06	5	1
1:A:32:GLU:O	1:A:32:GLU:CD	0.47	2.52	12	1
1:A:132:LEU:HD13	1:A:173:SER:OG	0.47	2.09	9	1
1:A:49:HIS:ND1	1:A:208:GLN:HG2	0.47	2.24	20	1
1:A:30:SER:OG	1:A:33:GLU:CB	0.47	2.62	17	1
1:A:187:GLY:H	1:A:188:PRO:HD2	0.47	1.70	19	1
1:A:64:GLN:HB3	1:A:121:TYR:CZ	0.47	2.45	10	2
1:A:174:LYS:HZ2	1:A:189:ILE:HD12	0.47	1.69	10	1
1:A:93:PHE:CE1	1:A:103:TYR:CB	0.47	2.97	7	1
1:A:46:ALA:O	1:A:55:THR:CG2	0.47	2.56	21	1
1:A:210:LEU:HD23	1:A:210:LEU:N	0.47	2.24	3	1
1:A:203:GLU:OE1	1:A:205:TYR:N	0.47	2.46	17	1
1:A:138:ASN:OD1	1:A:139:HIS:ND1	0.47	2.47	14	1
1:A:129:GLU:O	1:A:132:LEU:HD23	0.47	2.08	10	2
1:A:98:THR:OG1	1:A:111:THR:HG22	0.47	2.10	13	1
1:A:139:HIS:H	1:A:223:THR:HG23	0.47	1.70	18	1
1:A:105:GLU:C	1:A:107:CYS:N	0.47	2.68	15	2
1:A:156:ARG:NE	1:A:194:ARG:NH2	0.47	2.63	20	1
1:A:174:LYS:HZ2	1:A:189:ILE:CD1	0.47	2.22	10	1
1:A:132:LEU:O	1:A:136:TRP:CD1	0.47	2.68	5	1
1:A:44:VAL:HG21	1:A:202:ALA:O	0.47	2.10	12	1
1:A:78:ARG:CA	1:A:210:LEU:HD13	0.47	2.39	11	1
1:A:64:GLN:CD	1:A:64:GLN:C	0.47	2.72	11	1
1:A:143:GLN:CB	1:A:147:GLN:OE1	0.47	2.63	4	1
1:A:48:HIS:H	1:A:55:THR:HG23	0.47	1.69	4	1
1:A:103:TYR:CE1	1:A:107:CYS:SG	0.47	3.08	20	1
1:A:189:ILE:O	1:A:190:THR:CG2	0.47	2.62	20	1
1:A:90:GLN:N	1:A:90:GLN:HE21	0.47	2.08	14	1
1:A:48:HIS:CE1	1:A:50:VAL:CG2	0.47	2.97	14	3
1:A:54:ARG:CA	1:A:87:TYR:OH	0.47	2.62	9	3
1:A:105:GLU:OE2	1:A:111:THR:CG2	0.47	2.63	8	1
1:A:195:GLU:O	1:A:197:GLN:NE2	0.47	2.47	16	1
1:A:210:LEU:HD12	1:A:210:LEU:O	0.47	2.10	6	1
1:A:135:PHE:CE2	1:A:139:HIS:NE2	0.47	2.83	12	1
1:A:119:VAL:CG2	1:A:121:TYR:OH	0.47	2.63	18	1
1:A:57:GLU:O	1:A:57:GLU:OE2	0.47	2.33	7	1
1:A:49:HIS:ND1	1:A:49:HIS:O	0.47	2.47	11	1
1:A:81:TRP:CH2	1:A:208:GLN:HA	0.47	2.44	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:121:TYR:CD1	1:A:131:LEU:HD22	0.47	2.44	20	2
1:A:77:GLU:OE1	1:A:81:TRP:CE3	0.47	2.68	20	1
1:A:73:PHE:CZ	1:A:103:TYR:CD2	0.47	3.02	15	1
1:A:143:GLN:NE2	1:A:147:GLN:CB	0.47	2.78	14	1
1:A:184:HIS:O	1:A:185:ASN:CB	0.47	2.63	11	12
1:A:70:MET:HB3	1:A:139:HIS:CD2	0.47	2.44	8	5
1:A:64:GLN:HB2	1:A:121:TYR:CE1	0.47	2.45	10	1
1:A:119:VAL:HG21	1:A:121:TYR:OH	0.47	2.10	18	1
1:A:126:ILE:HG23	1:A:130:GLU:CG	0.47	2.39	21	1
1:A:49:HIS:CG	1:A:212:LYS:HE2	0.47	2.45	21	1
1:A:132:LEU:N	1:A:132:LEU:HD12	0.47	2.25	4	1
1:A:80:PHE:CZ	1:A:134:VAL:HG11	0.47	2.44	3	1
1:A:140:ASP:O	1:A:147:GLN:NE2	0.47	2.43	19	1
1:A:209:TYR:CE1	1:A:213:ASN:HB2	0.47	2.44	19	2
1:A:174:LYS:NZ	1:A:191:THR:OG1	0.47	2.38	10	1
1:A:63:THR:HG22	1:A:122:ARG:HB3	0.47	1.87	15	2
1:A:96:GLY:C	1:A:113:HIS:CE1	0.47	2.88	5	1
1:A:203:GLU:HG2	1:A:205:TYR:CD2	0.47	2.44	6	1
1:A:203:GLU:CG	1:A:205:TYR:CD2	0.47	2.98	6	1
1:A:145:MET:SD	2:A:21:MYR:C9	0.47	3.03	7	1
1:A:91:VAL:HG23	1:A:206:HIS:O	0.47	2.08	2	1
1:A:123:PRO:HG2	1:A:126:ILE:N	0.47	2.25	20	1
1:A:49:HIS:ND1	1:A:211:SER:OG	0.47	2.43	15	1
1:A:99:ARG:CG	1:A:100:ASN:ND2	0.47	2.77	3	1
1:A:62:GLY:O	1:A:63:THR:HG23	0.47	2.10	17	1
1:A:28:VAL:HG12	1:A:28:VAL:O	0.47	2.10	20	2
1:A:102:THR:O	1:A:105:GLU:N	0.47	2.47	8	1
1:A:168:GLU:OE1	1:A:168:GLU:N	0.47	2.48	10	1
1:A:89:THR:O	1:A:90:GLN:CD	0.47	2.54	4	1
1:A:102:THR:O	1:A:106:VAL:HG22	0.46	2.09	20	11
1:A:143:GLN:C	1:A:145:MET:N	0.46	2.69	16	2
1:A:184:HIS:O	1:A:185:ASN:CG	0.46	2.54	18	2
1:A:87:TYR:CE1	1:A:88:SER:HB2	0.46	2.44	5	3
1:A:49:HIS:CE1	1:A:212:LYS:CG	0.46	2.98	6	1
1:A:150:ASP:HB2	1:A:155:TYR:CG	0.46	2.45	11	1
1:A:78:ARG:NE	1:A:82:VAL:HG11	0.46	2.25	15	1
1:A:86:VAL:HG23	1:A:121:TYR:CZ	0.46	2.45	15	1
1:A:70:MET:H	1:A:139:HIS:CD2	0.46	2.27	14	1
1:A:66:ALA:HB2	1:A:166:GLN:NE2	0.46	2.25	8	1
1:A:118:ARG:HG3	1:A:118:ARG:O	0.46	2.09	13	1
1:A:195:GLU:C	1:A:197:GLN:OE1	0.46	2.53	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:GLN:OE1	1:A:64:GLN:C	0.46	2.53	18	1
1:A:87:TYR:CD1	1:A:87:TYR:C	0.46	2.87	14	1
1:A:60:PRO:HG2	1:A:87:TYR:CD2	0.46	2.46	7	3
1:A:175:GLU:OE1	1:A:175:GLU:O	0.46	2.34	13	1
1:A:136:TRP:CD1	1:A:177:TYR:CE1	0.46	3.02	7	1
1:A:160:TYR:HB3	1:A:197:GLN:NE2	0.46	2.25	3	2
1:A:101:PRO:HG2	1:A:113:HIS:NE2	0.46	2.26	3	1
1:A:166:GLN:O	1:A:168:GLU:N	0.46	2.48	17	1
1:A:163:SER:O	1:A:164:ALA:C	0.46	2.54	20	7
1:A:70:MET:HG3	1:A:139:HIS:CD2	0.46	2.46	14	1
1:A:154:GLN:N	1:A:154:GLN:CD	0.46	2.69	13	1
1:A:59:PHE:CE1	1:A:118:ARG:CZ	0.46	2.99	7	1
1:A:185:ASN:O	1:A:186:PHE:CG	0.46	2.68	7	1
1:A:142:THR:CB	1:A:188:PRO:O	0.46	2.63	11	1
1:A:86:VAL:HG23	1:A:121:TYR:CE1	0.46	2.45	15	2
1:A:136:TRP:CZ3	1:A:191:THR:OG1	0.46	2.68	17	1
1:A:136:TRP:HB3	1:A:177:TYR:CZ	0.46	2.46	7	2
1:A:80:PHE:CD2	1:A:117:VAL:HG11	0.46	2.46	14	1
1:A:89:THR:HB	1:A:119:VAL:HG12	0.46	1.86	13	2
1:A:119:VAL:O	1:A:119:VAL:HG23	0.46	2.11	8	1
