



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 24, 2026 – 11:53 AM UTC

PDB ID : 1EUB / pdb_00001eub
Title : SOLUTION STRUCTURE OF THE CATALYTIC DOMAIN OF HUMAN COLLAGENASE-3 (MMP-13) COMPLEXED TO A POTENT NON-PEPTIDIC SULFONAMIDE INHIBITOR
Authors : Zhang, X.; Gonnella, N.C.; Koehn, J.; Pathak, N.; Ganu, V.; Melton, R.; Parker, D.; Hu, S.I.; Nam, K.Y.
Deposited on : 2000-04-14

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

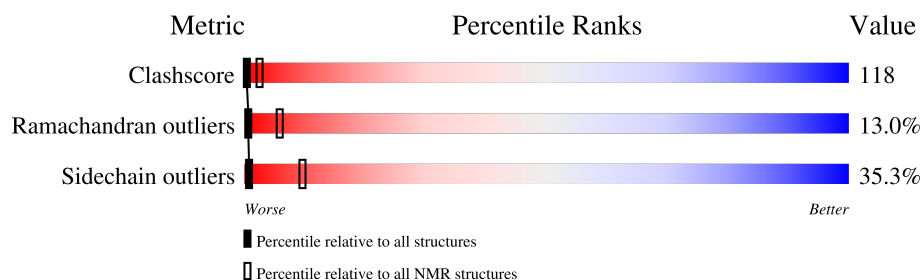
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

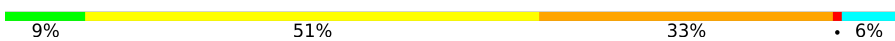
The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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	171	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:110-A:270 (161)	0.51	1

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

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

The models can be grouped into 4 clusters and 1 single-model cluster was found.

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

3 Entry composition [i](#)

There are 6 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2682 atoms, of which 1289 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called COLLAGENASE 3.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	171	Total	C	H	N	O	S	0
			2628	879	1266	220	258	5	

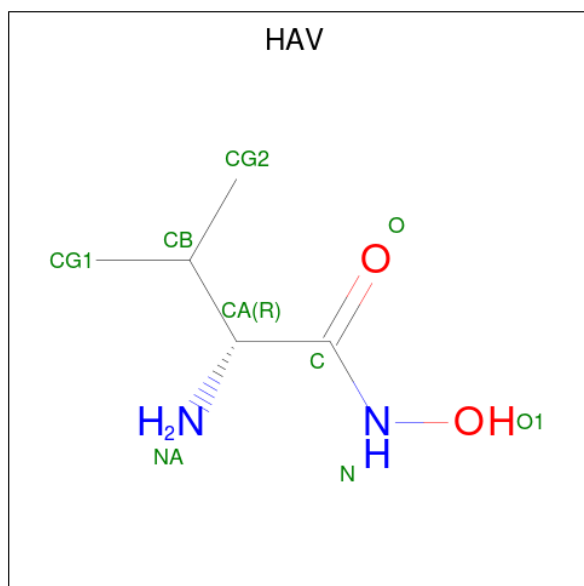
- Molecule 2 is ZINC ION (CCD ID: ZN) (formula: Zn).

Mol	Chain	Residues	Atoms	
2	A	2	Total	Zn
			2	2

- Molecule 3 is CALCIUM ION (CCD ID: CA) (formula: Ca).

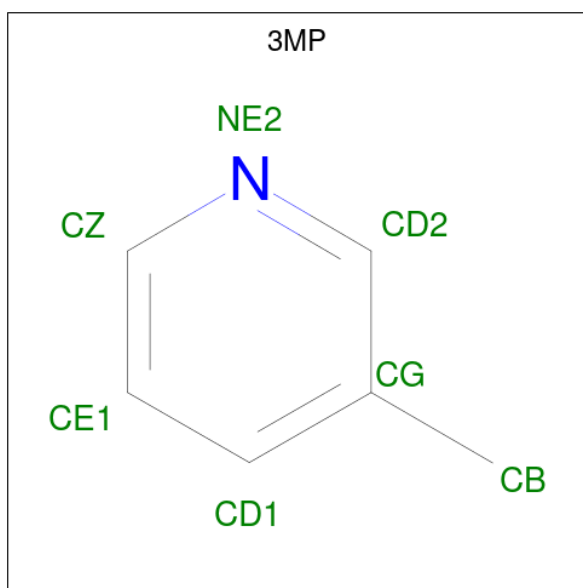
Mol	Chain	Residues	Atoms	
3	A	2	Total	Ca
			2	2

- Molecule 4 is HYDROXYAMINOVALINE (CCD ID: HAV) (formula: C₅H₁₂N₂O₂).



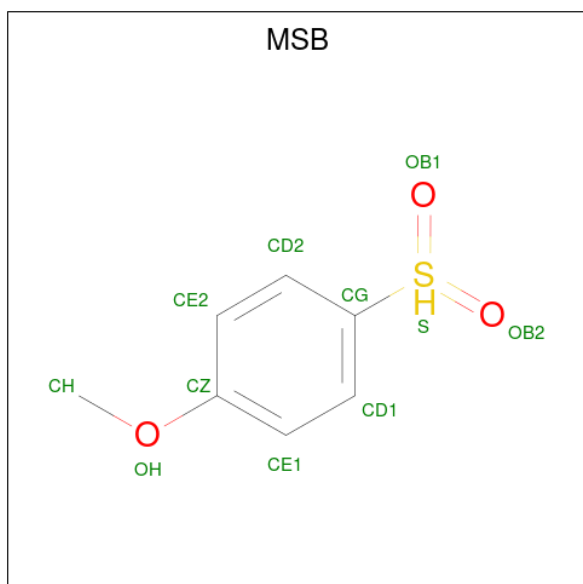
Mol	Chain	Residues	Atoms				
4	A	1	Total	C	H	N	O
			19	5	10	2	2

- Molecule 5 is 3-METHYLPYRIDINE (CCD ID: 3MP) (formula: C_6H_7N).



Mol	Chain	Residues	Atoms			
			Total	C	H	N
5	A	1	13	6	6	1

- Molecule 6 is 1-METHYLOXY-4-SULFONE-BENZENE (CCD ID: MSB) (formula: $C_7H_8O_3S$).



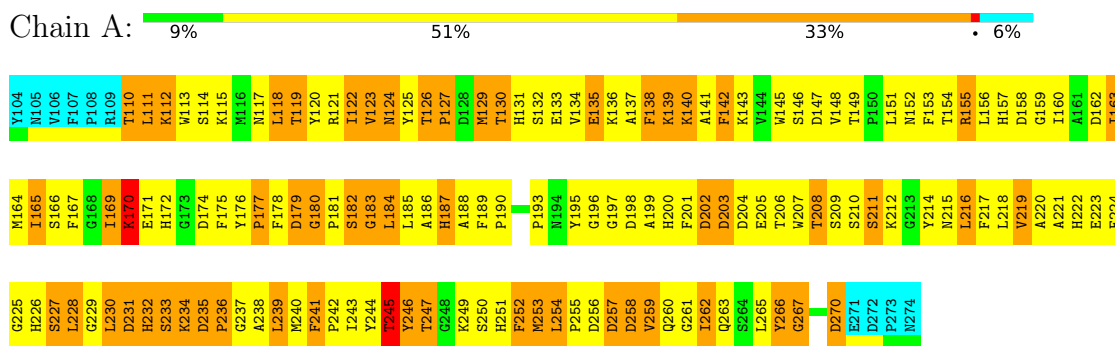
Mol	Chain	Residues	Atoms				
			Total	C	H	O	S
6	A	1	18	7	7	3	1

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: COLLAGENASE 3



4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

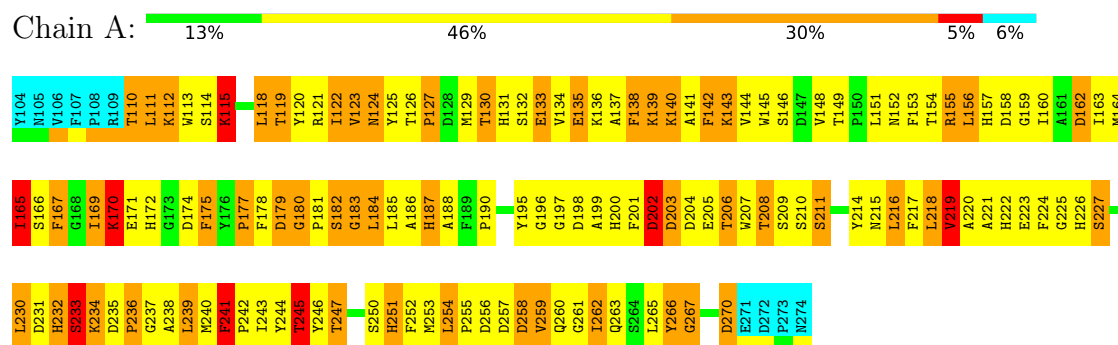
4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

• Molecule 1: COLLAGENASE 3



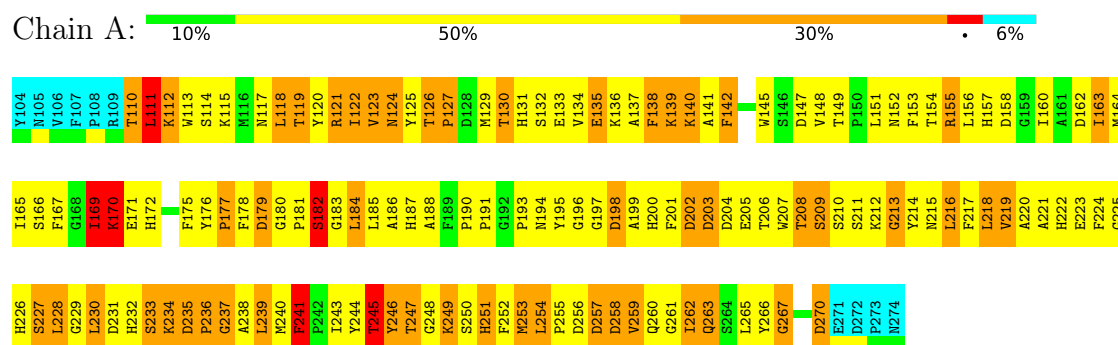
4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: COLLAGENASE 3



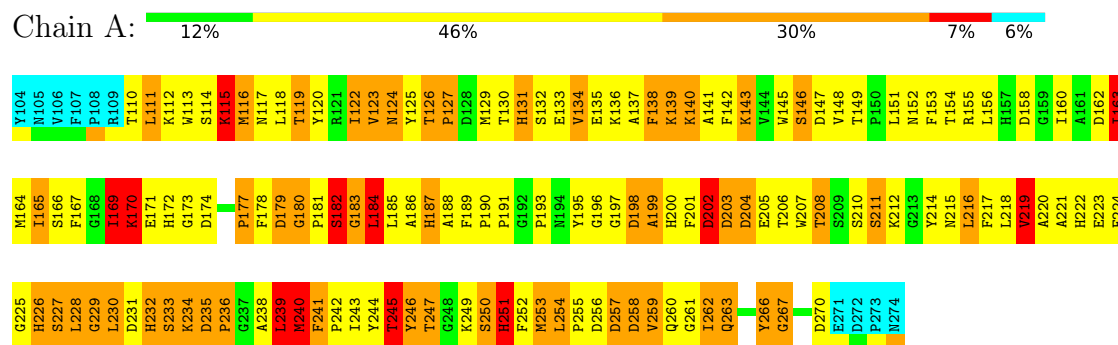
4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: COLLAGENASE 3



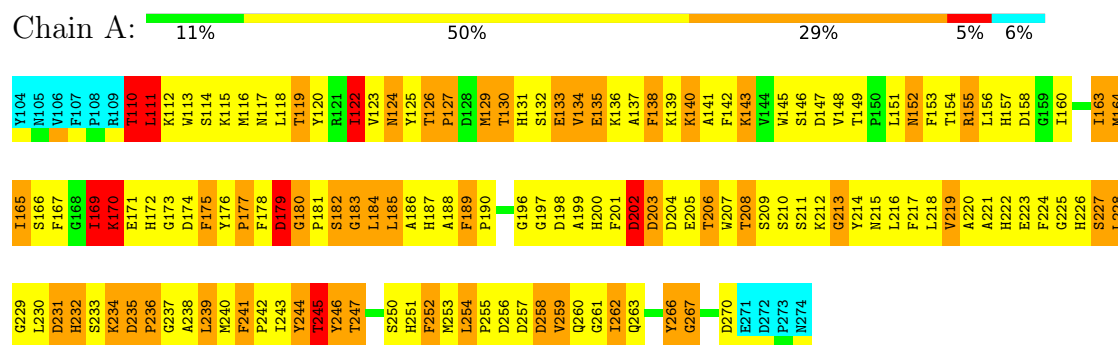
4.2.4 Score per residue for model 4

• Molecule 1: COLLAGENASE 3



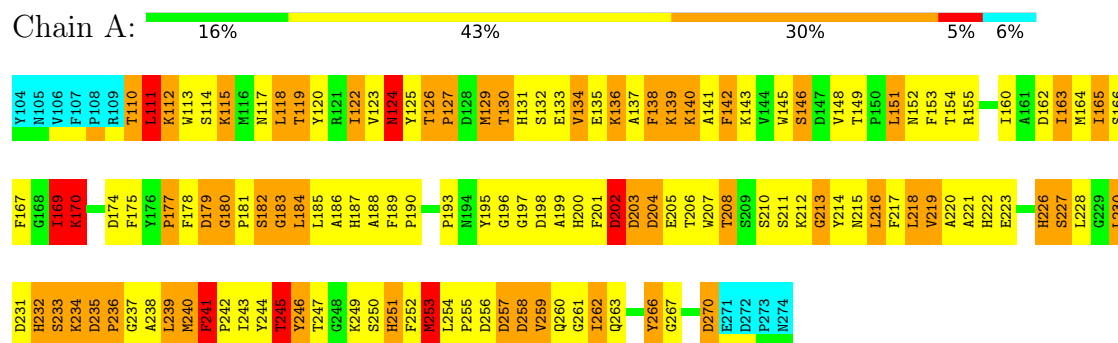
4.2.5 Score per residue for model 5

• Molecule 1: COLLAGENASE 3



4.2.6 Score per residue for model 6

• Molecule 1: COLLAGENASE 3



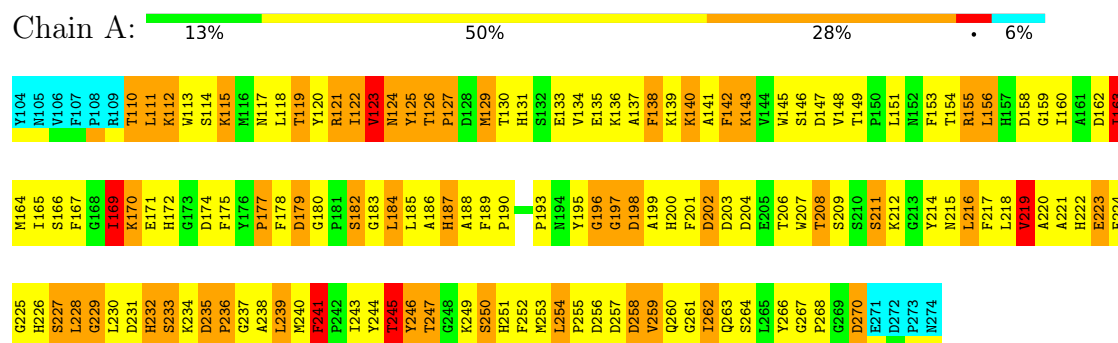
4.2.7 Score per residue for model 7

• Molecule 1: COLLAGENASE 3



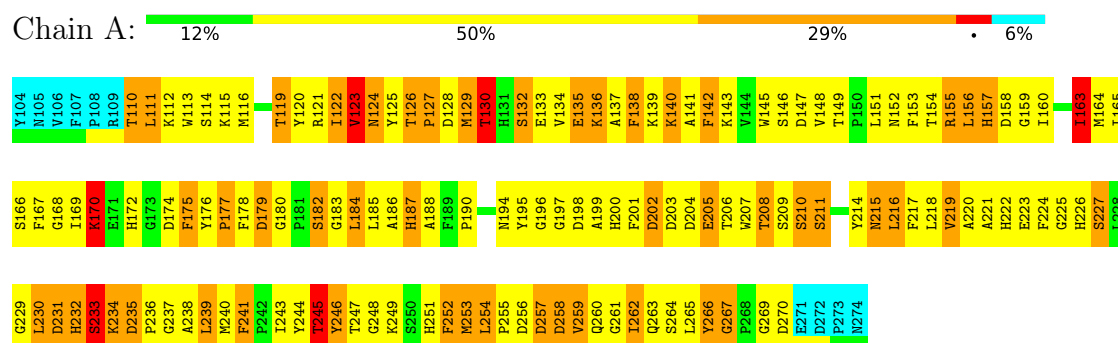
4.2.8 Score per residue for model 8

• Molecule 1: COLLAGENASE 3



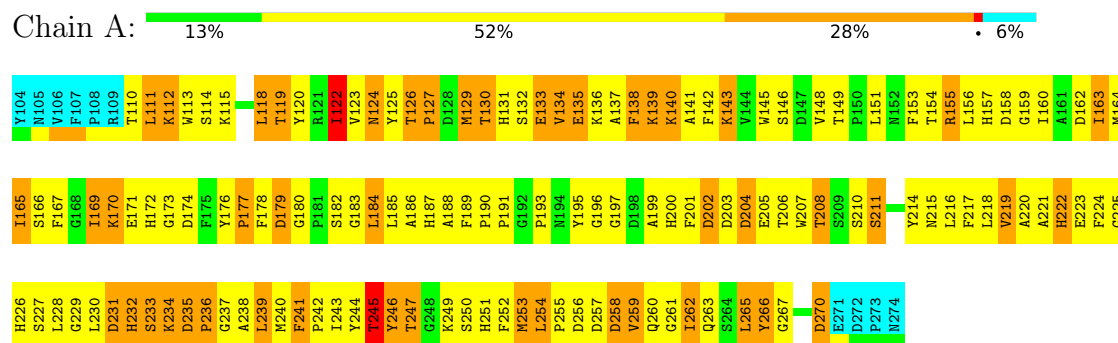
4.2.9 Score per residue for model 9

• Molecule 1: COLLAGENASE 3



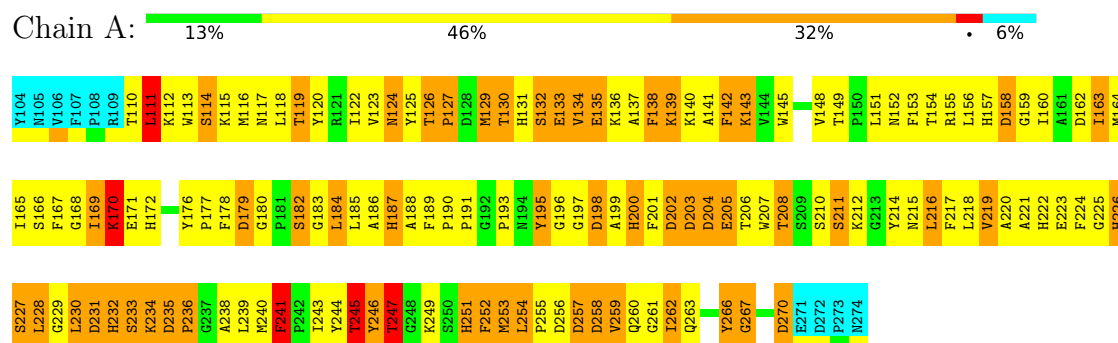
4.2.10 Score per residue for model 10

• Molecule 1: COLLAGENASE 3



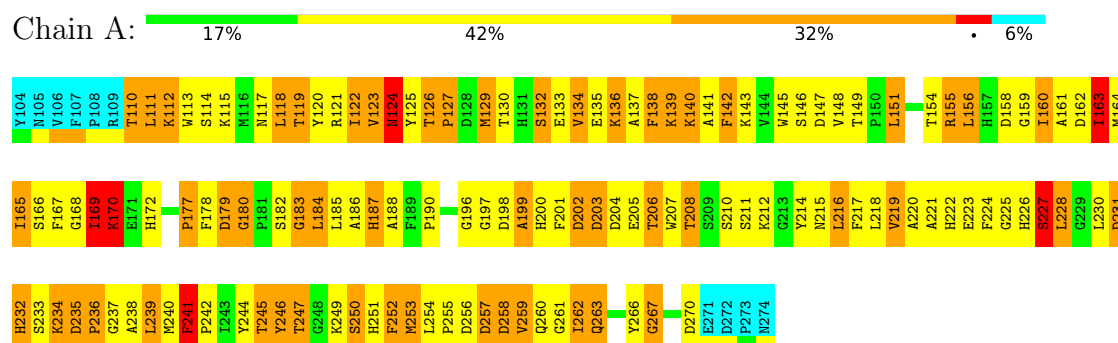
4.2.11 Score per residue for model 11

• Molecule 1: COLLAGENASE 3



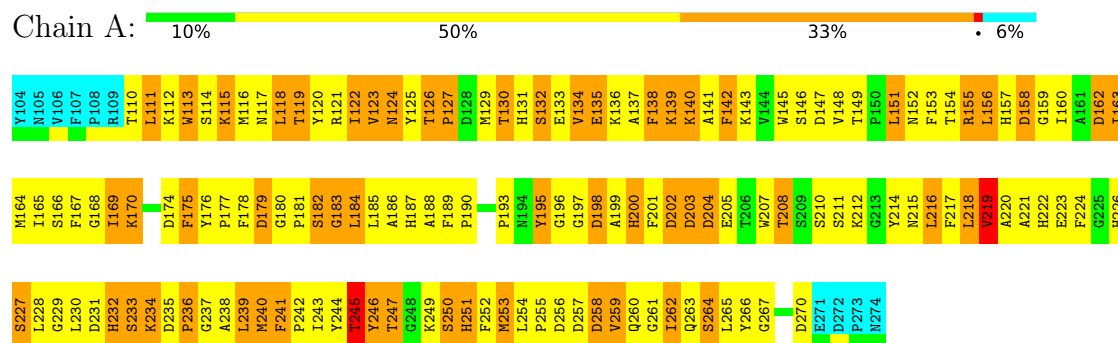
4.2.12 Score per residue for model 12

• Molecule 1: COLLAGENASE 3



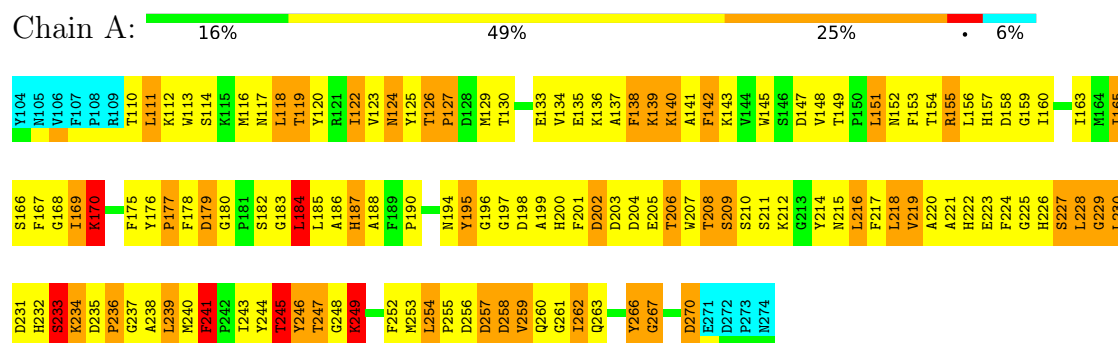
4.2.13 Score per residue for model 13

• Molecule 1: COLLAGENASE 3



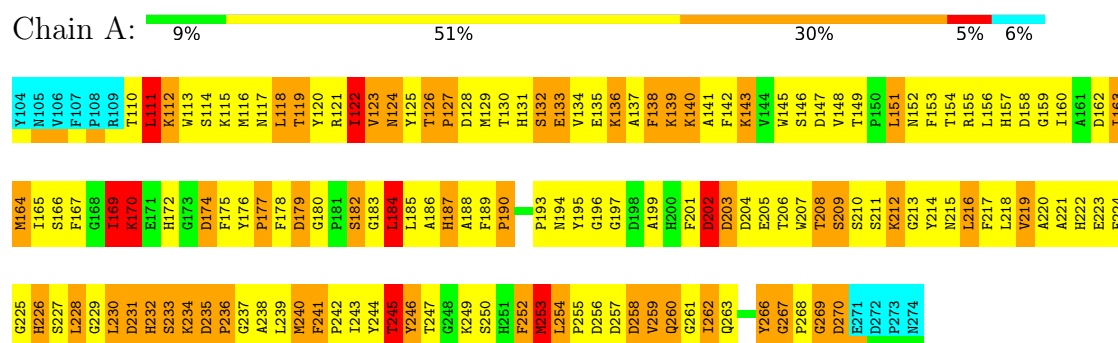
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: COLLAGENASE 3



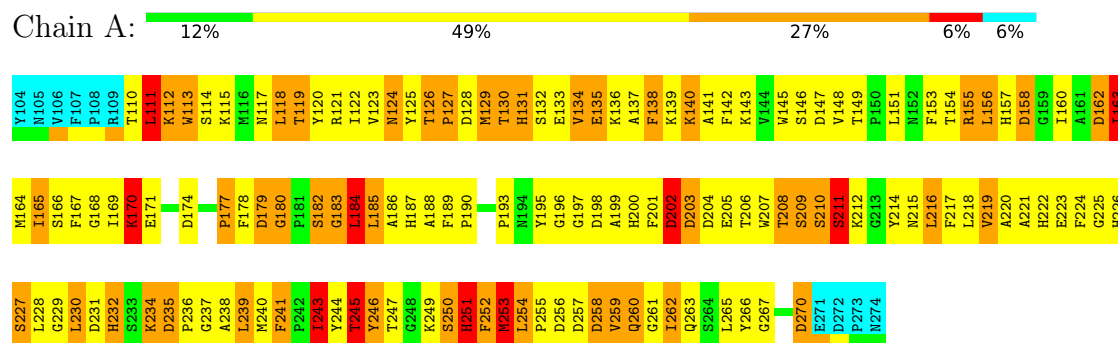
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: COLLAGENASE 3



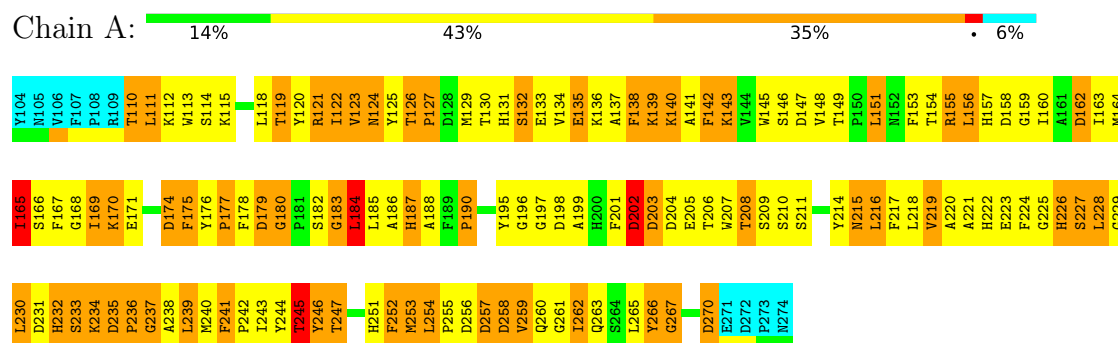
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: COLLAGENASE 3



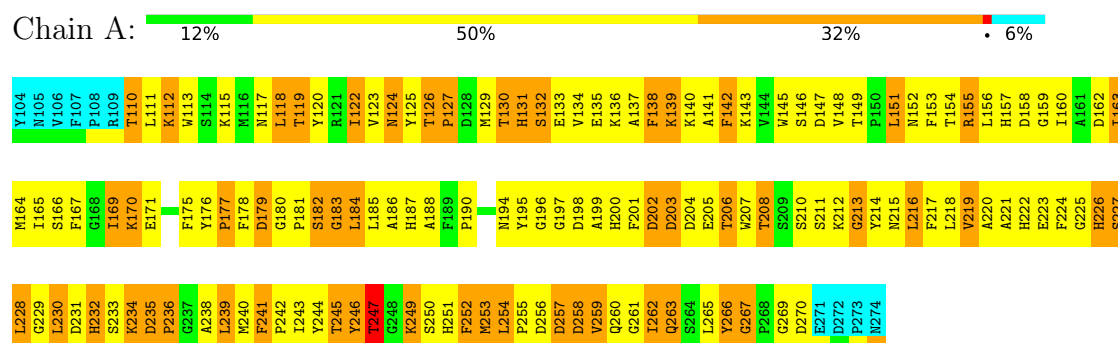
4.2.17 Score per residue for model 17

• Molecule 1: COLLAGENASE 3



4.2.18 Score per residue for model 18

• Molecule 1: COLLAGENASE 3



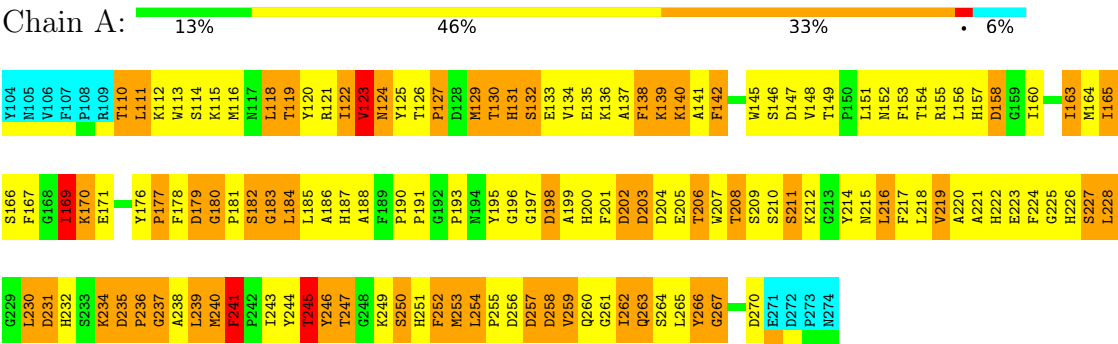
4.2.19 Score per residue for model 19

• Molecule 1: COLLAGENASE 3



4.2.20 Score per residue for model 20

● Molecule 1: COLLAGENASE 3



5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *SIMULATED ANNEALING AND ENERGY MINIMIZATION*.

Of the 50 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *BACK CALCULATED DATA AGREE WITH EXPERIMENTAL NOESY SPECTRUM, STRUCTURES WITH ACCEPTABLE COVALENT GEOMETRY, STRUCTURES WITH FAVORABLE NON-BOND ENERGY, TARGET FUNCTION*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	98.1
Felix	structure solution	97
NMRCompass	structure solution	2.5
Insight II	structure solution	98
QUANTA	structure solution	97

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: HAV, MSB, CA, 3MP, ZN

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.43±0.01	0±0/1319 (0.0± 0.0%)	1.54±0.01	4±1/1794 (0.2± 0.1%)
All	All	1.43	2/26380 (0.0%)	1.54	77/35880 (0.2%)

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	268	PRO	C-N	-5.28	1.31	1.33	8	1
1	A	196	GLY	N-CA	5.21	1.49	1.44	8	1

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	169	ILE	N-CA-CB	-7.60	105.05	112.65	7	18
1	A	160	ILE	N-CA-CB	-6.86	105.41	112.06	7	1
1	A	163	ILE	N-CA-CB	-6.41	105.27	112.45	6	9
1	A	122	ILE	N-CA-CB	-6.38	104.76	112.35	14	12
1	A	165	ILE	N-CA-CB	-6.04	104.11	111.00	2	9
1	A	190	PRO	O-C-N	5.71	123.83	121.15	17	2
1	A	134	VAL	N-CA-CB	-5.42	103.70	110.47	5	9
1	A	111	LEU	N-CA-CB	-5.40	104.24	112.28	11	4
1	A	244	TYR	N-CA-CB	-5.37	103.86	111.00	5	1
1	A	239	LEU	N-CA-CB	-5.35	103.06	110.65	4	1
1	A	222	HIS	N-CA-CB	-5.35	102.32	110.07	10	1
1	A	115	LYS	N-CA-CB	-5.35	105.38	111.79	6	1
1	A	218	LEU	N-CA-CB	-5.28	102.61	110.10	14	3
1	A	219	VAL	N-CA-CB	-5.12	105.25	110.62	2	1
1	A	243	ILE	N-CA-CB	-5.11	105.02	111.41	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	114	SER	N-CA-CB	-5.06	104.53	110.35	11	2
1	A	240	MET	N-CA-CB	-5.03	103.93	110.88	4	1
1	A	226	HIS	CA-CB-CG	-5.02	108.78	113.80	6	1

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	1273	1188	1188	296±13
4	A	9	10	10	5±1
5	A	7	6	6	2±1
6	A	11	7	7	12±3
All	All	26080	24220	24219	5947

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 118.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:163:ILE:HG21	1:A:228:LEU:HD13	1.07	1.25	18	4
1:A:234:LYS:CB	1:A:238:ALA:HB3	0.99	1.87	1	19
1:A:262:ILE:HD13	1:A:263:GLN:N	0.99	1.73	13	20
1:A:238:ALA:HB2	1:A:257:ASP:CB	0.98	1.89	1	20
1:A:258:ASP:O	1:A:262:ILE:HD12	0.97	1.59	6	20
1:A:163:ILE:HD12	1:A:197:GLY:O	0.96	1.60	15	1
1:A:230:LEU:HD13	1:A:230:LEU:O	0.95	1.58	20	1
1:A:117:ASN:O	1:A:118:LEU:HD22	0.94	1.63	6	3
1:A:149:THR:HG23	1:A:151:LEU:HD11	0.93	1.40	12	1
1:A:208:THR:O	1:A:216:LEU:HD22	0.93	1.63	13	18
1:A:184:LEU:HD22	1:A:202:ASP:OD1	0.92	1.65	2	5
1:A:151:LEU:HD21	1:A:266:TYR:CD1	0.91	1.99	13	8
1:A:188:ALA:HB1	1:A:227:SER:HB3	0.91	1.43	9	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:163:ILE:CD1	1:A:228:LEU:HD11	0.90	1.95	13	1
1:A:119:THR:HG21	1:A:160:ILE:HG22	0.90	1.42	11	4
1:A:184:LEU:HD12	4:A:1:HAV:CG1	0.90	1.95	11	4
1:A:151:LEU:HD21	1:A:266:TYR:O	0.89	1.66	9	4
1:A:151:LEU:HD21	1:A:266:TYR:CG	0.89	2.02	8	6
1:A:216:LEU:O	1:A:220:ALA:HB3	0.89	1.68	5	20
1:A:118:LEU:HD22	1:A:228:LEU:HD11	0.89	1.43	18	2
1:A:218:LEU:HD11	6:A:3:MSB:HH1	0.89	1.41	12	13
1:A:151:LEU:HD11	1:A:266:TYR:O	0.87	1.68	15	3
1:A:218:LEU:HD21	1:A:244:TYR:HB2	0.87	1.46	5	19
1:A:208:THR:O	1:A:216:LEU:HD12	0.87	1.67	5	2
1:A:129:MET:SD	1:A:216:LEU:HD21	0.86	2.10	14	7
1:A:188:ALA:HB1	1:A:227:SER:CB	0.86	2.01	9	18
1:A:238:ALA:HB2	1:A:257:ASP:HB2	0.86	1.46	1	18
1:A:110:THR:N	1:A:230:LEU:HD13	0.86	1.86	1	2
1:A:164:MET:O	1:A:199:ALA:HB3	0.85	1.72	17	18
1:A:184:LEU:HD23	1:A:202:ASP:OD1	0.85	1.72	4	7
1:A:184:LEU:HA	4:A:1:HAV:HG13	0.85	1.49	6	20
1:A:122:ILE:HD13	1:A:138:PHE:HB3	0.84	1.49	4	1
1:A:154:THR:CG2	1:A:156:LEU:HD13	0.84	2.02	13	2
1:A:119:THR:HG22	1:A:154:THR:O	0.84	1.71	4	15
1:A:163:ILE:HG21	1:A:228:LEU:HG	0.84	1.49	12	2
1:A:123:VAL:HG23	1:A:166:SER:HB3	0.83	1.47	2	20
1:A:151:LEU:HD13	1:A:152:ASN:N	0.83	1.87	20	1
1:A:228:LEU:HD22	1:A:266:TYR:OH	0.83	1.74	12	3
1:A:239:LEU:HD23	1:A:239:LEU:O	0.83	1.74	11	1
1:A:253:MET:HB2	1:A:259:VAL:HG21	0.82	1.49	15	20
1:A:215:ASN:ND2	1:A:247:THR:HG22	0.81	1.90	13	2
1:A:186:ALA:HB1	1:A:223:GLU:CG	0.81	2.04	19	1
1:A:163:ILE:HG21	1:A:228:LEU:HD12	0.81	1.48	7	1
1:A:188:ALA:HB2	1:A:223:GLU:CD	0.81	2.00	19	2
1:A:163:ILE:HG21	1:A:228:LEU:CD1	0.81	2.05	18	2
1:A:122:ILE:HD13	1:A:122:ILE:O	0.81	1.76	7	1
1:A:122:ILE:O	1:A:123:VAL:HG13	0.80	1.76	20	12
1:A:137:ALA:HB1	1:A:216:LEU:CB	0.80	2.05	1	20
1:A:163:ILE:HD13	1:A:227:SER:OG	0.80	1.76	15	1
1:A:163:ILE:HD13	1:A:228:LEU:HD22	0.80	1.51	6	1
1:A:163:ILE:HG22	1:A:197:GLY:HA3	0.80	1.52	12	8
1:A:216:LEU:HA	1:A:219:VAL:HG13	0.79	1.52	10	20
1:A:118:LEU:HD13	1:A:228:LEU:HD11	0.79	1.54	10	1
1:A:129:MET:HE3	1:A:216:LEU:HD21	0.79	1.54	1	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:230:LEU:HD22	1:A:231:ASP:N	0.79	1.93	20	2
1:A:185:LEU:HD12	1:A:205:GLU:CD	0.78	2.03	9	4
1:A:149:THR:CG2	1:A:151:LEU:HD11	0.78	2.07	12	1
1:A:163:ILE:HG21	1:A:228:LEU:HD21	0.78	1.51	13	1
1:A:122:ILE:HG21	1:A:138:PHE:CD1	0.78	2.13	15	17
1:A:151:LEU:HD21	1:A:266:TYR:HB3	0.78	1.56	10	3
1:A:184:LEU:HD12	4:A:1:HAV:HG11	0.78	1.52	12	7
1:A:230:LEU:HD13	1:A:230:LEU:C	0.78	2.03	20	1
1:A:238:ALA:HB2	1:A:257:ASP:HB3	0.78	1.54	18	17
1:A:151:LEU:HD12	1:A:151:LEU:O	0.78	1.79	14	1
1:A:234:LYS:HB3	1:A:238:ALA:HB3	0.77	1.54	8	11
1:A:112:LYS:NZ	1:A:262:ILE:HG22	0.77	1.94	5	3
1:A:185:LEU:HD12	1:A:205:GLU:OE1	0.77	1.78	12	9
1:A:253:MET:HE3	1:A:256:ASP:OD2	0.77	1.79	11	1
1:A:185:LEU:HD13	1:A:214:TYR:CZ	0.77	2.14	9	9
1:A:163:ILE:HD12	1:A:227:SER:HB2	0.77	1.57	20	2
1:A:244:TYR:CB	6:A:3:MSB:HH2	0.77	2.09	19	16
1:A:112:LYS:CD	1:A:265:LEU:HD23	0.76	2.10	19	1
1:A:122:ILE:HD13	1:A:122:ILE:C	0.76	2.05	7	1
1:A:177:PRO:O	1:A:184:LEU:HD22	0.76	1.80	9	6
1:A:169:ILE:HD13	1:A:169:ILE:N	0.75	1.96	1	2
1:A:122:ILE:HD13	1:A:138:PHE:CB	0.75	2.10	4	1
1:A:230:LEU:C	1:A:230:LEU:HD22	0.75	2.06	9	1
1:A:218:LEU:CD1	6:A:3:MSB:HH1	0.75	2.10	12	12
1:A:137:ALA:HB1	1:A:216:LEU:HD22	0.75	1.57	5	2
1:A:148:VAL:HG23	1:A:149:THR:HG22	0.75	1.59	12	9
1:A:120:TYR:CB	1:A:163:ILE:HG23	0.74	2.12	15	9
1:A:234:LYS:HB2	1:A:238:ALA:HB3	0.74	1.59	18	8
1:A:177:PRO:O	1:A:184:LEU:HD23	0.74	1.82	5	5
1:A:188:ALA:HB2	1:A:223:GLU:OE2	0.74	1.81	8	3
1:A:118:LEU:HD23	1:A:162:ASP:OD2	0.74	1.83	10	1
1:A:228:LEU:HD12	1:A:266:TYR:OH	0.73	1.83	5	2
1:A:160:ILE:O	1:A:160:ILE:HG22	0.73	1.84	12	9
1:A:188:ALA:HB1	1:A:227:SER:CA	0.73	2.14	14	13
1:A:226:HIS:HE2	1:A:232:HIS:CE1	0.73	1.98	15	5
1:A:154:THR:HG22	1:A:156:LEU:HD13	0.73	1.58	13	2
1:A:137:ALA:CB	1:A:216:LEU:HD22	0.72	2.13	5	2
1:A:169:ILE:HD13	1:A:169:ILE:C	0.72	2.09	15	4
1:A:186:ALA:HB1	1:A:223:GLU:HG3	0.72	1.61	19	1
1:A:120:TYR:HB3	1:A:163:ILE:HG23	0.72	1.57	15	10
1:A:163:ILE:HD11	1:A:224:PHE:CE1	0.72	2.18	18	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:230:LEU:HD11	1:A:232:HIS:O	0.72	1.85	11	7
1:A:222:HIS:HB2	1:A:239:LEU:HD21	0.72	1.61	11	1
1:A:169:ILE:HG23	1:A:169:ILE:O	0.71	1.85	11	9
1:A:156:LEU:HD12	1:A:158:ASP:HB3	0.71	1.62	2	2
1:A:124:ASN:ND2	1:A:129:MET:HE1	0.71	2.01	16	2
1:A:149:THR:OG1	1:A:151:LEU:HD23	0.71	1.86	9	3
1:A:185:LEU:HD13	1:A:214:TYR:CE2	0.70	2.21	9	10
1:A:137:ALA:HB1	1:A:216:LEU:HB3	0.70	1.62	12	20
1:A:172:HIS:CE1	1:A:189:PHE:CZ	0.70	2.80	11	4
1:A:230:LEU:HD23	1:A:230:LEU:C	0.70	2.11	11	5
1:A:222:HIS:HB2	1:A:239:LEU:HD11	0.70	1.63	4	2
1:A:199:ALA:HB1	1:A:223:GLU:HG2	0.69	1.61	5	12
1:A:124:ASN:OD1	1:A:134:VAL:HG22	0.69	1.87	12	1
1:A:149:THR:HG23	1:A:151:LEU:CD1	0.69	2.17	12	1
1:A:156:LEU:HD22	1:A:160:ILE:HD13	0.69	1.62	12	1
1:A:129:MET:SD	1:A:216:LEU:HD11	0.69	2.27	5	2
1:A:226:HIS:CE1	1:A:240:MET:HE2	0.69	2.23	12	1
1:A:156:LEU:CD2	1:A:160:ILE:HD12	0.69	2.16	19	2
1:A:115:LYS:HD3	1:A:118:LEU:HD11	0.69	1.63	10	2
1:A:186:ALA:HB1	1:A:223:GLU:OE1	0.69	1.87	13	5
1:A:112:LYS:HD2	1:A:265:LEU:HD23	0.69	1.64	19	1
1:A:163:ILE:C	1:A:163:ILE:HD13	0.68	2.13	18	2
1:A:186:ALA:N	6:A:3:MSB:OB2	0.68	2.26	11	20
1:A:118:LEU:HD13	1:A:162:ASP:OD2	0.68	1.87	11	1
1:A:199:ALA:HB1	1:A:223:GLU:OE1	0.68	1.87	20	2
1:A:115:LYS:CD	1:A:118:LEU:HD11	0.68	2.17	10	2
1:A:129:MET:HE2	1:A:134:VAL:HG23	0.68	1.62	20	2
1:A:243:ILE:HD11	1:A:245:THR:CG2	0.68	2.18	16	1
1:A:186:ALA:HB1	1:A:223:GLU:CD	0.68	2.13	3	9
1:A:137:ALA:CB	1:A:216:LEU:CB	0.68	2.72	3	20
1:A:129:MET:CE	1:A:216:LEU:HD21	0.68	2.19	6	1
1:A:262:ILE:HD13	1:A:263:GLN:H	0.68	1.49	11	19
1:A:251:HIS:CD2	1:A:252:PHE:CE2	0.68	2.82	6	1
1:A:163:ILE:CG2	1:A:228:LEU:HD12	0.68	2.18	7	1
1:A:254:LEU:N	1:A:255:PRO:HD2	0.67	2.04	17	20
1:A:230:LEU:HD22	1:A:230:LEU:C	0.67	2.15	20	1
1:A:125:TYR:CD1	1:A:167:PHE:CD1	0.67	2.83	6	9
1:A:151:LEU:HD11	1:A:266:TYR:HB3	0.67	1.65	2	2
1:A:120:TYR:CE2	1:A:142:PHE:CE2	0.66	2.83	10	9
1:A:226:HIS:CE1	1:A:240:MET:CG	0.66	2.79	4	4
1:A:226:HIS:NE2	1:A:232:HIS:CD2	0.66	2.63	13	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:137:ALA:HB1	1:A:216:LEU:CG	0.66	2.20	20	19
1:A:118:LEU:CD2	1:A:228:LEU:HD11	0.66	2.18	18	2
1:A:218:LEU:HD11	1:A:244:TYR:HB2	0.66	1.67	7	4
1:A:122:ILE:CG2	1:A:138:PHE:CD1	0.66	2.79	10	16
1:A:138:PHE:CG	1:A:139:LYS:N	0.66	2.64	13	20
1:A:187:HIS:CE1	1:A:189:PHE:CE1	0.66	2.84	11	4
1:A:112:LYS:HD2	1:A:265:LEU:HD13	0.66	1.68	9	1
1:A:137:ALA:HB1	1:A:216:LEU:CD2	0.66	2.21	5	2
1:A:241:PHE:CD1	1:A:241:PHE:N	0.66	2.63	18	20
1:A:225:GLY:HA3	1:A:240:MET:HE1	0.66	1.68	18	1
1:A:165:ILE:HG23	1:A:165:ILE:O	0.65	1.91	8	12
1:A:122:ILE:HD11	1:A:134:VAL:CG1	0.65	2.20	4	1
1:A:125:TYR:O	1:A:134:VAL:HG21	0.65	1.90	3	18
1:A:167:PHE:CE2	1:A:169:ILE:CG2	0.65	2.80	4	3
1:A:230:LEU:CD1	1:A:230:LEU:N	0.65	2.60	9	1
1:A:120:TYR:CZ	1:A:155:ARG:CG	0.64	2.80	5	11
1:A:156:LEU:HD13	1:A:160:ILE:HG21	0.64	1.69	12	1
1:A:169:ILE:O	1:A:170:LYS:C	0.64	2.40	2	20
1:A:122:ILE:HD12	1:A:138:PHE:CE2	0.64	2.28	1	4
1:A:170:LYS:CG	1:A:178:PHE:CE1	0.64	2.81	9	9
1:A:151:LEU:CD2	1:A:266:TYR:CD1	0.64	2.80	12	3
1:A:222:HIS:CD2	4:A:1:HAV:O1	0.64	2.51	18	20
1:A:184:LEU:HD23	1:A:202:ASP:CG	0.64	2.16	7	3
1:A:188:ALA:HB2	1:A:223:GLU:OE1	0.64	1.91	19	1
1:A:207:TRP:C	1:A:208:THR:HG22	0.64	2.17	3	15
1:A:208:THR:C	1:A:216:LEU:HD22	0.64	2.17	2	18
1:A:122:ILE:HG21	1:A:138:PHE:CE1	0.64	2.28	9	17
1:A:259:VAL:O	1:A:262:ILE:HD13	0.64	1.93	9	19
1:A:129:MET:HE2	1:A:134:VAL:CG2	0.64	2.23	4	5
1:A:145:TRP:HH2	1:A:262:ILE:HG21	0.64	1.53	20	12
1:A:122:ILE:C	1:A:122:ILE:HD12	0.64	2.18	4	1
1:A:184:LEU:HD22	1:A:202:ASP:CG	0.64	2.18	13	5
1:A:226:HIS:NE2	1:A:232:HIS:CE1	0.63	2.66	4	6
1:A:201:PHE:CE1	1:A:219:VAL:CG2	0.63	2.80	3	3
1:A:124:ASN:HD21	1:A:129:MET:HE1	0.63	1.52	16	1
1:A:243:ILE:CD1	1:A:245:THR:HG22	0.63	2.23	16	1
1:A:138:PHE:CD1	1:A:139:LYS:N	0.63	2.67	8	16
1:A:244:TYR:HB2	6:A:3:MSB:HH2	0.63	1.69	19	11
1:A:124:ASN:ND2	1:A:134:VAL:HG13	0.63	2.08	6	1
1:A:249:LYS:CD	1:A:249:LYS:N	0.63	2.61	14	1
1:A:156:LEU:HD22	1:A:160:ILE:HD12	0.63	1.69	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:243:ILE:HD13	1:A:243:ILE:C	0.63	2.19	16	1
1:A:111:LEU:HD23	1:A:191:PRO:CG	0.63	2.24	20	1
1:A:230:LEU:HD21	1:A:232:HIS:O	0.63	1.94	20	3
1:A:138:PHE:CD1	1:A:138:PHE:C	0.63	2.77	5	18
1:A:164:MET:HE2	1:A:198:ASP:OD1	0.63	1.94	6	1
1:A:124:ASN:ND2	1:A:165:ILE:HD13	0.62	2.09	9	1
1:A:163:ILE:HD13	1:A:228:LEU:HD11	0.62	1.70	13	1
1:A:230:LEU:HD23	1:A:230:LEU:N	0.62	2.08	10	3
1:A:167:PHE:CG	1:A:167:PHE:O	0.62	2.52	16	16
1:A:149:THR:HG23	1:A:149:THR:O	0.62	1.94	3	7
1:A:234:LYS:CA	1:A:238:ALA:HB3	0.62	2.25	16	11
1:A:163:ILE:CG2	1:A:228:LEU:HD13	0.62	2.14	18	4
1:A:120:TYR:HB2	1:A:163:ILE:HG23	0.62	1.71	17	1
1:A:149:THR:OG1	1:A:151:LEU:HD13	0.62	1.95	13	3
1:A:112:LYS:HB3	1:A:265:LEU:HD12	0.62	1.71	13	3
1:A:222:HIS:CE1	1:A:240:MET:CA	0.62	2.83	19	19
1:A:125:TYR:CD1	1:A:167:PHE:CG	0.62	2.88	17	2
1:A:243:ILE:HG23	1:A:243:ILE:O	0.62	1.93	16	1
1:A:262:ILE:HD13	1:A:262:ILE:C	0.61	2.19	12	12
1:A:122:ILE:O	1:A:122:ILE:HD12	0.61	1.95	3	5
1:A:163:ILE:HD13	1:A:163:ILE:H	0.61	1.55	12	1
1:A:254:LEU:N	1:A:255:PRO:CD	0.61	2.63	4	20
1:A:124:ASN:OD1	1:A:216:LEU:HD21	0.61	1.94	10	1
1:A:120:TYR:HB2	1:A:163:ILE:HD13	0.61	1.71	18	2
1:A:169:ILE:O	1:A:169:ILE:HG23	0.61	1.95	14	7
1:A:124:ASN:OD1	1:A:124:ASN:N	0.61	2.33	6	2
1:A:122:ILE:HD13	1:A:138:PHE:CD2	0.61	2.30	14	1
1:A:222:HIS:CE1	1:A:240:MET:HA	0.61	2.31	5	20
1:A:201:PHE:CE1	1:A:219:VAL:HG22	0.61	2.31	3	2
1:A:188:ALA:HB1	1:A:227:SER:N	0.61	2.09	10	3
1:A:184:LEU:HD23	1:A:184:LEU:C	0.61	2.20	3	4
1:A:261:GLY:O	1:A:265:LEU:HD12	0.61	1.96	10	2
1:A:241:PHE:CD1	1:A:243:ILE:O	0.60	2.53	7	19
1:A:244:TYR:O	1:A:245:THR:C	0.60	2.44	17	20
1:A:218:LEU:HD13	1:A:247:THR:HA	0.60	1.73	14	3
1:A:185:LEU:HD13	1:A:214:TYR:CE1	0.60	2.31	11	5
1:A:222:HIS:ND1	6:A:3:MSB:CE1	0.60	2.64	18	6
1:A:246:TYR:CD1	1:A:246:TYR:C	0.60	2.79	17	4
1:A:142:PHE:CE2	1:A:224:PHE:CE2	0.60	2.89	15	5
1:A:156:LEU:HD13	1:A:160:ILE:CG2	0.60	2.26	12	1
1:A:201:PHE:O	1:A:203:ASP:N	0.60	2.35	8	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:218:LEU:HD21	1:A:244:TYR:CD2	0.60	2.32	17	4
1:A:232:HIS:CD2	1:A:240:MET:O	0.60	2.54	15	3
1:A:244:TYR:CB	6:A:3:MSB:CH	0.60	2.80	19	17
1:A:163:ILE:HD12	1:A:228:LEU:HB2	0.60	1.74	17	1
1:A:145:TRP:O	1:A:148:VAL:HG22	0.60	1.96	19	19
1:A:178:PHE:CG	1:A:203:ASP:OD2	0.60	2.55	10	5
1:A:112:LYS:HD2	1:A:265:LEU:HD22	0.60	1.74	9	1
1:A:241:PHE:CE1	1:A:243:ILE:O	0.60	2.55	16	15
1:A:178:PHE:CD2	1:A:203:ASP:OD2	0.60	2.55	8	4
1:A:239:LEU:N	1:A:255:PRO:CB	0.59	2.65	18	16
1:A:246:TYR:CG	1:A:246:TYR:O	0.59	2.55	11	7
1:A:119:THR:HG21	1:A:160:ILE:CG2	0.59	2.21	11	2
1:A:118:LEU:HD23	1:A:162:ASP:CG	0.59	2.21	2	3
1:A:167:PHE:O	1:A:167:PHE:CD1	0.59	2.55	2	10
1:A:231:ASP:O	1:A:232:HIS:CG	0.59	2.55	5	3
1:A:124:ASN:OD1	1:A:134:VAL:HG13	0.59	1.96	12	1
1:A:151:LEU:HD11	1:A:266:TYR:C	0.59	2.22	15	1
1:A:243:ILE:CD1	1:A:245:THR:CG2	0.59	2.81	16	1
1:A:126:THR:N	1:A:127:PRO:CD	0.59	2.65	9	19
1:A:238:ALA:O	1:A:241:PHE:CE2	0.59	2.55	16	15
1:A:232:HIS:CD2	1:A:234:LYS:CE	0.59	2.85	5	1
1:A:238:ALA:O	1:A:241:PHE:CZ	0.59	2.56	13	14
1:A:187:HIS:CG	1:A:187:HIS:O	0.59	2.56	3	11
1:A:149:THR:CG2	1:A:151:LEU:HD23	0.59	2.28	4	2
1:A:110:THR:CA	1:A:230:LEU:HD13	0.59	2.27	1	2
1:A:235:ASP:CB	1:A:236:PRO:CD	0.59	2.80	9	4
1:A:112:LYS:HZ3	1:A:262:ILE:HG22	0.59	1.57	5	1
1:A:176:TYR:CD1	1:A:176:TYR:N	0.59	2.69	1	9
1:A:244:TYR:CD1	1:A:244:TYR:N	0.59	2.71	14	17
1:A:118:LEU:HD23	1:A:162:ASP:CB	0.59	2.27	2	3
1:A:222:HIS:CA	1:A:239:LEU:HD21	0.59	2.27	3	16
1:A:246:TYR:CZ	1:A:252:PHE:O	0.59	2.56	8	9
1:A:246:TYR:O	1:A:246:TYR:CD2	0.59	2.56	8	11
1:A:230:LEU:N	1:A:230:LEU:CD2	0.59	2.66	6	11
1:A:243:ILE:HG22	1:A:245:THR:HG22	0.59	1.74	3	9
1:A:251:HIS:O	1:A:252:PHE:CG	0.59	2.55	3	6
1:A:222:HIS:CB	1:A:239:LEU:HD11	0.59	2.27	4	1
1:A:188:ALA:CB	1:A:227:SER:CB	0.59	2.80	9	1
1:A:201:PHE:CE1	1:A:223:GLU:CD	0.59	2.81	20	2
1:A:251:HIS:C	1:A:252:PHE:CG	0.59	2.81	6	1
1:A:163:ILE:HD11	1:A:224:PHE:HE1	0.59	1.57	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:206:THR:C	1:A:207:TRP:CG	0.58	2.81	11	17
1:A:228:LEU:HD23	1:A:229:GLY:N	0.58	2.13	3	1
1:A:113:TRP:NE1	1:A:270:ASP:CB	0.58	2.67	9	17
1:A:167:PHE:CE2	1:A:169:ILE:HG21	0.58	2.33	9	3
1:A:217:PHE:O	1:A:221:ALA:CB	0.58	2.51	9	20
1:A:222:HIS:ND1	1:A:239:LEU:O	0.58	2.36	18	3
1:A:129:MET:CB	1:A:133:GLU:CB	0.58	2.81	19	4
1:A:228:LEU:HD23	1:A:266:TYR:OH	0.58	1.98	16	2
1:A:217:PHE:N	1:A:217:PHE:CD1	0.58	2.68	19	11
1:A:238:ALA:O	1:A:241:PHE:CD2	0.58	2.56	18	2
1:A:137:ALA:O	1:A:141:ALA:CB	0.58	2.52	20	20
1:A:206:THR:O	1:A:207:TRP:CD1	0.58	2.57	11	8
1:A:172:HIS:CE1	1:A:189:PHE:CE1	0.58	2.92	5	2
1:A:145:TRP:CH2	1:A:262:ILE:HG21	0.58	2.33	20	10
1:A:185:LEU:CD1	1:A:214:TYR:CZ	0.58	2.86	9	2
1:A:115:LYS:O	1:A:266:TYR:CD1	0.58	2.56	13	10
1:A:115:LYS:O	1:A:266:TYR:CE1	0.58	2.57	8	10
1:A:187:HIS:O	1:A:187:HIS:CD2	0.58	2.57	5	4
1:A:110:THR:HA	1:A:230:LEU:HD12	0.58	1.74	17	3
1:A:137:ALA:HB1	1:A:216:LEU:HG	0.58	1.73	20	18
1:A:169:ILE:O	1:A:169:ILE:CG2	0.58	2.52	12	10
1:A:122:ILE:HD13	1:A:122:ILE:N	0.58	2.14	10	1
1:A:250:SER:O	1:A:251:HIS:CG	0.58	2.56	13	1
1:A:178:PHE:O	1:A:178:PHE:CD1	0.58	2.56	4	11
1:A:216:LEU:O	1:A:220:ALA:CB	0.58	2.52	20	20
1:A:258:ASP:O	1:A:262:ILE:HG23	0.58	1.99	8	20
1:A:112:LYS:HZ1	1:A:262:ILE:HG22	0.57	1.58	18	2
1:A:235:ASP:N	1:A:236:PRO:CD	0.57	2.67	8	16
1:A:180:GLY:N	1:A:204:ASP:CB	0.57	2.67	19	13
1:A:238:ALA:C	1:A:255:PRO:HB3	0.57	2.24	4	19
1:A:151:LEU:HD13	1:A:151:LEU:C	0.57	2.24	20	1
1:A:217:PHE:O	1:A:221:ALA:HB2	0.57	2.00	11	19
1:A:234:LYS:O	1:A:235:ASP:C	0.57	2.47	7	20
1:A:125:TYR:CE1	1:A:167:PHE:CD2	0.57	2.92	2	2
1:A:187:HIS:NE2	1:A:200:HIS:CB	0.57	2.68	11	7
1:A:120:TYR:CE1	1:A:155:ARG:HG3	0.57	2.34	8	12
1:A:226:HIS:CD2	4:A:1:HAV:O1	0.57	2.56	13	12
1:A:165:ILE:O	1:A:165:ILE:CG2	0.57	2.53	18	12
1:A:157:HIS:CD2	1:A:157:HIS:O	0.57	2.57	9	1
1:A:235:ASP:CB	1:A:236:PRO:HD3	0.57	2.30	9	18
1:A:230:LEU:CD1	1:A:240:MET:HE2	0.57	2.30	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:126:THR:N	1:A:127:PRO:HD3	0.57	2.15	9	18
1:A:137:ALA:O	1:A:141:ALA:HB3	0.57	1.99	9	20
1:A:222:HIS:CE1	1:A:240:MET:C	0.57	2.83	15	16
1:A:239:LEU:O	1:A:239:LEU:HG	0.57	1.98	4	18
1:A:230:LEU:N	1:A:230:LEU:HD23	0.57	2.15	8	6
1:A:246:TYR:CD1	1:A:247:THR:O	0.57	2.57	16	6
1:A:174:ASP:O	1:A:176:TYR:CD1	0.56	2.58	5	1
1:A:231:ASP:O	1:A:232:HIS:CD2	0.56	2.58	7	7
1:A:120:TYR:CD1	1:A:154:THR:O	0.56	2.58	11	1
1:A:185:LEU:CD1	1:A:214:TYR:CD2	0.56	2.88	15	2
1:A:169:ILE:N	1:A:169:ILE:CD1	0.56	2.65	1	2
1:A:207:TRP:C	1:A:208:THR:CG2	0.56	2.78	11	15
1:A:201:PHE:CZ	1:A:219:VAL:HG22	0.56	2.36	10	4
1:A:251:HIS:O	1:A:252:PHE:CD2	0.56	2.58	12	2
1:A:158:ASP:OD2	1:A:160:ILE:HD11	0.56	2.01	19	3
1:A:244:TYR:HB3	6:A:3:MSB:HH2	0.56	1.76	19	8
1:A:265:LEU:N	1:A:265:LEU:CD2	0.56	2.68	16	2
1:A:124:ASN:OD1	1:A:129:MET:HE1	0.56	1.99	1	3
1:A:145:TRP:O	1:A:148:VAL:CG2	0.56	2.54	12	20
1:A:165:ILE:CG2	1:A:165:ILE:O	0.56	2.53	10	8
1:A:170:LYS:HG3	1:A:178:PHE:CE1	0.56	2.36	19	7
1:A:110:THR:O	1:A:112:LYS:CG	0.56	2.54	17	2
1:A:215:ASN:O	1:A:218:LEU:N	0.56	2.38	9	20
1:A:218:LEU:HD21	1:A:244:TYR:CB	0.56	2.30	17	6
1:A:169:ILE:C	1:A:169:ILE:CD1	0.56	2.79	8	4
1:A:136:LYS:O	1:A:140:LYS:CB	0.56	2.54	10	20
1:A:222:HIS:N	1:A:239:LEU:HD21	0.56	2.16	16	11
1:A:230:LEU:HD23	1:A:230:LEU:H	0.56	1.61	10	3
1:A:170:LYS:HG3	1:A:178:PHE:CZ	0.56	2.36	6	3
1:A:163:ILE:CG2	1:A:228:LEU:CD1	0.56	2.80	18	1
1:A:120:TYR:CZ	1:A:155:ARG:HG3	0.56	2.36	2	9
1:A:114:SER:O	1:A:115:LYS:CG	0.56	2.54	20	7
1:A:118:LEU:CD2	1:A:162:ASP:CB	0.56	2.84	12	4
1:A:246:TYR:O	1:A:246:TYR:CG	0.56	2.59	9	6
1:A:234:LYS:C	1:A:234:LYS:CD	0.56	2.78	15	5
1:A:177:PRO:O	1:A:184:LEU:CD2	0.55	2.54	15	6
1:A:244:TYR:CD1	1:A:245:THR:N	0.55	2.74	16	2
1:A:129:MET:HE2	1:A:134:VAL:HG22	0.55	1.78	4	1
1:A:252:PHE:CE2	1:A:253:MET:HE3	0.55	2.36	8	1
1:A:222:HIS:CB	1:A:239:LEU:CD2	0.55	2.84	11	2
1:A:119:THR:O	1:A:163:ILE:HD13	0.55	2.01	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:253:MET:CB	1:A:259:VAL:HG21	0.55	2.28	15	1
1:A:119:THR:CB	1:A:160:ILE:O	0.55	2.55	15	15
1:A:222:HIS:CG	6:A:3:MSB:CE1	0.55	2.89	14	18
1:A:222:HIS:CG	6:A:3:MSB:HE1	0.55	2.37	6	19
1:A:244:TYR:O	1:A:246:TYR:N	0.55	2.39	20	19
1:A:245:THR:HG23	1:A:246:TYR:H	0.55	1.62	16	17
1:A:226:HIS:CE1	1:A:232:HIS:CD2	0.55	2.95	4	5
1:A:170:LYS:HG2	1:A:178:PHE:CE1	0.55	2.36	13	2
1:A:178:PHE:CB	1:A:203:ASP:OD1	0.55	2.54	16	4
1:A:163:ILE:CD1	1:A:228:LEU:CD1	0.55	2.80	13	1
1:A:236:PRO:CG	1:A:257:ASP:CG	0.55	2.80	17	1
1:A:258:ASP:O	1:A:262:ILE:CD1	0.55	2.55	5	8
1:A:215:ASN:ND2	1:A:247:THR:HG23	0.55	2.16	6	3
1:A:145:TRP:O	1:A:149:THR:HG22	0.55	2.01	14	6
1:A:226:HIS:ND1	1:A:240:MET:HE2	0.55	2.16	12	1
1:A:110:THR:HG22	1:A:112:LYS:HE2	0.55	1.76	20	1
1:A:165:ILE:O	1:A:165:ILE:HG23	0.55	2.00	1	6
1:A:239:LEU:N	1:A:255:PRO:HB2	0.55	2.17	18	10
1:A:246:TYR:CE1	1:A:252:PHE:O	0.55	2.59	1	6
1:A:118:LEU:HD12	1:A:162:ASP:HB2	0.55	1.78	6	1
1:A:178:PHE:CB	1:A:203:ASP:OD2	0.55	2.55	12	16
1:A:246:TYR:CE1	1:A:247:THR:O	0.55	2.59	9	5
1:A:122:ILE:O	1:A:122:ILE:CG1	0.55	2.55	1	11
1:A:202:ASP:O	1:A:204:ASP:N	0.55	2.40	6	15
1:A:180:GLY:N	1:A:204:ASP:HB2	0.55	2.17	9	3
1:A:118:LEU:HD23	1:A:228:LEU:HD11	0.55	1.77	17	1
1:A:187:HIS:O	1:A:187:HIS:CG	0.55	2.60	4	6
1:A:203:ASP:HA	1:A:207:TRP:CH2	0.55	2.37	13	17
1:A:222:HIS:ND1	6:A:3:MSB:CZ	0.55	2.70	18	9
1:A:239:LEU:CG	1:A:239:LEU:O	0.55	2.55	13	7
1:A:226:HIS:CE1	1:A:240:MET:HE3	0.55	2.37	3	1
1:A:188:ALA:N	1:A:223:GLU:OE2	0.54	2.40	1	4
1:A:239:LEU:O	1:A:239:LEU:CG	0.54	2.54	4	8
1:A:202:ASP:O	1:A:203:ASP:C	0.54	2.51	16	20
1:A:219:VAL:HG13	1:A:220:ALA:H	0.54	1.62	8	20
1:A:222:HIS:ND1	6:A:3:MSB:OH	0.54	2.41	1	12
1:A:234:LYS:HA	1:A:238:ALA:HB3	0.54	1.80	16	6
1:A:111:LEU:CB	1:A:229:GLY:O	0.54	2.56	19	5
1:A:120:TYR:CE1	1:A:155:ARG:CG	0.54	2.90	8	1
1:A:120:TYR:HA	1:A:163:ILE:O	0.54	2.03	18	20
1:A:133:GLU:O	1:A:136:LYS:N	0.54	2.40	5	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:216:LEU:HA	1:A:219:VAL:CG1	0.54	2.32	5	20
1:A:137:ALA:HB2	1:A:216:LEU:HD13	0.54	1.78	10	2
1:A:139:LYS:O	1:A:142:PHE:N	0.54	2.41	11	20
1:A:214:TYR:CE2	1:A:244:TYR:CZ	0.54	2.96	1	2
1:A:129:MET:HB2	1:A:133:GLU:CB	0.54	2.32	9	13
1:A:187:HIS:CE1	1:A:200:HIS:HB2	0.54	2.37	5	3
1:A:230:LEU:N	1:A:230:LEU:HD13	0.54	2.17	9	1
1:A:110:THR:O	1:A:230:LEU:CB	0.54	2.55	20	2
1:A:185:LEU:HD13	1:A:214:TYR:CD1	0.54	2.38	15	1
1:A:190:PRO:O	1:A:196:GLY:CA	0.54	2.55	15	17
1:A:215:ASN:O	1:A:219:VAL:HG12	0.54	2.02	19	20
1:A:230:LEU:O	1:A:231:ASP:C	0.54	2.50	9	5
1:A:163:ILE:CG1	1:A:164:MET:N	0.54	2.70	13	6
1:A:214:TYR:CE1	1:A:244:TYR:CE1	0.54	2.96	20	5
1:A:113:TRP:CD1	1:A:270:ASP:HB2	0.54	2.38	14	16
1:A:186:ALA:CB	1:A:223:GLU:OE1	0.54	2.55	1	5
1:A:259:VAL:O	1:A:262:ILE:CD1	0.54	2.55	7	19
1:A:125:TYR:C	1:A:127:PRO:CD	0.54	2.81	19	3
1:A:125:TYR:O	1:A:134:VAL:CG2	0.54	2.55	12	13
1:A:170:LYS:C	1:A:170:LYS:CD	0.54	2.80	3	8
1:A:149:THR:HG23	1:A:151:LEU:HD23	0.54	1.80	4	2
1:A:251:HIS:O	1:A:252:PHE:CD1	0.54	2.61	6	1
1:A:138:PHE:O	1:A:142:PHE:CD2	0.54	2.61	7	1
1:A:215:ASN:OD1	1:A:247:THR:HG23	0.54	2.03	9	1
1:A:118:LEU:HD22	1:A:162:ASP:HB3	0.54	1.79	12	1
1:A:170:LYS:HB2	1:A:178:PHE:CE1	0.54	2.38	20	12
1:A:129:MET:CE	1:A:134:VAL:CG2	0.54	2.84	2	1
1:A:226:HIS:CE1	1:A:240:MET:HG2	0.54	2.38	19	4
1:A:252:PHE:O	1:A:253:MET:C	0.54	2.50	19	1
1:A:153:PHE:O	1:A:153:PHE:CD1	0.54	2.61	14	13
1:A:124:ASN:OD1	1:A:165:ILE:CG2	0.54	2.56	6	1
1:A:185:LEU:CB	1:A:205:GLU:OE1	0.54	2.56	9	1
1:A:110:THR:O	1:A:111:LEU:C	0.54	2.50	6	18
1:A:182:SER:O	1:A:184:LEU:N	0.54	2.42	5	13
1:A:246:TYR:CE2	1:A:255:PRO:HD3	0.54	2.38	17	7
1:A:210:SER:OG	1:A:211:SER:N	0.53	2.41	17	17
1:A:122:ILE:CG1	1:A:122:ILE:O	0.53	2.56	6	3
1:A:122:ILE:HD13	1:A:138:PHE:CE2	0.53	2.38	6	3
1:A:234:LYS:C	1:A:234:LYS:CE	0.53	2.81	7	1
1:A:239:LEU:O	1:A:239:LEU:CD2	0.53	2.53	11	1
1:A:184:LEU:O	1:A:202:ASP:CG	0.53	2.51	5	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:252:PHE:CE2	1:A:253:MET:SD	0.53	3.01	1	1
1:A:260:GLN:HA	1:A:263:GLN:HB3	0.53	1.79	5	20
1:A:133:GLU:CD	1:A:133:GLU:N	0.53	2.66	5	2
1:A:244:TYR:HB3	6:A:3:MSB:CH	0.53	2.33	12	18
1:A:124:ASN:N	1:A:165:ILE:O	0.53	2.42	6	6
1:A:120:TYR:CE2	1:A:155:ARG:CG	0.53	2.92	4	1
1:A:179:ASP:N	1:A:202:ASP:OD2	0.53	2.42	5	1
1:A:170:LYS:CD	1:A:170:LYS:O	0.53	2.57	6	3
1:A:247:THR:HG22	1:A:248:GLY:N	0.53	2.17	9	1
1:A:242:PRO:O	1:A:243:ILE:CG1	0.53	2.56	18	1
1:A:238:ALA:HA	1:A:255:PRO:CB	0.53	2.33	17	14
1:A:132:SER:O	1:A:135:GLU:CB	0.53	2.57	20	10
1:A:233:SER:O	1:A:238:ALA:CB	0.53	2.56	11	6
1:A:185:LEU:CD1	1:A:214:TYR:CE2	0.53	2.92	11	3
1:A:118:LEU:HD22	1:A:228:LEU:CD1	0.53	2.25	18	1
1:A:122:ILE:O	1:A:123:VAL:CG1	0.53	2.55	19	12
1:A:202:ASP:O	1:A:205:GLU:N	0.53	2.38	15	16
1:A:208:THR:C	1:A:216:LEU:CD2	0.53	2.82	18	13
1:A:232:HIS:CD2	1:A:240:MET:HB3	0.53	2.39	6	6
1:A:160:ILE:O	1:A:160:ILE:CG2	0.53	2.57	17	2
1:A:151:LEU:O	1:A:153:PHE:CD2	0.53	2.62	1	2
1:A:222:HIS:HA	1:A:239:LEU:HD21	0.53	1.81	3	13
1:A:125:TYR:CE1	1:A:167:PHE:CE2	0.53	2.97	2	1
1:A:234:LYS:C	1:A:234:LYS:HD2	0.53	2.29	8	3
1:A:228:LEU:CD2	1:A:266:TYR:OH	0.53	2.55	14	3
1:A:138:PHE:CZ	1:A:139:LYS:HG3	0.53	2.39	11	1
1:A:252:PHE:O	1:A:254:LEU:N	0.53	2.41	17	14
1:A:122:ILE:HD12	1:A:123:VAL:N	0.53	2.18	4	1
1:A:220:ALA:O	1:A:224:PHE:CG	0.53	2.61	7	2
1:A:174:ASP:O	1:A:176:TYR:N	0.53	2.42	5	1
1:A:154:THR:HG22	1:A:155:ARG:N	0.53	2.19	11	1
1:A:232:HIS:CE1	1:A:240:MET:O	0.53	2.62	11	2
1:A:124:ASN:OD1	1:A:134:VAL:CG2	0.53	2.56	12	1
1:A:203:ASP:OD1	1:A:204:ASP:N	0.53	2.42	6	12
1:A:187:HIS:CD2	1:A:200:HIS:HB2	0.53	2.38	19	4
1:A:151:LEU:CD1	1:A:266:TYR:O	0.53	2.56	11	1
1:A:122:ILE:HD13	1:A:155:ARG:HH12	0.53	1.63	1	1
4:A:1:HAV:O	4:A:1:HAV:HG22	0.53	2.03	6	15
1:A:179:ASP:N	1:A:202:ASP:OD1	0.53	2.42	10	5
1:A:238:ALA:O	1:A:241:PHE:CE1	0.53	2.62	1	3
1:A:114:SER:O	1:A:115:LYS:CD	0.53	2.57	13	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:140:LYS:NZ	1:A:144:VAL:HG23	0.53	2.19	2	1
1:A:184:LEU:O	1:A:202:ASP:HB2	0.53	2.02	11	18
1:A:255:PRO:O	1:A:259:VAL:HG23	0.53	2.04	18	1
1:A:180:GLY:N	1:A:204:ASP:HB3	0.52	2.19	5	15
1:A:222:HIS:NE2	1:A:240:MET:HA	0.52	2.19	15	16
1:A:172:HIS:N	1:A:172:HIS:CD2	0.52	2.77	4	5
1:A:239:LEU:N	1:A:255:PRO:HB3	0.52	2.19	6	6
1:A:228:LEU:HD22	1:A:266:TYR:HH	0.52	1.64	8	2
1:A:179:ASP:CG	1:A:180:GLY:N	0.52	2.67	15	1
1:A:187:HIS:O	1:A:187:HIS:ND1	0.52	2.42	10	9
1:A:215:ASN:O	1:A:216:LEU:C	0.52	2.52	4	20
1:A:216:LEU:HD22	1:A:216:LEU:H	0.52	1.63	1	14
1:A:125:TYR:CE1	1:A:167:PHE:CG	0.52	2.97	17	2
1:A:158:ASP:OD2	1:A:160:ILE:CD1	0.52	2.57	11	2
1:A:237:GLY:N	1:A:257:ASP:OD2	0.52	2.42	2	3
1:A:238:ALA:C	1:A:255:PRO:CB	0.52	2.83	4	9
1:A:185:LEU:CD1	1:A:214:TYR:CE1	0.52	2.92	9	2
1:A:145:TRP:CH2	1:A:262:ILE:HG13	0.52	2.40	1	19
1:A:231:ASP:O	1:A:232:HIS:ND1	0.52	2.42	1	7
1:A:118:LEU:HD22	1:A:162:ASP:CB	0.52	2.34	12	4
1:A:122:ILE:O	1:A:122:ILE:CD1	0.52	2.57	3	5
1:A:250:SER:O	1:A:251:HIS:ND1	0.52	2.42	4	1
1:A:258:ASP:OD1	1:A:259:VAL:N	0.52	2.43	11	2
1:A:215:ASN:N	1:A:215:ASN:ND2	0.52	2.55	9	1
1:A:252:PHE:O	1:A:253:MET:CG	0.52	2.57	19	1
1:A:122:ILE:HD11	1:A:134:VAL:HG13	0.52	1.81	4	1
1:A:129:MET:SD	1:A:129:MET:N	0.52	2.83	15	1
1:A:110:THR:O	1:A:112:LYS:N	0.52	2.43	12	9
1:A:123:VAL:O	1:A:124:ASN:C	0.52	2.52	19	20
1:A:129:MET:SD	1:A:216:LEU:CD1	0.52	2.97	10	2
1:A:120:TYR:CD1	1:A:120:TYR:N	0.52	2.77	6	3
1:A:215:ASN:OD1	1:A:218:LEU:CB	0.52	2.57	13	2
1:A:179:ASP:OD1	1:A:182:SER:CB	0.52	2.57	15	2
1:A:163:ILE:HD13	1:A:228:LEU:HB2	0.52	1.81	20	2
1:A:246:TYR:O	1:A:246:TYR:CD1	0.52	2.62	13	1
1:A:215:ASN:ND2	1:A:218:LEU:CB	0.52	2.73	17	1
1:A:122:ILE:C	1:A:122:ILE:CD1	0.52	2.77	7	2
1:A:124:ASN:OD1	1:A:125:TYR:N	0.52	2.42	8	2
1:A:203:ASP:N	1:A:203:ASP:OD1	0.52	2.42	9	3
1:A:218:LEU:CD1	1:A:239:LEU:CD1	0.52	2.88	12	1
1:A:232:HIS:CD2	1:A:234:LYS:NZ	0.52	2.78	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:187:HIS:ND1	1:A:187:HIS:C	0.52	2.68	17	11
1:A:151:LEU:CD2	1:A:266:TYR:O	0.52	2.57	3	3
1:A:167:PHE:O	1:A:167:PHE:CG	0.52	2.62	4	2
1:A:238:ALA:O	1:A:240:MET:N	0.52	2.43	15	4
1:A:179:ASP:OD1	1:A:180:GLY:N	0.52	2.43	14	2
1:A:137:ALA:CB	1:A:216:LEU:CG	0.52	2.88	20	18
1:A:113:TRP:O	1:A:270:ASP:N	0.52	2.43	6	6
1:A:252:PHE:CD2	1:A:253:MET:HG2	0.52	2.40	2	1
1:A:185:LEU:CD1	1:A:205:GLU:OE1	0.52	2.57	9	1
1:A:178:PHE:CD2	1:A:203:ASP:OD1	0.52	2.63	11	1
1:A:155:ARG:N	1:A:155:ARG:CD	0.52	2.73	14	1
1:A:265:LEU:N	1:A:265:LEU:HD22	0.52	2.19	16	2
1:A:110:THR:O	1:A:230:LEU:HD22	0.52	2.04	1	2
1:A:151:LEU:HD11	1:A:266:TYR:CB	0.52	2.33	2	2
1:A:124:ASN:N	1:A:165:ILE:HG23	0.52	2.19	6	3
1:A:233:SER:N	1:A:240:MET:SD	0.52	2.83	8	4
1:A:118:LEU:CD2	1:A:162:ASP:OD2	0.52	2.58	13	1
1:A:158:ASP:OD2	1:A:160:ILE:CG1	0.52	2.58	19	1
1:A:158:ASP:OD1	1:A:160:ILE:CD1	0.52	2.58	20	1
1:A:209:SER:OG	1:A:217:PHE:CZ	0.52	2.61	20	1
1:A:124:ASN:OD1	1:A:129:MET:CE	0.51	2.58	19	3
1:A:120:TYR:CZ	1:A:155:ARG:HG2	0.51	2.39	3	4
1:A:178:PHE:HB2	1:A:203:ASP:OD1	0.51	2.05	9	4
1:A:218:LEU:HD12	1:A:239:LEU:HD11	0.51	1.81	12	3
1:A:124:ASN:CG	1:A:125:TYR:N	0.51	2.68	19	1
1:A:184:LEU:CD2	1:A:202:ASP:OD1	0.51	2.56	5	2
1:A:228:LEU:CD2	1:A:266:TYR:CE2	0.51	2.93	11	2
1:A:119:THR:HG22	1:A:154:THR:HB	0.51	1.80	12	1
1:A:119:THR:CG2	1:A:154:THR:O	0.51	2.57	15	7
1:A:135:GLU:HA	1:A:138:PHE:CD2	0.51	2.41	12	13
1:A:247:THR:N	1:A:250:SER:OG	0.51	2.43	1	3
1:A:246:TYR:CE2	1:A:252:PHE:O	0.51	2.62	13	1
1:A:204:ASP:N	1:A:204:ASP:OD1	0.51	2.43	17	1
1:A:175:PHE:CD1	1:A:175:PHE:C	0.51	2.89	18	1
1:A:187:HIS:NE2	1:A:200:HIS:HB2	0.51	2.20	10	13
1:A:135:GLU:HA	1:A:138:PHE:CE2	0.51	2.40	8	11
1:A:218:LEU:CD1	6:A:3:MSB:CH	0.51	2.88	4	6
1:A:229:GLY:HA2	1:A:266:TYR:CE2	0.51	2.41	18	4
1:A:168:GLY:O	1:A:203:ASP:OD1	0.51	2.27	9	4
1:A:185:LEU:CG	1:A:205:GLU:OE1	0.51	2.58	9	1
1:A:151:LEU:HD11	1:A:266:TYR:CD1	0.51	2.40	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:163:ILE:CB	1:A:197:GLY:O	0.51	2.58	13	1
1:A:151:LEU:HD12	1:A:151:LEU:C	0.51	2.29	14	1
1:A:118:LEU:HD21	1:A:162:ASP:CG	0.51	2.30	17	1
1:A:234:LYS:HB2	1:A:238:ALA:CB	0.51	2.35	18	5
1:A:196:GLY:O	1:A:198:ASP:N	0.51	2.43	8	11
1:A:220:ALA:O	1:A:224:PHE:CD2	0.51	2.64	13	3
1:A:129:MET:CB	1:A:133:GLU:HB3	0.51	2.36	19	2
1:A:117:ASN:O	1:A:118:LEU:HD12	0.51	2.05	19	1
1:A:117:ASN:OD1	1:A:117:ASN:N	0.51	2.44	4	4
1:A:151:LEU:HD11	1:A:266:TYR:CG	0.51	2.41	5	3
1:A:197:GLY:HA2	1:A:227:SER:CB	0.51	2.36	7	17
1:A:241:PHE:CG	1:A:243:ILE:HG22	0.51	2.41	1	1
1:A:133:GLU:OE1	1:A:133:GLU:N	0.51	2.43	12	6
1:A:247:THR:OG1	1:A:248:GLY:N	0.51	2.42	3	1
1:A:122:ILE:HD13	1:A:122:ILE:H	0.51	1.66	20	4
1:A:163:ILE:HD13	1:A:163:ILE:N	0.51	2.19	12	1
1:A:253:MET:C	1:A:253:MET:SD	0.51	2.93	15	2
1:A:119:THR:HB	1:A:160:ILE:O	0.51	2.06	18	18
1:A:139:LYS:O	1:A:140:LYS:C	0.51	2.54	13	20
1:A:157:HIS:CD2	1:A:158:ASP:N	0.51	2.79	19	2
1:A:177:PRO:C	1:A:202:ASP:OD1	0.51	2.54	1	4
1:A:151:LEU:CD2	1:A:266:TYR:CG	0.51	2.94	12	1
1:A:148:VAL:O	1:A:263:GLN:NE2	0.51	2.44	17	1
1:A:140:LYS:O	1:A:143:LYS:N	0.51	2.43	16	18
1:A:221:ALA:C	1:A:239:LEU:HD21	0.51	2.31	8	7
1:A:122:ILE:HB	1:A:138:PHE:CG	0.51	2.41	6	1
1:A:204:ASP:OD1	1:A:204:ASP:N	0.51	2.41	16	1
1:A:120:TYR:CB	1:A:163:ILE:CG2	0.51	2.88	17	1
1:A:179:ASP:O	1:A:180:GLY:C	0.51	2.54	5	12
1:A:111:LEU:HD22	1:A:191:PRO:HD2	0.51	1.82	11	1
1:A:151:LEU:C	1:A:151:LEU:CD1	0.51	2.84	14	2
1:A:222:HIS:HA	1:A:239:LEU:HD22	0.51	1.82	15	1
1:A:230:LEU:C	1:A:230:LEU:CD1	0.51	2.76	20	1
1:A:238:ALA:HB1	1:A:258:ASP:HB3	0.50	1.82	5	10
1:A:228:LEU:CD1	1:A:266:TYR:OH	0.50	2.56	5	2
1:A:110:THR:CA	1:A:230:LEU:HD12	0.50	2.36	12	2
1:A:222:HIS:CA	1:A:239:LEU:HD22	0.50	2.36	15	1
1:A:120:TYR:CA	1:A:163:ILE:O	0.50	2.60	20	10
1:A:179:ASP:OD1	1:A:179:ASP:O	0.50	2.29	18	7
1:A:218:LEU:HG	6:A:3:MSB:CH	0.50	2.36	4	18
1:A:113:TRP:NE1	1:A:270:ASP:HB2	0.50	2.21	15	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:120:TYR:CE2	1:A:155:ARG:HD3	0.50	2.41	4	2
1:A:252:PHE:CG	1:A:253:MET:N	0.50	2.80	10	1
1:A:215:ASN:HD21	1:A:247:THR:HG22	0.50	1.66	13	1
1:A:136:LYS:HG2	1:A:217:PHE:CE1	0.50	2.42	5	14
1:A:196:GLY:O	1:A:197:GLY:C	0.50	2.54	8	15
1:A:202:ASP:CB	1:A:205:GLU:HG3	0.50	2.37	5	6
1:A:187:HIS:N	1:A:223:GLU:OE2	0.50	2.44	10	5
1:A:177:PRO:C	1:A:184:LEU:HD22	0.50	2.32	14	2
1:A:247:THR:HG22	1:A:248:GLY:H	0.50	1.67	14	1
1:A:226:HIS:CE1	1:A:240:MET:HB3	0.50	2.42	18	2
1:A:238:ALA:O	1:A:241:PHE:CG	0.50	2.64	18	1
1:A:122:ILE:C	1:A:123:VAL:HG13	0.50	2.31	13	4
1:A:133:GLU:O	1:A:134:VAL:C	0.50	2.55	9	20
1:A:203:ASP:HA	1:A:207:TRP:CZ2	0.50	2.41	13	5
1:A:185:LEU:HD13	1:A:214:TYR:CD2	0.50	2.41	8	1
1:A:253:MET:CG	1:A:253:MET:O	0.50	2.60	9	1
1:A:188:ALA:CB	1:A:223:GLU:OE2	0.50	2.57	19	3
1:A:120:TYR:CZ	1:A:155:ARG:CD	0.50	2.95	4	3
1:A:151:LEU:HB3	1:A:153:PHE:CE2	0.50	2.42	5	1
1:A:223:GLU:O	1:A:227:SER:OG	0.50	2.30	20	14
1:A:256:ASP:HA	1:A:259:VAL:HB	0.50	1.82	5	19
1:A:260:GLN:O	1:A:261:GLY:C	0.50	2.55	5	19
1:A:151:LEU:HD21	1:A:266:TYR:C	0.50	2.31	9	3
1:A:184:LEU:C	1:A:184:LEU:CD2	0.50	2.84	3	1
1:A:122:ILE:HG12	1:A:138:PHE:CD2	0.50	2.41	4	1
1:A:113:TRP:NE1	1:A:270:ASP:OD2	0.50	2.44	6	1
1:A:222:HIS:CA	1:A:239:LEU:CD2	0.50	2.90	11	1
1:A:110:THR:O	1:A:230:LEU:HB3	0.50	2.06	11	9
1:A:120:TYR:CB	1:A:163:ILE:CG1	0.50	2.90	3	1
1:A:187:HIS:CE1	1:A:200:HIS:CB	0.50	2.94	5	1
1:A:163:ILE:CD1	1:A:228:LEU:HD22	0.50	2.32	6	1
1:A:252:PHE:HB3	1:A:253:MET:HE2	0.50	1.84	6	1
1:A:258:ASP:OD1	1:A:259:VAL:HG23	0.50	2.07	6	2
1:A:122:ILE:HG13	1:A:138:PHE:CG	0.50	2.41	7	1
1:A:110:THR:CA	1:A:230:LEU:HB2	0.50	2.37	20	1
1:A:178:PHE:CD2	1:A:204:ASP:OD2	0.50	2.64	20	1
1:A:170:LYS:HB2	1:A:178:PHE:CD1	0.50	2.42	7	5
1:A:202:ASP:HB3	1:A:205:GLU:CG	0.50	2.37	15	5
1:A:222:HIS:HB2	1:A:239:LEU:CD2	0.50	2.37	15	2
1:A:158:ASP:OD1	1:A:158:ASP:C	0.50	2.55	20	1
1:A:187:HIS:C	1:A:223:GLU:OE2	0.50	2.55	13	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:129:MET:CE	1:A:134:VAL:HG23	0.50	2.37	2	1
1:A:179:ASP:OD1	1:A:202:ASP:OD2	0.50	2.30	18	4
1:A:259:VAL:HG12	1:A:260:GLN:N	0.50	2.22	17	7
1:A:120:TYR:CZ	1:A:155:ARG:HD3	0.50	2.41	15	2
1:A:120:TYR:CE2	1:A:155:ARG:HG2	0.50	2.41	5	3
1:A:113:TRP:CZ2	1:A:270:ASP:OD2	0.50	2.64	7	1
1:A:244:TYR:CD2	1:A:245:THR:N	0.50	2.80	18	3
1:A:243:ILE:O	1:A:243:ILE:CG2	0.50	2.60	16	1
1:A:127:PRO:HG2	1:A:129:MET:CE	0.50	2.37	19	1
1:A:140:LYS:O	1:A:141:ALA:C	0.49	2.54	9	20
1:A:253:MET:O	1:A:254:LEU:C	0.49	2.54	6	20
1:A:180:GLY:CA	1:A:204:ASP:HB3	0.49	2.37	9	8
1:A:156:LEU:HG	1:A:160:ILE:HD13	0.49	1.83	8	1
1:A:151:LEU:HD22	1:A:266:TYR:CD1	0.49	2.41	12	1
4:A:1:HAV:HB	5:A:2:3MP:CG	0.49	2.37	4	9
1:A:199:ALA:HB1	1:A:223:GLU:CG	0.49	2.37	14	3
1:A:208:THR:C	1:A:216:LEU:HD12	0.49	2.30	5	1
1:A:203:ASP:C	1:A:203:ASP:OD1	0.49	2.55	3	3
1:A:237:GLY:O	1:A:255:PRO:HA	0.49	2.07	9	8
1:A:179:ASP:O	1:A:179:ASP:OD1	0.49	2.30	12	5
1:A:224:PHE:O	1:A:225:GLY:C	0.49	2.55	17	16
1:A:239:LEU:C	1:A:240:MET:CG	0.49	2.85	8	3
1:A:122:ILE:HG13	1:A:138:PHE:CD2	0.49	2.42	7	1
1:A:181:PRO:O	1:A:182:SER:O	0.49	2.31	4	10
1:A:214:TYR:CE2	1:A:244:TYR:CE1	0.49	3.00	19	5
1:A:174:ASP:OD1	1:A:175:PHE:N	0.49	2.45	9	1
1:A:157:HIS:O	1:A:158:ASP:C	0.49	2.56	15	14
1:A:180:GLY:O	1:A:205:GLU:CD	0.49	2.55	3	4
1:A:209:SER:O	1:A:209:SER:OG	0.49	2.31	15	8
1:A:163:ILE:HD12	1:A:228:LEU:CD1	0.49	2.37	13	1
1:A:181:PRO:O	1:A:182:SER:C	0.49	2.55	5	6
1:A:216:LEU:O	1:A:217:PHE:C	0.49	2.55	20	19
1:A:122:ILE:CG2	1:A:138:PHE:CG	0.49	2.96	2	4
1:A:228:LEU:HD23	1:A:229:GLY:H	0.49	1.68	3	1
1:A:151:LEU:O	1:A:151:LEU:CD1	0.49	2.57	14	1
1:A:190:PRO:O	1:A:196:GLY:HA3	0.49	2.08	6	16
1:A:226:HIS:HE2	1:A:232:HIS:CD2	0.49	2.15	1	1
1:A:112:LYS:HD3	1:A:230:LEU:HD22	0.49	1.83	2	2
1:A:199:ALA:CB	1:A:223:GLU:OE1	0.49	2.61	8	2
1:A:156:LEU:O	1:A:158:ASP:N	0.49	2.43	9	2
1:A:154:THR:CG2	1:A:155:ARG:N	0.49	2.75	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:148:VAL:O	1:A:263:GLN:CG	0.49	2.60	19	2
1:A:243:ILE:HD13	1:A:245:THR:HG22	0.49	1.84	16	1
1:A:238:ALA:HA	1:A:255:PRO:CA	0.49	2.38	7	8
1:A:257:ASP:O	1:A:261:GLY:HA3	0.49	2.08	2	20
1:A:125:TYR:CE1	1:A:167:PHE:CD1	0.49	3.01	6	1
1:A:222:HIS:CB	1:A:239:LEU:HD21	0.49	2.34	11	1
1:A:163:ILE:HG12	1:A:164:MET:N	0.49	2.22	16	3
1:A:262:ILE:C	1:A:262:ILE:CD1	0.49	2.85	12	3
1:A:234:LYS:C	1:A:234:LYS:HD3	0.49	2.33	11	1
1:A:120:TYR:CE1	1:A:153:PHE:HB2	0.48	2.43	20	6
1:A:183:GLY:CA	5:A:2:3MP:HE1	0.48	2.38	20	18
1:A:123:VAL:C	1:A:165:ILE:O	0.48	2.56	13	8
1:A:247:THR:HG23	1:A:249:LYS:H	0.48	1.67	3	1
1:A:224:PHE:CD1	1:A:224:PHE:N	0.48	2.79	4	3
1:A:179:ASP:O	1:A:204:ASP:CG	0.48	2.56	14	2
1:A:119:THR:CG2	1:A:160:ILE:HG22	0.48	2.28	11	1
1:A:195:TYR:C	1:A:198:ASP:OD2	0.48	2.56	14	1
1:A:201:PHE:O	1:A:202:ASP:C	0.48	2.56	14	13
1:A:226:HIS:O	1:A:227:SER:C	0.48	2.56	14	14
1:A:120:TYR:CE1	1:A:155:ARG:HG2	0.48	2.43	3	2
1:A:240:MET:O	1:A:241:PHE:O	0.48	2.31	6	6
1:A:167:PHE:CE2	1:A:169:ILE:HB	0.48	2.43	11	2
1:A:120:TYR:CB	1:A:163:ILE:HG13	0.48	2.38	7	3
1:A:178:PHE:CD1	1:A:178:PHE:O	0.48	2.67	7	1
1:A:149:THR:HG21	1:A:262:ILE:CG1	0.48	2.38	12	1
1:A:238:ALA:HB1	1:A:258:ASP:CB	0.48	2.38	13	2
1:A:125:TYR:CD2	1:A:127:PRO:HD3	0.48	2.43	16	9
1:A:177:PRO:O	1:A:179:ASP:OD2	0.48	2.32	2	12
1:A:234:LYS:O	1:A:234:LYS:HG2	0.48	2.07	5	10
1:A:266:TYR:O	1:A:267:GLY:O	0.48	2.32	2	11
1:A:203:ASP:OD1	1:A:203:ASP:C	0.48	2.56	15	7
1:A:179:ASP:N	1:A:204:ASP:OD2	0.48	2.46	19	1
1:A:111:LEU:CD2	1:A:191:PRO:HD2	0.48	2.39	20	4
1:A:215:ASN:OD1	1:A:218:LEU:N	0.48	2.44	10	3
1:A:110:THR:HG22	1:A:112:LYS:CE	0.48	2.37	20	2
1:A:247:THR:OG1	1:A:250:SER:N	0.48	2.47	10	3
1:A:253:MET:SD	1:A:253:MET:N	0.48	2.87	18	2
1:A:122:ILE:O	1:A:122:ILE:HG13	0.48	2.09	8	8
1:A:146:SER:OG	1:A:153:PHE:CE2	0.48	2.66	1	1
1:A:178:PHE:O	1:A:178:PHE:CG	0.48	2.65	17	7
1:A:236:PRO:HG2	1:A:257:ASP:CG	0.48	2.33	9	19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:125:TYR:C	1:A:127:PRO:HD3	0.48	2.33	19	6
1:A:130:THR:N	1:A:133:GLU:OE1	0.48	2.43	1	2
1:A:222:HIS:HA	1:A:239:LEU:CD2	0.48	2.38	9	17
1:A:116:MET:CG	1:A:267:GLY:O	0.48	2.62	14	2
1:A:116:MET:O	1:A:151:LEU:HD13	0.48	2.07	9	1
1:A:157:HIS:O	1:A:157:HIS:CG	0.48	2.64	9	1
1:A:130:THR:O	1:A:131:HIS:C	0.48	2.56	11	15
1:A:177:PRO:O	1:A:202:ASP:OD1	0.48	2.31	5	4
1:A:186:ALA:C	1:A:223:GLU:OE2	0.48	2.57	2	5
1:A:236:PRO:CD	1:A:257:ASP:OD2	0.48	2.61	7	5
1:A:111:LEU:HB3	1:A:229:GLY:O	0.48	2.08	13	7
1:A:226:HIS:CE1	1:A:240:MET:HA	0.48	2.44	7	2
1:A:111:LEU:CD2	1:A:191:PRO:CG	0.48	2.92	11	2
1:A:223:GLU:O	1:A:224:PHE:C	0.48	2.56	18	1
1:A:154:THR:CG2	1:A:156:LEU:CD1	0.48	2.92	20	1
1:A:118:LEU:CD2	1:A:162:ASP:CG	0.48	2.86	2	2
1:A:136:LYS:O	1:A:140:LYS:HB2	0.48	2.09	10	14
1:A:237:GLY:O	1:A:257:ASP:OD2	0.48	2.31	13	3
1:A:212:LYS:O	1:A:213:GLY:C	0.48	2.57	18	4
1:A:255:PRO:O	1:A:258:ASP:OD1	0.48	2.32	11	10
1:A:179:ASP:OD2	1:A:184:LEU:HD22	0.48	2.08	4	1
1:A:124:ASN:CG	1:A:216:LEU:HD21	0.48	2.33	10	2
1:A:218:LEU:HD22	1:A:247:THR:HA	0.48	1.85	8	1
1:A:246:TYR:CE2	1:A:255:PRO:CD	0.48	2.97	18	3
1:A:195:TYR:C	1:A:198:ASP:OD1	0.48	2.57	11	1
1:A:216:LEU:HD13	1:A:216:LEU:N	0.48	2.23	12	1
1:A:137:ALA:CB	1:A:216:LEU:HB2	0.48	2.38	10	2
1:A:165:ILE:HB	1:A:224:PHE:CE2	0.48	2.43	11	3
1:A:136:LYS:HG2	1:A:217:PHE:CZ	0.48	2.44	17	5
1:A:142:PHE:CE2	1:A:224:PHE:CZ	0.48	3.02	12	1
1:A:117:ASN:N	1:A:117:ASN:OD1	0.48	2.46	16	1
1:A:263:GLN:CD	1:A:263:GLN:O	0.48	2.57	16	1
1:A:127:PRO:CG	1:A:129:MET:CE	0.48	2.91	19	1
1:A:253:MET:O	1:A:256:ASP:OD1	0.48	2.32	12	6
1:A:149:THR:O	1:A:149:THR:CG2	0.48	2.61	3	3
1:A:155:ARG:HB2	1:A:155:ARG:CZ	0.48	2.38	3	1
1:A:234:LYS:HD3	1:A:234:LYS:C	0.48	2.34	18	4
1:A:170:LYS:CG	1:A:178:PHE:CZ	0.48	2.97	6	1
1:A:168:GLY:O	1:A:203:ASP:OD2	0.48	2.32	12	3
1:A:170:LYS:HE2	1:A:176:TYR:CE1	0.48	2.44	17	1
1:A:203:ASP:OD1	1:A:204:ASP:CG	0.48	2.57	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:120:TYR:CB	1:A:163:ILE:HG12	0.47	2.38	12	3
1:A:212:LYS:O	1:A:213:GLY:O	0.47	2.31	5	4
1:A:222:HIS:NE2	4:A:1:HAV:O1	0.47	2.46	5	3
1:A:232:HIS:CE1	1:A:240:MET:C	0.47	2.92	11	1
1:A:112:LYS:CD	1:A:230:LEU:HD22	0.47	2.39	16	1
1:A:171:GLU:O	1:A:171:GLU:CG	0.47	2.62	20	2
1:A:156:LEU:O	1:A:157:HIS:C	0.47	2.57	20	1
1:A:230:LEU:HD11	1:A:240:MET:HE2	0.47	1.86	20	1
1:A:179:ASP:O	1:A:180:GLY:O	0.47	2.32	19	5
1:A:179:ASP:CG	1:A:202:ASP:OD2	0.47	2.57	8	4
1:A:180:GLY:O	1:A:205:GLU:OE2	0.47	2.32	14	2
1:A:111:LEU:CD2	1:A:191:PRO:HG2	0.47	2.39	11	4
1:A:234:LYS:HG2	1:A:241:PHE:N	0.47	2.24	15	2
1:A:170:LYS:HE2	1:A:176:TYR:CD1	0.47	2.43	10	1
1:A:113:TRP:NE1	1:A:270:ASP:HB3	0.47	2.24	12	1
1:A:248:GLY:O	1:A:249:LYS:CG	0.47	2.62	19	1
1:A:119:THR:HA	1:A:154:THR:O	0.47	2.09	12	18
1:A:129:MET:HB3	1:A:133:GLU:CB	0.47	2.39	15	6
1:A:136:LYS:O	1:A:137:ALA:C	0.47	2.57	1	15
1:A:163:ILE:HA	1:A:197:GLY:O	0.47	2.09	13	18
1:A:240:MET:O	1:A:241:PHE:C	0.47	2.57	20	7
1:A:185:LEU:O	1:A:185:LEU:HD23	0.47	2.09	10	2
1:A:175:PHE:C	1:A:176:TYR:CD1	0.47	2.92	13	2
1:A:117:ASN:C	1:A:117:ASN:ND2	0.47	2.72	14	1
1:A:186:ALA:HB1	1:A:223:GLU:HG2	0.47	1.80	19	1
1:A:247:THR:O	1:A:248:GLY:C	0.47	2.58	9	2
1:A:253:MET:C	1:A:255:PRO:HD2	0.47	2.35	7	20
1:A:263:GLN:O	1:A:263:GLN:NE2	0.47	2.48	7	1
1:A:124:ASN:C	1:A:124:ASN:OD1	0.47	2.58	18	3
1:A:112:LYS:HD2	1:A:230:LEU:CD2	0.47	2.40	16	1
1:A:120:TYR:CD1	1:A:153:PHE:HB2	0.47	2.45	17	1
1:A:242:PRO:O	1:A:243:ILE:HG13	0.47	2.10	18	1
1:A:219:VAL:O	1:A:222:HIS:HB3	0.47	2.09	10	18
1:A:234:LYS:HG3	1:A:241:PHE:CB	0.47	2.39	19	3
1:A:149:THR:HG21	1:A:262:ILE:HG12	0.47	1.85	12	4
1:A:226:HIS:O	1:A:230:LEU:O	0.47	2.33	7	1
1:A:227:SER:OG	1:A:228:LEU:N	0.47	2.48	15	1
1:A:228:LEU:CG	1:A:266:TYR:OH	0.47	2.62	16	1
1:A:112:LYS:HD3	1:A:230:LEU:CD2	0.47	2.39	2	2
1:A:165:ILE:HB	1:A:224:PHE:CE1	0.47	2.44	1	2
1:A:234:LYS:HG3	1:A:241:PHE:N	0.47	2.24	18	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:260:GLN:HG3	1:A:261:GLY:N	0.47	2.23	5	2
1:A:124:ASN:ND2	1:A:134:VAL:HA	0.47	2.24	6	1
1:A:185:LEU:HD12	1:A:205:GLU:HG2	0.47	1.85	11	1
1:A:203:ASP:OD1	1:A:204:ASP:OD2	0.47	2.32	12	1
1:A:220:ALA:HB1	1:A:224:PHE:CE2	0.47	2.44	13	1
1:A:178:PHE:HB2	1:A:203:ASP:OD2	0.47	2.10	12	6
1:A:234:LYS:HB2	1:A:238:ALA:N	0.47	2.25	17	3
1:A:255:PRO:O	1:A:258:ASP:OD2	0.47	2.33	1	2
1:A:165:ILE:HB	1:A:224:PHE:CZ	0.47	2.44	3	8
1:A:246:TYR:O	1:A:247:THR:O	0.47	2.32	7	5
1:A:122:ILE:HA	1:A:165:ILE:HG22	0.47	1.87	18	4
1:A:245:THR:O	1:A:246:TYR:C	0.47	2.55	6	3
1:A:252:PHE:CE2	1:A:253:MET:CE	0.47	2.98	8	1
1:A:209:SER:OG	1:A:209:SER:O	0.47	2.31	9	1
1:A:143:LYS:C	1:A:143:LYS:CD	0.47	2.88	10	1
1:A:228:LEU:C	1:A:266:TYR:OH	0.47	2.58	15	1
1:A:178:PHE:HB3	1:A:203:ASP:OD1	0.47	2.09	16	1
1:A:174:ASP:O	1:A:175:PHE:C	0.47	2.58	5	2
1:A:203:ASP:OD1	1:A:204:ASP:OD1	0.47	2.33	4	4
1:A:218:LEU:HG	6:A:3:MSB:HH2	0.47	1.87	4	4
1:A:222:HIS:HB2	1:A:239:LEU:CD1	0.47	2.38	4	1
1:A:124:ASN:OD1	1:A:134:VAL:CG1	0.47	2.62	12	1
1:A:253:MET:O	1:A:253:MET:CG	0.47	2.60	12	3
1:A:262:ILE:CD1	1:A:263:GLN:N	0.47	2.65	11	10
1:A:204:ASP:OD1	1:A:204:ASP:O	0.47	2.32	3	4
1:A:148:VAL:O	1:A:263:GLN:OE1	0.47	2.33	5	2
1:A:179:ASP:O	1:A:179:ASP:CG	0.47	2.58	18	2
1:A:219:VAL:O	1:A:222:HIS:N	0.47	2.47	20	2
1:A:234:LYS:HA	1:A:238:ALA:CB	0.47	2.40	17	6
1:A:167:PHE:CZ	1:A:169:ILE:HD12	0.47	2.44	4	1
1:A:170:LYS:CB	1:A:178:PHE:CE1	0.47	2.98	6	3
1:A:184:LEU:O	1:A:202:ASP:OD2	0.47	2.32	17	5
1:A:214:TYR:CE2	1:A:244:TYR:CE2	0.47	3.03	16	1
1:A:122:ILE:O	1:A:122:ILE:HG12	0.47	2.10	17	3
1:A:218:LEU:CD2	1:A:244:TYR:HB2	0.46	2.39	7	12
1:A:175:PHE:O	1:A:176:TYR:C	0.46	2.55	14	2
1:A:230:LEU:HG	1:A:231:ASP:N	0.46	2.24	11	7
1:A:135:GLU:O	1:A:139:LYS:HB2	0.46	2.10	5	20
1:A:234:LYS:CD	1:A:240:MET:HB2	0.46	2.40	12	4
1:A:241:PHE:CD1	1:A:243:ILE:HG22	0.46	2.45	1	1
1:A:141:ALA:HB2	1:A:217:PHE:HA	0.46	1.87	5	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:179:ASP:O	1:A:204:ASP:OD2	0.46	2.33	3	2
1:A:253:MET:O	1:A:256:ASP:OD2	0.46	2.34	8	3
1:A:230:LEU:C	1:A:230:LEU:CD2	0.46	2.81	9	5
1:A:129:MET:O	1:A:130:THR:O	0.46	2.33	9	2
1:A:110:THR:O	1:A:112:LYS:HG3	0.46	2.09	17	2
1:A:175:PHE:O	1:A:177:PRO:N	0.46	2.49	14	1
1:A:120:TYR:HB3	1:A:163:ILE:CG2	0.46	2.40	17	2
1:A:188:ALA:HB1	1:A:227:SER:HA	0.46	1.88	18	1
1:A:184:LEU:HG	4:A:1:HAV:CG1	0.46	2.40	13	9
1:A:234:LYS:HD3	1:A:234:LYS:N	0.46	2.25	17	5
1:A:234:LYS:C	1:A:236:PRO:HD2	0.46	2.35	2	6
1:A:239:LEU:O	1:A:240:MET:SD	0.46	2.73	3	5
1:A:241:PHE:HB2	1:A:242:PRO:HD2	0.46	1.87	13	10
1:A:217:PHE:O	1:A:221:ALA:HB3	0.46	2.09	9	8
1:A:232:HIS:CD2	1:A:234:LYS:HE3	0.46	2.44	5	2
1:A:260:GLN:CG	1:A:261:GLY:N	0.46	2.78	5	1
1:A:215:ASN:OD1	1:A:218:LEU:HB2	0.46	2.11	6	1
1:A:230:LEU:HD22	1:A:232:HIS:N	0.46	2.25	9	1
1:A:249:LYS:O	1:A:250:SER:C	0.46	2.57	10	1
1:A:195:TYR:O	1:A:198:ASP:OD1	0.46	2.34	11	1
1:A:148:VAL:O	1:A:263:GLN:CB	0.46	2.63	19	2
1:A:235:ASP:N	1:A:236:PRO:HD2	0.46	2.24	17	1
1:A:163:ILE:HD11	1:A:224:PHE:CD1	0.46	2.45	18	1
1:A:183:GLY:O	1:A:184:LEU:HB2	0.46	2.10	20	20
1:A:210:SER:O	1:A:215:ASN:OD1	0.46	2.33	1	1
1:A:117:ASN:OD1	1:A:117:ASN:O	0.46	2.34	3	2
1:A:115:LYS:HB3	1:A:266:TYR:CE1	0.46	2.45	13	1
1:A:163:ILE:HG13	1:A:164:MET:N	0.46	2.24	15	2
1:A:184:LEU:CD1	4:A:1:HAV:HG11	0.46	2.40	19	2
1:A:235:ASP:C	1:A:235:ASP:OD1	0.46	2.58	16	1
1:A:208:THR:OG1	1:A:209:SER:N	0.46	2.48	3	1
1:A:222:HIS:CE1	1:A:239:LEU:O	0.46	2.69	4	2
1:A:148:VAL:O	1:A:263:GLN:HB2	0.46	2.11	18	20
1:A:170:LYS:C	1:A:170:LYS:HD3	0.46	2.35	20	6
1:A:233:SER:O	1:A:233:SER:OG	0.46	2.33	3	2
1:A:167:PHE:CD1	1:A:167:PHE:C	0.46	2.91	2	1
1:A:218:LEU:O	1:A:219:VAL:C	0.46	2.59	11	9
1:A:243:ILE:HG12	1:A:245:THR:HG22	0.46	1.87	8	1
1:A:151:LEU:CD2	1:A:266:TYR:HB3	0.46	2.41	18	1
1:A:146:SER:HA	1:A:149:THR:O	0.46	2.11	10	16
1:A:228:LEU:O	1:A:266:TYR:OH	0.46	2.33	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:LYS:CG	1:A:265:LEU:HB3	0.46	2.40	7	1
1:A:129:MET:HE2	1:A:216:LEU:HD21	0.46	1.87	19	2
1:A:158:ASP:OD1	1:A:158:ASP:O	0.46	2.33	15	1
1:A:263:GLN:OE1	1:A:263:GLN:O	0.46	2.33	17	1
1:A:232:HIS:CD2	1:A:234:LYS:HZ3	0.46	2.28	18	1
1:A:110:THR:C	1:A:230:LEU:HB2	0.46	2.36	20	1
1:A:178:PHE:HB2	1:A:203:ASP:CG	0.46	2.36	4	9
1:A:163:ILE:CA	1:A:197:GLY:O	0.46	2.64	13	3
1:A:163:ILE:HB	1:A:228:LEU:HD23	0.46	1.85	5	1
1:A:132:SER:O	1:A:135:GLU:HB3	0.46	2.11	10	4
1:A:163:ILE:CG2	1:A:228:LEU:HG	0.46	2.39	14	1
1:A:200:HIS:O	1:A:223:GLU:OE2	0.46	2.34	20	3
1:A:247:THR:N	1:A:250:SER:HB3	0.46	2.25	7	2
1:A:129:MET:HE3	1:A:134:VAL:HG22	0.46	1.88	8	1
1:A:179:ASP:OD2	1:A:202:ASP:OD2	0.46	2.33	15	1
1:A:243:ILE:CD1	1:A:243:ILE:C	0.46	2.89	16	1
1:A:129:MET:SD	1:A:207:TRP:O	0.46	2.74	18	1
1:A:253:MET:SD	1:A:256:ASP:OD2	0.46	2.74	2	1
1:A:116:MET:O	1:A:116:MET:SD	0.46	2.74	14	3
1:A:247:THR:CG2	1:A:248:GLY:N	0.46	2.79	9	1
1:A:215:ASN:ND2	1:A:218:LEU:HB3	0.46	2.26	17	1
1:A:163:ILE:C	1:A:163:ILE:CD1	0.46	2.83	18	1
1:A:116:MET:HB2	1:A:269:GLY:HA3	0.46	1.88	19	1
1:A:158:ASP:OD1	1:A:160:ILE:HD11	0.46	2.10	20	1
1:A:196:GLY:C	1:A:198:ASP:N	0.45	2.73	8	14
1:A:186:ALA:O	1:A:223:GLU:OE1	0.45	2.35	12	3
1:A:234:LYS:C	1:A:236:PRO:CD	0.45	2.89	2	2
1:A:178:PHE:HA	1:A:202:ASP:OD1	0.45	2.12	3	3
1:A:215:ASN:C	1:A:219:VAL:HG12	0.45	2.36	17	4
1:A:236:PRO:CG	1:A:257:ASP:OD2	0.45	2.64	17	3
1:A:263:GLN:OE1	1:A:263:GLN:C	0.45	2.59	4	3
1:A:129:MET:HE1	1:A:216:LEU:HD21	0.45	1.87	6	1
1:A:223:GLU:OE1	1:A:223:GLU:O	0.45	2.33	19	1
1:A:167:PHE:CE2	1:A:169:ILE:HG23	0.45	2.45	4	1
1:A:174:ASP:OD1	1:A:174:ASP:N	0.45	2.49	4	1
1:A:253:MET:SD	1:A:256:ASP:OD1	0.45	2.74	5	1
1:A:110:THR:HA	1:A:230:LEU:CD1	0.45	2.41	17	1
1:A:208:THR:O	1:A:215:ASN:HA	0.45	2.11	9	15
1:A:222:HIS:CA	1:A:239:LEU:HD11	0.45	2.42	4	1
1:A:228:LEU:HD23	1:A:266:TYR:CZ	0.45	2.47	7	2
1:A:114:SER:O	1:A:115:LYS:HG2	0.45	2.10	11	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:230:LEU:HD23	1:A:230:LEU:O	0.45	2.11	11	1
1:A:246:TYR:CE1	1:A:249:LYS:HA	0.45	2.46	14	1
1:A:226:HIS:CE1	1:A:240:MET:HG3	0.45	2.46	15	1
1:A:203:ASP:OD2	1:A:204:ASP:OD1	0.45	2.34	17	1
1:A:167:PHE:O	1:A:167:PHE:CD2	0.45	2.69	19	1
1:A:247:THR:N	1:A:250:SER:HB2	0.45	2.25	4	3
1:A:163:ILE:HD12	1:A:228:LEU:HD11	0.45	1.79	13	1
1:A:224:PHE:C	1:A:226:HIS:N	0.45	2.74	19	5
1:A:226:HIS:CE1	1:A:232:HIS:HA	0.45	2.46	4	2
1:A:124:ASN:CG	1:A:134:VAL:HG13	0.45	2.37	6	2
1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:CD	0.45	2.74	10	1
1:A:252:PHE:C	1:A:253:MET:CG	0.45	2.90	19	1
1:A:126:THR:HG23	1:A:130:THR:HA	0.45	1.89	20	1
1:A:156:LEU:HD23	1:A:160:ILE:HD13	0.45	1.87	20	1
1:A:197:GLY:HA2	1:A:227:SER:HB2	0.45	1.88	16	11
1:A:199:ALA:CB	1:A:223:GLU:HG2	0.45	2.38	5	2
1:A:238:ALA:CB	1:A:257:ASP:HB2	0.45	2.36	5	2
1:A:110:THR:N	1:A:230:LEU:HD12	0.45	2.27	12	1
1:A:158:ASP:C	1:A:158:ASP:OD1	0.45	2.60	15	1
1:A:157:HIS:C	1:A:159:GLY:N	0.45	2.75	2	5
1:A:180:GLY:H	1:A:204:ASP:CB	0.45	2.25	20	7
1:A:234:LYS:CD	1:A:234:LYS:N	0.45	2.79	2	2
1:A:237:GLY:O	1:A:257:ASP:HB2	0.45	2.12	15	8
1:A:252:PHE:CE2	1:A:253:MET:HG2	0.45	2.47	10	2
1:A:234:LYS:HG3	1:A:241:PHE:CA	0.45	2.41	4	5
1:A:188:ALA:CB	1:A:227:SER:N	0.45	2.80	10	1
1:A:215:ASN:CG	1:A:218:LEU:HB3	0.45	2.37	13	1
1:A:219:VAL:O	1:A:220:ALA:C	0.45	2.58	20	5
1:A:234:LYS:O	1:A:234:LYS:HE3	0.45	2.12	7	1
1:A:129:MET:HE3	1:A:134:VAL:CG2	0.45	2.42	8	1
1:A:122:ILE:HD13	1:A:155:ARG:NH1	0.45	2.26	1	1
1:A:164:MET:O	1:A:199:ALA:CB	0.45	2.61	12	3
1:A:178:PHE:HA	1:A:202:ASP:CG	0.45	2.37	6	8
1:A:239:LEU:C	1:A:240:MET:HG2	0.45	2.37	6	4
1:A:185:LEU:C	1:A:185:LEU:HD23	0.45	2.37	8	1
1:A:217:PHE:CD1	1:A:217:PHE:N	0.45	2.84	13	3
1:A:186:ALA:CB	1:A:201:PHE:CE1	0.45	3.00	12	2
1:A:120:TYR:CB	1:A:163:ILE:O	0.45	2.65	14	2
1:A:117:ASN:O	1:A:118:LEU:CD1	0.45	2.65	19	1
1:A:120:TYR:CD2	1:A:142:PHE:CE2	0.44	3.05	15	3
1:A:129:MET:HB2	1:A:133:GLU:HB2	0.44	1.88	3	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:209:SER:HB2	1:A:216:LEU:HD23	0.44	1.89	20	2
1:A:228:LEU:HG	1:A:266:TYR:OH	0.44	2.12	18	7
1:A:156:LEU:CD1	1:A:160:ILE:HD13	0.44	2.42	8	1
1:A:246:TYR:CD1	1:A:250:SER:HB3	0.44	2.47	8	1
1:A:128:ASP:OD1	1:A:128:ASP:N	0.44	2.50	16	2
1:A:172:HIS:ND1	1:A:189:PHE:CZ	0.44	2.85	11	1
1:A:140:LYS:HD3	1:A:217:PHE:CE1	0.44	2.47	20	1
1:A:185:LEU:HB3	6:A:3:MSB:OB2	0.44	2.12	1	13
1:A:110:THR:C	1:A:112:LYS:N	0.44	2.75	16	4
1:A:169:ILE:HD13	1:A:169:ILE:H	0.44	1.73	4	1
1:A:177:PRO:O	1:A:178:PHE:C	0.44	2.57	6	2
1:A:199:ALA:HB2	1:A:223:GLU:OE1	0.44	2.12	8	1
1:A:218:LEU:HD12	1:A:239:LEU:CD1	0.44	2.43	20	2
1:A:120:TYR:OH	1:A:155:ARG:NH1	0.44	2.50	12	1
1:A:247:THR:OG1	1:A:250:SER:CB	0.44	2.66	15	2
1:A:249:LYS:N	1:A:249:LYS:HD2	0.44	2.25	14	1
1:A:120:TYR:HB2	1:A:163:ILE:O	0.44	2.12	14	8
1:A:163:ILE:HD11	1:A:224:PHE:HA	0.44	1.89	1	1
1:A:124:ASN:C	1:A:124:ASN:ND2	0.44	2.75	2	2
1:A:183:GLY:C	5:A:2:3MP:HE1	0.44	2.38	19	3
1:A:190:PRO:O	1:A:196:GLY:HA2	0.44	2.11	5	4
1:A:163:ILE:HB	1:A:197:GLY:O	0.44	2.12	13	5
1:A:210:SER:O	1:A:215:ASN:ND2	0.44	2.49	9	1
1:A:218:LEU:HD21	1:A:244:TYR:O	0.44	2.12	18	3
1:A:234:LYS:CB	1:A:238:ALA:CB	0.44	2.79	1	1
1:A:219:VAL:HG22	1:A:220:ALA:N	0.44	2.27	4	2
1:A:222:HIS:CG	1:A:239:LEU:O	0.44	2.70	4	1
1:A:129:MET:HE2	1:A:207:TRP:O	0.44	2.13	5	1
1:A:180:GLY:HA2	1:A:204:ASP:OD1	0.44	2.12	14	2
1:A:149:THR:CG2	1:A:262:ILE:HG12	0.44	2.43	12	1
1:A:156:LEU:CD1	1:A:158:ASP:HB3	0.44	2.40	2	1
1:A:117:ASN:C	1:A:118:LEU:HD22	0.44	2.33	14	2
1:A:151:LEU:HD21	1:A:266:TYR:CD2	0.44	2.48	11	1
1:A:185:LEU:HD11	1:A:214:TYR:CD2	0.44	2.47	15	2
1:A:235:ASP:HB3	1:A:236:PRO:HD3	0.44	1.89	16	3
1:A:222:HIS:O	1:A:226:HIS:ND1	0.44	2.51	20	1
1:A:202:ASP:C	1:A:204:ASP:N	0.44	2.76	1	14
1:A:114:SER:C	1:A:115:LYS:HG2	0.44	2.38	6	5
1:A:246:TYR:CD1	1:A:246:TYR:O	0.44	2.71	6	1
1:A:185:LEU:HD12	1:A:205:GLU:CG	0.44	2.42	9	1
1:A:222:HIS:ND1	1:A:239:LEU:HD23	0.44	2.27	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:247:THR:OG1	1:A:250:SER:HB2	0.44	2.13	15	1
1:A:133:GLU:N	1:A:133:GLU:OE1	0.44	2.50	5	2
1:A:244:TYR:HB2	6:A:3:MSB:CH	0.44	2.42	6	1
1:A:255:PRO:O	1:A:256:ASP:C	0.44	2.59	6	2
1:A:130:THR:C	1:A:132:SER:N	0.44	2.74	15	1
1:A:110:THR:CG2	1:A:112:LYS:HE2	0.44	2.42	20	1
1:A:222:HIS:CD2	1:A:226:HIS:CE1	0.44	3.06	20	1
1:A:114:SER:O	1:A:115:LYS:HG3	0.44	2.12	20	4
1:A:121:ARG:HG3	1:A:122:ILE:N	0.44	2.28	3	1
1:A:132:SER:O	1:A:135:GLU:HB2	0.44	2.13	17	7
1:A:137:ALA:HB2	1:A:216:LEU:HD23	0.44	1.88	13	3
1:A:260:GLN:O	1:A:264:SER:OG	0.44	2.35	13	2
1:A:158:ASP:OD2	1:A:160:ILE:HG13	0.44	2.13	19	1
1:A:184:LEU:O	1:A:202:ASP:CB	0.44	2.66	18	10
1:A:118:LEU:HD12	1:A:162:ASP:CB	0.44	2.43	6	1
1:A:156:LEU:CG	1:A:160:ILE:HD13	0.44	2.42	8	1
1:A:228:LEU:HD13	1:A:266:TYR:OH	0.44	2.13	8	1
1:A:234:LYS:HB3	1:A:240:MET:HB2	0.44	1.90	14	3
1:A:174:ASP:CG	1:A:175:PHE:N	0.44	2.76	17	2
1:A:116:MET:HB2	1:A:269:GLY:CA	0.44	2.43	19	1
1:A:236:PRO:HD2	1:A:257:ASP:OD2	0.43	2.13	7	8
1:A:122:ILE:HG22	1:A:138:PHE:CD1	0.43	2.48	12	3
1:A:163:ILE:HG13	1:A:197:GLY:O	0.43	2.13	17	3
1:A:247:THR:N	1:A:250:SER:CB	0.43	2.81	4	1
1:A:156:LEU:CB	1:A:160:ILE:HB	0.43	2.43	12	2
1:A:114:SER:O	1:A:115:LYS:HD3	0.43	2.13	15	3
1:A:244:TYR:CG	1:A:245:THR:N	0.43	2.85	12	3
1:A:120:TYR:HB3	1:A:163:ILE:CG1	0.43	2.43	14	1
1:A:181:PRO:HA	1:A:205:GLU:OE2	0.43	2.13	18	3
1:A:151:LEU:O	1:A:153:PHE:CE2	0.43	2.70	3	1
1:A:246:TYR:CE2	1:A:255:PRO:HG3	0.43	2.47	6	1
1:A:254:LEU:O	1:A:256:ASP:OD1	0.43	2.36	12	2
1:A:194:ASN:N	1:A:194:ASN:ND2	0.43	2.64	18	1
1:A:124:ASN:O	1:A:125:TYR:HB2	0.43	2.14	12	18
1:A:139:LYS:O	1:A:142:PHE:HB2	0.43	2.13	10	11
1:A:222:HIS:CE1	6:A:3:MSB:CZ	0.43	3.01	14	5
1:A:244:TYR:HB3	6:A:3:MSB:CZ	0.43	2.44	8	4
1:A:253:MET:O	1:A:253:MET:HG3	0.43	2.12	14	2
1:A:268:PRO:O	1:A:269:GLY:O	0.43	2.36	15	1
1:A:199:ALA:C	1:A:223:GLU:OE1	0.43	2.61	20	2
1:A:239:LEU:HB3	1:A:258:ASP:CG	0.43	2.38	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:120:TYR:CE2	1:A:155:ARG:HG3	0.43	2.48	3	1
1:A:178:PHE:C	1:A:179:ASP:OD1	0.43	2.61	10	1
1:A:218:LEU:CG	6:A:3:MSB:CH	0.43	2.96	12	2
1:A:130:THR:O	1:A:132:SER:N	0.43	2.52	15	1
1:A:136:LYS:HG3	1:A:140:LYS:CB	0.43	2.44	15	1
1:A:179:ASP:O	1:A:182:SER:HB2	0.43	2.14	20	4
1:A:186:ALA:HB2	1:A:201:PHE:CD1	0.43	2.49	1	2
1:A:201:PHE:CD1	1:A:201:PHE:N	0.43	2.85	6	2
1:A:234:LYS:O	1:A:234:LYS:CD	0.43	2.66	7	1
1:A:258:ASP:OD1	1:A:258:ASP:C	0.43	2.62	10	3
1:A:125:TYR:CG	1:A:126:THR:N	0.43	2.86	10	1
1:A:251:HIS:O	1:A:252:PHE:HB2	0.43	2.14	10	1
1:A:155:ARG:HB2	1:A:155:ARG:NH1	0.43	2.27	15	1
1:A:253:MET:HG3	1:A:256:ASP:OD1	0.43	2.14	16	1
1:A:229:GLY:C	1:A:230:LEU:HD23	0.43	2.38	18	1
1:A:127:PRO:HG2	1:A:129:MET:HE3	0.43	1.90	19	1
1:A:157:HIS:O	1:A:159:GLY:N	0.43	2.52	15	5
1:A:247:THR:OG1	1:A:250:SER:OG	0.43	2.35	2	1
1:A:184:LEU:O	1:A:202:ASP:OD1	0.43	2.36	5	1
1:A:112:LYS:HD2	1:A:265:LEU:CD1	0.43	2.42	9	1
1:A:188:ALA:CB	1:A:227:SER:OG	0.43	2.67	9	1
1:A:208:THR:O	1:A:216:LEU:CD2	0.43	2.55	12	2
1:A:214:TYR:N	1:A:214:TYR:CD1	0.43	2.86	19	1
1:A:234:LYS:HD3	1:A:240:MET:HB2	0.43	1.91	20	1
1:A:145:TRP:CZ2	1:A:228:LEU:HD21	0.43	2.49	3	1
1:A:110:THR:C	1:A:230:LEU:HB3	0.43	2.39	5	1
1:A:202:ASP:HB2	1:A:205:GLU:HG3	0.43	1.91	5	1
1:A:263:GLN:O	1:A:263:GLN:CD	0.43	2.62	7	1
1:A:179:ASP:OD2	1:A:184:LEU:HD23	0.43	2.13	11	1
1:A:124:ASN:ND2	1:A:216:LEU:HG	0.43	2.28	16	1
1:A:237:GLY:C	1:A:241:PHE:CE2	0.43	2.96	17	1
1:A:222:HIS:CD2	1:A:222:HIS:C	0.43	2.96	18	1
1:A:156:LEU:C	1:A:158:ASP:N	0.43	2.75	20	1
1:A:179:ASP:OD1	1:A:182:SER:HB3	0.43	2.14	15	4
1:A:244:TYR:HB3	6:A:3:MSB:OH	0.43	2.13	6	10
1:A:174:ASP:O	1:A:175:PHE:O	0.43	2.37	2	1
1:A:118:LEU:O	1:A:153:PHE:HA	0.43	2.14	18	4
1:A:224:PHE:O	1:A:226:HIS:N	0.43	2.52	5	3
1:A:226:HIS:CE1	1:A:240:MET:CE	0.43	3.01	3	1
1:A:180:GLY:HA2	1:A:204:ASP:CG	0.43	2.39	15	2
1:A:234:LYS:O	1:A:234:LYS:HD2	0.43	2.13	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:149:THR:CG2	1:A:151:LEU:HD13	0.43	2.44	8	1
1:A:168:GLY:O	1:A:203:ASP:HB3	0.43	2.13	9	3
1:A:163:ILE:HD12	1:A:164:MET:N	0.43	2.28	10	1
1:A:187:HIS:NE2	1:A:200:HIS:HB3	0.43	2.29	11	1
1:A:218:LEU:CD1	1:A:239:LEU:HD12	0.43	2.44	12	1
1:A:112:LYS:HB3	1:A:265:LEU:CD1	0.43	2.42	13	1
1:A:170:LYS:HD2	1:A:170:LYS:O	0.43	2.14	20	2
1:A:154:THR:CG2	1:A:156:LEU:HD23	0.43	2.44	2	1
1:A:231:ASP:N	1:A:231:ASP:OD1	0.43	2.52	3	1
1:A:110:THR:CB	1:A:112:LYS:HE2	0.43	2.44	9	1
1:A:111:LEU:HD22	1:A:191:PRO:CD	0.43	2.44	11	1
1:A:214:TYR:CE1	1:A:244:TYR:CZ	0.43	3.07	11	1
1:A:176:TYR:N	1:A:176:TYR:CD1	0.43	2.87	14	2
1:A:218:LEU:HD11	6:A:3:MSB:CH	0.43	2.40	17	1
1:A:140:LYS:HD3	1:A:217:PHE:CD1	0.43	2.49	4	1
1:A:149:THR:CG2	1:A:149:THR:O	0.43	2.67	4	1
1:A:178:PHE:CD2	1:A:203:ASP:CG	0.43	2.97	8	1
1:A:112:LYS:HG3	1:A:112:LYS:O	0.43	2.13	9	2
1:A:129:MET:HB2	1:A:133:GLU:HB3	0.43	1.90	9	2
1:A:122:ILE:HG23	1:A:155:ARG:HD3	0.43	1.90	18	1
1:A:149:THR:CG2	1:A:151:LEU:CD1	0.42	2.96	3	1
1:A:175:PHE:O	1:A:177:PRO:HD3	0.42	2.14	14	3
1:A:123:VAL:O	1:A:124:ASN:O	0.42	2.36	16	2
1:A:166:SER:O	1:A:200:HIS:HA	0.42	2.14	2	1
1:A:167:PHE:CD1	1:A:167:PHE:O	0.42	2.72	6	1
1:A:172:HIS:CD2	1:A:172:HIS:N	0.42	2.88	9	1
1:A:118:LEU:HD13	1:A:228:LEU:HD21	0.42	1.91	12	1
1:A:179:ASP:OD1	1:A:182:SER:HB2	0.42	2.14	15	1
1:A:140:LYS:HD2	1:A:217:PHE:CD1	0.42	2.49	1	1
1:A:234:LYS:N	1:A:234:LYS:CD	0.42	2.82	1	2
1:A:165:ILE:CG1	1:A:224:PHE:CE1	0.42	3.02	2	1
1:A:169:ILE:O	1:A:169:ILE:HG13	0.42	2.14	2	1
1:A:125:TYR:CE1	1:A:167:PHE:CE1	0.42	3.07	6	1
1:A:222:HIS:CD2	4:A:1:HAV:HO1	0.42	2.31	8	4
1:A:112:LYS:CD	1:A:265:LEU:HD22	0.42	2.44	9	1
1:A:111:LEU:HB2	1:A:229:GLY:O	0.42	2.14	19	1
1:A:252:PHE:C	1:A:253:MET:HG2	0.42	2.38	19	1
1:A:116:MET:HG3	1:A:267:GLY:O	0.42	2.15	15	4
1:A:120:TYR:HB3	1:A:163:ILE:HG12	0.42	1.90	14	2
1:A:149:THR:O	1:A:149:THR:HG23	0.42	2.13	18	2
1:A:252:PHE:CD2	1:A:253:MET:N	0.42	2.88	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:114:SER:O	1:A:115:LYS:HD2	0.42	2.14	13	1
1:A:202:ASP:HB3	1:A:205:GLU:HG3	0.42	1.91	10	3
1:A:220:ALA:HB1	1:A:224:PHE:CZ	0.42	2.49	4	1
1:A:236:PRO:HG2	1:A:257:ASP:OD1	0.42	2.14	8	5
1:A:223:GLU:CD	1:A:223:GLU:C	0.42	2.87	8	1
1:A:122:ILE:HG12	1:A:122:ILE:O	0.42	2.14	10	1
1:A:178:PHE:HB3	1:A:203:ASP:OD2	0.42	2.14	12	3
1:A:230:LEU:C	1:A:230:LEU:HD23	0.42	2.39	12	1
1:A:120:TYR:HB2	1:A:163:ILE:HG13	0.42	1.92	14	1
1:A:235:ASP:CG	1:A:236:PRO:HD3	0.42	2.40	16	1
1:A:120:TYR:HB2	1:A:163:ILE:CD1	0.42	2.44	18	1
1:A:133:GLU:C	1:A:135:GLU:N	0.42	2.77	18	1
1:A:129:MET:CB	1:A:133:GLU:HB2	0.42	2.44	19	1
1:A:243:ILE:CG2	1:A:245:THR:HG22	0.42	2.44	4	2
1:A:170:LYS:HB2	1:A:178:PHE:CZ	0.42	2.50	6	1
1:A:197:GLY:HA2	1:A:227:SER:OG	0.42	2.15	7	2
1:A:113:TRP:O	1:A:269:GLY:HA2	0.42	2.15	9	2
1:A:122:ILE:CG1	1:A:138:PHE:CB	0.42	2.97	7	1
1:A:138:PHE:CD2	1:A:139:LYS:N	0.42	2.88	7	1
1:A:177:PRO:O	1:A:184:LEU:HD13	0.42	2.14	10	1
1:A:149:THR:CG2	1:A:262:ILE:CG1	0.42	2.98	12	1
1:A:175:PHE:O	1:A:177:PRO:CD	0.42	2.68	14	1
1:A:117:ASN:O	1:A:117:ASN:CG	0.42	2.62	13	2
1:A:179:ASP:C	1:A:204:ASP:CB	0.42	2.92	11	1
1:A:186:ALA:CB	1:A:201:PHE:CD1	0.42	3.03	18	2
1:A:185:LEU:HD13	1:A:214:TYR:CG	0.42	2.50	15	1
1:A:124:ASN:HA	1:A:166:SER:HA	0.42	1.91	2	4
1:A:169:ILE:O	1:A:171:GLU:CG	0.42	2.68	4	1
1:A:163:ILE:HG12	1:A:197:GLY:O	0.42	2.15	5	2
1:A:185:LEU:CD1	1:A:214:TYR:CG	0.42	3.03	15	1
1:A:154:THR:HG22	1:A:156:LEU:HD23	0.42	1.92	16	1
1:A:174:ASP:OD2	1:A:175:PHE:CE2	0.42	2.73	8	1
1:A:246:TYR:CE1	1:A:255:PRO:CD	0.42	3.03	13	1
1:A:169:ILE:O	1:A:170:LYS:O	0.42	2.37	15	1
1:A:110:THR:O	1:A:112:LYS:HG2	0.42	2.14	17	1
1:A:113:TRP:O	1:A:269:GLY:CA	0.42	2.67	18	1
1:A:232:HIS:O	1:A:233:SER:HB3	0.42	2.14	1	1
1:A:112:LYS:HG2	1:A:265:LEU:CB	0.42	2.45	2	1
1:A:239:LEU:C	1:A:240:MET:HG3	0.42	2.39	2	1
1:A:253:MET:HG3	1:A:256:ASP:OD2	0.42	2.15	10	4
1:A:172:HIS:CE1	1:A:189:PHE:CE2	0.42	3.08	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:215:ASN:OD1	1:A:218:LEU:HB3	0.42	2.15	13	1
1:A:133:GLU:CA	1:A:133:GLU:OE1	0.42	2.67	15	1
1:A:129:MET:HE3	1:A:133:GLU:HB3	0.42	1.92	20	1
1:A:178:PHE:CD1	1:A:178:PHE:N	0.41	2.88	17	2
1:A:256:ASP:O	1:A:260:GLN:HG2	0.41	2.15	4	1
1:A:135:GLU:O	1:A:139:LYS:CB	0.41	2.68	5	2
1:A:180:GLY:O	1:A:205:GLU:HG2	0.41	2.15	15	2
1:A:228:LEU:C	1:A:266:TYR:HH	0.41	2.23	15	1
1:A:238:ALA:CA	1:A:255:PRO:CB	0.41	2.98	15	1
1:A:140:LYS:HE2	1:A:217:PHE:CG	0.41	2.50	20	1
1:A:149:THR:CB	1:A:263:GLN:HA	0.41	2.45	20	1
1:A:206:THR:C	1:A:207:TRP:CD1	0.41	2.98	3	1
1:A:122:ILE:HG21	1:A:138:PHE:CG	0.41	2.50	18	1
1:A:129:MET:HB3	1:A:133:GLU:HB3	0.41	1.92	19	1
1:A:148:VAL:O	1:A:263:GLN:CD	0.41	2.64	5	1
1:A:120:TYR:OH	1:A:155:ARG:HG2	0.41	2.15	7	1
1:A:122:ILE:HB	1:A:138:PHE:CD1	0.41	2.50	7	1
1:A:216:LEU:N	1:A:216:LEU:HD13	0.41	2.30	19	3
1:A:112:LYS:O	1:A:112:LYS:CG	0.41	2.68	9	1
1:A:226:HIS:O	1:A:228:LEU:N	0.41	2.53	12	1
1:A:195:TYR:HA	1:A:198:ASP:OD2	0.41	2.15	13	1
1:A:250:SER:O	1:A:251:HIS:CD2	0.41	2.73	13	1
1:A:140:LYS:HD3	1:A:217:PHE:CG	0.41	2.50	19	1
1:A:170:LYS:HA	1:A:177:PRO:CG	0.41	2.45	2	1
1:A:233:SER:C	1:A:240:MET:SD	0.41	3.04	2	1
1:A:236:PRO:HG2	1:A:257:ASP:OD2	0.41	2.15	15	2
1:A:262:ILE:CD1	1:A:262:ILE:C	0.41	2.93	3	2
1:A:117:ASN:HA	1:A:152:ASN:O	0.41	2.15	5	1
1:A:120:TYR:CD2	1:A:121:ARG:N	0.41	2.88	8	1
1:A:136:LYS:O	1:A:140:LYS:N	0.41	2.54	9	1
1:A:172:HIS:CE1	1:A:200:HIS:CE1	0.41	3.09	10	1
1:A:127:PRO:HG2	1:A:129:MET:SD	0.41	2.56	17	1
1:A:234:LYS:HD2	1:A:241:PHE:N	0.41	2.30	20	1
1:A:178:PHE:O	1:A:179:ASP:HB3	0.41	2.14	13	6
1:A:236:PRO:HG3	1:A:257:ASP:CG	0.41	2.41	17	1
1:A:242:PRO:HB3	5:A:2:3MP:CD2	0.41	2.45	17	1
1:A:149:THR:HG21	1:A:151:LEU:HD12	0.41	1.92	2	1
1:A:181:PRO:HA	1:A:205:GLU:CD	0.41	2.41	5	2
1:A:170:LYS:O	1:A:170:LYS:HD2	0.41	2.15	6	1
1:A:178:PHE:N	1:A:178:PHE:CD1	0.41	2.89	6	1
1:A:234:LYS:O	1:A:234:LYS:CE	0.41	2.69	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:LYS:HG2	1:A:266:TYR:CD2	0.41	2.50	11	1
1:A:218:LEU:HD13	1:A:247:THR:CA	0.41	2.44	14	1
1:A:187:HIS:C	1:A:187:HIS:ND1	0.41	2.77	15	1
1:A:129:MET:HE3	1:A:216:LEU:CD2	0.41	2.37	1	1
1:A:233:SER:CB	1:A:240:MET:SD	0.41	3.09	2	1
1:A:228:LEU:HG	1:A:266:TYR:CE2	0.41	2.51	3	1
4:A:1:HAV:HB	5:A:2:3MP:CD2	0.41	2.46	4	3
1:A:155:ARG:O	1:A:157:HIS:CE1	0.41	2.74	15	1
1:A:124:ASN:HD21	1:A:134:VAL:HG13	0.41	1.76	6	1
1:A:178:PHE:CD1	1:A:178:PHE:C	0.41	2.99	9	1
1:A:246:TYR:O	1:A:247:THR:C	0.41	2.64	10	1
1:A:247:THR:HG1	1:A:250:SER:N	0.41	2.13	10	1
1:A:148:VAL:HG12	1:A:259:VAL:HG13	0.41	1.92	12	3
1:A:242:PRO:O	6:A:3:MSB:HD2	0.41	2.16	15	1
1:A:185:LEU:O	1:A:201:PHE:HA	0.41	2.16	1	1
1:A:229:GLY:O	1:A:230:LEU:HB3	0.41	2.15	1	5
1:A:234:LYS:HE3	1:A:235:ASP:N	0.41	2.30	1	2
1:A:170:LYS:C	1:A:170:LYS:HD2	0.41	2.41	2	1
1:A:114:SER:O	1:A:115:LYS:CE	0.41	2.69	3	1
1:A:220:ALA:O	1:A:224:PHE:CD1	0.41	2.74	7	1
1:A:254:LEU:HB3	1:A:255:PRO:HD3	0.41	1.93	7	1
1:A:163:ILE:O	1:A:164:MET:HB3	0.41	2.15	12	3
1:A:185:LEU:HD23	1:A:185:LEU:O	0.41	2.16	8	1
1:A:185:LEU:HB3	6:A:3:MSB:S	0.41	2.56	14	2
1:A:163:ILE:HB	1:A:197:GLY:HA3	0.41	1.92	13	1
1:A:223:GLU:OE1	1:A:223:GLU:HA	0.41	2.15	13	1
1:A:188:ALA:CB	1:A:227:SER:HB3	0.41	2.38	15	1
1:A:237:GLY:C	1:A:255:PRO:HA	0.41	2.40	15	1
1:A:154:THR:CG2	1:A:156:LEU:CD2	0.41	2.98	16	1
1:A:149:THR:CB	1:A:262:ILE:HG12	0.41	2.46	18	1
1:A:163:ILE:HD13	1:A:164:MET:N	0.41	2.31	18	1
1:A:242:PRO:C	1:A:243:ILE:HG13	0.41	2.41	18	1
1:A:122:ILE:HD11	1:A:134:VAL:HG12	0.41	1.91	4	1
1:A:148:VAL:O	1:A:263:GLN:HG3	0.41	2.16	6	1
1:A:138:PHE:CZ	1:A:139:LYS:HD2	0.41	2.51	8	1
1:A:129:MET:HE1	1:A:216:LEU:HD13	0.41	1.92	10	1
1:A:140:LYS:CD	1:A:217:PHE:CD1	0.41	3.04	11	1
1:A:222:HIS:CB	6:A:3:MSB:HH3	0.41	2.46	13	1
1:A:120:TYR:O	1:A:155:ARG:CB	0.41	2.69	15	1
1:A:220:ALA:O	1:A:224:PHE:HB2	0.41	2.16	17	1
1:A:137:ALA:CB	1:A:216:LEU:HG	0.40	2.44	20	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:219:VAL:HG13	1:A:220:ALA:N	0.40	2.30	17	2
1:A:138:PHE:O	1:A:142:PHE:HB2	0.40	2.16	5	1
1:A:201:PHE:HB3	1:A:207:TRP:NE1	0.40	2.31	9	1
1:A:121:ARG:HB3	1:A:164:MET:CB	0.40	2.46	12	1
1:A:120:TYR:O	1:A:155:ARG:HG2	0.40	2.16	15	1
1:A:129:MET:HB3	1:A:133:GLU:HB2	0.40	1.93	15	1
1:A:164:MET:O	1:A:164:MET:HG3	0.40	2.16	17	1
1:A:232:HIS:O	1:A:233:SER:HB2	0.40	2.16	17	1
1:A:151:LEU:HD21	1:A:266:TYR:CB	0.40	2.45	18	1
1:A:234:LYS:HG3	1:A:241:PHE:HB3	0.40	1.93	19	1
1:A:154:THR:HG22	1:A:156:LEU:CD1	0.40	2.46	20	1
1:A:129:MET:SD	1:A:216:LEU:CD2	0.40	3.02	2	1
1:A:256:ASP:O	1:A:257:ASP:C	0.40	2.62	4	1
1:A:112:LYS:CB	1:A:265:LEU:HD12	0.40	2.42	13	1
1:A:230:LEU:HD12	1:A:232:HIS:H	0.40	1.75	16	1
1:A:121:ARG:NH1	1:A:121:ARG:HG2	0.40	2.32	17	1
1:A:171:GLU:O	1:A:171:GLU:HG2	0.40	2.15	20	1
1:A:233:SER:HB3	1:A:240:MET:SD	0.40	2.57	2	1
1:A:164:MET:CE	1:A:198:ASP:OD1	0.40	2.66	6	1
5:A:2:3MP:HD1	6:A:3:MSB:OB1	0.40	2.17	6	1
1:A:119:THR:CB	1:A:161:ALA:HA	0.40	2.46	12	1
1:A:216:LEU:CA	1:A:219:VAL:HG13	0.40	2.34	12	1
1:A:180:GLY:CA	1:A:204:ASP:OD1	0.40	2.70	14	1
1:A:142:PHE:CZ	1:A:224:PHE:CE2	0.40	3.09	1	1
1:A:239:LEU:C	1:A:240:MET:SD	0.40	3.04	3	1
1:A:120:TYR:O	1:A:155:ARG:HA	0.40	2.17	5	1
1:A:186:ALA:C	1:A:223:GLU:OE1	0.40	2.65	7	2
1:A:170:LYS:HD2	1:A:177:PRO:CD	0.40	2.46	7	1
1:A:215:ASN:O	1:A:215:ASN:CG	0.40	2.64	10	1
1:A:145:TRP:CZ3	1:A:262:ILE:HG13	0.40	2.50	11	1
1:A:195:TYR:O	1:A:198:ASP:HB2	0.40	2.17	11	1
1:A:234:LYS:O	1:A:234:LYS:CG	0.40	2.69	11	1
1:A:270:ASP:OD1	1:A:270:ASP:C	0.40	2.63	12	1
1:A:110:THR:O	1:A:112:LYS:HE2	0.40	2.16	19	1
1:A:163:ILE:HB	1:A:228:LEU:CD2	0.40	2.46	5	1
1:A:151:LEU:HD21	1:A:266:TYR:HD1	0.40	1.76	7	1
1:A:249:LYS:HD2	1:A:249:LYS:O	0.40	2.17	18	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	161/171 (94%)	98±3 (61±2%)	42±4 (26±2%)	21±2 (13±1%)	0	6
All	All	3220/3420 (94%)	1950 (61%)	850 (26%)	420 (13%)	0	6

All 45 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	124	ASN	20
1	A	127	PRO	20
1	A	170	LYS	20
1	A	179	ASP	20
1	A	184	LEU	20
1	A	202	ASP	20
1	A	245	THR	20
1	A	259	VAL	20
1	A	177	PRO	19
1	A	267	GLY	19
1	A	233	SER	18
1	A	236	PRO	18
1	A	203	ASP	15
1	A	182	SER	14
1	A	247	THR	14
1	A	123	VAL	13
1	A	183	GLY	13
1	A	180	GLY	11
1	A	193	PRO	11
1	A	111	LEU	9
1	A	251	HIS	9
1	A	241	PHE	8
1	A	159	GLY	7
1	A	253	MET	6
1	A	174	ASP	6
1	A	211	SER	5
1	A	229	GLY	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	213	GLY	4
1	A	237	GLY	4
1	A	219	VAL	4
1	A	115	LYS	3
1	A	175	PHE	3
1	A	173	GLY	3
1	A	110	THR	2
1	A	199	ALA	2
1	A	125	TYR	2
1	A	130	THR	2
1	A	231	ASP	2
1	A	113	TRP	2
1	A	249	LYS	2
1	A	197	GLY	1
1	A	157	HIS	1
1	A	227	SER	1
1	A	269	GLY	1
1	A	230	LEU	1

6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	136/146 (93%)	88±4 (65±3%)	48±4 (35±3%)	1	9
All	All	2720/2920 (93%)	1759 (65%)	961 (35%)	1	9

All 99 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	119	THR	20
1	A	138	PHE	20
1	A	208	THR	20
1	A	219	VAL	20
1	A	241	PHE	20
1	A	258	ASP	20
1	A	262	ILE	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	234	LYS	19
1	A	246	TYR	19
1	A	126	THR	18
1	A	140	LYS	18
1	A	156	LEU	18
1	A	195	TYR	18
1	A	216	LEU	18
1	A	227	SER	18
1	A	239	LEU	18
1	A	245	THR	17
1	A	130	THR	16
1	A	232	HIS	16
1	A	235	ASP	16
1	A	139	LYS	15
1	A	155	ARG	15
1	A	254	LEU	15
1	A	118	LEU	15
1	A	163	ILE	14
1	A	266	TYR	14
1	A	147	ASP	14
1	A	249	LYS	14
1	A	142	PHE	13
1	A	230	LEU	13
1	A	257	ASP	13
1	A	111	LEU	13
1	A	170	LYS	13
1	A	228	LEU	13
1	A	129	MET	12
1	A	152	ASN	12
1	A	187	HIS	12
1	A	270	ASP	12
1	A	250	SER	12
1	A	110	THR	11
1	A	112	LYS	11
1	A	121	ARG	11
1	A	212	LYS	11
1	A	253	MET	11
1	A	151	LEU	10
1	A	169	ILE	10
1	A	211	SER	10
1	A	231	ASP	10
1	A	135	GLU	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	252	PHE	10
1	A	132	SER	10
1	A	143	LYS	9
1	A	162	ASP	9
1	A	122	ILE	9
1	A	171	GLU	8
1	A	226	HIS	7
1	A	165	ILE	7
1	A	202	ASP	7
1	A	206	THR	7
1	A	251	HIS	7
1	A	182	SER	7
1	A	198	ASP	7
1	A	131	HIS	7
1	A	158	ASP	7
1	A	184	LEU	7
1	A	247	THR	6
1	A	233	SER	6
1	A	133	GLU	5
1	A	210	SER	5
1	A	263	GLN	5
1	A	189	PHE	5
1	A	204	ASP	5
1	A	240	MET	5
1	A	218	LEU	4
1	A	164	MET	4
1	A	194	ASN	4
1	A	209	SER	4
1	A	124	ASN	4
1	A	136	LYS	4
1	A	175	PHE	4
1	A	265	LEU	3
1	A	115	LYS	3
1	A	146	SER	3
1	A	260	GLN	3
1	A	123	VAL	3
1	A	264	SER	3
1	A	116	MET	2
1	A	185	LEU	2
1	A	223	GLU	2
1	A	205	GLU	2
1	A	215	ASN	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	174	ASP	2
1	A	200	HIS	2
1	A	167	PHE	1
1	A	203	ASP	1
1	A	179	ASP	1
1	A	160	ILE	1
1	A	128	ASP	1
1	A	243	ILE	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](#)

Of 7 ligands modelled in this entry, 4 are monoatomic - leaving 3 for Mogul analysis.

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
5	3MP	A	2	4	7,7,7	0.43±0.01	0±0 (0±0%)
6	MSB	A	3	4	9,11,11	0.96±0.01	0±0 (0±0%)
4	HAV	A	1	6,5	6,8,8	0.53±0.03	0±0 (0±0%)

In the following table, the Counts columns list the number of angles for which Mogul statistics could be retrieved, the number of angles that are observed in the model and the number of angles

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond angles		
					Counts	RMSZ	#Z>2
5	3MP	A	2	4	8,8,8	0.53±0.01	0±0 (0±0%)
6	MSB	A	3	4	13,14,14	0.82±0.01	1±0 (5±3%)
4	HAV	A	1	6,5	5,10,10	0.71±0.06	0±0 (0±0%)

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
5	3MP	A	2	4	-	-	0±0,1,1,1
4	HAV	A	1	6,5	-	0±0,10,10,10	-
6	MSB	A	3	4	-	0±0,6,6,6	0±0,1,1,1

There are no bond-length outliers.

All unique angle outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
6	A	3	MSB	OB1-S-CG	2.10	109.27	104.55	11	14

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided