Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Feb 20, 2022 – 01:48 AM EST

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*
A user guide is available at
https://www.wwpdb.org/validation/2017/NMRValidationReportHelp
with specific help available everywhere you see the (i) symbol.

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

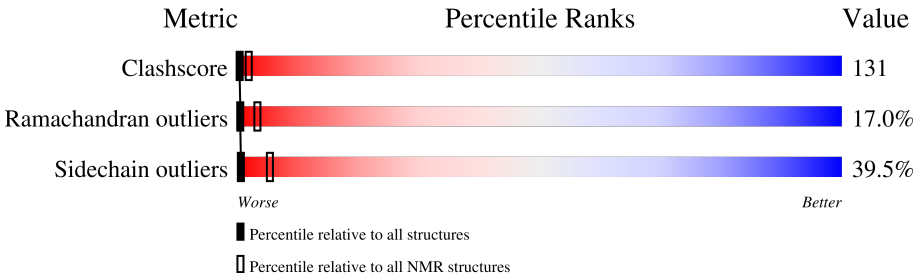
MolProbity	:	4.02b-467
Mogul	:	1.8.5 (274361), CSD as541be (2020)
buster-report	:	1.1.7 (2018)
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
ShiftChecker	:	2.26
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.26

1 Overall quality at a glance (i)

The following experimental techniques were used to determine the structure:
SOLUTION NMR

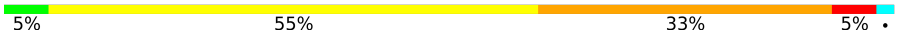
The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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	158937	12864
Ramachandran outliers	154571	11451
Sidechain outliers	154315	11428

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 <=5%

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	129	

2 Ensemble composition and analysis (i)

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 (i)

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

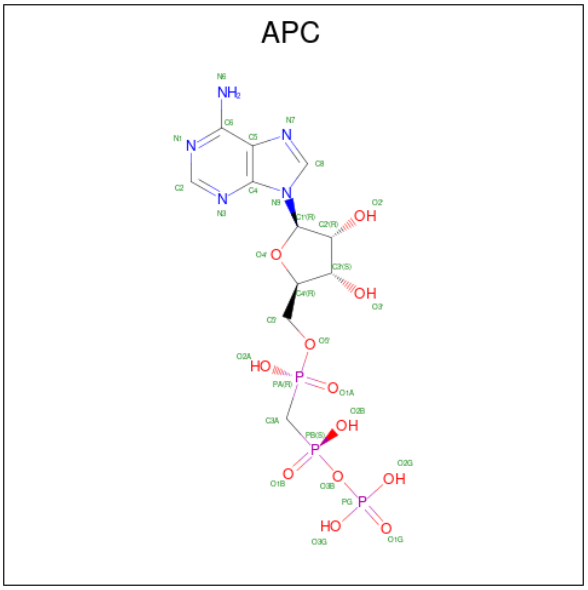
- Molecule 1 is a protein called MUTATOR MUTT PROTEIN.

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

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

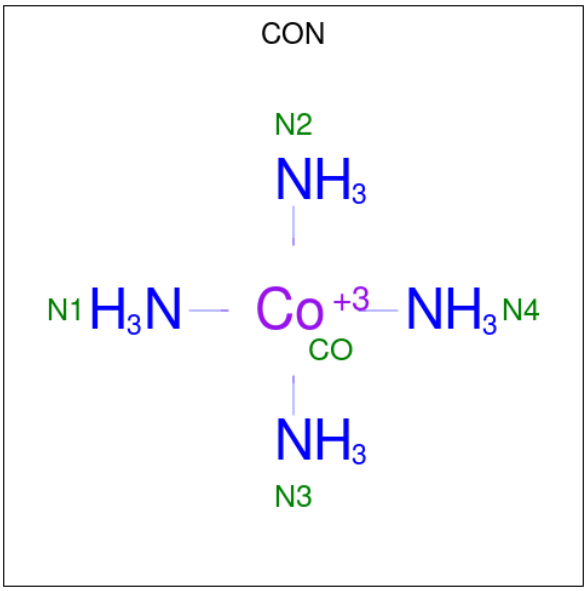
Mol	Chain	Residues	Atoms	
			Total	Mg
2	A	1	1	1

- Molecule 3 is DIPHOSPHOMETHYLPHOSPHONIC ACID ADENOSYL ESTER (three-letter code: APC) (formula: $C_{11}H_{18}N_5O_{12}P_3$).



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

- Molecule 4 is COBALT TETRAAMMINE ION (three-letter code: CON) (formula: $CoH_{12}N_4$).



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

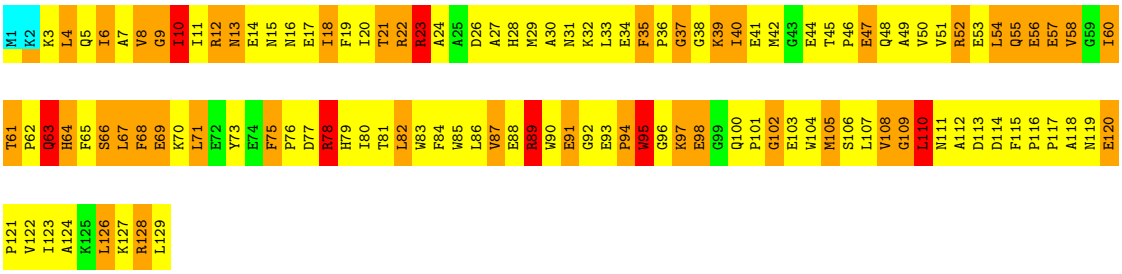
4 Residue-property plots (i)

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: MUTATOR MUTT PROTEIN

Chain A: 5% 55% 33% 5% •



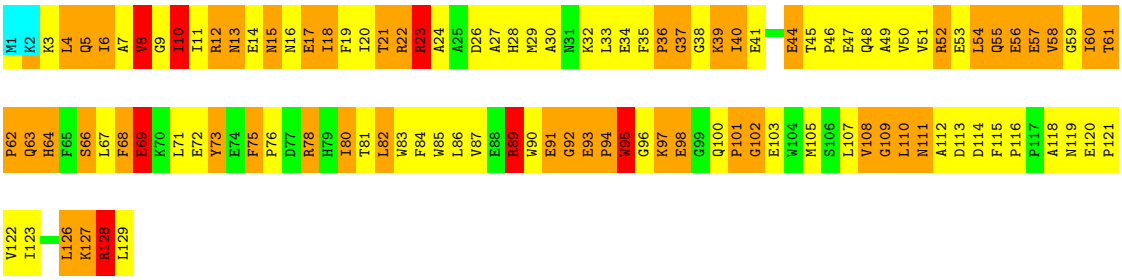
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: MUTATOR MUTT PROTEIN

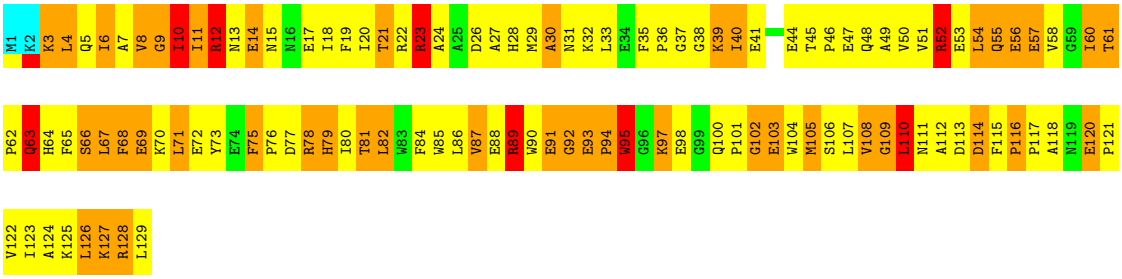
Chain A: 12% 44% 36% 5% •



4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: MUTATOR MUTT PROTEIN

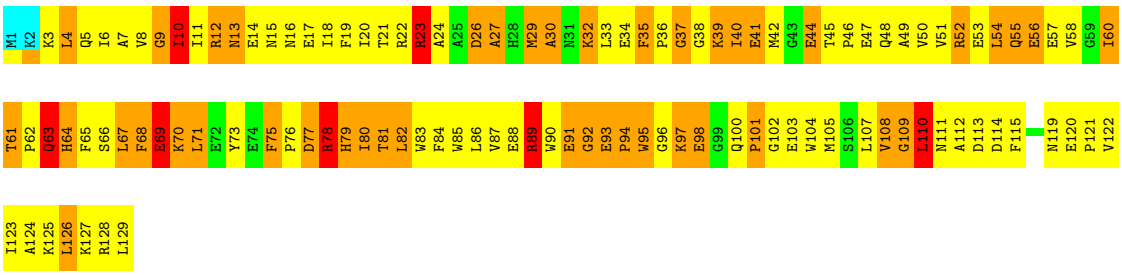
Chain A: 9% 50% 34% 6%



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: MUTATOR MUTT PROTEIN

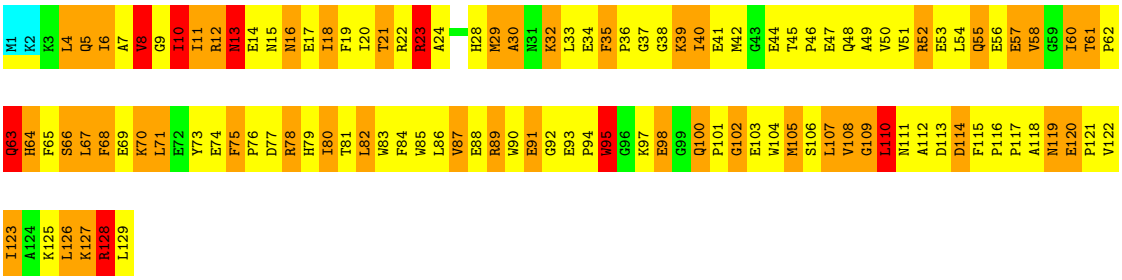
Chain A: 9% 50% 33% 5%



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: MUTATOR MUTT PROTEIN

Chain A: 9% 48% 36% 6%



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: MUTATOR MUTT PROTEIN

Chain A: 9% 50% 33% 7%

M1 K2 K3 L4 Q5 I6 A7 V8 G9 I10 I11 R12 N13 E14 N15 N16 E17 I18 F19 I20 T21 R22 R23 A24 A25 D26 A27 H28 M29 A30 L33 E34 F35 P36 G37 G38 K39 I40 E41 T45 P46 E47 Q48 A49 V50 V51 R52 E53 L54 Q55 E56 E57 V58 G59 I60 T61 P62 Q63

H64 F65 S66 L67 F68 E69 K70 L71 E72 Y73 E74 F75 P76 D77 R78 H79 I80 T81 L82 W83 F84 W85 L86 V87 E88 R89 W90 E91 G92 E93 P94 W95 G96 K97 E98 P101 G102 E103 W104 M105 S106 L107 V108 G109 L110 N111 A112 D113 D114 F115 P116 P117 A118 N119 E120 P121 V122 I123

L126 K127 R128 L129

4.2.6 Score per residue for model 6 (medoid)

- Molecule 1: MUTATOR MUTT PROTEIN

Chain A: 8% 53% 33%

M1 K2 K3 L4 Q5 I6 A7 V8 G9 I10 I11 R12 N13 E14 N15 N16 E17 I18 F19 I20 T21 R22 R23 A24 A27 H28 M29 A30 N31 K32 L33 E34 F35 P36 G37 G38 K39 I40 E41 M42 G43 E44 T45 P46 E47 Q48 A49 V50 V51 R52 E53 L54 Q55 E56 E57 V58 G59 I60 T61

P62 Q63 H64 F65 S66 L67 F68 E69 K70 L71 E72 Y73 E74 F75 P76 D77 R78 H79 I80 T81 L82 W83 F84 W85 L86 V87 E88 R89 W90 E91 G92 E93 P94 W95 G96 K97 E98 G99 Q100 P101 G102 E103 W104 M105 S106 L107 V108 G109 L110 N111 A112 D113 D114 F115 N119 E120 P121 V122 I123

A124 K125 L126 K127 R128 L129

4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: MUTATOR MUTT PROTEIN

Chain A: 7% 50% 36% 6%

M1 K2 K3 L4 Q5 I6 A7 V8 G9 I10 I11 R12 N13 E14 N15 N16 E17 I18 F19 I20 T21 R22 R23 A27 H28 M29 A30 N31 K32 L33 E34 F35 P36 G37 G38 K39 I40 E41 M42 G43 P46 E47 Q48 A49 V50 V51 R52 E53 L54 Q55 E56 E57 V58 G59 I60 T61 P62 Q63