1:A:71:GLY:N	1:A:147:GLN:CB	0.46	2.78	8	1
1:A:109:GLU:O	1:A:112:GLY:N	0.46	2.39	10	1
1:A:116:VAL:CG1	1:A:160:TYR:CE2	0.46	2.98	13	2
1:A:118:ARG:HD3	1:A:118:ARG:C	0.46	2.31	5	1
1:A:118:ARG:HD2	1:A:199:PHE:CE1	0.46	2.45	4	2
1:A:102:THR:OG1	1:A:105:GLU:HB3	0.46	2.11	18	1
1:A:143:GLN:O	1:A:190:THR:OG1	0.46	2.29	9	1
1:A:69:GLY:N	1:A:158:ALA:O	0.46	2.49	9	1
1:A:136:TRP:CG	1:A:177:TYR:CE1	0.46	3.03	7	1
1:A:103:TYR:CE1	1:A:206:HIS:CE1	0.46	3.03	7	1
1:A:153:THR:O	1:A:153:THR:OG1	0.46	2.34	4	1
1:A:176:GLU:OE1	1:A:176:GLU:CA	0.46	2.63	20	1
1:A:49:HIS:ND1	1:A:208:GLN:HB2	0.46	2.25	20	1
1:A:70:MET:HG2	1:A:71:GLY:H	0.46	1.70	20	1
1:A:35:LEU:HD22	1:A:110:LYS:C	0.46	2.30	8	1
1:A:185:ASN:CG	1:A:185:ASN:O	0.46	2.54	18	1
1:A:73:PHE:CE1	1:A:206:HIS:CE1	0.46	3.03	9	2
1:A:96:GLY:N	1:A:113:HIS:HD1	0.46	2.09	7	1
1:A:139:HIS:O	1:A:223:THR:HG22	0.46	2.10	4	2
1:A:81:TRP:CA	1:A:89:THR:HG21	0.46	2.40	4	1
1:A:157:SER:O	1:A:191:THR:HG23	0.46	2.11	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:136:TRP:CH2	1:A:191:THR:OG1	0.46	2.67	17	1
1:A:162:THR:OG1	1:A:166:GLN:NE2	0.46	2.48	5	2
1:A:68:PHE:CE1	1:A:80:PHE:CE2	0.46	3.03	13	1
1:A:162:THR:OG1	1:A:166:GLN:CD	0.46	2.54	5	1
1:A:214:PRO:C	1:A:216:GLY:N	0.46	2.69	5	3
1:A:101:PRO:HG2	1:A:113:HIS:CD2	0.46	2.46	3	3
1:A:181:LEU:HD22	1:A:181:LEU:N	0.46	2.25	11	1
1:A:203:GLU:OE2	1:A:205:TYR:CB	0.46	2.64	11	1
1:A:54:ARG:CD	1:A:57:GLU:O	0.46	2.64	2	1
1:A:105:GLU:O	1:A:107:CYS:N	0.46	2.49	15	1
1:A:140:ASP:CG	1:A:143:GLN:CD	0.46	2.73	3	1
1:A:72:CYS:N	1:A:115:GLU:OE2	0.46	2.44	8	1
1:A:180:VAL:HG13	1:A:181:LEU:N	0.46	2.26	13	1
1:A:31:ALA:O	1:A:33:GLU:N	0.46	2.49	5	3
1:A:185:ASN:O	1:A:185:ASN:CG	0.46	2.53	16	1
1:A:68:PHE:CD2	1:A:135:PHE:HB2	0.46	2.46	5	2
1:A:72:CYS:CB	1:A:150:ASP:CG	0.46	2.84	6	1
1:A:80:PHE:CG	1:A:119:VAL:HG11	0.46	2.46	12	1
1:A:189:ILE:HG23	1:A:191:THR:OG1	0.46	2.11	11	1
1:A:147:GLN:O	1:A:150:ASP:CG	0.46	2.54	21	1
1:A:118:ARG:O	1:A:118:ARG:CG	0.46	2.64	15	1
1:A:167:MET:HG3	1:A:171:LEU:HD22	0.46	1.87	17	1
1:A:103:TYR:HB2	1:A:206:HIS:CE1	0.46	2.46	14	5
1:A:177:TYR:CD2	1:A:181:LEU:HD21	0.46	2.46	12	1
1:A:189:ILE:HG22	1:A:191:THR:H	0.46	1.69	9	1
1:A:203:GLU:HG3	1:A:205:TYR:H	0.46	1.71	4	2
1:A:73:PHE:CE2	1:A:92:GLY:O	0.46	2.69	2	1
1:A:77:GLU:OE2	1:A:91:VAL:HG22	0.46	2.10	3	1
1:A:197:GLN:N	1:A:197:GLN:CD	0.46	2.69	5	3
1:A:31:ALA:C	1:A:33:GLU:N	0.46	2.69	13	4
1:A:126:ILE:HD13	1:A:130:GLU:CB	0.46	2.41	10	2
1:A:145:MET:SD	2:A:21:MYR:C7	0.46	3.04	7	1
1:A:75:GLY:CA	1:A:218:CYS:SG	0.46	3.04	21	1
1:A:159:VAL:HG23	1:A:191:THR:HG21	0.46	1.87	2	1
1:A:139:HIS:NE2	1:A:157:SER:HB2	0.46	2.26	3	1
1:A:128:PHE:O	1:A:129:GLU:C	0.45	2.51	10	3
1:A:118:ARG:HG3	1:A:199:PHE:CE1	0.45	2.46	20	5
1:A:143:GLN:HB3	1:A:146:ARG:O	0.45	2.11	2	2
1:A:35:LEU:HD11	1:A:105:GLU:OE2	0.45	2.11	18	1
1:A:126:ILE:CD1	1:A:130:GLU:OE2	0.45	2.64	18	1
1:A:87:TYR:CE2	1:A:88:SER:HB3	0.45	2.46	18	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:THR:HB	1:A:49:HIS:NE2	0.45	2.27	20	1
1:A:61:GLU:CD	1:A:61:GLU:C	0.45	2.75	3	1
1:A:136:TRP:HB2	1:A:177:TYR:CE2	0.45	2.46	17	1
1:A:212:LYS:HZ1	1:A:212:LYS:HB2	0.45	1.71	17	1
1:A:136:TRP:O	1:A:137:GLU:C	0.45	2.53	21	5
1:A:210:LEU:HD22	1:A:216:GLY:C	0.45	2.31	19	2
1:A:209:TYR:CE2	1:A:213:ASN:ND2	0.45	2.84	8	1
1:A:126:ILE:O	1:A:126:ILE:CG2	0.45	2.64	13	1
1:A:78:ARG:CZ	1:A:214:PRO:CB	0.45	2.94	5	1
1:A:50:VAL:CG2	1:A:211:SER:OG	0.45	2.65	4	2
1:A:136:TRP:HE1	1:A:173:SER:HB3	0.45	1.72	9	1
1:A:35:LEU:HD13	1:A:35:LEU:N	0.45	2.26	21	1
1:A:73:PHE:CD2	1:A:92:GLY:O	0.45	2.69	2	1
1:A:71:GLY:CA	1:A:147:GLN:CB	0.45	2.94	8	1
1:A:87:TYR:C	1:A:87:TYR:CD1	0.45	2.90	9	2
1:A:190:THR:OG1	1:A:190:THR:O	0.45	2.29	16	1
1:A:182:SER:OG	1:A:183:LYS:N	0.45	2.49	18	1
1:A:149:ASN:ND2	1:A:218:CYS:O	0.45	2.49	2	1
1:A:64:GLN:NE2	1:A:128:PHE:CE1	0.45	2.82	15	1
1:A:141:PRO:CG	1:A:181:LEU:CD1	0.45	2.94	15	3
1:A:60:PRO:HG3	1:A:87:TYR:CE2	0.45	2.46	8	1
1:A:48:HIS:CD2	1:A:208:GLN:HG2	0.45	2.47	16	2
1:A:72:CYS:CB	1:A:150:ASP:OD1	0.45	2.64	11	2
1:A:70:MET:SD	1:A:139:HIS:CB	0.45	3.04	18	1
1:A:73:PHE:CZ	1:A:115:GLU:HG2	0.45	2.46	7	1
1:A:197:GLN:CD	1:A:197:GLN:N	0.45	2.70	21	1
1:A:98:THR:O	1:A:100:ASN:N	0.45	2.49	21	1
1:A:156:ARG:NH2	2:A:21:MYR:C11	0.45	2.80	2	1
1:A:77:GLU:OE2	1:A:77:GLU:O	0.45	2.35	8	1
1:A:174:LYS:NZ	1:A:189:ILE:HD13	0.45	2.27	10	1
1:A:203:GLU:N	1:A:203:GLU:CD	0.45	2.68	10	1
1:A:64:GLN:CB	1:A:121:TYR:CZ	0.45	2.99	10	2
1:A:69:GLY:HA2	1:A:117:VAL:HG13	0.45	1.89	6	1
1:A:193:ILE:N	1:A:193:ILE:HD12	0.45	2.26	18	1
1:A:138:ASN:O	1:A:138:ASN:OD1	0.45	2.34	2	1
1:A:171:LEU:HD23	1:A:172:ARG:N	0.45	2.27	3	1
1:A:140:ASP:O	1:A:141:PRO:C	0.45	2.55	17	2
1:A:118:ARG:CZ	1:A:119:VAL:N	0.45	2.80	8	1
1:A:156:ARG:NH1	2:A:21:MYR:C9	0.45	2.80	8	1
1:A:162:THR:HG22	1:A:163:SER:OG	0.45	2.11	10	1
1:A:203:GLU:HG3	1:A:205:TYR:CD2	0.45	2.46	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:122:ARG:HG2	1:A:122:ARG:O	0.45	2.11	12	1
1:A:121:TYR:CE2	1:A:131:LEU:HG	0.45	2.47	18	2
1:A:59:PHE:CZ	1:A:118:ARG:CZ	0.45	3.00	7	1
1:A:177:TYR:CE2	1:A:181:LEU:HD21	0.45	2.47	2	1
1:A:64:GLN:NE2	1:A:121:TYR:HB2	0.45	2.27	3	1
1:A:146:ARG:CD	1:A:148:GLY:O	0.45	2.64	17	1
1:A:212:LYS:NZ	1:A:212:LYS:HB2	0.45	2.25	17	1
1:A:68:PHE:CD1	1:A:135:PHE:HB2	0.45	2.47	2	4
1:A:70:MET:HG3	1:A:71:GLY:H	0.45	1.72	13	1
1:A:150:ASP:HB3	1:A:155:TYR:CE2	0.45	2.47	12	1
1:A:103:TYR:CD1	1:A:104:LYS:N	0.45	2.84	14	1
1:A:98:THR:HG22	1:A:99:ARG:HH11	0.45	1.71	19	1
1:A:70:MET:HB3	1:A:139:HIS:NE2	0.45	2.26	13	4
1:A:154:GLN:HG2	1:A:155:TYR:CE2	0.45	2.47	12	3
1:A:179:LYS:O	1:A:182:SER:OG	0.45	2.23	18	1
1:A:148:GLY:CA	1:A:220:LEU:HD22	0.45	2.42	9	1
1:A:98:THR:HB	1:A:100:ASN:ND2	0.45	2.25	7	2
1:A:56:VAL:CG2	1:A:56:VAL:O	0.45	2.65	4	1
1:A:135:PHE:CE2	1:A:159:VAL:CG1	0.45	3.00	15	1
1:A:33:GLU:HG2	1:A:110:LYS:NZ	0.45	2.27	3	1
1:A:64:GLN:HE22	1:A:121:TYR:CB	0.45	2.24	3	1
1:A:151:PHE:C	1:A:151:PHE:CD1	0.45	2.89	3	1
1:A:141:PRO:HG3	1:A:186:PHE:CZ	0.45	2.46	17	1
1:A:102:THR:H	1:A:105:GLU:HG2	0.45	1.72	8	1
1:A:48:HIS:NE2	1:A:208:GLN:HG2	0.45	2.27	16	1
1:A:160:TYR:O	1:A:161:PRO:O	0.45	2.34	21	1
1:A:49:HIS:CG	1:A:212:LYS:HE3	0.45	2.45	21	1
1:A:49:HIS:CE1	1:A:208:GLN:HG2	0.45	2.47	20	1
1:A:55:THR:HG22	1:A:90:GLN:CD	0.45	2.32	15	1
1:A:156:ARG:HH21	1:A:192:ASP:CB	0.45	2.25	3	1
1:A:195:GLU:O	1:A:195:GLU:OE1	0.45	2.35	17	1
1:A:60:PRO:O	1:A:61:GLU:C	0.45	2.55	16	7
1:A:181:LEU:N	1:A:181:LEU:HD23	0.45	2.27	6	2
1:A:130:GLU:O	1:A:132:LEU:N	0.45	2.49	8	1
1:A:141:PRO:HG3	1:A:177:TYR:CD2	0.45	2.47	10	1
1:A:64:GLN:O	1:A:120:VAL:CA	0.45	2.65	10	1
1:A:34:ALA:CA	1:A:110:LYS:O	0.45	2.65	13	1
1:A:131:LEU:CD1	1:A:131:LEU:H	0.45	2.03	18	3
1:A:133:LYS:O	1:A:137:GLU:N	0.45	2.46	2	1
1:A:142:THR:O	1:A:143:GLN:OE1	0.45	2.34	15	1
1:A:55:THR:O	1:A:56:VAL:HG22	0.45	2.11	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:TYR:CE1	1:A:88:SER:HB3	0.44	2.47	11	12
1:A:174:LYS:CE	1:A:189:ILE:HD13	0.44	2.41	10	1
1:A:59:PHE:CE1	1:A:120:VAL:HG11	0.44	2.46	9	3
1:A:128:PHE:CZ	1:A:166:GLN:NE2	0.44	2.85	18	1
1:A:125:HIS:ND1	1:A:125:HIS:N	0.44	2.63	2	1
1:A:145:MET:CA	1:A:156:ARG:HH11	0.44	2.24	19	1
1:A:147:GLN:OE1	1:A:147:GLN:CA	0.44	2.63	8	1
1:A:70:MET:HA	1:A:139:HIS:CD2	0.44	2.47	6	4
1:A:34:ALA:CB	1:A:98:THR:OG1	0.44	2.65	6	1
1:A:59:PHE:CZ	1:A:120:VAL:HG21	0.44	2.47	12	1
1:A:212:LYS:C	1:A:214:PRO:CD	0.44	2.84	2	1
1:A:135:PHE:CE2	1:A:159:VAL:HG11	0.44	2.47	15	1
1:A:176:GLU:OE1	1:A:176:GLU:O	0.44	2.36	19	1
1:A:108:SER:O	1:A:109:GLU:HG2	0.44	2.12	10	1
1:A:139:HIS:HE2	1:A:157:SER:HB3	0.44	1.72	5	1
1:A:53:ASN:ND2	1:A:87:TYR:CD2	0.44	2.85	4	3
1:A:143:GLN:O	1:A:143:GLN:HG3	0.44	2.13	6	1
1:A:49:HIS:CG	1:A:211:SER:OG	0.44	2.70	6	1
1:A:74:TRP:CD1	1:A:74:TRP:C	0.44	2.86	6	1
1:A:140:ASP:O	1:A:143:GLN:CD	0.44	2.55	9	1
1:A:96:GLY:O	1:A:198:VAL:HG11	0.44	2.12	7	1
1:A:138:ASN:OD1	1:A:138:ASN:O	0.44	2.35	21	1
1:A:140:ASP:OD1	1:A:140:ASP:C	0.44	2.55	14	1
1:A:190:THR:O	1:A:190:THR:OG1	0.44	2.32	14	1
1:A:78:ARG:HG2	1:A:79:LYS:N	0.44	2.28	11	6
1:A:174:LYS:CD	1:A:189:ILE:CD1	0.44	2.96	10	1
1:A:123:PRO:HB2	1:A:125:HIS:H	0.44	1.73	20	2
1:A:154:GLN:CG	1:A:155:TYR:CE2	0.44	3.01	6	1
1:A:149:ASN:O	1:A:149:ASN:OD1	0.44	2.35	18	1
1:A:203:GLU:CG	1:A:205:TYR:H	0.44	2.25	4	2
1:A:158:ALA:CB	1:A:160:TYR:CZ	0.44	3.01	3	1
1:A:156:ARG:NH1	2:A:21:MYR:H82	0.44	2.28	17	1
1:A:68:PHE:CE1	1:A:135:PHE:HB2	0.44	2.48	14	1
1:A:91:VAL:CG2	1:A:207:GLN:HA	0.44	2.42	8	2
1:A:133:LYS:NZ	1:A:137:GLU:OE2	0.44	2.51	18	1
1:A:149:ASN:O	1:A:149:ASN:CG	0.44	2.55	18	1
1:A:30:SER:C	1:A:32:GLU:N	0.44	2.70	9	1
1:A:210:LEU:HD22	1:A:216:GLY:HA2	0.44	1.88	7	1
1:A:156:ARG:NE	1:A:192:ASP:HB2	0.44	2.27	14	2
1:A:178:GLN:OE1	1:A:178:GLN:O	0.44	2.36	19	1
1:A:187:GLY:N	1:A:188:PRO:HD2	0.44	2.23	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:180:VAL:CG1	1:A:181:LEU:N	0.44	2.80	13	1
1:A:208:GLN:C	1:A:210:LEU:N	0.44	2.71	6	1
1:A:97:HIS:NE2	1:A:111:THR:C	0.44	2.71	7	1
1:A:209:TYR:CE2	1:A:213:ASN:HB3	0.44	2.46	21	1
1:A:47:LYS:O	1:A:49:HIS:N	0.44	2.51	20	1
1:A:127:SER:C	1:A:129:GLU:N	0.44	2.71	3	1
1:A:157:SER:O	1:A:191:THR:HA	0.44	2.13	3	1
1:A:141:PRO:HG2	1:A:186:PHE:CZ	0.44	2.47	17	1
1:A:77:GLU:O	1:A:81:TRP:CE3	0.44	2.71	13	2
1:A:140:ASP:CG	1:A:140:ASP:O	0.44	2.55	8	1
1:A:60:PRO:CG	1:A:87:TYR:CE2	0.44	3.00	8	1
