



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Feb 13, 2022 – 11:43 PM EST

PDB ID : 1HOV  
Title : SOLUTION STRUCTURE OF A CATALYTIC DOMAIN OF MMP-2 COM-  
PLEXED WITH SC-74020  
Authors : Feng, Y.; Likos, J.J.; Zhu, L.; Woodward, H.; Munie, G.; McDonald, J.J.;  
Stevens, A.M.; Howard, C.P.; De Crescenzo, G.A.; Welsch, D.; Shieh, H.-S.;  
Stallings, W.C.  
Deposited on : 2000-12-11

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

We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto:validation@mail.wwpdb.org)

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

---

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

MolProbity : 4.02b-467  
Mogul : 1.8.5 (274361), CSD as541be (2020)  
buster-report : 1.1.7 (2018)  
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)  
RCI : v\_1n\_11\_5\_13\_A (Berjanski et al., 2005)  
PANAV : Wang et al. (2010)  
ShiftChecker : 2.26  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.26

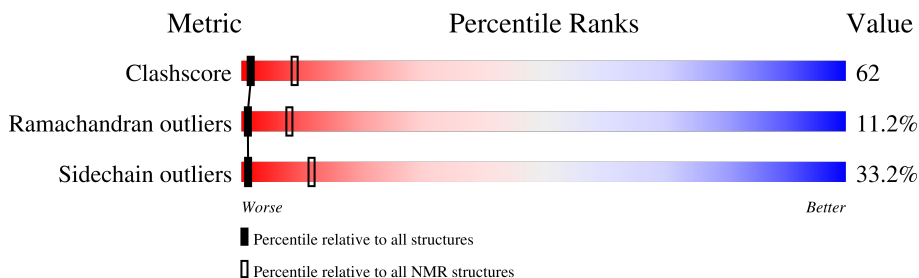
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	158937	12864
Ramachandran outliers	154571	11451
Sidechain outliers	154315	11428

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	163	

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 11 models. Model 8 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 3 as representative, based on the following criterion: *reasonable inhibitor conformation*.

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:10-A:163 (154)	0.79	8

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

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

The models can be grouped into 2 clusters. No single-model clusters were found.

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

### 3 Entry composition i

There are 4 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2601 atoms, of which 1247 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called MATRIX METALLOPROTEINASE-2.

Mol	Chain	Residues	Atoms					Trace	
			Total	C	H	N	O		S
1	A	163	2515	838	1205	219	249	4	0

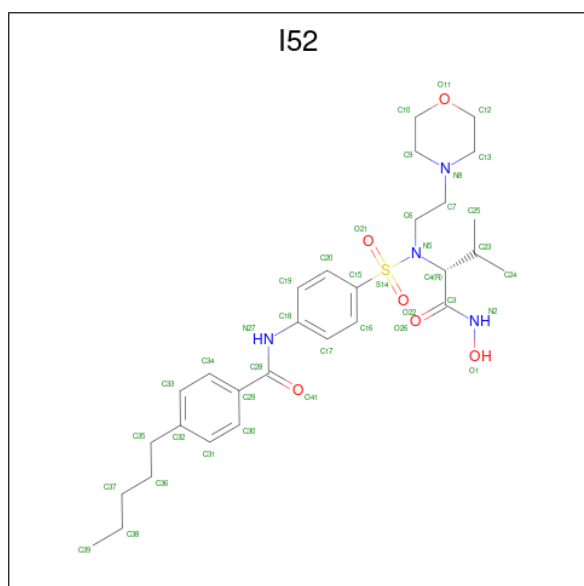
- Molecule 2 is ZINC ION (three-letter code: ZN) (formula: Zn).

Mol	Chain	Residues	Atoms	
			Total	Zn
2	A	2	2	2

- Molecule 3 is CALCIUM ION (three-letter code: CA) (formula: Ca).

Mol	Chain	Residues	Atoms	
			Total	Ca
3	A	2	2	2

- Molecule 4 is N-{4-[(1-HYDROXYCARBAMOYL-2-METHYL-PROPYL)-(2-MORPHOLIN-4-YL-ETHYL)-SULFAMOYL]-4-PENTYL-BENZAMIDE (three-letter code: I52) (formula: C<sub>29</sub>H<sub>42</sub>N<sub>4</sub>O<sub>6</sub>S).

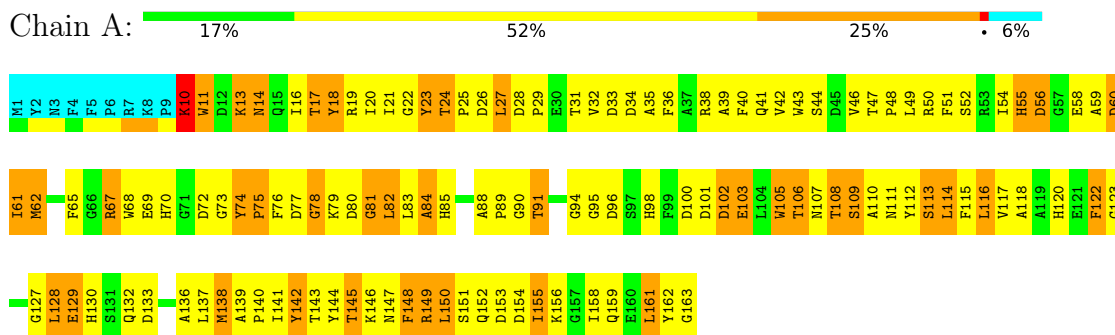


Mol	Chain	Residues	Atoms					
			Total	C	H	N	O	S
4	A	1	82	29	42	4	6	1



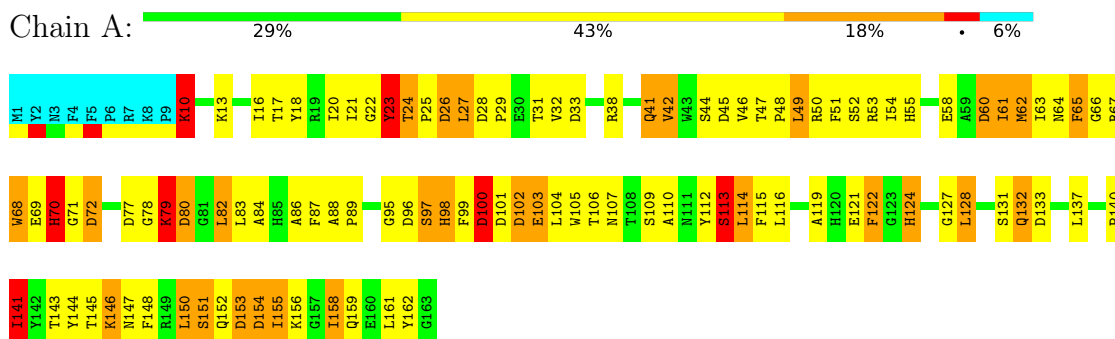
### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: MATRIX METALLOPROTEINASE-2



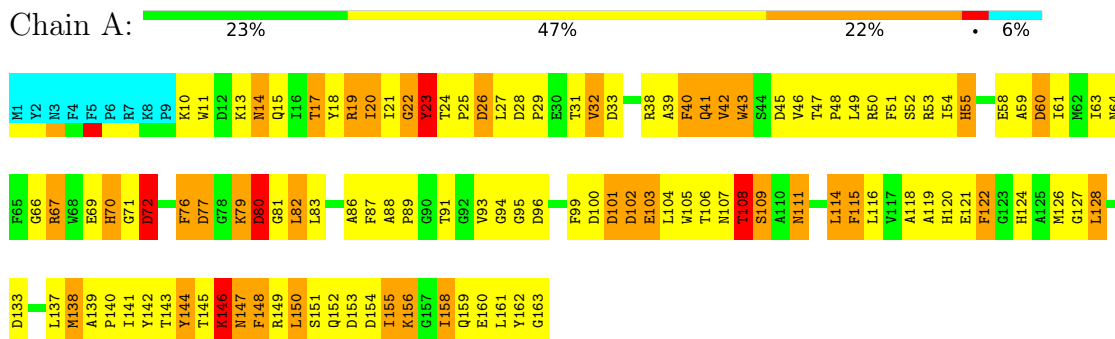
### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: MATRIX METALLOPROTEINASE-2



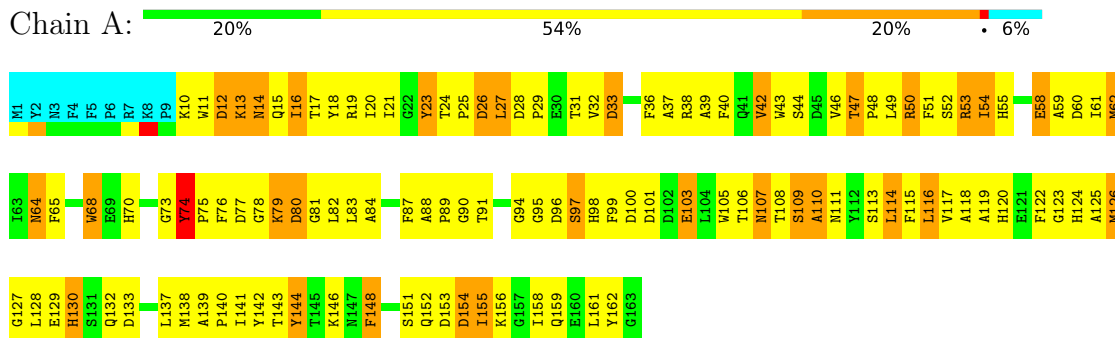
### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: MATRIX METALLOPROTEINASE-2



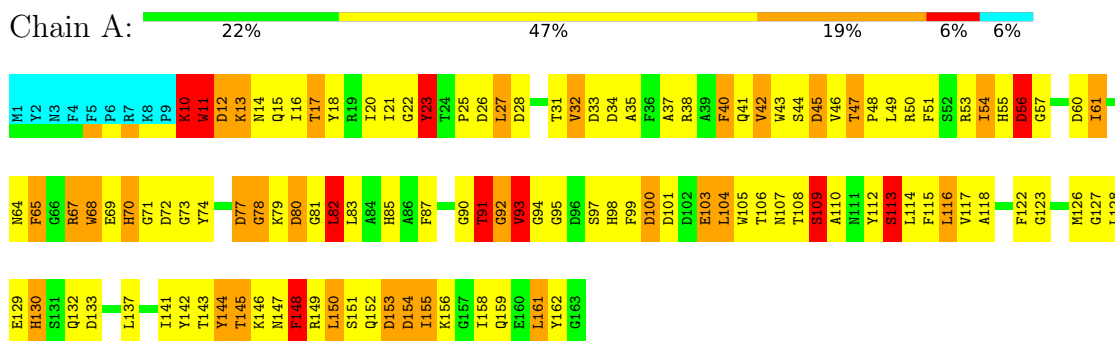
### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: MATRIX METALLOPROTEINASE-2



#### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: MATRIX METALLOPROTEINASE-2



#### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: MATRIX METALLOPROTEINASE-2

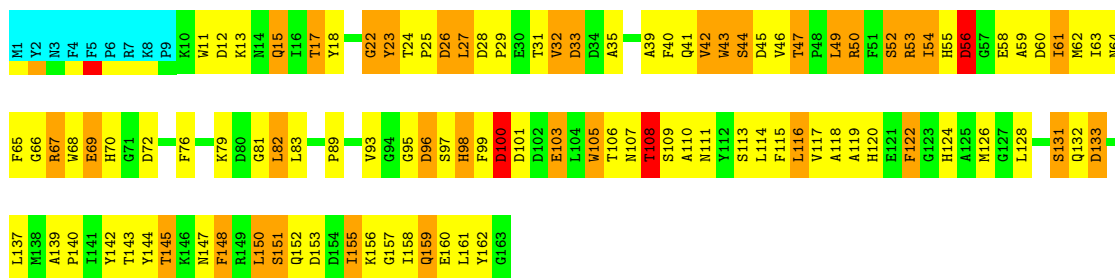


#### 4.2.8 Score per residue for model 8 (medoid)

- Molecule 1: MATRIX METALLOPROTEINASE-2



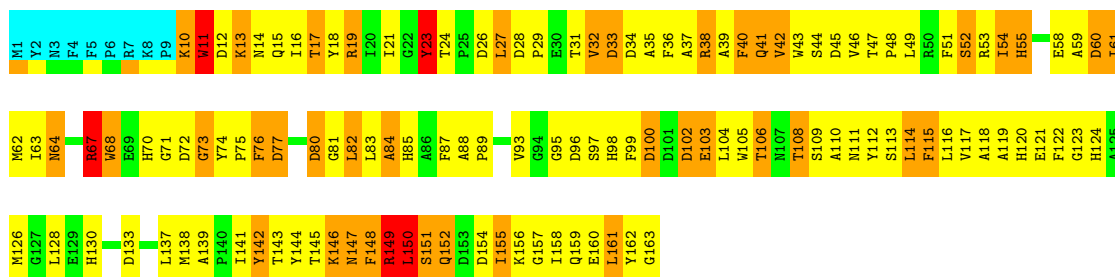




#### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: MATRIX METALLOPROTEINASE-2

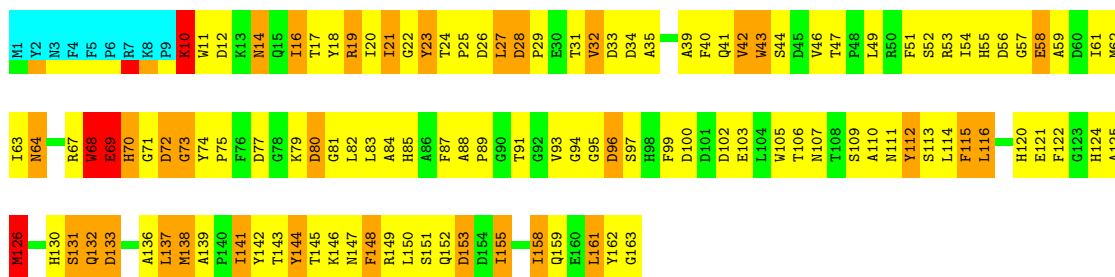
Chain A: 18% 50% 24% 6%



#### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: MATRIX METALLOPROTEINASE-2

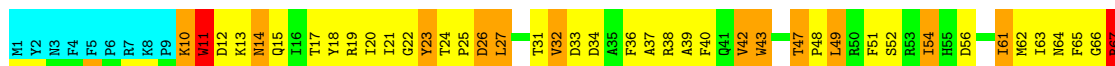
Chain A: 21% 51% 20% 6%



#### 4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: MATRIX METALLOPROTEINASE-2

Chain A: 20% 48% 23% 6%



H68	E69	H70	G71	D72	G73	Y74	F75	F76	D77	G78	K79	D80	G81	L82	L83	A84	H85	A86	F87	A88	P89	G90	T91	G92	V93	G94	G95	D96	S97	H98	F99	D100	D101	D102	E103	L104	W105	T106	M107	T108	S109	A110	M111	Y112	S113	L114	F115	L116	V117	A118	A119	F122	G123	H124	A125	M126	G127	L128
E129	H130	S131	Q132	D133	A136	L137	M138	T143	Y144	T145	K146	M147	F148	R149	L150	S151	Q152	D153	D154	I155	I158	Q159	E160	L161	Y162	G163																																

## 5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *distance geometry, simulated annealing, molecular dynamics, torsion angle dynamics*.

Of the 14 calculated structures, 11 were deposited, based on the following criterion: *structures with the least restraint violations*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	98.1

No chemical shift data was provided.

## 6 Model quality i

### 6.1 Standard geometry i

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: I52, ZN, CA

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

### 6.2 Too-close contacts i

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1226	1121	1121	149±23
4	A	40	42	41	10±4
All	All	13970	12793	12782	1670

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 62.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:THR:HG22	1:A:27:LEU:HD22	1.13	1.20	2	2
1:A:38:ARG:O	1:A:42:VAL:HG22	0.93	1.61	2	1
1:A:88:ALA:HB1	1:A:89:PRO:HD2	0.89	1.42	11	7
1:A:24:THR:CG2	1:A:27:LEU:HD22	0.88	1.96	2	2
1:A:137:LEU:HD13	4:A:800:I52:H382	0.88	1.43	5	3
1:A:20:ILE:HD13	1:A:23:TYR:CE1	0.87	2.05	10	4
4:A:800:I52:H251	4:A:800:I52:H61	0.87	1.43	4	2
1:A:137:LEU:HD13	4:A:800:I52:H381	0.86	1.48	3	1
1:A:27:LEU:HD21	1:A:32:VAL:HB	0.85	1.48	1	3
4:A:800:I52:H72	4:A:800:I52:H20	0.85	1.47	11	2
1:A:49:LEU:HD23	1:A:51:PHE:CE1	0.85	2.06	1	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:106:THR:HG23	1:A:108:THR:N	0.84	1.88	2	1
1:A:20:ILE:HD13	1:A:23:TYR:CZ	0.84	2.08	10	3
1:A:27:LEU:HD13	1:A:106:THR:HA	0.84	1.48	7	2
1:A:128:LEU:HD11	1:A:157:GLY:HA3	0.83	1.51	1	1
1:A:54:ILE:HD11	1:A:59:ALA:HB2	0.82	1.51	1	3
1:A:140:PRO:O	1:A:141:ILE:HD13	0.82	1.74	5	2
4:A:800:I52:H243	4:A:800:I52:H62	0.81	1.52	11	2
4:A:800:I52:H241	4:A:800:I52:H71	0.81	1.47	5	1
1:A:21:ILE:HD11	1:A:62:MET:HG2	0.81	1.53	5	3
1:A:23:TYR:CB	1:A:32:VAL:HG11	0.81	2.05	6	6
1:A:39:ALA:HB1	1:A:43:TRP:CZ2	0.81	2.11	8	5
1:A:61:ILE:HG23	1:A:95:GLY:O	0.80	1.76	10	3
1:A:116:LEU:HD11	4:A:800:I52:H33	0.80	1.52	9	1
1:A:61:ILE:HG22	1:A:95:GLY:O	0.80	1.76	11	7
1:A:20:ILE:HG21	1:A:23:TYR:CD1	0.79	2.13	6	2
4:A:800:I52:H241	4:A:800:I52:H72	0.79	1.52	1	1
1:A:106:THR:HG23	1:A:108:THR:H	0.78	1.39	2	1
1:A:137:LEU:HD13	4:A:800:I52:H362	0.78	1.55	8	4
1:A:137:LEU:CD1	4:A:800:I52:H351	0.77	2.10	6	1
1:A:145:THR:HG21	4:A:800:I52:H392	0.77	1.55	10	2
1:A:88:ALA:HB1	1:A:89:PRO:CD	0.77	2.10	11	4
1:A:39:ALA:HB1	1:A:43:TRP:CH2	0.77	2.15	4	5
1:A:116:LEU:HD12	1:A:142:TYR:CE2	0.76	2.16	7	1
1:A:54:ILE:HD11	1:A:59:ALA:CB	0.76	2.10	7	6
1:A:113:SER:O	1:A:117:VAL:HG22	0.76	1.80	1	3
1:A:108:THR:HG21	1:A:112:TYR:O	0.76	1.81	2	1
1:A:145:THR:HG22	4:A:800:I52:H371	0.75	1.57	9	1
1:A:116:LEU:HD11	1:A:144:TYR:HA	0.75	1.59	11	4
1:A:148:PHE:CE1	1:A:150:LEU:HD23	0.74	2.17	4	2
1:A:154:ASP:O	1:A:158:ILE:HG22	0.74	1.83	3	4
1:A:63:ILE:HD12	1:A:63:ILE:N	0.74	1.97	10	2
1:A:13:LYS:O	1:A:49:LEU:HD21	0.73	1.82	8	1
1:A:46:VAL:O	1:A:46:VAL:HG22	0.73	1.84	4	6
1:A:23:TYR:CG	1:A:32:VAL:HG11	0.73	2.19	4	8
1:A:42:VAL:HG13	1:A:43:TRP:CD1	0.73	2.18	7	5
1:A:54:ILE:HD11	1:A:59:ALA:HA	0.73	1.59	10	4
1:A:46:VAL:HG23	1:A:47:THR:HG22	0.73	1.59	6	1
1:A:126:MET:HE1	1:A:158:ILE:HD12	0.72	1.60	5	1
1:A:145:THR:HA	4:A:800:I52:H372	0.72	1.61	9	1
1:A:84:ALA:HB1	1:A:99:PHE:CD1	0.72	2.20	11	1
1:A:86:ALA:HB2	1:A:97:SER:OG	0.72	1.85	11	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:42:VAL:HG21	1:A:115:PHE:CE1	0.72	2.20	2	4
1:A:27:LEU:HD11	1:A:32:VAL:HG13	0.71	1.62	10	1
1:A:46:VAL:HG22	1:A:46:VAL:O	0.71	1.86	2	1
1:A:106:THR:HG23	1:A:108:THR:CA	0.71	2.16	2	1
1:A:47:THR:OG1	1:A:49:LEU:HD23	0.70	1.85	10	1
1:A:27:LEU:HD23	1:A:27:LEU:O	0.70	1.85	1	2
1:A:137:LEU:CD1	4:A:800:I52:H362	0.70	2.17	9	3
1:A:43:TRP:CH2	1:A:122:PHE:CD1	0.70	2.80	8	3
1:A:137:LEU:HD22	4:A:800:I52:H362	0.70	1.62	10	1
1:A:49:LEU:HD21	1:A:162:TYR:HB3	0.70	1.63	10	1
1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:HD13	0.69	2.02	1	4
1:A:29:PRO:HA	1:A:32:VAL:HG23	0.69	1.65	10	2
1:A:20:ILE:HD13	1:A:23:TYR:OH	0.69	1.86	10	1
1:A:116:LEU:HD21	1:A:144:TYR:CE1	0.69	2.23	2	1
1:A:49:LEU:HD13	1:A:162:TYR:CE2	0.69	2.22	4	2
1:A:49:LEU:HD11	1:A:162:TYR:CE2	0.69	2.23	6	1
1:A:27:LEU:HD23	1:A:105:TRP:O	0.69	1.87	9	1
1:A:27:LEU:HD21	1:A:32:VAL:CG2	0.68	2.18	7	2
1:A:105:TRP:CD1	1:A:105:TRP:N	0.68	2.61	7	1
1:A:49:LEU:HD23	1:A:51:PHE:CZ	0.68	2.24	3	2
1:A:49:LEU:HD11	1:A:162:TYR:CD2	0.68	2.22	5	3
1:A:31:THR:HG21	1:A:107:ASN:HA	0.68	1.64	6	1
1:A:137:LEU:CD1	4:A:800:I52:H371	0.68	2.18	11	1
1:A:76:PHE:CE1	1:A:85:HIS:CE1	0.67	2.82	2	1
1:A:42:VAL:CG1	1:A:43:TRP:CD1	0.67	2.78	8	5
1:A:136:ALA:O	4:A:800:I52:H352	0.67	1.88	2	1
1:A:49:LEU:HD21	1:A:162:TYR:CB	0.67	2.19	10	1
1:A:13:LYS:O	1:A:15:GLN:N	0.67	2.27	6	3
1:A:28:ASP:O	1:A:32:VAL:HG22	0.67	1.90	10	2
1:A:23:TYR:CD2	1:A:32:VAL:CG1	0.67	2.77	1	2
1:A:27:LEU:C	1:A:27:LEU:HD23	0.67	2.10	2	1
1:A:65:PHE:CD2	1:A:105:TRP:CZ3	0.67	2.83	7	1
1:A:19:ARG:HB2	1:A:54:ILE:HG23	0.67	1.66	9	1
4:A:800:I52:H61	4:A:800:I52:H243	0.67	1.66	8	1
1:A:23:TYR:HB2	1:A:32:VAL:HG11	0.67	1.64	6	5
1:A:137:LEU:HD13	4:A:800:I52:H371	0.66	1.68	11	1
1:A:16:ILE:HD12	1:A:51:PHE:HE1	0.66	1.50	3	1
1:A:137:LEU:HB2	4:A:800:I52:H382	0.66	1.67	11	1
1:A:105:TRP:NE1	1:A:117:VAL:HG11	0.66	2.05	11	1
1:A:70:HIS:CE1	1:A:72:ASP:CB	0.66	2.77	3	1
1:A:42:VAL:HG21	1:A:115:PHE:CZ	0.65	2.26	11	6

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:TYR:HB3	1:A:32:VAL:HG21	0.65	1.67	2	2
1:A:114:LEU:HD13	1:A:114:LEU:O	0.65	1.91	4	2
1:A:45:ASP:OD1	1:A:150:LEU:HD11	0.65	1.91	3	1
1:A:137:LEU:HD12	4:A:800:I52:H351	0.65	1.66	6	1
1:A:105:TRP:C	1:A:106:THR:HG22	0.65	2.10	9	1
1:A:83:LEU:O	1:A:84:ALA:HB2	0.65	1.91	7	8
4:A:800:I52:H72	4:A:800:I52:H16	0.65	1.67	9	2
1:A:130:HIS:CE1	4:A:800:I52:H132	0.65	2.26	2	1
1:A:65:PHE:CD1	1:A:65:PHE:N	0.65	2.64	7	1
1:A:49:LEU:HD23	1:A:51:PHE:HZ	0.65	1.50	3	1
1:A:42:VAL:CG2	1:A:148:PHE:CE1	0.65	2.80	10	1
1:A:27:LEU:HD23	1:A:106:THR:HA	0.65	1.67	10	1
1:A:27:LEU:CD1	1:A:32:VAL:HG13	0.65	2.21	10	1
1:A:49:LEU:CD2	1:A:51:PHE:CZ	0.64	2.80	7	1
1:A:46:VAL:HG23	1:A:47:THR:HG23	0.64	1.68	10	1
1:A:43:TRP:O	1:A:46:VAL:HG12	0.64	1.92	1	1
1:A:16:ILE:HD12	1:A:51:PHE:CE1	0.64	2.26	3	1
1:A:145:THR:HB	4:A:800:I52:H371	0.64	1.69	4	1
1:A:65:PHE:CE2	1:A:105:TRP:CZ3	0.64	2.86	7	1
1:A:32:VAL:HG12	1:A:114:LEU:CD2	0.64	2.23	10	1
1:A:106:THR:OG1	1:A:110:ALA:HB2	0.64	1.93	1	1
1:A:145:THR:CG2	4:A:800:I52:H382	0.63	2.23	6	2
1:A:49:LEU:HD22	1:A:51:PHE:CE2	0.63	2.28	4	1
1:A:49:LEU:HD23	1:A:51:PHE:HE1	0.63	1.53	5	1
1:A:53:ARG:NH1	1:A:55:HIS:CE1	0.63	2.66	5	1
1:A:144:TYR:CD1	1:A:145:THR:N	0.63	2.67	11	1
1:A:39:ALA:O	1:A:42:VAL:HG12	0.63	1.93	7	5
1:A:155:ILE:HD12	1:A:155:ILE:C	0.63	2.13	1	10
1:A:106:THR:HG23	1:A:108:THR:HA	0.63	1.70	2	1
1:A:162:TYR:O	1:A:162:TYR:CD2	0.63	2.52	4	1
1:A:42:VAL:CG1	1:A:43:TRP:NE1	0.63	2.62	10	5
1:A:43:TRP:CH2	1:A:122:PHE:CG	0.63	2.87	8	3
1:A:23:TYR:CD1	1:A:23:TYR:N	0.62	2.67	9	2
1:A:85:HIS:CB	4:A:800:I52:H241	0.62	2.24	2	1
1:A:19:ARG:HD2	1:A:21:ILE:HD13	0.62	1.71	4	1
1:A:65:PHE:CG	1:A:105:TRP:CH2	0.62	2.87	7	1
1:A:59:ALA:HB3	1:A:62:MET:SD	0.62	2.34	2	1
1:A:158:ILE:HD11	1:A:162:TYR:OH	0.62	1.93	4	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:122:PHE:CB	0.62	2.82	10	4
1:A:20:ILE:HD13	1:A:33:ASP:OD1	0.62	1.95	7	1
1:A:158:ILE:HD11	1:A:162:TYR:CE2	0.62	2.29	7	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:145:THR:OG1	1:A:148:PHE:N	0.62	2.32	9	1
1:A:144:TYR:CD2	1:A:145:THR:N	0.62	2.68	6	3
1:A:83:LEU:CD2	1:A:112:TYR:CE2	0.62	2.83	11	1
1:A:21:ILE:HD12	1:A:64:ASN:HB3	0.62	1.72	3	2
1:A:70:HIS:CE1	1:A:72:ASP:HB3	0.62	2.29	3	1
1:A:54:ILE:HD11	1:A:59:ALA:CA	0.61	2.24	10	4
1:A:137:LEU:HD13	4:A:800:I52:C37	0.61	2.25	11	1
1:A:97:SER:O	1:A:98:HIS:CD2	0.61	2.53	6	1
1:A:137:LEU:HD12	1:A:137:LEU:O	0.61	1.94	9	3
1:A:54:ILE:HD13	1:A:54:ILE:H	0.61	1.53	1	3
4:A:800:I52:H251	4:A:800:I52:H62	0.61	1.73	2	1
1:A:32:VAL:CG2	1:A:114:LEU:HD22	0.61	2.25	8	1
1:A:61:ILE:HD13	1:A:61:ILE:N	0.61	2.10	2	1
1:A:76:PHE:CD2	1:A:77:ASP:N	0.61	2.68	2	1
1:A:84:ALA:CB	1:A:99:PHE:CD1	0.61	2.83	11	1
1:A:55:HIS:O	1:A:57:GLY:N	0.61	2.34	6	1
1:A:116:LEU:HD12	4:A:800:I52:C38	0.61	2.26	2	1
1:A:106:THR:HG21	1:A:110:ALA:HB3	0.61	1.70	5	2
1:A:108:THR:HG21	1:A:112:TYR:C	0.60	2.16	2	1
1:A:116:LEU:CD2	4:A:800:I52:H382	0.60	2.26	3	1
1:A:120:HIS:HB2	4:A:800:I52:H34	0.60	1.72	4	2
1:A:42:VAL:HG21	1:A:115:PHE:HZ	0.60	1.54	3	2
1:A:49:LEU:HD21	1:A:162:TYR:CE1	0.60	2.31	6	1
1:A:116:LEU:HD13	4:A:800:I52:H33	0.60	1.71	7	1
1:A:146:LYS:O	1:A:147:ASN:CB	0.60	2.49	9	2
1:A:43:TRP:HZ3	1:A:158:ILE:HD13	0.60	1.56	6	2
1:A:74:TYR:O	1:A:74:TYR:CG	0.60	2.54	6	1
1:A:43:TRP:CH2	1:A:123:GLY:CA	0.60	2.85	9	2
1:A:21:ILE:HG22	1:A:21:ILE:O	0.60	1.97	6	4
1:A:27:LEU:HD23	1:A:27:LEU:C	0.60	2.16	1	1
1:A:130:HIS:CD2	1:A:138:MET:O	0.60	2.55	9	3
1:A:120:HIS:CE1	1:A:124:HIS:CE1	0.60	2.90	5	1
1:A:10:LYS:O	1:A:11:TRP:CG	0.60	2.55	9	2
1:A:106:THR:OG1	1:A:110:ALA:HB3	0.60	1.97	8	1
1:A:88:ALA:CB	1:A:89:PRO:CD	0.59	2.80	11	2
1:A:17:THR:O	1:A:61:ILE:CG1	0.59	2.49	9	3
1:A:116:LEU:HD21	1:A:144:TYR:CD1	0.59	2.32	2	1
1:A:23:TYR:CE2	1:A:33:ASP:OD2	0.59	2.56	8	1
1:A:91:THR:HG22	1:A:92:GLY:N	0.59	2.12	11	1
1:A:42:VAL:HG11	1:A:115:PHE:CZ	0.59	2.33	2	1
1:A:117:VAL:HG23	1:A:118:ALA:N	0.59	2.13	6	7

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:123:GLY:CA	0.59	2.85	5	1
1:A:55:HIS:O	1:A:55:HIS:CG	0.59	2.54	10	1
1:A:49:LEU:HD22	1:A:162:TYR:CE2	0.59	2.33	9	1
1:A:75:PRO:O	1:A:76:PHE:CG	0.59	2.55	1	1
1:A:65:PHE:CE2	1:A:105:TRP:CE3	0.59	2.91	7	1
1:A:161:LEU:HD13	1:A:161:LEU:O	0.59	1.97	2	1
1:A:74:TYR:CE1	1:A:85:HIS:CE1	0.59	2.91	6	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:154:ASP:OD2	0.59	2.56	9	1
1:A:19:ARG:HG2	1:A:59:ALA:HB3	0.59	1.74	10	1
1:A:107:ASN:O	1:A:108:THR:OG1	0.59	2.21	2	1
1:A:24:THR:HG23	1:A:26:ASP:OD1	0.58	1.98	3	2
1:A:23:TYR:CG	1:A:32:VAL:CG1	0.58	2.85	4	8
1:A:46:VAL:CG2	1:A:155:ILE:HB	0.58	2.27	9	1
1:A:144:TYR:CG	1:A:145:THR:N	0.58	2.70	8	4
1:A:43:TRP:HE1	1:A:137:LEU:HD21	0.58	1.57	5	1
1:A:63:ILE:N	1:A:63:ILE:CD1	0.58	2.67	10	1
1:A:83:LEU:CD2	1:A:112:TYR:CZ	0.58	2.86	11	1
1:A:130:HIS:CG	1:A:138:MET:O	0.58	2.57	10	1
1:A:142:TYR:OH	1:A:144:TYR:CD1	0.58	2.56	10	1
1:A:27:LEU:HD11	1:A:32:VAL:CA	0.58	2.29	1	1
1:A:113:SER:OG	1:A:116:LEU:HD22	0.58	1.98	2	1
1:A:29:PRO:HA	1:A:32:VAL:CG2	0.58	2.29	10	2
1:A:26:ASP:OD1	1:A:106:THR:HG22	0.58	1.99	7	1
1:A:61:ILE:CG2	1:A:95:GLY:O	0.58	2.51	11	6
1:A:31:THR:O	1:A:34:ASP:N	0.58	2.36	9	4
1:A:22:GLY:O	1:A:65:PHE:CD2	0.58	2.57	3	1
1:A:40:PHE:CE1	1:A:44:SER:HB2	0.58	2.34	9	1
1:A:103:GLU:CB	1:A:105:TRP:CZ2	0.58	2.87	1	1
1:A:105:TRP:O	1:A:110:ALA:CB	0.58	2.52	6	1
1:A:105:TRP:CB	1:A:114:LEU:CD2	0.57	2.81	11	2
1:A:145:THR:O	1:A:145:THR:HG23	0.57	1.99	10	2
1:A:147:ASN:O	1:A:148:PHE:CB	0.57	2.50	8	3
1:A:18:TYR:CD1	1:A:63:ILE:HD11	0.57	2.33	4	1
1:A:45:ASP:OD1	1:A:46:VAL:HG13	0.57	1.99	3	1
1:A:152:GLN:HA	1:A:155:ILE:CG1	0.57	2.29	2	11
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:158:ILE:HD13	0.57	2.34	6	1
1:A:23:TYR:CD2	1:A:32:VAL:HG12	0.57	2.35	1	1
1:A:11:TRP:CH2	1:A:60:ASP:OD2	0.57	2.58	7	3
1:A:43:TRP:CH2	1:A:154:ASP:OD2	0.57	2.58	5	1
1:A:60:ASP:OD1	1:A:60:ASP:N	0.57	2.37	9	1
1:A:148:PHE:CG	1:A:149:ARG:N	0.57	2.73	9	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:145:THR:CG2	4:A:800:I52:H392	0.57	2.30	1	1
1:A:158:ILE:HG23	1:A:159:GLN:N	0.57	2.15	7	4
1:A:139:ALA:HB1	1:A:140:PRO:HD2	0.57	1.75	4	2
1:A:49:LEU:HD21	1:A:162:TYR:CZ	0.56	2.34	3	1
1:A:65:PHE:CE2	1:A:101:ASP:OD1	0.56	2.58	6	1
1:A:71:GLY:O	1:A:73:GLY:N	0.56	2.39	11	4
1:A:54:ILE:CD1	1:A:59:ALA:CB	0.56	2.83	8	1
1:A:17:THR:HB	1:A:54:ILE:HD13	0.56	1.77	2	1
1:A:102:ASP:O	1:A:103:GLU:CB	0.56	2.52	2	2
1:A:148:PHE:CD1	4:A:800:I52:H393	0.56	2.36	2	1
1:A:42:VAL:HG23	1:A:148:PHE:CE1	0.56	2.34	10	1
1:A:99:PHE:HB2	1:A:105:TRP:CZ2	0.56	2.36	10	1
1:A:105:TRP:CD1	1:A:112:TYR:HB3	0.56	2.36	11	1
1:A:43:TRP:CH2	1:A:123:GLY:HA2	0.56	2.35	9	2
1:A:65:PHE:CD2	1:A:99:PHE:HB2	0.56	2.35	7	1
1:A:49:LEU:CD2	1:A:51:PHE:CE2	0.56	2.89	4	2
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:123:GLY:HA3	0.56	2.35	5	2
1:A:118:ALA:O	1:A:122:PHE:N	0.56	2.38	1	7
1:A:42:VAL:CG1	1:A:43:TRP:CE2	0.56	2.88	10	4
1:A:116:LEU:HD12	1:A:142:TYR:OH	0.56	2.01	1	2
1:A:40:PHE:C	1:A:40:PHE:CD1	0.56	2.78	7	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:122:PHE:HB3	0.56	2.35	8	3
1:A:75:PRO:HB2	1:A:82:LEU:CD2	0.56	2.30	7	1
1:A:31:THR:CG2	1:A:107:ASN:HB3	0.56	2.31	3	4
1:A:16:ILE:HG22	1:A:17:THR:N	0.56	2.16	7	2
1:A:98:HIS:N	1:A:98:HIS:CD2	0.56	2.72	9	1
1:A:142:TYR:O	1:A:143:THR:CB	0.56	2.54	9	1
1:A:11:TRP:CE2	1:A:60:ASP:OD2	0.56	2.59	2	1
1:A:108:THR:CG2	1:A:112:TYR:O	0.56	2.52	2	1
1:A:151:SER:O	1:A:155:ILE:HG23	0.56	2.00	6	8
1:A:88:ALA:O	1:A:94:GLY:CA	0.56	2.54	11	4
1:A:145:THR:HG22	4:A:800:I52:C37	0.56	2.29	9	1
1:A:151:SER:CB	1:A:153:ASP:OD1	0.56	2.54	10	1
1:A:74:TYR:O	1:A:74:TYR:CD2	0.55	2.59	6	1
4:A:800:I52:H251	4:A:800:I52:C6	0.55	2.31	2	2
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:154:ASP:OD1	0.55	2.59	2	1
1:A:116:LEU:HD12	4:A:800:I52:H381	0.55	1.78	2	1
1:A:116:LEU:CD1	1:A:144:TYR:CD2	0.55	2.89	5	1
1:A:155:ILE:HD12	1:A:155:ILE:O	0.55	2.00	8	4
1:A:40:PHE:O	1:A:44:SER:CB	0.55	2.54	2	4
1:A:152:GLN:O	1:A:155:ILE:N	0.55	2.39	3	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:ASP:N	1:A:12:ASP:OD1	0.55	2.40	11	4
1:A:116:LEU:HD12	1:A:142:TYR:CZ	0.55	2.36	8	3
1:A:158:ILE:HD11	1:A:162:TYR:CZ	0.55	2.37	4	1
1:A:35:ALA:HB3	1:A:114:LEU:HD23	0.55	1.78	6	1
1:A:47:THR:CB	1:A:49:LEU:HD23	0.55	2.31	10	1
1:A:96:ASP:OD1	1:A:96:ASP:N	0.55	2.39	10	1
1:A:106:THR:O	1:A:113:SER:HA	0.55	2.01	9	4
1:A:20:ILE:HD12	1:A:23:TYR:CD2	0.55	2.37	4	1
1:A:149:ARG:O	1:A:150:LEU:CB	0.55	2.54	7	3
1:A:42:VAL:HG12	1:A:43:TRP:CE2	0.55	2.37	10	4
1:A:54:ILE:HD11	1:A:59:ALA:HB1	0.55	1.78	5	1
1:A:28:ASP:O	1:A:32:VAL:CG2	0.55	2.54	10	2
1:A:40:PHE:CE1	1:A:51:PHE:CD2	0.55	2.94	2	1
1:A:131:SER:O	1:A:132:GLN:CB	0.55	2.55	1	3
1:A:106:THR:CG2	1:A:108:THR:HA	0.55	2.31	2	1
1:A:13:LYS:HD2	1:A:162:TYR:CD1	0.55	2.36	4	1
1:A:20:ILE:HG21	1:A:23:TYR:HD1	0.55	1.58	6	1
1:A:39:ALA:CB	1:A:43:TRP:CH2	0.55	2.89	4	3
1:A:18:TYR:O	1:A:54:ILE:HG22	0.55	2.02	9	1
1:A:137:LEU:HD13	4:A:800:I52:C36	0.54	2.31	1	1
1:A:115:PHE:C	1:A:115:PHE:CD1	0.54	2.80	4	3
1:A:54:ILE:CD1	1:A:58:GLU:O	0.54	2.56	4	1
1:A:106:THR:HG23	1:A:114:LEU:H	0.54	1.63	6	1
1:A:66:GLY:N	1:A:101:ASP:OD1	0.54	2.40	7	1
1:A:76:PHE:C	1:A:76:PHE:CD1	0.54	2.81	1	1
1:A:142:TYR:CD1	1:A:142:TYR:C	0.54	2.80	2	1
1:A:26:ASP:OD1	1:A:26:ASP:N	0.54	2.40	3	1
1:A:101:ASP:O	1:A:102:ASP:C	0.54	2.45	4	3
1:A:114:LEU:O	1:A:118:ALA:CB	0.54	2.56	6	1
1:A:20:ILE:CD1	1:A:33:ASP:OD1	0.54	2.56	7	1
1:A:68:TRP:CE3	1:A:68:TRP:C	0.54	2.81	10	1
1:A:106:THR:CG2	1:A:110:ALA:O	0.54	2.56	11	1
1:A:39:ALA:HA	1:A:42:VAL:CG2	0.54	2.33	2	1
1:A:27:LEU:HD23	1:A:27:LEU:H	0.54	1.61	4	2
1:A:148:PHE:CZ	1:A:150:LEU:HB2	0.54	2.36	8	1
1:A:128:LEU:CD2	1:A:128:LEU:N	0.54	2.70	11	1
1:A:40:PHE:O	1:A:44:SER:N	0.54	2.41	2	1
1:A:101:ASP:OD1	1:A:101:ASP:O	0.54	2.26	3	1
1:A:141:ILE:O	4:A:800:I52:N27	0.54	2.40	3	1
1:A:74:TYR:OH	1:A:85:HIS:CD2	0.54	2.60	6	1
1:A:99:PHE:CB	1:A:105:TRP:CZ2	0.54	2.91	10	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:67:ARG:O	1:A:76:PHE:CD2	0.54	2.60	11	1
1:A:38:ARG:O	1:A:41:GLN:N	0.54	2.41	9	2
1:A:41:GLN:O	1:A:45:ASP:CB	0.54	2.56	4	2
1:A:105:TRP:CB	1:A:114:LEU:HD22	0.54	2.33	11	2
1:A:23:TYR:CB	1:A:32:VAL:CG1	0.54	2.86	6	4
1:A:17:THR:HG23	1:A:52:SER:HB3	0.54	1.80	4	1
1:A:124:HIS:CD2	4:A:800:I52:O1	0.54	2.60	3	3
1:A:103:GLU:O	1:A:104:LEU:CB	0.54	2.54	6	1
1:A:42:VAL:HG23	1:A:148:PHE:CZ	0.54	2.37	10	1
1:A:54:ILE:CD1	1:A:59:ALA:HB2	0.53	2.33	8	2
1:A:49:LEU:HD11	1:A:162:TYR:CG	0.53	2.38	2	2
1:A:105:TRP:O	1:A:106:THR:HB	0.53	2.02	2	1
1:A:20:ILE:CD1	1:A:23:TYR:OH	0.53	2.56	10	2
1:A:11:TRP:CZ2	1:A:60:ASP:CG	0.53	2.81	1	1
1:A:23:TYR:CD2	1:A:32:VAL:HG11	0.53	2.38	11	3
1:A:17:THR:O	1:A:60:ASP:CB	0.53	2.56	3	1
1:A:113:SER:OG	1:A:144:TYR:CE1	0.53	2.58	3	1
1:A:116:LEU:HD22	4:A:800:I52:H382	0.53	1.78	3	1
1:A:75:PRO:HB2	1:A:82:LEU:HD22	0.53	1.80	7	1
1:A:28:ASP:CB	1:A:31:THR:OG1	0.53	2.56	1	1
1:A:18:TYR:CD1	1:A:63:ILE:CD1	0.53	2.91	4	1
1:A:104:LEU:O	1:A:111:ASN:ND2	0.53	2.41	9	1
1:A:93:VAL:HG12	1:A:94:GLY:N	0.53	2.19	11	1
1:A:137:LEU:HA	4:A:800:I52:H352	0.53	1.80	11	1
1:A:96:ASP:N	1:A:96:ASP:OD1	0.53	2.39	8	2
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:122:PHE:CG	0.53	2.96	11	3
1:A:133:ASP:O	1:A:139:ALA:HB2	0.53	2.03	1	3
1:A:61:ILE:HG23	1:A:95:GLY:C	0.53	2.24	4	2
1:A:140:PRO:C	1:A:141:ILE:HD13	0.53	2.23	5	1
1:A:62:MET:CB	1:A:96:ASP:CG	0.53	2.77	11	1
1:A:12:ASP:OD1	1:A:161:LEU:HD13	0.53	2.04	1	1
1:A:78:GLY:O	1:A:79:LYS:O	0.53	2.27	1	4
1:A:16:ILE:CG2	1:A:17:THR:N	0.53	2.71	7	1
1:A:32:VAL:HG22	1:A:114:LEU:CD2	0.53	2.33	8	1
1:A:76:PHE:CZ	1:A:100:ASP:HA	0.53	2.38	11	1
1:A:152:GLN:O	1:A:155:ILE:HG13	0.53	2.03	7	9
1:A:27:LEU:HD13	1:A:32:VAL:HB	0.53	1.80	5	1
1:A:99:PHE:CD1	1:A:99:PHE:N	0.53	2.75	10	2
1:A:101:ASP:O	1:A:102:ASP:O	0.53	2.26	7	1
1:A:93:VAL:O	1:A:93:VAL:HG23	0.53	2.03	9	1
1:A:85:HIS:HB3	4:A:800:I52:H252	0.53	1.81	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:70:HIS:CE1	1:A:76:PHE:CD1	0.53	2.97	2	1
1:A:24:THR:CG2	1:A:26:ASP:OD1	0.53	2.57	1	2
1:A:24:THR:HG23	1:A:25:PRO:HD2	0.53	1.81	2	1
1:A:32:VAL:CG1	1:A:33:ASP:N	0.53	2.72	2	6
1:A:105:TRP:CE2	1:A:112:TYR:HB2	0.53	2.39	2	1
1:A:107:ASN:N	1:A:107:ASN:OD1	0.53	2.42	2	1
1:A:74:TYR:N	1:A:75:PRO:CD	0.53	2.72	5	1
1:A:21:ILE:O	1:A:21:ILE:CG2	0.52	2.56	6	2
1:A:62:MET:CG	1:A:96:ASP:OD1	0.52	2.57	3	1
1:A:70:HIS:CE1	1:A:72:ASP:HB2	0.52	2.39	3	1
1:A:17:THR:O	1:A:61:ILE:HG13	0.52	2.03	7	2
1:A:76:PHE:O	1:A:77:ASP:CB	0.52	2.56	9	2
1:A:68:TRP:O	1:A:70:HIS:N	0.52	2.43	11	2
1:A:148:PHE:C	1:A:148:PHE:CD1	0.52	2.82	5	3
1:A:112:TYR:O	1:A:113:SER:CB	0.52	2.55	6	3
1:A:40:PHE:CD1	1:A:40:PHE:O	0.52	2.63	6	2
1:A:49:LEU:HD21	1:A:162:TYR:CE2	0.52	2.40	3	1
1:A:93:VAL:HG12	1:A:93:VAL:O	0.52	2.03	8	2
1:A:133:ASP:N	1:A:133:ASP:OD1	0.52	2.43	8	1
1:A:99:PHE:CZ	1:A:118:ALA:HA	0.52	2.40	9	1
1:A:77:ASP:OD2	1:A:82:LEU:N	0.52	2.43	5	3
1:A:74:TYR:N	1:A:75:PRO:HD2	0.52	2.20	5	1
1:A:79:LYS:O	1:A:80:ASP:C	0.52	2.47	5	7
1:A:69:GLU:O	1:A:70:HIS:O	0.52	2.26	3	1
1:A:15:GLN:CG	1:A:15:GLN:O	0.52	2.57	7	1
1:A:46:VAL:O	1:A:46:VAL:CG2	0.52	2.57	1	4
4:A:800:I52:H62	4:A:800:I52:H16	0.52	1.81	1	1
1:A:43:TRP:NE1	1:A:137:LEU:HD21	0.52	2.20	5	1
1:A:55:HIS:N	1:A:55:HIS:CD2	0.52	2.77	8	2
1:A:137:LEU:HD23	1:A:154:ASP:OD2	0.52	2.05	9	1
1:A:148:PHE:CZ	1:A:150:LEU:HG	0.52	2.39	11	1
1:A:14:ASN:OD1	1:A:14:ASN:N	0.52	2.43	1	2
1:A:104:LEU:O	1:A:104:LEU:HD12	0.52	2.05	1	1
1:A:115:PHE:CD1	1:A:115:PHE:O	0.52	2.63	4	3
1:A:154:ASP:N	1:A:154:ASP:OD1	0.52	2.42	3	1
1:A:109:SER:O	1:A:111:ASN:N	0.52	2.42	7	2
1:A:20:ILE:HG22	1:A:22:GLY:H	0.52	1.64	3	3
1:A:40:PHE:HA	1:A:43:TRP:CZ3	0.52	2.39	7	3
1:A:14:ASN:ND2	1:A:48:PRO:O	0.52	2.42	5	1
1:A:46:VAL:HG21	1:A:155:ILE:CB	0.52	2.35	9	1
1:A:148:PHE:O	1:A:149:ARG:CB	0.52	2.57	9	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:GLY:O	1:A:58:GLU:CG	0.52	2.57	10	1
1:A:64:ASN:OD1	1:A:98:HIS:CD2	0.52	2.62	5	2
1:A:116:LEU:HD21	4:A:800:I52:H352	0.52	1.82	6	1
1:A:105:TRP:HB2	1:A:114:LEU:CD1	0.52	2.35	8	1
1:A:24:THR:OG1	1:A:25:PRO:HD2	0.52	2.05	2	4
1:A:148:PHE:HE1	1:A:150:LEU:HD23	0.52	1.61	4	1
1:A:100:ASP:O	1:A:105:TRP:CZ3	0.52	2.63	5	1
1:A:77:ASP:O	1:A:78:GLY:O	0.51	2.29	6	2
1:A:11:TRP:CD1	1:A:89:PRO:HB3	0.51	2.39	8	1
1:A:130:HIS:ND1	1:A:138:MET:O	0.51	2.43	10	1
1:A:75:PRO:O	1:A:76:PHE:O	0.51	2.28	1	1
1:A:144:TYR:CE2	1:A:146:LYS:HG3	0.51	2.41	2	1
1:A:116:LEU:HD11	1:A:144:TYR:CG	0.51	2.41	5	1
1:A:104:LEU:O	1:A:104:LEU:CD1	0.51	2.58	1	1
1:A:18:TYR:CD1	1:A:18:TYR:C	0.51	2.83	2	3
1:A:65:PHE:HA	1:A:99:PHE:O	0.51	2.05	3	2
1:A:83:LEU:O	1:A:84:ALA:CB	0.51	2.58	9	3
1:A:126:MET:HE1	1:A:158:ILE:CD1	0.51	2.36	5	1
1:A:91:THR:O	1:A:93:VAL:N	0.51	2.44	6	1
1:A:150:LEU:O	1:A:151:SER:O	0.51	2.28	7	1
1:A:155:ILE:HD13	1:A:159:GLN:NE2	0.51	2.20	10	1
1:A:124:HIS:HE2	1:A:130:HIS:CD2	0.51	2.20	1	1
1:A:97:SER:OG	1:A:99:PHE:CE1	0.51	2.63	5	1
1:A:18:TYR:CB	1:A:61:ILE:HG13	0.51	2.36	9	4
1:A:29:PRO:O	1:A:33:ASP:OD1	0.51	2.29	3	1
1:A:102:ASP:O	1:A:103:GLU:C	0.51	2.49	7	2
1:A:56:ASP:N	1:A:56:ASP:OD1	0.51	2.43	6	1
1:A:28:ASP:CB	1:A:31:THR:HB	0.51	2.36	7	1
1:A:40:PHE:CE1	1:A:44:SER:CB	0.51	2.93	9	1
1:A:43:TRP:O	1:A:46:VAL:HG22	0.51	2.05	10	1
1:A:72:ASP:O	1:A:74:TYR:N	0.51	2.44	10	2
1:A:43:TRP:O	1:A:46:VAL:CG1	0.51	2.57	1	1
1:A:152:GLN:HA	1:A:155:ILE:CG2	0.51	2.35	11	8
1:A:16:ILE:CG2	1:A:61:ILE:HD11	0.51	2.36	2	1
1:A:106:THR:HG22	1:A:108:THR:CG2	0.51	2.36	2	1
1:A:61:ILE:HG22	1:A:95:GLY:CA	0.51	2.36	7	3
1:A:148:PHE:CZ	1:A:150:LEU:HD12	0.51	2.41	2	1
1:A:73:GLY:O	1:A:74:TYR:CB	0.51	2.56	5	1
1:A:88:ALA:O	1:A:94:GLY:HA2	0.51	2.06	7	5
1:A:107:ASN:O	1:A:107:ASN:CG	0.51	2.49	11	3
1:A:114:LEU:HA	1:A:117:VAL:CG2	0.51	2.35	7	4