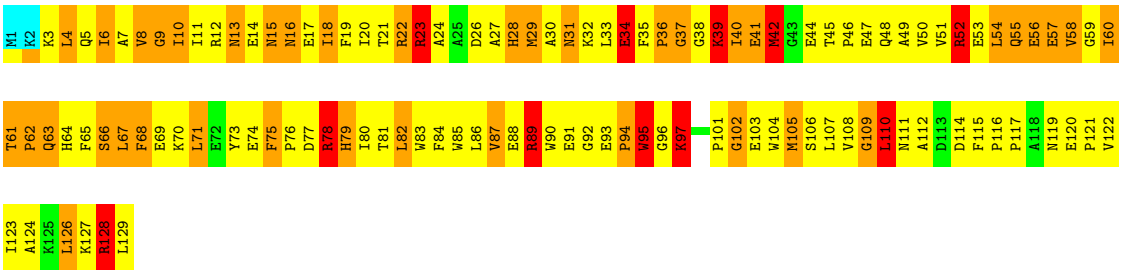
H64 F65 S66 L67 F68 E69 K70 L71 E72 Y73 E74 F75 P76 D77 R78 H79 I80 T81 L82 W83 F84 W85 L86 V87 E88 R89 W90 E91 G92 E93 P94 W95 G96 K97 E98 G99 Q100 P101 G102 E103 W104 M105 S106 L107 V108 G109 L110 N111 A112 D113 D114 F115 P116 P117 A118 N119 E120 P121 V122 I123

A124 K125 L126 K127 R128 L129

4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: MUTATOR MUTT PROTEIN

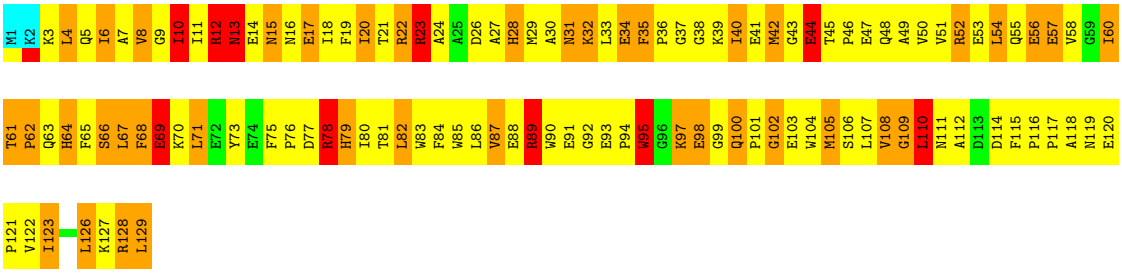
Chain A: 7% 53% 30% 9%



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: MUTATOR MUTT PROTEIN

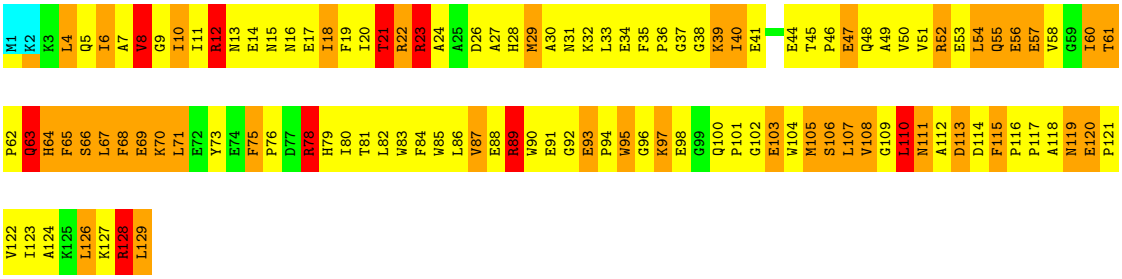
Chain A: 6% 53% 31% 8%



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: MUTATOR MUTT PROTEIN

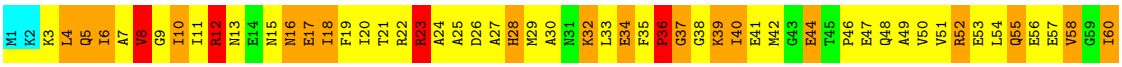
Chain A: 8% 52% 32% 7%

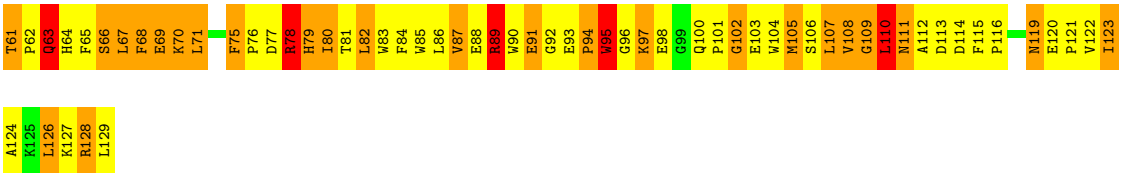


4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: MUTATOR MUTT PROTEIN

Chain A: 9% 49% 33% 7%

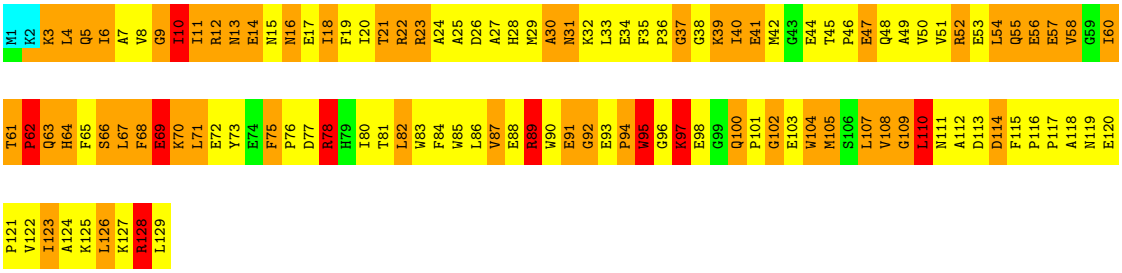




4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: MUTATOR MUTT PROTEIN

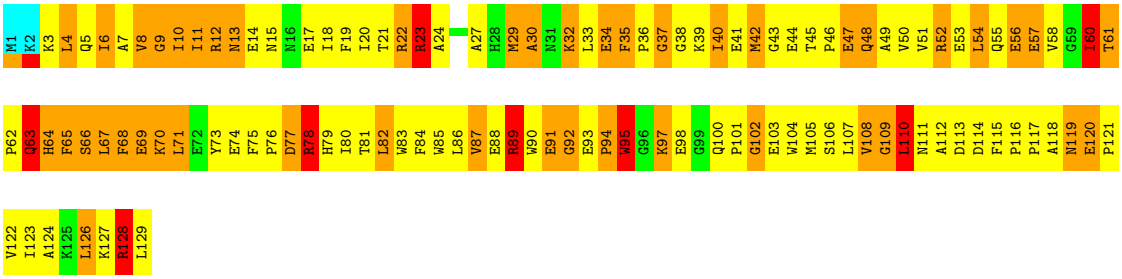
Chain A: 5% 47% 40% 7%



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: MUTATOR MUTT PROTEIN

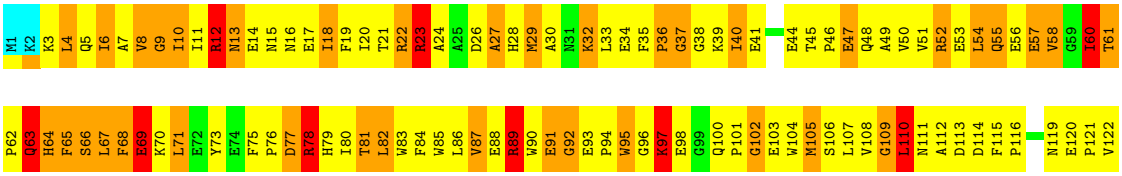
Chain A: 8% 50% 35% 6%

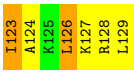


4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: MUTATOR MUTT PROTEIN

Chain A: 9% 53% 30% 7%

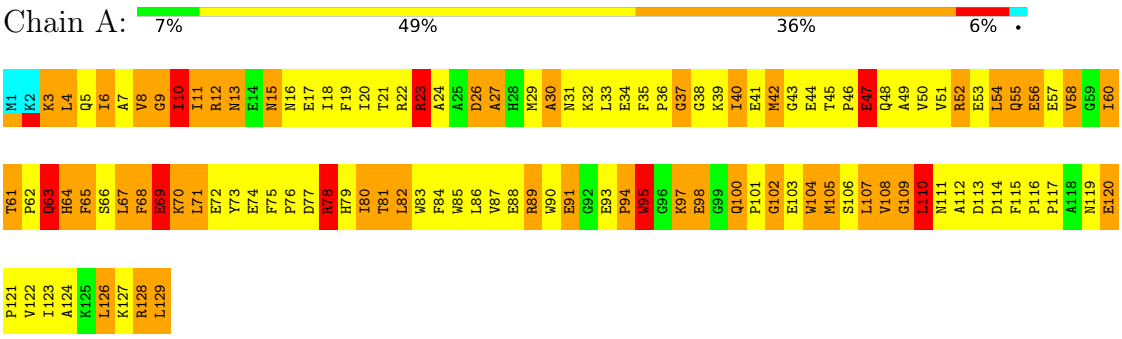




4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: MUTATOR MUTT PROTEIN

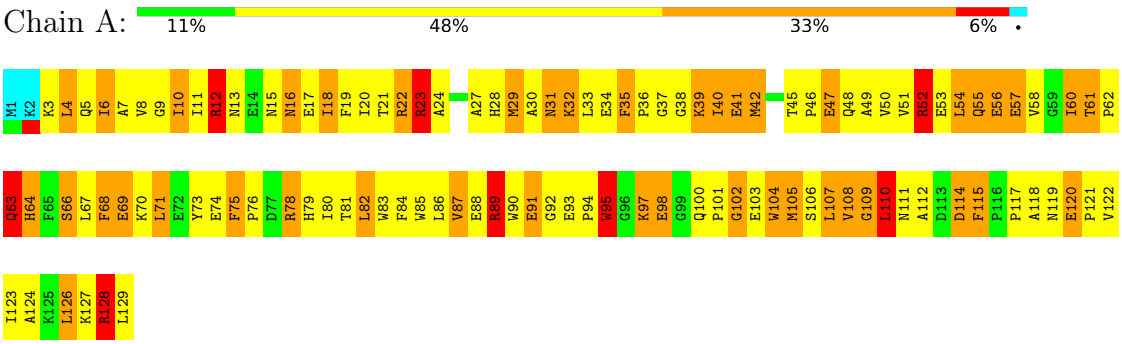
Chain A:



4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: MUTATOR MUTT PROTEIN

Chain A:



5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

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.

