



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Dec 23, 2021 – 06:21 pm GMT

PDB ID : 7QCB
Title : Williams-Beuren syndrome related methyltransferase WBSCR27 in complex with SAH
Authors : Polshakov, V.I.; Mariasina, S.S.; Chang, C.-F.; Efimov, S.V.
Deposited on : 2021-11-23

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

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

MolProbity : 4.02b-467
Mogul : 1.8.4, 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 : 2.24
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.24

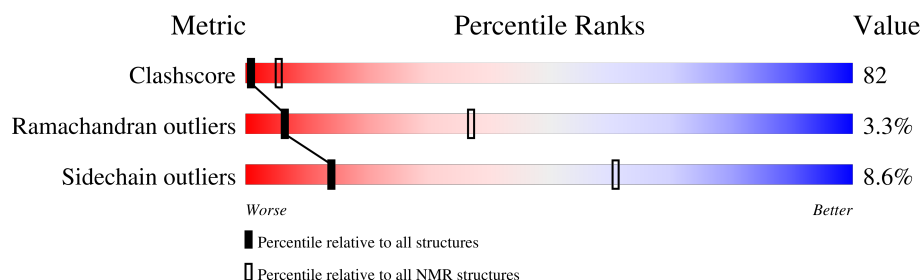
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 69%.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	240	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 4 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *closest to the average*.

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:10-A:206, A:228-A:240 (210)	0.49	4

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 and 6 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 3680 atoms, of which 1832 are hydrogens and 0 are deuteriums.

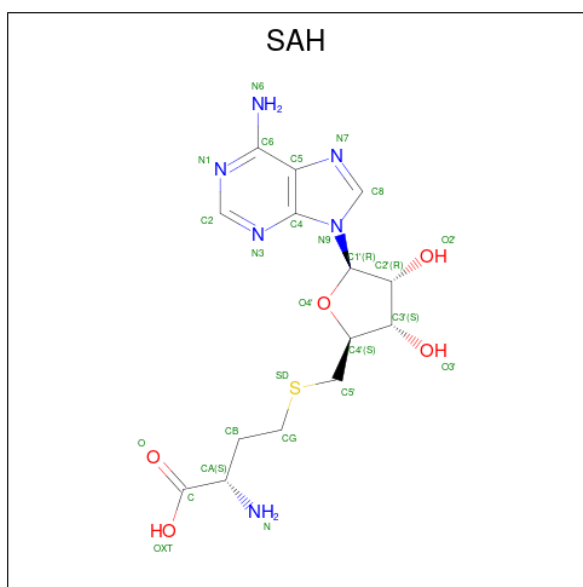
- Molecule 1 is a protein called Methyltransferase-like 27.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	240	3634	1145	1812	316	351	10	0

There are 4 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1	GLY	-	expression tag	UNP Q8BGM4
A	2	ALA	-	expression tag	UNP Q8BGM4
A	3	MET	-	expression tag	UNP Q8BGM4
A	4	ALA	-	expression tag	UNP Q8BGM4

- Molecule 2 is S-ADENOSYL-L-HOMOCYSTEINE (three-letter code: SAH) (formula: $C_{14}H_{20}N_6O_5S$) (labeled as "Ligand of Interest" by depositor).



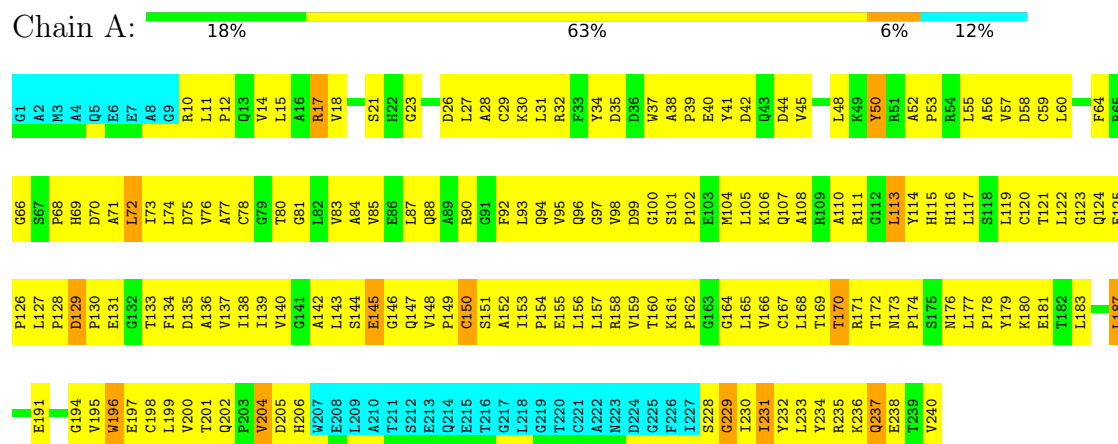
Mol	Chain	Residues	Atoms					
			Total	C	H	N	O	S
2	A	1	46	14	20	6	5	1

4 Residue-property plots [i](#)

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: Methyltransferase-like 27

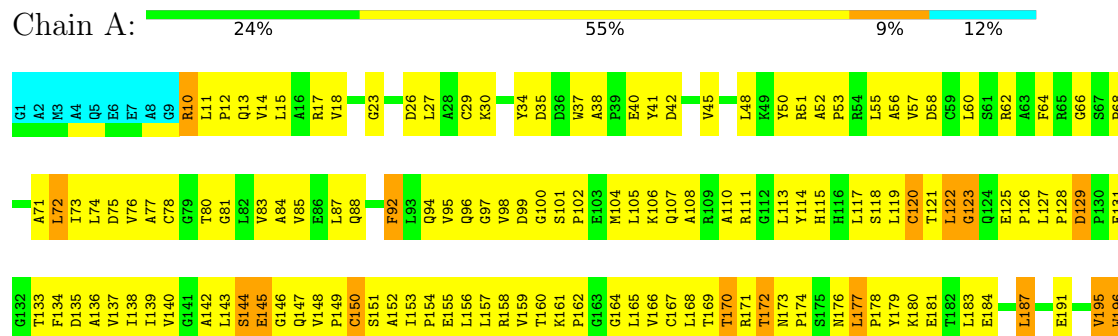


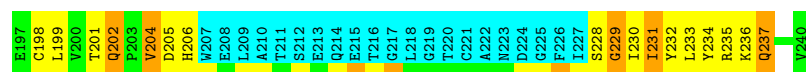
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

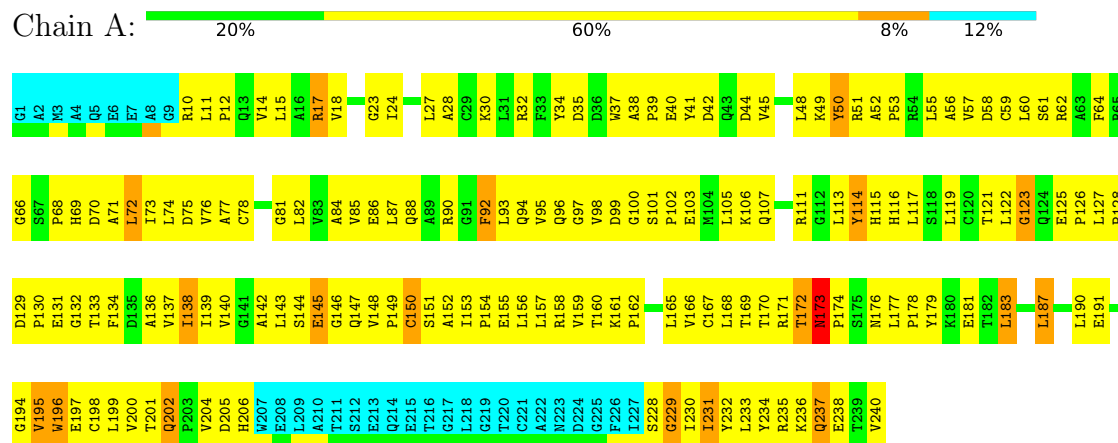
- Molecule 1: Methyltransferase-like 27





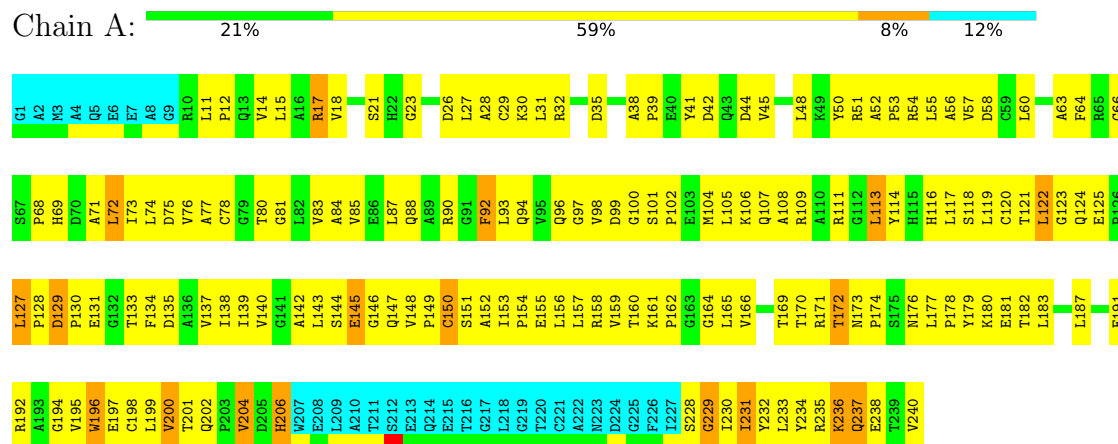
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Methyltransferase-like 27



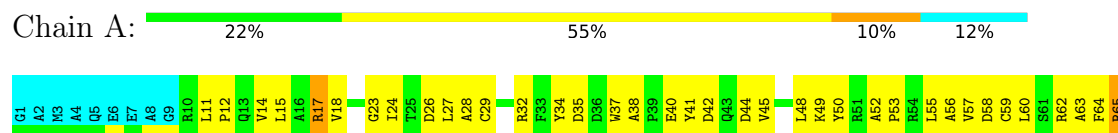
4.2.3 Score per residue for model 3

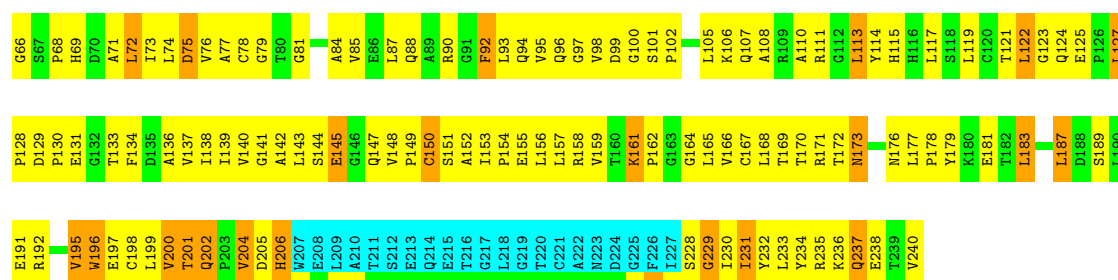
- Molecule 1: Methyltransferase-like 27



4.2.4 Score per residue for model 4 (medoid)

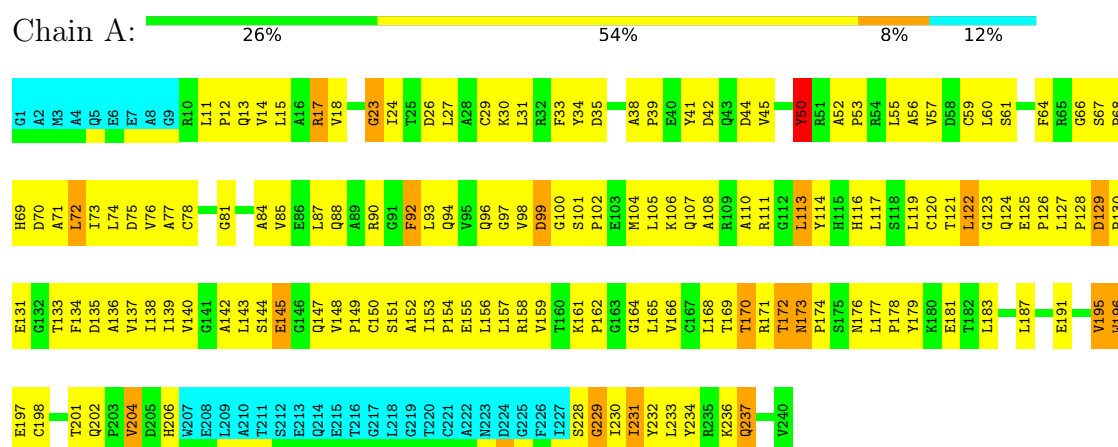
- Molecule 1: Methyltransferase-like 27





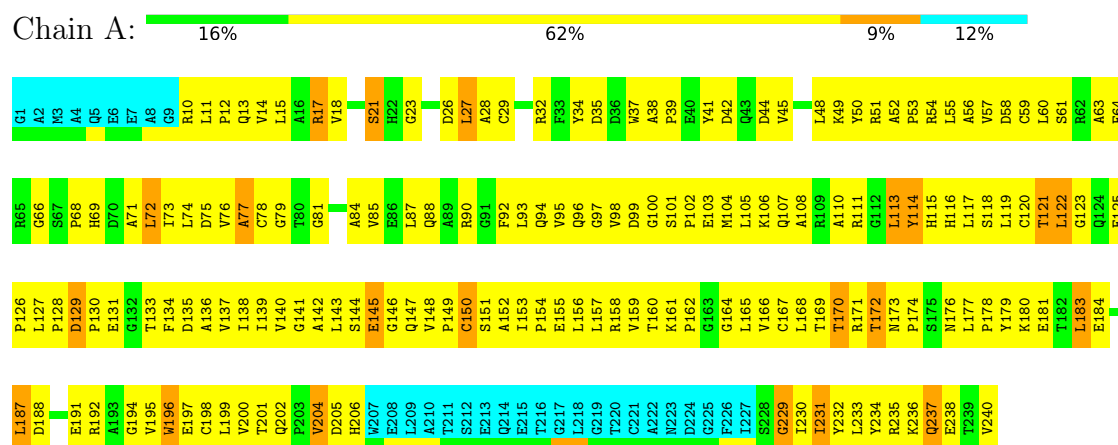
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Methyltransferase-like 27



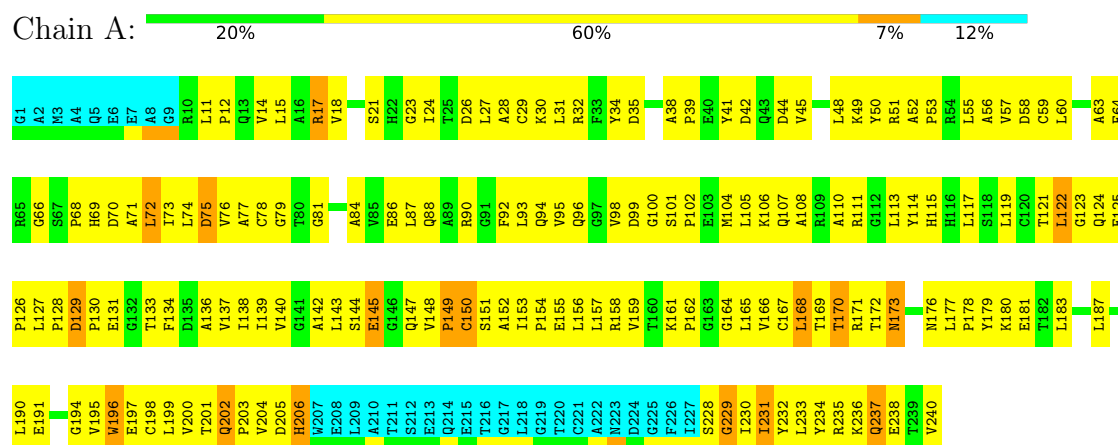
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Methyltransferase-like 27



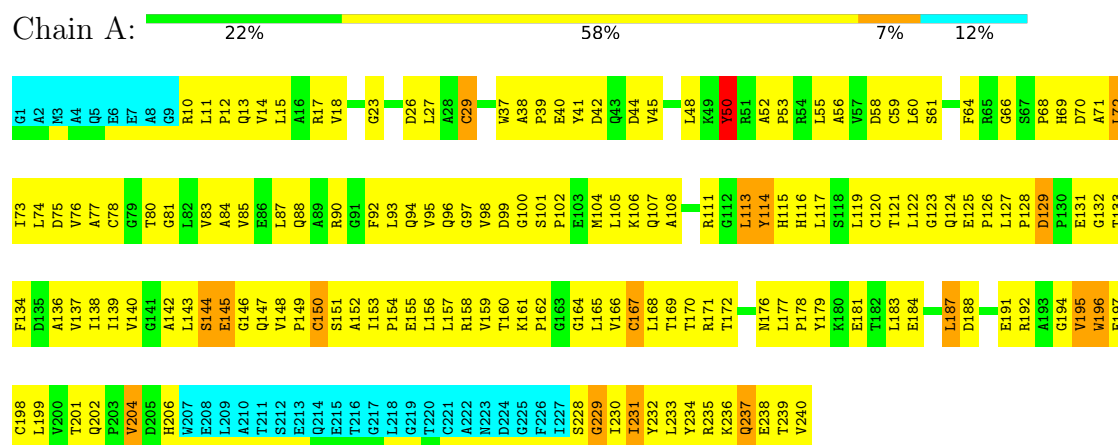
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Methyltransferase-like 27



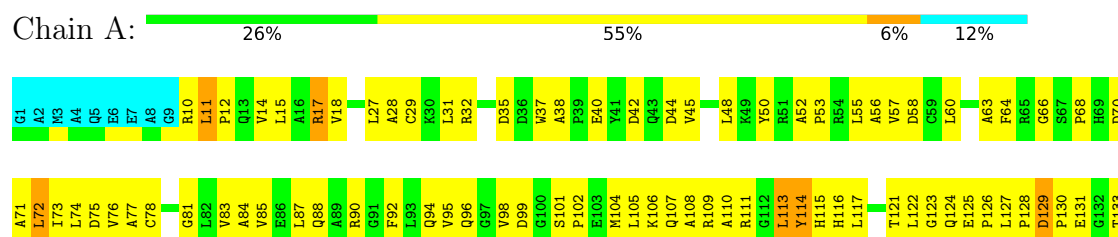
4.2.8 Score per residue for model 8

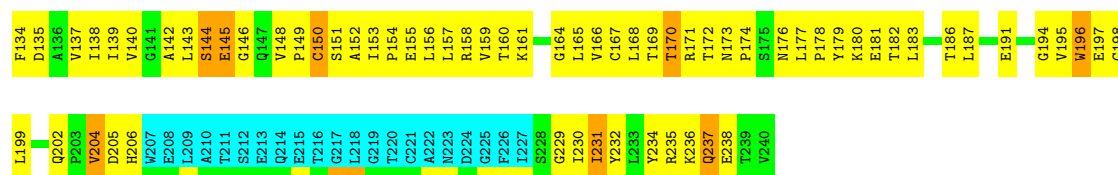
- Molecule 1: Methyltransferase-like 27



4.2.9 Score per residue for model 9

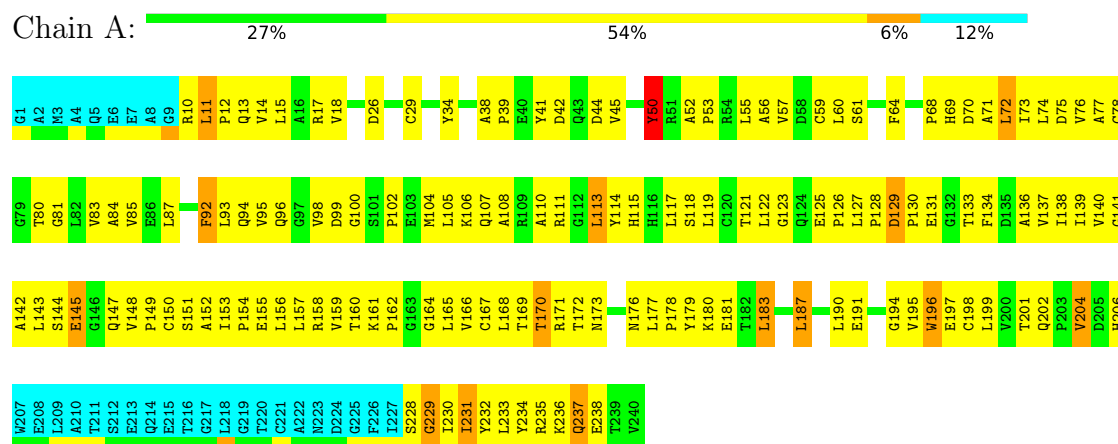
- Molecule 1: Methyltransferase-like 27





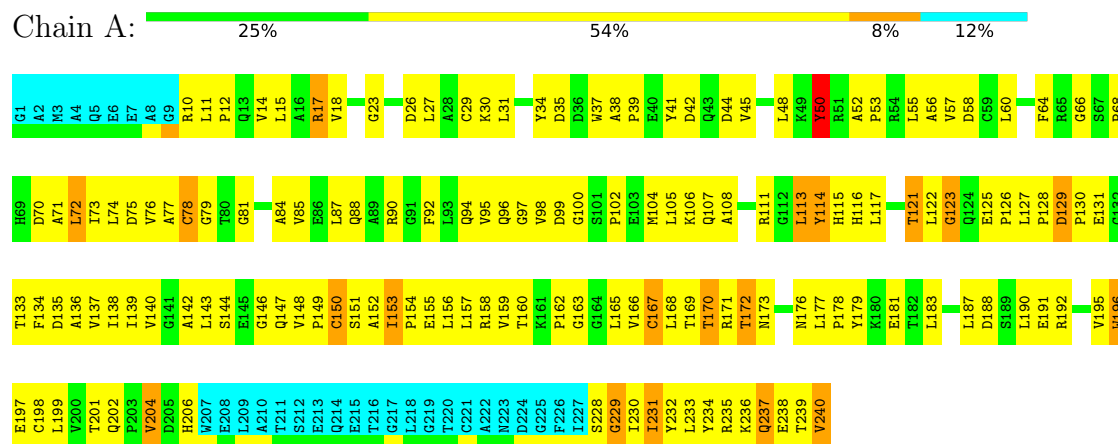
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Methyltransferase-like 27