1:A:50:VAL:CG2	1:A:81:TRP:CG	0.44	2.96	6	1
1:A:91:VAL:CG2	1:A:207:GLN:CD	0.44	2.86	12	1
1:A:153:THR:OG1	1:A:153:THR:O	0.44	2.26	3	2
1:A:193:ILE:O	1:A:194:ARG:CG	0.44	2.66	15	1
1:A:174:LYS:HG2	1:A:175:GLU:N	0.44	2.26	17	1
1:A:70:MET:SD	1:A:139:HIS:HB3	0.44	2.53	18	3
1:A:70:MET:HG2	1:A:139:HIS:NE2	0.44	2.28	8	3
1:A:99:ARG:HG3	1:A:100:ASN:ND2	0.44	2.28	13	1
1:A:146:ARG:HD2	1:A:147:GLN:N	0.44	2.28	4	2
1:A:29:ILE:HG12	1:A:30:SER:N	0.44	2.28	5	5
1:A:80:PHE:O	1:A:83:LEU:HD11	0.44	2.13	5	1
1:A:49:HIS:CE1	1:A:212:LYS:HG2	0.44	2.48	6	1
1:A:128:PHE:C	1:A:130:GLU:H	0.44	2.15	12	1
1:A:150:ASP:HB2	1:A:155:TYR:CD2	0.44	2.48	12	1
1:A:86:VAL:HG23	1:A:121:TYR:CD1	0.44	2.48	9	2
1:A:124:GLU:OE2	1:A:125:HIS:CG	0.44	2.70	21	1
1:A:140:ASP:CB	1:A:143:GLN:OE1	0.44	2.66	21	1
1:A:212:LYS:C	1:A:213:ASN:HD22	0.44	2.16	21	1
1:A:178:GLN:NE2	1:A:178:GLN:O	0.44	2.51	17	1
1:A:103:TYR:HB3	1:A:206:HIS:CE1	0.44	2.47	21	2
1:A:31:ALA:C	1:A:33:GLU:H	0.44	2.15	5	2
1:A:84:LYS:NZ	1:A:84:LYS:HA	0.44	2.27	5	1
1:A:150:ASP:HB3	1:A:155:TYR:CD2	0.44	2.48	11	3
1:A:203:GLU:HB3	1:A:205:TYR:CZ	0.44	2.48	12	2
1:A:92:GLY:HA3	1:A:200:TYR:O	0.44	2.13	21	1
1:A:121:TYR:CD2	1:A:126:ILE:HG21	0.44	2.47	15	1
1:A:126:ILE:CD1	1:A:130:GLU:OE1	0.43	2.65	17	1
1:A:94:ALA:HB3	1:A:116:VAL:CG2	0.43	2.43	19	2
1:A:77:GLU:OE1	1:A:119:VAL:CG1	0.43	2.66	8	1
1:A:55:THR:C	1:A:56:VAL:CG1	0.43	2.87	21	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:154:GLN:HG2	1:A:155:TYR:CE1	0.43	2.47	6	1
1:A:203:GLU:OE1	1:A:205:TYR:CE2	0.43	2.70	6	1
1:A:93:PHE:CZ	1:A:202:ALA:HB1	0.43	2.47	12	1
1:A:115:GLU:C	1:A:115:GLU:CD	0.43	2.77	4	1
1:A:48:HIS:NE2	1:A:208:GLN:HG3	0.43	2.27	17	2
1:A:140:ASP:HB3	1:A:143:GLN:NE2	0.43	2.28	19	2
1:A:141:PRO:CD	1:A:223:THR:OG1	0.43	2.66	19	1
1:A:140:ASP:HB2	1:A:143:GLN:NE2	0.43	2.28	10	1
1:A:80:PHE:CD1	1:A:80:PHE:N	0.43	2.85	15	3
1:A:209:TYR:CE1	1:A:213:ASN:ND2	0.43	2.85	4	1
1:A:47:LYS:O	1:A:48:HIS:O	0.43	2.36	2	2
1:A:33:GLU:OE2	1:A:33:GLU:O	0.43	2.36	2	1
1:A:88:SER:C	1:A:90:GLN:HE22	0.43	2.16	2	1
1:A:127:SER:O	1:A:129:GLU:N	0.43	2.51	3	1
1:A:48:HIS:CE1	1:A:50:VAL:HB	0.43	2.48	14	7
1:A:70:MET:SD	1:A:157:SER:HB2	0.43	2.54	14	1
1:A:96:GLY:HA3	1:A:113:HIS:CG	0.43	2.48	18	8
1:A:119:VAL:CG2	1:A:119:VAL:O	0.43	2.66	19	2
1:A:123:PRO:HA	1:A:126:ILE:O	0.43	2.14	9	4
1:A:150:ASP:HB3	1:A:155:TYR:CG	0.43	2.48	11	3
1:A:98:THR:OG1	1:A:111:THR:CG2	0.43	2.66	13	1
1:A:67:VAL:HG12	1:A:116:VAL:CG1	0.43	2.43	13	1
1:A:132:LEU:CD2	1:A:132:LEU:N	0.43	2.81	12	1
1:A:147:GLN:OE1	1:A:157:SER:CA	0.43	2.67	18	1
1:A:160:TYR:CE1	1:A:194:ARG:HB2	0.43	2.49	7	1
1:A:219:GLY:O	1:A:220:LEU:CD2	0.43	2.66	19	1
1:A:50:VAL:HG21	1:A:81:TRP:CE2	0.43	2.48	10	1
1:A:81:TRP:CH2	1:A:210:LEU:HB2	0.43	2.48	11	2
1:A:144:GLY:O	1:A:156:ARG:CD	0.43	2.66	6	1
1:A:138:ASN:O	1:A:139:HIS:HB3	0.43	2.13	12	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:131:LEU:HB3	0.43	2.48	9	1
1:A:29:ILE:CG2	1:A:109:GLU:O	0.43	2.66	7	1
1:A:204:ASP:C	1:A:204:ASP:OD1	0.43	2.56	11	1
1:A:126:ILE:HG23	1:A:130:GLU:HG3	0.43	1.89	21	1
1:A:93:PHE:CZ	1:A:202:ALA:CB	0.43	3.01	4	1
1:A:170:ALA:C	1:A:172:ARG:N	0.43	2.72	20	1
1:A:33:GLU:O	1:A:110:LYS:CE	0.43	2.66	20	1
1:A:59:PHE:O	1:A:60:PRO:O	0.43	2.36	20	1
1:A:219:GLY:O	1:A:220:LEU:HB2	0.43	2.13	14	2
1:A:69:GLY:CA	1:A:115:GLU:OE2	0.43	2.66	13	1
1:A:141:PRO:C	1:A:143:GLN:OE1	0.43	2.56	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:220:LEU:C	1:A:220:LEU:HD23	0.43	2.34	5	1
1:A:87:TYR:CG	1:A:88:SER:N	0.43	2.87	6	1
1:A:196:GLY:C	1:A:197:GLN:CD	0.43	2.75	7	1
1:A:93:PHE:CE1	1:A:103:TYR:HB2	0.43	2.49	7	1
1:A:75:GLY:HA3	1:A:218:CYS:SG	0.43	2.53	21	1
1:A:126:ILE:CG1	1:A:130:GLU:HG2	0.43	2.44	2	1
1:A:127:SER:H	1:A:130:GLU:HG2	0.43	1.73	15	1
1:A:33:GLU:HG2	1:A:110:LYS:HZ3	0.43	1.73	3	1
1:A:90:GLN:O	1:A:118:ARG:O	0.43	2.37	14	1
1:A:85:GLY:O	1:A:122:ARG:CD	0.43	2.67	12	1
1:A:140:ASP:CB	1:A:143:GLN:CD	0.43	2.86	21	1
1:A:157:SER:O	1:A:191:THR:CA	0.43	2.67	3	1
1:A:32:GLU:OE1	1:A:32:GLU:CA	0.43	2.67	14	1
1:A:102:THR:O	1:A:103:TYR:C	0.43	2.56	8	2
1:A:72:CYS:CA	1:A:115:GLU:CD	0.43	2.87	8	1
1:A:72:CYS:O	1:A:115:GLU:OE2	0.43	2.36	8	1
1:A:93:PHE:HB3	1:A:113:HIS:CD2	0.43	2.49	8	1
1:A:209:TYR:CD2	1:A:209:TYR:C	0.43	2.90	10	1
1:A:117:VAL:O	1:A:117:VAL:HG12	0.43	2.13	13	1
1:A:74:TRP:C	1:A:210:LEU:HD21	0.43	2.33	5	1
1:A:56:VAL:HG13	1:A:201:TYR:CZ	0.43	2.49	7	1
1:A:136:TRP:C	1:A:137:GLU:OE1	0.43	2.57	4	1
1:A:156:ARG:NH2	2:A:21:MYR:H111	0.43	2.28	2	1
1:A:70:MET:O	1:A:147:GLN:HB2	0.43	2.14	2	1
1:A:44:VAL:HG12	1:A:204:ASP:HA	0.43	1.90	20	1
1:A:88:SER:C	1:A:89:THR:HG23	0.43	2.34	15	5
1:A:101:PRO:HG3	1:A:113:HIS:NE2	0.43	2.28	12	2