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:144:TYR:CE2	1:A:145:THR:O	0.51	2.63	4	1
1:A:16:ILE:O	1:A:52:SER:N	0.51	2.44	10	3
1:A:131:SER:O	1:A:132:GLN:HB2	0.51	2.06	8	4
1:A:115:PHE:CD1	1:A:115:PHE:C	0.51	2.81	2	3
4:A:800:I52:H393	4:A:800:I52:H351	0.51	1.82	5	1
1:A:22:GLY:O	1:A:23:TYR:O	0.51	2.28	8	3
1:A:90:GLY:O	1:A:91:THR:OG1	0.51	2.28	6	1
1:A:29:PRO:CA	1:A:32:VAL:HG23	0.51	2.36	9	2
1:A:116:LEU:HD12	1:A:144:TYR:CE2	0.50	2.41	5	1
1:A:138:MET:CE	1:A:154:ASP:OD2	0.50	2.59	7	1
1:A:136:ALA:O	4:A:800:I52:H33	0.50	2.06	11	1
1:A:35:ALA:CB	1:A:114:LEU:HB3	0.50	2.36	7	4
1:A:77:ASP:O	1:A:77:ASP:OD2	0.50	2.28	2	1
1:A:65:PHE:CE1	1:A:67:ARG:HG3	0.50	2.41	11	1
1:A:152:GLN:HA	1:A:155:ILE:HG23	0.50	1.83	3	8
4:A:800:I52:H61	4:A:800:I52:C25	0.50	2.25	4	1
1:A:145:THR:HG22	4:A:800:I52:H382	0.50	1.83	6	1
1:A:69:GLU:O	1:A:70:HIS:CB	0.50	2.57	1	2
1:A:80:ASP:O	1:A:81:GLY:C	0.50	2.47	11	4
1:A:27:LEU:HD11	1:A:32:VAL:CB	0.50	2.36	2	1
1:A:119:ALA:HB1	1:A:137:LEU:HD21	0.50	1.83	3	1
4:A:800:I52:H16	4:A:800:I52:C7	0.50	2.37	6	2
1:A:23:TYR:CD1	1:A:32:VAL:HG11	0.50	2.42	7	2
1:A:34:ASP:O	1:A:35:ALA:C	0.50	2.49	9	3
1:A:55:HIS:O	1:A:56:ASP:HB2	0.50	2.07	8	1
1:A:27:LEU:HD11	1:A:32:VAL:HA	0.50	1.82	1	2
1:A:126:MET:SD	1:A:162:TYR:OH	0.50	2.70	4	1
1:A:108:THR:O	1:A:110:ALA:N	0.50	2.45	9	1
1:A:76:PHE:CZ	1:A:82:LEU:HD12	0.50	2.41	2	1
1:A:106:THR:O	1:A:114:LEU:N	0.50	2.41	10	7
1:A:154:ASP:O	1:A:158:ILE:CG2	0.50	2.57	3	2
1:A:77:ASP:OD2	1:A:80:ASP:O	0.50	2.30	5	1
1:A:100:ASP:O	1:A:105:TRP:CH2	0.50	2.65	5	1
1:A:77:ASP:OD2	1:A:100:ASP:OD2	0.50	2.30	6	1
1:A:72:ASP:N	1:A:72:ASP:OD1	0.50	2.41	10	1
1:A:147:ASN:O	1:A:148:PHE:HB3	0.50	2.06	11	4
1:A:126:MET:SD	1:A:158:ILE:CD1	0.50	3.00	5	1
1:A:128:LEU:CD1	1:A:154:ASP:OD1	0.50	2.60	9	1
1:A:121:GLU:O	1:A:124:HIS:N	0.50	2.44	10	1
1:A:103:GLU:HB3	1:A:105:TRP:CZ2	0.50	2.42	1	1
1:A:11:TRP:CE3	1:A:11:TRP:HA	0.50	2.42	2	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:TRP:CZ3	1:A:123:GLY:HA2	0.50	2.41	2	1
1:A:16:ILE:HD13	1:A:16:ILE:N	0.50	2.22	5	1
1:A:83:LEU:HD23	1:A:103:GLU:OE1	0.50	2.06	10	1
1:A:147:ASN:O	1:A:148:PHE:O	0.50	2.30	7	4
1:A:152:GLN:HA	1:A:155:ILE:HG12	0.50	1.83	2	4
1:A:18:TYR:CZ	1:A:53:ARG:HB3	0.50	2.40	5	3
1:A:74:TYR:CZ	1:A:85:HIS:CD2	0.50	3.00	6	1
1:A:66:GLY:O	1:A:68:TRP:N	0.50	2.45	11	1
1:A:25:PRO:O	1:A:27:LEU:N	0.49	2.45	4	8
1:A:117:VAL:CG2	1:A:118:ALA:N	0.49	2.75	6	3
1:A:53:ARG:CZ	1:A:53:ARG:HB2	0.49	2.37	3	2
1:A:23:TYR:HB2	1:A:32:VAL:HG21	0.49	1.82	4	1
1:A:162:TYR:O	1:A:162:TYR:CG	0.49	2.63	4	1
1:A:23:TYR:CD1	1:A:32:VAL:CG1	0.49	2.95	5	1
1:A:40:PHE:CD1	1:A:40:PHE:C	0.49	2.82	9	2
1:A:62:MET:C	1:A:63:ILE:HD12	0.49	2.27	10	1
1:A:66:GLY:O	1:A:67:ARG:O	0.49	2.29	7	1
1:A:24:THR:CG2	1:A:27:LEU:HD11	0.49	2.36	10	2
1:A:47:THR:OG1	1:A:48:PRO:HD2	0.49	2.07	11	7
1:A:85:HIS:CB	4:A:800:I52:H252	0.49	2.36	1	1
1:A:144:TYR:CZ	1:A:146:LYS:HA	0.49	2.42	2	1
1:A:82:LEU:HD23	1:A:100:ASP:HB2	0.49	1.84	4	1
1:A:77:ASP:CG	1:A:78:GLY:N	0.49	2.66	7	1
1:A:83:LEU:HD22	1:A:112:TYR:CE2	0.49	2.41	11	1
1:A:65:PHE:CD2	1:A:101:ASP:HA	0.49	2.42	6	1
1:A:106:THR:HG23	1:A:110:ALA:O	0.49	2.07	9	1
1:A:120:HIS:CE1	1:A:138:MET:HE2	0.49	2.43	9	1
1:A:31:THR:HG23	1:A:107:ASN:HB3	0.49	1.84	11	2
1:A:17:THR:HB	1:A:54:ILE:CD1	0.49	2.37	3	1
1:A:86:ALA:HB2	1:A:97:SER:HB3	0.49	1.83	3	1
4:A:800:I52:H20	4:A:800:I52:H71	0.49	1.84	3	1
1:A:143:THR:O	1:A:144:TYR:CB	0.49	2.61	9	2
1:A:17:THR:CG2	1:A:54:ILE:HD13	0.49	2.38	7	1
1:A:150:LEU:O	1:A:151:SER:OG	0.49	2.27	7	1
1:A:64:ASN:OD1	1:A:65:PHE:N	0.49	2.45	11	1
1:A:76:PHE:CE1	1:A:85:HIS:ND1	0.49	2.80	2	1
1:A:149:ARG:O	1:A:150:LEU:HB2	0.49	2.07	7	5
1:A:155:ILE:HA	1:A:158:ILE:HG22	0.49	1.83	2	1
1:A:158:ILE:CG2	1:A:159:GLN:N	0.49	2.76	6	3
1:A:67:ARG:O	1:A:76:PHE:CE1	0.49	2.66	8	1
1:A:116:LEU:C	1:A:116:LEU:HD13	0.49	2.28	9	1

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:128:LEU:N	1:A:128:LEU:HD22	0.49	2.23	11	1
1:A:68:TRP:O	1:A:75:PRO:CB	0.49	2.60	1	1
1:A:17:THR:O	1:A:60:ASP:OD2	0.49	2.31	4	1
1:A:19:ARG:NH1	1:A:19:ARG:HG2	0.49	2.23	4	1
1:A:18:TYR:CD1	1:A:18:TYR:N	0.49	2.80	5	1
1:A:63:ILE:CG2	1:A:64:ASN:N	0.49	2.76	9	1
1:A:116:LEU:CD1	1:A:144:TYR:HA	0.49	2.38	3	1
1:A:43:TRP:CG	1:A:126:MET:HE1	0.49	2.43	4	1
1:A:67:ARG:O	1:A:69:GLU:N	0.49	2.46	6	1
1:A:80:ASP:N	1:A:80:ASP:OD1	0.49	2.43	9	1
1:A:141:ILE:HD12	1:A:141:ILE:H	0.49	1.68	10	1
1:A:84:ALA:HB1	1:A:99:PHE:CE1	0.49	2.41	11	1
1:A:81:GLY:O	1:A:82:LEU:C	0.49	2.51	2	7
1:A:70:HIS:CE1	1:A:98:HIS:HB2	0.49	2.43	7	1
1:A:152:GLN:O	1:A:153:ASP:C	0.49	2.51	1	9
1:A:76:PHE:CG	1:A:77:ASP:N	0.49	2.81	2	2
1:A:41:GLN:O	1:A:45:ASP:HB3	0.49	2.08	4	2
1:A:143:THR:O	1:A:144:TYR:O	0.49	2.31	6	2
1:A:74:TYR:CD1	1:A:74:TYR:N	0.49	2.80	9	1
1:A:42:VAL:HG12	1:A:43:TRP:CD2	0.48	2.42	10	3
4:A:800:I52:H62	4:A:800:I52:C24	0.48	2.36	9	2
1:A:47:THR:HG21	1:A:158:ILE:HG12	0.48	1.83	10	1
1:A:105:TRP:HB3	1:A:114:LEU:CD2	0.48	2.37	11	1
4:A:800:I52:O22	4:A:800:I52:H72	0.48	2.07	10	2
1:A:105:TRP:O	1:A:113:SER:HA	0.48	2.08	6	1
1:A:24:THR:CG2	1:A:26:ASP:OD2	0.48	2.61	7	1
1:A:64:ASN:OD1	1:A:97:SER:O	0.48	2.31	8	1
1:A:116:LEU:HD21	4:A:800:I52:H371	0.48	1.85	9	1
1:A:159:GLN:O	1:A:163:GLY:N	0.48	2.45	10	3
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:122:PHE:HB2	0.48	2.43	10	1
1:A:11:TRP:CD2	1:A:60:ASP:OD2	0.48	2.66	6	2
1:A:102:ASP:O	1:A:103:GLU:HB2	0.48	2.09	2	1
1:A:95:GLY:O	1:A:96:ASP:CG	0.48	2.51	4	2
1:A:100:ASP:CB	1:A:103:GLU:OE1	0.48	2.61	10	1
1:A:107:ASN:OD1	1:A:108:THR:N	0.48	2.46	2	1
1:A:83:LEU:HD22	1:A:112:TYR:CZ	0.48	2.43	11	1
1:A:44:SER:O	1:A:47:THR:O	0.48	2.31	1	6
1:A:82:LEU:O	1:A:82:LEU:HG	0.48	2.07	1	1
1:A:13:LYS:O	1:A:14:ASN:C	0.48	2.50	2	1
1:A:116:LEU:HD22	1:A:116:LEU:H	0.48	1.67	2	1
1:A:81:GLY:O	1:A:83:LEU:N	0.48	2.46	6	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:VAL:HG21	1:A:155:ILE:HB	0.48	1.85	9	2
1:A:11:TRP:HA	1:A:11:TRP:CE3	0.48	2.44	6	4
1:A:25:PRO:O	1:A:26:ASP:C	0.48	2.51	3	9
1:A:85:HIS:HB2	4:A:800:I52:H241	0.48	1.85	2	1
1:A:102:ASP:OD1	1:A:102:ASP:N	0.48	2.46	3	2
1:A:54:ILE:HD12	1:A:58:GLU:O	0.48	2.08	8	1
1:A:105:TRP:CD1	1:A:112:TYR:CB	0.48	2.96	11	1
1:A:23:TYR:CD1	1:A:32:VAL:HG13	0.48	2.43	2	1
1:A:129:GLU:O	1:A:130:HIS:O	0.48	2.31	5	2
1:A:32:VAL:HG23	1:A:114:LEU:HD22	0.48	1.86	8	1
4:A:800:I52:H61	4:A:800:I52:C24	0.48	2.36	8	1
1:A:42:VAL:CG2	1:A:148:PHE:CZ	0.48	2.96	1	2
1:A:61:ILE:HA	1:A:95:GLY:O	0.48	2.09	4	3
1:A:101:ASP:O	1:A:103:GLU:N	0.48	2.47	11	2
1:A:93:VAL:CG2	1:A:94:GLY:N	0.48	2.76	6	1
1:A:148:PHE:O	1:A:149:ARG:CD	0.48	2.62	9	1
1:A:24:THR:HG23	1:A:26:ASP:H	0.48	1.69	2	1
1:A:66:GLY:N	1:A:99:PHE:O	0.48	2.47	4	1
1:A:88:ALA:O	1:A:95:GLY:N	0.48	2.47	11	1
1:A:24:THR:HG23	1:A:25:PRO:CD	0.48	2.37	2	1
1:A:84:ALA:O	4:A:800:I52:H4	0.48	2.09	5	1
1:A:17:THR:HG22	1:A:54:ILE:CG2	0.48	2.39	7	1
1:A:133:ASP:HB3	1:A:136:ALA:HB2	0.48	1.84	7	2
1:A:114:LEU:O	1:A:116:LEU:N	0.48	2.47	10	1
1:A:62:MET:SD	1:A:96:ASP:OD1	0.47	2.72	1	2
1:A:71:GLY:O	1:A:72:ASP:O	0.47	2.30	4	3
1:A:155:ILE:C	1:A:155:ILE:CD1	0.47	2.82	4	6
1:A:83:LEU:HD22	1:A:105:TRP:CZ2	0.47	2.43	2	1
1:A:41:GLN:O	1:A:45:ASP:CG	0.47	2.52	9	2
1:A:49:LEU:HD21	1:A:162:TYR:CG	0.47	2.43	10	1
1:A:83:LEU:HD21	1:A:112:TYR:CZ	0.47	2.43	11	1
1:A:14:ASN:O	1:A:15:GLN:O	0.47	2.32	1	1
1:A:73:GLY:O	1:A:74:TYR:O	0.47	2.32	2	1
1:A:79:LYS:O	1:A:80:ASP:O	0.47	2.32	3	3
1:A:106:THR:C	1:A:108:THR:N	0.47	2.66	6	2
1:A:10:LYS:O	1:A:11:TRP:C	0.47	2.52	10	1
1:A:40:PHE:CE1	1:A:51:PHE:CD1	0.47	3.02	11	1
1:A:130:HIS:HE1	4:A:800:I52:H132	0.47	1.65	2	1
1:A:142:TYR:CE2	1:A:144:TYR:HB2	0.47	2.44	6	1
1:A:28:ASP:HB2	1:A:31:THR:CB	0.47	2.39	7	5
1:A:31:THR:CG2	1:A:107:ASN:CB	0.47	2.92	11	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:102:ASP:C	1:A:103:GLU:CG	0.47	2.83	3	1
1:A:74:TYR:N	1:A:74:TYR:CD1	0.47	2.82	10	1
1:A:11:TRP:CZ2	1:A:60:ASP:OD2	0.47	2.68	2	1
1:A:16:ILE:HD12	1:A:51:PHE:CE2	0.47	2.44	2	1
1:A:31:THR:CG2	1:A:107:ASN:HB2	0.47	2.39	5	1
1:A:116:LEU:CD1	4:A:800:I52:H31	0.47	2.40	10	1
1:A:124:HIS:O	1:A:126:MET:N	0.47	2.48	5	3
1:A:158:ILE:O	1:A:162:TYR:HB2	0.47	2.10	2	1
1:A:13:LYS:O	1:A:14:ASN:CB	0.47	2.61	5	1
1:A:31:THR:HG23	1:A:107:ASN:CB	0.47	2.40	11	3
1:A:41:GLN:O	1:A:45:ASP:HB2	0.47	2.08	7	2
1:A:113:SER:O	1:A:114:LEU:C	0.47	2.52	6	4
1:A:90:GLY:O	1:A:91:THR:HB	0.47	2.09	7	1
1:A:24:THR:HG23	1:A:27:LEU:HD11	0.47	1.85	9	1
1:A:116:LEU:HD11	1:A:144:TYR:CA	0.47	2.37	11	1
1:A:124:HIS:CE1	1:A:130:HIS:CD2	0.47	3.02	11	1
1:A:124:HIS:O	1:A:125:ALA:C	0.47	2.52	5	3
1:A:32:VAL:HG12	1:A:114:LEU:HD21	0.47	1.86	10	1
1:A:21:ILE:HB	1:A:64:ASN:ND2	0.47	2.25	1	1
1:A:27:LEU:HD11	1:A:32:VAL:HB	0.47	1.86	2	1
1:A:28:ASP:HB2	1:A:31:THR:OG1	0.47	2.10	7	3
1:A:20:ILE:HD13	1:A:23:TYR:HE1	0.47	1.62	1	2
1:A:103:GLU:HB3	1:A:105:TRP:CE2	0.47	2.45	1	1
1:A:123:GLY:HA3	1:A:138:MET:CE	0.47	2.40	1	1
1:A:138:MET:SD	1:A:138:MET:N	0.47	2.88	2	1
1:A:21:ILE:N	1:A:63:ILE:O	0.47	2.48	4	1
1:A:43:TRP:CE3	1:A:126:MET:SD	0.47	3.08	9	1
1:A:61:ILE:N	1:A:61:ILE:CD1	0.46	2.75	2	1
1:A:119:ALA:HA	1:A:122:PHE:HB2	0.46	1.86	3	2
1:A:27:LEU:HD23	1:A:27:LEU:N	0.46	2.23	4	1
1:A:40:PHE:HA	1:A:43:TRP:CE3	0.46	2.45	4	1
1:A:31:THR:HG21	1:A:107:ASN:CA	0.46	2.38	6	1
1:A:68:TRP:O	1:A:69:GLU:C	0.46	2.53	10	2
1:A:71:GLY:O	1:A:72:ASP:C	0.46	2.53	1	2
1:A:102:ASP:O	1:A:103:GLU:OE1	0.46	2.34	9	2
1:A:147:ASN:O	1:A:148:PHE:C	0.46	2.54	1	1
1:A:29:PRO:O	1:A:33:ASP:HB3	0.46	2.10	2	1
1:A:38:ARG:C	1:A:42:VAL:HG22	0.46	2.28	2	1
1:A:158:ILE:O	1:A:163:GLY:N	0.46	2.49	2	1
1:A:161:LEU:O	1:A:161:LEU:CD1	0.46	2.62	2	1
1:A:76:PHE:O	1:A:76:PHE:CD1	0.46	2.69	5	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:119:ALA:O	1:A:122:PHE:N	0.46	2.48	11	3
1:A:116:LEU:CD2	4:A:800:I52:H381	0.46	2.40	6	1
1:A:70:HIS:N	1:A:70:HIS:ND1	0.46	2.63	3	1
1:A:138:MET:O	1:A:139:ALA:C	0.46	2.53	9	2
1:A:18:TYR:CD1	1:A:18:TYR:O	0.46	2.68	2	1
1:A:63:ILE:C	1:A:64:ASN:OD1	0.46	2.54	4	1
1:A:109:SER:O	1:A:110:ALA:C	0.46	2.52	7	2
1:A:91:THR:O	1:A:92:GLY:C	0.46	2.53	7	2
1:A:76:PHE:O	1:A:77:ASP:OD2	0.46	2.32	7	2
1:A:54:ILE:N	1:A:54:ILE:CD1	0.46	2.75	1	4
1:A:69:GLU:O	1:A:70:HIS:HB3	0.46	2.11	1	1
1:A:82:LEU:O	1:A:100:ASP:OD1	0.46	2.34	1	1
1:A:149:ARG:O	4:A:800:I52:H381	0.46	2.10	1	1
1:A:105:TRP:O	1:A:106:THR:HG22	0.46	2.10	9	2
1:A:116:LEU:HG	1:A:144:TYR:CD1	0.46	2.46	4	1
1:A:23:TYR:CD1	1:A:32:VAL:CG2	0.46	2.98	5	1
1:A:99:PHE:HB3	1:A:105:TRP:CZ3	0.46	2.45	5	1
1:A:151:SER:OG	1:A:153:ASP:OD1	0.46	2.34	7	1
1:A:43:TRP:CH2	1:A:123:GLY:HA3	0.46	2.45	9	1
1:A:62:MET:O	1:A:96:ASP:HA	0.46	2.11	1	4
1:A:105:TRP:C	1:A:106:THR:CG2	0.46	2.79	9	4
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:137:LEU:HD21	0.46	2.46	2	1
1:A:70:HIS:CD2	1:A:72:ASP:OD1	0.46	2.68	8	1
1:A:38:ARG:O	1:A:39:ALA:C	0.46	2.53	9	4
1:A:18:TYR:HB3	1:A:61:ILE:HG12	0.46	1.88	2	1
1:A:65:PHE:CD1	1:A:65:PHE:C	0.46	2.89	2	1
1:A:85:HIS:CE1	1:A:98:HIS:HB2	0.46	2.45	2	2
1:A:66:GLY:O	1:A:101:ASP:CB	0.46	2.63	3	1
1:A:158:ILE:CD1	1:A:162:TYR:OH	0.46	2.63	4	1
1:A:105:TRP:C	1:A:110:ALA:CB	0.46	2.84	6	1
1:A:65:PHE:CD2	1:A:105:TRP:CH2	0.46	3.04	7	1
1:A:148:PHE:O	1:A:149:ARG:CG	0.46	2.63	9	1
1:A:62:MET:HB2	1:A:96:ASP:CG	0.46	2.30	11	1
1:A:127:GLY:O	1:A:128:LEU:C	0.46	2.53	2	4
1:A:97:SER:C	1:A:98:HIS:CD2	0.46	2.89	6	1
1:A:109:SER:O	1:A:109:SER:OG	0.46	2.30	6	1
1:A:116:LEU:HD21	4:A:800:I52:H381	0.46	1.87	6	1
1:A:116:LEU:CD1	4:A:800:I52:H33	0.46	2.40	7	2
1:A:54:ILE:O	1:A:55:HIS:O	0.46	2.34	2	1
1:A:29:PRO:O	1:A:33:ASP:CB	0.46	2.65	2	1
1:A:75:PRO:O	1:A:76:PHE:HB2	0.46	2.11	2	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:77:ASP:O	1:A:78:GLY:C	0.46	2.54	6	2
1:A:24:THR:OG1	1:A:26:ASP:OD1	0.46	2.33	3	1
1:A:23:TYR:HB2	1:A:32:VAL:CG1	0.46	2.40	4	1
1:A:133:ASP:CB	1:A:136:ALA:HB2	0.46	2.41	10	1
1:A:93:VAL:O	1:A:96:ASP:OD2	0.45	2.34	1	1
1:A:108:THR:OG1	1:A:109:SER:N	0.45	2.49	9	3
1:A:155:ILE:C	1:A:155:ILE:HD12	0.45	2.31	2	1
1:A:31:THR:O	1:A:32:VAL:C	0.45	2.55	9	3
1:A:127:GLY:O	1:A:128:LEU:O	0.45	2.34	3	1
4:A:800:I52:C24	4:A:800:I52:H121	0.45	2.40	3	1
1:A:143:THR:O	4:A:800:I52:H352	0.45	2.11	7	1
1:A:100:ASP:OD2	1:A:103:GLU:CD	0.45	2.55	9	1
1:A:55:HIS:O	1:A:55:HIS:ND1	0.45	2.49	10	1
1:A:11:TRP:CZ2	1:A:90:GLY:O	0.45	2.68	11	1
1:A:45:ASP:O	1:A:45:ASP:OD1	0.45	2.34	1	2
1:A:62:MET:HB2	1:A:96:ASP:OD1	0.45	2.12	11	2
1:A:40:PHE:O	1:A:44:SER:HB3	0.45	2.12	10	3
1:A:15:GLN:HA	1:A:50:ARG:O	0.45	2.11	5	2
1:A:49:LEU:HB3	1:A:51:PHE:CE1	0.45	2.46	10	2
1:A:20:ILE:CD1	1:A:23:TYR:CE1	0.45	2.91	10	1
1:A:122:PHE:O	1:A:126:MET:SD	0.45	2.73	11	1
1:A:51:PHE:CD1	1:A:51:PHE:N	0.45	2.85	9	1
1:A:144:TYR:O	4:A:800:I52:H352	0.45	2.11	9	1
1:A:141:ILE:HD12	1:A:141:ILE:N	0.45	2.27	10	1
1:A:26:ASP:O	1:A:26:ASP:OD2	0.45	2.34	2	1
1:A:82:LEU:O	1:A:100:ASP:CB	0.45	2.64	4	1
1:A:90:GLY:O	1:A:91:THR:HG23	0.45	2.11	2	1
1:A:18:TYR:CZ	1:A:53:ARG:HG2	0.45	2.47	4	1
1:A:48:PRO:CD	1:A:163:GLY:OXT	0.45	2.65	4	1
1:A:143:THR:HB	4:A:800:I52:H31	0.45	1.86	5	1
1:A:24:THR:HG23	1:A:27:LEU:CD2	0.45	2.42	7	1
1:A:43:TRP:O	1:A:47:THR:OG1	0.45	2.34	8	1
1:A:28:ASP:HB3	1:A:31:THR:OG1	0.45	2.11	1	1
1:A:118:ALA:O	1:A:119:ALA:C	0.45	2.55	1	2
4:A:800:I52:H241	4:A:800:I52:C7	0.45	2.33	1	1
1:A:155:ILE:HG13	1:A:156:LYS:N	0.45	2.26	4	3
1:A:137:LEU:HD13	4:A:800:I52:H351	0.45	1.85	6	1
1:A:26:ASP:OD1	1:A:27:LEU:N	0.45	2.50	7	1
4:A:800:I52:H252	4:A:800:I52:C7	0.45	2.42	8	1
1:A:26:ASP:OD1	1:A:105:TRP:O	0.45	2.35	1	1
1:A:106:THR:O	1:A:107:ASN:C	0.45	2.55	2	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:107:ASN:O	1:A:107:ASN:ND2	0.45	2.49	3	1
1:A:17:THR:N	1:A:60:ASP:OD2	0.45	2.49	4	1
1:A:26:ASP:OD1	1:A:26:ASP:C	0.45	2.55	7	1
1:A:156:LYS:HD3	1:A:157:GLY:N	0.45	2.27	7	1
1:A:15:GLN:O	1:A:15:GLN:HG3	0.45	2.10	8	1
1:A:49:LEU:CD1	1:A:162:TYR:CG	0.45	3.00	8	1
1:A:142:TYR:O	1:A:143:THR:HB	0.45	2.11	9	1
1:A:142:TYR:CD1	1:A:143:THR:N	0.45	2.85	10	1
1:A:45:ASP:OD1	1:A:46:VAL:CG1	0.45	2.65	3	1
1:A:143:THR:O	1:A:144:TYR:C	0.45	2.55	10	3
1:A:45:ASP:OD1	1:A:45:ASP:C	0.45	2.55	8	1
1:A:76:PHE:CZ	1:A:98:HIS:NE2	0.45	2.85	8	1
1:A:106:THR:OG1	1:A:112:TYR:O	0.45	2.33	10	1
1:A:114:LEU:O	1:A:115:PHE:C	0.45	2.55	10	1
1:A:13:LYS:O	1:A:14:ASN:O	0.45	2.34	1	2
1:A:108:THR:C	1:A:110:ALA:N	0.45	2.64	2	1
1:A:113:SER:HB3	1:A:116:LEU:CD2	0.45	2.42	2	1
1:A:29:PRO:O	1:A:32:VAL:HG12	0.45	2.12	5	4
1:A:20:ILE:CG1	1:A:20:ILE:O	0.45	2.64	4	1
1:A:104:LEU:O	1:A:111:ASN:OD1	0.45	2.35	4	1
1:A:104:LEU:O	1:A:111:ASN:HB2	0.45	2.11	7	1
1:A:155:ILE:CD1	1:A:159:GLN:CD	0.45	2.85	10	1
1:A:36:PHE:O	1:A:40:PHE:CD2	0.45	2.70	2	1
1:A:54:ILE:CD1	1:A:59:ALA:HA	0.45	2.42	8	1
1:A:31:THR:O	1:A:33:ASP:N	0.45	2.50	9	1
1:A:105:TRP:CG	1:A:114:LEU:HD22	0.45	2.47	11	1
1:A:67:ARG:HA	1:A:101:ASP:CB	0.44	2.42	3	1
1:A:11:TRP:O	1:A:12:ASP:CB	0.44	2.65	5	1
1:A:42:VAL:CG2	1:A:148:PHE:CE2	0.44	2.99	6	1
1:A:39:ALA:O	1:A:40:PHE:C	0.44	2.53	8	4
1:A:129:GLU:O	1:A:130:HIS:C	0.44	2.56	6	2
1:A:23:TYR:HB2	1:A:32:VAL:CG2	0.44	2.41	4	1
1:A:27:LEU:CD1	1:A:32:VAL:HB	0.44	2.42	5	1
1:A:20:ILE:HD13	1:A:23:TYR:CD1	0.44	2.47	11	1
1:A:116:LEU:HD13	1:A:116:LEU:N	0.44	2.27	2	1
1:A:42:VAL:O	1:A:45:ASP:OD2	0.44	2.35	3	1
1:A:140:PRO:C	1:A:141:ILE:CG1	0.44	2.85	3	1
1:A:46:VAL:HG11	1:A:158:ILE:HG21	0.44	1.87	7	1
1:A:76:PHE:O	1:A:77:ASP:CG	0.44	2.56	7	2
1:A:100:ASP:O	1:A:105:TRP:CZ2	0.44	2.69	10	2
1:A:108:THR:O	1:A:108:THR:OG1	0.44	2.32	8	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:80:ASP:CG	1:A:112:TYR:OH	0.44	2.56	1	1
1:A:108:THR:OG1	1:A:113:SER:HA	0.44	2.12	2	1
1:A:63:ILE:HA	1:A:97:SER:O	0.44	2.12	3	1
1:A:27:LEU:HD21	1:A:32:VAL:CB	0.44	2.41	4	1
1:A:116:LEU:CD2	4:A:800:I52:C33	0.44	2.95	5	1
1:A:28:ASP:CB	1:A:31:THR:CB	0.44	2.95	7	1
1:A:116:LEU:CD1	4:A:800:I52:C33	0.44	2.96	7	1
1:A:122:PHE:O	1:A:126:MET:HG3	0.44	2.12	7	1
1:A:18:TYR:CB	1:A:61:ILE:HB	0.44	2.43	10	1
1:A:151:SER:HB2	1:A:153:ASP:OD1	0.44	2.13	10	1
1:A:17:THR:HA	1:A:52:SER:O	0.44	2.12	8	3
1:A:87:PHE:O	1:A:88:ALA:O	0.44	2.36	1	1
1:A:16:ILE:HG22	1:A:17:THR:H	0.44	1.72	6	1
1:A:49:LEU:HD23	1:A:51:PHE:CE2	0.44	2.48	7	1
1:A:65:PHE:CG	1:A:105:TRP:CZ3	0.44	3.05	7	1
1:A:70:HIS:CG	1:A:72:ASP:OD1	0.44	2.70	8	1
1:A:128:LEU:HD21	1:A:157:GLY:HA3	0.44	1.89	8	1
1:A:132:GLN:O	1:A:133:ASP:C	0.44	2.56	11	2
1:A:67:ARG:CZ	1:A:67:ARG:CB	0.44	2.96	2	1
1:A:106:THR:CG2	1:A:108:THR:CG2	0.44	2.96	2	1
1:A:148:PHE:CD2	4:A:800:I52:H391	0.44	2.48	2	1
1:A:115:PHE:O	1:A:115:PHE:CD1	0.44	2.70	3	1
1:A:158:ILE:O	1:A:162:TYR:N	0.44	2.48	3	1
1:A:81:GLY:O	1:A:83:LEU:HD12	0.44	2.11	4	1
1:A:121:GLU:HA	1:A:121:GLU:OE1	0.44	2.11	9	2
1:A:83:LEU:HD23	1:A:103:GLU:OE2	0.44	2.11	5	1
1:A:40:PHE:CD1	1:A:51:PHE:CD2	0.44	3.06	2	1
1:A:42:VAL:HG23	1:A:148:PHE:CD2	0.44	2.48	3	1
1:A:99:PHE:O	1:A:100:ASP:O	0.44	2.36	3	1
1:A:27:LEU:HD12	1:A:27:LEU:C	0.44	2.33	5	2
1:A:28:ASP:HB2	1:A:31:THR:HB	0.44	1.88	7	4
1:A:39:ALA:O	1:A:42:VAL:N	0.44	2.51	8	3
1:A:106:THR:OG1	1:A:108:THR:CG2	0.44	2.66	9	1
1:A:68:TRP:CE3	1:A:68:TRP:O	0.44	2.70	10	1
1:A:145:THR:O	1:A:145:THR:OG1	0.44	2.36	2	1
1:A:68:TRP:O	1:A:74:TYR:O	0.44	2.36	5	1
1:A:105:TRP:HB3	1:A:114:LEU:HB2	0.44	1.90	6	1
1:A:118:ALA:O	1:A:122:PHE:HB2	0.44	2.13	7	1
1:A:137:LEU:HA	4:A:800:I52:H362	0.44	1.89	7	1
1:A:100:ASP:OD2	1:A:103:GLU:OE1	0.44	2.35	8	1
1:A:12:ASP:HB3	1:A:162:TYR:CE1	0.44	2.48	9	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:123:GLY:C	1:A:138:MET:HE3	0.43	2.32	1	1
1:A:106:THR:CG2	1:A:108:THR:HG23	0.43	2.43	2	1
1:A:17:THR:HG22	1:A:54:ILE:HD13	0.43	1.89	7	1
1:A:105:TRP:HB2	1:A:114:LEU:HD12	0.43	1.89	8	1
1:A:161:LEU:O	1:A:162:TYR:CD1	0.43	2.71	10	1
1:A:105:TRP:CZ2	1:A:112:TYR:CB	0.43	3.01	2	1
1:A:137:LEU:CD1	4:A:800:I52:H381	0.43	2.34	3	1
1:A:158:ILE:CD1	1:A:162:TYR:CZ	0.43	3.00	4	1
1:A:24:THR:OG1	1:A:26:ASP:OD2	0.43	2.34	7	1
1:A:155:ILE:O	1:A:158:ILE:HG22	0.43	2.14	9	1
1:A:68:TRP:C	1:A:68:TRP:CD2	0.43	2.92	10	1
1:A:124:HIS:O	1:A:127:GLY:N	0.43	2.43	11	1
1:A:82:LEU:HG	1:A:100:ASP:OD1	0.43	2.12	1	1
1:A:13:LYS:HD2	1:A:16:ILE:HA	0.43	1.90	2	1
1:A:42:VAL:HG11	1:A:115:PHE:CE2	0.43	2.48	2	1
1:A:19:ARG:HD2	1:A:21:ILE:CD1	0.43	2.43	4	1
1:A:27:LEU:CD2	1:A:107:ASN:HB2	0.43	2.43	6	1
1:A:27:LEU:O	1:A:28:ASP:C	0.43	2.55	7	2
1:A:151:SER:HB3	1:A:153:ASP:OD1	0.43	2.12	10	1
1:A:18:TYR:CB	1:A:61:ILE:HG12	0.43	2.43	2	1
1:A:155:ILE:O	1:A:159:GLN:HG2	0.43	2.13	2	1
1:A:62:MET:N	1:A:96:ASP:OD1	0.43	2.51	3	1
1:A:105:TRP:HB2	1:A:114:LEU:CD2	0.43	2.44	3	2
1:A:105:TRP:HB3	1:A:114:LEU:HD22	0.43	1.90	3	1
1:A:152:GLN:O	1:A:154:ASP:N	0.43	2.51	3	1
1:A:27:LEU:CD1	1:A:106:THR:HA	0.43	2.43	4	1
1:A:116:LEU:HD12	1:A:144:TYR:CD2	0.43	2.48	5	1
1:A:30:GLU:O	1:A:34:ASP:HB2	0.43	2.13	7	1
1:A:93:VAL:O	1:A:96:ASP:CG	0.43	2.57	8	1
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:60:ASP:OD2	0.43	2.71	9	1
1:A:42:VAL:HG22	1:A:148:PHE:CE1	0.43	2.48	10	1
1:A:24:THR:CG2	1:A:25:PRO:HD2	0.43	2.42	2	1
1:A:72:ASP:OD1	1:A:72:ASP:C	0.43	2.56	2	1
1:A:120:HIS:ND1	4:A:800:I52:C28	0.43	2.82	4	1
1:A:123:GLY:O	1:A:126:MET:HB2	0.43	2.13	6	1
1:A:120:HIS:CD2	1:A:124:HIS:CD2	0.43	3.06	8	1
1:A:24:THR:HG23	1:A:27:LEU:CD1	0.43	2.43	9	1
1:A:63:ILE:HG22	1:A:64:ASN:N	0.43	2.27	9	1
1:A:18:TYR:HB3	1:A:61:ILE:HG13	0.43	1.90	11	1
1:A:27:LEU:HD21	1:A:105:TRP:O	0.43	2.13	11	1
1:A:108:THR:O	1:A:109:SER:CB	0.43	2.66	2	2

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:137:LEU:CD1	4:A:800:I52:C36	0.43	2.97	2	1
1:A:18:TYR:CE1	1:A:51:PHE:HB3	0.43	2.49	5	1
1:A:12:ASP:OD1	1:A:161:LEU:HD11	0.43	2.14	7	1
1:A:112:TYR:O	1:A:116:LEU:CB	0.43	2.67	7	1
1:A:35:ALA:HB2	1:A:114:LEU:HB3	0.43	1.91	2	1
1:A:145:THR:CG2	4:A:800:I52:C38	0.43	2.96	2	1
1:A:34:ASP:O	1:A:37:ALA:HB3	0.43	2.14	6	1
1:A:116:LEU:CD2	4:A:800:I52:H352	0.43	2.42	6	1
1:A:70:HIS:CG	1:A:75:PRO:HG3	0.43	2.49	7	1
1:A:159:GLN:O	1:A:163:GLY:O	0.43	2.37	1	1
1:A:70:HIS:CE1	1:A:85:HIS:CE1	0.43	3.06	2	1
4:A:800:I52:C25	4:A:800:I52:H131	0.43	2.43	4	1
1:A:40:PHE:O	1:A:44:SER:HB2	0.43	2.14	1	1
1:A:40:PHE:CD1	1:A:51:PHE:CG	0.43	3.07	2	1
1:A:74:TYR:CB	1:A:75:PRO:HD3	0.43	2.44	5	1
1:A:74:TYR:OH	1:A:85:HIS:NE2	0.43	2.51	6	1
1:A:104:LEU:HD13	1:A:105:TRP:H	0.43	1.74	6	1
1:A:132:GLN:O	1:A:136:ALA:CB	0.43	2.67	7	1
1:A:141:ILE:HG22	1:A:142:TYR:N	0.43	2.29	7	1
1:A:137:LEU:CD1	4:A:800:I52:C31	0.43	2.96	8	1
1:A:85:HIS:CD2	1:A:85:HIS:C	0.43	2.92	1	1
1:A:16:ILE:HD12	1:A:49:LEU:HD21	0.43	1.91	7	1
1:A:147:ASN:O	1:A:148:PHE:CD2	0.43	2.72	7	1
1:A:18:TYR:CA	1:A:61:ILE:HG13	0.43	2.44	9	1
1:A:10:LYS:HE2	1:A:89:PRO:CG	0.43	2.44	10	1
1:A:131:SER:O	1:A:131:SER:OG	0.42	2.34	1	1
1:A:116:LEU:CD2	1:A:144:TYR:CD1	0.42	3.01	2	1
1:A:145:THR:OG1	1:A:148:PHE:HA	0.42	2.14	2	1
1:A:46:VAL:O	1:A:47:THR:HG23	0.42	2.14	5	1
1:A:69:GLU:O	1:A:70:HIS:HB2	0.42	2.14	6	1
1:A:27:LEU:HD13	1:A:106:THR:CA	0.42	2.33	7	1
1:A:85:HIS:HA	4:A:800:I52:H2	0.42	1.74	9	1
1:A:24:THR:HG23	1:A:25:PRO:N	0.42	2.28	2	1
1:A:147:ASN:OD1	1:A:147:ASN:N	0.42	2.51	2	1
1:A:93:VAL:O	1:A:93:VAL:CG1	0.42	2.67	8	1
1:A:147:ASN:O	1:A:148:PHE:HB2	0.42	2.13	8	1
1:A:12:ASP:OD1	1:A:12:ASP:N	0.42	2.52	9	1
1:A:27:LEU:CD2	1:A:105:TRP:O	0.42	2.63	9	1
1:A:33:ASP:OD1	1:A:33:ASP:O	0.42	2.36	10	1
1:A:83:LEU:HD21	1:A:112:TYR:CE2	0.42	2.49	11	1
1:A:116:LEU:HD12	1:A:142:TYR:CE1	0.42	2.49	4	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:141:ILE:O	4:A:800:I52:O41	0.42	2.37	1	1
1:A:105:TRP:CE2	1:A:112:TYR:CB	0.42	3.01	2	1
1:A:55:HIS:CD2	1:A:55:HIS:N	0.42	2.87	4	1
1:A:119:ALA:O	1:A:120:HIS:C	0.42	2.57	9	4
1:A:11:TRP:O	1:A:12:ASP:HB3	0.42	2.14	5	1
1:A:73:GLY:O	1:A:74:TYR:CG	0.42	2.72	5	1
1:A:12:ASP:HB2	1:A:16:ILE:HG23	0.42	1.90	6	1
1:A:85:HIS:HB2	4:A:800:I52:H252	0.42	1.91	6	1
1:A:24:THR:HG21	1:A:26:ASP:OD2	0.42	2.15	7	1
1:A:116:LEU:O	1:A:117:VAL:C	0.42	2.57	11	2
1:A:12:ASP:CB	1:A:162:TYR:CE1	0.42	3.02	9	1
1:A:147:ASN:OD1	1:A:147:ASN:C	0.42	2.57	11	1
1:A:27:LEU:C	1:A:27:LEU:CD2	0.42	2.77	2	1
1:A:99:PHE:O	1:A:100:ASP:C	0.42	2.57	3	1
1:A:14:ASN:O	1:A:16:ILE:N	0.42	2.53	7	1
1:A:27:LEU:HD22	1:A:106:THR:HA	0.42	1.90	8	1
1:A:126:MET:HG2	1:A:162:TYR:OH	0.42	2.14	9	1
1:A:145:THR:HB	1:A:148:PHE:HA	0.42	1.91	9	1
1:A:145:THR:HG21	4:A:800:I52:H393	0.42	1.90	2	1
1:A:162:TYR:CD1	1:A:162:TYR:N	0.42	2.87	4	1
4:A:800:I52:H251	4:A:800:I52:H131	0.42	1.91	4	1
1:A:19:ARG:CZ	1:A:55:HIS:O	0.42	2.68	7	1
1:A:106:THR:OG1	1:A:110:ALA:CB	0.42	2.67	8	1
1:A:81:GLY:O	1:A:83:LEU:HG	0.42	2.15	11	3
1:A:123:GLY:C	1:A:138:MET:CE	0.42	2.88	1	1
1:A:16:ILE:HG21	1:A:61:ILE:HD11	0.42	1.92	2	1
1:A:113:SER:HB3	1:A:116:LEU:HD23	0.42	1.90	2	1
1:A:12:ASP:OD1	1:A:161:LEU:HD21	0.42	2.14	7	1
1:A:67:ARG:HG3	1:A:68:TRP:N	0.42	2.30	10	1
1:A:93:VAL:HG12	1:A:94:GLY:H	0.42	1.73	11	1
1:A:24:THR:HG21	1:A:27:LEU:HB3	0.42	1.91	2	1
1:A:39:ALA:CA	1:A:42:VAL:CG2	0.42	2.97	2	1
1:A:77:ASP:C	1:A:78:GLY:O	0.42	2.58	2	1
1:A:63:ILE:O	1:A:64:ASN:HB2	0.42	2.15	11	1
1:A:24:THR:OG1	1:A:26:ASP:CG	0.42	2.58	3	1
1:A:120:HIS:NE2	1:A:124:HIS:CE1	0.42	2.88	5	1
1:A:92:GLY:O	1:A:93:VAL:C	0.42	2.57	6	1
1:A:27:LEU:HD21	1:A:32:VAL:HG23	0.42	1.89	7	1
1:A:24:THR:HG23	1:A:27:LEU:HD22	0.42	1.91	1	1
1:A:105:TRP:CZ2	1:A:112:TYR:HB2	0.42	2.49	2	1
1:A:90:GLY:C	1:A:91:THR:OG1	0.42	2.58	6	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:LEU:HD22	1:A:106:THR:CB	0.42	2.44	8	1
1:A:76:PHE:CE1	1:A:102:ASP:OD2	0.42	2.73	9	1
1:A:115:PHE:CD1	1:A:116:LEU:N	0.42	2.88	9	1
1:A:34:ASP:O	1:A:37:ALA:N	0.42	2.53	11	1
1:A:105:TRP:HE1	1:A:117:VAL:HG11	0.42	1.75	11	1
1:A:109:SER:O	1:A:110:ALA:HB2	0.42	2.15	11	1
1:A:61:ILE:HG22	1:A:95:GLY:C	0.42	2.34	1	1
1:A:90:GLY:N	1:A:94:GLY:HA3	0.42	2.30	1	1
1:A:77:ASP:O	1:A:77:ASP:CG	0.42	2.57	2	1
1:A:66:GLY:O	1:A:101:ASP:HB3	0.42	2.15	3	1
1:A:99:PHE:HB2	1:A:105:TRP:CH2	0.42	2.50	10	1
1:A:120:HIS:CE1	4:A:800:I52:C28	0.41	3.03	4	1
1:A:10:LYS:O	1:A:12:ASP:OD1	0.41	2.38	5	1
1:A:50:ARG:N	1:A:50:ARG:HD2	0.41	2.30	8	1
1:A:53:ARG:HG2	1:A:53:ARG:O	0.41	2.14	10	1
1:A:32:VAL:O	1:A:36:PHE:CD1	0.41	2.73	11	1
1:A:23:TYR:HB3	1:A:32:VAL:HG11	0.41	1.91	2	1
1:A:129:GLU:O	1:A:138:MET:HB3	0.41	2.15	2	1
1:A:36:PHE:O	1:A:37:ALA:C	0.41	2.58	9	2
1:A:13:LYS:O	1:A:13:LYS:HG2	0.41	2.15	6	1
1:A:69:GLU:O	1:A:69:GLU:CG	0.41	2.68	6	1
1:A:113:SER:O	1:A:116:LEU:N	0.41	2.54	9	3
1:A:101:ASP:HA	1:A:105:TRP:CZ2	0.41	2.49	8	1
1:A:108:THR:O	1:A:109:SER:C	0.41	2.58	8	1
1:A:17:THR:O	1:A:61:ILE:HG12	0.41	2.13	9	1
1:A:106:THR:OG1	1:A:108:THR:HG22	0.41	2.15	9	1
1:A:61:ILE:CA	1:A:95:GLY:O	0.41	2.69	1	1
1:A:93:VAL:HA	1:A:96:ASP:OD2	0.41	2.15	1	1
1:A:24:THR:CB	1:A:25:PRO:CD	0.41	2.97	2	1
1:A:78:GLY:O	1:A:79:LYS:C	0.41	2.59	3	2
1:A:139:ALA:O	4:A:800:I52:H34	0.41	2.15	2	1
1:A:86:ALA:HA	1:A:96:ASP:O	0.41	2.15	11	2
1:A:90:GLY:O	1:A:91:THR:CB	0.41	2.67	7	1
1:A:31:THR:C	1:A:33:ASP:N	0.41	2.73	9	1
1:A:27:LEU:HG	1:A:28:ASP:N	0.41	2.30	2	1
1:A:114:LEU:O	1:A:114:LEU:CD1	0.41	2.65	4	1
1:A:18:TYR:O	1:A:53:ARG:HA	0.41	2.15	5	1
1:A:20:ILE:HD13	1:A:23:TYR:CE2	0.41	2.50	5	1
1:A:76:PHE:CE2	1:A:98:HIS:NE2	0.41	2.88	8	1
1:A:123:GLY:O	1:A:128:LEU:HB2	0.41	2.15	11	1
1:A:21:ILE:HB	1:A:64:ASN:OD1	0.41	2.15	10	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:LEU:C	1:A:82:LEU:HD12	0.41	2.35	1	1
1:A:24:THR:CB	1:A:25:PRO:HD2	0.41	2.44	2	1
1:A:161:LEU:CD2	1:A:161:LEU:N	0.41	2.83	4	1
1:A:24:THR:HG22	1:A:105:TRP:CE3	0.41	2.50	7	1
1:A:105:TRP:CZ2	1:A:112:TYR:CG	0.41	3.09	2	1
1:A:152:GLN:C	1:A:154:ASP:N	0.41	2.72	3	1
1:A:18:TYR:O	1:A:54:ILE:HD13	0.41	2.15	6	1
1:A:27:LEU:HD13	1:A:106:THR:OG1	0.41	2.16	6	1
1:A:13:LYS:O	1:A:14:ASN:HB2	0.41	2.14	9	1
1:A:19:ARG:HB3	1:A:59:ALA:CB	0.41	2.46	9	1
1:A:157:GLY:O	1:A:161:LEU:HB2	0.41	2.16	9	1
1:A:57:GLY:O	1:A:58:GLU:CB	0.41	2.69	10	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:137:LEU:CD2	0.41	3.03	2	1
1:A:25:PRO:C	1:A:27:LEU:N	0.41	2.74	5	4
1:A:71:GLY:C	1:A:73:GLY:N	0.41	2.74	6	1
1:A:97:SER:C	1:A:98:HIS:CG	0.41	2.94	6	1
1:A:75:PRO:CB	1:A:82:LEU:HD22	0.41	2.45	7	1
1:A:117:VAL:O	1:A:118:ALA:C	0.41	2.58	9	1
1:A:69:GLU:O	1:A:70:HIS:C	0.41	2.57	2	1
1:A:82:LEU:O	1:A:100:ASP:OD2	0.41	2.39	2	1
1:A:22:GLY:O	1:A:65:PHE:CE2	0.41	2.74	3	1
1:A:145:THR:O	1:A:146:LYS:C	0.41	2.59	3	1
1:A:59:ALA:C	1:A:60:ASP:OD1	0.41	2.59	4	1
1:A:23:TYR:CE1	1:A:32:VAL:HG13	0.41	2.51	5	1
1:A:35:ALA:CB	1:A:114:LEU:HD23	0.41	2.45	6	1
1:A:44:SER:OG	1:A:49:LEU:O	0.41	2.39	6	1
1:A:146:LYS:O	1:A:148:PHE:N	0.41	2.53	6	1
1:A:68:TRP:HB3	1:A:76:PHE:CD1	0.41	2.51	7	1
1:A:85:HIS:O	1:A:97:SER:HB3	0.41	2.15	7	1
1:A:75:PRO:O	1:A:76:PHE:HB3	0.41	2.16	9	1
1:A:49:LEU:CD2	1:A:162:TYR:HB3	0.41	2.39	10	1
1:A:62:MET:CB	1:A:96:ASP:HB3	0.41	2.46	10	1
1:A:112:TYR:CE1	1:A:142:TYR:CD2	0.41	3.09	10	1
1:A:155:ILE:CD1	1:A:159:GLN:NE2	0.41	2.84	10	1
1:A:82:LEU:CD1	1:A:100:ASP:OD1	0.41	2.69	1	1
1:A:19:ARG:HB2	1:A:59:ALA:CB	0.41	2.46	5	1
1:A:19:ARG:HG3	1:A:54:ILE:O	0.41	2.15	5	1
1:A:24:THR:HG22	1:A:27:LEU:HD11	0.41	1.92	5	1
1:A:126:MET:CE	1:A:158:ILE:HD12	0.41	2.40	5	1
1:A:79:LYS:C	1:A:80:ASP:OD1	0.41	2.59	6	1
1:A:90:GLY:O	1:A:91:THR:O	0.41	2.39	6	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:GLY:HA3	1:A:98:HIS:CD2	0.41	2.51	8	1
1:A:67:ARG:O	1:A:68:TRP:O	0.41	2.38	9	1
1:A:77:ASP:N	1:A:77:ASP:OD1	0.41	2.54	10	1
1:A:94:GLY:C	1:A:96:ASP:OD1	0.41	2.59	10	1
1:A:91:THR:CG2	1:A:92:GLY:N	0.41	2.79	11	1
4:A:800:I52:O41	4:A:800:I52:H17	0.40	2.16	1	1
1:A:108:THR:OG1	1:A:113:SER:CA	0.40	2.69	2	1
1:A:23:TYR:CB	1:A:32:VAL:HG21	0.40	2.46	3	1
1:A:119:ALA:CA	1:A:122:PHE:HB2	0.40	2.46	3	1
1:A:121:GLU:OE1	1:A:121:GLU:HA	0.40	2.16	3	1
1:A:38:ARG:O	1:A:42:VAL:N	0.40	2.53	5	2
1:A:70:HIS:CE1	1:A:98:HIS:CB	0.40	3.04	7	1
1:A:85:HIS:NE2	1:A:98:HIS:HB2	0.40	2.31	7	1
1:A:111:ASN:O	1:A:112:TYR:CG	0.40	2.74	7	1
1:A:120:HIS:CD2	4:A:800:I52:O1	0.40	2.73	7	2
1:A:150:LEU:HD12	1:A:150:LEU:HA	0.40	1.67	2	1
1:A:22:GLY:O	1:A:23:TYR:C	0.40	2.60	4	1
1:A:27:LEU:N	1:A:27:LEU:CD2	0.40	2.83	4	1
1:A:156:LYS:O	1:A:160:GLU:HG2	0.40	2.16	4	1
1:A:73:GLY:C	1:A:75:PRO:HD3	0.40	2.36	7	1
1:A:67:ARG:O	1:A:68:TRP:C	0.40	2.58	2	1
1:A:105:TRP:O	1:A:106:THR:CB	0.40	2.69	2	1
1:A:14:ASN:O	1:A:15:GLN:C	0.40	2.59	4	1
1:A:138:MET:HE1	1:A:154:ASP:OD1	0.40	2.16	4	1
1:A:146:LYS:O	1:A:147:ASN:HB2	0.40	2.16	4	1
1:A:16:ILE:N	1:A:16:ILE:CD1	0.40	2.83	5	1
1:A:37:ALA:O	1:A:40:PHE:HB3	0.40	2.16	5	1
1:A:19:ARG:O	1:A:19:ARG:HG3	0.40	2.16	10	1
1:A:68:TRP:CE3	1:A:68:TRP:CA	0.40	3.04	10	1
1:A:88:ALA:O	1:A:94:GLY:HA3	0.40	2.16	10	1
1:A:55:HIS:CG	1:A:56:ASP:N	0.40	2.84	2	1
1:A:42:VAL:C	1:A:45:ASP:OD2	0.40	2.60	3	1
1:A:19:ARG:NH2	1:A:58:GLU:N	0.40	2.69	5	1
1:A:29:PRO:O	1:A:33:ASP:HB2	0.40	2.16	5	1
1:A:67:ARG:HD3	1:A:69:GLU:HG3	0.40	1.94	8	1
1:A:120:HIS:HA	1:A:137:LEU:HD12	0.40	1.94	10	1
1:A:160:GLU:HA	1:A:160:GLU:OE1	0.40	2.15	11	1
1:A:76:PHE:O	1:A:77:ASP:HB3	0.40	2.17	1	1
1:A:103:GLU:HG2	1:A:105:TRP:CH2	0.40	2.52	2	1
1:A:144:TYR:CE2	1:A:146:LYS:CG	0.40	3.05	2	1
1:A:16:ILE:HB	1:A:51:PHE:CD1	0.40	2.52	3	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:95:GLY:O	1:A:96:ASP:OD1	0.40	2.40	3	1
1:A:43:TRP:CZ2	1:A:123:GLY:HA2	0.40	2.51	5	1
1:A:65:PHE:HB2	1:A:99:PHE:O	0.40	2.16	6	1
1:A:155:ILE:O	1:A:159:GLN:HG3	0.40	2.17	10	1
1:A:137:LEU:HD13	4:A:800:I52:H393	0.40	1.93	11	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	153/163 (94%)	104±3 (68±2%)	31±4 (20±2%)	17±4 (11±2%)	1	8
All	All	1683/1793 (94%)	1149 (68%)	345 (20%)	189 (11%)	1	8

All 61 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	80	ASP	9
1	A	148	PHE	9
1	A	23	TYR	8
1	A	10	LYS	7
1	A	72	ASP	6
1	A	150	LEU	6
1	A	14	ASN	5
1	A	70	HIS	5
1	A	110	ALA	5
1	A	113	SER	5
1	A	102	ASP	5
1	A	26	ASP	5
1	A	68	TRP	5
1	A	69	GLU	4
1	A	73	GLY	4
1	A	79	LYS	4
1	A	84	ALA	4

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	109	SER	4
1	A	67	ARG	4
1	A	55	HIS	3
1	A	56	ASP	3
1	A	64	ASN	3
1	A	76	PHE	3
1	A	77	ASP	3
1	A	111	ASN	3
1	A	126	MET	3
1	A	127	GLY	3
1	A	75	PRO	3
1	A	101	ASP	3
1	A	108	THR	3
1	A	128	LEU	3
1	A	132	GLN	3
1	A	11	TRP	3
1	A	12	ASP	2
1	A	15	GLN	2
1	A	88	ALA	2
1	A	74	TYR	2
1	A	78	GLY	2
1	A	100	ASP	2
1	A	141	ILE	2
1	A	22	GLY	2
1	A	82	LEU	2
1	A	144	TYR	2
1	A	147	ASN	2
1	A	90	GLY	2
1	A	130	HIS	2
1	A	91	THR	2
1	A	92	GLY	2
1	A	81	GLY	1
1	A	106	THR	1
1	A	103	GLU	1
1	A	146	LYS	1
1	A	93	VAL	1
1	A	145	THR	1
1	A	133	ASP	1
1	A	151	SER	1
1	A	112	TYR	1
1	A	142	TYR	1
1	A	149	ARG	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	115	PHE	1
1	A	143	THR	1

### 6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	125/134 (93%)	83±2 (67±2%)	42±2 (33±2%)	1	11
All	All	1375/1474 (93%)	918 (67%)	457 (33%)	1	11

All 107 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	133	ASP	11
1	A	42	VAL	10
1	A	155	ILE	10
1	A	17	THR	9
1	A	27	LEU	9
1	A	103	GLU	9
1	A	161	LEU	9
1	A	32	VAL	8
1	A	61	ILE	8
1	A	87	PHE	8
1	A	113	SER	8
1	A	114	LEU	8
1	A	146	LYS	8
1	A	10	LYS	7
1	A	13	LYS	7
1	A	52	SER	7
1	A	58	GLU	7
1	A	122	PHE	7
1	A	156	LYS	7
1	A	67	ARG	7
1	A	116	LEU	7
1	A	11	TRP	6
1	A	54	ILE	6

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	82	LEU	6
1	A	97	SER	6
1	A	138	MET	6
1	A	141	ILE	6
1	A	60	ASP	6
1	A	91	THR	6
1	A	109	SER	6
1	A	151	SER	6
1	A	23	TYR	6
1	A	153	ASP	6
1	A	38	ARG	5
1	A	40	PHE	5
1	A	41	GLN	5
1	A	53	ARG	5
1	A	100	ASP	5
1	A	19	ARG	5
1	A	24	THR	5
1	A	50	ARG	5
1	A	56	ASP	5
1	A	68	TRP	5
1	A	70	HIS	5
1	A	33	ASP	5
1	A	43	TRP	5
1	A	47	THR	5
1	A	108	THR	5
1	A	93	VAL	4
1	A	104	LEU	4
1	A	105	TRP	4
1	A	132	GLN	4
1	A	149	ARG	4
1	A	159	GLN	4
1	A	49	LEU	4
1	A	65	PHE	4
1	A	79	LYS	4
1	A	158	ILE	4
1	A	16	ILE	3
1	A	26	ASP	3
1	A	128	LEU	3
1	A	129	GLU	3
1	A	131	SER	3
1	A	62	MET	3
1	A	145	THR	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	154	ASP	3
1	A	69	GLU	3
1	A	77	ASP	3
1	A	80	ASP	3
1	A	107	ASN	3
1	A	111	ASN	3
1	A	115	PHE	3
1	A	150	LEU	3
1	A	14	ASN	3
1	A	28	ASP	2
1	A	44	SER	2
1	A	142	TYR	2
1	A	143	THR	2
1	A	55	HIS	2
1	A	98	HIS	2
1	A	102	ASP	2
1	A	124	HIS	2
1	A	72	ASP	2
1	A	76	PHE	2
1	A	64	ASN	2
1	A	74	TYR	2
1	A	144	TYR	2
1	A	148	PHE	2
1	A	96	ASP	2
1	A	126	MET	2
1	A	160	GLU	2
1	A	112	TYR	2
1	A	34	ASP	1
1	A	117	VAL	1
1	A	147	ASN	1
1	A	18	TYR	1
1	A	20	ILE	1
1	A	101	ASP	1
1	A	12	ASP	1
1	A	45	ASP	1
1	A	15	GLN	1
1	A	83	LEU	1
1	A	106	THR	1
1	A	152	GLN	1
1	A	21	ILE	1
1	A	85	HIS	1
1	A	137	LEU	1

### 6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

## 6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

## 6.6 Ligand geometry [i](#)

Of 5 ligands modelled in this entry, 4 are monoatomic - leaving 1 for Mogul analysis.

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths		
					Counts	RMSZ	#Z>2
4	I52	A	800	2	42,42,42	1.99±0.05	15±1 (35±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
4	I52	A	800	2	54,57,57	1.18±0.06	4±1 (8±1%)

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the chemical component dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means

no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
4	I52	A	800	2	-	0±0,44,52,52	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
4	A	800	I52	S14-N5	5.14	1.71	1.63	10	11
4	A	800	I52	C3-N2	4.11	1.39	1.33	2	11
4	A	800	I52	C17-C18	4.05	1.46	1.39	11	11
4	A	800	I52	C16-C15	3.47	1.44	1.38	7	11
4	A	800	I52	C19-C20	3.24	1.44	1.38	1	11
4	A	800	I52	C20-C15	3.22	1.43	1.38	11	11
4	A	800	I52	C34-C29	3.19	1.44	1.39	4	11
4	A	800	I52	C30-C29	3.14	1.44	1.39	11	11
4	A	800	I52	C34-C33	3.07	1.44	1.38	4	11
4	A	800	I52	C30-C31	3.06	1.44	1.38	7	11
4	A	800	I52	C19-C18	3.04	1.44	1.39	6	11
4	A	800	I52	C17-C16	3.01	1.44	1.38	4	11
4	A	800	I52	C31-C32	3.00	1.45	1.38	11	11
4	A	800	I52	C33-C32	2.70	1.44	1.38	8	11
4	A	800	I52	O21-S14	2.69	1.46	1.43	6	6
4	A	800	I52	C4-N5	2.50	1.52	1.47	2	5

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
4	A	800	I52	C12-C13-N8	4.40	116.78	110.10	3	11
4	A	800	I52	C10-C9-N8	4.06	116.26	110.10	10	11
4	A	800	I52	O26-C3-C4	3.02	125.98	121.09	7	11
4	A	800	I52	C6-C7-N8	2.87	119.96	113.02	3	10
4	A	800	I52	C7-C6-N5	2.22	116.26	112.46	9	1
4	A	800	I52	O22-S14-C15	2.18	105.28	108.05	3	4
4	A	800	I52	C4-N5-S14	2.09	122.56	118.30	3	1

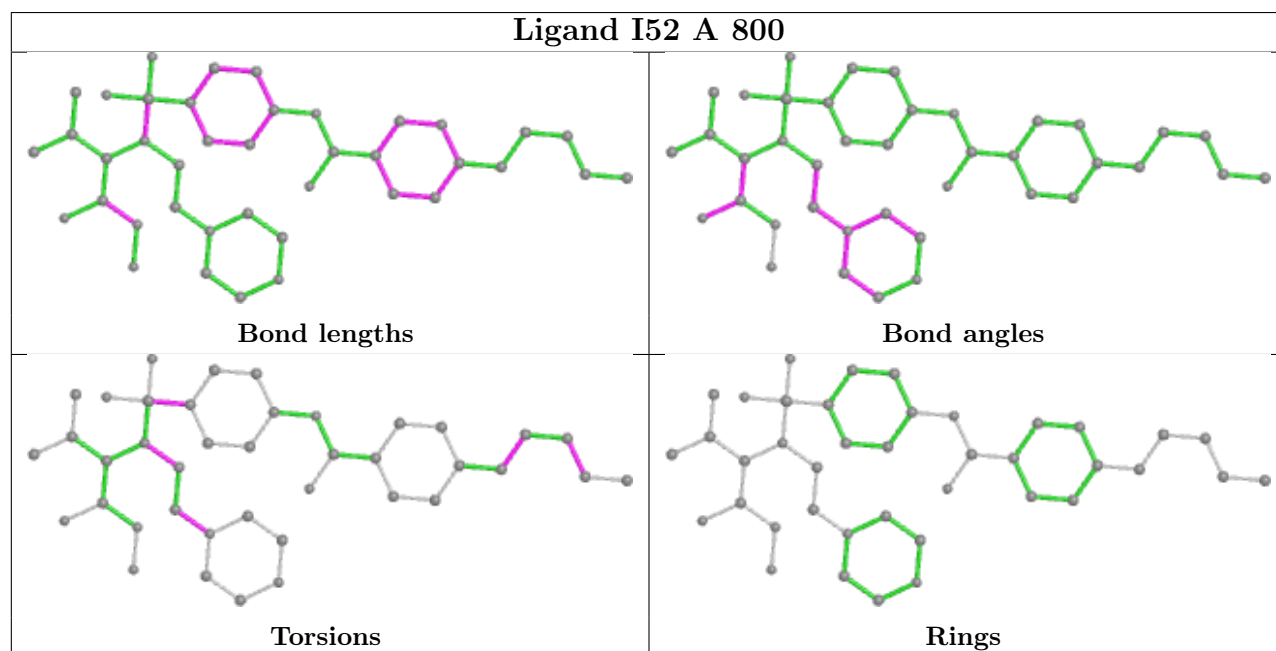
There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

The following is a two-dimensional graphical depiction of Mogul quality analysis of bond lengths,

bond angles, torsion angles, and ring geometry for all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the validation Tables will also be included. For torsion angles, if less 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