



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 8, 2026 – 04:42 AM UTC

PDB ID : 1RF8 / pdb_00001rf8
Title : Solution structure of the yeast translation initiation factor eIF4E in complex with m7GDP and eIF4GI residues 393 to 490
Authors : Gross, J.D.; Moerke, N.J.; von der Haar, T.; Lugovskoy, A.A.; Sachs, A.B.; McCarthy, J.E.G.; Wagner, G.
Deposited on : 2003-11-07

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

MolProbity	:	4-5-2 with Phenix2.0
Mogul	:	2022.3.0, CSD as543be (2022)
Buster-report	:	wwPDB partial adaption of 1.1.7 (2018)
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

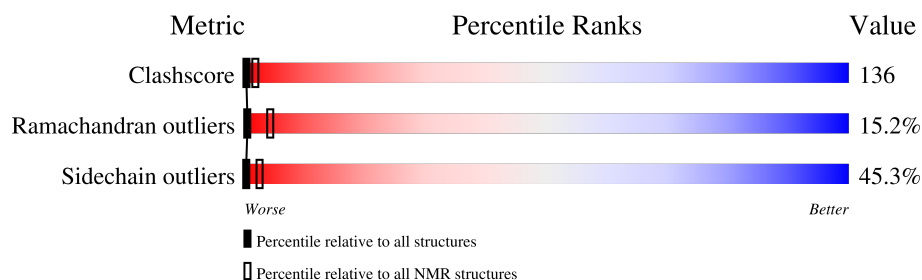
1 Overall quality at a glance

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	213	
2	B	100	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 11 models. Model 2 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:22-A:50, A:56-A:188, A:193-A:202, A:210-A:213, B:234-B:308 (251)	1.33	2

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. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 4, 5, 9, 10, 11
2	2, 3, 6, 7, 8

3 Entry composition

There are 4 unique types of molecules in this entry. The entry contains 5073 atoms, of which 2506 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Eukaryotic translation initiation factor 4E.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	213	Total	C	H	N	O	S	0
			3371	1089	1663	285	329	5	

There are 4 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	120	CYS	ARG	conflict	UNP P07260
A	132	CYS	ARG	conflict	UNP P07260
A	169	CYS	SER	conflict	UNP P07260
A	200	CYS	SER	conflict	UNP P07260

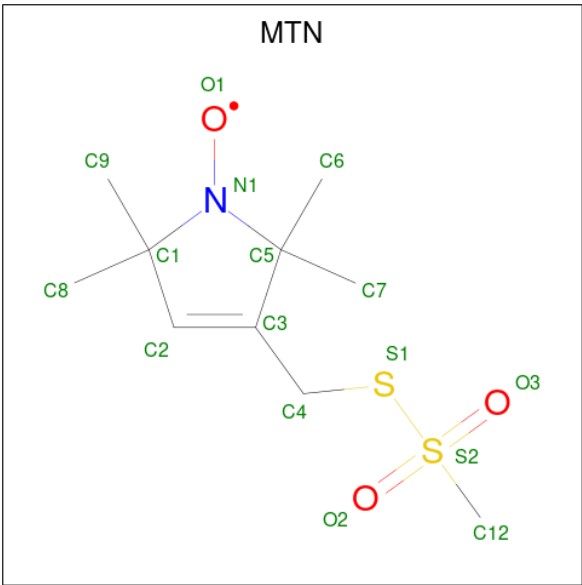
- Molecule 2 is a protein called Eukaryotic initiation factor 4F subunit p150.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
2	B	100	Total	C	H	N	O	S	0
			1550	498	768	123	160	1	

There are 2 discrepancies between the modelled and reference sequences:

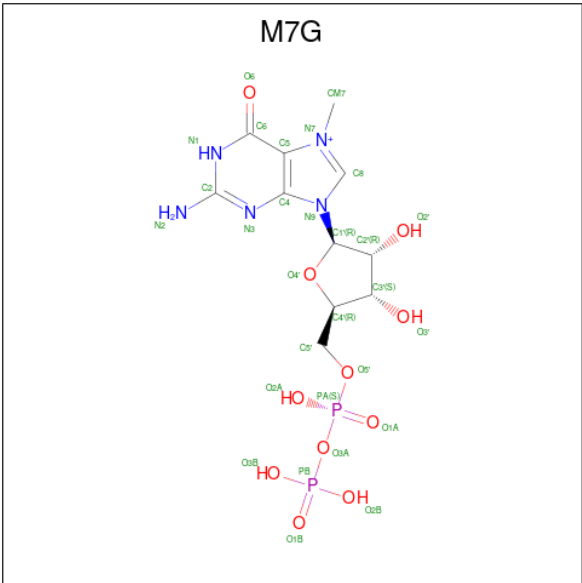
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
B	215	GLY	-	cloning artifact	UNP P39935
B	216	SER	-	cloning artifact	UNP P39935

- Molecule 3 is S-[(1-oxyl-2,2,5,5-tetramethyl-2,5-dihydro-1H-pyrrol-3-yl)methyl] methanesulfonothioate (CCD ID: MTN) (formula: C₁₀H₁₈NO₃S₂).



Mol	Chain	Residues	Atoms					
			Total	C	H	N	O	S
3	A	1	27	9	15	1	1	1
3	A	1	27	9	15	1	1	1
3	A	1	27	9	15	1	1	1
3	A	1	27	9	15	1	1	1

- Molecule 4 is 7N-METHYL-8-HYDROGUANOSINE-5'-DIPHOSPHATE (CCD ID: M7G) (formula: C₁₁H₁₈N₅O₁₁P₂).



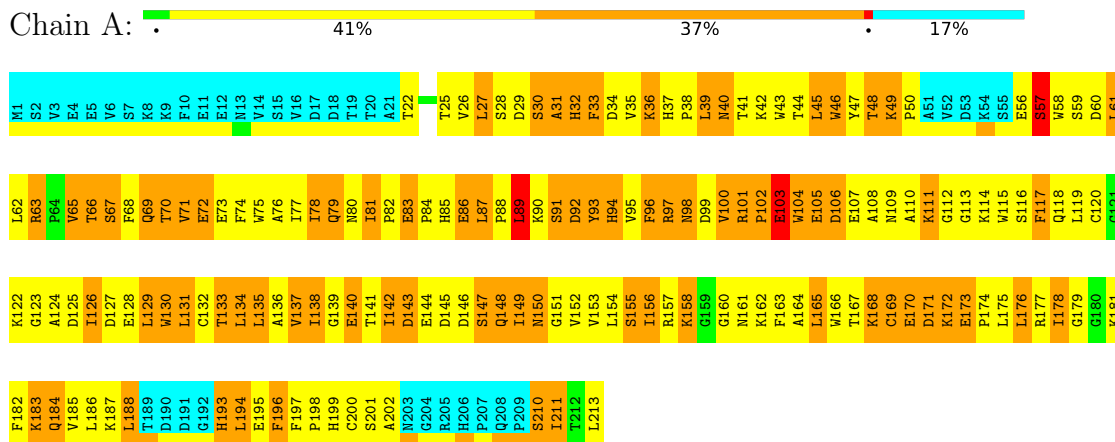
Mol	Chain	Residues	Atoms					
			Total	C	H	N	O	P
4	A	1	44	11	15	5	11	2

4 Residue-property plots

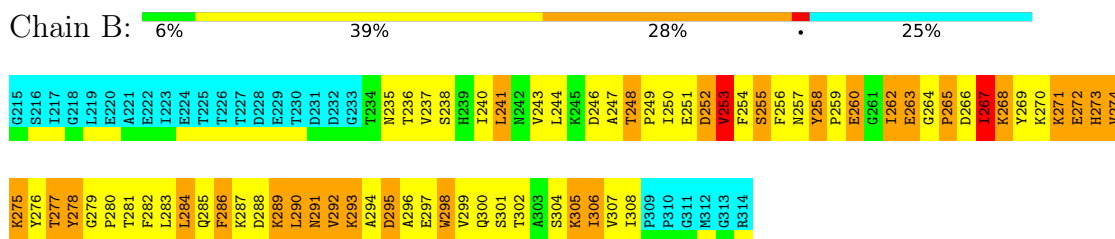
4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 4E



- Molecule 2: Eukaryotic initiation factor 4F subunit p150

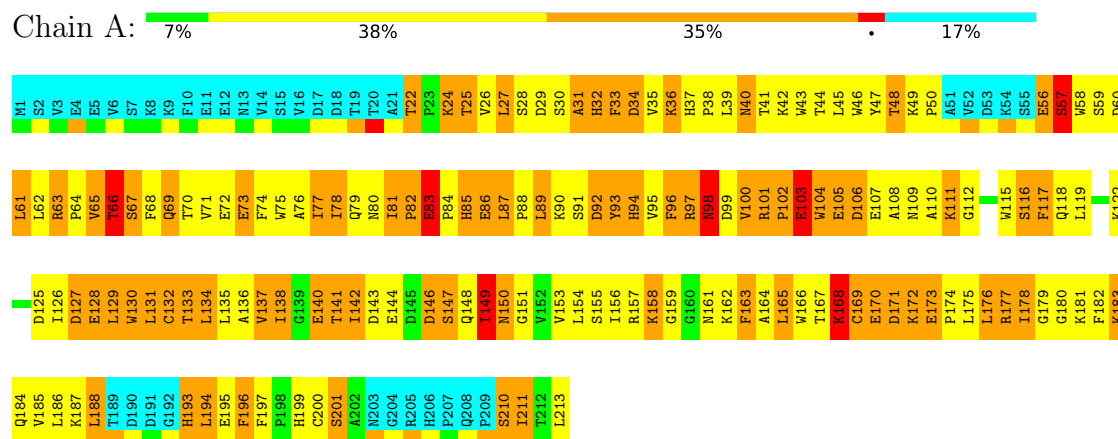


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

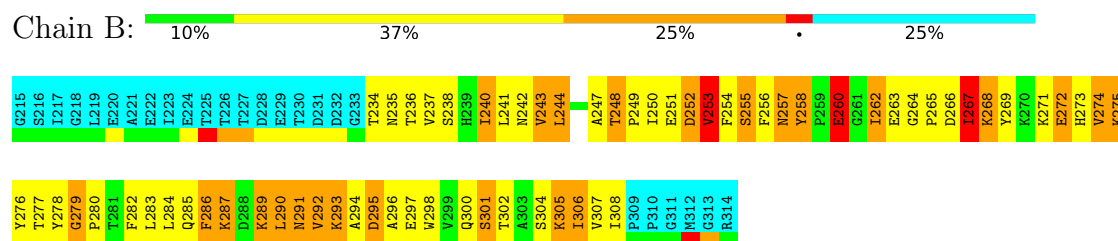
Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 4E

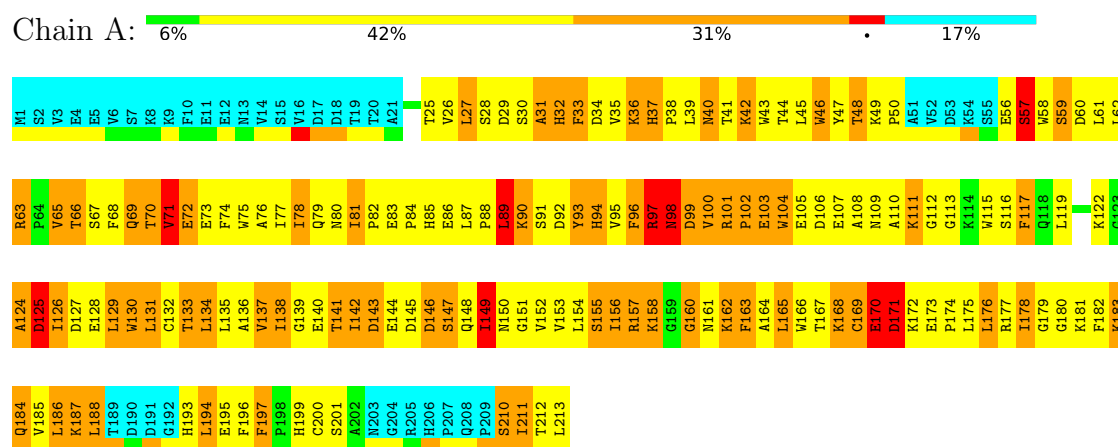


- Molecule 2: Eukaryotic initiation factor 4F subunit p150

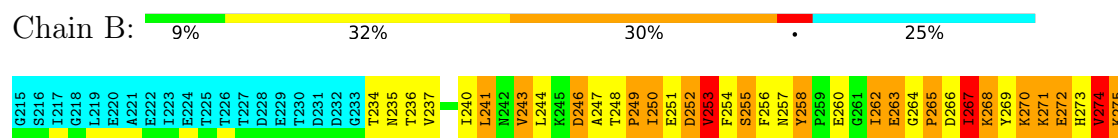


4.2.2 Score per residue for model 2 (medoid)

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 4E



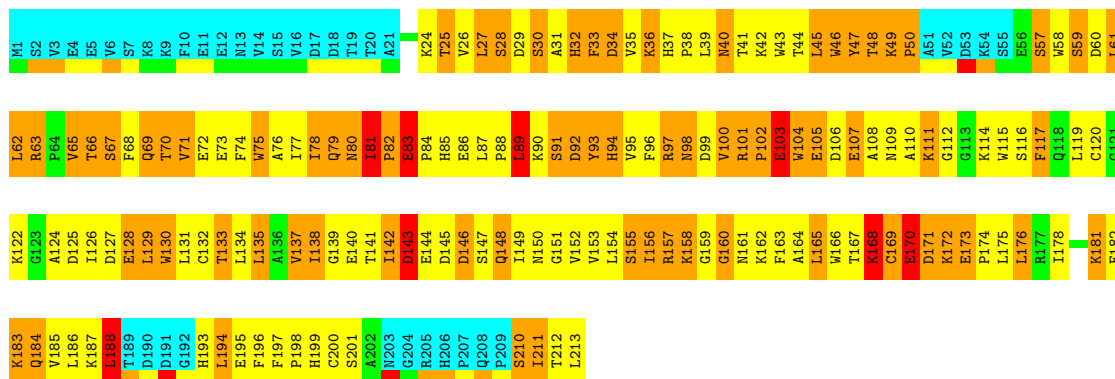
- Molecule 2: Eukaryotic initiation factor 4F subunit p150



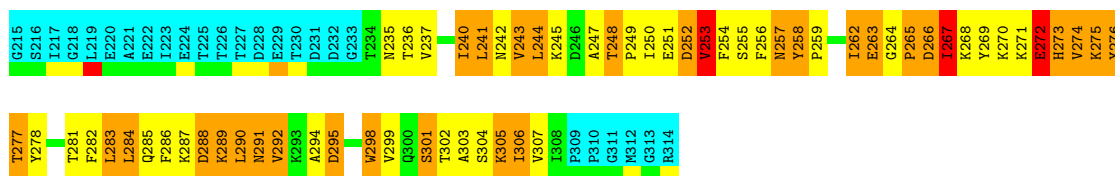


4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 4E

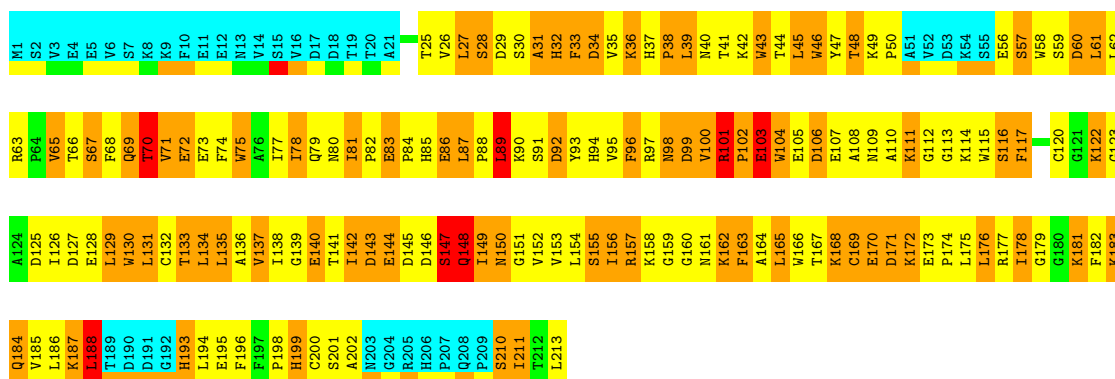


- Molecule 2: Eukaryotic initiation factor 4F subunit p150

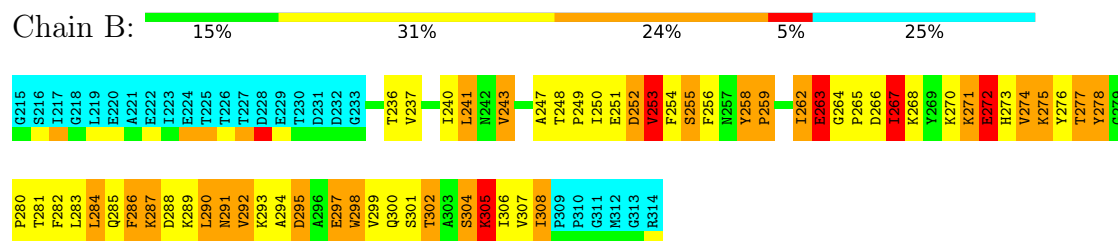


4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 4E

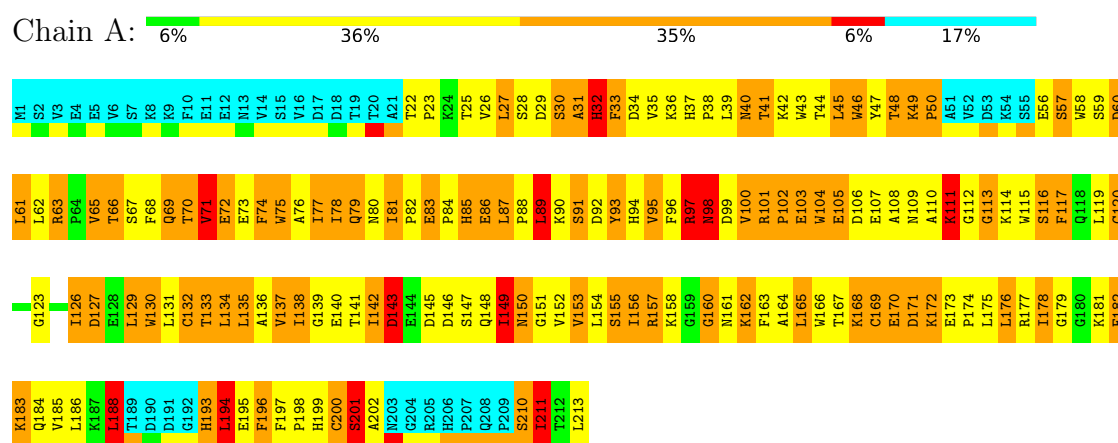


- Molecule 2: Eukaryotic initiation factor 4F subunit p150

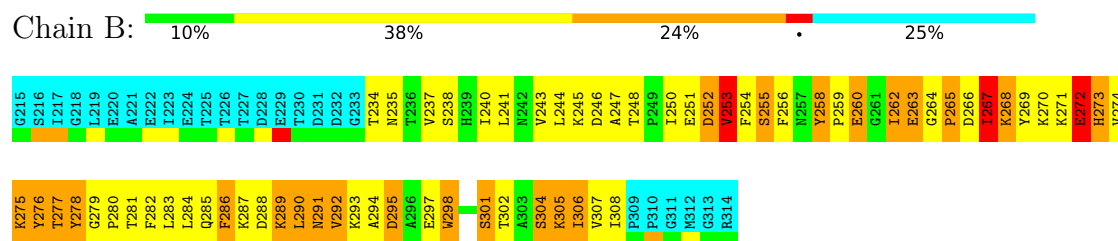


4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 4E

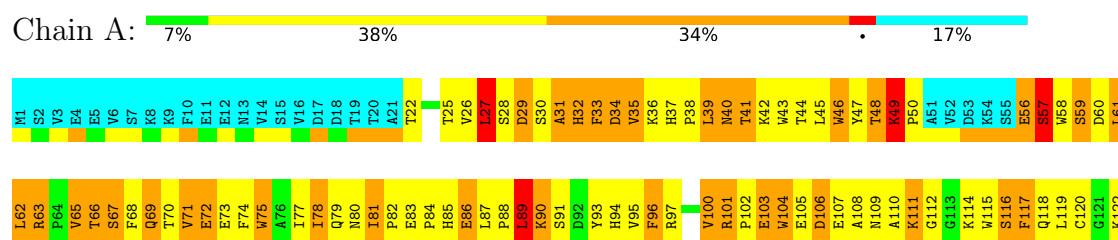


- Molecule 2: Eukaryotic initiation factor 4F subunit p150



4.2.6 Score per residue for model 6

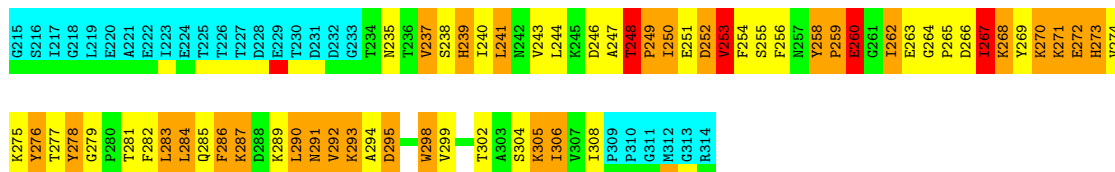
- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 4E





- Molecule 2: Eukaryotic initiation factor 4F subunit p150

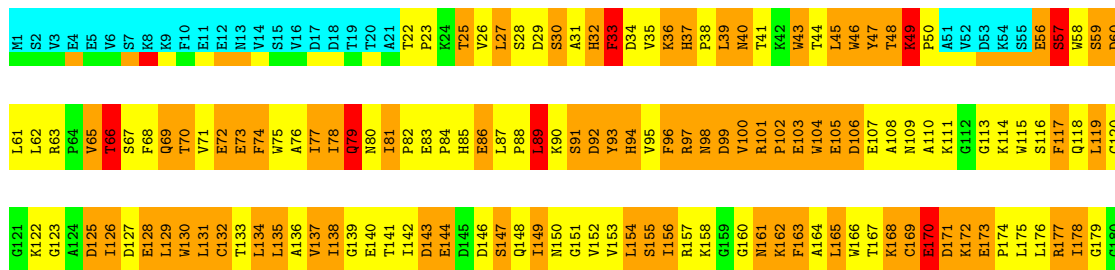
Chain B: 14% 29% 28% 25%



4.2.7 Score per residue for model 7

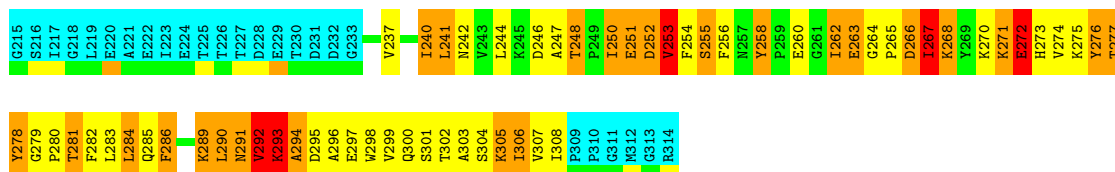
- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 4E

Chain A: 5% 38% 37% 17%



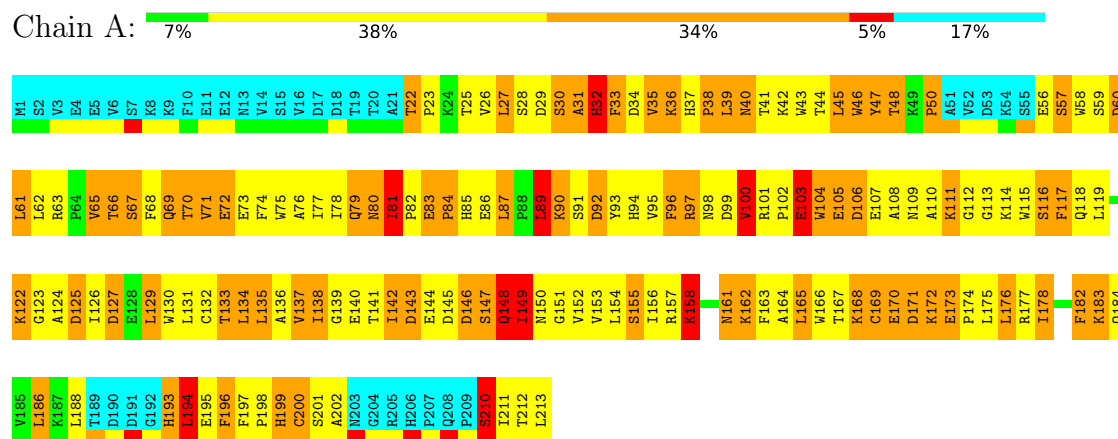
- Molecule 2: Eukaryotic initiation factor 4F subunit p150

Chain B: 14% 31% 25% 5% 25%

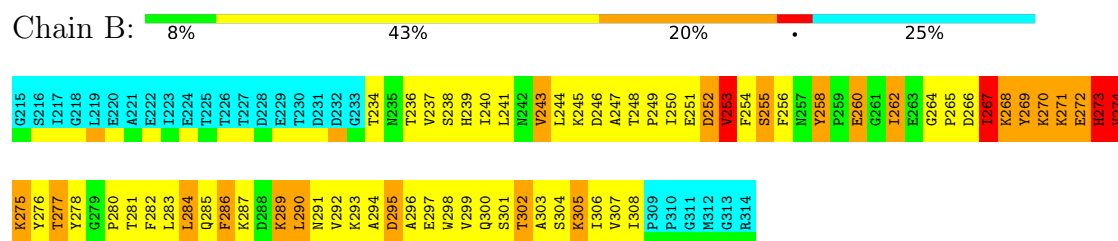


4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 4E

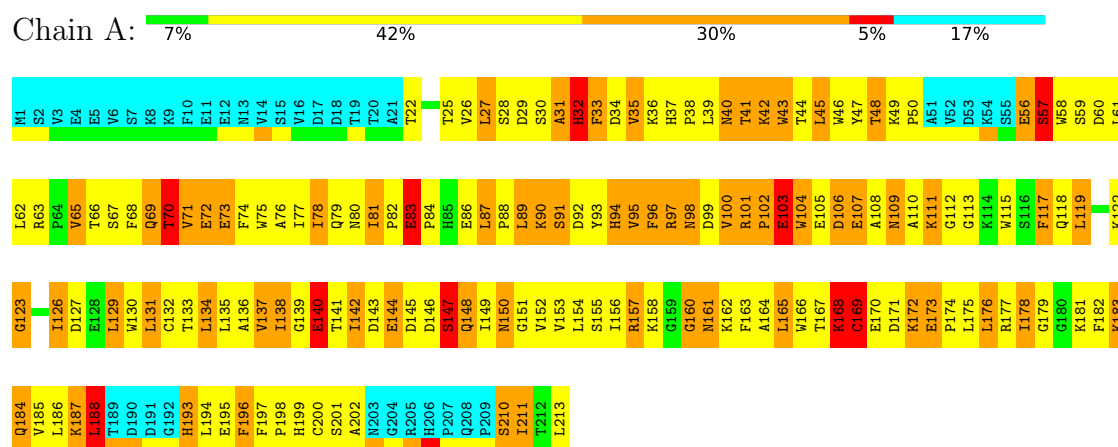


- Molecule 2: Eukaryotic initiation factor 4F subunit p150

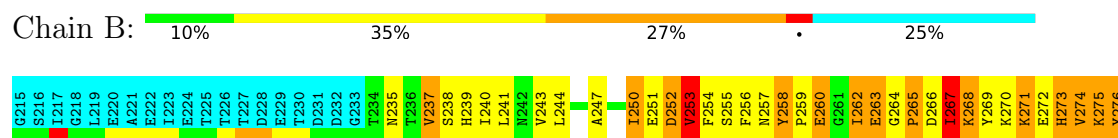


4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 4E



- Molecule 2: Eukaryotic initiation factor 4F subunit p150

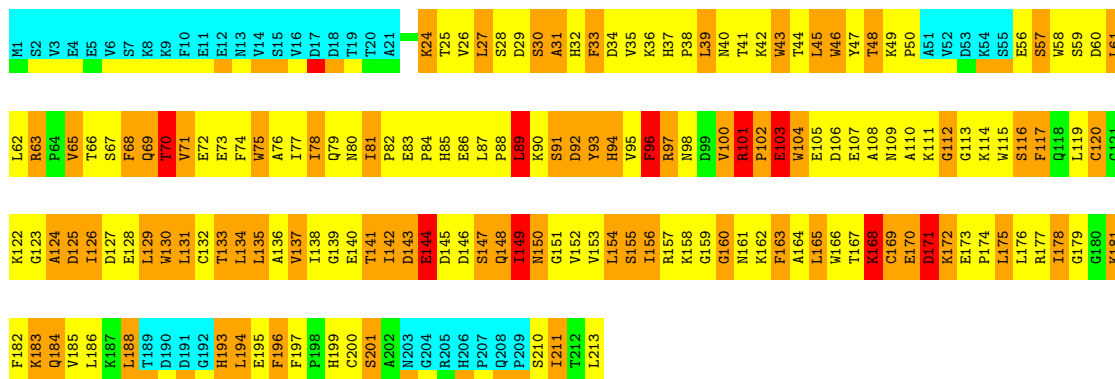




4.2.10 Score per residue for model 10

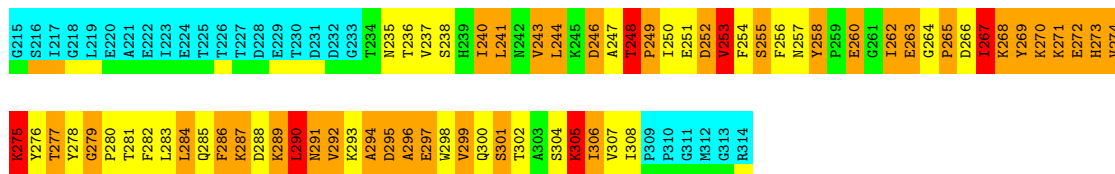
- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 4E

Chain A: 5% 41% 32% 17%



- Molecule 2: Eukaryotic initiation factor 4F subunit p150

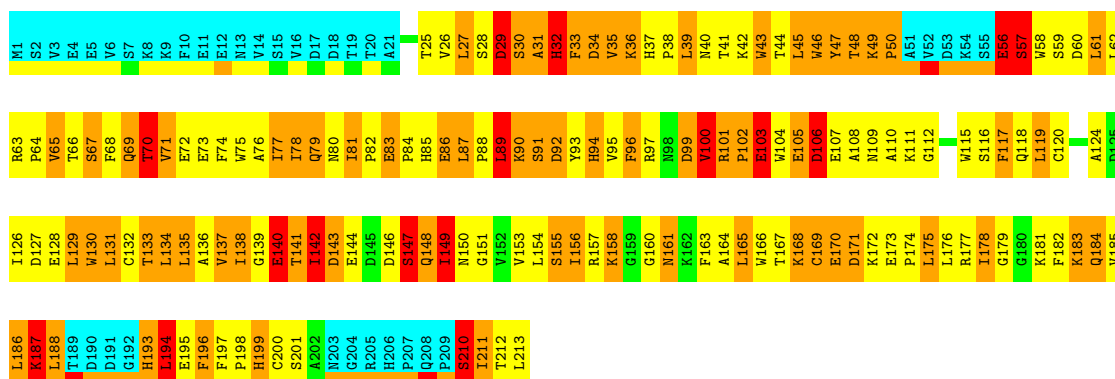
Chain B: 7% 27% 35% 6% 25%



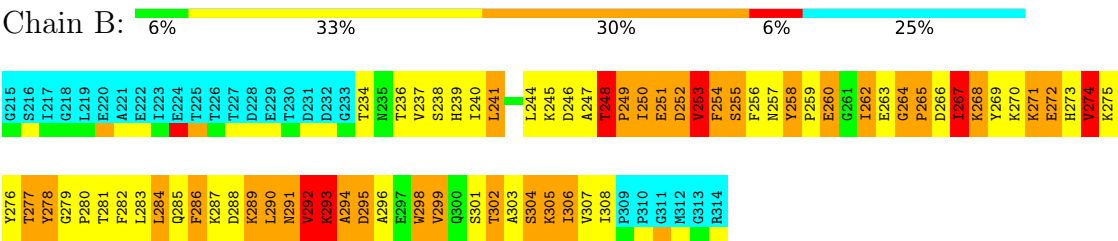
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Eukaryotic translation initiation factor 4E

Chain A: 8% 36% 32% 8% 17%



● Molecule 2: Eukaryotic initiation factor 4F subunit p150



5 Refinement protocol and experimental data overview

Of the 50 calculated structures, 11 were deposited, based on the following criterion: *structures with the least restraint violations*.

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

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

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: MTN, M7G

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts 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	1428	1403	1397	458±20
2	B	605	608	606	197±20
3	A	48	60	60	1±1
4	A	29	15	16	16±4
All	All	23210	22946	22869	6285

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 136.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:250:ILE:HD11	2:B:256:PHE:CE1	1.14	1.77	8	8
1:A:135:LEU:HD21	2:B:283:LEU:HD13	1.13	1.15	8	3
1:A:35:VAL:CG1	2:B:250:ILE:HD12	1.07	1.79	7	7
2:B:250:ILE:HD11	2:B:256:PHE:CZ	1.07	1.84	7	11
1:A:149:ILE:HD11	1:A:167:THR:HG22	1.07	1.10	11	5
2:B:241:LEU:HD11	2:B:298:TRP:CE3	1.06	1.84	3	7
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:134:LEU:HD11	1.05	1.86	8	2
1:A:142:ILE:HD13	2:B:274:VAL:HG13	1.05	1.26	4	1
1:A:196:PHE:CE1	1:A:211:ILE:HD12	1.02	1.88	9	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:134:LEU:HD22	1:A:152:VAL:HG11	1.01	1.29	3	2
1:A:153:VAL:HG21	1:A:166:TRP:CH2	1.01	1.89	9	7
2:B:237:VAL:HG22	2:B:292:VAL:CG2	1.01	1.85	4	6
2:B:253:VAL:HG13	2:B:278:TYR:CE2	1.00	1.92	4	4
1:A:100:VAL:CG2	1:A:110:ALA:HB2	1.00	1.85	3	2
1:A:71:VAL:HG21	2:B:283:LEU:HD22	1.00	1.34	8	5
1:A:93:TYR:CE2	1:A:154:LEU:HD13	0.99	1.91	3	3
1:A:65:VAL:HG12	2:B:299:VAL:HG21	0.99	1.33	8	1
1:A:149:ILE:CD1	1:A:167:THR:HG22	0.99	1.86	5	6
1:A:165:LEU:HD11	1:A:167:THR:HG23	0.99	1.27	7	2
1:A:135:LEU:HD13	1:A:136:ALA:N	0.98	1.73	7	3
1:A:149:ILE:CG1	1:A:167:THR:HG22	0.98	1.88	7	5
1:A:138:ILE:HD13	1:A:139:GLY:N	0.97	1.74	6	2
1:A:48:THR:HG21	1:A:58:TRP:CZ3	0.97	1.92	3	7
1:A:40:ASN:ND2	1:A:142:ILE:HD12	0.97	1.75	11	2
1:A:135:LEU:HD13	2:B:283:LEU:CD1	0.96	1.89	4	4
2:B:250:ILE:HD11	2:B:256:PHE:CE2	0.96	1.95	6	3
2:B:241:LEU:HD12	2:B:298:TRP:CE3	0.96	1.96	11	1
1:A:135:LEU:CD2	2:B:283:LEU:HD13	0.96	1.91	8	3
1:A:100:VAL:HG12	1:A:150:ASN:OD1	0.95	1.61	1	5
1:A:131:LEU:HD13	1:A:132:CYS:N	0.95	1.77	4	3
1:A:80:ASN:O	1:A:81:ILE:HD12	0.95	1.59	7	7
2:B:290:LEU:O	2:B:292:VAL:HG22	0.94	1.61	1	7
1:A:142:ILE:HD13	2:B:277:THR:HG23	0.94	1.38	8	1
1:A:43:TRP:CH2	1:A:138:ILE:HD13	0.94	1.97	10	2
2:B:264:GLY:CA	2:B:267:ILE:HD11	0.94	1.92	1	10
1:A:75:TRP:CE3	1:A:78:ILE:HD11	0.93	1.98	8	1
1:A:134:LEU:HD13	1:A:152:VAL:HG21	0.92	1.37	8	2
1:A:135:LEU:HD13	2:B:283:LEU:HD12	0.92	1.42	4	1
2:B:237:VAL:HG21	2:B:294:ALA:HB2	0.92	1.38	4	5
2:B:253:VAL:HG11	2:B:278:TYR:CD1	0.91	2.00	2	7
1:A:196:PHE:CE1	1:A:213:LEU:HD12	0.91	2.00	3	6
1:A:87:LEU:HD11	1:A:91:SER:HB3	0.91	1.42	5	2
2:B:274:VAL:HG11	2:B:277:THR:HG23	0.91	1.40	4	1
1:A:135:LEU:HD21	2:B:283:LEU:CD1	0.91	1.94	8	3
1:A:127:ASP:O	1:A:131:LEU:HD12	0.91	1.66	3	8
1:A:58:TRP:O	1:A:62:LEU:HD12	0.91	1.66	3	1
1:A:26:VAL:HG23	1:A:33:PHE:CE1	0.91	1.99	2	1
1:A:45:LEU:HD21	1:A:77:ILE:HG12	0.90	1.41	10	9
1:A:45:LEU:HD11	1:A:77:ILE:HG21	0.90	1.43	3	5
2:B:237:VAL:HG21	2:B:294:ALA:CB	0.90	1.96	4	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:LEU:HD12	2:B:262:ILE:HD13	0.90	1.40	5	1
1:A:87:LEU:HD11	1:A:91:SER:CB	0.90	1.96	5	4
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:CB	0.90	1.96	3	1
1:A:137:VAL:HG22	1:A:146:ASP:OD1	0.90	1.64	1	3
2:B:239:HIS:O	2:B:243:VAL:HG23	0.90	1.66	9	2
1:A:45:LEU:HD21	1:A:77:ILE:CG1	0.90	1.96	10	9
1:A:75:TRP:CB	2:B:290:LEU:HD12	0.89	1.97	5	10
1:A:25:THR:HG21	2:B:256:PHE:CE2	0.89	2.03	8	3
1:A:39:LEU:HD13	2:B:276:TYR:O	0.89	1.67	5	2
1:A:75:TRP:HB3	2:B:290:LEU:HD12	0.89	1.43	3	9
2:B:264:GLY:HA3	2:B:267:ILE:HD11	0.88	1.42	3	5
2:B:264:GLY:HA2	2:B:267:ILE:HD11	0.88	1.46	4	10
1:A:65:VAL:HG12	2:B:299:VAL:CG2	0.88	1.98	8	2
1:A:100:VAL:CG2	1:A:110:ALA:HB3	0.88	1.99	8	2
2:B:306:ILE:HD13	2:B:307:VAL:N	0.87	1.84	9	7
1:A:38:PRO:HD3	2:B:250:ILE:HG21	0.86	1.46	3	2
2:B:240:ILE:O	2:B:243:VAL:HG22	0.86	1.68	2	5
1:A:132:CYS:HA	1:A:135:LEU:HD23	0.86	1.43	6	2
1:A:108:ALA:HB1	1:A:111:LYS:HZ1	0.86	1.30	8	1
2:B:237:VAL:HG12	2:B:241:LEU:HG	0.86	1.44	5	1
1:A:35:VAL:HG12	2:B:250:ILE:HD12	0.86	1.46	5	5
1:A:181:LYS:O	1:A:185:VAL:HG23	0.86	1.70	4	7
1:A:149:ILE:HD11	1:A:167:THR:CG2	0.86	1.98	11	3
1:A:71:VAL:HG23	2:B:286:PHE:CE2	0.86	2.05	1	2
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:138:ILE:HD13	0.86	2.06	5	2
1:A:38:PRO:O	1:A:39:LEU:HD22	0.86	1.70	1	4
1:A:58:TRP:CZ3	4:A:325:M7G:H82	0.86	2.05	11	3
1:A:25:THR:HG21	2:B:256:PHE:CE1	0.86	2.06	9	1
1:A:78:ILE:O	1:A:81:ILE:HG23	0.85	1.71	3	1
2:B:241:LEU:HD12	2:B:297:GLU:HB3	0.85	1.45	1	2
2:B:237:VAL:HG11	2:B:294:ALA:O	0.85	1.71	11	3
1:A:35:VAL:HG13	2:B:250:ILE:HD12	0.85	1.49	8	2
1:A:142:ILE:HD13	1:A:143:ASP:N	0.85	1.87	6	2
1:A:27:LEU:HD12	2:B:258:TYR:CG	0.85	2.07	9	3
1:A:36:LYS:O	2:B:250:ILE:HD13	0.85	1.72	9	4
1:A:88:PRO:C	1:A:89:LEU:HD22	0.84	1.97	2	4
2:B:296:ALA:O	2:B:299:VAL:HG22	0.84	1.71	11	2
1:A:45:LEU:HD23	1:A:66:THR:HB	0.84	1.49	1	6
2:B:237:VAL:HG22	2:B:292:VAL:O	0.84	1.72	9	1
1:A:100:VAL:HG23	1:A:110:ALA:HB3	0.84	1.48	8	2
1:A:93:TYR:CD2	1:A:154:LEU:HD13	0.84	2.07	7	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:LEU:HD13	1:A:62:LEU:O	0.84	1.73	3	1
1:A:71:VAL:HG11	2:B:283:LEU:HD21	0.84	1.48	3	3
2:B:253:VAL:HG11	2:B:278:TYR:CE1	0.84	2.07	7	3
1:A:172:LYS:O	1:A:176:LEU:HD22	0.84	1.71	3	2
1:A:39:LEU:HD22	1:A:69:GLN:O	0.83	1.73	2	1
1:A:188:LEU:HD13	1:A:193:HIS:N	0.83	1.87	8	1
1:A:69:GLN:HG3	2:B:307:VAL:HG11	0.83	1.49	11	1
1:A:84:PRO:HA	1:A:156:ILE:HD11	0.83	1.47	1	3
1:A:183:LYS:O	1:A:188:LEU:HD23	0.83	1.73	2	5
1:A:41:THR:HG23	1:A:43:TRP:CD1	0.83	2.08	9	9
1:A:71:VAL:HG22	1:A:75:TRP:CD1	0.83	2.08	10	6
1:A:126:ILE:HA	1:A:129:LEU:HD22	0.83	1.48	10	3
2:B:250:ILE:HD11	2:B:256:PHE:CD2	0.83	2.08	9	2
1:A:65:VAL:CG1	2:B:299:VAL:HG21	0.83	2.03	8	1
1:A:69:GLN:CG	2:B:307:VAL:HG11	0.83	2.03	11	1
1:A:38:PRO:CB	2:B:307:VAL:HG12	0.83	2.03	1	2
2:B:237:VAL:HG21	2:B:294:ALA:CA	0.83	2.03	4	6
1:A:47:TYR:CE2	1:A:65:VAL:HG21	0.82	2.09	8	7
1:A:108:ALA:HB1	1:A:111:LYS:NZ	0.82	1.89	8	2
1:A:73:GLU:CD	2:B:302:THR:HG22	0.82	2.00	9	2
2:B:296:ALA:O	2:B:299:VAL:HG13	0.82	1.74	10	1
1:A:77:ILE:HD13	2:B:298:TRP:CH2	0.82	2.10	1	2
1:A:70:THR:HG21	2:B:305:LYS:HG2	0.82	1.48	2	7
2:B:237:VAL:HG11	2:B:294:ALA:HB2	0.82	1.50	6	5
2:B:241:LEU:HD11	2:B:298:TRP:CD2	0.81	2.09	10	7
1:A:134:LEU:O	1:A:138:ILE:HG23	0.81	1.76	10	1
1:A:58:TRP:CZ2	4:A:325:M7G:HM72	0.81	2.11	1	1
1:A:25:THR:OG1	1:A:27:LEU:HD22	0.81	1.75	10	1
1:A:36:LYS:CD	2:B:306:ILE:HG22	0.81	2.06	9	2
1:A:50:PRO:HA	1:A:61:LEU:HD13	0.81	1.52	4	2
1:A:153:VAL:HB	1:A:164:ALA:HB3	0.80	1.52	2	11
2:B:258:TYR:O	2:B:262:ILE:HD12	0.80	1.76	5	4
2:B:237:VAL:CG2	2:B:294:ALA:HB2	0.80	2.06	4	4
1:A:93:TYR:CD2	1:A:154:LEU:HD22	0.80	2.12	9	2
1:A:135:LEU:HD12	1:A:136:ALA:N	0.80	1.91	4	3
1:A:71:VAL:HG11	2:B:283:LEU:CD2	0.80	2.06	7	5
1:A:33:PHE:O	2:B:247:ALA:HB2	0.80	1.77	6	1
1:A:194:LEU:HD23	1:A:196:PHE:CZ	0.79	2.12	1	2
2:B:267:ILE:HG21	2:B:279:GLY:N	0.79	1.91	11	1
1:A:38:PRO:C	1:A:39:LEU:HD22	0.79	2.02	3	4
1:A:62:LEU:HD22	1:A:63:ARG:N	0.79	1.92	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:294:ALA:HB1	2:B:298:TRP:HB2	0.79	1.55	4	5
1:A:130:TRP:CD1	1:A:134:LEU:HD12	0.79	2.13	3	1
1:A:71:VAL:HG21	2:B:283:LEU:CD2	0.79	2.07	2	3
1:A:135:LEU:C	1:A:135:LEU:HD22	0.79	2.02	8	3
1:A:137:VAL:HG22	1:A:146:ASP:CG	0.79	2.01	11	3
1:A:183:LYS:HG3	1:A:188:LEU:HD22	0.79	1.54	9	2
2:B:237:VAL:HG22	2:B:292:VAL:HG23	0.79	1.55	6	3
1:A:87:LEU:HD11	1:A:156:ILE:HD12	0.79	1.53	1	4
1:A:153:VAL:HG21	1:A:166:TRP:CZ2	0.79	2.13	6	10
1:A:167:THR:HG21	1:A:175:LEU:HD22	0.79	1.54	6	6
1:A:140:GLU:HB2	2:B:277:THR:HG22	0.78	1.53	10	1
1:A:89:LEU:HD22	1:A:89:LEU:N	0.78	1.94	6	4
1:A:143:ASP:HB3	2:B:274:VAL:HG11	0.78	1.54	9	1
1:A:148:GLN:C	1:A:149:ILE:HD12	0.78	2.03	3	3
1:A:133:THR:HG22	1:A:182:PHE:CZ	0.78	2.13	4	2
1:A:38:PRO:CD	2:B:250:ILE:HG21	0.78	2.06	3	4
1:A:149:ILE:HG13	1:A:167:THR:HG22	0.78	1.55	7	4
1:A:27:LEU:HD12	2:B:258:TYR:CD2	0.78	2.13	9	4
1:A:36:LYS:HD3	2:B:306:ILE:HG22	0.78	1.56	2	2
1:A:74:PHE:CE1	1:A:78:ILE:HD11	0.78	2.13	7	2
1:A:135:LEU:HD22	1:A:135:LEU:O	0.78	1.77	8	3
2:B:298:TRP:CD2	2:B:302:THR:HG23	0.78	2.12	4	1
1:A:100:VAL:HG22	1:A:101:ARG:N	0.77	1.94	11	9
2:B:274:VAL:HG13	2:B:275:LYS:N	0.77	1.93	2	2
2:B:241:LEU:HD21	2:B:301:SER:CB	0.77	2.09	3	1
2:B:237:VAL:HG13	2:B:298:TRP:CE3	0.77	2.14	11	2
1:A:134:LEU:HD23	1:A:134:LEU:N	0.77	1.94	7	7
1:A:135:LEU:HD11	2:B:280:PRO:HA	0.77	1.57	11	6
1:A:37:HIS:HA	2:B:250:ILE:HD13	0.77	1.57	4	7
1:A:71:VAL:CG1	2:B:283:LEU:HD21	0.77	2.10	1	3
1:A:45:LEU:HD21	1:A:77:ILE:CD1	0.77	2.10	9	6
1:A:172:LYS:HA	1:A:175:LEU:HD12	0.77	1.56	3	7
2:B:250:ILE:CD1	2:B:256:PHE:CE1	0.77	2.67	7	8
1:A:44:THR:HG22	1:A:67:SER:HB3	0.76	1.57	7	6
2:B:237:VAL:HG21	2:B:294:ALA:C	0.76	2.05	10	3
1:A:196:PHE:CD1	1:A:211:ILE:HD12	0.76	2.15	4	5
2:B:269:TYR:CD1	2:B:274:VAL:HG22	0.76	2.15	10	1
1:A:129:LEU:HB2	1:A:185:VAL:HG13	0.76	1.56	2	2
1:A:40:ASN:CG	1:A:142:ILE:HD12	0.76	2.06	11	1
2:B:237:VAL:HG21	2:B:294:ALA:N	0.76	1.95	4	4
1:A:130:TRP:CE2	1:A:134:LEU:HD11	0.76	2.15	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:183:LYS:HG2	1:A:188:LEU:HD21	0.76	1.56	2	1
1:A:66:THR:HG21	2:B:302:THR:OG1	0.76	1.81	4	3
1:A:38:PRO:HB3	2:B:307:VAL:HG12	0.76	1.55	1	2
1:A:149:ILE:HG23	1:A:150:ASN:N	0.76	1.96	5	9
1:A:89:LEU:N	1:A:89:LEU:HD12	0.76	1.96	8	2
1:A:26:VAL:HG11	2:B:290:LEU:HD23	0.75	1.57	6	4
1:A:71:VAL:HG11	2:B:283:LEU:HD23	0.75	1.58	9	4
2:B:268:LYS:HD3	2:B:277:THR:HG22	0.75	1.56	2	1
1:A:74:PHE:CE1	1:A:95:VAL:HG21	0.75	2.16	10	1
1:A:136:ALA:HB2	2:B:280:PRO:HB3	0.75	1.59	8	2
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:HG	0.75	1.59	1	6
1:A:78:ILE:HG22	1:A:81:ILE:HG23	0.75	1.58	3	1
2:B:269:TYR:CG	2:B:274:VAL:HG22	0.75	2.16	10	1
1:A:74:PHE:CD1	1:A:78:ILE:HD11	0.75	2.17	7	2
1:A:100:VAL:HG21	1:A:110:ALA:HB2	0.74	1.58	11	2
1:A:138:ILE:HD12	1:A:138:ILE:C	0.74	2.07	2	8
2:B:253:VAL:HG13	2:B:278:TYR:CZ	0.74	2.17	8	4
1:A:27:LEU:HD23	2:B:258:TYR:CG	0.74	2.17	10	2
1:A:100:VAL:HG13	1:A:107:GLU:OE2	0.74	1.82	3	2
1:A:80:ASN:C	1:A:81:ILE:HD12	0.74	2.05	7	1
1:A:72:GLU:O	2:B:290:LEU:HD11	0.74	1.82	4	11
1:A:70:THR:HG21	2:B:305:LYS:CG	0.74	2.12	2	3
1:A:153:VAL:HG21	1:A:166:TRP:CE2	0.74	2.16	5	1
1:A:26:VAL:HG12	2:B:289:LYS:HB2	0.74	1.59	6	4
1:A:132:CYS:CA	1:A:135:LEU:HD23	0.74	2.11	6	1
1:A:142:ILE:HD13	2:B:277:THR:OG1	0.74	1.82	7	1
1:A:135:LEU:HD12	1:A:135:LEU:C	0.74	2.08	4	3
1:A:39:LEU:HD21	2:B:278:TYR:CZ	0.74	2.18	5	3
2:B:265:PRO:HD2	2:B:267:ILE:HD11	0.74	1.60	11	1
1:A:126:ILE:HB	1:A:185:VAL:HG12	0.73	1.58	7	1
1:A:131:LEU:C	1:A:131:LEU:HD22	0.73	2.09	4	3
2:B:237:VAL:HG12	2:B:241:LEU:HD13	0.73	1.60	9	5
2:B:237:VAL:HG11	2:B:294:ALA:CB	0.73	2.14	6	3
1:A:87:LEU:HD11	1:A:91:SER:HB2	0.73	1.59	9	3
1:A:58:TRP:CH2	4:A:325:M7G:H82	0.73	2.18	11	1
2:B:237:VAL:HG21	2:B:294:ALA:O	0.73	1.83	10	3
2:B:241:LEU:HD21	2:B:298:TRP:HA	0.73	1.58	6	4
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:154:LEU:HD12	0.73	2.18	9	7
1:A:36:LYS:O	2:B:250:ILE:HG21	0.73	1.82	11	7
2:B:292:VAL:O	2:B:292:VAL:HG23	0.73	1.84	9	1
2:B:241:LEU:HD12	2:B:298:TRP:CD2	0.73	2.17	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:LEU:HD23	1:A:69:GLN:O	0.73	1.84	3	5
2:B:253:VAL:HG11	2:B:278:TYR:CG	0.73	2.19	2	5
1:A:100:VAL:HB	1:A:110:ALA:HB2	0.73	1.59	1	7
1:A:73:GLU:HG2	2:B:302:THR:HG22	0.73	1.59	3	1
1:A:62:LEU:HD22	1:A:62:LEU:C	0.72	2.09	3	1
1:A:50:PRO:HG2	1:A:61:LEU:HD22	0.72	1.60	7	2
1:A:115:TRP:CH2	1:A:175:LEU:HD23	0.72	2.19	10	3
1:A:48:THR:HG21	1:A:58:TRP:CE3	0.72	2.18	8	1
1:A:154:LEU:C	1:A:154:LEU:HD23	0.72	2.08	7	11
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:HB2	0.72	1.61	3	1
1:A:38:PRO:CG	2:B:308:ILE:HG23	0.72	2.14	6	2
1:A:142:ILE:HD13	2:B:277:THR:CG2	0.72	2.13	8	1
1:A:74:PHE:CE2	1:A:78:ILE:HD11	0.72	2.19	10	2
1:A:87:LEU:HD11	1:A:89:LEU:HD21	0.72	1.60	8	1
1:A:66:THR:HG21	2:B:302:THR:CB	0.72	2.15	4	2
1:A:71:VAL:CG2	2:B:283:LEU:HD22	0.72	2.13	8	4
1:A:100:VAL:HG22	1:A:102:PRO:HD2	0.72	1.61	2	6
1:A:134:LEU:HD13	1:A:152:VAL:CG2	0.72	2.12	8	2
1:A:47:TYR:O	1:A:62:LEU:HD23	0.72	1.85	5	5
1:A:87:LEU:O	1:A:87:LEU:HD23	0.72	1.84	8	2
1:A:133:THR:HG22	1:A:182:PHE:CE1	0.72	2.20	5	3
2:B:250:ILE:O	2:B:308:ILE:HG23	0.72	1.85	9	1
1:A:45:LEU:HA	1:A:95:VAL:HG22	0.71	1.60	1	2
1:A:196:PHE:HE1	1:A:213:LEU:HD12	0.71	1.43	3	4
1:A:100:VAL:HG22	1:A:107:GLU:HA	0.71	1.62	6	2
1:A:47:TYR:CD1	1:A:65:VAL:HG22	0.71	2.20	11	1
1:A:142:ILE:HD13	2:B:274:VAL:HG12	0.71	1.59	11	1
1:A:39:LEU:HD22	2:B:278:TYR:CZ	0.71	2.19	8	4
1:A:43:TRP:CE3	1:A:95:VAL:HG13	0.71	2.19	5	1
1:A:73:GLU:CG	2:B:302:THR:HG23	0.71	2.15	5	1
2:B:237:VAL:HG22	2:B:292:VAL:HG21	0.71	1.60	4	5
1:A:135:LEU:CD1	2:B:283:LEU:HD13	0.71	2.14	5	3
1:A:41:THR:HG21	1:A:138:ILE:O	0.71	1.85	2	3
1:A:58:TRP:CZ2	1:A:62:LEU:HD11	0.71	2.21	7	7
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:163:PHE:CE1	0.71	2.79	10	4
1:A:70:THR:HG23	1:A:73:GLU:OE1	0.71	1.86	4	2
1:A:26:VAL:HG22	2:B:289:LYS:HB3	0.71	1.62	8	2
1:A:138:ILE:HD13	1:A:138:ILE:C	0.71	2.10	6	2
1:A:142:ILE:HD13	1:A:143:ASP:H	0.71	1.43	6	1
1:A:73:GLU:HG3	2:B:302:THR:HG22	0.71	1.61	4	1
1:A:76:ALA:O	1:A:79:GLN:NE2	0.71	2.24	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:237:VAL:CG1	2:B:294:ALA:HB2	0.71	2.16	6	3
1:A:43:TRP:CE2	1:A:138:ILE:HD13	0.70	2.20	5	3
1:A:100:VAL:HG11	1:A:107:GLU:HA	0.70	1.62	1	8
1:A:134:LEU:HD13	1:A:152:VAL:HB	0.70	1.60	2	4
1:A:39:LEU:HD11	2:B:278:TYR:CE1	0.70	2.21	6	1
1:A:100:VAL:HG13	1:A:101:ARG:N	0.70	2.01	3	9
2:B:298:TRP:CE3	2:B:302:THR:HG23	0.70	2.20	4	1
1:A:27:LEU:HD21	2:B:282:PHE:CE1	0.70	2.21	10	1
2:B:241:LEU:HD13	2:B:301:SER:CB	0.70	2.17	8	2
2:B:240:ILE:CD1	2:B:292:VAL:HG11	0.70	2.16	11	1
2:B:274:VAL:HG13	2:B:277:THR:OG1	0.70	1.85	3	1
1:A:83:GLU:C	1:A:87:LEU:HD22	0.70	2.11	8	1
2:B:254:PHE:CD1	2:B:269:TYR:CD1	0.70	2.79	10	1
1:A:130:TRP:CE3	1:A:163:PHE:CE1	0.70	2.80	7	1
1:A:104:TRP:CD1	4:A:325:M7G:C6	0.70	2.75	3	4
1:A:78:ILE:HG22	1:A:81:ILE:CG2	0.70	2.15	3	1
2:B:269:TYR:CE1	2:B:274:VAL:HG13	0.70	2.21	10	1
2:B:253:VAL:HG21	2:B:278:TYR:CE1	0.70	2.21	2	1
2:B:306:ILE:HD11	2:B:308:ILE:HG12	0.70	1.63	11	1
1:A:108:ALA:HB1	1:A:111:LYS:HE2	0.70	1.64	10	2
1:A:96:PHE:CE2	1:A:166:TRP:CZ3	0.70	2.80	6	8
2:B:274:VAL:CG1	2:B:277:THR:HG23	0.70	2.16	4	2
1:A:165:LEU:HD11	1:A:167:THR:CG2	0.70	2.11	7	1
1:A:46:TRP:CZ3	1:A:96:PHE:CE1	0.69	2.80	9	4
1:A:38:PRO:CB	2:B:307:VAL:HG13	0.69	2.17	5	2
2:B:250:ILE:CG2	2:B:306:ILE:HG21	0.69	2.16	6	2
1:A:167:THR:HG21	1:A:175:LEU:CD2	0.69	2.17	8	2
1:A:172:LYS:HA	1:A:175:LEU:HD22	0.69	1.62	10	4
1:A:131:LEU:HD22	1:A:131:LEU:O	0.69	1.87	10	3
2:B:241:LEU:HD13	2:B:301:SER:HB3	0.69	1.64	1	2
1:A:48:THR:HG21	1:A:58:TRP:HZ3	0.69	1.47	3	2
1:A:33:PHE:CD1	1:A:33:PHE:N	0.69	2.59	8	9
1:A:45:LEU:HD23	1:A:66:THR:CB	0.69	2.16	8	3
1:A:132:CYS:HA	1:A:135:LEU:HD22	0.69	1.65	5	1
1:A:35:VAL:HG23	2:B:249:PRO:O	0.69	1.86	11	3
1:A:100:VAL:HG23	1:A:110:ALA:CB	0.69	2.16	8	1
2:B:237:VAL:HG21	2:B:294:ALA:HA	0.69	1.65	1	1
2:B:250:ILE:CD1	2:B:256:PHE:CE2	0.69	2.75	9	3
1:A:89:LEU:HD13	1:A:89:LEU:N	0.69	2.02	2	2
1:A:130:TRP:CE3	1:A:163:PHE:CZ	0.69	2.80	2	4
1:A:45:LEU:O	1:A:65:VAL:HG22	0.69	1.87	2	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:VAL:HG12	2:B:286:PHE:CE1	0.69	2.23	5	2
1:A:165:LEU:HD12	1:A:166:TRP:N	0.69	2.02	10	4
1:A:46:TRP:CH2	1:A:96:PHE:CZ	0.69	2.81	5	1
1:A:87:LEU:CD2	1:A:156:ILE:HD12	0.69	2.18	9	2
2:B:278:TYR:CD2	2:B:282:PHE:CE1	0.69	2.81	9	2
2:B:298:TRP:O	2:B:302:THR:HG23	0.69	1.88	9	3
1:A:117:PHE:CZ	1:A:130:TRP:CZ3	0.69	2.81	8	2
1:A:107:GLU:O	1:A:110:ALA:HB3	0.68	1.87	1	6
2:B:258:TYR:CZ	2:B:282:PHE:CE1	0.68	2.81	1	5
1:A:183:LYS:HG3	1:A:188:LEU:HD21	0.68	1.64	6	1
1:A:83:GLU:O	1:A:87:LEU:HD22	0.68	1.88	8	1
2:B:280:PRO:O	2:B:284:LEU:HD13	0.68	1.88	9	1
1:A:163:PHE:CD1	1:A:163:PHE:N	0.68	2.60	10	5
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:163:PHE:CZ	0.68	2.82	4	4
1:A:46:TRP:CH2	1:A:96:PHE:CE1	0.68	2.81	10	4
1:A:25:THR:HG23	1:A:37:HIS:CE1	0.68	2.23	1	1
1:A:76:ALA:HB3	2:B:298:TRP:HZ2	0.68	1.47	1	1
1:A:93:TYR:HD2	1:A:154:LEU:HD13	0.68	1.49	7	3
1:A:117:PHE:CD1	1:A:163:PHE:CD2	0.68	2.81	10	2
1:A:27:LEU:HD12	2:B:262:ILE:HD11	0.68	1.63	11	1
1:A:47:TYR:CE1	1:A:65:VAL:HG22	0.68	2.23	11	1
1:A:104:TRP:CD1	1:A:104:TRP:C	0.68	2.71	3	4
1:A:27:LEU:HD11	2:B:282:PHE:CE1	0.68	2.23	8	2
1:A:165:LEU:HD21	1:A:178:ILE:HG21	0.68	1.65	2	4
1:A:45:LEU:CD2	1:A:77:ILE:HD13	0.68	2.18	11	6
1:A:132:CYS:O	1:A:135:LEU:HD23	0.68	1.89	5	1
1:A:119:LEU:HD21	1:A:186:LEU:HB3	0.68	1.64	6	1
1:A:58:TRP:CD1	4:A:325:M7G:C4	0.68	2.77	4	6
1:A:137:VAL:HG21	1:A:146:ASP:OD2	0.68	1.88	6	1
1:A:104:TRP:HB3	4:A:325:M7G:HM73	0.68	1.66	1	2
1:A:130:TRP:CD1	1:A:130:TRP:C	0.68	2.72	3	8
1:A:111:LYS:CD	1:A:166:TRP:CG	0.68	2.77	11	3
1:A:78:ILE:HD11	1:A:95:VAL:CG2	0.68	2.19	3	1
1:A:184:GLN:HA	1:A:188:LEU:HD23	0.68	1.65	9	3
1:A:84:PRO:O	1:A:156:ILE:HD11	0.68	1.89	8	1
1:A:142:ILE:CD1	2:B:277:THR:HG23	0.68	2.15	8	1
1:A:58:TRP:CE2	4:A:325:M7G:C5	0.67	2.77	2	11
1:A:27:LEU:HD13	2:B:258:TYR:CD2	0.67	2.24	2	1
1:A:135:LEU:HD13	2:B:283:LEU:HB3	0.67	1.66	6	2
1:A:69:GLN:OE1	2:B:307:VAL:HG11	0.67	1.89	2	1
1:A:140:GLU:OE1	2:B:277:THR:HG22	0.67	1.90	4	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:THR:HG23	1:A:73:GLU:CB	0.67	2.18	8	4
1:A:27:LEU:HD21	2:B:282:PHE:CE2	0.67	2.24	3	2
1:A:132:CYS:HA	1:A:135:LEU:HD12	0.67	1.64	7	1
1:A:77:ILE:CD1	2:B:298:TRP:CH2	0.67	2.77	1	2
1:A:46:TRP:CZ3	1:A:96:PHE:CD1	0.67	2.83	4	1
1:A:46:TRP:CZ2	1:A:96:PHE:CE1	0.67	2.83	5	4
1:A:58:TRP:CD2	4:A:325:M7G:C4	0.67	2.78	11	1
1:A:74:PHE:CZ	1:A:95:VAL:HG21	0.67	2.25	11	1
1:A:96:PHE:CE2	1:A:166:TRP:CE3	0.67	2.82	8	3
1:A:58:TRP:CG	4:A:325:M7G:C4	0.67	2.78	3	6
1:A:44:THR:HG22	1:A:67:SER:CB	0.67	2.20	2	3
1:A:71:VAL:HG12	2:B:283:LEU:HD21	0.67	1.66	1	1
2:B:298:TRP:CE2	2:B:302:THR:HG22	0.67	2.25	2	2
1:A:58:TRP:CE3	4:A:325:M7G:H82	0.67	2.25	3	3
1:A:45:LEU:HD11	1:A:77:ILE:CG2	0.66	2.20	3	1
1:A:39:LEU:CD2	2:B:278:TYR:CZ	0.66	2.78	5	5
2:B:241:LEU:HD21	2:B:298:TRP:CA	0.66	2.20	6	1
1:A:66:THR:OG1	2:B:299:VAL:HG13	0.66	1.90	4	2
1:A:123:GLY:HA2	1:A:126:ILE:HD12	0.66	1.67	7	1
2:B:267:ILE:HG21	2:B:279:GLY:H	0.66	1.48	11	1
1:A:103:GLU:O	1:A:107:GLU:N	0.66	2.26	9	11
1:A:87:LEU:HD21	1:A:156:ILE:HD12	0.66	1.65	9	2
1:A:138:ILE:HD12	1:A:139:GLY:N	0.66	2.05	2	6
1:A:117:PHE:CE1	1:A:130:TRP:CH2	0.66	2.83	5	2
1:A:141:THR:O	1:A:142:ILE:HG22	0.66	1.89	11	1
1:A:58:TRP:CD1	4:A:325:M7G:C2	0.66	2.79	11	8
1:A:100:VAL:HG11	1:A:107:GLU:CA	0.66	2.21	5	5
1:A:130:TRP:CD1	1:A:131:LEU:N	0.66	2.63	6	4
1:A:45:LEU:O	1:A:65:VAL:HG23	0.66	1.91	8	6
1:A:73:GLU:CG	2:B:302:THR:HG22	0.66	2.21	4	1
1:A:87:LEU:O	1:A:87:LEU:HD12	0.66	1.89	10	3
1:A:46:TRP:CD1	1:A:46:TRP:N	0.66	2.64	7	9
1:A:130:TRP:CE3	1:A:163:PHE:CE2	0.66	2.84	4	4
1:A:136:ALA:HB1	1:A:140:GLU:CD	0.66	2.15	7	1
1:A:74:PHE:CZ	1:A:78:ILE:HD11	0.66	2.25	10	1
2:B:306:ILE:HD13	2:B:306:ILE:C	0.66	2.14	11	6
2:B:294:ALA:HB1	2:B:298:TRP:CB	0.66	2.21	3	5
1:A:134:LEU:CD1	1:A:163:PHE:CZ	0.66	2.78	6	1
1:A:89:LEU:HD23	1:A:156:ILE:CG2	0.66	2.21	1	1
1:A:58:TRP:CD1	4:A:325:M7G:C5	0.66	2.79	3	3
1:A:134:LEU:HD22	1:A:152:VAL:CG1	0.66	2.15	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:135:LEU:C	1:A:135:LEU:HD12	0.66	2.16	11	4
1:A:176:LEU:N	1:A:176:LEU:HD13	0.66	2.06	3	2
1:A:47:TYR:CE1	1:A:63:ARG:CB	0.65	2.79	4	6
2:B:253:VAL:CG1	2:B:278:TYR:CE1	0.65	2.80	7	5
2:B:249:PRO:HA	2:B:306:ILE:HG21	0.65	1.67	3	1
1:A:71:VAL:CG2	1:A:75:TRP:CD1	0.65	2.79	4	4
2:B:252:ASP:C	2:B:256:PHE:CE1	0.65	2.74	5	8
1:A:104:TRP:CE3	4:A:325:M7G:CM7	0.65	2.79	4	1
2:B:290:LEU:CD1	2:B:298:TRP:CH2	0.65	2.80	8	1
2:B:254:PHE:CZ	2:B:268:LYS:CA	0.65	2.79	11	1
1:A:135:LEU:HD11	2:B:283:LEU:CB	0.65	2.22	5	1
1:A:196:PHE:CD1	1:A:211:ILE:CG1	0.65	2.79	4	6
1:A:33:PHE:CZ	2:B:240:ILE:HG22	0.65	2.27	5	2
1:A:47:TYR:CE2	1:A:65:VAL:CG2	0.65	2.80	10	6
1:A:82:PRO:HG2	1:A:154:LEU:HD11	0.65	1.69	3	1
2:B:295:ASP:O	2:B:299:VAL:HG23	0.65	1.92	4	3
1:A:58:TRP:CZ2	1:A:62:LEU:CD1	0.65	2.80	8	6
1:A:27:LEU:HD13	1:A:27:LEU:N	0.65	2.06	10	1
2:B:237:VAL:HG13	2:B:298:TRP:CD2	0.65	2.25	11	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:138:ILE:HD12	0.65	2.26	4	1
1:A:165:LEU:CD1	1:A:167:THR:HG23	0.65	2.14	7	1
1:A:58:TRP:O	1:A:62:LEU:HD13	0.65	1.92	2	1
1:A:27:LEU:CD2	2:B:258:TYR:CD2	0.65	2.80	6	1
1:A:129:LEU:N	1:A:129:LEU:CD1	0.65	2.60	7	7
1:A:89:LEU:HD13	1:A:89:LEU:H	0.65	1.49	2	1
1:A:74:PHE:CE2	1:A:78:ILE:HD13	0.65	2.27	8	1
1:A:39:LEU:HD13	2:B:276:TYR:HB3	0.64	1.66	1	1
1:A:104:TRP:CE3	4:A:325:M7G:C5	0.64	2.80	4	6
1:A:142:ILE:HB	2:B:274:VAL:HG22	0.64	1.68	4	1
1:A:38:PRO:CG	2:B:250:ILE:HG21	0.64	2.22	3	2
1:A:135:LEU:HD13	2:B:283:LEU:HD13	0.64	1.68	9	4
1:A:26:VAL:HG22	2:B:289:LYS:HB2	0.64	1.69	7	2
2:B:250:ILE:CD1	2:B:256:PHE:CD2	0.64	2.80	9	2
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:154:LEU:CD1	0.64	2.80	9	1
1:A:58:TRP:NE1	4:A:325:M7G:C6	0.64	2.59	6	9
1:A:66:THR:CG2	1:A:68:PHE:CE2	0.64	2.80	11	3
2:B:254:PHE:CE2	2:B:268:LYS:N	0.64	2.66	11	1
2:B:291:ASN:O	2:B:292:VAL:HG13	0.64	1.93	1	4
1:A:83:GLU:N	1:A:84:PRO:CD	0.64	2.60	7	6
1:A:26:VAL:HG21	2:B:290:LEU:HD23	0.64	1.70	7	3
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:163:PHE:CD1	0.64	2.85	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:GLN:HG3	2:B:307:VAL:HG22	0.64	1.69	10	1
1:A:76:ALA:HB3	2:B:298:TRP:CZ2	0.64	2.28	1	1
1:A:78:ILE:HD11	1:A:95:VAL:HG21	0.64	1.68	3	1
1:A:25:THR:CG2	2:B:256:PHE:CE2	0.64	2.80	4	5
1:A:39:LEU:N	1:A:39:LEU:HD23	0.64	2.07	4	2
1:A:43:TRP:CH2	1:A:138:ILE:CD1	0.64	2.79	10	3
1:A:104:TRP:CE3	4:A:325:M7G:N7	0.64	2.66	4	1
1:A:58:TRP:CD1	4:A:325:M7G:N3	0.64	2.66	4	4
1:A:30:SER:O	1:A:31:ALA:HB3	0.64	1.92	11	8
2:B:253:VAL:CG1	2:B:278:TYR:CE2	0.64	2.80	8	2
1:A:39:LEU:CD1	2:B:278:TYR:CE1	0.64	2.81	6	1
1:A:83:GLU:HB3	1:A:87:LEU:HD13	0.64	1.68	8	1
1:A:142:ILE:HD13	2:B:272:GLU:CG	0.64	2.23	10	1
2:B:252:ASP:O	2:B:256:PHE:CD1	0.64	2.50	7	8
1:A:47:TYR:CD2	1:A:65:VAL:HG21	0.64	2.26	8	6
2:B:252:ASP:C	2:B:256:PHE:CE2	0.64	2.76	3	3
1:A:33:PHE:CZ	2:B:240:ILE:CG2	0.64	2.81	5	3
1:A:134:LEU:HD13	1:A:152:VAL:CB	0.64	2.22	4	3
2:B:278:TYR:CD1	2:B:278:TYR:N	0.64	2.66	9	8
1:A:196:PHE:CZ	1:A:213:LEU:CD1	0.63	2.80	2	6
1:A:153:VAL:CG2	1:A:166:TRP:CH2	0.63	2.81	6	2
1:A:196:PHE:CD1	1:A:196:PHE:N	0.63	2.66	6	1
2:B:241:LEU:HD12	2:B:297:GLU:CB	0.63	2.23	5	2
1:A:37:HIS:O	1:A:70:THR:HG22	0.63	1.92	2	1
2:B:254:PHE:CZ	2:B:268:LYS:N	0.63	2.67	11	1
1:A:83:GLU:O	1:A:87:LEU:HD12	0.63	1.93	1	1
1:A:115:TRP:NE1	1:A:196:PHE:CE1	0.63	2.66	2	1
2:B:253:VAL:CG2	2:B:278:TYR:CE1	0.63	2.81	2	1
1:A:25:THR:CG2	2:B:256:PHE:CE1	0.63	2.82	9	1
1:A:71:VAL:CG2	2:B:286:PHE:CE2	0.63	2.81	1	2
2:B:292:VAL:HG23	2:B:292:VAL:O	0.63	1.93	1	1
1:A:167:THR:HG21	1:A:175:LEU:HG	0.63	1.68	5	2
2:B:254:PHE:CZ	2:B:269:TYR:N	0.63	2.67	6	5
1:A:130:TRP:CE3	1:A:163:PHE:CD1	0.63	2.86	7	1
1:A:194:LEU:HD23	1:A:196:PHE:HE1	0.63	1.53	7	1
1:A:74:PHE:CD1	1:A:95:VAL:HG21	0.63	2.28	10	4
1:A:130:TRP:CA	1:A:185:VAL:HG11	0.63	2.23	2	1
1:A:87:LEU:HD13	1:A:91:SER:HB2	0.63	1.71	10	1
2:B:252:ASP:O	2:B:256:PHE:CD2	0.63	2.51	3	3
2:B:290:LEU:HD13	2:B:298:TRP:CH2	0.63	2.28	8	1
2:B:241:LEU:CD1	2:B:298:TRP:CE3	0.63	2.80	9	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:HIS:ND1	1:A:153:VAL:HG13	0.63	2.08	5	3
1:A:130:TRP:CE3	1:A:182:PHE:CE1	0.63	2.86	8	1
1:A:100:VAL:HG13	1:A:107:GLU:OE1	0.63	1.93	2	5
1:A:134:LEU:O	1:A:137:VAL:HG22	0.63	1.94	2	1
1:A:39:LEU:HD12	2:B:276:TYR:O	0.63	1.94	3	2
1:A:196:PHE:CD1	1:A:211:ILE:CD1	0.63	2.81	4	5
2:B:237:VAL:HG12	2:B:241:LEU:CG	0.63	2.21	5	1
1:A:58:TRP:CZ2	4:A:325:M7G:CM7	0.62	2.81	8	8
1:A:149:ILE:CG2	1:A:150:ASN:N	0.62	2.61	2	11
1:A:45:LEU:CD1	1:A:77:ILE:HG21	0.62	2.22	3	1
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:HB3	0.62	1.71	3	1
1:A:168:LYS:O	1:A:169:CYS:CB	0.62	2.47	6	11
2:B:258:TYR:CE2	2:B:264:GLY:N	0.62	2.67	11	4
2:B:252:ASP:C	2:B:256:PHE:CD2	0.62	2.77	6	2
2:B:290:LEU:O	2:B:292:VAL:N	0.62	2.33	9	11
1:A:148:GLN:O	1:A:149:ILE:HD12	0.62	1.93	3	3
1:A:65:VAL:HG13	2:B:295:ASP:OD1	0.62	1.93	4	1
1:A:25:THR:HG21	2:B:256:PHE:HE1	0.62	1.54	9	1
1:A:102:PRO:CB	1:A:106:ASP:CB	0.62	2.77	3	7
2:B:251:GLU:O	2:B:252:ASP:CB	0.62	2.48	3	11
2:B:271:LYS:O	2:B:272:GLU:CB	0.62	2.47	11	6
1:A:81:ILE:O	1:A:83:GLU:N	0.62	2.33	3	2
1:A:117:PHE:CZ	1:A:130:TRP:CH2	0.62	2.87	5	2
2:B:235:ASN:HB3	2:B:292:VAL:HG12	0.62	1.72	10	1
1:A:143:ASP:CG	2:B:277:THR:HG21	0.62	2.20	9	1
1:A:94:HIS:HB3	1:A:153:VAL:HG22	0.62	1.71	1	3
1:A:133:THR:CG2	1:A:182:PHE:CE1	0.62	2.82	5	1
1:A:26:VAL:HG11	2:B:290:LEU:CD2	0.62	2.25	6	2
2:B:253:VAL:HA	2:B:256:PHE:CE2	0.62	2.30	9	2
1:A:142:ILE:O	1:A:143:ASP:CB	0.62	2.48	7	6
1:A:96:PHE:N	1:A:96:PHE:CD1	0.62	2.66	2	5
1:A:35:VAL:HG22	2:B:250:ILE:HD12	0.62	1.72	6	3
1:A:33:PHE:H	2:B:243:VAL:HG21	0.62	1.55	1	4
1:A:134:LEU:CD1	1:A:152:VAL:HG21	0.62	2.21	8	1
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:CG	0.61	2.25	4	6
1:A:36:LYS:CB	2:B:306:ILE:HG22	0.61	2.25	6	2
1:A:149:ILE:HD13	1:A:170:GLU:OE2	0.61	1.94	8	1
1:A:47:TYR:CD1	1:A:65:VAL:CG2	0.61	2.83	11	1
1:A:58:TRP:CG	4:A:325:M7G:N3	0.61	2.68	11	1
1:A:101:ARG:CB	1:A:106:ASP:CB	0.61	2.78	11	1
1:A:96:PHE:CD1	1:A:107:GLU:CD	0.61	2.78	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:273:HIS:C	2:B:273:HIS:CD2	0.61	2.79	5	2
1:A:142:ILE:CD1	2:B:274:VAL:HG21	0.61	2.25	3	2
1:A:117:PHE:CG	1:A:186:LEU:HD11	0.61	2.30	4	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:68:PHE:O	0.61	2.53	10	2
1:A:93:TYR:CD1	1:A:93:TYR:C	0.61	2.79	5	5
1:A:130:TRP:CH2	1:A:154:LEU:HD12	0.61	2.31	1	3
2:B:298:TRP:CD1	2:B:302:THR:HG1	0.61	2.12	5	1
1:A:94:HIS:CD2	1:A:94:HIS:N	0.61	2.68	11	4
1:A:80:ASN:O	1:A:81:ILE:C	0.61	2.44	3	9
1:A:67:SER:O	1:A:68:PHE:CG	0.61	2.54	9	4
1:A:193:HIS:N	1:A:193:HIS:CD2	0.61	2.69	4	1
1:A:186:LEU:HD12	1:A:188:LEU:HD23	0.61	1.72	8	1
1:A:41:THR:CG2	1:A:43:TRP:CD1	0.61	2.83	9	4
2:B:274:VAL:HG12	2:B:277:THR:HG23	0.61	1.70	6	1
1:A:33:PHE:CD1	2:B:243:VAL:CG2	0.61	2.83	10	1
1:A:136:ALA:HB2	2:B:280:PRO:HG3	0.61	1.71	11	1
2:B:258:TYR:CZ	2:B:282:PHE:CE2	0.61	2.88	3	2
1:A:108:ALA:HB1	1:A:199:HIS:CB	0.61	2.26	3	2
1:A:66:THR:CG2	1:A:73:GLU:CB	0.61	2.78	8	4
1:A:45:LEU:HD23	1:A:65:VAL:HG23	0.61	1.71	5	1
2:B:254:PHE:CE1	2:B:269:TYR:CD1	0.61	2.89	10	1
1:A:35:VAL:HG22	2:B:249:PRO:O	0.61	1.96	4	4
1:A:111:LYS:O	1:A:167:THR:O	0.61	2.19	7	10
1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:HD23	0.61	2.11	10	3
1:A:130:TRP:CD1	1:A:134:LEU:CD1	0.61	2.84	3	1
2:B:241:LEU:HA	2:B:244:LEU:HD22	0.61	1.70	3	1
2:B:237:VAL:CB	2:B:294:ALA:HB2	0.61	2.26	4	2
1:A:39:LEU:CD1	2:B:278:TYR:CZ	0.61	2.84	6	1
1:A:45:LEU:HB2	1:A:95:VAL:HG22	0.61	1.71	8	2
2:B:276:TYR:CD1	2:B:276:TYR:N	0.61	2.69	7	3
1:A:38:PRO:HA	2:B:307:VAL:HG22	0.61	1.71	8	2
1:A:196:PHE:N	1:A:196:PHE:CD1	0.60	2.69	1	4
1:A:130:TRP:NE1	1:A:134:LEU:HD12	0.60	2.11	3	1
1:A:183:LYS:HB2	1:A:194:LEU:HD13	0.60	1.71	3	2
1:A:41:THR:HB	1:A:141:THR:HG21	0.60	1.71	7	1
1:A:146:ASP:HB3	1:A:149:ILE:HD13	0.60	1.70	10	1
1:A:104:TRP:CE2	4:A:325:M7G:CM7	0.60	2.84	11	1
1:A:27:LEU:N	1:A:27:LEU:HD23	0.60	2.11	4	4
1:A:175:LEU:N	1:A:175:LEU:CD1	0.60	2.64	10	4
1:A:25:THR:HG21	2:B:256:PHE:HE2	0.60	1.55	8	3
1:A:73:GLU:CD	2:B:298:TRP:CD1	0.60	2.79	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:135:LEU:HD23	1:A:136:ALA:H	0.60	1.56	5	1
1:A:75:TRP:CE3	1:A:78:ILE:CD1	0.60	2.81	8	1
1:A:44:THR:HG23	1:A:97:ARG:HG3	0.60	1.72	1	1
1:A:133:THR:HG21	1:A:182:PHE:CD1	0.60	2.31	9	1
1:A:117:PHE:CD1	1:A:117:PHE:N	0.60	2.69	2	5
1:A:101:ARG:CB	1:A:102:PRO:CD	0.60	2.80	4	3
1:A:104:TRP:CZ3	4:A:325:M7G:C5	0.60	2.84	4	1
1:A:142:ILE:HG21	2:B:272:GLU:HG3	0.60	1.72	5	1
1:A:196:PHE:CE1	1:A:211:ILE:CD1	0.60	2.82	5	2
2:B:250:ILE:CG1	2:B:256:PHE:CD2	0.60	2.84	9	2
1:A:108:ALA:HB1	1:A:199:HIS:HB2	0.60	1.72	1	1
1:A:146:ASP:O	1:A:149:ILE:HD13	0.60	1.95	11	2
1:A:186:LEU:HD12	1:A:188:LEU:CD2	0.60	2.26	8	2
2:B:277:THR:C	2:B:278:TYR:CD1	0.60	2.80	2	2
2:B:273:HIS:O	2:B:273:HIS:CG	0.60	2.54	9	3
1:A:135:LEU:CD1	2:B:283:LEU:CD1	0.60	2.80	9	3
1:A:83:GLU:CB	1:A:84:PRO:CD	0.60	2.79	1	3
1:A:87:LEU:C	1:A:87:LEU:HD22	0.60	2.21	1	1
2:B:272:GLU:O	2:B:273:HIS:CG	0.60	2.55	4	3
1:A:69:GLN:HG2	2:B:307:VAL:HG21	0.60	1.74	8	1
1:A:43:TRP:CE3	1:A:67:SER:OG	0.60	2.55	10	2
2:B:269:TYR:O	2:B:274:VAL:HG23	0.60	1.96	10	1
1:A:58:TRP:CE3	4:A:325:M7G:O4'	0.60	2.55	11	1
1:A:43:TRP:CE2	1:A:68:PHE:O	0.60	2.54	11	11
1:A:58:TRP:NE1	4:A:325:M7G:C5	0.60	2.65	10	7
1:A:72:GLU:O	2:B:290:LEU:CD1	0.60	2.48	4	11
1:A:39:LEU:HD11	2:B:278:TYR:HE2	0.60	1.57	2	1
1:A:83:GLU:O	1:A:85:HIS:N	0.60	2.35	3	9
1:A:26:VAL:HG23	1:A:33:PHE:HE2	0.60	1.56	5	2
1:A:38:PRO:CB	2:B:308:ILE:HG23	0.60	2.27	10	2
1:A:26:VAL:CG2	1:A:33:PHE:CE1	0.60	2.80	2	1
1:A:175:LEU:HD12	1:A:175:LEU:N	0.60	2.11	2	2
1:A:93:TYR:C	1:A:94:HIS:CD2	0.60	2.80	3	5
1:A:39:LEU:CD2	1:A:39:LEU:N	0.60	2.65	8	2
1:A:67:SER:C	1:A:68:PHE:CD1	0.59	2.80	7	6
1:A:81:ILE:HG21	1:A:131:LEU:HD21	0.59	1.72	3	1
1:A:75:TRP:CE2	2:B:283:LEU:O	0.59	2.55	7	6
1:A:165:LEU:HD21	1:A:178:ILE:CG2	0.59	2.27	1	4
1:A:100:VAL:HG22	1:A:101:ARG:H	0.59	1.58	4	8
1:A:146:ASP:O	1:A:147:SER:CB	0.59	2.51	7	7
2:B:262:ILE:HD13	2:B:262:ILE:C	0.59	2.22	11	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:250:ILE:CG1	2:B:256:PHE:CE2	0.59	2.86	9	3
1:A:96:PHE:O	1:A:97:ARG:CB	0.59	2.50	9	7
1:A:183:LYS:CG	1:A:188:LEU:HD21	0.59	2.28	2	1
1:A:39:LEU:O	2:B:308:ILE:HG21	0.59	1.96	4	1
1:A:87:LEU:HD12	1:A:87:LEU:C	0.59	2.23	7	3
1:A:71:VAL:HG23	2:B:286:PHE:CD2	0.59	2.33	1	2
1:A:45:LEU:CD2	1:A:77:ILE:CD1	0.59	2.81	11	6
2:B:276:TYR:CG	2:B:276:TYR:O	0.59	2.55	10	2
1:A:46:TRP:CZ3	1:A:101:ARG:O	0.59	2.55	4	1
1:A:36:LYS:C	2:B:250:ILE:HD13	0.59	2.23	11	2
2:B:271:LYS:CE	2:B:274:VAL:CG2	0.59	2.80	6	1
1:A:79:GLN:NE2	1:A:80:ASN:ND2	0.59	2.51	7	2
1:A:73:GLU:OE1	2:B:298:TRP:CZ2	0.59	2.55	9	1
1:A:104:TRP:CE3	1:A:105:GLU:N	0.59	2.71	4	5
1:A:117:PHE:CB	1:A:186:LEU:CD1	0.59	2.80	4	2
1:A:87:LEU:CD1	1:A:91:SER:CB	0.59	2.80	9	3
1:A:138:ILE:HD13	1:A:139:GLY:CA	0.59	2.27	6	2
1:A:129:LEU:C	1:A:185:VAL:HG13	0.59	2.23	1	1
1:A:96:PHE:CG	1:A:107:GLU:OE1	0.59	2.56	3	2
1:A:95:VAL:C	1:A:96:PHE:CG	0.59	2.80	6	5
1:A:96:PHE:CG	1:A:107:GLU:CD	0.59	2.80	4	1
1:A:25:THR:CG2	2:B:256:PHE:CD2	0.59	2.86	11	3
1:A:73:GLU:HG3	2:B:302:THR:HG21	0.59	1.74	11	2
2:B:240:ILE:HD11	2:B:292:VAL:HG11	0.59	1.74	11	1
2:B:306:ILE:CD1	2:B:308:ILE:CG1	0.59	2.81	11	1
1:A:100:VAL:CB	1:A:110:ALA:HB2	0.59	2.26	3	4
1:A:129:LEU:N	1:A:129:LEU:HD13	0.59	2.12	8	7
1:A:196:PHE:CZ	1:A:211:ILE:HD12	0.59	2.32	10	5
1:A:73:GLU:CG	2:B:302:THR:CG2	0.59	2.80	6	4
1:A:96:PHE:CB	1:A:151:GLY:CA	0.59	2.80	5	3
1:A:115:TRP:CD1	1:A:196:PHE:CE1	0.59	2.91	2	2
1:A:96:PHE:CE1	1:A:107:GLU:CD	0.59	2.81	9	2
1:A:117:PHE:CD1	1:A:163:PHE:O	0.59	2.55	8	5
2:B:258:TYR:CB	2:B:262:ILE:CD1	0.59	2.80	8	1
1:A:27:LEU:HD21	2:B:282:PHE:HE1	0.59	1.58	10	1
1:A:68:PHE:CE1	2:B:302:THR:OG1	0.59	2.55	7	2
1:A:62:LEU:HD13	1:A:62:LEU:C	0.59	2.22	3	1
1:A:103:GLU:O	1:A:106:ASP:N	0.59	2.33	9	5
1:A:29:ASP:CG	1:A:33:PHE:CE2	0.59	2.81	6	1
1:A:175:LEU:N	1:A:175:LEU:HD12	0.59	2.13	11	2
1:A:41:THR:HG23	1:A:43:TRP:HD1	0.59	1.52	10	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:LEU:N	1:A:89:LEU:CD2	0.59	2.66	3	4
1:A:100:VAL:HG13	1:A:101:ARG:H	0.58	1.58	6	7
1:A:38:PRO:HA	2:B:307:VAL:HG12	0.58	1.74	7	3
1:A:163:PHE:CE1	1:A:164:ALA:O	0.58	2.56	6	1
1:A:142:ILE:CD1	2:B:274:VAL:CG1	0.58	2.81	9	1
2:B:256:PHE:O	2:B:258:TYR:CE1	0.58	2.56	11	1
1:A:47:TYR:CD1	1:A:63:ARG:O	0.58	2.55	11	2
1:A:74:PHE:CE1	1:A:78:ILE:CD1	0.58	2.85	7	2
1:A:93:TYR:C	1:A:93:TYR:CD1	0.58	2.80	3	1
1:A:96:PHE:CD1	1:A:107:GLU:OE1	0.58	2.56	3	1
1:A:165:LEU:HD12	1:A:165:LEU:C	0.58	2.23	4	5
1:A:47:TYR:CD2	1:A:65:VAL:CG2	0.58	2.87	9	3
1:A:131:LEU:HD13	1:A:131:LEU:C	0.58	2.23	10	3
1:A:115:TRP:O	1:A:117:PHE:CE1	0.58	2.56	7	3
2:B:254:PHE:CZ	2:B:277:THR:O	0.58	2.57	6	3
1:A:47:TYR:CE2	1:A:65:VAL:HG22	0.58	2.33	4	3
1:A:135:LEU:CD1	2:B:283:LEU:CB	0.58	2.81	6	2
2:B:274:VAL:HG13	2:B:277:THR:HB	0.58	1.73	7	2
1:A:29:ASP:OD2	1:A:33:PHE:CD1	0.58	2.56	8	1
2:B:237:VAL:CG1	2:B:298:TRP:CB	0.58	2.81	11	1
1:A:99:ASP:OD2	1:A:110:ALA:HB1	0.58	1.98	1	1
2:B:253:VAL:HA	2:B:256:PHE:CE1	0.58	2.33	8	3
2:B:272:GLU:O	2:B:273:HIS:CD2	0.58	2.55	3	4
1:A:39:LEU:O	2:B:276:TYR:CG	0.58	2.56	4	1
1:A:106:ASP:O	1:A:109:ASN:N	0.58	2.37	9	6
2:B:269:TYR:O	2:B:269:TYR:CD1	0.58	2.57	6	2
2:B:253:VAL:CG1	2:B:278:TYR:CD1	0.58	2.86	3	5
1:A:48:THR:CG2	1:A:58:TRP:CZ3	0.58	2.84	11	3
2:B:241:LEU:HD21	2:B:301:SER:HB2	0.58	1.74	3	1
1:A:96:PHE:CG	1:A:107:GLU:OE2	0.58	2.57	11	2
1:A:82:PRO:HA	1:A:86:GLU:CB	0.58	2.29	6	5
1:A:193:HIS:O	1:A:194:LEU:HD12	0.58	1.97	5	2
2:B:268:LYS:CD	2:B:279:GLY:N	0.58	2.66	5	2
1:A:117:PHE:HB3	1:A:186:LEU:HD11	0.58	1.76	6	1
1:A:30:SER:O	1:A:31:ALA:HB2	0.58	1.98	5	2
1:A:68:PHE:CZ	2:B:302:THR:OG1	0.58	2.56	6	2
2:B:252:ASP:O	2:B:256:PHE:CE1	0.58	2.57	10	6
1:A:67:SER:C	1:A:68:PHE:CG	0.58	2.82	5	1
1:A:46:TRP:O	1:A:94:HIS:CD2	0.58	2.57	10	2
1:A:112:GLY:O	1:A:199:HIS:CD2	0.58	2.56	11	2
2:B:293:LYS:O	2:B:295:ASP:N	0.58	2.37	11	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:298:TRP:CE3	2:B:298:TRP:O	0.58	2.56	9	7
1:A:39:LEU:HD22	1:A:39:LEU:N	0.58	2.12	3	1
1:A:135:LEU:HD13	2:B:283:LEU:CB	0.58	2.28	3	1
1:A:29:ASP:OD2	1:A:33:PHE:CE1	0.58	2.56	4	2
1:A:66:THR:OG1	2:B:298:TRP:CH2	0.58	2.57	5	1
1:A:100:VAL:HG13	1:A:107:GLU:CD	0.58	2.22	1	9
1:A:116:SER:C	1:A:117:PHE:CD1	0.58	2.82	3	3
2:B:298:TRP:CD1	2:B:298:TRP:C	0.58	2.82	8	2
1:A:68:PHE:CD1	1:A:73:GLU:OE1	0.58	2.57	3	2
1:A:104:TRP:HB2	1:A:166:TRP:CH2	0.58	2.34	10	5
2:B:295:ASP:O	2:B:298:TRP:N	0.58	2.36	7	4
1:A:38:PRO:CG	2:B:308:ILE:CG2	0.58	2.81	6	1
1:A:39:LEU:HD11	2:B:278:TYR:CZ	0.58	2.33	6	1
1:A:27:LEU:HD11	2:B:282:PHE:CE2	0.58	2.34	9	1
1:A:35:VAL:HG13	2:B:250:ILE:CD1	0.58	2.29	9	1
1:A:101:ARG:CB	1:A:102:PRO:HD2	0.58	2.28	11	1
1:A:193:HIS:CD2	1:A:213:LEU:O	0.58	2.57	11	1
2:B:298:TRP:CE2	2:B:302:THR:OG1	0.58	2.56	11	1
1:A:33:PHE:CD2	1:A:72:GLU:OE1	0.58	2.57	1	1
1:A:90:LYS:CA	1:A:156:ILE:O	0.58	2.52	4	10
1:A:138:ILE:CD1	1:A:139:GLY:N	0.58	2.61	6	7
1:A:196:PHE:CZ	1:A:213:LEU:HD12	0.58	2.33	3	3
1:A:161:ASN:OD1	1:A:163:PHE:CZ	0.58	2.57	9	3
1:A:193:HIS:CE1	1:A:213:LEU:OXT	0.58	2.56	3	1
1:A:26:VAL:CG1	2:B:286:PHE:CD1	0.58	2.86	5	2
1:A:75:TRP:CE3	1:A:79:GLN:OE1	0.58	2.57	5	2
1:A:69:GLN:N	1:A:69:GLN:NE2	0.58	2.52	5	1
1:A:135:LEU:HD21	2:B:280:PRO:CA	0.58	2.28	5	1
1:A:73:GLU:OE2	2:B:302:THR:HG22	0.58	1.99	9	1
1:A:74:PHE:CE1	1:A:95:VAL:CG2	0.58	2.87	10	1
1:A:139:GLY:O	2:B:276:TYR:CE2	0.58	2.57	10	1
1:A:135:LEU:CD1	1:A:136:ALA:N	0.57	2.66	4	5
1:A:79:GLN:NE2	2:B:287:LYS:CG	0.57	2.66	5	1
1:A:153:VAL:CG2	1:A:166:TRP:CE2	0.57	2.87	5	1
1:A:33:PHE:HB2	2:B:244:LEU:HD23	0.57	1.75	6	1
1:A:41:THR:CB	1:A:141:THR:HG21	0.57	2.28	7	1
1:A:43:TRP:CH2	1:A:70:THR:O	0.57	2.57	7	1
1:A:117:PHE:CZ	1:A:182:PHE:CE2	0.57	2.92	9	1
1:A:75:TRP:CB	2:B:290:LEU:CD1	0.57	2.81	1	5
2:B:250:ILE:CG1	2:B:256:PHE:CE1	0.57	2.86	1	4
1:A:111:LYS:HD2	1:A:166:TRP:CG	0.57	2.34	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:167:THR:CB	1:A:175:LEU:HD22	0.57	2.29	3	1
1:A:38:PRO:HB2	2:B:307:VAL:HG13	0.57	1.75	5	2
1:A:126:ILE:HG23	1:A:186:LEU:HA	0.57	1.74	5	1
1:A:74:PHE:CZ	1:A:78:ILE:HG21	0.57	2.34	8	1
1:A:80:ASN:ND2	2:B:293:LYS:CB	0.57	2.67	9	1
1:A:67:SER:O	1:A:68:PHE:CD1	0.57	2.56	11	1
1:A:167:THR:O	1:A:169:CYS:N	0.57	2.37	7	7
2:B:291:ASN:O	2:B:292:VAL:CG1	0.57	2.52	1	5
1:A:110:ALA:O	1:A:111:LYS:CB	0.57	2.51	3	2
1:A:103:GLU:CB	4:A:325:M7G:O6	0.57	2.52	4	2
1:A:117:PHE:CG	1:A:186:LEU:CD1	0.57	2.86	4	1
1:A:31:ALA:O	1:A:32:HIS:CG	0.57	2.58	7	1
1:A:87:LEU:CD1	1:A:89:LEU:HD21	0.57	2.30	8	1
1:A:96:PHE:CD2	1:A:107:GLU:CD	0.57	2.82	11	1
1:A:27:LEU:CD1	2:B:258:TYR:CD2	0.57	2.88	7	5
1:A:96:PHE:CD1	1:A:107:GLU:OE2	0.57	2.57	1	3
1:A:96:PHE:CB	1:A:151:GLY:HA3	0.57	2.28	5	7
1:A:39:LEU:N	1:A:39:LEU:CD2	0.57	2.66	4	3
1:A:188:LEU:CD1	1:A:193:HIS:N	0.57	2.66	8	1
1:A:27:LEU:N	1:A:27:LEU:CD1	0.57	2.66	10	1
1:A:87:LEU:HD21	1:A:91:SER:OG	0.57	2.00	1	1
1:A:111:LYS:HD3	1:A:166:TRP:CG	0.57	2.35	11	5
1:A:115:TRP:CZ2	1:A:175:LEU:HB3	0.57	2.35	10	10
2:B:294:ALA:O	2:B:295:ASP:CB	0.57	2.53	6	10
1:A:58:TRP:CD1	4:A:325:M7G:C6	0.57	2.88	6	2
1:A:47:TYR:CE1	1:A:63:ARG:HB2	0.57	2.34	9	5
1:A:111:LYS:O	1:A:113:GLY:N	0.57	2.33	10	2
2:B:237:VAL:CG1	2:B:298:TRP:CE3	0.57	2.88	8	1
2:B:299:VAL:CG2	2:B:300:GLN:N	0.57	2.66	10	1
1:A:96:PHE:CE1	1:A:107:GLU:OE2	0.57	2.58	1	1
2:B:274:VAL:O	2:B:275:LYS:CB	0.57	2.53	10	4
2:B:294:ALA:HB3	2:B:298:TRP:CE2	0.57	2.35	1	1
1:A:58:TRP:CE2	1:A:62:LEU:HD11	0.57	2.35	2	1
1:A:193:HIS:CE1	1:A:213:LEU:O	0.57	2.57	4	1
1:A:26:VAL:CG1	2:B:286:PHE:CE1	0.57	2.87	5	1
2:B:250:ILE:HG22	2:B:306:ILE:HG21	0.57	1.75	6	2
1:A:100:VAL:O	1:A:101:ARG:CB	0.57	2.52	9	8
1:A:165:LEU:HD22	1:A:182:PHE:CE2	0.57	2.34	2	2
1:A:45:LEU:CD2	1:A:65:VAL:HG23	0.57	2.29	5	1
2:B:266:ASP:O	2:B:268:LYS:N	0.57	2.38	11	1
1:A:78:ILE:HD13	1:A:78:ILE:N	0.57	2.13	2	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:106:ASP:HA	1:A:109:ASN:ND2	0.57	2.14	2	8
1:A:134:LEU:N	1:A:134:LEU:CD2	0.57	2.66	7	6
2:B:269:TYR:CD1	2:B:269:TYR:C	0.57	2.83	8	3
1:A:46:TRP:CH2	1:A:101:ARG:O	0.57	2.58	4	2
1:A:83:GLU:N	1:A:84:PRO:HD2	0.57	2.15	2	4
2:B:299:VAL:HA	2:B:302:THR:HG23	0.57	1.77	2	3
1:A:89:LEU:N	1:A:89:LEU:CD1	0.57	2.68	5	1
1:A:29:ASP:OD1	1:A:33:PHE:CD2	0.57	2.57	6	1
2:B:248:THR:C	2:B:306:ILE:HD13	0.57	2.24	6	1
1:A:75:TRP:CZ2	2:B:283:LEU:O	0.57	2.58	8	7
2:B:253:VAL:HG21	2:B:278:TYR:CD1	0.57	2.34	2	1
2:B:274:VAL:HG22	2:B:277:THR:OG1	0.57	1.99	3	1
1:A:111:LYS:CG	1:A:112:GLY:N	0.57	2.68	11	2
1:A:142:ILE:CD1	2:B:274:VAL:HG12	0.57	2.30	11	1
1:A:100:VAL:HB	1:A:110:ALA:CB	0.57	2.30	5	8
2:B:252:ASP:O	2:B:255:SER:N	0.57	2.37	11	11
1:A:66:THR:HG23	1:A:73:GLU:HB2	0.57	1.77	8	1
1:A:94:HIS:CG	1:A:103:GLU:OE2	0.57	2.57	11	1
1:A:102:PRO:HB2	1:A:106:ASP:CB	0.56	2.30	7	8
2:B:252:ASP:O	2:B:255:SER:CB	0.56	2.53	2	8
2:B:269:TYR:CD2	2:B:274:VAL:HG21	0.56	2.34	8	1
1:A:48:THR:OG1	1:A:49:LYS:N	0.56	2.38	2	1
1:A:176:LEU:HD13	1:A:176:LEU:H	0.56	1.59	2	4
1:A:40:ASN:HB2	2:B:276:TYR:CD1	0.56	2.35	3	2
1:A:111:LYS:CE	1:A:166:TRP:CD1	0.56	2.88	8	3
1:A:71:VAL:HG13	2:B:286:PHE:CE2	0.56	2.36	5	1
1:A:183:LYS:CG	1:A:188:LEU:CD2	0.56	2.83	5	1
2:B:240:ILE:HD12	2:B:244:LEU:HD11	0.56	1.76	6	1
2:B:253:VAL:N	2:B:256:PHE:CE2	0.56	2.73	6	2
1:A:117:PHE:CB	1:A:186:LEU:CD2	0.56	2.83	1	1
1:A:176:LEU:N	1:A:176:LEU:CD1	0.56	2.69	3	11
1:A:35:VAL:HG11	2:B:250:ILE:HD12	0.56	1.72	2	4
1:A:87:LEU:HD13	1:A:91:SER:HB3	0.56	1.76	2	1
1:A:171:ASP:O	1:A:175:LEU:HD13	0.56	2.00	11	3
1:A:93:TYR:O	1:A:94:HIS:CG	0.56	2.59	4	2
1:A:36:LYS:O	2:B:250:ILE:CG2	0.56	2.53	8	7
1:A:44:THR:HG23	1:A:97:ARG:HD3	0.56	1.78	3	1
1:A:74:PHE:O	1:A:78:ILE:CG1	0.56	2.54	3	5
1:A:196:PHE:O	1:A:210:SER:N	0.56	2.38	8	3
1:A:87:LEU:HD12	1:A:89:LEU:H	0.56	1.61	7	2
1:A:115:TRP:CZ2	1:A:175:LEU:CB	0.56	2.88	1	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:298:TRP:O	2:B:302:THR:N	0.56	2.39	1	8
1:A:104:TRP:CG	4:A:325:M7G:HM72	0.56	2.36	5	8
1:A:49:LYS:CB	1:A:50:PRO:CD	0.56	2.83	6	3
1:A:29:ASP:CB	1:A:32:HIS:O	0.56	2.53	5	1
1:A:135:LEU:CD2	1:A:135:LEU:C	0.56	2.75	8	2
1:A:96:PHE:CD2	1:A:107:GLU:OE1	0.56	2.57	11	1
2:B:268:LYS:O	2:B:274:VAL:N	0.56	2.38	11	1
1:A:47:TYR:OH	1:A:65:VAL:HG11	0.56	2.01	6	3
1:A:137:VAL:HG21	1:A:152:VAL:HG13	0.56	1.76	2	1
1:A:112:GLY:O	1:A:199:HIS:CG	0.56	2.59	8	3
1:A:27:LEU:HD13	2:B:285:GLN:OE1	0.56	2.00	5	4
1:A:102:PRO:C	1:A:103:GLU:CG	0.56	2.78	6	3
2:B:253:VAL:HA	2:B:256:PHE:CZ	0.56	2.36	5	10
2:B:266:ASP:O	2:B:267:ILE:C	0.56	2.48	1	11
1:A:47:TYR:CE1	1:A:63:ARG:HB3	0.56	2.35	10	6
1:A:81:ILE:O	1:A:81:ILE:HD12	0.56	2.00	3	1
1:A:45:LEU:O	1:A:65:VAL:C	0.56	2.49	9	4
1:A:150:ASN:ND2	1:A:166:TRP:HB3	0.56	2.16	6	3
1:A:35:VAL:CG2	2:B:250:ILE:HD12	0.56	2.30	6	3
1:A:153:VAL:CG1	1:A:154:LEU:N	0.56	2.69	6	10
1:A:43:TRP:CD1	1:A:43:TRP:N	0.56	2.73	10	5
1:A:94:HIS:CE1	1:A:153:VAL:CG1	0.56	2.88	5	1
1:A:146:ASP:OD2	1:A:149:ILE:HD13	0.56	2.01	7	1
1:A:142:ILE:CG2	2:B:273:HIS:CB	0.56	2.83	8	1
2:B:251:GLU:CB	2:B:255:SER:OG	0.56	2.54	8	1
1:A:142:ILE:HG21	2:B:272:GLU:HA	0.56	1.78	10	1
1:A:101:ARG:N	1:A:102:PRO:HD2	0.56	2.16	9	7
1:A:128:GLU:HG2	3:A:321:MTN:H72	0.56	1.77	1	1
1:A:48:THR:CG2	1:A:62:LEU:HB3	0.56	2.31	3	1
2:B:271:LYS:HE3	2:B:274:VAL:HG23	0.56	1.76	6	1
1:A:95:VAL:C	1:A:96:PHE:CD1	0.56	2.84	4	4
1:A:131:LEU:C	1:A:131:LEU:CD2	0.56	2.79	4	3
1:A:137:VAL:HG22	1:A:146:ASP:HB2	0.56	1.78	6	1
2:B:250:ILE:O	2:B:308:ILE:HD12	0.56	2.00	7	1
1:A:48:THR:HG22	1:A:61:LEU:HB2	0.56	1.78	8	1
1:A:102:PRO:O	1:A:103:GLU:CG	0.55	2.54	11	3
1:A:93:TYR:C	1:A:94:HIS:CG	0.55	2.84	4	2
1:A:80:ASN:O	1:A:82:PRO:N	0.55	2.39	8	1
2:B:298:TRP:NE1	2:B:302:THR:OG1	0.55	2.38	8	2
1:A:69:GLN:CG	2:B:307:VAL:CG1	0.55	2.82	11	1
1:A:141:THR:O	1:A:142:ILE:C	0.55	2.49	6	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:THR:CG2	1:A:73:GLU:HB2	0.55	2.30	8	4
1:A:127:ASP:OD1	1:A:130:TRP:CH2	0.55	2.58	6	1
2:B:250:ILE:CG2	2:B:306:ILE:CG2	0.55	2.84	6	1
1:A:38:PRO:C	1:A:39:LEU:CD2	0.55	2.79	7	2
2:B:241:LEU:HD13	2:B:301:SER:HB2	0.55	1.77	8	1
1:A:25:THR:HG22	1:A:35:VAL:CG1	0.55	2.32	9	1
1:A:182:PHE:CD1	1:A:182:PHE:O	0.55	2.60	9	1
1:A:178:ILE:CG2	1:A:179:GLY:N	0.55	2.70	5	9
1:A:39:LEU:CD2	1:A:69:GLN:O	0.55	2.53	2	3
1:A:45:LEU:CD2	1:A:66:THR:HB	0.55	2.31	8	4
1:A:100:VAL:HG21	1:A:107:GLU:O	0.55	2.00	8	2
2:B:252:ASP:O	2:B:256:PHE:N	0.55	2.40	9	3
1:A:89:LEU:CD1	1:A:156:ILE:HG21	0.55	2.30	8	1
1:A:111:LYS:HE3	1:A:166:TRP:CG	0.55	2.37	8	1
2:B:262:ILE:HD13	2:B:262:ILE:O	0.55	2.02	11	2
1:A:25:THR:CG2	1:A:37:HIS:CE1	0.55	2.90	1	1
1:A:65:VAL:O	1:A:66:THR:C	0.55	2.49	5	7
1:A:102:PRO:O	1:A:103:GLU:CB	0.55	2.54	1	10
1:A:170:GLU:O	1:A:171:ASP:CB	0.55	2.54	7	10
2:B:269:TYR:O	2:B:274:VAL:CG2	0.55	2.54	1	1
1:A:82:PRO:O	1:A:87:LEU:N	0.55	2.40	10	4
1:A:101:ARG:HB3	1:A:102:PRO:CD	0.55	2.31	6	2
1:A:25:THR:HG21	2:B:258:TYR:CD2	0.55	2.36	5	1
1:A:101:ARG:HB3	1:A:106:ASP:CB	0.55	2.31	11	2
1:A:101:ARG:CB	1:A:106:ASP:CG	0.55	2.79	11	1
2:B:252:ASP:C	2:B:256:PHE:CD1	0.55	2.85	11	1
1:A:105:GLU:OE1	4:A:325:M7G:N2	0.55	2.40	3	4
1:A:153:VAL:HG21	1:A:166:TRP:CZ3	0.55	2.35	9	1
1:A:131:LEU:O	1:A:134:LEU:N	0.55	2.40	7	11
2:B:274:VAL:CG1	2:B:275:LYS:N	0.55	2.66	2	3
1:A:49:LYS:CB	1:A:50:PRO:HD3	0.55	2.31	6	4
2:B:282:PHE:CD1	2:B:283:LEU:N	0.55	2.75	6	2
1:A:183:LYS:CG	1:A:188:LEU:HD22	0.55	2.32	5	1
1:A:87:LEU:CD2	1:A:156:ILE:HD13	0.55	2.32	8	1
2:B:254:PHE:CZ	2:B:268:LYS:HA	0.55	2.37	11	1
1:A:75:TRP:CD1	2:B:286:PHE:HB3	0.55	2.37	11	11
1:A:138:ILE:C	1:A:138:ILE:CD1	0.55	2.78	2	6
1:A:135:LEU:HD21	2:B:280:PRO:HA	0.55	1.78	5	2
1:A:194:LEU:HD23	1:A:196:PHE:CE2	0.55	2.37	4	1
2:B:244:LEU:HD12	2:B:301:SER:OG	0.55	2.02	5	1
1:A:73:GLU:CG	2:B:302:THR:HG21	0.55	2.32	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:LEU:O	1:A:65:VAL:N	0.55	2.39	4	7
2:B:253:VAL:CG1	2:B:278:TYR:CD2	0.55	2.89	8	3
1:A:130:TRP:O	1:A:133:THR:CB	0.55	2.54	10	2
1:A:29:ASP:OD2	1:A:33:PHE:CD2	0.55	2.60	10	2
1:A:105:GLU:OE2	4:A:325:M7G:N2	0.55	2.40	2	6
1:A:153:VAL:HG12	1:A:154:LEU:N	0.55	2.16	1	10
1:A:39:LEU:CD2	2:B:278:TYR:OH	0.55	2.54	9	4
1:A:38:PRO:HG3	2:B:308:ILE:HG23	0.55	1.79	6	1
2:B:247:ALA:O	2:B:248:THR:CB	0.55	2.55	11	2
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:70:THR:O	0.55	2.60	7	1
1:A:87:LEU:HD21	1:A:156:ILE:HD13	0.55	1.77	8	1
1:A:58:TRP:CD2	4:A:325:M7G:N9	0.55	2.75	11	1
1:A:58:TRP:CE2	1:A:62:LEU:CD1	0.55	2.90	2	2
1:A:132:CYS:O	1:A:135:LEU:CD2	0.55	2.55	5	1
1:A:34:ASP:O	2:B:248:THR:N	0.54	2.40	2	6
1:A:178:ILE:HG22	1:A:179:GLY:N	0.54	2.17	5	9
2:B:272:GLU:O	2:B:273:HIS:CB	0.54	2.55	1	1
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:138:ILE:HD13	0.54	2.36	10	2
1:A:106:ASP:O	1:A:109:ASN:CB	0.54	2.56	9	5
1:A:70:THR:C	1:A:71:VAL:HG12	0.54	2.28	2	2
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:163:PHE:HB3	0.54	2.37	5	1
1:A:179:GLY:C	1:A:194:LEU:HD21	0.54	2.27	9	1
2:B:253:VAL:N	2:B:256:PHE:CE1	0.54	2.76	11	1
1:A:39:LEU:N	1:A:69:GLN:O	0.54	2.41	1	2
1:A:45:LEU:O	1:A:65:VAL:CG2	0.54	2.54	2	6
1:A:100:VAL:CG1	1:A:107:GLU:OE1	0.54	2.56	5	6
1:A:161:ASN:OD1	1:A:163:PHE:CE1	0.54	2.60	4	2
1:A:43:TRP:CD1	1:A:138:ILE:HD13	0.54	2.37	2	1
1:A:26:VAL:O	2:B:289:LYS:CG	0.54	2.56	11	4
1:A:100:VAL:HG22	1:A:110:ALA:HB3	0.54	1.78	6	1
2:B:258:TYR:CB	2:B:262:ILE:HD13	0.54	2.31	8	1
1:A:25:THR:HG22	2:B:256:PHE:CE2	0.54	2.37	11	1
2:B:248:THR:HG23	2:B:306:ILE:HG21	0.54	1.79	11	1
1:A:38:PRO:CB	2:B:307:VAL:CG1	0.54	2.82	1	1
2:B:294:ALA:HB3	2:B:298:TRP:NE1	0.54	2.18	1	1
1:A:48:THR:CG2	1:A:62:LEU:CB	0.54	2.81	3	1
1:A:58:TRP:CZ2	4:A:325:M7G:HM71	0.54	2.37	6	6
1:A:183:LYS:CG	1:A:184:GLN:N	0.54	2.69	7	3
2:B:274:VAL:CG1	2:B:277:THR:OG1	0.54	2.56	3	1
2:B:258:TYR:OH	2:B:282:PHE:CE1	0.54	2.56	2	1
1:A:148:GLN:CB	1:A:170:GLU:CB	0.54	2.85	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:VAL:HG22	2:B:289:LYS:CB	0.54	2.32	7	3
1:A:74:PHE:CE2	1:A:95:VAL:HG21	0.54	2.37	11	2
2:B:298:TRP:O	2:B:302:THR:CB	0.54	2.55	5	1
1:A:134:LEU:HD21	1:A:182:PHE:CZ	0.54	2.38	9	2
1:A:106:ASP:O	1:A:109:ASN:ND2	0.54	2.40	9	1
1:A:71:VAL:CG1	2:B:283:LEU:CD2	0.54	2.83	1	4
1:A:130:TRP:HZ2	1:A:154:LEU:HD12	0.54	1.63	2	3
1:A:149:ILE:HG23	1:A:150:ASN:H	0.54	1.59	2	4
2:B:296:ALA:O	2:B:299:VAL:N	0.54	2.38	10	3
1:A:94:HIS:ND1	1:A:153:VAL:CG1	0.54	2.70	5	1
1:A:43:TRP:NE1	1:A:68:PHE:O	0.54	2.41	6	2
1:A:83:GLU:HG2	1:A:154:LEU:HD11	0.54	1.80	6	1
1:A:194:LEU:HD23	1:A:196:PHE:CE1	0.54	2.36	7	1
1:A:89:LEU:CD1	1:A:156:ILE:CG2	0.54	2.85	8	1
1:A:100:VAL:CG1	1:A:150:ASN:OD1	0.54	2.56	9	1
1:A:58:TRP:CE3	4:A:325:M7G:N9	0.54	2.75	11	1
2:B:250:ILE:HD11	2:B:256:PHE:CD1	0.54	2.36	11	1
1:A:38:PRO:HG3	2:B:250:ILE:HG21	0.54	1.79	3	2
1:A:129:LEU:C	1:A:185:VAL:CG1	0.54	2.81	11	2
1:A:58:TRP:CH2	1:A:62:LEU:HD11	0.54	2.37	2	1
1:A:107:GLU:HB2	1:A:166:TRP:CZ3	0.54	2.37	7	3
1:A:43:TRP:CB	1:A:96:PHE:O	0.54	2.56	8	4
1:A:100:VAL:O	1:A:101:ARG:CG	0.54	2.56	10	2
1:A:137:VAL:HG22	1:A:146:ASP:CB	0.54	2.33	4	2
2:B:279:GLY:O	2:B:283:LEU:HD12	0.54	2.03	5	1
1:A:80:ASN:C	1:A:81:ILE:HG12	0.54	2.27	9	2
1:A:140:GLU:CD	2:B:268:LYS:CD	0.54	2.81	8	2
1:A:74:PHE:O	1:A:78:ILE:CD1	0.54	2.56	1	1
1:A:76:ALA:O	1:A:79:GLN:N	0.54	2.41	7	4
2:B:269:TYR:O	2:B:274:VAL:HG22	0.54	2.03	1	1
1:A:30:SER:O	1:A:31:ALA:CB	0.54	2.56	4	9
1:A:25:THR:HG22	1:A:37:HIS:CE1	0.54	2.38	5	1
1:A:193:HIS:O	1:A:194:LEU:CG	0.54	2.56	11	3
1:A:127:ASP:O	1:A:131:LEU:CB	0.54	2.56	6	2
1:A:27:LEU:HD23	2:B:258:TYR:CD1	0.54	2.38	10	1
1:A:165:LEU:HD22	1:A:182:PHE:CD2	0.54	2.38	1	2
1:A:29:ASP:OD1	1:A:29:ASP:N	0.54	2.40	4	4
2:B:237:VAL:CG2	2:B:294:ALA:N	0.54	2.71	4	3
1:A:111:LYS:O	1:A:168:LYS:C	0.54	2.50	11	4
1:A:146:ASP:CG	1:A:149:ILE:HD13	0.54	2.27	7	1
1:A:146:ASP:O	1:A:148:GLN:N	0.54	2.40	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:250:ILE:HG12	2:B:256:PHE:CE2	0.54	2.37	9	1
1:A:106:ASP:OD2	1:A:109:ASN:ND2	0.54	2.41	1	1
1:A:81:ILE:O	1:A:86:GLU:CB	0.54	2.56	2	5
1:A:39:LEU:HD21	2:B:278:TYR:CE2	0.54	2.38	3	4
1:A:117:PHE:CD2	1:A:194:LEU:HD21	0.54	2.38	5	1
1:A:170:GLU:O	1:A:174:PRO:CD	0.54	2.56	9	2
1:A:79:GLN:O	1:A:81:ILE:CG1	0.54	2.55	8	1
1:A:183:LYS:O	1:A:188:LEU:CD2	0.53	2.56	10	3
1:A:127:ASP:HA	1:A:130:TRP:CE3	0.53	2.38	7	7
1:A:39:LEU:HD23	1:A:70:THR:HA	0.53	1.78	3	2
1:A:46:TRP:CZ3	1:A:103:GLU:HG2	0.53	2.38	3	1
1:A:62:LEU:C	1:A:62:LEU:CD2	0.53	2.79	3	1
1:A:75:TRP:O	1:A:79:GLN:CB	0.53	2.56	3	1
1:A:127:ASP:O	1:A:131:LEU:CD1	0.53	2.54	8	4
2:B:295:ASP:O	2:B:299:VAL:CG2	0.53	2.56	3	4
1:A:134:LEU:HB3	1:A:152:VAL:HG21	0.53	1.79	6	3
2:B:259:PRO:O	2:B:260:GLU:CB	0.53	2.56	5	2
1:A:77:ILE:O	1:A:80:ASN:ND2	0.53	2.42	6	2
1:A:45:LEU:O	1:A:65:VAL:CB	0.53	2.55	7	2
1:A:69:GLN:CD	1:A:69:GLN:N	0.53	2.65	8	2
1:A:188:LEU:HB2	1:A:193:HIS:CE1	0.53	2.38	7	1
1:A:81:ILE:N	1:A:82:PRO:HD3	0.53	2.18	2	9
1:A:111:LYS:HE2	1:A:166:TRP:CD1	0.53	2.38	4	3
1:A:96:PHE:O	1:A:97:ARG:HB3	0.53	2.03	5	3
1:A:44:THR:CA	1:A:67:SER:HB3	0.53	2.34	11	4
1:A:173:GLU:N	1:A:174:PRO:CD	0.53	2.71	5	3
1:A:135:LEU:O	1:A:138:ILE:CG2	0.53	2.56	8	2
1:A:83:GLU:O	1:A:87:LEU:N	0.53	2.41	8	1
1:A:143:ASP:OD2	2:B:277:THR:CG2	0.53	2.57	9	1
1:A:44:THR:OG1	1:A:46:TRP:NE1	0.53	2.41	5	3
1:A:48:THR:OG1	1:A:92:ASP:CB	0.53	2.57	1	2
1:A:96:PHE:CD1	1:A:96:PHE:N	0.53	2.76	4	3
1:A:148:GLN:O	1:A:168:LYS:CB	0.53	2.56	2	3
2:B:298:TRP:CZ2	2:B:302:THR:HG22	0.53	2.38	2	1
1:A:45:LEU:C	1:A:46:TRP:CD1	0.53	2.87	10	4
1:A:111:LYS:HB2	1:A:166:TRP:CB	0.53	2.33	7	2
1:A:114:LYS:CE	1:A:116:SER:OG	0.53	2.57	7	1
1:A:135:LEU:HD11	2:B:280:PRO:CB	0.53	2.34	7	1
1:A:26:VAL:O	2:B:289:LYS:CD	0.53	2.56	4	4
1:A:75:TRP:NE1	2:B:283:LEU:O	0.53	2.42	5	9
1:A:90:LYS:HA	1:A:156:ILE:O	0.53	2.03	6	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:101:ARG:CA	1:A:107:GLU:OE2	0.53	2.56	3	2
1:A:210:SER:C	1:A:211:ILE:CG1	0.53	2.81	5	2
1:A:27:LEU:HD23	2:B:258:TYR:CD2	0.53	2.37	6	1
1:A:105:GLU:C	1:A:109:ASN:ND2	0.53	2.67	6	1
1:A:141:THR:O	1:A:142:ILE:CG2	0.53	2.56	11	1
1:A:66:THR:CG2	1:A:73:GLU:HB3	0.53	2.34	6	6
1:A:104:TRP:HB2	1:A:166:TRP:CZ2	0.53	2.39	10	6
1:A:40:ASN:O	1:A:40:ASN:ND2	0.53	2.42	10	4
2:B:270:LYS:O	2:B:271:LYS:C	0.53	2.51	6	4
1:A:41:THR:OG1	1:A:141:THR:CG2	0.53	2.57	5	2
1:A:78:ILE:O	1:A:81:ILE:N	0.53	2.39	3	2
1:A:183:LYS:CD	1:A:193:HIS:O	0.53	2.57	5	1
1:A:82:PRO:O	1:A:86:GLU:N	0.53	2.41	6	2
1:A:142:ILE:CD1	1:A:143:ASP:N	0.53	2.66	6	1
1:A:163:PHE:CZ	1:A:186:LEU:HD22	0.53	2.39	10	1
2:B:248:THR:OG1	2:B:306:ILE:HG21	0.53	2.03	11	1
1:A:72:GLU:HA	2:B:290:LEU:HD11	0.53	1.80	1	4
1:A:100:VAL:CG1	1:A:107:GLU:HA	0.53	2.34	5	7
1:A:111:LYS:CA	1:A:167:THR:O	0.53	2.57	9	4
1:A:43:TRP:NE1	1:A:138:ILE:HD13	0.53	2.19	2	1
1:A:56:GLU:O	1:A:57:SER:CB	0.53	2.57	7	4
1:A:25:THR:HB	1:A:37:HIS:CE1	0.53	2.39	3	1
1:A:140:GLU:N	1:A:140:GLU:CD	0.53	2.66	4	2
1:A:199:HIS:O	1:A:200:CYS:C	0.53	2.52	11	4
1:A:135:LEU:HD21	2:B:280:PRO:HB3	0.53	1.78	5	1
1:A:140:GLU:CG	2:B:278:TYR:O	0.53	2.56	7	3
2:B:248:THR:O	2:B:250:ILE:N	0.53	2.41	11	3
1:A:89:LEU:O	1:A:90:LYS:CB	0.53	2.56	8	1
1:A:73:GLU:OE1	1:A:73:GLU:N	0.53	2.42	9	1
1:A:38:PRO:HG3	2:B:250:ILE:CG2	0.53	2.34	1	8
1:A:80:ASN:O	1:A:81:ILE:CD1	0.53	2.54	1	6
1:A:88:PRO:O	1:A:89:LEU:O	0.53	2.27	6	10
1:A:96:PHE:O	1:A:97:ARG:CG	0.53	2.57	9	3
1:A:167:THR:O	1:A:168:LYS:C	0.53	2.51	7	10
1:A:196:PHE:CD1	1:A:211:ILE:HG13	0.53	2.39	3	7
1:A:196:PHE:O	1:A:210:SER:CB	0.53	2.56	7	3
2:B:235:ASN:CB	2:B:291:ASN:O	0.53	2.57	10	2
1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:OE1	0.53	2.42	7	1
1:A:76:ALA:O	1:A:78:ILE:N	0.53	2.42	11	2
1:A:123:GLY:CA	1:A:126:ILE:HD12	0.53	2.34	7	1
1:A:74:PHE:CE1	1:A:78:ILE:HG21	0.53	2.39	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:101:ARG:CB	1:A:106:ASP:C	0.53	2.81	8	1
1:A:50:PRO:CD	1:A:92:ASP:OD1	0.53	2.57	9	1
1:A:36:LYS:O	2:B:306:ILE:CG2	0.53	2.57	10	1
1:A:108:ALA:O	1:A:199:HIS:ND1	0.53	2.41	11	1
1:A:33:PHE:CE2	1:A:72:GLU:OE1	0.53	2.61	1	1
1:A:75:TRP:HB3	2:B:290:LEU:CD1	0.53	2.30	6	8
1:A:41:THR:O	1:A:69:GLN:CB	0.53	2.57	2	3
1:A:82:PRO:O	1:A:87:LEU:CG	0.53	2.57	2	2
1:A:105:GLU:O	1:A:109:ASN:ND2	0.53	2.41	3	3
1:A:112:GLY:CA	1:A:167:THR:O	0.53	2.57	3	1
1:A:95:VAL:C	1:A:96:PHE:CD2	0.53	2.87	5	1
1:A:117:PHE:CD2	1:A:194:LEU:CD2	0.53	2.92	5	1
1:A:134:LEU:N	1:A:134:LEU:HD23	0.53	2.19	10	3
1:A:33:PHE:CB	2:B:244:LEU:HD23	0.53	2.34	6	1
1:A:73:GLU:OE2	2:B:302:THR:CG2	0.53	2.57	6	2
1:A:141:THR:O	1:A:143:ASP:N	0.53	2.42	6	1
2:B:275:LYS:HB2	2:B:276:TYR:CD1	0.53	2.39	7	2
1:A:58:TRP:CE2	4:A:325:M7G:C6	0.53	2.91	9	1
1:A:141:THR:OG1	1:A:146:ASP:CB	0.53	2.57	9	1
1:A:73:GLU:OE2	2:B:305:LYS:CD	0.53	2.57	9	2
1:A:138:ILE:CG1	1:A:139:GLY:N	0.53	2.71	4	5
1:A:135:LEU:C	1:A:135:LEU:CD2	0.53	2.76	10	1
1:A:96:PHE:HB3	1:A:151:GLY:CA	0.53	2.33	3	7
1:A:173:GLU:CB	1:A:174:PRO:HD3	0.53	2.34	1	5
1:A:58:TRP:CZ2	4:A:325:M7G:N7	0.53	2.77	2	4
1:A:28:SER:O	1:A:29:ASP:C	0.53	2.52	6	7
1:A:92:ASP:OD2	1:A:155:SER:CB	0.53	2.56	3	1
1:A:104:TRP:CE3	4:A:325:M7G:HM73	0.53	2.38	4	1
1:A:131:LEU:CD1	1:A:132:CYS:N	0.53	2.65	4	3
1:A:193:HIS:N	1:A:213:LEU:OXT	0.53	2.42	11	5
1:A:33:PHE:CE1	2:B:240:ILE:HB	0.53	2.39	5	2
1:A:41:THR:O	1:A:69:GLN:CG	0.53	2.57	5	1
1:A:137:VAL:O	1:A:141:THR:CG2	0.53	2.57	6	2
1:A:135:LEU:HD13	1:A:135:LEU:C	0.53	2.29	8	3
1:A:118:GLN:O	1:A:193:HIS:CD2	0.53	2.61	8	2
1:A:79:GLN:OE1	2:B:291:ASN:N	0.53	2.42	10	1
1:A:142:ILE:O	1:A:143:ASP:C	0.53	2.52	10	1
1:A:80:ASN:C	1:A:82:PRO:HD3	0.52	2.30	7	9
1:A:97:ARG:O	1:A:99:ASP:N	0.52	2.42	5	4
1:A:79:GLN:OE1	2:B:287:LYS:CG	0.52	2.57	2	2
1:A:108:ALA:O	1:A:199:HIS:CB	0.52	2.56	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:LEU:HG	1:A:65:VAL:CG2	0.52	2.34	4	6
1:A:70:THR:CG2	1:A:73:GLU:OE2	0.52	2.57	4	1
1:A:194:LEU:CB	1:A:213:LEU:HD13	0.52	2.34	4	1
1:A:84:PRO:O	1:A:156:ILE:CD1	0.52	2.56	8	1
1:A:142:ILE:CG2	2:B:273:HIS:HB3	0.52	2.35	8	1
1:A:144:GLU:O	1:A:145:ASP:CB	0.52	2.57	9	1
2:B:252:ASP:OD1	2:B:253:VAL:HG22	0.52	2.04	1	2
2:B:294:ALA:CB	2:B:298:TRP:HB2	0.52	2.34	8	4
1:A:71:VAL:HG13	2:B:286:PHE:CD2	0.52	2.38	4	3
1:A:98:ASN:O	1:A:99:ASP:C	0.52	2.53	4	1
1:A:77:ILE:HD13	2:B:298:TRP:CZ2	0.52	2.38	5	1
1:A:137:VAL:CG2	1:A:146:ASP:OD2	0.52	2.57	6	1
1:A:143:ASP:OD2	2:B:277:THR:HG21	0.52	2.04	9	1
1:A:82:PRO:O	1:A:86:GLU:CB	0.52	2.57	1	4
1:A:89:LEU:HD23	1:A:156:ILE:HG21	0.52	1.81	1	1
2:B:273:HIS:O	2:B:274:VAL:C	0.52	2.52	1	3
1:A:104:TRP:HA	1:A:166:TRP:CH2	0.52	2.39	7	5
1:A:50:PRO:CA	1:A:61:LEU:HD13	0.52	2.30	4	2
1:A:147:SER:O	1:A:149:ILE:N	0.52	2.42	7	6
1:A:40:ASN:HB3	2:B:276:TYR:CD2	0.52	2.39	6	1
2:B:250:ILE:HG13	2:B:256:PHE:CD2	0.52	2.39	6	1
2:B:271:LYS:CE	2:B:274:VAL:HG23	0.52	2.34	6	1
1:A:137:VAL:HG11	1:A:152:VAL:HG13	0.52	1.81	7	1
1:A:146:ASP:OD2	1:A:149:ILE:CD1	0.52	2.58	7	1
1:A:24:LYS:O	1:A:35:VAL:HG12	0.52	2.04	10	1
1:A:115:TRP:CH2	1:A:175:LEU:CD2	0.52	2.91	10	2
2:B:269:TYR:CG	2:B:274:VAL:CG2	0.52	2.91	10	1
1:A:72:GLU:C	2:B:290:LEU:HD11	0.52	2.28	1	2
1:A:102:PRO:CB	1:A:106:ASP:HB2	0.52	2.34	5	6
1:A:36:LYS:O	2:B:250:ILE:HB	0.52	2.04	7	7
1:A:127:ASP:O	1:A:131:LEU:HB3	0.52	2.05	6	3
1:A:182:PHE:O	1:A:186:LEU:CD2	0.52	2.57	4	1
3:A:321:MTN:S1	3:A:321:MTN:C6	0.52	2.97	5	1
2:B:275:LYS:CB	2:B:276:TYR:CE1	0.52	2.92	7	1
1:A:196:PHE:O	1:A:210:SER:CA	0.52	2.57	8	2
1:A:41:THR:O	1:A:69:GLN:NE2	0.52	2.43	8	5
1:A:45:LEU:N	1:A:66:THR:O	0.52	2.42	6	4
1:A:57:SER:O	1:A:60:ASP:N	0.52	2.40	6	11
1:A:70:THR:OG1	1:A:71:VAL:N	0.52	2.41	9	9
1:A:93:TYR:O	1:A:93:TYR:CD1	0.52	2.63	1	1
1:A:157:ARG:O	1:A:160:GLY:N	0.52	2.42	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:129:LEU:HB2	1:A:185:VAL:HG12	0.52	1.82	5	1
1:A:200:CYS:O	1:A:201:SER:CB	0.52	2.57	5	1
1:A:26:VAL:HG21	2:B:286:PHE:CE2	0.52	2.40	6	1
1:A:83:GLU:OE1	1:A:154:LEU:CD1	0.52	2.58	6	1
1:A:96:PHE:HE2	1:A:153:VAL:HG23	0.52	1.65	6	1
1:A:47:TYR:O	1:A:62:LEU:CD2	0.52	2.58	10	2
1:A:133:THR:HB	1:A:182:PHE:CE2	0.52	2.40	4	1
1:A:182:PHE:O	1:A:186:LEU:HD21	0.52	2.04	4	1
1:A:36:LYS:O	2:B:250:ILE:CD1	0.52	2.53	11	3
1:A:36:LYS:HB2	2:B:306:ILE:CG2	0.52	2.35	6	2
2:B:295:ASP:OD1	2:B:296:ALA:N	0.52	2.43	8	1
1:A:108:ALA:HB2	1:A:111:LYS:NZ	0.52	2.19	9	1
1:A:29:ASP:O	1:A:30:SER:CB	0.52	2.58	1	3
1:A:35:VAL:CG1	2:B:250:ILE:CD1	0.52	2.79	1	5
1:A:102:PRO:CB	1:A:106:ASP:HB3	0.52	2.33	3	4
1:A:104:TRP:C	1:A:104:TRP:CD2	0.52	2.87	4	4
1:A:169:CYS:O	1:A:171:ASP:N	0.52	2.43	4	6
1:A:175:LEU:O	1:A:178:ILE:N	0.52	2.43	10	5
1:A:119:LEU:CB	1:A:161:ASN:OD1	0.52	2.58	7	2
1:A:26:VAL:HG11	2:B:286:PHE:CG	0.52	2.39	4	1
1:A:104:TRP:NE1	1:A:202:ALA:O	0.52	2.43	4	1
1:A:46:TRP:CZ2	1:A:96:PHE:CZ	0.52	2.97	5	1
1:A:132:CYS:SG	2:B:280:PRO:CB	0.52	2.98	5	1
1:A:126:ILE:O	1:A:185:VAL:CG1	0.52	2.57	7	1
2:B:292:VAL:O	2:B:293:LYS:C	0.52	2.53	9	1
1:A:57:SER:OG	1:A:60:ASP:N	0.52	2.42	10	1
1:A:103:GLU:HB2	4:A:325:M7G:O6	0.52	2.04	1	3
1:A:193:HIS:N	1:A:213:LEU:O	0.52	2.43	9	3
1:A:38:PRO:HG3	2:B:250:ILE:HG23	0.52	1.80	8	5
1:A:140:GLU:OE2	2:B:280:PRO:N	0.52	2.43	2	1
1:A:153:VAL:N	1:A:164:ALA:O	0.52	2.43	10	4
2:B:237:VAL:CG1	2:B:294:ALA:O	0.52	2.57	2	3
2:B:258:TYR:CD1	2:B:262:ILE:HG12	0.52	2.40	2	2
1:A:39:LEU:C	2:B:276:TYR:CB	0.52	2.83	11	2
1:A:27:LEU:O	2:B:289:LYS:CE	0.52	2.58	6	1
1:A:70:THR:HG21	2:B:305:LYS:HD3	0.52	1.82	6	1
1:A:84:PRO:N	1:A:127:ASP:OD2	0.52	2.43	6	1
1:A:65:VAL:CG1	2:B:295:ASP:O	0.52	2.58	9	1
1:A:143:ASP:OD1	1:A:144:GLU:N	0.52	2.43	9	1
1:A:40:ASN:CG	1:A:142:ILE:CD1	0.52	2.83	11	1
1:A:96:PHE:O	1:A:97:ARG:HB2	0.52	2.04	10	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:107:GLU:O	1:A:110:ALA:N	0.52	2.43	10	3
1:A:111:LYS:HE2	1:A:166:TRP:CG	0.52	2.40	1	1
2:B:258:TYR:HB2	2:B:262:ILE:HD13	0.52	1.80	6	3
2:B:278:TYR:O	2:B:279:GLY:C	0.52	2.53	10	3
2:B:287:LYS:O	2:B:290:LEU:N	0.52	2.43	2	3
1:A:75:TRP:O	1:A:79:GLN:N	0.52	2.43	3	5
1:A:137:VAL:CG2	1:A:146:ASP:CB	0.52	2.88	4	1
2:B:237:VAL:HG12	2:B:241:LEU:CD1	0.52	2.35	4	1
1:A:71:VAL:CG2	2:B:283:LEU:HD23	0.52	2.35	5	1
2:B:268:LYS:HD2	2:B:279:GLY:N	0.52	2.20	9	3
1:A:106:ASP:OD1	1:A:109:ASN:ND2	0.52	2.43	7	2
1:A:83:GLU:O	1:A:87:LEU:CD2	0.52	2.57	8	1
1:A:61:LEU:O	1:A:62:LEU:C	0.52	2.53	11	10
2:B:290:LEU:O	2:B:291:ASN:C	0.52	2.52	2	6
1:A:41:THR:O	1:A:69:GLN:HB3	0.52	2.05	2	5
1:A:70:THR:O	1:A:71:VAL:CB	0.52	2.58	2	2
1:A:27:LEU:CD1	1:A:27:LEU:N	0.52	2.72	6	2
1:A:45:LEU:HD23	1:A:66:THR:OG1	0.52	2.04	8	2
1:A:40:ASN:ND2	1:A:142:ILE:CG1	0.52	2.73	5	1
2:B:258:TYR:CD2	2:B:262:ILE:HD13	0.52	2.40	8	1
1:A:112:GLY:O	1:A:199:HIS:ND1	0.52	2.43	10	1
1:A:142:ILE:O	1:A:144:GLU:N	0.52	2.42	10	1
1:A:163:PHE:HZ	1:A:186:LEU:HD22	0.52	1.64	10	1
1:A:104:TRP:HA	1:A:108:ALA:HB2	0.52	1.80	11	1
1:A:141:THR:O	1:A:142:ILE:CB	0.52	2.58	11	1
2:B:304:SER:O	2:B:305:LYS:C	0.51	2.53	8	10
1:A:33:PHE:CE1	2:B:240:ILE:HG23	0.51	2.40	3	2
1:A:156:ILE:HD13	1:A:161:ASN:HB3	0.51	1.81	5	2
2:B:262:ILE:O	2:B:263:GLU:CB	0.51	2.57	5	3
1:A:74:PHE:CE2	1:A:78:ILE:CD1	0.51	2.93	5	1
1:A:142:ILE:HD11	2:B:274:VAL:HG21	0.51	1.81	6	1
2:B:244:LEU:O	2:B:247:ALA:N	0.51	2.43	11	3
1:A:194:LEU:C	1:A:195:GLU:CG	0.51	2.82	7	1
1:A:104:TRP:CE3	1:A:104:TRP:C	0.51	2.89	5	3
1:A:199:HIS:CG	1:A:200:CYS:N	0.51	2.78	1	3
1:A:130:TRP:HA	1:A:185:VAL:HG11	0.51	1.82	2	1
2:B:268:LYS:CE	2:B:271:LYS:CG	0.51	2.89	2	1
1:A:151:GLY:O	1:A:166:TRP:N	0.51	2.44	5	5
1:A:44:THR:OG1	1:A:97:ARG:NE	0.51	2.43	10	1
1:A:95:VAL:O	1:A:96:PHE:CB	0.51	2.58	10	1
1:A:39:LEU:CD1	2:B:276:TYR:O	0.51	2.58	3	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:TYR:O	1:A:154:LEU:N	0.51	2.43	1	5
2:B:258:TYR:HB2	2:B:262:ILE:CD1	0.51	2.35	8	7
1:A:157:ARG:O	1:A:158:LYS:C	0.51	2.54	8	6
1:A:162:LYS:C	1:A:163:PHE:CD1	0.51	2.88	2	1
1:A:172:LYS:O	1:A:175:LEU:N	0.51	2.43	11	4
1:A:176:LEU:HD13	1:A:176:LEU:N	0.51	2.20	2	1
2:B:258:TYR:CE1	2:B:263:GLU:HA	0.51	2.41	2	3
2:B:295:ASP:O	2:B:296:ALA:C	0.51	2.53	11	4
1:A:143:ASP:O	1:A:145:ASP:N	0.51	2.43	5	3
1:A:29:ASP:OD1	1:A:33:PHE:CE2	0.51	2.63	6	1
2:B:241:LEU:HD11	2:B:298:TRP:CG	0.51	2.39	6	1
1:A:92:ASP:N	1:A:92:ASP:OD1	0.51	2.43	8	1
1:A:104:TRP:CH2	4:A:325:M7G:H81	0.51	2.41	11	1
2:B:306:ILE:HD11	2:B:308:ILE:CG1	0.51	2.32	11	1
1:A:79:GLN:OE1	2:B:290:LEU:CB	0.51	2.57	1	1
1:A:58:TRP:CZ2	1:A:62:LEU:HG	0.51	2.40	3	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:138:ILE:CD1	0.51	2.91	5	3
1:A:44:THR:C	1:A:67:SER:CB	0.51	2.84	4	3
1:A:117:PHE:CD2	1:A:186:LEU:CD1	0.51	2.93	4	1
1:A:36:LYS:CD	1:A:72:GLU:OE2	0.51	2.59	6	1
1:A:146:ASP:OD1	1:A:149:ILE:HD13	0.51	2.05	6	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:138:ILE:HD11	0.51	2.40	8	1
1:A:74:PHE:CE1	1:A:78:ILE:CG2	0.51	2.93	8	1
1:A:108:ALA:CB	1:A:111:LYS:NZ	0.51	2.70	8	4
1:A:39:LEU:HD11	2:B:278:TYR:CE2	0.51	2.41	2	1
2:B:258:TYR:CE1	2:B:264:GLY:N	0.51	2.79	3	1
1:A:127:ASP:HA	1:A:130:TRP:CZ3	0.51	2.41	6	3
1:A:81:ILE:HG13	1:A:82:PRO:CD	0.51	2.35	8	1
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:182:PHE:CE1	0.51	2.97	8	1
2:B:269:TYR:HD2	2:B:274:VAL:HG21	0.51	1.66	8	1
1:A:73:GLU:OE1	1:A:73:GLU:CA	0.51	2.57	9	1
2:B:274:VAL:O	2:B:275:LYS:CG	0.51	2.59	10	1
1:A:34:ASP:HA	2:B:247:ALA:CB	0.51	2.35	8	8
1:A:117:PHE:HB3	1:A:186:LEU:CD2	0.51	2.36	1	1
2:B:269:TYR:HA	2:B:274:VAL:HG23	0.51	1.83	2	1
1:A:36:LYS:HB2	2:B:306:ILE:HG22	0.51	1.82	3	1
1:A:188:LEU:HD22	1:A:193:HIS:HE1	0.51	1.66	3	1
2:B:240:ILE:CG1	2:B:241:LEU:N	0.51	2.73	5	2
1:A:73:GLU:OE2	2:B:298:TRP:CZ2	0.51	2.63	7	1
1:A:29:ASP:OD2	1:A:30:SER:N	0.51	2.43	11	1
1:A:130:TRP:CD1	1:A:130:TRP:O	0.51	2.64	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:131:LEU:O	1:A:132:CYS:C	0.51	2.54	3	8
1:A:137:VAL:HG12	1:A:138:ILE:HG23	0.51	1.82	4	3
1:A:36:LYS:O	2:B:250:ILE:CB	0.51	2.59	8	6
1:A:117:PHE:CD1	1:A:194:LEU:HD12	0.51	2.41	4	1
1:A:193:HIS:O	1:A:194:LEU:CB	0.51	2.59	8	3
1:A:87:LEU:O	1:A:87:LEU:CD2	0.51	2.57	8	1
1:A:152:VAL:HG12	1:A:165:LEU:HA	0.51	1.82	8	1
1:A:141:THR:O	1:A:144:GLU:N	0.51	2.44	9	1
1:A:196:PHE:CG	1:A:211:ILE:HG13	0.51	2.41	10	3
2:B:240:ILE:HD12	2:B:241:LEU:HD23	0.51	1.82	1	1
1:A:87:LEU:CB	1:A:88:PRO:CD	0.51	2.88	11	4
1:A:135:LEU:HD21	2:B:280:PRO:CB	0.51	2.36	5	1
2:B:275:LYS:HB2	2:B:276:TYR:CE1	0.51	2.41	7	1
1:A:25:THR:HG21	2:B:256:PHE:CD1	0.51	2.41	9	1
1:A:71:VAL:O	1:A:72:GLU:C	0.51	2.52	9	2
2:B:273:HIS:O	2:B:274:VAL:O	0.51	2.29	10	1
1:A:81:ILE:N	1:A:82:PRO:CD	0.51	2.73	1	7
1:A:108:ALA:O	1:A:112:GLY:N	0.51	2.42	9	2
1:A:136:ALA:O	1:A:140:GLU:N	0.51	2.42	7	4
1:A:33:PHE:CZ	2:B:240:ILE:HB	0.51	2.41	5	4
1:A:130:TRP:CE2	1:A:163:PHE:CD2	0.51	2.98	5	1
1:A:136:ALA:O	1:A:140:GLU:C	0.51	2.53	8	3
1:A:48:THR:OG1	1:A:58:TRP:CZ3	0.51	2.63	8	1
1:A:91:SER:OG	1:A:92:ASP:N	0.51	2.44	8	1
1:A:68:PHE:CZ	2:B:302:THR:CB	0.51	2.94	6	2
1:A:101:ARG:O	1:A:102:PRO:C	0.51	2.54	1	9
1:A:140:GLU:OE1	1:A:145:ASP:CB	0.51	2.58	3	1
2:B:282:PHE:CD1	2:B:282:PHE:C	0.51	2.88	11	3
1:A:26:VAL:CG1	1:A:27:LEU:HD23	0.51	2.36	4	1
1:A:44:THR:C	1:A:67:SER:HB2	0.51	2.31	10	4
1:A:196:PHE:CE1	1:A:213:LEU:CD1	0.51	2.94	6	3
1:A:198:PRO:O	1:A:200:CYS:N	0.51	2.43	8	2
1:A:101:ARG:HH11	1:A:110:ALA:HB2	0.51	1.65	8	1
1:A:169:CYS:O	1:A:170:GLU:C	0.50	2.54	6	8
1:A:196:PHE:CD2	1:A:211:ILE:HG13	0.50	2.41	2	2
2:B:299:VAL:O	2:B:302:THR:OG1	0.50	2.29	9	7
1:A:103:GLU:HB3	4:A:325:M7G:O6	0.50	2.06	9	3
2:B:306:ILE:C	2:B:306:ILE:CD1	0.50	2.84	9	4
1:A:29:ASP:OD1	1:A:30:SER:N	0.50	2.42	10	2
1:A:99:ASP:O	1:A:100:VAL:C	0.50	2.54	11	2
1:A:103:GLU:HA	1:A:107:GLU:HB2	0.50	1.82	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:LEU:HB3	1:A:66:THR:O	0.50	2.05	7	5
1:A:115:TRP:O	1:A:165:LEU:N	0.50	2.44	11	4
2:B:268:LYS:HG2	2:B:271:LYS:CG	0.50	2.36	1	1
1:A:38:PRO:HD3	2:B:250:ILE:HD13	0.50	1.83	5	5
1:A:58:TRP:NE1	1:A:62:LEU:HD12	0.50	2.19	4	2
1:A:183:LYS:CD	1:A:188:LEU:HD11	0.50	2.36	8	1
1:A:36:LYS:HD2	2:B:306:ILE:HG22	0.50	1.80	9	1
1:A:141:THR:HG23	1:A:142:ILE:N	0.50	2.21	9	1
1:A:179:GLY:O	1:A:194:LEU:HD11	0.50	2.06	11	1
1:A:47:TYR:CZ	1:A:63:ARG:HB3	0.50	2.40	1	1
1:A:97:ARG:O	1:A:98:ASN:C	0.50	2.54	5	5
1:A:106:ASP:O	1:A:109:ASN:HB2	0.50	2.06	10	7
1:A:116:SER:O	1:A:195:GLU:N	0.50	2.43	8	9
1:A:154:LEU:C	1:A:154:LEU:CD2	0.50	2.81	2	6
1:A:172:LYS:HA	1:A:175:LEU:CD1	0.50	2.37	8	7
2:B:237:VAL:CG2	2:B:294:ALA:O	0.50	2.59	2	2
1:A:87:LEU:CD1	1:A:91:SER:HB2	0.50	2.37	11	3
1:A:135:LEU:HD11	2:B:283:LEU:HB2	0.50	1.82	5	1
1:A:100:VAL:CG2	1:A:107:GLU:O	0.50	2.59	6	1
1:A:84:PRO:HA	1:A:156:ILE:CD1	0.50	2.37	8	1
1:A:119:LEU:HD11	1:A:186:LEU:HB3	0.50	1.83	8	1
1:A:38:PRO:O	1:A:39:LEU:CD2	0.50	2.58	9	1
1:A:33:PHE:CE2	2:B:240:ILE:HB	0.50	2.41	8	4
1:A:111:LYS:HE2	1:A:166:TRP:CD2	0.50	2.41	1	1
2:B:257:ASN:N	2:B:257:ASN:OD1	0.50	2.43	3	2
1:A:171:ASP:N	1:A:171:ASP:OD1	0.50	2.43	4	3
1:A:43:TRP:HA	1:A:97:ARG:HB2	0.50	1.82	3	2
1:A:58:TRP:CD2	4:A:325:M7G:C8	0.50	2.94	3	1
1:A:183:LYS:HG3	1:A:193:HIS:CE1	0.50	2.42	3	1
1:A:112:GLY:HA2	1:A:199:HIS:CD2	0.50	2.41	9	3
1:A:148:GLN:CB	1:A:170:GLU:HB2	0.50	2.35	6	1
1:A:107:GLU:O	1:A:111:LYS:N	0.50	2.40	7	2
1:A:99:ASP:O	1:A:100:VAL:O	0.50	2.30	8	2
1:A:101:ARG:HD3	1:A:110:ALA:HB2	0.50	1.83	8	1
2:B:263:GLU:O	2:B:265:PRO:CD	0.50	2.60	11	1
1:A:40:ASN:O	1:A:40:ASN:CG	0.50	2.54	2	5
1:A:87:LEU:HD22	1:A:88:PRO:O	0.50	2.06	1	1
1:A:101:ARG:HA	1:A:107:GLU:OE2	0.50	2.07	3	6
2:B:251:GLU:C	2:B:255:SER:CB	0.50	2.85	1	4
1:A:196:PHE:CD2	1:A:211:ILE:HD12	0.50	2.42	2	1
2:B:293:LYS:O	2:B:294:ALA:C	0.50	2.54	2	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:37:HIS:HB3	2:B:278:TYR:CE2	0.50	2.40	3	2
1:A:80:ASN:N	1:A:80:ASN:ND2	0.50	2.58	3	1
1:A:82:PRO:O	1:A:83:GLU:O	0.50	2.30	3	2
1:A:131:LEU:HD13	1:A:132:CYS:CA	0.50	2.36	4	3
1:A:96:PHE:CE1	1:A:166:TRP:CZ3	0.50	3.00	5	1
1:A:26:VAL:HG23	2:B:286:PHE:CZ	0.50	2.41	6	1
1:A:117:PHE:HB2	1:A:163:PHE:CE2	0.50	2.42	7	2
1:A:188:LEU:HD13	1:A:193:HIS:HB2	0.50	1.82	8	1
1:A:104:TRP:CA	1:A:166:TRP:CH2	0.50	2.95	4	6
1:A:148:GLN:O	1:A:149:ILE:O	0.50	2.30	8	5
2:B:278:TYR:HB3	2:B:282:PHE:CD1	0.50	2.42	3	3
1:A:37:HIS:C	2:B:306:ILE:CG2	0.50	2.85	4	1
1:A:108:ALA:HA	1:A:111:LYS:CG	0.50	2.36	7	4
1:A:126:ILE:CG2	1:A:186:LEU:HA	0.50	2.36	5	2
1:A:134:LEU:O	1:A:138:ILE:CG2	0.50	2.55	10	1
2:B:240:ILE:HD11	2:B:292:VAL:CG1	0.50	2.36	11	1
2:B:254:PHE:CE1	2:B:268:LYS:HB2	0.50	2.42	11	1
2:B:264:GLY:HA2	2:B:267:ILE:CD1	0.50	2.35	6	2
1:A:142:ILE:HD11	2:B:276:TYR:C	0.50	2.32	8	2
1:A:26:VAL:CG1	2:B:290:LEU:HD23	0.50	2.36	6	1
1:A:34:ASP:OD1	1:A:34:ASP:N	0.50	2.45	6	2
2:B:258:TYR:CE2	2:B:282:PHE:CE1	0.50	2.99	8	1
1:A:46:TRP:CZ3	1:A:96:PHE:CZ	0.50	3.00	9	2
2:B:277:THR:CG2	2:B:277:THR:O	0.50	2.59	9	2
1:A:83:GLU:CB	1:A:84:PRO:HD2	0.50	2.35	1	1
1:A:146:ASP:O	1:A:147:SER:C	0.50	2.55	1	1
1:A:92:ASP:OD1	1:A:94:HIS:NE2	0.50	2.45	2	1
2:B:257:ASN:ND2	2:B:263:GLU:OE2	0.50	2.45	2	1
1:A:40:ASN:ND2	1:A:40:ASN:C	0.50	2.70	3	2
1:A:142:ILE:CB	2:B:274:VAL:HG22	0.50	2.37	4	1
1:A:89:LEU:HD11	1:A:156:ILE:HG21	0.50	1.82	8	1
1:A:38:PRO:HB2	2:B:308:ILE:HG23	0.50	1.83	10	1
1:A:69:GLN:HG2	2:B:307:VAL:HG11	0.50	1.82	11	1
1:A:130:TRP:CD1	1:A:134:LEU:HG	0.50	2.41	1	3
2:B:252:ASP:O	2:B:255:SER:HB2	0.50	2.07	4	9
1:A:40:ASN:OD1	1:A:141:THR:CG2	0.50	2.59	4	1
1:A:94:HIS:HB3	1:A:96:PHE:CE1	0.50	2.41	8	3
1:A:105:GLU:HB2	4:A:325:M7G:N1	0.50	2.22	6	1
2:B:237:VAL:HG21	2:B:298:TRP:HB2	0.50	1.84	8	1
2:B:263:GLU:O	2:B:265:PRO:N	0.50	2.45	11	1
1:A:75:TRP:CE3	1:A:75:TRP:HA	0.49	2.42	5	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:108:ALA:C	1:A:110:ALA:N	0.49	2.69	10	4
2:B:268:LYS:CG	2:B:271:LYS:HG2	0.49	2.37	1	1
1:A:39:LEU:HD13	1:A:70:THR:HA	0.49	1.82	2	1
1:A:156:ILE:CG2	1:A:157:ARG:N	0.49	2.75	8	3
1:A:183:LYS:HG3	1:A:188:LEU:CD2	0.49	2.37	5	2
1:A:194:LEU:HB2	1:A:213:LEU:HD13	0.49	1.84	4	1
1:A:40:ASN:HB3	2:B:276:TYR:CG	0.49	2.41	10	2
1:A:66:THR:OG1	1:A:73:GLU:CD	0.49	2.55	6	1
1:A:44:THR:HG23	1:A:97:ARG:NE	0.49	2.21	7	1
1:A:76:ALA:C	1:A:78:ILE:N	0.49	2.69	7	2
1:A:78:ILE:O	1:A:80:ASN:N	0.49	2.45	7	2
2:B:244:LEU:HD11	2:B:298:TRP:CH2	0.49	2.42	11	1
1:A:96:PHE:HB3	1:A:151:GLY:HA3	0.49	1.83	10	4
1:A:175:LEU:C	1:A:177:ARG:N	0.49	2.69	1	10
2:B:250:ILE:O	2:B:308:ILE:CG2	0.49	2.57	9	3
1:A:94:HIS:HB3	1:A:96:PHE:CZ	0.49	2.43	6	3
1:A:71:VAL:HB	2:B:283:LEU:CD2	0.49	2.37	6	1
2:B:298:TRP:CH2	2:B:305:LYS:CE	0.49	2.95	6	1
3:A:320:MTN:C7	3:A:320:MTN:S1	0.49	3.00	9	1
1:A:26:VAL:CG1	2:B:289:LYS:HB2	0.49	2.37	10	1
1:A:75:TRP:CZ3	2:B:287:LYS:HB2	0.49	2.42	9	3
1:A:111:LYS:HE2	1:A:166:TRP:CE2	0.49	2.42	1	1
1:A:37:HIS:CE1	2:B:286:PHE:CE1	0.49	3.00	2	1
2:B:240:ILE:HG13	2:B:241:LEU:N	0.49	2.23	8	7
2:B:271:LYS:CB	2:B:277:THR:HG21	0.49	2.36	2	1
2:B:253:VAL:HG23	2:B:254:PHE:H	0.49	1.66	3	4
1:A:108:ALA:C	1:A:199:HIS:O	0.49	2.55	5	1
1:A:112:GLY:O	1:A:113:GLY:O	0.49	2.30	5	1
1:A:105:GLU:CD	4:A:325:M7G:N2	0.49	2.70	6	1
1:A:111:LYS:HD2	1:A:166:TRP:CB	0.49	2.37	11	2
2:B:248:THR:CB	2:B:306:ILE:HG21	0.49	2.37	11	1
1:A:38:PRO:HB3	2:B:307:VAL:CG1	0.49	2.34	1	1
1:A:46:TRP:CD1	1:A:64:PRO:HA	0.49	2.42	1	1
1:A:66:THR:HG22	1:A:66:THR:O	0.49	2.07	1	1
1:A:130:TRP:CH2	1:A:154:LEU:CD1	0.49	2.94	1	4
1:A:102:PRO:HB2	1:A:106:ASP:HB2	0.49	1.85	4	4
1:A:161:ASN:N	1:A:161:ASN:OD1	0.49	2.46	2	4
2:B:258:TYR:CD1	2:B:262:ILE:CD1	0.49	2.96	2	1
1:A:135:LEU:O	1:A:138:ILE:HG23	0.49	2.07	8	1
1:A:46:TRP:CH2	1:A:107:GLU:OE2	0.49	2.65	11	1
1:A:59:SER:HA	1:A:62:LEU:CD1	0.49	2.38	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:143:ASP:C	2:B:272:GLU:OE1	0.49	2.56	5	1
1:A:71:VAL:CB	2:B:283:LEU:HD21	0.49	2.37	6	1
1:A:100:VAL:CG2	1:A:107:GLU:HA	0.49	2.36	6	1
2:B:268:LYS:HD2	2:B:279:GLY:CA	0.49	2.38	7	1
1:A:146:ASP:OD1	1:A:178:ILE:CD1	0.49	2.61	9	1
2:B:292:VAL:O	2:B:292:VAL:CG2	0.49	2.56	9	1
2:B:290:LEU:O	2:B:292:VAL:HG13	0.49	2.06	10	1
2:B:296:ALA:O	2:B:299:VAL:CG1	0.49	2.57	10	1
1:A:40:ASN:HB3	2:B:276:TYR:CD1	0.49	2.42	1	5
2:B:294:ALA:CB	2:B:298:TRP:NE1	0.49	2.75	1	1
1:A:140:GLU:OE2	2:B:280:PRO:CA	0.49	2.61	2	1
1:A:171:ASP:O	1:A:175:LEU:CD1	0.49	2.61	10	3
2:B:258:TYR:CD1	2:B:263:GLU:HA	0.49	2.42	2	4
1:A:39:LEU:HA	2:B:276:TYR:CB	0.49	2.37	3	1
1:A:66:THR:HG21	1:A:74:PHE:N	0.49	2.21	7	2
1:A:93:TYR:CE2	1:A:154:LEU:CD1	0.49	2.83	3	1
2:B:271:LYS:HD2	2:B:272:GLU:CB	0.49	2.37	6	1
1:A:115:TRP:O	1:A:117:PHE:CZ	0.49	2.66	7	1
1:A:117:PHE:CE1	1:A:163:PHE:O	0.49	2.66	8	1
2:B:241:LEU:HD23	2:B:244:LEU:CD1	0.49	2.37	8	1
1:A:75:TRP:CZ2	2:B:283:LEU:C	0.49	2.91	7	3
1:A:112:GLY:HA2	1:A:199:HIS:CG	0.49	2.43	2	7
2:B:251:GLU:O	2:B:252:ASP:HB3	0.49	2.08	1	2
1:A:45:LEU:O	1:A:45:LEU:HG	0.49	2.07	8	4
1:A:74:PHE:CD1	1:A:74:PHE:C	0.49	2.90	5	2
2:B:281:THR:OG1	2:B:282:PHE:N	0.49	2.46	5	2
1:A:111:LYS:O	1:A:168:LYS:O	0.49	2.30	6	3
1:A:153:VAL:CG2	1:A:166:TRP:CZ2	0.49	2.93	6	1
1:A:40:ASN:C	1:A:40:ASN:ND2	0.49	2.71	1	1
1:A:168:LYS:O	1:A:169:CYS:HB2	0.49	2.07	7	6
1:A:73:GLU:HG2	2:B:302:THR:CG2	0.49	2.37	2	3
1:A:117:PHE:CD1	1:A:194:LEU:HG	0.49	2.43	2	1
1:A:41:THR:O	1:A:69:GLN:CD	0.49	2.55	9	3
1:A:58:TRP:CD2	4:A:325:M7G:H82	0.49	2.42	3	1
1:A:188:LEU:HD22	1:A:193:HIS:CE1	0.49	2.43	3	1
2:B:282:PHE:O	2:B:285:GLN:N	0.49	2.46	3	1
1:A:45:LEU:O	1:A:65:VAL:CA	0.49	2.60	11	6
1:A:117:PHE:CE1	1:A:163:PHE:HB2	0.49	2.42	5	1
1:A:183:LYS:O	1:A:186:LEU:CG	0.49	2.61	5	1
1:A:101:ARG:O	1:A:107:GLU:HG2	0.49	2.07	6	3
1:A:101:ARG:CG	1:A:106:ASP:HB3	0.49	2.38	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:154:LEU:HB2	1:A:163:PHE:CE2	0.49	2.43	6	1
1:A:150:ASN:OD1	1:A:166:TRP:C	0.49	2.55	8	1
1:A:35:VAL:HG13	2:B:250:ILE:HD13	0.49	1.85	9	1
1:A:142:ILE:HB	2:B:274:VAL:CG1	0.49	2.38	11	1
1:A:83:GLU:O	1:A:87:LEU:CD1	0.49	2.61	1	1
1:A:89:LEU:HA	1:A:156:ILE:CG2	0.49	2.37	11	10
1:A:91:SER:O	1:A:156:ILE:N	0.49	2.46	8	5
1:A:103:GLU:C	1:A:105:GLU:N	0.49	2.70	3	6
1:A:154:LEU:HD23	1:A:155:SER:N	0.49	2.23	5	4
1:A:47:TYR:CZ	1:A:65:VAL:HG22	0.49	2.43	3	1
1:A:108:ALA:O	1:A:199:HIS:HB2	0.49	2.08	8	3
1:A:98:ASN:O	1:A:100:VAL:N	0.49	2.46	4	1
2:B:252:ASP:OD2	2:B:276:TYR:CE2	0.49	2.65	4	1
1:A:160:GLY:O	1:A:161:ASN:ND2	0.49	2.46	5	1
2:B:268:LYS:O	2:B:274:VAL:CG2	0.49	2.61	9	1
2:B:263:GLU:O	2:B:264:GLY:C	0.49	2.56	11	1
1:A:75:TRP:CE3	2:B:287:LYS:HB2	0.49	2.42	2	4
1:A:83:GLU:HB3	1:A:84:PRO:CD	0.49	2.38	1	1
2:B:240:ILE:CD1	2:B:292:VAL:HG21	0.49	2.38	1	1
2:B:253:VAL:HG13	2:B:278:TYR:CE1	0.49	2.43	1	3
1:A:47:TYR:HE2	1:A:65:VAL:HG21	0.49	1.68	5	2
2:B:258:TYR:HB2	2:B:262:ILE:HD11	0.49	1.85	10	3
1:A:48:THR:N	1:A:92:ASP:O	0.49	2.46	4	3
1:A:94:HIS:CD2	1:A:153:VAL:HG13	0.49	2.43	3	1
1:A:139:GLY:C	1:A:140:GLU:CD	0.49	2.81	6	2
2:B:272:GLU:C	2:B:274:VAL:N	0.49	2.70	10	2
1:A:135:LEU:HD21	2:B:283:LEU:CB	0.49	2.38	10	2
2:B:286:PHE:O	2:B:289:LYS:N	0.49	2.44	8	2
1:A:153:VAL:CG2	1:A:166:TRP:CZ3	0.49	2.96	9	1
1:A:183:LYS:HG3	1:A:194:LEU:HD13	0.48	1.83	2	1
2:B:244:LEU:CD1	2:B:298:TRP:CH2	0.48	2.96	2	3
1:A:68:PHE:CE2	2:B:303:ALA:HA	0.48	2.43	11	3
1:A:75:TRP:O	1:A:79:GLN:HB2	0.48	2.08	3	2
1:A:78:ILE:CD1	1:A:95:VAL:HG21	0.48	2.36	3	1
1:A:35:VAL:HG13	2:B:250:ILE:HB	0.48	1.83	4	1
1:A:45:LEU:HD13	1:A:74:PHE:CD1	0.48	2.43	4	1
1:A:188:LEU:HD13	1:A:193:HIS:CD2	0.48	2.43	4	1
2:B:286:PHE:O	2:B:287:LYS:C	0.48	2.56	8	4
1:A:39:LEU:HB2	1:A:69:GLN:CG	0.48	2.38	5	1
1:A:71:VAL:HG22	2:B:286:PHE:CD2	0.48	2.43	5	1
1:A:48:THR:OG1	1:A:62:LEU:HD21	0.48	2.08	7	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:THR:HG21	1:A:73:GLU:HB3	0.48	1.85	6	1
1:A:58:TRP:NE1	4:A:325:M7G:N1	0.48	2.60	9	1
1:A:109:ASN:C	1:A:109:ASN:OD1	0.48	2.56	9	1
1:A:73:GLU:HG2	1:A:74:PHE:N	0.48	2.23	10	1
1:A:173:GLU:CB	1:A:174:PRO:CD	0.48	2.91	2	5
2:B:291:ASN:C	2:B:292:VAL:HG13	0.48	2.32	9	6
1:A:48:THR:CG2	1:A:92:ASP:OD1	0.48	2.61	2	1
1:A:147:SER:O	1:A:148:GLN:C	0.48	2.56	5	3
1:A:110:ALA:O	1:A:111:LYS:HB2	0.48	2.08	3	1
1:A:134:LEU:HD13	1:A:152:VAL:CG1	0.48	2.38	4	1
1:A:135:LEU:HG	1:A:136:ALA:N	0.48	2.23	6	2
1:A:76:ALA:O	1:A:77:ILE:C	0.48	2.55	7	2
1:A:105:GLU:O	1:A:106:ASP:CG	0.48	2.56	8	1
1:A:135:LEU:HD13	1:A:136:ALA:CA	0.48	2.38	8	2
1:A:105:GLU:CD	4:A:325:M7G:HN21	0.48	2.15	11	1
1:A:78:ILE:C	1:A:80:ASN:N	0.48	2.71	7	7
1:A:87:LEU:HD11	1:A:156:ILE:CD1	0.48	2.34	1	1
1:A:103:GLU:CA	1:A:107:GLU:HG3	0.48	2.39	5	7
1:A:194:LEU:O	1:A:213:LEU:N	0.48	2.46	8	2
1:A:76:ALA:HB1	2:B:294:ALA:HA	0.48	1.84	2	1
1:A:172:LYS:HA	1:A:175:LEU:HD13	0.48	1.84	2	4
1:A:78:ILE:CD1	1:A:95:VAL:CG2	0.48	2.91	3	1
1:A:155:SER:N	1:A:162:LYS:O	0.48	2.46	8	5
2:B:294:ALA:C	2:B:295:ASP:CG	0.48	2.80	3	4
1:A:25:THR:O	1:A:29:ASP:CG	0.48	2.56	7	2
2:B:271:LYS:HE3	2:B:274:VAL:CG2	0.48	2.37	6	1
1:A:156:ILE:HG23	1:A:160:GLY:O	0.48	2.07	7	2
1:A:89:LEU:HD12	1:A:89:LEU:H	0.48	1.63	8	1
1:A:139:GLY:O	1:A:140:GLU:HB2	0.48	2.08	9	1
1:A:130:TRP:CG	1:A:131:LEU:N	0.48	2.81	10	1
1:A:79:GLN:OE1	2:B:292:VAL:O	0.48	2.32	11	1
1:A:172:LYS:O	1:A:173:GLU:C	0.48	2.56	2	6
1:A:196:PHE:HB2	1:A:210:SER:CB	0.48	2.38	3	4
1:A:72:GLU:O	1:A:73:GLU:C	0.48	2.56	2	1
1:A:81:ILE:O	1:A:86:GLU:HB2	0.48	2.09	11	5
1:A:142:ILE:HD11	2:B:276:TYR:CD1	0.48	2.44	2	1
1:A:145:ASP:OD1	1:A:146:ASP:N	0.48	2.46	2	1
2:B:251:GLU:O	2:B:252:ASP:CG	0.48	2.56	9	6
2:B:258:TYR:O	2:B:262:ILE:O	0.48	2.31	5	7
1:A:81:ILE:O	1:A:82:PRO:C	0.48	2.56	3	1
1:A:161:ASN:CG	1:A:163:PHE:CZ	0.48	2.91	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:SER:C	1:A:92:ASP:CG	0.48	2.81	4	3
1:A:29:ASP:OD1	1:A:33:PHE:CG	0.48	2.65	6	1
1:A:58:TRP:CE2	1:A:62:LEU:HD12	0.48	2.43	6	1
1:A:32:HIS:O	1:A:34:ASP:N	0.48	2.46	7	1
1:A:79:GLN:OE1	2:B:293:LYS:HA	0.48	2.09	11	2
1:A:43:TRP:CE3	1:A:43:TRP:O	0.48	2.67	1	2
2:B:296:ALA:HA	2:B:299:VAL:HG23	0.48	1.85	2	1
1:A:101:ARG:N	1:A:107:GLU:OE2	0.48	2.46	3	1
1:A:123:GLY:N	1:A:126:ILE:HD11	0.48	2.23	4	1
1:A:137:VAL:O	1:A:146:ASP:CG	0.48	2.57	4	1
1:A:146:ASP:O	1:A:149:ILE:CD1	0.48	2.62	4	1
1:A:26:VAL:HG23	1:A:33:PHE:CE2	0.48	2.40	5	1
1:A:26:VAL:C	1:A:29:ASP:OD1	0.48	2.56	5	2
1:A:75:TRP:CZ2	1:A:135:LEU:HD13	0.48	2.43	5	1
1:A:129:LEU:CB	1:A:185:VAL:HG12	0.48	2.37	5	2
2:B:252:ASP:OD1	2:B:275:LYS:C	0.48	2.56	5	1
1:A:149:ILE:HG12	1:A:167:THR:HG22	0.48	1.79	7	1
2:B:240:ILE:HG21	2:B:292:VAL:HG11	0.48	1.85	7	1
1:A:102:PRO:O	1:A:103:GLU:HB2	0.48	2.07	9	2
1:A:35:VAL:CG2	2:B:249:PRO:O	0.48	2.61	11	1
2:B:241:LEU:CD2	2:B:301:SER:HB2	0.48	2.38	11	1
1:A:148:GLN:O	1:A:168:LYS:HB3	0.48	2.09	1	2
2:B:252:ASP:CA	2:B:255:SER:HB2	0.48	2.39	4	6
1:A:37:HIS:O	1:A:70:THR:HB	0.48	2.09	3	6
1:A:127:ASP:OD1	1:A:127:ASP:N	0.48	2.44	3	1
1:A:29:ASP:OD1	1:A:32:HIS:C	0.48	2.56	11	2
1:A:48:THR:OG1	1:A:62:LEU:CD2	0.48	2.61	6	3
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:N	0.48	2.24	8	1
1:A:83:GLU:CB	1:A:84:PRO:HD3	0.48	2.38	8	1
1:A:140:GLU:OE2	2:B:278:TYR:N	0.48	2.47	8	1
1:A:197:PHE:CE2	1:A:212:THR:CG2	0.48	2.96	8	1
2:B:296:ALA:HA	2:B:299:VAL:HG13	0.48	1.85	10	2
1:A:119:LEU:HD11	1:A:188:LEU:HB3	0.48	1.85	11	1
1:A:34:ASP:C	2:B:247:ALA:HB1	0.48	2.34	1	2
1:A:117:PHE:CG	1:A:186:LEU:HD21	0.48	2.44	1	1
1:A:133:THR:HB	1:A:182:PHE:CZ	0.48	2.44	10	2
2:B:251:GLU:O	2:B:252:ASP:HB2	0.48	2.09	5	9
1:A:44:THR:HG23	1:A:97:ARG:CD	0.48	2.39	3	1
1:A:70:THR:HG21	1:A:73:GLU:OE2	0.48	2.09	4	1
1:A:111:LYS:O	1:A:168:LYS:CA	0.48	2.61	11	2
1:A:150:ASN:C	1:A:150:ASN:ND2	0.48	2.72	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:268:LYS:O	2:B:274:VAL:HG23	0.48	2.08	9	2
1:A:140:GLU:CD	2:B:278:TYR:O	0.48	2.56	10	1
1:A:79:GLN:OE1	2:B:292:VAL:C	0.48	2.57	11	1
2:B:248:THR:HA	2:B:306:ILE:CG2	0.48	2.39	11	1
1:A:79:GLN:HA	1:A:79:GLN:NE2	0.48	2.22	6	4
1:A:94:HIS:HB2	1:A:96:PHE:CZ	0.48	2.44	10	2
2:B:252:ASP:O	2:B:253:VAL:C	0.48	2.57	4	10
1:A:87:LEU:HD12	1:A:89:LEU:N	0.48	2.24	7	3
1:A:198:PRO:O	1:A:199:HIS:C	0.48	2.56	3	5
1:A:82:PRO:HA	1:A:86:GLU:HB3	0.48	1.86	7	4
1:A:96:PHE:CD2	1:A:152:VAL:O	0.48	2.66	5	1
1:A:110:ALA:O	1:A:111:LYS:HB3	0.48	2.09	5	1
1:A:43:TRP:HB2	1:A:96:PHE:O	0.48	2.08	6	1
1:A:111:LYS:HB3	1:A:150:ASN:ND2	0.48	2.24	6	3
1:A:135:LEU:HD11	2:B:280:PRO:CA	0.48	2.39	7	1
1:A:39:LEU:CB	1:A:69:GLN:O	0.48	2.62	8	1
1:A:65:VAL:HG12	2:B:295:ASP:O	0.48	2.09	9	1
2:B:252:ASP:OD2	2:B:308:ILE:HD11	0.48	2.08	9	1
1:A:100:VAL:O	1:A:101:ARG:HB2	0.48	2.09	7	6
1:A:107:GLU:O	1:A:110:ALA:CB	0.48	2.61	1	1
1:A:58:TRP:CE2	4:A:325:M7G:N7	0.48	2.82	3	2
1:A:96:PHE:HB2	1:A:151:GLY:HA3	0.48	1.86	5	1
1:A:135:LEU:CD1	2:B:283:LEU:HB3	0.48	2.38	5	1
1:A:40:ASN:CG	2:B:276:TYR:CD2	0.48	2.92	6	1
2:B:268:LYS:CD	2:B:279:GLY:HA2	0.48	2.38	7	1
1:A:85:HIS:CD2	1:A:127:ASP:HB2	0.48	2.44	8	1
1:A:147:SER:O	1:A:148:GLN:CB	0.48	2.61	8	1
1:A:58:TRP:CH2	4:A:325:M7G:CM7	0.48	2.97	9	1
1:A:94:HIS:CB	1:A:153:VAL:HG22	0.48	2.38	10	1
2:B:268:LYS:CD	2:B:280:PRO:HD3	0.48	2.39	10	1
1:A:193:HIS:N	1:A:193:HIS:ND1	0.48	2.61	11	1
1:A:40:ASN:CG	1:A:40:ASN:O	0.48	2.56	3	1
1:A:112:GLY:HA3	1:A:167:THR:O	0.48	2.08	3	1
1:A:188:LEU:CB	1:A:193:HIS:CE1	0.48	2.96	7	2
1:A:102:PRO:O	1:A:103:GLU:CD	0.48	2.57	9	3
1:A:188:LEU:HD13	1:A:193:HIS:CG	0.48	2.44	4	1
1:A:74:PHE:CZ	1:A:138:ILE:HG21	0.48	2.43	6	1
1:A:101:ARG:CB	1:A:106:ASP:HB3	0.48	2.39	6	2
1:A:80:ASN:C	1:A:82:PRO:HD2	0.48	2.34	8	1
1:A:111:LYS:HD2	1:A:113:GLY:N	0.48	2.23	8	1
1:A:130:TRP:CE3	1:A:182:PHE:CD1	0.48	3.02	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:PRO:HB2	1:A:161:ASN:ND2	0.48	2.24	9	1
1:A:194:LEU:HB3	1:A:213:LEU:HD13	0.48	1.84	9	1
2:B:254:PHE:CD2	2:B:269:TYR:HB2	0.48	2.44	9	1
1:A:101:ARG:HB2	1:A:106:ASP:CG	0.48	2.34	11	1
1:A:24:LYS:C	1:A:29:ASP:OD2	0.47	2.57	1	1
1:A:47:TYR:CD1	1:A:47:TYR:N	0.47	2.82	11	2
1:A:72:GLU:CA	2:B:290:LEU:HD11	0.47	2.39	1	1
1:A:103:GLU:N	1:A:107:GLU:HG3	0.47	2.24	2	5
1:A:117:PHE:CD2	1:A:163:PHE:HB2	0.47	2.44	4	4
1:A:38:PRO:HD3	2:B:250:ILE:CD1	0.47	2.38	5	5
1:A:75:TRP:HB2	2:B:290:LEU:HD12	0.47	1.79	11	4
1:A:77:ILE:HD12	1:A:77:ILE:H	0.47	1.68	7	3
1:A:140:GLU:O	1:A:145:ASP:CG	0.47	2.57	2	1
1:A:142:ILE:CD1	2:B:277:THR:OG1	0.47	2.62	2	1
1:A:26:VAL:O	1:A:29:ASP:OD1	0.47	2.32	10	5
1:A:40:ASN:ND2	1:A:40:ASN:O	0.47	2.47	3	1
1:A:168:LYS:O	1:A:169:CYS:HB3	0.47	2.09	3	2
1:A:43:TRP:CH2	1:A:138:ILE:HD12	0.47	2.44	4	1
1:A:43:TRP:O	1:A:67:SER:C	0.47	2.57	11	2
1:A:45:LEU:HD13	1:A:74:PHE:CE1	0.47	2.44	4	1
1:A:84:PRO:CG	1:A:127:ASP:CG	0.47	2.87	4	1
2:B:241:LEU:HD23	2:B:301:SER:OG	0.47	2.09	4	1
2:B:301:SER:O	2:B:302:THR:C	0.47	2.57	4	1
1:A:39:LEU:CB	1:A:69:GLN:HB2	0.47	2.39	5	1
1:A:135:LEU:HD23	1:A:136:ALA:N	0.47	2.24	5	1
1:A:38:PRO:HG3	2:B:308:ILE:CG2	0.47	2.37	6	1
1:A:79:GLN:CG	2:B:291:ASN:HA	0.47	2.39	6	1
1:A:83:GLU:C	1:A:127:ASP:OD2	0.47	2.57	6	1
1:A:50:PRO:CG	1:A:61:LEU:HD22	0.47	2.36	7	1
1:A:101:ARG:HB2	1:A:106:ASP:C	0.47	2.34	8	1
1:A:44:THR:OG1	1:A:97:ARG:CD	0.47	2.61	10	1
1:A:66:THR:OG1	1:A:73:GLU:CB	0.47	2.62	7	2
1:A:79:GLN:OE1	2:B:287:LYS:O	0.47	2.32	8	2
1:A:131:LEU:O	1:A:133:THR:N	0.47	2.47	1	8
1:A:70:THR:O	1:A:71:VAL:HB	0.47	2.08	9	7
1:A:142:ILE:CD1	2:B:276:TYR:O	0.47	2.62	2	1
1:A:66:THR:HG21	2:B:302:THR:HB	0.47	1.84	4	1
1:A:199:HIS:O	1:A:202:ALA:N	0.47	2.46	4	1
2:B:298:TRP:CZ2	2:B:305:LYS:CE	0.47	2.98	6	1
1:A:27:LEU:HD13	2:B:258:TYR:CG	0.47	2.44	7	1
1:A:101:ARG:NH1	1:A:110:ALA:HB2	0.47	2.24	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:VAL:O	1:A:29:ASP:CG	0.47	2.57	9	1
1:A:103:GLU:O	1:A:104:TRP:C	0.47	2.57	9	2
1:A:143:ASP:C	1:A:145:ASP:N	0.47	2.71	10	1
2:B:272:GLU:CD	2:B:272:GLU:O	0.47	2.57	10	1
1:A:92:ASP:OD1	4:A:325:M7G:O1A	0.47	2.33	11	1
1:A:102:PRO:O	1:A:103:GLU:OE1	0.47	2.32	11	1
1:A:186:LEU:O	1:A:187:LYS:C	0.47	2.57	11	1
1:A:38:PRO:CB	2:B:307:VAL:HA	0.47	2.39	1	2
1:A:82:PRO:CB	1:A:87:LEU:HB3	0.47	2.39	1	1
1:A:27:LEU:HD21	2:B:286:PHE:CD1	0.47	2.44	2	1
2:B:287:LYS:O	2:B:288:ASP:C	0.47	2.58	2	4
1:A:69:GLN:O	1:A:70:THR:O	0.47	2.32	3	2
1:A:79:GLN:NE2	2:B:287:LYS:HB2	0.47	2.24	3	1
1:A:62:LEU:HD11	1:A:103:GLU:OE1	0.47	2.09	11	2
2:B:274:VAL:O	2:B:275:LYS:C	0.47	2.56	4	1
1:A:149:ILE:O	1:A:168:LYS:CB	0.47	2.62	5	1
1:A:104:TRP:CH2	4:A:325:M7G:H2'	0.47	2.44	10	4
2:B:241:LEU:HD21	2:B:298:TRP:N	0.47	2.24	6	1
2:B:247:ALA:C	2:B:248:THR:OG1	0.47	2.57	10	2
2:B:248:THR:CB	2:B:249:PRO:CD	0.47	2.91	6	3
1:A:195:GLU:HB3	1:A:197:PHE:CZ	0.47	2.44	9	1
2:B:237:VAL:HG11	2:B:298:TRP:CB	0.47	2.39	11	1
2:B:266:ASP:C	2:B:268:LYS:N	0.47	2.72	11	1
1:A:135:LEU:C	1:A:135:LEU:CD1	0.47	2.85	11	5
1:A:151:GLY:O	1:A:166:TRP:HB2	0.47	2.10	11	7
2:B:237:VAL:CG1	2:B:297:GLU:HB2	0.47	2.40	1	1
1:A:110:ALA:O	1:A:111:LYS:CG	0.47	2.61	3	2
1:A:105:GLU:HB2	4:A:325:M7G:C6	0.47	2.39	4	1
2:B:250:ILE:HG22	2:B:306:ILE:HD13	0.47	1.85	4	1
1:A:130:TRP:CD2	1:A:163:PHE:CG	0.47	3.03	7	1
1:A:93:TYR:CD2	1:A:154:LEU:CD2	0.47	2.93	9	1
2:B:250:ILE:HD11	2:B:256:PHE:CG	0.47	2.45	9	1
1:A:194:LEU:CD2	1:A:196:PHE:CZ	0.47	2.98	10	1
1:A:74:PHE:O	1:A:78:ILE:HG12	0.47	2.10	6	5
2:B:251:GLU:CB	2:B:255:SER:HB3	0.47	2.40	4	4
2:B:282:PHE:HA	2:B:285:GLN:NE2	0.47	2.25	3	10
1:A:48:THR:CG2	1:A:62:LEU:HG	0.47	2.39	7	6
1:A:65:VAL:HB	2:B:299:VAL:HG21	0.47	1.85	2	1
2:B:294:ALA:O	2:B:295:ASP:CG	0.47	2.57	6	3
1:A:117:PHE:CE2	1:A:163:PHE:HB2	0.47	2.44	4	2
2:B:291:ASN:C	2:B:292:VAL:CG1	0.47	2.87	6	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:126:ILE:CD1	1:A:127:ASP:OD1	0.47	2.62	6	1
1:A:188:LEU:HD22	1:A:193:HIS:HB2	0.47	1.86	8	1
1:A:108:ALA:HA	1:A:111:LYS:HG3	0.47	1.86	9	1
1:A:33:PHE:CD1	2:B:244:LEU:CD1	0.47	2.97	10	1
1:A:66:THR:OG1	1:A:73:GLU:CG	0.47	2.62	1	1
1:A:106:ASP:O	1:A:107:GLU:C	0.47	2.56	11	3
1:A:173:GLU:N	1:A:174:PRO:HD2	0.47	2.25	11	5
1:A:48:THR:OG1	1:A:92:ASP:HB3	0.47	2.10	3	1
1:A:26:VAL:HG12	2:B:286:PHE:CD1	0.47	2.43	4	1
1:A:87:LEU:CD1	1:A:91:SER:OG	0.47	2.63	4	1
1:A:123:GLY:CA	1:A:126:ILE:CD1	0.47	2.92	4	1
1:A:40:ASN:ND2	1:A:142:ILE:HD11	0.47	2.25	5	1
1:A:113:GLY:O	1:A:166:TRP:HA	0.47	2.09	5	1
1:A:201:SER:O	1:A:202:ALA:C	0.47	2.56	7	2
1:A:97:ARG:CZ	1:A:141:THR:HG21	0.47	2.39	6	1
1:A:111:LYS:CD	1:A:166:TRP:HB3	0.47	2.40	6	2
1:A:142:ILE:O	1:A:143:ASP:HB3	0.47	2.10	7	1
2:B:240:ILE:HG21	2:B:292:VAL:CG1	0.47	2.40	7	1
1:A:91:SER:C	1:A:92:ASP:OD1	0.47	2.57	9	2
1:A:143:ASP:HB2	2:B:274:VAL:HG21	0.47	1.85	9	1
1:A:36:LYS:C	2:B:306:ILE:HG22	0.47	2.34	10	1
1:A:140:GLU:CD	1:A:140:GLU:O	0.47	2.57	1	1
1:A:183:LYS:CD	1:A:188:LEU:HD21	0.47	2.39	1	1
1:A:46:TRP:CZ2	1:A:101:ARG:O	0.47	2.68	2	1
1:A:58:TRP:CD2	1:A:62:LEU:CD1	0.47	2.98	2	1
1:A:92:ASP:OD1	1:A:94:HIS:CE1	0.47	2.67	2	1
1:A:111:LYS:HE3	1:A:113:GLY:N	0.47	2.25	2	1
1:A:184:GLN:O	1:A:187:LYS:N	0.47	2.39	4	7
2:B:253:VAL:CA	2:B:256:PHE:CE1	0.47	2.97	11	3
1:A:40:ASN:CB	2:B:276:TYR:CD1	0.47	2.97	3	1
1:A:126:ILE:CG2	1:A:186:LEU:O	0.47	2.63	3	1
1:A:129:LEU:HB3	1:A:185:VAL:CG1	0.47	2.39	9	2
1:A:46:TRP:HA	1:A:65:VAL:HG23	0.47	1.87	4	2
1:A:101:ARG:O	1:A:107:GLU:OE2	0.47	2.33	8	3
2:B:237:VAL:HG13	2:B:240:ILE:HD11	0.47	1.85	4	1
1:A:79:GLN:NE2	2:B:287:LYS:HG3	0.47	2.25	5	1
1:A:73:GLU:HG3	2:B:302:THR:CG2	0.47	2.39	6	2
1:A:153:VAL:O	1:A:163:PHE:CE1	0.47	2.68	6	1
2:B:259:PRO:O	2:B:260:GLU:O	0.47	2.33	6	1
1:A:77:ILE:O	1:A:80:ASN:OD1	0.47	2.32	8	1
1:A:118:GLN:O	1:A:193:HIS:CG	0.47	2.68	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:150:ASN:OD1	1:A:166:TRP:HB3	0.47	2.10	8	1
2:B:252:ASP:HB2	2:B:255:SER:CB	0.47	2.40	9	1
1:A:26:VAL:HG22	1:A:33:PHE:CD2	0.47	2.45	10	1
1:A:68:PHE:CD1	2:B:305:LYS:CB	0.47	2.98	10	1
2:B:254:PHE:CD1	2:B:268:LYS:HB2	0.47	2.44	11	1
1:A:172:LYS:C	1:A:176:LEU:HD22	0.47	2.35	3	1
2:B:280:PRO:O	2:B:284:LEU:N	0.47	2.48	4	1
1:A:113:GLY:CA	1:A:199:HIS:HB3	0.47	2.40	5	1
1:A:126:ILE:HG23	1:A:186:LEU:CA	0.47	2.38	5	1
1:A:26:VAL:CG2	2:B:289:LYS:CB	0.47	2.92	7	1
1:A:89:LEU:O	1:A:90:LYS:HB3	0.47	2.10	8	1
1:A:67:SER:O	1:A:68:PHE:CD2	0.47	2.68	9	1
1:A:96:PHE:O	1:A:97:ARG:HG3	0.47	2.10	1	4
2:B:238:SER:O	2:B:242:ASN:CG	0.47	2.57	1	1
1:A:135:LEU:CD2	2:B:284:LEU:CD1	0.47	2.92	2	2
1:A:25:THR:O	1:A:29:ASP:CB	0.47	2.62	7	3
1:A:26:VAL:C	1:A:29:ASP:CG	0.47	2.82	9	2
1:A:47:TYR:OH	2:B:295:ASP:OD2	0.47	2.33	4	1
1:A:137:VAL:O	1:A:146:ASP:OD2	0.47	2.33	4	1
1:A:73:GLU:HG2	2:B:302:THR:HG23	0.47	1.82	5	1
1:A:197:PHE:HB3	1:A:198:PRO:CD	0.47	2.40	5	1
1:A:66:THR:OG1	1:A:73:GLU:OE1	0.47	2.32	6	1
1:A:106:ASP:CA	1:A:109:ASN:ND2	0.47	2.78	8	2
2:B:271:LYS:CE	2:B:274:VAL:HB	0.47	2.40	6	1
1:A:40:ASN:HB3	2:B:276:TYR:CE1	0.47	2.45	9	1
1:A:65:VAL:CG1	2:B:295:ASP:CA	0.47	2.93	9	1
1:A:111:LYS:HD2	1:A:113:GLY:O	0.47	2.10	9	1
1:A:131:LEU:C	1:A:133:THR:N	0.47	2.72	8	11
1:A:158:LYS:O	1:A:159:GLY:C	0.47	2.58	3	3
1:A:119:LEU:HD12	1:A:163:PHE:CE2	0.47	2.45	2	1
2:B:258:TYR:CE1	2:B:262:ILE:HG12	0.47	2.45	2	1
1:A:80:ASN:O	1:A:81:ILE:O	0.47	2.32	3	1
1:A:100:VAL:HG23	1:A:110:ALA:HB2	0.47	1.79	3	1
1:A:142:ILE:HD13	2:B:274:VAL:CG2	0.47	2.40	3	1
1:A:120:CYS:O	1:A:159:GLY:O	0.47	2.33	10	2
1:A:73:GLU:N	1:A:73:GLU:CD	0.47	2.73	5	1
1:A:89:LEU:HG	1:A:156:ILE:CG2	0.47	2.40	5	1
1:A:160:GLY:C	1:A:161:ASN:ND2	0.47	2.73	5	1
2:B:252:ASP:OD1	2:B:276:TYR:CA	0.47	2.63	5	1
1:A:68:PHE:CZ	2:B:302:THR:HB	0.47	2.45	6	1
1:A:106:ASP:O	1:A:110:ALA:N	0.47	2.46	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:235:ASN:O	2:B:293:LYS:NZ	0.47	2.48	6	1
1:A:102:PRO:HD2	1:A:106:ASP:CB	0.47	2.40	8	1
1:A:143:ASP:CB	2:B:274:VAL:HG21	0.47	2.40	9	1
2:B:272:GLU:O	2:B:274:VAL:N	0.47	2.48	10	1
1:A:25:THR:HG22	2:B:256:PHE:CD2	0.47	2.45	11	1
2:B:271:LYS:HB2	2:B:274:VAL:CG2	0.47	2.40	11	1
1:A:39:LEU:HG	2:B:278:TYR:OH	0.46	2.09	2	1
2:B:258:TYR:CD1	2:B:262:ILE:HD11	0.46	2.45	2	1
2:B:290:LEU:C	2:B:292:VAL:N	0.46	2.73	3	1
1:A:148:GLN:CB	1:A:170:GLU:HB3	0.46	2.40	4	1
1:A:26:VAL:CG2	2:B:289:LYS:HB3	0.46	2.39	5	1
1:A:96:PHE:CZ	1:A:166:TRP:CZ3	0.46	3.03	5	2
1:A:113:GLY:N	1:A:199:HIS:HB3	0.46	2.25	5	1
1:A:135:LEU:HD12	2:B:283:LEU:HD13	0.46	1.85	5	2
1:A:36:LYS:HD2	1:A:72:GLU:OE2	0.46	2.10	6	1
1:A:82:PRO:CA	1:A:86:GLU:HB3	0.46	2.39	6	1
1:A:188:LEU:O	1:A:188:LEU:HD12	0.46	2.10	8	1
2:B:304:SER:O	2:B:306:ILE:HG23	0.46	2.10	8	1
1:A:138:ILE:CD1	1:A:138:ILE:C	0.46	2.88	10	2
1:A:168:LYS:O	3:A:322:MTN:S1	0.46	2.73	9	1
1:A:137:VAL:HG13	1:A:146:ASP:OD2	0.46	2.10	11	1
1:A:24:LYS:O	1:A:29:ASP:OD2	0.46	2.33	1	1
1:A:108:ALA:HA	1:A:111:LYS:CE	0.46	2.40	2	5
1:A:140:GLU:CG	2:B:268:LYS:HD3	0.46	2.40	1	1
1:A:172:LYS:O	1:A:176:LEU:HD13	0.46	2.10	1	7
1:A:107:GLU:CB	1:A:166:TRP:CZ3	0.46	2.99	7	2
1:A:142:ILE:O	1:A:143:ASP:HB2	0.46	2.10	2	4
1:A:196:PHE:O	1:A:210:SER:HB2	0.46	2.10	2	4
1:A:74:PHE:O	1:A:78:ILE:HG13	0.46	2.09	4	6
1:A:142:ILE:HD13	2:B:274:VAL:HG21	0.46	1.87	3	1
1:A:41:THR:HG21	1:A:97:ARG:NE	0.46	2.26	4	1
1:A:72:GLU:HG3	2:B:290:LEU:HD21	0.46	1.86	4	1
2:B:250:ILE:HG22	2:B:306:ILE:CD1	0.46	2.40	4	1
2:B:292:VAL:HG23	2:B:293:LYS:N	0.46	2.25	4	3
1:A:112:GLY:O	1:A:113:GLY:C	0.46	2.58	5	1
1:A:140:GLU:OE2	1:A:145:ASP:OD2	0.46	2.34	5	1
2:B:298:TRP:HA	2:B:302:THR:OG1	0.46	2.10	5	1
1:A:111:LYS:HG3	1:A:112:GLY:N	0.46	2.24	11	2
1:A:117:PHE:CD2	1:A:163:PHE:HB3	0.46	2.46	6	1
1:A:130:TRP:HB3	1:A:185:VAL:HG11	0.46	1.86	6	1
2:B:273:HIS:CD2	2:B:273:HIS:C	0.46	2.93	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:LEU:CD1	2:B:258:TYR:CG	0.46	2.93	9	2
1:A:31:ALA:O	1:A:32:HIS:CB	0.46	2.63	8	1
1:A:94:HIS:HB2	1:A:96:PHE:CE2	0.46	2.46	10	1
1:A:137:VAL:HA	1:A:141:THR:HB	0.46	1.86	10	1
1:A:79:GLN:OE1	2:B:287:LYS:HA	0.46	2.10	2	3
1:A:175:LEU:O	1:A:176:LEU:C	0.46	2.58	10	7
2:B:238:SER:O	2:B:242:ASN:CB	0.46	2.64	1	1
2:B:275:LYS:C	2:B:276:TYR:CD1	0.46	2.93	1	1
1:A:79:GLN:NE2	1:A:79:GLN:HA	0.46	2.24	3	3
1:A:123:GLY:HA2	1:A:126:ILE:CD1	0.46	2.41	4	2
1:A:198:PRO:C	1:A:200:CYS:N	0.46	2.73	8	3
2:B:304:SER:O	2:B:305:LYS:O	0.46	2.34	4	1
1:A:66:THR:OG1	2:B:298:TRP:CZ2	0.46	2.68	5	1
1:A:119:LEU:C	1:A:120:CYS:SG	0.46	2.98	5	1
1:A:135:LEU:CD1	2:B:280:PRO:HB3	0.46	2.39	7	1
1:A:155:SER:HB3	1:A:157:ARG:NH2	0.46	2.25	8	1
1:A:137:VAL:HG11	1:A:152:VAL:CG1	0.46	2.40	9	1
1:A:29:ASP:CG	1:A:30:SER:N	0.46	2.73	11	2
1:A:25:THR:HG23	1:A:37:HIS:NE2	0.46	2.26	1	1
2:B:294:ALA:O	2:B:295:ASP:HB2	0.46	2.11	5	3
1:A:119:LEU:HD12	1:A:163:PHE:CZ	0.46	2.45	2	1
1:A:47:TYR:CZ	1:A:65:VAL:CG2	0.46	2.99	3	1
1:A:97:ARG:O	1:A:100:VAL:O	0.46	2.33	5	2
1:A:100:VAL:CG1	1:A:101:ARG:N	0.46	2.73	6	2
1:A:29:ASP:OD2	1:A:32:HIS:O	0.46	2.33	5	1
1:A:135:LEU:CD2	2:B:280:PRO:HB3	0.46	2.41	5	1
1:A:28:SER:CB	2:B:259:PRO:HB2	0.46	2.40	6	1
1:A:139:GLY:O	2:B:278:TYR:O	0.46	2.34	9	1
1:A:194:LEU:HD22	1:A:196:PHE:CZ	0.46	2.45	10	1
2:B:251:GLU:O	2:B:252:ASP:OD2	0.46	2.32	10	1
1:A:58:TRP:CE3	4:A:325:M7G:C1'	0.46	2.98	11	1
1:A:44:THR:HG1	1:A:46:TRP:NE1	0.46	2.09	1	1
1:A:111:LYS:HD3	1:A:166:TRP:CB	0.46	2.40	9	2
1:A:129:LEU:O	1:A:133:THR:OG1	0.46	2.34	4	2
1:A:104:TRP:CZ2	4:A:325:M7G:H2'	0.46	2.46	3	4
1:A:129:LEU:O	1:A:132:CYS:SG	0.46	2.73	2	1
1:A:102:PRO:HB3	1:A:106:ASP:CB	0.46	2.41	3	1
1:A:103:GLU:O	1:A:105:GLU:N	0.46	2.48	9	2
2:B:254:PHE:CD1	2:B:265:PRO:O	0.46	2.68	3	2
1:A:38:PRO:HD3	2:B:250:ILE:CG1	0.46	2.40	8	4
1:A:104:TRP:CD2	4:A:325:M7G:CM7	0.46	2.97	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:31:ALA:O	1:A:32:HIS:ND1	0.46	2.49	9	3
1:A:71:VAL:HA	1:A:74:PHE:CD2	0.46	2.46	6	1
1:A:79:GLN:O	1:A:81:ILE:HG13	0.46	2.11	11	3
2:B:258:TYR:CD1	2:B:262:ILE:HD13	0.46	2.45	7	1
2:B:237:VAL:HG12	2:B:241:LEU:HD12	0.46	1.88	8	1
1:A:111:LYS:CB	1:A:166:TRP:HB3	0.46	2.40	11	2
1:A:144:GLU:O	1:A:145:ASP:OD1	0.46	2.33	10	1
1:A:141:THR:OG1	1:A:142:ILE:N	0.46	2.44	11	1
2:B:237:VAL:CG1	2:B:298:TRP:CG	0.46	2.98	11	1
2:B:274:VAL:HB	2:B:277:THR:CG2	0.46	2.40	11	1
1:A:57:SER:O	1:A:61:LEU:HG	0.46	2.11	11	10
1:A:108:ALA:O	1:A:109:ASN:C	0.46	2.58	10	4
2:B:298:TRP:O	2:B:302:THR:OG1	0.46	2.33	1	2
1:A:134:LEU:O	1:A:137:VAL:N	0.46	2.47	8	2
1:A:66:THR:HG21	1:A:73:GLU:HB2	0.46	1.88	3	1
1:A:96:PHE:CE2	1:A:153:VAL:HG22	0.46	2.46	5	1
1:A:30:SER:OG	2:B:289:LYS:NZ	0.46	2.48	6	1
1:A:126:ILE:HG12	1:A:127:ASP:N	0.46	2.25	6	2
1:A:141:THR:C	1:A:143:ASP:N	0.46	2.73	6	1
1:A:149:ILE:CD1	1:A:170:GLU:OE2	0.46	2.62	8	1
1:A:196:PHE:O	1:A:210:SER:HA	0.46	2.11	8	1
2:B:258:TYR:CG	2:B:262:ILE:HD13	0.46	2.46	8	1
1:A:100:VAL:CG1	1:A:107:GLU:OE2	0.46	2.62	9	1
1:A:141:THR:CG2	1:A:142:ILE:N	0.46	2.79	9	1
2:B:288:ASP:O	2:B:291:ASN:OD1	0.46	2.34	9	1
1:A:101:ARG:CG	1:A:102:PRO:HD2	0.46	2.41	11	1
1:A:26:VAL:HG22	1:A:33:PHE:CG	0.46	2.45	1	1
2:B:271:LYS:O	2:B:272:GLU:HB3	0.46	2.11	1	1
2:B:268:LYS:HE3	2:B:271:LYS:CG	0.46	2.41	2	1
1:A:131:LEU:O	1:A:135:LEU:N	0.46	2.49	9	3
2:B:256:PHE:CE1	2:B:258:TYR:CE2	0.46	3.04	3	1
2:B:268:LYS:O	2:B:271:LYS:N	0.46	2.41	3	3
1:A:81:ILE:HD13	1:A:86:GLU:OE2	0.46	2.11	4	1
1:A:75:TRP:O	1:A:79:GLN:OE1	0.46	2.33	5	1
1:A:93:TYR:CD1	1:A:154:LEU:HB3	0.46	2.46	5	1
1:A:111:LYS:O	1:A:168:LYS:HA	0.46	2.10	5	2
1:A:116:SER:CB	1:A:195:GLU:HB2	0.46	2.40	6	2
1:A:142:ILE:O	1:A:143:ASP:O	0.46	2.34	6	1
1:A:34:ASP:O	2:B:248:THR:O	0.46	2.34	8	1
1:A:75:TRP:O	1:A:79:GLN:NE2	0.46	2.43	8	1
1:A:93:TYR:CG	1:A:154:LEU:HD22	0.46	2.46	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:157:ARG:O	1:A:158:LYS:O	0.46	2.34	8	1
1:A:119:LEU:HA	1:A:193:HIS:CD2	0.46	2.45	9	1
1:A:145:ASP:O	1:A:146:ASP:C	0.46	2.57	10	1
1:A:101:ARG:HB2	1:A:106:ASP:CB	0.46	2.41	11	1
2:B:241:LEU:HD12	2:B:298:TRP:CG	0.46	2.45	11	1
2:B:248:THR:CG2	2:B:306:ILE:HG21	0.46	2.40	11	1
1:A:102:PRO:O	1:A:103:GLU:HB3	0.46	2.11	5	4
1:A:111:LYS:CG	1:A:166:TRP:HB3	0.46	2.41	2	3
1:A:74:PHE:O	1:A:75:TRP:C	0.46	2.59	2	3
1:A:133:THR:O	1:A:137:VAL:HG13	0.46	2.11	2	1
1:A:134:LEU:O	1:A:135:LEU:C	0.46	2.59	2	2
1:A:43:TRP:O	1:A:67:SER:HA	0.46	2.11	6	5
1:A:91:SER:O	1:A:92:ASP:OD1	0.46	2.33	3	2
2:B:248:THR:HG22	2:B:249:PRO:HD2	0.46	1.88	3	1
1:A:45:LEU:N	1:A:67:SER:HB2	0.46	2.25	4	1
1:A:46:TRP:O	1:A:94:HIS:N	0.46	2.49	8	2
1:A:200:CYS:O	3:A:323:MTN:S1	0.46	2.74	5	4
1:A:155:SER:O	1:A:162:LYS:O	0.46	2.34	5	1
1:A:171:ASP:O	1:A:172:LYS:HB2	0.46	2.10	9	2
1:A:25:THR:HG22	1:A:35:VAL:HG11	0.46	1.87	6	2
1:A:75:TRP:NE1	2:B:283:LEU:HD23	0.46	2.26	6	1
1:A:78:ILE:O	1:A:79:GLN:C	0.46	2.59	7	4
2:B:253:VAL:CA	2:B:256:PHE:CE2	0.46	2.98	6	2
1:A:128:GLU:O	1:A:132:CYS:SG	0.46	2.74	7	1
1:A:79:GLN:OE1	2:B:287:LYS:HG3	0.46	2.10	8	2
1:A:43:TRP:O	1:A:67:SER:O	0.46	2.33	11	1
1:A:26:VAL:HG13	1:A:33:PHE:CE1	0.46	2.46	1	1
1:A:115:TRP:CE2	1:A:175:LEU:HB3	0.46	2.46	6	4
1:A:188:LEU:CB	1:A:193:HIS:CD2	0.46	2.98	2	1
2:B:271:LYS:O	2:B:272:GLU:HB2	0.46	2.11	2	6
1:A:39:LEU:HD23	1:A:70:THR:CA	0.46	2.41	3	1
1:A:68:PHE:CZ	2:B:303:ALA:HA	0.46	2.46	3	1
2:B:250:ILE:CG2	2:B:306:ILE:HG12	0.46	2.41	4	1
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:163:PHE:CB	0.46	2.99	5	1
1:A:168:LYS:O	1:A:169:CYS:SG	0.46	2.74	5	2
1:A:101:ARG:HB3	1:A:102:PRO:HD2	0.46	1.87	11	2
1:A:80:ASN:C	1:A:81:ILE:CD1	0.46	2.85	7	1
1:A:69:GLN:CG	2:B:307:VAL:HG21	0.46	2.41	8	1
1:A:137:VAL:O	1:A:141:THR:HG21	0.46	2.11	8	1
1:A:130:TRP:O	1:A:133:THR:OG1	0.46	2.34	10	1
1:A:39:LEU:C	2:B:276:TYR:HB3	0.46	2.35	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:THR:OG1	1:A:73:GLU:HB3	0.46	2.11	7	3
1:A:93:TYR:HB3	1:A:154:LEU:HD22	0.46	1.87	1	1
1:A:111:LYS:HA	1:A:168:LYS:CA	0.46	2.41	9	2
1:A:169:CYS:C	1:A:171:ASP:N	0.46	2.75	3	7
1:A:137:VAL:HG12	1:A:146:ASP:OD2	0.46	2.11	2	1
2:B:283:LEU:O	2:B:286:PHE:HB2	0.46	2.11	7	5
2:B:299:VAL:HA	2:B:302:THR:CG2	0.46	2.41	6	4
1:A:194:LEU:C	1:A:195:GLU:HG3	0.46	2.36	7	2
1:A:40:ASN:ND2	1:A:142:ILE:CD1	0.46	2.79	4	1
1:A:62:LEU:CD1	1:A:103:GLU:OE1	0.46	2.64	4	1
1:A:179:GLY:HA3	1:A:194:LEU:HD21	0.46	1.87	4	1
1:A:26:VAL:CG2	2:B:286:PHE:CZ	0.46	2.98	6	1
1:A:111:LYS:CD	1:A:166:TRP:CB	0.46	2.94	6	2
1:A:141:THR:O	1:A:143:ASP:OD1	0.46	2.34	6	1
1:A:143:ASP:CB	2:B:271:LYS:HB2	0.46	2.41	6	1
2:B:248:THR:OG1	2:B:249:PRO:HD3	0.46	2.11	6	2
1:A:28:SER:O	1:A:30:SER:OG	0.46	2.33	7	1
1:A:144:GLU:CG	2:B:271:LYS:O	0.46	2.64	7	1
2:B:252:ASP:CB	2:B:255:SER:HB3	0.46	2.41	8	1
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:67:SER:OG	0.46	2.68	9	1
2:B:291:ASN:N	2:B:291:ASN:ND2	0.46	2.61	9	1
1:A:75:TRP:CE3	1:A:78:ILE:HG13	0.45	2.46	1	1
1:A:180:GLY:O	1:A:183:LYS:HB2	0.45	2.12	1	2
1:A:126:ILE:HA	1:A:129:LEU:HD12	0.45	1.88	2	2
1:A:194:LEU:O	1:A:212:THR:HA	0.45	2.11	2	5
1:A:43:TRP:HB3	1:A:96:PHE:O	0.45	2.10	11	2
1:A:72:GLU:OE1	2:B:286:PHE:CE2	0.45	2.70	4	1
1:A:33:PHE:CE1	2:B:240:ILE:CB	0.45	2.99	5	1
1:A:142:ILE:CG2	2:B:272:GLU:HG3	0.45	2.41	5	1
1:A:153:VAL:O	1:A:163:PHE:CD1	0.45	2.70	6	1
1:A:111:LYS:HB3	1:A:150:ASN:CG	0.45	2.36	8	1
1:A:77:ILE:HD12	1:A:77:ILE:N	0.45	2.25	9	1
1:A:73:GLU:OE2	2:B:305:LYS:HD2	0.45	2.12	1	2
2:B:294:ALA:HB1	2:B:298:TRP:CD1	0.45	2.46	5	2
1:A:57:SER:C	1:A:59:SER:N	0.45	2.73	6	3
1:A:87:LEU:HD21	1:A:156:ILE:CD1	0.45	2.42	8	3
1:A:196:PHE:CD2	1:A:211:ILE:CD1	0.45	2.99	2	1
2:B:274:VAL:HG13	2:B:275:LYS:H	0.45	1.69	2	2
2:B:299:VAL:C	2:B:301:SER:N	0.45	2.72	10	3
1:A:102:PRO:HB3	1:A:106:ASP:HB2	0.45	1.87	3	2
1:A:104:TRP:HB3	4:A:325:M7G:CM7	0.45	2.41	10	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:187:LYS:O	1:A:188:LEU:O	0.45	2.34	9	2
3:A:322:MTN:C7	3:A:322:MTN:S1	0.45	3.04	3	1
1:A:69:GLN:OE1	2:B:306:ILE:O	0.45	2.33	4	1
1:A:143:ASP:CB	2:B:271:LYS:HD3	0.45	2.41	6	1
1:A:86:GLU:OE1	1:A:86:GLU:O	0.45	2.34	9	1
3:A:321:MTN:H63	3:A:321:MTN:S1	0.45	2.51	9	1
1:A:108:ALA:HA	1:A:111:LYS:HG2	0.45	1.87	10	1
1:A:167:THR:C	1:A:169:CYS:N	0.45	2.74	10	8
1:A:183:LYS:O	1:A:186:LEU:HG	0.45	2.11	5	2
1:A:33:PHE:HB2	2:B:244:LEU:HD11	0.45	1.87	3	1
1:A:78:ILE:O	1:A:81:ILE:CG2	0.45	2.57	3	1
1:A:22:THR:N	1:A:23:PRO:CD	0.45	2.79	8	2
1:A:130:TRP:HB2	1:A:186:LEU:CD2	0.45	2.41	5	2
1:A:127:ASP:OD1	1:A:130:TRP:CZ3	0.45	2.70	6	1
2:B:247:ALA:O	2:B:248:THR:HG23	0.45	2.10	6	2
2:B:274:VAL:O	2:B:275:LYS:HB3	0.45	2.11	8	1
1:A:66:THR:CB	2:B:299:VAL:HB	0.45	2.41	10	2
1:A:142:ILE:HG21	2:B:272:GLU:HG2	0.45	1.88	10	1
2:B:258:TYR:OH	2:B:264:GLY:CA	0.45	2.64	11	1
2:B:267:ILE:HG21	2:B:279:GLY:CA	0.45	2.41	11	1
1:A:34:ASP:HA	2:B:247:ALA:HB1	0.45	1.86	1	3
1:A:103:GLU:HG3	4:A:325:M7G:O6	0.45	2.12	1	2
2:B:252:ASP:CB	2:B:255:SER:HB2	0.45	2.41	2	4
1:A:172:LYS:O	1:A:176:LEU:CD2	0.45	2.57	3	1
2:B:286:PHE:O	2:B:290:LEU:N	0.45	2.49	3	2
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:CD2	0.45	2.41	4	3
1:A:111:LYS:HB2	1:A:167:THR:O	0.45	2.11	9	2
1:A:140:GLU:CB	2:B:268:LYS:HE2	0.45	2.42	6	1
1:A:73:GLU:HG2	2:B:302:THR:OG1	0.45	2.11	8	1
1:A:156:ILE:O	1:A:157:ARG:CD	0.45	2.64	8	1
1:A:73:GLU:OE1	2:B:298:TRP:CE2	0.45	2.70	9	1
1:A:34:ASP:OD1	2:B:246:ASP:O	0.45	2.35	10	1
1:A:66:THR:HG21	2:B:302:THR:HG22	0.45	1.88	11	1
1:A:74:PHE:O	1:A:78:ILE:HD11	0.45	2.10	1	1
1:A:75:TRP:HA	1:A:78:ILE:HG12	0.45	1.88	1	2
1:A:80:ASN:C	1:A:81:ILE:HG13	0.45	2.35	1	6
1:A:89:LEU:HD22	1:A:157:ARG:O	0.45	2.11	1	1
1:A:83:GLU:HA	1:A:87:LEU:HD23	0.45	1.89	2	2
1:A:87:LEU:O	1:A:89:LEU:N	0.45	2.44	2	1
1:A:146:ASP:O	1:A:147:SER:HB3	0.45	2.11	8	2
1:A:32:HIS:HA	2:B:243:VAL:HG21	0.45	1.87	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:79:GLN:NE2	2:B:287:LYS:CB	0.45	2.80	3	2
1:A:66:THR:CG2	2:B:302:THR:CB	0.45	2.92	4	1
2:B:270:LYS:O	2:B:272:GLU:N	0.45	2.49	6	2
1:A:111:LYS:CE	1:A:199:HIS:HA	0.45	2.42	10	2
1:A:143:ASP:HB2	2:B:274:VAL:CG2	0.45	2.41	9	1
2:B:296:ALA:O	2:B:300:GLN:NE2	0.45	2.50	9	1
2:B:272:GLU:O	2:B:273:HIS:C	0.45	2.59	10	1
2:B:243:VAL:HG23	2:B:244:LEU:HD13	0.45	1.88	1	1
1:A:75:TRP:CZ3	2:B:287:LYS:HD3	0.45	2.46	2	1
1:A:196:PHE:CD2	1:A:211:ILE:CG1	0.45	2.99	2	1
2:B:271:LYS:HB2	2:B:277:THR:HG21	0.45	1.89	2	1
1:A:143:ASP:CG	1:A:147:SER:OG	0.45	2.60	3	1
1:A:193:HIS:ND1	1:A:213:LEU:OXT	0.45	2.50	3	1
1:A:39:LEU:CD2	1:A:70:THR:HA	0.45	2.42	11	3
2:B:253:VAL:HG23	2:B:254:PHE:CD1	0.45	2.47	11	2
1:A:193:HIS:HA	1:A:213:LEU:CB	0.45	2.41	5	1
2:B:269:TYR:CE1	2:B:275:LYS:HD3	0.45	2.47	5	1
1:A:83:GLU:CG	1:A:154:LEU:HD11	0.45	2.42	6	1
1:A:43:TRP:HB3	1:A:97:ARG:CA	0.45	2.41	8	1
1:A:142:ILE:HG21	2:B:273:HIS:CB	0.45	2.40	8	1
1:A:36:LYS:HD3	2:B:306:ILE:CG2	0.45	2.38	9	1
1:A:46:TRP:CZ3	1:A:103:GLU:HG3	0.45	2.46	10	1
1:A:142:ILE:HD13	2:B:272:GLU:HG3	0.45	1.89	10	1
1:A:143:ASP:OD1	2:B:268:LYS:CD	0.45	2.65	10	1
1:A:44:THR:OG1	1:A:99:ASP:OD1	0.45	2.34	11	1
2:B:296:ALA:O	2:B:299:VAL:CG2	0.45	2.56	11	1
1:A:44:THR:HA	1:A:67:SER:HA	0.45	1.86	1	1
1:A:83:GLU:HB3	1:A:127:ASP:CB	0.45	2.42	9	2
1:A:98:ASN:OD1	1:A:150:ASN:O	0.45	2.34	1	2
1:A:117:PHE:CB	1:A:186:LEU:HD22	0.45	2.41	1	1
1:A:43:TRP:HA	1:A:97:ARG:CB	0.45	2.42	3	1
2:B:268:LYS:CB	2:B:277:THR:HB	0.45	2.42	3	2
1:A:87:LEU:HD23	1:A:87:LEU:C	0.45	2.36	4	1
1:A:39:LEU:HG	1:A:69:GLN:O	0.45	2.11	5	1
1:A:84:PRO:O	1:A:86:GLU:OE1	0.45	2.34	5	2
1:A:82:PRO:CA	1:A:86:GLU:CB	0.45	2.94	6	1
1:A:117:PHE:CD2	1:A:182:PHE:HB3	0.45	2.47	7	1
2:B:243:VAL:CG2	2:B:244:LEU:HD23	0.45	2.41	8	1
1:A:66:THR:CG2	2:B:302:THR:OG1	0.45	2.62	9	1
1:A:71:VAL:O	1:A:73:GLU:N	0.45	2.50	9	1
1:A:80:ASN:ND2	2:B:293:LYS:HB2	0.45	2.26	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:ASN:OD1	2:B:276:TYR:O	0.45	2.35	11	1
2:B:258:TYR:OH	2:B:264:GLY:HA2	0.45	2.12	11	1
2:B:265:PRO:HD2	2:B:267:ILE:CG1	0.45	2.42	10	2
1:A:39:LEU:HD23	1:A:69:GLN:C	0.45	2.37	3	2
1:A:75:TRP:HA	1:A:75:TRP:CE3	0.45	2.45	10	2
1:A:100:VAL:CG1	1:A:107:GLU:CD	0.45	2.89	3	2
1:A:112:GLY:HA2	1:A:168:LYS:O	0.45	2.11	3	1
2:B:252:ASP:OD2	2:B:275:LYS:O	0.45	2.35	5	2
2:B:241:LEU:HD21	2:B:297:GLU:O	0.45	2.11	4	1
1:A:41:THR:OG1	1:A:141:THR:HG21	0.45	2.11	5	1
1:A:135:LEU:CG	2:B:283:LEU:HD13	0.45	2.41	5	1
1:A:27:LEU:O	2:B:289:LYS:CD	0.45	2.65	6	1
1:A:123:GLY:O	1:A:124:ALA:HB2	0.45	2.12	10	2
2:B:269:TYR:CE1	2:B:275:LYS:HG2	0.45	2.47	6	1
1:A:43:TRP:O	1:A:67:SER:CA	0.45	2.65	7	1
2:B:296:ALA:O	2:B:297:GLU:C	0.45	2.59	10	2
1:A:33:PHE:CZ	2:B:240:ILE:HG23	0.45	2.47	9	1
1:A:65:VAL:CG1	2:B:295:ASP:HA	0.45	2.41	9	1
1:A:73:GLU:OE2	2:B:302:THR:HA	0.45	2.12	9	1
1:A:29:ASP:CG	1:A:32:HIS:O	0.45	2.59	1	1
1:A:132:CYS:HA	1:A:135:LEU:CD2	0.45	2.42	3	6
1:A:142:ILE:HG23	2:B:273:HIS:HB3	0.45	1.88	2	1
2:B:268:LYS:CA	2:B:271:LYS:HG2	0.45	2.42	3	2
1:A:45:LEU:HB3	1:A:66:THR:HB	0.45	1.88	8	3
1:A:84:PRO:CA	1:A:127:ASP:HB2	0.45	2.42	5	1
1:A:172:LYS:CA	1:A:175:LEU:HD13	0.45	2.42	5	1
1:A:193:HIS:O	1:A:194:LEU:CD1	0.45	2.65	5	2
2:B:252:ASP:OD1	2:B:276:TYR:HA	0.45	2.12	5	1
1:A:39:LEU:HD22	2:B:278:TYR:OH	0.45	2.10	8	2
1:A:130:TRP:HB2	1:A:182:PHE:CD1	0.45	2.46	6	1
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:134:LEU:HD21	0.45	2.47	8	1
1:A:199:HIS:CD2	1:A:200:CYS:N	0.45	2.85	11	2
2:B:252:ASP:CA	2:B:255:SER:HB3	0.45	2.42	8	1
1:A:41:THR:O	1:A:69:GLN:HG3	0.45	2.12	9	1
1:A:103:GLU:HG2	4:A:325:M7G:O6	0.45	2.12	9	2
1:A:106:ASP:C	1:A:108:ALA:N	0.45	2.74	11	1
1:A:117:PHE:CB	1:A:186:LEU:HD21	0.45	2.42	1	1
1:A:134:LEU:CD2	1:A:182:PHE:CZ	0.45	2.99	2	2
2:B:262:ILE:CB	2:B:285:GLN:OE1	0.45	2.65	2	1
1:A:37:HIS:O	1:A:70:THR:CB	0.45	2.65	3	1
1:A:82:PRO:HB3	1:A:156:ILE:CD1	0.45	2.42	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:188:LEU:HD13	1:A:193:HIS:CB	0.45	2.41	4	1
1:A:33:PHE:CZ	2:B:240:ILE:CB	0.45	3.00	5	1
1:A:43:TRP:HA	1:A:97:ARG:CD	0.45	2.42	5	1
1:A:87:LEU:CB	1:A:88:PRO:HD2	0.45	2.42	5	2
2:B:250:ILE:HG21	2:B:306:ILE:CG2	0.45	2.41	6	1
1:A:29:ASP:C	1:A:30:SER:OG	0.45	2.59	7	1
1:A:79:GLN:HG3	2:B:291:ASN:HA	0.45	1.87	7	2
1:A:114:LYS:HE3	1:A:116:SER:OG	0.45	2.11	7	1
1:A:81:ILE:CG2	1:A:131:LEU:CD1	0.45	2.94	8	1
1:A:183:LYS:HB2	1:A:188:LEU:HD21	0.45	1.88	8	1
1:A:26:VAL:O	1:A:26:VAL:HG12	0.45	2.12	9	1
1:A:74:PHE:CD2	1:A:95:VAL:HG21	0.45	2.47	9	1
1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CD2	0.45	2.76	10	1
1:A:146:ASP:O	1:A:147:SER:HB2	0.45	2.11	11	1
1:A:193:HIS:CD2	1:A:213:LEU:HB3	0.45	2.47	11	1
1:A:79:GLN:OE1	2:B:290:LEU:HB3	0.44	2.11	1	1
1:A:170:GLU:C	1:A:171:ASP:CG	0.44	2.83	1	2
1:A:135:LEU:CD1	2:B:283:LEU:HB2	0.44	2.42	6	2
1:A:75:TRP:CH2	2:B:287:LYS:HD3	0.44	2.48	4	1
1:A:134:LEU:O	1:A:137:VAL:HB	0.44	2.13	4	1
2:B:238:SER:CA	2:B:297:GLU:HG3	0.44	2.42	5	1
1:A:130:TRP:CE2	1:A:163:PHE:HB3	0.44	2.46	7	1
1:A:153:VAL:O	1:A:164:ALA:N	0.44	2.49	8	1
1:A:199:HIS:O	1:A:201:SER:N	0.44	2.50	8	1
1:A:132:CYS:HA	1:A:135:LEU:HD21	0.44	1.88	1	1
1:A:142:ILE:HG23	2:B:273:HIS:CB	0.44	2.42	8	2
1:A:29:ASP:OD2	1:A:33:PHE:CE2	0.44	2.70	3	2
1:A:102:PRO:HG2	1:A:106:ASP:CB	0.44	2.42	4	1
2:B:262:ILE:O	2:B:263:GLU:HB2	0.44	2.12	5	5
1:A:149:ILE:O	1:A:168:LYS:HB2	0.44	2.11	5	1
1:A:96:PHE:CE2	1:A:153:VAL:HG23	0.44	2.47	6	1
1:A:111:LYS:CB	1:A:150:ASN:OD1	0.44	2.65	8	1
1:A:39:LEU:HB2	1:A:69:GLN:CA	0.44	2.42	9	1
1:A:111:LYS:HB2	1:A:167:THR:N	0.44	2.26	9	1
1:A:74:PHE:CZ	1:A:78:ILE:CD1	0.44	2.99	10	1
1:A:28:SER:CB	2:B:260:GLU:HB2	0.44	2.42	11	1
1:A:193:HIS:NE2	1:A:213:LEU:O	0.44	2.50	11	1
1:A:111:LYS:HG2	1:A:150:ASN:ND2	0.44	2.28	2	2
2:B:251:GLU:HB3	2:B:255:SER:OG	0.44	2.13	5	5
2:B:254:PHE:CE2	2:B:277:THR:O	0.44	2.70	8	2
2:B:307:VAL:O	2:B:308:ILE:HD13	0.44	2.13	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:149:ILE:HG22	1:A:150:ASN:N	0.44	2.27	3	1
1:A:39:LEU:HG	1:A:69:GLN:C	0.44	2.37	8	3
1:A:45:LEU:CB	1:A:67:SER:HB2	0.44	2.42	4	1
1:A:156:ILE:CD1	1:A:161:ASN:HB3	0.44	2.42	4	1
1:A:179:GLY:O	1:A:183:LYS:N	0.44	2.50	4	1
1:A:33:PHE:HB2	2:B:244:LEU:CD2	0.44	2.43	5	1
1:A:45:LEU:CG	1:A:65:VAL:HG23	0.44	2.41	5	1
1:A:83:GLU:O	1:A:156:ILE:HD11	0.44	2.13	5	1
1:A:104:TRP:HB3	4:A:325:M7G:HM72	0.44	1.88	10	2
1:A:152:VAL:HB	1:A:163:PHE:CE1	0.44	2.48	6	1
1:A:146:ASP:CB	1:A:149:ILE:HD13	0.44	2.43	7	1
2:B:246:ASP:CG	2:B:246:ASP:O	0.44	2.59	7	1
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:CA	0.44	2.43	8	1
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:134:LEU:CD1	0.44	2.80	8	1
1:A:38:PRO:CG	2:B:252:ASP:HA	0.44	2.42	11	2
1:A:142:ILE:HD13	1:A:142:ILE:C	0.44	2.36	9	1
1:A:143:ASP:O	2:B:271:LYS:O	0.44	2.34	9	1
2:B:248:THR:HB	2:B:249:PRO:HD3	0.44	1.88	11	1
1:A:25:THR:O	1:A:29:ASP:OD2	0.44	2.35	1	1
1:A:48:THR:C	1:A:50:PRO:HD3	0.44	2.38	9	2
1:A:97:ARG:C	1:A:99:ASP:N	0.44	2.75	1	5
1:A:128:GLU:CG	3:A:321:MTN:H72	0.44	2.41	1	1
1:A:93:TYR:CD1	1:A:94:HIS:N	0.44	2.86	2	2
1:A:171:ASP:O	1:A:174:PRO:HG2	0.44	2.13	4	5
2:B:298:TRP:CE3	2:B:298:TRP:HA	0.44	2.48	9	3
1:A:137:VAL:O	1:A:141:THR:HB	0.44	2.12	5	3
1:A:140:GLU:HG2	2:B:278:TYR:O	0.44	2.11	7	3
1:A:26:VAL:CG2	2:B:286:PHE:CE2	0.44	3.00	6	1
1:A:104:TRP:CD1	1:A:105:GLU:N	0.44	2.86	8	1
2:B:237:VAL:HG11	2:B:298:TRP:HA	0.44	1.89	8	1
1:A:144:GLU:O	1:A:145:ASP:HB3	0.44	2.12	9	1
1:A:140:GLU:OE1	2:B:268:LYS:CD	0.44	2.65	10	1
2:B:289:LYS:O	2:B:291:ASN:N	0.44	2.51	10	1
1:A:29:ASP:OD1	1:A:32:HIS:O	0.44	2.35	11	1
1:A:83:GLU:HB3	1:A:84:PRO:HD2	0.44	1.88	1	1
2:B:250:ILE:H	2:B:306:ILE:HD11	0.44	1.73	1	1
1:A:130:TRP:N	1:A:185:VAL:HG11	0.44	2.27	2	1
1:A:110:ALA:C	1:A:111:LYS:HG3	0.44	2.37	3	1
1:A:137:VAL:CG2	1:A:146:ASP:OD1	0.44	2.59	3	2
2:B:248:THR:CB	2:B:249:PRO:HD2	0.44	2.43	3	1
1:A:194:LEU:HB3	1:A:213:LEU:CD1	0.44	2.42	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:126:ILE:CG2	1:A:186:LEU:HB3	0.44	2.42	5	1
1:A:82:PRO:O	1:A:86:GLU:HB2	0.44	2.11	6	2
1:A:140:GLU:OE2	2:B:278:TYR:O	0.44	2.36	10	2
1:A:97:ARG:O	1:A:98:ASN:HB2	0.44	2.13	8	1
1:A:111:LYS:HD3	1:A:113:GLY:O	0.44	2.11	8	1
1:A:141:THR:OG1	1:A:146:ASP:HB2	0.44	2.12	9	1
1:A:117:PHE:CG	1:A:163:PHE:CD2	0.44	3.05	10	1
1:A:38:PRO:CB	2:B:307:VAL:HB	0.44	2.42	11	1
1:A:115:TRP:CZ2	1:A:175:LEU:HB2	0.44	2.48	1	1
1:A:125:ASP:OD1	1:A:125:ASP:O	0.44	2.35	1	1
1:A:141:THR:HA	1:A:146:ASP:CB	0.44	2.43	1	1
2:B:237:VAL:HG12	2:B:297:GLU:HB2	0.44	1.90	1	1
2:B:253:VAL:C	2:B:255:SER:N	0.44	2.75	5	6
1:A:75:TRP:CA	1:A:78:ILE:HG12	0.44	2.43	2	2
2:B:298:TRP:CH2	2:B:302:THR:HA	0.44	2.47	2	1
1:A:87:LEU:HD21	1:A:156:ILE:HG21	0.44	1.89	3	1
1:A:49:LYS:N	1:A:50:PRO:CD	0.44	2.80	5	2
1:A:71:VAL:HG21	2:B:283:LEU:HD23	0.44	1.89	5	1
2:B:271:LYS:HD2	2:B:272:GLU:N	0.44	2.28	6	1
1:A:111:LYS:HG2	1:A:166:TRP:HB3	0.44	1.89	9	1
1:A:160:GLY:O	1:A:161:ASN:CB	0.44	2.65	9	1
1:A:35:VAL:HG13	1:A:35:VAL:O	0.44	2.12	10	1
1:A:48:THR:O	1:A:92:ASP:OD1	0.44	2.36	10	1
1:A:92:ASP:OD1	1:A:92:ASP:N	0.44	2.51	10	1
1:A:130:TRP:O	1:A:133:THR:N	0.44	2.50	10	1
1:A:179:GLY:C	1:A:194:LEU:HD11	0.44	2.37	11	1
1:A:71:VAL:O	1:A:75:TRP:HB2	0.44	2.12	3	3
1:A:73:GLU:O	2:B:298:TRP:CZ2	0.44	2.70	1	1
1:A:111:LYS:C	1:A:167:THR:O	0.44	2.60	2	3
1:A:133:THR:HB	1:A:182:PHE:CE1	0.44	2.48	2	3
2:B:296:ALA:C	2:B:298:TRP:N	0.44	2.75	1	1
1:A:87:LEU:HD13	1:A:91:SER:CB	0.44	2.42	2	1
1:A:186:LEU:HD23	1:A:186:LEU:N	0.44	2.27	2	1
1:A:111:LYS:O	1:A:169:CYS:HB2	0.44	2.13	3	1
1:A:156:ILE:HG22	1:A:157:ARG:N	0.44	2.26	11	5
1:A:135:LEU:HD11	2:B:280:PRO:N	0.44	2.28	4	1
1:A:79:GLN:HG2	2:B:290:LEU:C	0.44	2.38	5	1
2:B:298:TRP:CD1	2:B:302:THR:OG1	0.44	2.71	8	2
1:A:136:ALA:O	1:A:140:GLU:CB	0.44	2.65	11	2
1:A:75:TRP:CZ2	2:B:283:LEU:HB3	0.44	2.47	7	1
1:A:102:PRO:HB2	1:A:106:ASP:HB3	0.44	1.88	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:TRP:NE1	1:A:105:GLU:OE1	0.44	2.51	7	1
1:A:119:LEU:HD23	1:A:120:CYS:N	0.44	2.27	7	1
2:B:268:LYS:HD3	2:B:278:TYR:C	0.44	2.37	7	1
1:A:135:LEU:HD21	2:B:283:LEU:CG	0.44	2.41	8	1
2:B:252:ASP:O	2:B:255:SER:HB3	0.44	2.12	8	2
1:A:170:GLU:O	1:A:171:ASP:OD2	0.44	2.36	9	1
1:A:85:HIS:O	1:A:86:GLU:OE2	0.44	2.35	10	1
2:B:237:VAL:CB	2:B:294:ALA:O	0.44	2.66	10	1
1:A:58:TRP:CE2	4:A:325:M7G:C4	0.44	3.01	11	1
1:A:74:PHE:CZ	1:A:95:VAL:CG2	0.44	2.99	11	1
1:A:36:LYS:O	1:A:38:PRO:HD3	0.44	2.13	3	2
1:A:79:GLN:HG3	2:B:290:LEU:C	0.44	2.37	8	6
2:B:288:ASP:N	2:B:288:ASP:OD1	0.44	2.49	3	1
2:B:298:TRP:CD2	2:B:302:THR:CG2	0.44	2.93	4	1
1:A:96:PHE:HB2	1:A:151:GLY:CA	0.44	2.43	5	1
1:A:87:LEU:CD1	1:A:89:LEU:N	0.44	2.81	7	1
1:A:132:CYS:CA	1:A:135:LEU:HD12	0.44	2.38	7	1
1:A:22:THR:N	1:A:23:PRO:HD2	0.44	2.26	8	1
1:A:123:GLY:H	1:A:126:ILE:HD11	0.44	1.73	8	1
1:A:83:GLU:HG3	1:A:86:GLU:CB	0.44	2.43	9	1
1:A:40:ASN:CB	2:B:276:TYR:HB3	0.44	2.43	10	1
2:B:298:TRP:CZ3	2:B:301:SER:HB3	0.44	2.47	10	1
1:A:43:TRP:HA	1:A:97:ARG:HA	0.44	1.90	11	1
1:A:66:THR:OG1	1:A:73:GLU:HG2	0.44	2.12	1	1
2:B:240:ILE:O	2:B:243:VAL:CG2	0.44	2.57	1	2
2:B:302:THR:C	2:B:304:SER:N	0.44	2.76	8	3
1:A:43:TRP:CE2	1:A:138:ILE:HD12	0.44	2.48	4	1
1:A:23:PRO:CB	1:A:35:VAL:HG21	0.44	2.42	7	2
1:A:117:PHE:CD1	1:A:163:PHE:HB2	0.44	2.48	10	3
1:A:165:LEU:C	1:A:165:LEU:CD1	0.44	2.90	5	1
2:B:291:ASN:O	2:B:291:ASN:CG	0.44	2.59	7	1
1:A:25:THR:HG21	2:B:256:PHE:CD2	0.44	2.44	8	1
1:A:40:ASN:ND2	1:A:142:ILE:HG21	0.44	2.28	9	1
1:A:44:THR:OG1	1:A:99:ASP:CG	0.44	2.61	11	1
1:A:128:GLU:HG2	3:A:321:MTN:C7	0.43	2.43	1	1
1:A:138:ILE:O	1:A:141:THR:CG2	0.43	2.66	2	1
1:A:104:TRP:CD1	4:A:325:M7G:C5	0.43	3.01	3	1
1:A:108:ALA:C	1:A:199:HIS:HB2	0.43	2.38	3	1
2:B:251:GLU:C	2:B:255:SER:HB2	0.43	2.38	6	2
1:A:98:ASN:ND2	1:A:99:ASP:N	0.43	2.65	4	1
2:B:273:HIS:O	2:B:275:LYS:N	0.43	2.50	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:LEU:CD1	2:B:277:THR:HA	0.43	2.43	5	1
1:A:104:TRP:CD2	1:A:104:TRP:C	0.43	2.96	6	1
1:A:163:PHE:CD1	1:A:164:ALA:N	0.43	2.87	6	1
2:B:262:ILE:HG21	2:B:285:GLN:NE2	0.43	2.28	8	2
1:A:111:LYS:HB2	1:A:166:TRP:CG	0.43	2.48	7	1
1:A:132:CYS:O	2:B:280:PRO:HB3	0.43	2.13	7	1
1:A:111:LYS:CD	1:A:113:GLY:O	0.43	2.65	8	1
1:A:111:LYS:CB	1:A:167:THR:C	0.43	2.91	9	1
1:A:133:THR:HG21	1:A:182:PHE:CG	0.43	2.48	9	1
1:A:95:VAL:O	1:A:96:PHE:CG	0.43	2.70	10	1
1:A:140:GLU:OE1	2:B:268:LYS:HD2	0.43	2.12	10	1
2:B:250:ILE:CD1	2:B:256:PHE:CD1	0.43	3.00	11	1
1:A:38:PRO:HB3	2:B:307:VAL:HA	0.43	1.88	1	1
1:A:87:LEU:CD1	1:A:87:LEU:N	0.43	2.80	1	1
1:A:115:TRP:CH2	1:A:175:LEU:CD1	0.43	3.01	1	2
1:A:34:ASP:OD2	2:B:246:ASP:O	0.43	2.35	2	1
1:A:69:GLN:OE1	2:B:307:VAL:CG1	0.43	2.65	2	1
2:B:252:ASP:HB2	2:B:255:SER:HB2	0.43	1.89	10	5
1:A:25:THR:O	1:A:29:ASP:HB3	0.43	2.14	7	7
1:A:39:LEU:HA	2:B:276:TYR:HB3	0.43	1.90	3	1
1:A:73:GLU:HA	2:B:298:TRP:NE1	0.43	2.28	8	3
1:A:78:ILE:HG23	1:A:93:TYR:CZ	0.43	2.47	3	1
1:A:109:ASN:C	1:A:111:LYS:N	0.43	2.73	3	1
2:B:268:LYS:HB3	2:B:277:THR:HB	0.43	1.90	3	1
2:B:274:VAL:CG2	2:B:277:THR:OG1	0.43	2.66	3	1
1:A:107:GLU:O	1:A:111:LYS:HG3	0.43	2.14	4	1
1:A:173:GLU:HB2	1:A:174:PRO:CD	0.43	2.43	4	1
2:B:268:LYS:HD3	2:B:279:GLY:N	0.43	2.28	5	1
1:A:97:ARG:NH2	1:A:150:ASN:O	0.43	2.50	6	1
1:A:148:GLN:HB2	1:A:170:GLU:CB	0.43	2.43	6	1
2:B:271:LYS:C	2:B:272:GLU:CG	0.43	2.91	8	1
1:A:143:ASP:OD2	2:B:271:LYS:CB	0.43	2.66	9	1
2:B:289:LYS:C	2:B:291:ASN:N	0.43	2.76	10	1
1:A:29:ASP:O	1:A:30:SER:HB3	0.43	2.14	1	1
1:A:76:ALA:O	1:A:79:GLN:HB2	0.43	2.14	3	3
1:A:140:GLU:OE2	1:A:143:ASP:O	0.43	2.36	1	1
1:A:183:LYS:HD2	1:A:188:LEU:HD21	0.43	1.89	1	1
1:A:130:TRP:N	1:A:185:VAL:CG1	0.43	2.81	2	1
1:A:194:LEU:O	1:A:195:GLU:CG	0.43	2.66	2	1
2:B:296:ALA:O	2:B:299:VAL:HB	0.43	2.13	7	2
1:A:73:GLU:OE2	2:B:302:THR:HB	0.43	2.12	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:LEU:C	1:A:91:SER:N	0.43	2.76	11	3
1:A:101:ARG:C	1:A:107:GLU:HG2	0.43	2.38	6	1
1:A:102:PRO:C	1:A:103:GLU:HG3	0.43	2.37	6	1
1:A:75:TRP:CD1	2:B:286:PHE:CB	0.43	3.01	7	1
1:A:87:LEU:C	1:A:87:LEU:HD23	0.43	2.38	9	1
1:A:112:GLY:HA2	1:A:199:HIS:ND1	0.43	2.28	11	1
2:B:260:GLU:O	2:B:260:GLU:CG	0.43	2.66	1	1
1:A:27:LEU:HD21	2:B:286:PHE:HD1	0.43	1.74	2	1
1:A:83:GLU:HA	1:A:87:LEU:CD2	0.43	2.43	10	2
1:A:183:LYS:HG2	1:A:184:GLN:N	0.43	2.28	3	3
1:A:142:ILE:HD13	2:B:274:VAL:CG1	0.43	2.19	4	1
1:A:142:ILE:CD1	2:B:274:VAL:HG13	0.43	2.19	4	1
2:B:237:VAL:O	2:B:240:ILE:HG12	0.43	2.13	4	1
1:A:99:ASP:CB	1:A:150:ASN:HA	0.43	2.43	5	1
1:A:130:TRP:HB2	1:A:186:LEU:HD21	0.43	1.90	5	1
1:A:111:LYS:CE	1:A:114:LYS:HB2	0.43	2.43	6	1
1:A:87:LEU:C	1:A:87:LEU:CD1	0.43	2.91	7	1
3:A:321:MTN:S1	3:A:321:MTN:C7	0.43	3.06	9	1
1:A:33:PHE:CD1	2:B:244:LEU:HD13	0.43	2.48	10	1
1:A:42:LYS:O	1:A:97:ARG:O	0.43	2.37	10	1
2:B:237:VAL:CG1	2:B:298:TRP:CD2	0.43	3.01	11	1
1:A:75:TRP:HB2	2:B:290:LEU:CD1	0.43	2.42	1	1
1:A:82:PRO:CA	1:A:87:LEU:HB3	0.43	2.43	1	1
1:A:102:PRO:C	1:A:103:GLU:HG2	0.43	2.39	2	3
1:A:140:GLU:CG	2:B:268:LYS:CD	0.43	2.96	1	2
1:A:87:LEU:HD12	1:A:87:LEU:O	0.43	2.13	2	1
1:A:119:LEU:HB2	1:A:161:ASN:OD1	0.43	2.13	7	2
2:B:235:ASN:HB3	2:B:291:ASN:O	0.43	2.13	2	2
2:B:274:VAL:O	2:B:276:TYR:N	0.43	2.52	4	1
1:A:96:PHE:HB3	1:A:151:GLY:HA2	0.43	1.91	5	1
1:A:79:GLN:O	1:A:81:ILE:HG12	0.43	2.13	8	2
1:A:137:VAL:CG2	1:A:146:ASP:HB2	0.43	2.44	6	1
1:A:148:GLN:HB2	1:A:170:GLU:HB2	0.43	1.90	6	1
1:A:196:PHE:CG	1:A:211:ILE:CD1	0.43	3.01	6	1
2:B:247:ALA:O	2:B:248:THR:OG1	0.43	2.35	6	1
1:A:47:TYR:C	1:A:62:LEU:HD23	0.43	2.39	7	1
1:A:140:GLU:CG	1:A:140:GLU:O	0.43	2.65	9	1
1:A:87:LEU:HD22	1:A:88:PRO:C	0.43	2.39	1	1
2:B:274:VAL:O	2:B:275:LYS:HB2	0.43	2.12	2	3
2:B:301:SER:O	2:B:304:SER:N	0.43	2.42	1	1
1:A:66:THR:HG23	1:A:73:GLU:HB3	0.43	1.86	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:VAL:CG1	2:B:286:PHE:HA	0.43	2.44	4	1
1:A:156:ILE:HG12	1:A:161:ASN:CB	0.43	2.44	4	1
1:A:69:GLN:N	1:A:69:GLN:CD	0.43	2.77	5	1
1:A:36:LYS:HB3	2:B:306:ILE:HG22	0.43	1.88	6	1
1:A:39:LEU:HB2	1:A:69:GLN:C	0.43	2.38	9	3
1:A:47:TYR:O	1:A:47:TYR:CD1	0.43	2.71	9	1
2:B:269:TYR:CE1	2:B:274:VAL:CG1	0.43	2.98	10	1
2:B:298:TRP:CD1	2:B:299:VAL:N	0.43	2.87	11	1
1:A:79:GLN:NE2	2:B:291:ASN:HA	0.43	2.29	1	1
1:A:117:PHE:HB3	1:A:186:LEU:CD1	0.43	2.43	1	1
1:A:142:ILE:CD1	2:B:276:TYR:CD1	0.43	3.01	2	1
1:A:33:PHE:HZ	2:B:240:ILE:HG22	0.43	1.73	6	2
1:A:75:TRP:CB	1:A:79:GLN:OE1	0.43	2.67	5	1
1:A:92:ASP:HA	1:A:154:LEU:O	0.43	2.14	8	3
1:A:172:LYS:HA	1:A:175:LEU:CD2	0.43	2.40	5	2
2:B:275:LYS:CB	2:B:276:TYR:CD1	0.43	3.02	7	1
1:A:39:LEU:CG	1:A:69:GLN:O	0.43	2.67	8	1
1:A:73:GLU:CD	2:B:305:LYS:HD3	0.43	2.39	9	1
1:A:150:ASN:ND2	1:A:166:TRP:CB	0.43	2.82	9	1
1:A:68:PHE:CE1	2:B:302:THR:HB	0.43	2.49	1	2
1:A:104:TRP:CB	1:A:166:TRP:CH2	0.43	3.01	1	1
2:B:235:ASN:C	2:B:292:VAL:HG12	0.43	2.39	1	2
2:B:274:VAL:HG12	2:B:275:LYS:N	0.43	2.28	1	1
2:B:294:ALA:CB	2:B:298:TRP:CD1	0.43	3.02	1	2
1:A:140:GLU:OE2	2:B:280:PRO:CD	0.43	2.67	2	1
2:B:254:PHE:HA	2:B:264:GLY:O	0.43	2.14	4	4
2:B:272:GLU:HG2	2:B:273:HIS:N	0.43	2.27	2	1
1:A:36:LYS:CD	1:A:36:LYS:N	0.43	2.81	3	1
1:A:37:HIS:C	2:B:306:ILE:HG21	0.43	2.38	4	1
1:A:146:ASP:C	1:A:149:ILE:HD13	0.43	2.39	4	1
1:A:147:SER:CB	1:A:170:GLU:CD	0.43	2.92	5	1
1:A:183:LYS:HD3	1:A:193:HIS:O	0.43	2.13	5	1
1:A:111:LYS:HE2	1:A:114:LYS:CA	0.43	2.43	6	1
1:A:132:CYS:O	1:A:135:LEU:HG	0.43	2.14	6	1
2:B:248:THR:CB	2:B:249:PRO:HD3	0.43	2.44	11	2
2:B:274:VAL:HG13	2:B:276:TYR:CD2	0.43	2.49	6	1
2:B:268:LYS:CD	2:B:279:GLY:CA	0.43	2.97	7	1
1:A:72:GLU:O	1:A:75:TRP:HB2	0.43	2.13	8	1
1:A:42:LYS:O	1:A:42:LYS:HG3	0.43	2.13	10	1
1:A:104:TRP:CE2	4:A:325:M7G:HM73	0.43	2.48	11	1
1:A:112:GLY:C	1:A:199:HIS:HB3	0.43	2.39	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:271:LYS:HA	2:B:271:LYS:CE	0.43	2.43	11	1
1:A:76:ALA:HA	1:A:79:GLN:HG2	0.43	1.91	2	4
1:A:140:GLU:HG3	2:B:268:LYS:CD	0.43	2.44	1	1
1:A:136:ALA:O	1:A:140:GLU:CA	0.43	2.67	2	2
1:A:93:TYR:HE2	1:A:154:LEU:HD13	0.43	1.60	3	1
1:A:104:TRP:CB	4:A:325:M7G:HM72	0.43	2.44	10	3
1:A:45:LEU:O	1:A:46:TRP:CD1	0.43	2.72	4	1
1:A:104:TRP:CZ3	1:A:105:GLU:HB2	0.43	2.49	4	1
1:A:137:VAL:HA	1:A:146:ASP:CG	0.43	2.38	4	1
1:A:104:TRP:O	1:A:114:LYS:NZ	0.43	2.45	5	1
1:A:117:PHE:CE2	1:A:194:LEU:HD21	0.43	2.48	5	1
1:A:42:LYS:O	1:A:97:ARG:HA	0.43	2.13	6	1
1:A:126:ILE:HD11	1:A:127:ASP:OD1	0.43	2.14	6	1
1:A:26:VAL:HA	1:A:29:ASP:CG	0.43	2.39	7	1
2:B:268:LYS:HG2	2:B:277:THR:CG2	0.43	2.43	7	1
2:B:243:VAL:HG23	2:B:244:LEU:HD23	0.43	1.91	8	1
1:A:106:ASP:O	1:A:109:ASN:HB3	0.43	2.13	9	1
2:B:280:PRO:O	2:B:284:LEU:CD1	0.43	2.66	9	1
2:B:254:PHE:CD1	2:B:269:TYR:CE1	0.43	3.07	10	1
1:A:63:ARG:CZ	1:A:64:PRO:HD2	0.43	2.44	11	1
2:B:262:ILE:C	2:B:262:ILE:CD1	0.43	2.87	11	1
2:B:268:LYS:CG	2:B:271:LYS:CG	0.43	2.97	1	1
1:A:82:PRO:O	1:A:87:LEU:HG	0.43	2.13	10	2
1:A:140:GLU:O	1:A:145:ASP:OD1	0.43	2.36	2	1
2:B:281:THR:O	2:B:284:LEU:HB2	0.43	2.14	11	8
1:A:57:SER:HB2	1:A:60:ASP:CG	0.43	2.38	3	1
1:A:71:VAL:CG1	2:B:286:PHE:CD2	0.43	3.02	4	1
1:A:140:GLU:HB3	2:B:277:THR:CG2	0.43	2.44	4	1
1:A:193:HIS:C	1:A:213:LEU:HB2	0.43	2.39	5	1
2:B:298:TRP:CA	2:B:302:THR:OG1	0.43	2.67	5	1
1:A:165:LEU:O	1:A:165:LEU:HG	0.43	2.14	6	2
1:A:168:LYS:HG3	1:A:169:CYS:N	0.43	2.28	6	1
1:A:27:LEU:HD22	2:B:285:GLN:OE1	0.43	2.14	7	1
1:A:44:THR:HA	1:A:67:SER:CB	0.43	2.44	10	2
1:A:118:GLN:HG3	1:A:162:LYS:CE	0.43	2.44	7	1
2:B:244:LEU:HD12	2:B:298:TRP:CH2	0.43	2.49	7	1
1:A:79:GLN:C	1:A:81:ILE:HG12	0.43	2.39	8	1
1:A:89:LEU:C	1:A:90:LYS:HG2	0.43	2.39	8	1
1:A:132:CYS:HB2	2:B:284:LEU:HD11	0.43	1.90	8	1
1:A:194:LEU:O	1:A:195:GLU:HG2	0.43	2.13	8	2
1:A:198:PRO:HD3	1:A:210:SER:OG	0.43	2.14	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:237:VAL:HG11	2:B:298:TRP:CG	0.43	2.49	8	1
1:A:42:LYS:O	1:A:98:ASN:OD1	0.43	2.36	9	1
1:A:71:VAL:O	1:A:74:PHE:N	0.43	2.52	9	1
2:B:294:ALA:O	2:B:295:ASP:OD2	0.43	2.36	9	1
1:A:135:LEU:O	1:A:138:ILE:HG13	0.43	2.13	10	1
1:A:35:VAL:HG22	2:B:250:ILE:HB	0.43	1.91	11	1
1:A:119:LEU:CD1	1:A:188:LEU:HB3	0.43	2.44	11	1
1:A:37:HIS:O	1:A:70:THR:HA	0.42	2.14	1	2
1:A:140:GLU:CG	2:B:268:LYS:HG2	0.42	2.43	1	1
2:B:252:ASP:HB3	2:B:255:SER:HB2	0.42	1.89	1	2
1:A:26:VAL:O	2:B:289:LYS:HD2	0.42	2.13	3	3
1:A:88:PRO:O	1:A:89:LEU:C	0.42	2.62	3	4
1:A:84:PRO:HD3	1:A:127:ASP:CB	0.42	2.43	4	1
1:A:135:LEU:CD1	2:B:283:LEU:HD12	0.42	2.43	9	2
1:A:140:GLU:HG2	1:A:145:ASP:OD2	0.42	2.14	4	1
2:B:271:LYS:O	2:B:272:GLU:CG	0.42	2.67	8	2
1:A:46:TRP:CE3	1:A:94:HIS:CG	0.42	3.07	5	1
1:A:103:GLU:O	1:A:107:GLU:HB2	0.42	2.14	5	1
1:A:104:TRP:CD2	4:A:325:M7G:HM72	0.42	2.49	5	1
1:A:137:VAL:O	1:A:141:THR:CA	0.42	2.67	5	1
1:A:82:PRO:C	1:A:84:PRO:HD2	0.42	2.38	7	1
1:A:38:PRO:HD3	2:B:250:ILE:HG12	0.42	1.91	8	2
2:B:269:TYR:CD2	2:B:274:VAL:CG2	0.42	3.01	8	1
1:A:39:LEU:HB2	1:A:69:GLN:O	0.42	2.14	8	4
1:A:126:ILE:HA	1:A:129:LEU:CD1	0.42	2.44	2	2
1:A:165:LEU:CD2	1:A:178:ILE:CG2	0.42	2.97	2	1
1:A:92:ASP:OD2	1:A:155:SER:OG	0.42	2.34	3	1
1:A:38:PRO:HG2	2:B:252:ASP:OD1	0.42	2.14	4	1
1:A:117:PHE:CD2	1:A:186:LEU:HD13	0.42	2.49	4	1
2:B:238:SER:HA	2:B:297:GLU:CG	0.42	2.44	5	1
2:B:271:LYS:C	2:B:271:LYS:CD	0.42	2.92	6	1
1:A:70:THR:CG2	2:B:305:LYS:HG2	0.42	2.44	7	1
2:B:268:LYS:C	2:B:270:LYS:N	0.42	2.77	8	1
1:A:111:LYS:CB	1:A:167:THR:O	0.42	2.67	9	1
2:B:237:VAL:CG2	2:B:292:VAL:O	0.42	2.58	9	1
1:A:67:SER:HA	1:A:73:GLU:CG	0.42	2.44	10	1
1:A:195:GLU:HB3	1:A:197:PHE:CE1	0.42	2.49	10	1
1:A:133:THR:CG2	1:A:182:PHE:CZ	0.42	3.01	11	1
2:B:258:TYR:CD1	2:B:258:TYR:N	0.42	2.85	11	1
1:A:80:ASN:C	1:A:81:ILE:CG1	0.42	2.91	9	2
2:B:268:LYS:HG2	2:B:271:LYS:HG2	0.42	1.91	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:TRP:CH2	1:A:135:LEU:HD22	0.42	2.49	3	1
1:A:26:VAL:O	2:B:289:LYS:HG3	0.42	2.14	4	3
1:A:110:ALA:C	1:A:111:LYS:HG2	0.42	2.39	5	1
1:A:130:TRP:CD1	1:A:163:PHE:CE2	0.42	3.07	5	1
1:A:147:SER:C	1:A:149:ILE:N	0.42	2.77	5	2
1:A:49:LYS:HB2	1:A:50:PRO:HD3	0.42	1.91	6	1
1:A:70:THR:C	1:A:71:VAL:HG13	0.42	2.39	6	1
1:A:131:LEU:C	1:A:131:LEU:CD1	0.42	2.90	10	2
2:B:262:ILE:HD12	2:B:262:ILE:N	0.42	2.30	6	1
1:A:111:LYS:HB2	1:A:166:TRP:HB3	0.42	1.90	7	1
1:A:119:LEU:CD1	1:A:126:ILE:HG13	0.42	2.44	7	1
1:A:38:PRO:O	2:B:278:TYR:OH	0.42	2.36	8	1
1:A:96:PHE:CZ	1:A:153:VAL:HG22	0.42	2.50	8	1
1:A:112:GLY:O	1:A:199:HIS:CB	0.42	2.67	8	1
1:A:143:ASP:CG	2:B:271:LYS:CB	0.42	2.92	9	1
2:B:256:PHE:CD1	2:B:256:PHE:O	0.42	2.72	9	1
1:A:137:VAL:HG11	1:A:152:VAL:HG11	0.42	1.91	10	1
1:A:44:THR:OG1	1:A:99:ASP:OD2	0.42	2.34	11	1
1:A:48:THR:OG1	1:A:92:ASP:HB2	0.42	2.13	1	1
2:B:252:ASP:OD1	2:B:253:VAL:CG2	0.42	2.67	1	1
1:A:48:THR:HG23	1:A:92:ASP:HB3	0.42	1.92	2	1
1:A:56:GLU:O	1:A:57:SER:HB2	0.42	2.14	2	2
1:A:141:THR:O	1:A:141:THR:OG1	0.42	2.38	2	1
2:B:262:ILE:HB	2:B:285:GLN:OE1	0.42	2.14	2	1
1:A:112:GLY:HA2	1:A:168:LYS:C	0.42	2.39	3	1
1:A:100:VAL:CG2	1:A:101:ARG:N	0.42	2.67	11	2
1:A:25:THR:HG21	2:B:258:TYR:HD2	0.42	1.73	5	1
1:A:25:THR:HG21	2:B:258:TYR:CD1	0.42	2.49	6	1
1:A:56:GLU:HB3	1:A:60:ASP:CB	0.42	2.45	6	1
1:A:45:LEU:HD21	1:A:77:ILE:CB	0.42	2.45	7	1
1:A:48:THR:CB	1:A:58:TRP:CZ3	0.42	3.02	8	1
1:A:128:GLU:C	1:A:128:GLU:OE1	0.42	2.62	10	1
2:B:240:ILE:CG2	2:B:298:TRP:CZ3	0.42	3.02	11	1
2:B:256:PHE:O	2:B:258:TYR:CD1	0.42	2.72	11	1
1:A:97:ARG:NE	1:A:101:ARG:HB2	0.42	2.29	1	1
1:A:91:SER:O	1:A:155:SER:HA	0.42	2.14	11	4
1:A:145:ASP:OD1	1:A:145:ASP:C	0.42	2.62	3	1
1:A:182:PHE:CE1	1:A:186:LEU:HD21	0.42	2.49	3	1
1:A:79:GLN:NE2	1:A:80:ASN:N	0.42	2.68	7	1
1:A:79:GLN:HE22	1:A:80:ASN:ND2	0.42	2.11	11	2
1:A:143:ASP:O	1:A:144:GLU:HB2	0.42	2.14	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:PRO:CA	1:A:87:LEU:HD22	0.42	2.45	8	1
1:A:106:ASP:N	1:A:109:ASN:ND2	0.42	2.68	8	1
1:A:111:LYS:HE3	1:A:166:TRP:CD1	0.42	2.48	8	1
1:A:140:GLU:OE2	2:B:278:TYR:C	0.42	2.62	8	1
1:A:106:ASP:O	1:A:109:ASN:CG	0.42	2.63	9	1
1:A:70:THR:CG2	2:B:305:LYS:CG	0.42	2.98	10	1
1:A:83:GLU:HB2	1:A:84:PRO:CD	0.42	2.45	11	1
1:A:101:ARG:HB2	1:A:106:ASP:HB3	0.42	1.91	11	1
1:A:142:ILE:CB	2:B:274:VAL:CG1	0.42	2.97	11	1
1:A:134:LEU:CD2	1:A:182:PHE:CE1	0.42	3.03	1	2
1:A:48:THR:HB	1:A:62:LEU:HA	0.42	1.92	2	1
1:A:78:ILE:N	1:A:78:ILE:CD1	0.42	2.79	2	1
1:A:110:ALA:O	1:A:111:LYS:HG3	0.42	2.15	3	1
1:A:140:GLU:HG3	2:B:277:THR:CG2	0.42	2.44	3	1
1:A:57:SER:CB	1:A:60:ASP:HB2	0.42	2.45	4	2
1:A:170:GLU:O	1:A:171:ASP:HB2	0.42	2.15	4	2
2:B:299:VAL:HA	2:B:302:THR:OG1	0.42	2.14	4	1
1:A:87:LEU:HB2	1:A:88:PRO:HD2	0.42	1.90	9	2
2:B:271:LYS:C	2:B:271:LYS:HD2	0.42	2.40	6	1
1:A:79:GLN:HG3	2:B:292:VAL:N	0.42	2.30	11	2
1:A:92:ASP:OD2	4:A:325:M7G:O1A	0.42	2.37	7	1
1:A:43:TRP:CE2	1:A:138:ILE:HD11	0.42	2.50	8	1
1:A:104:TRP:HD1	1:A:105:GLU:N	0.42	2.11	8	1
1:A:140:GLU:OE1	1:A:140:GLU:HA	0.42	2.15	8	1
2:B:294:ALA:O	2:B:295:ASP:HB3	0.42	2.14	8	2
1:A:71:VAL:HG21	1:A:75:TRP:CD1	0.42	2.49	9	1
1:A:108:ALA:HA	1:A:111:LYS:HE2	0.42	1.91	9	1
1:A:111:LYS:HD3	1:A:166:TRP:CD1	0.42	2.50	9	1
2:B:278:TYR:CB	2:B:282:PHE:CD1	0.42	3.02	11	2
1:A:79:GLN:CG	2:B:290:LEU:HB3	0.42	2.45	10	1
1:A:143:ASP:C	2:B:271:LYS:HB3	0.42	2.40	10	1
1:A:143:ASP:O	1:A:144:GLU:C	0.42	2.63	10	1
1:A:147:SER:OG	1:A:148:GLN:N	0.42	2.51	10	1
2:B:244:LEU:HD23	2:B:298:TRP:CH2	0.42	2.49	10	1
1:A:87:LEU:CD1	1:A:91:SER:HB3	0.42	2.45	11	1
1:A:147:SER:CB	1:A:170:GLU:HG3	0.42	2.44	11	1
1:A:135:LEU:HD12	1:A:136:ALA:CA	0.42	2.45	2	3
1:A:175:LEU:O	1:A:177:ARG:N	0.42	2.52	10	3
2:B:268:LYS:HD2	2:B:278:TYR:C	0.42	2.40	9	2
1:A:31:ALA:O	1:A:32:HIS:HB2	0.42	2.14	8	3
1:A:72:GLU:O	2:B:290:LEU:HD12	0.42	2.14	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:135:LEU:CG	1:A:136:ALA:N	0.42	2.83	4	4
1:A:182:PHE:O	1:A:182:PHE:CD1	0.42	2.73	3	1
2:B:268:LYS:O	2:B:271:LYS:HG2	0.42	2.15	8	2
1:A:26:VAL:HG12	1:A:27:LEU:HD23	0.42	1.92	4	1
1:A:146:ASP:OD1	1:A:146:ASP:N	0.42	2.52	4	1
1:A:79:GLN:NE2	2:B:287:LYS:CD	0.42	2.83	5	1
2:B:241:LEU:HA	2:B:244:LEU:CD1	0.42	2.44	5	1
1:A:130:TRP:O	1:A:133:THR:HB	0.42	2.15	6	1
2:B:248:THR:O	2:B:306:ILE:HD13	0.42	2.15	6	1
2:B:262:ILE:HD12	2:B:262:ILE:H	0.42	1.75	6	1
1:A:81:ILE:HG13	1:A:82:PRO:HD2	0.42	1.91	8	1
1:A:100:VAL:CG2	1:A:110:ALA:CB	0.42	2.84	8	1
1:A:111:LYS:HE2	1:A:113:GLY:O	0.42	2.15	8	1
1:A:172:LYS:HG3	1:A:175:LEU:HD12	0.42	1.92	8	1
1:A:43:TRP:HA	1:A:97:ARG:CG	0.42	2.44	9	1
1:A:170:GLU:O	1:A:174:PRO:HG2	0.42	2.14	9	1
2:B:237:VAL:N	2:B:292:VAL:HB	0.42	2.29	9	1
2:B:250:ILE:HG13	2:B:256:PHE:CE1	0.42	2.49	10	1
2:B:257:ASN:O	2:B:259:PRO:HD3	0.42	2.15	11	1
1:A:199:HIS:C	1:A:201:SER:N	0.42	2.77	8	2
2:B:298:TRP:CA	2:B:302:THR:HG23	0.42	2.43	1	1
2:B:306:ILE:HD13	2:B:308:ILE:HD11	0.42	1.91	1	1
1:A:183:LYS:CG	1:A:194:LEU:HD13	0.42	2.44	2	1
1:A:27:LEU:CD2	2:B:285:GLN:OE1	0.42	2.67	3	1
2:B:256:PHE:CE2	2:B:258:TYR:CE2	0.42	3.08	4	1
1:A:94:HIS:O	1:A:95:VAL:HG23	0.42	2.15	5	1
1:A:152:VAL:HB	1:A:163:PHE:CZ	0.42	2.50	6	1
1:A:45:LEU:HA	1:A:94:HIS:O	0.42	2.15	8	1
1:A:80:ASN:ND2	2:B:293:LYS:HA	0.42	2.30	9	1
1:A:89:LEU:HA	1:A:156:ILE:HG21	0.42	1.90	9	1
1:A:123:GLY:HA2	1:A:126:ILE:HD11	0.42	1.91	9	1
2:B:263:GLU:O	2:B:265:PRO:HD3	0.42	2.14	9	2
1:A:39:LEU:HD22	2:B:278:TYR:CE1	0.42	2.49	10	1
1:A:108:ALA:O	1:A:111:LYS:N	0.42	2.52	10	1
1:A:135:LEU:O	1:A:138:ILE:CG1	0.42	2.67	10	1
2:B:298:TRP:O	2:B:301:SER:N	0.42	2.53	10	1
1:A:100:VAL:O	1:A:101:ARG:NE	0.42	2.53	11	1
1:A:45:LEU:CA	1:A:95:VAL:HG22	0.42	2.41	1	1
1:A:71:VAL:CG2	2:B:283:LEU:CD2	0.42	2.90	2	2
1:A:87:LEU:CD1	1:A:156:ILE:HD12	0.42	2.41	7	2
1:A:105:GLU:O	1:A:106:ASP:OD1	0.42	2.38	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:143:ASP:O	1:A:147:SER:HA	0.42	2.15	2	1
1:A:77:ILE:HD11	2:B:295:ASP:HA	0.42	1.90	3	1
1:A:81:ILE:HG22	1:A:93:TYR:CE2	0.42	2.50	3	1
1:A:99:ASP:HB2	1:A:150:ASN:HB2	0.42	1.92	3	1
1:A:109:ASN:O	1:A:110:ALA:C	0.42	2.63	3	1
1:A:200:CYS:O	3:A:323:MTN:C4	0.42	2.67	4	1
2:B:250:ILE:HG22	2:B:306:ILE:CG1	0.42	2.45	4	1
1:A:71:VAL:HG23	2:B:283:LEU:CD2	0.42	2.45	5	1
1:A:116:SER:HA	1:A:163:PHE:O	0.42	2.15	6	2
1:A:186:LEU:HD12	1:A:188:LEU:HD22	0.42	1.91	7	1
1:A:111:LYS:HB2	1:A:167:THR:C	0.42	2.40	9	1
1:A:58:TRP:CE3	4:A:325:M7G:C8	0.42	3.03	11	1
2:B:252:ASP:C	2:B:255:SER:HB2	0.42	2.40	10	3
2:B:302:THR:HA	2:B:305:LYS:CE	0.42	2.45	1	1
1:A:44:THR:HG22	1:A:67:SER:OG	0.42	2.14	2	1
1:A:72:GLU:HB3	2:B:305:LYS:CE	0.42	2.45	3	1
1:A:82:PRO:O	1:A:87:LEU:HD22	0.42	2.15	4	1
1:A:182:PHE:O	1:A:186:LEU:HG	0.42	2.15	4	1
1:A:135:LEU:HG	2:B:283:LEU:HD13	0.42	1.91	5	1
2:B:259:PRO:O	2:B:260:GLU:HB2	0.42	2.15	5	1
2:B:268:LYS:HB2	2:B:277:THR:O	0.42	2.15	5	1
1:A:195:GLU:OE1	1:A:197:PHE:CE2	0.42	2.73	6	1
1:A:80:ASN:O	1:A:82:PRO:CD	0.42	2.68	8	1
1:A:89:LEU:HD13	1:A:90:LYS:H	0.42	1.75	8	1
1:A:36:LYS:CB	2:B:306:ILE:CG2	0.42	2.98	10	1
1:A:129:LEU:O	1:A:185:VAL:CG1	0.42	2.67	11	1
2:B:271:LYS:CE	2:B:271:LYS:CA	0.42	2.97	11	1
1:A:44:THR:CG2	1:A:67:SER:HB3	0.41	2.40	2	2
1:A:66:THR:O	1:A:66:THR:CG2	0.41	2.67	1	1
2:B:275:LYS:O	2:B:276:TYR:CD1	0.41	2.73	1	1
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:74:PHE:HB2	0.41	2.50	2	1
1:A:65:VAL:O	1:A:67:SER:OG	0.41	2.35	2	1
1:A:124:ALA:O	1:A:125:ASP:CB	0.41	2.67	2	1
1:A:172:LYS:O	1:A:175:LEU:HB2	0.41	2.15	11	2
2:B:260:GLU:OE1	2:B:260:GLU:C	0.41	2.62	2	1
1:A:39:LEU:HB2	1:A:69:GLN:HB2	0.41	1.92	3	1
2:B:256:PHE:CE1	2:B:258:TYR:CD2	0.41	3.08	3	1
1:A:48:THR:OG1	1:A:94:HIS:NE2	0.41	2.52	4	1
1:A:188:LEU:CD1	1:A:193:HIS:CD2	0.41	3.03	4	1
1:A:200:CYS:O	1:A:201:SER:HB2	0.41	2.16	5	1
1:A:210:SER:C	1:A:211:ILE:HG12	0.41	2.39	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:237:VAL:HG11	2:B:298:TRP:HB2	0.41	1.92	7	1
1:A:142:ILE:HD11	2:B:276:TYR:O	0.41	2.15	8	1
1:A:147:SER:C	1:A:148:GLN:HG2	0.41	2.40	8	1
1:A:26:VAL:HB	2:B:286:PHE:CE1	0.41	2.50	9	1
1:A:42:LYS:HA	1:A:69:GLN:NE2	0.41	2.29	9	1
1:A:140:GLU:O	1:A:140:GLU:HG2	0.41	2.15	9	1
1:A:143:ASP:HB3	2:B:274:VAL:CG1	0.41	2.37	9	1
1:A:143:ASP:OD2	2:B:271:LYS:HG3	0.41	2.15	9	1
1:A:143:ASP:O	2:B:271:LYS:HB3	0.41	2.15	9	1
1:A:44:THR:OG1	1:A:97:ARG:HD3	0.41	2.15	10	1
1:A:88:PRO:C	1:A:89:LEU:CD2	0.41	2.88	10	1
2:B:254:PHE:CD2	2:B:265:PRO:O	0.41	2.73	10	1
2:B:282:PHE:HA	2:B:285:GLN:CD	0.41	2.39	11	1
1:A:87:LEU:CD2	1:A:88:PRO:O	0.41	2.68	1	1
1:A:137:VAL:O	1:A:146:ASP:HB2	0.41	2.15	1	1
1:A:140:GLU:HG3	2:B:268:LYS:CG	0.41	2.45	1	1
2:B:235:ASN:HB3	2:B:292:VAL:CG1	0.41	2.45	1	1
1:A:171:ASP:O	1:A:174:PRO:HD2	0.41	2.15	2	2
2:B:298:TRP:CE3	2:B:301:SER:HB3	0.41	2.51	10	2
1:A:129:LEU:HB3	1:A:185:VAL:HG12	0.41	1.93	9	2
1:A:167:THR:HB	1:A:175:LEU:CD2	0.41	2.45	3	1
2:B:241:LEU:CD2	2:B:301:SER:CB	0.41	2.90	3	1
1:A:84:PRO:HD3	1:A:127:ASP:CG	0.41	2.40	4	1
1:A:84:PRO:HG3	1:A:127:ASP:CG	0.41	2.40	4	1
1:A:143:ASP:O	1:A:144:GLU:CB	0.41	2.67	4	1
1:A:108:ALA:O	1:A:199:HIS:O	0.41	2.38	5	1
1:A:112:GLY:C	1:A:113:GLY:O	0.41	2.63	5	1
1:A:130:TRP:CE2	1:A:134:LEU:CD1	0.41	2.99	5	1
1:A:75:TRP:HE1	2:B:283:LEU:HD23	0.41	1.75	6	1
1:A:27:LEU:CD1	2:B:282:PHE:CE1	0.41	2.99	8	1
2:B:241:LEU:CD1	2:B:301:SER:HB2	0.41	2.44	8	1
1:A:80:ASN:ND2	2:B:293:LYS:CA	0.41	2.83	9	1
2:B:257:ASN:O	2:B:257:ASN:OD1	0.41	2.39	9	1
2:B:289:LYS:O	2:B:290:LEU:C	0.41	2.64	10	1
1:A:25:THR:O	1:A:29:ASP:HB2	0.41	2.14	11	1
1:A:127:ASP:O	1:A:131:LEU:HB2	0.41	2.15	11	1
2:B:298:TRP:O	2:B:302:THR:HB	0.41	2.15	11	1
1:A:26:VAL:HG12	2:B:289:LYS:CB	0.41	2.45	1	1
1:A:47:TYR:CE1	1:A:63:ARG:O	0.41	2.74	1	1
2:B:282:PHE:C	2:B:284:LEU:N	0.41	2.77	2	2
2:B:287:LYS:O	2:B:289:LYS:N	0.41	2.53	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:LEU:CD2	1:A:66:THR:CB	0.41	2.94	3	1
1:A:73:GLU:CD	2:B:302:THR:HB	0.41	2.40	3	1
1:A:115:TRP:CH2	1:A:175:LEU:HD13	0.41	2.50	4	1
2:B:270:LYS:C	2:B:272:GLU:N	0.41	2.77	4	2
1:A:111:LYS:HD2	1:A:166:TRP:HB3	0.41	1.92	6	1
1:A:153:VAL:O	1:A:163:PHE:CZ	0.41	2.74	6	1
1:A:43:TRP:CE3	1:A:95:VAL:CG1	0.41	3.03	7	1
1:A:32:HIS:CE1	2:B:243:VAL:HG12	0.41	2.50	8	1
1:A:71:VAL:HG22	1:A:75:TRP:CG	0.41	2.51	9	1
1:A:148:GLN:CB	1:A:170:GLU:HG2	0.41	2.44	9	1
1:A:110:ALA:O	1:A:168:LYS:HA	0.41	2.15	10	1
1:A:143:ASP:OD1	2:B:268:LYS:HE3	0.41	2.15	10	1
2:B:305:LYS:HA	2:B:305:LYS:CE	0.41	2.44	10	1
2:B:237:VAL:CG1	2:B:298:TRP:HB2	0.41	2.44	11	1
1:A:24:LYS:HG2	1:A:29:ASP:OD1	0.41	2.15	1	1
2:B:238:SER:O	2:B:242:ASN:HB2	0.41	2.15	1	1
1:A:42:LYS:HG3	1:A:97:ARG:CG	0.41	2.44	2	1
2:B:296:ALA:O	2:B:299:VAL:CB	0.41	2.68	2	1
1:A:49:LYS:O	1:A:50:PRO:C	0.41	2.63	3	1
1:A:74:PHE:CD2	1:A:78:ILE:HG13	0.41	2.51	3	1
1:A:142:ILE:CD1	2:B:274:VAL:CG2	0.41	2.98	3	1
1:A:43:TRP:CH2	1:A:138:ILE:HD11	0.41	2.50	4	1
1:A:111:LYS:CD	1:A:113:GLY:N	0.41	2.83	4	1
1:A:138:ILE:O	1:A:139:GLY:C	0.41	2.63	4	1
1:A:144:GLU:HG3	2:B:271:LYS:O	0.41	2.15	4	1
1:A:156:ILE:O	1:A:157:ARG:HB2	0.41	2.14	4	2
1:A:39:LEU:HB2	1:A:69:GLN:CB	0.41	2.45	8	2
1:A:170:GLU:CB	1:A:175:LEU:HD11	0.41	2.46	5	1
3:A:321:MTN:S1	3:A:321:MTN:H61	0.41	2.55	5	1
2:B:244:LEU:C	2:B:246:ASP:N	0.41	2.77	5	3
1:A:110:ALA:O	1:A:111:LYS:C	0.41	2.64	6	1
1:A:193:HIS:HA	1:A:213:LEU:O	0.41	2.16	10	2
1:A:50:PRO:C	1:A:61:LEU:HD13	0.41	2.40	7	1
1:A:149:ILE:HG13	1:A:167:THR:CG2	0.41	2.38	7	1
1:A:140:GLU:CD	2:B:268:LYS:HG2	0.41	2.41	8	1
1:A:96:PHE:O	1:A:97:ARG:HG2	0.41	2.16	9	1
1:A:143:ASP:CB	2:B:277:THR:HG21	0.41	2.46	9	1
1:A:26:VAL:O	2:B:289:LYS:HD3	0.41	2.15	5	2
1:A:146:ASP:CG	1:A:149:ILE:HB	0.41	2.40	1	1
1:A:26:VAL:HG22	1:A:26:VAL:O	0.41	2.16	2	1
1:A:197:PHE:CD1	1:A:201:SER:CB	0.41	3.03	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:156:ILE:HD13	1:A:161:ASN:CB	0.41	2.45	3	1
1:A:130:TRP:CD1	1:A:163:PHE:CD2	0.41	3.08	5	1
1:A:83:GLU:CD	1:A:154:LEU:CD1	0.41	2.94	6	1
1:A:108:ALA:CB	1:A:111:LYS:HE2	0.41	2.43	7	1
2:B:252:ASP:HB2	2:B:255:SER:HB3	0.41	1.92	8	1
2:B:269:TYR:CD2	2:B:274:VAL:O	0.41	2.73	9	1
1:A:126:ILE:HD13	1:A:127:ASP:H	0.41	1.75	10	1
1:A:137:VAL:CA	1:A:141:THR:HB	0.41	2.46	10	1
1:A:104:TRP:HA	1:A:108:ALA:CB	0.41	2.46	11	1
1:A:76:ALA:N	2:B:290:LEU:HD12	0.41	2.30	1	1
1:A:140:GLU:HG3	2:B:268:LYS:HG2	0.41	1.91	1	1
1:A:42:LYS:CB	1:A:97:ARG:HG2	0.41	2.45	2	1
1:A:58:TRP:CD2	1:A:62:LEU:HD11	0.41	2.51	2	1
1:A:94:HIS:CB	1:A:96:PHE:CZ	0.41	3.04	2	1
1:A:137:VAL:O	1:A:141:THR:HG22	0.41	2.16	2	1
1:A:140:GLU:OE1	1:A:145:ASP:OD2	0.41	2.39	2	1
1:A:196:PHE:CE2	1:A:211:ILE:HD12	0.41	2.50	2	1
2:B:271:LYS:CE	2:B:271:LYS:HA	0.41	2.45	2	1
1:A:27:LEU:N	1:A:27:LEU:HD13	0.41	2.30	3	1
1:A:148:GLN:HG2	1:A:149:ILE:CD1	0.41	2.45	3	1
2:B:298:TRP:C	2:B:302:THR:HG23	0.41	2.40	3	1
1:A:69:GLN:HG2	1:A:69:GLN:O	0.41	2.15	4	1
1:A:172:LYS:HA	1:A:175:LEU:CG	0.41	2.46	4	1
1:A:146:ASP:CG	1:A:149:ILE:HG12	0.41	2.41	6	1
1:A:81:ILE:O	1:A:84:PRO:HD2	0.41	2.16	8	2
2:B:268:LYS:CD	2:B:278:TYR:C	0.41	2.94	7	1
1:A:32:HIS:ND1	2:B:243:VAL:CG1	0.41	2.84	8	1
1:A:75:TRP:CZ2	1:A:135:LEU:HG	0.41	2.51	8	1
1:A:118:GLN:O	1:A:193:HIS:CB	0.41	2.68	9	1
1:A:156:ILE:O	1:A:157:ARG:CB	0.41	2.67	9	1
1:A:144:GLU:C	1:A:145:ASP:OD1	0.41	2.64	10	1
1:A:197:PHE:N	1:A:197:PHE:CD1	0.41	2.87	10	1
2:B:299:VAL:HG23	2:B:300:GLN:N	0.41	2.28	10	1
1:A:82:PRO:O	1:A:86:GLU:CA	0.41	2.69	1	1
1:A:79:GLN:OE1	2:B:290:LEU:HB2	0.41	2.16	2	1
1:A:26:VAL:HG22	1:A:72:GLU:OE2	0.41	2.15	3	1
1:A:92:ASP:OD2	1:A:155:SER:HB3	0.41	2.15	3	1
1:A:115:TRP:O	1:A:164:ALA:HA	0.41	2.16	3	1
1:A:165:LEU:HG	1:A:165:LEU:O	0.41	2.15	3	1
1:A:194:LEU:HB2	1:A:213:LEU:OXT	0.41	2.15	3	1
1:A:179:GLY:O	1:A:183:LYS:HB3	0.41	2.16	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:114:LYS:HG3	1:A:202:ALA:HB2	0.41	1.92	5	1
1:A:176:LEU:CD1	1:A:176:LEU:H	0.41	2.29	6	2
2:B:271:LYS:HE2	2:B:274:VAL:CG2	0.41	2.45	6	1
2:B:308:ILE:O	2:B:308:ILE:HG13	0.41	2.16	6	1
1:A:37:HIS:NE2	2:B:253:VAL:HG12	0.41	2.30	7	1
2:B:274:VAL:CG2	2:B:277:THR:CG2	0.41	2.98	7	1
1:A:26:VAL:O	2:B:289:LYS:HG2	0.41	2.16	8	1
1:A:150:ASN:OD1	1:A:166:TRP:CB	0.41	2.68	8	1
1:A:50:PRO:CG	1:A:92:ASP:OD1	0.41	2.69	9	1
1:A:28:SER:CB	2:B:260:GLU:HG3	0.41	2.44	10	1
1:A:42:LYS:O	1:A:42:LYS:CG	0.41	2.67	10	1
1:A:157:ARG:CZ	1:A:157:ARG:HB3	0.41	2.45	10	1
1:A:44:THR:O	1:A:95:VAL:HA	0.41	2.16	1	1
1:A:148:GLN:C	1:A:149:ILE:CD1	0.41	2.86	3	1
1:A:49:LYS:N	1:A:50:PRO:HD3	0.41	2.30	5	1
1:A:83:GLU:HB3	1:A:154:LEU:HD11	0.41	1.91	5	1
1:A:104:TRP:CD1	1:A:114:LYS:CE	0.41	3.03	5	1
1:A:27:LEU:CD2	2:B:258:TYR:CG	0.41	3.03	6	1
1:A:25:THR:HG21	1:A:37:HIS:CE1	0.41	2.51	7	1
1:A:135:LEU:HD11	2:B:280:PRO:HB3	0.41	1.92	7	1
1:A:36:LYS:HD2	2:B:306:ILE:HG13	0.41	1.92	8	1
1:A:112:GLY:O	1:A:199:HIS:HB3	0.41	2.16	8	1
2:B:276:TYR:O	2:B:276:TYR:CD2	0.41	2.74	8	1
1:A:65:VAL:HG11	2:B:295:ASP:HA	0.41	1.92	9	1
1:A:156:ILE:O	1:A:157:ARG:HB3	0.41	2.16	9	1
1:A:172:LYS:HG2	1:A:175:LEU:HD12	0.41	1.91	9	1
1:A:111:LYS:HD2	1:A:114:LYS:HB2	0.41	1.93	10	1
1:A:87:LEU:HD22	1:A:88:PRO:N	0.41	2.30	1	1
1:A:93:TYR:O	1:A:154:LEU:HB3	0.41	2.15	1	1
1:A:39:LEU:HD13	1:A:69:GLN:O	0.41	2.16	2	1
1:A:140:GLU:O	1:A:145:ASP:HB3	0.41	2.15	2	1
1:A:58:TRP:NE1	1:A:103:GLU:OE1	0.41	2.53	3	1
1:A:196:PHE:HB2	1:A:210:SER:HB3	0.41	1.92	3	1
2:B:273:HIS:CD2	2:B:273:HIS:O	0.41	2.74	5	2
1:A:58:TRP:NE1	1:A:62:LEU:CD1	0.41	2.84	4	1
1:A:84:PRO:CA	1:A:127:ASP:HB3	0.41	2.46	4	1
1:A:98:ASN:C	1:A:100:VAL:N	0.41	2.77	4	1
1:A:111:LYS:HD2	1:A:112:GLY:N	0.41	2.31	4	1
1:A:137:VAL:HG22	1:A:146:ASP:OD2	0.41	2.16	4	1
1:A:139:GLY:C	1:A:140:GLU:OE1	0.41	2.64	4	1
1:A:186:LEU:O	1:A:187:LYS:HB2	0.41	2.16	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:193:HIS:ND1	1:A:213:LEU:HB3	0.41	2.31	4	1
1:A:33:PHE:CE1	2:B:240:ILE:HA	0.41	2.51	5	1
1:A:81:ILE:C	1:A:84:PRO:HD2	0.41	2.41	5	1
1:A:100:VAL:HB	1:A:150:ASN:CG	0.41	2.41	6	1
1:A:101:ARG:HG3	1:A:102:PRO:HD3	0.41	1.92	6	1
1:A:57:SER:O	1:A:58:TRP:C	0.41	2.64	7	1
1:A:97:ARG:CD	1:A:101:ARG:CD	0.41	2.98	7	1
1:A:111:LYS:C	1:A:113:GLY:H	0.41	2.23	7	1
1:A:183:LYS:O	1:A:186:LEU:N	0.41	2.52	7	1
1:A:75:TRP:O	1:A:79:GLN:HG2	0.41	2.16	8	1
1:A:92:ASP:CA	1:A:154:LEU:O	0.41	2.69	8	1
1:A:111:LYS:CE	1:A:166:TRP:CG	0.41	3.03	8	1
1:A:142:ILE:CG2	2:B:273:HIS:HB2	0.41	2.46	8	1
1:A:156:ILE:O	1:A:157:ARG:NE	0.41	2.54	8	1
2:B:240:ILE:HA	2:B:243:VAL:HG13	0.41	1.93	8	1
2:B:251:GLU:HB2	2:B:255:SER:OG	0.41	2.16	8	1
1:A:39:LEU:HA	2:B:276:TYR:O	0.41	2.16	9	1
1:A:39:LEU:C	2:B:276:TYR:HB2	0.41	2.41	9	1
1:A:95:VAL:O	1:A:96:PHE:HB3	0.41	2.16	9	1
1:A:160:GLY:O	1:A:161:ASN:HB3	0.41	2.16	9	1
2:B:275:LYS:HG2	2:B:276:TYR:CE2	0.41	2.50	9	1
1:A:35:VAL:O	1:A:35:VAL:CG1	0.41	2.69	10	1
1:A:73:GLU:CG	1:A:74:PHE:N	0.41	2.83	10	1
1:A:137:VAL:HA	1:A:141:THR:CA	0.41	2.46	10	1
1:A:44:THR:CA	1:A:67:SER:CB	0.41	2.99	11	1
1:A:38:PRO:HB2	2:B:307:VAL:CB	0.41	2.46	1	1
1:A:58:TRP:CH2	4:A:325:M7G:HM72	0.41	2.50	1	1
1:A:87:LEU:HD13	1:A:87:LEU:O	0.41	2.15	1	1
2:B:258:TYR:CZ	2:B:282:PHE:CD1	0.41	3.09	1	1
1:A:27:LEU:O	2:B:260:GLU:CG	0.41	2.69	2	1
1:A:156:ILE:C	1:A:157:ARG:HG2	0.41	2.41	2	1
1:A:73:GLU:OE2	2:B:305:LYS:HD3	0.41	2.16	3	1
1:A:128:GLU:OE2	2:B:284:LEU:HD21	0.41	2.15	3	1
1:A:196:PHE:CD1	1:A:211:ILE:CB	0.41	3.04	4	1
1:A:70:THR:O	1:A:71:VAL:CG1	0.41	2.69	6	1
1:A:100:VAL:CG1	1:A:101:ARG:H	0.41	2.28	6	1
2:B:250:ILE:O	2:B:308:ILE:HB	0.41	2.16	8	1
1:A:44:THR:HA	1:A:67:SER:HB3	0.41	1.92	10	1
1:A:128:GLU:OE1	1:A:128:GLU:O	0.41	2.39	10	1
1:A:142:ILE:CD1	2:B:276:TYR:C	0.40	2.94	1	1
1:A:38:PRO:HA	2:B:307:VAL:CG1	0.40	2.46	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:PRO:O	1:A:87:LEU:CB	0.40	2.69	2	1
1:A:82:PRO:C	1:A:87:LEU:HD23	0.40	2.41	2	1
1:A:119:LEU:O	1:A:161:ASN:OD1	0.40	2.39	2	1
1:A:125:ASP:O	1:A:129:LEU:HG	0.40	2.15	2	1
1:A:82:PRO:HG2	1:A:154:LEU:CD1	0.40	2.44	3	1
1:A:70:THR:CG2	1:A:73:GLU:CD	0.40	2.94	4	1
1:A:117:PHE:CD2	1:A:186:LEU:HD11	0.40	2.51	4	1
1:A:117:PHE:HD1	1:A:194:LEU:HD12	0.40	1.75	4	1
1:A:138:ILE:HG13	1:A:139:GLY:N	0.40	2.31	4	1
1:A:47:TYR:OH	1:A:65:VAL:CG1	0.40	2.69	6	1
1:A:186:LEU:C	1:A:187:LYS:HG3	0.40	2.42	7	1
2:B:274:VAL:HG22	2:B:275:LYS:H	0.40	1.76	8	1
2:B:276:TYR:O	2:B:276:TYR:CG	0.40	2.74	8	1
2:B:302:THR:O	2:B:303:ALA:C	0.40	2.64	8	1
1:A:39:LEU:CA	2:B:276:TYR:HB2	0.40	2.45	9	1
1:A:37:HIS:CE1	2:B:286:PHE:CZ	0.40	3.08	10	1
1:A:94:HIS:ND1	1:A:103:GLU:OE2	0.40	2.54	11	1
1:A:27:LEU:HD21	2:B:285:GLN:OE1	0.40	2.15	3	1
1:A:28:SER:CB	2:B:259:PRO:HD2	0.40	2.46	4	1
1:A:182:PHE:O	1:A:186:LEU:CG	0.40	2.69	4	1
1:A:112:GLY:HA2	1:A:167:THR:O	0.40	2.17	5	1
1:A:47:TYR:CE2	1:A:65:VAL:HG11	0.40	2.51	6	1
1:A:73:GLU:OE2	2:B:302:THR:HG21	0.40	2.16	6	1
1:A:136:ALA:O	1:A:140:GLU:HG2	0.40	2.16	6	1
2:B:252:ASP:HB3	2:B:255:SER:CB	0.40	2.46	6	1
1:A:111:LYS:HA	1:A:150:ASN:OD1	0.40	2.17	7	1
1:A:126:ILE:HB	1:A:185:VAL:O	0.40	2.17	7	1
2:B:306:ILE:C	2:B:306:ILE:HD12	0.40	2.41	8	1
1:A:25:THR:CG2	2:B:256:PHE:CD1	0.40	3.05	9	1
1:A:41:THR:OG1	1:A:98:ASN:HB3	0.40	2.16	9	1
2:B:269:TYR:HA	2:B:274:VAL:O	0.40	2.16	9	1
1:A:29:ASP:OD1	2:B:289:LYS:HD2	0.40	2.17	10	1
3:A:321:MTN:H42	2:B:284:LEU:HD21	0.40	1.94	10	1
2:B:299:VAL:O	2:B:302:THR:N	0.40	2.54	10	1
2:B:274:VAL:CB	2:B:277:THR:CG2	0.40	2.99	11	1
2:B:269:TYR:HA	2:B:274:VAL:HG22	0.40	1.93	1	1
2:B:254:PHE:HB3	2:B:265:PRO:O	0.40	2.16	5	2
1:A:90:LYS:O	1:A:90:LYS:CG	0.40	2.68	4	1
1:A:76:ALA:O	1:A:80:ASN:ND2	0.40	2.54	5	1
1:A:148:GLN:O	1:A:149:ILE:C	0.40	2.64	5	1
2:B:241:LEU:HD12	2:B:297:GLU:HB2	0.40	1.93	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
2:B:268:LYS:HB3	2:B:271:LYS:CG	0.40	2.46	5	1
1:A:45:LEU:CB	1:A:95:VAL:HG22	0.40	2.43	8	1
1:A:183:LYS:CB	1:A:188:LEU:HD21	0.40	2.47	8	1
1:A:73:GLU:OE2	2:B:302:THR:CB	0.40	2.70	9	1
1:A:119:LEU:CD1	1:A:186:LEU:HB3	0.40	2.46	9	1
1:A:57:SER:OG	1:A:60:ASP:HB2	0.40	2.17	10	1
1:A:143:ASP:OD1	2:B:268:LYS:CE	0.40	2.69	10	1
2:B:266:ASP:OD2	2:B:270:LYS:HE2	0.40	2.17	10	1
2:B:296:ALA:C	2:B:299:VAL:HG13	0.40	2.36	10	1
2:B:277:THR:O	2:B:277:THR:HG22	0.40	2.17	11	1
1:A:98:ASN:OD1	1:A:150:ASN:HA	0.40	2.16	1	1
1:A:43:TRP:NE1	1:A:69:GLN:HA	0.40	2.30	2	1
1:A:120:CYS:O	1:A:160:GLY:HA3	0.40	2.17	3	1
1:A:84:PRO:HB3	1:A:127:ASP:CG	0.40	2.41	4	1
1:A:39:LEU:HB2	1:A:69:GLN:HG2	0.40	1.94	5	1
1:A:97:ARG:NH1	1:A:141:THR:HG21	0.40	2.32	6	1
2:B:287:LYS:O	2:B:291:ASN:OD1	0.40	2.40	6	1
1:A:126:ILE:CG2	1:A:185:VAL:O	0.40	2.69	7	1
1:A:118:GLN:O	1:A:193:HIS:HB3	0.40	2.15	9	1
1:A:84:PRO:HA	1:A:127:ASP:OD1	0.40	2.16	10	1
1:A:129:LEU:CB	1:A:185:VAL:HG13	0.40	2.46	10	1
1:A:103:GLU:HA	1:A:107:GLU:CB	0.40	2.46	11	1
1:A:129:LEU:O	1:A:185:VAL:HG11	0.40	2.17	11	1
2:B:268:LYS:O	2:B:274:VAL:O	0.40	2.40	11	1
1:A:43:TRP:CD2	1:A:68:PHE:O	0.40	2.74	2	1
1:A:46:TRP:HA	1:A:63:ARG:O	0.40	2.17	2	1
1:A:148:GLN:C	1:A:149:ILE:O	0.40	2.64	2	1
2:B:258:TYR:CD1	2:B:262:ILE:CG1	0.40	3.04	2	1
1:A:87:LEU:HB2	1:A:88:PRO:CD	0.40	2.47	3	1
1:A:90:LYS:O	1:A:90:LYS:HG2	0.40	2.16	4	1
2:B:274:VAL:C	2:B:276:TYR:N	0.40	2.80	4	1
1:A:166:TRP:N	1:A:166:TRP:CD1	0.40	2.88	5	1
2:B:244:LEU:O	2:B:245:LYS:C	0.40	2.65	5	1
1:A:108:ALA:HA	1:A:111:LYS:CD	0.40	2.47	6	1
1:A:49:LYS:HB3	1:A:50:PRO:HD3	0.40	1.93	7	1
1:A:70:THR:OG1	1:A:72:GLU:HG3	0.40	2.16	7	1
1:A:114:LYS:HB2	1:A:166:TRP:CD1	0.40	2.52	8	1
1:A:111:LYS:HA	1:A:168:LYS:HA	0.40	1.92	9	1
2:B:258:TYR:CD2	2:B:263:GLU:HA	0.40	2.52	9	1
1:A:56:GLU:O	1:A:56:GLU:HG3	0.40	2.16	10	1
1:A:163:PHE:CZ	1:A:186:LEU:CD2	0.40	3.05	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:163:PHE:CE2	1:A:186:LEU:CD2	0.40	3.05	10	1
2:B:298:TRP:CE3	2:B:301:SER:CB	0.40	3.03	10	1
1:A:45:LEU:HG	1:A:65:VAL:HB	0.40	1.94	11	1
1:A:47:TYR:OH	1:A:63:ARG:HG2	0.40	2.15	11	1
1:A:66:THR:OG1	2:B:299:VAL:HB	0.40	2.16	11	1
1:A:87:LEU:HD12	1:A:91:SER:CB	0.40	2.47	11	1

6.3 Torsion angles

6.3.1 Protein backbone

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	175/213 (82%)	110±4 (63±2%)	39±4 (22±2%)	25±3 (14±2%)	0	5
2	B	75/100 (75%)	50±2 (67±3%)	12±2 (16±3%)	13±3 (17±4%)	0	3
All	All	2750/3443 (80%)	1767 (64%)	564 (21%)	419 (15%)	0	4

All 93 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	89	LEU	11
1	A	100	VAL	11
1	A	169	CYS	11
2	B	252	ASP	11
2	B	253	VAL	11
2	B	265	PRO	11
2	B	267	ILE	11
2	B	272	GLU	11
2	B	291	ASN	11
1	A	103	GLU	10
2	B	295	ASP	10
1	A	31	ALA	9
1	A	32	HIS	9
1	A	102	PRO	9
1	A	170	GLU	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
2	B	292	VAL	9
1	A	71	VAL	9
1	A	143	ASP	9
1	A	101	ARG	8
2	B	263	GLU	8
1	A	66	THR	7
1	A	97	ARG	7
1	A	70	THR	7
1	A	147	SER	7
1	A	160	GLY	7
1	A	56	GLU	6
1	A	57	SER	6
1	A	149	ILE	6
1	A	168	LYS	6
2	B	260	GLU	6
2	B	274	VAL	6
1	A	50	PRO	6
1	A	124	ALA	6
1	A	125	ASP	6
1	A	171	ASP	6
1	A	148	GLN	6
1	A	193	HIS	5
2	B	249	PRO	5
1	A	65	VAL	4
1	A	83	GLU	4
1	A	98	ASN	4
2	B	293	LYS	4
2	B	294	ALA	4
1	A	188	LEU	4
1	A	122	LYS	3
1	A	49	LYS	3
2	B	259	PRO	3
1	A	157	ARG	3
1	A	199	HIS	3
2	B	275	LYS	3
1	A	194	LEU	3
2	B	248	THR	3
2	B	273	HIS	3
1	A	22	THR	2
1	A	82	PRO	2
1	A	132	CYS	2
2	B	279	GLY	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	81	ILE	2
1	A	84	PRO	2
1	A	111	LYS	2
1	A	38	PRO	2
2	B	305	LYS	2
1	A	29	ASP	2
1	A	123	GLY	2
1	A	142	ILE	2
2	B	271	LYS	2
1	A	77	ILE	2
1	A	144	GLU	2
1	A	106	ASP	2
1	A	210	SER	2
1	A	96	PHE	2
1	A	140	GLU	2
1	A	85	HIS	1
1	A	99	ASP	1
1	A	95	VAL	1
1	A	113	GLY	1
1	A	201	SER	1
1	A	211	ILE	1
1	A	27	LEU	1
1	A	33	PHE	1
1	A	79	GLN	1
1	A	90	LYS	1
1	A	145	ASP	1
1	A	158	LYS	1
1	A	200	CYS	1
1	A	72	GLU	1
1	A	161	ASN	1
1	A	112	GLY	1
2	B	290	LEU	1
2	B	296	ALA	1
1	A	187	LYS	1
2	B	264	GLY	1
2	B	270	LYS	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	158/191 (83%)	84±5 (53±3%)	74±5 (47±3%)	0	2
2	B	68/87 (78%)	40±3 (58±4%)	28±3 (42±4%)	0	4
All	All	2486/3058 (81%)	1361 (55%)	1125 (45%)	0	2

All 196 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	27	LEU	11
1	A	33	PHE	11
1	A	48	THR	11
1	A	57	SER	11
1	A	59	SER	11
1	A	69	GLN	11
1	A	81	ILE	11
1	A	117	PHE	11
1	A	129	LEU	11
1	A	137	VAL	11
1	A	155	SER	11
1	A	165	LEU	11
1	A	178	ILE	11
1	A	183	LYS	11
1	A	184	GLN	11
1	A	211	ILE	11
2	B	253	VAL	11
2	B	258	TYR	11
2	B	262	ILE	11
2	B	267	ILE	11
2	B	284	LEU	11
2	B	290	LEU	11
2	B	305	LYS	11
1	A	78	ILE	10
1	A	104	TRP	10
1	A	134	LEU	10
1	A	142	ILE	10
1	A	188	LEU	10
1	A	210	SER	10
2	B	286	PHE	10
1	A	130	TRP	9
1	A	133	THR	9
1	A	138	ILE	9
1	A	144	GLU	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	158	LYS	9
1	A	168	LYS	9
2	B	268	LYS	9
2	B	289	LYS	9
2	B	306	ILE	9
1	A	46	TRP	9
1	A	89	LEU	9
2	B	277	THR	9
1	A	40	ASN	8
1	A	42	LYS	8
1	A	49	LYS	8
1	A	61	LEU	8
1	A	63	ARG	8
1	A	86	GLU	8
1	A	96	PHE	8
1	A	103	GLU	8
1	A	122	LYS	8
1	A	126	ILE	8
1	A	131	LEU	8
1	A	149	ILE	8
1	A	162	LYS	8
1	A	172	LYS	8
1	A	176	LEU	8
2	B	255	SER	8
1	A	156	ILE	8
1	A	45	LEU	8
1	A	135	LEU	8
1	A	36	LYS	7
1	A	92	ASP	7
1	A	94	HIS	7
1	A	98	ASN	7
1	A	111	LYS	7
1	A	128	GLU	7
1	A	194	LEU	7
1	A	196	PHE	7
1	A	201	SER	7
2	B	236	THR	7
2	B	243	VAL	7
2	B	293	LYS	7
2	B	241	LEU	7
2	B	270	LYS	7
2	B	278	TYR	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	65	VAL	7
1	A	91	SER	7
1	A	67	SER	6
1	A	83	GLU	6
1	A	87	LEU	6
1	A	93	TYR	6
1	A	105	GLU	6
1	A	106	ASP	6
1	A	116	SER	6
1	A	119	LEU	6
1	A	150	ASN	6
1	A	171	ASP	6
1	A	173	GLU	6
1	A	181	LYS	6
1	A	187	LYS	6
2	B	248	THR	6
2	B	275	LYS	6
1	A	72	GLU	6
1	A	125	ASP	6
2	B	271	LYS	6
1	A	30	SER	6
1	A	32	HIS	6
2	B	298	TRP	6
1	A	39	LEU	6
1	A	70	THR	6
1	A	28	SER	5
1	A	34	ASP	5
1	A	140	GLU	5
1	A	146	ASP	5
1	A	147	SER	5
1	A	163	PHE	5
2	B	234	THR	5
2	B	260	GLU	5
2	B	300	GLN	5
2	B	301	SER	5
1	A	170	GLU	5
2	B	250	ILE	5
2	B	274	VAL	5
1	A	75	TRP	5
1	A	79	GLN	5
2	B	276	TYR	5
1	A	43	TRP	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	161	ASN	5
2	B	238	SER	5
1	A	25	THR	4
1	A	127	ASP	4
1	A	141	THR	4
2	B	240	ILE	4
2	B	287	LYS	4
1	A	90	LYS	4
1	A	99	ASP	4
1	A	186	LEU	4
1	A	47	TYR	4
1	A	148	GLN	4
2	B	272	GLU	4
2	B	273	HIS	4
1	A	60	ASP	4
1	A	101	ARG	4
2	B	297	GLU	4
1	A	120	CYS	4
1	A	35	VAL	4
1	A	24	LYS	3
1	A	73	GLU	3
1	A	118	GLN	3
2	B	244	LEU	3
2	B	257	ASN	3
1	A	97	ARG	3
1	A	200	CYS	3
2	B	246	ASP	3
2	B	308	ILE	3
1	A	143	ASP	3
2	B	245	LYS	3
2	B	263	GLU	3
1	A	193	HIS	3
2	B	302	THR	3
2	B	304	SER	3
1	A	41	THR	3
2	B	239	HIS	3
2	B	269	TYR	3
1	A	66	THR	2
1	A	77	ILE	2
1	A	85	HIS	2
1	A	177	ARG	2
1	A	37	HIS	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	71	VAL	2
1	A	157	ARG	2
2	B	281	THR	2
2	B	291	ASN	2
1	A	62	LEU	2
1	A	80	ASN	2
1	A	107	GLU	2
2	B	242	ASN	2
2	B	266	ASP	2
2	B	283	LEU	2
2	B	288	ASP	2
1	A	74	PHE	2
1	A	132	CYS	2
1	A	182	PHE	2
2	B	237	VAL	2
1	A	22	THR	2
1	A	154	LEU	2
2	B	251	GLU	2
2	B	292	VAL	2
1	A	100	VAL	2
1	A	175	LEU	2
2	B	299	VAL	2
1	A	197	PHE	1
1	A	114	LYS	1
2	B	235	ASN	1
2	B	285	GLN	1
2	B	307	VAL	1
1	A	153	VAL	1
1	A	145	ASP	1
1	A	95	VAL	1
1	A	109	ASN	1
1	A	169	CYS	1
1	A	68	PHE	1
1	A	29	ASP	1
1	A	56	GLU	1
2	B	254	PHE	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

5 ligands are modelled in this entry.

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths		
					Counts	RMSZ	#Z>2
3	MTN	A	321	1	9,12,16	1.13±0.01	1±0 (11±0%)
3	MTN	A	323	1	9,12,16	1.12±0.01	1±0 (11±0%)
3	MTN	A	322	1	9,12,16	1.12±0.01	1±0 (11±0%)
3	MTN	A	320	1	9,12,16	1.12±0.01	1±0 (11±0%)
4	M7G	A	325	-	30,31,31	0.84±0.01	1±0 (3±0%)

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond angles		
					Counts	RMSZ	#Z>2
3	MTN	A	321	1	11,20,27	1.33±0.01	2±0 (18±0%)
3	MTN	A	323	1	11,20,27	1.32±0.01	2±0 (18±0%)
3	MTN	A	322	1	11,20,27	1.32±0.01	2±0 (18±0%)
3	MTN	A	320	1	11,20,27	1.32±0.01	2±0 (18±0%)

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond angles		
					Counts	RMSZ	#Z>2
4	M7G	A	325	-	47,49,49	1.28±0.02	6±1 (12±1%)

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
3	MTN	A	321	1	-	0±0,0,25,29	0±0,1,1,1
3	MTN	A	323	1	-	0±0,0,25,29	0±0,1,1,1
3	MTN	A	320	1	-	0±0,0,25,29	0±0,1,1,1
4	M7G	A	325	-	-	0±0,16,32,32	0±0,3,3,3
3	MTN	A	322	1	-	0±0,0,25,29	0±0,1,1,1

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
3	A	323	MTN	O1-N1	3.05	1.27	1.43	2	11
3	A	321	MTN	O1-N1	3.04	1.27	1.43	10	11
3	A	320	MTN	O1-N1	3.03	1.27	1.43	10	11
3	A	322	MTN	O1-N1	3.03	1.27	1.43	1	11
4	A	325	M7G	C8-N7	2.53	1.28	1.33	5	11

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
4	A	325	M7G	C8-N7-C5	4.71	101.90	107.78	10	11
4	A	325	M7G	CM7-N7-C5	3.21	130.80	126.80	6	11
4	A	325	M7G	C3'-C2'-C1'	2.73	106.63	101.46	10	11
3	A	321	MTN	C9-C1-N1	2.70	113.14	110.05	11	11
3	A	320	MTN	C9-C1-N1	2.63	113.06	110.05	2	11
3	A	322	MTN	C9-C1-N1	2.62	113.05	110.05	3	11
3	A	323	MTN	C9-C1-N1	2.61	113.05	110.05	11	11
3	A	321	MTN	C8-C1-C2	2.36	110.53	112.77	5	11
3	A	322	MTN	C8-C1-C2	2.33	110.55	112.77	10	11
4	A	325	M7G	C6-C5-N7	2.33	129.25	132.17	9	9
3	A	323	MTN	C8-C1-C2	2.32	110.57	112.77	10	11
3	A	320	MTN	C8-C1-C2	2.32	110.57	112.77	4	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

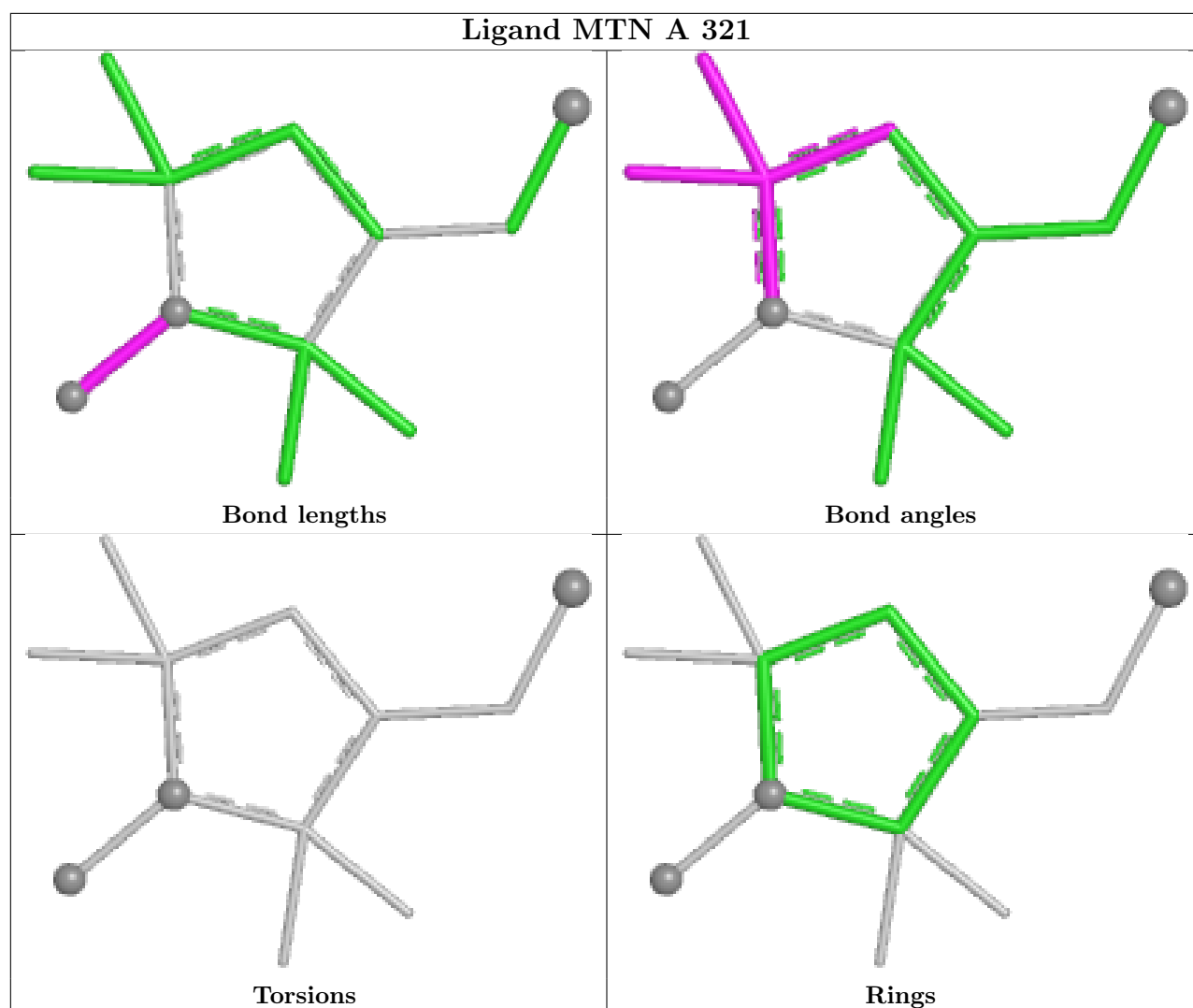
Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
4	A	325	M7G	O2B-PB-O1B	2.21	119.43	110.83	3	11
4	A	325	M7G	N9-C8-N7	2.16	117.73	112.48	3	11
4	A	325	M7G	CM7-N7-C8	2.16	128.07	124.79	9	2

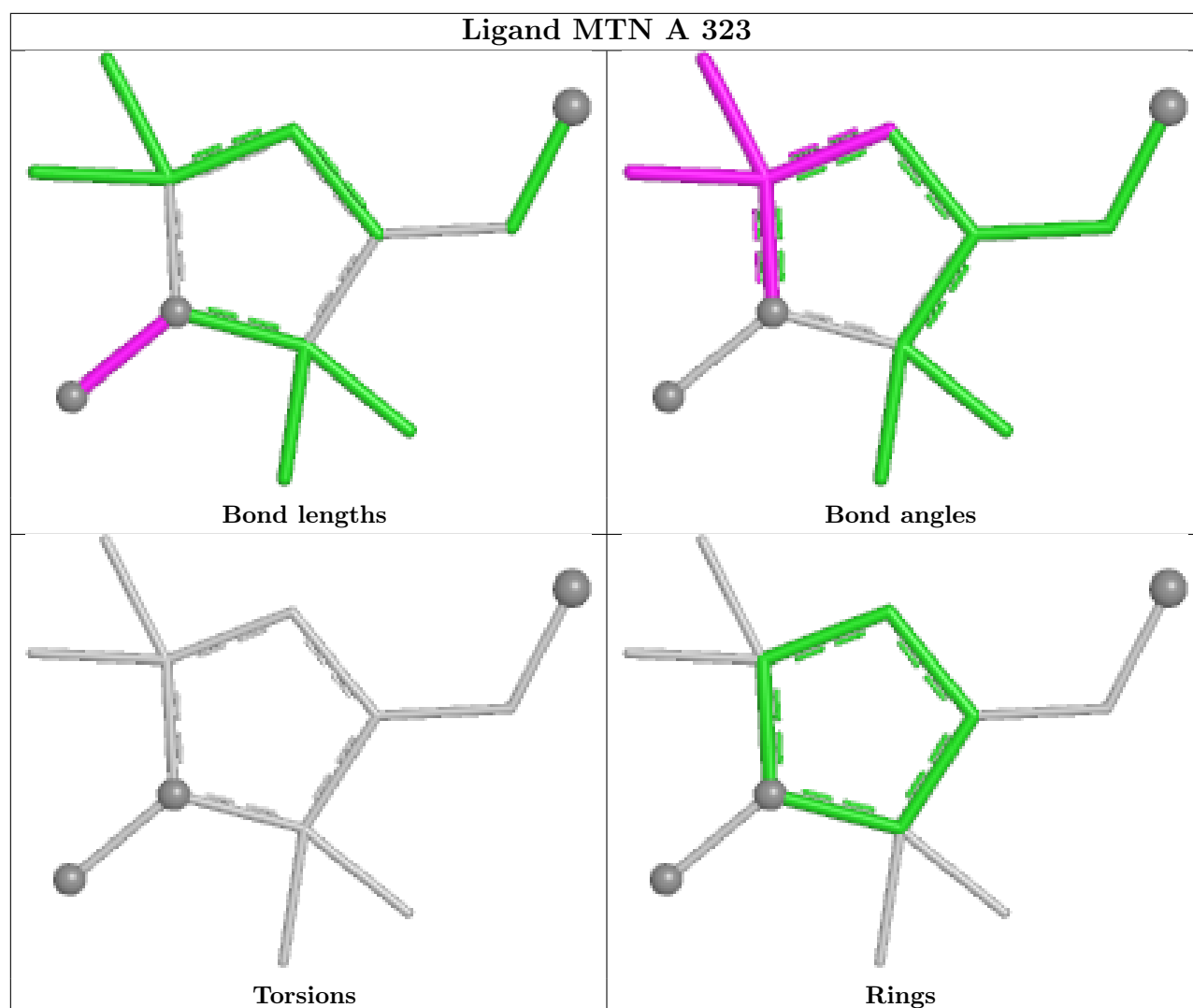
There are no chirality outliers.

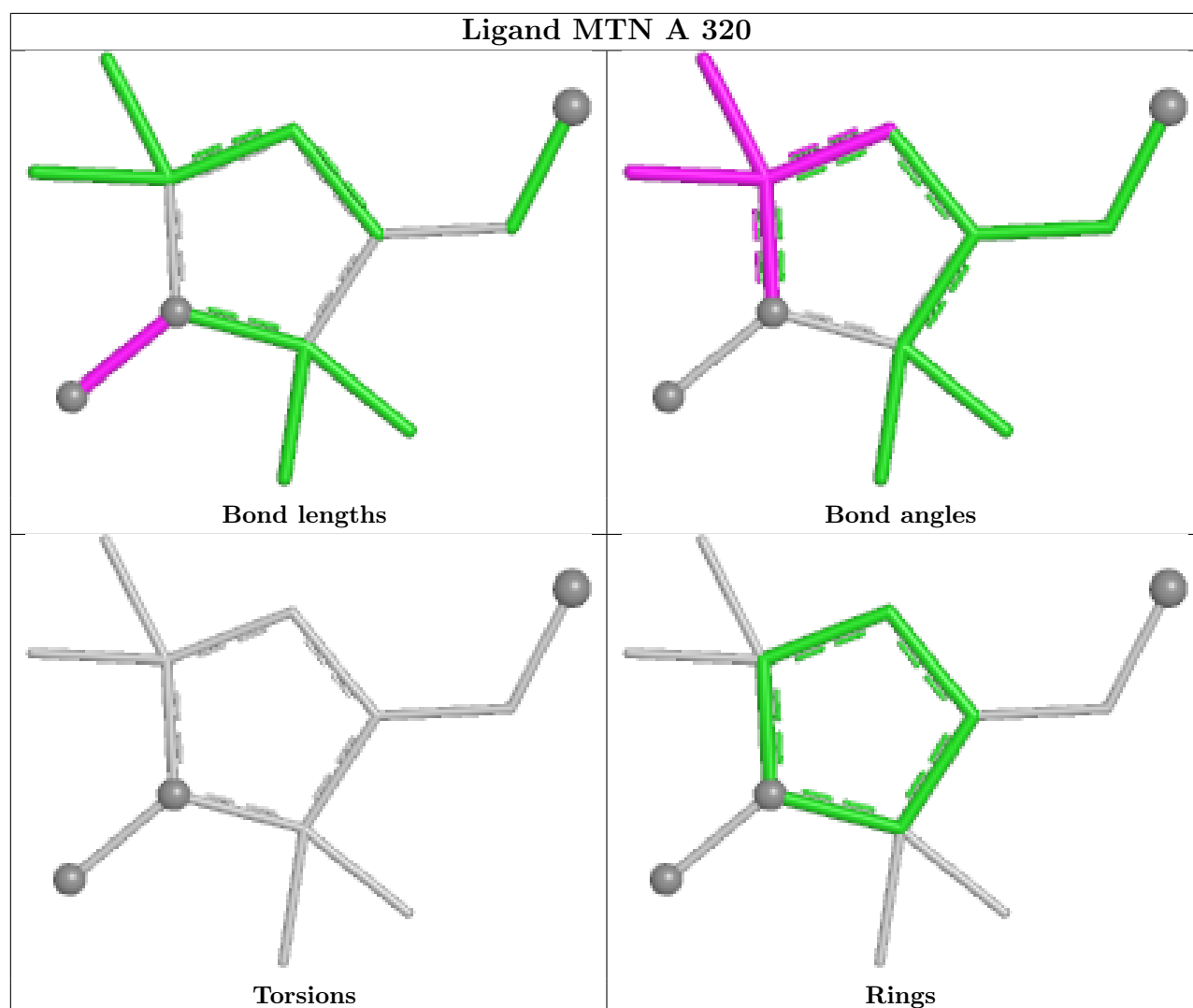
There are no torsion outliers.

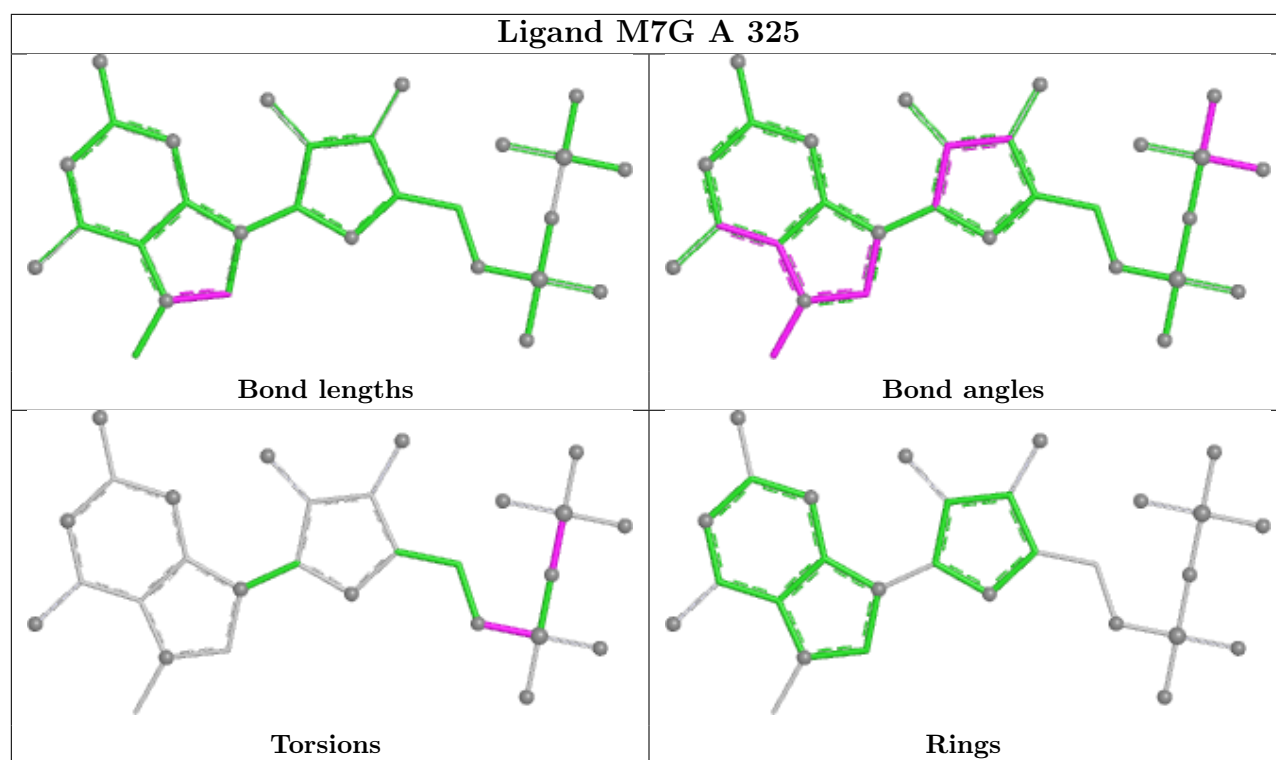
There are no ring outliers.

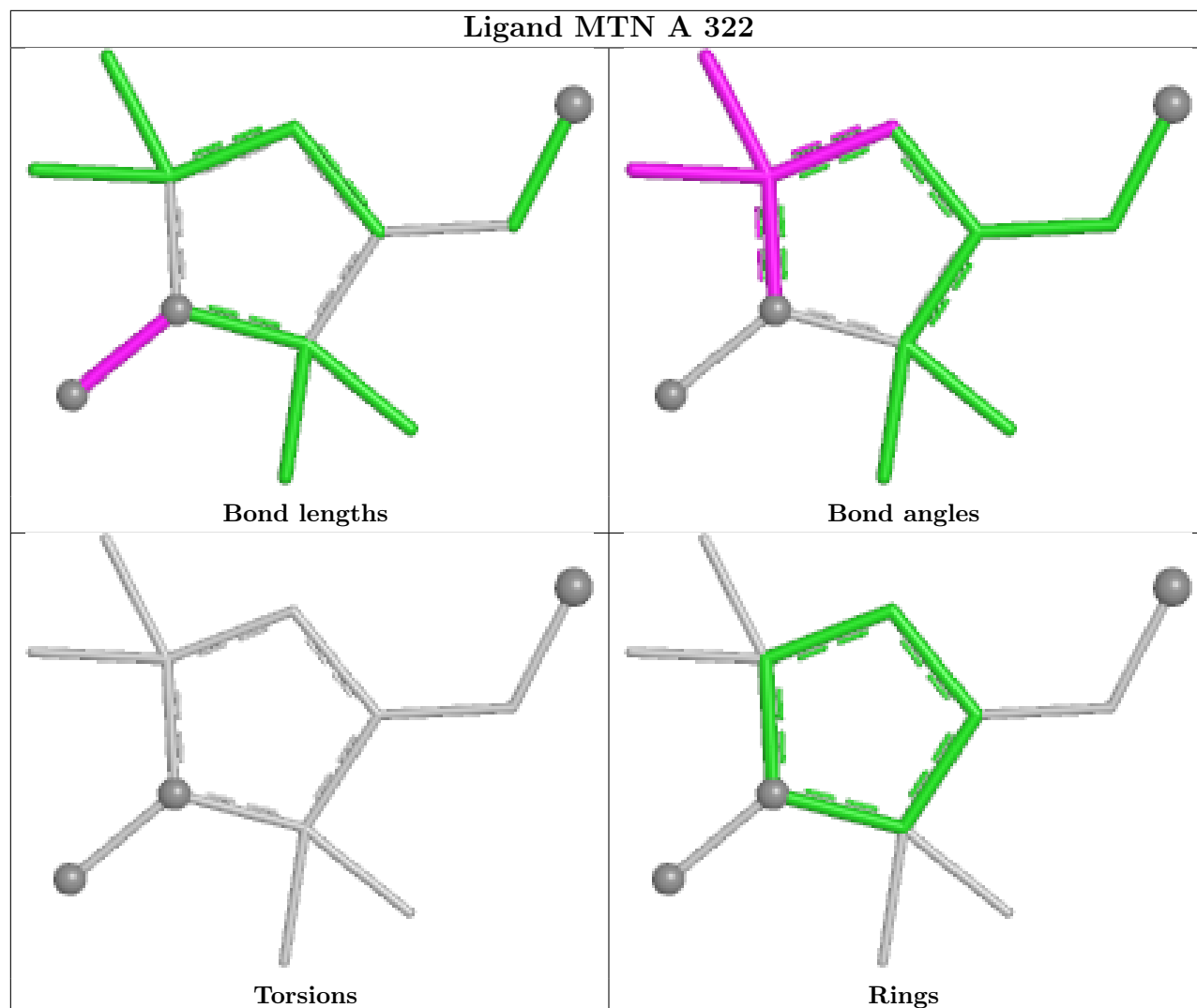
The following is a two-dimensional graphical depiction of Mogul quality analysis of bond lengths, bond angles, torsion angles, and ring geometry for all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the validation Tables will also be included.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











6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided