



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 12, 2017 – 07:48 pm GMT

PDB ID : 1RF8  
Title : Solution structure of the yeast translation initiation factor eIF4E in complex with m7GDP and eIF4GI residues 393 to 490  
Authors : Gross, J.D.; Moerke, N.J.; von der Haar, T.; Lugovskoy, A.A.; Sachs, A.B.; McCarthy, J.E.G.; Wagner, G.  
Deposited on : 2003-11-07

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

We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto:validation@mail.wwpdb.org)

A user guide is available at

<http://wwpdb.org/validation/2016/NMRValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

---

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

Cyrange	:	Kirchner and Güntert (2011)
NmrClust	:	Kelley et al. (1996)
MolProbity	:	4.02b-467
Mogul	:	1.7.2 (RC1), CSD as538be (2017)
Percentile statistics	:	20161228.v01 (using entries in the PDB archive December 28th 2016)
RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
ShiftChecker	:	trunk28760
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	recalc28949

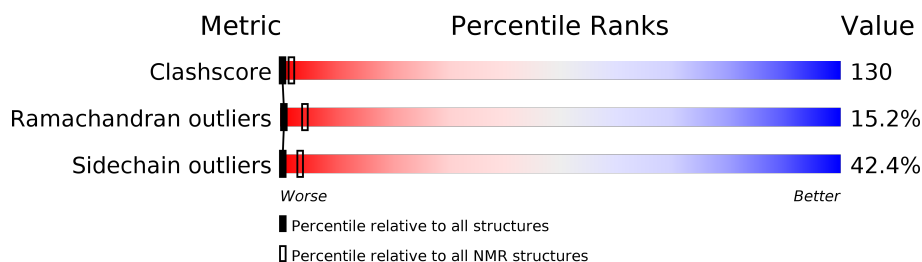
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	125131	11601
Ramachandran outliers	121729	10391
Sidechain outliers	121581	10367

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	213	
2	B	100	

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 11 models. Model 2 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:22-A:50, A:56-A:188, A:193-A:202, A:210-A:213, B:234-B:308 (251)	0.77	2

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, 4, 5, 9, 10, 11
2	2, 3, 6, 7, 8

### 3 Entry composition

There are 4 unique types of molecules in this entry. The entry contains 5073 atoms, of which 2506 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Eukaryotic translation initiation factor 4E.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	213	Total	C	H	N	O	S	0
			3371	1089	1663	285	329	5	

There are 4 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	120	CYS	ARG	CONFLICT	UNP P07260
A	132	CYS	ARG	CONFLICT	UNP P07260
A	169	CYS	SER	CONFLICT	UNP P07260
A	200	CYS	SER	CONFLICT	UNP P07260

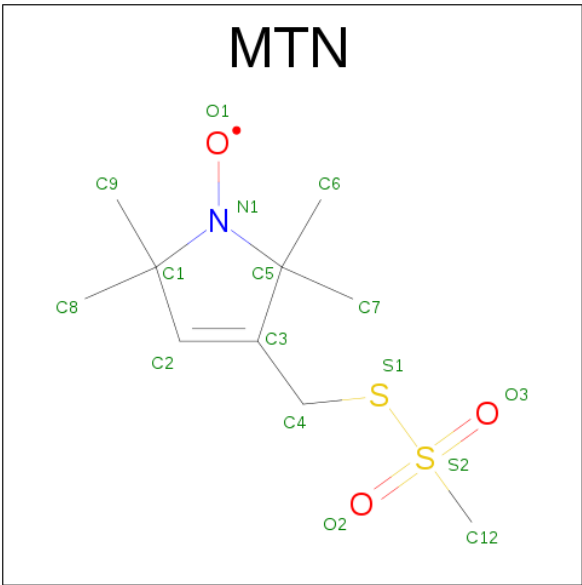
- Molecule 2 is a protein called Eukaryotic initiation factor 4F subunit p150.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
2	B	100	Total	C	H	N	O	S	0
			1550	498	768	123	160	1	

There are 2 discrepancies between the modelled and reference sequences:

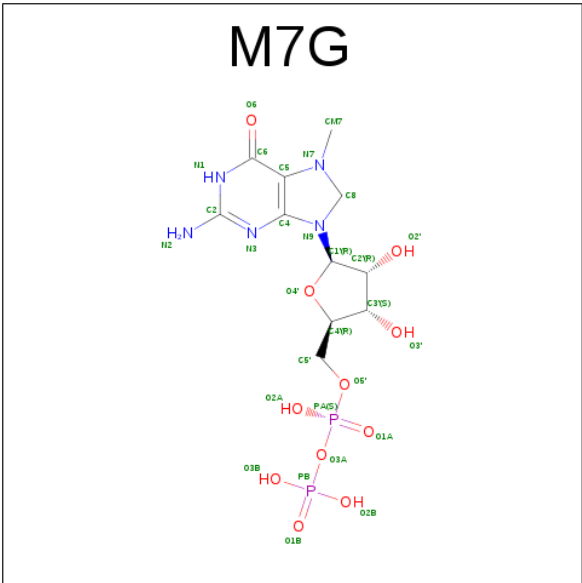
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
B	215	GLY	-	CLONING ARTIFACT	UNP P39935
B	216	SER	-	CLONING ARTIFACT	UNP P39935

- Molecule 3 is S-[(1-OXYL-2,2,5,5-TETRAMETHYL-2,5-DIHYDRO-1H-PYRROL-3-YL)METHYL] METHANESULFONOTHIOATE (three-letter code: MTN) (formula: C<sub>10</sub>H<sub>18</sub>NO<sub>3</sub>S<sub>2</sub>).



Mol	Chain	Residues	Atoms					
			Total	C	H	N	O	S
3	A	1	27	9	15	1	1	1
3	A	1	27	9	15	1	1	1
3	A	1	27	9	15	1	1	1
3	A	1	27	9	15	1	1	1

- Molecule 4 is 7N-METHYL-8-HYDROGUANOSINE-5'-DIPHOSPHATE (three-letter code: M7G) (formula: C<sub>11</sub>H<sub>19</sub>N<sub>5</sub>O<sub>11</sub>P<sub>2</sub>).



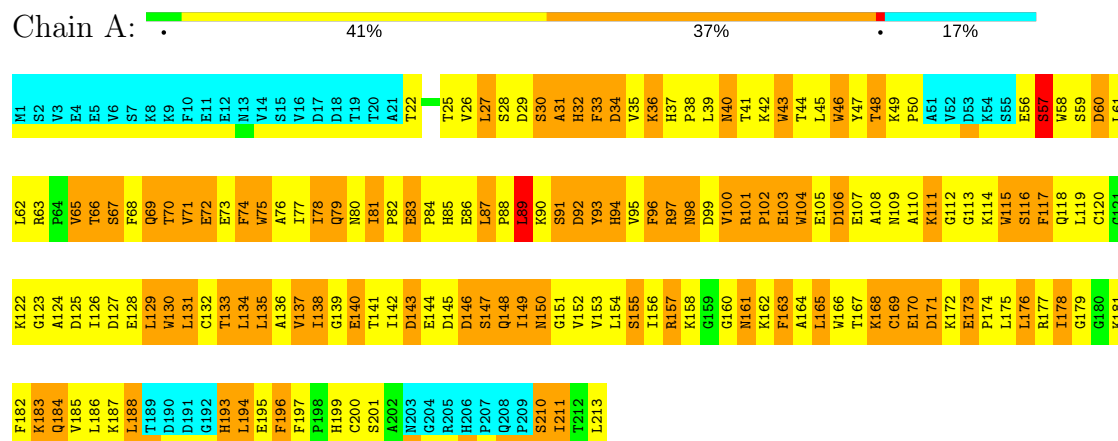
Mol	Chain	Residues	Atoms					
			Total	C	H	N	O	P
4	A	1	44	11	15	5	11	2

## 4 Residue-property plots

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

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

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 4E



- Molecule 2: Eukaryotic initiation factor 4F subunit p150

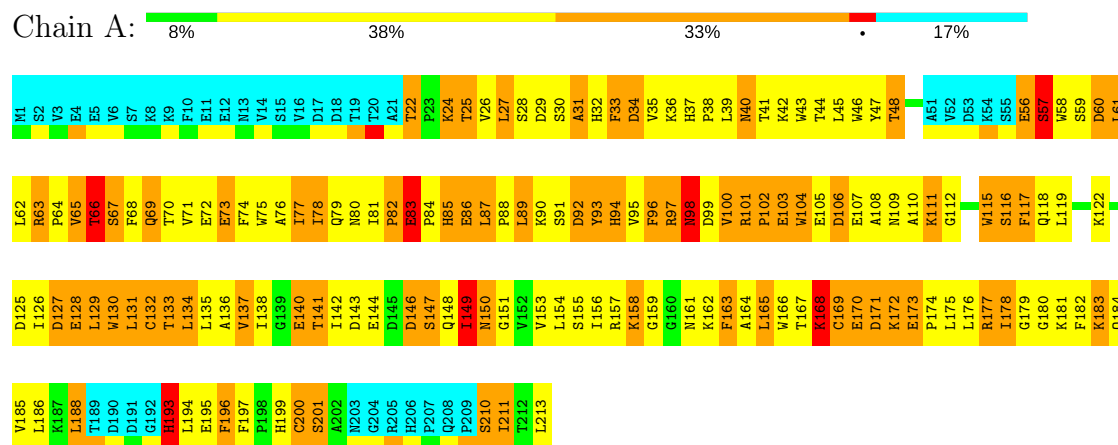


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

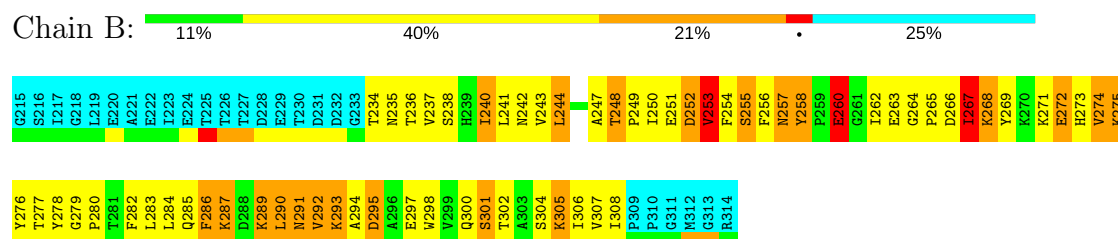
Colouring as in section 4.1 above.

#### 4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 4E

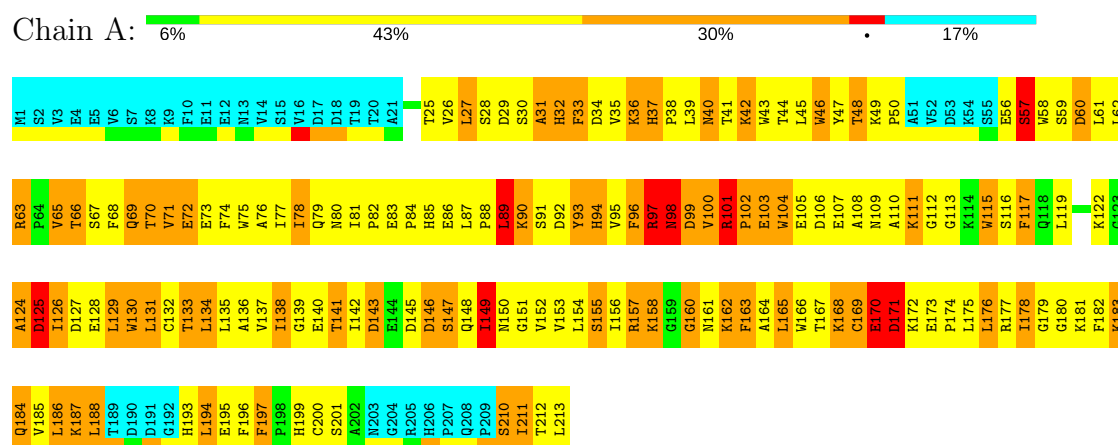


- Molecule 2: Eukaryotic initiation factor 4F subunit p150

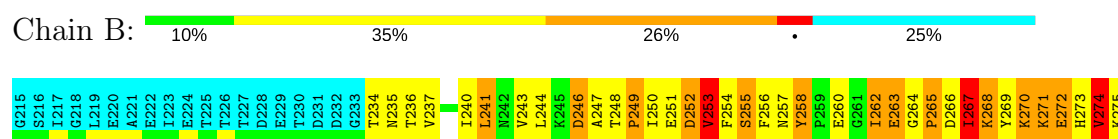


#### 4.2.2 Score per residue for model 2 (medoid)

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 4E



- Molecule 2: Eukaryotic initiation factor 4F subunit p150

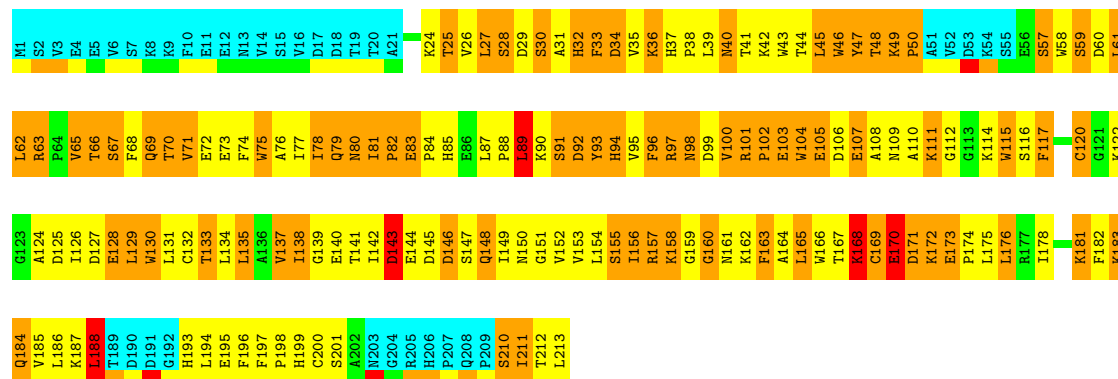




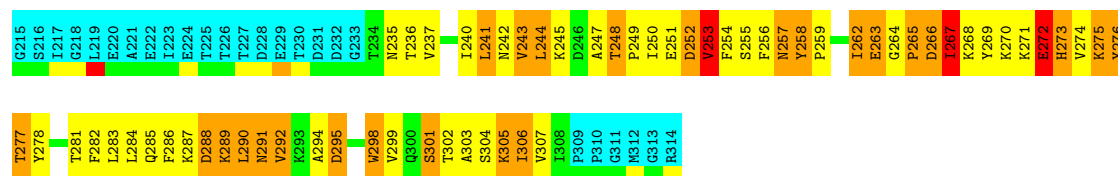


### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 4E

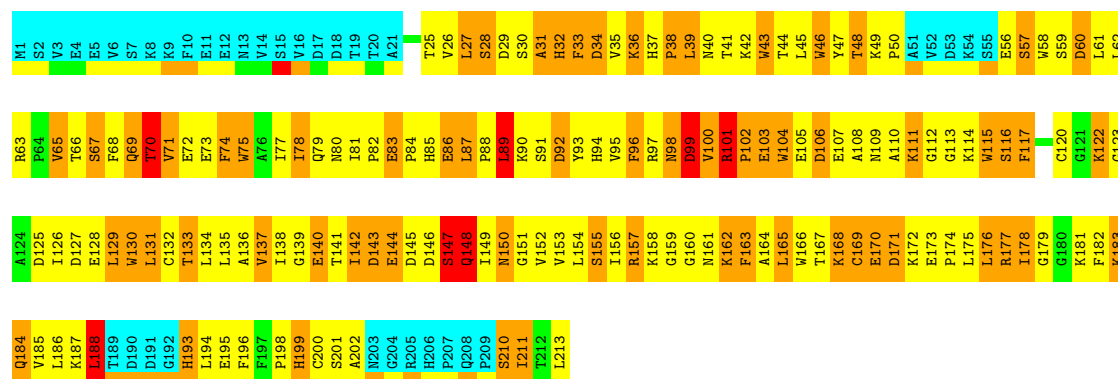


- Molecule 2: Eukaryotic initiation factor 4F subunit p150

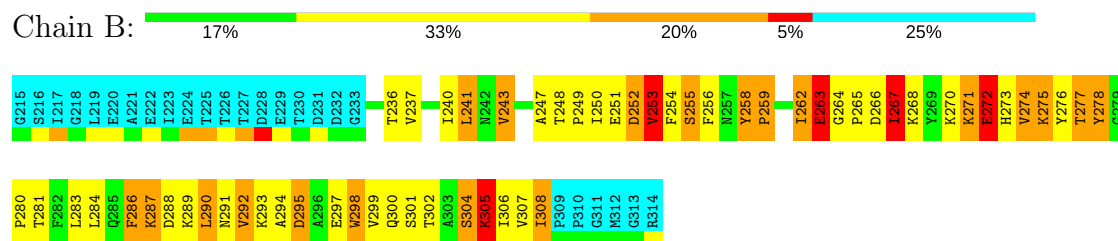


### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 4E

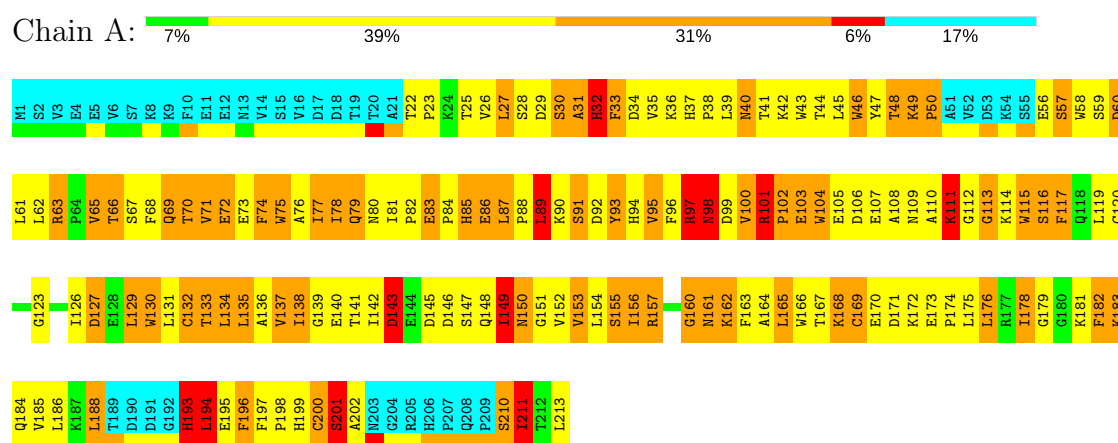


- Molecule 2: Eukaryotic initiation factor 4F subunit p150

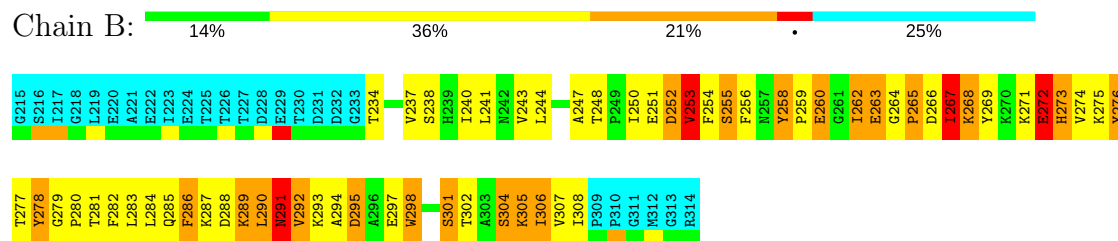


#### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 4E

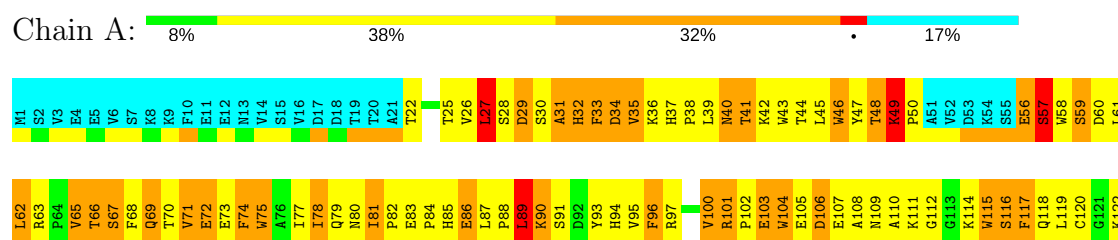


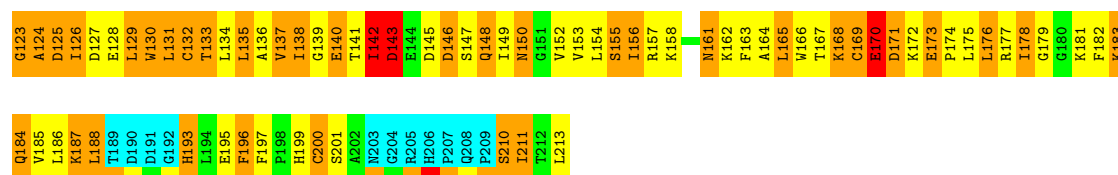
- Molecule 2: Eukaryotic initiation factor 4F subunit p150



#### 4.2.6 Score per residue for model 6

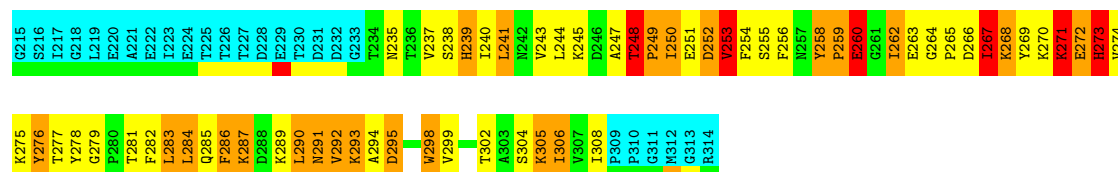
- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 4E





- Molecule 2: Eukaryotic initiation factor 4F subunit p150

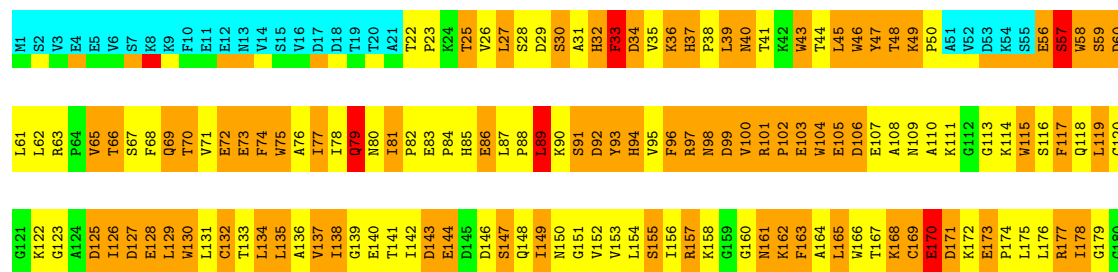
Chain B: 14% 32% 23% 6% 25%



#### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 4E

Chain A: 5% 37% 38% 17%



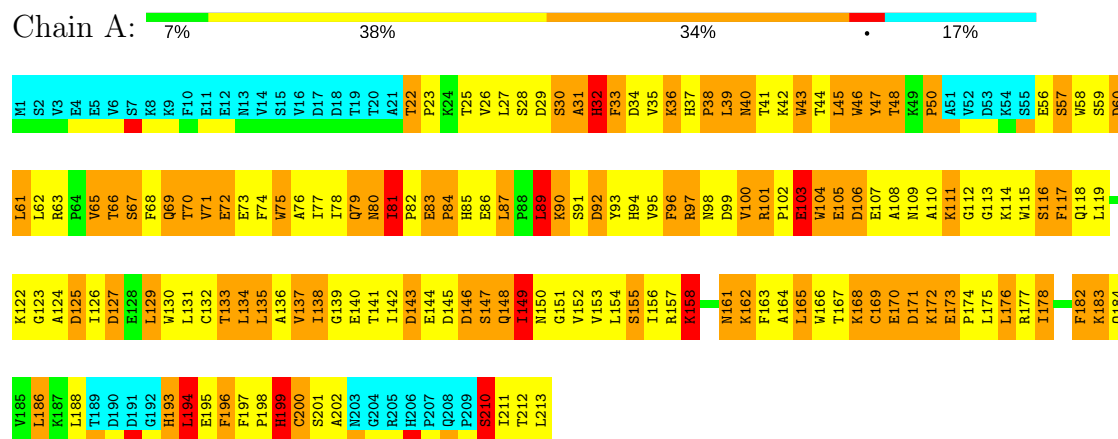
- Molecule 2: Eukaryotic initiation factor 4F subunit p150

Chain B: 16% 33% 21% 5% 25%

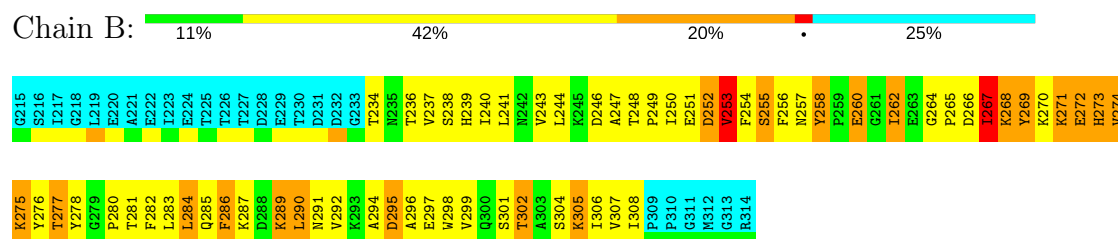


#### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 4E

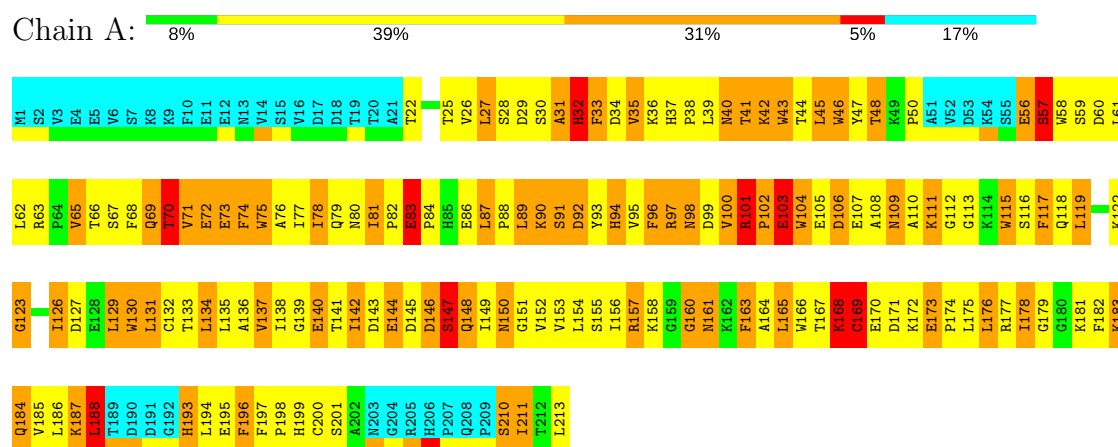


- Molecule 2: Eukaryotic initiation factor 4F subunit p150

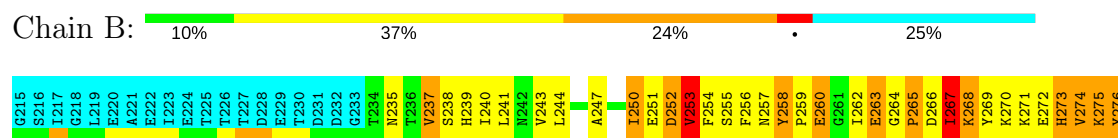


#### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 4E



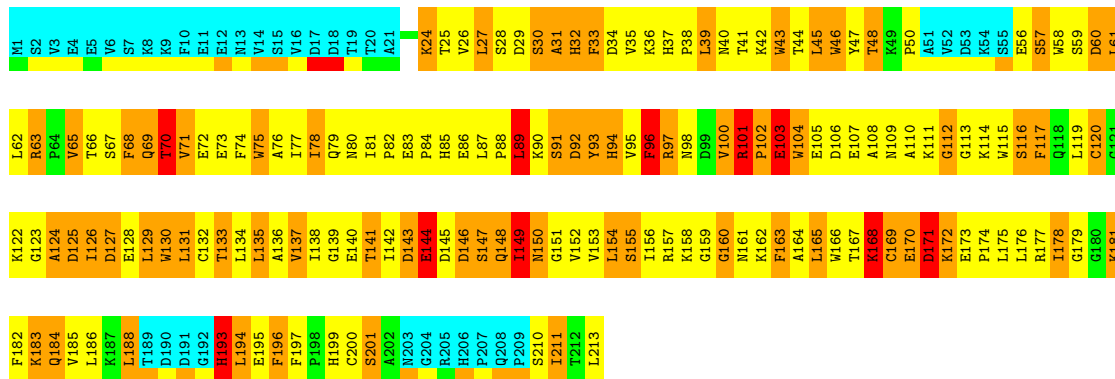
- Molecule 2: Eukaryotic initiation factor 4F subunit p150



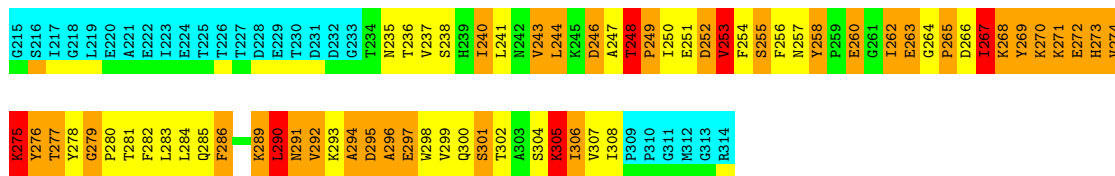


#### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 4E

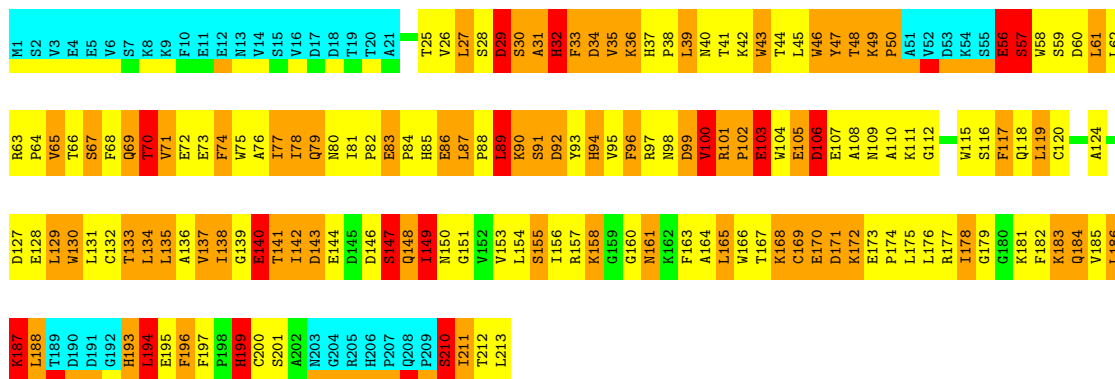


- Molecule 2: Eukaryotic initiation factor 4F subunit p150

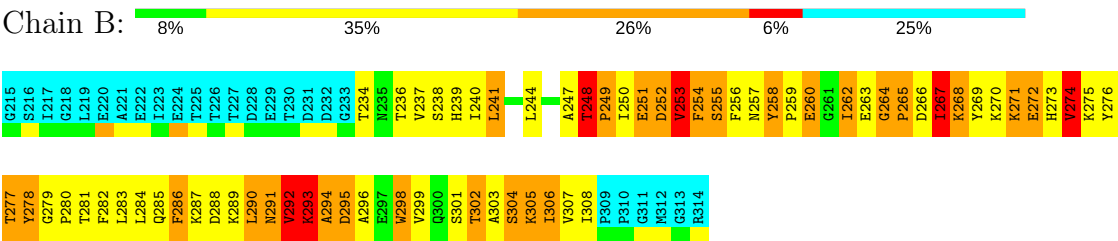


#### 4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 4E



● Molecule 2: Eukaryotic initiation factor 4F subunit p150



## 5 Refinement protocol and experimental data overview

Of the 50 calculated structures, 11 were deposited, based on the following criterion: *structures with the least restraint violations*.

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

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

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

## 6 Model quality ⓘ

### 6.1 Standard geometry ⓘ

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: MTN, M7G

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

### 6.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1428	1403	1397	438±19
2	B	605	608	606	188±21
3	A	48	60	60	2±2
4	A	29	15	16	16±4
All	All	23210	22946	22869	5990

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 130.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:250:ILE:HD11	2:B:256:PHE:CE1	1.14	1.77	8	8
1:A:135:LEU:HD21	2:B:283:LEU:HD13	1.13	1.15	8	3
1:A:35:VAL:CG1	2:B:250:ILE:HD12	1.07	1.79	7	7
2:B:250:ILE:HD11	2:B:256:PHE:CZ	1.07	1.84	7	11
1:A:149:ILE:HD11	1:A:167:THR:HG22	1.07	1.10	11	5
2:B:241:LEU:HD11	2:B:298:TRP:CE3	1.06	1.84	3	7
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:134:LEU:HD11	1.05	1.86	8	2
1:A:142:ILE:HD13	2:B:274:VAL:HG13	1.05	1.26	4	1
1:A:196:PHE:CE1	1:A:211:ILE:HD12	1.02	1.88	9	8

