



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 01:44 AM UTC

PDB ID : 1E88 / pdb_00001e88
Title : Solution structure of 6F11F22F2, a compact three-module fragment of the gelatin-binding domain of human fibronectin
Authors : Pickford, A.R.; Smith, S.P.; Staunton, D.; Boyd, J.; Campbell, I.D.
Deposited on : 2000-09-18

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

MolProbity	:	4-5-2 with Phenix2.0
Mogul	:	2022.3.0, CSD as543be (2022)
Percentile statistics	:	20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.49

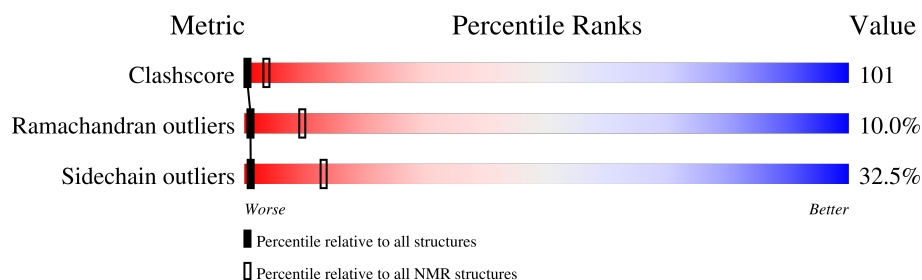
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	160	

The following table lists non-polymeric compounds, carbohydrate monomers and non-standard residues in protein, DNA and RNA chains that are outliers for geometric criteria:

Mol	Chain	Compound	Res	Total models with violations	
				Chirality	Geometry
2	A	NAG	161	1	-

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 14 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 10 as representative.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:3-A:40, A:102-A:158 (95)	1.12	14
2	A:45-A:98 (54)	0.65	9

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 3 clusters and 2 single-model clusters were found.

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

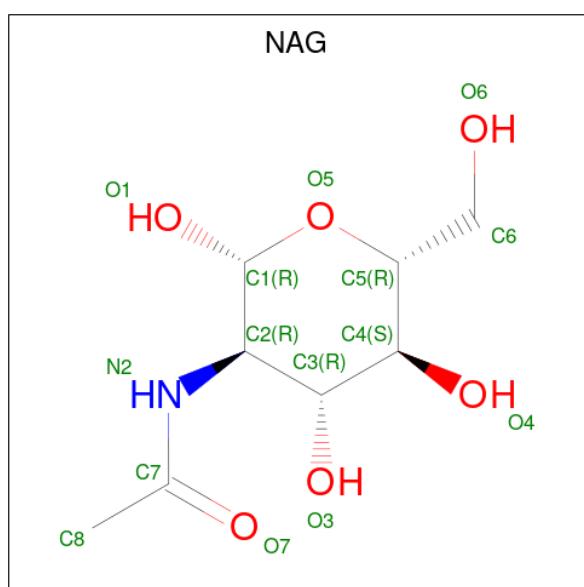
3 Entry composition [i](#)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2394 atoms, of which 1134 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called FIBRONECTIN.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	160	Total	C	H	N	O	S	0
			2366	763	1120	217	250	16	

- Molecule 2 is 2-acetamido-2-deoxy-beta-D-glucopyranose (CCD ID: NAG) (formula: $C_8H_{15}NO_6$).



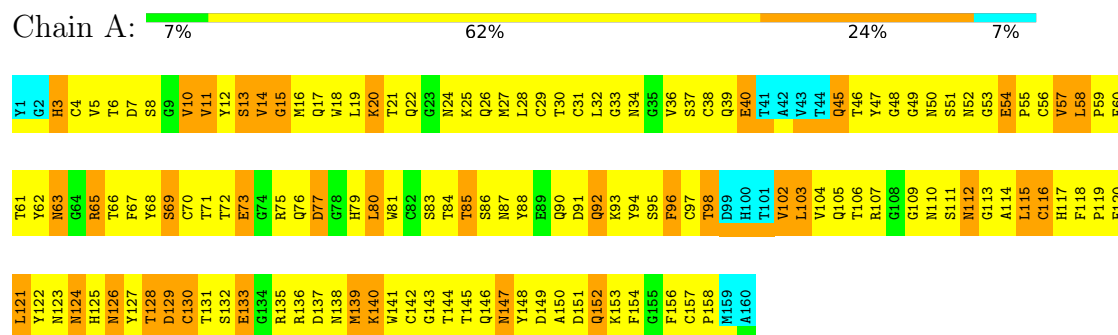
Mol	Chain	Residues	Atoms				
2	A	1	Total	C	H	N	O
			28	8	14	1	5

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

• Molecule 1: FIBRONECTIN

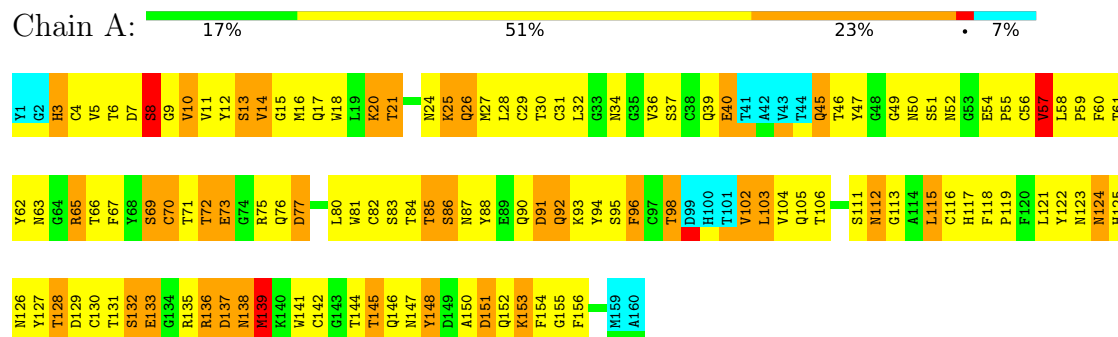


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

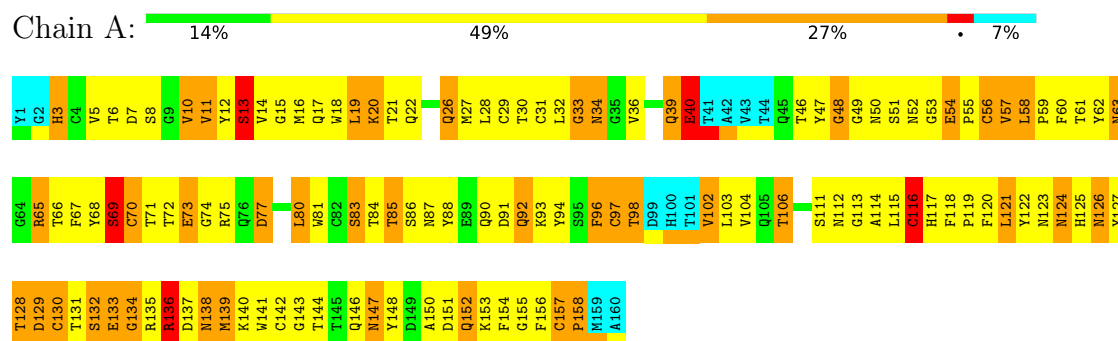
4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: FIBRONECTIN



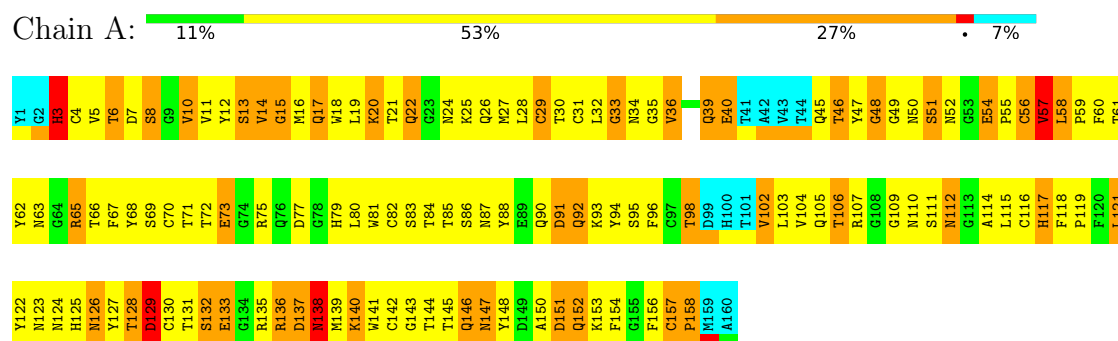
4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: FIBRONECTIN



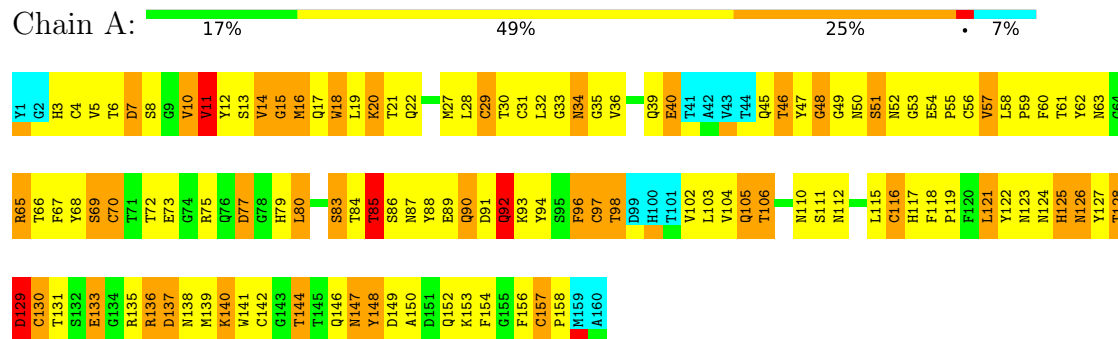
4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: FIBRONECTIN



4.2.4 Score per residue for model 4

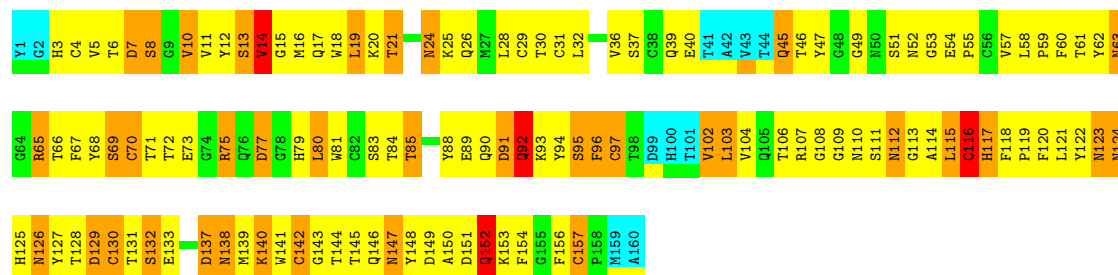
• Molecule 1: FIBRONECTIN



4.2.5 Score per residue for model 5

• Molecule 1: FIBRONECTIN

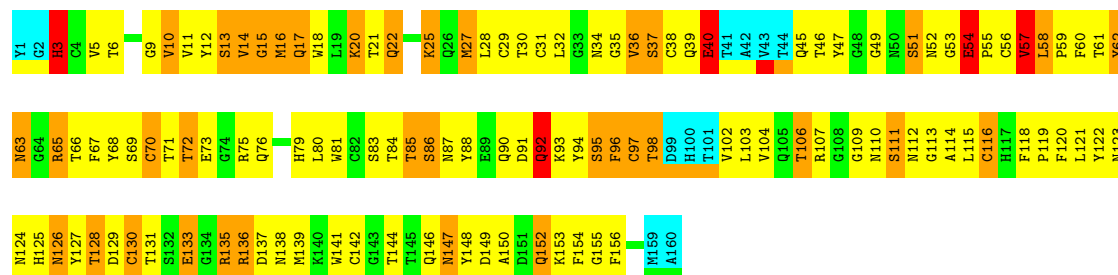
Chain A: 16% 52% 23% 7%



4.2.6 Score per residue for model 6

• Molecule 1: FIBRONECTIN

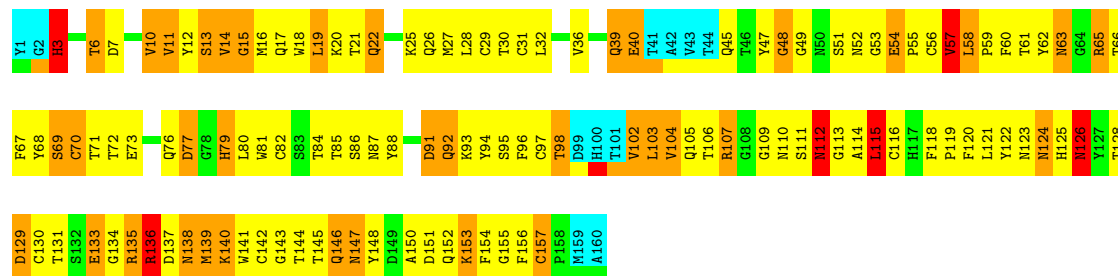
Chain A: 17% 51% 22% 7%



4.2.7 Score per residue for model 7

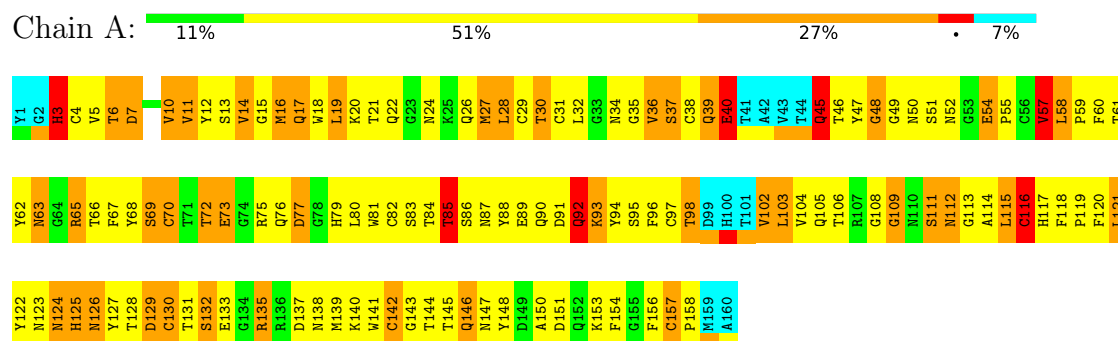
• Molecule 1: FIBRONECTIN

Chain A: 16% 50% 23% 7%



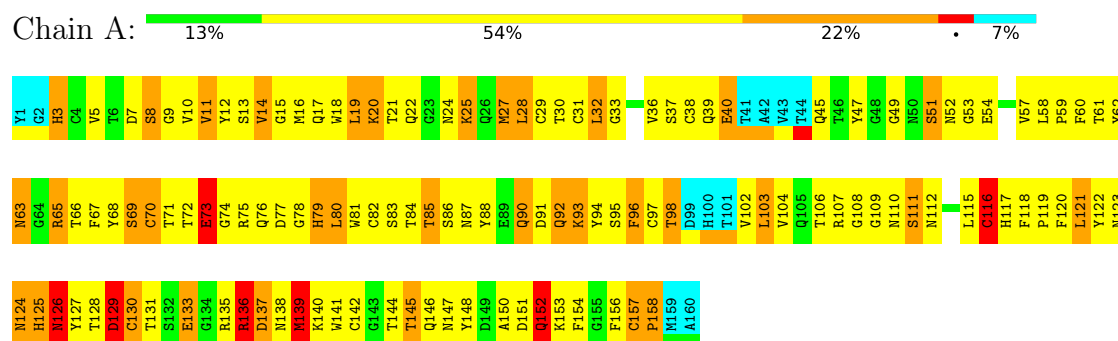
4.2.8 Score per residue for model 8

• Molecule 1: FIBRONECTIN



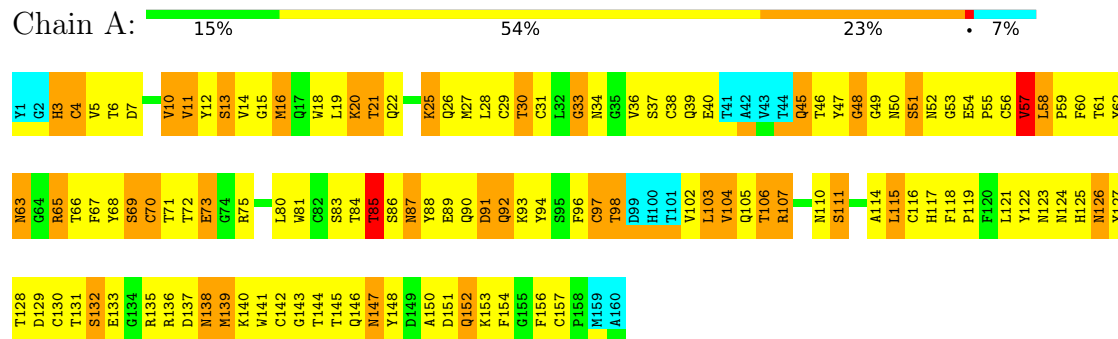
4.2.9 Score per residue for model 9

• Molecule 1: FIBRONECTIN



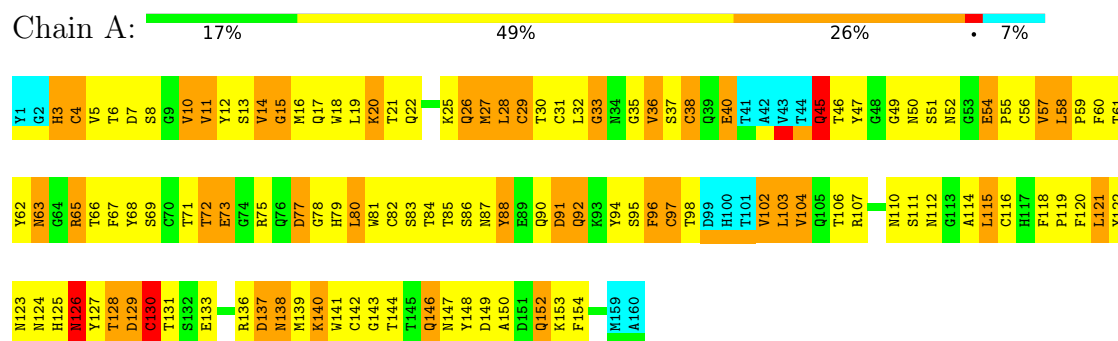
4.2.10 Score per residue for model 10

• Molecule 1: FIBRONECTIN



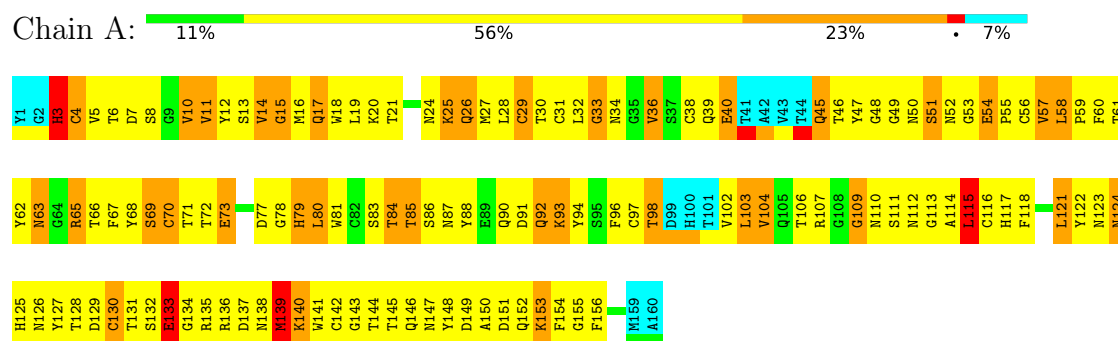
4.2.11 Score per residue for model 11

• Molecule 1: FIBRONECTIN



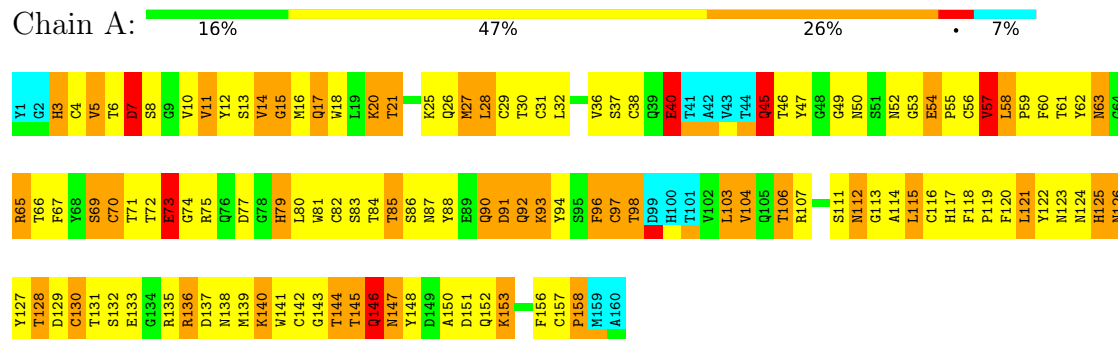
4.2.12 Score per residue for model 12

• Molecule 1: FIBRONECTIN



4.2.13 Score per residue for model 13

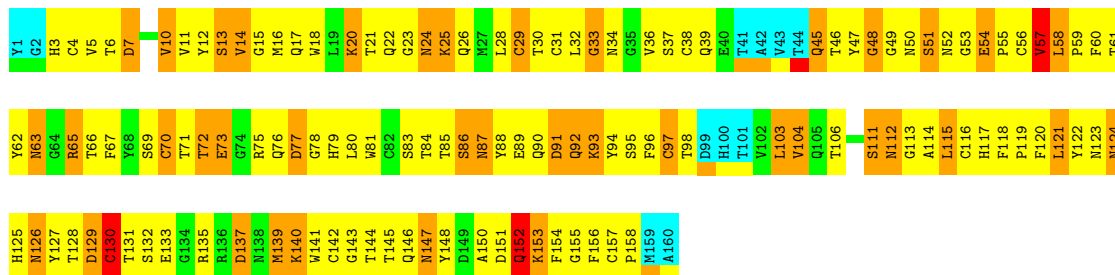
• Molecule 1: FIBRONECTIN



4.2.14 Score per residue for model 14 (medoid)

- Molecule 1: FIBRONECTIN

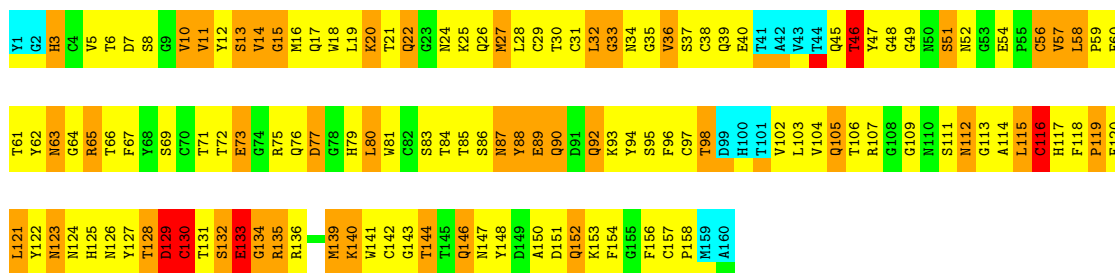
Chain A:  12% 54% 25% 7%



4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: FIBRONECTIN

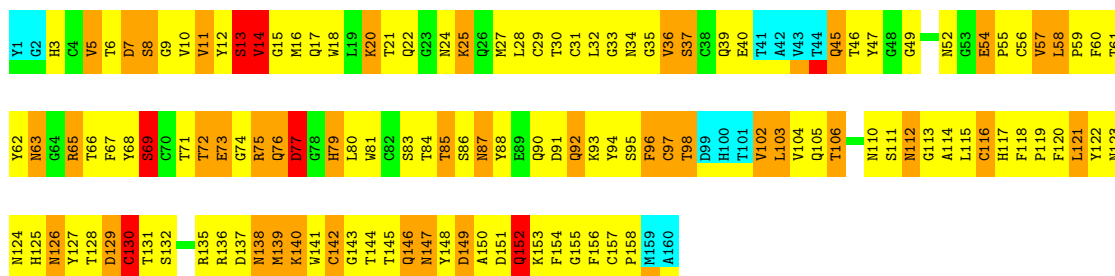
Chain A: 12% 52% 26% 7%



4.2.16 Score per residue for model 16

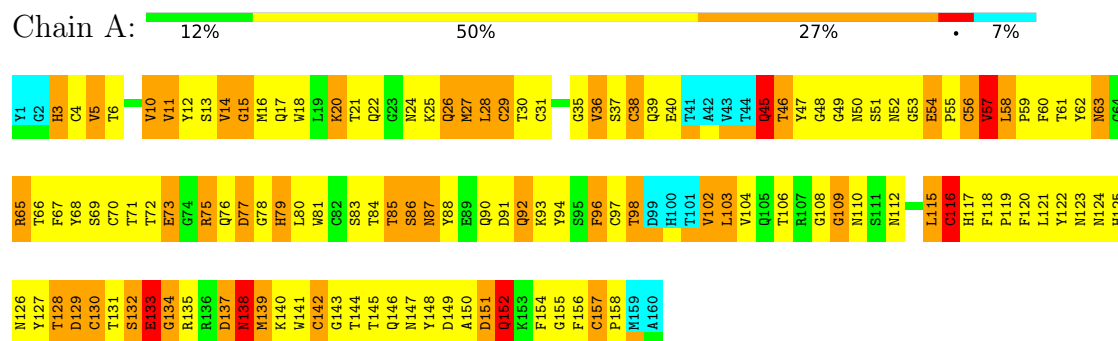
- Molecule 1: FIBRONECTIN

Chain A: 12% 52% 25% 1% 10%



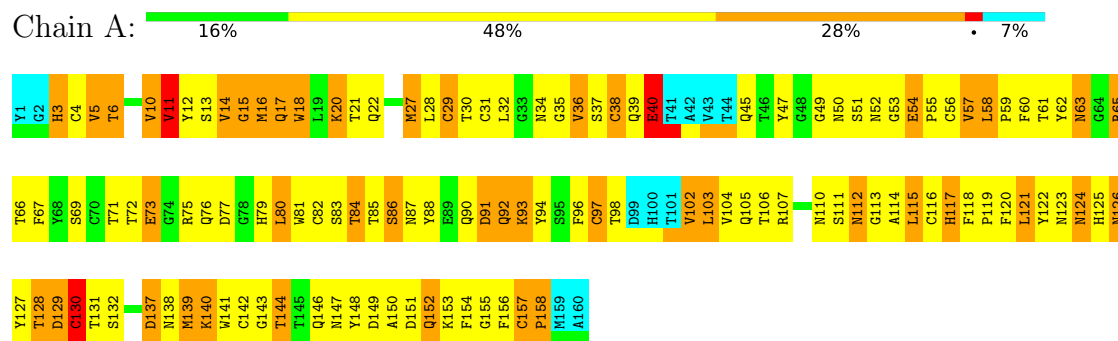
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: FIBRONECTIN



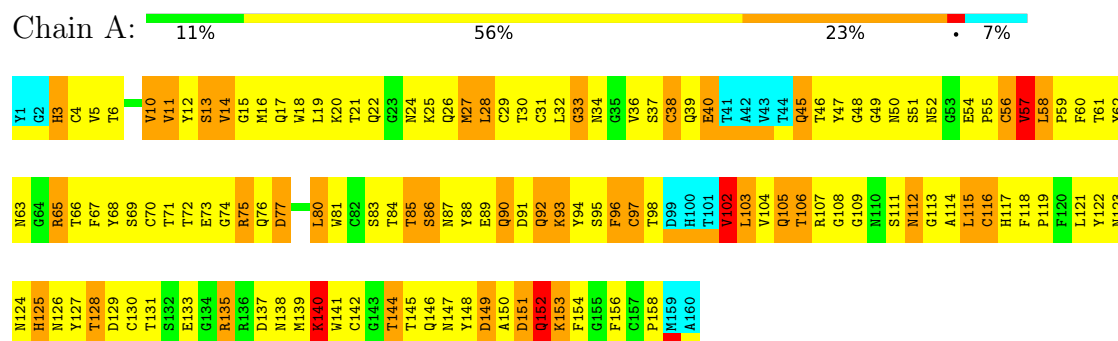
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: FIBRONECTIN



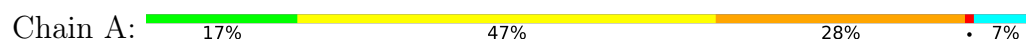
4.2.19 Score per residue for model 19

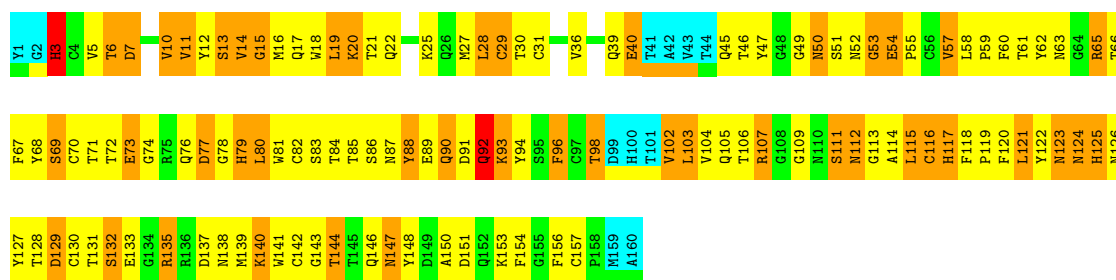
- Molecule 1: FIBRONECTIN



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: FIBRONECTIN





5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *AB INITIO SIMULATED ANNEALING*.

Of the 100 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *LEAST RESTRAINT VIOLATION*.

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

Software name	Classification	Version
CNS	refinement	0.9
Felix	structure solution	2.3
NMRView	structure solution	
CNS	structure solution	

No chemical shift data was provided.

6 Model quality ⓘ

6.1 Standard geometry ⓘ

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

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	1165	1045	1041	226±17
2	A	14	14	13	2±2
All	All	23580	21180	21080	4527

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 101.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:THR:HG22	1:A:10:VAL:HG12	1.07	1.21	18	5
1:A:28:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HD22	1.05	1.21	6	7
1:A:3:HIS:CD2	1:A:11:VAL:HG12	1.04	1.88	13	3
1:A:10:VAL:HG21	1:A:12:TYR:CZ	1.03	1.88	4	3
1:A:5:VAL:HG22	1:A:11:VAL:HG22	1.03	1.14	14	4
1:A:5:VAL:CG2	1:A:11:VAL:HG22	1.01	1.84	5	2
1:A:5:VAL:HG22	1:A:11:VAL:HG13	1.01	1.27	20	1
1:A:139:MET:HE3	1:A:156:PHE:CZ	1.00	1.92	8	2
1:A:103:LEU:CB	1:A:115:LEU:HD11	0.98	1.88	16	8
1:A:16:MET:C	1:A:30:THR:HG23	0.97	1.84	6	18
1:A:111:SER:CB	1:A:144:THR:HG21	0.97	1.89	8	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:THR:CG2	1:A:10:VAL:HG12	0.97	1.89	14	5
1:A:3:HIS:CD2	1:A:11:VAL:HG23	0.96	1.96	18	6
1:A:147:ASN:HB3	1:A:150:ALA:HB3	0.96	1.37	20	3
1:A:58:LEU:HD22	1:A:68:TYR:C	0.96	1.85	12	6
1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:PHE:CD1	0.94	1.97	10	5
1:A:104:VAL:O	1:A:115:LEU:HD12	0.93	1.61	1	11
1:A:10:VAL:HG11	1:A:12:TYR:CE2	0.93	1.97	4	6
1:A:18:TRP:CH2	1:A:36:VAL:HG21	0.93	1.97	2	3
1:A:32:LEU:HD13	1:A:37:SER:OG	0.93	1.63	11	3
1:A:85:THR:HG21	1:A:91:ASP:CB	0.93	1.94	1	2
1:A:147:ASN:HB2	1:A:150:ALA:HB3	0.92	1.41	3	14
1:A:102:VAL:C	1:A:103:LEU:HD13	0.92	1.88	11	2
1:A:16:MET:HE2	1:A:144:THR:CB	0.91	1.96	6	14
1:A:71:THR:C	1:A:80:LEU:HD23	0.91	1.91	11	3
1:A:55:PRO:O	1:A:84:THR:HG22	0.90	1.66	7	15
1:A:111:SER:OG	1:A:114:ALA:HB3	0.90	1.66	2	3
1:A:28:LEU:CD2	1:A:115:LEU:HD23	0.90	1.95	8	1
1:A:121:LEU:HD21	1:A:124:ASN:C	0.89	1.92	14	9
1:A:103:LEU:CB	1:A:115:LEU:HD21	0.89	1.96	19	3
1:A:10:VAL:HG21	1:A:12:TYR:CE2	0.89	2.01	19	3
1:A:104:VAL:HG21	1:A:118:PHE:CZ	0.88	2.04	15	1
1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:PHE:CD1	0.88	2.03	19	5
1:A:147:ASN:CB	1:A:150:ALA:HB3	0.88	1.98	7	15
1:A:85:THR:HG21	1:A:91:ASP:OD2	0.88	1.68	13	5
1:A:121:LEU:HD13	1:A:121:LEU:O	0.88	1.69	3	4
1:A:16:MET:HE3	1:A:153:LYS:HE3	0.87	1.46	9	3
1:A:102:VAL:HG21	1:A:118:PHE:O	0.87	1.67	10	3
1:A:145:THR:HG21	1:A:151:ASP:CG	0.87	1.95	1	3
1:A:51:SER:CB	1:A:84:THR:HG21	0.86	2.00	3	5
1:A:124:ASN:O	2:A:161:NAG:H82	0.86	1.68	17	8
1:A:104:VAL:HG22	1:A:116:CYS:HB3	0.86	1.43	12	4
1:A:28:LEU:HD11	1:A:115:LEU:CD1	0.86	2.00	13	3
1:A:16:MET:HE2	1:A:144:THR:OG1	0.86	1.71	18	6
1:A:5:VAL:HG22	1:A:11:VAL:CG2	0.86	1.99	5	4
1:A:104:VAL:HG22	1:A:116:CYS:CB	0.86	2.00	12	4
1:A:121:LEU:HD21	1:A:124:ASN:CA	0.85	2.01	18	5
1:A:5:VAL:HG13	1:A:10:VAL:O	0.85	1.71	5	5
1:A:5:VAL:HG22	1:A:11:VAL:HB	0.85	1.49	4	4
1:A:111:SER:OG	1:A:144:THR:HG21	0.85	1.70	9	4
1:A:106:THR:HG21	1:A:142:CYS:SG	0.85	2.11	15	8
1:A:72:THR:HG23	1:A:80:LEU:HG	0.84	1.48	16	15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:MET:HE2	1:A:40:GLU:N	0.84	1.88	11	2
1:A:102:VAL:C	1:A:103:LEU:HD12	0.83	1.97	2	2
1:A:14:VAL:HG12	1:A:31:CYS:SG	0.83	2.13	9	2
1:A:84:THR:O	1:A:85:THR:HG23	0.83	1.74	17	20
1:A:21:THR:HG23	1:A:25:LYS:O	0.83	1.73	19	1
1:A:102:VAL:O	1:A:103:LEU:HD12	0.83	1.72	6	2
1:A:17:GLN:HB2	1:A:115:LEU:HD23	0.82	1.49	4	3
1:A:103:LEU:HB3	1:A:115:LEU:HD11	0.82	1.51	20	7
1:A:16:MET:HE3	1:A:153:LYS:CE	0.82	2.05	9	2
1:A:16:MET:HE1	1:A:144:THR:OG1	0.81	1.76	2	2
1:A:16:MET:HE1	1:A:144:THR:CB	0.81	2.05	2	2
1:A:121:LEU:HD21	1:A:125:HIS:N	0.81	1.91	9	9
1:A:21:THR:HG23	1:A:26:GLN:HG3	0.81	1.53	5	1
1:A:5:VAL:HG12	1:A:11:VAL:HB	0.81	1.49	8	1
1:A:28:LEU:HD22	1:A:115:LEU:HD23	0.81	1.50	8	1
1:A:19:LEU:HD21	1:A:26:GLN:HB3	0.81	1.53	2	1
1:A:104:VAL:HG11	1:A:118:PHE:CE1	0.81	2.11	10	2
1:A:6:THR:HG23	1:A:10:VAL:CG1	0.81	2.06	19	1
1:A:3:HIS:CD2	1:A:11:VAL:HG13	0.80	2.12	5	2
1:A:27:MET:HE3	1:A:40:GLU:N	0.80	1.90	13	8
1:A:111:SER:HB2	1:A:144:THR:HG21	0.80	1.52	8	4
1:A:131:THR:HG23	1:A:141:TRP:CE2	0.79	2.12	16	4
1:A:58:LEU:HD13	1:A:68:TYR:C	0.79	2.02	16	3
1:A:104:VAL:HG21	1:A:118:PHE:CE1	0.79	2.12	17	3
1:A:104:VAL:HG21	1:A:118:PHE:CE2	0.79	2.13	6	12
1:A:71:THR:HA	1:A:80:LEU:HD23	0.78	1.53	3	5
1:A:6:THR:HG22	1:A:10:VAL:CG1	0.78	2.07	18	4
1:A:121:LEU:HD22	1:A:122:TYR:N	0.78	1.94	9	6
1:A:72:THR:HG22	1:A:80:LEU:HG	0.78	1.53	12	1
1:A:119:PRO:CB	1:A:128:THR:HG22	0.78	2.09	5	5
1:A:139:MET:HE3	1:A:156:PHE:CE2	0.78	2.14	14	1
1:A:105:GLN:OE1	1:A:115:LEU:HD13	0.77	1.79	4	1
1:A:61:THR:HG23	1:A:65:ARG:C	0.77	2.04	8	2
1:A:103:LEU:HD13	1:A:103:LEU:N	0.77	1.93	20	2
1:A:144:THR:HG22	1:A:153:LYS:O	0.77	1.79	20	3
1:A:19:LEU:HD22	1:A:105:GLN:HG3	0.77	1.55	19	1
1:A:119:PRO:HB3	1:A:128:THR:HG22	0.76	1.55	20	5
1:A:85:THR:HG21	1:A:91:ASP:CG	0.76	2.05	13	5
1:A:19:LEU:HD22	1:A:27:MET:O	0.76	1.79	4	1
1:A:80:LEU:N	1:A:80:LEU:HD12	0.76	1.95	15	8
1:A:5:VAL:HG22	1:A:11:VAL:CB	0.76	2.08	4	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:LEU:HD12	1:A:27:MET:O	0.76	1.81	3	1
1:A:6:THR:HG23	1:A:10:VAL:HG12	0.76	1.57	19	1
1:A:103:LEU:HB3	1:A:115:LEU:HD21	0.76	1.57	19	5
1:A:121:LEU:C	1:A:121:LEU:HD13	0.75	2.06	7	6
1:A:103:LEU:HB2	1:A:115:LEU:HD11	0.75	1.59	16	6
1:A:104:VAL:HG11	1:A:118:PHE:CD2	0.75	2.17	14	1
1:A:28:LEU:HD11	1:A:115:LEU:CD2	0.75	2.11	18	7
1:A:119:PRO:HB2	1:A:128:THR:HG22	0.75	1.59	14	5
1:A:145:THR:HG23	1:A:153:LYS:HZ1	0.75	1.42	13	1
1:A:145:THR:HG23	1:A:153:LYS:NZ	0.74	1.97	13	1
1:A:106:THR:HG23	1:A:116:CYS:HB2	0.74	1.59	1	5
1:A:145:THR:HG21	1:A:151:ASP:OD2	0.73	1.84	1	3
1:A:106:THR:HG21	1:A:116:CYS:SG	0.73	2.24	19	6
1:A:18:TRP:CZ2	1:A:36:VAL:HG21	0.73	2.18	20	1
1:A:111:SER:HB3	1:A:114:ALA:HB3	0.73	1.60	18	2
1:A:102:VAL:HG11	1:A:118:PHE:HB2	0.73	1.59	17	1
1:A:121:LEU:HD21	1:A:124:ASN:HA	0.72	1.61	18	4
1:A:46:THR:HG21	1:A:54:GLU:O	0.72	1.85	12	3
1:A:19:LEU:C	1:A:19:LEU:HD13	0.72	2.09	4	1
1:A:16:MET:HE2	1:A:144:THR:HB	0.72	1.57	6	7
1:A:19:LEU:HD12	1:A:28:LEU:HD12	0.72	1.60	5	2
1:A:28:LEU:HD12	1:A:115:LEU:CD1	0.72	2.15	15	1
1:A:28:LEU:CD1	1:A:115:LEU:HD23	0.72	2.13	11	2
1:A:19:LEU:HD11	1:A:26:GLN:HG2	0.72	1.62	11	1
1:A:57:VAL:HG22	1:A:57:VAL:O	0.72	1.85	12	1
1:A:19:LEU:HD22	1:A:105:GLN:CD	0.72	2.09	20	1
1:A:6:THR:HG21	1:A:18:TRP:CE2	0.71	2.20	13	5
1:A:111:SER:O	1:A:114:ALA:HB2	0.71	1.84	14	2
1:A:11:VAL:HG22	1:A:11:VAL:O	0.71	1.85	18	3
1:A:58:LEU:HD22	1:A:69:SER:HA	0.71	1.63	15	4
1:A:104:VAL:HG13	1:A:118:PHE:CE1	0.71	2.21	12	3
1:A:121:LEU:HD12	1:A:147:ASN:OD1	0.71	1.85	9	1
1:A:11:VAL:HG12	1:A:11:VAL:O	0.71	1.85	19	1
1:A:21:THR:HG22	1:A:25:LYS:O	0.70	1.84	1	2
1:A:6:THR:HG23	1:A:10:VAL:O	0.70	1.86	17	3
1:A:10:VAL:HG11	1:A:12:TYR:CD2	0.70	2.21	19	1
1:A:10:VAL:HG11	1:A:12:TYR:OH	0.70	1.85	20	13
1:A:28:LEU:CD1	1:A:115:LEU:HD22	0.70	2.16	19	3
1:A:103:LEU:HB2	1:A:115:LEU:HD21	0.70	1.61	19	3
1:A:61:THR:HG22	1:A:66:THR:HA	0.70	1.62	7	18
1:A:102:VAL:C	1:A:103:LEU:HD23	0.70	2.11	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:5:VAL:CG2	1:A:11:VAL:HG13	0.70	2.14	20	2
1:A:121:LEU:HD13	1:A:121:LEU:C	0.70	2.11	13	3
1:A:121:LEU:HD11	1:A:124:ASN:CA	0.70	2.16	15	4
1:A:121:LEU:HD11	1:A:124:ASN:HA	0.69	1.62	6	4
1:A:21:THR:HG23	1:A:21:THR:O	0.69	1.87	11	4
1:A:114:ALA:HB3	1:A:144:THR:HG21	0.69	1.63	19	3
1:A:21:THR:HG23	1:A:26:GLN:CD	0.69	2.12	1	1
1:A:104:VAL:HG12	1:A:106:THR:HG23	0.69	1.62	15	5
1:A:141:TRP:CH2	1:A:148:TYR:CE2	0.69	2.81	18	16
1:A:103:LEU:HD22	1:A:115:LEU:HD21	0.69	1.63	16	1
1:A:102:VAL:O	1:A:103:LEU:HD23	0.69	1.88	7	2
1:A:104:VAL:HG11	1:A:118:PHE:CE2	0.68	2.22	14	1
1:A:121:LEU:HD22	1:A:122:TYR:H	0.68	1.46	14	2
1:A:16:MET:O	1:A:30:THR:HG23	0.68	1.89	17	18
1:A:58:LEU:HD22	1:A:68:TYR:O	0.68	1.88	12	2
1:A:6:THR:HG21	1:A:18:TRP:NE1	0.68	2.03	2	4
1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:PHE:CD2	0.68	2.22	12	4
1:A:10:VAL:HG11	1:A:12:TYR:CZ	0.68	2.24	10	6
1:A:102:VAL:HG13	1:A:102:VAL:O	0.68	1.89	3	3
1:A:12:TYR:CD2	1:A:18:TRP:CD2	0.68	2.81	5	3
1:A:19:LEU:HD23	1:A:26:GLN:CB	0.67	2.18	5	1
1:A:57:VAL:HG23	1:A:84:THR:C	0.67	2.15	3	19
1:A:51:SER:HB2	1:A:84:THR:HG21	0.67	1.64	6	4
1:A:19:LEU:HD11	1:A:26:GLN:HB3	0.67	1.66	3	1
1:A:27:MET:HE2	1:A:39:GLN:O	0.67	1.90	7	1
1:A:5:VAL:HG12	1:A:11:VAL:CB	0.67	2.19	8	1
1:A:104:VAL:HG13	1:A:116:CYS:HB3	0.66	1.65	14	1
1:A:119:PRO:HB3	1:A:128:THR:HG23	0.66	1.66	6	6
1:A:19:LEU:HD13	1:A:20:LYS:N	0.66	2.04	4	1
1:A:106:THR:HG22	1:A:156:PHE:O	0.66	1.91	15	2
1:A:28:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HD23	0.66	1.68	11	2
1:A:3:HIS:CD2	1:A:11:VAL:HG21	0.66	2.25	7	4
1:A:30:THR:C	1:A:36:VAL:HG23	0.66	2.16	2	2
1:A:121:LEU:HD12	1:A:147:ASN:HB3	0.66	1.66	3	2
1:A:45:GLN:HB3	1:A:98:THR:HG23	0.66	1.67	4	2
1:A:121:LEU:HD11	1:A:124:ASN:H	0.65	1.50	10	4
1:A:10:VAL:CG2	1:A:12:TYR:CE2	0.65	2.79	19	1
1:A:72:THR:HG22	1:A:79:HIS:C	0.65	2.16	17	2
1:A:32:LEU:HD12	1:A:37:SER:HB2	0.65	1.68	1	2
1:A:102:VAL:O	1:A:102:VAL:HG22	0.65	1.89	9	1
1:A:19:LEU:CD1	1:A:28:LEU:HD12	0.65	2.22	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:3:HIS:CD2	1:A:11:VAL:CG2	0.65	2.80	10	11
1:A:27:MET:HE3	1:A:39:GLN:C	0.65	2.17	9	5
1:A:32:LEU:HD13	1:A:37:SER:CB	0.65	2.21	11	3
1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:PHE:HD2	0.65	1.51	17	3
1:A:18:TRP:CH2	1:A:36:VAL:CG2	0.65	2.80	20	3
1:A:103:LEU:CB	1:A:115:LEU:HD22	0.65	2.22	12	3
1:A:104:VAL:CG1	1:A:118:PHE:CD2	0.65	2.79	14	1
1:A:131:THR:HG23	1:A:141:TRP:NE1	0.65	2.07	16	1
1:A:17:GLN:NE2	1:A:103:LEU:HD23	0.64	2.08	12	1
1:A:65:ARG:CD	1:A:67:PHE:CE2	0.64	2.81	8	6
1:A:144:THR:HG21	1:A:153:LYS:HB3	0.64	1.68	20	4
1:A:111:SER:HB3	1:A:144:THR:HG21	0.64	1.69	10	1
1:A:10:VAL:CG1	1:A:12:TYR:CE2	0.64	2.81	12	7
1:A:16:MET:CB	1:A:145:THR:HG22	0.64	2.22	8	1
1:A:104:VAL:HG13	1:A:116:CYS:CB	0.64	2.23	14	1
1:A:17:GLN:N	1:A:30:THR:HG23	0.64	2.07	12	13
1:A:19:LEU:HD21	1:A:26:GLN:CD	0.64	2.17	3	2
1:A:104:VAL:CG1	1:A:118:PHE:CE1	0.64	2.81	7	4
1:A:12:TYR:CE2	1:A:18:TRP:CD1	0.64	2.86	5	1
1:A:16:MET:HE3	1:A:153:LYS:CG	0.64	2.22	3	1
1:A:3:HIS:CE1	1:A:13:SER:CB	0.64	2.81	10	2
1:A:18:TRP:CH2	1:A:36:VAL:CG1	0.64	2.81	14	2
1:A:3:HIS:CD2	1:A:11:VAL:CG1	0.64	2.81	1	5
1:A:109:GLY:CA	1:A:154:PHE:CZ	0.64	2.81	15	7
1:A:121:LEU:HD11	1:A:125:HIS:N	0.64	2.08	16	7
1:A:75:ARG:CD	1:A:96:PHE:CD1	0.64	2.81	5	1
1:A:3:HIS:HD2	1:A:11:VAL:HG12	0.64	1.49	12	1
1:A:6:THR:HG22	1:A:18:TRP:CZ2	0.63	2.26	20	1
1:A:121:LEU:HD11	1:A:124:ASN:N	0.63	2.08	10	3
1:A:3:HIS:CE1	1:A:13:SER:CA	0.63	2.82	12	1
1:A:29:CYS:SG	1:A:36:VAL:HG22	0.63	2.34	20	2
1:A:10:VAL:CG1	1:A:12:TYR:CD2	0.63	2.81	19	1
1:A:49:GLY:N	1:A:96:PHE:CE2	0.63	2.67	16	15
1:A:3:HIS:CD2	1:A:11:VAL:HG22	0.63	2.29	8	3
1:A:27:MET:HE1	1:A:40:GLU:N	0.63	2.08	4	1
1:A:131:THR:CG2	1:A:141:TRP:CH2	0.63	2.81	4	2
1:A:88:TYR:CE2	1:A:92:GLN:NE2	0.63	2.67	12	1
1:A:71:THR:CA	1:A:80:LEU:HD23	0.63	2.24	2	4
1:A:31:CYS:SG	1:A:36:VAL:HG22	0.63	2.34	17	1
1:A:58:LEU:CD2	1:A:60:PHE:CD2	0.63	2.81	4	4
1:A:124:ASN:C	2:A:161:NAG:H82	0.62	2.19	19	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:THR:O	1:A:32:LEU:HD12	0.62	1.93	14	2
1:A:50:ASN:ND2	1:A:94:TYR:CE2	0.62	2.68	8	7
1:A:19:LEU:N	1:A:115:LEU:HD12	0.62	2.09	15	1
1:A:19:LEU:HD21	1:A:26:GLN:CG	0.62	2.24	11	2
1:A:58:LEU:HD13	1:A:68:TYR:O	0.62	1.94	12	3
1:A:102:VAL:HG23	1:A:118:PHE:HB2	0.62	1.71	10	1
1:A:12:TYR:CE2	1:A:18:TRP:CG	0.62	2.87	5	1
1:A:18:TRP:CH2	1:A:36:VAL:HG13	0.62	2.29	17	6
1:A:104:VAL:CG2	1:A:118:PHE:CD1	0.62	2.83	2	1
1:A:110:ASN:ND2	1:A:154:PHE:CD2	0.62	2.67	3	2
1:A:65:ARG:CG	1:A:67:PHE:CZ	0.62	2.83	14	11
1:A:139:MET:HE2	1:A:156:PHE:CE1	0.62	2.29	10	2
1:A:124:ASN:HA	2:A:161:NAG:H82	0.62	1.70	18	3
1:A:137:ASP:CB	1:A:139:MET:HE2	0.62	2.24	8	1
1:A:104:VAL:CG1	1:A:106:THR:HG23	0.62	2.24	15	2
1:A:141:TRP:CZ3	1:A:148:TYR:CD2	0.61	2.87	8	4
1:A:27:MET:HE2	1:A:39:GLN:C	0.61	2.19	7	1
1:A:60:PHE:CG	1:A:83:SER:CB	0.61	2.84	9	4
1:A:51:SER:OG	1:A:84:THR:HG21	0.61	1.95	11	4
1:A:119:PRO:CB	1:A:128:THR:HG23	0.61	2.25	13	4
1:A:65:ARG:HG3	1:A:67:PHE:CE1	0.61	2.30	19	12
1:A:85:THR:HG21	1:A:91:ASP:HB3	0.61	1.69	1	1
1:A:75:ARG:NH1	1:A:96:PHE:CD1	0.61	2.67	3	1
1:A:103:LEU:HB3	1:A:115:LEU:HD22	0.61	1.71	5	2
1:A:58:LEU:HD22	1:A:69:SER:CA	0.61	2.25	14	3
1:A:121:LEU:HD22	1:A:121:LEU:C	0.61	2.20	3	3
1:A:139:MET:HE3	1:A:156:PHE:CE1	0.61	2.31	8	1
1:A:54:GLU:CB	1:A:55:PRO:CD	0.61	2.79	3	9
1:A:61:THR:HG22	1:A:66:THR:CA	0.61	2.26	5	17
1:A:104:VAL:HG22	1:A:116:CYS:HB2	0.61	1.73	10	4
1:A:58:LEU:HD21	1:A:82:CYS:SG	0.60	2.36	1	1
1:A:28:LEU:CD1	1:A:115:LEU:HD11	0.60	2.26	15	3
1:A:84:THR:HG21	1:A:95:SER:OG	0.60	1.95	8	3
1:A:141:TRP:CH2	1:A:148:TYR:CD2	0.60	2.90	8	7
1:A:58:LEU:CD2	1:A:60:PHE:CD1	0.60	2.81	10	2
1:A:121:LEU:HD21	2:A:161:NAG:H82	0.60	1.74	11	1
1:A:121:LEU:HD12	1:A:122:TYR:N	0.60	2.11	4	5
1:A:121:LEU:CD2	1:A:125:HIS:N	0.60	2.65	18	9
1:A:102:VAL:HG11	1:A:118:PHE:O	0.60	1.95	3	1
1:A:131:THR:CG2	1:A:141:TRP:CE2	0.60	2.85	16	1
1:A:139:MET:CE	1:A:156:PHE:CZ	0.60	2.83	14	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:VAL:O	1:A:36:VAL:HG12	0.60	1.94	9	2
1:A:61:THR:HG23	1:A:65:ARG:O	0.60	1.96	15	2
1:A:17:GLN:HE21	1:A:103:LEU:HD23	0.60	1.56	12	1
1:A:103:LEU:HD23	1:A:103:LEU:O	0.60	1.96	15	1
1:A:121:LEU:HD13	1:A:122:TYR:N	0.60	2.12	7	3
1:A:65:ARG:CG	1:A:67:PHE:CE1	0.60	2.85	19	1
1:A:65:ARG:CD	1:A:67:PHE:CZ	0.59	2.84	7	6
1:A:124:ASN:OD1	2:A:161:NAG:H83	0.59	1.97	16	3
1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:CD1	0.59	2.65	20	2
1:A:139:MET:CE	1:A:156:PHE:CE1	0.59	2.86	3	1
1:A:75:ARG:CG	1:A:81:TRP:CD1	0.59	2.85	15	1
1:A:3:HIS:CD2	1:A:12:TYR:C	0.59	2.81	10	5
1:A:32:LEU:HD12	1:A:37:SER:CB	0.59	2.26	1	2
1:A:121:LEU:CD2	1:A:126:ASN:N	0.59	2.66	10	3
1:A:72:THR:HG22	1:A:80:LEU:N	0.59	2.12	17	1
1:A:57:VAL:CG1	1:A:85:THR:N	0.59	2.66	12	1
1:A:104:VAL:C	1:A:115:LEU:HD12	0.59	2.21	20	6
1:A:10:VAL:CG1	1:A:12:TYR:CZ	0.59	2.86	10	7
1:A:88:TYR:CG	1:A:89:GLU:N	0.59	2.68	20	2
1:A:7:ASP:CB	1:A:10:VAL:CG2	0.59	2.81	9	5
1:A:28:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HD11	0.59	1.73	12	3
1:A:19:LEU:HD22	1:A:28:LEU:HB3	0.59	1.74	9	1
1:A:19:LEU:HD22	1:A:28:LEU:CB	0.59	2.27	9	1
1:A:103:LEU:CB	1:A:115:LEU:CD1	0.59	2.81	11	1
1:A:10:VAL:HG11	1:A:112:ASN:CB	0.59	2.28	17	1
1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:PHE:CD2	0.59	2.31	16	1
1:A:16:MET:HE1	1:A:144:THR:HB	0.59	1.73	2	2
1:A:27:MET:HE1	1:A:40:GLU:H	0.59	1.57	4	1
1:A:144:THR:CG2	1:A:153:LYS:CB	0.59	2.81	4	3
1:A:28:LEU:CD1	1:A:115:LEU:CD2	0.59	2.81	7	2
1:A:157:CYS:CB	1:A:158:PRO:CD	0.58	2.81	18	5
1:A:60:PHE:O	1:A:60:PHE:CD1	0.58	2.56	9	6
1:A:5:VAL:HG13	1:A:11:VAL:HG13	0.58	1.72	13	1
1:A:60:PHE:CD1	1:A:60:PHE:C	0.58	2.81	4	7
1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:PHE:HD1	0.58	1.58	8	2
1:A:32:LEU:CD1	1:A:37:SER:CB	0.58	2.81	9	5
1:A:122:TYR:CE1	1:A:123:ASN:CG	0.58	2.81	14	1
1:A:131:THR:HG23	1:A:141:TRP:CZ2	0.58	2.33	13	3
1:A:28:LEU:CD1	1:A:115:LEU:CD1	0.58	2.81	15	4
1:A:5:VAL:HG12	1:A:11:VAL:CG2	0.58	2.29	8	1
1:A:110:ASN:CG	1:A:154:PHE:CE2	0.58	2.81	11	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:SER:CB	1:A:153:LYS:HZ3	0.58	2.11	20	3
1:A:3:HIS:CG	1:A:11:VAL:CG2	0.58	2.86	16	2
1:A:12:TYR:CE1	1:A:112:ASN:O	0.58	2.57	19	14
1:A:122:TYR:CD1	1:A:122:TYR:C	0.58	2.81	3	13
1:A:117:HIS:CD2	1:A:119:PRO:O	0.58	2.57	19	5
1:A:118:PHE:HA	1:A:119:PRO:C	0.58	2.24	15	6
1:A:28:LEU:CD1	1:A:115:LEU:HD13	0.58	2.29	19	1
1:A:18:TRP:O	1:A:18:TRP:CD1	0.58	2.57	9	7
1:A:47:TYR:HH	1:A:79:HIS:CG	0.58	2.15	13	2
1:A:62:TYR:CD1	1:A:62:TYR:C	0.58	2.81	6	8
1:A:12:TYR:CE1	1:A:111:SER:O	0.58	2.57	10	2
1:A:18:TRP:CD2	1:A:29:CYS:O	0.58	2.57	9	5
1:A:118:PHE:CZ	1:A:142:CYS:SG	0.58	2.97	8	11
1:A:3:HIS:CG	1:A:11:VAL:HG23	0.58	2.34	18	2
1:A:15:GLY:N	1:A:31:CYS:O	0.58	2.36	9	20
1:A:122:TYR:CZ	1:A:133:GLU:CD	0.58	2.81	3	1
1:A:71:THR:O	1:A:81:TRP:CD1	0.58	2.57	10	16
1:A:154:PHE:CD1	1:A:154:PHE:C	0.58	2.82	20	7
1:A:47:TYR:OH	1:A:79:HIS:CG	0.58	2.57	12	10
1:A:18:TRP:HH2	1:A:36:VAL:HG22	0.58	1.59	4	4
1:A:3:HIS:CD2	1:A:3:HIS:C	0.57	2.81	1	4
1:A:125:HIS:O	1:A:127:TYR:CD1	0.57	2.57	4	3
1:A:145:THR:HG23	1:A:153:LYS:HG2	0.57	1.76	3	1
1:A:60:PHE:CD1	1:A:60:PHE:O	0.57	2.56	4	2
1:A:103:LEU:HG	1:A:115:LEU:HD21	0.57	1.74	6	1
1:A:117:HIS:O	1:A:117:HIS:CG	0.57	2.57	15	1
1:A:47:TYR:CD2	1:A:96:PHE:O	0.57	2.57	1	1
1:A:57:VAL:CG2	1:A:85:THR:N	0.57	2.67	8	10
1:A:47:TYR:CE2	1:A:97:CYS:O	0.57	2.57	6	10
1:A:30:THR:O	1:A:36:VAL:HG23	0.57	1.98	2	2
1:A:80:LEU:HD12	1:A:80:LEU:H	0.57	1.58	20	4
1:A:7:ASP:CB	1:A:10:VAL:HG23	0.57	2.29	2	5
1:A:47:TYR:CZ	1:A:97:CYS:O	0.57	2.57	6	4
1:A:60:PHE:CG	1:A:60:PHE:O	0.57	2.57	11	8
1:A:80:LEU:N	1:A:80:LEU:CD1	0.57	2.67	15	6
1:A:62:TYR:CE1	1:A:63:ASN:OD1	0.57	2.57	19	1
1:A:3:HIS:NE2	1:A:13:SER:N	0.57	2.53	8	4
1:A:62:TYR:CE2	1:A:73:GLU:O	0.57	2.58	20	2
1:A:28:LEU:N	1:A:28:LEU:CD2	0.57	2.67	17	1
1:A:50:ASN:OD1	1:A:94:TYR:CE2	0.57	2.58	20	1
1:A:131:THR:HG23	1:A:141:TRP:CH2	0.57	2.34	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:TRP:CZ3	1:A:30:THR:C	0.57	2.83	10	1
1:A:139:MET:O	1:A:156:PHE:CD1	0.57	2.57	14	1
1:A:3:HIS:C	1:A:3:HIS:CD2	0.57	2.83	15	1
1:A:14:VAL:HG13	1:A:33:GLY:N	0.57	2.14	16	1
1:A:122:TYR:CE1	1:A:133:GLU:OE1	0.57	2.57	3	1
1:A:103:LEU:C	1:A:115:LEU:HD11	0.57	2.25	11	3
1:A:18:TRP:CZ3	1:A:31:CYS:SG	0.57	2.98	17	2
1:A:18:TRP:CH2	1:A:31:CYS:SG	0.57	2.98	17	2
1:A:139:MET:HE2	1:A:156:PHE:CB	0.57	2.29	12	1
1:A:18:TRP:CE3	1:A:29:CYS:O	0.57	2.57	17	7
1:A:60:PHE:CD1	1:A:83:SER:OG	0.57	2.57	16	1
1:A:10:VAL:HG11	1:A:112:ASN:HB3	0.57	1.75	17	1
1:A:60:PHE:CE1	1:A:81:TRP:CZ3	0.57	2.92	17	1
1:A:121:LEU:CD1	1:A:125:HIS:C	0.57	2.78	20	4
1:A:147:ASN:HB2	1:A:150:ALA:HB2	0.57	1.77	16	1
1:A:10:VAL:CG1	1:A:112:ASN:ND2	0.56	2.68	1	1
1:A:50:ASN:OD1	1:A:94:TYR:CZ	0.56	2.57	2	2
1:A:116:CYS:SG	1:A:118:PHE:CE1	0.56	2.98	7	4
1:A:58:LEU:CB	1:A:59:PRO:HA	0.56	2.31	17	15
1:A:94:TYR:CD1	1:A:94:TYR:C	0.56	2.82	8	17
1:A:121:LEU:C	1:A:121:LEU:CD1	0.56	2.78	7	10
1:A:16:MET:CE	1:A:144:THR:CB	0.56	2.82	11	7
1:A:16:MET:HB3	1:A:145:THR:HG22	0.56	1.76	8	1
1:A:125:HIS:C	1:A:125:HIS:CD2	0.56	2.83	11	1
1:A:88:TYR:CD1	1:A:88:TYR:C	0.56	2.83	20	2
1:A:135:ARG:HH21	1:A:139:MET:HE2	0.56	1.60	1	2
1:A:65:ARG:HG3	1:A:67:PHE:CZ	0.56	2.35	11	10
1:A:156:PHE:CD1	1:A:156:PHE:N	0.56	2.71	17	1
1:A:139:MET:SD	1:A:156:PHE:CZ	0.56	2.98	19	1
1:A:47:TYR:CE2	1:A:96:PHE:O	0.56	2.59	1	1
1:A:62:TYR:HB3	1:A:67:PHE:CE1	0.56	2.35	19	20
1:A:110:ASN:OD1	1:A:154:PHE:CD1	0.56	2.59	6	1
1:A:147:ASN:CB	1:A:150:ALA:CB	0.56	2.83	12	7
1:A:16:MET:HE3	1:A:153:LYS:HE2	0.56	1.78	13	2
1:A:60:PHE:CG	1:A:83:SER:HB2	0.56	2.36	9	3
1:A:11:VAL:CG2	1:A:12:TYR:N	0.56	2.69	15	2
1:A:62:TYR:CE1	1:A:73:GLU:O	0.56	2.59	10	1
1:A:45:GLN:CB	1:A:98:THR:CG2	0.56	2.83	11	1
1:A:28:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HD13	0.56	1.77	15	2
1:A:117:HIS:O	1:A:117:HIS:CD2	0.56	2.59	15	1
1:A:14:VAL:CG2	1:A:15:GLY:N	0.56	2.69	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:121:LEU:CD1	1:A:125:HIS:N	0.56	2.69	20	6
1:A:77:ASP:OD1	1:A:79:HIS:CD2	0.56	2.59	11	1
1:A:147:ASN:HB3	1:A:150:ALA:HB2	0.56	1.77	8	6
1:A:12:TYR:CE2	1:A:18:TRP:CE2	0.56	2.93	4	1
1:A:30:THR:O	1:A:36:VAL:HG13	0.56	2.01	10	1
1:A:65:ARG:HD3	1:A:67:PHE:CE2	0.56	2.35	8	8
1:A:47:TYR:CD1	1:A:47:TYR:C	0.56	2.84	18	11
1:A:10:VAL:HG11	1:A:12:TYR:HE2	0.56	1.59	18	2
1:A:51:SER:HG	1:A:84:THR:HG21	0.56	1.61	11	1
1:A:61:THR:HG22	1:A:65:ARG:O	0.56	2.01	19	7
1:A:65:ARG:HD2	1:A:67:PHE:CZ	0.56	2.36	7	5
1:A:92:GLN:N	1:A:92:GLN:CD	0.56	2.64	14	1
1:A:122:TYR:CE1	1:A:123:ASN:OD1	0.56	2.58	14	1
1:A:118:PHE:CA	1:A:119:PRO:C	0.56	2.79	15	1
1:A:47:TYR:OH	1:A:79:HIS:CD2	0.55	2.60	3	3
1:A:27:MET:CE	1:A:40:GLU:N	0.55	2.67	11	6
1:A:121:LEU:HD11	1:A:124:ASN:C	0.55	2.26	16	7
1:A:109:GLY:HA2	1:A:154:PHE:CZ	0.55	2.36	15	4
1:A:50:ASN:ND2	1:A:94:TYR:CD2	0.55	2.74	10	3
1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:PHE:HD1	0.55	1.60	7	2
1:A:122:TYR:CZ	1:A:133:GLU:OE1	0.55	2.59	3	1
1:A:114:ALA:CB	1:A:144:THR:HG21	0.55	2.31	19	2
1:A:14:VAL:HG12	1:A:15:GLY:N	0.55	2.17	1	3
1:A:19:LEU:CD2	1:A:26:GLN:CB	0.55	2.84	5	1
1:A:58:LEU:HD12	1:A:58:LEU:H	0.55	1.61	6	1
1:A:16:MET:HE1	1:A:111:SER:OG	0.55	2.02	8	1
1:A:18:TRP:CH2	1:A:36:VAL:HG11	0.55	2.37	14	1
1:A:3:HIS:HD2	1:A:11:VAL:HG21	0.55	1.60	7	1
1:A:104:VAL:CG2	1:A:118:PHE:CE1	0.55	2.89	2	1
1:A:104:VAL:CG2	1:A:106:THR:HG23	0.55	2.31	7	3
1:A:28:LEU:CD2	1:A:115:LEU:CD2	0.55	2.81	8	1
1:A:28:LEU:N	1:A:28:LEU:HD22	0.55	2.15	15	1
1:A:60:PHE:HZ	1:A:71:THR:HG22	0.55	1.61	15	1
1:A:58:LEU:CB	1:A:59:PRO:CA	0.55	2.85	6	15
1:A:103:LEU:N	1:A:103:LEU:HD12	0.55	2.16	3	1
1:A:109:GLY:HA3	1:A:154:PHE:CZ	0.55	2.37	6	6
1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:PHE:CD2	0.55	2.36	5	3
1:A:120:PHE:CZ	1:A:131:THR:HG22	0.55	2.36	7	1
1:A:3:HIS:HD2	1:A:11:VAL:HG23	0.55	1.60	11	1
1:A:144:THR:HG23	1:A:153:LYS:O	0.55	2.01	14	1
1:A:60:PHE:O	1:A:60:PHE:CG	0.55	2.60	1	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:139:MET:SD	1:A:156:PHE:CG	0.55	2.99	4	1
1:A:135:ARG:NH2	1:A:137:ASP:OD2	0.55	2.40	20	8
1:A:19:LEU:HD13	1:A:28:LEU:HB3	0.55	1.79	9	1
1:A:104:VAL:O	1:A:116:CYS:N	0.55	2.40	11	20
1:A:117:HIS:CD2	1:A:117:HIS:O	0.55	2.60	2	3
1:A:10:VAL:CG2	1:A:112:ASN:CB	0.55	2.84	5	1
1:A:75:ARG:HD2	1:A:96:PHE:CD1	0.55	2.35	5	1
1:A:18:TRP:O	1:A:18:TRP:CG	0.55	2.60	6	6
1:A:5:VAL:HG13	1:A:11:VAL:HB	0.55	1.77	17	1
1:A:135:ARG:HD3	1:A:141:TRP:CD1	0.55	2.37	12	2
1:A:147:ASN:CB	1:A:150:ALA:HB2	0.55	2.32	12	2
1:A:139:MET:O	1:A:156:PHE:CE1	0.55	2.59	14	1
1:A:72:THR:CG2	1:A:80:LEU:N	0.55	2.70	17	1
1:A:19:LEU:HD22	1:A:105:GLN:CG	0.55	2.28	19	1
1:A:122:TYR:CE1	1:A:133:GLU:CD	0.55	2.85	3	1
1:A:19:LEU:HG	1:A:115:LEU:HD22	0.55	1.77	10	2
1:A:75:ARG:NE	1:A:77:ASP:HA	0.55	2.17	16	1
1:A:19:LEU:CD1	1:A:28:LEU:CD1	0.54	2.85	5	1
1:A:107:ARG:O	1:A:156:PHE:CD2	0.54	2.61	9	3
1:A:109:GLY:CA	1:A:154:PHE:CE1	0.54	2.89	8	1
1:A:62:TYR:CD1	1:A:63:ASN:CG	0.54	2.85	19	1
1:A:88:TYR:O	1:A:92:GLN:CA	0.54	2.55	12	2
1:A:147:ASN:HB2	1:A:150:ALA:CB	0.54	2.31	16	6
1:A:121:LEU:HD12	1:A:147:ASN:CG	0.54	2.27	9	1
1:A:129:ASP:O	1:A:131:THR:N	0.54	2.40	12	19
1:A:19:LEU:HD12	1:A:27:MET:C	0.54	2.26	3	2
1:A:127:TYR:C	1:A:128:THR:HG1	0.54	2.09	15	2
1:A:131:THR:CG2	1:A:141:TRP:CZ2	0.54	2.90	16	1
1:A:65:ARG:HG2	1:A:67:PHE:CZ	0.54	2.36	1	6
1:A:117:HIS:CE1	1:A:146:GLN:HG3	0.54	2.37	13	2
1:A:36:VAL:HG12	1:A:38:CYS:SG	0.54	2.43	15	2
1:A:49:GLY:HA2	1:A:96:PHE:CZ	0.54	2.38	16	17
1:A:135:ARG:CZ	1:A:137:ASP:CG	0.54	2.80	8	1
1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:PHE:CE1	0.54	2.36	10	1
1:A:121:LEU:O	1:A:148:TYR:CB	0.54	2.56	17	1
1:A:6:THR:HG21	1:A:18:TRP:CZ2	0.54	2.38	13	3
1:A:118:PHE:CZ	1:A:142:CYS:HB2	0.54	2.38	2	1
1:A:27:MET:HE3	1:A:40:GLU:CA	0.54	2.32	13	2
1:A:13:SER:CB	1:A:153:LYS:NZ	0.54	2.70	19	5
1:A:57:VAL:CG2	1:A:84:THR:C	0.54	2.81	1	18
1:A:60:PHE:CE1	1:A:67:PHE:HB2	0.54	2.38	19	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:144:THR:HG21	1:A:153:LYS:CB	0.54	2.31	20	1
1:A:60:PHE:CG	1:A:83:SER:HB3	0.54	2.38	14	6
1:A:131:THR:N	1:A:141:TRP:O	0.54	2.40	15	13
1:A:4:CYS:SG	1:A:36:VAL:HG23	0.54	2.42	8	2
1:A:5:VAL:CG1	1:A:10:VAL:O	0.54	2.56	18	5
1:A:17:GLN:CB	1:A:30:THR:OG1	0.54	2.56	9	13
1:A:65:ARG:HG2	1:A:67:PHE:CE2	0.54	2.37	3	10
1:A:104:VAL:HG21	1:A:118:PHE:CD2	0.54	2.37	6	7
1:A:46:THR:HG21	1:A:56:CYS:SG	0.54	2.43	2	5
1:A:60:PHE:CD2	1:A:83:SER:HB3	0.54	2.38	20	5
1:A:124:ASN:CG	2:A:161:NAG:C8	0.54	2.81	17	3
1:A:119:PRO:CB	1:A:128:THR:CG2	0.54	2.86	14	3
1:A:121:LEU:HD23	1:A:126:ASN:N	0.54	2.17	9	2
1:A:65:ARG:CG	1:A:66:THR:N	0.54	2.71	17	7
1:A:118:PHE:CZ	1:A:142:CYS:CB	0.54	2.91	11	12
1:A:137:ASP:O	1:A:138:ASN:CB	0.54	2.56	3	1
1:A:118:PHE:CE1	1:A:142:CYS:SG	0.54	3.01	8	3
1:A:135:ARG:O	1:A:136:ARG:CD	0.54	2.56	7	1
1:A:135:ARG:NH2	1:A:137:ASP:CG	0.54	2.66	20	8
1:A:3:HIS:ND1	1:A:3:HIS:N	0.54	2.56	19	1
1:A:131:THR:CG2	1:A:141:TRP:CZ3	0.53	2.90	4	1
1:A:27:MET:CE	1:A:39:GLN:C	0.53	2.81	15	6
1:A:13:SER:O	1:A:31:CYS:CB	0.53	2.57	10	1
1:A:151:ASP:O	1:A:152:GLN:CB	0.53	2.57	17	7
1:A:121:LEU:CD2	1:A:125:HIS:C	0.53	2.80	9	1
1:A:145:THR:HG23	1:A:151:ASP:OD2	0.53	2.03	9	1
1:A:7:ASP:CG	1:A:20:LYS:CE	0.53	2.81	16	1
1:A:75:ARG:NH2	1:A:77:ASP:CG	0.53	2.67	1	5
1:A:88:TYR:O	1:A:92:GLN:N	0.53	2.42	11	14
1:A:123:ASN:O	1:A:124:ASN:CB	0.53	2.57	1	4
1:A:75:ARG:NH1	1:A:96:PHE:CG	0.53	2.76	3	1
1:A:6:THR:CG2	1:A:10:VAL:CG1	0.53	2.80	4	4
1:A:14:VAL:HG22	1:A:15:GLY:N	0.53	2.18	5	1
1:A:12:TYR:CZ	1:A:112:ASN:O	0.53	2.61	19	3
1:A:5:VAL:CG1	1:A:11:VAL:HG22	0.53	2.33	13	1
1:A:10:VAL:CG1	1:A:112:ASN:CB	0.53	2.87	17	1
1:A:6:THR:O	1:A:10:VAL:HG23	0.53	2.03	1	1
1:A:18:TRP:CD1	1:A:20:LYS:HE3	0.53	2.39	7	1
1:A:28:LEU:CD1	1:A:28:LEU:C	0.53	2.82	8	1
1:A:144:THR:C	1:A:145:THR:CG2	0.53	2.82	9	2
1:A:6:THR:CG2	1:A:10:VAL:O	0.53	2.57	8	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:106:THR:C	1:A:107:ARG:CG	0.53	2.81	7	1
1:A:103:LEU:HB3	1:A:115:LEU:CD1	0.53	2.34	11	4
1:A:7:ASP:O	1:A:8:SER:CB	0.53	2.57	1	5
1:A:16:MET:CE	1:A:144:THR:OG1	0.53	2.57	20	11
1:A:110:ASN:ND2	1:A:154:PHE:CE2	0.53	2.77	18	2
1:A:109:GLY:HA3	1:A:154:PHE:CE2	0.53	2.39	9	4
1:A:118:PHE:CE2	1:A:142:CYS:SG	0.53	3.02	5	2
1:A:3:HIS:NE2	1:A:13:SER:CA	0.53	2.72	8	2
1:A:76:GLN:O	1:A:77:ASP:CB	0.53	2.57	16	1
1:A:12:TYR:CE1	1:A:112:ASN:OD1	0.53	2.62	1	1
1:A:91:ASP:O	1:A:92:GLN:CB	0.53	2.57	10	9
1:A:60:PHE:CD2	1:A:83:SER:HB2	0.53	2.38	14	2
1:A:57:VAL:HG11	1:A:85:THR:HA	0.53	1.79	12	1
1:A:5:VAL:HG12	1:A:11:VAL:HG22	0.53	1.79	19	2
1:A:10:VAL:CG1	1:A:12:TYR:OH	0.53	2.57	7	4
1:A:106:THR:CB	1:A:156:PHE:O	0.53	2.57	15	3
1:A:146:GLN:CG	1:A:146:GLN:O	0.53	2.57	20	2
1:A:19:LEU:HD21	1:A:26:GLN:OE1	0.53	2.02	3	1
1:A:141:TRP:CE3	1:A:154:PHE:HB2	0.53	2.39	9	5
1:A:146:GLN:CG	1:A:147:ASN:OD1	0.53	2.57	10	3
1:A:145:THR:HG21	1:A:153:LYS:NZ	0.53	2.18	9	1
1:A:103:LEU:C	1:A:115:LEU:HD22	0.53	2.28	12	1
1:A:139:MET:SD	1:A:156:PHE:CD2	0.53	3.02	17	2
1:A:24:ASN:C	1:A:25:LYS:CG	0.53	2.82	14	1
1:A:139:MET:HG2	1:A:156:PHE:CD1	0.53	2.39	16	2
1:A:75:ARG:CZ	1:A:77:ASP:OD1	0.53	2.57	3	3
1:A:84:THR:CG2	1:A:95:SER:OG	0.53	2.57	15	5
1:A:21:THR:O	1:A:21:THR:CG2	0.53	2.57	18	3
1:A:29:CYS:SG	1:A:36:VAL:HG12	0.53	2.44	8	2
1:A:84:THR:OG1	1:A:93:LYS:CG	0.53	2.57	8	5
1:A:103:LEU:CB	1:A:115:LEU:HD13	0.53	2.34	12	1
1:A:76:GLN:O	1:A:77:ASP:OD1	0.53	2.27	16	1
1:A:20:LYS:CD	1:A:27:MET:O	0.53	2.57	18	1
1:A:13:SER:O	1:A:16:MET:CB	0.53	2.57	3	13
1:A:119:PRO:HG3	1:A:128:THR:HG23	0.53	1.81	13	2
1:A:135:ARG:O	1:A:136:ARG:CB	0.53	2.58	1	7
1:A:121:LEU:CD2	1:A:124:ASN:C	0.53	2.81	2	4
1:A:130:CYS:O	1:A:140:LYS:CD	0.53	2.57	2	3
1:A:60:PHE:CB	1:A:83:SER:OG	0.53	2.57	13	5
1:A:58:LEU:CD2	1:A:67:PHE:O	0.53	2.57	4	3
1:A:135:ARG:CZ	1:A:137:ASP:OD1	0.53	2.57	16	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:121:LEU:O	1:A:148:TYR:N	0.53	2.41	9	6
1:A:72:THR:O	1:A:75:ARG:CG	0.53	2.57	16	1
1:A:151:ASP:O	1:A:153:LYS:CG	0.53	2.57	16	1
1:A:84:THR:OG1	1:A:93:LYS:CB	0.52	2.57	9	14
1:A:130:CYS:O	1:A:140:LYS:CG	0.52	2.57	2	7
1:A:19:LEU:CD2	1:A:26:GLN:OE1	0.52	2.57	3	1
1:A:61:THR:CG2	1:A:66:THR:OG1	0.52	2.57	9	8
1:A:119:PRO:HB3	1:A:128:THR:CG2	0.52	2.34	14	10
1:A:51:SER:OG	1:A:84:THR:CG2	0.52	2.57	5	1
1:A:51:SER:CB	1:A:95:SER:OG	0.52	2.57	19	6
1:A:27:MET:CE	1:A:39:GLN:O	0.52	2.57	7	1
1:A:144:THR:O	1:A:145:THR:CG2	0.52	2.57	16	2
1:A:75:ARG:NH2	1:A:77:ASP:OD2	0.52	2.42	4	6
1:A:46:THR:CB	1:A:54:GLU:O	0.52	2.58	13	7
1:A:131:THR:O	1:A:141:TRP:CD1	0.52	2.62	2	5
1:A:27:MET:HE3	1:A:40:GLU:CB	0.52	2.34	3	1
1:A:49:GLY:CA	1:A:96:PHE:CZ	0.52	2.92	16	7
1:A:16:MET:O	1:A:30:THR:CG2	0.52	2.57	8	2
1:A:132:SER:OG	1:A:140:LYS:CG	0.52	2.57	8	1
1:A:32:LEU:HD13	1:A:37:SER:HB2	0.52	1.80	9	1
1:A:106:THR:CG2	1:A:156:PHE:O	0.52	2.57	15	1
1:A:151:ASP:OD1	1:A:153:LYS:CG	0.52	2.58	15	1
1:A:3:HIS:CD2	1:A:12:TYR:N	0.52	2.77	20	1
1:A:85:THR:CG2	1:A:91:ASP:OD2	0.52	2.57	1	1
1:A:124:ASN:O	2:A:161:NAG:C8	0.52	2.57	8	7
1:A:148:TYR:O	1:A:152:GLN:N	0.52	2.42	16	12
1:A:102:VAL:CG1	1:A:118:PHE:O	0.52	2.57	8	2
1:A:10:VAL:HG21	1:A:112:ASN:HB3	0.52	1.80	5	1
1:A:58:LEU:CD1	1:A:68:TYR:O	0.52	2.57	11	1
1:A:106:THR:CG2	1:A:155:GLY:O	0.52	2.57	12	1
1:A:6:THR:O	1:A:7:ASP:CB	0.52	2.57	1	1
1:A:12:TYR:O	1:A:31:CYS:CB	0.52	2.57	15	4
1:A:21:THR:CG2	1:A:25:LYS:O	0.52	2.57	13	3
1:A:145:THR:CG2	1:A:151:ASP:OD2	0.52	2.57	9	2
1:A:75:ARG:HG2	1:A:81:TRP:CD1	0.52	2.40	8	8
1:A:106:THR:CG2	1:A:116:CYS:SG	0.52	2.98	2	6
1:A:106:THR:OG1	1:A:155:GLY:CA	0.52	2.57	2	1
1:A:111:SER:OG	1:A:144:THR:CG2	0.52	2.58	2	5
1:A:139:MET:SD	1:A:156:PHE:CD1	0.52	3.03	4	1
1:A:85:THR:OG1	1:A:93:LYS:CB	0.52	2.57	8	2
1:A:16:MET:CE	1:A:153:LYS:HE2	0.52	2.34	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:32:LEU:CD1	1:A:37:SER:OG	0.52	2.57	19	4
1:A:79:HIS:CB	1:A:97:CYS:O	0.52	2.57	16	1
1:A:105:GLN:N	1:A:105:GLN:CD	0.52	2.68	18	1
1:A:75:ARG:NH2	1:A:77:ASP:OD1	0.52	2.43	17	5
1:A:137:ASP:O	1:A:139:MET:N	0.52	2.42	16	9
1:A:61:THR:CB	1:A:65:ARG:O	0.52	2.57	17	5
1:A:106:THR:CG2	1:A:142:CYS:SG	0.52	2.98	13	6
1:A:16:MET:HE3	1:A:153:LYS:HG3	0.52	1.81	3	1
1:A:140:LYS:CG	1:A:140:LYS:O	0.52	2.57	3	1
1:A:125:HIS:O	1:A:127:TYR:N	0.52	2.43	16	3
1:A:7:ASP:CG	1:A:20:LYS:NZ	0.52	2.67	1	1
1:A:128:THR:O	1:A:129:ASP:CB	0.52	2.57	11	7
1:A:121:LEU:CB	1:A:146:GLN:O	0.52	2.58	6	1
1:A:135:ARG:NH2	1:A:137:ASP:OD1	0.52	2.43	13	6
1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:OE1	0.52	2.57	9	1
1:A:3:HIS:NE2	1:A:11:VAL:O	0.52	2.43	12	1
1:A:118:PHE:HB2	1:A:119:PRO:CA	0.52	2.34	15	1
1:A:118:PHE:HB2	1:A:120:PHE:N	0.52	2.20	15	1
1:A:6:THR:HG21	1:A:12:TYR:CD2	0.52	2.39	17	1
1:A:47:TYR:CE1	1:A:96:PHE:HB2	0.52	2.40	2	13
1:A:73:GLU:O	1:A:81:TRP:NE1	0.52	2.43	15	9
1:A:106:THR:OG1	1:A:156:PHE:N	0.52	2.43	2	1
1:A:24:ASN:O	1:A:25:LYS:CG	0.52	2.58	19	1
1:A:84:THR:O	1:A:85:THR:CG2	0.52	2.57	3	16
1:A:29:CYS:SG	1:A:36:VAL:CG1	0.52	2.98	8	3
1:A:121:LEU:HD22	1:A:126:ASN:N	0.52	2.19	6	1
1:A:135:ARG:NH2	1:A:139:MET:C	0.52	2.67	6	1
1:A:27:MET:CB	1:A:39:GLN:O	0.52	2.57	7	1
1:A:60:PHE:N	1:A:67:PHE:O	0.52	2.43	8	2
1:A:109:GLY:HA3	1:A:154:PHE:CE1	0.52	2.40	15	3
1:A:135:ARG:O	1:A:136:ARG:CG	0.52	2.57	10	2
1:A:124:ASN:O	1:A:124:ASN:ND2	0.52	2.43	15	1
1:A:146:GLN:NE2	1:A:147:ASN:OD1	0.52	2.43	15	1
1:A:20:LYS:CE	1:A:38:CYS:SG	0.52	2.98	17	2
1:A:82:CYS:O	1:A:95:SER:N	0.52	2.43	1	3
1:A:111:SER:O	1:A:113:GLY:N	0.52	2.43	18	4
1:A:28:LEU:O	1:A:39:GLN:N	0.52	2.43	3	3
1:A:65:ARG:NH1	1:A:66:THR:O	0.52	2.43	3	1
1:A:135:ARG:NE	1:A:137:ASP:OD1	0.52	2.43	6	7
1:A:137:ASP:OD1	1:A:137:ASP:N	0.52	2.43	19	5
1:A:144:THR:OG1	1:A:153:LYS:CG	0.52	2.58	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:THR:N	1:A:93:LYS:O	0.52	2.43	5	3
1:A:130:CYS:SG	1:A:140:LYS:CG	0.52	2.98	5	1
1:A:142:CYS:SG	1:A:143:GLY:N	0.52	2.83	17	4
1:A:20:LYS:CE	1:A:29:CYS:SG	0.52	2.98	15	3
1:A:111:SER:OG	1:A:114:ALA:CB	0.52	2.57	6	2
1:A:103:LEU:O	1:A:103:LEU:CD2	0.52	2.57	15	1
1:A:58:LEU:CD1	1:A:68:TYR:C	0.52	2.81	16	1
1:A:122:TYR:O	1:A:124:ASN:N	0.52	2.42	18	1
1:A:30:THR:O	1:A:37:SER:N	0.52	2.43	15	9
1:A:121:LEU:N	1:A:146:GLN:O	0.52	2.43	14	5
1:A:146:GLN:CG	1:A:147:ASN:N	0.52	2.72	9	1
1:A:18:TRP:O	1:A:29:CYS:N	0.52	2.43	10	1
1:A:146:GLN:O	1:A:147:ASN:ND2	0.52	2.43	10	1
1:A:75:ARG:NE	1:A:79:HIS:NE2	0.52	2.58	11	1
1:A:89:GLU:O	1:A:92:GLN:NE2	0.52	2.43	20	1
1:A:48:GLY:O	1:A:53:GLY:N	0.51	2.43	2	1
1:A:57:VAL:N	1:A:83:SER:O	0.51	2.43	10	3
1:A:117:HIS:CD2	1:A:146:GLN:HA	0.51	2.39	9	6
1:A:77:ASP:OD2	1:A:79:HIS:ND1	0.51	2.44	5	1
1:A:35:GLY:O	1:A:37:SER:N	0.51	2.43	8	2
1:A:47:TYR:OH	1:A:79:HIS:NE2	0.51	2.43	9	1
1:A:120:PHE:CE1	1:A:127:TYR:HB3	0.51	2.39	16	2
1:A:63:ASN:ND2	1:A:73:GLU:OE2	0.51	2.43	12	1
1:A:132:SER:O	1:A:134:GLY:N	0.51	2.43	12	2
1:A:107:ARG:N	1:A:107:ARG:CD	0.51	2.72	20	1
1:A:58:LEU:HD13	1:A:69:SER:HA	0.51	1.82	1	5
1:A:147:ASN:O	1:A:151:ASP:N	0.51	2.43	10	4
1:A:32:LEU:O	1:A:34:ASN:N	0.51	2.43	12	7
1:A:72:THR:O	1:A:74:GLY:N	0.51	2.43	20	5
1:A:144:THR:CG2	1:A:153:LYS:HB2	0.51	2.36	4	3
1:A:119:PRO:CB	1:A:127:TYR:O	0.51	2.57	6	2
1:A:84:THR:OG1	1:A:94:TYR:N	0.51	2.43	10	5
1:A:16:MET:CE	1:A:153:LYS:CE	0.51	2.87	13	1
1:A:135:ARG:C	1:A:136:ARG:CG	0.51	2.81	16	1
1:A:108:GLY:O	1:A:110:ASN:N	0.51	2.43	17	1
1:A:117:HIS:NE2	1:A:119:PRO:O	0.51	2.43	19	1
1:A:104:VAL:HG21	1:A:118:PHE:CD1	0.51	2.41	17	2
1:A:32:LEU:O	1:A:35:GLY:N	0.51	2.43	3	2
1:A:114:ALA:O	1:A:116:CYS:N	0.51	2.43	18	5
1:A:84:THR:HG21	1:A:95:SER:HG	0.51	1.65	8	1
1:A:145:THR:CG2	1:A:153:LYS:NZ	0.51	2.71	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:TYR:O	1:A:64:GLY:N	0.51	2.43	15	1
1:A:75:ARG:CZ	1:A:77:ASP:OD2	0.51	2.57	15	1
1:A:20:LYS:O	1:A:27:MET:N	0.51	2.43	19	6
1:A:40:GLU:N	1:A:40:GLU:OE1	0.51	2.44	20	2
1:A:6:THR:HG22	1:A:10:VAL:O	0.51	2.05	3	1
1:A:62:TYR:O	1:A:63:ASN:CG	0.51	2.53	6	12
1:A:62:TYR:O	1:A:63:ASN:ND2	0.51	2.43	16	11
1:A:91:ASP:O	1:A:93:LYS:N	0.51	2.43	5	2
1:A:3:HIS:CE1	1:A:13:SER:OG	0.51	2.64	13	3
1:A:3:HIS:CD2	1:A:13:SER:HA	0.51	2.40	8	1
1:A:146:GLN:NE2	1:A:147:ASN:CG	0.51	2.69	8	1
1:A:147:ASN:O	1:A:150:ALA:N	0.51	2.43	9	1
1:A:5:VAL:HG22	1:A:11:VAL:CG1	0.51	2.18	20	1
1:A:70:CYS:SG	1:A:80:LEU:CB	0.51	2.98	6	2
1:A:18:TRP:N	1:A:29:CYS:O	0.51	2.43	18	5
1:A:122:TYR:O	1:A:125:HIS:N	0.51	2.43	6	7
1:A:121:LEU:CD1	1:A:121:LEU:C	0.51	2.83	11	2
1:A:3:HIS:CE1	1:A:13:SER:HA	0.51	2.39	12	1
1:A:135:ARG:CD	1:A:141:TRP:CD1	0.51	2.94	12	1
1:A:73:GLU:O	1:A:81:TRP:CZ2	0.51	2.64	14	3
1:A:110:ASN:HB2	1:A:154:PHE:CE2	0.51	2.41	16	1
1:A:87:ASN:ND2	1:A:90:GLN:NE2	0.51	2.58	18	1
1:A:47:TYR:CD2	1:A:98:THR:HG23	0.51	2.41	20	1
1:A:22:GLN:O	1:A:22:GLN:CG	0.51	2.58	19	3
1:A:96:PHE:N	1:A:96:PHE:CD1	0.51	2.78	17	5
1:A:104:VAL:CG2	1:A:118:PHE:CE2	0.51	2.92	20	3
1:A:13:SER:OG	1:A:153:LYS:NZ	0.51	2.43	14	3
1:A:135:ARG:O	1:A:136:ARG:NE	0.51	2.43	7	1
1:A:60:PHE:O	1:A:67:PHE:N	0.51	2.43	8	1
1:A:110:ASN:O	1:A:153:LYS:NZ	0.51	2.43	10	1
1:A:129:ASP:O	1:A:130:CYS:C	0.51	2.52	15	2
1:A:76:GLN:O	1:A:76:GLN:NE2	0.51	2.44	16	1
1:A:124:ASN:CG	2:A:161:NAG:H83	0.51	2.31	16	1
1:A:130:CYS:SG	1:A:142:CYS:CB	0.51	2.98	16	1
1:A:47:TYR:CE2	1:A:98:THR:HG23	0.51	2.40	20	1
1:A:4:CYS:N	1:A:31:CYS:SG	0.51	2.84	14	4
1:A:11:VAL:O	1:A:11:VAL:HG13	0.51	2.06	3	1
1:A:122:TYR:OH	1:A:133:GLU:CG	0.51	2.59	4	3
1:A:144:THR:OG1	1:A:153:LYS:CB	0.51	2.59	16	3
1:A:121:LEU:HD12	1:A:121:LEU:C	0.51	2.30	4	1
1:A:60:PHE:CZ	1:A:67:PHE:HB2	0.51	2.40	16	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:120:PHE:CZ	1:A:127:TYR:HB3	0.51	2.40	14	2
1:A:19:LEU:HD11	1:A:26:GLN:CG	0.51	2.34	11	1
1:A:124:ASN:N	1:A:124:ASN:ND2	0.51	2.58	20	1
1:A:3:HIS:CG	1:A:11:VAL:CG1	0.51	2.94	6	2
1:A:77:ASP:OD1	1:A:77:ASP:N	0.51	2.43	19	6
1:A:14:VAL:HG12	1:A:15:GLY:H	0.51	1.66	16	2
1:A:148:TYR:CD1	1:A:148:TYR:C	0.51	2.88	17	5
1:A:55:PRO:O	1:A:84:THR:CG2	0.51	2.57	1	1
1:A:121:LEU:CD1	1:A:122:TYR:N	0.51	2.73	4	2
1:A:47:TYR:N	1:A:96:PHE:O	0.51	2.43	18	4
1:A:46:THR:CG2	1:A:54:GLU:O	0.51	2.58	12	2
1:A:50:ASN:ND2	1:A:92:GLN:O	0.51	2.44	12	3
1:A:147:ASN:CG	1:A:150:ALA:CB	0.51	2.84	16	1
1:A:78:GLY:O	1:A:79:HIS:O	0.51	2.29	17	1
1:A:135:ARG:NH1	1:A:139:MET:SD	0.51	2.84	19	1
1:A:7:ASP:HB2	1:A:10:VAL:CG2	0.51	2.36	9	5
1:A:54:GLU:CG	1:A:55:PRO:HD3	0.51	2.36	12	9
1:A:72:THR:O	1:A:75:ARG:N	0.51	2.43	17	6
1:A:62:TYR:CE1	1:A:63:ASN:HB3	0.51	2.41	6	1
1:A:135:ARG:NH2	1:A:139:MET:O	0.51	2.43	6	1
1:A:24:ASN:O	1:A:25:LYS:CD	0.51	2.59	9	1
1:A:111:SER:O	1:A:114:ALA:CB	0.51	2.57	14	1
1:A:103:LEU:O	1:A:103:LEU:CG	0.51	2.58	15	1
1:A:11:VAL:O	1:A:11:VAL:CG2	0.50	2.57	4	1
1:A:10:VAL:HG21	1:A:112:ASN:CB	0.50	2.36	5	1
1:A:111:SER:CB	1:A:114:ALA:HB3	0.50	2.36	8	1
1:A:123:ASN:C	1:A:124:ASN:ND2	0.50	2.69	10	1
1:A:28:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HD12	0.50	1.80	12	2
1:A:57:VAL:HG13	1:A:85:THR:N	0.50	2.21	12	1
1:A:120:PHE:CD2	1:A:143:GLY:HA3	0.50	2.41	14	2
1:A:18:TRP:CE2	1:A:29:CYS:HB2	0.50	2.41	16	1
1:A:58:LEU:HD22	1:A:60:PHE:HD2	0.50	1.66	16	1
1:A:147:ASN:ND2	1:A:150:ALA:HB3	0.50	2.20	16	1
1:A:10:VAL:CG1	1:A:112:ASN:HB3	0.50	2.36	17	1
1:A:56:CYS:C	1:A:57:VAL:CG2	0.50	2.84	7	13
1:A:11:VAL:HG22	1:A:12:TYR:N	0.50	2.21	15	2
1:A:142:CYS:N	1:A:155:GLY:O	0.50	2.44	16	3
1:A:61:THR:HG23	1:A:66:THR:HG23	0.50	1.83	10	4
1:A:83:SER:OG	1:A:88:TYR:CG	0.50	2.65	16	1
1:A:75:ARG:CG	1:A:78:GLY:O	0.50	2.59	17	1
1:A:10:VAL:HG12	1:A:112:ASN:ND2	0.50	2.22	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:65:ARG:HG2	1:A:67:PHE:CE1	0.50	2.42	7	6
1:A:131:THR:O	1:A:141:TRP:N	0.50	2.43	8	4
1:A:107:ARG:N	1:A:156:PHE:O	0.50	2.43	3	2
1:A:145:THR:HG23	1:A:153:LYS:CB	0.50	2.36	3	2
1:A:32:LEU:HD11	1:A:37:SER:OG	0.50	2.06	13	1
1:A:148:TYR:CE1	1:A:154:PHE:HB3	0.50	2.41	7	9
1:A:12:TYR:CD2	1:A:18:TRP:CE2	0.50	3.00	4	5
1:A:149:ASP:O	1:A:152:GLN:NE2	0.50	2.44	4	1
1:A:59:PRO:HB3	1:A:68:TYR:CD1	0.50	2.42	9	1
1:A:30:THR:N	1:A:37:SER:O	0.50	2.43	10	1
1:A:119:PRO:CG	1:A:128:THR:HG23	0.50	2.37	13	1
1:A:7:ASP:OD2	1:A:20:LYS:CE	0.50	2.59	16	1
1:A:123:ASN:C	1:A:124:ASN:CG	0.50	2.79	9	9
1:A:124:ASN:CA	2:A:161:NAG:H82	0.50	2.35	7	5
1:A:133:GLU:O	1:A:141:TRP:NE1	0.50	2.43	2	2
1:A:47:TYR:OH	1:A:79:HIS:ND1	0.50	2.45	15	4
1:A:7:ASP:HB2	1:A:10:VAL:HG23	0.50	1.84	15	2
1:A:45:GLN:HB3	1:A:98:THR:CG2	0.50	2.36	11	6
1:A:48:GLY:N	1:A:52:ASN:O	0.50	2.43	10	2
1:A:58:LEU:HD21	1:A:60:PHE:CE2	0.50	2.41	20	4
1:A:20:LYS:N	1:A:27:MET:O	0.50	2.43	19	3
1:A:106:THR:OG1	1:A:155:GLY:C	0.50	2.55	2	1
1:A:59:PRO:HG3	1:A:68:TYR:CD2	0.50	2.42	3	4
1:A:110:ASN:OD1	1:A:154:PHE:N	0.50	2.43	6	1
1:A:144:THR:O	1:A:145:THR:HG22	0.50	2.07	9	1
1:A:6:THR:HG23	1:A:7:ASP:N	0.50	2.21	11	1
1:A:104:VAL:HG12	1:A:116:CYS:HB2	0.50	1.83	6	10
1:A:115:LEU:O	1:A:116:CYS:C	0.50	2.55	9	16
1:A:109:GLY:CA	1:A:154:PHE:CE2	0.50	2.95	5	2
1:A:14:VAL:CG1	1:A:33:GLY:HA2	0.50	2.37	9	1
1:A:52:ASN:O	1:A:52:ASN:ND2	0.50	2.44	14	1
1:A:117:HIS:CD2	1:A:117:HIS:C	0.50	2.90	3	4
1:A:124:ASN:O	2:A:161:NAG:O7	0.50	2.30	11	3
1:A:102:VAL:O	1:A:103:LEU:HD13	0.50	2.07	8	1
1:A:137:ASP:HB2	1:A:139:MET:HE2	0.50	1.84	8	1
1:A:32:LEU:CD1	1:A:37:SER:HB3	0.50	2.35	9	3
1:A:102:VAL:O	1:A:102:VAL:CG2	0.50	2.60	9	1
1:A:148:TYR:O	1:A:151:ASP:N	0.49	2.43	17	3
1:A:91:ASP:O	1:A:92:GLN:C	0.49	2.55	5	4
1:A:80:LEU:O	1:A:97:CYS:N	0.49	2.43	14	3
1:A:20:LYS:NZ	1:A:29:CYS:SG	0.49	2.84	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:ASP:OD2	1:A:93:LYS:NZ	0.49	2.44	13	1
1:A:104:VAL:HG22	1:A:106:THR:HG23	0.49	1.82	14	1
1:A:24:ASN:O	1:A:24:ASN:ND2	0.49	2.45	16	1
1:A:81:TRP:CZ3	1:A:88:TYR:CZ	0.49	3.00	20	2
1:A:104:VAL:CG1	1:A:116:CYS:HB3	0.49	2.37	1	5
1:A:54:GLU:HB3	1:A:55:PRO:CD	0.49	2.37	3	9
1:A:145:THR:O	1:A:147:ASN:N	0.49	2.45	3	3
1:A:124:ASN:C	2:A:161:NAG:O7	0.49	2.55	6	1
1:A:120:PHE:HZ	1:A:131:THR:HG22	0.49	1.66	7	2
1:A:139:MET:HE2	1:A:156:PHE:CZ	0.49	2.42	10	1
1:A:28:LEU:CD2	1:A:28:LEU:N	0.49	2.75	15	1
1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:OE1	0.49	2.61	16	1
1:A:4:CYS:O	1:A:12:TYR:N	0.49	2.43	1	3
1:A:145:THR:CG2	1:A:151:ASP:CG	0.49	2.85	9	2
1:A:49:GLY:HA2	1:A:96:PHE:CE1	0.49	2.42	17	3
1:A:16:MET:HE2	1:A:144:THR:CG2	0.49	2.37	18	6
1:A:19:LEU:CD2	1:A:26:GLN:HB2	0.49	2.37	5	1
1:A:147:ASN:HB3	1:A:150:ALA:CB	0.49	2.37	11	6
1:A:32:LEU:CD1	1:A:37:SER:HB2	0.49	2.37	9	6
1:A:132:SER:HA	1:A:141:TRP:CD1	0.49	2.43	2	4
1:A:18:TRP:CD1	1:A:20:LYS:HD3	0.49	2.42	5	1
1:A:3:HIS:CD2	1:A:13:SER:N	0.49	2.80	20	2
1:A:63:ASN:C	1:A:63:ASN:OD1	0.49	2.55	2	8
1:A:10:VAL:HG23	1:A:112:ASN:HB3	0.49	1.85	4	1
1:A:22:GLN:O	1:A:22:GLN:NE2	0.49	2.45	6	1
1:A:154:PHE:CD1	1:A:155:GLY:N	0.49	2.80	7	1
1:A:6:THR:O	1:A:10:VAL:N	0.49	2.43	16	2
1:A:87:ASN:CB	1:A:90:GLN:CB	0.49	2.91	15	2
1:A:92:GLN:CG	1:A:92:GLN:O	0.49	2.60	11	1
1:A:60:PHE:CB	1:A:83:SER:HB3	0.49	2.38	9	6
1:A:122:TYR:CZ	1:A:133:GLU:HG3	0.49	2.42	1	3
1:A:146:GLN:C	1:A:147:ASN:CG	0.49	2.81	4	4
1:A:117:HIS:NE2	1:A:146:GLN:HG2	0.49	2.23	3	2
1:A:18:TRP:CG	1:A:18:TRP:O	0.49	2.65	4	2
1:A:61:THR:HG23	1:A:66:THR:HA	0.49	1.84	15	1
1:A:59:PRO:HB3	1:A:68:TYR:CD2	0.49	2.42	20	1
1:A:135:ARG:NH2	1:A:139:MET:HE2	0.49	2.22	1	1
1:A:18:TRP:CZ2	1:A:29:CYS:HB3	0.49	2.42	13	4
1:A:123:ASN:O	1:A:124:ASN:CG	0.49	2.56	3	11
1:A:58:LEU:HD13	1:A:69:SER:N	0.49	2.21	16	3
1:A:63:ASN:C	1:A:63:ASN:ND2	0.49	2.70	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:ASP:HB3	1:A:10:VAL:CG2	0.49	2.37	16	3
1:A:82:CYS:O	1:A:94:TYR:CA	0.49	2.61	11	3
1:A:57:VAL:O	1:A:57:VAL:CG2	0.49	2.57	12	1
1:A:76:GLN:O	1:A:77:ASP:HB2	0.49	2.08	16	1
1:A:122:TYR:O	1:A:123:ASN:CG	0.49	2.56	17	2
1:A:19:LEU:C	1:A:19:LEU:CD1	0.49	2.81	4	1
1:A:7:ASP:OD1	1:A:7:ASP:N	0.49	2.45	5	2
1:A:144:THR:HG22	1:A:153:LYS:C	0.49	2.33	5	1
1:A:17:GLN:CB	1:A:30:THR:HG23	0.49	2.38	8	1
1:A:12:TYR:CE1	1:A:113:GLY:O	0.49	2.66	13	4
1:A:127:TYR:CE1	1:A:131:THR:OG1	0.49	2.57	15	1
1:A:6:THR:HG23	1:A:10:VAL:HG11	0.49	1.81	19	1
1:A:10:VAL:HB	1:A:12:TYR:CE2	0.49	2.43	20	1
1:A:85:THR:O	1:A:86:SER:C	0.49	2.56	20	18
1:A:87:ASN:CB	1:A:90:GLN:HB3	0.49	2.37	11	4
1:A:103:LEU:HD22	1:A:115:LEU:HD13	0.49	1.83	12	2
1:A:65:ARG:HD3	1:A:67:PHE:CZ	0.49	2.42	6	1
1:A:102:VAL:CG1	1:A:118:PHE:HB2	0.49	2.38	7	1
1:A:123:ASN:O	1:A:124:ASN:ND2	0.49	2.45	19	2
1:A:28:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HD23	0.49	1.84	11	1
1:A:139:MET:SD	1:A:156:PHE:CE1	0.49	3.06	19	1
1:A:47:TYR:CZ	1:A:96:PHE:HB2	0.48	2.43	1	1
1:A:16:MET:CE	1:A:144:THR:HB	0.48	2.38	7	6
1:A:125:HIS:O	1:A:126:ASN:C	0.48	2.56	9	13
1:A:106:THR:HG22	1:A:156:PHE:C	0.48	2.33	4	3
1:A:72:THR:HG23	1:A:80:LEU:CG	0.48	2.38	11	1
1:A:139:MET:HG2	1:A:156:PHE:CE1	0.48	2.43	14	2
1:A:32:LEU:HD13	1:A:37:SER:HB3	0.48	1.83	19	1
1:A:87:ASN:CB	1:A:90:GLN:HB2	0.48	2.37	15	6
1:A:154:PHE:C	1:A:154:PHE:CD1	0.48	2.90	1	1
1:A:103:LEU:CD2	1:A:115:LEU:HD21	0.48	2.35	16	1
1:A:62:TYR:CE1	1:A:73:GLU:HB3	0.48	2.43	17	1
1:A:132:SER:O	1:A:135:ARG:N	0.48	2.45	1	3
1:A:145:THR:HG23	1:A:153:LYS:CG	0.48	2.39	3	1
1:A:145:THR:O	1:A:146:GLN:C	0.48	2.57	8	7
1:A:30:THR:O	1:A:37:SER:CB	0.48	2.61	6	1
1:A:27:MET:HE2	1:A:40:GLU:H	0.48	1.67	8	2
1:A:122:TYR:CZ	1:A:133:GLU:HB3	0.48	2.43	9	1
1:A:111:SER:HB2	1:A:144:THR:CG2	0.48	2.36	10	3
1:A:60:PHE:CD1	1:A:83:SER:HB2	0.48	2.43	12	1
1:A:12:TYR:HB2	1:A:18:TRP:CZ3	0.48	2.42	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:VAL:O	1:A:115:LEU:HA	0.48	2.09	2	19
1:A:19:LEU:HD11	1:A:26:GLN:CB	0.48	2.39	2	1
1:A:133:GLU:O	1:A:135:ARG:N	0.48	2.47	2	2
1:A:157:CYS:HB3	1:A:158:PRO:CD	0.48	2.39	16	3
1:A:144:THR:CG2	1:A:153:LYS:HB3	0.48	2.38	4	2
1:A:61:THR:HG23	1:A:66:THR:N	0.48	2.23	8	2
1:A:60:PHE:CE1	1:A:67:PHE:CB	0.48	2.96	19	1
1:A:27:MET:HE3	1:A:40:GLU:HG2	0.48	1.83	3	1
1:A:103:LEU:CB	1:A:115:LEU:CD2	0.48	2.92	10	4
1:A:121:LEU:O	1:A:148:TYR:HB3	0.48	2.08	17	3
1:A:86:SER:OG	1:A:87:ASN:N	0.48	2.45	7	3
1:A:17:GLN:HB2	1:A:28:LEU:HD11	0.48	1.86	8	1
1:A:45:GLN:N	1:A:98:THR:CG2	0.48	2.76	16	1
1:A:14:VAL:O	1:A:15:GLY:C	0.48	2.57	11	17
1:A:16:MET:HE3	1:A:153:LYS:HG2	0.48	1.84	3	1
1:A:122:TYR:O	1:A:123:ASN:C	0.48	2.57	6	5
1:A:83:SER:HB2	1:A:88:TYR:CD1	0.48	2.44	8	1
1:A:13:SER:HB2	1:A:153:LYS:CE	0.48	2.39	3	5
1:A:65:ARG:CG	1:A:67:PHE:CE2	0.48	2.97	18	5
1:A:19:LEU:CD2	1:A:27:MET:O	0.48	2.57	4	1
1:A:45:GLN:N	1:A:98:THR:HG23	0.48	2.24	16	1
1:A:111:SER:CB	1:A:154:PHE:O	0.48	2.61	16	3
1:A:141:TRP:CH2	1:A:148:TYR:CG	0.48	3.02	16	1
1:A:60:PHE:CG	1:A:83:SER:OG	0.48	2.65	18	1
1:A:60:PHE:CZ	1:A:82:CYS:HA	0.48	2.44	18	1
1:A:111:SER:O	1:A:112:ASN:C	0.48	2.56	8	12
1:A:32:LEU:O	1:A:33:GLY:C	0.48	2.57	15	9
1:A:102:VAL:HG23	1:A:118:PHE:O	0.48	2.09	9	2
1:A:139:MET:O	1:A:140:LYS:C	0.48	2.57	12	9
1:A:90:GLN:C	1:A:90:GLN:CD	0.48	2.81	3	1
1:A:157:CYS:CB	1:A:158:PRO:HD2	0.48	2.38	17	3
1:A:18:TRP:CH2	1:A:29:CYS:HB3	0.48	2.44	8	1
1:A:84:THR:OG1	1:A:93:LYS:C	0.48	2.57	12	6
1:A:145:THR:OG1	1:A:151:ASP:CG	0.48	2.57	9	1
1:A:10:VAL:CG1	1:A:112:ASN:O	0.48	2.62	13	2
1:A:116:CYS:SG	1:A:117:HIS:N	0.48	2.87	14	1
1:A:61:THR:CG2	1:A:66:THR:HA	0.48	2.39	9	12
1:A:102:VAL:O	1:A:103:LEU:CD1	0.48	2.62	2	1
1:A:67:PHE:CD1	1:A:67:PHE:N	0.48	2.81	19	3
1:A:110:ASN:HB2	1:A:154:PHE:CZ	0.48	2.44	16	2
1:A:32:LEU:HD12	1:A:37:SER:OG	0.48	2.08	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:GLY:HA3	1:A:96:PHE:CE2	0.48	2.43	15	1
1:A:34:ASN:OD1	1:A:35:GLY:N	0.48	2.46	18	1
1:A:85:THR:CG2	1:A:91:ASP:CB	0.48	2.81	1	1
1:A:62:TYR:O	1:A:63:ASN:OD1	0.48	2.32	12	3
1:A:4:CYS:N	1:A:12:TYR:O	0.48	2.47	19	3
1:A:35:GLY:O	1:A:36:VAL:C	0.48	2.57	6	3
1:A:3:HIS:CD2	1:A:11:VAL:C	0.48	2.92	13	1
1:A:17:GLN:O	1:A:115:LEU:CB	0.48	2.61	14	1
1:A:58:LEU:HD23	1:A:60:PHE:CE1	0.48	2.43	19	2
1:A:85:THR:O	1:A:87:ASN:N	0.48	2.47	19	1
1:A:51:SER:O	1:A:54:GLU:CD	0.47	2.58	11	2
1:A:52:ASN:O	1:A:52:ASN:CG	0.47	2.57	8	13
1:A:136:ARG:C	1:A:137:ASP:OD1	0.47	2.57	2	2
1:A:137:ASP:O	1:A:138:ASN:ND2	0.47	2.47	3	1
1:A:122:TYR:OH	1:A:133:GLU:CD	0.47	2.57	13	2
1:A:18:TRP:CD1	1:A:18:TRP:O	0.47	2.67	5	1
1:A:13:SER:CB	1:A:153:LYS:HD2	0.47	2.39	7	2
1:A:135:ARG:HG3	1:A:141:TRP:CD1	0.47	2.44	7	2
1:A:121:LEU:CD1	1:A:147:ASN:OD1	0.47	2.61	9	1
1:A:146:GLN:C	1:A:147:ASN:OD1	0.47	2.57	13	2
1:A:157:CYS:HB2	1:A:158:PRO:CD	0.47	2.39	14	2
1:A:141:TRP:HB3	1:A:156:PHE:CD1	0.47	2.44	14	2
1:A:72:THR:O	1:A:73:GLU:C	0.47	2.57	15	7
1:A:130:CYS:C	1:A:141:TRP:O	0.47	2.57	2	3
1:A:75:ARG:HG3	1:A:81:TRP:CD1	0.47	2.44	3	3
1:A:117:HIS:CE1	1:A:146:GLN:CG	0.47	2.97	3	2
1:A:135:ARG:C	1:A:137:ASP:OD1	0.47	2.57	3	1
1:A:136:ARG:C	1:A:137:ASP:CG	0.47	2.82	3	1
1:A:63:ASN:OD1	1:A:63:ASN:C	0.47	2.57	18	5
1:A:6:THR:O	1:A:7:ASP:CG	0.47	2.57	8	1
1:A:15:GLY:HA2	1:A:32:LEU:HD23	0.47	1.85	8	1
1:A:139:MET:HG2	1:A:156:PHE:CD2	0.47	2.44	14	1
1:A:76:GLN:C	1:A:76:GLN:CD	0.47	2.81	16	1
1:A:129:ASP:OD1	1:A:129:ASP:N	0.47	2.46	18	2
1:A:69:SER:O	1:A:70:CYS:C	0.47	2.57	3	12
1:A:104:VAL:CG1	1:A:116:CYS:HB2	0.47	2.39	15	3
1:A:151:ASP:O	1:A:152:GLN:C	0.47	2.57	16	4
1:A:3:HIS:ND1	1:A:11:VAL:HG11	0.47	2.24	6	1
1:A:153:LYS:NZ	1:A:153:LYS:HB2	0.47	2.24	13	1
1:A:114:ALA:HB3	1:A:144:THR:CG2	0.47	2.40	15	1
1:A:118:PHE:HB2	1:A:119:PRO:HA	0.47	1.86	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:THR:HG21	1:A:18:TRP:HE1	0.47	1.69	1	1
1:A:137:ASP:O	1:A:138:ASN:C	0.47	2.57	10	6
1:A:16:MET:CE	1:A:153:LYS:HG3	0.47	2.38	3	1
1:A:121:LEU:HB3	1:A:147:ASN:HA	0.47	1.87	19	3
1:A:53:GLY:O	1:A:54:GLU:CD	0.47	2.57	9	1
1:A:103:LEU:HB2	1:A:115:LEU:CD2	0.47	2.38	14	3
1:A:144:THR:C	1:A:145:THR:HG23	0.47	2.35	16	2
1:A:19:LEU:CD2	1:A:105:GLN:CD	0.47	2.85	20	1
1:A:87:ASN:CG	1:A:90:GLN:CD	0.47	2.83	20	1
1:A:124:ASN:CG	1:A:124:ASN:O	0.47	2.58	1	1
1:A:14:VAL:O	1:A:16:MET:N	0.47	2.48	4	13
1:A:121:LEU:CB	1:A:147:ASN:HA	0.47	2.39	5	2
1:A:19:LEU:CD2	1:A:115:LEU:HD22	0.47	2.40	9	1
1:A:47:TYR:OH	1:A:79:HIS:CE1	0.47	2.67	16	1
1:A:124:ASN:HA	2:A:161:NAG:C8	0.47	2.38	18	1
1:A:87:ASN:OD1	1:A:90:GLN:CD	0.47	2.57	20	1
1:A:107:ARG:N	1:A:107:ARG:HD2	0.47	2.25	20	1
1:A:13:SER:HB3	1:A:153:LYS:CD	0.47	2.39	1	1
1:A:39:GLN:O	1:A:40:GLU:C	0.47	2.57	4	3
1:A:105:GLN:OE1	1:A:115:LEU:CD1	0.47	2.60	4	1
1:A:13:SER:O	1:A:14:VAL:O	0.47	2.33	14	6
1:A:124:ASN:CA	2:A:161:NAG:O7	0.47	2.62	6	1
1:A:139:MET:HG2	1:A:156:PHE:CZ	0.47	2.44	14	1
1:A:3:HIS:C	1:A:31:CYS:SG	0.47	2.98	19	7
1:A:27:MET:CE	1:A:39:GLN:HA	0.47	2.40	16	2
1:A:124:ASN:OD1	1:A:124:ASN:C	0.47	2.57	1	1
1:A:62:TYR:CD1	1:A:63:ASN:HB3	0.47	2.45	8	3
1:A:18:TRP:CE2	1:A:29:CYS:HB3	0.47	2.45	3	1
1:A:65:ARG:NE	1:A:66:THR:N	0.47	2.63	3	1
1:A:45:GLN:O	1:A:46:THR:C	0.47	2.57	16	8
1:A:123:ASN:O	1:A:123:ASN:OD1	0.47	2.33	17	2
1:A:147:ASN:OD1	1:A:147:ASN:N	0.47	2.48	6	3
1:A:71:THR:HG23	1:A:81:TRP:NE1	0.47	2.25	7	1
1:A:135:ARG:O	1:A:137:ASP:CG	0.47	2.57	7	1
1:A:72:THR:N	1:A:80:LEU:HD23	0.47	2.24	11	1
1:A:79:HIS:N	1:A:79:HIS:CD2	0.47	2.82	13	1
1:A:139:MET:HG2	1:A:156:PHE:CG	0.47	2.45	14	1
1:A:139:MET:HB3	1:A:156:PHE:CE1	0.47	2.45	14	1
1:A:3:HIS:CG	1:A:11:VAL:HG21	0.47	2.44	15	1
1:A:127:TYR:OH	1:A:133:GLU:CD	0.47	2.57	15	1
1:A:6:THR:N	1:A:10:VAL:O	0.47	2.44	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:146:GLN:O	1:A:147:ASN:CG	0.47	2.57	18	1
1:A:60:PHE:CD1	1:A:67:PHE:HB2	0.47	2.45	19	1
1:A:71:THR:OG1	1:A:73:GLU:CD	0.47	2.57	20	1
1:A:76:GLN:O	1:A:76:GLN:CG	0.47	2.62	1	1
1:A:104:VAL:CG2	1:A:118:PHE:CD2	0.47	2.96	1	6
1:A:133:GLU:O	1:A:134:GLY:C	0.47	2.57	2	3
1:A:54:GLU:CB	1:A:55:PRO:HD2	0.47	2.40	4	4
1:A:88:TYR:CZ	1:A:92:GLN:NE2	0.47	2.83	4	1
1:A:130:CYS:SG	1:A:140:LYS:C	0.47	2.98	5	3
1:A:60:PHE:O	1:A:60:PHE:CD2	0.47	2.68	7	1
1:A:106:THR:O	1:A:113:GLY:CA	0.47	2.62	14	2
1:A:122:TYR:HB3	1:A:127:TYR:CD2	0.47	2.45	16	3
1:A:139:MET:HG2	1:A:156:PHE:CE2	0.47	2.44	14	1
1:A:7:ASP:OD1	1:A:7:ASP:C	0.47	2.57	20	1
1:A:19:LEU:HD11	1:A:26:GLN:HB2	0.47	1.86	2	1
1:A:52:ASN:O	1:A:53:GLY:C	0.47	2.57	13	2
1:A:102:VAL:HG12	1:A:118:PHE:HB2	0.47	1.86	7	1
1:A:106:THR:OG1	1:A:114:ALA:O	0.47	2.33	7	8
1:A:135:ARG:O	1:A:137:ASP:OD2	0.47	2.33	7	1
1:A:14:VAL:HG11	1:A:33:GLY:HA2	0.47	1.85	9	1
1:A:110:ASN:ND2	1:A:154:PHE:CE1	0.47	2.83	17	1
1:A:129:ASP:OD1	1:A:129:ASP:C	0.47	2.58	17	1
1:A:50:ASN:O	1:A:50:ASN:OD1	0.46	2.34	1	1
1:A:69:SER:O	1:A:70:CYS:O	0.46	2.33	9	8
1:A:46:THR:OG1	1:A:54:GLU:O	0.46	2.34	20	5
1:A:123:ASN:OD1	1:A:123:ASN:O	0.46	2.33	2	1
1:A:131:THR:O	1:A:141:TRP:CG	0.46	2.68	2	2
1:A:12:TYR:O	1:A:13:SER:C	0.46	2.56	9	2
1:A:53:GLY:C	1:A:54:GLU:OE1	0.46	2.57	9	1
1:A:108:GLY:HA3	1:A:156:PHE:CE2	0.46	2.44	9	2
1:A:133:GLU:CD	1:A:133:GLU:O	0.46	2.57	10	1
1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:C	0.46	2.35	11	1
1:A:92:GLN:NE2	1:A:92:GLN:CA	0.46	2.78	14	1
1:A:104:VAL:CG2	1:A:118:PHE:CZ	0.46	2.91	15	1
1:A:58:LEU:HA	1:A:59:PRO:C	0.46	2.35	13	19
1:A:70:CYS:SG	1:A:80:LEU:C	0.46	2.98	1	2
1:A:122:TYR:CD1	1:A:123:ASN:HB2	0.46	2.45	13	3
1:A:115:LEU:O	1:A:116:CYS:O	0.46	2.33	2	4
1:A:120:PHE:O	1:A:127:TYR:N	0.46	2.43	6	2
1:A:55:PRO:O	1:A:56:CYS:O	0.46	2.34	3	1
1:A:108:GLY:HA3	1:A:156:PHE:CD2	0.46	2.45	19	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:TYR:OH	1:A:79:HIS:CB	0.46	2.64	13	3
1:A:135:ARG:C	1:A:137:ASP:N	0.46	2.71	7	1
1:A:103:LEU:CB	1:A:115:LEU:CG	0.46	2.93	10	1
1:A:104:VAL:N	1:A:115:LEU:CD1	0.46	2.78	11	1
1:A:106:THR:HG22	1:A:155:GLY:O	0.46	2.11	12	1
1:A:104:VAL:CG1	1:A:116:CYS:CB	0.46	2.93	20	2
1:A:123:ASN:O	1:A:124:ASN:OD1	0.46	2.34	1	3
1:A:47:TYR:O	1:A:48:GLY:O	0.46	2.34	10	6
1:A:4:CYS:HB3	1:A:36:VAL:CG1	0.46	2.41	3	1
1:A:79:HIS:CE1	1:A:98:THR:HA	0.46	2.45	3	1
1:A:102:VAL:O	1:A:102:VAL:CG1	0.46	2.60	3	1
1:A:121:LEU:HD21	1:A:124:ASN:N	0.46	2.25	18	3
1:A:117:HIS:C	1:A:117:HIS:CD2	0.46	2.93	5	2
1:A:131:THR:O	1:A:141:TRP:O	0.46	2.34	5	8
1:A:146:GLN:O	1:A:147:ASN:OD1	0.46	2.34	7	4
1:A:51:SER:OG	1:A:95:SER:OG	0.46	2.34	11	2
1:A:65:ARG:HD2	1:A:67:PHE:CE2	0.46	2.45	8	1
1:A:20:LYS:O	1:A:27:MET:O	0.46	2.34	13	2
1:A:27:MET:HG2	1:A:40:GLU:CG	0.46	2.40	11	1
1:A:111:SER:O	1:A:112:ASN:O	0.46	2.34	14	1
1:A:148:TYR:CZ	1:A:154:PHE:HB3	0.46	2.45	14	1
1:A:135:ARG:CD	1:A:139:MET:HB3	0.46	2.41	15	1
1:A:12:TYR:O	1:A:13:SER:O	0.46	2.33	16	1
1:A:72:THR:O	1:A:75:ARG:HG2	0.46	2.10	16	1
1:A:122:TYR:O	1:A:123:ASN:OD1	0.46	2.34	17	1
1:A:27:MET:SD	1:A:39:GLN:C	0.46	2.98	18	1
1:A:10:VAL:HG12	1:A:12:TYR:CZ	0.46	2.46	2	4
1:A:12:TYR:OH	1:A:112:ASN:O	0.46	2.34	2	4
1:A:104:VAL:O	1:A:115:LEU:C	0.46	2.58	2	4
1:A:120:PHE:O	1:A:127:TYR:O	0.46	2.33	14	5
1:A:151:ASP:C	1:A:152:GLN:CG	0.46	2.86	5	1
1:A:3:HIS:ND1	1:A:11:VAL:CG1	0.46	2.78	6	1
1:A:47:TYR:OH	1:A:97:CYS:O	0.46	2.34	14	3
1:A:60:PHE:CD2	1:A:83:SER:CB	0.46	2.98	18	4
1:A:72:THR:CA	1:A:75:ARG:HG2	0.46	2.41	16	1
1:A:7:ASP:OD2	1:A:20:LYS:NZ	0.46	2.43	20	1
1:A:12:TYR:OH	1:A:113:GLY:O	0.46	2.34	12	4
1:A:52:ASN:O	1:A:52:ASN:OD1	0.46	2.34	11	5
1:A:12:TYR:CZ	1:A:18:TRP:CG	0.46	3.03	5	1
1:A:13:SER:CB	1:A:153:LYS:HE3	0.46	2.41	5	2
1:A:22:GLN:O	1:A:22:GLN:CD	0.46	2.58	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:121:LEU:HD22	1:A:125:HIS:C	0.46	2.35	10	3
1:A:3:HIS:C	1:A:4:CYS:SG	0.46	2.98	11	2
1:A:10:VAL:HG22	1:A:11:VAL:H	0.46	1.70	12	2
1:A:19:LEU:CD2	1:A:28:LEU:HD12	0.46	2.40	12	1
1:A:79:HIS:O	1:A:80:LEU:O	0.46	2.34	12	1
1:A:50:ASN:OD1	1:A:50:ASN:O	0.46	2.34	13	1
1:A:16:MET:HE3	1:A:153:LYS:HD3	0.46	1.85	20	1
1:A:111:SER:HB2	1:A:114:ALA:HB3	0.46	1.87	20	1
1:A:147:ASN:O	1:A:147:ASN:OD1	0.46	2.34	1	1
1:A:45:GLN:O	1:A:46:THR:O	0.46	2.34	15	2
1:A:145:THR:C	1:A:147:ASN:N	0.46	2.74	8	5
1:A:128:THR:O	1:A:128:THR:OG1	0.46	2.33	16	2
1:A:3:HIS:HB2	1:A:11:VAL:CG1	0.46	2.40	6	1
1:A:135:ARG:CZ	1:A:135:ARG:HB2	0.46	2.40	6	1
1:A:50:ASN:C	1:A:50:ASN:OD1	0.46	2.57	10	1
1:A:3:HIS:CD2	1:A:4:CYS:N	0.46	2.84	11	3
1:A:151:ASP:OD1	1:A:151:ASP:N	0.46	2.49	16	1
1:A:132:SER:O	1:A:135:ARG:O	0.46	2.34	17	1
1:A:22:GLN:CD	1:A:27:MET:SD	0.46	2.98	20	1
1:A:112:ASN:OD1	1:A:112:ASN:O	0.46	2.34	1	1
1:A:13:SER:O	1:A:16:MET:HB3	0.46	2.11	20	16
1:A:46:THR:O	1:A:53:GLY:O	0.46	2.34	2	1
1:A:111:SER:CB	1:A:144:THR:CG2	0.46	2.88	10	3
1:A:122:TYR:CE2	1:A:133:GLU:HB3	0.46	2.45	3	1
1:A:104:VAL:HB	1:A:116:CYS:CB	0.46	2.41	8	1
1:A:132:SER:OG	1:A:140:LYS:HG3	0.46	2.11	8	1
1:A:71:THR:OG1	1:A:73:GLU:OE1	0.46	2.34	9	1
1:A:3:HIS:NE2	1:A:12:TYR:C	0.46	2.74	12	1
1:A:87:ASN:HB3	1:A:90:GLN:CB	0.46	2.41	20	6
1:A:116:CYS:SG	1:A:143:GLY:O	0.46	2.74	10	10
1:A:12:TYR:O	1:A:31:CYS:SG	0.46	2.74	3	4
1:A:146:GLN:HG2	1:A:147:ASN:ND2	0.46	2.26	7	1
1:A:83:SER:O	1:A:83:SER:OG	0.46	2.34	8	1
1:A:124:ASN:HB3	2:A:161:NAG:C8	0.46	2.40	19	2
1:A:123:ASN:O	1:A:124:ASN:HB2	0.46	2.10	17	1
1:A:65:ARG:HG3	1:A:66:THR:N	0.46	2.25	6	2
1:A:102:VAL:CG2	1:A:118:PHE:O	0.46	2.64	7	2
1:A:22:GLN:O	1:A:22:GLN:OE1	0.46	2.34	3	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:26:GLN:CG	0.46	2.41	5	1
1:A:145:THR:CG2	1:A:153:LYS:HE2	0.46	2.41	9	1
1:A:157:CYS:O	1:A:158:PRO:O	0.46	2.34	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:GLN:OE1	1:A:115:LEU:O	0.46	2.34	12	1
1:A:19:LEU:HD13	1:A:26:GLN:HE21	0.46	1.71	12	1
1:A:22:GLN:HG3	1:A:27:MET:CB	0.46	2.41	15	1
1:A:75:ARG:NE	1:A:77:ASP:OD2	0.46	2.49	15	1
1:A:75:ARG:HD2	1:A:77:ASP:N	0.46	2.26	16	1
1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:OE1	0.46	2.49	20	1
1:A:21:THR:OG1	1:A:25:LYS:O	0.46	2.34	16	3
1:A:135:ARG:O	1:A:136:ARG:C	0.46	2.59	7	1
1:A:121:LEU:C	1:A:121:LEU:HD12	0.46	2.36	11	1
1:A:46:THR:OG1	1:A:53:GLY:O	0.46	2.34	12	2
1:A:32:LEU:O	1:A:34:ASN:CG	0.46	2.59	15	1
1:A:7:ASP:OD2	1:A:20:LYS:HE2	0.46	2.12	16	1
1:A:14:VAL:CG1	1:A:15:GLY:N	0.45	2.79	1	2
1:A:132:SER:HB3	1:A:135:ARG:CG	0.45	2.41	1	1
1:A:135:ARG:NE	1:A:135:ARG:HA	0.45	2.27	1	2
1:A:28:LEU:C	1:A:29:CYS:SG	0.45	2.99	2	1
1:A:68:TYR:O	1:A:69:SER:CB	0.45	2.63	10	3
1:A:75:ARG:HA	1:A:75:ARG:NE	0.45	2.26	2	2
1:A:123:ASN:O	1:A:123:ASN:CG	0.45	2.59	3	1
1:A:124:ASN:OD1	1:A:124:ASN:O	0.45	2.34	4	1
1:A:22:GLN:CD	1:A:22:GLN:O	0.45	2.60	11	1
1:A:128:THR:O	1:A:129:ASP:CG	0.45	2.59	11	2
1:A:148:TYR:CE1	1:A:153:LYS:C	0.45	2.94	14	1
1:A:85:THR:C	1:A:87:ASN:N	0.45	2.74	19	2
1:A:10:VAL:HG12	1:A:112:ASN:CG	0.45	2.36	1	1
1:A:19:LEU:CG	1:A:26:GLN:HB3	0.45	2.42	5	1
1:A:51:SER:HB2	1:A:95:SER:OG	0.45	2.11	19	6
1:A:60:PHE:CB	1:A:83:SER:CB	0.45	2.94	12	2
1:A:72:THR:HG23	1:A:80:LEU:CD2	0.45	2.41	11	1
1:A:30:THR:N	1:A:36:VAL:HG23	0.45	2.26	12	1
1:A:149:ASP:OD1	1:A:149:ASP:O	0.45	2.35	12	1
1:A:16:MET:HE2	1:A:144:THR:HG21	0.45	1.88	15	3
1:A:111:SER:CB	1:A:155:GLY:HA3	0.45	2.40	7	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:28:LEU:HB3	0.45	2.40	9	1
1:A:104:VAL:CG1	1:A:118:PHE:CD1	0.45	2.99	10	1
1:A:135:ARG:O	1:A:136:ARG:HG2	0.45	2.11	10	1
1:A:60:PHE:HB2	1:A:83:SER:CB	0.45	2.40	12	1
1:A:6:THR:OG1	1:A:7:ASP:N	0.45	2.49	13	1
1:A:4:CYS:O	1:A:4:CYS:SG	0.45	2.74	17	1
1:A:28:LEU:O	1:A:38:CYS:SG	0.45	2.74	17	1
1:A:133:GLU:O	1:A:135:ARG:O	0.45	2.34	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:146:GLN:O	1:A:146:GLN:HG2	0.45	2.12	2	2
1:A:75:ARG:NH1	1:A:96:PHE:CE1	0.45	2.85	3	1
1:A:135:ARG:O	1:A:137:ASP:OD1	0.45	2.35	3	1
1:A:142:CYS:SG	1:A:157:CYS:SG	0.45	3.15	18	4
1:A:61:THR:HG22	1:A:66:THR:OG1	0.45	2.10	20	6
1:A:135:ARG:O	1:A:137:ASP:N	0.45	2.48	7	1
1:A:21:THR:HG22	1:A:25:LYS:C	0.45	2.36	10	1
1:A:102:VAL:CG2	1:A:118:PHE:HB2	0.45	2.41	10	1
1:A:123:ASN:N	1:A:149:ASP:OD2	0.45	2.49	11	2
1:A:58:LEU:CD2	1:A:69:SER:HA	0.45	2.42	13	2
1:A:148:TYR:CD1	1:A:153:LYS:O	0.45	2.69	14	1
1:A:144:THR:OG1	1:A:153:LYS:HB2	0.45	2.12	16	1
1:A:123:ASN:OD1	1:A:123:ASN:C	0.45	2.58	17	1
1:A:111:SER:OG	1:A:154:PHE:O	0.45	2.34	20	2
1:A:132:SER:CB	1:A:135:ARG:HB2	0.45	2.42	1	1
1:A:28:LEU:O	1:A:29:CYS:SG	0.45	2.75	2	1
1:A:109:GLY:O	1:A:110:ASN:OD1	0.45	2.34	17	3
1:A:27:MET:CA	1:A:39:GLN:O	0.45	2.65	7	1
1:A:7:ASP:OD1	1:A:7:ASP:O	0.45	2.34	8	1
1:A:51:SER:O	1:A:54:GLU:OE1	0.45	2.34	9	2
1:A:127:TYR:OH	1:A:133:GLU:OE2	0.45	2.34	9	1
1:A:131:THR:OG1	1:A:133:GLU:OE2	0.45	2.34	9	1
1:A:86:SER:OG	1:A:87:ASN:OD1	0.45	2.34	15	3
1:A:122:TYR:CE2	1:A:133:GLU:CD	0.45	2.95	10	1
1:A:60:PHE:CB	1:A:83:SER:HG	0.45	2.23	13	2
1:A:39:GLN:O	1:A:40:GLU:O	0.45	2.34	19	4
1:A:18:TRP:CH2	1:A:36:VAL:HB	0.45	2.47	3	1
1:A:27:MET:HE3	1:A:40:GLU:CG	0.45	2.42	3	1
1:A:56:CYS:SG	1:A:82:CYS:O	0.45	2.75	3	1
1:A:90:GLN:C	1:A:90:GLN:OE1	0.45	2.60	4	1
1:A:92:GLN:NE2	1:A:92:GLN:HA	0.45	2.26	8	2
1:A:51:SER:OG	1:A:94:TYR:O	0.45	2.34	5	1
1:A:103:LEU:HB3	1:A:115:LEU:CD2	0.45	2.42	5	1
1:A:4:CYS:SG	1:A:36:VAL:CG2	0.45	3.04	8	1
1:A:45:GLN:OE1	1:A:46:THR:O	0.45	2.34	8	1
1:A:108:GLY:O	1:A:109:GLY:O	0.45	2.33	8	1
1:A:122:TYR:CE1	1:A:123:ASN:HB2	0.45	2.46	13	1
1:A:16:MET:SD	1:A:144:THR:O	0.45	2.74	14	1
1:A:73:GLU:OE1	1:A:74:GLY:N	0.45	2.49	16	1
1:A:48:GLY:N	1:A:52:ASN:HA	0.45	2.27	19	1
1:A:54:GLU:OE1	1:A:54:GLU:N	0.45	2.50	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:TYR:CE1	1:A:63:ASN:CG	0.45	2.95	19	1
1:A:106:THR:OG1	1:A:116:CYS:N	0.45	2.48	19	1
1:A:6:THR:CG2	1:A:18:TRP:CE2	0.45	3.00	20	1
1:A:111:SER:HB2	1:A:114:ALA:CB	0.45	2.41	20	1
1:A:13:SER:HB2	1:A:153:LYS:NZ	0.45	2.27	3	6
1:A:84:THR:OG1	1:A:93:LYS:HB3	0.45	2.12	6	12
1:A:13:SER:CB	1:A:153:LYS:HE2	0.45	2.40	3	1
1:A:58:LEU:HB3	1:A:59:PRO:HA	0.45	1.88	10	3
1:A:59:PRO:HG3	1:A:68:TYR:CE2	0.45	2.47	16	3
1:A:85:THR:OG1	1:A:93:LYS:HB2	0.45	2.12	14	1
1:A:128:THR:C	1:A:129:ASP:CG	0.45	2.83	18	2
1:A:17:GLN:O	1:A:115:LEU:N	0.45	2.50	2	2
1:A:48:GLY:CA	1:A:52:ASN:O	0.45	2.64	4	1
1:A:75:ARG:HD3	1:A:96:PHE:CD1	0.45	2.46	5	1
1:A:80:LEU:O	1:A:97:CYS:SG	0.45	2.74	5	1
1:A:53:GLY:O	1:A:54:GLU:O	0.45	2.34	6	1
1:A:122:TYR:CD1	1:A:148:TYR:CD2	0.45	3.04	12	5
1:A:145:THR:OG1	1:A:151:ASP:OD1	0.45	2.33	9	1
1:A:146:GLN:HG3	1:A:147:ASN:N	0.45	2.27	9	1
1:A:13:SER:O	1:A:31:CYS:HB2	0.45	2.12	10	2
1:A:29:CYS:SG	1:A:36:VAL:HG23	0.45	2.52	11	1
1:A:146:GLN:OE1	1:A:147:ASN:ND2	0.45	2.49	18	1
1:A:135:ARG:O	1:A:136:ARG:HB2	0.45	2.12	1	2
1:A:14:VAL:C	1:A:16:MET:N	0.45	2.74	4	13
1:A:32:LEU:C	1:A:34:ASN:N	0.45	2.75	15	3
1:A:46:THR:CG2	1:A:56:CYS:SG	0.45	3.05	4	1
1:A:54:GLU:CG	1:A:55:PRO:HD2	0.45	2.41	8	2
1:A:104:VAL:O	1:A:115:LEU:HD23	0.45	2.12	5	2
1:A:128:THR:O	1:A:129:ASP:HB2	0.45	2.12	7	1
1:A:56:CYS:SG	1:A:83:SER:O	0.45	2.74	11	2
1:A:71:THR:OG1	1:A:73:GLU:OE2	0.45	2.35	15	1
1:A:75:ARG:HG2	1:A:78:GLY:O	0.45	2.11	17	1
1:A:72:THR:HG22	1:A:79:HIS:O	0.45	2.11	20	1
1:A:125:HIS:O	1:A:127:TYR:CD2	0.45	2.70	15	4
1:A:47:TYR:HA	1:A:53:GLY:CA	0.45	2.42	14	1
1:A:124:ASN:OD1	2:A:161:NAG:C8	0.45	2.65	17	2
1:A:49:GLY:N	1:A:96:PHE:CZ	0.45	2.84	20	2
1:A:10:VAL:CG2	1:A:12:TYR:CZ	0.44	2.81	4	1
1:A:10:VAL:CG2	1:A:112:ASN:HB3	0.44	2.40	5	1
1:A:107:ARG:CB	1:A:113:GLY:HA2	0.44	2.42	6	3
1:A:102:VAL:O	1:A:102:VAL:HG13	0.44	2.11	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:78:GLY:O	1:A:80:LEU:N	0.44	2.49	12	1
1:A:58:LEU:CD1	1:A:69:SER:HA	0.44	2.42	10	7
1:A:102:VAL:C	1:A:103:LEU:CD1	0.44	2.81	2	1
1:A:133:GLU:C	1:A:135:ARG:N	0.44	2.76	2	2
1:A:15:GLY:HA2	1:A:32:LEU:CD2	0.44	2.43	6	2
1:A:47:TYR:CE2	1:A:97:CYS:C	0.44	2.96	13	2
1:A:121:LEU:HB3	1:A:147:ASN:CG	0.44	2.38	15	3
1:A:94:TYR:CE1	1:A:96:PHE:CE1	0.44	3.05	9	2
1:A:92:GLN:O	1:A:92:GLN:HG3	0.44	2.12	11	2
1:A:123:ASN:HA	1:A:149:ASP:CB	0.44	2.41	18	1
1:A:13:SER:HB2	1:A:153:LYS:HZ3	0.44	1.71	20	1
1:A:138:ASN:O	1:A:139:MET:CB	0.44	2.64	1	1
1:A:19:LEU:HG	1:A:20:LYS:N	0.44	2.27	2	2
1:A:144:THR:OG1	1:A:144:THR:O	0.44	2.35	4	1
1:A:22:GLN:CG	1:A:25:LYS:HB2	0.44	2.42	9	1
1:A:104:VAL:CG2	1:A:116:CYS:HB3	0.44	2.36	10	1
1:A:146:GLN:HG2	1:A:147:ASN:OD1	0.44	2.11	10	1
1:A:91:ASP:OD2	1:A:93:LYS:CE	0.44	2.65	13	1
1:A:58:LEU:HD22	1:A:69:SER:N	0.44	2.27	14	2
1:A:87:ASN:HB2	1:A:90:GLN:CB	0.44	2.41	17	3
1:A:62:TYR:O	1:A:63:ASN:HB2	0.44	2.12	3	5
1:A:65:ARG:HD3	1:A:66:THR:N	0.44	2.27	1	8
1:A:106:THR:HB	1:A:156:PHE:O	0.44	2.11	2	2
1:A:51:SER:O	1:A:52:ASN:HB3	0.44	2.12	10	8
1:A:144:THR:OG1	1:A:153:LYS:HG3	0.44	2.12	3	1
1:A:121:LEU:CB	1:A:147:ASN:OD1	0.44	2.66	8	1
1:A:47:TYR:OH	1:A:79:HIS:HB2	0.44	2.12	11	1
1:A:87:ASN:O	1:A:90:GLN:N	0.44	2.44	13	1
1:A:119:PRO:HG3	1:A:128:THR:CG2	0.44	2.42	15	2
1:A:17:GLN:O	1:A:115:LEU:HB2	0.44	2.12	14	1
1:A:27:MET:CE	1:A:39:GLN:CA	0.44	2.95	16	1
1:A:111:SER:HB2	1:A:154:PHE:O	0.44	2.12	16	2
1:A:118:PHE:CE1	1:A:129:ASP:N	0.44	2.85	20	2
1:A:146:GLN:HG3	1:A:147:ASN:ND2	0.44	2.28	18	1
1:A:3:HIS:O	1:A:4:CYS:SG	0.44	2.75	19	1
1:A:128:THR:O	1:A:129:ASP:OD1	0.44	2.36	20	1
1:A:103:LEU:CG	1:A:103:LEU:O	0.44	2.64	4	1
1:A:130:CYS:CB	1:A:140:LYS:HB2	0.44	2.43	4	2
1:A:51:SER:HB2	1:A:95:SER:CB	0.44	2.43	5	1
1:A:146:GLN:HG3	1:A:147:ASN:OD1	0.44	2.13	7	2
1:A:36:VAL:O	1:A:36:VAL:CG1	0.44	2.65	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:135:ARG:O	1:A:136:ARG:HB3	0.44	2.12	9	1
1:A:24:ASN:O	1:A:24:ASN:CG	0.44	2.60	16	2
1:A:91:ASP:CB	1:A:93:LYS:HG2	0.44	2.43	16	1
1:A:104:VAL:HG21	1:A:157:CYS:SG	0.44	2.52	7	1
1:A:91:ASP:O	1:A:92:GLN:HB3	0.44	2.12	8	1
1:A:121:LEU:HB3	1:A:147:ASN:ND2	0.44	2.28	20	2
1:A:57:VAL:CG1	1:A:85:THR:CA	0.44	2.95	12	1
1:A:62:TYR:CG	1:A:63:ASN:N	0.44	2.85	15	1
1:A:7:ASP:CG	1:A:20:LYS:HE2	0.44	2.37	16	1
1:A:151:ASP:O	1:A:153:LYS:N	0.44	2.51	16	1
1:A:13:SER:CB	1:A:153:LYS:CE	0.44	2.96	1	3
1:A:104:VAL:O	1:A:115:LEU:CA	0.44	2.65	2	3
1:A:18:TRP:HA	1:A:115:LEU:CB	0.44	2.43	8	7
1:A:141:TRP:C	1:A:141:TRP:CE3	0.44	2.96	3	2
1:A:109:GLY:C	1:A:110:ASN:OD1	0.44	2.60	7	2
1:A:61:THR:HG23	1:A:66:THR:CA	0.44	2.42	15	2
1:A:16:MET:HE1	1:A:114:ALA:CB	0.44	2.42	10	1
1:A:151:ASP:O	1:A:153:LYS:HG2	0.44	2.11	16	1
1:A:58:LEU:CA	1:A:59:PRO:C	0.44	2.91	6	7
1:A:106:THR:CG2	1:A:116:CYS:HB2	0.44	2.43	3	4
1:A:61:THR:CG2	1:A:65:ARG:O	0.44	2.66	8	6
1:A:24:ASN:C	1:A:25:LYS:HG3	0.44	2.37	14	2
1:A:141:TRP:C	1:A:157:CYS:SG	0.44	3.01	5	1
1:A:13:SER:O	1:A:16:MET:HG2	0.44	2.12	10	2
1:A:121:LEU:HD13	1:A:126:ASN:N	0.44	2.27	12	3
1:A:3:HIS:CE1	1:A:13:SER:HB2	0.44	2.48	10	1
1:A:28:LEU:HD22	1:A:115:LEU:HD22	0.44	1.90	16	1
1:A:135:ARG:NH1	1:A:139:MET:HB3	0.44	2.28	16	1
1:A:106:THR:HB	1:A:155:GLY:CA	0.44	2.42	18	1
1:A:47:TYR:O	1:A:48:GLY:C	0.44	2.60	2	2
1:A:121:LEU:CD1	1:A:126:ASN:HA	0.44	2.43	5	1
1:A:17:GLN:HB3	1:A:30:THR:HG23	0.44	1.89	8	1
1:A:84:THR:OG1	1:A:93:LYS:HG3	0.44	2.13	8	1
1:A:146:GLN:CD	1:A:147:ASN:OD1	0.44	2.61	8	1
1:A:153:LYS:NZ	1:A:153:LYS:CB	0.44	2.80	13	1
1:A:130:CYS:SG	1:A:140:LYS:O	0.44	2.76	16	1
1:A:20:LYS:HE3	1:A:38:CYS:SG	0.44	2.53	17	2
1:A:87:ASN:CG	1:A:90:GLN:CB	0.44	2.91	20	1
1:A:144:THR:OG1	1:A:153:LYS:HB3	0.43	2.13	13	2
1:A:145:THR:CG2	1:A:153:LYS:HG2	0.43	2.43	3	1
1:A:70:CYS:SG	1:A:80:LEU:HB3	0.43	2.53	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:121:LEU:HB3	1:A:146:GLN:O	0.43	2.14	6	2
1:A:45:GLN:HB2	1:A:98:THR:CG2	0.43	2.43	11	1
1:A:6:THR:HB	1:A:18:TRP:CZ2	0.43	2.48	12	1
1:A:110:ASN:CB	1:A:154:PHE:CE2	0.43	3.01	16	1
1:A:104:VAL:HG12	1:A:116:CYS:CB	0.43	2.43	1	2
1:A:50:ASN:CG	1:A:94:TYR:CZ	0.43	2.97	2	1
1:A:75:ARG:CZ	1:A:75:ARG:HA	0.43	2.43	5	2
1:A:144:THR:HG23	1:A:153:LYS:HB2	0.43	1.91	5	1
1:A:54:GLU:HG2	1:A:55:PRO:HD3	0.43	1.90	12	5
1:A:152:GLN:CA	1:A:152:GLN:OE1	0.43	2.66	13	1
1:A:127:TYR:OH	1:A:133:GLU:CG	0.43	2.66	15	1
1:A:135:ARG:NH1	1:A:156:PHE:CE1	0.43	2.86	16	1
1:A:121:LEU:HD12	1:A:125:HIS:C	0.43	2.38	17	1
1:A:84:THR:OG1	1:A:93:LYS:HG2	0.43	2.13	19	2
1:A:88:TYR:O	1:A:92:GLN:HA	0.43	2.14	12	7
1:A:135:ARG:C	1:A:136:ARG:HG3	0.43	2.39	7	1
1:A:14:VAL:CG1	1:A:31:CYS:SG	0.43	2.98	9	1
1:A:103:LEU:CD2	1:A:115:LEU:HD13	0.43	2.43	12	1
1:A:4:CYS:CB	1:A:36:VAL:HG12	0.43	2.44	3	1
1:A:145:THR:OG1	1:A:151:ASP:HB3	0.43	2.13	3	1
1:A:130:CYS:CB	1:A:140:LYS:HG3	0.43	2.43	4	1
1:A:28:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HD21	0.43	1.87	7	1
1:A:56:CYS:O	1:A:57:VAL:HG22	0.43	2.14	7	1
1:A:146:GLN:HG2	1:A:147:ASN:CG	0.43	2.38	7	1
1:A:14:VAL:CB	1:A:33:GLY:HA2	0.43	2.44	9	1
1:A:27:MET:CG	1:A:40:GLU:HG3	0.43	2.43	11	1
1:A:151:ASP:CB	1:A:153:LYS:HD3	0.43	2.44	13	1
1:A:3:HIS:HD2	1:A:11:VAL:HG13	0.43	1.73	14	1
1:A:26:GLN:O	1:A:26:GLN:CG	0.43	2.66	14	1
1:A:143:GLY:CA	1:A:148:TYR:HB2	0.43	2.43	14	1
1:A:122:TYR:CD2	1:A:148:TYR:CD2	0.43	3.07	16	1
1:A:151:ASP:O	1:A:152:GLN:HB3	0.43	2.12	17	2
1:A:70:CYS:SG	1:A:80:LEU:HB2	0.43	2.54	1	1
1:A:82:CYS:O	1:A:94:TYR:HB2	0.43	2.13	9	7
1:A:119:PRO:HB3	1:A:127:TYR:O	0.43	2.13	13	3
1:A:142:CYS:HB3	1:A:157:CYS:SG	0.43	2.54	5	3
1:A:132:SER:O	1:A:132:SER:OG	0.43	2.35	12	1
1:A:117:HIS:ND1	1:A:117:HIS:C	0.43	2.76	18	1
1:A:7:ASP:HB3	1:A:10:VAL:HG23	0.43	1.91	1	1
1:A:58:LEU:HB2	1:A:59:PRO:HA	0.43	1.91	6	8
1:A:60:PHE:HB2	1:A:83:SER:OG	0.43	2.13	3	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:5:VAL:HG22	1:A:11:VAL:HG23	0.43	1.87	4	1
1:A:61:THR:CA	1:A:65:ARG:O	0.43	2.66	20	2
1:A:72:THR:CG2	1:A:80:LEU:HG	0.43	2.43	11	6
1:A:91:ASP:O	1:A:92:GLN:HB2	0.43	2.13	4	1
1:A:151:ASP:O	1:A:152:GLN:CG	0.43	2.67	5	1
1:A:70:CYS:SG	1:A:81:TRP:N	0.43	2.91	6	1
1:A:18:TRP:O	1:A:28:LEU:HD13	0.43	2.13	8	1
1:A:28:LEU:HD21	1:A:115:LEU:HD23	0.43	1.81	8	1
1:A:85:THR:CG2	1:A:91:ASP:CG	0.43	2.92	9	1
1:A:14:VAL:CG1	1:A:33:GLY:N	0.43	2.81	10	1
1:A:117:HIS:ND1	1:A:146:GLN:HG3	0.43	2.29	13	1
1:A:147:ASN:CG	1:A:150:ALA:HB3	0.43	2.39	16	1
1:A:27:MET:HE2	1:A:39:GLN:N	0.43	2.28	20	1
1:A:21:THR:HG23	1:A:26:GLN:NE2	0.43	2.27	1	1
1:A:145:THR:OG1	1:A:147:ASN:OD1	0.43	2.34	1	1
1:A:10:VAL:HG13	1:A:112:ASN:HB3	0.43	1.89	3	1
1:A:130:CYS:SG	1:A:140:LYS:HG2	0.43	2.53	5	1
1:A:62:TYR:CD2	1:A:81:TRP:CH2	0.43	3.05	6	2
1:A:28:LEU:C	1:A:28:LEU:HD12	0.43	2.39	8	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:115:LEU:HD13	0.43	1.90	9	1
1:A:3:HIS:CE1	1:A:13:SER:HB3	0.43	2.48	12	1
1:A:6:THR:CG2	1:A:12:TYR:CD2	0.43	3.02	13	1
1:A:118:PHE:HB2	1:A:119:PRO:C	0.43	2.38	15	1
1:A:5:VAL:CG1	1:A:11:VAL:HB	0.43	2.44	16	1
1:A:144:THR:O	1:A:145:THR:HG23	0.43	2.13	16	1
1:A:46:THR:HB	1:A:54:GLU:O	0.43	2.14	14	3
1:A:121:LEU:C	1:A:121:LEU:CD2	0.43	2.88	3	1
1:A:122:TYR:OH	1:A:133:GLU:HB3	0.43	2.14	5	2
1:A:104:VAL:HG22	1:A:106:THR:CG2	0.43	2.44	14	1
1:A:106:THR:HG22	1:A:157:CYS:CB	0.43	2.43	14	2
1:A:119:PRO:CA	1:A:128:THR:HG23	0.43	2.44	17	2
1:A:60:PHE:CZ	1:A:71:THR:HG22	0.43	2.49	19	1
1:A:60:PHE:HB3	1:A:83:SER:OG	0.43	2.14	19	1
1:A:58:LEU:HD11	1:A:69:SER:HA	0.43	1.89	20	1
1:A:87:ASN:CG	1:A:90:GLN:HB2	0.43	2.38	20	1
1:A:51:SER:OG	1:A:54:GLU:HB2	0.43	2.14	6	2
1:A:132:SER:CA	1:A:135:ARG:HG2	0.43	2.44	1	1
1:A:46:THR:O	1:A:53:GLY:C	0.43	2.62	2	1
1:A:17:GLN:CB	1:A:115:LEU:HD23	0.43	2.32	4	1
1:A:117:HIS:NE2	1:A:146:GLN:HB3	0.43	2.28	5	1
1:A:135:ARG:NH1	1:A:139:MET:HG2	0.43	2.28	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:122:TYR:CD1	1:A:123:ASN:N	0.43	2.87	2	1
1:A:10:VAL:HG13	1:A:112:ASN:CB	0.43	2.44	3	2
1:A:112:ASN:O	1:A:113:GLY:C	0.43	2.61	16	2
1:A:4:CYS:HB3	1:A:36:VAL:CG2	0.43	2.44	8	1
1:A:16:MET:O	1:A:30:THR:HG22	0.43	2.14	8	1
1:A:91:ASP:HB3	1:A:93:LYS:CE	0.43	2.44	12	1
1:A:34:ASN:O	1:A:34:ASN:CG	0.43	2.61	14	1
1:A:20:LYS:HB2	1:A:20:LYS:NZ	0.43	2.28	17	1
1:A:123:ASN:CA	1:A:149:ASP:HB2	0.43	2.44	17	1
1:A:91:ASP:C	1:A:92:GLN:HG2	0.42	2.39	16	4
1:A:157:CYS:SG	1:A:158:PRO:HD2	0.42	2.54	2	2
1:A:103:LEU:O	1:A:103:LEU:HD23	0.42	2.15	4	1
1:A:122:TYR:HB3	1:A:127:TYR:CG	0.42	2.49	5	2
1:A:82:CYS:O	1:A:94:TYR:HA	0.42	2.13	11	5
1:A:23:GLY:C	1:A:24:ASN:OD1	0.42	2.62	14	1
1:A:122:TYR:O	1:A:125:HIS:HB3	0.42	2.14	15	1
1:A:6:THR:HG21	1:A:12:TYR:CE2	0.42	2.48	17	1
1:A:27:MET:HE2	1:A:39:GLN:CA	0.42	2.44	1	1
1:A:51:SER:HB3	1:A:95:SER:OG	0.42	2.14	6	2
1:A:19:LEU:HD21	1:A:27:MET:N	0.42	2.29	4	1
1:A:124:ASN:OD1	1:A:149:ASP:OD2	0.42	2.38	5	1
1:A:13:SER:HB3	1:A:153:LYS:CE	0.42	2.44	6	2
1:A:92:GLN:HA	1:A:92:GLN:NE2	0.42	2.29	15	3
1:A:104:VAL:HG12	1:A:106:THR:CG2	0.42	2.43	17	1
1:A:6:THR:N	1:A:10:VAL:HG12	0.42	2.28	19	1
1:A:125:HIS:HB3	1:A:127:TYR:CD1	0.42	2.49	19	1
1:A:111:SER:OG	1:A:155:GLY:HA3	0.42	2.13	1	1
1:A:6:THR:C	1:A:8:SER:N	0.42	2.77	5	3
1:A:102:VAL:CG1	1:A:118:PHE:CB	0.42	2.97	7	1
1:A:133:GLU:OE1	1:A:133:GLU:HA	0.42	2.14	9	1
1:A:16:MET:HE1	1:A:114:ALA:HB1	0.42	1.91	10	1
1:A:22:GLN:OE1	1:A:38:CYS:HB2	0.42	2.14	10	1
1:A:26:GLN:O	1:A:26:GLN:HG2	0.42	2.14	14	1
1:A:151:ASP:OD1	1:A:153:LYS:CB	0.42	2.68	15	1
1:A:142:CYS:O	1:A:155:GLY:N	0.42	2.49	17	1
1:A:29:CYS:HB3	1:A:36:VAL:CG1	0.42	2.45	9	4
1:A:17:GLN:HG2	1:A:30:THR:OG1	0.42	2.15	2	6
1:A:17:GLN:HB3	1:A:30:THR:OG1	0.42	2.15	13	6
1:A:104:VAL:HG21	1:A:118:PHE:HE2	0.42	1.67	5	1
1:A:124:ASN:HB2	2:A:161:NAG:O7	0.42	2.15	6	1
1:A:107:ARG:HB2	1:A:107:ARG:NH1	0.42	2.30	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:MET:HG2	1:A:40:GLU:HG3	0.42	1.90	11	1
1:A:47:TYR:CD1	1:A:47:TYR:O	0.42	2.73	18	2
1:A:120:PHE:O	1:A:127:TYR:HB2	0.42	2.15	17	2
1:A:46:THR:HG1	1:A:54:GLU:C	0.42	2.21	15	1
1:A:79:HIS:HB3	1:A:97:CYS:O	0.42	2.15	16	1
1:A:120:PHE:CD2	1:A:143:GLY:N	0.42	2.87	20	2
1:A:22:GLN:OE1	1:A:25:LYS:CE	0.42	2.68	20	1
1:A:132:SER:O	1:A:135:ARG:HB2	0.42	2.15	20	1
1:A:17:GLN:HA	1:A:30:THR:OG1	0.42	2.15	5	14
1:A:50:ASN:ND2	1:A:93:LYS:HA	0.42	2.29	1	1
1:A:71:THR:N	1:A:80:LEU:HB3	0.42	2.29	19	3
1:A:19:LEU:CD2	1:A:27:MET:N	0.42	2.82	4	1
1:A:119:PRO:HB2	1:A:127:TYR:O	0.42	2.14	6	1
1:A:141:TRP:HB2	1:A:155:GLY:O	0.42	2.14	6	2
1:A:103:LEU:CB	1:A:115:LEU:HG	0.42	2.43	10	1
1:A:57:VAL:CG1	1:A:84:THR:C	0.42	2.92	12	1
1:A:20:LYS:HD2	1:A:29:CYS:CB	0.42	2.45	14	1
1:A:75:ARG:CD	1:A:77:ASP:HA	0.42	2.44	16	1
1:A:135:ARG:HD2	1:A:156:PHE:CE1	0.42	2.49	17	1
1:A:141:TRP:HA	1:A:155:GLY:O	0.42	2.15	6	2
1:A:117:HIS:NE2	1:A:146:GLN:CG	0.42	2.83	3	1
1:A:103:LEU:O	1:A:103:LEU:HG	0.42	2.13	15	2
1:A:130:CYS:HA	1:A:141:TRP:O	0.42	2.15	11	3
1:A:13:SER:O	1:A:14:VAL:C	0.42	2.63	5	1
1:A:22:GLN:CD	1:A:25:LYS:HG3	0.42	2.39	9	1
1:A:145:THR:HG1	1:A:151:ASP:CG	0.42	2.21	9	1
1:A:103:LEU:C	1:A:115:LEU:CD2	0.42	2.93	12	1
1:A:125:HIS:HB3	1:A:127:TYR:CE1	0.42	2.49	19	1
1:A:91:ASP:HB3	1:A:93:LYS:CG	0.42	2.45	2	1
1:A:102:VAL:O	1:A:103:LEU:CG	0.42	2.68	2	1
1:A:75:ARG:NE	1:A:77:ASP:OD1	0.42	2.53	19	2
1:A:58:LEU:HD23	1:A:67:PHE:O	0.42	2.14	4	1
1:A:12:TYR:CD2	1:A:18:TRP:CE3	0.42	3.07	12	1
1:A:121:LEU:HB2	1:A:146:GLN:O	0.42	2.15	1	1
1:A:18:TRP:CD1	1:A:20:LYS:CD	0.42	3.03	5	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:26:GLN:OE1	0.42	2.15	5	1
1:A:19:LEU:HA	1:A:28:LEU:CB	0.42	2.45	9	1
1:A:72:THR:CB	1:A:75:ARG:HG2	0.42	2.45	16	1
1:A:20:LYS:HB2	1:A:27:MET:O	0.42	2.15	19	1
1:A:5:VAL:HA	1:A:10:VAL:O	0.42	2.15	18	2
1:A:6:THR:O	1:A:8:SER:N	0.42	2.52	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:123:ASN:HA	1:A:149:ASP:CG	0.42	2.40	5	1
1:A:20:LYS:NZ	1:A:38:CYS:SG	0.42	2.84	11	2
1:A:47:TYR:OH	1:A:79:HIS:HB3	0.42	2.15	6	2
1:A:106:THR:HA	1:A:156:PHE:O	0.42	2.15	7	2
1:A:122:TYR:O	1:A:125:HIS:HB2	0.42	2.15	8	1
1:A:102:VAL:C	1:A:103:LEU:HG	0.42	2.40	12	3
1:A:20:LYS:HE3	1:A:29:CYS:CB	0.42	2.45	11	1
1:A:50:ASN:OD1	1:A:50:ASN:C	0.42	2.62	13	1
1:A:83:SER:CB	1:A:88:TYR:HB2	0.42	2.45	18	3
1:A:116:CYS:SG	1:A:143:GLY:C	0.42	3.03	17	1
1:A:130:CYS:CB	1:A:140:LYS:HB3	0.42	2.45	17	1
1:A:16:MET:CE	1:A:153:LYS:HD3	0.42	2.44	20	1
1:A:7:ASP:CG	1:A:20:LYS:HE3	0.42	2.40	1	2
1:A:13:SER:O	1:A:16:MET:HB2	0.42	2.15	1	1
1:A:54:GLU:CG	1:A:55:PRO:CD	0.42	2.98	18	8
1:A:132:SER:O	1:A:135:ARG:HB3	0.42	2.14	3	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:26:GLN:NE2	0.42	2.30	7	1
1:A:60:PHE:CZ	1:A:69:SER:O	0.42	2.73	7	1
1:A:50:ASN:OD1	1:A:94:TYR:N	0.42	2.49	10	1
1:A:92:GLN:CD	1:A:92:GLN:O	0.42	2.63	15	1
1:A:6:THR:OG1	1:A:10:VAL:O	0.42	2.38	17	1
1:A:50:ASN:CB	1:A:93:LYS:HG3	0.42	2.45	19	1
1:A:77:ASP:C	1:A:79:HIS:N	0.42	2.78	20	1
1:A:12:TYR:O	1:A:31:CYS:HB2	0.41	2.15	1	1
1:A:121:LEU:C	1:A:121:LEU:HD22	0.41	2.38	2	1
1:A:115:LEU:O	1:A:115:LEU:HG	0.41	2.15	20	3
1:A:60:PHE:CE1	1:A:69:SER:O	0.41	2.73	7	1
1:A:102:VAL:CB	1:A:118:PHE:O	0.41	2.68	7	1
1:A:106:THR:O	1:A:113:GLY:HA2	0.41	2.15	14	2
1:A:45:GLN:CB	1:A:98:THR:OG1	0.41	2.67	8	1
1:A:85:THR:OG1	1:A:91:ASP:HB2	0.41	2.14	9	1
1:A:106:THR:CG2	1:A:155:GLY:C	0.41	2.93	12	1
1:A:6:THR:CG2	1:A:12:TYR:CE2	0.41	3.02	13	1
1:A:118:PHE:CD1	1:A:118:PHE:C	0.41	2.98	15	1
1:A:135:ARG:HH12	1:A:139:MET:HE3	0.41	1.74	16	1
1:A:151:ASP:C	1:A:153:LYS:N	0.41	2.77	16	1
1:A:20:LYS:O	1:A:26:GLN:HA	0.41	2.15	1	2
1:A:123:ASN:O	1:A:123:ASN:ND2	0.41	2.53	3	1
1:A:91:ASP:C	1:A:93:LYS:N	0.41	2.75	5	2
1:A:106:THR:OG1	1:A:116:CYS:CB	0.41	2.68	6	1
1:A:127:TYR:CZ	1:A:133:GLU:OE2	0.41	2.73	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:147:ASN:O	1:A:150:ALA:HB3	0.41	2.15	15	3
1:A:12:TYR:HB2	1:A:31:CYS:SG	0.41	2.56	11	1
1:A:7:ASP:OD1	1:A:8:SER:N	0.41	2.53	12	1
1:A:73:GLU:OE1	1:A:73:GLU:CA	0.41	2.67	15	1
1:A:121:LEU:HB2	1:A:147:ASN:OD1	0.41	2.15	15	1
1:A:123:ASN:N	1:A:149:ASP:OD1	0.41	2.52	19	1
1:A:87:ASN:OD1	1:A:90:GLN:OE1	0.41	2.38	20	1
1:A:140:LYS:CG	1:A:157:CYS:HB3	0.41	2.45	20	1
1:A:48:GLY:O	1:A:53:GLY:HA2	0.41	2.15	2	1
1:A:96:PHE:CD1	1:A:96:PHE:N	0.41	2.85	20	3
1:A:122:TYR:OH	1:A:133:GLU:CB	0.41	2.69	4	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:26:GLN:HB3	0.41	2.46	7	1
1:A:93:LYS:N	1:A:93:LYS:HD3	0.41	2.29	12	1
1:A:105:GLN:O	1:A:158:PRO:CG	0.41	2.68	15	1
1:A:121:LEU:HD11	2:A:161:NAG:H82	0.41	1.92	1	1
1:A:102:VAL:O	1:A:103:LEU:HG	0.41	2.14	2	1
1:A:17:GLN:HB2	1:A:115:LEU:CB	0.41	2.45	5	1
1:A:71:THR:O	1:A:81:TRP:N	0.41	2.47	9	1
1:A:6:THR:OG1	1:A:10:VAL:HB	0.41	2.15	10	2
1:A:103:LEU:HB3	1:A:115:LEU:HD13	0.41	1.92	12	1
1:A:87:ASN:ND2	1:A:90:GLN:HB3	0.41	2.31	14	1
1:A:130:CYS:SG	1:A:142:CYS:HB2	0.41	2.55	16	1
1:A:106:THR:O	1:A:114:ALA:N	0.41	2.53	19	1
1:A:126:ASN:OD1	2:A:161:NAG:O5	0.41	2.38	20	1
1:A:91:ASP:OD2	1:A:93:LYS:HG3	0.41	2.16	1	1
1:A:12:TYR:HB3	1:A:16:MET:CG	0.41	2.45	2	1
1:A:106:THR:OG1	1:A:155:GLY:HA3	0.41	2.14	2	1
1:A:122:TYR:CD1	1:A:123:ASN:HB3	0.41	2.51	3	1
1:A:48:GLY:HA2	1:A:52:ASN:O	0.41	2.16	4	1
1:A:91:ASP:O	1:A:93:LYS:HG2	0.41	2.16	5	1
1:A:15:GLY:HA2	1:A:32:LEU:HD21	0.41	1.91	6	1
1:A:106:THR:OG1	1:A:116:CYS:HB2	0.41	2.15	6	2
1:A:110:ASN:ND2	1:A:153:LYS:HA	0.41	2.30	6	1
1:A:106:THR:O	1:A:107:ARG:HG2	0.41	2.15	7	1
1:A:7:ASP:OD2	1:A:10:VAL:HG23	0.41	2.16	8	1
1:A:28:LEU:O	1:A:38:CYS:HA	0.41	2.15	10	3
1:A:25:LYS:HD3	1:A:25:LYS:C	0.41	2.40	12	1
1:A:54:GLU:HG2	1:A:55:PRO:CD	0.41	2.45	12	3
1:A:139:MET:HE2	1:A:156:PHE:CG	0.41	2.50	12	1
1:A:68:TYR:C	1:A:69:SER:HG	0.41	2.24	20	1
1:A:118:PHE:CE1	1:A:129:ASP:CA	0.41	3.04	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:111:SER:OG	1:A:155:GLY:CA	0.41	2.68	7	2
1:A:152:GLN:C	1:A:153:LYS:HG2	0.41	2.41	1	1
1:A:47:TYR:C	1:A:53:GLY:HA2	0.41	2.41	2	1
1:A:137:ASP:O	1:A:138:ASN:HB2	0.41	2.15	3	1
1:A:70:CYS:HB3	1:A:80:LEU:CB	0.41	2.45	10	2
1:A:88:TYR:CE1	1:A:92:GLN:NE2	0.41	2.88	6	1
1:A:104:VAL:HG21	1:A:118:PHE:HE1	0.41	1.69	8	1
1:A:121:LEU:HD21	2:A:161:NAG:C8	0.41	2.44	11	1
1:A:104:VAL:HG13	1:A:118:PHE:CD1	0.41	2.49	12	1
1:A:82:CYS:SG	1:A:83:SER:N	0.41	2.94	13	1
1:A:104:VAL:HG13	1:A:116:CYS:C	0.41	2.40	14	1
1:A:127:TYR:O	1:A:128:THR:OG1	0.41	2.39	17	1
1:A:22:GLN:CG	1:A:27:MET:HG3	0.41	2.46	20	1
1:A:138:ASN:O	1:A:139:MET:HB3	0.41	2.15	1	1
1:A:143:GLY:HA2	1:A:153:LYS:O	0.41	2.16	3	1
1:A:6:THR:O	1:A:7:ASP:C	0.41	2.64	4	2
1:A:122:TYR:O	1:A:125:HIS:CB	0.41	2.69	6	1
1:A:133:GLU:OE1	1:A:134:GLY:N	0.41	2.54	7	1
1:A:147:ASN:O	1:A:151:ASP:HB2	0.41	2.16	7	1
1:A:16:MET:HE1	1:A:111:SER:HG	0.41	1.75	8	1
1:A:60:PHE:O	1:A:67:PHE:HB2	0.41	2.16	8	1
1:A:111:SER:HB3	1:A:114:ALA:CB	0.41	2.42	8	1
1:A:20:LYS:HD2	1:A:29:CYS:SG	0.41	2.56	9	1
1:A:29:CYS:HB3	1:A:36:VAL:HG13	0.41	1.93	9	1
1:A:82:CYS:O	1:A:94:TYR:CB	0.41	2.69	9	2
1:A:148:TYR:HA	1:A:151:ASP:OD1	0.41	2.15	9	1
1:A:130:CYS:CB	1:A:140:LYS:HD3	0.41	2.45	14	1
1:A:87:ASN:HB3	1:A:90:GLN:HB3	0.41	1.90	19	1
1:A:71:THR:O	1:A:80:LEU:HA	0.41	2.16	9	1
1:A:7:ASP:O	1:A:8:SER:OG	0.41	2.35	11	1
1:A:78:GLY:C	1:A:79:HIS:O	0.41	2.63	17	1
1:A:20:LYS:CG	1:A:29:CYS:HB2	0.41	2.46	18	1
1:A:22:GLN:O	1:A:22:GLN:HG3	0.41	2.16	2	1
1:A:45:GLN:H	1:A:98:THR:HG23	0.41	1.76	3	1
1:A:58:LEU:HD22	1:A:68:TYR:CA	0.41	2.46	4	2
1:A:88:TYR:O	1:A:92:GLN:HB3	0.41	2.16	5	1
1:A:3:HIS:CD2	1:A:3:HIS:N	0.41	2.87	6	1
1:A:20:LYS:HD3	1:A:20:LYS:O	0.41	2.15	6	1
1:A:18:TRP:CD1	1:A:20:LYS:CE	0.41	3.03	7	1
1:A:18:TRP:CZ2	1:A:36:VAL:HG13	0.41	2.50	7	1
1:A:22:GLN:N	1:A:25:LYS:O	0.41	2.54	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:LEU:CD1	1:A:28:LEU:HB3	0.41	2.44	9	1
1:A:140:LYS:HD2	1:A:157:CYS:SG	0.41	2.56	10	1
1:A:7:ASP:CB	1:A:10:VAL:HG21	0.41	2.46	11	1
1:A:125:HIS:CD2	1:A:126:ASN:O	0.41	2.73	11	1
1:A:47:TYR:HA	1:A:53:GLY:HA2	0.41	1.92	14	1
1:A:73:GLU:OE1	1:A:73:GLU:HA	0.41	2.14	16	2
1:A:87:ASN:HB3	1:A:90:GLN:HB2	0.41	1.91	15	1
1:A:127:TYR:CD1	1:A:131:THR:HB	0.41	2.50	15	1
1:A:60:PHE:CD2	1:A:83:SER:OG	0.41	2.74	18	1
1:A:106:THR:HB	1:A:155:GLY:HA3	0.41	1.93	18	1
1:A:117:HIS:NE2	1:A:146:GLN:HA	0.41	2.31	19	1
1:A:140:LYS:HG2	1:A:140:LYS:O	0.41	2.16	19	1
1:A:76:GLN:O	1:A:76:GLN:HG2	0.41	2.15	1	1
1:A:14:VAL:HA	1:A:31:CYS:O	0.41	2.16	15	8
1:A:121:LEU:O	1:A:121:LEU:CD1	0.41	2.57	3	1
1:A:34:ASN:N	1:A:34:ASN:OD1	0.41	2.54	4	1
1:A:137:ASP:OD2	1:A:139:MET:HB2	0.41	2.16	6	1
1:A:80:LEU:O	1:A:96:PHE:HA	0.41	2.16	14	1
1:A:16:MET:HE3	1:A:144:THR:OG1	0.41	2.16	16	1
1:A:72:THR:C	1:A:75:ARG:HG2	0.41	2.41	16	1
1:A:11:VAL:O	1:A:11:VAL:CG1	0.41	2.57	19	1
1:A:18:TRP:CZ3	1:A:31:CYS:N	0.40	2.89	3	1
1:A:61:THR:HA	1:A:65:ARG:O	0.40	2.16	4	1
1:A:19:LEU:HG	1:A:26:GLN:HB3	0.40	1.93	5	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:26:GLN:CD	0.40	2.41	7	1
1:A:28:LEU:O	1:A:38:CYS:HB3	0.40	2.16	10	1
1:A:5:VAL:HB	1:A:10:VAL:O	0.40	2.16	19	1
1:A:47:TYR:CD1	1:A:96:PHE:HB2	0.40	2.51	2	1
1:A:28:LEU:HD22	1:A:103:LEU:HD21	0.40	1.93	6	1
1:A:53:GLY:O	1:A:54:GLU:C	0.40	2.64	6	1
1:A:151:ASP:O	1:A:152:GLN:HB2	0.40	2.15	9	1
1:A:87:ASN:HB2	1:A:90:GLN:HB3	0.40	1.93	11	1
1:A:28:LEU:CD1	1:A:115:LEU:HD12	0.40	2.44	12	1
1:A:148:TYR:C	1:A:150:ALA:N	0.40	2.79	17	1
1:A:68:TYR:C	1:A:69:SER:OG	0.40	2.64	20	1
1:A:104:VAL:O	1:A:115:LEU:HG	0.40	2.17	2	1
1:A:13:SER:CB	1:A:153:LYS:HZ1	0.40	2.29	5	1
1:A:3:HIS:CB	1:A:11:VAL:CG1	0.40	3.00	6	1
1:A:27:MET:HA	1:A:39:GLN:O	0.40	2.17	7	1
1:A:61:THR:O	1:A:89:GLU:OE2	0.40	2.39	8	1
1:A:24:ASN:O	1:A:25:LYS:HD2	0.40	2.16	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:SER:OG	1:A:153:LYS:HE3	0.40	2.17	11	1
1:A:45:GLN:O	1:A:47:TYR:CD2	0.40	2.74	14	1
1:A:51:SER:O	1:A:54:GLU:OE2	0.40	2.40	15	1
1:A:88:TYR:C	1:A:90:GLN:N	0.40	2.79	15	2
1:A:62:TYR:O	1:A:63:ASN:CB	0.40	2.70	3	1
1:A:17:GLN:O	1:A:18:TRP:HB3	0.40	2.17	4	1
1:A:107:ARG:HB2	1:A:107:ARG:CZ	0.40	2.47	7	1
1:A:51:SER:HB2	1:A:94:TYR:O	0.40	2.16	12	1
1:A:146:GLN:HB2	1:A:147:ASN:OD1	0.40	2.16	13	1
1:A:104:VAL:HG13	1:A:116:CYS:CA	0.40	2.47	14	1
1:A:22:GLN:HB3	1:A:27:MET:SD	0.40	2.56	16	1
1:A:121:LEU:CD1	1:A:126:ASN:N	0.40	2.84	20	1
1:A:102:VAL:HB	1:A:118:PHE:O	0.40	2.15	2	1
1:A:122:TYR:OH	1:A:133:GLU:HG2	0.40	2.16	3	1
1:A:87:ASN:O	1:A:90:GLN:HB3	0.40	2.17	4	1
1:A:12:TYR:CG	1:A:18:TRP:CE3	0.40	3.09	5	1
1:A:46:THR:O	1:A:53:GLY:HA2	0.40	2.17	6	1
1:A:31:CYS:C	1:A:32:LEU:HG	0.40	2.41	7	1
1:A:117:HIS:CD2	1:A:146:GLN:N	0.40	2.90	9	1
1:A:121:LEU:HD13	1:A:126:ASN:HA	0.40	1.93	12	2
1:A:130:CYS:O	1:A:140:LYS:HG2	0.40	2.16	16	1
1:A:104:VAL:CG1	1:A:157:CYS:HB3	0.40	2.47	17	1
1:A:77:ASP:O	1:A:78:GLY:C	0.40	2.64	20	1

6.3 Torsion angles ⓘ

6.3.1 Protein backbone ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	149/160 (93%)	103±5 (69±3%)	31±4 (21±3%)	15±3 (10±2%)	1	9
All	All	2980/3200 (93%)	2059 (69%)	622 (21%)	299 (10%)	1	9

All 53 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	130	CYS	20
1	A	14	VAL	18
1	A	3	HIS	13
1	A	57	VAL	13
1	A	70	CYS	12
1	A	138	ASN	12
1	A	112	ASN	11
1	A	15	GLY	11
1	A	40	GLU	10
1	A	115	LEU	10
1	A	126	ASN	10
1	A	129	ASP	10
1	A	48	GLY	9
1	A	33	GLY	8
1	A	45	GLN	7
1	A	73	GLU	7
1	A	139	MET	6
1	A	116	CYS	6
1	A	53	GLY	6
1	A	152	GLN	6
1	A	36	VAL	6
1	A	133	GLU	5
1	A	158	PRO	5
1	A	92	GLN	5
1	A	9	GLY	4
1	A	13	SER	4
1	A	136	ARG	4
1	A	79	HIS	4
1	A	69	SER	3
1	A	134	GLY	3
1	A	46	THR	3
1	A	102	VAL	3
1	A	140	LYS	3
1	A	146	GLN	3
1	A	7	ASP	3
1	A	11	VAL	3
1	A	85	THR	3
1	A	86	SER	3
1	A	109	GLY	3
1	A	35	GLY	3
1	A	88	TYR	3
1	A	128	THR	3
1	A	124	ASN	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	148	TYR	2
1	A	18	TRP	2
1	A	77	ASP	2
1	A	8	SER	1
1	A	56	CYS	1
1	A	54	GLU	1
1	A	78	GLY	1
1	A	80	LEU	1
1	A	63	ASN	1
1	A	119	PRO	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	130/138 (94%)	88±4 (68±3%)	42±4 (32±3%)	1	13
All	All	2600/2760 (94%)	1755 (68%)	845 (32%)	1	13

All 102 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	65	ARG	20
1	A	92	GLN	20
1	A	10	VAL	17
1	A	77	ASP	16
1	A	20	LYS	15
1	A	57	VAL	15
1	A	98	THR	15
1	A	103	LEU	15
1	A	58	LEU	15
1	A	73	GLU	14
1	A	11	VAL	14
1	A	63	ASN	14
1	A	133	GLU	14
1	A	152	GLN	14
1	A	21	THR	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	69	SER	13
1	A	85	THR	13
1	A	54	GLU	13
1	A	97	CYS	13
1	A	121	LEU	13
1	A	96	PHE	12
1	A	126	ASN	12
1	A	132	SER	12
1	A	25	LYS	11
1	A	102	VAL	11
1	A	136	ARG	11
1	A	40	GLU	11
1	A	116	CYS	11
1	A	147	ASN	11
1	A	140	LYS	11
1	A	45	GLN	11
1	A	76	GLN	11
1	A	128	THR	10
1	A	13	SER	10
1	A	157	CYS	10
1	A	90	GLN	10
1	A	26	GLN	9
1	A	91	ASP	9
1	A	105	GLN	9
1	A	137	ASP	9
1	A	139	MET	9
1	A	80	LEU	9
1	A	3	HIS	9
1	A	138	ASN	9
1	A	27	MET	9
1	A	8	SER	8
1	A	24	ASN	8
1	A	5	VAL	8
1	A	106	THR	8
1	A	124	ASN	8
1	A	129	ASP	8
1	A	22	GLN	8
1	A	29	CYS	8
1	A	51	SER	8
1	A	38	CYS	8
1	A	93	LYS	8
1	A	117	HIS	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	125	HIS	7
1	A	153	LYS	7
1	A	39	GLN	7
1	A	135	ARG	7
1	A	111	SER	7
1	A	7	ASP	7
1	A	107	ARG	7
1	A	28	LEU	7
1	A	72	THR	6
1	A	151	ASP	6
1	A	19	LEU	6
1	A	6	THR	6
1	A	17	GLN	6
1	A	89	GLU	6
1	A	144	THR	6
1	A	104	VAL	6
1	A	115	LEU	6
1	A	146	GLN	6
1	A	34	ASN	5
1	A	56	CYS	5
1	A	16	MET	5
1	A	87	ASN	5
1	A	130	CYS	5
1	A	75	ARG	4
1	A	123	ASN	4
1	A	142	CYS	4
1	A	37	SER	4
1	A	79	HIS	4
1	A	86	SER	3
1	A	145	THR	3
1	A	36	VAL	3
1	A	95	SER	3
1	A	149	ASP	3
1	A	4	CYS	3
1	A	83	SER	2
1	A	46	THR	2
1	A	14	VAL	2
1	A	112	ASN	2
1	A	30	THR	2
1	A	32	LEU	2
1	A	50	ASN	2
1	A	84	THR	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	62	TYR	1
1	A	110	ASN	1
1	A	70	CYS	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides 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	NAG	A	161	1	14,14,15	0.87±0.01	1±0 (7±0%)

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond angles		
					Counts	RMSZ	#Z>2
2	NAG	A	161	1	17,19,21	1.01±0.01	1±0 (5±0%)

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	NAG	A	161	1	-	0±0,6,23,26	0±0,1,1,1

All unique bond outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
2	A	161	NAG	C4-C5	2.27	1.57	1.53	13	20

All unique angle outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
2	A	161	NAG	C1-O5-C5	2.60	115.67	112.19	2	20

All unique chiral outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Models (Total)
2	A	161	NAG	C1	1

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided