



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 8, 2026 – 05:43 AM UTC

PDB ID : 2KBX / pdb_00002kbx
Title : Solution structure of ILK-PINCH complex
Authors : Qin, J.
Deposited on : 2008-12-10

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
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

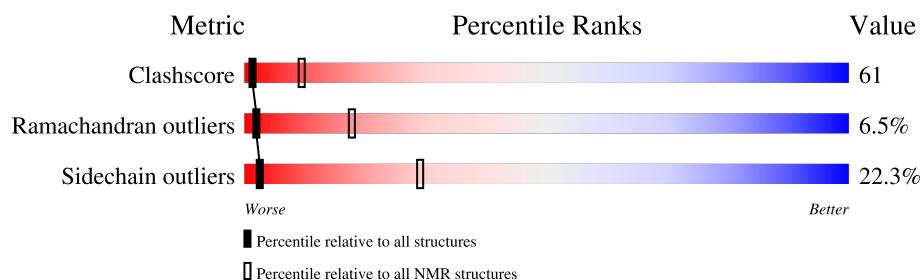
1 Overall quality at a glance

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	B	70	

2 Ensemble composition and analysis ⓘ

This entry contains 20 models. Model 11 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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:2-A:160, B:7-B:66 (219)	1.47	11

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

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

The models can be grouped into 2 clusters and 1 single-model cluster was found.

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

3 Entry composition [i](#)

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 3735 atoms, of which 1820 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Integrin-linked protein kinase.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	171	Total	C	H	N	O	S	0
			2675	843	1317	253	252	10	

- Molecule 2 is a protein called LIM and senescent cell antigen-like-containing domain protein 1.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
2	B	70	Total	C	H	N	O	S	0
			1058	352	503	91	103	9	

- Molecule 3 is ZINC ION (CCD ID: ZN) (formula: Zn).

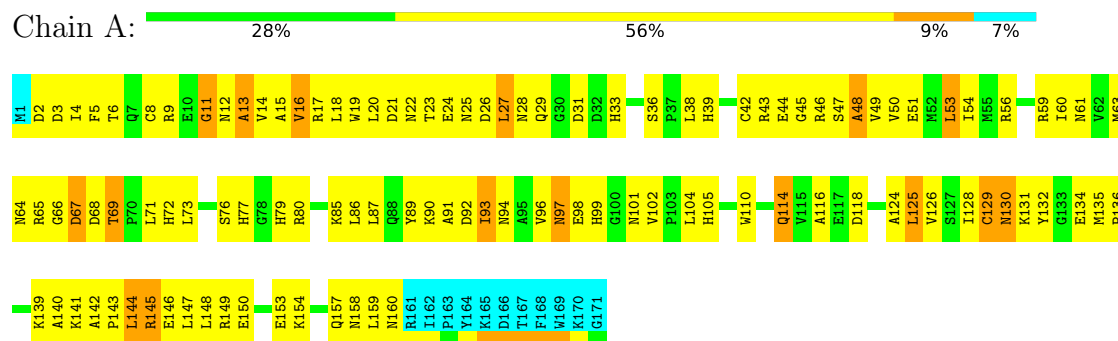
Mol	Chain	Residues	Atoms	
3	B	2	Total	Zn
			2	2

4 Residue-property plots

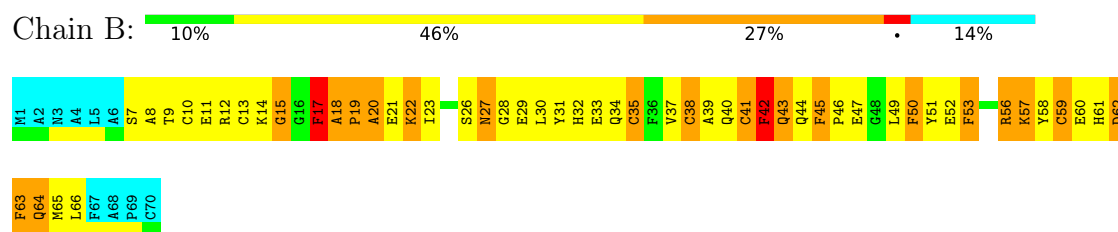
4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: Integrin-linked protein kinase



- Molecule 2: LIM and senescent cell antigen-like-containing domain protein 1



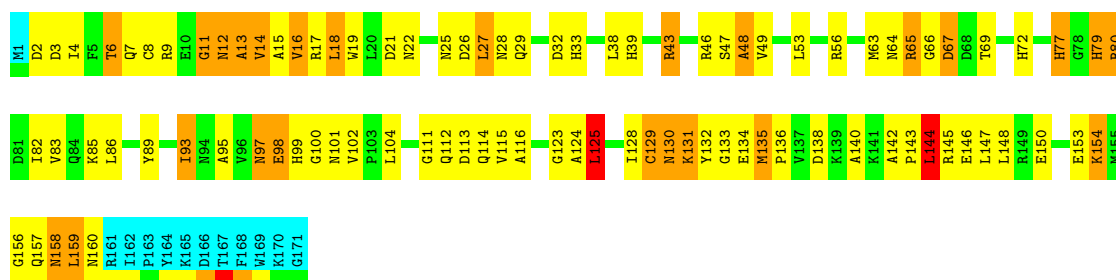
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

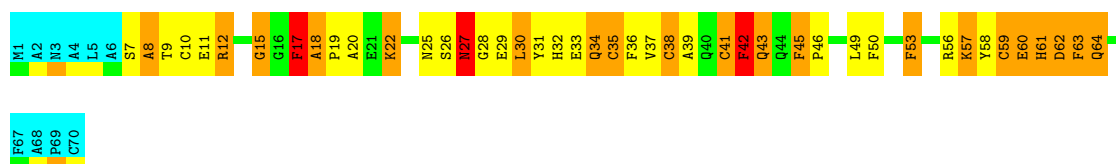
- Molecule 1: Integrin-linked protein kinase





- Molecule 2: LIM and senescent cell antigen-like-containing domain protein 1

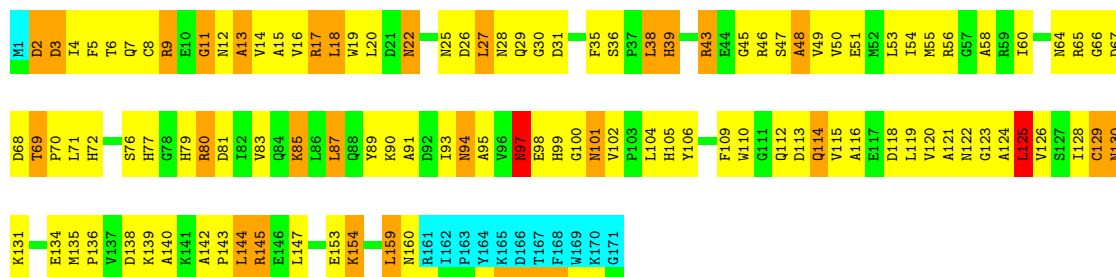
Chain B: 23% 30% 29% • 14%



4.2.2 Score per residue for model 2

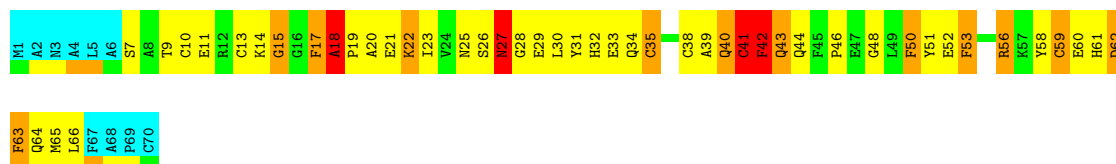
- Molecule 1: Integrin-linked protein kinase

Chain A: 28% 49% 15% • 7%



- Molecule 2: LIM and senescent cell antigen-like-containing domain protein 1

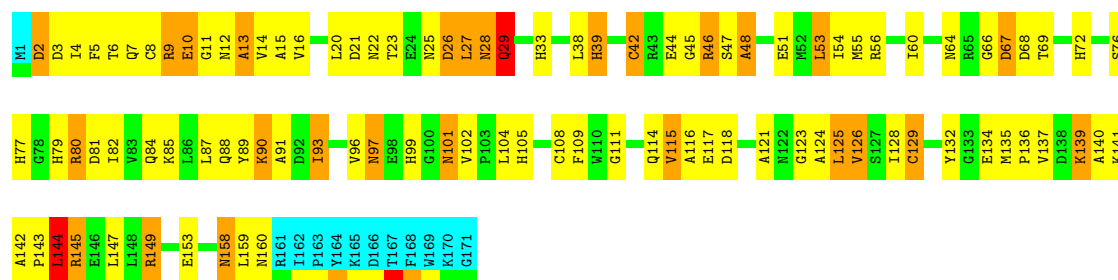
Chain B: 17% 46% 17% 6% 14%



4.2.3 Score per residue for model 3

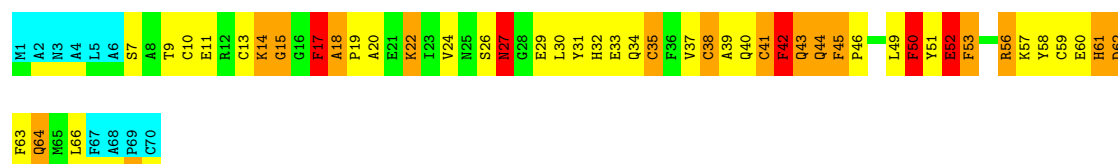
- Molecule 1: Integrin-linked protein kinase

Chain A: 35% 42% 15% • 7%



- Molecule 2: LIM and senescent cell antigen-like-containing domain protein 1

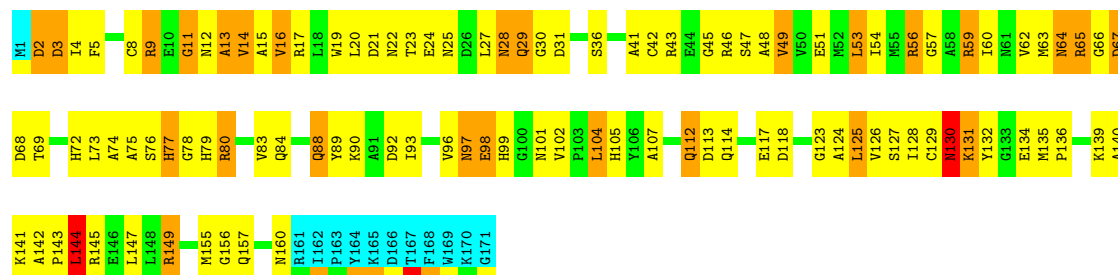
Chain B: 19% 39% 21% 7% 14%



4.2.4 Score per residue for model 4

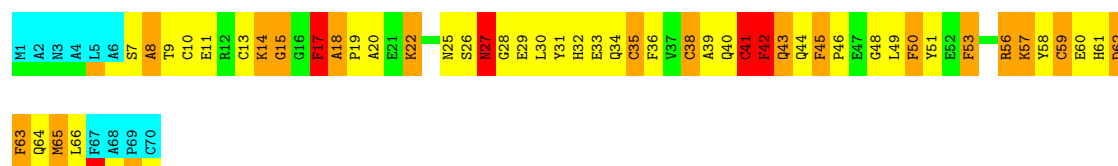
- Molecule 1: Integrin-linked protein kinase

Chain A: 32% 45% 15% 7%



- Molecule 2: LIM and senescent cell antigen-like-containing domain protein 1

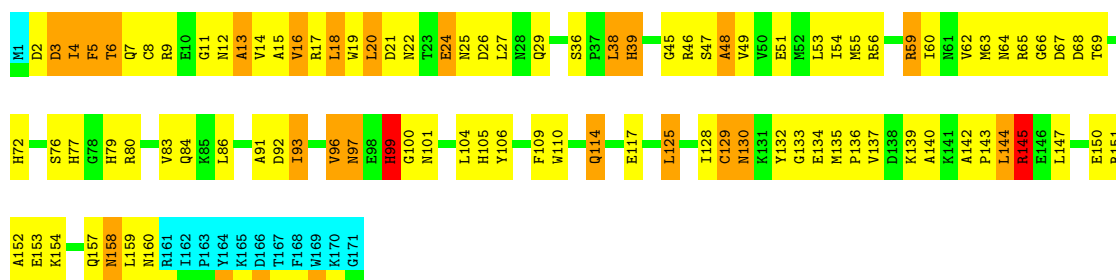
Chain B: 14% 41% 24% 6% 14%



4.2.5 Score per residue for model 5

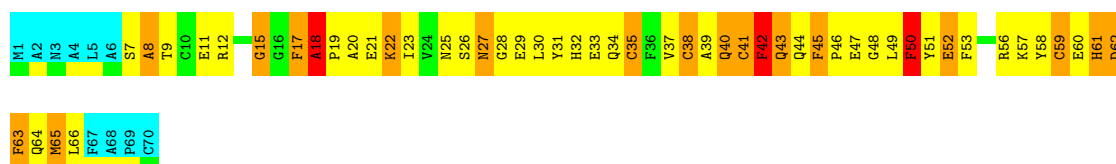
- Molecule 1: Integrin-linked protein kinase

Chain A: 36% 43% 13% 7%



- Molecule 2: LIM and senescent cell antigen-like-containing domain protein 1

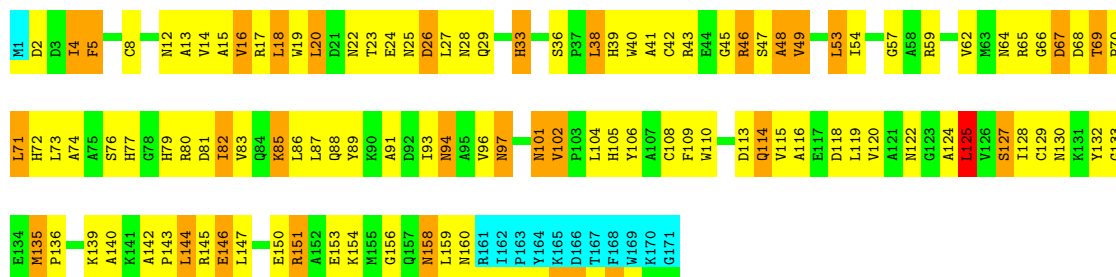
Chain B: 11% 46% 24% • 14%



4.2.6 Score per residue for model 6

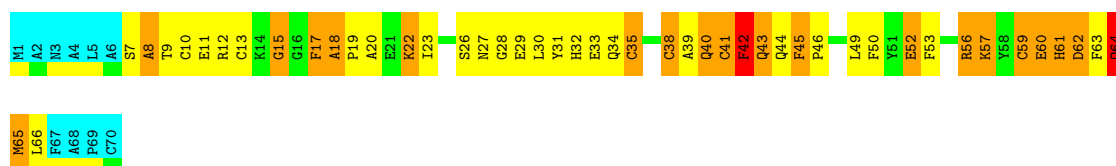
- Molecule 1: Integrin-linked protein kinase

Chain A: 29% 47% 16% • 7%



- Molecule 2: LIM and senescent cell antigen-like-containing domain protein 1

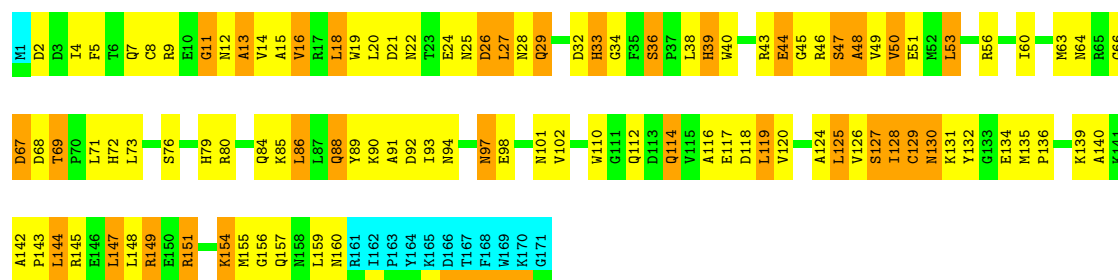
Chain B: 19% 37% 27% • 14%



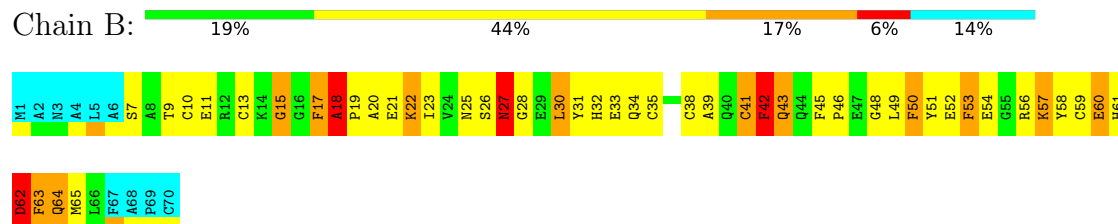
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Integrin-linked protein kinase

Chain A: 32% 42% 19% 7%

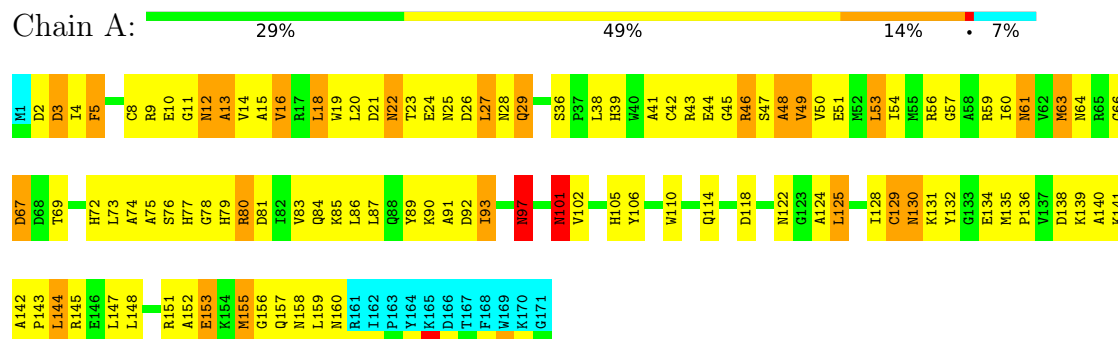


- Molecule 2: LIM and senescent cell antigen-like-containing domain protein 1

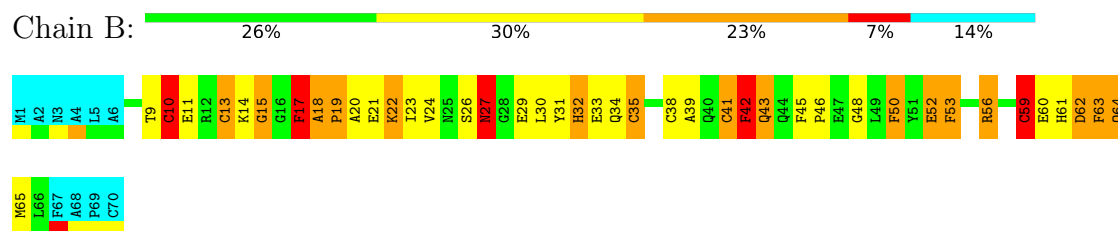


4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Integrin-linked protein kinase



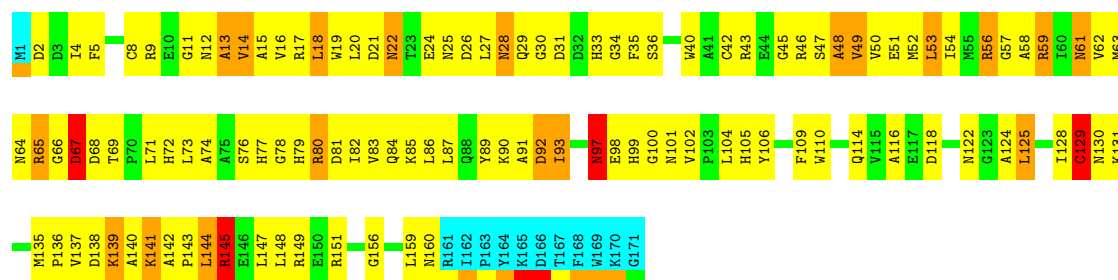
- Molecule 2: LIM and senescent cell antigen-like-containing domain protein 1



4.2.9 Score per residue for model 9

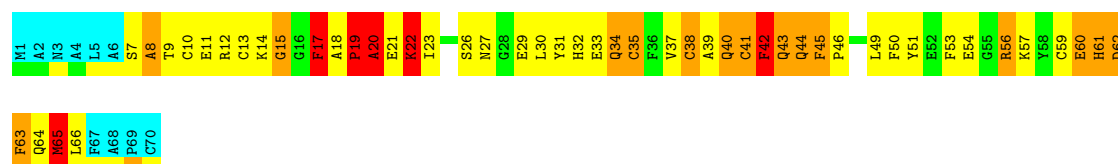
- Molecule 1: Integrin-linked protein kinase





- Molecule 2: LIM and senescent cell antigen-like-containing domain protein 1

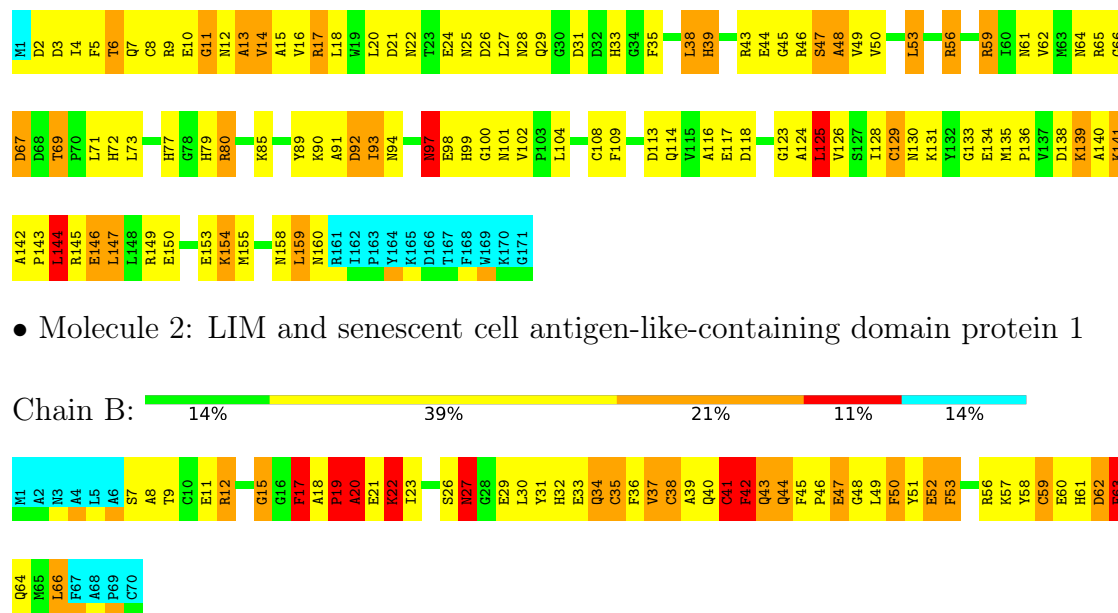
Chain B: 14% 41% 21% 9% 14%



4.2.10 Score per residue for model 10

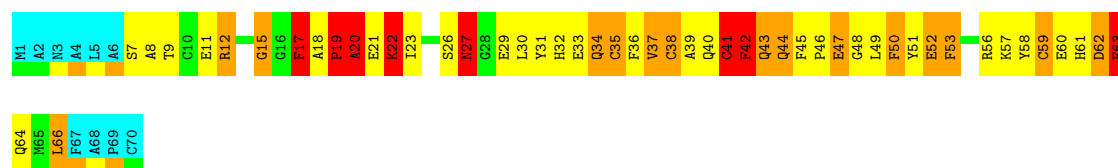
- Molecule 1: Integrin-linked protein kinase

Chain A: 31% 46% 14% 7%



- Molecule 2: LIM and senescent cell antigen-like-containing domain protein 1

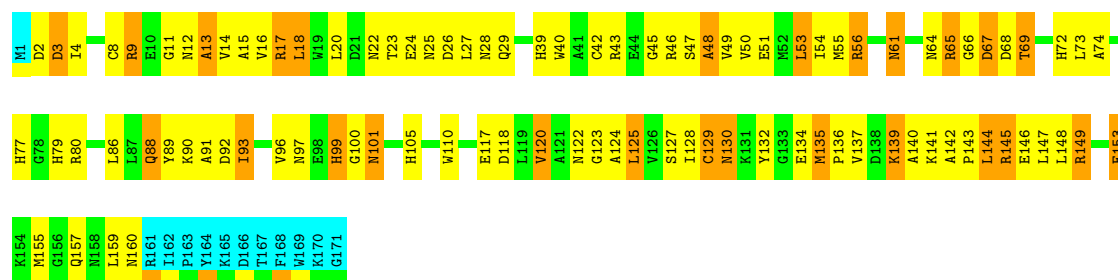
Chain B: 14% 39% 21% 11% 14%



4.2.11 Score per residue for model 11 (medoid)

- Molecule 1: Integrin-linked protein kinase

Chain A: 37% 41% 15% 7%



- Molecule 2: LIM and senescent cell antigen-like-containing domain protein 1

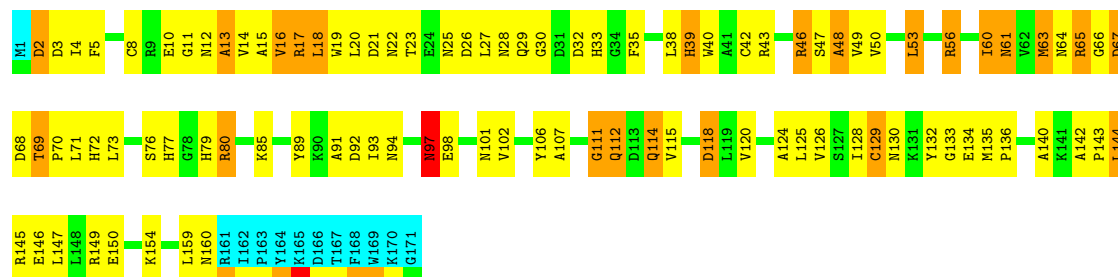
Chain B: 11% 41% 26% 7% 14%



4.2.12 Score per residue for model 12

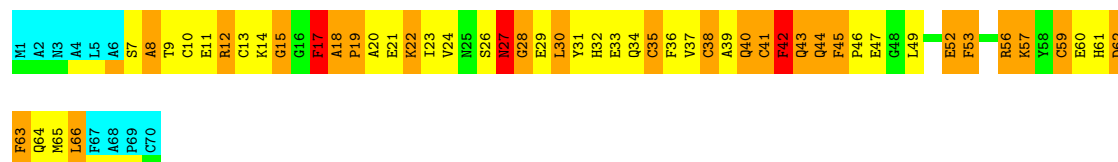
- Molecule 1: Integrin-linked protein kinase

Chain A: 36% 43% 13% 7%



- Molecule 2: LIM and senescent cell antigen-like-containing domain protein 1

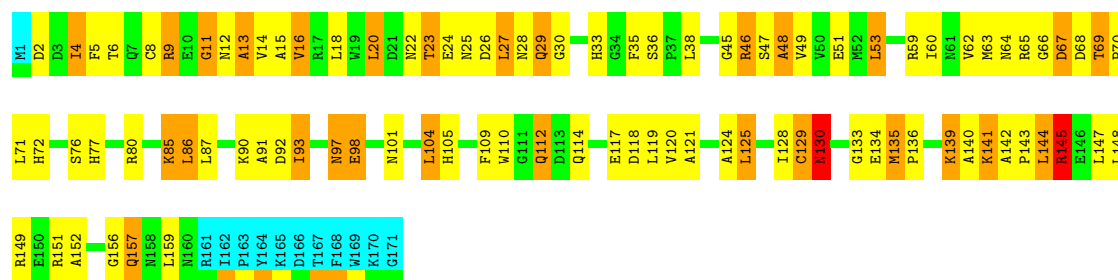
Chain B: 11% 37% 33% 14%



4.2.13 Score per residue for model 13

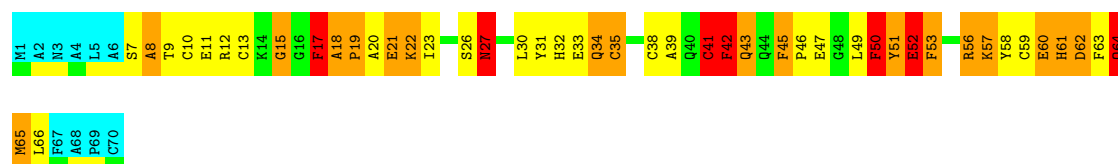
- Molecule 1: Integrin-linked protein kinase

Chain A: 37% 38% 16% 7%



- Molecule 2: LIM and senescent cell antigen-like-containing domain protein 1

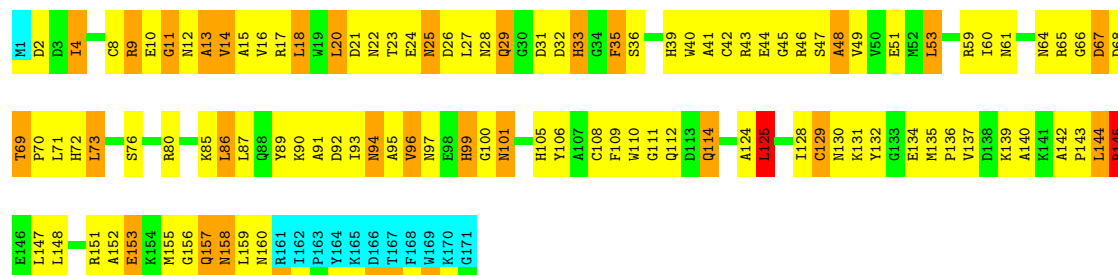
Chain B: 19% 31% 26% 10% 14%



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Integrin-linked protein kinase

Chain A: 30% 46% 16% 7%



- Molecule 2: LIM and senescent cell antigen-like-containing domain protein 1

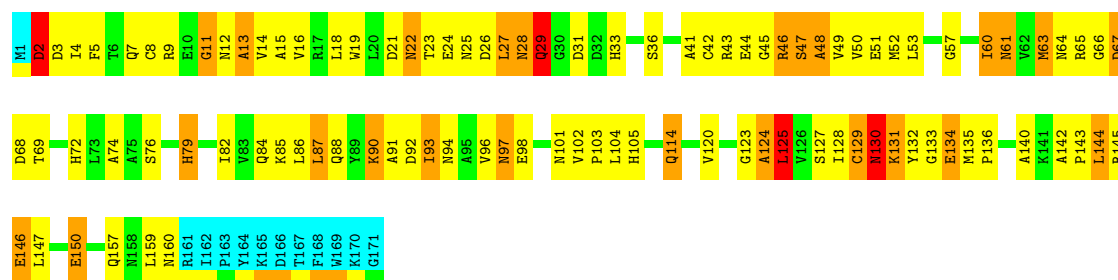
Chain B: 14% 39% 24% 9% 14%



4.2.15 Score per residue for model 15

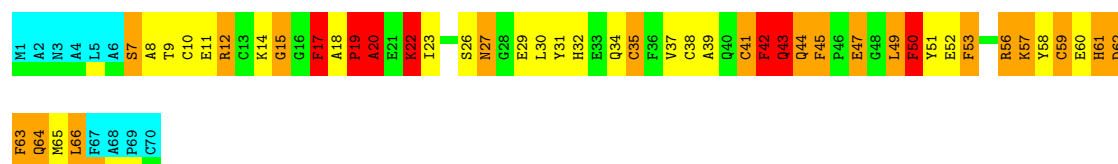
- Molecule 1: Integrin-linked protein kinase

Chain A: 35% 41% 15% 7%



- Molecule 2: LIM and senescent cell antigen-like-containing domain protein 1

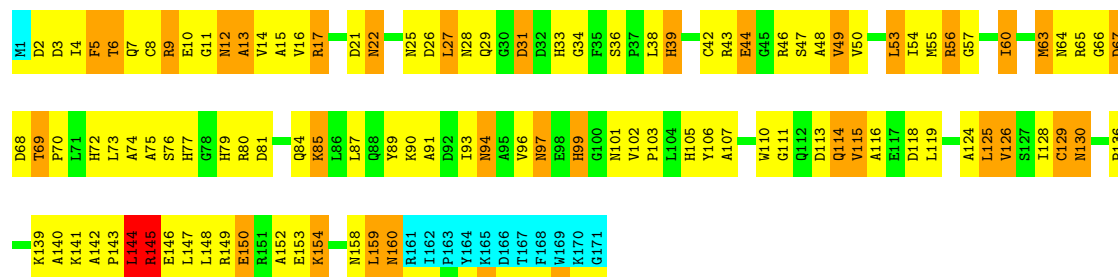
Chain B: 19% 30% 27% 10% 14%



4.2.16 Score per residue for model 16

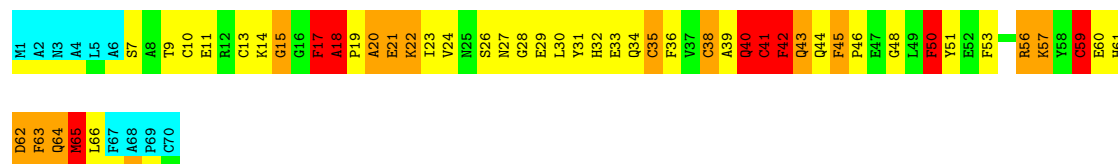
- Molecule 1: Integrin-linked protein kinase

Chain A: 29% 44% 19% 7%



- Molecule 2: LIM and senescent cell antigen-like-containing domain protein 1

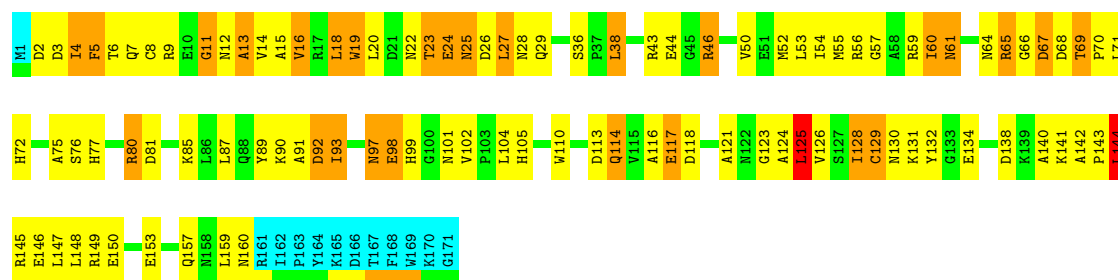
Chain B: 16% 40% 19% 11% 14%



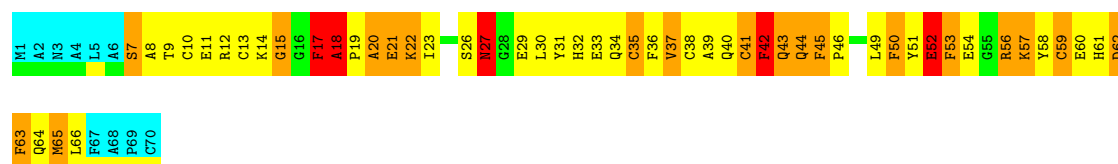
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Integrin-linked protein kinase

Chain A: 34% 42% 16% 7%

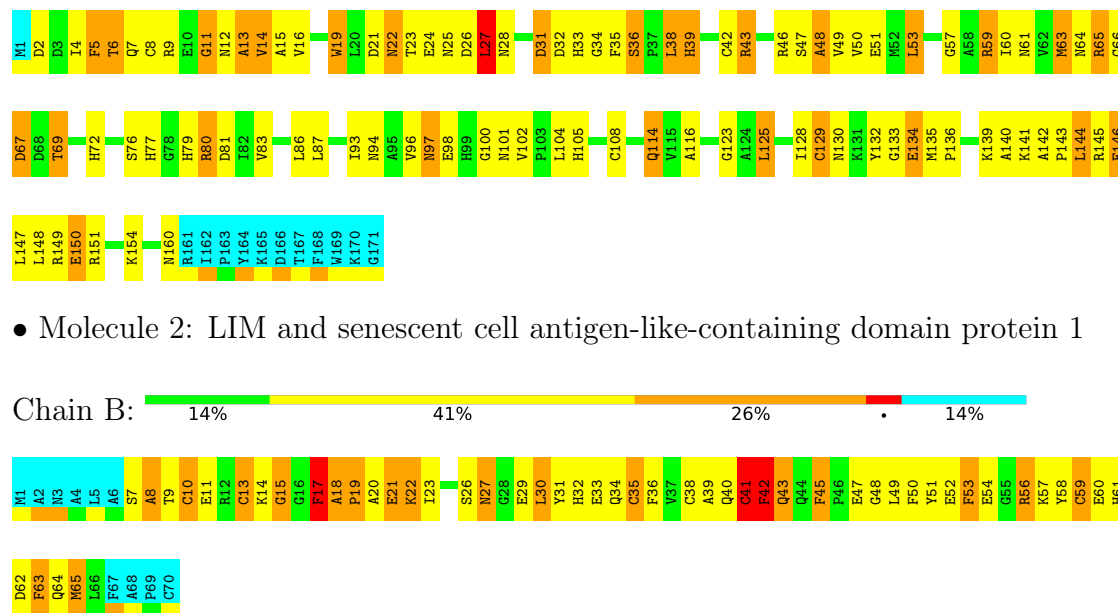


- Molecule 2: LIM and senescent cell antigen-like-containing domain protein 1

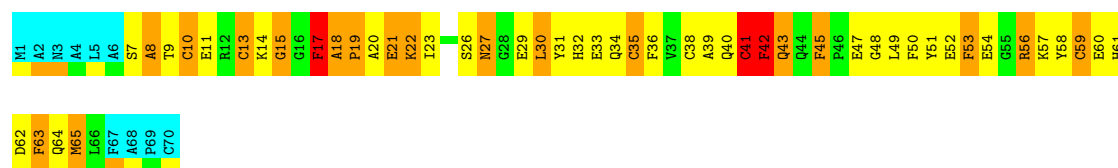


4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Integrin-linked protein kinase



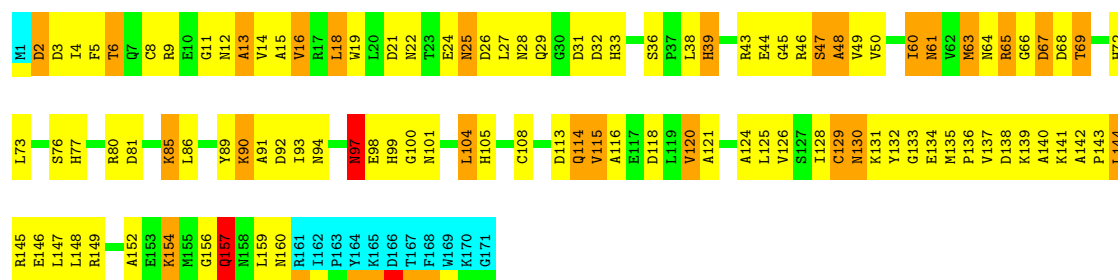
- Molecule 2: LIM and senescent cell antigen-like-containing domain protein 1



4.2.19 Score per residue for model 19

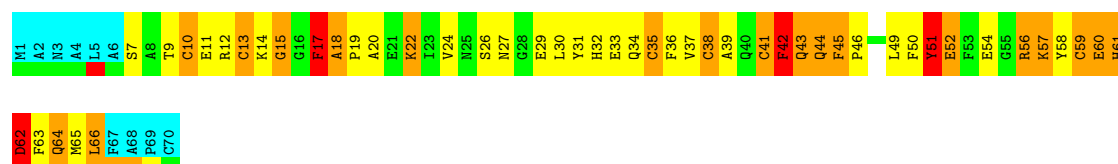
- Molecule 1: Integrin-linked protein kinase





- Molecule 2: LIM and senescent cell antigen-like-containing domain protein 1

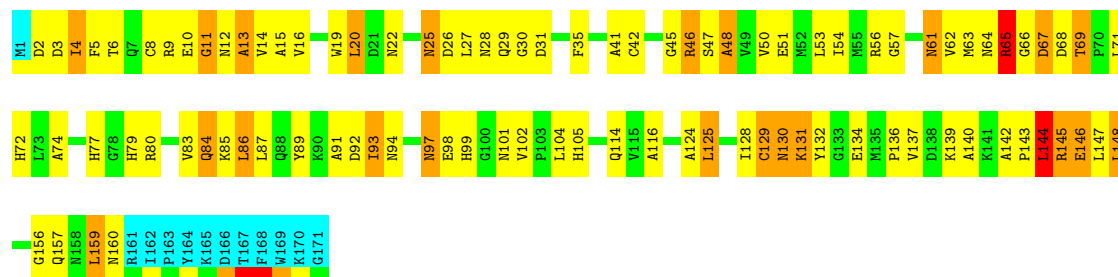
Chain B: 16% 37% 27% 6% 14%



4.2.20 Score per residue for model 20

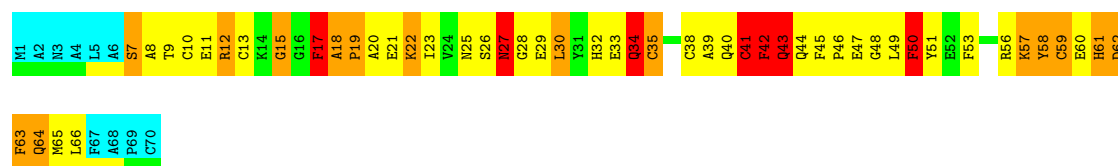
- Molecule 1: Integrin-linked protein kinase

Chain A: 38% 41% 13% 7%



- Molecule 2: LIM and senescent cell antigen-like-containing domain protein 1

Chain B: 13% 41% 21% 10% 14%



5 Refinement protocol and experimental data overview ⓘ

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

Of the 100 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

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

No chemical shift data was provided.

6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: 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	1.54±0.01	0±0/1273 (0.0± 0.0%)	1.29±0.01	1±1/1724 (0.1± 0.1%)
2	B	1.97±0.04	12±1/500 (2.3± 0.2%)	2.02±0.06	16±1/671 (2.4± 0.2%)
All	All	1.67	232/35460 (0.7%)	1.53	347/47900 (0.7%)

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
2	B	0.0±0.0	0.8±0.5
All	All	0	17

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
2	B	42	PHE	C-N	-11.83	1.16	1.33	20	20
2	B	42	PHE	N-CA	9.28	1.58	1.46	16	20
2	B	43	GLN	C-N	-8.82	1.22	1.33	10	20
2	B	19	PRO	N-CD	-8.78	1.35	1.47	8	20
2	B	19	PRO	C-N	-8.46	1.22	1.33	8	20
2	B	19	PRO	N-CA	-7.73	1.41	1.47	7	20
2	B	42	PHE	CA-C	-7.52	1.42	1.52	17	20
2	B	22	LYS	C-N	-7.19	1.23	1.33	5	14
2	B	15	GLY	C-N	-6.61	1.23	1.33	20	20
2	B	17	PHE	C-N	-6.56	1.23	1.33	10	16
2	B	18	ALA	CA-C	-6.22	1.44	1.52	9	4
2	B	18	ALA	N-CA	6.17	1.53	1.46	15	18
2	B	60	GLU	C-N	-5.78	1.26	1.33	7	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
2	B	64	GLN	C-N	-5.69	1.26	1.33	3	2
2	B	52	GLU	N-CA	5.52	1.53	1.46	3	4
2	B	10	CYS	C-N	-5.41	1.26	1.33	8	1
2	B	40	GLN	N-CA	5.32	1.53	1.46	16	1
2	B	62	ASP	C-N	-5.13	1.27	1.33	19	3
2	B	58	TYR	N-CA	5.10	1.52	1.45	20	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
2	B	19	PRO	N-CA-C	15.90	139.36	113.12	16	20
2	B	19	PRO	N-CA-CB	-14.93	92.81	102.81	16	20
2	B	19	PRO	CA-C-O	10.67	129.59	121.38	6	16
2	B	18	ALA	CA-C-N	-10.64	110.90	121.65	12	20
2	B	18	ALA	C-N-CA	-10.64	110.90	121.65	12	20
2	B	50	PHE	CA-CB-CG	-10.31	103.49	113.80	2	9
2	B	43	GLN	N-CA-C	-10.14	93.84	110.17	9	20
2	B	20	ALA	N-CA-C	-9.68	99.30	112.94	8	20
2	B	19	PRO	CA-N-CD	8.78	124.28	112.00	12	20
2	B	35	CYS	N-CA-C	-8.41	103.16	113.50	9	19
2	B	45	PHE	CA-CB-CG	-7.37	106.43	113.80	1	10
2	B	59	CYS	N-CA-C	-7.35	101.37	110.41	19	16
2	B	63	PHE	N-CA-C	-7.22	103.49	111.36	12	6
2	B	53	PHE	CA-CB-CG	-7.20	106.60	113.80	12	13
2	B	18	ALA	N-CA-C	-7.17	94.18	109.01	10	20
2	B	19	PRO	CB-CA-C	-7.14	100.75	112.10	11	20
2	B	63	PHE	CA-CB-CG	-6.83	106.97	113.80	7	1
1	A	27	LEU	N-CA-C	-6.58	105.07	113.23	7	4
2	B	65	MET	N-CA-C	-6.49	104.13	111.14	20	7
1	A	3	ASP	CB-CA-C	-6.18	109.44	116.54	1	5
2	B	64	GLN	N-CA-C	-6.11	105.54	112.87	6	3
1	A	11	GLY	N-CA-C	-6.03	106.93	115.43	8	13
2	B	50	PHE	N-CA-CB	-5.89	101.43	111.69	8	6
2	B	15	GLY	N-CA-C	-5.88	104.37	112.25	18	9
2	B	41	CYS	N-CA-C	-5.86	105.98	113.02	16	7
2	B	66	LEU	N-CA-C	-5.68	105.16	111.36	5	1
1	A	99	HIS	N-CA-C	-5.37	106.32	112.92	5	1
2	B	36	PHE	CA-CB-CG	-5.31	108.49	113.80	4	6
2	B	40	GLN	N-CA-C	-5.24	106.57	113.12	9	3
2	B	21	GLU	N-CA-C	-5.17	99.78	110.80	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	9	ARG	N-CA-C	-5.17	107.04	113.19	3	1
2	B	18	ALA	CA-C-O	-5.16	115.50	119.99	14	1
2	B	51	TYR	CA-CB-CG	-5.15	104.62	113.90	19	1
2	B	34	GLN	N-CA-C	-5.13	107.02	113.28	14	2
2	B	14	LYS	N-CA-C	-5.12	107.39	113.38	2	3
1	A	77	HIS	CA-CB-CG	-5.08	108.72	113.80	1	1
2	B	32	HIS	N-CA-C	-5.02	103.42	110.50	8	1

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
2	B	18	ALA	Mainchain	16
2	B	51	TYR	Sidechain	1

6.2 Too-close contacts [i](#)

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	1249	1207	1207	134±11
2	B	486	434	434	74±7
All	All	34740	32820	32820	4107

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 61.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:38:CYS:O	2:B:42:PHE:N	1.12	1.79	1	20
2:B:41:CYS:C	2:B:43:GLN:H	1.01	1.61	9	20
2:B:41:CYS:O	2:B:43:GLN:N	1.00	1.94	14	20
2:B:38:CYS:O	2:B:42:PHE:CA	0.97	2.11	19	20
1:A:4:ILE:HD12	1:A:5:PHE:N	0.91	1.80	19	1
2:B:10:CYS:SG	2:B:15:GLY:N	0.88	2.46	18	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:130:ASN:HD22	1:A:130:ASN:H	0.86	1.13	4	2
2:B:38:CYS:SG	2:B:59:CYS:N	0.84	2.51	14	20
1:A:86:LEU:O	1:A:86:LEU:HD22	0.84	1.72	13	3
1:A:86:LEU:HD13	1:A:87:LEU:N	0.82	1.88	14	3
2:B:30:LEU:N	2:B:30:LEU:HD22	0.79	1.92	20	17
1:A:119:LEU:N	1:A:119:LEU:HD13	0.78	1.92	7	1
1:A:145:ARG:NH2	1:A:148:LEU:HD11	0.78	1.94	20	1
1:A:93:ILE:O	1:A:93:ILE:HD12	0.78	1.78	9	1
1:A:90:LYS:HZ3	1:A:92:ASP:CG	0.78	1.86	15	1
2:B:30:LEU:HD22	2:B:30:LEU:N	0.77	1.94	1	3
1:A:152:ALA:O	1:A:155:MET:HE2	0.77	1.77	8	1
1:A:97:ASN:H	1:A:97:ASN:ND2	0.77	1.77	18	5
1:A:99:HIS:ND1	1:A:99:HIS:N	0.76	2.33	5	1
1:A:145:ARG:O	1:A:147:LEU:N	0.75	2.18	6	10
2:B:50:PHE:CD1	2:B:50:PHE:C	0.74	2.65	5	10
2:B:53:PHE:CE1	2:B:63:PHE:CE1	0.74	2.75	3	11
1:A:130:ASN:H	1:A:130:ASN:ND2	0.74	1.75	13	2
2:B:38:CYS:HB2	2:B:41:CYS:C	0.73	2.08	7	14
1:A:105:HIS:CE1	1:A:130:ASN:HD21	0.73	2.01	15	2
2:B:57:LYS:H	2:B:57:LYS:HZ2	0.73	1.23	12	1
2:B:39:ALA:HB2	2:B:57:LYS:NZ	0.73	1.98	14	1
1:A:97:ASN:HD22	1:A:97:ASN:H	0.73	1.27	17	6
1:A:124:ALA:C	1:A:125:LEU:HD23	0.73	2.08	16	2
1:A:33:HIS:CE1	1:A:65:ARG:N	0.73	2.57	14	1
2:B:10:CYS:SG	2:B:14:LYS:N	0.72	2.61	19	3
1:A:60:ILE:HD12	1:A:60:ILE:N	0.72	1.99	5	4
2:B:32:HIS:C	2:B:34:GLN:H	0.72	1.93	1	20
2:B:59:CYS:SG	2:B:62:ASP:OD1	0.72	2.48	12	14
2:B:50:PHE:C	2:B:50:PHE:CD1	0.72	2.68	3	1
2:B:32:HIS:C	2:B:34:GLN:N	0.72	2.46	2	20
2:B:58:TYR:CD2	2:B:63:PHE:CD1	0.72	2.77	7	1
2:B:53:PHE:CD2	2:B:63:PHE:CD1	0.71	2.78	1	2
1:A:86:LEU:C	1:A:86:LEU:HD13	0.71	2.09	20	2
1:A:20:LEU:HD13	1:A:20:LEU:O	0.70	1.85	8	2
1:A:27:LEU:C	1:A:27:LEU:HD22	0.70	2.11	18	1
1:A:20:LEU:HD13	1:A:20:LEU:C	0.70	2.11	5	2
1:A:72:HIS:NE2	1:A:97:ASN:ND2	0.70	2.40	4	3
1:A:60:ILE:HD12	1:A:60:ILE:H	0.70	1.46	19	2
2:B:53:PHE:CD1	2:B:63:PHE:CD1	0.70	2.80	13	6
1:A:97:ASN:HD21	1:A:101:ASN:H	0.69	1.27	3	4
1:A:105:HIS:NE2	1:A:130:ASN:ND2	0.69	2.41	4	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:97:ASN:H	1:A:101:ASN:ND2	0.69	1.85	2	2
2:B:41:CYS:C	2:B:43:GLN:N	0.69	2.42	16	20
2:B:53:PHE:CE2	2:B:63:PHE:CE1	0.69	2.80	8	1
2:B:38:CYS:O	2:B:42:PHE:HA	0.69	1.88	2	20
2:B:57:LYS:HZ2	2:B:57:LYS:H	0.69	1.28	1	1
1:A:18:LEU:HD13	1:A:18:LEU:N	0.69	2.03	17	1
1:A:71:LEU:HD12	1:A:86:LEU:HD11	0.68	1.63	7	1
1:A:98:GLU:CD	1:A:98:GLU:H	0.68	1.97	17	2
1:A:105:HIS:CE1	1:A:130:ASN:ND2	0.68	2.62	15	5
1:A:112:GLN:H	1:A:112:GLN:NE2	0.68	1.87	4	2
1:A:38:LEU:C	1:A:38:LEU:HD13	0.67	2.15	8	2
1:A:98:GLU:H	1:A:98:GLU:CD	0.67	1.97	1	1
1:A:86:LEU:HD22	1:A:86:LEU:C	0.67	2.15	14	2
1:A:130:ASN:ND2	1:A:130:ASN:N	0.66	2.36	15	3
1:A:72:HIS:CE1	1:A:97:ASN:ND2	0.66	2.63	15	5
1:A:18:LEU:HD12	1:A:18:LEU:C	0.66	2.14	6	1
2:B:60:GLU:O	2:B:64:GLN:N	0.66	2.26	6	11
2:B:45:PHE:CE1	2:B:50:PHE:CD2	0.66	2.83	10	4
1:A:148:LEU:HD12	1:A:148:LEU:C	0.65	2.16	16	4
2:B:53:PHE:CZ	2:B:63:PHE:CZ	0.65	2.85	13	3
1:A:39:HIS:CD2	1:A:64:ASN:HD21	0.65	2.09	16	2
2:B:17:PHE:CE1	2:B:23:ILE:HD12	0.65	2.26	13	2
1:A:130:ASN:N	1:A:130:ASN:HD22	0.65	1.89	15	1
1:A:97:ASN:ND2	1:A:101:ASN:H	0.65	1.90	12	6
2:B:52:GLU:H	2:B:52:GLU:CD	0.65	2.00	5	6
2:B:63:PHE:CE2	2:B:64:GLN:NE2	0.65	2.65	3	2
1:A:112:GLN:H	1:A:112:GLN:HE21	0.65	1.35	13	2
1:A:65:ARG:NE	1:A:66:GLY:N	0.65	2.45	20	1
1:A:97:ASN:ND2	1:A:99:HIS:H	0.64	1.90	19	4
1:A:8:CYS:SG	1:A:9:ARG:N	0.64	2.70	3	4
2:B:45:PHE:CE1	2:B:49:LEU:O	0.64	2.50	3	4
1:A:86:LEU:HD13	1:A:86:LEU:C	0.64	2.17	13	2
2:B:17:PHE:N	2:B:17:PHE:CD1	0.64	2.65	12	15
1:A:22:ASN:ND2	1:A:25:ASN:HD22	0.64	1.91	9	3
1:A:39:HIS:CE1	1:A:64:ASN:ND2	0.64	2.66	7	3
1:A:97:ASN:HD21	1:A:100:GLY:N	0.64	1.89	2	3
1:A:71:LEU:CD1	1:A:86:LEU:HD11	0.64	2.21	7	2
1:A:35:PHE:CD2	1:A:65:ARG:NH1	0.64	2.66	9	1
1:A:77:HIS:ND1	1:A:78:GLY:N	0.64	2.46	8	3
1:A:97:ASN:ND2	1:A:97:ASN:N	0.64	2.46	17	8
1:A:151:ARG:NH1	1:A:154:LYS:HZ1	0.64	1.90	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:ASN:O	1:A:15:ALA:N	0.64	2.30	4	20
1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:NE	0.63	2.46	4	1
2:B:49:LEU:H	2:B:49:LEU:HD23	0.63	1.53	4	2
2:B:19:PRO:CB	2:B:23:ILE:HG21	0.63	2.23	8	10
2:B:38:CYS:O	2:B:42:PHE:CB	0.63	2.47	15	20
2:B:51:TYR:CD1	2:B:53:PHE:CE2	0.63	2.87	7	1
2:B:44:GLN:NE2	2:B:44:GLN:N	0.63	2.47	4	2
2:B:45:PHE:CZ	2:B:50:PHE:CD1	0.63	2.87	8	1
1:A:35:PHE:CD1	1:A:65:ARG:NH2	0.63	2.66	9	1
1:A:130:ASN:ND2	1:A:134:GLU:O	0.63	2.31	4	2
2:B:58:TYR:CE2	2:B:63:PHE:CE1	0.63	2.87	7	1
1:A:20:LEU:HD11	1:A:53:LEU:HD23	0.63	1.70	14	2
2:B:39:ALA:O	2:B:42:PHE:CD2	0.63	2.52	16	20
1:A:114:GLN:N	1:A:114:GLN:CD	0.63	2.56	2	1
1:A:124:ALA:O	1:A:125:LEU:HD23	0.63	1.94	6	1
2:B:30:LEU:N	2:B:30:LEU:CD2	0.62	2.62	11	20
2:B:44:GLN:H	2:B:44:GLN:NE2	0.62	1.92	2	3
2:B:42:PHE:N	2:B:42:PHE:CD1	0.62	2.66	20	13
1:A:77:HIS:CE1	1:A:79:HIS:NE2	0.62	2.68	6	3
1:A:39:HIS:NE2	1:A:64:ASN:ND2	0.62	2.46	19	2
1:A:19:TRP:H	1:A:19:TRP:CD1	0.62	2.10	18	1
1:A:129:CYS:SG	1:A:129:CYS:O	0.62	2.57	7	2
2:B:45:PHE:CE1	2:B:50:PHE:CD1	0.62	2.87	8	1
1:A:101:ASN:HD22	1:A:101:ASN:H	0.62	1.36	11	1
1:A:148:LEU:H	1:A:148:LEU:HD23	0.62	1.55	14	1
2:B:12:ARG:HE	2:B:57:LYS:NZ	0.62	1.92	20	1
1:A:158:ASN:HD22	1:A:158:ASN:H	0.62	1.35	3	1
1:A:40:TRP:CZ3	1:A:43:ARG:NH2	0.62	2.68	12	2
1:A:155:MET:SD	1:A:156:GLY:N	0.62	2.72	8	1
1:A:87:LEU:C	1:A:87:LEU:HD23	0.62	2.19	15	1
1:A:19:TRP:CD1	1:A:20:LEU:N	0.62	2.68	17	1
2:B:12:ARG:NH2	2:B:57:LYS:NZ	0.62	2.47	20	1
1:A:13:ALA:N	1:A:46:ARG:NH2	0.62	2.47	11	4
1:A:22:ASN:HD22	1:A:22:ASN:H	0.62	1.38	18	2
2:B:40:GLN:NE2	2:B:40:GLN:N	0.62	2.47	4	1
1:A:35:PHE:CE1	1:A:65:ARG:NH2	0.62	2.67	9	1
1:A:141:LYS:NZ	1:A:149:ARG:NH1	0.62	2.47	9	1
1:A:99:HIS:CD2	1:A:131:LYS:NZ	0.62	2.68	20	1
1:A:22:ASN:ND2	1:A:25:ASN:N	0.62	2.48	1	2
1:A:97:ASN:HD22	1:A:97:ASN:N	0.62	1.92	5	6
1:A:22:ASN:ND2	1:A:25:ASN:ND2	0.62	2.47	2	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:45:PHE:CE1	2:B:46:PRO:O	0.62	2.53	3	4
1:A:99:HIS:N	1:A:99:HIS:CD2	0.62	2.67	11	1
1:A:80:ARG:H	1:A:80:ARG:CD	0.62	2.08	12	1
1:A:122:ASN:OD1	1:A:123:GLY:N	0.62	2.33	2	1
1:A:43:ARG:NH2	2:B:56:ARG:NH1	0.62	2.48	11	3
1:A:72:HIS:CE1	1:A:101:ASN:ND2	0.62	2.68	20	1
1:A:80:ARG:NE	1:A:112:GLN:NE2	0.62	2.48	1	1
1:A:85:LYS:NZ	1:A:89:TYR:CE2	0.62	2.68	3	1
1:A:35:PHE:CG	1:A:65:ARG:NH1	0.62	2.68	9	1
2:B:12:ARG:NE	2:B:57:LYS:NZ	0.62	2.48	20	1
2:B:57:LYS:HZ2	2:B:57:LYS:N	0.62	1.92	12	2
1:A:106:TYR:CE2	1:A:110:TRP:NE1	0.62	2.68	8	2
1:A:72:HIS:CD2	1:A:101:ASN:ND2	0.62	2.68	7	2
1:A:61:ASN:HD22	1:A:61:ASN:N	0.62	1.92	17	4
1:A:99:HIS:CD2	1:A:99:HIS:H	0.62	2.13	14	3
1:A:33:HIS:CG	1:A:65:ARG:NH1	0.62	2.67	16	1
1:A:77:HIS:CD2	1:A:79:HIS:NE2	0.62	2.68	18	1
1:A:85:LYS:NZ	1:A:89:TYR:CD2	0.61	2.67	3	1
1:A:96:VAL:HG22	1:A:97:ASN:H	0.61	1.54	15	3
1:A:33:HIS:CD2	1:A:65:ARG:NH2	0.61	2.68	13	1
1:A:99:HIS:CE1	1:A:131:LYS:NZ	0.61	2.68	20	1
1:A:39:HIS:CD2	1:A:64:ASN:ND2	0.61	2.68	1	2
1:A:97:ASN:H	1:A:101:ASN:HD21	0.61	1.38	6	2
1:A:157:GLN:NE2	1:A:157:GLN:N	0.61	2.48	14	2
1:A:61:ASN:N	1:A:61:ASN:ND2	0.61	2.46	17	3
1:A:99:HIS:ND1	1:A:101:ASN:ND2	0.61	2.48	11	1
2:B:13:CYS:SG	2:B:34:GLN:NE2	0.61	2.73	13	1
1:A:159:LEU:N	1:A:159:LEU:HD22	0.61	2.11	14	5
2:B:34:GLN:NE2	2:B:44:GLN:NE2	0.61	2.48	6	1
2:B:9:THR:HA	2:B:15:GLY:O	0.61	1.96	8	19
1:A:33:HIS:O	1:A:33:HIS:ND1	0.61	2.34	14	1
1:A:99:HIS:CE1	1:A:131:LYS:HZ2	0.61	2.13	20	1
1:A:39:HIS:ND1	1:A:64:ASN:ND2	0.61	2.48	7	2
1:A:126:VAL:HG22	1:A:126:VAL:O	0.61	1.96	7	2
1:A:142:ALA:HB3	1:A:143:PRO:CD	0.61	2.26	17	7
2:B:38:CYS:CB	2:B:41:CYS:CB	0.61	2.79	18	13
1:A:43:ARG:NE	2:B:56:ARG:NH2	0.61	2.48	16	1
1:A:145:ARG:HH11	1:A:146:GLU:H	0.61	1.37	17	1
1:A:77:HIS:CD2	1:A:79:HIS:CE1	0.61	2.88	4	3
2:B:17:PHE:CD1	2:B:17:PHE:N	0.61	2.67	3	5
1:A:25:ASN:N	1:A:25:ASN:HD22	0.61	1.92	19	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:80:ARG:NH2	1:A:84:GLN:NE2	0.61	2.48	8	1
1:A:97:ASN:ND2	1:A:100:GLY:H	0.61	1.94	1	4
1:A:112:GLN:HE21	1:A:112:GLN:N	0.60	1.93	13	2
2:B:40:GLN:NE2	2:B:41:CYS:SG	0.60	2.74	18	1
2:B:51:TYR:O	2:B:51:TYR:CG	0.60	2.54	19	1
1:A:59:ARG:CD	1:A:59:ARG:H	0.60	2.09	4	4
2:B:43:GLN:NE2	2:B:44:GLN:H	0.60	1.94	6	1
2:B:9:THR:CA	2:B:15:GLY:O	0.60	2.49	4	19
1:A:134:GLU:C	1:A:139:LYS:HZ1	0.60	2.04	5	1
2:B:59:CYS:N	2:B:62:ASP:OD1	0.60	2.35	17	7
2:B:65:MET:SD	2:B:65:MET:N	0.60	2.75	4	3
1:A:109:PHE:CZ	2:B:42:PHE:CD2	0.60	2.89	9	1
1:A:160:ASN:HD22	1:A:160:ASN:H	0.60	1.39	16	2
2:B:57:LYS:N	2:B:57:LYS:CD	0.60	2.65	19	1
1:A:22:ASN:O	1:A:25:ASN:ND2	0.60	2.34	5	18
1:A:42:CYS:SG	1:A:74:ALA:N	0.60	2.74	11	3
1:A:80:ARG:HH22	1:A:84:GLN:NE2	0.60	1.94	8	1
1:A:144:LEU:HD23	1:A:144:LEU:O	0.60	1.97	14	3
1:A:43:ARG:NH1	2:B:56:ARG:HH21	0.60	1.95	6	1
1:A:4:ILE:N	1:A:4:ILE:HD12	0.60	2.11	8	1
2:B:53:PHE:CD1	2:B:63:PHE:CE1	0.60	2.90	3	4
1:A:97:ASN:HD21	1:A:101:ASN:N	0.60	1.95	18	2
1:A:5:PHE:CD1	1:A:5:PHE:N	0.60	2.69	8	5
1:A:61:ASN:HD21	1:A:90:LYS:NZ	0.60	1.95	10	1
2:B:22:LYS:NZ	2:B:32:HIS:HE2	0.60	1.95	15	1
1:A:13:ALA:N	1:A:46:ARG:HH21	0.60	1.95	6	2
1:A:93:ILE:HD12	1:A:93:ILE:C	0.60	2.22	9	1
1:A:151:ARG:NH1	1:A:154:LYS:NZ	0.60	2.50	18	1
1:A:28:ASN:ND2	1:A:56:ARG:HH12	0.59	1.95	1	1
1:A:43:ARG:NH2	2:B:56:ARG:HH21	0.59	1.95	14	2
1:A:129:CYS:O	1:A:129:CYS:SG	0.59	2.60	9	3
1:A:20:LEU:O	1:A:20:LEU:HD23	0.59	1.98	7	6
1:A:86:LEU:HD12	1:A:87:LEU:N	0.59	2.12	8	1
1:A:155:MET:SD	1:A:157:GLN:NE2	0.59	2.75	8	1
1:A:43:ARG:NH2	2:B:56:ARG:HH11	0.59	1.94	11	1
1:A:42:CYS:SG	1:A:43:ARG:N	0.59	2.75	18	4
2:B:33:GLU:O	2:B:44:GLN:NE2	0.59	2.35	14	1
2:B:45:PHE:O	2:B:45:PHE:CD1	0.59	2.56	16	4
1:A:22:ASN:HD22	1:A:26:ASP:N	0.59	1.94	1	2
2:B:41:CYS:O	2:B:43:GLN:O	0.59	2.19	11	20
2:B:64:GLN:HE21	2:B:65:MET:N	0.59	1.96	8	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:63:MET:SD	1:A:63:MET:N	0.59	2.76	15	7
2:B:21:GLU:O	2:B:22:LYS:CE	0.59	2.51	18	8
1:A:8:CYS:O	1:A:12:ASN:ND2	0.59	2.36	16	2
1:A:65:ARG:HE	1:A:66:GLY:N	0.59	1.94	4	2
1:A:143:PRO:O	1:A:144:LEU:HB3	0.59	1.98	20	5
2:B:44:GLN:NE2	2:B:45:PHE:O	0.59	2.36	10	5
2:B:62:ASP:OD1	2:B:62:ASP:N	0.59	2.35	6	8
1:A:43:ARG:NH2	2:B:56:ARG:NE	0.59	2.51	6	1
1:A:59:ARG:N	1:A:59:ARG:CD	0.59	2.65	18	2
1:A:63:MET:SD	1:A:68:ASP:N	0.59	2.75	13	1
2:B:12:ARG:HH21	2:B:57:LYS:NZ	0.59	1.95	20	2
1:A:145:ARG:C	1:A:147:LEU:H	0.59	2.05	17	20
2:B:40:GLN:NE2	2:B:40:GLN:C	0.59	2.61	16	2
1:A:69:THR:OG1	1:A:72:HIS:ND1	0.59	2.36	6	20
1:A:109:PHE:N	1:A:139:LYS:HZ1	0.59	1.95	3	2
2:B:62:ASP:N	2:B:62:ASP:OD1	0.59	2.36	11	3
1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:HE	0.58	1.96	4	1
2:B:26:SER:O	2:B:27:ASN:CB	0.58	2.51	5	15
2:B:45:PHE:CZ	2:B:49:LEU:O	0.58	2.57	12	3
1:A:96:VAL:HG11	1:A:100:GLY:C	0.58	2.23	14	2
2:B:53:PHE:CG	2:B:63:PHE:CD1	0.58	2.90	1	2
1:A:143:PRO:O	1:A:144:LEU:HD22	0.58	1.96	4	2
1:A:22:ASN:HD22	1:A:25:ASN:N	0.58	1.96	1	1
2:B:45:PHE:CE2	2:B:49:LEU:O	0.58	2.56	17	6
1:A:40:TRP:CD1	1:A:40:TRP:N	0.58	2.66	14	2
1:A:72:HIS:NE2	1:A:101:ASN:ND2	0.58	2.52	7	3
1:A:39:HIS:CG	1:A:64:ASN:HD21	0.58	2.16	7	2
1:A:12:ASN:O	1:A:14:VAL:N	0.58	2.36	16	20
2:B:32:HIS:O	2:B:34:GLN:N	0.58	2.37	8	20
2:B:45:PHE:CE2	2:B:46:PRO:O	0.58	2.56	6	5
1:A:65:ARG:HE	1:A:65:ARG:CA	0.58	2.11	4	1
1:A:33:HIS:CD2	1:A:65:ARG:CZ	0.58	2.87	13	1
1:A:77:HIS:CE1	1:A:79:HIS:CE1	0.58	2.92	2	1
1:A:105:HIS:CE1	1:A:130:ASN:OD1	0.58	2.56	13	3
2:B:61:HIS:O	2:B:65:MET:SD	0.58	2.61	17	8
1:A:105:HIS:CG	1:A:130:ASN:HD21	0.58	2.17	5	1
1:A:69:THR:OG1	1:A:97:ASN:ND2	0.58	2.37	20	2
1:A:29:GLN:NE2	1:A:30:GLY:N	0.58	2.52	13	1
1:A:27:LEU:N	1:A:27:LEU:HD22	0.58	2.14	15	3
1:A:97:ASN:H	1:A:97:ASN:HD22	0.58	1.38	18	1
1:A:27:LEU:HD12	1:A:27:LEU:C	0.58	2.23	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:ASN:ND2	1:A:26:ASP:N	0.57	2.52	1	1
1:A:63:MET:N	1:A:63:MET:SD	0.57	2.77	1	1
2:B:44:GLN:N	2:B:44:GLN:OE1	0.57	2.37	3	1
1:A:74:ALA:O	1:A:77:HIS:CE1	0.57	2.57	4	3
1:A:72:HIS:CD2	1:A:101:ASN:HD22	0.57	2.17	7	1
2:B:61:HIS:CD2	2:B:65:MET:SD	0.57	2.97	11	3
2:B:50:PHE:C	2:B:51:TYR:CD1	0.57	2.82	14	1
1:A:92:ASP:OD1	1:A:92:ASP:N	0.57	2.36	9	3
1:A:112:GLN:NE2	1:A:112:GLN:N	0.57	2.52	12	3
2:B:51:TYR:O	2:B:58:TYR:O	0.57	2.21	7	9
1:A:65:ARG:CD	1:A:65:ARG:H	0.57	2.12	9	2
1:A:69:THR:HG23	1:A:97:ASN:HD21	0.57	1.58	7	3
1:A:97:ASN:ND2	1:A:101:ASN:OD1	0.57	2.38	5	4
1:A:124:ALA:O	1:A:125:LEU:O	0.57	2.22	16	8
2:B:34:GLN:NE2	2:B:34:GLN:C	0.57	2.62	13	2
2:B:32:HIS:O	2:B:35:CYS:N	0.57	2.31	7	20
1:A:43:ARG:NH2	2:B:56:ARG:HE	0.57	1.98	17	2
1:A:27:LEU:HD12	1:A:28:ASN:N	0.57	2.14	7	2
1:A:13:ALA:N	1:A:46:ARG:HH22	0.57	1.97	11	3
1:A:43:ARG:CZ	2:B:56:ARG:NH2	0.57	2.68	14	1
1:A:4:ILE:O	1:A:8:CYS:N	0.57	2.37	3	15
2:B:50:PHE:CE1	2:B:52:GLU:N	0.57	2.72	5	1
1:A:97:ASN:ND2	1:A:98:GLU:H	0.57	1.98	13	1
1:A:101:ASN:N	1:A:101:ASN:HD22	0.57	1.97	6	4
1:A:62:VAL:O	1:A:69:THR:HG22	0.57	2.00	13	1
1:A:80:ARG:HE	1:A:112:GLN:NE2	0.57	1.97	1	1
1:A:64:ASN:ND2	1:A:66:GLY:H	0.57	1.98	9	2
1:A:64:ASN:OD1	1:A:65:ARG:NH2	0.57	2.38	4	1
1:A:101:ASN:HD22	1:A:101:ASN:N	0.57	1.97	11	1
1:A:25:ASN:ND2	1:A:56:ARG:HH21	0.57	1.98	4	1
1:A:106:TYR:CE1	1:A:110:TRP:CD1	0.57	2.93	5	1
1:A:132:TYR:CG	1:A:132:TYR:O	0.57	2.58	7	4
1:A:128:ILE:O	1:A:129:CYS:SG	0.56	2.63	7	14
2:B:44:GLN:NE2	2:B:44:GLN:C	0.56	2.63	10	5
1:A:140:ALA:C	1:A:145:ARG:HE	0.56	2.08	17	1
2:B:51:TYR:CE1	2:B:58:TYR:O	0.56	2.58	19	1
2:B:39:ALA:O	2:B:42:PHE:CE2	0.56	2.58	14	18
1:A:90:LYS:CB	1:A:90:LYS:NZ	0.56	2.68	3	1
1:A:88:GLN:C	1:A:88:GLN:NE2	0.56	2.63	4	2
2:B:51:TYR:CZ	2:B:63:PHE:HB2	0.56	2.35	19	1
1:A:97:ASN:ND2	1:A:97:ASN:H	0.56	1.99	4	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:50:PHE:CE2	2:B:58:TYR:C	0.56	2.84	17	9
1:A:99:HIS:CG	1:A:101:ASN:OD1	0.56	2.58	5	2
1:A:135:MET:N	1:A:139:LYS:NZ	0.56	2.53	5	1
1:A:43:ARG:NH1	2:B:56:ARG:HH22	0.56	1.97	8	1
1:A:99:HIS:CE1	1:A:101:ASN:ND2	0.56	2.74	11	1
1:A:33:HIS:CD2	1:A:65:ARG:NH1	0.56	2.72	12	1
1:A:96:VAL:HG22	1:A:97:ASN:N	0.56	2.16	15	2
1:A:99:HIS:CG	1:A:131:LYS:HZ1	0.56	2.18	20	1
1:A:28:ASN:ND2	1:A:56:ARG:HH22	0.56	1.99	1	1
1:A:98:GLU:CD	1:A:98:GLU:N	0.56	2.64	17	3
1:A:93:ILE:HD11	1:A:124:ALA:HB2	0.56	1.77	20	8
1:A:69:THR:OG1	1:A:72:HIS:CE1	0.56	2.59	19	16
2:B:38:CYS:N	2:B:42:PHE:HA	0.56	2.16	5	16
1:A:38:LEU:O	1:A:38:LEU:HD13	0.56	1.99	3	1
1:A:90:LYS:CB	1:A:90:LYS:HZ3	0.56	2.13	3	1
2:B:40:GLN:NE2	2:B:40:GLN:H	0.56	1.97	4	1
1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:HD22	0.56	2.16	9	1
2:B:41:CYS:O	2:B:41:CYS:SG	0.56	2.63	14	1
1:A:143:PRO:O	1:A:144:LEU:CB	0.56	2.54	14	19
1:A:94:ASN:N	1:A:94:ASN:HD22	0.56	1.96	2	1
1:A:97:ASN:ND2	1:A:100:GLY:N	0.56	2.54	2	2
2:B:50:PHE:CD1	2:B:51:TYR:N	0.56	2.74	3	7
1:A:97:ASN:ND2	1:A:101:ASN:O	0.56	2.39	4	4
1:A:86:LEU:HD23	1:A:86:LEU:C	0.56	2.26	7	1
1:A:105:HIS:CE1	1:A:130:ASN:HD22	0.56	2.18	9	2
2:B:47:GLU:CD	2:B:47:GLU:N	0.56	2.64	10	1
2:B:60:GLU:O	2:B:64:GLN:NE2	0.56	2.39	11	2
1:A:15:ALA:O	1:A:19:TRP:CD1	0.56	2.58	18	2
1:A:53:LEU:O	1:A:56:ARG:N	0.56	2.39	5	7
1:A:22:ASN:N	1:A:22:ASN:HD22	0.56	1.99	9	2
1:A:105:HIS:NE2	1:A:130:ASN:OD1	0.56	2.39	15	2
1:A:16:VAL:O	1:A:19:TRP:CD1	0.56	2.59	7	4
2:B:45:PHE:CD2	2:B:49:LEU:O	0.56	2.59	12	8
1:A:35:PHE:CD1	1:A:64:ASN:ND2	0.56	2.74	2	1
1:A:72:HIS:CD2	1:A:97:ASN:HD21	0.56	2.18	4	2
1:A:5:PHE:C	1:A:5:PHE:CD1	0.56	2.84	6	1
1:A:114:GLN:H	1:A:114:GLN:CD	0.56	2.09	12	5
1:A:26:ASP:O	1:A:29:GLN:NE2	0.56	2.39	15	1
1:A:43:ARG:NH2	2:B:56:ARG:HH12	0.56	1.99	18	1
1:A:26:ASP:C	1:A:28:ASN:N	0.56	2.63	10	14
2:B:11:GLU:N	2:B:30:LEU:O	0.56	2.37	20	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:65:ARG:HH21	1:A:66:GLY:N	0.56	1.99	4	1
1:A:72:HIS:CD2	1:A:101:ASN:O	0.56	2.59	14	5
2:B:49:LEU:H	2:B:49:LEU:CD2	0.56	2.14	4	2
1:A:109:PHE:CE1	2:B:42:PHE:CD2	0.56	2.94	9	1
1:A:2:ASP:OD1	1:A:6:THR:N	0.56	2.39	10	1
1:A:103:PRO:O	1:A:106:TYR:CD2	0.56	2.59	16	1
1:A:72:HIS:CE1	1:A:101:ASN:HD21	0.56	2.19	20	1
2:B:53:PHE:CZ	2:B:63:PHE:CE1	0.56	2.94	1	2
1:A:53:LEU:HD13	1:A:53:LEU:O	0.56	2.01	15	9
1:A:114:GLN:HE21	1:A:114:GLN:C	0.56	2.09	19	3
1:A:148:LEU:HD12	1:A:148:LEU:O	0.56	2.01	20	1
2:B:7:SER:O	2:B:17:PHE:O	0.55	2.24	5	8
2:B:45:PHE:CD1	2:B:49:LEU:N	0.55	2.74	19	3
2:B:22:LYS:O	2:B:32:HIS:CD2	0.55	2.59	10	2
2:B:44:GLN:H	2:B:44:GLN:HE21	0.55	1.42	9	1
1:A:97:ASN:HD21	1:A:100:GLY:H	0.55	1.44	10	1
2:B:40:GLN:HE21	2:B:41:CYS:CA	0.55	2.13	18	1
1:A:28:ASN:ND2	1:A:56:ARG:NH1	0.55	2.54	1	1
1:A:39:HIS:CE1	1:A:64:ASN:OD1	0.55	2.59	8	5
1:A:65:ARG:NE	2:B:65:MET:SD	0.55	2.79	5	1
1:A:69:THR:CG2	1:A:97:ASN:HD21	0.55	2.14	20	3
1:A:29:GLN:CD	1:A:29:GLN:H	0.55	2.10	8	2
1:A:77:HIS:NE2	1:A:79:HIS:NE2	0.55	2.53	18	1
1:A:96:VAL:HG22	1:A:97:ASN:ND2	0.55	2.16	18	1
1:A:148:LEU:N	1:A:148:LEU:CD1	0.55	2.70	18	1
1:A:4:ILE:HG23	1:A:5:PHE:N	0.55	2.17	2	1
1:A:99:HIS:O	1:A:131:LYS:NZ	0.55	2.40	20	3
2:B:56:ARG:NE	2:B:58:TYR:OH	0.55	2.40	18	5
2:B:40:GLN:CD	2:B:41:CYS:SG	0.55	2.89	6	1
1:A:60:ILE:H	1:A:90:LYS:NZ	0.55	1.99	7	1
2:B:64:GLN:C	2:B:64:GLN:NE2	0.55	2.65	9	1
1:A:153:GLU:N	1:A:153:GLU:OE1	0.55	2.39	11	1
1:A:130:ASN:ND2	1:A:131:LYS:H	0.55	1.99	19	2
1:A:24:GLU:OE1	1:A:25:ASN:N	0.55	2.40	5	1
1:A:60:ILE:N	1:A:60:ILE:CD1	0.55	2.68	5	6
2:B:53:PHE:CE1	2:B:63:PHE:CZ	0.55	2.94	13	2
1:A:160:ASN:HD22	1:A:160:ASN:N	0.55	1.99	16	1
1:A:142:ALA:HB3	1:A:143:PRO:HD3	0.55	1.77	1	20
1:A:4:ILE:O	1:A:5:PHE:C	0.55	2.50	3	11
1:A:137:VAL:HG23	1:A:138:ASP:N	0.55	2.17	9	1
1:A:87:LEU:HD23	1:A:88:GLN:N	0.55	2.16	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:TRP:O	1:A:22:ASN:ND2	0.55	2.40	18	5
2:B:50:PHE:CE2	2:B:51:TYR:C	0.55	2.85	2	1
2:B:50:PHE:CE1	2:B:51:TYR:C	0.55	2.85	3	4
2:B:22:LYS:HE2	2:B:22:LYS:HA	0.55	1.79	13	6
1:A:159:LEU:N	1:A:159:LEU:CD2	0.55	2.70	14	3
1:A:97:ASN:ND2	1:A:101:ASN:CG	0.55	2.65	17	3
1:A:43:ARG:NH2	2:B:56:ARG:NH2	0.55	2.55	14	2
1:A:12:ASN:C	1:A:12:ASN:HD22	0.55	2.09	16	1
1:A:35:PHE:CE1	1:A:64:ASN:ND2	0.55	2.75	2	1
1:A:97:ASN:ND2	1:A:99:HIS:N	0.55	2.54	19	3
1:A:72:HIS:CE1	1:A:97:ASN:OD1	0.55	2.60	17	2
2:B:40:GLN:N	2:B:40:GLN:CD	0.55	2.65	4	1
1:A:87:LEU:CD1	1:A:122:ASN:ND2	0.55	2.70	9	1
1:A:101:ASN:ND2	2:B:40:GLN:HE22	0.55	2.00	12	2
1:A:25:ASN:ND2	1:A:56:ARG:HH12	0.55	1.99	16	1
2:B:12:ARG:NH1	2:B:57:LYS:NZ	0.55	2.55	17	1
1:A:12:ASN:C	1:A:14:VAL:N	0.54	2.65	18	20
1:A:97:ASN:OD1	1:A:101:ASN:ND2	0.54	2.40	5	5
1:A:98:GLU:CD	1:A:99:HIS:N	0.54	2.65	4	1
1:A:44:GLU:N	1:A:44:GLU:OE1	0.54	2.40	7	1
1:A:22:ASN:OD1	1:A:25:ASN:N	0.54	2.40	18	3
2:B:60:GLU:CG	2:B:61:HIS:N	0.54	2.70	4	14
1:A:105:HIS:CE1	1:A:130:ASN:CG	0.54	2.85	13	5
2:B:34:GLN:NE2	2:B:34:GLN:O	0.54	2.40	13	2
1:A:156:GLY:N	1:A:157:GLN:OE1	0.54	2.40	19	2
2:B:59:CYS:N	2:B:62:ASP:OD2	0.54	2.41	5	3
1:A:72:HIS:CE1	1:A:97:ASN:CG	0.54	2.86	17	2
1:A:135:MET:C	1:A:139:LYS:HZ3	0.54	2.10	5	1
1:A:146:GLU:N	1:A:146:GLU:OE1	0.54	2.40	6	1
2:B:40:GLN:CD	2:B:40:GLN:N	0.54	2.65	10	2
1:A:22:ASN:O	1:A:24:GLU:N	0.54	2.41	18	2
1:A:90:LYS:NZ	1:A:92:ASP:CG	0.54	2.64	15	1
1:A:35:PHE:CZ	1:A:65:ARG:NH1	0.54	2.75	20	1
1:A:107:ALA:O	1:A:112:GLN:NE2	0.54	2.40	12	2
1:A:99:HIS:CD2	1:A:101:ASN:OD1	0.54	2.61	5	2
1:A:9:ARG:C	1:A:46:ARG:HH22	0.54	2.09	18	1
1:A:27:LEU:N	1:A:27:LEU:CD2	0.54	2.71	15	2
1:A:97:ASN:CG	1:A:98:GLU:N	0.54	2.65	13	7
1:A:136:PRO:O	1:A:140:ALA:N	0.54	2.41	18	19
1:A:39:HIS:CG	1:A:64:ASN:ND2	0.54	2.76	1	2
1:A:85:LYS:O	1:A:89:TYR:CD1	0.54	2.59	12	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:26:SER:O	2:B:27:ASN:ND2	0.54	2.41	11	12
2:B:52:GLU:O	2:B:53:PHE:CD1	0.54	2.60	3	6
1:A:62:VAL:HG22	1:A:63:MET:N	0.54	2.18	5	2
1:A:118:ASP:OD1	1:A:119:LEU:N	0.54	2.40	16	3
1:A:157:GLN:N	1:A:157:GLN:CD	0.54	2.66	19	2
2:B:60:GLU:CA	2:B:64:GLN:HE21	0.54	2.15	20	2
1:A:132:TYR:N	1:A:134:GLU:OE1	0.54	2.39	15	1
1:A:75:ALA:O	1:A:106:TYR:CZ	0.54	2.61	16	1
1:A:140:ALA:CB	1:A:145:ARG:HE	0.54	2.15	17	1
1:A:45:GLY:O	1:A:47:SER:N	0.54	2.38	15	15
2:B:27:ASN:OD1	2:B:28:GLY:N	0.54	2.41	12	1
1:A:31:ASP:OD1	1:A:34:GLY:N	0.54	2.41	18	2
1:A:27:LEU:C	1:A:29:GLN:H	0.54	2.11	9	12
1:A:128:ILE:O	1:A:129:CYS:CB	0.54	2.55	8	19
1:A:114:GLN:CD	1:A:114:GLN:H	0.54	2.10	6	2
1:A:101:ASN:N	1:A:101:ASN:ND2	0.54	2.54	14	3
1:A:43:ARG:NH2	2:B:56:ARG:HH22	0.54	2.01	4	1
1:A:106:TYR:OH	1:A:110:TRP:NE1	0.54	2.41	5	1
2:B:26:SER:O	2:B:27:ASN:HB3	0.54	2.02	18	7
1:A:141:LYS:NZ	1:A:149:ARG:NH2	0.54	2.56	13	1
1:A:92:ASP:N	1:A:92:ASP:OD1	0.54	2.40	15	1
1:A:128:ILE:CG2	1:A:129:CYS:N	0.54	2.71	4	3
1:A:85:LYS:NZ	1:A:89:TYR:OH	0.54	2.41	10	1
1:A:146:GLU:OE1	1:A:146:GLU:N	0.54	2.41	10	1
1:A:39:HIS:NE2	1:A:64:ASN:OD1	0.53	2.40	2	2
1:A:101:ASN:ND2	1:A:101:ASN:O	0.53	2.41	2	3
1:A:33:HIS:ND1	1:A:33:HIS:N	0.53	2.55	7	2
1:A:42:CYS:SG	1:A:73:LEU:HD13	0.53	2.43	9	1
1:A:43:ARG:NH2	2:B:54:GLU:O	0.53	2.41	17	1
1:A:22:ASN:ND2	1:A:26:ASP:H	0.53	2.01	1	1
1:A:17:ARG:NH1	1:A:17:ARG:CG	0.53	2.71	2	4
1:A:148:LEU:HD12	1:A:149:ARG:N	0.53	2.18	7	1
1:A:149:ARG:HH11	1:A:149:ARG:CG	0.53	2.16	11	1
1:A:67:ASP:OD2	1:A:98:GLU:N	0.53	2.41	15	1
2:B:12:ARG:CG	2:B:12:ARG:NH1	0.53	2.71	15	1
1:A:9:ARG:C	1:A:11:GLY:H	0.53	2.10	14	15
2:B:64:GLN:NE2	2:B:65:MET:N	0.53	2.56	2	2
1:A:22:ASN:OD1	1:A:25:ASN:ND2	0.53	2.41	5	4
1:A:97:ASN:OD1	1:A:99:HIS:NE2	0.53	2.42	5	1
1:A:158:ASN:O	1:A:160:ASN:N	0.53	2.42	8	2
1:A:159:LEU:H	1:A:159:LEU:HD23	0.53	1.63	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:ARG:O	1:A:77:HIS:CE1	0.53	2.61	1	1
1:A:106:TYR:CE1	1:A:110:TRP:NE1	0.53	2.77	5	2
2:B:56:ARG:NH1	2:B:58:TYR:OH	0.53	2.40	5	1
1:A:38:LEU:HD13	1:A:38:LEU:O	0.53	2.03	10	2
1:A:140:ALA:C	1:A:145:ARG:NE	0.53	2.66	17	1
1:A:43:ARG:HH21	2:B:56:ARG:HH12	0.53	1.45	18	1
1:A:151:ARG:NH2	1:A:154:LYS:HZ3	0.53	2.02	18	1
1:A:99:HIS:NE2	1:A:131:LYS:NZ	0.53	2.57	20	1
1:A:98:GLU:OE2	1:A:99:HIS:CG	0.53	2.61	1	2
1:A:31:ASP:N	1:A:31:ASP:OD1	0.53	2.42	4	1
1:A:33:HIS:N	1:A:33:HIS:ND1	0.53	2.57	6	1
1:A:149:ARG:NH1	1:A:153:GLU:OE2	0.53	2.42	11	1
2:B:27:ASN:CG	2:B:28:GLY:N	0.53	2.66	12	1
1:A:92:ASP:O	1:A:95:ALA:O	0.53	2.27	14	1
1:A:99:HIS:C	1:A:131:LYS:NZ	0.53	2.67	17	1
2:B:39:ALA:C	2:B:40:GLN:NE2	0.53	2.66	20	1
2:B:9:THR:CB	2:B:15:GLY:O	0.53	2.56	8	19
2:B:12:ARG:CG	2:B:12:ARG:HH11	0.53	2.17	15	2
1:A:105:HIS:O	1:A:109:PHE:CE2	0.53	2.62	2	1
1:A:145:ARG:C	1:A:147:LEU:N	0.53	2.64	18	16
2:B:64:GLN:NE2	2:B:64:GLN:C	0.53	2.67	2	1
1:A:39:HIS:CD2	1:A:64:ASN:OD1	0.53	2.62	3	2
1:A:153:GLU:O	1:A:158:ASN:ND2	0.53	2.41	3	1
1:A:112:GLN:HE21	1:A:112:GLN:CA	0.53	2.17	13	2
1:A:106:TYR:OH	2:B:40:GLN:NE2	0.53	2.41	9	1
1:A:24:GLU:H	1:A:24:GLU:CD	0.53	2.11	17	2
2:B:23:ILE:HD11	2:B:30:LEU:HG	0.53	1.79	5	6
1:A:151:ARG:O	1:A:151:ARG:NE	0.53	2.42	6	1
1:A:24:GLU:CD	1:A:24:GLU:N	0.53	2.67	9	4
1:A:4:ILE:HD12	1:A:4:ILE:H	0.53	1.64	8	2
1:A:59:ARG:HH11	1:A:59:ARG:CG	0.53	2.16	18	3
1:A:64:ASN:ND2	1:A:68:ASP:OD2	0.53	2.42	9	3
1:A:3:ASP:OD2	1:A:4:ILE:N	0.53	2.42	16	2
1:A:97:ASN:HD21	1:A:101:ASN:CA	0.53	2.17	18	1
2:B:12:ARG:HH22	2:B:37:VAL:CG2	0.53	2.16	5	2
1:A:64:ASN:OD1	1:A:68:ASP:N	0.53	2.42	9	6
2:B:43:GLN:CD	2:B:44:GLN:N	0.53	2.67	6	3
1:A:88:GLN:NE2	1:A:89:TYR:CD1	0.53	2.77	11	1
1:A:43:ARG:HH12	2:B:56:ARG:HH12	0.53	1.46	15	1
1:A:99:HIS:CD2	1:A:99:HIS:O	0.53	2.62	17	1
1:A:43:ARG:O	1:A:77:HIS:NE2	0.53	2.42	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:GLN:O	1:A:12:ASN:ND2	0.53	2.42	2	3
1:A:139:LYS:O	1:A:143:PRO:CD	0.53	2.57	13	11
2:B:18:ALA:HB3	2:B:21:GLU:HG3	0.53	1.81	7	3
1:A:112:GLN:NE2	1:A:112:GLN:O	0.53	2.42	13	2
1:A:145:ARG:CG	1:A:145:ARG:NH1	0.53	2.72	4	3
1:A:155:MET:C	1:A:157:GLN:NE2	0.53	2.67	4	1
1:A:150:GLU:CD	1:A:151:ARG:N	0.53	2.66	6	1
2:B:43:GLN:NE2	2:B:44:GLN:O	0.53	2.42	15	3
1:A:67:ASP:OD2	1:A:99:HIS:CE1	0.53	2.62	19	1
1:A:17:ARG:CG	1:A:17:ARG:HH11	0.53	2.16	2	4
1:A:38:LEU:HD23	1:A:38:LEU:O	0.53	2.04	19	8
1:A:73:LEU:HD12	1:A:74:ALA:N	0.53	2.19	6	1
1:A:22:ASN:C	1:A:24:GLU:N	0.53	2.67	13	5
1:A:91:ALA:O	1:A:94:ASN:ND2	0.53	2.42	10	5
2:B:45:PHE:CG	2:B:49:LEU:O	0.53	2.62	12	2
1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:OE1	0.53	2.41	13	1
1:A:106:TYR:CD1	1:A:106:TYR:C	0.53	2.87	16	1
1:A:4:ILE:HG22	1:A:8:CYS:SG	0.52	2.45	1	2
1:A:133:GLY:O	1:A:135:MET:N	0.52	2.42	1	6
2:B:24:VAL:O	2:B:31:TYR:N	0.52	2.40	8	4
1:A:105:HIS:CD2	1:A:130:ASN:ND2	0.52	2.77	5	1
1:A:29:GLN:NE2	1:A:30:GLY:O	0.52	2.42	9	1
1:A:77:HIS:O	1:A:110:TRP:CZ3	0.52	2.63	17	3
2:B:36:PHE:O	2:B:44:GLN:NE2	0.52	2.41	14	1
1:A:99:HIS:CD2	2:B:40:GLN:O	0.52	2.62	17	1
1:A:12:ASN:ND2	1:A:12:ASN:H	0.52	2.02	1	1
1:A:28:ASN:ND2	1:A:56:ARG:NH2	0.52	2.57	1	1
1:A:65:ARG:HH11	1:A:65:ARG:CG	0.52	2.17	1	1
1:A:3:ASP:N	1:A:3:ASP:OD1	0.52	2.42	11	2
1:A:153:GLU:OE2	1:A:158:ASN:ND2	0.52	2.43	6	3
1:A:25:ASN:N	1:A:25:ASN:ND2	0.52	2.56	20	6
1:A:44:GLU:O	1:A:77:HIS:NE2	0.52	2.41	10	1
1:A:72:HIS:NE2	1:A:101:ASN:O	0.52	2.43	19	5
1:A:99:HIS:ND1	1:A:101:ASN:OD1	0.52	2.42	14	1
2:B:57:LYS:H	2:B:57:LYS:HZ3	0.52	1.45	14	1
1:A:28:ASN:O	1:A:28:ASN:ND2	0.52	2.42	19	2
1:A:64:ASN:HD22	1:A:66:GLY:H	0.52	1.44	18	1
1:A:86:LEU:HD13	1:A:86:LEU:O	0.52	2.04	1	1
1:A:123:GLY:C	1:A:125:LEU:N	0.52	2.66	15	8
1:A:128:ILE:C	1:A:129:CYS:SG	0.52	2.92	19	11
1:A:91:ALA:C	1:A:93:ILE:H	0.52	2.10	5	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:134:GLU:CD	1:A:139:LYS:NZ	0.52	2.68	14	2
1:A:10:GLU:OE2	1:A:12:ASN:ND2	0.52	2.42	3	1
1:A:128:ILE:HG23	1:A:129:CYS:N	0.52	2.19	4	3
1:A:151:ARG:CG	1:A:151:ARG:NH1	0.52	2.72	7	4
1:A:8:CYS:O	1:A:46:ARG:NH2	0.52	2.39	12	2
1:A:27:LEU:O	1:A:29:GLN:NE2	0.52	2.42	14	2
1:A:29:GLN:CD	1:A:30:GLY:N	0.52	2.67	13	1
2:B:39:ALA:HB2	2:B:57:LYS:HZ3	0.52	1.63	14	1
1:A:160:ASN:ND2	1:A:160:ASN:O	0.52	2.42	16	1
1:A:4:ILE:O	1:A:8:CYS:SG	0.52	2.67	6	7
1:A:12:ASN:ND2	1:A:12:ASN:N	0.52	2.55	1	2
1:A:26:ASP:O	1:A:28:ASN:N	0.52	2.42	18	13
1:A:149:ARG:CG	1:A:149:ARG:NH1	0.52	2.71	11	4
2:B:45:PHE:CD1	2:B:49:LEU:O	0.52	2.62	12	4
1:A:80:ARG:NH2	1:A:118:ASP:OD2	0.52	2.42	4	1
1:A:98:GLU:OE2	1:A:99:HIS:ND1	0.52	2.42	4	1
1:A:133:GLY:O	1:A:135:MET:SD	0.52	2.68	6	2
1:A:43:ARG:NH2	2:B:54:GLU:CD	0.52	2.68	11	1
1:A:29:GLN:NE2	1:A:29:GLN:C	0.52	2.66	13	1
1:A:65:ARG:NH2	2:B:65:MET:C	0.52	2.67	17	1
1:A:65:ARG:NH2	2:B:65:MET:O	0.52	2.42	17	1
2:B:49:LEU:HD23	2:B:49:LEU:N	0.52	2.19	9	2
1:A:101:ASN:OD1	1:A:101:ASN:N	0.52	2.42	5	1
1:A:79:HIS:NE2	1:A:81:ASP:CG	0.52	2.68	9	2
1:A:8:CYS:O	1:A:46:ARG:NH1	0.52	2.42	11	2
1:A:111:GLY:C	1:A:112:GLN:NE2	0.52	2.67	12	1
1:A:31:ASP:CG	1:A:35:PHE:CD2	0.52	2.88	18	1
2:B:41:CYS:O	2:B:43:GLN:CG	0.52	2.58	7	6
1:A:3:ASP:OD1	1:A:4:ILE:N	0.52	2.42	3	2
1:A:80:ARG:CG	1:A:80:ARG:NH1	0.52	2.73	17	6
1:A:139:LYS:CB	1:A:139:LYS:NZ	0.52	2.72	3	1
1:A:118:ASP:OD1	1:A:122:ASN:ND2	0.52	2.42	8	1
1:A:59:ARG:CG	1:A:59:ARG:NH1	0.52	2.72	10	3
1:A:76:SER:OG	1:A:110:TRP:CH2	0.52	2.62	9	1
2:B:47:GLU:N	2:B:47:GLU:OE1	0.52	2.42	10	1
1:A:60:ILE:N	1:A:60:ILE:HD13	0.52	2.20	15	2
1:A:74:ALA:O	1:A:79:HIS:NE2	0.52	2.42	15	1
1:A:79:HIS:N	1:A:79:HIS:CD2	0.52	2.76	15	1
1:A:98:GLU:OE2	1:A:99:HIS:N	0.52	2.43	1	3
1:A:11:GLY:O	1:A:13:ALA:N	0.52	2.41	17	5
1:A:44:GLU:OE2	1:A:46:ARG:NH2	0.52	2.42	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:ASN:C	1:A:64:ASN:ND2	0.52	2.67	4	1
1:A:65:ARG:HE	1:A:66:GLY:H	0.52	1.48	4	1
1:A:65:ARG:HH21	1:A:66:GLY:H	0.52	1.48	4	1
1:A:98:GLU:OE1	1:A:99:HIS:CE1	0.52	2.62	4	1
1:A:24:GLU:N	1:A:24:GLU:OE2	0.52	2.42	7	2
1:A:29:GLN:O	1:A:29:GLN:NE2	0.52	2.40	8	1
1:A:91:ALA:O	1:A:93:ILE:N	0.52	2.42	8	1
2:B:53:PHE:CD2	2:B:63:PHE:CE1	0.52	2.97	8	2
1:A:145:ARG:HH11	1:A:145:ARG:CG	0.52	2.18	9	1
2:B:34:GLN:C	2:B:34:GLN:HE21	0.52	2.12	13	2
1:A:134:GLU:CD	1:A:139:LYS:HZ1	0.52	2.12	14	1
1:A:64:ASN:OD1	1:A:65:ARG:NH1	0.52	2.42	20	1
2:B:30:LEU:C	2:B:31:TYR:CD1	0.52	2.87	5	18
1:A:108:CYS:SG	1:A:139:LYS:NZ	0.52	2.83	19	3
1:A:80:ARG:NH1	1:A:118:ASP:OD2	0.52	2.42	4	1
1:A:135:MET:N	1:A:139:LYS:HZ1	0.52	2.03	5	1
2:B:27:ASN:ND2	2:B:27:ASN:C	0.52	2.67	6	1
1:A:9:ARG:NH1	1:A:44:GLU:CB	0.52	2.73	8	1
1:A:77:HIS:ND1	1:A:79:HIS:N	0.52	2.58	9	2
1:A:74:ALA:O	1:A:77:HIS:CD2	0.52	2.62	9	1
2:B:44:GLN:NE2	2:B:45:PHE:C	0.52	2.68	17	4
1:A:43:ARG:O	1:A:77:HIS:ND1	0.52	2.43	1	1
2:B:11:GLU:CB	2:B:30:LEU:O	0.52	2.58	5	10
2:B:40:GLN:NE2	2:B:40:GLN:O	0.52	2.43	2	2
1:A:38:LEU:O	1:A:42:CYS:SG	0.52	2.68	3	1
1:A:105:HIS:CD2	1:A:134:GLU:O	0.52	2.63	5	10
1:A:117:GLU:O	1:A:121:ALA:N	0.52	2.40	17	2
1:A:7:GLN:NE2	1:A:12:ASN:OD1	0.52	2.43	7	1
1:A:99:HIS:ND1	1:A:101:ASN:CG	0.52	2.67	11	1
1:A:141:LYS:N	1:A:145:ARG:NE	0.52	2.58	17	1
1:A:27:LEU:C	1:A:27:LEU:CD2	0.52	2.83	18	1
1:A:6:THR:HG23	1:A:7:GLN:N	0.52	2.20	3	2
1:A:98:GLU:OE1	1:A:99:HIS:CD2	0.52	2.62	4	1
1:A:127:SER:O	1:A:129:CYS:SG	0.52	2.68	11	4
2:B:27:ASN:ND2	2:B:27:ASN:O	0.52	2.42	6	2
2:B:56:ARG:CB	2:B:56:ARG:HH11	0.52	2.18	6	2
1:A:56:ARG:CG	1:A:56:ARG:NH1	0.52	2.72	10	4
1:A:63:MET:SD	1:A:63:MET:O	0.52	2.68	16	2
1:A:8:CYS:SG	1:A:16:VAL:N	0.52	2.83	17	1
1:A:27:LEU:CD1	1:A:27:LEU:N	0.52	2.72	18	1
1:A:97:ASN:CG	1:A:101:ASN:ND2	0.51	2.68	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:114:GLN:OE1	1:A:115:VAL:N	0.51	2.40	2	1
2:B:25:ASN:HD21	2:B:29:GLU:N	0.51	2.02	5	1
1:A:125:LEU:CD2	1:A:127:SER:H	0.51	2.19	7	1
1:A:99:HIS:CG	1:A:101:ASN:CG	0.51	2.88	14	1
1:A:149:ARG:NH1	1:A:153:GLU:CD	0.51	2.67	16	2
1:A:27:LEU:N	1:A:27:LEU:HD13	0.51	2.20	18	1
1:A:2:ASP:H	1:A:6:THR:CB	0.51	2.18	1	1
1:A:76:SER:OG	1:A:106:TYR:CZ	0.51	2.62	2	1
1:A:158:ASN:ND2	1:A:159:LEU:N	0.51	2.58	3	1
1:A:77:HIS:CD2	1:A:79:HIS:ND1	0.51	2.78	4	1
1:A:135:MET:C	1:A:139:LYS:NZ	0.51	2.69	5	1
2:B:12:ARG:NH1	2:B:35:CYS:O	0.51	2.43	9	1
1:A:80:ARG:CD	1:A:80:ARG:N	0.51	2.73	12	1
2:B:53:PHE:CG	2:B:63:PHE:CE1	0.51	2.98	13	1
1:A:6:THR:O	1:A:9:ARG:CD	0.51	2.58	16	1
1:A:26:ASP:C	1:A:28:ASN:H	0.51	2.14	13	14
1:A:54:ILE:HG23	1:A:60:ILE:HD11	0.51	1.82	3	1
1:A:25:ASN:ND2	1:A:56:ARG:NH2	0.51	2.58	4	1
1:A:64:ASN:HD21	1:A:66:GLY:C	0.51	2.13	4	1
1:A:97:ASN:OD1	1:A:99:HIS:CE1	0.51	2.62	5	1
2:B:47:GLU:N	2:B:47:GLU:OE2	0.51	2.42	5	1
1:A:35:PHE:CA	1:A:65:ARG:HH12	0.51	2.18	9	1
2:B:51:TYR:HB3	2:B:63:PHE:CD2	0.51	2.39	9	1
1:A:22:ASN:H	1:A:22:ASN:ND2	0.51	2.03	18	1
2:B:51:TYR:CD2	2:B:51:TYR:C	0.51	2.86	19	1
1:A:28:ASN:HD21	1:A:56:ARG:NH1	0.51	2.04	1	1
1:A:156:GLY:C	1:A:157:GLN:NE2	0.51	2.68	4	3
2:B:52:GLU:CD	2:B:52:GLU:N	0.51	2.67	19	5
1:A:76:SER:OG	1:A:110:TRP:CZ3	0.51	2.62	9	1
1:A:56:ARG:CG	1:A:56:ARG:HH11	0.51	2.19	11	4
1:A:17:ARG:HH11	1:A:17:ARG:CG	0.51	2.18	11	1
2:B:51:TYR:O	2:B:63:PHE:CD2	0.51	2.64	20	1
1:A:65:ARG:CG	1:A:65:ARG:NH1	0.51	2.72	1	1
1:A:22:ASN:ND2	1:A:22:ASN:O	0.51	2.43	2	2
1:A:64:ASN:C	1:A:66:GLY:N	0.51	2.68	20	5
1:A:93:ILE:CD1	1:A:122:ASN:HD21	0.51	2.18	2	1
2:B:49:LEU:HD23	2:B:50:PHE:N	0.51	2.21	20	4
1:A:64:ASN:ND2	1:A:68:ASP:N	0.51	2.58	4	1
1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CD1	0.51	2.73	5	1
1:A:32:ASP:OD1	1:A:33:HIS:ND1	0.51	2.42	7	1
1:A:36:SER:OG	1:A:39:HIS:ND1	0.51	2.42	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:151:ARG:HH11	1:A:151:ARG:CG	0.51	2.19	9	1
1:A:97:ASN:ND2	1:A:97:ASN:C	0.51	2.66	19	4
2:B:10:CYS:N	2:B:15:GLY:O	0.51	2.43	20	11
2:B:49:LEU:HD12	2:B:49:LEU:N	0.51	2.21	18	3
2:B:13:CYS:C	2:B:15:GLY:N	0.51	2.66	4	10
2:B:44:GLN:N	2:B:44:GLN:CD	0.51	2.68	4	3
1:A:22:ASN:HD22	1:A:24:GLU:CD	0.51	2.14	5	1
1:A:77:HIS:ND1	1:A:77:HIS:C	0.51	2.69	5	3
1:A:106:TYR:CZ	1:A:110:TRP:NE1	0.51	2.79	5	2
1:A:43:ARG:O	1:A:43:ARG:NE	0.51	2.44	10	1
1:A:61:ASN:HD21	1:A:90:LYS:HZ1	0.51	1.49	10	1
1:A:71:LEU:HD12	1:A:71:LEU:N	0.51	2.20	12	1
2:B:40:GLN:OE1	2:B:41:CYS:SG	0.51	2.69	16	1
1:A:8:CYS:SG	1:A:19:TRP:NE1	0.51	2.84	18	1
2:B:12:ARG:NE	2:B:57:LYS:HZ1	0.51	2.04	20	1
1:A:155:MET:C	1:A:157:GLN:HE22	0.51	2.14	4	2
2:B:27:ASN:C	2:B:27:ASN:HD22	0.51	2.13	6	2
1:A:125:LEU:HD23	1:A:127:SER:H	0.51	1.65	7	1
2:B:49:LEU:HD13	2:B:50:PHE:N	0.51	2.20	15	1
1:A:9:ARG:C	1:A:11:GLY:N	0.51	2.67	14	17
1:A:12:ASN:N	1:A:12:ASN:HD22	0.51	2.04	18	5
1:A:123:GLY:O	1:A:125:LEU:N	0.51	2.43	15	6
1:A:20:LEU:C	1:A:20:LEU:CD1	0.51	2.84	5	1
1:A:26:ASP:CG	1:A:27:LEU:N	0.51	2.69	7	1
1:A:94:ASN:ND2	1:A:94:ASN:H	0.51	2.03	10	3
1:A:159:LEU:CD2	1:A:159:LEU:N	0.51	2.74	17	2
1:A:29:GLN:OE1	1:A:29:GLN:N	0.51	2.44	10	1
1:A:11:GLY:C	1:A:46:ARG:HH22	0.51	2.13	11	3
1:A:97:ASN:CG	1:A:101:ASN:HD21	0.51	2.14	17	1
1:A:140:ALA:C	1:A:142:ALA:N	0.51	2.68	17	1
1:A:141:LYS:N	1:A:145:ARG:HE	0.51	2.03	17	1
1:A:4:ILE:HD12	1:A:5:PHE:H	0.51	1.61	19	1
2:B:12:ARG:NH1	2:B:12:ARG:CG	0.51	2.74	1	1
2:B:37:VAL:O	2:B:50:PHE:CZ	0.51	2.64	1	1
1:A:97:ASN:ND2	1:A:98:GLU:N	0.51	2.58	19	3
1:A:72:HIS:O	1:A:76:SER:N	0.51	2.44	6	10
1:A:18:LEU:HD23	1:A:19:TRP:N	0.51	2.21	8	4
2:B:27:ASN:C	2:B:27:ASN:ND2	0.51	2.67	5	1
1:A:12:ASN:ND2	1:A:12:ASN:C	0.51	2.67	16	1
1:A:9:ARG:CG	1:A:9:ARG:NH1	0.51	2.73	20	3
1:A:142:ALA:N	1:A:143:PRO:CD	0.51	2.74	14	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:50:PHE:CE2	2:B:58:TYR:O	0.51	2.64	5	4
1:A:29:GLN:CD	1:A:29:GLN:N	0.51	2.69	8	2
1:A:141:LYS:NZ	1:A:146:GLU:OE2	0.51	2.42	11	1
1:A:44:GLU:CD	1:A:46:ARG:NH1	0.51	2.69	14	1
1:A:69:THR:HG1	1:A:72:HIS:CE1	0.50	2.25	13	5
2:B:46:PRO:C	2:B:48:GLY:H	0.50	2.12	10	9
1:A:44:GLU:CD	1:A:46:ARG:NH2	0.50	2.69	3	1
2:B:19:PRO:O	2:B:20:ALA:CB	0.50	2.59	14	4
1:A:145:ARG:CG	1:A:145:ARG:HH11	0.50	2.19	4	2
1:A:68:ASP:N	1:A:97:ASN:OD1	0.50	2.44	7	2
1:A:80:ARG:N	1:A:80:ARG:CD	0.50	2.74	13	1
2:B:41:CYS:O	2:B:43:GLN:CD	0.50	2.54	15	1
2:B:10:CYS:SG	2:B:13:CYS:C	0.50	2.94	19	2
1:A:96:VAL:CG1	1:A:102:VAL:HG13	0.50	2.36	6	1
2:B:66:LEU:HD23	2:B:66:LEU:N	0.50	2.22	10	5
1:A:67:ASP:OD1	1:A:99:HIS:ND1	0.50	2.42	14	1
2:B:21:GLU:CD	2:B:21:GLU:N	0.50	2.69	16	2
2:B:41:CYS:SG	2:B:62:ASP:OD1	0.50	2.70	2	1
2:B:40:GLN:C	2:B:40:GLN:HE21	0.50	2.15	6	2
1:A:155:MET:SD	1:A:155:MET:C	0.50	2.94	14	2
1:A:92:ASP:O	1:A:95:ALA:N	0.50	2.40	14	1
1:A:43:ARG:NH1	2:B:56:ARG:NH1	0.50	2.59	15	1
1:A:48:ALA:O	1:A:49:VAL:C	0.50	2.54	15	17
1:A:66:GLY:O	1:A:67:ASP:CB	0.50	2.60	1	1
1:A:119:LEU:N	1:A:119:LEU:CD1	0.50	2.67	7	1
1:A:2:ASP:OD1	1:A:3:ASP:N	0.50	2.45	8	1
1:A:25:ASN:CG	1:A:56:ARG:NH2	0.50	2.69	11	1
1:A:130:ASN:HD21	1:A:134:GLU:C	0.50	2.12	13	1
1:A:139:LYS:NZ	1:A:139:LYS:CB	0.50	2.74	13	3
1:A:141:LYS:HZ1	1:A:149:ARG:NH2	0.50	2.04	13	1
1:A:42:CYS:O	1:A:77:HIS:CE1	0.50	2.64	16	1
1:A:4:ILE:HD13	1:A:4:ILE:H	0.50	1.67	17	1
1:A:80:ARG:CG	1:A:80:ARG:HH11	0.50	2.20	3	6
2:B:46:PRO:O	2:B:47:GLU:CG	0.50	2.59	14	4
1:A:44:GLU:CD	1:A:46:ARG:HH21	0.50	2.14	3	2
1:A:46:ARG:NH1	1:A:46:ARG:CG	0.50	2.73	8	2
1:A:6:THR:C	1:A:8:CYS:H	0.50	2.15	10	2
1:A:43:ARG:NH2	2:B:54:GLU:OE2	0.50	2.45	18	1
1:A:64:ASN:ND2	1:A:65:ARG:H	0.50	2.05	20	1
1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:HD12	0.50	2.20	5	1
2:B:46:PRO:O	2:B:49:LEU:CD2	0.50	2.60	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:ARG:CG	1:A:17:ARG:NH1	0.50	2.71	11	1
1:A:67:ASP:O	1:A:99:HIS:NE2	0.50	2.44	11	1
2:B:39:ALA:HB2	2:B:57:LYS:HD3	0.50	1.83	13	3
2:B:52:GLU:OE2	2:B:53:PHE:N	0.50	2.44	18	1
1:A:35:PHE:CE1	1:A:65:ARG:NH1	0.50	2.79	20	1
1:A:132:TYR:O	1:A:132:TYR:CD2	0.50	2.65	18	9
1:A:158:ASN:HD22	1:A:158:ASN:N	0.50	2.03	3	1
1:A:43:ARG:HH11	2:B:56:ARG:NH2	0.50	2.05	8	1
1:A:20:LEU:HD11	1:A:53:LEU:CD2	0.50	2.37	9	1
1:A:29:GLN:C	1:A:29:GLN:HE21	0.50	2.14	13	1
2:B:13:CYS:C	2:B:15:GLY:H	0.49	2.14	4	7
2:B:50:PHE:CZ	2:B:51:TYR:C	0.49	2.90	5	1
1:A:147:LEU:HD23	1:A:147:LEU:C	0.49	2.32	8	1
1:A:155:MET:SD	1:A:157:GLN:OE1	0.49	2.70	14	1
2:B:22:LYS:NZ	2:B:32:HIS:NE2	0.49	2.60	15	1
1:A:103:PRO:O	1:A:106:TYR:CE2	0.49	2.65	16	1
1:A:129:CYS:O	1:A:130:ASN:O	0.49	2.29	4	8
2:B:25:ASN:HD21	2:B:28:GLY:C	0.49	2.15	5	1
2:B:44:GLN:HE21	2:B:44:GLN:N	0.49	2.05	9	1
1:A:135:MET:N	1:A:138:ASP:OD2	0.49	2.41	10	1
1:A:100:GLY:O	1:A:130:ASN:ND2	0.49	2.46	11	3
1:A:99:HIS:CD2	1:A:99:HIS:N	0.49	2.80	14	1
1:A:44:GLU:OE1	1:A:46:ARG:NH1	0.49	2.45	17	1
1:A:38:LEU:C	1:A:38:LEU:CD1	0.49	2.85	8	2
1:A:158:ASN:N	1:A:158:ASN:OD1	0.49	2.42	1	1
1:A:46:ARG:CG	1:A:46:ARG:NH1	0.49	2.73	3	2
1:A:149:ARG:CG	1:A:149:ARG:HH11	0.49	2.20	4	3
1:A:76:SER:O	1:A:110:TRP:CE2	0.49	2.64	13	2
1:A:31:ASP:CG	1:A:33:HIS:H	0.49	2.15	16	2
1:A:149:ARG:HH11	1:A:153:GLU:CD	0.49	2.15	17	1
1:A:86:LEU:C	1:A:86:LEU:CD1	0.49	2.81	20	2
1:A:145:ARG:O	1:A:146:GLU:CB	0.49	2.61	1	1
2:B:61:HIS:ND1	2:B:61:HIS:C	0.49	2.70	19	9
1:A:88:GLN:NE2	1:A:89:TYR:N	0.49	2.61	11	2
2:B:11:GLU:CG	2:B:31:TYR:CZ	0.49	2.95	7	2
2:B:19:PRO:HB2	2:B:23:ILE:HG21	0.49	1.84	14	2
2:B:40:GLN:HE21	2:B:41:CYS:CB	0.49	2.21	18	1
1:A:30:GLY:CA	1:A:35:PHE:O	0.49	2.60	12	3
1:A:98:GLU:OE1	1:A:99:HIS:CG	0.49	2.66	4	1
2:B:45:PHE:CD1	2:B:45:PHE:N	0.49	2.81	4	2
1:A:22:ASN:HD21	1:A:26:ASP:CG	0.49	2.16	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:144:LEU:O	1:A:144:LEU:CD2	0.49	2.61	9	3
1:A:80:ARG:NH1	1:A:80:ARG:CG	0.49	2.74	1	1
2:B:37:VAL:O	2:B:37:VAL:HG23	0.49	2.08	1	1
2:B:64:GLN:C	2:B:64:GLN:CD	0.49	2.81	9	2
1:A:5:PHE:O	1:A:8:CYS:SG	0.49	2.68	5	3
1:A:117:GLU:OE1	1:A:118:ASP:N	0.49	2.46	4	1
1:A:64:ASN:O	1:A:66:GLY:N	0.49	2.46	20	2
1:A:108:CYS:SG	1:A:109:PHE:N	0.49	2.85	14	2
2:B:51:TYR:CB	2:B:63:PHE:CG	0.49	2.96	14	1
1:A:130:ASN:ND2	1:A:130:ASN:H	0.49	2.06	15	1
1:A:60:ILE:C	1:A:61:ASN:HD22	0.49	2.16	18	1
1:A:33:HIS:O	1:A:65:ARG:NE	0.49	2.46	19	1
2:B:12:ARG:CZ	2:B:57:LYS:NZ	0.49	2.76	20	1
1:A:130:ASN:ND2	1:A:131:LYS:N	0.49	2.60	17	2
1:A:112:GLN:HE21	1:A:112:GLN:C	0.49	2.16	4	2
1:A:151:ARG:CD	1:A:151:ARG:C	0.49	2.85	6	1
1:A:8:CYS:SG	1:A:16:VAL:HG12	0.49	2.47	12	3
1:A:141:LYS:NZ	1:A:149:ARG:CZ	0.49	2.75	9	1
1:A:146:GLU:N	1:A:146:GLU:CD	0.49	2.70	12	1
2:B:12:ARG:HH21	2:B:57:LYS:HZ3	0.49	1.51	20	2
2:B:25:ASN:HD21	2:B:28:GLY:CA	0.49	2.20	7	6
1:A:60:ILE:O	1:A:60:ILE:HG22	0.49	2.07	5	2
1:A:64:ASN:C	1:A:66:GLY:H	0.49	2.16	20	3
1:A:97:ASN:N	1:A:101:ASN:ND2	0.49	2.60	2	1
1:A:47:SER:O	1:A:48:ALA:C	0.49	2.56	14	7
1:A:77:HIS:CE1	1:A:79:HIS:H	0.49	2.26	4	1
2:B:43:GLN:OE1	2:B:44:GLN:N	0.49	2.42	20	2
1:A:61:ASN:ND2	1:A:90:LYS:NZ	0.49	2.61	10	1
1:A:84:GLN:HE21	1:A:84:GLN:C	0.49	2.16	20	1
1:A:59:ARG:CD	1:A:59:ARG:N	0.49	2.75	4	2
1:A:20:LEU:HD23	1:A:20:LEU:O	0.49	2.08	6	1
1:A:43:ARG:NH1	2:B:56:ARG:HH12	0.49	2.04	15	2
1:A:86:LEU:N	1:A:86:LEU:CD2	0.49	2.75	9	1
1:A:3:ASP:CG	1:A:4:ILE:N	0.49	2.70	10	2
2:B:34:GLN:N	2:B:34:GLN:CD	0.49	2.70	14	1
1:A:44:GLU:OE1	1:A:46:ARG:NE	0.49	2.45	15	1
2:B:7:SER:O	2:B:8:ALA:O	0.49	2.31	5	8
1:A:22:ASN:HD22	1:A:22:ASN:N	0.49	2.06	2	1
1:A:77:HIS:NE2	1:A:79:HIS:CE1	0.49	2.81	5	2
2:B:61:HIS:CE1	2:B:65:MET:SD	0.49	3.06	9	1
1:A:129:CYS:SG	1:A:135:MET:SD	0.49	3.03	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:80:ARG:NE	1:A:112:GLN:HE22	0.48	2.06	1	1
1:A:46:ARG:CG	1:A:46:ARG:HH11	0.48	2.21	8	4
1:A:22:ASN:ND2	1:A:24:GLU:OE2	0.48	2.41	5	1
2:B:45:PHE:CD2	2:B:49:LEU:N	0.48	2.81	6	1
1:A:20:LEU:O	1:A:56:ARG:NH2	0.48	2.42	8	1
1:A:141:LYS:NZ	1:A:149:ARG:HE	0.48	2.06	10	1
1:A:63:MET:SD	1:A:63:MET:C	0.48	2.96	16	1
1:A:135:MET:SD	1:A:135:MET:O	0.48	2.70	1	1
2:B:29:GLU:C	2:B:30:LEU:HD22	0.48	2.33	20	17
1:A:11:GLY:C	1:A:46:ARG:NH2	0.48	2.70	16	4
1:A:66:GLY:O	1:A:67:ASP:C	0.48	2.57	5	18
1:A:134:GLU:C	1:A:139:LYS:NZ	0.48	2.70	5	1
1:A:151:ARG:CG	1:A:151:ARG:HH11	0.48	2.21	8	3
1:A:130:ASN:HD22	1:A:131:LYS:H	0.48	1.50	19	1
1:A:20:LEU:CD2	1:A:56:ARG:HH21	0.48	2.21	2	1
1:A:8:CYS:C	1:A:10:GLU:N	0.48	2.70	3	5
1:A:66:GLY:O	1:A:67:ASP:CG	0.48	2.57	13	7
1:A:148:LEU:C	1:A:148:LEU:CD1	0.48	2.86	16	3
1:A:63:MET:SD	1:A:68:ASP:C	0.48	2.96	13	1
1:A:105:HIS:CD2	1:A:130:ASN:OD1	0.48	2.65	13	1
1:A:106:TYR:CG	1:A:107:ALA:N	0.48	2.80	16	1
1:A:18:LEU:N	1:A:18:LEU:CD1	0.48	2.77	17	1
1:A:97:ASN:C	1:A:97:ASN:HD22	0.48	2.15	19	1
1:A:65:ARG:CD	1:A:65:ARG:C	0.48	2.87	1	1
2:B:60:GLU:O	2:B:64:GLN:CG	0.48	2.62	16	5
1:A:109:PHE:O	1:A:109:PHE:CD1	0.48	2.67	13	2
2:B:24:VAL:N	2:B:31:TYR:O	0.48	2.46	12	1
1:A:79:HIS:CD2	1:A:79:HIS:H	0.48	2.25	15	1
1:A:140:ALA:O	1:A:142:ALA:N	0.48	2.46	17	1
1:A:43:ARG:HH21	2:B:56:ARG:NH1	0.48	2.05	18	1
2:B:12:ARG:NH2	2:B:57:LYS:HZ3	0.48	2.05	20	1
1:A:2:ASP:N	1:A:2:ASP:OD1	0.48	2.47	1	1
1:A:46:ARG:O	1:A:47:SER:C	0.48	2.57	15	15
1:A:2:ASP:O	1:A:3:ASP:C	0.48	2.55	11	8
1:A:62:VAL:C	1:A:63:MET:SD	0.48	2.96	4	2
1:A:22:ASN:ND2	1:A:24:GLU:CD	0.48	2.71	5	1
1:A:7:GLN:OE1	1:A:15:ALA:CB	0.48	2.62	7	1
1:A:104:LEU:HD11	1:A:116:ALA:HB1	0.48	1.86	17	7
1:A:150:GLU:O	1:A:154:LYS:N	0.48	2.44	1	2
1:A:124:ALA:O	1:A:125:LEU:CB	0.48	2.62	7	5
1:A:17:ARG:O	1:A:21:ASP:N	0.48	2.38	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:ASN:H	1:A:94:ASN:HD22	0.48	1.49	14	1
1:A:96:VAL:CG2	1:A:101:ASN:N	0.48	2.77	15	1
1:A:28:ASN:HD21	1:A:56:ARG:HH12	0.48	1.52	1	1
1:A:19:TRP:CD1	1:A:19:TRP:N	0.48	2.82	18	2
1:A:126:VAL:O	1:A:126:VAL:CG2	0.48	2.61	7	3
1:A:8:CYS:SG	1:A:16:VAL:CG1	0.48	3.02	8	2
1:A:130:ASN:ND2	1:A:134:GLU:C	0.48	2.72	13	1
1:A:7:GLN:OE1	1:A:7:GLN:N	0.48	2.47	15	1
1:A:145:ARG:O	1:A:146:GLU:CG	0.48	2.62	20	3
1:A:145:ARG:HG2	1:A:146:GLU:N	0.48	2.24	17	1
1:A:11:GLY:H	1:A:46:ARG:HH22	0.48	1.51	18	1
2:B:45:PHE:CE1	2:B:49:LEU:N	0.48	2.82	19	1
1:A:135:MET:N	1:A:135:MET:SD	0.48	2.85	1	1
1:A:150:GLU:O	1:A:154:LYS:CG	0.48	2.62	1	1
1:A:71:LEU:CD1	1:A:92:ASP:O	0.48	2.62	10	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:60:ILE:H	0.48	1.68	17	2
1:A:9:ARG:C	1:A:9:ARG:CD	0.48	2.87	18	1
2:B:12:ARG:HE	2:B:57:LYS:HZ2	0.48	1.49	20	1
1:A:133:GLY:O	1:A:135:MET:CE	0.48	2.62	1	1
2:B:32:HIS:O	2:B:33:GLU:C	0.48	2.56	9	19
1:A:39:HIS:O	1:A:42:CYS:SG	0.48	2.66	3	3
1:A:152:ALA:O	1:A:157:GLN:NE2	0.48	2.47	5	2
1:A:40:TRP:CE3	1:A:43:ARG:NH2	0.48	2.82	12	1
1:A:9:ARG:CG	1:A:9:ARG:HH11	0.48	2.22	20	4
1:A:53:LEU:C	1:A:53:LEU:HD13	0.48	2.33	3	1
1:A:113:ASP:N	1:A:113:ASP:OD1	0.48	2.47	4	1
1:A:84:GLN:O	1:A:88:GLN:CD	0.48	2.57	7	1
1:A:128:ILE:C	1:A:129:CYS:HG	0.48	2.17	11	1
1:A:141:LYS:O	1:A:141:LYS:CD	0.48	2.62	11	1
2:B:44:GLN:C	2:B:44:GLN:HE21	0.48	2.17	12	3
1:A:71:LEU:CD1	1:A:86:LEU:HD21	0.48	2.39	14	1
1:A:86:LEU:C	1:A:86:LEU:CD2	0.48	2.85	14	1
1:A:64:ASN:HD22	1:A:65:ARG:H	0.48	1.50	20	1
1:A:39:HIS:CD2	1:A:64:ASN:HD22	0.47	2.24	1	1
1:A:119:LEU:O	1:A:122:ASN:OD1	0.47	2.32	2	1
1:A:77:HIS:CG	1:A:79:HIS:CE1	0.47	3.01	4	1
1:A:18:LEU:C	1:A:18:LEU:CD1	0.47	2.84	6	1
1:A:59:ARG:CZ	1:A:61:ASN:OD1	0.47	2.62	8	1
1:A:159:LEU:HD23	1:A:159:LEU:N	0.47	2.24	10	2
1:A:68:ASP:CG	1:A:73:LEU:CD2	0.47	2.87	14	1
1:A:150:GLU:CA	1:A:150:GLU:OE1	0.47	2.62	15	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:101:ASN:OD1	1:A:101:ASN:O	0.47	2.31	1	2
1:A:22:ASN:HD21	1:A:25:ASN:ND2	0.47	2.07	2	2
1:A:53:LEU:O	1:A:54:ILE:C	0.47	2.56	5	10
2:B:38:CYS:SG	2:B:58:TYR:C	0.47	2.97	3	2
1:A:53:LEU:HD13	1:A:53:LEU:C	0.47	2.34	11	5
1:A:74:ALA:O	1:A:77:HIS:ND1	0.47	2.46	4	1
2:B:47:GLU:N	2:B:47:GLU:CD	0.47	2.72	5	1
2:B:19:PRO:HB3	2:B:23:ILE:HG21	0.47	1.85	13	3
1:A:2:ASP:N	1:A:6:THR:OG1	0.47	2.41	5	3
1:A:53:LEU:C	1:A:53:LEU:HD23	0.47	2.35	17	2
1:A:79:HIS:O	1:A:80:ARG:C	0.47	2.58	18	10
1:A:93:ILE:HG23	1:A:94:ASN:N	0.47	2.24	19	5
1:A:134:GLU:CD	1:A:139:LYS:HZ2	0.47	2.17	2	1
2:B:56:ARG:N	2:B:56:ARG:HD2	0.47	2.24	3	1
2:B:44:GLN:CD	2:B:44:GLN:H	0.47	2.18	4	1
2:B:38:CYS:HB2	2:B:41:CYS:CB	0.47	2.38	7	5
1:A:40:TRP:CD1	1:A:40:TRP:H	0.47	2.27	14	1
1:A:12:ASN:O	1:A:13:ALA:C	0.47	2.57	15	20
1:A:22:ASN:HD22	1:A:26:ASP:H	0.47	1.49	1	3
2:B:63:PHE:CD1	2:B:64:GLN:N	0.47	2.83	9	1
1:A:13:ALA:CA	1:A:46:ARG:NH2	0.47	2.78	11	3
1:A:130:ASN:HD22	1:A:130:ASN:N	0.47	1.96	13	1
1:A:83:VAL:O	1:A:87:LEU:N	0.47	2.45	2	4
1:A:109:PHE:CD1	2:B:42:PHE:CD2	0.47	3.02	6	1
2:B:56:ARG:NH1	2:B:56:ARG:CG	0.47	2.77	6	1
1:A:9:ARG:O	1:A:11:GLY:N	0.47	2.47	14	3
1:A:61:ASN:H	1:A:61:ASN:ND2	0.47	2.07	8	1
1:A:155:MET:CE	1:A:157:GLN:H	0.47	2.22	8	1
2:B:51:TYR:O	2:B:51:TYR:CD1	0.47	2.67	19	1
2:B:45:PHE:CD2	2:B:46:PRO:O	0.47	2.68	1	1
1:A:97:ASN:N	1:A:101:ASN:HD21	0.47	2.07	2	1
1:A:138:ASP:C	1:A:140:ALA:N	0.47	2.72	10	5
2:B:60:GLU:HG3	2:B:61:HIS:N	0.47	2.24	4	12
1:A:27:LEU:C	1:A:29:GLN:N	0.47	2.71	4	7
1:A:39:HIS:ND1	1:A:64:ASN:OD1	0.47	2.48	8	1
1:A:141:LYS:HZ1	1:A:149:ARG:NH1	0.47	2.06	9	1
1:A:104:LEU:CD1	1:A:116:ALA:HB1	0.47	2.39	10	1
1:A:77:HIS:ND1	1:A:77:HIS:N	0.47	2.63	12	1
1:A:146:GLU:O	1:A:150:GLU:CD	0.47	2.57	18	3
1:A:36:SER:CB	1:A:59:ARG:HH12	0.47	2.23	18	1
1:A:101:ASN:O	1:A:101:ASN:CG	0.47	2.58	2	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:158:ASN:ND2	1:A:159:LEU:H	0.47	2.07	3	1
2:B:52:GLU:CD	2:B:52:GLU:C	0.47	2.82	3	1
1:A:4:ILE:O	1:A:8:CYS:CB	0.47	2.62	8	4
1:A:22:ASN:ND2	1:A:26:ASP:CG	0.47	2.72	6	1
1:A:101:ASN:ND2	1:A:101:ASN:N	0.47	2.62	6	1
1:A:43:ARG:HH11	2:B:56:ARG:HH22	0.47	1.52	8	1
1:A:138:ASP:OD1	1:A:139:LYS:N	0.47	2.48	10	2
2:B:64:GLN:HE21	2:B:64:GLN:C	0.47	2.16	8	1
1:A:109:PHE:CE1	2:B:42:PHE:CG	0.47	3.03	9	1
2:B:40:GLN:N	2:B:40:GLN:OE1	0.47	2.47	10	1
1:A:55:MET:HE2	1:A:89:TYR:OH	0.47	2.10	16	1
1:A:117:GLU:CA	1:A:117:GLU:OE1	0.47	2.61	17	1
1:A:24:GLU:CG	1:A:26:ASP:OD2	0.47	2.63	19	1
1:A:28:ASN:CG	1:A:56:ARG:HH12	0.47	2.18	1	1
1:A:94:ASN:N	1:A:94:ASN:ND2	0.47	2.60	2	1
1:A:105:HIS:O	1:A:109:PHE:CD2	0.47	2.68	2	1
1:A:53:LEU:O	1:A:55:MET:N	0.47	2.48	5	1
2:B:56:ARG:HH11	2:B:56:ARG:CG	0.47	2.23	6	2
2:B:60:GLU:O	2:B:64:GLN:OE1	0.47	2.33	6	2
1:A:151:ARG:HH22	1:A:154:LYS:HZ3	0.47	1.52	18	1
1:A:8:CYS:C	1:A:10:GLU:H	0.47	2.16	3	5
1:A:64:ASN:C	1:A:64:ASN:HD22	0.47	2.18	4	1
1:A:80:ARG:HH21	1:A:114:GLN:CD	0.47	2.18	5	1
1:A:91:ALA:C	1:A:93:ILE:N	0.47	2.72	5	3
1:A:124:ALA:O	1:A:125:LEU:CD2	0.47	2.61	6	1
1:A:22:ASN:C	1:A:24:GLU:H	0.47	2.17	13	4
1:A:71:LEU:HD12	1:A:92:ASP:OD2	0.47	2.10	9	1
1:A:145:ARG:N	1:A:145:ARG:CD	0.47	2.77	11	2
2:B:51:TYR:HB2	2:B:63:PHE:CG	0.47	2.44	14	1
1:A:79:HIS:CD2	1:A:82:ILE:CG2	0.47	2.97	15	1
1:A:20:LEU:HD23	1:A:56:ARG:HE	0.47	1.69	2	1
1:A:94:ASN:HD22	1:A:94:ASN:H	0.47	1.52	6	1
1:A:44:GLU:OE1	1:A:44:GLU:CA	0.47	2.63	7	1
1:A:137:VAL:HG23	1:A:138:ASP:H	0.47	1.70	9	1
1:A:20:LEU:HD21	1:A:53:LEU:HD23	0.47	1.86	11	1
1:A:2:ASP:OD1	1:A:2:ASP:N	0.47	2.48	15	2
1:A:4:ILE:CG2	1:A:5:PHE:N	0.46	2.78	2	1
1:A:4:ILE:N	1:A:4:ILE:HD13	0.46	2.23	6	1
1:A:97:ASN:CG	1:A:98:GLU:H	0.46	2.18	13	4
1:A:114:GLN:H	1:A:114:GLN:NE2	0.46	2.07	20	1
1:A:87:LEU:CD2	1:A:118:ASP:OD1	0.46	2.63	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:117:GLU:O	1:A:121:ALA:CB	0.46	2.63	17	2
1:A:27:LEU:O	1:A:29:GLN:N	0.46	2.48	4	2
1:A:50:VAL:CG1	1:A:51:GLU:N	0.46	2.79	7	1
1:A:141:LYS:NZ	1:A:141:LYS:CB	0.46	2.78	10	1
2:B:24:VAL:HG11	2:B:36:PHE:CZ	0.46	2.45	19	2
2:B:56:ARG:CG	2:B:56:ARG:NH1	0.46	2.77	16	1
1:A:21:ASP:OD1	1:A:21:ASP:O	0.46	2.34	8	7
1:A:28:ASN:CG	1:A:56:ARG:HH22	0.46	2.19	1	1
1:A:26:ASP:OD1	1:A:27:LEU:N	0.46	2.47	7	1
1:A:80:ARG:CD	1:A:80:ARG:H	0.46	2.23	9	1
2:B:47:GLU:CD	2:B:47:GLU:O	0.46	2.59	11	2
1:A:105:HIS:NE2	1:A:130:ASN:CG	0.46	2.73	13	2
1:A:80:ARG:CG	1:A:81:ASP:N	0.46	2.79	17	3
2:B:12:ARG:NH2	2:B:37:VAL:CG2	0.46	2.78	17	1
1:A:97:ASN:CG	1:A:101:ASN:OD1	0.46	2.59	1	2
1:A:17:ARG:O	1:A:20:LEU:N	0.46	2.49	2	1
1:A:10:GLU:CD	1:A:10:GLU:O	0.46	2.59	3	1
1:A:22:ASN:OD1	1:A:22:ASN:N	0.46	2.47	5	2
1:A:67:ASP:O	1:A:67:ASP:OD1	0.46	2.33	5	1
2:B:53:PHE:O	2:B:56:ARG:CD	0.46	2.63	5	1
2:B:52:GLU:C	2:B:52:GLU:CD	0.46	2.83	7	1
2:B:17:PHE:HD2	2:B:22:LYS:O	0.46	1.93	10	1
1:A:21:ASP:C	1:A:21:ASP:OD1	0.46	2.59	19	3
1:A:43:ARG:CD	2:B:56:ARG:NH2	0.46	2.78	12	1
1:A:131:LYS:N	1:A:131:LYS:CD	0.46	2.79	14	1
1:A:97:ASN:HD21	1:A:101:ASN:C	0.46	2.19	18	1
1:A:114:GLN:NE2	1:A:118:ASP:OD2	0.46	2.48	19	1
1:A:65:ARG:HE	1:A:66:GLY:CA	0.46	2.24	20	1
2:B:50:PHE:CZ	2:B:57:LYS:CB	0.46	2.98	1	2
1:A:64:ASN:ND2	1:A:66:GLY:C	0.46	2.73	4	1
1:A:132:TYR:CG	2:B:43:GLN:NE2	0.46	2.84	5	1
1:A:43:ARG:NH1	2:B:56:ARG:NH2	0.46	2.61	8	3
1:A:144:LEU:O	1:A:144:LEU:CG	0.46	2.64	9	2
1:A:35:PHE:CD1	1:A:35:PHE:N	0.46	2.83	12	2
1:A:31:ASP:OD1	1:A:32:ASP:N	0.46	2.48	19	1
2:B:60:GLU:O	2:B:63:PHE:HB3	0.46	2.09	19	1
1:A:145:ARG:CD	1:A:146:GLU:H	0.46	2.23	20	1
1:A:27:LEU:O	1:A:29:GLN:OE1	0.46	2.34	15	3
2:B:7:SER:OG	2:B:8:ALA:N	0.46	2.46	10	1
2:B:60:GLU:C	2:B:64:GLN:HE21	0.46	2.17	11	2
1:A:85:LYS:NZ	1:A:85:LYS:CB	0.46	2.78	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:GLN:HE21	1:A:85:LYS:N	0.46	2.09	20	1
1:A:6:THR:C	1:A:8:CYS:N	0.46	2.74	13	5
1:A:21:ASP:O	1:A:22:ASN:C	0.46	2.58	15	4
1:A:137:VAL:CG1	1:A:149:ARG:NH2	0.46	2.79	3	1
1:A:65:ARG:HH21	1:A:66:GLY:CA	0.46	2.23	4	1
1:A:155:MET:CE	1:A:156:GLY:H	0.46	2.24	8	1
2:B:53:PHE:CB	2:B:63:PHE:CE1	0.46	2.99	11	1
2:B:53:PHE:HB2	2:B:63:PHE:CE1	0.46	2.46	20	3
1:A:64:ASN:OD1	1:A:65:ARG:N	0.46	2.48	14	1
2:B:18:ALA:O	2:B:21:GLU:OE2	0.46	2.34	16	2
1:A:21:ASP:OD1	1:A:21:ASP:C	0.46	2.59	10	7
1:A:130:ASN:C	1:A:132:TYR:N	0.46	2.73	6	3
2:B:32:HIS:N	2:B:35:CYS:HB2	0.46	2.26	15	5
1:A:43:ARG:NH1	2:B:54:GLU:OE1	0.46	2.49	9	1
1:A:33:HIS:CD2	1:A:35:PHE:CD1	0.46	3.04	14	1
1:A:134:GLU:CG	1:A:139:LYS:NZ	0.46	2.79	14	1
1:A:6:THR:CG2	1:A:7:GLN:N	0.46	2.79	18	1
1:A:145:ARG:CZ	1:A:148:LEU:HD11	0.46	2.41	20	1
1:A:97:ASN:OD1	1:A:98:GLU:OE2	0.46	2.34	1	2
2:B:23:ILE:HD11	2:B:30:LEU:CG	0.46	2.40	7	7
2:B:50:PHE:CD2	2:B:51:TYR:N	0.46	2.83	2	1
2:B:49:LEU:CD2	2:B:49:LEU:N	0.46	2.79	4	2
1:A:127:SER:O	1:A:128:ILE:C	0.46	2.59	7	1
1:A:160:ASN:H	1:A:160:ASN:ND2	0.46	2.07	16	2
1:A:159:LEU:H	1:A:159:LEU:CD2	0.46	2.20	16	2
2:B:51:TYR:CE1	2:B:63:PHE:HB2	0.46	2.46	19	1
1:A:53:LEU:HD23	1:A:53:LEU:O	0.46	2.11	20	1
1:A:25:ASN:ND2	1:A:25:ASN:N	0.46	2.61	4	1
1:A:43:ARG:HH12	2:B:56:ARG:NH2	0.46	2.09	6	1
1:A:87:LEU:C	1:A:87:LEU:CD2	0.46	2.86	15	1
1:A:28:ASN:O	1:A:28:ASN:CG	0.46	2.59	16	2
1:A:151:ARG:CZ	1:A:154:LYS:NZ	0.46	2.79	18	1
1:A:114:GLN:NE2	1:A:114:GLN:O	0.46	2.46	19	1
1:A:12:ASN:C	1:A:14:VAL:H	0.45	2.19	1	3
1:A:153:GLU:O	1:A:158:ASN:OD1	0.45	2.33	5	2
1:A:28:ASN:O	1:A:29:GLN:O	0.45	2.34	4	4
1:A:140:ALA:CB	1:A:148:LEU:HD11	0.45	2.41	7	2
1:A:2:ASP:OD1	1:A:6:THR:OG1	0.45	2.33	10	1
2:B:50:PHE:CE2	2:B:58:TYR:N	0.45	2.85	17	3
1:A:86:LEU:HD23	1:A:86:LEU:O	0.45	2.11	15	1
1:A:132:TYR:O	1:A:132:TYR:CD1	0.45	2.69	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:114:GLN:HE21	1:A:114:GLN:CA	0.45	2.24	16	2
1:A:136:PRO:O	1:A:140:ALA:CB	0.45	2.64	9	13
1:A:38:LEU:HD13	1:A:38:LEU:C	0.45	2.36	3	2
1:A:83:VAL:O	1:A:84:GLN:C	0.45	2.58	4	4
1:A:88:GLN:HE21	1:A:89:TYR:N	0.45	2.08	4	2
1:A:139:LYS:O	1:A:143:PRO:CG	0.45	2.65	6	2
1:A:60:ILE:H	1:A:60:ILE:CD1	0.45	2.14	12	2
1:A:31:ASP:CG	1:A:32:ASP:N	0.45	2.74	14	1
1:A:90:LYS:O	1:A:91:ALA:C	0.45	2.60	16	9
1:A:143:PRO:O	1:A:144:LEU:CG	0.45	2.64	7	3
2:B:38:CYS:CB	2:B:41:CYS:C	0.45	2.89	4	4
2:B:61:HIS:CD2	2:B:61:HIS:C	0.45	2.94	10	1
2:B:40:GLN:O	2:B:42:PHE:CE1	0.45	2.69	16	2
1:A:7:GLN:O	1:A:12:ASN:OD1	0.45	2.34	1	2
1:A:18:LEU:O	1:A:21:ASP:CG	0.45	2.60	1	3
1:A:22:ASN:HD22	1:A:25:ASN:CA	0.45	2.24	1	1
1:A:24:GLU:OE1	1:A:26:ASP:N	0.45	2.50	5	1
1:A:99:HIS:CD2	1:A:101:ASN:CG	0.45	2.94	16	2
2:B:13:CYS:SG	2:B:15:GLY:N	0.45	2.89	11	4
1:A:46:ARG:O	1:A:48:ALA:N	0.45	2.50	7	3
1:A:109:PHE:CE1	2:B:12:ARG:NH2	0.45	2.84	10	1
1:A:120:VAL:C	1:A:122:ASN:N	0.45	2.73	11	1
1:A:69:THR:HG23	1:A:97:ASN:OD1	0.45	2.11	14	1
1:A:134:GLU:CG	1:A:139:LYS:HZ3	0.45	2.24	14	1
1:A:12:ASN:HD22	1:A:12:ASN:N	0.45	2.09	16	1
1:A:149:ARG:NH1	1:A:153:GLU:CG	0.45	2.79	16	2
1:A:26:ASP:O	1:A:26:ASP:CG	0.45	2.60	17	1
1:A:145:ARG:CG	1:A:146:GLU:N	0.45	2.78	17	1
2:B:31:TYR:CD1	2:B:31:TYR:N	0.45	2.83	6	9
1:A:94:ASN:HD22	1:A:95:ALA:N	0.45	2.10	2	1
1:A:97:ASN:HD21	1:A:101:ASN:CG	0.45	2.19	12	1
1:A:77:HIS:O	1:A:110:TRP:CH2	0.45	2.69	13	1
1:A:75:ALA:O	1:A:106:TYR:OH	0.45	2.33	16	1
2:B:45:PHE:CE2	2:B:48:GLY:HA2	0.45	2.46	18	1
2:B:51:TYR:CD1	2:B:58:TYR:O	0.45	2.69	19	1
1:A:141:LYS:O	1:A:141:LYS:CG	0.45	2.64	3	3
1:A:143:PRO:O	1:A:144:LEU:CD2	0.45	2.63	4	1
1:A:40:TRP:O	1:A:44:GLU:OE2	0.45	2.35	7	1
1:A:117:GLU:O	1:A:118:ASP:C	0.45	2.59	7	4
2:B:10:CYS:SG	2:B:13:CYS:HB2	0.45	2.51	8	1
1:A:155:MET:HE2	1:A:157:GLN:NE2	0.45	2.27	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:ASN:ND2	1:A:25:ASN:H	0.45	2.10	13	1
1:A:92:ASP:O	1:A:92:ASP:OD2	0.45	2.35	20	4
1:A:43:ARG:HH22	2:B:54:GLU:CD	0.45	2.19	18	1
1:A:129:CYS:N	1:A:135:MET:SD	0.45	2.89	2	1
1:A:153:GLU:OE2	1:A:159:LEU:CD2	0.45	2.64	2	1
1:A:115:VAL:CG2	1:A:116:ALA:N	0.45	2.80	3	3
1:A:41:ALA:O	1:A:42:CYS:C	0.45	2.60	6	6
1:A:49:VAL:CG2	1:A:50:VAL:N	0.45	2.79	9	1
1:A:72:HIS:ND1	1:A:97:ASN:OD1	0.45	2.50	17	1
1:A:152:ALA:O	1:A:157:GLN:OE1	0.45	2.35	19	1
2:B:11:GLU:CD	2:B:11:GLU:O	0.45	2.60	11	14
1:A:142:ALA:CB	1:A:143:PRO:CD	0.45	2.93	17	3
1:A:3:ASP:CG	1:A:4:ILE:H	0.45	2.20	11	2
1:A:42:CYS:SG	1:A:74:ALA:CA	0.45	3.05	11	1
1:A:43:ARG:CZ	2:B:56:ARG:HH21	0.45	2.25	14	1
1:A:132:TYR:CD1	1:A:132:TYR:N	0.45	2.83	14	1
1:A:39:HIS:CE1	1:A:64:ASN:CG	0.45	2.95	19	3
1:A:8:CYS:O	1:A:12:ASN:OD1	0.45	2.35	5	1
1:A:84:GLN:O	1:A:88:GLN:OE1	0.45	2.35	7	1
1:A:33:HIS:CB	1:A:35:PHE:CZ	0.45	3.00	10	1
1:A:120:VAL:HG21	1:A:126:VAL:CG2	0.45	2.42	12	1
1:A:31:ASP:CG	1:A:32:ASP:H	0.45	2.19	14	1
1:A:2:ASP:O	1:A:3:ASP:CG	0.45	2.60	12	4
1:A:97:ASN:OD1	1:A:101:ASN:OD1	0.45	2.35	5	1
1:A:144:LEU:C	1:A:146:GLU:CD	0.45	2.85	6	2
2:B:54:GLU:O	2:B:54:GLU:CD	0.45	2.60	19	2
1:A:34:GLY:C	1:A:65:ARG:NH1	0.45	2.74	9	1
1:A:67:ASP:CB	1:A:99:HIS:HE2	0.45	2.24	11	1
1:A:73:LEU:O	1:A:77:HIS:ND1	0.45	2.50	16	1
2:B:20:ALA:C	2:B:21:GLU:OE1	0.45	2.60	16	2
1:A:140:ALA:C	1:A:142:ALA:H	0.45	2.20	17	1
1:A:53:LEU:HD23	1:A:53:LEU:C	0.45	2.36	20	1
1:A:25:ASN:HD22	1:A:25:ASN:N	0.44	2.10	2	1
1:A:51:GLU:C	1:A:51:GLU:CD	0.44	2.85	5	5
1:A:143:PRO:C	1:A:144:LEU:HD22	0.44	2.37	17	2
1:A:18:LEU:O	1:A:21:ASP:OD1	0.44	2.36	12	4
1:A:136:PRO:O	1:A:140:ALA:HB2	0.44	2.12	14	3
1:A:101:ASN:CG	1:A:101:ASN:O	0.44	2.60	11	1
1:A:112:GLN:N	1:A:112:GLN:HE21	0.44	2.10	12	1
2:B:27:ASN:OD1	2:B:27:ASN:C	0.44	2.61	20	11
1:A:118:ASP:OD1	1:A:118:ASP:C	0.44	2.61	2	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:154:LYS:CB	1:A:154:LYS:NZ	0.44	2.80	19	2
2:B:50:PHE:CG	2:B:51:TYR:N	0.44	2.85	2	3
1:A:143:PRO:O	1:A:144:LEU:HB2	0.44	2.12	4	1
1:A:53:LEU:C	1:A:55:MET:N	0.44	2.72	5	2
1:A:115:VAL:O	1:A:118:ASP:OD1	0.44	2.36	6	2
1:A:64:ASN:OD1	1:A:67:ASP:N	0.44	2.50	9	1
1:A:123:GLY:C	1:A:125:LEU:H	0.44	2.20	18	4
1:A:111:GLY:O	1:A:112:GLN:NE2	0.44	2.50	14	1
1:A:158:ASN:C	1:A:158:ASN:HD22	0.44	2.20	14	1
2:B:33:GLU:O	2:B:44:GLN:OE1	0.44	2.35	14	1
1:A:61:ASN:ND2	1:A:61:ASN:H	0.44	2.10	19	2
1:A:131:LYS:CB	1:A:131:LYS:NZ	0.44	2.79	15	1
2:B:41:CYS:O	2:B:43:GLN:OE1	0.44	2.35	15	1
1:A:75:ALA:O	1:A:76:SER:C	0.44	2.59	16	1
1:A:82:ILE:CG2	1:A:83:VAL:N	0.44	2.80	1	1
2:B:26:SER:O	2:B:27:ASN:CG	0.44	2.60	10	12
1:A:76:SER:OG	1:A:106:TYR:CE1	0.44	2.62	2	1
1:A:152:ALA:O	1:A:157:GLN:CD	0.44	2.61	19	3
2:B:53:PHE:HB2	2:B:63:PHE:CZ	0.44	2.47	11	2
1:A:29:GLN:NE2	1:A:29:GLN:N	0.44	2.66	8	1
1:A:71:LEU:HD12	1:A:92:ASP:CG	0.44	2.38	9	1
2:B:53:PHE:CE1	2:B:63:PHE:CD1	0.44	3.06	17	1
1:A:160:ASN:O	1:A:160:ASN:CG	0.44	2.61	19	11
1:A:26:ASP:O	1:A:29:GLN:OE1	0.44	2.35	3	1
2:B:45:PHE:CD1	2:B:46:PRO:O	0.44	2.70	19	4
1:A:27:LEU:O	1:A:28:ASN:C	0.44	2.61	4	1
1:A:64:ASN:ND2	1:A:64:ASN:O	0.44	2.50	4	1
1:A:147:LEU:HD11	1:A:151:ARG:HH12	0.44	1.72	9	1
1:A:135:MET:SD	1:A:135:MET:N	0.44	2.87	11	1
1:A:22:ASN:O	1:A:22:ASN:CG	0.44	2.60	13	1
1:A:56:ARG:CD	1:A:56:ARG:C	0.44	2.90	16	1
1:A:141:LYS:CE	1:A:149:ARG:NH1	0.44	2.81	18	1
1:A:150:GLU:OE1	1:A:150:GLU:N	0.44	2.50	18	1
1:A:112:GLN:C	1:A:114:GLN:OE1	0.44	2.61	2	1
1:A:53:LEU:C	1:A:53:LEU:CD1	0.44	2.91	3	3
1:A:72:HIS:O	1:A:76:SER:OG	0.44	2.35	12	3
1:A:81:ASP:OD1	1:A:82:ILE:N	0.44	2.50	6	1
1:A:144:LEU:O	1:A:146:GLU:OE2	0.44	2.35	6	2
1:A:147:LEU:O	1:A:150:GLU:OE2	0.44	2.36	6	1
1:A:147:LEU:HD11	1:A:151:ARG:NH1	0.44	2.27	9	1
1:A:9:ARG:NH1	1:A:9:ARG:CG	0.44	2.80	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:47:GLU:O	2:B:47:GLU:OE2	0.44	2.34	15	2
1:A:120:VAL:CG2	1:A:121:ALA:N	0.44	2.80	19	2
2:B:12:ARG:HH12	2:B:57:LYS:NZ	0.44	2.11	17	1
1:A:27:LEU:C	1:A:29:GLN:OE1	0.44	2.61	3	1
1:A:118:ASP:O	1:A:122:ASN:CG	0.44	2.61	6	2
2:B:60:GLU:O	2:B:64:GLN:CB	0.44	2.66	16	3
1:A:153:GLU:O	1:A:153:GLU:OE1	0.44	2.35	8	1
1:A:43:ARG:NH2	2:B:54:GLU:OE1	0.44	2.51	9	1
1:A:71:LEU:N	1:A:71:LEU:CD1	0.44	2.80	12	1
1:A:71:LEU:CD2	1:A:92:ASP:O	0.44	2.66	12	1
1:A:145:ARG:CG	1:A:146:GLU:H	0.44	2.25	17	2
1:A:93:ILE:C	1:A:95:ALA:H	0.44	2.21	1	1
1:A:130:ASN:CG	1:A:131:LYS:H	0.44	2.20	7	2
1:A:158:ASN:OD1	1:A:159:LEU:HD23	0.44	2.12	1	1
1:A:104:LEU:O	1:A:105:HIS:C	0.44	2.60	4	11
1:A:65:ARG:NE	1:A:66:GLY:H	0.44	2.11	4	1
1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:ARG:NH2	0.44	2.27	5	1
1:A:119:LEU:HD22	1:A:119:LEU:H	0.44	1.72	7	1
1:A:29:GLN:OE1	1:A:29:GLN:O	0.44	2.36	10	2
1:A:64:ASN:ND2	2:B:66:LEU:CD2	0.44	2.80	13	1
2:B:27:ASN:C	2:B:27:ASN:OD1	0.44	2.60	13	1
1:A:12:ASN:ND2	1:A:12:ASN:O	0.44	2.51	16	1
1:A:25:ASN:CG	1:A:56:ARG:NH1	0.44	2.76	16	1
1:A:113:ASP:CG	1:A:114:GLN:H	0.44	2.20	16	2
1:A:28:ASN:O	1:A:29:GLN:C	0.44	2.60	17	1
1:A:142:ALA:N	1:A:143:PRO:HD2	0.44	2.26	14	12
2:B:10:CYS:HB3	2:B:14:LYS:N	0.44	2.28	9	8
1:A:97:ASN:OD1	1:A:101:ASN:CG	0.44	2.61	9	2
2:B:11:GLU:O	2:B:11:GLU:CG	0.44	2.66	15	5
1:A:46:ARG:CZ	1:A:46:ARG:CB	0.44	2.96	17	1
1:A:117:GLU:CD	1:A:117:GLU:N	0.44	2.76	17	1
1:A:63:MET:SD	1:A:97:ASN:CG	0.44	3.00	20	1
1:A:119:LEU:C	1:A:121:ALA:N	0.44	2.74	2	1
2:B:40:GLN:C	2:B:40:GLN:CD	0.44	2.86	2	1
1:A:67:ASP:CG	1:A:67:ASP:O	0.44	2.61	3	5
1:A:147:LEU:C	1:A:147:LEU:HD23	0.44	2.37	3	1
1:A:19:TRP:O	1:A:22:ASN:OD1	0.44	2.36	12	4
1:A:60:ILE:N	1:A:60:ILE:HD12	0.44	2.28	7	1
1:A:147:LEU:HD21	1:A:151:ARG:HH12	0.44	1.73	8	1
1:A:64:ASN:CG	1:A:68:ASP:OD2	0.44	2.61	17	2
1:A:48:ALA:O	1:A:50:VAL:N	0.44	2.50	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:33:HIS:NE2	1:A:65:ARG:N	0.44	2.66	14	1
1:A:76:SER:O	1:A:110:TRP:CD2	0.44	2.71	14	1
1:A:3:ASP:O	1:A:7:GLN:OE1	0.44	2.36	15	1
1:A:53:LEU:C	1:A:53:LEU:CD2	0.43	2.90	17	2
1:A:126:VAL:O	1:A:135:MET:CE	0.43	2.66	2	1
2:B:46:PRO:C	2:B:48:GLY:N	0.43	2.75	4	7
2:B:31:TYR:N	2:B:31:TYR:CD1	0.43	2.86	3	3
2:B:59:CYS:O	2:B:62:ASP:OD1	0.43	2.36	14	1
1:A:65:ARG:CZ	1:A:65:ARG:CB	0.43	2.96	19	1
1:A:32:ASP:N	1:A:32:ASP:OD1	0.43	2.51	1	1
1:A:156:GLY:C	1:A:157:GLN:CD	0.43	2.86	7	3
1:A:67:ASP:O	1:A:97:ASN:OD1	0.43	2.36	6	2
1:A:21:ASP:O	1:A:23:THR:N	0.43	2.51	8	1
1:A:77:HIS:NE2	1:A:82:ILE:HD12	0.43	2.29	9	1
1:A:2:ASP:O	1:A:3:ASP:O	0.43	2.36	11	1
1:A:2:ASP:OD1	1:A:2:ASP:O	0.43	2.36	14	1
1:A:157:GLN:NE2	1:A:157:GLN:CA	0.43	2.80	14	1
1:A:84:GLN:CG	1:A:85:LYS:N	0.43	2.81	15	2
1:A:51:GLU:CD	1:A:51:GLU:C	0.43	2.86	4	2
2:B:57:LYS:CD	2:B:57:LYS:H	0.43	2.26	7	3
1:A:100:GLY:O	1:A:130:ASN:OD1	0.43	2.36	5	1
1:A:160:ASN:CG	1:A:160:ASN:O	0.43	2.61	5	5
1:A:18:LEU:HG	1:A:19:TRP:N	0.43	2.28	6	1
2:B:10:CYS:SG	2:B:32:HIS:CE1	0.43	3.11	19	3
1:A:64:ASN:OD1	1:A:66:GLY:C	0.43	2.62	17	2
1:A:22:ASN:CG	1:A:25:ASN:H	0.43	2.21	13	1
1:A:152:ALA:C	1:A:154:LYS:N	0.43	2.71	16	1
1:A:113:ASP:O	1:A:117:GLU:CD	0.43	2.60	17	1
1:A:31:ASP:OD2	1:A:33:HIS:CD2	0.43	2.71	19	1
1:A:17:ARG:O	1:A:18:LEU:C	0.43	2.60	2	5
1:A:67:ASP:O	1:A:68:ASP:OD1	0.43	2.36	17	3
1:A:72:HIS:O	1:A:73:LEU:C	0.43	2.61	4	8
1:A:156:GLY:C	1:A:157:GLN:OE1	0.43	2.62	13	2
1:A:118:ASP:O	1:A:122:ASN:OD1	0.43	2.36	9	1
1:A:144:LEU:C	1:A:146:GLU:OE2	0.43	2.62	12	2
1:A:149:ARG:O	1:A:153:GLU:OE1	0.43	2.37	11	1
1:A:153:GLU:C	1:A:153:GLU:CD	0.43	2.86	2	2
2:B:56:ARG:N	2:B:56:ARG:CD	0.43	2.81	3	1
1:A:39:HIS:O	1:A:40:TRP:C	0.43	2.61	6	2
1:A:68:ASP:CA	1:A:97:ASN:OD1	0.43	2.66	7	1
2:B:64:GLN:NE2	2:B:65:MET:SD	0.43	2.91	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:12:ARG:CA	2:B:12:ARG:HE	0.43	2.27	12	1
2:B:45:PHE:CD1	2:B:59:CYS:CB	0.43	3.02	13	1
2:B:50:PHE:CD2	2:B:58:TYR:C	0.43	2.96	17	1
1:A:70:PRO:O	1:A:71:LEU:C	0.43	2.61	12	6
2:B:50:PHE:CE1	2:B:58:TYR:O	0.43	2.72	2	1
1:A:51:GLU:O	1:A:55:MET:CG	0.43	2.67	3	1
1:A:147:LEU:C	1:A:147:LEU:CD2	0.43	2.92	3	2
1:A:65:ARG:NH2	1:A:66:GLY:H	0.43	2.11	4	1
1:A:105:HIS:CG	1:A:130:ASN:ND2	0.43	2.87	5	1
1:A:153:GLU:CD	1:A:158:ASN:CG	0.43	2.87	16	2
1:A:7:GLN:OE1	1:A:7:GLN:O	0.43	2.37	7	1
1:A:7:GLN:CD	1:A:7:GLN:O	0.43	2.62	7	2
2:B:45:PHE:CE1	2:B:50:PHE:CE1	0.43	3.05	8	1
1:A:141:LYS:NZ	1:A:149:ARG:NE	0.43	2.67	10	1
1:A:27:LEU:CD2	1:A:27:LEU:N	0.43	2.81	11	1
1:A:106:TYR:OH	2:B:40:GLN:CD	0.43	2.62	14	1
1:A:66:GLY:O	1:A:68:ASP:OD2	0.43	2.37	15	1
1:A:67:ASP:OD1	1:A:97:ASN:CG	0.43	2.62	16	1
2:B:43:GLN:OE1	2:B:44:GLN:O	0.43	2.37	17	1
1:A:97:ASN:CG	1:A:101:ASN:CG	0.43	2.86	2	2
1:A:10:GLU:OE2	1:A:10:GLU:O	0.43	2.36	3	1
1:A:84:GLN:OE1	1:A:118:ASP:OD2	0.43	2.37	3	1
1:A:24:GLU:O	1:A:25:ASN:C	0.43	2.61	18	2
1:A:65:ARG:C	1:A:67:ASP:H	0.43	2.22	5	1
1:A:135:MET:O	1:A:138:ASP:CG	0.43	2.61	10	2
2:B:53:PHE:CB	2:B:63:PHE:CZ	0.43	3.02	11	1
1:A:12:ASN:C	1:A:46:ARG:HH21	0.43	2.21	12	1
2:B:52:GLU:O	2:B:52:GLU:CD	0.43	2.62	12	1
2:B:7:SER:O	2:B:8:ALA:C	0.43	2.62	20	4
1:A:114:GLN:O	1:A:114:GLN:NE2	0.43	2.51	16	1
1:A:153:GLU:O	1:A:159:LEU:CD2	0.43	2.67	16	1
1:A:148:LEU:N	1:A:148:LEU:HD12	0.43	2.29	18	1
1:A:135:MET:SD	1:A:138:ASP:OD1	0.43	2.77	1	1
2:B:45:PHE:CD1	2:B:45:PHE:C	0.43	2.97	19	4
2:B:38:CYS:HB2	2:B:41:CYS:CA	0.43	2.43	7	1
1:A:153:GLU:OE2	1:A:158:ASN:OD1	0.43	2.37	10	1
1:A:140:ALA:HB1	1:A:148:LEU:HD21	0.43	1.91	11	2
1:A:67:ASP:O	1:A:99:HIS:CE1	0.43	2.71	14	1
2:B:51:TYR:CB	2:B:63:PHE:CD2	0.43	3.02	14	1
1:A:67:ASP:C	1:A:97:ASN:OD1	0.43	2.62	16	1
1:A:93:ILE:HG23	1:A:94:ASN:ND2	0.43	2.29	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:145:ARG:HH11	1:A:146:GLU:N	0.43	2.10	17	1
1:A:99:HIS:N	1:A:99:HIS:ND1	0.43	2.66	3	1
1:A:21:ASP:CG	1:A:21:ASP:O	0.43	2.61	4	1
1:A:64:ASN:O	1:A:67:ASP:N	0.43	2.51	5	1
1:A:99:HIS:CD2	1:A:101:ASN:ND2	0.43	2.87	5	1
2:B:52:GLU:CD	2:B:52:GLU:O	0.43	2.62	6	2
2:B:52:GLU:O	2:B:52:GLU:OE2	0.43	2.37	6	2
1:A:71:LEU:CD2	1:A:92:ASP:C	0.43	2.92	7	1
1:A:25:ASN:C	1:A:26:ASP:OD1	0.43	2.62	9	2
1:A:6:THR:O	1:A:8:CYS:N	0.43	2.51	10	1
1:A:44:GLU:C	1:A:44:GLU:CD	0.43	2.87	19	3
1:A:48:ALA:C	1:A:50:VAL:N	0.43	2.77	10	3
1:A:72:HIS:NE2	1:A:101:ASN:CG	0.43	2.77	10	1
2:B:53:PHE:N	2:B:63:PHE:CE2	0.43	2.87	11	1
2:B:38:CYS:CB	2:B:41:CYS:HB2	0.43	2.44	19	6
1:A:105:HIS:O	1:A:108:CYS:SG	0.43	2.71	18	2
2:B:57:LYS:H	2:B:57:LYS:CD	0.43	2.27	14	1
1:A:67:ASP:OD2	1:A:98:GLU:OE1	0.43	2.37	18	1
1:A:151:ARG:HH12	1:A:154:LYS:HZ1	0.43	1.54	18	1
1:A:63:MET:SD	1:A:97:ASN:ND2	0.43	2.92	20	1
1:A:2:ASP:CG	1:A:3:ASP:H	0.43	2.22	8	2
1:A:67:ASP:O	1:A:68:ASP:CG	0.43	2.62	15	3
2:B:52:GLU:O	2:B:52:GLU:CG	0.43	2.66	2	2
1:A:17:ARG:O	1:A:21:ASP:CB	0.43	2.66	5	1
1:A:4:ILE:N	1:A:4:ILE:CD1	0.43	2.81	8	2
2:B:63:PHE:C	2:B:65:MET:N	0.43	2.73	6	1
2:B:45:PHE:CZ	2:B:50:PHE:CE1	0.43	3.07	8	1
1:A:106:TYR:OH	2:B:40:GLN:OE1	0.43	2.36	14	1
1:A:158:ASN:C	1:A:158:ASN:ND2	0.43	2.77	14	1
1:A:9:ARG:O	1:A:44:GLU:OE2	0.43	2.37	15	1
1:A:157:GLN:HE21	1:A:157:GLN:N	0.43	2.12	15	1
1:A:27:LEU:C	1:A:27:LEU:CD1	0.43	2.92	17	1
1:A:142:ALA:O	1:A:143:PRO:C	0.43	2.62	17	2
1:A:120:VAL:O	1:A:120:VAL:HG22	0.42	2.14	15	2
1:A:93:ILE:HD11	1:A:124:ALA:CB	0.42	2.44	3	2
2:B:11:GLU:OE1	2:B:29:GLU:OE2	0.42	2.37	17	3
1:A:117:GLU:C	1:A:117:GLU:CD	0.42	2.87	5	3
1:A:136:PRO:O	1:A:137:VAL:C	0.42	2.62	20	3
1:A:40:TRP:O	1:A:44:GLU:CD	0.42	2.62	7	1
1:A:127:SER:O	1:A:127:SER:OG	0.42	2.36	7	1
1:A:44:GLU:C	1:A:44:GLU:OE1	0.42	2.62	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:ASN:O	1:A:26:ASP:OD1	0.42	2.37	20	3
1:A:71:LEU:O	1:A:75:ALA:N	0.42	2.46	17	1
2:B:40:GLN:CD	2:B:40:GLN:C	0.42	2.87	18	1
1:A:137:VAL:CG1	1:A:149:ARG:HE	0.42	2.26	19	1
1:A:126:VAL:O	1:A:126:VAL:HG22	0.42	2.14	3	3
1:A:18:LEU:O	1:A:21:ASP:OD2	0.42	2.37	7	2
2:B:11:GLU:CG	2:B:11:GLU:O	0.42	2.66	7	2
1:A:29:GLN:OE1	1:A:30:GLY:C	0.42	2.62	9	1
2:B:51:TYR:CD1	2:B:63:PHE:CE2	0.42	3.07	9	1
1:A:8:CYS:SG	1:A:15:ALA:C	0.42	3.02	14	1
1:A:90:LYS:NZ	1:A:92:ASP:OD2	0.42	2.52	15	1
1:A:12:ASN:N	1:A:12:ASN:ND2	0.42	2.67	18	1
1:A:51:GLU:C	1:A:51:GLU:OE2	0.42	2.62	5	2
1:A:76:SER:OG	1:A:77:HIS:N	0.42	2.52	4	1
1:A:98:GLU:CD	1:A:98:GLU:C	0.42	2.87	4	1
1:A:14:VAL:HG13	1:A:15:ALA:N	0.42	2.29	5	2
2:B:34:GLN:OE1	2:B:44:GLN:OE1	0.42	2.37	6	1
1:A:147:LEU:C	1:A:147:LEU:CD1	0.42	2.92	7	2
1:A:25:ASN:CG	1:A:56:ARG:HH22	0.42	2.23	11	1
2:B:52:GLU:C	2:B:53:PHE:CD1	0.42	2.97	12	2
1:A:104:LEU:CD1	1:A:104:LEU:C	0.42	2.92	13	1
1:A:27:LEU:O	1:A:29:GLN:CD	0.42	2.62	14	1
1:A:113:ASP:O	1:A:117:GLU:OE2	0.42	2.36	17	1
1:A:71:LEU:O	1:A:72:HIS:C	0.42	2.62	20	1
1:A:32:ASP:OD1	1:A:33:HIS:CE1	0.42	2.72	1	1
1:A:123:GLY:O	1:A:124:ALA:C	0.42	2.62	1	3
1:A:30:GLY:C	1:A:31:ASP:OD1	0.42	2.63	9	3
1:A:109:PHE:CE1	2:B:57:LYS:NZ	0.42	2.85	5	1
1:A:153:GLU:CD	1:A:153:GLU:C	0.42	2.87	5	1
1:A:7:GLN:CD	1:A:12:ASN:OD1	0.42	2.62	7	1
1:A:74:ALA:O	1:A:77:HIS:NE2	0.42	2.51	9	1
1:A:130:ASN:OD1	1:A:131:LYS:N	0.42	2.52	9	1
1:A:2:ASP:C	1:A:3:ASP:OD1	0.42	2.62	16	2
1:A:71:LEU:CD1	1:A:92:ASP:OD2	0.42	2.68	10	1
1:A:55:MET:O	1:A:56:ARG:C	0.42	2.62	11	1
2:B:41:CYS:O	2:B:43:GLN:CA	0.42	2.65	14	3
1:A:28:ASN:ND2	1:A:28:ASN:C	0.42	2.77	15	1
1:A:146:GLU:O	1:A:150:GLU:OE2	0.42	2.37	15	2
1:A:22:ASN:O	1:A:25:ASN:N	0.42	2.49	18	1
1:A:22:ASN:O	1:A:22:ASN:OD1	0.42	2.37	3	1
1:A:144:LEU:C	1:A:146:GLU:OE1	0.42	2.62	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:102:VAL:O	1:A:103:PRO:C	0.42	2.62	15	1
1:A:153:GLU:C	1:A:153:GLU:OE1	0.42	2.63	2	1
1:A:160:ASN:OD1	1:A:160:ASN:O	0.42	2.37	2	1
2:B:11:GLU:CD	2:B:29:GLU:OE2	0.42	2.63	12	3
1:A:68:ASP:OD1	2:B:40:GLN:OE1	0.42	2.37	5	1
2:B:46:PRO:C	2:B:47:GLU:CD	0.42	2.87	5	1
1:A:7:GLN:OE1	1:A:7:GLN:C	0.42	2.62	7	1
1:A:154:LYS:HB2	1:A:154:LYS:HZ2	0.42	1.74	7	1
1:A:68:ASP:CG	1:A:73:LEU:HD21	0.42	2.40	12	1
1:A:66:GLY:C	1:A:67:ASP:CG	0.42	2.87	14	1
1:A:43:ARG:CZ	2:B:56:ARG:NH1	0.42	2.83	15	1
2:B:18:ALA:HB3	2:B:21:GLU:OE2	0.42	2.15	17	2
1:A:134:GLU:C	1:A:134:GLU:CD	0.42	2.86	17	1
1:A:81:ASP:N	1:A:81:ASP:OD1	0.42	2.53	18	1
1:A:64:ASN:CG	1:A:65:ARG:NH1	0.42	2.78	20	1
2:B:27:ASN:OD1	2:B:29:GLU:OE1	0.42	2.37	20	1
1:A:135:MET:SD	1:A:135:MET:C	0.42	3.03	1	1
2:B:37:VAL:O	2:B:37:VAL:CG2	0.42	2.67	1	1
1:A:32:ASP:C	1:A:34:GLY:H	0.42	2.22	7	1
1:A:135:MET:O	1:A:138:ASP:OD1	0.42	2.37	8	1
2:B:44:GLN:NE2	2:B:45:PHE:N	0.42	2.68	10	1
1:A:105:HIS:C	1:A:108:CYS:HG	0.42	2.22	14	1
1:A:131:LYS:C	1:A:132:TYR:CD1	0.42	2.97	14	1
2:B:18:ALA:C	2:B:21:GLU:OE2	0.42	2.63	16	1
1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD23	0.42	1.75	19	1
1:A:64:ASN:O	1:A:65:ARG:C	0.42	2.62	18	3
1:A:24:GLU:C	1:A:26:ASP:OD1	0.42	2.62	6	2
1:A:44:GLU:OE1	1:A:44:GLU:O	0.42	2.37	16	1
1:A:66:GLY:C	1:A:68:ASP:OD1	0.42	2.62	16	1
1:A:4:ILE:HD13	1:A:4:ILE:N	0.42	2.28	17	1
1:A:147:LEU:C	1:A:149:ARG:N	0.42	2.76	17	1
1:A:66:GLY:O	1:A:67:ASP:OD1	0.42	2.37	6	3
1:A:67:ASP:O	1:A:67:ASP:OD2	0.42	2.37	10	2
1:A:19:TRP:O	1:A:22:ASN:CG	0.42	2.62	17	2
1:A:66:GLY:O	1:A:68:ASP:OD1	0.42	2.38	16	2
2:B:25:ASN:ND2	2:B:29:GLU:N	0.42	2.68	5	1
1:A:153:GLU:OE1	1:A:158:ASN:OD1	0.42	2.37	6	1
1:A:154:LYS:C	1:A:156:GLY:N	0.42	2.76	6	1
1:A:24:GLU:O	1:A:26:ASP:OD2	0.42	2.37	15	2
1:A:150:GLU:C	1:A:150:GLU:OE1	0.42	2.63	12	1
2:B:18:ALA:CB	2:B:21:GLU:OE2	0.42	2.67	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:114:GLN:CG	1:A:115:VAL:N	0.42	2.83	3	2
1:A:20:LEU:O	1:A:22:ASN:OD1	0.42	2.37	3	1
1:A:28:ASN:O	1:A:28:ASN:OD1	0.42	2.37	3	1
1:A:108:CYS:C	1:A:139:LYS:HZ1	0.42	2.22	3	1
2:B:30:LEU:HD22	2:B:30:LEU:H	0.42	1.71	5	1
1:A:157:GLN:C	1:A:158:ASN:HD22	0.42	2.23	8	1
2:B:11:GLU:OE1	2:B:29:GLU:CD	0.42	2.63	8	1
2:B:61:HIS:ND1	2:B:65:MET:SD	0.42	2.93	9	1
1:A:124:ALA:O	1:A:128:ILE:HD13	0.42	2.14	11	1
1:A:61:ASN:ND2	1:A:61:ASN:N	0.42	2.68	12	1
1:A:148:LEU:O	1:A:152:ALA:N	0.42	2.50	14	1
1:A:66:GLY:C	1:A:67:ASP:OD1	0.42	2.62	20	1
2:B:59:CYS:O	2:B:60:GLU:C	0.41	2.62	4	4
1:A:8:CYS:SG	1:A:19:TRP:CH2	0.41	3.10	2	1
1:A:97:ASN:N	1:A:97:ASN:HD22	0.41	2.13	2	1
1:A:88:GLN:O	1:A:88:GLN:CG	0.41	2.68	6	2
1:A:74:ALA:O	1:A:75:ALA:C	0.41	2.63	4	2
1:A:3:ASP:OD1	1:A:5:PHE:CD2	0.41	2.73	12	1
1:A:111:GLY:O	1:A:112:GLN:CD	0.41	2.62	14	1
1:A:67:ASP:OD2	1:A:97:ASN:C	0.41	2.63	15	1
1:A:38:LEU:HD12	1:A:58:ALA:HB1	0.41	1.90	2	1
1:A:113:ASP:O	1:A:114:GLN:C	0.41	2.62	6	3
2:B:52:GLU:O	2:B:52:GLU:OE1	0.41	2.37	5	1
1:A:47:SER:O	1:A:51:GLU:CB	0.41	2.69	8	1
2:B:36:PHE:C	2:B:37:VAL:CG1	0.41	2.93	10	1
1:A:77:HIS:O	1:A:110:TRP:CE3	0.41	2.73	11	1
1:A:67:ASP:CG	1:A:98:GLU:CD	0.41	2.88	12	1
1:A:24:GLU:O	1:A:26:ASP:OD1	0.41	2.37	13	1
1:A:21:ASP:O	1:A:21:ASP:CG	0.41	2.62	16	1
1:A:43:ARG:HH22	2:B:56:ARG:NH2	0.41	2.13	19	1
2:B:58:TYR:O	2:B:59:CYS:C	0.41	2.62	1	1
1:A:16:VAL:HG11	1:A:46:ARG:NH2	0.41	2.30	6	1
2:B:34:GLN:O	2:B:37:VAL:CG1	0.41	2.68	9	2
1:A:31:ASP:C	1:A:33:HIS:N	0.41	2.75	15	2
1:A:67:ASP:OD1	1:A:67:ASP:O	0.41	2.38	14	1
1:A:101:ASN:CG	2:B:40:GLN:HE22	0.41	2.23	17	1
1:A:9:ARG:O	1:A:46:ARG:NH2	0.41	2.52	18	1
1:A:113:ASP:OD2	1:A:114:GLN:N	0.41	2.53	19	1
1:A:43:ARG:CZ	2:B:56:ARG:HH22	0.41	2.28	4	1
2:B:52:GLU:N	2:B:52:GLU:OE1	0.41	2.54	5	2
2:B:57:LYS:H	2:B:57:LYS:NZ	0.41	2.04	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:33:HIS:NE2	1:A:65:ARG:CZ	0.41	2.83	13	1
1:A:51:GLU:CG	1:A:52:MET:N	0.41	2.83	15	1
1:A:70:PRO:O	1:A:74:ALA:N	0.41	2.43	16	1
1:A:99:HIS:CD2	1:A:131:LYS:HZ1	0.41	2.32	20	1
1:A:145:ARG:O	1:A:146:GLU:C	0.41	2.63	6	1
1:A:32:ASP:C	1:A:34:GLY:N	0.41	2.79	7	1
1:A:93:ILE:CG2	1:A:94:ASN:N	0.41	2.83	14	1
1:A:99:HIS:NE2	2:B:40:GLN:O	0.41	2.53	17	1
2:B:11:GLU:O	2:B:11:GLU:OE2	0.41	2.38	17	1
1:A:93:ILE:CG1	1:A:94:ASN:N	0.41	2.83	18	1
1:A:2:ASP:CB	1:A:6:THR:OG1	0.41	2.69	19	1
1:A:32:ASP:OD2	1:A:33:HIS:NE2	0.41	2.53	1	1
1:A:25:ASN:HD22	1:A:56:ARG:HH21	0.41	1.56	4	1
2:B:9:THR:HG22	2:B:15:GLY:O	0.41	2.15	4	3
1:A:25:ASN:OD1	1:A:56:ARG:CZ	0.41	2.69	5	1
1:A:53:LEU:O	1:A:53:LEU:HD13	0.41	2.15	6	3
1:A:14:VAL:CG2	1:A:15:ALA:N	0.41	2.83	9	1
1:A:35:PHE:N	1:A:65:ARG:HH12	0.41	2.13	9	1
1:A:67:ASP:C	1:A:68:ASP:CG	0.41	2.88	16	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:60:ILE:N	0.41	2.31	17	1
2:B:17:PHE:CD2	2:B:32:HIS:CD2	0.41	3.09	19	1
1:A:65:ARG:NE	1:A:65:ARG:C	0.41	2.79	20	1
2:B:51:TYR:O	2:B:63:PHE:CE2	0.41	2.74	20	1
1:A:113:ASP:CG	1:A:114:GLN:N	0.41	2.78	1	4
2:B:58:TYR:CZ	2:B:66:LEU:CD1	0.41	3.04	4	1
1:A:62:VAL:CG2	1:A:63:MET:N	0.41	2.83	5	1
1:A:35:PHE:CE1	1:A:65:ARG:CZ	0.41	3.04	9	1
2:B:43:GLN:O	2:B:44:GLN:C	0.41	2.62	9	1
1:A:153:GLU:C	1:A:153:GLU:OE2	0.41	2.64	14	1
1:A:145:ARG:HG2	1:A:146:GLU:H	0.41	1.76	17	1
1:A:151:ARG:HH12	1:A:154:LYS:NZ	0.41	2.13	18	1
1:A:76:SER:O	1:A:110:TRP:CH2	0.41	2.74	5	1
2:B:53:PHE:HB2	2:B:63:PHE:CE2	0.41	2.51	7	1
1:A:51:GLU:HB3	1:A:85:LYS:HZ1	0.41	1.75	13	1
2:B:49:LEU:N	2:B:49:LEU:CD1	0.41	2.84	18	1
1:A:124:ALA:O	1:A:128:ILE:HD11	0.41	2.15	1	1
1:A:39:HIS:NE2	1:A:64:ASN:CG	0.41	2.78	2	1
1:A:67:ASP:OD1	1:A:97:ASN:OD1	0.41	2.38	2	1
1:A:81:ASP:CG	1:A:82:ILE:N	0.41	2.78	3	1
1:A:16:VAL:O	1:A:20:LEU:CB	0.41	2.69	4	1
1:A:131:LYS:H	1:A:131:LYS:CD	0.41	2.29	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:2:ASP:CB	1:A:5:PHE:CD2	0.41	3.04	7	1
1:A:119:LEU:HD13	1:A:119:LEU:H	0.41	1.66	7	1
1:A:43:ARG:O	1:A:44:GLU:C	0.41	2.63	8	1
1:A:74:ALA:C	1:A:76:SER:N	0.41	2.77	8	1
1:A:51:GLU:CD	1:A:52:MET:N	0.41	2.78	9	1
1:A:61:ASN:O	1:A:62:VAL:C	0.41	2.62	20	2
1:A:32:ASP:OD2	1:A:33:HIS:CD2	0.41	2.74	12	1
1:A:71:LEU:CD1	1:A:71:LEU:H	0.41	2.29	12	1
1:A:111:GLY:N	1:A:112:GLN:NE2	0.41	2.69	12	1
2:B:38:CYS:HB3	2:B:41:CYS:H	0.41	1.75	19	2
1:A:22:ASN:HD21	1:A:25:ASN:CA	0.41	2.29	13	1
1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CD1	0.41	2.88	13	1
2:B:12:ARG:CD	2:B:12:ARG:C	0.41	2.94	15	1
1:A:124:ALA:C	1:A:125:LEU:CD2	0.41	2.91	16	1
2:B:57:LYS:HD2	2:B:57:LYS:N	0.41	2.31	16	1
1:A:11:GLY:C	1:A:13:ALA:N	0.41	2.78	17	1
1:A:23:THR:N	1:A:24:GLU:OE2	0.41	2.53	17	1
1:A:137:VAL:HG12	1:A:149:ARG:HE	0.41	1.76	19	1
1:A:154:LYS:NZ	1:A:158:ASN:ND2	0.41	2.68	1	1
1:A:65:ARG:N	1:A:65:ARG:CD	0.41	2.80	4	1
1:A:133:GLY:O	1:A:134:GLU:C	0.41	2.63	5	1
1:A:116:ALA:O	1:A:119:LEU:HD22	0.41	2.15	7	1
1:A:132:TYR:C	1:A:134:GLU:N	0.41	2.79	7	1
1:A:4:ILE:H	1:A:4:ILE:CD1	0.41	2.29	8	1
1:A:50:VAL:HG13	1:A:51:GLU:N	0.41	2.31	8	1
2:B:17:PHE:CD1	2:B:17:PHE:O	0.41	2.74	9	1
1:A:72:HIS:NE2	1:A:101:ASN:OD1	0.41	2.54	10	1
1:A:151:ARG:NH2	1:A:154:LYS:NZ	0.41	2.69	18	1
1:A:43:ARG:HH21	2:B:56:ARG:HH21	0.40	1.57	2	1
1:A:80:ARG:CZ	1:A:114:GLN:NE2	0.40	2.83	7	1
2:B:17:PHE:O	2:B:17:PHE:HD1	0.40	1.98	9	1
1:A:15:ALA:O	1:A:19:TRP:NE1	0.40	2.54	18	1
1:A:31:ASP:OD1	1:A:31:ASP:N	0.40	2.53	2	1
1:A:4:ILE:CD1	1:A:4:ILE:H	0.40	2.28	6	1
1:A:160:ASN:H	1:A:160:ASN:HD22	0.40	1.58	6	1
2:B:40:GLN:C	2:B:40:GLN:NE2	0.40	2.78	6	1
1:A:57:GLY:O	1:A:58:ALA:C	0.40	2.63	9	1
1:A:149:ARG:NH1	1:A:149:ARG:CG	0.40	2.81	12	1
1:A:159:LEU:HD23	1:A:159:LEU:H	0.40	1.77	1	1
2:B:50:PHE:CZ	2:B:57:LYS:HB2	0.40	2.51	1	1
1:A:80:ARG:CD	1:A:81:ASP:N	0.40	2.85	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:109:PHE:N	1:A:139:LYS:NZ	0.40	2.67	3	1
2:B:66:LEU:N	2:B:66:LEU:HD23	0.40	2.31	14	1
2:B:17:PHE:HD1	2:B:17:PHE:O	0.40	1.99	15	1
1:A:4:ILE:O	1:A:6:THR:N	0.40	2.54	16	1
1:A:27:LEU:HD12	1:A:27:LEU:H	0.40	1.76	16	1
1:A:43:ARG:NE	2:B:56:ARG:HH22	0.40	2.13	16	1
2:B:47:GLU:O	2:B:49:LEU:CD1	0.40	2.69	18	1
1:A:160:ASN:ND2	1:A:160:ASN:H	0.40	2.15	1	1
1:A:16:VAL:CG2	1:A:17:ARG:N	0.40	2.84	4	1
1:A:59:ARG:NH1	1:A:59:ARG:CG	0.40	2.85	4	1
2:B:64:GLN:O	2:B:65:MET:C	0.40	2.63	7	1
1:A:67:ASP:CB	1:A:99:HIS:NE2	0.40	2.84	11	1
1:A:49:VAL:CG1	1:A:50:VAL:N	0.40	2.84	16	1
1:A:2:ASP:OD1	1:A:3:ASP:OD2	0.40	2.39	20	1
1:A:72:HIS:CE1	1:A:101:ASN:OD1	0.40	2.75	2	1
2:B:50:PHE:CD2	2:B:50:PHE:C	0.40	2.98	2	1
1:A:85:LYS:NZ	1:A:89:TYR:CE1	0.40	2.90	9	1
1:A:63:MET:SD	1:A:69:THR:N	0.40	2.95	13	1
1:A:130:ASN:OD1	1:A:131:LYS:CE	0.40	2.69	20	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	159/171 (93%)	118±3 (74±2%)	30±3 (19±2%)	11±2 (7±2%)	2	16
2	B	60/70 (86%)	50±1 (84±2%)	6±1 (11±2%)	3±1 (6±2%)	2	21
All	All	4380/4820 (91%)	3373 (77%)	721 (16%)	286 (7%)	2	18

All 42 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	144	LEU	20
2	B	42	PHE	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	13	ALA	19
1	A	67	ASP	18
1	A	125	LEU	18
1	A	129	CYS	18
1	A	48	ALA	17
2	B	27	ASN	15
1	A	130	ASN	14
2	B	7	SER	10
2	B	8	ALA	8
1	A	97	ASN	8
1	A	145	ARG	8
1	A	57	GLY	8
1	A	2	ASP	6
1	A	46	ARG	6
1	A	146	GLU	6
1	A	27	LEU	5
1	A	134	GLU	5
1	A	157	GLN	5
1	A	29	GLN	5
1	A	111	GLY	4
2	B	28	GLY	4
1	A	47	SER	4
2	B	19	PRO	4
2	B	20	ALA	4
1	A	156	GLY	3
1	A	98	GLU	3
1	A	26	ASP	2
1	A	3	ASP	2
1	A	28	ASN	2
1	A	22	ASN	2
1	A	92	ASP	2
1	A	23	THR	2
1	A	10	GLU	2
1	A	49	VAL	1
1	A	101	ASN	1
1	A	7	GLN	1
2	B	21	GLU	1
1	A	124	ALA	1
1	A	5	PHE	1
1	A	65	ARG	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	131/142 (92%)	105±4 (80±3%)	26±4 (20±3%)	3	33
2	B	51/57 (89%)	36±2 (71±5%)	15±2 (29±5%)	1	19
All	All	3640/3980 (91%)	2830 (78%)	810 (22%)	2	29

All 138 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	16	VAL	20
2	B	17	PHE	20
2	B	22	LYS	20
2	B	41	CYS	20
2	B	62	ASP	20
2	B	56	ARG	19
2	B	42	PHE	18
2	B	57	LYS	17
1	A	97	ASN	16
1	A	102	VAL	14
1	A	36	SER	14
1	A	114	GLN	14
1	A	18	LEU	13
1	A	93	ILE	13
1	A	69	THR	13
2	B	66	LEU	13
1	A	53	LEU	13
2	B	50	PHE	13
1	A	80	ARG	12
2	B	27	ASN	12
1	A	65	ARG	11
1	A	125	LEU	11
1	A	159	LEU	11
2	B	38	CYS	11
1	A	39	HIS	10
1	A	135	MET	9
2	B	61	HIS	9
2	B	63	PHE	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
2	B	64	GLN	9
1	A	23	THR	9
2	B	44	GLN	9
1	A	59	ARG	9
1	A	154	LYS	8
2	B	12	ARG	8
1	A	38	LEU	8
1	A	56	ARG	8
2	B	52	GLU	8
2	B	65	MET	8
1	A	86	LEU	8
1	A	61	ASN	8
1	A	17	ARG	7
1	A	144	LEU	7
1	A	50	VAL	7
1	A	60	ILE	7
1	A	4	ILE	7
1	A	6	THR	6
1	A	14	VAL	6
1	A	148	LEU	6
2	B	30	LEU	6
2	B	34	GLN	6
1	A	9	ARG	6
1	A	101	ASN	6
1	A	90	LYS	6
1	A	139	LYS	6
2	B	37	VAL	6
1	A	5	PHE	6
1	A	145	ARG	6
1	A	63	MET	6
1	A	115	VAL	5
1	A	131	LYS	5
1	A	158	ASN	5
1	A	85	LYS	5
2	B	40	GLN	5
1	A	29	GLN	5
1	A	96	VAL	5
1	A	141	LYS	5
1	A	20	LEU	5
1	A	150	GLU	5
1	A	22	ASN	4
1	A	87	LEU	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	94	ASN	4
1	A	126	VAL	4
1	A	149	ARG	4
1	A	112	GLN	4
2	B	45	PHE	4
1	A	92	ASP	4
1	A	99	HIS	4
1	A	33	HIS	4
1	A	49	VAL	4
1	A	120	VAL	4
1	A	151	ARG	4
1	A	25	ASN	4
1	A	12	ASN	3
1	A	43	ARG	3
1	A	98	GLU	3
1	A	27	LEU	3
1	A	88	GLN	3
1	A	104	LEU	3
1	A	130	ASN	3
1	A	46	ARG	3
1	A	153	GLU	3
2	B	10	CYS	3
2	B	13	CYS	3
2	B	47	GLU	3
1	A	31	ASP	3
1	A	79	HIS	2
1	A	28	ASN	2
1	A	24	GLU	2
1	A	127	SER	2
1	A	44	GLU	2
1	A	128	ILE	2
1	A	147	LEU	2
2	B	59	CYS	2
2	B	49	LEU	2
2	B	51	TYR	2
1	A	157	GLN	2
2	B	43	GLN	2
2	B	21	GLU	2
1	A	19	TRP	2
1	A	55	MET	1
1	A	10	GLU	1
1	A	42	CYS	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	64	ASN	1
1	A	77	HIS	1
1	A	26	ASP	1
1	A	62	VAL	1
1	A	71	LEU	1
1	A	82	ILE	1
1	A	119	LEU	1
1	A	155	MET	1
1	A	67	ASP	1
1	A	129	CYS	1
2	B	53	PHE	1
1	A	106	TYR	1
1	A	118	ASP	1
1	A	35	PHE	1
1	A	51	GLU	1
1	A	73	LEU	1
1	A	137	VAL	1
2	B	23	ILE	1
2	B	33	GLU	1
1	A	2	ASP	1
1	A	110	TRP	1
1	A	160	ASN	1
1	A	52	MET	1
1	A	117	GLU	1
1	A	84	GLN	1
2	B	9	THR	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

Of 2 ligands modelled in this entry, 2 are monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

The following chains have linkage breaks:

Mol	Chain	Number of breaks
2	10-B	1
2	12-B	1
2	13-B	1
2	2-B	1
2	3-B	1
2	4-B	1
2	5-B	1
2	7-B	1
2	8-B	1
2	9-B	1
2	11-B	1
2	17-B	1
2	18-B	1
2	6-B	1
2	14-B	1
2	16-B	1
2	20-B	1

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
10	B	42:PHE	C	43:GLN	N	1.20
12	B	42:PHE	C	43:GLN	N	1.19
13	B	42:PHE	C	43:GLN	N	1.19
2	B	42:PHE	C	43:GLN	N	1.18
3	B	42:PHE	C	43:GLN	N	1.18
4	B	42:PHE	C	43:GLN	N	1.18
5	B	42:PHE	C	43:GLN	N	1.18
7	B	42:PHE	C	43:GLN	N	1.18
8	B	42:PHE	C	43:GLN	N	1.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
9	B	42:PHE	C	43:GLN	N	1.18
11	B	42:PHE	C	43:GLN	N	1.18
17	B	42:PHE	C	43:GLN	N	1.18
18	B	42:PHE	C	43:GLN	N	1.18
6	B	42:PHE	C	43:GLN	N	1.17
14	B	42:PHE	C	43:GLN	N	1.17
16	B	42:PHE	C	43:GLN	N	1.16
20	B	42:PHE	C	43:GLN	N	1.16

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided