



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Apr 26, 2016 – 05:12 PM BST

PDB ID : 1TUM  
Title : MUTT PYROPHOSPHOHYDROLASE-METAL-NUCLEOTIDE-METAL  
COMPLEX, NMR, 16 STRUCTURES  
Authors : Lin, J.; Abeygunawardana, C.; Frick, D.N.; Bessman, M.J.; Mildvan, A.S.  
Deposited on : 1996-12-05

This is a Full wwPDB NMR Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.  
We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto:validation@mail.wwpdb.org)  
A user guide is available at  
<http://wwpdb.org/validation/2016/NMRValidationReportHelp>  
with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

---

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

Cyrange : Kirchner and Güntert (2011)  
NmrClust : Kelley et al. (1996)  
MolProbity : 4.02b-467  
Mogul : 1.7.1 (RC1), CSD as537be (2016)  
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)  
RCI : v\_1n\_11\_5\_13\_A (Berjanski et al., 2005)  
PANAV : Wang et al. (2010)  
ShiftChecker : rb-20027457  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : rb-20027457

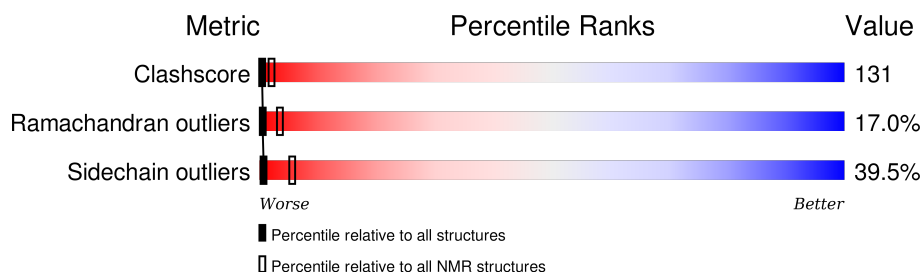
# 1 Overall quality at a glance

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	114402	11133
Ramachandran outliers	111179	9975
Sidechain outliers	111093	9958

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  $\geq 3$ , 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	129	

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 16 models. Model 6 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:3-A:129 (127)	0.35	6

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

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

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

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

### 3 Entry composition

There are 5 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2160 atoms, of which 1066 are hydrogens and 0 are deuteriums.

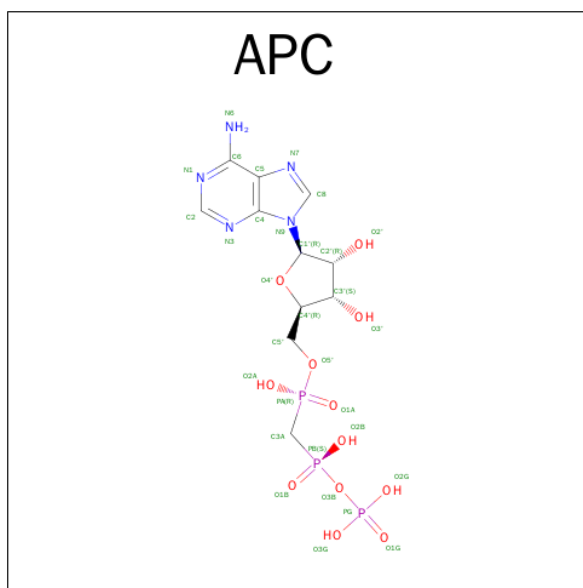
- Molecule 1 is a protein called MUTATOR MUTT PROTEIN.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	129	Total	C	H	N	O	S	0
			2090	679	1035	180	192	4	

- Molecule 2 is MAGNESIUM ION (three-letter code: MG) (formula: Mg).

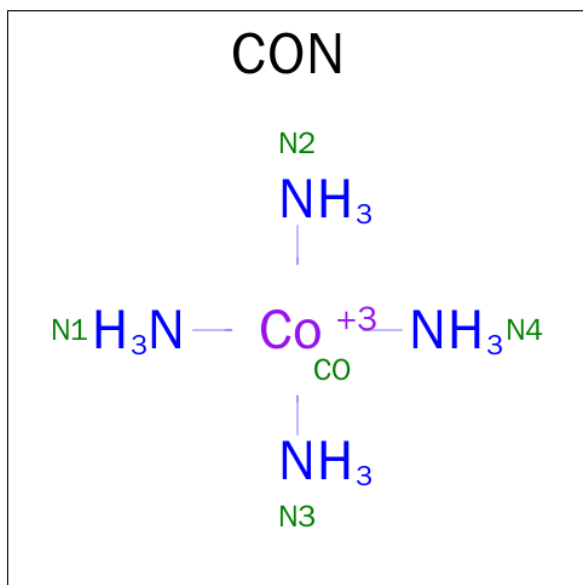
Mol	Chain	Residues	Atoms	
2	A	1	Total	Mg
			1	1

- Molecule 3 is DIPHOSPHOMETHYLPHOSPHONIC ACID ADENOSYL ESTER (three-letter code: APC) (formula:  $\text{C}_{11}\text{H}_{18}\text{N}_5\text{O}_{12}\text{P}_3$ ).



Mol	Chain	Residues	Atoms					
3	A	1	Total	C	H	N	O	P
			46	11	15	5	12	3

- Molecule 4 is COBALT TETRAAMMINE ION (three-letter code: CON) (formula:  $\text{CoH}_{12}\text{N}_4$ ).



Mol	Chain	Residues	Atoms			
			Total	Co	H	N
4	A	1	17	1	12	4

- Molecule 5 is water.

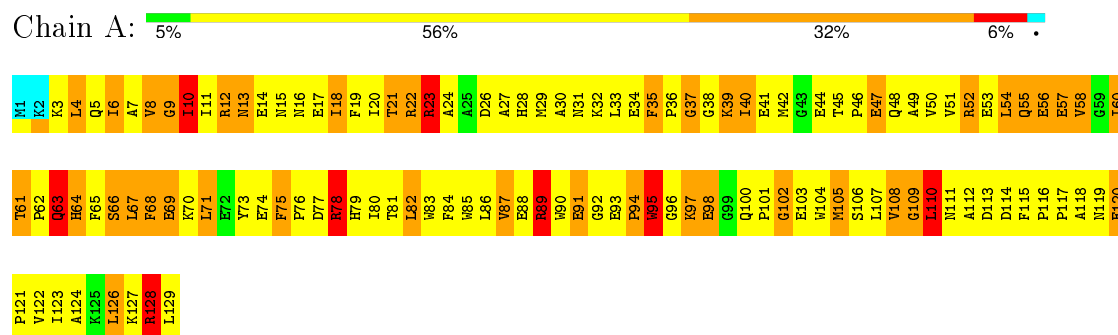
Mol	Chain	Residues	Atoms		
			Total	H	O
5	A	2	6	4	2

## 4 Residue-property plots

### 4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA and DNA 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: MUTATOR MUTT PROTEIN

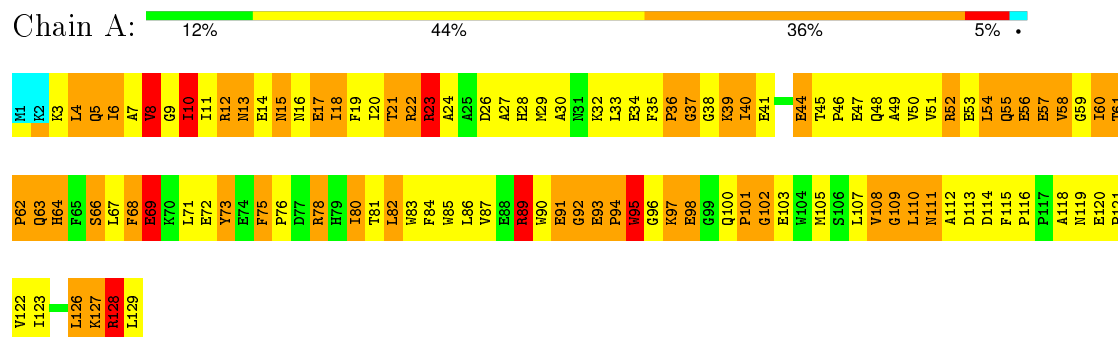


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

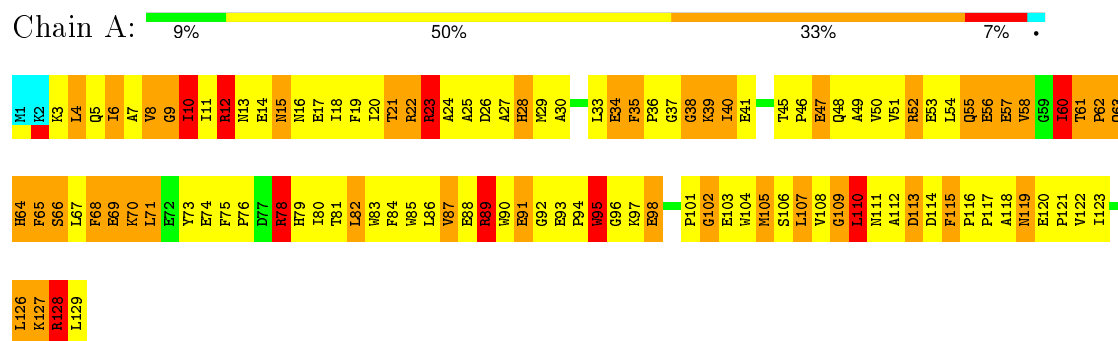
Colouring as in section 4.1 above.

#### 4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: MUTATOR MUTT PROTEIN

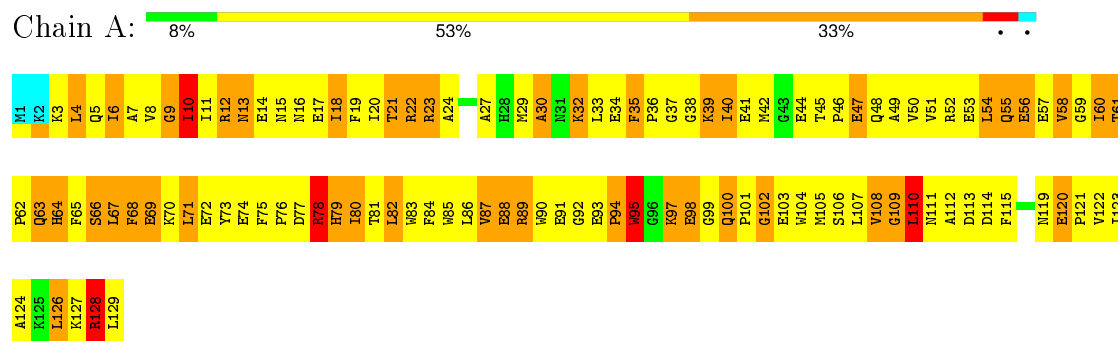






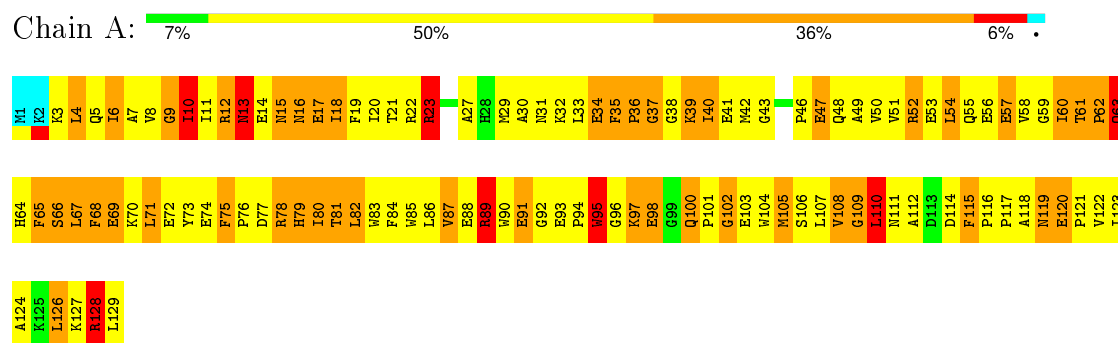
#### 4.2.6 Score per residue for model 6 (medoid)

- Molecule 1: MUTATOR MUTT PROTEIN



#### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: MUTATOR MUTT PROTEIN

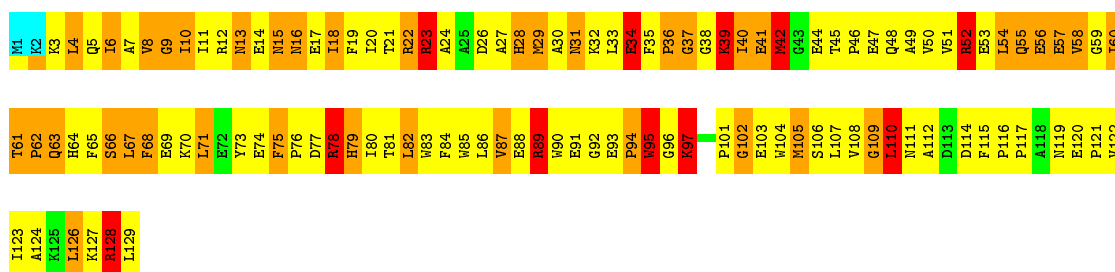


#### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: MUTATOR MUTT PROTEIN

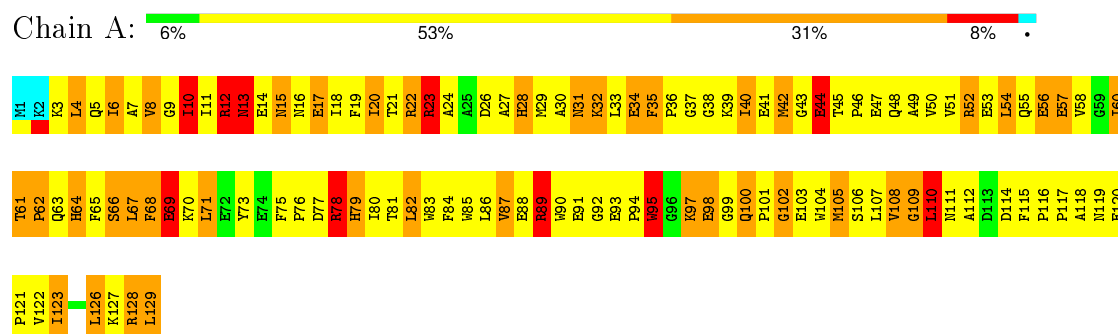






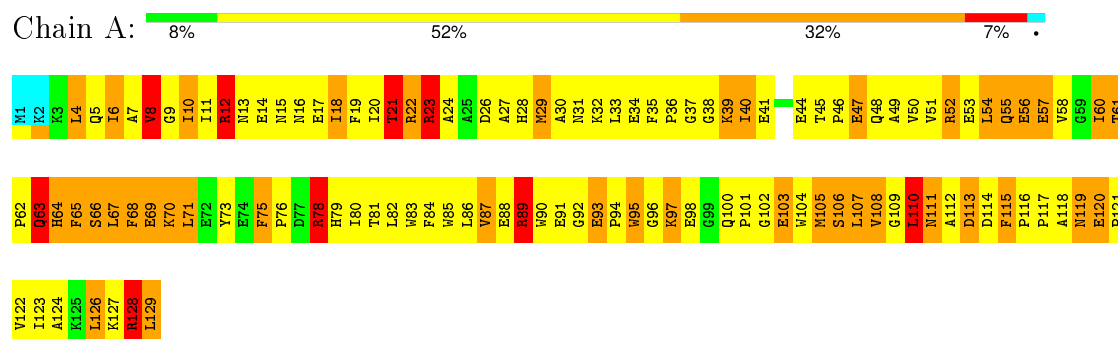
#### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: MUTATOR MUTT PROTEIN



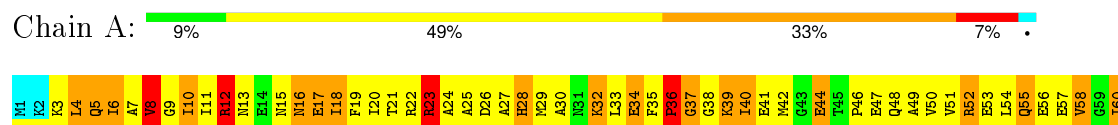
#### 4.2.10 Score per residue for model 10

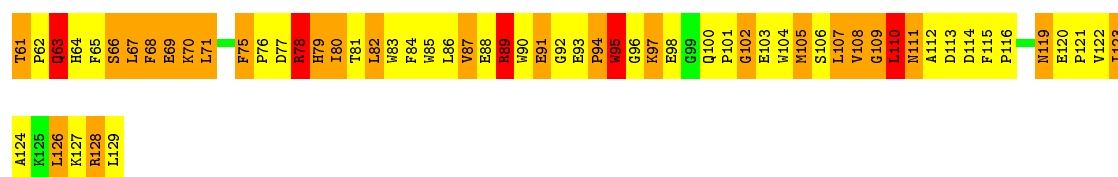
- Molecule 1: MUTATOR MUTT PROTEIN



#### 4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: MUTATOR MUTT PROTEIN

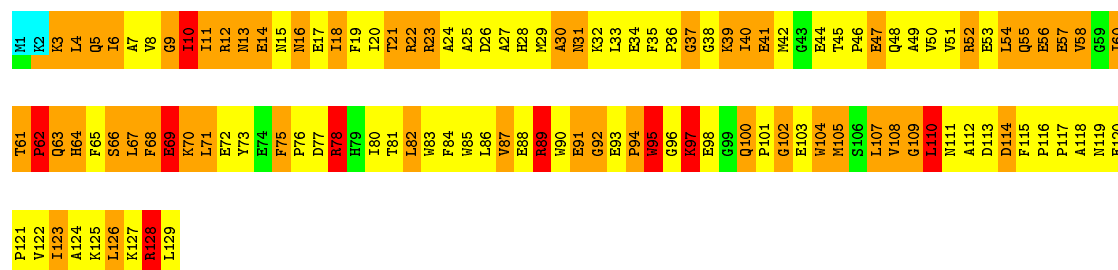




#### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: MUTATOR MUTT PROTEIN

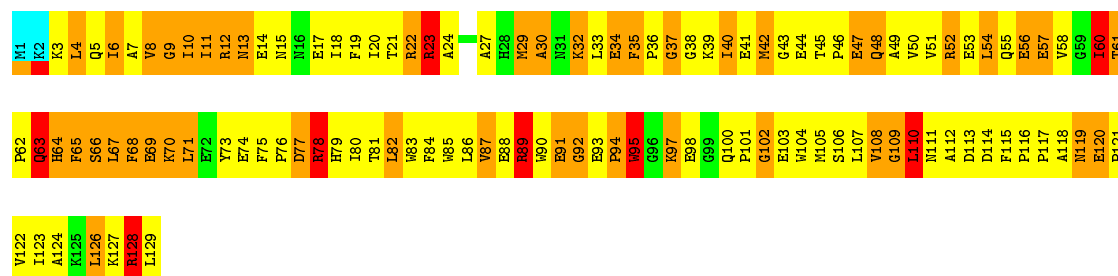
Chain A: 5% 47% 40% 7% •



#### 4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: MUTATOR MUTT PROTEIN

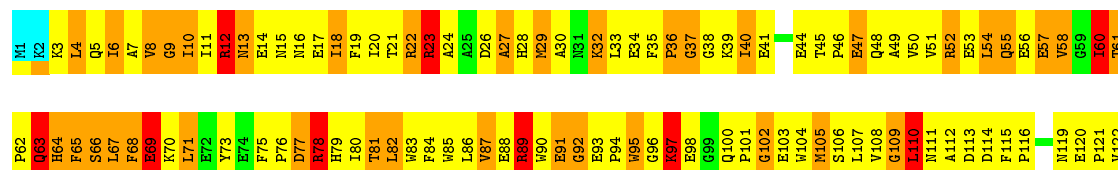
Chain A: 8% 50% 35% 6% •



#### 4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: MUTATOR MUTT PROTEIN

Chain A: 9% 53% 30% 7% •



I123  
A124  
K125  
L126  
K127  
R128  
L129

#### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: MUTATOR MUTT PROTEIN

Chain A:  7% 49% 36% 6% .

M1 R2 K3 L4 Q5 I6 A7 V8 G9 I10 I11 R12 R13 R14 N15 N16 N17 E18 I19 F20 T21 T22 R23 R24 A25 A26 D27 A28 E29 N30 A31 N32 K33 L34 E35 F36 F37 P38 G39 G40 K41 Q42 P43 Q44 T45 P46 E47 Q48 A49 V50 V51 R52 R53 L54 L55 Q56 E57 E58 E59 I60

T61 P62 Q63 R64 S65 S66 I67 F68 E69 R70 L71 I72 E73 Y74 E75 F76 F77 R78 R79 I80 T81 T82 L83 R84 W85 F86 A87 A88 L89 V90 W91 N92 G93 E94 E95 W96 G97 G98 E99 G100 Q101 P102 E103 E104 M105 M106 S107 L108 V109 G110 I111 M112 A113 D114 D115 F116 P117 A118 N119 E120

P121  
V122  
I123  
A124  
K125  
L126  
K127  
R128  
L129

#### 4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: MUTATOR MUTT PROTEIN

Chain A:  11% 48% 33% 6% .

M1 R2 K3 L4 Q5 I6 A7 V8 G9 I10 I11 R12 R13 R14 N15 N16 N17 E18 I19 F20 T21 T22 R23 R24 A25 A26 D27 A28 E29 N30 A31 N32 K33 L34 E35 F36 F37 P38 G39 G40 K41 Q42 P43 Q44 T45 P46 E47 Q48 A49 V50 V51 R52 R53 L54 L55 Q56 E57 E58 E59 I60 P62

Q63 R64 S65 S66 I67 F68 E69 R70 L71 I72 E73 Y74 E75 F76 F77 R78 R79 I80 T81 T82 L83 R84 W85 F86 A87 A88 L89 V90 W91 N92 G93 E94 E95 W96 G97 G98 E99 G100 Q101 P102 E103 E104 M105 M106 S107 L108 V109 G110 I111 M112 A113 D114 D115 F116 P117 A118 N119 E120 V122

I123  
A124  
K125  
L126  
K127  
R128  
L129

## 5 Refinement protocol and experimental data overview

Of the ? calculated structures, 16 were deposited, based on the following criterion: ?.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	3.1

No chemical shift data was provided. No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.

## 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: APC, MG, CON

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

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	6.1±1.1
All	All	0	98

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	78	ARG	Sidechain	16
1	A	128	ARG	Sidechain	15
1	A	12	ARG	Sidechain	15
1	A	23	ARG	Sidechain	15
1	A	52	ARG	Sidechain	14
1	A	89	ARG	Sidechain	13
1	A	22	ARG	Sidechain	10

### 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	1038	1011	1011	274±18
3	A	31	15	14	15±4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
4	A	5	12	0	0±1
All	All	17232	16672	16400	4409

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 131.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:LEU:HD22	1:A:115:PHE:CD2	1.08	1.83	10	3
1:A:54:LEU:HD12	1:A:95:TRP:CD1	1.06	1.85	5	15
1:A:10:ILE:HG22	1:A:18:ILE:HD13	1.05	1.07	14	1
1:A:110:LEU:HD21	1:A:115:PHE:CE1	1.04	1.87	11	9
1:A:60:ILE:HG21	1:A:93:GLU:O	1.03	1.54	16	16
1:A:80:ILE:HG21	3:A:130:APC:C5	1.02	1.84	2	7
1:A:11:ILE:HG22	1:A:87:VAL:HG22	1.02	1.32	14	11
1:A:4:LEU:HD13	1:A:4:LEU:O	1.01	1.55	15	9
1:A:10:ILE:HG22	1:A:18:ILE:CD1	1.00	1.87	14	1
1:A:115:PHE:CE2	1:A:126:LEU:HD23	0.98	1.94	10	2
1:A:33:LEU:HD13	1:A:115:PHE:CE1	0.98	1.94	14	5
1:A:11:ILE:HG22	1:A:87:VAL:CG2	0.98	1.89	15	14
1:A:4:LEU:CD1	1:A:80:ILE:HG23	0.98	1.88	16	4
1:A:7:ALA:HB1	1:A:50:VAL:HG23	0.96	1.36	6	16
1:A:80:ILE:HG21	3:A:130:APC:C6	0.96	1.88	15	15
1:A:107:LEU:HD22	1:A:107:LEU:O	0.95	1.62	10	2
1:A:110:LEU:HD13	1:A:115:PHE:CE2	0.95	1.97	10	3
1:A:4:LEU:O	1:A:4:LEU:HD13	0.94	1.62	10	2
1:A:4:LEU:HD22	1:A:5:GLN:N	0.94	1.75	1	9
1:A:110:LEU:HD21	1:A:115:PHE:CD1	0.93	1.99	11	9
1:A:54:LEU:HD12	1:A:95:TRP:NE1	0.92	1.80	11	13
1:A:12:ARG:HG2	1:A:18:ILE:HG22	0.92	1.42	15	7
1:A:63:GLN:NE2	1:A:87:VAL:HG11	0.91	1.80	5	3
1:A:12:ARG:NH1	1:A:129:LEU:HD21	0.90	1.82	10	1
1:A:79:HIS:C	1:A:80:ILE:HD13	0.88	1.89	13	1
1:A:79:HIS:C	1:A:80:ILE:HD12	0.88	1.88	5	10
1:A:82:LEU:HD23	1:A:84:PHE:CE1	0.88	2.03	15	2
1:A:40:ILE:HD13	1:A:40:ILE:O	0.88	1.69	15	5
1:A:71:LEU:HD21	1:A:119:ASN:OD1	0.87	1.69	7	6
1:A:7:ALA:HB2	1:A:40:ILE:HB	0.87	1.46	16	16
1:A:8:VAL:HG23	1:A:36:PRO:O	0.86	1.68	4	16
1:A:107:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HG	0.86	1.47	6	7
1:A:33:LEU:HD12	1:A:114:ASP:HB3	0.86	1.47	14	9

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:4:LEU:CD1	1:A:80:ILE:HD12	0.85	2.02	13	1
1:A:4:LEU:HD13	1:A:80:ILE:HG23	0.85	1.45	16	2
1:A:110:LEU:HD22	1:A:115:PHE:CE2	0.84	2.07	8	2
1:A:126:LEU:HA	1:A:129:LEU:HD13	0.84	1.46	10	3
1:A:60:ILE:HD13	1:A:90:TRP:HB2	0.84	1.49	13	7
1:A:54:LEU:HD12	1:A:95:TRP:CG	0.84	2.08	10	11
1:A:4:LEU:HD22	1:A:4:LEU:C	0.84	1.92	15	5
1:A:50:VAL:O	1:A:54:LEU:HD23	0.84	1.72	4	16
1:A:54:LEU:HD12	1:A:95:TRP:CE2	0.84	2.08	11	11
1:A:123:ILE:HA	1:A:126:LEU:HD22	0.83	1.50	3	15
1:A:60:ILE:HD11	1:A:95:TRP:CE2	0.82	2.09	8	7
1:A:4:LEU:HD12	1:A:80:ILE:HD12	0.82	1.49	13	2
1:A:11:ILE:HG22	1:A:87:VAL:CG1	0.82	2.04	8	12
1:A:68:PHE:CD2	1:A:86:LEU:HD23	0.81	2.09	8	14
1:A:12:ARG:HG2	1:A:18:ILE:HG23	0.81	1.49	16	2
1:A:4:LEU:C	1:A:4:LEU:HD22	0.81	1.94	16	6
1:A:33:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HD21	0.80	1.51	10	2
1:A:107:LEU:HD13	1:A:108:VAL:N	0.80	1.91	16	2
1:A:23:ARG:HD2	1:A:27:ALA:HB3	0.80	1.50	13	11
1:A:12:ARG:HB3	1:A:18:ILE:HG23	0.80	1.52	2	5
1:A:33:LEU:CD1	1:A:110:LEU:HD21	0.79	2.08	10	2
1:A:11:ILE:HG22	1:A:87:VAL:HG13	0.79	1.50	1	8
1:A:119:ASN:O	1:A:123:ILE:HD12	0.79	1.78	5	7
1:A:8:VAL:HG11	1:A:82:LEU:CD2	0.79	2.08	4	9
1:A:54:LEU:HD12	1:A:95:TRP:CD2	0.78	2.14	10	9
1:A:110:LEU:HD13	1:A:115:PHE:CZ	0.78	2.13	10	2
1:A:12:ARG:NH1	1:A:110:LEU:HD13	0.78	1.94	9	1
1:A:12:ARG:CZ	1:A:129:LEU:HD21	0.77	2.09	10	2
1:A:107:LEU:HD21	1:A:110:LEU:HA	0.77	1.56	12	8
1:A:84:PHE:CD2	1:A:122:VAL:HG11	0.77	2.14	11	12
1:A:7:ALA:HB1	1:A:50:VAL:CG2	0.77	2.09	8	14
1:A:20:ILE:HD11	1:A:34:GLU:O	0.77	1.80	9	4
1:A:107:LEU:HD12	1:A:108:VAL:N	0.77	1.95	7	1
1:A:4:LEU:C	1:A:4:LEU:HD13	0.76	2.00	12	3
1:A:60:ILE:HD12	1:A:61:THR:N	0.76	1.95	8	7
1:A:84:PHE:CG	1:A:122:VAL:HG11	0.76	2.16	8	6
1:A:71:LEU:O	1:A:71:LEU:HD12	0.76	1.81	2	7
1:A:82:LEU:HD23	1:A:84:PHE:CZ	0.76	2.16	15	1
1:A:75:PHE:CB	1:A:76:PRO:CD	0.75	2.64	2	3
1:A:67:LEU:HD13	1:A:69:GLU:N	0.75	1.96	1	3
1:A:84:PHE:CE2	1:A:122:VAL:HG11	0.74	2.18	13	13

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:ILE:O	1:A:40:ILE:HD13	0.74	1.83	12	7
1:A:54:LEU:HD13	1:A:95:TRP:O	0.74	1.83	4	8
1:A:40:ILE:HG12	1:A:49:ALA:HB1	0.74	1.58	5	15
1:A:10:ILE:CG2	1:A:18:ILE:HD13	0.74	2.03	14	1
1:A:80:ILE:HD12	1:A:80:ILE:N	0.73	1.98	9	6
1:A:107:LEU:HD11	1:A:110:LEU:CA	0.73	2.12	10	2
1:A:126:LEU:HD13	1:A:126:LEU:N	0.73	1.98	14	6
1:A:4:LEU:HD11	3:A:130:APC:C8	0.73	2.13	16	7
1:A:107:LEU:HD23	1:A:108:VAL:N	0.73	1.99	15	6
1:A:10:ILE:HD12	1:A:12:ARG:NH2	0.72	1.99	9	1
1:A:95:TRP:O	1:A:95:TRP:CD1	0.72	2.43	3	4
1:A:12:ARG:HB3	1:A:18:ILE:HG22	0.72	1.60	14	1
1:A:126:LEU:N	1:A:126:LEU:HD13	0.72	1.99	6	9
1:A:107:LEU:C	1:A:107:LEU:HD13	0.72	2.06	10	2
1:A:107:LEU:HD21	1:A:110:LEU:CA	0.72	2.15	4	6
1:A:115:PHE:HE2	1:A:126:LEU:HD23	0.71	1.44	10	1
1:A:4:LEU:HD22	3:A:130:APC:O4'	0.71	1.85	9	4
1:A:8:VAL:HG22	1:A:9:GLY:N	0.71	1.99	10	10
1:A:84:PHE:CZ	1:A:122:VAL:HG11	0.71	2.20	14	10
1:A:7:ALA:CB	1:A:50:VAL:HG23	0.71	2.15	8	10
1:A:63:GLN:OE1	1:A:87:VAL:HG11	0.70	1.86	9	1
1:A:4:LEU:HD13	1:A:4:LEU:C	0.70	2.05	1	5
1:A:71:LEU:HD12	1:A:71:LEU:O	0.70	1.85	6	7
1:A:6:ILE:HG22	1:A:8:VAL:HG12	0.70	1.61	15	9
1:A:12:ARG:NH1	1:A:129:LEU:HD23	0.70	2.02	14	2
1:A:16:ASN:ND2	1:A:129:LEU:HD23	0.70	2.01	10	2
1:A:21:THR:HG23	1:A:21:THR:O	0.69	1.87	3	5
1:A:107:LEU:HD23	1:A:107:LEU:C	0.69	2.08	3	4
1:A:90:TRP:CZ2	1:A:104:TRP:CD1	0.69	2.80	13	10
1:A:60:ILE:HD11	1:A:63:GLN:HB3	0.69	1.63	13	2
1:A:29:MET:O	1:A:30:ALA:HB2	0.69	1.86	2	7
1:A:115:PHE:CG	1:A:123:ILE:HD11	0.69	2.22	4	2
1:A:110:LEU:HD21	1:A:115:PHE:CZ	0.69	2.21	14	4
1:A:5:GLN:HB2	1:A:40:ILE:HG23	0.69	1.65	5	6
1:A:11:ILE:HD12	1:A:94:PRO:HB3	0.68	1.63	8	4
1:A:71:LEU:HD11	1:A:82:LEU:HB2	0.68	1.63	15	5
1:A:58:VAL:HG21	1:A:95:TRP:HA	0.68	1.65	14	9
1:A:120:GLU:N	1:A:121:PRO:CD	0.68	2.57	2	16
1:A:107:LEU:HD22	1:A:107:LEU:C	0.68	2.09	16	1
1:A:63:GLN:HB2	1:A:95:TRP:CE2	0.68	2.23	3	1
1:A:35:PHE:CE2	1:A:115:PHE:CE1	0.68	2.82	10	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:LEU:HD13	3:A:130:APC:HN61	0.68	1.49	6	4
1:A:111:ASN:O	1:A:112:ALA:HB3	0.68	1.89	14	13
1:A:84:PHE:CE1	1:A:122:VAL:HG11	0.67	2.24	6	8
1:A:68:PHE:CZ	1:A:126:LEU:HD11	0.67	2.25	13	7
1:A:40:ILE:CG1	1:A:49:ALA:HB1	0.67	2.20	5	6
1:A:7:ALA:HB2	1:A:40:ILE:CB	0.67	2.20	16	9
1:A:29:MET:O	1:A:30:ALA:CB	0.67	2.43	15	10
1:A:115:PHE:HB3	1:A:123:ILE:HD13	0.67	1.65	10	1
1:A:29:MET:O	1:A:30:ALA:HB3	0.67	1.90	14	4
1:A:20:ILE:CD1	1:A:115:PHE:CE2	0.67	2.78	2	1
1:A:91:GLU:O	1:A:93:GLU:N	0.67	2.28	1	14
1:A:107:LEU:C	1:A:107:LEU:HD23	0.67	2.10	6	2
1:A:110:LEU:HD23	1:A:111:ASN:H	0.66	1.51	10	3
1:A:84:PHE:CD1	1:A:122:VAL:HG21	0.66	2.25	1	7
1:A:20:ILE:CD1	1:A:115:PHE:CZ	0.66	2.78	13	3
1:A:60:ILE:HG13	1:A:95:TRP:CD2	0.66	2.25	9	15
1:A:20:ILE:HD12	1:A:115:PHE:CZ	0.66	2.25	6	1
1:A:33:LEU:O	1:A:115:PHE:CD1	0.66	2.49	16	3
1:A:11:ILE:HD11	1:A:19:PHE:CB	0.66	2.20	10	8
1:A:11:ILE:CG2	1:A:87:VAL:HG22	0.66	2.19	4	9
1:A:26:ASP:O	1:A:27:ALA:HB3	0.66	1.90	5	2
1:A:12:ARG:CG	1:A:18:ILE:HG23	0.66	2.21	16	1
1:A:95:TRP:CD1	1:A:95:TRP:O	0.66	2.49	14	2
1:A:19:PHE:CZ	1:A:102:GLY:O	0.66	2.49	2	15
1:A:90:TRP:CH2	1:A:104:TRP:CD1	0.66	2.84	16	13
1:A:33:LEU:CD1	1:A:115:PHE:CE1	0.66	2.77	14	5
1:A:45:THR:HG22	1:A:47:GLU:H	0.65	1.50	12	7
1:A:4:LEU:CG	3:A:130:APC:H5'1	0.65	2.22	12	3
1:A:4:LEU:CD2	3:A:130:APC:O4'	0.65	2.44	2	4
1:A:120:GLU:N	1:A:121:PRO:HD2	0.65	2.05	8	16
1:A:4:LEU:HD12	1:A:80:ILE:HG13	0.65	1.69	15	2
1:A:4:LEU:HD21	1:A:39:LYS:CD	0.65	2.22	12	1
1:A:35:PHE:CZ	1:A:119:ASN:ND2	0.65	2.65	6	3
1:A:20:ILE:HD11	1:A:34:GLU:C	0.65	2.12	10	12
1:A:19:PHE:CZ	1:A:94:PRO:HG2	0.65	2.27	3	12
1:A:35:PHE:CZ	1:A:115:PHE:CD2	0.65	2.84	11	3
1:A:71:LEU:HD12	1:A:71:LEU:C	0.65	2.13	1	6
1:A:107:LEU:O	1:A:108:VAL:CB	0.65	2.44	13	8
1:A:107:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HA	0.65	1.69	10	3
1:A:13:ASN:CB	1:A:90:TRP:CH2	0.65	2.80	13	5
1:A:12:ARG:CB	1:A:18:ILE:HG22	0.65	2.22	14	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:ILE:CG1	1:A:95:TRP:CD2	0.65	2.80	12	13
1:A:8:VAL:HG11	1:A:82:LEU:HD21	0.65	1.68	4	5
1:A:49:ALA:O	1:A:53:GLU:CG	0.64	2.45	2	16
1:A:9:GLY:HA2	1:A:85:TRP:N	0.64	2.06	6	16
1:A:33:LEU:HB3	1:A:115:PHE:CE1	0.64	2.28	11	10
1:A:115:PHE:CG	1:A:123:ILE:CG1	0.64	2.79	16	1
1:A:110:LEU:CD2	1:A:115:PHE:CD1	0.64	2.81	15	8
1:A:19:PHE:CD1	1:A:94:PRO:CG	0.64	2.80	4	12
1:A:60:ILE:CD1	1:A:63:GLN:OE1	0.64	2.46	3	1
1:A:115:PHE:CD2	1:A:123:ILE:HD11	0.64	2.27	4	1
1:A:71:LEU:C	1:A:71:LEU:HD12	0.64	2.11	15	10
1:A:54:LEU:CG	1:A:95:TRP:CE3	0.64	2.81	3	1
1:A:54:LEU:CD1	1:A:95:TRP:CD1	0.64	2.79	4	6
1:A:35:PHE:CE2	1:A:119:ASN:ND2	0.63	2.66	16	1
1:A:4:LEU:HD11	1:A:80:ILE:HG23	0.63	1.68	13	1
1:A:107:LEU:HD11	1:A:110:LEU:N	0.63	2.08	10	2
1:A:11:ILE:HD11	1:A:19:PHE:HB3	0.63	1.69	1	8
1:A:63:GLN:O	1:A:64:HIS:C	0.63	2.36	3	6
1:A:22:ARG:HD3	1:A:33:LEU:HD21	0.63	1.68	1	7
1:A:54:LEU:HB3	1:A:95:TRP:CE3	0.63	2.27	3	1
1:A:18:ILE:HD12	1:A:105:MET:HB3	0.63	1.68	8	1
1:A:110:LEU:CD1	1:A:115:PHE:CE2	0.63	2.81	10	2
1:A:112:ALA:HB2	1:A:123:ILE:CG2	0.63	2.23	14	11
1:A:9:GLY:CA	1:A:85:TRP:N	0.63	2.61	15	16
1:A:110:LEU:CD2	1:A:115:PHE:CE2	0.63	2.82	8	2
1:A:84:PHE:CD1	1:A:122:VAL:HG11	0.63	2.28	8	3
1:A:75:PHE:CG	1:A:76:PRO:HD2	0.62	2.29	3	2
1:A:80:ILE:N	1:A:80:ILE:HD13	0.62	2.06	13	3
3:A:130:APC:O2A	4:A:131:CON:N3	0.62	2.31	2	7
1:A:47:GLU:O	1:A:51:VAL:HG12	0.62	1.94	8	13
1:A:13:ASN:ND2	1:A:90:TRP:CH2	0.62	2.68	9	3
1:A:67:LEU:O	1:A:68:PHE:HB3	0.62	1.93	3	16
1:A:33:LEU:O	1:A:115:PHE:CD2	0.62	2.53	15	8
1:A:107:LEU:HD21	1:A:110:LEU:N	0.62	2.09	4	5
1:A:110:LEU:CD2	1:A:115:PHE:CE1	0.62	2.80	4	5
1:A:50:VAL:HG22	1:A:54:LEU:CD2	0.62	2.25	9	4
1:A:60:ILE:CG1	1:A:95:TRP:CG	0.62	2.83	16	14
1:A:4:LEU:CD2	1:A:4:LEU:C	0.62	2.68	16	5
1:A:82:LEU:O	1:A:84:PHE:CD1	0.62	2.53	16	8
1:A:80:ILE:CD1	1:A:80:ILE:N	0.62	2.63	11	10
1:A:33:LEU:O	1:A:115:PHE:CE1	0.62	2.53	5	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:ARG:HD2	1:A:33:LEU:HD21	0.62	1.71	9	3
1:A:35:PHE:CE1	1:A:115:PHE:CE2	0.61	2.88	15	4
1:A:107:LEU:O	1:A:108:VAL:HB	0.61	1.95	2	11
1:A:71:LEU:HD11	1:A:82:LEU:CB	0.61	2.25	15	4
1:A:75:PHE:HB3	1:A:76:PRO:HD3	0.61	1.69	2	1
1:A:10:ILE:O	1:A:86:LEU:HD13	0.61	1.95	10	5
1:A:4:LEU:HG	3:A:130:APC:O4'	0.61	1.95	6	12
1:A:4:LEU:HD23	1:A:39:LYS:CD	0.61	2.25	16	3
1:A:68:PHE:CZ	1:A:126:LEU:CD1	0.61	2.84	4	7
1:A:36:PRO:CB	1:A:97:LYS:HA	0.61	2.25	9	5
1:A:19:PHE:CD2	1:A:94:PRO:HB2	0.61	2.30	3	1
1:A:89:ARG:CG	1:A:89:ARG:O	0.61	2.49	16	11
1:A:4:LEU:HD21	3:A:130:APC:H5'2	0.61	1.72	14	1
1:A:110:LEU:CD2	1:A:115:PHE:CD2	0.61	2.80	8	2
1:A:119:ASN:C	1:A:123:ILE:HD12	0.61	2.16	5	3
1:A:68:PHE:HD2	1:A:86:LEU:HD23	0.61	1.55	3	2
1:A:63:GLN:O	1:A:65:PHE:N	0.61	2.33	3	2
1:A:19:PHE:CE1	1:A:102:GLY:O	0.61	2.53	4	11
1:A:90:TRP:C	1:A:90:TRP:CD1	0.61	2.74	7	15
1:A:19:PHE:CE1	1:A:94:PRO:CG	0.61	2.84	16	5
1:A:112:ALA:CB	1:A:123:ILE:CG2	0.61	2.79	12	12
1:A:20:ILE:HG21	1:A:33:LEU:HD22	0.61	1.72	3	6
1:A:107:LEU:HD13	1:A:110:LEU:HA	0.61	1.72	7	1
1:A:107:LEU:CD2	1:A:108:VAL:N	0.61	2.63	15	2
1:A:10:ILE:CG1	1:A:86:LEU:HD11	0.61	2.26	16	7
1:A:46:PRO:O	1:A:50:VAL:HG12	0.60	1.94	3	16
1:A:22:ARG:CD	1:A:33:LEU:HD21	0.60	2.26	9	5
1:A:35:PHE:N	1:A:35:PHE:CD1	0.60	2.67	16	1
1:A:126:LEU:N	1:A:126:LEU:CD1	0.60	2.65	15	10
1:A:12:ARG:NH1	1:A:129:LEU:CD2	0.60	2.65	4	3
1:A:6:ILE:CD1	3:A:130:APC:N7	0.60	2.65	1	5
1:A:107:LEU:C	1:A:107:LEU:CD2	0.60	2.70	15	5
1:A:8:VAL:HG11	1:A:82:LEU:HD23	0.60	1.74	9	4
1:A:126:LEU:CD1	1:A:126:LEU:N	0.60	2.64	8	4
1:A:38:GLY:N	1:A:98:GLU:CG	0.60	2.64	7	4
1:A:67:LEU:HD23	1:A:85:TRP:CE2	0.60	2.31	1	3
1:A:80:ILE:N	1:A:80:ILE:CD1	0.60	2.65	1	3
1:A:32:LYS:O	1:A:33:LEU:HD23	0.60	1.97	6	6
1:A:54:LEU:HG	1:A:95:TRP:CZ3	0.60	2.32	3	1
1:A:22:ARG:O	1:A:23:ARG:C	0.60	2.39	4	16
1:A:67:LEU:O	1:A:84:PHE:O	0.60	2.18	5	16

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:63:GLN:O	1:A:87:VAL:HB	0.60	1.96	9	13
1:A:62:PRO:O	1:A:63:GLN:CB	0.60	2.49	14	10
1:A:54:LEU:O	1:A:95:TRP:CE3	0.60	2.55	13	2
1:A:23:ARG:HB3	1:A:27:ALA:HB2	0.60	1.72	6	1
1:A:62:PRO:O	1:A:63:GLN:CG	0.60	2.50	9	8
1:A:115:PHE:CG	1:A:123:ILE:HG13	0.60	2.32	16	1
1:A:68:PHE:CD1	1:A:69:GLU:N	0.60	2.70	7	2
1:A:80:ILE:CG2	1:A:81:THR:N	0.60	2.65	8	9
1:A:13:ASN:OD1	1:A:90:TRP:CH2	0.60	2.54	7	2
1:A:110:LEU:HD22	1:A:115:PHE:HD2	0.60	1.57	5	2
1:A:4:LEU:HD12	1:A:80:ILE:HG23	0.60	1.73	12	2
1:A:89:ARG:CD	1:A:89:ARG:O	0.60	2.50	16	11
1:A:40:ILE:HD13	1:A:40:ILE:C	0.60	2.15	15	3
1:A:89:ARG:O	1:A:89:ARG:CG	0.60	2.50	13	5
1:A:61:THR:CB	1:A:62:PRO:CD	0.59	2.80	6	16
1:A:100:GLN:CB	1:A:101:PRO:CD	0.59	2.80	4	2
1:A:107:LEU:C	1:A:107:LEU:HD22	0.59	2.18	10	1
1:A:112:ALA:CB	1:A:127:LYS:CD	0.59	2.79	9	8
1:A:4:LEU:O	1:A:4:LEU:CD1	0.59	2.45	15	4
1:A:63:GLN:HE22	1:A:87:VAL:HG11	0.59	1.52	5	1
1:A:54:LEU:HB3	1:A:95:TRP:CZ2	0.59	2.32	13	7
1:A:28:HIS:CG	1:A:28:HIS:O	0.59	2.55	16	1
1:A:90:TRP:CZ2	1:A:104:TRP:NE1	0.59	2.71	13	6
1:A:8:VAL:HG21	1:A:35:PHE:CB	0.59	2.28	16	2
1:A:115:PHE:CG	1:A:123:ILE:HG12	0.59	2.32	5	5
1:A:68:PHE:O	1:A:69:GLU:CB	0.59	2.51	16	12
1:A:60:ILE:HG12	1:A:95:TRP:CG	0.59	2.33	10	10
1:A:60:ILE:CD1	1:A:61:THR:N	0.59	2.66	8	2
1:A:12:ARG:NH1	1:A:129:LEU:HD22	0.59	2.12	9	1
1:A:35:PHE:CE2	1:A:123:ILE:HD11	0.59	2.32	11	1
1:A:40:ILE:HG21	1:A:83:TRP:CD1	0.59	2.31	10	12
1:A:60:ILE:HG13	1:A:95:TRP:CG	0.59	2.33	8	4
1:A:80:ILE:HG21	3:A:130:APC:N6	0.59	2.12	15	2
1:A:6:ILE:HD11	3:A:130:APC:H8	0.58	1.75	10	8
1:A:22:ARG:O	1:A:24:ALA:N	0.58	2.36	9	3
1:A:87:VAL:HG23	1:A:88:GLU:N	0.58	2.13	10	10
1:A:68:PHE:CE2	1:A:69:GLU:O	0.58	2.57	13	7
1:A:51:VAL:CG1	1:A:52:ARG:N	0.58	2.66	2	16
1:A:39:LYS:CB	3:A:130:APC:O2B	0.58	2.50	6	4
1:A:19:PHE:CE1	1:A:94:PRO:HG3	0.58	2.33	16	3
1:A:34:GLU:O	1:A:115:PHE:CE1	0.58	2.57	16	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:TRP:CD1	1:A:90:TRP:C	0.58	2.77	16	1
1:A:19:PHE:CD1	1:A:94:PRO:HG3	0.58	2.34	8	8
1:A:48:GLN:O	1:A:52:ARG:CG	0.58	2.52	12	12
1:A:62:PRO:O	1:A:64:HIS:N	0.58	2.37	3	4
1:A:33:LEU:O	1:A:116:PRO:CD	0.58	2.52	11	11
1:A:19:PHE:CD1	1:A:94:PRO:HG2	0.58	2.33	4	7
1:A:16:ASN:OD1	1:A:129:LEU:HD23	0.58	1.99	11	2
1:A:66:SER:O	1:A:86:LEU:N	0.58	2.37	4	15
1:A:20:ILE:HD11	1:A:34:GLU:N	0.58	2.14	12	3
1:A:4:LEU:CD2	1:A:39:LYS:HD2	0.58	2.27	16	1
1:A:95:TRP:O	1:A:95:TRP:CG	0.58	2.57	11	4
1:A:71:LEU:HD21	1:A:119:ASN:HD22	0.58	1.57	14	2
1:A:34:GLU:O	1:A:115:PHE:CE2	0.58	2.57	3	1
1:A:50:VAL:CG1	1:A:51:VAL:N	0.58	2.66	8	16
1:A:20:ILE:CD1	1:A:34:GLU:O	0.58	2.50	9	7
1:A:79:HIS:O	1:A:80:ILE:HD12	0.58	1.98	8	5
1:A:34:GLU:O	1:A:35:PHE:CD2	0.58	2.56	9	2
1:A:30:ALA:HB1	1:A:114:ASP:OD1	0.58	1.99	6	3
1:A:4:LEU:HD11	1:A:80:ILE:HG13	0.58	1.74	11	2
1:A:33:LEU:HD12	1:A:114:ASP:CB	0.58	2.27	14	8
1:A:123:ILE:HD13	1:A:126:LEU:HD23	0.58	1.75	2	3
1:A:61:THR:HB	1:A:62:PRO:HD3	0.57	1.75	15	16
1:A:65:PHE:O	1:A:65:PHE:CD1	0.57	2.57	15	4
1:A:54:LEU:CD1	1:A:95:TRP:NE1	0.57	2.67	8	3
1:A:90:TRP:CD1	1:A:91:GLU:O	0.57	2.57	5	2
1:A:18:ILE:HD12	1:A:19:PHE:N	0.57	2.14	14	1
1:A:80:ILE:HG22	1:A:81:THR:N	0.57	2.14	1	10
1:A:6:ILE:HG13	3:A:130:APC:N7	0.57	2.15	9	15
1:A:60:ILE:HD11	1:A:63:GLN:HB2	0.57	1.75	5	1
1:A:34:GLU:O	1:A:115:PHE:CZ	0.57	2.57	16	1
1:A:63:GLN:CD	1:A:95:TRP:CZ3	0.57	2.78	3	1
1:A:126:LEU:HD12	1:A:129:LEU:HD13	0.57	1.76	9	1
1:A:60:ILE:HD12	1:A:61:THR:H	0.57	1.59	10	3
1:A:78:ARG:O	1:A:80:ILE:CD1	0.57	2.53	5	2
1:A:53:GLU:O	1:A:57:GLU:CG	0.57	2.53	1	5
1:A:19:PHE:CG	1:A:94:PRO:CG	0.57	2.88	8	6
1:A:8:VAL:CB	1:A:36:PRO:O	0.57	2.53	13	8
1:A:7:ALA:HB1	1:A:50:VAL:CB	0.57	2.29	4	10
1:A:68:PHE:CD2	1:A:69:GLU:N	0.57	2.73	6	2
1:A:71:LEU:C	1:A:71:LEU:CD1	0.57	2.73	8	6
1:A:60:ILE:CD1	1:A:95:TRP:CE2	0.57	2.86	8	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:38:GLY:O	1:A:39:LYS:CB	0.57	2.53	8	1
1:A:128:ARG:O	1:A:129:LEU:C	0.57	2.42	10	12
1:A:115:PHE:CD2	1:A:123:ILE:HG12	0.57	2.35	3	3
1:A:34:GLU:O	1:A:35:PHE:CD1	0.57	2.57	1	2
1:A:54:LEU:CD1	1:A:95:TRP:CD2	0.57	2.88	3	1
1:A:6:ILE:HD11	3:A:130:APC:C8	0.57	2.29	1	6
1:A:101:PRO:O	1:A:102:GLY:O	0.57	2.22	2	14
1:A:23:ARG:CB	1:A:27:ALA:HB2	0.57	2.29	6	2
1:A:112:ALA:HB2	1:A:123:ILE:HG23	0.57	1.76	14	3
1:A:58:VAL:HB	1:A:95:TRP:CB	0.56	2.30	13	15
1:A:19:PHE:CE1	1:A:103:GLU:HA	0.56	2.35	11	10
1:A:21:THR:CG2	1:A:100:GLN:NE2	0.56	2.69	12	1
1:A:19:PHE:CE1	1:A:94:PRO:HG2	0.56	2.35	7	9
1:A:13:ASN:HB2	1:A:90:TRP:CH2	0.56	2.35	6	7
1:A:65:PHE:N	1:A:65:PHE:CD1	0.56	2.72	7	1
1:A:98:GLU:CG	3:A:130:APC:O2G	0.56	2.53	14	1
1:A:8:VAL:HG13	1:A:9:GLY:H	0.56	1.60	12	16
1:A:126:LEU:O	1:A:129:LEU:HB2	0.56	2.00	7	14
1:A:54:LEU:CD1	1:A:95:TRP:O	0.56	2.53	11	12
1:A:111:ASN:O	1:A:112:ALA:CB	0.56	2.52	16	12
1:A:40:ILE:C	1:A:40:ILE:HD13	0.56	2.20	9	6
1:A:55:GLN:HA	1:A:95:TRP:CE3	0.56	2.34	5	10
1:A:61:THR:CB	1:A:62:PRO:HD3	0.56	2.30	4	15
1:A:107:LEU:HD13	1:A:110:LEU:CG	0.56	2.28	6	1
1:A:123:ILE:O	1:A:127:LYS:CG	0.56	2.53	14	16
1:A:61:THR:HB	1:A:62:PRO:CD	0.56	2.31	1	16
1:A:80:ILE:N	1:A:80:ILE:HD12	0.56	2.15	14	2
1:A:60:ILE:HD11	1:A:95:TRP:NE1	0.56	2.15	12	6
1:A:18:ILE:HG13	1:A:20:ILE:HG22	0.56	1.77	13	3
1:A:71:LEU:CD1	1:A:71:LEU:C	0.56	2.74	3	10
1:A:39:LYS:CB	3:A:130:APC:O1A	0.56	2.54	16	3
1:A:12:ARG:HH22	1:A:129:LEU:HD11	0.56	1.60	10	1
1:A:80:ILE:HG21	3:A:130:APC:C4	0.56	2.29	2	1
1:A:97:LYS:N	1:A:97:LYS:CD	0.56	2.68	14	3
1:A:4:LEU:HD21	3:A:130:APC:H5*1	0.55	1.78	12	1
1:A:60:ILE:HG13	1:A:95:TRP:CE3	0.55	2.36	15	8
1:A:50:VAL:O	1:A:54:LEU:CD2	0.55	2.52	5	14
1:A:4:LEU:HD12	1:A:5:GLN:O	0.55	2.01	2	3
1:A:82:LEU:HD22	1:A:119:ASN:OD1	0.55	2.01	11	2
1:A:116:PRO:O	1:A:123:ILE:CD1	0.55	2.54	10	2
1:A:107:LEU:HD22	1:A:110:LEU:HA	0.55	1.78	2	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:ILE:HD13	1:A:115:PHE:CZ	0.55	2.36	9	3
1:A:54:LEU:HG	1:A:95:TRP:CE3	0.55	2.36	3	1
1:A:54:LEU:HD12	1:A:95:TRP:CE3	0.55	2.36	3	1
1:A:26:ASP:O	1:A:27:ALA:CB	0.55	2.54	9	2
1:A:123:ILE:O	1:A:127:LYS:HG3	0.55	2.02	10	14
1:A:52:ARG:O	1:A:56:GLU:CG	0.55	2.54	9	14
1:A:8:VAL:CG2	1:A:36:PRO:O	0.55	2.54	14	11
1:A:87:VAL:O	1:A:88:GLU:CG	0.55	2.55	11	12
1:A:34:GLU:O	1:A:35:PHE:CG	0.55	2.59	12	3
1:A:4:LEU:CD1	1:A:4:LEU:O	0.55	2.52	6	3
1:A:35:PHE:CZ	1:A:119:ASN:CG	0.55	2.80	16	3
1:A:11:ILE:HG22	1:A:87:VAL:HG11	0.55	1.77	8	1
1:A:75:PHE:CB	1:A:76:PRO:HD2	0.55	2.32	3	15
1:A:40:ILE:HG12	1:A:49:ALA:CB	0.55	2.32	8	12
1:A:110:LEU:CD1	1:A:115:PHE:CZ	0.55	2.88	10	2
1:A:8:VAL:HG21	1:A:35:PHE:HB3	0.55	1.78	2	5
1:A:19:PHE:CE2	1:A:97:LYS:HG2	0.55	2.36	3	2
1:A:63:GLN:HB2	1:A:95:TRP:CZ2	0.55	2.37	3	1
1:A:89:ARG:O	1:A:89:ARG:CD	0.55	2.55	5	5
1:A:107:LEU:O	1:A:108:VAL:HG23	0.55	2.01	13	1
1:A:63:GLN:CD	1:A:95:TRP:CH2	0.55	2.80	3	1
1:A:55:GLN:HG2	1:A:95:TRP:CZ3	0.55	2.37	4	2
1:A:68:PHE:O	1:A:69:GLU:HB2	0.55	2.02	5	10
1:A:33:LEU:CD1	1:A:114:ASP:HB3	0.55	2.32	2	13
1:A:9:GLY:HA3	1:A:85:TRP:O	0.55	2.02	2	15
1:A:63:GLN:HB2	1:A:87:VAL:HG21	0.55	1.79	15	5
1:A:60:ILE:CG2	1:A:93:GLU:O	0.54	2.52	10	1
1:A:13:ASN:HB3	1:A:90:TRP:CH2	0.54	2.36	13	2
1:A:63:GLN:NE2	1:A:87:VAL:CG1	0.54	2.71	10	2
1:A:46:PRO:HB2	1:A:85:TRP:CZ2	0.54	2.37	11	6
1:A:13:ASN:O	1:A:13:ASN:ND2	0.54	2.40	2	1
1:A:107:LEU:HD12	1:A:108:VAL:C	0.54	2.23	7	1
1:A:13:ASN:ND2	1:A:17:GLU:CB	0.54	2.71	3	1
1:A:3:LYS:CG	1:A:79:HIS:O	0.54	2.56	2	1
1:A:10:ILE:HG13	1:A:86:LEU:HD11	0.54	1.78	16	3
1:A:97:LYS:O	1:A:97:LYS:CG	0.54	2.56	7	1
1:A:107:LEU:O	1:A:108:VAL:CG2	0.54	2.55	13	2
1:A:97:LYS:CG	1:A:97:LYS:O	0.54	2.55	13	2
1:A:109:GLY:O	1:A:110:LEU:O	0.54	2.23	16	16
1:A:11:ILE:CD1	1:A:19:PHE:CB	0.54	2.85	16	6
1:A:19:PHE:CE2	1:A:94:PRO:HG2	0.54	2.37	3	8

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:ALA:HB2	1:A:123:ILE:HG22	0.54	1.78	3	6
1:A:19:PHE:CG	1:A:94:PRO:HG2	0.54	2.37	2	5
1:A:98:GLU:HG3	3:A:130:APC:PG	0.54	2.43	5	1
1:A:107:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HG	0.54	1.79	15	1
1:A:9:GLY:CA	1:A:85:TRP:O	0.54	2.55	2	15
1:A:11:ILE:HG13	1:A:19:PHE:CB	0.54	2.33	6	8
1:A:23:ARG:CZ	1:A:26:ASP:O	0.54	2.56	9	1
1:A:107:LEU:CD2	1:A:110:LEU:HA	0.54	2.33	14	11
1:A:10:ILE:HB	1:A:86:LEU:CD1	0.54	2.32	16	9
1:A:18:ILE:HD13	1:A:107:LEU:HD21	0.54	1.80	7	1
1:A:63:GLN:HG3	1:A:95:TRP:CZ2	0.54	2.38	3	1
1:A:17:GLU:HA	1:A:105:MET:O	0.54	2.02	8	13
1:A:58:VAL:CG2	1:A:95:TRP:HA	0.54	2.33	11	16
1:A:38:GLY:CA	1:A:98:GLU:OE1	0.54	2.55	5	3
1:A:4:LEU:C	1:A:4:LEU:CD2	0.54	2.67	15	3
1:A:33:LEU:CD1	1:A:114:ASP:CB	0.54	2.86	5	3
1:A:48:GLN:O	1:A:52:ARG:HB2	0.54	2.03	9	16
1:A:82:LEU:HD13	3:A:130:APC:N6	0.54	2.16	6	1
1:A:75:PHE:HB2	1:A:76:PRO:CD	0.54	2.33	2	1
1:A:115:PHE:CD2	1:A:123:ILE:HG13	0.54	2.38	16	3
1:A:11:ILE:HD12	1:A:94:PRO:CB	0.54	2.33	15	2
1:A:67:LEU:N	1:A:85:TRP:CE3	0.54	2.76	6	5
1:A:8:VAL:HA	1:A:37:GLY:HA2	0.54	1.80	5	3
1:A:21:THR:O	1:A:32:LYS:O	0.54	2.26	14	7
1:A:4:LEU:CD2	1:A:80:ILE:HD12	0.54	2.32	2	1
1:A:35:PHE:HE2	1:A:123:ILE:HD11	0.54	1.62	11	1
1:A:111:ASN:ND2	1:A:127:LYS:HE3	0.53	2.19	10	1
1:A:4:LEU:HG	3:A:130:APC:C5'	0.53	2.33	12	2
1:A:4:LEU:CD2	3:A:130:APC:H5'1	0.53	2.33	12	2
1:A:49:ALA:O	1:A:53:GLU:HG2	0.53	2.03	14	8
1:A:12:ARG:NH2	1:A:16:ASN:OD1	0.53	2.40	1	1
1:A:34:GLU:C	1:A:35:PHE:CG	0.53	2.81	4	3
1:A:38:GLY:O	1:A:39:LYS:HB3	0.53	2.03	8	9
1:A:33:LEU:O	1:A:116:PRO:HD2	0.53	2.04	14	6
1:A:115:PHE:CD2	1:A:123:ILE:CG1	0.53	2.90	3	3
1:A:97:LYS:O	1:A:97:LYS:HG2	0.53	2.03	13	3
1:A:37:GLY:O	1:A:98:GLU:CB	0.53	2.56	2	3
1:A:19:PHE:CE2	1:A:97:LYS:HG3	0.53	2.38	11	3
1:A:82:LEU:CD1	3:A:130:APC:HN61	0.53	2.17	4	6
1:A:33:LEU:HB3	1:A:115:PHE:CD1	0.53	2.38	8	5
1:A:75:PHE:HB2	1:A:76:PRO:HD2	0.53	1.80	2	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:30:ALA:O	1:A:31:ASN:CB	0.53	2.57	10	5
1:A:7:ALA:N	1:A:40:ILE:HG22	0.53	2.19	15	5
1:A:36:PRO:O	1:A:37:GLY:O	0.53	2.26	13	9
1:A:68:PHE:CD2	1:A:86:LEU:CD2	0.53	2.90	13	6
1:A:67:LEU:O	1:A:68:PHE:CB	0.53	2.56	5	16
1:A:11:ILE:CG1	1:A:19:PHE:HB3	0.53	2.33	3	3
1:A:16:ASN:OD1	1:A:107:LEU:CD2	0.53	2.57	4	1
1:A:12:ARG:NH1	1:A:16:ASN:OD1	0.53	2.42	8	2
1:A:55:GLN:HA	1:A:95:TRP:CZ3	0.53	2.39	13	5
1:A:39:LYS:HD3	3:A:130:APC:C5'	0.53	2.34	4	6
1:A:16:ASN:O	1:A:18:ILE:HD13	0.53	2.03	12	1
1:A:19:PHE:CD2	1:A:94:PRO:HG2	0.53	2.39	2	5
1:A:110:LEU:HD21	1:A:115:PHE:HD1	0.53	1.64	7	1
1:A:63:GLN:OE1	1:A:95:TRP:CZ2	0.53	2.62	10	1
1:A:68:PHE:O	1:A:69:GLU:CG	0.53	2.57	13	3
1:A:63:GLN:HG2	1:A:95:TRP:CZ2	0.53	2.39	13	5
1:A:65:PHE:CD1	1:A:65:PHE:N	0.53	2.72	14	3
1:A:62:PRO:O	1:A:63:GLN:HG2	0.53	2.04	3	10
1:A:68:PHE:CG	1:A:69:GLU:N	0.52	2.77	11	4
1:A:16:ASN:HD21	1:A:110:LEU:HD12	0.52	1.63	1	1
1:A:73:TYR:CE2	1:A:118:ALA:O	0.52	2.62	1	1
1:A:54:LEU:CB	1:A:95:TRP:CE3	0.52	2.92	3	1
1:A:14:GLU:CB	1:A:17:GLU:OE2	0.52	2.57	13	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:9:GLY:N	0.52	2.70	10	2
1:A:108:VAL:O	1:A:109:GLY:C	0.52	2.47	15	15
1:A:46:PRO:HG3	1:A:83:TRP:CZ3	0.52	2.40	8	3
1:A:45:THR:HG23	1:A:46:PRO:HD2	0.52	1.80	1	6
1:A:30:ALA:O	1:A:31:ASN:OD1	0.52	2.27	16	1
1:A:63:GLN:O	1:A:65:PHE:CD2	0.52	2.63	5	1
1:A:18:ILE:CG1	1:A:20:ILE:HG22	0.52	2.34	15	1
1:A:62:PRO:CG	1:A:91:GLU:HB2	0.52	2.34	3	2
1:A:58:VAL:CG1	1:A:93:GLU:OE2	0.52	2.57	6	2
1:A:38:GLY:N	1:A:98:GLU:HG3	0.52	2.20	3	3
1:A:29:MET:N	1:A:29:MET:SD	0.52	2.82	3	2
1:A:60:ILE:C	1:A:60:ILE:HD12	0.52	2.25	8	2
3:A:130:APC:O1B	3:A:130:APC:O1A	0.52	2.26	8	3
1:A:107:LEU:HG	1:A:108:VAL:N	0.52	2.19	5	2
1:A:54:LEU:HB3	1:A:95:TRP:CH2	0.52	2.39	9	7
1:A:49:ALA:O	1:A:53:GLU:HG3	0.52	2.04	5	10
1:A:75:PHE:CG	1:A:76:PRO:CD	0.52	2.92	3	2
1:A:63:GLN:CG	1:A:95:TRP:CH2	0.52	2.93	3	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:ASN:ND2	1:A:16:ASN:O	0.52	2.43	4	1
1:A:64:HIS:HB2	1:A:89:ARG:HG2	0.52	1.82	12	10
1:A:82:LEU:HD22	1:A:119:ASN:ND2	0.52	2.20	16	1
1:A:100:GLN:CB	1:A:101:PRO:HD2	0.52	2.35	4	1
1:A:96:GLY:O	1:A:98:GLU:N	0.52	2.43	12	2
1:A:62:PRO:HD2	1:A:91:GLU:HB3	0.52	1.82	3	8
1:A:22:ARG:NH2	1:A:114:ASP:OD2	0.52	2.43	16	1
1:A:8:VAL:HG21	1:A:35:PHE:HB2	0.52	1.81	16	2
1:A:63:GLN:HG3	1:A:95:TRP:CH2	0.52	2.40	3	1
1:A:66:SER:O	1:A:85:TRP:HA	0.52	2.05	2	13
1:A:71:LEU:O	1:A:71:LEU:CD1	0.52	2.57	2	1
1:A:115:PHE:CG	1:A:123:ILE:CD1	0.52	2.92	4	1
1:A:13:ASN:N	1:A:17:GLU:O	0.52	2.43	8	1
1:A:12:ARG:CZ	1:A:86:LEU:HG	0.51	2.36	10	1
1:A:51:VAL:HG13	1:A:52:ARG:N	0.51	2.19	5	12
1:A:38:GLY:O	1:A:53:GLU:OE1	0.51	2.29	8	13
1:A:53:GLU:O	1:A:57:GLU:HG3	0.51	2.05	1	5
1:A:4:LEU:O	1:A:4:LEU:HD22	0.51	2.05	6	2
1:A:19:PHE:CZ	1:A:94:PRO:CG	0.51	2.93	3	1
1:A:13:ASN:CG	1:A:90:TRP:CZ3	0.51	2.84	5	1
1:A:37:GLY:C	1:A:98:GLU:CG	0.51	2.79	16	2
1:A:17:GLU:N	1:A:17:GLU:OE1	0.51	2.43	7	3
1:A:4:LEU:HD11	3:A:130:APC:H5'2	0.51	1.82	14	1
1:A:119:ASN:CB	1:A:123:ILE:HD12	0.51	2.35	15	2
1:A:8:VAL:HA	1:A:36:PRO:O	0.51	2.04	10	6
1:A:48:GLN:O	1:A:52:ARG:HG3	0.51	2.06	16	9
1:A:75:PHE:HB2	1:A:78:ARG:CB	0.51	2.35	15	5
1:A:11:ILE:CG1	1:A:19:PHE:CB	0.51	2.88	3	4
1:A:12:ARG:HB3	1:A:18:ILE:CG2	0.51	2.35	7	1
1:A:38:GLY:N	1:A:98:GLU:HG2	0.51	2.20	7	3
1:A:53:GLU:HA	1:A:56:GLU:HG2	0.51	1.83	13	16
1:A:75:PHE:CD1	1:A:76:PRO:HD2	0.51	2.40	8	5
1:A:97:LYS:N	1:A:97:LYS:HD3	0.51	2.21	12	3
1:A:75:PHE:CD2	1:A:76:PRO:HD2	0.51	2.40	3	3
1:A:15:ASN:CG	1:A:108:VAL:HG22	0.51	2.26	7	1
1:A:107:LEU:CD1	1:A:108:VAL:N	0.51	2.71	7	1
1:A:97:LYS:CD	1:A:97:LYS:O	0.51	2.58	3	1
1:A:4:LEU:HD21	3:A:130:APC:C5'	0.51	2.35	12	1
1:A:98:GLU:OE1	3:A:130:APC:O2G	0.51	2.29	1	1
1:A:97:LYS:CD	1:A:97:LYS:N	0.51	2.72	10	3
1:A:39:LYS:CG	3:A:130:APC:O1A	0.51	2.58	12	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:PRO:CB	1:A:85:TRP:CZ2	0.51	2.94	2	1
1:A:38:GLY:CA	1:A:98:GLU:HG3	0.51	2.35	16	1
1:A:38:GLY:O	1:A:39:LYS:O	0.51	2.28	16	1
1:A:34:GLU:HG2	1:A:35:PHE:CE1	0.51	2.41	7	4
1:A:105:MET:SD	1:A:107:LEU:CB	0.51	2.99	5	1
1:A:62:PRO:O	1:A:63:GLN:C	0.51	2.49	10	4
1:A:112:ALA:HB3	1:A:127:LYS:HD2	0.51	1.82	9	2
1:A:65:PHE:C	1:A:65:PHE:CD1	0.51	2.84	8	2
1:A:95:TRP:CD1	1:A:95:TRP:N	0.51	2.78	15	4
1:A:16:ASN:HB3	1:A:107:LEU:CD2	0.51	2.36	15	1
1:A:18:ILE:CD1	1:A:105:MET:HB3	0.51	2.36	8	1
3:A:130:APC:O3'	3:A:130:APC:O2A	0.51	2.26	14	3
1:A:110:LEU:CB	1:A:126:LEU:HB3	0.51	2.36	9	11
1:A:4:LEU:CG	3:A:130:APC:O4'	0.51	2.59	6	1
1:A:62:PRO:HG2	1:A:91:GLU:CB	0.51	2.36	3	8
1:A:20:ILE:CG2	1:A:33:LEU:HD22	0.51	2.36	3	2
1:A:4:LEU:HD23	1:A:39:LYS:HE2	0.51	1.82	15	1
1:A:5:GLN:CG	1:A:81:THR:HB	0.51	2.36	4	12
1:A:112:ALA:CB	1:A:127:LYS:HD3	0.51	2.36	9	11
1:A:71:LEU:HB3	1:A:122:VAL:HG23	0.51	1.82	3	5
1:A:112:ALA:HB2	1:A:127:LYS:HD3	0.51	1.82	2	1
1:A:54:LEU:HB3	1:A:95:TRP:CE2	0.51	2.41	5	4
1:A:18:ILE:HG13	1:A:20:ILE:CG2	0.51	2.36	7	3
1:A:97:LYS:CG	1:A:100:GLN:O	0.51	2.59	7	1
1:A:14:GLU:HB3	1:A:17:GLU:CG	0.51	2.36	8	3
1:A:13:ASN:HB3	1:A:90:TRP:CZ3	0.51	2.41	4	1
1:A:50:VAL:HG13	1:A:51:VAL:N	0.51	2.21	2	16
1:A:70:LYS:HE3	1:A:83:TRP:CD2	0.51	2.41	3	2
1:A:33:LEU:HB3	1:A:115:PHE:CZ	0.51	2.41	12	3
1:A:80:ILE:HG13	3:A:130:APC:N3	0.51	2.21	2	1
1:A:60:ILE:CG1	1:A:95:TRP:HB3	0.51	2.36	3	2
1:A:17:GLU:N	1:A:17:GLU:CD	0.51	2.64	7	4
1:A:4:LEU:CD1	3:A:130:APC:O4'	0.51	2.59	5	3
1:A:97:LYS:CB	1:A:100:GLN:HG2	0.50	2.36	11	3
1:A:109:GLY:CA	1:A:129:LEU:OXT	0.50	2.59	13	1
1:A:53:GLU:HA	1:A:56:GLU:CG	0.50	2.37	1	16
1:A:64:HIS:O	1:A:87:VAL:HA	0.50	2.06	5	2
1:A:11:ILE:CD1	1:A:19:PHE:HB3	0.50	2.36	6	5
1:A:61:THR:CG2	1:A:62:PRO:HD3	0.50	2.36	4	8
1:A:75:PHE:CB	1:A:76:PRO:HD3	0.50	2.31	2	1
1:A:21:THR:O	1:A:21:THR:CG2	0.50	2.59	3	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:THR:CG2	1:A:21:THR:O	0.50	2.58	15	1
3:A:130:APC:O1B	3:A:130:APC:O2A	0.50	2.30	14	3
1:A:107:LEU:CD1	1:A:110:LEU:HG	0.50	2.36	15	3
1:A:4:LEU:HG	3:A:130:APC:C4'	0.50	2.36	6	1
1:A:112:ALA:CB	1:A:123:ILE:HG23	0.50	2.35	9	2
1:A:4:LEU:HD11	3:A:130:APC:C5'	0.50	2.36	14	1
1:A:14:GLU:CB	1:A:17:GLU:HG3	0.50	2.36	2	3
1:A:84:PHE:CE1	1:A:122:VAL:HG21	0.50	2.41	1	4
1:A:14:GLU:HB2	1:A:17:GLU:CG	0.50	2.36	7	1
1:A:90:TRP:CE3	1:A:94:PRO:HB3	0.50	2.42	1	1
1:A:46:PRO:HG3	1:A:83:TRP:CH2	0.50	2.42	5	5
1:A:123:ILE:O	1:A:127:LYS:HG2	0.50	2.07	9	6
1:A:35:PHE:CD1	1:A:35:PHE:N	0.50	2.79	5	3
1:A:3:LYS:CD	1:A:3:LYS:C	0.50	2.79	15	1
1:A:110:LEU:HD23	1:A:111:ASN:N	0.50	2.21	10	1
1:A:119:ASN:O	1:A:123:ILE:CD1	0.50	2.55	5	3
1:A:18:ILE:HD12	1:A:105:MET:CB	0.50	2.36	8	1
1:A:107:LEU:HD23	1:A:107:LEU:O	0.50	2.07	6	2
1:A:36:PRO:HB3	1:A:97:LYS:HA	0.50	1.83	3	3
1:A:11:ILE:HD11	1:A:19:PHE:CD2	0.50	2.41	3	1
1:A:14:GLU:CB	1:A:17:GLU:CD	0.50	2.80	10	1
1:A:105:MET:SD	1:A:107:LEU:N	0.50	2.85	12	3
1:A:112:ALA:HB3	1:A:127:LYS:CD	0.50	2.37	9	3
1:A:23:ARG:HB3	1:A:27:ALA:CB	0.50	2.36	6	1
1:A:112:ALA:CB	1:A:123:ILE:HG22	0.50	2.37	3	3
1:A:79:HIS:C	1:A:80:ILE:CD1	0.50	2.79	3	5
1:A:18:ILE:CG1	1:A:20:ILE:CG2	0.50	2.90	15	1
1:A:39:LYS:HB2	3:A:130:APC:O1A	0.49	2.07	12	2
1:A:18:ILE:HD12	1:A:20:ILE:HB	0.49	1.83	2	2
1:A:17:GLU:OE1	1:A:17:GLU:CA	0.49	2.60	8	1
1:A:31:ASN:OD1	1:A:113:ASP:O	0.49	2.30	10	1
1:A:45:THR:CG2	1:A:46:PRO:HD2	0.49	2.37	1	7
1:A:87:VAL:O	1:A:88:GLU:HG2	0.49	2.07	2	7
1:A:11:ILE:O	1:A:18:ILE:HA	0.49	2.07	16	12
1:A:9:GLY:O	1:A:10:ILE:O	0.49	2.30	4	8
1:A:63:GLN:CG	1:A:95:TRP:CZ2	0.49	2.95	3	1
1:A:4:LEU:HD13	3:A:130:APC:O4'	0.49	2.07	5	3
1:A:107:LEU:O	1:A:108:VAL:O	0.49	2.30	16	2
1:A:109:GLY:CA	1:A:129:LEU:O	0.49	2.61	8	2
1:A:8:VAL:HA	1:A:37:GLY:CA	0.49	2.36	16	1
1:A:33:LEU:CD1	1:A:114:ASP:HB2	0.49	2.37	5	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:ALA:O	1:A:50:VAL:HG23	0.49	2.06	4	4
1:A:100:GLN:HB2	1:A:101:PRO:CD	0.49	2.37	4	1
1:A:18:ILE:HD12	1:A:110:LEU:HD11	0.49	1.83	4	1
1:A:79:HIS:O	1:A:80:ILE:HD13	0.49	2.07	13	1
1:A:97:LYS:CA	1:A:100:GLN:HG2	0.49	2.38	14	2
1:A:98:GLU:OE2	3:A:130:APC:O2G	0.49	2.29	10	1
1:A:20:ILE:CD1	1:A:34:GLU:C	0.49	2.80	3	4
1:A:39:LYS:HB2	3:A:130:APC:PB	0.49	2.47	8	1
1:A:97:LYS:O	1:A:97:LYS:HD3	0.49	2.07	3	5
3:A:130:APC:PA	4:A:131:CON:N3	0.49	2.86	8	1
1:A:55:GLN:N	1:A:95:TRP:CZ3	0.49	2.80	10	4
1:A:62:PRO:O	1:A:89:ARG:O	0.49	2.31	8	3
1:A:4:LEU:CD1	1:A:4:LEU:C	0.49	2.81	14	3
1:A:4:LEU:CG	3:A:130:APC:C5'	0.49	2.90	12	1
1:A:95:TRP:N	1:A:95:TRP:CD1	0.49	2.78	12	6
1:A:38:GLY:HA3	1:A:98:GLU:OE1	0.49	2.07	16	1
1:A:33:LEU:O	1:A:116:PRO:HD3	0.49	2.07	9	6
1:A:39:LYS:O	1:A:53:GLU:OE1	0.49	2.31	8	1
1:A:33:LEU:HD12	1:A:114:ASP:HB2	0.49	1.83	10	3
1:A:37:GLY:O	1:A:98:GLU:HB2	0.49	2.07	10	4
1:A:40:ILE:CG1	1:A:49:ALA:CB	0.49	2.91	10	4
1:A:62:PRO:HG2	1:A:91:GLU:HB3	0.49	1.85	13	9
1:A:62:PRO:O	1:A:63:GLN:HB3	0.49	2.06	1	9
1:A:26:ASP:O	1:A:27:ALA:O	0.49	2.30	3	2
1:A:16:ASN:OD1	1:A:107:LEU:HD23	0.49	2.08	4	1
1:A:33:LEU:HD13	1:A:115:PHE:HE1	0.49	1.57	14	1
1:A:70:LYS:HD2	1:A:83:TRP:CE3	0.49	2.42	6	4
1:A:60:ILE:CG2	1:A:93:GLU:HG2	0.49	2.37	3	4
1:A:17:GLU:CA	1:A:17:GLU:OE1	0.49	2.61	9	2
1:A:95:TRP:C	1:A:95:TRP:CD1	0.49	2.85	5	1
1:A:6:ILE:HG23	1:A:37:GLY:HA3	0.49	1.84	10	1
1:A:4:LEU:CG	3:A:130:APC:H5'2	0.49	2.38	11	4
1:A:62:PRO:O	1:A:89:ARG:HG3	0.49	2.08	8	3
1:A:69:GLU:O	1:A:84:PHE:HB2	0.49	2.08	3	13
1:A:38:GLY:HA2	1:A:98:GLU:OE1	0.49	2.08	5	8
1:A:107:LEU:CD2	1:A:107:LEU:C	0.49	2.80	2	2
3:A:130:APC:O1A	3:A:130:APC:O1B	0.49	2.30	2	1
1:A:37:GLY:O	1:A:98:GLU:CA	0.49	2.61	4	1
1:A:48:GLN:O	1:A:52:ARG:CB	0.49	2.61	13	13
1:A:20:ILE:HD11	1:A:33:LEU:C	0.49	2.29	6	1
1:A:5:GLN:OE1	1:A:5:GLN:N	0.49	2.46	7	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:TRP:O	1:A:90:TRP:CD1	0.49	2.65	9	1
1:A:63:GLN:HG3	1:A:64:HIS:N	0.49	2.23	13	1
1:A:33:LEU:HB3	1:A:115:PHE:CE2	0.48	2.43	1	3
1:A:16:ASN:OD1	1:A:109:GLY:N	0.48	2.46	4	1
1:A:54:LEU:C	1:A:95:TRP:CE3	0.48	2.87	12	2
1:A:16:ASN:O	1:A:16:ASN:ND2	0.48	2.46	3	3
1:A:35:PHE:CZ	1:A:115:PHE:CE2	0.48	3.01	15	2
1:A:109:GLY:O	1:A:110:LEU:C	0.48	2.52	10	14
1:A:6:ILE:CG2	1:A:37:GLY:HA3	0.48	2.38	10	1
1:A:39:LYS:O	1:A:53:GLU:OE2	0.48	2.30	14	12
1:A:97:LYS:HD3	1:A:97:LYS:N	0.48	2.21	11	3
1:A:95:TRP:CD1	1:A:95:TRP:C	0.48	2.83	2	2
1:A:18:ILE:CD1	1:A:20:ILE:N	0.48	2.76	14	1
1:A:12:ARG:NH2	1:A:15:ASN:O	0.48	2.46	8	1
1:A:55:GLN:CA	1:A:95:TRP:CZ3	0.48	2.96	14	7
1:A:58:VAL:HG22	1:A:97:LYS:HE3	0.48	1.85	7	1
1:A:50:VAL:C	1:A:54:LEU:HD23	0.48	2.28	5	1
1:A:64:HIS:C	1:A:65:PHE:CG	0.48	2.87	14	1
1:A:63:GLN:NE2	1:A:65:PHE:HB3	0.48	2.24	15	2
1:A:58:VAL:CG2	1:A:97:LYS:HD2	0.48	2.38	2	1
1:A:54:LEU:HB3	1:A:95:TRP:CZ3	0.48	2.43	10	3
1:A:70:LYS:HE3	1:A:83:TRP:CE3	0.48	2.43	3	2
1:A:13:ASN:OD1	1:A:13:ASN:C	0.48	2.52	3	3
1:A:39:LYS:HD3	3:A:130:APC:O5'	0.48	2.08	3	1
1:A:10:ILE:CG2	1:A:18:ILE:CD1	0.48	2.78	14	1
1:A:39:LYS:O	1:A:53:GLU:CD	0.48	2.52	12	12
1:A:48:GLN:HA	1:A:51:VAL:CG1	0.48	2.39	16	15
1:A:4:LEU:HD23	3:A:130:APC:H5'2	0.48	1.85	11	2
1:A:12:ARG:CB	1:A:18:ILE:HG23	0.48	2.31	2	3
1:A:11:ILE:CD1	1:A:94:PRO:CB	0.48	2.92	8	1
1:A:12:ARG:HE	1:A:86:LEU:HD12	0.48	1.69	10	1
1:A:5:GLN:HG3	1:A:81:THR:CB	0.48	2.39	10	6
1:A:89:ARG:HD3	1:A:89:ARG:O	0.48	2.09	2	4
1:A:4:LEU:CD2	1:A:39:LYS:CD	0.48	2.91	12	1
1:A:39:LYS:HB2	3:A:130:APC:O2B	0.48	2.08	6	3
1:A:117:PRO:O	1:A:120:GLU:OE1	0.48	2.32	15	1
1:A:126:LEU:O	1:A:127:LYS:C	0.48	2.53	4	4
1:A:91:GLU:O	1:A:92:GLY:C	0.48	2.52	1	6
1:A:52:ARG:O	1:A:56:GLU:HG3	0.48	2.09	3	8
1:A:68:PHE:CD1	1:A:86:LEU:HD23	0.48	2.44	7	1
1:A:40:ILE:HG13	1:A:49:ALA:HB1	0.48	1.85	4	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:PHE:CD2	1:A:122:VAL:HG21	0.48	2.44	4	1
1:A:70:LYS:HA	1:A:122:VAL:HG21	0.48	1.83	11	3
1:A:100:GLN:HG3	1:A:101:PRO:N	0.48	2.24	12	2
1:A:13:ASN:OD1	1:A:17:GLU:OE1	0.48	2.32	12	1
1:A:61:THR:HG22	1:A:62:PRO:N	0.48	2.24	9	7
1:A:98:GLU:HG3	3:A:130:APC:O2G	0.48	2.08	14	3
1:A:50:VAL:HG22	1:A:54:LEU:HD23	0.48	1.86	3	1
1:A:82:LEU:CD2	1:A:84:PHE:CE1	0.48	2.96	5	2
1:A:87:VAL:O	1:A:88:GLU:HG3	0.48	2.09	13	4
1:A:15:ASN:O	1:A:16:ASN:OD1	0.48	2.32	15	1
1:A:111:ASN:ND2	1:A:127:LYS:CE	0.47	2.76	10	1
1:A:19:PHE:CE2	1:A:97:LYS:CG	0.47	2.97	3	4
1:A:48:GLN:HA	1:A:51:VAL:HG12	0.47	1.86	1	16
1:A:23:ARG:NH1	1:A:26:ASP:O	0.47	2.47	9	1
1:A:6:ILE:CG2	1:A:37:GLY:HA2	0.47	2.39	13	3
1:A:60:ILE:HD13	1:A:90:TRP:CB	0.47	2.32	10	1
1:A:21:THR:O	1:A:21:THR:HG23	0.47	2.09	16	4
1:A:4:LEU:HD23	1:A:39:LYS:HD2	0.47	1.86	6	2
1:A:70:LYS:HD2	1:A:83:TRP:CD2	0.47	2.44	6	1
1:A:107:LEU:HD23	1:A:108:VAL:O	0.47	2.09	2	3
1:A:120:GLU:O	1:A:124:ALA:HB2	0.47	2.09	3	1
1:A:3:LYS:CG	1:A:4:LEU:N	0.47	2.75	14	3
1:A:23:ARG:CA	1:A:32:LYS:HD2	0.47	2.39	10	3
1:A:96:GLY:O	1:A:97:LYS:C	0.47	2.52	3	6
1:A:13:ASN:ND2	1:A:13:ASN:C	0.47	2.67	12	1
1:A:35:PHE:CE2	1:A:119:ASN:CG	0.47	2.88	5	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:62:PRO:O	0.47	2.62	11	4
1:A:100:GLN:HB2	1:A:101:PRO:HD2	0.47	1.85	4	2
1:A:107:LEU:HD11	1:A:110:LEU:CD1	0.47	2.39	15	1
1:A:14:GLU:HB3	1:A:17:GLU:HG3	0.47	1.87	3	5
1:A:20:ILE:HD11	1:A:33:LEU:CA	0.47	2.39	6	1
1:A:62:PRO:HG2	1:A:91:GLU:HB2	0.47	1.86	9	2
1:A:98:GLU:CD	3:A:130:APC:O2G	0.47	2.53	9	2
1:A:90:TRP:CD1	1:A:93:GLU:O	0.47	2.67	3	1
1:A:110:LEU:O	1:A:127:LYS:HA	0.47	2.08	5	1
1:A:19:PHE:CE2	1:A:102:GLY:HA3	0.47	2.44	4	2
1:A:10:ILE:HD12	1:A:86:LEU:HD11	0.47	1.85	15	1
1:A:80:ILE:HG12	3:A:130:APC:C2	0.47	2.40	10	5
1:A:80:ILE:HD13	1:A:80:ILE:N	0.47	2.25	16	2
1:A:119:ASN:O	1:A:123:ILE:HD13	0.47	2.09	3	1
1:A:71:LEU:CD1	1:A:82:LEU:HB2	0.47	2.37	15	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:107:LEU:C	1:A:107:LEU:CD1	0.47	2.78	10	2
1:A:11:ILE:HG22	1:A:87:VAL:HG21	0.47	1.78	12	3
1:A:3:LYS:HG2	1:A:4:LEU:N	0.47	2.25	12	4
1:A:98:GLU:HG3	1:A:99:GLY:N	0.47	2.24	6	2
1:A:23:ARG:CB	1:A:27:ALA:CB	0.47	2.93	6	1
1:A:10:ILE:CB	1:A:86:LEU:CD1	0.47	2.92	16	2
1:A:109:GLY:HA2	1:A:129:LEU:O	0.47	2.10	2	1
1:A:3:LYS:HG3	1:A:4:LEU:N	0.47	2.24	16	2
1:A:123:ILE:N	1:A:123:ILE:CD1	0.47	2.77	7	2
1:A:47:GLU:O	1:A:51:VAL:CG1	0.47	2.63	1	1
1:A:11:ILE:CG2	1:A:87:VAL:CG2	0.47	2.87	9	4
1:A:12:ARG:HH11	1:A:129:LEU:HD23	0.47	1.70	14	1
1:A:12:ARG:HG2	1:A:18:ILE:CG2	0.47	2.40	12	4
1:A:67:LEU:C	1:A:67:LEU:CD2	0.47	2.83	3	3
1:A:54:LEU:CD1	1:A:95:TRP:CE3	0.47	2.97	3	1
1:A:54:LEU:HD13	1:A:96:GLY:HA2	0.47	1.86	5	1
1:A:18:ILE:HD11	1:A:20:ILE:HB	0.47	1.85	14	1
1:A:16:ASN:HD21	1:A:129:LEU:HD23	0.47	1.65	10	1
1:A:20:ILE:O	1:A:103:GLU:HG2	0.47	2.10	14	12
1:A:39:LYS:HB2	3:A:130:APC:PA	0.47	2.50	5	2
1:A:97:LYS:HG3	1:A:97:LYS:O	0.47	2.09	16	3
1:A:5:GLN:CB	1:A:81:THR:HB	0.47	2.39	5	2
1:A:20:ILE:HD13	1:A:36:PRO:HD3	0.47	1.87	15	1
1:A:40:ILE:C	1:A:40:ILE:CD1	0.47	2.81	15	2
1:A:72:GLU:HG3	1:A:81:THR:HG23	0.47	1.88	1	5
1:A:89:ARG:O	1:A:89:ARG:HD3	0.47	2.10	4	4
1:A:37:GLY:CA	1:A:98:GLU:HB2	0.46	2.40	12	1
1:A:12:ARG:HA	1:A:17:GLU:O	0.46	2.10	9	5
1:A:105:MET:SD	1:A:106:SER:N	0.46	2.87	8	1
1:A:39:LYS:HG2	3:A:130:APC:O1A	0.46	2.10	1	5
1:A:30:ALA:O	1:A:114:ASP:OD1	0.46	2.33	5	2
1:A:123:ILE:HA	1:A:126:LEU:CD2	0.46	2.39	9	4
1:A:35:PHE:CE2	1:A:119:ASN:CB	0.46	2.99	13	4
1:A:62:PRO:HD2	1:A:91:GLU:CB	0.46	2.41	3	1
1:A:4:LEU:HD13	1:A:5:GLN:N	0.46	2.26	14	1
1:A:12:ARG:HD2	1:A:16:ASN:ND2	0.46	2.25	4	4
1:A:110:LEU:HD13	1:A:115:PHE:HE2	0.46	1.69	16	1
1:A:38:GLY:CA	1:A:98:GLU:CD	0.46	2.84	16	1
1:A:115:PHE:CB	1:A:123:ILE:HG12	0.46	2.40	8	4
1:A:23:ARG:N	1:A:32:LYS:HD2	0.46	2.25	9	1
1:A:71:LEU:CD1	1:A:82:LEU:CB	0.46	2.93	15	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:115:PHE:HB3	1:A:123:ILE:CD1	0.46	2.41	6	4
1:A:53:GLU:O	1:A:57:GLU:CD	0.46	2.54	16	8
1:A:4:LEU:CD2	3:A:130:APC:C5'	0.46	2.93	12	1
1:A:33:LEU:CB	1:A:115:PHE:CD1	0.46	2.98	4	5
1:A:31:ASN:OD1	1:A:31:ASN:O	0.46	2.33	2	2
1:A:41:GLU:HG3	1:A:42:MET:N	0.46	2.24	12	1
3:A:130:APC:H3'	3:A:130:APC:O2A	0.46	2.11	6	1
1:A:38:GLY:C	3:A:130:APC:O2B	0.46	2.54	2	1
1:A:110:LEU:CD2	1:A:126:LEU:HD23	0.46	2.40	1	1
1:A:62:PRO:CB	1:A:89:ARG:HD3	0.46	2.40	9	1
1:A:8:VAL:HB	1:A:37:GLY:HA2	0.46	1.85	4	2
1:A:105:MET:SD	1:A:107:LEU:HB2	0.46	2.50	5	1
1:A:119:ASN:O	1:A:123:ILE:CG1	0.46	2.63	10	1
1:A:30:ALA:O	1:A:31:ASN:HB2	0.46	2.10	10	2
1:A:8:VAL:HB	1:A:37:GLY:CA	0.46	2.41	10	2
1:A:124:ALA:CA	1:A:127:LYS:HG3	0.46	2.41	14	10
1:A:108:VAL:O	1:A:109:GLY:O	0.46	2.33	16	2
1:A:107:LEU:HD12	1:A:107:LEU:C	0.46	2.29	7	1
1:A:12:ARG:NH1	1:A:129:LEU:HG	0.46	2.26	1	2
1:A:14:GLU:HB2	1:A:17:GLU:OE2	0.46	2.11	13	2
1:A:54:LEU:CB	1:A:95:TRP:CZ3	0.46	2.98	3	1
1:A:36:PRO:O	1:A:96:GLY:O	0.46	2.33	5	1
1:A:36:PRO:CB	1:A:96:GLY:O	0.46	2.63	8	1
1:A:106:SER:O	1:A:108:VAL:HG23	0.46	2.10	10	1
1:A:9:GLY:CA	1:A:85:TRP:C	0.46	2.84	3	9
1:A:117:PRO:O	1:A:118:ALA:C	0.46	2.54	10	9
1:A:14:GLU:HB2	1:A:17:GLU:OE1	0.46	2.11	5	2
1:A:39:LYS:CG	3:A:130:APC:H3A2	0.46	2.40	1	1
1:A:83:TRP:HB3	1:A:85:TRP:NE1	0.46	2.25	4	1
1:A:16:ASN:O	1:A:105:MET:O	0.46	2.32	15	1
1:A:12:ARG:C	1:A:17:GLU:O	0.46	2.54	8	1
1:A:62:PRO:CG	1:A:91:GLU:HB3	0.46	2.40	13	8
1:A:23:ARG:O	1:A:24:ALA:C	0.46	2.54	6	14
1:A:124:ALA:HA	1:A:127:LYS:HG3	0.46	1.86	15	7
1:A:10:ILE:HB	1:A:86:LEU:HD11	0.46	1.85	13	5
1:A:123:ILE:O	1:A:124:ALA:C	0.46	2.53	2	1
1:A:63:GLN:HA	1:A:90:TRP:N	0.46	2.26	15	2
1:A:91:GLU:O	1:A:93:GLU:O	0.46	2.33	3	2
1:A:47:GLU:O	1:A:48:GLN:C	0.46	2.53	16	11
1:A:53:GLU:O	1:A:57:GLU:OE2	0.46	2.34	16	1
1:A:22:ARG:CB	1:A:105:MET:CE	0.46	2.93	13	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:PHE:HB3	1:A:76:PRO:HD2	0.46	1.88	15	11
1:A:6:ILE:HG13	3:A:130:APC:C8	0.46	2.41	12	2
1:A:20:ILE:HG13	1:A:21:THR:N	0.46	2.26	15	10
1:A:19:PHE:CD1	1:A:103:GLU:CA	0.46	2.99	3	1
1:A:17:GLU:HA	1:A:17:GLU:OE1	0.46	2.10	8	1
1:A:30:ALA:O	1:A:114:ASP:OD2	0.46	2.34	11	1
1:A:5:GLN:HG3	1:A:81:THR:HB	0.46	1.88	3	7
1:A:103:GLU:O	1:A:104:TRP:C	0.46	2.54	4	11
1:A:38:GLY:CA	1:A:98:GLU:HB2	0.46	2.40	2	1
1:A:22:ARG:O	1:A:103:GLU:OE2	0.46	2.34	16	4
1:A:107:LEU:HD22	1:A:110:LEU:HG	0.46	1.87	7	1
1:A:110:LEU:HB3	1:A:126:LEU:HB3	0.46	1.88	9	5
1:A:100:GLN:CG	1:A:101:PRO:HD2	0.46	2.41	4	1
1:A:97:LYS:O	1:A:98:GLU:C	0.46	2.54	15	1
1:A:89:ARG:HG3	1:A:89:ARG:O	0.45	2.11	9	9
1:A:66:SER:OG	1:A:86:LEU:O	0.45	2.27	2	1
1:A:13:ASN:ND2	1:A:17:GLU:HB2	0.45	2.26	3	2
1:A:11:ILE:HG13	1:A:19:PHE:HB3	0.45	1.88	4	1
1:A:18:ILE:H	1:A:18:ILE:HD13	0.45	1.71	11	1
1:A:12:ARG:HA	1:A:18:ILE:HA	0.45	1.89	10	2
1:A:54:LEU:HD11	1:A:95:TRP:O	0.45	2.11	10	1
1:A:19:PHE:O	1:A:102:GLY:HA2	0.45	2.10	16	5
1:A:13:ASN:CG	1:A:14:GLU:N	0.45	2.69	13	1
1:A:35:PHE:CE1	1:A:115:PHE:CE1	0.45	3.04	8	1
1:A:109:GLY:HA2	1:A:129:LEU:HB3	0.45	1.87	10	1
1:A:71:LEU:HG	1:A:122:VAL:CG2	0.45	2.41	4	3
1:A:98:GLU:OE1	1:A:98:GLU:CA	0.45	2.64	7	1
1:A:110:LEU:HD21	1:A:115:PHE:HE1	0.45	1.68	3	1
1:A:119:ASN:O	1:A:119:ASN:OD1	0.45	2.35	3	1
1:A:11:ILE:HG21	1:A:95:TRP:CD1	0.45	2.46	3	1
1:A:12:ARG:NE	1:A:18:ILE:CG2	0.45	2.79	9	1
1:A:62:PRO:O	1:A:63:GLN:HG3	0.45	2.11	9	1
1:A:12:ARG:HA	1:A:17:GLU:C	0.45	2.31	5	4
1:A:4:LEU:CD2	3:A:130:APC:H5'2	0.45	2.42	11	4
1:A:80:ILE:HG13	3:A:130:APC:C2	0.45	2.42	12	1
1:A:27:ALA:C	1:A:29:MET:N	0.45	2.69	16	4
1:A:12:ARG:HD2	1:A:16:ASN:OD1	0.45	2.12	1	1
1:A:62:PRO:HG2	1:A:91:GLU:CA	0.45	2.41	3	1
1:A:17:GLU:HG2	1:A:106:SER:CB	0.45	2.42	15	1
1:A:8:VAL:CA	1:A:36:PRO:O	0.45	2.64	10	2
1:A:58:VAL:HB	1:A:95:TRP:HB3	0.45	1.88	13	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:38:GLY:HA2	1:A:98:GLU:CG	0.45	2.42	2	1
1:A:107:LEU:HD13	1:A:110:LEU:CA	0.45	2.39	7	1
1:A:6:ILE:CD1	3:A:130:APC:C8	0.45	2.95	1	6
1:A:39:LYS:HB3	3:A:130:APC:O2B	0.45	2.11	6	3
1:A:5:GLN:HG3	1:A:81:THR:OG1	0.45	2.11	15	9
1:A:12:ARG:NH2	1:A:129:LEU:HD21	0.45	2.27	2	1
1:A:97:LYS:HB2	1:A:100:GLN:CG	0.45	2.41	1	2
1:A:94:PRO:O	1:A:95:TRP:HB3	0.45	2.12	12	8
1:A:4:LEU:CD1	3:A:130:APC:H5'1	0.45	2.41	12	1
1:A:12:ARG:CG	1:A:18:ILE:CG2	0.45	2.93	16	1
1:A:12:ARG:CD	1:A:18:ILE:HG23	0.45	2.42	9	1
1:A:70:LYS:C	1:A:122:VAL:CG2	0.45	2.85	11	2
1:A:4:LEU:HD11	3:A:130:APC:H5'1	0.45	1.89	12	1
1:A:38:GLY:HA3	1:A:98:GLU:CD	0.45	2.32	16	1
1:A:18:ILE:CD1	1:A:107:LEU:HD21	0.45	2.42	7	1
1:A:18:ILE:HD13	1:A:18:ILE:N	0.45	2.27	1	1
1:A:127:LYS:HB3	1:A:127:LYS:NZ	0.45	2.25	3	1
1:A:82:LEU:HD22	1:A:84:PHE:CE1	0.45	2.47	3	1
1:A:63:GLN:CD	1:A:87:VAL:HG11	0.45	2.30	5	1
1:A:115:PHE:CD2	1:A:123:ILE:CD1	0.45	2.99	4	1
1:A:6:ILE:N	1:A:40:ILE:HG22	0.45	2.26	4	1
1:A:56:GLU:OE1	1:A:56:GLU:C	0.45	2.56	10	6
1:A:51:VAL:O	1:A:54:LEU:HB2	0.45	2.12	7	7
1:A:22:ARG:N	1:A:103:GLU:OE2	0.45	2.49	16	2
1:A:4:LEU:HD23	3:A:130:APC:H5'1	0.45	1.88	3	1
1:A:14:GLU:CB	1:A:17:GLU:OE1	0.45	2.65	5	1
1:A:119:ASN:HB3	1:A:123:ILE:HD13	0.45	1.89	13	1
1:A:107:LEU:HD11	1:A:110:LEU:CG	0.45	2.42	15	1
1:A:10:ILE:HG22	1:A:18:ILE:HB	0.45	1.89	7	2
1:A:4:LEU:HG	3:A:130:APC:H5'1	0.45	1.89	7	3
1:A:35:PHE:CE2	1:A:119:ASN:HB2	0.45	2.46	7	2
3:A:130:APC:PA	3:A:130:APC:H3'	0.45	2.51	3	1
1:A:19:PHE:CD2	1:A:97:LYS:HG2	0.45	2.46	9	1
1:A:109:GLY:HA2	1:A:129:LEU:OXT	0.45	2.12	13	1
1:A:97:LYS:O	1:A:98:GLU:O	0.45	2.34	15	1
1:A:23:ARG:O	1:A:25:ALA:O	0.44	2.35	12	1
1:A:48:GLN:O	1:A:52:ARG:HG2	0.44	2.13	8	1
1:A:83:TRP:HB3	1:A:85:TRP:CD1	0.44	2.47	8	1
1:A:100:GLN:HG3	1:A:101:PRO:CD	0.44	2.42	12	1
1:A:42:MET:O	1:A:43:GLY:C	0.44	2.56	7	4
1:A:6:ILE:CG1	3:A:130:APC:N7	0.44	2.80	9	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:4:LEU:CD2	1:A:5:GLN:O	0.44	2.65	15	3
1:A:41:GLU:HG2	1:A:42:MET:N	0.44	2.27	3	1
1:A:62:PRO:CB	1:A:89:ARG:HD2	0.44	2.42	5	1
1:A:93:GLU:HB2	1:A:94:PRO:HD2	0.44	1.90	5	1
1:A:58:VAL:CG2	1:A:97:LYS:HE3	0.44	2.42	13	1
1:A:82:LEU:O	1:A:84:PHE:CE1	0.44	2.70	11	1
1:A:39:LYS:HB2	3:A:130:APC:H3A2	0.44	1.89	14	3
1:A:78:ARG:NH1	1:A:78:ARG:HG3	0.44	2.27	6	1
1:A:37:GLY:C	1:A:98:GLU:HG3	0.44	2.33	16	1
1:A:41:GLU:O	1:A:42:MET:C	0.44	2.52	16	2
1:A:7:ALA:HB1	1:A:50:VAL:CA	0.44	2.42	4	1
1:A:105:MET:C	1:A:105:MET:SD	0.44	2.95	10	3
1:A:20:ILE:O	1:A:22:ARG:N	0.44	2.50	10	1
1:A:4:LEU:HG	3:A:130:APC:H5'2	0.44	1.90	13	5
1:A:6:ILE:CG2	1:A:82:LEU:HG	0.44	2.42	12	1
1:A:64:HIS:CB	1:A:89:ARG:HG2	0.44	2.42	3	1
1:A:13:ASN:CB	1:A:90:TRP:CZ3	0.44	3.00	4	1
1:A:35:PHE:CE2	1:A:115:PHE:CZ	0.44	3.05	10	1
1:A:21:THR:HG21	1:A:100:GLN:NE2	0.44	2.28	12	1
1:A:91:GLU:HG3	1:A:91:GLU:O	0.44	2.11	12	1
1:A:98:GLU:CG	1:A:99:GLY:N	0.44	2.80	9	1
1:A:7:ALA:HB1	1:A:50:VAL:HA	0.44	1.89	4	1
3:A:130:APC:O3G	3:A:130:APC:H3'	0.44	2.12	14	1
1:A:107:LEU:CD2	1:A:110:LEU:HG	0.44	2.42	8	1
1:A:107:LEU:C	1:A:108:VAL:HG23	0.44	2.33	3	2
1:A:9:GLY:O	1:A:10:ILE:C	0.44	2.54	16	8
1:A:97:LYS:HD3	1:A:97:LYS:O	0.44	2.13	1	2
1:A:31:ASN:ND2	1:A:31:ASN:O	0.44	2.50	16	1
1:A:57:GLU:CD	1:A:98:GLU:OE2	0.44	2.56	16	1
1:A:38:GLY:CA	1:A:98:GLU:HG2	0.44	2.43	7	1
1:A:91:GLU:HG3	1:A:92:GLY:N	0.44	2.28	5	1
1:A:104:TRP:CD1	1:A:104:TRP:N	0.44	2.82	4	1
1:A:40:ILE:HG13	1:A:49:ALA:CB	0.44	2.43	4	1
1:A:18:ILE:CG1	1:A:20:ILE:HB	0.44	2.43	14	1
1:A:38:GLY:C	1:A:53:GLU:OE1	0.44	2.56	8	1
1:A:119:ASN:O	1:A:123:ILE:HB	0.44	2.13	3	3
1:A:115:PHE:CB	1:A:123:ILE:HG13	0.44	2.43	9	2
1:A:16:ASN:C	1:A:17:GLU:OE1	0.44	2.56	7	3
1:A:13:ASN:CG	1:A:90:TRP:CH2	0.44	2.90	5	1
1:A:62:PRO:HB2	1:A:89:ARG:O	0.44	2.13	12	9
1:A:74:GLU:OE2	1:A:79:HIS:CE1	0.44	2.71	5	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:ILE:CD1	1:A:36:PRO:HD3	0.44	2.43	15	1
1:A:87:VAL:CG2	1:A:88:GLU:N	0.44	2.81	3	2
1:A:56:GLU:C	1:A:56:GLU:OE1	0.44	2.56	14	6
1:A:33:LEU:HD13	1:A:110:LEU:CD2	0.43	2.35	10	1
1:A:12:ARG:NE	1:A:86:LEU:HD12	0.43	2.28	10	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:19:PHE:HB2	0.43	2.43	16	2
1:A:84:PHE:CZ	1:A:122:VAL:CG1	0.43	2.98	14	2
1:A:112:ALA:HA	1:A:123:ILE:CG2	0.43	2.43	16	2
1:A:38:GLY:N	1:A:98:GLU:CD	0.43	2.72	16	1
1:A:19:PHE:CD2	1:A:94:PRO:CB	0.43	3.01	3	1
1:A:22:ARG:HB2	1:A:105:MET:HE3	0.43	1.90	13	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:90:TRP:HB2	0.43	2.43	15	1
1:A:54:LEU:CD1	1:A:95:TRP:CE2	0.43	3.00	8	1
1:A:48:GLN:CA	1:A:51:VAL:HG12	0.43	2.43	13	12
1:A:26:ASP:OD1	1:A:26:ASP:O	0.43	2.36	12	1
1:A:20:ILE:CD1	1:A:33:LEU:HB3	0.43	2.43	6	1
1:A:75:PHE:HB3	1:A:76:PRO:CD	0.43	2.33	2	1
1:A:82:LEU:HB3	1:A:84:PHE:CE1	0.43	2.48	16	1
1:A:18:ILE:CD1	1:A:107:LEU:CD2	0.43	2.96	7	1
1:A:34:GLU:HG2	1:A:35:PHE:CD1	0.43	2.48	9	3
1:A:22:ARG:HG3	1:A:22:ARG:O	0.43	2.13	15	2
1:A:128:ARG:O	1:A:129:LEU:O	0.43	2.36	3	2
1:A:53:GLU:O	1:A:56:GLU:OE2	0.43	2.36	3	1
1:A:10:ILE:HD12	1:A:12:ARG:HH21	0.43	1.67	9	1
1:A:58:VAL:HB	1:A:95:TRP:HB2	0.43	1.90	5	1
1:A:90:TRP:CD1	1:A:93:GLU:C	0.43	2.90	4	1
1:A:84:PHE:CE2	1:A:122:VAL:CG1	0.43	3.01	11	2
1:A:100:GLN:HG3	1:A:101:PRO:HD2	0.43	1.90	12	2
1:A:4:LEU:HD13	3:A:130:APC:H5'2	0.43	1.91	2	1
1:A:67:LEU:HB2	1:A:85:TRP:CZ3	0.43	2.48	4	2
1:A:112:ALA:O	1:A:113:ASP:C	0.43	2.56	10	2
1:A:19:PHE:CE1	1:A:102:GLY:C	0.43	2.92	3	1
1:A:63:GLN:CB	1:A:95:TRP:CZ2	0.43	3.02	3	1
1:A:62:PRO:C	1:A:63:GLN:CG	0.43	2.86	4	2
1:A:6:ILE:HB	1:A:82:LEU:HD12	0.43	1.91	12	1
1:A:36:PRO:HB2	1:A:96:GLY:O	0.43	2.14	8	2
1:A:35:PHE:CZ	1:A:119:ASN:HB2	0.43	2.48	13	2
1:A:3:LYS:HE2	1:A:5:GLN:OE1	0.43	2.14	15	1
1:A:107:LEU:CD1	1:A:110:LEU:HA	0.43	2.39	10	1
1:A:110:LEU:CD2	1:A:115:PHE:CZ	0.43	3.02	2	1
1:A:119:ASN:OD1	1:A:123:ILE:HG12	0.43	2.14	3	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:ARG:O	1:A:88:GLU:HA	0.43	2.14	5	1
1:A:112:ALA:HB2	1:A:127:LYS:CD	0.43	2.44	8	3
1:A:26:ASP:O	1:A:26:ASP:CG	0.43	2.57	12	1
1:A:74:GLU:CG	1:A:79:HIS:NE2	0.43	2.81	6	1
1:A:61:THR:HG22	1:A:62:PRO:HD3	0.43	1.90	4	4
1:A:82:LEU:O	1:A:83:TRP:C	0.43	2.57	7	1
1:A:39:LYS:C	1:A:53:GLU:OE1	0.43	2.57	8	1
1:A:58:VAL:HG22	1:A:97:LYS:NZ	0.43	2.27	11	1
1:A:111:ASN:O	1:A:112:ALA:C	0.43	2.56	10	1
1:A:14:GLU:HB2	1:A:17:GLU:CD	0.43	2.34	10	1
1:A:54:LEU:CG	1:A:95:TRP:CZ3	0.43	3.00	3	1
1:A:23:ARG:HD2	1:A:27:ALA:CB	0.43	2.44	15	3
1:A:70:LYS:HD2	1:A:83:TRP:CZ3	0.43	2.49	4	1
1:A:4:LEU:HD22	1:A:5:GLN:O	0.43	2.14	15	1
1:A:30:ALA:HB1	1:A:114:ASP:OD2	0.43	2.14	11	1
1:A:101:PRO:O	1:A:102:GLY:C	0.43	2.56	10	2
1:A:86:LEU:HA	1:A:86:LEU:HD13	0.43	1.68	13	4
1:A:30:ALA:O	1:A:114:ASP:HA	0.43	2.13	4	2
1:A:68:PHE:O	1:A:69:GLU:OE1	0.43	2.37	9	1
1:A:11:ILE:CG2	1:A:87:VAL:HG13	0.43	2.40	5	1
1:A:74:GLU:HG3	1:A:79:HIS:CD2	0.43	2.48	4	1
1:A:78:ARG:HD3	1:A:80:ILE:HD11	0.43	1.91	13	1
1:A:18:ILE:H	1:A:18:ILE:HD12	0.43	1.74	8	1
1:A:62:PRO:C	1:A:64:HIS:N	0.43	2.71	13	3
3:A:130:APC:H3'	3:A:130:APC:H3A1	0.43	1.89	16	3
1:A:74:GLU:CG	1:A:79:HIS:CD2	0.43	3.02	16	1
1:A:91:GLU:O	1:A:91:GLU:HG3	0.43	2.13	7	1
1:A:78:ARG:HB2	1:A:78:ARG:NH1	0.43	2.29	5	1
1:A:32:LYS:HD2	1:A:32:LYS:O	0.43	2.14	4	1
1:A:10:ILE:CD1	1:A:86:LEU:HD11	0.43	2.43	15	1
1:A:75:PHE:CD1	1:A:76:PRO:CD	0.43	3.02	8	1
1:A:20:ILE:HD12	1:A:21:THR:H	0.42	1.74	10	1
1:A:4:LEU:HD21	1:A:39:LYS:HD3	0.42	1.88	12	1
1:A:16:ASN:OD1	1:A:16:ASN:O	0.42	2.37	5	1
1:A:47:GLU:HG2	1:A:65:PHE:CZ	0.42	2.48	4	1
1:A:107:LEU:CD2	1:A:108:VAL:O	0.42	2.66	2	1
1:A:72:GLU:HG3	1:A:80:ILE:O	0.42	2.14	2	1
1:A:16:ASN:HB3	1:A:108:VAL:HA	0.42	1.90	16	1
1:A:39:LYS:HD3	3:A:130:APC:O1A	0.42	2.14	3	2
1:A:37:GLY:C	1:A:98:GLU:HG2	0.42	2.34	3	1
1:A:34:GLU:C	1:A:35:PHE:CD2	0.42	2.93	9	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:HIS:O	1:A:65:PHE:C	0.42	2.56	9	1
1:A:105:MET:CE	1:A:107:LEU:HB2	0.42	2.44	5	1
1:A:39:LYS:HD3	3:A:130:APC:H5'1	0.42	1.91	5	1
3:A:130:APC:O2A	3:A:130:APC:C3'	0.42	2.67	12	1
1:A:3:LYS:HD3	1:A:5:GLN:OE1	0.42	2.14	12	1
1:A:31:ASN:HA	1:A:114:ASP:O	0.42	2.13	16	3
1:A:115:PHE:HB3	1:A:123:ILE:HG13	0.42	1.91	9	1
1:A:71:LEU:CB	1:A:121:PRO:HB2	0.42	2.44	15	2
1:A:10:ILE:O	1:A:86:LEU:HA	0.42	2.14	8	1
1:A:4:LEU:C	1:A:4:LEU:CD1	0.42	2.73	12	3
1:A:16:ASN:ND2	1:A:107:LEU:HD23	0.42	2.28	5	1
1:A:37:GLY:C	1:A:98:GLU:HB2	0.42	2.33	13	2
1:A:111:ASN:O	1:A:127:LYS:HD2	0.42	2.15	14	1
1:A:11:ILE:HG13	1:A:19:PHE:HB2	0.42	1.90	5	3
1:A:20:ILE:HD11	1:A:115:PHE:CE2	0.42	2.47	2	1
1:A:61:THR:HG22	1:A:62:PRO:CD	0.42	2.45	4	3
1:A:28:HIS:O	1:A:29:MET:HG2	0.42	2.14	9	2
1:A:78:ARG:O	1:A:80:ILE:HD13	0.42	2.15	3	3
1:A:9:GLY:C	1:A:10:ILE:O	0.42	2.58	4	2
1:A:35:PHE:CE2	1:A:115:PHE:CE2	0.42	3.08	4	1
1:A:13:ASN:HB2	1:A:90:TRP:CZ3	0.42	2.49	15	1
1:A:112:ALA:HA	1:A:115:PHE:HB2	0.42	1.91	10	1
1:A:22:ARG:NH2	1:A:30:ALA:HA	0.42	2.29	10	1
1:A:33:LEU:HB2	1:A:115:PHE:HA	0.42	1.91	2	1
1:A:68:PHE:O	1:A:69:GLU:HG3	0.42	2.15	7	2
1:A:38:GLY:HA2	1:A:98:GLU:HG2	0.42	1.92	7	1
1:A:63:GLN:O	1:A:87:VAL:CG2	0.42	2.68	11	1
1:A:86:LEU:HD13	1:A:86:LEU:HA	0.42	1.69	9	4
1:A:103:GLU:O	1:A:103:GLU:CG	0.42	2.67	6	1
1:A:75:PHE:CB	1:A:78:ARG:HB2	0.42	2.45	6	1
1:A:17:GLU:OE1	1:A:105:MET:C	0.42	2.57	2	1
1:A:60:ILE:HG12	1:A:95:TRP:HB3	0.42	1.91	2	1
1:A:89:ARG:NE	1:A:89:ARG:O	0.42	2.53	9	1
1:A:30:ALA:O	1:A:114:ASP:CA	0.42	2.68	4	1
1:A:64:HIS:O	1:A:65:PHE:HB3	0.42	2.15	13	2
1:A:3:LYS:HE3	1:A:5:GLN:OE1	0.42	2.15	14	1
1:A:12:ARG:NH1	1:A:15:ASN:O	0.42	2.53	15	1
1:A:84:PHE:N	1:A:84:PHE:CD1	0.42	2.87	11	1
1:A:112:ALA:HB3	1:A:127:LYS:NZ	0.42	2.30	10	1
1:A:22:ARG:O	1:A:23:ARG:HG3	0.42	2.15	12	1
1:A:40:ILE:CD1	1:A:40:ILE:C	0.42	2.88	12	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:ILE:HG13	1:A:86:LEU:CD1	0.42	2.44	7	2
1:A:32:LYS:O	1:A:32:LYS:HD3	0.42	2.14	9	1
1:A:14:GLU:HB3	1:A:17:GLU:CD	0.42	2.35	14	1
1:A:98:GLU:HG2	3:A:130:APC:O2G	0.42	2.14	14	1
1:A:18:ILE:HG13	1:A:20:ILE:CB	0.42	2.45	15	1
1:A:22:ARG:HB3	1:A:103:GLU:OE2	0.42	2.14	10	2
1:A:55:GLN:O	1:A:56:GLU:C	0.42	2.58	10	2
1:A:63:GLN:O	1:A:64:HIS:O	0.42	2.37	10	1
1:A:20:ILE:O	1:A:103:GLU:HG3	0.42	2.15	6	1
1:A:27:ALA:O	1:A:28:HIS:C	0.42	2.57	16	4
1:A:97:LYS:O	1:A:97:LYS:CD	0.42	2.68	7	1
1:A:21:THR:OG1	1:A:101:PRO:HG2	0.42	2.15	3	3
1:A:89:ARG:O	1:A:89:ARG:HG3	0.42	2.15	3	2
1:A:18:ILE:O	1:A:104:TRP:HA	0.42	2.15	10	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:63:GLN:HB3	0.42	2.45	3	1
1:A:78:ARG:CG	1:A:78:ARG:NH1	0.42	2.83	9	1
1:A:13:ASN:OD1	1:A:17:GLU:HB2	0.42	2.15	4	1
1:A:70:LYS:HA	1:A:122:VAL:CG2	0.42	2.45	13	1
1:A:63:GLN:N	1:A:90:TRP:HA	0.42	2.29	13	1
3:A:130:APC:C3'	3:A:130:APC:O2A	0.42	2.67	14	1
1:A:17:GLU:OE2	1:A:106:SER:HA	0.42	2.15	8	1
3:A:130:APC:O3G	3:A:130:APC:O2A	0.42	2.38	8	1
1:A:107:LEU:HG	1:A:110:LEU:HG	0.41	1.91	10	1
1:A:103:GLU:O	1:A:103:GLU:HG3	0.41	2.15	6	1
1:A:21:THR:HB	1:A:100:GLN:HG2	0.41	1.92	6	1
1:A:69:GLU:OE2	1:A:125:LYS:HE2	0.41	2.15	2	1
1:A:126:LEU:HD13	1:A:126:LEU:H	0.41	1.73	7	1
1:A:75:PHE:HB2	1:A:78:ARG:O	0.41	2.15	5	2
1:A:120:GLU:O	1:A:124:ALA:N	0.41	2.53	8	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:95:TRP:CD2	0.41	3.02	8	1
1:A:4:LEU:CD1	1:A:80:ILE:HA	0.41	2.45	11	1
1:A:20:ILE:CD1	1:A:115:PHE:CE1	0.41	3.03	6	1
1:A:22:ARG:C	1:A:23:ARG:HG3	0.41	2.36	8	2
1:A:13:ASN:CG	1:A:13:ASN:O	0.41	2.59	2	1
1:A:22:ARG:HD2	1:A:33:LEU:CD2	0.41	2.42	9	1
1:A:112:ALA:HA	1:A:123:ILE:HG21	0.41	1.91	5	1
1:A:62:PRO:HG2	1:A:91:GLU:N	0.41	2.30	5	2
1:A:4:LEU:HD23	1:A:39:LYS:CE	0.41	2.45	8	2
1:A:111:ASN:C	1:A:113:ASP:N	0.41	2.74	10	1
1:A:79:HIS:CD2	1:A:79:HIS:N	0.41	2.88	15	2
1:A:12:ARG:O	1:A:88:GLU:HG2	0.41	2.14	2	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:LYS:HG2	1:A:41:GLU:OE1	0.41	2.14	16	2
1:A:22:ARG:NH1	1:A:30:ALA:O	0.41	2.53	13	1
1:A:12:ARG:HA	1:A:18:ILE:CA	0.41	2.45	14	1
1:A:3:LYS:CG	1:A:5:GLN:OE1	0.41	2.68	14	1
1:A:12:ARG:NE	1:A:86:LEU:CD1	0.41	2.83	10	1
1:A:6:ILE:N	1:A:81:THR:O	0.41	2.54	2	1
1:A:87:VAL:C	1:A:88:GLU:CG	0.41	2.89	4	2
1:A:124:ALA:HA	1:A:127:LYS:CE	0.41	2.46	7	1
1:A:82:LEU:CD2	1:A:84:PHE:CZ	0.41	3.03	7	2
1:A:119:ASN:C	1:A:121:PRO:HD2	0.41	2.35	3	1
1:A:110:LEU:CD2	1:A:123:ILE:HD11	0.41	2.46	9	1
1:A:126:LEU:H	1:A:126:LEU:HD13	0.41	1.75	5	1
1:A:28:HIS:C	1:A:29:MET:SD	0.41	2.99	4	1
1:A:38:GLY:HA3	1:A:57:GLU:OE2	0.41	2.15	4	1
1:A:68:PHE:CE1	1:A:126:LEU:CD1	0.41	3.04	13	1
1:A:16:ASN:O	1:A:16:ASN:CG	0.41	2.56	14	1
1:A:111:ASN:OD1	1:A:127:LYS:HA	0.41	2.16	10	1
1:A:72:GLU:CG	1:A:80:ILE:O	0.41	2.68	2	1
1:A:35:PHE:CD2	1:A:115:PHE:CE1	0.41	3.09	16	1
1:A:74:GLU:HG3	1:A:79:HIS:NE2	0.41	2.30	7	1
1:A:12:ARG:NH2	1:A:129:LEU:HD11	0.41	2.31	10	1
1:A:34:GLU:C	1:A:35:PHE:CD1	0.41	2.93	10	1
1:A:115:PHE:HB3	1:A:123:ILE:HG12	0.41	1.90	16	1
1:A:30:ALA:O	1:A:31:ASN:CG	0.41	2.59	16	1
1:A:38:GLY:CA	1:A:98:GLU:CG	0.41	2.98	16	1
1:A:51:VAL:O	1:A:55:GLN:HG3	0.41	2.15	13	1
1:A:76:PRO:C	1:A:77:ASP:CG	0.41	2.78	14	1
1:A:20:ILE:CG1	1:A:21:THR:N	0.41	2.83	11	2
1:A:69:GLU:HG3	1:A:70:LYS:N	0.41	2.29	15	1
1:A:78:ARG:NH2	1:A:78:ARG:HG2	0.41	2.30	12	1
1:A:19:PHE:CD2	1:A:102:GLY:HA3	0.41	2.51	16	1
1:A:5:GLN:O	1:A:39:LYS:HE3	0.41	2.16	1	1
1:A:19:PHE:CD1	1:A:103:GLU:HA	0.41	2.51	10	2
1:A:70:LYS:HE3	1:A:81:THR:HG22	0.41	1.92	6	1
1:A:109:GLY:C	1:A:110:LEU:O	0.41	2.59	16	1
1:A:36:PRO:HB2	1:A:97:LYS:HA	0.41	1.92	16	1
1:A:35:PHE:CD2	1:A:84:PHE:CZ	0.41	3.09	1	1
1:A:39:LYS:HG2	3:A:130:APC:O2B	0.41	2.16	1	2
1:A:4:LEU:HD22	1:A:5:GLN:CA	0.41	2.45	1	1
1:A:116:PRO:O	1:A:123:ILE:HD13	0.41	2.16	5	1
1:A:30:ALA:O	1:A:114:ASP:O	0.41	2.39	4	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:ILE:HG21	1:A:18:ILE:HD12	0.41	1.93	15	1
1:A:22:ARG:HB3	1:A:103:GLU:CG	0.41	2.46	6	1
3:A:130:APC:O1A	3:A:130:APC:O2B	0.41	2.39	16	1
1:A:68:PHE:CE2	1:A:126:LEU:CD1	0.41	3.03	7	1
1:A:97:LYS:HB3	1:A:102:GLY:HA3	0.41	1.93	3	1
1:A:77:ASP:O	1:A:78:ARG:HD2	0.41	2.16	9	1
1:A:115:PHE:HB3	1:A:123:ILE:CG1	0.41	2.46	13	1
1:A:55:GLN:O	1:A:57:GLU:N	0.41	2.54	13	1
1:A:111:ASN:HA	1:A:127:LYS:HA	0.41	1.91	14	1
1:A:22:ARG:HG3	1:A:23:ARG:N	0.41	2.30	11	1
1:A:62:PRO:CG	1:A:91:GLU:CB	0.41	2.98	3	2
1:A:51:VAL:O	1:A:55:GLN:CG	0.41	2.69	3	1
1:A:43:GLY:C	1:A:44:GLU:HG2	0.41	2.37	9	1
1:A:4:LEU:C	1:A:5:GLN:OE1	0.41	2.59	5	1
1:A:58:VAL:HG11	1:A:93:GLU:CD	0.41	2.36	8	1
1:A:22:ARG:HD3	1:A:105:MET:CG	0.41	2.46	11	1
1:A:54:LEU:HG	1:A:63:GLN:OE1	0.40	2.16	10	1
1:A:4:LEU:CD1	1:A:80:ILE:HG13	0.40	2.47	10	1
1:A:20:ILE:HD11	1:A:33:LEU:HB3	0.40	1.91	6	1
1:A:17:GLU:OE1	1:A:106:SER:HA	0.40	2.16	7	1
1:A:98:GLU:CG	3:A:130:APC:PG	0.40	3.09	5	1
1:A:64:HIS:O	1:A:87:VAL:HB	0.40	2.16	5	1
1:A:46:PRO:O	1:A:50:VAL:CG1	0.40	2.69	4	1
1:A:33:LEU:HB2	1:A:114:ASP:O	0.40	2.17	11	1
1:A:64:HIS:HB2	1:A:89:ARG:CG	0.40	2.45	12	1
1:A:63:GLN:HA	1:A:90:TRP:CA	0.40	2.46	13	1
1:A:107:LEU:CG	1:A:110:LEU:HA	0.40	2.47	10	1
1:A:38:GLY:HA2	1:A:98:GLU:CD	0.40	2.37	10	1
1:A:5:GLN:O	1:A:39:LYS:CE	0.40	2.69	10	1
1:A:60:ILE:HG12	1:A:95:TRP:CD1	0.40	2.51	10	1
1:A:4:LEU:CD2	1:A:39:LYS:CE	0.40	2.99	12	1
3:A:130:APC:PG	3:A:130:APC:O1A	0.40	2.79	6	1
1:A:107:LEU:HD22	1:A:110:LEU:CA	0.40	2.44	2	1
1:A:62:PRO:CD	1:A:91:GLU:HB3	0.40	2.46	7	2
1:A:15:ASN:C	1:A:15:ASN:OD1	0.40	2.59	1	1
1:A:39:LYS:HE2	1:A:40:ILE:O	0.40	2.17	5	1
1:A:22:ARG:CB	1:A:105:MET:HE3	0.40	2.45	13	1
1:A:60:ILE:HB	1:A:91:GLU:HG2	0.40	1.93	15	1
1:A:33:LEU:O	1:A:115:PHE:HD1	0.40	1.97	10	1
1:A:117:PRO:O	1:A:120:GLU:HG3	0.40	2.17	12	1
1:A:52:ARG:HD3	1:A:55:GLN:NE2	0.40	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:39:LYS:HD3	3:A:130:APC:H5'2	0.40	1.93	2	1
1:A:22:ARG:CZ	1:A:114:ASP:OD2	0.40	2.69	16	1
1:A:3:LYS:HE2	1:A:5:GLN:NE2	0.40	2.32	1	1
1:A:19:PHE:CE2	1:A:94:PRO:CG	0.40	3.05	3	1
1:A:77:ASP:C	1:A:77:ASP:OD1	0.40	2.60	3	1
1:A:97:LYS:HB2	1:A:100:GLN:O	0.40	2.16	15	1
1:A:123:ILE:CG2	1:A:123:ILE:O	0.40	2.69	8	1
1:A:5:GLN:O	1:A:39:LYS:HD2	0.40	2.16	10	1
1:A:125:LYS:O	1:A:128:ARG:HG3	0.40	2.16	4	1
1:A:47:GLU:O	1:A:49:ALA:N	0.40	2.55	4	1
1:A:117:PRO:HA	1:A:120:GLU:CD	0.40	2.36	8	1

## 6.3 Torsion angles [i](#)

### 6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	126/129 (98%)	70±2 (56±2%)	34±3 (27±3%)	21±3 (17±2%)	0	3
All	All	2016/2064 (98%)	1125 (56%)	548 (27%)	343 (17%)	0	3

All 46 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	60	ILE	16
1	A	41	GLU	16
1	A	15	ASN	16
1	A	110	LEU	16
1	A	61	THR	16
1	A	109	GLY	15
1	A	69	GLU	14
1	A	102	GLY	14
1	A	92	GLY	14
1	A	63	GLN	14
1	A	95	TRP	13

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	23	ARG	13
1	A	108	VAL	13
1	A	57	GLU	12
1	A	10	ILE	10
1	A	39	LYS	10
1	A	9	GLY	10
1	A	44	GLU	9
1	A	37	GLY	9
1	A	58	VAL	9
1	A	94	PRO	9
1	A	98	GLU	8
1	A	30	ALA	7
1	A	62	PRO	6
1	A	13	ASN	5
1	A	36	PRO	5
1	A	64	HIS	4
1	A	34	GLU	4
1	A	59	GLY	4
1	A	8	VAL	4
1	A	77	ASP	4
1	A	47	GLU	3
1	A	97	LYS	3
1	A	27	ALA	3
1	A	91	GLU	2
1	A	42	MET	2
1	A	25	ALA	2
1	A	100	GLN	1
1	A	26	ASP	1
1	A	38	GLY	1
1	A	21	THR	1
1	A	101	PRO	1
1	A	75	PHE	1
1	A	28	HIS	1
1	A	29	MET	1
1	A	65	PHE	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	108/110 (98%)	65±3 (61±3%)	43±3 (39±3%)	1	5
All	All	1728/1760 (98%)	1046 (61%)	682 (39%)	1	5

All 85 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	82	LEU	16
1	A	95	TRP	16
1	A	10	ILE	16
1	A	126	LEU	16
1	A	4	LEU	16
1	A	40	ILE	16
1	A	78	ARG	16
1	A	68	PHE	16
1	A	89	ARG	16
1	A	6	ILE	15
1	A	73	TYR	15
1	A	71	LEU	15
1	A	55	GLN	15
1	A	110	LEU	15
1	A	66	SER	14
1	A	97	LYS	14
1	A	23	ARG	14
1	A	70	LYS	13
1	A	105	MET	13
1	A	54	LEU	13
1	A	67	LEU	13
1	A	128	ARG	13
1	A	87	VAL	13
1	A	56	GLU	12
1	A	113	ASP	12
1	A	13	ASN	11
1	A	63	GLN	11
1	A	8	VAL	11
1	A	106	SER	10
1	A	91	GLU	10
1	A	18	ILE	10
1	A	64	HIS	9
1	A	32	LYS	9
1	A	28	HIS	9
1	A	75	PHE	9
1	A	100	GLN	8

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	21	THR	8
1	A	44	GLU	8
1	A	120	GLU	8
1	A	77	ASP	8
1	A	35	PHE	8
1	A	26	ASP	7
1	A	47	GLU	7
1	A	42	MET	7
1	A	107	LEU	7
1	A	79	HIS	7
1	A	80	ILE	7
1	A	12	ARG	7
1	A	69	GLU	6
1	A	119	ASN	6
1	A	29	MET	6
1	A	16	ASN	6
1	A	65	PHE	6
1	A	81	THR	5
1	A	123	ILE	5
1	A	11	ILE	5
1	A	31	ASN	5
1	A	5	GLN	4
1	A	127	LYS	4
1	A	17	GLU	4
1	A	115	PHE	4
1	A	34	GLU	4
1	A	52	ARG	4
1	A	93	GLU	4
1	A	114	ASP	4
1	A	111	ASN	4
1	A	104	TRP	3
1	A	129	LEU	3
1	A	14	GLU	3
1	A	3	LYS	3
1	A	74	GLU	3
1	A	60	ILE	3
1	A	39	LYS	3
1	A	57	GLU	2
1	A	15	ASN	2
1	A	125	LYS	2
1	A	103	GLU	2
1	A	36	PRO	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	98	GLU	1
1	A	48	GLN	1
1	A	20	ILE	1
1	A	62	PRO	1
1	A	116	PRO	1
1	A	101	PRO	1
1	A	88	GLU	1

### 6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

## 6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no carbohydrates in this entry.

## 6.6 Ligand geometry ⓘ

Of 3 ligands modelled in this entry, 1 is monoatomic - leaving 2 for Mogul analysis.

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths		
					Counts	RMSZ	#Z>2
3	APC	A	130	4	29,33,33	8.19±0.06	2±0 (6±0%)
4	CON	A	131	3	0,4,4	0.00±0.00	-

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	APC	A	130	4	29,52,52	1.10±0.02	0±0 (0±0%)
4	CON	A	131	3	0,6,6	0.00±0.00	-

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	APC	A	130	4	-	0±0,15,38,38	0±0,3,3,3
4	CON	A	131	3	-	0±0,0,0,0	0±0,0,0,0

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	130	APC	PA-C3A	31.05	1.47	1.80	12	16
3	A	130	APC	PB-C3A	30.67	1.48	1.80	4	16

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

## 6.7 Other polymers

There are no such molecules in this entry.

## 6.8 Polymer linkage issues

There are no chain breaks in this entry.



## 7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided