



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 17, 2026 – 07:03 PM UTC

PDB ID : 1AP8 / pdb_00001ap8
Title : TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E IN COMPLEX WITH
M7GDP, NMR, 20 STRUCTURES
Authors : Matsuo, H.; Li, H.; Mcguire, A.M.; Fletcher, M.; Gingras, A.C.; Sonenberg,
N.; Wagner, G.
Deposited on : 1997-07-25

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

MolProbity : 4-5-2 with Phenix2.0
Mogul : 2022.3.0, CSD as543be (2022)
Buster-report : wwPDB partial adaption of 1.1.7 (2018)
Percentile statistics : 20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
wwPDB-RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker : v1.2
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.49

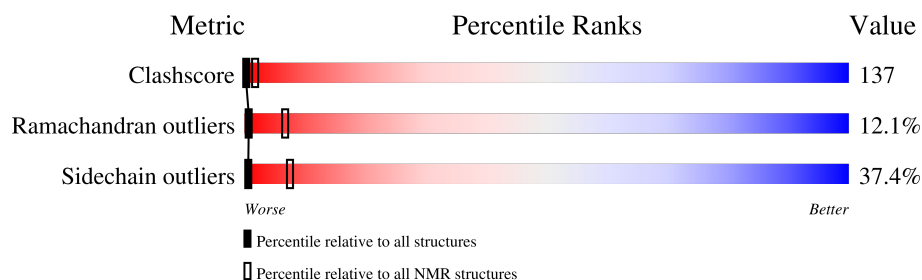
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

Percentile scores (ranging between 0-100) for global validation metrics of the entry are shown in the following graphic. The table shows the number of entries on which the scores are based.



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	229148	14424
Ramachandran outliers	224038	12848
Sidechain outliers	223484	12823

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the experimental data. The red, orange, yellow and green segments indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. A cyan segment indicates the fraction of residues that are not part of the well-defined cores, and a grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions $\leq 5\%$

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	213	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 20 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:11 (9)	2.19	8
2	A:39-A:50, A:57-A:139, A:148-A:188, A:193-A:203, A:210-A:213 (151)	1.04	20

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. No single-model clusters were found.

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

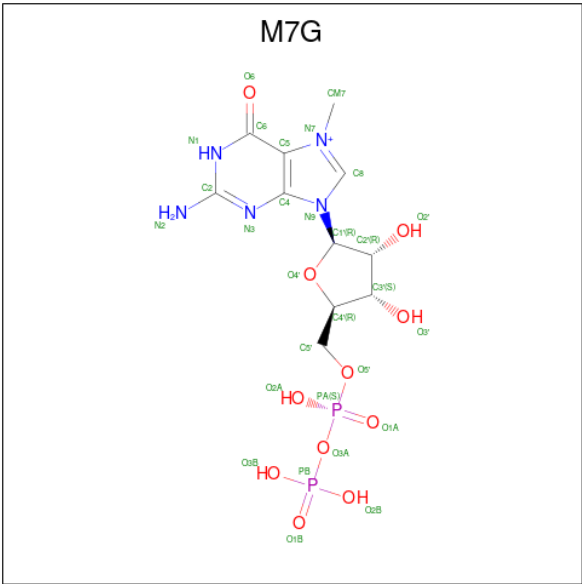
3 Entry composition [i](#)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 3438 atoms, of which 1691 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	213	3394	1095	1676	291	331	1	0

- Molecule 2 is 7N-METHYL-8-HYDROGUANOSINE-5'-DIPHOSPHATE (CCD ID: M7G) (formula: C₁₁H₁₈N₅O₁₁P₂).



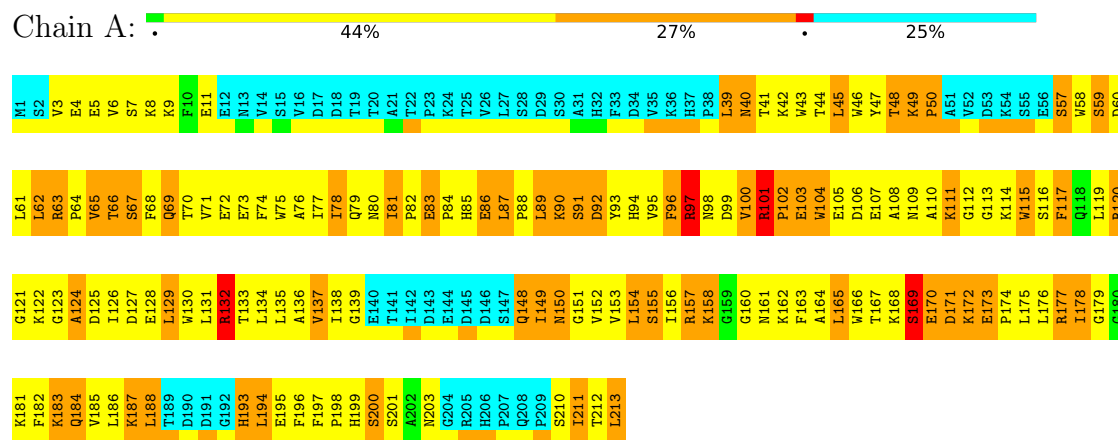
Mol	Chain	Residues	Atoms					
			Total	C	H	N	O	P
2	A	1	44	11	15	5	11	2

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E

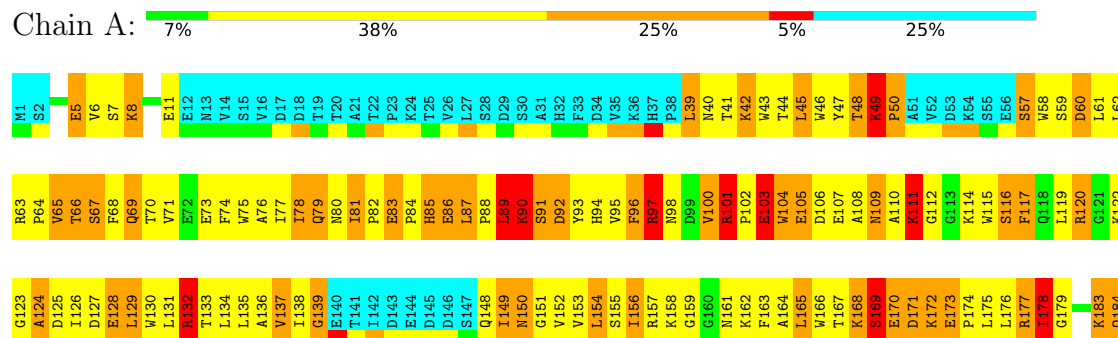


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

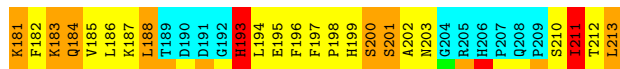
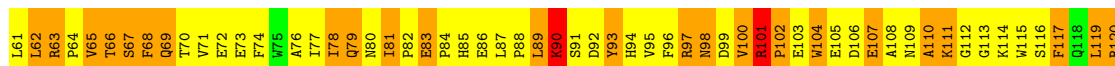
- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E





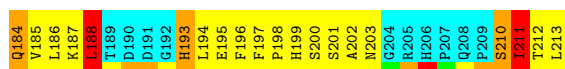
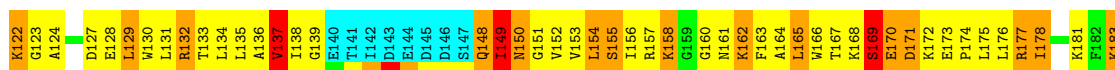
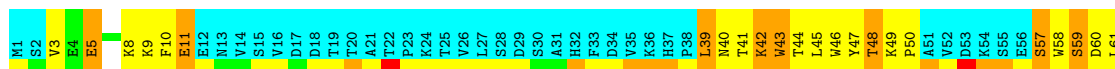
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E



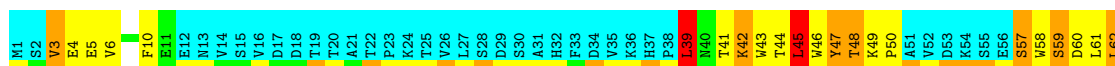
4.2.3 Score per residue for model 3

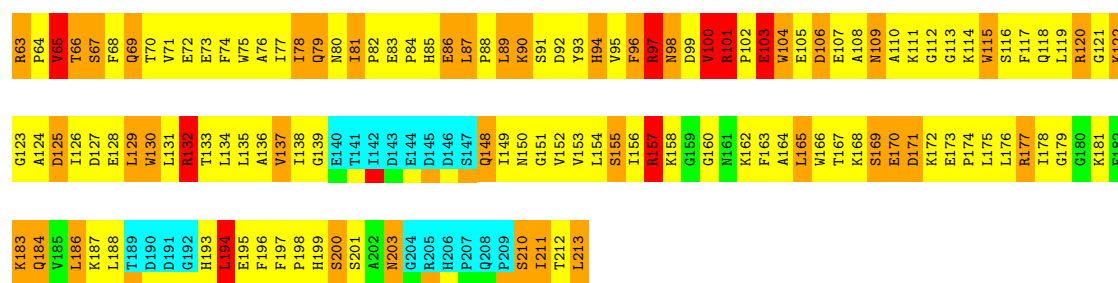
- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E



4.2.4 Score per residue for model 4

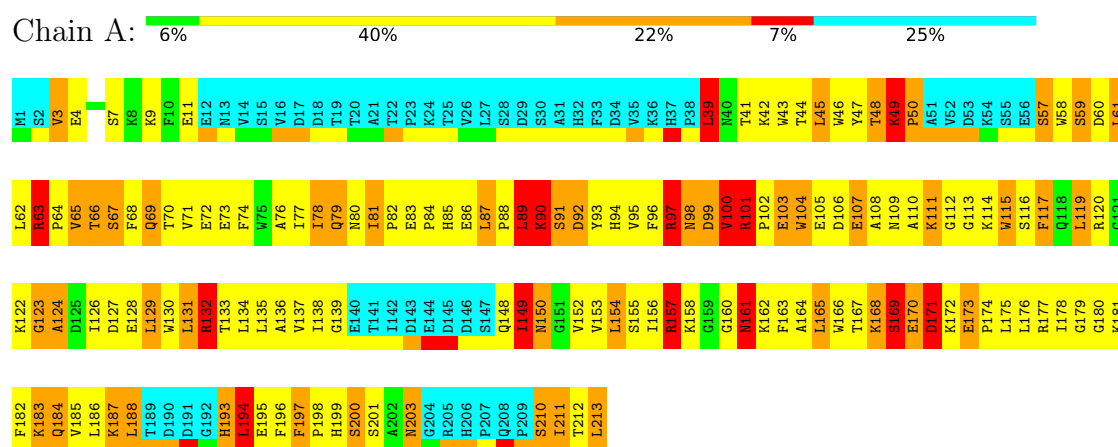
- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E





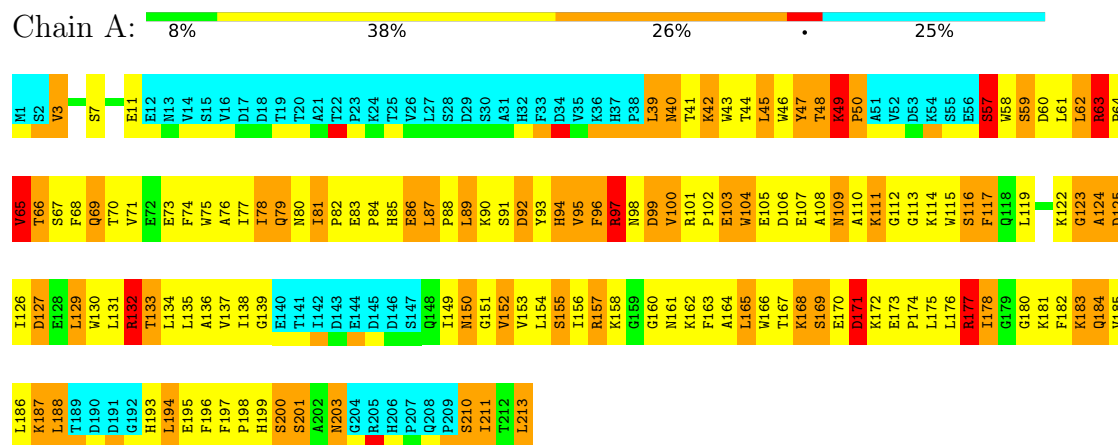
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E



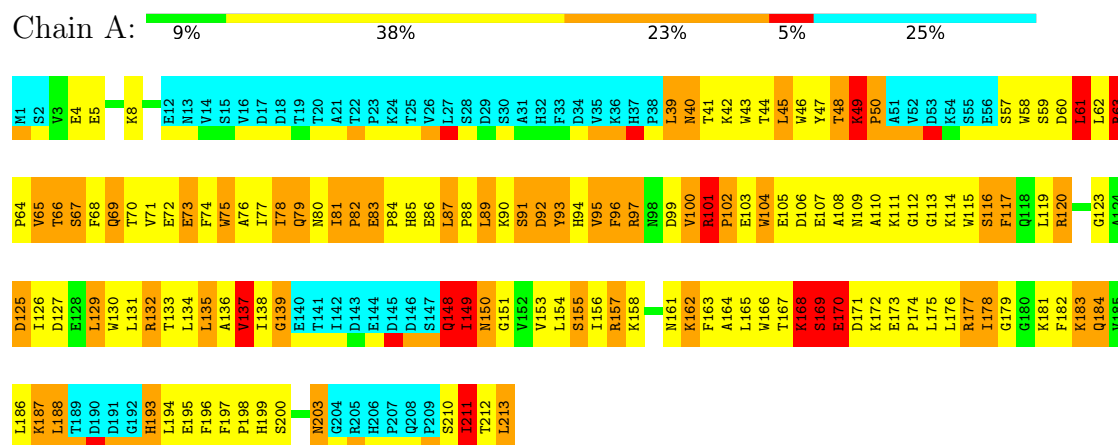
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E



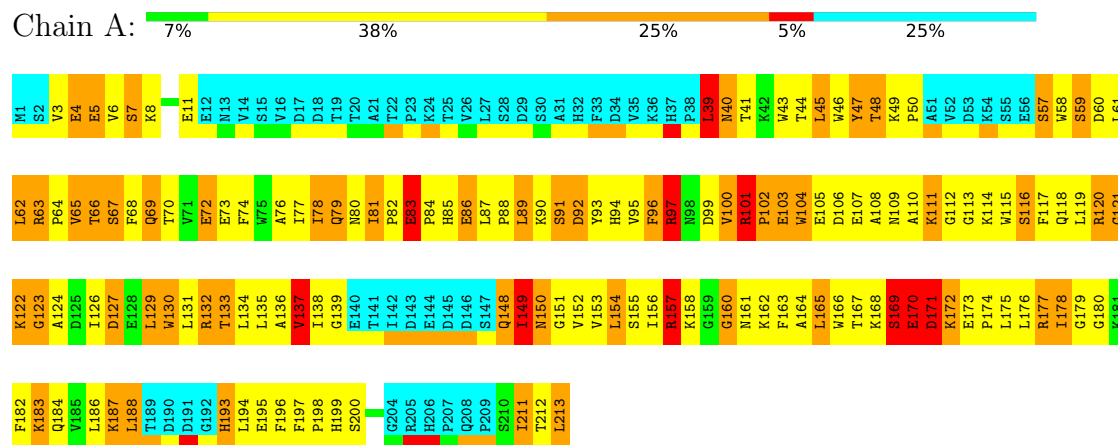
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E



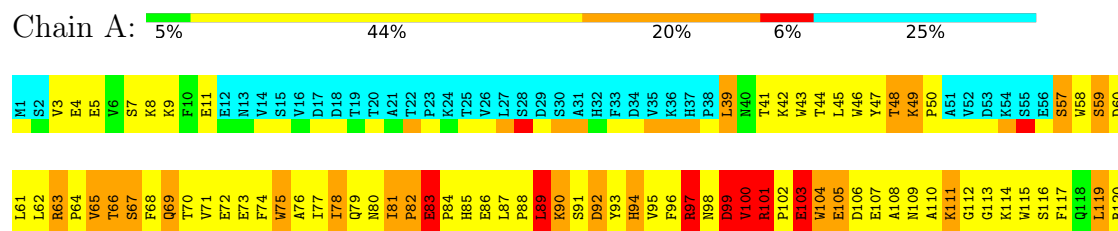
4.2.8 Score per residue for model 8

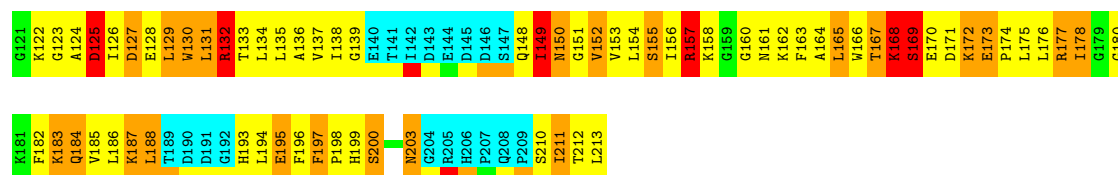
- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E



4.2.9 Score per residue for model 9

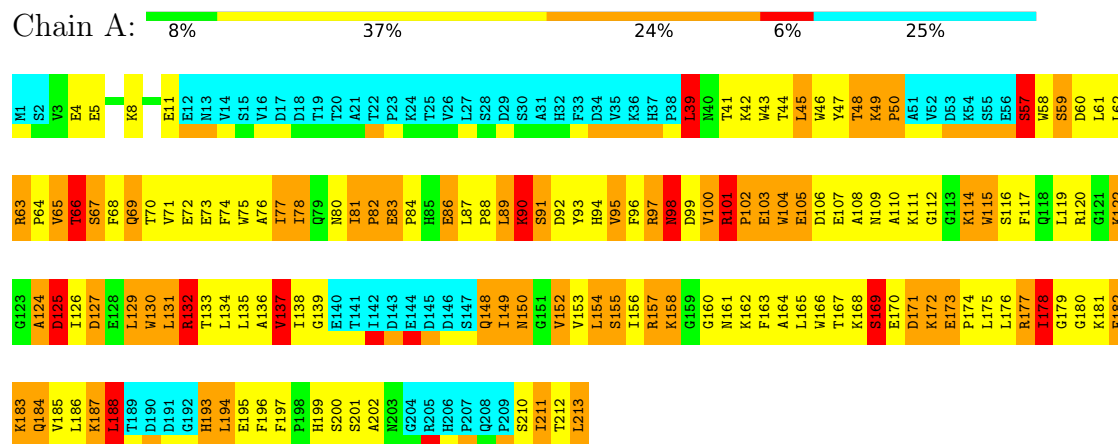
- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E





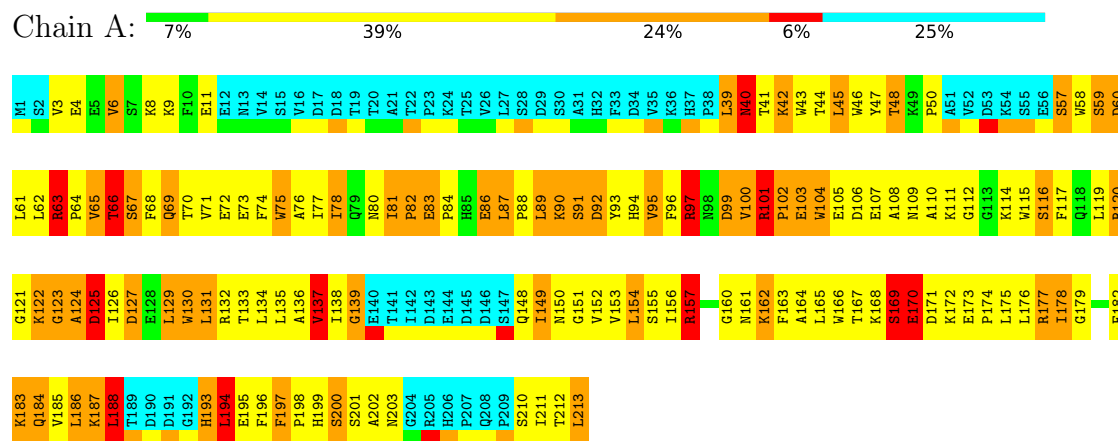
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E



4.2.11 Score per residue for model 11

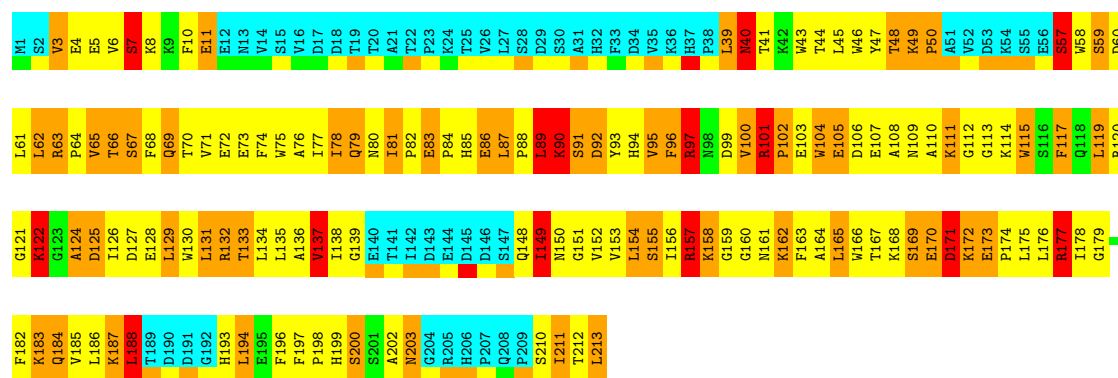
- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E



4.2.12 Score per residue for model 12

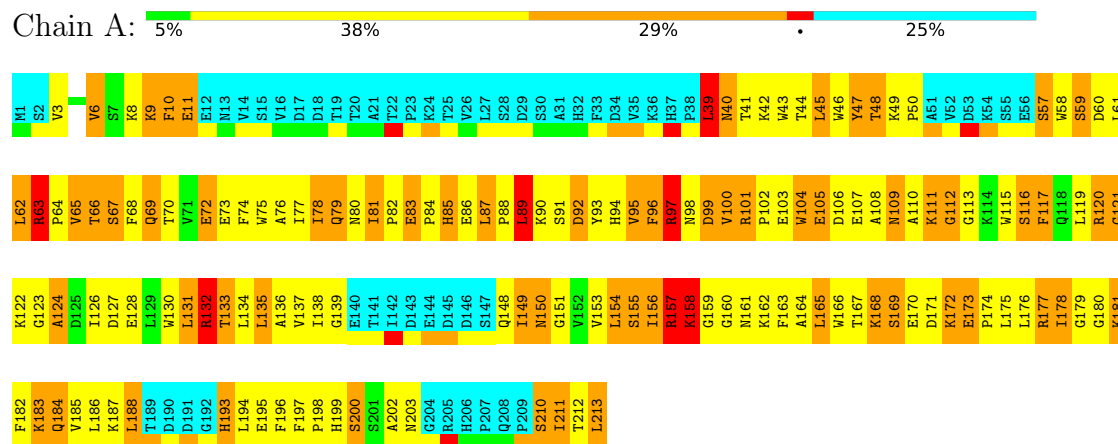
- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E





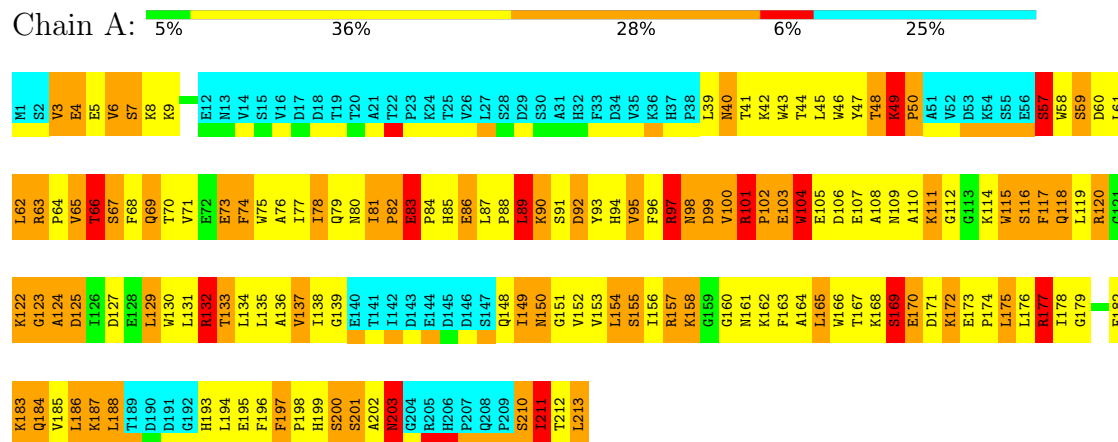
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E



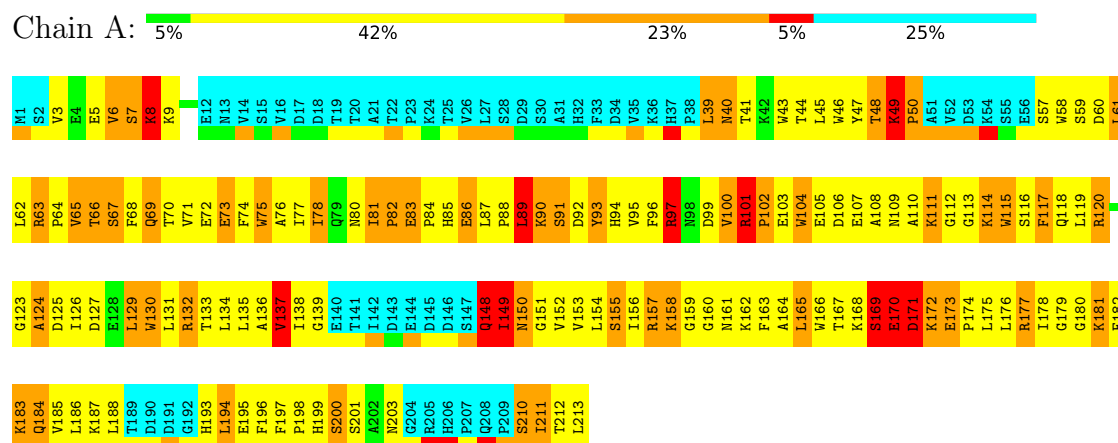
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E



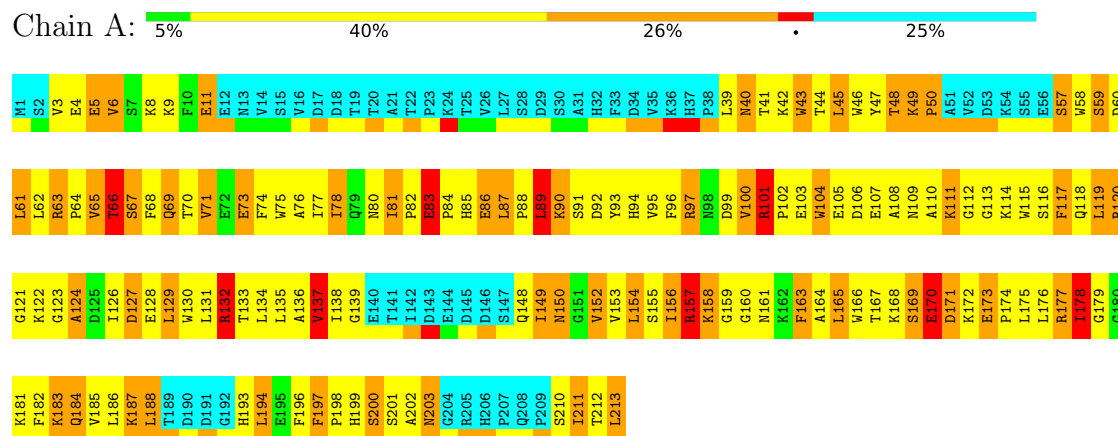
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E



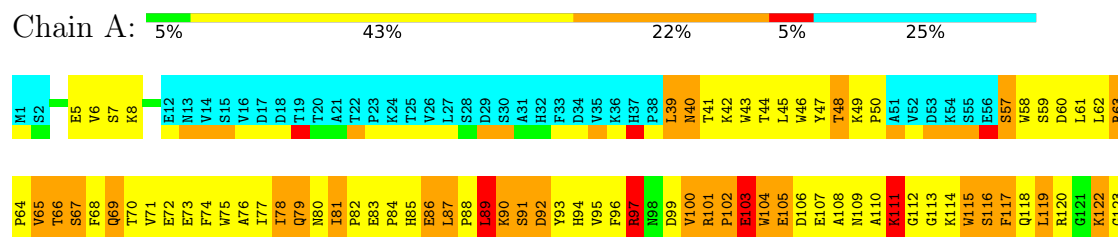
4.2.16 Score per residue for model 16

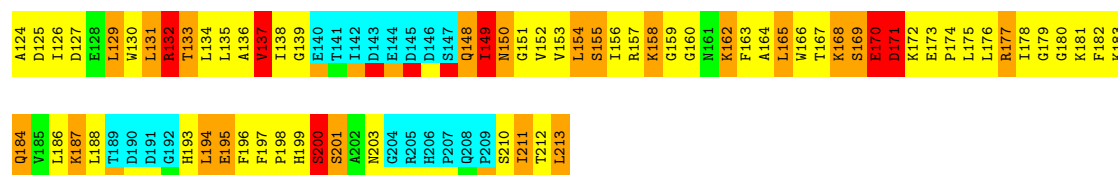
- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E



4.2.17 Score per residue for model 17

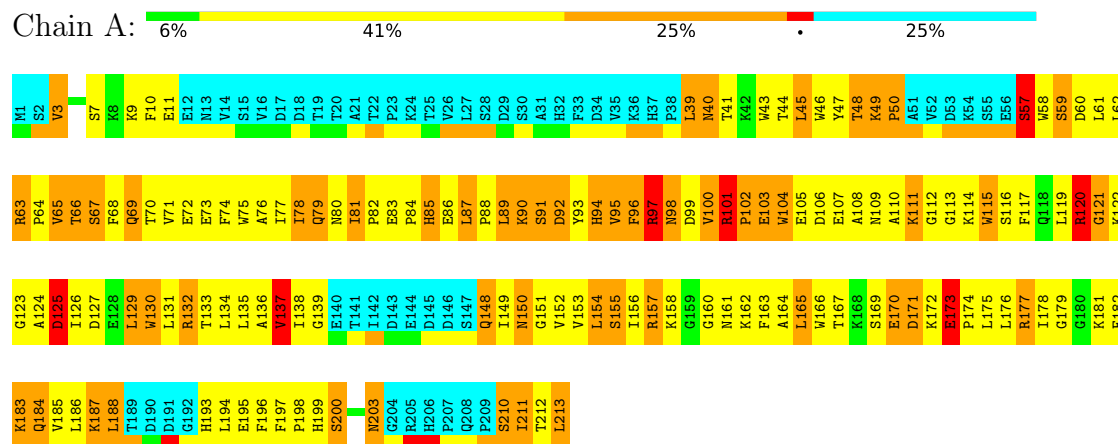
- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E





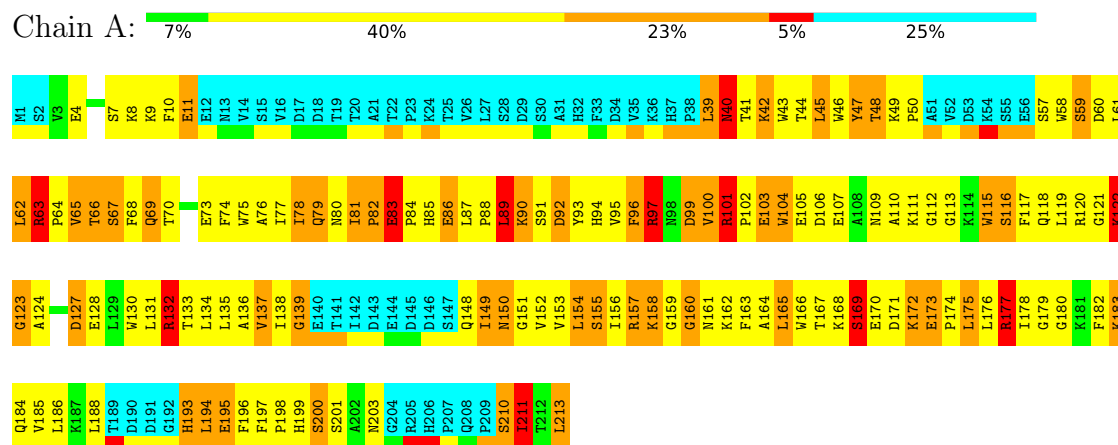
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E



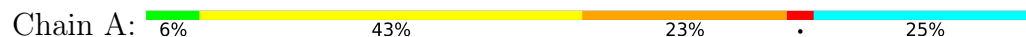
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E



4.2.20 Score per residue for model 20 (medoid)

- Molecule 1: TRANSLATION INITIATION FACTOR EIF4E



K181	G121	L61	M1
F182	K122	L62	S2
K183	G123	R63	
K184	D124	F64	E4
V185	L125	V65	E5
L186	I126	T66	V6
K187	D127	S67	S7
L188	E128	F68	X8
T189	L129	Q69	K9
D190	W130	T70	F10
D191	L131	V71	E11
G192	R132	E72	E12
H193	T133	E73	M13
L194	L134	F74	V14
E195	L135	W75	S15
F196	A136	A76	V16
F197	V137	L77	D17
F198	I138	L78	D18
H199	G139	Q79	T19
S200	E140	N80	T20
S201	T141	R81	A21
A202	I142	P82	T22
N203	D143	E83	P23
G204	E144	P84	V24
R205	L145	H85	T25
H206	D146	E86	V26
P207	S147	L87	L27
Q208	I148	P88	S28
P209	L149	L89	D29
S210	M150	K90	S30
L211	G151	S91	A31
T212	V152	D92	H32
L213	V153	V93	F33
	L154	H94	D34
	S155	V95	V35
	L156	F96	K36
	R157	S97	H37
	K158	N98	F38
	G159	D99	L39
	G160	V100	N40
	M161	R101	T41
	K162	P102	K42
	F163	E103	N43
	A164	W104	T44
	L165	E105	L45
	W166	D106	N46
	T167	E107	V47
	K168	M108	T48
	S169	N109	K49
	E170	A110	P50
	D171	K111	A51
	K172	G112	V52
	E173	H113	D53
	P174	K114	N54
	L175	W115	S55
	L176	S116	E56
	R177	F117	S57
	L178	Q118	N58
	T179	H119	S59
	C180	P120	N60

5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *molecular dynamics*.

Of the 60 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *NO VIOLATION ABOVE 0.5 ANGSTROMS AND 5 DEGREE DIHEDRAL ANGLE*.

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

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

No chemical shift data was provided.

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: M7G

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.39±0.01	0±0/1356 (0.0± 0.0%)	1.57±0.02	4±2/1837 (0.2± 0.1%)
All	All	1.39	1/27120 (0.0%)	1.57	80/36740 (0.2%)

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	6.4±0.7
All	All	0	128

All unique bond outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	101	ARG	N-CA	5.47	1.53	1.46	1	1

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	124	ALA	N-CA-CB	-7.68	105.41	114.17	1	2
1	A	3	VAL	N-CA-CB	-6.60	105.03	111.89	11	2
1	A	152	VAL	N-CA-CB	-6.53	105.13	112.45	16	5
1	A	211	ILE	N-CA-CB	-6.12	105.59	112.45	9	4
1	A	149	ILE	N-CA-CB	-6.10	105.12	112.07	1	2
1	A	6	VAL	N-CA-CB	-6.07	104.96	111.46	13	3
1	A	137	VAL	N-CA-CB	-5.94	103.92	110.51	18	10
1	A	169	SER	N-CA-CB	-5.94	104.92	113.65	11	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	193	HIS	CA-CB-CG	-5.75	108.05	113.80	7	1
1	A	125	ASP	N-CA-CB	-5.70	104.95	111.79	1	1
1	A	45	LEU	N-CA-CB	-5.64	102.26	110.84	5	14
1	A	95	VAL	N-CA-CB	-5.63	105.02	112.34	10	2
1	A	148	GLN	N-CA-CB	-5.62	105.39	113.65	2	1
1	A	156	ILE	N-CA-CB	-5.57	105.72	112.07	16	2
1	A	178	ILE	N-CA-CB	-5.51	104.42	110.65	1	3
1	A	173	GLU	O-C-N	5.45	124.03	120.27	18	1
1	A	90	LYS	N-CA-CB	-5.34	104.33	112.28	17	11
1	A	130	TRP	N-CA-CB	-5.33	102.28	110.01	20	2
1	A	98	ASN	N-CA-CB	-5.25	105.92	113.65	4	2
1	A	61	LEU	N-CA-CB	-5.23	102.34	110.39	7	1
1	A	193	HIS	N-CA-CB	-5.16	104.45	112.30	11	1
1	A	158	LYS	N-CA-CB	-5.11	104.30	109.51	2	1
1	A	71	VAL	N-CA-CB	-5.10	105.31	112.35	16	1
1	A	99	ASP	N-CA-CB	-5.08	104.74	112.47	9	1
1	A	126	ILE	N-CA-CB	-5.01	104.46	112.07	15	1
1	A	110	ALA	N-CA-CB	-5.00	102.99	110.10	2	1

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	63	ARG	Sidechain	20
1	A	120	ARG	Sidechain	19
1	A	132	ARG	Sidechain	19
1	A	177	ARG	Sidechain	19
1	A	97	ARG	Sidechain	17
1	A	101	ARG	Sidechain	17
1	A	157	ARG	Sidechain	17

6.2 Too-close contacts ⓘ

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in each chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen atoms added and optimized by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes averaged over the ensemble.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1318	1317	1317	367±18
2	A	29	15	16	15±2
All	All	26940	26640	26660	7350

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 137.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:167:THR:HG21	1:A:175:LEU:HD22	1.11	1.14	18	10
1:A:100:VAL:HG21	1:A:110:ALA:HB2	1.05	1.09	9	2
1:A:39:LEU:HD21	1:A:71:VAL:HG13	1.05	1.09	9	4
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:134:LEU:HD11	1.05	1.85	17	13
1:A:196:PHE:CD2	1:A:211:ILE:HD12	1.02	1.90	16	4
1:A:149:ILE:CG1	1:A:167:THR:HG22	1.01	1.84	9	5
1:A:134:LEU:HD22	1:A:152:VAL:HG11	1.01	1.32	16	12
1:A:149:ILE:HG23	1:A:167:THR:HG22	1.01	1.30	4	2
1:A:183:LYS:CD	1:A:194:LEU:HD22	0.99	1.88	19	1
1:A:45:LEU:HD22	1:A:77:ILE:HD11	0.99	1.31	6	20
1:A:100:VAL:CG2	1:A:110:ALA:HB2	0.98	1.88	17	12
1:A:149:ILE:HD11	1:A:167:THR:HG22	0.98	1.32	7	5
1:A:39:LEU:CD1	1:A:41:THR:HG22	0.98	1.88	1	4
1:A:117:PHE:CZ	1:A:165:LEU:HD11	0.97	1.92	10	1
1:A:100:VAL:HG23	1:A:110:ALA:HB2	0.97	1.31	17	9
1:A:87:LEU:HD21	1:A:156:ILE:HD12	0.96	1.35	3	15
1:A:186:LEU:HD12	1:A:193:HIS:CE1	0.96	1.94	20	1
1:A:48:THR:HG21	1:A:58:TRP:CZ3	0.96	1.96	15	19
1:A:196:PHE:CG	1:A:211:ILE:HD12	0.96	1.96	16	3
1:A:148:GLN:O	1:A:149:ILE:HD13	0.96	1.61	11	2
1:A:153:VAL:HG21	1:A:166:TRP:CZ2	0.95	1.97	7	16
1:A:39:LEU:HD21	1:A:69:GLN:CA	0.95	1.92	19	2
1:A:39:LEU:CD2	1:A:71:VAL:HG13	0.94	1.91	9	2
1:A:87:LEU:HD11	1:A:91:SER:HB3	0.94	1.39	17	3
1:A:100:VAL:HG21	1:A:110:ALA:CB	0.93	1.94	9	1
1:A:78:ILE:CD1	1:A:131:LEU:HD22	0.93	1.93	20	1
1:A:39:LEU:HD22	1:A:139:GLY:CA	0.92	1.94	15	2
1:A:94:HIS:CE1	1:A:153:VAL:HG13	0.92	1.98	7	8
1:A:111:LYS:HZ3	1:A:166:TRP:CG	0.92	1.83	14	1
1:A:167:THR:HG21	1:A:175:LEU:CD2	0.92	1.95	18	8
1:A:39:LEU:HD21	1:A:69:GLN:CB	0.92	1.95	13	2
1:A:77:ILE:HG21	1:A:93:TYR:CE1	0.91	2.00	4	1
1:A:93:TYR:CD2	1:A:154:LEU:HD22	0.91	2.01	16	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:SER:O	1:A:61:LEU:HD22	0.91	1.64	16	2
1:A:87:LEU:HD11	1:A:91:SER:CB	0.91	1.93	5	7
1:A:100:VAL:CG2	1:A:110:ALA:HB3	0.90	1.95	5	7
1:A:181:LYS:O	1:A:185:VAL:HG23	0.90	1.66	5	8
1:A:196:PHE:CE1	1:A:213:LEU:HD12	0.90	2.01	16	10
1:A:82:PRO:O	1:A:87:LEU:HD23	0.89	1.67	12	2
1:A:39:LEU:HD12	1:A:69:GLN:CB	0.89	1.97	3	2
1:A:87:LEU:HD11	1:A:91:SER:HB2	0.89	1.41	1	4
1:A:127:ASP:O	1:A:131:LEU:HD12	0.89	1.68	16	19
1:A:165:LEU:HD11	1:A:167:THR:HG23	0.89	1.41	9	2
1:A:74:PHE:CE2	1:A:95:VAL:HG11	0.89	2.02	9	11
1:A:47:TYR:CZ	1:A:65:VAL:HG21	0.88	2.03	6	18
1:A:196:PHE:CE1	1:A:211:ILE:HD12	0.88	2.03	2	13
1:A:100:VAL:HG22	1:A:102:PRO:HD3	0.87	1.43	1	1
1:A:183:LYS:HD3	1:A:194:LEU:HD22	0.87	1.46	19	2
1:A:88:PRO:C	1:A:89:LEU:HD22	0.87	1.95	13	4
1:A:39:LEU:HD11	1:A:41:THR:HG22	0.86	1.46	1	1
1:A:80:ASN:O	1:A:81:ILE:HD12	0.86	1.69	12	7
1:A:82:PRO:HB2	1:A:87:LEU:HD23	0.86	1.46	19	4
1:A:77:ILE:HG21	1:A:93:TYR:CD1	0.86	2.06	4	1
1:A:153:VAL:HB	1:A:164:ALA:HB3	0.85	1.48	16	18
1:A:39:LEU:HD21	1:A:69:GLN:C	0.85	1.96	8	2
1:A:82:PRO:HB2	1:A:87:LEU:HD13	0.85	1.47	3	5
1:A:43:TRP:CE3	1:A:95:VAL:HG13	0.85	2.07	19	7
1:A:62:LEU:HD12	1:A:63:ARG:N	0.84	1.87	4	6
1:A:149:ILE:HG13	1:A:167:THR:HG22	0.84	1.50	16	5
1:A:94:HIS:ND1	1:A:153:VAL:HG13	0.84	1.87	7	10
1:A:89:LEU:HD23	1:A:156:ILE:CG2	0.84	2.01	10	7
1:A:188:LEU:HD13	1:A:193:HIS:HB2	0.83	1.48	19	2
1:A:188:LEU:HD22	1:A:193:HIS:ND1	0.83	1.87	20	1
1:A:188:LEU:HD22	1:A:193:HIS:CE1	0.83	2.08	1	4
1:A:78:ILE:HD13	1:A:131:LEU:HD22	0.83	1.48	20	1
1:A:100:VAL:HG22	1:A:102:PRO:CD	0.83	2.03	1	1
1:A:84:PRO:HA	1:A:156:ILE:HD11	0.82	1.50	11	9
1:A:188:LEU:HD11	1:A:193:HIS:CG	0.82	2.08	6	1
1:A:45:LEU:CD2	1:A:77:ILE:HD11	0.82	2.04	4	7
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:95:VAL:HG13	0.82	2.10	14	1
1:A:47:TYR:CE2	1:A:65:VAL:HG21	0.82	2.10	16	20
1:A:148:GLN:C	1:A:149:ILE:HD13	0.82	1.99	11	2
1:A:50:PRO:HG2	1:A:61:LEU:HD22	0.82	1.52	2	8
1:A:149:ILE:HD12	1:A:167:THR:HG22	0.82	1.52	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:188:LEU:HD11	1:A:193:HIS:CD2	0.81	2.11	6	1
1:A:210:SER:O	1:A:211:ILE:HG23	0.81	1.74	2	7
1:A:39:LEU:HD22	1:A:39:LEU:N	0.81	1.90	13	2
1:A:39:LEU:HD13	1:A:39:LEU:N	0.81	1.90	19	1
1:A:167:THR:CG2	1:A:175:LEU:HD22	0.81	2.06	20	6
1:A:100:VAL:HG23	1:A:110:ALA:HB3	0.81	1.53	5	3
1:A:130:TRP:CE2	1:A:134:LEU:HD11	0.81	2.11	6	12
1:A:172:LYS:HA	1:A:175:LEU:HD12	0.81	1.51	10	14
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:CA	0.80	2.06	20	18
1:A:149:ILE:CD1	1:A:167:THR:HG22	0.80	2.05	7	3
1:A:111:LYS:HZ3	1:A:166:TRP:CD1	0.80	1.94	14	1
1:A:135:LEU:HD12	1:A:136:ALA:N	0.80	1.92	16	11
1:A:153:VAL:HG21	1:A:166:TRP:CH2	0.79	2.11	11	11
1:A:152:VAL:HG12	1:A:165:LEU:HG	0.79	1.53	4	1
1:A:57:SER:C	1:A:61:LEU:HD22	0.79	2.02	7	2
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:N	0.79	1.92	20	11
1:A:123:GLY:CA	1:A:126:ILE:HD11	0.78	2.07	1	3
1:A:89:LEU:HD23	1:A:156:ILE:HG21	0.78	1.55	10	7
1:A:174:PRO:O	1:A:178:ILE:HG23	0.78	1.79	18	8
1:A:94:HIS:CB	1:A:153:VAL:HG22	0.78	2.09	3	3
1:A:39:LEU:N	1:A:39:LEU:HD23	0.78	1.94	14	5
1:A:119:LEU:HD21	1:A:188:LEU:CB	0.78	2.09	15	1
1:A:167:THR:HG21	1:A:175:LEU:HD23	0.78	1.55	8	1
1:A:100:VAL:HG21	1:A:150:ASN:OD1	0.77	1.77	3	2
1:A:39:LEU:HD12	1:A:69:GLN:HB3	0.77	1.55	3	1
1:A:39:LEU:HD22	1:A:139:GLY:HA3	0.77	1.55	15	2
1:A:89:LEU:HD22	1:A:89:LEU:N	0.77	1.94	19	4
1:A:183:LYS:HG3	1:A:194:LEU:HD13	0.77	1.55	19	3
1:A:62:LEU:HD12	1:A:62:LEU:C	0.77	2.04	4	6
1:A:69:GLN:CB	1:A:138:ILE:HD12	0.77	2.09	3	1
1:A:119:LEU:HG	1:A:188:LEU:HD22	0.77	1.54	5	1
1:A:44:THR:HG23	1:A:97:ARG:HD2	0.77	1.56	1	1
1:A:100:VAL:HG13	1:A:101:ARG:N	0.77	1.94	6	17
1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:HD23	0.77	1.95	5	2
1:A:87:LEU:O	1:A:87:LEU:HD12	0.77	1.80	19	1
1:A:47:TYR:OH	1:A:65:VAL:HG21	0.77	1.79	8	11
1:A:47:TYR:OH	1:A:65:VAL:HG11	0.76	1.80	17	17
1:A:44:THR:HG22	1:A:67:SER:HB3	0.76	1.57	14	14
1:A:183:LYS:HB2	1:A:194:LEU:HD13	0.76	1.54	13	7
1:A:130:TRP:CE3	1:A:186:LEU:HD21	0.76	2.16	19	5
1:A:123:GLY:HA3	1:A:126:ILE:HD11	0.76	1.55	1	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:GLN:CG	1:A:138:ILE:HD12	0.76	2.11	3	1
1:A:171:ASP:O	1:A:175:LEU:HD13	0.76	1.80	8	5
1:A:87:LEU:HD12	1:A:89:LEU:N	0.76	1.96	2	4
1:A:100:VAL:HG22	1:A:101:ARG:N	0.76	1.94	9	11
1:A:180:GLY:HA2	1:A:194:LEU:HD11	0.76	1.56	6	1
1:A:41:THR:HG21	1:A:97:ARG:HD3	0.76	1.58	10	1
1:A:89:LEU:HD22	1:A:158:LYS:O	0.76	1.81	20	2
1:A:87:LEU:CD2	1:A:156:ILE:HD12	0.76	2.10	6	16
1:A:41:THR:HG21	1:A:97:ARG:CD	0.76	2.11	10	1
1:A:108:ALA:HB1	1:A:199:HIS:HA	0.75	1.55	1	2
1:A:134:LEU:CD2	1:A:165:LEU:HD21	0.75	2.10	15	2
1:A:117:PHE:CG	1:A:186:LEU:HD11	0.75	2.17	3	3
1:A:183:LYS:CB	1:A:194:LEU:HD12	0.75	2.12	5	1
1:A:87:LEU:C	1:A:87:LEU:HD12	0.75	2.07	15	4
1:A:100:VAL:HG13	1:A:107:GLU:HG2	0.75	1.56	16	3
1:A:137:VAL:HG12	1:A:138:ILE:HG23	0.75	1.59	10	8
1:A:87:LEU:HD22	1:A:91:SER:OG	0.75	1.82	19	2
1:A:100:VAL:O	1:A:101:ARG:CB	0.75	2.34	1	11
1:A:188:LEU:HD13	1:A:193:HIS:NE2	0.75	1.97	1	1
1:A:58:TRP:CE2	1:A:62:LEU:HD11	0.74	2.16	12	1
1:A:45:LEU:HA	1:A:95:VAL:HG22	0.74	1.58	17	17
1:A:188:LEU:HD13	1:A:193:HIS:CE1	0.74	2.17	12	2
1:A:100:VAL:HG21	1:A:107:GLU:HA	0.74	1.58	15	11
1:A:66:THR:HG23	1:A:73:GLU:OE1	0.74	1.82	8	4
1:A:50:PRO:CG	1:A:61:LEU:HD22	0.74	2.12	12	3
1:A:39:LEU:HD22	1:A:139:GLY:HA2	0.74	1.57	11	3
1:A:41:THR:O	1:A:69:GLN:CG	0.74	2.36	14	2
1:A:154:LEU:C	1:A:154:LEU:HD23	0.74	2.06	4	20
1:A:58:TRP:CZ2	1:A:62:LEU:HD11	0.74	2.18	3	13
1:A:61:LEU:HD13	1:A:61:LEU:N	0.73	1.96	16	1
1:A:135:LEU:HD12	1:A:135:LEU:C	0.73	2.07	18	6
1:A:196:PHE:CD1	1:A:211:ILE:HD12	0.73	2.17	15	9
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:CB	0.73	2.12	6	6
1:A:135:LEU:C	1:A:135:LEU:HD12	0.73	2.09	11	13
1:A:188:LEU:HD13	1:A:193:HIS:CD2	0.73	2.18	1	1
1:A:39:LEU:HD12	1:A:41:THR:HG22	0.73	1.59	16	3
1:A:119:LEU:HD21	1:A:121:GLY:O	0.73	1.84	11	2
1:A:119:LEU:HD11	1:A:186:LEU:HB3	0.73	1.61	20	3
1:A:104:TRP:CD1	2:A:214:M7G:C6	0.73	2.72	6	20
1:A:48:THR:HG22	1:A:61:LEU:HB3	0.73	1.58	7	1
1:A:179:GLY:C	1:A:194:LEU:HD21	0.73	2.09	7	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:167:THR:HG21	1:A:175:LEU:HD21	0.73	1.60	1	2
1:A:82:PRO:O	1:A:87:LEU:HD22	0.72	1.84	18	6
1:A:100:VAL:HG23	1:A:110:ALA:CB	0.72	2.14	5	5
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:154:LEU:HD12	0.72	2.18	10	2
1:A:48:THR:CG2	1:A:62:LEU:HD12	0.72	2.14	12	1
1:A:39:LEU:HD21	1:A:69:GLN:HA	0.72	1.61	19	1
1:A:179:GLY:C	1:A:194:LEU:HD11	0.72	2.09	4	1
1:A:87:LEU:HD13	1:A:91:SER:OG	0.72	1.84	14	1
1:A:45:LEU:O	1:A:65:VAL:HG22	0.72	1.85	7	18
1:A:126:ILE:HG23	1:A:186:LEU:HA	0.72	1.60	11	1
1:A:87:LEU:HD12	1:A:87:LEU:O	0.72	1.85	14	4
1:A:133:THR:HG22	1:A:182:PHE:CZ	0.72	2.19	10	3
1:A:123:GLY:O	1:A:124:ALA:HB3	0.72	1.84	8	4
1:A:104:TRP:CD1	1:A:104:TRP:C	0.72	2.68	19	20
1:A:89:LEU:HD13	1:A:158:LYS:O	0.72	1.84	20	2
1:A:149:ILE:HG23	1:A:150:ASN:N	0.72	2.00	7	10
1:A:100:VAL:HG11	1:A:107:GLU:HA	0.71	1.61	8	11
1:A:134:LEU:HD13	1:A:152:VAL:HB	0.71	1.61	17	4
1:A:188:LEU:HD12	1:A:188:LEU:O	0.71	1.84	17	4
1:A:100:VAL:HG22	1:A:107:GLU:HA	0.71	1.60	16	4
1:A:183:LYS:O	1:A:188:LEU:HD23	0.71	1.85	1	5
1:A:87:LEU:HD12	1:A:87:LEU:C	0.71	2.10	19	2
1:A:186:LEU:HB2	1:A:188:LEU:HD23	0.71	1.62	15	4
1:A:50:PRO:HA	1:A:61:LEU:HD13	0.71	1.62	3	5
1:A:97:ARG:NH2	1:A:138:ILE:HG22	0.71	2.01	4	1
1:A:165:LEU:HD21	1:A:178:ILE:HD12	0.71	1.63	14	2
1:A:74:PHE:CZ	1:A:78:ILE:HD11	0.71	2.21	15	1
1:A:169:SER:O	1:A:175:LEU:HD11	0.71	1.85	10	2
1:A:183:LYS:HG3	1:A:188:LEU:HD21	0.71	1.60	7	2
1:A:123:GLY:N	1:A:126:ILE:HD11	0.71	2.00	5	5
1:A:50:PRO:C	1:A:61:LEU:HD13	0.71	2.11	5	3
1:A:73:GLU:O	1:A:76:ALA:HB3	0.70	1.86	18	20
1:A:94:HIS:HB3	1:A:153:VAL:HG22	0.70	1.61	4	3
1:A:48:THR:HG22	1:A:61:LEU:HB2	0.70	1.61	15	3
1:A:123:GLY:O	1:A:124:ALA:HB2	0.70	1.87	15	7
1:A:41:THR:HG23	1:A:43:TRP:CD1	0.70	2.22	16	4
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:186:LEU:HD22	0.70	2.22	7	1
1:A:134:LEU:HD22	1:A:152:VAL:CG1	0.70	2.16	18	5
1:A:176:LEU:HG	1:A:211:ILE:HD11	0.70	1.62	17	1
1:A:96:PHE:CZ	1:A:166:TRP:CZ3	0.70	2.80	9	6
1:A:149:ILE:HG12	1:A:167:THR:HG22	0.70	1.63	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:130:TRP:CH2	1:A:163:PHE:CE1	0.70	2.79	10	1
1:A:119:LEU:HD12	1:A:193:HIS:NE2	0.70	2.02	3	1
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:163:PHE:CD1	0.70	2.79	20	2
1:A:39:LEU:HD11	1:A:70:THR:O	0.70	1.87	18	7
1:A:58:TRP:CE2	2:A:214:M7G:C5	0.70	2.75	15	20
1:A:58:TRP:CZ2	2:A:214:M7G:N7	0.70	2.60	15	18
1:A:87:LEU:HD12	1:A:89:LEU:H	0.70	1.46	2	4
1:A:186:LEU:HD12	1:A:193:HIS:NE2	0.70	2.01	20	1
1:A:96:PHE:CE1	1:A:166:TRP:CZ3	0.70	2.79	2	2
1:A:96:PHE:CE2	1:A:166:TRP:CZ3	0.69	2.80	6	16
1:A:117:PHE:CE1	1:A:130:TRP:CH2	0.69	2.80	17	10
1:A:6:VAL:HG13	1:A:6:VAL:O	0.69	1.86	1	3
1:A:103:GLU:O	1:A:107:GLU:N	0.69	2.25	2	19
1:A:117:PHE:CZ	1:A:130:TRP:CH2	0.69	2.80	6	9
1:A:130:TRP:CE2	1:A:134:LEU:HD12	0.69	2.22	9	6
1:A:179:GLY:O	1:A:194:LEU:HD11	0.69	1.87	4	2
1:A:119:LEU:HD21	1:A:188:LEU:HB2	0.69	1.64	5	1
1:A:96:PHE:CE2	1:A:166:TRP:CE3	0.69	2.81	5	2
1:A:119:LEU:HD21	1:A:188:LEU:CA	0.69	2.17	15	1
1:A:48:THR:HG21	1:A:58:TRP:CE3	0.69	2.21	2	12
1:A:108:ALA:HB1	1:A:199:HIS:CA	0.69	2.17	1	1
1:A:185:VAL:HG12	1:A:186:LEU:CD1	0.69	2.18	11	1
1:A:130:TRP:HA	1:A:185:VAL:HG11	0.69	1.62	14	2
1:A:58:TRP:CZ2	2:A:214:M7G:CM7	0.68	2.76	4	20
1:A:119:LEU:HD12	1:A:186:LEU:HB3	0.68	1.64	13	2
1:A:87:LEU:HD12	1:A:91:SER:CB	0.68	2.17	4	1
1:A:69:GLN:HB3	1:A:138:ILE:HD12	0.68	1.65	3	1
1:A:68:PHE:N	1:A:68:PHE:CD1	0.68	2.62	16	1
1:A:3:VAL:HG23	1:A:3:VAL:O	0.68	1.88	15	1
1:A:175:LEU:HD12	1:A:175:LEU:N	0.68	2.04	15	2
1:A:74:PHE:CE2	1:A:131:LEU:HD22	0.68	2.24	3	1
1:A:39:LEU:HD12	1:A:69:GLN:HA	0.68	1.64	15	2
1:A:58:TRP:CZ2	1:A:62:LEU:HD22	0.68	2.22	8	6
1:A:96:PHE:CE1	1:A:166:TRP:CE3	0.67	2.83	10	2
1:A:117:PHE:CE2	1:A:163:PHE:CD1	0.67	2.82	7	1
1:A:122:LYS:C	1:A:126:ILE:HD11	0.67	2.14	8	2
1:A:43:TRP:HB3	1:A:69:GLN:HG3	0.67	1.65	3	1
1:A:172:LYS:HA	1:A:175:LEU:HD13	0.67	1.66	4	4
1:A:129:LEU:N	1:A:129:LEU:CD1	0.67	2.58	11	18
1:A:94:HIS:HB2	1:A:153:VAL:HG22	0.67	1.65	3	2
1:A:47:TYR:O	1:A:62:LEU:HD23	0.67	1.90	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:188:LEU:HD11	1:A:193:HIS:HA	0.67	1.65	4	2
1:A:111:LYS:CD	1:A:166:TRP:CG	0.67	2.77	10	3
1:A:100:VAL:HG22	1:A:102:PRO:HD2	0.67	1.65	14	11
1:A:74:PHE:CE2	1:A:78:ILE:HD11	0.67	2.25	15	1
1:A:129:LEU:HB3	1:A:185:VAL:HG13	0.67	1.66	10	2
1:A:58:TRP:CZ2	1:A:62:LEU:CD1	0.67	2.78	7	12
1:A:43:TRP:CE2	1:A:138:ILE:CD1	0.67	2.78	10	1
1:A:149:ILE:HG23	1:A:166:TRP:O	0.67	1.88	19	1
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:163:PHE:CG	0.67	2.82	10	2
1:A:39:LEU:HD11	1:A:69:GLN:C	0.66	2.15	13	1
1:A:168:LYS:O	1:A:169:SER:CB	0.66	2.43	6	19
1:A:188:LEU:HD12	1:A:188:LEU:C	0.66	2.15	15	3
1:A:93:TYR:CD1	1:A:154:LEU:HD22	0.66	2.24	17	3
1:A:45:LEU:HD23	1:A:66:THR:OG1	0.66	1.90	10	18
1:A:130:TRP:CH2	1:A:163:PHE:CD1	0.66	2.84	20	2
1:A:39:LEU:HD13	1:A:138:ILE:HG13	0.66	1.67	11	1
1:A:170:GLU:O	1:A:171:ASP:CB	0.66	2.44	1	11
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:138:ILE:CG2	0.66	2.79	6	1
1:A:100:VAL:HG11	1:A:107:GLU:OE1	0.66	1.91	19	3
1:A:211:ILE:O	1:A:212:THR:HG23	0.66	1.90	1	10
1:A:43:TRP:CD2	1:A:138:ILE:HD11	0.66	2.26	10	1
1:A:87:LEU:HD11	1:A:91:SER:OG	0.65	1.91	6	3
1:A:47:TYR:CZ	1:A:65:VAL:CG2	0.65	2.80	6	9
1:A:183:LYS:HB2	1:A:194:LEU:HD22	0.65	1.67	11	3
1:A:129:LEU:CB	1:A:185:VAL:HG13	0.65	2.20	10	1
1:A:119:LEU:HD23	1:A:120:ARG:N	0.65	2.06	1	2
1:A:129:LEU:N	1:A:129:LEU:HD13	0.65	2.07	10	18
1:A:102:PRO:CG	1:A:106:ASP:CB	0.65	2.75	10	12
1:A:132:ARG:HA	1:A:135:LEU:HD21	0.65	1.69	3	17
1:A:100:VAL:HG11	1:A:150:ASN:OD1	0.65	1.92	5	1
1:A:94:HIS:CE1	1:A:153:VAL:CG1	0.65	2.80	9	7
1:A:117:PHE:CD1	1:A:117:PHE:N	0.65	2.65	1	18
1:A:45:LEU:HD22	1:A:77:ILE:CD1	0.65	2.20	4	9
1:A:165:LEU:HD12	1:A:165:LEU:N	0.65	2.06	10	1
1:A:58:TRP:NE1	2:A:214:M7G:C6	0.65	2.60	19	20
1:A:117:PHE:HB3	1:A:186:LEU:HD11	0.65	1.68	13	4
1:A:130:TRP:CE2	1:A:134:LEU:CD1	0.65	2.79	4	9
1:A:39:LEU:HD11	1:A:43:TRP:HE1	0.65	1.52	16	1
1:A:46:TRP:HB3	1:A:62:LEU:HD11	0.65	1.69	2	6
1:A:165:LEU:HD21	1:A:178:ILE:CG2	0.65	2.20	3	1
1:A:45:LEU:HB2	1:A:95:VAL:HG22	0.65	1.68	4	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:183:LYS:HB3	1:A:194:LEU:HD12	0.65	1.69	5	1
1:A:117:PHE:CG	1:A:186:LEU:CD1	0.65	2.80	3	1
1:A:196:PHE:CE1	1:A:213:LEU:CD1	0.65	2.80	12	6
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:134:LEU:CD1	0.64	2.80	15	5
1:A:100:VAL:HG11	1:A:110:ALA:HB2	0.64	1.67	1	1
1:A:84:PRO:HG3	1:A:126:ILE:HD11	0.64	1.67	10	1
1:A:94:HIS:CD2	1:A:153:VAL:CG1	0.64	2.81	13	3
1:A:130:TRP:CH2	1:A:154:LEU:HD12	0.64	2.26	10	2
1:A:196:PHE:N	1:A:196:PHE:CD1	0.64	2.65	3	9
1:A:196:PHE:CD1	1:A:211:ILE:CG1	0.64	2.80	15	12
1:A:196:PHE:CD1	1:A:211:ILE:CD1	0.64	2.81	2	9
1:A:186:LEU:C	1:A:186:LEU:CD2	0.64	2.70	11	1
1:A:100:VAL:CB	1:A:110:ALA:HB2	0.64	2.21	17	2
1:A:93:TYR:CD2	1:A:154:LEU:HD13	0.64	2.26	3	1
1:A:66:THR:HG23	1:A:73:GLU:CB	0.64	2.21	4	1
1:A:43:TRP:CE2	1:A:138:ILE:HD11	0.64	2.28	10	1
1:A:94:HIS:CD2	1:A:153:VAL:HG13	0.64	2.28	13	5
1:A:57:SER:O	1:A:60:ASP:N	0.64	2.31	15	20
1:A:71:VAL:HG12	1:A:138:ILE:HD11	0.64	1.70	2	1
1:A:196:PHE:CZ	1:A:213:LEU:CD1	0.64	2.81	4	6
1:A:163:PHE:CD1	1:A:164:ALA:N	0.64	2.65	7	1
1:A:119:LEU:CD1	1:A:126:ILE:HD12	0.64	2.23	9	1
1:A:130:TRP:CH2	1:A:154:LEU:CD1	0.64	2.81	20	2
1:A:87:LEU:HD21	1:A:156:ILE:CD1	0.64	2.23	15	4
1:A:58:TRP:O	1:A:62:LEU:HD13	0.64	1.92	12	1
1:A:186:LEU:HD23	1:A:186:LEU:N	0.64	2.07	14	7
1:A:172:LYS:HA	1:A:175:LEU:HD22	0.64	1.68	15	1
1:A:108:ALA:HB2	1:A:111:LYS:NZ	0.64	2.08	15	1
1:A:87:LEU:HD11	1:A:156:ILE:HD12	0.63	1.68	2	3
1:A:133:THR:CG2	1:A:182:PHE:CE1	0.63	2.82	10	6
1:A:96:PHE:O	1:A:97:ARG:CB	0.63	2.46	7	14
1:A:194:LEU:HD23	1:A:196:PHE:CZ	0.63	2.28	18	7
1:A:58:TRP:CE2	1:A:62:LEU:CD1	0.63	2.81	12	3
1:A:93:TYR:OH	1:A:131:LEU:HD21	0.63	1.92	3	1
1:A:101:ARG:CD	1:A:110:ALA:HB2	0.63	2.24	4	1
1:A:133:THR:HG22	1:A:182:PHE:CE1	0.63	2.28	14	5
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:163:PHE:CB	0.63	2.81	11	2
1:A:134:LEU:HD22	1:A:165:LEU:HD21	0.63	1.70	15	1
1:A:165:LEU:HD12	1:A:166:TRP:N	0.63	2.08	14	7
1:A:94:HIS:CD2	1:A:94:HIS:N	0.63	2.66	9	8
1:A:39:LEU:HD12	1:A:41:THR:H	0.63	1.52	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:163:PHE:CD1	1:A:163:PHE:N	0.63	2.65	20	5
1:A:96:PHE:N	1:A:96:PHE:CD1	0.63	2.65	1	1
1:A:115:TRP:CZ2	1:A:176:LEU:CD1	0.63	2.81	10	8
1:A:115:TRP:NE1	1:A:196:PHE:CD2	0.63	2.66	11	1
1:A:119:LEU:HD21	1:A:188:LEU:HA	0.63	1.69	15	1
1:A:154:LEU:HD12	1:A:163:PHE:CE1	0.63	2.28	4	1
1:A:43:TRP:CE2	1:A:68:PHE:O	0.63	2.52	14	15
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:68:PHE:CB	0.63	2.81	2	1
1:A:45:LEU:O	1:A:65:VAL:HG23	0.63	1.94	6	2
1:A:117:PHE:CZ	1:A:165:LEU:CD1	0.63	2.78	10	1
1:A:74:PHE:CE1	1:A:131:LEU:HD22	0.63	2.29	15	1
1:A:115:TRP:CZ2	1:A:175:LEU:CB	0.63	2.82	6	4
1:A:84:PRO:CG	1:A:126:ILE:HD11	0.62	2.24	10	1
1:A:101:ARG:N	1:A:102:PRO:CD	0.62	2.62	1	1
1:A:130:TRP:NE1	1:A:134:LEU:HD11	0.62	2.10	1	3
1:A:188:LEU:HD13	1:A:193:HIS:CB	0.62	2.24	10	1
1:A:49:LYS:CB	1:A:50:PRO:CD	0.62	2.77	16	11
1:A:43:TRP:CD1	1:A:43:TRP:N	0.62	2.66	16	7
1:A:196:PHE:HE1	1:A:213:LEU:HD12	0.62	1.54	8	8
1:A:58:TRP:CZ2	2:A:214:M7G:C5	0.62	2.83	15	6
1:A:50:PRO:HG2	1:A:61:LEU:HD12	0.62	1.70	16	2
1:A:165:LEU:HD11	1:A:167:THR:CG2	0.62	2.20	9	1
1:A:87:LEU:HD12	1:A:88:PRO:C	0.62	2.20	10	1
1:A:41:THR:HG23	1:A:43:TRP:HD1	0.62	1.53	16	6
1:A:111:LYS:CE	1:A:166:TRP:CD1	0.62	2.83	20	4
1:A:39:LEU:HD12	1:A:69:GLN:C	0.62	2.20	15	1
1:A:39:LEU:HD23	1:A:70:THR:CA	0.62	2.25	1	1
1:A:47:TYR:CE2	1:A:65:VAL:CG2	0.62	2.82	3	17
1:A:45:LEU:HD23	1:A:66:THR:CB	0.62	2.24	4	18
1:A:39:LEU:HD12	1:A:69:GLN:HB2	0.62	1.69	3	2
1:A:101:ARG:CB	1:A:102:PRO:CD	0.62	2.78	9	7
1:A:87:LEU:HD22	1:A:91:SER:CB	0.62	2.25	15	4
1:A:89:LEU:HD13	1:A:89:LEU:H	0.62	1.55	16	3
1:A:134:LEU:HD21	1:A:165:LEU:HD11	0.61	1.71	18	3
1:A:130:TRP:CD1	1:A:131:LEU:N	0.61	2.68	9	1
1:A:39:LEU:HD23	1:A:39:LEU:N	0.61	2.10	11	1
1:A:41:THR:HG21	1:A:98:ASN:OD1	0.61	1.95	6	1
1:A:165:LEU:HD22	1:A:182:PHE:CE2	0.61	2.30	19	1
1:A:6:VAL:HG12	1:A:6:VAL:O	0.61	1.93	20	1
1:A:46:TRP:CD1	1:A:64:PRO:HA	0.61	2.31	11	20
1:A:46:TRP:CD1	1:A:46:TRP:N	0.61	2.68	5	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:VAL:HG22	1:A:110:ALA:HB3	0.61	1.71	13	4
1:A:100:VAL:HB	1:A:110:ALA:CB	0.61	2.25	2	12
1:A:87:LEU:CD1	1:A:91:SER:CB	0.61	2.79	4	3
1:A:89:LEU:N	1:A:89:LEU:HD13	0.61	2.10	16	4
1:A:43:TRP:CD1	1:A:68:PHE:O	0.61	2.54	2	4
1:A:173:GLU:CB	1:A:174:PRO:CD	0.61	2.78	1	19
1:A:134:LEU:HD21	1:A:182:PHE:CE2	0.61	2.31	9	1
1:A:178:ILE:HG22	1:A:179:GLY:N	0.61	2.11	1	6
1:A:83:GLU:N	1:A:84:PRO:HD2	0.61	2.11	12	10
1:A:108:ALA:HB1	1:A:199:HIS:CB	0.61	2.26	1	3
1:A:149:ILE:CG2	1:A:167:THR:HG22	0.61	2.17	4	1
1:A:119:LEU:HD13	1:A:126:ILE:HD12	0.61	1.73	9	1
1:A:67:SER:C	1:A:68:PHE:CD1	0.61	2.79	14	3
1:A:165:LEU:HD22	1:A:178:ILE:HD12	0.61	1.72	18	1
1:A:44:THR:OG1	1:A:46:TRP:CE2	0.61	2.54	14	14
1:A:169:SER:HA	1:A:175:LEU:HD11	0.61	1.72	7	3
1:A:162:LYS:C	1:A:163:PHE:CD1	0.61	2.79	10	4
1:A:133:THR:CG2	1:A:182:PHE:CZ	0.61	2.83	18	2
1:A:100:VAL:CG1	1:A:101:ARG:N	0.60	2.64	13	11
1:A:149:ILE:CG2	1:A:150:ASN:N	0.60	2.64	9	17
1:A:96:PHE:CD1	1:A:107:GLU:OE1	0.60	2.54	6	8
1:A:96:PHE:CD1	1:A:107:GLU:CD	0.60	2.79	18	11
1:A:61:LEU:CD1	1:A:61:LEU:N	0.60	2.64	7	1
1:A:39:LEU:HD23	1:A:40:ASN:N	0.60	2.11	13	1
1:A:78:ILE:HD11	1:A:131:LEU:HD22	0.60	1.73	20	1
1:A:100:VAL:HG21	1:A:107:GLU:CA	0.60	2.26	17	9
1:A:183:LYS:HE3	1:A:213:LEU:HD22	0.60	1.72	18	1
1:A:41:THR:CG2	1:A:43:TRP:CD1	0.60	2.84	6	3
1:A:87:LEU:HD12	1:A:88:PRO:N	0.60	2.11	10	1
1:A:66:THR:HG23	1:A:68:PHE:CE2	0.60	2.30	19	1
1:A:81:ILE:N	1:A:82:PRO:HD3	0.60	2.12	4	20
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:68:PHE:O	0.60	2.55	14	1
1:A:41:THR:O	1:A:69:GLN:HB3	0.60	1.96	12	15
1:A:58:TRP:NE1	2:A:214:M7G:C5	0.60	2.65	6	10
1:A:82:PRO:CB	1:A:87:LEU:HD13	0.60	2.26	3	2
1:A:96:PHE:CD1	1:A:107:GLU:OE2	0.60	2.55	12	11
1:A:101:ARG:CG	1:A:102:PRO:CD	0.60	2.79	9	3
1:A:196:PHE:CD1	1:A:196:PHE:N	0.60	2.69	2	11
1:A:69:GLN:C	1:A:70:THR:HG23	0.60	2.20	19	4
1:A:89:LEU:N	1:A:89:LEU:CD2	0.60	2.65	14	3
1:A:92:ASP:CG	1:A:94:HIS:HE2	0.60	2.05	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:THR:CG2	1:A:58:TRP:CZ3	0.60	2.83	2	8
1:A:119:LEU:HD12	1:A:193:HIS:CD2	0.60	2.32	3	1
1:A:66:THR:CG2	1:A:73:GLU:CB	0.60	2.80	4	3
1:A:66:THR:HG23	1:A:73:GLU:OE2	0.60	1.97	11	5
1:A:117:PHE:CD1	1:A:163:PHE:O	0.60	2.55	16	9
1:A:43:TRP:CE3	1:A:138:ILE:HD11	0.60	2.31	10	1
1:A:44:THR:HG23	1:A:97:ARG:CD	0.60	2.24	1	1
1:A:100:VAL:HG13	1:A:101:ARG:H	0.60	1.57	19	19
1:A:115:TRP:CZ2	1:A:175:LEU:HB3	0.60	2.31	6	15
1:A:172:LYS:CA	1:A:175:LEU:HD12	0.60	2.27	10	4
1:A:43:TRP:HB2	1:A:68:PHE:N	0.60	2.12	3	1
1:A:111:LYS:HD3	1:A:166:TRP:CG	0.60	2.31	10	3
1:A:180:GLY:CA	1:A:194:LEU:HD11	0.60	2.27	6	1
1:A:39:LEU:HD11	1:A:70:THR:N	0.59	2.12	13	1
1:A:39:LEU:CD2	1:A:69:GLN:CB	0.59	2.79	19	2
1:A:93:TYR:CG	1:A:154:LEU:HD22	0.59	2.32	11	7
1:A:39:LEU:HD12	1:A:69:GLN:CA	0.59	2.26	15	2
1:A:130:TRP:CD2	1:A:134:LEU:CD1	0.59	2.85	11	2
1:A:175:LEU:N	1:A:175:LEU:CD1	0.59	2.64	15	1
1:A:46:TRP:CH2	1:A:101:ARG:O	0.59	2.55	10	7
1:A:64:PRO:C	1:A:65:VAL:HG13	0.59	2.22	1	18
1:A:93:TYR:C	1:A:94:HIS:CD2	0.59	2.80	12	15
1:A:96:PHE:CE1	1:A:107:GLU:OE2	0.59	2.55	8	6
1:A:41:THR:O	1:A:69:GLN:CA	0.59	2.49	2	2
1:A:41:THR:CG2	1:A:69:GLN:NE2	0.59	2.65	3	1
1:A:193:HIS:O	1:A:194:LEU:CB	0.59	2.49	6	3
1:A:153:VAL:O	1:A:163:PHE:CD2	0.59	2.56	7	1
1:A:83:GLU:CG	1:A:84:PRO:CD	0.59	2.81	19	3
1:A:104:TRP:HA	1:A:108:ALA:HB2	0.59	1.72	9	1
1:A:176:LEU:N	1:A:176:LEU:CD1	0.59	2.65	5	17
1:A:70:THR:C	1:A:71:VAL:HG13	0.59	2.22	3	1
1:A:96:PHE:CE1	1:A:107:GLU:CD	0.59	2.80	17	7
1:A:39:LEU:O	1:A:40:ASN:CB	0.59	2.50	11	1
1:A:39:LEU:N	1:A:39:LEU:CD2	0.59	2.62	13	6
1:A:83:GLU:CB	1:A:84:PRO:CD	0.59	2.80	19	6
1:A:149:ILE:HG23	1:A:167:THR:CG2	0.59	2.18	4	1
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:163:PHE:HB3	0.59	2.33	11	2
1:A:93:TYR:C	1:A:94:HIS:CG	0.59	2.81	12	8
1:A:93:TYR:CD1	1:A:93:TYR:C	0.59	2.81	2	3
1:A:183:LYS:CG	1:A:188:LEU:HD21	0.59	2.27	17	3
1:A:39:LEU:HD23	1:A:70:THR:HA	0.59	1.73	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:LEU:HD23	1:A:66:THR:HB	0.59	1.73	19	17
1:A:102:PRO:O	1:A:103:GLU:CB	0.59	2.51	1	11
1:A:43:TRP:CD1	1:A:69:GLN:HB2	0.59	2.33	3	1
1:A:48:THR:CG2	1:A:62:LEU:CD1	0.59	2.80	12	1
1:A:39:LEU:N	1:A:39:LEU:CD1	0.59	2.61	19	1
1:A:117:PHE:CB	1:A:186:LEU:HD11	0.59	2.28	2	4
1:A:96:PHE:CG	1:A:107:GLU:OE1	0.59	2.56	16	7
1:A:149:ILE:CG2	1:A:166:TRP:O	0.59	2.51	14	3
1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CD1	0.59	2.65	16	1
1:A:135:LEU:CD1	1:A:136:ALA:N	0.59	2.66	3	9
1:A:50:PRO:CA	1:A:61:LEU:HD13	0.59	2.28	3	1
1:A:132:ARG:O	1:A:136:ALA:HB2	0.59	1.98	15	14
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:186:LEU:CD2	0.59	2.86	7	1
1:A:66:THR:HG21	1:A:73:GLU:HB3	0.58	1.73	1	9
1:A:100:VAL:CG1	1:A:110:ALA:HB2	0.58	2.27	1	1
1:A:116:SER:C	1:A:117:PHE:CD1	0.58	2.81	7	4
1:A:39:LEU:HD21	1:A:70:THR:C	0.58	2.23	11	1
1:A:196:PHE:CB	1:A:211:ILE:HD12	0.58	2.28	16	2
1:A:44:THR:HG22	1:A:67:SER:CB	0.58	2.26	15	2
1:A:110:ALA:O	1:A:111:LYS:CB	0.58	2.50	1	2
1:A:100:VAL:CG2	1:A:110:ALA:CB	0.58	2.80	4	10
1:A:93:TYR:O	1:A:94:HIS:CD2	0.58	2.56	11	2
1:A:101:ARG:H	1:A:102:PRO:CD	0.58	2.11	1	1
1:A:126:ILE:CG2	1:A:186:LEU:CB	0.58	2.81	11	1
1:A:74:PHE:HA	1:A:77:ILE:HD12	0.58	1.76	15	18
1:A:87:LEU:C	1:A:87:LEU:HD23	0.58	2.23	18	7
1:A:152:VAL:C	1:A:153:VAL:HG23	0.58	2.24	1	9
1:A:111:LYS:CG	1:A:112:GLY:N	0.58	2.67	18	4
1:A:96:PHE:O	1:A:97:ARG:CG	0.58	2.51	6	6
1:A:161:ASN:OD1	1:A:163:PHE:CZ	0.58	2.57	8	2
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:HG	0.58	1.74	9	2
1:A:83:GLU:N	1:A:84:PRO:CD	0.58	2.67	20	10
1:A:74:PHE:CZ	1:A:93:TYR:OH	0.58	2.57	4	2
1:A:87:LEU:C	1:A:87:LEU:CD1	0.58	2.76	19	6
1:A:87:LEU:CD1	1:A:89:LEU:N	0.58	2.67	9	5
1:A:96:PHE:CD2	1:A:107:GLU:CD	0.58	2.81	9	2
1:A:173:GLU:N	1:A:174:PRO:HD2	0.58	2.12	13	19
1:A:41:THR:HG22	1:A:69:GLN:NE2	0.58	2.14	3	1
1:A:165:LEU:CD1	1:A:167:THR:HG23	0.58	2.22	9	1
1:A:58:TRP:CD2	1:A:62:LEU:HD11	0.58	2.33	12	1
1:A:83:GLU:OE2	1:A:93:TYR:CZ	0.58	2.57	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:169:SER:O	1:A:170:GLU:C	0.58	2.47	4	18
1:A:57:SER:O	1:A:61:LEU:HG	0.58	1.98	15	16
1:A:58:TRP:CH2	2:A:214:M7G:H82	0.58	2.33	15	4
1:A:127:ASP:OD2	1:A:163:PHE:CZ	0.58	2.56	9	2
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:153:VAL:O	0.58	2.57	18	1
1:A:41:THR:O	1:A:69:GLN:CB	0.58	2.51	9	9
1:A:96:PHE:CB	1:A:151:GLY:HA3	0.58	2.28	13	14
1:A:45:LEU:C	1:A:46:TRP:CD1	0.58	2.82	4	19
1:A:46:TRP:CZ3	1:A:102:PRO:O	0.58	2.56	19	5
1:A:107:GLU:CG	1:A:166:TRP:CZ3	0.58	2.87	11	1
1:A:39:LEU:HD21	1:A:69:GLN:HB2	0.58	1.73	13	1
1:A:196:PHE:HD2	1:A:211:ILE:HD12	0.58	1.57	14	1
1:A:105:GLU:OE2	2:A:214:M7G:N2	0.58	2.37	9	13
1:A:115:TRP:NE1	1:A:196:PHE:CE2	0.58	2.72	9	2
1:A:137:VAL:HG12	1:A:138:ILE:CG2	0.58	2.29	10	7
1:A:39:LEU:HD21	1:A:70:THR:N	0.57	2.14	8	1
1:A:161:ASN:OD1	1:A:163:PHE:CE2	0.57	2.57	8	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:68:PHE:HB2	0.57	2.33	2	1
1:A:127:ASP:OD1	1:A:163:PHE:CZ	0.57	2.57	2	3
1:A:178:ILE:CG1	1:A:179:GLY:N	0.57	2.67	12	8
1:A:58:TRP:CD1	2:A:214:M7G:C2	0.57	2.87	8	20
1:A:193:HIS:CD2	1:A:213:LEU:OXT	0.57	2.57	4	1
1:A:39:LEU:HD11	1:A:69:GLN:HA	0.57	1.76	14	2
1:A:111:LYS:HD2	1:A:166:TRP:CD1	0.57	2.34	7	2
1:A:83:GLU:O	1:A:156:ILE:HD11	0.57	1.98	12	3
1:A:66:THR:HG23	1:A:73:GLU:HG2	0.57	1.77	7	1
1:A:130:TRP:CE3	1:A:134:LEU:HD11	0.57	2.34	18	2
1:A:149:ILE:N	1:A:149:ILE:CD1	0.57	2.66	1	2
1:A:89:LEU:N	1:A:89:LEU:CD1	0.57	2.67	4	5
1:A:101:ARG:CB	1:A:106:ASP:HB3	0.57	2.29	9	3
1:A:183:LYS:HB2	1:A:194:LEU:HD12	0.57	1.76	5	1
1:A:67:SER:O	1:A:68:PHE:CD1	0.57	2.58	6	4
1:A:45:LEU:CD2	1:A:77:ILE:CD1	0.57	2.80	4	5
1:A:96:PHE:HB3	1:A:151:GLY:HA3	0.57	1.75	3	12
1:A:101:ARG:CB	1:A:106:ASP:CB	0.57	2.82	9	2
1:A:46:TRP:O	1:A:94:HIS:CE1	0.57	2.58	4	2
1:A:67:SER:O	1:A:68:PHE:CD2	0.57	2.58	3	1
1:A:45:LEU:CD2	1:A:66:THR:HB	0.57	2.30	4	16
1:A:39:LEU:HD22	1:A:39:LEU:H	0.57	1.60	19	2
1:A:41:THR:O	1:A:43:TRP:CE2	0.57	2.58	3	1
1:A:108:ALA:HB1	1:A:111:LYS:NZ	0.57	2.15	20	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:80:ASN:C	1:A:81:ILE:CG1	0.57	2.77	19	20
1:A:102:PRO:HG2	1:A:106:ASP:CB	0.57	2.29	1	12
1:A:111:LYS:HZ2	1:A:166:TRP:CD1	0.57	2.18	7	2
1:A:58:TRP:CD2	1:A:62:LEU:CD1	0.57	2.88	12	1
1:A:83:GLU:O	1:A:87:LEU:HD23	0.56	1.99	10	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:73:GLU:HB3	0.56	2.34	16	1
1:A:65:VAL:HG23	1:A:66:THR:N	0.56	2.15	8	18
1:A:149:ILE:N	1:A:149:ILE:HD12	0.56	2.14	1	1
1:A:74:PHE:CE1	1:A:93:TYR:OH	0.56	2.58	2	2
1:A:135:LEU:C	1:A:135:LEU:CD2	0.56	2.78	7	1
1:A:176:LEU:CD1	1:A:176:LEU:N	0.56	2.67	12	3
1:A:162:LYS:O	1:A:163:PHE:CD1	0.56	2.58	19	1
1:A:193:HIS:ND1	1:A:193:HIS:O	0.56	2.38	20	1
1:A:81:ILE:O	1:A:86:GLU:CB	0.56	2.53	18	10
1:A:165:LEU:HD12	1:A:165:LEU:C	0.56	2.25	1	6
1:A:96:PHE:CG	1:A:107:GLU:CD	0.56	2.83	2	1
1:A:117:PHE:CZ	1:A:165:LEU:HD12	0.56	2.35	15	6
1:A:119:LEU:C	1:A:119:LEU:HD23	0.56	2.25	4	1
1:A:149:ILE:HG22	1:A:150:ASN:H	0.56	1.59	14	2
1:A:96:PHE:CZ	1:A:153:VAL:HG22	0.56	2.36	16	2
1:A:66:THR:HG21	1:A:73:GLU:CB	0.56	2.30	6	1
1:A:130:TRP:CD1	1:A:130:TRP:C	0.56	2.83	7	5
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:138:ILE:HG13	0.56	2.36	10	1
1:A:165:LEU:HD21	1:A:178:ILE:CD1	0.56	2.30	14	2
1:A:119:LEU:CD2	1:A:188:LEU:CB	0.56	2.82	15	1
1:A:66:THR:HG22	1:A:68:PHE:CD1	0.56	2.34	16	1
1:A:179:GLY:CA	1:A:194:LEU:HD21	0.56	2.30	18	1
1:A:100:VAL:CG2	1:A:107:GLU:HA	0.56	2.31	11	11
1:A:149:ILE:HD11	1:A:167:THR:CG2	0.56	2.21	7	1
1:A:62:LEU:C	1:A:62:LEU:CD1	0.56	2.73	4	6
1:A:111:LYS:CD	1:A:113:GLY:O	0.56	2.54	2	5
1:A:123:GLY:HA2	1:A:126:ILE:HD12	0.56	1.75	2	1
1:A:70:THR:O	1:A:71:VAL:CG1	0.56	2.53	3	1
1:A:68:PHE:CE2	1:A:73:GLU:OE2	0.56	2.59	13	1
1:A:183:LYS:HD2	1:A:194:LEU:HD22	0.56	1.73	19	1
1:A:101:ARG:N	1:A:102:PRO:HD2	0.56	2.15	8	11
1:A:100:VAL:CB	1:A:150:ASN:OD1	0.56	2.54	5	1
1:A:196:PHE:CD1	1:A:211:ILE:HB	0.56	2.36	17	7
1:A:43:TRP:CE3	1:A:95:VAL:CG1	0.56	2.86	19	2
1:A:103:GLU:HA	1:A:107:GLU:CD	0.56	2.26	8	1
1:A:87:LEU:CD1	1:A:88:PRO:O	0.56	2.54	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:103:GLU:CA	1:A:107:GLU:CG	0.56	2.84	11	3
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:95:VAL:CG1	0.56	2.86	14	1
1:A:95:VAL:C	1:A:96:PHE:CG	0.56	2.82	8	7
1:A:102:PRO:CG	1:A:106:ASP:HB3	0.56	2.31	8	12
1:A:107:GLU:HB3	1:A:166:TRP:CE3	0.56	2.36	11	5
1:A:123:GLY:O	1:A:124:ALA:CB	0.56	2.53	9	11
1:A:115:TRP:CZ3	1:A:196:PHE:HA	0.56	2.36	3	1
1:A:187:LYS:O	1:A:188:LEU:C	0.56	2.47	11	2
1:A:39:LEU:O	1:A:40:ASN:ND2	0.56	2.39	11	1
1:A:68:PHE:CD1	1:A:73:GLU:OE2	0.56	2.58	12	1
1:A:44:THR:OG1	1:A:46:TRP:CZ2	0.56	2.56	2	3
1:A:47:TYR:CE1	1:A:63:ARG:HB3	0.56	2.36	14	6
1:A:167:THR:O	1:A:169:SER:N	0.56	2.38	7	4
1:A:179:GLY:O	1:A:194:LEU:HD21	0.56	2.01	10	1
1:A:123:GLY:H	1:A:126:ILE:HD11	0.56	1.60	16	1
1:A:183:LYS:HG2	1:A:188:LEU:HD11	0.56	1.78	19	1
1:A:102:PRO:CG	1:A:106:ASP:HB2	0.56	2.31	10	12
1:A:100:VAL:CG1	1:A:107:GLU:CD	0.56	2.79	2	10
1:A:103:GLU:O	1:A:106:ASP:N	0.56	2.33	8	11
1:A:108:ALA:HB1	1:A:111:LYS:HZ1	0.56	1.60	5	2
1:A:130:TRP:HZ3	1:A:186:LEU:HD22	0.56	1.60	7	1
1:A:183:LYS:CB	1:A:188:LEU:HD21	0.56	2.30	17	2
1:A:10:PHE:CG	1:A:10:PHE:O	0.56	2.58	20	1
1:A:90:LYS:CA	1:A:156:ILE:O	0.56	2.54	8	20
1:A:130:TRP:NE1	1:A:134:LEU:CD1	0.56	2.68	1	3
1:A:101:ARG:HB3	1:A:102:PRO:CD	0.56	2.31	3	8
1:A:169:SER:O	1:A:170:GLU:CG	0.56	2.54	18	2
1:A:108:ALA:O	1:A:112:GLY:N	0.56	2.39	11	4
1:A:101:ARG:CB	1:A:106:ASP:C	0.56	2.78	5	2
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:138:ILE:HG21	0.56	2.36	6	1
1:A:183:LYS:O	1:A:187:LYS:N	0.56	2.38	11	1
1:A:58:TRP:CH2	1:A:62:LEU:HD11	0.56	2.36	12	1
1:A:43:TRP:NE1	1:A:68:PHE:O	0.55	2.39	5	13
1:A:61:LEU:O	1:A:62:LEU:C	0.55	2.49	3	14
1:A:65:VAL:O	1:A:66:THR:C	0.55	2.49	2	20
1:A:111:LYS:HE3	1:A:166:TRP:CD1	0.55	2.36	9	3
1:A:58:TRP:CZ3	2:A:214:M7G:H82	0.55	2.36	20	4
1:A:101:ARG:CG	1:A:106:ASP:CB	0.55	2.84	9	1
1:A:111:LYS:CA	1:A:167:THR:O	0.55	2.54	18	4
1:A:117:PHE:HZ	1:A:165:LEU:HD12	0.55	1.61	17	3
1:A:194:LEU:O	1:A:196:PHE:CE1	0.55	2.59	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:TRP:CE3	1:A:43:TRP:O	0.55	2.59	1	1
1:A:46:TRP:CH2	1:A:107:GLU:OE2	0.55	2.60	5	3
1:A:111:LYS:HE2	1:A:166:TRP:CD1	0.55	2.36	20	2
1:A:49:LYS:CB	1:A:50:PRO:HD3	0.55	2.32	10	11
1:A:161:ASN:C	1:A:162:LYS:CG	0.55	2.80	15	7
1:A:43:TRP:NE1	1:A:68:PHE:C	0.55	2.65	2	1
1:A:101:ARG:CG	1:A:106:ASP:HB3	0.55	2.32	9	6
1:A:43:TRP:CB	1:A:96:PHE:O	0.55	2.54	7	5
1:A:112:GLY:HA2	1:A:199:HIS:CG	0.55	2.37	4	12
1:A:41:THR:O	1:A:43:TRP:NE1	0.55	2.39	3	1
1:A:100:VAL:CG2	1:A:150:ASN:OD1	0.55	2.52	3	2
1:A:101:ARG:HB3	1:A:106:ASP:CB	0.55	2.32	6	5
1:A:197:PHE:CE1	1:A:201:SER:HB3	0.55	2.36	16	1
1:A:186:LEU:O	1:A:187:LYS:CB	0.55	2.55	6	15
1:A:83:GLU:OE1	1:A:131:LEU:HD11	0.55	2.02	4	1
1:A:183:LYS:CG	1:A:184:GLN:N	0.55	2.70	14	5
1:A:161:ASN:CG	1:A:163:PHE:CZ	0.55	2.85	10	1
1:A:185:VAL:CG1	1:A:186:LEU:CD1	0.55	2.84	11	1
1:A:73:GLU:O	1:A:76:ALA:CB	0.55	2.55	16	20
1:A:193:HIS:O	1:A:194:LEU:CD1	0.55	2.55	17	4
1:A:74:PHE:CD1	1:A:135:LEU:CB	0.55	2.90	2	1
1:A:106:ASP:HA	1:A:109:ASN:ND2	0.55	2.16	17	13
1:A:183:LYS:CD	1:A:193:HIS:O	0.55	2.55	4	2
1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:HD13	0.55	2.17	7	1
1:A:94:HIS:ND1	1:A:153:VAL:CG1	0.55	2.69	9	4
1:A:193:HIS:O	1:A:193:HIS:ND1	0.55	2.40	6	4
1:A:40:ASN:ND2	1:A:40:ASN:C	0.55	2.65	11	2
1:A:105:GLU:OE1	2:A:214:M7G:N2	0.55	2.40	14	7
1:A:45:LEU:HD13	1:A:95:VAL:CG2	0.55	2.32	4	3
1:A:94:HIS:HB2	1:A:96:PHE:CE2	0.55	2.37	6	2
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:163:PHE:HB3	0.55	2.37	8	4
1:A:97:ARG:HA	1:A:100:VAL:HG12	0.55	1.79	6	2
1:A:107:GLU:O	1:A:110:ALA:HB3	0.55	2.01	9	2
1:A:170:GLU:CD	1:A:175:LEU:CD2	0.55	2.80	1	1
1:A:135:LEU:O	1:A:138:ILE:CG1	0.55	2.55	2	1
1:A:115:TRP:CZ2	1:A:176:LEU:HD12	0.55	2.37	20	7
1:A:61:LEU:N	1:A:61:LEU:CD2	0.55	2.64	15	2
1:A:41:THR:CG2	1:A:43:TRP:NE1	0.55	2.70	6	1
1:A:188:LEU:HD11	1:A:193:HIS:CB	0.55	2.32	6	1
1:A:44:THR:HB	1:A:46:TRP:CZ2	0.55	2.37	10	1
1:A:68:PHE:CB	1:A:73:GLU:CD	0.55	2.80	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:169:SER:O	1:A:171:ASP:N	0.54	2.39	4	16
1:A:178:ILE:CG2	1:A:179:GLY:N	0.54	2.71	1	4
1:A:45:LEU:CB	1:A:95:VAL:HG22	0.54	2.32	4	1
1:A:193:HIS:CG	1:A:213:LEU:OXT	0.54	2.59	4	1
1:A:111:LYS:HD2	1:A:166:TRP:CG	0.54	2.37	7	2
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:186:LEU:HD21	0.54	2.37	13	1
1:A:197:PHE:CD1	1:A:201:SER:CB	0.54	2.90	16	1
1:A:39:LEU:N	1:A:69:GLN:O	0.54	2.33	9	7
1:A:106:ASP:O	1:A:109:ASN:N	0.54	2.40	7	10
1:A:183:LYS:CG	1:A:188:LEU:CD1	0.54	2.85	3	1
1:A:183:LYS:HG3	1:A:188:LEU:HD11	0.54	1.80	3	1
1:A:4:GLU:O	1:A:6:VAL:HG13	0.54	2.02	4	1
1:A:69:GLN:CG	1:A:69:GLN:O	0.54	2.56	12	3
1:A:84:PRO:CD	1:A:127:ASP:OD1	0.54	2.56	11	1
1:A:186:LEU:N	1:A:186:LEU:HD13	0.54	2.17	11	1
1:A:138:ILE:CG1	1:A:139:GLY:N	0.54	2.71	1	19
1:A:196:PHE:CD1	1:A:211:ILE:HG13	0.54	2.37	18	13
1:A:89:LEU:N	1:A:89:LEU:HD12	0.54	2.17	4	3
1:A:95:VAL:O	1:A:96:PHE:CD1	0.54	2.60	2	1
1:A:111:LYS:CB	1:A:150:ASN:CG	0.54	2.80	7	1
1:A:137:VAL:HG12	1:A:138:ILE:N	0.54	2.16	16	9
1:A:196:PHE:O	1:A:210:SER:N	0.54	2.41	4	5
1:A:105:GLU:C	1:A:109:ASN:ND2	0.54	2.65	19	3
1:A:107:GLU:HB3	1:A:166:TRP:CZ3	0.54	2.38	8	2
1:A:115:TRP:CE2	1:A:196:PHE:CE2	0.54	2.96	9	1
1:A:107:GLU:HG3	1:A:166:TRP:CZ3	0.54	2.37	11	2
1:A:185:VAL:HG12	1:A:186:LEU:HD13	0.54	1.79	11	1
1:A:148:GLN:O	1:A:149:ILE:HD12	0.54	2.02	13	1
1:A:132:ARG:O	1:A:136:ALA:CB	0.54	2.56	10	16
1:A:104:TRP:HB2	1:A:166:TRP:CZ2	0.54	2.38	4	9
1:A:69:GLN:C	1:A:70:THR:CG2	0.54	2.79	14	5
1:A:93:TYR:HB3	1:A:154:LEU:HD22	0.54	1.79	4	2
1:A:100:VAL:CG2	1:A:101:ARG:N	0.54	2.66	9	2
1:A:87:LEU:HD12	1:A:88:PRO:O	0.54	2.03	10	1
1:A:130:TRP:CD2	1:A:134:LEU:HD12	0.54	2.38	11	2
1:A:130:TRP:CA	1:A:185:VAL:HG11	0.54	2.32	14	1
1:A:149:ILE:HG22	1:A:150:ASN:N	0.54	2.17	19	5
1:A:111:LYS:O	1:A:167:THR:O	0.54	2.26	7	13
1:A:43:TRP:O	1:A:67:SER:CA	0.54	2.56	10	13
1:A:45:LEU:O	1:A:65:VAL:N	0.54	2.41	4	2
1:A:66:THR:HG23	1:A:73:GLU:HB3	0.54	1.78	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:LEU:CD2	1:A:156:ILE:CG2	0.54	2.85	7	6
1:A:39:LEU:CG	1:A:69:GLN:C	0.54	2.80	15	5
1:A:119:LEU:HD22	1:A:161:ASN:HD21	0.54	1.62	11	2
1:A:80:ASN:O	1:A:81:ILE:C	0.54	2.51	6	20
1:A:104:TRP:HB2	1:A:166:TRP:CH2	0.54	2.38	4	9
1:A:152:VAL:O	1:A:153:VAL:HG23	0.54	2.01	1	5
1:A:82:PRO:O	1:A:86:GLU:CB	0.54	2.55	9	10
1:A:117:PHE:CB	1:A:186:LEU:CD1	0.54	2.85	3	4
1:A:153:VAL:HG21	1:A:166:TRP:CE2	0.54	2.38	4	1
1:A:193:HIS:O	1:A:194:LEU:CG	0.54	2.56	6	3
1:A:47:TYR:CE1	1:A:63:ARG:HB2	0.54	2.37	15	5
1:A:127:ASP:OD1	1:A:127:ASP:N	0.54	2.40	11	2
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:138:ILE:HD11	0.54	2.37	10	1
1:A:68:PHE:C	1:A:69:GLN:NE2	0.54	2.66	11	1
1:A:101:ARG:O	1:A:101:ARG:CG	0.54	2.55	1	1
1:A:80:ASN:O	1:A:81:ILE:CD1	0.54	2.54	3	7
1:A:119:LEU:HD11	1:A:188:LEU:HB3	0.54	1.79	15	1
1:A:57:SER:C	1:A:61:LEU:CD2	0.54	2.81	16	1
1:A:64:PRO:C	1:A:65:VAL:CG1	0.54	2.80	1	15
1:A:73:GLU:O	1:A:76:ALA:N	0.54	2.40	14	14
1:A:115:TRP:CE2	1:A:175:LEU:HB3	0.54	2.38	18	7
1:A:103:GLU:CG	1:A:106:ASP:OD1	0.54	2.56	3	1
1:A:149:ILE:HG23	1:A:150:ASN:H	0.54	1.62	9	9
1:A:150:ASN:ND2	1:A:166:TRP:HB3	0.54	2.18	16	7
1:A:97:ARG:NH1	1:A:149:ILE:HG22	0.54	2.18	5	1
1:A:98:ASN:O	1:A:99:ASP:CB	0.54	2.56	5	2
1:A:45:LEU:N	1:A:66:THR:O	0.54	2.41	19	10
1:A:39:LEU:HD13	1:A:138:ILE:CG1	0.54	2.33	11	1
1:A:39:LEU:CD2	1:A:70:THR:C	0.54	2.81	1	1
1:A:66:THR:CG2	1:A:73:GLU:HB3	0.54	2.33	4	19
1:A:69:GLN:CD	1:A:69:GLN:N	0.54	2.66	19	8
1:A:96:PHE:HB3	1:A:151:GLY:CA	0.54	2.32	7	10
1:A:193:HIS:O	1:A:194:LEU:HD12	0.54	2.03	1	1
1:A:70:THR:OG1	1:A:71:VAL:N	0.54	2.41	3	2
1:A:183:LYS:CB	1:A:194:LEU:HD13	0.54	2.28	13	2
1:A:117:PHE:CE1	1:A:165:LEU:HD11	0.54	2.35	10	1
1:A:129:LEU:CB	1:A:185:VAL:CG1	0.54	2.86	10	1
1:A:103:GLU:C	1:A:107:GLU:CG	0.54	2.81	17	3
1:A:118:GLN:O	1:A:193:HIS:CG	0.54	2.61	19	1
1:A:80:ASN:C	1:A:81:ILE:HG12	0.53	2.28	9	13
1:A:100:VAL:HG22	1:A:101:ARG:H	0.53	1.62	8	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:210:SER:C	1:A:211:ILE:CG1	0.53	2.81	11	13
1:A:199:HIS:O	1:A:203:ASN:ND2	0.53	2.41	4	12
1:A:117:PHE:CD2	1:A:186:LEU:HD11	0.53	2.38	3	1
1:A:195:GLU:CD	1:A:212:THR:HG22	0.53	2.27	4	1
1:A:126:ILE:O	1:A:130:TRP:CB	0.53	2.56	10	3
1:A:194:LEU:HB3	1:A:213:LEU:HD13	0.53	1.80	17	1
1:A:80:ASN:C	1:A:82:PRO:HD3	0.53	2.28	13	20
1:A:157:ARG:CG	1:A:157:ARG:O	0.53	2.56	2	1
1:A:39:LEU:CD1	1:A:69:GLN:HB3	0.53	2.29	3	1
1:A:67:SER:O	1:A:68:PHE:CG	0.53	2.61	3	2
1:A:100:VAL:CG1	1:A:107:GLU:OE1	0.53	2.56	6	3
1:A:108:ALA:O	1:A:199:HIS:CB	0.53	2.56	16	5
1:A:171:ASP:O	1:A:175:LEU:CD1	0.53	2.56	4	5
1:A:130:TRP:CH2	1:A:165:LEU:HD12	0.53	2.37	8	1
1:A:57:SER:CB	1:A:60:ASP:OD2	0.53	2.57	9	2
1:A:85:HIS:CG	1:A:85:HIS:O	0.53	2.60	19	2
1:A:103:GLU:CA	1:A:107:GLU:HG2	0.53	2.33	17	2
1:A:41:THR:HG23	1:A:42:LYS:N	0.53	2.17	2	1
1:A:43:TRP:O	1:A:67:SER:HA	0.53	2.04	8	18
1:A:183:LYS:HE2	1:A:194:LEU:HD22	0.53	1.80	2	1
1:A:69:GLN:O	1:A:70:THR:C	0.53	2.51	3	1
1:A:200:SER:HA	1:A:203:ASN:ND2	0.53	2.19	17	2
1:A:203:ASN:C	1:A:203:ASN:ND2	0.53	2.66	6	1
1:A:101:ARG:CG	1:A:102:PRO:HD3	0.53	2.33	9	3
1:A:152:VAL:O	1:A:153:VAL:CG2	0.53	2.57	14	4
1:A:87:LEU:CD1	1:A:93:TYR:OH	0.53	2.57	11	3
1:A:66:THR:CG2	1:A:73:GLU:OE2	0.53	2.56	11	4
1:A:82:PRO:O	1:A:87:LEU:CD2	0.53	2.55	13	1
1:A:98:ASN:C	1:A:98:ASN:ND2	0.53	2.66	14	1
1:A:154:LEU:HD23	1:A:154:LEU:O	0.53	2.03	2	11
1:A:183:LYS:O	1:A:188:LEU:CD2	0.53	2.57	7	5
1:A:148:GLN:O	1:A:168:LYS:CB	0.53	2.57	3	6
1:A:96:PHE:CD1	1:A:96:PHE:N	0.53	2.77	4	3
1:A:152:VAL:CG1	1:A:165:LEU:HD13	0.53	2.34	5	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:138:ILE:CG1	0.53	2.92	10	1
1:A:94:HIS:CE1	2:A:214:M7G:CM7	0.53	2.92	11	1
1:A:47:TYR:CE1	1:A:63:ARG:CB	0.53	2.92	5	11
1:A:126:ILE:CG2	1:A:186:LEU:O	0.53	2.57	5	2
1:A:93:TYR:C	1:A:93:TYR:CD1	0.53	2.86	7	1
1:A:193:HIS:ND1	1:A:213:LEU:OXT	0.53	2.41	15	1
1:A:165:LEU:HD21	1:A:178:ILE:HG21	0.53	1.81	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:193:HIS:ND1	1:A:193:HIS:N	0.53	2.57	4	3
1:A:193:HIS:N	1:A:213:LEU:O	0.53	2.42	15	2
1:A:101:ARG:O	1:A:107:GLU:CG	0.53	2.57	9	3
1:A:167:THR:CG2	1:A:175:LEU:CD2	0.53	2.84	8	3
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:182:PHE:CD1	0.53	2.97	13	1
1:A:100:VAL:HG12	1:A:150:ASN:OD1	0.53	2.04	17	1
1:A:117:PHE:O	1:A:162:LYS:CG	0.53	2.57	17	2
1:A:108:ALA:CB	1:A:111:LYS:NZ	0.53	2.72	2	3
1:A:111:LYS:O	1:A:168:LYS:C	0.53	2.51	9	4
1:A:46:TRP:CZ3	1:A:107:GLU:OE2	0.53	2.62	10	3
1:A:100:VAL:CG1	1:A:150:ASN:OD1	0.53	2.56	5	2
1:A:47:TYR:HB2	1:A:93:TYR:CD1	0.53	2.39	6	1
1:A:101:ARG:CD	1:A:102:PRO:HD3	0.53	2.33	6	1
1:A:111:LYS:HG2	1:A:112:GLY:N	0.53	2.18	15	2
1:A:179:GLY:O	1:A:183:LYS:CB	0.53	2.57	18	2
1:A:185:VAL:CG1	1:A:186:LEU:HD13	0.53	2.34	11	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:73:GLU:CB	0.53	2.92	16	1
1:A:68:PHE:CE2	1:A:73:GLU:HB2	0.53	2.39	16	1
1:A:92:ASP:OD2	1:A:155:SER:CB	0.53	2.57	9	2
1:A:105:GLU:O	1:A:109:ASN:ND2	0.53	2.42	18	4
1:A:185:VAL:HG12	1:A:186:LEU:HD12	0.53	1.81	11	1
1:A:197:PHE:CE1	1:A:201:SER:CB	0.53	2.91	16	1
1:A:39:LEU:CD2	1:A:70:THR:CA	0.53	2.87	1	1
1:A:138:ILE:HG13	1:A:139:GLY:N	0.53	2.19	10	18
1:A:89:LEU:CD2	1:A:158:LYS:O	0.53	2.57	20	2
1:A:172:LYS:HG3	1:A:175:LEU:HD12	0.53	1.80	2	1
1:A:42:LYS:CG	1:A:42:LYS:O	0.53	2.57	16	6
1:A:46:TRP:O	1:A:94:HIS:ND1	0.53	2.42	6	2
1:A:101:ARG:CB	1:A:102:PRO:HD2	0.53	2.34	4	3
1:A:153:VAL:CG2	1:A:166:TRP:CH2	0.53	2.89	11	3
1:A:183:LYS:CG	1:A:213:LEU:O	0.53	2.56	9	1
1:A:183:LYS:HG2	1:A:188:LEU:HD21	0.53	1.80	9	1
1:A:39:LEU:CD2	1:A:69:GLN:HB2	0.53	2.34	19	2
1:A:193:HIS:ND1	1:A:213:LEU:O	0.53	2.42	18	1
1:A:100:VAL:O	1:A:101:ARG:HB3	0.52	2.03	1	1
1:A:100:VAL:HG13	1:A:107:GLU:OE2	0.52	2.04	12	3
1:A:71:VAL:HG12	1:A:138:ILE:CD1	0.52	2.34	2	1
1:A:48:THR:OG1	1:A:92:ASP:CB	0.52	2.57	15	3
1:A:68:PHE:CB	1:A:73:GLU:OE1	0.52	2.56	15	2
1:A:66:THR:CG2	1:A:73:GLU:OE1	0.52	2.57	18	5
1:A:43:TRP:C	1:A:44:THR:CG2	0.52	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:138:ILE:O	1:A:139:GLY:C	0.52	2.52	11	1
1:A:193:HIS:NE2	1:A:194:LEU:HD12	0.52	2.18	12	1
1:A:82:PRO:HA	1:A:86:GLU:CB	0.52	2.34	13	7
1:A:94:HIS:HB2	1:A:96:PHE:CZ	0.52	2.39	2	2
1:A:103:GLU:N	1:A:107:GLU:HG3	0.52	2.19	3	7
1:A:39:LEU:HG	1:A:70:THR:CA	0.52	2.34	9	9
1:A:183:LYS:CB	1:A:194:LEU:CD1	0.52	2.87	5	1
1:A:130:TRP:CH2	1:A:163:PHE:HB3	0.52	2.39	18	2
1:A:150:ASN:OD1	1:A:168:LYS:N	0.52	2.43	14	1
1:A:45:LEU:HB3	1:A:66:THR:O	0.52	2.04	13	18
1:A:154:LEU:C	1:A:154:LEU:CD2	0.52	2.82	16	16
1:A:76:ALA:O	1:A:80:ASN:ND2	0.52	2.42	18	7
1:A:153:VAL:N	1:A:164:ALA:O	0.52	2.43	5	13
1:A:104:TRP:N	1:A:107:GLU:OE1	0.52	2.42	8	1
1:A:112:GLY:O	1:A:199:HIS:N	0.52	2.42	8	1
1:A:62:LEU:HD13	1:A:103:GLU:CD	0.52	2.29	9	1
1:A:100:VAL:CG1	1:A:107:GLU:OE2	0.52	2.56	12	3
1:A:157:ARG:O	1:A:159:GLY:N	0.52	2.42	13	1
1:A:134:LEU:HB3	1:A:152:VAL:HG11	0.52	1.80	15	1
1:A:57:SER:OG	1:A:60:ASP:N	0.52	2.42	1	1
1:A:74:PHE:O	1:A:78:ILE:HG13	0.52	2.05	11	20
1:A:73:GLU:CA	1:A:73:GLU:OE1	0.52	2.57	14	3
1:A:87:LEU:HD12	1:A:93:TYR:OH	0.52	2.03	6	2
1:A:196:PHE:O	1:A:210:SER:CB	0.52	2.57	12	5
1:A:161:ASN:N	1:A:161:ASN:OD1	0.52	2.43	12	2
1:A:110:ALA:O	1:A:111:LYS:HB2	0.52	2.05	1	1
1:A:93:TYR:O	1:A:154:LEU:N	0.52	2.42	4	5
1:A:48:THR:OG1	1:A:58:TRP:CH2	0.52	2.55	4	3
1:A:170:GLU:O	1:A:174:PRO:CG	0.52	2.57	17	6
1:A:39:LEU:HD12	1:A:43:TRP:CZ2	0.52	2.40	10	1
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:138:ILE:HD11	0.52	2.40	10	1
1:A:119:LEU:CB	1:A:161:ASN:OD1	0.52	2.57	12	1
1:A:161:ASN:OD1	1:A:161:ASN:N	0.52	2.43	15	3
1:A:120:ARG:CD	1:A:121:GLY:N	0.52	2.73	18	1
1:A:131:LEU:O	1:A:132:ARG:C	0.52	2.53	8	20
1:A:82:PRO:CB	1:A:87:LEU:HB3	0.52	2.35	10	9
1:A:44:THR:OG1	1:A:46:TRP:NE1	0.52	2.43	4	6
1:A:43:TRP:CD2	1:A:138:ILE:CD1	0.52	2.92	10	1
1:A:186:LEU:C	1:A:186:LEU:HD22	0.52	2.30	11	1
1:A:186:LEU:HD22	1:A:187:LYS:N	0.52	2.20	11	1
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:HD12	0.52	1.82	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:181:LYS:CG	1:A:182:PHE:N	0.52	2.73	13	1
1:A:58:TRP:CE2	2:A:214:M7G:C4	0.52	2.93	15	1
1:A:6:VAL:O	1:A:6:VAL:CG1	0.52	2.58	1	2
1:A:88:PRO:O	1:A:89:LEU:O	0.52	2.27	10	20
1:A:102:PRO:O	1:A:103:GLU:CG	0.52	2.58	5	4
1:A:104:TRP:CB	2:A:214:M7G:HM72	0.52	2.35	7	19
1:A:117:PHE:CD1	1:A:163:PHE:HB2	0.52	2.40	20	8
1:A:131:LEU:O	1:A:134:LEU:N	0.52	2.43	2	18
1:A:196:PHE:HB2	1:A:210:SER:CB	0.52	2.34	1	9
1:A:99:ASP:O	1:A:100:VAL:O	0.52	2.27	4	2
1:A:101:ARG:N	1:A:101:ARG:CD	0.52	2.71	3	1
1:A:107:GLU:O	1:A:111:LYS:CG	0.52	2.58	6	4
1:A:58:TRP:O	1:A:62:LEU:CD1	0.52	2.58	12	1
1:A:40:ASN:ND2	1:A:139:GLY:O	0.52	2.43	13	2
1:A:84:PRO:O	1:A:161:ASN:ND2	0.52	2.43	14	2
1:A:96:PHE:HZ	1:A:153:VAL:HG22	0.52	1.64	16	1
1:A:10:PHE:CD1	1:A:10:PHE:C	0.52	2.85	20	1
1:A:84:PRO:N	1:A:127:ASP:OD2	0.52	2.43	20	1
1:A:42:LYS:CG	1:A:97:ARG:O	0.52	2.57	3	1
1:A:111:LYS:HD2	1:A:166:TRP:CB	0.52	2.35	15	4
1:A:87:LEU:HD13	1:A:91:SER:CB	0.52	2.35	13	1
1:A:39:LEU:HD12	1:A:69:GLN:H	0.52	1.65	2	1
1:A:94:HIS:CD2	1:A:96:PHE:CE2	0.52	2.98	2	1
1:A:160:GLY:O	1:A:161:ASN:CB	0.52	2.57	5	4
1:A:44:THR:CB	1:A:46:TRP:CZ2	0.52	2.92	10	2
1:A:117:PHE:CZ	1:A:130:TRP:CZ3	0.52	2.97	3	3
1:A:109:ASN:CG	1:A:110:ALA:N	0.52	2.67	4	1
1:A:111:LYS:CD	1:A:166:TRP:CB	0.52	2.88	18	2
1:A:188:LEU:HD13	1:A:193:HIS:CG	0.52	2.40	10	2
1:A:126:ILE:HG22	1:A:186:LEU:CB	0.52	2.34	11	1
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:163:PHE:HB2	0.52	2.40	11	2
1:A:134:LEU:O	1:A:138:ILE:HG23	0.51	2.04	2	2
1:A:100:VAL:CG1	1:A:107:GLU:HA	0.51	2.34	18	10
1:A:198:PRO:O	1:A:199:HIS:C	0.51	2.54	5	16
1:A:41:THR:O	1:A:69:GLN:NE2	0.51	2.43	2	2
1:A:46:TRP:CH2	1:A:97:ARG:HG3	0.51	2.40	3	1
1:A:96:PHE:CB	1:A:151:GLY:CA	0.51	2.87	19	2
1:A:183:LYS:CG	1:A:194:LEU:HD13	0.51	2.35	20	2
1:A:39:LEU:O	1:A:40:ASN:HB3	0.51	2.06	11	2
1:A:87:LEU:CB	1:A:88:PRO:HD2	0.51	2.36	11	10
1:A:106:ASP:O	1:A:109:ASN:ND2	0.51	2.44	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:115:TRP:O	1:A:165:LEU:N	0.51	2.44	2	3
1:A:194:LEU:HD23	1:A:196:PHE:HZ	0.51	1.65	7	2
1:A:69:GLN:O	1:A:70:THR:O	0.51	2.28	3	1
1:A:188:LEU:CD1	1:A:193:HIS:HA	0.51	2.35	15	2
1:A:194:LEU:HB3	1:A:196:PHE:CZ	0.51	2.40	6	2
1:A:84:PRO:CA	1:A:156:ILE:HD11	0.51	2.32	7	1
1:A:106:ASP:OD2	1:A:109:ASN:ND2	0.51	2.43	15	1
1:A:39:LEU:HD13	1:A:139:GLY:HA3	0.51	1.83	20	1
1:A:92:ASP:OD2	1:A:94:HIS:NE2	0.51	2.43	20	1
1:A:87:LEU:CB	1:A:88:PRO:CD	0.51	2.88	16	7
1:A:193:HIS:HA	1:A:213:LEU:CB	0.51	2.36	1	3
1:A:60:ASP:C	1:A:61:LEU:HD23	0.51	2.30	5	2
1:A:153:VAL:O	1:A:163:PHE:CE2	0.51	2.64	7	1
1:A:105:GLU:OE1	2:A:214:M7G:N1	0.51	2.43	9	1
1:A:111:LYS:NZ	1:A:166:TRP:CG	0.51	2.67	14	1
1:A:46:TRP:CE3	1:A:103:GLU:OE1	0.51	2.64	18	1
1:A:87:LEU:CD1	1:A:91:SER:OG	0.51	2.59	14	2
1:A:89:LEU:HA	1:A:156:ILE:CG2	0.51	2.36	7	20
1:A:89:LEU:O	1:A:90:LYS:C	0.51	2.53	9	10
1:A:184:GLN:O	1:A:185:VAL:C	0.51	2.53	11	10
1:A:98:ASN:O	1:A:99:ASP:C	0.51	2.54	10	3
1:A:89:LEU:O	1:A:91:SER:N	0.51	2.42	9	7
1:A:106:ASP:HA	1:A:109:ASN:HB2	0.51	1.82	17	7
1:A:183:LYS:HB2	1:A:194:LEU:CD1	0.51	2.36	5	3
1:A:62:LEU:CD1	1:A:103:GLU:CD	0.51	2.84	9	1
1:A:183:LYS:HG2	1:A:194:LEU:HD13	0.51	1.82	9	1
1:A:183:LYS:CG	1:A:188:LEU:O	0.51	2.58	11	1
1:A:39:LEU:CD1	1:A:69:GLN:C	0.51	2.83	15	2
1:A:69:GLN:O	1:A:70:THR:CG2	0.51	2.59	19	2
1:A:57:SER:O	1:A:58:TRP:C	0.51	2.54	3	20
1:A:106:ASP:OD1	1:A:109:ASN:ND2	0.51	2.43	2	4
1:A:114:LYS:N	1:A:197:PHE:O	0.51	2.42	2	3
1:A:46:TRP:O	1:A:94:HIS:N	0.51	2.44	11	6
1:A:126:ILE:HG21	1:A:186:LEU:O	0.51	2.05	18	5
1:A:161:ASN:O	1:A:162:LYS:CG	0.51	2.58	9	2
1:A:172:LYS:HA	1:A:175:LEU:CG	0.51	2.36	18	3
1:A:117:PHE:CE1	1:A:130:TRP:CZ3	0.51	2.98	15	1
1:A:83:GLU:CG	1:A:124:ALA:O	0.51	2.59	16	1
1:A:135:LEU:C	1:A:135:LEU:CD1	0.51	2.81	4	14
1:A:150:ASN:OD1	1:A:150:ASN:C	0.51	2.54	1	2
1:A:211:ILE:O	1:A:212:THR:CG2	0.51	2.59	5	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:210:SER:O	1:A:211:ILE:CG2	0.51	2.56	2	3
1:A:43:TRP:CD2	1:A:68:PHE:HA	0.51	2.40	3	1
1:A:90:LYS:CG	2:A:214:M7G:O1A	0.51	2.59	3	1
1:A:178:ILE:HG13	1:A:179:GLY:N	0.51	2.20	12	8
1:A:83:GLU:CB	1:A:127:ASP:CG	0.51	2.83	6	1
1:A:100:VAL:HG11	1:A:107:GLU:CA	0.51	2.35	8	9
1:A:88:PRO:C	1:A:89:LEU:CD2	0.51	2.80	13	2
1:A:81:ILE:N	1:A:82:PRO:CD	0.51	2.73	19	19
1:A:83:GLU:O	1:A:85:HIS:N	0.51	2.44	13	7
1:A:88:PRO:O	1:A:89:LEU:C	0.51	2.53	5	12
1:A:152:VAL:HG12	1:A:165:LEU:CG	0.51	2.32	4	1
1:A:163:PHE:CD1	1:A:163:PHE:C	0.51	2.88	7	1
1:A:124:ALA:O	1:A:125:ASP:CB	0.51	2.59	15	3
2:A:214:M7G:C4'	2:A:214:M7G:O1A	0.51	2.59	10	1
1:A:196:PHE:CD2	1:A:211:ILE:CD1	0.51	2.81	16	1
1:A:92:ASP:C	1:A:93:TYR:CD1	0.51	2.89	18	1
1:A:70:THR:O	1:A:71:VAL:HG13	0.51	2.06	3	1
1:A:93:TYR:OH	1:A:131:LEU:CD2	0.51	2.59	3	1
1:A:106:ASP:HA	1:A:109:ASN:HB3	0.51	1.82	4	3
1:A:111:LYS:HG3	1:A:112:GLY:N	0.51	2.19	3	4
1:A:106:ASP:N	1:A:109:ASN:ND2	0.51	2.59	19	3
1:A:43:TRP:CE3	1:A:95:VAL:HG12	0.51	2.41	6	1
1:A:69:GLN:O	1:A:69:GLN:NE2	0.51	2.43	10	1
1:A:157:ARG:CD	1:A:160:GLY:O	0.51	2.58	16	1
1:A:41:THR:O	1:A:69:GLN:HA	0.51	2.04	2	3
2:A:214:M7G:O2A	2:A:214:M7G:O3'	0.51	2.22	4	1
1:A:74:PHE:CD2	1:A:135:LEU:HB2	0.51	2.41	19	2
1:A:43:TRP:CE3	1:A:96:PHE:HA	0.51	2.41	6	1
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:HB2	0.51	1.83	6	1
1:A:84:PRO:HG3	1:A:126:ILE:CG1	0.51	2.36	9	1
1:A:113:GLY:N	1:A:170:GLU:HB3	0.51	2.20	18	1
1:A:104:TRP:CD1	1:A:105:GLU:N	0.50	2.78	4	17
1:A:188:LEU:HB2	1:A:193:HIS:NE2	0.50	2.20	17	2
1:A:62:LEU:CD2	1:A:103:GLU:OE1	0.50	2.59	2	1
1:A:117:PHE:CE1	1:A:130:TRP:CZ2	0.50	2.99	5	2
1:A:175:LEU:O	1:A:178:ILE:N	0.50	2.44	14	9
1:A:173:GLU:HB2	1:A:174:PRO:CD	0.50	2.36	20	10
1:A:162:LYS:C	1:A:163:PHE:CG	0.50	2.89	14	2
1:A:93:TYR:C	1:A:94:HIS:ND1	0.50	2.69	10	2
1:A:50:PRO:CD	1:A:90:LYS:O	0.50	2.60	17	2
1:A:107:GLU:O	1:A:111:LYS:HG2	0.50	2.05	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:TYR:CD1	1:A:93:TYR:N	0.50	2.79	20	3
1:A:196:PHE:CG	1:A:211:ILE:HG13	0.50	2.42	1	4
1:A:44:THR:HB	1:A:46:TRP:CE2	0.50	2.41	6	3
1:A:67:SER:C	1:A:68:PHE:CG	0.50	2.89	6	5
1:A:39:LEU:N	1:A:39:LEU:HD22	0.50	2.21	19	1
1:A:157:ARG:O	1:A:158:LYS:C	0.50	2.55	13	9
1:A:156:ILE:O	1:A:157:ARG:CB	0.50	2.57	5	3
1:A:194:LEU:N	1:A:213:LEU:O	0.50	2.43	8	3
1:A:112:GLY:HA2	1:A:199:HIS:CD2	0.50	2.41	12	1
1:A:99:ASP:OD2	1:A:168:LYS:CB	0.50	2.59	17	1
1:A:150:ASN:HB2	1:A:168:LYS:CA	0.50	2.37	17	1
1:A:107:GLU:O	1:A:110:ALA:CB	0.50	2.59	1	1
1:A:89:LEU:H	1:A:89:LEU:HD12	0.50	1.66	2	1
1:A:108:ALA:HA	1:A:111:LYS:CE	0.50	2.37	2	10
1:A:80:ASN:C	1:A:81:ILE:HG13	0.50	2.30	16	7
1:A:167:THR:O	1:A:168:LYS:C	0.50	2.52	16	12
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:165:LEU:HD12	0.50	2.40	8	1
1:A:3:VAL:HG13	1:A:3:VAL:O	0.50	2.06	12	2
1:A:99:ASP:CB	1:A:150:ASN:HB3	0.50	2.37	14	1
1:A:168:LYS:O	1:A:169:SER:OG	0.50	2.29	6	3
1:A:47:TYR:O	1:A:62:LEU:HA	0.50	2.07	8	7
1:A:84:PRO:O	1:A:85:HIS:CB	0.50	2.60	6	5
1:A:108:ALA:HA	1:A:111:LYS:CG	0.50	2.36	20	9
1:A:123:GLY:CA	1:A:126:ILE:HD12	0.50	2.36	2	1
1:A:129:LEU:HB3	1:A:185:VAL:CG1	0.50	2.35	10	2
1:A:126:ILE:CG2	1:A:186:LEU:HB2	0.50	2.37	11	1
1:A:76:ALA:O	1:A:79:GLN:N	0.50	2.44	19	8
1:A:134:LEU:HD13	1:A:152:VAL:CB	0.50	2.37	3	1
1:A:42:LYS:O	1:A:97:ARG:HA	0.50	2.06	10	1
1:A:103:GLU:HA	1:A:107:GLU:CG	0.50	2.37	17	2
1:A:4:GLU:O	1:A:4:GLU:CG	0.50	2.59	12	1
1:A:157:ARG:NE	2:A:214:M7G:O3B	0.50	2.44	12	1
1:A:74:PHE:CD1	1:A:135:LEU:HB2	0.50	2.42	13	1
1:A:90:LYS:HA	1:A:156:ILE:O	0.50	2.06	19	20
1:A:97:ARG:O	1:A:98:ASN:C	0.50	2.53	1	5
1:A:43:TRP:CE3	1:A:67:SER:O	0.50	2.64	3	1
1:A:97:ARG:O	1:A:98:ASN:CB	0.50	2.57	4	1
1:A:48:THR:OG1	1:A:92:ASP:HB3	0.50	2.07	9	6
1:A:111:LYS:HZ2	1:A:166:TRP:NE1	0.50	2.04	7	1
1:A:149:ILE:HG13	1:A:167:THR:CG2	0.50	2.36	10	2
1:A:66:THR:HG22	1:A:73:GLU:CG	0.50	2.36	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:130:TRP:CH2	1:A:134:LEU:HD11	0.50	2.41	15	2
1:A:111:LYS:HD2	1:A:112:GLY:N	0.50	2.22	20	4
1:A:196:PHE:CD1	1:A:211:ILE:CB	0.50	2.95	5	4
1:A:111:LYS:HZ1	1:A:114:LYS:HB2	0.50	1.67	16	1
1:A:42:LYS:O	1:A:97:ARG:CB	0.50	2.60	1	1
1:A:78:ILE:O	1:A:81:ILE:N	0.50	2.40	12	9
1:A:211:ILE:C	1:A:212:THR:HG23	0.50	2.31	4	5
1:A:100:VAL:HG11	1:A:107:GLU:CD	0.50	2.31	2	3
1:A:111:LYS:O	1:A:168:LYS:O	0.50	2.30	14	3
1:A:84:PRO:HB2	1:A:161:ASN:ND2	0.50	2.22	8	4
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:68:PHE:HB3	0.49	2.42	2	1
1:A:105:GLU:C	1:A:106:ASP:CG	0.49	2.80	16	5
1:A:183:LYS:HG3	1:A:188:LEU:CD1	0.49	2.36	3	1
1:A:94:HIS:HB3	1:A:96:PHE:CZ	0.49	2.41	8	6
1:A:49:LYS:HB3	1:A:50:PRO:CD	0.49	2.37	6	1
1:A:165:LEU:HD22	1:A:182:PHE:CD2	0.49	2.42	16	2
1:A:200:SER:CA	1:A:203:ASN:ND2	0.49	2.75	17	1
1:A:104:TRP:CB	1:A:166:TRP:CH2	0.49	2.95	17	5
1:A:175:LEU:O	1:A:176:LEU:C	0.49	2.55	14	17
1:A:94:HIS:CD2	1:A:96:PHE:CZ	0.49	3.00	3	2
1:A:84:PRO:HA	1:A:156:ILE:CD1	0.49	2.37	9	6
1:A:193:HIS:N	1:A:213:LEU:OXT	0.49	2.43	11	6
1:A:104:TRP:N	1:A:166:TRP:CH2	0.49	2.79	9	1
1:A:196:PHE:HB2	1:A:211:ILE:CG1	0.49	2.37	16	3
1:A:99:ASP:OD1	1:A:111:LYS:NZ	0.49	2.44	11	1
1:A:82:PRO:O	1:A:83:GLU:O	0.49	2.30	16	6
1:A:43:TRP:HB2	1:A:68:PHE:O	0.49	2.06	10	2
1:A:107:GLU:CB	1:A:166:TRP:CZ3	0.49	2.96	20	4
1:A:106:ASP:O	1:A:107:GLU:C	0.49	2.55	12	9
1:A:101:ARG:HB3	1:A:102:PRO:HD2	0.49	1.85	9	5
1:A:115:TRP:CZ3	1:A:196:PHE:HB3	0.49	2.42	18	5
1:A:103:GLU:C	1:A:107:GLU:HG3	0.49	2.32	11	7
1:A:122:LYS:C	1:A:122:LYS:CD	0.49	2.85	8	1
1:A:183:LYS:O	1:A:187:LYS:C	0.49	2.56	11	1
1:A:103:GLU:HA	1:A:107:GLU:HG3	0.49	1.83	11	10
1:A:103:GLU:CA	1:A:107:GLU:HG3	0.49	2.37	12	10
1:A:89:LEU:HD12	1:A:89:LEU:H	0.49	1.67	4	1
1:A:99:ASP:O	1:A:100:VAL:C	0.49	2.54	5	3
1:A:50:PRO:C	1:A:61:LEU:CD1	0.49	2.84	5	1
1:A:45:LEU:HD21	1:A:77:ILE:CG1	0.49	2.38	14	3
1:A:94:HIS:HB3	1:A:96:PHE:CE2	0.49	2.43	17	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:TRP:CH2	1:A:138:ILE:HD11	0.49	2.43	10	1
1:A:103:GLU:O	1:A:105:GLU:N	0.49	2.45	14	11
1:A:172:LYS:HA	1:A:175:LEU:CD1	0.49	2.38	13	13
1:A:45:LEU:CD2	1:A:77:ILE:CG1	0.49	2.90	15	5
1:A:43:TRP:CH2	1:A:138:ILE:HG21	0.49	2.42	6	1
1:A:96:PHE:O	1:A:97:ARG:HB3	0.49	2.07	17	4
1:A:43:TRP:CB	1:A:68:PHE:O	0.49	2.61	10	1
1:A:107:GLU:O	1:A:111:LYS:HG3	0.49	2.08	14	1
1:A:81:ILE:O	1:A:86:GLU:HB2	0.49	2.07	2	9
1:A:127:ASP:O	1:A:131:LEU:CD1	0.49	2.56	14	7
1:A:149:ILE:HD11	1:A:170:GLU:OE1	0.49	2.08	1	1
1:A:44:THR:HA	1:A:67:SER:HA	0.49	1.84	19	14
2:A:214:M7G:O2B	2:A:214:M7G:O5'	0.49	2.31	2	1
1:A:43:TRP:O	1:A:67:SER:CB	0.49	2.60	3	2
1:A:96:PHE:O	1:A:97:ARG:HB2	0.49	2.07	13	9
1:A:39:LEU:HG	1:A:69:GLN:C	0.49	2.33	7	9
1:A:105:GLU:O	1:A:106:ASP:CG	0.49	2.56	5	6
1:A:116:SER:N	1:A:195:GLU:O	0.49	2.46	6	3
1:A:66:THR:CG2	1:A:73:GLU:HG2	0.49	2.37	15	3
1:A:104:TRP:HA	1:A:108:ALA:CB	0.49	2.37	9	1
1:A:84:PRO:HG3	1:A:126:ILE:CD1	0.49	2.38	10	1
1:A:117:PHE:CD2	1:A:186:LEU:HD21	0.49	2.43	11	1
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:CD1	0.49	2.36	12	1
1:A:68:PHE:CD2	1:A:73:GLU:OE2	0.49	2.66	13	1
1:A:202:ALA:O	1:A:203:ASN:CB	0.49	2.59	14	1
1:A:48:THR:CB	1:A:58:TRP:CZ3	0.49	2.96	2	4
1:A:3:VAL:HG22	1:A:3:VAL:O	0.49	2.08	3	2
1:A:43:TRP:CG	1:A:69:GLN:N	0.49	2.81	3	1
1:A:70:THR:C	1:A:71:VAL:CG1	0.49	2.85	3	1
1:A:170:GLU:C	1:A:171:ASP:CG	0.49	2.80	4	2
1:A:49:LYS:HB3	1:A:50:PRO:HD3	0.49	1.84	6	2
1:A:116:SER:CB	1:A:163:PHE:O	0.49	2.60	7	1
1:A:196:PHE:CZ	1:A:213:LEU:HD12	0.49	2.41	9	1
1:A:82:PRO:C	1:A:87:LEU:HD23	0.49	2.30	12	1
1:A:175:LEU:N	1:A:175:LEU:HD23	0.49	2.22	18	1
1:A:83:GLU:CG	1:A:84:PRO:HD3	0.49	2.37	19	1
1:A:91:SER:O	1:A:155:SER:HA	0.49	2.08	16	20
1:A:100:VAL:O	1:A:101:ARG:HB2	0.49	2.08	11	5
1:A:74:PHE:CD1	1:A:135:LEU:HB3	0.49	2.42	2	1
1:A:188:LEU:HG	1:A:193:HIS:CE1	0.49	2.42	3	1
1:A:87:LEU:CD1	1:A:91:SER:HB3	0.49	2.38	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:194:LEU:O	1:A:212:THR:HA	0.49	2.08	11	10
1:A:60:ASP:N	1:A:60:ASP:OD1	0.49	2.45	5	2
1:A:188:LEU:CD1	1:A:193:HIS:CD2	0.49	2.92	6	1
1:A:117:PHE:CZ	1:A:182:PHE:HB3	0.49	2.43	10	1
1:A:40:ASN:C	1:A:69:GLN:HG2	0.49	2.33	14	1
1:A:3:VAL:O	1:A:3:VAL:CG2	0.49	2.60	15	1
1:A:172:LYS:HG3	1:A:175:LEU:HD22	0.49	1.83	15	1
1:A:106:ASP:O	1:A:109:ASN:HB2	0.49	2.08	10	9
1:A:108:ALA:O	1:A:109:ASN:C	0.49	2.56	15	5
1:A:179:GLY:O	1:A:183:LYS:N	0.49	2.46	20	5
1:A:68:PHE:HB2	1:A:73:GLU:CG	0.49	2.38	3	1
1:A:188:LEU:HG	1:A:193:HIS:ND1	0.49	2.22	3	1
1:A:87:LEU:CD1	1:A:91:SER:HB2	0.49	2.38	5	4
1:A:183:LYS:HG2	1:A:184:GLN:N	0.49	2.23	7	5
1:A:101:ARG:O	1:A:107:GLU:HG2	0.49	2.07	16	3
1:A:157:ARG:NH1	2:A:214:M7G:O5'	0.49	2.46	5	1
1:A:58:TRP:CG	2:A:214:M7G:C4	0.49	2.96	20	2
1:A:111:LYS:CG	1:A:168:LYS:HA	0.49	2.38	11	2
1:A:66:THR:HG23	1:A:73:GLU:CD	0.49	2.33	13	1
1:A:111:LYS:O	1:A:113:GLY:N	0.49	2.46	13	1
1:A:85:HIS:CE1	1:A:124:ALA:HA	0.49	2.43	15	1
1:A:118:GLN:O	1:A:193:HIS:ND1	0.49	2.45	19	1
1:A:116:SER:C	1:A:117:PHE:CG	0.48	2.88	14	3
1:A:93:TYR:HD2	1:A:154:LEU:HD13	0.48	1.64	3	1
1:A:45:LEU:CD1	1:A:95:VAL:CG2	0.48	2.90	4	4
1:A:176:LEU:HG	1:A:196:PHE:CE2	0.48	2.43	4	1
1:A:101:ARG:HG2	1:A:106:ASP:CB	0.48	2.38	9	1
1:A:112:GLY:C	1:A:169:SER:OG	0.48	2.56	11	2
1:A:157:ARG:O	1:A:157:ARG:CG	0.48	2.60	16	1
1:A:111:LYS:CD	1:A:166:TRP:HB3	0.48	2.38	18	1
1:A:73:GLU:O	1:A:74:PHE:C	0.48	2.56	14	13
1:A:167:THR:CG2	1:A:175:LEU:HD21	0.48	2.38	8	2
1:A:101:ARG:HD3	1:A:110:ALA:HB2	0.48	1.84	4	1
1:A:153:VAL:CB	1:A:164:ALA:HB3	0.48	2.34	8	3
1:A:203:ASN:N	1:A:203:ASN:OD1	0.48	2.43	5	1
1:A:117:PHE:CD2	1:A:163:PHE:HB2	0.48	2.43	10	1
1:A:83:GLU:HB3	1:A:84:PRO:CD	0.48	2.38	15	1
1:A:157:ARG:O	1:A:158:LYS:O	0.48	2.30	16	1
1:A:104:TRP:CA	1:A:166:TRP:CH2	0.48	2.96	4	9
1:A:169:SER:C	1:A:171:ASP:N	0.48	2.70	13	12
1:A:175:LEU:C	1:A:177:ARG:N	0.48	2.69	19	18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:PRO:O	1:A:87:LEU:CG	0.48	2.61	2	1
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:HA	0.48	1.84	16	2
1:A:183:LYS:CG	1:A:193:HIS:O	0.48	2.61	15	2
1:A:99:ASP:HB2	1:A:150:ASN:CB	0.48	2.38	11	2
1:A:117:PHE:HB3	1:A:186:LEU:CD1	0.48	2.38	16	3
1:A:181:LYS:O	1:A:185:VAL:CG2	0.48	2.57	18	1
1:A:49:LYS:HB2	1:A:50:PRO:CD	0.48	2.38	2	4
1:A:48:THR:N	1:A:92:ASP:O	0.48	2.46	5	9
1:A:165:LEU:CD2	1:A:178:ILE:CG2	0.48	2.91	3	2
1:A:83:GLU:C	1:A:127:ASP:OD2	0.48	2.57	14	3
1:A:137:VAL:CG1	1:A:138:ILE:N	0.48	2.76	16	5
1:A:101:ARG:HB3	1:A:106:ASP:HB2	0.48	1.84	9	1
1:A:186:LEU:HD11	1:A:194:LEU:HD11	0.48	1.86	9	1
1:A:111:LYS:O	1:A:168:LYS:CA	0.48	2.61	10	1
2:A:214:M7G:O1A	2:A:214:M7G:O4'	0.48	2.31	10	1
1:A:111:LYS:HE2	1:A:166:TRP:HB3	0.48	1.84	14	1
1:A:106:ASP:C	1:A:108:ALA:N	0.48	2.71	15	4
1:A:123:GLY:O	1:A:124:ALA:C	0.48	2.56	18	3
1:A:170:GLU:O	1:A:171:ASP:CG	0.48	2.56	14	5
1:A:119:LEU:CD1	1:A:193:HIS:NE2	0.48	2.74	3	1
1:A:126:ILE:CG1	1:A:127:ASP:N	0.48	2.76	18	3
1:A:156:ILE:O	1:A:157:ARG:HB3	0.48	2.08	5	3
1:A:116:SER:CB	1:A:195:GLU:HB2	0.48	2.39	13	5
1:A:85:HIS:CG	1:A:123:GLY:HA3	0.48	2.44	7	1
1:A:115:TRP:O	1:A:164:ALA:HB1	0.48	2.09	10	1
1:A:165:LEU:N	1:A:165:LEU:CD1	0.48	2.73	10	1
1:A:92:ASP:OD2	2:A:214:M7G:O2A	0.48	2.32	15	1
1:A:42:LYS:O	1:A:97:ARG:HB2	0.48	2.09	1	1
1:A:58:TRP:CZ2	2:A:214:M7G:HM71	0.48	2.44	11	9
1:A:158:LYS:O	1:A:159:GLY:C	0.48	2.56	12	6
1:A:172:LYS:O	1:A:173:GLU:C	0.48	2.56	4	8
1:A:93:TYR:O	1:A:154:LEU:HB3	0.48	2.08	4	1
1:A:108:ALA:O	1:A:112:GLY:CA	0.48	2.62	4	2
1:A:102:PRO:O	1:A:103:GLU:CD	0.48	2.57	9	1
1:A:163:PHE:CE2	1:A:186:LEU:HD13	0.48	2.44	10	1
1:A:111:LYS:HB3	1:A:167:THR:O	0.48	2.09	11	2
1:A:130:TRP:O	1:A:134:LEU:CG	0.48	2.62	11	2
1:A:148:GLN:C	1:A:149:ILE:CD1	0.48	2.81	11	1
1:A:188:LEU:C	1:A:188:LEU:CD1	0.48	2.84	15	3
1:A:103:GLU:C	1:A:105:GLU:N	0.48	2.70	8	19
1:A:116:SER:O	1:A:195:GLU:N	0.48	2.47	20	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:199:HIS:O	1:A:203:ASN:CG	0.48	2.57	5	3
1:A:101:ARG:HD2	1:A:102:PRO:CD	0.48	2.37	6	1
1:A:97:ARG:CG	1:A:101:ARG:HA	0.48	2.39	7	1
1:A:148:GLN:O	1:A:149:ILE:C	0.48	2.57	9	4
1:A:94:HIS:NE2	1:A:153:VAL:HG13	0.48	2.24	11	1
1:A:119:LEU:HG	1:A:193:HIS:CE1	0.48	2.44	17	1
1:A:131:LEU:C	1:A:133:THR:N	0.48	2.72	8	19
1:A:108:ALA:C	1:A:110:ALA:N	0.48	2.71	12	5
1:A:194:LEU:O	1:A:213:LEU:N	0.48	2.47	8	6
1:A:115:TRP:CE3	1:A:196:PHE:HA	0.48	2.44	19	2
1:A:148:GLN:O	1:A:149:ILE:O	0.48	2.32	8	11
1:A:39:LEU:CB	1:A:69:GLN:O	0.48	2.62	15	6
1:A:111:LYS:NZ	1:A:166:TRP:CD1	0.48	2.78	14	3
1:A:83:GLU:CG	1:A:84:PRO:HD2	0.48	2.39	10	3
1:A:99:ASP:CB	1:A:150:ASN:HB2	0.48	2.39	11	1
1:A:130:TRP:CH2	1:A:153:VAL:O	0.48	2.66	18	2
1:A:194:LEU:CB	1:A:213:LEU:HB2	0.48	2.39	14	2
1:A:5:GLU:CG	1:A:5:GLU:O	0.48	2.61	15	1
1:A:210:SER:OG	1:A:211:ILE:CG1	0.48	2.61	20	1
1:A:74:PHE:HA	1:A:77:ILE:CD1	0.48	2.39	8	15
1:A:103:GLU:O	1:A:104:TRP:C	0.48	2.56	8	10
1:A:44:THR:HB	1:A:46:TRP:NE1	0.48	2.24	6	5
1:A:47:TYR:OH	1:A:65:VAL:CG2	0.48	2.59	13	3
1:A:173:GLU:N	1:A:174:PRO:CD	0.48	2.76	13	4
1:A:94:HIS:NE2	1:A:153:VAL:CG1	0.48	2.77	13	3
1:A:69:GLN:OE1	1:A:69:GLN:O	0.48	2.32	14	1
1:A:182:PHE:O	1:A:186:LEU:HG	0.48	2.08	15	3
1:A:148:GLN:C	1:A:149:ILE:HD12	0.48	2.34	1	2
1:A:39:LEU:HB3	1:A:69:GLN:CB	0.48	2.39	2	1
1:A:131:LEU:O	1:A:133:THR:N	0.48	2.47	8	13
1:A:109:ASN:O	1:A:110:ALA:C	0.48	2.56	4	2
1:A:97:ARG:O	1:A:99:ASP:N	0.48	2.47	5	3
1:A:156:ILE:C	1:A:157:ARG:HG2	0.48	2.34	5	1
1:A:160:GLY:C	1:A:161:ASN:CG	0.48	2.81	5	1
1:A:97:ARG:O	1:A:97:ARG:CD	0.48	2.62	6	1
1:A:83:GLU:HB3	1:A:84:PRO:HD2	0.48	1.86	11	4
1:A:100:VAL:HB	1:A:110:ALA:HB3	0.48	1.84	7	5
1:A:112:GLY:O	1:A:198:PRO:HA	0.48	2.09	19	2
1:A:130:TRP:CB	1:A:185:VAL:HG11	0.48	2.39	9	1
1:A:124:ALA:O	1:A:125:ASP:CG	0.48	2.57	18	2
1:A:66:THR:CG2	1:A:73:GLU:CD	0.48	2.86	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:TRP:CD1	2:A:214:M7G:C5	0.47	2.97	8	16
1:A:183:LYS:CG	1:A:188:LEU:HD11	0.47	2.39	3	1
1:A:45:LEU:CD2	1:A:66:THR:CB	0.47	2.91	4	2
1:A:195:GLU:CG	1:A:212:THR:HG22	0.47	2.38	4	2
1:A:109:ASN:OD1	1:A:203:ASN:OD1	0.47	2.32	5	1
1:A:89:LEU:HD22	1:A:157:ARG:O	0.47	2.09	11	2
1:A:161:ASN:OD1	1:A:161:ASN:C	0.47	2.56	10	2
1:A:169:SER:OG	1:A:170:GLU:N	0.47	2.45	8	2
1:A:48:THR:HG23	1:A:62:LEU:CG	0.47	2.39	9	3
1:A:103:GLU:CD	1:A:106:ASP:OD2	0.47	2.57	13	1
1:A:41:THR:CG2	1:A:42:LYS:N	0.47	2.76	2	1
1:A:71:VAL:O	1:A:72:GLU:C	0.47	2.56	2	4
1:A:96:PHE:CB	1:A:107:GLU:OE2	0.47	2.62	2	1
1:A:111:LYS:HD3	1:A:166:TRP:CB	0.47	2.39	13	2
1:A:101:ARG:O	1:A:107:GLU:OE2	0.47	2.32	6	3
1:A:187:LYS:O	1:A:188:LEU:O	0.47	2.33	11	2
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:96:PHE:HA	0.47	2.45	6	1
1:A:183:LYS:HD3	1:A:193:HIS:ND1	0.47	2.25	6	1
1:A:101:ARG:CD	1:A:106:ASP:HB3	0.47	2.39	9	1
1:A:181:LYS:O	1:A:182:PHE:C	0.47	2.57	17	1
1:A:193:HIS:ND1	1:A:193:HIS:C	0.47	2.72	17	1
1:A:107:GLU:CB	1:A:166:TRP:CE3	0.47	2.96	1	2
1:A:155:SER:O	1:A:162:LYS:O	0.47	2.33	20	6
1:A:46:TRP:HB2	1:A:94:HIS:CD2	0.47	2.44	3	1
1:A:43:TRP:HB3	1:A:97:ARG:CG	0.47	2.40	4	2
1:A:111:LYS:HD2	1:A:113:GLY:N	0.47	2.22	6	2
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:182:PHE:CD2	0.47	3.02	19	2
1:A:135:LEU:HG	1:A:136:ALA:N	0.47	2.25	20	7
1:A:148:GLN:O	1:A:168:LYS:HB3	0.47	2.09	8	6
1:A:180:GLY:O	1:A:183:LYS:CB	0.47	2.62	15	2
1:A:115:TRP:CE2	1:A:196:PHE:CD2	0.47	3.02	9	1
1:A:6:VAL:HG22	1:A:6:VAL:O	0.47	2.09	11	1
1:A:48:THR:OG1	1:A:92:ASP:O	0.47	2.33	16	2
1:A:119:LEU:CD2	1:A:188:LEU:HB2	0.47	2.39	15	1
1:A:171:ASP:O	1:A:172:LYS:HB2	0.47	2.08	18	1
1:A:78:ILE:HG23	1:A:131:LEU:HD13	0.47	1.85	2	3
1:A:111:LYS:HE3	1:A:113:GLY:N	0.47	2.25	2	2
1:A:154:LEU:C	1:A:155:SER:OG	0.47	2.58	12	15
1:A:41:THR:OG1	1:A:98:ASN:O	0.47	2.31	3	1
1:A:150:ASN:C	1:A:150:ASN:ND2	0.47	2.72	3	3
1:A:195:GLU:HG2	1:A:212:THR:HG22	0.47	1.85	18	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:TRP:CA	1:A:96:PHE:O	0.47	2.63	9	3
1:A:111:LYS:NZ	1:A:166:TRP:NE1	0.47	2.62	7	1
1:A:134:LEU:HD21	1:A:182:PHE:CE1	0.47	2.43	7	1
1:A:96:PHE:HE2	1:A:153:VAL:HG22	0.47	1.68	8	1
1:A:121:GLY:O	1:A:122:LYS:O	0.47	2.32	19	2
1:A:193:HIS:O	1:A:194:LEU:O	0.47	2.31	11	1
1:A:83:GLU:CB	1:A:127:ASP:HB3	0.47	2.39	12	1
1:A:88:PRO:CA	1:A:89:LEU:HD22	0.47	2.40	16	2
1:A:70:THR:OG1	1:A:73:GLU:OE1	0.47	2.32	15	1
1:A:109:ASN:OD1	1:A:203:ASN:CB	0.47	2.62	18	2
1:A:203:ASN:C	1:A:203:ASN:OD1	0.47	2.56	17	1
1:A:39:LEU:HG	1:A:69:GLN:O	0.47	2.09	12	9
1:A:90:LYS:HG3	2:A:214:M7G:O1A	0.47	2.10	3	1
1:A:193:HIS:CG	1:A:213:LEU:HB3	0.47	2.44	5	1
1:A:111:LYS:NZ	1:A:114:LYS:HB2	0.47	2.25	6	4
1:A:39:LEU:CD2	1:A:69:GLN:C	0.47	2.80	8	1
1:A:180:GLY:O	1:A:183:LYS:HB2	0.47	2.10	20	5
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:138:ILE:CD1	0.47	2.96	10	1
1:A:41:THR:CG2	1:A:98:ASN:OD1	0.47	2.62	13	1
1:A:111:LYS:HD3	1:A:166:TRP:CA	0.47	2.40	13	1
1:A:170:GLU:O	1:A:174:PRO:HG3	0.47	2.09	16	2
1:A:127:ASP:OD2	1:A:163:PHE:CE1	0.47	2.67	19	1
1:A:104:TRP:HD1	1:A:105:GLU:N	0.47	2.08	20	16
1:A:155:SER:N	1:A:162:LYS:O	0.47	2.48	9	7
1:A:156:ILE:HG22	1:A:157:ARG:N	0.47	2.25	1	6
1:A:171:ASP:O	1:A:174:PRO:HD2	0.47	2.09	1	16
1:A:39:LEU:HD12	1:A:69:GLN:N	0.47	2.24	2	1
1:A:68:PHE:CD1	1:A:73:GLU:HG3	0.47	2.44	2	3
1:A:89:LEU:C	1:A:91:SER:N	0.47	2.71	9	10
1:A:104:TRP:HA	1:A:166:TRP:CH2	0.47	2.44	2	9
1:A:39:LEU:HB2	1:A:69:GLN:O	0.47	2.10	15	9
1:A:183:LYS:O	1:A:184:GLN:C	0.47	2.56	14	4
1:A:193:HIS:HB2	1:A:213:LEU:CB	0.47	2.40	15	3
1:A:111:LYS:HB3	1:A:150:ASN:ND2	0.47	2.24	6	3
1:A:115:TRP:CZ2	1:A:175:LEU:HB2	0.47	2.45	6	1
1:A:108:ALA:HA	1:A:111:LYS:CD	0.47	2.39	14	4
1:A:129:LEU:O	1:A:133:THR:OG1	0.47	2.33	14	3
1:A:160:GLY:C	1:A:161:ASN:OD1	0.47	2.57	11	1
1:A:84:PRO:O	1:A:161:ASN:CG	0.47	2.56	16	1
1:A:45:LEU:O	1:A:45:LEU:HG	0.47	2.09	4	7
1:A:93:TYR:N	1:A:154:LEU:O	0.47	2.48	10	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:VAL:CB	1:A:110:ALA:CB	0.47	2.92	1	6
1:A:101:ARG:N	1:A:102:PRO:HD3	0.47	2.25	1	1
1:A:161:ASN:C	1:A:162:LYS:HG3	0.47	2.35	3	6
1:A:84:PRO:O	1:A:123:GLY:O	0.47	2.32	2	1
1:A:168:LYS:O	1:A:169:SER:HB2	0.47	2.09	13	9
1:A:198:PRO:O	1:A:200:SER:N	0.47	2.47	5	10
1:A:101:ARG:HB3	1:A:106:ASP:HB3	0.47	1.85	3	4
1:A:58:TRP:CE2	2:A:214:M7G:N7	0.47	2.82	6	5
1:A:66:THR:CG2	1:A:73:GLU:HB2	0.47	2.40	4	2
1:A:83:GLU:OE2	1:A:131:LEU:HD11	0.47	2.09	5	1
1:A:94:HIS:HB3	1:A:96:PHE:CE1	0.47	2.44	16	2
1:A:178:ILE:HG23	1:A:182:PHE:CD2	0.47	2.45	6	1
1:A:93:TYR:CD2	1:A:154:LEU:CD2	0.47	2.91	8	3
1:A:170:GLU:O	1:A:174:PRO:HG2	0.47	2.10	10	1
1:A:50:PRO:CG	1:A:90:LYS:O	0.47	2.62	17	2
1:A:8:LYS:O	1:A:9:LYS:C	0.47	2.57	13	1
1:A:39:LEU:HB3	1:A:139:GLY:CA	0.47	2.39	14	1
1:A:41:THR:N	1:A:69:GLN:HG2	0.47	2.25	14	1
1:A:41:THR:N	1:A:69:GLN:CB	0.47	2.77	14	1
1:A:85:HIS:NE2	1:A:124:ALA:C	0.47	2.73	14	1
1:A:186:LEU:CB	1:A:188:LEU:HD23	0.47	2.38	15	1
1:A:66:THR:HG23	1:A:68:PHE:CD2	0.47	2.45	19	1
1:A:112:GLY:O	1:A:169:SER:OG	0.47	2.32	19	1
1:A:58:TRP:CE3	2:A:214:M7G:H82	0.47	2.44	20	1
1:A:110:ALA:C	1:A:111:LYS:CG	0.47	2.84	1	2
1:A:170:GLU:CD	1:A:175:LEU:HD21	0.47	2.35	1	1
1:A:46:TRP:HB2	1:A:94:HIS:NE2	0.47	2.24	3	2
1:A:98:ASN:ND2	1:A:99:ASP:N	0.47	2.63	10	2
1:A:108:ALA:HA	1:A:111:LYS:HG3	0.47	1.87	12	2
1:A:199:HIS:O	1:A:203:ASN:OD1	0.47	2.33	5	2
1:A:43:TRP:C	1:A:44:THR:HG23	0.47	2.34	10	2
1:A:99:ASP:CB	1:A:150:ASN:HA	0.47	2.40	8	4
1:A:183:LYS:O	1:A:186:LEU:N	0.47	2.47	14	2
1:A:46:TRP:HB3	1:A:62:LEU:HD22	0.47	1.86	15	2
1:A:87:LEU:HD13	1:A:91:SER:HB3	0.47	1.87	13	1
1:A:127:ASP:OD1	1:A:163:PHE:CE1	0.47	2.68	17	1
1:A:89:LEU:CD1	1:A:158:LYS:O	0.47	2.60	20	1
1:A:102:PRO:HG3	1:A:106:ASP:HB3	0.47	1.87	14	12
1:A:172:LYS:HA	1:A:175:LEU:HB2	0.47	1.86	19	5
1:A:194:LEU:N	1:A:213:LEU:HB2	0.47	2.25	17	3
1:A:74:PHE:CE2	1:A:131:LEU:CD2	0.47	2.97	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:97:ARG:C	1:A:98:ASN:ND2	0.47	2.73	4	1
1:A:168:LYS:O	1:A:168:LYS:CG	0.47	2.62	4	1
1:A:186:LEU:N	1:A:186:LEU:CD2	0.47	2.73	14	3
1:A:120:ARG:O	1:A:121:GLY:O	0.47	2.33	8	2
1:A:43:TRP:N	1:A:68:PHE:O	0.47	2.40	10	1
1:A:46:TRP:CZ3	1:A:101:ARG:O	0.47	2.68	18	3
1:A:110:ALA:O	1:A:111:LYS:HB3	0.47	2.10	17	1
1:A:165:LEU:HD22	1:A:178:ILE:CD1	0.47	2.39	18	1
1:A:169:SER:O	1:A:170:GLU:HG2	0.47	2.10	18	1
1:A:104:TRP:CZ2	2:A:214:M7G:H2'	0.47	2.45	19	20
1:A:107:GLU:OE1	1:A:150:ASN:OD1	0.47	2.33	1	1
1:A:109:ASN:OD1	1:A:109:ASN:C	0.47	2.57	4	1
1:A:154:LEU:HD23	1:A:155:SER:N	0.47	2.25	7	4
1:A:186:LEU:O	1:A:187:LYS:C	0.47	2.56	15	2
1:A:194:LEU:O	1:A:195:GLU:CG	0.47	2.63	15	3
1:A:39:LEU:HD13	1:A:41:THR:HG22	0.47	1.77	6	1
1:A:117:PHE:CD2	1:A:163:PHE:HB3	0.47	2.44	7	1
1:A:167:THR:C	1:A:169:SER:N	0.47	2.73	9	4
1:A:199:HIS:N	1:A:199:HIS:CD2	0.47	2.83	8	3
1:A:149:ILE:CA	1:A:168:LYS:HG3	0.47	2.40	9	1
1:A:39:LEU:CD1	1:A:139:GLY:CA	0.47	2.93	10	1
1:A:150:ASN:ND2	1:A:166:TRP:CB	0.47	2.78	16	2
1:A:6:VAL:O	1:A:6:VAL:HG13	0.47	2.09	11	1
1:A:193:HIS:NE2	1:A:194:LEU:CD1	0.47	2.78	12	1
1:A:73:GLU:OE1	1:A:73:GLU:N	0.47	2.48	14	1
1:A:117:PHE:O	1:A:162:LYS:CB	0.47	2.63	18	1
1:A:87:LEU:HG	1:A:88:PRO:N	0.46	2.25	7	10
1:A:199:HIS:CD2	1:A:200:SER:N	0.46	2.83	13	3
2:A:214:M7G:C3'	2:A:214:M7G:PA	0.46	3.03	4	1
1:A:183:LYS:CD	1:A:193:HIS:ND1	0.46	2.78	6	1
1:A:91:SER:O	1:A:92:ASP:OD1	0.46	2.32	7	4
1:A:108:ALA:O	1:A:199:HIS:HB3	0.46	2.10	20	3
1:A:148:GLN:CB	1:A:168:LYS:HB3	0.46	2.40	11	1
1:A:6:VAL:O	1:A:7:SER:C	0.46	2.58	12	1
1:A:84:PRO:O	1:A:86:GLU:OE1	0.46	2.33	12	1
1:A:157:ARG:CD	2:A:214:M7G:O3B	0.46	2.63	12	1
1:A:108:ALA:CA	1:A:111:LYS:HE3	0.46	2.40	14	1
1:A:113:GLY:CA	1:A:198:PRO:HA	0.46	2.41	17	1
1:A:10:PHE:O	1:A:11:GLU:O	0.46	2.33	19	1
1:A:92:ASP:CG	1:A:94:HIS:NE2	0.46	2.73	20	1
1:A:100:VAL:HG13	1:A:107:GLU:CD	0.46	2.35	18	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:109:ASN:C	1:A:111:LYS:N	0.46	2.73	1	1
1:A:74:PHE:CE2	1:A:135:LEU:HB3	0.46	2.44	3	1
1:A:83:GLU:CB	1:A:84:PRO:HD2	0.46	2.39	9	7
1:A:98:ASN:OD1	1:A:150:ASN:O	0.46	2.33	3	2
1:A:110:ALA:O	1:A:111:LYS:C	0.46	2.58	6	3
1:A:44:THR:CG2	1:A:97:ARG:HG2	0.46	2.41	6	1
1:A:83:GLU:HB3	1:A:127:ASP:CG	0.46	2.35	6	2
1:A:84:PRO:HB3	1:A:161:ASN:CG	0.46	2.35	8	1
1:A:130:TRP:HE1	1:A:134:LEU:HD11	0.46	1.69	10	1
1:A:88:PRO:O	1:A:91:SER:OG	0.46	2.34	20	2
1:A:99:ASP:CB	1:A:150:ASN:CB	0.46	2.93	11	1
1:A:183:LYS:O	1:A:187:LYS:CA	0.46	2.63	11	1
1:A:157:ARG:O	1:A:157:ARG:HG2	0.46	2.09	16	1
1:A:113:GLY:N	1:A:170:GLU:CB	0.46	2.78	18	1
1:A:179:GLY:HA3	1:A:194:LEU:HD21	0.46	1.86	18	1
1:A:116:SER:HA	1:A:163:PHE:O	0.46	2.10	19	16
1:A:111:LYS:HD2	1:A:113:GLY:O	0.46	2.10	12	6
1:A:43:TRP:HB2	1:A:68:PHE:CA	0.46	2.39	3	1
1:A:45:LEU:CB	1:A:66:THR:O	0.46	2.64	3	9
1:A:179:GLY:O	1:A:180:GLY:C	0.46	2.58	5	2
1:A:133:THR:HB	1:A:182:PHE:CE2	0.46	2.45	8	1
1:A:164:ALA:C	1:A:165:LEU:HD12	0.46	2.35	10	1
1:A:126:ILE:CG2	1:A:186:LEU:CA	0.46	2.94	11	1
1:A:166:TRP:C	1:A:167:THR:HG23	0.46	2.35	14	2
1:A:40:ASN:ND2	1:A:138:ILE:O	0.46	2.48	15	1
1:A:210:SER:OG	1:A:211:ILE:HG13	0.46	2.11	20	1
1:A:153:VAL:HG21	1:A:166:TRP:CZ3	0.46	2.46	17	2
1:A:123:GLY:HA2	1:A:126:ILE:CD1	0.46	2.41	2	2
1:A:111:LYS:O	1:A:168:LYS:HA	0.46	2.11	4	2
1:A:81:ILE:O	1:A:86:GLU:CD	0.46	2.57	11	1
1:A:107:GLU:OE1	1:A:166:TRP:CE3	0.46	2.68	11	2
1:A:48:THR:HG21	1:A:62:LEU:HD12	0.46	1.86	12	1
1:A:200:SER:C	1:A:203:ASN:ND2	0.46	2.74	17	1
1:A:39:LEU:HB3	1:A:69:GLN:HB3	0.46	1.88	2	1
1:A:57:SER:O	1:A:59:SER:N	0.46	2.49	16	3
1:A:101:ARG:HG3	1:A:109:ASN:ND2	0.46	2.26	6	2
1:A:111:LYS:HB3	1:A:150:ASN:CG	0.46	2.36	14	5
1:A:87:LEU:HD23	1:A:87:LEU:O	0.46	2.09	18	4
1:A:154:LEU:HD12	1:A:163:PHE:HE1	0.46	1.70	4	1
1:A:106:ASP:CA	1:A:109:ASN:ND2	0.46	2.78	5	2
1:A:114:LYS:HE2	1:A:197:PHE:CD2	0.46	2.45	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:170:GLU:O	1:A:171:ASP:O	0.46	2.33	8	2
1:A:170:GLU:O	1:A:171:ASP:OD1	0.46	2.34	9	1
1:A:83:GLU:CD	1:A:127:ASP:OD2	0.46	2.58	11	1
1:A:135:LEU:O	1:A:138:ILE:HG12	0.46	2.11	2	7
1:A:39:LEU:CD1	1:A:70:THR:HG22	0.46	2.41	2	1
1:A:46:TRP:HB3	1:A:62:LEU:CD1	0.46	2.40	2	4
1:A:46:TRP:CZ3	1:A:96:PHE:CD2	0.46	3.04	10	2
1:A:193:HIS:O	1:A:194:LEU:HB2	0.46	2.11	6	6
1:A:183:LYS:HD3	1:A:193:HIS:O	0.46	2.11	10	1
1:A:117:PHE:CD2	1:A:194:LEU:HD21	0.46	2.45	12	1
1:A:114:LYS:HG3	1:A:166:TRP:NE1	0.46	2.25	15	1
1:A:182:PHE:O	1:A:183:LYS:C	0.46	2.57	15	1
1:A:66:THR:HG22	1:A:68:PHE:CE1	0.46	2.45	16	1
1:A:116:SER:CB	1:A:195:GLU:HG2	0.46	2.41	1	3
1:A:151:GLY:O	1:A:166:TRP:HB2	0.46	2.11	15	13
1:A:178:ILE:O	1:A:179:GLY:C	0.46	2.57	1	3
1:A:70:THR:HG23	1:A:71:VAL:N	0.46	2.25	2	1
1:A:109:ASN:OD1	1:A:203:ASN:ND2	0.46	2.48	2	1
1:A:108:ALA:HA	1:A:111:LYS:HG2	0.46	1.86	18	4
1:A:103:GLU:CA	1:A:107:GLU:CD	0.46	2.89	8	1
1:A:115:TRP:O	1:A:164:ALA:CB	0.46	2.63	10	1
1:A:124:ALA:O	1:A:125:ASP:OD1	0.46	2.34	11	1
1:A:76:ALA:O	1:A:77:ILE:C	0.46	2.59	6	11
1:A:92:ASP:HA	1:A:154:LEU:O	0.46	2.10	1	19
1:A:95:VAL:O	1:A:96:PHE:CB	0.46	2.64	8	4
1:A:102:PRO:HG2	1:A:106:ASP:HB2	0.46	1.86	8	6
1:A:198:PRO:C	1:A:200:SER:N	0.46	2.74	5	12
1:A:57:SER:C	1:A:59:SER:N	0.46	2.74	12	15
1:A:92:ASP:OD1	1:A:155:SER:OG	0.46	2.33	20	2
1:A:108:ALA:HA	1:A:111:LYS:HE2	0.46	1.88	2	3
1:A:87:LEU:HB2	1:A:88:PRO:HD2	0.46	1.88	3	5
1:A:45:LEU:HG	1:A:65:VAL:CG2	0.46	2.41	9	7
1:A:82:PRO:O	1:A:86:GLU:HB3	0.46	2.10	15	5
1:A:83:GLU:CG	1:A:127:ASP:HB2	0.46	2.41	10	1
1:A:84:PRO:HB3	1:A:163:PHE:CZ	0.46	2.45	11	1
1:A:93:TYR:N	1:A:93:TYR:CD1	0.46	2.83	11	2
1:A:111:LYS:HB3	1:A:168:LYS:CA	0.46	2.41	19	2
1:A:174:PRO:O	1:A:178:ILE:CG2	0.46	2.59	18	4
1:A:117:PHE:HB2	1:A:186:LEU:CD1	0.46	2.41	14	1
1:A:165:LEU:HD11	1:A:182:PHE:CE2	0.46	2.46	15	1
1:A:94:HIS:HD1	1:A:153:VAL:HG13	0.46	1.71	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:PHE:CZ	1:A:153:VAL:CG2	0.46	2.99	16	1
1:A:101:ARG:O	1:A:101:ARG:HG2	0.46	2.11	1	1
1:A:176:LEU:N	1:A:176:LEU:HD12	0.46	2.26	3	12
1:A:108:ALA:CB	1:A:111:LYS:HE3	0.46	2.41	18	3
1:A:201:SER:OG	1:A:202:ALA:N	0.46	2.47	3	2
1:A:117:PHE:O	1:A:162:LYS:HA	0.46	2.10	18	13
1:A:99:ASP:OD1	1:A:99:ASP:C	0.46	2.58	8	1
1:A:122:LYS:HD3	1:A:123:GLY:N	0.46	2.26	8	1
1:A:7:SER:O	1:A:8:LYS:O	0.46	2.34	15	1
1:A:203:ASN:OD1	1:A:203:ASN:N	0.46	2.49	15	2
1:A:97:ARG:O	1:A:98:ASN:HB2	0.46	2.11	4	1
1:A:101:ARG:HB2	1:A:106:ASP:C	0.46	2.36	6	3
1:A:111:LYS:HB3	1:A:168:LYS:HA	0.46	1.87	11	2
1:A:104:TRP:CH2	2:A:214:M7G:O2A	0.46	2.69	12	1
1:A:82:PRO:O	1:A:87:LEU:N	0.46	2.49	13	1
1:A:196:PHE:CZ	1:A:213:LEU:HD13	0.46	2.46	14	1
1:A:134:LEU:HD13	1:A:152:VAL:HG21	0.46	1.86	16	1
1:A:197:PHE:CD1	1:A:201:SER:HB3	0.46	2.45	16	1
1:A:96:PHE:O	1:A:97:ARG:HG3	0.45	2.10	20	5
1:A:110:ALA:O	1:A:111:LYS:HG3	0.45	2.11	1	1
1:A:58:TRP:CE2	1:A:62:LEU:HD23	0.45	2.45	4	4
1:A:148:GLN:O	1:A:168:LYS:HB2	0.45	2.11	10	2
1:A:115:TRP:HA	1:A:115:TRP:CE3	0.45	2.46	14	3
1:A:194:LEU:O	1:A:195:GLU:HG2	0.45	2.11	4	4
1:A:69:GLN:O	1:A:69:GLN:CG	0.45	2.63	8	1
1:A:148:GLN:O	1:A:168:LYS:CE	0.45	2.64	8	1
1:A:115:TRP:CZ2	1:A:196:PHE:CD2	0.45	3.04	9	1
1:A:84:PRO:HD2	1:A:127:ASP:OD1	0.45	2.10	11	1
1:A:148:GLN:HB3	1:A:168:LYS:CB	0.45	2.41	11	1
1:A:165:LEU:CD2	1:A:178:ILE:HG21	0.45	2.41	13	1
1:A:202:ALA:C	1:A:203:ASN:CG	0.45	2.84	14	1
1:A:93:TYR:CD1	1:A:154:LEU:CD2	0.45	2.98	17	2
1:A:71:VAL:O	1:A:75:TRP:HB2	0.45	2.11	12	7
1:A:110:ALA:O	1:A:111:LYS:CG	0.45	2.64	1	1
1:A:152:VAL:C	1:A:153:VAL:CG2	0.45	2.89	14	4
1:A:155:SER:O	1:A:162:LYS:N	0.45	2.49	1	2
1:A:122:LYS:O	1:A:126:ILE:HD11	0.45	2.11	8	1
1:A:83:GLU:OE2	1:A:125:ASP:OD1	0.45	2.34	9	2
1:A:149:ILE:C	1:A:168:LYS:HG2	0.45	2.37	9	1
1:A:134:LEU:O	1:A:137:VAL:N	0.45	2.49	14	1
1:A:87:LEU:CD2	1:A:87:LEU:C	0.45	2.87	18	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:92:ASP:OD1	1:A:155:SER:CB	0.45	2.65	20	1
1:A:39:LEU:HD23	1:A:70:THR:C	0.45	2.37	1	1
1:A:83:GLU:O	1:A:87:LEU:HD22	0.45	2.11	11	3
1:A:101:ARG:C	1:A:107:GLU:HG2	0.45	2.36	9	5
1:A:96:PHE:CE2	1:A:153:VAL:CG2	0.45	2.99	16	2
1:A:74:PHE:CE2	1:A:95:VAL:CG1	0.45	2.96	6	3
1:A:99:ASP:HB2	1:A:150:ASN:HB2	0.45	1.88	11	1
1:A:183:LYS:HA	1:A:194:LEU:CD1	0.45	2.41	11	1
1:A:170:GLU:HA	1:A:175:LEU:HD11	0.45	1.86	18	1
1:A:186:LEU:O	1:A:187:LYS:HB3	0.45	2.12	2	2
1:A:201:SER:O	1:A:202:ALA:C	0.45	2.56	2	2
1:A:45:LEU:CA	1:A:95:VAL:HG22	0.45	2.41	6	2
1:A:58:TRP:CH2	1:A:62:LEU:HG	0.45	2.47	15	3
1:A:111:LYS:CD	1:A:166:TRP:CD1	0.45	2.99	10	3
1:A:39:LEU:CD2	1:A:69:GLN:O	0.45	2.63	8	1
1:A:153:VAL:O	1:A:164:ALA:N	0.45	2.50	16	2
1:A:172:LYS:O	1:A:175:LEU:HB2	0.45	2.12	15	4
1:A:194:LEU:C	1:A:195:GLU:CG	0.45	2.89	20	2
1:A:92:ASP:OD2	2:A:214:M7G:O1A	0.45	2.34	19	1
1:A:132:ARG:HA	1:A:135:LEU:CD2	0.45	2.41	15	15
1:A:179:GLY:O	1:A:183:LYS:HB3	0.45	2.10	11	3
1:A:58:TRP:CZ2	1:A:62:LEU:CD2	0.45	2.99	2	4
1:A:119:LEU:C	1:A:120:ARG:CG	0.45	2.89	2	1
1:A:165:LEU:C	1:A:165:LEU:CD1	0.45	2.89	2	1
1:A:78:ILE:C	1:A:80:ASN:N	0.45	2.74	19	6
1:A:101:ARG:HB2	1:A:106:ASP:CB	0.45	2.41	3	1
1:A:64:PRO:C	1:A:65:VAL:CG2	0.45	2.89	6	2
1:A:193:HIS:O	1:A:194:LEU:HG	0.45	2.11	6	3
1:A:98:ASN:OD1	1:A:149:ILE:O	0.45	2.34	5	1
1:A:111:LYS:HE2	1:A:114:LYS:CA	0.45	2.42	6	1
1:A:83:GLU:OE1	1:A:127:ASP:OD2	0.45	2.35	11	2
1:A:39:LEU:CB	1:A:139:GLY:HA2	0.45	2.41	8	1
1:A:95:VAL:C	1:A:96:PHE:CD1	0.45	2.95	9	1
1:A:115:TRP:HB3	1:A:117:PHE:CZ	0.45	2.46	9	1
1:A:199:HIS:O	1:A:201:SER:N	0.45	2.49	17	1
1:A:48:THR:OG1	1:A:94:HIS:CE1	0.45	2.70	18	1
1:A:172:LYS:CA	1:A:175:LEU:HG	0.45	2.41	18	1
1:A:202:ALA:O	1:A:203:ASN:C	0.45	2.60	20	1
1:A:150:ASN:OD1	1:A:151:GLY:N	0.45	2.49	1	1
1:A:74:PHE:CE1	1:A:135:LEU:HB3	0.45	2.47	2	1
1:A:112:GLY:CA	1:A:199:HIS:HB3	0.45	2.41	19	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:TRP:HA	1:A:78:ILE:HG13	0.45	1.89	15	7
1:A:43:TRP:HB3	1:A:97:ARG:CA	0.45	2.41	5	2
1:A:114:LYS:O	1:A:197:PHE:HB2	0.45	2.10	11	3
1:A:47:TYR:CB	1:A:93:TYR:CD1	0.45	2.99	6	2
1:A:41:THR:O	1:A:69:GLN:HB2	0.45	2.10	10	1
1:A:48:THR:HG21	1:A:62:LEU:CD1	0.45	2.42	12	1
1:A:183:LYS:HB2	1:A:194:LEU:CD2	0.45	2.41	14	2
1:A:194:LEU:N	1:A:213:LEU:OXT	0.45	2.43	14	2
1:A:68:PHE:HB2	1:A:73:GLU:CD	0.45	2.37	15	1
1:A:78:ILE:CG2	1:A:131:LEU:HD13	0.45	2.42	20	1
1:A:115:TRP:O	1:A:164:ALA:HA	0.45	2.12	4	10
1:A:196:PHE:CB	1:A:210:SER:CB	0.45	2.95	1	1
1:A:108:ALA:O	1:A:199:HIS:HB2	0.45	2.11	6	4
1:A:43:TRP:HB2	1:A:96:PHE:O	0.45	2.11	16	4
1:A:101:ARG:CG	1:A:102:PRO:HD2	0.45	2.42	4	2
1:A:170:GLU:O	1:A:171:ASP:HB2	0.45	2.11	4	4
1:A:198:PRO:O	1:A:201:SER:OG	0.45	2.35	6	3
1:A:42:LYS:O	1:A:42:LYS:HG3	0.45	2.12	9	3
1:A:111:LYS:HE2	1:A:114:LYS:CB	0.45	2.41	10	2
1:A:74:PHE:CZ	1:A:78:ILE:CD1	0.45	2.98	15	1
1:A:180:GLY:O	1:A:183:LYS:N	0.45	2.50	15	1
1:A:130:TRP:CE3	1:A:163:PHE:CB	0.45	2.99	18	1
1:A:104:TRP:CG	2:A:214:M7G:HM72	0.45	2.47	8	20
1:A:172:LYS:O	1:A:176:LEU:HD13	0.45	2.12	6	11
1:A:69:GLN:HB3	1:A:138:ILE:CD1	0.45	2.39	3	1
1:A:75:TRP:O	1:A:79:GLN:HG2	0.45	2.11	18	2
1:A:75:TRP:O	1:A:79:GLN:CG	0.45	2.65	18	2
1:A:48:THR:CG2	1:A:62:LEU:CB	0.45	2.92	19	2
1:A:113:GLY:O	1:A:166:TRP:HA	0.45	2.11	4	2
1:A:126:ILE:HG23	1:A:186:LEU:CA	0.45	2.39	11	1
1:A:131:LEU:O	1:A:135:LEU:N	0.45	2.49	11	1
1:A:185:VAL:CB	1:A:186:LEU:HD13	0.45	2.42	11	1
1:A:87:LEU:HG	1:A:88:PRO:CD	0.45	2.42	18	5
1:A:42:LYS:O	1:A:42:LYS:HG2	0.45	2.12	4	2
1:A:111:LYS:HB3	1:A:167:THR:C	0.45	2.37	4	1
1:A:111:LYS:HB3	1:A:150:ASN:CB	0.45	2.42	20	5
1:A:4:GLU:O	1:A:5:GLU:CB	0.45	2.64	7	2
1:A:57:SER:N	1:A:60:ASP:HB2	0.45	2.27	16	2
1:A:108:ALA:C	1:A:199:HIS:HB2	0.45	2.37	20	2
1:A:116:SER:O	1:A:194:LEU:HA	0.45	2.12	9	2
1:A:43:TRP:CG	1:A:68:PHE:O	0.45	2.70	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:PRO:CB	1:A:125:ASP:HA	0.45	2.42	12	1
1:A:170:GLU:OE2	1:A:175:LEU:CD2	0.45	2.65	1	1
1:A:82:PRO:CA	1:A:87:LEU:HB3	0.45	2.42	3	6
1:A:97:ARG:C	1:A:99:ASP:N	0.45	2.74	9	3
1:A:175:LEU:O	1:A:177:ARG:N	0.45	2.50	14	4
1:A:111:LYS:CE	1:A:114:LYS:HB2	0.45	2.42	5	3
1:A:96:PHE:CD2	1:A:166:TRP:CZ3	0.45	3.05	6	2
1:A:103:GLU:C	1:A:107:GLU:OE1	0.45	2.60	8	1
1:A:83:GLU:HA	1:A:127:ASP:OD2	0.45	2.11	16	1
1:A:100:VAL:O	1:A:101:ARG:CG	0.45	2.65	20	1
1:A:43:TRP:HB2	1:A:68:PHE:C	0.44	2.38	3	1
1:A:44:THR:CB	1:A:46:TRP:CE2	0.44	3.00	3	1
1:A:117:PHE:CD2	1:A:194:LEU:CD1	0.44	3.00	3	2
1:A:111:LYS:HB2	1:A:167:THR:O	0.44	2.11	13	7
1:A:134:LEU:HB3	1:A:152:VAL:HG21	0.44	1.89	16	2
1:A:157:ARG:HG2	1:A:160:GLY:O	0.44	2.12	16	1
1:A:196:PHE:C	1:A:197:PHE:CD1	0.44	2.95	19	1
1:A:186:LEU:CD1	1:A:193:HIS:CE1	0.44	2.87	20	1
1:A:68:PHE:CB	1:A:73:GLU:CG	0.44	2.96	3	1
1:A:69:GLN:CB	1:A:138:ILE:CD1	0.44	2.91	3	1
1:A:75:TRP:CA	1:A:78:ILE:HG13	0.44	2.42	11	6
1:A:112:GLY:HA2	1:A:199:HIS:CB	0.44	2.42	14	2
1:A:101:ARG:CD	1:A:102:PRO:CD	0.44	2.95	6	1
1:A:125:ASP:OD1	1:A:125:ASP:O	0.44	2.36	6	1
1:A:89:LEU:HG	1:A:156:ILE:CG2	0.44	2.42	8	1
1:A:43:TRP:O	1:A:67:SER:HB3	0.44	2.12	10	1
1:A:157:ARG:HD2	2:A:214:M7G:O3B	0.44	2.12	12	1
1:A:74:PHE:CD2	1:A:95:VAL:HG11	0.44	2.47	13	1
1:A:130:TRP:CD2	1:A:186:LEU:HD21	0.44	2.47	19	1
1:A:84:PRO:HB3	1:A:124:ALA:O	0.44	2.12	20	1
1:A:44:THR:O	1:A:95:VAL:HA	0.44	2.12	8	7
1:A:82:PRO:HB2	1:A:87:LEU:HB3	0.44	1.88	20	4
1:A:101:ARG:O	1:A:101:ARG:HD2	0.44	2.12	1	1
1:A:116:SER:CB	1:A:195:GLU:OE1	0.44	2.65	1	1
1:A:111:LYS:CD	1:A:113:GLY:N	0.44	2.80	6	2
1:A:102:PRO:O	1:A:103:GLU:OE1	0.44	2.35	18	3
1:A:66:THR:CG2	1:A:73:GLU:CG	0.44	2.94	16	3
1:A:134:LEU:HD21	1:A:165:LEU:HD21	0.44	1.89	18	1
1:A:183:LYS:HA	1:A:188:LEU:HD21	0.44	1.89	19	1
1:A:39:LEU:CD2	1:A:70:THR:O	0.44	2.66	1	1
1:A:81:ILE:CG2	1:A:128:GLU:OE2	0.44	2.66	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:130:TRP:HB2	1:A:186:LEU:CD2	0.44	2.43	5	7
1:A:111:LYS:CD	1:A:112:GLY:N	0.44	2.81	9	1
1:A:110:ALA:C	1:A:111:LYS:HD3	0.44	2.38	17	1
1:A:62:LEU:HD21	1:A:94:HIS:CE1	0.44	2.47	18	1
1:A:39:LEU:HD23	1:A:41:THR:H	0.44	1.71	19	1
1:A:193:HIS:HA	1:A:213:LEU:HB3	0.44	1.90	1	3
1:A:58:TRP:CH2	2:A:214:M7G:CM7	0.44	3.00	12	5
1:A:84:PRO:HB2	1:A:161:ASN:CG	0.44	2.37	3	1
1:A:102:PRO:O	1:A:103:GLU:HB3	0.44	2.12	12	5
1:A:184:GLN:O	1:A:187:LYS:N	0.44	2.40	3	8
1:A:97:ARG:C	1:A:98:ASN:CG	0.44	2.84	4	1
1:A:183:LYS:HB2	1:A:194:LEU:CG	0.44	2.42	5	1
1:A:153:VAL:CG2	1:A:166:TRP:CZ2	0.44	2.87	7	1
1:A:83:GLU:HG2	1:A:127:ASP:CG	0.44	2.38	10	1
1:A:103:GLU:CG	1:A:106:ASP:OD2	0.44	2.65	13	1
1:A:101:ARG:HD3	1:A:106:ASP:O	0.44	2.13	19	1
1:A:6:VAL:HG23	1:A:7:SER:N	0.44	2.28	2	1
1:A:83:GLU:HA	1:A:87:LEU:CD2	0.44	2.43	2	1
1:A:66:THR:HG22	1:A:73:GLU:HB3	0.44	1.88	3	1
1:A:101:ARG:HG2	1:A:109:ASN:ND2	0.44	2.28	4	2
1:A:98:ASN:CG	1:A:149:ILE:O	0.44	2.61	5	1
1:A:152:VAL:HG12	1:A:165:LEU:HD13	0.44	1.89	5	1
1:A:111:LYS:HB3	1:A:150:ASN:HB3	0.44	1.90	9	3
1:A:116:SER:HB3	1:A:195:GLU:CB	0.44	2.43	9	1
1:A:96:PHE:HE2	1:A:153:VAL:HG23	0.44	1.72	16	1
1:A:93:TYR:HB2	1:A:154:LEU:HD22	0.44	1.88	18	1
1:A:119:LEU:O	1:A:120:ARG:C	0.44	2.57	18	1
1:A:46:TRP:CZ2	1:A:101:ARG:HD3	0.44	2.48	1	1
1:A:150:ASN:HB3	1:A:168:LYS:CA	0.44	2.43	1	1
1:A:39:LEU:CD1	1:A:69:GLN:HB2	0.44	2.43	2	1
1:A:43:TRP:CB	1:A:68:PHE:C	0.44	2.91	3	1
1:A:111:LYS:C	1:A:168:LYS:HA	0.44	2.38	4	1
1:A:183:LYS:HD2	1:A:193:HIS:O	0.44	2.13	4	1
1:A:97:ARG:O	1:A:97:ARG:HD3	0.44	2.13	6	1
1:A:115:TRP:HB2	1:A:165:LEU:CB	0.44	2.43	8	1
1:A:123:GLY:HA3	1:A:126:ILE:CD1	0.44	2.42	8	2
1:A:183:LYS:HG3	1:A:213:LEU:O	0.44	2.13	9	1
1:A:47:TYR:OH	1:A:65:VAL:CG1	0.44	2.62	13	2
1:A:186:LEU:CD2	1:A:187:LYS:HB2	0.44	2.43	11	1
1:A:58:TRP:CE3	1:A:62:LEU:HD11	0.44	2.48	12	1
1:A:5:GLU:O	1:A:5:GLU:HG2	0.44	2.13	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:SER:HB2	1:A:60:ASP:CG	0.44	2.38	17	2
1:A:210:SER:C	1:A:211:ILE:HG12	0.44	2.37	3	3
1:A:44:THR:OG1	1:A:96:PHE:O	0.44	2.32	6	1
1:A:134:LEU:O	1:A:137:VAL:HB	0.44	2.12	7	3
1:A:49:LYS:CD	1:A:50:PRO:HD2	0.44	2.43	9	1
1:A:211:ILE:HG22	1:A:212:THR:H	0.44	1.73	9	3
1:A:111:LYS:HB2	1:A:167:THR:N	0.44	2.28	12	2
1:A:165:LEU:HD21	1:A:178:ILE:HD11	0.44	1.89	12	1
1:A:108:ALA:N	1:A:111:LYS:HE3	0.44	2.27	14	1
1:A:180:GLY:O	1:A:181:LYS:C	0.44	2.59	15	1
1:A:111:LYS:O	1:A:169:SER:CB	0.44	2.66	19	1
1:A:45:LEU:HA	1:A:95:VAL:CG2	0.44	2.43	1	9
1:A:111:LYS:O	1:A:169:SER:OG	0.44	2.33	1	1
1:A:68:PHE:CG	1:A:73:GLU:HG3	0.44	2.48	2	1
1:A:115:TRP:CE3	1:A:115:TRP:HA	0.44	2.47	3	2
1:A:100:VAL:HG21	1:A:107:GLU:O	0.44	2.12	16	4
1:A:168:LYS:O	1:A:168:LYS:HG3	0.44	2.13	4	2
1:A:78:ILE:HD13	1:A:131:LEU:HB3	0.44	1.90	5	1
1:A:173:GLU:CB	1:A:174:PRO:HD3	0.44	2.42	18	3
1:A:103:GLU:N	1:A:107:GLU:HG2	0.44	2.28	11	2
1:A:84:PRO:CD	1:A:127:ASP:CG	0.44	2.91	14	1
1:A:134:LEU:O	1:A:135:LEU:C	0.44	2.61	19	2
1:A:194:LEU:HD23	1:A:196:PHE:CE2	0.44	2.48	15	1
1:A:43:TRP:CB	1:A:69:GLN:HG3	0.43	2.41	3	1
1:A:108:ALA:O	1:A:112:GLY:HA2	0.43	2.12	11	2
1:A:117:PHE:CE2	1:A:182:PHE:HB3	0.43	2.48	13	2
1:A:50:PRO:HG2	1:A:61:LEU:CG	0.43	2.43	7	1
1:A:104:TRP:CB	2:A:214:M7G:CM7	0.43	2.96	7	1
1:A:48:THR:CG2	1:A:62:LEU:HG	0.43	2.43	18	2
1:A:183:LYS:CD	1:A:188:LEU:HD21	0.43	2.43	9	1
1:A:193:HIS:C	1:A:194:LEU:O	0.43	2.61	11	1
1:A:121:GLY:O	1:A:122:LYS:C	0.43	2.60	12	1
1:A:103:GLU:OE2	1:A:106:ASP:OD2	0.43	2.36	13	1
1:A:157:ARG:O	1:A:160:GLY:N	0.43	2.51	14	1
1:A:39:LEU:CG	1:A:69:GLN:O	0.43	2.66	15	1
1:A:161:ASN:C	1:A:161:ASN:OD1	0.43	2.59	19	1
1:A:117:PHE:CD1	1:A:163:PHE:CD2	0.43	3.06	20	1
1:A:39:LEU:HD21	1:A:70:THR:O	0.43	2.14	1	1
1:A:46:TRP:CH2	1:A:101:ARG:CD	0.43	3.02	1	1
1:A:102:PRO:O	1:A:103:GLU:HB2	0.43	2.12	9	4
1:A:170:GLU:O	1:A:171:ASP:HB3	0.43	2.14	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:188:LEU:CD2	1:A:193:HIS:CE1	0.43	2.94	1	1
1:A:156:ILE:HG12	1:A:161:ASN:CB	0.43	2.42	5	2
1:A:50:PRO:HG2	1:A:61:LEU:CD1	0.43	2.40	16	2
1:A:134:LEU:HD21	1:A:182:PHE:HE1	0.43	1.72	7	1
1:A:82:PRO:HA	1:A:86:GLU:HB3	0.43	1.89	12	2
1:A:93:TYR:HD2	1:A:154:LEU:HD22	0.43	1.64	9	2
1:A:130:TRP:CH2	1:A:182:PHE:CD2	0.43	3.07	2	1
1:A:111:LYS:CD	1:A:150:ASN:HB3	0.43	2.44	4	1
1:A:111:LYS:HD3	1:A:113:GLY:O	0.43	2.13	9	3
1:A:196:PHE:O	1:A:210:SER:HB3	0.43	2.13	11	1
1:A:196:PHE:O	1:A:210:SER:HB2	0.43	2.13	14	2
1:A:99:ASP:CG	1:A:168:LYS:HB3	0.43	2.38	17	1
1:A:153:VAL:HG12	1:A:154:LEU:N	0.43	2.28	4	2
1:A:89:LEU:HD23	1:A:158:LYS:O	0.43	2.14	2	1
1:A:101:ARG:O	1:A:107:GLU:CD	0.43	2.61	3	2
1:A:44:THR:HG1	1:A:46:TRP:NE1	0.43	2.10	5	1
1:A:48:THR:CG2	1:A:61:LEU:HB2	0.43	2.42	5	2
1:A:126:ILE:O	1:A:130:TRP:HB2	0.43	2.13	7	3
1:A:100:VAL:HG21	1:A:106:ASP:O	0.43	2.14	17	2
1:A:167:THR:OG1	1:A:175:LEU:HD21	0.43	2.14	14	1
1:A:43:TRP:CD1	1:A:138:ILE:HD12	0.43	2.48	1	1
1:A:58:TRP:CE2	1:A:62:LEU:CD2	0.43	3.02	19	6
1:A:115:TRP:CZ3	1:A:196:PHE:CA	0.43	3.02	3	1
1:A:101:ARG:HG3	1:A:102:PRO:HD2	0.43	1.89	4	2
1:A:96:PHE:CD1	1:A:96:PHE:C	0.43	2.97	17	4
1:A:90:LYS:C	2:A:214:M7G:O3B	0.43	2.61	7	1
1:A:72:GLU:O	1:A:73:GLU:C	0.43	2.61	13	2
1:A:107:GLU:OE1	1:A:166:TRP:CZ3	0.43	2.72	11	3
1:A:108:ALA:CB	1:A:111:LYS:HZ3	0.43	2.27	8	1
1:A:95:VAL:C	1:A:96:PHE:CD2	0.43	2.97	11	1
1:A:42:LYS:HG2	1:A:42:LYS:O	0.43	2.13	13	1
1:A:43:TRP:HA	1:A:97:ARG:HB2	0.43	1.89	14	2
1:A:89:LEU:H	1:A:89:LEU:HD13	0.43	1.72	14	1
1:A:114:LYS:HB3	1:A:197:PHE:O	0.43	2.13	16	1
1:A:109:ASN:HA	1:A:199:HIS:CB	0.43	2.44	17	1
1:A:101:ARG:HG2	1:A:102:PRO:HD3	0.43	1.90	19	1
1:A:47:TYR:C	1:A:62:LEU:HD23	0.43	2.38	18	3
1:A:64:PRO:O	1:A:65:VAL:CG1	0.43	2.66	1	1
1:A:42:LYS:N	1:A:42:LYS:HD2	0.43	2.29	2	1
1:A:104:TRP:HB3	2:A:214:M7G:CM7	0.43	2.43	7	11
1:A:160:GLY:O	1:A:161:ASN:HB3	0.43	2.14	20	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:42:LYS:HG3	1:A:97:ARG:O	0.43	2.13	3	1
1:A:97:ARG:CZ	1:A:151:GLY:HA2	0.43	2.44	4	1
1:A:162:LYS:HG2	1:A:163:PHE:N	0.43	2.27	5	2
1:A:58:TRP:CE3	2:A:214:M7G:O2A	0.43	2.71	7	1
1:A:199:HIS:CG	1:A:200:SER:N	0.43	2.86	9	2
1:A:130:TRP:O	1:A:134:LEU:HG	0.43	2.13	18	2
1:A:118:GLN:OE1	1:A:195:GLU:OE2	0.43	2.35	15	1
1:A:188:LEU:CB	1:A:193:HIS:NE2	0.43	2.81	17	1
1:A:69:GLN:HG2	1:A:138:ILE:HD12	0.43	1.90	3	1
1:A:84:PRO:CB	1:A:161:ASN:CG	0.43	2.92	3	2
1:A:111:LYS:CA	1:A:168:LYS:HA	0.43	2.44	4	1
1:A:119:LEU:HD23	1:A:160:GLY:HA3	0.43	1.90	4	1
1:A:195:GLU:HA	1:A:211:ILE:O	0.43	2.14	4	2
1:A:130:TRP:CZ2	1:A:163:PHE:CB	0.43	3.02	8	1
1:A:151:GLY:O	1:A:166:TRP:N	0.43	2.51	9	1
1:A:102:PRO:C	1:A:103:GLU:OE2	0.43	2.62	11	1
1:A:81:ILE:C	1:A:84:PRO:HD2	0.43	2.39	12	1
1:A:46:TRP:CH2	1:A:102:PRO:O	0.43	2.72	13	2
1:A:75:TRP:HA	1:A:78:ILE:CD1	0.43	2.44	14	1
1:A:165:LEU:CD2	1:A:178:ILE:HD12	0.43	2.41	14	1
1:A:183:LYS:CD	1:A:188:LEU:HD11	0.43	2.43	14	1
1:A:101:ARG:HG2	1:A:102:PRO:CD	0.43	2.44	19	1
1:A:106:ASP:O	1:A:108:ALA:N	0.43	2.52	15	4
1:A:84:PRO:O	1:A:85:HIS:HB3	0.43	2.14	12	2
1:A:81:ILE:O	1:A:86:GLU:OE1	0.43	2.37	9	1
1:A:129:LEU:C	1:A:185:VAL:HG13	0.43	2.39	11	1
1:A:175:LEU:O	1:A:178:ILE:HG12	0.43	2.14	20	7
1:A:130:TRP:CE3	1:A:186:LEU:CD2	0.43	3.01	13	1
1:A:118:GLN:O	1:A:193:HIS:HB3	0.43	2.14	14	1
1:A:193:HIS:O	1:A:195:GLU:CG	0.43	2.67	14	1
1:A:71:VAL:HG23	1:A:72:GLU:N	0.43	2.28	18	1
1:A:116:SER:HB3	1:A:195:GLU:OE1	0.43	2.13	1	1
1:A:58:TRP:NE1	1:A:62:LEU:HD23	0.43	2.28	2	3
1:A:43:TRP:HB3	1:A:69:GLN:CG	0.43	2.41	3	1
1:A:196:PHE:CZ	1:A:213:LEU:HD11	0.43	2.49	4	1
1:A:102:PRO:HD2	1:A:106:ASP:CB	0.43	2.44	5	1
1:A:39:LEU:HG	1:A:70:THR:HA	0.43	1.91	9	2
1:A:83:GLU:CG	1:A:93:TYR:CE2	0.43	3.02	12	1
1:A:99:ASP:HB2	1:A:150:ASN:HB3	0.43	1.91	14	1
1:A:165:LEU:CD2	1:A:178:ILE:CD1	0.43	2.96	14	1
1:A:133:THR:HB	1:A:182:PHE:CZ	0.43	2.48	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:TYR:HE2	1:A:65:VAL:HG21	0.43	1.68	1	3
1:A:107:GLU:CG	1:A:166:TRP:CE3	0.43	3.02	1	1
1:A:135:LEU:O	1:A:138:ILE:HG13	0.43	2.13	2	1
1:A:111:LYS:HD2	1:A:166:TRP:HA	0.43	1.91	3	2
1:A:154:LEU:HG	1:A:163:PHE:CD1	0.43	2.49	8	2
1:A:42:LYS:O	1:A:42:LYS:CG	0.43	2.67	13	3
1:A:66:THR:HG21	1:A:73:GLU:HB2	0.43	1.90	6	1
1:A:92:ASP:OD2	1:A:155:SER:HB3	0.43	2.13	7	3
1:A:108:ALA:CB	1:A:111:LYS:HE2	0.43	2.43	7	1
1:A:100:VAL:HG11	1:A:107:GLU:CG	0.43	2.44	8	1
1:A:48:THR:CB	1:A:92:ASP:HB2	0.43	2.44	9	1
1:A:126:ILE:HG22	1:A:186:LEU:HB2	0.43	1.91	11	1
1:A:112:GLY:HA2	1:A:199:HIS:HB3	0.43	1.91	14	2
1:A:183:LYS:HB2	1:A:194:LEU:HD21	0.43	1.91	14	1
1:A:45:LEU:CD1	1:A:95:VAL:HG23	0.43	2.43	15	1
1:A:85:HIS:HB2	1:A:123:GLY:C	0.43	2.38	17	1
1:A:199:HIS:O	1:A:200:SER:C	0.43	2.59	17	1
1:A:75:TRP:O	1:A:79:GLN:N	0.42	2.51	13	4
1:A:102:PRO:HG2	1:A:106:ASP:C	0.42	2.39	1	1
1:A:203:ASN:OD1	1:A:203:ASN:C	0.42	2.62	1	1
1:A:50:PRO:HD2	1:A:90:LYS:O	0.42	2.13	4	1
1:A:169:SER:O	1:A:170:GLU:HG3	0.42	2.15	4	1
1:A:81:ILE:O	1:A:86:GLU:HB3	0.42	2.14	9	1
1:A:94:HIS:CE1	1:A:153:VAL:HG11	0.42	2.48	11	2
1:A:111:LYS:HE3	1:A:168:LYS:CD	0.42	2.44	11	1
1:A:85:HIS:CB	1:A:123:GLY:C	0.42	2.91	17	1
1:A:183:LYS:HG3	1:A:188:LEU:CD2	0.42	2.44	17	1
1:A:188:LEU:HD21	1:A:193:HIS:HA	0.42	1.91	18	1
1:A:83:GLU:HB2	1:A:127:ASP:CG	0.42	2.38	20	1
1:A:106:ASP:O	1:A:109:ASN:HB3	0.42	2.14	1	1
1:A:161:ASN:O	1:A:162:LYS:HG2	0.42	2.14	10	4
1:A:171:ASP:O	1:A:174:PRO:HG2	0.42	2.15	9	9
1:A:82:PRO:O	1:A:87:LEU:HG	0.42	2.14	2	1
1:A:114:LYS:HA	1:A:165:LEU:O	0.42	2.14	4	2
1:A:84:PRO:CA	1:A:127:ASP:HB2	0.42	2.43	6	1
1:A:126:ILE:CG2	1:A:186:LEU:HA	0.42	2.36	11	2
1:A:111:LYS:HG3	1:A:113:GLY:O	0.42	2.15	15	2
1:A:126:ILE:HG22	1:A:187:LYS:HB2	0.42	1.91	7	1
1:A:57:SER:OG	1:A:60:ASP:OD2	0.42	2.36	8	1
1:A:111:LYS:HA	1:A:168:LYS:HA	0.42	1.91	15	2
1:A:83:GLU:HG2	1:A:84:PRO:HD2	0.42	1.91	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:SER:HB2	1:A:60:ASP:OD2	0.42	2.15	13	1
1:A:166:TRP:O	1:A:167:THR:HG23	0.42	2.15	14	1
1:A:193:HIS:O	1:A:194:LEU:HD13	0.42	2.14	15	1
1:A:148:GLN:CG	1:A:170:GLU:CB	0.42	2.98	1	1
1:A:171:ASP:O	1:A:175:LEU:HG	0.42	2.14	1	5
1:A:87:LEU:HD13	1:A:91:SER:HB2	0.42	1.89	2	2
1:A:171:ASP:N	1:A:171:ASP:OD1	0.42	2.49	4	2
1:A:87:LEU:HD22	1:A:156:ILE:HD12	0.42	1.90	5	1
1:A:197:PHE:CD2	1:A:201:SER:CB	0.42	3.03	5	1
1:A:132:ARG:O	1:A:136:ALA:HB3	0.42	2.15	10	1
1:A:180:GLY:HA2	1:A:194:LEU:CD1	0.42	2.44	10	1
1:A:58:TRP:CZ3	1:A:62:LEU:HD11	0.42	2.49	12	1
1:A:111:LYS:O	1:A:169:SER:HB2	0.42	2.14	19	2
1:A:108:ALA:O	1:A:111:LYS:HE2	0.42	2.14	16	1
1:A:76:ALA:C	1:A:78:ILE:N	0.42	2.76	19	1
1:A:150:ASN:ND2	1:A:167:THR:O	0.42	2.42	1	1
1:A:135:LEU:CG	1:A:136:ALA:N	0.42	2.82	10	7
1:A:43:TRP:CD1	1:A:69:GLN:CB	0.42	3.02	3	1
1:A:74:PHE:CE1	1:A:78:ILE:HD11	0.42	2.49	4	1
1:A:178:ILE:O	1:A:182:PHE:CD2	0.42	2.72	6	1
1:A:116:SER:HB3	1:A:162:LYS:CE	0.42	2.43	8	1
1:A:87:LEU:CG	1:A:88:PRO:HD2	0.42	2.45	11	2
1:A:194:LEU:HB2	1:A:213:LEU:HB2	0.42	1.91	14	1
1:A:44:THR:CG2	1:A:67:SER:HB3	0.42	2.41	15	1
1:A:48:THR:HG22	1:A:61:LEU:CB	0.42	2.41	15	1
1:A:100:VAL:HG13	1:A:107:GLU:CG	0.42	2.36	16	1
1:A:196:PHE:CG	1:A:211:ILE:HB	0.42	2.49	16	1
1:A:193:HIS:HA	1:A:213:LEU:C	0.42	2.39	3	5
1:A:115:TRP:CE3	1:A:115:TRP:CA	0.42	3.02	18	8
1:A:83:GLU:O	1:A:127:ASP:OD2	0.42	2.36	5	1
1:A:156:ILE:C	1:A:157:ARG:CG	0.42	2.89	5	1
2:A:214:M7G:O2A	2:A:214:M7G:O4'	0.42	2.37	7	1
1:A:196:PHE:O	1:A:197:PHE:CD1	0.42	2.72	8	1
1:A:109:ASN:OD1	1:A:203:ASN:CG	0.42	2.63	9	1
1:A:148:GLN:HG2	1:A:168:LYS:CE	0.42	2.45	10	1
1:A:44:THR:HA	1:A:67:SER:CB	0.42	2.45	13	2
1:A:5:GLU:O	1:A:6:VAL:C	0.42	2.63	15	1
1:A:68:PHE:HB2	1:A:73:GLU:OE1	0.42	2.13	15	1
1:A:8:LYS:HG3	1:A:9:LYS:N	0.42	2.29	16	1
1:A:60:ASP:C	1:A:61:LEU:HD13	0.42	2.38	16	1
1:A:68:PHE:CZ	1:A:74:PHE:N	0.42	2.88	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:157:ARG:HD2	1:A:160:GLY:O	0.42	2.14	16	1
1:A:183:LYS:CE	1:A:188:LEU:HD11	0.42	2.45	17	1
1:A:85:HIS:HB3	1:A:123:GLY:C	0.42	2.40	19	1
1:A:49:LYS:HB2	1:A:50:PRO:HD3	0.42	1.91	1	3
1:A:42:LYS:N	1:A:42:LYS:CD	0.42	2.82	2	1
1:A:193:HIS:HB2	1:A:213:LEU:HB3	0.42	1.92	5	4
1:A:111:LYS:HE2	1:A:113:GLY:O	0.42	2.15	5	1
1:A:195:GLU:OE1	1:A:212:THR:CG2	0.42	2.68	8	1
1:A:84:PRO:HG3	1:A:126:ILE:HG12	0.42	1.92	9	1
1:A:6:VAL:O	1:A:8:LYS:N	0.42	2.53	14	1
1:A:111:LYS:HB3	1:A:150:ASN:OD1	0.42	2.14	14	1
1:A:66:THR:HG21	1:A:73:GLU:HG2	0.42	1.91	16	1
1:A:68:PHE:CE1	1:A:73:GLU:HB3	0.42	2.49	16	1
1:A:58:TRP:CH2	1:A:92:ASP:OD2	0.42	2.73	20	1
1:A:156:ILE:O	1:A:157:ARG:HB2	0.42	2.14	2	1
1:A:100:VAL:HB	1:A:150:ASN:OD1	0.42	2.15	13	2
1:A:58:TRP:N	1:A:61:LEU:HD22	0.42	2.28	7	1
1:A:46:TRP:CE3	1:A:102:PRO:O	0.42	2.72	9	1
1:A:134:LEU:CD2	1:A:152:VAL:HG11	0.42	2.44	10	1
1:A:210:SER:C	1:A:211:ILE:HG13	0.42	2.39	11	1
1:A:148:GLN:HB3	1:A:170:GLU:CD	0.42	2.40	13	1
1:A:183:LYS:HG3	1:A:193:HIS:O	0.42	2.15	15	1
1:A:117:PHE:O	1:A:162:LYS:HG3	0.42	2.15	18	1
1:A:115:TRP:O	1:A:117:PHE:CE1	0.42	2.73	19	1
1:A:76:ALA:O	1:A:79:GLN:HB2	0.42	2.15	4	8
1:A:96:PHE:CD2	1:A:107:GLU:OE1	0.42	2.73	20	2
1:A:99:ASP:HB3	1:A:150:ASN:CB	0.42	2.44	8	1
1:A:171:ASP:HB3	1:A:174:PRO:CD	0.42	2.45	10	1
1:A:83:GLU:OE1	1:A:83:GLU:CA	0.42	2.67	11	1
1:A:116:SER:OG	1:A:162:LYS:HE2	0.42	2.15	11	1
1:A:111:LYS:HD2	1:A:166:TRP:CA	0.42	2.45	18	1
1:A:115:TRP:NE1	1:A:175:LEU:HB3	0.42	2.29	18	1
1:A:162:LYS:HG3	1:A:163:PHE:N	0.42	2.30	18	1
1:A:153:VAL:CG1	1:A:154:LEU:N	0.42	2.82	4	2
1:A:96:PHE:HB2	1:A:151:GLY:HA3	0.42	1.90	19	2
1:A:100:VAL:HG22	1:A:101:ARG:HB2	0.42	1.92	9	1
1:A:69:GLN:O	1:A:69:GLN:CD	0.42	2.63	10	1
1:A:83:GLU:HG2	1:A:127:ASP:HB2	0.42	1.92	10	1
1:A:193:HIS:N	1:A:213:LEU:C	0.42	2.78	11	2
1:A:108:ALA:HB1	1:A:113:GLY:CA	0.42	2.45	17	1
1:A:111:LYS:HD3	1:A:166:TRP:HB3	0.42	1.92	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:120:ARG:HD3	1:A:121:GLY:N	0.42	2.29	18	1
1:A:115:TRP:O	1:A:117:PHE:CZ	0.42	2.73	19	1
1:A:39:LEU:HD13	1:A:139:GLY:CA	0.42	2.44	20	1
1:A:83:GLU:CD	1:A:131:LEU:HD11	0.42	2.39	5	1
1:A:115:TRP:HB3	1:A:165:LEU:HD13	0.42	1.92	10	1
1:A:39:LEU:HB3	1:A:138:ILE:O	0.42	2.15	11	1
1:A:92:ASP:OD1	1:A:155:SER:HB3	0.42	2.14	11	3
1:A:99:ASP:OD2	1:A:149:ILE:O	0.42	2.37	11	1
1:A:106:ASP:O	1:A:109:ASN:CB	0.41	2.67	1	1
1:A:101:ARG:HB2	1:A:107:GLU:N	0.41	2.30	3	1
1:A:148:GLN:HB3	1:A:170:GLU:OE1	0.41	2.15	4	1
1:A:101:ARG:HD2	1:A:102:PRO:HD2	0.41	1.92	6	1
1:A:111:LYS:HB2	1:A:167:THR:C	0.41	2.40	20	2
1:A:101:ARG:HG3	1:A:102:PRO:HD3	0.41	1.92	9	1
1:A:117:PHE:CD2	1:A:194:LEU:HG	0.41	2.50	9	1
1:A:4:GLU:HA	1:A:4:GLU:OE1	0.41	2.14	14	1
1:A:109:ASN:OD1	1:A:203:ASN:HB3	0.41	2.15	17	1
1:A:183:LYS:HE3	1:A:188:LEU:HD11	0.41	1.91	17	1
1:A:111:LYS:C	1:A:167:THR:O	0.41	2.62	18	1
1:A:119:LEU:HD21	1:A:186:LEU:HB3	0.41	1.91	18	1
1:A:116:SER:CB	1:A:195:GLU:CG	0.41	2.98	1	1
1:A:157:ARG:NH2	2:A:214:M7G:O3A	0.41	2.53	1	1
1:A:104:TRP:HB3	2:A:214:M7G:O6	0.41	2.15	13	3
1:A:183:LYS:CD	1:A:194:LEU:HB2	0.41	2.44	8	1
1:A:105:GLU:CD	2:A:214:M7G:N2	0.41	2.78	9	1
1:A:74:PHE:CE2	1:A:131:LEU:HD23	0.41	2.50	10	1
1:A:87:LEU:CD2	1:A:91:SER:OG	0.41	2.68	14	1
1:A:194:LEU:CB	1:A:213:LEU:HD13	0.41	2.44	17	1
1:A:102:PRO:O	1:A:103:GLU:HG3	0.41	2.15	1	1
1:A:112:GLY:HA3	1:A:167:THR:O	0.41	2.15	17	2
1:A:83:GLU:CD	1:A:154:LEU:CD1	0.41	2.94	4	1
1:A:111:LYS:HG3	1:A:150:ASN:ND2	0.41	2.30	4	1
1:A:95:VAL:O	1:A:96:PHE:HB3	0.41	2.16	6	3
1:A:68:PHE:HB3	1:A:73:GLU:OE1	0.41	2.16	7	1
1:A:112:GLY:O	1:A:199:HIS:CD2	0.41	2.74	7	1
1:A:163:PHE:CE1	1:A:164:ALA:C	0.41	2.98	7	1
1:A:116:SER:CB	1:A:162:LYS:HE2	0.41	2.45	8	1
1:A:92:ASP:HB3	1:A:94:HIS:NE2	0.41	2.30	9	2
1:A:183:LYS:CD	1:A:213:LEU:O	0.41	2.68	9	1
1:A:83:GLU:HG2	1:A:84:PRO:CD	0.41	2.45	10	1
1:A:156:ILE:HG23	1:A:160:GLY:O	0.41	2.14	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:111:LYS:HE3	1:A:113:GLY:C	0.41	2.40	12	2
1:A:196:PHE:HB2	1:A:211:ILE:CB	0.41	2.45	16	1
1:A:133:THR:HG21	1:A:182:PHE:CE1	0.41	2.49	20	1
1:A:109:ASN:O	1:A:111:LYS:HG2	0.41	2.16	1	1
1:A:154:LEU:O	1:A:155:SER:OG	0.41	2.38	16	2
1:A:93:TYR:CD1	1:A:94:HIS:N	0.41	2.88	2	1
1:A:58:TRP:CE2	2:A:214:M7G:C6	0.41	3.03	3	2
1:A:93:TYR:CE2	1:A:154:LEU:HD13	0.41	2.50	3	1
1:A:94:HIS:CB	1:A:96:PHE:CE2	0.41	3.03	6	1
1:A:149:ILE:HD11	1:A:170:GLU:OE2	0.41	2.14	6	1
1:A:116:SER:CA	1:A:163:PHE:O	0.41	2.68	7	1
1:A:161:ASN:O	1:A:162:LYS:HG3	0.41	2.16	9	2
1:A:102:PRO:C	1:A:103:GLU:HG2	0.41	2.41	15	1
1:A:90:LYS:O	1:A:90:LYS:HG2	0.41	2.15	1	1
1:A:100:VAL:HG11	1:A:110:ALA:CB	0.41	2.43	1	1
1:A:40:ASN:ND2	1:A:41:THR:HB	0.41	2.30	2	1
1:A:83:GLU:HG2	1:A:154:LEU:HD11	0.41	1.93	2	1
1:A:47:TYR:CD1	1:A:63:ARG:HB2	0.41	2.50	7	1
1:A:79:GLN:O	1:A:81:ILE:HG12	0.41	2.16	9	1
1:A:82:PRO:HB2	1:A:87:LEU:CD2	0.41	2.46	10	1
1:A:148:GLN:HG2	1:A:168:LYS:HE2	0.41	1.92	10	1
1:A:84:PRO:HD3	1:A:127:ASP:CG	0.41	2.40	14	1
1:A:108:ALA:HB1	1:A:113:GLY:HA2	0.41	1.90	17	1
1:A:58:TRP:CZ2	1:A:62:LEU:HD12	0.41	2.50	1	1
1:A:118:GLN:HB2	1:A:162:LYS:CE	0.41	2.45	4	1
1:A:47:TYR:CE1	1:A:65:VAL:HG21	0.41	2.50	6	1
1:A:85:HIS:CB	1:A:123:GLY:HA3	0.41	2.46	7	1
1:A:83:GLU:OE2	1:A:127:ASP:CB	0.41	2.68	8	1
1:A:39:LEU:CD2	1:A:71:VAL:CG1	0.41	2.83	9	1
1:A:149:ILE:N	1:A:149:ILE:HD13	0.41	2.30	14	1
1:A:78:ILE:O	1:A:79:GLN:C	0.41	2.62	19	3
1:A:43:TRP:HA	1:A:96:PHE:O	0.41	2.16	9	1
1:A:106:ASP:HA	1:A:109:ASN:CB	0.41	2.46	11	2
1:A:193:HIS:CD2	1:A:194:LEU:HD12	0.41	2.50	12	1
1:A:74:PHE:CE2	1:A:135:LEU:HD22	0.41	2.49	15	1
1:A:119:LEU:CG	1:A:188:LEU:CB	0.41	2.99	15	1
1:A:96:PHE:CE2	1:A:153:VAL:HG23	0.41	2.50	16	1
1:A:89:LEU:HB3	1:A:157:ARG:C	0.41	2.41	18	1
1:A:193:HIS:HA	1:A:213:LEU:O	0.41	2.14	19	1
1:A:111:LYS:HE3	1:A:166:TRP:CG	0.41	2.51	20	1
1:A:73:GLU:OE1	1:A:73:GLU:HA	0.41	2.16	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:196:PHE:CB	1:A:210:SER:HB2	0.41	2.46	1	1
1:A:41:THR:O	1:A:43:TRP:CD1	0.41	2.74	3	1
1:A:114:LYS:O	1:A:197:PHE:CB	0.41	2.69	4	1
1:A:124:ALA:O	1:A:125:ASP:HB2	0.41	2.16	4	1
1:A:179:GLY:C	1:A:194:LEU:CD1	0.41	2.90	4	1
1:A:101:ARG:HB3	1:A:106:ASP:C	0.41	2.39	5	1
1:A:187:LYS:O	1:A:188:LEU:HG	0.41	2.16	11	1
1:A:39:LEU:HD23	1:A:39:LEU:H	0.41	1.71	14	1
1:A:39:LEU:HB3	1:A:139:GLY:HA2	0.41	1.92	14	1
1:A:85:HIS:O	1:A:85:HIS:ND1	0.41	2.54	14	1
1:A:130:TRP:CA	1:A:185:VAL:CG1	0.41	2.99	14	1
1:A:157:ARG:CD	2:A:214:M7G:O2B	0.41	2.69	14	1
1:A:43:TRP:HB3	1:A:97:ARG:HA	0.41	1.93	16	1
1:A:97:ARG:O	1:A:97:ARG:HG3	0.41	2.16	17	1
1:A:130:TRP:HA	1:A:185:VAL:CG1	0.41	2.46	19	1
1:A:83:GLU:HB2	1:A:127:ASP:OD1	0.41	2.15	20	1
1:A:111:LYS:HA	1:A:168:LYS:CA	0.41	2.44	20	1
1:A:84:PRO:C	1:A:123:GLY:O	0.41	2.63	2	1
1:A:43:TRP:CD1	1:A:69:GLN:HG3	0.41	2.50	3	1
1:A:43:TRP:CH2	1:A:138:ILE:CG2	0.41	3.04	6	1
1:A:39:LEU:HB2	1:A:69:GLN:C	0.41	2.40	7	1
1:A:115:TRP:HA	1:A:195:GLU:O	0.41	2.16	7	1
1:A:39:LEU:HD12	1:A:40:ASN:H	0.41	1.75	8	1
1:A:58:TRP:CE2	1:A:62:LEU:HD12	0.41	2.51	9	1
1:A:87:LEU:CD1	1:A:89:LEU:CA	0.41	2.99	9	1
1:A:39:LEU:CD2	1:A:70:THR:HA	0.41	2.46	10	1
1:A:41:THR:CG2	1:A:97:ARG:CD	0.41	2.95	10	1
1:A:111:LYS:HE3	1:A:168:LYS:CG	0.41	2.45	11	1
1:A:148:GLN:HB3	1:A:168:LYS:CD	0.41	2.45	11	1
1:A:173:GLU:HB2	1:A:174:PRO:HD3	0.41	1.93	11	1
1:A:83:GLU:HA	1:A:87:LEU:HD23	0.41	1.91	12	1
1:A:41:THR:O	1:A:69:GLN:HG2	0.41	2.11	14	1
1:A:130:TRP:CZ3	1:A:134:LEU:HD11	0.41	2.51	15	2
1:A:115:TRP:CB	1:A:165:LEU:HD23	0.41	2.46	16	1
1:A:118:GLN:O	1:A:119:LEU:HD12	0.41	2.16	16	1
1:A:176:LEU:HG	1:A:211:ILE:CD1	0.41	2.43	17	1
1:A:134:LEU:HD21	1:A:165:LEU:CD1	0.41	2.45	18	1
1:A:127:ASP:O	1:A:131:LEU:CG	0.41	2.69	19	1
1:A:68:PHE:HB2	1:A:73:GLU:HG3	0.41	1.91	3	1
1:A:172:LYS:O	1:A:175:LEU:N	0.41	2.54	3	1
1:A:111:LYS:HG3	1:A:150:ASN:CB	0.41	2.45	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:114:LYS:O	1:A:114:LYS:HG2	0.41	2.15	4	1
1:A:116:SER:CB	1:A:195:GLU:CB	0.41	2.99	6	1
1:A:58:TRP:O	1:A:62:LEU:HB3	0.41	2.16	8	1
1:A:153:VAL:HB	1:A:164:ALA:O	0.41	2.16	9	1
1:A:183:LYS:O	1:A:186:LEU:HG	0.41	2.15	10	1
1:A:83:GLU:O	1:A:156:ILE:CD1	0.41	2.69	16	1
1:A:79:GLN:O	1:A:81:ILE:HG13	0.40	2.15	3	1
1:A:94:HIS:HB3	1:A:153:VAL:HA	0.40	1.93	3	1
1:A:119:LEU:C	1:A:119:LEU:CD2	0.40	2.92	4	1
1:A:43:TRP:NE1	1:A:69:GLN:HA	0.40	2.31	9	1
1:A:74:PHE:CE1	1:A:95:VAL:HG11	0.40	2.51	10	1
1:A:107:GLU:C	1:A:111:LYS:HE3	0.40	2.41	14	1
1:A:110:ALA:O	1:A:111:LYS:CD	0.40	2.69	17	1
1:A:199:HIS:C	1:A:201:SER:N	0.40	2.78	17	1
1:A:148:GLN:NE2	1:A:174:PRO:CB	0.40	2.84	18	1
1:A:40:ASN:O	1:A:40:ASN:CG	0.40	2.64	19	1
1:A:193:HIS:CA	1:A:213:LEU:O	0.40	2.69	19	1
1:A:10:PHE:O	1:A:10:PHE:CD1	0.40	2.75	20	1
1:A:97:ARG:CG	1:A:101:ARG:NE	0.40	2.84	1	1
1:A:196:PHE:HB2	1:A:210:SER:HB2	0.40	1.93	1	1
1:A:69:GLN:CD	1:A:138:ILE:HD12	0.40	2.40	3	1
1:A:82:PRO:HA	1:A:87:LEU:HB3	0.40	1.92	7	1
1:A:103:GLU:HA	1:A:107:GLU:OE2	0.40	2.16	8	1
1:A:49:LYS:CB	1:A:50:PRO:HD2	0.40	2.46	9	1
1:A:112:GLY:O	1:A:199:HIS:ND1	0.40	2.53	9	1
1:A:100:VAL:CG2	1:A:107:GLU:O	0.40	2.69	16	1
1:A:199:HIS:O	1:A:203:ASN:HB2	0.40	2.16	19	1
1:A:116:SER:CB	1:A:195:GLU:CD	0.40	2.93	1	1
1:A:200:SER:HA	1:A:203:ASN:OD1	0.40	2.15	1	1
1:A:96:PHE:C	1:A:97:ARG:HG3	0.40	2.41	2	1
1:A:7:SER:O	1:A:7:SER:OG	0.40	2.35	5	1
1:A:196:PHE:HB2	1:A:210:SER:HB3	0.40	1.92	5	1
1:A:101:ARG:HD3	1:A:102:PRO:HD3	0.40	1.93	6	1
1:A:111:LYS:HA	1:A:150:ASN:CB	0.40	2.47	7	1
1:A:161:ASN:C	1:A:162:LYS:HG2	0.40	2.40	7	1
1:A:43:TRP:CD2	1:A:68:PHE:O	0.40	2.75	9	1
1:A:46:TRP:O	1:A:94:HIS:HB2	0.40	2.16	9	1
1:A:62:LEU:HD23	1:A:62:LEU:HA	0.40	1.72	11	1
1:A:162:LYS:CG	1:A:163:PHE:N	0.40	2.85	11	2
1:A:202:ALA:O	1:A:203:ASN:HB3	0.40	2.16	12	1
1:A:3:VAL:O	1:A:4:GLU:CB	0.40	2.65	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:TRP:HA	1:A:78:ILE:CG1	0.40	2.46	15	1
1:A:87:LEU:HD11	1:A:156:ILE:HG21	0.40	1.92	19	1
1:A:8:LYS:O	1:A:10:PHE:N	0.40	2.53	2	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:73:GLU:HB2	0.40	2.52	2	1
1:A:148:GLN:HG2	1:A:168:LYS:HD2	0.40	1.94	2	1
1:A:3:VAL:HG23	1:A:4:GLU:N	0.40	2.31	4	1
1:A:58:TRP:NE1	2:A:214:M7G:N1	0.40	2.69	5	1
1:A:123:GLY:N	1:A:126:ILE:CD1	0.40	2.78	5	1
1:A:114:LYS:CE	1:A:197:PHE:CD2	0.40	3.04	6	1
1:A:131:LEU:O	1:A:135:LEU:HG	0.40	2.17	10	1
1:A:164:ALA:C	1:A:165:LEU:CG	0.40	2.95	10	1
1:A:180:GLY:O	1:A:183:LYS:HB3	0.40	2.16	17	1
1:A:117:PHE:O	1:A:162:LYS:CA	0.40	2.69	18	1
1:A:170:GLU:OE2	1:A:175:LEU:HD23	0.40	2.17	1	1
1:A:125:ASP:O	1:A:129:LEU:HD22	0.40	2.15	2	1
1:A:184:GLN:C	1:A:186:LEU:N	0.40	2.79	2	1
1:A:39:LEU:HG	1:A:70:THR:N	0.40	2.32	4	1
1:A:211:ILE:C	1:A:212:THR:CG2	0.40	2.94	4	1
1:A:163:PHE:CD2	1:A:163:PHE:N	0.40	2.88	6	1
1:A:94:HIS:CG	1:A:153:VAL:HG13	0.40	2.51	9	1
1:A:39:LEU:CD1	1:A:43:TRP:CZ2	0.40	3.04	10	1
1:A:130:TRP:O	1:A:134:LEU:HD12	0.40	2.16	11	1
1:A:126:ILE:HA	1:A:129:LEU:HD22	0.40	1.94	12	1
1:A:111:LYS:CE	1:A:166:TRP:HB3	0.40	2.46	14	1
1:A:83:GLU:HG3	1:A:127:ASP:HB2	0.40	1.92	16	1
1:A:84:PRO:HD3	1:A:127:ASP:CB	0.40	2.47	16	1
1:A:84:PRO:HD3	1:A:127:ASP:HB2	0.40	1.93	16	1
1:A:106:ASP:CA	1:A:109:ASN:HB2	0.40	2.46	17	1
1:A:108:ALA:C	1:A:199:HIS:HB3	0.40	2.42	17	1
1:A:122:LYS:HD3	1:A:126:ILE:HD11	0.40	1.94	17	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	159/213 (75%)	104±3 (65±2%)	36±4 (23±2%)	19±3 (12±2%)	1	7
All	All	3180/4260 (75%)	2079 (65%)	716 (23%)	385 (12%)	1	7

All 55 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	65	VAL	20
1	A	66	THR	20
1	A	89	LEU	20
1	A	100	VAL	20
1	A	170	GLU	14
1	A	101	ARG	13
1	A	39	LEU	13
1	A	149	ILE	13
1	A	40	ASN	12
1	A	124	ALA	12
1	A	49	LYS	11
1	A	50	PRO	11
1	A	169	SER	11
1	A	171	ASP	11
1	A	102	PRO	11
1	A	160	GLY	11
1	A	97	ARG	10
1	A	83	GLU	10
1	A	125	ASP	9
1	A	122	LYS	8
1	A	123	GLY	8
1	A	203	ASN	7
1	A	3	VAL	7
1	A	82	PRO	7
1	A	211	ILE	5
1	A	6	VAL	5
1	A	157	ARG	5
1	A	193	HIS	5
1	A	11	GLU	5
1	A	96	PHE	5
1	A	188	LEU	5
1	A	194	LEU	5
1	A	57	SER	5
1	A	5	GLU	4
1	A	103	GLU	4
1	A	139	GLY	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	99	ASP	4
1	A	121	GLY	4
1	A	90	LYS	4
1	A	8	LYS	3
1	A	148	GLN	3
1	A	7	SER	3
1	A	158	LYS	3
1	A	111	LYS	2
1	A	98	ASN	2
1	A	168	LYS	2
1	A	70	THR	1
1	A	71	VAL	1
1	A	106	ASP	1
1	A	161	ASN	1
1	A	10	PHE	1
1	A	112	GLY	1
1	A	202	ALA	1
1	A	104	TRP	1
1	A	200	SER	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	143/191 (75%)	90±4 (63±3%)	53±4 (37±3%)	0	7
All	All	2860/3820 (75%)	1791 (63%)	1069 (37%)	0	7

All 117 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	48	THR	20
1	A	59	SER	20
1	A	78	ILE	20
1	A	81	ILE	20
1	A	104	TRP	20
1	A	137	VAL	20

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	184	GLN	20
1	A	200	SER	20
1	A	67	SER	19
1	A	69	GLN	19
1	A	165	LEU	19
1	A	129	LEU	18
1	A	183	LYS	18
1	A	150	ASN	17
1	A	57	SER	16
1	A	188	LEU	16
1	A	211	ILE	16
1	A	213	LEU	16
1	A	122	LYS	15
1	A	154	LEU	15
1	A	169	SER	15
1	A	158	LYS	15
1	A	49	LYS	14
1	A	111	LYS	14
1	A	79	GLN	13
1	A	86	GLU	13
1	A	92	ASP	13
1	A	97	ARG	13
1	A	103	GLU	13
1	A	117	PHE	13
1	A	155	SER	13
1	A	187	LYS	13
1	A	8	LYS	12
1	A	11	GLU	12
1	A	87	LEU	12
1	A	116	SER	12
1	A	132	ARG	12
1	A	178	ILE	12
1	A	101	ARG	12
1	A	39	LEU	11
1	A	91	SER	11
1	A	172	LYS	11
1	A	173	GLU	11
1	A	119	LEU	11
1	A	115	TRP	11
1	A	5	GLU	10
1	A	7	SER	10
1	A	83	GLU	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	89	LEU	10
1	A	128	GLU	10
1	A	194	LEU	10
1	A	4	GLU	10
1	A	40	ASN	10
1	A	62	LEU	10
1	A	9	LYS	10
1	A	99	ASP	10
1	A	149	ILE	10
1	A	157	ARG	10
1	A	131	LEU	9
1	A	148	GLN	9
1	A	210	SER	9
1	A	171	ASP	9
1	A	42	LYS	8
1	A	168	LYS	8
1	A	127	ASP	8
1	A	170	GLU	8
1	A	96	PHE	7
1	A	105	GLU	7
1	A	125	ASP	7
1	A	181	LYS	7
1	A	75	TRP	7
1	A	114	LYS	6
1	A	47	TYR	6
1	A	201	SER	6
1	A	120	ARG	6
1	A	130	TRP	6
1	A	63	ARG	6
1	A	95	VAL	6
1	A	133	THR	6
1	A	177	ARG	6
1	A	85	HIS	5
1	A	90	LYS	5
1	A	109	ASN	5
1	A	195	GLU	5
1	A	66	THR	5
1	A	73	GLU	5
1	A	162	LYS	5
1	A	197	PHE	5
1	A	93	TYR	4
1	A	193	HIS	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	10	PHE	4
1	A	94	HIS	4
1	A	186	LEU	4
1	A	61	LEU	4
1	A	203	ASN	4
1	A	118	GLN	4
1	A	98	ASN	3
1	A	100	VAL	3
1	A	60	ASP	2
1	A	107	GLU	2
1	A	43	TRP	2
1	A	65	VAL	2
1	A	135	LEU	2
1	A	72	GLU	2
1	A	167	THR	2
1	A	175	LEU	2
1	A	163	PHE	2
1	A	41	THR	1
1	A	68	PHE	1
1	A	138	ILE	1
1	A	70	THR	1
1	A	45	LEU	1
1	A	161	ASN	1
1	A	77	ILE	1
1	A	182	PHE	1
1	A	156	ILE	1
1	A	74	PHE	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates ⓘ

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry

1 ligand is modelled in this entry.

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths		
					Counts	RMSZ	#Z>2
2	M7G	A	214	-	30,31,31	0.84±0.01	1±0 (4±1%)

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
2	M7G	A	214	-	47,49,49	1.26±0.00	6±0 (12±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
2	M7G	A	214	-	-	0±0,16,32,32	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
2	A	214	M7G	C8-N7	2.53	1.28	1.33	8	20
2	A	214	M7G	PB-O2B	2.01	1.47	1.54	16	6

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

occurrence in the ensemble.

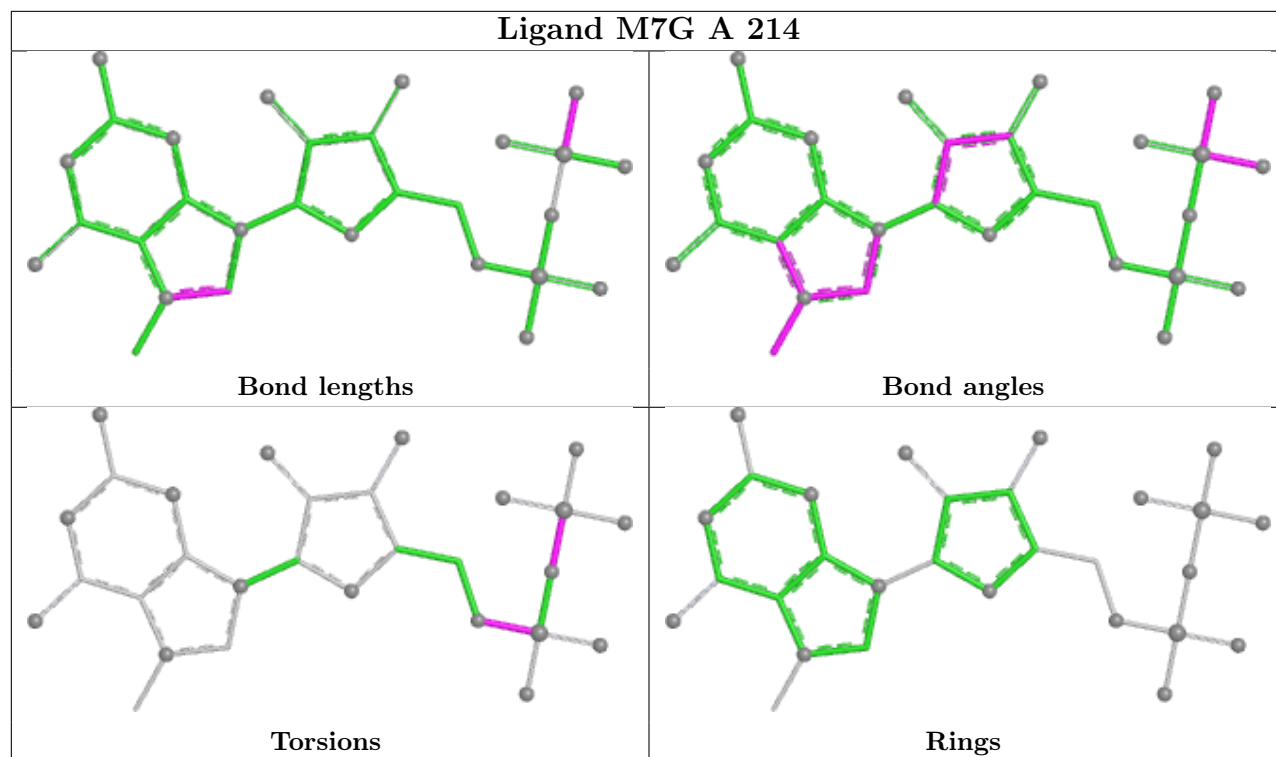
Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
2	A	214	M7G	C8-N7-C5	4.56	102.08	107.78	11	20
2	A	214	M7G	CM7-N7-C5	2.99	130.53	126.80	3	20
2	A	214	M7G	C3'-C2'-C1'	2.52	106.23	101.46	6	20
2	A	214	M7G	O2B-PB-O1B	2.22	119.47	110.83	7	20
2	A	214	M7G	N9-C8-N7	2.19	117.80	112.48	8	20
2	A	214	M7G	C6-C5-N7	2.14	129.49	132.17	14	16

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

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



6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

No chemical shift data were provided