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:134:LEU:HD22	1:A:152:VAL:HG11	1.01	1.29	3	2
1:A:153:VAL:HG21	1:A:166:TRP:CH2	1.01	1.89	9	7
2:B:237:VAL:HG22	2:B:292:VAL:CG2	1.01	1.85	4	6
2:B:253:VAL:HG13	2:B:278:TYR:CE2	1.00	1.92	4	4
1:A:100:VAL:CG2	1:A:110:ALA:HB2	1.00	1.85	3	2
1:A:71:VAL:HG21	2:B:283:LEU:HD22	1.00	1.34	8	5
1:A:65:VAL:HG12	2:B:299:VAL:HG21	0.99	1.33	8	1
1:A:93:TYR:CE2	1:A:154:LEU:HD13	0.99	1.91	3	3
1:A:149:ILE:CD1	1:A:167:THR:HG22	0.99	1.86	5	6
1:A:165:LEU:HD11	1:A:167:THR:HG23	0.99	1.27	7	2
1:A:135:LEU:HD13	1:A:136:ALA:N	0.98	1.73	7	3
1:A:149:ILE:CG1	1:A:167:THR:HG22	0.98	1.88	7	5
1:A:138:ILE:HD13	1:A:139:GLY:N	0.97	1.74	6	2
1:A:48:THR:HG21	1:A:58:TRP:CZ3	0.97	1.92	3	7
1:A:40:ASN:ND2	1:A:142:ILE:HD12	0.97	1.75	11	2
2:B:250:ILE:HD11	2:B:256:PHE:CE2	0.96	1.95	6	3
1:A:135:LEU:HD13	2:B:283:LEU:CD1	0.96	1.89	4	4
2:B:241:LEU:HD12	2:B:298:TRP:CE3	0.96	1.96	11	1
1:A:135:LEU:CD2	2:B:283:LEU:HD13	0.96	1.91	8	3
1:A:100:VAL:HG12	1:A:150:ASN:OD1	0.95	1.61	1	5
1:A:131:LEU:HD13	1:A:132:CYS:N	0.95	1.77	4	3
1:A:80:ASN:O	1:A:81:ILE:HD12	0.95	1.59	7	7
2:B:290:LEU:O	2:B:292:VAL:HG22	0.94	1.61	1	7
1:A:43:TRP:CH2	1:A:138:ILE:HD13	0.94	1.97	10	2
1:A:142:ILE:HD13	2:B:277:THR:HG23	0.94	1.38	8	1
2:B:264:GLY:CA	2:B:267:ILE:HD11	0.94	1.92	1	10
1:A:75:TRP:CE3	1:A:78:ILE:HD11	0.93	1.98	8	1
1:A:134:LEU:HD13	1:A:152:VAL:HG21	0.92	1.37	8	2
1:A:135:LEU:HD13	2:B:283:LEU:HD12	0.92	1.42	4	1
2:B:237:VAL:HG21	2:B:294:ALA:HB2	0.92	1.38	4	5
2:B:253:VAL:HG11	2:B:278:TYR:CD1	0.91	2.00	2	7
1:A:196:PHE:CE1	1:A:213:LEU:HD12	0.91	2.00	3	6
1:A:87:LEU:HD11	1:A:91:SER:HB3	0.91	1.42	5	2
1:A:135:LEU:HD21	2:B:283:LEU:CD1	0.91	1.94	8	3
2:B:274:VAL:HG11	2:B:277:THR:HG23	0.91	1.40	4	1
1:A:127:ASP:O	1:A:131:LEU:HD12	0.91	1.66	3	8
1:A:58:TRP:O	1:A:62:LEU:HD12	0.91	1.66	3	1
1:A:26:VAL:HG23	1:A:33:PHE:CE1	0.91	1.99	2	1
1:A:45:LEU:HD21	1:A:77:ILE:HG12	0.90	1.41	10	9
2:B:237:VAL:HG21	2:B:294:ALA:CB	0.90	1.96	4	5
1:A:45:LEU:HD11	1:A:77:ILE:HG21	0.90	1.43	3	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:LEU:HD12	2:B:262:ILE:HD13	0.90	1.40	5	1
1:A:87:LEU:HD11	1:A:91:SER:CB	0.90	1.96	5	4
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:CB	0.90	1.96	3	1
2:B:239:HIS:O	2:B:243:VAL:HG23	0.90	1.66	9	2
1:A:137:VAL:HG22	1:A:146:ASP:OD1	0.90	1.64	1	3
1:A:45:LEU:HD21	1:A:77:ILE:CG1	0.90	1.96	10	9
1:A:75:TRP:CB	2:B:290:LEU:HD12	0.89	1.97	5	10
1:A:25:THR:HG21	2:B:256:PHE:CE2	0.89	2.03	8	3
1:A:39:LEU:HD13	2:B:276:TYR:O	0.89	1.67	5	2
1:A:75:TRP:HB3	2:B:290:LEU:HD12	0.89	1.43	3	9
2:B:264:GLY:HA3	2:B:267:ILE:HD11	0.88	1.42	3	5
2:B:264:GLY:HA2	2:B:267:ILE:HD11	0.88	1.46	4	10
1:A:65:VAL:HG12	2:B:299:VAL:CG2	0.88	1.98	8	2
1:A:100:VAL:CG2	1:A:110:ALA:HB3	0.88	1.99	8	2
2:B:306:ILE:HD13	2:B:307:VAL:N	0.87	1.84	9	7
2:B:240:ILE:O	2:B:243:VAL:HG22	0.86	1.68	2	5
1:A:38:PRO:HD3	2:B:250:ILE:HG21	0.86	1.46	3	2
1:A:132:CYS:HA	1:A:135:LEU:HD23	0.86	1.43	6	2
1:A:108:ALA:HB1	1:A:111:LYS:HZ1	0.86	1.30	8	1
2:B:237:VAL:HG12	2:B:241:LEU:HG	0.86	1.44	5	1
1:A:181:LYS:O	1:A:185:VAL:HG23	0.86	1.70	4	7
1:A:149:ILE:HD11	1:A:167:THR:CG2	0.86	1.98	11	3
1:A:35:VAL:HG12	2:B:250:ILE:HD12	0.86	1.46	5	5
1:A:71:VAL:HG23	2:B:286:PHE:CE2	0.86	2.05	1	2
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:138:ILE:HD13	0.86	2.06	5	2
1:A:58:TRP:CZ3	4:A:325:M7G:H82	0.86	2.05	11	3
1:A:38:PRO:O	1:A:39:LEU:HD22	0.86	1.70	1	4
1:A:25:THR:HG21	2:B:256:PHE:CE1	0.86	2.06	9	1
1:A:78:ILE:O	1:A:81:ILE:HG23	0.85	1.71	3	1
2:B:241:LEU:HD12	2:B:297:GLU:HB3	0.85	1.45	1	2
2:B:237:VAL:HG11	2:B:294:ALA:O	0.85	1.71	11	3
1:A:35:VAL:HG13	2:B:250:ILE:HD12	0.85	1.49	8	2
1:A:142:ILE:HD13	1:A:143:ASP:N	0.85	1.87	6	2
1:A:36:LYS:O	2:B:250:ILE:HD13	0.85	1.72	9	4
1:A:27:LEU:HD12	2:B:258:TYR:CG	0.85	2.07	9	3
2:B:296:ALA:O	2:B:299:VAL:HG22	0.84	1.71	11	2
1:A:45:LEU:HD23	1:A:66:THR:HB	0.84	1.49	1	6
2:B:237:VAL:HG22	2:B:292:VAL:O	0.84	1.72	9	1
1:A:100:VAL:HG23	1:A:110:ALA:HB3	0.84	1.48	8	2
1:A:93:TYR:CD2	1:A:154:LEU:HD13	0.84	2.07	7	5
1:A:71:VAL:HG11	2:B:283:LEU:HD21	0.84	1.48	3	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:LEU:HD13	1:A:62:LEU:O	0.84	1.73	3	1
2:B:253:VAL:HG11	2:B:278:TYR:CE1	0.84	2.07	7	3
1:A:172:LYS:O	1:A:176:LEU:HD22	0.84	1.71	3	2
1:A:39:LEU:HD22	1:A:69:GLN:O	0.83	1.73	2	1
1:A:188:LEU:HD13	1:A:193:HIS:N	0.83	1.87	8	1
1:A:69:GLN:HG3	2:B:307:VAL:HG11	0.83	1.49	11	1
1:A:183:LYS:O	1:A:188:LEU:HD23	0.83	1.73	2	5
1:A:84:PRO:HA	1:A:156:ILE:HD11	0.83	1.47	1	3
1:A:71:VAL:HG22	1:A:75:TRP:CD1	0.83	2.08	10	6
1:A:41:THR:HG23	1:A:43:TRP:CD1	0.83	2.08	9	9
1:A:126:ILE:HA	1:A:129:LEU:HD22	0.83	1.48	10	3
2:B:250:ILE:HD11	2:B:256:PHE:CD2	0.83	2.08	9	2
1:A:69:GLN:CG	2:B:307:VAL:HG11	0.83	2.03	11	1
1:A:65:VAL:CG1	2:B:299:VAL:HG21	0.83	2.03	8	1
2:B:237:VAL:HG21	2:B:294:ALA:CA	0.83	2.03	4	6
1:A:38:PRO:CB	2:B:307:VAL:HG12	0.83	2.03	1	2
1:A:47:TYR:CE2	1:A:65:VAL:HG21	0.82	2.09	8	7
1:A:108:ALA:HB1	1:A:111:LYS:NZ	0.82	1.89	8	2
2:B:296:ALA:O	2:B:299:VAL:HG13	0.82	1.74	10	1
1:A:77:ILE:HD13	2:B:298:TRP:CH2	0.82	2.10	1	2
1:A:70:THR:HG21	2:B:305:LYS:HG2	0.82	1.48	2	7
2:B:237:VAL:HG11	2:B:294:ALA:HB2	0.82	1.50	6	5
2:B:241:LEU:HD11	2:B:298:TRP:CD2	0.81	2.09	10	7
1:A:134:LEU:O	1:A:138:ILE:HG23	0.81	1.76	10	1
1:A:25:THR:OG1	1:A:27:LEU:HD22	0.81	1.75	10	1
1:A:36:LYS:CD	2:B:306:ILE:HG22	0.81	2.06	9	2
1:A:50:PRO:HA	1:A:61:LEU:HD13	0.81	1.52	4	2
1:A:153:VAL:HB	1:A:164:ALA:HB3	0.80	1.52	2	11
2:B:258:TYR:O	2:B:262:ILE:HD12	0.80	1.76	5	4
2:B:237:VAL:CG2	2:B:294:ALA:HB2	0.80	2.06	4	4
1:A:93:TYR:CD2	1:A:154:LEU:HD22	0.80	2.12	9	2
1:A:135:LEU:HD12	1:A:136:ALA:N	0.80	1.91	4	3
1:A:71:VAL:HG11	2:B:283:LEU:CD2	0.80	2.06	7	5
1:A:88:PRO:C	1:A:89:LEU:HD22	0.80	1.97	2	4
1:A:33:PHE:O	2:B:247:ALA:HB2	0.80	1.77	6	1
2:B:267:ILE:HG21	2:B:279:GLY:N	0.79	1.91	11	1
1:A:194:LEU:HD23	1:A:196:PHE:CZ	0.79	2.12	1	2
2:B:294:ALA:HB1	2:B:298:TRP:HB2	0.79	1.55	4	5
1:A:62:LEU:HD22	1:A:63:ARG:N	0.79	1.92	3	1
1:A:130:TRP:CD1	1:A:134:LEU:HD12	0.79	2.13	3	1
1:A:71:VAL:HG21	2:B:283:LEU:CD2	0.79	2.07	2	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:183:LYS:HG3	1:A:188:LEU:HD22	0.79	1.54	9	2
2:B:237:VAL:HG22	2:B:292:VAL:HG23	0.79	1.55	6	3
1:A:153:VAL:HG21	1:A:166:TRP:CZ2	0.79	2.13	6	10
1:A:87:LEU:HD11	1:A:156:ILE:HD12	0.79	1.53	1	4
1:A:167:THR:HG21	1:A:175:LEU:HD22	0.79	1.54	6	6
1:A:104:TRP:CE2	4:A:325:M7G:HM72	0.79	2.12	11	1
1:A:140:GLU:HB2	2:B:277:THR:HG22	0.78	1.53	10	1
1:A:89:LEU:N	1:A:89:LEU:HD22	0.78	1.94	6	2
1:A:143:ASP:HB3	2:B:274:VAL:HG11	0.78	1.54	9	1
1:A:133:THR:HG22	1:A:182:PHE:CZ	0.78	2.13	4	2
1:A:38:PRO:CD	2:B:250:ILE:HG21	0.78	2.06	3	4
1:A:149:ILE:HG13	1:A:167:THR:HG22	0.78	1.55	7	4
1:A:36:LYS:HD3	2:B:306:ILE:HG22	0.78	1.56	2	2
1:A:74:PHE:CE1	1:A:78:ILE:HD11	0.78	2.13	7	2
1:A:27:LEU:HD12	2:B:258:TYR:CD2	0.78	2.13	9	4
1:A:73:GLU:CD	2:B:302:THR:HG22	0.78	2.00	9	1
1:A:135:LEU:HD22	1:A:135:LEU:O	0.78	1.77	8	2
2:B:298:TRP:CD2	2:B:302:THR:HG23	0.78	2.12	4	1
2:B:274:VAL:HG13	2:B:275:LYS:N	0.78	1.93	2	2
1:A:89:LEU:HD22	1:A:89:LEU:N	0.78	1.94	3	2
1:A:100:VAL:HG22	1:A:101:ARG:N	0.77	1.94	11	9
2:B:237:VAL:HG13	2:B:298:TRP:CE3	0.77	2.14	11	2
2:B:241:LEU:HD21	2:B:301:SER:CB	0.77	2.09	3	1
1:A:134:LEU:N	1:A:134:LEU:HD23	0.77	1.94	7	4
1:A:135:LEU:HD11	2:B:280:PRO:HA	0.77	1.57	11	6
1:A:45:LEU:HD21	1:A:77:ILE:CD1	0.77	2.10	9	6
1:A:71:VAL:CG1	2:B:283:LEU:HD21	0.77	2.10	1	3
1:A:37:HIS:HA	2:B:250:ILE:HD13	0.77	1.57	4	7
2:B:250:ILE:CD1	2:B:256:PHE:CE1	0.77	2.67	7	8
1:A:172:LYS:HA	1:A:175:LEU:HD12	0.77	1.56	3	7
1:A:44:THR:HG22	1:A:67:SER:HB3	0.76	1.57	7	6
1:A:196:PHE:CD1	1:A:211:ILE:HD12	0.76	2.15	4	5
2:B:269:TYR:CD1	2:B:274:VAL:HG22	0.76	2.15	10	1
1:A:129:LEU:HB2	1:A:185:VAL:HG13	0.76	1.56	2	2
2:B:237:VAL:HG21	2:B:294:ALA:N	0.76	1.95	4	4
1:A:130:TRP:CE2	1:A:134:LEU:HD11	0.76	2.15	8	2
1:A:183:LYS:HG2	1:A:188:LEU:HD21	0.76	1.56	2	1
1:A:66:THR:HG21	2:B:302:THR:OG1	0.76	1.81	4	3
1:A:149:ILE:HG23	1:A:150:ASN:N	0.76	1.96	5	9
1:A:38:PRO:HB3	2:B:307:VAL:HG12	0.76	1.55	1	2
1:A:89:LEU:N	1:A:89:LEU:HD12	0.76	1.96	8	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:VAL:HG11	2:B:290:LEU:HD23	0.75	1.57	6	4
2:B:268:LYS:HD3	2:B:277:THR:HG22	0.75	1.56	2	1
1:A:71:VAL:HG11	2:B:283:LEU:HD23	0.75	1.58	9	4
1:A:74:PHE:CE1	1:A:95:VAL:HG21	0.75	2.16	10	1
1:A:136:ALA:HB2	2:B:280:PRO:HB3	0.75	1.59	8	2
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:HG	0.75	1.59	1	6
2:B:269:TYR:CG	2:B:274:VAL:HG22	0.75	2.16	10	1
1:A:78:ILE:HG22	1:A:81:ILE:HG23	0.75	1.58	3	1
1:A:74:PHE:CD1	1:A:78:ILE:HD11	0.75	2.17	7	2
1:A:38:PRO:C	1:A:39:LEU:HD22	0.75	2.02	3	3
1:A:135:LEU:O	1:A:135:LEU:HD22	0.75	1.80	7	1
1:A:100:VAL:HG21	1:A:110:ALA:HB2	0.74	1.58	11	2
1:A:135:LEU:HD22	1:A:135:LEU:C	0.74	2.02	8	2
2:B:253:VAL:HG13	2:B:278:TYR:CZ	0.74	2.17	8	4
1:A:100:VAL:HG13	1:A:107:GLU:OE2	0.74	1.82	3	2
1:A:27:LEU:HD23	2:B:258:TYR:CG	0.74	2.17	10	2
1:A:137:VAL:HG22	1:A:146:ASP:CG	0.74	2.01	11	1
1:A:72:GLU:O	2:B:290:LEU:HD11	0.74	1.82	4	11
1:A:70:THR:HG21	2:B:305:LYS:CG	0.74	2.12	2	3
1:A:153:VAL:HG21	1:A:166:TRP:CE2	0.74	2.16	5	1
1:A:132:CYS:CA	1:A:135:LEU:HD23	0.74	2.11	6	1
1:A:26:VAL:HG12	2:B:289:LYS:HB2	0.74	1.59	6	4
1:A:142:ILE:HD13	2:B:277:THR:OG1	0.74	1.82	7	1
1:A:135:LEU:C	1:A:135:LEU:HD22	0.74	2.03	10	1
2:B:265:PRO:HD2	2:B:267:ILE:HD11	0.74	1.60	11	1
1:A:39:LEU:HD21	2:B:278:TYR:CZ	0.74	2.18	5	3
1:A:126:ILE:HB	1:A:185:VAL:HG12	0.73	1.58	7	1
2:B:237:VAL:HG12	2:B:241:LEU:HD13	0.73	1.60	9	5
1:A:148:GLN:C	1:A:149:ILE:HD12	0.73	2.03	3	2
3:A:321:MTN:S1	3:A:321:MTN:H61	0.73	2.24	5	1
2:B:237:VAL:HG11	2:B:294:ALA:CB	0.73	2.14	6	3
1:A:58:TRP:CH2	4:A:325:M7G:H82	0.73	2.18	11	1
1:A:87:LEU:HD11	1:A:91:SER:HB2	0.73	1.59	9	3
2:B:237:VAL:HG21	2:B:294:ALA:O	0.73	1.83	10	3
2:B:241:LEU:HD21	2:B:298:TRP:HA	0.73	1.58	6	4
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:154:LEU:HD12	0.73	2.18	9	7
1:A:36:LYS:O	2:B:250:ILE:HG21	0.73	1.82	11	7
2:B:241:LEU:HD12	2:B:298:TRP:CD2	0.73	2.17	11	1
2:B:292:VAL:O	2:B:292:VAL:HG23	0.73	1.84	9	2
1:A:39:LEU:HD23	1:A:69:GLN:O	0.73	1.84	3	5
2:B:253:VAL:HG11	2:B:278:TYR:CG	0.73	2.19	2	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:VAL:HB	1:A:110:ALA:HB2	0.73	1.59	1	7
1:A:73:GLU:HG2	2:B:302:THR:HG22	0.73	1.59	3	1
1:A:50:PRO:HG2	1:A:61:LEU:HD22	0.72	1.60	7	2
1:A:115:TRP:CH2	1:A:175:LEU:HD23	0.72	2.19	10	3
1:A:48:THR:HG21	1:A:58:TRP:CE3	0.72	2.18	8	1
1:A:38:PRO:CG	2:B:308:ILE:HG23	0.72	2.14	6	2
1:A:142:ILE:HD13	2:B:277:THR:CG2	0.72	2.13	8	1
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:HB2	0.72	1.61	3	1
1:A:87:LEU:HD11	1:A:89:LEU:HD21	0.72	1.60	8	1
1:A:74:PHE:CE2	1:A:78:ILE:HD11	0.72	2.19	10	2
1:A:66:THR:HG21	2:B:302:THR:CB	0.72	2.15	4	2
1:A:71:VAL:CG2	2:B:283:LEU:HD22	0.72	2.13	8	4
1:A:100:VAL:HG22	1:A:102:PRO:HD2	0.72	1.61	2	6
1:A:134:LEU:HD13	1:A:152:VAL:CG2	0.72	2.12	8	2
2:B:237:VAL:HG21	2:B:294:ALA:C	0.72	2.05	10	3
1:A:87:LEU:O	1:A:87:LEU:HD23	0.72	1.84	8	2
1:A:47:TYR:O	1:A:62:LEU:HD23	0.72	1.85	5	5
1:A:133:THR:HG22	1:A:182:PHE:CE1	0.72	2.20	5	3
2:B:250:ILE:O	2:B:308:ILE:HG23	0.72	1.85	9	1
1:A:100:VAL:HG22	1:A:107:GLU:HA	0.71	1.62	6	2
1:A:196:PHE:HE1	1:A:213:LEU:HD12	0.71	1.43	3	4
1:A:142:ILE:HD13	2:B:274:VAL:HG12	0.71	1.59	11	1
1:A:47:TYR:CD1	1:A:65:VAL:HG22	0.71	2.20	11	1
1:A:45:LEU:HA	1:A:95:VAL:HG22	0.71	1.60	1	2
1:A:40:ASN:CG	1:A:142:ILE:HD12	0.71	2.06	11	1
1:A:39:LEU:HD22	2:B:278:TYR:CZ	0.71	2.19	8	4
1:A:43:TRP:CE3	1:A:95:VAL:HG13	0.71	2.19	5	1
1:A:73:GLU:CG	2:B:302:THR:HG23	0.71	2.15	5	1
2:B:237:VAL:HG22	2:B:292:VAL:HG21	0.71	1.60	4	5
1:A:135:LEU:CD1	2:B:283:LEU:HD13	0.71	2.14	5	3
1:A:41:THR:HG21	1:A:138:ILE:O	0.71	1.85	2	3
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:163:PHE:CE1	0.71	2.79	10	4
1:A:58:TRP:CZ2	1:A:62:LEU:HD11	0.71	2.21	7	7
1:A:58:TRP:CZ2	4:A:325:M7G:HM73	0.71	2.20	3	7
1:A:26:VAL:HG22	2:B:289:LYS:HB3	0.71	1.62	8	2
1:A:70:THR:HG23	1:A:73:GLU:OE1	0.71	1.86	4	2
1:A:142:ILE:HD13	1:A:143:ASP:H	0.71	1.43	6	1
1:A:76:ALA:O	1:A:79:GLN:NE2	0.71	2.24	7	2
1:A:73:GLU:HG3	2:B:302:THR:HG22	0.71	1.61	4	1
2:B:237:VAL:CG1	2:B:294:ALA:HB2	0.71	2.16	6	3
1:A:134:LEU:HD13	1:A:152:VAL:HB	0.70	1.60	2	4

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:VAL:HG11	1:A:107:GLU:HA	0.70	1.62	1	8
1:A:39:LEU:HD11	2:B:278:TYR:CE1	0.70	2.21	6	1
1:A:43:TRP:CE2	1:A:138:ILE:HD13	0.70	2.20	5	3
1:A:100:VAL:HG13	1:A:101:ARG:N	0.70	2.01	3	9
2:B:298:TRP:CE3	2:B:302:THR:HG23	0.70	2.20	4	1
1:A:27:LEU:HD21	2:B:282:PHE:CE1	0.70	2.21	10	1
2:B:240:ILE:CD1	2:B:292:VAL:HG11	0.70	2.16	11	1
2:B:241:LEU:HD13	2:B:301:SER:CB	0.70	2.17	8	2
2:B:254:PHE:CD1	2:B:269:TYR:CD1	0.70	2.79	10	1
2:B:274:VAL:HG13	2:B:277:THR:OG1	0.70	1.85	3	1
1:A:130:TRP:CE3	1:A:163:PHE:CE1	0.70	2.80	7	1
1:A:104:TRP:CD1	4:A:325:M7G:C6	0.70	2.75	3	4
2:B:269:TYR:CE1	2:B:274:VAL:HG13	0.70	2.21	10	1
1:A:78:ILE:HG22	1:A:81:ILE:CG2	0.70	2.15	3	1
1:A:138:ILE:HD12	1:A:138:ILE:C	0.70	2.07	2	5
2:B:253:VAL:HG21	2:B:278:TYR:CE1	0.70	2.21	2	1
2:B:306:ILE:HD11	2:B:308:ILE:HG12	0.70	1.63	11	1
1:A:108:ALA:HB1	1:A:111:LYS:HE2	0.70	1.64	10	2
1:A:96:PHE:CE2	1:A:166:TRP:CZ3	0.70	2.80	6	8
2:B:274:VAL:CG1	2:B:277:THR:HG23	0.70	2.16	4	2
1:A:165:LEU:HD11	1:A:167:THR:CG2	0.70	2.11	7	1
1:A:80:ASN:C	1:A:81:ILE:HD12	0.70	2.05	7	1
2:B:250:ILE:CG2	2:B:306:ILE:HG21	0.69	2.16	6	2
1:A:46:TRP:CZ3	1:A:96:PHE:CE1	0.69	2.80	9	4
1:A:167:THR:HG21	1:A:175:LEU:CD2	0.69	2.17	8	2
1:A:38:PRO:CB	2:B:307:VAL:HG13	0.69	2.17	5	2
1:A:172:LYS:HA	1:A:175:LEU:HD22	0.69	1.62	10	4
1:A:131:LEU:O	1:A:131:LEU:HD22	0.69	1.87	10	3
1:A:48:THR:HG21	1:A:58:TRP:HZ3	0.69	1.47	3	2
2:B:241:LEU:HD13	2:B:301:SER:HB3	0.69	1.64	1	2
1:A:33:PHE:N	1:A:33:PHE:CD1	0.69	2.59	8	4
1:A:35:VAL:HG23	2:B:249:PRO:O	0.69	1.86	11	3
1:A:100:VAL:HG23	1:A:110:ALA:CB	0.69	2.16	8	1
1:A:45:LEU:HD23	1:A:66:THR:CB	0.69	2.16	8	3
1:A:132:CYS:HA	1:A:135:LEU:HD22	0.69	1.65	5	1
2:B:250:ILE:CD1	2:B:256:PHE:CE2	0.69	2.75	9	3
2:B:237:VAL:HG21	2:B:294:ALA:HA	0.69	1.65	1	1
1:A:89:LEU:HD13	1:A:89:LEU:N	0.69	2.02	2	2
1:A:130:TRP:CE3	1:A:163:PHE:CZ	0.69	2.80	2	4
1:A:45:LEU:O	1:A:65:VAL:HG22	0.69	1.87	2	4
1:A:87:LEU:CD2	1:A:156:ILE:HD12	0.69	2.18	9	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:165:LEU:HD12	1:A:166:TRP:N	0.69	2.02	10	4
1:A:46:TRP:CH2	1:A:96:PHE:CZ	0.69	2.81	5	1
1:A:26:VAL:HG12	2:B:286:PHE:CE1	0.69	2.23	5	2
2:B:278:TYR:CD2	2:B:282:PHE:CE1	0.69	2.81	9	2
1:A:131:LEU:HD22	1:A:131:LEU:C	0.69	2.09	4	1
2:B:298:TRP:O	2:B:302:THR:HG23	0.69	1.88	9	3
1:A:117:PHE:CZ	1:A:130:TRP:CZ3	0.69	2.81	8	2
2:B:258:TYR:CZ	2:B:282:PHE:CE1	0.68	2.81	1	5
1:A:107:GLU:O	1:A:110:ALA:HB3	0.68	1.87	1	6
1:A:183:LYS:HG3	1:A:188:LEU:HD21	0.68	1.64	6	1
2:B:280:PRO:O	2:B:284:LEU:HD13	0.68	1.88	9	1
1:A:83:GLU:O	1:A:87:LEU:HD22	0.68	1.88	8	1
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:163:PHE:CZ	0.68	2.82	4	4
1:A:46:TRP:CH2	1:A:96:PHE:CE1	0.68	2.81	10	4
1:A:163:PHE:CD1	1:A:163:PHE:N	0.68	2.60	10	4
1:A:93:TYR:HD2	1:A:154:LEU:HD13	0.68	1.49	7	3
1:A:27:LEU:HD12	2:B:262:ILE:HD11	0.68	1.63	11	1
1:A:47:TYR:CE1	1:A:65:VAL:HG22	0.68	2.23	11	1
1:A:25:THR:HG23	1:A:37:HIS:CE1	0.68	2.23	1	1
1:A:76:ALA:HB3	2:B:298:TRP:HZ2	0.68	1.47	1	1
1:A:117:PHE:CD1	1:A:163:PHE:CD2	0.68	2.81	10	2
1:A:165:LEU:HD21	1:A:178:ILE:HG21	0.68	1.65	2	4
1:A:45:LEU:CD2	1:A:77:ILE:HD13	0.68	2.18	11	6
1:A:27:LEU:HD11	2:B:282:PHE:CE1	0.68	2.23	8	2
1:A:132:CYS:O	1:A:135:LEU:HD23	0.68	1.89	5	1
1:A:119:LEU:HD21	1:A:186:LEU:HB3	0.68	1.64	6	1
1:A:62:LEU:HD22	1:A:62:LEU:C	0.68	2.09	3	1
1:A:137:VAL:HG21	1:A:146:ASP:OD2	0.68	1.88	6	1
1:A:58:TRP:CD1	4:A:325:M7G:C4	0.68	2.77	4	6
1:A:135:LEU:C	1:A:135:LEU:HD12	0.68	2.08	4	3
1:A:154:LEU:C	1:A:154:LEU:HD23	0.68	2.08	7	7
1:A:111:LYS:CD	1:A:166:TRP:CG	0.68	2.77	11	3
1:A:184:GLN:HA	1:A:188:LEU:HD23	0.68	1.65	9	3
1:A:142:ILE:CD1	2:B:277:THR:HG23	0.68	2.15	8	1
1:A:84:PRO:O	1:A:156:ILE:HD11	0.68	1.89	8	1
1:A:78:ILE:HD11	1:A:95:VAL:CG2	0.68	2.19	3	1
1:A:154:LEU:HD23	1:A:154:LEU:C	0.67	2.09	10	4
1:A:27:LEU:HD13	2:B:258:TYR:CD2	0.67	2.24	2	1
1:A:58:TRP:CE2	4:A:325:M7G:C5	0.67	2.77	2	11
1:A:135:LEU:HD13	2:B:283:LEU:HB3	0.67	1.66	6	2
1:A:33:PHE:CD1	1:A:33:PHE:N	0.67	2.62	4	5

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:GLN:OE1	2:B:307:VAL:HG11	0.67	1.89	2	1
1:A:140:GLU:OE1	2:B:277:THR:HG22	0.67	1.90	4	3
1:A:66:THR:HG23	1:A:73:GLU:CB	0.67	2.18	8	4
1:A:131:LEU:C	1:A:131:LEU:HD22	0.67	2.10	10	2
1:A:27:LEU:HD21	2:B:282:PHE:CE2	0.67	2.24	3	2
1:A:132:CYS:HA	1:A:135:LEU:HD12	0.67	1.64	7	1
1:A:46:TRP:CZ2	1:A:96:PHE:CE1	0.67	2.83	5	4
1:A:58:TRP:CD2	4:A:325:M7G:C4	0.67	2.78	11	1
1:A:74:PHE:CZ	1:A:95:VAL:HG21	0.67	2.25	11	1
1:A:77:ILE:CD1	2:B:298:TRP:CH2	0.67	2.77	1	2
1:A:46:TRP:CZ3	1:A:96:PHE:CD1	0.67	2.83	4	1
1:A:96:PHE:CE2	1:A:166:TRP:CE3	0.67	2.82	8	3
1:A:58:TRP:CG	4:A:325:M7G:C4	0.67	2.78	3	6
1:A:44:THR:HG22	1:A:67:SER:CB	0.67	2.20	2	3
2:B:298:TRP:CE2	2:B:302:THR:HG22	0.67	2.25	2	2
1:A:134:LEU:HD23	1:A:134:LEU:N	0.67	2.05	1	6
1:A:58:TRP:CE3	4:A:325:M7G:H82	0.67	2.25	3	3
1:A:71:VAL:HG12	2:B:283:LEU:HD21	0.67	1.66	1	1
2:B:241:LEU:HD21	2:B:298:TRP:CA	0.66	2.20	6	1
1:A:39:LEU:CD2	2:B:278:TYR:CZ	0.66	2.78	5	5
1:A:45:LEU:HD11	1:A:77:ILE:CG2	0.66	2.20	3	1
2:B:267:ILE:HG21	2:B:279:GLY:H	0.66	1.48	11	1
1:A:66:THR:OG1	2:B:299:VAL:HG13	0.66	1.90	4	2
1:A:123:GLY:HA2	1:A:126:ILE:HD12	0.66	1.67	7	1
1:A:138:ILE:C	1:A:138:ILE:HD13	0.66	2.10	6	1
1:A:138:ILE:HD12	1:A:139:GLY:N	0.66	2.05	2	6
1:A:103:GLU:O	1:A:107:GLU:N	0.66	2.26	9	11
1:A:87:LEU:HD21	1:A:156:ILE:HD12	0.66	1.65	9	2
1:A:141:THR:O	1:A:142:ILE:HG22	0.66	1.89	11	1
1:A:117:PHE:CE1	1:A:130:TRP:CH2	0.66	2.83	5	2
1:A:58:TRP:CD1	4:A:325:M7G:C2	0.66	2.79	11	8
1:A:100:VAL:HG11	1:A:107:GLU:CA	0.66	2.21	5	5
1:A:130:TRP:CD1	1:A:131:LEU:N	0.66	2.63	6	4
1:A:45:LEU:O	1:A:65:VAL:HG23	0.66	1.91	8	6
1:A:73:GLU:CG	2:B:302:THR:HG22	0.66	2.21	4	1
1:A:87:LEU:HD12	1:A:87:LEU:O	0.66	1.89	10	2
1:A:46:TRP:N	1:A:46:TRP:CD1	0.66	2.64	7	7
1:A:130:TRP:CE3	1:A:163:PHE:CE2	0.66	2.84	4	4
1:A:74:PHE:CZ	1:A:78:ILE:HD11	0.66	2.25	10	1
1:A:135:LEU:HD12	1:A:135:LEU:C	0.66	2.11	2	3
1:A:87:LEU:O	1:A:87:LEU:HD12	0.66	1.90	6	2

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:134:LEU:CD1	1:A:163:PHE:CZ	0.66	2.78	6	1
2:B:294:ALA:HB1	2:B:298:TRP:CB	0.66	2.21	3	5
1:A:89:LEU:HD23	1:A:156:ILE:CG2	0.66	2.21	1	1
1:A:58:TRP:CD1	4:A:325:M7G:C5	0.66	2.79	3	3
1:A:176:LEU:N	1:A:176:LEU:HD13	0.66	2.06	3	2
1:A:83:GLU:C	1:A:87:LEU:HD22	0.66	2.11	8	1
1:A:134:LEU:HD22	1:A:152:VAL:CG1	0.66	2.15	3	1
1:A:47:TYR:CE1	1:A:63:ARG:CB	0.65	2.79	4	6
2:B:253:VAL:CG1	2:B:278:TYR:CE1	0.65	2.80	7	5
1:A:71:VAL:CG2	1:A:75:TRP:CD1	0.65	2.79	4	4
2:B:249:PRO:HA	2:B:306:ILE:HG21	0.65	1.67	3	1
2:B:290:LEU:CD1	2:B:298:TRP:CH2	0.65	2.80	8	1
1:A:104:TRP:CE3	4:A:325:M7G:CM7	0.65	2.79	4	1
2:B:254:PHE:CZ	2:B:268:LYS:CA	0.65	2.79	11	1
1:A:135:LEU:HD11	2:B:283:LEU:CB	0.65	2.22	5	1
1:A:33:PHE:CZ	2:B:240:ILE:HG22	0.65	2.27	5	2
1:A:104:TRP:HB3	4:A:325:M7G:HM71	0.65	1.69	3	9
1:A:58:TRP:CZ2	1:A:62:LEU:CD1	0.65	2.80	8	6
1:A:196:PHE:CD1	1:A:211:ILE:CG1	0.65	2.79	4	6
2:B:295:ASP:O	2:B:299:VAL:HG23	0.65	1.92	4	3
1:A:47:TYR:CE2	1:A:65:VAL:CG2	0.65	2.80	10	6
1:A:82:PRO:HG2	1:A:154:LEU:HD11	0.65	1.69	3	1
2:B:237:VAL:HG13	2:B:298:TRP:CD2	0.65	2.25	11	1
1:A:27:LEU:N	1:A:27:LEU:HD13	0.65	2.06	10	2
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:138:ILE:HD12	0.65	2.26	4	1
1:A:165:LEU:CD1	1:A:167:THR:HG23	0.65	2.14	7	1
1:A:58:TRP:O	1:A:62:LEU:HD13	0.65	1.92	2	1
1:A:27:LEU:CD2	2:B:258:TYR:CD2	0.65	2.80	6	1
1:A:89:LEU:H	1:A:89:LEU:HD13	0.65	1.49	2	1
1:A:129:LEU:N	1:A:129:LEU:CD1	0.65	2.60	7	5
1:A:74:PHE:CE2	1:A:78:ILE:HD13	0.65	2.27	8	1
1:A:39:LEU:HD13	2:B:276:TYR:HB3	0.64	1.66	1	1
1:A:104:TRP:CE3	4:A:325:M7G:C5	0.64	2.80	4	6
1:A:142:ILE:HB	2:B:274:VAL:HG22	0.64	1.68	4	1
2:B:250:ILE:CD1	2:B:256:PHE:CD2	0.64	2.80	9	2
1:A:135:LEU:HD13	2:B:283:LEU:HD13	0.64	1.68	9	4
1:A:38:PRO:CG	2:B:250:ILE:HG21	0.64	2.22	3	2
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:154:LEU:CD1	0.64	2.80	9	1
1:A:26:VAL:HG22	2:B:289:LYS:HB2	0.64	1.69	7	2
1:A:58:TRP:NE1	4:A:325:M7G:C6	0.64	2.59	6	9
1:A:66:THR:CG2	1:A:68:PHE:CE2	0.64	2.80	11	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:254:PHE:CE2	2:B:268:LYS:N	0.64	2.66	11	1
1:A:104:TRP:CD2	4:A:325:M7G:HM72	0.64	2.28	4	1
1:A:83:GLU:N	1:A:84:PRO:CD	0.64	2.60	7	6
2:B:291:ASN:O	2:B:292:VAL:HG13	0.64	1.93	1	4
1:A:26:VAL:HG21	2:B:290:LEU:HD23	0.64	1.70	7	3
1:A:69:GLN:HG3	2:B:307:VAL:HG22	0.64	1.69	10	1
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:163:PHE:CD1	0.64	2.85	7	1
1:A:25:THR:CG2	2:B:256:PHE:CE2	0.64	2.80	4	5
1:A:76:ALA:HB3	2:B:298:TRP:CZ2	0.64	2.28	1	1
1:A:43:TRP:CH2	1:A:138:ILE:CD1	0.64	2.79	10	3
1:A:39:LEU:HD23	1:A:39:LEU:N	0.64	2.07	4	2
1:A:104:TRP:CE3	4:A:325:M7G:N7	0.64	2.66	4	1
1:A:78:ILE:HD11	1:A:95:VAL:HG21	0.64	1.68	3	1
1:A:58:TRP:CD1	4:A:325:M7G:N3	0.64	2.66	4	4
1:A:39:LEU:CD1	2:B:278:TYR:CE1	0.64	2.81	6	1
1:A:30:SER:O	1:A:31:ALA:HB3	0.64	1.92	11	8
1:A:83:GLU:HB3	1:A:87:LEU:HD13	0.64	1.68	8	1
2:B:253:VAL:CG1	2:B:278:TYR:CE2	0.64	2.80	8	2
1:A:142:ILE:HD13	2:B:272:GLU:CG	0.64	2.23	10	1
2:B:252:ASP:O	2:B:256:PHE:CD1	0.64	2.51	11	8
1:A:58:TRP:CH2	4:A:325:M7G:HM73	0.64	2.28	7	8
1:A:47:TYR:CD2	1:A:65:VAL:HG21	0.64	2.26	8	6
1:A:134:LEU:HD13	1:A:152:VAL:CB	0.64	2.22	4	3
2:B:278:TYR:CD1	2:B:278:TYR:N	0.64	2.66	9	5
1:A:33:PHE:CZ	2:B:240:ILE:CG2	0.64	2.81	5	3
1:A:196:PHE:CZ	1:A:213:LEU:CD1	0.63	2.80	2	6
1:A:153:VAL:CG2	1:A:166:TRP:CH2	0.63	2.81	6	2
1:A:196:PHE:CD1	1:A:196:PHE:N	0.63	2.66	6	2
2:B:278:TYR:N	2:B:278:TYR:CD1	0.63	2.65	11	3
1:A:37:HIS:O	1:A:70:THR:HG22	0.63	1.92	2	1
2:B:254:PHE:CZ	2:B:268:LYS:N	0.63	2.67	11	1
2:B:241:LEU:HD12	2:B:297:GLU:CB	0.63	2.23	5	2
1:A:115:TRP:NE1	1:A:196:PHE:CE1	0.63	2.66	2	1
2:B:253:VAL:CG2	2:B:278:TYR:CE1	0.63	2.81	2	1
1:A:104:TRP:C	1:A:104:TRP:CD1	0.63	2.71	3	3
1:A:83:GLU:O	1:A:87:LEU:HD12	0.63	1.93	1	1
1:A:25:THR:CG2	2:B:256:PHE:CE1	0.63	2.82	9	1
1:A:167:THR:HG21	1:A:175:LEU:HG	0.63	1.68	5	2
2:B:254:PHE:CZ	2:B:269:TYR:N	0.63	2.67	6	5
1:A:71:VAL:CG2	2:B:286:PHE:CE2	0.63	2.81	1	2
1:A:130:TRP:CE3	1:A:163:PHE:CD1	0.63	2.86	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:194:LEU:HD23	1:A:196:PHE:HE1	0.63	1.53	7	1
1:A:130:TRP:CA	1:A:185:VAL:HG11	0.63	2.23	2	1
1:A:74:PHE:CD1	1:A:95:VAL:HG21	0.63	2.28	10	4
1:A:87:LEU:HD13	1:A:91:SER:HB2	0.63	1.71	10	1
3:A:322:MTN:S1	3:A:322:MTN:H71	0.63	2.34	3	1
2:B:252:ASP:O	2:B:256:PHE:CD2	0.63	2.51	3	3
2:B:290:LEU:HD13	2:B:298:TRP:CH2	0.63	2.28	8	1
2:B:241:LEU:CD1	2:B:298:TRP:CE3	0.63	2.80	9	6
1:A:130:TRP:CD1	1:A:130:TRP:C	0.63	2.72	3	6
1:A:94:HIS:ND1	1:A:153:VAL:HG13	0.63	2.08	5	3
1:A:130:TRP:CE3	1:A:182:PHE:CE1	0.63	2.86	8	1
1:A:100:VAL:HG13	1:A:107:GLU:OE1	0.63	1.93	2	5
1:A:134:LEU:O	1:A:137:VAL:HG22	0.63	1.94	2	1
1:A:196:PHE:CD1	1:A:211:ILE:CD1	0.63	2.81	4	5
1:A:39:LEU:HD12	2:B:276:TYR:O	0.63	1.94	3	2
1:A:138:ILE:HD13	1:A:138:ILE:C	0.63	2.13	8	1
2:B:237:VAL:HG12	2:B:241:LEU:CG	0.63	2.21	5	1
1:A:58:TRP:CZ2	4:A:325:M7G:CM7	0.62	2.81	8	8
1:A:149:ILE:CG2	1:A:150:ASN:N	0.62	2.61	2	11
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:HB3	0.62	1.71	3	1
1:A:45:LEU:CD1	1:A:77:ILE:HG21	0.62	2.22	3	1
1:A:168:LYS:O	1:A:169:CYS:CB	0.62	2.47	6	11
2:B:258:TYR:CE2	2:B:264:GLY:N	0.62	2.67	11	4
2:B:290:LEU:O	2:B:292:VAL:N	0.62	2.33	9	11
1:A:148:GLN:O	1:A:149:ILE:HD12	0.62	1.93	3	3
1:A:25:THR:HG21	2:B:256:PHE:HE1	0.62	1.54	9	1
1:A:65:VAL:HG13	2:B:295:ASP:OD1	0.62	1.93	4	1
2:B:271:LYS:O	2:B:272:GLU:CB	0.62	2.47	11	6
2:B:251:GLU:O	2:B:252:ASP:CB	0.62	2.48	3	11
1:A:102:PRO:CB	1:A:106:ASP:CB	0.62	2.77	3	7
1:A:117:PHE:CZ	1:A:130:TRP:CH2	0.62	2.87	5	2
1:A:81:ILE:O	1:A:83:GLU:N	0.62	2.33	3	2
2:B:235:ASN:HB3	2:B:292:VAL:HG12	0.62	1.72	10	1
1:A:104:TRP:CD1	1:A:104:TRP:C	0.62	2.73	8	1
1:A:26:VAL:HG11	2:B:290:LEU:CD2	0.62	2.25	6	2
2:B:253:VAL:HA	2:B:256:PHE:CE2	0.62	2.30	9	2
1:A:94:HIS:HB3	1:A:153:VAL:HG22	0.62	1.71	1	3
1:A:133:THR:CG2	1:A:182:PHE:CE1	0.62	2.82	5	1
1:A:129:LEU:CD1	1:A:129:LEU:N	0.62	2.63	4	2
1:A:142:ILE:O	1:A:143:ASP:CB	0.62	2.48	7	6
1:A:96:PHE:CD1	1:A:96:PHE:N	0.62	2.66	2	4

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:35:VAL:HG22	2:B:250:ILE:HD12	0.62	1.72	6	3
1:A:33:PHE:H	2:B:243:VAL:HG21	0.62	1.55	1	4
1:A:134:LEU:CD1	1:A:152:VAL:HG21	0.62	2.21	8	1
1:A:36:LYS:CB	2:B:306:ILE:HG22	0.61	2.25	6	2
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:CG	0.61	2.25	4	6
1:A:101:ARG:CB	1:A:106:ASP:CB	0.61	2.78	11	1
1:A:58:TRP:CG	4:A:325:M7G:N3	0.61	2.68	11	1
1:A:47:TYR:CD1	1:A:65:VAL:CG2	0.61	2.83	11	1
1:A:149:ILE:HD13	1:A:170:GLU:OE2	0.61	1.94	8	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:68:PHE:O	0.61	2.53	10	2
1:A:142:ILE:CD1	2:B:274:VAL:HG21	0.61	2.25	3	2
1:A:117:PHE:CG	1:A:186:LEU:HD11	0.61	2.30	4	1
1:A:130:TRP:CH2	1:A:154:LEU:HD12	0.61	2.31	1	3
1:A:104:TRP:CZ2	4:A:325:M7G:HM72	0.61	2.31	11	1
1:A:94:HIS:CD2	1:A:94:HIS:N	0.61	2.68	11	1
1:A:67:SER:O	1:A:68:PHE:CG	0.61	2.54	9	4
1:A:96:PHE:N	1:A:96:PHE:CD1	0.61	2.65	10	4
1:A:186:LEU:HD12	1:A:188:LEU:HD23	0.61	1.72	8	1
1:A:193:HIS:N	1:A:193:HIS:CD2	0.61	2.69	4	1
1:A:136:ALA:HB1	1:A:140:GLU:CD	0.61	2.15	7	1
2:B:274:VAL:HG12	2:B:277:THR:HG23	0.61	1.70	6	1
1:A:136:ALA:HB2	2:B:280:PRO:HG3	0.61	1.71	11	1
1:A:41:THR:CG2	1:A:43:TRP:CD1	0.61	2.83	9	4
1:A:33:PHE:CD1	2:B:243:VAL:CG2	0.61	2.83	10	1
2:B:306:ILE:C	2:B:306:ILE:HD13	0.61	2.14	11	5
2:B:258:TYR:CZ	2:B:282:PHE:CE2	0.61	2.88	3	2
1:A:66:THR:CG2	1:A:73:GLU:CB	0.61	2.78	8	4
2:B:252:ASP:C	2:B:256:PHE:CE1	0.61	2.74	5	6
1:A:108:ALA:HB1	1:A:199:HIS:CB	0.61	2.26	3	2
1:A:45:LEU:HD23	1:A:65:VAL:HG23	0.61	1.71	5	1
2:B:254:PHE:CE1	2:B:269:TYR:CD1	0.61	2.89	10	1
1:A:111:LYS:O	1:A:167:THR:O	0.61	2.19	7	10
1:A:35:VAL:HG22	2:B:249:PRO:O	0.61	1.96	4	4
1:A:61:LEU:HD23	1:A:61:LEU:N	0.61	2.11	10	1
1:A:39:LEU:CD1	2:B:278:TYR:CZ	0.61	2.84	6	1
2:B:237:VAL:CB	2:B:294:ALA:HB2	0.61	2.26	4	2
1:A:38:PRO:HA	2:B:307:VAL:HG22	0.61	1.71	8	2
1:A:45:LEU:HB2	1:A:95:VAL:HG22	0.61	1.71	8	2
2:B:276:TYR:CD1	2:B:276:TYR:N	0.61	2.69	7	1
1:A:130:TRP:CD1	1:A:134:LEU:CD1	0.61	2.84	3	1
2:B:241:LEU:HA	2:B:244:LEU:HD22	0.61	1.70	3	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:196:PHE:N	1:A:196:PHE:CD1	0.60	2.69	1	3
1:A:183:LYS:HB2	1:A:194:LEU:HD13	0.60	1.71	3	2
1:A:146:ASP:HB3	1:A:149:ILE:HD13	0.60	1.70	10	1
1:A:41:THR:HB	1:A:141:THR:HG21	0.60	1.71	7	1
1:A:130:TRP:NE1	1:A:134:LEU:HD12	0.60	2.11	3	1
1:A:27:LEU:N	1:A:27:LEU:HD23	0.60	2.11	4	4
1:A:25:THR:HG21	2:B:256:PHE:HE2	0.60	1.55	8	3
1:A:175:LEU:N	1:A:175:LEU:CD1	0.60	2.64	10	2
1:A:75:TRP:CE3	1:A:78:ILE:CD1	0.60	2.81	8	1
1:A:135:LEU:HD23	1:A:136:ALA:H	0.60	1.56	5	1
1:A:44:THR:HG23	1:A:97:ARG:HG3	0.60	1.72	1	1
1:A:133:THR:HG21	1:A:182:PHE:CD1	0.60	2.31	9	1
3:A:321:MTN:H71	3:A:321:MTN:S1	0.60	2.36	9	1
1:A:117:PHE:CD1	1:A:117:PHE:N	0.60	2.69	2	3
1:A:130:TRP:C	1:A:130:TRP:CD1	0.60	2.75	2	2
1:A:101:ARG:CB	1:A:102:PRO:CD	0.60	2.80	4	3
2:B:250:ILE:CG1	2:B:256:PHE:CD2	0.60	2.84	9	2
1:A:196:PHE:CE1	1:A:211:ILE:CD1	0.60	2.82	5	2
1:A:142:ILE:HG21	2:B:272:GLU:HG3	0.60	1.72	5	1
1:A:104:TRP:CZ3	4:A:325:M7G:C5	0.60	2.84	4	1
1:A:146:ASP:O	1:A:149:ILE:HD13	0.60	1.95	11	2
1:A:108:ALA:HB1	1:A:199:HIS:HB2	0.60	1.72	1	1
1:A:186:LEU:HD12	1:A:188:LEU:CD2	0.60	2.26	8	2
1:A:94:HIS:N	1:A:94:HIS:CD2	0.60	2.69	2	3
1:A:135:LEU:CD1	2:B:283:LEU:CD1	0.60	2.80	9	3
2:B:273:HIS:O	2:B:273:HIS:CG	0.60	2.54	9	2
1:A:138:ILE:C	1:A:138:ILE:HD12	0.60	2.16	5	3
1:A:58:TRP:CE3	4:A:325:M7G:O4'	0.60	2.55	11	1
2:B:272:GLU:O	2:B:273:HIS:CG	0.60	2.55	4	3
1:A:83:GLU:CB	1:A:84:PRO:CD	0.60	2.79	1	3
1:A:43:TRP:CE3	1:A:67:SER:OG	0.60	2.55	10	2
1:A:69:GLN:HG2	2:B:307:VAL:HG21	0.60	1.74	8	1
2:B:269:TYR:O	2:B:274:VAL:HG23	0.60	1.96	10	1
1:A:39:LEU:HD11	2:B:278:TYR:HE2	0.60	1.57	2	1
1:A:43:TRP:CE2	1:A:68:PHE:O	0.60	2.54	11	11
1:A:72:GLU:O	2:B:290:LEU:CD1	0.60	2.48	4	11
1:A:83:GLU:O	1:A:85:HIS:N	0.60	2.35	3	9
1:A:38:PRO:CB	2:B:308:ILE:HG23	0.60	2.27	10	2
1:A:58:TRP:NE1	4:A:325:M7G:C5	0.60	2.65	10	7
1:A:26:VAL:HG23	1:A:33:PHE:HE2	0.60	1.56	5	2
1:A:175:LEU:HD12	1:A:175:LEU:N	0.60	2.11	2	2

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:VAL:CG2	1:A:33:PHE:CE1	0.60	2.80	2	1
1:A:39:LEU:CD2	1:A:39:LEU:N	0.60	2.65	8	3
1:A:81:ILE:HG21	1:A:131:LEU:HD21	0.59	1.72	3	1
1:A:165:LEU:HD21	1:A:178:ILE:CG2	0.59	2.27	1	4
1:A:175:LEU:CD1	1:A:175:LEU:N	0.59	2.65	11	2
1:A:75:TRP:CE2	2:B:283:LEU:O	0.59	2.55	7	6
1:A:146:ASP:O	1:A:147:SER:CB	0.59	2.51	7	7
1:A:100:VAL:HG22	1:A:101:ARG:H	0.59	1.58	4	8
2:B:250:ILE:CG1	2:B:256:PHE:CE2	0.59	2.86	9	3
1:A:183:LYS:CG	1:A:188:LEU:HD21	0.59	2.28	2	1
1:A:96:PHE:O	1:A:97:ARG:CB	0.59	2.50	9	7
1:A:39:LEU:O	2:B:308:ILE:HG21	0.59	1.96	4	1
1:A:45:LEU:CD2	1:A:77:ILE:CD1	0.59	2.81	11	6
2:B:276:TYR:O	2:B:276:TYR:CG	0.59	2.55	10	3
2:B:271:LYS:CE	2:B:274:VAL:CG2	0.59	2.80	6	1
1:A:79:GLN:NE2	1:A:80:ASN:ND2	0.59	2.51	7	2
1:A:71:VAL:HG23	2:B:286:PHE:CD2	0.59	2.33	1	2
3:A:320:MTN:S1	3:A:320:MTN:H71	0.59	2.37	9	1
1:A:73:GLU:OE1	2:B:298:TRP:CZ2	0.59	2.55	9	1
1:A:46:TRP:CZ3	1:A:101:ARG:O	0.59	2.55	4	1
1:A:138:ILE:HD13	1:A:139:GLY:CA	0.59	2.27	6	2
1:A:104:TRP:CE3	1:A:105:GLU:N	0.59	2.71	4	5
1:A:87:LEU:CD1	1:A:91:SER:CB	0.59	2.80	9	3
1:A:117:PHE:CB	1:A:186:LEU:CD1	0.59	2.80	4	2
1:A:73:GLU:HG3	2:B:302:THR:HG21	0.59	1.74	11	2
1:A:104:TRP:CE2	4:A:325:M7G:CM7	0.59	2.84	11	1
1:A:25:THR:CG2	2:B:256:PHE:CD2	0.59	2.86	11	3
2:B:240:ILE:HD11	2:B:292:VAL:HG11	0.59	1.74	11	1
2:B:306:ILE:CD1	2:B:308:ILE:CG1	0.59	2.81	11	1
1:A:96:PHE:CG	1:A:107:GLU:OE1	0.59	2.56	3	2
1:A:115:TRP:CD1	1:A:196:PHE:CE1	0.59	2.91	2	2
1:A:96:PHE:CB	1:A:151:GLY:CA	0.59	2.80	5	3
1:A:100:VAL:CB	1:A:110:ALA:HB2	0.59	2.26	3	4
1:A:73:GLU:CG	2:B:302:THR:CG2	0.59	2.80	6	4
2:B:252:ASP:C	2:B:256:PHE:CE2	0.59	2.76	3	2
1:A:196:PHE:CZ	1:A:211:ILE:HD12	0.59	2.32	10	5
1:A:175:LEU:N	1:A:175:LEU:HD12	0.59	2.12	5	2
1:A:129:LEU:HD13	1:A:129:LEU:N	0.59	2.12	8	6
1:A:117:PHE:CD1	1:A:163:PHE:O	0.59	2.55	8	5
2:B:258:TYR:CB	2:B:262:ILE:CD1	0.59	2.80	8	1
1:A:27:LEU:HD21	2:B:282:PHE:HE1	0.59	1.58	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:PHE:CE1	2:B:302:THR:OG1	0.59	2.55	7	2
1:A:103:GLU:O	1:A:106:ASP:N	0.59	2.33	9	5
1:A:46:TRP:CD1	1:A:46:TRP:N	0.59	2.71	5	2
1:A:89:LEU:N	1:A:89:LEU:CD2	0.59	2.66	3	4
1:A:41:THR:HG23	1:A:43:TRP:HD1	0.59	1.52	10	6
1:A:100:VAL:HG13	1:A:101:ARG:H	0.58	1.58	6	7
1:A:38:PRO:HA	2:B:307:VAL:HG12	0.58	1.74	7	3
1:A:163:PHE:CE1	1:A:164:ALA:O	0.58	2.56	6	1
2:B:256:PHE:O	2:B:258:TYR:CE1	0.58	2.56	11	1
1:A:142:ILE:CD1	2:B:274:VAL:CG1	0.58	2.81	9	1
1:A:74:PHE:CE1	1:A:78:ILE:CD1	0.58	2.85	7	2
1:A:47:TYR:CD1	1:A:63:ARG:O	0.58	2.55	11	2
1:A:47:TYR:CD2	1:A:65:VAL:CG2	0.58	2.87	9	3
1:A:96:PHE:CD1	1:A:107:GLU:OE1	0.58	2.56	3	1
1:A:115:TRP:O	1:A:117:PHE:CE1	0.58	2.56	7	3
2:B:254:PHE:CZ	2:B:277:THR:O	0.58	2.57	6	3
1:A:135:LEU:CD1	2:B:283:LEU:CB	0.58	2.81	6	2
2:B:237:VAL:CG1	2:B:298:TRP:CB	0.58	2.81	11	1
1:A:47:TYR:CE2	1:A:65:VAL:HG22	0.58	2.33	4	3
1:A:29:ASP:OD2	1:A:33:PHE:CD1	0.58	2.56	8	1
2:B:274:VAL:HG13	2:B:277:THR:HB	0.58	1.73	7	2
2:B:253:VAL:HA	2:B:256:PHE:CE1	0.58	2.33	8	3
2:B:272:GLU:O	2:B:273:HIS:CD2	0.58	2.55	3	4
1:A:99:ASP:OD2	1:A:110:ALA:HB1	0.58	1.98	1	1
1:A:39:LEU:O	2:B:276:TYR:CG	0.58	2.56	4	1
1:A:106:ASP:O	1:A:109:ASN:N	0.58	2.37	9	6
2:B:253:VAL:CG1	2:B:278:TYR:CD1	0.58	2.86	3	5
1:A:117:PHE:HB3	1:A:186:LEU:HD11	0.58	1.76	6	1
1:A:82:PRO:HA	1:A:86:GLU:CB	0.58	2.29	6	5
2:B:269:TYR:CD1	2:B:269:TYR:O	0.58	2.57	6	1
1:A:96:PHE:CG	1:A:107:GLU:OE2	0.58	2.57	11	2
1:A:48:THR:CG2	1:A:58:TRP:CZ3	0.58	2.84	11	3
1:A:193:HIS:O	1:A:194:LEU:HD12	0.58	1.97	5	2
2:B:268:LYS:CD	2:B:279:GLY:N	0.58	2.66	5	2
2:B:241:LEU:HD21	2:B:301:SER:HB2	0.58	1.74	3	1
2:B:252:ASP:O	2:B:256:PHE:CE1	0.58	2.57	10	6
1:A:68:PHE:CZ	2:B:302:THR:OG1	0.58	2.56	6	2
1:A:112:GLY:O	1:A:199:HIS:CD2	0.58	2.56	11	2
1:A:30:SER:O	1:A:31:ALA:HB2	0.58	1.98	5	2
1:A:46:TRP:O	1:A:94:HIS:CD2	0.58	2.57	10	2
2:B:293:LYS:O	2:B:295:ASP:N	0.58	2.37	11	4

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:298:TRP:O	2:B:298:TRP:CE3	0.58	2.56	9	5
1:A:29:ASP:OD2	1:A:33:PHE:CE1	0.58	2.56	4	2
1:A:66:THR:OG1	2:B:298:TRP:CH2	0.58	2.57	5	1
1:A:135:LEU:HD13	2:B:283:LEU:CB	0.58	2.28	3	1
1:A:39:LEU:N	1:A:39:LEU:HD22	0.58	2.12	3	1
2:B:295:ASP:O	2:B:298:TRP:N	0.58	2.36	7	4
1:A:38:PRO:CG	2:B:308:ILE:CG2	0.58	2.81	6	1
1:A:39:LEU:HD11	2:B:278:TYR:CZ	0.58	2.33	6	1
1:A:104:TRP:HB2	1:A:166:TRP:CH2	0.58	2.34	10	5
1:A:101:ARG:CB	1:A:102:PRO:HD2	0.58	2.28	11	1
1:A:193:HIS:CD2	1:A:213:LEU:O	0.58	2.57	11	1
1:A:68:PHE:CD1	1:A:73:GLU:OE1	0.58	2.57	3	2
1:A:27:LEU:HD11	2:B:282:PHE:CE2	0.58	2.34	9	1
1:A:35:VAL:HG13	2:B:250:ILE:CD1	0.58	2.29	9	1
1:A:90:LYS:CA	1:A:156:ILE:O	0.58	2.52	4	10
1:A:196:PHE:CZ	1:A:213:LEU:HD12	0.58	2.33	3	3
1:A:138:ILE:CD1	1:A:139:GLY:N	0.58	2.61	6	7
1:A:33:PHE:CD2	1:A:72:GLU:OE1	0.58	2.57	1	1
1:A:161:ASN:OD1	1:A:163:PHE:CZ	0.58	2.57	9	3
1:A:73:GLU:OE2	2:B:302:THR:HG22	0.58	1.99	9	1
1:A:26:VAL:CG1	2:B:286:PHE:CD1	0.58	2.86	5	2
1:A:69:GLN:N	1:A:69:GLN:NE2	0.58	2.52	5	1
1:A:75:TRP:CE3	1:A:79:GLN:OE1	0.58	2.57	5	2
1:A:135:LEU:HD21	2:B:280:PRO:CA	0.58	2.28	5	1
1:A:139:GLY:O	2:B:276:TYR:CE2	0.58	2.57	10	1
1:A:74:PHE:CE1	1:A:95:VAL:CG2	0.58	2.87	10	1
1:A:193:HIS:CE1	1:A:213:LEU:OXT	0.58	2.56	3	1
1:A:135:LEU:CD1	1:A:136:ALA:N	0.57	2.66	4	5
1:A:33:PHE:HB2	2:B:244:LEU:HD23	0.57	1.75	6	1
2:B:252:ASP:C	2:B:256:PHE:CD2	0.57	2.77	6	2
2:B:298:TRP:CE2	2:B:302:THR:OG1	0.57	2.56	11	1
1:A:117:PHE:CZ	1:A:182:PHE:CE2	0.57	2.92	9	1
1:A:153:VAL:CG2	1:A:166:TRP:CE2	0.57	2.87	5	1
1:A:79:GLN:NE2	2:B:287:LYS:CG	0.57	2.66	5	1
1:A:41:THR:CB	1:A:141:THR:HG21	0.57	2.28	7	1
1:A:43:TRP:CH2	1:A:70:THR:O	0.57	2.57	7	1
1:A:111:LYS:HD2	1:A:166:TRP:CG	0.57	2.34	11	2
1:A:67:SER:O	1:A:68:PHE:CD1	0.57	2.56	11	1
1:A:75:TRP:CB	2:B:290:LEU:CD1	0.57	2.81	1	5
2:B:250:ILE:CG1	2:B:256:PHE:CE1	0.57	2.86	1	4
1:A:80:ASN:ND2	2:B:293:LYS:CB	0.57	2.67	9	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:38:PRO:HB2	2:B:307:VAL:HG13	0.57	1.75	5	2
1:A:74:PHE:CZ	1:A:78:ILE:HG21	0.57	2.34	8	1
1:A:126:ILE:HG23	1:A:186:LEU:HA	0.57	1.74	5	1
1:A:167:THR:CB	1:A:175:LEU:HD22	0.57	2.29	3	1
2:B:291:ASN:O	2:B:292:VAL:CG1	0.57	2.52	1	5
1:A:167:THR:O	1:A:169:CYS:N	0.57	2.37	7	7
1:A:103:GLU:CB	4:A:325:M7G:O6	0.57	2.52	4	2
1:A:143:ASP:CG	2:B:277:THR:HG21	0.57	2.20	9	1
1:A:87:LEU:CD1	1:A:89:LEU:HD21	0.57	2.30	8	1
1:A:110:ALA:O	1:A:111:LYS:CB	0.57	2.51	3	2
1:A:117:PHE:CG	1:A:186:LEU:CD1	0.57	2.86	4	1
1:A:31:ALA:O	1:A:32:HIS:CG	0.57	2.58	7	1
1:A:96:PHE:CB	1:A:151:GLY:HA3	0.57	2.28	5	7
1:A:27:LEU:CD1	2:B:258:TYR:CD2	0.57	2.88	7	5
1:A:96:PHE:CD1	1:A:107:GLU:OE2	0.57	2.57	1	3
1:A:188:LEU:CD1	1:A:193:HIS:N	0.57	2.66	8	1
1:A:27:LEU:N	1:A:27:LEU:CD1	0.57	2.66	10	1
1:A:111:LYS:HD3	1:A:166:TRP:CG	0.57	2.35	11	5
1:A:115:TRP:CZ2	1:A:175:LEU:HB3	0.57	2.35	10	10
2:B:294:ALA:O	2:B:295:ASP:CB	0.57	2.53	6	10
1:A:58:TRP:CD1	4:A:325:M7G:C6	0.57	2.88	6	2
1:A:47:TYR:CE1	1:A:63:ARG:HB2	0.57	2.34	9	5
1:A:87:LEU:HD21	1:A:91:SER:OG	0.57	2.00	1	1
2:B:237:VAL:CG1	2:B:298:TRP:CE3	0.57	2.88	8	1
1:A:111:LYS:O	1:A:113:GLY:N	0.57	2.33	10	2
2:B:299:VAL:CG2	2:B:300:GLN:N	0.57	2.66	10	1
1:A:58:TRP:CE2	1:A:62:LEU:HD11	0.57	2.35	2	1
2:B:274:VAL:O	2:B:275:LYS:CB	0.57	2.53	10	4
2:B:250:ILE:HG22	2:B:306:ILE:HG21	0.57	1.75	6	2
1:A:96:PHE:CE1	1:A:107:GLU:OE2	0.57	2.58	1	1
2:B:294:ALA:HB3	2:B:298:TRP:CE2	0.57	2.35	1	1
1:A:26:VAL:CG1	2:B:286:PHE:CE1	0.57	2.87	5	1
1:A:193:HIS:CE1	1:A:213:LEU:O	0.57	2.57	4	1
1:A:165:LEU:HD22	1:A:182:PHE:CE2	0.57	2.34	2	2
1:A:100:VAL:O	1:A:101:ARG:CB	0.57	2.52	9	8
2:B:266:ASP:O	2:B:268:LYS:N	0.57	2.38	11	1
1:A:96:PHE:CD1	1:A:107:GLU:CD	0.57	2.78	9	2
1:A:45:LEU:CD2	1:A:65:VAL:HG23	0.57	2.29	5	1
1:A:106:ASP:HA	1:A:109:ASN:ND2	0.57	2.14	2	8
1:A:78:ILE:N	1:A:78:ILE:HD13	0.57	2.13	2	3
1:A:83:GLU:N	1:A:84:PRO:HD2	0.57	2.15	2	4

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:299:VAL:HA	2:B:302:THR:HG23	0.57	1.77	2	3
1:A:46:TRP:CH2	1:A:101:ARG:O	0.57	2.58	4	2
1:A:29:ASP:OD1	1:A:33:PHE:CD2	0.57	2.57	6	1
1:A:134:LEU:N	1:A:134:LEU:CD2	0.57	2.66	7	3
1:A:89:LEU:N	1:A:89:LEU:CD1	0.57	2.68	5	1
2:B:253:VAL:HG21	2:B:278:TYR:CD1	0.57	2.34	2	1
1:A:75:TRP:CZ2	2:B:283:LEU:O	0.57	2.58	8	7
1:A:111:LYS:CG	1:A:112:GLY:N	0.57	2.68	11	2
1:A:142:ILE:CD1	2:B:274:VAL:HG12	0.57	2.30	11	1
2:B:269:TYR:O	2:B:269:TYR:CD1	0.57	2.57	1	1
2:B:273:HIS:CD2	2:B:273:HIS:C	0.57	2.79	5	2
2:B:274:VAL:HG22	2:B:277:THR:OG1	0.57	1.99	3	1
1:A:100:VAL:HB	1:A:110:ALA:CB	0.57	2.30	5	8
2:B:252:ASP:O	2:B:255:SER:N	0.57	2.37	11	11
1:A:94:HIS:CG	1:A:103:GLU:OE2	0.57	2.57	11	1
1:A:66:THR:HG23	1:A:73:GLU:HB2	0.57	1.77	8	1
2:B:252:ASP:O	2:B:255:SER:CB	0.56	2.53	2	8
1:A:102:PRO:HB2	1:A:106:ASP:CB	0.56	2.30	7	8
2:B:269:TYR:CD2	2:B:274:VAL:HG21	0.56	2.34	8	1
1:A:93:TYR:CD1	1:A:93:TYR:C	0.56	2.79	5	1
1:A:176:LEU:HD13	1:A:176:LEU:H	0.56	1.59	2	1
1:A:48:THR:OG1	1:A:49:LYS:N	0.56	2.38	2	1
1:A:134:LEU:CD2	1:A:134:LEU:N	0.56	2.68	11	3
2:B:240:ILE:HD12	2:B:244:LEU:HD11	0.56	1.76	6	1
2:B:253:VAL:N	2:B:256:PHE:CE2	0.56	2.73	6	2
1:A:111:LYS:CE	1:A:166:TRP:CD1	0.56	2.88	8	3
1:A:80:ASN:O	1:A:81:ILE:C	0.56	2.44	3	6
1:A:183:LYS:CG	1:A:188:LEU:CD2	0.56	2.83	5	1
1:A:71:VAL:HG13	2:B:286:PHE:CE2	0.56	2.36	5	1
1:A:40:ASN:HB2	2:B:276:TYR:CD1	0.56	2.35	3	2
1:A:87:LEU:HD13	1:A:91:SER:HB3	0.56	1.76	2	1
1:A:35:VAL:HG11	2:B:250:ILE:HD12	0.56	1.72	2	4
1:A:171:ASP:O	1:A:175:LEU:HD13	0.56	2.00	11	3
1:A:176:LEU:N	1:A:176:LEU:CD1	0.56	2.69	3	8
1:A:117:PHE:CB	1:A:186:LEU:CD2	0.56	2.83	1	1
1:A:93:TYR:O	1:A:94:HIS:CG	0.56	2.59	4	2
1:A:36:LYS:O	2:B:250:ILE:CG2	0.56	2.53	8	7
1:A:74:PHE:O	1:A:78:ILE:CG1	0.56	2.54	3	5
1:A:196:PHE:O	1:A:210:SER:N	0.56	2.38	8	3
1:A:87:LEU:HD12	1:A:89:LEU:H	0.56	1.61	7	2
1:A:44:THR:HG23	1:A:97:ARG:HD3	0.56	1.78	3	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:298:TRP:O	2:B:302:THR:N	0.56	2.39	1	8
1:A:115:TRP:CZ2	1:A:175:LEU:CB	0.56	2.88	1	8
1:A:49:LYS:CB	1:A:50:PRO:CD	0.56	2.83	6	3
1:A:96:PHE:CD2	1:A:107:GLU:OE1	0.56	2.57	11	1
2:B:268:LYS:O	2:B:274:VAL:N	0.56	2.38	11	1
1:A:29:ASP:CB	1:A:32:HIS:O	0.56	2.53	5	1
1:A:137:VAL:HG21	1:A:152:VAL:HG13	0.56	1.76	2	1
1:A:47:TYR:OH	1:A:65:VAL:HG11	0.56	2.01	6	3
1:A:112:GLY:O	1:A:199:HIS:CG	0.56	2.59	8	3
1:A:47:TYR:CE1	1:A:63:ARG:HB3	0.56	2.35	10	6
2:B:253:VAL:HA	2:B:256:PHE:CZ	0.56	2.36	5	10
1:A:150:ASN:ND2	1:A:166:TRP:HB3	0.56	2.16	6	3
1:A:35:VAL:CG2	2:B:250:ILE:HD12	0.56	2.30	6	3
1:A:176:LEU:H	1:A:176:LEU:HD13	0.56	1.60	9	3
1:A:27:LEU:HD13	2:B:285:GLN:OE1	0.56	2.00	5	4
1:A:81:ILE:O	1:A:81:ILE:HD12	0.56	2.00	3	1
1:A:153:VAL:CG1	1:A:154:LEU:N	0.56	2.69	6	10
1:A:73:GLU:CD	2:B:298:TRP:CD1	0.56	2.79	6	1
2:B:251:GLU:CB	2:B:255:SER:OG	0.56	2.54	8	1
1:A:142:ILE:CG2	2:B:273:HIS:CB	0.56	2.83	8	1
1:A:94:HIS:CE1	1:A:153:VAL:CG1	0.56	2.88	5	1
1:A:43:TRP:N	1:A:43:TRP:CD1	0.56	2.73	10	2
1:A:142:ILE:HG21	2:B:272:GLU:HA	0.56	1.78	10	1
1:A:146:ASP:OD2	1:A:149:ILE:HD13	0.56	2.01	7	1
1:A:101:ARG:N	1:A:102:PRO:HD2	0.56	2.16	9	7
2:B:271:LYS:HE3	2:B:274:VAL:HG23	0.56	1.76	6	1
1:A:48:THR:CG2	1:A:62:LEU:HB3	0.56	2.31	3	1
1:A:70:THR:OG1	1:A:71:VAL:N	0.56	2.38	2	9
1:A:137:VAL:HG22	1:A:146:ASP:HB2	0.56	1.78	6	1
1:A:48:THR:HG22	1:A:61:LEU:HB2	0.56	1.78	8	1
1:A:39:LEU:N	1:A:39:LEU:CD2	0.56	2.69	7	2
2:B:250:ILE:O	2:B:308:ILE:HD12	0.56	2.00	7	1
1:A:102:PRO:O	1:A:103:GLU:CG	0.55	2.54	11	3
1:A:69:GLN:CG	2:B:307:VAL:CG1	0.55	2.82	11	1
1:A:80:ASN:O	1:A:82:PRO:N	0.55	2.39	8	1
1:A:127:ASP:OD1	1:A:130:TRP:CH2	0.55	2.58	6	1
2:B:250:ILE:CG2	2:B:306:ILE:CG2	0.55	2.84	6	1
1:A:182:PHE:CD1	1:A:182:PHE:O	0.55	2.60	9	2
1:A:25:THR:HG22	1:A:35:VAL:CG1	0.55	2.32	9	1
1:A:66:THR:CG2	1:A:73:GLU:HB2	0.55	2.30	8	4
2:B:241:LEU:HD13	2:B:301:SER:HB2	0.55	1.77	8	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:LEU:CD2	1:A:69:GLN:O	0.55	2.53	2	3
2:B:277:THR:C	2:B:278:TYR:CD1	0.55	2.80	2	1
1:A:178:ILE:CG2	1:A:179:GLY:N	0.55	2.70	5	9
1:A:45:LEU:CD2	1:A:66:THR:HB	0.55	2.31	8	4
2:B:252:ASP:O	2:B:256:PHE:N	0.55	2.40	9	3
1:A:100:VAL:HG21	1:A:107:GLU:O	0.55	2.00	8	2
2:B:262:ILE:HD13	2:B:262:ILE:O	0.55	2.02	11	1
1:A:111:LYS:HE3	1:A:166:TRP:CG	0.55	2.37	8	1
1:A:89:LEU:CD1	1:A:156:ILE:HG21	0.55	2.30	8	1
1:A:82:PRO:O	1:A:87:LEU:N	0.55	2.40	10	4
1:A:102:PRO:O	1:A:103:GLU:CB	0.55	2.54	1	10
1:A:170:GLU:O	1:A:171:ASP:CB	0.55	2.54	7	10
1:A:101:ARG:HB3	1:A:102:PRO:CD	0.55	2.31	6	2
1:A:101:ARG:HB3	1:A:106:ASP:CB	0.55	2.31	11	2
1:A:25:THR:CG2	1:A:37:HIS:CE1	0.55	2.90	1	1
1:A:87:LEU:HD22	1:A:87:LEU:C	0.55	2.21	1	1
2:B:269:TYR:O	2:B:274:VAL:CG2	0.55	2.54	1	1
1:A:25:THR:HG21	2:B:258:TYR:CD2	0.55	2.36	5	1
1:A:153:VAL:HG21	1:A:166:TRP:CZ3	0.55	2.35	9	1
1:A:105:GLU:OE1	4:A:325:M7G:N2	0.55	2.40	3	4
2:B:274:VAL:CG1	2:B:275:LYS:N	0.55	2.66	2	3
1:A:131:LEU:O	1:A:134:LEU:N	0.55	2.40	7	11
1:A:49:LYS:CB	1:A:50:PRO:HD3	0.55	2.31	6	4
2:B:282:PHE:CD1	2:B:283:LEU:N	0.55	2.75	6	2
2:B:254:PHE:CZ	2:B:268:LYS:HA	0.55	2.37	11	1
1:A:93:TYR:C	1:A:94:HIS:CD2	0.55	2.80	3	5
1:A:87:LEU:CD2	1:A:156:ILE:HD13	0.55	2.32	8	1
1:A:183:LYS:CG	1:A:188:LEU:HD22	0.55	2.32	5	1
1:A:75:TRP:CD1	2:B:286:PHE:HB3	0.55	2.37	11	11
1:A:73:GLU:CG	2:B:302:THR:HG21	0.55	2.32	6	1
2:B:244:LEU:HD12	2:B:301:SER:OG	0.55	2.02	5	1
1:A:135:LEU:HD21	2:B:280:PRO:HA	0.55	1.78	5	2
1:A:194:LEU:HD23	1:A:196:PHE:CE2	0.55	2.37	4	1
1:A:67:SER:C	1:A:68:PHE:CD1	0.55	2.80	7	6
1:A:130:TRP:O	1:A:133:THR:CB	0.55	2.54	10	2
1:A:45:LEU:O	1:A:65:VAL:N	0.55	2.39	4	7
2:B:253:VAL:CG1	2:B:278:TYR:CD2	0.55	2.89	8	3
1:A:29:ASP:OD2	1:A:33:PHE:CD2	0.55	2.60	10	2
1:A:105:GLU:OE2	4:A:325:M7G:N2	0.55	2.40	2	6
1:A:153:VAL:HG12	1:A:154:LEU:N	0.55	2.16	1	10
1:A:38:PRO:HG3	2:B:308:ILE:HG23	0.55	1.79	6	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:247:ALA:O	2:B:248:THR:CB	0.55	2.55	11	2
1:A:58:TRP:CD2	4:A:325:M7G:N9	0.55	2.75	11	1
2:B:262:ILE:HD13	2:B:262:ILE:C	0.55	2.22	11	2
1:A:39:LEU:CD2	2:B:278:TYR:OH	0.55	2.54	9	4
2:B:298:TRP:NE1	2:B:302:THR:OG1	0.55	2.38	8	2
1:A:87:LEU:HD21	1:A:156:ILE:HD13	0.55	1.77	8	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:70:THR:O	0.55	2.60	7	1
1:A:58:TRP:CE2	1:A:62:LEU:CD1	0.55	2.90	2	2
1:A:132:CYS:O	1:A:135:LEU:CD2	0.55	2.55	5	1
1:A:87:LEU:HD12	1:A:87:LEU:C	0.55	2.23	7	1
1:A:34:ASP:O	2:B:248:THR:N	0.54	2.40	2	6
1:A:178:ILE:HG22	1:A:179:GLY:N	0.54	2.17	9	9
1:A:36:LYS:C	2:B:250:ILE:HD13	0.54	2.23	11	2
1:A:129:LEU:C	1:A:185:VAL:HG13	0.54	2.23	1	1
2:B:272:GLU:O	2:B:273:HIS:CB	0.54	2.55	1	1
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:138:ILE:HD13	0.54	2.36	10	2
1:A:165:LEU:HD12	1:A:165:LEU:C	0.54	2.23	4	3
1:A:106:ASP:O	1:A:109:ASN:CB	0.54	2.56	9	5
1:A:95:VAL:C	1:A:96:PHE:CG	0.54	2.80	6	5
2:B:253:VAL:N	2:B:256:PHE:CE1	0.54	2.76	11	1
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:163:PHE:HB3	0.54	2.37	5	1
1:A:43:TRP:CD1	1:A:138:ILE:HD13	0.54	2.37	2	1
1:A:45:LEU:O	1:A:65:VAL:CG2	0.54	2.54	2	6
1:A:93:TYR:C	1:A:93:TYR:CD1	0.54	2.80	7	4
1:A:100:VAL:CG1	1:A:107:GLU:OE1	0.54	2.56	5	6
1:A:100:VAL:HG22	1:A:110:ALA:HB3	0.54	1.78	6	1
1:A:26:VAL:O	2:B:289:LYS:CG	0.54	2.56	11	4
1:A:25:THR:HG22	2:B:256:PHE:CE2	0.54	2.37	11	1
2:B:248:THR:HG23	2:B:306:ILE:HG21	0.54	1.79	11	1
1:A:43:TRP:CD1	1:A:43:TRP:N	0.54	2.74	9	3
1:A:39:LEU:N	1:A:69:GLN:O	0.54	2.41	1	2
1:A:161:ASN:OD1	1:A:163:PHE:CE1	0.54	2.60	4	2
2:B:258:TYR:CB	2:B:262:ILE:HD13	0.54	2.31	8	1
1:A:96:PHE:CG	1:A:107:GLU:CD	0.54	2.80	4	1
1:A:183:LYS:CG	1:A:184:GLN:N	0.54	2.69	7	3
2:B:294:ALA:HB3	2:B:298:TRP:NE1	0.54	2.18	1	1
1:A:38:PRO:CB	2:B:307:VAL:CG1	0.54	2.82	1	1
1:A:96:PHE:CE1	1:A:107:GLU:CD	0.54	2.81	9	1
1:A:48:THR:CG2	1:A:62:LEU:CB	0.54	2.81	3	1
2:B:274:VAL:CG1	2:B:277:THR:OG1	0.54	2.56	3	1
2:B:258:TYR:OH	2:B:282:PHE:CE1	0.54	2.56	2	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:148:GLN:CB	1:A:170:GLU:CB	0.54	2.85	6	2
1:A:29:ASP:CG	1:A:33:PHE:CE2	0.54	2.81	6	1
1:A:74:PHE:CE2	1:A:95:VAL:HG21	0.54	2.37	11	2
1:A:106:ASP:O	1:A:109:ASN:ND2	0.54	2.40	9	1
1:A:134:LEU:HD21	1:A:182:PHE:CZ	0.54	2.38	9	2
2:B:298:TRP:O	2:B:302:THR:CB	0.54	2.55	5	1
1:A:26:VAL:HG22	2:B:289:LYS:CB	0.54	2.32	7	3
1:A:130:TRP:HZ2	1:A:154:LEU:HD12	0.54	1.63	2	3
1:A:149:ILE:HG23	1:A:150:ASN:H	0.54	1.59	2	4
2:B:296:ALA:O	2:B:299:VAL:N	0.54	2.38	10	3
1:A:129:LEU:N	1:A:129:LEU:HD13	0.54	2.17	6	1
1:A:83:GLU:HG2	1:A:154:LEU:HD11	0.54	1.80	6	1
1:A:43:TRP:NE1	1:A:68:PHE:O	0.54	2.41	6	2
1:A:58:TRP:CE3	4:A:325:M7G:N9	0.54	2.75	11	1
2:B:250:ILE:HD11	2:B:256:PHE:CD1	0.54	2.36	11	1
1:A:71:VAL:CG1	2:B:283:LEU:CD2	0.54	2.83	1	4
1:A:100:VAL:CG1	1:A:150:ASN:OD1	0.54	2.56	9	1
1:A:89:LEU:CD1	1:A:156:ILE:CG2	0.54	2.85	8	1
1:A:94:HIS:ND1	1:A:153:VAL:CG1	0.54	2.70	5	1
1:A:194:LEU:HD23	1:A:196:PHE:CE1	0.54	2.36	7	1
1:A:62:LEU:HD13	1:A:62:LEU:C	0.54	2.22	3	1
1:A:58:TRP:CH2	1:A:62:LEU:HD11	0.54	2.37	2	1
1:A:107:GLU:HB2	1:A:166:TRP:CZ3	0.54	2.37	7	3
1:A:43:TRP:CB	1:A:96:PHE:O	0.54	2.56	8	4
1:A:137:VAL:HG22	1:A:146:ASP:CB	0.54	2.33	4	2
1:A:38:PRO:HG3	2:B:250:ILE:HG21	0.54	1.79	3	2
2:B:279:GLY:O	2:B:283:LEU:HD12	0.54	2.03	5	1
1:A:100:VAL:O	1:A:101:ARG:CG	0.54	2.56	10	2
1:A:127:ASP:O	1:A:131:LEU:CB	0.54	2.56	6	2
1:A:30:SER:O	1:A:31:ALA:CB	0.54	2.56	4	9
1:A:193:HIS:O	1:A:194:LEU:CG	0.54	2.56	11	3
1:A:76:ALA:O	1:A:79:GLN:N	0.54	2.41	7	4
1:A:74:PHE:O	1:A:78:ILE:CD1	0.54	2.56	1	1
2:B:269:TYR:O	2:B:274:VAL:HG22	0.54	2.03	1	1
1:A:25:THR:HG22	1:A:37:HIS:CE1	0.54	2.38	5	1
1:A:27:LEU:HD23	2:B:258:TYR:CD1	0.54	2.38	10	1
1:A:165:LEU:HD22	1:A:182:PHE:CD2	0.54	2.38	1	2
1:A:146:ASP:O	1:A:148:GLN:N	0.54	2.40	9	1
2:B:250:ILE:HG12	2:B:256:PHE:CE2	0.54	2.37	9	1
1:A:29:ASP:N	1:A:29:ASP:OD1	0.54	2.40	4	3
2:B:237:VAL:CG2	2:B:294:ALA:N	0.54	2.71	4	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:ILE:O	1:A:86:GLU:CB	0.54	2.56	2	5
1:A:39:LEU:HD21	2:B:278:TYR:CE2	0.54	2.38	3	4
1:A:106:ASP:OD2	1:A:109:ASN:ND2	0.54	2.41	1	1
1:A:170:GLU:O	1:A:174:PRO:CD	0.54	2.56	9	2
1:A:79:GLN:O	1:A:81:ILE:CG1	0.54	2.55	8	1
1:A:117:PHE:CD2	1:A:194:LEU:HD21	0.54	2.38	5	1
1:A:127:ASP:HA	1:A:130:TRP:CE3	0.53	2.38	7	7
1:A:134:LEU:HB3	1:A:152:VAL:HG21	0.53	1.79	6	3
1:A:77:ILE:O	1:A:80:ASN:ND2	0.53	2.42	6	2
2:B:295:ASP:O	2:B:299:VAL:CG2	0.53	2.56	3	4
1:A:183:LYS:O	1:A:188:LEU:CD2	0.53	2.56	10	3
1:A:127:ASP:O	1:A:131:LEU:CD1	0.53	2.54	8	4
2:B:259:PRO:O	2:B:260:GLU:CB	0.53	2.56	5	2
1:A:39:LEU:HD23	1:A:70:THR:HA	0.53	1.78	3	2
1:A:45:LEU:O	1:A:65:VAL:CB	0.53	2.55	7	2
1:A:188:LEU:HB2	1:A:193:HIS:CE1	0.53	2.38	7	1
1:A:46:TRP:CZ3	1:A:103:GLU:HG2	0.53	2.38	3	1
1:A:75:TRP:O	1:A:79:GLN:CB	0.53	2.56	3	1
1:A:81:ILE:N	1:A:82:PRO:HD3	0.53	2.18	2	9
1:A:96:PHE:O	1:A:97:ARG:HB3	0.53	2.03	5	3
1:A:135:LEU:O	1:A:138:ILE:CG2	0.53	2.56	8	2
1:A:173:GLU:N	1:A:174:PRO:CD	0.53	2.71	5	3
1:A:44:THR:CA	1:A:67:SER:HB3	0.53	2.34	11	4
1:A:111:LYS:HE2	1:A:166:TRP:CD1	0.53	2.38	4	3
1:A:143:ASP:OD2	2:B:277:THR:CG2	0.53	2.57	9	1
1:A:83:GLU:O	1:A:87:LEU:N	0.53	2.41	8	1
1:A:148:GLN:O	1:A:168:LYS:CB	0.53	2.56	2	3
2:B:298:TRP:CZ2	2:B:302:THR:HG22	0.53	2.38	2	1
1:A:96:PHE:CD2	1:A:107:GLU:CD	0.53	2.82	11	1
1:A:48:THR:OG1	1:A:92:ASP:CB	0.53	2.57	1	2
1:A:111:LYS:HB2	1:A:166:TRP:CB	0.53	2.33	7	2
1:A:114:LYS:CE	1:A:116:SER:OG	0.53	2.57	7	1
1:A:135:LEU:HD11	2:B:280:PRO:CB	0.53	2.34	7	1
1:A:90:LYS:HA	1:A:156:ILE:O	0.53	2.03	6	11
1:A:75:TRP:NE1	2:B:283:LEU:O	0.53	2.42	11	9
1:A:27:LEU:HD23	2:B:258:TYR:CD2	0.53	2.37	6	1
1:A:116:SER:C	1:A:117:PHE:CD1	0.53	2.82	3	3
1:A:141:THR:O	1:A:142:ILE:CG2	0.53	2.56	11	1
1:A:100:VAL:HG13	1:A:107:GLU:CD	0.53	2.22	1	8
1:A:26:VAL:O	2:B:289:LYS:CD	0.53	2.56	8	4
1:A:101:ARG:CA	1:A:107:GLU:OE2	0.53	2.56	3	2

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:THR:CG2	1:A:73:GLU:HB3	0.53	2.34	6	6
1:A:142:ILE:CD1	1:A:143:ASP:N	0.53	2.66	6	1
1:A:82:PRO:O	1:A:86:GLU:N	0.53	2.41	6	2
1:A:104:TRP:HB2	1:A:166:TRP:CZ2	0.53	2.39	10	6
2:B:248:THR:OG1	2:B:306:ILE:HG21	0.53	2.03	11	1
2:B:298:TRP:CD1	2:B:298:TRP:C	0.53	2.82	8	2
1:A:40:ASN:O	1:A:40:ASN:ND2	0.53	2.42	10	2
1:A:183:LYS:CD	1:A:193:HIS:O	0.53	2.57	5	1
1:A:41:THR:OG1	1:A:141:THR:CG2	0.53	2.57	5	2
1:A:163:PHE:CZ	1:A:186:LEU:HD22	0.53	2.39	10	1
1:A:78:ILE:O	1:A:81:ILE:N	0.53	2.39	3	2
1:A:43:TRP:NE1	1:A:138:ILE:HD13	0.53	2.19	2	1
1:A:111:LYS:CA	1:A:167:THR:O	0.53	2.57	9	4
1:A:56:GLU:O	1:A:57:SER:CB	0.53	2.57	7	4
1:A:100:VAL:CG1	1:A:107:GLU:HA	0.53	2.34	5	7
2:B:248:THR:O	2:B:250:ILE:N	0.53	2.41	11	3
1:A:72:GLU:HA	2:B:290:LEU:HD11	0.53	1.80	1	4
1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:OE1	0.53	2.42	9	1
1:A:89:LEU:O	1:A:90:LYS:CB	0.53	2.56	8	1
1:A:140:GLU:CG	2:B:278:TYR:O	0.53	2.56	7	3
1:A:135:LEU:HD21	2:B:280:PRO:HB3	0.53	1.78	5	1
1:A:25:THR:HB	1:A:37:HIS:CE1	0.53	2.39	3	1
1:A:88:PRO:O	1:A:89:LEU:O	0.53	2.27	6	10
1:A:196:PHE:O	1:A:210:SER:CB	0.53	2.56	7	3
1:A:80:ASN:O	1:A:81:ILE:CD1	0.53	2.54	1	6
1:A:38:PRO:HG3	2:B:250:ILE:CG2	0.53	2.34	1	8
2:B:235:ASN:CB	2:B:291:ASN:O	0.53	2.57	10	2
1:A:108:ALA:O	1:A:199:HIS:ND1	0.53	2.41	11	1
1:A:76:ALA:O	1:A:78:ILE:N	0.53	2.42	11	2
1:A:196:PHE:CD1	1:A:211:ILE:HG13	0.53	2.39	3	7
1:A:96:PHE:O	1:A:97:ARG:CG	0.53	2.57	9	3
1:A:50:PRO:CD	1:A:92:ASP:OD1	0.53	2.57	9	1
1:A:74:PHE:CE1	1:A:78:ILE:HG21	0.53	2.39	8	1
1:A:44:THR:OG1	1:A:46:TRP:NE1	0.53	2.41	5	2
1:A:36:LYS:O	2:B:306:ILE:CG2	0.53	2.57	10	1
1:A:123:GLY:CA	1:A:126:ILE:HD12	0.53	2.34	7	1
1:A:73:GLU:OE1	1:A:73:GLU:N	0.53	2.42	7	1
1:A:41:THR:O	1:A:69:GLN:CB	0.53	2.57	2	3
1:A:82:PRO:O	1:A:87:LEU:CG	0.53	2.57	2	2
1:A:141:THR:O	1:A:143:ASP:N	0.53	2.42	6	1
1:A:33:PHE:CB	2:B:244:LEU:HD23	0.53	2.34	6	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:TRP:HB3	2:B:290:LEU:CD1	0.53	2.30	6	8
1:A:73:GLU:OE2	2:B:302:THR:CG2	0.53	2.57	6	2
2:B:275:LYS:HB2	2:B:276:TYR:CD1	0.53	2.39	7	2
1:A:33:PHE:CE2	1:A:72:GLU:OE1	0.53	2.61	1	1
1:A:141:THR:OG1	1:A:146:ASP:CB	0.53	2.57	9	1
1:A:58:TRP:CE2	4:A:325:M7G:C6	0.53	2.91	9	1
1:A:117:PHE:CD2	1:A:194:LEU:CD2	0.53	2.92	5	1
1:A:105:GLU:O	1:A:109:ASN:ND2	0.53	2.41	3	3
1:A:112:GLY:CA	1:A:167:THR:O	0.53	2.57	3	1
1:A:138:ILE:CG1	1:A:139:GLY:N	0.53	2.71	4	5
1:A:73:GLU:OE2	2:B:305:LYS:CD	0.53	2.57	9	2
1:A:58:TRP:CZ2	4:A:325:M7G:N7	0.53	2.77	2	4
1:A:96:PHE:HB3	1:A:151:GLY:CA	0.53	2.33	3	7
1:A:137:VAL:O	1:A:141:THR:CG2	0.53	2.57	6	2
1:A:131:LEU:CD1	1:A:132:CYS:N	0.53	2.65	4	3
1:A:193:HIS:N	1:A:213:LEU:OXT	0.53	2.42	11	5
1:A:173:GLU:CB	1:A:174:PRO:HD3	0.53	2.34	1	5
1:A:118:GLN:O	1:A:193:HIS:CD2	0.53	2.61	8	2
1:A:41:THR:O	1:A:69:GLN:CG	0.53	2.57	5	1
1:A:33:PHE:CE1	2:B:240:ILE:HB	0.53	2.39	5	2
1:A:79:GLN:OE1	2:B:291:ASN:N	0.53	2.42	10	1
1:A:92:ASP:OD2	1:A:155:SER:CB	0.53	2.56	3	1
1:A:79:GLN:OE1	2:B:287:LYS:CG	0.52	2.57	2	2
1:A:97:ARG:O	1:A:99:ASP:N	0.52	2.42	5	4
1:A:45:LEU:HG	1:A:65:VAL:CG2	0.52	2.34	4	6
1:A:144:GLU:O	1:A:145:ASP:CB	0.52	2.57	9	1
1:A:142:ILE:CG2	2:B:273:HIS:HB3	0.52	2.35	8	1
1:A:84:PRO:O	1:A:156:ILE:CD1	0.52	2.56	8	1
1:A:108:ALA:O	1:A:199:HIS:CB	0.52	2.56	3	2
1:A:165:LEU:C	1:A:165:LEU:HD12	0.52	2.24	5	2
1:A:194:LEU:CB	1:A:213:LEU:HD13	0.52	2.34	4	1
1:A:70:THR:CG2	1:A:73:GLU:OE2	0.52	2.57	4	1
1:A:137:VAL:CG2	1:A:146:ASP:OD2	0.52	2.57	6	1
2:B:252:ASP:OD1	2:B:253:VAL:HG22	0.52	2.04	1	2
1:A:71:VAL:HG13	2:B:286:PHE:CD2	0.52	2.38	4	3
1:A:143:ASP:OD2	2:B:277:THR:HG21	0.52	2.04	9	1
2:B:294:ALA:CB	2:B:298:TRP:HB2	0.52	2.34	8	4
1:A:67:SER:C	1:A:68:PHE:CG	0.52	2.82	5	1
1:A:77:ILE:HD13	2:B:298:TRP:CZ2	0.52	2.38	5	1
2:B:306:ILE:HD13	2:B:306:ILE:C	0.52	2.24	7	1
1:A:104:TRP:HA	1:A:166:TRP:CH2	0.52	2.39	7	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:250:ILE:HG13	2:B:256:PHE:CD2	0.52	2.39	6	1
2:B:271:LYS:CE	2:B:274:VAL:HG23	0.52	2.34	6	1
1:A:40:ASN:HB3	2:B:276:TYR:CD2	0.52	2.39	6	1
1:A:82:PRO:O	1:A:86:GLU:CB	0.52	2.57	1	4
1:A:147:SER:O	1:A:149:ILE:N	0.52	2.42	7	6
1:A:115:TRP:CH2	1:A:175:LEU:CD2	0.52	2.91	10	2
1:A:89:LEU:HD23	1:A:156:ILE:HG21	0.52	1.81	1	1
1:A:50:PRO:CA	1:A:61:LEU:HD13	0.52	2.30	4	2
1:A:24:LYS:O	1:A:35:VAL:HG12	0.52	2.04	10	1
2:B:269:TYR:CG	2:B:274:VAL:CG2	0.52	2.91	10	1
1:A:137:VAL:HG11	1:A:152:VAL:HG13	0.52	1.81	7	1
1:A:146:ASP:OD2	1:A:149:ILE:CD1	0.52	2.58	7	1
1:A:36:LYS:O	2:B:250:ILE:HB	0.52	2.04	7	7
1:A:102:PRO:CB	1:A:106:ASP:HB2	0.52	2.34	5	6
1:A:127:ASP:O	1:A:131:LEU:HB3	0.52	2.05	6	3
2:B:248:THR:C	2:B:306:ILE:HD13	0.52	2.24	6	1
1:A:196:PHE:O	1:A:210:SER:CA	0.52	2.57	8	2
2:B:269:TYR:CD1	2:B:269:TYR:C	0.52	2.83	8	1
1:A:182:PHE:O	1:A:186:LEU:CD2	0.52	2.57	4	1
2:B:275:LYS:CB	2:B:276:TYR:CE1	0.52	2.92	7	1
1:A:157:ARG:O	1:A:160:GLY:N	0.52	2.42	2	1
1:A:57:SER:O	1:A:60:ASP:N	0.52	2.40	6	11
1:A:83:GLU:OE1	1:A:154:LEU:CD1	0.52	2.58	6	1
1:A:26:VAL:HG21	2:B:286:PHE:CE2	0.52	2.40	6	1
1:A:45:LEU:N	1:A:66:THR:O	0.52	2.42	6	4
1:A:96:PHE:HE2	1:A:153:VAL:HG23	0.52	1.65	6	1
1:A:41:THR:O	1:A:69:GLN:NE2	0.52	2.43	8	5
1:A:93:TYR:O	1:A:93:TYR:CD1	0.52	2.63	1	1
1:A:129:LEU:HB2	1:A:185:VAL:HG12	0.52	1.82	5	1
1:A:200:CYS:O	1:A:201:SER:CB	0.52	2.57	5	1
1:A:40:ASN:ND2	1:A:40:ASN:O	0.52	2.43	5	3
1:A:36:LYS:HB2	2:B:306:ILE:CG2	0.52	2.35	6	2
1:A:36:LYS:O	2:B:250:ILE:CD1	0.52	2.53	11	3
1:A:108:ALA:HB2	1:A:111:LYS:NZ	0.52	2.19	9	1
2:B:295:ASP:OD1	2:B:296:ALA:N	0.52	2.43	8	1
1:A:133:THR:HB	1:A:182:PHE:CE2	0.52	2.40	4	1
1:A:182:PHE:O	1:A:186:LEU:HD21	0.52	2.04	4	1
1:A:47:TYR:O	1:A:62:LEU:CD2	0.52	2.58	10	2
1:A:25:THR:HG1	1:A:27:LEU:HD22	0.52	1.65	10	1
1:A:169:CYS:O	1:A:171:ASP:N	0.52	2.43	4	6
1:A:29:ASP:O	1:A:30:SER:CB	0.52	2.58	1	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:119:LEU:CB	1:A:161:ASN:OD1	0.52	2.58	7	2
1:A:175:LEU:O	1:A:178:ILE:N	0.52	2.43	11	5
1:A:35:VAL:CG1	2:B:250:ILE:CD1	0.52	2.79	1	5
1:A:102:PRO:CB	1:A:106:ASP:HB3	0.52	2.33	3	4
1:A:132:CYS:SG	2:B:280:PRO:CB	0.52	2.98	5	1
1:A:46:TRP:CZ2	1:A:96:PHE:CZ	0.52	2.97	5	1
1:A:104:TRP:NE1	1:A:202:ALA:O	0.52	2.43	4	1
1:A:26:VAL:HG11	2:B:286:PHE:CG	0.52	2.39	4	1
1:A:57:SER:OG	1:A:60:ASP:N	0.52	2.42	10	1
1:A:126:ILE:O	1:A:185:VAL:CG1	0.52	2.57	7	1
1:A:140:GLU:OE2	2:B:280:PRO:N	0.52	2.43	2	1
2:B:258:TYR:CD1	2:B:262:ILE:HG12	0.52	2.40	2	2
2:B:237:VAL:CG1	2:B:294:ALA:O	0.52	2.57	2	3
1:A:153:VAL:N	1:A:164:ALA:O	0.52	2.43	10	4
1:A:38:PRO:HG3	2:B:250:ILE:HG23	0.52	1.80	8	5
1:A:193:HIS:N	1:A:213:LEU:O	0.52	2.43	9	3
1:A:84:PRO:N	1:A:127:ASP:OD2	0.52	2.43	6	1
1:A:27:LEU:O	2:B:289:LYS:CE	0.52	2.58	6	1
1:A:70:THR:HG21	2:B:305:LYS:HD3	0.52	1.82	6	1
1:A:103:GLU:HB2	4:A:325:M7G:O6	0.52	2.04	1	3
1:A:143:ASP:OD1	1:A:144:GLU:N	0.52	2.43	9	1
1:A:65:VAL:CG1	2:B:295:ASP:O	0.52	2.58	9	1
2:B:287:LYS:O	2:B:290:LEU:N	0.52	2.43	2	3
2:B:258:TYR:HB2	2:B:262:ILE:HD13	0.52	1.80	6	3
1:A:75:TRP:O	1:A:79:GLN:N	0.52	2.43	3	5
1:A:111:LYS:HE2	1:A:166:TRP:CG	0.52	2.40	1	1
1:A:107:GLU:O	1:A:110:ALA:N	0.52	2.43	10	3
1:A:96:PHE:O	1:A:97:ARG:HB2	0.52	2.04	10	4
2:B:268:LYS:HD2	2:B:279:GLY:N	0.52	2.20	9	3
1:A:135:LEU:CD2	1:A:135:LEU:C	0.52	2.75	8	2
1:A:83:GLU:O	1:A:87:LEU:CD2	0.52	2.57	8	1
1:A:71:VAL:CG2	2:B:283:LEU:HD23	0.52	2.35	5	1
1:A:137:VAL:CG2	1:A:146:ASP:CB	0.52	2.88	4	1
2:B:237:VAL:HG12	2:B:241:LEU:CD1	0.52	2.35	4	1
1:A:106:ASP:OD1	1:A:109:ASN:ND2	0.52	2.43	7	2
1:A:41:THR:O	1:A:69:GLN:HB3	0.52	2.05	2	5
1:A:70:THR:O	1:A:71:VAL:CB	0.52	2.58	2	2
1:A:27:LEU:CD1	1:A:27:LEU:N	0.52	2.72	6	2
1:A:104:TRP:HA	1:A:108:ALA:HB2	0.52	1.80	11	1
1:A:141:THR:O	1:A:142:ILE:CB	0.52	2.58	11	1
1:A:176:LEU:CD1	1:A:176:LEU:N	0.52	2.73	9	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:OE1	0.52	2.57	9	1
1:A:45:LEU:HD23	1:A:66:THR:OG1	0.52	2.04	8	2
2:B:258:TYR:CD2	2:B:262:ILE:HD13	0.52	2.40	8	1
1:A:40:ASN:ND2	1:A:142:ILE:CG1	0.52	2.73	5	1
1:A:112:GLY:O	1:A:199:HIS:ND1	0.52	2.43	10	1
1:A:142:ILE:O	1:A:144:GLU:N	0.52	2.42	10	1
1:A:163:PHE:HZ	1:A:186:LEU:HD22	0.52	1.64	10	1
1:A:142:ILE:HD11	2:B:274:VAL:HG21	0.51	1.81	6	1
2:B:244:LEU:O	2:B:247:ALA:N	0.51	2.43	11	3
2:B:262:ILE:O	2:B:263:GLU:CB	0.51	2.57	5	3
1:A:33:PHE:CE1	2:B:240:ILE:HG23	0.51	2.40	3	2
1:A:156:ILE:HD13	1:A:161:ASN:HB3	0.51	1.81	5	2
1:A:74:PHE:CE2	1:A:78:ILE:CD1	0.51	2.93	5	1
1:A:130:TRP:HA	1:A:185:VAL:HG11	0.51	1.82	2	1
2:B:268:LYS:CE	2:B:271:LYS:CG	0.51	2.89	2	1
1:A:199:HIS:CG	1:A:200:CYS:N	0.51	2.78	1	3
1:A:151:GLY:O	1:A:166:TRP:N	0.51	2.44	5	5
1:A:95:VAL:O	1:A:96:PHE:CB	0.51	2.58	10	1
1:A:44:THR:OG1	1:A:97:ARG:NE	0.51	2.43	10	1
1:A:171:ASP:OD1	1:A:171:ASP:N	0.51	2.43	2	3
1:A:176:LEU:HD13	1:A:176:LEU:N	0.51	2.20	2	1
2:B:258:TYR:CE1	2:B:263:GLU:HA	0.51	2.41	2	3
1:A:172:LYS:O	1:A:175:LEU:N	0.51	2.43	11	4
1:A:93:TYR:O	1:A:154:LEU:N	0.51	2.43	1	5
1:A:29:ASP:OD1	1:A:33:PHE:CE2	0.51	2.63	6	1
2:B:241:LEU:HD11	2:B:298:TRP:CG	0.51	2.39	6	1
2:B:258:TYR:HB2	2:B:262:ILE:CD1	0.51	2.35	8	7
1:A:104:TRP:CH2	4:A:325:M7G:H81	0.51	2.41	11	1
2:B:306:ILE:HD11	2:B:308:ILE:CG1	0.51	2.32	11	1
1:A:39:LEU:CD1	2:B:276:TYR:O	0.51	2.58	3	3
1:A:92:ASP:OD1	1:A:92:ASP:N	0.51	2.43	8	2
1:A:143:ASP:O	1:A:145:ASP:N	0.51	2.43	5	3
2:B:266:ASP:O	2:B:267:ILE:C	0.51	2.48	1	10
1:A:146:ASP:OD1	1:A:149:ILE:HD13	0.51	2.05	6	1
1:A:36:LYS:CD	1:A:72:GLU:OE2	0.51	2.59	6	1
1:A:45:LEU:O	1:A:65:VAL:C	0.51	2.49	9	4
1:A:79:GLN:OE1	2:B:290:LEU:CB	0.51	2.57	1	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:138:ILE:CD1	0.51	2.91	5	3
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:138:ILE:HD11	0.51	2.40	8	1
1:A:74:PHE:CE1	1:A:78:ILE:CG2	0.51	2.93	8	1
1:A:117:PHE:CD2	1:A:186:LEU:CD1	0.51	2.93	4	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:TRP:CZ2	1:A:62:LEU:HG	0.51	2.40	3	1
1:A:39:LEU:HD11	2:B:278:TYR:CE2	0.51	2.41	2	1
1:A:127:ASP:HA	1:A:130:TRP:CZ3	0.51	2.41	6	3
1:A:131:LEU:HD13	1:A:131:LEU:C	0.51	2.23	10	3
1:A:108:ALA:CB	1:A:111:LYS:NZ	0.51	2.70	8	4
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:182:PHE:CE1	0.51	2.97	8	1
1:A:81:ILE:HG13	1:A:82:PRO:CD	0.51	2.35	8	1
2:B:269:TYR:HD2	2:B:274:VAL:HG21	0.51	1.66	8	1
2:B:274:VAL:O	2:B:275:LYS:CG	0.51	2.59	10	1
2:B:258:TYR:CE1	2:B:264:GLY:N	0.51	2.79	3	1
2:B:269:TYR:HA	2:B:274:VAL:HG23	0.51	1.83	2	1
1:A:34:ASP:HA	2:B:247:ALA:CB	0.51	2.35	8	8
1:A:102:PRO:C	1:A:103:GLU:CG	0.51	2.78	6	1
1:A:29:ASP:OD2	1:A:30:SER:N	0.51	2.43	11	1
1:A:117:PHE:HB3	1:A:186:LEU:CD2	0.51	2.36	1	1
2:B:240:ILE:CG1	2:B:241:LEU:N	0.51	2.73	5	2
1:A:73:GLU:OE2	2:B:298:TRP:CZ2	0.51	2.63	7	1
1:A:188:LEU:HD22	1:A:193:HIS:HE1	0.51	1.66	3	1
1:A:36:LYS:HB2	2:B:306:ILE:HG22	0.51	1.82	3	1
1:A:36:LYS:O	2:B:250:ILE:CB	0.51	2.59	8	6
1:A:137:VAL:HG12	1:A:138:ILE:HG23	0.51	1.82	4	3
1:A:193:HIS:O	1:A:194:LEU:CB	0.51	2.59	8	3
1:A:130:TRP:CD1	1:A:130:TRP:O	0.51	2.64	1	1
1:A:141:THR:O	1:A:144:GLU:N	0.51	2.44	9	1
1:A:152:VAL:HG12	1:A:165:LEU:HA	0.51	1.82	8	1
1:A:87:LEU:CD2	1:A:87:LEU:O	0.51	2.57	8	1
1:A:117:PHE:CD1	1:A:194:LEU:HD12	0.51	2.41	4	1
1:A:87:LEU:CB	1:A:88:PRO:CD	0.51	2.88	11	4
1:A:95:VAL:C	1:A:96:PHE:CD1	0.51	2.84	4	3
2:B:240:ILE:HD12	2:B:241:LEU:HD23	0.51	1.82	1	1
1:A:196:PHE:CG	1:A:211:ILE:HG13	0.51	2.41	10	3
1:A:25:THR:HG21	2:B:256:PHE:CD1	0.51	2.41	9	1
1:A:93:TYR:C	1:A:94:HIS:CG	0.51	2.84	4	2
1:A:135:LEU:HD21	2:B:280:PRO:CB	0.51	2.36	5	1
2:B:273:HIS:O	2:B:274:VAL:O	0.51	2.29	10	1
2:B:275:LYS:HB2	2:B:276:TYR:CE1	0.51	2.41	7	1
1:A:136:ALA:O	1:A:140:GLU:N	0.51	2.42	7	4
1:A:81:ILE:N	1:A:82:PRO:CD	0.51	2.73	1	7
1:A:141:THR:O	1:A:142:ILE:C	0.51	2.49	6	7
1:A:33:PHE:CZ	2:B:240:ILE:HB	0.51	2.41	5	4
1:A:108:ALA:O	1:A:112:GLY:N	0.51	2.42	9	2

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:THR:OG1	1:A:58:TRP:CZ3	0.51	2.63	8	1
1:A:91:SER:OG	1:A:92:ASP:N	0.51	2.44	8	1
1:A:130:TRP:CE2	1:A:163:PHE:CD2	0.51	2.98	5	1
1:A:196:PHE:CE1	1:A:213:LEU:CD1	0.51	2.94	6	3
1:A:68:PHE:CZ	2:B:302:THR:CB	0.51	2.94	6	2
1:A:141:THR:OG1	1:A:142:ILE:N	0.51	2.44	11	1
1:A:101:ARG:HH11	1:A:110:ALA:HB2	0.51	1.65	8	1
1:A:198:PRO:O	1:A:200:CYS:N	0.51	2.43	8	2
1:A:26:VAL:CG1	1:A:27:LEU:HD23	0.51	2.36	4	1
1:A:140:GLU:OE1	1:A:145:ASP:CB	0.51	2.58	3	1
1:A:196:PHE:CD2	1:A:211:ILE:HG13	0.50	2.41	2	2
1:A:65:VAL:O	1:A:66:THR:C	0.50	2.49	5	7
2:B:299:VAL:O	2:B:302:THR:OG1	0.50	2.29	9	6
1:A:103:GLU:HA	1:A:107:GLU:HB2	0.50	1.82	11	1
1:A:103:GLU:HB3	4:A:325:M7G:O6	0.50	2.06	9	3
1:A:29:ASP:OD1	1:A:30:SER:N	0.50	2.42	10	2
1:A:138:ILE:CD1	1:A:138:ILE:C	0.50	2.78	2	4
1:A:168:LYS:NZ	3:A:322:MTN:H71	0.50	2.21	2	1
1:A:38:PRO:HD3	2:B:250:ILE:HD13	0.50	1.83	5	5
1:A:45:LEU:HB3	1:A:66:THR:O	0.50	2.05	7	5
1:A:115:TRP:O	1:A:165:LEU:N	0.50	2.44	11	4
1:A:58:TRP:NE1	1:A:62:LEU:HD12	0.50	2.19	4	2
1:A:101:ARG:CB	1:A:106:ASP:CG	0.50	2.79	11	1
1:A:179:GLY:O	1:A:194:LEU:HD11	0.50	2.06	11	1
2:B:268:LYS:HG2	2:B:271:LYS:CG	0.50	2.36	1	1
1:A:141:THR:HG23	1:A:142:ILE:N	0.50	2.21	9	1
1:A:36:LYS:HD2	2:B:306:ILE:HG22	0.50	1.80	9	1
1:A:183:LYS:CD	1:A:188:LEU:HD11	0.50	2.36	8	1
2:B:237:VAL:CG2	2:B:294:ALA:O	0.50	2.59	2	2
1:A:106:ASP:O	1:A:109:ASN:HB2	0.50	2.06	10	7
1:A:116:SER:O	1:A:195:GLU:N	0.50	2.43	8	9
1:A:100:VAL:CG2	1:A:107:GLU:O	0.50	2.59	6	1
1:A:172:LYS:HA	1:A:175:LEU:CD1	0.50	2.37	8	7
1:A:87:LEU:CD1	1:A:91:SER:HB2	0.50	2.37	11	3
1:A:47:TYR:CZ	1:A:63:ARG:HB3	0.50	2.40	1	1
1:A:38:PRO:O	1:A:39:LEU:CD2	0.50	2.58	9	1
1:A:119:LEU:HD11	1:A:186:LEU:HB3	0.50	1.83	8	1
1:A:84:PRO:HA	1:A:156:ILE:CD1	0.50	2.37	8	1
1:A:135:LEU:HD11	2:B:283:LEU:HB2	0.50	1.82	5	1
1:A:33:PHE:CE2	2:B:240:ILE:HB	0.50	2.41	8	4
1:A:148:GLN:CB	1:A:170:GLU:HB2	0.50	2.35	6	1

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:HD23	0.50	2.22	11	2
2:B:263:GLU:O	2:B:265:PRO:CD	0.50	2.60	11	1
1:A:99:ASP:O	1:A:100:VAL:O	0.50	2.30	8	2
1:A:111:LYS:HE2	1:A:166:TRP:CD2	0.50	2.41	1	1
2:B:257:ASN:N	2:B:257:ASN:OD1	0.50	2.43	3	2
1:A:112:GLY:HA2	1:A:199:HIS:CD2	0.50	2.41	9	3
1:A:101:ARG:HD3	1:A:110:ALA:HB2	0.50	1.83	8	1
2:B:298:TRP:CE3	2:B:298:TRP:O	0.50	2.64	10	2
1:A:107:GLU:O	1:A:111:LYS:N	0.50	2.40	7	2
1:A:43:TRP:HA	1:A:97:ARG:HB2	0.50	1.82	3	2
1:A:183:LYS:HG3	1:A:193:HIS:CE1	0.50	2.42	3	1
1:A:58:TRP:CD2	4:A:325:M7G:C8	0.50	2.94	3	1
1:A:196:PHE:CD2	1:A:211:ILE:HD12	0.50	2.42	2	1
1:A:101:ARG:HA	1:A:107:GLU:OE2	0.50	2.07	3	6
1:A:26:VAL:HG23	2:B:286:PHE:CZ	0.50	2.41	6	1
1:A:131:LEU:HD13	1:A:132:CYS:CA	0.50	2.36	4	3
1:A:37:HIS:HB3	2:B:278:TYR:CE2	0.50	2.40	3	2
1:A:87:LEU:HD22	1:A:88:PRO:O	0.50	2.06	1	1
1:A:82:PRO:O	1:A:83:GLU:O	0.50	2.30	3	2
1:A:188:LEU:HD13	1:A:193:HIS:HB2	0.50	1.82	8	1
1:A:96:PHE:CE1	1:A:166:TRP:CZ3	0.50	3.00	5	1
1:A:117:PHE:HB2	1:A:163:PHE:CE2	0.50	2.42	7	2
1:A:38:PRO:C	1:A:39:LEU:CD2	0.50	2.79	7	1
1:A:80:ASN:N	1:A:80:ASN:ND2	0.50	2.58	3	1
1:A:104:TRP:CA	1:A:166:TRP:CH2	0.50	2.95	4	6
1:A:148:GLN:O	1:A:149:ILE:O	0.50	2.30	8	5
2:B:278:TYR:HB3	2:B:282:PHE:CD1	0.50	2.42	3	3
2:B:254:PHE:CE1	2:B:268:LYS:HB2	0.50	2.42	11	1
2:B:252:ASP:C	2:B:256:PHE:CD1	0.50	2.85	11	1
2:B:240:ILE:HD11	2:B:292:VAL:CG1	0.50	2.36	11	1
1:A:108:ALA:HA	1:A:111:LYS:CG	0.50	2.36	7	4
1:A:126:ILE:CG2	1:A:186:LEU:HA	0.50	2.36	5	2
1:A:134:LEU:O	1:A:138:ILE:CG2	0.50	2.55	10	1
1:A:34:ASP:OD1	1:A:34:ASP:N	0.50	2.45	6	2
2:B:264:GLY:HA2	2:B:267:ILE:CD1	0.50	2.35	6	2
1:A:26:VAL:CG1	2:B:290:LEU:HD23	0.50	2.36	6	1
2:B:277:THR:CG2	2:B:277:THR:O	0.50	2.59	9	2
1:A:46:TRP:CZ3	1:A:96:PHE:CZ	0.50	3.00	9	2
2:B:269:TYR:C	2:B:269:TYR:CD1	0.50	2.85	9	1
2:B:258:TYR:CE2	2:B:282:PHE:CE1	0.50	2.99	8	1
1:A:92:ASP:OD1	1:A:94:HIS:NE2	0.50	2.45	2	1