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	12	ARG	Sidechain	15
1	A	23	ARG	Sidechain	15
1	A	128	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	11
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:O	1:A:107:LEU:HD22	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: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	12
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
1:A:4:LEU:CD1	1:A:80:ILE:HD12	0.85	2.02	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
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: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:54:LEU:HD12	1:A:95:TRP:CG	0.84	2.08	10	11
1:A:4:LEU:C	1:A:4:LEU:HD22	0.84	1.92	15	8
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: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:11:ILE:HG22	1:A:87:VAL:HG13	0.79	1.50	1	8
1:A:33:LEU:CD1	1:A:110:LEU:HD21	0.79	2.08	10	2
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:HD13	1:A:4:LEU:C	0.76	2.00	12	7
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:HD12	1:A:71:LEU:O	0.76	1.81	2	14
1:A:82:LEU:HD23	1:A:84:PHE:CZ	0.76	2.16	15	1
1:A:67:LEU:HD13	1:A:69:GLU:N	0.75	1.96	1	3
1:A:75:PHE:CB	1:A:76:PRO:CD	0.75	2.64	2	3
1:A:84:PHE:CE2	1:A:122:VAL:HG11	0.74	2.18	13	13
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
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:4:LEU:HD11	3:A:130:APC:C8	0.73	2.13	16	7
1:A:126:LEU:HD13	1:A:126:LEU:N	0.73	1.98	14	13
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:107:LEU:HD21	1:A:110:LEU:CA	0.72	2.15	4	6
1:A:107:LEU:HD13	1:A:107:LEU:C	0.72	2.06	10	2
1:A:4:LEU:HD22	3:A:130:APC:O4'	0.71	1.85	9	4
1:A:115:PHE:HE2	1:A:126:LEU:HD23	0.71	1.44	10	1
1:A:8:VAL:HG22	1:A:9:GLY:N	0.71	1.99	10	10
1:A:4:LEU:HD22	1:A:4:LEU:C	0.71	2.03	8	3
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: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	7
1:A:107:LEU:HD23	1:A:107:LEU:C	0.69	2.08	3	6
1:A:90:TRP:CZ2	1:A:104:TRP:CD1	0.69	2.80	13	10
1:A:29:MET:O	1:A:30:ALA:HB2	0.69	1.86	2	7
1:A:60:ILE:HD11	1:A:63:GLN:HB3	0.69	1.63	13	2
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:120:GLU:N	1:A:121:PRO:CD	0.68	2.57	2	16
1:A:58:VAL:HG21	1:A:95:TRP:HA	0.68	1.65	14	9
1:A:107:LEU:HD22	1:A:107:LEU:C	0.68	2.09	16	2
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
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:7:ALA:HB2	1:A:40:ILE:CB	0.67	2.20	16	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:MET:O	1:A:30:ALA:CB	0.67	2.43	15	10
1:A:40:ILE:CG1	1:A:49:ALA:HB1	0.67	2.20	5	6
1:A:20:ILE:CD1	1:A:115:PHE:CE2	0.67	2.78	2	1
1:A:29:MET:O	1:A:30:ALA:HB3	0.67	1.90	14	4
1:A:115:PHE:HB3	1:A:123:ILE:HD13	0.67	1.65	10	1
1:A:91:GLU:O	1:A:93:GLU:N	0.67	2.28	1	14
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: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:35:PHE:CZ	1:A:119:ASN:ND2	0.65	2.65	6	3
1:A:4:LEU:HD21	1:A:39:LYS:CD	0.65	2.22	12	1
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	12
1:A:107:LEU:O	1:A:108:VAL:CB	0.65	2.44	13	8
1:A:13:ASN:CB	1:A:90:TRP:CH2	0.65	2.80	13	5
1:A:107:LEU:HD11	1:A:110:LEU:HA	0.65	1.69	10	3
1:A:12:ARG:CB	1:A:18:ILE:HG22	0.65	2.22	14	1
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:9:GLY:HA2	1:A:85:TRP:N	0.64	2.06	6	16
1:A:49:ALA:O	1:A:53:GLU:CG	0.64	2.45	2	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
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: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:11:ILE:HD11	1:A:19:PHE:HB3	0.63	1.69	1	8
1:A:22:ARG:HD3	1:A:33:LEU:HD21	0.63	1.68	1	7
1:A:63:GLN:O	1:A:64:HIS:C	0.63	2.36	3	6
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:107:LEU:HD11	1:A:110:LEU:N	0.63	2.08	10	2
1:A:112:ALA:HB2	1:A:123:ILE:CG2	0.63	2.23	14	11
1:A:110:LEU:CD1	1:A:115:PHE:CE2	0.63	2.81	10	2
1:A:9:GLY:CA	1:A:85:TRP:N	0.63	2.61	15	16
1:A:84:PHE:CD1	1:A:122:VAL:HG11	0.63	2.28	8	3
1:A:110:LEU:CD2	1:A:115:PHE:CE2	0.63	2.82	8	2
1:A:75:PHE:CG	1:A:76:PRO:HD2	0.62	2.29	3	2
1:A:80:ILE:HD13	1:A:80:ILE:N	0.62	2.06	13	3
1:A:13:ASN:ND2	1:A:90:TRP:CH2	0.62	2.68	9	3
1:A:47:GLU:O	1:A:51:VAL:HG12	0.62	1.94	8	13
3:A:130:APC:O2A	4:A:131:CON:N3	0.62	2.31	2	7
1:A:33:LEU:O	1:A:115:PHE:CD2	0.62	2.53	15	8
1:A:67:LEU:O	1:A:68:PHE:HB3	0.62	1.93	3	16
1:A:50:VAL:HG22	1:A:54:LEU:CD2	0.62	2.25	9	4
1:A:110:LEU:CD2	1:A:115:PHE:CE1	0.62	2.80	4	5
1:A:107:LEU:HD21	1:A:110:LEU:N	0.62	2.09	4	5
1:A:4:LEU:C	1:A:4:LEU:CD2	0.62	2.68	16	8
1:A:60:ILE:CG1	1:A:95:TRP:CG	0.62	2.83	16	14
1:A:82:LEU:O	1:A:84:PHE:CD1	0.62	2.53	16	8
1:A:80:ILE:N	1:A:80:ILE:CD1	0.62	2.63	11	12
1:A:33:LEU:O	1:A:115:PHE:CE1	0.62	2.53	5	3
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:71:LEU:HD11	1:A:82:LEU:CB	0.61	2.25	15	4
1:A:107:LEU:O	1:A:108:VAL:HB	0.61	1.95	2	11
1:A:75:PHE:HB3	1:A:76:PRO:HD3	0.61	1.69	2	1
1:A:4:LEU:HD23	1:A:39:LYS:CD	0.61	2.25	16	3
1:A:4:LEU:HG	3:A:130:APC:O4'	0.61	1.95	6	12
1:A:68:PHE:CZ	1:A:126:LEU:CD1	0.61	2.84	4	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:PHE:CD2	1:A:94:PRO:HB2	0.61	2.30	3	1
1:A:36:PRO:CB	1:A:97:LYS:HA	0.61	2.25	9	5
1:A:10:ILE:O	1:A:86:LEU:HD13	0.61	1.95	10	5
1:A:89:ARG:O	1:A:89:ARG:CG	0.61	2.49	16	16
1:A:4:LEU:HD21	3:A:130:APC:H5'2	0.61	1.72	14	1
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:119:ASN:C	1:A:123:ILE:HD12	0.61	2.16	5	3
1:A:110:LEU:CD2	1:A:115:PHE:CD2	0.61	2.80	8	2
1:A:90:TRP:CD1	1:A:90:TRP:C	0.61	2.74	7	16
1:A:19:PHE:CE1	1:A:102:GLY:O	0.61	2.53	4	11
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:CD1	1:A:35:PHE:N	0.60	2.67	16	4
1:A:126:LEU:N	1:A:126:LEU:CD1	0.60	2.65	15	13
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:67:LEU:HD23	1:A:85:TRP:CE2	0.60	2.31	1	3
1:A:107:LEU:C	1:A:107:LEU:CD2	0.60	2.70	15	7
1:A:38:GLY:N	1:A:98:GLU:CG	0.60	2.64	7	4
1:A:8:VAL:HG11	1:A:82:LEU:HD23	0.60	1.74	9	4
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:95:TRP:CD1	1:A:95:TRP:O	0.60	2.55	12	2
1:A:22:ARG:O	1:A:23:ARG:C	0.60	2.39	4	16
1:A:62:PRO:O	1:A:63:GLN:CB	0.60	2.49	14	10
1:A:62:PRO:O	1:A:63:GLN:CG	0.60	2.50	9	8
1:A:63:GLN:O	1:A:87:VAL:HB	0.60	1.96	9	13
1:A:67:LEU:O	1:A:84:PHE:O	0.60	2.18	5	16
1:A:23:ARG:HB3	1:A:27:ALA:HB2	0.60	1.72	6	1
1:A:68:PHE:CD1	1:A:69:GLU:N	0.60	2.70	7	2
1:A:54:LEU:O	1:A:95:TRP:CE3	0.60	2.55	13	2
1:A:115:PHE:CG	1:A:123:ILE:HG13	0.60	2.32	16	1
1:A:80:ILE:CG2	1:A:81:THR:N	0.60	2.65	8	9
1:A:110:LEU:HD22	1:A:115:PHE:HD2	0.60	1.57	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:ASN:OD1	1:A:90:TRP:CH2	0.60	2.54	7	2
1:A:4:LEU:HD12	1:A:80:ILE:HG23	0.60	1.73	12	2
1:A:89:ARG:O	1:A:89:ARG:CD	0.60	2.50	16	14
1:A:40:ILE:HD13	1:A:40:ILE:C	0.60	2.15	15	9
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:112:ALA:CB	1:A:127:LYS:CD	0.59	2.79	9	8
1:A:63:GLN:HE22	1:A:87:VAL:HG11	0.59	1.52	5	1
1:A:4:LEU:O	1:A:4:LEU:CD1	0.59	2.45	15	6
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:89:ARG:CD	1:A:89:ARG:O	0.59	2.51	15	2
1:A:8:VAL:HG21	1:A:35:PHE:CB	0.59	2.28	16	2
1:A:68:PHE:O	1:A:69:GLU:CB	0.59	2.51	16	12
1:A:115:PHE:CG	1:A:123:ILE:HG12	0.59	2.32	5	5
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:51:VAL:CG1	1:A:52:ARG:N	0.58	2.66	2	16
1:A:68:PHE:CE2	1:A:69:GLU:O	0.58	2.57	13	7
1:A:80:ILE:N	1:A:80:ILE:HD12	0.58	2.12	11	2
1:A:19:PHE:CE1	1:A:94:PRO:HG3	0.58	2.33	16	3
1:A:39:LYS:CB	3:A:130:APC:O2B	0.58	2.50	6	4
1:A:34:GLU:O	1:A:115:PHE:CE1	0.58	2.57	16	1
1:A:19:PHE:CD1	1:A:94:PRO:HG3	0.58	2.34	8	8
1:A:19:PHE:CD1	1:A:94:PRO:HG2	0.58	2.33	4	7
1:A:33:LEU:O	1:A:116:PRO:CD	0.58	2.52	11	11
1:A:48:GLN:O	1:A:52:ARG:CG	0.58	2.52	12	12
1:A:16:ASN:OD1	1:A:129:LEU:HD23	0.58	1.99	11	2
1:A:62:PRO:O	1:A:64:HIS:N	0.58	2.37	3	4
1:A:66:SER:O	1:A:86:LEU:N	0.58	2.37	4	15
1:A:71:LEU:HD21	1:A:119:ASN:HD22	0.58	1.57	14	2
1:A:95:TRP:O	1:A:95:TRP:CG	0.58	2.57	11	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:GLU:O	1:A:115:PHE:CE2	0.58	2.57	3	1
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:50:VAL:CG1	1:A:51:VAL:N	0.58	2.66	8	16
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:20:ILE:CD1	1:A:34:GLU:O	0.58	2.50	9	7
1:A:4:LEU:HD11	1:A:80:ILE:HG13	0.58	1.74	11	2
1:A:30:ALA:HB1	1:A:114:ASP:OD1	0.58	1.99	6	3
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:54:LEU:CD1	1:A:95:TRP:NE1	0.57	2.67	8	3
1:A:65:PHE:O	1:A:65:PHE:CD1	0.57	2.57	15	4
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:6:ILE:HG13	3:A:130:APC:N7	0.57	2.15	9	15
1:A:80:ILE:HG22	1:A:81:THR:N	0.57	2.14	1	10
1:A:60:ILE:HD11	1:A:63:GLN:HB2	0.57	1.75	5	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:34:GLU:O	1:A:115:PHE:CZ	0.57	2.57	16	1
1:A:60:ILE:HD12	1:A:61:THR:H	0.57	1.59	10	3
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:78:ARG:O	1:A:80:ILE:CD1	0.57	2.53	5	2
1:A:8:VAL:CB	1:A:36:PRO:O	0.57	2.53	13	8
1:A:60:ILE:CD1	1:A:95:TRP:CE2	0.57	2.86	8	3
1:A:71:LEU:C	1:A:71:LEU:CD1	0.57	2.73	8	11
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:38:GLY:O	1:A:39:LYS:CB	0.57	2.53	8	1
1:A:34:GLU:O	1:A:35:PHE:CD1	0.57	2.57	1	2
1:A:128:ARG:O	1:A:129:LEU:C	0.57	2.42	10	12
1:A:54:LEU:CD1	1:A:95:TRP:CD2	0.57	2.88	3	1
1:A:115:PHE:CD2	1:A:123:ILE:HG12	0.57	2.35	3	3
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:19:PHE:CE1	1:A:103:GLU:HA	0.56	2.35	11	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:VAL:HB	1:A:95:TRP:CB	0.56	2.30	13	15
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:CD1	1:A:65:PHE:N	0.56	2.72	7	4
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:54:LEU:CD1	1:A:95:TRP:O	0.56	2.53	11	12
1:A:55:GLN:HA	1:A:95:TRP:CE3	0.56	2.34	5	10
1:A:111:ASN:O	1:A:112:ALA:CB	0.56	2.52	14	12
1:A:126:LEU:O	1:A:129:LEU:HB2	0.56	2.00	7	14
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:61:THR:HB	1:A:62:PRO:CD	0.56	2.31	1	16
1:A:123:ILE:O	1:A:127:LYS:CG	0.56	2.53	14	16
1:A:60:ILE:HD11	1:A:95:TRP:NE1	0.56	2.15	12	6
1:A:126:LEU:CD1	1:A:126:LEU:N	0.56	2.69	4	1
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	5
1:A:39:LYS:CB	3:A:130:APC:O1A	0.56	2.54	16	3
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	6
1:A:12:ARG:HH22	1:A:129:LEU:HD11	0.56	1.60	10	1
1:A:50:VAL:O	1:A:54:LEU:CD2	0.55	2.52	5	14
1:A:60:ILE:HG13	1:A:95:TRP:CE3	0.55	2.36	15	8
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:4:LEU:HD21	3:A:130:APC:H5'1	0.55	1.78	12	1
1:A:107:LEU:HD22	1:A:110:LEU:HA	0.55	1.78	2	5
1:A:20:ILE:HD13	1:A:115:PHE:CZ	0.55	2.36	9	3
1:A:54:LEU:HD12	1:A:95:TRP:CE3	0.55	2.36	3	1
1:A:54:LEU:HG	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:116:PRO:O	1:A:123:ILE:CD1	0.55	2.54	10	2
1:A:8:VAL:CG2	1:A:36:PRO:O	0.55	2.54	14	11
1:A:34:GLU:O	1:A:35:PHE:CG	0.55	2.59	12	3
1:A:52:ARG:O	1:A:56:GLU:CG	0.55	2.54	9	14
1:A:123:ILE:O	1:A:127:LYS:HG3	0.55	2.02	10	14
1:A:87:VAL:O	1:A:88:GLU:CG	0.55	2.55	11	12
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:ILE:HG12	1:A:49:ALA:CB	0.55	2.32	8	12
1:A:75:PHE:CB	1:A:76:PRO:HD2	0.55	2.32	3	15
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:110:LEU:CD1	1:A:115:PHE:CZ	0.55	2.88	10	2
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:33:LEU:CD1	1:A:114:ASP:HB3	0.55	2.32	2	13
1:A:68:PHE:O	1:A:69:GLU:HB2	0.55	2.02	5	10
1:A:71:LEU:C	1:A:71:LEU:HD12	0.55	2.22	12	4
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: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:13:ASN:ND2	1:A:17:GLU:CB	0.54	2.71	3	1
1:A:63:GLN:NE2	1:A:87:VAL:CG1	0.54	2.71	10	2
1:A:107:LEU:HD12	1:A:108:VAL:C	0.54	2.23	7	1
1:A:97:LYS:CG	1:A:97:LYS:O	0.54	2.56	7	3
1:A:107:LEU:O	1:A:108:VAL:CG2	0.54	2.55	13	2
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:109:GLY:O	1:A:110:LEU:O	0.54	2.23	16	16
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:19:PHE:CE2	1:A:94:PRO:HG2	0.54	2.37	3	8
1:A:11:ILE:CD1	1:A:19:PHE:CB	0.54	2.85	16	6
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:63:GLN:HG3	1:A:95:TRP:CZ2	0.54	2.38	3	1
1:A:18:ILE:HD13	1:A:107:LEU:HD21	0.54	1.80	7	1
1:A:58:VAL:CG2	1:A:95:TRP:HA	0.54	2.33	11	16
1:A:17:GLU:HA	1:A:105:MET:O	0.54	2.02	8	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:38:GLY:CA	1:A:98:GLU:OE1	0.54	2.55	5	3
1:A:48:GLN:O	1:A:52:ARG:HB2	0.54	2.03	9	16
1:A:33:LEU:CD1	1:A:114:ASP:CB	0.54	2.86	5	3
1:A:75:PHE:HB2	1:A:76:PRO:CD	0.54	2.33	2	1
1:A:82:LEU:HD13	3:A:130:APC:N6	0.54	2.16	6	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:21:THR:O	1:A:32:LYS:O	0.54	2.26	14	7
1:A:67:LEU:N	1:A:85:TRP:CE3	0.54	2.76	6	5
1:A:4:LEU:CD2	1:A:80:ILE:HD12	0.54	2.32	2	1
1:A:8:VAL:HA	1:A:37:GLY:HA2	0.54	1.80	5	3
1:A:35:PHE:HE2	1:A:123:ILE:HD11	0.54	1.62	11	1
1:A:12:ARG:NH2	1:A:16:ASN:OD1	0.53	2.40	1	1
1:A:49:ALA:O	1:A:53:GLU:HG2	0.53	2.03	14	8
1:A:4:LEU:CD2	3:A:130:APC:H5'1	0.53	2.33	12	2
1:A:4:LEU:HG	3:A:130:APC:C5'	0.53	2.33	12	2
1:A:111:ASN:ND2	1:A:127:LYS:HE3	0.53	2.19	10	1
1:A:33:LEU:O	1:A:116:PRO:HD2	0.53	2.04	14	6
1:A:38:GLY:O	1:A:39:LYS:HB3	0.53	2.03	8	9
1:A:97:LYS:O	1:A:97:LYS:HG2	0.53	2.03	13	3
1:A:115:PHE:CD2	1:A:123:ILE:CG1	0.53	2.90	3	3
1:A:34:GLU:C	1:A:35:PHE:CG	0.53	2.81	4	3
1:A:37:GLY:O	1:A:98:GLU:CB	0.53	2.56	2	3
1:A:75:PHE:HB2	1:A:76:PRO:HD2	0.53	1.80	2	1
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:19:PHE:CE2	1:A:97:LYS:HG3	0.53	2.38	11	3
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:19:PHE:CD2	1:A:94:PRO:HG2	0.53	2.39	2	5
1:A:39:LYS:HD3	3:A:130:APC:C5'	0.53	2.34	4	6
1:A:110:LEU:HD21	1:A:115:PHE:HD1	0.53	1.64	7	1
1:A:16:ASN:O	1:A:18:ILE:HD13	0.53	2.03	12	1
1:A:63:GLN:HG2	1:A:95:TRP:CZ2	0.53	2.39	11	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
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:62:PRO:O	1:A:63:GLN:HG2	0.53	2.04	3	10
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:68:PHE:CG	1:A:69:GLU:N	0.52	2.77	11	4
1:A:14:GLU:CB	1:A:17:GLU:OE2	0.52	2.57	13	1
1:A:45:THR:HG23	1:A:46:PRO:HD2	0.52	1.80	1	6
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:8:VAL:CG2	1:A:9:GLY:N	0.52	2.70	10	2
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:29:MET:SD	1:A:29:MET:N	0.52	2.82	3	2
3:A:130:APC:O1A	3:A:130:APC:O1B	0.52	2.26	8	4
1:A:38:GLY:N	1:A:98:GLU:HG3	0.52	2.20	3	3
1:A:60:ILE:HD12	1:A:60:ILE:C	0.52	2.25	8	2
1:A:107:LEU:HG	1:A:108:VAL:N	0.52	2.19	5	2
1:A:58:VAL:CG1	1:A:93:GLU:OE2	0.52	2.57	6	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:16:ASN:O	1:A:16:ASN:ND2	0.52	2.43	4	4
1:A:63:GLN:CG	1:A:95:TRP:CH2	0.52	2.93	3	1
1:A:75:PHE:CG	1:A:76:PRO:CD	0.52	2.92	3	2
1:A:64:HIS:HB2	1:A:89:ARG:HG2	0.52	1.82	12	10
1:A:100:GLN:CB	1:A:101:PRO:HD2	0.52	2.35	4	1
1:A:82:LEU:HD22	1:A:119:ASN:ND2	0.52	2.20	16	1
1:A:62:PRO:HD2	1:A:91:GLU:HB3	0.52	1.82	3	8
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:96:GLY:O	1:A:98:GLU:N	0.52	2.43	12	2
1:A:22:ARG:NH2	1:A:114:ASP:OD2	0.52	2.43	16	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: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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:VAL:HG13	1:A:52:ARG:N	0.51	2.19	5	12
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:4:LEU:O	1:A:4:LEU:HD22	0.51	2.05	6	2
1:A:12:ARG:CZ	1:A:86:LEU:HG	0.51	2.36	10	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:119:ASN:CB	1:A:123:ILE:HD12	0.51	2.35	15	2
1:A:4:LEU:HD11	3:A:130:APC:H5'2	0.51	1.82	14	1
1:A:48:GLN:O	1:A:52:ARG:HG3	0.51	2.06	16	9
1:A:8:VAL:HA	1:A:36:PRO:O	0.51	2.04	10	6
1:A:11:ILE:CG1	1:A:19:PHE:CB	0.51	2.88	3	4
1:A:38:GLY:N	1:A:98:GLU:HG2	0.51	2.20	7	3
1:A:12:ARG:HB3	1:A:18:ILE:CG2	0.51	2.35	7	1
1:A:75:PHE:HB2	1:A:78:ARG:CB	0.51	2.35	15	5
1:A:53:GLU:HA	1:A:56:GLU:HG2	0.51	1.83	13	16
1:A:97:LYS:HD3	1:A:97:LYS:N	0.51	2.21	12	2
1:A:75:PHE:CD2	1:A:76:PRO:HD2	0.51	2.40	3	3
1:A:97:LYS:CD	1:A:97:LYS:O	0.51	2.58	3	1
1:A:75:PHE:CD1	1:A:76:PRO:HD2	0.51	2.40	8	5
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:98:GLU:OE1	3:A:130:APC:O2G	0.51	2.29	1	1
1:A:4:LEU:HD21	3:A:130:APC:C5'	0.51	2.35	12	1
1:A:46:PRO:CB	1:A:85:TRP:CZ2	0.51	2.94	2	1
1:A:34:GLU:HG2	1:A:35:PHE:CE1	0.51	2.41	7	4
1:A:39:LYS:CG	3:A:130:APC:O1A	0.51	2.58	12	2
1:A:105:MET:SD	1:A:107:LEU:CB	0.51	2.99	5	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:95:TRP:CD1	1:A:95:TRP:N	0.51	2.78	15	10
1:A:62:PRO:O	1:A:63:GLN:C	0.51	2.49	10	4
1:A:18:ILE:CD1	1:A:105:MET:HB3	0.51	2.36	8	1
1:A:65:PHE:CD1	1:A:65:PHE:C	0.51	2.84	8	2
1:A:112:ALA:HB3	1:A:127:LYS:HD2	0.51	1.82	9	2
1:A:16:ASN:HB3	1:A:107:LEU:CD2	0.51	2.36	15	1
1:A:20:ILE:CG2	1:A:33:LEU:HD22	0.51	2.36	3	2
1:A:110:LEU:CB	1:A:126:LEU:HB3	0.51	2.36	9	11
1:A:62:PRO:HG2	1:A:91:GLU:CB	0.51	2.36	3	8
3:A:130:APC:O2A	3:A:130:APC:O3'	0.51	2.26	14	3
1:A:4:LEU:CG	3:A:130:APC:O4'	0.51	2.59	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
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:14:GLU:HB3	1:A:17:GLU:CG	0.51	2.36	8	3
1:A:112:ALA:CB	1:A:127:LYS:HD3	0.51	2.36	9	11
1:A:54:LEU:HB3	1:A:95:TRP:CE2	0.51	2.41	5	4
1:A:112:ALA:HB2	1:A:127:LYS:HD3	0.51	1.82	2	1
1:A:71:LEU:HB3	1:A:122:VAL:HG23	0.51	1.82	3	5
1:A:13:ASN:HB3	1:A:90:TRP:CZ3	0.51	2.41	4	1
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:17:GLU:N	1:A:17:GLU:CD	0.51	2.64	7	4
1:A:33:LEU:HB3	1:A:115:PHE:CZ	0.51	2.41	12	3
1:A:50:VAL:HG13	1:A:51:VAL:N	0.51	2.21	2	16
1:A:60:ILE:CG1	1:A:95:TRP:HB3	0.51	2.36	3	2
1:A:80:ILE:HG13	3:A:130:APC:N3	0.51	2.21	2	1
1:A:70:LYS:HE3	1:A:83:TRP:CD2	0.51	2.41	3	2
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: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:11:ILE:CD1	1:A:19:PHE:HB3	0.50	2.36	6	5
1:A:21:THR:O	1:A:21:THR:CG2	0.50	2.59	3	2
1:A:64:HIS:O	1:A:87:VAL:HA	0.50	2.06	5	2
1:A:112:ALA:CB	1:A:123:ILE:HG23	0.50	2.35	9	2
3:A:130:APC:O2A	3:A:130:APC:O1B	0.50	2.30	14	3
1:A:4:LEU:HG	3:A:130:APC:C4'	0.50	2.36	6	1
1:A:97:LYS:N	1:A:97:LYS:HD3	0.50	2.20	14	4
1:A:107:LEU:CD1	1:A:110:LEU:HG	0.50	2.36	15	3
1:A:4:LEU:HD11	3:A:130:APC:C5'	0.50	2.36	14	1
1:A:84:PHE:CE1	1:A:122:VAL:HG21	0.50	2.41	1	4
1:A:90:TRP:CE3	1:A:94:PRO:HB3	0.50	2.42	1	1
1:A:14:GLU:CB	1:A:17:GLU:HG3	0.50	2.36	2	3
1:A:14:GLU:HB2	1:A:17:GLU:CG	0.50	2.36	7	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:3:LYS:CD	1:A:3:LYS:C	0.50	2.79	15	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:110:LEU:HD23	1:A:111:ASN:N	0.50	2.21	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:36:PRO:HB3	1:A:97:LYS:HA	0.50	1.83	3	3
1:A:107:LEU:HD23	1:A:107:LEU:O	0.50	2.07	6	2
1:A:11:ILE:HD11	1:A:19:PHE:CD2	0.50	2.41	3	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:112:ALA:HB3	1:A:127:LYS:CD	0.50	2.37	9	3
1:A:105:MET:SD	1:A:107:LEU:N	0.50	2.85	12	3
1:A:23:ARG:HB3	1:A:27:ALA:CB	0.50	2.36	6	1
1:A:14:GLU:CB	1:A:17:GLU:CD	0.50	2.80	10	1
1:A:18:ILE:CG1	1:A:20:ILE:CG2	0.50	2.90	15	1
1:A:18:ILE:HD12	1:A:20:ILE:HB	0.49	1.83	2	2
1:A:17:GLU:CA	1:A:17:GLU:OE1	0.49	2.60	8	1
1:A:39:LYS:HB2	3:A:130:APC:O1A	0.49	2.07	12	2
1:A:9:GLY:O	1:A:10:ILE:O	0.49	2.30	4	8
1:A:45:THR:CG2	1:A:46:PRO:HD2	0.49	2.37	1	7
1:A:11:ILE:O	1:A:18:ILE:HA	0.49	2.07	16	12
1:A:87:VAL:O	1:A:88:GLU:HG2	0.49	2.07	2	7
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:31:ASN:OD1	1:A:113:ASP:O	0.49	2.30	10	1
1:A:109:GLY:CA	1:A:129:LEU:O	0.49	2.61	8	2
1:A:7:ALA:O	1:A:50:VAL:HG23	0.49	2.06	4	4
1:A:18:ILE:HD12	1:A:110:LEU:HD11	0.49	1.83	4	1
1:A:100:GLN:HB2	1:A:101:PRO:CD	0.49	2.37	4	1
1:A:33:LEU:CD1	1:A:114:ASP:HB2	0.49	2.37	5	1
1:A:107:LEU:O	1:A:108:VAL:O	0.49	2.30	16	2
1:A:97:LYS:CA	1:A:100:GLN:HG2	0.49	2.38	14	2
1:A:79:HIS:O	1:A:80:ILE:HD13	0.49	2.07	13	1
1:A:8:VAL:HA	1:A:37:GLY:CA	0.49	2.36	16	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:98:GLU:OE2	3:A:130:APC:O2G	0.49	2.29	10	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:33:LEU:O	1:A:116:PRO:HD3	0.49	2.07	9	6
1:A:126:LEU:N	1:A:126:LEU:HD13	0.49	2.23	5	2
1:A:39:LYS:O	1:A:53:GLU:OE1	0.49	2.31	8	1
1:A:62:PRO:O	1:A:89:ARG:O	0.49	2.31	8	3
1:A:4:LEU:CG	3:A:130:APC:C5'	0.49	2.90	12	1
1:A:4:LEU:CD1	1:A:4:LEU:C	0.49	2.81	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:38:GLY:HA3	1:A:98:GLU:OE1	0.49	2.07	16	1
1:A:62:PRO:O	1:A:63:GLN:HB3	0.49	2.06	1	9
1:A:33:LEU:HD12	1:A:114:ASP:HB2	0.49	1.83	10	3
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:37:GLY:O	1:A:98:GLU:HB2	0.49	2.07	10	4
1:A:62:PRO:HG2	1:A:91:GLU:HB3	0.49	1.85	13	9
1:A:40:ILE:CG1	1:A:49:ALA:CB	0.49	2.91	10	4
1:A:33:LEU:HD13	1:A:115:PHE:HE1	0.49	1.57	14	1
1:A:95:TRP:CD1	1:A:95:TRP:C	0.49	2.85	5	3
1:A:60:ILE:CG2	1:A:93:GLU:HG2	0.49	2.37	3	4
1:A:70:LYS:HD2	1:A:83:TRP:CE3	0.49	2.42	6	4
1:A:17:GLU:OE1	1:A:17:GLU:CA	0.49	2.61	9	2
1:A:4:LEU:CG	3:A:130:APC:H5'2	0.49	2.38	11	4
1:A:38:GLY:HA2	1:A:98:GLU:OE1	0.49	2.08	5	8
1:A:69:GLU:O	1:A:84:PHE:HB2	0.49	2.08	3	13
1:A:37:GLY:O	1:A:98:GLU:CA	0.49	2.61	4	1
1:A:62:PRO:O	1:A:89:ARG:HG3	0.49	2.08	8	3
1:A:6:ILE:HG23	1:A:37:GLY:HA3	0.49	1.84	10	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:N	1:A:5:GLN:OE1	0.49	2.46	7	1
1:A:90:TRP:CD1	1:A:90:TRP:O	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:35:PHE:CZ	1:A:115:PHE:CE2	0.48	3.01	15	2
1:A:39:LYS:O	1:A:53:GLU:OE2	0.48	2.30	14	12
1:A:109:GLY:O	1:A:110:LEU:C	0.48	2.52	10	14
1:A:12:ARG:NH2	1:A:15:ASN:O	0.48	2.46	8	1
1:A:6:ILE:CG2	1:A:37:GLY:HA3	0.48	2.38	10	1
1:A:18:ILE:CD1	1:A:20:ILE:N	0.48	2.76	14	1
1:A:55:GLN:CA	1:A:95:TRP:CZ3	0.48	2.96	14	7
1:A:50:VAL:C	1:A:54:LEU:HD23	0.48	2.28	5	1
1:A:58:VAL:HG22	1:A:97:LYS:HE3	0.48	1.85	7	1
1:A:64:HIS:C	1:A:65:PHE:CG	0.48	2.87	14	1
1:A:58:VAL:CG2	1:A:97:LYS:HD2	0.48	2.38	2	1
1:A:63:GLN:NE2	1:A:65:PHE:HB3	0.48	2.24	15	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
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:10:ILE:CG2	1:A:18:ILE:CD1	0.48	2.78	14	1
1:A:12:ARG:CB	1:A:18:ILE:HG23	0.48	2.31	2	3
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:11:ILE:CD1	1:A:94:PRO:CB	0.48	2.92	8	1
1:A:4:LEU:HD23	3:A:130:APC:H5'2	0.48	1.85	11	2
1:A:5:GLN:HG3	1:A:81:THR:CB	0.48	2.39	10	6
1:A:89:ARG:O	1:A:89:ARG:HD3	0.48	2.09	2	8
1:A:39:LYS:HB2	3:A:130:APC:O2B	0.48	2.08	6	3
1:A:12:ARG:HE	1:A:86:LEU:HD12	0.48	1.69	10	1
1:A:4:LEU:CD2	1:A:39:LYS:CD	0.48	2.91	12	1
1:A:117:PRO:O	1:A:120:GLU:OE1	0.48	2.32	15	1
1:A:91:GLU:O	1:A:92:GLY:C	0.48	2.52	1	6
1:A:126:LEU:O	1:A:127:LYS:C	0.48	2.53	4	4
1:A:52:ARG:O	1:A:56:GLU:HG3	0.48	2.09	3	8
1:A:40:ILE:HG13	1:A:49:ALA:HB1	0.48	1.85	4	1
1:A:84:PHE:CD2	1:A:122:VAL:HG21	0.48	2.44	4	1
1:A:68:PHE:CD1	1:A:86:LEU:HD23	0.48	2.44	7	1
1:A:70:LYS:HA	1:A:122:VAL:HG21	0.48	1.83	11	3
1:A:61:THR:HG22	1:A:62:PRO:N	0.48	2.24	9	7
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:100:GLN:HG3	1:A:101:PRO:N	0.48	2.24	12	2
1:A:87:VAL:O	1:A:88:GLU:HG3	0.48	2.09	13	4
1:A:98:GLU:HG3	3:A:130:APC:O2G	0.48	2.08	14	3
1:A:13:ASN:OD1	1:A:17:GLU:OE1	0.48	2.32	12	1
1:A:15:ASN:O	1:A:16:ASN:OD1	0.48	2.32	15	1
1:A:48:GLN:HA	1:A:51:VAL:HG12	0.47	1.86	1	16
1:A:19:PHE:CE2	1:A:97:LYS:CG	0.47	2.97	3	4
1:A:6:ILE:CG2	1:A:37:GLY:HA2	0.47	2.39	13	3
1:A:23:ARG:NH1	1:A:26:ASP:O	0.47	2.47	9	1
1:A:111:ASN:ND2	1:A:127:LYS:CE	0.47	2.76	10	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: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:3:LYS:CG	1:A:4:LEU:N	0.47	2.75	14	3
1:A:60:ILE:HD13	1:A:90:TRP:CB	0.47	2.32	10	1
1:A:23:ARG:CA	1:A:32:LYS:HD2	0.47	2.39	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:GLY:O	1:A:97:LYS:C	0.47	2.52	3	6
1:A:35:PHE:CE2	1:A:119:ASN:CG	0.47	2.88	5	1
1:A:13:ASN:C	1:A:13:ASN:ND2	0.47	2.67	12	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:98:GLU:CD	3:A:130:APC:O2G	0.47	2.53	9	2
1:A:14:GLU:HB3	1:A:17:GLU:HG3	0.47	1.87	3	5
1:A:90:TRP:CD1	1:A:93:GLU:O	0.47	2.67	3	1
1:A:19:PHE:CE2	1:A:102:GLY:HA3	0.47	2.44	4	2
1:A:110:LEU:O	1:A:127:LYS:HA	0.47	2.08	5	1
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:10:ILE:HD12	1:A:86:LEU:HD11	0.47	1.85	15	1
1:A:119:ASN:O	1:A:123:ILE:HD13	0.47	2.09	3	1
1:A:80:ILE:HG12	3:A:130:APC:C2	0.47	2.40	10	5
1:A:71:LEU:CD1	1:A:82:LEU:HB2	0.47	2.37	15	1
1:A:47:GLU:O	1:A:51:VAL:CG1	0.47	2.63	1	1
1:A:3:LYS:HG2	1:A:4:LEU:N	0.47	2.25	12	4
1:A:109:GLY:HA2	1:A:129:LEU:O	0.47	2.10	2	1
1:A:11:ILE:CG2	1:A:87:VAL:CG2	0.47	2.87	9	4
1:A:3:LYS:HG3	1:A:4:LEU:N	0.47	2.24	5	2
1:A:10:ILE:CB	1:A:86:LEU:CD1	0.47	2.92	16	2
1:A:23:ARG:CB	1:A:27:ALA:CB	0.47	2.93	6	1
1:A:98:GLU:HG3	1:A:99:GLY:N	0.47	2.24	6	2
1:A:123:ILE:CD1	1:A:123:ILE:N	0.47	2.77	7	1
