Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Dec 13, 2023 – 06:36 PM EST

PDB ID	:	2JRC
Title	:	Solution structure of Peptidyl-tRNA Hydrolase from Mycobacterium tuberculosis H37Rv.
Authors	:	Pulavarti, S.V.S.R.K.; Jain, A.; Pathak, P.P.; Arora, A.
Deposited on	:	2007-06-22

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 types of validation reports are described at
http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types.

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

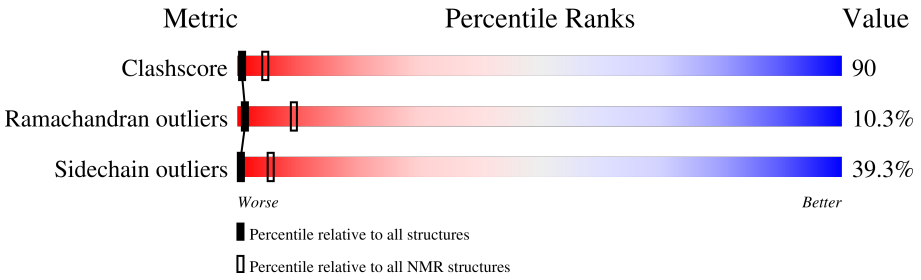
Cyrange	:	Kirchner and Güntert (2011)
NmrClust	:	Kelley et al. (1996)
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.36

1 Overall quality at a glance (i)

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

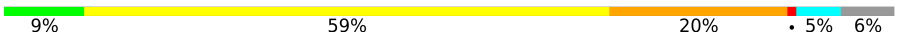
The overall completeness of chemical shifts assignment was not calculated.

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	204	

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 40 models. Model 15 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *fewest violations*.

The following residues are included in the computation of the global validation metrics.

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	**Residue range (total)**	**Backbone RMSD (Å)**	**Medoid model**
1	A:3-A:138, A:147-A:191 (181)	1.05	15

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 6 clusters and 3 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	3, 4, 5, 6, 8, 9, 10, 11, 13, 15, 16, 18, 19, 20, 21, 24, 26, 28, 30, 31, 33, 34, 35, 36, 38, 39
2	1, 7, 37
3	27, 29
4	22, 40
5	12, 17
6	2, 14
Single-model clusters	23; 25; 32

3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2681 atoms, of which 1241 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Peptidyl-tRNA hydrolase.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	191	2681	904	1241	274	257	5	0

There are 13 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	192	LYS	-	expression tag	UNP P65865
A	193	LEU	-	expression tag	UNP P65865
A	194	ALA	-	expression tag	UNP P65865
A	195	ALA	-	expression tag	UNP P65865
A	196	ALA	-	expression tag	UNP P65865
A	197	LEU	-	expression tag	UNP P65865
A	198	GLU	-	expression tag	UNP P65865
A	199	HIS	-	expression tag	UNP P65865
A	200	HIS	-	expression tag	UNP P65865
A	201	HIS	-	expression tag	UNP P65865
A	202	HIS	-	expression tag	UNP P65865
A	203	HIS	-	expression tag	UNP P65865
A	204	HIS	-	expression tag	UNP P65865

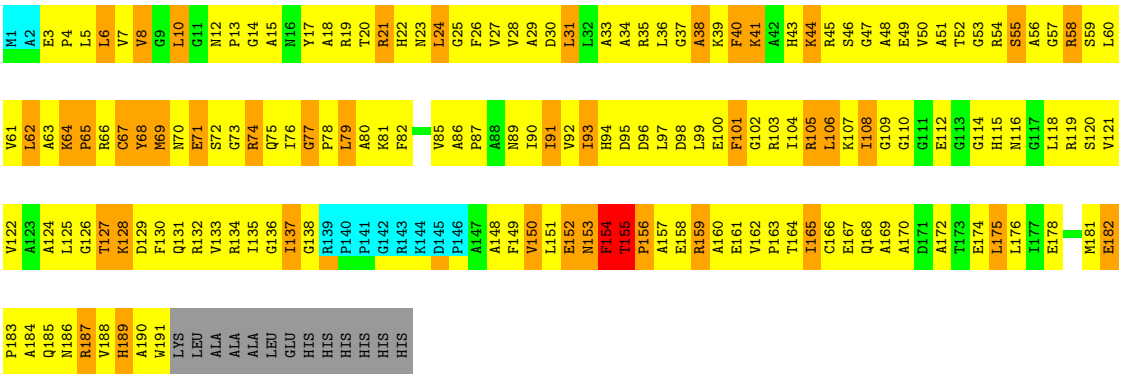
4 Residue-property plots (i)

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: Peptidyl-tRNA hydrolase

Chain A: 9% 59% 20% • 5% 6%



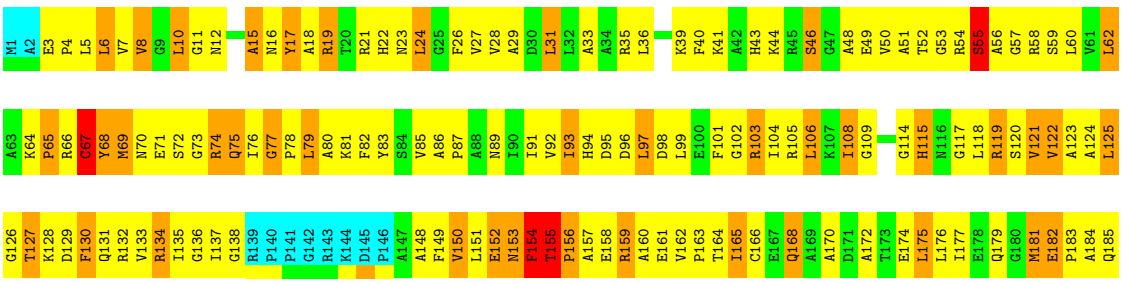
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

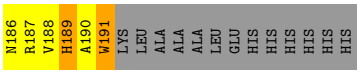
Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

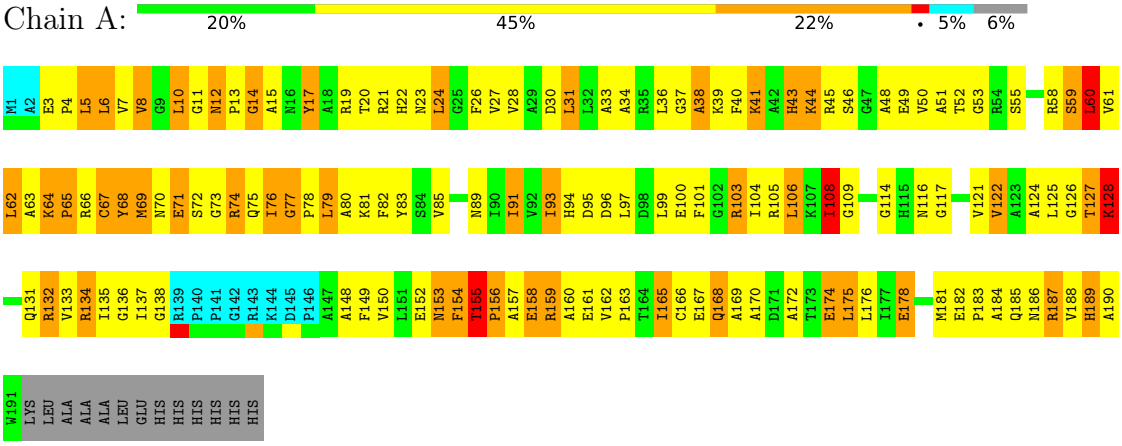
Chain A: 16% 50% 21% • 5% 6%





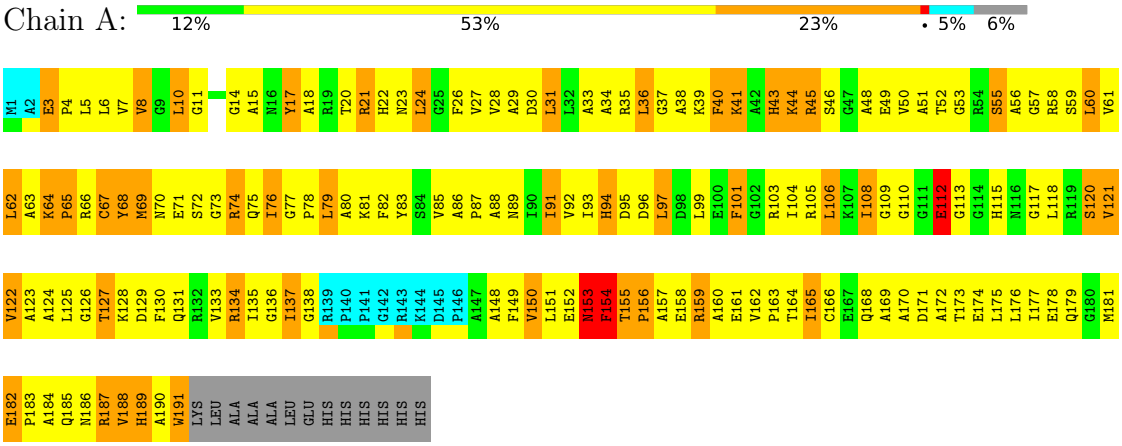
4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



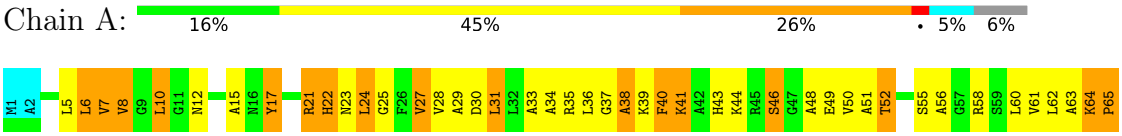
4.2.3 Score per residue for model 3

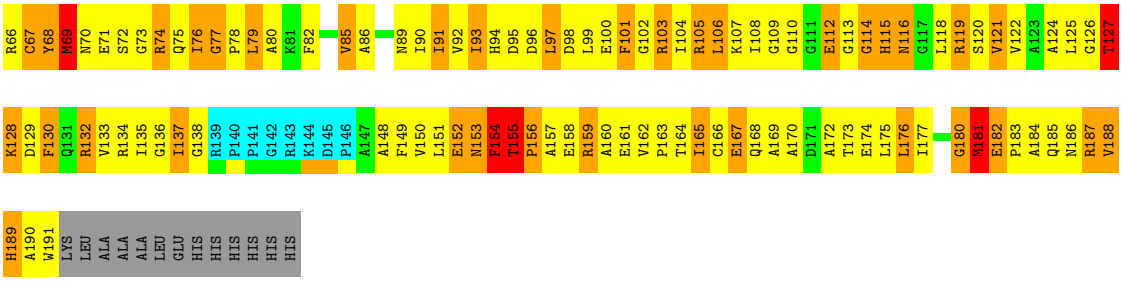
• Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase



4.2.4 Score per residue for model 4

• Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

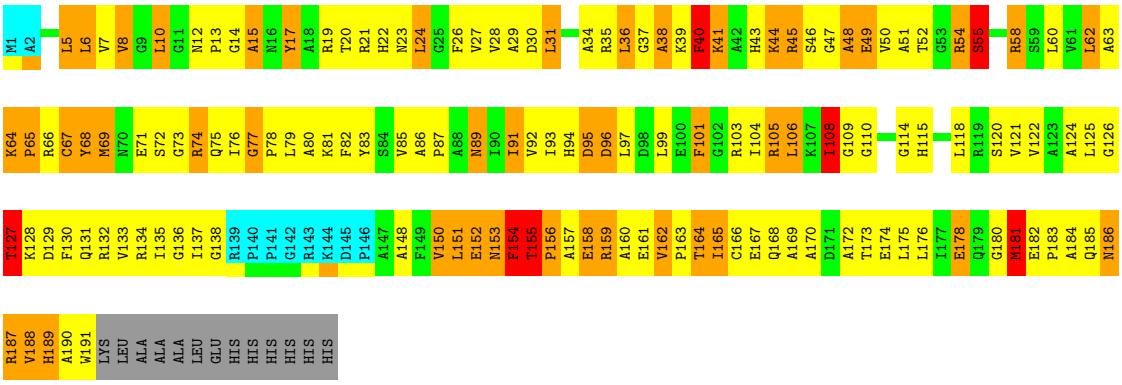




4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

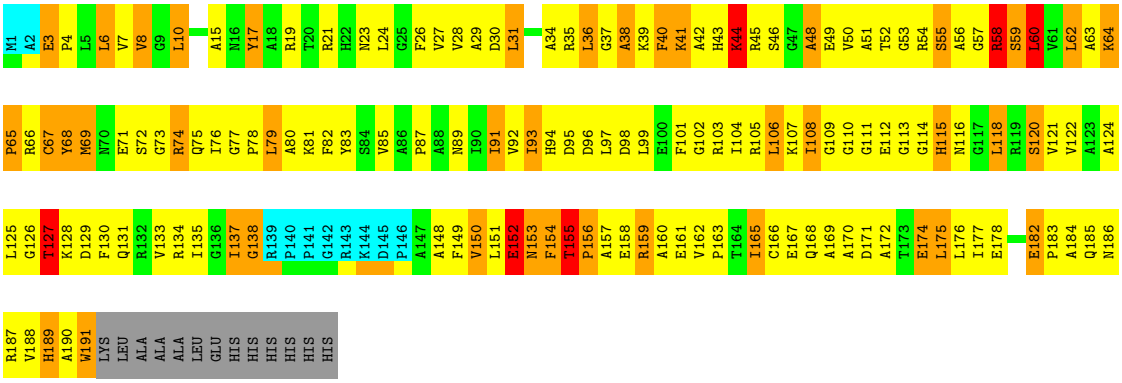
Chain A: 17% 45% 23% • 5% 6%



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

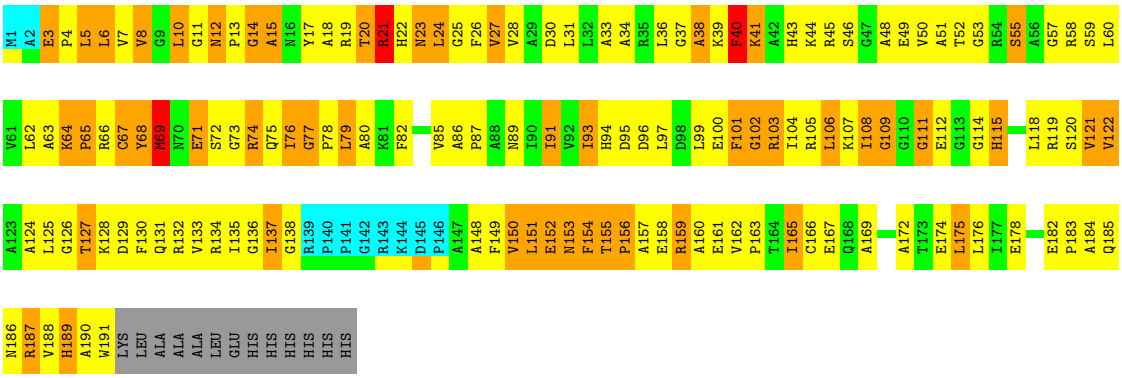
Chain A: 16% 50% 20% • 5% 6%



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

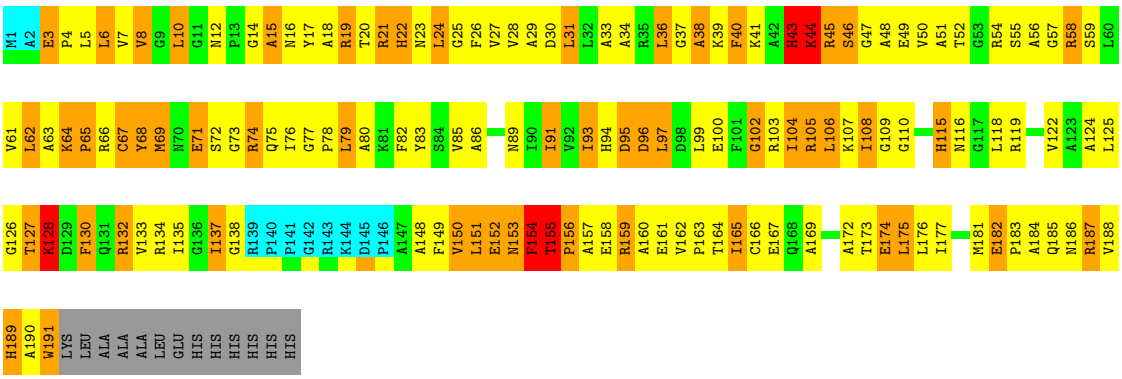
Chain A: 16% 47% 25% • 5% 6%



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

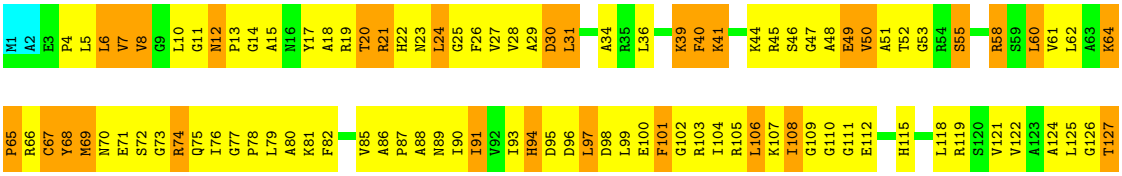
Chain A: 17% 43% 26% • 5% 6%

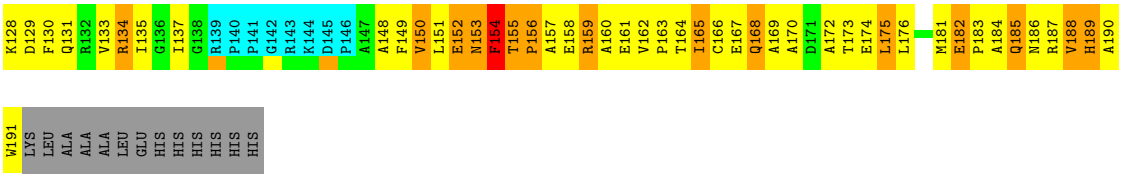


4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

Chain A: 16% 50% 22% 5% 6%

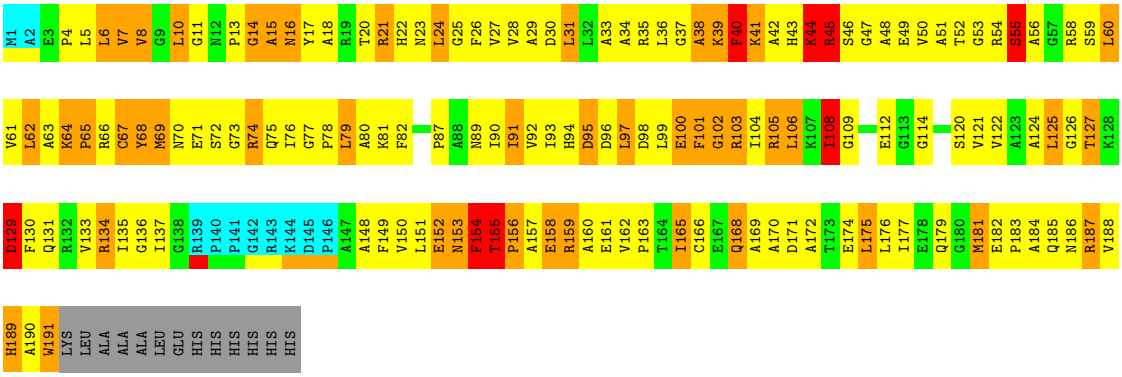




4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

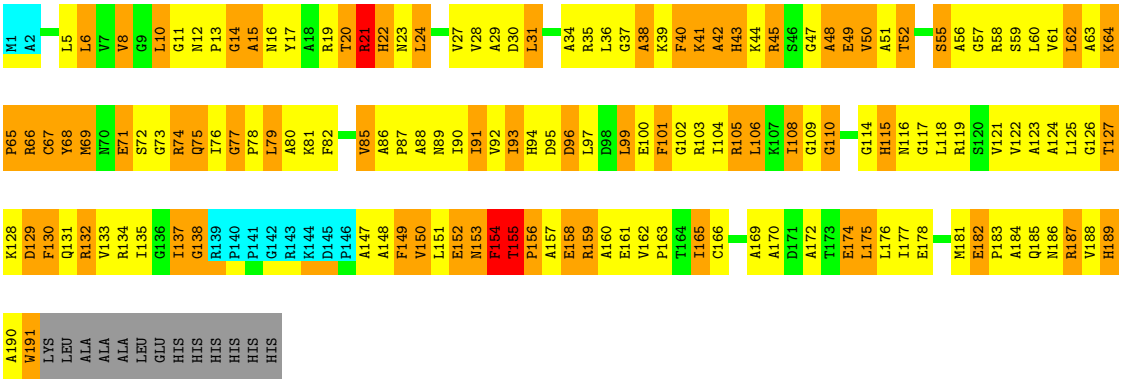
Chain A: 15% 48% 23% • 5% 6%



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

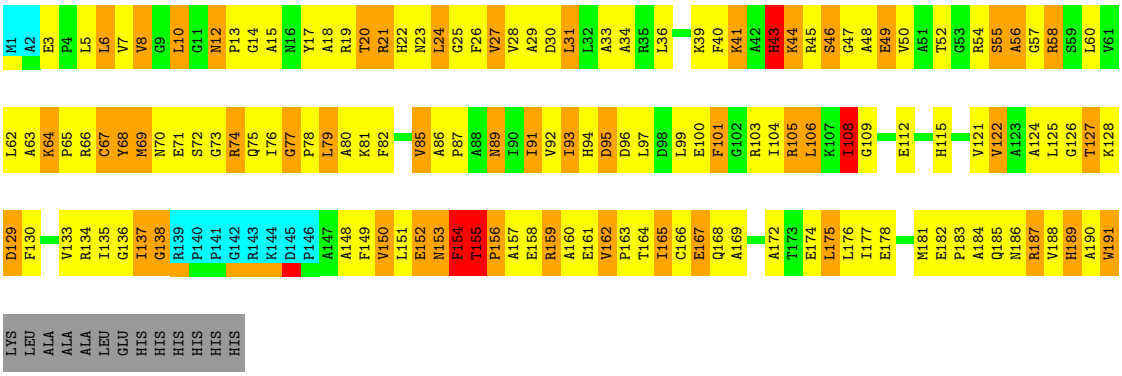
Chain A: 14% 42% 31% • 5% 6%



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

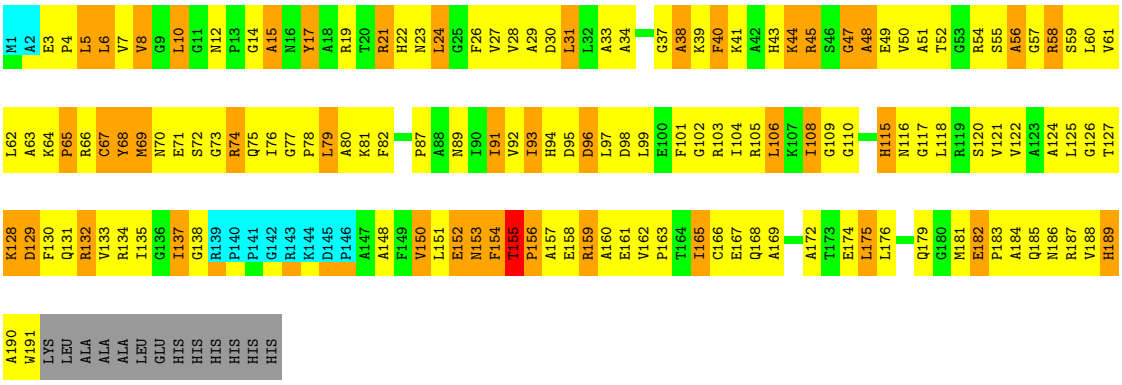
Chain A: 19% 45% 24% • 5% 6%



4.2.13 Score per residue for model 13

• Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

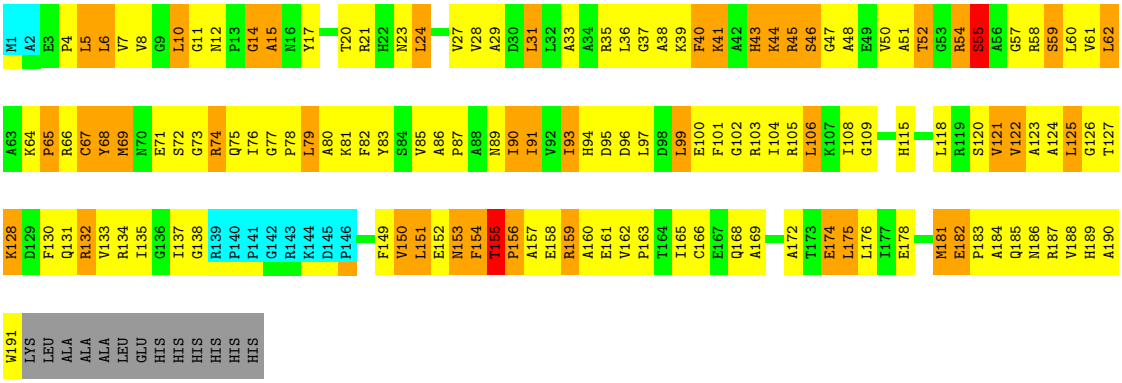
Chain A: 18% 49% 21% 5% 6%



4.2.14 Score per residue for model 14

• Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

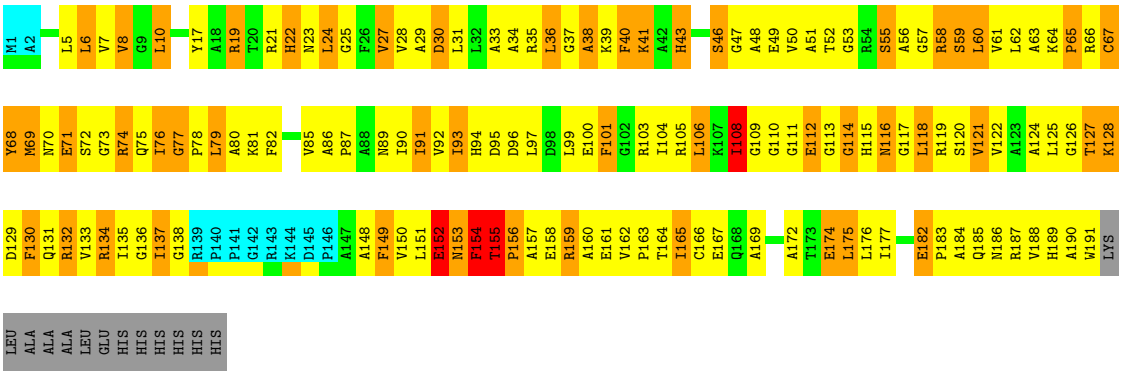
Chain A: 21% 46% 21% • 5% 6%



4.2.15 Score per residue for model 15 (medoid)

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

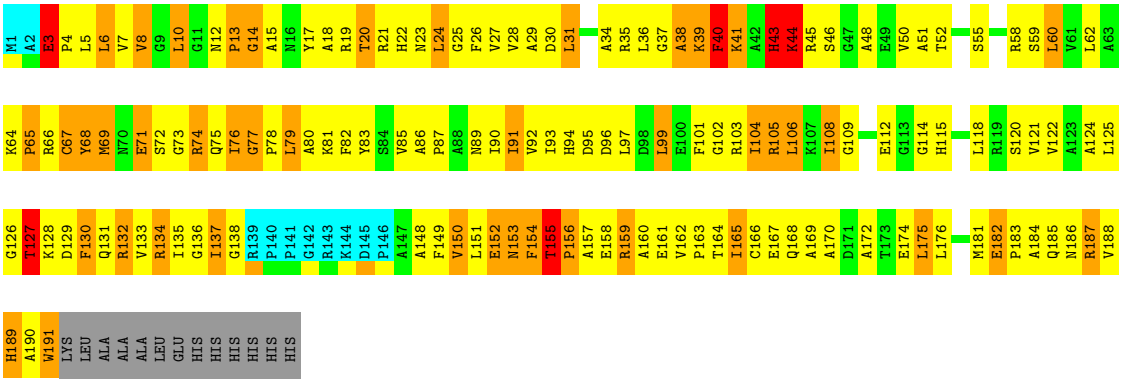
Chain A: 16% 46% 25% • 5% 6%



4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

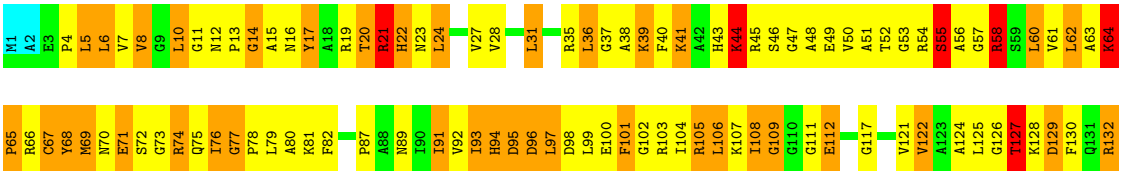
Chain A: 17% 48% 21% • 5% 6%



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

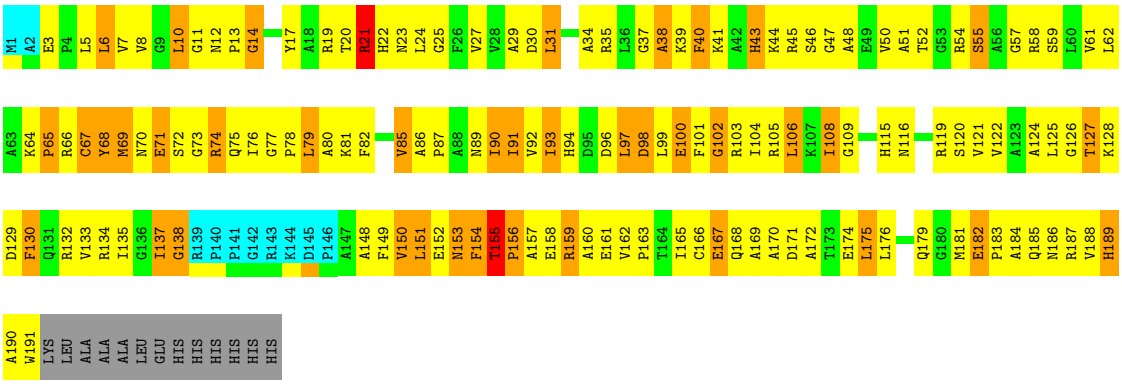
Chain A: 17% 43% 25% • 5% 6%



4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

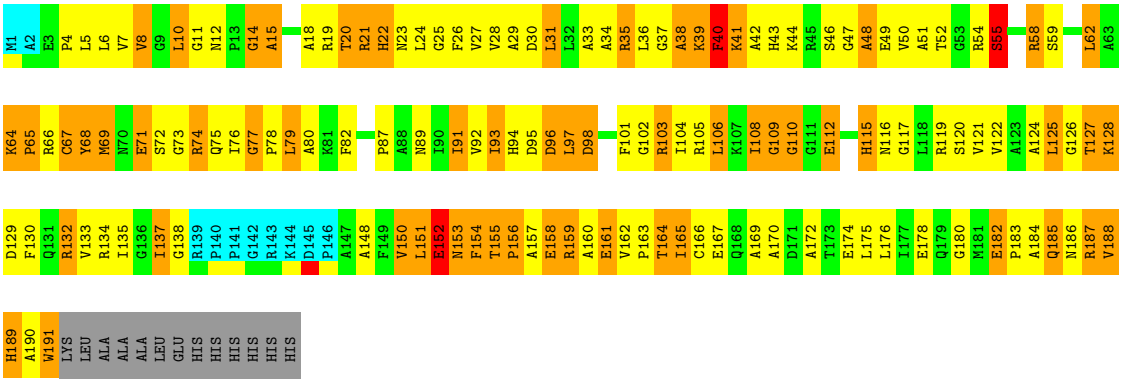
Chain A: 18% 50% 19% • 5% 6%



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

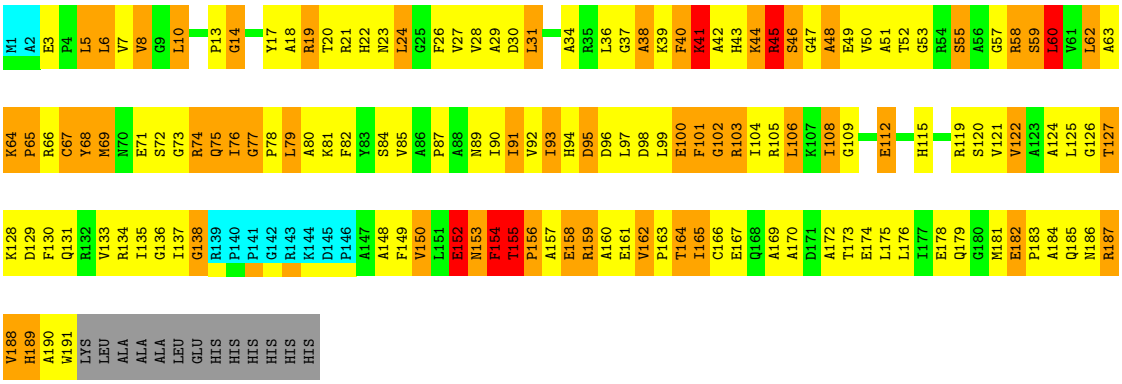
Chain A: 19% 40% 28% • 5% 6%



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

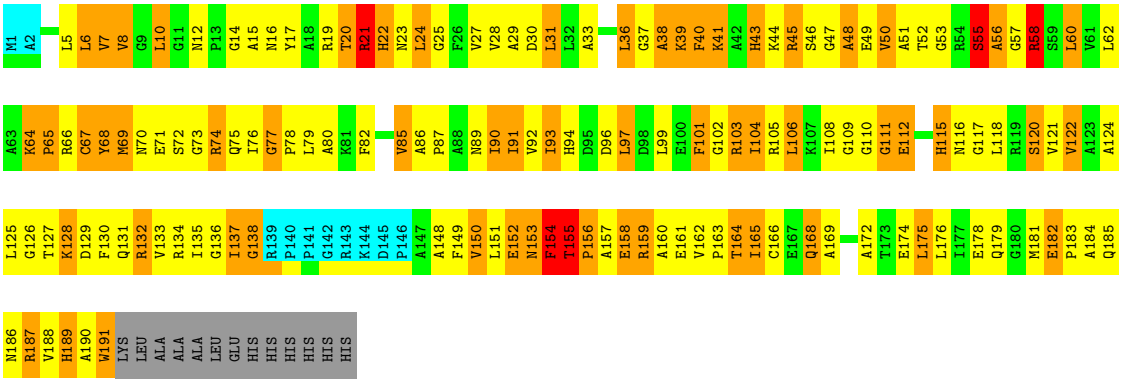
Chain A: 16% 44% 25% • 5% 6%



4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

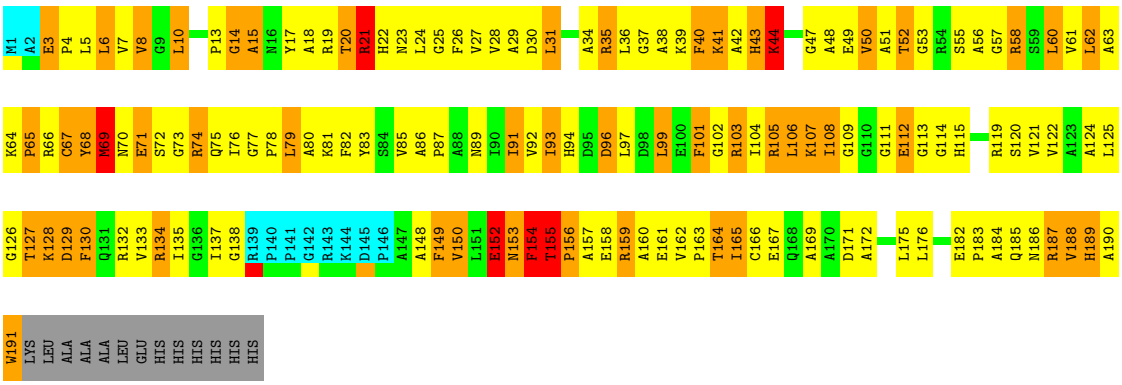
Chain A: 17% 41% 28% • 5% 6%



4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

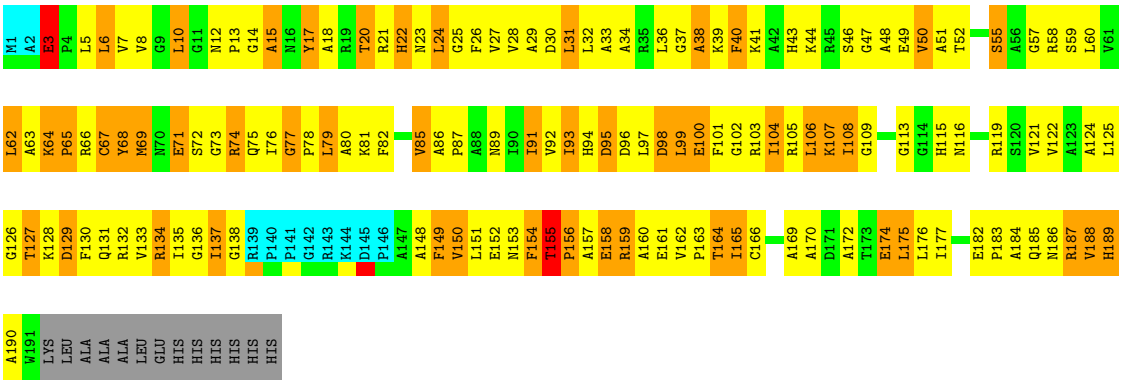
Chain A: 17% 45% 25% • 5% 6%



4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

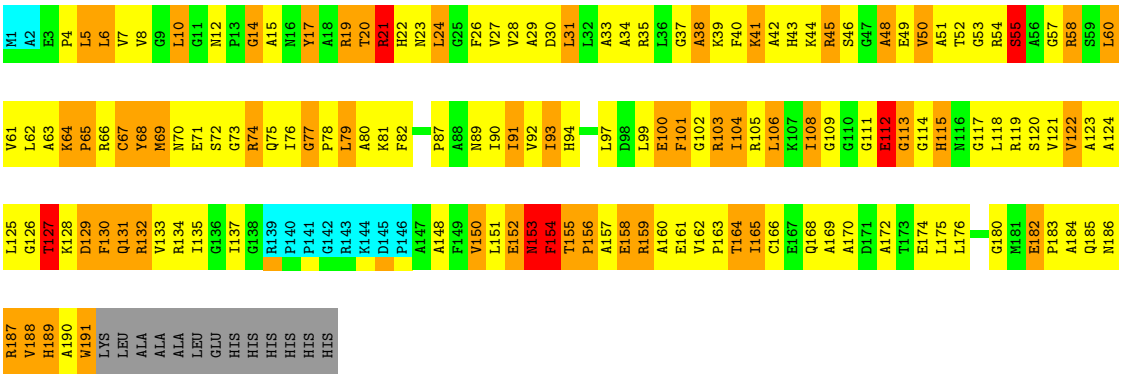
Chain A: 17% 46% 25% • 5% 6%



4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

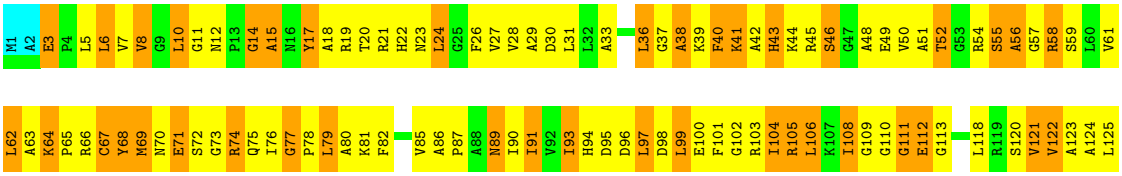
Chain A: 17% 44% 25% • 5% 6%



4.2.25 Score per residue for model 25

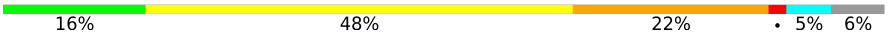
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

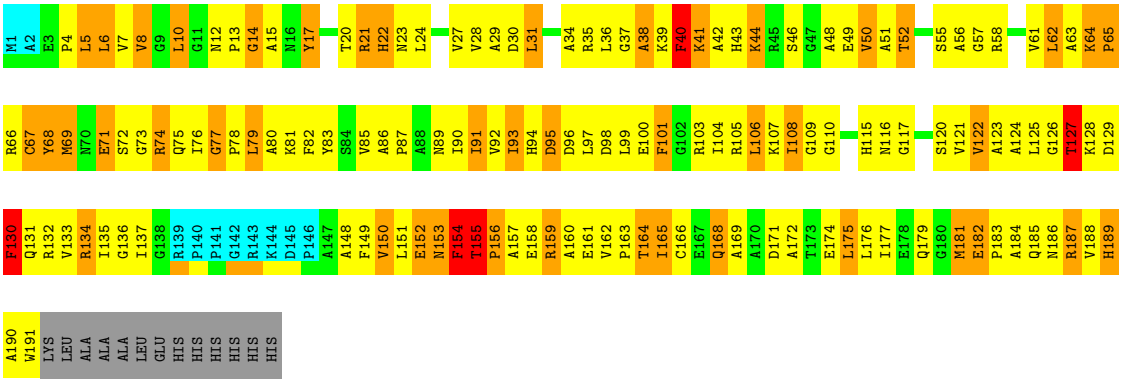
Chain A: 13% 46% 28% • 5% 6%



4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

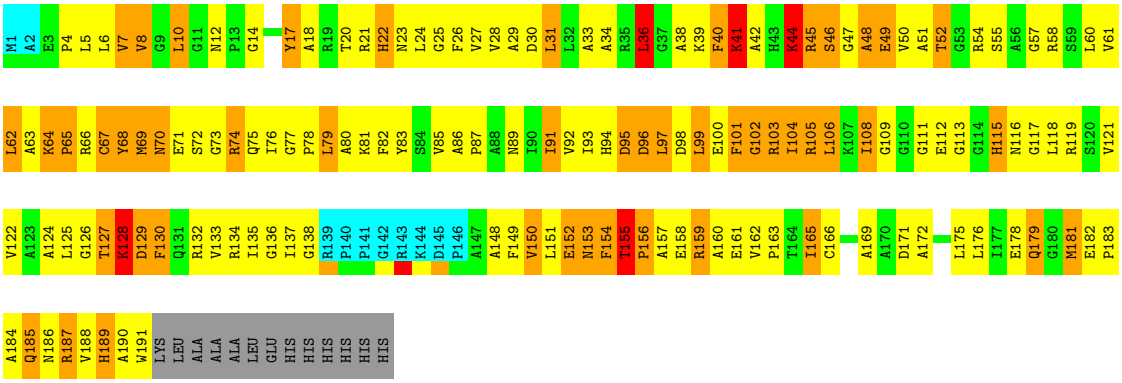
Chain A: 



4.2.27 Score per residue for model 27

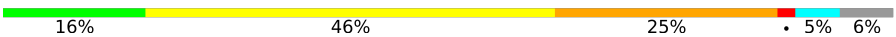
- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

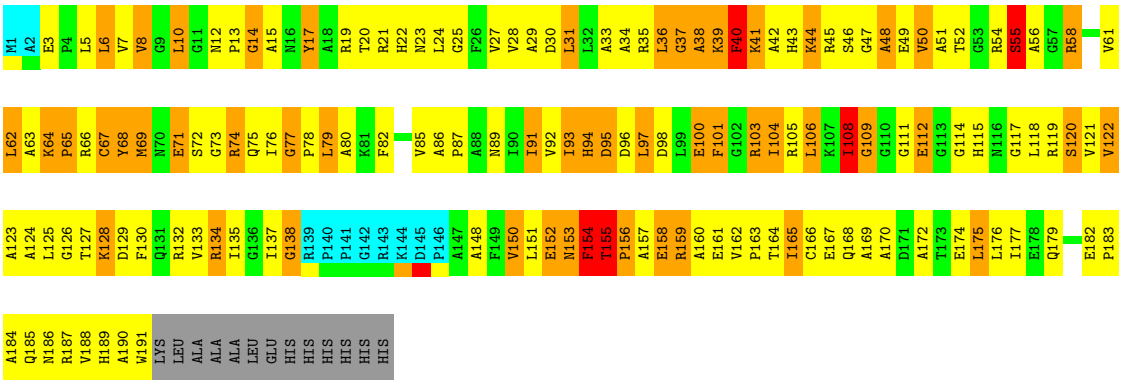
Chain A:



4.2.28 Score per residue for model 28

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

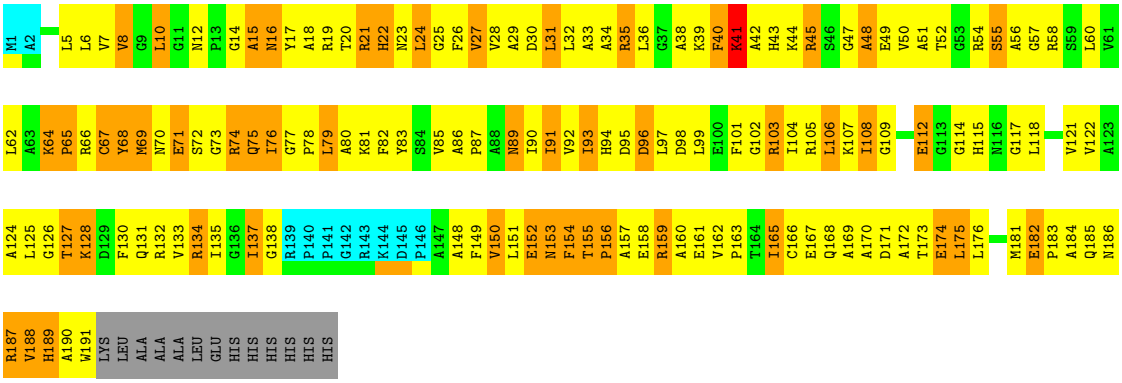
Chain A: 



4.2.29 Score per residue for model 29

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

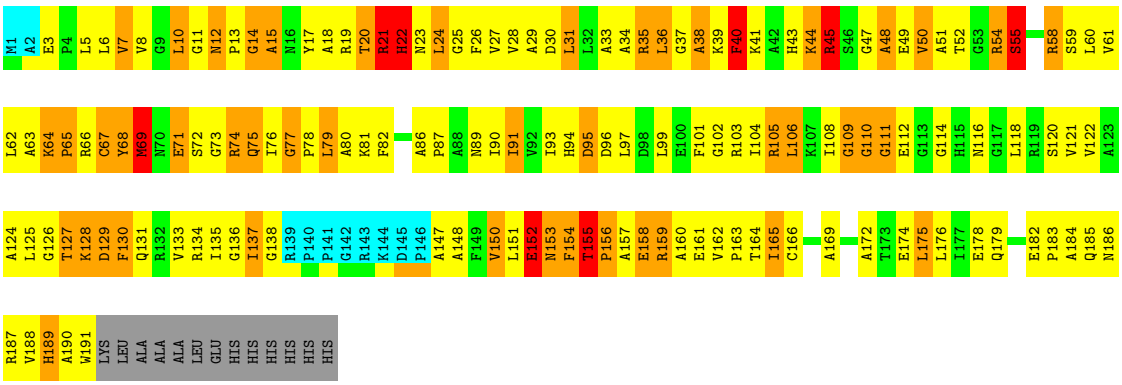
Chain A: 14% 50% 25% 5% 6%



4.2.30 Score per residue for model 30

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

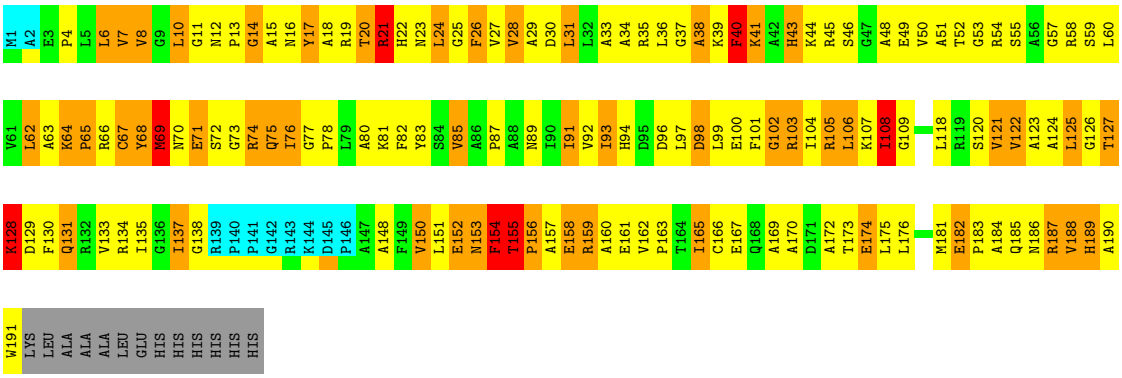
Chain A: 16% 46% 23% • 5% 6%



4.2.31 Score per residue for model 31

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

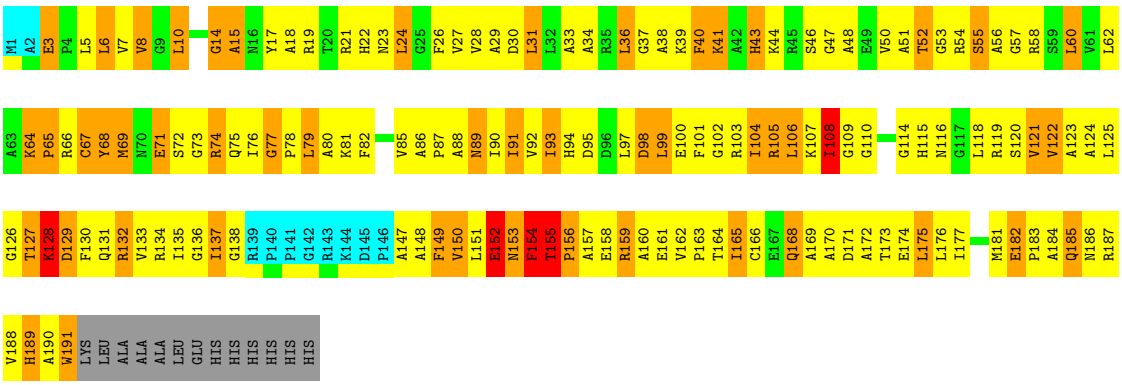
Chain A: 17% 45% 24% • 5% 6%



4.2.32 Score per residue for model 32

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

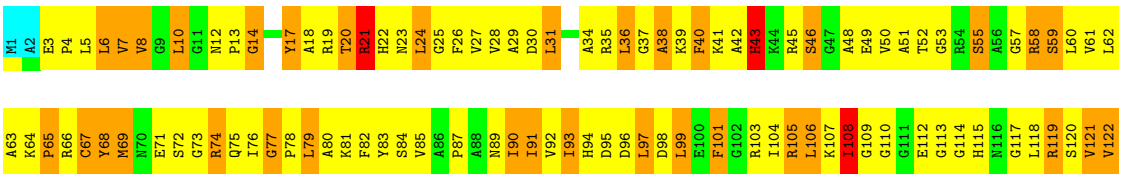
Chain A: 14% 48% 25% • 5% 6%

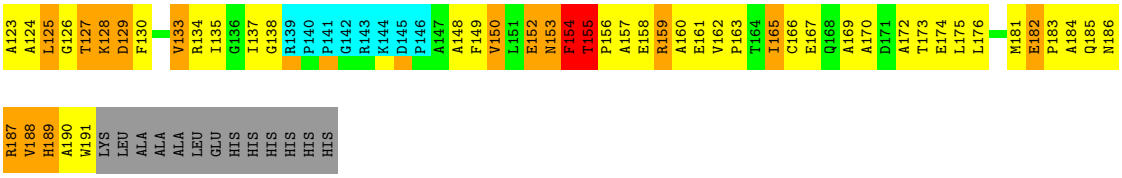


4.2.33 Score per residue for model 33

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

Chain A: 14% 49% 24% • 5% 6%

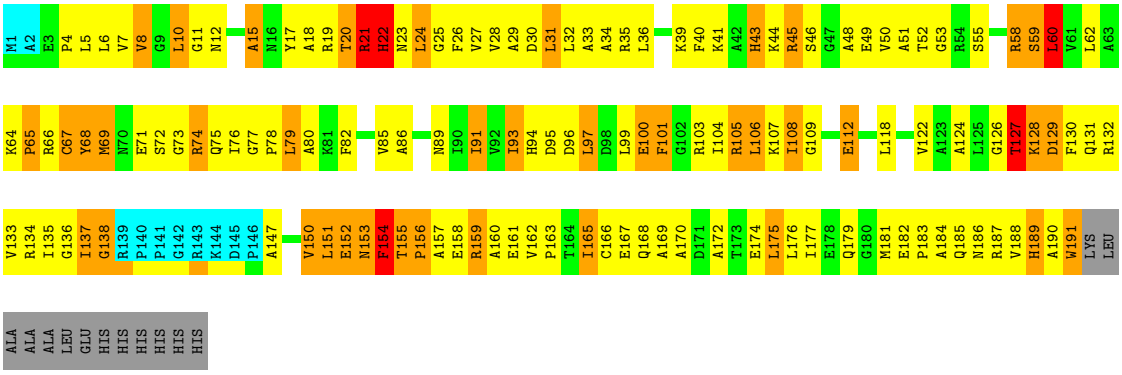




4.2.34 Score per residue for model 34

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

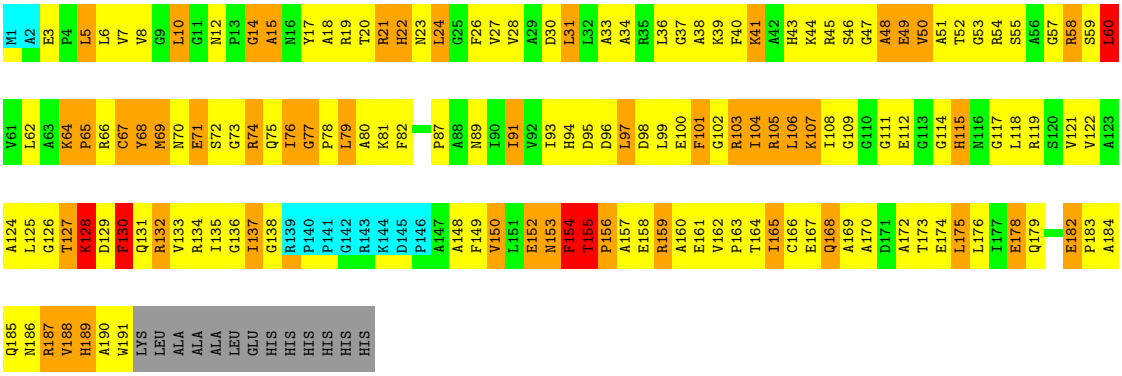
Chain A: 21% 46% 20% • 5% 6%



4.2.35 Score per residue for model 35

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

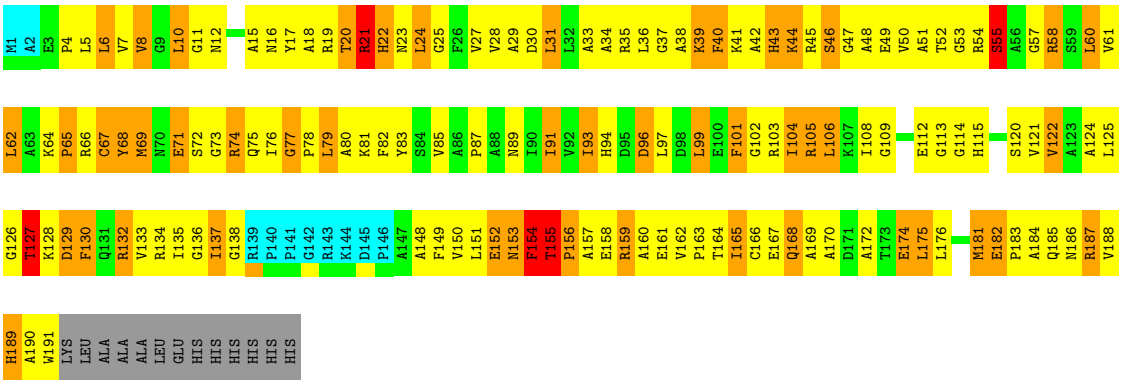
Chain A: 15% 48% 24% • 5% 6%



4.2.36 Score per residue for model 36

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

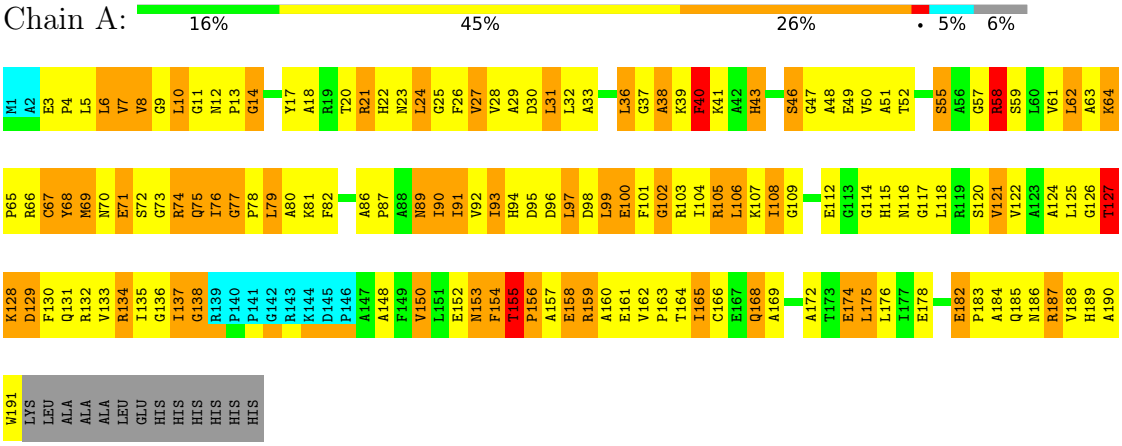
Chain A: 17% 46% 24% • 5% 6%



4.2.37 Score per residue for model 37

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

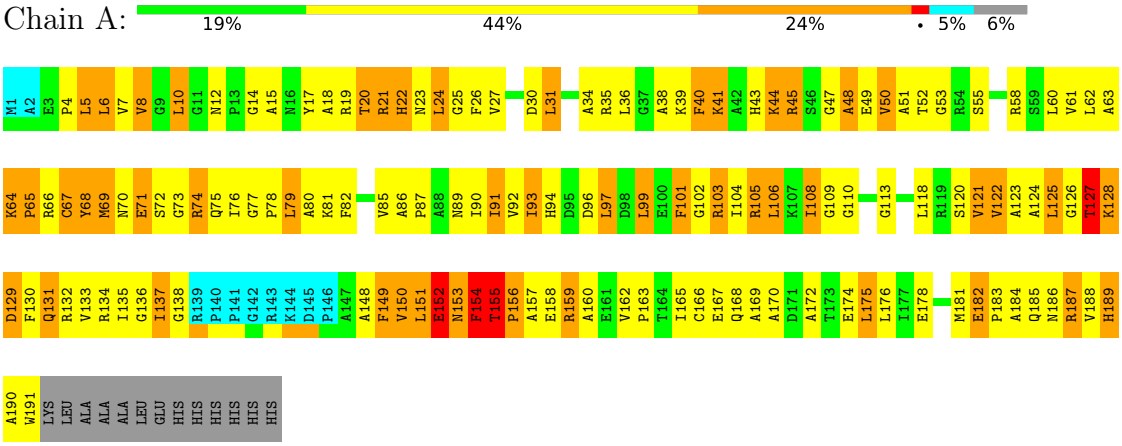
Chain A:



4.2.38 Score per residue for model 38

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

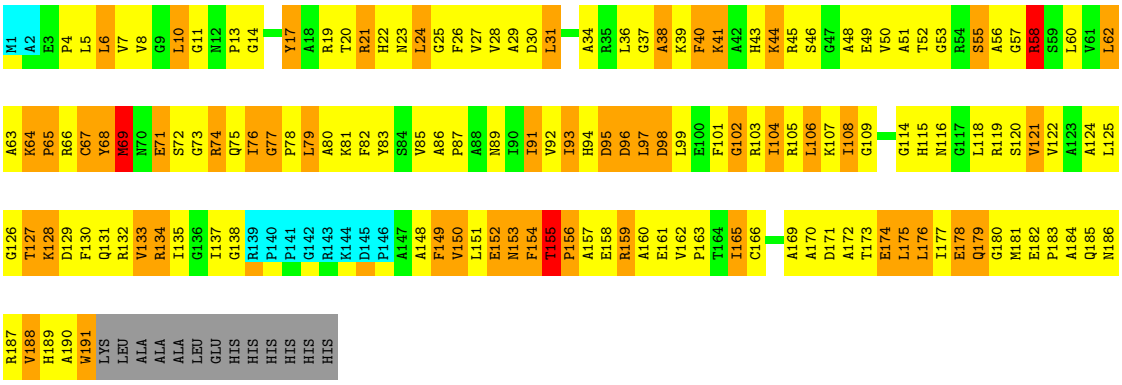
Chain A:



4.2.39 Score per residue for model 39

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

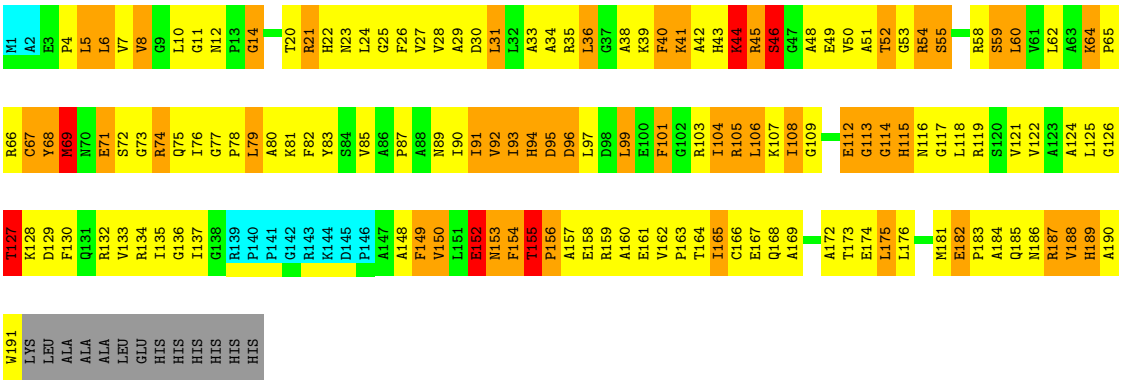
Chain A: 15% 48% 25% • 5% 6%



4.2.40 Score per residue for model 40

- Molecule 1: Peptidyl-tRNA hydrolase

Chain A: 18% 45% 24% • 5% 6%



5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

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

Of the 135 calculated structures, 40 were deposited, based on the following criterion: *target function*.

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

Software name	Classification	Version
CYANA	refinement	1.0.5

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	1363	1182	1383	247±15
All	All	54520	47280	55320	9875

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 90.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:74:ARG:O	1:A:78:PRO:CD	1.12	1.95	18	40
1:A:29:ALA:HB1	1:A:62:LEU:HD11	1.11	1.19	3	27
1:A:24:LEU:HD13	1:A:135:ILE:HD13	1.10	1.23	19	4
1:A:172:ALA:HB2	1:A:188:VAL:HG21	1.07	1.22	27	22
1:A:40:PHE:CB	1:A:51:ALA:HB2	1.06	1.79	6	16
1:A:172:ALA:HB1	1:A:188:VAL:HG22	1.06	1.20	32	1
1:A:159:ARG:O	1:A:163:PRO:CD	1.04	2.05	38	40
1:A:158:GLU:O	1:A:162:VAL:HG13	1.04	1.52	40	1
1:A:56:ALA:HB1	1:A:177:ILE:HG21	1.04	1.08	8	2
1:A:125:LEU:HD13	1:A:130:PHE:CE2	1.01	1.90	18	9
1:A:17:TYR:CE1	1:A:151:LEU:HD11	1.01	1.91	23	2
1:A:24:LEU:HD23	1:A:135:ILE:HD13	1.00	1.32	40	2
1:A:172:ALA:HB1	1:A:188:VAL:HG12	1.00	1.30	3	1
1:A:52:THR:HG22	1:A:61:VAL:HG22	1.00	1.29	11	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:125:LEU:HD13	1:A:130:PHE:CE1	0.99	1.92	27	9
1:A:159:ARG:O	1:A:163:PRO:HD3	0.99	1.58	19	40
1:A:97:LEU:HD22	1:A:150:VAL:HG23	0.99	1.35	13	2
1:A:40:PHE:CD2	1:A:51:ALA:HB2	0.98	1.93	31	18
1:A:17:TYR:CD1	1:A:151:LEU:HD11	0.97	1.94	27	2
1:A:104:ILE:HG23	1:A:165:ILE:HD11	0.96	1.32	22	31
1:A:56:ALA:CB	1:A:177:ILE:HG21	0.96	1.89	4	2
1:A:161:GLU:O	1:A:165:ILE:HG22	0.96	1.61	15	38
1:A:74:ARG:O	1:A:78:PRO:HD2	0.96	1.59	24	40
1:A:186:ASN:O	1:A:190:ALA:HB3	0.95	1.60	33	15
1:A:172:ALA:HB2	1:A:188:VAL:CG2	0.94	1.92	27	26
1:A:46:SER:O	1:A:79:LEU:HD21	0.94	1.61	21	1
1:A:52:THR:CG2	1:A:61:VAL:HG22	0.94	1.91	11	5
1:A:20:THR:HG21	1:A:151:LEU:HD13	0.94	1.38	5	2
1:A:94:HIS:O	1:A:135:ILE:HD12	0.94	1.62	13	38
1:A:24:LEU:HD22	1:A:135:ILE:HD13	0.94	1.36	35	3
1:A:186:ASN:O	1:A:190:ALA:HB2	0.94	1.63	9	25
1:A:40:PHE:HB3	1:A:51:ALA:HB2	0.93	1.37	6	12
1:A:36:LEU:HD12	1:A:36:LEU:O	0.93	1.62	6	4
1:A:137:ILE:O	1:A:137:ILE:HD12	0.93	1.64	9	9
1:A:93:ILE:HD13	1:A:93:ILE:N	0.93	1.76	1	2
1:A:17:TYR:O	1:A:20:THR:HG22	0.92	1.64	10	8
1:A:154:PHE:CG	1:A:157:ALA:HB3	0.92	1.98	37	33
1:A:172:ALA:CB	1:A:188:VAL:HG23	0.92	1.93	5	12
1:A:106:LEU:HD12	1:A:107:LYS:N	0.92	1.80	22	2
1:A:87:PRO:O	1:A:90:ILE:HG22	0.92	1.65	32	3
1:A:7:VAL:HG12	1:A:91:ILE:CG1	0.91	1.95	39	17
1:A:12:ASN:OD1	1:A:18:ALA:HB2	0.91	1.64	35	4
1:A:117:GLY:O	1:A:121:VAL:HG23	0.91	1.66	21	13
1:A:125:LEU:HD13	1:A:130:PHE:CD2	0.91	1.99	9	5
1:A:29:ALA:HB1	1:A:62:LEU:CD1	0.91	1.96	3	14
1:A:172:ALA:HB3	1:A:188:VAL:HG23	0.91	1.39	39	8
1:A:24:LEU:HD12	1:A:135:ILE:HD13	0.91	1.40	17	8
1:A:172:ALA:CB	1:A:188:VAL:HG21	0.90	1.96	21	25
1:A:17:TYR:CD2	1:A:151:LEU:HD11	0.90	2.02	5	1
1:A:68:TYR:O	1:A:72:SER:N	0.90	2.03	12	40
1:A:46:SER:CB	1:A:79:LEU:HD11	0.90	1.95	2	18
1:A:80:ALA:CB	1:A:125:LEU:HD21	0.90	1.95	10	34
1:A:29:ALA:CB	1:A:62:LEU:HD11	0.90	1.97	26	16
1:A:165:ILE:HD13	1:A:166:CYS:N	0.90	1.82	30	34
1:A:74:ARG:O	1:A:78:PRO:HD3	0.90	1.66	18	40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:136:GLY:O	1:A:137:ILE:HD12	0.89	1.67	32	1
1:A:36:LEU:HD21	1:A:38:ALA:HB3	0.89	1.41	21	1
1:A:108:ILE:HD11	1:A:129:ASP:O	0.89	1.66	23	14
1:A:43:HIS:HE2	1:A:48:ALA:HB3	0.89	1.25	19	1
1:A:7:VAL:HG13	1:A:91:ILE:CG1	0.88	1.97	12	21
1:A:80:ALA:HB3	1:A:125:LEU:HD21	0.88	1.40	2	18
1:A:104:ILE:HG23	1:A:165:ILE:CG1	0.88	1.98	10	18
1:A:106:LEU:HB3	1:A:133:VAL:HG22	0.88	1.43	35	1
1:A:106:LEU:HD13	1:A:106:LEU:O	0.88	1.69	34	1
1:A:162:VAL:HG22	1:A:163:PRO:HD3	0.88	1.45	40	1
1:A:19:ARG:O	1:A:21:ARG:N	0.87	2.06	9	17
1:A:8:VAL:HG11	1:A:76:ILE:HD11	0.87	1.43	22	10
1:A:104:ILE:HD11	1:A:188:VAL:CG1	0.87	1.98	21	1
1:A:76:ILE:CG2	1:A:125:LEU:HD11	0.87	1.98	31	11
1:A:43:HIS:NE2	1:A:48:ALA:HB3	0.87	1.85	19	1
1:A:10:LEU:HD11	1:A:94:HIS:NE2	0.87	1.84	16	13
1:A:21:ARG:NH1	1:A:27:VAL:HG21	0.86	1.85	29	3
1:A:122:VAL:HG22	1:A:130:PHE:CE2	0.86	2.04	34	4
1:A:86:ALA:HB3	1:A:89:ASN:OD1	0.86	1.71	39	3
1:A:121:VAL:HG13	1:A:125:LEU:HD12	0.86	1.48	12	12
1:A:104:ILE:HD13	1:A:169:ALA:CB	0.86	2.01	16	9
1:A:103:ARG:O	1:A:135:ILE:HG23	0.86	1.70	9	38
1:A:73:GLY:HA2	1:A:121:VAL:HG22	0.85	1.47	26	15
1:A:154:PHE:O	1:A:158:GLU:N	0.85	2.08	33	37
1:A:5:LEU:HD12	1:A:89:ASN:O	0.85	1.72	40	5
1:A:160:ALA:C	1:A:163:PRO:HD2	0.85	1.91	40	40
1:A:24:LEU:HD12	1:A:28:VAL:HG23	0.85	1.46	12	8
1:A:46:SER:O	1:A:79:LEU:HD11	0.85	1.69	9	2
1:A:42:ALA:HB2	1:A:49:GLU:OE1	0.85	1.69	10	5
1:A:104:ILE:HD13	1:A:169:ALA:HB2	0.85	1.48	16	6
1:A:40:PHE:CD2	1:A:51:ALA:HB3	0.85	2.06	35	5
1:A:24:LEU:HG	1:A:135:ILE:HD13	0.84	1.49	24	16
1:A:106:LEU:C	1:A:106:LEU:HD22	0.84	1.92	32	16
1:A:24:LEU:HD13	1:A:95:ASP:CG	0.84	1.93	9	1
1:A:125:LEU:HD13	1:A:130:PHE:CZ	0.84	2.06	40	7
1:A:40:PHE:CE2	1:A:51:ALA:HB2	0.84	2.08	3	7
1:A:17:TYR:CE2	1:A:151:LEU:HD21	0.84	2.06	16	3
1:A:7:VAL:HG12	1:A:91:ILE:HG13	0.84	1.49	39	8
1:A:17:TYR:CE2	1:A:151:LEU:HD22	0.84	2.07	31	2
1:A:40:PHE:CD1	1:A:51:ALA:HB2	0.84	2.08	9	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:135:ILE:HD13	0.84	2.02	26	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:184:ALA:O	1:A:188:VAL:N	0.84	2.11	32	40
1:A:93:ILE:HG22	1:A:133:VAL:HB	0.83	1.47	3	17
1:A:104:ILE:HG12	1:A:169:ALA:HB2	0.83	1.48	27	24
1:A:104:ILE:HG21	1:A:169:ALA:HB2	0.83	1.47	21	1
1:A:106:LEU:HB2	1:A:133:VAL:HG22	0.83	1.49	34	25
1:A:122:VAL:HG13	1:A:127:THR:O	0.83	1.74	29	6
1:A:97:LEU:HD11	1:A:150:VAL:CG2	0.83	2.04	5	3
1:A:40:PHE:HB2	1:A:50:VAL:O	0.82	1.73	16	26
1:A:97:LEU:HD22	1:A:150:VAL:CG2	0.82	2.04	30	4
1:A:104:ILE:HD11	1:A:188:VAL:HG12	0.82	1.51	21	1
1:A:85:VAL:HG22	1:A:89:ASN:ND2	0.82	1.90	23	5
1:A:7:VAL:HG13	1:A:91:ILE:HG12	0.81	1.52	34	15
1:A:154:PHE:CD2	1:A:157:ALA:HB3	0.81	2.10	35	38
1:A:56:ALA:HB1	1:A:177:ILE:CG2	0.81	2.02	8	1
1:A:150:VAL:HG12	1:A:151:LEU:HD22	0.81	1.52	29	7
1:A:8:VAL:CG2	1:A:92:VAL:HG22	0.81	2.05	5	18
1:A:97:LEU:HB2	1:A:150:VAL:HG22	0.81	1.50	25	1
1:A:121:VAL:HG12	1:A:125:LEU:HD12	0.81	1.51	26	4
1:A:106:LEU:HD22	1:A:106:LEU:O	0.81	1.75	13	34
1:A:8:VAL:HG23	1:A:92:VAL:HG22	0.81	1.53	22	16
1:A:20:THR:HG22	1:A:153:ASN:OD1	0.81	1.75	18	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:135:ILE:CD1	0.81	2.04	19	4
1:A:20:THR:O	1:A:21:ARG:HB3	0.80	1.74	11	13
1:A:104:ILE:CG2	1:A:165:ILE:HD11	0.80	2.06	11	30
1:A:40:PHE:HB2	1:A:51:ALA:HB2	0.80	1.51	6	1
1:A:24:LEU:HD23	1:A:135:ILE:CD1	0.80	2.06	26	2
1:A:173:THR:O	1:A:177:ILE:HD12	0.80	1.76	8	1
1:A:23:ASN:OD1	1:A:27:VAL:HG23	0.80	1.75	16	3
1:A:159:ARG:O	1:A:163:PRO:HG3	0.80	1.77	40	31
1:A:92:VAL:C	1:A:93:ILE:HD13	0.80	1.96	1	2
1:A:137:ILE:HD11	1:A:150:VAL:HG22	0.80	1.52	38	9
1:A:151:LEU:HD23	1:A:151:LEU:O	0.80	1.75	9	1
1:A:24:LEU:HD22	1:A:135:ILE:CD1	0.80	2.06	35	1
1:A:78:PRO:O	1:A:82:PHE:N	0.79	2.15	26	40
1:A:17:TYR:CE1	1:A:151:LEU:HD22	0.79	2.11	36	5
1:A:6:LEU:N	1:A:89:ASN:O	0.79	2.14	25	37
1:A:97:LEU:HD21	1:A:150:VAL:HA	0.79	1.55	23	1
1:A:95:ASP:OD2	1:A:137:ILE:HG21	0.79	1.78	20	4
1:A:118:LEU:O	1:A:122:VAL:HG23	0.79	1.76	11	11
1:A:46:SER:HB3	1:A:79:LEU:HD11	0.79	1.53	8	11
1:A:7:VAL:HG23	1:A:62:LEU:HA	0.79	1.54	38	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:VAL:HG12	1:A:91:ILE:HG12	0.79	1.52	16	15
1:A:159:ARG:O	1:A:163:PRO:CG	0.78	2.31	38	40
1:A:104:ILE:HG23	1:A:165:ILE:CD1	0.78	2.08	23	25
1:A:97:LEU:HD22	1:A:150:VAL:HG21	0.78	1.55	1	6
1:A:17:TYR:OH	1:A:151:LEU:HD13	0.78	1.78	36	1
1:A:76:ILE:HG23	1:A:125:LEU:HD21	0.78	1.52	37	2
1:A:24:LEU:CG	1:A:135:ILE:HD13	0.78	2.09	5	18
1:A:65:PRO:O	1:A:68:TYR:CE1	0.78	2.37	11	40
1:A:184:ALA:O	1:A:188:VAL:HG13	0.78	1.78	3	1
1:A:76:ILE:O	1:A:80:ALA:N	0.78	2.16	35	40
1:A:15:ALA:HB3	1:A:18:ALA:HB2	0.78	1.54	19	2
1:A:17:TYR:CE1	1:A:151:LEU:HD21	0.78	2.13	27	1
1:A:14:GLY:O	1:A:18:ALA:HB2	0.78	1.78	9	3
1:A:162:VAL:N	1:A:163:PRO:CD	0.77	2.47	40	40
1:A:10:LEU:HD13	1:A:69:MET:CA	0.77	2.09	38	19
1:A:17:TYR:CD2	1:A:151:LEU:HD22	0.77	2.14	31	3
1:A:7:VAL:HB	1:A:62:LEU:HD22	0.77	1.56	19	7
1:A:122:VAL:HG22	1:A:127:THR:O	0.77	1.79	25	4
1:A:28:VAL:HG22	1:A:166:CYS:SG	0.77	2.18	16	4
1:A:104:ILE:HG22	1:A:135:ILE:HG13	0.77	1.57	35	13
1:A:20:THR:HB	1:A:151:LEU:HD23	0.77	1.53	12	1
1:A:172:ALA:HB1	1:A:184:ALA:HB1	0.77	1.56	28	12
1:A:17:TYR:O	1:A:20:THR:HG23	0.77	1.78	2	2
1:A:17:TYR:CE2	1:A:151:LEU:HD11	0.77	2.14	5	2
1:A:106:LEU:HD13	1:A:106:LEU:N	0.76	1.96	35	1
1:A:40:PHE:CD2	1:A:51:ALA:CB	0.76	2.68	35	12
1:A:10:LEU:HD12	1:A:10:LEU:C	0.76	2.01	13	34
1:A:76:ILE:HG21	1:A:125:LEU:HD11	0.76	1.57	37	11
1:A:48:ALA:HB1	1:A:65:PRO:HA	0.76	1.57	6	28
1:A:93:ILE:HD12	1:A:133:VAL:HB	0.76	1.55	1	2
1:A:154:PHE:O	1:A:156:PRO:N	0.76	2.18	37	37
1:A:172:ALA:HB1	1:A:188:VAL:CG2	0.76	2.07	32	3
1:A:158:GLU:O	1:A:162:VAL:N	0.76	2.18	2	35
1:A:168:GLN:HG2	1:A:188:VAL:HG13	0.76	1.57	13	1
1:A:122:VAL:HG23	1:A:130:PHE:CE2	0.76	2.16	33	2
1:A:56:ALA:O	1:A:177:ILE:HG21	0.76	1.80	17	1
1:A:10:LEU:HD13	1:A:69:MET:HA	0.76	1.56	18	23
1:A:24:LEU:CD1	1:A:28:VAL:HG23	0.76	2.11	32	11
1:A:31:LEU:HD12	1:A:31:LEU:O	0.76	1.81	16	9
1:A:80:ALA:HB1	1:A:125:LEU:HD21	0.76	1.56	10	6
1:A:5:LEU:HD23	1:A:89:ASN:OD1	0.76	1.81	26	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:LEU:CD1	1:A:135:ILE:HD13	0.75	2.10	19	9
1:A:73:GLY:HA2	1:A:121:VAL:HG23	0.75	1.59	15	13
1:A:6:LEU:HD23	1:A:7:VAL:N	0.75	1.96	29	5
1:A:154:PHE:C	1:A:156:PRO:HD2	0.75	2.03	26	40
1:A:40:PHE:HD2	1:A:51:ALA:HB2	0.75	1.41	31	3
1:A:108:ILE:HD12	1:A:130:PHE:O	0.75	1.82	38	8
1:A:8:VAL:HG11	1:A:76:ILE:CD1	0.74	2.12	22	7
1:A:24:LEU:HB3	1:A:135:ILE:HD13	0.74	1.59	14	7
1:A:137:ILE:O	1:A:137:ILE:CG2	0.74	2.35	32	2
1:A:76:ILE:HG22	1:A:125:LEU:HD21	0.74	1.59	25	5
1:A:21:ARG:CZ	1:A:24:LEU:HD21	0.74	2.12	20	2
1:A:93:ILE:N	1:A:93:ILE:CD1	0.74	2.50	1	1
1:A:28:VAL:HG11	1:A:93:ILE:HD13	0.74	1.59	10	3
1:A:175:LEU:HD21	1:A:183:PRO:HG2	0.74	1.59	39	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:162:VAL:HG21	0.73	1.97	25	3
1:A:21:ARG:NE	1:A:24:LEU:HD21	0.73	1.97	8	2
1:A:108:ILE:C	1:A:108:ILE:HD12	0.73	2.02	8	9
1:A:28:VAL:HG21	1:A:93:ILE:HD11	0.73	1.59	36	2
1:A:40:PHE:CE1	1:A:62:LEU:HD12	0.73	2.19	21	2
1:A:96:ASP:O	1:A:137:ILE:N	0.73	2.20	13	30
1:A:87:PRO:HB3	1:A:130:PHE:CD2	0.73	2.18	10	3
1:A:137:ILE:HD11	1:A:150:VAL:HG21	0.73	1.61	35	1
1:A:36:LEU:HD12	1:A:36:LEU:C	0.73	2.04	30	3
1:A:46:SER:HB2	1:A:79:LEU:HD11	0.73	1.59	23	12
1:A:21:ARG:NE	1:A:162:VAL:HG22	0.73	1.99	18	2
1:A:15:ALA:HB3	1:A:18:ALA:CB	0.73	2.13	19	2
1:A:176:LEU:HD23	1:A:176:LEU:O	0.73	1.84	2	36
1:A:10:LEU:HD13	1:A:94:HIS:CE1	0.73	2.19	9	1
1:A:112:GLU:OE1	1:A:122:VAL:HG21	0.73	1.83	16	1
1:A:152:GLU:O	1:A:153:ASN:CB	0.73	2.36	27	33
1:A:93:ILE:HD13	1:A:93:ILE:C	0.72	2.04	31	1
1:A:104:ILE:HG23	1:A:165:ILE:HG13	0.72	1.61	30	11
1:A:20:THR:O	1:A:21:ARG:CB	0.72	2.37	18	16
1:A:137:ILE:HD13	1:A:137:ILE:O	0.72	1.85	35	4
1:A:128:LYS:O	1:A:129:ASP:CB	0.72	2.38	36	24
1:A:182:GLU:N	1:A:183:PRO:CD	0.72	2.52	27	40
1:A:56:ALA:CB	1:A:177:ILE:HG22	0.72	2.14	32	2
1:A:40:PHE:HA	1:A:51:ALA:HB2	0.72	1.59	35	6
1:A:31:LEU:HD12	1:A:31:LEU:C	0.72	2.05	16	9
1:A:20:THR:HG22	1:A:152:GLU:O	0.72	1.84	34	4
1:A:21:ARG:O	1:A:24:LEU:HD23	0.72	1.85	38	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:121:VAL:HG22	1:A:125:LEU:CD1	0.71	2.15	1	4
1:A:156:PRO:O	1:A:159:ARG:HG3	0.71	1.86	39	6
1:A:165:ILE:HD13	1:A:165:ILE:C	0.71	2.05	17	30
1:A:158:GLU:HG2	1:A:162:VAL:HG23	0.71	1.59	34	3
1:A:62:LEU:HD11	1:A:64:LYS:HE3	0.71	1.60	31	2
1:A:68:TYR:O	1:A:72:SER:CB	0.71	2.38	27	40
1:A:188:VAL:O	1:A:191:TRP:CE3	0.71	2.44	11	7
1:A:52:THR:HG22	1:A:61:VAL:CG2	0.71	2.13	11	2
1:A:150:VAL:HG12	1:A:151:LEU:CD2	0.71	2.16	29	1
1:A:7:VAL:HG13	1:A:91:ILE:HG13	0.71	1.62	3	7
1:A:7:VAL:HG12	1:A:91:ILE:CD1	0.71	2.15	37	9
1:A:62:LEU:HD13	1:A:64:LYS:NZ	0.71	2.01	39	4
1:A:128:LYS:CB	1:A:130:PHE:CE2	0.70	2.74	5	6
1:A:36:LEU:HD11	1:A:55:SER:HB3	0.70	1.61	27	1
1:A:106:LEU:HD22	1:A:106:LEU:C	0.70	2.07	36	19
1:A:150:VAL:CG1	1:A:151:LEU:HD22	0.70	2.16	29	2
1:A:17:TYR:CG	1:A:151:LEU:HD11	0.70	2.21	27	2
1:A:56:ALA:HB1	1:A:177:ILE:HG22	0.70	1.63	32	1
1:A:106:LEU:CB	1:A:133:VAL:HG22	0.70	2.16	38	8
1:A:24:LEU:HD12	1:A:28:VAL:CG2	0.70	2.17	12	5
1:A:122:VAL:HG23	1:A:130:PHE:CZ	0.70	2.22	38	5
1:A:15:ALA:O	1:A:18:ALA:HB3	0.70	1.86	29	5
1:A:10:LEU:CD1	1:A:92:VAL:HG13	0.70	2.16	40	1
1:A:8:VAL:CG1	1:A:76:ILE:HD11	0.70	2.16	22	2
1:A:118:LEU:O	1:A:121:VAL:HG12	0.70	1.87	15	13
1:A:21:ARG:NH1	1:A:162:VAL:HG22	0.69	2.02	14	1
1:A:125:LEU:HD13	1:A:130:PHE:CD1	0.69	2.21	27	5
1:A:125:LEU:CD1	1:A:130:PHE:CE2	0.69	2.75	18	3
1:A:24:LEU:HD12	1:A:135:ILE:CD1	0.69	2.16	17	5
1:A:31:LEU:HD23	1:A:166:CYS:CB	0.69	2.18	16	1
1:A:85:VAL:CG1	1:A:90:ILE:HD11	0.69	2.17	20	1
1:A:40:PHE:HB3	1:A:51:ALA:CB	0.69	2.16	16	16
1:A:21:ARG:NH1	1:A:101:PHE:CE1	0.69	2.60	24	1
1:A:112:GLU:CD	1:A:122:VAL:HG21	0.69	2.08	15	3
1:A:166:CYS:O	1:A:170:ALA:HB2	0.69	1.88	39	15
1:A:100:GLU:N	1:A:138:GLY:H	0.69	1.84	23	1
1:A:73:GLY:O	1:A:124:ALA:CB	0.69	2.40	24	39
1:A:33:ALA:O	1:A:38:ALA:HB2	0.69	1.87	13	3
1:A:70:ASN:O	1:A:74:ARG:CD	0.69	2.40	38	14
1:A:91:ILE:HD12	1:A:91:ILE:C	0.69	2.07	6	9
1:A:133:VAL:HG12	1:A:133:VAL:O	0.69	1.87	27	22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:ILE:HG13	1:A:93:ILE:HD11	0.69	1.65	1	1
1:A:104:ILE:HD11	1:A:188:VAL:CG2	0.69	2.18	24	2
1:A:33:ALA:CB	1:A:40:PHE:CE1	0.69	2.75	24	5
1:A:24:LEU:HD12	1:A:95:ASP:HB2	0.69	1.64	27	4
1:A:76:ILE:CG2	1:A:125:LEU:HD21	0.69	2.18	37	3
1:A:33:ALA:HB1	1:A:38:ALA:CB	0.68	2.18	25	9
1:A:191:TRP:CE3	1:A:191:TRP:C	0.68	2.67	10	7
1:A:10:LEU:HD11	1:A:94:HIS:CE1	0.68	2.23	32	7
1:A:102:GLY:O	1:A:165:ILE:HD13	0.68	1.87	38	3
1:A:121:VAL:O	1:A:125:LEU:HD12	0.68	1.88	14	1
1:A:74:ARG:HG2	1:A:75:GLN:N	0.68	2.02	3	17
1:A:154:PHE:CD2	1:A:157:ALA:CB	0.68	2.77	25	37
1:A:154:PHE:O	1:A:155:THR:C	0.68	2.32	37	40
1:A:98:ASP:HB3	1:A:99:LEU:HD12	0.68	1.63	20	1
1:A:40:PHE:CD1	1:A:40:PHE:C	0.68	2.65	6	17
1:A:104:ILE:HD13	1:A:169:ALA:HB1	0.68	1.66	24	5
1:A:166:CYS:O	1:A:170:ALA:N	0.68	2.26	19	23
1:A:17:TYR:CD1	1:A:17:TYR:C	0.68	2.66	33	9
1:A:17:TYR:CD1	1:A:151:LEU:HD22	0.68	2.23	13	2
1:A:162:VAL:CG2	1:A:163:PRO:HD3	0.68	2.18	40	1
1:A:128:LYS:O	1:A:129:ASP:HB2	0.68	1.89	36	7
1:A:56:ALA:HB1	1:A:177:ILE:HD13	0.68	1.64	17	1
1:A:103:ARG:NE	1:A:191:TRP:CD1	0.68	2.62	22	3
1:A:33:ALA:HB1	1:A:40:PHE:CE1	0.68	2.24	24	4
1:A:33:ALA:HA	1:A:36:LEU:HD22	0.68	1.66	21	1
1:A:99:LEU:O	1:A:138:GLY:CA	0.67	2.43	34	4
1:A:42:ALA:HB2	1:A:49:GLU:CD	0.67	2.08	40	2
1:A:97:LEU:HB3	1:A:150:VAL:HG21	0.67	1.65	32	3
1:A:150:VAL:CG1	1:A:151:LEU:HD13	0.67	2.19	23	4
1:A:60:LEU:HD12	1:A:62:LEU:HD23	0.67	1.67	17	2
1:A:125:LEU:CD1	1:A:130:PHE:CE1	0.67	2.75	27	2
1:A:103:ARG:NH2	1:A:191:TRP:CD1	0.67	2.62	37	2
1:A:122:VAL:HG13	1:A:130:PHE:HE2	0.67	1.49	35	1
1:A:102:GLY:O	1:A:191:TRP:CH2	0.67	2.47	39	2
1:A:102:GLY:O	1:A:165:ILE:HG21	0.67	1.89	32	1
1:A:104:ILE:HD11	1:A:188:VAL:HG22	0.67	1.66	24	5
1:A:125:LEU:HD22	1:A:130:PHE:CE2	0.67	2.24	16	5
1:A:161:GLU:O	1:A:165:ILE:N	0.67	2.23	14	2
1:A:163:PRO:O	1:A:167:GLU:CG	0.67	2.42	29	2
1:A:137:ILE:O	1:A:137:ILE:HG23	0.67	1.89	37	2
1:A:137:ILE:HG12	1:A:137:ILE:O	0.67	1.89	3	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:ASN:O	1:A:27:VAL:HG23	0.67	1.90	36	23
1:A:125:LEU:HD22	1:A:130:PHE:CE1	0.67	2.25	1	2
1:A:97:LEU:HD11	1:A:150:VAL:HG23	0.67	1.67	5	2
1:A:155:THR:HG23	1:A:156:PRO:HD3	0.67	1.65	26	1
1:A:26:PHE:CD1	1:A:68:TYR:OH	0.66	2.47	20	10
1:A:103:ARG:O	1:A:136:GLY:N	0.66	2.23	2	19
1:A:176:LEU:HD22	1:A:184:ALA:HB1	0.66	1.67	39	1
1:A:125:LEU:HD22	1:A:130:PHE:CZ	0.66	2.25	16	10
1:A:172:ALA:HB2	1:A:188:VAL:CB	0.66	2.19	8	23
1:A:24:LEU:HD12	1:A:95:ASP:CB	0.66	2.19	6	5
1:A:31:LEU:HD23	1:A:166:CYS:HB3	0.66	1.66	16	2
1:A:176:LEU:HD12	1:A:180:GLY:O	0.66	1.90	39	1
1:A:96:ASP:N	1:A:135:ILE:O	0.66	2.29	34	29
1:A:33:ALA:HB1	1:A:38:ALA:HB2	0.66	1.66	15	9
1:A:85:VAL:HG22	1:A:89:ASN:HD21	0.66	1.48	18	5
1:A:137:ILE:O	1:A:137:ILE:CD1	0.66	2.44	35	18
1:A:172:ALA:HB1	1:A:188:VAL:CG1	0.66	2.15	3	1
1:A:102:GLY:O	1:A:191:TRP:CZ2	0.66	2.49	7	4
1:A:62:LEU:HD11	1:A:64:LYS:CE	0.66	2.20	31	2
1:A:95:ASP:OD1	1:A:137:ILE:HD13	0.66	1.90	37	2
1:A:176:LEU:HD23	1:A:176:LEU:C	0.65	2.11	8	35
1:A:97:LEU:HD23	1:A:97:LEU:H	0.65	1.49	27	11
1:A:37:GLY:O	1:A:38:ALA:C	0.65	2.34	4	21
1:A:73:GLY:CA	1:A:121:VAL:HG22	0.65	2.21	26	7
1:A:7:VAL:HG13	1:A:91:ILE:CD1	0.65	2.21	3	8
1:A:25:GLY:HA2	1:A:93:ILE:HD11	0.65	1.67	39	12
1:A:95:ASP:OD2	1:A:97:LEU:HD21	0.65	1.92	25	1
1:A:137:ILE:CD1	1:A:150:VAL:HG22	0.65	2.21	1	8
1:A:26:PHE:CE1	1:A:64:LYS:NZ	0.65	2.64	7	1
1:A:66:ARG:O	1:A:68:TYR:CD2	0.65	2.50	17	17
1:A:125:LEU:HB3	1:A:130:PHE:CE2	0.65	2.26	12	8
1:A:118:LEU:HD13	1:A:132:ARG:HD3	0.65	1.67	8	2
1:A:10:LEU:O	1:A:94:HIS:CD2	0.65	2.49	32	10
1:A:40:PHE:CE2	1:A:49:GLU:CD	0.65	2.70	7	3
1:A:103:ARG:CZ	1:A:191:TRP:CD1	0.65	2.80	22	3
1:A:40:PHE:CE2	1:A:51:ALA:HB3	0.65	2.27	34	5
1:A:40:PHE:CB	1:A:51:ALA:HA	0.65	2.22	33	19
1:A:20:THR:HG21	1:A:151:LEU:HD12	0.65	1.69	23	2
1:A:40:PHE:CE2	1:A:49:GLU:OE2	0.65	2.50	10	3
1:A:85:VAL:HG11	1:A:90:ILE:HD11	0.65	1.69	40	1
1:A:96:ASP:O	1:A:137:ILE:HD13	0.65	1.91	3	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:ARG:HG3	1:A:24:LEU:HD22	0.65	1.67	4	1
1:A:126:GLY:O	1:A:127:THR:HG22	0.65	1.92	24	9
1:A:130:PHE:CE1	1:A:132:ARG:NH2	0.65	2.65	24	1
1:A:76:ILE:HG22	1:A:80:ALA:HB2	0.65	1.66	5	11
1:A:71:GLU:O	1:A:75:GLN:HB2	0.65	1.92	35	14
1:A:185:GLN:O	1:A:189:HIS:CB	0.65	2.44	22	18
1:A:24:LEU:HD13	1:A:28:VAL:HG23	0.65	1.67	39	4
1:A:6:LEU:HD22	1:A:90:ILE:CD1	0.65	2.21	33	2
1:A:122:VAL:HG22	1:A:130:PHE:CE1	0.65	2.27	29	1
1:A:172:ALA:CA	1:A:188:VAL:HG21	0.64	2.21	21	15
1:A:85:VAL:HG12	1:A:89:ASN:OD1	0.64	1.92	5	2
1:A:47:GLY:O	1:A:48:ALA:HB2	0.64	1.92	19	6
1:A:103:ARG:NH2	1:A:189:HIS:CE1	0.64	2.65	17	1
1:A:6:LEU:HD22	1:A:90:ILE:HD12	0.64	1.67	32	2
1:A:130:PHE:CD1	1:A:130:PHE:N	0.64	2.65	4	3
1:A:103:ARG:NH2	1:A:191:TRP:CG	0.64	2.65	22	3
1:A:6:LEU:HD13	1:A:90:ILE:HG12	0.64	1.68	30	1
1:A:160:ALA:C	1:A:163:PRO:CD	0.64	2.66	40	1
1:A:80:ALA:CB	1:A:125:LEU:CD2	0.64	2.76	37	13
1:A:186:ASN:C	1:A:190:ALA:HB3	0.64	2.12	39	3
1:A:10:LEU:HD11	1:A:94:HIS:CD2	0.64	2.28	16	4
1:A:87:PRO:HA	1:A:130:PHE:CD1	0.64	2.27	9	4
1:A:17:TYR:CE2	1:A:151:LEU:CD1	0.64	2.81	5	1
1:A:137:ILE:HD12	1:A:150:VAL:HG22	0.64	1.68	17	4
1:A:73:GLY:O	1:A:124:ALA:HB3	0.64	1.93	9	39
1:A:172:ALA:CB	1:A:188:VAL:CG2	0.64	2.76	9	14
1:A:14:GLY:O	1:A:15:ALA:HB2	0.64	1.92	7	9
1:A:21:ARG:CZ	1:A:22:HIS:CE1	0.64	2.81	9	1
1:A:50:VAL:HG12	1:A:63:ALA:HB2	0.64	1.70	26	4
1:A:137:ILE:O	1:A:137:ILE:CG1	0.64	2.46	3	10
1:A:99:LEU:HD23	1:A:101:PHE:CD1	0.64	2.27	32	2
1:A:100:GLU:OE1	1:A:154:PHE:CE2	0.63	2.51	25	1
1:A:137:ILE:CG1	1:A:137:ILE:O	0.63	2.46	36	7
1:A:21:ARG:HB3	1:A:24:LEU:HD23	0.63	1.68	39	5
1:A:49:GLU:O	1:A:63:ALA:HB1	0.63	1.93	30	10
1:A:74:ARG:O	1:A:78:PRO:CG	0.63	2.46	18	3
1:A:10:LEU:CD2	1:A:118:LEU:HD21	0.63	2.23	1	4
1:A:15:ALA:HA	1:A:18:ALA:HB3	0.63	1.69	25	4
1:A:122:VAL:O	1:A:126:GLY:CA	0.63	2.47	36	22
1:A:7:VAL:HG22	1:A:62:LEU:HA	0.63	1.69	36	1
1:A:105:ARG:N	1:A:134:ARG:O	0.63	2.31	22	39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:172:ALA:CB	1:A:184:ALA:HB1	0.63	2.23	28	7
1:A:28:VAL:HG21	1:A:93:ILE:HD13	0.63	1.70	21	1
1:A:40:PHE:CD1	1:A:64:LYS:NZ	0.63	2.67	21	1
1:A:125:LEU:CD2	1:A:130:PHE:CE1	0.63	2.82	1	1
1:A:137:ILE:O	1:A:138:GLY:C	0.63	2.37	20	2
1:A:56:ALA:HA	1:A:177:ILE:HG23	0.63	1.71	1	2
1:A:40:PHE:N	1:A:40:PHE:CD1	0.62	2.67	25	9
1:A:125:LEU:HB3	1:A:130:PHE:CZ	0.62	2.29	30	11
1:A:24:LEU:HD22	1:A:95:ASP:CB	0.62	2.24	40	2
1:A:87:PRO:HB3	1:A:130:PHE:CE1	0.62	2.29	37	5
1:A:40:PHE:CE2	1:A:50:VAL:CG2	0.62	2.82	22	1
1:A:93:ILE:HD12	1:A:135:ILE:HD11	0.62	1.71	39	2
1:A:26:PHE:CE2	1:A:30:ASP:OD2	0.62	2.51	37	1
1:A:56:ALA:CA	1:A:177:ILE:HG23	0.62	2.24	1	1
1:A:36:LEU:HD21	1:A:38:ALA:CB	0.62	2.23	21	1
1:A:93:ILE:C	1:A:93:ILE:HD12	0.62	2.13	23	1
1:A:98:ASP:O	1:A:99:LEU:HD22	0.62	1.93	39	2
1:A:19:ARG:HG3	1:A:155:THR:HG23	0.62	1.70	1	1
1:A:162:VAL:N	1:A:163:PRO:HD2	0.62	2.09	40	29
1:A:87:PRO:HG3	1:A:127:THR:HG21	0.62	1.69	28	2
1:A:122:VAL:O	1:A:126:GLY:N	0.62	2.32	2	40
1:A:101:PHE:CE1	1:A:158:GLU:CG	0.62	2.82	21	2
1:A:36:LEU:CD2	1:A:38:ALA:HB3	0.62	2.23	21	1
1:A:168:GLN:CD	1:A:191:TRP:CH2	0.62	2.73	26	2
1:A:55:SER:O	1:A:58:ARG:O	0.62	2.18	10	25
1:A:108:ILE:HD13	1:A:131:GLN:HG3	0.62	1.70	6	5
1:A:127:THR:OG1	1:A:130:PHE:CE2	0.62	2.48	35	2
1:A:14:GLY:O	1:A:15:ALA:HB3	0.62	1.95	24	3
1:A:17:TYR:CE2	1:A:151:LEU:CG	0.62	2.83	5	1
1:A:137:ILE:O	1:A:137:ILE:HG12	0.62	1.95	36	11
1:A:30:ASP:O	1:A:34:ALA:N	0.62	2.32	6	34
1:A:12:ASN:ND2	1:A:22:HIS:CG	0.62	2.68	7	3
1:A:76:ILE:CG2	1:A:125:LEU:CD1	0.61	2.78	31	4
1:A:115:HIS:HB2	1:A:118:LEU:HD12	0.61	1.69	15	1
1:A:188:VAL:O	1:A:191:TRP:CZ3	0.61	2.53	17	2
1:A:106:LEU:HD12	1:A:106:LEU:O	0.61	1.94	30	1
1:A:172:ALA:CB	1:A:188:VAL:HG22	0.61	2.11	32	1
1:A:153:ASN:CG	1:A:153:ASN:O	0.61	2.37	6	34
1:A:108:ILE:HG23	1:A:109:GLY:N	0.61	2.10	23	11
1:A:13:PRO:HG3	1:A:66:ARG:C	0.61	2.15	17	3
1:A:23:ASN:O	1:A:27:VAL:CG2	0.61	2.48	34	24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:71:GLU:O	1:A:75:GLN:CB	0.61	2.48	39	32
1:A:20:THR:O	1:A:21:ARG:HB2	0.61	1.95	33	8
1:A:40:PHE:CE2	1:A:49:GLU:HB3	0.61	2.29	26	4
1:A:128:LYS:CD	1:A:128:LYS:N	0.61	2.62	25	3
1:A:80:ALA:HB3	1:A:125:LEU:CD2	0.61	2.26	21	5
1:A:121:VAL:CG1	1:A:125:LEU:HD12	0.61	2.23	24	3
1:A:168:GLN:OE1	1:A:191:TRP:CD1	0.61	2.54	10	2
1:A:104:ILE:CD1	1:A:169:ALA:HB1	0.61	2.25	32	1
1:A:128:LYS:HB2	1:A:130:PHE:CE2	0.61	2.30	5	8
1:A:185:GLN:O	1:A:189:HIS:C	0.61	2.38	17	19
1:A:71:GLU:O	1:A:75:GLN:CG	0.61	2.49	4	17
1:A:40:PHE:CZ	1:A:49:GLU:OE1	0.61	2.53	8	3
1:A:101:PHE:CE1	1:A:137:ILE:CG1	0.61	2.83	18	2
1:A:26:PHE:CE1	1:A:49:GLU:OE1	0.61	2.54	27	2
1:A:85:VAL:HG13	1:A:90:ILE:HD11	0.61	1.73	20	1
1:A:99:LEU:O	1:A:138:GLY:C	0.61	2.39	34	17
1:A:65:PRO:O	1:A:68:TYR:CD1	0.61	2.54	27	26
1:A:172:ALA:HB1	1:A:188:VAL:HG23	0.61	1.70	4	2
1:A:93:ILE:HD11	1:A:135:ILE:HD11	0.61	1.73	10	3
1:A:90:ILE:CG2	1:A:130:PHE:CD2	0.61	2.84	37	1
1:A:161:GLU:O	1:A:165:ILE:CG2	0.61	2.45	17	37
1:A:24:LEU:HD23	1:A:95:ASP:OD1	0.61	1.95	33	2
1:A:122:VAL:HG13	1:A:130:PHE:CE2	0.61	2.31	35	1
1:A:60:LEU:HD12	1:A:60:LEU:O	0.61	1.96	13	3
1:A:10:LEU:HD21	1:A:118:LEU:HD21	0.60	1.70	1	2
1:A:120:SER:O	1:A:124:ALA:CB	0.60	2.49	33	14
1:A:5:LEU:HD23	1:A:89:ASN:HD22	0.60	1.55	7	1
1:A:87:PRO:CG	1:A:128:LYS:O	0.60	2.49	6	9
1:A:22:HIS:CE1	1:A:151:LEU:HD21	0.60	2.31	13	2
1:A:10:LEU:HD11	1:A:92:VAL:HG22	0.60	1.72	40	1
1:A:108:ILE:HD13	1:A:131:GLN:CG	0.60	2.25	30	4
1:A:46:SER:OG	1:A:79:LEU:HD11	0.60	1.95	2	3
1:A:101:PHE:CE1	1:A:158:GLU:OE2	0.60	2.54	5	5
1:A:186:ASN:N	1:A:186:ASN:HD22	0.60	1.92	5	1
1:A:168:GLN:CG	1:A:191:TRP:CH2	0.60	2.84	38	4
1:A:10:LEU:HD12	1:A:10:LEU:N	0.60	2.12	40	1
1:A:168:GLN:O	1:A:188:VAL:HG21	0.60	1.96	34	2
1:A:46:SER:HB2	1:A:79:LEU:HD21	0.60	1.74	5	1
1:A:112:GLU:OE2	1:A:122:VAL:HG21	0.60	1.97	15	1
1:A:103:ARG:NE	1:A:191:TRP:CE2	0.60	2.69	37	1
1:A:12:ASN:N	1:A:22:HIS:O	0.60	2.35	8	18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:ASN:OD1	1:A:22:HIS:CD2	0.60	2.54	28	4
1:A:104:ILE:CD1	1:A:169:ALA:HB2	0.60	2.24	16	5
1:A:50:VAL:HA	1:A:62:LEU:O	0.60	1.97	9	16
1:A:24:LEU:CB	1:A:135:ILE:HD13	0.60	2.27	14	6
1:A:46:SER:CB	1:A:79:LEU:HD21	0.60	2.27	5	8
1:A:76:ILE:CG2	1:A:125:LEU:CG	0.60	2.80	37	2
1:A:59:SER:C	1:A:60:LEU:HD23	0.60	2.17	15	4
1:A:126:GLY:O	1:A:127:THR:CB	0.60	2.50	26	18
1:A:7:VAL:HG23	1:A:62:LEU:CA	0.60	2.27	39	8
1:A:30:ASP:O	1:A:34:ALA:CB	0.60	2.50	40	10
1:A:165:ILE:CG2	1:A:166:CYS:N	0.60	2.64	18	3
1:A:87:PRO:CB	1:A:130:PHE:CD1	0.60	2.85	18	2
1:A:5:LEU:HD12	1:A:59:SER:O	0.60	1.97	30	1
1:A:6:LEU:HD22	1:A:90:ILE:HG12	0.59	1.73	38	6
1:A:8:VAL:HG21	1:A:76:ILE:CD1	0.59	2.27	8	3
1:A:98:ASP:N	1:A:138:GLY:O	0.59	2.35	27	7
1:A:103:ARG:CD	1:A:191:TRP:CH2	0.59	2.85	16	4
1:A:168:GLN:CD	1:A:191:TRP:CZ2	0.59	2.76	26	1
1:A:10:LEU:CD2	1:A:118:LEU:CD2	0.59	2.80	1	2
1:A:93:ILE:HA	1:A:133:VAL:O	0.59	1.98	32	38
1:A:172:ALA:HA	1:A:184:ALA:HB1	0.59	1.75	34	7
1:A:183:PRO:O	1:A:187:ARG:N	0.59	2.35	29	39
1:A:188:VAL:C	1:A:190:ALA:H	0.59	2.00	8	20
1:A:10:LEU:CD1	1:A:94:HIS:CD2	0.59	2.84	16	6
1:A:67:CYS:CB	1:A:71:GLU:HB2	0.59	2.27	13	27
1:A:97:LEU:HD21	1:A:150:VAL:HG23	0.59	1.74	6	3
1:A:40:PHE:CZ	1:A:62:LEU:HD12	0.59	2.31	12	2
1:A:155:THR:O	1:A:159:ARG:HB3	0.59	1.96	35	6
1:A:152:GLU:OE1	1:A:154:PHE:CD1	0.59	2.55	33	4
1:A:118:LEU:N	1:A:118:LEU:HD23	0.59	2.11	11	5
1:A:103:ARG:NE	1:A:191:TRP:CD2	0.59	2.70	15	2
1:A:95:ASP:OD2	1:A:137:ILE:HD13	0.59	1.96	20	1
1:A:56:ALA:O	1:A:177:ILE:HG22	0.59	1.97	28	5
1:A:122:VAL:HG23	1:A:130:PHE:CE1	0.59	2.32	14	2
1:A:154:PHE:O	1:A:157:ALA:N	0.59	2.35	33	1
1:A:154:PHE:C	1:A:156:PRO:CD	0.59	2.70	26	40
1:A:6:LEU:O	1:A:89:ASN:O	0.59	2.21	23	15
1:A:75:GLN:O	1:A:79:LEU:CG	0.59	2.51	13	10
1:A:23:ASN:O	1:A:27:VAL:HG21	0.59	1.98	7	1
1:A:122:VAL:HG13	1:A:127:THR:C	0.59	2.17	13	1
1:A:191:TRP:CD1	1:A:191:TRP:C	0.59	2.75	25	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:24:LEU:HD23	1:A:28:VAL:HG23	0.59	1.74	29	2
1:A:62:LEU:HD22	1:A:63:ALA:N	0.59	2.11	31	5
1:A:40:PHE:CE2	1:A:49:GLU:OE1	0.59	2.55	8	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:62:LEU:CD2	0.59	2.80	24	1
1:A:83:TYR:HB3	1:A:85:VAL:HG23	0.59	1.73	3	8
1:A:40:PHE:O	1:A:41:LYS:CG	0.59	2.50	27	5
1:A:37:GLY:O	1:A:38:ALA:O	0.59	2.21	13	17
1:A:21:ARG:HD2	1:A:162:VAL:HG21	0.59	1.75	23	1
1:A:152:GLU:CD	1:A:154:PHE:CD1	0.59	2.76	27	1
1:A:76:ILE:O	1:A:80:ALA:CB	0.59	2.51	27	15
1:A:85:VAL:HG12	1:A:86:ALA:N	0.59	2.13	26	8
1:A:20:THR:O	1:A:21:ARG:CG	0.59	2.51	17	4
1:A:6:LEU:HD11	1:A:61:VAL:HG11	0.58	1.74	38	14
1:A:108:ILE:HG23	1:A:109:GLY:H	0.58	1.57	24	21
1:A:95:ASP:O	1:A:115:HIS:CE1	0.58	2.56	23	2
1:A:20:THR:CG2	1:A:21:ARG:N	0.58	2.65	9	1
1:A:114:GLY:O	1:A:115:HIS:CD2	0.58	2.56	22	5
1:A:17:TYR:CE1	1:A:151:LEU:CD1	0.58	2.78	23	2
1:A:23:ASN:O	1:A:27:VAL:N	0.58	2.33	15	32
1:A:10:LEU:HD12	1:A:10:LEU:O	0.58	1.97	36	9
1:A:127:THR:O	1:A:128:LYS:CB	0.58	2.49	22	3
1:A:188:VAL:CG1	1:A:189:HIS:N	0.58	2.66	33	15
1:A:166:CYS:O	1:A:170:ALA:CB	0.58	2.51	39	16
1:A:91:ILE:HD12	1:A:91:ILE:O	0.58	1.97	38	6
1:A:19:ARG:O	1:A:20:THR:C	0.58	2.41	33	13
1:A:115:HIS:O	1:A:119:ARG:CB	0.58	2.50	11	6
1:A:20:THR:HG21	1:A:151:LEU:HD23	0.58	1.74	25	1
1:A:100:GLU:HA	1:A:137:ILE:CA	0.58	2.28	25	1
1:A:24:LEU:HD23	1:A:95:ASP:CG	0.58	2.18	33	1
1:A:186:ASN:O	1:A:190:ALA:CB	0.58	2.51	2	19
1:A:121:VAL:O	1:A:125:LEU:HB2	0.58	1.98	12	20
1:A:101:PHE:CZ	1:A:158:GLU:OE2	0.58	2.56	26	5
1:A:137:ILE:CG1	1:A:150:VAL:CG2	0.58	2.82	35	1
1:A:75:GLN:HG3	1:A:76:ILE:N	0.58	2.13	37	1
1:A:176:LEU:CD1	1:A:180:GLY:O	0.58	2.51	39	1
1:A:158:GLU:O	1:A:162:VAL:HG23	0.58	1.97	29	11
1:A:79:LEU:N	1:A:79:LEU:CD2	0.58	2.67	13	8
1:A:87:PRO:HA	1:A:130:PHE:CE1	0.58	2.34	18	3
1:A:76:ILE:HD12	1:A:90:ILE:HD13	0.58	1.74	29	1
1:A:162:VAL:O	1:A:166:CYS:SG	0.58	2.62	25	36
1:A:176:LEU:HD13	1:A:184:ALA:CB	0.58	2.27	39	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:106:LEU:C	1:A:106:LEU:CD2	0.58	2.72	40	32
1:A:70:ASN:O	1:A:74:ARG:HD2	0.58	1.98	31	14
1:A:21:ARG:CD	1:A:162:VAL:CG2	0.58	2.82	26	3
1:A:17:TYR:O	1:A:17:TYR:CD1	0.58	2.57	34	4
1:A:97:LEU:HD23	1:A:150:VAL:HG23	0.58	1.75	39	1
1:A:128:LYS:HB2	1:A:130:PHE:CZ	0.58	2.33	20	5
1:A:150:VAL:HG13	1:A:151:LEU:HD13	0.58	1.76	34	4
1:A:40:PHE:CZ	1:A:49:GLU:OE2	0.58	2.56	31	3
1:A:28:VAL:HG12	1:A:32:LEU:HD12	0.58	1.76	34	1
1:A:101:PHE:CD2	1:A:138:GLY:O	0.58	2.57	38	1
1:A:155:THR:N	1:A:156:PRO:CD	0.58	2.67	25	39
1:A:44:LYS:O	1:A:45:ARG:CB	0.58	2.52	40	2
1:A:21:ARG:HB2	1:A:24:LEU:HD23	0.58	1.76	17	2
1:A:40:PHE:O	1:A:41:LYS:CB	0.58	2.51	27	1
1:A:74:ARG:CG	1:A:75:GLN:N	0.57	2.66	3	24
1:A:26:PHE:CE1	1:A:64:LYS:HE2	0.57	2.33	7	1
1:A:114:GLY:O	1:A:115:HIS:CG	0.57	2.57	40	7
1:A:91:ILE:HG22	1:A:131:GLN:NE2	0.57	2.14	25	1
1:A:125:LEU:HD13	1:A:130:PHE:HD2	0.57	1.57	26	1
1:A:10:LEU:HG	1:A:94:HIS:CD2	0.57	2.34	16	25
1:A:183:PRO:O	1:A:187:ARG:CB	0.57	2.53	31	34
1:A:10:LEU:HD21	1:A:94:HIS:ND1	0.57	2.14	16	10
1:A:43:HIS:CD2	1:A:50:VAL:HG21	0.57	2.33	4	1
1:A:87:PRO:HB3	1:A:130:PHE:CD1	0.57	2.33	18	8
1:A:102:GLY:O	1:A:165:ILE:CG2	0.57	2.52	32	1
1:A:182:GLU:N	1:A:183:PRO:HD2	0.57	2.14	27	36
1:A:51:ALA:N	1:A:62:LEU:O	0.57	2.37	31	23
1:A:21:ARG:HH11	1:A:27:VAL:HG21	0.57	1.59	29	1
1:A:184:ALA:CA	1:A:188:VAL:HG13	0.57	2.29	3	1
1:A:184:ALA:O	1:A:188:VAL:CB	0.57	2.53	32	16
1:A:31:LEU:HD22	1:A:166:CYS:HB3	0.57	1.76	36	12
1:A:103:ARG:HD2	1:A:191:TRP:CZ3	0.57	2.35	1	5
1:A:97:LEU:CD2	1:A:150:VAL:HG23	0.57	2.29	6	3
1:A:62:LEU:HD11	1:A:64:LYS:HZ3	0.57	1.60	12	1
1:A:188:VAL:O	1:A:191:TRP:CD2	0.57	2.57	37	2
1:A:13:PRO:O	1:A:18:ALA:HB2	0.57	1.99	16	1
1:A:17:TYR:CE2	1:A:151:LEU:CB	0.57	2.88	24	1
1:A:87:PRO:HA	1:A:90:ILE:HD12	0.57	1.77	26	3
1:A:74:ARG:CD	1:A:75:GLN:N	0.57	2.68	7	16
1:A:187:ARG:O	1:A:190:ALA:HB3	0.57	1.99	32	4
1:A:96:ASP:CG	1:A:115:HIS:HE2	0.57	2.02	18	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:ARG:HG3	1:A:24:LEU:HD23	0.57	1.76	10	1
1:A:13:PRO:O	1:A:18:ALA:CB	0.57	2.53	16	1
1:A:53:GLY:O	1:A:60:LEU:HD23	0.57	1.98	40	5
1:A:28:VAL:HG13	1:A:32:LEU:HD12	0.57	1.74	37	2
1:A:75:GLN:O	1:A:79:LEU:HB2	0.57	2.00	9	25
1:A:41:LYS:O	1:A:42:ALA:HB2	0.57	1.99	11	1
1:A:25:GLY:O	1:A:29:ALA:HB2	0.57	2.00	40	3
1:A:22:HIS:CE1	1:A:94:HIS:NE2	0.57	2.72	37	1
1:A:76:ILE:CG2	1:A:125:LEU:CD2	0.57	2.83	37	1
1:A:97:LEU:HD23	1:A:150:VAL:CG2	0.57	2.30	39	1
1:A:174:GLU:HG3	1:A:175:LEU:N	0.57	2.13	2	5
1:A:10:LEU:HB3	1:A:94:HIS:CE1	0.57	2.34	9	4
1:A:122:VAL:HG13	1:A:127:THR:OG1	0.57	1.99	35	2
1:A:10:LEU:C	1:A:10:LEU:CD1	0.56	2.74	36	26
1:A:108:ILE:CG2	1:A:109:GLY:N	0.56	2.67	9	12
1:A:76:ILE:HG21	1:A:125:LEU:CD1	0.56	2.29	37	2
1:A:127:THR:HA	1:A:130:PHE:CZ	0.56	2.35	26	1
1:A:75:GLN:O	1:A:79:LEU:HG	0.56	2.00	22	25
1:A:10:LEU:HD13	1:A:69:MET:N	0.56	2.14	32	9
1:A:102:GLY:O	1:A:165:ILE:CB	0.56	2.53	32	1
1:A:108:ILE:CD1	1:A:129:ASP:O	0.56	2.52	18	11
1:A:153:ASN:C	1:A:155:THR:H	0.56	2.04	35	37
1:A:155:THR:O	1:A:159:ARG:CG	0.56	2.53	38	29
1:A:86:ALA:O	1:A:89:ASN:ND2	0.56	2.38	37	14
1:A:115:HIS:ND1	1:A:118:LEU:HD11	0.56	2.15	6	1
1:A:12:ASN:CB	1:A:18:ALA:HB1	0.56	2.30	19	3
1:A:103:ARG:HD2	1:A:191:TRP:CH2	0.56	2.36	16	6
1:A:79:LEU:N	1:A:79:LEU:HD23	0.56	2.15	29	10
1:A:97:LEU:HD11	1:A:150:VAL:HG21	0.56	1.73	5	1
1:A:10:LEU:HD22	1:A:69:MET:HA	0.56	1.75	9	1
1:A:106:LEU:HD22	1:A:106:LEU:H	0.56	1.60	35	1
1:A:36:LEU:HD11	1:A:38:ALA:HB2	0.56	1.77	37	1
1:A:68:TYR:O	1:A:69:MET:O	0.56	2.24	34	24
1:A:185:GLN:O	1:A:189:HIS:HB3	0.56	2.01	38	34
1:A:62:LEU:HD13	1:A:64:LYS:HE2	0.56	1.77	28	2
1:A:71:GLU:OE2	1:A:74:ARG:CZ	0.56	2.54	3	3
1:A:114:GLY:O	1:A:115:HIS:CB	0.56	2.54	40	2
1:A:176:LEU:CD1	1:A:181:MET:CB	0.56	2.84	14	2
1:A:40:PHE:CB	1:A:51:ALA:CB	0.56	2.84	38	16
1:A:54:ARG:O	1:A:55:SER:CB	0.56	2.53	12	6
1:A:122:VAL:HG13	1:A:127:THR:CB	0.56	2.31	6	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:26:PHE:CE1	1:A:64:LYS:CE	0.56	2.89	7	1
1:A:102:GLY:O	1:A:165:ILE:CD1	0.56	2.53	38	3
1:A:162:VAL:O	1:A:166:CYS:CB	0.56	2.54	34	29
1:A:86:ALA:O	1:A:89:ASN:CG	0.56	2.44	18	14
1:A:85:VAL:HG22	1:A:89:ASN:OD1	0.56	2.00	12	2
1:A:172:ALA:HB3	1:A:188:VAL:CG2	0.56	2.30	29	5
1:A:184:ALA:HA	1:A:188:VAL:HG23	0.56	1.76	32	1
1:A:78:PRO:O	1:A:82:PHE:CB	0.56	2.54	26	38
1:A:188:VAL:HG12	1:A:189:HIS:N	0.56	2.16	39	10
1:A:168:GLN:HG2	1:A:191:TRP:CH2	0.56	2.36	38	2
1:A:87:PRO:CB	1:A:130:PHE:CD2	0.56	2.87	10	2
1:A:122:VAL:CG2	1:A:127:THR:OG1	0.56	2.54	17	4
1:A:21:ARG:NH1	1:A:162:VAL:HG21	0.56	2.16	16	2
1:A:7:VAL:CG1	1:A:91:ILE:CD1	0.56	2.84	31	5
1:A:10:LEU:HD21	1:A:72:SER:HB3	0.56	1.76	9	1
1:A:103:ARG:CD	1:A:191:TRP:CE2	0.56	2.89	37	2
1:A:104:ILE:CG2	1:A:165:ILE:CG1	0.56	2.81	23	2
1:A:95:ASP:OD2	1:A:97:LEU:CD2	0.56	2.54	25	1
1:A:96:ASP:CB	1:A:135:ILE:O	0.56	2.53	34	1
1:A:71:GLU:O	1:A:74:ARG:CD	0.55	2.54	35	21
1:A:152:GLU:C	1:A:153:ASN:CG	0.55	2.64	24	2
1:A:184:ALA:O	1:A:188:VAL:HG22	0.55	2.02	3	1
1:A:128:LYS:N	1:A:130:PHE:CE2	0.55	2.74	12	7
1:A:21:ARG:CG	1:A:24:LEU:HD22	0.55	2.31	4	1
1:A:93:ILE:CD1	1:A:135:ILE:HD11	0.55	2.31	12	4
1:A:31:LEU:HD13	1:A:166:CYS:HB3	0.55	1.77	21	3
1:A:130:PHE:CE2	1:A:132:ARG:HG3	0.55	2.36	13	2
1:A:176:LEU:HD11	1:A:181:MET:HB3	0.55	1.77	14	1
1:A:12:ASN:OD1	1:A:22:HIS:CG	0.55	2.59	21	2
1:A:104:ILE:HG23	1:A:165:ILE:HG12	0.55	1.77	21	1
1:A:155:THR:O	1:A:159:ARG:CB	0.55	2.55	23	36
1:A:92:VAL:O	1:A:133:VAL:N	0.55	2.39	27	16
1:A:103:ARG:NH1	1:A:191:TRP:CZ3	0.55	2.75	7	1
1:A:111:GLY:O	1:A:112:GLU:CB	0.55	2.54	21	2
1:A:17:TYR:CZ	1:A:151:LEU:HD11	0.55	2.36	16	1
1:A:98:ASP:C	1:A:99:LEU:HD12	0.55	2.22	17	1
1:A:103:ARG:CZ	1:A:188:VAL:O	0.55	2.54	22	3
1:A:10:LEU:HD13	1:A:92:VAL:HG13	0.55	1.78	40	1
1:A:149:PHE:CE1	1:A:152:GLU:OE2	0.55	2.59	40	1
1:A:20:THR:CG2	1:A:151:LEU:HD13	0.55	2.24	27	2
1:A:26:PHE:CD2	1:A:30:ASP:OD2	0.55	2.59	37	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:GLU:N	1:A:138:GLY:O	0.55	2.39	32	1
1:A:24:LEU:HD21	1:A:101:PHE:CZ	0.55	2.36	34	1
1:A:21:ARG:C	1:A:23:ASN:H	0.55	2.05	30	40
1:A:17:TYR:O	1:A:20:THR:CG2	0.55	2.54	23	6
1:A:24:LEU:CD2	1:A:95:ASP:OD1	0.55	2.54	7	2
1:A:108:ILE:HD12	1:A:108:ILE:C	0.55	2.20	11	1
1:A:22:HIS:ND1	1:A:151:LEU:HD21	0.55	2.17	13	1
1:A:176:LEU:HD11	1:A:181:MET:CB	0.55	2.32	14	1
1:A:105:ARG:CG	1:A:105:ARG:O	0.55	2.54	38	1
1:A:156:PRO:O	1:A:159:ARG:N	0.55	2.40	35	26
1:A:163:PRO:O	1:A:167:GLU:CB	0.55	2.55	5	19
1:A:19:ARG:C	1:A:21:ARG:N	0.55	2.59	16	12
1:A:5:LEU:CD1	1:A:91:ILE:HG23	0.55	2.31	14	2
1:A:36:LEU:HD23	1:A:37:GLY:N	0.55	2.16	21	1
1:A:24:LEU:O	1:A:28:VAL:N	0.55	2.32	9	14
1:A:26:PHE:CD2	1:A:68:TYR:OH	0.55	2.57	32	2
1:A:99:LEU:HB2	1:A:101:PHE:CE1	0.55	2.36	25	1
1:A:33:ALA:HB1	1:A:38:ALA:HB3	0.55	1.77	28	3
1:A:15:ALA:O	1:A:18:ALA:CB	0.55	2.55	16	3
1:A:157:ALA:O	1:A:161:GLU:CG	0.55	2.55	39	16
1:A:101:PHE:CE2	1:A:154:PHE:CD2	0.55	2.95	3	1
1:A:95:ASP:OD1	1:A:95:ASP:C	0.55	2.45	10	7
1:A:22:HIS:O	1:A:22:HIS:ND1	0.55	2.40	37	1
1:A:176:LEU:C	1:A:176:LEU:CD2	0.54	2.75	4	35
1:A:164:THR:HG22	1:A:165:ILE:N	0.54	2.17	24	8
1:A:42:ALA:HA	1:A:48:ALA:O	0.54	2.01	24	4
1:A:87:PRO:CB	1:A:128:LYS:O	0.54	2.55	9	1
1:A:101:PHE:CE1	1:A:137:ILE:HB	0.54	2.37	21	15
1:A:21:ARG:NH1	1:A:101:PHE:CZ	0.54	2.75	24	1
1:A:42:ALA:HA	1:A:49:GLU:HA	0.54	1.78	40	2
1:A:168:GLN:OE1	1:A:191:TRP:CZ2	0.54	2.60	26	1
1:A:158:GLU:O	1:A:162:VAL:CB	0.54	2.55	2	23
1:A:7:VAL:HG13	1:A:91:ILE:HD11	0.54	1.78	3	4
1:A:94:HIS:O	1:A:135:ILE:N	0.54	2.39	22	15
1:A:165:ILE:O	1:A:169:ALA:N	0.54	2.24	32	8
1:A:8:VAL:HG23	1:A:91:ILE:O	0.54	2.02	9	5
1:A:5:LEU:HA	1:A:89:ASN:HB3	0.54	1.78	14	4
1:A:36:LEU:HD11	1:A:55:SER:CB	0.54	2.29	27	1
1:A:56:ALA:CB	1:A:177:ILE:CG2	0.54	2.86	32	1
1:A:21:ARG:HH21	1:A:27:VAL:HG21	0.54	1.62	33	1
1:A:176:LEU:HD13	1:A:184:ALA:HB3	0.54	1.78	39	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:ALA:CB	1:A:65:PRO:HA	0.54	2.32	7	28
1:A:105:ARG:O	1:A:134:ARG:O	0.54	2.25	21	34
1:A:103:ARG:HG3	1:A:104:ILE:N	0.54	2.17	40	3
1:A:20:THR:CB	1:A:151:LEU:HD23	0.54	2.29	12	1
1:A:101:PHE:CE1	1:A:137:ILE:HG12	0.54	2.37	18	2
1:A:99:LEU:C	1:A:101:PHE:H	0.54	2.05	23	2
1:A:17:TYR:CE1	1:A:151:LEU:HD13	0.54	2.37	1	5
1:A:21:ARG:C	1:A:23:ASN:N	0.54	2.61	30	36
1:A:68:TYR:O	1:A:69:MET:C	0.54	2.46	6	24
1:A:40:PHE:CE2	1:A:49:GLU:CG	0.54	2.90	20	3
1:A:97:LEU:N	1:A:97:LEU:HD23	0.54	2.17	8	2
1:A:172:ALA:HB2	1:A:188:VAL:HG23	0.54	1.80	25	5
1:A:38:ALA:CB	1:A:52:THR:O	0.54	2.55	40	2
1:A:161:GLU:C	1:A:163:PRO:HD2	0.54	2.22	40	1
1:A:76:ILE:O	1:A:77:GLY:C	0.54	2.46	17	40
1:A:103:ARG:O	1:A:135:ILE:CG2	0.54	2.55	37	36
1:A:56:ALA:HB2	1:A:177:ILE:HD13	0.54	1.78	4	2
1:A:45:ARG:O	1:A:47:GLY:N	0.54	2.40	20	6
1:A:71:GLU:OE1	1:A:74:ARG:CZ	0.54	2.55	18	2
1:A:101:PHE:CE2	1:A:152:GLU:OE1	0.54	2.61	27	1
1:A:161:GLU:N	1:A:163:PRO:HD2	0.54	2.17	40	1
1:A:11:GLY:C	1:A:68:TYR:CD2	0.54	2.81	31	11
1:A:66:ARG:C	1:A:68:TYR:N	0.54	2.60	38	40
1:A:103:ARG:HD3	1:A:191:TRP:CZ2	0.54	2.38	8	4
1:A:103:ARG:CD	1:A:104:ILE:O	0.54	2.56	23	8
1:A:21:ARG:CG	1:A:24:LEU:CD2	0.54	2.85	4	1
1:A:133:VAL:O	1:A:133:VAL:HG12	0.54	2.00	31	12
1:A:129:ASP:O	1:A:130:PHE:O	0.54	2.24	36	4
1:A:103:ARG:HD2	1:A:191:TRP:CZ2	0.54	2.38	37	1
1:A:15:ALA:O	1:A:17:TYR:N	0.54	2.40	1	4
1:A:73:GLY:HA2	1:A:121:VAL:CG2	0.54	2.30	25	21
1:A:94:HIS:C	1:A:135:ILE:HD12	0.54	2.23	5	7
1:A:104:ILE:HG22	1:A:135:ILE:CG1	0.54	2.33	23	14
1:A:90:ILE:CG2	1:A:130:PHE:CD1	0.54	2.91	18	2
1:A:22:HIS:ND1	1:A:151:LEU:CD2	0.54	2.70	13	2
1:A:50:VAL:CG2	1:A:51:ALA:N	0.54	2.71	35	5
1:A:152:GLU:O	1:A:153:ASN:HB2	0.54	2.01	2	37
1:A:59:SER:O	1:A:60:LEU:HD23	0.54	2.03	20	2
1:A:8:VAL:HG21	1:A:92:VAL:HG22	0.54	1.78	12	7
1:A:30:ASP:O	1:A:34:ALA:HB2	0.54	2.03	26	10
1:A:25:GLY:O	1:A:29:ALA:CB	0.54	2.55	40	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:93:ILE:C	1:A:93:ILE:CD1	0.54	2.76	31	2
1:A:90:ILE:HG21	1:A:130:PHE:CD2	0.54	2.37	37	1
1:A:23:ASN:O	1:A:27:VAL:CB	0.54	2.56	34	22
1:A:67:CYS:O	1:A:68:TYR:HB2	0.54	2.02	7	40
1:A:168:GLN:HB3	1:A:191:TRP:CZ2	0.54	2.37	35	3
1:A:106:LEU:O	1:A:106:LEU:HD13	0.54	2.03	32	1
1:A:28:VAL:CG2	1:A:93:ILE:HD11	0.54	2.31	36	1
1:A:127:THR:O	1:A:128:LYS:CD	0.54	2.56	37	1
1:A:10:LEU:O	1:A:10:LEU:CG	0.53	2.56	24	13
1:A:19:ARG:HG2	1:A:155:THR:HG23	0.53	1.80	11	1
1:A:114:GLY:C	1:A:115:HIS:CG	0.53	2.82	16	3
1:A:91:ILE:CG2	1:A:131:GLN:CD	0.53	2.77	24	2
1:A:7:VAL:HG23	1:A:61:VAL:O	0.53	2.03	30	2
1:A:24:LEU:HD21	1:A:101:PHE:HZ	0.53	1.63	34	1
1:A:94:HIS:CE1	1:A:115:HIS:CE1	0.53	2.96	35	1
1:A:17:TYR:HE1	1:A:151:LEU:HD22	0.53	1.63	3	2
1:A:128:LYS:CB	1:A:130:PHE:CZ	0.53	2.92	5	3
1:A:50:VAL:HG23	1:A:62:LEU:O	0.53	2.02	20	4
1:A:21:ARG:HE	1:A:162:VAL:HG22	0.53	1.63	8	2
1:A:21:ARG:NE	1:A:22:HIS:CE1	0.53	2.76	9	1
1:A:101:PHE:CZ	1:A:158:GLU:HG3	0.53	2.38	21	2
1:A:128:LYS:HD3	1:A:128:LYS:C	0.53	2.24	13	1
1:A:71:GLU:O	1:A:75:GLN:NE2	0.53	2.41	31	1
1:A:176:LEU:HD12	1:A:181:MET:HA	0.53	1.79	40	1
1:A:10:LEU:HG	1:A:94:HIS:CG	0.53	2.38	23	28
1:A:85:VAL:CG2	1:A:89:ASN:OD1	0.53	2.57	12	2
1:A:104:ILE:HG21	1:A:169:ALA:CB	0.53	2.26	21	1
1:A:178:GLU:O	1:A:179:GLN:CB	0.53	2.56	27	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:91:ILE:HD11	0.53	2.32	31	1
1:A:38:ALA:HB3	1:A:52:THR:O	0.53	2.04	40	1
1:A:174:GLU:CG	1:A:175:LEU:N	0.53	2.72	37	32
1:A:8:VAL:HG11	1:A:76:ILE:HG12	0.53	1.81	27	7
1:A:96:ASP:O	1:A:137:ILE:CD1	0.53	2.57	7	13
1:A:169:ALA:O	1:A:173:THR:N	0.53	2.36	29	12
1:A:86:ALA:O	1:A:89:ASN:OD1	0.53	2.26	29	12
1:A:103:ARG:NH1	1:A:191:TRP:CH2	0.53	2.77	7	1
1:A:149:PHE:O	1:A:152:GLU:CG	0.53	2.56	26	6
1:A:26:PHE:CG	1:A:68:TYR:OH	0.53	2.58	32	5
1:A:99:LEU:O	1:A:136:GLY:C	0.53	2.46	32	1
1:A:91:ILE:HG22	1:A:131:GLN:HB2	0.53	1.80	15	3
1:A:105:ARG:NH1	1:A:189:HIS:CE1	0.53	2.76	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:VAL:CG1	1:A:91:ILE:CG1	0.53	2.86	27	3
1:A:33:ALA:HA	1:A:36:LEU:CD2	0.53	2.33	21	1
1:A:97:LEU:HD21	1:A:150:VAL:CA	0.53	2.32	23	1
1:A:21:ARG:HD3	1:A:162:VAL:HG11	0.53	1.79	40	1
1:A:53:GLY:N	1:A:60:LEU:O	0.53	2.41	40	7
1:A:168:GLN:O	1:A:188:VAL:HG11	0.53	2.04	1	3
1:A:49:GLU:O	1:A:63:ALA:CB	0.53	2.56	30	7
1:A:100:GLU:O	1:A:138:GLY:N	0.53	2.41	4	4
1:A:97:LEU:HD21	1:A:150:VAL:CG2	0.53	2.33	40	2
1:A:21:ARG:NE	1:A:24:LEU:HD13	0.53	2.17	18	1
1:A:122:VAL:CG2	1:A:127:THR:O	0.53	2.57	28	2
1:A:99:LEU:O	1:A:136:GLY:O	0.53	2.27	23	2
1:A:6:LEU:HD22	1:A:90:ILE:HD11	0.53	1.80	33	1
1:A:21:ARG:HG2	1:A:24:LEU:HD21	0.53	1.80	38	1
1:A:96:ASP:C	1:A:137:ILE:CD1	0.53	2.78	21	2
1:A:184:ALA:O	1:A:188:VAL:HB	0.53	2.04	23	20
1:A:5:LEU:HA	1:A:89:ASN:HB2	0.53	1.79	5	4
1:A:41:LYS:N	1:A:50:VAL:O	0.53	2.42	9	1
1:A:168:GLN:HG3	1:A:191:TRP:CH2	0.53	2.39	21	1
1:A:96:ASP:O	1:A:137:ILE:CG1	0.53	2.57	28	1
1:A:10:LEU:CD1	1:A:10:LEU:N	0.53	2.72	40	1
1:A:66:ARG:O	1:A:68:TYR:CG	0.53	2.62	1	11
1:A:128:LYS:CD	1:A:128:LYS:C	0.53	2.77	28	2
1:A:87:PRO:HB3	1:A:130:PHE:CZ	0.53	2.39	37	4
1:A:15:ALA:O	1:A:19:ARG:N	0.53	2.41	11	2
1:A:168:GLN:HG3	1:A:169:ALA:N	0.53	2.17	12	1
1:A:122:VAL:HG22	1:A:127:THR:CB	0.53	2.34	17	2
1:A:154:PHE:C	1:A:158:GLU:HB2	0.53	2.24	37	5
1:A:21:ARG:CZ	1:A:95:ASP:OD2	0.53	2.57	30	1
1:A:76:ILE:HG22	1:A:125:LEU:HD11	0.53	1.80	38	4
1:A:168:GLN:CG	1:A:188:VAL:HG13	0.53	2.34	6	2
1:A:47:GLY:O	1:A:48:ALA:CB	0.53	2.57	11	2
1:A:21:ARG:CD	1:A:95:ASP:CG	0.53	2.78	17	1
1:A:29:ALA:HB1	1:A:64:LYS:HE3	0.53	1.80	21	1
1:A:172:ALA:CA	1:A:184:ALA:HB1	0.52	2.34	34	7
1:A:91:ILE:HG22	1:A:131:GLN:OE1	0.52	2.04	10	7
1:A:122:VAL:CG1	1:A:127:THR:O	0.52	2.57	27	5
1:A:130:PHE:CD1	1:A:130:PHE:C	0.52	2.83	21	4
1:A:26:PHE:O	1:A:30:ASP:CB	0.52	2.57	39	13
1:A:48:ALA:HB2	1:A:75:GLN:OE1	0.52	2.04	21	3
1:A:21:ARG:CB	1:A:95:ASP:OD2	0.52	2.57	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:THR:O	1:A:20:THR:OG1	0.52	2.27	23	1
1:A:40:PHE:HB2	1:A:51:ALA:HA	0.52	1.80	13	10
1:A:19:ARG:O	1:A:20:THR:HG22	0.52	2.05	9	1
1:A:6:LEU:CD1	1:A:61:VAL:HG11	0.52	2.34	38	6
1:A:108:ILE:CD1	1:A:130:PHE:O	0.52	2.58	28	6
1:A:125:LEU:HD22	1:A:130:PHE:HE2	0.52	1.65	18	1
1:A:120:SER:O	1:A:124:ALA:HB2	0.52	2.04	14	9
1:A:96:ASP:CG	1:A:115:HIS:CE1	0.52	2.83	5	3
1:A:137:ILE:O	1:A:137:ILE:HD13	0.52	2.05	34	8
1:A:149:PHE:O	1:A:149:PHE:CD1	0.52	2.62	17	4
1:A:122:VAL:HG23	1:A:127:THR:O	0.52	2.04	28	1
1:A:10:LEU:CG	1:A:94:HIS:CD2	0.52	2.93	16	5
1:A:31:LEU:O	1:A:34:ALA:HB3	0.52	2.05	11	8
1:A:20:THR:HG21	1:A:151:LEU:CD1	0.52	2.34	8	3
1:A:72:SER:O	1:A:76:ILE:HD12	0.52	2.04	5	2
1:A:97:LEU:CD1	1:A:150:VAL:HG23	0.52	2.33	5	1
1:A:12:ASN:CG	1:A:22:HIS:CG	0.52	2.83	21	2
1:A:152:GLU:OE1	1:A:154:PHE:CE1	0.52	2.62	33	2
1:A:8:VAL:HG11	1:A:76:ILE:CG1	0.52	2.34	22	6
1:A:63:ALA:C	1:A:64:LYS:CD	0.52	2.78	2	4
1:A:101:PHE:CE2	1:A:158:GLU:OE2	0.52	2.62	36	2
1:A:7:VAL:N	1:A:61:VAL:O	0.52	2.36	3	1
1:A:188:VAL:CG2	1:A:189:HIS:N	0.52	2.72	3	1
1:A:176:LEU:CD2	1:A:180:GLY:O	0.52	2.58	4	1
1:A:29:ALA:HB3	1:A:64:LYS:NZ	0.52	2.20	6	2
1:A:108:ILE:O	1:A:132:ARG:CZ	0.52	2.58	14	2
1:A:153:ASN:O	1:A:155:THR:HG22	0.52	2.05	26	1
1:A:24:LEU:CD2	1:A:28:VAL:HG23	0.52	2.35	29	1
1:A:159:ARG:NE	1:A:160:ALA:HB2	0.52	2.19	33	1
1:A:162:VAL:O	1:A:166:CYS:HB2	0.52	2.05	40	33
1:A:63:ALA:C	1:A:64:LYS:CE	0.52	2.79	25	1
1:A:56:ALA:CB	1:A:174:GLU:O	0.52	2.58	29	1
1:A:103:ARG:CD	1:A:191:TRP:CZ2	0.52	2.92	1	3
1:A:181:MET:O	1:A:185:GLN:N	0.52	2.27	32	16
1:A:184:ALA:C	1:A:188:VAL:HG13	0.52	2.25	3	1
1:A:95:ASP:OD1	1:A:137:ILE:HG21	0.52	2.05	7	1
1:A:101:PHE:CE1	1:A:138:GLY:HA3	0.52	2.39	19	2
1:A:137:ILE:HD11	1:A:150:VAL:CG2	0.52	2.35	21	3
1:A:71:GLU:O	1:A:74:ARG:HD3	0.52	2.04	22	14
1:A:69:MET:CE	1:A:116:ASN:CB	0.52	2.88	6	1
1:A:71:GLU:O	1:A:75:GLN:HB3	0.52	2.05	37	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:103:ARG:NH2	1:A:189:HIS:NE2	0.52	2.58	17	2
1:A:104:ILE:HD11	1:A:188:VAL:HG11	0.52	1.78	21	1
1:A:160:ALA:O	1:A:163:PRO:HD2	0.52	2.04	40	2
1:A:108:ILE:O	1:A:130:PHE:O	0.51	2.28	39	5
1:A:180:GLY:O	1:A:181:MET:CB	0.51	2.58	5	2
1:A:17:TYR:CE2	1:A:151:LEU:HG	0.51	2.41	5	3
1:A:151:LEU:O	1:A:152:GLU:C	0.51	2.48	23	1
1:A:10:LEU:HD13	1:A:69:MET:CB	0.51	2.36	24	1
1:A:25:GLY:HA2	1:A:93:ILE:HD12	0.51	1.81	31	1
1:A:158:GLU:C	1:A:162:VAL:HG13	0.51	2.24	40	1
1:A:160:ALA:O	1:A:163:PRO:HG2	0.51	2.05	40	1
1:A:56:ALA:HB1	1:A:177:ILE:HB	0.51	1.80	26	2
1:A:121:VAL:O	1:A:125:LEU:N	0.51	2.34	24	5
1:A:10:LEU:O	1:A:10:LEU:CD1	0.51	2.58	24	3
1:A:101:PHE:CZ	1:A:137:ILE:HG12	0.51	2.41	18	1
1:A:100:GLU:O	1:A:137:ILE:HA	0.51	2.06	20	2
1:A:80:ALA:HB2	1:A:125:LEU:HD21	0.51	1.83	37	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:162:VAL:CG2	0.51	2.73	18	4
1:A:12:ASN:ND2	1:A:22:HIS:CE1	0.51	2.78	5	1
1:A:3:GLU:O	1:A:58:ARG:CD	0.51	2.59	6	1
1:A:62:LEU:HD11	1:A:64:LYS:NZ	0.51	2.19	29	3
1:A:21:ARG:NH1	1:A:162:VAL:CG2	0.51	2.73	16	1
1:A:101:PHE:CZ	1:A:158:GLU:CG	0.51	2.93	35	3
1:A:125:LEU:CB	1:A:130:PHE:CZ	0.51	2.93	27	1
1:A:21:ARG:CZ	1:A:95:ASP:OD1	0.51	2.58	30	1
1:A:20:THR:O	1:A:158:GLU:CD	0.51	2.49	33	2
1:A:70:ASN:O	1:A:74:ARG:HD3	0.51	2.05	38	9
1:A:154:PHE:CB	1:A:158:GLU:HB2	0.51	2.35	14	3
1:A:101:PHE:CD1	1:A:137:ILE:HB	0.51	2.41	30	12
1:A:167:GLU:CG	1:A:168:GLN:N	0.51	2.73	36	4
1:A:138:GLY:HA3	1:A:149:PHE:CE2	0.51	2.41	20	1
1:A:40:PHE:HB3	1:A:50:VAL:O	0.51	2.06	22	4
1:A:12:ASN:O	1:A:18:ALA:HB1	0.51	2.05	33	1
1:A:105:ARG:C	1:A:106:LEU:HD13	0.51	2.26	35	1
1:A:76:ILE:HG22	1:A:125:LEU:HG	0.51	1.81	37	1
1:A:42:ALA:O	1:A:43:HIS:HB3	0.51	2.06	40	1
1:A:21:ARG:CG	1:A:158:GLU:CD	0.51	2.78	32	3
1:A:14:GLY:O	1:A:15:ALA:CB	0.51	2.59	11	9
1:A:26:PHE:CD1	1:A:64:LYS:HE3	0.51	2.41	9	2
1:A:31:LEU:HD21	1:A:166:CYS:HB3	0.51	1.82	19	1
1:A:96:ASP:O	1:A:137:ILE:O	0.51	2.29	25	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:4:PRO:O	1:A:89:ASN:CG	0.51	2.49	26	18
1:A:76:ILE:CG2	1:A:80:ALA:HB2	0.51	2.35	12	12
1:A:168:GLN:O	1:A:188:VAL:CG1	0.51	2.59	1	4
1:A:43:HIS:N	1:A:48:ALA:O	0.51	2.44	34	13
1:A:85:VAL:CG1	1:A:89:ASN:OD1	0.51	2.59	5	4
1:A:173:THR:O	1:A:177:ILE:CD1	0.51	2.57	8	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:95:ASP:OD2	0.51	2.03	9	1
1:A:28:VAL:HG21	1:A:93:ILE:CD1	0.51	2.33	36	3
1:A:122:VAL:HG22	1:A:130:PHE:CZ	0.51	2.40	34	3
1:A:189:HIS:HA	1:A:191:TRP:CZ3	0.51	2.40	30	2
1:A:82:PHE:CD1	1:A:82:PHE:C	0.51	2.84	8	40
1:A:15:ALA:HB1	1:A:17:TYR:CD2	0.51	2.39	2	1
1:A:87:PRO:CG	1:A:128:LYS:CB	0.51	2.88	11	1
1:A:48:ALA:CB	1:A:75:GLN:OE1	0.51	2.58	12	2
1:A:12:ASN:ND2	1:A:22:HIS:ND1	0.51	2.59	28	2
1:A:125:LEU:CD2	1:A:130:PHE:CZ	0.51	2.94	1	1
1:A:175:LEU:HD23	1:A:183:PRO:HB2	0.51	1.82	33	3
1:A:29:ALA:O	1:A:33:ALA:CB	0.51	2.58	34	4
1:A:43:HIS:O	1:A:48:ALA:N	0.51	2.44	38	6
1:A:116:ASN:O	1:A:120:SER:CB	0.51	2.59	30	4
1:A:165:ILE:HG23	1:A:166:CYS:N	0.51	2.20	18	3
1:A:33:ALA:HB2	1:A:40:PHE:CE2	0.51	2.41	21	1
1:A:40:PHE:O	1:A:41:LYS:HB2	0.51	2.06	29	1
1:A:99:LEU:CA	1:A:138:GLY:O	0.51	2.59	32	1
1:A:24:LEU:HD22	1:A:95:ASP:HB2	0.51	1.83	40	1
1:A:73:GLY:HA2	1:A:121:VAL:HA	0.51	1.83	37	4
1:A:29:ALA:HB3	1:A:64:LYS:HZ1	0.51	1.65	12	2
1:A:24:LEU:CD1	1:A:28:VAL:CG2	0.51	2.89	22	3
1:A:28:VAL:CG1	1:A:29:ALA:N	0.51	2.73	31	2
1:A:31:LEU:CD2	1:A:166:CYS:SG	0.51	2.99	29	1
1:A:23:ASN:O	1:A:27:VAL:HB	0.51	2.05	34	12
1:A:67:CYS:O	1:A:69:MET:N	0.51	2.44	8	32
1:A:85:VAL:CG1	1:A:86:ALA:N	0.51	2.74	26	4
1:A:93:ILE:HG22	1:A:133:VAL:CB	0.51	2.31	3	5
1:A:17:TYR:CD1	1:A:17:TYR:O	0.51	2.64	7	2
1:A:90:ILE:HB	1:A:130:PHE:CD1	0.51	2.40	18	3
1:A:105:ARG:NH1	1:A:189:HIS:NE2	0.51	2.59	9	1
1:A:95:ASP:OD1	1:A:96:ASP:N	0.51	2.44	10	2
1:A:97:LEU:HD22	1:A:150:VAL:O	0.51	2.06	25	1
1:A:164:THR:HG23	1:A:191:TRP:CH2	0.51	2.41	25	1
1:A:99:LEU:HD23	1:A:103:ARG:HH21	0.51	1.64	39	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:184:ALA:O	1:A:188:VAL:HG12	0.50	2.07	19	9
1:A:40:PHE:HB2	1:A:51:ALA:CB	0.50	2.32	6	1
1:A:21:ARG:CD	1:A:95:ASP:OD2	0.50	2.59	7	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:24:LEU:CD2	0.50	2.74	8	1
1:A:188:VAL:HA	1:A:191:TRP:CH2	0.50	2.40	17	3
1:A:40:PHE:CG	1:A:41:LYS:N	0.50	2.77	40	12
1:A:137:ILE:O	1:A:138:GLY:O	0.50	2.28	28	5
1:A:65:PRO:HG3	1:A:72:SER:HA	0.50	1.83	6	18
1:A:158:GLU:O	1:A:162:VAL:HB	0.50	2.07	23	29
1:A:158:GLU:O	1:A:162:VAL:CG2	0.50	2.59	29	5
1:A:97:LEU:CG	1:A:150:VAL:HG23	0.50	2.36	6	2
1:A:41:LYS:O	1:A:49:GLU:HA	0.50	2.06	21	5
1:A:28:VAL:HG11	1:A:93:ILE:CD1	0.50	2.36	25	4
1:A:101:PHE:O	1:A:161:GLU:CG	0.50	2.59	13	2
1:A:40:PHE:CE2	1:A:64:LYS:HE3	0.50	2.41	17	1
1:A:127:THR:O	1:A:128:LYS:CG	0.50	2.59	22	2
1:A:187:ARG:O	1:A:191:TRP:CZ3	0.50	2.64	31	2
1:A:19:ARG:C	1:A:21:ARG:H	0.50	2.10	12	10
1:A:33:ALA:CB	1:A:38:ALA:HB2	0.50	2.36	3	6
1:A:36:LEU:O	1:A:38:ALA:N	0.50	2.44	28	6
1:A:12:ASN:CG	1:A:17:TYR:CD1	0.50	2.85	9	1
1:A:101:PHE:CD2	1:A:149:PHE:CZ	0.50	2.99	14	1
1:A:98:ASP:C	1:A:99:LEU:HD22	0.50	2.27	31	2
1:A:184:ALA:CA	1:A:188:VAL:HG23	0.50	2.37	32	1
1:A:122:VAL:CG1	1:A:127:THR:OG1	0.50	2.59	34	1
1:A:44:LYS:O	1:A:46:SER:N	0.50	2.44	17	3
1:A:83:TYR:HB3	1:A:85:VAL:CG2	0.50	2.36	39	9
1:A:152:GLU:CD	1:A:153:ASN:N	0.50	2.65	9	1
1:A:14:GLY:C	1:A:18:ALA:HB2	0.50	2.27	12	1
1:A:172:ALA:HB2	1:A:188:VAL:HB	0.50	1.82	34	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:91:ILE:O	0.50	2.60	10	5
1:A:188:VAL:HA	1:A:191:TRP:CZ3	0.50	2.41	40	6
1:A:24:LEU:HD12	1:A:95:ASP:HB3	0.50	1.82	6	3
1:A:103:ARG:HG2	1:A:191:TRP:CZ2	0.50	2.41	34	7
1:A:79:LEU:HD23	1:A:79:LEU:H	0.50	1.67	13	4
1:A:154:PHE:O	1:A:156:PRO:CD	0.50	2.58	37	5
1:A:164:THR:CG2	1:A:165:ILE:N	0.50	2.74	25	3
1:A:98:ASP:CG	1:A:99:LEU:HD12	0.50	2.26	4	1
1:A:14:GLY:O	1:A:15:ALA:O	0.50	2.30	8	1
1:A:103:ARG:HD2	1:A:104:ILE:N	0.50	2.21	10	4
1:A:87:PRO:CG	1:A:128:LYS:HB3	0.50	2.37	26	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:21:ARG:NE	1:A:24:LEU:CD1	0.50	2.75	18	1
1:A:106:LEU:HD12	1:A:106:LEU:C	0.50	2.26	22	1
1:A:45:ARG:CG	1:A:46:SER:N	0.50	2.73	24	2
1:A:5:LEU:CD2	1:A:89:ASN:OD1	0.50	2.58	26	1
1:A:152:GLU:OE1	1:A:154:PHE:CG	0.50	2.64	27	1
1:A:105:ARG:O	1:A:105:ARG:CD	0.50	2.59	38	1
1:A:114:GLY:N	1:A:118:LEU:CD1	0.50	2.75	40	1
1:A:121:VAL:HG22	1:A:125:LEU:HD12	0.50	1.82	31	4
1:A:100:GLU:O	1:A:136:GLY:O	0.50	2.30	34	6
1:A:71:GLU:HA	1:A:74:ARG:CD	0.50	2.36	22	13
1:A:75:GLN:OE1	1:A:79:LEU:CD1	0.50	2.60	5	1
1:A:108:ILE:HD12	1:A:131:GLN:CG	0.50	2.36	7	2
1:A:147:ALA:O	1:A:151:LEU:HD12	0.50	2.06	11	1
1:A:168:GLN:O	1:A:188:VAL:CG2	0.50	2.59	34	2
1:A:28:VAL:CG1	1:A:32:LEU:HD12	0.50	2.36	29	2
1:A:5:LEU:HD23	1:A:89:ASN:HA	0.50	1.82	36	1
1:A:76:ILE:CG2	1:A:125:LEU:HG	0.50	2.36	37	1
1:A:133:VAL:O	1:A:133:VAL:CG1	0.50	2.59	9	5
1:A:13:PRO:O	1:A:14:GLY:O	0.50	2.28	22	14
1:A:112:GLU:CG	1:A:112:GLU:O	0.50	2.59	16	1
1:A:49:GLU:O	1:A:50:VAL:CG2	0.50	2.60	29	3
1:A:6:LEU:HD23	1:A:7:VAL:H	0.50	1.67	30	1
1:A:4:PRO:O	1:A:89:ASN:ND2	0.50	2.45	39	10
1:A:72:SER:OG	1:A:76:ILE:CD1	0.50	2.60	8	2
1:A:106:LEU:O	1:A:107:LYS:CG	0.50	2.60	17	3
1:A:103:ARG:HG2	1:A:191:TRP:CH2	0.50	2.42	10	2
1:A:43:HIS:O	1:A:44:LYS:CB	0.50	2.59	36	2
1:A:21:ARG:CD	1:A:162:VAL:HG21	0.50	2.36	23	2
1:A:104:ILE:CD1	1:A:169:ALA:CB	0.50	2.89	24	4
1:A:130:PHE:CZ	1:A:132:ARG:NH2	0.50	2.80	24	1
1:A:128:LYS:C	1:A:128:LYS:HD2	0.50	2.27	28	1
1:A:103:ARG:HD3	1:A:191:TRP:CH2	0.49	2.41	8	1
1:A:14:GLY:HA3	1:A:17:TYR:CE2	0.49	2.42	33	2
1:A:31:LEU:C	1:A:31:LEU:CD1	0.49	2.79	37	2
1:A:10:LEU:CD2	1:A:10:LEU:N	0.49	2.75	17	2
1:A:91:ILE:O	1:A:91:ILE:CD1	0.49	2.60	38	2
1:A:106:LEU:HD22	1:A:107:LYS:N	0.49	2.22	34	2
1:A:28:VAL:CG1	1:A:93:ILE:HD13	0.49	2.37	35	1
1:A:170:ALA:O	1:A:173:THR:HG22	0.49	2.05	39	1
1:A:87:PRO:HB3	1:A:130:PHE:CE2	0.49	2.42	31	3
1:A:20:THR:HG21	1:A:151:LEU:O	0.49	2.07	38	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:ILE:HD13	1:A:169:ALA:CA	0.49	2.36	21	1
1:A:62:LEU:HD22	1:A:62:LEU:C	0.49	2.27	23	1
1:A:17:TYR:CE1	1:A:151:LEU:HB3	0.49	2.42	38	2
1:A:108:ILE:HG13	1:A:109:GLY:N	0.49	2.22	36	26
1:A:106:LEU:O	1:A:106:LEU:CD1	0.49	2.60	30	1
1:A:20:THR:O	1:A:21:ARG:CD	0.49	2.60	31	1
1:A:64:LYS:N	1:A:64:LYS:CD	0.49	2.76	32	1
1:A:156:PRO:HA	1:A:159:ARG:CG	0.49	2.37	39	3
1:A:191:TRP:C	1:A:191:TRP:CD2	0.49	2.84	8	7
1:A:180:GLY:C	1:A:181:MET:CG	0.49	2.78	5	2
1:A:62:LEU:HD13	1:A:64:LYS:HZ2	0.49	1.66	5	1
1:A:100:GLU:HB2	1:A:138:GLY:C	0.49	2.28	25	1
1:A:37:GLY:O	1:A:38:ALA:HB3	0.49	2.08	32	2
1:A:40:PHE:CG	1:A:51:ALA:HA	0.49	2.42	33	7
1:A:76:ILE:HG23	1:A:80:ALA:HB2	0.49	1.83	21	6
1:A:42:ALA:HB2	1:A:49:GLU:OE2	0.49	2.08	40	2
1:A:155:THR:CG2	1:A:156:PRO:HD3	0.49	2.37	26	1
1:A:66:ARG:O	1:A:68:TYR:N	0.49	2.45	1	32
1:A:168:GLN:HB3	1:A:191:TRP:CH2	0.49	2.42	35	4
1:A:113:GLY:CA	1:A:134:ARG:NH2	0.49	2.75	6	1
1:A:21:ARG:CG	1:A:24:LEU:HD23	0.49	2.37	10	1
1:A:21:ARG:HH12	1:A:27:VAL:HG21	0.49	1.68	13	1
1:A:108:ILE:O	1:A:132:ARG:NE	0.49	2.46	19	1
1:A:28:VAL:HB	1:A:93:ILE:HD11	0.49	1.84	24	1
1:A:97:LEU:CA	1:A:138:GLY:O	0.49	2.61	17	4
1:A:40:PHE:CG	1:A:51:ALA:CB	0.49	2.96	4	6
1:A:71:GLU:O	1:A:74:ARG:HD2	0.49	2.07	35	10
1:A:36:LEU:C	1:A:36:LEU:CD1	0.49	2.77	30	2
1:A:31:LEU:HD11	1:A:35:ARG:NH1	0.49	2.23	19	1
1:A:31:LEU:O	1:A:35:ARG:N	0.49	2.46	22	2
1:A:127:THR:HA	1:A:130:PHE:CE2	0.49	2.42	35	2
1:A:137:ILE:CD1	1:A:150:VAL:CG2	0.49	2.91	28	2
1:A:17:TYR:HE1	1:A:151:LEU:HD13	0.49	1.67	26	3
1:A:24:LEU:O	1:A:27:VAL:N	0.49	2.46	21	7
1:A:105:ARG:CB	1:A:134:ARG:O	0.49	2.61	32	2
1:A:7:VAL:CG2	1:A:62:LEU:HA	0.49	2.38	36	1
1:A:108:ILE:C	1:A:108:ILE:CD1	0.49	2.78	19	3
1:A:183:PRO:O	1:A:187:ARG:HB3	0.49	2.08	21	22
1:A:38:ALA:HB1	1:A:40:PHE:CE1	0.49	2.43	3	2
1:A:103:ARG:O	1:A:135:ILE:HG22	0.49	2.07	28	2
1:A:165:ILE:CD1	1:A:165:ILE:C	0.49	2.80	10	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:PRO:HG2	1:A:128:LYS:CB	0.49	2.38	24	2
1:A:95:ASP:CG	1:A:137:ILE:HG21	0.49	2.28	11	1
1:A:20:THR:HB	1:A:151:LEU:HD12	0.49	1.84	16	1
1:A:103:ARG:NH2	1:A:188:VAL:O	0.49	2.46	22	5
1:A:185:GLN:HA	1:A:189:HIS:CB	0.49	2.37	15	20
1:A:21:ARG:NE	1:A:162:VAL:HG23	0.49	2.22	15	2
1:A:3:GLU:CG	1:A:3:GLU:O	0.49	2.61	33	2
1:A:21:ARG:CD	1:A:151:LEU:CD1	0.49	2.91	34	1
1:A:11:GLY:CA	1:A:23:ASN:HA	0.48	2.38	25	5
1:A:57:GLY:O	1:A:58:ARG:CB	0.48	2.61	25	4
1:A:100:GLU:OE1	1:A:102:GLY:N	0.48	2.46	9	1
1:A:98:ASP:OD2	1:A:99:LEU:HD13	0.48	2.08	17	1
1:A:97:LEU:HB3	1:A:150:VAL:HG23	0.48	1.85	20	1
1:A:56:ALA:HB2	1:A:174:GLU:O	0.48	2.08	29	1
1:A:154:PHE:HB3	1:A:158:GLU:N	0.48	2.23	37	3
1:A:6:LEU:O	1:A:91:ILE:HG23	0.48	2.08	15	5
1:A:168:GLN:HG2	1:A:191:TRP:CZ3	0.48	2.43	5	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:135:ILE:HB	0.48	1.86	6	1
1:A:160:ALA:O	1:A:164:THR:OG1	0.48	2.28	30	4
1:A:119:ARG:O	1:A:123:ALA:N	0.48	2.46	11	1
1:A:96:ASP:OD1	1:A:115:HIS:CD2	0.48	2.66	18	1
1:A:161:GLU:OE2	1:A:164:THR:HG21	0.48	2.08	22	1
1:A:4:PRO:O	1:A:89:ASN:CB	0.48	2.61	37	2
1:A:45:ARG:NH2	1:A:83:TYR:CE2	0.48	2.82	40	1
1:A:12:ASN:HB2	1:A:22:HIS:CD2	0.48	2.43	18	1
1:A:185:GLN:O	1:A:189:HIS:HB2	0.48	2.07	28	6
1:A:101:PHE:CD1	1:A:101:PHE:N	0.48	2.81	32	2
1:A:101:PHE:CE2	1:A:154:PHE:HB2	0.48	2.43	37	1
1:A:117:GLY:O	1:A:121:VAL:N	0.48	2.46	37	1
1:A:20:THR:OG1	1:A:150:VAL:O	0.48	2.31	39	1
1:A:128:LYS:HA	1:A:128:LYS:CE	0.48	2.38	34	2
1:A:105:ARG:O	1:A:134:ARG:N	0.48	2.47	25	9
1:A:57:GLY:O	1:A:58:ARG:NH1	0.48	2.46	15	2
1:A:32:LEU:HD21	1:A:170:ALA:HB1	0.48	1.85	23	1
1:A:17:TYR:CE2	1:A:151:LEU:HB2	0.48	2.42	24	1
1:A:58:ARG:CB	1:A:177:ILE:CG2	0.48	2.90	34	1
1:A:106:LEU:N	1:A:106:LEU:CD1	0.48	2.67	35	1
1:A:56:ALA:HB2	1:A:177:ILE:HG12	0.48	1.85	1	1
1:A:184:ALA:O	1:A:188:VAL:CG1	0.48	2.56	3	2
1:A:161:GLU:OE1	1:A:164:THR:HG21	0.48	2.09	26	2
1:A:127:THR:O	1:A:127:THR:CG2	0.48	2.60	9	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:42:ALA:CB	1:A:49:GLU:HA	0.48	2.38	29	4
1:A:103:ARG:HD2	1:A:104:ILE:O	0.48	2.09	23	2
1:A:36:LEU:CD1	1:A:54:ARG:O	0.48	2.61	27	1
1:A:103:ARG:NH2	1:A:191:TRP:C	0.48	2.67	31	4
1:A:21:ARG:CZ	1:A:95:ASP:CG	0.48	2.82	30	1
1:A:24:LEU:CD1	1:A:95:ASP:CB	0.48	2.91	35	1
1:A:188:VAL:C	1:A:190:ALA:N	0.48	2.67	1	18
1:A:96:ASP:C	1:A:137:ILE:HD13	0.48	2.29	3	2
1:A:169:ALA:O	1:A:173:THR:CB	0.48	2.62	4	1
1:A:24:LEU:O	1:A:25:GLY:C	0.48	2.52	12	10
1:A:26:PHE:CE1	1:A:49:GLU:OE2	0.48	2.67	8	1
1:A:10:LEU:CD2	1:A:68:TYR:C	0.48	2.82	9	1
1:A:92:VAL:HG12	1:A:132:ARG:CG	0.48	2.38	24	1
1:A:11:GLY:C	1:A:22:HIS:O	0.48	2.52	37	3
1:A:127:THR:HB	1:A:130:PHE:CZ	0.48	2.44	27	1
1:A:48:ALA:HB1	1:A:65:PRO:CA	0.48	2.38	1	2
1:A:165:ILE:C	1:A:165:ILE:CD1	0.48	2.79	31	6
1:A:127:THR:CB	1:A:130:PHE:CZ	0.48	2.96	27	2
1:A:23:ASN:O	1:A:24:LEU:C	0.48	2.52	37	7
1:A:161:GLU:O	1:A:165:ILE:HG23	0.48	2.08	20	2
1:A:71:GLU:CA	1:A:71:GLU:OE1	0.48	2.61	28	1
1:A:36:LEU:HD12	1:A:54:ARG:N	0.48	2.23	40	1
1:A:176:LEU:CD1	1:A:184:ALA:CB	0.48	2.92	40	1
1:A:91:ILE:C	1:A:91:ILE:CD1	0.48	2.77	6	7
1:A:68:TYR:O	1:A:72:SER:OG	0.48	2.32	27	3
1:A:7:VAL:O	1:A:62:LEU:HA	0.48	2.09	9	4
1:A:50:VAL:CA	1:A:62:LEU:O	0.48	2.61	9	1
1:A:99:LEU:O	1:A:138:GLY:HA3	0.48	2.09	36	3
1:A:5:LEU:CB	1:A:89:ASN:OD1	0.48	2.61	40	3
1:A:101:PHE:CE2	1:A:149:PHE:CE1	0.48	3.02	14	1
1:A:99:LEU:O	1:A:101:PHE:N	0.48	2.45	23	1
1:A:159:ARG:O	1:A:162:VAL:HG22	0.48	2.09	40	1
1:A:53:GLY:O	1:A:60:LEU:N	0.48	2.47	3	18
1:A:97:LEU:HA	1:A:138:GLY:O	0.48	2.09	17	4
1:A:13:PRO:O	1:A:14:GLY:C	0.48	2.53	16	5
1:A:126:GLY:O	1:A:127:THR:HB	0.48	2.08	26	4
1:A:46:SER:HB3	1:A:79:LEU:HD21	0.48	1.84	28	3
1:A:71:GLU:O	1:A:75:GLN:N	0.48	2.44	35	2
1:A:62:LEU:HD13	1:A:64:LYS:HZ1	0.48	1.68	25	1
1:A:188:VAL:O	1:A:191:TRP:CE2	0.48	2.67	37	1
1:A:161:GLU:HA	1:A:164:THR:HB	0.48	1.84	20	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:40:PHE:CG	1:A:51:ALA:HB2	0.48	2.44	30	5
1:A:62:LEU:CD1	1:A:64:LYS:NZ	0.48	2.77	5	2
1:A:62:LEU:HD13	1:A:62:LEU:C	0.48	2.29	12	1
1:A:4:PRO:HB3	1:A:59:SER:CB	0.48	2.39	14	1
1:A:94:HIS:O	1:A:134:ARG:HA	0.48	2.08	37	3
1:A:21:ARG:CZ	1:A:162:VAL:HG21	0.48	2.38	25	1
1:A:100:GLU:HA	1:A:137:ILE:C	0.48	2.29	25	2
1:A:155:THR:OG1	1:A:156:PRO:HD3	0.48	2.09	26	1
1:A:87:PRO:HA	1:A:90:ILE:HG22	0.48	1.86	37	2
1:A:96:ASP:O	1:A:135:ILE:O	0.47	2.32	36	13
1:A:55:SER:O	1:A:57:GLY:N	0.47	2.46	12	10
1:A:96:ASP:CG	1:A:115:HIS:NE2	0.47	2.67	6	4
1:A:21:ARG:NH1	1:A:137:ILE:HG22	0.47	2.24	8	1
1:A:21:ARG:CZ	1:A:162:VAL:HG22	0.47	2.38	14	1
1:A:71:GLU:O	1:A:74:ARG:NE	0.47	2.46	33	3
1:A:104:ILE:HG22	1:A:135:ILE:HG12	0.47	1.84	20	1
1:A:158:GLU:OE1	1:A:162:VAL:HG23	0.47	2.08	21	1
1:A:12:ASN:OD1	1:A:14:GLY:N	0.47	2.47	25	3
1:A:17:TYR:O	1:A:22:HIS:CB	0.47	2.62	28	1
1:A:97:LEU:CA	1:A:138:GLY:HA3	0.47	2.39	32	1
1:A:111:GLY:N	1:A:132:ARG:HH12	0.47	2.05	35	1
1:A:105:ARG:O	1:A:105:ARG:HG3	0.47	2.08	38	2
1:A:108:ILE:HD12	1:A:130:PHE:C	0.47	2.28	38	1
1:A:50:VAL:HG22	1:A:51:ALA:N	0.47	2.24	1	4
1:A:184:ALA:HA	1:A:188:VAL:HG13	0.47	1.85	3	1
1:A:75:GLN:O	1:A:79:LEU:CB	0.47	2.62	13	7
1:A:153:ASN:O	1:A:153:ASN:OD1	0.47	2.32	40	5
1:A:17:TYR:CZ	1:A:151:LEU:HG	0.47	2.43	7	1
1:A:18:ALA:O	1:A:21:ARG:N	0.47	2.47	8	4
1:A:6:LEU:CD1	1:A:61:VAL:CG1	0.47	2.92	38	5
1:A:96:ASP:O	1:A:137:ILE:HG23	0.47	2.09	11	2
1:A:98:ASP:C	1:A:138:GLY:O	0.47	2.53	32	4
1:A:101:PHE:CD1	1:A:138:GLY:N	0.47	2.82	19	2
1:A:68:TYR:O	1:A:72:SER:HB3	0.47	2.09	27	4
1:A:87:PRO:HA	1:A:130:PHE:CD2	0.47	2.44	31	1
1:A:40:PHE:CD2	1:A:51:ALA:CA	0.47	2.98	3	6
1:A:21:ARG:CZ	1:A:151:LEU:CD2	0.47	2.92	11	1
1:A:104:ILE:HD13	1:A:169:ALA:HA	0.47	1.85	21	1
1:A:127:THR:HA	1:A:130:PHE:CD2	0.47	2.43	24	1
1:A:55:SER:HB3	1:A:177:ILE:HD13	0.47	1.86	25	1
1:A:17:TYR:HE1	1:A:151:LEU:HD21	0.47	1.67	27	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:29:ALA:O	1:A:33:ALA:HB2	0.47	2.09	37	2
1:A:91:ILE:CG1	1:A:91:ILE:O	0.47	2.62	23	22
1:A:5:LEU:CD1	1:A:91:ILE:CG2	0.47	2.92	14	2
1:A:16:ASN:CG	1:A:17:TYR:N	0.47	2.67	17	1
1:A:122:VAL:HG22	1:A:127:THR:OG1	0.47	2.09	17	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:91:ILE:HG13	0.47	2.39	21	2
1:A:3:GLU:O	1:A:58:ARG:CZ	0.47	2.63	22	1
1:A:150:VAL:HG12	1:A:151:LEU:HD13	0.47	1.85	23	1
1:A:45:ARG:C	1:A:47:GLY:N	0.47	2.67	27	1
1:A:104:ILE:HG12	1:A:169:ALA:CB	0.47	2.40	29	1
1:A:175:LEU:HA	1:A:178:GLU:HB2	0.47	1.86	39	1
1:A:76:ILE:HD12	1:A:80:ALA:HB2	0.47	1.86	2	4
1:A:46:SER:HB2	1:A:79:LEU:CD2	0.47	2.38	5	1
1:A:114:GLY:O	1:A:115:HIS:ND1	0.47	2.47	11	2
1:A:42:ALA:HB2	1:A:49:GLU:HA	0.47	1.85	20	1
1:A:90:ILE:HG21	1:A:130:PHE:CE2	0.47	2.44	37	1
1:A:71:GLU:CD	1:A:74:ARG:NH2	0.47	2.68	40	1
1:A:55:SER:O	1:A:58:ARG:N	0.47	2.46	36	17
1:A:155:THR:O	1:A:159:ARG:HB2	0.47	2.10	24	18
1:A:12:ASN:CB	1:A:22:HIS:CG	0.47	2.97	18	1
1:A:127:THR:O	1:A:128:LYS:HB2	0.47	2.09	22	3
1:A:55:SER:CB	1:A:177:ILE:HD13	0.47	2.40	25	1
1:A:14:GLY:CA	1:A:18:ALA:HB2	0.47	2.39	33	1
1:A:159:ARG:HE	1:A:160:ALA:HB2	0.47	1.69	33	1
1:A:185:GLN:CG	1:A:189:HIS:CB	0.47	2.93	15	14
1:A:155:THR:CB	1:A:156:PRO:HD3	0.47	2.39	37	7
1:A:47:GLY:O	1:A:48:ALA:O	0.47	2.33	38	8
1:A:21:ARG:O	1:A:23:ASN:N	0.47	2.48	21	7
1:A:94:HIS:O	1:A:135:ILE:CD1	0.47	2.62	12	3
1:A:20:THR:C	1:A:22:HIS:H	0.47	2.13	16	2
1:A:12:ASN:CB	1:A:22:HIS:O	0.47	2.62	35	6
1:A:5:LEU:CB	1:A:89:ASN:CG	0.47	2.83	14	1
1:A:45:ARG:HG2	1:A:82:PHE:CE2	0.47	2.44	17	1
1:A:21:ARG:O	1:A:24:LEU:N	0.47	2.46	21	1
1:A:36:LEU:HD11	1:A:38:ALA:CB	0.47	2.40	21	1
1:A:150:VAL:HG12	1:A:151:LEU:HD23	0.47	1.87	27	1
1:A:21:ARG:NH1	1:A:95:ASP:OD1	0.47	2.48	30	1
1:A:103:ARG:NH2	1:A:191:TRP:NE1	0.47	2.63	32	1
1:A:75:GLN:CD	1:A:75:GLN:C	0.47	2.74	37	1
1:A:4:PRO:CB	1:A:59:SER:OG	0.47	2.62	40	1
1:A:55:SER:OG	1:A:60:LEU:CD2	0.47	2.63	27	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:91:ILE:CD1	1:A:93:ILE:HG22	0.47	2.40	14	1
1:A:10:LEU:O	1:A:10:LEU:HG	0.47	2.08	24	4
1:A:21:ARG:NE	1:A:150:VAL:O	0.47	2.48	24	2
1:A:103:ARG:NH2	1:A:191:TRP:CD2	0.47	2.82	22	1
1:A:91:ILE:HG22	1:A:131:GLN:CD	0.47	2.30	24	2
1:A:33:ALA:O	1:A:38:ALA:O	0.47	2.32	29	3
1:A:75:GLN:OE1	1:A:76:ILE:CD1	0.47	2.63	1	1
1:A:93:ILE:CG2	1:A:133:VAL:O	0.47	2.63	1	1
1:A:186:ASN:C	1:A:190:ALA:HB2	0.47	2.30	34	5
1:A:97:LEU:HD23	1:A:97:LEU:N	0.47	2.23	20	4
1:A:109:GLY:O	1:A:111:GLY:N	0.47	2.47	15	1
1:A:71:GLU:OE1	1:A:74:ARG:NH1	0.47	2.47	18	1
1:A:176:LEU:HA	1:A:180:GLY:O	0.47	2.08	19	3
1:A:161:GLU:OE2	1:A:164:THR:CG2	0.47	2.63	22	1
1:A:160:ALA:O	1:A:164:THR:HB	0.47	2.10	25	2
1:A:46:SER:O	1:A:79:LEU:CD1	0.47	2.62	35	1
1:A:55:SER:C	1:A:57:GLY:N	0.47	2.67	12	28
1:A:185:GLN:CG	1:A:189:HIS:HB3	0.47	2.40	13	18
1:A:12:ASN:HB2	1:A:22:HIS:CG	0.47	2.45	5	3
1:A:3:GLU:O	1:A:58:ARG:NE	0.47	2.48	23	4
1:A:187:ARG:O	1:A:190:ALA:O	0.47	2.33	22	3
1:A:71:GLU:OE2	1:A:74:ARG:NH2	0.47	2.48	40	3
1:A:15:ALA:CA	1:A:18:ALA:HB3	0.47	2.40	31	1
1:A:122:VAL:CG1	1:A:123:ALA:N	0.46	2.77	31	11
1:A:25:GLY:HA2	1:A:93:ILE:CD1	0.46	2.40	31	7
1:A:8:VAL:HG21	1:A:76:ILE:HD11	0.46	1.87	8	1
1:A:10:LEU:HD22	1:A:69:MET:CA	0.46	2.39	9	1
1:A:28:VAL:HG23	1:A:166:CYS:SG	0.46	2.51	10	1
1:A:96:ASP:OD1	1:A:115:HIS:NE2	0.46	2.48	12	1
1:A:21:ARG:O	1:A:24:LEU:CD2	0.46	2.62	22	2
1:A:28:VAL:HG13	1:A:29:ALA:N	0.46	2.25	23	1
1:A:29:ALA:HB1	1:A:62:LEU:HD21	0.46	1.87	29	2
1:A:11:GLY:O	1:A:68:TYR:CB	0.46	2.63	40	5
1:A:7:VAL:HG22	1:A:91:ILE:HG12	0.46	1.88	17	1
1:A:158:GLU:OE1	1:A:162:VAL:CG2	0.46	2.64	21	1
1:A:168:GLN:NE2	1:A:191:TRP:CZ3	0.46	2.83	26	1
1:A:50:VAL:CG1	1:A:63:ALA:HB2	0.46	2.39	38	1
1:A:137:ILE:CG1	1:A:150:VAL:HG22	0.46	2.39	35	3
1:A:48:ALA:HB2	1:A:75:GLN:NE2	0.46	2.25	4	1
1:A:103:ARG:CD	1:A:191:TRP:CZ3	0.46	2.99	8	1
1:A:112:GLU:O	1:A:115:HIS:ND1	0.46	2.48	22	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:149:PHE:CD1	1:A:152:GLU:HG3	0.46	2.45	15	4
1:A:60:LEU:HD12	1:A:60:LEU:C	0.46	2.30	16	2
1:A:71:GLU:OE2	1:A:74:ARG:NE	0.46	2.49	21	1
1:A:178:GLU:O	1:A:179:GLN:CG	0.46	2.63	27	1
1:A:69:MET:CE	1:A:116:ASN:HB2	0.46	2.41	6	1
1:A:153:ASN:O	1:A:155:THR:N	0.46	2.49	35	9
1:A:21:ARG:CG	1:A:158:GLU:OE2	0.46	2.64	20	2
1:A:31:LEU:HD21	1:A:166:CYS:SG	0.46	2.51	29	1
1:A:21:ARG:HB2	1:A:24:LEU:CD2	0.46	2.41	36	2
1:A:71:GLU:HA	1:A:74:ARG:NE	0.46	2.26	12	5
1:A:86:ALA:HB3	1:A:89:ASN:HD21	0.46	1.70	12	2
1:A:163:PRO:O	1:A:167:GLU:HB3	0.46	2.10	17	9
1:A:75:GLN:OE1	1:A:76:ILE:N	0.46	2.49	11	1
1:A:152:GLU:OE1	1:A:154:PHE:N	0.46	2.48	22	1
1:A:104:ILE:CG1	1:A:169:ALA:HB2	0.46	2.41	38	2
1:A:44:LYS:O	1:A:45:ARG:C	0.46	2.54	27	13
1:A:126:GLY:O	1:A:127:THR:CG2	0.46	2.63	11	5
1:A:26:PHE:CZ	1:A:64:LYS:NZ	0.46	2.70	7	1
1:A:128:LYS:N	1:A:128:LYS:HD3	0.46	2.26	27	3
1:A:105:ARG:O	1:A:132:ARG:NH2	0.46	2.49	17	1
1:A:175:LEU:CD2	1:A:183:PRO:HB2	0.46	2.41	19	4
1:A:39:LYS:O	1:A:40:PHE:C	0.46	2.53	21	2
1:A:53:GLY:O	1:A:60:LEU:CD2	0.46	2.64	21	2
1:A:129:ASP:CG	1:A:130:PHE:N	0.46	2.66	22	1
1:A:21:ARG:HH12	1:A:150:VAL:HG22	0.46	1.71	30	1
1:A:91:ILE:HG13	1:A:93:ILE:CD1	0.46	2.41	37	1
1:A:176:LEU:HG	1:A:184:ALA:CB	0.46	2.40	32	2
1:A:111:GLY:O	1:A:113:GLY:N	0.46	2.49	27	4
1:A:24:LEU:CD2	1:A:28:VAL:CG2	0.46	2.93	29	1
1:A:83:TYR:O	1:A:85:VAL:HG23	0.46	2.10	29	1
1:A:105:ARG:CA	1:A:134:ARG:O	0.46	2.63	34	6
1:A:108:ILE:CG1	1:A:109:GLY:N	0.46	2.77	8	8
1:A:24:LEU:HD13	1:A:95:ASP:CB	0.46	2.40	9	1
1:A:53:GLY:HA3	1:A:60:LEU:CD2	0.46	2.41	9	1
1:A:73:GLY:HA2	1:A:121:VAL:CB	0.46	2.41	25	3
1:A:85:VAL:HG12	1:A:86:ALA:H	0.46	1.70	14	4
1:A:21:ARG:CD	1:A:101:PHE:CE1	0.46	2.99	20	1
1:A:71:GLU:O	1:A:75:GLN:OE1	0.46	2.34	29	1
1:A:106:LEU:HD13	1:A:106:LEU:H	0.46	1.71	36	1
1:A:185:GLN:HG3	1:A:189:HIS:CB	0.46	2.41	13	16
1:A:23:ASN:HB3	1:A:27:VAL:HG23	0.46	1.87	10	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:33:ALA:CB	1:A:38:ALA:HB3	0.46	2.40	28	4
1:A:168:GLN:HB3	1:A:188:VAL:HG13	0.46	1.86	14	1
1:A:122:VAL:HG22	1:A:132:ARG:NH2	0.46	2.26	16	1
1:A:41:LYS:O	1:A:49:GLU:CD	0.46	2.54	21	2
1:A:136:GLY:O	1:A:137:ILE:CG2	0.46	2.64	23	1
1:A:12:ASN:HB3	1:A:18:ALA:HB1	0.46	1.88	38	2
1:A:137:ILE:N	1:A:137:ILE:HD13	0.46	2.26	4	1
1:A:43:HIS:O	1:A:47:GLY:HA2	0.46	2.11	8	1
1:A:94:HIS:ND1	1:A:115:HIS:NE2	0.46	2.62	8	1
1:A:74:ARG:NH1	1:A:74:ARG:HB2	0.46	2.27	18	1
1:A:108:ILE:O	1:A:132:ARG:CD	0.46	2.64	19	1
1:A:128:LYS:HE2	1:A:130:PHE:CE1	0.46	2.45	29	1
1:A:71:GLU:OE1	1:A:74:ARG:NH2	0.46	2.49	33	1
1:A:46:SER:CB	1:A:79:LEU:CD1	0.45	2.84	18	2
1:A:64:LYS:O	1:A:64:LYS:HG2	0.45	2.11	12	4
1:A:39:LYS:O	1:A:40:PHE:O	0.45	2.34	9	6
1:A:66:ARG:C	1:A:68:TYR:H	0.45	2.14	38	9
1:A:75:GLN:OE1	1:A:76:ILE:CG1	0.45	2.64	11	1
1:A:130:PHE:CE1	1:A:132:ARG:NE	0.45	2.84	11	1
1:A:20:THR:CG2	1:A:153:ASN:OD1	0.45	2.60	18	1
1:A:20:THR:O	1:A:21:ARG:NE	0.45	2.48	24	2
1:A:31:LEU:HD13	1:A:166:CYS:CB	0.45	2.40	21	1
1:A:118:LEU:HD13	1:A:132:ARG:CD	0.45	2.41	27	2
1:A:20:THR:CB	1:A:151:LEU:HA	0.45	2.42	23	1
1:A:93:ILE:HD13	1:A:93:ILE:O	0.45	2.10	31	1
1:A:21:ARG:HD2	1:A:151:LEU:CD1	0.45	2.41	34	1
1:A:97:LEU:HA	1:A:137:ILE:HD13	0.45	1.88	35	1
1:A:7:VAL:HG21	1:A:62:LEU:HD22	0.45	1.86	36	1
1:A:10:LEU:HB2	1:A:94:HIS:CG	0.45	2.46	40	1
1:A:40:PHE:HB3	1:A:51:ALA:HA	0.45	1.88	40	1
1:A:125:LEU:CD1	1:A:130:PHE:CZ	0.45	2.91	40	1
1:A:65:PRO:CB	1:A:75:GLN:HG3	0.45	2.41	13	8
1:A:116:ASN:O	1:A:120:SER:N	0.45	2.48	4	7
1:A:36:LEU:C	1:A:38:ALA:N	0.45	2.69	28	2
1:A:122:VAL:O	1:A:126:GLY:HA2	0.45	2.11	12	6
1:A:21:ARG:NH1	1:A:95:ASP:O	0.45	2.49	9	1
1:A:151:LEU:O	1:A:151:LEU:CD2	0.45	2.57	9	1
1:A:21:ARG:N	1:A:21:ARG:HD3	0.45	2.26	11	1
1:A:128:LYS:O	1:A:129:ASP:CG	0.45	2.54	38	6
1:A:168:GLN:HG3	1:A:191:TRP:CZ2	0.45	2.46	21	1
1:A:108:ILE:HD13	1:A:131:GLN:HG2	0.45	1.87	30	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:48:ALA:HB2	1:A:65:PRO:HB3	0.45	1.87	31	1
1:A:95:ASP:HB2	1:A:137:ILE:CD1	0.45	2.41	34	1
1:A:10:LEU:HD23	1:A:118:LEU:HD21	0.45	1.89	38	1
1:A:21:ARG:HG2	1:A:24:LEU:CD2	0.45	2.42	38	1
1:A:97:LEU:CD2	1:A:150:VAL:CG2	0.45	2.94	39	1
1:A:29:ALA:CB	1:A:64:LYS:HE3	0.45	2.41	31	4
1:A:49:GLU:O	1:A:64:LYS:N	0.45	2.48	6	2
1:A:72:SER:OG	1:A:76:ILE:HD11	0.45	2.12	34	2
1:A:125:LEU:HB2	1:A:130:PHE:CZ	0.45	2.46	10	2
1:A:130:PHE:CE2	1:A:132:ARG:CG	0.45	3.00	13	1
1:A:122:VAL:CG2	1:A:130:PHE:CE1	0.45	3.00	19	1
1:A:185:GLN:HA	1:A:189:HIS:HB2	0.45	1.88	21	4
1:A:155:THR:N	1:A:156:PRO:HD2	0.45	2.26	25	4
1:A:69:MET:HE1	1:A:70:ASN:HB2	0.45	1.89	35	1
1:A:115:HIS:N	1:A:118:LEU:HD12	0.45	2.26	40	1
1:A:15:ALA:O	1:A:18:ALA:N	0.45	2.49	10	4
1:A:96:ASP:O	1:A:137:ILE:HG13	0.45	2.11	9	3
1:A:10:LEU:HG	1:A:10:LEU:O	0.45	2.12	34	4
1:A:47:GLY:O	1:A:75:GLN:NE2	0.45	2.50	18	2
1:A:10:LEU:HD21	1:A:94:HIS:CG	0.45	2.46	16	1
1:A:135:ILE:HD12	1:A:135:ILE:N	0.45	2.27	18	1
1:A:151:LEU:O	1:A:153:ASN:OD1	0.45	2.34	18	1
1:A:25:GLY:CA	1:A:93:ILE:HD11	0.45	2.42	23	1
1:A:92:VAL:CG1	1:A:132:ARG:HG2	0.45	2.42	24	1
1:A:102:GLY:N	1:A:136:GLY:O	0.45	2.45	25	1
1:A:17:TYR:CZ	1:A:151:LEU:HD22	0.45	2.46	36	1
1:A:23:ASN:O	1:A:26:PHE:N	0.45	2.49	40	1
1:A:17:TYR:CE2	1:A:151:LEU:CD2	0.45	3.00	5	1
1:A:71:GLU:OE1	1:A:74:ARG:NE	0.45	2.49	33	2
1:A:55:SER:O	1:A:56:ALA:C	0.45	2.54	25	5
1:A:76:ILE:HD13	1:A:76:ILE:N	0.45	2.26	13	1
1:A:96:ASP:OD2	1:A:115:HIS:NE2	0.45	2.49	16	2
1:A:102:GLY:HA3	1:A:161:GLU:CG	0.45	2.42	24	3
1:A:21:ARG:NE	1:A:95:ASP:OD2	0.45	2.50	30	1
1:A:43:HIS:CD2	1:A:45:ARG:N	0.45	2.84	34	1
1:A:169:ALA:O	1:A:173:THR:HB	0.45	2.12	39	1
1:A:137:ILE:HG12	1:A:150:VAL:CG2	0.45	2.41	3	2
1:A:5:LEU:HA	1:A:89:ASN:CB	0.45	2.42	5	2
1:A:22:HIS:O	1:A:22:HIS:CD2	0.45	2.69	5	1
1:A:86:ALA:HB3	1:A:89:ASN:ND2	0.45	2.27	12	2
1:A:93:ILE:HD13	1:A:135:ILE:HD11	0.45	1.88	40	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:43:HIS:O	1:A:47:GLY:N	0.45	2.48	23	3
1:A:73:GLY:HA2	1:A:121:VAL:CA	0.45	2.42	25	4
1:A:21:ARG:HH11	1:A:22:HIS:N	0.45	2.10	17	1
1:A:138:GLY:CA	1:A:149:PHE:CE2	0.45	3.00	20	1
1:A:7:VAL:HG12	1:A:62:LEU:CD2	0.45	2.41	24	1
1:A:97:LEU:HA	1:A:138:GLY:HA3	0.45	1.87	32	1
1:A:75:GLN:CG	1:A:76:ILE:N	0.45	2.79	37	1
1:A:24:LEU:HD13	1:A:28:VAL:CG2	0.45	2.38	39	1
1:A:69:MET:HG2	1:A:117:GLY:CA	0.45	2.42	3	2
1:A:91:ILE:CD1	1:A:91:ILE:O	0.45	2.64	14	3
1:A:8:VAL:HG23	1:A:92:VAL:CG2	0.45	2.36	6	3
1:A:43:HIS:O	1:A:44:LYS:O	0.45	2.34	8	4
1:A:44:LYS:O	1:A:47:GLY:N	0.45	2.49	10	5
1:A:87:PRO:O	1:A:130:PHE:HA	0.45	2.12	29	4
1:A:41:LYS:O	1:A:42:ALA:CB	0.45	2.65	11	1
1:A:50:VAL:HB	1:A:63:ALA:CB	0.45	2.42	12	2
1:A:21:ARG:HD2	1:A:162:VAL:CG2	0.45	2.42	27	3
1:A:5:LEU:CD1	1:A:89:ASN:O	0.45	2.61	14	1
1:A:82:PHE:CD1	1:A:83:TYR:CD1	0.45	3.05	14	1
1:A:7:VAL:HB	1:A:62:LEU:CD2	0.45	2.42	34	2
1:A:12:ASN:CG	1:A:18:ALA:HB2	0.45	2.32	25	1
1:A:62:LEU:HD13	1:A:64:LYS:CE	0.45	2.42	39	3
1:A:17:TYR:CE1	1:A:151:LEU:CD2	0.45	2.93	27	2
1:A:67:CYS:CB	1:A:71:GLU:OE1	0.45	2.65	37	1
1:A:103:ARG:CG	1:A:104:ILE:N	0.45	2.80	40	1
1:A:10:LEU:HG	1:A:92:VAL:CG1	0.45	2.42	17	3
1:A:49:GLU:O	1:A:50:VAL:CG1	0.45	2.65	8	2
1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:HD23	0.45	2.27	17	2
1:A:62:LEU:C	1:A:62:LEU:HD22	0.45	2.33	20	2
1:A:12:ASN:N	1:A:23:ASN:HA	0.45	2.26	25	1
1:A:7:VAL:CG2	1:A:62:LEU:HD22	0.45	2.42	27	1
1:A:14:GLY:HA3	1:A:18:ALA:HB2	0.45	1.88	33	1
1:A:6:LEU:HB3	1:A:90:ILE:CD1	0.45	2.41	40	1
1:A:93:ILE:HG23	1:A:133:VAL:CG1	0.45	2.41	37	2
1:A:101:PHE:O	1:A:161:GLU:CD	0.45	2.54	13	5
1:A:64:LYS:NZ	1:A:68:TYR:OH	0.45	2.48	4	1
1:A:20:THR:C	1:A:21:ARG:CG	0.45	2.85	7	3
1:A:10:LEU:CG	1:A:10:LEU:O	0.45	2.65	15	2
1:A:109:GLY:O	1:A:132:ARG:NH1	0.45	2.50	13	1
1:A:72:SER:OG	1:A:76:ILE:HD13	0.45	2.11	22	1
1:A:45:ARG:O	1:A:46:SER:C	0.45	2.55	27	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:12:ASN:OD1	1:A:22:HIS:NE2	0.45	2.50	28	1
1:A:110:GLY:O	1:A:111:GLY:C	0.45	2.55	30	1
1:A:127:THR:HB	1:A:130:PHE:CE1	0.45	2.47	31	1
1:A:104:ILE:CG2	1:A:135:ILE:HG12	0.45	2.41	38	1
1:A:154:PHE:CB	1:A:158:GLU:HG2	0.45	2.41	39	1
1:A:56:ALA:CB	1:A:177:ILE:HG23	0.45	2.42	1	1
1:A:54:ARG:O	1:A:55:SER:OG	0.45	2.35	8	1
1:A:11:GLY:O	1:A:68:TYR:HB2	0.45	2.13	10	5
1:A:21:ARG:N	1:A:21:ARG:CD	0.45	2.80	11	1
1:A:156:PRO:HA	1:A:159:ARG:HG2	0.45	1.89	36	4
1:A:159:ARG:HG3	1:A:160:ALA:N	0.45	2.27	17	2
1:A:87:PRO:CA	1:A:130:PHE:CD1	0.45	3.00	18	1
1:A:43:HIS:NE2	1:A:48:ALA:CB	0.45	2.72	19	1
1:A:172:ALA:HB1	1:A:188:VAL:HB	0.45	1.88	29	1
1:A:101:PHE:CD2	1:A:154:PHE:CD2	0.45	3.05	33	1
1:A:26:PHE:O	1:A:30:ASP:N	0.45	2.46	34	2
1:A:69:MET:CG	1:A:117:GLY:HA3	0.44	2.42	37	3
1:A:71:GLU:HA	1:A:74:ARG:CZ	0.44	2.42	1	2
1:A:74:ARG:CD	1:A:75:GLN:H	0.44	2.25	7	8
1:A:40:PHE:HB2	1:A:51:ALA:CA	0.44	2.42	26	5
1:A:12:ASN:HB3	1:A:18:ALA:CB	0.44	2.42	7	3
1:A:43:HIS:O	1:A:47:GLY:CA	0.44	2.65	8	1
1:A:109:GLY:O	1:A:110:GLY:O	0.44	2.35	30	2
1:A:156:PRO:C	1:A:158:GLU:N	0.44	2.70	14	6
1:A:103:ARG:CZ	1:A:191:TRP:CG	0.44	3.00	15	1
1:A:99:LEU:C	1:A:101:PHE:N	0.44	2.70	23	1
1:A:101:PHE:N	1:A:101:PHE:CD1	0.44	2.85	25	1
1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:HG23	0.44	2.32	29	3
1:A:29:ALA:CB	1:A:62:LEU:HD21	0.44	2.42	29	2
1:A:103:ARG:HG3	1:A:191:TRP:CH2	0.44	2.48	1	1
1:A:153:ASN:C	1:A:155:THR:N	0.44	2.70	35	10
1:A:15:ALA:O	1:A:16:ASN:C	0.44	2.55	10	4
1:A:100:GLU:OE2	1:A:101:PHE:N	0.44	2.50	10	3
1:A:149:PHE:O	1:A:152:GLU:CD	0.44	2.56	23	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:62:LEU:HD23	0.44	2.42	24	1
1:A:58:ARG:HB3	1:A:177:ILE:CG2	0.44	2.42	34	1
1:A:106:LEU:HD13	1:A:106:LEU:C	0.44	2.31	34	1
1:A:33:ALA:HA	1:A:38:ALA:HB3	0.44	1.88	8	2
1:A:44:LYS:O	1:A:45:ARG:HB2	0.44	2.11	8	1
1:A:165:ILE:HD13	1:A:166:CYS:CA	0.44	2.41	30	4
1:A:71:GLU:O	1:A:71:GLU:OE1	0.44	2.35	26	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:87:PRO:HB2	1:A:130:PHE:HB3	0.44	1.90	13	1
1:A:62:LEU:HD12	1:A:64:LYS:NZ	0.44	2.27	19	1
1:A:191:TRP:CE3	1:A:191:TRP:HA	0.44	2.47	19	1
1:A:29:ALA:O	1:A:33:ALA:N	0.44	2.49	21	2
1:A:40:PHE:HA	1:A:51:ALA:CB	0.44	2.38	35	2
1:A:26:PHE:CD1	1:A:49:GLU:OE1	0.44	2.70	27	1
1:A:64:LYS:CD	1:A:64:LYS:N	0.44	2.80	27	1
1:A:66:ARG:HB2	1:A:71:GLU:OE2	0.44	2.12	27	1
1:A:174:GLU:CD	1:A:178:GLU:OE1	0.44	2.56	2	1
1:A:69:MET:CE	1:A:115:HIS:NE2	0.44	2.80	4	1
1:A:49:GLU:O	1:A:63:ALA:HA	0.44	2.12	33	5
1:A:93:ILE:HD12	1:A:133:VAL:HG12	0.44	1.90	12	1
1:A:8:VAL:HA	1:A:63:ALA:O	0.44	2.13	13	2
1:A:87:PRO:HB2	1:A:130:PHE:CA	0.44	2.43	19	4
1:A:90:ILE:CG2	1:A:130:PHE:HB2	0.44	2.42	21	1
1:A:103:ARG:CZ	1:A:191:TRP:NE1	0.44	2.81	22	2
1:A:49:GLU:OE1	1:A:68:TYR:OH	0.44	2.35	27	1
1:A:108:ILE:HD13	1:A:131:GLN:CB	0.44	2.43	31	1
1:A:49:GLU:HG3	1:A:50:VAL:N	0.44	2.27	3	10
1:A:188:VAL:O	1:A:190:ALA:N	0.44	2.51	8	5
1:A:63:ALA:O	1:A:64:LYS:HB3	0.44	2.12	17	7
1:A:90:ILE:HB	1:A:130:PHE:CE1	0.44	2.48	18	3
1:A:165:ILE:O	1:A:168:GLN:N	0.44	2.51	16	2
1:A:17:TYR:CE1	1:A:151:LEU:CB	0.44	3.01	30	1
1:A:99:LEU:HD13	1:A:103:ARG:NH2	0.44	2.27	30	1
1:A:154:PHE:O	1:A:158:GLU:HB2	0.44	2.13	35	4
1:A:42:ALA:O	1:A:43:HIS:CB	0.44	2.65	40	1
1:A:40:PHE:O	1:A:41:LYS:HG2	0.44	2.12	24	16
1:A:101:PHE:CD2	1:A:154:PHE:CE2	0.44	3.05	3	1
1:A:114:GLY:C	1:A:115:HIS:ND1	0.44	2.71	4	1
1:A:6:LEU:HB3	1:A:90:ILE:CG1	0.44	2.43	10	2
1:A:21:ARG:NE	1:A:158:GLU:OE1	0.44	2.50	16	2
1:A:91:ILE:CG2	1:A:131:GLN:NE2	0.44	2.80	25	1
1:A:65:PRO:CB	1:A:75:GLN:HG2	0.44	2.42	29	1
1:A:50:VAL:HG23	1:A:62:LEU:C	0.44	2.33	20	2
1:A:46:SER:O	1:A:75:GLN:NE2	0.44	2.47	17	1
1:A:20:THR:O	1:A:21:ARG:HG3	0.44	2.13	22	1
1:A:87:PRO:HG2	1:A:128:LYS:O	0.44	2.13	23	1
1:A:100:GLU:CA	1:A:138:GLY:N	0.44	2.80	23	1
1:A:40:PHE:CB	1:A:51:ALA:CA	0.44	2.96	26	1
1:A:51:ALA:O	1:A:62:LEU:N	0.44	2.48	32	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:LEU:CD1	1:A:62:LEU:C	0.44	2.85	36	1
1:A:191:TRP:N	1:A:191:TRP:HE3	0.44	2.11	1	3
1:A:21:ARG:HD3	1:A:162:VAL:CG2	0.44	2.42	26	2
1:A:100:GLU:OE2	1:A:103:ARG:NH2	0.44	2.50	15	1
1:A:112:GLU:O	1:A:113:GLY:C	0.44	2.56	24	4
1:A:7:VAL:CB	1:A:62:LEU:HD22	0.44	2.43	27	1
1:A:40:PHE:CE2	1:A:50:VAL:HB	0.44	2.48	27	2
1:A:6:LEU:CD1	1:A:61:VAL:HB	0.44	2.42	4	5
1:A:128:LYS:HB3	1:A:130:PHE:CZ	0.44	2.48	5	3
1:A:98:ASP:C	1:A:98:ASP:OD1	0.44	2.56	9	1
1:A:19:ARG:CG	1:A:155:THR:HG23	0.44	2.43	11	1
1:A:40:PHE:CD2	1:A:50:VAL:HG23	0.44	2.47	22	1
1:A:20:THR:C	1:A:21:ARG:HG2	0.44	2.33	24	2
1:A:24:LEU:CD1	1:A:95:ASP:HB3	0.44	2.43	35	1
1:A:25:GLY:HA2	1:A:93:ILE:CG1	0.43	2.42	8	2
1:A:103:ARG:HA	1:A:191:TRP:CZ2	0.43	2.48	8	1
1:A:93:ILE:CG1	1:A:135:ILE:HD11	0.43	2.42	10	2
1:A:164:THR:O	1:A:168:GLN:NE2	0.43	2.51	17	1
1:A:108:ILE:O	1:A:108:ILE:HD13	0.43	2.12	37	2
1:A:41:LYS:O	1:A:49:GLU:CG	0.43	2.66	21	1
1:A:158:GLU:CD	1:A:162:VAL:HG23	0.43	2.33	21	1
1:A:100:GLU:CB	1:A:137:ILE:C	0.43	2.86	25	1
1:A:80:ALA:CB	1:A:125:LEU:HD23	0.43	2.43	32	1
1:A:4:PRO:O	1:A:89:ASN:HB3	0.43	2.13	37	2
1:A:132:ARG:O	1:A:133:VAL:HG23	0.43	2.13	39	1
1:A:94:HIS:CD2	1:A:95:ASP:H	0.43	2.31	25	8
1:A:122:VAL:CG1	1:A:127:THR:CB	0.43	2.96	34	3
1:A:29:ALA:CB	1:A:64:LYS:HE2	0.43	2.43	9	1
1:A:85:VAL:HG22	1:A:86:ALA:N	0.43	2.27	9	1
1:A:101:PHE:CE1	1:A:158:GLU:CD	0.43	2.91	21	2
1:A:153:ASN:OD1	1:A:154:PHE:N	0.43	2.51	14	1
1:A:10:LEU:CD2	1:A:94:HIS:CG	0.43	3.01	39	2
1:A:121:VAL:O	1:A:125:LEU:CB	0.43	2.66	25	1
1:A:21:ARG:HB3	1:A:24:LEU:HD13	0.43	1.90	26	1
1:A:85:VAL:CG1	1:A:86:ALA:H	0.43	2.26	26	1
1:A:3:GLU:O	1:A:58:ARG:NH1	0.43	2.51	30	1
1:A:160:ALA:HA	1:A:163:PRO:CG	0.43	2.43	40	1
1:A:162:VAL:CG2	1:A:163:PRO:CD	0.43	2.94	40	1
1:A:31:LEU:CD2	1:A:166:CYS:HB3	0.43	2.43	17	13
1:A:26:PHE:O	1:A:30:ASP:HB2	0.43	2.14	37	3
1:A:108:ILE:CD1	1:A:131:GLN:CG	0.43	2.96	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:VAL:CG1	1:A:91:ILE:HG12	0.43	2.42	31	5
1:A:85:VAL:CG2	1:A:89:ASN:ND2	0.43	2.74	23	1
1:A:93:ILE:HD12	1:A:94:HIS:N	0.43	2.28	23	1
1:A:152:GLU:O	1:A:153:ASN:HB3	0.43	2.13	23	2
1:A:65:PRO:HG3	1:A:75:GLN:HB2	0.43	1.90	31	1
1:A:93:ILE:HG23	1:A:133:VAL:O	0.43	2.14	1	1
1:A:12:ASN:ND2	1:A:17:TYR:OH	0.43	2.51	2	1
1:A:97:LEU:C	1:A:138:GLY:O	0.43	2.56	27	2
1:A:10:LEU:HD13	1:A:94:HIS:ND1	0.43	2.29	9	1
1:A:69:MET:SD	1:A:70:ASN:OD1	0.43	2.77	9	1
1:A:112:GLU:CD	1:A:112:GLU:N	0.43	2.71	20	1
1:A:40:PHE:CD2	1:A:50:VAL:HB	0.43	2.49	27	1
1:A:87:PRO:HB2	1:A:129:ASP:C	0.43	2.34	31	1
1:A:128:LYS:N	1:A:128:LYS:HD2	0.43	2.29	31	2
1:A:66:ARG:CB	1:A:71:GLU:OE2	0.43	2.66	20	2
1:A:74:ARG:O	1:A:77:GLY:N	0.43	2.51	27	2
1:A:112:GLU:OE1	1:A:122:VAL:CG2	0.43	2.63	16	1
1:A:152:GLU:O	1:A:153:ASN:CG	0.43	2.56	18	2
1:A:10:LEU:HB3	1:A:92:VAL:CG2	0.43	2.43	21	1
1:A:168:GLN:HB2	1:A:191:TRP:CH2	0.43	2.48	24	1
1:A:103:ARG:HD3	1:A:104:ILE:O	0.43	2.14	26	1
1:A:125:LEU:CB	1:A:130:PHE:CE1	0.43	3.02	27	1
1:A:110:GLY:C	1:A:132:ARG:NH1	0.43	2.72	32	1
1:A:105:ARG:HG3	1:A:134:ARG:O	0.43	2.13	38	1
1:A:65:PRO:CG	1:A:72:SER:HA	0.43	2.44	6	2
1:A:115:HIS:O	1:A:119:ARG:HB3	0.43	2.14	11	1
1:A:168:GLN:CG	1:A:169:ALA:N	0.43	2.82	12	1
1:A:185:GLN:O	1:A:190:ALA:N	0.43	2.52	37	2
1:A:153:ASN:OD1	1:A:153:ASN:N	0.43	2.52	24	1
1:A:152:GLU:HG2	1:A:153:ASN:N	0.43	2.29	27	1
1:A:156:PRO:O	1:A:158:GLU:N	0.43	2.52	31	3
1:A:59:SER:OG	1:A:60:LEU:N	0.43	2.52	33	1
1:A:10:LEU:HD21	1:A:94:HIS:CE1	0.43	2.49	35	1
1:A:7:VAL:CG1	1:A:91:ILE:HD13	0.43	2.44	37	1
1:A:9:GLY:O	1:A:64:LYS:CB	0.43	2.67	37	1
1:A:21:ARG:CG	1:A:24:LEU:HD21	0.43	2.43	38	1
1:A:8:VAL:CG2	1:A:92:VAL:HG23	0.43	2.44	40	1
1:A:112:GLU:OE1	1:A:119:ARG:NH2	0.43	2.52	4	1
1:A:43:HIS:O	1:A:44:LYS:C	0.43	2.57	6	1
1:A:99:LEU:O	1:A:138:GLY:HA2	0.43	2.14	31	2
1:A:71:GLU:OE1	1:A:74:ARG:CD	0.43	2.66	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:VAL:HB	1:A:62:LEU:HD23	0.43	1.91	12	1
1:A:128:LYS:HD2	1:A:128:LYS:C	0.43	2.34	21	2
1:A:111:GLY:C	1:A:113:GLY:N	0.43	2.71	22	1
1:A:155:THR:O	1:A:159:ARG:HG3	0.43	2.14	25	1
1:A:108:ILE:CD1	1:A:131:GLN:HG3	0.43	2.43	30	1
1:A:102:GLY:CA	1:A:161:GLU:HG3	0.43	2.44	35	1
1:A:40:PHE:C	1:A:40:PHE:CD1	0.43	2.90	40	1
1:A:41:LYS:C	1:A:49:GLU:OE2	0.43	2.57	19	3
1:A:128:LYS:CG	1:A:128:LYS:O	0.43	2.67	8	1
1:A:88:ALA:O	1:A:131:GLN:NE2	0.43	2.51	11	2
1:A:137:ILE:HD13	1:A:137:ILE:N	0.43	2.28	15	2
1:A:115:HIS:CG	1:A:118:LEU:CD1	0.43	3.02	21	1
1:A:168:GLN:CA	1:A:168:GLN:OE1	0.43	2.67	21	1
1:A:91:ILE:CB	1:A:131:GLN:HG2	0.43	2.44	24	2
1:A:176:LEU:CD1	1:A:181:MET:HA	0.43	2.43	39	3
1:A:17:TYR:HB3	1:A:151:LEU:HD11	0.43	1.89	29	1
1:A:87:PRO:HB2	1:A:130:PHE:CD1	0.43	2.48	30	1
1:A:112:GLU:CD	1:A:132:ARG:CZ	0.43	2.87	36	1
1:A:49:GLU:CB	1:A:64:LYS:HE2	0.43	2.44	4	1
1:A:128:LYS:HB3	1:A:130:PHE:CE2	0.43	2.46	5	3
1:A:152:GLU:OE1	1:A:153:ASN:N	0.43	2.50	9	1
1:A:120:SER:O	1:A:124:ALA:N	0.43	2.48	10	1
1:A:106:LEU:O	1:A:107:LYS:HG2	0.43	2.14	23	2
1:A:164:THR:HG23	1:A:191:TRP:CZ2	0.43	2.48	25	1
1:A:24:LEU:O	1:A:28:VAL:HG23	0.43	2.13	30	1
1:A:36:LEU:O	1:A:36:LEU:CD1	0.43	2.55	30	1
1:A:71:GLU:CD	1:A:74:ARG:NE	0.43	2.73	33	1
1:A:154:PHE:HB2	1:A:158:GLU:CD	0.43	2.34	33	1
1:A:19:ARG:O	1:A:158:GLU:OE1	0.43	2.37	35	1
1:A:112:GLU:CD	1:A:132:ARG:NH2	0.43	2.72	36	1
1:A:69:MET:HG2	1:A:70:ASN:N	0.43	2.29	3	5
1:A:68:TYR:O	1:A:72:SER:HB2	0.43	2.14	9	3
1:A:95:ASP:CG	1:A:137:ILE:HG12	0.43	2.35	9	1
1:A:40:PHE:CE2	1:A:50:VAL:HG23	0.43	2.46	22	1
1:A:99:LEU:HG	1:A:101:PHE:CE1	0.43	2.49	23	1
1:A:87:PRO:HB3	1:A:125:LEU:HD22	0.43	1.89	24	1
1:A:96:ASP:O	1:A:137:ILE:HG12	0.43	2.14	28	1
1:A:168:GLN:HB3	1:A:191:TRP:CE2	0.43	2.49	32	1
1:A:106:LEU:HD21	1:A:181:MET:HB2	0.42	1.90	2	1
1:A:91:ILE:O	1:A:91:ILE:CG1	0.42	2.67	11	3
1:A:95:ASP:OD2	1:A:137:ILE:CG2	0.42	2.64	11	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:101:PHE:O	1:A:161:GLU:OE2	0.42	2.38	13	1
1:A:21:ARG:CD	1:A:24:LEU:CD2	0.42	2.96	15	1
1:A:87:PRO:C	1:A:129:ASP:O	0.42	2.57	38	3
1:A:125:LEU:CD2	1:A:130:PHE:CE2	0.42	3.00	18	1
1:A:92:VAL:O	1:A:132:ARG:HA	0.42	2.14	21	1
1:A:88:ALA:HB2	1:A:129:ASP:CB	0.42	2.44	32	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:151:LEU:HD11	0.42	2.29	34	1
1:A:10:LEU:HD12	1:A:11:GLY:N	0.42	2.30	1	2
1:A:112:GLU:OE1	1:A:113:GLY:N	0.42	2.52	24	2
1:A:152:GLU:CG	1:A:153:ASN:N	0.42	2.82	37	3
1:A:121:VAL:CG1	1:A:132:ARG:NH2	0.42	2.82	15	1
1:A:21:ARG:HD2	1:A:101:PHE:CE1	0.42	2.48	20	1
1:A:114:GLY:O	1:A:115:HIS:O	0.42	2.37	24	1
1:A:99:LEU:CB	1:A:101:PHE:CE1	0.42	3.02	25	1
1:A:100:GLU:HA	1:A:137:ILE:HA	0.42	1.91	25	1
1:A:87:PRO:CG	1:A:129:ASP:HB2	0.42	2.43	27	1
1:A:150:VAL:CG1	1:A:151:LEU:HD23	0.42	2.44	27	1
1:A:26:PHE:CE1	1:A:64:LYS:HE3	0.42	2.50	30	1
1:A:21:ARG:HG3	1:A:24:LEU:CD1	0.42	2.44	40	1
1:A:10:LEU:CD2	1:A:92:VAL:HG13	0.42	2.44	17	2
1:A:109:GLY:O	1:A:110:GLY:C	0.42	2.57	3	5
1:A:5:LEU:HD23	1:A:89:ASN:ND2	0.42	2.28	7	1
1:A:45:ARG:O	1:A:46:SER:CB	0.42	2.67	8	1
1:A:10:LEU:CD2	1:A:69:MET:HA	0.42	2.45	9	1
1:A:87:PRO:HG2	1:A:129:ASP:CB	0.42	2.45	10	3
1:A:102:GLY:HA2	1:A:165:ILE:HG21	0.42	1.92	10	1
1:A:161:GLU:O	1:A:165:ILE:CB	0.42	2.67	14	1
1:A:165:ILE:HG12	1:A:166:CYS:N	0.42	2.29	20	1
1:A:50:VAL:HG22	1:A:63:ALA:CB	0.42	2.44	27	1
1:A:64:LYS:N	1:A:64:LYS:HD3	0.42	2.30	27	2
1:A:126:GLY:O	1:A:127:THR:O	0.42	2.37	37	1
1:A:40:PHE:N	1:A:40:PHE:HD1	0.42	2.12	7	1
1:A:165:ILE:O	1:A:166:CYS:C	0.42	2.58	16	2
1:A:46:SER:OG	1:A:75:GLN:NE2	0.42	2.51	26	1
1:A:12:ASN:H	1:A:23:ASN:HA	0.42	1.74	34	1
1:A:91:ILE:CG1	1:A:93:ILE:HD11	0.42	2.44	37	1
1:A:31:LEU:CD1	1:A:166:CYS:HB3	0.42	2.45	17	5
1:A:24:LEU:CD1	1:A:95:ASP:OD2	0.42	2.68	9	1
1:A:153:ASN:OD1	1:A:158:GLU:OE2	0.42	2.38	14	1
1:A:3:GLU:CB	1:A:4:PRO:HD3	0.42	2.44	16	1
1:A:103:ARG:HG2	1:A:191:TRP:CD1	0.42	2.49	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:121:VAL:HG12	1:A:125:LEU:CD1	0.42	2.41	21	1
1:A:64:LYS:HB2	1:A:68:TYR:CE1	0.42	2.49	24	1
1:A:185:GLN:CA	1:A:189:HIS:HB2	0.42	2.45	28	1
1:A:21:ARG:NH2	1:A:158:GLU:HG2	0.42	2.29	31	1
1:A:7:VAL:HG12	1:A:91:ILE:HD13	0.42	1.87	37	1
1:A:158:GLU:O	1:A:162:VAL:CG1	0.42	2.45	40	1
1:A:6:LEU:HD12	1:A:61:VAL:HB	0.42	1.92	8	3
1:A:78:PRO:O	1:A:82:PHE:HB2	0.42	2.15	14	2
1:A:24:LEU:CD2	1:A:135:ILE:HB	0.42	2.45	18	1
1:A:165:ILE:CG2	1:A:166:CYS:H	0.42	2.27	18	2
1:A:128:LYS:C	1:A:128:LYS:CD	0.42	2.86	29	2
1:A:12:ASN:OD1	1:A:12:ASN:C	0.42	2.57	25	1
1:A:36:LEU:O	1:A:37:GLY:C	0.42	2.58	28	1
1:A:21:ARG:HE	1:A:162:VAL:HG21	0.42	1.73	13	2
1:A:96:ASP:N	1:A:137:ILE:HD11	0.42	2.30	4	1
1:A:180:GLY:O	1:A:181:MET:CG	0.42	2.68	5	1
1:A:115:HIS:ND1	1:A:118:LEU:CD1	0.42	2.83	6	1
1:A:21:ARG:NH1	1:A:158:GLU:OE1	0.42	2.53	12	1
1:A:87:PRO:HG3	1:A:128:LYS:CB	0.42	2.45	35	2
1:A:101:PHE:O	1:A:161:GLU:OE1	0.42	2.37	21	1
1:A:10:LEU:HD13	1:A:69:MET:HB2	0.42	1.92	24	1
1:A:119:ARG:O	1:A:122:VAL:HG12	0.42	2.14	7	5
1:A:18:ALA:O	1:A:19:ARG:C	0.42	2.58	7	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:151:LEU:HD23	0.42	2.30	11	1
1:A:6:LEU:O	1:A:90:ILE:HA	0.42	2.15	16	1
1:A:102:GLY:CA	1:A:165:ILE:HG21	0.42	2.45	20	1
1:A:96:ASP:O	1:A:136:GLY:HA2	0.42	2.15	27	1
1:A:185:GLN:HG3	1:A:189:HIS:CG	0.42	2.50	28	1
1:A:106:LEU:CD1	1:A:106:LEU:C	0.42	2.88	30	1
1:A:24:LEU:HA	1:A:27:VAL:HB	0.42	1.91	38	1
1:A:63:ALA:C	1:A:64:LYS:CG	0.42	2.88	4	1
1:A:97:LEU:CD1	1:A:150:VAL:CG2	0.42	2.88	5	1
1:A:69:MET:CE	1:A:116:ASN:HB3	0.42	2.45	6	1
1:A:69:MET:CE	1:A:115:HIS:CG	0.42	3.02	7	1
1:A:156:PRO:O	1:A:159:ARG:HB2	0.42	2.14	23	2
1:A:18:ALA:C	1:A:20:THR:N	0.42	2.73	20	2
1:A:131:GLN:C	1:A:132:ARG:HG3	0.42	2.35	24	2
1:A:26:PHE:O	1:A:30:ASP:CG	0.42	2.58	25	1
1:A:33:ALA:O	1:A:37:GLY:N	0.42	2.53	25	2
1:A:168:GLN:OE1	1:A:188:VAL:CG1	0.42	2.68	26	1
1:A:23:ASN:OD1	1:A:26:PHE:CB	0.42	2.68	31	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:GLY:HA3	1:A:17:TYR:CZ	0.42	2.50	33	1
1:A:21:ARG:NH1	1:A:95:ASP:OD2	0.42	2.53	34	1
1:A:49:GLU:OE2	1:A:65:PRO:O	0.42	2.37	35	1
1:A:132:ARG:NH2	1:A:134:ARG:NE	0.42	2.68	2	1
1:A:20:THR:OG1	1:A:152:GLU:N	0.42	2.53	10	2
1:A:38:ALA:HB1	1:A:40:PHE:HE1	0.42	1.72	3	2
1:A:168:GLN:HG2	1:A:191:TRP:CE3	0.42	2.49	5	1
1:A:111:GLY:O	1:A:112:GLU:C	0.42	2.58	17	3
1:A:6:LEU:HG	1:A:61:VAL:CG1	0.42	2.44	11	1
1:A:5:LEU:CD1	1:A:58:ARG:NE	0.42	2.83	13	1
1:A:131:GLN:C	1:A:132:ARG:HG2	0.42	2.35	16	1
1:A:138:GLY:C	1:A:149:PHE:CE2	0.42	2.93	20	1
1:A:33:ALA:HB2	1:A:40:PHE:CE1	0.42	2.50	36	2
1:A:163:PRO:O	1:A:167:GLU:HG3	0.42	2.12	31	2
1:A:174:GLU:O	1:A:178:GLU:OE2	0.42	2.38	35	1
1:A:105:ARG:HG3	1:A:134:ARG:C	0.42	2.34	36	1
1:A:96:ASP:C	1:A:137:ILE:HG13	0.42	2.36	39	1
1:A:132:ARG:HB2	1:A:132:ARG:CZ	0.42	2.45	39	1
1:A:184:ALA:O	1:A:188:VAL:CA	0.41	2.68	32	3
1:A:95:ASP:OD2	1:A:137:ILE:HG12	0.41	2.15	10	1
1:A:3:GLU:N	1:A:4:PRO:CD	0.41	2.82	16	1
1:A:112:GLU:N	1:A:132:ARG:HH22	0.41	2.13	19	1
1:A:91:ILE:HB	1:A:131:GLN:HG2	0.41	1.91	24	1
1:A:65:PRO:HG2	1:A:71:GLU:HB3	0.41	1.91	25	1
1:A:131:GLN:HG3	1:A:132:ARG:N	0.41	2.30	25	1
1:A:168:GLN:HG2	1:A:191:TRP:CD2	0.41	2.50	25	1
1:A:52:THR:HA	1:A:60:LEU:O	0.41	2.15	32	1
1:A:71:GLU:CD	1:A:74:ARG:CZ	0.41	2.88	33	2
1:A:20:THR:CG2	1:A:152:GLU:O	0.41	2.64	34	1
1:A:171:ASP:O	1:A:174:GLU:HG2	0.41	2.15	39	1
1:A:41:LYS:O	1:A:49:GLU:OE2	0.41	2.39	25	5
1:A:44:LYS:C	1:A:46:SER:N	0.41	2.72	10	2
1:A:87:PRO:HB2	1:A:130:PHE:CB	0.41	2.45	13	1
1:A:8:VAL:N	1:A:91:ILE:O	0.41	2.48	15	1
1:A:112:GLU:O	1:A:112:GLU:CD	0.41	2.58	16	1
1:A:31:LEU:HD21	1:A:166:CYS:CB	0.41	2.45	29	2
1:A:8:VAL:O	1:A:92:VAL:HA	0.41	2.15	21	2
1:A:17:TYR:O	1:A:22:HIS:HB2	0.41	2.15	23	1
1:A:152:GLU:OE2	1:A:154:PHE:CE1	0.41	2.74	27	1
1:A:93:ILE:HG12	1:A:133:VAL:O	0.41	2.14	31	1
1:A:102:GLY:O	1:A:165:ILE:HB	0.41	2.15	37	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:117:GLY:O	1:A:120:SER:N	0.41	2.53	33	1
1:A:50:VAL:HG12	1:A:63:ALA:CB	0.41	2.45	39	1
1:A:99:LEU:HD23	1:A:103:ARG:NH2	0.41	2.30	39	1
1:A:106:LEU:O	1:A:106:LEU:CD2	0.41	2.60	13	3
1:A:167:GLU:HG3	1:A:168:GLN:N	0.41	2.30	40	2
1:A:20:THR:C	1:A:21:ARG:HG3	0.41	2.35	17	1
1:A:96:ASP:OD1	1:A:97:LEU:HD23	0.41	2.15	20	1
1:A:40:PHE:HD2	1:A:50:VAL:C	0.41	2.18	29	1
1:A:122:VAL:CG2	1:A:130:PHE:CE2	0.41	2.93	34	1
1:A:94:HIS:HD1	1:A:118:LEU:HD21	0.41	1.76	37	1
1:A:49:GLU:HB3	1:A:64:LYS:CE	0.41	2.45	4	1
1:A:95:ASP:OD1	1:A:137:ILE:CG2	0.41	2.69	14	2
1:A:49:GLU:O	1:A:50:VAL:HG13	0.41	2.14	8	1
1:A:21:ARG:HD2	1:A:24:LEU:CD2	0.41	2.45	15	1
1:A:39:LYS:HD2	1:A:40:PHE:N	0.41	2.30	17	1
1:A:104:ILE:HD12	1:A:104:ILE:O	0.41	2.15	20	1
1:A:137:ILE:O	1:A:152:GLU:OE2	0.41	2.38	23	1
1:A:20:THR:CG2	1:A:151:LEU:HD23	0.41	2.46	25	1
1:A:76:ILE:O	1:A:80:ALA:HB3	0.41	2.16	27	1
1:A:71:GLU:HA	1:A:74:ARG:HD3	0.41	1.93	29	3
1:A:176:LEU:HG	1:A:181:MET:CB	0.41	2.46	31	2
1:A:101:PHE:CZ	1:A:138:GLY:HA3	0.41	2.50	31	1
1:A:101:PHE:CZ	1:A:158:GLU:HG2	0.41	2.50	35	1
1:A:41:LYS:O	1:A:50:VAL:O	0.41	2.38	25	2
1:A:21:ARG:HB3	1:A:24:LEU:CD2	0.41	2.45	5	1
1:A:186:ASN:O	1:A:190:ALA:O	0.41	2.38	5	1
1:A:168:GLN:HG3	1:A:188:VAL:HG13	0.41	1.91	6	1
1:A:118:LEU:N	1:A:118:LEU:CD2	0.41	2.82	11	1
1:A:29:ALA:CB	1:A:64:LYS:NZ	0.41	2.83	12	2
1:A:24:LEU:HG	1:A:135:ILE:CG1	0.41	2.46	14	1
1:A:37:GLY:C	1:A:38:ALA:O	0.41	2.57	26	1
1:A:87:PRO:CB	1:A:128:LYS:HB3	0.41	2.45	26	1
1:A:168:GLN:CD	1:A:188:VAL:HG13	0.41	2.36	26	1
1:A:163:PRO:O	1:A:167:GLU:HG2	0.41	2.16	31	1
1:A:10:LEU:CD1	1:A:10:LEU:O	0.41	2.68	35	1
1:A:12:ASN:CB	1:A:22:HIS:HB3	0.41	2.46	36	1
1:A:12:ASN:OD1	1:A:17:TYR:OH	0.41	2.36	2	1
1:A:149:PHE:CD1	1:A:149:PHE:O	0.41	2.74	2	1
1:A:48:ALA:HB3	1:A:75:GLN:HE22	0.41	1.76	9	1
1:A:12:ASN:HB2	1:A:18:ALA:HB1	0.41	1.92	19	1
1:A:40:PHE:CE2	1:A:49:GLU:HG2	0.41	2.51	19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:GLU:CD	1:A:112:GLU:O	0.41	2.58	21	1
1:A:99:LEU:O	1:A:137:ILE:HA	0.41	2.16	23	1
1:A:100:GLU:HG3	1:A:138:GLY:N	0.41	2.30	25	1
1:A:20:THR:O	1:A:20:THR:HG23	0.41	2.16	28	1
1:A:17:TYR:HB2	1:A:22:HIS:CB	0.41	2.45	29	1
1:A:58:ARG:CB	1:A:177:ILE:HG23	0.41	2.44	34	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:21:ARG:HA	0.41	2.31	35	1
1:A:40:PHE:CA	1:A:51:ALA:HB2	0.41	2.37	35	1
1:A:127:THR:OG1	1:A:130:PHE:CZ	0.41	2.72	35	1
1:A:42:ALA:CB	1:A:49:GLU:CD	0.41	2.83	40	1
1:A:21:ARG:HD3	1:A:162:VAL:HG23	0.41	1.93	4	1
1:A:113:GLY:O	1:A:114:GLY:O	0.41	2.39	4	1
1:A:46:SER:OG	1:A:79:LEU:HD21	0.41	2.15	5	1
1:A:16:ASN:OD1	1:A:16:ASN:N	0.41	2.53	10	1
1:A:20:THR:HG21	1:A:151:LEU:HA	0.41	1.92	23	2
1:A:98:ASP:O	1:A:99:LEU:HD12	0.41	2.15	17	2
1:A:132:ARG:CZ	1:A:134:ARG:HD3	0.41	2.45	17	1
1:A:185:GLN:O	1:A:189:HIS:CA	0.41	2.69	17	1
1:A:40:PHE:CD2	1:A:51:ALA:HA	0.41	2.51	18	1
1:A:21:ARG:HH21	1:A:151:LEU:HD11	0.41	1.76	21	1
1:A:168:GLN:OE1	1:A:168:GLN:HA	0.41	2.14	21	1
1:A:21:ARG:HD3	1:A:137:ILE:HG21	0.41	1.91	22	1
1:A:105:ARG:C	1:A:134:ARG:O	0.41	2.59	24	1
1:A:152:GLU:C	1:A:153:ASN:OD1	0.41	2.59	24	1
1:A:39:LYS:HE2	1:A:39:LYS:HA	0.41	1.92	28	1
1:A:76:ILE:CD1	1:A:90:ILE:HD13	0.41	2.45	29	1
1:A:112:GLU:OE1	1:A:112:GLU:C	0.41	2.59	30	1
1:A:99:LEU:N	1:A:138:GLY:O	0.41	2.53	32	1
1:A:12:ASN:CG	1:A:22:HIS:O	0.41	2.59	34	1
1:A:87:PRO:HG3	1:A:128:LYS:O	0.41	2.15	1	1
1:A:21:ARG:CZ	1:A:21:ARG:HA	0.41	2.46	12	1
1:A:128:LYS:CG	1:A:130:PHE:CZ	0.41	3.04	12	1
1:A:101:PHE:CE2	1:A:149:PHE:CZ	0.41	3.08	14	1
1:A:12:ASN:CB	1:A:18:ALA:CB	0.41	2.99	19	1
1:A:44:LYS:O	1:A:45:ARG:O	0.41	2.38	20	1
1:A:150:VAL:HG12	1:A:151:LEU:HD12	0.41	1.91	24	1
1:A:65:PRO:HG2	1:A:72:SER:N	0.41	2.31	31	1
1:A:19:ARG:O	1:A:153:ASN:OD1	0.41	2.39	2	1
1:A:174:GLU:O	1:A:178:GLU:CD	0.41	2.60	2	1
1:A:107:LYS:O	1:A:132:ARG:O	0.41	2.38	4	1
1:A:128:LYS:O	1:A:129:ASP:OD2	0.41	2.39	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:178:GLU:OE1	1:A:178:GLU:O	0.41	2.38	5	1
1:A:42:ALA:HB2	1:A:49:GLU:HG2	0.41	1.92	6	1
1:A:104:ILE:HA	1:A:135:ILE:HA	0.41	1.93	8	1
1:A:5:LEU:HD11	1:A:58:ARG:NE	0.41	2.31	13	1
1:A:12:ASN:OD1	1:A:22:HIS:O	0.41	2.39	13	1
1:A:176:LEU:CD1	1:A:181:MET:HB3	0.41	2.44	14	1
1:A:20:THR:C	1:A:22:HIS:N	0.41	2.73	16	1
1:A:69:MET:CG	1:A:70:ASN:N	0.41	2.82	18	1
1:A:43:HIS:CD2	1:A:44:LYS:N	0.41	2.88	22	1
1:A:69:MET:CE	1:A:70:ASN:HB2	0.41	2.45	22	1
1:A:58:ARG:HB2	1:A:177:ILE:CG2	0.41	2.46	23	1
1:A:122:VAL:CG2	1:A:130:PHE:CZ	0.41	3.04	26	1
1:A:65:PRO:HG2	1:A:71:GLU:C	0.41	2.35	27	1
1:A:46:SER:HB3	1:A:79:LEU:CD2	0.41	2.46	28	1
1:A:14:GLY:O	1:A:15:ALA:C	0.41	2.59	29	1
1:A:21:ARG:NE	1:A:151:LEU:CD2	0.41	2.84	30	1
1:A:121:VAL:CG1	1:A:122:VAL:N	0.41	2.84	33	2
1:A:112:GLU:OE2	1:A:132:ARG:NH1	0.41	2.54	36	1
1:A:101:PHE:O	1:A:161:GLU:CB	0.41	2.68	39	1
1:A:152:GLU:O	1:A:153:ASN:OD1	0.41	2.39	3	1
1:A:17:TYR:HB2	1:A:151:LEU:HD22	0.41	1.92	10	1
1:A:128:LYS:O	1:A:128:LYS:CG	0.41	2.68	25	1
1:A:31:LEU:CD1	1:A:35:ARG:HD3	0.41	2.45	29	1
1:A:189:HIS:HA	1:A:191:TRP:CH2	0.41	2.50	30	1
1:A:71:GLU:OE1	1:A:71:GLU:CA	0.41	2.68	31	1
1:A:62:LEU:C	1:A:62:LEU:HD12	0.41	2.36	36	1
1:A:164:THR:O	1:A:167:GLU:HG2	0.41	2.16	40	2
1:A:181:MET:O	1:A:182:GLU:C	0.41	2.60	38	1
1:A:93:ILE:HG23	1:A:133:VAL:HG12	0.40	1.93	37	2
1:A:28:VAL:HB	1:A:93:ILE:CD1	0.40	2.46	3	1
1:A:49:GLU:OE2	1:A:64:LYS:O	0.40	2.39	5	2
1:A:25:GLY:O	1:A:28:VAL:HG12	0.40	2.15	10	1
1:A:172:ALA:O	1:A:176:LEU:HB2	0.40	2.16	21	2
1:A:112:GLU:O	1:A:118:LEU:HD12	0.40	2.16	25	1
1:A:17:TYR:O	1:A:20:THR:OG1	0.40	2.33	37	1
1:A:8:VAL:HG23	1:A:92:VAL:HG23	0.40	1.92	40	1
1:A:8:VAL:HG21	1:A:76:ILE:HD13	0.40	1.91	8	1
1:A:45:ARG:CB	1:A:50:VAL:HG21	0.40	2.47	8	1
1:A:21:ARG:NH2	1:A:162:VAL:HG21	0.40	2.31	12	1
1:A:5:LEU:HB2	1:A:89:ASN:CB	0.40	2.46	14	1
1:A:191:TRP:O	1:A:191:TRP:CG	0.40	2.74	14	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:PRO:HG3	1:A:67:CYS:N	0.40	2.30	17	1
1:A:41:LYS:O	1:A:49:GLU:OE1	0.40	2.40	26	2
1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:CG2	0.40	2.89	27	1
1:A:100:GLU:C	1:A:138:GLY:N	0.40	2.75	28	1
1:A:128:LYS:CA	1:A:128:LYS:HE3	0.40	2.46	34	1
1:A:31:LEU:HD22	1:A:166:CYS:SG	0.40	2.57	2	1
1:A:132:ARG:CZ	1:A:134:ARG:CD	0.40	2.99	2	1
1:A:71:GLU:OE1	1:A:75:GLN:NE2	0.40	2.54	3	1
1:A:172:ALA:HB3	1:A:188:VAL:HG21	0.40	1.92	9	1
1:A:104:ILE:CG2	1:A:165:ILE:CD1	0.40	2.85	10	1
1:A:87:PRO:CD	1:A:128:LYS:HB3	0.40	2.46	11	1
1:A:185:GLN:CA	1:A:189:HIS:HB3	0.40	2.47	11	1
1:A:107:LYS:HB2	1:A:132:ARG:CZ	0.40	2.47	17	1
1:A:20:THR:OG1	1:A:151:LEU:HD13	0.40	2.17	21	1
1:A:100:GLU:N	1:A:138:GLY:N	0.40	2.63	23	1
1:A:17:TYR:C	1:A:19:ARG:N	0.40	2.74	29	1
1:A:6:LEU:HG	1:A:61:VAL:HB	0.40	1.93	30	1
1:A:71:GLU:O	1:A:75:GLN:HG2	0.40	2.16	31	1
1:A:85:VAL:HG22	1:A:86:ALA:H	0.40	1.76	32	1
1:A:46:SER:OG	1:A:79:LEU:CD2	0.40	2.69	33	1
1:A:165:ILE:CD1	1:A:166:CYS:N	0.40	2.73	36	1
1:A:188:VAL:HG12	1:A:189:HIS:H	0.40	1.77	39	1
1:A:88:ALA:O	1:A:131:GLN:OE1	0.40	2.39	3	1
1:A:176:LEU:CD2	1:A:176:LEU:O	0.40	2.69	4	1
1:A:24:LEU:HB3	1:A:135:ILE:CD1	0.40	2.46	5	1
1:A:45:ARG:HB2	1:A:50:VAL:HG21	0.40	1.93	8	1
1:A:49:GLU:C	1:A:50:VAL:HG13	0.40	2.37	8	1
1:A:21:ARG:HD3	1:A:24:LEU:HD22	0.40	1.94	13	1
1:A:56:ALA:O	1:A:177:ILE:CG2	0.40	2.69	15	1
1:A:40:PHE:CE1	1:A:64:LYS:NZ	0.40	2.78	17	1
1:A:95:ASP:OD1	1:A:135:ILE:HB	0.40	2.17	23	1
1:A:127:THR:O	1:A:128:LYS:HB3	0.40	2.16	27	1
1:A:67:CYS:HB3	1:A:71:GLU:HB2	0.40	1.93	32	1
1:A:96:ASP:HB2	1:A:135:ILE:O	0.40	2.16	34	1
1:A:156:PRO:O	1:A:157:ALA:C	0.40	2.60	35	1
1:A:4:PRO:HA	1:A:58:ARG:CD	0.40	2.47	37	1
1:A:125:LEU:HD22	1:A:130:PHE:HZ	0.40	1.75	39	1
1:A:154:PHE:CB	1:A:158:GLU:CG	0.40	3.00	39	1
1:A:97:LEU:HD21	1:A:150:VAL:HG21	0.40	1.93	40	1
1:A:46:SER:C	1:A:79:LEU:HD11	0.40	2.36	6	1
1:A:97:LEU:HD23	1:A:137:ILE:O	0.40	2.16	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:103:ARG:HA	1:A:191:TRP:CH2	0.40	2.52	8	1
1:A:26:PHE:O	1:A:30:ASP:OD2	0.40	2.40	9	1
1:A:118:LEU:HD23	1:A:118:LEU:N	0.40	2.32	14	1
1:A:104:ILE:HG13	1:A:191:TRP:CH2	0.40	2.52	16	1
1:A:67:CYS:HB2	1:A:71:GLU:CG	0.40	2.46	18	1
1:A:29:ALA:HB3	1:A:64:LYS:HE2	0.40	1.92	20	1
1:A:49:GLU:HG2	1:A:64:LYS:HZ2	0.40	1.77	21	1
1:A:74:ARG:O	1:A:75:GLN:C	0.40	2.60	27	1
1:A:31:LEU:O	1:A:34:ALA:N	0.40	2.54	30	1
1:A:147:ALA:O	1:A:150:VAL:HG12	0.40	2.16	30	2
1:A:23:ASN:OD1	1:A:23:ASN:O	0.40	2.40	37	1
1:A:91:ILE:HA	1:A:131:GLN:O	0.40	2.17	38	1
1:A:137:ILE:HD12	1:A:150:VAL:CG2	0.40	2.47	40	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	180/204 (88%)	130±3 (72±2%)	31±4 (17±2%)	19±4 (10±2%)	1 9
All	All	7200/8160 (88%)	5206 (72%)	1251 (17%)	743 (10%)	1 9

All 58 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	68	TYR	40
1	A	69	MET	40
1	A	153	ASN	39
1	A	156	PRO	39
1	A	65	PRO	36
1	A	152	GLU	34
1	A	155	THR	32
1	A	154	PHE	27
1	A	38	ALA	26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	77	GLY	25
1	A	14	GLY	25
1	A	15	ALA	23
1	A	102	GLY	22
1	A	128	LYS	18
1	A	21	ARG	18
1	A	127	THR	17
1	A	40	PHE	17
1	A	189	HIS	16
1	A	129	ASP	16
1	A	20	THR	16
1	A	55	SER	14
1	A	108	ILE	14
1	A	48	ALA	14
1	A	114	GLY	13
1	A	110	GLY	12
1	A	43	HIS	11
1	A	112	GLU	11
1	A	45	ARG	11
1	A	44	LYS	10
1	A	130	PHE	9
1	A	138	GLY	9
1	A	3	GLU	7
1	A	115	HIS	6
1	A	58	ARG	6
1	A	111	GLY	6
1	A	113	GLY	6
1	A	16	ASN	5
1	A	60	LEU	5
1	A	109	GLY	5
1	A	46	SER	4
1	A	36	LEU	4
1	A	56	ALA	4
1	A	22	HIS	4
1	A	13	PRO	3
1	A	47	GLY	3
1	A	41	LYS	3
1	A	181	MET	2
1	A	37	GLY	2
1	A	116	ASN	2
1	A	64	LYS	2
1	A	179	GLN	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	133	VAL	2
1	A	67	CYS	1
1	A	180	GLY	1
1	A	42	ALA	1
1	A	100	GLU	1
1	A	137	ILE	1
1	A	50	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	135/153 (88%)	82±4 (61±3%)	53±4 (39±3%)	0 5
All	All	5400/6120 (88%)	3278 (61%)	2122 (39%)	0 5

All 116 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	8	VAL	40
1	A	31	LEU	40
1	A	39	LYS	40
1	A	52	THR	40
1	A	67	CYS	40
1	A	74	ARG	40
1	A	106	LEU	40
1	A	150	VAL	40
1	A	155	THR	40
1	A	64	LYS	39
1	A	159	ARG	39
1	A	91	ILE	39
1	A	10	LEU	38
1	A	41	LYS	38
1	A	154	PHE	38
1	A	127	THR	37
1	A	165	ILE	37
1	A	36	LEU	36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	79	LEU	36
1	A	5	LEU	35
1	A	6	LEU	33
1	A	44	LYS	33
1	A	81	LYS	33
1	A	175	LEU	33
1	A	24	LEU	32
1	A	93	ILE	32
1	A	108	ILE	29
1	A	132	ARG	29
1	A	58	ARG	29
1	A	55	SER	27
1	A	182	GLU	27
1	A	187	ARG	27
1	A	97	LEU	26
1	A	40	PHE	26
1	A	35	ARG	25
1	A	101	PHE	25
1	A	71	GLU	24
1	A	17	TYR	23
1	A	59	SER	23
1	A	22	HIS	23
1	A	60	LEU	23
1	A	62	LEU	22
1	A	43	HIS	22
1	A	137	ILE	22
1	A	95	ASP	21
1	A	21	ARG	21
1	A	105	ARG	21
1	A	99	LEU	20
1	A	191	TRP	19
1	A	45	ARG	19
1	A	122	VAL	18
1	A	149	PHE	18
1	A	178	GLU	18
1	A	189	HIS	18
1	A	54	ARG	17
1	A	3	GLU	16
1	A	103	ARG	16
1	A	134	ARG	16
1	A	188	VAL	16
1	A	115	HIS	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	179	GLN	14
1	A	128	LYS	14
1	A	158	GLU	14
1	A	174	GLU	14
1	A	104	ILE	14
1	A	121	VAL	13
1	A	168	GLN	13
1	A	181	MET	13
1	A	76	ILE	13
1	A	107	LYS	13
1	A	100	GLU	13
1	A	46	SER	12
1	A	96	ASP	12
1	A	98	ASP	12
1	A	119	ARG	11
1	A	112	GLU	11
1	A	164	THR	10
1	A	152	GLU	10
1	A	50	VAL	10
1	A	171	ASP	9
1	A	7	VAL	9
1	A	85	VAL	9
1	A	19	ARG	8
1	A	151	LEU	8
1	A	131	GLN	8
1	A	75	GLN	7
1	A	125	LEU	7
1	A	12	ASN	7
1	A	116	ASN	7
1	A	120	SER	7
1	A	69	MET	7
1	A	130	PHE	7
1	A	167	GLU	7
1	A	49	GLU	7
1	A	27	VAL	6
1	A	89	ASN	6
1	A	129	ASP	6
1	A	94	HIS	5
1	A	162	VAL	5
1	A	90	ILE	5
1	A	28	VAL	4
1	A	118	LEU	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	185	GLN	4
1	A	30	ASP	3
1	A	70	ASN	2
1	A	153	ASN	2
1	A	176	LEU	2
1	A	84	SER	2
1	A	186	ASN	1
1	A	23	ASN	1
1	A	16	ASN	1
1	A	66	ARG	1
1	A	161	GLU	1
1	A	20	THR	1
1	A	26	PHE	1
1	A	92	VAL	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