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:257:ASN:ND2	2:B:263:GLU:OE2	0.50	2.45	2	1
1:A:111:LYS:O	1:A:168:LYS:C	0.50	2.50	11	4
1:A:69:GLN:HG2	2:B:307:VAL:HG11	0.50	1.82	11	1
1:A:66:THR:HG22	1:A:66:THR:O	0.50	2.07	1	1
1:A:83:GLU:CB	1:A:84:PRO:HD2	0.50	2.35	1	1
1:A:89:LEU:HD11	1:A:156:ILE:HG21	0.50	1.82	8	1
1:A:142:ILE:CB	2:B:274:VAL:HG22	0.50	2.37	4	1
1:A:38:PRO:HB2	2:B:308:ILE:HG23	0.50	1.83	10	1
1:A:70:THR:C	1:A:71:VAL:HG12	0.50	2.28	2	2
2:B:252:ASP:O	2:B:255:SER:HB2	0.50	2.07	4	9
1:A:105:GLU:HB2	4:A:325:M7G:N1	0.50	2.22	6	1
1:A:94:HIS:HB3	1:A:96:PHE:CE1	0.50	2.41	8	3
2:B:263:GLU:O	2:B:265:PRO:N	0.50	2.45	11	1
1:A:130:TRP:CD1	1:A:134:LEU:HG	0.50	2.41	1	3
1:A:179:GLY:C	1:A:194:LEU:HD21	0.50	2.27	9	1
2:B:237:VAL:HG21	2:B:298:TRP:HB2	0.50	1.84	8	1
1:A:40:ASN:OD1	1:A:141:THR:CG2	0.50	2.59	4	1
1:A:39:LEU:HD13	1:A:70:THR:HA	0.49	1.82	2	1
1:A:40:ASN:HB3	2:B:276:TYR:CG	0.49	2.41	10	2
2:B:244:LEU:HD11	2:B:298:TRP:CH2	0.49	2.42	11	1
1:A:156:ILE:CG2	1:A:157:ARG:N	0.49	2.75	8	3
1:A:78:ILE:O	1:A:80:ASN:N	0.49	2.45	7	2
2:B:268:LYS:CG	2:B:271:LYS:HG2	0.49	2.37	1	1
1:A:75:TRP:CE3	1:A:75:TRP:HA	0.49	2.42	5	4
1:A:183:LYS:HG3	1:A:188:LEU:CD2	0.49	2.37	5	2
1:A:194:LEU:HB2	1:A:213:LEU:HD13	0.49	1.84	4	1
1:A:44:THR:HG23	1:A:97:ARG:NE	0.49	2.21	7	1
2:B:250:ILE:O	2:B:308:ILE:CG2	0.49	2.57	9	3
1:A:71:VAL:HB	2:B:283:LEU:CD2	0.49	2.37	6	1
1:A:94:HIS:HB3	1:A:96:PHE:CZ	0.49	2.43	6	3
2:B:298:TRP:CH2	2:B:305:LYS:CE	0.49	2.95	6	1
1:A:96:PHE:HB3	1:A:151:GLY:HA3	0.49	1.83	10	4
3:A:320:MTN:S1	3:A:320:MTN:C7	0.49	3.00	9	1
1:A:26:VAL:CG1	2:B:289:LYS:HB2	0.49	2.37	10	1
1:A:37:HIS:CE1	2:B:286:PHE:CE1	0.49	3.00	2	1
2:B:271:LYS:CB	2:B:277:THR:HG21	0.49	2.36	2	1
2:B:240:ILE:HG13	2:B:241:LEU:N	0.49	2.23	8	7
1:A:111:LYS:HD2	1:A:166:TRP:CB	0.49	2.37	11	2
2:B:248:THR:CB	2:B:306:ILE:HG21	0.49	2.37	11	1
1:A:75:TRP:CZ3	2:B:287:LYS:HB2	0.49	2.42	9	3
1:A:111:LYS:HE2	1:A:166:TRP:CE2	0.49	2.42	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:GLY:O	1:A:113:GLY:O	0.49	2.30	5	1
2:B:253:VAL:HG23	2:B:254:PHE:H	0.49	1.66	3	4
1:A:161:ASN:N	1:A:161:ASN:OD1	0.49	2.46	2	2
2:B:258:TYR:CD1	2:B:262:ILE:CD1	0.49	2.96	2	1
1:A:102:PRO:HB2	1:A:106:ASP:HB2	0.49	1.85	4	4
1:A:46:TRP:CH2	1:A:107:GLU:OE2	0.49	2.65	11	1
1:A:130:TRP:CH2	1:A:154:LEU:CD1	0.49	2.94	1	4
1:A:38:PRO:HB3	2:B:307:VAL:CG1	0.49	2.34	1	1
1:A:46:TRP:CD1	1:A:64:PRO:HA	0.49	2.42	1	1
1:A:135:LEU:O	1:A:138:ILE:HG23	0.49	2.07	8	1
1:A:100:VAL:CG2	1:A:107:GLU:HA	0.49	2.36	6	1
1:A:71:VAL:CB	2:B:283:LEU:HD21	0.49	2.37	6	1
1:A:80:ASN:C	1:A:81:ILE:HG12	0.49	2.27	9	2
1:A:129:LEU:C	1:A:185:VAL:CG1	0.49	2.81	11	2
1:A:146:ASP:OD1	1:A:178:ILE:CD1	0.49	2.61	9	1
2:B:292:VAL:O	2:B:292:VAL:CG2	0.49	2.56	9	1
1:A:140:GLU:CD	2:B:268:LYS:CD	0.49	2.81	8	1
2:B:290:LEU:O	2:B:292:VAL:HG13	0.49	2.06	10	1
2:B:296:ALA:O	2:B:299:VAL:CG1	0.49	2.57	10	1
2:B:268:LYS:HD2	2:B:279:GLY:CA	0.49	2.38	7	1
1:A:59:SER:HA	1:A:62:LEU:CD1	0.49	2.38	3	1
2:B:258:TYR:CD1	2:B:263:GLU:HA	0.49	2.42	2	4
1:A:140:GLU:OE2	2:B:280:PRO:CA	0.49	2.61	2	1
1:A:40:ASN:HB3	2:B:276:TYR:CD1	0.49	2.42	1	5
1:A:171:ASP:O	1:A:175:LEU:CD1	0.49	2.61	10	3
2:B:271:LYS:HD2	2:B:272:GLU:CB	0.49	2.37	6	1
2:B:251:GLU:O	2:B:252:ASP:HB3	0.49	2.08	1	2
2:B:294:ALA:CB	2:B:298:TRP:NE1	0.49	2.75	1	1
1:A:117:PHE:CE1	1:A:163:PHE:O	0.49	2.66	8	1
2:B:241:LEU:HD23	2:B:244:LEU:CD1	0.49	2.37	8	1
1:A:115:TRP:O	1:A:117:PHE:CZ	0.49	2.66	7	1
1:A:66:THR:HG21	1:A:74:PHE:N	0.49	2.21	7	2
1:A:39:LEU:HA	2:B:276:TYR:CB	0.49	2.37	3	1
1:A:93:TYR:CE2	1:A:154:LEU:CD1	0.49	2.83	3	1
1:A:112:GLY:HA2	1:A:199:HIS:CG	0.49	2.43	2	7
1:A:79:GLN:NE2	1:A:79:GLN:HA	0.49	2.22	6	5
1:A:153:VAL:CG2	1:A:166:TRP:CZ2	0.49	2.93	6	1
1:A:111:LYS:O	1:A:168:LYS:O	0.49	2.30	6	3
2:B:281:THR:OG1	2:B:282:PHE:N	0.49	2.46	5	2
1:A:101:ARG:CB	1:A:106:ASP:C	0.49	2.81	8	1
1:A:45:LEU:HG	1:A:45:LEU:O	0.49	2.07	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:146:ASP:CG	1:A:149:ILE:HD13	0.49	2.27	7	1
1:A:117:PHE:CD1	1:A:194:LEU:HG	0.49	2.43	2	1
1:A:73:GLU:HG2	2:B:302:THR:CG2	0.49	2.37	2	3
1:A:168:LYS:O	1:A:169:CYS:HB2	0.49	2.07	7	6
1:A:101:ARG:O	1:A:107:GLU:HG2	0.49	2.07	6	3
1:A:101:ARG:CG	1:A:106:ASP:HB3	0.49	2.38	6	2
1:A:154:LEU:HB2	1:A:163:PHE:CE2	0.49	2.43	6	1
1:A:45:LEU:O	1:A:65:VAL:CA	0.49	2.60	11	6
1:A:142:ILE:HB	2:B:274:VAL:CG1	0.49	2.38	11	1
1:A:35:VAL:HG13	2:B:250:ILE:HD13	0.49	1.85	9	1
1:A:117:PHE:CE1	1:A:163:PHE:HB2	0.49	2.42	5	1
1:A:183:LYS:O	1:A:186:LEU:CG	0.49	2.61	5	1
1:A:188:LEU:HD22	1:A:193:HIS:CE1	0.49	2.43	3	1
1:A:58:TRP:CD2	4:A:325:M7G:H82	0.49	2.42	3	1
2:B:282:PHE:O	2:B:285:GLN:N	0.49	2.46	3	1
1:A:89:LEU:HA	1:A:156:ILE:CG2	0.49	2.37	11	10
1:A:91:SER:O	1:A:156:ILE:N	0.49	2.46	8	5
1:A:154:LEU:HD23	1:A:155:SER:N	0.49	2.23	5	4
1:A:108:ALA:O	1:A:199:HIS:HB2	0.49	2.08	8	3
1:A:83:GLU:O	1:A:87:LEU:CD1	0.49	2.61	1	1
3:A:321:MTN:H61	3:A:321:MTN:S1	0.49	2.48	9	1
2:B:268:LYS:O	2:B:274:VAL:CG2	0.49	2.61	9	1
1:A:69:GLN:CD	1:A:69:GLN:N	0.49	2.65	8	1
1:A:160:GLY:O	1:A:161:ASN:ND2	0.49	2.46	5	1
1:A:98:ASN:O	1:A:100:VAL:N	0.49	2.46	4	1
2:B:252:ASP:OD2	2:B:276:TYR:CE2	0.49	2.65	4	1
1:A:29:ASP:OD1	1:A:29:ASP:N	0.49	2.46	3	1
1:A:47:TYR:CZ	1:A:65:VAL:HG22	0.49	2.43	3	1
1:A:75:TRP:CE3	2:B:287:LYS:HB2	0.49	2.42	2	4
1:A:47:TYR:HE2	1:A:65:VAL:HG21	0.49	1.68	5	2
2:B:258:TYR:HB2	2:B:262:ILE:HD11	0.49	1.85	10	3
1:A:105:GLU:C	1:A:109:ASN:ND2	0.49	2.67	6	1
1:A:83:GLU:HB3	1:A:84:PRO:CD	0.49	2.38	1	1
2:B:253:VAL:HG13	2:B:278:TYR:CE1	0.49	2.43	1	3
2:B:240:ILE:CD1	2:B:292:VAL:HG21	0.49	2.38	1	1
1:A:153:VAL:CG2	1:A:166:TRP:CZ3	0.49	2.96	9	1
2:B:286:PHE:O	2:B:289:LYS:N	0.49	2.44	8	2
1:A:135:LEU:HD21	2:B:283:LEU:CB	0.49	2.38	10	2
1:A:48:THR:N	1:A:92:ASP:O	0.49	2.46	4	3
1:A:94:HIS:CD2	1:A:153:VAL:HG13	0.49	2.43	3	1
1:A:183:LYS:HG3	1:A:194:LEU:HD13	0.48	1.83	2	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:244:LEU:CD1	2:B:298:TRP:CH2	0.48	2.96	2	3
1:A:66:THR:HG21	1:A:73:GLU:HB3	0.48	1.85	6	1
1:A:75:TRP:O	1:A:79:GLN:HB2	0.48	2.08	3	2
1:A:48:THR:OG1	1:A:62:LEU:HD21	0.48	2.08	7	3
1:A:87:LEU:C	1:A:87:LEU:HD12	0.48	2.29	10	2
1:A:68:PHE:CE2	2:B:303:ALA:HA	0.48	2.43	11	3
1:A:45:LEU:C	1:A:46:TRP:CD1	0.48	2.87	10	4
1:A:58:TRP:NE1	4:A:325:M7G:N1	0.48	2.60	9	1
1:A:210:SER:C	1:A:211:ILE:CG1	0.48	2.81	5	1
1:A:39:LEU:HB2	1:A:69:GLN:CG	0.48	2.38	5	1
1:A:71:VAL:HG22	2:B:286:PHE:CD2	0.48	2.43	5	1
1:A:188:LEU:HD13	1:A:193:HIS:CD2	0.48	2.43	4	1
1:A:35:VAL:HG13	2:B:250:ILE:HB	0.48	1.83	4	1
1:A:45:LEU:HD13	1:A:74:PHE:CD1	0.48	2.43	4	1
1:A:73:GLU:HG2	1:A:74:PHE:N	0.48	2.23	10	1
1:A:78:ILE:CD1	1:A:95:VAL:HG21	0.48	2.36	3	1
1:A:173:GLU:CB	1:A:174:PRO:CD	0.48	2.91	2	5
1:A:48:THR:CG2	1:A:92:ASP:OD1	0.48	2.61	2	1
1:A:135:LEU:HG	1:A:136:ALA:N	0.48	2.23	6	2
1:A:117:PHE:N	1:A:117:PHE:CD1	0.48	2.81	5	2
1:A:135:LEU:HD13	1:A:136:ALA:CA	0.48	2.38	8	2
1:A:134:LEU:HD13	1:A:152:VAL:CG1	0.48	2.38	4	1
1:A:69:GLN:N	1:A:69:GLN:CD	0.48	2.67	7	1
1:A:110:ALA:O	1:A:111:LYS:HB2	0.48	2.08	3	1
1:A:172:LYS:HA	1:A:175:LEU:HD13	0.48	1.84	2	4
1:A:76:ALA:HB1	2:B:294:ALA:HA	0.48	1.84	2	1
1:A:103:GLU:CA	1:A:107:GLU:HG3	0.48	2.39	5	7
2:B:270:LYS:O	2:B:271:LYS:C	0.48	2.51	6	2
2:B:271:LYS:HE3	2:B:274:VAL:CG2	0.48	2.37	6	1
1:A:79:GLN:OE1	2:B:292:VAL:O	0.48	2.32	11	1
1:A:87:LEU:HD11	1:A:156:ILE:CD1	0.48	2.34	1	1
1:A:194:LEU:O	1:A:213:LEU:N	0.48	2.46	8	2
1:A:139:GLY:O	1:A:140:GLU:HB2	0.48	2.08	9	1
1:A:155:SER:N	1:A:162:LYS:O	0.48	2.46	8	5
1:A:89:LEU:H	1:A:89:LEU:HD12	0.48	1.63	8	1
1:A:131:LEU:CD2	1:A:131:LEU:C	0.48	2.79	4	1
1:A:130:TRP:CG	1:A:131:LEU:N	0.48	2.81	10	1
1:A:156:ILE:HG23	1:A:160:GLY:O	0.48	2.07	7	2
1:A:78:ILE:CD1	1:A:95:VAL:CG2	0.48	2.91	3	1
1:A:145:ASP:OD1	1:A:146:ASP:N	0.48	2.46	2	1
1:A:142:ILE:HD11	2:B:276:TYR:CD1	0.48	2.44	2	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:81:ILE:O	1:A:86:GLU:HB2	0.48	2.09	11	5
2:B:258:TYR:O	2:B:262:ILE:O	0.48	2.31	5	7
1:A:29:ASP:OD1	1:A:33:PHE:CG	0.48	2.65	6	1
1:A:58:TRP:CE2	1:A:62:LEU:HD12	0.48	2.43	6	1
1:A:199:HIS:O	1:A:200:CYS:C	0.48	2.52	11	4
1:A:79:GLN:OE1	2:B:293:LYS:HA	0.48	2.09	11	2
1:A:196:PHE:HB2	1:A:210:SER:CB	0.48	2.38	3	4
3:A:321:MTN:S1	3:A:321:MTN:C6	0.48	2.97	5	1
1:A:140:GLU:N	1:A:140:GLU:CD	0.48	2.66	4	1
1:A:135:LEU:C	1:A:135:LEU:CD2	0.48	2.76	10	1
1:A:32:HIS:O	1:A:34:ASP:N	0.48	2.46	7	1
2:B:296:ALA:HA	2:B:299:VAL:HG23	0.48	1.85	2	1
1:A:167:THR:O	1:A:168:LYS:C	0.48	2.51	7	6
1:A:35:VAL:CG2	2:B:249:PRO:O	0.48	2.61	11	1
2:B:241:LEU:CD2	2:B:301:SER:HB2	0.48	2.38	11	1
1:A:43:TRP:O	1:A:43:TRP:CE3	0.48	2.67	1	1
1:A:102:PRO:O	1:A:103:GLU:HB2	0.48	2.07	9	2
1:A:129:LEU:CB	1:A:185:VAL:HG12	0.48	2.37	5	2
1:A:26:VAL:HG23	1:A:33:PHE:CE2	0.48	2.40	5	1
1:A:75:TRP:CZ2	1:A:135:LEU:HD13	0.48	2.43	5	1
1:A:123:GLY:N	1:A:126:ILE:HD11	0.48	2.23	4	1
1:A:146:ASP:O	1:A:149:ILE:CD1	0.48	2.62	4	1
1:A:149:ILE:HG12	1:A:167:THR:HG22	0.48	1.79	7	1
2:B:240:ILE:HG21	2:B:292:VAL:HG11	0.48	1.85	7	1
1:A:101:ARG:N	1:A:107:GLU:OE2	0.48	2.46	3	1
2:B:252:ASP:CA	2:B:255:SER:HB2	0.48	2.39	4	6
1:A:48:THR:OG1	1:A:62:LEU:CD2	0.48	2.61	6	3
1:A:119:LEU:HD11	1:A:188:LEU:HB3	0.48	1.85	11	1
1:A:148:GLN:O	1:A:168:LYS:HB3	0.48	2.09	1	2
2:B:296:ALA:HA	2:B:299:VAL:HG13	0.48	1.85	10	2
1:A:37:HIS:O	1:A:70:THR:HB	0.48	2.09	3	6
1:A:197:PHE:CE2	1:A:212:THR:CG2	0.48	2.96	8	1
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:N	0.48	2.24	8	1
1:A:83:GLU:CB	1:A:84:PRO:HD3	0.48	2.38	8	1
1:A:140:GLU:OE2	2:B:278:TYR:N	0.48	2.47	8	1
1:A:127:ASP:OD1	1:A:127:ASP:N	0.48	2.44	3	1
3:A:322:MTN:H61	3:A:322:MTN:S1	0.48	2.49	3	1
1:A:133:THR:HB	1:A:182:PHE:CZ	0.48	2.44	10	2
2:B:251:GLU:O	2:B:252:ASP:HB2	0.48	2.09	5	9
1:A:111:LYS:O	1:A:168:LYS:CA	0.48	2.61	11	2
2:B:248:THR:HA	2:B:306:ILE:CG2	0.48	2.39	11	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:268:LYS:O	2:B:274:VAL:HG23	0.48	2.08	9	2
1:A:117:PHE:CG	1:A:186:LEU:HD21	0.48	2.44	1	1
1:A:95:VAL:C	1:A:96:PHE:CD2	0.48	2.87	5	1
1:A:70:THR:HG21	1:A:73:GLU:OE2	0.48	2.09	4	1
1:A:44:THR:HG23	1:A:97:ARG:CD	0.48	2.39	3	1
1:A:87:LEU:HD12	1:A:89:LEU:N	0.48	2.24	7	3
1:A:111:LYS:HB3	1:A:150:ASN:ND2	0.48	2.24	6	3
1:A:28:SER:O	1:A:29:ASP:C	0.48	2.52	6	7
1:A:43:TRP:HB2	1:A:96:PHE:O	0.48	2.08	6	1
1:A:82:PRO:HA	1:A:86:GLU:HB3	0.48	1.86	7	4
1:A:94:HIS:HB2	1:A:96:PHE:CZ	0.48	2.44	10	2
2:B:252:ASP:OD2	2:B:308:ILE:HD11	0.48	2.08	9	1
1:A:65:VAL:HG12	2:B:295:ASP:O	0.48	2.09	9	1
1:A:135:LEU:C	1:A:135:LEU:HD13	0.48	2.29	8	2
1:A:39:LEU:CB	1:A:69:GLN:O	0.48	2.62	8	1
1:A:110:ALA:O	1:A:111:LYS:HB3	0.48	2.09	5	1
1:A:96:PHE:CD2	1:A:152:VAL:O	0.48	2.66	5	1
1:A:142:ILE:O	1:A:143:ASP:C	0.48	2.52	10	1
1:A:135:LEU:HD11	2:B:280:PRO:CA	0.48	2.39	7	1
1:A:80:ASN:C	1:A:82:PRO:HD3	0.48	2.29	11	9
1:A:100:VAL:O	1:A:101:ARG:HB2	0.48	2.09	9	6
1:A:58:TRP:CE2	4:A:325:M7G:N7	0.48	2.82	3	2
1:A:193:HIS:ND1	1:A:193:HIS:N	0.48	2.61	11	1
1:A:107:GLU:O	1:A:110:ALA:CB	0.48	2.61	1	1
1:A:147:SER:O	1:A:148:GLN:CB	0.48	2.61	8	1
1:A:85:HIS:CD2	1:A:127:ASP:HB2	0.48	2.44	8	1
1:A:96:PHE:HB2	1:A:151:GLY:HA3	0.48	1.86	5	1
1:A:135:LEU:CD1	2:B:283:LEU:HB3	0.48	2.38	5	1
1:A:94:HIS:CB	1:A:153:VAL:HG22	0.48	2.38	10	1
2:B:268:LYS:CD	2:B:280:PRO:HD3	0.48	2.39	10	1
2:B:268:LYS:CD	2:B:279:GLY:HA2	0.48	2.38	7	1
1:A:101:ARG:CB	1:A:106:ASP:HB3	0.48	2.39	6	2
1:A:131:LEU:C	1:A:131:LEU:CD2	0.48	2.79	6	2
1:A:74:PHE:CZ	1:A:138:ILE:HG21	0.48	2.43	6	1
1:A:161:ASN:OD1	1:A:161:ASN:N	0.48	2.46	11	2
1:A:194:LEU:HB3	1:A:213:LEU:HD13	0.48	1.84	9	1
1:A:84:PRO:HB2	1:A:161:ASN:ND2	0.48	2.24	9	1
2:B:254:PHE:CD2	2:B:269:TYR:HB2	0.48	2.44	9	1
1:A:111:LYS:HD2	1:A:113:GLY:N	0.48	2.23	8	1
1:A:130:TRP:CE3	1:A:182:PHE:CD1	0.48	3.02	8	1
1:A:188:LEU:HD13	1:A:193:HIS:CG	0.48	2.44	4	1

Continued on next page...



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:188:LEU:CB	1:A:193:HIS:CE1	0.48	2.96	7	2
1:A:112:GLY:HA3	1:A:167:THR:O	0.48	2.08	3	1
1:A:103:GLU:N	1:A:107:GLU:HG3	0.47	2.24	2	5
1:A:142:ILE:CD1	2:B:277:THR:OG1	0.47	2.62	2	1
1:A:38:PRO:HD3	2:B:250:ILE:CD1	0.47	2.38	5	5
1:A:75:TRP:HB2	2:B:290:LEU:HD12	0.47	1.79	11	4
1:A:77:ILE:H	1:A:77:ILE:HD12	0.47	1.68	7	2
1:A:79:GLN:CG	2:B:291:ASN:HA	0.47	2.39	6	1
1:A:38:PRO:HG3	2:B:308:ILE:CG2	0.47	2.37	6	1
1:A:47:TYR:N	1:A:47:TYR:CD1	0.47	2.82	11	1
1:A:117:PHE:CD2	1:A:163:PHE:HB2	0.47	2.44	4	4
1:A:72:GLU:CA	2:B:290:LEU:HD11	0.47	2.39	1	1
1:A:79:GLN:HA	1:A:79:GLN:NE2	0.47	2.24	9	2
1:A:26:VAL:O	1:A:29:ASP:OD1	0.47	2.32	10	5
1:A:135:LEU:HD23	1:A:136:ALA:N	0.47	2.24	5	1
1:A:39:LEU:CB	1:A:69:GLN:HB2	0.47	2.39	5	1
1:A:43:TRP:CH2	1:A:138:ILE:HD12	0.47	2.44	4	1
1:A:45:LEU:HD13	1:A:74:PHE:CE1	0.47	2.44	4	1
1:A:98:ASN:O	1:A:99:ASP:C	0.47	2.53	4	1
2:B:241:LEU:HD23	2:B:301:SER:OG	0.47	2.09	4	1
1:A:168:LYS:O	1:A:169:CYS:HB3	0.47	2.09	3	2
1:A:44:THR:OG1	1:A:97:ARG:CD	0.47	2.61	10	1
1:A:50:PRO:CG	1:A:61:LEU:HD22	0.47	2.36	7	1
1:A:142:ILE:CD1	2:B:276:TYR:O	0.47	2.62	2	1
1:A:70:THR:O	1:A:71:VAL:HB	0.47	2.08	9	7
2:B:273:HIS:O	2:B:274:VAL:C	0.47	2.52	1	3
1:A:131:LEU:O	1:A:133:THR:N	0.47	2.47	1	8
2:B:298:TRP:CZ2	2:B:305:LYS:CE	0.47	2.98	6	1
1:A:102:PRO:O	1:A:103:GLU:OE1	0.47	2.32	11	1
1:A:92:ASP:OD1	4:A:325:M7G:O1A	0.47	2.33	11	1
1:A:72:GLU:C	2:B:290:LEU:HD11	0.47	2.28	1	1
1:A:79:GLN:OE1	2:B:287:LYS:O	0.47	2.32	8	2
1:A:66:THR:OG1	1:A:73:GLU:CB	0.47	2.62	7	2
1:A:101:ARG:NH1	1:A:110:ALA:HB2	0.47	2.24	8	1
1:A:199:HIS:O	1:A:202:ALA:N	0.47	2.46	4	1
1:A:66:THR:HG21	2:B:302:THR:HB	0.47	1.84	4	1
1:A:27:LEU:HD13	2:B:258:TYR:CG	0.47	2.44	7	1
1:A:27:LEU:HD21	2:B:286:PHE:CD1	0.47	2.44	2	1
2:B:241:LEU:HD21	2:B:298:TRP:N	0.47	2.24	6	1
2:B:248:THR:CB	2:B:249:PRO:CD	0.47	2.91	6	3
1:A:104:TRP:CH2	4:A:325:M7G:H2'	0.47	2.44	10	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:LEU:HD11	1:A:103:GLU:OE1	0.47	2.09	11	2
2:B:237:VAL:HG11	2:B:298:TRP:CB	0.47	2.39	11	1
1:A:82:PRO:CB	1:A:87:LEU:HB3	0.47	2.39	1	1
1:A:38:PRO:CB	2:B:307:VAL:HA	0.47	2.39	1	2
1:A:195:GLU:HB3	1:A:197:PHE:CZ	0.47	2.44	9	1
1:A:149:ILE:O	1:A:168:LYS:CB	0.47	2.62	5	1
1:A:69:GLN:O	1:A:70:THR:O	0.47	2.32	3	2
1:A:79:GLN:NE2	2:B:287:LYS:HB2	0.47	2.24	3	1
1:A:151:GLY:O	1:A:166:TRP:HB2	0.47	2.10	11	7
1:A:77:ILE:HD12	1:A:77:ILE:H	0.47	1.70	11	1
1:A:39:LEU:C	2:B:276:TYR:CB	0.47	2.83	11	1
2:B:237:VAL:CG1	2:B:297:GLU:HB2	0.47	2.40	1	1
1:A:58:TRP:CH2	4:A:325:M7G:CM7	0.47	2.97	9	1
1:A:93:TYR:CD2	1:A:154:LEU:CD2	0.47	2.93	9	1
2:B:250:ILE:HD11	2:B:256:PHE:CG	0.47	2.45	9	1
1:A:110:ALA:O	1:A:111:LYS:CG	0.47	2.61	3	2
1:A:105:GLU:HB2	4:A:325:M7G:C6	0.47	2.39	4	1
2:B:250:ILE:HG22	2:B:306:ILE:HD13	0.47	1.85	4	1
1:A:194:LEU:CD2	1:A:196:PHE:CZ	0.47	2.98	10	1
1:A:130:TRP:CD2	1:A:163:PHE:CG	0.47	3.03	7	1
1:A:65:VAL:HB	2:B:299:VAL:HG21	0.47	1.85	2	1
1:A:48:THR:CG2	1:A:62:LEU:HG	0.47	2.39	7	6
2:B:282:PHE:HA	2:B:285:GLN:NE2	0.47	2.25	3	10
1:A:74:PHE:O	1:A:78:ILE:HG12	0.47	2.10	6	5
1:A:126:ILE:CD1	1:A:127:ASP:OD1	0.47	2.62	6	1
1:A:140:GLU:CD	1:A:140:GLU:N	0.47	2.67	6	1
2:B:251:GLU:CB	2:B:255:SER:HB3	0.47	2.40	4	4
1:A:117:PHE:CE2	1:A:163:PHE:HB2	0.47	2.44	4	2
1:A:108:ALA:HA	1:A:111:LYS:HG3	0.47	1.86	9	1
1:A:188:LEU:HD22	1:A:193:HIS:HB2	0.47	1.86	8	1
1:A:104:TRP:CG	4:A:325:M7G:HM72	0.47	2.44	4	1
1:A:33:PHE:CD1	2:B:244:LEU:CD1	0.47	2.97	10	1
1:A:173:GLU:N	1:A:174:PRO:HD2	0.47	2.25	11	5
1:A:111:LYS:CD	1:A:166:TRP:HB3	0.47	2.40	6	2
1:A:97:ARG:CZ	1:A:141:THR:HG21	0.47	2.39	6	1
1:A:66:THR:OG1	1:A:73:GLU:CG	0.47	2.62	1	1
1:A:143:ASP:HB2	2:B:274:VAL:HG21	0.47	1.85	9	1
2:B:292:VAL:O	2:B:293:LYS:C	0.47	2.53	9	1
1:A:40:ASN:ND2	1:A:142:ILE:HD11	0.47	2.25	5	1
1:A:113:GLY:O	1:A:166:TRP:HA	0.47	2.09	5	1
1:A:104:TRP:CD2	1:A:104:TRP:C	0.47	2.87	4	1

Continued on next page...



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:123:GLY:CA	1:A:126:ILE:CD1	0.47	2.92	4	1
1:A:87:LEU:CD1	1:A:91:SER:OG	0.47	2.63	4	1
1:A:26:VAL:HG12	2:B:286:PHE:CD1	0.47	2.43	4	1
1:A:142:ILE:O	1:A:143:ASP:HB3	0.47	2.10	7	1
2:B:240:ILE:HG21	2:B:292:VAL:CG1	0.47	2.40	7	1
1:A:48:THR:OG1	1:A:92:ASP:HB3	0.47	2.10	3	1
1:A:46:TRP:CZ2	1:A:101:ARG:O	0.47	2.68	2	1
1:A:111:LYS:HE3	1:A:113:GLY:N	0.47	2.25	2	1
1:A:58:TRP:CD2	1:A:62:LEU:CD1	0.47	2.98	2	1
1:A:92:ASP:OD1	1:A:94:HIS:CE1	0.47	2.67	2	1
2:B:290:LEU:O	2:B:291:ASN:C	0.47	2.52	2	5
1:A:175:LEU:C	1:A:177:ARG:N	0.47	2.68	10	9
2:B:253:VAL:CA	2:B:256:PHE:CE1	0.47	2.97	11	3
1:A:61:LEU:O	1:A:62:LEU:C	0.47	2.53	11	10
1:A:184:GLN:O	1:A:187:LYS:N	0.47	2.39	4	7
1:A:153:VAL:O	1:A:163:PHE:CE1	0.47	2.68	6	1
1:A:73:GLU:HG3	2:B:302:THR:CG2	0.47	2.39	6	2
2:B:259:PRO:O	2:B:260:GLU:O	0.47	2.33	6	1
2:B:278:TYR:O	2:B:279:GLY:C	0.47	2.53	10	2
2:B:254:PHE:CD1	2:B:268:LYS:HB2	0.47	2.44	11	1
1:A:46:TRP:HA	1:A:65:VAL:HG23	0.47	1.87	4	2
1:A:183:LYS:CD	1:A:188:LEU:HD21	0.47	2.39	1	1
1:A:129:LEU:HB3	1:A:185:VAL:CG1	0.47	2.39	9	2
1:A:118:GLN:O	1:A:193:HIS:CG	0.47	2.68	9	2
2:B:252:ASP:HB2	2:B:255:SER:CB	0.47	2.40	9	1
1:A:101:ARG:O	1:A:107:GLU:OE2	0.47	2.33	8	3
1:A:150:ASN:OD1	1:A:166:TRP:HB3	0.47	2.10	8	1
1:A:77:ILE:O	1:A:80:ASN:OD1	0.47	2.32	8	1
1:A:79:GLN:NE2	2:B:287:LYS:HG3	0.47	2.25	5	1
2:B:237:VAL:HG13	2:B:240:ILE:HD11	0.47	1.85	4	1
1:A:26:VAL:HG22	1:A:33:PHE:CD2	0.47	2.45	10	1
1:A:68:PHE:CD1	2:B:305:LYS:CB	0.47	2.98	10	1
1:A:40:ASN:CB	2:B:276:TYR:CD1	0.47	2.97	3	1
1:A:126:ILE:CG2	1:A:186:LEU:O	0.47	2.63	3	1
2:B:304:SER:O	2:B:305:LYS:C	0.47	2.53	8	10
1:A:67:SER:O	1:A:68:PHE:CD2	0.47	2.68	9	1
1:A:89:LEU:O	1:A:90:LYS:HB3	0.47	2.10	8	1
1:A:113:GLY:CA	1:A:199:HIS:HB3	0.47	2.40	5	1
1:A:126:ILE:HG23	1:A:186:LEU:CA	0.47	2.38	5	1
2:B:280:PRO:O	2:B:284:LEU:N	0.47	2.48	4	1
1:A:26:VAL:CG2	2:B:289:LYS:CB	0.47	2.92	7	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:LEU:CD2	1:A:62:LEU:C	0.47	2.79	3	1
1:A:135:LEU:CD2	2:B:284:LEU:CD1	0.47	2.92	2	2
1:A:66:THR:OG1	1:A:73:GLU:OE1	0.47	2.32	6	1
2:B:271:LYS:CE	2:B:274:VAL:HB	0.47	2.40	6	1
1:A:106:ASP:CA	1:A:109:ASN:ND2	0.47	2.78	8	2
1:A:96:PHE:O	1:A:97:ARG:HG3	0.47	2.10	1	4
1:A:111:LYS:HD2	1:A:113:GLY:O	0.47	2.10	9	1
1:A:71:VAL:O	1:A:72:GLU:C	0.47	2.52	9	1
1:A:40:ASN:HB3	2:B:276:TYR:CE1	0.47	2.45	9	1
1:A:65:VAL:CG1	2:B:295:ASP:CA	0.47	2.93	9	1
1:A:104:TRP:CE3	1:A:104:TRP:C	0.47	2.89	5	2
1:A:197:PHE:HB3	1:A:198:PRO:CD	0.47	2.40	5	1
1:A:73:GLU:HG2	2:B:302:THR:HG23	0.47	1.82	5	1
1:A:25:THR:O	1:A:29:ASP:CB	0.47	2.62	7	3
1:A:137:VAL:O	1:A:146:ASP:OD2	0.47	2.33	4	1
1:A:47:TYR:OH	2:B:295:ASP:OD2	0.47	2.33	4	1
2:B:273:HIS:CG	2:B:273:HIS:O	0.47	2.68	3	1
1:A:162:LYS:C	1:A:163:PHE:CD1	0.47	2.88	2	1
1:A:119:LEU:HD12	1:A:163:PHE:CE2	0.47	2.45	2	1
2:B:258:TYR:CE1	2:B:262:ILE:HG12	0.47	2.45	2	1
1:A:157:ARG:O	1:A:158:LYS:C	0.47	2.54	8	6
2:B:295:ASP:O	2:B:296:ALA:C	0.47	2.53	11	4
2:B:235:ASN:O	2:B:293:LYS:NZ	0.47	2.48	6	1
1:A:68:PHE:CZ	2:B:302:THR:HB	0.47	2.45	6	1
1:A:106:ASP:O	1:A:110:ALA:N	0.47	2.46	11	2
1:A:25:THR:HG22	2:B:256:PHE:CD2	0.47	2.45	11	1
2:B:271:LYS:HB2	2:B:274:VAL:CG2	0.47	2.40	11	1
1:A:143:ASP:CB	2:B:274:VAL:HG21	0.47	2.40	9	1
1:A:102:PRO:HD2	1:A:106:ASP:CB	0.47	2.40	8	1
1:A:89:LEU:HG	1:A:156:ILE:CG2	0.47	2.40	5	1
2:B:252:ASP:OD1	2:B:276:TYR:CA	0.47	2.63	5	1
1:A:120:CYS:O	1:A:159:GLY:O	0.47	2.33	10	2
2:B:272:GLU:O	2:B:274:VAL:N	0.47	2.48	10	1
1:A:100:VAL:HG23	1:A:110:ALA:HB2	0.47	1.79	3	1
1:A:80:ASN:O	1:A:81:ILE:O	0.47	2.32	3	1
1:A:142:ILE:HD13	2:B:274:VAL:CG2	0.47	2.40	3	1
1:A:39:LEU:HG	2:B:278:TYR:OH	0.46	2.09	2	1
2:B:258:TYR:CD1	2:B:262:ILE:HD11	0.46	2.45	2	1
1:A:36:LYS:HD2	1:A:72:GLU:OE2	0.46	2.10	6	1
1:A:82:PRO:CA	1:A:86:GLU:HB3	0.46	2.39	6	1
1:A:96:PHE:CZ	1:A:166:TRP:CZ3	0.46	3.03	5	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:135:LEU:HD12	2:B:283:LEU:HD13	0.46	1.85	5	2
1:A:137:VAL:HG13	1:A:146:ASP:OD2	0.46	2.10	11	1
1:A:44:THR:C	1:A:67:SER:CB	0.46	2.84	4	3
1:A:168:LYS:O	3:A:322:MTN:S1	0.46	2.73	9	1
1:A:188:LEU:HD12	1:A:188:LEU:O	0.46	2.10	8	1
2:B:304:SER:O	2:B:306:ILE:HG23	0.46	2.10	8	1
1:A:113:GLY:N	1:A:199:HIS:HB3	0.46	2.25	5	1
1:A:26:VAL:CG2	2:B:289:LYS:HB3	0.46	2.39	5	1
1:A:148:GLN:CB	1:A:170:GLU:HB3	0.46	2.40	4	1
1:A:108:ALA:HA	1:A:111:LYS:CE	0.46	2.40	2	5
1:A:142:ILE:O	1:A:143:ASP:HB2	0.46	2.10	2	4
1:A:154:LEU:C	1:A:154:LEU:CD2	0.46	2.81	2	2
1:A:196:PHE:O	1:A:210:SER:HB2	0.46	2.10	2	4
1:A:107:GLU:CB	1:A:166:TRP:CZ3	0.46	2.99	7	2
1:A:117:PHE:CD2	1:A:163:PHE:HB3	0.46	2.46	6	1
1:A:130:TRP:HB3	1:A:185:VAL:HG11	0.46	1.86	6	1
2:B:292:VAL:HG23	2:B:293:LYS:N	0.46	2.25	4	3
1:A:111:LYS:HG3	1:A:112:GLY:N	0.46	2.24	11	2
1:A:172:LYS:O	1:A:176:LEU:HD13	0.46	2.10	1	7
1:A:74:PHE:O	1:A:78:ILE:HG13	0.46	2.09	4	6
1:A:140:GLU:CG	2:B:268:LYS:HD3	0.46	2.40	1	1
1:A:24:LYS:O	1:A:29:ASP:OD2	0.46	2.33	1	1
1:A:47:TYR:CD1	1:A:47:TYR:N	0.46	2.83	1	1
1:A:27:LEU:CD1	2:B:258:TYR:CG	0.46	2.93	9	2
1:A:31:ALA:O	1:A:32:HIS:CB	0.46	2.63	8	1
1:A:140:GLU:OE2	1:A:145:ASP:OD2	0.46	2.34	5	1
2:B:298:TRP:HA	2:B:302:THR:OG1	0.46	2.10	5	1
1:A:72:GLU:HG3	2:B:290:LEU:HD21	0.46	1.86	4	1
1:A:41:THR:HG21	1:A:97:ARG:NE	0.46	2.26	4	1
2:B:250:ILE:HG22	2:B:306:ILE:CD1	0.46	2.40	4	1
1:A:137:VAL:HA	1:A:141:THR:HB	0.46	1.86	10	1
1:A:94:HIS:HB2	1:A:96:PHE:CE2	0.46	2.46	10	1
1:A:142:ILE:HD13	2:B:274:VAL:HG21	0.46	1.87	3	1
1:A:79:GLN:OE1	2:B:287:LYS:HA	0.46	2.10	2	3
2:B:276:TYR:N	2:B:276:TYR:CD1	0.46	2.83	9	2
2:B:238:SER:O	2:B:242:ASN:CB	0.46	2.64	1	1
1:A:104:TRP:C	1:A:104:TRP:CD2	0.46	2.89	5	2
1:A:137:VAL:HG11	1:A:152:VAL:CG1	0.46	2.40	9	1
1:A:155:SER:HB3	1:A:157:ARG:NH2	0.46	2.25	8	1
1:A:66:THR:OG1	2:B:298:TRP:CZ2	0.46	2.68	5	1
1:A:123:GLY:HA2	1:A:126:ILE:CD1	0.46	2.41	4	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:304:SER:O	2:B:305:LYS:O	0.46	2.34	4	1
1:A:135:LEU:CD1	2:B:280:PRO:HB3	0.46	2.39	7	1
1:A:119:LEU:HD12	1:A:163:PHE:CZ	0.46	2.45	2	1
1:A:163:PHE:N	1:A:163:PHE:CD1	0.46	2.82	2	1
1:A:131:LEU:O	1:A:132:CYS:C	0.46	2.54	3	8
1:A:100:VAL:CG1	1:A:101:ARG:N	0.46	2.73	6	2
1:A:28:SER:CB	2:B:259:PRO:HB2	0.46	2.40	6	1
1:A:58:TRP:CE3	4:A:325:M7G:C1'	0.46	2.98	11	1
1:A:25:THR:HG23	1:A:37:HIS:NE2	0.46	2.26	1	1
2:B:294:ALA:O	2:B:295:ASP:HB2	0.46	2.11	5	3
1:A:139:GLY:O	2:B:278:TYR:O	0.46	2.34	9	1
1:A:97:ARG:O	1:A:100:VAL:O	0.46	2.33	5	2
1:A:135:LEU:CD2	2:B:280:PRO:HB3	0.46	2.41	5	1
1:A:29:ASP:OD2	1:A:32:HIS:O	0.46	2.33	5	1
1:A:194:LEU:HD22	1:A:196:PHE:CZ	0.46	2.45	10	1
2:B:251:GLU:O	2:B:252:ASP:OD2	0.46	2.32	10	1
1:A:194:LEU:C	1:A:195:GLU:CG	0.46	2.82	7	1
1:A:47:TYR:CZ	1:A:65:VAL:CG2	0.46	2.99	3	1
1:A:129:LEU:O	1:A:132:CYS:SG	0.46	2.73	2	1
1:A:104:TRP:CZ2	4:A:325:M7G:H2'	0.46	2.46	3	4
1:A:71:VAL:HA	1:A:74:PHE:CD2	0.46	2.46	6	1
1:A:31:ALA:O	1:A:32:HIS:ND1	0.46	2.49	9	3
1:A:111:LYS:CB	1:A:166:TRP:HB3	0.46	2.40	11	2
1:A:40:ASN:CG	1:A:142:ILE:CD1	0.46	2.83	11	1
1:A:79:GLN:O	1:A:81:ILE:HG13	0.46	2.11	11	3
2:B:237:VAL:CG1	2:B:298:TRP:CG	0.46	2.98	11	1
2:B:274:VAL:HB	2:B:277:THR:CG2	0.46	2.40	11	1
1:A:129:LEU:O	1:A:133:THR:OG1	0.46	2.34	4	2
1:A:111:LYS:HD3	1:A:166:TRP:CB	0.46	2.40	9	2
1:A:103:GLU:O	1:A:105:GLU:N	0.46	2.48	9	2
2:B:237:VAL:HG12	2:B:241:LEU:HD12	0.46	1.88	8	1
1:A:38:PRO:HD3	2:B:250:ILE:CG1	0.46	2.40	8	4
2:B:254:PHE:CD1	2:B:265:PRO:O	0.46	2.68	3	2
1:A:144:GLU:O	1:A:145:ASP:OD1	0.46	2.33	10	1
2:B:258:TYR:CD1	2:B:262:ILE:HD13	0.46	2.45	7	1
1:A:102:PRO:HB3	1:A:106:ASP:CB	0.46	2.41	3	1
1:A:134:LEU:O	1:A:137:VAL:N	0.46	2.47	8	2
1:A:57:SER:O	1:A:61:LEU:HG	0.46	2.11	11	10
1:A:126:ILE:HG12	1:A:127:ASP:N	0.46	2.25	6	2
1:A:136:ALA:O	1:A:140:GLU:C	0.46	2.53	8	3
1:A:101:ARG:CG	1:A:102:PRO:HD2	0.46	2.41	11	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:298:TRP:O	2:B:302:THR:OG1	0.46	2.33	1	2
1:A:100:VAL:CG1	1:A:107:GLU:OE2	0.46	2.62	9	1
1:A:141:THR:CG2	1:A:142:ILE:N	0.46	2.79	9	1
2:B:288:ASP:O	2:B:291:ASN:OD1	0.46	2.34	9	1
1:A:149:ILE:CD1	1:A:170:GLU:OE2	0.46	2.62	8	1
1:A:196:PHE:O	1:A:210:SER:HA	0.46	2.11	8	1
2:B:258:TYR:CG	2:B:262:ILE:HD13	0.46	2.46	8	1
1:A:96:PHE:CE2	1:A:153:VAL:HG22	0.46	2.46	5	1
1:A:66:THR:HG21	1:A:73:GLU:HB2	0.46	1.88	3	1
2:B:268:LYS:HE3	2:B:271:LYS:CG	0.46	2.41	2	1
1:A:101:ARG:O	1:A:102:PRO:C	0.46	2.54	1	8
1:A:142:ILE:O	1:A:143:ASP:O	0.46	2.34	6	1
1:A:116:SER:CB	1:A:195:GLU:HB2	0.46	2.40	6	2
1:A:101:ARG:HB2	1:A:106:ASP:CB	0.46	2.41	11	1
2:B:241:LEU:HD12	2:B:298:TRP:CG	0.46	2.45	11	1
2:B:282:PHE:CD1	2:B:282:PHE:C	0.46	2.88	11	3
2:B:248:THR:CG2	2:B:306:ILE:HG21	0.46	2.40	11	1
1:A:44:THR:C	1:A:67:SER:HB2	0.46	2.31	10	4
1:A:111:LYS:O	1:A:168:LYS:HA	0.46	2.10	5	2
1:A:26:VAL:HG22	1:A:33:PHE:CG	0.46	2.45	1	1
2:B:271:LYS:O	2:B:272:GLU:HB3	0.46	2.11	1	1
1:A:131:LEU:O	1:A:135:LEU:N	0.46	2.49	9	3
1:A:119:LEU:HA	1:A:193:HIS:CD2	0.46	2.45	9	1
1:A:157:ARG:O	1:A:158:LYS:O	0.46	2.34	8	1
1:A:75:TRP:O	1:A:79:GLN:NE2	0.46	2.43	8	1
1:A:93:TYR:CG	1:A:154:LEU:HD22	0.46	2.46	8	1
1:A:34:ASP:O	2:B:248:THR:O	0.46	2.34	8	1
1:A:93:TYR:CD1	1:A:154:LEU:HB3	0.46	2.46	5	1
1:A:75:TRP:O	1:A:79:GLN:OE1	0.46	2.33	5	1
2:B:268:LYS:O	2:B:271:LYS:N	0.46	2.41	3	3
1:A:81:ILE:HD13	1:A:86:GLU:OE2	0.46	2.11	4	1
2:B:256:PHE:CE1	2:B:258:TYR:CE2	0.46	3.04	3	1
1:A:111:LYS:CG	1:A:166:TRP:HB3	0.46	2.41	2	3
1:A:133:THR:O	1:A:137:VAL:HG13	0.46	2.11	2	1
1:A:102:PRO:O	1:A:103:GLU:HB3	0.46	2.11	5	4
1:A:25:THR:HG22	1:A:35:VAL:HG11	0.46	1.87	6	2
1:A:43:TRP:O	1:A:67:SER:HA	0.46	2.11	6	5
2:B:253:VAL:CA	2:B:256:PHE:CE2	0.46	2.98	6	2
1:A:75:TRP:NE1	2:B:283:LEU:HD23	0.46	2.26	6	1
1:A:200:CYS:O	3:A:323:MTN:S1	0.46	2.74	5	4
1:A:43:TRP:O	1:A:67:SER:O	0.46	2.33	11	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:ASP:O	1:A:100:VAL:C	0.46	2.54	11	2
1:A:171:ASP:O	1:A:172:LYS:HB2	0.46	2.10	9	2
1:A:79:GLN:OE1	2:B:287:LYS:HG3	0.46	2.10	8	2
1:A:46:TRP:O	1:A:94:HIS:N	0.46	2.49	8	2
1:A:155:SER:O	1:A:162:LYS:O	0.46	2.34	5	1
1:A:91:SER:O	1:A:92:ASP:OD1	0.46	2.33	3	2
1:A:104:TRP:CD2	4:A:325:M7G:CM7	0.46	2.97	4	1
1:A:45:LEU:N	1:A:67:SER:HB2	0.46	2.25	4	1
1:A:128:GLU:O	1:A:132:CYS:SG	0.46	2.74	7	1
2:B:248:THR:HG22	2:B:249:PRO:HD2	0.46	1.88	3	1
1:A:188:LEU:CB	1:A:193:HIS:CD2	0.46	2.98	2	1
2:B:271:LYS:O	2:B:272:GLU:HB2	0.46	2.11	2	6
1:A:169:CYS:O	1:A:170:GLU:C	0.46	2.54	6	8
1:A:115:TRP:CE2	1:A:175:LEU:HB3	0.46	2.46	6	4
1:A:101:ARG:HB3	1:A:102:PRO:HD2	0.46	1.87	11	2
2:B:306:ILE:C	2:B:306:ILE:CD1	0.46	2.84	9	3
1:A:26:VAL:HG13	1:A:33:PHE:CE1	0.46	2.46	1	1
1:A:137:VAL:O	1:A:141:THR:HG21	0.46	2.11	8	1
1:A:69:GLN:CG	2:B:307:VAL:HG21	0.46	2.41	8	1
1:A:168:LYS:O	1:A:169:CYS:SG	0.46	2.74	5	2
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:163:PHE:CB	0.46	2.99	5	1
2:B:250:ILE:CG2	2:B:306:ILE:HG12	0.46	2.41	4	1
1:A:130:TRP:O	1:A:133:THR:OG1	0.46	2.34	10	1
1:A:39:LEU:HD23	1:A:70:THR:CA	0.46	2.41	3	1
1:A:68:PHE:CZ	2:B:303:ALA:HA	0.46	2.46	3	1
1:A:137:VAL:HG12	1:A:146:ASP:OD2	0.46	2.11	2	1
2:B:299:VAL:HA	2:B:302:THR:CG2	0.46	2.41	6	4
1:A:97:ARG:O	1:A:98:ASN:C	0.46	2.54	5	5
2:B:283:LEU:O	2:B:286:PHE:HB2	0.46	2.11	7	5
1:A:143:ASP:CB	2:B:271:LYS:HB2	0.46	2.41	6	1
1:A:141:THR:O	1:A:143:ASP:OD1	0.46	2.34	6	1
1:A:111:LYS:CD	1:A:166:TRP:CB	0.46	2.94	6	2
1:A:26:VAL:CG2	2:B:286:PHE:CZ	0.46	2.98	6	1
2:B:248:THR:OG1	2:B:249:PRO:HD3	0.46	2.11	6	2
1:A:66:THR:OG1	1:A:73:GLU:HB3	0.46	2.11	7	3
1:A:93:TYR:HB3	1:A:154:LEU:HD22	0.46	1.87	1	1
1:A:111:LYS:HA	1:A:168:LYS:CA	0.46	2.41	9	2
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:67:SER:OG	0.46	2.68	9	1
2:B:291:ASN:ND2	2:B:291:ASN:N	0.46	2.61	9	1
2:B:252:ASP:CB	2:B:255:SER:HB3	0.46	2.41	8	1
1:A:179:GLY:HA3	1:A:194:LEU:HD21	0.46	1.87	4	1

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:ASN:ND2	1:A:142:ILE:CD1	0.46	2.79	4	1
1:A:62:LEU:CD1	1:A:103:GLU:OE1	0.46	2.64	4	1
1:A:144:GLU:CG	2:B:271:LYS:O	0.46	2.64	7	1
1:A:28:SER:O	1:A:30:SER:OG	0.46	2.33	7	1
1:A:126:ILE:HA	1:A:129:LEU:HD12	0.45	1.88	2	2
1:A:194:LEU:O	1:A:212:THR:HA	0.45	2.11	2	5
1:A:180:GLY:O	1:A:183:LYS:HB2	0.45	2.12	1	2
1:A:153:VAL:O	1:A:163:PHE:CD1	0.45	2.70	6	1
1:A:43:TRP:HB3	1:A:96:PHE:O	0.45	2.10	11	2
1:A:75:TRP:CE3	1:A:78:ILE:HG13	0.45	2.46	1	1
1:A:77:ILE:HD12	1:A:77:ILE:N	0.45	2.25	9	1
1:A:33:PHE:CE1	2:B:240:ILE:CB	0.45	2.99	5	1
1:A:142:ILE:CG2	2:B:272:GLU:HG3	0.45	2.41	5	1
1:A:72:GLU:OE1	2:B:286:PHE:CE2	0.45	2.70	4	1
1:A:196:PHE:CD2	1:A:211:ILE:CD1	0.45	2.99	2	1
1:A:40:ASN:CG	1:A:40:ASN:O	0.45	2.54	2	4
2:B:274:VAL:HG13	2:B:275:LYS:H	0.45	1.69	2	2
2:B:293:LYS:O	2:B:294:ALA:C	0.45	2.54	2	3
1:A:87:LEU:HD21	1:A:156:ILE:CD1	0.45	2.42	8	3
1:A:143:ASP:CB	2:B:271:LYS:HD3	0.45	2.41	6	1
1:A:104:TRP:HB3	4:A:325:M7G:CM7	0.45	2.41	10	4
1:A:73:GLU:OE2	2:B:305:LYS:HD2	0.45	2.12	1	2
2:B:251:GLU:C	2:B:255:SER:CB	0.45	2.85	1	2
2:B:294:ALA:HB1	2:B:298:TRP:CD1	0.45	2.46	5	2
1:A:187:LYS:O	1:A:188:LEU:O	0.45	2.34	9	2
1:A:86:GLU:OE1	1:A:86:GLU:O	0.45	2.34	9	1
1:A:102:PRO:HB3	1:A:106:ASP:HB2	0.45	1.87	3	2
1:A:69:GLN:OE1	2:B:306:ILE:O	0.45	2.33	4	1
1:A:108:ALA:HA	1:A:111:LYS:HG2	0.45	1.87	10	1
1:A:142:ILE:HD11	2:B:276:TYR:C	0.45	2.32	8	2
1:A:127:ASP:OD1	1:A:130:TRP:CZ3	0.45	2.70	6	1
2:B:247:ALA:O	2:B:248:THR:HG23	0.45	2.10	6	2
2:B:258:TYR:OH	2:B:264:GLY:CA	0.45	2.64	11	1
2:B:267:ILE:HG21	2:B:279:GLY:CA	0.45	2.41	11	1
1:A:130:TRP:HB2	1:A:186:LEU:CD2	0.45	2.41	5	2
1:A:66:THR:CB	2:B:299:VAL:HB	0.45	2.41	10	2
1:A:183:LYS:O	1:A:186:LEU:HG	0.45	2.11	5	2
1:A:22:THR:N	1:A:23:PRO:CD	0.45	2.79	8	2
2:B:274:VAL:O	2:B:275:LYS:HB3	0.45	2.11	8	1
1:A:37:HIS:C	2:B:306:ILE:CG2	0.45	2.85	4	1
2:B:262:ILE:O	2:B:262:ILE:HD13	0.45	2.11	10	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:142:ILE:HG21	2:B:272:GLU:HG2	0.45	1.88	10	1
1:A:78:ILE:O	1:A:81:ILE:CG2	0.45	2.57	3	1
1:A:33:PHE:HB2	2:B:244:LEU:HD11	0.45	1.87	3	1
2:B:252:ASP:CB	2:B:255:SER:HB2	0.45	2.41	2	4
1:A:140:GLU:CB	2:B:268:LYS:HE2	0.45	2.42	6	1
1:A:66:THR:HG21	2:B:302:THR:HG22	0.45	1.88	11	1
1:A:103:GLU:HG3	4:A:325:M7G:O6	0.45	2.12	1	2
1:A:34:ASP:HA	2:B:247:ALA:HB1	0.45	1.86	1	3
1:A:111:LYS:HB2	1:A:167:THR:O	0.45	2.11	9	2
1:A:73:GLU:OE1	2:B:298:TRP:CE2	0.45	2.70	9	1
1:A:156:ILE:O	1:A:157:ARG:CD	0.45	2.64	8	1
1:A:73:GLU:HG2	2:B:302:THR:OG1	0.45	2.11	8	1
2:B:286:PHE:O	2:B:290:LEU:N	0.45	2.49	3	2
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:CD2	0.45	2.41	4	3
1:A:34:ASP:OD1	2:B:246:ASP:O	0.45	2.35	10	1
1:A:172:LYS:O	1:A:176:LEU:CD2	0.45	2.57	3	1
1:A:83:GLU:HA	1:A:87:LEU:HD23	0.45	1.89	2	2
1:A:87:LEU:O	1:A:89:LEU:N	0.45	2.44	2	1
1:A:146:ASP:O	1:A:147:SER:HB3	0.45	2.11	8	2
1:A:75:TRP:HA	1:A:78:ILE:HG12	0.45	1.88	1	2
2:B:270:LYS:O	2:B:272:GLU:N	0.45	2.49	6	2
1:A:146:ASP:O	1:A:147:SER:C	0.45	2.55	1	1
1:A:89:LEU:HD22	1:A:157:ARG:O	0.45	2.11	1	1
1:A:74:PHE:O	1:A:78:ILE:HD11	0.45	2.10	1	1
1:A:40:ASN:ND2	1:A:40:ASN:C	0.45	2.70	3	3
1:A:143:ASP:HB2	2:B:274:VAL:CG2	0.45	2.41	9	1
2:B:296:ALA:O	2:B:300:GLN:NE2	0.45	2.50	9	1
1:A:79:GLN:NE2	2:B:287:LYS:CB	0.45	2.80	3	2
1:A:66:THR:CG2	2:B:302:THR:CB	0.45	2.92	4	1
1:A:111:LYS:CE	1:A:199:HIS:HA	0.45	2.42	10	2
1:A:32:HIS:HA	2:B:243:VAL:HG21	0.45	1.87	3	1
1:A:196:PHE:CD2	1:A:211:ILE:CG1	0.45	2.99	2	1
2:B:271:LYS:HB2	2:B:277:THR:HG21	0.45	1.89	2	1
1:A:75:TRP:CZ3	2:B:287:LYS:HD3	0.45	2.46	2	1
1:A:105:GLU:CD	4:A:325:M7G:N2	0.45	2.70	6	1
1:A:83:GLU:CG	1:A:154:LEU:HD11	0.45	2.42	6	1
1:A:44:THR:OG1	1:A:99:ASP:OD1	0.45	2.34	11	1
1:A:39:LEU:CD2	1:A:70:THR:HA	0.45	2.42	11	3
2:B:253:VAL:HG23	2:B:254:PHE:CD1	0.45	2.47	11	2
2:B:296:ALA:O	2:B:299:VAL:CG2	0.45	2.56	11	1
1:A:104:TRP:C	1:A:104:TRP:CE3	0.45	2.90	1	1

Continued on next page...



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:243:VAL:HG23	2:B:244:LEU:HD13	0.45	1.88	1	1
1:A:36:LYS:HD3	2:B:306:ILE:CG2	0.45	2.38	9	1
1:A:142:ILE:HG21	2:B:273:HIS:CB	0.45	2.40	8	1
1:A:43:TRP:HB3	1:A:97:ARG:CA	0.45	2.41	8	1
1:A:193:HIS:HA	1:A:213:LEU:CB	0.45	2.41	5	1
2:B:269:TYR:CE1	2:B:275:LYS:HD3	0.45	2.47	5	1
1:A:46:TRP:CZ3	1:A:103:GLU:HG3	0.45	2.46	10	1
1:A:142:ILE:HD13	2:B:272:GLU:HG3	0.45	1.89	10	1
1:A:143:ASP:OD1	2:B:268:LYS:CD	0.45	2.65	10	1
1:A:193:HIS:ND1	1:A:213:LEU:OXT	0.45	2.50	3	1
1:A:66:THR:OG1	1:A:73:GLU:CD	0.45	2.55	6	1
1:A:82:PRO:CA	1:A:86:GLU:CB	0.45	2.94	6	1
2:B:258:TYR:OH	2:B:264:GLY:HA2	0.45	2.12	11	1
1:A:40:ASN:OD1	2:B:276:TYR:O	0.45	2.35	11	1
1:A:76:ALA:C	1:A:78:ILE:N	0.45	2.69	7	2
1:A:98:ASN:OD1	1:A:150:ASN:O	0.45	2.34	1	2
1:A:117:PHE:CB	1:A:186:LEU:HD22	0.45	2.41	1	1
1:A:44:THR:HA	1:A:67:SER:HA	0.45	1.86	1	1
1:A:83:GLU:HB3	1:A:127:ASP:CB	0.45	2.42	9	2
1:A:71:VAL:O	1:A:73:GLU:N	0.45	2.50	9	1
1:A:80:ASN:ND2	2:B:293:LYS:HB2	0.45	2.26	9	1
1:A:66:THR:CG2	2:B:302:THR:OG1	0.45	2.62	9	1
2:B:243:VAL:CG2	2:B:244:LEU:HD23	0.45	2.41	8	1
1:A:39:LEU:HG	1:A:69:GLN:O	0.45	2.11	5	1
1:A:84:PRO:O	1:A:86:GLU:OE1	0.45	2.34	5	2
2:B:268:LYS:CB	2:B:277:THR:HB	0.45	2.42	3	2
1:A:117:PHE:CD2	1:A:182:PHE:HB3	0.45	2.47	7	1
1:A:43:TRP:HA	1:A:97:ARG:CB	0.45	2.42	3	1
2:B:265:PRO:HD2	2:B:267:ILE:CG1	0.45	2.42	10	2
2:B:269:TYR:CE1	2:B:275:LYS:HG2	0.45	2.47	6	1
1:A:27:LEU:O	2:B:289:LYS:CD	0.45	2.65	6	1
1:A:123:GLY:O	1:A:124:ALA:HB2	0.45	2.12	10	2
1:A:73:GLU:OE2	2:B:302:THR:HA	0.45	2.12	9	1
1:A:33:PHE:CZ	2:B:240:ILE:HG23	0.45	2.47	9	1
1:A:65:VAL:CG1	2:B:295:ASP:HA	0.45	2.41	9	1
1:A:41:THR:OG1	1:A:141:THR:HG21	0.45	2.11	5	1
2:B:252:ASP:OD2	2:B:275:LYS:O	0.45	2.35	5	2
1:A:135:LEU:CG	2:B:283:LEU:HD13	0.45	2.41	5	1
2:B:241:LEU:HD21	2:B:297:GLU:O	0.45	2.11	4	1
1:A:43:TRP:O	1:A:67:SER:CA	0.45	2.65	7	1
1:A:112:GLY:HA2	1:A:168:LYS:O	0.45	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:142:ILE:HG23	2:B:273:HIS:HB3	0.45	1.88	2	1
1:A:132:CYS:HA	1:A:135:LEU:CD2	0.45	2.42	3	6
1:A:130:TRP:HB2	1:A:182:PHE:CD1	0.45	2.46	6	1
1:A:45:LEU:HB3	1:A:66:THR:HB	0.45	1.88	8	3
1:A:39:LEU:HD22	2:B:278:TYR:OH	0.45	2.10	8	2
1:A:199:HIS:CD2	1:A:200:CYS:N	0.45	2.85	11	2
1:A:193:HIS:O	1:A:194:LEU:CD1	0.45	2.65	5	2
1:A:103:GLU:HG2	4:A:325:M7G:O6	0.45	2.12	9	2
1:A:41:THR:O	1:A:69:GLN:HG3	0.45	2.12	9	1
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:134:LEU:HD21	0.45	2.47	8	1
2:B:252:ASP:CA	2:B:255:SER:HB3	0.45	2.42	8	1
1:A:172:LYS:CA	1:A:175:LEU:HD13	0.45	2.42	5	1
1:A:108:ALA:C	1:A:199:HIS:O	0.45	2.55	5	1
1:A:84:PRO:CA	1:A:127:ASP:HB2	0.45	2.42	5	1
2:B:252:ASP:OD1	2:B:276:TYR:HA	0.45	2.12	5	1
2:B:268:LYS:CA	2:B:271:LYS:HG2	0.45	2.42	3	2
1:A:135:LEU:HD13	1:A:135:LEU:C	0.45	2.28	7	1
1:A:134:LEU:CD2	1:A:182:PHE:CZ	0.45	2.99	2	2
2:B:262:ILE:CB	2:B:285:GLN:OE1	0.45	2.65	2	1
2:B:250:ILE:HG21	2:B:306:ILE:CG2	0.45	2.41	6	1
1:A:146:ASP:O	1:A:147:SER:HB2	0.45	2.11	11	1
1:A:193:HIS:CD2	1:A:213:LEU:HB3	0.45	2.47	11	1
1:A:79:GLN:HG3	2:B:291:ASN:HA	0.45	1.87	7	2
1:A:117:PHE:CB	1:A:186:LEU:HD21	0.45	2.42	1	1
1:A:26:VAL:O	1:A:26:VAL:HG12	0.45	2.12	9	1
1:A:74:PHE:CD2	1:A:95:VAL:HG21	0.45	2.47	9	1
1:A:87:LEU:CB	1:A:88:PRO:HD2	0.45	2.42	5	2
1:A:81:ILE:CG2	1:A:131:LEU:CD1	0.45	2.94	8	1
1:A:183:LYS:HB2	1:A:188:LEU:HD21	0.45	1.88	8	1
1:A:33:PHE:CZ	2:B:240:ILE:CB	0.45	3.00	5	1
1:A:43:TRP:HA	1:A:97:ARG:CD	0.45	2.42	5	1
1:A:188:LEU:HD13	1:A:193:HIS:CB	0.45	2.41	4	1
1:A:61:LEU:CD2	1:A:61:LEU:N	0.45	2.76	10	1
1:A:114:LYS:HE3	1:A:116:SER:OG	0.45	2.11	7	1
1:A:82:PRO:HB3	1:A:156:ILE:CD1	0.45	2.42	3	1
1:A:37:HIS:O	1:A:70:THR:CB	0.45	2.65	3	1
1:A:135:LEU:CD1	2:B:283:LEU:HB2	0.44	2.42	6	2
1:A:79:GLN:OE1	2:B:290:LEU:HB3	0.44	2.11	1	1
1:A:153:VAL:O	1:A:164:ALA:N	0.44	2.49	8	1
1:A:199:HIS:O	1:A:201:SER:N	0.44	2.50	8	1
2:B:238:SER:CA	2:B:297:GLU:HG3	0.44	2.42	5	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:134:LEU:O	1:A:137:VAL:HB	0.44	2.13	4	1
1:A:75:TRP:CH2	2:B:287:LYS:HD3	0.44	2.48	4	1
1:A:130:TRP:CE2	1:A:163:PHE:HB3	0.44	2.46	7	1
1:A:142:ILE:HG23	2:B:273:HIS:CB	0.44	2.42	8	2
1:A:96:PHE:CE2	1:A:153:VAL:HG23	0.44	2.47	6	1
1:A:193:HIS:NE2	1:A:213:LEU:O	0.44	2.50	11	1
1:A:28:SER:CB	2:B:260:GLU:HB2	0.44	2.42	11	1
1:A:132:CYS:HA	1:A:135:LEU:HD21	0.44	1.88	1	1
1:A:108:ALA:C	1:A:110:ALA:N	0.44	2.71	9	3
1:A:111:LYS:HB2	1:A:167:THR:N	0.44	2.26	9	1
1:A:39:LEU:HB2	1:A:69:GLN:CA	0.44	2.42	9	1
1:A:41:THR:O	1:A:69:GLN:CD	0.44	2.55	9	3
2:B:262:ILE:O	2:B:263:GLU:HB2	0.44	2.12	5	5
1:A:111:LYS:CB	1:A:150:ASN:OD1	0.44	2.65	8	1
1:A:40:ASN:O	1:A:40:ASN:CG	0.44	2.54	8	2
1:A:149:ILE:O	1:A:168:LYS:HB2	0.44	2.11	5	1
1:A:102:PRO:HG2	1:A:106:ASP:CB	0.44	2.42	4	1
1:A:74:PHE:CZ	1:A:78:ILE:CD1	0.44	2.99	10	1
1:A:29:ASP:OD2	1:A:33:PHE:CE2	0.44	2.70	3	2
1:A:111:LYS:HG2	1:A:150:ASN:ND2	0.44	2.28	2	2
1:A:45:LEU:O	1:A:45:LEU:HG	0.44	2.13	5	2
1:A:152:VAL:HB	1:A:163:PHE:CE1	0.44	2.48	6	1
2:B:248:THR:HB	2:B:249:PRO:HD3	0.44	1.88	11	1
1:A:38:PRO:CG	2:B:252:ASP:HA	0.44	2.42	11	2
2:B:307:VAL:O	2:B:308:ILE:HD13	0.44	2.13	1	1
2:B:254:PHE:CE2	2:B:277:THR:O	0.44	2.70	8	2
2:B:251:GLU:HB3	2:B:255:SER:OG	0.44	2.13	5	5
1:A:103:GLU:C	1:A:105:GLU:N	0.44	2.69	9	3
1:A:143:ASP:O	2:B:271:LYS:O	0.44	2.34	9	1
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:134:LEU:CD1	0.44	2.80	8	1
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:CA	0.44	2.43	8	1
1:A:45:LEU:CG	1:A:65:VAL:HG23	0.44	2.41	5	1
1:A:74:PHE:C	1:A:74:PHE:CD1	0.44	2.90	5	1
1:A:83:GLU:O	1:A:156:ILE:HD11	0.44	2.13	5	1
1:A:33:PHE:HB2	2:B:244:LEU:CD2	0.44	2.43	5	1
1:A:156:ILE:CD1	1:A:161:ASN:HB3	0.44	2.42	4	1
1:A:179:GLY:O	1:A:183:LYS:N	0.44	2.50	4	1
1:A:45:LEU:CB	1:A:67:SER:HB2	0.44	2.42	4	1
1:A:143:ASP:C	1:A:145:ASP:N	0.44	2.71	10	1
1:A:146:ASP:CB	1:A:149:ILE:HD13	0.44	2.43	7	1
1:A:149:ILE:HG22	1:A:150:ASN:N	0.44	2.27	3	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:TYR:CD1	1:A:94:HIS:N	0.44	2.86	2	2
1:A:171:ASP:O	1:A:174:PRO:HG2	0.44	2.13	4	5
1:A:26:VAL:CG2	2:B:286:PHE:CE2	0.44	3.00	6	1
1:A:137:VAL:O	1:A:141:THR:HB	0.44	2.12	5	3
1:A:29:ASP:OD1	1:A:32:HIS:O	0.44	2.35	11	1
1:A:25:THR:O	1:A:29:ASP:OD2	0.44	2.35	1	1
1:A:144:GLU:O	1:A:145:ASP:HB3	0.44	2.12	9	1
2:B:298:TRP:HA	2:B:298:TRP:CE3	0.44	2.48	9	2
1:A:104:TRP:CD1	1:A:105:GLU:N	0.44	2.86	8	1
1:A:150:ASN:OD1	1:A:166:TRP:C	0.44	2.55	8	1
2:B:237:VAL:HG11	2:B:298:TRP:HA	0.44	1.89	8	1
1:A:140:GLU:HG2	2:B:278:TYR:O	0.44	2.11	7	3
1:A:140:GLU:OE1	2:B:268:LYS:CD	0.44	2.65	10	1
2:B:289:LYS:O	2:B:291:ASN:N	0.44	2.51	10	1
1:A:130:TRP:N	1:A:185:VAL:HG11	0.44	2.27	2	1
1:A:82:PRO:O	1:A:86:GLU:HB2	0.44	2.11	6	2
1:A:38:PRO:CB	2:B:307:VAL:HB	0.44	2.42	11	1
2:B:263:GLU:O	2:B:264:GLY:C	0.44	2.56	11	1
1:A:137:VAL:CG2	1:A:146:ASP:OD1	0.44	2.59	3	2
1:A:83:GLU:HB3	1:A:84:PRO:HD2	0.44	1.88	1	1
2:B:250:ILE:H	2:B:306:ILE:HD11	0.44	1.73	1	1
1:A:141:THR:OG1	1:A:146:ASP:HB2	0.44	2.12	9	1
1:A:194:LEU:HB3	1:A:213:LEU:CD1	0.44	2.42	9	2
1:A:111:LYS:HD3	1:A:113:GLY:O	0.44	2.11	8	1
1:A:97:ARG:O	1:A:98:ASN:HB2	0.44	2.13	8	1
1:A:126:ILE:CG2	1:A:186:LEU:HB3	0.44	2.42	5	1
1:A:117:PHE:CG	1:A:163:PHE:CD2	0.44	3.05	10	1
1:A:140:GLU:OE2	2:B:278:TYR:O	0.44	2.36	10	2
2:B:248:THR:CB	2:B:249:PRO:HD2	0.44	2.43	3	1
1:A:75:TRP:CA	1:A:78:ILE:HG12	0.44	2.43	2	2
2:B:298:TRP:CH2	2:B:302:THR:HA	0.44	2.47	2	1
2:B:271:LYS:HD2	2:B:272:GLU:N	0.44	2.28	6	1
1:A:49:LYS:N	1:A:50:PRO:CD	0.44	2.80	5	2
1:A:115:TRP:CZ2	1:A:175:LEU:HB2	0.44	2.48	1	1
1:A:125:ASP:OD1	1:A:125:ASP:O	0.44	2.35	1	1
1:A:141:THR:HA	1:A:146:ASP:CB	0.44	2.43	1	1
2:B:237:VAL:HG12	2:B:297:GLU:HB2	0.44	1.90	1	1
1:A:160:GLY:O	1:A:161:ASN:CB	0.44	2.65	9	1
1:A:111:LYS:HG2	1:A:166:TRP:HB3	0.44	1.89	9	1
1:A:143:ASP:C	2:B:272:GLU:OE1	0.44	2.56	5	1
1:A:71:VAL:HG21	2:B:283:LEU:HD23	0.44	1.89	5	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:130:TRP:O	1:A:133:THR:N	0.44	2.50	10	1
1:A:35:VAL:HG13	1:A:35:VAL:O	0.44	2.12	10	1
1:A:48:THR:O	1:A:92:ASP:OD1	0.44	2.36	10	1
2:B:272:GLU:C	2:B:274:VAL:N	0.44	2.70	10	1
1:A:87:LEU:HD21	1:A:156:ILE:HG21	0.44	1.89	3	1
1:A:133:THR:HB	1:A:182:PHE:CE1	0.44	2.48	2	3
1:A:186:LEU:N	1:A:186:LEU:HD23	0.44	2.27	2	1
1:A:87:LEU:HD13	1:A:91:SER:CB	0.44	2.42	2	1
1:A:131:LEU:C	1:A:133:THR:N	0.44	2.71	1	7
2:B:251:GLU:O	2:B:252:ASP:CG	0.44	2.56	9	5
1:A:136:ALA:O	1:A:140:GLU:CB	0.44	2.65	11	2
1:A:156:ILE:HG22	1:A:157:ARG:N	0.44	2.26	11	5
1:A:58:TRP:CE2	4:A:325:M7G:C4	0.44	3.01	11	1
1:A:74:PHE:CZ	1:A:95:VAL:CG2	0.44	2.99	11	1
2:B:286:PHE:O	2:B:287:LYS:C	0.44	2.56	8	4
1:A:78:ILE:C	1:A:80:ASN:N	0.44	2.71	7	3
1:A:73:GLU:O	2:B:298:TRP:CZ2	0.44	2.70	1	1
1:A:71:VAL:O	1:A:75:TRP:HB2	0.44	2.12	3	3
1:A:102:PRO:HB2	1:A:106:ASP:HB3	0.44	1.88	9	2
1:A:109:ASN:OD1	1:A:109:ASN:C	0.44	2.56	9	1
1:A:170:GLU:O	1:A:171:ASP:OD2	0.44	2.36	9	1
2:B:252:ASP:O	2:B:255:SER:HB3	0.44	2.12	8	2
1:A:135:LEU:HD21	2:B:283:LEU:CG	0.44	2.41	8	1
1:A:135:LEU:HD11	2:B:280:PRO:N	0.44	2.28	4	1
1:A:85:HIS:O	1:A:86:GLU:OE2	0.44	2.35	10	1
2:B:237:VAL:CB	2:B:294:ALA:O	0.44	2.66	10	1
1:A:104:TRP:NE1	1:A:105:GLU:OE1	0.44	2.51	7	1
1:A:119:LEU:HD23	1:A:120:CYS:N	0.44	2.27	7	1
1:A:75:TRP:CZ2	2:B:283:LEU:C	0.44	2.91	7	1
1:A:75:TRP:CZ2	2:B:283:LEU:HB3	0.44	2.47	7	1
1:A:111:LYS:O	1:A:169:CYS:HB2	0.44	2.13	3	1
2:B:291:ASN:C	2:B:292:VAL:HG13	0.44	2.32	9	5
1:A:147:SER:O	1:A:148:GLN:C	0.44	2.56	5	3
1:A:168:LYS:HG3	1:A:169:CYS:N	0.44	2.28	6	2
1:A:105:GLU:CD	4:A:325:M7G:HN21	0.44	2.15	11	1
1:A:43:TRP:HA	1:A:97:ARG:HA	0.44	1.90	11	1
1:A:76:ALA:O	1:A:77:ILE:C	0.44	2.55	7	2
1:A:36:LYS:O	1:A:38:PRO:HD3	0.44	2.13	3	2
1:A:83:GLU:HG3	1:A:86:GLU:CB	0.44	2.43	9	1
1:A:105:GLU:O	1:A:106:ASP:CG	0.44	2.56	8	1
1:A:123:GLY:H	1:A:126:ILE:HD11	0.44	1.73	8	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:THR:N	1:A:23:PRO:HD2	0.44	2.26	8	1
1:A:96:PHE:HB2	1:A:151:GLY:CA	0.44	2.43	5	1
2:B:298:TRP:CD2	2:B:302:THR:CG2	0.44	2.93	4	1
1:A:40:ASN:CB	2:B:276:TYR:HB3	0.44	2.43	10	1
2:B:298:TRP:CZ3	2:B:301:SER:HB3	0.44	2.47	10	1
1:A:132:CYS:CA	1:A:135:LEU:HD12	0.44	2.38	7	1
1:A:87:LEU:CD1	1:A:89:LEU:N	0.44	2.81	7	1
2:B:288:ASP:N	2:B:288:ASP:OD1	0.44	2.49	3	1
1:A:66:THR:OG1	1:A:73:GLU:HG2	0.44	2.12	1	1
2:B:240:ILE:O	2:B:243:VAL:CG2	0.44	2.57	1	2
1:A:40:ASN:ND2	1:A:142:ILE:HG21	0.44	2.28	9	1
1:A:117:PHE:CD1	1:A:163:PHE:HB2	0.44	2.48	10	3
1:A:25:THR:HG21	2:B:256:PHE:CD2	0.44	2.44	8	1
1:A:25:THR:O	1:A:29:ASP:CG	0.44	2.57	5	2
1:A:23:PRO:CB	1:A:35:VAL:HG21	0.44	2.42	7	2
1:A:43:TRP:CE2	1:A:138:ILE:HD12	0.44	2.48	4	1
2:B:298:TRP:CE3	2:B:298:TRP:HA	0.44	2.48	4	1
1:A:95:VAL:O	1:A:96:PHE:CG	0.44	2.70	10	1
1:A:138:ILE:O	1:A:141:THR:CG2	0.43	2.66	2	1
1:A:172:LYS:O	1:A:173:GLU:C	0.43	2.56	2	3
1:A:72:GLU:O	1:A:73:GLU:C	0.43	2.56	2	1
1:A:163:PHE:CD1	1:A:164:ALA:N	0.43	2.87	6	1
2:B:262:ILE:HG21	2:B:285:GLN:NE2	0.43	2.28	8	2
2:B:250:ILE:CD1	2:B:256:PHE:CD1	0.43	3.00	11	1
1:A:128:GLU:HG2	3:A:321:MTN:C7	0.43	2.43	1	1
1:A:133:THR:HG21	1:A:182:PHE:CG	0.43	2.48	9	1
1:A:111:LYS:CD	1:A:113:GLY:O	0.43	2.65	8	1
1:A:39:LEU:CD1	2:B:277:THR:HA	0.43	2.43	5	1
1:A:98:ASN:ND2	1:A:99:ASP:N	0.43	2.65	4	1
2:B:273:HIS:O	2:B:275:LYS:N	0.43	2.50	4	1
1:A:140:GLU:OE1	2:B:268:LYS:HD2	0.43	2.12	10	1
1:A:111:LYS:HB2	1:A:166:TRP:CG	0.43	2.48	7	1
1:A:132:CYS:O	2:B:280:PRO:HB3	0.43	2.13	7	1
1:A:104:TRP:CD1	4:A:325:M7G:C5	0.43	3.01	3	1
1:A:81:ILE:O	1:A:82:PRO:C	0.43	2.56	3	1
1:A:69:GLN:OE1	2:B:307:VAL:CG1	0.43	2.65	2	1
1:A:34:ASP:OD2	2:B:246:ASP:O	0.43	2.35	2	1
2:B:252:ASP:HB2	2:B:255:SER:HB2	0.43	1.89	10	5
1:A:148:GLN:HB2	1:A:170:GLU:CB	0.43	2.43	6	1
1:A:97:ARG:NH2	1:A:150:ASN:O	0.43	2.50	6	1
1:A:115:TRP:CH2	1:A:175:LEU:CD1	0.43	3.01	1	2

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:38:PRO:HB3	2:B:307:VAL:HA	0.43	1.88	1	1
1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CD1	0.43	2.80	1	1
1:A:143:ASP:OD2	2:B:271:LYS:CB	0.43	2.66	9	1
1:A:25:THR:O	1:A:29:ASP:HB3	0.43	2.14	7	7
1:A:101:ARG:HB2	1:A:106:ASP:C	0.43	2.34	8	1
1:A:73:GLU:HA	2:B:298:TRP:NE1	0.43	2.28	8	3
1:A:26:VAL:C	1:A:29:ASP:OD1	0.43	2.56	5	1
2:B:252:ASP:OD1	2:B:275:LYS:C	0.43	2.56	5	1
2:B:268:LYS:HD3	2:B:279:GLY:N	0.43	2.28	5	1
1:A:107:GLU:O	1:A:111:LYS:HG3	0.43	2.14	4	1
1:A:173:GLU:HB2	1:A:174:PRO:CD	0.43	2.43	4	1
1:A:39:LEU:HA	2:B:276:TYR:HB3	0.43	1.90	3	1
1:A:78:ILE:HG23	1:A:93:TYR:CZ	0.43	2.47	3	1
2:B:268:LYS:HB3	2:B:277:THR:HB	0.43	1.90	3	1
2:B:274:VAL:CG2	2:B:277:THR:OG1	0.43	2.66	3	1
1:A:130:TRP:N	1:A:185:VAL:CG1	0.43	2.81	2	1
1:A:194:LEU:O	1:A:195:GLU:CG	0.43	2.66	2	1
2:B:296:ALA:O	2:B:299:VAL:HB	0.43	2.13	7	2
1:A:29:ASP:OD1	1:A:32:HIS:C	0.43	2.56	11	2
1:A:112:GLY:HA2	1:A:199:HIS:ND1	0.43	2.28	11	1
1:A:140:GLU:OE2	1:A:143:ASP:O	0.43	2.36	1	1
1:A:183:LYS:HD2	1:A:188:LEU:HD21	0.43	1.89	1	1
1:A:29:ASP:O	1:A:30:SER:HB3	0.43	2.14	1	1
1:A:76:ALA:O	1:A:79:GLN:HB2	0.43	2.14	3	3
1:A:137:VAL:O	1:A:146:ASP:CG	0.43	2.57	4	1
1:A:140:GLU:CD	2:B:278:TYR:O	0.43	2.56	10	1
1:A:75:TRP:CD1	2:B:286:PHE:CB	0.43	3.01	7	1
1:A:161:ASN:CG	1:A:163:PHE:CZ	0.43	2.91	3	1
1:A:73:GLU:OE2	2:B:302:THR:HB	0.43	2.12	3	1
1:A:27:LEU:HD21	2:B:286:PHE:HD1	0.43	1.74	2	1
1:A:83:GLU:HA	1:A:87:LEU:CD2	0.43	2.43	10	2
1:A:111:LYS:CE	1:A:114:LYS:HB2	0.43	2.43	6	1
1:A:79:GLN:OE1	2:B:292:VAL:C	0.43	2.57	11	1
2:B:237:VAL:CG1	2:B:298:TRP:CD2	0.43	3.01	11	1
1:A:183:LYS:HG2	1:A:184:GLN:N	0.43	2.28	3	3
1:A:34:ASP:C	2:B:247:ALA:HB1	0.43	2.34	1	2
2:B:260:GLU:O	2:B:260:GLU:CG	0.43	2.66	1	1
1:A:150:ASN:C	1:A:150:ASN:ND2	0.43	2.72	5	1
1:A:130:TRP:HB2	1:A:186:LEU:HD21	0.43	1.90	5	1
1:A:99:ASP:CB	1:A:150:ASN:HA	0.43	2.43	5	1
1:A:142:ILE:HD13	2:B:274:VAL:CG1	0.43	2.19	4	1

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:237:VAL:O	2:B:240:ILE:HG12	0.43	2.13	4	1
1:A:142:ILE:CD1	2:B:274:VAL:HG13	0.43	2.19	4	1
1:A:33:PHE:CD1	2:B:244:LEU:HD13	0.43	2.48	10	1
1:A:42:LYS:O	1:A:97:ARG:O	0.43	2.37	10	1
1:A:43:TRP:CE3	1:A:43:TRP:O	0.43	2.71	2	1
2:B:235:ASN:HB3	2:B:291:ASN:O	0.43	2.13	2	2
1:A:119:LEU:HB2	1:A:161:ASN:OD1	0.43	2.13	7	2
2:B:252:ASP:O	2:B:253:VAL:C	0.43	2.57	4	7
1:A:137:VAL:CG2	1:A:146:ASP:HB2	0.43	2.44	6	1
1:A:148:GLN:HB2	1:A:170:GLU:HB2	0.43	1.90	6	1
1:A:196:PHE:CG	1:A:211:ILE:CD1	0.43	3.01	6	1
2:B:247:ALA:O	2:B:248:THR:OG1	0.43	2.35	6	1
1:A:79:GLN:O	1:A:81:ILE:HG12	0.43	2.13	8	2
1:A:140:GLU:CG	2:B:268:LYS:CD	0.43	2.96	1	2
3:A:322:MTN:H71	3:A:322:MTN:S1	0.43	2.53	1	1
1:A:75:TRP:HB2	2:B:290:LEU:CD1	0.43	2.42	1	1
1:A:82:PRO:CA	1:A:87:LEU:HB3	0.43	2.43	1	1
1:A:140:GLU:CG	1:A:140:GLU:O	0.43	2.65	9	1
1:A:198:PRO:O	1:A:199:HIS:C	0.43	2.56	3	4
1:A:96:PHE:HB3	1:A:151:GLY:HA2	0.43	1.91	5	1
2:B:298:TRP:CD1	2:B:302:THR:OG1	0.43	2.70	5	1
2:B:274:VAL:O	2:B:276:TYR:N	0.43	2.52	4	1
1:A:154:LEU:CD2	1:A:154:LEU:C	0.43	2.80	7	2
2:B:274:VAL:O	2:B:275:LYS:HB2	0.43	2.12	2	3
1:A:36:LYS:HB3	2:B:306:ILE:HG22	0.43	1.88	6	1
2:B:298:TRP:CD1	2:B:299:VAL:N	0.43	2.87	11	1
2:B:301:SER:O	2:B:304:SER:N	0.43	2.42	1	1
1:A:47:TYR:CD1	1:A:47:TYR:O	0.43	2.71	9	1
1:A:66:THR:HG23	1:A:73:GLU:HB3	0.43	1.86	8	2
1:A:201:SER:O	1:A:202:ALA:C	0.43	2.56	7	2
1:A:156:ILE:HG12	1:A:161:ASN:CB	0.43	2.44	4	1
1:A:26:VAL:CG1	2:B:286:PHE:HA	0.43	2.44	4	1
2:B:269:TYR:CE1	2:B:274:VAL:CG1	0.43	2.98	10	1
1:A:142:ILE:CD1	2:B:276:TYR:CD1	0.43	3.01	2	1
1:A:33:PHE:HZ	2:B:240:ILE:HG22	0.43	1.73	6	2
1:A:40:ASN:CG	2:B:276:TYR:CD2	0.43	2.92	6	1
1:A:101:ARG:HB2	1:A:106:ASP:CG	0.43	2.34	11	1
1:A:92:ASP:HA	1:A:154:LEU:O	0.43	2.14	8	3
1:A:117:PHE:HB3	1:A:186:LEU:CD1	0.43	2.43	1	1
1:A:79:GLN:NE2	2:B:291:ASN:HA	0.43	2.29	1	1
1:A:75:TRP:HA	1:A:75:TRP:CE3	0.43	2.49	3	2

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:102:PRO:O	1:A:103:GLU:CD	0.43	2.57	9	1
1:A:150:ASN:ND2	1:A:166:TRP:CB	0.43	2.82	9	1
3:A:321:MTN:S1	3:A:321:MTN:C7	0.43	3.06	9	1
1:A:39:LEU:CG	1:A:69:GLN:O	0.43	2.67	8	1
1:A:80:ASN:C	1:A:82:PRO:HD2	0.43	2.34	8	1
1:A:172:LYS:HA	1:A:175:LEU:CD2	0.43	2.40	5	2
1:A:75:TRP:CB	1:A:79:GLN:OE1	0.43	2.67	5	1
2:B:275:LYS:CB	2:B:276:TYR:CD1	0.43	3.02	7	1
1:A:140:GLU:OE2	2:B:280:PRO:CD	0.43	2.67	2	1
1:A:140:GLU:O	1:A:145:ASP:CG	0.43	2.57	2	1
2:B:272:GLU:HG2	2:B:273:HIS:N	0.43	2.27	2	1
2:B:254:PHE:HA	2:B:264:GLY:O	0.43	2.14	4	4
2:B:271:LYS:CE	2:B:271:LYS:HA	0.43	2.43	11	2
1:A:111:LYS:HE2	1:A:114:LYS:CA	0.43	2.43	6	1
1:A:83:GLU:C	1:A:127:ASP:OD2	0.43	2.57	6	1
1:A:132:CYS:O	1:A:135:LEU:HG	0.43	2.14	6	1
2:B:274:VAL:HG13	2:B:276:TYR:CD2	0.43	2.49	6	1
2:B:248:THR:CB	2:B:249:PRO:HD3	0.43	2.44	11	2
1:A:68:PHE:CE1	2:B:302:THR:HB	0.43	2.49	1	2
1:A:43:TRP:O	1:A:67:SER:C	0.43	2.57	11	1
1:A:104:TRP:CB	1:A:166:TRP:CH2	0.43	3.01	1	1
1:A:24:LYS:C	1:A:29:ASP:OD2	0.43	2.57	1	1
2:B:274:VAL:HG12	2:B:275:LYS:N	0.43	2.28	1	1
2:B:294:ALA:CB	2:B:298:TRP:CD1	0.43	3.02	1	2
1:A:26:VAL:O	1:A:29:ASP:CG	0.43	2.57	9	1
1:A:72:GLU:O	1:A:75:TRP:HB2	0.43	2.13	8	1
1:A:183:LYS:HD3	1:A:193:HIS:O	0.43	2.13	5	1
1:A:42:LYS:O	1:A:42:LYS:HG3	0.43	2.13	10	1
2:B:268:LYS:CD	2:B:279:GLY:CA	0.43	2.97	7	1
1:A:36:LYS:N	1:A:36:LYS:CD	0.43	2.81	3	1
1:A:136:ALA:O	1:A:140:GLU:CA	0.43	2.67	2	2
1:A:76:ALA:HA	1:A:79:GLN:HG2	0.43	1.91	2	4
1:A:126:ILE:HD11	1:A:127:ASP:OD1	0.43	2.14	6	1
1:A:42:LYS:O	1:A:97:ARG:HA	0.43	2.13	6	1
1:A:186:LEU:O	1:A:187:LYS:C	0.43	2.57	11	1
1:A:63:ARG:CZ	1:A:64:PRO:HD2	0.43	2.44	11	1
1:A:140:GLU:HG3	2:B:268:LYS:CD	0.43	2.44	1	1
1:A:103:GLU:O	1:A:104:TRP:C	0.43	2.57	9	1
1:A:106:ASP:O	1:A:109:ASN:HB3	0.43	2.13	9	1
2:B:280:PRO:O	2:B:284:LEU:CD1	0.43	2.66	9	1
2:B:243:VAL:HG23	2:B:244:LEU:HD23	0.43	1.91	8	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:TRP:O	1:A:114:LYS:NZ	0.43	2.45	5	1
1:A:117:PHE:CE2	1:A:194:LEU:HD21	0.43	2.48	5	1
1:A:104:TRP:CZ3	1:A:105:GLU:HB2	0.43	2.49	4	1
1:A:84:PRO:CG	1:A:127:ASP:CG	0.43	2.87	4	1
1:A:135:LEU:C	1:A:135:LEU:CD1	0.43	2.81	4	1
1:A:45:LEU:O	1:A:46:TRP:CD1	0.43	2.72	4	1
2:B:301:SER:O	2:B:302:THR:C	0.43	2.57	4	1
2:B:254:PHE:CD1	2:B:269:TYR:CE1	0.43	3.07	10	1
2:B:272:GLU:O	2:B:272:GLU:CD	0.43	2.57	10	1
2:B:268:LYS:HG2	2:B:277:THR:CG2	0.43	2.43	7	1
1:A:93:TYR:HE2	1:A:154:LEU:HD13	0.43	1.60	3	1
3:A:322:MTN:S1	3:A:322:MTN:C7	0.43	3.04	3	1
1:A:140:GLU:O	1:A:145:ASP:OD1	0.43	2.36	2	1
2:B:287:LYS:O	2:B:288:ASP:C	0.43	2.58	2	3
1:A:82:PRO:O	1:A:87:LEU:HG	0.43	2.13	10	2
2:B:281:THR:O	2:B:284:LEU:HB2	0.43	2.14	11	8
1:A:165:LEU:O	1:A:165:LEU:HG	0.43	2.14	6	2
2:B:247:ALA:C	2:B:248:THR:OG1	0.43	2.57	10	2
1:A:119:LEU:CD1	1:A:188:LEU:HB3	0.43	2.44	11	1
1:A:35:VAL:HG22	2:B:250:ILE:HB	0.43	1.91	11	1
2:B:266:ASP:C	2:B:268:LYS:N	0.43	2.72	11	1
1:A:194:LEU:O	1:A:195:GLU:HG2	0.43	2.13	8	2
2:B:268:LYS:CG	2:B:271:LYS:CG	0.43	2.97	1	1
1:A:42:LYS:O	1:A:98:ASN:OD1	0.43	2.36	9	1
1:A:71:VAL:O	1:A:74:PHE:N	0.43	2.52	9	1
2:B:294:ALA:O	2:B:295:ASP:OD2	0.43	2.36	9	1
1:A:132:CYS:HB2	2:B:284:LEU:HD11	0.43	1.90	8	1
1:A:198:PRO:HD3	1:A:210:SER:OG	0.43	2.14	8	1
2:B:237:VAL:HG11	2:B:298:TRP:CG	0.43	2.49	8	1
2:B:298:TRP:CA	2:B:302:THR:OG1	0.43	2.67	5	1
1:A:140:GLU:HB3	2:B:277:THR:CG2	0.43	2.44	4	1
2:B:274:VAL:O	2:B:275:LYS:C	0.43	2.56	4	1
1:A:71:VAL:CG1	2:B:286:PHE:CD2	0.43	3.02	4	1
1:A:135:LEU:O	1:A:138:ILE:HG13	0.43	2.13	10	1
1:A:44:THR:HA	1:A:67:SER:CB	0.43	2.44	10	2
1:A:118:GLN:HG3	1:A:162:LYS:CE	0.43	2.44	7	1
1:A:27:LEU:HD22	2:B:285:GLN:OE1	0.43	2.14	7	1
2:B:244:LEU:HD12	2:B:298:TRP:CH2	0.43	2.49	7	1
1:A:26:VAL:O	2:B:289:LYS:HD2	0.42	2.13	3	3
1:A:135:LEU:CD1	1:A:135:LEU:C	0.42	2.85	11	1
2:B:252:ASP:HB3	2:B:255:SER:HB2	0.42	1.89	1	2