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: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	4	4
1:A:54:LEU:CD1	1:A:95:TRP:CE3	0.47	2.97	3	1
1:A:67:LEU:C	1:A:67:LEU:CD2	0.47	2.83	3	3
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:20:ILE:O	1:A:103:GLU:HG2	0.47	2.10	14	12
1:A:40:ILE:C	1:A:40:ILE:CD1	0.47	2.81	15	4
1:A:5:GLN:CB	1:A:81:THR:HB	0.47	2.39	5	2
1:A:39:LYS:HB2	3:A:130:APC:PA	0.47	2.50	5	2
1:A:97:LYS:O	1:A:97:LYS:HG3	0.47	2.09	16	2
1:A:16:ASN:HD21	1:A:129:LEU:HD23	0.47	1.65	10	1
1:A:20:ILE:HD13	1:A:36:PRO:HD3	0.47	1.87	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:72:GLU:HG3	1:A:81:THR:HG23	0.47	1.88	1	5
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:37:GLY:CA	1:A:98:GLU:HB2	0.46	2.40	12	1
1:A:39:LYS:HG2	3:A:130:APC:O1A	0.46	2.10	1	5
1:A:62:PRO:HD2	1:A:91:GLU:CB	0.46	2.41	3	1
1:A:30:ALA:O	1:A:114:ASP:OD1	0.46	2.33	5	2
1:A:35:PHE:CE2	1:A:119:ASN:CB	0.46	2.99	13	4
1:A:123:ILE:HA	1:A:126:LEU:CD2	0.46	2.39	9	4
1:A:4:LEU:HD13	1:A:5:GLN:N	0.46	2.26	14	1
1:A:80:ILE:N	1:A:80:ILE:HD13	0.46	2.24	1	2
1:A:115:PHE:CB	1:A:123:ILE:HG12	0.46	2.40	8	4
1:A:12:ARG:HD2	1:A:16:ASN:ND2	0.46	2.25	4	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
1:A:38:GLY:CA	1:A:98:GLU:CD	0.46	2.84	16	1
1:A:110:LEU:HD13	1:A:115:PHE:HE2	0.46	1.69	16	1
1:A:110:LEU:CD2	1:A:126:LEU:HD23	0.46	2.40	1	1
1:A:115:PHE:HB3	1:A:123:ILE:CD1	0.46	2.41	6	4
1:A:31:ASN:OD1	1:A:31:ASN:O	0.46	2.33	2	2
1:A:38:GLY:C	3:A:130:APC:O2B	0.46	2.54	2	1
1:A:53:GLU:O	1:A:57:GLU:CD	0.46	2.54	16	8
1:A:8:VAL:HB	1:A:37:GLY:HA2	0.46	1.85	4	2
1:A:33:LEU:CB	1:A:115:PHE:CD1	0.46	2.98	4	5
1:A:105:MET:SD	1:A:107:LEU:HB2	0.46	2.50	5	1
3:A:130:APC:H3'	3:A:130:APC:O2A	0.46	2.11	6	1
1:A:62:PRO:CB	1:A:89:ARG:HD3	0.46	2.40	9	1
1:A:4:LEU:CD2	3:A:130:APC:C5'	0.46	2.93	12	1
1:A:41:GLU:HG3	1:A:42:MET:N	0.46	2.24	12	1
1:A:12:ARG:NH1	1:A:129:LEU:HG	0.46	2.26	1	2
1:A:54:LEU:CB	1:A:95:TRP:CZ3	0.46	2.98	3	1
1:A:124:ALA:CA	1:A:127:LYS:HG3	0.46	2.41	14	10
1:A:8:VAL:HB	1:A:37:GLY:CA	0.46	2.41	10	2
1:A:36:PRO:O	1:A:96:GLY:O	0.46	2.33	5	1
1:A:14:GLU:HB2	1:A:17:GLU:OE2	0.46	2.11	13	2
1:A:107:LEU:HD12	1:A:107:LEU:C	0.46	2.29	7	1
1:A:36:PRO:CB	1:A:96:GLY:O	0.46	2.63	8	1
1:A:30:ALA:O	1:A:31:ASN:HB2	0.46	2.10	10	2
1:A:119:ASN:O	1:A:123:ILE:CG1	0.46	2.63	10	1
1:A:108:VAL:O	1:A:109:GLY:O	0.46	2.33	16	2
1:A:39:LYS:CG	3:A:130:APC:H3A2	0.46	2.40	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
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:83:TRP:HB3	1:A:85:TRP:NE1	0.46	2.25	4	1
1:A:14:GLU:HB2	1:A:17:GLU:OE1	0.46	2.11	5	2
1:A:12:ARG:C	1:A:17:GLU:O	0.46	2.54	8	1
1:A:106:SER:O	1:A:108:VAL:HG23	0.46	2.10	10	1
1:A:16:ASN:O	1:A:105:MET:O	0.46	2.32	15	1
1:A:23:ARG:O	1:A:24:ALA:C	0.46	2.54	6	14
1:A:91:GLU:O	1:A:93:GLU:O	0.46	2.33	3	2
1:A:63:GLN:HA	1:A:90:TRP:N	0.46	2.26	15	2
1:A:123:ILE:O	1:A:124:ALA:C	0.46	2.53	2	1
1:A:10:ILE:HB	1:A:86:LEU:HD11	0.46	1.85	13	5
1:A:62:PRO:CG	1:A:91:GLU:HB3	0.46	2.40	13	8
1:A:124:ALA:HA	1:A:127:LYS:HG3	0.46	1.86	15	7
1:A:47:GLU:O	1:A:48:GLN:C	0.46	2.53	16	11
1:A:22:ARG:CB	1:A:105:MET:CE	0.46	2.93	13	1
1:A:53:GLU:O	1:A:57:GLU:OE2	0.46	2.34	16	1
1:A:20:ILE:HG13	1:A:21:THR:N	0.46	2.26	15	10
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: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:38:GLY:CA	1:A:98:GLU:HB2	0.46	2.40	2	1
1:A:103:GLU:O	1:A:104:TRP:C	0.46	2.54	4	11
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: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:97:LYS:O	1:A:98:GLU:C	0.46	2.54	15	1
1:A:4:LEU:CD1	1:A:4:LEU:O	0.46	2.54	16	1
1:A:89:ARG:O	1:A:89:ARG:HG3	0.45	2.11	9	11
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:HD13	1:A:18:ILE:H	0.45	1.71	11	1
1:A:19:PHE:O	1:A:102:GLY:HA2	0.45	2.10	16	5
1:A:35:PHE:CE1	1:A:115:PHE:CE1	0.45	3.04	8	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:ASN:CG	1:A:14:GLU:N	0.45	2.69	13	1
1:A:71:LEU:HG	1:A:122:VAL:CG2	0.45	2.41	4	3
1:A:11:ILE:HG21	1:A:95:TRP:CD1	0.45	2.46	3	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:98:GLU:CA	1:A:98:GLU:OE1	0.45	2.64	7	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:109:GLY:HA2	1:A:129:LEU:HB3	0.45	1.87	10	1
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:12:ARG:HA	1:A:17:GLU:C	0.45	2.31	5	4
1:A:27:ALA:C	1:A:29:MET:N	0.45	2.69	16	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:17:GLU:HG2	1:A:106:SER:CB	0.45	2.42	15	1
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: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
1:A:5:GLN:HG3	1:A:81:THR:OG1	0.45	2.11	15	9
1:A:6:ILE:CD1	3:A:130:APC:C8	0.45	2.95	1	6
1:A:97:LYS:HB2	1:A:100:GLN:CG	0.45	2.41	1	2
1:A:12:ARG:NH2	1:A:129:LEU:HD21	0.45	2.27	2	1
1:A:39:LYS:HB3	3:A:130:APC:O2B	0.45	2.11	6	3
1:A:94:PRO:O	1:A:95:TRP:HB3	0.45	2.12	12	8
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: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:18:ILE:HD13	1:A:18:ILE:N	0.45	2.27	1	1
1:A:82:LEU:HD22	1:A:84:PHE:CE1	0.45	2.47	3	1
1:A:127:LYS:NZ	1:A:127:LYS:HB3	0.45	2.25	3	1
1:A:6:ILE:N	1:A:40:ILE:HG22	0.45	2.26	4	1
1:A:115:PHE:CD2	1:A:123:ILE:CD1	0.45	2.99	4	1
1:A:63:GLN:CD	1:A:87:VAL:HG11	0.45	2.30	5	1
1:A:18:ILE:CD1	1:A:107:LEU:HD21	0.45	2.42	7	1
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:56:GLU:OE1	1:A:56:GLU:C	0.45	2.56	10	12
1:A:4:LEU:HD23	3:A:130:APC:H5'1	0.45	1.88	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:VAL:O	1:A:54:LEU:HB2	0.45	2.12	7	7
1:A:14:GLU:CB	1:A:17:GLU:OE1	0.45	2.65	5	1
1:A:22:ARG:N	1:A:103:GLU:OE2	0.45	2.49	16	2
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:4:LEU:HG	3:A:130:APC:H5'1	0.45	1.89	7	3
3:A:130:APC:PA	3:A:130:APC:H3'	0.45	2.51	3	1
1:A:10:ILE:HG22	1:A:18:ILE:HB	0.45	1.89	7	2
1:A:35:PHE:CE2	1:A:119:ASN:HB2	0.45	2.46	7	2
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: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:23:ARG:O	1:A:25:ALA:O	0.44	2.35	12	1
1:A:4:LEU:CD2	1:A:5:GLN:O	0.44	2.65	15	3
1:A:6:ILE:CG1	3:A:130:APC:N7	0.44	2.80	9	2
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:42:MET:O	1:A:43:GLY:C	0.44	2.56	7	4
1:A:82:LEU:O	1:A:84:PHE:CE1	0.44	2.70	11	1
1:A:100:GLN:HG3	1:A:101:PRO:CD	0.44	2.42	12	1
1:A:58:VAL:CG2	1:A:97:LYS:HE3	0.44	2.42	13	1
1:A:4:LEU:C	1:A:4:LEU:HD13	0.44	2.32	14	1
1:A:39:LYS:HB2	3:A:130:APC:H3A2	0.44	1.89	14	3
1:A:7:ALA:HB1	1:A:50:VAL:CA	0.44	2.42	4	1
1:A:78:ARG:NH1	1:A:78:ARG:HG3	0.44	2.27	6	1
1:A:41:GLU:O	1:A:42:MET:C	0.44	2.52	16	2
1:A:37:GLY:C	1:A:98:GLU:HG3	0.44	2.33	16	1
1:A:4:LEU:HG	3:A:130:APC:H5'2	0.44	1.90	13	5
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:20:ILE:O	1:A:22:ARG:N	0.44	2.50	10	1
1:A:105:MET:SD	1:A:105:MET:C	0.44	2.95	10	3
1:A:6:ILE:CG2	1:A:82:LEU:HG	0.44	2.42	12	1
1:A:97:LYS:HD3	1:A:97:LYS:O	0.44	2.13	2	2
1:A:7:ALA:HB1	1:A:50:VAL:HA	0.44	1.89	4	1
1:A:91:GLU:O	1:A:91:GLU:HG3	0.44	2.11	12	2
1:A:107:LEU:CD2	1:A:110:LEU:HG	0.44	2.42	8	1
1:A:98:GLU:CG	1:A:99:GLY:N	0.44	2.80	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
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
3:A:130:APC:O3G	3:A:130:APC:H3'	0.44	2.12	14	1
1:A:9:GLY:O	1:A:10:ILE:C	0.44	2.54	16	8
1:A:107:LEU:C	1:A:108:VAL:HG23	0.44	2.33	3	2
1:A:40:ILE:HG13	1:A:49:ALA:CB	0.44	2.43	4	1
1:A:104:TRP:CD1	1:A:104:TRP:N	0.44	2.82	4	1
1:A:91:GLU:HG3	1:A:92:GLY:N	0.44	2.28	5	1
1:A:38:GLY:CA	1:A:98:GLU:HG2	0.44	2.43	7	1
1:A:38:GLY:C	1:A:53:GLU:OE1	0.44	2.56	8	1
1:A:18:ILE:CG1	1:A:20:ILE:HB	0.44	2.43	14	1
1:A:31:ASN:O	1:A:31:ASN:ND2	0.44	2.50	16	1
1:A:57:GLU:CD	1:A:98:GLU:OE2	0.44	2.56	16	1
1:A:115:PHE:CB	1:A:123:ILE:HG13	0.44	2.43	9	2
1:A:119:ASN:O	1:A:123:ILE:HB	0.44	2.13	3	3
1:A:13:ASN:CG	1:A:90:TRP:CH2	0.44	2.90	5	1
1:A:16:ASN:C	1:A:17:GLU:OE1	0.44	2.56	7	3
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
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:19:PHE:CD2	1:A:94:PRO:CB	0.43	3.01	3	1
1:A:112:ALA:HA	1:A:123:ILE:CG2	0.43	2.43	16	2
1:A:80:ILE:CD1	1:A:80:ILE:N	0.43	2.81	5	1
1:A:84:PHE:CZ	1:A:122:VAL:CG1	0.43	2.98	14	2
1:A:54:LEU:CD1	1:A:95:TRP:CE2	0.43	3.00	8	1
1:A:11:ILE:CD1	1:A:19:PHE:HB2	0.43	2.43	16	2
1:A:12:ARG:NE	1:A:86:LEU:HD12	0.43	2.28	10	1
1:A:33:LEU:HD13	1:A:110:LEU:CD2	0.43	2.35	10	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:38:GLY:N	1:A:98:GLU:CD	0.43	2.72	16	1
1:A:48:GLN:CA	1:A:51:VAL:HG12	0.43	2.43	8	12
1:A:75:PHE:HB3	1:A:76:PRO:CD	0.43	2.33	2	1
1:A:53:GLU:O	1:A:56:GLU:OE2	0.43	2.36	3	1
1:A:128:ARG:O	1:A:129:LEU:O	0.43	2.36	3	2
1:A:34:GLU:HG2	1:A:35:PHE:CD1	0.43	2.48	9	3
1:A:90:TRP:CD1	1:A:93:GLU:C	0.43	2.90	4	1
1:A:58:VAL:HB	1:A:95:TRP:HB2	0.43	1.90	5	1
1:A:20:ILE:CD1	1:A:33:LEU:HB3	0.43	2.43	6	1
1:A:18:ILE:CD1	1:A:107:LEU:CD2	0.43	2.96	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:22:ARG:O	1:A:22:ARG:HG3	0.43	2.13	15	2
1:A:10:ILE:HD12	1:A:12:ARG:HH21	0.43	1.67	9	1
1:A:84:PHE:CE2	1:A:122:VAL:CG1	0.43	3.01	11	2
1:A:26:ASP:OD1	1:A:26:ASP:O	0.43	2.36	12	1
1:A:82:LEU:HB3	1:A:84:PHE:CE1	0.43	2.48	16	1
1:A:67:LEU:HB2	1:A:85:TRP:CZ3	0.43	2.48	4	2
1:A:4:LEU:HD13	3:A:130:APC:H5'2	0.43	1.91	2	1
1:A:100:GLN:HG3	1:A:101:PRO:HD2	0.43	1.90	12	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:112:ALA:O	1:A:113:ASP:C	0.43	2.56	10	2
1:A:35:PHE:CZ	1:A:119:ASN:HB2	0.43	2.48	13	2
1:A:36:PRO:HB2	1:A:96:GLY:O	0.43	2.14	8	2
1:A:6:ILE:HB	1:A:82:LEU:HD12	0.43	1.91	12	1
1:A:3:LYS:HE2	1:A:5:GLN:OE1	0.43	2.14	15	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
1:A:12:ARG:O	1:A:88:GLU:HA	0.43	2.14	5	1
1:A:107:LEU:CD1	1:A:110:LEU:HA	0.43	2.39	10	1
1:A:61:THR:HG22	1:A:62:PRO:HD3	0.43	1.90	4	4
1:A:74:GLU:CG	1:A:79:HIS:NE2	0.43	2.81	6	1
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:112:ALA:HB2	1:A:127:LYS:CD	0.43	2.44	8	3
1:A:58:VAL:HG22	1:A:97:LYS:NZ	0.43	2.27	11	1
1:A:26:ASP:O	1:A:26:ASP:CG	0.43	2.57	12	1
1:A:54:LEU:CG	1:A:95:TRP:CZ3	0.43	3.00	3	1
1:A:70:LYS:HD2	1:A:83:TRP:CZ3	0.43	2.49	4	1
1:A:23:ARG:HD2	1:A:27:ALA:CB	0.43	2.39	11	3
1:A:14:GLU:HB2	1:A:17:GLU:CD	0.43	2.34	10	1
1:A:111:ASN:O	1:A:112:ALA:C	0.43	2.56	10	1
1:A:30:ALA:HB1	1:A:114:ASP:OD2	0.43	2.14	11	1
1:A:4:LEU:HD22	1:A:5:GLN:O	0.43	2.14	15	1
1:A:30:ALA:O	1:A:114:ASP:HA	0.43	2.13	4	2
1:A:86:LEU:HD13	1:A:86:LEU:HA	0.43	1.68	13	8
1:A:101:PRO:O	1:A:102:GLY:C	0.43	2.56	10	2
1:A:4:LEU:C	1:A:4:LEU:CD1	0.43	2.87	10	5
1:A:74:GLU:HG3	1:A:79:HIS:CD2	0.43	2.48	4	1
1:A:11:ILE:CG2	1:A:87:VAL:HG13	0.43	2.40	5	1
1:A:18:ILE:HD12	1:A:18:ILE:H	0.43	1.74	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:PHE:O	1:A:69:GLU:OE1	0.43	2.37	9	1
1:A:78:ARG:HD3	1:A:80:ILE:HD11	0.43	1.91	13	1
1:A:32:LYS:HD2	1:A:32:LYS:O	0.43	2.14	4	1
1:A:78:ARG:NH1	1:A:78:ARG:HB2	0.43	2.29	5	1
1:A:62:PRO:C	1:A:64:HIS:N	0.43	2.71	13	3
1:A:75:PHE:CD1	1:A:76:PRO:CD	0.43	3.02	8	1
3:A:130:APC:H3'	3:A:130:APC:H3A1	0.43	1.89	16	3
1:A:10:ILE:CD1	1:A:86:LEU:HD11	0.43	2.43	15	1
1:A:74:GLU:CG	1:A:79:HIS:CD2	0.43	3.02	16	1
1:A:47:GLU:HG2	1:A:65:PHE:CZ	0.42	2.48	4	1
1:A:16:ASN:OD1	1:A:16:ASN:O	0.42	2.37	5	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:39:LYS:HD3	3:A:130:APC:O1A	0.42	2.14	3	2
1:A:72:GLU:HG3	1:A:80:ILE:O	0.42	2.14	2	1
1:A:107:LEU:CD2	1:A:108:VAL:O	0.42	2.66	2	1
1:A:37:GLY:C	1:A:98:GLU:HG2	0.42	2.34	3	1
1:A:39:LYS:HD3	3:A:130:APC:H5'1	0.42	1.91	5	1
1:A:105:MET:CE	1:A:107:LEU:HB2	0.42	2.44	5	1
1:A:34:GLU:C	1:A:35:PHE:CD2	0.42	2.93	9	1
1:A:64:HIS:O	1:A:65:PHE:C	0.42	2.56	9	1
1:A:16:ASN:HB3	1:A:108:VAL:HA	0.42	1.90	16	1
1:A:31:ASN:HA	1:A:114:ASP:O	0.42	2.13	16	3
1:A:10:ILE:O	1:A:86:LEU:HA	0.42	2.14	8	1
1:A:115:PHE:HB3	1:A:123:ILE:HG13	0.42	1.91	9	1
1:A:3:LYS:HD3	1:A:5:GLN:OE1	0.42	2.14	12	1
3:A:130:APC:O2A	3:A:130:APC:C3'	0.42	2.67	12	2
1:A:71:LEU:CB	1:A:121:PRO:HB2	0.42	2.44	15	2
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: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: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:11:ILE:HG13	1:A:19:PHE:HB2	0.42	1.90	5	3
1:A:28:HIS:O	1:A:29:MET:HG2	0.42	2.14	9	2
1:A:13:ASN:HB2	1:A:90:TRP:CZ3	0.42	2.49	15	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

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:HG2	0.42	1.92	7	1
1:A:22:ARG:NH2	1:A:30:ALA:HA	0.42	2.29	10	1
1:A:112:ALA:HA	1:A:115:PHE:HB2	0.42	1.91	10	1
1:A:63:GLN:O	1:A:87:VAL:CG2	0.42	2.68	11	1
1:A:123:ILE:N	1:A:123:ILE:CD1	0.42	2.82	13	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:30:ALA:O	1:A:114:ASP:CA	0.42	2.68	4	1
1:A:75:PHE:CB	1:A:78:ARG:HB2	0.42	2.45	6	1
1:A:103:GLU:O	1:A:103:GLU:CG	0.42	2.67	6	1
1:A:89:ARG:O	1:A:89:ARG:NE	0.42	2.53	9	1
1:A:64:HIS:O	1:A:65:PHE:HB3	0.42	2.15	13	2
1:A:84:PHE:CD1	1:A:84:PHE:N	0.42	2.87	11	1
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: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: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: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:21:THR:OG1	1:A:101:PRO:HG2	0.42	2.15	3	3
1:A:55:GLN:O	1:A:56:GLU:C	0.42	2.58	10	2
1:A:27:ALA:O	1:A:28:HIS:C	0.42	2.57	16	4
1:A:20:ILE:O	1:A:103:GLU:HG3	0.42	2.15	6	1
1:A:97:LYS:O	1:A:97:LYS:CD	0.42	2.68	7	1
1:A:22:ARG:HB3	1:A:103:GLU:OE2	0.42	2.14	10	2
1:A:63:GLN:O	1:A:64:HIS:O	0.42	2.37	10	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:63:GLN:HB3	0.42	2.45	3	1
1:A:13:ASN:OD1	1:A:17:GLU:HB2	0.42	2.15	4	1
1:A:17:GLU:OE2	1:A:106:SER:HA	0.42	2.15	8	1
3:A:130:APC:O2A	3:A:130:APC:O3G	0.42	2.38	8	1
1:A:78:ARG:NH1	1:A:78:ARG:CG	0.42	2.83	9	1
1:A:18:ILE:O	1:A:104:TRP:HA	0.42	2.15	10	1
1:A:63:GLN:N	1:A:90:TRP:HA	0.42	2.29	13	1
1:A:70:LYS:HA	1:A:122:VAL:CG2	0.42	2.45	13	1
1:A:69:GLU:OE2	1:A:125:LYS:HE2	0.41	2.15	2	1
1:A:75:PHE:HB2	1:A:78:ARG:O	0.41	2.15	5	2
1:A:126:LEU:HD13	1:A:126:LEU:H	0.41	1.73	7	2
1:A:21:THR:HB	1:A:100:GLN:HG2	0.41	1.92	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:103:GLU:O	1:A:103:GLU:HG3	0.41	2.15	6	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:95:TRP:CD2	0.41	3.02	8	1
1:A:120:GLU:O	1:A:124:ALA:N	0.41	2.53	8	1
1:A:107:LEU:HG	1:A:110:LEU:HG	0.41	1.91	10	1
1:A:4:LEU:CD1	1:A:80:ILE:HA	0.41	2.45	11	1
1:A:13:ASN:O	1:A:13:ASN:CG	0.41	2.59	2	1
1:A:62:PRO:HG2	1:A:91:GLU:N	0.41	2.30	5	2
1:A:112:ALA:HA	1:A:123:ILE:HG21	0.41	1.91	5	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:4:LEU:HD23	1:A:39:LYS:CE	0.41	2.45	8	2
1:A:22:ARG:HD2	1:A:33:LEU:CD2	0.41	2.42	9	1
1:A:12:ARG:O	1:A:88:GLU:HG2	0.41	2.14	2	1
1:A:39:LYS:HG2	1:A:41:GLU:OE1	0.41	2.14	16	2
1:A:111:ASN:C	1:A:113:ASP:N	0.41	2.74	10	1
1:A:22:ARG:NH1	1:A:30:ALA:O	0.41	2.53	13	1
1:A:3:LYS:CG	1:A:5:GLN:OE1	0.41	2.68	14	1
1:A:12:ARG:HA	1:A:18:ILE:CA	0.41	2.45	14	1
1:A:79:HIS:N	1:A:79:HIS:CD2	0.41	2.88	15	1
1:A:6:ILE:N	1:A:81:THR:O	0.41	2.54	2	1
1:A:119:ASN:C	1:A:121:PRO:HD2	0.41	2.35	3	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:87:VAL:C	1:A:88:GLU:CG	0.41	2.89	4	2
1:A:82:LEU:CD2	1:A:84:PHE:CZ	0.41	3.03	7	2
1:A:124:ALA:HA	1:A:127:LYS:CE	0.41	2.46	7	1
1:A:110:LEU:CD2	1:A:123:ILE:HD11	0.41	2.46	9	1
1:A:12:ARG:NE	1:A:86:LEU:CD1	0.41	2.83	10	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:72:GLU:CG	1:A:80:ILE:O	0.41	2.68	2	1
1:A:74:GLU:HG3	1:A:79:HIS:NE2	0.41	2.30	7	1
1:A:111:ASN:OD1	1:A:127:LYS:HA	0.41	2.16	10	1
1:A:35:PHE:CD2	1:A:115:PHE:CE1	0.41	3.09	16	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:20:ILE:CG1	1:A:21:THR:N	0.41	2.83	11	2
1:A:21:THR:O	1:A:21:THR:HG23	0.41	2.16	11	2
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:69:GLU:HG3	1:A:70:LYS:N	0.41	2.29	15	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: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:115:PHE:HB3	1:A:123:ILE:HG12	0.41	1.90	16	1
1:A:5:GLN:O	1:A:39:LYS:HE3	0.41	2.16	1	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:4:LEU:HD22	1:A:5:GLN:CA	0.41	2.45	1	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:19:PHE:CD1	1:A:103:GLU:HA	0.41	2.51	10	2
1:A:30:ALA:O	1:A:114:ASP:O	0.41	2.39	4	1
1:A:116:PRO:O	1:A:123:ILE:HD13	0.41	2.16	5	1
1:A:70:LYS:HE3	1:A:81:THR:HG22	0.41	1.92	6	1
1:A:10:ILE:HG21	1:A:18:ILE:HD12	0.41	1.93	15	1
1:A:36:PRO:HB2	1:A:97:LYS:HA	0.41	1.92	16	1
1:A:109:GLY:C	1:A:110:LEU:O	0.41	2.59	16	1
1:A:97:LYS:HB3	1:A:102:GLY:HA3	0.41	1.93	3	1
1:A:22:ARG:HB3	1:A:103:GLU:CG	0.41	2.46	6	1
1:A:68:PHE:CE2	1:A:126:LEU:CD1	0.41	3.03	7	1
1:A:77:ASP:O	1:A:78:ARG:HD2	0.41	2.16	9	1
1:A:22:ARG:HG3	1:A:23:ARG:N	0.41	2.30	11	1
1:A:55:GLN:O	1:A:57:GLU:N	0.41	2.54	13	1
1:A:115:PHE:HB3	1:A:123:ILE:CG1	0.41	2.46	13	1
1:A:111:ASN:HA	1:A:127:LYS:HA	0.41	1.91	14	1
3:A:130:APC:O1A	3:A:130:APC:O2B	0.41	2.39	16	1
1:A:51:VAL:O	1:A:55:GLN:CG	0.41	2.69	3	1
1:A:62:PRO:CG	1:A:91:GLU:CB	0.41	2.98	3	2
1:A:4:LEU:C	1:A:5:GLN:OE1	0.41	2.59	5	1
1:A:97:LYS:HG3	1:A:97:LYS:O	0.41	2.16	5	1
1:A:58:VAL:HG11	1:A:93:GLU:CD	0.41	2.36	8	1
1:A:43:GLY:C	1:A:44:GLU:HG2	0.41	2.37	9	1
1:A:22:ARG:HD3	1:A:105:MET:CG	0.41	2.46	11	1
1:A:46:PRO:O	1:A:50:VAL:CG1	0.40	2.69	4	1
1:A:64:HIS:O	1:A:87:VAL:HB	0.40	2.16	5	1
1:A:98:GLU:CG	3:A:130:APC:PG	0.40	3.09	5	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:4:LEU:CD1	1:A:80:ILE:HG13	0.40	2.47	10	1
1:A:54:LEU:HG	1:A:63:GLN:OE1	0.40	2.16	10	1
1:A:33:LEU:HB2	1:A:114:ASP:O	0.40	2.17	11	1
1:A:79:HIS:CD2	1:A:79:HIS:N	0.40	2.89	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
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:15:ASN:C	1:A:15:ASN:OD1	0.40	2.59	1	1
1:A:107:LEU:HD22	1:A:110:LEU:CA	0.40	2.44	2	1
1:A:39:LYS:HE2	1:A:40:ILE:O	0.40	2.17	5	1
3:A:130:APC:O1A	3:A:130:APC:PG	0.40	2.79	6	1
1:A:62:PRO:CD	1:A:91:GLU:HB3	0.40	2.46	7	2
1:A:5:GLN:O	1:A:39:LYS:CE	0.40	2.69	10	1
1:A:38:GLY:HA2	1:A:98:GLU:CD	0.40	2.37	10	1
1:A:60:ILE:HG12	1:A:95:TRP:CD1	0.40	2.51	10	1
1:A:107:LEU:CG	1:A:110:LEU:HA	0.40	2.47	10	1
1:A:4:LEU:CD2	1:A:39:LYS:CE	0.40	2.99	12	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:3:LYS:HE2	1:A:5:GLN:NE2	0.40	2.32	1	1
1:A:39:LYS:HD3	3:A:130:APC:H5'2	0.40	1.93	2	1
1:A:19:PHE:CE2	1:A:94:PRO:CG	0.40	3.05	3	1
1:A:77:ASP:OD1	1:A:77:ASP:C	0.40	2.60	3	1
1:A:52:ARG:HD3	1:A:55:GLN:NE2	0.40	2.32	6	1
1:A:123:ILE:O	1:A:123:ILE:CG2	0.40	2.69	8	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:97:LYS:HB2	1:A:100:GLN:O	0.40	2.16	15	1
1:A:22:ARG:CZ	1:A:114:ASP:OD2	0.40	2.69	16	1
1:A:47:GLU:O	1:A:49:ALA:N	0.40	2.55	4	1
1:A:125:LYS:O	1:A:128:ARG:HG3	0.40	2.16	4	1
1:A:117:PRO:HA	1:A:120:GLU:CD	0.40	2.36	8	1
1:A:5:GLN:O	1:A:39:LYS:HD2	0.40	2.16	10	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
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	15	ASN	16
1	A	41	GLU	16
1	A	60	ILE	16
1	A	61	THR	16
1	A	110	LEU	16
1	A	109	GLY	15
1	A	63	GLN	14
1	A	69	GLU	14
1	A	92	GLY	14
1	A	102	GLY	14
1	A	23	ARG	13
1	A	95	TRP	13
1	A	108	VAL	13
1	A	57	GLU	12
1	A	10	ILE	10
1	A	9	GLY	10
1	A	39	LYS	10
1	A	37	GLY	9
1	A	44	GLU	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	36	PRO	5
1	A	13	ASN	5
1	A	8	VAL	4
1	A	59	GLY	4
1	A	77	ASP	4
1	A	64	HIS	4
1	A	34	GLU	4
1	A	27	ALA	3
1	A	47	GLU	3
1	A	97	LYS	3
1	A	25	ALA	2
1	A	91	GLU	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	42	MET	2
1	A	75	PHE	1
1	A	29	MET	1
1	A	101	PRO	1
1	A	100	GLN	1
1	A	38	GLY	1
1	A	65	PHE	1
1	A	26	ASP	1
1	A	21	THR	1
1	A	28	HIS	1

6.3.2 Protein sidechains (i)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	108/110 (98%)	65±3 (61±3%)	43±3 (39±3%)	0 5
All	All	1728/1760 (98%)	1046 (61%)	682 (39%)	0 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	4	LEU	16
1	A	10	ILE	16
1	A	40	ILE	16
1	A	68	PHE	16
1	A	78	ARG	16
1	A	82	LEU	16
1	A	89	ARG	16
1	A	95	TRP	16
1	A	126	LEU	16
1	A	6	ILE	15
1	A	55	GLN	15
1	A	73	TYR	15
1	A	71	LEU	15
1	A	110	LEU	15
1	A	23	ARG	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	66	SER	14
1	A	97	LYS	14
1	A	54	LEU	13
1	A	105	MET	13
1	A	128	ARG	13
1	A	67	LEU	13
1	A	70	LYS	13
1	A	87	VAL	13
1	A	56	GLU	12
1	A	113	ASP	12
1	A	8	VAL	11
1	A	13	ASN	11
1	A	63	GLN	11
1	A	18	ILE	10
1	A	91	GLU	10
1	A	106	SER	10
1	A	28	HIS	9
1	A	64	HIS	9
1	A	75	PHE	9
1	A	32	LYS	9
1	A	21	THR	8
1	A	44	GLU	8
1	A	100	GLN	8
1	A	120	GLU	8
1	A	35	PHE	8
1	A	77	ASP	8
1	A	26	ASP	7
1	A	80	ILE	7
1	A	12	ARG	7
1	A	79	HIS	7
1	A	42	MET	7
1	A	107	LEU	7
1	A	47	GLU	7
1	A	69	GLU	6
1	A	16	ASN	6
1	A	29	MET	6
1	A	119	ASN	6
1	A	65	PHE	6
1	A	11	ILE	5
1	A	81	THR	5
1	A	123	ILE	5
1	A	31	ASN	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	5	GLN	4
1	A	17	GLU	4
1	A	93	GLU	4
1	A	111	ASN	4
1	A	127	LYS	4
1	A	52	ARG	4
1	A	114	ASP	4
1	A	34	GLU	4
1	A	115	PHE	4
1	A	39	LYS	3
1	A	3	LYS	3
1	A	14	GLU	3
1	A	60	ILE	3
1	A	74	GLU	3
1	A	129	LEU	3
1	A	104	TRP	3
1	A	57	GLU	2
1	A	103	GLU	2
1	A	125	LYS	2
1	A	15	ASN	2
1	A	101	PRO	1
1	A	116	PRO	1
1	A	98	GLU	1
1	A	88	GLU	1
1	A	20	ILE	1
1	A	36	PRO	1
1	A	62	PRO	1
1	A	48	GLN	1

6.3.3 RNA (i)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates (i)

There are no monosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry (i)

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
4	CON	A	131	3	0,4,4	0.00±0.00	-
3	APC	A	130	4	27,33,33	1.86±0.02	8±0 (29±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
4	CON	A	131	3	-	-	-
3	APC	A	130	4	31,52,52	1.11±0.03	2±0 (6±0%)

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
3	APC	A	130	4	-	0±0,15,38,38	0±0,3,3,3

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	PB-O1B	4.27	1.61	1.51	14	16
3	A	130	APC	PA-O2A	3.50	1.48	1.56	12	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
3	A	130	APC	PB-O2B	3.50	1.48	1.56	6	16
3	A	130	APC	PG-O1G	3.42	1.61	1.50	2	16
3	A	130	APC	PA-O5'	3.12	1.62	1.57	14	16
3	A	130	APC	PB-O3B	3.09	1.61	1.58	6	16
3	A	130	APC	C8-N7	3.03	1.29	1.34	8	16
3	A	130	APC	O4'-C1'	2.72	1.44	1.41	7	16

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

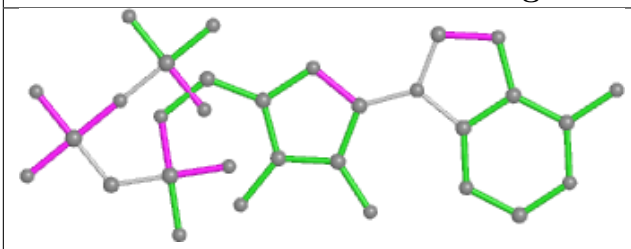
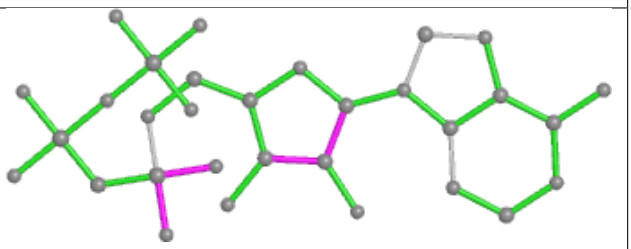
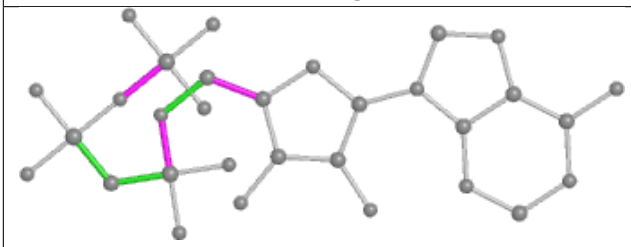
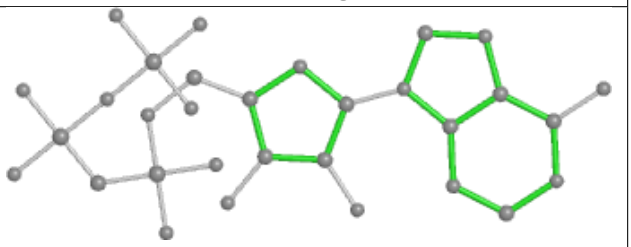
Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
3	A	130	APC	C3'-C2'-C1'	3.72	106.58	100.98	12	16
3	A	130	APC	O2A-PA-O1A	2.52	118.50	110.07	4	16
3	A	130	APC	C2'-C3'-C4'	2.09	106.69	102.64	6	1

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 then 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.

Ligand APC A 130	
 Bond lengths	 Bond angles
 Torsions	 Rings

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 (i)

No chemical shift data were provided