Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Feb 12, 2022 – 08:01 PM EST

PDB ID	:	1FZT
Title	:	SOLUTION STRUCTURE AND DYNAMICS OF AN OPEN B-SHEET, GLYCOLYTIC ENZYME-MONOMERIC 23.7 KDA PHOSPHOGLYCERATE MUTASE FROM SCHIZOSACCHAROMYCES POMBE
Authors	:	Uhrinova, S.; Uhrin, D.; Nairn, J.; Price, N.C.; Fothergill-Gilmore, L.A.
Deposited on	:	2000-10-04

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:

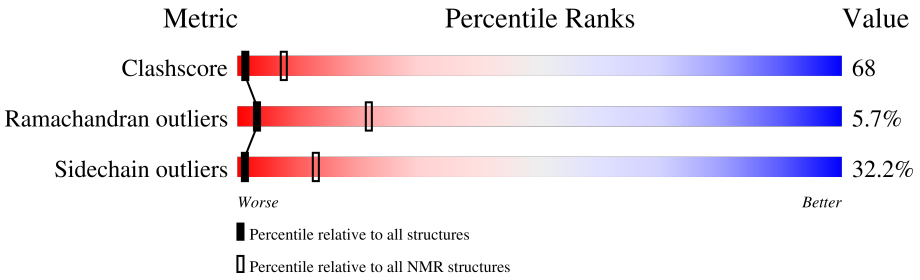
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
ShiftChecker	:	2.26
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)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

1 Overall quality at a glance (i)

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

The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	211	14% 71% 13% •

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 21 models. Model 5 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 21 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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:6-A:211 (206)	0.42	5

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 3 clusters and 1 single-model cluster was found.

Cluster number	Models
1	2, 3, 4, 5, 6, 8, 9, 10, 13, 14, 15, 17, 19, 20, 21
2	1, 7, 11
3	12, 16
Single-model clusters	18

3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3382 atoms, of which 1706 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called PHOSPHOGLYCERATE MUTASE.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	211	3382	1061	1706	292	320	3	0

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: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

Chain A: 14% 71% 13%

M1 T2 T3 E4 A5 A6 P7 N8 L9 L10 V11 L12 T13 R14 H15 G16 E17 S18 E19 W20 L23 N24 L25 F26 T27 G28 W29 K30 D31 P32 A33 L34 S35 E36 T37 G38 I39 K40 E41 A42 K43 L44 E47 R48 L49 K50 S51 R52 G53 Y54 K55 F56 D57 I58 A59 F60 T61

L64 Q65 R66 A67 Q68 K69 T70 C71 Q72 I73 I74 L75 E76 E77 V78 G79 E80 P81 N82 L83 E84 T85 I86 K87 S88 E89 K90 L91 N92 E93 R94 Y95 Y96 G97 D98 L99 Q100 G101 L102 N103 K104 D105 D106 A107 R108 K109 K110 W111 G112 A113 E114 Q115 V116 Q117 I118 W119 R120 R121 S122 Y123

D124 I125 A126 P127 P128 N129 G130 E131 S132 L133 K134 D135 T136 A137 E138 R139 V140 L141 P142 Y143 Y144 K145 S146 T147 I148 V149 P150 H151 I152 L153 E156 K157 V158 L159 I160 A161 A162 H163 G164 N165 S166 L167 R168 A169 L170 I171 M172 D173 L174 E175 G176 L177 T178 G179 D180 Q181 I182 V183 K184

R185 E186 L187 A188 V191 P192 I193 V194 Y195 H196 L197 D198 K199 K202 Y203 V204 S205 K206 E207 L208 I209 D210 N211

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: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

Chain A: 20% 55% 20%

M1 T2 T3 E4 A5 A6 P7 N8 L9 L10 V11 L12 G16 E17 S18 E19 W20 N21 K22 L23 N24 L25 F26 T27 G28 W29 K30 D31 P32 S35 E36 T37 K40 E41 L44 E47 R48 L49 K50 S51 R52 G53 Y54 K55 F56 D57 I58 A59 F60 T61 L64 Q65 R66 A67

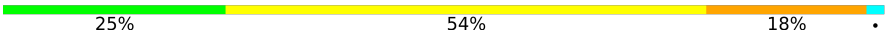
Q68 K69 T70 C71 Q72 I73 I74 L75 E76 E77 V78 G79 E80 P81 N82 L83 E84 T85 I86 K87 S88 E89 K90 L91 N92 E93 R94 Y95 Y96 L99 Q100 G101 L102 N103 K104 D105 R108 K109 K110 W111 G112 A113 E114 Q115 V116 Q117 I118 W119 R120 R121 S122 Y123 D124 I125 A126 P127 P128 N129

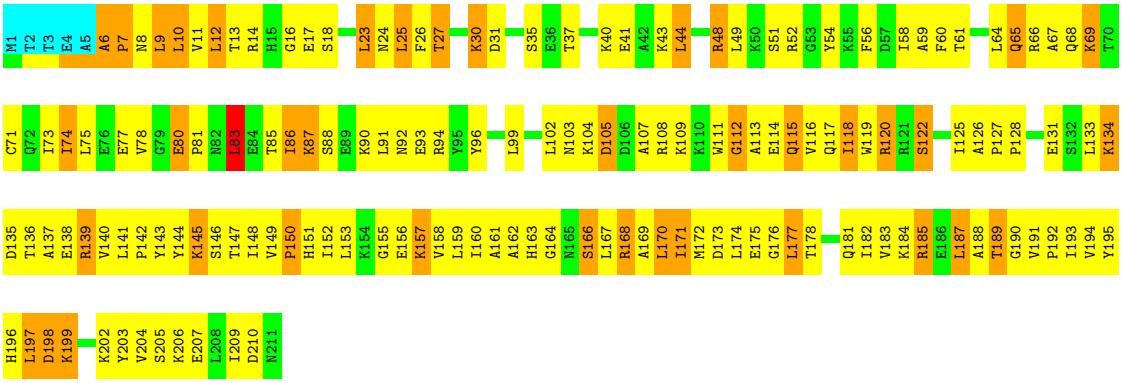
G130 E131 S132 L133 K134 D135 T136 A137 E138 R139 V140 L141 P142 Y143 Y144 K145 S146 T147 I148 V149 P150 H151 I152 L153 K154 G155 E156 K157 V158 L159 I160 A161 A162 H163 G164 N165 S166 L167 R168 A169 L170 I171 M172 D173 L174 E175 G176 L177 T178 G179 D180 Q181 I182 V183 K184 R185 E186 L187 A188

4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

Chain A:

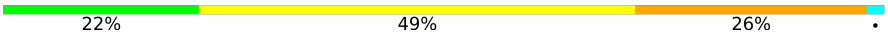


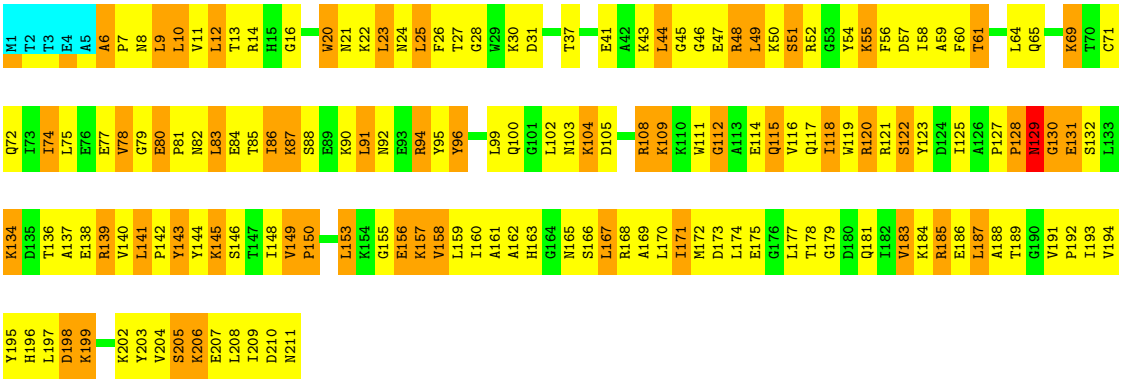


4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

Chain A:

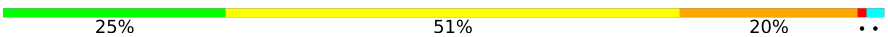


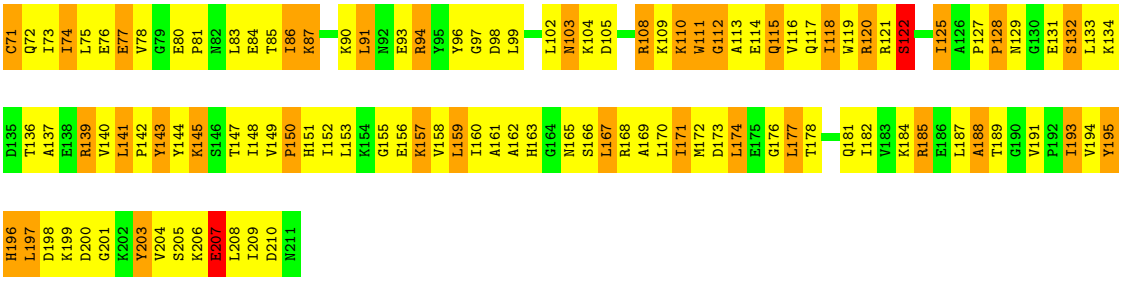


4.2.4 Score per residue for model 4

• Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

Chain A:

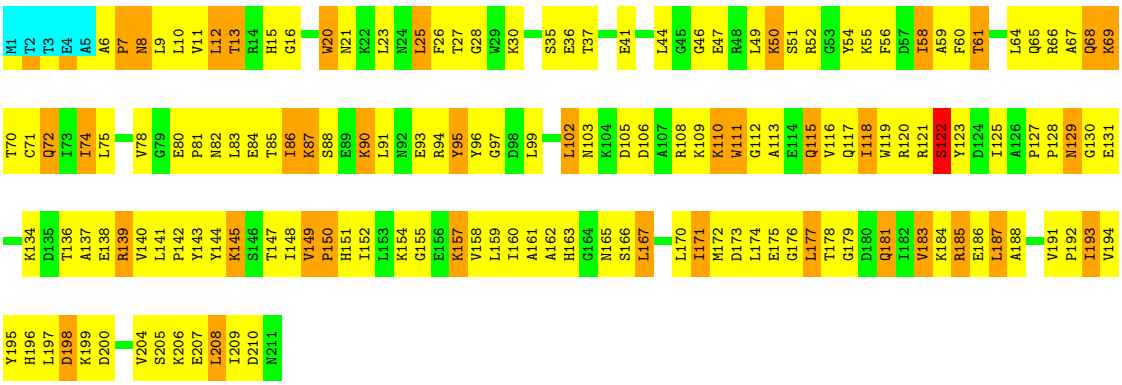




4.2.5 Score per residue for model 5 (medoid)

- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

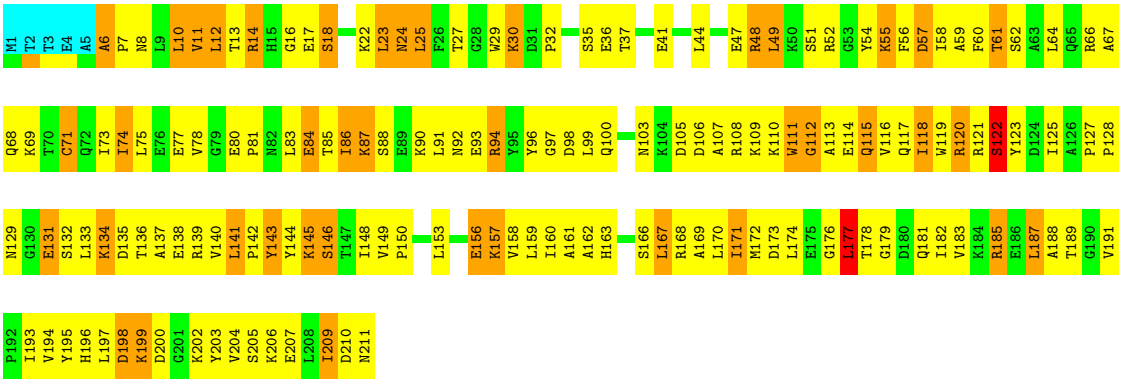
Chain A: 25% 54% 18% •



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

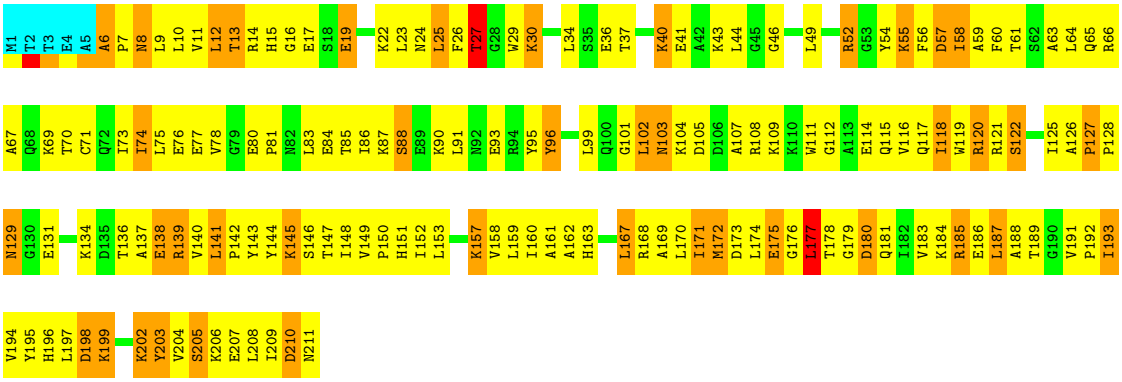
Chain A: 23% 54% 19% • •



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

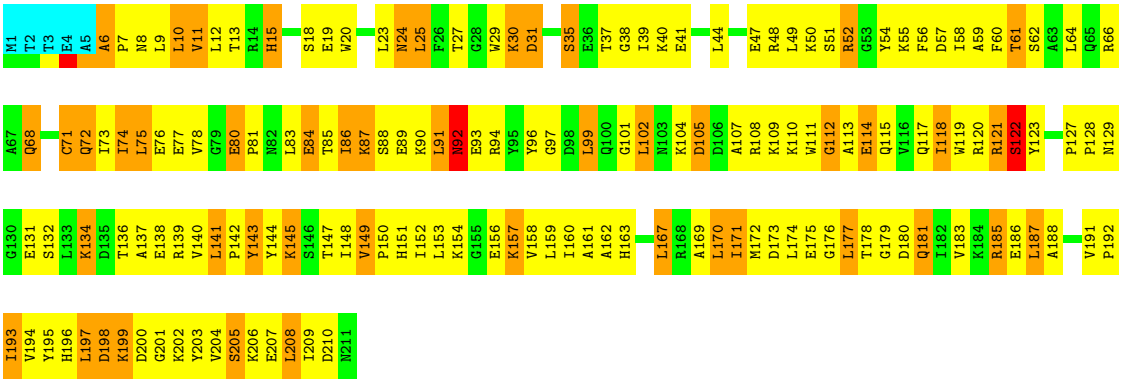
Chain A: 22% 55% 19%



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

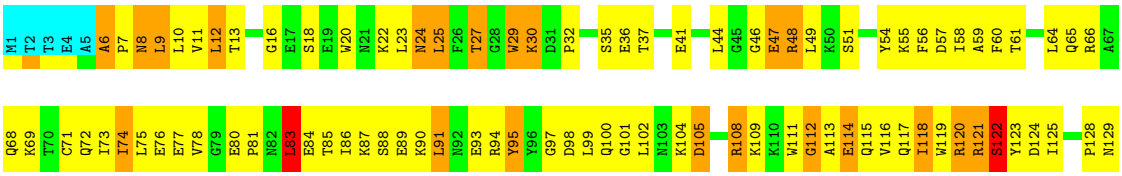
Chain A: 22% 53% 22%



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

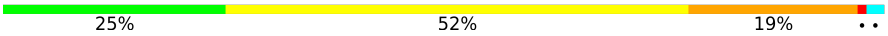
Chain A: 22% 55% 18%

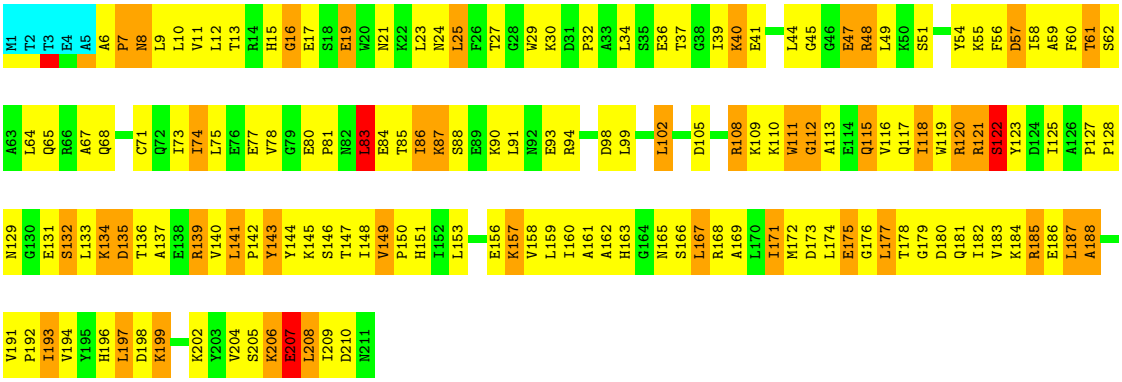


4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

Chain A:

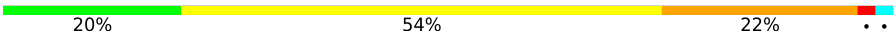


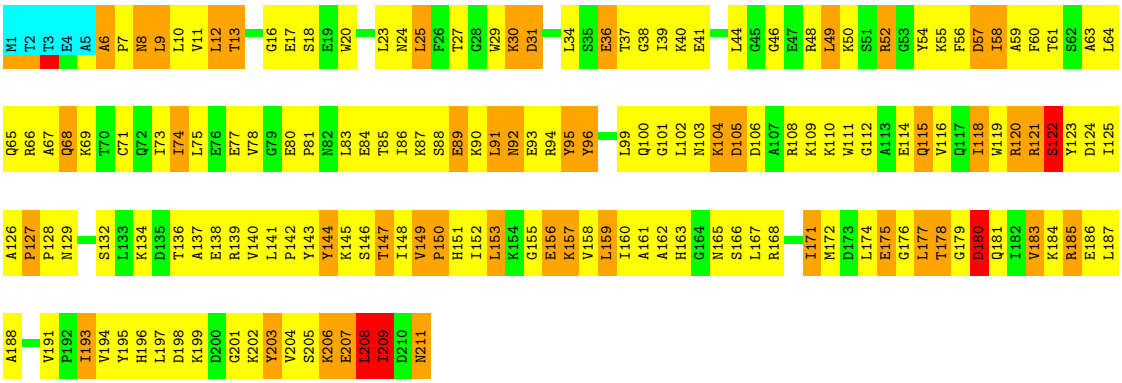


4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

Chain A:

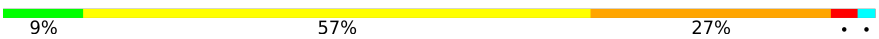


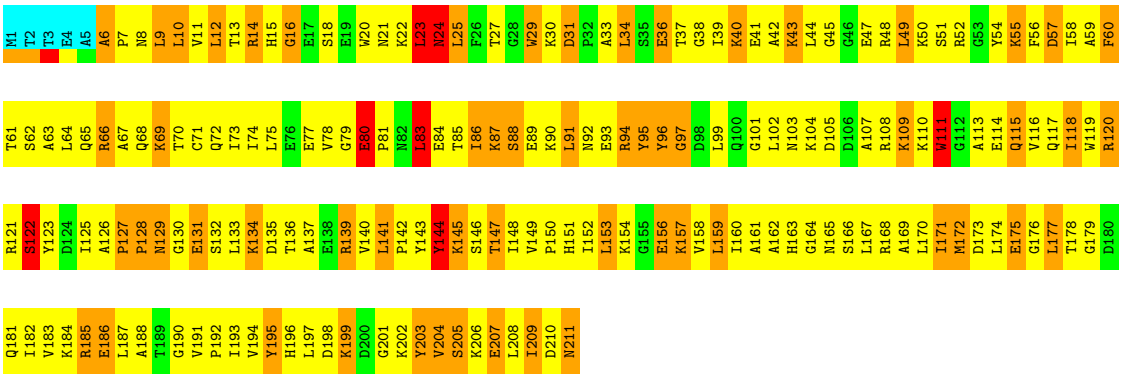


4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

Chain A:

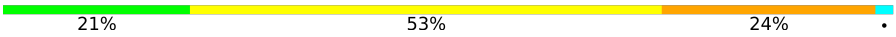


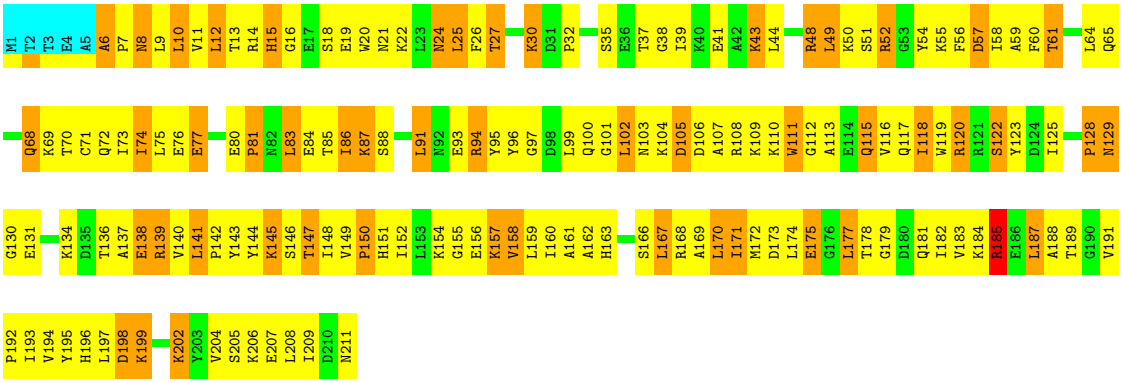


4.2.13 Score per residue for model 13

• Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

Chain A:

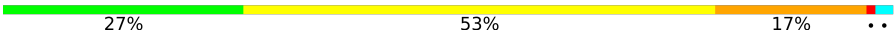


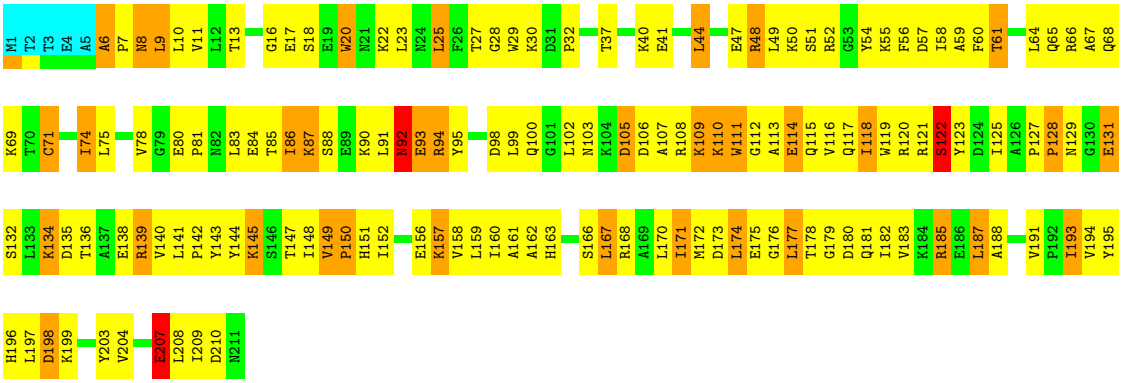


4.2.14 Score per residue for model 14

• Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

Chain A:

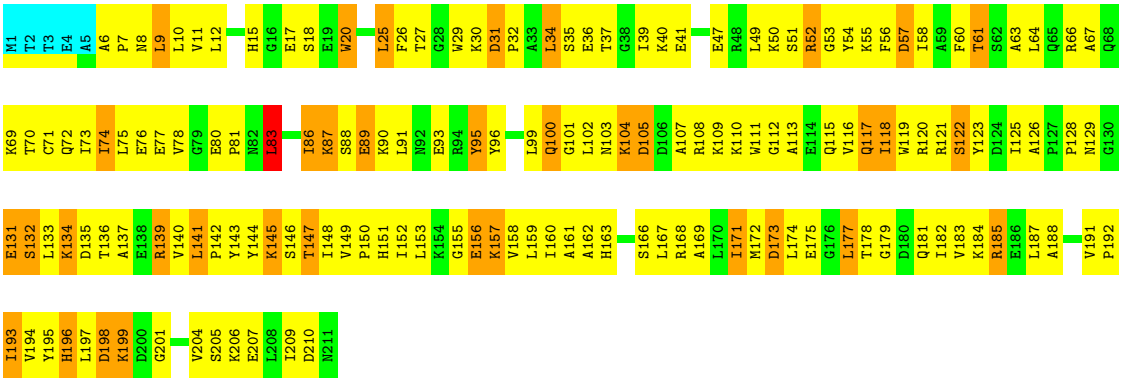




4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

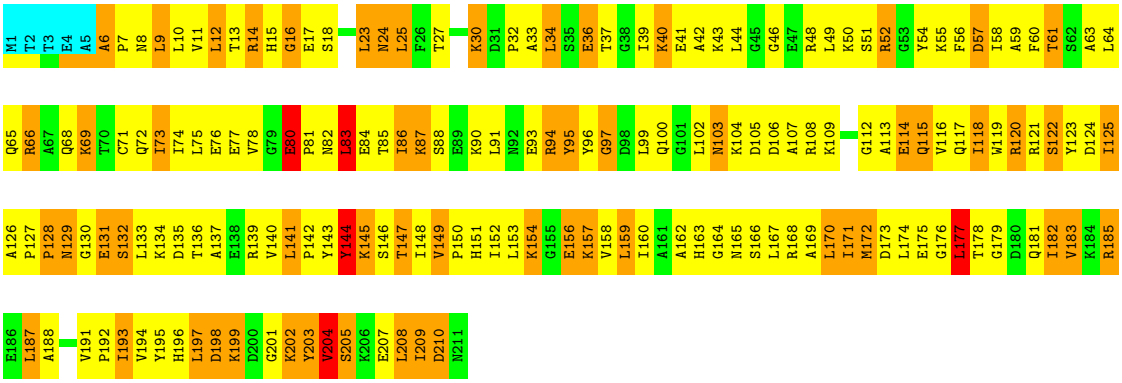
Chain A: 23% 57% 17%



4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

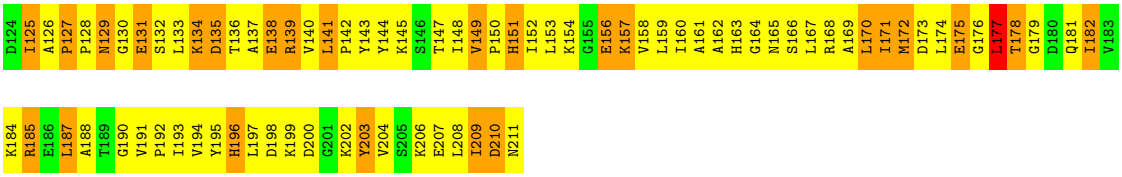
Chain A: 16% 51% 28%



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

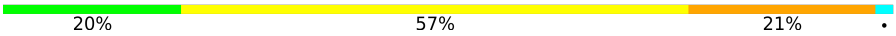
Chain A: 12% 55% 29%

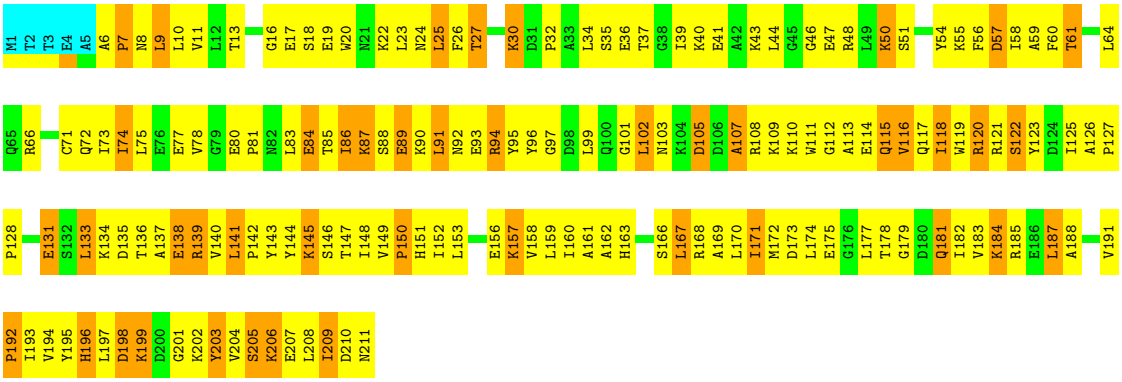


4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

Chain A:

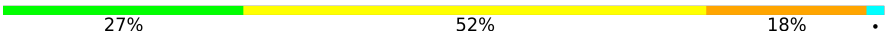


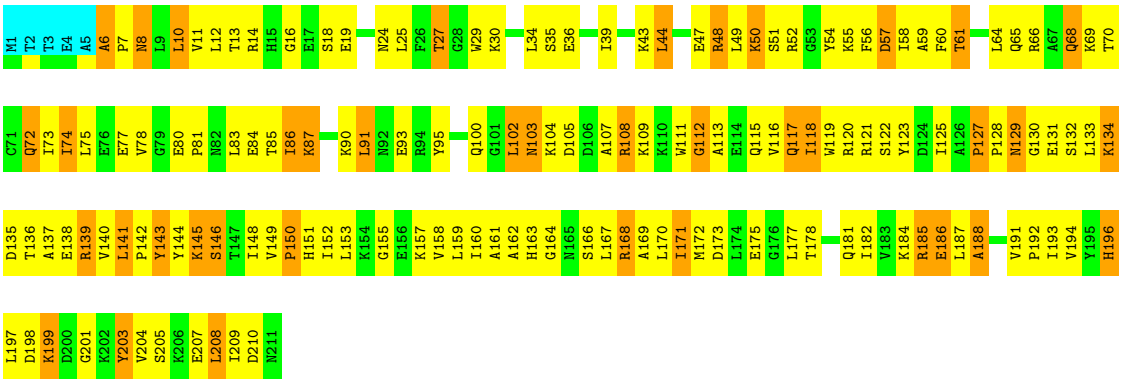


4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

Chain A:

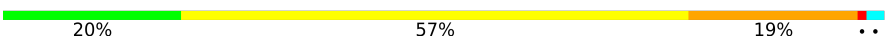


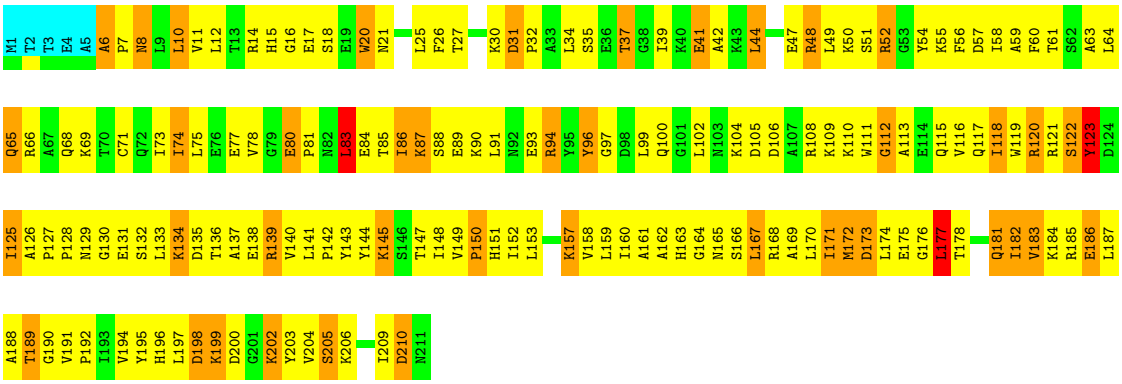


4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

Chain A:

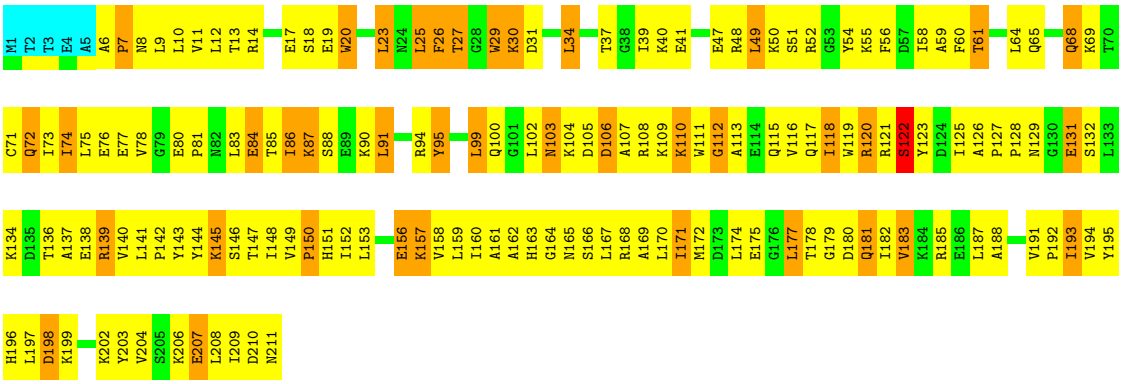




4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: PHOSPHOGLYCERATE MUTASE

Chain A: 23% 56% 18%



5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

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

Of the 55 calculated structures, 21 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy.*

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	refinement	3.851

No chemical shift data was provided.

6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts (i)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1640	1670	1666	223±62
All	All	34440	35070	34986	4688

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 68.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:118:ILE:HD11	1:A:125:ILE:HD13	1.11	1.22	3	9
1:A:148:ILE:HG23	1:A:151:HIS:CE1	1.04	1.87	17	10
1:A:11:VAL:HG22	1:A:194:VAL:HG22	1.04	1.29	4	12
1:A:56:PHE:CZ	1:A:159:LEU:HD12	0.97	1.94	4	9
1:A:11:VAL:CG2	1:A:194:VAL:HG13	0.95	1.90	12	7
1:A:118:ILE:HD11	1:A:125:ILE:CD1	0.95	1.91	12	7
1:A:99:LEU:HD21	1:A:119:TRP:CZ2	0.94	1.97	11	1
1:A:20:TRP:CE3	1:A:27:THR:HG23	0.92	1.97	21	1
1:A:171:ILE:HG21	1:A:185:ARG:CD	0.91	1.95	20	5
1:A:61:THR:HG23	1:A:161:ALA:HB3	0.91	1.40	1	4
1:A:137:ALA:HB2	1:A:169:ALA:HB1	0.91	1.43	4	13
1:A:56:PHE:CZ	1:A:159:LEU:HD13	0.90	2.01	19	5
1:A:136:THR:O	1:A:140:VAL:HG12	0.90	1.66	18	3
1:A:26:PHE:CE2	1:A:99:LEU:HD23	0.90	2.02	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:9:LEU:HD12	1:A:54:TYR:OH	0.89	1.67	17	1
1:A:145:LYS:O	1:A:149:VAL:HG22	0.88	1.68	3	3
1:A:12:LEU:HD22	1:A:167:LEU:HD23	0.88	1.40	4	2
1:A:74:ILE:O	1:A:78:VAL:HG13	0.88	1.69	16	3
1:A:11:VAL:C	1:A:12:LEU:HD23	0.88	1.88	17	11
1:A:12:LEU:HD12	1:A:167:LEU:HD23	0.88	1.45	11	1
1:A:20:TRP:CZ3	1:A:27:THR:HG23	0.88	2.04	17	2
1:A:196:HIS:C	1:A:204:VAL:HG12	0.87	1.88	12	3
1:A:141:LEU:HD12	1:A:173:ASP:OD2	0.87	1.69	12	1
1:A:39:ILE:HG23	1:A:73:ILE:HD13	0.87	1.46	12	3
1:A:197:LEU:HD23	1:A:201:GLY:C	0.86	1.89	12	2
1:A:58:ILE:HG22	1:A:158:VAL:HG22	0.86	1.45	1	4
1:A:83:LEU:HD13	1:A:84:GLU:N	0.86	1.85	7	2
1:A:58:ILE:HG22	1:A:158:VAL:HG13	0.86	1.44	8	14
1:A:56:PHE:CE2	1:A:159:LEU:HD12	0.86	2.05	11	12
1:A:90:LYS:O	1:A:140:VAL:HG22	0.86	1.69	16	16
1:A:12:LEU:HD22	1:A:167:LEU:CD2	0.86	1.98	4	2
1:A:11:VAL:HG22	1:A:194:VAL:HG13	0.86	1.48	12	5
1:A:74:ILE:O	1:A:78:VAL:HG22	0.85	1.71	10	3
1:A:112:GLY:O	1:A:116:VAL:HG22	0.85	1.70	19	7
1:A:11:VAL:CG2	1:A:194:VAL:HG12	0.85	2.02	8	1
1:A:42:ALA:O	1:A:74:ILE:HG22	0.85	1.71	16	2
1:A:178:THR:O	1:A:182:ILE:HG22	0.85	1.72	19	8
1:A:108:ARG:HA	1:A:116:VAL:HG21	0.84	1.49	11	9
1:A:61:THR:HG22	1:A:161:ALA:HB3	0.84	1.49	2	13
1:A:74:ILE:O	1:A:78:VAL:HG23	0.84	1.72	21	8
1:A:90:LYS:O	1:A:140:VAL:HG12	0.84	1.72	10	2
1:A:178:THR:HG22	1:A:181:GLN:CB	0.84	2.02	1	7
1:A:151:HIS:NE2	1:A:158:VAL:HG21	0.84	1.87	15	11
1:A:6:ALA:HB3	1:A:7:PRO:HD3	0.84	1.47	12	15
1:A:60:PHE:CE2	1:A:148:ILE:HD11	0.83	2.08	17	9
1:A:60:PHE:CE2	1:A:148:ILE:HD12	0.83	2.07	18	1
1:A:163:HIS:O	1:A:167:LEU:HD12	0.83	1.72	9	13
1:A:185:ARG:CZ	1:A:187:LEU:HD11	0.83	2.03	7	1
1:A:153:LEU:HD13	1:A:199:LYS:O	0.83	1.74	6	4
1:A:14:ARG:HD3	1:A:187:LEU:HD13	0.83	1.50	12	1
1:A:125:ILE:HD13	1:A:126:ALA:N	0.83	1.88	1	2
1:A:102:LEU:HD12	1:A:103:ASN:N	0.83	1.88	18	1
1:A:137:ALA:HB1	1:A:173:ASP:OD2	0.82	1.73	3	2
1:A:193:ILE:HD13	1:A:194:VAL:N	0.82	1.90	16	4
1:A:99:LEU:HD13	1:A:102:LEU:HD12	0.82	1.52	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:163:HIS:C	1:A:167:LEU:HD12	0.82	1.95	11	15
1:A:11:VAL:HG22	1:A:194:VAL:CG2	0.82	2.03	4	1
1:A:185:ARG:NH2	1:A:187:LEU:HD21	0.82	1.89	11	2
1:A:196:HIS:O	1:A:204:VAL:HG12	0.81	1.75	11	3
1:A:60:PHE:CE2	1:A:158:VAL:HG11	0.81	2.09	6	3
1:A:141:LEU:HD21	1:A:173:ASP:CG	0.81	1.96	18	8
1:A:141:LEU:HD21	1:A:173:ASP:OD1	0.81	1.74	6	4
1:A:83:LEU:HD13	1:A:83:LEU:O	0.81	1.75	13	2
1:A:118:ILE:HD13	1:A:118:ILE:O	0.81	1.76	15	16
1:A:60:PHE:CE1	1:A:86:ILE:HG21	0.81	2.11	16	3
1:A:137:ALA:CA	1:A:169:ALA:HB1	0.81	2.06	17	14
1:A:91:LEU:HD11	1:A:143:TYR:CZ	0.81	2.11	4	2
1:A:58:ILE:CG2	1:A:158:VAL:HG13	0.80	2.05	2	15
1:A:56:PHE:CE2	1:A:159:LEU:HD22	0.80	2.10	8	2
1:A:64:LEU:HD12	1:A:163:HIS:CE1	0.80	2.11	15	16
1:A:20:TRP:CH2	1:A:27:THR:HG23	0.80	2.11	17	1
1:A:61:THR:HG21	1:A:71:CYS:HB3	0.80	1.51	3	2
1:A:91:LEU:HD23	1:A:162:ALA:HB2	0.80	1.53	8	3
1:A:102:LEU:HG	1:A:107:ALA:HB2	0.80	1.51	12	2
1:A:122:SER:OG	1:A:125:ILE:HG22	0.80	1.77	1	1
1:A:193:ILE:HD11	1:A:207:GLU:CB	0.80	2.07	4	7
1:A:14:ARG:CD	1:A:187:LEU:HD13	0.80	2.06	12	1
1:A:167:LEU:HD12	1:A:187:LEU:HD12	0.80	1.51	14	1
1:A:11:VAL:HG21	1:A:56:PHE:CZ	0.80	2.12	10	5
1:A:58:ILE:HG23	1:A:158:VAL:HG13	0.79	1.52	1	4
1:A:143:TYR:CE1	1:A:148:ILE:HD11	0.79	2.11	3	3
1:A:9:LEU:HD11	1:A:196:HIS:CE1	0.79	2.13	4	4
1:A:188:ALA:O	1:A:191:VAL:HG22	0.79	1.77	16	1
1:A:74:ILE:HD12	1:A:75:LEU:N	0.79	1.93	12	2
1:A:186:GLU:C	1:A:187:LEU:HD13	0.79	1.98	7	1
1:A:122:SER:CB	1:A:125:ILE:HG22	0.79	2.08	1	2
1:A:196:HIS:O	1:A:204:VAL:HG22	0.79	1.77	17	10
1:A:10:LEU:HD11	1:A:160:ILE:HD11	0.79	1.53	11	2
1:A:114:GLU:O	1:A:118:ILE:HG22	0.79	1.78	12	1
1:A:188:ALA:HB3	1:A:191:VAL:CG2	0.78	2.08	3	18
1:A:159:LEU:HD23	1:A:160:ILE:N	0.78	1.92	3	8
1:A:99:LEU:HD22	1:A:111:TRP:CH2	0.78	2.12	3	3
1:A:6:ALA:HB1	1:A:7:PRO:HD2	0.78	1.56	5	6
1:A:83:LEU:HD13	1:A:83:LEU:C	0.78	1.99	17	5
1:A:137:ALA:CB	1:A:169:ALA:HB1	0.78	2.08	4	14
1:A:34:LEU:HD23	1:A:39:ILE:CD1	0.78	2.09	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:LEU:O	1:A:162:ALA:HB1	0.78	1.79	3	15
1:A:143:TYR:O	1:A:147:THR:HG22	0.78	1.77	4	3
1:A:49:LEU:HD13	1:A:192:PRO:HG2	0.78	1.53	17	2
1:A:136:THR:O	1:A:140:VAL:HG23	0.78	1.78	1	16
1:A:178:THR:HG22	1:A:181:GLN:HB3	0.77	1.54	1	4
1:A:149:VAL:O	1:A:153:LEU:HD23	0.77	1.79	9	2
1:A:85:THR:HG22	1:A:87:LYS:CE	0.77	2.08	19	4
1:A:43:LYS:NZ	1:A:73:ILE:HG23	0.77	1.94	7	1
1:A:75:LEU:HD11	1:A:85:THR:HG21	0.77	1.54	14	1
1:A:143:TYR:CZ	1:A:148:ILE:HD11	0.77	2.15	3	2
1:A:197:LEU:HD23	1:A:202:LYS:C	0.77	2.00	20	2
1:A:59:ALA:HB3	1:A:85:THR:HA	0.77	1.57	19	19
1:A:60:PHE:CD2	1:A:86:ILE:HD11	0.76	2.14	1	4
1:A:174:LEU:HG	1:A:197:LEU:HD21	0.76	1.58	21	1
1:A:61:THR:HG21	1:A:71:CYS:HB2	0.76	1.55	10	8
1:A:187:LEU:HD22	1:A:193:ILE:HG13	0.76	1.58	11	1
1:A:85:THR:HG22	1:A:87:LYS:HE3	0.76	1.57	12	2
1:A:43:LYS:NZ	1:A:73:ILE:HG22	0.75	1.95	16	1
1:A:118:ILE:CD1	1:A:125:ILE:HG21	0.75	2.11	1	3
1:A:193:ILE:HD12	1:A:207:GLU:HB2	0.75	1.57	21	3
1:A:25:LEU:HD12	1:A:25:LEU:N	0.75	1.97	17	1
1:A:58:ILE:HB	1:A:158:VAL:HG22	0.75	1.59	12	13
1:A:143:TYR:CE1	1:A:147:THR:HG21	0.75	2.17	9	6
1:A:80:GLU:O	1:A:83:LEU:HD22	0.75	1.82	12	6
1:A:131:GLU:OE2	1:A:136:THR:HG22	0.75	1.80	16	2
1:A:144:TYR:CZ	1:A:174:LEU:HD21	0.74	2.17	15	11
1:A:193:ILE:HD12	1:A:207:GLU:HG2	0.74	1.57	1	1
1:A:172:MET:CE	1:A:182:ILE:HG21	0.74	2.11	10	1
1:A:177:LEU:HD22	1:A:178:THR:N	0.74	1.96	1	3
1:A:10:LEU:HD21	1:A:160:ILE:HD12	0.74	1.58	4	1
1:A:34:LEU:HD23	1:A:39:ILE:HD13	0.74	1.59	4	8
1:A:175:GLU:CD	1:A:177:LEU:HD22	0.74	2.02	7	1
1:A:6:ALA:HB3	1:A:7:PRO:CD	0.74	2.12	16	14
1:A:13:THR:CG2	1:A:159:LEU:HD21	0.74	2.13	10	8
1:A:99:LEU:HD22	1:A:127:PRO:CG	0.74	2.12	6	1
1:A:75:LEU:HD11	1:A:85:THR:OG1	0.74	1.83	5	2
1:A:99:LEU:HD21	1:A:119:TRP:CH2	0.74	2.18	11	1
1:A:159:LEU:HD12	1:A:160:ILE:N	0.74	1.97	12	2
1:A:111:TRP:CD1	1:A:116:VAL:HG12	0.73	2.17	18	1
1:A:102:LEU:HD12	1:A:107:ALA:HB2	0.73	1.59	16	3
1:A:144:TYR:CZ	1:A:174:LEU:HD11	0.73	2.18	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:144:TYR:CE2	1:A:174:LEU:HD21	0.73	2.19	17	1
1:A:10:LEU:HD21	1:A:160:ILE:CD1	0.73	2.13	4	4
1:A:88:SER:HB3	1:A:91:LEU:HD12	0.73	1.59	18	12
1:A:193:ILE:HD13	1:A:208:LEU:O	0.73	1.83	1	2
1:A:61:THR:HG22	1:A:67:ALA:HB1	0.73	1.60	5	2
1:A:132:SER:O	1:A:136:THR:HG23	0.73	1.84	3	6
1:A:151:HIS:CD2	1:A:158:VAL:HG21	0.73	2.18	7	2
1:A:102:LEU:CD2	1:A:107:ALA:HB2	0.72	2.14	14	2
1:A:102:LEU:HD13	1:A:103:ASN:N	0.72	1.99	16	2
1:A:12:LEU:HD23	1:A:12:LEU:N	0.72	1.99	16	10
1:A:88:SER:CB	1:A:91:LEU:HD12	0.72	2.14	7	2
1:A:188:ALA:HB3	1:A:191:VAL:HG22	0.72	1.61	17	12
1:A:67:ALA:HB1	1:A:161:ALA:O	0.72	1.83	12	5
1:A:86:ILE:HD11	1:A:143:TYR:OH	0.72	1.84	21	1
1:A:136:THR:O	1:A:140:VAL:HG13	0.72	1.85	15	2
1:A:113:ALA:O	1:A:118:ILE:HG22	0.72	1.84	18	1
1:A:136:THR:O	1:A:140:VAL:N	0.72	2.22	12	15
1:A:43:LYS:CD	1:A:73:ILE:HG23	0.72	2.14	17	1
1:A:80:GLU:N	1:A:81:PRO:HD3	0.72	2.00	17	20
1:A:60:PHE:CE2	1:A:86:ILE:HD11	0.72	2.20	5	2
1:A:56:PHE:CE2	1:A:159:LEU:HD13	0.72	2.19	8	4
1:A:178:THR:HG22	1:A:181:GLN:HB2	0.72	1.60	8	15
1:A:13:THR:HG23	1:A:161:ALA:HB2	0.72	1.60	7	7
1:A:177:LEU:HD12	1:A:181:GLN:HB3	0.71	1.60	4	4
1:A:58:ILE:HD13	1:A:84:GLU:O	0.71	1.84	11	4
1:A:60:PHE:CZ	1:A:148:ILE:HG23	0.71	2.19	3	3
1:A:185:ARG:NH2	1:A:187:LEU:HD13	0.71	2.01	9	2
1:A:83:LEU:HD23	1:A:84:GLU:N	0.71	2.00	8	3
1:A:60:PHE:CZ	1:A:148:ILE:HD12	0.71	2.20	18	1
1:A:40:LYS:O	1:A:44:LEU:HD13	0.71	1.86	7	2
1:A:136:THR:HG21	1:A:165:ASN:ND2	0.71	2.01	1	4
1:A:20:TRP:CD2	1:A:27:THR:HG23	0.71	2.21	21	1
1:A:11:VAL:HG23	1:A:194:VAL:HG13	0.70	1.61	13	5
1:A:75:LEU:HD11	1:A:85:THR:CG2	0.70	2.15	14	3
1:A:8:ASN:OD1	1:A:197:LEU:HD21	0.70	1.87	18	1
1:A:187:LEU:HD13	1:A:187:LEU:N	0.70	2.01	16	3
1:A:174:LEU:HD21	1:A:197:LEU:HD11	0.70	1.61	3	2
1:A:35:SER:O	1:A:39:ILE:HD12	0.70	1.85	13	2
1:A:12:LEU:CD1	1:A:167:LEU:HD23	0.70	2.16	11	2
1:A:69:LYS:CD	1:A:73:ILE:HD11	0.70	2.17	16	1
1:A:14:ARG:HB2	1:A:187:LEU:HD11	0.70	1.62	21	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:58:ILE:CG2	1:A:158:VAL:HG22	0.70	2.16	7	4
1:A:10:LEU:CD2	1:A:160:ILE:HD11	0.70	2.17	21	6
1:A:56:PHE:CE1	1:A:159:LEU:HB2	0.70	2.21	17	9
1:A:75:LEU:HD21	1:A:83:LEU:HD12	0.70	1.63	6	1
1:A:74:ILE:HD13	1:A:78:VAL:HG23	0.70	1.63	8	8
1:A:56:PHE:CE1	1:A:159:LEU:CB	0.70	2.75	12	7
1:A:149:VAL:N	1:A:150:PRO:CD	0.70	2.55	12	21
1:A:14:ARG:HD3	1:A:189:THR:HG22	0.70	1.61	7	5
1:A:60:PHE:CZ	1:A:148:ILE:CG1	0.70	2.75	17	3
1:A:85:THR:HG22	1:A:87:LYS:HZ1	0.70	1.44	16	2
1:A:58:ILE:HD12	1:A:60:PHE:CE1	0.70	2.22	7	2
1:A:56:PHE:CE2	1:A:159:LEU:HB2	0.69	2.21	16	9
1:A:185:ARG:NH2	1:A:187:LEU:HD11	0.69	2.01	7	1
1:A:123:TYR:CD2	1:A:133:LEU:HD23	0.69	2.22	19	1
1:A:60:PHE:CE1	1:A:86:ILE:HD12	0.69	2.22	2	2
1:A:80:GLU:N	1:A:81:PRO:CD	0.69	2.55	16	10
1:A:133:LEU:HD11	1:A:168:ARG:HB3	0.69	1.65	2	3
1:A:99:LEU:HD11	1:A:111:TRP:CH2	0.69	2.22	4	7
1:A:157:LYS:HZ1	1:A:159:LEU:N	0.69	1.85	8	2
1:A:54:TYR:CD1	1:A:56:PHE:CE1	0.69	2.80	16	5
1:A:144:TYR:OH	1:A:174:LEU:HD11	0.69	1.86	9	2
1:A:56:PHE:CD1	1:A:159:LEU:HB2	0.69	2.22	17	7
1:A:99:LEU:HA	1:A:102:LEU:HD23	0.69	1.62	10	2
1:A:20:TRP:CH2	1:A:32:PRO:HG2	0.69	2.23	17	1
1:A:174:LEU:HD22	1:A:197:LEU:HD21	0.69	1.62	10	2
1:A:167:LEU:HD22	1:A:187:LEU:CD1	0.68	2.18	11	1
1:A:108:ARG:HA	1:A:116:VAL:HG11	0.68	1.63	4	5
1:A:99:LEU:HD11	1:A:127:PRO:HB3	0.68	1.63	21	3
1:A:27:THR:HG23	1:A:30:LYS:CE	0.68	2.18	6	2
1:A:115:GLN:HG3	1:A:116:VAL:N	0.68	2.03	12	1
1:A:57:ASP:C	1:A:83:LEU:HD23	0.68	2.08	13	1
1:A:71:CYS:SG	1:A:85:THR:HG23	0.68	2.29	2	4
1:A:177:LEU:HD23	1:A:182:ILE:HA	0.68	1.66	18	2
1:A:91:LEU:HD22	1:A:162:ALA:HB2	0.68	1.66	20	5
1:A:144:TYR:CE2	1:A:174:LEU:HD11	0.68	2.23	20	2
1:A:153:LEU:HD21	1:A:199:LYS:HB2	0.68	1.66	2	2
1:A:192:PRO:O	1:A:209:ILE:HD13	0.68	1.89	13	5
1:A:194:VAL:HG12	1:A:208:LEU:O	0.68	1.88	3	2
1:A:193:ILE:HD11	1:A:207:GLU:HB2	0.68	1.65	12	5
1:A:88:SER:OG	1:A:91:LEU:HD12	0.68	1.88	7	1
1:A:185:ARG:NH1	1:A:187:LEU:HD12	0.68	2.03	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:167:LEU:HD22	1:A:187:LEU:HD11	0.68	1.66	11	1
1:A:141:LEU:N	1:A:142:PRO:CD	0.68	2.57	16	19
1:A:27:THR:HG22	1:A:30:LYS:HE2	0.67	1.65	18	3
1:A:171:ILE:HD13	1:A:175:GLU:HB2	0.67	1.66	11	3
1:A:60:PHE:CD2	1:A:148:ILE:HD11	0.67	2.24	16	8
1:A:58:ILE:HG21	1:A:60:PHE:CZ	0.67	2.24	3	3
1:A:49:LEU:HD12	1:A:192:PRO:CG	0.67	2.19	5	1
1:A:20:TRP:CH2	1:A:27:THR:CG2	0.67	2.77	17	1
1:A:99:LEU:HD22	1:A:127:PRO:HG2	0.67	1.66	6	1
1:A:207:GLU:O	1:A:208:LEU:HD22	0.67	1.90	8	1
1:A:187:LEU:N	1:A:187:LEU:HD13	0.67	2.05	13	3
1:A:153:LEU:HD22	1:A:199:LYS:O	0.67	1.90	9	3
1:A:209:ILE:HG23	1:A:210:ASP:N	0.67	2.05	1	5
1:A:60:PHE:CZ	1:A:148:ILE:HD11	0.67	2.25	17	3
1:A:194:VAL:HG13	1:A:207:GLU:HB3	0.67	1.65	3	1
1:A:11:VAL:CG2	1:A:194:VAL:HG22	0.67	2.14	4	2
1:A:60:PHE:CE2	1:A:158:VAL:HG21	0.67	2.24	19	2
1:A:145:LYS:O	1:A:149:VAL:HG13	0.67	1.89	9	1
1:A:141:LEU:HD23	1:A:142:PRO:N	0.66	2.06	17	2
1:A:43:LYS:HD3	1:A:73:ILE:HG23	0.66	1.67	17	1
1:A:99:LEU:HD12	1:A:127:PRO:HB3	0.66	1.66	7	1
1:A:13:THR:HG21	1:A:159:LEU:HD21	0.66	1.66	10	4
1:A:185:ARG:NH2	1:A:187:LEU:HD23	0.66	2.05	2	5
1:A:197:LEU:HD13	1:A:202:LYS:C	0.66	2.11	9	2
1:A:60:PHE:CE2	1:A:148:ILE:HG23	0.66	2.25	18	2
1:A:185:ARG:CZ	1:A:187:LEU:HD21	0.66	2.20	11	2
1:A:171:ILE:HG21	1:A:185:ARG:HD3	0.66	1.66	20	2
1:A:145:LYS:O	1:A:149:VAL:HG12	0.66	1.91	12	13
1:A:74:ILE:HD12	1:A:74:ILE:C	0.66	2.10	12	1
1:A:9:LEU:HD13	1:A:10:LEU:H	0.66	1.49	17	1
1:A:27:THR:HG23	1:A:30:LYS:HE2	0.66	1.66	4	4
1:A:149:VAL:O	1:A:153:LEU:HD13	0.66	1.91	4	1
1:A:144:TYR:CG	1:A:145:LYS:N	0.66	2.62	12	2
1:A:99:LEU:HD21	1:A:111:TRP:CZ3	0.66	2.26	14	3
1:A:10:LEU:CD2	1:A:12:LEU:HD21	0.66	2.21	11	1
1:A:9:LEU:HD11	1:A:54:TYR:OH	0.66	1.91	12	1
1:A:198:ASP:HB3	1:A:204:VAL:HG11	0.65	1.66	20	12
1:A:20:TRP:CZ3	1:A:27:THR:CG2	0.65	2.79	17	1
1:A:147:THR:O	1:A:148:ILE:HD13	0.65	1.90	18	1
1:A:85:THR:HG22	1:A:87:LYS:NZ	0.65	2.05	16	8
1:A:111:TRP:HB3	1:A:115:GLN:CG	0.65	2.21	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:141:LEU:HD23	1:A:141:LEU:C	0.65	2.12	17	2
1:A:6:ALA:HB1	1:A:7:PRO:CD	0.65	2.21	5	6
1:A:91:LEU:HD12	1:A:162:ALA:HB2	0.65	1.69	3	1
1:A:75:LEU:CD1	1:A:85:THR:HG21	0.65	2.21	14	4
1:A:86:ILE:CD1	1:A:143:TYR:CE1	0.65	2.79	12	1
1:A:119:TRP:CE3	1:A:127:PRO:HA	0.65	2.27	12	8
1:A:99:LEU:HD13	1:A:128:PRO:HD2	0.65	1.67	16	2
1:A:197:LEU:HD23	1:A:201:GLY:O	0.65	1.90	12	1
1:A:49:LEU:HD13	1:A:192:PRO:CG	0.65	2.21	17	1
1:A:207:GLU:O	1:A:208:LEU:HD12	0.65	1.91	10	2
1:A:188:ALA:HB3	1:A:191:VAL:HG21	0.64	1.69	21	9
1:A:12:LEU:HD12	1:A:195:TYR:CE1	0.64	2.27	20	2
1:A:74:ILE:O	1:A:74:ILE:HD13	0.64	1.91	1	5
1:A:86:ILE:C	1:A:86:ILE:HD12	0.64	2.12	1	3
1:A:56:PHE:O	1:A:83:LEU:HD23	0.64	1.91	7	2
1:A:144:TYR:CZ	1:A:174:LEU:CD2	0.64	2.81	17	2
1:A:61:THR:HG21	1:A:71:CYS:CB	0.64	2.21	3	2
1:A:167:LEU:N	1:A:167:LEU:HD23	0.64	2.07	5	5
1:A:118:ILE:CD1	1:A:125:ILE:HD13	0.64	2.14	12	4
1:A:133:LEU:HD22	1:A:168:ARG:NH2	0.64	2.07	15	1
1:A:12:LEU:HD23	1:A:160:ILE:HB	0.64	1.69	4	2
1:A:60:PHE:CD2	1:A:158:VAL:HG11	0.64	2.27	21	3
1:A:9:LEU:HD12	1:A:54:TYR:HH	0.64	1.50	17	1
1:A:20:TRP:CZ3	1:A:32:PRO:HG3	0.64	2.28	17	1
1:A:112:GLY:O	1:A:116:VAL:HG13	0.64	1.92	21	1
1:A:182:ILE:HD12	1:A:185:ARG:HG2	0.64	1.70	12	1
1:A:148:ILE:HG23	1:A:151:HIS:NE2	0.64	2.07	17	2
1:A:149:VAL:O	1:A:153:LEU:HD22	0.63	1.93	4	1
1:A:185:ARG:HH11	1:A:187:LEU:HD12	0.63	1.53	8	1
1:A:13:THR:HG23	1:A:13:THR:O	0.63	1.94	16	9
1:A:58:ILE:CB	1:A:158:VAL:HG13	0.63	2.24	21	8
1:A:9:LEU:HD13	1:A:10:LEU:N	0.63	2.09	17	1
1:A:141:LEU:HD12	1:A:173:ASP:CG	0.63	2.13	12	2
1:A:185:ARG:HH22	1:A:187:LEU:HD21	0.63	1.53	20	1
1:A:74:ILE:HD13	1:A:74:ILE:O	0.63	1.93	15	2
1:A:140:VAL:HG12	1:A:170:LEU:HD13	0.63	1.70	4	6
1:A:11:VAL:HG21	1:A:54:TYR:CE2	0.63	2.29	7	2
1:A:13:THR:HG22	1:A:159:LEU:HD21	0.62	1.69	2	5
1:A:27:THR:HG22	1:A:28:GLY:N	0.62	2.09	17	4
1:A:14:ARG:CD	1:A:189:THR:HG22	0.62	2.23	6	1
1:A:115:GLN:CG	1:A:116:VAL:N	0.62	2.63	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:LEU:HD12	1:A:163:HIS:HE1	0.62	1.54	10	10
1:A:144:TYR:CD2	1:A:148:ILE:HD12	0.62	2.29	9	1
1:A:170:LEU:HD23	1:A:170:LEU:N	0.62	2.10	8	3
1:A:99:LEU:N	1:A:99:LEU:HD23	0.62	2.08	21	2
1:A:123:TYR:HD2	1:A:133:LEU:HD23	0.62	1.55	19	1
1:A:99:LEU:HG	1:A:102:LEU:HD12	0.62	1.70	4	2
1:A:49:LEU:HD23	1:A:54:TYR:HB3	0.62	1.70	8	1
1:A:70:THR:O	1:A:74:ILE:HG22	0.62	1.94	13	1
1:A:43:LYS:HZ1	1:A:73:ILE:HG22	0.62	1.55	16	1
1:A:9:LEU:HD11	1:A:194:VAL:CG1	0.62	2.25	17	1
1:A:194:VAL:HG23	1:A:208:LEU:O	0.61	1.95	14	3
1:A:174:LEU:CG	1:A:197:LEU:HD21	0.61	2.24	21	2
1:A:74:ILE:HD13	1:A:78:VAL:CG2	0.61	2.26	4	9
1:A:131:GLU:CD	1:A:136:THR:HG23	0.61	2.14	17	1
1:A:191:VAL:O	1:A:191:VAL:HG23	0.61	1.95	4	17
1:A:185:ARG:HH21	1:A:187:LEU:HD13	0.61	1.53	9	1
1:A:10:LEU:CD1	1:A:158:VAL:HG22	0.61	2.26	19	3
1:A:12:LEU:HD22	1:A:160:ILE:HB	0.61	1.70	16	5
1:A:60:PHE:CE2	1:A:86:ILE:HD13	0.61	2.30	8	1
1:A:151:HIS:NE2	1:A:158:VAL:CG2	0.61	2.63	16	5
1:A:168:ARG:CD	1:A:185:ARG:NH1	0.61	2.64	12	1
1:A:193:ILE:HD11	1:A:207:GLU:HA	0.61	1.73	15	1
1:A:174:LEU:HD22	1:A:197:LEU:HD11	0.61	1.72	7	2
1:A:56:PHE:CD2	1:A:157:LYS:NZ	0.61	2.68	16	8
1:A:31:ASP:OD2	1:A:64:LEU:HD23	0.61	1.95	3	2
1:A:208:LEU:HD23	1:A:209:ILE:O	0.61	1.94	17	1
1:A:56:PHE:CD2	1:A:159:LEU:HB2	0.61	2.31	16	10
1:A:60:PHE:CE2	1:A:143:TYR:CD1	0.61	2.89	17	2
1:A:144:TYR:CE2	1:A:174:LEU:CD2	0.61	2.84	17	1
1:A:118:ILE:CD1	1:A:125:ILE:HD12	0.60	2.26	17	2
1:A:122:SER:CB	1:A:125:ILE:HG23	0.60	2.26	17	8
1:A:49:LEU:HD13	1:A:56:PHE:CE1	0.60	2.31	7	3
1:A:102:LEU:CG	1:A:107:ALA:HB2	0.60	2.26	12	2
1:A:20:TRP:CZ3	1:A:32:PRO:CG	0.60	2.84	17	1
1:A:151:HIS:CD2	1:A:156:GLU:OE1	0.60	2.54	17	1
1:A:59:ALA:O	1:A:86:ILE:N	0.60	2.34	16	5
1:A:102:LEU:HD13	1:A:102:LEU:C	0.60	2.16	16	1
1:A:13:THR:HG22	1:A:159:LEU:HD11	0.60	1.73	19	1
1:A:118:ILE:HD11	1:A:125:ILE:HG13	0.60	1.72	4	1
1:A:137:ALA:O	1:A:141:LEU:HD22	0.60	1.95	16	3
1:A:137:ALA:HA	1:A:169:ALA:HB1	0.60	1.71	18	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:37:THR:HA	1:A:40:LYS:CG	0.60	2.27	16	2
1:A:187:LEU:HD21	1:A:193:ILE:HG21	0.60	1.74	18	3
1:A:94:ARG:HB2	1:A:136:THR:HG21	0.60	1.71	21	7
1:A:118:ILE:O	1:A:122:SER:CB	0.60	2.48	16	5
1:A:60:PHE:CZ	1:A:147:THR:HG23	0.60	2.31	4	2
1:A:10:LEU:HD11	1:A:160:ILE:CD1	0.60	2.27	7	1
1:A:151:HIS:CD2	1:A:152:ILE:N	0.60	2.69	16	16
1:A:133:LEU:HD11	1:A:168:ARG:CB	0.60	2.27	2	2
1:A:174:LEU:HD22	1:A:197:LEU:CD2	0.60	2.26	10	2
1:A:187:LEU:HD11	1:A:193:ILE:HG21	0.60	1.73	9	2
1:A:60:PHE:CE2	1:A:148:ILE:HD13	0.60	2.32	6	2
1:A:143:TYR:HE1	1:A:148:ILE:HD11	0.60	1.56	10	1
1:A:185:ARG:HH21	1:A:187:LEU:HD12	0.60	1.57	16	1
1:A:49:LEU:HD21	1:A:56:PHE:CZ	0.60	2.32	19	2
1:A:174:LEU:CD2	1:A:197:LEU:HD11	0.59	2.26	3	2
1:A:174:LEU:CG	1:A:197:LEU:HD11	0.59	2.27	9	1
1:A:171:ILE:HG21	1:A:185:ARG:HD2	0.59	1.73	20	3
1:A:10:LEU:HB2	1:A:197:LEU:HD13	0.59	1.75	15	1
1:A:86:ILE:HD12	1:A:143:TYR:OH	0.59	1.97	17	2
1:A:177:LEU:HD12	1:A:181:GLN:CB	0.59	2.27	19	4
1:A:88:SER:HB3	1:A:91:LEU:HD13	0.59	1.74	8	1
1:A:193:ILE:HD12	1:A:195:TYR:CE2	0.59	2.32	14	3
1:A:191:VAL:HB	1:A:209:ILE:HD12	0.59	1.73	13	5
1:A:197:LEU:HD12	1:A:201:GLY:C	0.59	2.17	8	1
1:A:99:LEU:HD11	1:A:111:TRP:HH2	0.59	1.57	14	1
1:A:133:LEU:HD22	1:A:168:ARG:HH21	0.59	1.56	15	1
1:A:49:LEU:HD21	1:A:56:PHE:CE1	0.59	2.33	16	3
1:A:126:ALA:HB1	1:A:127:PRO:CD	0.59	2.28	11	5
1:A:91:LEU:HD11	1:A:143:TYR:CE2	0.59	2.31	4	1
1:A:110:LYS:O	1:A:111:TRP:CG	0.59	2.56	12	7
1:A:141:LEU:N	1:A:142:PRO:HD2	0.59	2.12	12	2
1:A:46:GLY:HA2	1:A:74:ILE:HD11	0.59	1.74	9	1
1:A:131:GLU:CD	1:A:136:THR:HG22	0.59	2.17	16	2
1:A:144:TYR:CD2	1:A:170:LEU:HD11	0.59	2.33	5	6
1:A:93:GLU:N	1:A:163:HIS:CD2	0.59	2.70	12	16
1:A:160:ILE:HD13	1:A:170:LEU:HD23	0.59	1.73	6	2
1:A:54:TYR:CE1	1:A:157:LYS:CE	0.59	2.85	17	9
1:A:88:SER:HB2	1:A:143:TYR:CD2	0.59	2.32	12	3
1:A:137:ALA:HB2	1:A:169:ALA:CB	0.59	2.25	4	8
1:A:54:TYR:CE1	1:A:157:LYS:HE3	0.59	2.33	17	9
1:A:197:LEU:CA	1:A:204:VAL:HG22	0.59	2.28	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:LEU:HD11	1:A:127:PRO:CB	0.59	2.27	21	2
1:A:118:ILE:HD11	1:A:125:ILE:HG21	0.58	1.75	1	4
1:A:43:LYS:CD	1:A:73:ILE:CG2	0.58	2.81	17	2
1:A:151:HIS:CG	1:A:156:GLU:OE1	0.58	2.56	17	1
1:A:86:ILE:HD12	1:A:86:ILE:O	0.58	1.98	7	3
1:A:95:TYR:CE1	1:A:100:GLN:OE1	0.58	2.56	16	5
1:A:11:VAL:CG2	1:A:54:TYR:CZ	0.58	2.86	12	15
1:A:60:PHE:CZ	1:A:86:ILE:HD12	0.58	2.32	13	2
1:A:50:LYS:CB	1:A:78:VAL:HG22	0.58	2.27	3	1
1:A:148:ILE:O	1:A:152:ILE:HG23	0.58	1.97	15	6
1:A:91:LEU:HD12	1:A:140:VAL:HG13	0.58	1.73	6	1
1:A:11:VAL:HG11	1:A:49:LEU:HD11	0.58	1.75	11	2
1:A:69:LYS:HD2	1:A:73:ILE:HD11	0.58	1.76	16	1
1:A:148:ILE:CG2	1:A:151:HIS:CE1	0.58	2.78	17	1
1:A:58:ILE:HB	1:A:158:VAL:HG13	0.58	1.75	6	6
1:A:91:LEU:HD21	1:A:143:TYR:OH	0.58	1.99	10	1
1:A:60:PHE:CZ	1:A:148:ILE:HG13	0.58	2.34	12	2
1:A:91:LEU:HD23	1:A:143:TYR:CD2	0.58	2.33	19	1
1:A:26:PHE:CD1	1:A:96:TYR:CE2	0.58	2.92	3	2
1:A:75:LEU:HD13	1:A:85:THR:HG21	0.58	1.74	3	1
1:A:145:LYS:HA	1:A:149:VAL:HG13	0.58	1.76	9	2
1:A:61:THR:CG2	1:A:71:CYS:CB	0.58	2.81	12	2
1:A:121:ARG:O	1:A:183:VAL:HG12	0.58	1.99	21	2
1:A:56:PHE:CD1	1:A:157:LYS:NZ	0.58	2.72	19	4
1:A:118:ILE:CD1	1:A:125:ILE:CD1	0.58	2.82	17	3
1:A:144:TYR:O	1:A:148:ILE:N	0.58	2.37	17	21
1:A:153:LEU:HD21	1:A:199:LYS:O	0.58	1.98	7	5
1:A:188:ALA:CB	1:A:191:VAL:HG22	0.58	2.28	12	2
1:A:141:LEU:HD21	1:A:173:ASP:OD2	0.58	1.98	19	3
1:A:193:ILE:HD13	1:A:208:LEU:C	0.58	2.19	7	2
1:A:10:LEU:HD22	1:A:197:LEU:HD11	0.58	1.74	17	1
1:A:111:TRP:CG	1:A:115:GLN:OE1	0.58	2.57	12	1
1:A:80:GLU:O	1:A:83:LEU:HD12	0.58	1.97	13	2
1:A:111:TRP:CD1	1:A:116:VAL:CG1	0.58	2.87	18	1
1:A:148:ILE:HA	1:A:151:HIS:CE1	0.58	2.33	12	10
1:A:136:THR:O	1:A:140:VAL:CG2	0.58	2.52	17	14
1:A:140:VAL:HG11	1:A:170:LEU:HD21	0.58	1.75	8	2
1:A:15:HIS:HA	1:A:70:THR:HG21	0.57	1.76	13	5
1:A:185:ARG:NH1	1:A:187:LEU:HD21	0.57	2.13	7	1
1:A:13:THR:CG2	1:A:159:LEU:HD11	0.57	2.30	19	2
1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CD2	0.57	2.68	16	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:174:LEU:HG	1:A:197:LEU:HD11	0.57	1.76	9	1
1:A:14:ARG:NE	1:A:167:LEU:HD13	0.57	2.14	12	1
1:A:91:LEU:CD1	1:A:162:ALA:HB2	0.57	2.29	3	2
1:A:151:HIS:CD2	1:A:152:ILE:HG23	0.57	2.35	12	7
1:A:113:ALA:CB	1:A:119:TRP:CD1	0.57	2.88	18	1
1:A:74:ILE:CD1	1:A:75:LEU:N	0.57	2.67	12	1
1:A:32:PRO:CG	1:A:66:ARG:NE	0.57	2.68	16	2
1:A:148:ILE:O	1:A:148:ILE:HG22	0.57	1.99	9	10
1:A:117:GLN:CG	1:A:118:ILE:N	0.57	2.67	17	2
1:A:133:LEU:HD13	1:A:168:ARG:CZ	0.57	2.30	6	2
1:A:162:ALA:C	1:A:163:HIS:CG	0.57	2.78	12	20
1:A:193:ILE:N	1:A:209:ILE:HD11	0.57	2.15	19	3
1:A:59:ALA:HB2	1:A:83:LEU:HD11	0.57	1.76	6	1
1:A:26:PHE:CE1	1:A:96:TYR:CE1	0.57	2.93	13	2
1:A:11:VAL:HG22	1:A:194:VAL:CG1	0.56	2.27	12	1
1:A:118:ILE:HD11	1:A:125:ILE:CG1	0.56	2.30	12	1
1:A:52:ARG:CD	1:A:210:ASP:CB	0.56	2.82	16	1
1:A:112:GLY:C	1:A:116:VAL:HG22	0.56	2.20	19	2
1:A:111:TRP:HB2	1:A:116:VAL:HG13	0.56	1.76	19	1
1:A:133:LEU:HD13	1:A:168:ARG:NH2	0.56	2.14	12	1
1:A:57:ASP:O	1:A:83:LEU:HD23	0.56	2.00	13	1
1:A:99:LEU:HD11	1:A:111:TRP:CZ2	0.56	2.35	18	2
1:A:49:LEU:HD22	1:A:56:PHE:HE1	0.56	1.60	10	3
1:A:115:GLN:O	1:A:119:TRP:CD1	0.56	2.59	16	18
1:A:91:LEU:HD23	1:A:166:SER:OG	0.56	2.01	5	1
1:A:126:ALA:HB1	1:A:127:PRO:HD2	0.56	1.77	7	2
1:A:167:LEU:HD22	1:A:187:LEU:HD22	0.56	1.78	9	1
1:A:64:LEU:N	1:A:64:LEU:HD23	0.56	2.15	17	1
1:A:102:LEU:HD23	1:A:103:ASN:N	0.56	2.15	13	2
1:A:162:ALA:O	1:A:163:HIS:CG	0.56	2.58	12	12
1:A:50:LYS:HB2	1:A:78:VAL:HG22	0.56	1.75	3	1
1:A:125:ILE:HD12	1:A:125:ILE:C	0.56	2.21	4	1
1:A:141:LEU:HD11	1:A:173:ASP:CG	0.56	2.20	6	2
1:A:99:LEU:HD23	1:A:128:PRO:HD2	0.56	1.77	11	1
1:A:58:ILE:HD13	1:A:84:GLU:HB2	0.56	1.78	12	2
1:A:34:LEU:HD23	1:A:39:ILE:HD12	0.56	1.75	17	1
1:A:209:ILE:CG2	1:A:210:ASP:N	0.56	2.69	16	15
1:A:6:ALA:O	1:A:199:LYS:N	0.56	2.39	16	7
1:A:167:LEU:CD1	1:A:187:LEU:HD12	0.56	2.28	14	1
1:A:54:TYR:CE2	1:A:194:VAL:HG11	0.56	2.36	15	2
1:A:175:GLU:OE1	1:A:177:LEU:HD21	0.56	2.00	2	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:THR:HG21	1:A:66:ARG:HH12	0.56	1.59	11	3
1:A:188:ALA:CB	1:A:191:VAL:CG2	0.56	2.83	12	4
1:A:126:ALA:HB2	1:A:131:GLU:O	0.56	2.01	16	1
1:A:56:PHE:CD2	1:A:157:LYS:HE3	0.56	2.36	1	7
1:A:99:LEU:HD22	1:A:111:TRP:CZ3	0.56	2.35	3	3
1:A:185:ARG:CZ	1:A:187:LEU:HD23	0.56	2.30	2	1
1:A:11:VAL:HG23	1:A:54:TYR:OH	0.56	2.01	12	6
1:A:131:GLU:CG	1:A:132:SER:N	0.56	2.69	17	4
1:A:9:LEU:HD23	1:A:194:VAL:CG1	0.56	2.30	15	2
1:A:20:TRP:CH2	1:A:32:PRO:CG	0.56	2.88	17	1
1:A:43:LYS:HZ2	1:A:73:ILE:HG23	0.56	1.61	7	1
1:A:64:LEU:HD13	1:A:66:ARG:HH21	0.56	1.59	12	4
1:A:56:PHE:HA	1:A:157:LYS:CE	0.56	2.31	16	2
1:A:174:LEU:HD13	1:A:197:LEU:HD11	0.56	1.78	11	1
1:A:54:TYR:CE1	1:A:56:PHE:CZ	0.56	2.94	16	3
1:A:137:ALA:O	1:A:141:LEU:CD2	0.56	2.54	16	1
1:A:11:VAL:HG21	1:A:54:TYR:CE1	0.56	2.36	4	10
1:A:74:ILE:HG23	1:A:75:LEU:HD22	0.56	1.77	9	1
1:A:74:ILE:HD13	1:A:78:VAL:HG13	0.56	1.78	15	2
1:A:121:ARG:O	1:A:123:TYR:N	0.55	2.39	16	2
1:A:127:PRO:CB	1:A:128:PRO:HD2	0.55	2.31	16	3
1:A:39:ILE:HD13	1:A:39:ILE:N	0.55	2.15	16	1
1:A:196:HIS:O	1:A:204:VAL:N	0.55	2.39	16	15
1:A:141:LEU:HD13	1:A:173:ASP:CG	0.55	2.22	2	1
1:A:60:PHE:CZ	1:A:86:ILE:HD13	0.55	2.36	4	2
1:A:14:ARG:CZ	1:A:167:LEU:HD13	0.55	2.31	12	1
1:A:148:ILE:O	1:A:152:ILE:CG1	0.55	2.54	12	1
1:A:60:PHE:CZ	1:A:143:TYR:CD1	0.55	2.94	17	2
1:A:83:LEU:HD23	1:A:83:LEU:C	0.55	2.22	21	3
1:A:193:ILE:C	1:A:193:ILE:HD13	0.55	2.22	14	1
1:A:83:LEU:C	1:A:83:LEU:CD1	0.55	2.72	17	1
1:A:60:PHE:HD2	1:A:91:LEU:HD11	0.55	1.60	16	1
1:A:204:VAL:HG13	1:A:204:VAL:O	0.55	2.01	16	1
1:A:11:VAL:CG2	1:A:54:TYR:CE1	0.55	2.90	1	8
1:A:105:ASP:O	1:A:109:LYS:N	0.55	2.39	12	20
1:A:49:LEU:CD1	1:A:74:ILE:HD11	0.55	2.31	6	1
1:A:108:ARG:CA	1:A:116:VAL:HG21	0.55	2.31	14	2
1:A:175:GLU:CG	1:A:177:LEU:HD22	0.55	2.31	7	1
1:A:11:VAL:HG11	1:A:56:PHE:CE1	0.55	2.37	8	1
1:A:118:ILE:CD1	1:A:125:ILE:HD11	0.55	2.31	16	1
1:A:13:THR:CG2	1:A:161:ALA:HB2	0.55	2.32	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:LEU:HD23	1:A:79:GLY:HA3	0.55	1.77	3	1
1:A:122:SER:OG	1:A:125:ILE:CG2	0.55	2.55	12	1
1:A:17:GLU:OE2	1:A:37:THR:HG21	0.55	2.01	14	1
1:A:94:ARG:CB	1:A:165:ASN:ND2	0.55	2.70	16	3
1:A:168:ARG:NH1	1:A:183:VAL:HG12	0.55	2.16	16	1
1:A:157:LYS:HE3	1:A:157:LYS:C	0.55	2.23	2	1
1:A:117:GLN:O	1:A:121:ARG:N	0.55	2.39	3	11
1:A:17:GLU:OE1	1:A:37:THR:HG21	0.55	2.01	6	7
1:A:49:LEU:C	1:A:49:LEU:HD12	0.55	2.22	13	1
1:A:193:ILE:HD11	1:A:207:GLU:CA	0.55	2.32	15	1
1:A:171:ILE:HD13	1:A:175:GLU:HB3	0.55	1.78	20	1
1:A:6:ALA:CB	1:A:7:PRO:CD	0.54	2.82	16	17
1:A:49:LEU:HD22	1:A:56:PHE:CE1	0.54	2.37	1	3
1:A:192:PRO:C	1:A:209:ILE:HD11	0.54	2.22	16	5
1:A:115:GLN:O	1:A:119:TRP:CG	0.54	2.60	16	4
1:A:83:LEU:C	1:A:83:LEU:HD22	0.54	2.22	13	1
1:A:58:ILE:CG1	1:A:156:GLU:OE2	0.54	2.55	16	1
1:A:208:LEU:HD23	1:A:209:ILE:H	0.54	1.62	16	1
1:A:60:PHE:CD2	1:A:143:TYR:CE1	0.54	2.95	4	1
1:A:121:ARG:CB	1:A:183:VAL:HG12	0.54	2.32	11	1
1:A:57:ASP:C	1:A:83:LEU:HD21	0.54	2.23	19	2
1:A:60:PHE:CZ	1:A:86:ILE:HG21	0.54	2.38	10	3
1:A:182:ILE:HD13	1:A:182:ILE:O	0.54	2.02	9	2
1:A:139:ARG:O	1:A:139:ARG:CD	0.54	2.55	12	2
1:A:11:VAL:HG22	1:A:194:VAL:HB	0.54	1.79	19	1
1:A:197:LEU:HD23	1:A:203:TYR:N	0.54	2.17	20	1
1:A:140:VAL:O	1:A:143:TYR:CD2	0.54	2.60	4	2
1:A:49:LEU:HD12	1:A:192:PRO:HB3	0.54	1.79	21	1
1:A:126:ALA:HB1	1:A:130:GLY:O	0.54	2.01	1	1
1:A:60:PHE:CE2	1:A:86:ILE:CD1	0.54	2.91	5	1
1:A:187:LEU:HD11	1:A:193:ILE:HG13	0.54	1.78	5	1
1:A:25:LEU:HD23	1:A:103:ASN:ND2	0.54	2.17	7	2
1:A:185:ARG:O	1:A:186:GLU:O	0.54	2.24	12	1
1:A:141:LEU:N	1:A:141:LEU:HD13	0.54	2.17	16	1
1:A:141:LEU:N	1:A:142:PRO:HD3	0.54	2.17	17	2
1:A:14:ARG:HB2	1:A:187:LEU:HD13	0.54	1.79	20	1
1:A:102:LEU:C	1:A:102:LEU:CD1	0.54	2.76	16	1
1:A:49:LEU:HD13	1:A:192:PRO:HB2	0.54	1.77	19	1
1:A:145:LYS:O	1:A:149:VAL:CG1	0.54	2.56	16	18
1:A:105:ASP:O	1:A:109:LYS:CB	0.54	2.56	12	13
1:A:6:ALA:CB	1:A:7:PRO:HD3	0.54	2.29	12	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:187:LEU:HD13	1:A:188:ALA:O	0.54	2.03	19	1
1:A:58:ILE:HG22	1:A:158:VAL:CG2	0.54	2.27	1	4
1:A:60:PHE:CE2	1:A:148:ILE:CD1	0.54	2.91	1	6
1:A:128:PRO:O	1:A:129:ASN:CB	0.54	2.55	17	9
1:A:143:TYR:CD1	1:A:147:THR:CG2	0.54	2.91	2	6
1:A:193:ILE:HD11	1:A:207:GLU:HB3	0.54	1.79	4	2
1:A:182:ILE:CD1	1:A:182:ILE:O	0.54	2.56	17	2
1:A:102:LEU:HD12	1:A:102:LEU:C	0.54	2.21	18	1
1:A:102:LEU:CD2	1:A:111:TRP:CZ3	0.54	2.91	18	1
1:A:11:VAL:HG23	1:A:54:TYR:CZ	0.54	2.38	12	3
1:A:23:LEU:O	1:A:24:ASN:CB	0.54	2.55	12	6
1:A:24:ASN:C	1:A:25:LEU:HD23	0.54	2.23	9	3
1:A:177:LEU:O	1:A:178:THR:HB	0.54	2.03	11	1
1:A:11:VAL:CG2	1:A:54:TYR:CE2	0.53	2.92	7	2
1:A:116:VAL:O	1:A:120:ARG:CG	0.53	2.56	16	7
1:A:141:LEU:HD11	1:A:173:ASP:CB	0.53	2.33	8	3
1:A:127:PRO:CB	1:A:128:PRO:CD	0.53	2.85	11	2
1:A:56:PHE:CD1	1:A:157:LYS:CE	0.53	2.91	8	2
1:A:136:THR:O	1:A:140:VAL:HG22	0.53	2.03	10	2
1:A:64:LEU:HD13	1:A:66:ARG:NH2	0.53	2.18	14	3
1:A:111:TRP:CD2	1:A:115:GLN:OE1	0.53	2.62	12	1
1:A:60:PHE:CZ	1:A:148:ILE:CD1	0.53	2.90	17	2
1:A:56:PHE:CD2	1:A:157:LYS:CE	0.53	2.91	16	6
1:A:143:TYR:CE1	1:A:147:THR:CG2	0.53	2.91	2	5
1:A:56:PHE:CD2	1:A:159:LEU:HD12	0.53	2.37	11	2
1:A:111:TRP:CH2	1:A:119:TRP:CZ2	0.53	2.96	11	1
1:A:167:LEU:HD12	1:A:187:LEU:CD1	0.53	2.32	14	1
1:A:16:GLY:O	1:A:34:LEU:CD1	0.53	2.57	17	1
1:A:90:LYS:CB	1:A:139:ARG:O	0.53	2.56	17	2
1:A:10:LEU:HD22	1:A:144:TYR:OH	0.53	2.03	15	4
1:A:197:LEU:HD23	1:A:202:LYS:CA	0.53	2.33	2	2
1:A:118:ILE:HD13	1:A:118:ILE:C	0.53	2.23	4	12
1:A:59:ALA:HB2	1:A:83:LEU:CD2	0.53	2.33	11	3
1:A:27:THR:HG21	1:A:66:ARG:NH1	0.53	2.19	19	3
1:A:65:GLN:O	1:A:68:GLN:N	0.53	2.42	12	2
1:A:58:ILE:HB	1:A:158:VAL:HG12	0.53	1.80	19	2
1:A:12:LEU:CD1	1:A:195:TYR:CE1	0.53	2.91	1	2
1:A:12:LEU:O	1:A:193:ILE:N	0.53	2.39	17	11
1:A:26:PHE:CE1	1:A:96:TYR:CZ	0.53	2.97	5	3
1:A:187:LEU:HD13	1:A:187:LEU:H	0.53	1.61	16	3
1:A:56:PHE:CZ	1:A:159:LEU:CD1	0.53	2.92	3	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:158:VAL:HG12	1:A:159:LEU:N	0.53	2.18	12	7
1:A:56:PHE:HB3	1:A:83:LEU:HD13	0.53	1.81	15	1
1:A:49:LEU:HD12	1:A:192:PRO:CB	0.53	2.34	8	3
1:A:185:ARG:HH22	1:A:187:LEU:HD11	0.53	1.64	11	1
1:A:86:ILE:HD13	1:A:143:TYR:CE1	0.53	2.38	12	1
1:A:115:GLN:HG3	1:A:119:TRP:CD1	0.53	2.39	12	1
1:A:16:GLY:O	1:A:17:GLU:C	0.53	2.46	17	1
1:A:60:PHE:HE1	1:A:86:ILE:HD13	0.53	1.63	18	2
1:A:73:ILE:O	1:A:77:GLU:N	0.53	2.42	16	16
1:A:88:SER:HB2	1:A:143:TYR:CE2	0.53	2.39	12	9
1:A:175:GLU:CG	1:A:203:TYR:CG	0.53	2.92	19	3
1:A:75:LEU:HD21	1:A:83:LEU:HD23	0.53	1.80	11	2
1:A:187:LEU:HD11	1:A:193:ILE:CG1	0.53	2.33	5	1
1:A:193:ILE:CG2	1:A:195:TYR:CE1	0.53	2.92	5	1
1:A:99:LEU:HD11	1:A:119:TRP:CZ2	0.53	2.39	11	1
1:A:43:LYS:CE	1:A:73:ILE:HG22	0.53	2.33	16	1
1:A:49:LEU:HD22	1:A:192:PRO:CB	0.53	2.33	17	1
1:A:149:VAL:N	1:A:150:PRO:HD2	0.53	2.18	16	16
1:A:60:PHE:CE2	1:A:148:ILE:CG1	0.53	2.91	9	2
1:A:126:ALA:CB	1:A:131:GLU:O	0.53	2.57	12	4
1:A:86:ILE:CG1	1:A:87:LYS:N	0.53	2.72	3	8
1:A:58:ILE:CB	1:A:158:VAL:HG22	0.53	2.34	16	4
1:A:85:THR:CG2	1:A:87:LYS:NZ	0.53	2.72	12	2
1:A:55:LYS:O	1:A:157:LYS:HE3	0.53	2.04	12	2
1:A:96:TYR:O	1:A:97:GLY:C	0.53	2.47	12	3
1:A:94:ARG:CG	1:A:131:GLU:O	0.53	2.56	16	6
1:A:83:LEU:C	1:A:83:LEU:HD23	0.53	2.24	2	3
1:A:196:HIS:CD2	1:A:204:VAL:CG2	0.53	2.92	6	3
1:A:75:LEU:O	1:A:78:VAL:HG22	0.53	2.03	5	3
1:A:123:TYR:CG	1:A:179:GLY:CA	0.53	2.92	8	2
1:A:54:TYR:CE1	1:A:56:PHE:CE1	0.53	2.97	11	2
1:A:115:GLN:C	1:A:119:TRP:CD1	0.53	2.82	16	2
1:A:95:TYR:CE1	1:A:100:GLN:NE2	0.53	2.77	15	1
1:A:144:TYR:CD1	1:A:145:LYS:N	0.53	2.77	17	1
1:A:193:ILE:HD13	1:A:193:ILE:C	0.52	2.24	15	3
1:A:65:GLN:O	1:A:69:LYS:N	0.52	2.42	12	10
1:A:198:ASP:N	1:A:202:LYS:O	0.52	2.43	17	4
1:A:123:TYR:CE1	1:A:172:MET:CE	0.52	2.92	15	2
1:A:52:ARG:CG	1:A:210:ASP:CB	0.52	2.87	7	1
1:A:20:TRP:O	1:A:25:LEU:HD12	0.52	2.04	11	2
1:A:193:ILE:HD12	1:A:195:TYR:CD2	0.52	2.39	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:60:PHE:HE2	1:A:148:ILE:HG23	0.52	1.60	18	1
1:A:69:LYS:O	1:A:73:ILE:HD12	0.52	2.05	2	1
1:A:54:TYR:CE2	1:A:157:LYS:CE	0.52	2.93	6	1
1:A:172:MET:SD	1:A:173:ASP:N	0.52	2.83	12	1
1:A:44:LEU:HD11	1:A:48:ARG:CZ	0.52	2.34	16	1
1:A:37:THR:O	1:A:41:GLU:CB	0.52	2.58	16	11
1:A:136:THR:OG1	1:A:165:ASN:ND2	0.52	2.42	12	4
1:A:187:LEU:N	1:A:187:LEU:CD1	0.52	2.73	16	5
1:A:44:LEU:O	1:A:48:ARG:CG	0.52	2.58	16	11
1:A:27:THR:HG23	1:A:30:LYS:HE3	0.52	1.79	11	2
1:A:205:SER:O	1:A:206:LYS:CE	0.52	2.57	12	1
1:A:25:LEU:HD12	1:A:25:LEU:H	0.52	1.60	17	1
1:A:47:GLU:O	1:A:51:SER:CB	0.52	2.56	12	15
1:A:27:THR:HG22	1:A:30:LYS:NZ	0.52	2.20	7	2
1:A:54:TYR:CE2	1:A:157:LYS:HE2	0.52	2.40	3	2
1:A:123:TYR:CD2	1:A:179:GLY:CA	0.52	2.92	13	4
1:A:56:PHE:HA	1:A:157:LYS:CD	0.52	2.35	12	6
1:A:49:LEU:CD2	1:A:54:TYR:CD2	0.52	2.92	6	1
1:A:193:ILE:HD11	1:A:207:GLU:CG	0.52	2.35	6	2
1:A:78:VAL:HG12	1:A:80:GLU:OE1	0.52	2.05	12	1
1:A:51:SER:OG	1:A:52:ARG:CZ	0.52	2.57	16	2
1:A:96:TYR:O	1:A:99:LEU:N	0.52	2.43	16	2
1:A:34:LEU:HD23	1:A:39:ILE:CG1	0.52	2.33	17	1
1:A:208:LEU:CD2	1:A:209:ILE:O	0.52	2.58	17	1
1:A:144:TYR:CE2	1:A:170:LEU:HD21	0.52	2.39	18	1
1:A:57:ASP:C	1:A:83:LEU:HD11	0.52	2.25	1	3
1:A:60:PHE:CD2	1:A:86:ILE:CG1	0.52	2.92	7	3
1:A:172:MET:O	1:A:176:GLY:N	0.52	2.43	12	13
1:A:143:TYR:CD1	1:A:143:TYR:C	0.52	2.83	4	3
1:A:24:ASN:O	1:A:104:LYS:N	0.52	2.43	16	2
1:A:49:LEU:CD2	1:A:56:PHE:CE1	0.52	2.92	20	1
1:A:12:LEU:CD2	1:A:160:ILE:HD12	0.52	2.35	17	4
1:A:12:LEU:HD22	1:A:160:ILE:HD12	0.52	1.80	11	5
1:A:58:ILE:CG2	1:A:60:PHE:CZ	0.52	2.92	3	1
1:A:20:TRP:CZ3	1:A:30:LYS:CD	0.52	2.92	4	1
1:A:185:ARG:NH2	1:A:187:LEU:HD12	0.52	2.19	4	1
1:A:10:LEU:HD23	1:A:160:ILE:HD11	0.52	1.81	6	2
1:A:31:ASP:CG	1:A:64:LEU:HD23	0.52	2.24	11	1
1:A:12:LEU:CD1	1:A:195:TYR:CE2	0.52	2.93	13	1
1:A:49:LEU:HD13	1:A:192:PRO:CB	0.52	2.35	19	1
1:A:56:PHE:HZ	1:A:159:LEU:HD13	0.52	1.60	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:PHE:HE2	1:A:159:LEU:HD22	0.52	1.65	19	1
1:A:24:ASN:O	1:A:103:ASN:ND2	0.52	2.42	16	7
1:A:171:ILE:CG1	1:A:195:TYR:CE2	0.52	2.92	20	2
1:A:183:VAL:O	1:A:183:VAL:HG22	0.52	2.04	2	2
1:A:152:ILE:HD12	1:A:153:LEU:N	0.52	2.20	11	3
1:A:93:GLU:CA	1:A:163:HIS:CD2	0.52	2.93	11	1
1:A:182:ILE:O	1:A:185:ARG:CG	0.52	2.58	12	1
1:A:20:TRP:HA	1:A:25:LEU:HD11	0.52	1.82	17	1
1:A:8:ASN:N	1:A:197:LEU:O	0.52	2.43	16	20
1:A:10:LEU:HD21	1:A:160:ILE:HD11	0.52	1.82	9	11
1:A:60:PHE:CD2	1:A:86:ILE:CD1	0.52	2.91	1	3
1:A:37:THR:O	1:A:41:GLU:N	0.52	2.42	16	18
1:A:34:LEU:CB	1:A:69:LYS:CE	0.52	2.88	16	2
1:A:121:ARG:O	1:A:183:VAL:HG23	0.52	2.05	18	3
1:A:93:GLU:OE2	1:A:94:ARG:NH1	0.52	2.43	17	1
1:A:116:VAL:O	1:A:120:ARG:N	0.52	2.43	17	7
1:A:99:LEU:HD13	1:A:127:PRO:HB3	0.52	1.82	8	2
1:A:144:TYR:HA	1:A:148:ILE:CG1	0.52	2.35	18	4
1:A:136:THR:C	1:A:140:VAL:HG12	0.52	2.26	9	3
1:A:56:PHE:CE2	1:A:159:LEU:CD1	0.51	2.91	10	7
1:A:93:GLU:OE1	1:A:165:ASN:CB	0.51	2.57	12	3
1:A:121:ARG:O	1:A:122:SER:O	0.51	2.28	17	7
1:A:51:SER:OG	1:A:52:ARG:NH1	0.51	2.44	16	3
1:A:39:ILE:O	1:A:42:ALA:N	0.51	2.43	12	1
1:A:114:GLU:O	1:A:117:GLN:HB3	0.51	2.04	18	1
1:A:17:GLU:CD	1:A:37:THR:HG21	0.51	2.26	11	7
1:A:177:LEU:HD12	1:A:181:GLN:HB2	0.51	1.82	6	3
1:A:83:LEU:HD23	1:A:84:GLU:C	0.51	2.25	8	3
1:A:94:ARG:HB2	1:A:165:ASN:ND2	0.51	2.20	16	3
1:A:69:LYS:HD3	1:A:73:ILE:HD11	0.51	1.83	16	1
1:A:133:LEU:HD12	1:A:168:ARG:CZ	0.51	2.34	16	1
1:A:49:LEU:CD2	1:A:56:PHE:CZ	0.51	2.92	19	1
1:A:162:ALA:C	1:A:163:HIS:CD2	0.51	2.84	17	16
1:A:86:ILE:C	1:A:86:ILE:HD13	0.51	2.26	2	2
1:A:115:GLN:O	1:A:118:ILE:CG2	0.51	2.57	17	2
1:A:74:ILE:O	1:A:78:VAL:CG2	0.51	2.57	17	2
1:A:177:LEU:HD12	1:A:181:GLN:C	0.51	2.26	12	1
1:A:69:LYS:O	1:A:73:ILE:CG1	0.51	2.58	16	1
1:A:99:LEU:CD2	1:A:111:TRP:CH2	0.51	2.92	3	2
1:A:141:LEU:HD13	1:A:173:ASP:OD1	0.51	2.06	2	2
1:A:115:GLN:O	1:A:118:ILE:HG22	0.51	2.04	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:LYS:O	1:A:111:TRP:CB	0.51	2.57	17	6
1:A:131:GLU:OE1	1:A:139:ARG:NH2	0.51	2.44	16	6
1:A:151:HIS:CD2	1:A:158:VAL:CG2	0.51	2.92	7	1
1:A:187:LEU:HD22	1:A:187:LEU:H	0.51	1.64	10	2
1:A:91:LEU:O	1:A:163:HIS:CD2	0.51	2.64	12	1
1:A:208:LEU:HD23	1:A:209:ILE:N	0.51	2.20	17	2
1:A:8:ASN:ND2	1:A:198:ASP:O	0.51	2.43	16	6
1:A:10:LEU:HD11	1:A:158:VAL:CG2	0.51	2.35	2	1
1:A:11:VAL:HB	1:A:56:PHE:CZ	0.51	2.41	16	5
1:A:63:ALA:HB2	1:A:89:GLU:HA	0.51	1.80	15	4
1:A:18:SER:O	1:A:21:ASN:N	0.51	2.44	12	1
1:A:60:PHE:CD1	1:A:86:ILE:HG12	0.51	2.40	12	1
1:A:196:HIS:CB	1:A:205:SER:HB3	0.51	2.35	16	1
1:A:185:ARG:HH21	1:A:187:LEU:HD23	0.51	1.65	19	1
1:A:152:ILE:HG13	1:A:153:LEU:HD23	0.51	1.82	21	1
1:A:25:LEU:HD23	1:A:103:ASN:HD22	0.51	1.66	3	3
1:A:112:GLY:O	1:A:116:VAL:HG23	0.51	2.06	3	2
1:A:13:THR:O	1:A:13:THR:CG2	0.51	2.58	16	3
1:A:116:VAL:O	1:A:116:VAL:HG23	0.51	2.06	18	1
1:A:207:GLU:C	1:A:208:LEU:HD12	0.51	2.25	18	1
1:A:148:ILE:HG23	1:A:151:HIS:HE1	0.51	1.60	1	2
1:A:14:ARG:O	1:A:190:GLY:N	0.51	2.43	12	3
1:A:56:PHE:HB3	1:A:83:LEU:CD1	0.51	2.36	16	6
1:A:197:LEU:HD23	1:A:202:LYS:N	0.51	2.21	2	2
1:A:144:TYR:CE1	1:A:174:LEU:HD21	0.51	2.41	13	2
1:A:177:LEU:O	1:A:178:THR:CB	0.51	2.59	11	1
1:A:204:VAL:O	1:A:204:VAL:CG1	0.51	2.59	16	1
1:A:144:TYR:O	1:A:148:ILE:HB	0.51	2.06	9	19
1:A:67:ALA:CB	1:A:161:ALA:O	0.51	2.56	12	4
1:A:56:PHE:CD1	1:A:157:LYS:HE3	0.51	2.41	19	2
1:A:60:PHE:CE1	1:A:86:ILE:CD1	0.51	2.94	12	1
1:A:61:THR:CG2	1:A:71:CYS:HB2	0.51	2.36	12	1
1:A:71:CYS:SG	1:A:75:LEU:CD1	0.51	2.99	12	1
1:A:113:ALA:HA	1:A:116:VAL:CG2	0.51	2.35	12	2
1:A:71:CYS:C	1:A:75:LEU:HD12	0.51	2.26	14	1
1:A:196:HIS:O	1:A:204:VAL:CB	0.51	2.59	16	1
1:A:143:TYR:O	1:A:147:THR:N	0.51	2.44	17	2
1:A:111:TRP:CD1	1:A:111:TRP:O	0.51	2.64	18	1
1:A:193:ILE:CG2	1:A:195:TYR:CE2	0.51	2.94	8	1
1:A:177:LEU:CD2	1:A:178:THR:N	0.50	2.73	1	3
1:A:91:LEU:CD1	1:A:143:TYR:CE2	0.50	2.94	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:178:THR:OG1	1:A:179:GLY:N	0.50	2.43	17	5
1:A:89:GLU:OE1	1:A:89:GLU:N	0.50	2.44	12	1
1:A:168:ARG:HA	1:A:171:ILE:HG22	0.50	1.83	13	1
1:A:75:LEU:HD22	1:A:83:LEU:CD2	0.50	2.36	15	1
1:A:47:GLU:N	1:A:77:GLU:OE1	0.50	2.44	17	1
1:A:137:ALA:HB1	1:A:141:LEU:HG	0.50	1.82	2	2
1:A:10:LEU:HD23	1:A:195:TYR:OH	0.50	2.05	4	1
1:A:127:PRO:O	1:A:129:ASN:N	0.50	2.44	16	5
1:A:99:LEU:CD1	1:A:111:TRP:CH2	0.50	2.94	8	2
1:A:58:ILE:N	1:A:83:LEU:HD12	0.50	2.20	15	1
1:A:49:LEU:HD22	1:A:192:PRO:CG	0.50	2.37	17	1
1:A:139:ARG:C	1:A:142:PRO:CD	0.50	2.80	17	1
1:A:142:PRO:O	1:A:146:SER:CB	0.50	2.58	12	13
1:A:52:ARG:NH1	1:A:210:ASP:CB	0.50	2.74	2	1
1:A:193:ILE:HG21	1:A:195:TYR:CE2	0.50	2.41	8	1
1:A:56:PHE:CD1	1:A:159:LEU:HB3	0.50	2.40	12	1
1:A:136:THR:O	1:A:140:VAL:CB	0.50	2.59	12	3
1:A:157:LYS:NZ	1:A:157:LYS:C	0.50	2.64	16	1
1:A:187:LEU:N	1:A:187:LEU:HD22	0.50	2.22	7	1
1:A:143:TYR:O	1:A:147:THR:HB	0.50	2.06	17	2
1:A:168:ARG:HD3	1:A:185:ARG:NH1	0.50	2.21	12	1
1:A:7:PRO:HB3	1:A:204:VAL:HG21	0.50	1.82	18	1
1:A:123:TYR:CE1	1:A:172:MET:HE3	0.50	2.41	18	1
1:A:133:LEU:CD1	1:A:168:ARG:CZ	0.50	2.89	16	3
1:A:13:THR:HG22	1:A:159:LEU:CD2	0.50	2.37	2	1
1:A:56:PHE:CD2	1:A:157:LYS:HE2	0.50	2.42	2	1
1:A:49:LEU:HD22	1:A:192:PRO:HG3	0.50	1.82	17	1
1:A:11:VAL:O	1:A:160:ILE:N	0.50	2.43	12	19
1:A:44:LEU:O	1:A:48:ARG:N	0.50	2.41	16	8
1:A:11:VAL:HG11	1:A:56:PHE:CZ	0.50	2.42	8	2
1:A:60:PHE:N	1:A:159:LEU:O	0.50	2.44	17	5
1:A:8:ASN:O	1:A:197:LEU:N	0.50	2.40	12	1
1:A:57:ASP:OD1	1:A:57:ASP:N	0.50	2.44	12	5
1:A:168:ARG:NH1	1:A:183:VAL:CG1	0.50	2.75	16	1
1:A:202:LYS:O	1:A:203:TYR:O	0.50	2.30	16	1
1:A:64:LEU:HD13	1:A:163:HIS:CE1	0.50	2.41	4	1
1:A:27:THR:HG22	1:A:30:LYS:CE	0.50	2.37	7	3
1:A:60:PHE:CZ	1:A:86:ILE:CD1	0.50	2.94	12	1
1:A:34:LEU:HB3	1:A:69:LYS:CE	0.50	2.37	16	2
1:A:52:ARG:CD	1:A:210:ASP:HB2	0.50	2.37	16	1
1:A:39:ILE:HG22	1:A:43:LYS:HD3	0.50	1.82	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:157:LYS:HZ1	1:A:158:VAL:HA	0.50	1.67	1	3
1:A:157:LYS:HZ2	1:A:158:VAL:N	0.50	2.05	6	3
1:A:20:TRP:CE3	1:A:30:LYS:CD	0.50	2.95	4	1
1:A:137:ALA:O	1:A:141:LEU:CD1	0.50	2.60	4	1
1:A:118:ILE:O	1:A:122:SER:HB2	0.50	2.07	16	2
1:A:117:GLN:HG3	1:A:118:ILE:N	0.50	2.22	17	2
1:A:131:GLU:OE2	1:A:136:THR:N	0.50	2.45	17	1
1:A:75:LEU:HA	1:A:79:GLY:HA3	0.50	1.84	3	1
1:A:144:TYR:HA	1:A:148:ILE:HD12	0.50	1.82	6	3
1:A:11:VAL:HG23	1:A:54:TYR:HH	0.50	1.67	12	1
1:A:197:LEU:HD23	1:A:197:LEU:N	0.50	2.22	16	2
1:A:193:ILE:HD12	1:A:207:GLU:CG	0.49	2.36	1	1
1:A:197:LEU:HD13	1:A:203:TYR:N	0.49	2.22	3	2
1:A:95:TYR:CD2	1:A:130:GLY:HA2	0.49	2.42	16	3
1:A:35:SER:O	1:A:38:GLY:N	0.49	2.45	17	3
1:A:185:ARG:HH12	1:A:187:LEU:HD13	0.49	1.66	14	1
1:A:56:PHE:HA	1:A:157:LYS:HD3	0.49	1.82	7	2
1:A:144:TYR:OH	1:A:174:LEU:HD21	0.49	2.06	7	2
1:A:115:GLN:O	1:A:119:TRP:N	0.49	2.45	16	3
1:A:169:ALA:HA	1:A:172:MET:HE3	0.49	1.82	9	1
1:A:193:ILE:HD11	1:A:208:LEU:N	0.49	2.21	9	3
1:A:23:LEU:O	1:A:24:ASN:HB2	0.49	2.07	12	2
1:A:20:TRP:CZ3	1:A:27:THR:OG1	0.49	2.65	21	3
1:A:102:LEU:HD21	1:A:107:ALA:HB2	0.49	1.84	21	2
1:A:8:ASN:OD1	1:A:9:LEU:N	0.49	2.45	16	1
1:A:14:ARG:HD2	1:A:187:LEU:HD12	0.49	1.84	19	1
1:A:61:THR:HG23	1:A:161:ALA:CB	0.49	2.28	1	1
1:A:56:PHE:CE2	1:A:159:LEU:CB	0.49	2.95	15	4
1:A:58:ILE:CG2	1:A:60:PHE:CE1	0.49	2.95	3	2
1:A:75:LEU:O	1:A:79:GLY:N	0.49	2.45	3	1
1:A:167:LEU:N	1:A:167:LEU:CD2	0.49	2.75	5	5
1:A:174:LEU:HD13	1:A:197:LEU:HD21	0.49	1.85	5	1
1:A:43:LYS:CE	1:A:73:ILE:HG23	0.49	2.37	7	1
1:A:12:LEU:HD12	1:A:167:LEU:CD2	0.49	2.30	11	1
1:A:122:SER:O	1:A:123:TYR:HB3	0.49	2.06	16	1
1:A:49:LEU:HD23	1:A:78:VAL:HG11	0.49	1.84	19	1
1:A:149:VAL:N	1:A:150:PRO:HD3	0.49	2.21	12	4
1:A:174:LEU:HD13	1:A:174:LEU:O	0.49	2.08	4	1
1:A:174:LEU:HD22	1:A:201:GLY:O	0.49	2.06	4	3
1:A:59:ALA:HB3	1:A:85:THR:CA	0.49	2.35	19	1
1:A:123:TYR:CD2	1:A:179:GLY:HA3	0.49	2.41	17	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:193:ILE:HG21	1:A:195:TYR:CE1	0.49	2.43	5	1
1:A:56:PHE:CD2	1:A:159:LEU:HD22	0.49	2.42	8	1
1:A:123:TYR:CE1	1:A:178:THR:OG1	0.49	2.66	11	1
1:A:195:TYR:O	1:A:197:LEU:CD1	0.49	2.60	12	1
1:A:102:LEU:HD22	1:A:107:ALA:HB2	0.49	1.80	14	2
1:A:54:TYR:HE2	1:A:194:VAL:HG11	0.49	1.68	20	2
1:A:49:LEU:HD11	1:A:56:PHE:HE1	0.49	1.67	16	1
1:A:18:SER:HB3	1:A:20:TRP:NE1	0.49	2.23	17	1
1:A:113:ALA:HB1	1:A:119:TRP:CD1	0.49	2.43	18	1
1:A:193:ILE:HD12	1:A:207:GLU:CB	0.49	2.35	21	1
1:A:168:ARG:O	1:A:171:ILE:HG22	0.49	2.07	16	4
1:A:36:GLU:O	1:A:40:LYS:N	0.49	2.43	12	2
1:A:151:HIS:CE1	1:A:158:VAL:CG2	0.49	2.96	16	2
1:A:18:SER:CB	1:A:20:TRP:NE1	0.49	2.75	17	1
1:A:194:VAL:O	1:A:195:TYR:CD1	0.49	2.65	17	1
1:A:116:VAL:O	1:A:116:VAL:CG2	0.49	2.60	18	1
1:A:197:LEU:HD12	1:A:201:GLY:HA2	0.49	1.84	19	2
1:A:91:LEU:HD23	1:A:143:TYR:CE2	0.49	2.41	19	1
1:A:113:ALA:O	1:A:117:GLN:CB	0.49	2.60	21	14
1:A:60:PHE:CE2	1:A:148:ILE:CG2	0.49	2.95	6	1
1:A:99:LEU:HD13	1:A:127:PRO:CB	0.49	2.37	8	2
1:A:56:PHE:CE2	1:A:159:LEU:CD2	0.49	2.92	8	2
1:A:52:ARG:NH1	1:A:211:ASN:ND2	0.49	2.61	17	1
1:A:60:PHE:CE1	1:A:148:ILE:HG12	0.49	2.43	17	1
1:A:93:GLU:HB2	1:A:163:HIS:CG	0.49	2.43	16	7
1:A:175:GLU:HG2	1:A:203:TYR:CD1	0.49	2.43	17	3
1:A:75:LEU:HD21	1:A:83:LEU:CD2	0.49	2.37	11	2
1:A:46:GLY:CA	1:A:74:ILE:CG1	0.49	2.91	7	3
1:A:56:PHE:CD1	1:A:159:LEU:CB	0.49	2.96	12	1
1:A:27:THR:CG2	1:A:30:LYS:HE2	0.49	2.38	16	1
1:A:26:PHE:N	1:A:102:LEU:O	0.49	2.45	17	1
1:A:152:ILE:C	1:A:152:ILE:HD12	0.49	2.28	19	1
1:A:9:LEU:CD1	1:A:196:HIS:CE1	0.49	2.95	18	2
1:A:99:LEU:CD2	1:A:111:TRP:CZ3	0.49	2.95	10	1
1:A:37:THR:O	1:A:41:GLU:CG	0.49	2.60	16	9
1:A:88:SER:CB	1:A:143:TYR:CD2	0.49	2.96	12	3
1:A:115:GLN:HA	1:A:118:ILE:CG2	0.49	2.38	17	2
1:A:167:LEU:O	1:A:171:ILE:HG22	0.49	2.08	19	6
1:A:121:ARG:HB2	1:A:183:VAL:HG12	0.49	1.84	11	1
1:A:61:THR:HB	1:A:67:ALA:HB1	0.48	1.85	2	1
1:A:49:LEU:CD1	1:A:192:PRO:CB	0.48	2.91	21	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:LEU:HG	1:A:84:GLU:N	0.48	2.23	16	3
1:A:168:ARG:CD	1:A:185:ARG:CZ	0.48	2.91	10	1
1:A:65:GLN:HG3	1:A:66:ARG:N	0.48	2.23	16	2
1:A:75:LEU:CD2	1:A:83:LEU:HD21	0.48	2.38	15	1
1:A:123:TYR:CD1	1:A:133:LEU:HD22	0.48	2.43	16	1
1:A:60:PHE:CZ	1:A:143:TYR:CE1	0.48	3.01	17	1
1:A:157:LYS:NZ	1:A:158:VAL:HA	0.48	2.23	1	3
1:A:72:GLN:O	1:A:76:GLU:CG	0.48	2.61	16	4
1:A:99:LEU:HD11	1:A:111:TRP:CZ3	0.48	2.43	17	4
1:A:131:GLU:CD	1:A:136:THR:CG2	0.48	2.81	17	1
1:A:17:GLU:OE2	1:A:37:THR:HG22	0.48	2.08	18	1
1:A:52:ARG:CZ	1:A:210:ASP:CB	0.48	2.91	2	1
1:A:74:ILE:CD1	1:A:78:VAL:CG2	0.48	2.92	18	6
1:A:125:ILE:CG1	1:A:126:ALA:N	0.48	2.76	12	1
1:A:169:ALA:O	1:A:172:MET:HG3	0.48	2.07	12	1
1:A:56:PHE:CD2	1:A:159:LEU:CB	0.48	2.97	16	1
1:A:108:ARG:O	1:A:112:GLY:HA2	0.48	2.08	16	1
1:A:20:TRP:CZ3	1:A:27:THR:CB	0.48	2.96	17	1
1:A:170:LEU:C	1:A:170:LEU:HD13	0.48	2.28	21	1
1:A:113:ALA:O	1:A:117:GLN:N	0.48	2.41	16	4
1:A:49:LEU:HD12	1:A:192:PRO:HG3	0.48	1.84	3	2
1:A:10:LEU:CD2	1:A:160:ILE:HD12	0.48	2.34	4	3
1:A:59:ALA:O	1:A:86:ILE:HG23	0.48	2.08	8	3
1:A:195:TYR:CE2	1:A:207:GLU:CG	0.48	2.96	7	1
1:A:151:HIS:CE1	1:A:158:VAL:HG21	0.48	2.44	17	3
1:A:75:LEU:HD12	1:A:81:PRO:HA	0.48	1.85	10	2
1:A:60:PHE:CE1	1:A:86:ILE:HD13	0.48	2.42	18	2
1:A:107:ALA:O	1:A:111:TRP:HB2	0.48	2.08	18	1
1:A:177:LEU:N	1:A:177:LEU:CD1	0.48	2.76	1	1
1:A:141:LEU:CD2	1:A:173:ASP:CB	0.48	2.91	4	1
1:A:83:LEU:HD22	1:A:84:GLU:N	0.48	2.23	17	3
1:A:20:TRP:HA	1:A:25:LEU:CD1	0.48	2.38	17	1
1:A:77:GLU:O	1:A:78:VAL:HG23	0.48	2.09	3	1
1:A:116:VAL:HG12	1:A:120:ARG:NE	0.48	2.23	3	1
1:A:194:VAL:HG13	1:A:207:GLU:CB	0.48	2.38	3	1
1:A:197:LEU:HD22	1:A:203:TYR:HA	0.48	1.85	11	1
1:A:58:ILE:HD13	1:A:84:GLU:CB	0.48	2.38	17	2
1:A:20:TRP:CE3	1:A:25:LEU:O	0.48	2.67	15	2
1:A:192:PRO:C	1:A:209:ILE:CD1	0.48	2.82	16	1
1:A:74:ILE:O	1:A:78:VAL:CG1	0.48	2.58	17	1
1:A:111:TRP:CB	1:A:116:VAL:HG13	0.48	2.39	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:118:ILE:HD11	1:A:125:ILE:HD12	0.48	1.86	2	2
1:A:20:TRP:CE3	1:A:27:THR:OG1	0.48	2.61	17	4
1:A:10:LEU:O	1:A:195:TYR:N	0.48	2.44	17	2
1:A:63:ALA:N	1:A:88:SER:O	0.48	2.46	12	3
1:A:126:ALA:HB1	1:A:131:GLU:O	0.48	2.08	12	2
1:A:153:LEU:HD23	1:A:199:LYS:O	0.48	2.09	12	1
1:A:25:LEU:N	1:A:25:LEU:CD1	0.48	2.68	17	1
1:A:172:MET:CG	1:A:173:ASP:N	0.48	2.76	1	3
1:A:58:ILE:HG22	1:A:158:VAL:CG1	0.48	2.36	20	6
1:A:197:LEU:HD12	1:A:201:GLY:O	0.48	2.09	8	1
1:A:116:VAL:O	1:A:120:ARG:HG3	0.48	2.09	12	4
1:A:14:ARG:CZ	1:A:187:LEU:HB2	0.48	2.38	12	1
1:A:145:LYS:HG3	1:A:146:SER:N	0.48	2.23	12	1
1:A:12:LEU:HG	1:A:195:TYR:CE2	0.48	2.44	17	1
1:A:34:LEU:HD23	1:A:39:ILE:HG13	0.48	1.85	17	1
1:A:134:LYS:NZ	1:A:138:GLU:OE1	0.48	2.45	17	1
1:A:15:HIS:CD2	1:A:162:ALA:O	0.48	2.66	20	1
1:A:38:GLY:O	1:A:42:ALA:N	0.48	2.46	12	1
1:A:121:ARG:HD3	1:A:168:ARG:CZ	0.48	2.39	16	1
1:A:185:ARG:NH1	1:A:195:TYR:OH	0.48	2.47	16	1
1:A:193:ILE:CD1	1:A:194:VAL:N	0.48	2.72	16	1
1:A:115:GLN:O	1:A:118:ILE:HG23	0.48	2.08	17	1
1:A:112:GLY:O	1:A:115:GLN:N	0.48	2.46	18	1
1:A:122:SER:O	1:A:183:VAL:HG11	0.48	2.09	1	1
1:A:11:VAL:CG2	1:A:56:PHE:CZ	0.48	2.95	9	5
1:A:58:ILE:CG1	1:A:156:GLU:CD	0.48	2.82	16	1
1:A:97:GLY:O	1:A:100:GLN:OE1	0.48	2.32	16	1
1:A:94:ARG:HB3	1:A:165:ASN:ND2	0.48	2.24	17	1
1:A:197:LEU:HD23	1:A:203:TYR:HA	0.48	1.84	17	1
1:A:195:TYR:O	1:A:197:LEU:HD12	0.48	2.09	21	1
1:A:32:PRO:CG	1:A:66:ARG:CZ	0.47	2.92	9	5
1:A:20:TRP:CZ3	1:A:26:PHE:HA	0.47	2.43	5	3
1:A:203:TYR:CD1	1:A:203:TYR:O	0.47	2.67	18	4
1:A:134:LYS:HE3	1:A:135:ASP:N	0.47	2.24	17	5
1:A:143:TYR:C	1:A:143:TYR:CD1	0.47	2.87	19	2
1:A:179:GLY:O	1:A:180:ASP:CB	0.47	2.61	11	1
1:A:14:ARG:HH11	1:A:189:THR:HG22	0.47	1.69	3	1
1:A:11:VAL:HB	1:A:56:PHE:CE2	0.47	2.44	16	1
1:A:14:ARG:HD3	1:A:187:LEU:CD2	0.47	2.39	16	1
1:A:10:LEU:HD22	1:A:197:LEU:CD1	0.47	2.38	17	1
1:A:113:ALA:O	1:A:116:VAL:N	0.47	2.47	18	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:195:TYR:CE1	1:A:207:GLU:OE2	0.47	2.68	1	2
1:A:185:ARG:CG	1:A:186:GLU:N	0.47	2.77	8	3
1:A:10:LEU:CD1	1:A:160:ILE:CD1	0.47	2.92	7	1
1:A:141:LEU:CD1	1:A:173:ASP:CG	0.47	2.82	12	1
1:A:123:TYR:CE1	1:A:172:MET:HE1	0.47	2.44	15	1
1:A:60:PHE:CD2	1:A:91:LEU:HD11	0.47	2.42	16	1
1:A:58:ILE:CG2	1:A:158:VAL:CG1	0.47	2.92	18	7
1:A:151:HIS:NE2	1:A:152:ILE:HG23	0.47	2.25	4	3
1:A:178:THR:CG2	1:A:181:GLN:CG	0.47	2.92	6	1
1:A:65:GLN:HA	1:A:68:GLN:NE2	0.47	2.24	11	5
1:A:186:GLU:O	1:A:187:LEU:HD23	0.47	2.09	11	1
1:A:114:GLU:O	1:A:118:ILE:CG2	0.47	2.58	12	1
1:A:12:LEU:HD11	1:A:195:TYR:CE2	0.47	2.44	13	1
1:A:49:LEU:HD12	1:A:74:ILE:HD11	0.47	1.84	15	1
1:A:121:ARG:O	1:A:122:SER:C	0.47	2.52	17	2
1:A:60:PHE:CD2	1:A:148:ILE:CD1	0.47	2.97	1	1
1:A:60:PHE:CE2	1:A:148:ILE:HG12	0.47	2.44	9	10
1:A:94:ARG:NH2	1:A:120:ARG:O	0.47	2.47	17	7
1:A:196:HIS:CG	1:A:205:SER:OG	0.47	2.68	1	1
1:A:61:THR:OG1	1:A:87:LYS:HE2	0.47	2.10	12	1
1:A:148:ILE:C	1:A:150:PRO:HD2	0.47	2.30	12	2
1:A:117:GLN:NE2	1:A:121:ARG:CB	0.47	2.78	15	1
1:A:52:ARG:HD3	1:A:210:ASP:CB	0.47	2.39	16	1
1:A:69:LYS:O	1:A:73:ILE:HG13	0.47	2.10	16	1
1:A:175:GLU:CD	1:A:203:TYR:CB	0.47	2.83	16	1
1:A:61:THR:O	1:A:87:LYS:HA	0.47	2.10	2	16
1:A:116:VAL:CG1	1:A:120:ARG:NE	0.47	2.77	3	1
1:A:175:GLU:HG2	1:A:203:TYR:CG	0.47	2.45	17	3
1:A:145:LYS:CA	1:A:149:VAL:HG13	0.47	2.40	9	1
1:A:113:ALA:O	1:A:114:GLU:C	0.47	2.53	12	2
1:A:80:GLU:O	1:A:83:LEU:CD2	0.47	2.62	16	1
1:A:94:ARG:NH1	1:A:96:TYR:CZ	0.47	2.83	16	2
1:A:120:ARG:NH1	1:A:121:ARG:CZ	0.47	2.78	18	1
1:A:95:TYR:CD1	1:A:100:GLN:OE1	0.47	2.67	21	1
1:A:51:SER:CB	1:A:52:ARG:NH1	0.47	2.77	4	2
1:A:177:LEU:HD23	1:A:182:ILE:HB	0.47	1.86	1	1
1:A:87:LYS:N	1:A:87:LYS:CD	0.47	2.78	13	2
1:A:175:GLU:HG3	1:A:203:TYR:CG	0.47	2.45	19	3
1:A:118:ILE:O	1:A:118:ILE:CD1	0.47	2.62	18	7
1:A:11:VAL:O	1:A:159:LEU:HD12	0.47	2.10	7	1
1:A:29:TRP:CD1	1:A:93:GLU:O	0.47	2.67	11	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:135:ASP:O	1:A:139:ARG:N	0.47	2.48	12	3
1:A:121:ARG:NH2	1:A:168:ARG:CZ	0.47	2.78	11	1
1:A:89:GLU:O	1:A:92:ASN:ND2	0.47	2.47	12	2
1:A:12:LEU:HD13	1:A:167:LEU:HD23	0.47	1.86	16	1
1:A:25:LEU:HD23	1:A:103:ASN:N	0.47	2.25	16	1
1:A:42:ALA:C	1:A:74:ILE:HG22	0.47	2.30	16	1
1:A:123:TYR:CD2	1:A:179:GLY:HA2	0.47	2.45	14	6
1:A:171:ILE:CG2	1:A:172:MET:N	0.47	2.77	11	9
1:A:51:SER:OG	1:A:52:ARG:NH2	0.47	2.48	17	2
1:A:15:HIS:O	1:A:16:GLY:O	0.47	2.33	12	3
1:A:14:ARG:HG3	1:A:167:LEU:CD1	0.47	2.39	12	1
1:A:74:ILE:HD13	1:A:74:ILE:C	0.47	2.29	1	3
1:A:71:CYS:O	1:A:75:LEU:CB	0.47	2.63	16	2
1:A:88:SER:HB3	1:A:143:TYR:CE2	0.47	2.45	6	2
1:A:20:TRP:CE3	1:A:30:LYS:HD3	0.47	2.45	4	1
1:A:11:VAL:CG1	1:A:56:PHE:CE1	0.47	2.98	8	1
1:A:123:TYR:CG	1:A:179:GLY:HA3	0.47	2.45	8	1
1:A:91:LEU:HD21	1:A:143:TYR:CZ	0.47	2.45	10	1
1:A:11:VAL:HB	1:A:56:PHE:CE1	0.47	2.45	12	2
1:A:99:LEU:CD1	1:A:128:PRO:HD2	0.47	2.38	16	2
1:A:128:PRO:O	1:A:129:ASN:HB2	0.47	2.10	17	3
1:A:140:VAL:C	1:A:142:PRO:HD2	0.47	2.30	12	3
1:A:167:LEU:O	1:A:170:LEU:N	0.47	2.48	12	1
1:A:118:ILE:CD1	1:A:125:ILE:CG2	0.47	2.92	19	2
1:A:8:ASN:OD1	1:A:198:ASP:O	0.47	2.32	17	1
1:A:138:GLU:O	1:A:142:PRO:HG3	0.47	2.09	17	1
1:A:193:ILE:HD12	1:A:209:ILE:HG12	0.47	1.86	19	1
1:A:57:ASP:CB	1:A:157:LYS:O	0.47	2.63	3	1
1:A:157:LYS:NZ	1:A:158:VAL:C	0.47	2.68	3	1
1:A:20:TRP:CZ3	1:A:30:LYS:HD3	0.47	2.44	4	1
1:A:11:VAL:HG23	1:A:194:VAL:HG12	0.47	1.81	8	1
1:A:177:LEU:CD1	1:A:177:LEU:N	0.47	2.77	20	2
1:A:78:VAL:HG12	1:A:80:GLU:HG2	0.47	1.85	11	1
1:A:65:GLN:O	1:A:66:ARG:C	0.47	2.52	12	3
1:A:171:ILE:O	1:A:171:ILE:HD13	0.47	2.10	13	1
1:A:93:GLU:OE2	1:A:94:ARG:N	0.47	2.48	16	1
1:A:168:ARG:HG3	1:A:182:ILE:HD11	0.47	1.86	19	1
1:A:58:ILE:HD13	1:A:59:ALA:H	0.46	1.70	7	2
1:A:174:LEU:HD21	1:A:197:LEU:HD13	0.46	1.86	4	1
1:A:143:TYR:CD1	1:A:147:THR:HG23	0.46	2.44	5	5
1:A:12:LEU:O	1:A:192:PRO:HA	0.46	2.10	16	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:SER:HA	1:A:88:SER:O	0.46	2.11	12	1
1:A:44:LEU:HD21	1:A:48:ARG:NH1	0.46	2.25	19	1
1:A:60:PHE:CD1	1:A:86:ILE:HG23	0.46	2.45	21	1
1:A:65:GLN:O	1:A:69:LYS:CB	0.46	2.63	20	5
1:A:74:ILE:CD1	1:A:78:VAL:HG13	0.46	2.40	15	3
1:A:171:ILE:O	1:A:175:GLU:N	0.46	2.42	12	4
1:A:192:PRO:O	1:A:209:ILE:CD1	0.46	2.64	17	5
1:A:60:PHE:CZ	1:A:148:ILE:HG12	0.46	2.45	9	9
1:A:123:TYR:CG	1:A:179:GLY:HA2	0.46	2.46	21	8
1:A:132:SER:OG	1:A:133:LEU:N	0.46	2.48	12	2
1:A:12:LEU:N	1:A:193:ILE:O	0.46	2.45	16	7
1:A:74:ILE:HG12	1:A:78:VAL:HG23	0.46	1.87	7	1
1:A:134:LYS:CE	1:A:135:ASP:N	0.46	2.79	20	5
1:A:41:GLU:O	1:A:45:GLY:N	0.46	2.44	12	2
1:A:194:VAL:O	1:A:208:LEU:HA	0.46	2.11	11	1
1:A:195:TYR:CD1	1:A:203:TYR:CZ	0.46	3.03	11	1
1:A:94:ARG:HG3	1:A:131:GLU:O	0.46	2.09	17	3
1:A:136:THR:CG2	1:A:165:ASN:ND2	0.46	2.77	1	1
1:A:26:PHE:CE1	1:A:96:TYR:CE2	0.46	3.03	3	1
1:A:64:LEU:HD13	1:A:163:HIS:HE1	0.46	1.70	4	1
1:A:12:LEU:HG	1:A:193:ILE:HG23	0.46	1.87	6	1
1:A:123:TYR:CD1	1:A:178:THR:OG1	0.46	2.68	11	1
1:A:48:ARG:HA	1:A:48:ARG:NE	0.46	2.26	12	1
1:A:70:THR:O	1:A:74:ILE:HG23	0.46	2.10	12	1
1:A:119:TRP:CD2	1:A:127:PRO:HA	0.46	2.45	12	1
1:A:184:LYS:O	1:A:184:LYS:CG	0.46	2.63	12	1
1:A:71:CYS:O	1:A:75:LEU:HD12	0.46	2.11	14	1
1:A:168:ARG:O	1:A:172:MET:HB3	0.46	2.10	16	1
1:A:182:ILE:CD1	1:A:182:ILE:C	0.46	2.84	16	2
1:A:30:LYS:HZ2	1:A:32:PRO:HG3	0.46	1.71	6	1
1:A:118:ILE:HG23	1:A:119:TRP:HD1	0.46	1.69	7	1
1:A:133:LEU:HA	1:A:136:THR:OG1	0.46	2.11	17	1
1:A:156:GLU:HG2	1:A:157:LYS:N	0.46	2.25	17	1
1:A:31:ASP:OD2	1:A:64:LEU:HD22	0.46	2.10	20	1
1:A:75:LEU:CD1	1:A:85:THR:CG2	0.46	2.93	21	2
1:A:197:LEU:CD2	1:A:197:LEU:N	0.46	2.79	8	2
1:A:103:ASN:O	1:A:104:LYS:C	0.46	2.54	12	3
1:A:44:LEU:O	1:A:48:ARG:HG2	0.46	2.11	17	1
1:A:59:ALA:O	1:A:86:ILE:HB	0.46	2.11	17	1
1:A:172:MET:CB	1:A:182:ILE:HG13	0.46	2.41	17	1
1:A:198:ASP:CG	1:A:199:LYS:N	0.46	2.69	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:ILE:C	1:A:86:ILE:CD1	0.46	2.83	7	3
1:A:111:TRP:O	1:A:115:GLN:CB	0.46	2.64	8	12
1:A:122:SER:CB	1:A:125:ILE:CG2	0.46	2.93	6	6
1:A:121:ARG:NH1	1:A:168:ARG:NH1	0.46	2.63	3	1
1:A:185:ARG:HG2	1:A:186:GLU:N	0.46	2.24	10	3
1:A:137:ALA:HA	1:A:140:VAL:HG22	0.46	1.87	15	2
1:A:11:VAL:HG21	1:A:54:TYR:CZ	0.46	2.46	16	4
1:A:34:LEU:HD13	1:A:66:ARG:HG2	0.46	1.86	12	1
1:A:105:ASP:O	1:A:109:LYS:HB2	0.46	2.11	17	2
1:A:185:ARG:NH2	1:A:186:GLU:C	0.46	2.69	12	1
1:A:198:ASP:OD2	1:A:204:VAL:HG13	0.46	2.11	15	1
1:A:188:ALA:HB1	1:A:191:VAL:CG2	0.46	2.41	1	1
1:A:10:LEU:CD1	1:A:158:VAL:HG23	0.46	2.41	2	1
1:A:118:ILE:HG12	1:A:125:ILE:HD11	0.46	1.88	2	1
1:A:140:VAL:HG11	1:A:170:LEU:CD2	0.46	2.40	2	1
1:A:80:GLU:O	1:A:83:LEU:N	0.46	2.48	3	1
1:A:170:LEU:O	1:A:174:LEU:N	0.46	2.46	12	5
1:A:194:VAL:CG2	1:A:195:TYR:N	0.46	2.78	3	1
1:A:196:HIS:C	1:A:197:LEU:HD22	0.46	2.30	3	2
1:A:49:LEU:HD13	1:A:74:ILE:HD11	0.46	1.88	6	1
1:A:141:LEU:HD11	1:A:173:ASP:OD2	0.46	2.11	6	1
1:A:60:PHE:CD2	1:A:86:ILE:HG12	0.46	2.46	7	1
1:A:83:LEU:CD2	1:A:84:GLU:N	0.46	2.77	8	1
1:A:44:LEU:HD11	1:A:48:ARG:NH2	0.46	2.25	16	1
1:A:75:LEU:HA	1:A:78:VAL:HG22	0.46	1.87	17	2
1:A:119:TRP:CZ3	1:A:126:ALA:O	0.46	2.68	18	1
1:A:60:PHE:CD1	1:A:143:TYR:OH	0.46	2.68	19	1
1:A:152:ILE:HD12	1:A:199:LYS:O	0.46	2.11	19	1
1:A:125:ILE:HG23	1:A:125:ILE:O	0.46	2.11	21	1
1:A:94:ARG:CZ	1:A:96:TYR:CZ	0.46	2.99	4	1
1:A:86:ILE:HG13	1:A:87:LYS:N	0.46	2.25	20	3
1:A:195:TYR:CE1	1:A:207:GLU:OE1	0.46	2.69	8	1
1:A:187:LEU:HD21	1:A:193:ILE:HG22	0.46	1.88	9	1
1:A:33:ALA:O	1:A:34:LEU:O	0.46	2.34	12	2
1:A:143:TYR:HE1	1:A:147:THR:HG21	0.46	1.68	17	1
1:A:56:PHE:O	1:A:83:LEU:HD12	0.46	2.11	18	1
1:A:175:GLU:HG2	1:A:203:TYR:CD2	0.46	2.46	3	1
1:A:11:VAL:CG1	1:A:56:PHE:CZ	0.46	2.99	8	1
1:A:58:ILE:HB	1:A:158:VAL:CG2	0.46	2.40	17	4
1:A:151:HIS:O	1:A:154:LYS:N	0.46	2.45	16	1
1:A:25:LEU:CA	1:A:102:LEU:O	0.46	2.64	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:THR:HB	1:A:161:ALA:HB2	0.46	1.88	18	1
1:A:123:TYR:CD1	1:A:182:ILE:HG21	0.46	2.45	18	1
1:A:49:LEU:CD1	1:A:54:TYR:HB3	0.46	2.41	12	1
1:A:143:TYR:O	1:A:147:THR:HG23	0.46	2.11	16	3
1:A:85:THR:CG2	1:A:87:LYS:HZ1	0.46	2.20	16	1
1:A:182:ILE:O	1:A:182:ILE:HD13	0.46	2.11	17	1
1:A:202:LYS:O	1:A:204:VAL:HG13	0.46	2.11	17	1
1:A:120:ARG:NH1	1:A:121:ARG:NH2	0.46	2.63	21	2
1:A:175:GLU:O	1:A:203:TYR:CE1	0.46	2.69	20	1
1:A:197:LEU:HD22	1:A:203:TYR:N	0.45	2.26	11	2
1:A:57:ASP:HB2	1:A:157:LYS:O	0.45	2.11	3	1
1:A:185:ARG:NH2	1:A:187:LEU:CG	0.45	2.79	5	1
1:A:49:LEU:HD22	1:A:56:PHE:CE2	0.45	2.47	21	2
1:A:57:ASP:C	1:A:83:LEU:HD12	0.45	2.31	10	1
1:A:149:VAL:O	1:A:152:ILE:HD11	0.45	2.12	11	1
1:A:8:ASN:O	1:A:197:LEU:O	0.45	2.33	17	2
1:A:55:LYS:HA	1:A:55:LYS:CE	0.45	2.41	16	2
1:A:145:LYS:CG	1:A:146:SER:N	0.45	2.78	12	1
1:A:176:GLY:O	1:A:177:LEU:O	0.45	2.33	17	3
1:A:93:GLU:OE2	1:A:165:ASN:HB2	0.45	2.11	16	1
1:A:90:LYS:O	1:A:139:ARG:NH1	0.45	2.45	17	7
1:A:74:ILE:O	1:A:78:VAL:N	0.45	2.45	12	1
1:A:137:ALA:HA	1:A:140:VAL:CG1	0.45	2.42	13	2
1:A:52:ARG:CD	1:A:210:ASP:HB3	0.45	2.41	16	1
1:A:61:THR:OG1	1:A:87:LYS:NZ	0.45	2.47	16	1
1:A:118:ILE:O	1:A:122:SER:HB3	0.45	2.09	16	2
1:A:168:ARG:O	1:A:172:MET:CB	0.45	2.64	21	2
1:A:196:HIS:O	1:A:204:VAL:CG1	0.45	2.62	16	1
1:A:23:LEU:HD22	1:A:25:LEU:HD11	0.45	1.88	21	1
1:A:88:SER:OG	1:A:143:TYR:CD2	0.45	2.67	9	2
1:A:10:LEU:CD2	1:A:160:ILE:CD1	0.45	2.94	10	3
1:A:136:THR:O	1:A:139:ARG:HG3	0.45	2.11	18	2
1:A:185:ARG:CZ	1:A:185:ARG:O	0.45	2.64	10	1
1:A:39:ILE:HG23	1:A:73:ILE:CD1	0.45	2.32	12	1
1:A:86:ILE:HD12	1:A:143:TYR:CE1	0.45	2.46	12	1
1:A:86:ILE:HD12	1:A:143:TYR:CZ	0.45	2.47	12	1
1:A:164:GLY:O	1:A:168:ARG:HG3	0.45	2.11	16	3
1:A:31:ASP:CG	1:A:64:LEU:HD22	0.45	2.31	15	1
1:A:133:LEU:HD11	1:A:165:ASN:O	0.45	2.11	20	1
1:A:71:CYS:SG	1:A:72:GLN:N	0.45	2.89	16	2
1:A:140:VAL:CG1	1:A:170:LEU:HD13	0.45	2.41	19	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:LEU:HD11	1:A:119:TRP:HZ2	0.45	1.70	11	1
1:A:111:TRP:HB3	1:A:115:GLN:CB	0.45	2.41	12	1
1:A:158:VAL:CG1	1:A:159:LEU:N	0.45	2.78	12	2
1:A:115:GLN:HG3	1:A:119:TRP:NE1	0.45	2.26	16	1
1:A:182:ILE:CG2	1:A:183:VAL:N	0.45	2.79	16	2
1:A:72:GLN:O	1:A:76:GLU:N	0.45	2.43	17	1
1:A:134:LYS:CE	1:A:138:GLU:OE1	0.45	2.64	17	1
1:A:54:TYR:CZ	1:A:157:LYS:HE2	0.45	2.46	6	7
1:A:91:LEU:HG	1:A:143:TYR:CE2	0.45	2.47	4	2
1:A:61:THR:HG21	1:A:71:CYS:SG	0.45	2.52	16	2
1:A:193:ILE:HD11	1:A:195:TYR:CE1	0.45	2.46	11	1
1:A:123:TYR:CD1	1:A:179:GLY:HA2	0.45	2.46	12	1
1:A:49:LEU:HD11	1:A:56:PHE:CE1	0.45	2.47	16	1
1:A:72:GLN:O	1:A:76:GLU:CB	0.45	2.65	16	1
1:A:48:ARG:NH1	1:A:211:ASN:OD1	0.45	2.50	17	1
1:A:80:GLU:O	1:A:83:LEU:CG	0.45	2.64	17	1
1:A:197:LEU:HD23	1:A:197:LEU:H	0.45	1.71	18	1
1:A:175:GLU:CG	1:A:176:GLY:N	0.45	2.79	20	1
1:A:171:ILE:HG12	1:A:195:TYR:CE2	0.45	2.46	20	2
1:A:61:THR:O	1:A:87:LYS:CB	0.45	2.65	6	6
1:A:88:SER:CB	1:A:143:TYR:CE2	0.45	2.99	8	5
1:A:75:LEU:HD11	1:A:83:LEU:HD11	0.45	1.87	9	1
1:A:9:LEU:HD23	1:A:54:TYR:CE2	0.45	2.47	10	1
1:A:57:ASP:CB	1:A:156:GLU:HG2	0.45	2.42	12	2
1:A:95:TYR:HB3	1:A:130:GLY:CA	0.45	2.42	12	1
1:A:90:LYS:HB3	1:A:139:ARG:O	0.45	2.10	17	1
1:A:52:ARG:NH1	1:A:210:ASP:HB3	0.45	2.27	2	1
1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:MET:N	0.45	2.27	7	8
1:A:68:GLN:O	1:A:72:GLN:N	0.45	2.43	12	1
1:A:151:HIS:CD2	1:A:151:HIS:C	0.45	2.90	17	2
1:A:168:ARG:O	1:A:172:MET:N	0.45	2.46	16	1
1:A:125:ILE:HD13	1:A:125:ILE:C	0.45	2.30	17	2
1:A:195:TYR:CD2	1:A:207:GLU:OE1	0.45	2.70	7	1
1:A:6:ALA:O	1:A:8:ASN:N	0.45	2.50	8	2
1:A:122:SER:HB3	1:A:125:ILE:HG23	0.45	1.89	17	2
1:A:197:LEU:N	1:A:197:LEU:CD2	0.45	2.80	16	1
1:A:134:LYS:NZ	1:A:134:LYS:HB2	0.45	2.26	17	1
1:A:51:SER:OG	1:A:52:ARG:N	0.45	2.50	2	1
1:A:90:LYS:O	1:A:140:VAL:CG2	0.45	2.65	6	6
1:A:91:LEU:CG	1:A:143:TYR:CE2	0.45	3.00	4	1
1:A:88:SER:HB2	1:A:143:TYR:CZ	0.45	2.47	7	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:178:THR:HG23	1:A:180:ASP:H	0.45	1.71	7	3
1:A:13:THR:N	1:A:160:ILE:O	0.45	2.50	11	1
1:A:37:THR:O	1:A:41:GLU:HB2	0.45	2.12	16	2
1:A:134:LYS:HG3	1:A:135:ASP:N	0.45	2.27	12	1
1:A:123:TYR:HD1	1:A:133:LEU:HD23	0.45	1.71	15	1
1:A:11:VAL:C	1:A:12:LEU:CD2	0.45	2.81	16	1
1:A:198:ASP:OD2	1:A:202:LYS:O	0.45	2.35	16	1
1:A:56:PHE:HB3	1:A:83:LEU:HD11	0.45	1.89	18	2
1:A:121:ARG:NH1	1:A:168:ARG:NH2	0.45	2.64	1	1
1:A:177:LEU:HD23	1:A:182:ILE:CG2	0.45	2.42	1	1
1:A:164:GLY:O	1:A:168:ARG:N	0.45	2.49	20	6
1:A:59:ALA:N	1:A:84:GLU:O	0.45	2.44	12	10
1:A:103:ASN:O	1:A:106:ASP:N	0.45	2.50	16	3
1:A:136:THR:HG21	1:A:165:ASN:OD1	0.45	2.12	5	1
1:A:119:TRP:CZ3	1:A:128:PRO:HD3	0.45	2.46	11	1
1:A:182:ILE:O	1:A:185:ARG:HG2	0.45	2.11	12	1
1:A:114:GLU:O	1:A:115:GLN:CG	0.45	2.65	18	1
1:A:56:PHE:CE1	1:A:159:LEU:HD13	0.45	2.45	21	1
1:A:31:ASP:OD1	1:A:31:ASP:N	0.44	2.50	12	3
1:A:13:THR:CG2	1:A:13:THR:O	0.44	2.65	9	3
1:A:77:GLU:O	1:A:78:VAL:CG2	0.44	2.66	3	1
1:A:193:ILE:CD1	1:A:208:LEU:HA	0.44	2.41	11	2
1:A:10:LEU:HB2	1:A:197:LEU:HD21	0.44	1.88	4	1
1:A:12:LEU:CD2	1:A:167:LEU:HD23	0.44	2.27	4	1
1:A:94:ARG:CZ	1:A:96:TYR:CE1	0.44	3.01	4	2
1:A:60:PHE:CE2	1:A:86:ILE:HG12	0.44	2.47	7	2
1:A:139:ARG:O	1:A:139:ARG:HD2	0.44	2.12	12	2
1:A:121:ARG:C	1:A:123:TYR:N	0.44	2.70	16	1
1:A:125:ILE:HG13	1:A:126:ALA:N	0.44	2.26	16	1
1:A:60:PHE:HA	1:A:86:ILE:O	0.44	2.12	17	1
1:A:99:LEU:HD22	1:A:127:PRO:HB3	0.44	1.89	17	1
1:A:167:LEU:O	1:A:171:ILE:N	0.44	2.41	12	5
1:A:143:TYR:CD1	1:A:144:TYR:N	0.44	2.85	4	1
1:A:8:ASN:OD1	1:A:156:GLU:N	0.44	2.50	6	1
1:A:10:LEU:CG	1:A:160:ILE:CD1	0.44	2.95	7	1
1:A:211:ASN:OXT	1:A:211:ASN:OD1	0.44	2.34	12	1
1:A:59:ALA:N	1:A:83:LEU:HD21	0.44	2.27	13	1
1:A:193:ILE:CG1	1:A:207:GLU:HB2	0.44	2.42	16	3
1:A:195:TYR:CE1	1:A:207:GLU:CD	0.44	2.91	1	2
1:A:7:PRO:HB2	1:A:196:HIS:CD2	0.44	2.48	4	3
1:A:60:PHE:HZ	1:A:147:THR:HG23	0.44	1.68	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:57:ASP:OD2	1:A:156:GLU:CG	0.44	2.65	6	1
1:A:56:PHE:CE2	1:A:157:LYS:HE3	0.44	2.47	20	3
1:A:49:LEU:HD11	1:A:192:PRO:CG	0.44	2.42	15	1
1:A:57:ASP:HB2	1:A:156:GLU:OE1	0.44	2.13	16	1
1:A:151:HIS:HB2	1:A:156:GLU:OE2	0.44	2.12	16	1
1:A:172:MET:SD	1:A:177:LEU:O	0.44	2.75	16	1
1:A:174:LEU:O	1:A:202:LYS:HA	0.44	2.12	16	1
1:A:96:TYR:O	1:A:100:GLN:HG3	0.44	2.11	17	1
1:A:60:PHE:HE2	1:A:158:VAL:HG21	0.44	1.67	19	1
1:A:78:VAL:HG11	1:A:80:GLU:OE1	0.44	2.12	4	1
1:A:59:ALA:HB2	1:A:83:LEU:CD1	0.44	2.43	6	1
1:A:52:ARG:CG	1:A:210:ASP:HB2	0.44	2.43	7	1
1:A:193:ILE:CD1	1:A:208:LEU:CA	0.44	2.96	7	1
1:A:119:TRP:CE3	1:A:127:PRO:CA	0.44	3.00	12	1
1:A:48:ARG:CB	1:A:210:ASP:CG	0.44	2.86	17	1
1:A:94:ARG:HB2	1:A:136:THR:CG2	0.44	2.43	17	1
1:A:56:PHE:CE1	1:A:159:LEU:HD12	0.44	2.45	4	3
1:A:20:TRP:CD1	1:A:21:ASN:N	0.44	2.85	3	3
1:A:121:ARG:NE	1:A:121:ARG:HA	0.44	2.28	4	6
1:A:175:GLU:OE2	1:A:203:TYR:CZ	0.44	2.71	9	1
1:A:93:GLU:OE1	1:A:165:ASN:HB2	0.44	2.12	12	1
1:A:17:GLU:O	1:A:17:GLU:CG	0.44	2.66	17	1
1:A:195:TYR:CD1	1:A:207:GLU:HG3	0.44	2.48	1	1
1:A:61:THR:O	1:A:87:LYS:CA	0.44	2.66	21	8
1:A:193:ILE:HD11	1:A:208:LEU:HA	0.44	1.90	3	1
1:A:55:LYS:O	1:A:157:LYS:CD	0.44	2.65	6	1
1:A:43:LYS:HE2	1:A:77:GLU:CG	0.44	2.43	12	1
1:A:42:ALA:HB1	1:A:74:ILE:HG23	0.44	1.88	16	1
1:A:182:ILE:O	1:A:182:ILE:HD12	0.44	2.11	16	1
1:A:74:ILE:CG2	1:A:75:LEU:N	0.44	2.81	3	7
1:A:185:ARG:O	1:A:185:ARG:NH1	0.44	2.51	10	1
1:A:90:LYS:CE	1:A:143:TYR:HB2	0.44	2.43	12	1
1:A:61:THR:O	1:A:88:SER:N	0.44	2.46	17	2
1:A:34:LEU:CD2	1:A:39:ILE:HG13	0.44	2.43	17	1
1:A:185:ARG:O	1:A:186:GLU:C	0.44	2.56	19	1
1:A:80:GLU:HG2	1:A:83:LEU:HD13	0.44	1.89	20	1
1:A:164:GLY:O	1:A:168:ARG:CG	0.44	2.66	20	1
1:A:104:LYS:O	1:A:108:ARG:CG	0.44	2.66	11	7
1:A:191:VAL:CG2	1:A:191:VAL:O	0.44	2.66	14	9
1:A:94:ARG:NE	1:A:131:GLU:O	0.44	2.51	3	1
1:A:97:GLY:CA	1:A:129:ASN:OD1	0.44	2.66	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:123:TYR:CD1	1:A:123:TYR:C	0.44	2.92	9	2
1:A:143:TYR:O	1:A:147:THR:CB	0.44	2.66	9	1
1:A:203:TYR:CE1	1:A:206:LYS:HA	0.44	2.47	11	1
1:A:27:THR:HG21	1:A:66:ARG:CZ	0.44	2.43	12	1
1:A:167:LEU:O	1:A:168:ARG:C	0.44	2.56	12	1
1:A:37:THR:O	1:A:41:GLU:HG2	0.44	2.12	16	1
1:A:29:TRP:HB2	1:A:95:TYR:CD1	0.44	2.48	17	1
1:A:57:ASP:CA	1:A:83:LEU:HD21	0.44	2.43	19	1
1:A:123:TYR:CE2	1:A:172:MET:CE	0.44	3.01	19	1
1:A:61:THR:N	1:A:86:ILE:O	0.44	2.50	1	2
1:A:177:LEU:HD22	1:A:178:THR:CA	0.44	2.42	1	1
1:A:87:LYS:N	1:A:87:LYS:HD2	0.44	2.28	2	1
1:A:170:LEU:N	1:A:170:LEU:CD2	0.44	2.81	8	2
1:A:172:MET:HG3	1:A:173:ASP:N	0.44	2.28	13	5
1:A:178:THR:CG2	1:A:181:GLN:CB	0.44	2.92	5	2
1:A:36:GLU:O	1:A:40:LYS:HG2	0.44	2.12	16	2
1:A:60:PHE:CB	1:A:160:ILE:HG12	0.44	2.42	12	1
1:A:37:THR:HA	1:A:40:LYS:HG3	0.44	1.90	16	1
1:A:121:ARG:O	1:A:183:VAL:HG11	0.44	2.12	16	1
1:A:41:GLU:CG	1:A:190:GLY:CA	0.44	2.95	20	1
1:A:170:LEU:CD1	1:A:174:LEU:HD22	0.44	2.43	21	1
1:A:9:LEU:O	1:A:157:LYS:CB	0.43	2.66	11	2
1:A:60:PHE:CD1	1:A:86:ILE:HD12	0.43	2.46	2	1
1:A:111:TRP:O	1:A:115:GLN:HB2	0.43	2.13	20	10
1:A:55:LYS:O	1:A:157:LYS:HD2	0.43	2.13	12	4
1:A:191:VAL:CG1	1:A:211:ASN:ND2	0.43	2.81	7	1
1:A:54:TYR:HE2	1:A:194:VAL:HG21	0.43	1.72	10	1
1:A:59:ALA:HB2	1:A:83:LEU:HD23	0.43	1.90	11	1
1:A:111:TRP:HB3	1:A:115:GLN:CD	0.43	2.34	12	1
1:A:120:ARG:CD	1:A:121:ARG:HG2	0.43	2.42	17	3
1:A:25:LEU:HD23	1:A:103:ASN:CA	0.43	2.42	16	1
1:A:199:LYS:CD	1:A:199:LYS:C	0.43	2.86	16	1
1:A:29:TRP:HB2	1:A:95:TYR:CE1	0.43	2.47	17	1
1:A:137:ALA:N	1:A:169:ALA:HB1	0.43	2.28	17	1
1:A:159:LEU:HD12	1:A:160:ILE:H	0.43	1.73	17	1
1:A:34:LEU:HD22	1:A:70:THR:OG1	0.43	2.13	19	1
1:A:122:SER:HB2	1:A:125:ILE:HG22	0.43	1.90	20	1
1:A:36:GLU:O	1:A:40:LYS:CG	0.43	2.66	7	5
1:A:163:HIS:N	1:A:166:SER:OG	0.43	2.51	2	1
1:A:57:ASP:OD2	1:A:157:LYS:N	0.43	2.51	6	1
1:A:123:TYR:O	1:A:133:LEU:CB	0.43	2.66	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:193:ILE:CD1	1:A:195:TYR:CZ	0.43	3.01	11	1
1:A:79:GLY:C	1:A:81:PRO:CD	0.43	2.87	12	1
1:A:193:ILE:CD1	1:A:207:GLU:HB2	0.43	2.43	16	2
1:A:93:GLU:OE2	1:A:165:ASN:CG	0.43	2.56	17	1
1:A:111:TRP:HB2	1:A:116:VAL:HG12	0.43	1.91	21	1
1:A:144:TYR:CD2	1:A:170:LEU:HD21	0.43	2.48	21	1
1:A:141:LEU:O	1:A:145:LYS:CG	0.43	2.67	2	5
1:A:171:ILE:HG21	1:A:185:ARG:CZ	0.43	2.44	19	2
1:A:153:LEU:CD2	1:A:199:LYS:O	0.43	2.67	7	4
1:A:50:LYS:CE	1:A:78:VAL:O	0.43	2.67	5	3
1:A:10:LEU:HD23	1:A:160:ILE:CD1	0.43	2.43	6	2
1:A:120:ARG:C	1:A:120:ARG:CD	0.43	2.87	7	1
1:A:191:VAL:O	1:A:191:VAL:CG2	0.43	2.66	20	3
1:A:99:LEU:O	1:A:101:GLY:N	0.43	2.51	11	2
1:A:89:GLU:O	1:A:92:ASN:CG	0.43	2.56	12	2
1:A:202:LYS:O	1:A:203:TYR:C	0.43	2.56	16	2
1:A:29:TRP:CG	1:A:95:TYR:CD1	0.43	3.06	19	1
1:A:197:LEU:HD13	1:A:201:GLY:C	0.43	2.33	1	1
1:A:27:THR:O	1:A:100:GLN:CG	0.43	2.67	15	2
1:A:56:PHE:CE1	1:A:159:LEU:CG	0.43	3.02	18	2
1:A:143:TYR:CG	1:A:144:TYR:N	0.43	2.86	4	2
1:A:175:GLU:HA	1:A:203:TYR:CD1	0.43	2.48	7	2
1:A:20:TRP:CZ3	1:A:101:GLY:HA2	0.43	2.48	8	5
1:A:60:PHE:CD1	1:A:86:ILE:CG2	0.43	3.01	16	3
1:A:121:ARG:O	1:A:168:ARG:NH1	0.43	2.51	9	1
1:A:193:ILE:CG2	1:A:194:VAL:N	0.43	2.81	10	1
1:A:195:TYR:CD1	1:A:207:GLU:O	0.43	2.71	11	1
1:A:207:GLU:HG3	1:A:208:LEU:N	0.43	2.29	11	1
1:A:162:ALA:O	1:A:163:HIS:ND1	0.43	2.51	12	1
1:A:8:ASN:OD1	1:A:8:ASN:C	0.43	2.56	16	1
1:A:57:ASP:HB2	1:A:156:GLU:CG	0.43	2.43	17	1
1:A:107:ALA:O	1:A:111:TRP:CB	0.43	2.65	18	1
1:A:12:LEU:CD1	1:A:195:TYR:CZ	0.43	3.01	1	1
1:A:58:ILE:CG2	1:A:158:VAL:CG2	0.43	2.94	1	2
1:A:90:LYS:CG	1:A:139:ARG:O	0.43	2.66	1	4
1:A:133:LEU:HD12	1:A:165:ASN:OD1	0.43	2.13	1	1
1:A:48:ARG:O	1:A:52:ARG:NH1	0.43	2.52	2	2
1:A:194:VAL:O	1:A:207:GLU:CB	0.43	2.66	18	5
1:A:23:LEU:HB3	1:A:25:LEU:HD21	0.43	1.89	3	1
1:A:196:HIS:CB	1:A:205:SER:OG	0.43	2.67	18	2
1:A:44:LEU:O	1:A:48:ARG:CB	0.43	2.66	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:71:CYS:O	1:A:75:LEU:HG	0.43	2.13	16	1
1:A:43:LYS:HD2	1:A:73:ILE:CG2	0.43	2.42	17	1
1:A:194:VAL:O	1:A:194:VAL:HG13	0.43	2.13	21	1
1:A:157:LYS:NZ	1:A:158:VAL:N	0.43	2.66	6	1
1:A:171:ILE:HG13	1:A:195:TYR:CZ	0.43	2.48	6	1
1:A:131:GLU:HG2	1:A:132:SER:N	0.43	2.29	9	2
1:A:19:GLU:N	1:A:19:GLU:OE1	0.43	2.52	10	1
1:A:34:LEU:HD11	1:A:38:GLY:HA3	0.43	1.89	11	1
1:A:10:LEU:CD2	1:A:144:TYR:OH	0.43	2.67	18	4
1:A:70:THR:O	1:A:74:ILE:CG2	0.43	2.66	13	1
1:A:50:LYS:HD3	1:A:78:VAL:O	0.43	2.13	16	1
1:A:197:LEU:HA	1:A:202:LYS:O	0.43	2.14	16	1
1:A:43:LYS:O	1:A:77:GLU:OE1	0.43	2.36	17	1
1:A:61:THR:CG2	1:A:161:ALA:HB3	0.43	2.38	3	2
1:A:92:ASN:C	1:A:163:HIS:CD2	0.43	2.92	3	3
1:A:138:GLU:O	1:A:142:PRO:CD	0.43	2.66	3	6
1:A:194:VAL:CG1	1:A:208:LEU:O	0.43	2.66	3	1
1:A:198:ASP:OD2	1:A:204:VAL:CG1	0.43	2.67	6	8
1:A:206:LYS:N	1:A:206:LYS:CD	0.43	2.82	3	1
1:A:149:VAL:O	1:A:153:LEU:CD1	0.43	2.65	4	1
1:A:143:TYR:O	1:A:147:THR:CG2	0.43	2.67	5	3
1:A:193:ILE:HG23	1:A:207:GLU:HB2	0.43	1.91	21	2
1:A:205:SER:OG	1:A:206:LYS:N	0.43	2.52	18	2
1:A:171:ILE:HG21	1:A:185:ARG:NE	0.43	2.27	13	1
1:A:171:ILE:CD1	1:A:175:GLU:HG3	0.43	2.44	16	1
1:A:197:LEU:HD13	1:A:202:LYS:CA	0.43	2.44	16	1
1:A:71:CYS:HA	1:A:74:ILE:CG2	0.43	2.44	17	1
1:A:75:LEU:CD1	1:A:85:THR:OG1	0.43	2.67	11	5
1:A:90:LYS:CD	1:A:139:ARG:O	0.43	2.67	21	8
1:A:163:HIS:O	1:A:167:LEU:CD1	0.43	2.66	3	5
1:A:112:GLY:O	1:A:116:VAL:CG2	0.43	2.66	3	1
1:A:62:SER:OG	1:A:67:ALA:CB	0.43	2.67	10	2
1:A:96:TYR:O	1:A:100:GLN:N	0.43	2.51	6	1
1:A:19:GLU:O	1:A:23:LEU:HD13	0.43	2.14	7	1
1:A:75:LEU:HD22	1:A:83:LEU:HB3	0.43	1.91	7	1
1:A:122:SER:O	1:A:183:VAL:CG1	0.43	2.66	7	1
1:A:195:TYR:CE2	1:A:207:GLU:CD	0.43	2.92	18	2
1:A:142:PRO:O	1:A:146:SER:HB3	0.43	2.13	12	2
1:A:185:ARG:NH1	1:A:185:ARG:HG3	0.43	2.28	12	1
1:A:25:LEU:HA	1:A:102:LEU:O	0.43	2.13	17	1
1:A:58:ILE:HD13	1:A:59:ALA:N	0.43	2.28	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:181:GLN:O	1:A:184:LYS:CG	0.43	2.67	2	2
1:A:185:ARG:NH2	1:A:187:LEU:CD2	0.43	2.80	2	1
1:A:120:ARG:HG2	1:A:121:ARG:N	0.43	2.28	3	1
1:A:59:ALA:O	1:A:86:ILE:CG2	0.43	2.67	8	2
1:A:111:TRP:CD1	1:A:115:GLN:HG2	0.43	2.49	4	4
1:A:144:TYR:OH	1:A:197:LEU:CD1	0.43	2.67	4	2
1:A:210:ASP:OD1	1:A:211:ASN:N	0.43	2.51	6	1
1:A:14:ARG:HD3	1:A:187:LEU:CD1	0.43	2.35	12	1
1:A:74:ILE:C	1:A:74:ILE:CD1	0.43	2.81	12	1
1:A:131:GLU:HB3	1:A:136:THR:CG2	0.43	2.43	12	1
1:A:32:PRO:HG2	1:A:66:ARG:CD	0.43	2.44	16	1
1:A:58:ILE:HG12	1:A:156:GLU:CD	0.43	2.34	16	1
1:A:133:LEU:O	1:A:136:THR:OG1	0.43	2.36	17	1
1:A:91:LEU:CD1	1:A:91:LEU:O	0.43	2.67	19	1
1:A:193:ILE:CA	1:A:209:ILE:HD11	0.43	2.44	19	1
1:A:160:ILE:HG21	1:A:170:LEU:CD2	0.43	2.44	20	1
1:A:171:ILE:HD13	1:A:171:ILE:O	0.43	2.14	20	1
1:A:107:ALA:O	1:A:116:VAL:CG2	0.43	2.67	7	3
1:A:111:TRP:CB	1:A:116:VAL:HG23	0.43	2.44	2	1
1:A:75:LEU:HD11	1:A:85:THR:HG23	0.43	1.90	4	1
1:A:86:ILE:HG12	1:A:87:LYS:N	0.43	2.28	8	5
1:A:175:GLU:OE2	1:A:177:LEU:N	0.43	2.52	7	1
1:A:60:PHE:CE1	1:A:86:ILE:CG2	0.43	2.97	17	4
1:A:93:GLU:HB2	1:A:163:HIS:CD2	0.43	2.49	11	1
1:A:197:LEU:HD22	1:A:203:TYR:CA	0.43	2.43	11	1
1:A:24:ASN:O	1:A:103:ASN:HA	0.43	2.14	12	2
1:A:171:ILE:O	1:A:175:GLU:CB	0.43	2.67	13	1
1:A:75:LEU:O	1:A:78:VAL:CG2	0.43	2.67	15	2
1:A:58:ILE:HG13	1:A:156:GLU:OE2	0.43	2.14	16	1
1:A:187:LEU:CD2	1:A:187:LEU:C	0.43	2.87	16	1
1:A:71:CYS:SG	1:A:75:LEU:HD23	0.43	2.54	17	1
1:A:94:ARG:HG2	1:A:95:TYR:N	0.43	2.29	17	1
1:A:8:ASN:ND2	1:A:156:GLU:O	0.42	2.52	15	3
1:A:174:LEU:O	1:A:202:LYS:CG	0.42	2.67	11	3
1:A:45:GLY:O	1:A:49:LEU:N	0.42	2.51	3	3
1:A:134:LYS:O	1:A:138:GLU:CG	0.42	2.67	8	4
1:A:145:LYS:O	1:A:149:VAL:CG2	0.42	2.62	9	1
1:A:8:ASN:CG	1:A:152:ILE:O	0.42	2.57	12	1
1:A:23:LEU:O	1:A:24:ASN:OD1	0.42	2.36	12	1
1:A:193:ILE:HG13	1:A:194:VAL:N	0.42	2.29	12	1
1:A:73:ILE:O	1:A:76:GLU:CG	0.42	2.67	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:80:GLU:O	1:A:80:GLU:CG	0.42	2.67	13	1
1:A:81:PRO:O	1:A:82:ASN:C	0.42	2.58	16	1
1:A:148:ILE:O	1:A:152:ILE:HG12	0.42	2.13	16	1
1:A:27:THR:CG2	1:A:28:GLY:N	0.42	2.77	17	1
1:A:198:ASP:HB3	1:A:204:VAL:CG1	0.42	2.44	17	1
1:A:114:GLU:O	1:A:117:GLN:CB	0.42	2.67	18	1
1:A:43:LYS:CE	1:A:73:ILE:CG2	0.42	2.97	19	1
1:A:148:ILE:O	1:A:152:ILE:CG2	0.42	2.67	21	5
1:A:175:GLU:CG	1:A:203:TYR:CD2	0.42	3.02	3	1
1:A:196:HIS:O	1:A:204:VAL:CG2	0.42	2.66	4	3
1:A:192:PRO:C	1:A:209:ILE:HD13	0.42	2.34	8	1
1:A:92:ASN:O	1:A:139:ARG:NH2	0.42	2.52	11	1
1:A:172:MET:O	1:A:177:LEU:N	0.42	2.52	11	1
1:A:49:LEU:CD2	1:A:54:TYR:O	0.42	2.67	14	1
1:A:209:ILE:HG22	1:A:210:ASP:N	0.42	2.30	14	1
1:A:95:TYR:CE1	1:A:100:GLN:CD	0.42	2.92	21	2
1:A:58:ILE:HG13	1:A:156:GLU:CD	0.42	2.34	17	1
1:A:141:LEU:O	1:A:144:TYR:HB3	0.42	2.14	17	1
1:A:114:GLU:O	1:A:115:GLN:HG2	0.42	2.14	18	1
1:A:174:LEU:CD2	1:A:201:GLY:O	0.42	2.67	18	1
1:A:111:TRP:O	1:A:112:GLY:O	0.42	2.37	10	8
1:A:126:ALA:CB	1:A:130:GLY:O	0.42	2.68	1	1
1:A:49:LEU:CD1	1:A:54:TYR:O	0.42	2.67	2	1
1:A:145:LYS:HA	1:A:149:VAL:CG1	0.42	2.44	9	2
1:A:194:VAL:HG22	1:A:195:TYR:N	0.42	2.28	3	1
1:A:209:ILE:HG22	1:A:211:ASN:N	0.42	2.30	3	1
1:A:93:GLU:OE1	1:A:163:HIS:CB	0.42	2.68	9	2
1:A:94:ARG:CD	1:A:131:GLU:O	0.42	2.67	14	2
1:A:121:ARG:CZ	1:A:168:ARG:NE	0.42	2.82	7	1
1:A:195:TYR:CE2	1:A:207:GLU:HG3	0.42	2.49	7	1
1:A:167:LEU:HD23	1:A:167:LEU:H	0.42	1.71	8	1
1:A:13:THR:CG2	1:A:159:LEU:CD2	0.42	2.92	10	1
1:A:20:TRP:O	1:A:25:LEU:CD1	0.42	2.68	11	1
1:A:208:LEU:O	1:A:209:ILE:CB	0.42	2.68	11	1
1:A:8:ASN:OD1	1:A:152:ILE:O	0.42	2.37	12	1
1:A:203:TYR:C	1:A:203:TYR:CD1	0.42	2.91	12	1
1:A:58:ILE:HD11	1:A:156:GLU:OE2	0.42	2.14	16	1
1:A:43:LYS:HD2	1:A:73:ILE:HG23	0.42	1.85	17	1
1:A:58:ILE:HG13	1:A:156:GLU:OE1	0.42	2.15	17	1
1:A:71:CYS:SG	1:A:75:LEU:CD2	0.42	3.07	17	1
1:A:105:ASP:O	1:A:109:LYS:CG	0.42	2.67	6	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:94:ARG:NH2	1:A:96:TYR:OH	0.42	2.53	8	3
1:A:23:LEU:HB2	1:A:25:LEU:HD11	0.42	1.90	14	2
1:A:52:ARG:CG	1:A:210:ASP:HB3	0.42	2.44	7	2
1:A:145:LYS:O	1:A:149:VAL:HB	0.42	2.13	10	7
1:A:10:LEU:HD23	1:A:12:LEU:HD21	0.42	1.91	11	1
1:A:56:PHE:O	1:A:83:LEU:CD1	0.42	2.67	11	1
1:A:71:CYS:O	1:A:75:LEU:HB2	0.42	2.14	16	2
1:A:74:ILE:HD12	1:A:75:LEU:CA	0.42	2.45	12	1
1:A:58:ILE:HB	1:A:158:VAL:CG1	0.42	2.45	13	1
1:A:177:LEU:HD23	1:A:182:ILE:HD13	0.42	1.91	15	2
1:A:37:THR:HA	1:A:40:LYS:CD	0.42	2.44	16	1
1:A:51:SER:O	1:A:52:ARG:CZ	0.42	2.68	20	1
1:A:20:TRP:CZ3	1:A:27:THR:N	0.42	2.87	21	1
1:A:141:LEU:O	1:A:145:LYS:N	0.42	2.51	2	2
1:A:58:ILE:HG21	1:A:60:PHE:CE1	0.42	2.49	3	1
1:A:80:GLU:O	1:A:82:ASN:N	0.42	2.53	3	1
1:A:95:TYR:O	1:A:131:GLU:N	0.42	2.51	14	3
1:A:121:ARG:O	1:A:183:VAL:CG1	0.42	2.67	3	2
1:A:27:THR:O	1:A:30:LYS:CG	0.42	2.68	21	2
1:A:174:LEU:O	1:A:174:LEU:CD1	0.42	2.67	4	1
1:A:107:ALA:O	1:A:116:VAL:CG1	0.42	2.68	6	2
1:A:209:ILE:CG2	1:A:211:ASN:OD1	0.42	2.68	6	2
1:A:26:PHE:O	1:A:101:GLY:N	0.42	2.53	7	2
1:A:26:PHE:CE2	1:A:96:TYR:CE1	0.42	3.07	7	1
1:A:118:ILE:O	1:A:122:SER:OG	0.42	2.38	7	1
1:A:30:LYS:CE	1:A:30:LYS:O	0.42	2.67	8	1
1:A:11:VAL:CG2	1:A:194:VAL:CG1	0.42	2.82	12	1
1:A:29:TRP:O	1:A:64:LEU:HD21	0.42	2.14	12	1
1:A:43:LYS:O	1:A:47:GLU:CB	0.42	2.68	12	1
1:A:73:ILE:O	1:A:77:GLU:CG	0.42	2.68	19	2
1:A:187:LEU:H	1:A:187:LEU:HD23	0.42	1.74	15	1
1:A:182:ILE:HG23	1:A:183:VAL:N	0.42	2.29	16	1
1:A:48:ARG:CD	1:A:211:ASN:OD1	0.42	2.68	17	1
1:A:115:GLN:C	1:A:117:GLN:N	0.42	2.72	18	1
1:A:126:ALA:HB2	1:A:131:GLU:C	0.42	2.34	20	1
1:A:113:ALA:CA	1:A:116:VAL:HG22	0.42	2.44	21	1
1:A:11:VAL:N	1:A:158:VAL:O	0.42	2.49	1	2
1:A:144:TYR:O	1:A:148:ILE:CB	0.42	2.67	13	5
1:A:23:LEU:CB	1:A:25:LEU:HD11	0.42	2.44	2	2
1:A:99:LEU:CD1	1:A:127:PRO:HB3	0.42	2.45	3	1
1:A:91:LEU:CD2	1:A:162:ALA:HB2	0.42	2.43	20	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:ARG:HB3	1:A:210:ASP:CB	0.42	2.45	6	1
1:A:120:ARG:HD2	1:A:121:ARG:N	0.42	2.29	7	1
1:A:157:LYS:NZ	1:A:157:LYS:O	0.42	2.51	7	2
1:A:175:GLU:HB3	1:A:177:LEU:HD13	0.42	1.90	8	1
1:A:11:VAL:O	1:A:12:LEU:HD23	0.42	2.12	11	1
1:A:177:LEU:HG	1:A:182:ILE:HD13	0.42	1.90	12	1
1:A:15:HIS:O	1:A:16:GLY:C	0.42	2.57	16	1
1:A:6:ALA:O	1:A:198:ASP:C	0.42	2.58	17	1
1:A:131:GLU:OE2	1:A:139:ARG:NH2	0.42	2.53	18	1
1:A:20:TRP:CG	1:A:30:LYS:NZ	0.42	2.87	1	1
1:A:32:PRO:O	1:A:65:GLN:NE2	0.42	2.53	10	4
1:A:68:GLN:O	1:A:72:GLN:NE2	0.42	2.53	19	6
1:A:188:ALA:O	1:A:189:THR:O	0.42	2.38	20	2
1:A:194:VAL:O	1:A:207:GLU:HB3	0.42	2.15	3	1
1:A:137:ALA:O	1:A:141:LEU:HG	0.42	2.14	9	3
1:A:96:TYR:O	1:A:100:GLN:CG	0.42	2.68	6	2
1:A:26:PHE:CD2	1:A:96:TYR:CE1	0.42	3.07	7	1
1:A:144:TYR:OH	1:A:174:LEU:CD2	0.42	2.68	7	1
1:A:92:ASN:OD1	1:A:92:ASN:N	0.42	2.53	8	2
1:A:9:LEU:CD2	1:A:54:TYR:CE2	0.42	3.02	10	1
1:A:168:ARG:HD3	1:A:185:ARG:CZ	0.42	2.44	10	1
1:A:29:TRP:CD1	1:A:95:TYR:CA	0.42	3.02	11	1
1:A:119:TRP:CH2	1:A:128:PRO:HD3	0.42	2.49	11	1
1:A:89:GLU:OE2	1:A:90:LYS:HG3	0.42	2.15	12	1
1:A:97:GLY:HA3	1:A:129:ASN:O	0.42	2.14	12	2
1:A:185:ARG:O	1:A:185:ARG:NE	0.42	2.53	15	1
1:A:123:TYR:O	1:A:133:LEU:HB3	0.42	2.14	16	1
1:A:122:SER:HB2	1:A:125:ILE:HG23	0.42	1.90	17	1
1:A:151:HIS:HB2	1:A:156:GLU:OE1	0.42	2.14	17	1
1:A:207:GLU:O	1:A:208:LEU:CD1	0.42	2.68	18	1
1:A:157:LYS:NZ	1:A:159:LEU:N	0.42	2.67	19	1
1:A:29:TRP:N	1:A:100:GLN:OE1	0.42	2.52	21	1
1:A:103:ASN:OD1	1:A:105:ASP:CB	0.42	2.68	1	1
1:A:10:LEU:CD1	1:A:158:VAL:CG2	0.42	2.98	2	1
1:A:94:ARG:NH1	1:A:165:ASN:OD1	0.42	2.52	3	1
1:A:141:LEU:HD22	1:A:173:ASP:CG	0.42	2.35	4	1
1:A:65:GLN:CG	1:A:66:ARG:N	0.42	2.82	5	1
1:A:187:LEU:HD21	1:A:193:ILE:CG2	0.42	2.44	17	2
1:A:106:ASP:O	1:A:110:LYS:N	0.42	2.53	11	3
1:A:14:ARG:NE	1:A:187:LEU:HB2	0.42	2.28	12	1
1:A:141:LEU:HA	1:A:170:LEU:HD11	0.42	1.91	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:174:LEU:HD21	1:A:197:LEU:HD21	0.42	1.90	12	1
1:A:196:HIS:C	1:A:197:LEU:HD12	0.42	2.35	12	1
1:A:168:ARG:NH1	1:A:182:ILE:O	0.42	2.53	15	1
1:A:28:GLY:CA	1:A:96:TYR:HB2	0.42	2.44	17	1
1:A:48:ARG:HD3	1:A:211:ASN:OD1	0.42	2.15	17	1
1:A:61:THR:CB	1:A:87:LYS:HG3	0.42	2.44	19	1
1:A:71:CYS:SG	1:A:75:LEU:HD11	0.42	2.55	20	1
1:A:74:ILE:CD1	1:A:78:VAL:HG21	0.42	2.45	2	1
1:A:116:VAL:HG12	1:A:120:ARG:CD	0.42	2.44	3	1
1:A:144:TYR:OH	1:A:197:LEU:HD11	0.42	2.15	4	1
1:A:71:CYS:O	1:A:74:ILE:CG2	0.42	2.67	7	1
1:A:75:LEU:CD1	1:A:80:GLU:O	0.42	2.67	8	1
1:A:93:GLU:OE1	1:A:165:ASN:ND2	0.42	2.53	11	1
1:A:12:LEU:HD23	1:A:160:ILE:CG2	0.42	2.45	12	1
1:A:86:ILE:O	1:A:86:ILE:HG13	0.42	2.13	12	1
1:A:102:LEU:C	1:A:102:LEU:CD2	0.42	2.88	13	1
1:A:56:PHE:CE2	1:A:159:LEU:CG	0.42	3.03	15	1
1:A:193:ILE:HD13	1:A:194:VAL:C	0.42	2.35	15	2
1:A:75:LEU:HA	1:A:78:VAL:CG2	0.42	2.45	17	1
1:A:92:ASN:HA	1:A:163:HIS:NE2	0.42	2.30	17	1
1:A:104:LYS:O	1:A:108:ARG:HG2	0.42	2.15	17	1
1:A:115:GLN:HG2	1:A:119:TRP:NE1	0.42	2.29	17	1
1:A:175:GLU:O	1:A:203:TYR:CD1	0.42	2.73	20	1
1:A:174:LEU:HD22	1:A:197:LEU:CD1	0.42	2.42	7	2
1:A:40:LYS:O	1:A:44:LEU:CB	0.42	2.68	2	2
1:A:52:ARG:CZ	1:A:210:ASP:HB3	0.42	2.45	2	1
1:A:46:GLY:O	1:A:49:LEU:N	0.42	2.53	3	1
1:A:75:LEU:HD13	1:A:85:THR:CG2	0.42	2.45	3	1
1:A:96:TYR:CD2	1:A:99:LEU:HB2	0.42	2.50	3	1
1:A:47:GLU:O	1:A:51:SER:N	0.42	2.53	19	2
1:A:75:LEU:CD2	1:A:83:LEU:HD12	0.42	2.42	6	1
1:A:196:HIS:CD2	1:A:204:VAL:HG23	0.42	2.49	6	1
1:A:194:VAL:O	1:A:194:VAL:CG2	0.42	2.67	8	1
1:A:124:ASP:OD1	1:A:125:ILE:N	0.42	2.53	11	2
1:A:90:LYS:O	1:A:139:ARG:CZ	0.42	2.68	11	1
1:A:177:LEU:HG	1:A:182:ILE:CD1	0.42	2.44	12	1
1:A:194:VAL:O	1:A:207:GLU:HA	0.42	2.14	12	2
1:A:74:ILE:HG23	1:A:75:LEU:N	0.42	2.29	13	1
1:A:56:PHE:C	1:A:83:LEU:HD13	0.42	2.35	14	1
1:A:67:ALA:O	1:A:71:CYS:N	0.42	2.52	15	1
1:A:144:TYR:CG	1:A:148:ILE:HD12	0.42	2.50	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:136:THR:O	1:A:137:ALA:C	0.42	2.58	16	1
1:A:17:GLU:CD	1:A:37:THR:CG2	0.42	2.88	17	1
1:A:48:ARG:O	1:A:52:ARG:HG2	0.42	2.15	17	1
1:A:181:GLN:O	1:A:184:LYS:CD	0.42	2.68	18	1
1:A:48:ARG:CG	1:A:210:ASP:CB	0.42	2.98	19	1
1:A:97:GLY:N	1:A:130:GLY:HA2	0.42	2.30	20	1
1:A:118:ILE:O	1:A:125:ILE:CG2	0.41	2.68	1	1
1:A:197:LEU:HD13	1:A:201:GLY:O	0.41	2.15	1	1
1:A:134:LYS:O	1:A:138:GLU:CB	0.41	2.68	14	3
1:A:172:MET:CB	1:A:182:ILE:HD13	0.41	2.45	4	1
1:A:46:GLY:CA	1:A:74:ILE:HG13	0.41	2.45	11	2
1:A:56:PHE:CZ	1:A:159:LEU:HB2	0.41	2.51	8	2
1:A:50:LYS:O	1:A:51:SER:C	0.41	2.59	12	1
1:A:111:TRP:CB	1:A:115:GLN:CD	0.41	2.88	12	1
1:A:152:ILE:HD12	1:A:153:LEU:HG	0.41	1.92	16	1
1:A:120:ARG:HD3	1:A:121:ARG:NH1	0.41	2.30	17	1
1:A:125:ILE:HG12	1:A:126:ALA:N	0.41	2.28	17	1
1:A:60:PHE:O	1:A:161:ALA:N	0.41	2.51	1	1
1:A:122:SER:O	1:A:123:TYR:CB	0.41	2.68	1	2
1:A:56:PHE:HA	1:A:157:LYS:HE2	0.41	1.91	2	1
1:A:27:THR:HG22	1:A:30:LYS:HZ3	0.41	1.73	7	1
1:A:52:ARG:NE	1:A:211:ASN:OXT	0.41	2.53	11	1
1:A:56:PHE:O	1:A:83:LEU:HD13	0.41	2.15	11	1
1:A:193:ILE:HD12	1:A:195:TYR:CZ	0.41	2.49	16	2
1:A:71:CYS:O	1:A:74:ILE:HG13	0.41	2.13	12	1
1:A:93:GLU:OE1	1:A:163:HIS:HB2	0.41	2.15	12	1
1:A:120:ARG:NH1	1:A:120:ARG:HB2	0.41	2.30	12	1
1:A:174:LEU:CD2	1:A:197:LEU:HD21	0.41	2.45	12	1
1:A:123:TYR:OH	1:A:172:MET:CE	0.41	2.69	16	1
1:A:131:GLU:OE2	1:A:139:ARG:CZ	0.41	2.68	16	1
1:A:144:TYR:O	1:A:145:LYS:C	0.41	2.58	16	1
1:A:8:ASN:OD1	1:A:197:LEU:CD2	0.41	2.66	18	1
1:A:111:TRP:CG	1:A:116:VAL:HG12	0.41	2.50	18	1
1:A:8:ASN:O	1:A:197:LEU:CD2	0.41	2.68	19	1
1:A:142:PRO:O	1:A:146:SER:N	0.41	2.53	21	4
1:A:195:TYR:CD1	1:A:195:TYR:N	0.41	2.87	4	2
1:A:198:ASP:OD1	1:A:202:LYS:N	0.41	2.53	13	2
1:A:191:VAL:HG11	1:A:211:ASN:ND2	0.41	2.30	7	1
1:A:145:LYS:C	1:A:149:VAL:HG13	0.41	2.36	9	1
1:A:86:ILE:C	1:A:87:LYS:HE2	0.41	2.36	12	1
1:A:94:ARG:NH1	1:A:94:ARG:HB3	0.41	2.30	16	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:196:HIS:HB3	1:A:205:SER:CB	0.41	2.46	16	1
1:A:8:ASN:OD1	1:A:197:LEU:CB	0.41	2.68	17	1
1:A:14:ARG:O	1:A:15:HIS:C	0.41	2.58	17	1
1:A:50:LYS:CE	1:A:77:GLU:O	0.41	2.67	18	1
1:A:112:GLY:O	1:A:115:GLN:CA	0.41	2.68	18	1
1:A:85:THR:O	1:A:87:LYS:NZ	0.41	2.52	19	1
1:A:102:LEU:HD21	1:A:107:ALA:N	0.41	2.30	21	1
1:A:102:LEU:CD2	1:A:102:LEU:C	0.41	2.88	1	1
1:A:65:GLN:OE1	1:A:66:ARG:N	0.41	2.53	2	1
1:A:75:LEU:HA	1:A:79:GLY:H	0.41	1.75	3	1
1:A:204:VAL:O	1:A:205:SER:CB	0.41	2.69	3	1
1:A:94:ARG:NH1	1:A:120:ARG:O	0.41	2.53	6	1
1:A:19:GLU:O	1:A:23:LEU:CD1	0.41	2.68	7	1
1:A:177:LEU:CD2	1:A:179:GLY:N	0.41	2.84	9	1
1:A:182:ILE:O	1:A:182:ILE:CD1	0.41	2.68	9	1
1:A:94:ARG:CB	1:A:165:ASN:CG	0.41	2.89	12	1
1:A:147:THR:O	1:A:147:THR:CG2	0.41	2.68	12	1
1:A:37:THR:HG22	1:A:41:GLU:OE2	0.41	2.15	13	1
1:A:131:GLU:OE2	1:A:136:THR:CG2	0.41	2.68	15	1
1:A:140:VAL:C	1:A:142:PRO:CD	0.41	2.88	17	2
1:A:35:SER:O	1:A:36:GLU:C	0.41	2.59	17	1
1:A:65:GLN:OE1	1:A:69:LYS:NZ	0.41	2.54	17	1
1:A:193:ILE:CD1	1:A:209:ILE:HG12	0.41	2.45	19	1
1:A:195:TYR:CE1	1:A:207:GLU:HB3	0.41	2.50	21	1
1:A:122:SER:O	1:A:123:TYR:HB2	0.41	2.15	1	1
1:A:160:ILE:HG21	1:A:170:LEU:HD12	0.41	1.91	2	1
1:A:31:ASP:N	1:A:31:ASP:OD1	0.41	2.53	8	1
1:A:208:LEU:O	1:A:209:ILE:HG12	0.41	2.16	11	1
1:A:60:PHE:HA	1:A:86:ILE:CG1	0.41	2.44	12	1
1:A:113:ALA:O	1:A:117:GLN:HB3	0.41	2.16	16	2
1:A:177:LEU:HG	1:A:182:ILE:HB	0.41	1.92	12	1
1:A:52:ARG:HD2	1:A:210:ASP:HB2	0.41	1.93	16	1
1:A:102:LEU:HD12	1:A:107:ALA:CB	0.41	2.40	16	1
1:A:142:PRO:HA	1:A:145:LYS:CG	0.41	2.46	16	1
1:A:16:GLY:O	1:A:34:LEU:HD12	0.41	2.16	17	1
1:A:20:TRP:CZ2	1:A:32:PRO:HG2	0.41	2.51	17	1
1:A:50:LYS:HE3	1:A:78:VAL:O	0.41	2.15	17	1
1:A:75:LEU:CA	1:A:78:VAL:HG22	0.41	2.45	17	1
1:A:178:THR:CG2	1:A:181:GLN:HB2	0.41	2.46	17	2
1:A:152:ILE:CD1	1:A:199:LYS:O	0.41	2.69	19	1
1:A:125:ILE:O	1:A:125:ILE:HG23	0.41	2.16	20	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:TRP:CZ3	1:A:26:PHE:C	0.41	2.94	21	1
1:A:48:ARG:NE	1:A:211:ASN:OD1	0.41	2.53	21	1
1:A:58:ILE:HG23	1:A:158:VAL:CG1	0.41	2.36	1	1
1:A:56:PHE:CZ	1:A:159:LEU:HG	0.41	2.50	3	1
1:A:95:TYR:O	1:A:130:GLY:CA	0.41	2.69	3	1
1:A:20:TRP:CZ3	1:A:30:LYS:HD2	0.41	2.50	4	1
1:A:163:HIS:O	1:A:164:GLY:C	0.41	2.58	12	1
1:A:11:VAL:HA	1:A:193:ILE:O	0.41	2.15	16	1
1:A:34:LEU:CD2	1:A:39:ILE:HD13	0.41	2.45	16	1
1:A:144:TYR:CD2	1:A:145:LYS:N	0.41	2.89	16	1
1:A:74:ILE:HD13	1:A:75:LEU:HD22	0.41	1.93	17	1
1:A:15:HIS:CE1	1:A:66:ARG:NH1	0.41	2.89	7	2
1:A:11:VAL:HG22	1:A:193:ILE:O	0.41	2.16	8	1
1:A:144:TYR:CD1	1:A:144:TYR:C	0.41	2.93	17	2
1:A:60:PHE:CZ	1:A:86:ILE:HD11	0.41	2.50	12	1
1:A:139:ARG:HD2	1:A:139:ARG:C	0.41	2.35	12	1
1:A:18:SER:HB3	1:A:20:TRP:CD1	0.41	2.51	17	1
1:A:163:HIS:O	1:A:167:LEU:HG	0.41	2.15	17	1
1:A:115:GLN:C	1:A:116:VAL:HG13	0.41	2.34	18	1
1:A:32:PRO:HG2	1:A:66:ARG:NE	0.41	2.31	20	1
1:A:9:LEU:HD11	1:A:194:VAL:HG22	0.41	1.92	21	1
1:A:75:LEU:HA	1:A:79:GLY:CA	0.41	2.46	3	1
1:A:75:LEU:HD13	1:A:85:THR:OG1	0.41	2.15	4	1
1:A:148:ILE:O	1:A:148:ILE:CG2	0.41	2.67	9	1
1:A:177:LEU:HD22	1:A:177:LEU:C	0.41	2.35	9	1
1:A:52:ARG:NH1	1:A:211:ASN:OXT	0.41	2.53	13	1
1:A:178:THR:HG22	1:A:181:GLN:CG	0.41	2.46	14	1
1:A:49:LEU:CD1	1:A:192:PRO:HG3	0.41	2.46	15	1
1:A:95:TYR:N	1:A:131:GLU:OE1	0.41	2.53	16	1
1:A:108:ARG:O	1:A:112:GLY:CA	0.41	2.69	16	1
1:A:112:GLY:O	1:A:116:VAL:N	0.41	2.47	16	1
1:A:83:LEU:O	1:A:85:THR:N	0.41	2.53	21	1
1:A:91:LEU:O	1:A:162:ALA:CB	0.41	2.68	1	1
1:A:187:LEU:HD22	1:A:187:LEU:C	0.41	2.36	1	1
1:A:10:LEU:CD1	1:A:158:VAL:HB	0.41	2.46	2	1
1:A:134:LYS:CE	1:A:135:ASP:OD1	0.41	2.69	2	1
1:A:10:LEU:HG	1:A:160:ILE:CD1	0.41	2.46	7	1
1:A:43:LYS:HD3	1:A:77:GLU:CG	0.41	2.45	7	1
1:A:11:VAL:HG13	1:A:193:ILE:O	0.41	2.16	10	1
1:A:143:TYR:CE1	1:A:148:ILE:CD1	0.41	3.02	10	1
1:A:168:ARG:HG2	1:A:185:ARG:CZ	0.41	2.46	10	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:50:LYS:CD	1:A:78:VAL:O	0.41	2.68	11	1
1:A:22:LYS:O	1:A:23:LEU:C	0.41	2.59	12	1
1:A:118:ILE:HD12	1:A:119:TRP:CZ3	0.41	2.51	12	1
1:A:184:LYS:O	1:A:184:LYS:HG3	0.41	2.15	12	1
1:A:138:GLU:OE1	1:A:138:GLU:CA	0.41	2.69	13	1
1:A:175:GLU:N	1:A:175:GLU:OE1	0.41	2.53	14	1
1:A:46:GLY:O	1:A:78:VAL:HG12	0.41	2.15	16	1
1:A:16:GLY:HA3	1:A:38:GLY:HA2	0.41	1.93	17	1
1:A:56:PHE:CE1	1:A:159:LEU:CA	0.41	3.04	17	1
1:A:74:ILE:HA	1:A:77:GLU:HG2	0.41	1.91	17	1
1:A:54:TYR:CE2	1:A:194:VAL:HG21	0.41	2.51	19	1
1:A:194:VAL:CG1	1:A:208:LEU:HB3	0.41	2.46	19	1
1:A:41:GLU:CG	1:A:190:GLY:HA3	0.41	2.46	20	1
1:A:41:GLU:OE2	1:A:42:ALA:N	0.41	2.53	20	1
1:A:44:LEU:HD23	1:A:48:ARG:NE	0.41	2.31	20	1
1:A:175:GLU:HG2	1:A:203:TYR:CE1	0.41	2.51	21	1
1:A:178:THR:O	1:A:182:ILE:CG2	0.41	2.68	21	1
1:A:182:ILE:CG1	1:A:182:ILE:O	0.41	2.68	21	1
1:A:96:TYR:OH	1:A:120:ARG:CB	0.41	2.69	3	1
1:A:175:GLU:HG2	1:A:203:TYR:CE2	0.41	2.51	3	1
1:A:17:GLU:OE1	1:A:37:THR:CG2	0.41	2.68	4	1
1:A:46:GLY:CA	1:A:74:ILE:HG12	0.41	2.46	5	1
1:A:141:LEU:HD22	1:A:173:ASP:OD2	0.41	2.16	5	1
1:A:34:LEU:HB2	1:A:69:LYS:CE	0.41	2.46	7	1
1:A:121:ARG:CD	1:A:168:ARG:CZ	0.41	2.99	7	1
1:A:102:LEU:CD1	1:A:102:LEU:C	0.41	2.89	8	2
1:A:46:GLY:CA	1:A:74:ILE:CD1	0.41	2.99	9	1
1:A:152:ILE:HG13	1:A:153:LEU:N	0.41	2.31	9	1
1:A:140:VAL:HG23	1:A:141:LEU:N	0.41	2.31	10	1
1:A:195:TYR:HD1	1:A:203:TYR:HH	0.41	1.53	11	1
1:A:8:ASN:ND2	1:A:152:ILE:CD1	0.41	2.84	12	1
1:A:113:ALA:HA	1:A:116:VAL:HG22	0.41	1.93	12	2
1:A:134:LYS:HE2	1:A:135:ASP:OD1	0.41	2.16	12	2
1:A:144:TYR:OH	1:A:201:GLY:O	0.41	2.35	16	1
1:A:115:GLN:HA	1:A:118:ILE:HG22	0.41	1.93	17	1
1:A:115:GLN:HG2	1:A:115:GLN:O	0.41	2.16	18	1
1:A:60:PHE:CE2	1:A:158:VAL:CG2	0.41	3.02	19	1
1:A:121:ARG:CZ	1:A:168:ARG:NH1	0.40	2.84	3	1
1:A:134:LYS:HE2	1:A:135:ASP:N	0.40	2.31	6	1
1:A:144:TYR:CE2	1:A:170:LEU:HD13	0.40	2.51	8	1
1:A:141:LEU:HD11	1:A:173:ASP:HB3	0.40	1.93	10	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:46:GLY:O	1:A:50:LYS:N	0.40	2.53	18	2
1:A:8:ASN:ND2	1:A:152:ILE:HD12	0.40	2.31	12	1
1:A:31:ASP:CB	1:A:64:LEU:HD22	0.40	2.46	12	1
1:A:43:LYS:O	1:A:47:GLU:N	0.40	2.44	12	1
1:A:49:LEU:CD2	1:A:74:ILE:HD11	0.40	2.46	13	1
1:A:76:GLU:OE2	1:A:81:PRO:CG	0.40	2.69	15	1
1:A:94:ARG:NH1	1:A:96:TYR:CE2	0.40	2.88	20	1
1:A:177:LEU:CG	1:A:182:ILE:HB	0.40	2.46	1	2
1:A:119:TRP:CZ3	1:A:127:PRO:HA	0.40	2.51	3	2
1:A:167:LEU:CB	1:A:185:ARG:NH2	0.40	2.84	5	1
1:A:178:THR:CG2	1:A:181:GLN:HG3	0.40	2.46	6	1
1:A:111:TRP:HB2	1:A:116:VAL:HG23	0.40	1.92	7	1
1:A:71:CYS:SG	1:A:85:THR:CG2	0.40	3.10	8	1
1:A:94:ARG:NE	1:A:96:TYR:CE1	0.40	2.89	8	1
1:A:17:GLU:OE2	1:A:37:THR:CB	0.40	2.69	11	1
1:A:99:LEU:CD2	1:A:119:TRP:CZ2	0.40	2.87	11	1
1:A:208:LEU:HG	1:A:209:ILE:N	0.40	2.32	12	1
1:A:93:GLU:HG2	1:A:163:HIS:CB	0.40	2.46	14	1
1:A:49:LEU:CG	1:A:192:PRO:HG2	0.40	2.47	15	1
1:A:73:ILE:O	1:A:77:GLU:CB	0.40	2.69	15	2
1:A:141:LEU:O	1:A:144:TYR:N	0.40	2.54	15	1
1:A:52:ARG:HD2	1:A:210:ASP:CB	0.40	2.47	16	1
1:A:164:GLY:O	1:A:168:ARG:CB	0.40	2.69	16	2
1:A:171:ILE:HD11	1:A:175:GLU:HG3	0.40	1.93	16	1
1:A:110:LYS:O	1:A:110:LYS:HG2	0.40	2.17	17	1
1:A:61:THR:OG1	1:A:87:LYS:CE	0.40	2.69	18	1
1:A:207:GLU:N	1:A:207:GLU:OE1	0.40	2.54	18	1
1:A:58:ILE:HG22	1:A:59:ALA:N	0.40	2.31	19	1
1:A:82:ASN:OD1	1:A:83:LEU:N	0.40	2.54	3	2
1:A:186:GLU:O	1:A:187:LEU:HD12	0.40	2.16	3	1
1:A:61:THR:CG2	1:A:71:CYS:SG	0.40	3.10	4	2
1:A:64:LEU:CD1	1:A:163:HIS:CE1	0.40	3.05	4	1
1:A:18:SER:OG	1:A:66:ARG:CD	0.40	2.69	6	1
1:A:13:THR:HG23	1:A:161:ALA:CB	0.40	2.40	7	1
1:A:43:LYS:CD	1:A:77:GLU:CG	0.40	2.99	7	1
1:A:55:LYS:O	1:A:157:LYS:HD3	0.40	2.16	7	1
1:A:93:GLU:OE2	1:A:165:ASN:CB	0.40	2.69	9	2
1:A:180:ASP:O	1:A:183:VAL:HG12	0.40	2.16	9	1
1:A:104:LYS:O	1:A:108:ARG:CB	0.40	2.70	11	1
1:A:126:ALA:CB	1:A:127:PRO:CD	0.40	2.96	11	1
1:A:152:ILE:HD12	1:A:152:ILE:C	0.40	2.37	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:177:LEU:CD1	1:A:181:GLN:C	0.40	2.90	11	1
1:A:43:LYS:O	1:A:47:GLU:HB2	0.40	2.16	12	1
1:A:94:ARG:HB2	1:A:165:ASN:CG	0.40	2.37	12	1
1:A:211:ASN:OD1	1:A:211:ASN:C	0.40	2.59	12	1
1:A:97:GLY:CA	1:A:130:GLY:N	0.40	2.84	13	1
1:A:49:LEU:HD21	1:A:54:TYR:O	0.40	2.16	14	1
1:A:122:SER:HB3	1:A:125:ILE:CG2	0.40	2.46	14	1
1:A:15:HIS:ND1	1:A:66:ARG:HD2	0.40	2.31	16	1
1:A:111:TRP:O	1:A:112:GLY:C	0.40	2.59	18	1
1:A:144:TYR:OH	1:A:174:LEU:CD1	0.40	2.67	21	1
1:A:153:LEU:CG	1:A:199:LYS:O	0.40	2.70	2	1
1:A:111:TRP:CG	1:A:115:GLN:HB3	0.40	2.52	4	1
1:A:23:LEU:HB3	1:A:25:LEU:HD11	0.40	1.93	6	1
1:A:59:ALA:O	1:A:86:ILE:O	0.40	2.40	9	2
1:A:168:ARG:HD3	1:A:185:ARG:NH2	0.40	2.32	10	1
1:A:12:LEU:HD22	1:A:160:ILE:CG1	0.40	2.47	11	1
1:A:115:GLN:CG	1:A:119:TRP:CD1	0.40	3.03	12	1
1:A:141:LEU:CD1	1:A:173:ASP:OD1	0.40	2.70	14	1
1:A:56:PHE:CG	1:A:157:LYS:HE3	0.40	2.51	16	1
1:A:71:CYS:O	1:A:75:LEU:CG	0.40	2.70	16	1
1:A:172:MET:HB2	1:A:182:ILE:HG13	0.40	1.94	16	1
1:A:66:ARG:O	1:A:70:THR:CB	0.40	2.69	17	1
1:A:195:TYR:CE1	1:A:207:GLU:CB	0.40	3.05	17	1
1:A:194:VAL:O	1:A:208:LEU:N	0.40	2.53	19	1
1:A:9:LEU:O	1:A:157:LYS:HA	0.40	2.17	1	1
1:A:10:LEU:HB2	1:A:197:LEU:CD1	0.40	2.47	2	1
1:A:69:LYS:O	1:A:73:ILE:CD1	0.40	2.69	2	1
1:A:193:ILE:HD12	1:A:208:LEU:C	0.40	2.37	3	1
1:A:10:LEU:HB3	1:A:195:TYR:CE2	0.40	2.52	4	1
1:A:12:LEU:HD22	1:A:167:LEU:HD22	0.40	1.86	4	1
1:A:52:ARG:HG3	1:A:210:ASP:CB	0.40	2.47	7	1
1:A:121:ARG:NH1	1:A:121:ARG:HA	0.40	2.32	7	1
1:A:9:LEU:HD22	1:A:54:TYR:CE2	0.40	2.52	9	1
1:A:96:TYR:CD1	1:A:127:PRO:HG2	0.40	2.51	11	1
1:A:74:ILE:CG1	1:A:75:LEU:N	0.40	2.84	12	1
1:A:122:SER:OG	1:A:125:ILE:HG23	0.40	2.16	12	1
1:A:197:LEU:C	1:A:204:VAL:HB	0.40	2.37	12	1
1:A:49:LEU:HG	1:A:192:PRO:CG	0.40	2.46	15	1
1:A:56:PHE:HA	1:A:157:LYS:HE3	0.40	1.93	16	1
1:A:137:ALA:O	1:A:140:VAL:N	0.40	2.49	16	1
1:A:64:LEU:N	1:A:64:LEU:CD2	0.40	2.84	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:27:THR:HG22	1:A:30:LYS:HZ1	0.40	1.77	21	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	205/211 (97%)	162±4 (79±2%)	31±4 (15±2%)	12±2 (6±1%)	3	22
All	All	4305/4431 (97%)	3406 (79%)	652 (15%)	247 (6%)	3	22

All 57 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	122	SER	20
1	A	16	GLY	17
1	A	112	GLY	17
1	A	128	PRO	17
1	A	177	LEU	14
1	A	6	ALA	13
1	A	150	PRO	12
1	A	114	GLU	9
1	A	205	SER	8
1	A	24	ASN	8
1	A	83	LEU	8
1	A	97	GLY	8
1	A	111	TRP	7
1	A	7	PRO	6
1	A	127	PRO	6
1	A	155	GLY	5
1	A	92	ASN	4
1	A	129	ASN	4
1	A	34	LEU	4
1	A	185	ARG	3
1	A	188	ALA	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	207	GLU	3
1	A	100	GLN	3
1	A	80	GLU	3
1	A	123	TYR	2
1	A	192	PRO	2
1	A	189	THR	2
1	A	130	GLY	2
1	A	8	ASN	2
1	A	30	LYS	2
1	A	84	GLU	2
1	A	146	SER	2
1	A	15	HIS	2
1	A	144	TYR	2
1	A	186	GLU	2
1	A	117	GLN	2
1	A	179	GLY	1
1	A	193	ILE	1
1	A	78	VAL	1
1	A	81	PRO	1
1	A	149	VAL	1
1	A	27	THR	1
1	A	145	LYS	1
1	A	178	THR	1
1	A	180	ASP	1
1	A	208	LEU	1
1	A	209	ILE	1
1	A	23	LEU	1
1	A	66	ARG	1
1	A	53	GLY	1
1	A	203	TYR	1
1	A	204	VAL	1
1	A	17	GLU	1
1	A	94	ARG	1
1	A	107	ALA	1
1	A	108	ARG	1
1	A	116	VAL	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	175/179 (98%)	119±6 (68±3%)	56±6 (32±3%)	1 13
All	All	3675/3759 (98%)	2493 (68%)	1182 (32%)	1 13

All 148 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	25	LEU	21
1	A	118	ILE	21
1	A	120	ARG	21
1	A	134	LYS	21
1	A	171	ILE	21
1	A	157	LYS	20
1	A	198	ASP	20
1	A	30	LYS	19
1	A	55	LYS	19
1	A	74	ILE	19
1	A	139	ARG	19
1	A	199	LYS	19
1	A	87	LYS	19
1	A	86	ILE	18
1	A	145	LYS	18
1	A	166	SER	18
1	A	185	ARG	18
1	A	206	LYS	17
1	A	9	LEU	15
1	A	18	SER	15
1	A	61	THR	14
1	A	68	GLN	14
1	A	131	GLU	14
1	A	187	LEU	14
1	A	141	LEU	14
1	A	57	ASP	14
1	A	12	LEU	13
1	A	52	ARG	13
1	A	102	LEU	13
1	A	115	GLN	13
1	A	177	LEU	13
1	A	122	SER	13
1	A	156	GLU	13
1	A	91	LEU	12
1	A	167	LEU	12
1	A	205	SER	12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	184	LYS	12
1	A	29	TRP	11
1	A	193	ILE	11
1	A	203	TYR	11
1	A	94	ARG	11
1	A	129	ASN	11
1	A	183	VAL	11
1	A	35	SER	10
1	A	23	LEU	10
1	A	48	ARG	10
1	A	69	LYS	10
1	A	83	LEU	10
1	A	50	LYS	10
1	A	27	THR	9
1	A	31	ASP	9
1	A	104	LYS	9
1	A	110	LYS	9
1	A	175	GLU	9
1	A	208	LEU	9
1	A	10	LEU	9
1	A	103	ASN	9
1	A	138	GLU	9
1	A	108	ARG	9
1	A	36	GLU	9
1	A	40	LYS	9
1	A	132	SER	9
1	A	19	GLU	8
1	A	22	LYS	8
1	A	105	ASP	8
1	A	95	TYR	8
1	A	8	ASN	8
1	A	147	THR	8
1	A	114	GLU	7
1	A	172	MET	7
1	A	200	ASP	7
1	A	209	ILE	7
1	A	43	LYS	7
1	A	44	LEU	7
1	A	20	TRP	7
1	A	49	LEU	7
1	A	207	GLU	7
1	A	149	VAL	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	154	LYS	7
1	A	181	GLN	7
1	A	96	TYR	6
1	A	125	ILE	6
1	A	135	ASP	6
1	A	80	GLU	6
1	A	143	TYR	6
1	A	210	ASP	6
1	A	196	HIS	6
1	A	72	GLN	6
1	A	71	CYS	5
1	A	121	ARG	5
1	A	170	LEU	5
1	A	197	LEU	5
1	A	98	ASP	5
1	A	106	ASP	5
1	A	202	LYS	5
1	A	89	GLU	5
1	A	47	GLU	4
1	A	58	ILE	4
1	A	84	GLU	4
1	A	65	GLN	4
1	A	109	LYS	4
1	A	13	THR	4
1	A	159	LEU	4
1	A	14	ARG	4
1	A	24	ASN	4
1	A	180	ASP	4
1	A	182	ILE	4
1	A	21	ASN	3
1	A	153	LEU	3
1	A	99	LEU	3
1	A	178	THR	3
1	A	111	TRP	3
1	A	144	TYR	3
1	A	211	ASN	3
1	A	75	LEU	2
1	A	168	ARG	2
1	A	158	VAL	2
1	A	77	GLU	2
1	A	174	LEU	2
1	A	195	TYR	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	90	LYS	2
1	A	186	GLU	2
1	A	11	VAL	2
1	A	76	GLU	2
1	A	88	SER	2
1	A	92	ASN	2
1	A	85	THR	2
1	A	60	PHE	2
1	A	204	VAL	2
1	A	100	GLN	2
1	A	17	GLU	2
1	A	173	ASP	2
1	A	66	ARG	2
1	A	78	VAL	1
1	A	51	SER	1
1	A	64	LEU	1
1	A	62	SER	1
1	A	81	PRO	1
1	A	93	GLU	1
1	A	73	ILE	1
1	A	124	ASP	1
1	A	151	HIS	1
1	A	34	LEU	1
1	A	133	LEU	1
1	A	37	THR	1
1	A	41	GLU	1
1	A	123	TYR	1
1	A	26	PHE	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