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:37:HIS:O	1:A:70:THR:HA	0.42	2.14	1	2
1:A:140:GLU:CG	2:B:268:LYS:HG2	0.42	2.43	1	1
1:A:135:LEU:CD1	2:B:283:LEU:HD12	0.42	2.43	9	2
1:A:38:PRO:HD3	2:B:250:ILE:HG12	0.42	1.91	8	2
2:B:269:TYR:CD2	2:B:274:VAL:CG2	0.42	3.01	8	1
2:B:271:LYS:O	2:B:272:GLU:CG	0.42	2.67	8	2
1:A:103:GLU:O	1:A:107:GLU:HB2	0.42	2.14	5	1
1:A:137:VAL:O	1:A:141:THR:CA	0.42	2.67	5	1
1:A:46:TRP:CE3	1:A:94:HIS:CG	0.42	3.07	5	1
1:A:84:PRO:HD3	1:A:127:ASP:CB	0.42	2.43	4	1
1:A:140:GLU:HG2	1:A:145:ASP:OD2	0.42	2.14	4	1
1:A:126:ILE:HA	1:A:129:LEU:CD1	0.42	2.44	2	2
1:A:165:LEU:CD2	1:A:178:ILE:CG2	0.42	2.97	2	1
1:A:39:LEU:HB2	1:A:69:GLN:O	0.42	2.14	8	4
2:B:291:ASN:C	2:B:292:VAL:CG1	0.42	2.87	6	1
1:A:133:THR:CG2	1:A:182:PHE:CZ	0.42	3.01	11	1
2:B:258:TYR:CD1	2:B:258:TYR:N	0.42	2.85	11	1
1:A:111:LYS:CB	1:A:167:THR:O	0.42	2.67	9	1
2:B:237:VAL:CG2	2:B:292:VAL:O	0.42	2.58	9	1
2:B:238:SER:HA	2:B:297:GLU:CG	0.42	2.44	5	1
1:A:117:PHE:CD2	1:A:186:LEU:HD13	0.42	2.49	4	1
1:A:38:PRO:HG2	2:B:252:ASP:OD1	0.42	2.14	4	1
1:A:195:GLU:HB3	1:A:197:PHE:CE1	0.42	2.49	10	1
1:A:67:SER:HA	1:A:73:GLU:CG	0.42	2.44	10	1
1:A:70:THR:CG2	2:B:305:LYS:HG2	0.42	2.44	7	1
1:A:92:ASP:OD2	1:A:155:SER:OG	0.42	2.34	3	1
1:A:26:VAL:O	2:B:289:LYS:HG3	0.42	2.13	6	3
1:A:49:LYS:HB2	1:A:50:PRO:HD3	0.42	1.91	6	1
2:B:262:ILE:HD12	2:B:262:ILE:N	0.42	2.30	6	1
1:A:106:ASP:O	1:A:107:GLU:C	0.42	2.56	11	1
1:A:44:THR:OG1	1:A:99:ASP:OD2	0.42	2.34	11	1
2:B:268:LYS:HG2	2:B:271:LYS:HG2	0.42	1.91	1	1
1:A:91:SER:C	1:A:92:ASP:OD1	0.42	2.57	9	1
2:B:256:PHE:CD1	2:B:256:PHE:O	0.42	2.72	9	1
1:A:112:GLY:O	1:A:199:HIS:CB	0.42	2.67	8	1
1:A:38:PRO:O	2:B:278:TYR:OH	0.42	2.36	8	1
1:A:96:PHE:CZ	1:A:153:VAL:HG22	0.42	2.50	8	1
1:A:130:TRP:CD1	1:A:163:PHE:CE2	0.42	3.07	5	1
1:A:137:VAL:HG11	1:A:152:VAL:HG11	0.42	1.91	10	1
1:A:36:LYS:C	2:B:306:ILE:HG22	0.42	2.34	10	1
1:A:119:LEU:CD1	1:A:126:ILE:HG13	0.42	2.44	7	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:111:LYS:HB2	1:A:166:TRP:HB3	0.42	1.90	7	1
1:A:75:TRP:CH2	1:A:135:LEU:HD22	0.42	2.49	3	1
1:A:141:THR:OG1	1:A:141:THR:O	0.42	2.38	2	1
1:A:48:THR:HG23	1:A:92:ASP:HB3	0.42	1.92	2	1
1:A:56:GLU:O	1:A:57:SER:HB2	0.42	2.14	2	2
2:B:262:ILE:HB	2:B:285:GLN:OE1	0.42	2.14	2	1
1:A:25:THR:HG21	2:B:258:TYR:CD1	0.42	2.49	6	1
1:A:56:GLU:HB3	1:A:60:ASP:CB	0.42	2.45	6	1
2:B:294:ALA:O	2:B:295:ASP:CG	0.42	2.57	3	2
1:A:100:VAL:CG2	1:A:101:ARG:N	0.42	2.67	11	2
2:B:256:PHE:O	2:B:258:TYR:CD1	0.42	2.72	11	1
2:B:240:ILE:CG2	2:B:298:TRP:CZ3	0.42	3.02	11	1
1:A:140:GLU:O	1:A:140:GLU:CD	0.42	2.57	1	1
1:A:48:THR:OG1	1:A:92:ASP:HB2	0.42	2.13	1	1
2:B:252:ASP:OD1	2:B:253:VAL:CG2	0.42	2.67	1	1
1:A:48:THR:CB	1:A:58:TRP:CZ3	0.42	3.02	8	1
1:A:25:THR:HG21	2:B:258:TYR:HD2	0.42	1.73	5	1
1:A:145:ASP:O	1:A:146:ASP:C	0.42	2.57	10	1
1:A:45:LEU:HD21	1:A:77:ILE:CB	0.42	2.45	7	1
1:A:91:SER:O	1:A:155:SER:HA	0.42	2.14	11	4
1:A:101:ARG:HB2	1:A:106:ASP:HB3	0.42	1.91	11	1
1:A:79:GLN:HE22	1:A:80:ASN:ND2	0.42	2.11	11	2
1:A:83:GLU:HB2	1:A:84:PRO:CD	0.42	2.45	11	1
1:A:142:ILE:CB	2:B:274:VAL:CG1	0.42	2.97	11	1
1:A:97:ARG:NE	1:A:101:ARG:HB2	0.42	2.29	1	1
1:A:106:ASP:N	1:A:109:ASN:ND2	0.42	2.68	8	1
1:A:111:LYS:HE3	1:A:166:TRP:CD1	0.42	2.48	8	1
1:A:84:PRO:CA	1:A:87:LEU:HD22	0.42	2.45	8	1
1:A:70:THR:CG2	2:B:305:LYS:CG	0.42	2.98	10	1
1:A:143:ASP:O	1:A:144:GLU:HB2	0.42	2.14	7	1
1:A:79:GLN:NE2	1:A:80:ASN:N	0.42	2.68	7	1
1:A:182:PHE:CE1	1:A:186:LEU:HD21	0.42	2.49	3	1
1:A:134:LEU:CD2	1:A:182:PHE:CE1	0.42	3.02	2	2
1:A:48:THR:HB	1:A:62:LEU:HA	0.42	1.92	2	1
1:A:78:ILE:CD1	1:A:78:ILE:N	0.42	2.79	2	1
1:A:147:SER:CB	1:A:170:GLU:HG3	0.42	2.44	11	1
1:A:79:GLN:HG3	2:B:292:VAL:N	0.42	2.30	11	2
1:A:87:LEU:CD1	1:A:91:SER:HB3	0.42	2.45	11	1
2:B:278:TYR:CB	2:B:282:PHE:CD1	0.42	3.02	11	2
1:A:170:GLU:O	1:A:171:ASP:HB2	0.42	2.15	4	2
1:A:108:ALA:HA	1:A:111:LYS:HE2	0.42	1.91	9	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:111:LYS:HD3	1:A:166:TRP:CD1	0.42	2.50	9	1
1:A:71:VAL:HG21	1:A:75:TRP:CD1	0.42	2.49	9	1
1:A:87:LEU:HB2	1:A:88:PRO:HD2	0.42	1.90	9	2
2:B:294:ALA:O	2:B:295:ASP:HB3	0.42	2.14	8	2
1:A:104:TRP:HD1	1:A:105:GLU:N	0.42	2.11	8	1
1:A:43:TRP:CE2	1:A:138:ILE:HD11	0.42	2.50	8	1
1:A:140:GLU:OE1	1:A:140:GLU:HA	0.42	2.15	8	1
1:A:57:SER:CB	1:A:60:ASP:HB2	0.42	2.45	4	2
2:B:299:VAL:HA	2:B:302:THR:OG1	0.42	2.14	4	1
1:A:147:SER:OG	1:A:148:GLN:N	0.42	2.51	10	1
2:B:244:LEU:HD23	2:B:298:TRP:CH2	0.42	2.49	10	1
1:A:79:GLN:CG	2:B:290:LEU:HB3	0.42	2.45	10	1
1:A:92:ASP:OD2	4:A:325:M7G:O1A	0.42	2.37	7	1
1:A:110:ALA:O	1:A:111:LYS:HG3	0.42	2.15	3	1
1:A:140:GLU:HG3	2:B:277:THR:CG2	0.42	2.44	3	1
1:A:135:LEU:HD12	1:A:136:ALA:CA	0.42	2.45	2	3
1:A:72:GLU:O	2:B:290:LEU:HD12	0.42	2.14	2	2
1:A:31:ALA:O	1:A:32:HIS:HB2	0.42	2.14	8	3
1:A:135:LEU:CG	1:A:136:ALA:N	0.42	2.83	4	4
1:A:130:TRP:O	1:A:133:THR:HB	0.42	2.15	6	1
2:B:248:THR:O	2:B:306:ILE:HD13	0.42	2.15	6	1
2:B:262:ILE:HD12	2:B:262:ILE:H	0.42	1.75	6	1
2:B:257:ASN:O	2:B:259:PRO:HD3	0.42	2.15	11	1
1:A:175:LEU:O	1:A:177:ARG:N	0.42	2.52	10	3
2:B:238:SER:O	2:B:242:ASN:CG	0.42	2.57	1	1
1:A:170:GLU:O	1:A:174:PRO:HG2	0.42	2.14	9	1
1:A:43:TRP:HA	1:A:97:ARG:CG	0.42	2.44	9	1
2:B:237:VAL:N	2:B:292:VAL:HB	0.42	2.29	9	1
1:A:100:VAL:CG2	1:A:110:ALA:CB	0.42	2.84	8	1
1:A:111:LYS:HE2	1:A:113:GLY:O	0.42	2.15	8	1
1:A:165:LEU:HG	1:A:165:LEU:O	0.42	2.14	8	1
1:A:172:LYS:HG3	1:A:175:LEU:HD12	0.42	1.92	8	1
1:A:81:ILE:HG13	1:A:82:PRO:HD2	0.42	1.91	8	1
2:B:268:LYS:O	2:B:271:LYS:HG2	0.42	2.15	8	2
1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CD	0.42	2.73	5	1
2:B:241:LEU:HA	2:B:244:LEU:CD1	0.42	2.44	5	1
1:A:79:GLN:NE2	2:B:287:LYS:CD	0.42	2.83	5	1
1:A:146:ASP:N	1:A:146:ASP:OD1	0.42	2.52	4	1
1:A:26:VAL:HG12	1:A:27:LEU:HD23	0.42	1.92	4	1
2:B:250:ILE:HG13	2:B:256:PHE:CE1	0.42	2.49	10	1
1:A:183:LYS:CG	1:A:194:LEU:HD13	0.42	2.44	2	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:152:VAL:HB	1:A:163:PHE:CZ	0.42	2.50	6	1
1:A:100:VAL:O	1:A:101:ARG:NE	0.42	2.53	11	1
2:B:263:GLU:O	2:B:265:PRO:HD3	0.42	2.14	9	2
2:B:275:LYS:C	2:B:276:TYR:CD1	0.42	2.93	1	1
2:B:298:TRP:CA	2:B:302:THR:HG23	0.42	2.43	1	1
2:B:306:ILE:HD13	2:B:308:ILE:HD11	0.42	1.91	1	1
1:A:158:LYS:O	1:A:159:GLY:C	0.42	2.58	3	2
1:A:123:GLY:HA2	1:A:126:ILE:HD11	0.42	1.91	9	1
1:A:89:LEU:HA	1:A:156:ILE:HG21	0.42	1.90	9	1
1:A:80:ASN:ND2	2:B:293:LYS:HA	0.42	2.30	9	1
1:A:45:LEU:HA	1:A:94:HIS:O	0.42	2.15	8	1
1:A:160:GLY:C	1:A:161:ASN:ND2	0.42	2.73	5	1
1:A:94:HIS:O	1:A:95:VAL:HG23	0.42	2.15	5	1
2:B:256:PHE:CE2	2:B:258:TYR:CE2	0.42	3.08	4	1
1:A:108:ALA:O	1:A:111:LYS:N	0.42	2.52	10	1
1:A:135:LEU:O	1:A:138:ILE:CG1	0.42	2.67	10	1
1:A:39:LEU:HD22	2:B:278:TYR:CE1	0.42	2.49	10	1
2:B:298:TRP:O	2:B:301:SER:N	0.42	2.53	10	1
1:A:27:LEU:CD2	2:B:285:GLN:OE1	0.42	2.67	3	1
1:A:105:GLU:O	1:A:106:ASP:OD1	0.42	2.38	2	1
1:A:143:ASP:O	1:A:147:SER:HA	0.42	2.15	2	1
1:A:71:VAL:CG2	2:B:283:LEU:CD2	0.42	2.90	2	2
1:A:87:LEU:CD1	1:A:156:ILE:HD12	0.42	2.41	7	2
1:A:116:SER:HA	1:A:163:PHE:O	0.42	2.15	6	2
1:A:58:TRP:CE3	4:A:325:M7G:C8	0.42	3.03	11	1
1:A:45:LEU:CA	1:A:95:VAL:HG22	0.42	2.41	1	1
1:A:71:VAL:HG23	2:B:283:LEU:CD2	0.42	2.45	5	1
1:A:200:CYS:O	3:A:323:MTN:C4	0.42	2.67	4	1
2:B:250:ILE:HG22	2:B:306:ILE:CG1	0.42	2.45	4	1
1:A:186:LEU:HD12	1:A:188:LEU:HD22	0.42	1.91	7	1
1:A:77:ILE:HD11	2:B:295:ASP:HA	0.42	1.90	3	1
1:A:81:ILE:HG22	1:A:93:TYR:CE2	0.42	2.50	3	1
1:A:99:ASP:HB2	1:A:150:ASN:HB2	0.42	1.92	3	1
2:B:290:LEU:C	2:B:292:VAL:N	0.42	2.73	3	1
1:A:44:THR:HG22	1:A:67:SER:OG	0.42	2.14	2	1
1:A:195:GLU:OE1	1:A:197:PHE:CE2	0.42	2.73	6	1
1:A:74:PHE:CD1	1:A:74:PHE:C	0.42	2.93	6	1
2:B:273:HIS:C	2:B:273:HIS:CD2	0.42	2.93	6	1
1:A:129:LEU:O	1:A:185:VAL:CG1	0.42	2.67	11	1
2:B:271:LYS:CE	2:B:271:LYS:CA	0.42	2.97	11	1
2:B:302:THR:HA	2:B:305:LYS:CE	0.42	2.45	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:80:ASN:O	1:A:82:PRO:CD	0.42	2.68	8	1
1:A:89:LEU:HD13	1:A:90:LYS:H	0.42	1.75	8	1
1:A:112:GLY:O	1:A:113:GLY:C	0.42	2.58	5	1
2:B:259:PRO:O	2:B:260:GLU:HB2	0.42	2.15	5	1
2:B:268:LYS:HB2	2:B:277:THR:O	0.42	2.15	5	1
1:A:135:LEU:HG	2:B:283:LEU:HD13	0.42	1.91	5	1
1:A:182:PHE:O	1:A:186:LEU:HG	0.42	2.15	4	1
1:A:82:PRO:O	1:A:87:LEU:HD22	0.42	2.15	4	1
1:A:36:LYS:CB	2:B:306:ILE:CG2	0.42	2.98	10	1
1:A:72:GLU:HB3	2:B:305:LYS:CE	0.42	2.45	3	1
1:A:124:ALA:O	1:A:125:ASP:CB	0.41	2.67	2	1
1:A:65:VAL:O	1:A:67:SER:OG	0.41	2.35	2	1
1:A:44:THR:CG2	1:A:67:SER:HB3	0.41	2.40	2	2
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:74:PHE:HB2	0.41	2.50	2	1
1:A:172:LYS:O	1:A:175:LEU:HB2	0.41	2.15	11	2
1:A:175:LEU:O	1:A:176:LEU:C	0.41	2.58	10	5
1:A:29:ASP:CG	1:A:30:SER:N	0.41	2.73	11	1
1:A:66:THR:CG2	1:A:66:THR:O	0.41	2.67	1	1
2:B:275:LYS:O	2:B:276:TYR:CD1	0.41	2.73	1	1
1:A:140:GLU:HG2	1:A:140:GLU:O	0.41	2.15	9	1
1:A:143:ASP:HB3	2:B:274:VAL:CG1	0.41	2.37	9	1
1:A:143:ASP:O	2:B:271:LYS:HB3	0.41	2.15	9	1
1:A:143:ASP:OD2	2:B:271:LYS:HG3	0.41	2.15	9	1
1:A:26:VAL:HB	2:B:286:PHE:CE1	0.41	2.50	9	1
1:A:42:LYS:HA	1:A:69:GLN:NE2	0.41	2.29	9	1
1:A:198:PRO:C	1:A:200:CYS:N	0.41	2.73	8	2
1:A:142:ILE:HD11	2:B:276:TYR:O	0.41	2.15	8	1
1:A:119:LEU:C	1:A:120:CYS:SG	0.41	2.98	5	1
1:A:200:CYS:O	1:A:201:SER:HB2	0.41	2.16	5	1
1:A:188:LEU:CD1	1:A:193:HIS:CD2	0.41	3.03	4	1
1:A:48:THR:OG1	1:A:94:HIS:NE2	0.41	2.52	4	1
1:A:44:THR:OG1	1:A:97:ARG:HD3	0.41	2.15	10	1
2:B:254:PHE:CD2	2:B:265:PRO:O	0.41	2.73	10	1
2:B:237:VAL:HG11	2:B:298:TRP:HB2	0.41	1.92	7	1
1:A:39:LEU:HB2	1:A:69:GLN:HB2	0.41	1.92	3	1
2:B:256:PHE:CE1	2:B:258:TYR:CD2	0.41	3.08	3	1
1:A:171:ASP:O	1:A:174:PRO:HD2	0.41	2.15	2	2
2:B:298:TRP:CE3	2:B:301:SER:HB3	0.41	2.51	10	2
1:A:75:TRP:HE1	2:B:283:LEU:HD23	0.41	1.75	6	1
1:A:127:ASP:O	1:A:131:LEU:HB2	0.41	2.15	11	1
1:A:25:THR:O	1:A:29:ASP:HB2	0.41	2.14	11	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:298:TRP:O	2:B:302:THR:HB	0.41	2.15	11	1
1:A:137:VAL:O	1:A:146:ASP:HB2	0.41	2.15	1	1
1:A:80:ASN:C	1:A:81:ILE:HG13	0.41	2.35	1	1
1:A:87:LEU:CD2	1:A:88:PRO:O	0.41	2.68	1	1
1:A:87:LEU:HD22	1:A:88:PRO:N	0.41	2.30	1	1
2:B:235:ASN:HB3	2:B:292:VAL:CG1	0.41	2.45	1	1
1:A:140:GLU:HG3	2:B:268:LYS:CG	0.41	2.45	1	1
1:A:129:LEU:HB3	1:A:185:VAL:HG12	0.41	1.93	9	2
2:B:257:ASN:O	2:B:257:ASN:OD1	0.41	2.39	9	1
1:A:80:ASN:ND2	2:B:293:LYS:CA	0.41	2.83	9	1
1:A:27:LEU:CD1	2:B:282:PHE:CE1	0.41	2.99	8	1
2:B:241:LEU:CD1	2:B:301:SER:HB2	0.41	2.44	8	1
1:A:108:ALA:O	1:A:199:HIS:O	0.41	2.38	5	1
1:A:130:TRP:CE2	1:A:134:LEU:CD1	0.41	2.99	5	1
1:A:143:ASP:O	1:A:144:GLU:CB	0.41	2.67	4	1
1:A:167:THR:HB	1:A:175:LEU:CD2	0.41	2.45	3	1
2:B:241:LEU:CD2	2:B:301:SER:CB	0.41	2.90	3	1
2:B:287:LYS:O	2:B:289:LYS:N	0.41	2.53	2	1
1:A:111:LYS:HD2	1:A:166:TRP:HB3	0.41	1.92	6	1
1:A:153:VAL:O	1:A:163:PHE:CZ	0.41	2.74	6	1
2:B:237:VAL:CG1	2:B:298:TRP:HB2	0.41	2.44	11	1
1:A:26:VAL:HG12	2:B:289:LYS:CB	0.41	2.45	1	1
1:A:47:TYR:CE1	1:A:63:ARG:O	0.41	2.74	1	1
1:A:148:GLN:CB	1:A:170:GLU:HG2	0.41	2.44	9	1
1:A:71:VAL:HG22	1:A:75:TRP:CG	0.41	2.51	9	1
1:A:32:HIS:CE1	2:B:243:VAL:HG12	0.41	2.50	8	1
1:A:115:TRP:CH2	1:A:175:LEU:HD13	0.41	2.50	4	1
1:A:90:LYS:O	1:A:90:LYS:CG	0.41	2.68	4	1
1:A:110:ALA:O	1:A:168:LYS:HA	0.41	2.15	10	1
1:A:143:ASP:OD1	2:B:268:LYS:HE3	0.41	2.15	10	1
1:A:42:LYS:O	1:A:42:LYS:CG	0.41	2.67	10	1
2:B:305:LYS:HA	2:B:305:LYS:CE	0.41	2.44	10	1
1:A:43:TRP:CE3	1:A:95:VAL:CG1	0.41	3.03	7	1
1:A:45:LEU:CD2	1:A:66:THR:CB	0.41	2.94	3	1
1:A:42:LYS:HG3	1:A:97:ARG:CG	0.41	2.44	2	1
2:B:296:ALA:O	2:B:299:VAL:CB	0.41	2.68	2	1
1:A:141:THR:C	1:A:143:ASP:N	0.41	2.73	6	1
1:A:193:HIS:HA	1:A:213:LEU:O	0.41	2.16	10	2
1:A:24:LYS:HG2	1:A:29:ASP:OD1	0.41	2.15	1	1
2:B:238:SER:O	2:B:242:ASN:HB2	0.41	2.15	1	1
1:A:143:ASP:CB	2:B:277:THR:HG21	0.41	2.46	9	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:PHE:O	1:A:97:ARG:HG2	0.41	2.16	9	1
1:A:39:LEU:HB2	1:A:69:GLN:CB	0.41	2.45	8	2
1:A:170:GLU:CB	1:A:175:LEU:HD11	0.41	2.46	5	1
1:A:156:ILE:O	1:A:157:ARG:HB2	0.41	2.14	4	2
1:A:111:LYS:CD	1:A:113:GLY:N	0.41	2.83	4	1
1:A:137:VAL:CG1	1:A:138:ILE:N	0.41	2.84	4	1
1:A:144:GLU:HG3	2:B:271:LYS:O	0.41	2.15	4	1
1:A:43:TRP:CH2	1:A:138:ILE:HD11	0.41	2.50	4	1
1:A:108:ALA:O	1:A:109:ASN:C	0.41	2.58	10	1
1:A:149:ILE:HG13	1:A:167:THR:CG2	0.41	2.38	7	1
1:A:142:ILE:CD1	2:B:274:VAL:CG2	0.41	2.98	3	1
1:A:74:PHE:CD2	1:A:78:ILE:HG13	0.41	2.51	3	1
1:A:197:PHE:CD1	1:A:201:SER:CB	0.41	3.03	2	1
1:A:26:VAL:HG22	1:A:26:VAL:O	0.41	2.16	2	1
1:A:104:TRP:HA	1:A:108:ALA:CB	0.41	2.46	11	1
1:A:26:VAL:O	2:B:289:LYS:HD3	0.41	2.15	5	2
2:B:269:TYR:CD2	2:B:274:VAL:O	0.41	2.73	9	1
2:B:252:ASP:HB2	2:B:255:SER:HB3	0.41	1.92	8	1
1:A:130:TRP:CD1	1:A:163:PHE:CD2	0.41	3.08	5	1
1:A:89:LEU:HD12	1:A:89:LEU:N	0.41	2.30	5	1
1:A:126:ILE:HD13	1:A:127:ASP:H	0.41	1.75	10	1
1:A:137:VAL:CA	1:A:141:THR:HB	0.41	2.46	10	1
1:A:73:GLU:CG	1:A:74:PHE:N	0.41	2.83	10	1
1:A:108:ALA:CB	1:A:111:LYS:HE2	0.41	2.43	7	1
1:A:80:ASN:C	1:A:81:ILE:CD1	0.41	2.85	7	1
1:A:156:ILE:HD13	1:A:161:ASN:CB	0.41	2.45	3	1
1:A:140:GLU:OE1	1:A:145:ASP:OD2	0.41	2.39	2	1
1:A:137:VAL:O	1:A:141:THR:HG22	0.41	2.16	2	1
1:A:196:PHE:CE2	1:A:211:ILE:HD12	0.41	2.50	2	1
1:A:58:TRP:CD2	1:A:62:LEU:HD11	0.41	2.51	2	1
1:A:74:PHE:O	1:A:75:TRP:C	0.41	2.59	2	3
1:A:94:HIS:CB	1:A:96:PHE:CZ	0.41	3.04	2	1
1:A:42:LYS:CB	1:A:97:ARG:HG2	0.41	2.45	2	1
1:A:140:GLU:HG3	2:B:268:LYS:HG2	0.41	1.91	1	1
1:A:76:ALA:N	2:B:290:LEU:HD12	0.41	2.30	1	1
1:A:118:GLN:O	1:A:193:HIS:CB	0.41	2.68	9	1
1:A:156:ILE:O	1:A:157:ARG:CB	0.41	2.67	9	1
1:A:75:TRP:CZ2	1:A:135:LEU:HG	0.41	2.51	8	1
1:A:32:HIS:ND1	2:B:243:VAL:CG1	0.41	2.84	8	1
1:A:81:ILE:O	1:A:84:PRO:HD2	0.41	2.16	8	2
1:A:172:LYS:HA	1:A:175:LEU:CG	0.41	2.46	4	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:GLN:HG2	1:A:69:GLN:O	0.41	2.15	4	1
1:A:197:PHE:N	1:A:197:PHE:CD1	0.41	2.87	10	1
2:B:299:VAL:HG23	2:B:300:GLN:N	0.41	2.28	10	1
1:A:78:ILE:O	1:A:79:GLN:C	0.41	2.59	7	1
1:A:148:GLN:HG2	1:A:149:ILE:CD1	0.41	2.45	3	1
1:A:134:LEU:O	1:A:135:LEU:C	0.41	2.59	2	1
1:A:79:GLN:OE1	2:B:290:LEU:HB2	0.41	2.16	2	1
1:A:176:LEU:H	1:A:176:LEU:CD1	0.41	2.29	6	1
2:B:271:LYS:HE2	2:B:274:VAL:CG2	0.41	2.45	6	1
2:B:308:ILE:O	2:B:308:ILE:HG13	0.41	2.16	6	1
1:A:39:LEU:C	2:B:276:TYR:HB3	0.41	2.35	11	1
1:A:82:PRO:O	1:A:86:GLU:CA	0.41	2.69	1	1
1:A:50:PRO:CG	1:A:92:ASP:OD1	0.41	2.69	9	1
1:A:150:ASN:OD1	1:A:166:TRP:CB	0.41	2.68	8	1
1:A:26:VAL:O	2:B:289:LYS:HG2	0.41	2.16	8	1
1:A:114:LYS:HG3	1:A:202:ALA:HB2	0.41	1.92	5	1
1:A:45:LEU:HD23	1:A:66:THR:HG1	0.41	1.75	5	1
1:A:179:GLY:O	1:A:183:LYS:HB3	0.41	2.16	4	1
1:A:157:ARG:HB3	1:A:157:ARG:CZ	0.41	2.45	10	1
1:A:28:SER:CB	2:B:260:GLU:HG3	0.41	2.44	10	1
1:A:37:HIS:NE2	2:B:253:VAL:HG12	0.41	2.30	7	1
2:B:274:VAL:CG2	2:B:277:THR:CG2	0.41	2.98	7	1
1:A:115:TRP:O	1:A:164:ALA:HA	0.41	2.16	3	1
1:A:194:LEU:HB2	1:A:213:LEU:OXT	0.41	2.15	3	1
1:A:26:VAL:HG22	1:A:72:GLU:OE2	0.41	2.15	3	1
1:A:92:ASP:OD2	1:A:155:SER:HB3	0.41	2.15	3	1
1:A:27:LEU:CD2	2:B:258:TYR:CG	0.41	3.03	6	1
1:A:44:THR:O	1:A:95:VAL:HA	0.41	2.16	1	1
1:A:156:ILE:O	1:A:157:ARG:HB3	0.41	2.16	9	1
1:A:172:LYS:HG2	1:A:175:LEU:HD12	0.41	1.91	9	1
1:A:65:VAL:HG11	2:B:295:ASP:HA	0.41	1.92	9	1
1:A:112:GLY:O	1:A:199:HIS:HB3	0.41	2.16	8	1
2:B:276:TYR:CD2	2:B:276:TYR:O	0.41	2.74	8	1
1:A:36:LYS:HD2	2:B:306:ILE:HG13	0.41	1.92	8	1
1:A:104:TRP:CD1	1:A:114:LYS:CE	0.41	3.03	5	1
1:A:83:GLU:HB3	1:A:154:LEU:HD11	0.41	1.91	5	1
1:A:49:LYS:N	1:A:50:PRO:HD3	0.41	2.30	5	1
1:A:111:LYS:HD2	1:A:114:LYS:HB2	0.41	1.93	10	1
1:A:25:THR:HG21	1:A:37:HIS:CE1	0.41	2.51	7	1
1:A:135:LEU:HD11	2:B:280:PRO:HB3	0.41	1.92	7	1
1:A:169:CYS:C	1:A:171:ASP:N	0.41	2.75	3	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:140:GLU:O	1:A:145:ASP:HB3	0.41	2.15	2	1
1:A:39:LEU:HD13	1:A:69:GLN:O	0.41	2.16	2	1
1:A:101:ARG:HG3	1:A:102:PRO:HD3	0.41	1.92	6	1
1:A:57:SER:C	1:A:59:SER:N	0.41	2.73	6	2
1:A:44:THR:CA	1:A:67:SER:CB	0.41	2.99	11	1
1:A:93:TYR:O	1:A:154:LEU:HB3	0.41	2.15	1	1
1:A:160:GLY:O	1:A:161:ASN:HB3	0.41	2.16	9	1
1:A:95:VAL:O	1:A:96:PHE:HB3	0.41	2.16	9	1
2:B:275:LYS:HG2	2:B:276:TYR:CE2	0.41	2.50	9	1
1:A:39:LEU:HA	2:B:276:TYR:O	0.41	2.16	9	1
1:A:111:LYS:HB3	1:A:150:ASN:CG	0.41	2.36	8	1
1:A:156:ILE:O	1:A:157:ARG:NE	0.41	2.54	8	1
1:A:75:TRP:O	1:A:79:GLN:HG2	0.41	2.16	8	1
1:A:92:ASP:CA	1:A:154:LEU:O	0.41	2.69	8	1
1:A:142:ILE:CG2	2:B:273:HIS:HB2	0.41	2.46	8	1
1:A:111:LYS:CE	1:A:166:TRP:CG	0.41	3.03	8	1
2:B:240:ILE:HA	2:B:243:VAL:HG13	0.41	1.93	8	1
2:B:251:GLU:HB2	2:B:255:SER:OG	0.41	2.16	8	1
2:B:273:HIS:CD2	2:B:273:HIS:O	0.41	2.74	5	1
1:A:33:PHE:CE1	2:B:240:ILE:HA	0.41	2.51	5	1
1:A:137:VAL:HG22	1:A:146:ASP:OD2	0.41	2.16	4	1
1:A:186:LEU:O	1:A:187:LYS:HB2	0.41	2.16	4	1
1:A:193:HIS:ND1	1:A:213:LEU:HB3	0.41	2.31	4	1
1:A:111:LYS:HD2	1:A:112:GLY:N	0.41	2.31	4	1
1:A:84:PRO:CA	1:A:127:ASP:HB3	0.41	2.46	4	1
1:A:58:TRP:NE1	1:A:62:LEU:CD1	0.41	2.84	4	1
1:A:137:VAL:HA	1:A:141:THR:CA	0.41	2.46	10	1
1:A:35:VAL:O	1:A:35:VAL:CG1	0.41	2.69	10	1
2:B:296:ALA:O	2:B:297:GLU:C	0.41	2.59	10	1
2:B:299:VAL:C	2:B:301:SER:N	0.41	2.72	10	1
1:A:194:LEU:C	1:A:195:GLU:HG3	0.41	2.36	7	1
1:A:97:ARG:CD	1:A:101:ARG:CD	0.41	2.98	7	1
1:A:183:LYS:O	1:A:186:LEU:N	0.41	2.52	7	1
1:A:58:TRP:NE1	1:A:103:GLU:OE1	0.41	2.53	3	1
1:A:196:PHE:HB2	1:A:210:SER:HB3	0.41	1.92	3	1
1:A:27:LEU:O	2:B:260:GLU:CG	0.41	2.69	2	1
1:A:100:VAL:CG1	1:A:101:ARG:H	0.41	2.28	6	1
1:A:70:THR:O	1:A:71:VAL:CG1	0.41	2.69	6	1
1:A:38:PRO:HB2	2:B:307:VAL:CB	0.41	2.46	1	1
1:A:87:LEU:HD13	1:A:87:LEU:O	0.41	2.15	1	1
2:B:258:TYR:CZ	2:B:282:PHE:CD1	0.41	3.09	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:167:THR:C	1:A:169:CYS:N	0.41	2.74	10	2
1:A:142:ILE:HD13	1:A:142:ILE:C	0.41	2.36	9	1
2:B:250:ILE:O	2:B:308:ILE:HB	0.41	2.16	8	1
1:A:196:PHE:CD1	1:A:211:ILE:CB	0.41	3.04	4	1
1:A:128:GLU:O	1:A:128:GLU:OE1	0.41	2.39	10	1
1:A:44:THR:HA	1:A:67:SER:HB3	0.41	1.92	10	1
1:A:128:GLU:OE2	2:B:284:LEU:HD21	0.41	2.15	3	1
1:A:73:GLU:OE2	2:B:305:LYS:HD3	0.41	2.16	3	1
1:A:119:LEU:O	1:A:161:ASN:OD1	0.40	2.39	2	1
1:A:125:ASP:O	1:A:129:LEU:HG	0.40	2.15	2	1
1:A:82:PRO:O	1:A:87:LEU:CB	0.40	2.69	2	1
1:A:38:PRO:HA	2:B:307:VAL:CG1	0.40	2.46	2	1
1:A:47:TYR:OH	1:A:65:VAL:CG1	0.40	2.69	6	1
1:A:94:HIS:ND1	1:A:103:GLU:OE2	0.40	2.54	11	1
1:A:39:LEU:CA	2:B:276:TYR:HB2	0.40	2.45	9	1
2:B:274:VAL:HG22	2:B:275:LYS:H	0.40	1.76	8	1
1:A:117:PHE:CD2	1:A:186:LEU:HD11	0.40	2.51	4	1
1:A:138:ILE:HG13	1:A:139:GLY:N	0.40	2.31	4	1
1:A:117:PHE:HD1	1:A:194:LEU:HD12	0.40	1.75	4	1
1:A:37:HIS:CE1	2:B:286:PHE:CZ	0.40	3.08	10	1
1:A:82:PRO:HG2	1:A:154:LEU:CD1	0.40	2.44	3	1
1:A:136:ALA:O	1:A:140:GLU:HG2	0.40	2.16	6	1
1:A:47:TYR:CE2	1:A:65:VAL:HG11	0.40	2.51	6	1
1:A:73:GLU:OE2	2:B:302:THR:HG21	0.40	2.16	6	1
2:B:252:ASP:HB3	2:B:255:SER:CB	0.40	2.46	6	1
1:A:176:LEU:CD1	1:A:176:LEU:H	0.40	2.30	11	1
2:B:274:VAL:CB	2:B:277:THR:CG2	0.40	2.99	11	1
1:A:25:THR:CG2	2:B:256:PHE:CD1	0.40	3.05	9	1
1:A:41:THR:OG1	1:A:98:ASN:HB3	0.40	2.16	9	1
2:B:269:TYR:HA	2:B:274:VAL:O	0.40	2.16	9	1
1:A:112:GLY:HA2	1:A:167:THR:O	0.40	2.17	5	1
1:A:182:PHE:O	1:A:186:LEU:CG	0.40	2.69	4	1
1:A:28:SER:CB	2:B:259:PRO:HD2	0.40	2.46	4	1
1:A:29:ASP:OD1	2:B:289:LYS:HD2	0.40	2.17	10	1
2:B:272:GLU:O	2:B:273:HIS:C	0.40	2.59	10	1
3:A:321:MTN:H42	2:B:284:LEU:HD21	0.40	1.94	10	1
2:B:299:VAL:O	2:B:302:THR:N	0.40	2.54	10	1
1:A:111:LYS:HA	1:A:150:ASN:OD1	0.40	2.17	7	1
1:A:126:ILE:HB	1:A:185:VAL:O	0.40	2.17	7	1
1:A:27:LEU:HD21	2:B:285:GLN:OE1	0.40	2.15	3	1
2:B:277:THR:HG22	2:B:277:THR:O	0.40	2.17	11	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:171:ASP:N	1:A:171:ASP:OD1	0.40	2.54	1	1
2:B:269:TYR:HA	2:B:274:VAL:HG22	0.40	1.93	1	1
1:A:119:LEU:CD1	1:A:186:LEU:HB3	0.40	2.46	9	1
1:A:73:GLU:OE2	2:B:302:THR:CB	0.40	2.70	9	1
1:A:183:LYS:CB	1:A:188:LEU:HD21	0.40	2.47	8	1
1:A:45:LEU:CB	1:A:95:VAL:HG22	0.40	2.43	8	1
1:A:76:ALA:O	1:A:80:ASN:ND2	0.40	2.54	5	1
2:B:241:LEU:HD12	2:B:297:GLU:HB2	0.40	1.93	5	1
2:B:254:PHE:HB3	2:B:265:PRO:O	0.40	2.16	5	2
2:B:268:LYS:HB3	2:B:271:LYS:CG	0.40	2.46	5	1
1:A:143:ASP:OD1	2:B:268:LYS:CE	0.40	2.69	10	1
1:A:57:SER:OG	1:A:60:ASP:HB2	0.40	2.17	10	1
2:B:266:ASP:OD2	2:B:270:LYS:HE2	0.40	2.17	10	1
1:A:143:ASP:CG	1:A:147:SER:OG	0.40	2.60	3	1
2:B:273:HIS:O	2:B:273:HIS:CD2	0.40	2.74	3	1
1:A:43:TRP:NE1	1:A:69:GLN:HA	0.40	2.30	2	1
1:A:97:ARG:NH1	1:A:141:THR:HG21	0.40	2.32	6	1
2:B:287:LYS:O	2:B:291:ASN:OD1	0.40	2.40	6	1
1:A:103:GLU:HA	1:A:107:GLU:CB	0.40	2.46	11	1
1:A:129:LEU:O	1:A:185:VAL:HG11	0.40	2.17	11	1
2:B:268:LYS:O	2:B:274:VAL:O	0.40	2.40	11	1
1:A:98:ASN:OD1	1:A:150:ASN:HA	0.40	2.16	1	1
1:A:118:GLN:O	1:A:193:HIS:HB3	0.40	2.15	9	1
1:A:39:LEU:HB2	1:A:69:GLN:HG2	0.40	1.94	5	1
2:B:253:VAL:C	2:B:255:SER:N	0.40	2.75	5	1
1:A:87:LEU:C	1:A:87:LEU:HD23	0.40	2.36	4	1
1:A:129:LEU:CB	1:A:185:VAL:HG13	0.40	2.46	10	1
1:A:84:PRO:HA	1:A:127:ASP:OD1	0.40	2.16	10	1
1:A:126:ILE:CG2	1:A:185:VAL:O	0.40	2.69	7	1
1:A:120:CYS:O	1:A:160:GLY:HA3	0.40	2.17	3	1
1:A:43:TRP:CD2	1:A:68:PHE:O	0.40	2.74	2	1
1:A:46:TRP:HA	1:A:63:ARG:O	0.40	2.17	2	1
2:B:258:TYR:CD1	2:B:262:ILE:CG1	0.40	3.04	2	1
1:A:108:ALA:HA	1:A:111:LYS:CD	0.40	2.47	6	1
1:A:106:ASP:C	1:A:108:ALA:N	0.40	2.74	11	1
1:A:47:TYR:OH	1:A:63:ARG:HG2	0.40	2.15	11	1
1:A:45:LEU:HG	1:A:65:VAL:HB	0.40	1.94	11	1
1:A:87:LEU:HD12	1:A:91:SER:CB	0.40	2.47	11	1
1:A:66:THR:OG1	2:B:299:VAL:HB	0.40	2.16	11	1
1:A:111:LYS:HA	1:A:168:LYS:HA	0.40	1.92	9	1
2:B:258:TYR:CD2	2:B:263:GLU:HA	0.40	2.52	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:114:LYS:HB2	1:A:166:TRP:CD1	0.40	2.52	8	1
1:A:166:TRP:N	1:A:166:TRP:CD1	0.40	2.88	5	1
1:A:90:LYS:O	1:A:90:LYS:HG2	0.40	2.16	4	1
1:A:163:PHE:CZ	1:A:186:LEU:CD2	0.40	3.05	10	1
1:A:163:PHE:CE2	1:A:186:LEU:CD2	0.40	3.05	10	1
1:A:56:GLU:HG3	1:A:56:GLU:O	0.40	2.16	10	1
2:B:298:TRP:CE3	2:B:301:SER:CB	0.40	3.03	10	1
1:A:49:LYS:HB3	1:A:50:PRO:HD3	0.40	1.93	7	1
1:A:70:THR:OG1	1:A:72:GLU:HG3	0.40	2.16	7	1
1:A:87:LEU:HB2	1:A:88:PRO:CD	0.40	2.47	3	1

## 6.3 Torsion angles ⓘ

### 6.3.1 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	175/213 (82%)	110±4 (63±2%)	39±4 (22±2%)	25±3 (14±2%)	1	5
2	B	75/100 (75%)	50±2 (67±3%)	12±2 (16±3%)	13±3 (17±4%)	0	3
All	All	2750/3443 (80%)	1767 (64%)	564 (21%)	419 (15%)	1	4

All 93 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
2	B	252	ASP	11
2	B	253	VAL	11
1	A	169	CYS	11
2	B	267	ILE	11
2	B	272	GLU	11
1	A	100	VAL	11
2	B	291	ASN	11
2	B	265	PRO	11
1	A	89	LEU	11
2	B	295	ASP	10
1	A	103	GLU	10

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	71	VAL	9
1	A	170	GLU	9
1	A	143	ASP	9
1	A	32	HIS	9
2	B	292	VAL	9
1	A	102	PRO	9
1	A	31	ALA	9
2	B	263	GLU	8
1	A	101	ARG	8
1	A	97	ARG	7
1	A	160	GLY	7
1	A	70	THR	7
1	A	66	THR	7
1	A	147	SER	7
1	A	168	LYS	6
1	A	149	ILE	6
1	A	50	PRO	6
2	B	274	VAL	6
2	B	260	GLU	6
1	A	171	ASP	6
1	A	57	SER	6
1	A	148	GLN	6
1	A	124	ALA	6
1	A	56	GLU	6
1	A	125	ASP	6
2	B	249	PRO	5
1	A	193	HIS	5
1	A	98	ASN	4
2	B	293	LYS	4
1	A	83	GLU	4
1	A	188	LEU	4
2	B	294	ALA	4
1	A	65	VAL	4
2	B	273	HIS	3
2	B	259	PRO	3
1	A	157	ARG	3
2	B	275	LYS	3
1	A	194	LEU	3
2	B	248	THR	3
1	A	49	LYS	3
1	A	199	HIS	3
1	A	122	LYS	3

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
2	B	271	LYS	2
2	B	305	LYS	2
2	B	279	GLY	2
1	A	111	LYS	2
1	A	142	ILE	2
1	A	81	ILE	2
1	A	123	GLY	2
1	A	106	ASP	2
1	A	140	GLU	2
1	A	22	THR	2
1	A	132	CYS	2
1	A	210	SER	2
1	A	38	PRO	2
1	A	29	ASP	2
1	A	144	GLU	2
1	A	96	PHE	2
1	A	82	PRO	2
1	A	77	ILE	2
1	A	84	PRO	2
1	A	200	CYS	1
1	A	72	GLU	1
1	A	113	GLY	1
1	A	95	VAL	1
1	A	79	GLN	1
1	A	90	LYS	1
1	A	145	ASP	1
1	A	112	GLY	1
1	A	158	LYS	1
1	A	201	SER	1
2	B	296	ALA	1
2	B	290	LEU	1
1	A	211	ILE	1
1	A	99	ASP	1
2	B	264	GLY	1
1	A	187	LYS	1
1	A	27	LEU	1
1	A	161	ASN	1
2	B	270	LYS	1
1	A	85	HIS	1
1	A	33	PHE	1

### 6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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	158/191 (83%)	87±4 (55±3%)	71±4 (45±3%)	0	2
2	B	68/87 (78%)	43±2 (63±3%)	25±2 (37±3%)	1	7
All	All	2486/3058 (81%)	1432 (58%)	1054 (42%)	0	3

All 194 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	48	THR	11
2	B	253	VAL	11
2	B	305	LYS	11
1	A	117	PHE	11
1	A	183	LYS	11
2	B	267	ILE	11
1	A	165	LEU	11
2	B	258	TYR	11
2	B	290	LEU	11
1	A	211	ILE	11
1	A	178	ILE	11
1	A	57	SER	11
1	A	155	SER	11
1	A	69	GLN	11
1	A	59	SER	11
1	A	184	GLN	11
1	A	129	LEU	11
1	A	33	PHE	11
2	B	286	PHE	10
1	A	104	TRP	10
1	A	130	TRP	10
1	A	27	LEU	10
1	A	137	VAL	10
1	A	46	TRP	10
1	A	210	SER	10
1	A	78	ILE	9
1	A	188	LEU	9
1	A	96	PHE	9

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	168	LYS	9
2	B	268	LYS	9
1	A	133	THR	9
1	A	89	LEU	9
1	A	98	ASN	8
1	A	115	TRP	8
2	B	289	LYS	8
1	A	158	LYS	8
2	B	255	SER	8
1	A	92	ASP	8
2	B	277	THR	8
1	A	101	ARG	8
1	A	42	LYS	8
2	B	262	ILE	8
2	B	306	ILE	8
1	A	75	TRP	8
1	A	40	ASN	8
2	B	236	THR	7
1	A	116	SER	7
1	A	63	ARG	7
1	A	138	ILE	7
1	A	149	ILE	7
1	A	60	ASP	7
1	A	94	HIS	7
1	A	176	LEU	7
1	A	86	GLU	7
1	A	32	HIS	7
1	A	134	LEU	7
1	A	144	GLU	7
1	A	146	ASP	7
1	A	201	SER	7
1	A	196	PHE	7
1	A	128	GLU	7
1	A	135	LEU	7
1	A	162	LYS	7
1	A	163	PHE	7
1	A	65	VAL	7
1	A	122	LYS	7
1	A	91	SER	7
1	A	34	ASP	6
1	A	43	TRP	6
2	B	241	LEU	6

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
2	B	271	LYS	6
1	A	173	GLU	6
2	B	284	LEU	6
1	A	111	LYS	6
2	B	298	TRP	6
1	A	70	THR	6
1	A	36	LYS	6
1	A	74	PHE	6
1	A	126	ILE	6
1	A	87	LEU	6
1	A	30	SER	6
1	A	106	ASP	6
2	B	293	LYS	6
1	A	150	ASN	6
1	A	67	SER	6
1	A	131	LEU	6
2	B	276	TYR	6
1	A	161	ASN	6
1	A	93	TYR	6
2	B	278	TYR	6
2	B	248	THR	6
2	B	270	LYS	6
1	A	193	HIS	6
1	A	125	ASP	6
2	B	238	SER	5
1	A	119	LEU	5
1	A	72	GLU	5
1	A	39	LEU	5
1	A	194	LEU	5
1	A	79	GLN	5
1	A	103	GLU	5
1	A	83	GLU	5
2	B	260	GLU	5
2	B	301	SER	5
1	A	99	ASP	5
2	B	234	THR	5
1	A	171	ASP	5
1	A	172	LYS	5
1	A	45	LEU	5
1	A	28	SER	5
1	A	61	LEU	5
1	A	127	ASP	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	181	LYS	5
1	A	147	SER	5
2	B	273	HIS	4
1	A	47	TYR	4
1	A	141	THR	4
1	A	90	LYS	4
1	A	105	GLU	4
2	B	275	LYS	4
1	A	142	ILE	4
1	A	81	ILE	4
1	A	49	LYS	4
2	B	243	VAL	4
1	A	25	THR	4
1	A	140	GLU	4
1	A	187	LYS	4
2	B	257	ASN	4
1	A	170	GLU	4
2	B	272	GLU	4
1	A	186	LEU	4
1	A	200	CYS	4
1	A	120	CYS	4
1	A	97	ARG	3
2	B	274	VAL	3
1	A	118	GLN	3
2	B	246	ASP	3
1	A	157	ARG	3
2	B	239	HIS	3
1	A	35	VAL	3
2	B	297	GLU	3
1	A	143	ASP	3
2	B	263	GLU	3
2	B	269	TYR	3
2	B	244	LEU	3
2	B	287	LYS	3
2	B	304	SER	3
1	A	24	LYS	3
1	A	177	ARG	3
2	B	300	GLN	3
2	B	291	ASN	3
1	A	148	GLN	3
2	B	245	LYS	3
1	A	156	ILE	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	73	GLU	3
2	B	240	ILE	3
2	B	308	ILE	3
2	B	288	ASP	2
1	A	37	HIS	2
1	A	80	ASN	2
1	A	22	THR	2
2	B	251	GLU	2
2	B	266	ASP	2
2	B	242	ASN	2
1	A	62	LEU	2
2	B	302	THR	2
1	A	182	PHE	2
1	A	199	HIS	2
2	B	292	VAL	2
1	A	41	THR	2
1	A	132	CYS	2
2	B	250	ILE	2
1	A	85	HIS	2
1	A	77	ILE	2
1	A	197	PHE	2
2	B	237	VAL	1
2	B	295	ASP	1
1	A	68	PHE	1
2	B	235	ASN	1
2	B	307	VAL	1
1	A	145	ASP	1
1	A	107	GLU	1
1	A	66	THR	1
1	A	109	ASN	1
1	A	154	LEU	1
1	A	153	VAL	1
1	A	100	VAL	1
1	A	114	LYS	1
1	A	58	TRP	1
1	A	29	ASP	1
1	A	169	CYS	1
2	B	254	PHE	1
1	A	56	GLU	1
2	B	283	LEU	1

### 6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

## 6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no carbohydrates in this entry.

## 6.6 Ligand geometry ⓘ

5 ligands are 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
3	MTN	A	320	1	10,12,16	1.12±0.01	0±0 (0±0%)
3	MTN	A	321	1	10,12,16	1.12±0.01	0±0 (0±0%)
3	MTN	A	322	1	10,12,16	1.12±0.00	0±0 (0±0%)
3	MTN	A	323	1	10,12,16	1.12±0.00	0±0 (0±0%)
4	M7G	A	325	-	27,31,31	1.67±0.02	1±0 (3±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
3	MTN	A	320	1	11,20,27	1.47±0.01	0±0 (0±0%)
3	MTN	A	321	1	11,20,27	1.47±0.01	0±0 (0±0%)



Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond angles		
					Counts	RMSZ	#Z>2
3	MTN	A	322	1	11,20,27	1.47±0.01	0±0 (0±0%)
3	MTN	A	323	1	11,20,27	1.47±0.01	0±0 (0±0%)
4	M7G	A	325	-	27,49,49	1.05±0.02	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
3	MTN	A	320	1	-	0±0,0,25,29	0±0,1,1,1
3	MTN	A	321	1	-	0±0,0,25,29	0±0,1,1,1
3	MTN	A	322	1	-	0±0,0,25,29	0±0,1,1,1
3	MTN	A	323	1	-	0±0,0,25,29	0±0,1,1,1
4	M7G	A	325	-	-	0±0,16,44,44	0±0,3,3,3

All unique bond outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
4	A	325	M7G	C8-N9	6.96	1.35	1.45	5	11

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

## 6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

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

There are no chain breaks in this entry.

## 7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided