



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Jun 15, 2024 – 07:38 PM EDT

PDB ID : 1URK  
Title : SOLUTION STRUCTURE OF THE AMINO TERMINAL FRAGMENT OF UROKINASE-TYPE PLASMINOGEN ACTIVATOR  
Authors : Hansen, A.P.; Petros, A.M.; Meadows, R.P.; Nettlesheim, D.G.; Mazar, A.P.; Olejniczak, E.T.; Xu, R.X.; Pederson, T.M.; Henkin, J.; Fesik, S.W.  
Deposited on : 1994-01-10

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 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 : 4.02b-467  
Mogul : 2022.3.0, CSD as543be (2022)  
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)  
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) : 2.37.1

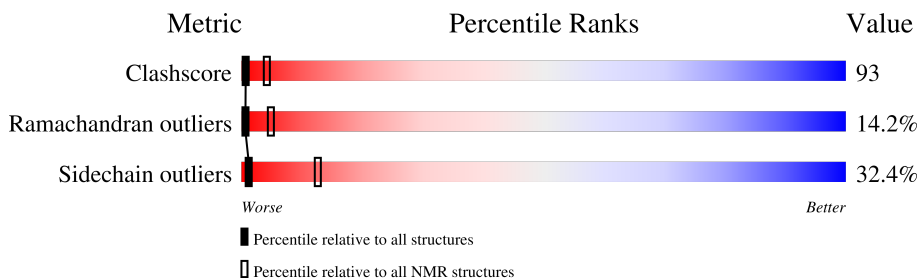
# 1 Overall quality at a glance

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	130	

## 2 Ensemble composition and analysis i

This entry contains 15 models. Model 11 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:11-A:46 (36)	1.21	9
2	A:54-A:129 (76)	0.95	11

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	4, 5, 7, 11, 13, 15
2	1, 2, 8, 10, 14
3	3, 12
4	6, 9

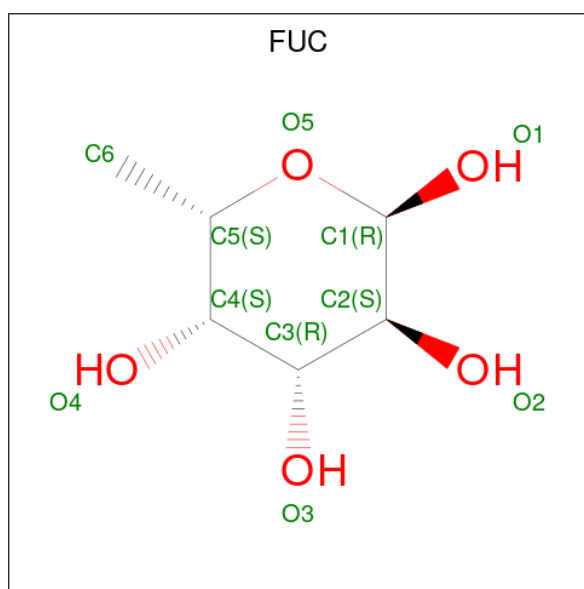
### 3 Entry composition [i](#)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 1035 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called PLASMINOGEN ACTIVATOR.

Mol	Chain	Residues	Atoms				Trace	
			Total	C	N	O		S
1	A	130	1025	630	194	187	14	0

- Molecule 2 is alpha-L-fucopyranose (three-letter code: FUC) (formula: C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>O<sub>5</sub>).



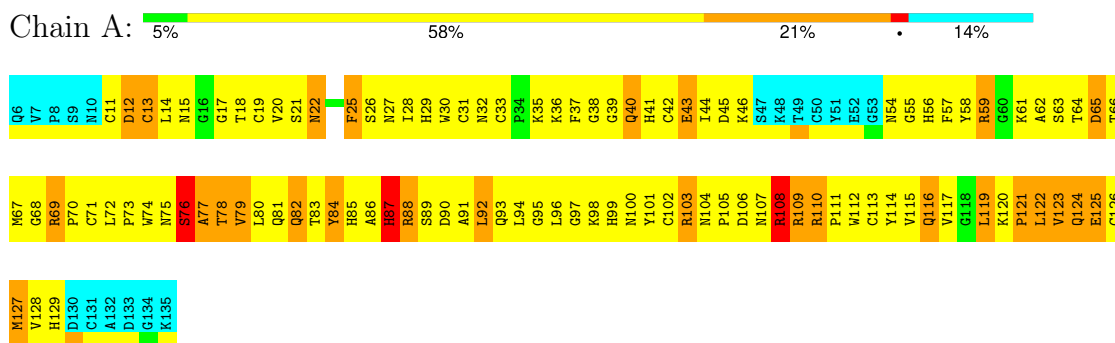
Mol	Chain	Residues	Atoms		
			Total	C	O
2	A	1	10	6	4

## 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: PLASMINOGEN ACTIVATOR

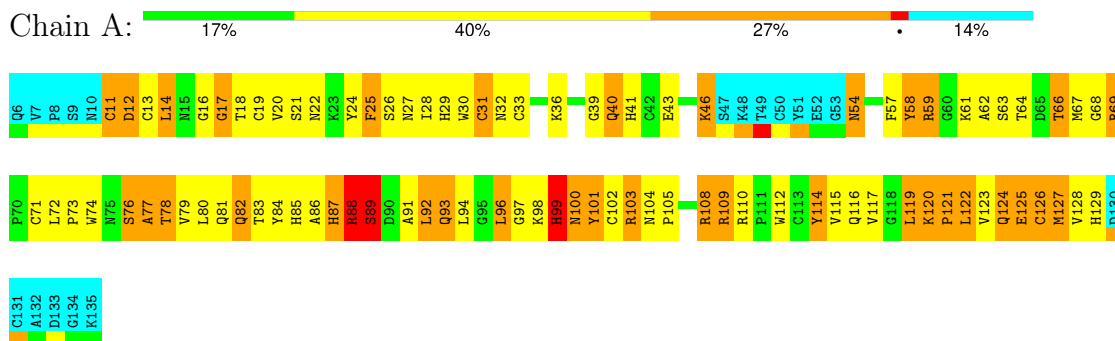


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

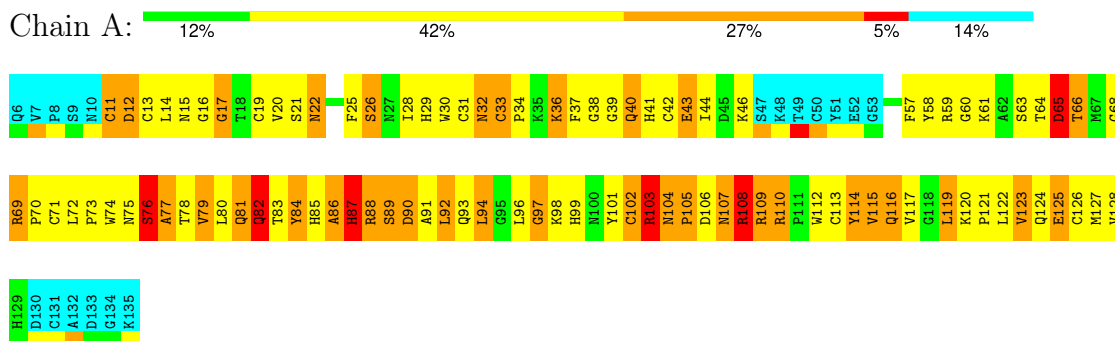
#### 4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: PLASMINOGEN ACTIVATOR



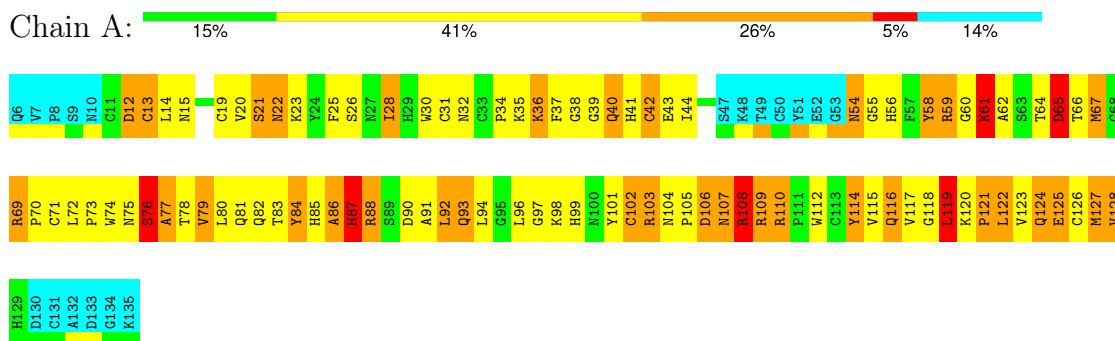
### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: PLASMINOGEN ACTIVATOR



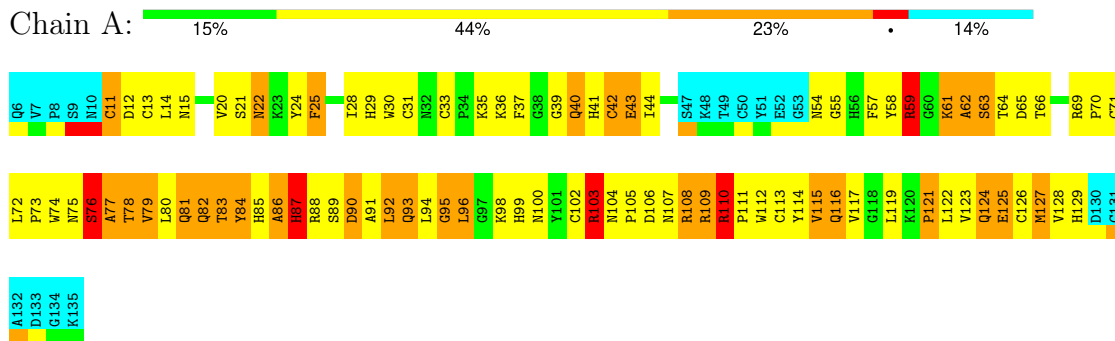
### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: PLASMINOGEN ACTIVATOR



### 4.2.4 Score per residue for model 4

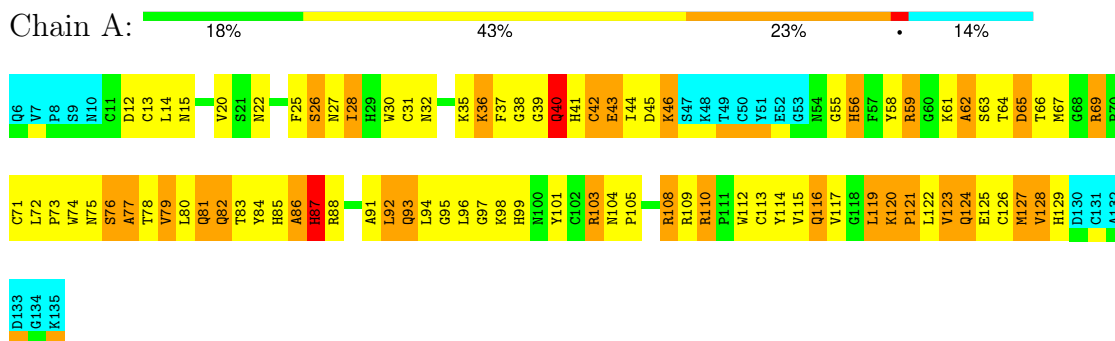
- Molecule 1: PLASMINOGEN ACTIVATOR





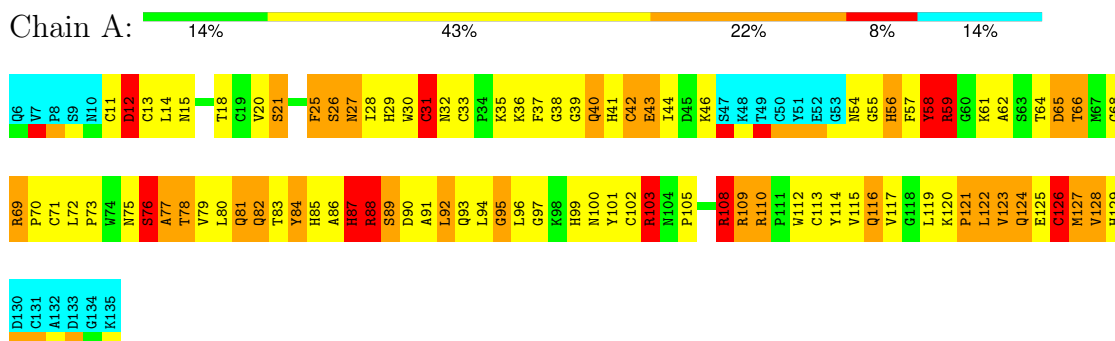
### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: PLASMINOGEN ACTIVATOR



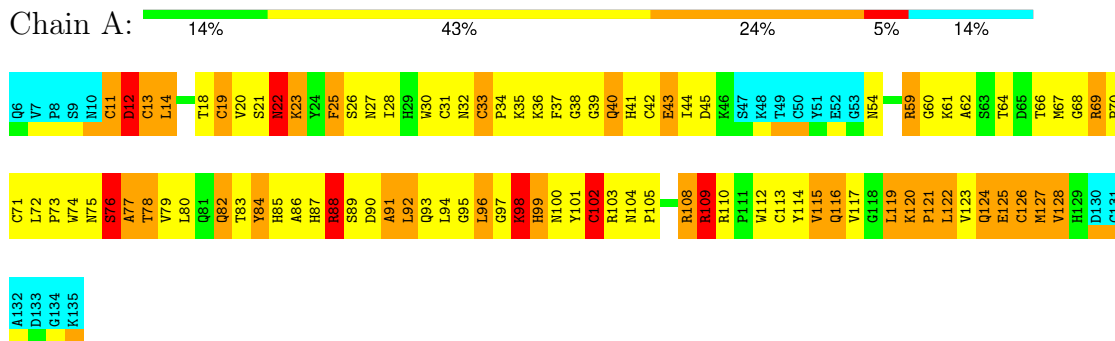
### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: PLASMINOGEN ACTIVATOR



### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: PLASMINOGEN ACTIVATOR

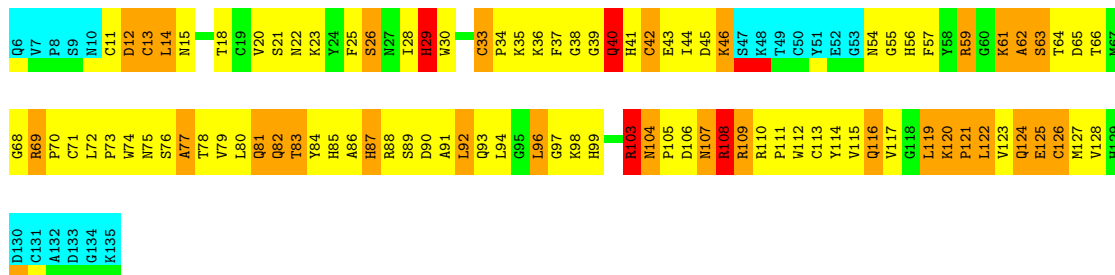




### 4.2.11 Score per residue for model 11 (medoid)

- Molecule 1: PLASMINOGEN ACTIVATOR

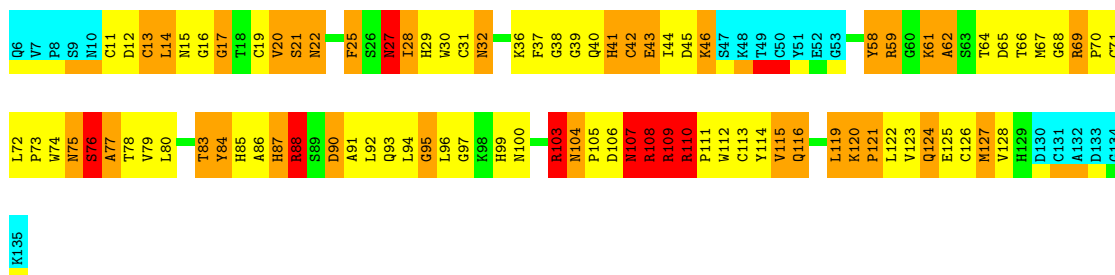
Chain A: 12% 48% 23% 14%



### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: PLASMINOGEN ACTIVATOR

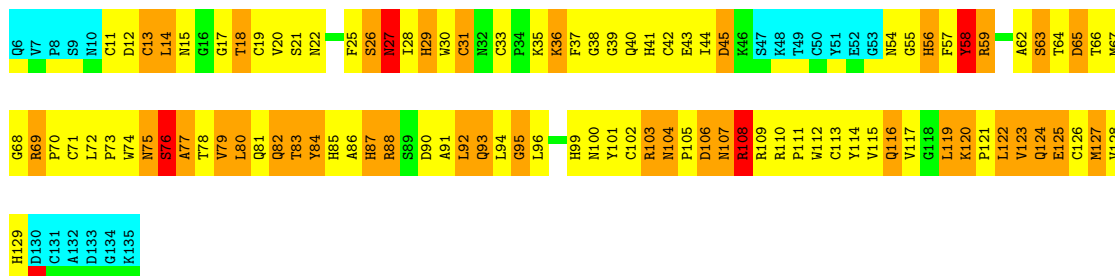
Chain A: 17% 38% 25% 6% 14%



### 4.2.13 Score per residue for model 13

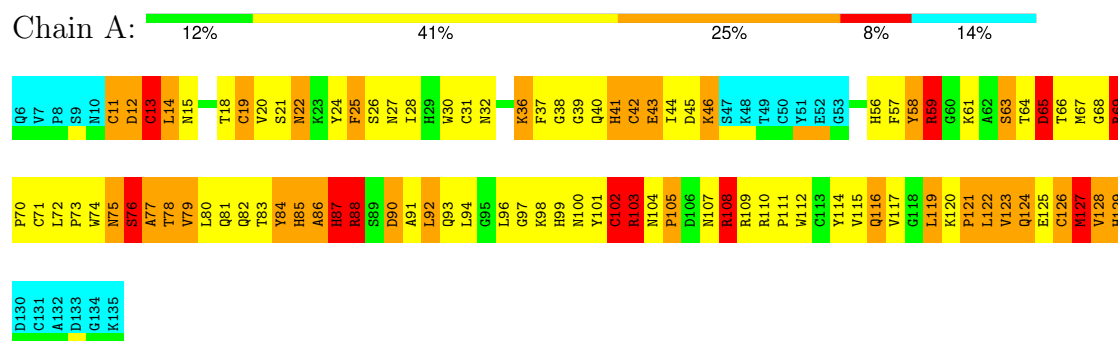
- Molecule 1: PLASMINOGEN ACTIVATOR

Chain A: 9% 45% 28% 14%



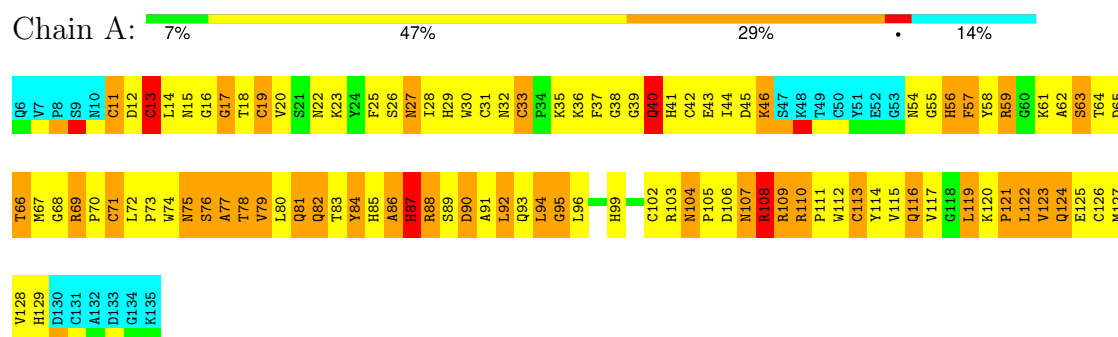
## 4.2.14 Score per residue for model 14

## • Molecule 1: PLASMINOGEN ACTIVATOR



## 4.2.15 Score per residue for model 15

## • Molecule 1: PLASMINOGEN ACTIVATOR



## 5 Refinement protocol and experimental data overview

Of the ? calculated structures, 15 were deposited, based on the following criterion: ?.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	

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: FUC

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

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	6.8±0.4
All	All	0	102

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	59	ARG	Sidechain	15
1	A	88	ARG	Sidechain	15
1	A	108	ARG	Sidechain	15
1	A	109	ARG	Sidechain	15
1	A	110	ARG	Sidechain	15
1	A	69	ARG	Sidechain	14
1	A	103	ARG	Sidechain	13

### 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	894	0	840	163±13
2	A	10	0	10	1±1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
All	All	13560	0	12750	2451

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 93.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:CYS:SG	1:A:33:CYS:SG	1.07	2.52	7	5
1:A:94:LEU:HD13	1:A:105:PRO:CB	1.00	1.86	3	2
1:A:88:ARG:CZ	1:A:91:ALA:HB2	1.00	1.87	10	2
1:A:25:PHE:CD2	1:A:28:ILE:HD13	0.99	1.93	10	1
1:A:27:ASN:O	1:A:28:ILE:HD13	0.96	1.60	14	4
1:A:66:THR:HG23	1:A:125:GLU:O	0.94	1.62	15	6
1:A:20:VAL:HG21	1:A:30:TRP:CE2	0.94	1.97	3	7
1:A:114:TYR:CE1	1:A:123:VAL:HG12	0.89	2.02	8	9
1:A:91:ALA:O	1:A:96:LEU:HD12	0.88	1.68	14	4
1:A:119:LEU:HD13	1:A:119:LEU:N	0.87	1.85	14	5
1:A:20:VAL:HG22	1:A:30:TRP:O	0.87	1.69	13	8
1:A:86:ALA:HB2	1:A:97:GLY:O	0.86	1.70	11	6
1:A:71:CYS:CB	1:A:115:VAL:HG12	0.84	2.02	13	1
1:A:14:LEU:HD13	1:A:41:HIS:O	0.84	1.71	13	1
1:A:119:LEU:HD22	1:A:119:LEU:O	0.84	1.72	1	5
1:A:18:THR:HG21	2:A:136:FUC:O2	0.83	1.73	10	3
1:A:33:CYS:SG	1:A:37:PHE:CB	0.83	2.67	11	3
1:A:42:CYS:SG	1:A:42:CYS:O	0.82	2.37	11	2
1:A:94:LEU:HD22	1:A:94:LEU:N	0.81	1.90	6	12
1:A:19:CYS:SG	1:A:31:CYS:SG	0.81	2.78	10	1
1:A:72:LEU:HD21	1:A:116:GLN:HG3	0.81	1.52	13	3
1:A:120:LYS:HD2	1:A:122:LEU:HD23	0.81	1.50	11	1
1:A:66:THR:HG22	1:A:127:MET:HG2	0.81	1.51	1	4
1:A:119:LEU:HD22	1:A:120:LYS:N	0.81	1.90	14	5
1:A:80:LEU:HD23	1:A:85:HIS:CD2	0.80	2.10	2	10
1:A:66:THR:HG22	1:A:127:MET:CG	0.80	2.05	1	3
1:A:14:LEU:HD12	1:A:41:HIS:HB2	0.80	1.53	1	3
1:A:14:LEU:HD12	1:A:15:ASN:N	0.80	1.91	9	5
1:A:93:GLN:C	1:A:94:LEU:HD13	0.80	1.97	6	1
1:A:37:PHE:CB	1:A:42:CYS:SG	0.80	2.70	5	9
1:A:62:ALA:HB1	1:A:128:VAL:CG2	0.79	2.07	15	1
1:A:71:CYS:HA	1:A:115:VAL:HG23	0.79	1.52	14	4
1:A:99:HIS:HE2	1:A:101:TYR:CB	0.79	1.90	6	2
1:A:119:LEU:C	1:A:119:LEU:HD22	0.78	1.99	11	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:79:VAL:HG22	1:A:85:HIS:CB	0.78	2.08	7	15
1:A:20:VAL:HG21	1:A:30:TRP:NE1	0.78	1.92	2	11
1:A:33:CYS:SG	1:A:37:PHE:HB2	0.77	2.18	11	3
1:A:91:ALA:HB1	1:A:96:LEU:HD12	0.77	1.56	7	4
1:A:118:GLY:O	1:A:119:LEU:HD23	0.77	1.79	3	1
1:A:12:ASP:O	1:A:13:CYS:SG	0.77	2.43	13	7
1:A:64:THR:O	1:A:126:CYS:SG	0.77	2.43	15	3
1:A:119:LEU:HD22	1:A:119:LEU:C	0.77	2.00	6	7
1:A:118:GLY:C	1:A:119:LEU:HD23	0.77	1.99	3	1
1:A:65:ASP:O	1:A:127:MET:SD	0.77	2.42	3	1
1:A:37:PHE:HB3	1:A:42:CYS:SG	0.77	2.19	2	8
1:A:88:ARG:NH1	1:A:91:ALA:HB2	0.76	1.94	10	1
1:A:124:GLN:OE1	1:A:126:CYS:SG	0.76	2.43	8	2
1:A:79:VAL:HG22	1:A:85:HIS:HB3	0.76	1.55	10	8
1:A:93:GLN:C	1:A:94:LEU:HD23	0.76	2.00	2	2
1:A:14:LEU:HD12	1:A:41:HIS:CB	0.76	2.11	14	4
1:A:12:ASP:O	1:A:31:CYS:SG	0.75	2.44	8	2
1:A:66:THR:HG22	1:A:125:GLU:O	0.75	1.81	10	2
1:A:88:ARG:HG2	1:A:91:ALA:HB2	0.75	1.56	14	1
1:A:63:SER:O	1:A:102:CYS:SG	0.75	2.44	5	2
1:A:65:ASP:CG	1:A:115:VAL:HG21	0.75	2.01	6	1
1:A:14:LEU:HD22	1:A:43:GLU:CD	0.75	2.02	11	1
1:A:102:CYS:SG	1:A:111:PRO:C	0.74	2.65	6	3
1:A:94:LEU:HD12	1:A:105:PRO:HA	0.74	1.58	14	1
1:A:102:CYS:SG	1:A:112:TRP:O	0.74	2.45	4	2
1:A:126:CYS:SG	1:A:126:CYS:O	0.74	2.46	1	1
1:A:12:ASP:C	1:A:31:CYS:SG	0.73	2.66	8	3
1:A:83:THR:HG23	1:A:88:ARG:NH2	0.73	1.99	15	2
1:A:77:ALA:HA	1:A:80:LEU:HD12	0.73	1.61	5	5
1:A:94:LEU:HD13	1:A:105:PRO:HB3	0.73	1.59	3	1
1:A:71:CYS:HB2	1:A:115:VAL:HG12	0.73	1.60	13	1
1:A:117:VAL:HG12	1:A:117:VAL:O	0.73	1.84	8	13
1:A:28:ILE:HG22	1:A:28:ILE:O	0.72	1.84	1	3
1:A:93:GLN:O	1:A:94:LEU:HD13	0.72	1.83	6	1
1:A:71:CYS:SG	1:A:115:VAL:HB	0.72	2.24	7	12
1:A:12:ASP:C	1:A:13:CYS:SG	0.72	2.67	15	4
1:A:27:ASN:C	1:A:28:ILE:HD13	0.72	2.04	14	3
1:A:128:VAL:HG22	1:A:128:VAL:O	0.71	1.85	10	7
1:A:91:ALA:HB1	1:A:96:LEU:CD1	0.71	2.15	7	4
1:A:80:LEU:HD22	1:A:87:HIS:ND1	0.71	1.99	14	1
1:A:94:LEU:HD23	1:A:94:LEU:N	0.71	2.00	2	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:76:SER:O	1:A:79:VAL:HG12	0.71	1.85	10	5
1:A:66:THR:HA	1:A:127:MET:SD	0.71	2.26	9	3
1:A:65:ASP:OD1	1:A:113:CYS:SG	0.71	2.49	2	1
1:A:102:CYS:SG	1:A:111:PRO:O	0.70	2.49	4	1
1:A:123:VAL:HG23	1:A:123:VAL:O	0.70	1.84	10	5
1:A:85:HIS:O	1:A:86:ALA:HB3	0.70	1.87	15	7
1:A:14:LEU:HD13	1:A:43:GLU:CG	0.70	2.16	10	1
1:A:13:CYS:SG	1:A:42:CYS:HB2	0.70	2.26	5	6
1:A:65:ASP:OD2	1:A:115:VAL:HG21	0.70	1.86	6	4
1:A:72:LEU:HD11	1:A:116:GLN:N	0.70	2.01	3	15
1:A:14:LEU:HD11	1:A:43:GLU:HA	0.70	1.64	8	5
1:A:79:VAL:HG23	1:A:114:TYR:CD2	0.70	2.22	11	5
1:A:73:PRO:O	1:A:79:VAL:HG11	0.69	1.86	1	15
1:A:18:THR:O	1:A:31:CYS:SG	0.69	2.50	13	2
1:A:102:CYS:SG	1:A:112:TRP:C	0.69	2.70	4	5
1:A:128:VAL:O	1:A:128:VAL:HG23	0.69	1.87	4	1
1:A:114:TYR:CD1	1:A:123:VAL:HG12	0.69	2.22	6	6
1:A:11:CYS:SG	1:A:20:VAL:O	0.69	2.50	14	2
1:A:74:TRP:CD2	1:A:96:LEU:HD23	0.69	2.22	1	2
1:A:67:MET:SD	1:A:69:ARG:NH2	0.69	2.66	15	1
1:A:79:VAL:HG22	1:A:85:HIS:HB2	0.68	1.65	8	13
1:A:14:LEU:HD12	1:A:41:HIS:HB3	0.68	1.64	14	2
1:A:62:ALA:HB1	1:A:128:VAL:HG22	0.68	1.64	15	1
1:A:66:THR:HG23	1:A:126:CYS:C	0.68	2.09	2	1
1:A:13:CYS:HB3	1:A:33:CYS:SG	0.68	2.27	15	1
1:A:82:GLN:NE2	1:A:114:TYR:CG	0.68	2.62	8	1
1:A:13:CYS:SG	1:A:33:CYS:HB3	0.67	2.29	10	1
1:A:13:CYS:SG	1:A:17:GLY:HA3	0.67	2.29	13	2
1:A:89:SER:O	1:A:92:LEU:HD21	0.67	1.89	4	1
1:A:102:CYS:SG	1:A:112:TRP:N	0.67	2.67	6	3
1:A:92:LEU:H	1:A:92:LEU:HD13	0.67	1.50	3	11
1:A:99:HIS:NE2	1:A:101:TYR:CD2	0.67	2.63	10	2
1:A:102:CYS:SG	1:A:111:PRO:HB2	0.67	2.30	6	1
1:A:102:CYS:SG	1:A:113:CYS:HB3	0.67	2.30	10	3
1:A:99:HIS:NE2	1:A:101:TYR:CG	0.67	2.60	6	3
1:A:94:LEU:HD13	1:A:105:PRO:HB2	0.66	1.64	3	1
1:A:14:LEU:C	1:A:14:LEU:HD12	0.66	2.10	4	2
1:A:62:ALA:CB	1:A:128:VAL:HG21	0.66	2.20	12	1
1:A:85:HIS:CD2	1:A:87:HIS:N	0.66	2.63	12	14
1:A:89:SER:C	1:A:92:LEU:HD21	0.66	2.10	4	2
1:A:20:VAL:HG21	1:A:30:TRP:CD1	0.66	2.25	6	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:85:HIS:O	1:A:86:ALA:CB	0.66	2.44	8	7
1:A:83:THR:HG23	1:A:88:ARG:CZ	0.66	2.21	2	1
1:A:80:LEU:HD21	1:A:86:ALA:O	0.66	1.91	13	1
1:A:113:CYS:HB3	1:A:126:CYS:SG	0.65	2.31	4	2
1:A:80:LEU:HD22	1:A:87:HIS:CG	0.65	2.26	14	1
1:A:14:LEU:HD12	1:A:14:LEU:C	0.65	2.11	6	3
1:A:25:PHE:CD1	1:A:25:PHE:O	0.65	2.50	3	2
1:A:74:TRP:CE3	1:A:96:LEU:CD2	0.65	2.80	11	3
1:A:25:PHE:CD1	1:A:28:ILE:CG2	0.65	2.80	10	1
1:A:82:GLN:NE2	1:A:114:TYR:CE2	0.65	2.65	13	1
1:A:25:PHE:CD1	1:A:25:PHE:N	0.65	2.65	1	5
1:A:119:LEU:HD13	1:A:119:LEU:H	0.65	1.50	15	10
1:A:74:TRP:CZ3	1:A:103:ARG:NH2	0.65	2.65	12	1
1:A:86:ALA:O	1:A:87:HIS:CD2	0.64	2.50	12	14
1:A:22:ASN:CB	1:A:25:PHE:CD2	0.64	2.80	12	1
1:A:102:CYS:SG	1:A:112:TRP:CA	0.64	2.86	14	3
1:A:14:LEU:HD13	1:A:43:GLU:HG2	0.64	1.68	10	1
1:A:84:TYR:CD2	1:A:94:LEU:CD1	0.64	2.80	3	1
1:A:82:GLN:NE2	1:A:114:TYR:CD2	0.64	2.66	8	1
1:A:114:TYR:CE1	1:A:123:VAL:CG1	0.64	2.81	6	7
1:A:20:VAL:CG2	1:A:30:TRP:CD1	0.64	2.81	12	3
1:A:84:TYR:CE1	1:A:105:PRO:CB	0.64	2.80	12	1
1:A:86:ALA:O	1:A:87:HIS:CG	0.64	2.51	13	11
1:A:99:HIS:CD2	1:A:100:ASN:N	0.64	2.66	6	2
1:A:84:TYR:CE1	1:A:90:ASP:CB	0.64	2.80	4	1
1:A:103:ARG:NH2	1:A:112:TRP:CZ3	0.64	2.66	12	1
1:A:85:HIS:CE1	1:A:88:ARG:CG	0.64	2.81	7	3
1:A:14:LEU:HD13	1:A:43:GLU:HB3	0.63	1.70	10	4
1:A:85:HIS:CD2	1:A:86:ALA:N	0.63	2.67	5	9
1:A:15:ASN:CB	1:A:37:PHE:CE2	0.63	2.81	14	1
1:A:74:TRP:CZ3	1:A:96:LEU:CD2	0.63	2.81	5	2
1:A:94:LEU:HD12	1:A:105:PRO:CA	0.63	2.24	14	1
1:A:99:HIS:NE2	1:A:101:TYR:CD1	0.63	2.67	6	1
1:A:99:HIS:CG	1:A:100:ASN:N	0.63	2.66	10	3
1:A:20:VAL:HG21	1:A:30:TRP:CD2	0.63	2.28	9	2
1:A:14:LEU:HD13	1:A:43:GLU:HB2	0.63	1.68	11	1
1:A:14:LEU:HD22	1:A:43:GLU:CB	0.63	2.23	14	1
1:A:63:SER:HA	1:A:102:CYS:SG	0.62	2.34	15	1
1:A:14:LEU:CD1	1:A:15:ASN:N	0.62	2.62	9	5
1:A:117:VAL:HG21	1:A:122:LEU:CB	0.62	2.25	11	6
1:A:84:TYR:CD2	1:A:88:ARG:NH1	0.62	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:22:ASN:HB3	1:A:25:PHE:CD2	0.62	2.29	12	1
1:A:33:CYS:SG	1:A:34:PRO:HD2	0.62	2.35	2	1
1:A:72:LEU:HD12	1:A:114:TYR:O	0.62	1.94	15	6
1:A:91:ALA:CB	1:A:96:LEU:HD12	0.62	2.25	8	6
1:A:119:LEU:N	1:A:119:LEU:CD1	0.62	2.60	10	10
1:A:115:VAL:HG13	1:A:124:GLN:NE2	0.62	2.10	10	3
1:A:37:PHE:C	1:A:42:CYS:SG	0.61	2.79	5	2
1:A:22:ASN:CB	1:A:28:ILE:CG1	0.61	2.77	10	1
1:A:25:PHE:CD2	1:A:28:ILE:CD1	0.61	2.79	10	1
1:A:84:TYR:CE2	1:A:105:PRO:CG	0.61	2.83	1	1
1:A:104:ASN:N	1:A:105:PRO:CD	0.61	2.63	10	7
1:A:63:SER:C	1:A:102:CYS:SG	0.61	2.79	15	1
1:A:103:ARG:NH1	1:A:105:PRO:CG	0.61	2.64	12	1
1:A:92:LEU:HD22	1:A:93:GLN:N	0.61	2.11	7	11
1:A:85:HIS:O	1:A:96:LEU:HD13	0.61	1.95	9	2
1:A:94:LEU:N	1:A:94:LEU:CD2	0.61	2.63	14	12
1:A:88:ARG:CZ	1:A:88:ARG:CB	0.61	2.79	6	1
1:A:74:TRP:CE3	1:A:96:LEU:HD22	0.60	2.31	5	8
1:A:74:TRP:CD1	1:A:96:LEU:O	0.60	2.55	2	2
1:A:14:LEU:HD13	1:A:43:GLU:CB	0.60	2.25	10	2
1:A:22:ASN:HB3	1:A:28:ILE:HG21	0.60	1.72	13	3
1:A:72:LEU:CD1	1:A:116:GLN:N	0.60	2.64	10	15
1:A:30:TRP:CD1	1:A:30:TRP:O	0.60	2.55	6	4
1:A:80:LEU:HA	1:A:85:HIS:CG	0.60	2.31	4	14
1:A:99:HIS:CE1	1:A:100:ASN:O	0.60	2.54	1	1
1:A:88:ARG:CZ	1:A:91:ALA:CB	0.60	2.79	12	1
1:A:88:ARG:CG	1:A:91:ALA:HB2	0.60	2.26	14	2
1:A:79:VAL:HG23	1:A:82:GLN:HE21	0.60	1.56	8	1
1:A:78:THR:HG22	1:A:121:PRO:CD	0.60	2.27	10	4
1:A:88:ARG:HH22	1:A:96:LEU:HD13	0.60	1.56	1	1
1:A:96:LEU:O	1:A:99:HIS:CE1	0.60	2.54	2	1
1:A:29:HIS:N	1:A:29:HIS:CD2	0.60	2.70	4	3
1:A:80:LEU:O	1:A:85:HIS:CE1	0.59	2.55	14	6
1:A:22:ASN:CB	1:A:28:ILE:HG13	0.59	2.27	10	1
1:A:71:CYS:SG	1:A:115:VAL:HG12	0.59	2.37	13	1
1:A:83:THR:O	1:A:84:TYR:C	0.59	2.41	6	8
1:A:94:LEU:CD2	1:A:94:LEU:N	0.59	2.65	4	1
1:A:22:ASN:OD1	1:A:25:PHE:CD2	0.59	2.55	7	2
1:A:13:CYS:SG	1:A:42:CYS:SG	0.59	3.01	7	1
1:A:78:THR:HG22	1:A:121:PRO:CG	0.59	2.28	10	8
1:A:39:GLY:O	1:A:41:HIS:N	0.59	2.36	2	15

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:LEU:CD1	1:A:105:PRO:CB	0.59	2.80	2	2
1:A:78:THR:CG2	1:A:121:PRO:CG	0.59	2.81	10	11
1:A:88:ARG:O	1:A:89:SER:CB	0.59	2.50	5	2
1:A:84:TYR:CE1	1:A:94:LEU:CD1	0.59	2.86	2	1
1:A:91:ALA:CB	1:A:96:LEU:CD1	0.59	2.81	7	5
1:A:85:HIS:NE2	1:A:87:HIS:CB	0.59	2.66	5	13
1:A:99:HIS:HE2	1:A:101:TYR:HB2	0.59	1.57	6	3
1:A:14:LEU:HD12	1:A:43:GLU:HA	0.59	1.73	5	3
1:A:82:GLN:OE1	1:A:114:TYR:CE1	0.59	2.55	2	1
1:A:71:CYS:SG	1:A:115:VAL:CB	0.59	2.91	7	9
1:A:108:ARG:NH2	1:A:123:VAL:HG21	0.59	2.12	4	1
1:A:14:LEU:HD13	1:A:14:LEU:N	0.59	2.13	13	1
1:A:14:LEU:C	1:A:14:LEU:CD2	0.59	2.71	13	1
1:A:94:LEU:HD22	1:A:105:PRO:HB3	0.59	1.75	3	1
1:A:88:ARG:CD	1:A:91:ALA:HB2	0.58	2.27	5	1
1:A:92:LEU:H	1:A:92:LEU:HD23	0.58	1.56	6	1
1:A:28:ILE:O	1:A:30:TRP:CE3	0.58	2.56	7	2
1:A:92:LEU:HD22	1:A:92:LEU:N	0.58	2.12	1	11
1:A:22:ASN:CB	1:A:28:ILE:HG21	0.58	2.28	3	3
1:A:112:TRP:O	1:A:112:TRP:CE3	0.58	2.56	6	2
1:A:79:VAL:HG23	1:A:114:TYR:HD2	0.58	1.56	11	1
1:A:28:ILE:O	1:A:30:TRP:CZ3	0.58	2.56	7	1
1:A:82:GLN:NE2	1:A:84:TYR:O	0.58	2.37	8	1
1:A:25:PHE:O	1:A:25:PHE:CG	0.58	2.57	3	1
1:A:106:ASP:O	1:A:108:ARG:N	0.58	2.37	11	4
1:A:115:VAL:HG12	1:A:124:GLN:HE21	0.58	1.58	9	4
1:A:117:VAL:HG21	1:A:122:LEU:HB3	0.58	1.75	9	3
1:A:25:PHE:CD1	1:A:28:ILE:HB	0.58	2.33	3	1
1:A:96:LEU:O	1:A:99:HIS:CD2	0.58	2.57	4	4
1:A:18:THR:HG22	1:A:19:CYS:N	0.58	2.14	5	3
1:A:13:CYS:HA	1:A:41:HIS:O	0.58	1.98	13	12
1:A:86:ALA:O	1:A:87:HIS:CB	0.58	2.52	13	1
1:A:85:HIS:CD2	1:A:87:HIS:HB2	0.58	2.34	7	14
1:A:104:ASN:OD1	1:A:112:TRP:CD1	0.58	2.57	4	3
1:A:36:LYS:CD	1:A:36:LYS:N	0.58	2.66	5	1
1:A:66:THR:C	1:A:127:MET:SD	0.58	2.82	10	1
1:A:84:TYR:CD2	1:A:105:PRO:CG	0.58	2.86	1	1
1:A:12:ASP:OD1	1:A:41:HIS:CE1	0.58	2.57	2	1
1:A:93:GLN:C	1:A:94:LEU:HD22	0.58	2.20	14	3
1:A:119:LEU:HD22	1:A:120:LYS:CG	0.57	2.29	2	1
1:A:79:VAL:O	1:A:82:GLN:CG	0.57	2.51	8	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:LEU:N	1:A:41:HIS:O	0.57	2.38	10	5
1:A:104:ASN:ND2	1:A:112:TRP:CD1	0.57	2.72	13	2
1:A:84:TYR:O	1:A:114:TYR:CE1	0.57	2.57	15	2
1:A:84:TYR:CD2	1:A:105:PRO:HG2	0.57	2.33	1	3
1:A:105:PRO:HG2	1:A:112:TRP:CH2	0.57	2.35	13	8
1:A:20:VAL:CG2	1:A:30:TRP:NE1	0.57	2.67	11	6
1:A:89:SER:O	1:A:90:ASP:CB	0.57	2.53	2	1
1:A:100:ASN:O	1:A:101:TYR:CD1	0.57	2.57	10	1
1:A:75:ASN:ND2	1:A:76:SER:N	0.57	2.53	15	2
1:A:30:TRP:O	1:A:30:TRP:CD1	0.57	2.57	3	4
1:A:84:TYR:CZ	1:A:94:LEU:HD11	0.57	2.35	3	1
1:A:25:PHE:HB3	1:A:28:ILE:HG22	0.57	1.75	15	3
1:A:20:VAL:HG23	1:A:30:TRP:CD1	0.57	2.35	12	1
1:A:119:LEU:C	1:A:119:LEU:CD2	0.57	2.74	11	9
1:A:65:ASP:CG	1:A:115:VAL:HG11	0.57	2.20	2	1
1:A:84:TYR:CZ	1:A:105:PRO:O	0.57	2.57	6	2
1:A:85:HIS:O	1:A:88:ARG:NH1	0.57	2.38	10	1
1:A:64:THR:HG21	1:A:68:GLY:O	0.57	1.99	2	5
1:A:12:ASP:O	1:A:41:HIS:CD2	0.56	2.57	1	1
1:A:88:ARG:NH2	1:A:96:LEU:HD13	0.56	2.14	1	1
1:A:14:LEU:HD21	1:A:43:GLU:HB3	0.56	1.75	3	3
1:A:66:THR:CG2	1:A:125:GLU:O	0.56	2.53	14	8
1:A:66:THR:CA	1:A:127:MET:SD	0.56	2.93	10	2
1:A:85:HIS:NE2	1:A:87:HIS:HB2	0.56	2.14	10	13
1:A:14:LEU:HD22	1:A:43:GLU:OE1	0.56	2.01	11	1
1:A:104:ASN:N	1:A:105:PRO:HD3	0.56	2.16	3	6
1:A:117:VAL:O	1:A:117:VAL:CG1	0.56	2.52	3	11
1:A:14:LEU:HD11	1:A:43:GLU:CB	0.56	2.31	6	6
1:A:91:ALA:CA	1:A:96:LEU:HD12	0.56	2.31	9	5
1:A:69:ARG:HD2	1:A:115:VAL:HG21	0.56	1.77	13	1
1:A:80:LEU:CD2	1:A:85:HIS:CD2	0.56	2.89	1	10
1:A:91:ALA:HA	1:A:96:LEU:HD12	0.56	1.77	9	7
1:A:84:TYR:CE1	1:A:90:ASP:HB3	0.56	2.35	4	4
1:A:84:TYR:CE2	1:A:105:PRO:HG2	0.56	2.35	1	1
1:A:125:GLU:O	1:A:126:CYS:C	0.56	2.43	14	13
1:A:94:LEU:HD22	1:A:94:LEU:H	0.56	1.60	10	3
1:A:92:LEU:HD13	1:A:92:LEU:N	0.56	2.15	13	10
1:A:85:HIS:CE1	1:A:88:ARG:HG3	0.56	2.36	3	2
1:A:25:PHE:O	1:A:26:SER:CB	0.56	2.53	3	5
1:A:94:LEU:CD1	1:A:105:PRO:HB2	0.56	2.31	2	1
1:A:25:PHE:CD1	1:A:28:ILE:HG23	0.56	2.35	10	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:108:ARG:NH2	1:A:123:VAL:CG2	0.56	2.69	4	2
1:A:71:CYS:SG	1:A:115:VAL:CA	0.56	2.93	7	2
1:A:63:SER:CB	1:A:100:ASN:ND2	0.56	2.69	13	1
1:A:33:CYS:CB	1:A:34:PRO:CD	0.56	2.83	2	1
1:A:74:TRP:CD1	1:A:99:HIS:O	0.56	2.59	2	3
1:A:55:GLY:O	1:A:56:HIS:CB	0.56	2.53	8	3
1:A:84:TYR:O	1:A:114:TYR:CE2	0.56	2.59	4	2
1:A:14:LEU:CD1	1:A:43:GLU:CB	0.55	2.85	2	3
1:A:94:LEU:N	1:A:94:LEU:HD22	0.55	2.14	4	1
1:A:88:ARG:HD2	1:A:91:ALA:HB2	0.55	1.77	5	1
1:A:26:SER:O	1:A:27:ASN:CB	0.55	2.53	6	4
1:A:108:ARG:O	1:A:109:ARG:CB	0.55	2.54	11	1
1:A:14:LEU:HD11	1:A:43:GLU:HB2	0.55	1.78	13	1
1:A:74:TRP:CE3	1:A:96:LEU:HD23	0.55	2.37	1	1
1:A:74:TRP:CE2	1:A:96:LEU:HD23	0.55	2.35	1	2
1:A:92:LEU:CD2	1:A:93:GLN:N	0.55	2.70	14	11
1:A:91:ALA:O	1:A:95:GLY:N	0.55	2.39	12	4
1:A:84:TYR:CE1	1:A:94:LEU:HD12	0.55	2.36	2	1
1:A:91:ALA:O	1:A:96:LEU:CD1	0.55	2.54	2	1
1:A:14:LEU:HD11	1:A:43:GLU:CA	0.55	2.32	8	5
1:A:112:TRP:CZ3	1:A:114:TYR:CE1	0.55	2.95	13	3
1:A:85:HIS:O	1:A:91:ALA:HB1	0.55	2.01	5	1
1:A:91:ALA:HB2	1:A:96:LEU:HD12	0.55	1.77	13	2
1:A:91:ALA:HA	1:A:96:LEU:CD1	0.55	2.31	1	6
1:A:99:HIS:N	1:A:99:HIS:CD2	0.55	2.74	9	5
1:A:84:TYR:CD1	1:A:105:PRO:CB	0.55	2.90	12	2
1:A:14:LEU:C	1:A:14:LEU:HD22	0.55	2.20	13	1
1:A:72:LEU:HD11	1:A:116:GLN:CA	0.55	2.31	13	13
1:A:76:SER:O	1:A:78:THR:N	0.55	2.40	11	15
1:A:84:TYR:CE2	1:A:88:ARG:NH1	0.55	2.75	1	1
1:A:82:GLN:CD	1:A:114:TYR:CE2	0.55	2.80	8	1
1:A:38:GLY:O	1:A:44:ILE:CG1	0.55	2.55	12	3
1:A:127:MET:O	1:A:128:VAL:HG12	0.55	2.01	9	1
1:A:84:TYR:CE1	1:A:88:ARG:NH1	0.55	2.75	14	1
1:A:105:PRO:HD2	1:A:112:TRP:CZ2	0.55	2.37	11	13
1:A:57:PHE:O	1:A:58:TYR:CB	0.55	2.54	4	2
1:A:84:TYR:CE2	1:A:94:LEU:HD11	0.55	2.37	3	1
1:A:85:HIS:NE2	1:A:87:HIS:O	0.55	2.39	10	3
1:A:113:CYS:O	1:A:115:VAL:HG12	0.55	2.02	2	1
1:A:123:VAL:CG2	1:A:123:VAL:O	0.55	2.55	8	7
1:A:112:TRP:CB	1:A:124:GLN:O	0.55	2.55	9	4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:LEU:CD1	1:A:41:HIS:O	0.55	2.53	13	2
1:A:123:VAL:O	1:A:123:VAL:CG2	0.54	2.55	10	5
1:A:86:ALA:CB	1:A:97:GLY:O	0.54	2.55	2	6
1:A:22:ASN:HB2	1:A:28:ILE:CG1	0.54	2.33	10	1
1:A:28:ILE:C	1:A:29:HIS:CG	0.54	2.81	11	1
1:A:15:ASN:HB3	1:A:37:PHE:CE2	0.54	2.37	14	1
1:A:108:ARG:HB2	1:A:112:TRP:CD1	0.54	2.38	2	4
1:A:113:CYS:SG	1:A:126:CYS:SG	0.54	3.05	5	1
1:A:105:PRO:HG2	1:A:112:TRP:CZ2	0.54	2.37	14	6
1:A:20:VAL:CG2	1:A:30:TRP:CE2	0.54	2.84	3	2
1:A:62:ALA:HB1	1:A:128:VAL:HG23	0.54	1.77	5	1
1:A:25:PHE:O	1:A:28:ILE:CG1	0.54	2.56	8	1
1:A:30:TRP:C	1:A:30:TRP:CD1	0.54	2.81	10	2
1:A:117:VAL:HG21	1:A:122:LEU:HB2	0.54	1.79	13	7
1:A:99:HIS:CD2	1:A:99:HIS:N	0.54	2.75	4	4
1:A:25:PHE:CD2	1:A:28:ILE:HG12	0.54	2.37	12	1
1:A:15:ASN:HB2	1:A:37:PHE:CE2	0.54	2.37	14	1
1:A:13:CYS:CA	1:A:41:HIS:O	0.54	2.55	14	4
1:A:96:LEU:O	1:A:99:HIS:NE2	0.54	2.41	12	8
1:A:25:PHE:CD1	1:A:28:ILE:CB	0.54	2.90	3	1
1:A:89:SER:O	1:A:92:LEU:HD22	0.54	2.02	6	1
1:A:36:LYS:CD	1:A:37:PHE:CE1	0.54	2.91	3	1
1:A:61:LYS:O	1:A:62:ALA:HB3	0.54	2.03	3	2
1:A:71:CYS:SG	1:A:115:VAL:N	0.54	2.81	7	2
1:A:84:TYR:CE1	1:A:105:PRO:HB3	0.54	2.37	11	2
1:A:85:HIS:CD2	1:A:85:HIS:C	0.54	2.81	7	8
1:A:112:TRP:CZ3	1:A:114:TYR:CE2	0.54	2.96	2	1
1:A:84:TYR:CE1	1:A:105:PRO:HB2	0.54	2.38	12	9
1:A:11:CYS:O	1:A:12:ASP:CB	0.54	2.56	5	4
1:A:37:PHE:CE1	1:A:45:ASP:OD1	0.54	2.61	7	1
1:A:64:THR:CG2	1:A:68:GLY:O	0.54	2.56	10	10
1:A:25:PHE:CD2	1:A:28:ILE:HG13	0.54	2.38	8	2
1:A:22:ASN:HB2	1:A:28:ILE:HD11	0.54	1.79	10	1
1:A:83:THR:O	1:A:85:HIS:CG	0.54	2.60	14	1
1:A:106:ASP:O	1:A:107:ASN:C	0.53	2.47	3	4
1:A:44:ILE:N	1:A:44:ILE:HD13	0.53	2.18	11	1
1:A:83:THR:O	1:A:85:HIS:N	0.53	2.41	2	10
1:A:84:TYR:CE1	1:A:90:ASP:HB2	0.53	2.38	4	1
1:A:57:PHE:N	1:A:57:PHE:CD1	0.53	2.75	11	2
1:A:74:TRP:CH2	1:A:103:ARG:NH2	0.53	2.76	12	1
1:A:88:ARG:NH1	1:A:88:ARG:O	0.53	2.41	12	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:84:TYR:CE2	1:A:94:LEU:CD1	0.53	2.91	3	1
1:A:14:LEU:HD12	1:A:43:GLU:CA	0.53	2.33	5	2
1:A:91:ALA:O	1:A:95:GLY:CA	0.53	2.56	12	4
1:A:104:ASN:ND2	1:A:107:ASN:O	0.53	2.41	12	1
1:A:84:TYR:CD1	1:A:88:ARG:HD3	0.53	2.38	15	1
1:A:84:TYR:CD1	1:A:90:ASP:HB3	0.53	2.38	6	2
1:A:124:GLN:O	1:A:126:CYS:N	0.53	2.42	1	6
1:A:33:CYS:CB	1:A:34:PRO:HD2	0.53	2.34	2	1
1:A:74:TRP:CD1	1:A:99:HIS:CD2	0.53	2.96	8	3
1:A:98:LYS:O	1:A:99:HIS:CB	0.53	2.56	1	1
1:A:65:ASP:OD2	1:A:69:ARG:CG	0.53	2.57	2	2
1:A:79:VAL:CG2	1:A:85:HIS:CB	0.53	2.87	8	7
1:A:15:ASN:O	1:A:37:PHE:CE2	0.53	2.62	3	3
1:A:122:LEU:O	1:A:124:GLN:NE2	0.53	2.42	10	9
1:A:69:ARG:CD	1:A:115:VAL:HG21	0.53	2.34	13	2
1:A:82:GLN:OE1	1:A:84:TYR:N	0.53	2.41	13	1
1:A:63:SER:CB	1:A:100:ASN:O	0.53	2.57	4	2
1:A:22:ASN:OD1	1:A:25:PHE:CB	0.53	2.57	8	3
1:A:57:PHE:O	1:A:58:TYR:CD2	0.53	2.62	9	1
1:A:126:CYS:O	1:A:127:MET:CB	0.53	2.55	14	1
1:A:101:TYR:N	1:A:101:TYR:CD1	0.53	2.75	1	1
1:A:85:HIS:O	1:A:91:ALA:CB	0.53	2.56	5	1
1:A:112:TRP:HA	1:A:124:GLN:O	0.53	2.04	6	4
1:A:99:HIS:CD2	1:A:101:TYR:CD1	0.53	2.97	6	1
1:A:20:VAL:CG2	1:A:30:TRP:O	0.53	2.57	11	3
1:A:14:LEU:HD22	1:A:43:GLU:HB2	0.53	1.79	14	1
1:A:33:CYS:SG	1:A:34:PRO:CD	0.53	2.97	2	1
1:A:79:VAL:O	1:A:85:HIS:CB	0.53	2.57	8	6
1:A:104:ASN:ND2	1:A:108:ARG:O	0.53	2.42	4	1
1:A:22:ASN:HB3	1:A:25:PHE:CD1	0.53	2.39	11	1
1:A:88:ARG:NH1	1:A:90:ASP:OD2	0.53	2.42	13	1
1:A:25:PHE:CD1	1:A:28:ILE:HG13	0.52	2.39	9	1
1:A:63:SER:CA	1:A:102:CYS:SG	0.52	2.98	15	1
1:A:112:TRP:CE3	1:A:123:VAL:HB	0.52	2.39	9	15
1:A:117:VAL:CG2	1:A:124:GLN:NE2	0.52	2.72	2	1
1:A:25:PHE:CG	1:A:28:ILE:HG13	0.52	2.39	9	3
1:A:82:GLN:HB3	1:A:114:TYR:CE1	0.52	2.40	5	1
1:A:87:HIS:N	1:A:88:ARG:NH2	0.52	2.58	12	1
1:A:64:THR:O	1:A:126:CYS:CB	0.52	2.58	15	1
1:A:86:ALA:HB2	1:A:97:GLY:HA2	0.52	1.80	1	1
1:A:92:LEU:HD22	1:A:93:GLN:H	0.52	1.64	3	9

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:ASP:O	1:A:13:CYS:CB	0.52	2.57	15	2
1:A:117:VAL:CG2	1:A:122:LEU:HB2	0.52	2.34	14	13
1:A:70:PRO:O	1:A:71:CYS:CB	0.52	2.57	9	9
1:A:22:ASN:HB2	1:A:28:ILE:HG21	0.52	1.81	3	1
1:A:89:SER:O	1:A:92:LEU:CD2	0.52	2.57	6	1
1:A:18:THR:O	1:A:32:ASN:CB	0.52	2.57	10	2
1:A:65:ASP:OD1	1:A:69:ARG:CG	0.52	2.58	9	1
1:A:25:PHE:CE1	1:A:28:ILE:HG21	0.52	2.39	10	1
1:A:90:ASP:O	1:A:94:LEU:CD2	0.52	2.58	5	4
1:A:124:GLN:OE1	1:A:126:CYS:CA	0.52	2.57	6	1
1:A:106:ASP:O	1:A:107:ASN:CB	0.52	2.56	2	3
1:A:37:PHE:HB2	1:A:42:CYS:SG	0.52	2.44	5	3
1:A:84:TYR:CZ	1:A:90:ASP:CB	0.52	2.93	4	1
1:A:57:PHE:O	1:A:59:ARG:N	0.52	2.43	5	1
1:A:74:TRP:O	1:A:80:LEU:CD2	0.52	2.58	6	4
1:A:104:ASN:N	1:A:104:ASN:OD1	0.52	2.41	6	2
1:A:22:ASN:HB3	1:A:28:ILE:HG13	0.52	1.82	10	1
1:A:36:LYS:O	1:A:46:LYS:N	0.52	2.43	14	3
1:A:33:CYS:SG	1:A:34:PRO:N	0.52	2.83	2	1
1:A:75:ASN:O	1:A:80:LEU:HD11	0.52	2.05	6	3
1:A:37:PHE:CE1	1:A:45:ASP:CG	0.52	2.83	7	1
1:A:62:ALA:HB1	1:A:128:VAL:HG21	0.52	1.80	15	1
1:A:83:THR:CG2	1:A:88:ARG:CZ	0.52	2.87	15	1
1:A:76:SER:O	1:A:79:VAL:CG1	0.52	2.56	6	4
1:A:94:LEU:CG	1:A:105:PRO:HB3	0.52	2.35	14	4
1:A:37:PHE:HD2	1:A:42:CYS:SG	0.52	2.27	11	2
1:A:92:LEU:HG	1:A:93:GLN:N	0.52	2.20	6	1
1:A:88:ARG:NH1	1:A:90:ASP:OD1	0.52	2.43	9	1
1:A:100:ASN:N	1:A:100:ASN:OD1	0.52	2.43	1	2
1:A:79:VAL:O	1:A:85:HIS:HB3	0.52	2.05	8	8
1:A:54:ASN:O	1:A:54:ASN:ND2	0.52	2.43	3	2
1:A:66:THR:HG22	1:A:127:MET:SD	0.52	2.45	9	1
1:A:74:TRP:O	1:A:80:LEU:HD21	0.51	2.04	12	4
1:A:25:PHE:HB3	1:A:28:ILE:CG2	0.51	2.35	6	3
1:A:25:PHE:O	1:A:28:ILE:HD11	0.51	2.04	8	1
1:A:57:PHE:C	1:A:58:TYR:CG	0.51	2.84	9	1
1:A:22:ASN:OD1	1:A:23:LYS:N	0.51	2.42	10	1
1:A:123:VAL:O	1:A:123:VAL:HG23	0.51	2.04	11	6
1:A:88:ARG:NH2	1:A:90:ASP:OD2	0.51	2.43	9	1
1:A:11:CYS:O	1:A:41:HIS:NE2	0.51	2.44	11	1
1:A:25:PHE:CD1	1:A:28:ILE:HG12	0.51	2.40	3	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:GLY:C	1:A:40:GLN:CG	0.51	2.79	11	1
1:A:75:ASN:O	1:A:76:SER:C	0.51	2.49	8	12
1:A:64:THR:CB	1:A:69:ARG:O	0.51	2.59	7	10
1:A:75:ASN:OD1	1:A:76:SER:N	0.51	2.44	3	1
1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:OD1	0.51	2.44	4	2
1:A:117:VAL:HG12	1:A:120:LYS:O	0.51	2.06	15	1
1:A:99:HIS:NE2	1:A:101:TYR:HB2	0.51	2.20	6	3
1:A:94:LEU:HD12	1:A:105:PRO:CB	0.51	2.36	14	2
1:A:24:TYR:C	1:A:25:PHE:CD1	0.51	2.84	4	2
1:A:14:LEU:CD1	1:A:15:ASN:OD1	0.51	2.59	8	2
1:A:88:ARG:CZ	1:A:88:ARG:HB2	0.51	2.35	6	1
1:A:119:LEU:CD2	1:A:119:LEU:C	0.51	2.79	10	1
1:A:25:PHE:CD2	1:A:26:SER:N	0.51	2.79	11	1
1:A:14:LEU:HD21	1:A:43:GLU:HA	0.51	1.81	13	1
1:A:18:THR:HG23	2:A:136:FUC:O5	0.51	2.05	14	1
1:A:14:LEU:CD1	1:A:43:GLU:HB2	0.51	2.35	2	1
1:A:22:ASN:CG	1:A:25:PHE:CE1	0.51	2.84	4	1
1:A:75:ASN:O	1:A:80:LEU:CD1	0.51	2.59	7	4
1:A:66:THR:HA	1:A:127:MET:CB	0.51	2.35	5	1
1:A:115:VAL:CG1	1:A:124:GLN:NE2	0.51	2.74	9	2
1:A:119:LEU:HD22	1:A:120:LYS:HB3	0.51	1.82	15	2
1:A:128:VAL:HG22	1:A:129:HIS:N	0.51	2.21	14	1
1:A:31:CYS:SG	1:A:32:ASN:N	0.50	2.84	12	3
1:A:124:GLN:OE1	1:A:126:CYS:N	0.50	2.44	6	1
1:A:14:LEU:HD11	1:A:43:GLU:HB3	0.50	1.83	7	1
1:A:65:ASP:HB3	1:A:113:CYS:SG	0.50	2.46	12	1
1:A:28:ILE:HG22	1:A:30:TRP:CZ3	0.50	2.41	2	2
1:A:94:LEU:CD1	1:A:105:PRO:HB3	0.50	2.33	3	3
1:A:85:HIS:NE2	1:A:87:HIS:C	0.50	2.64	13	4
1:A:22:ASN:CB	1:A:28:ILE:CG2	0.50	2.89	3	1
1:A:117:VAL:CG2	1:A:122:LEU:CB	0.50	2.89	9	5
1:A:80:LEU:O	1:A:85:HIS:ND1	0.50	2.45	14	3
1:A:65:ASP:CG	1:A:69:ARG:CG	0.50	2.79	9	1
1:A:128:VAL:HG22	1:A:129:HIS:H	0.50	1.65	9	2
1:A:12:ASP:OD2	1:A:41:HIS:NE2	0.50	2.44	1	1
1:A:66:THR:HG22	1:A:127:MET:HG3	0.50	1.84	4	1
1:A:18:THR:HG22	1:A:20:VAL:HG13	0.50	1.82	1	1
1:A:25:PHE:CD2	1:A:28:ILE:CG1	0.50	2.94	12	1
1:A:14:LEU:CB	1:A:43:GLU:CB	0.50	2.89	1	2
1:A:80:LEU:HA	1:A:85:HIS:CD2	0.50	2.42	11	5
1:A:102:CYS:O	1:A:112:TRP:O	0.50	2.30	6	2

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:65:ASP:OD2	1:A:115:VAL:HG11	0.50	2.07	2	1
1:A:14:LEU:CB	1:A:43:GLU:HB3	0.50	2.37	1	3
1:A:37:PHE:CD2	1:A:42:CYS:SG	0.50	3.05	11	2
1:A:65:ASP:OD1	1:A:65:ASP:N	0.50	2.45	9	2
1:A:58:TYR:C	1:A:59:ARG:CD	0.50	2.80	14	1
1:A:22:ASN:CB	1:A:28:ILE:O	0.50	2.60	14	2
1:A:84:TYR:CD1	1:A:105:PRO:HB2	0.50	2.42	4	3
1:A:45:ASP:N	1:A:45:ASP:OD1	0.50	2.44	14	2
1:A:90:ASP:O	1:A:92:LEU:N	0.50	2.45	10	1
1:A:18:THR:CG2	2:A:136:FUC:O5	0.50	2.59	14	2
1:A:83:THR:HG22	1:A:84:TYR:N	0.50	2.20	15	2
1:A:113:CYS:SG	1:A:113:CYS:O	0.49	2.69	2	1
1:A:14:LEU:HD12	1:A:15:ASN:CB	0.49	2.37	6	2
1:A:74:TRP:O	1:A:85:HIS:O	0.49	2.31	2	7
1:A:94:LEU:HG	1:A:105:PRO:CB	0.49	2.38	5	3
1:A:25:PHE:CE1	1:A:28:ILE:CG2	0.49	2.95	10	1
1:A:119:LEU:CD2	1:A:120:LYS:CG	0.49	2.90	2	1
1:A:90:ASP:O	1:A:94:LEU:HD23	0.49	2.07	14	3
1:A:33:CYS:SG	1:A:37:PHE:HB3	0.49	2.45	11	1
1:A:119:LEU:HD13	1:A:120:LYS:N	0.49	2.22	6	5
1:A:33:CYS:SG	1:A:37:PHE:CD2	0.49	3.05	11	1
1:A:28:ILE:HG22	1:A:30:TRP:HZ3	0.49	1.67	2	1
1:A:92:LEU:CD2	1:A:92:LEU:C	0.49	2.81	8	6
1:A:94:LEU:CD2	1:A:105:PRO:HB3	0.49	2.37	9	4
1:A:30:TRP:O	1:A:30:TRP:CG	0.49	2.64	9	3
1:A:14:LEU:CD1	1:A:41:HIS:HB2	0.49	2.38	13	2
1:A:84:TYR:CD1	1:A:105:PRO:HB3	0.49	2.42	11	1
1:A:34:PRO:HG2	1:A:37:PHE:CE2	0.49	2.43	11	3
1:A:65:ASP:HA	1:A:126:CYS:SG	0.49	2.47	2	1
1:A:74:TRP:NE1	1:A:99:HIS:CE1	0.49	2.80	4	2
1:A:105:PRO:CG	1:A:112:TRP:CH2	0.49	2.95	9	4
1:A:128:VAL:O	1:A:128:VAL:CG2	0.49	2.60	7	4
1:A:40:GLN:CD	1:A:40:GLN:N	0.49	2.66	8	1
1:A:85:HIS:O	1:A:96:LEU:CD1	0.49	2.61	9	1
1:A:113:CYS:SG	1:A:114:TYR:N	0.49	2.86	15	2
1:A:103:ARG:NH1	1:A:105:PRO:HG2	0.49	2.21	12	1
1:A:96:LEU:C	1:A:99:HIS:NE2	0.49	2.66	8	5
1:A:124:GLN:O	1:A:125:GLU:O	0.49	2.31	13	2
1:A:27:ASN:O	1:A:28:ILE:CD1	0.49	2.57	7	1
1:A:25:PHE:C	1:A:25:PHE:CD1	0.49	2.85	12	1
1:A:38:GLY:O	1:A:44:ILE:N	0.49	2.46	11	4

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:71:CYS:SG	1:A:72:LEU:N	0.49	2.86	3	2
1:A:104:ASN:OD1	1:A:112:TRP:NE1	0.49	2.46	10	1
1:A:71:CYS:SG	1:A:114:TYR:C	0.49	2.91	13	2
1:A:96:LEU:O	1:A:97:GLY:C	0.48	2.51	14	2
1:A:108:ARG:HD3	1:A:112:TRP:CD1	0.48	2.43	12	2
1:A:14:LEU:CB	1:A:43:GLU:HA	0.48	2.38	11	2
1:A:88:ARG:NE	1:A:91:ALA:HB2	0.48	2.22	12	1
1:A:103:ARG:CD	1:A:103:ARG:C	0.48	2.81	12	1
1:A:123:VAL:C	1:A:124:GLN:NE2	0.48	2.67	15	1
1:A:14:LEU:C	1:A:14:LEU:CD1	0.48	2.81	4	4
1:A:14:LEU:CD1	1:A:15:ASN:CG	0.48	2.81	3	2
1:A:81:GLN:O	1:A:82:GLN:O	0.48	2.30	8	6
1:A:94:LEU:N	1:A:94:LEU:HD13	0.48	2.23	6	1
1:A:85:HIS:CE1	1:A:88:ARG:HG2	0.48	2.42	7	1
1:A:27:ASN:N	1:A:27:ASN:OD1	0.48	2.45	9	1
1:A:25:PHE:CD1	1:A:28:ILE:HG21	0.48	2.42	10	1
1:A:22:ASN:HB3	1:A:28:ILE:CG2	0.48	2.38	15	2
1:A:80:LEU:CD2	1:A:87:HIS:CG	0.48	2.96	14	1
1:A:84:TYR:CZ	1:A:90:ASP:HB3	0.48	2.43	4	1
1:A:63:SER:HB2	1:A:100:ASN:ND2	0.48	2.23	13	1
1:A:74:TRP:CG	1:A:96:LEU:HB3	0.48	2.43	1	2
1:A:76:SER:O	1:A:77:ALA:C	0.48	2.52	6	15
1:A:56:HIS:CE1	1:A:94:LEU:HD12	0.48	2.43	9	1
1:A:126:CYS:O	1:A:127:MET:HB2	0.48	2.09	9	1
1:A:127:MET:O	1:A:128:VAL:O	0.48	2.32	9	1
1:A:14:LEU:HD21	1:A:43:GLU:CB	0.48	2.38	13	1
1:A:36:LYS:HD2	1:A:37:PHE:CE1	0.48	2.43	3	2
1:A:84:TYR:CG	1:A:94:LEU:HD12	0.48	2.44	3	1
1:A:34:PRO:HB2	1:A:37:PHE:CD1	0.48	2.43	10	2
1:A:74:TRP:CD2	1:A:96:LEU:HD22	0.48	2.42	15	2
1:A:27:ASN:HA	1:A:29:HIS:CE1	0.48	2.44	12	1
1:A:14:LEU:HB3	1:A:43:GLU:CB	0.48	2.39	1	1
1:A:69:ARG:NH1	1:A:69:ARG:CG	0.48	2.77	1	1
1:A:39:GLY:HA3	1:A:44:ILE:CD1	0.48	2.39	8	5
1:A:34:PRO:HD2	1:A:37:PHE:CD2	0.48	2.43	11	4
1:A:65:ASP:C	1:A:126:CYS:O	0.48	2.51	9	1
1:A:83:THR:O	1:A:85:HIS:ND1	0.48	2.47	9	4
1:A:94:LEU:CB	1:A:105:PRO:HB3	0.48	2.39	5	1
1:A:22:ASN:HB2	1:A:28:ILE:CD1	0.48	2.38	10	1
1:A:84:TYR:CZ	1:A:105:PRO:HB2	0.48	2.43	13	5
1:A:94:LEU:HD21	1:A:105:PRO:HB3	0.48	1.85	6	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:80:LEU:HD21	1:A:86:ALA:HB3	0.48	1.86	9	1
1:A:115:VAL:HG11	1:A:124:GLN:HB2	0.48	1.86	10	1
1:A:113:CYS:O	1:A:115:VAL:HG13	0.48	2.08	13	1
1:A:26:SER:O	1:A:27:ASN:ND2	0.48	2.47	1	1
1:A:119:LEU:O	1:A:119:LEU:CD2	0.48	2.55	13	4
1:A:62:ALA:CB	1:A:128:VAL:HG23	0.48	2.39	5	1
1:A:14:LEU:HD12	1:A:14:LEU:N	0.48	2.24	7	1
1:A:74:TRP:CD2	1:A:96:LEU:CD2	0.47	2.96	15	3
1:A:25:PHE:CB	1:A:28:ILE:HG12	0.47	2.38	4	2
1:A:92:LEU:CD2	1:A:93:GLN:HG3	0.47	2.39	2	1
1:A:84:TYR:CE2	1:A:105:PRO:HB2	0.47	2.44	5	2
1:A:15:ASN:HB3	1:A:37:PHE:CE1	0.47	2.43	8	1
1:A:124:GLN:CD	1:A:124:GLN:O	0.47	2.52	8	1
1:A:94:LEU:HG	1:A:105:PRO:CA	0.47	2.39	12	2
1:A:119:LEU:CD2	1:A:120:LYS:HG3	0.47	2.39	2	1
1:A:74:TRP:CD1	1:A:99:HIS:NE2	0.47	2.82	8	4
1:A:119:LEU:CD2	1:A:120:LYS:N	0.47	2.74	10	1
1:A:115:VAL:HG12	1:A:124:GLN:NE2	0.47	2.24	9	1
1:A:98:LYS:CG	1:A:98:LYS:O	0.47	2.62	10	1
1:A:26:SER:O	1:A:27:ASN:O	0.47	2.33	7	1
1:A:64:THR:HA	1:A:69:ARG:O	0.47	2.09	4	15
1:A:69:ARG:HD3	1:A:115:VAL:CG2	0.47	2.39	9	1
1:A:94:LEU:O	1:A:95:GLY:O	0.47	2.33	15	1
1:A:21:SER:O	1:A:22:ASN:O	0.47	2.33	3	2
1:A:26:SER:OG	1:A:27:ASN:N	0.47	2.47	5	1
1:A:74:TRP:CE3	1:A:84:TYR:O	0.47	2.68	10	2
1:A:14:LEU:CD1	1:A:43:GLU:HB3	0.47	2.40	7	3
1:A:125:GLU:O	1:A:127:MET:N	0.47	2.48	10	3
1:A:66:THR:CG2	1:A:126:CYS:C	0.47	2.83	2	1
1:A:65:ASP:HA	1:A:124:GLN:OE1	0.47	2.09	9	4
1:A:115:VAL:O	1:A:117:VAL:HG23	0.47	2.10	9	2
1:A:88:ARG:NH2	1:A:91:ALA:HB2	0.47	2.21	10	1
1:A:120:LYS:CD	1:A:122:LEU:HD23	0.47	2.32	11	1
1:A:30:TRP:CD1	1:A:31:CYS:N	0.47	2.83	12	1
1:A:74:TRP:CH2	1:A:103:ARG:CZ	0.47	2.97	12	1
1:A:83:THR:CG2	1:A:88:ARG:NH1	0.47	2.77	15	1
1:A:107:ASN:O	1:A:108:ARG:O	0.47	2.33	15	1
1:A:22:ASN:ND2	1:A:22:ASN:C	0.47	2.67	2	1
1:A:64:THR:O	1:A:65:ASP:O	0.47	2.33	3	2
1:A:38:GLY:O	1:A:44:ILE:HG12	0.47	2.10	10	2
1:A:124:GLN:O	1:A:124:GLN:CD	0.47	2.53	6	4

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:ASP:O	1:A:46:LYS:O	0.47	2.33	11	3
1:A:84:TYR:HA	1:A:88:ARG:NH2	0.47	2.25	1	1
1:A:14:LEU:CD1	1:A:43:GLU:HA	0.47	2.39	5	5
1:A:104:ASN:OD1	1:A:110:ARG:O	0.47	2.33	4	1
1:A:85:HIS:NE2	1:A:87:HIS:CA	0.47	2.78	5	1
1:A:24:TYR:HB2	1:A:25:PHE:CE1	0.46	2.45	1	1
1:A:13:CYS:SG	1:A:42:CYS:CB	0.46	3.03	7	3
1:A:18:THR:CG2	1:A:19:CYS:N	0.46	2.78	5	1
1:A:84:TYR:CD1	1:A:90:ASP:CB	0.46	2.98	10	2
1:A:111:PRO:O	1:A:126:CYS:N	0.46	2.48	11	2
1:A:56:HIS:HB3	1:A:57:PHE:CE1	0.46	2.44	15	1
1:A:28:ILE:O	1:A:28:ILE:CG2	0.46	2.60	9	2
1:A:64:THR:HB	1:A:69:ARG:O	0.46	2.11	2	10
1:A:119:LEU:N	1:A:119:LEU:HD13	0.46	2.26	11	5
1:A:85:HIS:O	1:A:96:LEU:CB	0.46	2.64	13	1
1:A:100:ASN:O	1:A:101:TYR:C	0.46	2.53	1	1
1:A:11:CYS:O	1:A:12:ASP:OD2	0.46	2.33	2	1
1:A:118:GLY:C	1:A:119:LEU:CD2	0.46	2.80	3	1
1:A:82:GLN:OE1	1:A:121:PRO:O	0.46	2.34	10	2
1:A:38:GLY:O	1:A:44:ILE:HG13	0.46	2.10	14	4
1:A:12:ASP:O	1:A:13:CYS:O	0.46	2.32	13	3
1:A:62:ALA:HB2	1:A:128:VAL:HG21	0.46	1.85	12	1
1:A:106:ASP:O	1:A:107:ASN:HB3	0.46	2.11	15	1
1:A:22:ASN:OD1	1:A:25:PHE:CG	0.46	2.68	7	1
1:A:83:THR:OG1	1:A:84:TYR:N	0.46	2.48	10	1
1:A:22:ASN:OD1	1:A:26:SER:O	0.46	2.33	2	1
1:A:55:GLY:O	1:A:56:HIS:O	0.46	2.33	9	1
1:A:16:GLY:O	1:A:17:GLY:O	0.46	2.33	5	5
1:A:67:MET:HB3	1:A:69:ARG:NH2	0.46	2.25	1	1
1:A:32:ASN:CG	2:A:136:FUC:H61	0.46	2.31	7	1
1:A:83:THR:CG2	1:A:88:ARG:NH2	0.46	2.78	14	1
1:A:99:HIS:CD2	1:A:101:TYR:CD2	0.46	3.04	1	1
1:A:74:TRP:HB3	1:A:85:HIS:O	0.46	2.10	2	3
1:A:100:ASN:O	1:A:100:ASN:OD1	0.46	2.33	12	1
1:A:15:ASN:OD1	1:A:37:PHE:CE1	0.46	2.69	15	1
1:A:39:GLY:O	1:A:40:GLN:C	0.46	2.54	4	8
1:A:96:LEU:O	1:A:97:GLY:O	0.46	2.33	2	1
1:A:93:GLN:O	1:A:94:LEU:HD23	0.46	2.11	3	1
1:A:106:ASP:O	1:A:106:ASP:OD1	0.46	2.34	3	1
1:A:66:THR:OG1	1:A:67:MET:CE	0.46	2.64	8	1
1:A:79:VAL:O	1:A:82:GLN:HG3	0.46	2.11	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:25:PHE:CZ	1:A:28:ILE:HG21	0.46	2.46	10	1
1:A:26:SER:O	1:A:27:ASN:OD1	0.46	2.34	13	1
1:A:86:ALA:CB	1:A:97:GLY:HA2	0.46	2.40	1	2
1:A:88:ARG:HG2	1:A:89:SER:N	0.46	2.25	1	1
1:A:83:THR:OG1	1:A:114:TYR:OH	0.46	2.34	4	1
1:A:22:ASN:OD1	1:A:25:PHE:HB2	0.46	2.11	8	3
1:A:30:TRP:O	1:A:31:CYS:C	0.46	2.54	6	1
1:A:68:GLY:O	1:A:69:ARG:C	0.46	2.54	14	3
1:A:91:ALA:O	1:A:95:GLY:HA2	0.46	2.11	12	5
1:A:55:GLY:O	1:A:104:ASN:OD1	0.46	2.34	7	1
1:A:54:ASN:O	1:A:109:ARG:O	0.46	2.33	6	2
1:A:94:LEU:HG	1:A:105:PRO:HB3	0.46	1.88	14	3
1:A:20:VAL:O	1:A:21:SER:CB	0.46	2.63	6	2
1:A:12:ASP:HA	1:A:41:HIS:CD2	0.46	2.46	8	2
1:A:11:CYS:O	1:A:12:ASP:OD1	0.46	2.34	10	1
1:A:108:ARG:O	1:A:109:ARG:C	0.46	2.55	12	1
1:A:57:PHE:O	1:A:58:TYR:HB3	0.45	2.11	4	1
1:A:99:HIS:NE2	1:A:101:TYR:CB	0.45	2.77	10	1
1:A:55:GLY:O	1:A:56:HIS:HB2	0.45	2.11	13	1
1:A:126:CYS:O	1:A:127:MET:HB3	0.45	2.10	14	1
1:A:119:LEU:HD22	1:A:120:LYS:CB	0.45	2.40	15	1
1:A:126:CYS:O	1:A:127:MET:O	0.45	2.34	10	1
1:A:91:ALA:HA	1:A:96:LEU:HD11	0.45	1.87	4	1
1:A:106:ASP:OD1	1:A:106:ASP:C	0.45	2.55	4	1
1:A:18:THR:O	1:A:32:ASN:HB3	0.45	2.11	7	1
1:A:65:ASP:CB	1:A:115:VAL:HG11	0.45	2.41	12	1
1:A:25:PHE:HB2	1:A:28:ILE:CG1	0.45	2.41	1	1
1:A:94:LEU:O	1:A:95:GLY:C	0.45	2.54	10	4
1:A:83:THR:CG2	1:A:88:ARG:HD2	0.45	2.41	9	1
1:A:102:CYS:SG	1:A:113:CYS:SG	0.45	3.14	9	1
1:A:82:GLN:CD	1:A:83:THR:N	0.45	2.70	13	1
1:A:115:VAL:CG1	1:A:124:GLN:HB2	0.45	2.41	15	7
1:A:14:LEU:HD12	1:A:15:ASN:HB2	0.45	1.87	4	1
1:A:28:ILE:HG13	1:A:29:HIS:N	0.45	2.27	6	1
1:A:38:GLY:O	1:A:44:ILE:CB	0.45	2.65	9	2
1:A:103:ARG:C	1:A:103:ARG:HD3	0.45	2.32	12	1
1:A:84:TYR:CZ	1:A:88:ARG:NH1	0.45	2.85	14	1
1:A:106:ASP:OD2	1:A:112:TRP:CE2	0.45	2.70	4	1
1:A:14:LEU:HD12	1:A:43:GLU:CB	0.45	2.41	5	1
1:A:108:ARG:O	1:A:110:ARG:N	0.45	2.50	12	1
1:A:85:HIS:NE2	1:A:88:ARG:N	0.45	2.64	14	1

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:61:LYS:O	1:A:62:ALA:C	0.45	2.55	15	9
1:A:119:LEU:C	1:A:119:LEU:HD13	0.45	2.32	8	3
1:A:41:HIS:O	1:A:42:CYS:C	0.45	2.55	7	9
1:A:55:GLY:O	1:A:56:HIS:HB3	0.45	2.11	3	2
1:A:15:ASN:O	1:A:15:ASN:OD1	0.45	2.34	4	1
1:A:73:PRO:HA	1:A:99:HIS:O	0.45	2.11	15	3
1:A:14:LEU:HB2	1:A:43:GLU:CA	0.45	2.41	14	1
1:A:80:LEU:CD2	1:A:87:HIS:HB2	0.45	2.42	13	3
1:A:15:ASN:O	1:A:37:PHE:CZ	0.45	2.70	7	1
1:A:84:TYR:CE2	1:A:105:PRO:O	0.45	2.70	7	1
1:A:113:CYS:O	1:A:124:GLN:NE2	0.45	2.50	8	2
1:A:65:ASP:OD1	1:A:69:ARG:HG3	0.45	2.11	9	1
1:A:88:ARG:N	1:A:88:ARG:CD	0.45	2.80	10	1
1:A:14:LEU:HD21	1:A:43:GLU:CA	0.45	2.42	13	1
1:A:108:ARG:CB	1:A:112:TRP:CD1	0.45	2.99	2	1
1:A:38:GLY:O	1:A:44:ILE:HB	0.45	2.12	9	4
1:A:106:ASP:O	1:A:107:ASN:HB2	0.44	2.12	12	2
1:A:14:LEU:HD12	1:A:42:CYS:O	0.44	2.11	7	1
1:A:59:ARG:O	1:A:60:GLY:O	0.44	2.35	7	1
1:A:119:LEU:CD2	1:A:120:LYS:HB3	0.44	2.41	15	1
1:A:45:ASP:O	1:A:46:LYS:C	0.44	2.54	15	5
1:A:57:PHE:CD2	1:A:58:TYR:N	0.44	2.85	9	2
1:A:58:TYR:N	1:A:58:TYR:CD1	0.44	2.85	12	1
1:A:25:PHE:CG	1:A:28:ILE:HB	0.44	2.47	6	1
1:A:100:ASN:ND2	1:A:100:ASN:N	0.44	2.65	7	1
1:A:34:PRO:HG2	1:A:37:PHE:CZ	0.44	2.48	10	2
1:A:103:ARG:C	1:A:104:ASN:OD1	0.44	2.56	11	1
1:A:24:TYR:O	1:A:25:PHE:CD1	0.44	2.70	14	1
1:A:12:ASP:O	1:A:41:HIS:CG	0.44	2.71	1	1
1:A:122:LEU:HB3	1:A:124:GLN:NE2	0.44	2.28	1	2
1:A:22:ASN:HB2	1:A:28:ILE:O	0.44	2.13	2	4
1:A:82:GLN:CG	1:A:83:THR:N	0.44	2.81	2	1
1:A:58:TYR:O	1:A:59:ARG:C	0.44	2.55	14	2
1:A:63:SER:HB2	1:A:100:ASN:O	0.44	2.13	4	1
1:A:72:LEU:HD11	1:A:116:GLN:CB	0.44	2.43	11	2
1:A:78:THR:CG2	1:A:121:PRO:CD	0.44	2.96	6	2
1:A:112:TRP:CE3	1:A:112:TRP:C	0.44	2.90	6	2
1:A:65:ASP:OD1	1:A:69:ARG:HG2	0.44	2.12	12	1
1:A:65:ASP:HB2	1:A:125:GLU:O	0.44	2.13	13	1
1:A:40:GLN:HG2	1:A:41:HIS:N	0.44	2.27	1	1
1:A:43:GLU:O	1:A:45:ASP:OD1	0.44	2.34	5	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:SER:C	1:A:27:ASN:OD1	0.44	2.56	9	1
1:A:103:ARG:O	1:A:112:TRP:O	0.44	2.36	11	1
1:A:64:THR:CA	1:A:69:ARG:O	0.44	2.66	8	6
1:A:104:ASN:OD1	1:A:110:ARG:C	0.44	2.56	15	2
1:A:70:PRO:O	1:A:71:CYS:HB3	0.44	2.13	11	4
1:A:84:TYR:CG	1:A:94:LEU:CD1	0.44	3.00	3	1
1:A:25:PHE:O	1:A:26:SER:HB2	0.44	2.12	9	1
1:A:18:THR:CG2	2:A:136:FUC:O2	0.44	2.57	10	1
1:A:97:GLY:O	1:A:99:HIS:N	0.44	2.50	10	1
1:A:82:GLN:NE2	1:A:114:TYR:CZ	0.44	2.85	13	1
1:A:107:ASN:N	1:A:107:ASN:OD1	0.44	2.49	13	1
1:A:58:TYR:O	1:A:59:ARG:CB	0.44	2.64	15	1
1:A:114:TYR:CZ	1:A:123:VAL:HG12	0.44	2.47	2	1
1:A:61:LYS:O	1:A:62:ALA:HB2	0.44	2.11	4	1
1:A:14:LEU:CG	1:A:43:GLU:HA	0.44	2.43	5	1
1:A:112:TRP:CA	1:A:124:GLN:O	0.44	2.66	6	3
1:A:92:LEU:HD23	1:A:92:LEU:N	0.44	2.27	6	1
1:A:102:CYS:O	1:A:103:ARG:C	0.44	2.56	6	1
1:A:22:ASN:ND2	1:A:25:PHE:HB3	0.44	2.26	10	1
1:A:71:CYS:HA	1:A:115:VAL:CB	0.44	2.42	13	1
1:A:102:CYS:O	1:A:103:ARG:CB	0.44	2.66	13	1
1:A:124:GLN:O	1:A:125:GLU:C	0.44	2.56	2	1
1:A:74:TRP:O	1:A:86:ALA:N	0.44	2.51	10	1
1:A:122:LEU:HD13	1:A:123:VAL:N	0.44	2.27	15	2
1:A:57:PHE:O	1:A:58:TYR:O	0.44	2.36	1	1
1:A:21:SER:O	1:A:22:ASN:C	0.44	2.56	2	5
1:A:80:LEU:HA	1:A:85:HIS:HB2	0.44	1.90	2	4
1:A:80:LEU:HA	1:A:85:HIS:CB	0.44	2.43	2	1
1:A:88:ARG:O	1:A:92:LEU:HD11	0.44	2.13	2	1
1:A:66:THR:HG22	1:A:127:MET:N	0.44	2.28	6	2
1:A:72:LEU:CD1	1:A:121:PRO:HB3	0.44	2.43	8	5
1:A:54:ASN:OD1	1:A:104:ASN:HB2	0.44	2.13	5	1
1:A:77:ALA:CA	1:A:80:LEU:HD12	0.44	2.39	5	1
1:A:90:ASP:O	1:A:91:ALA:C	0.44	2.56	10	1
1:A:90:ASP:C	1:A:92:LEU:N	0.44	2.71	10	1
1:A:69:ARG:NH1	1:A:69:ARG:HG3	0.43	2.27	1	1
1:A:75:ASN:O	1:A:80:LEU:HD12	0.43	2.13	2	1
1:A:79:VAL:C	1:A:81:GLN:N	0.43	2.72	8	3
1:A:14:LEU:HD22	1:A:43:GLU:HB3	0.43	1.88	14	2
1:A:103:ARG:NH1	1:A:103:ARG:HG2	0.43	2.28	12	1
1:A:104:ASN:OD1	1:A:111:PRO:N	0.43	2.51	12	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:108:ARG:C	0.43	2.56	15	1
1:A:79:VAL:HA	1:A:82:GLN:CG	0.43	2.43	1	1
1:A:43:GLU:C	1:A:44:ILE:CG1	0.43	2.86	2	2
1:A:94:LEU:HD12	1:A:105:PRO:HB2	0.43	1.90	2	1
1:A:21:SER:HB2	1:A:29:HIS:CD2	0.43	2.48	4	1
1:A:85:HIS:CG	1:A:86:ALA:N	0.43	2.85	5	2
1:A:13:CYS:SG	1:A:31:CYS:O	0.43	2.76	6	1
1:A:85:HIS:ND1	1:A:88:ARG:HD2	0.43	2.28	6	1
1:A:14:LEU:HD21	1:A:43:GLU:HB2	0.43	1.89	13	1
1:A:75:ASN:ND2	1:A:75:ASN:C	0.43	2.71	15	2
1:A:79:VAL:O	1:A:80:LEU:C	0.43	2.55	8	4
1:A:104:ASN:CG	1:A:107:ASN:O	0.43	2.56	12	1
1:A:89:SER:C	1:A:90:ASP:OD1	0.43	2.57	4	4
1:A:43:GLU:CG	1:A:44:ILE:N	0.43	2.81	5	1
1:A:77:ALA:HA	1:A:80:LEU:CD1	0.43	2.40	5	2
1:A:20:VAL:HG23	1:A:30:TRP:O	0.43	2.14	11	1
1:A:88:ARG:HB3	1:A:88:ARG:CZ	0.43	2.43	3	1
1:A:124:GLN:OE1	1:A:126:CYS:HA	0.43	2.13	6	1
1:A:56:HIS:CD2	1:A:56:HIS:C	0.43	2.92	14	1
1:A:64:THR:HG22	1:A:70:PRO:HA	0.43	1.91	2	3
1:A:54:ASN:O	1:A:54:ASN:CG	0.43	2.57	3	1
1:A:75:ASN:CB	1:A:98:LYS:HG3	0.43	2.44	8	1
1:A:122:LEU:HD13	1:A:123:VAL:H	0.43	1.73	11	1
1:A:14:LEU:O	1:A:15:ASN:C	0.43	2.57	15	1
1:A:39:GLY:HA3	1:A:44:ILE:CG1	0.43	2.43	15	2
1:A:105:PRO:CG	1:A:112:TRP:CZ2	0.43	3.02	14	1
1:A:22:ASN:OD1	1:A:25:PHE:CE1	0.43	2.71	4	1
1:A:113:CYS:O	1:A:113:CYS:SG	0.43	2.77	4	1
1:A:124:GLN:CD	1:A:124:GLN:C	0.43	2.78	6	3
1:A:43:GLU:O	1:A:43:GLU:OE2	0.43	2.36	8	1
1:A:71:CYS:HA	1:A:115:VAL:CG2	0.43	2.44	8	1
1:A:110:ARG:CB	1:A:125:GLU:OE1	0.43	2.67	8	1
1:A:66:THR:HA	1:A:126:CYS:O	0.43	2.14	14	2
1:A:78:THR:CG2	1:A:121:PRO:HD3	0.43	2.44	10	1
1:A:22:ASN:OD1	1:A:26:SER:C	0.43	2.58	2	1
1:A:104:ASN:OD1	1:A:109:ARG:C	0.43	2.57	2	1
1:A:12:ASP:N	1:A:31:CYS:SG	0.43	2.91	6	1
1:A:83:THR:HG23	1:A:88:ARG:NE	0.43	2.28	9	1
1:A:43:GLU:OE1	1:A:43:GLU:C	0.43	2.57	14	1
1:A:110:ARG:CG	1:A:111:PRO:HD2	0.43	2.44	15	1
1:A:120:LYS:O	1:A:120:LYS:HG3	0.43	2.14	15	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:HIS:CE1	1:A:105:PRO:HA	0.42	2.49	3	1
1:A:32:ASN:C	1:A:32:ASN:OD1	0.42	2.57	1	1
1:A:54:ASN:OD1	1:A:104:ASN:CB	0.42	2.67	5	1
1:A:98:LYS:O	1:A:98:LYS:HG3	0.42	2.14	10	1
1:A:20:VAL:C	1:A:21:SER:OG	0.42	2.57	12	1
1:A:22:ASN:HB3	1:A:25:PHE:CG	0.42	2.50	12	1
1:A:127:MET:SD	1:A:127:MET:N	0.42	2.93	3	1
1:A:26:SER:O	1:A:27:ASN:HB3	0.42	2.14	9	2
1:A:73:PRO:HG2	1:A:75:ASN:OD1	0.42	2.14	7	1
1:A:84:TYR:CE1	1:A:90:ASP:CG	0.42	2.92	10	1
1:A:58:TYR:O	1:A:59:ARG:HG2	0.42	2.14	14	1
1:A:58:TYR:O	1:A:59:ARG:CD	0.42	2.67	14	1
1:A:15:ASN:O	1:A:16:GLY:C	0.42	2.58	2	1
1:A:65:ASP:OD1	1:A:71:CYS:HB2	0.42	2.15	2	1
1:A:30:TRP:CD1	1:A:30:TRP:C	0.42	2.92	4	1
1:A:66:THR:CB	1:A:127:MET:HG3	0.42	2.44	8	1
1:A:79:VAL:O	1:A:82:GLN:HG2	0.42	2.13	8	1
1:A:73:PRO:CA	1:A:99:HIS:O	0.42	2.68	15	1
1:A:126:CYS:O	1:A:127:MET:C	0.42	2.58	1	3
1:A:65:ASP:OD1	1:A:71:CYS:SG	0.42	2.78	2	1
1:A:65:ASP:OD2	1:A:69:ARG:HG3	0.42	2.13	2	2
1:A:67:MET:SD	1:A:69:ARG:NH1	0.42	2.92	3	1
1:A:14:LEU:CD1	1:A:43:GLU:CA	0.42	2.98	7	1
1:A:54:ASN:CB	1:A:109:ARG:O	0.42	2.67	10	1
1:A:54:ASN:O	1:A:54:ASN:OD1	0.42	2.38	13	1
1:A:73:PRO:HB2	1:A:75:ASN:ND2	0.42	2.30	3	1
1:A:103:ARG:C	1:A:105:PRO:HD3	0.42	2.35	11	3
1:A:34:PRO:HG2	1:A:37:PHE:CG	0.42	2.49	7	1
1:A:14:LEU:O	1:A:15:ASN:HB2	0.42	2.14	9	2
1:A:73:PRO:O	1:A:75:ASN:N	0.42	2.53	8	1
1:A:103:ARG:HD2	1:A:112:TRP:O	0.42	2.14	12	1
1:A:20:VAL:HG13	1:A:32:ASN:HB2	0.42	1.91	14	1
1:A:58:TYR:O	1:A:59:ARG:CG	0.42	2.68	14	1
1:A:128:VAL:O	1:A:129:HIS:C	0.42	2.57	14	1
1:A:12:ASP:N	1:A:12:ASP:OD1	0.42	2.48	1	1
1:A:37:PHE:HA	1:A:44:ILE:O	0.42	2.15	2	1
1:A:36:LYS:HD2	1:A:37:PHE:CE2	0.42	2.50	8	1
1:A:128:VAL:HG13	1:A:129:HIS:N	0.42	2.29	9	1
1:A:19:CYS:SG	1:A:31:CYS:HA	0.42	2.55	10	1
1:A:66:THR:HA	1:A:127:MET:CG	0.42	2.45	10	2
1:A:115:VAL:HG13	1:A:124:GLN:CD	0.42	2.34	10	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:CYS:C	1:A:41:HIS:O	0.42	2.57	1	1
1:A:92:LEU:CD2	1:A:93:GLN:CG	0.42	2.97	2	1
1:A:12:ASP:O	1:A:13:CYS:HB2	0.42	2.14	3	1
1:A:84:TYR:N	1:A:84:TYR:CD1	0.42	2.85	3	1
1:A:102:CYS:O	1:A:103:ARG:O	0.42	2.37	6	1
1:A:55:GLY:O	1:A:56:HIS:C	0.42	2.58	9	2
1:A:100:ASN:O	1:A:100:ASN:CG	0.42	2.58	12	1
1:A:80:LEU:HD23	1:A:80:LEU:HA	0.42	1.73	2	1
1:A:106:ASP:OD2	1:A:112:TRP:NE1	0.42	2.53	4	1
1:A:56:HIS:O	1:A:56:HIS:CG	0.42	2.72	5	1
1:A:98:LYS:O	1:A:99:HIS:HB3	0.42	2.14	6	1
1:A:12:ASP:O	1:A:13:CYS:HB3	0.42	2.15	12	1
1:A:84:TYR:CD2	1:A:105:PRO:HB2	0.42	2.50	5	2
1:A:22:ASN:CG	1:A:25:PHE:CB	0.42	2.88	10	1
1:A:67:MET:SD	1:A:69:ARG:CZ	0.41	3.08	3	1
1:A:84:TYR:CG	1:A:105:PRO:HB2	0.41	2.49	7	1
1:A:25:PHE:CG	1:A:28:ILE:CG2	0.41	3.03	10	1
1:A:70:PRO:O	1:A:100:ASN:OD1	0.41	2.37	10	1
1:A:69:ARG:CD	1:A:115:VAL:CG2	0.41	2.98	13	1
1:A:14:LEU:CD1	1:A:41:HIS:CB	0.41	2.92	14	1
1:A:93:GLN:HG2	1:A:94:LEU:HD13	0.41	1.91	15	1
1:A:74:TRP:HB2	1:A:97:GLY:O	0.41	2.16	12	2
1:A:84:TYR:CG	1:A:105:PRO:CG	0.41	3.02	9	2
1:A:102:CYS:O	1:A:103:ARG:HB2	0.41	2.14	13	2
1:A:14:LEU:HD13	1:A:15:ASN:OD1	0.41	2.15	8	1
1:A:78:THR:CG2	1:A:121:PRO:HG3	0.41	2.45	10	1
1:A:94:LEU:HG	1:A:105:PRO:CG	0.41	2.45	12	1
1:A:14:LEU:O	1:A:16:GLY:N	0.41	2.53	15	1
1:A:11:CYS:O	1:A:12:ASP:CG	0.41	2.58	2	1
1:A:127:MET:O	1:A:128:VAL:HB	0.41	2.14	3	1
1:A:106:ASP:OD1	1:A:107:ASN:N	0.41	2.53	4	1
1:A:14:LEU:CD1	1:A:14:LEU:C	0.41	2.89	7	1
1:A:25:PHE:O	1:A:28:ILE:CD1	0.41	2.68	8	1
1:A:79:VAL:O	1:A:81:GLN:N	0.41	2.54	8	1
1:A:111:PRO:O	1:A:125:GLU:HA	0.41	2.15	12	2
1:A:64:THR:O	1:A:126:CYS:HB3	0.41	2.14	15	1
1:A:80:LEU:HD22	1:A:85:HIS:CD2	0.41	2.50	1	1
1:A:25:PHE:HB2	1:A:28:ILE:HG12	0.41	1.92	2	1
1:A:13:CYS:CB	1:A:33:CYS:HB3	0.41	2.46	5	1
1:A:26:SER:HB3	1:A:28:ILE:HD11	0.41	1.91	8	1
1:A:104:ASN:O	1:A:104:ASN:CG	0.41	2.59	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:103:ARG:O	1:A:111:PRO:HA	0.41	2.14	12	1
1:A:36:LYS:O	1:A:46:LYS:C	0.41	2.59	1	1
1:A:74:TRP:HB2	1:A:96:LEU:O	0.41	2.15	1	1
1:A:38:GLY:N	1:A:44:ILE:O	0.41	2.53	2	1
1:A:127:MET:O	1:A:128:VAL:CB	0.41	2.68	3	1
1:A:29:HIS:ND1	1:A:29:HIS:N	0.41	2.68	5	2
1:A:20:VAL:O	1:A:21:SER:HB3	0.41	2.16	9	2
1:A:65:ASP:CG	1:A:115:VAL:CG2	0.41	2.83	6	1
1:A:66:THR:HG23	1:A:124:GLN:HG2	0.41	1.92	6	1
1:A:73:PRO:HB2	1:A:75:ASN:OD1	0.41	2.16	7	1
1:A:65:ASP:HB2	1:A:124:GLN:HG3	0.41	1.93	9	1
1:A:112:TRP:HB2	1:A:124:GLN:O	0.41	2.14	9	1
1:A:39:GLY:C	1:A:40:GLN:HG2	0.41	2.35	11	1
1:A:91:ALA:CA	1:A:96:LEU:CD1	0.41	2.99	11	1
1:A:79:VAL:CG2	1:A:85:HIS:HA	0.41	2.45	2	1
1:A:14:LEU:CD1	1:A:15:ASN:HB2	0.41	2.45	4	1
1:A:43:GLU:O	1:A:44:ILE:C	0.41	2.59	11	2
1:A:72:LEU:HD11	1:A:116:GLN:CG	0.41	2.46	5	2
1:A:12:ASP:CA	1:A:31:CYS:SG	0.41	3.09	6	1
1:A:75:ASN:O	1:A:80:LEU:HG	0.41	2.15	7	1
1:A:26:SER:O	1:A:27:ASN:HB2	0.41	2.15	15	3
1:A:73:PRO:O	1:A:79:VAL:CG1	0.41	2.67	11	1
1:A:91:ALA:CB	1:A:96:LEU:HB2	0.41	2.45	12	1
1:A:101:TYR:O	1:A:103:ARG:N	0.41	2.54	14	1
1:A:15:ASN:OD1	1:A:37:PHE:CZ	0.41	2.73	15	1
1:A:57:PHE:O	1:A:57:PHE:CD1	0.41	2.73	2	1
1:A:20:VAL:CG2	1:A:30:TRP:CD2	0.41	3.04	3	1
1:A:117:VAL:HG22	1:A:124:GLN:OE1	0.41	2.16	3	1
1:A:66:THR:HA	1:A:127:MET:HB2	0.41	1.92	5	1
1:A:36:LYS:HE3	1:A:37:PHE:CE1	0.41	2.51	9	1
1:A:11:CYS:O	1:A:12:ASP:HB2	0.41	2.15	10	1
1:A:84:TYR:CE2	1:A:106:ASP:OD2	0.41	2.73	11	1
1:A:89:SER:O	1:A:90:ASP:OD1	0.41	2.38	11	1
1:A:105:PRO:HD2	1:A:112:TRP:CH2	0.41	2.50	11	1
1:A:88:ARG:HG3	1:A:91:ALA:N	0.41	2.30	14	1
1:A:84:TYR:CD1	1:A:88:ARG:CD	0.41	3.03	15	1
1:A:79:VAL:HA	1:A:82:GLN:HG2	0.41	1.92	2	1
1:A:22:ASN:N	1:A:30:TRP:CZ3	0.41	2.89	6	1
1:A:58:TYR:CD1	1:A:59:ARG:N	0.41	2.89	8	1
1:A:101:TYR:CB	1:A:103:ARG:NH1	0.41	2.84	8	1
1:A:88:ARG:NH1	1:A:96:LEU:HB2	0.41	2.31	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:98:LYS:O	1:A:98:LYS:HG2	0.41	2.15	14	1
1:A:14:LEU:HB3	1:A:43:GLU:HA	0.41	1.92	1	1
1:A:89:SER:O	1:A:92:LEU:HD11	0.41	2.15	1	1
1:A:80:LEU:HD23	1:A:85:HIS:CG	0.41	2.49	2	1
1:A:89:SER:O	1:A:90:ASP:HB3	0.41	2.16	2	1
1:A:103:ARG:O	1:A:105:PRO:CD	0.41	2.68	2	1
1:A:58:TYR:C	1:A:58:TYR:CD1	0.41	2.94	3	1
1:A:43:GLU:HG3	1:A:44:ILE:N	0.41	2.31	5	1
1:A:85:HIS:O	1:A:96:LEU:HB2	0.41	2.16	6	1
1:A:22:ASN:HA	1:A:25:PHE:CE2	0.41	2.51	7	1
1:A:101:TYR:O	1:A:103:ARG:CD	0.41	2.69	9	1
1:A:25:PHE:CG	1:A:28:ILE:HG21	0.41	2.51	10	1
1:A:36:LYS:O	1:A:45:ASP:HA	0.41	2.16	13	1
1:A:65:ASP:O	1:A:127:MET:HG2	0.41	2.14	13	1
1:A:38:GLY:O	1:A:42:CYS:HA	0.41	2.16	15	1
1:A:124:GLN:NE2	1:A:124:GLN:CA	0.41	2.83	15	1
1:A:86:ALA:HB1	1:A:97:GLY:HA2	0.41	1.93	6	1
1:A:119:LEU:CD1	1:A:119:LEU:H	0.41	2.29	6	2
1:A:57:PHE:O	1:A:58:TYR:CG	0.41	2.74	9	1
1:A:127:MET:O	1:A:128:VAL:C	0.41	2.59	9	1
1:A:58:TYR:O	1:A:59:ARG:HD2	0.41	2.16	12	1
1:A:11:CYS:N	1:A:19:CYS:SG	0.41	2.93	14	1
1:A:88:ARG:NH1	1:A:90:ASP:HB2	0.41	2.31	14	1
1:A:25:PHE:CB	1:A:28:ILE:CG2	0.41	2.99	15	1
1:A:84:TYR:OH	1:A:90:ASP:HB3	0.40	2.16	4	1
1:A:103:ARG:C	1:A:104:ASN:CG	0.40	2.80	6	1
1:A:61:LYS:O	1:A:63:SER:N	0.40	2.55	11	1
1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:N	0.40	2.30	12	1
1:A:43:GLU:OE1	1:A:44:ILE:N	0.40	2.54	14	1
1:A:122:LEU:HD23	1:A:122:LEU:HA	0.40	1.73	14	1
1:A:117:VAL:HG22	1:A:117:VAL:O	0.40	2.16	15	1
1:A:37:PHE:O	1:A:46:LYS:HE3	0.40	2.17	2	1
1:A:78:THR:HB	1:A:121:PRO:HG3	0.40	1.93	10	1
1:A:102:CYS:SG	1:A:113:CYS:N	0.40	2.95	10	1
1:A:79:VAL:CG2	1:A:85:HIS:HB3	0.40	2.40	12	1
1:A:22:ASN:HB2	1:A:28:ILE:N	0.40	2.32	2	1
1:A:86:ALA:HB2	1:A:97:GLY:H	0.40	1.75	3	1
1:A:58:TYR:O	1:A:59:ARG:HB2	0.40	2.17	5	1
1:A:56:HIS:HA	1:A:104:ASN:ND2	0.40	2.31	7	1
1:A:73:PRO:HD2	1:A:76:SER:OG	0.40	2.16	11	1
1:A:82:GLN:CB	1:A:114:TYR:CE2	0.40	3.05	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:SER:OG	1:A:29:HIS:HB3	0.40	2.17	13	1
1:A:119:LEU:HD23	1:A:120:LYS:HG3	0.40	1.92	14	1
1:A:97:GLY:O	1:A:98:LYS:C	0.40	2.59	1	1
1:A:66:THR:HG22	1:A:127:MET:H	0.40	1.76	6	1
1:A:83:THR:HG22	1:A:88:ARG:HD2	0.40	1.93	9	1
1:A:25:PHE:CD2	1:A:28:ILE:HB	0.40	2.51	13	2
1:A:14:LEU:CB	1:A:43:GLU:CA	0.40	3.00	14	1
1:A:54:ASN:CG	1:A:55:GLY:N	0.40	2.75	15	1
1:A:93:GLN:HG2	1:A:94:LEU:CD1	0.40	2.46	15	1
1:A:12:ASP:CG	1:A:41:HIS:CD2	0.40	2.95	1	1
1:A:65:ASP:OD2	1:A:69:ARG:HD2	0.40	2.16	2	1
1:A:103:ARG:O	1:A:105:PRO:HD3	0.40	2.15	2	1
1:A:55:GLY:HA3	1:A:111:PRO:CG	0.40	2.45	4	1
1:A:57:PHE:CD1	1:A:58:TYR:N	0.40	2.90	7	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	112/130 (86%)	63±4 (56±4%)	33±3 (29±3%)	16±3 (14±3%)	<b>1</b> <b>5</b>
All	All	1680/1950 (86%)	947 (56%)	494 (29%)	239 (14%)	<b>1</b> <b>5</b>

All 53 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	40	GLN	15
1	A	77	ALA	15
1	A	87	HIS	14
1	A	121	PRO	13
1	A	82	GLN	12
1	A	76	SER	12
1	A	84	TYR	11
1	A	107	ASN	9

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	46	LYS	8
1	A	125	GLU	8
1	A	58	TYR	7
1	A	86	ALA	7
1	A	13	CYS	7
1	A	95	GLY	7
1	A	126	CYS	6
1	A	65	ASP	6
1	A	62	ALA	6
1	A	27	ASN	6
1	A	11	CYS	5
1	A	12	ASP	5
1	A	17	GLY	5
1	A	128	VAL	5
1	A	22	ASN	4
1	A	114	TYR	3
1	A	60	GLY	3
1	A	21	SER	3
1	A	103	ARG	3
1	A	129	HIS	3
1	A	127	MET	3
1	A	89	SER	2
1	A	105	PRO	2
1	A	56	HIS	2
1	A	102	CYS	2
1	A	99	HIS	1
1	A	101	TYR	1
1	A	90	ASP	1
1	A	97	GLY	1
1	A	23	LYS	1
1	A	54	ASN	1
1	A	61	LYS	1
1	A	119	LEU	1
1	A	26	SER	1
1	A	111	PRO	1
1	A	31	CYS	1
1	A	59	ARG	1
1	A	91	ALA	1
1	A	98	LYS	1
1	A	29	HIS	1
1	A	110	ARG	1
1	A	18	THR	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	83	THR	1
1	A	104	ASN	1
1	A	108	ARG	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	98/113 (87%)	66±3 (68±3%)	32±3 (32±3%)	1	12
All	All	1470/1695 (87%)	994 (68%)	476 (32%)	1	12

All 77 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	119	LEU	15
1	A	92	LEU	14
1	A	108	ARG	14
1	A	124	GLN	14
1	A	116	GLN	14
1	A	81	GLN	13
1	A	36	LYS	13
1	A	76	SER	11
1	A	127	MET	11
1	A	103	ARG	10
1	A	120	LYS	10
1	A	87	HIS	10
1	A	59	ARG	9
1	A	63	SER	9
1	A	93	GLN	9
1	A	122	LEU	9
1	A	26	SER	9
1	A	43	GLU	9
1	A	25	PHE	8
1	A	78	THR	8
1	A	61	LYS	8
1	A	79	VAL	8

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	123	VAL	8
1	A	35	LYS	8
1	A	42	CYS	8
1	A	67	MET	8
1	A	14	LEU	7
1	A	19	CYS	7
1	A	31	CYS	7
1	A	33	CYS	7
1	A	83	THR	7
1	A	88	ARG	7
1	A	65	ASP	7
1	A	104	ASN	7
1	A	12	ASP	7
1	A	109	ARG	7
1	A	22	ASN	6
1	A	11	CYS	6
1	A	32	ASN	6
1	A	98	LYS	6
1	A	40	GLN	6
1	A	66	THR	5
1	A	89	SER	5
1	A	102	CYS	5
1	A	29	HIS	5
1	A	115	VAL	5
1	A	90	ASP	5
1	A	110	ARG	5
1	A	23	LYS	5
1	A	21	SER	4
1	A	96	LEU	4
1	A	82	GLN	4
1	A	15	ASN	4
1	A	27	ASN	4
1	A	57	PHE	4
1	A	75	ASN	4
1	A	99	HIS	3
1	A	94	LEU	3
1	A	101	TYR	3
1	A	28	ILE	3
1	A	13	CYS	3
1	A	58	TYR	3
1	A	54	ASN	2
1	A	100	ASN	2

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	106	ASP	2
1	A	129	HIS	2
1	A	107	ASN	2
1	A	56	HIS	2
1	A	45	ASP	2
1	A	41	HIS	2
1	A	126	CYS	1
1	A	20	VAL	1
1	A	80	LEU	1
1	A	69	ARG	1
1	A	85	HIS	1
1	A	71	CYS	1
1	A	113	CYS	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](#)

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	FUC	A	136	1	10,10,11	0.28±0.01	0±0 (0±0%)

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond angles		
					Counts	RMSZ	#Z>2
2	FUC	A	136	1	14,14,16	0.42±0.00	0±0 (0±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	FUC	A	136	1	-	-	0±0,1,1,1

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

## 6.7 Other polymers [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