1:A:91:VAL:CG1	1:A:117:VAL:HG13	0.43	2.44	9	2
1:A:66:ALA:CB	1:A:166:GLN:HE22	0.43	2.26	9	1
1:A:30:SER:O	1:A:32:GLU:N	0.43	2.51	9	1
1:A:215:ASP:OD1	1:A:217:TYR:O	0.43	2.36	7	1
1:A:124:GLU:CD	1:A:124:GLU:C	0.43	2.78	21	1
1:A:121:TYR:CE2	1:A:128:PHE:HA	0.43	2.49	13	2
1:A:121:TYR:CE2	1:A:131:LEU:HD21	0.43	2.48	19	1
1:A:135:PHE:CE2	1:A:136:TRP:CZ3	0.43	3.07	10	1
1:A:171:LEU:HG	1:A:172:ARG:N	0.43	2.29	9	2
1:A:72:CYS:SG	1:A:74:TRP:CZ2	0.43	3.12	16	1
1:A:87:TYR:CD1	1:A:88:SER:CB	0.43	3.02	5	2
1:A:93:PHE:CZ	1:A:202:ALA:HA	0.43	2.49	21	5
1:A:153:THR:O	1:A:153:THR:CG2	0.43	2.66	18	1
1:A:59:PHE:CZ	1:A:120:VAL:HG11	0.43	2.49	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:145:MET:SD	2:A:21:MYR:H71	0.43	2.54	7	1
1:A:72:CYS:SG	1:A:74:TRP:CB	0.43	3.07	11	2
1:A:96:GLY:HA3	1:A:113:HIS:CD2	0.43	2.49	21	1
1:A:152:GLY:C	1:A:154:GLN:H	0.43	2.16	4	2
1:A:69:GLY:O	1:A:139:HIS:NE2	0.43	2.52	2	1
1:A:89:THR:N	1:A:90:GLN:NE2	0.43	2.67	2	1
1:A:208:GLN:HA	1:A:208:GLN:OE1	0.43	2.13	20	1
1:A:166:GLN:C	1:A:168:GLU:N	0.43	2.72	17	1
1:A:171:LEU:HD13	1:A:171:LEU:O	0.43	2.14	19	1
1:A:158:ALA:CB	1:A:192:ASP:HB3	0.43	2.43	8	1
1:A:87:TYR:CD1	1:A:88:SER:HB3	0.43	2.49	9	3
1:A:147:GLN:O	1:A:148:GLY:C	0.43	2.56	13	2
1:A:121:TYR:HD2	1:A:131:LEU:HD21	0.43	1.74	6	1
1:A:177:TYR:CE2	1:A:181:LEU:HD11	0.43	2.49	6	1
1:A:70:MET:O	1:A:147:GLN:CG	0.43	2.67	6	1
1:A:48:HIS:CE1	1:A:208:GLN:CG	0.43	3.01	18	1
1:A:184:HIS:CE1	1:A:186:PHE:CZ	0.43	3.07	11	1
1:A:46:ALA:C	1:A:55:THR:HG1	0.43	2.11	11	1
1:A:31:ALA:CB	1:A:97:HIS:NE2	0.43	2.82	21	1
1:A:90:GLN:OE1	1:A:120:VAL:HG23	0.43	2.14	20	1
1:A:121:TYR:HB3	1:A:126:ILE:CD1	0.43	2.44	3	1
1:A:106:VAL:HG12	1:A:111:THR:HG23	0.42	1.86	17	1
1:A:77:GLU:CG	1:A:77:GLU:O	0.42	2.67	17	2
1:A:31:ALA:HA	1:A:97:HIS:NE2	0.42	2.29	9	2
1:A:172:ARG:O	1:A:176:GLU:N	0.42	2.43	14	2
1:A:79:LYS:NZ	1:A:138:ASN:HB2	0.42	2.28	10	1
1:A:77:GLU:OE1	1:A:91:VAL:CG2	0.42	2.67	10	1
1:A:78:ARG:HA	1:A:81:TRP:CE3	0.42	2.49	10	1
1:A:177:TYR:CD1	1:A:181:LEU:HD11	0.42	2.49	13	1
1:A:91:VAL:CG2	1:A:207:GLN:CG	0.42	2.96	12	1
1:A:194:ARG:CD	1:A:194:ARG:N	0.42	2.80	18	1
1:A:151:PHE:O	1:A:151:PHE:CD1	0.42	2.71	15	2
1:A:78:ARG:NH2	1:A:214:PRO:HB3	0.42	2.29	5	1
1:A:184:HIS:CD2	1:A:186:PHE:CG	0.42	3.07	11	1
1:A:129:GLU:HA	1:A:132:LEU:HD22	0.42	1.91	20	1
1:A:189:ILE:C	1:A:190:THR:HG23	0.42	2.35	20	1
1:A:98:THR:HB	1:A:100:ASN:HD21	0.42	1.72	15	1
1:A:80:PHE:CE2	1:A:134:VAL:HB	0.42	2.48	17	1
1:A:57:GLU:HA	1:A:58:PRO:C	0.42	2.34	17	1
1:A:146:ARG:CG	1:A:150:ASP:O	0.42	2.67	14	1
1:A:154:GLN:CA	1:A:154:GLN:OE1	0.42	2.67	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:71:GLY:CA	1:A:147:GLN:OE1	0.42	2.67	10	1
1:A:60:PRO:HG2	1:A:87:TYR:CE2	0.42	2.50	10	1
1:A:128:PHE:CE2	1:A:132:LEU:HD23	0.42	2.49	16	1
1:A:105:GLU:HG2	1:A:106:VAL:N	0.42	2.28	18	1
1:A:48:HIS:HD1	1:A:50:VAL:HB	0.42	1.73	11	1
1:A:130:GLU:C	1:A:130:GLU:OE2	0.42	2.58	2	1
1:A:109:GLU:HG2	1:A:110:LYS:N	0.42	2.30	14	1
1:A:159:VAL:HG12	1:A:191:THR:CG2	0.42	2.42	14	1
1:A:219:GLY:O	1:A:220:LEU:HG	0.42	2.14	19	1
1:A:48:HIS:CE1	1:A:208:GLN:HG2	0.42	2.50	16	2
1:A:77:GLU:HG2	1:A:91:VAL:HG13	0.42	1.92	7	1
1:A:145:MET:O	1:A:146:ARG:HD2	0.42	2.13	20	1
1:A:85:GLY:CA	1:A:123:PRO:HB3	0.42	2.44	20	1
1:A:112:GLY:O	2:A:21:MYR:H141	0.42	2.14	8	1
1:A:113:HIS:O	1:A:154:GLN:CB	0.42	2.67	8	1
1:A:216:GLY:C	1:A:217:TYR:CD2	0.42	2.93	8	1
1:A:86:VAL:O	1:A:86:VAL:HG12	0.42	2.13	8	1
1:A:175:GLU:OE1	1:A:175:GLU:C	0.42	2.58	13	1
1:A:128:PHE:CZ	1:A:166:GLN:HG2	0.42	2.49	9	2
1:A:74:TRP:C	1:A:76:ALA:N	0.42	2.73	12	1
1:A:103:TYR:O	1:A:103:TYR:CD1	0.42	2.72	9	1
1:A:197:GLN:O	1:A:197:GLN:HG2	0.42	2.14	7	1
1:A:178:GLN:HA	1:A:178:GLN:OE1	0.42	2.15	21	1
1:A:193:ILE:C	1:A:194:ARG:CG	0.42	2.88	4	1
1:A:105:GLU:O	1:A:106:VAL:C	0.42	2.58	15	1
1:A:49:HIS:CD2	1:A:212:LYS:HD3	0.42	2.50	17	1
1:A:96:GLY:HA3	1:A:113:HIS:CE1	0.42	2.49	11	3
1:A:81:TRP:CH2	1:A:211:SER:OG	0.42	2.72	13	1
1:A:86:VAL:CG2	1:A:120:VAL:O	0.42	2.68	16	1
1:A:143:GLN:CB	1:A:147:GLN:HG2	0.42	2.45	12	1
1:A:198:VAL:HG13	1:A:200:TYR:CE2	0.42	2.49	12	1
1:A:63:THR:CG2	1:A:122:ARG:CD	0.42	2.97	18	1
1:A:78:ARG:HA	1:A:81:TRP:CE2	0.42	2.50	21	1
1:A:135:PHE:CZ	1:A:159:VAL:CG1	0.42	3.03	15	1
1:A:156:ARG:NH1	2:A:21:MYR:H102	0.42	2.30	15	1
1:A:134:VAL:HG22	1:A:138:ASN:ND2	0.42	2.30	14	1
1:A:150:ASP:HB3	1:A:155:TYR:CD1	0.42	2.50	19	1
1:A:177:TYR:OH	1:A:223:THR:HG21	0.42	2.14	16	1
1:A:86:VAL:HG23	1:A:121:TYR:CD2	0.42	2.49	5	1
1:A:140:ASP:N	1:A:141:PRO:HD3	0.42	2.30	6	1
1:A:153:THR:CA	1:A:156:ARG:HH11	0.42	2.28	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:TYR:CD1	1:A:120:VAL:HG11	0.42	2.49	12	1
1:A:136:TRP:HE1	1:A:173:SER:HB2	0.42	1.74	12	1
1:A:203:GLU:OE1	1:A:203:GLU:N	0.42	2.43	18	1
1:A:128:PHE:CE1	1:A:132:LEU:HD23	0.42	2.49	7	1
1:A:147:GLN:HA	1:A:147:GLN:OE1	0.42	2.15	21	1
1:A:147:GLN:OE1	1:A:157:SER:CB	0.42	2.67	2	1
1:A:70:MET:O	1:A:147:GLN:HG3	0.42	2.14	20	1
1:A:126:ILE:CG2	1:A:130:GLU:CD	0.42	2.86	3	1
1:A:216:GLY:C	1:A:217:TYR:O	0.42	2.58	9	3
1:A:70:MET:HG3	1:A:76:ALA:HB1	0.42	1.90	19	1
1:A:98:THR:HB	1:A:99:ARG:NH1	0.42	2.30	19	1
1:A:54:ARG:CB	1:A:54:ARG:NH1	0.42	2.83	13	1
1:A:168:GLU:C	1:A:168:GLU:CD	0.42	2.79	9	1
1:A:64:GLN:NE2	1:A:121:TYR:CA	0.42	2.77	3	1
1:A:55:THR:HG22	1:A:90:GLN:OE1	0.42	2.14	8	1
1:A:195:GLU:C	1:A:197:GLN:N	0.42	2.73	5	1
1:A:54:ARG:NH1	1:A:57:GLU:O	0.42	2.53	5	1
1:A:35:LEU:HD23	1:A:35:LEU:N	0.42	2.30	6	1
1:A:156:ARG:HD3	1:A:157:SER:N	0.42	2.30	12	1
1:A:49:HIS:NE2	1:A:212:LYS:HD2	0.42	2.29	18	1
1:A:184:HIS:CD2	1:A:186:PHE:CZ	0.42	3.08	11	1
1:A:101:PRO:HG3	1:A:113:HIS:CD2	0.42	2.50	3	1
1:A:142:THR:O	1:A:190:THR:CG2	0.42	2.68	17	1
1:A:176:GLU:HG3	1:A:177:TYR:N	0.42	2.30	20	5
1:A:157:SER:OG	1:A:191:THR:HA	0.42	2.15	14	1
1:A:47:LYS:HA	1:A:53:ASN:O	0.42	2.15	8	1
1:A:50:VAL:HG23	1:A:208:GLN:HG3	0.42	1.91	5	1
1:A:67:VAL:HG11	1:A:160:TYR:CD2	0.42	2.50	12	1
1:A:107:CYS:O	1:A:108:SER:C	0.42	2.58	9	1
1:A:49:HIS:ND1	1:A:212:LYS:CE	0.42	2.82	21	1
1:A:118:ARG:HB2	1:A:199:PHE:CE1	0.42	2.50	2	1
1:A:99:ARG:HG2	1:A:100:ASN:ND2	0.42	2.30	3	1
1:A:64:GLN:OE1	1:A:65:MET:SD	0.41	2.77	19	1
1:A:118:ARG:O	1:A:118:ARG:NH2	0.41	2.53	8	1
1:A:121:TYR:CE1	1:A:131:LEU:HB3	0.41	2.50	5	1
1:A:81:TRP:CZ3	1:A:208:GLN:HB3	0.41	2.49	6	1
1:A:173:SER:OG	1:A:174:LYS:N	0.41	2.53	12	1
1:A:64:GLN:CG	1:A:65:MET:N	0.41	2.82	7	1
1:A:178:GLN:OE1	1:A:189:ILE:HG12	0.41	2.14	21	1
1:A:68:PHE:O	1:A:116:VAL:HG12	0.41	2.15	21	1
1:A:156:ARG:HB2	1:A:156:ARG:NH1	0.41	2.30	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:156:ARG:NH2	2:A:21:MYR:C13	0.41	2.58	20	1
1:A:94:ALA:O	1:A:95:GLY:C	0.41	2.58	3	1
1:A:179:LYS:C	1:A:182:SER:OG	0.41	2.59	17	1
1:A:31:ALA:HA	1:A:97:HIS:CD2	0.41	2.49	17	1
1:A:179:LYS:O	1:A:179:LYS:CG	0.41	2.69	19	1
1:A:109:GLU:O	1:A:110:LYS:C	0.41	2.58	8	1
1:A:73:PHE:O	1:A:77:GLU:HB2	0.41	2.15	10	1
1:A:34:ALA:HB2	1:A:111:THR:HA	0.41	1.92	6	1
1:A:35:LEU:CG	1:A:98:THR:HG23	0.41	2.45	21	1
1:A:48:HIS:N	1:A:55:THR:CG2	0.41	2.81	4	1
1:A:44:VAL:HG12	1:A:203:GLU:C	0.41	2.35	20	1
1:A:160:TYR:CZ	1:A:192:ASP:OD2	0.41	2.73	14	1
1:A:34:ALA:C	1:A:35:LEU:O	0.41	2.59	14	1
1:A:121:TYR:CE1	1:A:131:LEU:HD21	0.41	2.50	19	1
1:A:153:THR:CB	1:A:156:ARG:NH1	0.41	2.83	6	1
1:A:203:GLU:CD	1:A:205:TYR:CD2	0.41	2.93	6	1
1:A:72:CYS:SG	1:A:74:TRP:HB2	0.41	2.56	6	2
1:A:30:SER:N	1:A:33:GLU:OE1	0.41	2.49	7	1
1:A:102:THR:O	1:A:106:VAL:N	0.41	2.35	11	1
1:A:118:ARG:HB2	1:A:199:PHE:CZ	0.41	2.50	2	1
1:A:154:GLN:HG3	1:A:155:TYR:CE2	0.41	2.50	3	2
1:A:114:ALA:CA	1:A:156:ARG:HH12	0.41	2.29	20	1
1:A:171:LEU:CD2	1:A:171:LEU:C	0.41	2.88	3	1
1:A:89:THR:CB	1:A:119:VAL:HG12	0.41	2.46	14	1
1:A:198:VAL:CG2	1:A:199:PHE:N	0.41	2.83	19	1
1:A:70:MET:HB3	1:A:147:GLN:HE21	0.41	1.74	8	1
1:A:136:TRP:HB3	1:A:177:TYR:CE1	0.41	2.50	9	2
1:A:88:SER:C	1:A:89:THR:CG2	0.41	2.88	7	1
1:A:147:GLN:HG2	1:A:155:TYR:O	0.41	2.15	4	1
1:A:85:GLY:C	1:A:123:PRO:HG3	0.41	2.36	20	1
1:A:45:THR:N	1:A:204:ASP:OD1	0.41	2.50	20	1
1:A:77:GLU:OE1	1:A:81:TRP:CZ3	0.41	2.72	20	1
1:A:64:GLN:NE2	1:A:131:LEU:HD21	0.41	2.30	3	1
1:A:156:ARG:NH2	1:A:158:ALA:HB2	0.41	2.30	3	1
1:A:34:ALA:HB2	1:A:110:LYS:O	0.41	2.13	14	1
1:A:145:MET:N	1:A:156:ARG:NH1	0.41	2.68	19	1
1:A:49:HIS:CG	1:A:212:LYS:HD2	0.41	2.51	4	2
1:A:118:ARG:NH2	1:A:118:ARG:C	0.41	2.74	8	1
1:A:118:ARG:NH2	1:A:120:VAL:N	0.41	2.61	8	1
1:A:119:VAL:HG13	1:A:131:LEU:HD22	0.41	1.92	10	1
1:A:104:LYS:HZ3	1:A:104:LYS:CB	0.41	2.29	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:176:GLU:HG2	1:A:177:TYR:N	0.41	2.29	6	1
1:A:118:ARG:HG3	1:A:199:PHE:CZ	0.41	2.51	6	1
1:A:64:GLN:HB2	1:A:121:TYR:CZ	0.41	2.51	6	1
1:A:129:GLU:H	1:A:129:GLU:CD	0.41	2.18	12	1
1:A:128:PHE:HE1	1:A:132:LEU:HD23	0.41	1.76	7	1
1:A:129:GLU:HA	1:A:132:LEU:HD12	0.41	1.92	11	1
1:A:156:ARG:HG2	1:A:156:ARG:NH1	0.41	2.31	15	1
1:A:188:PRO:O	1:A:189:ILE:C	0.41	2.59	19	2
1:A:29:ILE:N	1:A:29:ILE:HD13	0.41	2.29	8	1
1:A:35:LEU:HD21	1:A:110:LYS:CB	0.41	2.45	8	1
1:A:80:PHE:CD1	1:A:134:VAL:HG11	0.41	2.50	5	1
1:A:83:LEU:HD12	1:A:121:TYR:OH	0.41	2.15	12	1
1:A:142:THR:CG2	1:A:189:ILE:HD13	0.41	2.45	9	1
1:A:140:ASP:OD2	1:A:141:PRO:CD	0.41	2.68	11	1
1:A:81:TRP:CZ2	1:A:211:SER:CB	0.41	3.03	4	1
1:A:212:LYS:HB3	1:A:212:LYS:NZ	0.41	2.30	17	1
1:A:216:GLY:O	1:A:217:TYR:CB	0.41	2.68	8	1
1:A:34:ALA:CB	1:A:97:HIS:CE1	0.41	3.04	8	2
1:A:171:LEU:O	1:A:171:LEU:HD13	0.41	2.15	12	1
1:A:151:PHE:N	1:A:151:PHE:CD1	0.41	2.88	9	1
1:A:145:MET:SD	2:A:21:MYR:H92	0.41	2.55	7	1
1:A:115:GLU:OE1	1:A:115:GLU:O	0.41	2.37	11	1
1:A:210:LEU:HD23	1:A:216:GLY:CA	0.41	2.45	11	1
1:A:55:THR:HG22	1:A:88:SER:OG	0.41	2.14	21	1
1:A:70:MET:N	1:A:139:HIS:CD2	0.41	2.89	14	1
1:A:77:GLU:CD	1:A:90:GLN:N	0.41	2.73	19	1
1:A:143:GLN:HG3	1:A:148:GLY:H	0.41	1.76	13	1
1:A:67:VAL:HG13	1:A:117:VAL:O	0.41	2.16	5	1
1:A:113:HIS:O	1:A:156:ARG:NH2	0.41	2.53	6	1
1:A:150:ASP:O	1:A:150:ASP:OD1	0.41	2.38	21	1
1:A:178:GLN:OE1	1:A:189:ILE:HG13	0.41	2.16	21	1
1:A:198:VAL:HG22	1:A:200:TYR:CE2	0.41	2.51	4	1
1:A:79:LYS:C	1:A:80:PHE:CD1	0.41	2.94	4	1
1:A:59:PHE:CE2	1:A:118:ARG:CZ	0.41	3.04	2	1
1:A:60:PRO:HG3	1:A:87:TYR:CD2	0.41	2.51	3	1
1:A:147:GLN:HA	1:A:147:GLN:NE2	0.41	2.31	17	1
1:A:178:GLN:OE1	1:A:178:GLN:C	0.41	2.59	19	1
1:A:139:HIS:NE2	1:A:141:PRO:HB3	0.41	2.30	19	1
1:A:102:THR:OG1	1:A:105:GLU:HB2	0.41	2.16	13	1
1:A:103:TYR:O	1:A:107:CYS:N	0.41	2.49	16	1
1:A:94:ALA:CB	1:A:198:VAL:O	0.41	2.69	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:PHE:HB2	1:A:113:HIS:CD2	0.41	2.51	16	1
1:A:29:ILE:HD13	1:A:29:ILE:C	0.41	2.36	6	2
1:A:77:GLU:OE2	1:A:119:VAL:HG12	0.41	2.16	12	1
1:A:32:GLU:CA	1:A:32:GLU:OE1	0.41	2.69	18	1
1:A:204:ASP:O	1:A:209:TYR:CB	0.41	2.69	18	1
1:A:172:ARG:C	1:A:176:GLU:OE2	0.41	2.59	9	1
1:A:202:ALA:HB1	1:A:206:HIS:CB	0.41	2.46	9	1
1:A:150:ASP:CB	1:A:155:TYR:CD2	0.41	3.04	11	1
1:A:140:ASP:C	1:A:143:GLN:OE1	0.41	2.59	21	1
1:A:49:HIS:CE1	1:A:212:LYS:HE2	0.41	2.51	21	1
1:A:53:ASN:OD1	1:A:53:ASN:C	0.41	2.59	21	1
1:A:106:VAL:HG11	1:A:113:HIS:HD2	0.41	1.76	4	1
1:A:132:LEU:CD1	1:A:132:LEU:N	0.41	2.83	4	1
1:A:136:TRP:CZ2	1:A:173:SER:CB	0.41	3.03	20	1
1:A:141:PRO:HG2	1:A:181:LEU:CD1	0.41	2.46	15	1
1:A:210:LEU:HD13	1:A:218:CYS:HB3	0.41	1.93	17	1
1:A:116:VAL:HG11	1:A:160:TYR:CD2	0.41	2.50	13	1
1:A:155:TYR:C	1:A:156:ARG:O	0.41	2.59	13	1
1:A:84:LYS:HZ1	1:A:84:LYS:HA	0.41	1.75	5	1
1:A:59:PHE:CE2	1:A:120:VAL:HG21	0.41	2.51	12	1
1:A:156:ARG:HH22	1:A:194:ARG:NH2	0.41	2.12	7	1
1:A:93:PHE:HB2	1:A:113:HIS:NE2	0.41	2.30	7	1
1:A:81:TRP:CZ2	1:A:210:LEU:HB2	0.41	2.51	11	1
1:A:173:SER:OG	1:A:191:THR:HG21	0.41	2.16	20	1
1:A:81:TRP:CZ2	1:A:211:SER:HA	0.41	2.51	20	1
1:A:118:ARG:HD3	1:A:199:PHE:CE1	0.40	2.52	14	1
1:A:93:PHE:CZ	1:A:102:THR:HA	0.40	2.51	10	1
1:A:33:GLU:C	1:A:34:ALA:O	0.40	2.60	15	2
1:A:121:TYR:CD1	1:A:126:ILE:HG22	0.40	2.51	6	1
1:A:146:ARG:HB2	1:A:151:PHE:CB	0.40	2.46	12	1
1:A:121:TYR:CD2	1:A:131:LEU:HG	0.40	2.51	18	1
1:A:121:TYR:CZ	1:A:131:LEU:HG	0.40	2.51	18	1
1:A:158:ALA:HB1	1:A:194:ARG:NH1	0.40	2.31	18	1
1:A:29:ILE:HG21	1:A:110:LYS:O	0.40	2.16	18	1
1:A:77:GLU:CD	1:A:78:ARG:H	0.40	2.20	18	1
1:A:128:PHE:HE2	1:A:132:LEU:HD11	0.40	1.67	9	1
1:A:84:LYS:O	1:A:126:ILE:HG12	0.40	2.16	9	1
1:A:128:PHE:CD2	1:A:131:LEU:HD21	0.40	2.51	7	1
1:A:70:MET:CG	1:A:76:ALA:HB2	0.40	2.46	7	1
1:A:184:HIS:NE2	1:A:186:PHE:CZ	0.40	2.89	11	1
1:A:35:LEU:CD2	1:A:35:LEU:N	0.40	2.84	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:156:ARG:NH2	1:A:194:ARG:HH12	0.40	2.14	2	1
1:A:145:MET:CA	1:A:156:ARG:NH1	0.40	2.84	19	1
1:A:135:PHE:CE2	1:A:159:VAL:CG2	0.40	3.04	18	2
1:A:139:HIS:CE1	1:A:141:PRO:N	0.40	2.89	10	1
1:A:77:GLU:CD	1:A:208:GLN:HE21	0.40	2.19	16	1
1:A:72:CYS:CB	1:A:150:ASP:OD2	0.40	2.70	12	1
1:A:67:VAL:HG21	1:A:197:GLN:CD	0.40	2.37	7	1
1:A:31:ALA:HA	1:A:97:HIS:CE1	0.40	2.51	2	1
1:A:118:ARG:C	1:A:118:ARG:HD3	0.40	2.37	15	1
1:A:160:TYR:CD1	1:A:197:GLN:HG3	0.40	2.51	8	1
1:A:64:GLN:HB3	1:A:121:TYR:CE2	0.40	2.51	10	1
1:A:194:ARG:C	1:A:195:GLU:CD	0.40	2.79	10	1
1:A:194:ARG:HH12	2:A:21:MYR:H101	0.40	1.76	16	1
1:A:122:ARG:NH1	1:A:122:ARG:HB2	0.40	2.30	12	1
1:A:156:ARG:NH1	1:A:192:ASP:HB2	0.40	2.31	7	1
1:A:49:HIS:ND1	1:A:212:LYS:HE3	0.40	2.31	21	1
1:A:108:SER:OG	1:A:110:LYS:CE	0.40	2.68	15	1
1:A:198:VAL:HG11	1:A:200:TYR:OH	0.40	2.15	15	1
1:A:178:GLN:O	1:A:178:GLN:CD	0.40	2.60	19	1
1:A:98:THR:CB	1:A:99:ARG:NH1	0.40	2.84	19	1
1:A:107:CYS:O	1:A:109:GLU:OE1	0.40	2.39	13	1
1:A:68:PHE:HA	1:A:158:ALA:O	0.40	2.16	16	1
1:A:43:PRO:C	1:A:44:VAL:HG13	0.40	2.36	12	1
1:A:142:THR:HG22	1:A:189:ILE:HD13	0.40	1.92	9	1
1:A:69:GLY:C	1:A:139:HIS:NE2	0.40	2.74	2	1
1:A:73:PHE:HA	1:A:76:ALA:HB3	0.40	1.92	15	1
1:A:74:TRP:CA	1:A:210:LEU:HD11	0.40	2.46	8	1
1:A:126:ILE:HD13	1:A:130:GLU:CD	0.40	2.36	13	1
1:A:140:ASP:HB3	1:A:143:GLN:HE21	0.40	1.76	6	1
1:A:154:GLN:HG3	1:A:155:TYR:CD2	0.40	2.51	9	1
1:A:167:MET:SD	1:A:171:LEU:CD1	0.40	3.10	7	1
1:A:84:LYS:O	1:A:84:LYS:CG	0.40	2.66	20	1
1:A:94:ALA:N	1:A:113:HIS:HD1	0.40	2.12	20	1

5.2 Torsion angles

5.2.1 Protein backbone

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

was analysed and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	190/212 (90%)	137±7 (72±4%)	33±4 (17±2%)	20±5 (10±2%)	1	9
All	All	3990/4452 (90%)	2878 (72%)	698 (17%)	414 (10%)	1	9

All 62 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	53	ASN	21
1	A	208	GLN	20
1	A	72	CYS	18
1	A	73	PHE	17
1	A	216	GLY	17
1	A	28	VAL	15
1	A	189	ILE	14
1	A	144	GLY	13
1	A	29	ILE	13
1	A	57	GLU	13
1	A	217	TYR	13
1	A	79	LYS	13
1	A	99	ARG	13
1	A	45	THR	13
1	A	34	ALA	13
1	A	214	PRO	11
1	A	124	GLU	9
1	A	198	VAL	9
1	A	141	PRO	8
1	A	223	THR	8
1	A	145	MET	8
1	A	163	SER	8
1	A	109	GLU	8
1	A	107	CYS	7
1	A	43	PRO	7
1	A	35	LEU	7
1	A	108	SER	6
1	A	48	HIS	6
1	A	218	CYS	6
1	A	161	PRO	5
1	A	219	GLY	5
1	A	44	VAL	5
1	A	221	GLY	5
1	A	164	ALA	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	205	TYR	4
1	A	100	ASN	4
1	A	110	LYS	4
1	A	139	HIS	4
1	A	196	GLY	3
1	A	122	ARG	3
1	A	101	PRO	3
1	A	88	SER	3
1	A	220	LEU	2
1	A	156	ARG	2
1	A	143	GLN	2
1	A	197	GLN	2
1	A	78	ARG	2
1	A	61	GLU	2
1	A	137	GLU	2
1	A	97	HIS	2
1	A	60	PRO	1
1	A	167	MET	1
1	A	56	VAL	1
1	A	188	PRO	1
1	A	209	TYR	1
1	A	222	GLY	1
1	A	32	GLU	1
1	A	182	SER	1
1	A	215	ASP	1
1	A	146	ARG	1
1	A	210	LEU	1
1	A	112	GLY	1

5.2.2 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	159/176 (90%)	108±10 (68±6%)	51±10 (32±6%)	1	13
All	All	3339/3696 (90%)	2270 (68%)	1069 (32%)	1	13

All 131 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	73	PHE	21
1	A	30	SER	21
1	A	29	ILE	20
1	A	205	TYR	20
1	A	204	ASP	20
1	A	87	TYR	20
1	A	162	THR	20
1	A	185	ASN	20
1	A	86	VAL	18
1	A	63	THR	18
1	A	126	ILE	17
1	A	153	THR	17
1	A	189	ILE	16
1	A	193	ILE	16
1	A	65	MET	16
1	A	42	ILE	16
1	A	140	ASP	15
1	A	70	MET	15
1	A	177	TYR	15
1	A	163	SER	14
1	A	116	VAL	14
1	A	145	MET	14
1	A	142	THR	14
1	A	173	SER	14
1	A	91	VAL	13
1	A	98	THR	13
1	A	120	VAL	13
1	A	194	ARG	12
1	A	35	LEU	12
1	A	84	LYS	12
1	A	150	ASP	12
1	A	156	ARG	12
1	A	118	ARG	12
1	A	104	LYS	12
1	A	28	VAL	11
1	A	146	ARG	11
1	A	97	HIS	11
1	A	223	THR	11
1	A	72	CYS	11
1	A	131	LEU	11
1	A	195	GLU	11
1	A	210	LEU	11
1	A	220	LEU	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	157	SER	10
1	A	208	GLN	10
1	A	110	LYS	10
1	A	113	HIS	10
1	A	47	LYS	9
1	A	127	SER	9
1	A	133	LYS	9
1	A	90	GLN	9
1	A	171	LEU	9
1	A	179	LYS	9
1	A	172	ARG	9
1	A	103	TYR	9
1	A	174	LYS	8
1	A	178	GLN	8
1	A	121	TYR	8
1	A	45	THR	8
1	A	147	GLN	8
1	A	197	GLN	8
1	A	125	HIS	8
1	A	176	GLU	7
1	A	138	ASN	7
1	A	81	TRP	7
1	A	100	ASN	7
1	A	56	VAL	7
1	A	203	GLU	7
1	A	168	GLU	6
1	A	134	VAL	6
1	A	130	GLU	6
1	A	79	LYS	6
1	A	99	ARG	6
1	A	115	GLU	6
1	A	139	HIS	6
1	A	119	VAL	6
1	A	88	SER	6
1	A	32	GLU	6
1	A	149	ASN	5
1	A	129	GLU	5
1	A	218	CYS	5
1	A	83	LEU	5
1	A	122	ARG	5
1	A	54	ARG	5
1	A	184	HIS	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	105	GLU	5
1	A	213	ASN	5
1	A	82	VAL	5
1	A	175	GLU	5
1	A	49	HIS	5
1	A	143	GLN	5
1	A	109	GLU	5
1	A	137	GLU	4
1	A	68	PHE	4
1	A	212	LYS	4
1	A	166	GLN	4
1	A	93	PHE	4
1	A	57	GLU	4
1	A	186	PHE	4
1	A	78	ARG	4
1	A	183	LYS	4
1	A	167	MET	4
1	A	207	GLN	3
1	A	61	GLU	3
1	A	200	TYR	3
1	A	44	VAL	3
1	A	107	CYS	3
1	A	132	LEU	3
1	A	154	GLN	3
1	A	117	VAL	2
1	A	108	SER	2
1	A	198	VAL	2
1	A	211	SER	2
1	A	77	GLU	2
1	A	215	ASP	2
1	A	74	TRP	2
1	A	217	TYR	2
1	A	151	PHE	2
1	A	182	SER	2
1	A	190	THR	2
1	A	124	GLU	2
1	A	89	THR	2
1	A	111	THR	2
1	A	201	TYR	1
1	A	64	GLN	1
1	A	51	SER	1
1	A	191	THR	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	33	GLU	1
1	A	159	VAL	1
1	A	128	PHE	1
1	A	106	VAL	1

5.2.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.4 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

5.5 Ligand geometry [i](#)

1 ligand is modelled in this entry.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds that are observed in the model and the number of bonds that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond length is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the average root-mean-square of all Z scores of the bond lengths.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths		
					Counts	RMSZ	#Z>2
2	MYR	A	21	1	14,14,15	0.40±0.04	0±0 (0±0%)

In the following table, the Counts columns list the number of angles for which Mogul statistics could be retrieved, the number of angles that are observed in the model and the number of angles that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond angle is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond angle with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the average root-mean-square of all Z scores of the bond angles.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond angles		
					Counts	RMSZ	#Z>2
2	MYR	A	21	1	13,13,15	0.89±0.06	0±0 (0±0%)

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the chemical component dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	MYR	A	21	1	-	0±0,11,12,13	-

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

5.6 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

5.7 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

6 Chemical shift validation [i](#)

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 39% for the well-defined parts and 39% for the entire structure.

6.1 Chemical shift list 1

File name: input_cs.cif

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_1*

6.1.1 Bookkeeping [i](#)

The following table shows the results of parsing the chemical shift list and reports the number of nuclei with statistically unusual chemical shifts.

Total number of shifts	1010
Number of shifts mapped to atoms	1010
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	1

6.1.2 Chemical shift referencing [i](#)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction \pm precision, ppm	Suggested action
¹³ C _α	209	0.02 \pm 0.13	None needed (< 0.5 ppm)
¹³ C _β	184	0.08 \pm 0.17	None needed (< 0.5 ppm)
¹³ C'	0	—	None (insufficient data)
¹⁵ N	196	0.46 \pm 0.32	None needed (< 0.5 ppm)

6.1.3 Completeness of resonance assignments [i](#)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 39%, i.e. 900 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2324. 0 out of 26 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	734/932 (79%)	366/371 (99%)	189/380 (50%)	179/181 (99%)
Sidechain	166/1122 (15%)	0/662 (0%)	166/407 (41%)	0/53 (0%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Aromatic	0/270 (0%)	0/144 (0%)	0/115 (0%)	0/11 (0%)
Overall	900/2324 (39%)	366/1177 (31%)	355/902 (39%)	179/245 (73%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 39%, i.e. 990 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2566. 0 out of 27 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	806/1036 (78%)	401/412 (97%)	209/424 (49%)	196/200 (98%)
Sidechain	184/1260 (15%)	0/746 (0%)	184/455 (40%)	0/59 (0%)
Aromatic	0/270 (0%)	0/144 (0%)	0/115 (0%)	0/11 (0%)
Overall	990/2566 (39%)	401/1302 (31%)	393/994 (40%)	196/270 (73%)

6.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

Mol	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	96	GLY	HA3	1.92	5.80 – 2.00	-5.2

6.1.5 Random Coil Index (RCI) plots [i](#)

The image below reports *random coil index* values for the protein chains in the structure. The height of each bar gives a probability of a given residue to be disordered, as predicted from the available chemical shifts and the amino acid sequence. A value above 0.2 is an indication of significant predicted disorder. The colour of the bar shows whether the residue is in the well-defined core (black) or in the ill-defined residue ranges (cyan), as described in section 2 on ensemble composition.

Random coil index (RCI) for chain A:

