



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 7, 2022 – 07:35 PM EST

PDB ID : 1AP8  
Title : TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E IN COMPLEX WITH  
M7GDP, NMR, 20 STRUCTURES  
Authors : Matsuo, H.; Li, H.; Mcguire, A.M.; Fletcher, M.; Gingras, A.C.; Sonenberg,  
N.; Wagner, G.  
Deposited on : 1997-07-25

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

---

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

MolProbity : 4.02b-467  
Mogul : 1.8.5 (274361), CSD as541be (2020)  
buster-report : 1.1.7 (2018)  
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)  
RCI : v\_1n\_11\_5\_13\_A (Berjanski et al., 2005)  
PANAV : Wang et al. (2010)  
ShiftChecker : 2.26  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.26

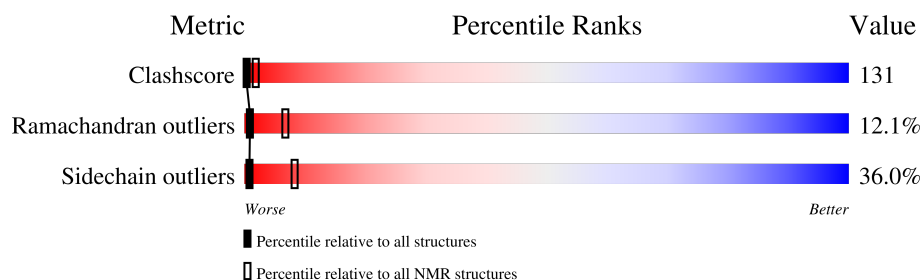
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	158937	12864
Ramachandran outliers	154571	11451
Sidechain outliers	154315	11428

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the experimental data. The red, orange, yellow and green segments indicate the fraction of residues that contain outliers for  $\geq 3$ , 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 Ensemble composition and analysis

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

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:3-A:11 (9)	1.27	8
2	A:39-A:50, A:57-A:139, A:148-A:188, A:193-A:203, A:210-A:213 (151)	0.60	20

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

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

The models can be grouped into 4 clusters. No single-model clusters were found.

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

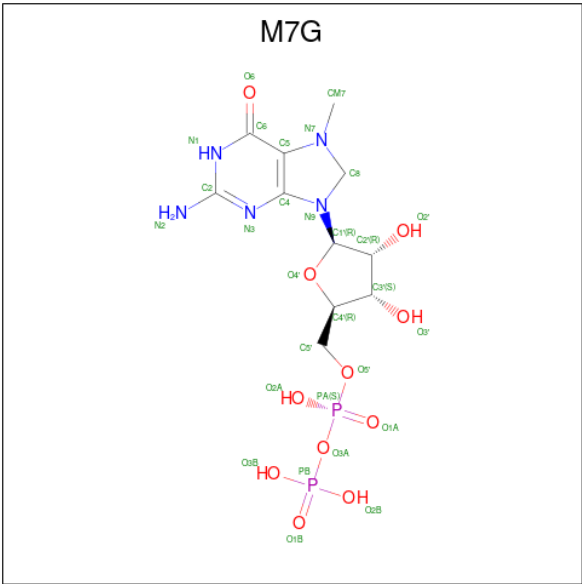
3 Entry composition ⓘ

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 3438 atoms, of which 1691 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	213	3394	1095	1676	291	331	1	0

- Molecule 2 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>).



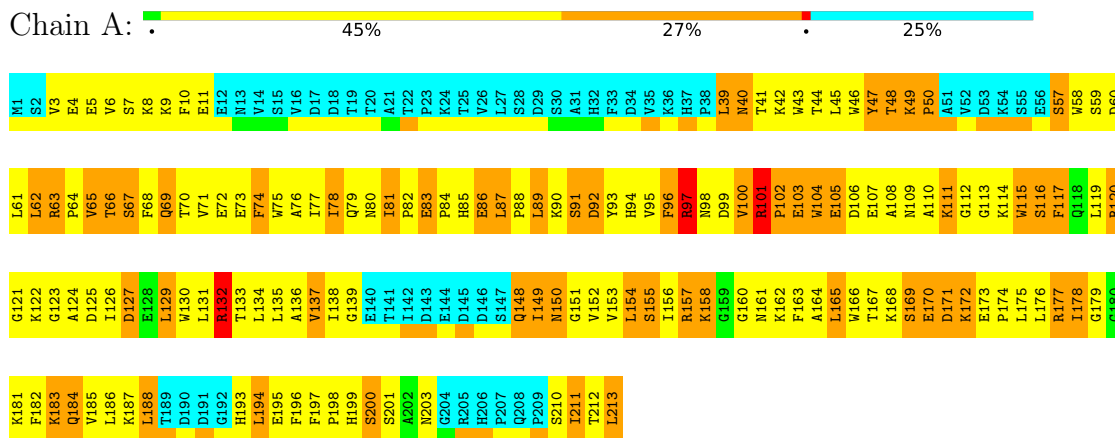
Mol	Chain	Residues	Atoms					
			Total	C	H	N	O	P
2	A	1	44	11	15	5	11	2

## 4 Residue-property plots

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

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

- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E

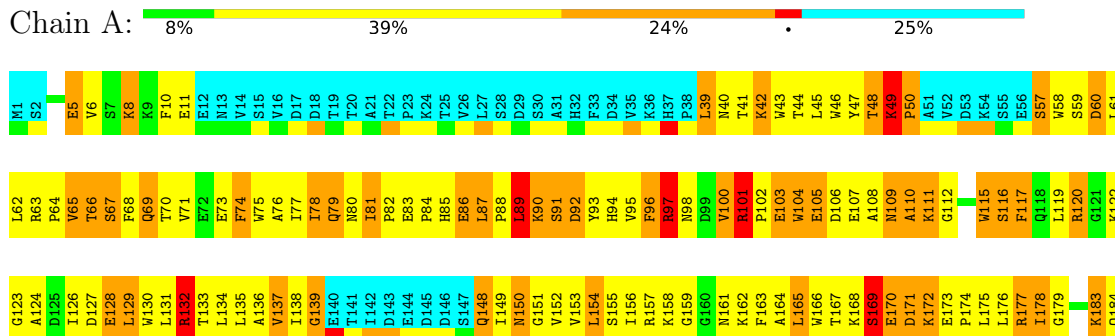


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

#### 4.2.1 Score per residue for model 1

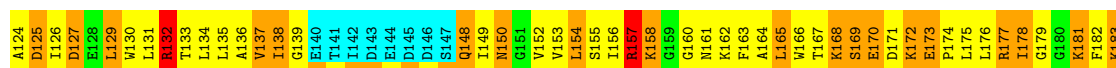
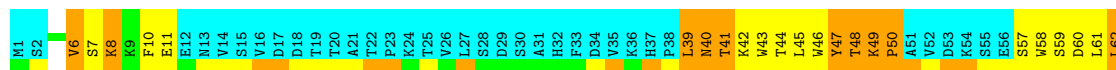
- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E





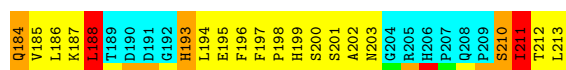
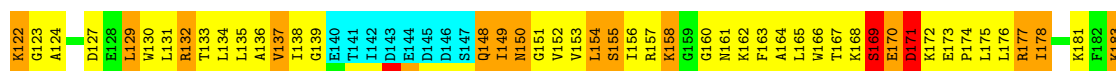
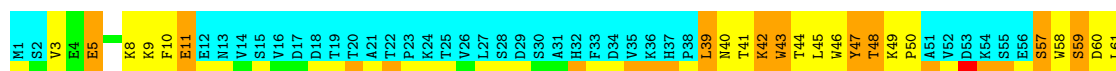
#### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E



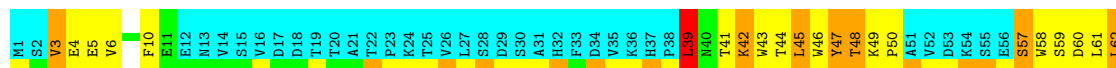
#### 4.2.3 Score per residue for model 3

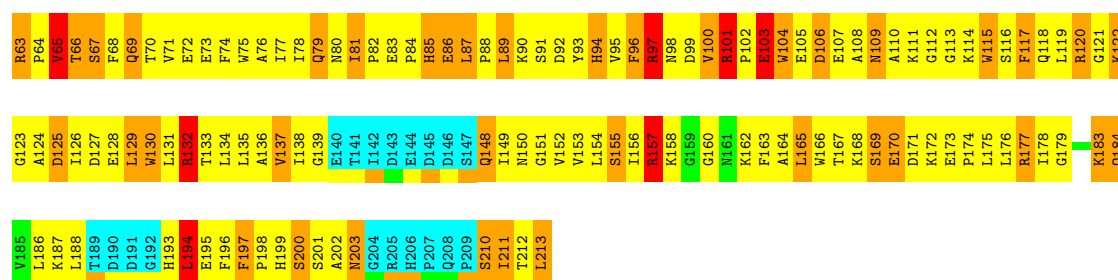
- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E



#### 4.2.4 Score per residue for model 4

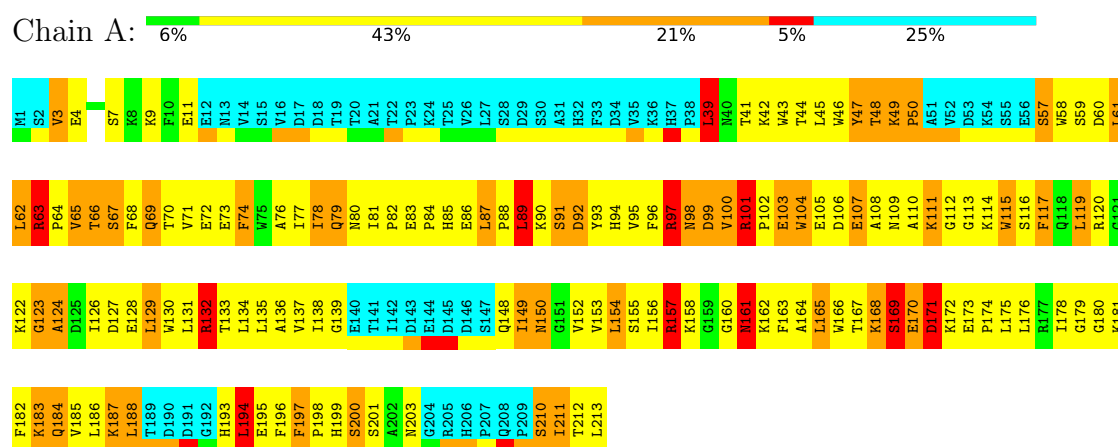
- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E





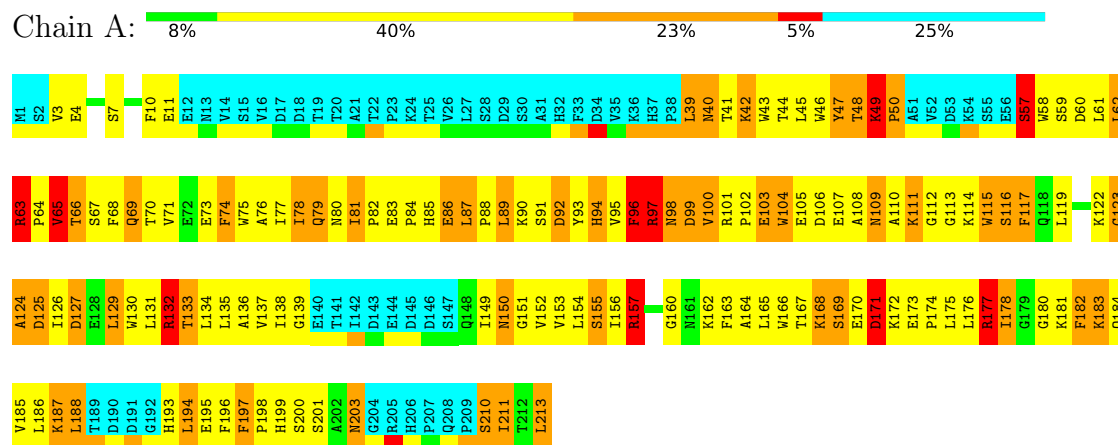
#### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E



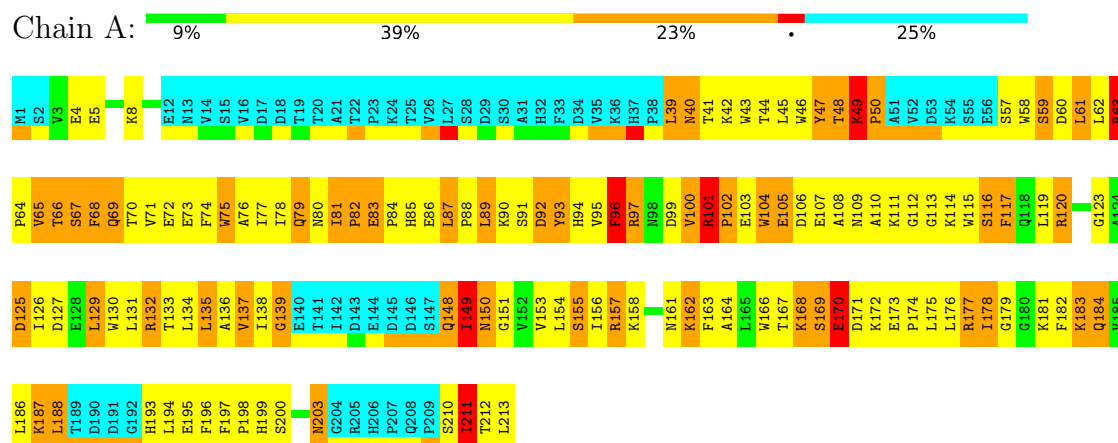
#### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E



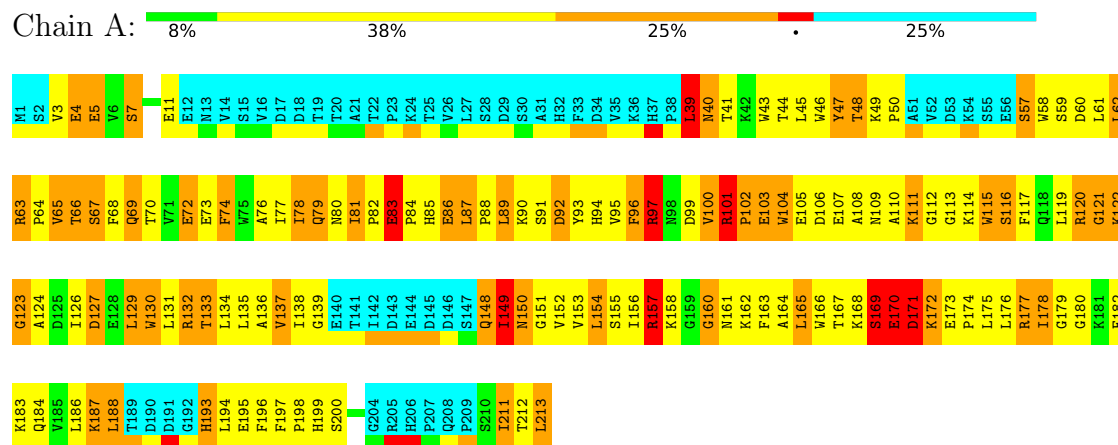
### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E



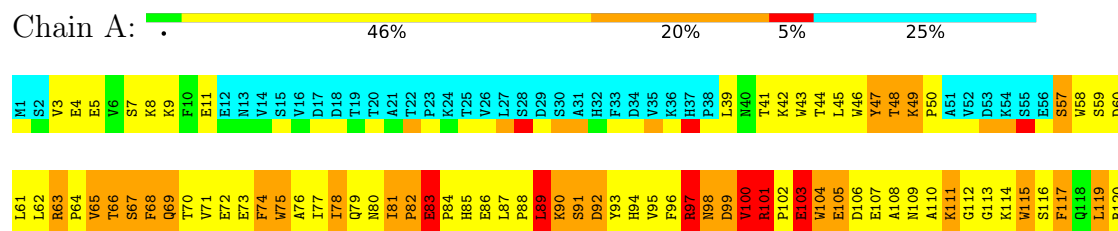
### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E

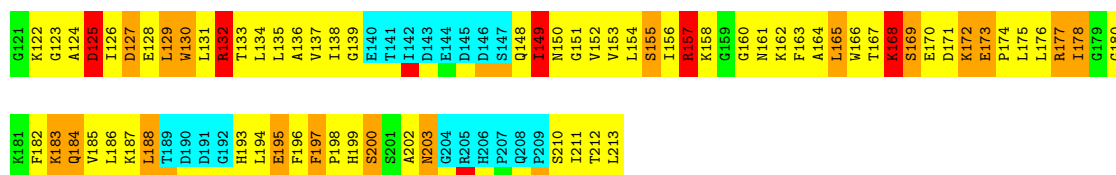


### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E

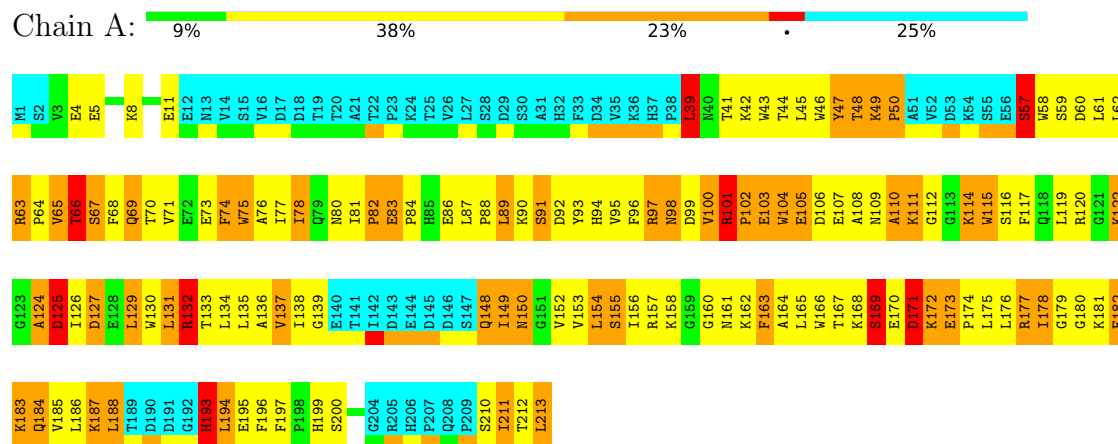






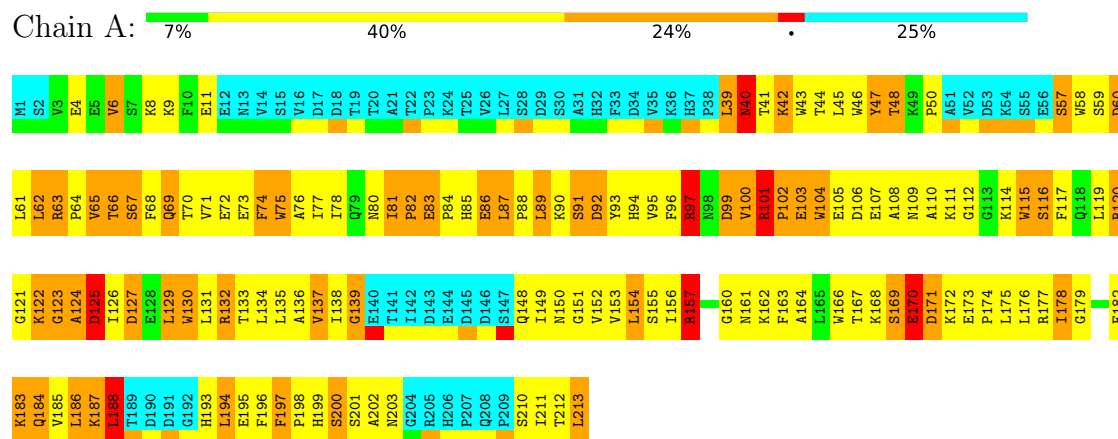
#### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E



#### 4.2.11 Score per residue for model 11

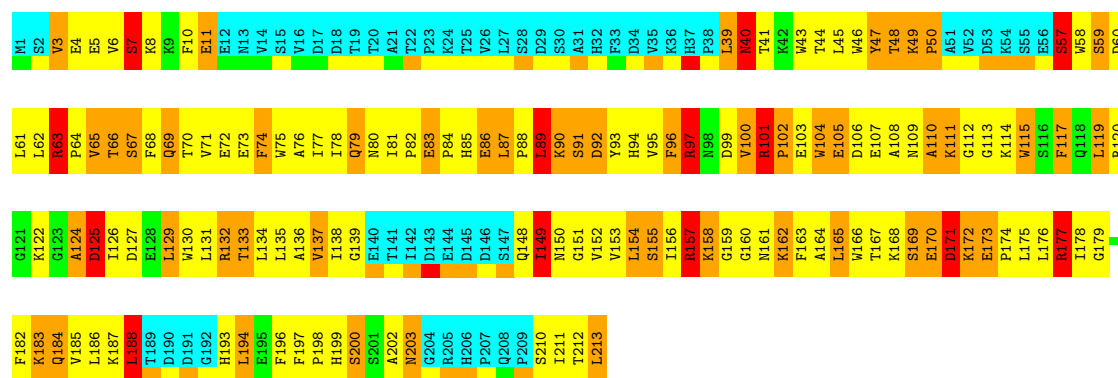
- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E



#### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E

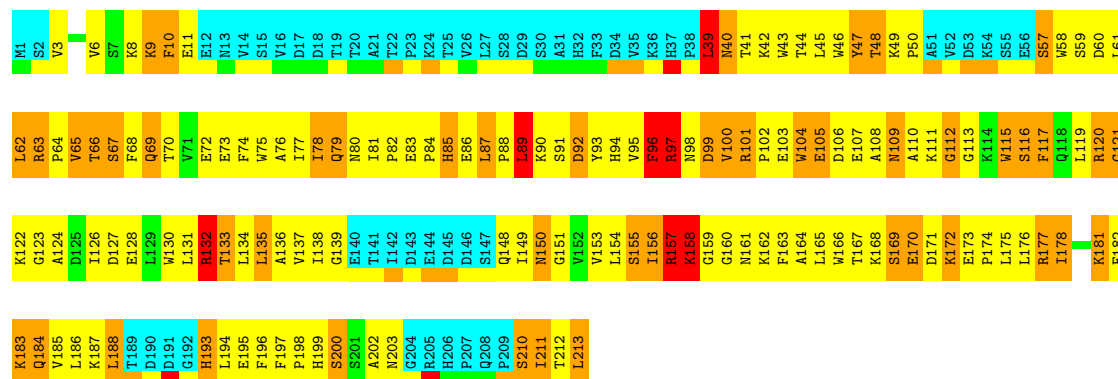




#### 4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E

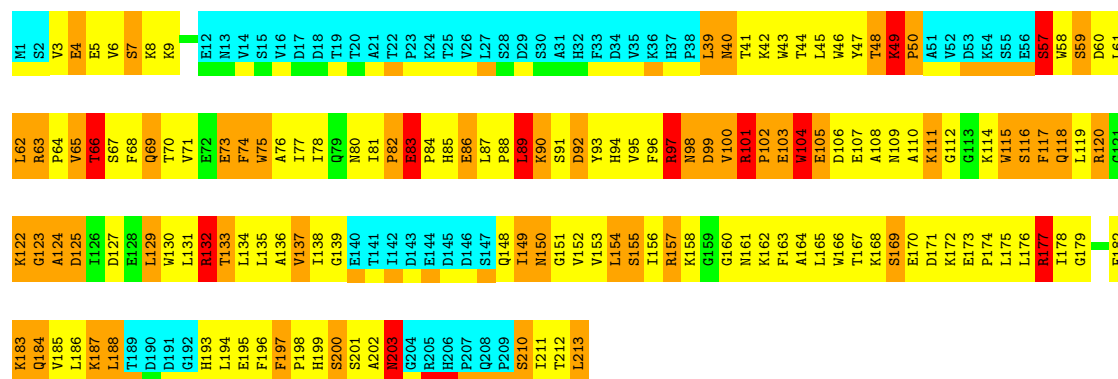
Chain A: 6% 44% 23% 25%



#### 4.2.14 Score per residue for model 14

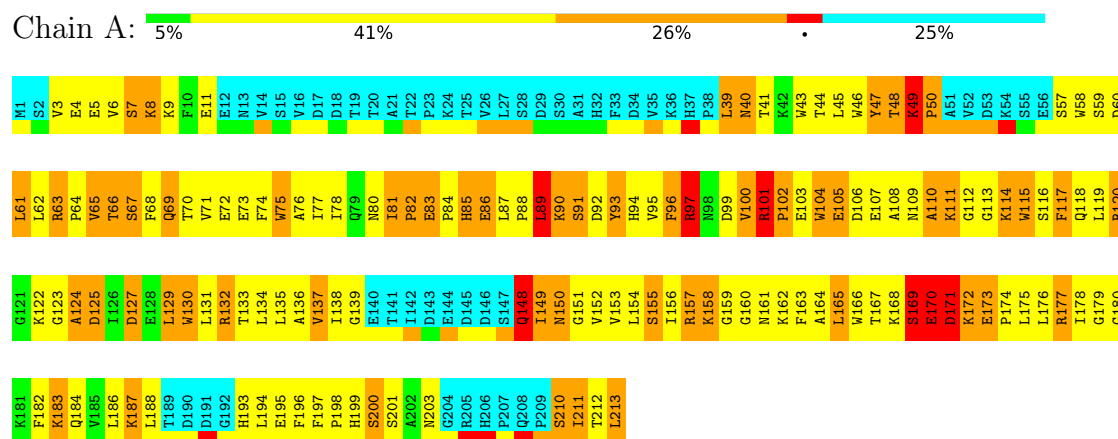
- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E

Chain A: 5% 41% 24% 5% 25%



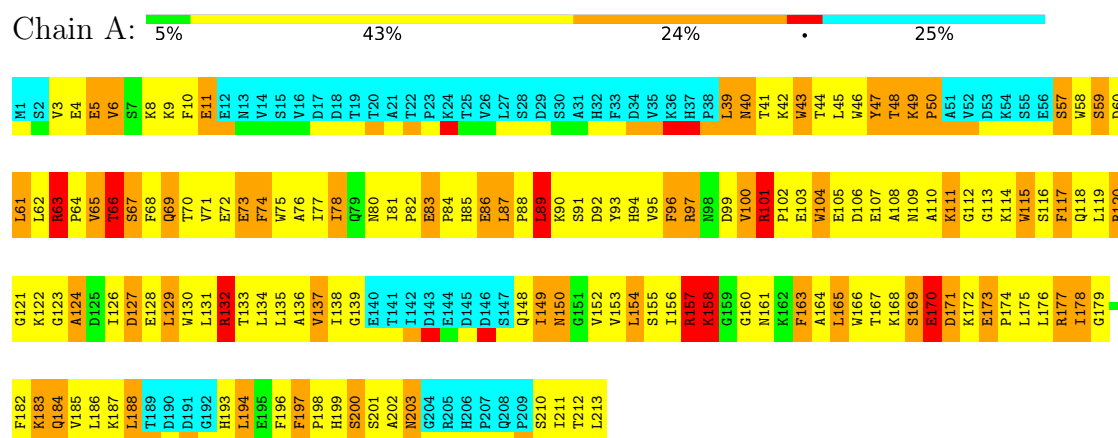
### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E



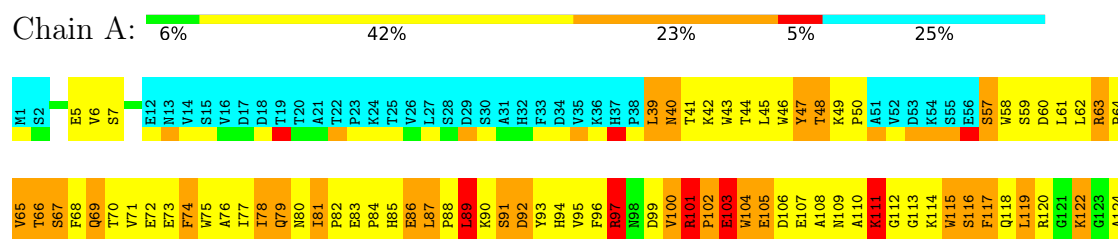
### 4.2.16 Score per residue for model 16

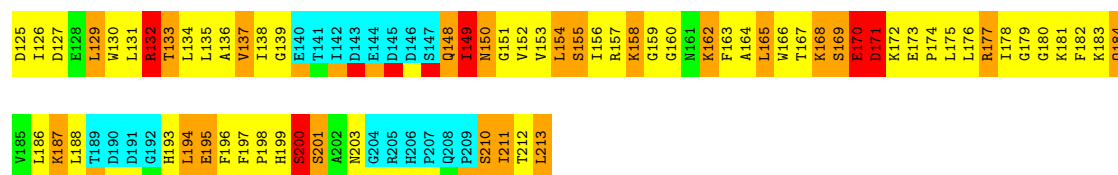
- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E



### 4.2.17 Score per residue for model 17

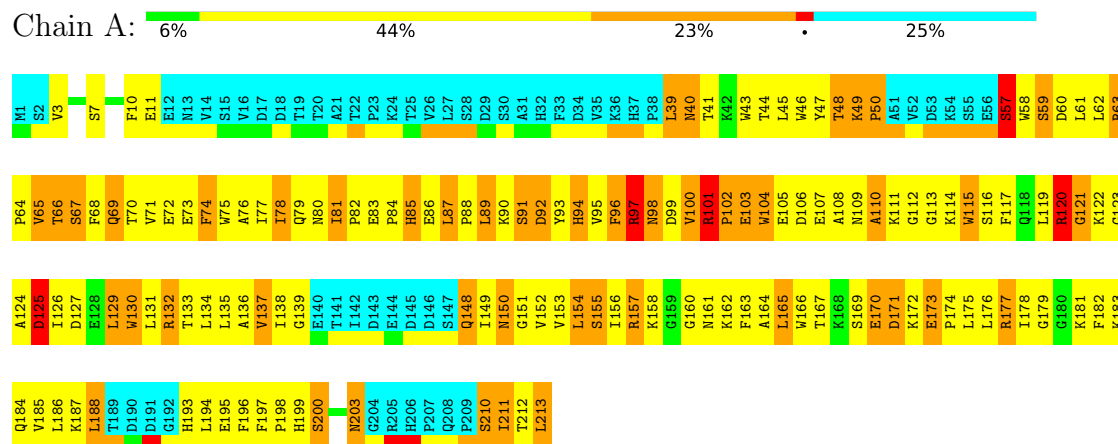
- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E





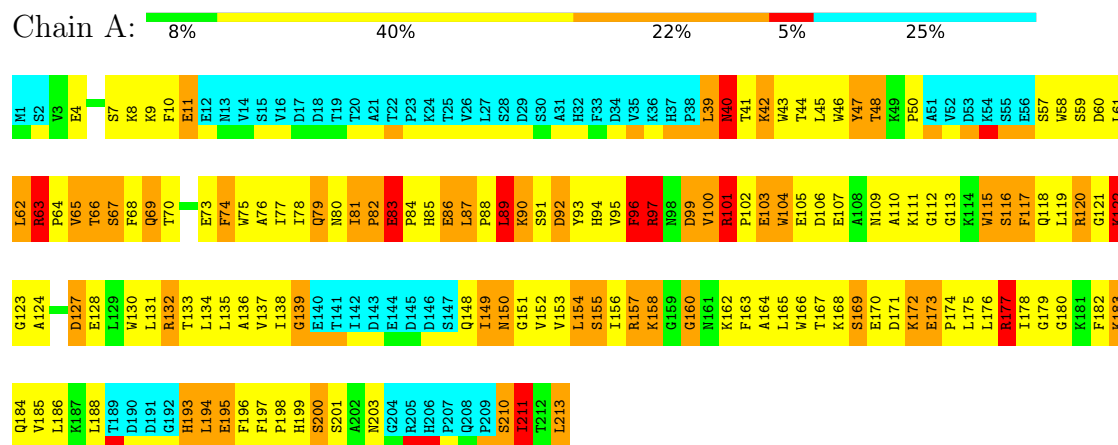
#### 4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E



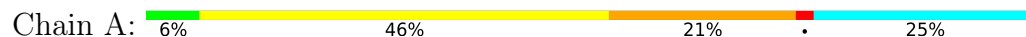
#### 4.2.19 Score per residue for model 19

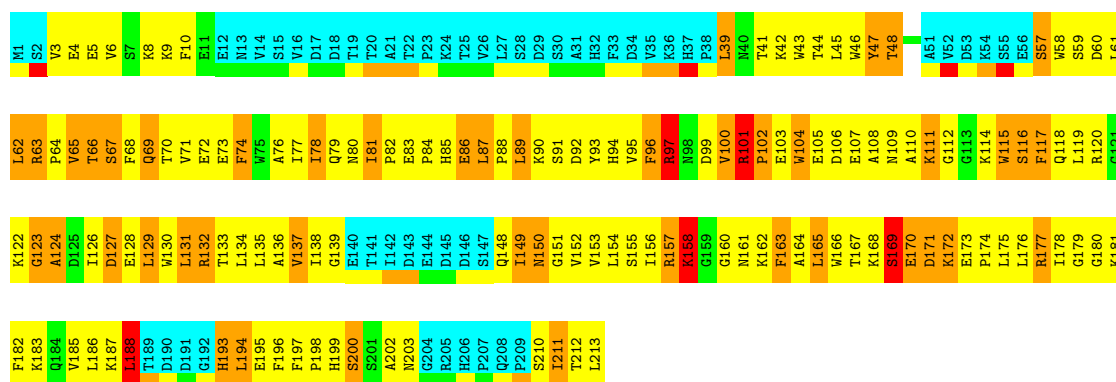
- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E



#### 4.2.20 Score per residue for model 20 (medoid)

- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E





## 5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

The models were refined using the following method: *molecular dynamics*.

Of the 60 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *NO VIOLATION ABOVE 0.5 ANGSTROMS AND 5 DEGREE DIHEDRAL ANGLE*.

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

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

No chemical shift data was provided.

## 6 Model quality

### 6.1 Standard geometry

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

The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with  $|Z| > 5$  is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the (average) root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.03±0.00	0±0/1356 ( 0.0± 0.0%)	1.29±0.00	0±0/1837 ( 0.0± 0.0%)
All	All	1.03	0/27120 ( 0.0%)	1.29	6/36740 ( 0.0%)

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	6.4±0.7
All	All	0	128

There are no bond-length outliers.

All unique angle outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	110	ALA	N-CA-CB	-5.14	102.91	110.10	12	6

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	63	ARG	Sidechain	20
1	A	120	ARG	Sidechain	19
1	A	132	ARG	Sidechain	19
1	A	177	ARG	Sidechain	19
1	A	97	ARG	Sidechain	17
1	A	101	ARG	Sidechain	17

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	157	ARG	Sidechain	17

## 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	1318	1317	1317	350±19
2	A	29	15	16	15±2
All	All	26940	26640	26660	7015

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 131.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:167:THR:HG21	1:A:175:LEU:HD22	1.11	1.14	18	10
1:A:100:VAL:HG21	1:A:110:ALA:HB2	1.05	1.09	9	2
1:A:39:LEU:HD21	1:A:71:VAL:HG13	1.05	1.09	9	4
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:134:LEU:HD11	1.05	1.85	17	13
1:A:196:PHE:CD2	1:A:211:ILE:HD12	1.02	1.90	16	4
1:A:149:ILE:CG1	1:A:167:THR:HG22	1.01	1.84	9	5
1:A:134:LEU:HD22	1:A:152:VAL:HG11	1.01	1.32	16	12
1:A:149:ILE:HG23	1:A:167:THR:HG22	1.01	1.30	4	2
1:A:183:LYS:CD	1:A:194:LEU:HD22	0.99	1.88	19	1
1:A:45:LEU:HD22	1:A:77:ILE:HD11	0.99	1.31	6	20
1:A:100:VAL:CG2	1:A:110:ALA:HB2	0.98	1.88	17	12
1:A:149:ILE:HD11	1:A:167:THR:HG22	0.98	1.32	7	5
1:A:39:LEU:CD1	1:A:41:THR:HG22	0.98	1.88	1	4
1:A:117:PHE:CZ	1:A:165:LEU:HD11	0.97	1.92	10	1
1:A:100:VAL:HG23	1:A:110:ALA:HB2	0.97	1.31	17	9
1:A:87:LEU:HD21	1:A:156:ILE:HD12	0.96	1.35	3	15
1:A:186:LEU:HD12	1:A:193:HIS:CE1	0.96	1.94	20	1
1:A:48:THR:HG21	1:A:58:TRP:CZ3	0.96	1.96	15	19
1:A:196:PHE:CG	1:A:211:ILE:HD12	0.96	1.96	16	3
1:A:148:GLN:O	1:A:149:ILE:HD13	0.96	1.61	11	2
1:A:153:VAL:HG21	1:A:166:TRP:CZ2	0.95	1.97	7	16

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:LEU:HD21	1:A:69:GLN:CA	0.95	1.92	19	2
1:A:39:LEU:CD2	1:A:71:VAL:HG13	0.94	1.91	9	2
1:A:87:LEU:HD11	1:A:91:SER:HB3	0.94	1.39	17	3
1:A:100:VAL:HG21	1:A:110:ALA:CB	0.93	1.94	9	1
1:A:78:ILE:CD1	1:A:131:LEU:HD22	0.93	1.93	20	1
1:A:39:LEU:HD22	1:A:139:GLY:CA	0.92	1.94	15	2
1:A:94:HIS:CE1	1:A:153:VAL:HG13	0.92	1.98	7	8
1:A:167:THR:HG21	1:A:175:LEU:CD2	0.92	1.95	18	8
1:A:39:LEU:HD21	1:A:69:GLN:CB	0.92	1.95	13	2
1:A:77:ILE:HG21	1:A:93:TYR:CE1	0.91	2.00	4	1
1:A:93:TYR:CD2	1:A:154:LEU:HD22	0.91	2.01	16	12
1:A:57:SER:O	1:A:61:LEU:HD22	0.91	1.64	16	2
1:A:87:LEU:HD11	1:A:91:SER:CB	0.91	1.93	5	7
1:A:100:VAL:CG2	1:A:110:ALA:HB3	0.90	1.95	5	7
1:A:181:LYS:O	1:A:185:VAL:HG23	0.90	1.66	5	8
1:A:196:PHE:CE1	1:A:213:LEU:HD12	0.90	2.01	16	10
1:A:82:PRO:O	1:A:87:LEU:HD23	0.89	1.67	12	2
1:A:39:LEU:HD12	1:A:69:GLN:CB	0.89	1.97	3	2
1:A:87:LEU:HD11	1:A:91:SER:HB2	0.89	1.41	1	4
1:A:127:ASP:O	1:A:131:LEU:HD12	0.89	1.68	16	19
1:A:165:LEU:HD11	1:A:167:THR:HG23	0.89	1.41	9	2
1:A:74:PHE:CE2	1:A:95:VAL:HG11	0.89	2.02	9	11
1:A:47:TYR:CZ	1:A:65:VAL:HG21	0.88	2.03	6	18
1:A:196:PHE:CE1	1:A:211:ILE:HD12	0.88	2.03	2	13
1:A:100:VAL:HG22	1:A:102:PRO:HD3	0.87	1.43	1	1
1:A:183:LYS:HD3	1:A:194:LEU:HD22	0.87	1.46	19	2
1:A:39:LEU:HD11	1:A:41:THR:HG22	0.86	1.46	1	1
1:A:80:ASN:O	1:A:81:ILE:HD12	0.86	1.69	12	7
1:A:82:PRO:HB2	1:A:87:LEU:HD23	0.86	1.46	19	4
1:A:77:ILE:HG21	1:A:93:TYR:CD1	0.86	2.06	4	1
1:A:153:VAL:HB	1:A:164:ALA:HB3	0.85	1.48	16	18
1:A:82:PRO:HB2	1:A:87:LEU:HD13	0.85	1.47	3	5
1:A:43:TRP:CE3	1:A:95:VAL:HG13	0.85	2.07	19	7
1:A:62:LEU:HD12	1:A:63:ARG:N	0.84	1.87	4	6
1:A:149:ILE:HG13	1:A:167:THR:HG22	0.84	1.50	16	5
1:A:94:HIS:ND1	1:A:153:VAL:HG13	0.84	1.87	7	10
1:A:89:LEU:HD23	1:A:156:ILE:CG2	0.84	2.01	10	7
1:A:188:LEU:HD13	1:A:193:HIS:HB2	0.83	1.48	19	2
1:A:188:LEU:HD22	1:A:193:HIS:ND1	0.83	1.87	20	1
1:A:188:LEU:HD22	1:A:193:HIS:CE1	0.83	2.08	1	4
1:A:78:ILE:HD13	1:A:131:LEU:HD22	0.83	1.48	20	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:VAL:HG22	1:A:102:PRO:CD	0.83	2.03	1	1
1:A:84:PRO:HA	1:A:156:ILE:HD11	0.82	1.50	11	9
1:A:188:LEU:HD11	1:A:193:HIS:CG	0.82	2.08	6	1
1:A:45:LEU:CD2	1:A:77:ILE:HD11	0.82	2.04	4	7
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:95:VAL:HG13	0.82	2.10	14	1
1:A:47:TYR:CE2	1:A:65:VAL:HG21	0.82	2.10	16	20
1:A:88:PRO:C	1:A:89:LEU:HD22	0.82	1.95	13	4
1:A:50:PRO:HG2	1:A:61:LEU:HD22	0.82	1.52	2	8
1:A:149:ILE:HD12	1:A:167:THR:HG22	0.82	1.52	11	2
1:A:188:LEU:HD11	1:A:193:HIS:CD2	0.81	2.11	6	1
1:A:210:SER:O	1:A:211:ILE:HG23	0.81	1.74	2	7
1:A:39:LEU:HD22	1:A:39:LEU:N	0.81	1.90	13	2
1:A:39:LEU:HD13	1:A:39:LEU:N	0.81	1.90	19	1
1:A:167:THR:CG2	1:A:175:LEU:HD22	0.81	2.06	20	6
1:A:100:VAL:HG23	1:A:110:ALA:HB3	0.81	1.53	5	3
1:A:130:TRP:CE2	1:A:134:LEU:HD11	0.81	2.11	6	12
1:A:172:LYS:HA	1:A:175:LEU:HD12	0.81	1.51	10	14
1:A:39:LEU:HD21	1:A:69:GLN:C	0.81	1.96	8	2
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:CA	0.80	2.06	20	18
1:A:149:ILE:CD1	1:A:167:THR:HG22	0.80	2.05	7	3
1:A:135:LEU:HD12	1:A:136:ALA:N	0.80	1.92	16	11
1:A:153:VAL:HG21	1:A:166:TRP:CH2	0.79	2.11	11	11
1:A:152:VAL:HG12	1:A:165:LEU:HG	0.79	1.53	4	1
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:N	0.79	1.92	20	11
1:A:123:GLY:CA	1:A:126:ILE:HD11	0.78	2.07	1	3
1:A:89:LEU:HD23	1:A:156:ILE:HG21	0.78	1.55	10	7
1:A:100:VAL:HG13	1:A:101:ARG:N	0.78	1.93	13	17
1:A:174:PRO:O	1:A:178:ILE:HG23	0.78	1.79	18	8
1:A:94:HIS:CB	1:A:153:VAL:HG22	0.78	2.09	3	3
1:A:39:LEU:N	1:A:39:LEU:HD23	0.78	1.94	14	5
1:A:119:LEU:HD21	1:A:188:LEU:CB	0.78	2.09	15	1
1:A:167:THR:HG21	1:A:175:LEU:HD23	0.78	1.55	8	1
1:A:100:VAL:HG21	1:A:150:ASN:OD1	0.77	1.77	3	2
1:A:39:LEU:HD12	1:A:69:GLN:HB3	0.77	1.55	3	1
1:A:148:GLN:C	1:A:149:ILE:HD13	0.77	1.99	11	2
1:A:39:LEU:HD22	1:A:139:GLY:HA3	0.77	1.55	15	2
1:A:89:LEU:HD22	1:A:89:LEU:N	0.77	1.94	19	4
1:A:183:LYS:HG3	1:A:194:LEU:HD13	0.77	1.55	19	3
1:A:69:GLN:CB	1:A:138:ILE:HD12	0.77	2.09	3	1
1:A:119:LEU:HG	1:A:188:LEU:HD22	0.77	1.54	5	1
1:A:44:THR:HG23	1:A:97:ARG:HD2	0.77	1.56	1	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	0.77	1.95	5	2
1:A:87:LEU:O	1:A:87:LEU:HD12	0.77	1.80	19	2
1:A:47:TYR:OH	1:A:65:VAL:HG21	0.77	1.79	8	11
1:A:47:TYR:OH	1:A:65:VAL:HG11	0.76	1.80	17	17
1:A:44:THR:HG22	1:A:67:SER:HB3	0.76	1.57	14	14
1:A:183:LYS:HB2	1:A:194:LEU:HD13	0.76	1.54	13	7
1:A:130:TRP:CE3	1:A:186:LEU:HD21	0.76	2.16	19	5
1:A:123:GLY:HA3	1:A:126:ILE:HD11	0.76	1.55	1	3
1:A:69:GLN:CG	1:A:138:ILE:HD12	0.76	2.11	3	1
1:A:171:ASP:O	1:A:175:LEU:HD13	0.76	1.80	8	5
1:A:87:LEU:HD12	1:A:89:LEU:N	0.76	1.96	2	4
1:A:100:VAL:HG22	1:A:101:ARG:N	0.76	1.94	9	11
1:A:180:GLY:HA2	1:A:194:LEU:HD11	0.76	1.56	6	1
1:A:41:THR:HG21	1:A:97:ARG:HD3	0.76	1.58	10	1
1:A:89:LEU:HD22	1:A:158:LYS:O	0.76	1.81	20	2
1:A:87:LEU:CD2	1:A:156:ILE:HD12	0.76	2.10	6	16
1:A:41:THR:HG21	1:A:97:ARG:CD	0.76	2.11	10	1
1:A:108:ALA:HB1	1:A:199:HIS:HA	0.75	1.55	1	2
1:A:134:LEU:CD2	1:A:165:LEU:HD21	0.75	2.10	15	2
1:A:117:PHE:CG	1:A:186:LEU:HD11	0.75	2.17	3	3
1:A:183:LYS:CB	1:A:194:LEU:HD12	0.75	2.12	5	1
1:A:100:VAL:HG13	1:A:107:GLU:HG2	0.75	1.56	16	3
1:A:137:VAL:HG12	1:A:138:ILE:HG23	0.75	1.59	10	8
1:A:87:LEU:HD22	1:A:91:SER:OG	0.75	1.82	19	2
1:A:100:VAL:O	1:A:101:ARG:CB	0.75	2.34	1	11
1:A:188:LEU:HD13	1:A:193:HIS:NE2	0.75	1.97	1	1
1:A:58:TRP:CE2	1:A:62:LEU:HD11	0.74	2.16	12	1
1:A:45:LEU:HA	1:A:95:VAL:HG22	0.74	1.58	17	17
1:A:188:LEU:HD13	1:A:193:HIS:CE1	0.74	2.17	12	2
1:A:100:VAL:HG21	1:A:107:GLU:HA	0.74	1.58	15	11
1:A:66:THR:HG23	1:A:73:GLU:OE1	0.74	1.82	8	4
1:A:50:PRO:CG	1:A:61:LEU:HD22	0.74	2.12	12	3
1:A:39:LEU:HD22	1:A:139:GLY:HA2	0.74	1.57	11	3
1:A:41:THR:O	1:A:69:GLN:CG	0.74	2.36	14	2
1:A:57:SER:C	1:A:61:LEU:HD22	0.74	2.02	7	2
1:A:58:TRP:CZ2	1:A:62:LEU:HD11	0.74	2.18	3	13
1:A:61:LEU:HD13	1:A:61:LEU:N	0.73	1.96	16	1
1:A:196:PHE:CD1	1:A:211:ILE:HD12	0.73	2.17	15	9
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:CB	0.73	2.12	6	6
1:A:188:LEU:HD13	1:A:193:HIS:CD2	0.73	2.18	1	1
1:A:39:LEU:HD12	1:A:41:THR:HG22	0.73	1.59	16	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:119:LEU:HD21	1:A:121:GLY:O	0.73	1.84	11	2
1:A:119:LEU:HD11	1:A:186:LEU:HB3	0.73	1.61	20	3
1:A:104:TRP:CD1	2:A:214:M7G:C6	0.73	2.72	6	20
1:A:48:THR:HG22	1:A:61:LEU:HB3	0.73	1.58	7	1
1:A:167:THR:HG21	1:A:175:LEU:HD21	0.73	1.60	1	2
1:A:149:ILE:HG23	1:A:150:ASN:N	0.73	1.99	3	10
1:A:82:PRO:O	1:A:87:LEU:HD22	0.72	1.84	18	6
1:A:100:VAL:HG23	1:A:110:ALA:CB	0.72	2.14	5	5
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:154:LEU:HD12	0.72	2.18	10	2
1:A:48:THR:CG2	1:A:62:LEU:HD12	0.72	2.14	12	1
1:A:39:LEU:HD21	1:A:69:GLN:HA	0.72	1.61	19	1
1:A:87:LEU:HD13	1:A:91:SER:OG	0.72	1.84	14	1
1:A:45:LEU:O	1:A:65:VAL:HG22	0.72	1.85	7	18
1:A:126:ILE:HG23	1:A:186:LEU:HA	0.72	1.60	11	1
1:A:133:THR:HG22	1:A:182:PHE:CZ	0.72	2.19	10	3
1:A:123:GLY:O	1:A:124:ALA:HB3	0.72	1.84	8	4
1:A:62:LEU:HD12	1:A:62:LEU:C	0.72	2.04	4	6
1:A:89:LEU:HD13	1:A:158:LYS:O	0.72	1.84	20	2
1:A:58:TRP:CZ2	2:A:214:M7G:HM73	0.72	2.20	19	15
1:A:100:VAL:HG11	1:A:107:GLU:HA	0.71	1.61	8	11
1:A:134:LEU:HD13	1:A:152:VAL:HB	0.71	1.61	17	4
1:A:188:LEU:HD12	1:A:188:LEU:O	0.71	1.84	17	4
1:A:100:VAL:HG22	1:A:107:GLU:HA	0.71	1.60	16	4
1:A:183:LYS:O	1:A:188:LEU:HD23	0.71	1.85	1	5
1:A:186:LEU:HB2	1:A:188:LEU:HD23	0.71	1.62	15	4
1:A:50:PRO:HA	1:A:61:LEU:HD13	0.71	1.62	3	5
1:A:97:ARG:NH2	1:A:138:ILE:HG22	0.71	2.01	4	1
1:A:165:LEU:HD21	1:A:178:ILE:HD12	0.71	1.63	14	2
1:A:74:PHE:CZ	1:A:78:ILE:HD11	0.71	2.21	15	1
1:A:169:SER:O	1:A:175:LEU:HD11	0.71	1.85	10	2
1:A:183:LYS:HG3	1:A:188:LEU:HD21	0.71	1.60	7	2
1:A:123:GLY:N	1:A:126:ILE:HD11	0.71	2.00	5	5
1:A:73:GLU:O	1:A:76:ALA:HB3	0.70	1.86	18	20
1:A:104:TRP:HB3	2:A:214:M7G:HM71	0.70	1.63	7	20
1:A:94:HIS:HB3	1:A:153:VAL:HG22	0.70	1.61	4	3
1:A:48:THR:HG22	1:A:61:LEU:HB2	0.70	1.61	15	3
1:A:123:GLY:O	1:A:124:ALA:HB2	0.70	1.87	15	7
1:A:41:THR:HG23	1:A:43:TRP:CD1	0.70	2.22	16	4
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:186:LEU:HD22	0.70	2.22	7	1
1:A:134:LEU:HD22	1:A:152:VAL:CG1	0.70	2.16	18	5
1:A:87:LEU:C	1:A:87:LEU:HD12	0.70	2.07	15	3

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:176:LEU:HG	1:A:211:ILE:HD11	0.70	1.62	17	1
1:A:96:PHE:CZ	1:A:166:TRP:CZ3	0.70	2.80	9	6
1:A:149:ILE:HG12	1:A:167:THR:HG22	0.70	1.63	9	1
1:A:130:TRP:CH2	1:A:163:PHE:CE1	0.70	2.79	10	1
1:A:87:LEU:HD12	1:A:87:LEU:O	0.70	1.85	15	3
1:A:119:LEU:HD12	1:A:193:HIS:NE2	0.70	2.02	3	1
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:163:PHE:CD1	0.70	2.79	20	2
1:A:39:LEU:HD11	1:A:70:THR:O	0.70	1.87	18	7
1:A:58:TRP:CE2	2:A:214:M7G:C5	0.70	2.75	15	20
1:A:58:TRP:CZ2	2:A:214:M7G:N7	0.70	2.60	15	18
1:A:87:LEU:HD12	1:A:89:LEU:H	0.70	1.46	2	4
1:A:186:LEU:HD12	1:A:193:HIS:NE2	0.70	2.01	20	1
1:A:96:PHE:CE1	1:A:166:TRP:CZ3	0.70	2.79	2	2
1:A:96:PHE:CE2	1:A:166:TRP:CZ3	0.69	2.80	6	16
1:A:117:PHE:CE1	1:A:130:TRP:CH2	0.69	2.80	17	10
1:A:6:VAL:HG13	1:A:6:VAL:O	0.69	1.86	1	3
1:A:103:GLU:O	1:A:107:GLU:N	0.69	2.25	2	19
1:A:117:PHE:CZ	1:A:130:TRP:CH2	0.69	2.80	6	9
1:A:154:LEU:C	1:A:154:LEU:HD23	0.69	2.06	4	20
1:A:87:LEU:HD12	1:A:87:LEU:C	0.69	2.08	14	3
1:A:130:TRP:CE2	1:A:134:LEU:HD12	0.69	2.22	9	6
1:A:179:GLY:O	1:A:194:LEU:HD11	0.69	1.87	4	2
1:A:119:LEU:HD21	1:A:188:LEU:HB2	0.69	1.64	5	1
1:A:96:PHE:CE2	1:A:166:TRP:CE3	0.69	2.81	5	2
1:A:119:LEU:HD21	1:A:188:LEU:CA	0.69	2.17	15	1
1:A:48:THR:HG21	1:A:58:TRP:CE3	0.69	2.21	2	12
1:A:108:ALA:HB1	1:A:199:HIS:CA	0.69	2.17	1	1
1:A:135:LEU:HD12	1:A:135:LEU:C	0.69	2.07	18	7
1:A:185:VAL:HG12	1:A:186:LEU:CD1	0.69	2.18	11	1
1:A:130:TRP:HA	1:A:185:VAL:HG11	0.69	1.62	14	2
1:A:58:TRP:CZ2	2:A:214:M7G:CM7	0.68	2.76	4	20
1:A:119:LEU:HD12	1:A:186:LEU:HB3	0.68	1.64	13	2
1:A:135:LEU:C	1:A:135:LEU:HD12	0.68	2.09	11	11
1:A:87:LEU:HD12	1:A:91:SER:CB	0.68	2.17	4	1
1:A:69:GLN:HB3	1:A:138:ILE:HD12	0.68	1.65	3	1
1:A:3:VAL:HG23	1:A:3:VAL:O	0.68	1.88	15	1
1:A:68:PHE:N	1:A:68:PHE:CD1	0.68	2.62	16	1
1:A:179:GLY:C	1:A:194:LEU:HD21	0.68	2.09	7	1
1:A:175:LEU:HD12	1:A:175:LEU:N	0.68	2.04	15	2
1:A:74:PHE:CE2	1:A:131:LEU:HD22	0.68	2.24	3	1
1:A:39:LEU:HD12	1:A:69:GLN:HA	0.68	1.64	15	2

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:HD22	0.68	2.22	8	6
1:A:179:GLY:C	1:A:194:LEU:HD11	0.68	2.09	4	1
1:A:96:PHE:CE1	1:A:166:TRP:CE3	0.67	2.83	10	2
1:A:117:PHE:CE2	1:A:163:PHE:CD1	0.67	2.82	7	1
1:A:43:TRP:HB3	1:A:69:GLN:HG3	0.67	1.65	3	1
1:A:172:LYS:HA	1:A:175:LEU:HD13	0.67	1.66	4	4
1:A:129:LEU:N	1:A:129:LEU:CD1	0.67	2.58	11	18
1:A:94:HIS:HB2	1:A:153:VAL:HG22	0.67	1.65	3	2
1:A:47:TYR:O	1:A:62:LEU:HD23	0.67	1.90	3	2
1:A:188:LEU:HD11	1:A:193:HIS:HA	0.67	1.65	4	2
1:A:111:LYS:CD	1:A:166:TRP:CG	0.67	2.77	10	3
1:A:100:VAL:HG22	1:A:102:PRO:HD2	0.67	1.65	14	11
1:A:74:PHE:CE2	1:A:78:ILE:HD11	0.67	2.25	15	1
1:A:104:TRP:CD1	1:A:104:TRP:C	0.67	2.68	19	20
1:A:129:LEU:HB3	1:A:185:VAL:HG13	0.67	1.66	10	2
1:A:58:TRP:CZ2	1:A:62:LEU:CD1	0.67	2.78	7	12
1:A:58:TRP:CH2	2:A:214:M7G:HM73	0.67	2.25	11	17
1:A:43:TRP:CE2	1:A:138:ILE:CD1	0.67	2.78	10	1
1:A:149:ILE:HG23	1:A:166:TRP:O	0.67	1.88	19	1
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:163:PHE:CG	0.67	2.82	10	2
1:A:168:LYS:O	1:A:169:SER:CB	0.66	2.43	6	19
1:A:93:TYR:CD1	1:A:154:LEU:HD22	0.66	2.24	17	3
1:A:45:LEU:HD23	1:A:66:THR:OG1	0.66	1.90	10	18
1:A:50:PRO:C	1:A:61:LEU:HD13	0.66	2.11	5	2
1:A:130:TRP:CH2	1:A:163:PHE:CD1	0.66	2.84	20	2
1:A:39:LEU:HD13	1:A:138:ILE:HG13	0.66	1.67	11	1
1:A:170:GLU:O	1:A:171:ASP:CB	0.66	2.44	1	11
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:138:ILE:CG2	0.66	2.79	6	1
1:A:100:VAL:HG11	1:A:107:GLU:OE1	0.66	1.91	19	3
1:A:211:ILE:O	1:A:212:THR:HG23	0.66	1.90	1	10
1:A:43:TRP:CD2	1:A:138:ILE:HD11	0.66	2.26	10	1
1:A:87:LEU:HD11	1:A:91:SER:OG	0.65	1.91	6	3
1:A:47:TYR:CZ	1:A:65:VAL:CG2	0.65	2.80	6	9
1:A:183:LYS:HB2	1:A:194:LEU:HD22	0.65	1.67	11	3
1:A:129:LEU:CB	1:A:185:VAL:HG13	0.65	2.20	10	1
1:A:119:LEU:HD23	1:A:120:ARG:N	0.65	2.06	1	2
1:A:129:LEU:N	1:A:129:LEU:HD13	0.65	2.07	10	18
1:A:102:PRO:CG	1:A:106:ASP:CB	0.65	2.75	10	12
1:A:132:ARG:HA	1:A:135:LEU:HD21	0.65	1.69	3	17
1:A:100:VAL:HG11	1:A:150:ASN:OD1	0.65	1.92	5	1
1:A:94:HIS:CE1	1:A:153:VAL:CG1	0.65	2.80	9	7

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:117:PHE:CD1	1:A:117:PHE:N	0.65	2.65	1	18
1:A:45:LEU:HD22	1:A:77:ILE:CD1	0.65	2.20	4	9
1:A:165:LEU:HD12	1:A:165:LEU:N	0.65	2.06	10	1
1:A:58:TRP:NE1	2:A:214:M7G:C6	0.65	2.60	19	20
1:A:117:PHE:HB3	1:A:186:LEU:HD11	0.65	1.68	13	4
1:A:130:TRP:CE2	1:A:134:LEU:CD1	0.65	2.79	4	9
1:A:39:LEU:HD11	1:A:43:TRP:HE1	0.65	1.52	16	1
1:A:46:TRP:HB3	1:A:62:LEU:HD11	0.65	1.69	2	6
1:A:165:LEU:HD21	1:A:178:ILE:CG2	0.65	2.20	3	1
1:A:45:LEU:HB2	1:A:95:VAL:HG22	0.65	1.68	4	2
1:A:183:LYS:HB3	1:A:194:LEU:HD12	0.65	1.69	5	1
1:A:117:PHE:CG	1:A:186:LEU:CD1	0.65	2.80	3	1
1:A:196:PHE:CE1	1:A:213:LEU:CD1	0.65	2.80	12	6
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:134:LEU:CD1	0.64	2.80	15	5
1:A:100:VAL:HG11	1:A:110:ALA:HB2	0.64	1.67	1	1
1:A:84:PRO:HG3	1:A:126:ILE:HD11	0.64	1.67	10	1
1:A:94:HIS:CD2	1:A:153:VAL:CG1	0.64	2.81	13	3
1:A:130:TRP:CH2	1:A:154:LEU:HD12	0.64	2.26	10	2
1:A:196:PHE:N	1:A:196:PHE:CD1	0.64	2.65	3	9
1:A:196:PHE:CD1	1:A:211:ILE:CG1	0.64	2.80	15	12
1:A:196:PHE:CD1	1:A:211:ILE:CD1	0.64	2.81	2	9
1:A:100:VAL:CB	1:A:110:ALA:HB2	0.64	2.21	17	2
1:A:93:TYR:CD2	1:A:154:LEU:HD13	0.64	2.26	3	1
1:A:66:THR:HG23	1:A:73:GLU:CB	0.64	2.21	4	1
1:A:43:TRP:CE2	1:A:138:ILE:HD11	0.64	2.28	10	1
1:A:94:HIS:CD2	1:A:153:VAL:HG13	0.64	2.28	13	5
1:A:57:SER:O	1:A:60:ASP:N	0.64	2.31	15	20
1:A:71:VAL:HG12	1:A:138:ILE:HD11	0.64	1.70	2	1
1:A:196:PHE:CZ	1:A:213:LEU:CD1	0.64	2.81	4	6
1:A:163:PHE:CD1	1:A:164:ALA:N	0.64	2.65	7	1
1:A:119:LEU:CD1	1:A:126:ILE:HD12	0.64	2.23	9	1
1:A:130:TRP:CH2	1:A:154:LEU:CD1	0.64	2.81	20	2
1:A:87:LEU:HD21	1:A:156:ILE:CD1	0.64	2.23	15	4
1:A:58:TRP:O	1:A:62:LEU:HD13	0.64	1.92	12	1
1:A:186:LEU:HD23	1:A:186:LEU:N	0.64	2.07	14	7
1:A:172:LYS:HA	1:A:175:LEU:HD22	0.64	1.68	15	1
1:A:108:ALA:HB2	1:A:111:LYS:NZ	0.64	2.08	15	1
1:A:87:LEU:HD11	1:A:156:ILE:HD12	0.63	1.68	2	3
1:A:122:LYS:C	1:A:126:ILE:HD11	0.63	2.14	8	2
1:A:133:THR:CG2	1:A:182:PHE:CE1	0.63	2.82	10	6
1:A:96:PHE:O	1:A:97:ARG:CB	0.63	2.46	7	14

*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:CZ	0.63	2.28	18	7
1:A:58:TRP:CE2	1:A:62:LEU:CD1	0.63	2.81	12	3
1:A:93:TYR:OH	1:A:131:LEU:HD21	0.63	1.92	3	1
1:A:101:ARG:CD	1:A:110:ALA:HB2	0.63	2.24	4	1
1:A:133:THR:HG22	1:A:182:PHE:CE1	0.63	2.28	14	5
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:163:PHE:CB	0.63	2.81	11	2
1:A:134:LEU:HD22	1:A:165:LEU:HD21	0.63	1.70	15	1
1:A:165:LEU:HD12	1:A:166:TRP:N	0.63	2.08	14	7
1:A:94:HIS:CD2	1:A:94:HIS:N	0.63	2.66	9	8
1:A:39:LEU:HD12	1:A:41:THR:H	0.63	1.52	6	2
1:A:163:PHE:CD1	1:A:163:PHE:N	0.63	2.65	20	5
1:A:96:PHE:N	1:A:96:PHE:CD1	0.63	2.65	1	1
1:A:115:TRP:CZ2	1:A:176:LEU:CD1	0.63	2.81	10	8
1:A:115:TRP:NE1	1:A:196:PHE:CD2	0.63	2.66	11	1
1:A:119:LEU:HD21	1:A:188:LEU:HA	0.63	1.69	15	1
1:A:154:LEU:HD12	1:A:163:PHE:CE1	0.63	2.28	4	1
1:A:43:TRP:CE2	1:A:68:PHE:O	0.63	2.52	14	15
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:68:PHE:CB	0.63	2.81	2	1
1:A:45:LEU:O	1:A:65:VAL:HG23	0.63	1.94	6	2
1:A:117:PHE:CZ	1:A:165:LEU:CD1	0.63	2.78	10	1
1:A:74:PHE:CE1	1:A:131:LEU:HD22	0.63	2.29	15	1
1:A:115:TRP:CZ2	1:A:175:LEU:CB	0.63	2.82	6	4
1:A:84:PRO:CG	1:A:126:ILE:HD11	0.62	2.24	10	1
1:A:101:ARG:N	1:A:102:PRO:CD	0.62	2.62	1	1
1:A:130:TRP:NE1	1:A:134:LEU:HD11	0.62	2.10	1	3
1:A:188:LEU:HD13	1:A:193:HIS:CB	0.62	2.24	10	1
1:A:49:LYS:CB	1:A:50:PRO:CD	0.62	2.77	16	11
1:A:43:TRP:CD1	1:A:43:TRP:N	0.62	2.66	16	7
1:A:196:PHE:HE1	1:A:213:LEU:HD12	0.62	1.54	8	8
1:A:58:TRP:CZ2	2:A:214:M7G:C5	0.62	2.83	15	6
1:A:50:PRO:HG2	1:A:61:LEU:HD12	0.62	1.70	16	2
1:A:165:LEU:HD11	1:A:167:THR:CG2	0.62	2.20	9	1
1:A:41:THR:HG23	1:A:43:TRP:HD1	0.62	1.53	16	6
1:A:111:LYS:CE	1:A:166:TRP:CD1	0.62	2.83	20	4
1:A:39:LEU:HD23	1:A:70:THR:CA	0.62	2.25	1	1
1:A:47:TYR:CE2	1:A:65:VAL:CG2	0.62	2.82	3	17
1:A:45:LEU:HD23	1:A:66:THR:CB	0.62	2.24	4	18
1:A:39:LEU:HD12	1:A:69:GLN:HB2	0.62	1.69	3	2
1:A:101:ARG:CB	1:A:102:PRO:CD	0.62	2.78	9	7
1:A:87:LEU:HD22	1:A:91:SER:CB	0.62	2.25	15	4
1:A:89:LEU:HD13	1:A:89:LEU:H	0.62	1.55	16	3

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:188:LEU:HD12	1:A:188:LEU:C	0.62	2.15	15	3
1:A:134:LEU:HD21	1:A:165:LEU:HD11	0.61	1.71	18	3
1:A:130:TRP:CD1	1:A:131:LEU:N	0.61	2.68	9	1
1:A:39:LEU:HD11	1:A:69:GLN:C	0.61	2.15	13	1
1:A:39:LEU:HD23	1:A:39:LEU:N	0.61	2.10	11	1
1:A:41:THR:HG21	1:A:98:ASN:OD1	0.61	1.95	6	1
1:A:165:LEU:HD22	1:A:182:PHE:CE2	0.61	2.30	19	1
1:A:6:VAL:HG12	1:A:6:VAL:O	0.61	1.93	20	1
1:A:46:TRP:CD1	1:A:64:PRO:HA	0.61	2.31	11	20
1:A:46:TRP:CD1	1:A:46:TRP:N	0.61	2.68	5	20
1:A:100:VAL:HG22	1:A:110:ALA:HB3	0.61	1.71	13	4
1:A:100:VAL:HB	1:A:110:ALA:CB	0.61	2.25	2	12
1:A:87:LEU:CD1	1:A:91:SER:CB	0.61	2.79	4	3
1:A:89:LEU:N	1:A:89:LEU:HD13	0.61	2.10	16	4
1:A:43:TRP:CD1	1:A:68:PHE:O	0.61	2.54	2	4
1:A:173:GLU:CB	1:A:174:PRO:CD	0.61	2.78	1	19
1:A:134:LEU:HD21	1:A:182:PHE:CE2	0.61	2.31	9	1
1:A:178:ILE:HG22	1:A:179:GLY:N	0.61	2.11	1	6
1:A:83:GLU:N	1:A:84:PRO:HD2	0.61	2.11	12	10
1:A:108:ALA:HB1	1:A:199:HIS:CB	0.61	2.26	1	3
1:A:149:ILE:CG2	1:A:167:THR:HG22	0.61	2.17	4	1
1:A:119:LEU:HD13	1:A:126:ILE:HD12	0.61	1.73	9	1
1:A:165:LEU:HD22	1:A:178:ILE:HD12	0.61	1.72	18	1
1:A:169:SER:HA	1:A:175:LEU:HD11	0.61	1.72	7	3
1:A:133:THR:CG2	1:A:182:PHE:CZ	0.61	2.83	18	2
1:A:100:VAL:CG1	1:A:101:ARG:N	0.60	2.64	13	12
1:A:149:ILE:CG2	1:A:150:ASN:N	0.60	2.64	9	17
1:A:96:PHE:CD1	1:A:107:GLU:OE1	0.60	2.54	6	8
1:A:61:LEU:CD1	1:A:61:LEU:N	0.60	2.64	7	1
1:A:39:LEU:HD23	1:A:40:ASN:N	0.60	2.11	13	1
1:A:78:ILE:HD11	1:A:131:LEU:HD22	0.60	1.73	20	1
1:A:100:VAL:HG21	1:A:107:GLU:CA	0.60	2.26	17	9
1:A:183:LYS:HE3	1:A:213:LEU:HD22	0.60	1.72	18	1
1:A:41:THR:CG2	1:A:43:TRP:CD1	0.60	2.84	6	3
1:A:87:LEU:HD12	1:A:88:PRO:N	0.60	2.11	10	1
1:A:66:THR:HG23	1:A:68:PHE:CE2	0.60	2.30	19	1
1:A:81:ILE:N	1:A:82:PRO:HD3	0.60	2.12	4	20
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:68:PHE:O	0.60	2.55	14	1
1:A:41:THR:O	1:A:69:GLN:HB3	0.60	1.96	12	15
1:A:58:TRP:NE1	2:A:214:M7G:C5	0.60	2.65	6	10
1:A:82:PRO:CB	1:A:87:LEU:HD13	0.60	2.26	3	2

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:PHE:CD1	1:A:107:GLU:OE2	0.60	2.55	12	11
1:A:101:ARG:CG	1:A:102:PRO:CD	0.60	2.79	9	3
1:A:196:PHE:CD1	1:A:196:PHE:N	0.60	2.69	2	11
1:A:89:LEU:N	1:A:89:LEU:CD2	0.60	2.65	14	4
1:A:48:THR:CG2	1:A:58:TRP:CZ3	0.60	2.83	2	8
1:A:119:LEU:HD12	1:A:193:HIS:CD2	0.60	2.32	3	1
1:A:66:THR:CG2	1:A:73:GLU:CB	0.60	2.80	4	3
1:A:66:THR:HG23	1:A:73:GLU:OE2	0.60	1.97	11	5
1:A:117:PHE:CD1	1:A:163:PHE:O	0.60	2.55	16	9
1:A:43:TRP:CE3	1:A:138:ILE:HD11	0.60	2.31	10	1
1:A:44:THR:HG23	1:A:97:ARG:CD	0.60	2.24	1	1
1:A:100:VAL:HG13	1:A:101:ARG:H	0.60	1.57	19	19
1:A:115:TRP:CZ2	1:A:175:LEU:HB3	0.60	2.31	6	15
1:A:172:LYS:CA	1:A:175:LEU:HD12	0.60	2.27	10	4
1:A:43:TRP:HB2	1:A:68:PHE:N	0.60	2.12	3	1
1:A:111:LYS:HD3	1:A:166:TRP:CG	0.60	2.31	10	3
1:A:180:GLY:CA	1:A:194:LEU:HD11	0.60	2.27	6	1
1:A:186:LEU:C	1:A:186:LEU:CD2	0.60	2.70	11	1
1:A:39:LEU:HD11	1:A:70:THR:N	0.59	2.12	13	1
1:A:39:LEU:CD2	1:A:69:GLN:CB	0.59	2.79	19	2
1:A:93:TYR:CG	1:A:154:LEU:HD22	0.59	2.32	11	7
1:A:39:LEU:HD12	1:A:69:GLN:CA	0.59	2.26	15	2
1:A:130:TRP:CD2	1:A:134:LEU:CD1	0.59	2.85	11	2
1:A:175:LEU:N	1:A:175:LEU:CD1	0.59	2.64	15	1
1:A:46:TRP:CH2	1:A:101:ARG:O	0.59	2.55	10	7
1:A:96:PHE:CE1	1:A:107:GLU:OE2	0.59	2.55	8	6
1:A:41:THR:O	1:A:69:GLN:CA	0.59	2.49	2	2
1:A:41:THR:CG2	1:A:69:GLN:NE2	0.59	2.65	3	1
1:A:193:HIS:O	1:A:194:LEU:CB	0.59	2.49	6	4
1:A:153:VAL:O	1:A:163:PHE:CD2	0.59	2.56	7	1
1:A:83:GLU:CG	1:A:84:PRO:CD	0.59	2.81	19	3
1:A:104:TRP:HA	1:A:108:ALA:HB2	0.59	1.72	9	1
1:A:176:LEU:N	1:A:176:LEU:CD1	0.59	2.65	5	17
1:A:39:LEU:O	1:A:40:ASN:CB	0.59	2.50	11	1
1:A:39:LEU:N	1:A:39:LEU:CD2	0.59	2.62	13	6
1:A:83:GLU:CB	1:A:84:PRO:CD	0.59	2.80	19	6
1:A:149:ILE:HG23	1:A:167:THR:CG2	0.59	2.18	4	1
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:163:PHE:HB3	0.59	2.33	11	2
1:A:183:LYS:CG	1:A:188:LEU:HD21	0.59	2.27	17	3
1:A:39:LEU:HD23	1:A:70:THR:HA	0.59	1.73	1	1
1:A:45:LEU:HD23	1:A:66:THR:HB	0.59	1.73	19	17

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:CB	0.59	2.51	1	11
1:A:43:TRP:CD1	1:A:69:GLN:HB2	0.59	2.33	3	1
1:A:48:THR:CG2	1:A:62:LEU:CD1	0.59	2.80	12	1
1:A:39:LEU:N	1:A:39:LEU:CD1	0.59	2.61	19	1
1:A:117:PHE:CB	1:A:186:LEU:HD11	0.59	2.28	2	4
1:A:96:PHE:CG	1:A:107:GLU:OE1	0.59	2.56	16	7
1:A:149:ILE:CG2	1:A:166:TRP:O	0.59	2.51	14	3
1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CD1	0.59	2.65	16	1
1:A:135:LEU:CD1	1:A:136:ALA:N	0.59	2.66	3	9
1:A:50:PRO:CA	1:A:61:LEU:HD13	0.59	2.28	3	1
1:A:132:ARG:O	1:A:136:ALA:HB2	0.59	1.98	15	14
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:186:LEU:CD2	0.59	2.86	7	1
1:A:66:THR:HG21	1:A:73:GLU:HB3	0.58	1.73	1	9
1:A:100:VAL:CG1	1:A:110:ALA:HB2	0.58	2.27	1	1
1:A:196:PHE:CB	1:A:211:ILE:HD12	0.58	2.28	16	2
1:A:44:THR:HG22	1:A:67:SER:CB	0.58	2.26	15	2
1:A:110:ALA:O	1:A:111:LYS:CB	0.58	2.50	1	2
1:A:100:VAL:CG2	1:A:110:ALA:CB	0.58	2.80	4	10
1:A:93:TYR:O	1:A:94:HIS:CD2	0.58	2.56	11	2
1:A:101:ARG:H	1:A:102:PRO:CD	0.58	2.11	1	1
1:A:126:ILE:CG2	1:A:186:LEU:CB	0.58	2.81	11	1
1:A:74:PHE:HA	1:A:77:ILE:HD12	0.58	1.76	15	18
1:A:111:LYS:CG	1:A:112:GLY:N	0.58	2.67	18	5
1:A:96:PHE:O	1:A:97:ARG:CG	0.58	2.51	6	6
1:A:161:ASN:OD1	1:A:163:PHE:CZ	0.58	2.57	8	2
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:HG	0.58	1.74	9	2
1:A:83:GLU:N	1:A:84:PRO:CD	0.58	2.67	20	10
1:A:74:PHE:CZ	1:A:93:TYR:OH	0.58	2.57	4	2
1:A:87:LEU:CD1	1:A:89:LEU:N	0.58	2.67	9	5
1:A:173:GLU:N	1:A:174:PRO:HD2	0.58	2.12	13	19
1:A:41:THR:HG22	1:A:69:GLN:NE2	0.58	2.14	3	1
1:A:165:LEU:CD1	1:A:167:THR:HG23	0.58	2.22	9	1
1:A:58:TRP:CD2	1:A:62:LEU:HD11	0.58	2.33	12	1
1:A:83:GLU:OE2	1:A:93:TYR:CZ	0.58	2.57	17	1
1:A:57:SER:O	1:A:61:LEU:HG	0.58	1.98	15	16
1:A:58:TRP:CH2	2:A:214:M7G:H82	0.58	2.33	15	4
1:A:127:ASP:OD2	1:A:163:PHE:CZ	0.58	2.56	9	2
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:153:VAL:O	0.58	2.57	18	1
1:A:41:THR:O	1:A:69:GLN:CB	0.58	2.51	9	9
1:A:65:VAL:HG23	1:A:66:THR:N	0.58	2.14	2	18
1:A:96:PHE:CB	1:A:151:GLY:HA3	0.58	2.28	13	14

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:TRP:CZ3	1:A:102:PRO:O	0.58	2.56	19	5
1:A:107:GLU:CG	1:A:166:TRP:CZ3	0.58	2.87	11	1
1:A:39:LEU:HD21	1:A:69:GLN:HB2	0.58	1.73	13	1
1:A:196:PHE:HD2	1:A:211:ILE:HD12	0.58	1.57	14	1
1:A:105:GLU:OE2	2:A:214:M7G:N2	0.58	2.37	9	13
1:A:115:TRP:NE1	1:A:196:PHE:CE2	0.58	2.72	9	2
1:A:137:VAL:HG12	1:A:138:ILE:CG2	0.58	2.29	10	7
1:A:39:LEU:HD21	1:A:70:THR:N	0.57	2.14	8	1
1:A:161:ASN:OD1	1:A:163:PHE:CE2	0.57	2.57	8	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:68:PHE:HB2	0.57	2.33	2	1
1:A:44:THR:OG1	1:A:46:TRP:CE2	0.57	2.54	14	9
1:A:127:ASP:OD1	1:A:163:PHE:CZ	0.57	2.57	2	3
1:A:178:ILE:CG1	1:A:179:GLY:N	0.57	2.67	12	8
1:A:58:TRP:CD1	2:A:214:M7G:C2	0.57	2.87	8	20
1:A:193:HIS:CD2	1:A:213:LEU:OXT	0.57	2.57	4	1
1:A:39:LEU:HD11	1:A:69:GLN:HA	0.57	1.76	14	2
1:A:111:LYS:HD2	1:A:166:TRP:CD1	0.57	2.34	7	2
1:A:83:GLU:O	1:A:156:ILE:HD11	0.57	1.98	12	3
1:A:66:THR:HG23	1:A:73:GLU:HG2	0.57	1.77	7	1
1:A:130:TRP:CE3	1:A:134:LEU:HD11	0.57	2.34	18	2
1:A:149:ILE:N	1:A:149:ILE:CD1	0.57	2.66	1	2
1:A:89:LEU:N	1:A:89:LEU:CD1	0.57	2.67	4	5
1:A:101:ARG:CB	1:A:106:ASP:HB3	0.57	2.29	9	3
1:A:183:LYS:HB2	1:A:194:LEU:HD12	0.57	1.76	5	1
1:A:67:SER:O	1:A:68:PHE:CD1	0.57	2.58	6	4
1:A:87:LEU:HD12	1:A:88:PRO:C	0.57	2.20	10	1
1:A:39:LEU:HD12	1:A:69:GLN:C	0.57	2.20	15	1
1:A:45:LEU:CD2	1:A:77:ILE:CD1	0.57	2.80	4	5
1:A:96:PHE:HB3	1:A:151:GLY:HA3	0.57	1.75	3	12
1:A:101:ARG:CB	1:A:106:ASP:CB	0.57	2.82	9	2
1:A:46:TRP:O	1:A:94:HIS:CE1	0.57	2.58	4	2
1:A:67:SER:O	1:A:68:PHE:CD2	0.57	2.58	3	1
1:A:45:LEU:CD2	1:A:66:THR:HB	0.57	2.30	4	16
1:A:39:LEU:HD22	1:A:39:LEU:H	0.57	1.60	19	2
1:A:41:THR:O	1:A:43:TRP:CE2	0.57	2.58	3	1
1:A:108:ALA:HB1	1:A:111:LYS:NZ	0.57	2.15	20	2
1:A:102:PRO:HG2	1:A:106:ASP:CB	0.57	2.29	1	12
1:A:58:TRP:CD2	1:A:62:LEU:CD1	0.57	2.88	12	1
1:A:83:GLU:O	1:A:87:LEU:HD23	0.56	1.99	10	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:73:GLU:HB3	0.56	2.34	16	1
1:A:149:ILE:N	1:A:149:ILE:HD12	0.56	2.14	1	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:PHE:CE1	1:A:93:TYR:OH	0.56	2.58	2	2
1:A:176:LEU:CD1	1:A:176:LEU:N	0.56	2.67	12	3
1:A:162:LYS:O	1:A:163:PHE:CD1	0.56	2.58	19	1
1:A:193:HIS:ND1	1:A:193:HIS:O	0.56	2.38	20	1
1:A:81:ILE:O	1:A:86:GLU:CB	0.56	2.53	18	10
1:A:117:PHE:CZ	1:A:165:LEU:HD12	0.56	2.35	15	6
1:A:149:ILE:HG22	1:A:150:ASN:H	0.56	1.59	14	2
1:A:96:PHE:CZ	1:A:153:VAL:HG22	0.56	2.36	16	2
1:A:66:THR:HG21	1:A:73:GLU:CB	0.56	2.30	6	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:138:ILE:HG13	0.56	2.36	10	1
1:A:165:LEU:HD21	1:A:178:ILE:CD1	0.56	2.30	14	2
1:A:67:SER:C	1:A:68:PHE:CD1	0.56	2.79	14	1
1:A:119:LEU:CD2	1:A:188:LEU:CB	0.56	2.82	15	1
1:A:66:THR:HG22	1:A:68:PHE:CD1	0.56	2.34	16	1
1:A:179:GLY:CA	1:A:194:LEU:HD21	0.56	2.30	18	1
1:A:100:VAL:CG2	1:A:107:GLU:HA	0.56	2.31	11	11
1:A:149:ILE:HD11	1:A:167:THR:CG2	0.56	2.21	7	1
1:A:111:LYS:CD	1:A:113:GLY:O	0.56	2.54	2	5
1:A:123:GLY:HA2	1:A:126:ILE:HD12	0.56	1.75	2	1
1:A:70:THR:O	1:A:71:VAL:CG1	0.56	2.53	3	1
1:A:68:PHE:CE2	1:A:73:GLU:OE2	0.56	2.59	13	1
1:A:183:LYS:HD2	1:A:194:LEU:HD22	0.56	1.73	19	1
1:A:101:ARG:N	1:A:102:PRO:HD2	0.56	2.15	8	11
1:A:100:VAL:CB	1:A:150:ASN:OD1	0.56	2.54	5	1
1:A:196:PHE:CD1	1:A:211:ILE:HB	0.56	2.36	17	7
1:A:43:TRP:CE3	1:A:95:VAL:CG1	0.56	2.86	19	2
1:A:162:LYS:C	1:A:163:PHE:CD1	0.56	2.79	10	4
1:A:87:LEU:CD1	1:A:88:PRO:O	0.56	2.54	10	1
1:A:103:GLU:CA	1:A:107:GLU:CG	0.56	2.84	11	3
1:A:69:GLN:C	1:A:70:THR:HG23	0.56	2.20	19	3
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:95:VAL:CG1	0.56	2.86	14	1
1:A:102:PRO:CG	1:A:106:ASP:HB3	0.56	2.31	8	12
1:A:107:GLU:HB3	1:A:166:TRP:CE3	0.56	2.36	11	5
1:A:123:GLY:O	1:A:124:ALA:CB	0.56	2.53	9	11
1:A:115:TRP:CZ3	1:A:196:PHE:HA	0.56	2.36	3	1
1:A:96:PHE:CD1	1:A:107:GLU:CD	0.56	2.79	18	11
1:A:39:LEU:O	1:A:40:ASN:ND2	0.56	2.39	11	1
1:A:68:PHE:CD1	1:A:73:GLU:OE2	0.56	2.58	12	1
1:A:44:THR:OG1	1:A:46:TRP:CZ2	0.56	2.56	2	6
1:A:47:TYR:CE1	1:A:63:ARG:HB3	0.56	2.36	14	6
1:A:167:THR:O	1:A:169:SER:N	0.56	2.38	7	4

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:179:GLY:O	1:A:194:LEU:HD21	0.56	2.01	10	1
1:A:123:GLY:H	1:A:126:ILE:HD11	0.56	1.60	16	1
1:A:183:LYS:HG2	1:A:188:LEU:HD11	0.56	1.78	19	1
1:A:102:PRO:CG	1:A:106:ASP:HB2	0.56	2.31	10	12
1:A:103:GLU:O	1:A:106:ASP:N	0.56	2.33	8	11
1:A:137:VAL:HG12	1:A:138:ILE:N	0.56	2.16	16	9
1:A:108:ALA:HB1	1:A:111:LYS:HZ1	0.56	1.60	5	2
1:A:130:TRP:HZ3	1:A:186:LEU:HD22	0.56	1.60	7	1
1:A:183:LYS:CB	1:A:188:LEU:HD21	0.56	2.30	17	2
1:A:10:PHE:CG	1:A:10:PHE:O	0.56	2.58	20	1
1:A:90:LYS:CA	1:A:156:ILE:O	0.56	2.54	8	20
1:A:130:TRP:NE1	1:A:134:LEU:CD1	0.56	2.68	1	3
1:A:101:ARG:HB3	1:A:102:PRO:CD	0.56	2.31	3	8
1:A:169:SER:O	1:A:170:GLU:CG	0.56	2.54	18	2
1:A:108:ALA:O	1:A:112:GLY:N	0.56	2.39	11	4
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:138:ILE:HG21	0.56	2.36	6	1
1:A:183:LYS:O	1:A:187:LYS:N	0.56	2.38	11	1
1:A:58:TRP:CH2	1:A:62:LEU:HD11	0.56	2.36	12	1
1:A:43:TRP:NE1	1:A:68:PHE:O	0.55	2.39	5	13
1:A:111:LYS:HE3	1:A:166:TRP:CD1	0.55	2.36	9	3
1:A:58:TRP:CZ3	2:A:214:M7G:H82	0.55	2.36	20	4
1:A:101:ARG:CG	1:A:106:ASP:CB	0.55	2.84	9	1
1:A:111:LYS:CA	1:A:167:THR:O	0.55	2.54	18	4
1:A:117:PHE:HZ	1:A:165:LEU:HD12	0.55	1.61	17	3
1:A:194:LEU:O	1:A:196:PHE:CE1	0.55	2.59	19	1
1:A:43:TRP:CE3	1:A:43:TRP:O	0.55	2.59	1	1
1:A:46:TRP:CH2	1:A:107:GLU:OE2	0.55	2.60	5	3
1:A:111:LYS:HE2	1:A:166:TRP:CD1	0.55	2.36	20	2
1:A:92:ASP:CG	1:A:94:HIS:HE2	0.55	2.05	20	1
1:A:49:LYS:CB	1:A:50:PRO:HD3	0.55	2.32	10	11
1:A:101:ARG:CG	1:A:106:ASP:HB3	0.55	2.32	9	6
1:A:43:TRP:CB	1:A:96:PHE:O	0.55	2.54	7	5
1:A:112:GLY:HA2	1:A:199:HIS:CG	0.55	2.37	4	12
1:A:41:THR:O	1:A:43:TRP:NE1	0.55	2.39	3	1
1:A:100:VAL:CG2	1:A:150:ASN:OD1	0.55	2.52	3	2
1:A:101:ARG:HB3	1:A:106:ASP:CB	0.55	2.32	6	5
1:A:197:PHE:CE1	1:A:201:SER:HB3	0.55	2.36	16	1
1:A:186:LEU:O	1:A:187:LYS:CB	0.55	2.55	6	15
1:A:83:GLU:OE1	1:A:131:LEU:HD11	0.55	2.02	4	1
1:A:183:LYS:CG	1:A:184:GLN:N	0.55	2.70	14	5
1:A:185:VAL:CG1	1:A:186:LEU:CD1	0.55	2.84	11	1

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:73:GLU:O	1:A:76:ALA:CB	0.55	2.55	16	20
1:A:193:HIS:O	1:A:194:LEU:CD1	0.55	2.55	17	4
1:A:74:PHE:CD1	1:A:135:LEU:CB	0.55	2.90	2	1
1:A:106:ASP:HA	1:A:109:ASN:ND2	0.55	2.16	17	13
1:A:183:LYS:CD	1:A:193:HIS:O	0.55	2.55	4	2
1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:HD13	0.55	2.17	7	1
1:A:64:PRO:C	1:A:65:VAL:HG13	0.55	2.22	1	12
1:A:93:TYR:C	1:A:94:HIS:CD2	0.55	2.80	12	13
1:A:94:HIS:ND1	1:A:153:VAL:CG1	0.55	2.69	9	4
1:A:193:HIS:O	1:A:193:HIS:ND1	0.55	2.40	6	4
1:A:105:GLU:OE1	2:A:214:M7G:N2	0.55	2.40	14	7
1:A:45:LEU:HD13	1:A:95:VAL:CG2	0.55	2.32	4	3
1:A:94:HIS:HB2	1:A:96:PHE:CE2	0.55	2.37	6	2
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:163:PHE:HB3	0.55	2.37	8	4
1:A:97:ARG:HA	1:A:100:VAL:HG12	0.55	1.79	6	2
1:A:107:GLU:O	1:A:110:ALA:HB3	0.55	2.01	9	2
1:A:135:LEU:O	1:A:138:ILE:CG1	0.55	2.55	2	1
1:A:115:TRP:CZ2	1:A:176:LEU:HD12	0.55	2.37	20	7
1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CD2	0.55	2.64	15	2
1:A:41:THR:CG2	1:A:43:TRP:NE1	0.55	2.70	6	1
1:A:188:LEU:HD11	1:A:193:HIS:CB	0.55	2.32	6	1
1:A:44:THR:HB	1:A:46:TRP:CZ2	0.55	2.37	10	1
1:A:169:SER:O	1:A:171:ASP:N	0.54	2.39	4	16
1:A:178:ILE:CG2	1:A:179:GLY:N	0.54	2.71	1	5
1:A:70:THR:C	1:A:71:VAL:HG13	0.54	2.22	3	1
1:A:45:LEU:CB	1:A:95:VAL:HG22	0.54	2.32	4	1
1:A:193:HIS:CG	1:A:213:LEU:OXT	0.54	2.59	4	1
1:A:96:PHE:CE1	1:A:107:GLU:CD	0.54	2.80	17	6
1:A:111:LYS:HD2	1:A:166:TRP:CG	0.54	2.37	7	2
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:186:LEU:HD21	0.54	2.37	13	1
1:A:197:PHE:CD1	1:A:201:SER:CB	0.54	2.90	16	1
1:A:39:LEU:N	1:A:69:GLN:O	0.54	2.33	9	7
1:A:106:ASP:O	1:A:109:ASN:N	0.54	2.40	7	10
1:A:183:LYS:CG	1:A:188:LEU:CD1	0.54	2.85	3	1
1:A:183:LYS:HG3	1:A:188:LEU:HD11	0.54	1.80	3	1
1:A:4:GLU:O	1:A:6:VAL:HG13	0.54	2.02	4	1
1:A:69:GLN:CG	1:A:69:GLN:O	0.54	2.56	12	3
1:A:84:PRO:CD	1:A:127:ASP:OD1	0.54	2.56	11	1
1:A:186:LEU:N	1:A:186:LEU:HD13	0.54	2.17	11	1
1:A:138:ILE:CG1	1:A:139:GLY:N	0.54	2.71	1	19
1:A:196:PHE:CD1	1:A:211:ILE:HG13	0.54	2.37	18	13

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:LEU:N	1:A:89:LEU:HD12	0.54	2.17	4	3
1:A:93:TYR:CD1	1:A:93:TYR:C	0.54	2.81	2	3
1:A:95:VAL:O	1:A:96:PHE:CD1	0.54	2.60	2	1
1:A:93:TYR:C	1:A:94:HIS:CG	0.54	2.81	12	5
1:A:196:PHE:O	1:A:210:SER:N	0.54	2.41	4	5
1:A:107:GLU:HB3	1:A:166:TRP:CZ3	0.54	2.38	8	2
1:A:115:TRP:CE2	1:A:196:PHE:CE2	0.54	2.96	9	1
1:A:107:GLU:HG3	1:A:166:TRP:CZ3	0.54	2.37	11	2
1:A:185:VAL:HG12	1:A:186:LEU:HD13	0.54	1.79	11	1
1:A:148:GLN:O	1:A:149:ILE:HD12	0.54	2.02	13	1
1:A:132:ARG:O	1:A:136:ALA:CB	0.54	2.56	10	16
1:A:104:TRP:HB2	1:A:166:TRP:CZ2	0.54	2.38	4	9
1:A:93:TYR:HB3	1:A:154:LEU:HD22	0.54	1.79	4	2
1:A:100:VAL:CG2	1:A:101:ARG:N	0.54	2.66	9	2
1:A:87:LEU:HD12	1:A:88:PRO:O	0.54	2.03	10	1
1:A:130:TRP:CD2	1:A:134:LEU:HD12	0.54	2.38	11	2
1:A:130:TRP:CA	1:A:185:VAL:HG11	0.54	2.32	14	1
1:A:149:ILE:HG22	1:A:150:ASN:N	0.54	2.17	19	5
1:A:111:LYS:O	1:A:167:THR:O	0.54	2.26	7	13
1:A:43:TRP:O	1:A:67:SER:CA	0.54	2.56	10	13
1:A:45:LEU:O	1:A:65:VAL:N	0.54	2.41	4	2
1:A:66:THR:HG23	1:A:73:GLU:HB3	0.54	1.78	4	1
1:A:89:LEU:CD2	1:A:156:ILE:CG2	0.54	2.85	7	6
1:A:119:LEU:HD22	1:A:161:ASN:HD21	0.54	1.62	11	2
1:A:104:TRP:HB2	1:A:166:TRP:CH2	0.54	2.38	4	9
1:A:152:VAL:O	1:A:153:VAL:HG23	0.54	2.01	1	5
1:A:82:PRO:O	1:A:86:GLU:CB	0.54	2.55	9	10
1:A:117:PHE:CB	1:A:186:LEU:CD1	0.54	2.85	3	4
1:A:153:VAL:HG21	1:A:166:TRP:CE2	0.54	2.38	4	1
1:A:193:HIS:O	1:A:194:LEU:CG	0.54	2.56	6	3
1:A:47:TYR:CE1	1:A:63:ARG:HB2	0.54	2.37	15	5
1:A:87:LEU:C	1:A:87:LEU:HD23	0.54	2.23	18	4
1:A:116:SER:C	1:A:117:PHE:CD1	0.54	2.81	7	3
1:A:127:ASP:OD1	1:A:127:ASP:N	0.54	2.40	11	2
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:138:ILE:HD11	0.54	2.37	10	1
1:A:39:LEU:HD21	1:A:70:THR:C	0.54	2.23	11	1
1:A:101:ARG:O	1:A:101:ARG:CG	0.54	2.55	1	1
1:A:80:ASN:O	1:A:81:ILE:CD1	0.54	2.54	3	7
1:A:119:LEU:HD11	1:A:188:LEU:HB3	0.54	1.79	15	1
1:A:73:GLU:O	1:A:76:ALA:N	0.54	2.40	14	14
1:A:115:TRP:CE2	1:A:175:LEU:HB3	0.54	2.38	18	7

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:103:GLU:CG	1:A:106:ASP:OD1	0.54	2.56	3	1
1:A:149:ILE:HG23	1:A:150:ASN:H	0.54	1.62	9	9
1:A:150:ASN:ND2	1:A:166:TRP:HB3	0.54	2.18	16	7
1:A:97:ARG:NH1	1:A:149:ILE:HG22	0.54	2.18	5	1
1:A:98:ASN:O	1:A:99:ASP:CB	0.54	2.56	5	2
1:A:45:LEU:N	1:A:66:THR:O	0.54	2.41	19	10
1:A:39:LEU:HD13	1:A:138:ILE:CG1	0.54	2.33	11	1
1:A:66:THR:CG2	1:A:73:GLU:HB3	0.54	2.33	4	19
1:A:96:PHE:HB3	1:A:151:GLY:CA	0.54	2.32	7	10
1:A:152:VAL:C	1:A:153:VAL:HG23	0.54	2.24	1	5
1:A:193:HIS:O	1:A:194:LEU:HD12	0.54	2.03	1	1
1:A:70:THR:OG1	1:A:71:VAL:N	0.54	2.41	3	2
1:A:183:LYS:CB	1:A:194:LEU:HD13	0.54	2.28	13	2
1:A:117:PHE:CE1	1:A:165:LEU:HD11	0.54	2.35	10	1
1:A:129:LEU:CB	1:A:185:VAL:CG1	0.54	2.86	10	1
1:A:118:GLN:O	1:A:193:HIS:CG	0.54	2.61	19	1
1:A:100:VAL:HG22	1:A:101:ARG:H	0.53	1.62	8	17
1:A:199:HIS:O	1:A:203:ASN:ND2	0.53	2.41	4	12
1:A:117:PHE:CD2	1:A:186:LEU:HD11	0.53	2.38	3	1
1:A:126:ILE:O	1:A:130:TRP:CB	0.53	2.56	10	3
1:A:194:LEU:HB3	1:A:213:LEU:HD13	0.53	1.80	17	1
1:A:157:ARG:CG	1:A:157:ARG:O	0.53	2.56	2	2
1:A:39:LEU:CD1	1:A:69:GLN:HB3	0.53	2.29	3	1
1:A:67:SER:O	1:A:68:PHE:CG	0.53	2.61	3	2
1:A:100:VAL:CG1	1:A:107:GLU:OE1	0.53	2.56	6	4
1:A:108:ALA:O	1:A:199:HIS:CB	0.53	2.56	16	5
1:A:171:ASP:O	1:A:175:LEU:CD1	0.53	2.56	4	5
1:A:130:TRP:CH2	1:A:165:LEU:HD12	0.53	2.37	8	1
1:A:57:SER:CB	1:A:60:ASP:OD2	0.53	2.57	9	2
1:A:85:HIS:CG	1:A:85:HIS:O	0.53	2.60	19	2
1:A:103:GLU:CA	1:A:107:GLU:HG2	0.53	2.33	17	2
1:A:41:THR:HG23	1:A:42:LYS:N	0.53	2.17	2	1
1:A:43:TRP:O	1:A:67:SER:HA	0.53	2.04	8	18
1:A:169:SER:O	1:A:170:GLU:C	0.53	2.47	4	14
1:A:183:LYS:HE2	1:A:194:LEU:HD22	0.53	1.80	2	1
1:A:200:SER:HA	1:A:203:ASN:ND2	0.53	2.19	17	2
1:A:101:ARG:CG	1:A:102:PRO:HD3	0.53	2.33	9	3
1:A:152:VAL:O	1:A:153:VAL:CG2	0.53	2.57	14	4
1:A:154:LEU:HD23	1:A:154:LEU:O	0.53	2.03	2	11
1:A:45:LEU:C	1:A:46:TRP:CD1	0.53	2.82	4	16
1:A:96:PHE:CD2	1:A:107:GLU:CD	0.53	2.81	9	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:LEU:CD1	1:A:93:TYR:OH	0.53	2.57	11	3
1:A:66:THR:CG2	1:A:73:GLU:OE2	0.53	2.56	11	4
1:A:82:PRO:O	1:A:87:LEU:CD2	0.53	2.55	13	1
1:A:183:LYS:O	1:A:188:LEU:CD2	0.53	2.57	7	5
1:A:148:GLN:O	1:A:168:LYS:CB	0.53	2.57	3	6
1:A:96:PHE:CD1	1:A:96:PHE:N	0.53	2.77	4	3
1:A:152:VAL:CG1	1:A:165:LEU:HD13	0.53	2.34	5	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:138:ILE:CG1	0.53	2.92	10	1
1:A:94:HIS:CE1	2:A:214:M7G:CM7	0.53	2.92	11	1
1:A:47:TYR:CE1	1:A:63:ARG:CB	0.53	2.92	5	11
1:A:126:ILE:CG2	1:A:186:LEU:O	0.53	2.57	5	2
1:A:193:HIS:ND1	1:A:213:LEU:OXT	0.53	2.41	15	1
1:A:165:LEU:HD21	1:A:178:ILE:HG21	0.53	1.81	3	2
1:A:193:HIS:ND1	1:A:193:HIS:N	0.53	2.57	4	3
1:A:193:HIS:N	1:A:213:LEU:O	0.53	2.42	15	2
1:A:101:ARG:O	1:A:107:GLU:CG	0.53	2.57	9	3
1:A:167:THR:CG2	1:A:175:LEU:CD2	0.53	2.84	8	3
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:182:PHE:CD1	0.53	2.97	13	1
1:A:100:VAL:HG12	1:A:150:ASN:OD1	0.53	2.04	17	1
1:A:117:PHE:O	1:A:162:LYS:CG	0.53	2.57	17	2
1:A:108:ALA:CB	1:A:111:LYS:NZ	0.53	2.72	2	3
1:A:46:TRP:CZ3	1:A:107:GLU:OE2	0.53	2.62	10	3
1:A:100:VAL:CG1	1:A:150:ASN:OD1	0.53	2.56	5	2
1:A:47:TYR:HB2	1:A:93:TYR:CD1	0.53	2.39	6	1
1:A:101:ARG:CD	1:A:102:PRO:HD3	0.53	2.33	6	1
1:A:111:LYS:HG2	1:A:112:GLY:N	0.53	2.18	15	2
1:A:179:GLY:O	1:A:183:LYS:CB	0.53	2.57	18	2
1:A:185:VAL:CG1	1:A:186:LEU:HD13	0.53	2.34	11	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:73:GLU:CB	0.53	2.92	16	1
1:A:68:PHE:CE2	1:A:73:GLU:HB2	0.53	2.39	16	1
1:A:92:ASP:OD2	1:A:155:SER:CB	0.53	2.57	9	2
1:A:105:GLU:O	1:A:109:ASN:ND2	0.53	2.42	18	4
1:A:185:VAL:HG12	1:A:186:LEU:HD12	0.53	1.81	11	1
1:A:197:PHE:CE1	1:A:201:SER:CB	0.53	2.91	16	1
1:A:39:LEU:CD2	1:A:70:THR:CA	0.53	2.87	1	1
1:A:138:ILE:HG13	1:A:139:GLY:N	0.53	2.19	10	18
1:A:89:LEU:CD2	1:A:158:LYS:O	0.53	2.57	20	2
1:A:172:LYS:HG3	1:A:175:LEU:HD12	0.53	1.80	2	1
1:A:42:LYS:CG	1:A:42:LYS:O	0.53	2.57	16	6
1:A:46:TRP:O	1:A:94:HIS:ND1	0.53	2.42	6	2
1:A:101:ARG:CB	1:A:102:PRO:HD2	0.53	2.34	4	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:153:VAL:CG2	1:A:166:TRP:CH2	0.53	2.89	11	3
1:A:183:LYS:CG	1:A:213:LEU:O	0.53	2.56	9	1
1:A:183:LYS:HG2	1:A:188:LEU:HD21	0.53	1.80	9	1
1:A:39:LEU:CD2	1:A:69:GLN:HB2	0.53	2.34	19	2
1:A:193:HIS:ND1	1:A:213:LEU:O	0.53	2.42	18	1
1:A:100:VAL:O	1:A:101:ARG:HB3	0.52	2.03	1	1
1:A:100:VAL:HG13	1:A:107:GLU:OE2	0.52	2.04	12	3
1:A:71:VAL:HG12	1:A:138:ILE:CD1	0.52	2.34	2	1
1:A:48:THR:OG1	1:A:92:ASP:CB	0.52	2.57	15	3
1:A:68:PHE:CB	1:A:73:GLU:OE1	0.52	2.56	15	2
1:A:66:THR:CG2	1:A:73:GLU:OE1	0.52	2.57	18	5
1:A:193:HIS:NE2	1:A:194:LEU:HD12	0.52	2.18	12	1
1:A:82:PRO:HA	1:A:86:GLU:CB	0.52	2.34	13	7
1:A:94:HIS:HB2	1:A:96:PHE:CZ	0.52	2.39	2	2
1:A:103:GLU:N	1:A:107:GLU:HG3	0.52	2.19	3	7
1:A:39:LEU:HG	1:A:70:THR:CA	0.52	2.34	9	9
1:A:183:LYS:CB	1:A:194:LEU:CD1	0.52	2.87	5	1
1:A:87:LEU:C	1:A:87:LEU:CD1	0.52	2.76	19	5
1:A:130:TRP:CH2	1:A:163:PHE:HB3	0.52	2.39	18	2
1:A:150:ASN:OD1	1:A:168:LYS:N	0.52	2.43	14	1
1:A:45:LEU:HB3	1:A:66:THR:O	0.52	2.04	13	18
1:A:76:ALA:O	1:A:80:ASN:ND2	0.52	2.42	18	7
1:A:153:VAL:N	1:A:164:ALA:O	0.52	2.43	5	13
1:A:104:TRP:N	1:A:107:GLU:OE1	0.52	2.42	8	1
1:A:112:GLY:O	1:A:199:HIS:N	0.52	2.42	8	1
1:A:100:VAL:CG1	1:A:107:GLU:OE2	0.52	2.56	12	3
1:A:157:ARG:O	1:A:159:GLY:N	0.52	2.42	13	1
1:A:134:LEU:HB3	1:A:152:VAL:HG11	0.52	1.80	15	1
1:A:57:SER:OG	1:A:60:ASP:N	0.52	2.42	1	1
1:A:74:PHE:O	1:A:78:ILE:HG13	0.52	2.05	11	20
1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:OE1	0.52	2.57	14	3
1:A:87:LEU:HD12	1:A:93:TYR:OH	0.52	2.03	6	2
1:A:196:PHE:O	1:A:210:SER:CB	0.52	2.57	12	5
1:A:161:ASN:N	1:A:161:ASN:OD1	0.52	2.43	12	2
1:A:80:ASN:C	1:A:81:ILE:CG1	0.52	2.77	19	18
1:A:110:ALA:O	1:A:111:LYS:HB2	0.52	2.05	1	1
1:A:93:TYR:O	1:A:154:LEU:N	0.52	2.42	4	5
1:A:48:THR:OG1	1:A:58:TRP:CH2	0.52	2.55	4	4
1:A:170:GLU:O	1:A:174:PRO:CG	0.52	2.57	17	6
1:A:39:LEU:HD12	1:A:43:TRP:CZ2	0.52	2.40	10	1
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:138:ILE:HD11	0.52	2.40	10	1

*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	2.57	12	1
1:A:161:ASN:OD1	1:A:161:ASN:N	0.52	2.43	15	3
1:A:120:ARG:CD	1:A:121:GLY:N	0.52	2.73	18	1
1:A:82:PRO:CB	1:A:87:LEU:HB3	0.52	2.35	10	9
1:A:44:THR:OG1	1:A:46:TRP:NE1	0.52	2.43	4	6
1:A:43:TRP:CD2	1:A:138:ILE:CD1	0.52	2.92	10	1
1:A:186:LEU:HD22	1:A:187:LYS:N	0.52	2.20	11	1
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:HD12	0.52	1.82	12	1
1:A:181:LYS:CG	1:A:182:PHE:N	0.52	2.73	13	1
1:A:58:TRP:CE2	2:A:214:M7G:C4	0.52	2.93	15	1
1:A:6:VAL:O	1:A:6:VAL:CG1	0.52	2.58	1	2
1:A:88:PRO:O	1:A:89:LEU:O	0.52	2.27	10	20
1:A:102:PRO:O	1:A:103:GLU:CG	0.52	2.58	5	4
1:A:117:PHE:CD1	1:A:163:PHE:HB2	0.52	2.40	20	8
1:A:131:LEU:O	1:A:134:LEU:N	0.52	2.43	2	18
1:A:196:PHE:HB2	1:A:210:SER:CB	0.52	2.34	1	9
1:A:99:ASP:O	1:A:100:VAL:O	0.52	2.27	4	2
1:A:101:ARG:N	1:A:101:ARG:CD	0.52	2.71	3	1
1:A:107:GLU:O	1:A:111:LYS:CG	0.52	2.58	6	4
1:A:135:LEU:C	1:A:135:LEU:CD2	0.52	2.78	7	1
1:A:58:TRP:O	1:A:62:LEU:CD1	0.52	2.58	12	1
1:A:40:ASN:ND2	1:A:139:GLY:O	0.52	2.43	13	2
1:A:84:PRO:O	1:A:161:ASN:ND2	0.52	2.43	14	2
1:A:96:PHE:HZ	1:A:153:VAL:HG22	0.52	1.64	16	1
1:A:84:PRO:N	1:A:127:ASP:OD2	0.52	2.43	20	1
1:A:42:LYS:CG	1:A:97:ARG:O	0.52	2.57	3	1
1:A:111:LYS:HD2	1:A:166:TRP:CB	0.52	2.35	15	4
1:A:87:LEU:HD13	1:A:91:SER:CB	0.52	2.35	13	1
1:A:39:LEU:HD12	1:A:69:GLN:H	0.52	1.65	2	1
1:A:94:HIS:CD2	1:A:96:PHE:CE2	0.52	2.98	2	1
1:A:96:PHE:CG	1:A:107:GLU:CD	0.52	2.83	2	1
1:A:160:GLY:O	1:A:161:ASN:CB	0.52	2.57	5	4
1:A:44:THR:CB	1:A:46:TRP:CZ2	0.52	2.92	10	2
1:A:117:PHE:CZ	1:A:130:TRP:CZ3	0.52	2.97	3	3
1:A:119:LEU:C	1:A:119:LEU:HD23	0.52	2.25	4	1
1:A:130:TRP:CD1	1:A:130:TRP:C	0.52	2.83	7	5
1:A:111:LYS:CD	1:A:166:TRP:CB	0.52	2.88	18	2
1:A:188:LEU:HD13	1:A:193:HIS:CG	0.52	2.40	10	2
1:A:126:ILE:HG22	1:A:186:LEU:CB	0.52	2.34	11	1
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:163:PHE:HB2	0.52	2.40	11	2
1:A:134:LEU:O	1:A:138:ILE:HG23	0.51	2.04	2	2

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:VAL:CG1	1:A:107:GLU:HA	0.51	2.34	18	10
1:A:95:VAL:C	1:A:96:PHE:CG	0.51	2.82	8	5
1:A:41:THR:O	1:A:69:GLN:NE2	0.51	2.43	2	2
1:A:62:LEU:C	1:A:62:LEU:CD1	0.51	2.73	4	5
1:A:46:TRP:CH2	1:A:97:ARG:HG3	0.51	2.40	3	1
1:A:96:PHE:CB	1:A:151:GLY:CA	0.51	2.87	19	2
1:A:183:LYS:CG	1:A:194:LEU:HD13	0.51	2.35	20	2
1:A:39:LEU:O	1:A:40:ASN:HB3	0.51	2.06	11	2
1:A:87:LEU:CB	1:A:88:PRO:HD2	0.51	2.36	11	10
1:A:106:ASP:O	1:A:109:ASN:ND2	0.51	2.44	1	2
1:A:115:TRP:O	1:A:165:LEU:N	0.51	2.44	2	3
1:A:194:LEU:HD23	1:A:196:PHE:HZ	0.51	1.65	7	2
1:A:69:GLN:O	1:A:70:THR:O	0.51	2.28	3	1
1:A:188:LEU:CD1	1:A:193:HIS:HA	0.51	2.35	15	2
1:A:194:LEU:HB3	1:A:196:PHE:CZ	0.51	2.40	6	2
1:A:84:PRO:CA	1:A:156:ILE:HD11	0.51	2.32	7	1
1:A:103:GLU:HA	1:A:107:GLU:CD	0.51	2.26	8	1
1:A:106:ASP:OD2	1:A:109:ASN:ND2	0.51	2.43	15	1
1:A:39:LEU:HD13	1:A:139:GLY:HA3	0.51	1.83	20	1
1:A:92:ASP:OD2	1:A:94:HIS:NE2	0.51	2.43	20	1
1:A:87:LEU:CB	1:A:88:PRO:CD	0.51	2.88	16	7
1:A:193:HIS:HA	1:A:213:LEU:CB	0.51	2.36	1	3
1:A:187:LYS:O	1:A:188:LEU:C	0.51	2.47	11	2
1:A:101:ARG:CB	1:A:106:ASP:C	0.51	2.78	5	1
1:A:153:VAL:O	1:A:163:PHE:CE2	0.51	2.64	7	1
1:A:105:GLU:OE1	2:A:214:M7G:N1	0.51	2.43	9	1
1:A:111:LYS:NZ	1:A:166:TRP:CG	0.51	2.67	14	1
1:A:108:ALA:HB2	1:A:111:LYS:HZ1	0.51	1.63	15	1
1:A:46:TRP:CE3	1:A:103:GLU:OE1	0.51	2.64	18	1
1:A:87:LEU:CD1	1:A:91:SER:OG	0.51	2.59	14	2
1:A:89:LEU:HA	1:A:156:ILE:CG2	0.51	2.36	7	20
1:A:89:LEU:O	1:A:91:SER:N	0.51	2.42	9	7
1:A:106:ASP:HA	1:A:109:ASN:HB2	0.51	1.82	17	7
1:A:183:LYS:HB2	1:A:194:LEU:CD1	0.51	2.36	5	3
1:A:183:LYS:HG2	1:A:194:LEU:HD13	0.51	1.82	9	1
1:A:183:LYS:CG	1:A:188:LEU:O	0.51	2.58	11	1
1:A:69:GLN:O	1:A:70:THR:CG2	0.51	2.59	19	2
1:A:106:ASP:OD1	1:A:109:ASN:ND2	0.51	2.43	2	4
1:A:114:LYS:N	1:A:197:PHE:O	0.51	2.42	2	3
1:A:46:TRP:O	1:A:94:HIS:N	0.51	2.44	11	6
1:A:126:ILE:HG21	1:A:186:LEU:O	0.51	2.05	18	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:161:ASN:O	1:A:162:LYS:CG	0.51	2.58	9	2
1:A:172:LYS:HA	1:A:175:LEU:CG	0.51	2.36	18	3
1:A:117:PHE:CE1	1:A:130:TRP:CZ3	0.51	2.98	15	1
1:A:83:GLU:CG	1:A:124:ALA:O	0.51	2.59	16	1
1:A:104:TRP:CD1	1:A:105:GLU:N	0.51	2.78	4	17
1:A:165:LEU:HD12	1:A:165:LEU:C	0.51	2.25	1	4
1:A:211:ILE:O	1:A:212:THR:CG2	0.51	2.59	5	7
1:A:210:SER:O	1:A:211:ILE:CG2	0.51	2.56	2	3
1:A:43:TRP:CD2	1:A:68:PHE:HA	0.51	2.40	3	1
1:A:90:LYS:CG	2:A:214:M7G:O1A	0.51	2.59	3	1
1:A:178:ILE:HG13	1:A:179:GLY:N	0.51	2.20	12	8
1:A:100:VAL:HG11	1:A:107:GLU:CA	0.51	2.35	8	9
1:A:81:ILE:N	1:A:82:PRO:CD	0.51	2.73	19	19
1:A:83:GLU:O	1:A:85:HIS:N	0.51	2.44	13	7
1:A:100:VAL:CG1	1:A:107:GLU:CD	0.51	2.79	2	9
1:A:152:VAL:HG12	1:A:165:LEU:CG	0.51	2.32	4	1
1:A:124:ALA:O	1:A:125:ASP:CB	0.51	2.59	15	3
2:A:214:M7G:C4'	2:A:214:M7G:O1A	0.51	2.59	10	1
1:A:196:PHE:CD2	1:A:211:ILE:CD1	0.51	2.81	16	1
1:A:61:LEU:O	1:A:62:LEU:C	0.51	2.49	3	14
1:A:65:VAL:O	1:A:66:THR:C	0.51	2.49	2	20
1:A:70:THR:O	1:A:71:VAL:HG13	0.51	2.06	3	1
1:A:93:TYR:OH	1:A:131:LEU:CD2	0.51	2.59	3	1
1:A:106:ASP:HA	1:A:109:ASN:HB3	0.51	1.82	4	3
1:A:111:LYS:HG3	1:A:112:GLY:N	0.51	2.19	3	4
1:A:106:ASP:N	1:A:109:ASN:ND2	0.51	2.59	19	3
1:A:43:TRP:CE3	1:A:95:VAL:HG12	0.51	2.41	6	1
1:A:69:GLN:O	1:A:69:GLN:NE2	0.51	2.43	10	1
1:A:157:ARG:CD	1:A:160:GLY:O	0.51	2.58	16	1
1:A:41:THR:O	1:A:69:GLN:HA	0.51	2.04	2	3
2:A:214:M7G:O2A	2:A:214:M7G:O3'	0.51	2.22	4	1
1:A:74:PHE:CD2	1:A:135:LEU:HB2	0.51	2.41	19	2
1:A:43:TRP:CE3	1:A:96:PHE:HA	0.51	2.41	6	1
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:HB2	0.51	1.83	6	1
1:A:84:PRO:HG3	1:A:126:ILE:CG1	0.51	2.36	9	1
1:A:113:GLY:N	1:A:170:GLU:HB3	0.51	2.20	18	1
1:A:188:LEU:HB2	1:A:193:HIS:NE2	0.50	2.20	17	2
1:A:43:TRP:NE1	1:A:68:PHE:C	0.50	2.65	2	1
1:A:62:LEU:CD2	1:A:103:GLU:OE1	0.50	2.59	2	1
1:A:117:PHE:CE1	1:A:130:TRP:CZ2	0.50	2.99	5	2
1:A:175:LEU:O	1:A:178:ILE:N	0.50	2.44	14	9

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:173:GLU:HB2	1:A:174:PRO:CD	0.50	2.36	20	10
1:A:50:PRO:CD	1:A:90:LYS:O	0.50	2.60	17	2
1:A:107:GLU:O	1:A:111:LYS:HG2	0.50	2.05	13	2
1:A:93:TYR:CD1	1:A:93:TYR:N	0.50	2.79	20	3
1:A:196:PHE:CG	1:A:211:ILE:HG13	0.50	2.42	1	4
1:A:44:THR:HB	1:A:46:TRP:CE2	0.50	2.41	6	3
1:A:111:LYS:CB	1:A:150:ASN:CG	0.50	2.80	7	1
1:A:39:LEU:N	1:A:39:LEU:HD22	0.50	2.21	19	1
1:A:156:ILE:O	1:A:157:ARG:CB	0.50	2.57	5	3
1:A:194:LEU:N	1:A:213:LEU:O	0.50	2.43	8	3
1:A:112:GLY:HA2	1:A:199:HIS:CD2	0.50	2.41	12	1
1:A:99:ASP:OD2	1:A:168:LYS:CB	0.50	2.59	17	1
1:A:150:ASN:HB2	1:A:168:LYS:CA	0.50	2.37	17	1
1:A:107:GLU:O	1:A:110:ALA:CB	0.50	2.59	1	1
1:A:168:LYS:O	1:A:169:SER:OG	0.50	2.29	6	3
1:A:89:LEU:H	1:A:89:LEU:HD12	0.50	1.66	2	1
1:A:108:ALA:HA	1:A:111:LYS:CE	0.50	2.37	2	10
1:A:195:GLU:CD	1:A:212:THR:HG22	0.50	2.27	4	1
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:165:LEU:HD12	0.50	2.40	8	1
1:A:3:VAL:HG13	1:A:3:VAL:O	0.50	2.06	12	2
1:A:99:ASP:CB	1:A:150:ASN:HB3	0.50	2.37	14	1
1:A:44:THR:HG1	1:A:46:TRP:HE1	0.50	1.45	16	1
1:A:47:TYR:O	1:A:62:LEU:HA	0.50	2.07	8	7
1:A:84:PRO:O	1:A:85:HIS:CB	0.50	2.60	6	5
1:A:108:ALA:HA	1:A:111:LYS:CG	0.50	2.36	20	9
1:A:123:GLY:CA	1:A:126:ILE:HD12	0.50	2.36	2	1
1:A:129:LEU:HB3	1:A:185:VAL:CG1	0.50	2.35	10	2
1:A:126:ILE:CG2	1:A:186:LEU:HB2	0.50	2.37	11	1
1:A:76:ALA:O	1:A:79:GLN:N	0.50	2.44	19	8
1:A:134:LEU:HD13	1:A:152:VAL:CB	0.50	2.37	3	1
1:A:42:LYS:O	1:A:97:ARG:HA	0.50	2.06	10	1
1:A:161:ASN:CG	1:A:163:PHE:CZ	0.50	2.85	10	1
1:A:103:GLU:HA	1:A:107:GLU:CG	0.50	2.37	17	2
1:A:4:GLU:O	1:A:4:GLU:CG	0.50	2.59	12	1
1:A:157:ARG:NE	2:A:214:M7G:O3B	0.50	2.44	12	1
1:A:74:PHE:CD1	1:A:135:LEU:HB2	0.50	2.42	13	1
1:A:68:PHE:CB	1:A:73:GLU:CD	0.50	2.80	15	1
1:A:90:LYS:HA	1:A:156:ILE:O	0.50	2.06	19	20
1:A:161:ASN:C	1:A:162:LYS:CG	0.50	2.80	3	6
1:A:170:GLU:CD	1:A:175:LEU:CD2	0.50	2.80	1	1
1:A:40:ASN:ND2	1:A:40:ASN:C	0.50	2.65	11	2

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:TRP:CE3	1:A:67:SER:O	0.50	2.64	3	1
1:A:97:ARG:O	1:A:98:ASN:CB	0.50	2.57	4	1
1:A:48:THR:OG1	1:A:92:ASP:HB3	0.50	2.07	9	6
1:A:149:ILE:HG13	1:A:167:THR:CG2	0.50	2.36	10	2
1:A:66:THR:HG22	1:A:73:GLU:CG	0.50	2.36	14	1
1:A:130:TRP:CH2	1:A:134:LEU:HD11	0.50	2.41	15	2
1:A:111:LYS:HD2	1:A:112:GLY:N	0.50	2.22	20	4
1:A:196:PHE:CD1	1:A:211:ILE:CB	0.50	2.95	5	4
1:A:42:LYS:O	1:A:97:ARG:CB	0.50	2.60	1	1
1:A:78:ILE:O	1:A:81:ILE:N	0.50	2.40	12	9
1:A:111:LYS:O	1:A:168:LYS:O	0.50	2.30	14	3
1:A:84:PRO:HB2	1:A:161:ASN:ND2	0.50	2.22	8	4
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:68:PHE:HB3	0.49	2.42	2	1
1:A:183:LYS:HG3	1:A:188:LEU:CD1	0.49	2.36	3	1
1:A:94:HIS:HB3	1:A:96:PHE:CZ	0.49	2.41	8	6
1:A:49:LYS:HB3	1:A:50:PRO:CD	0.49	2.37	6	1
1:A:103:GLU:C	1:A:107:GLU:CG	0.49	2.81	17	3
1:A:165:LEU:HD22	1:A:182:PHE:CD2	0.49	2.42	16	2
1:A:200:SER:CA	1:A:203:ASN:ND2	0.49	2.75	17	1
1:A:104:TRP:CB	1:A:166:TRP:CH2	0.49	2.95	17	5
1:A:94:HIS:CD2	1:A:96:PHE:CZ	0.49	3.00	3	2
1:A:84:PRO:HA	1:A:156:ILE:CD1	0.49	2.37	9	6
1:A:69:GLN:C	1:A:70:THR:CG2	0.49	2.79	14	5
1:A:193:HIS:N	1:A:213:LEU:OXT	0.49	2.43	11	6
1:A:104:TRP:N	1:A:166:TRP:CH2	0.49	2.79	9	1
1:A:196:PHE:HB2	1:A:211:ILE:CG1	0.49	2.37	16	3
1:A:99:ASP:OD1	1:A:111:LYS:NZ	0.49	2.44	11	1
1:A:69:GLN:CD	1:A:69:GLN:N	0.49	2.66	19	8
1:A:82:PRO:O	1:A:83:GLU:O	0.49	2.30	16	6
1:A:105:GLU:C	1:A:109:ASN:ND2	0.49	2.66	16	3
1:A:43:TRP:HB2	1:A:68:PHE:O	0.49	2.06	10	2
1:A:107:GLU:CB	1:A:166:TRP:CZ3	0.49	2.96	20	4
1:A:39:LEU:CD2	1:A:70:THR:C	0.49	2.81	1	1
1:A:101:ARG:HB3	1:A:102:PRO:HD2	0.49	1.85	9	5
1:A:104:TRP:CB	2:A:214:M7G:HM71	0.49	2.36	7	4
1:A:115:TRP:CZ3	1:A:196:PHE:HB3	0.49	2.42	18	5
1:A:39:LEU:CG	1:A:69:GLN:C	0.49	2.80	15	5
1:A:80:ASN:O	1:A:81:ILE:C	0.49	2.51	6	20
1:A:103:GLU:HA	1:A:107:GLU:HG3	0.49	1.83	11	10
1:A:103:GLU:CA	1:A:107:GLU:HG3	0.49	2.37	12	10
1:A:89:LEU:HD12	1:A:89:LEU:H	0.49	1.67	4	1

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:LEU:HD21	1:A:77:ILE:CG1	0.49	2.38	14	3
1:A:94:HIS:HB3	1:A:96:PHE:CE2	0.49	2.43	17	10
1:A:43:TRP:CH2	1:A:138:ILE:HD11	0.49	2.43	10	1
1:A:68:PHE:C	1:A:69:GLN:NE2	0.49	2.66	11	1
1:A:64:PRO:C	1:A:65:VAL:CG1	0.49	2.80	1	4
1:A:103:GLU:O	1:A:105:GLU:N	0.49	2.45	14	11
1:A:172:LYS:HA	1:A:175:LEU:CD1	0.49	2.38	13	13
1:A:45:LEU:CD2	1:A:77:ILE:CG1	0.49	2.90	15	5
1:A:43:TRP:CH2	1:A:138:ILE:HG21	0.49	2.42	6	1
1:A:96:PHE:O	1:A:97:ARG:HB3	0.49	2.07	17	4
1:A:43:TRP:CB	1:A:68:PHE:O	0.49	2.61	10	1
1:A:107:GLU:O	1:A:111:LYS:HG3	0.49	2.08	14	1
1:A:57:SER:C	1:A:61:LEU:CD2	0.49	2.81	16	1
1:A:81:ILE:O	1:A:86:GLU:HB2	0.49	2.07	2	9
1:A:127:ASP:O	1:A:131:LEU:CD1	0.49	2.56	14	7
1:A:149:ILE:HD11	1:A:170:GLU:OE1	0.49	2.08	1	1
1:A:44:THR:HA	1:A:67:SER:HA	0.49	1.84	19	14
2:A:214:M7G:O2B	2:A:214:M7G:O5'	0.49	2.31	2	1
1:A:43:TRP:O	1:A:67:SER:CB	0.49	2.60	3	2
1:A:96:PHE:O	1:A:97:ARG:HB2	0.49	2.07	13	9
1:A:116:SER:N	1:A:195:GLU:O	0.49	2.46	6	3
1:A:66:THR:CG2	1:A:73:GLU:HG2	0.49	2.37	15	3
1:A:104:TRP:HA	1:A:108:ALA:CB	0.49	2.37	9	1
1:A:84:PRO:HG3	1:A:126:ILE:CD1	0.49	2.38	10	1
1:A:117:PHE:CD2	1:A:186:LEU:HD21	0.49	2.43	11	1
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:CD1	0.49	2.36	12	1
1:A:68:PHE:CD2	1:A:73:GLU:OE2	0.49	2.66	13	1
1:A:202:ALA:O	1:A:203:ASN:CB	0.49	2.59	14	1
1:A:48:THR:CB	1:A:58:TRP:CZ3	0.49	2.96	2	4
1:A:3:VAL:HG22	1:A:3:VAL:O	0.49	2.08	3	2
1:A:43:TRP:CG	1:A:69:GLN:N	0.49	2.81	3	1
1:A:49:LYS:HB3	1:A:50:PRO:HD3	0.49	1.84	6	2
1:A:116:SER:CB	1:A:163:PHE:O	0.49	2.60	7	1
1:A:196:PHE:CZ	1:A:213:LEU:HD12	0.49	2.41	9	1
1:A:175:LEU:N	1:A:175:LEU:HD23	0.49	2.22	18	1
1:A:83:GLU:CG	1:A:84:PRO:HD3	0.49	2.37	19	1
1:A:80:ASN:C	1:A:81:ILE:HG12	0.49	2.28	9	13
1:A:91:SER:O	1:A:155:SER:HA	0.49	2.08	16	20
1:A:100:VAL:O	1:A:101:ARG:HB2	0.49	2.08	11	5
1:A:210:SER:C	1:A:211:ILE:CG1	0.49	2.81	11	8
1:A:74:PHE:CD1	1:A:135:LEU:HB3	0.49	2.42	2	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:188:LEU:HG	1:A:193:HIS:CE1	0.49	2.42	3	1
1:A:87:LEU:CD1	1:A:91:SER:HB3	0.49	2.38	13	2
1:A:194:LEU:O	1:A:212:THR:HA	0.49	2.08	11	10
1:A:60:ASP:N	1:A:60:ASP:OD1	0.49	2.45	5	2
1:A:188:LEU:CD1	1:A:193:HIS:CD2	0.49	2.92	6	1
1:A:117:PHE:CZ	1:A:182:PHE:HB3	0.49	2.43	10	1
1:A:3:VAL:O	1:A:3:VAL:CG2	0.49	2.60	15	1
1:A:172:LYS:HG3	1:A:175:LEU:HD22	0.49	1.83	15	1
1:A:80:ASN:C	1:A:82:PRO:HD3	0.49	2.28	13	19
1:A:106:ASP:O	1:A:109:ASN:HB2	0.49	2.08	10	9
1:A:179:GLY:O	1:A:183:LYS:N	0.49	2.46	20	5
1:A:68:PHE:HB2	1:A:73:GLU:CG	0.49	2.38	3	1
1:A:188:LEU:HG	1:A:193:HIS:ND1	0.49	2.22	3	1
1:A:87:LEU:CD1	1:A:91:SER:HB2	0.49	2.38	5	4
1:A:183:LYS:HG2	1:A:184:GLN:N	0.49	2.23	7	5
1:A:101:ARG:O	1:A:107:GLU:HG2	0.49	2.07	16	3
1:A:157:ARG:NH1	2:A:214:M7G:O5'	0.49	2.46	5	1
1:A:58:TRP:CG	2:A:214:M7G:C4	0.49	2.96	20	2
1:A:111:LYS:CG	1:A:168:LYS:HA	0.49	2.38	11	2
1:A:111:LYS:O	1:A:113:GLY:N	0.49	2.46	13	1
1:A:85:HIS:CE1	1:A:124:ALA:HA	0.49	2.43	15	1
1:A:118:GLN:O	1:A:193:HIS:ND1	0.49	2.45	19	1
1:A:69:GLN:O	1:A:70:THR:C	0.48	2.51	3	1
1:A:93:TYR:HD2	1:A:154:LEU:HD13	0.48	1.64	3	1
1:A:45:LEU:CD1	1:A:95:VAL:CG2	0.48	2.90	4	4
1:A:176:LEU:HG	1:A:196:PHE:CE2	0.48	2.43	4	1
1:A:203:ASN:ND2	1:A:203:ASN:C	0.48	2.66	6	1
1:A:101:ARG:HG2	1:A:106:ASP:CB	0.48	2.38	9	1
1:A:111:LYS:CD	1:A:166:TRP:HB3	0.48	2.38	18	1
1:A:167:THR:CG2	1:A:175:LEU:HD21	0.48	2.38	8	2
1:A:101:ARG:HD3	1:A:110:ALA:HB2	0.48	1.84	4	1
1:A:153:VAL:CB	1:A:164:ALA:HB3	0.48	2.34	8	3
1:A:203:ASN:N	1:A:203:ASN:OD1	0.48	2.43	5	2
1:A:117:PHE:CD2	1:A:163:PHE:HB2	0.48	2.43	10	1
1:A:98:ASN:C	1:A:98:ASN:ND2	0.48	2.66	14	1
1:A:83:GLU:HB3	1:A:84:PRO:CD	0.48	2.38	15	1
1:A:157:ARG:O	1:A:158:LYS:O	0.48	2.30	16	1
1:A:104:TRP:CA	1:A:166:TRP:CH2	0.48	2.96	4	9
1:A:82:PRO:O	1:A:87:LEU:CG	0.48	2.61	2	1
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:HA	0.48	1.84	16	2
1:A:183:LYS:CG	1:A:193:HIS:O	0.48	2.61	15	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:ASP:HB2	1:A:150:ASN:CB	0.48	2.38	11	2
1:A:117:PHE:HB3	1:A:186:LEU:CD1	0.48	2.38	16	3
1:A:181:LYS:O	1:A:185:VAL:CG2	0.48	2.57	18	1
1:A:49:LYS:HB2	1:A:50:PRO:CD	0.48	2.38	2	4
1:A:48:THR:N	1:A:92:ASP:O	0.48	2.46	5	9
1:A:165:LEU:CD2	1:A:178:ILE:CG2	0.48	2.91	3	2
1:A:201:SER:OG	1:A:202:ALA:N	0.48	2.47	3	2
1:A:93:TYR:C	1:A:93:TYR:CD1	0.48	2.86	7	1
1:A:137:VAL:CG1	1:A:138:ILE:N	0.48	2.76	16	5
1:A:101:ARG:HB3	1:A:106:ASP:HB2	0.48	1.84	9	1
1:A:186:LEU:HD11	1:A:194:LEU:HD11	0.48	1.86	9	1
1:A:111:LYS:O	1:A:168:LYS:CA	0.48	2.61	10	1
2:A:214:M7G:O1A	2:A:214:M7G:O4'	0.48	2.31	10	1
1:A:111:LYS:HE2	1:A:166:TRP:HB3	0.48	1.84	14	1
1:A:119:LEU:CD1	1:A:193:HIS:NE2	0.48	2.74	3	1
1:A:126:ILE:CG1	1:A:127:ASP:N	0.48	2.76	18	3
1:A:156:ILE:O	1:A:157:ARG:HB3	0.48	2.08	5	3
1:A:116:SER:CB	1:A:195:GLU:HB2	0.48	2.39	13	5
1:A:85:HIS:CG	1:A:123:GLY:HA3	0.48	2.44	7	1
1:A:115:TRP:O	1:A:164:ALA:HB1	0.48	2.09	10	1
1:A:165:LEU:N	1:A:165:LEU:CD1	0.48	2.73	10	1
1:A:92:ASP:OD2	2:A:214:M7G:O2A	0.48	2.32	15	1
1:A:42:LYS:O	1:A:97:ARG:HB2	0.48	2.09	1	1
1:A:111:LYS:O	1:A:168:LYS:C	0.48	2.51	9	4
1:A:93:TYR:O	1:A:154:LEU:HB3	0.48	2.08	4	1
1:A:108:ALA:O	1:A:112:GLY:CA	0.48	2.62	4	2
1:A:163:PHE:CE2	1:A:186:LEU:HD13	0.48	2.44	10	1
1:A:111:LYS:HB3	1:A:167:THR:O	0.48	2.09	11	2
1:A:130:TRP:O	1:A:134:LEU:CG	0.48	2.62	11	2
1:A:116:SER:O	1:A:195:GLU:N	0.48	2.47	20	9
1:A:101:ARG:HD2	1:A:102:PRO:CD	0.48	2.37	6	1
1:A:97:ARG:CG	1:A:101:ARG:HA	0.48	2.39	7	1
1:A:94:HIS:NE2	1:A:153:VAL:HG13	0.48	2.24	11	1
1:A:119:LEU:HG	1:A:193:HIS:CE1	0.48	2.44	17	1
1:A:194:LEU:O	1:A:213:LEU:N	0.48	2.47	8	6
1:A:115:TRP:CE3	1:A:196:PHE:HA	0.48	2.44	19	2
1:A:148:GLN:O	1:A:149:ILE:O	0.48	2.32	8	11
1:A:39:LEU:CB	1:A:69:GLN:O	0.48	2.62	15	6
1:A:111:LYS:NZ	1:A:166:TRP:CD1	0.48	2.78	14	3
1:A:83:GLU:CG	1:A:84:PRO:HD2	0.48	2.39	10	3
1:A:99:ASP:CB	1:A:150:ASN:HB2	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
1:A:130:TRP:CH2	1:A:153:VAL:O	0.48	2.66	18	2
1:A:194:LEU:CB	1:A:213:LEU:HB2	0.48	2.39	14	2
1:A:5:GLU:CG	1:A:5:GLU:O	0.48	2.61	15	1
1:A:210:SER:OG	1:A:211:ILE:CG1	0.48	2.61	20	1
1:A:74:PHE:HA	1:A:77:ILE:CD1	0.48	2.39	8	15
1:A:44:THR:HB	1:A:46:TRP:NE1	0.48	2.24	6	5
1:A:47:TYR:OH	1:A:65:VAL:CG2	0.48	2.59	13	3
1:A:173:GLU:N	1:A:174:PRO:CD	0.48	2.76	13	4
1:A:43:TRP:C	1:A:44:THR:CG2	0.48	2.82	10	1
1:A:94:HIS:NE2	1:A:153:VAL:CG1	0.48	2.77	13	3
1:A:138:ILE:O	1:A:139:GLY:C	0.48	2.52	11	1
1:A:69:GLN:OE1	1:A:69:GLN:O	0.48	2.32	14	1
1:A:182:PHE:O	1:A:186:LEU:HG	0.48	2.08	15	3
1:A:39:LEU:HB3	1:A:69:GLN:CB	0.48	2.39	2	1
1:A:131:LEU:O	1:A:133:THR:N	0.48	2.47	8	13
1:A:97:ARG:O	1:A:99:ASP:N	0.48	2.47	5	3
1:A:97:ARG:O	1:A:97:ARG:CD	0.48	2.62	6	1
1:A:83:GLU:HB3	1:A:84:PRO:HD2	0.48	1.86	11	4
1:A:100:VAL:HB	1:A:110:ALA:HB3	0.48	1.84	7	5
1:A:112:GLY:O	1:A:198:PRO:HA	0.48	2.09	19	2
1:A:62:LEU:HD13	1:A:103:GLU:CD	0.48	2.29	9	1
1:A:130:TRP:CB	1:A:185:VAL:HG11	0.48	2.39	9	1
1:A:104:TRP:CD1	2:A:214:M7G:C5	0.47	2.97	8	16
1:A:183:LYS:CG	1:A:188:LEU:HD11	0.47	2.39	3	1
1:A:45:LEU:CD2	1:A:66:THR:CB	0.47	2.91	4	2
1:A:195:GLU:CG	1:A:212:THR:HG22	0.47	2.38	4	2
1:A:109:ASN:OD1	1:A:203:ASN:OD1	0.47	2.32	5	1
1:A:89:LEU:HD22	1:A:157:ARG:O	0.47	2.09	11	2
1:A:169:SER:OG	1:A:170:GLU:N	0.47	2.45	8	2
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:CG	0.47	2.39	9	3
1:A:41:THR:CG2	1:A:42:LYS:N	0.47	2.76	2	1
1:A:96:PHE:CB	1:A:107:GLU:OE2	0.47	2.62	2	1
1:A:111:LYS:HD3	1:A:166:TRP:CB	0.47	2.39	13	2
1:A:101:ARG:O	1:A:107:GLU:OE2	0.47	2.32	6	3
1:A:187:LYS:O	1:A:188:LEU:O	0.47	2.33	11	2
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:96:PHE:HA	0.47	2.45	6	1
1:A:183:LYS:HD3	1:A:193:HIS:ND1	0.47	2.25	6	1
1:A:101:ARG:CD	1:A:106:ASP:HB3	0.47	2.39	9	1
1:A:107:GLU:CB	1:A:166:TRP:CE3	0.47	2.96	1	2
1:A:155:SER:O	1:A:162:LYS:O	0.47	2.33	20	6
1:A:46:TRP:HB2	1:A:94:HIS:CD2	0.47	2.44	3	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:TRP:HB3	1:A:97:ARG:CG	0.47	2.40	4	2
1:A:111:LYS:HD2	1:A:113:GLY:N	0.47	2.22	6	2
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:182:PHE:CD2	0.47	3.02	19	2
1:A:135:LEU:HG	1:A:136:ALA:N	0.47	2.25	20	7
1:A:148:GLN:O	1:A:168:LYS:HB3	0.47	2.09	8	6
1:A:87:LEU:HD23	1:A:87:LEU:O	0.47	2.09	18	3
1:A:180:GLY:O	1:A:183:LYS:CB	0.47	2.62	15	2
1:A:115:TRP:CE2	1:A:196:PHE:CD2	0.47	3.02	9	1
1:A:6:VAL:HG22	1:A:6:VAL:O	0.47	2.09	11	1
1:A:119:LEU:CD2	1:A:188:LEU:HB2	0.47	2.39	15	1
1:A:171:ASP:O	1:A:172:LYS:HB2	0.47	2.08	18	1
1:A:131:LEU:O	1:A:132:ARG:C	0.47	2.53	8	19
1:A:78:ILE:HG23	1:A:131:LEU:HD13	0.47	1.85	2	3
1:A:111:LYS:HE3	1:A:113:GLY:N	0.47	2.25	2	2
1:A:41:THR:OG1	1:A:98:ASN:O	0.47	2.31	3	1
1:A:195:GLU:HG2	1:A:212:THR:HG22	0.47	1.85	18	3
1:A:43:TRP:CA	1:A:96:PHE:O	0.47	2.63	9	3
1:A:134:LEU:HD21	1:A:182:PHE:CE1	0.47	2.43	7	1
1:A:96:PHE:HE2	1:A:153:VAL:HG22	0.47	1.68	8	1
1:A:121:GLY:O	1:A:122:LYS:O	0.47	2.32	19	2
1:A:186:LEU:C	1:A:186:LEU:HD22	0.47	2.30	11	1
1:A:193:HIS:O	1:A:194:LEU:O	0.47	2.31	11	1
1:A:83:GLU:CB	1:A:127:ASP:HB3	0.47	2.39	12	1
1:A:88:PRO:CA	1:A:89:LEU:HD22	0.47	2.40	16	2
1:A:70:THR:OG1	1:A:73:GLU:OE1	0.47	2.32	15	1
1:A:109:ASN:OD1	1:A:203:ASN:CB	0.47	2.62	18	2
1:A:39:LEU:HG	1:A:69:GLN:O	0.47	2.09	12	9
1:A:90:LYS:HG3	2:A:214:M7G:O1A	0.47	2.10	3	1
1:A:193:HIS:CG	1:A:213:LEU:HB3	0.47	2.44	5	1
1:A:111:LYS:NZ	1:A:114:LYS:HB2	0.47	2.25	6	4
1:A:180:GLY:O	1:A:183:LYS:HB2	0.47	2.10	20	5
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:138:ILE:CD1	0.47	2.96	10	1
1:A:41:THR:CG2	1:A:98:ASN:OD1	0.47	2.62	13	1
1:A:111:LYS:HD3	1:A:166:TRP:CA	0.47	2.40	13	1
1:A:170:GLU:O	1:A:174:PRO:HG3	0.47	2.09	16	2
1:A:127:ASP:OD2	1:A:163:PHE:CE1	0.47	2.67	19	1
1:A:104:TRP:HD1	1:A:105:GLU:N	0.47	2.08	20	16
1:A:155:SER:N	1:A:162:LYS:O	0.47	2.48	9	7
1:A:156:ILE:HG22	1:A:157:ARG:N	0.47	2.25	1	7
1:A:171:ASP:O	1:A:174:PRO:HD2	0.47	2.09	1	16
1:A:39:LEU:HD12	1:A:69:GLN:N	0.47	2.24	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:PHE:CD1	1:A:73:GLU:HG3	0.47	2.44	2	3
1:A:104:TRP:HA	1:A:166:TRP:CH2	0.47	2.44	2	9
1:A:39:LEU:HB2	1:A:69:GLN:O	0.47	2.10	15	9
1:A:193:HIS:HB2	1:A:213:LEU:CB	0.47	2.40	15	3
1:A:111:LYS:HB3	1:A:150:ASN:ND2	0.47	2.24	6	3
1:A:115:TRP:CZ2	1:A:175:LEU:HB2	0.47	2.45	6	1
1:A:108:ALA:HA	1:A:111:LYS:CD	0.47	2.39	14	4
1:A:129:LEU:O	1:A:133:THR:OG1	0.47	2.33	14	3
1:A:10:PHE:CD1	1:A:10:PHE:C	0.47	2.85	20	1
1:A:45:LEU:O	1:A:45:LEU:HG	0.47	2.09	4	7
1:A:93:TYR:N	1:A:154:LEU:O	0.47	2.48	10	10
1:A:100:VAL:CB	1:A:110:ALA:CB	0.47	2.92	1	6
1:A:101:ARG:N	1:A:102:PRO:HD3	0.47	2.25	1	1
1:A:84:PRO:O	1:A:123:GLY:O	0.47	2.32	2	1
1:A:168:LYS:O	1:A:169:SER:HB2	0.47	2.09	13	9
1:A:198:PRO:O	1:A:200:SER:N	0.47	2.47	5	10
1:A:101:ARG:HB3	1:A:106:ASP:HB3	0.47	1.85	3	4
1:A:58:TRP:CE2	2:A:214:M7G:N7	0.47	2.82	6	5
1:A:66:THR:CG2	1:A:73:GLU:HB2	0.47	2.40	4	2
1:A:109:ASN:CG	1:A:110:ALA:N	0.47	2.67	4	1
1:A:83:GLU:OE2	1:A:131:LEU:HD11	0.47	2.09	5	1
1:A:94:HIS:HB3	1:A:96:PHE:CE1	0.47	2.44	16	2
1:A:178:ILE:HG23	1:A:182:PHE:CD2	0.47	2.45	6	1
1:A:93:TYR:CD2	1:A:154:LEU:CD2	0.47	2.91	8	3
1:A:170:GLU:O	1:A:174:PRO:HG2	0.47	2.10	10	1
1:A:50:PRO:CG	1:A:90:LYS:O	0.47	2.62	17	2
1:A:39:LEU:HB3	1:A:139:GLY:CA	0.47	2.39	14	1
1:A:41:THR:N	1:A:69:GLN:HG2	0.47	2.25	14	1
1:A:41:THR:N	1:A:69:GLN:CB	0.47	2.77	14	1
1:A:186:LEU:CB	1:A:188:LEU:HD23	0.47	2.38	15	1
1:A:66:THR:HG23	1:A:68:PHE:CD2	0.47	2.45	19	1
1:A:112:GLY:O	1:A:169:SER:OG	0.47	2.32	19	1
1:A:58:TRP:CE3	2:A:214:M7G:H82	0.47	2.44	20	1
1:A:154:LEU:C	1:A:154:LEU:CD2	0.47	2.81	11	13
1:A:46:TRP:HB2	1:A:94:HIS:NE2	0.47	2.24	3	2
1:A:98:ASN:ND2	1:A:99:ASP:N	0.47	2.63	10	2
1:A:108:ALA:HA	1:A:111:LYS:HG3	0.47	1.87	12	2
1:A:199:HIS:O	1:A:203:ASN:OD1	0.47	2.33	5	2
1:A:99:ASP:CB	1:A:150:ASN:HA	0.47	2.40	8	4
1:A:183:LYS:O	1:A:186:LEU:N	0.47	2.47	14	2
1:A:46:TRP:HB3	1:A:62:LEU:HD22	0.47	1.86	15	2

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:LEU:HD13	1:A:91:SER:HB3	0.47	1.87	13	1
1:A:127:ASP:OD1	1:A:163:PHE:CE1	0.47	2.68	17	1
1:A:89:LEU:CD1	1:A:158:LYS:O	0.47	2.60	20	1
1:A:102:PRO:HG3	1:A:106:ASP:HB3	0.47	1.87	14	12
1:A:172:LYS:HA	1:A:175:LEU:HB2	0.47	1.86	19	5
1:A:194:LEU:N	1:A:213:LEU:HB2	0.47	2.25	17	3
1:A:198:PRO:O	1:A:199:HIS:C	0.47	2.54	5	13
1:A:74:PHE:CE2	1:A:131:LEU:CD2	0.47	2.97	3	1
1:A:168:LYS:O	1:A:168:LYS:CG	0.47	2.62	4	1
1:A:186:LEU:N	1:A:186:LEU:CD2	0.47	2.73	14	3
1:A:111:LYS:NZ	1:A:166:TRP:NE1	0.47	2.62	7	1
1:A:120:ARG:O	1:A:121:GLY:O	0.47	2.33	8	2
1:A:43:TRP:N	1:A:68:PHE:O	0.47	2.40	10	1
1:A:46:TRP:CZ3	1:A:101:ARG:O	0.47	2.68	18	3
1:A:110:ALA:O	1:A:111:LYS:HB3	0.47	2.10	17	1
1:A:165:LEU:HD22	1:A:178:ILE:CD1	0.47	2.39	18	1
1:A:169:SER:O	1:A:170:GLU:HG2	0.47	2.10	18	1
1:A:104:TRP:CZ2	2:A:214:M7G:H2'	0.47	2.45	19	20
1:A:107:GLU:OE1	1:A:150:ASN:OD1	0.47	2.33	1	1
1:A:154:LEU:HD23	1:A:155:SER:N	0.47	2.25	7	4
1:A:194:LEU:O	1:A:195:GLU:CG	0.47	2.63	15	3
1:A:39:LEU:HD13	1:A:41:THR:HG22	0.47	1.77	6	1
1:A:117:PHE:CD2	1:A:163:PHE:HB3	0.47	2.44	7	1
1:A:199:HIS:N	1:A:199:HIS:CD2	0.47	2.83	8	3
1:A:149:ILE:CA	1:A:168:LYS:HG3	0.47	2.40	9	1
1:A:39:LEU:CD1	1:A:139:GLY:CA	0.47	2.93	10	1
1:A:150:ASN:ND2	1:A:166:TRP:CB	0.47	2.78	16	2
1:A:6:VAL:O	1:A:6:VAL:HG13	0.47	2.09	11	1
1:A:193:HIS:NE2	1:A:194:LEU:CD1	0.47	2.78	12	1
1:A:73:GLU:OE1	1:A:73:GLU:N	0.47	2.48	14	1
1:A:117:PHE:O	1:A:162:LYS:CB	0.47	2.63	18	1
1:A:87:LEU:HG	1:A:88:PRO:N	0.46	2.25	7	10
1:A:199:HIS:CD2	1:A:200:SER:N	0.46	2.83	13	3
2:A:214:M7G:C3'	2:A:214:M7G:PA	0.46	3.03	4	1
1:A:183:LYS:CD	1:A:193:HIS:ND1	0.46	2.78	6	1
1:A:91:SER:O	1:A:92:ASP:OD1	0.46	2.32	7	4
1:A:108:ALA:O	1:A:199:HIS:HB3	0.46	2.10	20	3
1:A:148:GLN:CB	1:A:168:LYS:HB3	0.46	2.40	11	1
1:A:84:PRO:O	1:A:86:GLU:OE1	0.46	2.33	12	1
1:A:157:ARG:CD	2:A:214:M7G:O3B	0.46	2.63	12	1
1:A:108:ALA:CA	1:A:111:LYS:HE3	0.46	2.40	14	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:113:GLY:CA	1:A:198:PRO:HA	0.46	2.41	17	1
1:A:10:PHE:O	1:A:11:GLU:O	0.46	2.33	19	1
1:A:98:ASN:O	1:A:99:ASP:C	0.46	2.54	10	3
1:A:74:PHE:CE2	1:A:135:LEU:HB3	0.46	2.44	3	1
1:A:83:GLU:CB	1:A:84:PRO:HD2	0.46	2.39	9	7
1:A:98:ASN:OD1	1:A:150:ASN:O	0.46	2.33	3	2
1:A:60:ASP:C	1:A:61:LEU:HD23	0.46	2.30	5	1
1:A:44:THR:CG2	1:A:97:ARG:HG2	0.46	2.41	6	1
1:A:62:LEU:CD1	1:A:103:GLU:CD	0.46	2.84	9	1
1:A:89:LEU:O	1:A:90:LYS:C	0.46	2.53	9	2
1:A:130:TRP:HE1	1:A:134:LEU:HD11	0.46	1.69	10	1
1:A:88:PRO:O	1:A:91:SER:OG	0.46	2.34	20	2
1:A:99:ASP:CB	1:A:150:ASN:CB	0.46	2.93	11	1
1:A:183:LYS:O	1:A:187:LYS:CA	0.46	2.63	11	1
1:A:157:ARG:O	1:A:157:ARG:HG2	0.46	2.09	16	1
1:A:113:GLY:N	1:A:170:GLU:CB	0.46	2.78	18	1
1:A:179:GLY:HA3	1:A:194:LEU:HD21	0.46	1.86	18	1
1:A:116:SER:HA	1:A:163:PHE:O	0.46	2.10	19	16
1:A:175:LEU:C	1:A:177:ARG:N	0.46	2.69	4	16
1:A:111:LYS:HD2	1:A:113:GLY:O	0.46	2.10	12	6
1:A:184:GLN:O	1:A:185:VAL:C	0.46	2.53	11	4
1:A:43:TRP:HB2	1:A:68:PHE:CA	0.46	2.39	3	1
1:A:45:LEU:CB	1:A:66:THR:O	0.46	2.64	3	9
1:A:133:THR:HB	1:A:182:PHE:CE2	0.46	2.45	8	1
1:A:126:ILE:CG2	1:A:186:LEU:CA	0.46	2.94	11	1
1:A:40:ASN:ND2	1:A:138:ILE:O	0.46	2.48	15	1
1:A:210:SER:OG	1:A:211:ILE:HG13	0.46	2.11	20	1
1:A:150:ASN:OD1	1:A:150:ASN:C	0.46	2.54	1	1
1:A:153:VAL:HG21	1:A:166:TRP:CZ3	0.46	2.46	17	2
1:A:57:SER:O	1:A:58:TRP:C	0.46	2.54	3	18
1:A:123:GLY:HA2	1:A:126:ILE:CD1	0.46	2.41	2	2
1:A:111:LYS:O	1:A:168:LYS:HA	0.46	2.11	4	2
1:A:107:GLU:OE1	1:A:166:TRP:CE3	0.46	2.68	11	2
1:A:48:THR:HG21	1:A:62:LEU:HD12	0.46	1.86	12	1
1:A:39:LEU:CD1	1:A:69:GLN:C	0.46	2.83	15	1
1:A:88:PRO:O	1:A:89:LEU:C	0.46	2.53	5	10
1:A:39:LEU:HB3	1:A:69:GLN:HB3	0.46	1.88	2	1
1:A:57:SER:O	1:A:59:SER:N	0.46	2.49	16	3
1:A:101:ARG:HG3	1:A:109:ASN:ND2	0.46	2.26	6	2
1:A:154:LEU:HD12	1:A:163:PHE:HE1	0.46	1.70	4	1
1:A:106:ASP:CA	1:A:109:ASN:ND2	0.46	2.78	5	2

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:114:LYS:HE2	1:A:197:PHE:CD2	0.46	2.45	6	1
1:A:163:PHE:CD1	1:A:163:PHE:C	0.46	2.88	7	1
1:A:170:GLU:O	1:A:171:ASP:O	0.46	2.33	8	2
1:A:170:GLU:O	1:A:171:ASP:OD1	0.46	2.34	9	1
1:A:92:ASP:C	1:A:93:TYR:CD1	0.46	2.89	18	1
1:A:135:LEU:O	1:A:138:ILE:HG12	0.46	2.11	2	7
1:A:39:LEU:CD1	1:A:70:THR:HG22	0.46	2.41	2	1
1:A:46:TRP:HB3	1:A:62:LEU:CD1	0.46	2.40	2	4
1:A:46:TRP:CZ3	1:A:96:PHE:CD2	0.46	3.04	10	2
1:A:193:HIS:O	1:A:194:LEU:HB2	0.46	2.11	6	6
1:A:183:LYS:HD3	1:A:193:HIS:O	0.46	2.11	10	1
1:A:117:PHE:CD2	1:A:194:LEU:HD21	0.46	2.45	12	1
1:A:114:LYS:HG3	1:A:166:TRP:NE1	0.46	2.25	15	1
1:A:66:THR:HG22	1:A:68:PHE:CE1	0.46	2.45	16	1
1:A:116:SER:CB	1:A:195:GLU:HG2	0.46	2.41	1	3
1:A:151:GLY:O	1:A:166:TRP:HB2	0.46	2.11	15	13
1:A:70:THR:HG23	1:A:71:VAL:N	0.46	2.25	2	1
1:A:109:ASN:OD1	1:A:203:ASN:ND2	0.46	2.48	2	1
1:A:108:ALA:HA	1:A:111:LYS:HG2	0.46	1.86	18	4
1:A:115:TRP:O	1:A:164:ALA:CB	0.46	2.63	10	1
1:A:124:ALA:O	1:A:125:ASP:OD1	0.46	2.34	11	1
1:A:162:LYS:C	1:A:163:PHE:CG	0.46	2.89	14	1
1:A:92:ASP:HA	1:A:154:LEU:O	0.46	2.10	1	19
1:A:95:VAL:O	1:A:96:PHE:CB	0.46	2.64	8	4
1:A:101:ARG:O	1:A:101:ARG:HG2	0.46	2.11	1	1
1:A:102:PRO:HG2	1:A:106:ASP:HB2	0.46	1.86	8	6
1:A:92:ASP:OD1	1:A:155:SER:OG	0.46	2.33	20	3
1:A:108:ALA:HA	1:A:111:LYS:HE2	0.46	1.88	2	3
1:A:87:LEU:HB2	1:A:88:PRO:HD2	0.46	1.88	3	5
1:A:99:ASP:O	1:A:100:VAL:C	0.46	2.54	5	3
1:A:45:LEU:HG	1:A:65:VAL:CG2	0.46	2.41	9	7
1:A:82:PRO:O	1:A:86:GLU:HB3	0.46	2.10	15	5
1:A:83:GLU:CG	1:A:127:ASP:HB2	0.46	2.41	10	1
1:A:93:TYR:C	1:A:94:HIS:ND1	0.46	2.69	10	2
1:A:84:PRO:HB3	1:A:163:PHE:CZ	0.46	2.45	11	1
1:A:93:TYR:N	1:A:93:TYR:CD1	0.46	2.83	11	2
1:A:111:LYS:HB3	1:A:168:LYS:CA	0.46	2.41	19	2
1:A:174:PRO:O	1:A:178:ILE:CG2	0.46	2.59	18	4
1:A:117:PHE:HB2	1:A:186:LEU:CD1	0.46	2.41	14	1
1:A:165:LEU:HD11	1:A:182:PHE:CE2	0.46	2.46	15	1
1:A:94:HIS:HD1	1:A:153:VAL:HG13	0.46	1.71	16	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:PHE:CZ	1:A:153:VAL:CG2	0.46	2.99	16	1
1:A:176:LEU:N	1:A:176:LEU:HD12	0.46	2.26	3	12
1:A:80:ASN:C	1:A:81:ILE:HG13	0.46	2.30	16	6
1:A:108:ALA:CB	1:A:111:LYS:HE3	0.46	2.41	18	3
1:A:117:PHE:O	1:A:162:LYS:HA	0.46	2.10	18	13
1:A:83:GLU:CB	1:A:127:ASP:CG	0.46	2.83	6	1
1:A:122:LYS:HD3	1:A:123:GLY:N	0.46	2.26	8	1
1:A:7:SER:O	1:A:8:LYS:O	0.46	2.34	15	1
1:A:203:ASN:OD1	1:A:203:ASN:N	0.46	2.49	15	1
1:A:157:ARG:O	1:A:158:LYS:C	0.46	2.55	13	7
1:A:97:ARG:O	1:A:98:ASN:HB2	0.46	2.11	4	1
1:A:67:SER:C	1:A:68:PHE:CG	0.46	2.89	6	3
1:A:111:LYS:HB3	1:A:168:LYS:HA	0.46	1.87	11	2
1:A:104:TRP:CH2	2:A:214:M7G:O2A	0.46	2.69	12	1
1:A:82:PRO:O	1:A:87:LEU:N	0.46	2.49	13	1
1:A:196:PHE:CZ	1:A:213:LEU:HD13	0.46	2.46	14	1
1:A:134:LEU:HD13	1:A:152:VAL:HG21	0.46	1.86	16	1
1:A:197:PHE:CD1	1:A:201:SER:HB3	0.46	2.45	16	1
1:A:96:PHE:O	1:A:97:ARG:HG3	0.45	2.10	20	5
1:A:110:ALA:O	1:A:111:LYS:HG3	0.45	2.11	1	1
1:A:135:LEU:C	1:A:135:LEU:CD1	0.45	2.80	1	11
1:A:58:TRP:CE2	1:A:62:LEU:HD23	0.45	2.45	4	4
1:A:148:GLN:O	1:A:168:LYS:HB2	0.45	2.11	10	2
1:A:115:TRP:HA	1:A:115:TRP:CE3	0.45	2.46	14	3
1:A:194:LEU:O	1:A:195:GLU:HG2	0.45	2.11	4	4
1:A:69:GLN:O	1:A:69:GLN:CG	0.45	2.63	8	1
1:A:148:GLN:O	1:A:168:LYS:CE	0.45	2.64	8	1
1:A:115:TRP:CZ2	1:A:196:PHE:CD2	0.45	3.04	9	1
1:A:84:PRO:HD2	1:A:127:ASP:OD1	0.45	2.10	11	1
1:A:148:GLN:HB3	1:A:168:LYS:CB	0.45	2.41	11	1
1:A:165:LEU:CD2	1:A:178:ILE:HG21	0.45	2.41	13	1
1:A:93:TYR:CD1	1:A:154:LEU:CD2	0.45	2.98	17	2
1:A:71:VAL:O	1:A:75:TRP:HB2	0.45	2.11	12	7
1:A:110:ALA:O	1:A:111:LYS:CG	0.45	2.64	1	1
1:A:155:SER:O	1:A:162:LYS:N	0.45	2.49	1	2
1:A:167:THR:O	1:A:168:LYS:C	0.45	2.52	16	11
1:A:122:LYS:O	1:A:126:ILE:HD11	0.45	2.11	8	1
1:A:83:GLU:OE2	1:A:125:ASP:OD1	0.45	2.34	9	2
1:A:134:LEU:O	1:A:137:VAL:N	0.45	2.49	14	1
1:A:92:ASP:OD1	1:A:155:SER:CB	0.45	2.65	20	1
1:A:83:GLU:O	1:A:87:LEU:HD22	0.45	2.11	11	3

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:PHE:CE2	1:A:153:VAL:CG2	0.45	2.99	16	2
1:A:74:PHE:CE2	1:A:95:VAL:CG1	0.45	2.96	6	3
1:A:99:ASP:HB2	1:A:150:ASN:HB2	0.45	1.88	11	1
1:A:183:LYS:HA	1:A:194:LEU:CD1	0.45	2.41	11	1
1:A:170:GLU:HA	1:A:175:LEU:HD11	0.45	1.86	18	1
1:A:97:ARG:O	1:A:98:ASN:C	0.45	2.53	1	4
1:A:186:LEU:O	1:A:187:LYS:HB3	0.45	2.12	2	2
1:A:45:LEU:CA	1:A:95:VAL:HG22	0.45	2.41	6	2
1:A:211:ILE:C	1:A:212:THR:HG23	0.45	2.31	4	3
1:A:58:TRP:CH2	1:A:62:LEU:HG	0.45	2.47	15	3
1:A:111:LYS:CD	1:A:166:TRP:CD1	0.45	2.99	10	3
1:A:39:LEU:CD2	1:A:69:GLN:O	0.45	2.63	8	1
1:A:153:VAL:O	1:A:164:ALA:N	0.45	2.50	16	2
1:A:172:LYS:O	1:A:175:LEU:HB2	0.45	2.12	15	4
1:A:92:ASP:OD2	2:A:214:M7G:O1A	0.45	2.34	19	1
1:A:132:ARG:HA	1:A:135:LEU:CD2	0.45	2.41	15	15
1:A:179:GLY:O	1:A:183:LYS:HB3	0.45	2.10	11	3
1:A:58:TRP:CZ2	1:A:62:LEU:CD2	0.45	2.99	2	4
1:A:101:ARG:HB2	1:A:106:ASP:CB	0.45	2.41	3	1
1:A:193:HIS:O	1:A:194:LEU:HG	0.45	2.11	6	3
1:A:98:ASN:OD1	1:A:149:ILE:O	0.45	2.34	5	1
1:A:111:LYS:HE2	1:A:114:LYS:CA	0.45	2.42	6	1
1:A:83:GLU:OE1	1:A:127:ASP:OD2	0.45	2.35	11	2
1:A:39:LEU:CB	1:A:139:GLY:HA2	0.45	2.41	8	1
1:A:115:TRP:HB3	1:A:117:PHE:CZ	0.45	2.46	9	1
1:A:199:HIS:O	1:A:201:SER:N	0.45	2.49	17	1
1:A:48:THR:OG1	1:A:94:HIS:CE1	0.45	2.70	18	1
1:A:172:LYS:CA	1:A:175:LEU:HG	0.45	2.41	18	1
1:A:150:ASN:OD1	1:A:151:GLY:N	0.45	2.49	1	1
1:A:74:PHE:CE1	1:A:135:LEU:HB3	0.45	2.47	2	1
1:A:100:VAL:HG11	1:A:107:GLU:CD	0.45	2.31	2	3
1:A:112:GLY:CA	1:A:199:HIS:HB3	0.45	2.41	19	4
1:A:75:TRP:HA	1:A:78:ILE:HG13	0.45	1.89	15	7
1:A:43:TRP:HB3	1:A:97:ARG:CA	0.45	2.41	5	2
1:A:114:LYS:O	1:A:197:PHE:HB2	0.45	2.10	11	3
1:A:47:TYR:CB	1:A:93:TYR:CD1	0.45	2.99	6	2
1:A:41:THR:O	1:A:69:GLN:HB2	0.45	2.10	10	1
1:A:48:THR:HG21	1:A:62:LEU:CD1	0.45	2.42	12	1
1:A:183:LYS:HB2	1:A:194:LEU:CD2	0.45	2.41	14	2
1:A:194:LEU:N	1:A:213:LEU:OXT	0.45	2.43	14	2
1:A:78:ILE:CG2	1:A:131:LEU:HD13	0.45	2.42	20	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:115:TRP:O	1:A:164:ALA:HA	0.45	2.12	4	10
1:A:196:PHE:CB	1:A:210:SER:CB	0.45	2.95	1	1
1:A:108:ALA:O	1:A:199:HIS:HB2	0.45	2.11	6	4
1:A:43:TRP:HB2	1:A:96:PHE:O	0.45	2.11	16	4
1:A:101:ARG:CG	1:A:102:PRO:HD2	0.45	2.42	4	2
1:A:170:GLU:O	1:A:171:ASP:HB2	0.45	2.11	4	4
1:A:198:PRO:O	1:A:201:SER:OG	0.45	2.35	6	2
1:A:42:LYS:O	1:A:42:LYS:HG3	0.45	2.12	9	3
1:A:111:LYS:HE2	1:A:114:LYS:CB	0.45	2.41	10	2
1:A:74:PHE:CZ	1:A:78:ILE:CD1	0.45	2.98	15	1
1:A:180:GLY:O	1:A:183:LYS:N	0.45	2.50	15	1
1:A:130:TRP:CE3	1:A:163:PHE:CB	0.45	2.99	18	1
1:A:172:LYS:O	1:A:176:LEU:HD13	0.45	2.12	6	11
1:A:175:LEU:O	1:A:176:LEU:C	0.45	2.55	14	13
1:A:69:GLN:HB3	1:A:138:ILE:CD1	0.45	2.39	3	1
1:A:75:TRP:O	1:A:79:GLN:HG2	0.45	2.11	18	2
1:A:75:TRP:O	1:A:79:GLN:CG	0.45	2.65	18	2
1:A:48:THR:CG2	1:A:62:LEU:CB	0.45	2.92	19	2
1:A:113:GLY:O	1:A:166:TRP:HA	0.45	2.11	4	2
1:A:129:LEU:HD23	1:A:187:LYS:HZ3	0.45	1.71	6	1
1:A:126:ILE:HG23	1:A:186:LEU:CA	0.45	2.39	11	1
1:A:131:LEU:O	1:A:135:LEU:N	0.45	2.49	11	1
1:A:185:VAL:CB	1:A:186:LEU:HD13	0.45	2.42	11	1
1:A:87:LEU:HG	1:A:88:PRO:CD	0.45	2.42	18	5
1:A:42:LYS:O	1:A:42:LYS:HG2	0.45	2.12	4	2
1:A:111:LYS:HB3	1:A:150:ASN:CB	0.45	2.42	20	5
1:A:4:GLU:O	1:A:5:GLU:CB	0.45	2.64	7	2
1:A:57:SER:N	1:A:60:ASP:HB2	0.45	2.27	16	2
1:A:116:SER:O	1:A:194:LEU:HA	0.45	2.12	9	2
1:A:43:TRP:CG	1:A:68:PHE:O	0.45	2.70	10	1
1:A:84:PRO:CB	1:A:125:ASP:HA	0.45	2.42	12	1
1:A:110:ALA:C	1:A:111:LYS:CG	0.45	2.84	1	1
1:A:170:GLU:OE2	1:A:175:LEU:CD2	0.45	2.65	1	1
1:A:106:ASP:O	1:A:107:GLU:C	0.45	2.55	12	8
1:A:82:PRO:CA	1:A:87:LEU:HB3	0.45	2.42	3	6
1:A:175:LEU:O	1:A:177:ARG:N	0.45	2.50	14	4
1:A:50:PRO:C	1:A:61:LEU:CD1	0.45	2.84	5	1
1:A:111:LYS:CE	1:A:114:LYS:HB2	0.45	2.42	5	3
1:A:96:PHE:CD2	1:A:166:TRP:CZ3	0.45	3.05	6	2
1:A:122:LYS:C	1:A:122:LYS:CD	0.45	2.85	8	1
1:A:103:GLU:C	1:A:107:GLU:HG3	0.45	2.32	11	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:183:LYS:O	1:A:187:LYS:C	0.45	2.56	11	1
1:A:83:GLU:HA	1:A:127:ASP:OD2	0.45	2.11	16	1
1:A:100:VAL:O	1:A:101:ARG:CG	0.45	2.65	20	1
1:A:44:THR:CB	1:A:46:TRP:CE2	0.44	3.00	3	1
1:A:117:PHE:CD2	1:A:194:LEU:CD1	0.44	3.00	3	2
1:A:111:LYS:HB2	1:A:167:THR:O	0.44	2.11	13	7
1:A:134:LEU:HB3	1:A:152:VAL:HG21	0.44	1.89	16	2
1:A:157:ARG:HG2	1:A:160:GLY:O	0.44	2.12	16	1
1:A:186:LEU:CD1	1:A:193:HIS:CE1	0.44	2.87	20	1
1:A:68:PHE:CB	1:A:73:GLU:CG	0.44	2.96	3	1
1:A:69:GLN:CB	1:A:138:ILE:CD1	0.44	2.91	3	1
1:A:75:TRP:CA	1:A:78:ILE:HG13	0.44	2.42	11	6
1:A:112:GLY:HA2	1:A:199:HIS:CB	0.44	2.42	14	2
1:A:101:ARG:CD	1:A:102:PRO:CD	0.44	2.95	6	1
1:A:125:ASP:OD1	1:A:125:ASP:O	0.44	2.36	6	1
1:A:89:LEU:HG	1:A:156:ILE:CG2	0.44	2.42	8	1
1:A:43:TRP:O	1:A:67:SER:HB3	0.44	2.12	10	1
1:A:157:ARG:HD2	2:A:214:M7G:O3B	0.44	2.12	12	1
1:A:74:PHE:CD2	1:A:95:VAL:HG11	0.44	2.47	13	1
1:A:130:TRP:CD2	1:A:186:LEU:HD21	0.44	2.47	19	1
1:A:84:PRO:HB3	1:A:124:ALA:O	0.44	2.12	20	1
1:A:44:THR:O	1:A:95:VAL:HA	0.44	2.12	8	7
1:A:82:PRO:HB2	1:A:87:LEU:HB3	0.44	1.88	20	4
1:A:101:ARG:O	1:A:101:ARG:HD2	0.44	2.12	1	1
1:A:116:SER:CB	1:A:195:GLU:OE1	0.44	2.65	1	1
1:A:106:ASP:C	1:A:108:ALA:N	0.44	2.70	12	4
1:A:39:LEU:HG	1:A:69:GLN:C	0.44	2.33	7	9
1:A:105:GLU:O	1:A:106:ASP:CG	0.44	2.56	5	6
1:A:171:ASP:N	1:A:171:ASP:OD1	0.44	2.49	4	2
1:A:111:LYS:CD	1:A:113:GLY:N	0.44	2.80	6	2
1:A:102:PRO:O	1:A:103:GLU:OE1	0.44	2.35	18	3
1:A:66:THR:CG2	1:A:73:GLU:CG	0.44	2.94	16	3
1:A:134:LEU:HD21	1:A:165:LEU:HD21	0.44	1.89	18	1
1:A:183:LYS:HA	1:A:188:LEU:HD21	0.44	1.89	19	1
1:A:39:LEU:CD2	1:A:70:THR:O	0.44	2.66	1	1
1:A:81:ILE:CG2	1:A:128:GLU:OE2	0.44	2.66	1	1
1:A:116:SER:C	1:A:117:PHE:CG	0.44	2.88	14	2
1:A:130:TRP:HB2	1:A:186:LEU:CD2	0.44	2.43	5	7
1:A:111:LYS:CD	1:A:112:GLY:N	0.44	2.81	9	1
1:A:62:LEU:HD21	1:A:94:HIS:CE1	0.44	2.47	18	1
1:A:71:VAL:HG23	1:A:72:GLU:N	0.44	2.28	18	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:LEU:HD23	1:A:41:THR:H	0.44	1.71	19	1
1:A:193:HIS:HA	1:A:213:LEU:HB3	0.44	1.90	1	3
1:A:102:PRO:O	1:A:103:GLU:HB3	0.44	2.12	12	5
1:A:184:GLN:O	1:A:187:LYS:N	0.44	2.40	3	8
1:A:183:LYS:HB2	1:A:194:LEU:CG	0.44	2.42	5	1
1:A:153:VAL:CG2	1:A:166:TRP:CZ2	0.44	2.87	7	1
1:A:103:GLU:CG	1:A:106:ASP:OD2	0.44	2.65	13	1
1:A:40:ASN:C	1:A:69:GLN:HG2	0.44	2.33	14	1
1:A:101:ARG:HD3	1:A:106:ASP:O	0.44	2.13	19	1
1:A:6:VAL:HG23	1:A:7:SER:N	0.44	2.28	2	1
1:A:83:GLU:HA	1:A:87:LEU:CD2	0.44	2.43	2	1
1:A:108:ALA:O	1:A:109:ASN:C	0.44	2.56	15	3
1:A:66:THR:HG22	1:A:73:GLU:HB3	0.44	1.88	3	1
1:A:101:ARG:HG2	1:A:109:ASN:ND2	0.44	2.28	4	2
1:A:152:VAL:HG12	1:A:165:LEU:HD13	0.44	1.89	5	1
1:A:111:LYS:HB3	1:A:150:ASN:HB3	0.44	1.90	9	3
1:A:116:SER:HB3	1:A:195:GLU:CB	0.44	2.43	9	1
1:A:112:GLY:C	1:A:169:SER:OG	0.44	2.56	11	2
1:A:148:GLN:C	1:A:149:ILE:CD1	0.44	2.81	11	1
1:A:66:THR:HG23	1:A:73:GLU:CD	0.44	2.33	13	1
1:A:96:PHE:HE2	1:A:153:VAL:HG23	0.44	1.72	16	1
1:A:93:TYR:HB2	1:A:154:LEU:HD22	0.44	1.88	18	1
1:A:46:TRP:CZ2	1:A:101:ARG:HD3	0.44	2.48	1	1
1:A:103:GLU:C	1:A:105:GLU:N	0.44	2.71	14	14
1:A:150:ASN:HB3	1:A:168:LYS:CA	0.44	2.43	1	1
1:A:39:LEU:CD1	1:A:69:GLN:HB2	0.44	2.43	2	1
1:A:172:LYS:O	1:A:173:GLU:C	0.44	2.56	4	6
1:A:183:LYS:HD2	1:A:193:HIS:O	0.44	2.13	4	1
1:A:97:ARG:O	1:A:97:ARG:HD3	0.44	2.13	6	1
1:A:115:TRP:HB2	1:A:165:LEU:CB	0.44	2.43	8	1
1:A:123:GLY:HA3	1:A:126:ILE:CD1	0.44	2.42	8	2
1:A:183:LYS:HG3	1:A:213:LEU:O	0.44	2.13	9	1
1:A:47:TYR:OH	1:A:65:VAL:CG1	0.44	2.62	13	2
1:A:186:LEU:CD2	1:A:187:LYS:HB2	0.44	2.43	11	1
1:A:58:TRP:CE3	1:A:62:LEU:HD11	0.44	2.48	12	1
1:A:5:GLU:O	1:A:5:GLU:HG2	0.44	2.13	15	1
1:A:73:GLU:O	1:A:74:PHE:C	0.44	2.56	14	10
1:A:44:THR:OG1	1:A:96:PHE:O	0.44	2.32	6	1
1:A:134:LEU:O	1:A:137:VAL:HB	0.44	2.12	7	3
1:A:49:LYS:CD	1:A:50:PRO:HD2	0.44	2.43	9	1
1:A:211:ILE:HG22	1:A:212:THR:H	0.44	1.73	9	3

*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:167:THR:N	0.44	2.28	12	2
1:A:165:LEU:HD21	1:A:178:ILE:HD11	0.44	1.89	12	1
1:A:108:ALA:N	1:A:111:LYS:HE3	0.44	2.27	14	1
1:A:111:LYS:O	1:A:169:SER:CB	0.44	2.66	19	1
1:A:45:LEU:HA	1:A:95:VAL:CG2	0.44	2.43	1	9
1:A:111:LYS:O	1:A:169:SER:OG	0.44	2.33	1	1
1:A:68:PHE:CG	1:A:73:GLU:HG3	0.44	2.48	2	1
1:A:108:ALA:C	1:A:110:ALA:N	0.44	2.71	12	4
1:A:169:SER:C	1:A:171:ASP:N	0.44	2.68	9	8
1:A:70:THR:C	1:A:71:VAL:CG1	0.44	2.85	3	1
1:A:115:TRP:CE3	1:A:115:TRP:HA	0.44	2.47	3	2
1:A:100:VAL:HG21	1:A:107:GLU:O	0.44	2.12	16	4
1:A:168:LYS:O	1:A:168:LYS:HG3	0.44	2.13	4	2
1:A:78:ILE:HD13	1:A:131:LEU:HB3	0.44	1.90	5	1
1:A:173:GLU:CB	1:A:174:PRO:HD3	0.44	2.42	18	3
1:A:103:GLU:N	1:A:107:GLU:HG2	0.44	2.28	11	2
1:A:194:LEU:HD23	1:A:196:PHE:CE2	0.44	2.48	15	1
1:A:43:TRP:CB	1:A:69:GLN:HG3	0.43	2.41	3	1
1:A:58:TRP:CH2	2:A:214:M7G:CM7	0.43	3.00	3	3
1:A:108:ALA:O	1:A:112:GLY:HA2	0.43	2.12	11	2
1:A:117:PHE:CE2	1:A:182:PHE:HB3	0.43	2.48	13	2
1:A:50:PRO:HG2	1:A:61:LEU:CG	0.43	2.43	7	1
1:A:104:TRP:CB	2:A:214:M7G:CM7	0.43	2.96	7	1
1:A:48:THR:CG2	1:A:62:LEU:HG	0.43	2.43	18	2
1:A:183:LYS:CD	1:A:188:LEU:HD21	0.43	2.43	9	1
1:A:103:GLU:OE2	1:A:106:ASP:OD2	0.43	2.36	13	1
1:A:157:ARG:O	1:A:160:GLY:N	0.43	2.51	14	1
1:A:39:LEU:CG	1:A:69:GLN:O	0.43	2.66	15	1
1:A:117:PHE:CD1	1:A:163:PHE:CD2	0.43	3.06	20	1
1:A:39:LEU:HD21	1:A:70:THR:O	0.43	2.14	1	1
1:A:46:TRP:CH2	1:A:101:ARG:CD	0.43	3.02	1	1
1:A:102:PRO:O	1:A:103:GLU:HB2	0.43	2.12	9	4
1:A:170:GLU:O	1:A:171:ASP:HB3	0.43	2.14	1	1
1:A:188:LEU:CD2	1:A:193:HIS:CE1	0.43	2.94	1	1
1:A:156:ILE:HG12	1:A:161:ASN:CB	0.43	2.42	5	2
1:A:170:GLU:O	1:A:171:ASP:CG	0.43	2.56	11	4
1:A:50:PRO:HG2	1:A:61:LEU:CD1	0.43	2.40	16	2
1:A:134:LEU:HD21	1:A:182:PHE:HE1	0.43	1.72	7	1
1:A:83:GLU:C	1:A:127:ASP:OD2	0.43	2.57	14	2
1:A:82:PRO:HA	1:A:86:GLU:HB3	0.43	1.89	12	2
1:A:93:TYR:HD2	1:A:154:LEU:HD22	0.43	1.64	9	2

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:123:GLY:O	1:A:124:ALA:C	0.43	2.56	18	3
1:A:130:TRP:CH2	1:A:182:PHE:CD2	0.43	3.07	2	1
1:A:111:LYS:CD	1:A:150:ASN:HB3	0.43	2.44	4	1
1:A:7:SER:O	1:A:7:SER:OG	0.43	2.35	5	1
1:A:111:LYS:HD3	1:A:113:GLY:O	0.43	2.13	9	3
1:A:196:PHE:O	1:A:210:SER:HB3	0.43	2.13	11	1
1:A:196:PHE:O	1:A:210:SER:HB2	0.43	2.13	14	2
1:A:188:LEU:C	1:A:188:LEU:CD1	0.43	2.84	15	2
1:A:203:ASN:OD1	1:A:203:ASN:C	0.43	2.56	17	1
1:A:153:VAL:HG12	1:A:154:LEU:N	0.43	2.28	4	2
1:A:158:LYS:O	1:A:159:GLY:C	0.43	2.56	12	4
1:A:89:LEU:HD23	1:A:158:LYS:O	0.43	2.14	2	1
1:A:48:THR:CG2	1:A:61:LEU:HB2	0.43	2.42	5	2
1:A:199:HIS:O	1:A:203:ASN:CG	0.43	2.57	5	2
1:A:126:ILE:O	1:A:130:TRP:HB2	0.43	2.13	7	3
1:A:148:GLN:O	1:A:149:ILE:C	0.43	2.57	9	4
1:A:100:VAL:HG21	1:A:106:ASP:O	0.43	2.14	17	2
1:A:167:THR:OG1	1:A:175:LEU:HD21	0.43	2.14	14	1
1:A:43:TRP:CD1	1:A:138:ILE:HD12	0.43	2.48	1	1
1:A:131:LEU:C	1:A:133:THR:N	0.43	2.72	8	17
1:A:58:TRP:CE2	1:A:62:LEU:CD2	0.43	3.02	19	6
1:A:115:TRP:CZ3	1:A:196:PHE:CA	0.43	3.02	3	1
1:A:101:ARG:HG3	1:A:102:PRO:HD2	0.43	1.89	4	2
1:A:107:GLU:OE1	1:A:166:TRP:CZ3	0.43	2.72	11	3
1:A:161:ASN:OD1	1:A:161:ASN:C	0.43	2.56	10	1
1:A:42:LYS:HG2	1:A:42:LYS:O	0.43	2.13	13	1
1:A:43:TRP:HA	1:A:97:ARG:HB2	0.43	1.89	14	2
1:A:89:LEU:H	1:A:89:LEU:HD13	0.43	1.72	14	1
1:A:114:LYS:HB3	1:A:197:PHE:O	0.43	2.13	16	1
1:A:109:ASN:HA	1:A:199:HIS:CB	0.43	2.44	17	1
1:A:101:ARG:HG2	1:A:102:PRO:HD3	0.43	1.90	19	1
1:A:64:PRO:O	1:A:65:VAL:CG1	0.43	2.66	1	1
1:A:42:LYS:N	1:A:42:LYS:HD2	0.43	2.29	2	1
1:A:103:GLU:O	1:A:104:TRP:C	0.43	2.56	8	3
1:A:160:GLY:O	1:A:161:ASN:HB3	0.43	2.14	20	5
1:A:42:LYS:HG3	1:A:97:ARG:O	0.43	2.13	3	1
1:A:97:ARG:CZ	1:A:151:GLY:HA2	0.43	2.44	4	1
1:A:162:LYS:HG2	1:A:163:PHE:N	0.43	2.27	5	2
1:A:58:TRP:CE3	2:A:214:M7G:O2A	0.43	2.71	7	1
1:A:199:HIS:CG	1:A:200:SER:N	0.43	2.86	9	2
1:A:130:TRP:O	1:A:134:LEU:HG	0.43	2.13	18	2

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:118:GLN:OE1	1:A:195:GLU:OE2	0.43	2.35	15	1
1:A:188:LEU:CB	1:A:193:HIS:NE2	0.43	2.81	17	1
1:A:69:GLN:HG2	1:A:138:ILE:HD12	0.43	1.90	3	1
1:A:87:LEU:O	1:A:87:LEU:HD23	0.43	2.14	4	1
1:A:109:ASN:O	1:A:110:ALA:C	0.43	2.56	4	1
1:A:111:LYS:CA	1:A:168:LYS:HA	0.43	2.44	4	1
1:A:119:LEU:HD23	1:A:160:GLY:HA3	0.43	1.90	4	1
1:A:195:GLU:HA	1:A:211:ILE:O	0.43	2.14	4	2
1:A:156:ILE:C	1:A:157:ARG:HG2	0.43	2.34	5	1
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:163:PHE:CB	0.43	3.02	8	1
1:A:151:GLY:O	1:A:166:TRP:N	0.43	2.51	9	1
1:A:46:TRP:CH2	1:A:102:PRO:O	0.43	2.72	13	2
1:A:66:THR:CG2	1:A:73:GLU:CD	0.43	2.86	14	2
1:A:75:TRP:HA	1:A:78:ILE:CD1	0.43	2.44	14	1
1:A:165:LEU:CD2	1:A:178:ILE:HD12	0.43	2.41	14	1
1:A:183:LYS:CD	1:A:188:LEU:HD11	0.43	2.43	14	1
1:A:101:ARG:HG2	1:A:102:PRO:CD	0.43	2.44	19	1
1:A:106:ASP:O	1:A:108:ALA:N	0.43	2.52	15	4
1:A:84:PRO:O	1:A:85:HIS:HB3	0.43	2.14	12	2
1:A:183:LYS:O	1:A:184:GLN:C	0.43	2.56	14	3
1:A:81:ILE:O	1:A:86:GLU:OE1	0.43	2.37	9	1
1:A:124:ALA:O	1:A:125:ASP:CG	0.43	2.57	18	2
1:A:175:LEU:O	1:A:178:ILE:HG12	0.43	2.14	20	7
1:A:130:TRP:CE3	1:A:186:LEU:CD2	0.43	3.01	13	1
1:A:118:GLN:O	1:A:193:HIS:HB3	0.43	2.14	14	1
1:A:193:HIS:O	1:A:195:GLU:CG	0.43	2.67	14	1
1:A:116:SER:HB3	1:A:195:GLU:OE1	0.43	2.13	1	1
1:A:58:TRP:NE1	1:A:62:LEU:HD23	0.43	2.28	2	3
1:A:71:VAL:O	1:A:72:GLU:C	0.43	2.56	2	3
1:A:43:TRP:HB3	1:A:69:GLN:CG	0.43	2.41	3	1
1:A:57:SER:C	1:A:59:SER:N	0.43	2.72	18	6
1:A:196:PHE:CZ	1:A:213:LEU:HD11	0.43	2.49	4	1
1:A:102:PRO:HD2	1:A:106:ASP:CB	0.43	2.44	5	1
1:A:39:LEU:HG	1:A:70:THR:HA	0.43	1.91	9	2
1:A:83:GLU:CG	1:A:93:TYR:CE2	0.43	3.02	12	1
1:A:99:ASP:HB2	1:A:150:ASN:HB3	0.43	1.91	14	1
1:A:165:LEU:CD2	1:A:178:ILE:CD1	0.43	2.96	14	1
1:A:181:LYS:O	1:A:182:PHE:C	0.43	2.57	17	1
1:A:193:HIS:ND1	1:A:193:HIS:C	0.43	2.72	17	1
1:A:133:THR:HB	1:A:182:PHE:CZ	0.43	2.48	18	1
1:A:47:TYR:HE2	1:A:65:VAL:HG21	0.43	1.68	1	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:107:GLU:CG	1:A:166:TRP:CE3	0.43	3.02	1	1
1:A:135:LEU:O	1:A:138:ILE:HG13	0.43	2.13	2	1
1:A:111:LYS:HD2	1:A:166:TRP:HA	0.43	1.91	3	2
1:A:154:LEU:HG	1:A:163:PHE:CD1	0.43	2.49	8	2
1:A:42:LYS:O	1:A:42:LYS:CG	0.43	2.67	13	3
1:A:66:THR:HG21	1:A:73:GLU:HB2	0.43	1.90	6	1
1:A:58:TRP:N	1:A:61:LEU:HD22	0.43	2.28	7	1
1:A:92:ASP:OD2	1:A:155:SER:HB3	0.43	2.13	7	3
1:A:108:ALA:CB	1:A:111:LYS:HE2	0.43	2.43	7	1
1:A:100:VAL:HG11	1:A:107:GLU:CG	0.43	2.44	8	1
1:A:48:THR:CB	1:A:92:ASP:HB2	0.43	2.44	9	1
1:A:126:ILE:HG22	1:A:186:LEU:HB2	0.43	1.91	11	1
1:A:112:GLY:HA2	1:A:199:HIS:HB3	0.43	1.91	14	2
1:A:183:LYS:HB2	1:A:194:LEU:HD21	0.43	1.91	14	1
1:A:45:LEU:CD1	1:A:95:VAL:HG23	0.43	2.43	15	1
1:A:75:TRP:O	1:A:79:GLN:N	0.42	2.51	13	4
1:A:154:LEU:C	1:A:155:SER:OG	0.42	2.58	12	13
1:A:150:ASN:ND2	1:A:150:ASN:C	0.42	2.72	3	2
1:A:50:PRO:HD2	1:A:90:LYS:O	0.42	2.13	4	1
1:A:169:SER:O	1:A:170:GLU:HG3	0.42	2.15	4	1
1:A:81:ILE:O	1:A:86:GLU:HB3	0.42	2.14	9	1
1:A:94:HIS:CE1	1:A:153:VAL:HG11	0.42	2.48	11	2
1:A:111:LYS:HE3	1:A:168:LYS:CD	0.42	2.44	11	1
1:A:84:PRO:O	1:A:161:ASN:CG	0.42	2.56	16	1
1:A:183:LYS:HG3	1:A:188:LEU:CD2	0.42	2.44	17	1
1:A:188:LEU:HD21	1:A:193:HIS:HA	0.42	1.91	18	1
1:A:106:ASP:O	1:A:109:ASN:HB3	0.42	2.14	1	1
1:A:148:GLN:C	1:A:149:ILE:HD12	0.42	2.34	1	1
1:A:161:ASN:O	1:A:162:LYS:HG2	0.42	2.14	10	4
1:A:171:ASP:O	1:A:174:PRO:HG2	0.42	2.15	9	9
1:A:82:PRO:O	1:A:87:LEU:HG	0.42	2.14	2	1
1:A:114:LYS:HA	1:A:165:LEU:O	0.42	2.14	4	2
1:A:84:PRO:CA	1:A:127:ASP:HB2	0.42	2.43	6	1
1:A:126:ILE:CG2	1:A:186:LEU:HA	0.42	2.36	11	2
1:A:111:LYS:HG3	1:A:113:GLY:O	0.42	2.15	15	2
1:A:126:ILE:HG22	1:A:187:LYS:HB2	0.42	1.91	7	1
1:A:57:SER:OG	1:A:60:ASP:OD2	0.42	2.36	8	1
1:A:111:LYS:HA	1:A:168:LYS:HA	0.42	1.91	15	2
1:A:83:GLU:HG2	1:A:84:PRO:HD2	0.42	1.91	10	2
1:A:102:PRO:O	1:A:103:GLU:CD	0.42	2.57	9	1
1:A:57:SER:HB2	1:A:60:ASP:OD2	0.42	2.15	13	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:166:TRP:O	1:A:167:THR:HG23	0.42	2.15	14	1
1:A:193:HIS:O	1:A:194:LEU:HD13	0.42	2.14	15	1
1:A:148:GLN:CG	1:A:170:GLU:CB	0.42	2.98	1	1
1:A:171:ASP:O	1:A:175:LEU:HG	0.42	2.14	1	5
1:A:178:ILE:O	1:A:179:GLY:C	0.42	2.57	16	3
1:A:87:LEU:HD13	1:A:91:SER:HB2	0.42	1.89	2	2
1:A:156:ILE:O	1:A:157:ARG:HB2	0.42	2.14	2	1
1:A:89:LEU:C	1:A:91:SER:N	0.42	2.71	9	5
1:A:87:LEU:HD22	1:A:156:ILE:HD12	0.42	1.90	5	1
1:A:197:PHE:CD2	1:A:201:SER:CB	0.42	3.03	5	1
1:A:132:ARG:O	1:A:136:ALA:HB3	0.42	2.15	10	1
1:A:180:GLY:HA2	1:A:194:LEU:CD1	0.42	2.44	10	1
1:A:160:GLY:C	1:A:161:ASN:OD1	0.42	2.57	11	1
1:A:58:TRP:CZ3	1:A:62:LEU:HD11	0.42	2.49	12	1
1:A:111:LYS:O	1:A:169:SER:HB2	0.42	2.14	19	2
1:A:108:ALA:O	1:A:111:LYS:HE2	0.42	2.14	16	1
1:A:150:ASN:ND2	1:A:167:THR:O	0.42	2.42	1	1
1:A:135:LEU:CG	1:A:136:ALA:N	0.42	2.82	10	7
1:A:43:TRP:CD1	1:A:69:GLN:CB	0.42	3.02	3	1
1:A:74:PHE:CE1	1:A:78:ILE:HD11	0.42	2.49	4	1
1:A:178:ILE:O	1:A:182:PHE:CD2	0.42	2.72	6	1
1:A:116:SER:HB3	1:A:162:LYS:CE	0.42	2.43	8	1
1:A:87:LEU:CG	1:A:88:PRO:HD2	0.42	2.45	11	2
1:A:85:HIS:NE2	1:A:124:ALA:C	0.42	2.73	14	1
1:A:194:LEU:HB2	1:A:213:LEU:HB2	0.42	1.91	14	1
1:A:44:THR:CG2	1:A:67:SER:HB3	0.42	2.41	15	1
1:A:48:THR:HG22	1:A:61:LEU:CB	0.42	2.41	15	1
1:A:100:VAL:HG13	1:A:107:GLU:CG	0.42	2.36	16	1
1:A:196:PHE:CG	1:A:211:ILE:HB	0.42	2.49	16	1
1:A:161:ASN:C	1:A:162:LYS:HG3	0.42	2.35	3	2
1:A:115:TRP:CE3	1:A:115:TRP:CA	0.42	3.02	18	8
1:A:83:GLU:O	1:A:127:ASP:OD2	0.42	2.36	5	1
2:A:214:M7G:O2A	2:A:214:M7G:O4'	0.42	2.37	7	1
1:A:196:PHE:O	1:A:197:PHE:CD1	0.42	2.72	8	1
1:A:148:GLN:HG2	1:A:168:LYS:CE	0.42	2.45	10	1
1:A:8:LYS:O	1:A:9:LYS:C	0.42	2.57	13	1
1:A:44:THR:HA	1:A:67:SER:CB	0.42	2.45	13	2
1:A:68:PHE:HB2	1:A:73:GLU:OE1	0.42	2.13	15	1
1:A:8:LYS:HG3	1:A:9:LYS:N	0.42	2.29	16	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:74:PHE:N	0.42	2.88	16	1
1:A:157:ARG:HD2	1:A:160:GLY:O	0.42	2.14	16	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:183:LYS:CE	1:A:188:LEU:HD11	0.42	2.45	17	1
1:A:49:LYS:HB2	1:A:50:PRO:HD3	0.42	1.91	1	3
1:A:170:GLU:CD	1:A:175:LEU:HD21	0.42	2.35	1	1
1:A:42:LYS:N	1:A:42:LYS:CD	0.42	2.82	2	1
1:A:193:HIS:HB2	1:A:213:LEU:HB3	0.42	1.92	5	4
1:A:111:LYS:HE2	1:A:113:GLY:O	0.42	2.15	5	1
1:A:195:GLU:OE1	1:A:212:THR:CG2	0.42	2.68	8	1
1:A:84:PRO:HG3	1:A:126:ILE:HG12	0.42	1.92	9	1
1:A:6:VAL:O	1:A:8:LYS:N	0.42	2.53	14	1
1:A:111:LYS:HB3	1:A:150:ASN:OD1	0.42	2.14	14	1
1:A:66:THR:HG21	1:A:73:GLU:HG2	0.42	1.91	16	1
1:A:68:PHE:CE1	1:A:73:GLU:HB3	0.42	2.49	16	1
1:A:58:TRP:CH2	1:A:92:ASP:OD2	0.42	2.73	20	1
1:A:97:ARG:C	1:A:98:ASN:ND2	0.42	2.73	4	1
1:A:100:VAL:HB	1:A:150:ASN:OD1	0.42	2.15	13	2
1:A:46:TRP:CE3	1:A:102:PRO:O	0.42	2.72	9	1
1:A:43:TRP:C	1:A:44:THR:HG23	0.42	2.34	10	1
1:A:134:LEU:CD2	1:A:152:VAL:HG11	0.42	2.44	10	1
1:A:103:GLU:CD	1:A:106:ASP:OD2	0.42	2.57	13	1
1:A:183:LYS:HG3	1:A:193:HIS:O	0.42	2.15	15	1
1:A:186:LEU:O	1:A:187:LYS:C	0.42	2.56	15	1
1:A:100:VAL:HG13	1:A:107:GLU:CD	0.42	2.35	18	1
1:A:117:PHE:O	1:A:162:LYS:HG3	0.42	2.15	18	1
1:A:115:TRP:O	1:A:117:PHE:CE1	0.42	2.73	19	1
1:A:76:ALA:O	1:A:79:GLN:HB2	0.42	2.15	4	8
1:A:109:ASN:OD1	1:A:109:ASN:C	0.42	2.57	4	1
1:A:96:PHE:CD2	1:A:107:GLU:OE1	0.42	2.73	20	2
1:A:110:ALA:O	1:A:111:LYS:C	0.42	2.58	6	1
1:A:167:THR:C	1:A:169:SER:N	0.42	2.73	9	2
1:A:99:ASP:HB3	1:A:150:ASN:CB	0.42	2.44	8	1
1:A:171:ASP:HB3	1:A:174:PRO:CD	0.42	2.45	10	1
1:A:83:GLU:OE1	1:A:83:GLU:CA	0.42	2.67	11	1
1:A:116:SER:OG	1:A:162:LYS:HE2	0.42	2.15	11	1
1:A:111:LYS:HD2	1:A:166:TRP:CA	0.42	2.45	18	1
1:A:115:TRP:NE1	1:A:175:LEU:HB3	0.42	2.29	18	1
1:A:162:LYS:HG3	1:A:163:PHE:N	0.42	2.30	18	1
1:A:109:ASN:C	1:A:111:LYS:N	0.42	2.73	1	1
1:A:153:VAL:CG1	1:A:154:LEU:N	0.42	2.82	4	2
1:A:83:GLU:HB3	1:A:127:ASP:CG	0.42	2.35	6	1
1:A:96:PHE:HB2	1:A:151:GLY:HA3	0.42	1.90	19	2
1:A:108:ALA:CB	1:A:111:LYS:HZ3	0.42	2.28	8	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:VAL:HG22	1:A:101:ARG:HB2	0.42	1.92	9	1
1:A:83:GLU:HG2	1:A:127:ASP:HB2	0.42	1.92	10	1
1:A:6:VAL:O	1:A:7:SER:C	0.42	2.58	12	1
1:A:108:ALA:HB1	1:A:113:GLY:CA	0.42	2.45	17	1
1:A:111:LYS:HD3	1:A:166:TRP:HB3	0.42	1.92	18	1
1:A:120:ARG:HD3	1:A:121:GLY:N	0.42	2.29	18	1
1:A:115:TRP:O	1:A:117:PHE:CZ	0.42	2.73	19	1
1:A:39:LEU:HD13	1:A:139:GLY:CA	0.42	2.44	20	1
1:A:92:ASP:CG	1:A:94:HIS:NE2	0.42	2.73	20	1
1:A:201:SER:O	1:A:202:ALA:C	0.42	2.56	2	1
1:A:84:PRO:HB3	1:A:161:ASN:CG	0.42	2.35	8	1
1:A:115:TRP:HB3	1:A:165:LEU:HD13	0.42	1.92	10	1
1:A:39:LEU:HB3	1:A:138:ILE:O	0.42	2.15	11	1
1:A:81:ILE:O	1:A:86:GLU:CD	0.42	2.57	11	1
1:A:92:ASP:OD1	1:A:155:SER:HB3	0.42	2.14	11	3
1:A:99:ASP:OD2	1:A:149:ILE:O	0.42	2.37	11	1
1:A:106:ASP:O	1:A:109:ASN:CB	0.41	2.67	1	1
1:A:101:ARG:HB2	1:A:107:GLU:N	0.41	2.30	3	1
1:A:148:GLN:HB3	1:A:170:GLU:OE1	0.41	2.15	4	1
1:A:179:GLY:O	1:A:180:GLY:C	0.41	2.58	5	1
1:A:101:ARG:HD2	1:A:102:PRO:HD2	0.41	1.92	6	1
1:A:101:ARG:HG3	1:A:102:PRO:HD3	0.41	1.92	9	1
1:A:117:PHE:CD2	1:A:194:LEU:HG	0.41	2.50	9	1
1:A:164:ALA:C	1:A:165:LEU:HD12	0.41	2.35	10	1
1:A:82:PRO:C	1:A:87:LEU:HD23	0.41	2.30	12	1
1:A:4:GLU:HA	1:A:4:GLU:OE1	0.41	2.14	14	1
1:A:166:TRP:C	1:A:167:THR:HG23	0.41	2.35	14	1
1:A:109:ASN:OD1	1:A:203:ASN:HB3	0.41	2.15	17	1
1:A:183:LYS:HE3	1:A:188:LEU:HD11	0.41	1.91	17	1
1:A:119:LEU:HD21	1:A:186:LEU:HB3	0.41	1.91	18	1
1:A:116:SER:CB	1:A:195:GLU:CG	0.41	2.98	1	1
1:A:157:ARG:NH2	2:A:214:M7G:O3A	0.41	2.53	1	1
1:A:104:TRP:HB3	2:A:214:M7G:O6	0.41	2.15	13	3
1:A:183:LYS:CD	1:A:194:LEU:HB2	0.41	2.44	8	1
1:A:74:PHE:CE2	1:A:131:LEU:HD23	0.41	2.50	10	1
1:A:87:LEU:CD2	1:A:91:SER:OG	0.41	2.68	14	1
1:A:194:LEU:CB	1:A:213:LEU:HD13	0.41	2.44	17	1
1:A:200:SER:C	1:A:203:ASN:ND2	0.41	2.74	17	1
1:A:102:PRO:O	1:A:103:GLU:HG3	0.41	2.15	1	1
1:A:112:GLY:HA3	1:A:167:THR:O	0.41	2.15	17	2
1:A:111:LYS:HG3	1:A:150:ASN:ND2	0.41	2.30	4	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:202:ALA:O	1:A:203:ASN:HB3	0.41	2.15	4	3
1:A:95:VAL:O	1:A:96:PHE:HB3	0.41	2.16	6	3
1:A:68:PHE:HB3	1:A:73:GLU:OE1	0.41	2.16	7	1
1:A:112:GLY:O	1:A:199:HIS:CD2	0.41	2.74	7	1
1:A:116:SER:CB	1:A:162:LYS:HE2	0.41	2.45	8	1
1:A:92:ASP:HB3	1:A:94:HIS:NE2	0.41	2.30	9	2
1:A:183:LYS:CD	1:A:213:LEU:O	0.41	2.68	9	1
1:A:83:GLU:HG2	1:A:84:PRO:CD	0.41	2.45	10	1
1:A:83:GLU:CD	1:A:127:ASP:OD2	0.41	2.58	11	1
1:A:156:ILE:HG23	1:A:160:GLY:O	0.41	2.14	11	2
1:A:111:LYS:HB3	1:A:150:ASN:CG	0.41	2.36	14	1
1:A:196:PHE:HB2	1:A:211:ILE:CB	0.41	2.45	16	1
1:A:133:THR:HG21	1:A:182:PHE:CE1	0.41	2.49	20	1
1:A:109:ASN:O	1:A:111:LYS:HG2	0.41	2.16	1	1
1:A:93:TYR:CD1	1:A:94:HIS:N	0.41	2.88	2	1
1:A:58:TRP:CE2	2:A:214:M7G:C6	0.41	3.03	3	2
1:A:93:TYR:CE2	1:A:154:LEU:HD13	0.41	2.50	3	1
1:A:76:ALA:O	1:A:77:ILE:C	0.41	2.57	8	4
1:A:94:HIS:CB	1:A:96:PHE:CE2	0.41	3.03	6	1
1:A:149:ILE:HD11	1:A:170:GLU:OE2	0.41	2.14	6	1
1:A:116:SER:CA	1:A:163:PHE:O	0.41	2.68	7	1
1:A:161:ASN:O	1:A:162:LYS:HG3	0.41	2.16	9	2
1:A:182:PHE:O	1:A:183:LYS:C	0.41	2.57	15	1
1:A:90:LYS:O	1:A:90:LYS:HG2	0.41	2.15	1	1
1:A:100:VAL:HG11	1:A:110:ALA:CB	0.41	2.43	1	1
1:A:40:ASN:ND2	1:A:41:THR:HB	0.41	2.30	2	1
1:A:83:GLU:HG2	1:A:154:LEU:HD11	0.41	1.93	2	1
1:A:47:TYR:CD1	1:A:63:ARG:HB2	0.41	2.50	7	1
1:A:103:GLU:CA	1:A:107:GLU:CD	0.41	2.89	8	1
1:A:79:GLN:O	1:A:81:ILE:HG12	0.41	2.16	9	1
1:A:82:PRO:HB2	1:A:87:LEU:CD2	0.41	2.46	10	1
1:A:148:GLN:HG2	1:A:168:LYS:HE2	0.41	1.92	10	1
1:A:108:ALA:HB1	1:A:113:GLY:HA2	0.41	1.90	17	1
1:A:58:TRP:CZ2	1:A:62:LEU:HD12	0.41	2.50	1	1
1:A:118:GLN:HB2	1:A:162:LYS:CE	0.41	2.45	4	1
1:A:47:TYR:CE1	1:A:65:VAL:HG21	0.41	2.50	6	1
1:A:85:HIS:CB	1:A:123:GLY:HA3	0.41	2.46	7	1
1:A:83:GLU:OE2	1:A:127:ASP:CB	0.41	2.68	8	1
1:A:39:LEU:CD2	1:A:71:VAL:CG1	0.41	2.83	9	1
1:A:149:ILE:N	1:A:149:ILE:HD13	0.41	2.30	14	1
1:A:198:PRO:C	1:A:200:SER:N	0.41	2.74	5	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:ASP:OD1	1:A:99:ASP:C	0.41	2.58	8	1
1:A:43:TRP:HA	1:A:96:PHE:O	0.41	2.16	9	1
1:A:106:ASP:HA	1:A:109:ASN:CB	0.41	2.46	11	2
1:A:193:HIS:CD2	1:A:194:LEU:HD12	0.41	2.50	12	1
1:A:74:PHE:CE2	1:A:135:LEU:HD22	0.41	2.49	15	1
1:A:119:LEU:CG	1:A:188:LEU:CB	0.41	2.99	15	1
1:A:96:PHE:CE2	1:A:153:VAL:HG23	0.41	2.50	16	1
1:A:193:HIS:HA	1:A:213:LEU:O	0.41	2.14	19	1
1:A:111:LYS:HE3	1:A:166:TRP:CG	0.41	2.51	20	1
1:A:73:GLU:OE1	1:A:73:GLU:HA	0.41	2.16	1	1
1:A:196:PHE:CB	1:A:210:SER:HB2	0.41	2.46	1	1
1:A:41:THR:O	1:A:43:TRP:CD1	0.41	2.74	3	1
1:A:114:LYS:O	1:A:197:PHE:CB	0.41	2.69	4	1
1:A:124:ALA:O	1:A:125:ASP:HB2	0.41	2.16	4	1
1:A:101:ARG:HB2	1:A:106:ASP:C	0.41	2.36	6	1
1:A:187:LYS:O	1:A:188:LEU:HG	0.41	2.16	11	1
1:A:39:LEU:HD23	1:A:39:LEU:H	0.41	1.71	14	1
1:A:39:LEU:HB3	1:A:139:GLY:HA2	0.41	1.92	14	1
1:A:85:HIS:O	1:A:85:HIS:ND1	0.41	2.54	14	1
1:A:130:TRP:CA	1:A:185:VAL:CG1	0.41	2.99	14	1
1:A:157:ARG:CD	2:A:214:M7G:O2B	0.41	2.69	14	1
1:A:43:TRP:HB3	1:A:97:ARG:HA	0.41	1.93	16	1
1:A:97:ARG:O	1:A:97:ARG:HG3	0.41	2.16	17	1
1:A:130:TRP:HA	1:A:185:VAL:CG1	0.41	2.46	19	1
1:A:83:GLU:HB2	1:A:127:ASP:OD1	0.41	2.15	20	1
1:A:111:LYS:HA	1:A:168:LYS:CA	0.41	2.44	20	1
1:A:104:TRP:HB3	2:A:214:M7G:CM7	0.41	2.44	10	2
1:A:43:TRP:CD1	1:A:69:GLN:HG3	0.41	2.50	3	1
1:A:97:ARG:C	1:A:99:ASP:N	0.41	2.74	3	1
1:A:43:TRP:CH2	1:A:138:ILE:CG2	0.41	3.04	6	1
1:A:64:PRO:C	1:A:65:VAL:CG2	0.41	2.89	6	1
1:A:115:TRP:HA	1:A:195:GLU:O	0.41	2.16	7	1
1:A:39:LEU:HD12	1:A:40:ASN:H	0.41	1.75	8	1
1:A:58:TRP:CE2	1:A:62:LEU:HD12	0.41	2.51	9	1
1:A:87:LEU:CD1	1:A:89:LEU:CA	0.41	2.99	9	1
1:A:101:ARG:C	1:A:107:GLU:HG2	0.41	2.36	9	1
1:A:149:ILE:C	1:A:168:LYS:HG2	0.41	2.37	9	1
1:A:39:LEU:CD2	1:A:70:THR:HA	0.41	2.46	10	1
1:A:41:THR:CG2	1:A:97:ARG:CD	0.41	2.95	10	1
1:A:111:LYS:HE3	1:A:168:LYS:CG	0.41	2.45	11	1
1:A:148:GLN:HB3	1:A:168:LYS:CD	0.41	2.45	11	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:173:GLU:HB2	1:A:174:PRO:HD3	0.41	1.93	11	1
1:A:83:GLU:HA	1:A:87:LEU:HD23	0.41	1.91	12	1
1:A:41:THR:O	1:A:69:GLN:HG2	0.41	2.11	14	1
1:A:152:VAL:C	1:A:153:VAL:CG2	0.41	2.89	14	2
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:134:LEU:HD11	0.41	2.51	15	2
1:A:115:TRP:CB	1:A:165:LEU:HD23	0.41	2.46	16	1
1:A:118:GLN:O	1:A:119:LEU:HD12	0.41	2.16	16	1
1:A:176:LEU:HG	1:A:211:ILE:CD1	0.41	2.43	17	1
1:A:87:LEU:CD2	1:A:87:LEU:C	0.41	2.87	18	1
1:A:134:LEU:HD21	1:A:165:LEU:CD1	0.41	2.45	18	1
1:A:127:ASP:O	1:A:131:LEU:CG	0.41	2.69	19	1
1:A:194:LEU:C	1:A:195:GLU:CG	0.41	2.89	20	1
1:A:39:LEU:HD23	1:A:70:THR:C	0.41	2.37	1	1
1:A:154:LEU:O	1:A:155:SER:OG	0.41	2.39	1	1
1:A:68:PHE:HB2	1:A:73:GLU:HG3	0.41	1.91	3	1
1:A:172:LYS:O	1:A:175:LEU:N	0.41	2.54	3	1
1:A:111:LYS:HG3	1:A:150:ASN:CB	0.41	2.45	4	1
1:A:114:LYS:O	1:A:114:LYS:HG2	0.41	2.15	4	1
1:A:150:ASN:C	1:A:150:ASN:ND2	0.41	2.73	5	1
1:A:116:SER:CB	1:A:195:GLU:CB	0.41	2.99	6	1
1:A:58:TRP:O	1:A:62:LEU:HB3	0.41	2.16	8	1
1:A:153:VAL:HB	1:A:164:ALA:O	0.41	2.16	9	1
1:A:183:LYS:O	1:A:186:LEU:HG	0.41	2.15	10	1
1:A:3:VAL:O	1:A:4:GLU:CB	0.41	2.65	14	1
1:A:83:GLU:O	1:A:156:ILE:CD1	0.41	2.69	16	1
1:A:79:GLN:O	1:A:81:ILE:HG13	0.40	2.15	3	1
1:A:94:HIS:HB3	1:A:153:VAL:HA	0.40	1.93	3	1
1:A:43:TRP:NE1	1:A:69:GLN:HA	0.40	2.31	9	1
1:A:74:PHE:CE1	1:A:95:VAL:HG11	0.40	2.51	10	1
1:A:110:ALA:O	1:A:111:LYS:CD	0.40	2.69	17	1
1:A:148:GLN:NE2	1:A:174:PRO:CB	0.40	2.84	18	1
1:A:78:ILE:C	1:A:80:ASN:N	0.40	2.74	19	1
1:A:193:HIS:CA	1:A:213:LEU:O	0.40	2.69	19	1
1:A:10:PHE:O	1:A:10:PHE:CD1	0.40	2.75	20	1
1:A:97:ARG:CG	1:A:101:ARG:NE	0.40	2.84	1	1
1:A:196:PHE:HB2	1:A:210:SER:HB2	0.40	1.93	1	1
1:A:119:LEU:C	1:A:120:ARG:CG	0.40	2.89	2	1
1:A:82:PRO:HA	1:A:87:LEU:HB3	0.40	1.92	7	1
1:A:103:GLU:HA	1:A:107:GLU:OE2	0.40	2.16	8	1
1:A:49:LYS:CB	1:A:50:PRO:HD2	0.40	2.46	9	1
1:A:95:VAL:C	1:A:96:PHE:CD1	0.40	2.95	9	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:199:HIS:ND1	0.40	2.53	9	1
1:A:68:PHE:HB2	1:A:73:GLU:CD	0.40	2.37	15	1
1:A:100:VAL:CG2	1:A:107:GLU:O	0.40	2.69	16	1
1:A:199:HIS:O	1:A:203:ASN:HB2	0.40	2.16	19	1
1:A:200:SER:HA	1:A:203:ASN:OD1	0.40	2.15	1	1
1:A:165:LEU:C	1:A:165:LEU:CD1	0.40	2.89	2	1
1:A:196:PHE:HB2	1:A:210:SER:HB3	0.40	1.92	5	1
1:A:101:ARG:HD3	1:A:102:PRO:HD3	0.40	1.93	6	1
1:A:111:LYS:HA	1:A:150:ASN:CB	0.40	2.47	7	1
1:A:43:TRP:CD2	1:A:68:PHE:O	0.40	2.75	9	1
1:A:46:TRP:O	1:A:94:HIS:HB2	0.40	2.16	9	1
1:A:62:LEU:HD23	1:A:62:LEU:HA	0.40	1.72	11	1
1:A:162:LYS:CG	1:A:163:PHE:N	0.40	2.85	11	2
1:A:75:TRP:HA	1:A:78:ILE:CG1	0.40	2.46	15	1
1:A:87:LEU:HD11	1:A:156:ILE:HG21	0.40	1.92	19	1
1:A:202:ALA:O	1:A:203:ASN:C	0.40	2.60	20	1
1:A:8:LYS:O	1:A:10:PHE:N	0.40	2.53	2	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:73:GLU:HB2	0.40	2.52	2	1
1:A:148:GLN:HG2	1:A:168:LYS:HD2	0.40	1.94	2	1
1:A:3:VAL:HG23	1:A:4:GLU:N	0.40	2.31	4	1
1:A:58:TRP:NE1	2:A:214:M7G:N1	0.40	2.69	5	1
1:A:123:GLY:N	1:A:126:ILE:CD1	0.40	2.78	5	1
1:A:114:LYS:CE	1:A:197:PHE:CD2	0.40	3.04	6	1
1:A:131:LEU:O	1:A:135:LEU:HG	0.40	2.17	10	1
1:A:180:GLY:O	1:A:183:LYS:HB3	0.40	2.16	17	1
1:A:117:PHE:O	1:A:162:LYS:CA	0.40	2.69	18	1
1:A:170:GLU:OE2	1:A:175:LEU:HD23	0.40	2.17	1	1
1:A:125:ASP:O	1:A:129:LEU:HD22	0.40	2.15	2	1
1:A:39:LEU:HG	1:A:70:THR:N	0.40	2.32	4	1
1:A:163:PHE:CD2	1:A:163:PHE:N	0.40	2.88	6	1
1:A:94:HIS:CG	1:A:153:VAL:HG13	0.40	2.51	9	1
1:A:39:LEU:CD1	1:A:43:TRP:CZ2	0.40	3.04	10	1
1:A:130:TRP:O	1:A:134:LEU:HD12	0.40	2.16	11	1
1:A:126:ILE:HA	1:A:129:LEU:HD22	0.40	1.94	12	1
1:A:111:LYS:CE	1:A:166:TRP:HB3	0.40	2.46	14	1
1:A:83:GLU:HG3	1:A:127:ASP:HB2	0.40	1.92	16	1
1:A:84:PRO:HD3	1:A:127:ASP:HB2	0.40	1.93	16	1
1:A:84:PRO:HD3	1:A:127:ASP:CB	0.40	2.47	16	1
1:A:106:ASP:CA	1:A:109:ASN:HB2	0.40	2.46	17	1
1:A:122:LYS:HD3	1:A:126:ILE:HD11	0.40	1.94	17	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	159/213 (75%)	104±3 (65±2%)	36±4 (23±2%)	19±3 (12±2%)	<b>1</b>	<b>7</b>
All	All	3180/4260 (75%)	2079 (65%)	716 (23%)	385 (12%)	<b>1</b>	<b>7</b>

All 55 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	65	VAL	20
1	A	66	THR	20
1	A	89	LEU	20
1	A	100	VAL	20
1	A	170	GLU	14
1	A	101	ARG	13
1	A	39	LEU	13
1	A	149	ILE	13
1	A	40	ASN	12
1	A	124	ALA	12
1	A	49	LYS	11
1	A	50	PRO	11
1	A	169	SER	11
1	A	171	ASP	11
1	A	102	PRO	11
1	A	160	GLY	11
1	A	97	ARG	10
1	A	83	GLU	10
1	A	125	ASP	9
1	A	122	LYS	8
1	A	123	GLY	8
1	A	203	ASN	7
1	A	3	VAL	7
1	A	82	PRO	7
1	A	211	ILE	5
1	A	6	VAL	5
1	A	157	ARG	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	193	HIS	5
1	A	11	GLU	5
1	A	96	PHE	5
1	A	188	LEU	5
1	A	194	LEU	5
1	A	57	SER	5
1	A	5	GLU	4
1	A	103	GLU	4
1	A	139	GLY	4
1	A	99	ASP	4
1	A	121	GLY	4
1	A	90	LYS	4
1	A	8	LYS	3
1	A	148	GLN	3
1	A	7	SER	3
1	A	158	LYS	3
1	A	111	LYS	2
1	A	98	ASN	2
1	A	168	LYS	2
1	A	70	THR	1
1	A	71	VAL	1
1	A	106	ASP	1
1	A	161	ASN	1
1	A	10	PHE	1
1	A	112	GLY	1
1	A	202	ALA	1
1	A	104	TRP	1
1	A	200	SER	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	143/191 (75%)	92±5 (64±3%)	51±5 (36±3%)	<span>1</span> <span>8</span>
All	All	2860/3820 (75%)	1831 (64%)	1029 (36%)	<span>1</span> <span>8</span>

All 113 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	20
1	A	59	SER	20
1	A	104	TRP	20
1	A	200	SER	20
1	A	69	GLN	19
1	A	137	VAL	19
1	A	67	SER	18
1	A	115	TRP	18
1	A	129	LEU	18
1	A	184	GLN	18
1	A	47	TYR	17
1	A	57	SER	16
1	A	117	PHE	16
1	A	150	ASN	16
1	A	183	LYS	16
1	A	97	ARG	15
1	A	169	SER	15
1	A	188	LEU	15
1	A	211	ILE	15
1	A	101	ARG	15
1	A	74	PHE	14
1	A	87	LEU	14
1	A	92	ASP	14
1	A	122	LYS	14
1	A	158	LYS	14
1	A	78	ILE	13
1	A	81	ILE	13
1	A	96	PHE	13
1	A	116	SER	13
1	A	154	LEU	13
1	A	213	LEU	13
1	A	155	SER	13
1	A	11	GLU	12
1	A	79	GLN	12
1	A	86	GLU	12
1	A	132	ARG	12
1	A	165	LEU	12
1	A	178	ILE	12
1	A	111	LYS	12
1	A	39	LEU	11
1	A	49	LYS	11
1	A	62	LEU	11
1	A	75	TRP	11

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	103	GLU	11
1	A	4	GLU	11
1	A	5	GLU	10
1	A	89	LEU	10
1	A	91	SER	10
1	A	105	GLU	10
1	A	172	LYS	10
1	A	40	ASN	10
1	A	119	LEU	10
1	A	127	ASP	10
1	A	99	ASP	10
1	A	171	ASP	10
1	A	210	SER	10
1	A	187	LYS	10
1	A	8	LYS	9
1	A	148	GLN	9
1	A	125	ASP	9
1	A	9	LYS	9
1	A	7	SER	9
1	A	157	ARG	9
1	A	42	LYS	8
1	A	128	GLU	8
1	A	194	LEU	8
1	A	173	GLU	8
1	A	85	HIS	8
1	A	10	PHE	7
1	A	120	ARG	7
1	A	197	PHE	7
1	A	170	GLU	7
1	A	83	GLU	6
1	A	130	TRP	6
1	A	63	ARG	6
1	A	133	THR	6
1	A	177	ARG	6
1	A	109	ASN	5
1	A	195	GLU	5
1	A	98	ASN	5
1	A	168	LYS	5
1	A	201	SER	5
1	A	149	ILE	5
1	A	114	LYS	5
1	A	93	TYR	4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	193	HIS	4
1	A	61	LEU	4
1	A	90	LYS	3
1	A	68	PHE	3
1	A	181	LYS	3
1	A	73	GLU	3
1	A	94	HIS	3
1	A	203	ASN	3
1	A	162	LYS	3
1	A	66	THR	3
1	A	163	PHE	3
1	A	118	GLN	3
1	A	60	ASP	2
1	A	43	TRP	2
1	A	65	VAL	2
1	A	182	PHE	2
1	A	135	LEU	2
1	A	72	GLU	2
1	A	131	LEU	2
1	A	41	THR	1
1	A	138	ILE	1
1	A	70	THR	1
1	A	45	LEU	1
1	A	107	GLU	1
1	A	161	ASN	1
1	A	100	VAL	1
1	A	186	LEU	1
1	A	156	ILE	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 monosaccharides in this entry.

## 6.6 Ligand geometry

1 ligand is modelled in this entry.

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths		
					Counts	RMSZ	#Z>2
2	M7G	A	214	-	28,31,31	1.29±0.01	2±0 (7±0%)

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond angles		
					Counts	RMSZ	#Z>2
2	M7G	A	214	-	39,49,49	2.45±0.01	9±0 (21±1%)

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	M7G	A	214	-	-	0±0,16,44,44	0±0,3,3,3

All unique bond outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
2	A	214	M7G	C8-N9	4.41	1.35	1.45	13	20
2	A	214	M7G	C6-N1	3.59	1.39	1.33	13	20

All unique angle outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst

occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
2	A	214	M7G	N9-C8-N7	10.09	117.80	103.38	8	20
2	A	214	M7G	C2-N1-C6	5.91	125.33	115.93	7	20
2	A	214	M7G	C5-C6-N1	5.75	111.32	123.14	13	20
2	A	214	M7G	C4-C5-C6	4.45	119.97	115.20	14	20
2	A	214	M7G	C8-N7-C5	2.64	102.08	108.94	11	20
2	A	214	M7G	C3'-C2'-C1'	2.53	106.23	101.43	6	20
2	A	214	M7G	C4-C5-N7	2.37	110.61	106.98	18	20
2	A	214	M7G	O2B-PB-O1B	2.24	119.47	110.68	7	20
2	A	214	M7G	N2-C2-N3	2.09	120.51	117.25	8	11

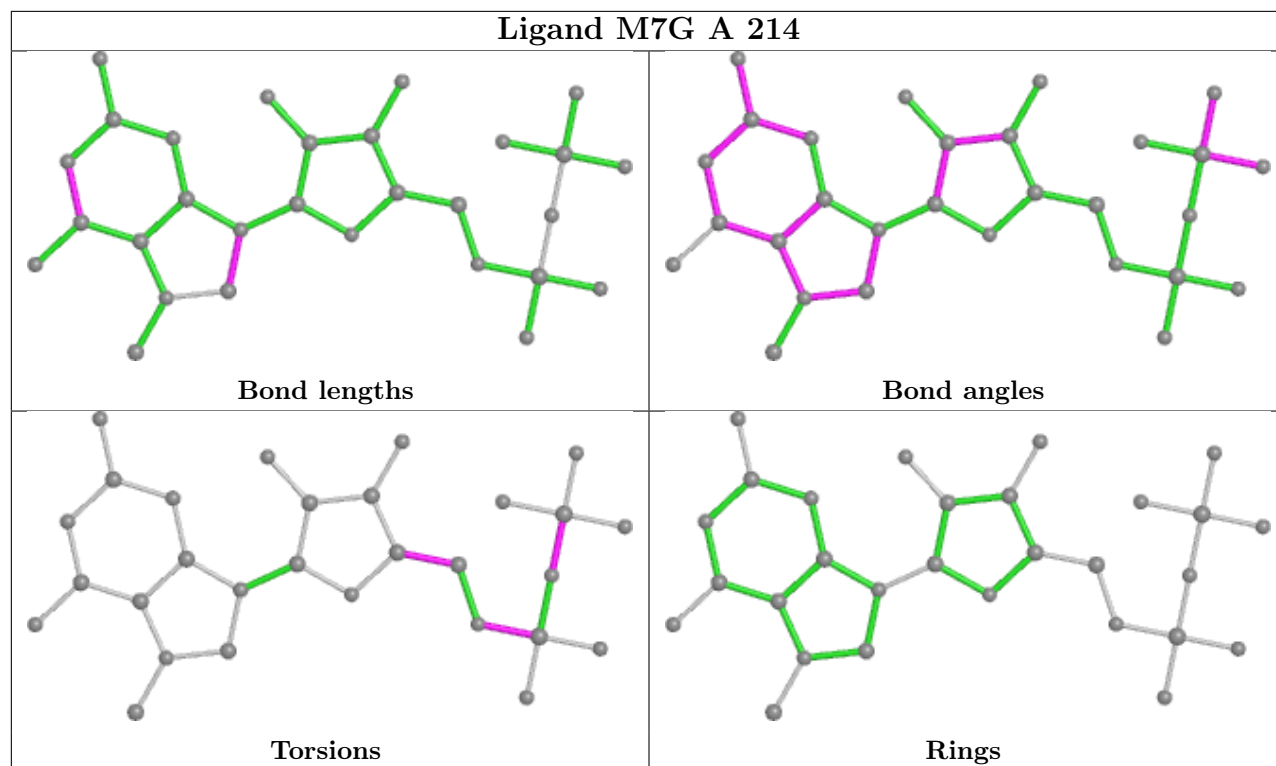
There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

The following is a two-dimensional graphical depiction of Mogul quality analysis of bond lengths, bond angles, torsion angles, and ring geometry for all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the validation Tables will also be included. For torsion angles, if less than 5% of the Mogul distribution of torsion angles is within 10 degrees of the torsion angle in question, then that torsion angle is considered an outlier. Any bond that is central to one or more torsion angles identified as an outlier by Mogul will be highlighted in the graph. For rings, the root-mean-square deviation (RMSD) between the ring in question and similar rings identified by Mogul is calculated over all ring torsion angles. If the average RMSD is greater than 60 degrees and the minimal RMSD between the ring in question and any Mogul-identified rings is also greater than 60 degrees, then that ring is considered an outlier. The outliers are highlighted in purple. The color gray indicates Mogul did not find sufficient equivalents in the CSD to analyse the geometry.





## 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