4.2.11 Score per residue for model 11

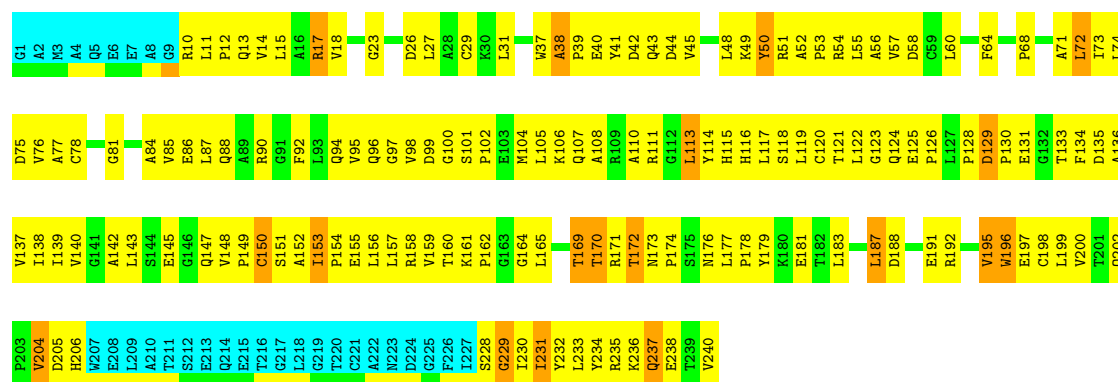
- Molecule 1: Methyltransferase-like 27



4.2.12 Score per residue for model 12

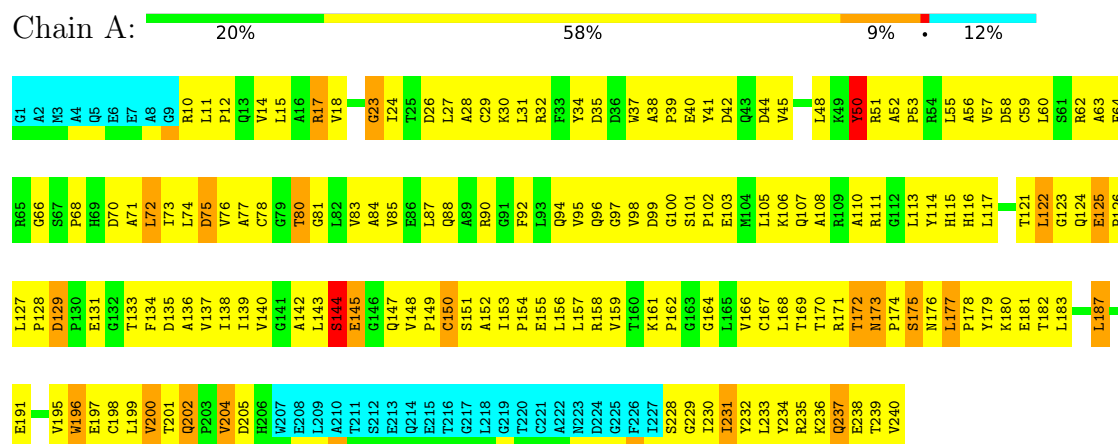
- Molecule 1: Methyltransferase-like 27





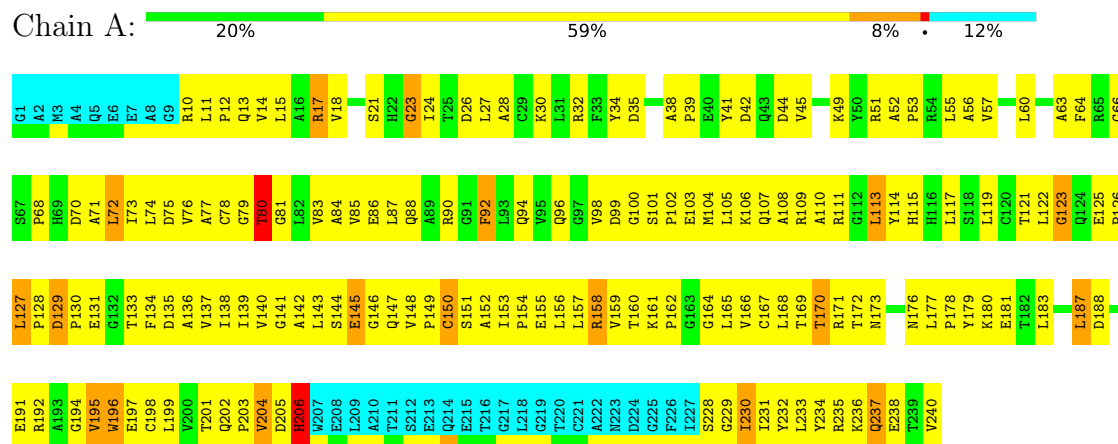
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Methyltransferase-like 27



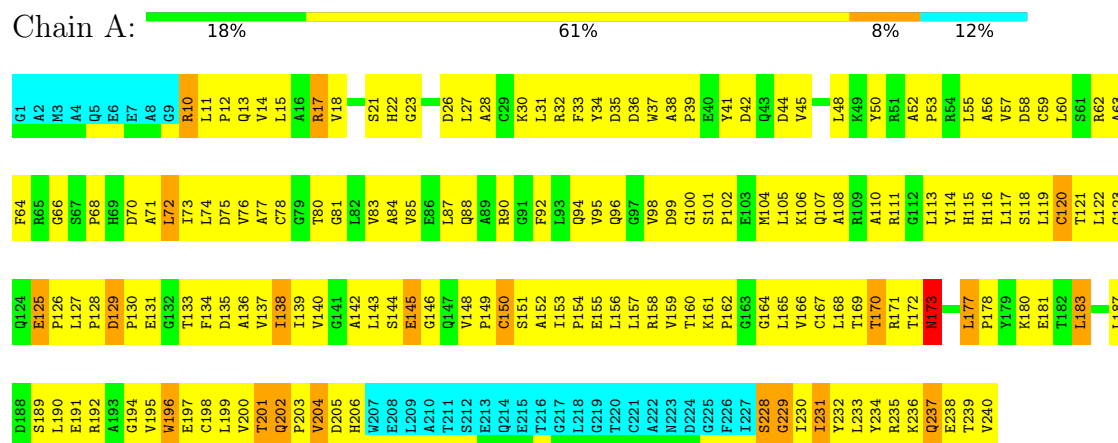
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Methyltransferase-like 27



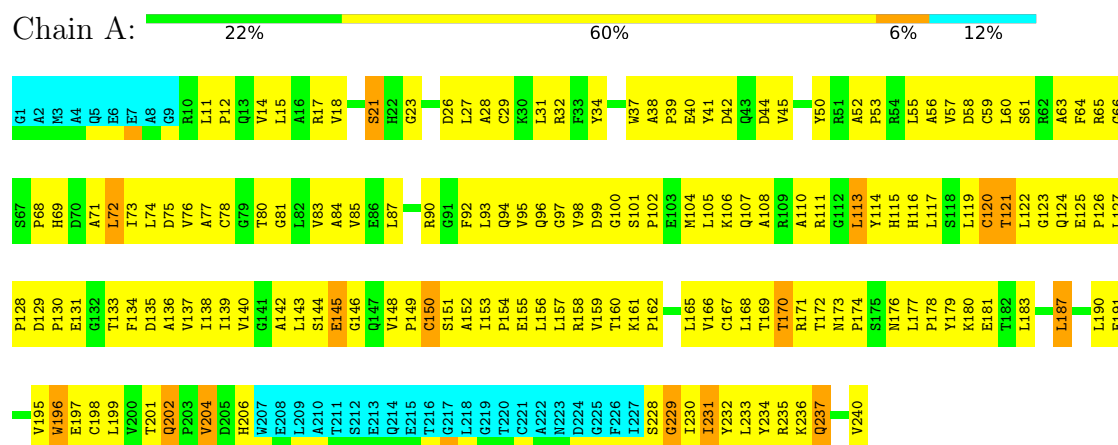
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Methyltransferase-like 27



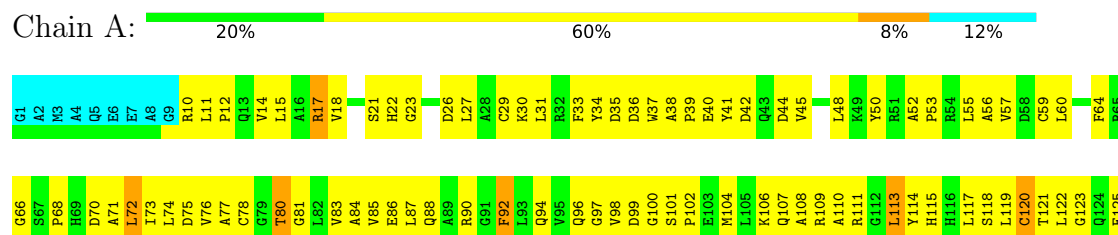
4.2.16 Score per residue for model 16

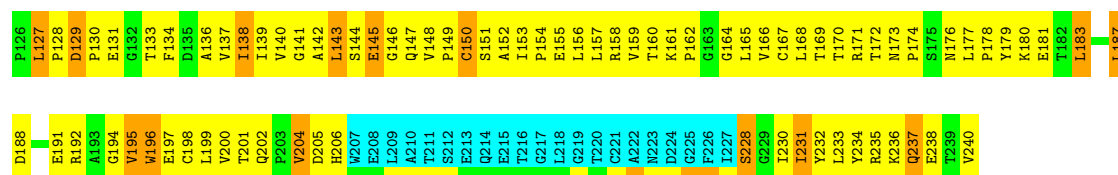
- Molecule 1: Methyltransferase-like 27



4.2.17 Score per residue for model 17

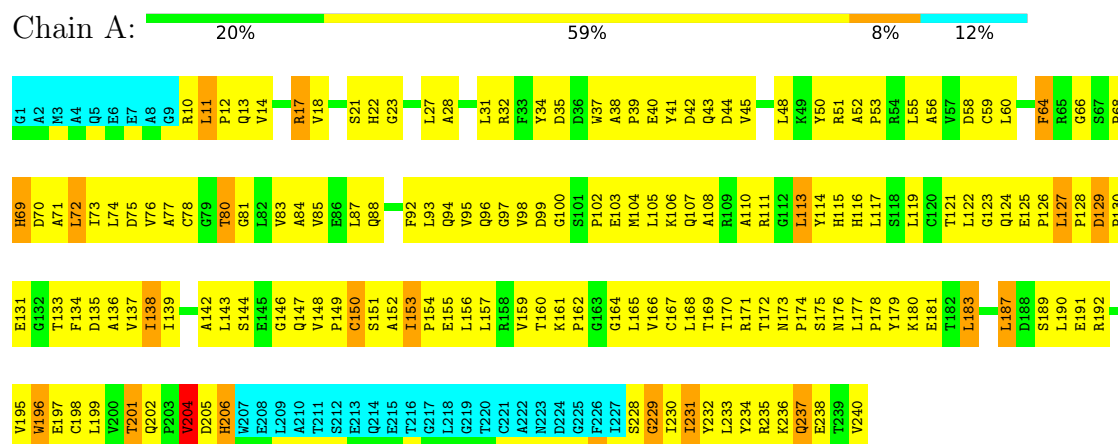
- Molecule 1: Methyltransferase-like 27





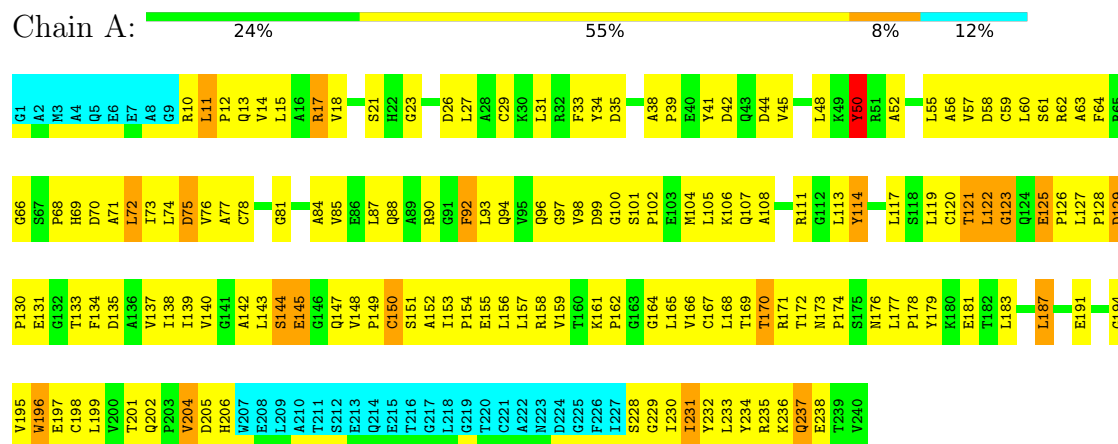
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Methyltransferase-like 27



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Methyltransferase-like 27



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Methyltransferase-like 27



G1	A2	M3	A4	Q5	E6	E7	A8	G9	R10	L11	P12	Q13	V14	L15	A16	R17	V18		S21	H22	G23	I24	T25	D26	L27	A28	C29	K30	L31	R32	F33	Y34		W37	A38	P39	E40	T41	D42	Q43	D44	V45		L48	K49	Y50	A51	A52	P53	R54	L55	A56	V57	D58	C59	L60		F64	R65	
G66	L127	P128	D129	P130	E131	G132	T133	F134	D135	A136	V137	I138	I139	V140	G81	L82	V83	A84	V85	E86	L87	Q88	A89	R90	G91	F92	L93	Q94	V95	Q96	G97	V98	D99	G100	S101	P102	E103	M104	L105	K106	Q107	A108	R109	A110	R111	L112	L113	Y114	H115	H116	L117	S118	L119	C120	T121	L122	G123	Q124	E125	P126
L127	P128	D129	P130	E131	G132	T133	F134	D135	A136	V137	I138	I139	V140	G141	A142	L143	S144	E145	G146	Q147	V148	P149	C150	S151	A152	T153	P154	E155	L156	L157	R158	V159	T160	K161	P162	G163	G164	L165	V166	C167	L168	T169	T170	R171	T172		N176	L177	P178	Y179	K180	E181	T182	L183		L187		E191		
V195	W196	E197	C198	L199	V200	T201	Q202	P203	V204	D205	H206	W207	E208	L209	A210	T211	S212	E213	Q214	E215	T216	G217	L218	G219	T220	C221	A222	N223	D224	G225	P226	T227	S228	G229	I230	T231	Y232	L233	Y234	R235	K236	Q237		V240																

5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 200 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the least restraint violations*.

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

Software name	Classification	Version
ARIA	structure calculation	
CNS	refinement	2.21

The following table shows chemical shift validation statistics as aggregates over all chemical shift files. Detailed validation can be found in section 7 of this report.

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	2166
Number of shifts mapped to atoms	2166
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	69%

6 Model quality ⓘ

6.1 Standard geometry ⓘ

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

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1608	1622	1617	267±15
2	A	26	20	19	16±4
All	All	32680	32840	32720	5354

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 82.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:121:THR:HA	2:A:300:SAH:N1	1.26	1.45	10	20
1:A:74:LEU:HB3	1:A:137:VAL:HG12	1.07	1.26	4	13
1:A:14:VAL:HB	1:A:121:THR:OG1	1.02	1.54	1	7
1:A:123:GLY:O	1:A:152:ALA:HB2	1.01	1.54	8	19
1:A:144:SER:O	1:A:145:GLU:HG2	1.00	1.56	2	5
1:A:11:LEU:HG	1:A:12:PRO:HD3	1.00	1.31	15	5
1:A:52:ALA:HB1	1:A:169:THR:HG21	0.98	1.30	5	10
1:A:15:LEU:HD12	1:A:122:LEU:HD11	0.97	1.36	1	1
1:A:137:VAL:HG13	1:A:166:VAL:HG13	0.97	1.34	2	5
1:A:204:VAL:HG21	1:A:230:ILE:HA	0.94	1.36	18	10
1:A:11:LEU:HD13	1:A:12:PRO:HD2	0.94	1.35	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:111:ARG:HG3	1:A:113:LEU:HD23	0.94	1.37	2	10
1:A:137:VAL:HG12	1:A:166:VAL:HG22	0.93	1.36	13	2
1:A:121:THR:CA	2:A:300:SAH:N1	0.92	2.31	10	17
1:A:143:LEU:HD21	1:A:168:LEU:HD13	0.92	1.40	1	14
1:A:63:ALA:HB1	1:A:199:LEU:HD13	0.92	1.40	6	6
1:A:107:GLN:O	1:A:111:ARG:HG2	0.91	1.66	8	1
1:A:144:SER:O	1:A:145:GLU:HG3	0.91	1.66	13	2
1:A:88:GLN:HB2	1:A:113:LEU:HD21	0.91	1.39	4	9
1:A:18:VAL:HG23	1:A:27:LEU:HD13	0.91	1.39	5	2
1:A:139:ILE:HD11	1:A:142:ALA:HB3	0.89	1.40	12	12
1:A:11:LEU:HD12	1:A:121:THR:HB	0.89	1.44	1	1
1:A:114:TYR:CD1	1:A:117:LEU:HD21	0.89	2.03	19	19
1:A:111:ARG:HG2	1:A:113:LEU:HD22	0.88	1.44	16	5
1:A:127:LEU:HD22	1:A:156:LEU:HD21	0.88	1.44	9	4
1:A:11:LEU:CD2	1:A:123:GLY:HA3	0.88	1.98	10	3
1:A:76:VAL:HB	1:A:139:ILE:HD12	0.88	1.43	5	13
1:A:78:CYS:HB3	1:A:140:VAL:O	0.88	1.68	8	19
1:A:142:ALA:HB1	1:A:148:VAL:HG21	0.87	1.44	7	11
1:A:122:LEU:HD23	1:A:126:PRO:O	0.87	1.70	10	10
1:A:156:LEU:O	1:A:159:VAL:HG22	0.87	1.70	8	15
1:A:137:VAL:CG2	1:A:166:VAL:HG13	0.86	1.99	11	13
1:A:55:LEU:HD13	1:A:202:GLN:HB3	0.86	1.45	10	9
1:A:171:ARG:HA	1:A:229:GLY:H	0.86	1.25	7	18
1:A:74:LEU:HD23	1:A:75:ASP:N	0.86	1.84	2	20
1:A:157:LEU:HD21	1:A:196:TRP:CE3	0.86	2.06	5	14
1:A:157:LEU:HG	1:A:236:LYS:HE3	0.86	1.45	2	1
1:A:143:LEU:HB2	1:A:170:THR:HG21	0.86	1.46	20	13
1:A:114:TYR:HD1	1:A:117:LEU:HD21	0.85	1.29	19	9
1:A:172:THR:HG22	1:A:230:ILE:CG2	0.85	2.01	16	5
1:A:34:TYR:HB3	2:A:300:SAH:SD	0.85	2.12	20	4
1:A:11:LEU:O	1:A:14:VAL:HG12	0.85	1.69	12	1
1:A:38:ALA:HA	2:A:300:SAH:HA	0.85	1.48	9	2
1:A:23:GLY:O	1:A:27:LEU:HG	0.85	1.71	16	10
1:A:98:VAL:HG11	1:A:128:PRO:HG2	0.84	1.48	1	10
1:A:77:ALA:CB	2:A:300:SAH:C4	0.84	2.55	1	16
1:A:129:ASP:OD2	1:A:159:VAL:HG11	0.84	1.72	16	9
1:A:78:CYS:HB2	1:A:142:ALA:HB2	0.84	1.47	18	4
1:A:231:ILE:HD12	1:A:233:LEU:CD1	0.84	2.02	4	5
1:A:52:ALA:HB1	1:A:169:THR:CG2	0.84	2.02	18	10
1:A:137:VAL:HG23	1:A:166:VAL:HG13	0.84	1.48	17	9
1:A:142:ALA:HB1	1:A:148:VAL:CG2	0.84	2.02	20	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:HD12	0.83	1.88	19	1
1:A:14:VAL:O	1:A:17:ARG:HG3	0.83	1.73	4	17
1:A:80:THR:O	1:A:83:VAL:HG12	0.83	1.72	16	3
1:A:130:PRO:O	1:A:159:VAL:HG22	0.83	1.72	12	5
1:A:11:LEU:HD13	1:A:12:PRO:CD	0.83	2.03	10	3
1:A:143:LEU:HD12	1:A:170:THR:CG2	0.83	2.04	15	3
1:A:74:LEU:HB3	1:A:137:VAL:HG22	0.83	1.51	12	2
1:A:202:GLN:HB2	1:A:231:ILE:HG23	0.82	1.51	20	6
1:A:137:VAL:CG1	1:A:166:VAL:HG13	0.82	2.03	15	5
1:A:87:LEU:HD21	1:A:92:PHE:CD2	0.82	2.09	8	8
1:A:80:THR:O	1:A:83:VAL:HG22	0.82	1.73	10	5
1:A:108:ALA:HB1	1:A:114:TYR:CD2	0.82	2.09	10	19
1:A:11:LEU:HG	1:A:147:GLN:O	0.82	1.73	10	1
1:A:172:THR:HG22	1:A:230:ILE:HB	0.82	1.51	15	3
1:A:111:ARG:CG	1:A:113:LEU:HD22	0.81	2.05	10	5
1:A:10:ARG:HB3	1:A:146:GLY:O	0.81	1.73	1	2
1:A:127:LEU:HG	1:A:156:LEU:HG	0.81	1.51	1	3
1:A:123:GLY:HA3	1:A:149:PRO:HD2	0.81	1.53	17	10
1:A:11:LEU:HD21	1:A:149:PRO:CD	0.81	2.06	10	3
1:A:14:VAL:HG11	1:A:121:THR:HG21	0.81	1.50	7	9
1:A:122:LEU:HD22	1:A:126:PRO:O	0.81	1.76	20	2
1:A:176:ASN:HB3	1:A:179:TYR:HB2	0.81	1.51	9	12
1:A:139:ILE:HD11	1:A:142:ALA:CB	0.81	2.05	12	12
1:A:168:LEU:HD11	1:A:232:TYR:CZ	0.81	2.11	10	11
1:A:169:THR:O	1:A:170:THR:OG1	0.81	1.99	9	13
1:A:167:CYS:SG	1:A:231:ILE:HD11	0.81	2.15	13	8
1:A:11:LEU:HD22	1:A:11:LEU:O	0.81	1.74	9	2
1:A:11:LEU:HD23	1:A:147:GLN:O	0.81	1.75	11	11
1:A:52:ALA:HB3	1:A:53:PRO:HD3	0.81	1.52	20	18
1:A:127:LEU:HD12	1:A:155:GLU:HB2	0.81	1.53	20	3
1:A:74:LEU:HD11	1:A:129:ASP:OD1	0.81	1.76	14	9
1:A:65:ARG:HD2	1:A:66:GLY:N	0.80	1.91	4	1
1:A:74:LEU:CB	1:A:137:VAL:HG12	0.80	2.06	20	11
1:A:170:THR:HG22	1:A:171:ARG:H	0.80	1.34	5	10
1:A:204:VAL:HG23	1:A:206:HIS:CD2	0.80	2.10	4	2
1:A:204:VAL:HG21	1:A:229:GLY:O	0.80	1.77	11	9
1:A:57:VAL:HG23	1:A:87:LEU:HD23	0.80	1.51	3	3
1:A:126:PRO:HB3	1:A:155:GLU:HG3	0.80	1.51	19	2
1:A:191:GLU:HA	1:A:196:TRP:O	0.80	1.76	6	20
1:A:69:HIS:CD2	1:A:93:LEU:HD22	0.80	2.11	2	4
1:A:14:VAL:HG11	1:A:121:THR:HB	0.80	1.53	19	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:131:GLU:HA	1:A:159:VAL:HA	0.80	1.53	5	19
1:A:187:LEU:HD23	1:A:234:TYR:OH	0.80	1.77	13	7
1:A:63:ALA:CB	1:A:199:LEU:HD13	0.79	2.07	6	3
1:A:124:GLN:HG3	1:A:149:PRO:HG2	0.79	1.53	16	2
1:A:10:ARG:HB2	1:A:146:GLY:O	0.79	1.76	15	3
1:A:84:ALA:HA	1:A:87:LEU:HD12	0.79	1.52	3	7
1:A:11:LEU:CB	2:A:300:SAH:HN61	0.79	1.91	10	1
1:A:42:ASP:O	1:A:45:VAL:HG22	0.79	1.78	1	20
1:A:14:VAL:O	1:A:18:VAL:HG23	0.79	1.76	16	11
1:A:124:GLN:HG3	1:A:149:PRO:CG	0.79	2.08	16	1
1:A:74:LEU:HD11	1:A:129:ASP:OD2	0.79	1.77	11	6
1:A:11:LEU:HD22	1:A:12:PRO:HD3	0.78	1.54	10	1
1:A:24:ILE:HA	1:A:27:LEU:HD13	0.78	1.54	2	2
1:A:140:VAL:HG13	1:A:169:THR:CG2	0.78	2.08	13	5
1:A:74:LEU:HD22	1:A:156:LEU:HD11	0.78	1.55	17	1
1:A:11:LEU:HD12	1:A:11:LEU:H	0.78	1.39	19	2
1:A:17:ARG:NH1	1:A:27:LEU:HD22	0.78	1.94	1	2
1:A:121:THR:O	1:A:122:LEU:HD12	0.78	1.77	1	2
1:A:74:LEU:HD12	1:A:134:PHE:HD2	0.78	1.38	16	20
1:A:143:LEU:HD12	1:A:170:THR:HB	0.77	1.56	8	13
1:A:17:ARG:HH11	1:A:27:LEU:HD22	0.77	1.39	1	1
1:A:198:CYS:HB2	1:A:234:TYR:CE1	0.77	2.14	15	14
1:A:11:LEU:HG	2:A:300:SAH:HN61	0.77	1.39	11	1
1:A:143:LEU:HD21	1:A:168:LEU:CD1	0.77	2.10	1	8
1:A:74:LEU:HD12	1:A:134:PHE:CD2	0.77	2.15	15	20
1:A:15:LEU:HB2	1:A:121:THR:O	0.77	1.80	20	9
1:A:98:VAL:CG2	1:A:127:LEU:HD23	0.77	2.09	2	2
1:A:111:ARG:CG	1:A:113:LEU:HD23	0.76	2.10	15	9
1:A:50:TYR:HA	1:A:204:VAL:CG1	0.76	2.11	6	2
1:A:48:LEU:HD13	1:A:50:TYR:OH	0.76	1.79	1	1
1:A:107:GLN:O	1:A:111:ARG:HB2	0.76	1.80	1	19
1:A:72:LEU:O	1:A:134:PHE:HB3	0.76	1.80	10	20
1:A:204:VAL:HG23	1:A:206:HIS:ND1	0.76	1.95	11	6
1:A:87:LEU:HD12	1:A:113:LEU:HD12	0.76	1.54	2	4
1:A:14:VAL:HG11	1:A:121:THR:CB	0.76	2.11	19	3
1:A:55:LEU:HB3	1:A:202:GLN:HG2	0.76	1.57	9	4
1:A:166:VAL:HG21	1:A:236:LYS:HE2	0.75	1.57	2	1
1:A:125:GLU:HG3	1:A:126:PRO:HD2	0.75	1.57	15	3
1:A:129:ASP:OD1	1:A:159:VAL:HG21	0.75	1.79	20	6
1:A:171:ARG:HG3	1:A:174:PRO:HG3	0.75	1.57	6	2
1:A:76:VAL:CB	1:A:139:ILE:HD12	0.75	2.11	5	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:168:LEU:HD11	1:A:232:TYR:OH	0.75	1.81	10	11
1:A:157:LEU:HG	1:A:166:VAL:HG21	0.75	1.57	8	9
1:A:76:VAL:CG2	1:A:156:LEU:HD21	0.75	2.12	11	2
1:A:129:ASP:OD2	1:A:159:VAL:HG21	0.75	1.82	15	10
1:A:11:LEU:HG	1:A:12:PRO:CD	0.75	2.11	6	4
1:A:88:GLN:HG3	1:A:113:LEU:HD11	0.75	1.59	6	2
1:A:78:CYS:CB	1:A:142:ALA:HB2	0.75	2.11	18	3
1:A:10:ARG:HD3	1:A:34:TYR:OH	0.75	1.82	13	1
1:A:206:HIS:CE1	1:A:230:ILE:HD12	0.75	2.17	14	2
1:A:52:ALA:O	1:A:56:ALA:CB	0.74	2.35	1	13
1:A:98:VAL:HG11	1:A:128:PRO:CG	0.74	2.12	12	19
1:A:17:ARG:CZ	1:A:27:LEU:HD22	0.74	2.12	16	4
1:A:88:GLN:CA	1:A:113:LEU:HD11	0.74	2.13	2	5
1:A:48:LEU:O	1:A:205:ASP:HB3	0.74	1.82	9	1
1:A:55:LEU:HD23	1:A:202:GLN:HB3	0.74	1.59	1	2
1:A:137:VAL:HG22	1:A:166:VAL:HG22	0.74	1.57	17	7
1:A:11:LEU:HD12	1:A:12:PRO:N	0.74	1.98	8	4
1:A:29:CYS:O	1:A:32:ARG:HG2	0.74	1.83	20	1
1:A:68:PRO:HB2	1:A:92:PHE:HA	0.74	1.60	12	20
1:A:129:ASP:OD1	1:A:159:VAL:HG11	0.74	1.83	11	4
1:A:14:VAL:HG21	1:A:121:THR:CG2	0.73	2.13	15	1
1:A:74:LEU:HA	1:A:96:GLN:O	0.73	1.83	16	20
1:A:204:VAL:CG2	1:A:230:ILE:HA	0.73	2.13	7	8
1:A:139:ILE:CD1	1:A:142:ALA:HB3	0.73	2.12	12	12
1:A:15:LEU:HB2	1:A:122:LEU:CD1	0.73	2.13	19	3
1:A:206:HIS:CD2	1:A:230:ILE:HD11	0.73	2.18	17	2
1:A:77:ALA:CB	2:A:300:SAH:N3	0.73	2.51	17	13
1:A:204:VAL:HG23	1:A:230:ILE:HA	0.73	1.60	15	6
1:A:204:VAL:HG11	1:A:229:GLY:O	0.73	1.83	19	3
1:A:17:ARG:NE	1:A:27:LEU:HD22	0.73	1.99	4	2
1:A:98:VAL:HG11	1:A:128:PRO:HG3	0.73	1.60	14	8
1:A:52:ALA:O	1:A:56:ALA:N	0.73	2.20	6	20
1:A:157:LEU:HA	1:A:236:LYS:HE3	0.73	1.61	13	2
1:A:75:ASP:HB2	1:A:114:TYR:CE1	0.72	2.19	9	14
1:A:75:ASP:HB3	1:A:114:TYR:HE1	0.72	1.44	18	4
1:A:143:LEU:HD22	1:A:153:ILE:HD11	0.72	1.59	17	2
1:A:52:ALA:CB	1:A:169:THR:HG21	0.72	2.14	6	5
1:A:34:TYR:HB3	2:A:300:SAH:HG2	0.72	1.58	4	3
1:A:104:MET:HG3	2:A:300:SAH:O3'	0.72	1.84	17	8
1:A:11:LEU:CG	1:A:12:PRO:HD3	0.72	2.11	8	5
1:A:48:LEU:HD13	1:A:50:TYR:CZ	0.72	2.20	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:153:ILE:HA	1:A:156:LEU:HD13	0.72	1.62	5	6
1:A:144:SER:O	1:A:145:GLU:CG	0.71	2.36	2	7
1:A:154:PRO:HA	1:A:157:LEU:HD13	0.71	1.60	11	8
1:A:173:ASN:HB3	1:A:177:LEU:HD13	0.71	1.61	3	1
1:A:31:LEU:HD13	1:A:102:PRO:HD3	0.71	1.62	11	8
1:A:102:PRO:O	1:A:106:LYS:HG3	0.71	1.85	1	19
1:A:88:GLN:HB2	1:A:113:LEU:HD11	0.71	1.62	13	12
1:A:169:THR:HB	1:A:231:ILE:HG12	0.71	1.62	19	1
1:A:197:GLU:HG3	1:A:240:VAL:HG11	0.71	1.61	20	1
1:A:11:LEU:HD13	1:A:12:PRO:N	0.71	2.00	9	1
1:A:75:ASP:OD2	1:A:138:ILE:HG22	0.71	1.86	9	3
1:A:78:CYS:SG	1:A:142:ALA:HB2	0.71	2.24	12	13
1:A:17:ARG:NH1	1:A:18:VAL:HG12	0.71	2.00	1	1
1:A:202:GLN:HB2	1:A:231:ILE:CG2	0.71	2.15	10	15
1:A:194:GLY:HA2	1:A:238:GLU:O	0.71	1.84	3	8
1:A:11:LEU:HD11	1:A:123:GLY:N	0.71	2.00	9	1
1:A:204:VAL:HG21	1:A:229:GLY:C	0.71	2.07	14	3
2:A:300:SAH:CB	2:A:300:SAH:H4'	0.71	2.16	9	2
1:A:129:ASP:CG	1:A:159:VAL:HG21	0.71	2.05	2	2
1:A:147:GLN:OE1	2:A:300:SAH:H8	0.71	1.86	10	2
1:A:11:LEU:HD21	1:A:147:GLN:O	0.71	1.86	18	1
1:A:88:GLN:NE2	1:A:113:LEU:HD12	0.70	2.00	3	2
1:A:191:GLU:HB3	1:A:240:VAL:HG21	0.70	1.63	4	1
1:A:11:LEU:CD2	1:A:149:PRO:HD3	0.70	2.15	6	4
1:A:85:VAL:HG22	1:A:111:ARG:NE	0.70	2.01	2	8
1:A:202:GLN:O	1:A:231:ILE:HG22	0.70	1.86	15	4
1:A:114:TYR:CD1	1:A:117:LEU:HD11	0.70	2.22	4	3
1:A:38:ALA:HB3	1:A:39:PRO:HD3	0.70	1.62	17	9
1:A:76:VAL:HG21	1:A:139:ILE:HD12	0.70	1.63	11	2
1:A:138:ILE:HG13	1:A:167:CYS:HB3	0.70	1.61	16	14
1:A:198:CYS:HB3	1:A:234:TYR:CE1	0.70	2.22	4	5
1:A:11:LEU:HD21	1:A:149:PRO:HD3	0.70	1.61	10	3
1:A:197:GLU:HB3	1:A:235:ARG:HB2	0.70	1.63	2	1
1:A:18:VAL:HG23	1:A:27:LEU:CD1	0.70	2.17	7	2
1:A:63:ALA:HB1	1:A:199:LEU:HD23	0.70	1.61	15	1
1:A:168:LEU:HD21	1:A:232:TYR:CE2	0.70	2.21	20	6
1:A:178:PRO:O	1:A:181:GLU:HG2	0.70	1.87	4	18
1:A:131:GLU:HG2	1:A:158:ARG:HG3	0.70	1.62	14	1
1:A:172:THR:HG21	1:A:230:ILE:HD12	0.70	1.64	17	3
1:A:55:LEU:HD13	1:A:202:GLN:HG2	0.70	1.62	6	2
1:A:11:LEU:HD13	1:A:122:LEU:HA	0.70	1.64	17	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:123:GLY:CA	1:A:149:PRO:HD2	0.69	2.17	13	10
1:A:102:PRO:O	1:A:106:LYS:HG2	0.69	1.85	17	1
2:A:300:SAH:H4'	2:A:300:SAH:HB2	0.69	1.64	9	1
1:A:204:VAL:HG21	1:A:230:ILE:CA	0.69	2.16	18	9
1:A:231:ILE:HD13	1:A:232:TYR:N	0.69	2.02	9	10
1:A:11:LEU:CD1	1:A:11:LEU:N	0.69	2.55	10	1
1:A:155:GLU:O	1:A:158:ARG:HG2	0.69	1.87	11	1
1:A:137:VAL:CG1	1:A:166:VAL:HG22	0.69	2.14	13	1
1:A:162:PRO:HB3	1:A:237:GLN:HB3	0.69	1.65	19	15
1:A:11:LEU:HD22	1:A:11:LEU:C	0.69	2.07	9	2
1:A:75:ASP:OD1	1:A:138:ILE:HG23	0.69	1.88	12	5
1:A:161:LYS:HG3	1:A:162:PRO:HD2	0.69	1.64	10	3
1:A:127:LEU:HD12	1:A:156:LEU:HG	0.69	1.63	19	1
1:A:14:VAL:CG1	1:A:121:THR:HG21	0.69	2.17	4	3
1:A:73:ILE:HG13	1:A:92:PHE:CD2	0.69	2.23	2	12
1:A:104:MET:CG	2:A:300:SAH:O3'	0.68	2.41	17	3
1:A:127:LEU:HD22	1:A:156:LEU:CD2	0.68	2.18	3	3
1:A:232:TYR:HB3	1:A:234:TYR:CE2	0.68	2.22	6	2
1:A:177:LEU:HB2	1:A:178:PRO:HD3	0.68	1.66	9	11
1:A:122:LEU:HD23	1:A:125:GLU:HB2	0.68	1.64	1	2
1:A:133:THR:HG22	1:A:134:PHE:CD1	0.68	2.24	9	19
1:A:231:ILE:HD12	1:A:233:LEU:HD11	0.68	1.65	3	5
1:A:83:VAL:O	1:A:87:LEU:HG	0.68	1.88	20	7
1:A:84:ALA:HB3	1:A:113:LEU:HD23	0.68	1.66	3	2
1:A:176:ASN:O	1:A:179:TYR:HB3	0.68	1.88	10	6
1:A:194:GLY:O	1:A:237:GLN:HA	0.68	1.89	3	7
1:A:15:LEU:HA	1:A:18:VAL:HG12	0.68	1.66	10	5
1:A:11:LEU:HD11	1:A:147:GLN:O	0.68	1.87	18	1
1:A:150:CYS:O	1:A:153:ILE:HG13	0.68	1.89	11	3
1:A:133:THR:HG22	1:A:134:PHE:CE1	0.67	2.24	5	19
1:A:155:GLU:O	1:A:159:VAL:HG13	0.67	1.89	6	7
1:A:15:LEU:HB2	1:A:122:LEU:HD13	0.67	1.66	12	3
1:A:12:PRO:HA	1:A:122:LEU:HA	0.67	1.66	20	4
1:A:11:LEU:HD23	1:A:147:GLN:HA	0.67	1.66	7	7
1:A:76:VAL:CG2	1:A:139:ILE:HD12	0.67	2.19	11	5
1:A:108:ALA:HB1	1:A:114:TYR:CE2	0.67	2.25	20	17
1:A:176:ASN:HB3	1:A:179:TYR:CG	0.67	2.24	12	8
1:A:164:GLY:C	1:A:165:LEU:HD22	0.67	2.10	5	12
1:A:11:LEU:HB3	2:A:300:SAH:HN61	0.67	1.48	10	1
1:A:127:LEU:HD11	1:A:156:LEU:HD12	0.67	1.66	11	1
1:A:98:VAL:HG12	1:A:118:SER:HB2	0.67	1.64	1	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:172:THR:CG2	1:A:230:ILE:HB	0.67	2.20	18	5
1:A:199:LEU:HG	1:A:200:VAL:HG12	0.67	1.67	4	1
1:A:11:LEU:H	1:A:11:LEU:CD1	0.67	2.01	10	2
1:A:60:LEU:HD22	1:A:92:PHE:CZ	0.67	2.24	15	5
1:A:151:SER:O	1:A:154:PRO:HD2	0.67	1.89	12	12
1:A:170:THR:HG22	1:A:171:ARG:N	0.67	2.05	1	14
1:A:14:VAL:HG13	1:A:17:ARG:CZ	0.67	2.19	13	4
1:A:63:ALA:HB1	1:A:199:LEU:CD2	0.67	2.20	4	4
2:A:300:SAH:HG2	2:A:300:SAH:O3'	0.67	1.89	10	1
1:A:14:VAL:CB	1:A:121:THR:OG1	0.67	2.40	1	3
1:A:81:GLY:HA3	1:A:107:GLN:HB3	0.67	1.65	1	10
1:A:206:HIS:HB3	1:A:228:SER:O	0.67	1.90	14	12
1:A:230:ILE:HG23	1:A:232:TYR:CE1	0.67	2.24	12	4
1:A:196:TRP:HB2	1:A:235:ARG:O	0.66	1.90	15	18
1:A:131:GLU:HG2	1:A:158:ARG:HG2	0.66	1.66	19	1
1:A:76:VAL:HG12	1:A:77:ALA:H	0.66	1.50	5	19
1:A:56:ALA:HB2	1:A:231:ILE:HG13	0.66	1.67	12	2
1:A:173:ASN:N	1:A:174:PRO:HD2	0.66	2.05	17	2
1:A:141:GLY:O	1:A:147:GLN:NE2	0.66	2.28	17	2
1:A:168:LEU:C	1:A:168:LEU:HD12	0.66	2.10	7	1
1:A:56:ALA:HB2	1:A:231:ILE:CG1	0.66	2.20	12	1
1:A:127:LEU:HD13	1:A:156:LEU:HG	0.66	1.68	20	3
1:A:101:SER:OG	2:A:300:SAH:H3'	0.66	1.90	17	2
1:A:102:PRO:O	1:A:106:LYS:N	0.66	2.27	5	20
1:A:88:GLN:CB	1:A:113:LEU:HD11	0.66	2.20	2	5
1:A:39:PRO:HD3	1:A:103:GLU:OE1	0.66	1.90	2	1
1:A:191:GLU:HG2	1:A:197:GLU:HA	0.66	1.67	9	8
1:A:195:VAL:O	1:A:237:GLN:N	0.66	2.29	11	19
1:A:170:THR:CG2	1:A:171:ARG:H	0.66	2.04	1	14
1:A:45:VAL:HA	1:A:48:LEU:HD12	0.66	1.67	8	2
1:A:161:LYS:O	1:A:236:LYS:HB3	0.66	1.91	12	4
1:A:75:ASP:O	1:A:97:GLY:HA3	0.65	1.91	20	15
1:A:111:ARG:HG3	1:A:113:LEU:HD13	0.65	1.66	1	5
1:A:206:HIS:HB3	1:A:229:GLY:O	0.65	1.90	1	8
1:A:44:ASP:O	1:A:48:LEU:HD13	0.65	1.91	20	13
1:A:55:LEU:HD22	1:A:202:GLN:HB3	0.65	1.68	14	1
1:A:199:LEU:HD21	1:A:235:ARG:NE	0.65	2.06	8	4
1:A:172:THR:HB	1:A:230:ILE:HG21	0.65	1.68	12	2
1:A:76:VAL:HG21	1:A:156:LEU:HD21	0.65	1.67	5	6
1:A:76:VAL:HG13	1:A:127:LEU:HD21	0.65	1.69	14	2
1:A:107:GLN:O	1:A:111:ARG:CB	0.65	2.45	5	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:176:ASN:HB3	1:A:179:TYR:CB	0.65	2.22	11	15
1:A:15:LEU:HD12	1:A:18:VAL:CG1	0.65	2.21	10	1
1:A:104:MET:HG3	2:A:300:SAH:O2'	0.65	1.91	12	1
1:A:73:ILE:CD1	1:A:136:ALA:HB3	0.65	2.22	17	11
1:A:121:THR:CB	2:A:300:SAH:N1	0.65	2.59	8	6
1:A:77:ALA:O	1:A:104:MET:HG2	0.65	1.91	15	3
1:A:14:VAL:HG21	1:A:121:THR:HG21	0.65	1.66	15	1
1:A:202:GLN:HB2	1:A:231:ILE:HG22	0.65	1.69	19	1
1:A:11:LEU:H	1:A:11:LEU:HD22	0.65	1.51	18	1
1:A:55:LEU:HA	1:A:58:ASP:OD2	0.65	1.92	18	1
1:A:88:GLN:HG3	1:A:113:LEU:CD1	0.65	2.22	6	2
1:A:157:LEU:CD1	1:A:166:VAL:HG11	0.65	2.22	6	1
1:A:56:ALA:CB	1:A:231:ILE:HD11	0.65	2.21	12	1
1:A:88:GLN:HB2	1:A:113:LEU:CD2	0.65	2.19	4	5
1:A:151:SER:O	1:A:154:PRO:HG2	0.65	1.91	8	8
1:A:87:LEU:CD1	1:A:92:PHE:HB2	0.64	2.21	6	7
1:A:12:PRO:HG3	1:A:123:GLY:HA3	0.64	1.68	4	2
1:A:191:GLU:HB3	1:A:240:VAL:HG13	0.64	1.67	20	1
1:A:232:TYR:C	1:A:233:LEU:HD12	0.64	2.13	2	10
1:A:60:LEU:HD22	1:A:92:PHE:CE2	0.64	2.27	16	3
1:A:235:ARG:HD2	1:A:238:GLU:HG3	0.64	1.69	15	1
1:A:57:VAL:HG22	1:A:90:ARG:HG2	0.64	1.68	11	7
1:A:15:LEU:HD12	1:A:122:LEU:CD1	0.64	2.19	1	1
1:A:76:VAL:HG23	1:A:139:ILE:HB	0.64	1.67	11	13
1:A:52:ALA:CB	1:A:231:ILE:HB	0.64	2.21	16	10
1:A:23:GLY:O	1:A:27:LEU:HB2	0.64	1.92	6	3
1:A:84:ALA:HB1	1:A:113:LEU:CB	0.64	2.23	17	10
1:A:100:GLY:N	2:A:300:SAH:N3	0.64	2.46	5	13
1:A:14:VAL:HG21	1:A:121:THR:CB	0.64	2.22	6	1
1:A:191:GLU:OE2	1:A:240:VAL:HG21	0.64	1.92	18	1
1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CD1	0.64	2.60	19	1
1:A:143:LEU:HB2	1:A:170:THR:CB	0.64	2.23	11	2
1:A:74:LEU:HD13	1:A:156:LEU:CD1	0.64	2.23	17	1
1:A:168:LEU:HD21	1:A:232:TYR:OH	0.64	1.93	7	3
1:A:123:GLY:O	1:A:152:ALA:CB	0.64	2.45	9	4
1:A:171:ARG:HG2	1:A:228:SER:HB2	0.64	1.68	20	9
1:A:77:ALA:HB1	2:A:300:SAH:O2'	0.64	1.93	18	2
1:A:69:HIS:CG	1:A:93:LEU:HD12	0.63	2.28	18	5
1:A:77:ALA:HA	1:A:99:ASP:HA	0.63	1.71	1	15
1:A:140:VAL:HG13	1:A:169:THR:HG23	0.63	1.69	13	2
1:A:201:THR:HG23	1:A:231:ILE:O	0.63	1.93	14	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:LEU:HD21	2:A:300:SAH:H5'1	0.63	1.70	3	1
1:A:12:PRO:HG3	1:A:123:GLY:CA	0.63	2.23	4	2
1:A:74:LEU:HB3	1:A:137:VAL:CG1	0.63	2.20	8	11
1:A:76:VAL:HG23	1:A:139:ILE:HG12	0.63	1.68	7	1
1:A:11:LEU:HD23	1:A:122:LEU:O	0.63	1.93	10	1
1:A:176:ASN:HB2	1:A:179:TYR:CG	0.63	2.29	18	1
1:A:71:ALA:HB1	1:A:135:ASP:HB2	0.63	1.69	6	10
1:A:28:ALA:O	1:A:32:ARG:HG3	0.63	1.94	13	6
1:A:74:LEU:HD11	1:A:129:ASP:CG	0.63	2.14	14	11
1:A:87:LEU:HG	1:A:92:PHE:CD2	0.63	2.28	15	2
1:A:172:THR:HG22	1:A:230:ILE:HG22	0.63	1.69	10	4
1:A:41:TYR:HB2	2:A:300:SAH:HN2	0.63	1.53	11	1
1:A:11:LEU:HD21	1:A:149:PRO:CG	0.63	2.24	12	2
1:A:74:LEU:O	1:A:137:VAL:HA	0.63	1.93	3	18
1:A:99:ASP:HB2	1:A:105:LEU:CD2	0.63	2.24	7	18
1:A:96:GLN:HG2	1:A:116:HIS:HB3	0.63	1.70	6	7
1:A:15:LEU:HB2	1:A:122:LEU:HD11	0.63	1.70	19	2
1:A:121:THR:HB	2:A:300:SAH:N1	0.63	2.09	16	4
1:A:143:LEU:CD1	1:A:170:THR:HB	0.62	2.23	1	12
1:A:206:HIS:CB	1:A:228:SER:O	0.62	2.47	10	10
1:A:154:PRO:O	1:A:158:ARG:HG3	0.62	1.92	17	6
1:A:166:VAL:CG2	1:A:236:LYS:HE2	0.62	2.23	2	3
1:A:52:ALA:O	1:A:56:ALA:HB2	0.62	1.94	19	8
1:A:231:ILE:HD12	1:A:233:LEU:HD12	0.62	1.71	4	3
1:A:51:ARG:HB3	1:A:55:LEU:HD13	0.62	1.71	7	1
1:A:85:VAL:HG22	1:A:111:ARG:HD2	0.62	1.71	8	4
1:A:60:LEU:HD12	1:A:167:CYS:SG	0.62	2.33	14	1
1:A:72:LEU:HD12	1:A:134:PHE:CD1	0.62	2.29	19	20
1:A:127:LEU:HD23	1:A:155:GLU:HB2	0.62	1.70	4	3
1:A:191:GLU:HG3	1:A:197:GLU:HA	0.62	1.70	3	9
1:A:172:THR:HG22	1:A:173:ASN:ND2	0.62	2.08	9	2
1:A:121:THR:HG22	2:A:300:SAH:N1	0.62	2.09	10	2
1:A:199:LEU:HD21	1:A:235:ARG:CD	0.62	2.24	8	5
1:A:84:ALA:O	1:A:87:LEU:HB3	0.62	1.93	18	5
1:A:127:LEU:HD23	1:A:155:GLU:HB3	0.62	1.70	6	1
1:A:77:ALA:HB1	2:A:300:SAH:N3	0.62	2.10	16	7
1:A:56:ALA:HB2	1:A:231:ILE:CD1	0.62	2.24	12	1
1:A:50:TYR:O	1:A:53:PRO:HD2	0.62	1.94	12	9
1:A:173:ASN:HA	1:A:180:LYS:HG3	0.62	1.71	3	1
1:A:172:THR:HB	1:A:230:ILE:CG2	0.62	2.25	6	2
1:A:171:ARG:HA	1:A:228:SER:HB2	0.62	1.70	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:134:PHE:O	1:A:160:THR:HA	0.62	1.95	15	8
1:A:171:ARG:HA	1:A:229:GLY:N	0.62	2.05	7	4
1:A:52:ALA:HB1	1:A:231:ILE:HG12	0.62	1.71	3	5
1:A:142:ALA:O	1:A:148:VAL:HB	0.62	1.95	10	3
1:A:72:LEU:HD22	1:A:94:GLN:HB3	0.62	1.70	18	14
1:A:204:VAL:HG11	1:A:230:ILE:HA	0.62	1.71	7	9
1:A:106:LYS:O	1:A:110:ALA:HB3	0.61	1.95	1	15
1:A:170:THR:CG2	1:A:171:ARG:N	0.61	2.63	20	15
1:A:11:LEU:HD13	1:A:123:GLY:N	0.61	2.09	6	2
1:A:122:LEU:N	2:A:300:SAH:HN62	0.61	1.93	11	6
1:A:144:SER:O	1:A:145:GLU:HB2	0.61	1.95	10	5
1:A:78:CYS:HB2	1:A:139:ILE:HD11	0.61	1.72	15	4
1:A:147:GLN:OE1	2:A:300:SAH:H5'2	0.61	1.96	20	1
1:A:64:PHE:HB2	1:A:165:LEU:HD22	0.61	1.71	1	2
1:A:173:ASN:OD1	1:A:177:LEU:O	0.61	2.18	3	1
1:A:109:ARG:HD3	1:A:117:LEU:HB2	0.61	1.73	14	1
1:A:37:TRP:HB2	2:A:300:SAH:HN2	0.61	1.54	17	1
1:A:184:GLU:HA	1:A:187:LEU:HD22	0.61	1.73	8	2
1:A:76:VAL:HG21	1:A:156:LEU:CD1	0.61	2.25	3	2
1:A:14:VAL:HG11	1:A:121:THR:OG1	0.61	1.95	6	3
1:A:143:LEU:O	1:A:170:THR:OG1	0.61	2.18	11	2
1:A:121:THR:HG22	2:A:300:SAH:C2	0.61	2.26	10	5
1:A:144:SER:HB2	1:A:150:CYS:H	0.61	1.56	15	13
1:A:74:LEU:HD13	1:A:156:LEU:HD12	0.61	1.70	17	1
1:A:71:ALA:O	1:A:94:GLN:HB2	0.61	1.95	8	4
1:A:143:LEU:HD11	1:A:168:LEU:HD13	0.61	1.72	18	3
1:A:204:VAL:CG2	1:A:229:GLY:O	0.61	2.48	11	8
1:A:11:LEU:HD12	1:A:121:THR:HG22	0.61	1.72	3	2
1:A:143:LEU:HD12	1:A:170:THR:HG21	0.61	1.72	15	2
1:A:126:PRO:HA	1:A:155:GLU:HG2	0.61	1.73	13	1
1:A:86:GLU:O	1:A:90:ARG:HD3	0.61	1.96	17	3
1:A:87:LEU:HD22	1:A:92:PHE:CD2	0.61	2.31	20	4
1:A:38:ALA:CA	2:A:300:SAH:HA	0.61	2.24	9	1
1:A:176:ASN:HB3	1:A:179:TYR:HB3	0.60	1.70	11	5
1:A:144:SER:O	1:A:145:GLU:HB3	0.60	1.96	17	4
1:A:196:TRP:CZ3	1:A:234:TYR:CD2	0.60	2.89	6	1
1:A:170:THR:HG23	1:A:171:ARG:N	0.60	2.11	15	1
1:A:24:ILE:HD13	1:A:27:LEU:HD12	0.60	1.73	20	1
1:A:11:LEU:HD12	1:A:121:THR:CB	0.60	2.25	1	1
1:A:172:THR:HG22	1:A:230:ILE:HG21	0.60	1.73	4	1
1:A:173:ASN:N	1:A:174:PRO:CD	0.60	2.63	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:55:LEU:HG	1:A:202:GLN:HG2	0.60	1.74	1	2
1:A:85:VAL:HA	1:A:113:LEU:HD21	0.60	1.72	10	4
1:A:196:TRP:CZ3	1:A:234:TYR:CG	0.60	2.89	6	14
1:A:56:ALA:HB1	1:A:167:CYS:SG	0.60	2.36	7	10
1:A:11:LEU:HD12	1:A:11:LEU:C	0.60	2.17	12	3
1:A:167:CYS:SG	1:A:233:LEU:HD11	0.60	2.37	20	3
1:A:14:VAL:O	1:A:18:VAL:HG13	0.60	1.97	15	2
1:A:171:ARG:O	1:A:174:PRO:HD3	0.60	1.95	3	4
1:A:183:LEU:O	1:A:183:LEU:HD12	0.60	1.97	2	18
1:A:41:TYR:CD1	2:A:300:SAH:HA	0.60	2.32	3	2
1:A:153:ILE:HG21	1:A:168:LEU:HD22	0.60	1.72	5	1
2:A:300:SAH:HB1	2:A:300:SAH:H4'	0.60	1.72	8	1
1:A:139:ILE:O	1:A:168:LEU:HA	0.60	1.97	16	11
1:A:11:LEU:HG	2:A:300:SAH:N6	0.60	2.12	11	1
1:A:77:ALA:HB3	2:A:300:SAH:N9	0.60	2.12	20	5
1:A:191:GLU:HG2	1:A:240:VAL:HG21	0.60	1.73	3	1
1:A:73:ILE:HD12	1:A:136:ALA:HB3	0.60	1.72	4	9
1:A:98:VAL:HG21	1:A:128:PRO:CG	0.60	2.27	13	3
1:A:94:GLN:HA	1:A:115:HIS:CD2	0.59	2.32	17	10
1:A:123:GLY:HA2	1:A:149:PRO:HD2	0.59	1.74	13	6
1:A:140:VAL:HG13	1:A:169:THR:OG1	0.59	1.97	4	5
1:A:75:ASP:HB2	1:A:114:TYR:HE1	0.59	1.57	16	7
1:A:87:LEU:CD1	1:A:113:LEU:HD12	0.59	2.27	2	2
1:A:143:LEU:HB2	1:A:170:THR:CG2	0.59	2.26	10	5
1:A:157:LEU:O	1:A:236:LYS:HE2	0.59	1.98	3	5
1:A:133:THR:HG22	1:A:134:PHE:CG	0.59	2.32	15	4
1:A:127:LEU:HD12	1:A:155:GLU:CG	0.59	2.27	9	2
1:A:198:CYS:HA	1:A:234:TYR:HA	0.59	1.74	7	1
1:A:168:LEU:HD11	1:A:232:TYR:CE2	0.59	2.32	9	1
1:A:123:GLY:C	1:A:149:PRO:HG2	0.59	2.17	18	4
1:A:160:THR:HB	1:A:236:LYS:HG3	0.59	1.73	2	3
1:A:131:GLU:HG3	1:A:158:ARG:O	0.59	1.96	11	6
1:A:199:LEU:HD11	1:A:235:ARG:HG3	0.59	1.75	10	4
1:A:35:ASP:OD2	1:A:101:SER:HB3	0.59	1.97	14	6
1:A:168:LEU:HD21	1:A:232:TYR:CZ	0.59	2.32	20	7
1:A:75:ASP:OD1	1:A:138:ILE:HG22	0.59	1.97	14	3
1:A:177:LEU:CB	1:A:178:PRO:HD3	0.59	2.28	3	2
1:A:122:LEU:CD1	1:A:125:GLU:HB3	0.59	2.28	7	4
1:A:35:ASP:HA	1:A:38:ALA:HB2	0.59	1.74	1	6
1:A:11:LEU:HD23	1:A:146:GLY:O	0.59	1.97	14	2
1:A:127:LEU:HD12	1:A:155:GLU:C	0.59	2.18	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:191:GLU:HG2	1:A:240:VAL:HB	0.59	1.74	11	2
1:A:55:LEU:HD23	1:A:202:GLN:HG2	0.59	1.75	12	1
1:A:11:LEU:HD22	1:A:149:PRO:HG3	0.59	1.75	19	1
1:A:52:ALA:O	1:A:56:ALA:HB3	0.58	1.97	1	1
1:A:84:ALA:C	1:A:113:LEU:HD23	0.58	2.19	5	3
1:A:138:ILE:HG23	1:A:138:ILE:O	0.58	1.98	15	20
1:A:84:ALA:HB1	1:A:113:LEU:HG	0.58	1.75	11	6
2:A:300:SAH:H4'	2:A:300:SAH:CB	0.58	2.27	8	1
1:A:84:ALA:CB	1:A:113:LEU:HD23	0.58	2.28	16	2
1:A:74:LEU:O	1:A:137:VAL:HG23	0.58	1.98	15	2
1:A:164:GLY:O	1:A:235:ARG:HA	0.58	1.97	6	9
1:A:11:LEU:CD2	1:A:149:PRO:CD	0.58	2.81	15	5
1:A:168:LEU:O	1:A:231:ILE:HG12	0.58	1.98	9	1
1:A:197:GLU:HB3	1:A:238:GLU:OE2	0.58	1.97	18	3
1:A:77:ALA:N	1:A:98:VAL:O	0.58	2.36	15	20
1:A:157:LEU:HD11	1:A:166:VAL:HG11	0.58	1.75	6	1
1:A:143:LEU:HB2	1:A:170:THR:OG1	0.58	1.98	11	1
1:A:51:ARG:HG3	1:A:55:LEU:HD13	0.58	1.73	18	1
1:A:157:LEU:CG	1:A:236:LYS:HE3	0.58	2.25	2	1
1:A:165:LEU:N	1:A:165:LEU:HD22	0.58	2.12	11	4
1:A:122:LEU:CG	1:A:125:GLU:HB2	0.58	2.28	11	6
1:A:41:TYR:HB2	2:A:300:SAH:N	0.58	2.12	11	1
1:A:166:VAL:HG21	1:A:236:LYS:CE	0.58	2.27	13	2
1:A:198:CYS:HA	1:A:234:TYR:CD1	0.58	2.33	2	1
1:A:199:LEU:HD13	1:A:235:ARG:CZ	0.58	2.29	18	1
1:A:143:LEU:CD2	1:A:168:LEU:HD13	0.58	2.25	7	1
1:A:122:LEU:HD22	1:A:125:GLU:HB2	0.58	1.74	17	1
1:A:26:ASP:O	1:A:29:CYS:HB2	0.58	1.98	12	12
1:A:157:LEU:CD2	1:A:196:TRP:CE3	0.58	2.85	12	16
1:A:196:TRP:CH2	1:A:234:TYR:CD1	0.58	2.92	11	10
1:A:41:TYR:CB	2:A:300:SAH:HN2	0.58	2.11	8	3
1:A:75:ASP:CB	1:A:114:TYR:CE1	0.58	2.87	8	9
1:A:127:LEU:HD12	1:A:155:GLU:CB	0.58	2.28	3	3
1:A:171:ARG:HB2	1:A:228:SER:HB3	0.58	1.76	15	1
1:A:81:GLY:O	1:A:85:VAL:HG23	0.58	1.98	16	14
1:A:170:THR:O	1:A:229:GLY:HA2	0.58	1.98	7	2
1:A:142:ALA:HB1	1:A:148:VAL:HG23	0.58	1.75	10	4
1:A:36:ASP:OD1	1:A:37:TRP:N	0.58	2.37	17	1
1:A:77:ALA:HB1	2:A:300:SAH:H1'	0.57	1.76	11	12
1:A:230:ILE:CG2	1:A:232:TYR:CE1	0.57	2.87	12	5
1:A:171:ARG:NE	1:A:174:PRO:HB3	0.57	2.14	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:77:ALA:CB	2:A:300:SAH:N9	0.57	2.68	3	7
1:A:169:THR:HB	1:A:231:ILE:CG1	0.57	2.29	19	1
1:A:75:ASP:HB3	1:A:114:TYR:CE1	0.57	2.33	11	5
1:A:23:GLY:O	1:A:26:ASP:OD1	0.57	2.21	15	2
1:A:84:ALA:HB1	1:A:113:LEU:CG	0.57	2.29	18	5
1:A:78:CYS:HB2	1:A:139:ILE:HG13	0.57	1.76	9	10
1:A:204:VAL:CG1	1:A:230:ILE:HA	0.57	2.29	7	4
1:A:86:GLU:O	1:A:90:ARG:CD	0.57	2.52	12	3
1:A:202:GLN:OE1	1:A:231:ILE:HG21	0.57	1.99	8	2
1:A:203:PRO:HA	1:A:230:ILE:HD11	0.57	1.76	14	1
1:A:127:LEU:HD21	1:A:152:ALA:HB1	0.57	1.76	16	1
1:A:57:VAL:HG12	1:A:90:ARG:HD3	0.57	1.74	15	1
1:A:172:THR:HG22	1:A:230:ILE:CB	0.57	2.30	16	3
1:A:199:LEU:HD13	1:A:235:ARG:HH22	0.57	1.59	15	1
1:A:206:HIS:ND1	1:A:230:ILE:HD11	0.57	2.15	5	1
1:A:230:ILE:HG22	1:A:232:TYR:CE1	0.57	2.35	14	1
1:A:12:PRO:CG	1:A:124:GLN:HB3	0.57	2.29	18	1
1:A:176:ASN:HB3	1:A:179:TYR:CD2	0.57	2.34	16	7
1:A:157:LEU:HB3	1:A:236:LYS:HD3	0.57	1.76	7	5
1:A:98:VAL:HG12	1:A:118:SER:HB3	0.57	1.77	6	2
1:A:139:ILE:HD11	1:A:156:LEU:HD13	0.56	1.75	7	1
1:A:160:THR:O	1:A:236:LYS:CD	0.56	2.52	18	4
1:A:15:LEU:HA	1:A:18:VAL:HG22	0.56	1.74	1	2
1:A:11:LEU:CD1	1:A:12:PRO:HD3	0.56	2.30	6	3
1:A:34:TYR:HB3	2:A:300:SAH:HB1	0.56	1.75	7	2
1:A:98:VAL:CG1	1:A:128:PRO:HG2	0.56	2.28	12	1
1:A:171:ARG:CD	1:A:174:PRO:HB3	0.56	2.30	18	1
1:A:52:ALA:HB3	1:A:53:PRO:CD	0.56	2.31	5	12
1:A:172:THR:HG23	1:A:230:ILE:HG21	0.56	1.77	1	2
1:A:72:LEU:HG	1:A:134:PHE:CD1	0.56	2.35	10	8
1:A:122:LEU:HG	1:A:125:GLU:HB2	0.56	1.76	18	4
1:A:196:TRP:CZ2	1:A:234:TYR:CE1	0.56	2.93	7	11
1:A:52:ALA:HB2	1:A:231:ILE:HB	0.56	1.77	9	3
1:A:144:SER:CA	1:A:149:PRO:HA	0.56	2.30	8	1
1:A:98:VAL:HG21	1:A:128:PRO:HG3	0.56	1.77	13	2
1:A:18:VAL:HG13	1:A:27:LEU:CD2	0.56	2.30	2	1
1:A:84:ALA:O	1:A:113:LEU:HG	0.56	2.01	17	9
1:A:137:VAL:HG22	1:A:166:VAL:HG13	0.56	1.72	11	2
1:A:31:LEU:HD22	1:A:100:GLY:O	0.56	2.00	17	2
1:A:147:GLN:HA	2:A:300:SAH:N7	0.56	2.15	17	1
1:A:157:LEU:CA	1:A:236:LYS:HE3	0.56	2.30	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:228:SER:O	1:A:229:GLY:O	0.56	2.23	7	2
1:A:49:LYS:HB2	1:A:205:ASP:OD2	0.56	2.01	4	1
1:A:85:VAL:HG22	1:A:111:ARG:CD	0.56	2.30	12	6
1:A:13:GLN:O	1:A:17:ARG:HG2	0.56	1.99	15	1
1:A:196:TRP:CE2	1:A:234:TYR:CD1	0.56	2.94	13	10
1:A:55:LEU:HD13	1:A:202:GLN:CB	0.56	2.30	13	7
1:A:231:ILE:CD1	1:A:233:LEU:HD12	0.56	2.31	19	2
1:A:17:ARG:NH1	1:A:30:LYS:HE2	0.56	2.16	7	1
1:A:204:VAL:HG11	1:A:230:ILE:CA	0.56	2.31	7	1
1:A:78:CYS:CA	1:A:139:ILE:HD11	0.56	2.30	15	4
1:A:88:GLN:CG	1:A:113:LEU:HD21	0.56	2.31	18	1
1:A:119:LEU:O	1:A:120:CYS:HB2	0.56	2.01	1	3
1:A:127:LEU:HD11	1:A:156:LEU:CD1	0.56	2.30	11	1
1:A:130:PRO:O	1:A:159:VAL:HG12	0.56	2.01	11	3
1:A:52:ALA:HB1	1:A:231:ILE:CG1	0.56	2.31	12	1
1:A:84:ALA:C	1:A:113:LEU:HG	0.56	2.21	18	5
1:A:87:LEU:CD2	1:A:92:PHE:CD2	0.56	2.89	18	4
1:A:41:TYR:CE1	2:A:300:SAH:C	0.56	2.89	14	2
1:A:162:PRO:HA	1:A:236:LYS:O	0.55	2.01	2	7
1:A:157:LEU:O	1:A:236:LYS:HD2	0.55	2.02	14	2
1:A:122:LEU:HG	1:A:125:GLU:O	0.55	2.01	2	3
1:A:58:ASP:HA	1:A:90:ARG:NE	0.55	2.15	6	5
1:A:153:ILE:N	1:A:154:PRO:HD2	0.55	2.16	7	9
1:A:173:ASN:CB	1:A:177:LEU:HD13	0.55	2.32	3	2
1:A:76:VAL:HG21	1:A:156:LEU:CD2	0.55	2.31	5	4
1:A:206:HIS:CE1	1:A:230:ILE:HD11	0.55	2.36	5	2
1:A:74:LEU:CB	1:A:137:VAL:HG22	0.55	2.28	12	1
1:A:87:LEU:CD2	1:A:113:LEU:HD12	0.55	2.31	15	1
1:A:169:THR:HG22	1:A:231:ILE:CG1	0.55	2.31	17	5
1:A:11:LEU:CD2	1:A:147:GLN:O	0.55	2.54	18	6
1:A:196:TRP:CE3	1:A:234:TYR:CG	0.55	2.94	6	1
1:A:197:GLU:CD	1:A:240:VAL:HG22	0.55	2.22	7	1
1:A:143:LEU:HD12	1:A:170:THR:CB	0.55	2.31	15	2
1:A:76:VAL:HG21	1:A:156:LEU:HD11	0.55	1.79	3	1
1:A:114:TYR:CG	1:A:117:LEU:HD21	0.55	2.36	15	3
1:A:143:LEU:HD11	1:A:168:LEU:CD1	0.55	2.31	15	2
1:A:143:LEU:HD21	1:A:153:ILE:HG12	0.55	1.78	12	1
1:A:51:ARG:HB2	1:A:204:VAL:HG13	0.55	1.78	13	1
1:A:15:LEU:HD13	1:A:122:LEU:HD11	0.55	1.78	17	1
1:A:142:ALA:O	1:A:143:LEU:HD23	0.55	2.00	11	5
1:A:88:GLN:CB	1:A:113:LEU:HD21	0.55	2.25	4	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:143:LEU:O	1:A:147:GLN:HG3	0.55	2.02	17	1
1:A:11:LEU:CG	1:A:147:GLN:O	0.55	2.54	18	1
1:A:151:SER:C	1:A:154:PRO:HD2	0.55	2.22	18	10
1:A:62:ARG:HG3	1:A:90:ARG:NH2	0.55	2.16	2	1
1:A:78:CYS:CB	1:A:139:ILE:HD11	0.55	2.31	15	4
1:A:11:LEU:CD1	1:A:147:GLN:O	0.55	2.54	18	1
1:A:50:TYR:CE1	1:A:229:GLY:HA3	0.55	2.36	18	1
1:A:99:ASP:OD2	1:A:105:LEU:HD23	0.55	2.02	5	2
1:A:49:LYS:HB3	1:A:205:ASP:OD2	0.55	2.01	20	1
1:A:157:LEU:HD21	1:A:196:TRP:CZ3	0.55	2.36	18	8
1:A:199:LEU:HD21	1:A:235:ARG:HE	0.55	1.60	2	1
1:A:11:LEU:HD13	1:A:122:LEU:C	0.55	2.22	12	1
1:A:60:LEU:O	1:A:64:PHE:N	0.55	2.40	15	13
1:A:14:VAL:HG22	1:A:30:LYS:NZ	0.55	2.17	7	2
1:A:197:GLU:HB3	1:A:238:GLU:OE1	0.55	2.01	7	5
1:A:122:LEU:HD21	1:A:125:GLU:HG2	0.55	1.78	19	2
1:A:161:LYS:CG	1:A:162:PRO:HD2	0.55	2.31	19	3
1:A:172:THR:OG1	1:A:230:ILE:HB	0.55	2.02	19	2
1:A:176:ASN:HB3	1:A:179:TYR:CD1	0.55	2.37	14	3
1:A:95:VAL:HG11	1:A:114:TYR:CE1	0.54	2.37	1	1
1:A:187:LEU:HG	1:A:234:TYR:OH	0.54	2.02	6	1
1:A:157:LEU:HD23	1:A:196:TRP:CE3	0.54	2.37	18	2
1:A:127:LEU:HD23	1:A:155:GLU:CB	0.54	2.32	4	2
1:A:204:VAL:HG23	1:A:206:HIS:H	0.54	1.63	14	1
1:A:164:GLY:O	1:A:165:LEU:HD12	0.54	2.01	7	2
1:A:75:ASP:OD2	1:A:138:ILE:HG23	0.54	2.03	13	4
1:A:77:ALA:CB	2:A:300:SAH:H1'	0.54	2.32	18	8
1:A:34:TYR:O	2:A:300:SAH:HB2	0.54	2.02	16	2
1:A:45:VAL:HB	1:A:50:TYR:CD1	0.54	2.38	10	1
1:A:11:LEU:N	1:A:12:PRO:HD2	0.54	2.17	20	8
1:A:14:VAL:HG21	1:A:121:THR:HB	0.54	1.79	6	1
1:A:11:LEU:HD11	1:A:124:GLN:H	0.54	1.62	8	2
1:A:31:LEU:HD22	1:A:101:SER:HA	0.54	1.77	19	3
1:A:37:TRP:O	1:A:40:GLU:N	0.54	2.41	12	4
1:A:74:LEU:N	1:A:136:ALA:O	0.54	2.40	12	13
1:A:177:LEU:N	1:A:178:PRO:HD2	0.54	2.18	2	5
1:A:114:TYR:CG	1:A:117:LEU:HD11	0.54	2.36	4	8
1:A:56:ALA:CB	1:A:231:ILE:CD1	0.54	2.85	12	1
1:A:34:TYR:HB3	2:A:300:SAH:CB	0.54	2.33	7	3
1:A:88:GLN:HA	1:A:113:LEU:HD11	0.54	1.78	2	1
1:A:31:LEU:HD11	1:A:100:GLY:O	0.54	2.03	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:LEU:HD21	1:A:122:LEU:CA	0.54	2.33	9	2
1:A:57:VAL:HG23	1:A:87:LEU:CD2	0.54	2.30	16	2
1:A:14:VAL:HA	1:A:17:ARG:HG2	0.54	1.77	15	4
1:A:51:ARG:H	1:A:204:VAL:HG13	0.54	1.62	12	2
1:A:198:CYS:HB3	1:A:234:TYR:CD1	0.54	2.37	7	1
1:A:127:LEU:HD12	1:A:155:GLU:HB3	0.54	1.78	8	1
1:A:28:ALA:HA	1:A:31:LEU:HD12	0.54	1.78	13	1
1:A:36:ASP:OD2	1:A:37:TRP:N	0.54	2.41	15	1
1:A:11:LEU:CG	1:A:12:PRO:CD	0.54	2.84	6	3
1:A:11:LEU:HD23	2:A:300:SAH:N6	0.54	2.18	9	2
1:A:157:LEU:HD21	1:A:196:TRP:HB3	0.54	1.79	9	1
1:A:104:MET:HG2	2:A:300:SAH:O2'	0.54	2.01	11	1
1:A:196:TRP:CE3	1:A:234:TYR:CB	0.54	2.91	1	14
1:A:77:ALA:HB2	2:A:300:SAH:C4	0.54	2.32	3	3
1:A:192:ARG:HA	1:A:240:VAL:HB	0.54	1.79	3	1
1:A:11:LEU:HD21	1:A:149:PRO:HG2	0.54	1.79	15	1
1:A:41:TYR:CZ	2:A:300:SAH:C	0.54	2.91	18	1
1:A:50:TYR:CD1	1:A:52:ALA:HB3	0.54	2.37	19	1
1:A:127:LEU:HB3	1:A:128:PRO:HD2	0.54	1.78	17	2
1:A:200:VAL:HG23	1:A:202:GLN:NE2	0.53	2.17	2	3
1:A:179:TYR:O	1:A:182:THR:HB	0.53	2.03	9	3
1:A:14:VAL:HG11	1:A:121:THR:CG2	0.53	2.33	16	2
1:A:11:LEU:CD2	2:A:300:SAH:N6	0.53	2.71	9	2
1:A:204:VAL:HG21	1:A:230:ILE:N	0.53	2.18	9	2
1:A:99:ASP:OD1	1:A:105:LEU:HD23	0.53	2.03	14	3
1:A:172:THR:CG2	1:A:230:ILE:HG22	0.53	2.33	14	1
1:A:77:ALA:HB3	2:A:300:SAH:C4	0.53	2.33	7	4
1:A:179:TYR:O	1:A:183:LEU:N	0.53	2.37	19	12
1:A:199:LEU:HD11	1:A:235:ARG:CG	0.53	2.32	10	3
1:A:55:LEU:CD1	1:A:202:GLN:HB3	0.53	2.34	19	5
1:A:10:ARG:HD3	1:A:34:TYR:CE1	0.53	2.38	6	1
1:A:15:LEU:C	1:A:15:LEU:HD13	0.53	2.24	12	2
1:A:202:GLN:O	1:A:230:ILE:HG12	0.53	2.03	14	1
1:A:15:LEU:HD22	1:A:122:LEU:HD11	0.53	1.80	15	3
1:A:100:GLY:HA2	1:A:119:LEU:HD12	0.53	1.80	7	14
1:A:71:ALA:HB1	1:A:135:ASP:CB	0.53	2.33	6	5
1:A:77:ALA:HB1	2:A:300:SAH:C1'	0.53	2.32	11	4
1:A:57:VAL:CG1	1:A:90:ARG:HB2	0.53	2.33	5	3
1:A:84:ALA:HB1	1:A:113:LEU:HB3	0.53	1.80	18	2
1:A:52:ALA:CB	1:A:169:THR:OG1	0.53	2.57	14	1
1:A:11:LEU:HB3	2:A:300:SAH:N6	0.53	2.19	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:150:CYS:HA	1:A:153:ILE:HG13	0.53	1.81	15	10
1:A:120:CYS:CB	1:A:128:PRO:HG3	0.53	2.33	12	1
1:A:123:GLY:O	1:A:149:PRO:HB2	0.53	2.03	16	2
1:A:142:ALA:N	1:A:170:THR:OG1	0.53	2.42	5	3
1:A:192:ARG:HG2	1:A:240:VAL:HG11	0.53	1.79	6	1
1:A:122:LEU:HD11	1:A:125:GLU:HB3	0.53	1.81	14	2
1:A:190:LEU:O	1:A:195:VAL:HG22	0.53	2.02	7	3
1:A:12:PRO:HG3	1:A:124:GLN:HB3	0.53	1.81	18	1
1:A:206:HIS:CA	1:A:228:SER:O	0.53	2.56	1	7
1:A:162:PRO:HA	1:A:236:LYS:CB	0.53	2.34	13	4
1:A:60:LEU:HD12	1:A:167:CYS:HB2	0.53	1.81	8	2
1:A:172:THR:OG1	1:A:230:ILE:HD12	0.53	2.04	2	1
1:A:88:GLN:HG3	1:A:113:LEU:HD21	0.53	1.81	9	2
1:A:87:LEU:HD22	1:A:92:PHE:CE2	0.53	2.39	7	1
1:A:172:THR:OG1	1:A:230:ILE:HG22	0.53	2.04	9	1
1:A:45:VAL:HB	1:A:50:TYR:CG	0.53	2.38	10	1
1:A:204:VAL:HG23	1:A:206:HIS:HD1	0.53	1.63	11	1
1:A:127:LEU:HD13	1:A:156:LEU:CG	0.53	2.33	14	1
1:A:96:GLN:CB	1:A:134:PHE:CZ	0.53	2.91	4	15
1:A:143:LEU:HG	1:A:170:THR:OG1	0.53	2.04	8	3
1:A:145:GLU:O	1:A:145:GLU:HG2	0.53	2.03	14	3
1:A:55:LEU:HD22	1:A:203:PRO:HD2	0.53	1.81	7	1
1:A:142:ALA:O	1:A:148:VAL:HG11	0.53	2.02	11	2
1:A:74:LEU:HD12	1:A:159:VAL:HG11	0.53	1.80	12	1
1:A:99:ASP:O	1:A:119:LEU:HD12	0.53	2.04	1	3
1:A:202:GLN:OE1	1:A:231:ILE:HD12	0.53	2.03	11	5
1:A:168:LEU:HD11	1:A:232:TYR:CE1	0.53	2.37	16	2
1:A:172:THR:HA	1:A:180:LYS:HE3	0.53	1.80	13	1
1:A:145:GLU:OE1	1:A:147:GLN:NE2	0.53	2.42	17	1
1:A:166:VAL:O	1:A:233:LEU:HA	0.53	2.04	18	1
1:A:73:ILE:O	1:A:95:VAL:HA	0.53	2.03	7	5
1:A:77:ALA:HB2	1:A:99:ASP:HA	0.53	1.80	7	5
1:A:199:LEU:HD11	1:A:235:ARG:HE	0.53	1.62	6	2
1:A:235:ARG:NE	1:A:238:GLU:OE1	0.53	2.42	8	2
1:A:143:LEU:C	1:A:148:VAL:O	0.52	2.48	19	4
1:A:190:LEU:HD22	1:A:195:VAL:HG21	0.52	1.81	18	4
1:A:240:VAL:O	1:A:240:VAL:HG22	0.52	2.04	12	3
1:A:11:LEU:HD22	1:A:147:GLN:O	0.52	2.04	20	1
1:A:76:VAL:HB	1:A:139:ILE:CD1	0.52	2.28	5	6
1:A:11:LEU:HD23	1:A:123:GLY:HA3	0.52	1.77	10	1
1:A:81:GLY:HA3	1:A:107:GLN:HG2	0.52	1.81	20	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:109:ARG:HG3	1:A:117:LEU:HD12	0.52	1.80	17	1
1:A:50:TYR:CE1	1:A:52:ALA:HB3	0.52	2.39	19	2
1:A:120:CYS:O	2:A:300:SAH:N1	0.52	2.43	19	1
1:A:37:TRP:CE3	1:A:40:GLU:OE2	0.52	2.62	2	3
1:A:127:LEU:HG	1:A:156:LEU:CD1	0.52	2.34	6	1
1:A:153:ILE:O	1:A:157:LEU:HD13	0.52	2.04	10	8
1:A:12:PRO:HB3	1:A:123:GLY:N	0.52	2.20	2	3
1:A:191:GLU:HG3	1:A:197:GLU:HG2	0.52	1.80	3	1
1:A:196:TRP:CZ2	1:A:234:TYR:CD1	0.52	2.97	15	12
1:A:204:VAL:HG23	1:A:230:ILE:CA	0.52	2.31	15	2
1:A:126:PRO:HA	1:A:155:GLU:OE1	0.52	2.04	16	1
1:A:23:GLY:O	1:A:26:ASP:OD2	0.52	2.28	14	2
1:A:64:PHE:CE2	1:A:66:GLY:CA	0.52	2.93	2	13
1:A:169:THR:HG22	1:A:231:ILE:HG12	0.52	1.81	6	6
1:A:191:GLU:HB3	1:A:240:VAL:CG2	0.52	2.35	4	1
1:A:31:LEU:HD21	1:A:102:PRO:HD3	0.52	1.80	5	1
1:A:171:ARG:CG	1:A:174:PRO:HG3	0.52	2.32	6	2
1:A:150:CYS:O	1:A:154:PRO:HD3	0.52	2.05	17	4
1:A:11:LEU:HD23	1:A:147:GLN:C	0.52	2.24	11	1
1:A:56:ALA:HB2	1:A:231:ILE:HD13	0.52	1.81	14	1
1:A:171:ARG:HB3	1:A:174:PRO:HG3	0.52	1.81	17	1
1:A:240:VAL:HG13	1:A:240:VAL:O	0.52	2.05	14	3
1:A:172:THR:O	1:A:180:LYS:HG3	0.52	2.03	13	1
1:A:122:LEU:HD21	1:A:125:GLU:CD	0.52	2.25	14	1
1:A:189:SER:O	1:A:192:ARG:HG2	0.52	2.04	15	2
1:A:122:LEU:HD11	1:A:125:GLU:HB2	0.52	1.80	11	3
1:A:60:LEU:C	1:A:60:LEU:HD23	0.52	2.25	14	11
1:A:11:LEU:HD21	1:A:122:LEU:N	0.52	2.20	16	1
1:A:11:LEU:HD23	1:A:149:PRO:HD3	0.52	1.81	19	1
1:A:196:TRP:CZ3	1:A:234:TYR:CD1	0.52	2.98	18	10
1:A:166:VAL:CG2	1:A:236:LYS:CE	0.52	2.88	13	1
1:A:123:GLY:C	1:A:152:ALA:HB2	0.52	2.25	17	2
1:A:35:ASP:OD2	1:A:101:SER:HB2	0.52	2.05	5	2
1:A:157:LEU:C	1:A:236:LYS:HE2	0.52	2.25	3	1
1:A:126:PRO:HB3	1:A:155:GLU:CG	0.52	2.34	14	2
1:A:198:CYS:HB3	1:A:234:TYR:CZ	0.52	2.39	7	1
1:A:206:HIS:HA	1:A:228:SER:O	0.51	2.05	1	4
1:A:41:TYR:O	1:A:44:ASP:HB2	0.51	2.05	8	16
1:A:49:LYS:O	1:A:205:ASP:OD1	0.51	2.28	2	2
1:A:99:ASP:HB2	1:A:105:LEU:HG	0.51	1.83	8	5
1:A:28:ALA:O	1:A:32:ARG:HG2	0.51	2.04	14	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:201:THR:HG23	1:A:232:TYR:HB3	0.51	1.81	7	2
1:A:11:LEU:CB	2:A:300:SAH:N6	0.51	2.70	10	1
1:A:199:LEU:HD13	1:A:200:VAL:HG13	0.51	1.81	12	1
1:A:31:LEU:HD13	1:A:102:PRO:CD	0.51	2.33	13	1
1:A:14:VAL:HG22	1:A:30:LYS:CE	0.51	2.35	14	1
1:A:72:LEU:CD1	1:A:134:PHE:CD1	0.51	2.93	17	19
1:A:232:TYR:CD2	1:A:234:TYR:CE2	0.51	2.97	7	11
1:A:73:ILE:HG13	1:A:92:PHE:HD2	0.51	1.65	10	4
1:A:77:ALA:CB	1:A:99:ASP:HA	0.51	2.35	7	11
1:A:161:LYS:O	1:A:236:LYS:HB2	0.51	2.05	20	5
1:A:144:SER:HA	1:A:149:PRO:HA	0.51	1.82	8	3
1:A:11:LEU:CD1	2:A:300:SAH:N6	0.51	2.74	11	1
1:A:56:ALA:HB2	1:A:231:ILE:HD11	0.51	1.80	12	1
1:A:11:LEU:CD1	1:A:121:THR:HB	0.51	2.29	1	1
1:A:153:ILE:HB	1:A:154:PRO:HD3	0.51	1.81	1	10
1:A:160:THR:O	1:A:236:LYS:HG2	0.51	2.05	12	2
1:A:123:GLY:HA2	1:A:152:ALA:CB	0.51	2.35	15	2
1:A:137:VAL:HB	1:A:166:VAL:HG13	0.51	1.82	16	1
1:A:15:LEU:CB	1:A:122:LEU:HD21	0.51	2.35	17	1
1:A:33:PHE:O	1:A:36:ASP:OD1	0.51	2.29	17	1
1:A:38:ALA:HB2	2:A:300:SAH:HG1	0.51	1.81	18	1
1:A:64:PHE:CD2	1:A:165:LEU:HD23	0.51	2.40	2	2
1:A:85:VAL:HG22	1:A:113:LEU:HD21	0.51	1.83	3	1
1:A:17:ARG:NH1	1:A:30:LYS:HD2	0.51	2.20	13	1
1:A:162:PRO:HA	1:A:236:LYS:HB2	0.51	1.83	13	2
1:A:51:ARG:HG2	1:A:55:LEU:HD13	0.51	1.82	2	1
1:A:152:ALA:O	1:A:155:GLU:HB2	0.51	2.06	15	7
1:A:55:LEU:HD13	1:A:202:GLN:CG	0.51	2.32	6	2
1:A:191:GLU:HG2	1:A:196:TRP:O	0.51	2.06	7	4
1:A:88:GLN:CG	1:A:113:LEU:HD11	0.51	2.35	6	2
1:A:120:CYS:SG	1:A:128:PRO:HG3	0.51	2.45	12	1
1:A:57:VAL:HG22	1:A:90:ARG:CG	0.51	2.36	13	1
1:A:14:VAL:HA	1:A:17:ARG:CG	0.51	2.36	1	2
1:A:57:VAL:CG2	1:A:87:LEU:HD23	0.51	2.31	3	1
1:A:199:LEU:HD11	1:A:235:ARG:NE	0.51	2.21	6	3
1:A:50:TYR:HA	1:A:204:VAL:HG11	0.51	1.83	12	1
1:A:60:LEU:O	1:A:64:PHE:CB	0.51	2.59	6	18
1:A:122:LEU:HD23	1:A:125:GLU:CB	0.51	2.36	1	1
1:A:55:LEU:O	1:A:59:CYS:HB2	0.51	2.05	4	13
1:A:145:GLU:OE2	1:A:174:PRO:CG	0.51	2.59	3	1
1:A:76:VAL:CG1	1:A:139:ILE:HD12	0.51	2.36	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:191:GLU:OE1	1:A:197:GLU:HG3	0.51	2.06	11	2
1:A:78:CYS:N	1:A:139:ILE:HD11	0.51	2.20	8	3
1:A:231:ILE:HG23	1:A:233:LEU:CD1	0.51	2.35	8	1
1:A:11:LEU:HD11	1:A:122:LEU:C	0.51	2.26	9	1
1:A:63:ALA:HB1	1:A:199:LEU:HD21	0.51	1.81	14	2
1:A:76:VAL:CG2	1:A:156:LEU:CD2	0.51	2.89	1	2
1:A:92:PHE:CD1	1:A:92:PHE:N	0.51	2.79	12	18
1:A:14:VAL:HG13	1:A:17:ARG:NH1	0.51	2.21	11	3
1:A:96:GLN:HG2	1:A:116:HIS:HB2	0.51	1.82	5	6
1:A:187:LEU:O	1:A:191:GLU:HG3	0.51	2.05	4	1
1:A:11:LEU:HD21	1:A:122:LEU:HA	0.51	1.82	9	1
1:A:11:LEU:CD2	1:A:12:PRO:HD3	0.51	2.33	10	1
1:A:206:HIS:CE1	1:A:230:ILE:CD1	0.51	2.93	14	1
1:A:147:GLN:CA	2:A:300:SAH:N7	0.51	2.74	17	1
1:A:50:TYR:OH	1:A:169:THR:HB	0.51	2.06	20	2
1:A:68:PRO:HB3	1:A:92:PHE:CG	0.51	2.41	19	6
1:A:24:ILE:HA	1:A:27:LEU:HD12	0.51	1.82	4	4
1:A:108:ALA:CB	1:A:114:TYR:CE2	0.51	2.93	11	6
1:A:152:ALA:O	1:A:155:GLU:HB3	0.51	2.06	9	2
1:A:122:LEU:H	2:A:300:SAH:HN62	0.51	1.49	11	1
1:A:165:LEU:HD13	1:A:235:ARG:HG2	0.51	1.83	12	4
1:A:121:THR:HA	2:A:300:SAH:C6	0.50	2.35	1	9
1:A:38:ALA:N	1:A:39:PRO:HD2	0.50	2.20	18	5
1:A:62:ARG:HG2	1:A:90:ARG:NH2	0.50	2.21	4	1
1:A:130:PRO:O	1:A:159:VAL:HB	0.50	2.06	19	6
1:A:231:ILE:CD1	1:A:233:LEU:CD1	0.50	2.89	19	3
1:A:48:LEU:O	1:A:205:ASP:HB2	0.50	2.06	12	1
1:A:86:GLU:O	1:A:90:ARG:HD2	0.50	2.06	12	1
1:A:204:VAL:HB	1:A:229:GLY:O	0.50	2.05	13	1
1:A:23:GLY:O	1:A:27:LEU:HD13	0.50	2.06	15	2
1:A:11:LEU:HB2	1:A:12:PRO:HD3	0.50	1.82	18	1
1:A:196:TRP:O	1:A:196:TRP:CD1	0.50	2.65	14	19
1:A:68:PRO:HG2	1:A:92:PHE:CE1	0.50	2.41	8	8
1:A:11:LEU:HG	2:A:300:SAH:C8	0.50	2.35	4	1
1:A:95:VAL:O	1:A:115:HIS:N	0.50	2.45	13	12
1:A:37:TRP:HB2	2:A:300:SAH:HA	0.50	1.84	11	1
1:A:196:TRP:CZ3	1:A:234:TYR:CB	0.50	2.94	18	2
1:A:55:LEU:O	1:A:59:CYS:CB	0.50	2.59	15	3
1:A:75:ASP:CB	1:A:114:TYR:HE1	0.50	2.20	17	3
1:A:68:PRO:CB	1:A:92:PHE:HA	0.50	2.36	20	3
1:A:60:LEU:HD22	1:A:92:PHE:HE2	0.50	1.65	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:LEU:O	1:A:14:VAL:N	0.50	2.45	18	3
1:A:11:LEU:HD22	1:A:149:PRO:HD3	0.50	1.82	6	1
1:A:154:PRO:O	1:A:158:ARG:HG2	0.50	2.07	7	3
1:A:180:LYS:NZ	1:A:184:GLU:OE1	0.50	2.44	6	1
1:A:68:PRO:CG	1:A:92:PHE:CD1	0.50	2.95	18	4
1:A:150:CYS:HA	1:A:153:ILE:HD11	0.50	1.82	18	3
1:A:137:VAL:O	1:A:166:VAL:HA	0.50	2.05	13	1
1:A:88:GLN:HB2	1:A:113:LEU:HG	0.50	1.84	1	1
1:A:140:VAL:HA	1:A:169:THR:HG22	0.50	1.84	7	1
1:A:183:LEU:O	1:A:187:LEU:HD13	0.50	2.06	13	1
1:A:60:LEU:N	1:A:233:LEU:HD21	0.50	2.22	17	2
1:A:177:LEU:HB3	1:A:178:PRO:CD	0.50	2.36	18	1
1:A:108:ALA:HB1	1:A:117:LEU:HD11	0.50	1.83	18	5
1:A:84:ALA:HA	1:A:87:LEU:HB2	0.50	1.84	3	2
1:A:122:LEU:CD1	1:A:125:GLU:HB2	0.50	2.36	11	4
1:A:153:ILE:HA	1:A:156:LEU:HD23	0.50	1.82	16	2
1:A:145:GLU:OE1	1:A:174:PRO:HG3	0.50	2.06	16	1
1:A:15:LEU:HB2	1:A:122:LEU:HD21	0.50	1.83	17	1
1:A:64:PHE:CZ	1:A:66:GLY:O	0.50	2.65	6	13
1:A:199:LEU:CG	1:A:235:ARG:HG2	0.50	2.37	1	1
1:A:130:PRO:HG2	1:A:133:THR:OG1	0.50	2.07	6	7
1:A:11:LEU:HD22	1:A:123:GLY:HA3	0.50	1.82	6	3
1:A:121:THR:CG2	2:A:300:SAH:N1	0.50	2.75	10	1
1:A:37:TRP:HB2	2:A:300:SAH:N	0.50	2.20	17	1
1:A:10:ARG:O	1:A:13:GLN:HB2	0.50	2.07	18	5
1:A:17:ARG:CZ	1:A:27:LEU:HD12	0.50	2.37	3	1
1:A:196:TRP:CE3	1:A:234:TYR:HB3	0.50	2.42	18	5
1:A:38:ALA:HB3	1:A:103:GLU:OE2	0.50	2.05	6	2
1:A:68:PRO:CB	1:A:92:PHE:CD1	0.50	2.95	12	5
1:A:11:LEU:HD21	1:A:121:THR:C	0.50	2.26	16	1
1:A:95:VAL:CG1	1:A:114:TYR:CE1	0.49	2.95	1	1
1:A:17:ARG:NH2	1:A:27:LEU:HD12	0.49	2.22	3	1
1:A:35:ASP:HB3	1:A:103:GLU:OE2	0.49	2.06	18	2
1:A:157:LEU:CB	1:A:236:LYS:HE3	0.49	2.35	17	2
1:A:138:ILE:HG13	1:A:167:CYS:SG	0.49	2.47	19	1
1:A:172:THR:OG1	1:A:230:ILE:CG2	0.49	2.59	20	1
1:A:188:ASP:OD2	1:A:192:ARG:HG3	0.49	2.07	6	3
1:A:197:GLU:CB	1:A:238:GLU:HB2	0.49	2.37	18	2
1:A:76:VAL:HG12	1:A:77:ALA:N	0.49	2.23	7	7
2:A:300:SAH:HG1	2:A:300:SAH:C3'	0.49	2.37	1	2
1:A:190:LEU:O	1:A:195:VAL:HG23	0.49	2.08	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:LEU:HD13	1:A:123:GLY:CA	0.49	2.38	6	1
1:A:127:LEU:HD12	1:A:156:LEU:HD21	0.49	1.83	7	1
1:A:177:LEU:HB2	1:A:178:PRO:CD	0.49	2.36	16	4
1:A:58:ASP:HA	1:A:90:ARG:CZ	0.49	2.37	13	5
1:A:233:LEU:HD12	1:A:233:LEU:N	0.49	2.22	17	4
1:A:124:GLN:HG3	1:A:124:GLN:O	0.49	2.07	13	2
1:A:150:CYS:O	1:A:154:PRO:CD	0.49	2.60	17	1
1:A:37:TRP:CE2	1:A:40:GLU:OE1	0.49	2.65	18	1
1:A:100:GLY:O	1:A:119:LEU:HD11	0.49	2.07	1	1
1:A:157:LEU:HB3	1:A:236:LYS:NZ	0.49	2.22	6	3
1:A:96:GLN:HB3	1:A:134:PHE:CZ	0.49	2.43	11	5
1:A:196:TRP:CH2	1:A:234:TYR:CE2	0.49	3.01	6	1
1:A:11:LEU:HD12	1:A:12:PRO:CD	0.49	2.36	17	1
1:A:144:SER:HB3	1:A:150:CYS:H	0.49	1.67	17	1
1:A:87:LEU:HD13	1:A:87:LEU:C	0.49	2.28	18	1
1:A:127:LEU:CD1	1:A:155:GLU:HB2	0.49	2.36	18	2
1:A:157:LEU:HB3	1:A:236:LYS:CE	0.49	2.37	1	2
1:A:196:TRP:CE3	1:A:234:TYR:CD1	0.49	3.01	5	6
1:A:131:GLU:CG	1:A:158:ARG:HG3	0.49	2.37	14	1
1:A:140:VAL:HB	1:A:169:THR:CG2	0.49	2.38	14	1
1:A:41:TYR:CE2	2:A:300:SAH:C	0.49	2.96	17	1
1:A:231:ILE:HD13	1:A:233:LEU:HD12	0.49	1.84	19	1
1:A:11:LEU:HD11	2:A:300:SAH:H2'	0.49	1.83	3	1
1:A:50:TYR:CE1	1:A:229:GLY:CA	0.49	2.96	9	2
1:A:202:GLN:H	1:A:231:ILE:HG22	0.49	1.68	12	3
1:A:140:VAL:HG13	1:A:169:THR:HG21	0.49	1.83	7	1
1:A:50:TYR:CE1	1:A:229:GLY:O	0.49	2.65	9	1
1:A:191:GLU:HB3	1:A:240:VAL:CG1	0.49	2.36	20	1
1:A:77:ALA:CA	1:A:99:ASP:HA	0.49	2.38	1	14
1:A:199:LEU:HD11	1:A:235:ARG:HG2	0.49	1.83	1	1
1:A:204:VAL:CG2	1:A:230:ILE:HG13	0.49	2.37	1	1
1:A:121:THR:HA	2:A:300:SAH:C2	0.49	2.37	3	7
1:A:81:GLY:CA	1:A:107:GLN:HB3	0.49	2.38	1	4
1:A:48:LEU:O	1:A:205:ASP:OD1	0.49	2.31	2	4
1:A:123:GLY:HA3	1:A:149:PRO:CD	0.49	2.38	18	4
1:A:101:SER:CB	2:A:300:SAH:O3'	0.49	2.61	12	1
1:A:60:LEU:HB2	1:A:167:CYS:SG	0.49	2.48	14	1
1:A:51:ARG:CG	1:A:55:LEU:HD13	0.49	2.38	18	1
1:A:11:LEU:CD2	1:A:147:GLN:HA	0.49	2.38	1	3
1:A:34:TYR:HB3	2:A:300:SAH:HB2	0.49	1.83	2	1
1:A:49:LYS:O	1:A:49:LYS:HG3	0.49	2.08	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:VAL:CA	1:A:113:LEU:HD21	0.49	2.38	16	1
1:A:48:LEU:O	1:A:205:ASP:OD2	0.49	2.31	17	1
1:A:11:LEU:HD22	1:A:122:LEU:C	0.49	2.28	15	3
1:A:50:TYR:CZ	1:A:229:GLY:HA2	0.49	2.43	13	1
1:A:173:ASN:ND2	1:A:206:HIS:O	0.49	2.45	17	1
1:A:168:LEU:O	1:A:232:TYR:N	0.49	2.46	19	1
1:A:85:VAL:CG2	1:A:113:LEU:HD21	0.48	2.38	3	1
1:A:122:LEU:CG	1:A:125:GLU:HB3	0.48	2.38	7	4
1:A:104:MET:SD	2:A:300:SAH:O2'	0.48	2.71	10	1
1:A:131:GLU:HG2	1:A:158:ARG:HB3	0.48	1.85	13	4
1:A:131:GLU:HG3	1:A:158:ARG:HB3	0.48	1.85	2	1
1:A:127:LEU:HG	1:A:156:LEU:CD2	0.48	2.38	6	1
1:A:173:ASN:CB	1:A:180:LYS:HG3	0.48	2.37	9	1
1:A:11:LEU:HD22	1:A:123:GLY:N	0.48	2.23	15	1
1:A:77:ALA:O	1:A:104:MET:CG	0.48	2.61	15	1
1:A:106:LYS:O	1:A:110:ALA:CB	0.48	2.62	7	13
1:A:26:ASP:HA	1:A:29:CYS:HB2	0.48	1.85	8	6
1:A:158:ARG:HA	1:A:236:LYS:HE2	0.48	1.84	7	2
1:A:107:GLN:O	1:A:111:ARG:CG	0.48	2.53	8	1
1:A:27:LEU:O	1:A:31:LEU:HG	0.48	2.07	9	1
1:A:173:ASN:ND2	1:A:180:LYS:HB3	0.48	2.23	9	1
1:A:94:GLN:HA	1:A:115:HIS:CE1	0.48	2.44	10	4
1:A:191:GLU:OE1	1:A:240:VAL:HG11	0.48	2.08	11	1
1:A:173:ASN:O	1:A:177:LEU:HD23	0.48	2.09	13	1
1:A:122:LEU:HD21	1:A:125:GLU:OE1	0.48	2.08	14	1
1:A:72:LEU:HD22	1:A:94:GLN:CB	0.48	2.38	18	1
1:A:14:VAL:HB	1:A:121:THR:CB	0.48	2.38	4	3
1:A:52:ALA:CB	1:A:231:ILE:HG12	0.48	2.38	4	2
1:A:84:ALA:HB2	1:A:114:TYR:HE2	0.48	1.66	19	2
1:A:100:GLY:HA2	1:A:119:LEU:CD1	0.48	2.38	10	6
1:A:71:ALA:HA	1:A:135:ASP:OD1	0.48	2.08	16	4
1:A:143:LEU:HD22	1:A:153:ILE:CD1	0.48	2.33	17	1
1:A:172:THR:C	1:A:174:PRO:HD2	0.48	2.29	17	1
1:A:199:LEU:HB2	1:A:233:LEU:O	0.48	2.09	2	1
1:A:72:LEU:CG	1:A:134:PHE:CD1	0.48	2.97	10	4
1:A:195:VAL:O	1:A:237:GLN:HA	0.48	2.08	12	8
1:A:160:THR:O	1:A:236:LYS:HD2	0.48	2.08	18	2
1:A:31:LEU:HD22	1:A:101:SER:CA	0.48	2.39	19	2
1:A:58:ASP:O	1:A:62:ARG:HG3	0.48	2.09	13	3
1:A:41:TYR:CD2	2:A:300:SAH:C	0.48	2.96	19	1
1:A:169:THR:CB	1:A:231:ILE:HA	0.48	2.39	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:ARG:HG3	1:A:18:VAL:N	0.48	2.24	9	6
1:A:35:ASP:OD2	1:A:101:SER:OG	0.48	2.31	7	3
1:A:149:PRO:O	1:A:152:ALA:N	0.48	2.45	19	4
1:A:67:SER:O	1:A:70:ASP:OD2	0.48	2.32	5	1
1:A:51:ARG:HG2	1:A:54:ARG:HH21	0.48	1.68	6	1
1:A:122:LEU:HG	1:A:125:GLU:HB3	0.48	1.85	15	3
1:A:17:ARG:NH1	1:A:27:LEU:HA	0.48	2.24	7	1
1:A:59:CYS:SG	1:A:202:GLN:HG2	0.48	2.48	18	2
1:A:202:GLN:O	1:A:230:ILE:CG1	0.48	2.61	14	1
1:A:11:LEU:HD23	2:A:300:SAH:C8	0.48	2.38	20	1
1:A:153:ILE:N	1:A:154:PRO:CD	0.48	2.76	17	12
1:A:196:TRP:CD2	1:A:234:TYR:CD1	0.48	3.02	5	4
1:A:41:TYR:CE2	2:A:300:SAH:HA	0.48	2.43	18	2
1:A:78:CYS:CB	1:A:140:VAL:O	0.48	2.59	6	6
1:A:50:TYR:CE1	1:A:229:GLY:HA2	0.48	2.43	13	2
1:A:79:GLY:HA3	1:A:114:TYR:OH	0.48	2.07	6	1
1:A:173:ASN:OD1	1:A:180:LYS:HD2	0.48	2.08	6	3
1:A:33:PHE:O	1:A:36:ASP:OD2	0.48	2.32	15	1
1:A:88:GLN:CG	1:A:113:LEU:CD2	0.48	2.92	18	1
1:A:41:TYR:CD2	2:A:300:SAH:HA	0.48	2.43	19	1
1:A:15:LEU:HD23	1:A:15:LEU:C	0.48	2.30	1	1
1:A:74:LEU:CD1	1:A:134:PHE:CD2	0.48	2.95	10	11
1:A:155:GLU:N	1:A:155:GLU:OE2	0.48	2.47	1	1
1:A:132:GLY:HA2	1:A:161:LYS:HG2	0.48	1.86	2	2
1:A:11:LEU:HD13	1:A:122:LEU:HD12	0.48	1.84	15	1
1:A:171:ARG:CB	1:A:228:SER:HB3	0.48	2.39	15	1
1:A:74:LEU:CD1	1:A:134:PHE:HD2	0.48	2.19	4	8
1:A:82:LEU:HD21	1:A:86:GLU:OE1	0.48	2.08	2	1
2:A:300:SAH:N3	2:A:300:SAH:H2'	0.48	2.24	5	1
1:A:98:VAL:HG11	1:A:128:PRO:CB	0.48	2.39	20	2
1:A:15:LEU:O	1:A:18:VAL:HG12	0.48	2.09	12	3
1:A:121:THR:HB	2:A:300:SAH:C6	0.48	2.39	8	4
1:A:77:ALA:HB3	2:A:300:SAH:H1'	0.48	1.86	18	1
1:A:84:ALA:O	1:A:113:LEU:HD11	0.48	2.09	18	1
1:A:15:LEU:HD23	1:A:122:LEU:HD11	0.47	1.85	4	2
1:A:165:LEU:HD22	1:A:165:LEU:N	0.47	2.24	15	5
1:A:172:THR:OG1	1:A:180:LYS:HG3	0.47	2.08	13	1
1:A:200:VAL:HG22	1:A:202:GLN:NE2	0.47	2.24	13	1
1:A:73:ILE:HA	1:A:136:ALA:O	0.47	2.08	17	1
1:A:74:LEU:HB2	1:A:134:PHE:CD2	0.47	2.44	17	5
1:A:127:LEU:CD2	1:A:156:LEU:HD21	0.47	2.35	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:200:VAL:CG2	1:A:201:THR:N	0.47	2.76	3	3
1:A:61:SER:HA	1:A:64:PHE:HB3	0.47	1.84	19	4
1:A:24:ILE:CA	1:A:27:LEU:HD13	0.47	2.38	13	1
1:A:153:ILE:O	1:A:156:LEU:N	0.47	2.45	19	4
1:A:41:TYR:CE1	2:A:300:SAH:HB1	0.47	2.43	1	2
1:A:199:LEU:HD21	1:A:235:ARG:CG	0.47	2.39	1	1
1:A:236:LYS:O	1:A:237:GLN:O	0.47	2.31	2	3
1:A:12:PRO:HB3	1:A:124:GLN:H	0.47	1.70	3	1
1:A:235:ARG:HD3	1:A:238:GLU:OE2	0.47	2.08	3	5
1:A:79:GLY:C	1:A:80:THR:OG1	0.47	2.52	14	1
1:A:11:LEU:N	1:A:12:PRO:CD	0.47	2.77	1	5
1:A:77:ALA:HB1	2:A:300:SAH:C4	0.47	2.39	1	2
1:A:108:ALA:CB	1:A:117:LEU:HD11	0.47	2.39	12	3
1:A:160:THR:CG2	1:A:236:LYS:HG3	0.47	2.40	2	2
1:A:206:HIS:CD2	1:A:230:ILE:HD12	0.47	2.44	1	1
1:A:157:LEU:HD21	1:A:196:TRP:HE3	0.47	1.63	5	1
1:A:114:TYR:CD2	1:A:114:TYR:N	0.47	2.83	11	3
1:A:74:LEU:HB3	1:A:137:VAL:CG2	0.47	2.34	12	1
1:A:64:PHE:CE2	1:A:66:GLY:O	0.47	2.68	19	2
1:A:76:VAL:HG13	1:A:127:LEU:CD2	0.47	2.39	2	1
1:A:88:GLN:HB2	1:A:113:LEU:CD1	0.47	2.40	2	4
1:A:104:MET:O	1:A:107:GLN:HG2	0.47	2.08	3	1
1:A:200:VAL:CG2	1:A:202:GLN:OE1	0.47	2.62	3	1
1:A:157:LEU:O	1:A:160:THR:HB	0.47	2.10	10	3
1:A:14:VAL:O	1:A:17:ARG:CG	0.47	2.62	9	1
1:A:60:LEU:O	1:A:64:PHE:HB2	0.47	2.09	10	1
1:A:17:ARG:HD3	1:A:30:LYS:HE3	0.47	1.85	11	1
1:A:141:GLY:O	1:A:147:GLN:OE1	0.47	2.33	14	1
1:A:173:ASN:OD1	1:A:177:LEU:HD22	0.47	2.09	18	1
1:A:177:LEU:HD13	1:A:177:LEU:C	0.47	2.29	18	1
1:A:131:GLU:HG3	1:A:158:ARG:HG2	0.47	1.85	20	1
1:A:60:LEU:HD22	1:A:92:PHE:HZ	0.47	1.70	17	3
1:A:172:THR:O	1:A:173:ASN:CB	0.47	2.62	2	2
1:A:155:GLU:HA	1:A:158:ARG:HE	0.47	1.69	4	1
1:A:14:VAL:HG12	1:A:121:THR:OG1	0.47	2.09	5	2
1:A:199:LEU:HD11	1:A:235:ARG:HD3	0.47	1.86	7	1
1:A:38:ALA:HB3	1:A:39:PRO:CD	0.47	2.40	12	4
1:A:205:ASP:HB2	1:A:228:SER:O	0.47	2.10	13	2
1:A:187:LEU:HD12	1:A:196:TRP:HZ2	0.47	1.70	16	2
1:A:60:LEU:HA	1:A:233:LEU:CD2	0.47	2.40	10	6
1:A:77:ALA:O	1:A:104:MET:SD	0.47	2.73	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:151:SER:O	1:A:154:PRO:CG	0.47	2.63	11	8
1:A:14:VAL:CG1	1:A:121:THR:CG2	0.47	2.92	4	1
1:A:76:VAL:O	1:A:79:GLY:N	0.47	2.47	4	4
1:A:235:ARG:CD	1:A:238:GLU:OE2	0.47	2.63	10	3
1:A:76:VAL:HG22	1:A:156:LEU:HD21	0.47	1.86	11	1
1:A:144:SER:HB3	1:A:147:GLN:HB2	0.47	1.86	11	1
1:A:175:SER:O	1:A:176:ASN:CG	0.47	2.53	18	1
1:A:100:GLY:N	2:A:300:SAH:C2	0.47	2.78	5	8
1:A:45:VAL:HA	1:A:50:TYR:CD2	0.47	2.44	4	3
1:A:196:TRP:CH2	1:A:234:TYR:CZ	0.47	3.03	6	1
1:A:239:THR:HG22	1:A:240:VAL:HG12	0.47	1.87	8	1
1:A:172:THR:CG2	1:A:230:ILE:CG2	0.47	2.88	10	1
1:A:167:CYS:SG	1:A:233:LEU:HG	0.47	2.50	14	1
1:A:34:TYR:O	1:A:38:ALA:N	0.47	2.47	19	1
1:A:78:CYS:HB2	1:A:139:ILE:CG1	0.47	2.40	9	4
1:A:84:ALA:HB2	1:A:114:TYR:CE2	0.47	2.45	18	3
1:A:160:THR:CB	1:A:236:LYS:HG3	0.47	2.40	2	1
1:A:15:LEU:CB	1:A:122:LEU:HD13	0.47	2.40	3	1
1:A:55:LEU:N	1:A:55:LEU:HD12	0.47	2.24	12	2
1:A:169:THR:HG22	1:A:231:ILE:HA	0.47	1.86	6	2
1:A:11:LEU:HB3	1:A:122:LEU:O	0.47	2.09	19	2
1:A:168:LEU:CD1	1:A:232:TYR:CZ	0.47	2.98	9	2
1:A:17:ARG:NH2	1:A:30:LYS:HB3	0.47	2.25	14	1
1:A:76:VAL:CG2	1:A:139:ILE:HB	0.47	2.39	6	2
1:A:133:THR:CG2	1:A:134:PHE:CE1	0.47	2.97	15	6
1:A:199:LEU:CD1	1:A:235:ARG:HG3	0.47	2.39	3	3
1:A:196:TRP:CD2	1:A:234:TYR:HD1	0.47	2.27	7	2
1:A:15:LEU:HA	1:A:18:VAL:CG1	0.47	2.39	7	1
1:A:52:ALA:CB	1:A:169:THR:CB	0.47	2.93	16	2
1:A:176:ASN:HB2	1:A:179:TYR:CD2	0.47	2.44	18	1
1:A:11:LEU:HD22	1:A:149:PRO:CG	0.47	2.39	19	1
1:A:173:ASN:OD1	1:A:180:LYS:HB2	0.46	2.10	1	1
1:A:14:VAL:HG22	1:A:17:ARG:NH1	0.46	2.25	12	1
1:A:63:ALA:HB1	1:A:199:LEU:CD1	0.46	2.36	19	1
1:A:10:ARG:O	1:A:13:GLN:HB3	0.46	2.09	6	3
1:A:87:LEU:HD13	1:A:92:PHE:HB2	0.46	1.87	6	1
1:A:14:VAL:HG21	1:A:121:THR:OG1	0.46	2.10	17	2
1:A:101:SER:N	2:A:300:SAH:O2'	0.46	2.43	8	1
1:A:49:LYS:CG	1:A:205:ASP:OD2	0.46	2.63	14	1
1:A:11:LEU:HD13	1:A:12:PRO:HD3	0.46	1.85	19	1
1:A:24:ILE:HD13	1:A:27:LEU:CD1	0.46	2.39	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:122:LEU:CD2	1:A:126:PRO:O	0.46	2.60	1	3
1:A:130:PRO:HD2	1:A:133:THR:HG21	0.46	1.85	2	2
1:A:14:VAL:CB	1:A:121:THR:HG21	0.46	2.40	4	1
1:A:15:LEU:N	1:A:121:THR:OG1	0.46	2.48	4	1
1:A:60:LEU:N	1:A:233:LEU:CD2	0.46	2.79	6	1
1:A:190:LEU:HB2	1:A:196:TRP:HE1	0.46	1.71	7	3
1:A:37:TRP:CE2	1:A:40:GLU:OE2	0.46	2.68	8	1
1:A:11:LEU:CD2	1:A:123:GLY:CA	0.46	2.84	10	1
1:A:137:VAL:HG13	1:A:160:THR:OG1	0.46	2.11	11	1
1:A:240:VAL:HG12	1:A:240:VAL:O	0.46	2.11	13	1
1:A:71:ALA:O	1:A:94:GLN:NE2	0.46	2.48	14	9
1:A:100:GLY:CA	2:A:300:SAH:H2	0.46	2.40	20	4
1:A:172:THR:HB	1:A:230:ILE:HB	0.46	1.86	6	1
1:A:24:ILE:CD1	1:A:27:LEU:HD12	0.46	2.40	20	1
1:A:15:LEU:HD22	1:A:125:GLU:OE2	0.46	2.11	1	1
1:A:87:LEU:HD12	1:A:113:LEU:CD1	0.46	2.41	6	1
1:A:230:ILE:HD13	1:A:232:TYR:OH	0.46	2.10	6	1
1:A:11:LEU:HD23	1:A:147:GLN:CA	0.46	2.36	7	1
1:A:78:CYS:HA	1:A:104:MET:HE1	0.46	1.88	10	2
1:A:99:ASP:O	1:A:119:LEU:HA	0.46	2.10	17	6
1:A:204:VAL:HG21	1:A:230:ILE:CB	0.46	2.40	4	2
1:A:152:ALA:O	1:A:155:GLU:N	0.46	2.48	9	2
1:A:87:LEU:HD22	1:A:113:LEU:HD12	0.46	1.87	11	2
1:A:173:ASN:O	1:A:177:LEU:CG	0.46	2.64	13	1
1:A:48:LEU:HB2	1:A:50:TYR:CE1	0.46	2.46	7	1
1:A:37:TRP:CE3	1:A:40:GLU:OE1	0.46	2.69	9	4
1:A:162:PRO:HA	1:A:236:LYS:HB3	0.46	1.86	11	4
1:A:104:MET:HG3	2:A:300:SAH:C3'	0.46	2.41	18	1
1:A:15:LEU:CA	1:A:18:VAL:HG22	0.46	2.41	1	2
1:A:15:LEU:CA	1:A:18:VAL:HG12	0.46	2.39	10	3
1:A:60:LEU:HA	1:A:233:LEU:HD23	0.46	1.86	10	4
1:A:24:ILE:HA	1:A:27:LEU:CD1	0.46	2.41	7	1
1:A:199:LEU:HG	1:A:235:ARG:HG3	0.46	1.86	7	1
1:A:235:ARG:NE	1:A:238:GLU:HG3	0.46	2.25	9	1
1:A:50:TYR:OH	1:A:170:THR:HA	0.46	2.11	10	2
1:A:136:ALA:HB1	1:A:165:LEU:O	0.46	2.11	2	2
1:A:196:TRP:CD1	1:A:196:TRP:C	0.46	2.89	19	6
1:A:48:LEU:HB2	1:A:50:TYR:CE2	0.46	2.46	4	1
1:A:88:GLN:CG	1:A:113:LEU:CD1	0.46	2.94	6	1
1:A:161:LYS:C	1:A:236:LYS:HD3	0.46	2.31	9	3
1:A:191:GLU:OE1	1:A:198:CYS:HB3	0.45	2.12	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:206:HIS:CG	1:A:230:ILE:HD11	0.45	2.46	2	1
1:A:171:ARG:HG2	1:A:228:SER:HB3	0.45	1.87	12	1
1:A:14:VAL:O	1:A:18:VAL:HG22	0.45	2.11	15	1
1:A:58:ASP:OD2	1:A:59:CYS:N	0.45	2.49	18	1
1:A:197:GLU:CD	1:A:240:VAL:CG2	0.45	2.85	18	1
1:A:77:ALA:HA	1:A:99:ASP:OD1	0.45	2.11	5	6
1:A:165:LEU:HD12	1:A:199:LEU:HD11	0.45	1.88	2	1
1:A:41:TYR:CG	2:A:300:SAH:HA	0.45	2.47	3	1
1:A:172:THR:O	1:A:173:ASN:HB3	0.45	2.11	4	1
1:A:69:HIS:O	1:A:94:GLN:NE2	0.45	2.50	6	1
1:A:198:CYS:SG	1:A:234:TYR:CE1	0.45	3.10	6	1
1:A:74:LEU:CD1	1:A:159:VAL:HG11	0.45	2.41	12	2
1:A:153:ILE:HG22	1:A:157:LEU:CD1	0.45	2.40	17	2
1:A:172:THR:CG2	1:A:230:ILE:HD12	0.45	2.38	17	1
1:A:177:LEU:CB	1:A:178:PRO:CD	0.45	2.93	17	3
1:A:172:THR:HB	1:A:230:ILE:CB	0.45	2.40	6	1
1:A:76:VAL:HB	1:A:139:ILE:HG12	0.45	1.88	15	1
1:A:11:LEU:O	1:A:14:VAL:HB	0.45	2.12	20	1
1:A:154:PRO:CA	1:A:157:LEU:HD13	0.45	2.40	13	3
1:A:145:GLU:HG3	1:A:145:GLU:O	0.45	2.11	12	3
1:A:64:PHE:HA	1:A:165:LEU:HD21	0.45	1.88	8	1
1:A:168:LEU:HG	1:A:232:TYR:HB2	0.45	1.88	13	1
1:A:17:ARG:HD3	1:A:27:LEU:HD22	0.45	1.87	8	1
1:A:158:ARG:HA	1:A:236:LYS:HE3	0.45	1.87	10	1
1:A:172:THR:HB	1:A:180:LYS:CE	0.45	2.41	18	1
1:A:55:LEU:HD23	1:A:202:GLN:CG	0.45	2.42	3	1
1:A:75:ASP:O	1:A:97:GLY:CA	0.45	2.62	11	4
1:A:171:ARG:HG2	1:A:228:SER:CB	0.45	2.42	17	1
1:A:69:HIS:C	1:A:69:HIS:CD2	0.45	2.90	20	1
1:A:199:LEU:CD1	1:A:235:ARG:HG2	0.45	2.42	1	1
1:A:64:PHE:HZ	1:A:71:ALA:CB	0.45	2.25	9	6
1:A:85:VAL:HG22	1:A:111:ARG:CZ	0.45	2.41	4	2
1:A:77:ALA:HA	1:A:99:ASP:OD2	0.45	2.11	6	5
1:A:133:THR:N	1:A:159:VAL:O	0.45	2.48	9	3
1:A:14:VAL:HG13	1:A:17:ARG:NH2	0.45	2.27	13	2
1:A:31:LEU:CD2	1:A:100:GLY:O	0.45	2.65	15	1
1:A:55:LEU:CA	1:A:58:ASP:OD2	0.45	2.65	18	1
1:A:198:CYS:CB	1:A:234:TYR:CZ	0.45	3.00	19	1
1:A:69:HIS:HD2	1:A:93:LEU:HD22	0.45	1.72	3	2
1:A:111:ARG:HG2	1:A:113:LEU:CD2	0.45	2.34	3	1
1:A:87:LEU:HD21	1:A:92:PHE:CG	0.45	2.47	19	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:LEU:CD1	1:A:159:VAL:HG21	0.45	2.41	8	1
1:A:173:ASN:HA	1:A:180:LYS:HE3	0.45	1.89	9	1
1:A:157:LEU:N	1:A:157:LEU:HD12	0.45	2.27	19	5
1:A:130:PRO:O	1:A:159:VAL:CB	0.45	2.65	16	3
1:A:57:VAL:HG13	1:A:58:ASP:N	0.45	2.27	4	8
1:A:24:ILE:O	1:A:27:LEU:HB2	0.45	2.11	2	1
1:A:129:ASP:HB2	1:A:159:VAL:HG11	0.45	1.89	2	2
1:A:144:SER:O	1:A:145:GLU:CB	0.45	2.64	17	4
1:A:51:ARG:HB2	1:A:203:PRO:O	0.45	2.12	7	1
1:A:124:GLN:O	1:A:124:GLN:HG2	0.45	2.12	7	2
1:A:169:THR:C	1:A:170:THR:HG1	0.45	2.07	9	1
1:A:11:LEU:HB2	2:A:300:SAH:N6	0.45	2.27	10	1
1:A:87:LEU:HD11	1:A:92:PHE:HB2	0.45	1.89	6	2
1:A:169:THR:HA	1:A:230:ILE:O	0.45	2.10	6	1
1:A:76:VAL:CG2	1:A:139:ILE:HG12	0.45	2.38	7	1
1:A:125:GLU:HB3	1:A:126:PRO:HD2	0.45	1.88	9	1
1:A:96:GLN:HB2	1:A:134:PHE:CE2	0.45	2.47	10	1
1:A:144:SER:HB2	1:A:147:GLN:HB2	0.45	1.88	18	1
1:A:204:VAL:HG21	1:A:230:ILE:HG12	0.44	1.88	2	1
1:A:157:LEU:HB3	1:A:236:LYS:HE2	0.44	1.88	3	1
1:A:72:LEU:HD13	1:A:73:ILE:N	0.44	2.28	12	2
1:A:95:VAL:O	1:A:115:HIS:HB2	0.44	2.12	12	1
1:A:135:ASP:OD2	1:A:161:LYS:HD3	0.44	2.12	12	1
1:A:75:ASP:OD2	1:A:114:TYR:OH	0.44	2.28	14	1
1:A:176:ASN:OD1	1:A:176:ASN:O	0.44	2.35	18	1
1:A:17:ARG:NE	1:A:27:LEU:CD2	0.44	2.81	19	1
1:A:30:LYS:O	1:A:34:TYR:HD2	0.44	1.94	20	3
1:A:35:ASP:OD1	1:A:102:PRO:HD2	0.44	2.12	5	3
1:A:96:GLN:OE1	1:A:134:PHE:CE1	0.44	2.70	6	3
1:A:52:ALA:HA	1:A:231:ILE:CG1	0.44	2.42	4	1
1:A:88:GLN:HG3	1:A:113:LEU:CD2	0.44	2.41	9	2
1:A:49:LYS:HD2	1:A:205:ASP:OD1	0.44	2.12	14	1
1:A:157:LEU:CD2	1:A:196:TRP:HE3	0.44	2.25	16	1
1:A:61:SER:HB3	1:A:90:ARG:NE	0.44	2.26	8	2
1:A:70:ASP:OD1	1:A:70:ASP:O	0.44	2.36	13	7
1:A:73:ILE:O	1:A:96:GLN:N	0.44	2.50	6	2
1:A:123:GLY:CA	1:A:149:PRO:HG2	0.44	2.42	14	1
1:A:85:VAL:N	1:A:113:LEU:CD2	0.44	2.81	16	1
1:A:11:LEU:CD1	1:A:12:PRO:HD2	0.44	2.42	19	1
1:A:15:LEU:CD1	1:A:122:LEU:HD21	0.44	2.42	1	1
1:A:95:VAL:CG1	1:A:114:TYR:CD1	0.44	3.00	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:LEU:C	1:A:82:LEU:HD23	0.44	2.33	2	1
1:A:52:ALA:O	1:A:231:ILE:HG13	0.44	2.12	3	1
1:A:100:GLY:HA3	2:A:300:SAH:N3	0.44	2.27	10	1
1:A:188:ASP:OD1	1:A:192:ARG:HG3	0.44	2.12	12	2
1:A:191:GLU:C	1:A:240:VAL:HG12	0.44	2.32	15	1
1:A:84:ALA:O	1:A:113:LEU:CD1	0.44	2.65	18	1
1:A:88:GLN:HG2	1:A:113:LEU:HD21	0.44	1.89	18	1
1:A:122:LEU:HD21	1:A:125:GLU:HB3	0.44	1.89	19	1
1:A:138:ILE:O	1:A:138:ILE:CG2	0.44	2.64	15	4
1:A:28:ALA:O	1:A:32:ARG:HB2	0.44	2.12	6	1
1:A:77:ALA:HA	1:A:99:ASP:CB	0.44	2.42	7	1
1:A:127:LEU:N	1:A:127:LEU:CD2	0.44	2.80	7	1
1:A:17:ARG:NH1	1:A:18:VAL:HB	0.44	2.28	12	1
1:A:12:PRO:HD3	1:A:124:GLN:NE2	0.44	2.27	16	1
1:A:74:LEU:CD1	1:A:129:ASP:OD1	0.44	2.66	16	1
1:A:171:ARG:CA	1:A:228:SER:HB2	0.44	2.42	17	1
1:A:201:THR:CG2	1:A:201:THR:O	0.44	2.65	18	1
1:A:126:PRO:HB3	1:A:155:GLU:CD	0.44	2.33	2	2
1:A:137:VAL:CG1	1:A:166:VAL:CG1	0.44	2.90	2	1
1:A:121:THR:O	1:A:122:LEU:HD22	0.44	2.13	3	1
1:A:169:THR:CG2	1:A:231:ILE:HG12	0.44	2.43	8	3
1:A:48:LEU:HB3	1:A:205:ASP:OD2	0.44	2.13	7	1
1:A:11:LEU:HB2	2:A:300:SAH:HN61	0.44	1.70	10	1
1:A:155:GLU:OE1	1:A:158:ARG:HD2	0.44	2.13	10	1
1:A:68:PRO:HG2	1:A:92:PHE:CD1	0.44	2.48	18	3
1:A:137:VAL:HG13	1:A:166:VAL:CG1	0.44	2.26	13	1
1:A:74:LEU:O	1:A:138:ILE:N	0.44	2.48	16	4
1:A:96:GLN:CG	1:A:116:HIS:HB2	0.44	2.42	11	1
1:A:90:ARG:HD2	1:A:90:ARG:N	0.44	2.27	12	1
1:A:86:GLU:OE2	1:A:90:ARG:NH1	0.44	2.51	14	1
1:A:74:LEU:HD12	1:A:134:PHE:CE2	0.44	2.48	17	1
1:A:144:SER:N	1:A:148:VAL:O	0.44	2.51	19	1
1:A:14:VAL:CG1	1:A:121:THR:OG1	0.44	2.65	5	3
1:A:11:LEU:CD1	1:A:12:PRO:CD	0.44	2.95	17	3
1:A:100:GLY:CA	2:A:300:SAH:C2	0.44	2.96	10	1
1:A:142:ALA:O	1:A:143:LEU:HG	0.44	2.13	12	1
2:A:300:SAH:SD	2:A:300:SAH:C	0.44	3.06	13	1
1:A:161:LYS:HG2	1:A:162:PRO:HD2	0.44	1.88	15	1
1:A:88:GLN:HG2	1:A:113:LEU:CD2	0.44	2.42	18	1
1:A:202:GLN:NE2	1:A:233:LEU:HD13	0.44	2.27	19	1
1:A:64:PHE:CE2	1:A:66:GLY:HA3	0.44	2.48	4	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:199:LEU:HG	1:A:200:VAL:HG13	0.44	1.90	15	1
1:A:76:VAL:CG1	1:A:127:LEU:HD21	0.43	2.43	2	1
1:A:231:ILE:HD11	1:A:233:LEU:HD11	0.43	1.90	2	2
1:A:104:MET:SD	2:A:300:SAH:H4'	0.43	2.53	10	1
1:A:11:LEU:CG	2:A:300:SAH:N6	0.43	2.80	11	1
1:A:163:GLY:N	1:A:236:LYS:O	0.43	2.50	11	1
1:A:10:ARG:HA	1:A:13:GLN:NE2	0.43	2.28	15	1
1:A:15:LEU:HD13	1:A:125:GLU:OE2	0.43	2.13	1	1
1:A:169:THR:HG22	1:A:231:ILE:CB	0.43	2.43	2	1
1:A:84:ALA:HA	1:A:87:LEU:CD1	0.43	2.34	3	1
1:A:92:PHE:N	1:A:92:PHE:HD1	0.43	2.10	12	6
1:A:157:LEU:O	1:A:236:LYS:HE3	0.43	2.13	5	1
1:A:139:ILE:CD1	1:A:156:LEU:HD13	0.43	2.43	7	1
1:A:143:LEU:O	1:A:145:GLU:N	0.43	2.51	9	1
1:A:190:LEU:HB3	1:A:195:VAL:CG2	0.43	2.43	18	4
1:A:173:ASN:OD1	1:A:177:LEU:HD23	0.43	2.13	17	1
1:A:180:LYS:CG	1:A:181:GLU:N	0.43	2.81	17	1
1:A:30:LYS:HG2	1:A:34:TYR:HE1	0.43	1.72	1	1
1:A:183:LEU:HD12	1:A:183:LEU:C	0.43	2.33	2	2
1:A:199:LEU:HD21	1:A:235:ARG:CZ	0.43	2.42	3	1
1:A:60:LEU:O	1:A:64:PHE:HB3	0.43	2.13	4	5
1:A:64:PHE:CE1	1:A:66:GLY:O	0.43	2.71	4	3
1:A:96:GLN:CD	1:A:134:PHE:CE1	0.43	2.92	20	4
1:A:154:PRO:O	1:A:158:ARG:N	0.43	2.48	8	4
1:A:87:LEU:CD2	1:A:92:PHE:CE2	0.43	3.02	7	1
1:A:92:PHE:N	1:A:92:PHE:CD1	0.43	2.86	8	1
1:A:156:LEU:HA	1:A:159:VAL:HG22	0.43	1.89	14	2
1:A:75:ASP:N	1:A:96:GLN:O	0.43	2.44	11	1
1:A:165:LEU:N	1:A:165:LEU:CD2	0.43	2.81	11	2
1:A:37:TRP:O	1:A:38:ALA:C	0.43	2.55	12	1
1:A:51:ARG:HB2	1:A:204:VAL:HG12	0.43	1.90	14	1
1:A:98:VAL:O	1:A:99:ASP:OD1	0.43	2.36	10	6
1:A:195:VAL:O	1:A:237:GLN:CA	0.43	2.66	4	6
1:A:45:VAL:HA	1:A:50:TYR:CD1	0.43	2.48	7	1
1:A:12:PRO:HG3	1:A:124:GLN:OE1	0.43	2.13	9	1
1:A:183:LEU:O	1:A:186:THR:HB	0.43	2.13	9	1
1:A:77:ALA:HB2	2:A:300:SAH:N3	0.43	2.27	19	4
1:A:84:ALA:CB	1:A:113:LEU:HG	0.43	2.43	18	1
1:A:70:ASP:O	1:A:70:ASP:OD2	0.43	2.37	15	6
1:A:170:THR:O	1:A:229:GLY:CA	0.43	2.67	7	1
1:A:15:LEU:HD13	1:A:15:LEU:O	0.43	2.13	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:95:VAL:HG12	1:A:114:TYR:CD1	0.43	2.48	15	1
1:A:197:GLU:OE2	1:A:239:THR:O	0.43	2.36	15	1
1:A:114:TYR:N	1:A:114:TYR:CD2	0.43	2.86	2	1
1:A:51:ARG:O	1:A:54:ARG:N	0.43	2.51	12	2
1:A:84:ALA:CA	1:A:87:LEU:HD12	0.43	2.33	3	1
1:A:52:ALA:CB	1:A:53:PRO:HD3	0.43	2.36	4	2
1:A:37:TRP:HB3	1:A:41:TYR:HE1	0.43	1.73	8	1
1:A:69:HIS:CD2	1:A:93:LEU:HD13	0.43	2.47	8	1
1:A:80:THR:OG1	1:A:83:VAL:HG23	0.43	2.13	8	1
2:A:300:SAH:CB	2:A:300:SAH:C4'	0.43	2.94	9	1
1:A:100:GLY:HA3	2:A:300:SAH:C2	0.43	2.44	18	1
1:A:55:LEU:O	1:A:59:CYS:N	0.43	2.41	19	1
1:A:198:CYS:CB	1:A:234:TYR:CE1	0.43	3.00	4	3
1:A:162:PRO:HB3	1:A:237:GLN:CB	0.43	2.44	5	1
1:A:173:ASN:ND2	1:A:180:LYS:HB2	0.43	2.28	6	2
1:A:10:ARG:HG2	1:A:146:GLY:CA	0.43	2.42	9	1
1:A:196:TRP:CZ3	1:A:234:TYR:HB2	0.43	2.47	13	1
1:A:30:LYS:O	1:A:34:TYR:HD1	0.43	1.95	15	1
1:A:61:SER:O	1:A:64:PHE:O	0.43	2.36	16	1
1:A:87:LEU:CD2	1:A:92:PHE:CG	0.43	3.02	19	1
1:A:37:TRP:O	1:A:41:TYR:N	0.43	2.52	4	1
1:A:100:GLY:N	2:A:300:SAH:O2'	0.43	2.49	4	1
1:A:15:LEU:HD22	1:A:122:LEU:CD2	0.43	2.44	9	1
1:A:173:ASN:O	1:A:177:LEU:CA	0.43	2.66	13	1
1:A:36:ASP:OD2	1:A:37:TRP:CD1	0.43	2.72	15	1
1:A:18:VAL:HG13	1:A:27:LEU:HD21	0.43	1.90	2	1
1:A:45:VAL:O	1:A:50:TYR:HD2	0.43	1.96	3	2
1:A:127:LEU:HG	1:A:156:LEU:CG	0.43	2.41	7	1
2:A:300:SAH:HB2	2:A:300:SAH:C4'	0.43	2.38	9	1
1:A:64:PHE:HE2	1:A:66:GLY:O	0.43	1.97	16	1
1:A:157:LEU:CD2	1:A:196:TRP:CZ3	0.43	3.02	18	1
1:A:45:VAL:O	1:A:50:TYR:HB2	0.43	2.14	19	2
1:A:15:LEU:HA	1:A:18:VAL:CG2	0.43	2.43	1	2
1:A:202:GLN:HB2	1:A:231:ILE:HG21	0.43	1.88	2	2
1:A:78:CYS:SG	1:A:141:GLY:O	0.43	2.76	4	1
1:A:101:SER:HB3	1:A:104:MET:CB	0.43	2.44	5	1
1:A:10:ARG:HD3	1:A:34:TYR:CZ	0.43	2.49	6	1
1:A:142:ALA:O	1:A:148:VAL:CG1	0.43	2.67	11	2
1:A:76:VAL:H	1:A:139:ILE:HD13	0.43	1.73	17	1
1:A:35:ASP:OD1	1:A:101:SER:HB3	0.42	2.14	1	1
1:A:60:LEU:HB2	1:A:233:LEU:HD21	0.42	1.91	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:199:LEU:HD21	1:A:235:ARG:HG3	0.42	1.90	1	1
1:A:76:VAL:CG2	1:A:156:LEU:CD1	0.42	2.97	3	1
1:A:129:ASP:O	1:A:159:VAL:CG1	0.42	2.67	9	2
1:A:130:PRO:C	1:A:133:THR:HG1	0.42	2.16	14	1
1:A:172:THR:HG1	1:A:206:HIS:CG	0.42	2.29	17	1
1:A:176:ASN:O	1:A:179:TYR:HB2	0.42	2.14	18	2
1:A:100:GLY:CA	2:A:300:SAH:N3	0.42	2.82	10	3
1:A:41:TYR:CD2	2:A:300:SAH:O	0.42	2.72	6	1
1:A:199:LEU:HD21	1:A:235:ARG:HD2	0.42	1.91	13	1
1:A:231:ILE:HD13	1:A:232:TYR:H	0.42	1.73	13	1
1:A:11:LEU:CD2	1:A:149:PRO:HD2	0.42	2.43	15	1
1:A:10:ARG:C	1:A:12:PRO:HD2	0.42	2.35	17	1
1:A:101:SER:O	1:A:105:LEU:N	0.42	2.46	3	1
1:A:50:TYR:OH	1:A:170:THR:N	0.42	2.53	5	1
1:A:153:ILE:O	1:A:156:LEU:HB2	0.42	2.13	5	2
1:A:162:PRO:HG3	1:A:237:GLN:OE1	0.42	2.14	7	1
1:A:142:ALA:O	1:A:143:LEU:CD2	0.42	2.66	11	1
1:A:34:TYR:HD2	2:A:300:SAH:HB2	0.42	1.74	14	1
1:A:29:CYS:O	1:A:33:PHE:CD2	0.42	2.73	17	2
1:A:131:GLU:CG	1:A:158:ARG:HG2	0.42	2.42	19	2
2:A:300:SAH:C	2:A:300:SAH:SD	0.42	3.07	19	1
1:A:190:LEU:HB2	1:A:196:TRP:NE1	0.42	2.29	16	2
1:A:68:PRO:CB	1:A:92:PHE:CG	0.42	3.03	4	1
1:A:14:VAL:O	1:A:18:VAL:N	0.42	2.48	6	3
1:A:127:LEU:CD1	1:A:156:LEU:HG	0.42	2.42	20	3
1:A:11:LEU:C	1:A:11:LEU:CD2	0.42	2.79	9	1
1:A:11:LEU:HD21	1:A:123:GLY:HA3	0.42	1.84	10	1
1:A:127:LEU:HD11	1:A:156:LEU:HD11	0.42	1.91	10	1
1:A:201:THR:OG1	1:A:232:TYR:HB3	0.42	2.14	15	1
1:A:50:TYR:CE2	1:A:229:GLY:CA	0.42	3.02	20	1
1:A:30:LYS:HG2	1:A:34:TYR:CE1	0.42	2.49	1	1
1:A:41:TYR:CD1	2:A:300:SAH:HB1	0.42	2.50	1	1
1:A:17:ARG:HE	1:A:27:LEU:HD22	0.42	1.74	5	1
1:A:111:ARG:HG3	1:A:113:LEU:CD1	0.42	2.41	5	1
1:A:157:LEU:HB3	1:A:236:LYS:CD	0.42	2.45	6	1
1:A:143:LEU:CD2	1:A:153:ILE:HD11	0.42	2.44	20	2
1:A:41:TYR:CE2	2:A:300:SAH:N	0.42	2.87	10	1
1:A:171:ARG:CB	1:A:174:PRO:HG3	0.42	2.44	12	1
1:A:172:THR:O	1:A:180:LYS:CG	0.42	2.68	13	1
1:A:140:VAL:HG12	1:A:169:THR:HG22	0.42	1.90	14	1
1:A:123:GLY:CA	1:A:149:PRO:CD	0.42	2.97	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:LEU:HD13	1:A:138:ILE:HD12	0.42	1.92	20	1
1:A:177:LEU:N	1:A:178:PRO:CD	0.42	2.82	5	4
1:A:99:ASP:HB2	1:A:105:LEU:CG	0.42	2.45	2	1
1:A:171:ARG:CB	1:A:228:SER:HB2	0.42	2.45	14	2
1:A:191:GLU:HB3	1:A:240:VAL:HB	0.42	1.90	2	1
1:A:231:ILE:HD11	1:A:233:LEU:CD1	0.42	2.44	5	3
1:A:68:PRO:CG	1:A:92:PHE:CE1	0.42	3.03	12	2
1:A:88:GLN:CD	1:A:113:LEU:HG	0.42	2.35	5	1
1:A:129:ASP:O	1:A:159:VAL:HG12	0.42	2.15	10	1
1:A:169:THR:O	1:A:170:THR:HB	0.42	2.15	11	1
1:A:137:VAL:CG1	1:A:166:VAL:CG2	0.42	2.92	13	1
1:A:153:ILE:HA	1:A:156:LEU:CD1	0.42	2.43	13	1
1:A:145:GLU:OE2	1:A:171:ARG:NH2	0.42	2.51	14	1
1:A:177:LEU:HB3	1:A:178:PRO:HD3	0.42	1.90	18	1
1:A:88:GLN:OE1	1:A:113:LEU:HD11	0.42	2.15	1	1
1:A:114:TYR:HD1	1:A:117:LEU:CD2	0.42	2.23	2	1
1:A:98:VAL:O	1:A:99:ASP:OD2	0.42	2.37	12	2
1:A:199:LEU:HD21	1:A:235:ARG:HD3	0.42	1.91	8	1
1:A:111:ARG:HG2	1:A:113:LEU:HD23	0.42	1.92	9	1
1:A:172:THR:C	1:A:174:PRO:HD3	0.42	2.35	9	1
1:A:72:LEU:CD1	1:A:72:LEU:C	0.42	2.87	12	2
1:A:143:LEU:HB2	1:A:170:THR:HG1	0.42	1.74	11	1
1:A:58:ASP:HA	1:A:90:ARG:NH2	0.42	2.30	13	1
1:A:83:VAL:O	1:A:87:LEU:N	0.42	2.45	14	1
1:A:10:ARG:O	1:A:13:GLN:N	0.42	2.48	15	2
1:A:74:LEU:CD2	1:A:156:LEU:HD11	0.42	2.38	17	1
1:A:21:SER:O	1:A:22:HIS:HB2	0.42	2.15	18	1
1:A:145:GLU:HG3	1:A:174:PRO:HG3	0.42	1.91	1	1
1:A:105:LEU:O	1:A:109:ARG:CB	0.42	2.68	9	1
1:A:37:TRP:CB	2:A:300:SAH:HA	0.42	2.44	11	1
1:A:74:LEU:CD2	1:A:75:ASP:N	0.42	2.76	7	2
1:A:143:LEU:CG	1:A:170:THR:HB	0.42	2.45	7	2
1:A:11:LEU:HD22	1:A:122:LEU:O	0.42	2.15	8	1
1:A:171:ARG:CG	1:A:228:SER:HB2	0.42	2.43	20	2
1:A:60:LEU:HD23	1:A:60:LEU:C	0.42	2.35	9	1
1:A:143:LEU:CD2	1:A:153:ILE:CD1	0.42	2.98	15	2
1:A:77:ALA:O	1:A:104:MET:HE2	0.42	2.15	14	1
1:A:187:LEU:HB3	1:A:234:TYR:HE1	0.42	1.74	17	1
1:A:196:TRP:O	1:A:196:TRP:HD1	0.42	1.98	19	1
1:A:11:LEU:O	1:A:121:THR:HB	0.42	2.14	20	1
1:A:53:PRO:O	1:A:57:VAL:HG12	0.42	2.15	12	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:ASP:OD2	1:A:114:TYR:CE1	0.42	2.73	3	1
1:A:173:ASN:CG	1:A:180:LYS:HG3	0.42	2.35	3	1
1:A:155:GLU:OE1	1:A:158:ARG:NH1	0.42	2.53	5	1
1:A:28:ALA:O	1:A:32:ARG:CB	0.42	2.68	6	1
1:A:50:TYR:HA	1:A:204:VAL:HG12	0.42	1.85	6	1
1:A:31:LEU:HD13	1:A:100:GLY:O	0.42	2.15	7	1
1:A:45:VAL:O	1:A:50:TYR:HD1	0.42	1.97	7	1
1:A:52:ALA:HA	1:A:231:ILE:HG21	0.42	1.92	7	1
1:A:14:VAL:HG22	1:A:30:LYS:HE3	0.42	1.91	14	1
1:A:233:LEU:N	1:A:233:LEU:CD1	0.42	2.83	17	1
1:A:121:THR:O	1:A:122:LEU:CG	0.42	2.67	20	1
1:A:12:PRO:HA	1:A:122:LEU:HD12	0.41	1.92	2	1
1:A:50:TYR:CD1	1:A:53:PRO:HD3	0.41	2.50	2	1
1:A:57:VAL:CG1	1:A:58:ASP:N	0.41	2.83	6	5
1:A:174:PRO:HD2	1:A:180:LYS:HE3	0.41	1.91	3	1
1:A:15:LEU:CD2	1:A:122:LEU:CD1	0.41	2.98	5	2
1:A:145:GLU:OE2	1:A:170:THR:CG2	0.41	2.68	7	1
1:A:164:GLY:C	1:A:165:LEU:HD12	0.41	2.36	7	1
1:A:168:LEU:C	1:A:168:LEU:CD1	0.41	2.83	7	1
1:A:123:GLY:O	1:A:149:PRO:HG2	0.41	2.15	10	2
1:A:147:GLN:HB3	2:A:300:SAH:N7	0.41	2.29	8	1
1:A:55:LEU:CB	1:A:202:GLN:HG2	0.41	2.38	9	1
1:A:84:ALA:O	1:A:113:LEU:HD21	0.41	2.14	9	1
1:A:11:LEU:C	1:A:11:LEU:CD1	0.41	2.89	12	1
1:A:171:ARG:HB2	1:A:174:PRO:HG3	0.41	1.91	12	1
1:A:77:ALA:CB	2:A:300:SAH:C1'	0.41	2.98	20	2
1:A:57:VAL:HG21	1:A:87:LEU:HA	0.41	1.91	3	1
1:A:122:LEU:HD12	1:A:125:GLU:HB2	0.41	1.92	3	1
1:A:150:CYS:HA	1:A:153:ILE:CG1	0.41	2.45	7	2
1:A:37:TRP:CZ3	1:A:40:GLU:OE1	0.41	2.73	12	1
1:A:40:GLU:O	1:A:43:GLN:HG2	0.41	2.14	12	2
1:A:127:LEU:HD13	1:A:156:LEU:CD2	0.41	2.45	14	1
1:A:204:VAL:HG23	1:A:206:HIS:HB3	0.41	1.92	18	1
1:A:100:GLY:O	1:A:119:LEU:CD1	0.41	2.68	1	1
1:A:35:ASP:HA	1:A:38:ALA:CB	0.41	2.46	3	1
1:A:168:LEU:CG	1:A:232:TYR:CZ	0.41	3.03	7	1
1:A:74:LEU:HD23	1:A:75:ASP:H	0.41	1.72	19	3
1:A:169:THR:C	1:A:170:THR:OG1	0.41	2.58	9	1
1:A:197:GLU:HG3	1:A:238:GLU:HB2	0.41	1.91	15	1
1:A:88:GLN:OE1	1:A:113:LEU:HD21	0.41	2.15	19	1
1:A:206:HIS:NE2	1:A:230:ILE:HD12	0.41	2.31	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:GLN:HB2	1:A:134:PHE:CE1	0.41	2.51	7	2
1:A:127:LEU:CD1	1:A:155:GLU:HB3	0.41	2.46	9	1
1:A:101:SER:HB3	2:A:300:SAH:O3'	0.41	2.16	12	1
1:A:17:ARG:NH2	1:A:27:LEU:HG	0.41	2.30	13	1
1:A:173:ASN:O	1:A:177:LEU:HA	0.41	2.15	13	1
1:A:41:TYR:CD1	2:A:300:SAH:O	0.41	2.73	14	1
1:A:79:GLY:O	1:A:80:THR:OG1	0.41	2.36	14	1
1:A:104:MET:HB2	2:A:300:SAH:O3'	0.41	2.14	16	1
1:A:11:LEU:HD13	1:A:122:LEU:CA	0.41	2.40	17	1
1:A:15:LEU:HD22	1:A:122:LEU:CD1	0.41	2.45	17	1
1:A:129:ASP:OD1	1:A:129:ASP:N	0.41	2.53	17	1
1:A:187:LEU:HB3	1:A:234:TYR:CE1	0.41	2.50	17	1
1:A:143:LEU:HG	1:A:170:THR:HB	0.41	1.92	20	1
1:A:51:ARG:O	1:A:52:ALA:C	0.41	2.59	1	2
1:A:130:PRO:HB2	1:A:133:THR:OG1	0.41	2.15	4	2
1:A:235:ARG:CZ	1:A:238:GLU:OE1	0.41	2.69	7	1
1:A:122:LEU:HA	1:A:122:LEU:HD12	0.41	1.79	9	1
1:A:72:LEU:HD12	1:A:134:PHE:CG	0.41	2.50	10	1
1:A:121:THR:HB	2:A:300:SAH:N6	0.41	2.31	10	1
1:A:15:LEU:HD22	1:A:18:VAL:CG1	0.41	2.45	12	1
1:A:96:GLN:CD	1:A:134:PHE:CZ	0.41	2.94	3	1
1:A:105:LEU:HD11	1:A:119:LEU:HD13	0.41	1.92	3	1
1:A:88:GLN:HG3	1:A:113:LEU:HG	0.41	1.93	5	1
1:A:18:VAL:CG2	1:A:27:LEU:HD13	0.41	2.36	7	1
1:A:195:VAL:HG23	1:A:196:TRP:N	0.41	2.31	13	1
1:A:74:LEU:O	1:A:75:ASP:OD1	0.41	2.38	14	1
1:A:75:ASP:OD1	1:A:138:ILE:CG2	0.41	2.68	14	1
1:A:11:LEU:HD23	1:A:149:PRO:CD	0.41	2.45	15	1
1:A:78:CYS:HA	1:A:104:MET:HE2	0.41	1.93	17	1
1:A:109:ARG:CG	1:A:117:LEU:HD12	0.41	2.45	17	1
1:A:85:VAL:HA	1:A:113:LEU:CD2	0.41	2.45	1	1
1:A:180:LYS:O	1:A:183:LEU:HB3	0.41	2.16	9	3
1:A:191:GLU:HG3	1:A:197:GLU:CA	0.41	2.44	3	1
1:A:171:ARG:HB2	1:A:228:SER:CB	0.41	2.46	4	1
1:A:68:PRO:HA	1:A:71:ALA:HB3	0.41	1.93	8	1
1:A:188:ASP:OD1	1:A:192:ARG:HG2	0.41	2.16	8	1
1:A:172:THR:HB	1:A:180:LYS:HE2	0.41	1.93	15	1
1:A:58:ASP:OD2	1:A:62:ARG:NE	0.41	2.54	1	1
1:A:137:VAL:HG12	1:A:166:VAL:CG2	0.41	2.38	2	1
1:A:105:LEU:HB3	1:A:109:ARG:HH12	0.41	1.76	3	1
1:A:111:ARG:HA	1:A:111:ARG:HH11	0.41	1.76	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:204:VAL:CG2	1:A:230:ILE:CA	0.41	2.99	6	1
1:A:202:GLN:CD	1:A:231:ILE:HG21	0.41	2.36	8	1
1:A:77:ALA:C	1:A:79:GLY:H	0.41	2.19	11	1
1:A:11:LEU:CD1	1:A:12:PRO:N	0.41	2.80	12	1
1:A:72:LEU:C	1:A:72:LEU:CD1	0.41	2.90	13	1
1:A:199:LEU:HD13	1:A:235:ARG:NH2	0.41	2.29	15	1
1:A:87:LEU:HD21	1:A:92:PHE:HD2	0.41	1.71	18	1
1:A:69:HIS:CD2	1:A:93:LEU:CD2	0.41	3.02	8	2
1:A:189:SER:HA	1:A:192:ARG:HG2	0.41	1.92	4	1
1:A:52:ALA:CB	1:A:53:PRO:CD	0.41	2.98	5	2
1:A:60:LEU:CA	1:A:233:LEU:CD2	0.41	2.98	6	1
1:A:191:GLU:OE1	1:A:240:VAL:HA	0.41	2.16	6	1
1:A:204:VAL:CG2	1:A:206:HIS:CD2	0.41	3.04	7	1
1:A:14:VAL:CG2	1:A:121:THR:OG1	0.41	2.69	8	1
1:A:48:LEU:HD23	1:A:205:ASP:OD1	0.41	2.15	9	1
1:A:169:THR:HB	1:A:231:ILE:CB	0.41	2.45	9	1
1:A:14:VAL:CG1	1:A:15:LEU:N	0.41	2.84	12	1
1:A:143:LEU:HA	1:A:148:VAL:HB	0.41	1.92	12	1
1:A:155:GLU:OE2	1:A:158:ARG:HD2	0.41	2.16	12	1
1:A:121:THR:O	1:A:122:LEU:HD13	0.41	2.16	13	1
1:A:21:SER:OG	1:A:22:HIS:N	0.41	2.53	15	1
1:A:133:THR:CG2	1:A:134:PHE:CD1	0.41	3.04	15	1
1:A:69:HIS:CB	1:A:93:LEU:HD12	0.41	2.46	16	1
1:A:123:GLY:CA	1:A:152:ALA:HB2	0.41	2.46	17	1
1:A:72:LEU:HD21	1:A:96:GLN:HE21	0.41	1.76	18	1
1:A:88:GLN:HG2	1:A:113:LEU:CD1	0.41	2.46	18	1
1:A:104:MET:HG3	2:A:300:SAH:H3'	0.41	1.91	18	1
1:A:11:LEU:HB2	1:A:123:GLY:HA3	0.41	1.93	19	1
1:A:14:VAL:HG13	1:A:17:ARG:NE	0.41	2.31	1	1
1:A:98:VAL:HA	1:A:118:SER:O	0.41	2.16	1	1
1:A:141:GLY:N	1:A:169:THR:O	0.41	2.49	10	2
1:A:88:GLN:HG2	1:A:113:LEU:HD11	0.41	1.92	18	1
1:A:12:PRO:CA	1:A:122:LEU:HA	0.41	2.43	20	1
1:A:29:CYS:O	1:A:33:PHE:HD1	0.41	1.99	20	1
1:A:205:ASP:O	1:A:205:ASP:OD2	0.40	2.39	1	2
1:A:187:LEU:N	1:A:187:LEU:CD1	0.40	2.84	12	2
1:A:171:ARG:C	1:A:174:PRO:HD3	0.40	2.35	3	1
1:A:30:LYS:HA	1:A:33:PHE:HD1	0.40	1.76	5	1
1:A:191:GLU:HG2	1:A:240:VAL:CA	0.40	2.46	6	1
1:A:204:VAL:HG22	1:A:230:ILE:HG13	0.40	1.93	7	1
1:A:50:TYR:CD1	1:A:53:PRO:CG	0.40	3.04	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:239:THR:O	1:A:240:VAL:HG23	0.40	2.16	11	1
1:A:49:LYS:O	1:A:51:ARG:N	0.40	2.54	12	1
1:A:52:ALA:CB	1:A:231:ILE:CG1	0.40	2.99	12	1
1:A:170:THR:OG1	1:A:171:ARG:N	0.40	2.55	12	1
1:A:14:VAL:HG22	1:A:30:LYS:HE2	0.40	1.93	3	1
1:A:200:VAL:HG23	1:A:233:LEU:HD13	0.40	1.91	6	1
1:A:75:ASP:OD2	1:A:138:ILE:CG2	0.40	2.63	9	1
1:A:74:LEU:HB2	1:A:134:PHE:HD2	0.40	1.76	10	1
1:A:183:LEU:O	1:A:187:LEU:HD22	0.40	2.15	17	2
1:A:149:PRO:O	1:A:151:SER:N	0.40	2.53	11	2
1:A:155:GLU:O	1:A:159:VAL:N	0.40	2.52	14	1
1:A:162:PRO:CG	1:A:237:GLN:OE1	0.40	2.70	15	1
1:A:108:ALA:HB1	1:A:114:TYR:CG	0.40	2.50	19	1
1:A:122:LEU:CD2	1:A:125:GLU:HB3	0.40	2.46	19	1
1:A:69:HIS:NE2	1:A:93:LEU:HD22	0.40	2.30	2	1
1:A:165:LEU:HD12	1:A:199:LEU:CD1	0.40	2.47	2	1
1:A:15:LEU:HD23	1:A:122:LEU:CD1	0.40	2.46	4	1
1:A:157:LEU:O	1:A:236:LYS:HD3	0.40	2.16	4	1
1:A:73:ILE:HB	1:A:94:GLN:O	0.40	2.17	6	1
1:A:111:ARG:CG	1:A:113:LEU:CD2	0.40	2.91	10	1
1:A:52:ALA:HB1	1:A:169:THR:HB	0.40	1.93	11	1
1:A:23:GLY:O	1:A:27:LEU:CD1	0.40	2.69	13	1
1:A:41:TYR:CD1	2:A:300:SAH:C	0.40	3.04	14	1
1:A:52:ALA:HB1	1:A:169:THR:CB	0.40	2.47	14	1
1:A:114:TYR:HB3	1:A:117:LEU:HG	0.40	1.92	16	1
1:A:199:LEU:CG	1:A:235:ARG:HG3	0.40	2.46	8	1
1:A:106:LYS:O	1:A:110:ALA:N	0.40	2.54	10	1
1:A:172:THR:CA	1:A:180:LYS:HG3	0.40	2.46	13	1
1:A:11:LEU:CD1	1:A:122:LEU:HD12	0.40	2.45	15	1
1:A:58:ASP:O	1:A:90:ARG:NH2	0.40	2.54	15	1
1:A:120:CYS:HB3	1:A:128:PRO:HG3	0.40	1.94	16	1
1:A:137:VAL:HG21	1:A:156:LEU:HG	0.40	1.93	17	1
1:A:160:THR:HG22	1:A:236:LYS:HG3	0.40	1.92	17	1
1:A:147:GLN:NE2	2:A:300:SAH:O	0.40	2.54	18	1
1:A:138:ILE:HA	1:A:167:CYS:HB3	0.40	1.93	19	1
1:A:12:PRO:HB2	1:A:124:GLN:HG2	0.40	1.93	20	1
1:A:37:TRP:HB3	2:A:300:SAH:O	0.40	2.16	20	1
1:A:10:ARG:NH1	1:A:34:TYR:CD1	0.40	2.90	6	1
1:A:98:VAL:HG11	1:A:128:PRO:HB2	0.40	1.94	6	1
1:A:17:ARG:CZ	1:A:27:LEU:HA	0.40	2.47	13	1
1:A:239:THR:HG22	1:A:240:VAL:HG23	0.40	1.94	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:191:GLU:HG3	1:A:197:GLU:HG3	0.40	1.93	14	1
1:A:74:LEU:HD13	1:A:156:LEU:HD22	0.40	1.92	15	1
1:A:83:VAL:O	1:A:87:LEU:HB2	0.40	2.16	15	1
1:A:52:ALA:CB	1:A:169:THR:HB	0.40	2.47	16	1
1:A:157:LEU:HD12	1:A:157:LEU:N	0.40	2.32	16	1
1:A:22:HIS:CG	1:A:22:HIS:O	0.40	2.74	17	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	209/240 (87%)	185±2 (89±1%)	17±3 (8±1%)	7±1 (3±1%)	6	37
All	All	4180/4800 (87%)	3701 (89%)	339 (8%)	140 (3%)	6	37

All 23 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	237	GLN	20
1	A	150	CYS	19
1	A	145	GLU	17
1	A	229	GLY	15
1	A	170	THR	12
1	A	204	VAL	10
1	A	120	CYS	9
1	A	50	TYR	7
1	A	123	GLY	5
1	A	23	GLY	5
1	A	144	SER	4
1	A	173	ASN	3
1	A	10	ARG	2
1	A	21	SER	2
1	A	206	HIS	2
1	A	77	ALA	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	149	PRO	1
1	A	38	ALA	1
1	A	175	SER	1
1	A	80	THR	1
1	A	228	SER	1
1	A	64	PHE	1
1	A	52	ALA	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	174/194 (90%)	159±3 (91±1%)	15±3 (9±1%)	14	61
All	All	3480/3880 (90%)	3180 (91%)	300 (9%)	14	61

All 52 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	72	LEU	20
1	A	196	TRP	20
1	A	187	LEU	19
1	A	231	ILE	19
1	A	129	ASP	17
1	A	17	ARG	17
1	A	113	LEU	14
1	A	172	THR	11
1	A	201	THR	11
1	A	92	PHE	9
1	A	122	LEU	9
1	A	195	VAL	9
1	A	204	VAL	9
1	A	202	GLN	8
1	A	50	TYR	8
1	A	21	SER	8
1	A	183	LEU	7
1	A	127	LEU	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	114	TYR	6
1	A	173	ASN	5
1	A	11	LEU	5
1	A	138	ILE	4
1	A	206	HIS	4
1	A	75	ASP	4
1	A	121	THR	4
1	A	80	THR	4
1	A	177	LEU	3
1	A	200	VAL	3
1	A	161	LYS	3
1	A	29	CYS	3
1	A	153	ILE	3
1	A	125	GLU	3
1	A	181	GLU	2
1	A	65	ARG	2
1	A	144	SER	2
1	A	167	CYS	2
1	A	236	LYS	1
1	A	99	ASP	1
1	A	27	LEU	1
1	A	37	TRP	1
1	A	168	LEU	1
1	A	118	SER	1
1	A	78	CYS	1
1	A	240	VAL	1
1	A	169	THR	1
1	A	175	SER	1
1	A	158	ARG	1
1	A	230	ILE	1
1	A	170	THR	1
1	A	228	SER	1
1	A	143	LEU	1
1	A	69	HIS	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 [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

1 ligand is modelled in this entry.

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths		
					Counts	RMSZ	#Z>2
2	SAH	A	300	-	21,28,28	0.60±0.02	0±0 (0±0%)

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond angles		
					Counts	RMSZ	#Z>2
2	SAH	A	300	-	20,40,40	0.78±0.05	1±0 (5±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	SAH	A	300	-	-	0±0,7,31,31	0±0,3,3,3

There are no bond-length outliers.

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

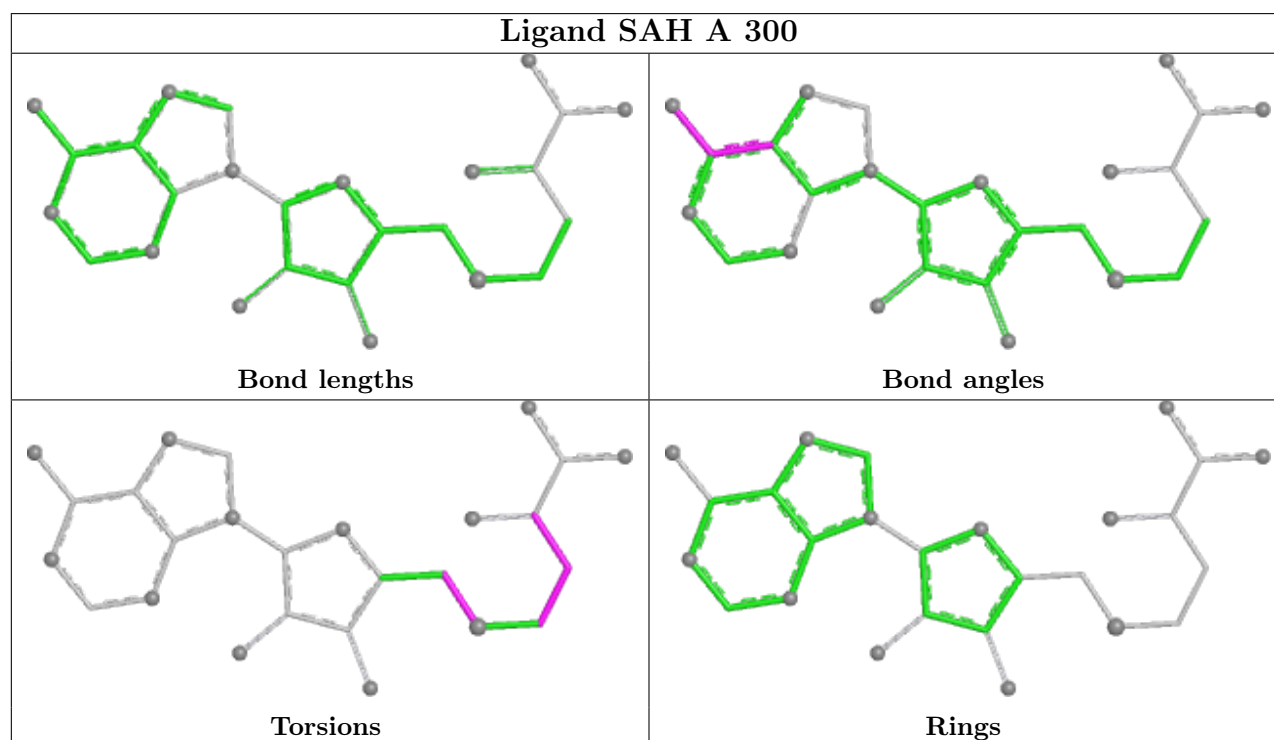
Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
2	A	300	SAH	C5-C6-N6	2.51	124.17	120.35	7	20
2	A	300	SAH	O4'-C1'-C2'	2.12	103.83	106.93	7	1

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 ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 69% for the well-defined parts and 68% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_1*

7.1.1 Bookkeeping

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

Total number of shifts	2166
Number of shifts mapped to atoms	2166
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	0

7.1.2 Chemical shift referencing

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction \pm precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	226	-0.27 ± 0.08	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	190	0.34 ± 0.13	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	218	-0.03 ± 0.11	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	207	-0.04 ± 0.30	None needed (< 0.5 ppm)

7.1.3 Completeness of resonance assignments

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 69%, i.e. 1744 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2519. 0 out of 47 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	957/1022 (94%)	375/406 (92%)	396/420 (94%)	186/196 (95%)
Sidechain	756/1341 (56%)	444/782 (57%)	307/499 (62%)	5/60 (8%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Aromatic	31/156 (20%)	23/80 (29%)	8/64 (12%)	0/12 (0%)
Overall	1744/2519 (69%)	842/1268 (66%)	711/983 (72%)	191/268 (71%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 68%, i.e. 1921 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2825. 0 out of 49 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	1069/1172 (91%)	418/466 (90%)	444/480 (92%)	207/226 (92%)
Sidechain	819/1476 (55%)	481/859 (56%)	331/554 (60%)	7/63 (11%)
Aromatic	33/177 (19%)	25/91 (27%)	8/73 (11%)	0/13 (0%)
Overall	1921/2825 (68%)	924/1416 (65%)	783/1107 (71%)	214/302 (71%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

There are no statistically unusual chemical shifts.

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

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

Random coil index (RCI) for chain A:

