Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Oct 23, 2021 – 11:23 AM EDT

PDB ID	:	1E2B
Title	:	NMR STRUCTURE OF THE C10S MUTANT OF ENZYME IIB CELLOBIOSE OF THE PHOSPHOENOL-PYRUVATE DEPENDENT PHOSPHOTRANSFERASE SYSTEM OF ESCHERICHIA COLI, 17 STRUCTURES
Authors	:	Ab, E.; Schuurman-Wolters, G.; Reizer, J.; Saier, M.H.; Dijkstra, K.; Scheek, R.M.; Robillard, G.T.
Deposited on	:	1996-11-15

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

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

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

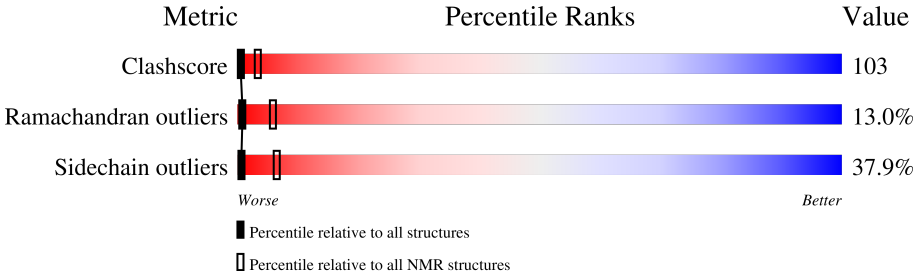
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
ShiftChecker	:	2.23.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.23.2

1 Overall quality at a glance (i)

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

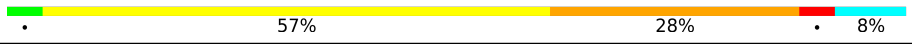
The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	106	

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 17 models. Model 1 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:4-A:101 (98)	0.54	1

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

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

NmrClust was unable to cluster the ensemble.

Error message: Inconsistent models

3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1650 atoms, of which 850 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called ENZYME IIB-CELLOBIOSE.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	106	1650	518	850	131	147	4	0

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

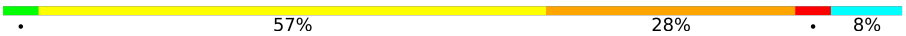
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	10	SER	CYS	engineered mutation	UNP P69795

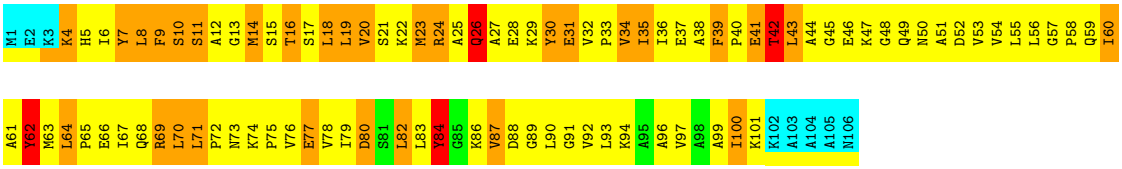
4 Residue-property plots (i)

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

• Molecule 1: ENZYME IIB-CELLOBIOSE

Chain A: 

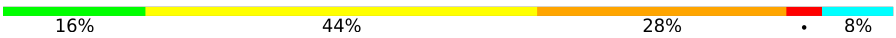


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

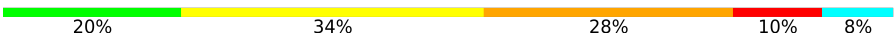
4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

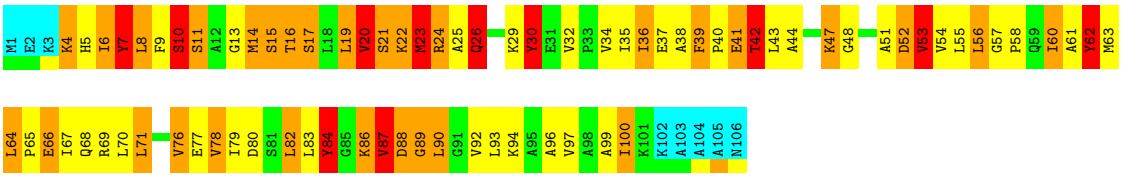
• Molecule 1: ENZYME IIB-CELLOBIOSE

Chain A: 

4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: ENZYME IIB-CELLOBIOSE

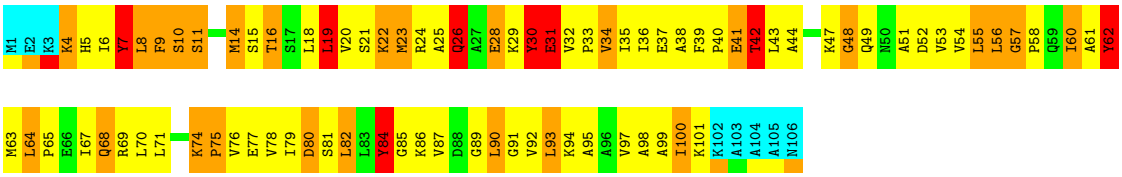
Chain A: 



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: ENZYME IIB-CELLOBIOSE

Chain A: 13% 47% 25% 8% 8%



4.2.4 Score per residue for model 4

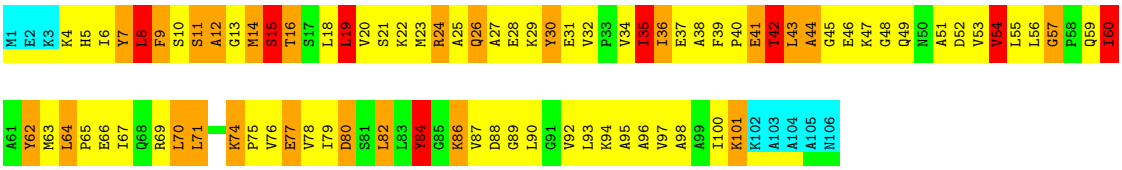
- Molecule 1: ENZYME IIB-CELLOBIOSE

Chain A: 10% 42% 32% 8% 8%

4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: ENZYME IIB-CELLOBIOSE

Chain A: 12% 50% 23% 8% 8%



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: ENZYME IIB-CELLOBIOSE

Chain A: 11% 38% 33% 10% 8%

M1 E2 K3 K4 H5 I6 Y7 L8 F9 S10 S11 A12 G13 M14 S15 T16 S17 L18 L19 V20 S21 K22 M23 R24 A25 Q26 A27 E28 K29 Y30 E31 V32 P33 V34 I35 I36 E37 A38 F39 P40 E41 T42 L43 A44 G45 E46 K47 G48 Q49 N50 A51 D52 V53 V54 L55 L56 G57 I60 A61

Y62 M63 L64 P65 E66 I67 Q68 R69 L70 L71 P72 N73 K74 P75 V76 E77 V78 I79 D80 S81 L82 L83 Y84 G85 K86 V87 D88 G89 L90 G91 V92 L93 A96 A99 I100 K101 K102 A103 A104 A105 N106

4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: ENZYME IIB-CELLOBIOSE

Chain A: 13% 54% 22% • 8%

M1 E2 K3 K4 H5 I6 Y7 L8 F9 S10 S11 A12 G13 M14 S15 T16 S17 L18 L19 V20 S21 K22 M23 R24 A25 Q26 A27 E28 K29 Y30 E31 V34 I35 I36 E37 A38 F39 P40 E41 A44 G45 E46 K47 G48 Q49 N50 A51 D52 V53 V54 L55 L56 G57 P58 Q59 I60 A61 Y62

M63 L64 P65 E66 I67 Q68 R69 K74 P75 V76 E77 V78 I79 D80 S81 L82 L83 Y84 G85 K86 V87 D88 G89 L90 G91 V92 L93 K94 A95 A96 V97 A98 A99 I100 K101 K102 A103 A104 A105 N106

4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: ENZYME IIB-CELLOBIOSE

Chain A: 13% 45% 26% 8% 8%

M1 E2 K3 K4 H5 I6 Y7 L8 F9 S10 S11 A12 G13 M14 S15 T16 S17 L18 L19 V20 S21 K22 M23 R24 A25 Q26 A27 E28 K29 Y30 E31 V32 P33 V34 I35 I36 E37 A38 F39 P40 E41 T42 L43 A44 G45 E46 K47 G48 Q49 N50 A51 D52 V53 V54 L55 L56 G57 P58 Q59 I60

A61 Y62 M63 L64 P65 E66 I67 Q68 R69 L70 L71 P72 N73 K74 P75 V76 E77 V78 I79 D80 S81 L82 L83 Y84 G85 K86 V87 D88 G89 L90 G91 V92 L93 A96 A99 I100 K101 K102 A103 A104 A105 N106

4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: ENZYME IIB-CELLOBIOSE

Chain A: 9% 45% 28% 9% 8%

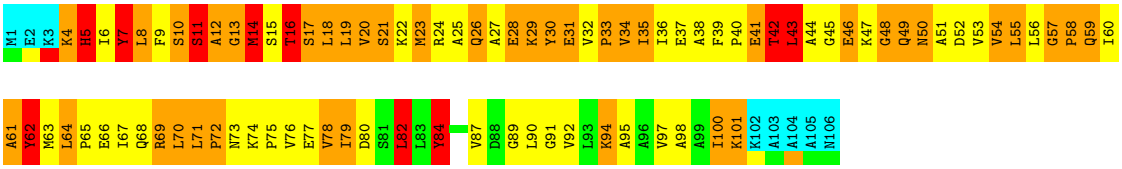
M1 E2 K3 K4 H5 I6 Y7 L8 F9 S10 S11 A12 G13 M14 S15 T16 S17 L18 L19 V20 S21 K22 M23 R24 A25 Q26 A27 E28 K29 Y30 E31 V32 P33 V34 I35 I36 E37 A38 F39 P40 E41 T42 L43 A44 G45 E46 K47 G48 Q49 D52 V53 V54 L55 L56 G57 P58 Q59 I60 A61

Y62 M63 L64 P65 E66 I67 Q68 R69 L70 L71 P72 N73 K74 P75 V76 E77 V78 I79 D80 S81 L82 L83 Y84 G85 K86 V87 D88 G89 L90 G91 V92 L93 K94 A95 A96 V97 A98 A99 I100 K101 K102 A103 A104 A105 N106

4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: ENZYME IIB-CELLOBIOSE

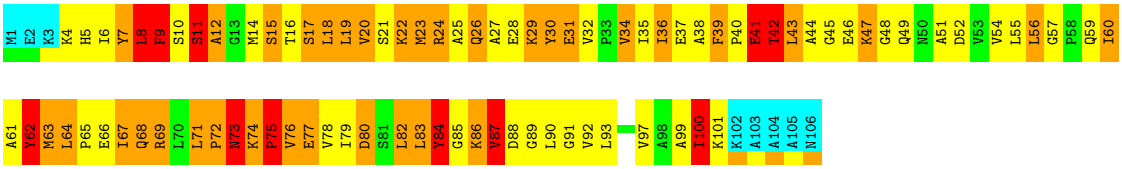
Chain A: 8% 38% 38% 9% 8%



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: ENZYME IIB-CELLOBIOSE

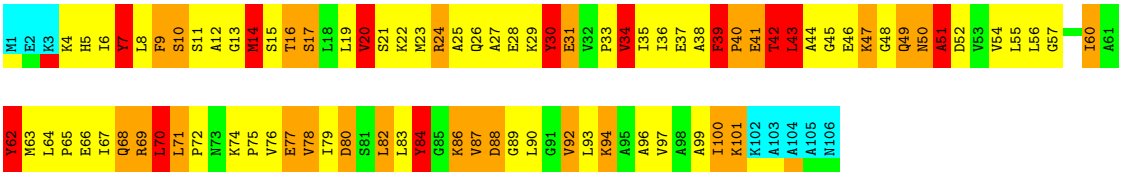
Chain A: 10% 39% 33% 10% 8%



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: ENZYME IIB-CELLOBIOSE

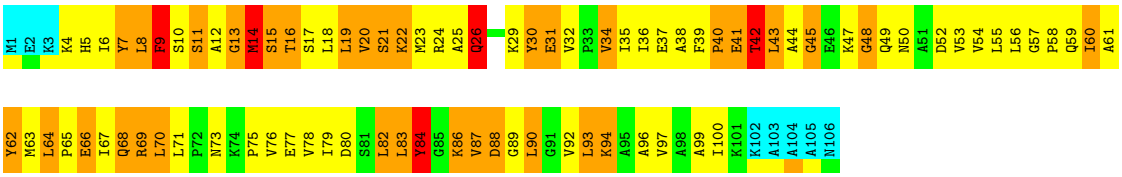
Chain A: 11% 45% 25% 11% 8%



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: ENZYME IIB-CELLOBIOSE

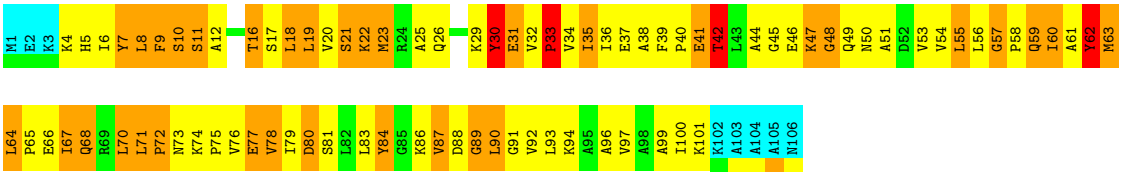
Chain A: 12% 44% 31% 5% 8%



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: ENZYME IIB-CELLOBIOSE

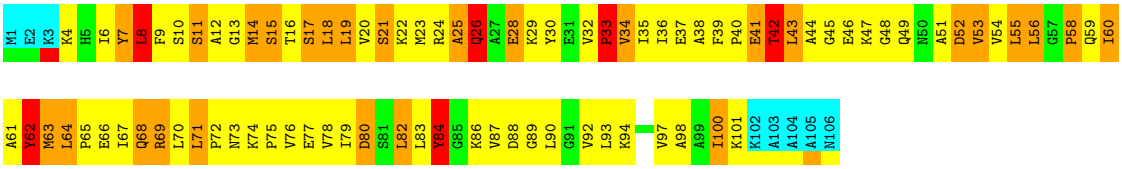
Chain A: 12% 44% 32% • 8%



4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: ENZYME IIB-CELLOBIOSE

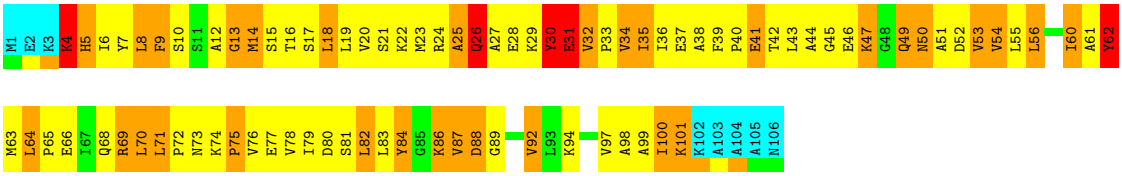
Chain A: 10% 51% 25% 6% 8%



4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: ENZYME IIB-CELLOBIOSE

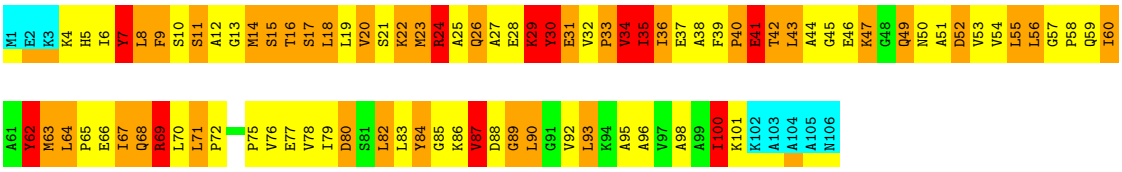
Chain A: 11% 47% 29% 5% 8%



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: ENZYME IIB-CELLOBIOSE

Chain A: 8% 41% 33% 10% 8%



5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

The models were refined using the following method: *DISTANCE GEOMETRY, RESTRAINED MOLECULAR DYNAMICS, SIMULATED ANNEALING*.

Of the 32 calculated structures, 17 were deposited, based on the following criterion: *TARGET FUNCTION, NUMBER OF VIOLATIONS*.

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

Software name	Classification	Version
DDD	refinement	
SNARF	structure solution	
DDD	structure solution	

No chemical shift data was provided.

6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.24±0.03	1±1/755 (0.1± 0.1%)	1.46±0.03	6±2/1024 (0.6± 0.2%)
All	All	1.24	9/12835 (0.1%)	1.46	101/17408 (0.6%)

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	5.1±2.2
All	All	0	87

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
1	A	31	GLU	CD-OE2	7.46	1.33	1.25	3	1
1	A	34	VAL	CB-CG1	6.68	1.66	1.52	17	2
1	A	41	GLU	CD-OE2	6.64	1.32	1.25	17	1
1	A	37	GLU	CD-OE1	6.05	1.32	1.25	7	1
1	A	39	PHE	CA-CB	6.03	1.67	1.53	4	1
1	A	11	SER	CB-OG	5.60	1.49	1.42	4	1
1	A	57	GLY	N-CA	5.25	1.53	1.46	10	1
1	A	89	GLY	N-CA	5.24	1.53	1.46	2	1

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
1	A	62	TYR	CB-CG-CD2	-8.19	116.08	121.00	16	11
1	A	30	TYR	CB-CG-CD1	-7.96	116.22	121.00	17	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
1	A	7	TYR	CB-CG-CD2	-7.87	116.28	121.00	4	15
1	A	7	TYR	CB-CG-CD1	-7.18	116.69	121.00	10	1
1	A	26	GLN	CA-CB-CG	7.10	129.03	113.40	2	4
1	A	24	ARG	NE-CZ-NH1	6.94	123.77	120.30	11	4
1	A	8	LEU	N-CA-CB	-6.93	96.55	110.40	16	5
1	A	16	THR	N-CA-CB	6.91	123.43	110.30	4	1
1	A	30	TYR	CB-CG-CD2	-6.79	116.93	121.00	10	3
1	A	84	TYR	CB-CG-CD2	-6.58	117.05	121.00	12	8
1	A	9	PHE	CB-CG-CD1	-6.35	116.36	120.80	3	5
1	A	87	VAL	CA-CB-CG1	6.32	120.38	110.90	17	1
1	A	35	ILE	CG1-CB-CG2	6.21	125.07	111.40	17	1
1	A	69	ARG	NE-CZ-NH2	6.13	123.37	120.30	12	1
1	A	8	LEU	CA-CB-CG	6.10	129.33	115.30	17	1
1	A	69	ARG	NE-CZ-NH1	6.07	123.33	120.30	11	5
1	A	19	LEU	CB-CG-CD1	5.98	121.16	111.00	3	1
1	A	82	LEU	CB-CG-CD1	5.87	120.98	111.00	10	1
1	A	83	LEU	CA-CB-CG	5.86	128.78	115.30	7	1
1	A	39	PHE	CB-CG-CD1	-5.85	116.71	120.80	6	2
1	A	53	VAL	CA-CB-CG1	5.82	119.63	110.90	16	1
1	A	62	TYR	CG-CD1-CE1	-5.75	116.70	121.30	3	1
1	A	80	ASP	CB-CG-OD1	-5.66	113.20	118.30	5	1
1	A	62	TYR	CB-CG-CD1	-5.64	117.61	121.00	11	1
1	A	43	LEU	CB-CG-CD1	5.53	120.41	111.00	10	1
1	A	88	ASP	CB-CG-OD2	-5.53	113.32	118.30	4	1
1	A	19	LEU	CA-CB-CG	5.51	127.97	115.30	8	2
1	A	39	PHE	N-CA-CB	-5.50	100.70	110.60	4	1
1	A	84	TYR	CG-CD1-CE1	-5.45	116.94	121.30	4	1
1	A	43	LEU	CA-CB-CG	5.38	127.67	115.30	12	1
1	A	7	TYR	CD1-CG-CD2	5.30	123.73	117.90	13	1
1	A	71	LEU	N-CA-CB	-5.30	99.81	110.40	15	1
1	A	62	TYR	CG-CD2-CE2	-5.22	117.12	121.30	10	1
1	A	42	THR	N-CA-CB	5.22	120.22	110.30	5	2
1	A	30	TYR	CG-CD1-CE1	-5.12	117.20	121.30	14	1
1	A	54	VAL	CG1-CB-CG2	5.11	119.08	110.90	5	1

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	62	TYR	Sidechain	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	9	PHE	Peptide,Sidechain	12
1	A	84	TYR	Sidechain	10
1	A	7	TYR	Sidechain	8
1	A	30	TYR	Sidechain	8
1	A	14	MET	Peptide	7
1	A	39	PHE	Sidechain	6
1	A	5	HIS	Sidechain,Peptide	3
1	A	35	ILE	Peptide	3
1	A	51	ALA	Peptide	2
1	A	28	GLU	Peptide	1
1	A	33	PRO	Peptide	1
1	A	70	LEU	Peptide	1
1	A	10	SER	Peptide	1
1	A	18	LEU	Peptide	1
1	A	34	VAL	Peptide	1
1	A	59	GLN	Peptide	1
1	A	8	LEU	Peptide	1
1	A	58	PRO	Peptide	1
1	A	42	THR	Peptide	1

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	742	788	788	157±17
All	All	12614	13396	13396	2670

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 103.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:VAL:HG22	1:A:36:ILE:HG22	1.08	1.15	7	9
1:A:54:VAL:HG11	1:A:76:VAL:HG22	1.04	1.23	5	2
1:A:8:LEU:HD23	1:A:38:ALA:HB2	1.04	1.12	17	2
1:A:56:LEU:HD21	1:A:67:ILE:HD12	1.02	1.30	6	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:VAL:CG2	1:A:38:ALA:HB2	1.00	1.86	14	1
1:A:20:VAL:HG21	1:A:38:ALA:HB2	1.00	1.29	14	3
1:A:23:MET:HE3	1:A:36:ILE:HG21	0.99	1.34	9	2
1:A:70:LEU:HD23	1:A:71:LEU:HD13	0.99	1.24	6	1
1:A:8:LEU:CD2	1:A:16:THR:HG22	0.97	1.89	14	5
1:A:8:LEU:HD12	1:A:20:VAL:HG22	0.97	1.32	8	1
1:A:23:MET:SD	1:A:92:VAL:HG12	0.97	1.99	15	11
1:A:67:ILE:HG21	1:A:76:VAL:HG11	0.97	1.36	7	3
1:A:8:LEU:HD22	1:A:20:VAL:CG2	0.96	1.90	5	1
1:A:16:THR:HG1	1:A:84:TYR:HE1	0.95	1.04	1	1
1:A:64:LEU:O	1:A:67:ILE:HB	0.95	1.61	11	4
1:A:8:LEU:HD21	1:A:16:THR:HG22	0.94	1.37	14	5
1:A:43:LEU:O	1:A:47:LYS:HB2	0.93	1.64	4	7
1:A:19:LEU:HD11	1:A:92:VAL:HG11	0.93	1.36	11	6
1:A:80:ASP:O	1:A:84:TYR:HB2	0.93	1.63	11	17
1:A:88:ASP:O	1:A:92:VAL:HG23	0.92	1.63	1	8
1:A:16:THR:O	1:A:19:LEU:HB2	0.92	1.64	17	6
1:A:45:GLY:O	1:A:49:GLN:HB3	0.92	1.64	10	6
1:A:55:LEU:HA	1:A:77:GLU:O	0.92	1.65	14	16
1:A:16:THR:HG22	1:A:38:ALA:HB1	0.91	1.42	7	2
1:A:8:LEU:HD13	1:A:20:VAL:HG12	0.91	1.41	1	2
1:A:25:ALA:O	1:A:29:LYS:HB2	0.90	1.66	11	9
1:A:27:ALA:HB1	1:A:32:VAL:O	0.90	1.66	16	4
1:A:54:VAL:CG1	1:A:76:VAL:HG22	0.90	1.95	5	3
1:A:70:LEU:CD2	1:A:71:LEU:HD13	0.89	1.97	6	1
1:A:8:LEU:HD12	1:A:20:VAL:CG2	0.89	1.97	8	2
1:A:61:ALA:CB	1:A:78:VAL:HG21	0.89	1.97	11	2
1:A:82:LEU:HD12	1:A:82:LEU:O	0.89	1.68	12	1
1:A:23:MET:O	1:A:26:GLN:HB2	0.89	1.66	14	8
1:A:17:SER:O	1:A:20:VAL:HG22	0.89	1.67	12	1
1:A:23:MET:HG2	1:A:89:GLY:O	0.89	1.67	11	5
1:A:40:PRO:O	1:A:42:THR:HG22	0.89	1.67	9	4
1:A:15:SER:O	1:A:19:LEU:HD12	0.89	1.68	9	1
1:A:93:LEU:O	1:A:97:VAL:HG13	0.88	1.69	15	2
1:A:6:ILE:O	1:A:36:ILE:HA	0.88	1.69	7	15
1:A:19:LEU:HD12	1:A:19:LEU:O	0.88	1.69	7	6
1:A:40:PRO:O	1:A:42:THR:HG23	0.88	1.67	11	7
1:A:57:GLY:O	1:A:78:VAL:HG23	0.87	1.68	8	4
1:A:8:LEU:O	1:A:38:ALA:HA	0.87	1.69	5	9
1:A:23:MET:HA	1:A:26:GLN:OE1	0.87	1.69	9	3
1:A:17:SER:O	1:A:21:SER:HB2	0.87	1.69	15	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:PHE:O	1:A:56:LEU:HG	0.87	1.68	8	1
1:A:20:VAL:HG22	1:A:36:ILE:CG2	0.87	2.00	7	6
1:A:53:VAL:HG23	1:A:75:PRO:O	0.87	1.69	15	2
1:A:22:LYS:O	1:A:25:ALA:HB3	0.87	1.68	4	15
1:A:53:VAL:HG11	1:A:96:ALA:HB1	0.87	1.46	17	2
1:A:54:VAL:HG21	1:A:76:VAL:HG13	0.87	1.47	16	1
1:A:20:VAL:CG2	1:A:36:ILE:HG22	0.87	2.00	11	4
1:A:10:SER:HA	1:A:60:ILE:HD11	0.86	1.47	7	1
1:A:54:VAL:CG2	1:A:76:VAL:HG13	0.86	2.00	16	2
1:A:56:LEU:O	1:A:78:VAL:HA	0.86	1.69	4	15
1:A:64:LEU:O	1:A:68:GLN:HB3	0.86	1.71	3	2
1:A:5:HIS:NE2	1:A:35:ILE:HD12	0.85	1.85	14	1
1:A:8:LEU:HD12	1:A:20:VAL:HG23	0.85	1.46	6	1
1:A:22:LYS:HG2	1:A:26:GLN:OE1	0.85	1.71	13	1
1:A:45:GLY:O	1:A:49:GLN:HB2	0.85	1.71	8	5
1:A:93:LEU:O	1:A:96:ALA:HB3	0.85	1.71	5	2
1:A:9:PHE:O	1:A:56:LEU:HD13	0.85	1.70	6	2
1:A:9:PHE:O	1:A:56:LEU:HA	0.85	1.70	13	6
1:A:54:VAL:HG12	1:A:76:VAL:HG13	0.85	1.49	10	4
1:A:31:GLU:O	1:A:33:PRO:HD3	0.85	1.71	16	7
1:A:43:LEU:O	1:A:47:LYS:HG2	0.85	1.71	12	2
1:A:49:GLN:O	1:A:74:LYS:HE2	0.85	1.69	11	3
1:A:23:MET:CE	1:A:36:ILE:HG21	0.85	2.00	9	2
1:A:57:GLY:O	1:A:60:ILE:HG22	0.84	1.72	3	2
1:A:57:GLY:O	1:A:60:ILE:HG23	0.84	1.70	4	1
1:A:56:LEU:HD13	1:A:57:GLY:N	0.84	1.86	1	2
1:A:8:LEU:HA	1:A:55:LEU:O	0.84	1.70	8	8
1:A:60:ILE:HD13	1:A:61:ALA:N	0.84	1.87	4	1
1:A:94:LYS:O	1:A:97:VAL:HG22	0.84	1.72	9	2
1:A:66:GLU:O	1:A:70:LEU:HB2	0.84	1.73	10	3
1:A:15:SER:O	1:A:87:VAL:HG22	0.83	1.72	10	2
1:A:26:GLN:OE1	1:A:89:GLY:HA3	0.83	1.73	4	3
1:A:17:SER:O	1:A:20:VAL:HG12	0.83	1.73	13	2
1:A:22:LYS:HE3	1:A:87:VAL:O	0.83	1.73	6	7
1:A:9:PHE:HB2	1:A:56:LEU:HD12	0.83	1.51	15	2
1:A:4:LYS:HD3	1:A:52:ASP:OD1	0.83	1.73	11	2
1:A:56:LEU:CD2	1:A:67:ILE:HD12	0.83	2.04	6	3
1:A:45:GLY:HA3	1:A:70:LEU:HD21	0.83	1.49	14	1
1:A:42:THR:OG1	1:A:43:LEU:HD13	0.83	1.74	6	1
1:A:54:VAL:O	1:A:55:LEU:HD23	0.82	1.73	11	5
1:A:61:ALA:HB2	1:A:78:VAL:HG21	0.82	1.50	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:THR:CG2	1:A:38:ALA:HB1	0.82	2.04	7	4
1:A:90:LEU:O	1:A:90:LEU:HD22	0.82	1.74	14	2
1:A:54:VAL:HG22	1:A:76:VAL:HG13	0.82	1.51	5	2
1:A:17:SER:O	1:A:21:SER:HB3	0.82	1.73	14	2
1:A:69:ARG:O	1:A:72:PRO:HD3	0.82	1.75	1	1
1:A:9:PHE:HA	1:A:39:PHE:O	0.82	1.73	7	10
1:A:46:GLU:O	1:A:49:GLN:HB3	0.82	1.75	12	3
1:A:10:SER:HB2	1:A:39:PHE:O	0.82	1.75	2	1
1:A:10:SER:CA	1:A:60:ILE:HD11	0.81	2.05	7	1
1:A:8:LEU:HD22	1:A:20:VAL:HG13	0.81	1.53	1	1
1:A:23:MET:O	1:A:26:GLN:HG2	0.81	1.73	9	4
1:A:7:TYR:O	1:A:54:VAL:HA	0.81	1.75	17	4
1:A:90:LEU:O	1:A:93:LEU:HB3	0.81	1.75	12	1
1:A:56:LEU:HD12	1:A:60:ILE:HD13	0.81	1.49	16	2
1:A:44:ALA:O	1:A:48:GLY:HA3	0.81	1.76	11	7
1:A:68:GLN:HA	1:A:71:LEU:O	0.81	1.76	6	5
1:A:30:TYR:CE2	1:A:93:LEU:HD21	0.81	2.10	2	1
1:A:4:LYS:O	1:A:34:VAL:HA	0.81	1.76	1	9
1:A:4:LYS:N	1:A:34:VAL:HG23	0.81	1.90	17	3
1:A:25:ALA:HA	1:A:28:GLU:OE1	0.81	1.75	4	1
1:A:19:LEU:HD13	1:A:92:VAL:HG21	0.80	1.50	2	6
1:A:19:LEU:CB	1:A:87:VAL:HG12	0.80	2.05	11	2
1:A:23:MET:CE	1:A:92:VAL:HG12	0.80	2.05	6	4
1:A:41:GLU:OE1	1:A:60:ILE:HD12	0.80	1.76	1	1
1:A:14:MET:O	1:A:14:MET:HG3	0.80	1.77	9	1
1:A:19:LEU:HD22	1:A:88:ASP:OD2	0.80	1.75	13	1
1:A:58:PRO:HB3	1:A:79:ILE:O	0.80	1.77	8	7
1:A:7:TYR:HA	1:A:37:GLU:O	0.80	1.75	17	15
1:A:26:GLN:HB3	1:A:93:LEU:HD22	0.80	1.54	2	1
1:A:65:PRO:O	1:A:69:ARG:HG3	0.80	1.74	4	5
1:A:18:LEU:O	1:A:18:LEU:HD22	0.80	1.77	9	3
1:A:22:LYS:HD2	1:A:88:ASP:O	0.80	1.77	13	1
1:A:40:PRO:O	1:A:41:GLU:HG3	0.79	1.75	3	2
1:A:9:PHE:CB	1:A:56:LEU:HD12	0.79	2.07	15	2
1:A:65:PRO:O	1:A:69:ARG:HD2	0.79	1.77	1	1
1:A:64:LEU:HD23	1:A:76:VAL:HG22	0.79	1.52	11	1
1:A:52:ASP:OD1	1:A:53:VAL:HG12	0.79	1.76	15	1
1:A:88:ASP:OD2	1:A:92:VAL:HG23	0.79	1.78	2	1
1:A:16:THR:HG23	1:A:84:TYR:OH	0.79	1.76	10	1
1:A:41:GLU:OE1	1:A:42:THR:HG23	0.79	1.78	17	1
1:A:17:SER:O	1:A:20:VAL:HG23	0.79	1.77	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:8:LEU:HD12	1:A:55:LEU:HD12	0.78	1.53	11	1
1:A:67:ILE:O	1:A:71:LEU:HG	0.78	1.78	14	1
1:A:15:SER:O	1:A:16:THR:HG22	0.78	1.78	4	1
1:A:90:LEU:HD23	1:A:91:GLY:N	0.78	1.93	6	1
1:A:8:LEU:CD2	1:A:38:ALA:HB2	0.78	2.08	5	2
1:A:77:GLU:OE1	1:A:99:ALA:HB2	0.78	1.78	6	1
1:A:16:THR:HB	1:A:84:TYR:OH	0.78	1.78	2	2
1:A:19:LEU:CD1	1:A:92:VAL:HG11	0.78	2.09	6	2
1:A:53:VAL:HG21	1:A:96:ALA:O	0.78	1.79	7	1
1:A:68:GLN:O	1:A:68:GLN:HG3	0.78	1.77	11	1
1:A:19:LEU:HD22	1:A:92:VAL:HG11	0.78	1.54	9	2
1:A:20:VAL:HG13	1:A:36:ILE:HG22	0.78	1.56	3	4
1:A:67:ILE:O	1:A:71:LEU:HB2	0.77	1.78	6	2
1:A:13:GLY:O	1:A:14:MET:HB3	0.77	1.76	10	1
1:A:4:LYS:O	1:A:34:VAL:HB	0.77	1.79	12	4
1:A:86:LYS:O	1:A:86:LYS:HG3	0.77	1.80	12	3
1:A:90:LEU:O	1:A:94:LYS:HB2	0.77	1.80	3	2
1:A:15:SER:OG	1:A:85:GLY:HA2	0.77	1.79	3	5
1:A:26:GLN:HG3	1:A:93:LEU:HD12	0.77	1.55	11	1
1:A:82:LEU:O	1:A:86:LYS:HD3	0.77	1.78	16	1
1:A:41:GLU:OE1	1:A:60:ILE:HG13	0.77	1.80	2	1
1:A:56:LEU:HD23	1:A:60:ILE:O	0.77	1.80	5	1
1:A:11:SER:HB2	1:A:84:TYR:HH	0.77	1.40	13	1
1:A:41:GLU:OE2	1:A:63:MET:HG3	0.77	1.80	1	2
1:A:11:SER:HB3	1:A:60:ILE:HG22	0.77	1.57	15	1
1:A:26:GLN:CB	1:A:93:LEU:HD22	0.76	2.10	2	1
1:A:56:LEU:HD11	1:A:67:ILE:HD11	0.76	1.57	11	2
1:A:56:LEU:HD12	1:A:60:ILE:CD1	0.76	2.10	16	1
1:A:64:LEU:O	1:A:64:LEU:HD22	0.76	1.80	11	2
1:A:77:GLU:HG3	1:A:99:ALA:HB1	0.76	1.55	16	1
1:A:70:LEU:HD23	1:A:70:LEU:O	0.76	1.81	5	2
1:A:11:SER:OG	1:A:60:ILE:HG22	0.76	1.81	2	1
1:A:26:GLN:HG3	1:A:93:LEU:HD22	0.76	1.57	9	1
1:A:15:SER:O	1:A:19:LEU:HG	0.76	1.80	15	2
1:A:44:ALA:O	1:A:71:LEU:HD22	0.76	1.80	15	2
1:A:65:PRO:O	1:A:69:ARG:HD3	0.76	1.81	6	1
1:A:11:SER:OG	1:A:57:GLY:HA3	0.76	1.80	11	1
1:A:52:ASP:O	1:A:75:PRO:HG2	0.75	1.82	9	9
1:A:8:LEU:HD21	1:A:16:THR:CG2	0.75	2.11	9	3
1:A:63:MET:O	1:A:67:ILE:HG13	0.75	1.82	14	2
1:A:56:LEU:HD11	1:A:60:ILE:HG13	0.75	1.59	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:THR:HA	1:A:19:LEU:HD12	0.75	1.57	12	2
1:A:63:MET:CE	1:A:78:VAL:HG22	0.75	2.10	15	1
1:A:41:GLU:OE1	1:A:60:ILE:HD13	0.75	1.81	15	1
1:A:26:GLN:OE1	1:A:90:LEU:HA	0.75	1.82	12	1
1:A:4:LYS:O	1:A:34:VAL:HG23	0.75	1.82	8	1
1:A:68:GLN:O	1:A:72:PRO:HA	0.75	1.81	15	2
1:A:16:THR:HG23	1:A:38:ALA:HB1	0.74	1.59	13	1
1:A:16:THR:CB	1:A:19:LEU:HD12	0.74	2.12	16	1
1:A:55:LEU:HD12	1:A:77:GLU:O	0.74	1.82	8	1
1:A:8:LEU:HD23	1:A:16:THR:OG1	0.74	1.82	1	2
1:A:9:PHE:CD2	1:A:54:VAL:HG13	0.74	2.18	13	4
1:A:63:MET:HE2	1:A:78:VAL:HG22	0.74	1.58	15	1
1:A:26:GLN:OE1	1:A:90:LEU:HB3	0.74	1.82	6	2
1:A:8:LEU:O	1:A:8:LEU:HD23	0.74	1.81	14	4
1:A:6:ILE:HG22	1:A:36:ILE:HG23	0.73	1.58	11	9
1:A:18:LEU:HG	1:A:87:VAL:HG11	0.73	1.57	5	1
1:A:36:ILE:O	1:A:37:GLU:HG2	0.73	1.82	5	3
1:A:23:MET:HB3	1:A:36:ILE:HD13	0.73	1.60	8	5
1:A:45:GLY:CA	1:A:70:LEU:HD21	0.73	2.12	14	2
1:A:25:ALA:O	1:A:29:LYS:HB3	0.73	1.83	7	7
1:A:83:LEU:HB3	1:A:88:ASP:OD1	0.73	1.83	2	2
1:A:61:ALA:O	1:A:64:LEU:HB3	0.73	1.83	10	2
1:A:56:LEU:CD1	1:A:67:ILE:HD11	0.73	2.14	11	2
1:A:10:SER:O	1:A:60:ILE:HD13	0.73	1.84	1	1
1:A:53:VAL:HG21	1:A:100:ILE:HG21	0.73	1.58	4	1
1:A:54:VAL:HG13	1:A:75:PRO:O	0.73	1.83	5	1
1:A:26:GLN:O	1:A:29:LYS:HB3	0.73	1.84	8	10
1:A:24:ARG:N	1:A:36:ILE:HD12	0.73	1.98	16	1
1:A:8:LEU:CD1	1:A:55:LEU:HD23	0.73	2.14	7	1
1:A:79:ILE:HD13	1:A:84:TYR:CD1	0.73	2.18	4	2
1:A:79:ILE:HD13	1:A:84:TYR:CE1	0.72	2.19	4	1
1:A:67:ILE:CG2	1:A:76:VAL:HG11	0.72	2.14	5	2
1:A:82:LEU:O	1:A:86:LYS:HG3	0.72	1.84	15	5
1:A:94:LYS:O	1:A:97:VAL:HB	0.72	1.84	10	2
1:A:60:ILE:O	1:A:60:ILE:HG13	0.72	1.83	13	3
1:A:53:VAL:CG2	1:A:100:ILE:HG22	0.72	2.15	7	1
1:A:56:LEU:HD21	1:A:67:ILE:CD1	0.72	2.13	6	1
1:A:64:LEU:HD12	1:A:64:LEU:O	0.72	1.83	1	1
1:A:5:HIS:CD2	1:A:34:VAL:HG11	0.72	2.19	16	2
1:A:19:LEU:O	1:A:23:MET:HB2	0.72	1.85	16	9
1:A:44:ALA:HB3	1:A:67:ILE:HD12	0.72	1.62	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:LYS:O	1:A:76:VAL:HG23	0.72	1.85	3	3
1:A:97:VAL:O	1:A:100:ILE:HG23	0.72	1.83	7	1
1:A:56:LEU:HD11	1:A:76:VAL:CG2	0.71	2.14	2	1
1:A:18:LEU:O	1:A:22:LYS:HB2	0.71	1.85	4	3
1:A:81:SER:O	1:A:84:TYR:HB3	0.71	1.85	16	1
1:A:57:GLY:HA3	1:A:60:ILE:HG22	0.71	1.62	17	1
1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ILE:N	0.71	1.98	10	4
1:A:22:LYS:HD2	1:A:87:VAL:O	0.71	1.86	7	4
1:A:53:VAL:HG21	1:A:100:ILE:HG22	0.71	1.60	7	1
1:A:89:GLY:O	1:A:90:LEU:HB2	0.71	1.85	9	1
1:A:40:PRO:HD2	1:A:42:THR:HG23	0.71	1.60	12	1
1:A:7:TYR:CD2	1:A:39:PHE:CE1	0.71	2.78	17	2
1:A:83:LEU:HD13	1:A:88:ASP:OD2	0.71	1.84	11	1
1:A:65:PRO:O	1:A:69:ARG:HB3	0.71	1.85	15	2
1:A:10:SER:HB2	1:A:57:GLY:N	0.71	2.00	8	1
1:A:54:VAL:O	1:A:76:VAL:HG23	0.71	1.86	8	1
1:A:23:MET:SD	1:A:92:VAL:HG23	0.71	2.25	10	1
1:A:56:LEU:HD22	1:A:60:ILE:CG1	0.71	2.15	11	2
1:A:56:LEU:HD11	1:A:76:VAL:HG21	0.71	1.62	2	1
1:A:78:VAL:HG12	1:A:79:ILE:O	0.71	1.86	3	2
1:A:26:GLN:OE1	1:A:90:LEU:HB2	0.71	1.85	8	2
1:A:9:PHE:CE1	1:A:54:VAL:HG13	0.71	2.21	15	1
1:A:54:VAL:C	1:A:55:LEU:HD22	0.70	2.06	7	2
1:A:4:LYS:H	1:A:34:VAL:N	0.70	1.83	17	2
1:A:8:LEU:C	1:A:8:LEU:HD23	0.70	2.06	15	2
1:A:66:GLU:O	1:A:69:ARG:HB2	0.70	1.87	13	1
1:A:24:ARG:CA	1:A:36:ILE:HD12	0.70	2.17	16	2
1:A:68:GLN:O	1:A:72:PRO:HB3	0.70	1.86	10	1
1:A:24:ARG:O	1:A:28:GLU:HG3	0.70	1.86	11	1
1:A:23:MET:SD	1:A:93:LEU:HD13	0.70	2.27	4	1
1:A:56:LEU:HD11	1:A:60:ILE:CD1	0.70	2.17	4	1
1:A:79:ILE:HG22	1:A:80:ASP:O	0.70	1.87	5	6
1:A:67:ILE:HG21	1:A:76:VAL:HG21	0.70	1.63	11	2
1:A:56:LEU:HD22	1:A:63:MET:SD	0.70	2.27	15	1
1:A:6:ILE:HA	1:A:53:VAL:O	0.70	1.87	10	4
1:A:54:VAL:CG1	1:A:56:LEU:HD21	0.69	2.16	2	1
1:A:30:TYR:O	1:A:31:GLU:HB2	0.69	1.86	17	5
1:A:96:ALA:O	1:A:100:ILE:HG22	0.69	1.87	7	1
1:A:10:SER:HA	1:A:60:ILE:HG21	0.69	1.65	8	3
1:A:22:LYS:HE2	1:A:87:VAL:O	0.69	1.87	1	1
1:A:82:LEU:HD12	1:A:83:LEU:HD23	0.69	1.64	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:LEU:HD22	1:A:60:ILE:HG13	0.69	1.64	13	2
1:A:64:LEU:HD22	1:A:64:LEU:C	0.69	2.07	11	1
1:A:22:LYS:HD2	1:A:89:GLY:N	0.69	2.02	12	1
1:A:9:PHE:CE1	1:A:39:PHE:CD1	0.69	2.81	1	5
1:A:44:ALA:O	1:A:71:LEU:HD21	0.69	1.86	16	2
1:A:36:ILE:HD13	1:A:36:ILE:N	0.69	2.01	5	2
1:A:55:LEU:HD11	1:A:79:ILE:HG12	0.69	1.64	8	1
1:A:26:GLN:HG2	1:A:89:GLY:O	0.69	1.88	1	1
1:A:15:SER:O	1:A:19:LEU:HB3	0.69	1.88	3	1
1:A:41:GLU:O	1:A:41:GLU:HG3	0.69	1.87	16	3
1:A:18:LEU:HD11	1:A:87:VAL:HG11	0.69	1.64	9	1
1:A:9:PHE:HB2	1:A:56:LEU:HD13	0.69	1.65	14	2
1:A:20:VAL:HG22	1:A:36:ILE:O	0.68	1.88	10	3
1:A:8:LEU:CD1	1:A:20:VAL:HG12	0.68	2.18	12	1
1:A:94:LYS:HE2	1:A:94:LYS:O	0.68	1.88	12	1
1:A:56:LEU:HD22	1:A:67:ILE:HD12	0.68	1.63	17	1
1:A:8:LEU:HD23	1:A:8:LEU:C	0.68	2.08	14	2
1:A:48:GLY:HA2	1:A:54:VAL:HG22	0.68	1.65	14	6
1:A:82:LEU:O	1:A:86:LYS:HB3	0.68	1.89	13	1
1:A:56:LEU:HD11	1:A:60:ILE:CG1	0.68	2.19	1	3
1:A:71:LEU:O	1:A:71:LEU:HG	0.68	1.88	15	4
1:A:8:LEU:HD23	1:A:79:ILE:CD1	0.68	2.19	3	1
1:A:56:LEU:CD1	1:A:67:ILE:HG21	0.68	2.18	3	1
1:A:8:LEU:HD22	1:A:79:ILE:HD11	0.68	1.63	12	2
1:A:48:GLY:O	1:A:51:ALA:HB3	0.67	1.90	2	7
1:A:26:GLN:CG	1:A:93:LEU:HD12	0.67	2.18	11	1
1:A:16:THR:HB	1:A:19:LEU:HD12	0.67	1.66	16	1
1:A:24:ARG:HA	1:A:36:ILE:HD12	0.67	1.66	16	2
1:A:64:LEU:O	1:A:68:GLN:HG2	0.67	1.88	14	3
1:A:58:PRO:HA	1:A:61:ALA:HB2	0.67	1.65	8	1
1:A:9:PHE:O	1:A:56:LEU:HD22	0.67	1.89	12	1
1:A:46:GLU:O	1:A:50:ASN:HB2	0.67	1.89	10	3
1:A:70:LEU:HD23	1:A:71:LEU:CD1	0.67	2.14	6	1
1:A:19:LEU:HD21	1:A:92:VAL:HG21	0.67	1.65	9	1
1:A:45:GLY:O	1:A:71:LEU:HD11	0.67	1.90	12	1
1:A:19:LEU:O	1:A:23:MET:HG3	0.67	1.88	5	8
1:A:5:HIS:HA	1:A:35:ILE:O	0.67	1.89	14	8
1:A:19:LEU:HD12	1:A:19:LEU:C	0.66	2.09	7	4
1:A:16:THR:HG22	1:A:38:ALA:CB	0.66	2.18	7	1
1:A:60:ILE:O	1:A:62:TYR:HD1	0.66	1.71	10	3
1:A:88:ASP:OD2	1:A:92:VAL:HG21	0.66	1.91	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:GLY:CA	1:A:60:ILE:HG22	0.66	2.21	17	1
1:A:54:VAL:C	1:A:55:LEU:HD23	0.66	2.11	4	2
1:A:70:LEU:HD23	1:A:70:LEU:C	0.66	2.10	5	2
1:A:56:LEU:HD11	1:A:60:ILE:O	0.66	1.91	12	1
1:A:9:PHE:O	1:A:56:LEU:HD23	0.66	1.90	13	1
1:A:61:ALA:HB2	1:A:78:VAL:CG2	0.66	2.21	14	1
1:A:10:SER:O	1:A:11:SER:HB2	0.66	1.89	4	3
1:A:18:LEU:HD23	1:A:87:VAL:CG2	0.66	2.20	17	1
1:A:8:LEU:HD13	1:A:20:VAL:CG1	0.66	2.18	1	1
1:A:55:LEU:HD22	1:A:55:LEU:N	0.66	2.05	7	2
1:A:56:LEU:HB3	1:A:60:ILE:O	0.66	1.91	11	2
1:A:19:LEU:C	1:A:19:LEU:HD12	0.66	2.10	13	5
1:A:20:VAL:O	1:A:24:ARG:HD3	0.66	1.91	9	1
1:A:54:VAL:CG1	1:A:76:VAL:HG13	0.66	2.20	10	1
1:A:82:LEU:O	1:A:86:LYS:HB2	0.65	1.91	4	3
1:A:4:LYS:C	1:A:34:VAL:HB	0.65	2.11	17	4
1:A:5:HIS:CB	1:A:7:TYR:CE2	0.65	2.79	7	2
1:A:37:GLU:CB	1:A:39:PHE:CZ	0.65	2.80	7	3
1:A:53:VAL:HG22	1:A:75:PRO:CG	0.65	2.22	16	2
1:A:7:TYR:HB3	1:A:9:PHE:CE2	0.65	2.26	2	1
1:A:63:MET:O	1:A:66:GLU:HB3	0.65	1.91	4	1
1:A:71:LEU:HD12	1:A:71:LEU:O	0.65	1.90	11	3
1:A:78:VAL:HG22	1:A:79:ILE:O	0.65	1.91	8	2
1:A:9:PHE:HB2	1:A:55:LEU:O	0.65	1.91	13	1
1:A:55:LEU:HD22	1:A:77:GLU:OE2	0.65	1.91	13	1
1:A:26:GLN:OE1	1:A:90:LEU:HD12	0.65	1.90	1	1
1:A:63:MET:O	1:A:67:ILE:HG12	0.65	1.91	1	4
1:A:96:ALA:O	1:A:99:ALA:HB3	0.65	1.91	8	8
1:A:11:SER:O	1:A:59:GLN:HB2	0.65	1.90	5	1
1:A:51:ALA:CB	1:A:54:VAL:HG23	0.65	2.22	7	3
1:A:8:LEU:HD12	1:A:55:LEU:HD23	0.65	1.67	7	1
1:A:29:LYS:HG2	1:A:30:TYR:CD1	0.65	2.26	12	2
1:A:40:PRO:HD2	1:A:43:LEU:HD13	0.65	1.67	11	2
1:A:66:GLU:OE2	1:A:70:LEU:HD13	0.65	1.92	5	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:84:TYR:CD1	0.65	2.80	10	2
1:A:18:LEU:CD1	1:A:87:VAL:HG11	0.65	2.21	9	1
1:A:11:SER:CB	1:A:60:ILE:HG22	0.65	2.22	2	2
1:A:89:GLY:O	1:A:90:LEU:HD12	0.65	1.91	13	1
1:A:32:VAL:HG12	1:A:34:VAL:HG12	0.65	1.67	2	2
1:A:20:VAL:O	1:A:24:ARG:HD2	0.65	1.90	17	2
1:A:62:TYR:CE2	1:A:63:MET:SD	0.65	2.89	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:LEU:HB3	1:A:87:VAL:HG11	0.64	1.68	16	3
1:A:19:LEU:CA	1:A:87:VAL:HG12	0.64	2.21	11	2
1:A:53:VAL:HG13	1:A:75:PRO:O	0.64	1.92	9	4
1:A:53:VAL:HG21	1:A:100:ILE:CG1	0.64	2.23	16	1
1:A:60:ILE:HG12	1:A:60:ILE:O	0.64	1.90	2	1
1:A:60:ILE:HD11	1:A:63:MET:CE	0.64	2.22	8	1
1:A:29:LYS:CG	1:A:30:TYR:CE1	0.64	2.79	12	1
1:A:16:THR:HB	1:A:38:ALA:HB1	0.64	1.67	15	1
1:A:39:PHE:CE2	1:A:47:LYS:CG	0.64	2.80	16	10
1:A:15:SER:HB3	1:A:84:TYR:O	0.64	1.93	5	1
1:A:10:SER:O	1:A:60:ILE:HG21	0.64	1.92	5	2
1:A:8:LEU:HD23	1:A:38:ALA:CB	0.64	2.21	5	1
1:A:101:LYS:O	1:A:101:LYS:HD3	0.64	1.92	5	1
1:A:97:VAL:O	1:A:100:ILE:HG22	0.64	1.92	11	1
1:A:62:TYR:CZ	1:A:63:MET:CG	0.64	2.81	16	2
1:A:8:LEU:CD1	1:A:20:VAL:HG23	0.64	2.23	6	1
1:A:29:LYS:CG	1:A:30:TYR:CD1	0.64	2.81	12	1
1:A:41:GLU:O	1:A:42:THR:HG22	0.64	1.92	14	1
1:A:60:ILE:C	1:A:60:ILE:HD12	0.64	2.13	16	1
1:A:62:TYR:O	1:A:65:PRO:HD2	0.64	1.93	17	5
1:A:56:LEU:O	1:A:78:VAL:HG23	0.64	1.93	14	3
1:A:20:VAL:HG21	1:A:38:ALA:CB	0.64	2.17	14	1
1:A:46:GLU:O	1:A:49:GLN:HG3	0.64	1.93	17	1
1:A:62:TYR:CZ	1:A:63:MET:SD	0.64	2.91	17	1
1:A:76:VAL:O	1:A:77:GLU:HG2	0.64	1.92	17	1
1:A:23:MET:HE1	1:A:92:VAL:HG12	0.63	1.71	6	1
1:A:18:LEU:CB	1:A:87:VAL:HG11	0.63	2.23	16	1
1:A:79:ILE:CD1	1:A:84:TYR:CE1	0.63	2.82	4	1
1:A:60:ILE:HD12	1:A:62:TYR:CE2	0.63	2.29	11	1
1:A:4:LYS:HB3	1:A:52:ASP:OD2	0.63	1.93	15	2
1:A:16:THR:HG23	1:A:84:TYR:CE1	0.63	2.28	12	1
1:A:101:LYS:HG2	1:A:101:LYS:O	0.63	1.91	17	1
1:A:64:LEU:N	1:A:65:PRO:HD2	0.63	2.08	5	6
1:A:19:LEU:HB2	1:A:87:VAL:HG12	0.63	1.69	11	2
1:A:4:LYS:HA	1:A:52:ASP:OD2	0.63	1.93	13	1
1:A:65:PRO:O	1:A:68:GLN:HB2	0.63	1.94	14	1
1:A:13:GLY:O	1:A:14:MET:HB2	0.63	1.92	6	1
1:A:26:GLN:NE2	1:A:27:ALA:HB2	0.63	2.08	12	1
1:A:9:PHE:CE1	1:A:39:PHE:CB	0.63	2.82	6	3
1:A:64:LEU:HD22	1:A:64:LEU:O	0.63	1.94	17	1
1:A:9:PHE:CE2	1:A:44:ALA:CB	0.62	2.82	13	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:MET:CE	1:A:92:VAL:HG23	0.62	2.23	4	1
1:A:7:TYR:CD2	1:A:51:ALA:HB2	0.62	2.29	1	3
1:A:54:VAL:HG12	1:A:56:LEU:HD21	0.62	1.70	2	1
1:A:62:TYR:CE1	1:A:63:MET:CG	0.62	2.83	2	6
1:A:27:ALA:HB3	1:A:36:ILE:HD11	0.62	1.71	17	1
1:A:58:PRO:HA	1:A:78:VAL:HG13	0.62	1.70	3	1
1:A:26:GLN:OE1	1:A:89:GLY:HA2	0.62	1.95	9	1
1:A:68:GLN:OE1	1:A:76:VAL:HG11	0.62	1.94	13	1
1:A:18:LEU:O	1:A:22:LYS:HD2	0.62	1.94	11	1
1:A:37:GLU:HB3	1:A:39:PHE:CE1	0.62	2.29	17	4
1:A:11:SER:HB2	1:A:84:TYR:OH	0.62	1.94	13	1
1:A:53:VAL:HG22	1:A:75:PRO:HG2	0.61	1.70	16	5
1:A:20:VAL:HG13	1:A:24:ARG:HD2	0.61	1.72	6	1
1:A:20:VAL:HG23	1:A:36:ILE:HG22	0.61	1.72	2	3
1:A:97:VAL:O	1:A:100:ILE:HB	0.61	1.95	2	3
1:A:56:LEU:CD1	1:A:60:ILE:CD1	0.61	2.78	4	1
1:A:8:LEU:HD12	1:A:20:VAL:HG12	0.61	1.71	12	1
1:A:45:GLY:O	1:A:49:GLN:HG2	0.61	1.95	17	1
1:A:9:PHE:CE2	1:A:39:PHE:CB	0.61	2.83	17	1
1:A:23:MET:SD	1:A:92:VAL:CG1	0.61	2.88	11	10
1:A:9:PHE:CD1	1:A:39:PHE:HB2	0.61	2.31	4	9
1:A:56:LEU:HD11	1:A:67:ILE:CD1	0.61	2.26	9	2
1:A:8:LEU:HD23	1:A:9:PHE:N	0.61	2.09	16	1
1:A:6:ILE:HG22	1:A:6:ILE:O	0.61	1.96	15	2
1:A:19:LEU:N	1:A:87:VAL:HG12	0.61	2.10	16	1
1:A:32:VAL:CG1	1:A:34:VAL:HG12	0.61	2.25	2	1
1:A:93:LEU:O	1:A:97:VAL:HG23	0.61	1.96	14	4
1:A:60:ILE:O	1:A:60:ILE:HG23	0.61	1.95	3	3
1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:HD23	0.61	2.11	14	2
1:A:5:HIS:CD2	1:A:35:ILE:HD12	0.61	2.31	14	1
1:A:39:PHE:CE2	1:A:47:LYS:HG3	0.60	2.31	4	12
1:A:100:ILE:HG22	1:A:101:LYS:N	0.60	2.10	8	9
1:A:55:LEU:HD12	1:A:79:ILE:HG12	0.60	1.71	6	1
1:A:56:LEU:CD1	1:A:60:ILE:HD13	0.60	2.25	6	1
1:A:62:TYR:O	1:A:65:PRO:HD3	0.60	1.96	8	1
1:A:8:LEU:HD22	1:A:16:THR:OG1	0.60	1.95	4	1
1:A:52:ASP:O	1:A:53:VAL:HG23	0.60	1.97	5	1
1:A:64:LEU:CD2	1:A:76:VAL:HG22	0.60	2.24	11	1
1:A:56:LEU:HD13	1:A:67:ILE:CG1	0.60	2.26	17	3
1:A:45:GLY:CA	1:A:70:LEU:CD2	0.60	2.79	14	1
1:A:51:ALA:HB3	1:A:54:VAL:HG23	0.60	1.70	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:VAL:O	1:A:24:ARG:HB2	0.60	1.96	7	2
1:A:9:PHE:CZ	1:A:44:ALA:HA	0.60	2.31	14	12
1:A:40:PRO:HG2	1:A:42:THR:CG2	0.60	2.27	12	3
1:A:22:LYS:O	1:A:26:GLN:HG2	0.60	1.97	17	2
1:A:61:ALA:O	1:A:64:LEU:HB2	0.60	1.95	16	2
1:A:58:PRO:HG3	1:A:80:ASP:O	0.60	1.97	13	3
1:A:7:TYR:CG	1:A:47:LYS:HB3	0.60	2.31	10	2
1:A:20:VAL:HG12	1:A:21:SER:N	0.60	2.12	6	3
1:A:46:GLU:HA	1:A:46:GLU:OE1	0.60	1.96	4	2
1:A:4:LYS:CG	1:A:52:ASP:CB	0.60	2.80	10	1
1:A:32:VAL:HG12	1:A:34:VAL:CG1	0.60	2.26	13	3
1:A:56:LEU:HD13	1:A:67:ILE:HG13	0.60	1.71	2	2
1:A:64:LEU:HD12	1:A:64:LEU:C	0.59	2.17	1	1
1:A:4:LYS:C	1:A:34:VAL:HG23	0.59	2.18	2	1
1:A:62:TYR:CZ	1:A:63:MET:HG2	0.59	2.31	5	5
1:A:6:ILE:CG2	1:A:36:ILE:HG23	0.59	2.27	7	3
1:A:19:LEU:CD2	1:A:92:VAL:HG21	0.59	2.27	9	1
1:A:34:VAL:O	1:A:36:ILE:HD13	0.59	1.98	5	1
1:A:54:VAL:O	1:A:55:LEU:HD22	0.59	1.97	6	1
1:A:19:LEU:N	1:A:87:VAL:HG13	0.59	2.13	1	1
1:A:33:PRO:O	1:A:34:VAL:HG12	0.59	1.96	4	2
1:A:23:MET:HE1	1:A:92:VAL:O	0.59	1.96	7	1
1:A:62:TYR:CE1	1:A:63:MET:SD	0.59	2.96	17	1
1:A:37:GLU:HB2	1:A:39:PHE:CZ	0.59	2.32	15	2
1:A:54:VAL:HB	1:A:76:VAL:HG22	0.59	1.74	12	2
1:A:4:LYS:HE2	1:A:52:ASP:OD2	0.59	1.96	2	1
1:A:13:GLY:O	1:A:17:SER:HB2	0.59	1.97	7	1
1:A:101:LYS:O	1:A:101:LYS:HE3	0.59	1.98	7	1
1:A:8:LEU:CD2	1:A:79:ILE:HD11	0.59	2.27	12	1
1:A:7:TYR:HB3	1:A:9:PHE:CE1	0.59	2.33	15	2
1:A:56:LEU:HD13	1:A:60:ILE:CD1	0.59	2.27	9	1
1:A:20:VAL:HG12	1:A:36:ILE:HG22	0.59	1.74	1	2
1:A:4:LYS:HG2	1:A:52:ASP:OD2	0.59	1.98	6	2
1:A:9:PHE:CD1	1:A:39:PHE:CB	0.59	2.85	14	2
1:A:56:LEU:HD23	1:A:60:ILE:HG12	0.59	1.73	15	1
1:A:9:PHE:CE1	1:A:44:ALA:HA	0.59	2.33	14	5
1:A:9:PHE:CE2	1:A:44:ALA:HA	0.59	2.33	13	10
1:A:54:VAL:HG13	1:A:76:VAL:HA	0.59	1.75	5	1
1:A:65:PRO:O	1:A:69:ARG:HB2	0.59	1.97	6	1
1:A:20:VAL:O	1:A:24:ARG:HG3	0.58	1.97	2	4
1:A:56:LEU:HD13	1:A:67:ILE:HG21	0.58	1.74	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:TYR:CD2	1:A:47:LYS:HB3	0.58	2.33	7	8
1:A:11:SER:HB3	1:A:59:GLN:NE2	0.58	2.13	7	1
1:A:39:PHE:N	1:A:39:PHE:CD1	0.58	2.71	12	2
1:A:15:SER:HA	1:A:87:VAL:CG2	0.58	2.28	10	2
1:A:8:LEU:CD2	1:A:55:LEU:HG	0.58	2.28	8	1
1:A:16:THR:HA	1:A:19:LEU:HD23	0.58	1.74	1	1
1:A:23:MET:C	1:A:36:ILE:HD13	0.58	2.18	10	2
1:A:26:GLN:HB3	1:A:93:LEU:HD23	0.58	1.75	1	1
1:A:57:GLY:N	1:A:60:ILE:HG22	0.58	2.14	14	2
1:A:30:TYR:HB2	1:A:32:VAL:HG23	0.58	1.75	14	4
1:A:10:SER:OG	1:A:57:GLY:HA3	0.58	1.98	13	2
1:A:15:SER:CB	1:A:84:TYR:CZ	0.58	2.87	4	2
1:A:9:PHE:CB	1:A:56:LEU:CD1	0.58	2.80	15	1
1:A:20:VAL:HG11	1:A:38:ALA:HB2	0.58	1.75	1	1
1:A:44:ALA:CB	1:A:67:ILE:HD12	0.58	2.29	2	1
1:A:33:PRO:C	1:A:34:VAL:HG12	0.58	2.19	4	2
1:A:4:LYS:N	1:A:34:VAL:CG2	0.58	2.67	10	4
1:A:56:LEU:HD23	1:A:67:ILE:HD11	0.58	1.74	7	1
1:A:29:LYS:HD2	1:A:30:TYR:CE1	0.58	2.33	12	1
1:A:11:SER:OG	1:A:60:ILE:HB	0.58	1.99	14	1
1:A:25:ALA:O	1:A:29:LYS:HE2	0.58	1.99	11	1
1:A:70:LEU:C	1:A:70:LEU:HD23	0.58	2.18	14	1
1:A:52:ASP:OD1	1:A:100:ILE:HD11	0.58	1.99	15	1
1:A:27:ALA:O	1:A:31:GLU:HA	0.58	1.98	4	1
1:A:71:LEU:HD13	1:A:71:LEU:N	0.58	2.12	12	2
1:A:56:LEU:CD1	1:A:67:ILE:CD1	0.58	2.82	11	1
1:A:82:LEU:HD12	1:A:82:LEU:C	0.58	2.20	12	1
1:A:9:PHE:CE2	1:A:39:PHE:HB2	0.58	2.32	17	1
1:A:54:VAL:O	1:A:76:VAL:HA	0.57	1.99	8	5
1:A:67:ILE:HB	1:A:68:GLN:OE1	0.57	1.98	7	1
1:A:48:GLY:CA	1:A:54:VAL:HG22	0.57	2.29	9	3
1:A:23:MET:SD	1:A:36:ILE:HG21	0.57	2.39	12	1
1:A:29:LYS:HG2	1:A:30:TYR:CE1	0.57	2.33	12	3
1:A:23:MET:HB3	1:A:36:ILE:HD12	0.57	1.76	2	1
1:A:11:SER:HB2	1:A:57:GLY:HA3	0.57	1.76	5	1
1:A:11:SER:CB	1:A:84:TYR:OH	0.57	2.52	8	2
1:A:11:SER:OG	1:A:59:GLN:HG2	0.57	1.99	10	1
1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:HD2	0.57	2.14	14	1
1:A:67:ILE:O	1:A:70:LEU:HB3	0.57	2.00	17	1
1:A:60:ILE:HG22	1:A:63:MET:SD	0.57	2.39	7	1
1:A:8:LEU:CD2	1:A:16:THR:CG2	0.57	2.81	9	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:PRO:O	1:A:61:ALA:HB2	0.57	2.00	1	1
1:A:71:LEU:CD1	1:A:71:LEU:N	0.57	2.67	17	3
1:A:91:GLY:O	1:A:94:LYS:HB3	0.57	2.00	10	1
1:A:5:HIS:HB3	1:A:7:TYR:CE1	0.57	2.35	17	8
1:A:62:TYR:CE1	1:A:63:MET:HG2	0.57	2.35	6	8
1:A:64:LEU:O	1:A:68:GLN:HB2	0.57	2.00	15	2
1:A:53:VAL:HG22	1:A:75:PRO:HB2	0.57	1.76	9	1
1:A:15:SER:CB	1:A:84:TYR:CE2	0.57	2.87	4	2
1:A:18:LEU:HB2	1:A:87:VAL:HG11	0.57	1.75	10	1
1:A:45:GLY:O	1:A:49:GLN:HG3	0.57	1.99	1	1
1:A:51:ALA:O	1:A:74:LYS:HE3	0.57	1.99	1	2
1:A:87:VAL:HG12	1:A:87:VAL:O	0.57	1.99	3	1
1:A:35:ILE:N	1:A:35:ILE:HD13	0.57	2.15	4	1
1:A:79:ILE:CG2	1:A:83:LEU:CD1	0.57	2.83	7	1
1:A:39:PHE:CZ	1:A:47:LYS:HG2	0.57	2.35	8	2
1:A:8:LEU:HD22	1:A:16:THR:O	0.57	1.98	2	1
1:A:64:LEU:C	1:A:64:LEU:HD13	0.57	2.19	14	1
1:A:62:TYR:CG	1:A:63:MET:N	0.57	2.73	15	1
1:A:18:LEU:N	1:A:18:LEU:HD22	0.57	2.15	17	1
1:A:90:LEU:HD12	1:A:91:GLY:N	0.56	2.15	3	1
1:A:89:GLY:O	1:A:92:VAL:HG22	0.56	1.99	10	2
1:A:15:SER:HB2	1:A:84:TYR:CE2	0.56	2.35	4	4
1:A:15:SER:O	1:A:84:TYR:CD1	0.56	2.58	11	6
1:A:55:LEU:HD22	1:A:79:ILE:HG12	0.56	1.76	5	1
1:A:8:LEU:HD22	1:A:38:ALA:CB	0.56	2.30	15	3
1:A:10:SER:HB2	1:A:84:TYR:OH	0.56	2.00	12	1
1:A:64:LEU:N	1:A:65:PRO:CD	0.56	2.68	14	17
1:A:56:LEU:CD1	1:A:67:ILE:CG1	0.56	2.83	11	1
1:A:40:PRO:HG2	1:A:42:THR:HG21	0.56	1.75	12	1
1:A:16:THR:CG2	1:A:38:ALA:CB	0.56	2.81	13	1
1:A:39:PHE:CZ	1:A:47:LYS:CG	0.56	2.89	1	2
1:A:20:VAL:CG1	1:A:21:SER:N	0.56	2.69	2	4
1:A:15:SER:O	1:A:84:TYR:CE1	0.56	2.58	9	5
1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ILE:HB	0.56	1.76	17	2
1:A:41:GLU:HB2	1:A:56:LEU:CD1	0.56	2.30	14	1
1:A:8:LEU:HD13	1:A:20:VAL:HG23	0.56	1.76	15	1
1:A:38:ALA:O	1:A:39:PHE:CG	0.56	2.58	5	2
1:A:41:GLU:HB2	1:A:56:LEU:HD21	0.56	1.76	11	1
1:A:53:VAL:HG21	1:A:100:ILE:CD1	0.56	2.30	16	1
1:A:41:GLU:CD	1:A:60:ILE:HD12	0.56	2.20	1	1
1:A:56:LEU:CD1	1:A:60:ILE:HG13	0.56	2.30	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:PHE:HB2	1:A:56:LEU:HD22	0.56	1.76	9	2
1:A:88:ASP:HB3	1:A:92:VAL:HG23	0.56	1.78	11	1
1:A:20:VAL:CG2	1:A:21:SER:N	0.56	2.69	12	1
1:A:54:VAL:HG22	1:A:76:VAL:HA	0.56	1.76	16	1
1:A:40:PRO:HG2	1:A:42:THR:HG23	0.56	1.77	1	2
1:A:60:ILE:O	1:A:62:TYR:CD1	0.56	2.58	10	4
1:A:68:GLN:NE2	1:A:76:VAL:CG1	0.56	2.69	2	1
1:A:7:TYR:HB2	1:A:54:VAL:CG2	0.56	2.31	10	1
1:A:63:MET:HE1	1:A:66:GLU:OE2	0.56	2.01	4	1
1:A:88:ASP:CB	1:A:92:VAL:HG23	0.56	2.29	11	1
1:A:60:ILE:CG2	1:A:63:MET:SD	0.56	2.94	7	1
1:A:51:ALA:CB	1:A:54:VAL:CG2	0.55	2.84	7	2
1:A:11:SER:OG	1:A:59:GLN:HB2	0.55	2.01	11	3
1:A:8:LEU:HD22	1:A:20:VAL:HG22	0.55	1.74	5	1
1:A:12:ALA:HB2	1:A:59:GLN:OE1	0.55	2.00	10	1
1:A:72:PRO:HG2	1:A:73:ASN:ND2	0.55	2.16	11	2
1:A:51:ALA:HB3	1:A:54:VAL:CG2	0.55	2.31	17	1
1:A:26:GLN:O	1:A:30:TYR:CD2	0.55	2.59	13	9
1:A:54:VAL:CG1	1:A:76:VAL:CG2	0.55	2.79	5	2
1:A:60:ILE:O	1:A:63:MET:HG2	0.55	2.00	15	1
1:A:5:HIS:CG	1:A:7:TYR:CE1	0.55	2.94	17	1
1:A:55:LEU:CD2	1:A:55:LEU:N	0.55	2.68	6	2
1:A:73:ASN:O	1:A:74:LYS:HD2	0.55	2.01	10	1
1:A:53:VAL:HG21	1:A:100:ILE:HD11	0.55	1.78	16	1
1:A:79:ILE:CD1	1:A:84:TYR:CD1	0.55	2.89	4	1
1:A:71:LEU:N	1:A:71:LEU:CD1	0.55	2.70	12	1
1:A:26:GLN:HA	1:A:30:TYR:CE2	0.55	2.36	13	1
1:A:9:PHE:CE2	1:A:54:VAL:HG13	0.55	2.36	7	4
1:A:39:PHE:CE2	1:A:47:LYS:HG2	0.55	2.36	2	4
1:A:56:LEU:HD23	1:A:57:GLY:H	0.55	1.61	8	1
1:A:56:LEU:HB2	1:A:60:ILE:CG2	0.55	2.31	3	1
1:A:8:LEU:HD13	1:A:20:VAL:HG22	0.55	1.79	4	1
1:A:30:TYR:CB	1:A:32:VAL:HG23	0.55	2.31	14	4
1:A:7:TYR:CE2	1:A:47:LYS:HB3	0.55	2.37	7	3
1:A:41:GLU:OE1	1:A:60:ILE:HB	0.55	2.02	9	1
1:A:9:PHE:HB2	1:A:56:LEU:CD1	0.55	2.30	14	2
1:A:41:GLU:OE2	1:A:60:ILE:HD11	0.55	2.02	14	1
1:A:48:GLY:HA2	1:A:51:ALA:HB2	0.55	1.78	15	1
1:A:49:GLN:O	1:A:74:LYS:HE3	0.55	2.01	5	3
1:A:22:LYS:CE	1:A:87:VAL:HG13	0.55	2.32	6	1
1:A:90:LEU:HD22	1:A:90:LEU:C	0.55	2.21	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:8:LEU:C	1:A:9:PHE:CD1	0.55	2.80	17	1
1:A:19:LEU:HD11	1:A:92:VAL:CG1	0.55	2.29	1	1
1:A:15:SER:O	1:A:19:LEU:HD23	0.55	2.02	5	2
1:A:8:LEU:O	1:A:9:PHE:CD1	0.55	2.59	13	2
1:A:19:LEU:HD23	1:A:84:TYR:CD1	0.55	2.37	10	1
1:A:70:LEU:O	1:A:72:PRO:HD3	0.55	2.02	9	3
1:A:35:ILE:CG2	1:A:36:ILE:N	0.55	2.69	10	1
1:A:14:MET:N	1:A:14:MET:SD	0.55	2.80	13	1
1:A:9:PHE:CD2	1:A:44:ALA:HB2	0.54	2.37	15	4
1:A:7:TYR:CB	1:A:9:PHE:CE2	0.54	2.90	2	1
1:A:59:GLN:OE1	1:A:84:TYR:CE2	0.54	2.61	4	1
1:A:56:LEU:HD23	1:A:57:GLY:N	0.54	2.18	8	1
1:A:83:LEU:HD22	1:A:88:ASP:OD2	0.54	2.03	9	2
1:A:7:TYR:CD1	1:A:37:GLU:HB2	0.54	2.37	17	7
1:A:32:VAL:HG21	1:A:93:LEU:HD13	0.54	1.79	6	1
1:A:22:LYS:HD2	1:A:87:VAL:HG23	0.54	1.79	7	1
1:A:8:LEU:HD11	1:A:19:LEU:HD11	0.54	1.77	10	1
1:A:56:LEU:HD23	1:A:56:LEU:N	0.54	2.17	3	1
1:A:26:GLN:CG	1:A:93:LEU:HD22	0.54	2.31	9	2
1:A:48:GLY:C	1:A:71:LEU:HD21	0.54	2.22	9	1
1:A:40:PRO:CG	1:A:42:THR:CG2	0.54	2.86	12	1
1:A:80:ASP:HB2	1:A:83:LEU:HD12	0.54	1.79	17	1
1:A:62:TYR:CE1	1:A:63:MET:HG3	0.54	2.37	2	3
1:A:9:PHE:CD2	1:A:39:PHE:HB2	0.54	2.38	17	1
1:A:23:MET:SD	1:A:93:LEU:N	0.54	2.81	4	8
1:A:53:VAL:HG11	1:A:96:ALA:HA	0.54	1.78	7	1
1:A:8:LEU:HD11	1:A:19:LEU:HD13	0.54	1.79	16	1
1:A:9:PHE:CE1	1:A:39:PHE:HB2	0.54	2.37	4	3
1:A:88:ASP:O	1:A:92:VAL:HB	0.54	2.03	12	1
1:A:53:VAL:HG21	1:A:100:ILE:HG12	0.54	1.79	16	1
1:A:9:PHE:CD1	1:A:44:ALA:HB2	0.54	2.38	1	3
1:A:8:LEU:HD23	1:A:79:ILE:HD11	0.54	1.78	3	2
1:A:36:ILE:N	1:A:36:ILE:CD1	0.54	2.70	17	2
1:A:57:GLY:HA3	1:A:60:ILE:CG2	0.54	2.33	8	1
1:A:15:SER:HA	1:A:87:VAL:HG21	0.54	1.79	10	1
1:A:11:SER:CB	1:A:57:GLY:HA3	0.53	2.32	11	4
1:A:15:SER:OG	1:A:85:GLY:CA	0.53	2.56	9	5
1:A:62:TYR:CE2	1:A:63:MET:HG2	0.53	2.38	5	4
1:A:41:GLU:CD	1:A:63:MET:HG3	0.53	2.24	6	1
1:A:35:ILE:O	1:A:36:ILE:HG13	0.53	2.03	10	1
1:A:19:LEU:HD22	1:A:88:ASP:O	0.53	2.01	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:41:GLU:C	1:A:42:THR:HG22	0.53	2.24	14	1
1:A:7:TYR:HB3	1:A:9:PHE:CZ	0.53	2.38	12	2
1:A:19:LEU:HD21	1:A:79:ILE:HD12	0.53	1.78	8	1
1:A:48:GLY:CA	1:A:54:VAL:CG2	0.53	2.86	12	3
1:A:56:LEU:HD13	1:A:60:ILE:HD11	0.53	1.80	9	1
1:A:60:ILE:HG12	1:A:62:TYR:CE1	0.53	2.38	17	1
1:A:8:LEU:C	1:A:8:LEU:CD2	0.53	2.75	16	1
1:A:37:GLU:HB3	1:A:39:PHE:CZ	0.53	2.37	7	4
1:A:39:PHE:N	1:A:39:PHE:HD1	0.53	2.02	12	2
1:A:23:MET:SD	1:A:92:VAL:C	0.53	2.87	11	5
1:A:34:VAL:CG1	1:A:35:ILE:N	0.53	2.69	16	3
1:A:48:GLY:HA2	1:A:54:VAL:HG21	0.53	1.80	7	3
1:A:56:LEU:HG	1:A:67:ILE:CD1	0.53	2.34	14	1
1:A:56:LEU:HG	1:A:67:ILE:HD11	0.53	1.80	14	1
1:A:9:PHE:HD2	1:A:54:VAL:HG13	0.53	1.56	13	2
1:A:67:ILE:HG23	1:A:71:LEU:HD12	0.53	1.80	13	1
1:A:47:LYS:O	1:A:50:ASN:HB2	0.53	2.03	17	1
1:A:58:PRO:HD3	1:A:79:ILE:HB	0.53	1.79	4	2
1:A:9:PHE:HB2	1:A:56:LEU:HA	0.53	1.81	4	1
1:A:23:MET:SD	1:A:93:LEU:CD1	0.53	2.96	4	1
1:A:53:VAL:HA	1:A:75:PRO:O	0.53	2.04	5	1
1:A:29:LYS:CD	1:A:30:TYR:CE1	0.53	2.92	12	1
1:A:22:LYS:CE	1:A:87:VAL:O	0.53	2.57	14	2
1:A:57:GLY:C	1:A:78:VAL:HG23	0.53	2.24	8	1
1:A:23:MET:CG	1:A:92:VAL:HG23	0.53	2.33	10	1
1:A:67:ILE:HG21	1:A:76:VAL:CG2	0.53	2.33	11	1
1:A:11:SER:HB2	1:A:15:SER:O	0.53	2.03	13	1
1:A:11:SER:CB	1:A:60:ILE:CG2	0.53	2.86	2	1
1:A:71:LEU:O	1:A:71:LEU:CG	0.53	2.57	5	5
1:A:26:GLN:O	1:A:30:TYR:CD1	0.53	2.61	3	1
1:A:56:LEU:CD2	1:A:63:MET:SD	0.53	2.95	15	1
1:A:19:LEU:C	1:A:19:LEU:CD1	0.53	2.77	13	5
1:A:37:GLU:HA	1:A:37:GLU:OE1	0.53	2.04	8	1
1:A:61:ALA:CB	1:A:78:VAL:CG2	0.53	2.86	14	2
1:A:30:TYR:O	1:A:31:GLU:CB	0.52	2.57	6	7
1:A:7:TYR:CD2	1:A:47:LYS:O	0.52	2.61	7	4
1:A:87:VAL:O	1:A:87:VAL:HG23	0.52	2.05	7	1
1:A:10:SER:HB2	1:A:57:GLY:CA	0.52	2.34	8	1
1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ILE:HG13	0.52	1.80	6	1
1:A:53:VAL:CG2	1:A:100:ILE:CG2	0.52	2.87	7	1
1:A:19:LEU:HD11	1:A:84:TYR:HA	0.52	1.79	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:LEU:CD2	1:A:83:LEU:N	0.52	2.72	11	2
1:A:70:LEU:HD23	1:A:71:LEU:N	0.52	2.19	13	1
1:A:19:LEU:H	1:A:87:VAL:HG12	0.52	1.64	16	1
1:A:16:THR:HB	1:A:84:TYR:CE1	0.52	2.39	1	1
1:A:45:GLY:O	1:A:49:GLN:CG	0.52	2.58	1	1
1:A:4:LYS:HG2	1:A:52:ASP:CB	0.52	2.34	10	1
1:A:26:GLN:OE1	1:A:90:LEU:CA	0.52	2.57	12	2
1:A:39:PHE:CD1	1:A:39:PHE:N	0.52	2.77	11	1
1:A:55:LEU:HB3	1:A:77:GLU:O	0.52	2.04	15	1
1:A:15:SER:HB2	1:A:84:TYR:CD2	0.52	2.39	1	2
1:A:54:VAL:HG11	1:A:76:VAL:CG2	0.52	2.17	5	2
1:A:83:LEU:HD12	1:A:84:TYR:N	0.52	2.19	7	1
1:A:4:LYS:CG	1:A:52:ASP:HB2	0.52	2.33	10	1
1:A:79:ILE:CG2	1:A:84:TYR:HB2	0.52	2.34	10	1
1:A:29:LYS:HG2	1:A:30:TYR:CG	0.52	2.40	12	1
1:A:4:LYS:HD3	1:A:52:ASP:OD2	0.52	2.05	17	1
1:A:82:LEU:O	1:A:86:LYS:HE2	0.52	2.05	2	1
1:A:38:ALA:C	1:A:39:PHE:CD1	0.52	2.83	8	3
1:A:30:TYR:OH	1:A:90:LEU:CD2	0.52	2.58	13	1
1:A:19:LEU:CD1	1:A:92:VAL:HG21	0.52	2.29	2	3
1:A:25:ALA:O	1:A:29:LYS:CB	0.52	2.57	8	11
1:A:100:ILE:CG2	1:A:101:LYS:N	0.52	2.72	17	7
1:A:56:LEU:HD22	1:A:67:ILE:CG1	0.52	2.35	4	1
1:A:68:GLN:NE2	1:A:76:VAL:HB	0.52	2.20	12	1
1:A:5:HIS:HE2	1:A:35:ILE:HD12	0.52	1.59	14	1
1:A:82:LEU:C	1:A:82:LEU:CD1	0.52	2.77	16	4
1:A:10:SER:O	1:A:11:SER:CB	0.52	2.57	15	4
1:A:73:ASN:O	1:A:74:LYS:HG2	0.52	2.03	4	1
1:A:5:HIS:HB3	1:A:7:TYR:CZ	0.52	2.40	10	5
1:A:49:GLN:N	1:A:71:LEU:HD21	0.52	2.20	9	1
1:A:45:GLY:HA2	1:A:70:LEU:CD2	0.52	2.34	14	1
1:A:4:LYS:HE2	1:A:52:ASP:OD1	0.52	2.05	3	1
1:A:26:GLN:NE2	1:A:89:GLY:HA3	0.52	2.18	3	3
1:A:38:ALA:O	1:A:39:PHE:CD1	0.52	2.63	10	2
1:A:67:ILE:HG22	1:A:76:VAL:HG11	0.52	1.80	11	2
1:A:8:LEU:HD22	1:A:20:VAL:HG23	0.52	1.79	5	4
1:A:23:MET:SD	1:A:93:LEU:CA	0.52	2.97	4	1
1:A:9:PHE:CE1	1:A:39:PHE:CG	0.52	2.98	14	3
1:A:94:LYS:HA	1:A:97:VAL:CG1	0.52	2.35	9	1
1:A:26:GLN:CA	1:A:30:TYR:CE2	0.52	2.93	13	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:62:TYR:CE1	0.52	2.93	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:TYR:CE2	1:A:47:LYS:HD3	0.52	2.40	5	1
1:A:83:LEU:HA	1:A:88:ASP:OD2	0.52	2.05	9	1
1:A:24:ARG:N	1:A:36:ILE:HG12	0.52	2.20	17	1
1:A:23:MET:HA	1:A:89:GLY:O	0.51	2.04	1	1
1:A:8:LEU:HB2	1:A:38:ALA:HB2	0.51	1.83	3	1
1:A:95:ALA:O	1:A:98:ALA:HB3	0.51	2.05	5	3
1:A:58:PRO:HG3	1:A:79:ILE:O	0.51	2.05	10	1
1:A:19:LEU:O	1:A:23:MET:CB	0.51	2.58	15	6
1:A:77:GLU:OE2	1:A:99:ALA:HB1	0.51	2.05	6	1
1:A:83:LEU:CD1	1:A:83:LEU:C	0.51	2.78	7	1
1:A:8:LEU:CD2	1:A:8:LEU:C	0.51	2.79	15	2
1:A:15:SER:CB	1:A:84:TYR:CD2	0.51	2.93	1	2
1:A:20:VAL:HG13	1:A:36:ILE:CG2	0.51	2.33	3	2
1:A:82:LEU:C	1:A:82:LEU:HD12	0.51	2.25	3	2
1:A:6:ILE:HD12	1:A:34:VAL:CG2	0.51	2.35	8	1
1:A:61:ALA:HB1	1:A:78:VAL:HG21	0.51	1.76	11	1
1:A:64:LEU:O	1:A:68:GLN:HG3	0.51	2.04	12	1
1:A:19:LEU:N	1:A:87:VAL:CG1	0.51	2.73	1	2
1:A:24:ARG:N	1:A:36:ILE:HD13	0.51	2.20	1	3
1:A:52:ASP:O	1:A:53:VAL:HG22	0.51	2.06	2	1
1:A:45:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD22	0.51	1.82	4	1
1:A:11:SER:HB2	1:A:57:GLY:CA	0.51	2.35	5	1
1:A:38:ALA:C	1:A:39:PHE:CG	0.51	2.84	8	1
1:A:14:MET:O	1:A:15:SER:CB	0.51	2.58	10	1
1:A:9:PHE:CB	1:A:56:LEU:HD13	0.51	2.34	14	1
1:A:5:HIS:HB3	1:A:7:TYR:CD1	0.51	2.39	17	1
1:A:15:SER:O	1:A:87:VAL:CG2	0.51	2.58	3	1
1:A:11:SER:O	1:A:12:ALA:HB2	0.51	2.05	5	1
1:A:11:SER:O	1:A:12:ALA:CB	0.51	2.59	8	4
1:A:38:ALA:O	1:A:39:PHE:CD2	0.51	2.64	5	1
1:A:64:LEU:C	1:A:64:LEU:CD2	0.51	2.79	11	1
1:A:15:SER:O	1:A:84:TYR:CZ	0.51	2.64	13	1
1:A:4:LYS:O	1:A:34:VAL:CA	0.51	2.59	8	7
1:A:20:VAL:HG22	1:A:36:ILE:C	0.51	2.26	10	2
1:A:15:SER:CB	1:A:84:TYR:C	0.51	2.79	5	1
1:A:4:LYS:N	1:A:34:VAL:HB	0.51	2.21	6	2
1:A:70:LEU:CD2	1:A:71:LEU:CD1	0.51	2.82	6	1
1:A:97:VAL:CG2	1:A:98:ALA:N	0.51	2.73	9	2
1:A:40:PRO:HD2	1:A:43:LEU:HD12	0.51	1.82	10	2
1:A:40:PRO:O	1:A:42:THR:CG2	0.51	2.59	15	7
1:A:6:ILE:HG21	1:A:23:MET:HE1	0.51	1.83	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:ILE:CG1	1:A:100:ILE:O	0.51	2.58	4	1
1:A:24:ARG:O	1:A:28:GLU:HB2	0.51	2.05	12	2
1:A:5:HIS:HB3	1:A:7:TYR:CE2	0.51	2.41	7	2
1:A:48:GLY:HA2	1:A:54:VAL:CG2	0.51	2.36	11	3
1:A:20:VAL:HG13	1:A:24:ARG:NH2	0.51	2.20	10	1
1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ILE:CB	0.51	2.35	10	2
1:A:8:LEU:CD2	1:A:16:THR:HG21	0.51	2.35	16	1
1:A:23:MET:CA	1:A:26:GLN:OE1	0.51	2.59	4	2
1:A:88:ASP:O	1:A:92:VAL:CG2	0.51	2.58	12	3
1:A:57:GLY:HA3	1:A:60:ILE:HG23	0.51	1.81	8	1
1:A:16:THR:CB	1:A:84:TYR:CE1	0.51	2.94	1	2
1:A:56:LEU:CD1	1:A:57:GLY:O	0.51	2.59	1	1
1:A:87:VAL:CG1	1:A:87:VAL:O	0.51	2.59	2	1
1:A:16:THR:O	1:A:19:LEU:HB3	0.51	2.06	6	2
1:A:53:VAL:CG1	1:A:96:ALA:HB1	0.51	2.34	6	1
1:A:66:GLU:O	1:A:70:LEU:CB	0.51	2.59	6	2
1:A:9:PHE:CE2	1:A:44:ALA:CA	0.51	2.93	15	3
1:A:26:GLN:O	1:A:29:LYS:CB	0.51	2.59	17	4
1:A:39:PHE:CZ	1:A:47:LYS:HG3	0.51	2.40	16	2
1:A:23:MET:O	1:A:26:GLN:CG	0.50	2.59	2	1
1:A:7:TYR:CZ	1:A:37:GLU:OE1	0.50	2.64	3	1
1:A:54:VAL:HG13	1:A:76:VAL:CA	0.50	2.35	5	2
1:A:94:LYS:HG3	1:A:95:ALA:N	0.50	2.21	7	1
1:A:56:LEU:CD2	1:A:60:ILE:HG12	0.50	2.36	11	1
1:A:5:HIS:N	1:A:34:VAL:HG23	0.50	2.21	2	1
1:A:88:ASP:CG	1:A:92:VAL:HG23	0.50	2.26	2	1
1:A:95:ALA:O	1:A:99:ALA:HB2	0.50	2.06	3	1
1:A:27:ALA:CB	1:A:32:VAL:O	0.50	2.59	6	1
1:A:5:HIS:CD2	1:A:5:HIS:N	0.50	2.77	14	2
1:A:41:GLU:OE1	1:A:60:ILE:CD1	0.50	2.59	14	2
1:A:15:SER:HB3	1:A:84:TYR:CG	0.50	2.41	17	1
1:A:100:ILE:O	1:A:100:ILE:HG13	0.50	2.05	4	2
1:A:7:TYR:CE1	1:A:37:GLU:HB2	0.50	2.42	5	5
1:A:6:ILE:HG21	1:A:23:MET:CE	0.50	2.36	3	2
1:A:54:VAL:O	1:A:55:LEU:CD2	0.50	2.60	4	1
1:A:8:LEU:HD23	1:A:55:LEU:O	0.50	2.07	8	1
1:A:26:GLN:OE1	1:A:89:GLY:CA	0.50	2.60	9	2
1:A:88:ASP:O	1:A:92:VAL:HG22	0.50	2.06	16	1
1:A:41:GLU:OE2	1:A:63:MET:SD	0.50	2.69	12	2
1:A:63:MET:O	1:A:67:ILE:CG1	0.50	2.60	7	5
1:A:64:LEU:N	1:A:65:PRO:HD3	0.50	2.22	14	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:LEU:HD23	1:A:90:LEU:C	0.50	2.26	6	1
1:A:90:LEU:CD2	1:A:91:GLY:N	0.50	2.72	6	1
1:A:5:HIS:HB2	1:A:7:TYR:CE2	0.50	2.41	7	1
1:A:20:VAL:CG1	1:A:24:ARG:NH2	0.50	2.75	10	1
1:A:67:ILE:O	1:A:70:LEU:HD23	0.50	2.06	13	1
1:A:89:GLY:O	1:A:90:LEU:CD1	0.50	2.60	13	1
1:A:19:LEU:HD21	1:A:84:TYR:O	0.50	2.06	2	1
1:A:27:ALA:O	1:A:31:GLU:CA	0.50	2.59	4	2
1:A:19:LEU:CD2	1:A:88:ASP:O	0.50	2.60	12	1
1:A:15:SER:HB2	1:A:84:TYR:CZ	0.50	2.42	7	3
1:A:7:TYR:CZ	1:A:47:LYS:HD2	0.50	2.42	5	2
1:A:55:LEU:N	1:A:55:LEU:CD2	0.50	2.71	7	1
1:A:55:LEU:CA	1:A:77:GLU:O	0.50	2.60	15	2
1:A:9:PHE:HE2	1:A:54:VAL:HG22	0.50	1.66	12	1
1:A:8:LEU:CD2	1:A:8:LEU:O	0.50	2.60	15	2
1:A:62:TYR:CD2	1:A:63:MET:SD	0.50	3.04	17	1
1:A:17:SER:O	1:A:20:VAL:CG2	0.50	2.60	1	2
1:A:15:SER:HB3	1:A:84:TYR:CE1	0.50	2.42	4	1
1:A:31:GLU:O	1:A:31:GLU:CG	0.50	2.60	12	2
1:A:82:LEU:O	1:A:86:LYS:CG	0.50	2.59	15	3
1:A:62:TYR:O	1:A:65:PRO:CD	0.50	2.60	12	4
1:A:77:GLU:OE2	1:A:99:ALA:CB	0.50	2.59	6	1
1:A:23:MET:CE	1:A:93:LEU:HB2	0.50	2.37	17	1
1:A:91:GLY:O	1:A:95:ALA:CB	0.50	2.59	7	4
1:A:15:SER:HB3	1:A:84:TYR:CZ	0.50	2.42	4	1
1:A:30:TYR:O	1:A:31:GLU:HB3	0.50	2.07	8	3
1:A:10:SER:OG	1:A:57:GLY:CA	0.50	2.60	7	2
1:A:23:MET:CE	1:A:92:VAL:O	0.50	2.60	7	1
1:A:61:ALA:HA	1:A:78:VAL:CG2	0.50	2.36	11	1
1:A:13:GLY:O	1:A:14:MET:SD	0.50	2.70	12	1
1:A:8:LEU:CB	1:A:55:LEU:HB2	0.50	2.36	16	1
1:A:77:GLU:CG	1:A:99:ALA:HB1	0.50	2.34	16	1
1:A:20:VAL:HG13	1:A:36:ILE:C	0.50	2.27	8	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:62:TYR:CD1	0.50	2.42	14	1
1:A:82:LEU:O	1:A:86:LYS:CB	0.49	2.60	13	3
1:A:65:PRO:O	1:A:69:ARG:CG	0.49	2.60	7	2
1:A:27:ALA:HB2	1:A:93:LEU:HD11	0.49	1.82	9	1
1:A:60:ILE:CD1	1:A:60:ILE:C	0.49	2.79	16	1
1:A:6:ILE:O	1:A:6:ILE:HG22	0.49	2.05	5	1
1:A:79:ILE:CG2	1:A:80:ASP:O	0.49	2.59	16	2
1:A:7:TYR:HB2	1:A:51:ALA:CB	0.49	2.37	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:44:ALA:O	1:A:48:GLY:CA	0.49	2.60	13	7
1:A:20:VAL:CG2	1:A:36:ILE:O	0.49	2.60	2	2
1:A:5:HIS:CA	1:A:34:VAL:HG23	0.49	2.37	11	1
1:A:23:MET:SD	1:A:92:VAL:HB	0.49	2.46	13	2
1:A:25:ALA:O	1:A:29:LYS:CE	0.49	2.60	11	1
1:A:49:GLN:O	1:A:74:LYS:CE	0.49	2.60	12	3
1:A:8:LEU:CD1	1:A:79:ILE:HD11	0.49	2.37	17	2
1:A:33:PRO:C	1:A:34:VAL:CG1	0.49	2.81	4	3
1:A:26:GLN:O	1:A:93:LEU:CD1	0.49	2.61	11	1
1:A:37:GLU:CB	1:A:39:PHE:CE1	0.49	2.96	11	1
1:A:60:ILE:O	1:A:63:MET:CG	0.49	2.60	15	1
1:A:22:LYS:CD	1:A:87:VAL:O	0.49	2.59	3	2
1:A:10:SER:O	1:A:60:ILE:CG2	0.49	2.58	5	1
1:A:15:SER:HB2	1:A:84:TYR:CD1	0.49	2.43	5	1
1:A:62:TYR:CD2	1:A:63:MET:HG2	0.49	2.43	5	2
1:A:20:VAL:O	1:A:24:ARG:CB	0.49	2.59	15	2
1:A:67:ILE:CG2	1:A:76:VAL:HG21	0.49	2.37	7	2
1:A:10:SER:CA	1:A:60:ILE:HG21	0.49	2.34	8	2
1:A:8:LEU:O	1:A:38:ALA:CA	0.49	2.60	11	4
1:A:54:VAL:HG13	1:A:76:VAL:N	0.49	2.22	16	1
1:A:87:VAL:O	1:A:87:VAL:CG1	0.49	2.61	6	3
1:A:4:LYS:N	1:A:34:VAL:CB	0.49	2.76	10	2
1:A:15:SER:OG	1:A:84:TYR:CD2	0.49	2.63	6	2
1:A:31:GLU:O	1:A:31:GLU:HG3	0.49	2.08	12	2
1:A:71:LEU:O	1:A:71:LEU:HD12	0.49	2.07	10	1
1:A:55:LEU:CD2	1:A:77:GLU:OE2	0.49	2.60	13	1
1:A:62:TYR:CD2	1:A:63:MET:N	0.49	2.81	15	1
1:A:55:LEU:HB3	1:A:79:ILE:CG1	0.49	2.38	3	1
1:A:9:PHE:CE2	1:A:44:ALA:N	0.49	2.81	15	1
1:A:15:SER:O	1:A:18:LEU:HD23	0.49	2.07	17	1
1:A:55:LEU:CD1	1:A:79:ILE:HG12	0.49	2.37	8	1
1:A:8:LEU:CD2	1:A:16:THR:OG1	0.49	2.60	4	1
1:A:34:VAL:C	1:A:35:ILE:HD13	0.49	2.28	4	1
1:A:40:PRO:O	1:A:42:THR:N	0.49	2.46	17	8
1:A:7:TYR:CE2	1:A:47:LYS:CD	0.49	2.95	5	1
1:A:23:MET:SD	1:A:92:VAL:CB	0.49	3.00	11	2
1:A:83:LEU:CD1	1:A:84:TYR:N	0.49	2.76	7	1
1:A:79:ILE:CG2	1:A:80:ASP:N	0.49	2.75	16	2
1:A:22:LYS:HG2	1:A:23:MET:N	0.49	2.22	11	1
1:A:4:LYS:CD	1:A:52:ASP:CG	0.49	2.81	12	1
1:A:4:LYS:O	1:A:5:HIS:CD2	0.49	2.65	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:90:LEU:O	1:A:94:LYS:CB	0.49	2.61	13	1
1:A:61:ALA:HB2	1:A:78:VAL:HG11	0.49	1.84	15	1
1:A:8:LEU:CA	1:A:55:LEU:O	0.49	2.59	17	1
1:A:6:ILE:CD1	1:A:96:ALA:CB	0.49	2.91	8	1
1:A:5:HIS:CD2	1:A:7:TYR:OH	0.49	2.65	10	1
1:A:89:GLY:O	1:A:90:LEU:CG	0.49	2.61	13	1
1:A:55:LEU:HD23	1:A:55:LEU:N	0.48	2.23	4	1
1:A:54:VAL:CB	1:A:76:VAL:HG22	0.48	2.38	12	1
1:A:52:ASP:OD1	1:A:100:ILE:CD1	0.48	2.60	15	1
1:A:8:LEU:HD11	1:A:79:ILE:HD11	0.48	1.85	17	1
1:A:23:MET:CG	1:A:89:GLY:HA2	0.48	2.38	3	2
1:A:23:MET:CG	1:A:92:VAL:HB	0.48	2.38	7	3
1:A:56:LEU:CD1	1:A:60:ILE:CG1	0.48	2.91	1	2
1:A:15:SER:HA	1:A:87:VAL:HG22	0.48	1.84	5	1
1:A:45:GLY:O	1:A:49:GLN:CB	0.48	2.61	16	5
1:A:56:LEU:CD1	1:A:67:ILE:HG13	0.48	2.38	11	1
1:A:11:SER:HB2	1:A:60:ILE:HG22	0.48	1.85	14	1
1:A:94:LYS:O	1:A:94:LYS:HG2	0.48	2.08	16	1
1:A:46:GLU:O	1:A:49:GLN:HB2	0.48	2.09	1	1
1:A:60:ILE:O	1:A:60:ILE:CG2	0.48	2.61	5	3
1:A:11:SER:CB	1:A:59:GLN:HG2	0.48	2.38	10	1
1:A:68:GLN:OE1	1:A:76:VAL:CG1	0.48	2.61	13	1
1:A:71:LEU:HD11	1:A:74:LYS:CG	0.48	2.39	15	1
1:A:16:THR:HA	1:A:84:TYR:CE1	0.48	2.44	2	1
1:A:23:MET:HG2	1:A:89:GLY:CA	0.48	2.37	3	4
1:A:80:ASP:O	1:A:84:TYR:CB	0.48	2.59	3	5
1:A:4:LYS:O	1:A:34:VAL:CG2	0.48	2.58	8	1
1:A:8:LEU:HB2	1:A:38:ALA:CB	0.48	2.38	13	1
1:A:7:TYR:HB2	1:A:9:PHE:CE2	0.48	2.44	6	1
1:A:60:ILE:O	1:A:60:ILE:CG1	0.48	2.60	12	2
1:A:46:GLU:OE1	1:A:46:GLU:CA	0.48	2.61	4	1
1:A:62:TYR:CZ	1:A:63:MET:HG3	0.48	2.43	8	1
1:A:9:PHE:O	1:A:56:LEU:CD2	0.48	2.61	13	1
1:A:52:ASP:OD1	1:A:100:ILE:CG1	0.48	2.61	15	1
1:A:26:GLN:OE1	1:A:90:LEU:CD1	0.48	2.60	1	1
1:A:10:SER:OG	1:A:11:SER:N	0.48	2.47	4	6
1:A:65:PRO:O	1:A:69:ARG:HG2	0.48	2.08	5	1
1:A:41:GLU:OE1	1:A:42:THR:CG2	0.48	2.62	11	2
1:A:71:LEU:HD12	1:A:71:LEU:C	0.48	2.28	11	1
1:A:9:PHE:HD1	1:A:39:PHE:HB2	0.48	1.67	12	1
1:A:63:MET:O	1:A:66:GLU:CB	0.48	2.62	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:MET:HG2	1:A:89:GLY:HA2	0.48	1.83	3	2
1:A:30:TYR:OH	1:A:90:LEU:HD23	0.48	2.09	13	1
1:A:48:GLY:O	1:A:54:VAL:CG2	0.48	2.62	14	1
1:A:56:LEU:CD2	1:A:67:ILE:CD1	0.48	2.92	14	1
1:A:83:LEU:N	1:A:83:LEU:CD2	0.48	2.77	14	1
1:A:7:TYR:O	1:A:55:LEU:N	0.48	2.47	1	1
1:A:15:SER:CB	1:A:84:TYR:O	0.48	2.62	5	1
1:A:34:VAL:HG13	1:A:35:ILE:O	0.48	2.08	9	1
1:A:26:GLN:C	1:A:93:LEU:HD11	0.48	2.28	11	1
1:A:56:LEU:CD1	1:A:60:ILE:O	0.48	2.61	12	1
1:A:23:MET:HE3	1:A:93:LEU:CB	0.48	2.39	17	1
1:A:9:PHE:CD1	1:A:39:PHE:HB3	0.48	2.44	14	2
1:A:67:ILE:O	1:A:71:LEU:N	0.48	2.47	6	1
1:A:26:GLN:OE1	1:A:90:LEU:CB	0.48	2.61	11	2
1:A:57:GLY:CA	1:A:60:ILE:HG23	0.48	2.38	8	1
1:A:15:SER:CA	1:A:87:VAL:CG2	0.48	2.92	10	1
1:A:26:GLN:C	1:A:30:TYR:CD2	0.48	2.88	13	1
1:A:19:LEU:HD11	1:A:84:TYR:HD1	0.48	1.68	16	1
1:A:20:VAL:CG1	1:A:36:ILE:HG22	0.48	2.39	17	1
1:A:8:LEU:HD23	1:A:79:ILE:HD13	0.47	1.85	3	1
1:A:88:ASP:OD2	1:A:92:VAL:CG2	0.47	2.61	13	1
1:A:41:GLU:OE2	1:A:60:ILE:CD1	0.47	2.62	14	1
1:A:18:LEU:CG	1:A:87:VAL:HG21	0.47	2.39	17	1
1:A:7:TYR:CB	1:A:9:PHE:CZ	0.47	2.97	7	1
1:A:23:MET:HE2	1:A:36:ILE:HG21	0.47	1.84	11	1
1:A:79:ILE:HD12	1:A:84:TYR:CE1	0.47	2.43	11	1
1:A:56:LEU:HD23	1:A:60:ILE:CG1	0.47	2.39	15	1
1:A:10:SER:N	1:A:39:PHE:O	0.47	2.47	4	3
1:A:18:LEU:O	1:A:22:LYS:CB	0.47	2.61	9	4
1:A:16:THR:HG23	1:A:84:TYR:CZ	0.47	2.44	12	1
1:A:53:VAL:CG1	1:A:75:PRO:O	0.47	2.61	4	2
1:A:79:ILE:CG2	1:A:83:LEU:HD11	0.47	2.39	7	1
1:A:53:VAL:HG22	1:A:75:PRO:CB	0.47	2.39	9	1
1:A:4:LYS:CA	1:A:52:ASP:OD2	0.47	2.62	13	1
1:A:16:THR:CG2	1:A:17:SER:N	0.47	2.77	1	1
1:A:8:LEU:HD11	1:A:23:MET:HE2	0.47	1.87	2	1
1:A:29:LYS:HG2	1:A:30:TYR:CE2	0.47	2.45	5	1
1:A:60:ILE:O	1:A:60:ILE:HD12	0.47	2.10	9	1
1:A:86:LYS:C	1:A:87:VAL:HG22	0.47	2.29	9	1
1:A:8:LEU:HD22	1:A:55:LEU:HB2	0.47	1.85	10	1
1:A:4:LYS:O	1:A:5:HIS:HD2	0.47	1.92	13	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:LEU:HD21	1:A:76:VAL:HG13	0.47	1.85	17	2
1:A:8:LEU:HD23	1:A:55:LEU:HB2	0.47	1.86	6	1
1:A:32:VAL:HG21	1:A:93:LEU:CD1	0.47	2.40	6	1
1:A:53:VAL:HG22	1:A:75:PRO:O	0.47	2.09	6	1
1:A:86:LYS:C	1:A:87:VAL:CG2	0.47	2.83	16	2
1:A:74:LYS:HB3	1:A:75:PRO:CD	0.47	2.39	12	1
1:A:101:LYS:O	1:A:101:LYS:CG	0.47	2.61	17	1
1:A:26:GLN:CG	1:A:89:GLY:O	0.47	2.59	1	1
1:A:11:SER:CB	1:A:59:GLN:OE1	0.47	2.63	4	1
1:A:9:PHE:N	1:A:55:LEU:O	0.47	2.48	11	7
1:A:4:LYS:O	1:A:34:VAL:CB	0.47	2.63	7	2
1:A:35:ILE:HG21	1:A:37:GLU:HG3	0.47	1.85	10	1
1:A:9:PHE:CB	1:A:55:LEU:O	0.47	2.63	13	1
1:A:22:LYS:O	1:A:25:ALA:CB	0.47	2.59	11	4
1:A:15:SER:HB3	1:A:84:TYR:CD2	0.47	2.44	4	1
1:A:53:VAL:HG11	1:A:100:ILE:HG22	0.47	1.85	4	1
1:A:57:GLY:O	1:A:60:ILE:CG2	0.47	2.63	10	1
1:A:56:LEU:CD2	1:A:67:ILE:HG21	0.47	2.40	17	1
1:A:9:PHE:CD2	1:A:55:LEU:O	0.47	2.68	1	1
1:A:4:LYS:HG3	1:A:52:ASP:CB	0.47	2.39	10	2
1:A:79:ILE:HG23	1:A:83:LEU:HD11	0.47	1.86	7	1
1:A:23:MET:O	1:A:26:GLN:N	0.47	2.48	15	2
1:A:47:LYS:O	1:A:51:ALA:N	0.47	2.48	10	5
1:A:12:ALA:HB3	1:A:84:TYR:CE2	0.47	2.45	7	2
1:A:67:ILE:HG21	1:A:76:VAL:CG1	0.47	2.24	7	1
1:A:55:LEU:CD2	1:A:77:GLU:HB2	0.47	2.39	11	1
1:A:43:LEU:O	1:A:47:LYS:CB	0.47	2.61	13	2
1:A:4:LYS:HA	1:A:34:VAL:HG21	0.47	1.87	16	1
1:A:16:THR:O	1:A:19:LEU:N	0.46	2.48	16	3
1:A:20:VAL:HG13	1:A:36:ILE:HB	0.46	1.85	5	1
1:A:39:PHE:CE2	1:A:47:LYS:HD2	0.46	2.45	5	2
1:A:54:VAL:HG13	1:A:75:PRO:C	0.46	2.31	16	2
1:A:26:GLN:NE2	1:A:26:GLN:N	0.46	2.63	7	1
1:A:26:GLN:O	1:A:93:LEU:HD11	0.46	2.09	11	1
1:A:39:PHE:HB3	1:A:43:LEU:CD2	0.46	2.40	15	1
1:A:56:LEU:HD13	1:A:56:LEU:C	0.46	2.30	1	1
1:A:79:ILE:HG22	1:A:80:ASP:N	0.46	2.25	2	3
1:A:9:PHE:CE2	1:A:44:ALA:HB2	0.46	2.45	4	1
1:A:56:LEU:N	1:A:77:GLU:O	0.46	2.48	5	3
1:A:71:LEU:O	1:A:71:LEU:CD1	0.46	2.63	5	3
1:A:23:MET:CB	1:A:36:ILE:HD13	0.46	2.37	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:LEU:O	1:A:23:MET:CG	0.46	2.63	13	2
1:A:56:LEU:HD22	1:A:60:ILE:HG12	0.46	1.83	11	1
1:A:4:LYS:CD	1:A:52:ASP:OD1	0.46	2.64	13	1
1:A:22:LYS:HA	1:A:25:ALA:CB	0.46	2.40	17	2
1:A:34:VAL:CG2	1:A:35:ILE:N	0.46	2.78	13	1
1:A:39:PHE:HD2	1:A:43:LEU:HB3	0.46	1.70	13	1
1:A:33:PRO:O	1:A:34:VAL:CG1	0.46	2.63	15	1
1:A:18:LEU:HB3	1:A:87:VAL:CG1	0.46	2.39	16	1
1:A:52:ASP:O	1:A:75:PRO:CG	0.46	2.60	10	4
1:A:11:SER:HA	1:A:84:TYR:OH	0.46	2.11	8	1
1:A:11:SER:HB3	1:A:84:TYR:CE2	0.46	2.45	11	1
1:A:8:LEU:HD22	1:A:16:THR:HG21	0.46	1.87	16	1
1:A:19:LEU:O	1:A:19:LEU:CD1	0.46	2.64	13	2
1:A:6:ILE:HD12	1:A:34:VAL:HG21	0.46	1.86	8	1
1:A:25:ALA:O	1:A:29:LYS:NZ	0.46	2.48	11	1
1:A:39:PHE:CD2	1:A:47:LYS:HG2	0.46	2.45	16	1
1:A:40:PRO:HD2	1:A:43:LEU:CD1	0.46	2.39	17	1
1:A:30:TYR:CD1	1:A:30:TYR:N	0.46	2.83	1	1
1:A:89:GLY:O	1:A:92:VAL:N	0.46	2.48	7	5
1:A:8:LEU:O	1:A:39:PHE:N	0.46	2.48	4	4
1:A:90:LEU:HD13	1:A:91:GLY:N	0.46	2.26	14	1
1:A:24:ARG:N	1:A:36:ILE:CD1	0.46	2.74	16	1
1:A:12:ALA:HB2	1:A:59:GLN:NE2	0.46	2.24	17	1
1:A:12:ALA:HB3	1:A:84:TYR:HE2	0.46	1.71	17	1
1:A:62:TYR:CD1	1:A:62:TYR:N	0.46	2.83	17	1
1:A:45:GLY:HA2	1:A:70:LEU:HD21	0.46	1.85	6	2
1:A:23:MET:CE	1:A:92:VAL:CG1	0.46	2.88	6	1
1:A:41:GLU:OE2	1:A:60:ILE:CG1	0.46	2.63	14	1
1:A:70:LEU:HB3	1:A:71:LEU:HD13	0.46	1.88	16	1
1:A:35:ILE:C	1:A:36:ILE:HD13	0.46	2.31	17	1
1:A:40:PRO:C	1:A:42:THR:HG22	0.46	2.30	9	1
1:A:70:LEU:O	1:A:72:PRO:CD	0.46	2.64	16	2
1:A:62:TYR:CD1	1:A:63:MET:N	0.46	2.84	13	1
1:A:7:TYR:CB	1:A:9:PHE:CE1	0.46	2.99	15	1
1:A:26:GLN:OE1	1:A:29:LYS:CE	0.46	2.64	16	1
1:A:41:GLU:OE1	1:A:63:MET:SD	0.46	2.73	6	1
1:A:6:ILE:HG13	1:A:34:VAL:HG11	0.46	1.87	9	1
1:A:56:LEU:HD13	1:A:60:ILE:HG23	0.46	1.87	12	1
1:A:87:VAL:O	1:A:87:VAL:HG12	0.46	2.10	12	1
1:A:39:PHE:CE2	1:A:47:LYS:CD	0.46	2.99	15	1
1:A:9:PHE:CD1	1:A:9:PHE:N	0.46	2.83	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:18:LEU:O	1:A:22:LYS:HE2	0.46	2.11	17	1
1:A:41:GLU:OE2	1:A:63:MET:CG	0.46	2.62	1	1
1:A:41:GLU:O	1:A:43:LEU:N	0.46	2.48	15	2
1:A:56:LEU:CD2	1:A:60:ILE:O	0.46	2.64	8	1
1:A:65:PRO:O	1:A:69:ARG:CB	0.46	2.64	17	1
1:A:23:MET:SD	1:A:92:VAL:O	0.46	2.74	1	2
1:A:54:VAL:CG1	1:A:56:LEU:CD2	0.46	2.94	3	2
1:A:27:ALA:O	1:A:31:GLU:N	0.46	2.49	4	1
1:A:41:GLU:HB3	1:A:63:MET:CE	0.46	2.41	8	1
1:A:23:MET:HB3	1:A:36:ILE:CD1	0.46	2.39	11	1
1:A:43:LEU:O	1:A:47:LYS:CG	0.46	2.57	12	1
1:A:20:VAL:O	1:A:24:ARG:CD	0.46	2.62	17	1
1:A:20:VAL:O	1:A:24:ARG:N	0.45	2.49	1	4
1:A:8:LEU:CD2	1:A:16:THR:O	0.45	2.64	2	1
1:A:18:LEU:O	1:A:22:LYS:N	0.45	2.48	3	1
1:A:39:PHE:HB3	1:A:43:LEU:CB	0.45	2.40	5	1
1:A:20:VAL:O	1:A:24:ARG:CG	0.45	2.64	11	2
1:A:22:LYS:O	1:A:26:GLN:NE2	0.45	2.49	15	3
1:A:16:THR:OG1	1:A:17:SER:N	0.45	2.48	15	1
1:A:16:THR:OG1	1:A:84:TYR:CE1	0.45	2.66	11	2
1:A:56:LEU:O	1:A:79:ILE:HG13	0.45	2.12	6	1
1:A:88:ASP:O	1:A:90:LEU:N	0.45	2.49	9	1
1:A:11:SER:O	1:A:59:GLN:NE2	0.45	2.49	11	2
1:A:24:ARG:NH2	1:A:37:GLU:OE2	0.45	2.49	15	2
1:A:94:LYS:HA	1:A:94:LYS:CE	0.45	2.41	12	1
1:A:8:LEU:HD23	1:A:16:THR:HG22	0.45	1.84	15	1
1:A:86:LYS:N	1:A:86:LYS:CD	0.45	2.79	16	1
1:A:16:THR:HB	1:A:84:TYR:CZ	0.45	2.46	1	1
1:A:6:ILE:CG2	1:A:23:MET:HE1	0.45	2.41	3	1
1:A:35:ILE:HG21	1:A:37:GLU:OE2	0.45	2.10	3	1
1:A:49:GLN:N	1:A:71:LEU:CD2	0.45	2.79	3	1
1:A:24:ARG:O	1:A:28:GLU:N	0.45	2.49	10	4
1:A:8:LEU:CD2	1:A:55:LEU:HD12	0.45	2.41	10	1
1:A:8:LEU:HD21	1:A:55:LEU:HD12	0.45	1.86	10	1
1:A:61:ALA:HB1	1:A:78:VAL:HG11	0.45	1.88	13	1
1:A:22:LYS:HA	1:A:25:ALA:HB2	0.45	1.88	17	1
1:A:56:LEU:HD22	1:A:67:ILE:HG12	0.45	1.89	4	1
1:A:5:HIS:CD2	1:A:34:VAL:CG1	0.45	2.98	6	1
1:A:22:LYS:HE3	1:A:87:VAL:HG13	0.45	1.87	6	1
1:A:53:VAL:HG11	1:A:96:ALA:O	0.45	2.12	7	1
1:A:54:VAL:O	1:A:76:VAL:CA	0.45	2.65	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:SER:CB	1:A:85:GLY:HA2	0.45	2.42	11	2
1:A:11:SER:OG	1:A:57:GLY:CA	0.45	2.58	11	1
1:A:35:ILE:HG22	1:A:37:GLU:HG3	0.45	1.88	12	1
1:A:12:ALA:O	1:A:14:MET:N	0.45	2.50	15	1
1:A:7:TYR:CD1	1:A:39:PHE:CE1	0.45	3.05	16	1
1:A:20:VAL:HG12	1:A:36:ILE:CG2	0.45	2.40	1	1
1:A:8:LEU:CD2	1:A:19:LEU:HG	0.45	2.42	7	1
1:A:40:PRO:O	1:A:43:LEU:N	0.45	2.47	4	1
1:A:68:GLN:O	1:A:72:PRO:CD	0.45	2.65	4	1
1:A:20:VAL:HG21	1:A:37:GLU:C	0.45	2.31	6	1
1:A:57:GLY:CA	1:A:79:ILE:HD12	0.45	2.42	14	1
1:A:82:LEU:O	1:A:84:TYR:N	0.45	2.50	17	1
1:A:18:LEU:O	1:A:18:LEU:CD2	0.45	2.65	1	1
1:A:52:ASP:C	1:A:53:VAL:CG2	0.45	2.85	2	1
1:A:77:GLU:OE1	1:A:99:ALA:CB	0.45	2.61	6	1
1:A:10:SER:CB	1:A:57:GLY:CA	0.45	2.94	8	1
1:A:47:LYS:O	1:A:50:ASN:N	0.45	2.49	14	3
1:A:39:PHE:HB3	1:A:40:PRO:CD	0.45	2.41	9	1
1:A:71:LEU:HD11	1:A:74:LYS:HG3	0.45	1.88	15	1
1:A:11:SER:OG	1:A:12:ALA:N	0.45	2.49	1	1
1:A:26:GLN:OE1	1:A:89:GLY:O	0.45	2.35	2	1
1:A:89:GLY:HA2	1:A:92:VAL:HG22	0.45	1.88	4	1
1:A:8:LEU:CD2	1:A:55:LEU:HB2	0.45	2.42	10	1
1:A:59:GLN:OE1	1:A:84:TYR:HE2	0.45	1.95	4	1
1:A:60:ILE:O	1:A:62:TYR:N	0.45	2.49	7	2
1:A:77:GLU:CD	1:A:99:ALA:CB	0.45	2.85	6	1
1:A:60:ILE:HD11	1:A:63:MET:HE2	0.45	1.87	8	1
1:A:20:VAL:HG13	1:A:36:ILE:O	0.45	2.11	9	1
1:A:64:LEU:HD13	1:A:65:PRO:HD3	0.45	1.87	11	1
1:A:94:LYS:C	1:A:97:VAL:HG22	0.45	2.32	15	1
1:A:48:GLY:HA3	1:A:71:LEU:HD11	0.45	1.89	3	1
1:A:11:SER:HB3	1:A:59:GLN:OE1	0.45	2.12	4	1
1:A:18:LEU:O	1:A:22:LYS:HB3	0.45	2.11	6	1
1:A:80:ASP:N	1:A:80:ASP:OD1	0.45	2.50	7	1
1:A:89:GLY:O	1:A:90:LEU:CB	0.45	2.61	9	1
1:A:64:LEU:HD23	1:A:76:VAL:CG2	0.45	2.34	11	1
1:A:19:LEU:HD23	1:A:84:TYR:HD1	0.45	1.72	13	1
1:A:18:LEU:C	1:A:87:VAL:CG1	0.44	2.86	1	1
1:A:78:VAL:CG1	1:A:79:ILE:O	0.44	2.62	3	1
1:A:56:LEU:O	1:A:78:VAL:CA	0.44	2.59	14	3
1:A:91:GLY:O	1:A:95:ALA:N	0.44	2.50	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:63:MET:C	1:A:65:PRO:CD	0.44	2.85	8	1
1:A:4:LYS:C	1:A:5:HIS:CD2	0.44	2.90	11	2
1:A:11:SER:O	1:A:12:ALA:HB3	0.44	2.12	11	1
1:A:88:ASP:OD2	1:A:91:GLY:HA3	0.44	2.12	11	1
1:A:56:LEU:HD12	1:A:64:LEU:HB2	0.44	1.89	2	1
1:A:56:LEU:HD11	1:A:60:ILE:HD11	0.44	1.86	4	1
1:A:54:VAL:O	1:A:76:VAL:CG2	0.44	2.63	8	1
1:A:15:SER:OG	1:A:84:TYR:CG	0.44	2.67	11	1
1:A:23:MET:HE3	1:A:36:ILE:CG2	0.44	2.40	11	1
1:A:41:GLU:CB	1:A:56:LEU:HD21	0.44	2.43	11	1
1:A:83:LEU:CD1	1:A:88:ASP:OD2	0.44	2.63	11	1
1:A:41:GLU:HA	1:A:44:ALA:HB2	0.44	1.89	12	1
1:A:60:ILE:HD11	1:A:62:TYR:OH	0.44	2.12	15	1
1:A:37:GLU:OE1	1:A:39:PHE:HZ	0.44	1.96	3	1
1:A:8:LEU:HA	1:A:55:LEU:HB2	0.44	1.88	14	3
1:A:26:GLN:O	1:A:30:TYR:N	0.44	2.50	5	2
1:A:18:LEU:HA	1:A:21:SER:OG	0.44	2.12	14	2
1:A:24:ARG:NE	1:A:36:ILE:O	0.44	2.50	11	2
1:A:39:PHE:CD2	1:A:43:LEU:HD22	0.44	2.48	11	1
1:A:20:VAL:HG22	1:A:21:SER:H	0.44	1.72	12	1
1:A:22:LYS:CD	1:A:89:GLY:N	0.44	2.77	12	1
1:A:44:ALA:O	1:A:71:LEU:CD2	0.44	2.59	15	1
1:A:15:SER:O	1:A:16:THR:CG2	0.44	2.60	4	1
1:A:70:LEU:C	1:A:70:LEU:CD2	0.44	2.83	5	1
1:A:52:ASP:C	1:A:53:VAL:HG22	0.44	2.33	2	1
1:A:39:PHE:CD2	1:A:47:LYS:HG3	0.44	2.48	5	1
1:A:57:GLY:O	1:A:78:VAL:CG2	0.44	2.66	6	2
1:A:82:LEU:HD12	1:A:83:LEU:N	0.44	2.27	16	2
1:A:4:LYS:O	1:A:4:LYS:HD2	0.44	2.11	10	1
1:A:91:GLY:O	1:A:95:ALA:HB2	0.44	2.12	3	3
1:A:30:TYR:CE2	1:A:93:LEU:CD2	0.44	2.94	2	1
1:A:63:MET:CE	1:A:66:GLU:OE2	0.44	2.65	4	1
1:A:70:LEU:O	1:A:70:LEU:CD2	0.44	2.61	5	1
1:A:66:GLU:O	1:A:70:LEU:HB3	0.44	2.13	6	1
1:A:16:THR:HG23	1:A:84:TYR:HE1	0.44	1.73	17	2
1:A:4:LYS:HG2	1:A:52:ASP:HB2	0.44	1.89	10	1
1:A:79:ILE:HD12	1:A:84:TYR:CD1	0.44	2.48	12	2
1:A:8:LEU:HD23	1:A:38:ALA:CA	0.44	2.43	5	1
1:A:8:LEU:HD12	1:A:79:ILE:HD11	0.44	1.89	5	1
1:A:23:MET:HA	1:A:26:GLN:CG	0.44	2.42	12	1
1:A:61:ALA:O	1:A:64:LEU:CB	0.44	2.61	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:TYR:C	1:A:62:TYR:CD1	0.44	2.91	3	1
1:A:68:GLN:O	1:A:72:PRO:CG	0.44	2.66	4	1
1:A:51:ALA:HB2	1:A:54:VAL:CG2	0.44	2.43	7	1
1:A:26:GLN:O	1:A:30:TYR:HD2	0.44	1.96	8	1
1:A:41:GLU:O	1:A:44:ALA:HB3	0.44	2.11	12	1
1:A:60:ILE:HD13	1:A:62:TYR:CE1	0.44	2.48	14	1
1:A:9:PHE:CG	1:A:56:LEU:HD12	0.44	2.47	15	1
1:A:4:LYS:N	1:A:33:PRO:HB2	0.44	2.27	17	1
1:A:9:PHE:O	1:A:57:GLY:N	0.44	2.50	1	1
1:A:8:LEU:O	1:A:8:LEU:CD2	0.44	2.64	9	2
1:A:25:ALA:O	1:A:29:LYS:N	0.44	2.51	15	3
1:A:82:LEU:HD23	1:A:86:LYS:NZ	0.44	2.28	15	1
1:A:4:LYS:O	1:A:35:ILE:N	0.43	2.51	8	3
1:A:89:GLY:O	1:A:93:LEU:N	0.43	2.51	3	1
1:A:48:GLY:O	1:A:74:LYS:HG2	0.43	2.13	7	1
1:A:79:ILE:CG2	1:A:83:LEU:HD12	0.43	2.43	7	1
1:A:30:TYR:O	1:A:31:GLU:HG3	0.43	2.12	9	1
1:A:29:LYS:O	1:A:30:TYR:CD1	0.43	2.71	1	1
1:A:56:LEU:O	1:A:56:LEU:HG	0.43	2.13	4	1
1:A:89:GLY:O	1:A:92:VAL:HB	0.43	2.13	8	1
1:A:57:GLY:HA2	1:A:79:ILE:CG1	0.43	2.43	14	1
1:A:46:GLU:O	1:A:49:GLN:CG	0.43	2.65	17	1
1:A:64:LEU:HG	1:A:65:PRO:HD3	0.43	1.90	2	1
1:A:32:VAL:HG11	1:A:93:LEU:HG	0.43	1.89	4	1
1:A:9:PHE:CA	1:A:39:PHE:O	0.43	2.65	5	2
1:A:34:VAL:O	1:A:36:ILE:CD1	0.43	2.64	5	1
1:A:7:TYR:HB2	1:A:9:PHE:CZ	0.43	2.48	6	1
1:A:4:LYS:HB3	1:A:34:VAL:HG22	0.43	1.90	9	1
1:A:40:PRO:O	1:A:41:GLU:HG2	0.43	2.13	9	2
1:A:57:GLY:CA	1:A:60:ILE:HG13	0.43	2.42	9	1
1:A:7:TYR:HB2	1:A:54:VAL:HG22	0.43	1.90	10	1
1:A:47:LYS:O	1:A:51:ALA:HB2	0.43	2.14	10	1
1:A:18:LEU:HB2	1:A:87:VAL:HG21	0.43	1.90	17	1
1:A:29:LYS:HE3	1:A:30:TYR:CZ	0.43	2.49	1	1
1:A:51:ALA:CB	1:A:54:VAL:HG22	0.43	2.43	2	1
1:A:74:LYS:O	1:A:76:VAL:N	0.43	2.51	3	1
1:A:4:LYS:CA	1:A:34:VAL:HB	0.43	2.44	6	1
1:A:72:PRO:O	1:A:74:LYS:N	0.43	2.52	6	1
1:A:8:LEU:HB3	1:A:16:THR:CG2	0.43	2.43	8	1
1:A:94:LYS:HA	1:A:97:VAL:CG2	0.43	2.44	9	2
1:A:63:MET:O	1:A:67:ILE:N	0.43	2.48	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:LEU:HB2	1:A:65:PRO:HD3	0.43	1.90	12	1
1:A:6:ILE:O	1:A:6:ILE:CG2	0.43	2.65	15	2
1:A:9:PHE:O	1:A:56:LEU:CA	0.43	2.59	6	1
1:A:15:SER:OG	1:A:85:GLY:N	0.43	2.51	11	1
1:A:19:LEU:CB	1:A:87:VAL:CG1	0.43	2.90	11	1
1:A:8:LEU:HD12	1:A:55:LEU:HB2	0.43	1.89	17	1
1:A:18:LEU:HD23	1:A:87:VAL:HG21	0.43	1.91	17	1
1:A:23:MET:O	1:A:26:GLN:CB	0.43	2.65	6	3
1:A:57:GLY:HA3	1:A:60:ILE:CG1	0.43	2.43	9	1
1:A:10:SER:HA	1:A:60:ILE:CG2	0.43	2.42	13	1
1:A:11:SER:C	1:A:13:GLY:N	0.43	2.72	13	1
1:A:16:THR:N	1:A:84:TYR:CE1	0.43	2.87	13	1
1:A:17:SER:O	1:A:21:SER:N	0.43	2.52	15	1
1:A:4:LYS:HG3	1:A:52:ASP:CG	0.43	2.33	4	1
1:A:8:LEU:HD23	1:A:19:LEU:HG	0.43	1.91	7	1
1:A:8:LEU:HB3	1:A:16:THR:HG22	0.43	1.90	8	1
1:A:26:GLN:NE2	1:A:90:LEU:HG	0.43	2.29	13	1
1:A:22:LYS:HG2	1:A:26:GLN:NE2	0.43	2.29	14	1
1:A:8:LEU:HD21	1:A:16:THR:CB	0.43	2.44	15	1
1:A:11:SER:C	1:A:59:GLN:OE1	0.43	2.57	15	1
1:A:74:LYS:HD2	1:A:74:LYS:N	0.43	2.29	7	1
1:A:60:ILE:HD12	1:A:62:TYR:CZ	0.43	2.49	11	1
1:A:56:LEU:O	1:A:78:VAL:CG2	0.43	2.64	14	1
1:A:64:LEU:HD13	1:A:65:PRO:N	0.43	2.27	14	1
1:A:16:THR:CA	1:A:19:LEU:HD12	0.43	2.43	16	1
1:A:60:ILE:CG1	1:A:62:TYR:CE1	0.43	3.02	3	1
1:A:63:MET:CE	1:A:66:GLU:HG2	0.43	2.44	5	1
1:A:77:GLU:CD	1:A:99:ALA:HB2	0.43	2.33	6	1
1:A:88:ASP:O	1:A:92:VAL:N	0.43	2.52	6	2
1:A:4:LYS:HG3	1:A:52:ASP:OD2	0.43	2.14	10	1
1:A:40:PRO:HD2	1:A:42:THR:CG2	0.43	2.40	12	1
1:A:23:MET:CG	1:A:89:GLY:CA	0.43	2.97	1	1
1:A:56:LEU:CD1	1:A:56:LEU:C	0.43	2.87	1	1
1:A:57:GLY:HA2	1:A:79:ILE:HD12	0.43	1.91	4	1
1:A:6:ILE:N	1:A:35:ILE:O	0.43	2.52	5	1
1:A:97:VAL:HA	1:A:100:ILE:HG23	0.43	1.90	7	1
1:A:57:GLY:HA3	1:A:60:ILE:HG13	0.43	1.90	9	1
1:A:94:LYS:O	1:A:97:VAL:N	0.43	2.52	10	1
1:A:24:ARG:CD	1:A:36:ILE:O	0.43	2.67	11	1
1:A:15:SER:HB2	1:A:84:TYR:CG	0.43	2.48	15	1
1:A:22:LYS:O	1:A:26:GLN:CG	0.43	2.66	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:8:LEU:CB	1:A:38:ALA:HA	0.42	2.44	2	1
1:A:66:GLU:O	1:A:70:LEU:HD12	0.42	2.14	2	1
1:A:56:LEU:C	1:A:60:ILE:HG22	0.42	2.34	3	1
1:A:60:ILE:HA	1:A:62:TYR:CD1	0.42	2.49	3	1
1:A:21:SER:OG	1:A:24:ARG:NH1	0.42	2.51	5	1
1:A:97:VAL:HA	1:A:100:ILE:CG2	0.42	2.44	7	1
1:A:4:LYS:N	1:A:34:VAL:HA	0.42	2.29	8	1
1:A:6:ILE:HD11	1:A:96:ALA:CB	0.42	2.44	8	1
1:A:20:VAL:HG21	1:A:38:ALA:N	0.42	2.28	10	1
1:A:93:LEU:O	1:A:97:VAL:CG2	0.42	2.66	14	1
1:A:76:VAL:O	1:A:77:GLU:CG	0.42	2.67	17	1
1:A:22:LYS:HE3	1:A:87:VAL:HG12	0.42	1.91	3	1
1:A:68:GLN:O	1:A:72:PRO:HG3	0.42	2.14	4	1
1:A:84:TYR:O	1:A:87:VAL:N	0.42	2.50	7	2
1:A:44:ALA:O	1:A:48:GLY:N	0.42	2.51	13	1
1:A:54:VAL:CG2	1:A:76:VAL:HA	0.42	2.43	16	1
1:A:26:GLN:HG3	1:A:90:LEU:CA	0.42	2.44	5	1
1:A:31:GLU:O	1:A:31:GLU:HG2	0.42	2.15	14	2
1:A:26:GLN:N	1:A:26:GLN:HE21	0.42	2.12	7	1
1:A:34:VAL:HG12	1:A:35:ILE:CG1	0.42	2.45	10	1
1:A:19:LEU:HD21	1:A:79:ILE:HD13	0.42	1.91	11	1
1:A:63:MET:O	1:A:66:GLU:N	0.42	2.50	15	3
1:A:64:LEU:CB	1:A:65:PRO:HD3	0.42	2.45	12	4
1:A:23:MET:SD	1:A:93:LEU:CB	0.42	3.08	4	1
1:A:56:LEU:HD21	1:A:63:MET:HB2	0.42	1.92	5	1
1:A:23:MET:O	1:A:26:GLN:HG3	0.42	2.13	12	1
1:A:26:GLN:O	1:A:29:LYS:N	0.42	2.52	13	1
1:A:8:LEU:HD22	1:A:38:ALA:HB1	0.42	1.90	15	1
1:A:71:LEU:HD11	1:A:74:LYS:HB2	0.42	1.91	15	1
1:A:16:THR:O	1:A:17:SER:C	0.42	2.58	16	1
1:A:7:TYR:CG	1:A:51:ALA:HB2	0.42	2.49	17	1
1:A:82:LEU:O	1:A:86:LYS:CE	0.42	2.67	2	1
1:A:8:LEU:CD2	1:A:38:ALA:CB	0.42	2.86	5	1
1:A:31:GLU:C	1:A:33:PRO:HD3	0.42	2.35	6	1
1:A:94:LYS:CG	1:A:95:ALA:N	0.42	2.81	7	1
1:A:7:TYR:CD2	1:A:39:PHE:CZ	0.42	3.08	9	1
1:A:6:ILE:HB	1:A:36:ILE:CG1	0.42	2.44	10	1
1:A:41:GLU:C	1:A:42:THR:CG2	0.42	2.88	14	1
1:A:9:PHE:CG	1:A:44:ALA:HB2	0.42	2.49	1	1
1:A:35:ILE:CG2	1:A:37:GLU:OE2	0.42	2.67	4	2
1:A:58:PRO:CA	1:A:78:VAL:HG13	0.42	2.42	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:41:GLU:O	1:A:44:ALA:N	0.42	2.48	11	2
1:A:4:LYS:O	1:A:33:PRO:O	0.42	2.38	17	2
1:A:55:LEU:CD1	1:A:92:VAL:CG1	0.42	2.97	13	1
1:A:61:ALA:CB	1:A:78:VAL:HG11	0.42	2.45	13	1
1:A:58:PRO:CG	1:A:81:SER:HB2	0.42	2.44	14	1
1:A:9:PHE:O	1:A:10:SER:O	0.42	2.38	2	1
1:A:18:LEU:CG	1:A:87:VAL:HG11	0.42	2.38	5	1
1:A:9:PHE:O	1:A:56:LEU:CD1	0.42	2.58	6	1
1:A:6:ILE:CD1	1:A:34:VAL:HG21	0.42	2.44	8	1
1:A:55:LEU:CD1	1:A:77:GLU:O	0.42	2.68	9	1
1:A:88:ASP:O	1:A:92:VAL:CB	0.42	2.67	12	1
1:A:23:MET:CG	1:A:89:GLY:O	0.42	2.63	14	1
1:A:86:LYS:O	1:A:87:VAL:C	0.42	2.57	14	1
1:A:67:ILE:O	1:A:71:LEU:CB	0.42	2.59	6	1
1:A:10:SER:OG	1:A:57:GLY:HA2	0.42	2.13	7	1
1:A:41:GLU:HG2	1:A:63:MET:CE	0.42	2.44	8	1
1:A:8:LEU:O	1:A:9:PHE:HD1	0.42	1.93	13	1
1:A:89:GLY:C	1:A:90:LEU:HG	0.42	2.35	13	1
1:A:41:GLU:O	1:A:41:GLU:HG2	0.42	2.14	14	1
1:A:53:VAL:CG2	1:A:75:PRO:O	0.42	2.64	14	1
1:A:26:GLN:HB3	1:A:93:LEU:CD2	0.42	2.45	15	1
1:A:39:PHE:HB3	1:A:43:LEU:HD21	0.42	1.91	15	1
1:A:56:LEU:HB3	1:A:63:MET:SD	0.42	2.55	15	1
1:A:23:MET:CE	1:A:93:LEU:CB	0.42	2.98	17	1
1:A:16:THR:O	1:A:20:VAL:HG22	0.42	2.14	17	2
1:A:74:LYS:O	1:A:76:VAL:CG2	0.42	2.65	3	1
1:A:7:TYR:CD1	1:A:39:PHE:CE2	0.42	3.07	7	1
1:A:29:LYS:HE3	1:A:30:TYR:CE2	0.42	2.49	8	1
1:A:73:ASN:ND2	1:A:74:LYS:N	0.42	2.67	8	1
1:A:56:LEU:HD11	1:A:60:ILE:HG12	0.42	1.91	12	1
1:A:13:GLY:O	1:A:14:MET:CG	0.42	2.66	13	1
1:A:28:GLU:N	1:A:28:GLU:CD	0.42	2.73	15	1
1:A:8:LEU:N	1:A:37:GLU:O	0.42	2.53	17	1
1:A:11:SER:HB2	1:A:60:ILE:CG2	0.42	2.44	2	1
1:A:24:ARG:O	1:A:28:GLU:HB3	0.42	2.15	3	1
1:A:58:PRO:CG	1:A:81:SER:HA	0.42	2.45	3	1
1:A:37:GLU:OE1	1:A:37:GLU:CA	0.42	2.68	8	1
1:A:18:LEU:C	1:A:18:LEU:HD13	0.42	2.35	9	1
1:A:7:TYR:CD2	1:A:47:LYS:C	0.42	2.93	10	1
1:A:48:GLY:O	1:A:51:ALA:CB	0.42	2.67	10	2
1:A:64:LEU:C	1:A:64:LEU:CD1	0.41	2.86	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:17:SER:O	1:A:20:VAL:HB	0.41	2.15	2	1
1:A:20:VAL:CG2	1:A:36:ILE:C	0.41	2.88	2	1
1:A:26:GLN:O	1:A:30:TYR:CG	0.41	2.73	2	1
1:A:41:GLU:HG3	1:A:63:MET:HE1	0.41	1.91	2	1
1:A:7:TYR:CZ	1:A:47:LYS:CD	0.41	3.02	5	1
1:A:26:GLN:N	1:A:29:LYS:HE2	0.41	2.30	6	1
1:A:16:THR:HG1	1:A:84:TYR:HH	0.41	1.53	11	1
1:A:14:MET:O	1:A:15:SER:C	0.41	2.58	13	1
1:A:52:ASP:OD1	1:A:100:ILE:HG12	0.41	2.14	15	1
1:A:41:GLU:HB2	1:A:56:LEU:HD11	0.41	1.92	16	1
1:A:71:LEU:N	1:A:71:LEU:HD12	0.41	2.30	17	1
1:A:29:LYS:C	1:A:30:TYR:CD1	0.41	2.93	1	1
1:A:22:LYS:C	1:A:26:GLN:OE1	0.41	2.58	2	2
1:A:31:GLU:O	1:A:33:PRO:CD	0.41	2.66	3	2
1:A:26:GLN:HG2	1:A:93:LEU:HD22	0.41	1.92	4	1
1:A:56:LEU:CD1	1:A:60:ILE:HD12	0.41	2.45	4	1
1:A:9:PHE:CE2	1:A:54:VAL:CG1	0.41	3.03	7	1
1:A:22:LYS:O	1:A:25:ALA:N	0.41	2.52	1	1
1:A:8:LEU:CB	1:A:38:ALA:HB2	0.41	2.45	3	1
1:A:10:SER:CB	1:A:57:GLY:HA3	0.41	2.46	8	1
1:A:68:GLN:O	1:A:72:PRO:N	0.41	2.54	8	1
1:A:48:GLY:O	1:A:74:LYS:HD2	0.41	2.15	15	1
1:A:57:GLY:H	1:A:60:ILE:HG22	0.41	1.74	17	1
1:A:56:LEU:HD12	1:A:57:GLY:O	0.41	2.15	1	1
1:A:20:VAL:HG12	1:A:21:SER:H	0.41	1.74	2	1
1:A:41:GLU:HG3	1:A:63:MET:CE	0.41	2.45	2	1
1:A:8:LEU:CD2	1:A:20:VAL:CG2	0.41	2.82	5	1
1:A:94:LYS:O	1:A:98:ALA:N	0.41	2.53	7	1
1:A:19:LEU:O	1:A:19:LEU:HD12	0.41	2.16	11	1
1:A:26:GLN:OE1	1:A:89:GLY:C	0.41	2.59	2	1
1:A:54:VAL:HG12	1:A:56:LEU:CD2	0.41	2.44	2	1
1:A:54:VAL:HG13	1:A:56:LEU:CD2	0.41	2.45	3	1
1:A:57:GLY:N	1:A:60:ILE:CG2	0.41	2.83	3	2
1:A:55:LEU:CD1	1:A:78:VAL:O	0.41	2.69	8	1
1:A:73:ASN:ND2	1:A:74:LYS:H	0.41	2.13	8	1
1:A:40:PRO:C	1:A:41:GLU:HG3	0.41	2.36	13	1
1:A:58:PRO:CB	1:A:79:ILE:O	0.41	2.67	15	1
1:A:7:TYR:HB2	1:A:51:ALA:HB2	0.41	1.91	17	1
1:A:26:GLN:OE1	1:A:90:LEU:N	0.41	2.53	17	1
1:A:56:LEU:O	1:A:57:GLY:O	0.41	2.38	4	2
1:A:13:GLY:O	1:A:14:MET:O	0.41	2.38	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:28:GLU:HA	1:A:28:GLU:OE1	0.41	2.15	5	1
1:A:23:MET:CE	1:A:93:LEU:HA	0.41	2.45	8	1
1:A:70:LEU:C	1:A:72:PRO:HD3	0.41	2.36	9	1
1:A:9:PHE:CE2	1:A:54:VAL:CG2	0.41	3.03	10	1
1:A:83:LEU:HD23	1:A:83:LEU:H	0.41	1.75	11	1
1:A:18:LEU:HB2	1:A:87:VAL:CG2	0.41	2.45	17	1
1:A:62:TYR:CE2	1:A:63:MET:CG	0.41	3.03	5	1
1:A:87:VAL:O	1:A:87:VAL:HG13	0.41	2.16	6	1
1:A:5:HIS:CB	1:A:7:TYR:CZ	0.41	3.03	7	1
1:A:11:SER:OG	1:A:84:TYR:OH	0.41	2.39	8	1
1:A:19:LEU:HB2	1:A:87:VAL:CG1	0.41	2.43	11	1
1:A:4:LYS:HG2	1:A:52:ASP:CG	0.41	2.35	13	1
1:A:23:MET:HB3	1:A:36:ILE:HG13	0.41	1.93	17	1
1:A:19:LEU:HD12	1:A:23:MET:HG3	0.41	1.92	1	1
1:A:26:GLN:NE2	1:A:89:GLY:O	0.41	2.53	1	1
1:A:29:LYS:O	1:A:30:TYR:HD1	0.41	1.99	1	1
1:A:19:LEU:CD2	1:A:87:VAL:HA	0.41	2.45	2	1
1:A:4:LYS:CG	1:A:52:ASP:CG	0.41	2.89	4	1
1:A:63:MET:CE	1:A:66:GLU:CD	0.41	2.89	4	1
1:A:7:TYR:CD2	1:A:47:LYS:CB	0.41	3.02	10	1
1:A:29:LYS:HG2	1:A:30:TYR:CZ	0.41	2.50	11	3
1:A:60:ILE:HA	1:A:62:TYR:CE2	0.41	2.51	11	1
1:A:62:TYR:CD1	1:A:63:MET:HG2	0.41	2.51	11	1
1:A:64:LEU:O	1:A:68:GLN:CG	0.41	2.64	14	1
1:A:83:LEU:O	1:A:87:VAL:N	0.41	2.54	14	1
1:A:66:GLU:O	1:A:69:ARG:HG3	0.41	2.16	16	1
1:A:43:LEU:O	1:A:46:GLU:N	0.41	2.53	1	1
1:A:56:LEU:O	1:A:57:GLY:C	0.41	2.59	3	1
1:A:41:GLU:HG3	1:A:42:THR:N	0.41	2.30	5	1
1:A:52:ASP:O	1:A:53:VAL:CG2	0.41	2.67	5	1
1:A:41:GLU:CD	1:A:63:MET:CG	0.41	2.89	6	1
1:A:41:GLU:HG2	1:A:63:MET:SD	0.41	2.56	7	1
1:A:24:ARG:O	1:A:27:ALA:N	0.41	2.53	10	1
1:A:9:PHE:CE1	1:A:44:ALA:CA	0.41	3.04	14	1
1:A:55:LEU:CB	1:A:77:GLU:O	0.41	2.69	15	1
1:A:54:VAL:CG2	1:A:76:VAL:CG1	0.41	2.89	16	1
1:A:82:LEU:O	1:A:83:LEU:C	0.41	2.59	17	1
1:A:35:ILE:N	1:A:35:ILE:CD1	0.41	2.83	4	1
1:A:54:VAL:CA	1:A:55:LEU:HD22	0.41	2.45	7	1
1:A:58:PRO:CA	1:A:61:ALA:HB2	0.41	2.44	8	1
1:A:26:GLN:HA	1:A:29:LYS:HB3	0.41	1.93	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:TYR:CE2	1:A:47:LYS:O	0.41	2.73	15	1
1:A:39:PHE:CZ	1:A:47:LYS:HE3	0.41	2.51	15	1
1:A:56:LEU:CB	1:A:63:MET:SD	0.41	3.09	15	1
1:A:10:SER:OG	1:A:12:ALA:N	0.41	2.53	17	1
1:A:51:ALA:O	1:A:74:LYS:CE	0.40	2.70	1	1
1:A:22:LYS:O	1:A:26:GLN:OE1	0.40	2.38	2	2
1:A:6:ILE:CG2	1:A:23:MET:CE	0.40	2.98	3	1
1:A:30:TYR:HB3	1:A:32:VAL:HG23	0.40	1.93	3	1
1:A:19:LEU:O	1:A:23:MET:N	0.40	2.49	4	1
1:A:83:LEU:C	1:A:83:LEU:HD13	0.40	2.36	7	1
1:A:56:LEU:O	1:A:78:VAL:HG22	0.40	2.16	11	1
1:A:12:ALA:O	1:A:13:GLY:C	0.40	2.59	16	1
1:A:56:LEU:CD1	1:A:76:VAL:CG2	0.40	2.93	2	1
1:A:26:GLN:O	1:A:93:LEU:CD2	0.40	2.69	4	1
1:A:7:TYR:HD2	1:A:47:LYS:O	0.40	2.00	11	1
1:A:22:LYS:O	1:A:25:ALA:CA	0.40	2.69	11	1
1:A:23:MET:O	1:A:27:ALA:N	0.40	2.54	11	1
1:A:61:ALA:CA	1:A:78:VAL:CG2	0.40	2.99	11	1
1:A:68:GLN:NE2	1:A:72:PRO:O	0.40	2.54	14	1
1:A:97:VAL:HG23	1:A:98:ALA:N	0.40	2.31	15	1
1:A:8:LEU:HB2	1:A:55:LEU:HB2	0.40	1.93	16	1
1:A:53:VAL:CG2	1:A:100:ILE:HG12	0.40	2.47	16	1
1:A:36:ILE:H	1:A:36:ILE:HD12	0.40	1.75	3	1
1:A:67:ILE:O	1:A:70:LEU:N	0.40	2.54	4	1
1:A:6:ILE:CG2	1:A:36:ILE:HD12	0.40	2.46	5	1
1:A:57:GLY:O	1:A:60:ILE:C	0.40	2.59	14	1
1:A:5:HIS:CB	1:A:7:TYR:CE1	0.40	3.04	17	1
1:A:8:LEU:HD11	1:A:79:ILE:CD1	0.40	2.46	17	1
1:A:11:SER:HA	1:A:60:ILE:HB	0.40	1.93	5	1
1:A:66:GLU:OE2	1:A:70:LEU:CD1	0.40	2.68	5	1
1:A:11:SER:HB3	1:A:84:TYR:CZ	0.40	2.51	11	1
1:A:45:GLY:HA3	1:A:70:LEU:CD2	0.40	2.47	15	1
1:A:47:LYS:N	1:A:47:LYS:CD	0.40	2.84	17	1
1:A:54:VAL:O	1:A:77:GLU:N	0.40	2.50	17	1
1:A:5:HIS:ND1	1:A:50:ASN:O	0.40	2.54	6	1
1:A:26:GLN:NE2	1:A:26:GLN:H	0.40	2.14	7	1
1:A:16:THR:OG1	1:A:84:TYR:OH	0.40	2.39	13	1
1:A:77:GLU:HG2	1:A:99:ALA:HB2	0.40	1.94	13	1
1:A:92:VAL:O	1:A:96:ALA:HB2	0.40	2.17	13	1
1:A:24:ARG:NH2	1:A:37:GLU:CD	0.40	2.75	15	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	98/106 (92%)	65±5 (67±5%)	20±5 (20±5%)	13±4 (13±4%)	1 6
All	All	1666/1802 (92%)	1109 (67%)	340 (20%)	217 (13%)	1 6

All 55 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	41	GLU	17
1	A	84	TYR	15
1	A	42	THR	11
1	A	31	GLU	10
1	A	13	GLY	9
1	A	26	GLN	8
1	A	11	SER	8
1	A	12	ALA	8
1	A	61	ALA	7
1	A	14	MET	7
1	A	57	GLY	7
1	A	33	PRO	6
1	A	34	VAL	6
1	A	89	GLY	6
1	A	10	SER	5
1	A	87	VAL	5
1	A	15	SER	5
1	A	40	PRO	5
1	A	16	THR	4
1	A	48	GLY	4
1	A	75	PRO	4
1	A	72	PRO	4
1	A	73	ASN	4
1	A	100	ILE	4
1	A	25	ALA	3
1	A	90	LEU	3
1	A	78	VAL	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	32	VAL	3
1	A	70	LEU	2
1	A	20	VAL	2
1	A	24	ARG	2
1	A	67	ILE	2
1	A	60	ILE	2
1	A	93	LEU	2
1	A	17	SER	2
1	A	88	ASP	2
1	A	51	ALA	2
1	A	23	MET	1
1	A	53	VAL	1
1	A	77	GLU	1
1	A	35	ILE	1
1	A	44	ALA	1
1	A	27	ALA	1
1	A	91	GLY	1
1	A	97	VAL	1
1	A	58	PRO	1
1	A	79	ILE	1
1	A	94	LYS	1
1	A	49	GLN	1
1	A	50	ASN	1
1	A	101	LYS	1
1	A	45	GLY	1
1	A	69	ARG	1
1	A	4	LYS	1
1	A	29	LYS	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	80/85 (94%)	50±4 (62±5%)	30±4 (38±5%)	1 6
All	All	1360/1445 (94%)	844 (62%)	516 (38%)	1 6

All 74 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	82	LEU	16
1	A	42	THR	15
1	A	100	ILE	15
1	A	19	LEU	14
1	A	26	GLN	14
1	A	60	ILE	14
1	A	18	LEU	13
1	A	43	LEU	13
1	A	64	LEU	12
1	A	71	LEU	12
1	A	16	THR	11
1	A	69	ARG	11
1	A	70	LEU	11
1	A	21	SER	11
1	A	14	MET	11
1	A	8	LEU	10
1	A	77	GLU	10
1	A	90	LEU	10
1	A	11	SER	9
1	A	62	TYR	9
1	A	80	ASP	9
1	A	17	SER	9
1	A	34	VAL	9
1	A	4	LYS	8
1	A	36	ILE	8
1	A	47	LYS	8
1	A	23	MET	8
1	A	56	LEU	8
1	A	86	LYS	8
1	A	55	LEU	8
1	A	68	GLN	8
1	A	93	LEU	7
1	A	10	SER	7
1	A	20	VAL	7
1	A	22	LYS	7
1	A	66	GLU	7
1	A	87	VAL	7
1	A	35	ILE	7
1	A	101	LYS	7
1	A	31	GLU	6
1	A	46	GLU	6
1	A	88	ASP	6
1	A	94	LYS	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	63	MET	6
1	A	67	ILE	6
1	A	73	ASN	6
1	A	15	SER	5
1	A	24	ARG	5
1	A	52	ASP	5
1	A	28	GLU	5
1	A	59	GLN	5
1	A	83	LEU	5
1	A	74	LYS	4
1	A	29	LYS	4
1	A	54	VAL	4
1	A	49	GLN	4
1	A	50	ASN	4
1	A	79	ILE	3
1	A	53	VAL	3
1	A	76	VAL	3
1	A	78	VAL	3
1	A	97	VAL	3
1	A	41	GLU	3
1	A	39	PHE	3
1	A	58	PRO	2
1	A	72	PRO	2
1	A	5	HIS	2
1	A	92	VAL	2
1	A	33	PRO	2
1	A	6	ILE	1
1	A	81	SER	1
1	A	37	GLU	1
1	A	84	TYR	1
1	A	75	PRO	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)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers (i)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues (i)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation (i)

No chemical shift data were provided