



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

May 28, 2020 – 11:13 pm BST

PDB ID : 2LPM  
Title : Chemical Shift and Structure Assignments for Sma0114  
Authors : Sheftic, S.R.; Gage, D.J.; Alexandrescu, A.T.  
Deposited on : 2012-02-15

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

---

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

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)  
RCI : v\_1n\_11\_5\_13\_A (Berjanski et al., 2005)  
PANAV : Wang et al. (2010)  
ShiftChecker : 2.11  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.11

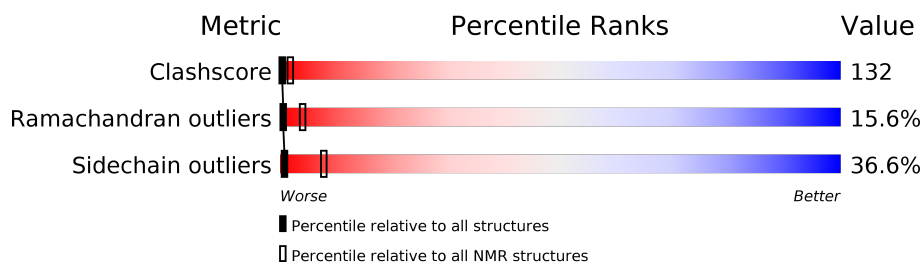
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

The overall completeness of chemical shifts assignment is 85%.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	123	

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:8-A:116 (109)	0.76	1

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

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

The models can be grouped into 4 clusters and 2 single-model clusters were found.

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

### 3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1912 atoms, of which 960 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Two-component response regulator.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	123	1912	601	960	158	188	5	0

There are 3 discrepancies between the modelled and reference sequences:

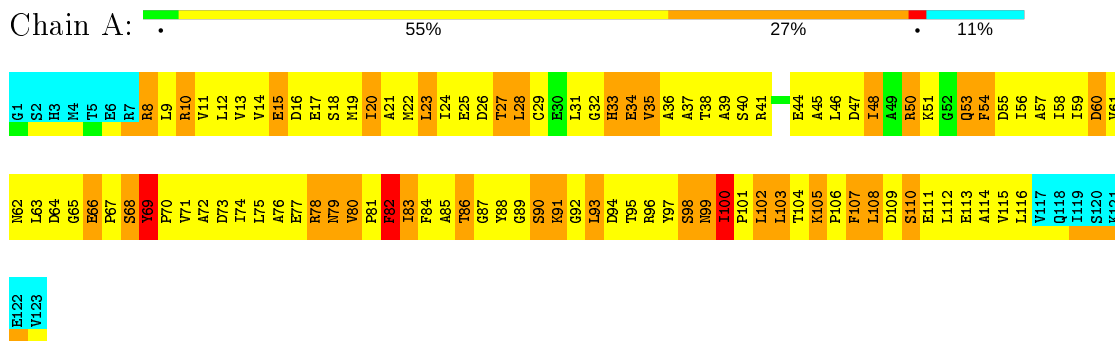
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1	GLY	-	EXPRESSION TAG	UNP Q930Y6
A	2	SER	-	EXPRESSION TAG	UNP Q930Y6
A	3	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP Q930Y6

## 4 Residue-property plots [i](#)

### 4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA and DNA 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: Two-component response regulator

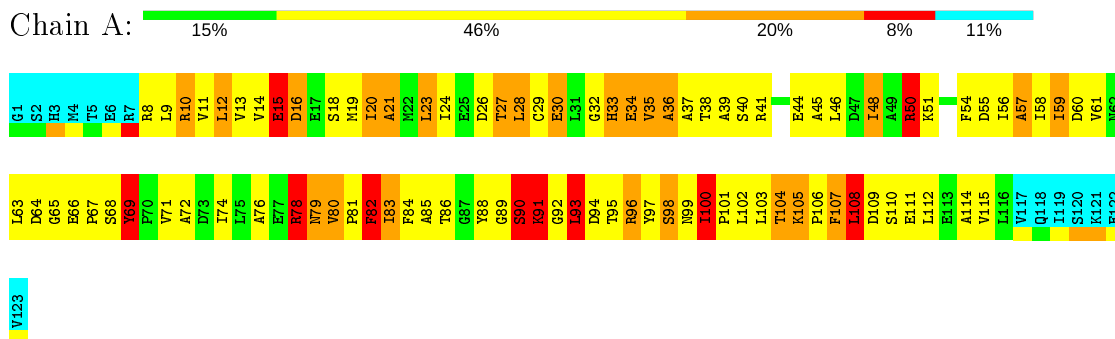


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

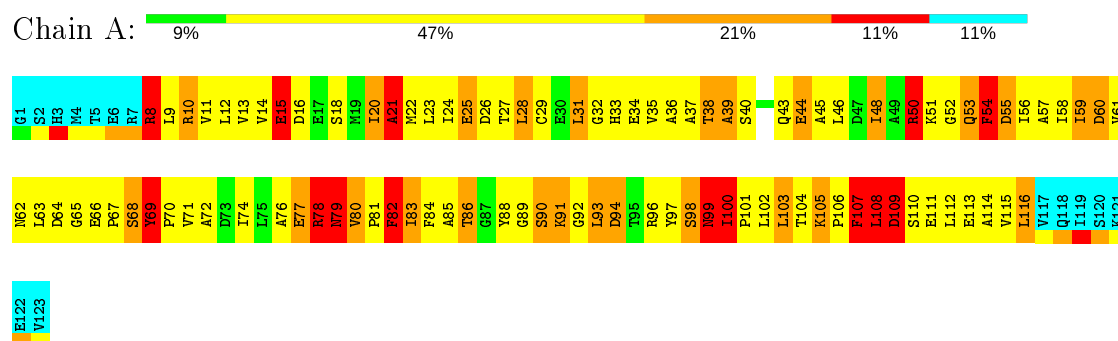
#### 4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

- Molecule 1: Two-component response regulator



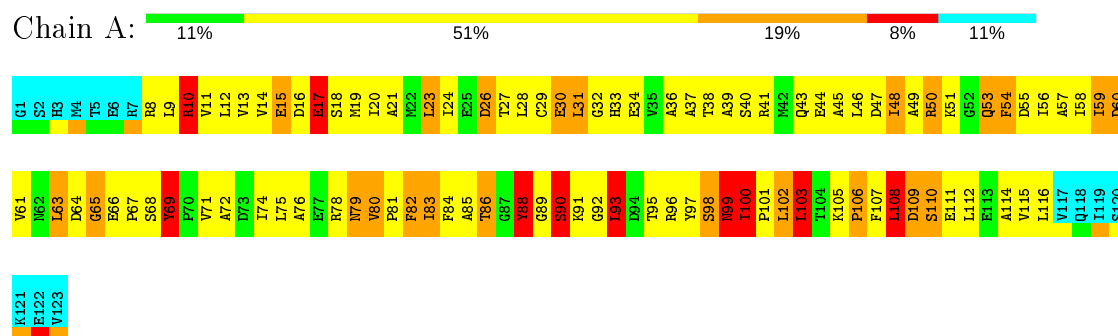
### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Two-component response regulator



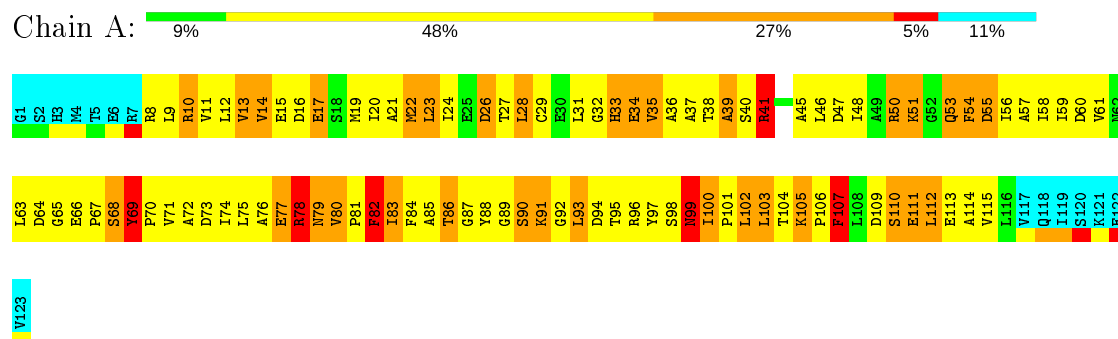
### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Two-component response regulator



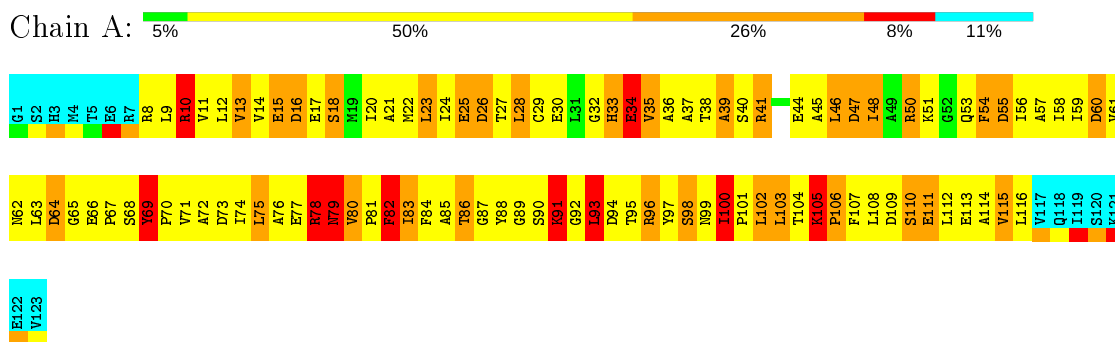
### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Two-component response regulator



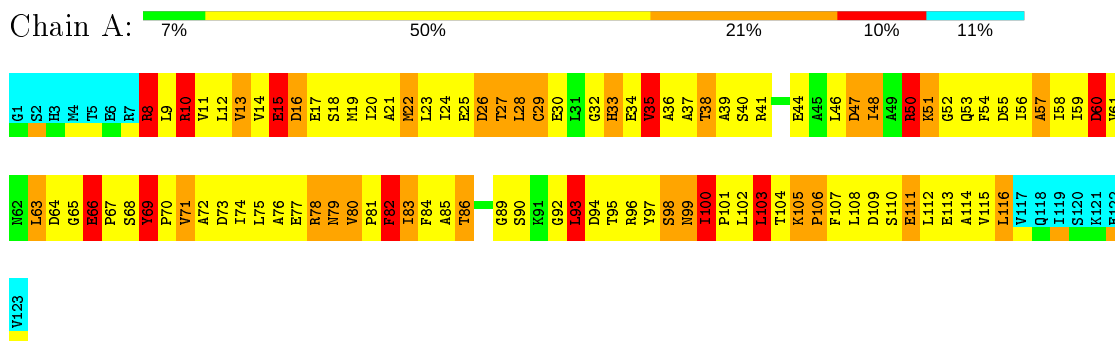
### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Two-component response regulator



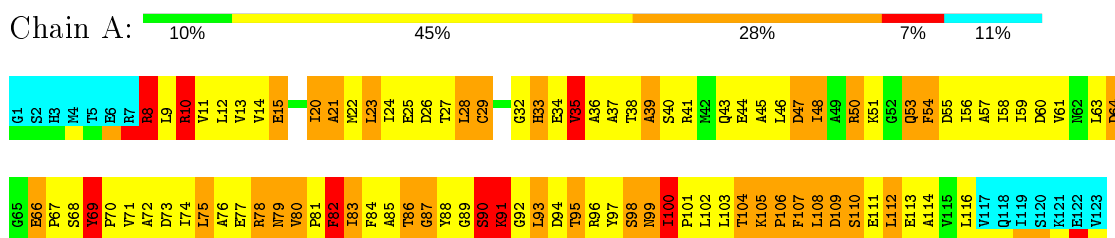
### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Two-component response regulator



### 4.2.7 Score per residue for model 7

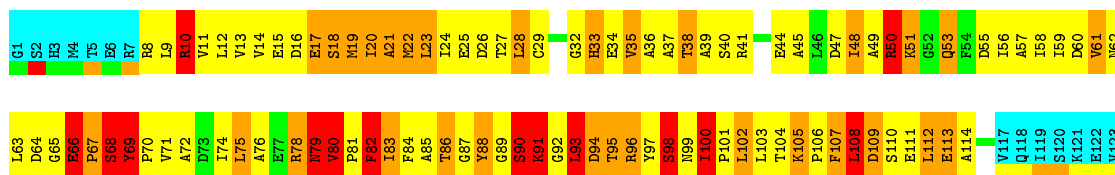
- Molecule 1: Two-component response regulator



### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Two-component response regulator

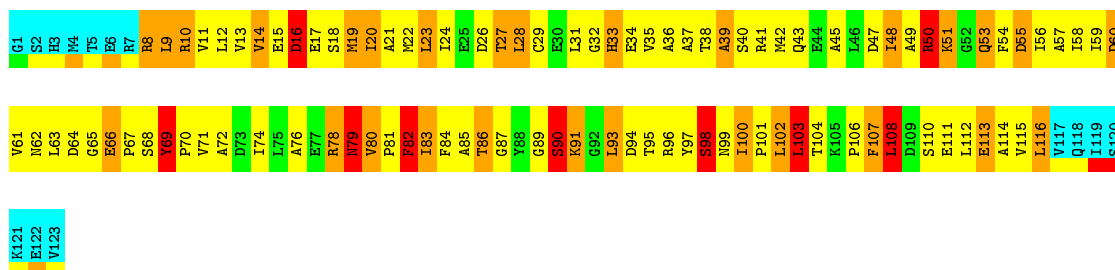




#### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Two-component response regulator

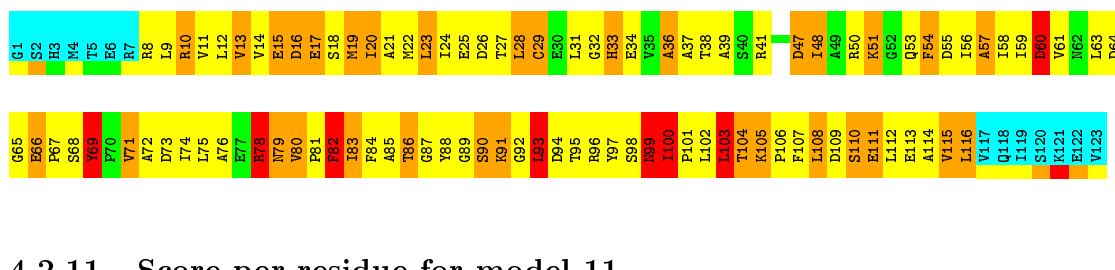
Chain A: 10% 49% 23% 7% 11%



#### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Two-component response regulator

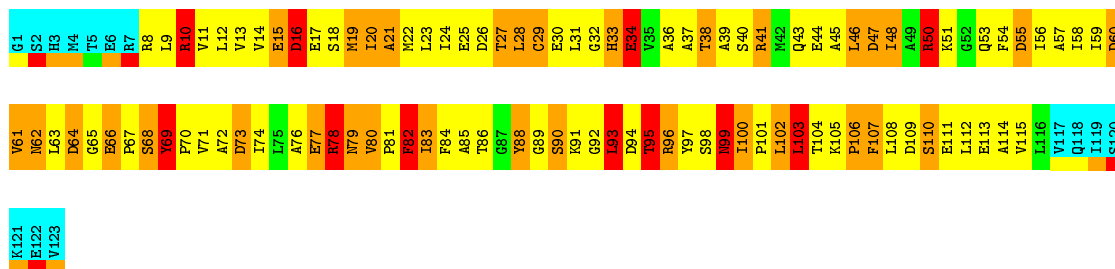
Chain A: 11% 46% 26% 7% 11%



#### 4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Two-component response regulator

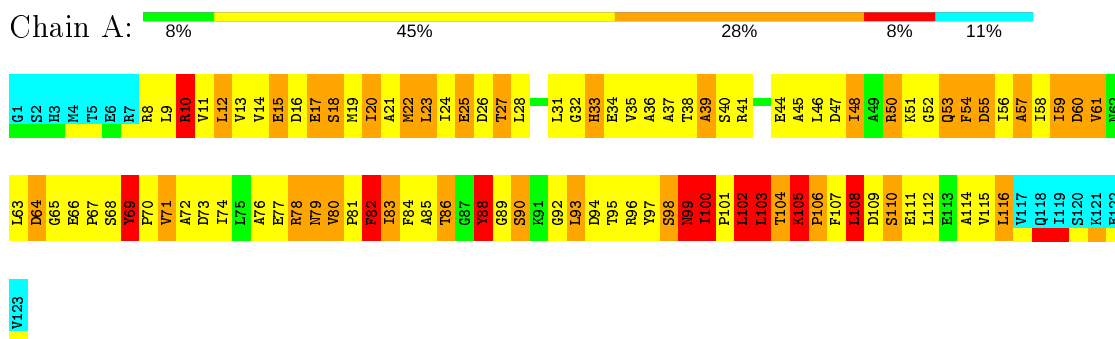
Chain A: 6% 47% 27% 9% 11%





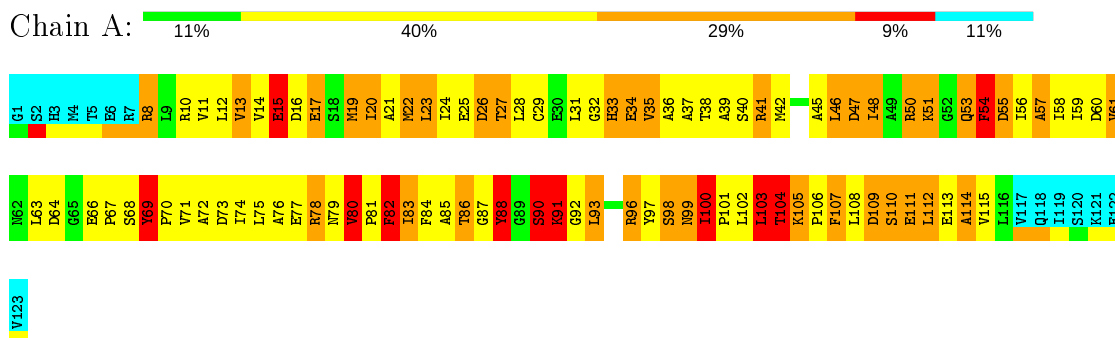
### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Two-component response regulator



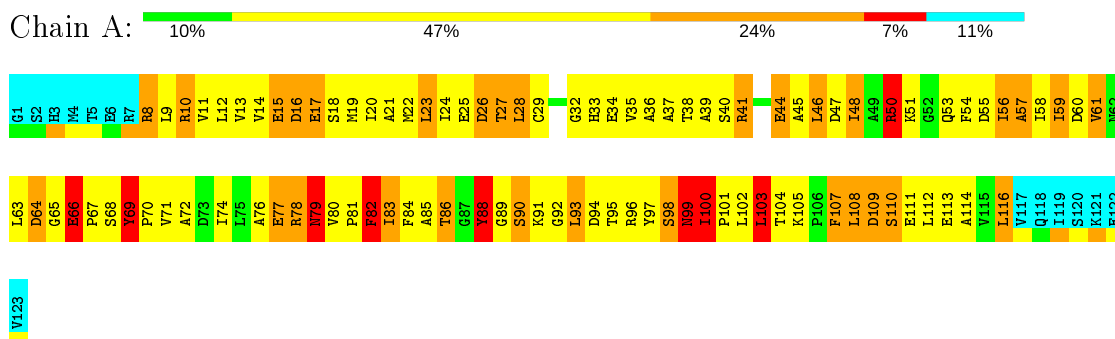
### 4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Two-component response regulator



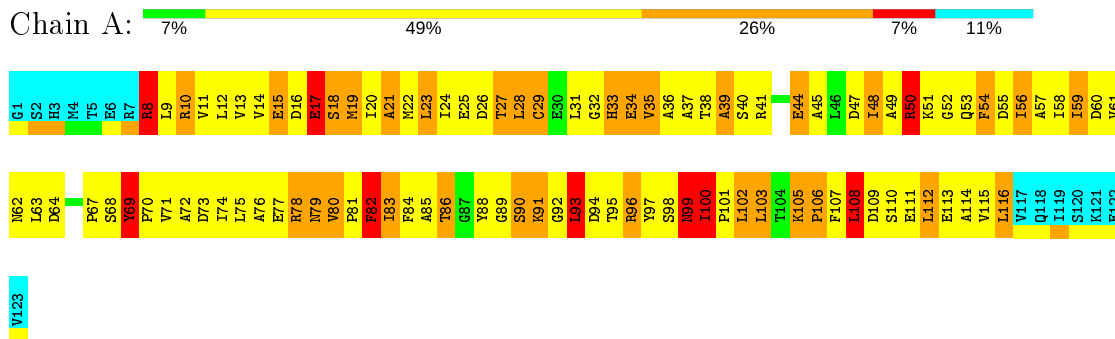
### 4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Two-component response regulator



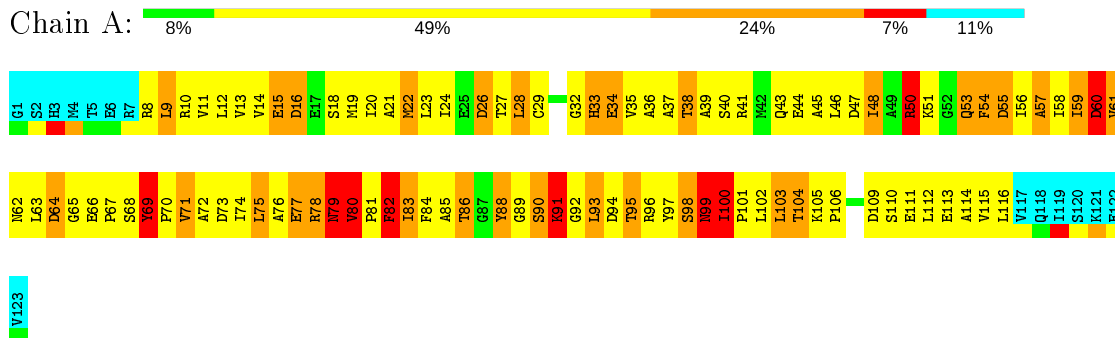
#### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Two-component response regulator



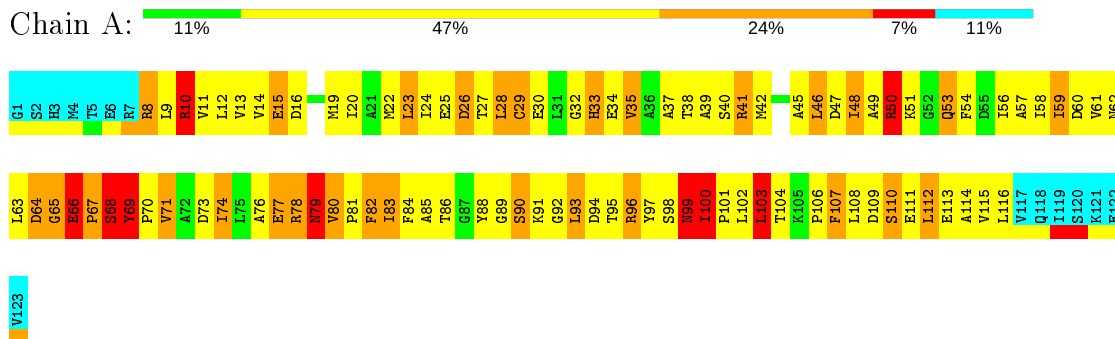
#### 4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Two-component response regulator



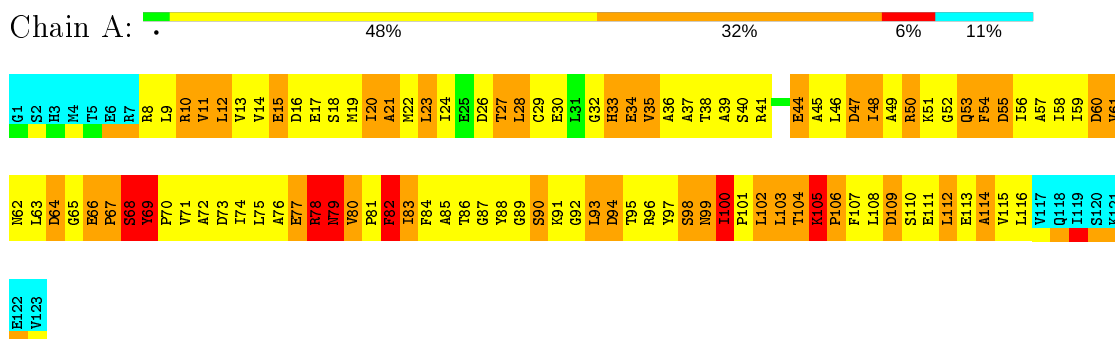
#### 4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Two-component response regulator



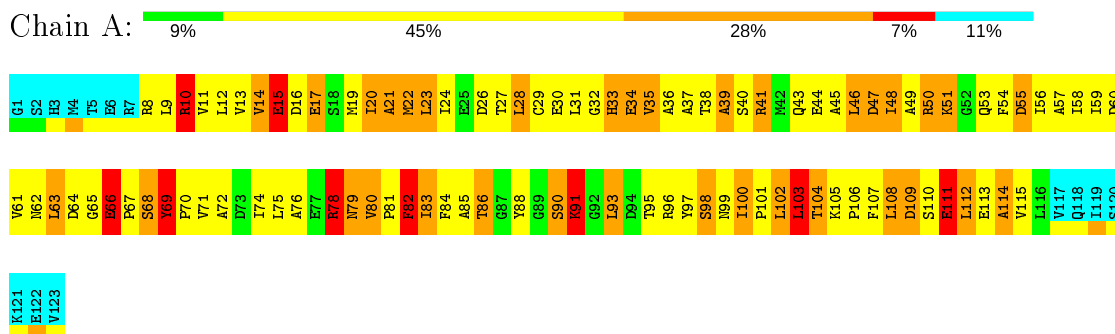
### 4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Two-component response regulator



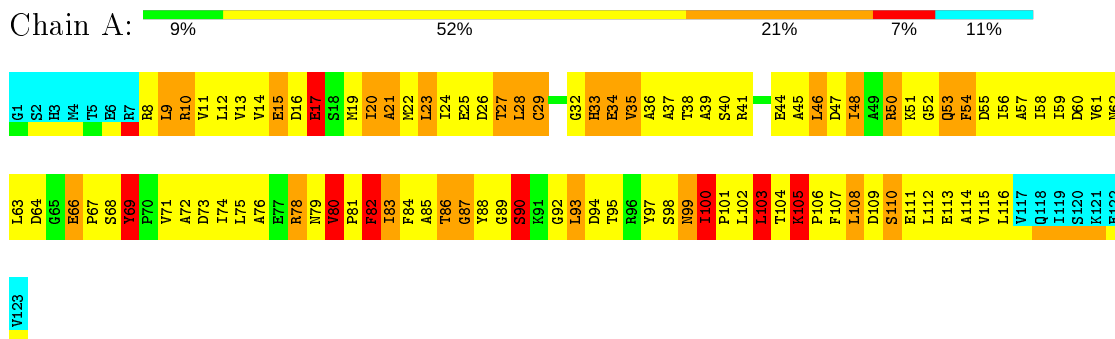
### 4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Two-component response regulator



### 4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Two-component response regulator



## 5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

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

Of the 500 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR	structure solution	
X-PLOR	refinement	

The following table shows chemical shift validation statistics as aggregates over all chemical shift files. Detailed validation can be found in section 6 of this report.

Chemical shift file(s)	input_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1310
Number of shifts mapped to atoms	1310
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	85%

No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.

COVALENT-GEOMETRY INFOmissingINFO

### 5.1 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	842	847	847	222±16
All	All	16840	16940	16940	4447

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 132.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:VAL:HG12	1:A:20:ILE:HD11	1.14	1.15	18	15
1:A:13:VAL:HG12	1:A:58:ILE:HD13	1.07	1.21	14	4
1:A:48:ILE:HD11	1:A:59:ILE:HD11	1.06	1.10	6	12
1:A:93:LEU:HD21	1:A:102:LEU:HD23	1.06	1.21	14	2
1:A:86:THR:HG21	1:A:88:TYR:CZ	1.06	1.84	17	3
1:A:28:LEU:HD13	1:A:29:CYS:N	1.02	1.70	9	7
1:A:99:ASN:C	1:A:100:ILE:HD12	1.01	1.76	8	3
1:A:108:LEU:HD13	1:A:109:ASP:N	1.01	1.70	19	2
1:A:24:ILE:HG21	1:A:38:THR:HG22	0.99	1.33	3	4
1:A:20:ILE:HG21	1:A:39:ALA:N	0.98	1.71	15	5
1:A:112:LEU:HD12	1:A:113:GLU:N	0.98	1.72	20	3
1:A:85:ALA:HB1	1:A:103:LEU:O	0.96	1.57	16	16
1:A:24:ILE:HD11	1:A:36:ALA:HB1	0.95	1.39	2	3
1:A:116:LEU:O	1:A:116:LEU:HD22	0.95	1.60	12	1
1:A:12:LEU:HD11	1:A:54:PHE:HB2	0.95	1.39	1	5
1:A:21:ALA:O	1:A:24:ILE:HG22	0.93	1.61	14	14
1:A:82:PHE:CZ	1:A:93:LEU:HD12	0.93	1.98	5	5
1:A:103:LEU:HD21	1:A:110:SER:OG	0.93	1.62	15	3
1:A:93:LEU:HD23	1:A:93:LEU:O	0.93	1.63	5	2
1:A:23:LEU:HD22	1:A:23:LEU:O	0.92	1.63	17	6
1:A:28:LEU:O	1:A:28:LEU:HD22	0.92	1.64	7	4
1:A:23:LEU:HD23	1:A:107:PHE:CE2	0.92	2.00	9	1
1:A:13:VAL:CG1	1:A:58:ILE:HD13	0.92	1.94	14	4
1:A:102:LEU:HD12	1:A:102:LEU:O	0.91	1.63	19	1
1:A:12:LEU:HD22	1:A:54:PHE:CB	0.91	1.95	19	2
1:A:82:PHE:O	1:A:83:ILE:HD12	0.91	1.64	10	2
1:A:14:VAL:HG22	1:A:39:ALA:O	0.91	1.66	7	4
1:A:70:PRO:O	1:A:74:ILE:HD13	0.91	1.66	9	2
1:A:100:ILE:HD13	1:A:101:PRO:HD2	0.90	1.43	5	7
1:A:100:ILE:HG22	1:A:101:PRO:HD3	0.90	1.40	10	5
1:A:28:LEU:HD22	1:A:28:LEU:O	0.90	1.65	6	3
1:A:93:LEU:O	1:A:93:LEU:HD23	0.89	1.66	11	4
1:A:13:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HD11	0.89	1.42	5	1
1:A:61:VAL:HG12	1:A:86:THR:OG1	0.89	1.68	3	14
1:A:93:LEU:CD2	1:A:102:LEU:HD23	0.88	1.97	14	2
1:A:101:PRO:HB3	1:A:114:ALA:HB2	0.88	1.44	4	7
1:A:27:THR:O	1:A:31:LEU:HD12	0.88	1.66	2	6
1:A:93:LEU:O	1:A:93:LEU:HD22	0.88	1.68	10	5
1:A:83:ILE:HD11	1:A:100:ILE:HD13	0.88	1.46	2	4
1:A:12:LEU:HD23	1:A:48:ILE:HB	0.88	1.46	19	2
1:A:13:VAL:HG12	1:A:20:ILE:CD1	0.87	1.98	18	8
1:A:58:ILE:O	1:A:59:ILE:HD13	0.87	1.66	16	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:101:PRO:C	1:A:102:LEU:HD12	0.87	1.89	17	3
1:A:93:LEU:O	1:A:93:LEU:HD13	0.87	1.70	2	4
1:A:23:LEU:HD23	1:A:107:PHE:CE1	0.87	2.04	14	1
1:A:97:TYR:HB3	1:A:100:ILE:HD11	0.87	1.46	2	10
1:A:12:LEU:HD22	1:A:48:ILE:HG22	0.86	1.44	12	3
1:A:100:ILE:HB	1:A:101:PRO:CD	0.86	2.01	3	18
1:A:28:LEU:HD23	1:A:29:CYS:N	0.86	1.85	10	5
1:A:99:ASN:O	1:A:100:ILE:HD12	0.86	1.69	9	3
1:A:54:PHE:CE1	1:A:57:ALA:HB2	0.86	2.05	14	6
1:A:13:VAL:HG22	1:A:58:ILE:HD13	0.86	1.47	11	9
1:A:93:LEU:HD22	1:A:102:LEU:CD2	0.86	2.00	19	2
1:A:23:LEU:O	1:A:23:LEU:HD13	0.85	1.71	6	6
1:A:100:ILE:HD13	1:A:100:ILE:N	0.85	1.85	16	1
1:A:13:VAL:CG2	1:A:24:ILE:HD11	0.85	2.00	5	1
1:A:13:VAL:HG12	1:A:58:ILE:CD1	0.85	2.02	14	3
1:A:14:VAL:HG13	1:A:40:SER:HA	0.85	1.47	9	4
1:A:28:LEU:HD23	1:A:32:GLY:O	0.85	1.71	7	1
1:A:12:LEU:HD12	1:A:36:ALA:HB1	0.85	1.46	19	1
1:A:100:ILE:HG22	1:A:101:PRO:CD	0.84	2.02	11	4
1:A:85:ALA:HB1	1:A:104:THR:N	0.84	1.86	10	1
1:A:28:LEU:HD13	1:A:33:HIS:O	0.84	1.72	17	1
1:A:89:GLY:HA3	1:A:102:LEU:HD12	0.84	1.47	18	1
1:A:61:VAL:HG12	1:A:86:THR:HB	0.84	1.49	5	3
1:A:56:ILE:HG23	1:A:83:ILE:HB	0.84	1.48	2	20
1:A:34:GLU:O	1:A:35:VAL:HG12	0.84	1.73	6	1
1:A:9:LEU:HD23	1:A:55:ASP:OD2	0.84	1.73	1	2
1:A:109:ASP:HA	1:A:112:LEU:HD21	0.83	1.49	17	4
1:A:80:VAL:HG22	1:A:81:PRO:HD2	0.83	1.48	18	7
1:A:56:ILE:HD12	1:A:83:ILE:HB	0.83	1.49	12	1
1:A:13:VAL:CG2	1:A:24:ILE:HD12	0.83	2.03	14	4
1:A:13:VAL:HG13	1:A:58:ILE:HB	0.83	1.48	2	16
1:A:14:VAL:HG22	1:A:59:ILE:HG13	0.83	1.47	4	1
1:A:80:VAL:HG12	1:A:81:PRO:CD	0.83	2.04	13	4
1:A:59:ILE:HG21	1:A:69:TYR:CE2	0.82	2.09	4	7
1:A:100:ILE:N	1:A:100:ILE:HD12	0.82	1.89	15	4
1:A:23:LEU:HD13	1:A:23:LEU:O	0.82	1.72	16	4
1:A:34:GLU:O	1:A:35:VAL:HG22	0.82	1.75	1	1
1:A:108:LEU:HD22	1:A:108:LEU:C	0.82	1.96	19	1
1:A:24:ILE:CD1	1:A:36:ALA:HB1	0.81	2.04	2	2
1:A:46:LEU:HD23	1:A:47:ASP:N	0.81	1.90	11	4
1:A:83:ILE:HD11	1:A:100:ILE:CD1	0.81	2.06	19	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:104:THR:HG23	1:A:105:LYS:HD2	0.81	1.49	19	2
1:A:102:LEU:O	1:A:103:LEU:HD23	0.81	1.76	10	8
1:A:12:LEU:HD11	1:A:54:PHE:CB	0.81	2.06	1	4
1:A:102:LEU:O	1:A:102:LEU:HD12	0.80	1.77	8	1
1:A:100:ILE:HD12	1:A:100:ILE:N	0.80	1.91	6	8
1:A:23:LEU:O	1:A:23:LEU:HD22	0.80	1.76	14	6
1:A:80:VAL:HG12	1:A:81:PRO:HD3	0.80	1.51	20	4
1:A:56:ILE:HD13	1:A:83:ILE:HD12	0.80	1.52	17	3
1:A:23:LEU:HD11	1:A:107:PHE:CD1	0.80	2.12	5	2
1:A:12:LEU:HD12	1:A:56:ILE:O	0.80	1.77	12	3
1:A:108:LEU:HD12	1:A:112:LEU:HD11	0.79	1.50	2	1
1:A:61:VAL:HG23	1:A:68:SER:OG	0.79	1.76	12	6
1:A:82:PHE:CE1	1:A:95:THR:HG21	0.79	2.12	14	1
1:A:28:LEU:HD23	1:A:33:HIS:HB2	0.79	1.52	6	1
1:A:99:ASN:HA	1:A:102:LEU:HD21	0.79	1.53	11	2
1:A:45:ALA:O	1:A:48:ILE:HD13	0.78	1.78	3	3
1:A:12:LEU:HD22	1:A:48:ILE:CG2	0.78	2.08	1	4
1:A:13:VAL:HG13	1:A:58:ILE:CB	0.78	2.08	2	13
1:A:20:ILE:HG23	1:A:39:ALA:H	0.78	1.35	6	10
1:A:83:ILE:HG13	1:A:100:ILE:HD13	0.78	1.53	1	3
1:A:58:ILE:C	1:A:59:ILE:HD13	0.78	1.99	12	2
1:A:15:GLU:HG2	1:A:20:ILE:HD13	0.78	1.56	13	1
1:A:12:LEU:HD23	1:A:48:ILE:CB	0.78	2.08	19	2
1:A:48:ILE:CD1	1:A:59:ILE:HD11	0.77	2.09	5	5
1:A:15:GLU:HG3	1:A:20:ILE:HD13	0.77	1.55	8	3
1:A:54:PHE:CE2	1:A:57:ALA:HB2	0.77	2.14	13	4
1:A:23:LEU:C	1:A:23:LEU:HD23	0.77	2.00	7	1
1:A:58:ILE:HD12	1:A:58:ILE:N	0.77	1.95	6	3
1:A:12:LEU:HD13	1:A:48:ILE:HG22	0.77	1.57	15	4
1:A:108:LEU:HD22	1:A:108:LEU:O	0.77	1.80	19	1
1:A:28:LEU:HD22	1:A:28:LEU:C	0.77	2.00	7	3
1:A:56:ILE:HD13	1:A:83:ILE:HD13	0.77	1.55	6	5
1:A:11:VAL:HG22	1:A:13:VAL:HG22	0.77	1.56	13	3
1:A:61:VAL:HG23	1:A:68:SER:HB2	0.76	1.56	20	3
1:A:116:LEU:HD13	1:A:116:LEU:C	0.76	2.00	12	2
1:A:17:GLU:O	1:A:20:ILE:HG22	0.76	1.79	10	4
1:A:12:LEU:HD22	1:A:54:PHE:CG	0.76	2.15	6	2
1:A:106:PRO:HG2	1:A:108:LEU:HD21	0.76	1.58	12	1
1:A:97:TYR:HB3	1:A:100:ILE:HD12	0.76	1.57	18	1
1:A:102:LEU:C	1:A:103:LEU:HD23	0.76	2.01	19	4
1:A:70:PRO:O	1:A:74:ILE:HD12	0.76	1.79	14	5

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:59:ILE:HG21	1:A:72:ALA:HB2	0.76	1.57	8	6
1:A:100:ILE:HB	1:A:101:PRO:HD2	0.75	1.59	9	16
1:A:11:VAL:O	1:A:36:ALA:HB1	0.75	1.81	6	4
1:A:12:LEU:HD22	1:A:12:LEU:N	0.75	1.96	16	6
1:A:111:GLU:HG2	1:A:112:LEU:HD23	0.75	1.58	13	1
1:A:61:VAL:HG12	1:A:86:THR:CG2	0.75	2.11	4	2
1:A:13:VAL:O	1:A:14:VAL:HG23	0.75	1.81	19	4
1:A:100:ILE:CD1	1:A:101:PRO:HD2	0.75	2.12	5	9
1:A:101:PRO:CB	1:A:114:ALA:HA	0.75	2.12	8	9
1:A:83:ILE:CG1	1:A:100:ILE:HD13	0.74	2.12	3	3
1:A:23:LEU:HD13	1:A:23:LEU:C	0.74	2.01	10	5
1:A:11:VAL:O	1:A:36:ALA:HB3	0.74	1.82	18	9
1:A:15:GLU:OE2	1:A:63:LEU:HD22	0.74	1.81	12	2
1:A:59:ILE:HG22	1:A:68:SER:HB2	0.74	1.59	5	3
1:A:20:ILE:HG23	1:A:39:ALA:N	0.74	1.96	6	5
1:A:100:ILE:H	1:A:100:ILE:HD12	0.74	1.42	13	3
1:A:15:GLU:OE2	1:A:58:ILE:HG22	0.74	1.82	13	1
1:A:23:LEU:C	1:A:23:LEU:HD13	0.74	2.03	20	7
1:A:72:ALA:HB1	1:A:84:PHE:CE2	0.74	2.18	15	11
1:A:23:LEU:HD23	1:A:23:LEU:O	0.74	1.83	7	3
1:A:101:PRO:HB2	1:A:114:ALA:HA	0.74	1.59	18	3
1:A:93:LEU:N	1:A:93:LEU:HD22	0.74	1.98	14	2
1:A:86:THR:HG21	1:A:88:TYR:CE1	0.73	2.18	17	1
1:A:93:LEU:HD22	1:A:93:LEU:C	0.73	2.04	1	4
1:A:57:ALA:C	1:A:58:ILE:HD12	0.73	2.03	17	5
1:A:24:ILE:HG21	1:A:38:THR:CG2	0.73	2.13	16	2
1:A:61:VAL:HG12	1:A:86:THR:CB	0.73	2.13	20	8
1:A:12:LEU:HD13	1:A:48:ILE:HB	0.73	1.59	10	5
1:A:38:THR:O	1:A:39:ALA:HB3	0.73	1.82	19	17
1:A:85:ALA:HB1	1:A:104:THR:CA	0.73	2.12	10	1
1:A:112:LEU:HD23	1:A:112:LEU:N	0.73	1.99	5	6
1:A:83:ILE:HD12	1:A:97:TYR:CD2	0.73	2.19	6	7
1:A:28:LEU:C	1:A:28:LEU:HD22	0.72	2.05	9	4
1:A:104:THR:HG23	1:A:105:LYS:CD	0.72	2.14	19	1
1:A:116:LEU:HD13	1:A:116:LEU:O	0.72	1.85	2	1
1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:HD12	0.72	1.99	6	3
1:A:12:LEU:HD22	1:A:36:ALA:HB1	0.72	1.60	9	3
1:A:93:LEU:C	1:A:93:LEU:HD22	0.72	2.05	10	3
1:A:68:SER:OG	1:A:72:ALA:HB3	0.72	1.84	9	8
1:A:61:VAL:HG23	1:A:68:SER:HB3	0.71	1.60	6	4
1:A:16:ASP:OD2	1:A:63:LEU:HD23	0.71	1.85	14	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:ALA:HA	1:A:48:ILE:HD12	0.71	1.61	3	2
1:A:100:ILE:CG1	1:A:101:PRO:HD2	0.71	2.15	16	6
1:A:11:VAL:HG23	1:A:36:ALA:CB	0.71	2.16	11	1
1:A:66:GLU:N	1:A:67:PRO:CD	0.71	2.53	17	9
1:A:11:VAL:O	1:A:13:VAL:HG23	0.71	1.84	3	10
1:A:83:ILE:HG12	1:A:102:LEU:HD11	0.71	1.61	17	2
1:A:14:VAL:HG22	1:A:58:ILE:O	0.71	1.85	17	11
1:A:61:VAL:HG22	1:A:61:VAL:O	0.71	1.85	17	2
1:A:14:VAL:HG12	1:A:39:ALA:O	0.71	1.85	16	11
1:A:15:GLU:HB2	1:A:20:ILE:HD13	0.71	1.60	16	4
1:A:56:ILE:HG23	1:A:83:ILE:CB	0.70	2.16	6	15
1:A:11:VAL:HG23	1:A:11:VAL:O	0.70	1.86	10	4
1:A:12:LEU:HD23	1:A:36:ALA:HB1	0.70	1.64	3	4
1:A:11:VAL:O	1:A:11:VAL:HG13	0.70	1.85	13	2
1:A:97:TYR:HB3	1:A:100:ILE:CD1	0.70	2.17	11	8
1:A:109:ASP:HA	1:A:112:LEU:HD11	0.70	1.61	18	4
1:A:103:LEU:HD13	1:A:110:SER:OG	0.70	1.86	1	1
1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:HD23	0.70	2.00	9	4
1:A:23:LEU:HD11	1:A:107:PHE:HD1	0.70	1.45	5	1
1:A:116:LEU:C	1:A:116:LEU:HD22	0.70	2.07	12	1
1:A:76:ALA:HB1	1:A:91:LYS:HD3	0.70	1.62	16	1
1:A:28:LEU:C	1:A:28:LEU:HD13	0.70	2.07	5	5
1:A:83:ILE:CD1	1:A:100:ILE:HD13	0.70	2.17	3	2
1:A:20:ILE:HG21	1:A:39:ALA:H	0.70	1.46	10	4
1:A:12:LEU:HD13	1:A:48:ILE:CG2	0.70	2.17	4	4
1:A:83:ILE:HG13	1:A:100:ILE:HD12	0.70	1.64	4	1
1:A:100:ILE:HD13	1:A:101:PRO:CD	0.69	2.16	8	2
1:A:38:THR:O	1:A:39:ALA:CB	0.69	2.40	7	12
1:A:14:VAL:CG2	1:A:59:ILE:HG23	0.69	2.18	12	2
1:A:44:GLU:O	1:A:48:ILE:HG23	0.69	1.86	20	9
1:A:93:LEU:HD13	1:A:93:LEU:H	0.69	1.48	14	3
1:A:100:ILE:N	1:A:100:ILE:CD1	0.69	2.55	16	7
1:A:56:ILE:CD1	1:A:83:ILE:HD12	0.69	2.17	2	5
1:A:28:LEU:HD13	1:A:28:LEU:C	0.69	2.07	8	2
1:A:65:GLY:O	1:A:66:GLU:CB	0.69	2.41	14	7
1:A:56:ILE:HD11	1:A:97:TYR:CZ	0.69	2.23	12	1
1:A:86:THR:HG22	1:A:89:GLY:C	0.69	2.06	18	1
1:A:85:ALA:HB1	1:A:103:LEU:C	0.69	2.09	8	3
1:A:109:ASP:CA	1:A:112:LEU:HD21	0.68	2.17	17	3
1:A:28:LEU:HD23	1:A:33:HIS:O	0.68	1.88	9	1
1:A:108:LEU:HD13	1:A:109:ASP:H	0.68	1.45	19	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:14:VAL:HG13	1:A:40:SER:CA	0.68	2.18	7	4
1:A:84:PHE:CE2	1:A:86:THR:CG2	0.68	2.76	1	2
1:A:14:VAL:HG11	1:A:69:TYR:OH	0.68	1.88	7	1
1:A:59:ILE:CG2	1:A:72:ALA:HB2	0.68	2.18	8	5
1:A:97:TYR:O	1:A:98:SER:CB	0.68	2.41	1	17
1:A:93:LEU:HD11	1:A:102:LEU:HD23	0.68	1.64	2	2
1:A:80:VAL:HB	1:A:81:PRO:CD	0.68	2.18	3	6
1:A:80:VAL:HG13	1:A:81:PRO:HD2	0.68	1.64	4	7
1:A:93:LEU:HG	1:A:102:LEU:HD22	0.68	1.66	10	1
1:A:99:ASN:O	1:A:100:ILE:HG23	0.68	1.87	16	1
1:A:80:VAL:HG22	1:A:81:PRO:CD	0.68	2.18	18	4
1:A:93:LEU:CD1	1:A:93:LEU:N	0.68	2.57	13	5
1:A:14:VAL:O	1:A:15:GLU:CB	0.68	2.41	10	5
1:A:56:ILE:HD13	1:A:83:ILE:CD1	0.67	2.18	6	7
1:A:11:VAL:HG12	1:A:11:VAL:O	0.67	1.89	2	2
1:A:13:VAL:CG1	1:A:20:ILE:HD11	0.67	2.14	17	6
1:A:82:PHE:O	1:A:97:TYR:CD2	0.67	2.47	20	3
1:A:51:LYS:CE	1:A:54:PHE:CD1	0.67	2.78	2	1
1:A:84:PHE:CE2	1:A:86:THR:HG21	0.67	2.24	1	2
1:A:103:LEU:HD22	1:A:114:ALA:HB2	0.67	1.67	18	1
1:A:28:LEU:HD11	1:A:33:HIS:O	0.67	1.89	3	2
1:A:48:ILE:HD11	1:A:59:ILE:CD1	0.67	2.05	6	3
1:A:82:PHE:CG	1:A:83:ILE:N	0.67	2.63	8	20
1:A:84:PHE:CD1	1:A:85:ALA:N	0.67	2.63	6	16
1:A:59:ILE:O	1:A:84:PHE:CZ	0.67	2.48	12	17
1:A:90:SER:OG	1:A:102:LEU:HD12	0.67	1.90	15	1
1:A:83:ILE:CD1	1:A:100:ILE:HD11	0.67	2.19	19	1
1:A:13:VAL:HG12	1:A:58:ILE:HB	0.67	1.66	19	1
1:A:23:LEU:HD23	1:A:107:PHE:CD1	0.67	2.25	14	2
1:A:102:LEU:O	1:A:103:LEU:HD22	0.67	1.88	20	1
1:A:56:ILE:CD1	1:A:83:ILE:HD13	0.67	2.20	6	4
1:A:23:LEU:O	1:A:23:LEU:HD23	0.66	1.89	2	1
1:A:85:ALA:O	1:A:86:THR:HG23	0.66	1.91	1	1
1:A:90:SER:O	1:A:91:LYS:CB	0.66	2.44	1	2
1:A:84:PHE:CZ	1:A:86:THR:CG2	0.66	2.78	1	2
1:A:13:VAL:O	1:A:14:VAL:HG13	0.66	1.89	13	7
1:A:100:ILE:CG2	1:A:101:PRO:CD	0.66	2.73	11	4
1:A:83:ILE:CD1	1:A:97:TYR:CD2	0.66	2.79	6	6
1:A:69:TYR:CD1	1:A:69:TYR:N	0.66	2.62	6	3
1:A:86:THR:HG23	1:A:89:GLY:H	0.66	1.51	8	2
1:A:68:SER:O	1:A:69:TYR:CD1	0.66	2.49	9	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:SER:O	1:A:72:ALA:HB3	0.66	1.91	13	8
1:A:45:ALA:CB	1:A:69:TYR:CE2	0.66	2.79	18	5
1:A:13:VAL:HG13	1:A:58:ILE:CG2	0.66	2.20	17	5
1:A:65:GLY:O	1:A:66:GLU:HB3	0.66	1.91	18	3
1:A:100:ILE:H	1:A:102:LEU:HD13	0.66	1.51	17	2
1:A:80:VAL:HG13	1:A:81:PRO:CD	0.65	2.22	4	7
1:A:28:LEU:HD23	1:A:33:HIS:N	0.65	2.05	2	3
1:A:28:LEU:C	1:A:28:LEU:HD23	0.65	2.11	10	4
1:A:9:LEU:N	1:A:9:LEU:HD22	0.65	2.06	15	1
1:A:108:LEU:HD23	1:A:112:LEU:HD21	0.65	1.68	19	1
1:A:54:PHE:CZ	1:A:56:ILE:O	0.65	2.49	2	1
1:A:79:ASN:CB	1:A:82:PHE:CZ	0.65	2.80	8	5
1:A:116:LEU:O	1:A:116:LEU:HD13	0.65	1.90	7	1
1:A:12:LEU:HD13	1:A:54:PHE:HB2	0.65	1.69	19	1
1:A:12:LEU:HD13	1:A:36:ALA:HB1	0.65	1.69	13	1
1:A:82:PHE:N	1:A:97:TYR:CE1	0.65	2.64	19	6
1:A:81:PRO:O	1:A:82:PHE:HB3	0.65	1.92	13	20
1:A:48:ILE:O	1:A:54:PHE:CE2	0.65	2.50	20	7
1:A:109:ASP:HA	1:A:112:LEU:HD12	0.65	1.68	1	1
1:A:99:ASN:C	1:A:100:ILE:HD13	0.65	2.11	14	2
1:A:13:VAL:C	1:A:20:ILE:HD11	0.65	2.12	4	3
1:A:85:ALA:O	1:A:86:THR:CG2	0.64	2.45	1	1
1:A:97:TYR:CD1	1:A:100:ILE:HD11	0.64	2.27	4	1
1:A:82:PHE:CE1	1:A:93:LEU:HD12	0.64	2.27	11	4
1:A:110:SER:O	1:A:114:ALA:N	0.64	2.30	19	4
1:A:100:ILE:HD12	1:A:100:ILE:H	0.64	1.52	3	4
1:A:100:ILE:N	1:A:100:ILE:HD13	0.64	2.07	14	1
1:A:86:THR:OG1	1:A:88:TYR:CE1	0.64	2.51	1	2
1:A:80:VAL:O	1:A:82:PHE:CD1	0.64	2.51	1	16
1:A:80:VAL:CG2	1:A:81:PRO:HD2	0.64	2.20	18	11
1:A:61:VAL:O	1:A:61:VAL:HG13	0.64	1.92	16	4
1:A:9:LEU:HD12	1:A:55:ASP:CG	0.64	2.13	12	1
1:A:80:VAL:CG1	1:A:81:PRO:CD	0.64	2.74	20	4
1:A:68:SER:O	1:A:69:TYR:CD2	0.64	2.51	3	17
1:A:100:ILE:HB	1:A:101:PRO:HD3	0.64	1.68	20	9
1:A:93:LEU:HD22	1:A:93:LEU:O	0.64	1.93	13	3
1:A:101:PRO:O	1:A:102:LEU:HD12	0.64	1.92	2	2
1:A:82:PHE:CD2	1:A:83:ILE:N	0.64	2.66	17	2
1:A:100:ILE:CB	1:A:101:PRO:HD2	0.64	2.23	18	11
1:A:83:ILE:HG13	1:A:100:ILE:HD11	0.64	1.70	18	1
1:A:83:ILE:HD11	1:A:100:ILE:HD11	0.64	1.69	19	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:THR:HG23	1:A:90:SER:N	0.63	2.08	5	1
1:A:47:ASP:O	1:A:51:LYS:CG	0.63	2.47	16	2
1:A:45:ALA:HB1	1:A:69:TYR:CE2	0.63	2.28	12	4
1:A:28:LEU:HD12	1:A:28:LEU:C	0.63	2.14	14	2
1:A:10:ARG:NE	1:A:10:ARG:HA	0.63	2.06	7	1
1:A:82:PHE:C	1:A:82:PHE:CD1	0.63	2.71	14	12
1:A:103:LEU:HD11	1:A:110:SER:HB2	0.63	1.70	19	1
1:A:83:ILE:CG1	1:A:100:ILE:HD11	0.63	2.24	19	1
1:A:86:THR:HG23	1:A:90:SER:H	0.63	1.54	5	3
1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CD1	0.63	2.67	6	3
1:A:34:GLU:O	1:A:35:VAL:HG13	0.63	1.94	7	1
1:A:85:ALA:CB	1:A:103:LEU:HD12	0.63	2.24	8	1
1:A:90:SER:HB2	1:A:102:LEU:HD13	0.63	1.70	19	1
1:A:95:THR:HG22	1:A:97:TYR:H	0.63	1.53	5	1
1:A:103:LEU:HD13	1:A:105:LYS:HD3	0.63	1.69	14	1
1:A:83:ILE:HG21	1:A:101:PRO:HG2	0.63	1.70	20	1
1:A:14:VAL:HG13	1:A:39:ALA:O	0.63	1.92	19	1
1:A:100:ILE:CB	1:A:101:PRO:CD	0.62	2.77	10	17
1:A:93:LEU:HD21	1:A:102:LEU:HD21	0.62	1.69	2	1
1:A:79:ASN:CG	1:A:82:PHE:CZ	0.62	2.73	20	2
1:A:97:TYR:C	1:A:100:ILE:HD11	0.62	2.15	5	1
1:A:11:VAL:HG23	1:A:33:HIS:CD2	0.62	2.29	16	2
1:A:66:GLU:N	1:A:67:PRO:HD2	0.62	2.10	16	2
1:A:90:SER:O	1:A:91:LYS:CG	0.62	2.47	1	1
1:A:68:SER:OG	1:A:72:ALA:CB	0.62	2.47	15	3
1:A:89:GLY:O	1:A:90:SER:CB	0.62	2.46	16	6
1:A:14:VAL:O	1:A:15:GLU:HB2	0.62	1.93	11	2
1:A:57:ALA:O	1:A:83:ILE:O	0.62	2.17	9	20
1:A:11:VAL:O	1:A:11:VAL:HG23	0.62	1.94	11	4
1:A:102:LEU:O	1:A:103:LEU:CB	0.62	2.47	16	13
1:A:82:PHE:CE1	1:A:93:LEU:CD1	0.62	2.82	19	3
1:A:17:GLU:O	1:A:21:ALA:HB2	0.62	1.94	20	2
1:A:93:LEU:HD13	1:A:93:LEU:N	0.62	2.09	10	2
1:A:15:GLU:O	1:A:16:ASP:CB	0.62	2.45	6	4
1:A:79:ASN:HB3	1:A:82:PHE:CZ	0.62	2.29	18	5
1:A:66:GLU:N	1:A:67:PRO:HD3	0.62	2.10	17	12
1:A:75:LEU:O	1:A:79:ASN:N	0.62	2.33	3	5
1:A:13:VAL:HG13	1:A:58:ILE:HG21	0.62	1.72	17	1
1:A:109:ASP:O	1:A:112:LEU:HD21	0.62	1.95	20	2
1:A:101:PRO:HG3	1:A:113:GLU:O	0.62	1.93	19	1
1:A:79:ASN:ND2	1:A:82:PHE:CZ	0.62	2.67	20	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:SER:O	1:A:69:TYR:O	0.62	2.17	9	20
1:A:54:PHE:CZ	1:A:56:ILE:C	0.62	2.73	2	1
1:A:28:LEU:C	1:A:28:LEU:HD12	0.62	2.15	16	1
1:A:109:ASP:N	1:A:112:LEU:HD21	0.62	2.10	18	1
1:A:97:TYR:CG	1:A:100:ILE:HD11	0.62	2.30	4	1
1:A:103:LEU:HD12	1:A:104:THR:N	0.62	2.10	14	3
1:A:67:PRO:O	1:A:69:TYR:CD2	0.62	2.52	9	1
1:A:100:ILE:HD12	1:A:101:PRO:CD	0.62	2.25	20	1
1:A:45:ALA:HB2	1:A:69:TYR:CE2	0.62	2.29	14	2
1:A:108:LEU:CD1	1:A:112:LEU:HD11	0.61	2.25	2	1
1:A:103:LEU:HD12	1:A:104:THR:O	0.61	1.95	16	3
1:A:20:ILE:HG23	1:A:39:ALA:CA	0.61	2.24	6	2
1:A:15:GLU:CG	1:A:20:ILE:HD13	0.61	2.24	13	2
1:A:58:ILE:N	1:A:58:ILE:CD1	0.61	2.63	6	1
1:A:59:ILE:HG22	1:A:68:SER:CB	0.61	2.25	5	3
1:A:82:PHE:CD1	1:A:82:PHE:C	0.61	2.73	4	5
1:A:56:ILE:HD13	1:A:82:PHE:HA	0.61	1.71	12	1
1:A:14:VAL:CB	1:A:39:ALA:O	0.61	2.48	1	16
1:A:67:PRO:O	1:A:69:TYR:CE1	0.61	2.53	11	10
1:A:97:TYR:CB	1:A:100:ILE:HD11	0.61	2.26	4	3
1:A:16:ASP:O	1:A:20:ILE:HG22	0.61	1.95	19	4
1:A:84:PHE:O	1:A:102:LEU:HD13	0.61	1.96	13	2
1:A:83:ILE:HD12	1:A:97:TYR:CE2	0.61	2.30	5	3
1:A:46:LEU:HD23	1:A:46:LEU:C	0.61	2.15	11	2
1:A:57:ALA:O	1:A:58:ILE:HD12	0.61	1.95	17	2
1:A:80:VAL:CB	1:A:81:PRO:CD	0.61	2.77	17	12
1:A:100:ILE:O	1:A:102:LEU:HD23	0.61	1.95	4	2
1:A:98:SER:O	1:A:100:ILE:N	0.61	2.34	8	5
1:A:100:ILE:CD1	1:A:101:PRO:CD	0.61	2.78	7	1
1:A:107:PHE:O	1:A:108:LEU:CB	0.61	2.49	8	5
1:A:86:THR:O	1:A:88:TYR:N	0.61	2.33	13	8
1:A:23:LEU:HD21	1:A:107:PHE:CB	0.61	2.26	10	1
1:A:56:ILE:HD11	1:A:100:ILE:CD1	0.61	2.25	4	2
1:A:99:ASN:O	1:A:100:ILE:CG2	0.61	2.49	16	1
1:A:11:VAL:HG13	1:A:11:VAL:O	0.60	1.96	7	1
1:A:15:GLU:CG	1:A:20:ILE:CD1	0.60	2.79	6	2
1:A:14:VAL:CG2	1:A:39:ALA:O	0.60	2.48	19	3
1:A:88:TYR:CD1	1:A:88:TYR:C	0.60	2.70	16	4
1:A:13:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HD12	0.60	1.73	13	2
1:A:88:TYR:C	1:A:88:TYR:CD1	0.60	2.75	2	4
1:A:16:ASP:CG	1:A:63:LEU:HD23	0.60	2.15	14	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:68:SER:C	1:A:69:TYR:CG	0.60	2.73	19	20
1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CD1	0.60	2.69	13	13
1:A:80:VAL:CG1	1:A:81:PRO:HD2	0.60	2.27	8	8
1:A:104:THR:O	1:A:105:LYS:CD	0.60	2.48	5	1
1:A:80:VAL:HB	1:A:81:PRO:HD2	0.60	1.73	20	11
1:A:83:ILE:CG1	1:A:100:ILE:HD12	0.60	2.26	4	1
1:A:31:LEU:HD23	1:A:33:HIS:CE1	0.60	2.32	11	1
1:A:46:LEU:O	1:A:50:ARG:CD	0.60	2.49	14	1
1:A:93:LEU:CD2	1:A:99:ASN:ND2	0.60	2.64	14	1
1:A:101:PRO:HB2	1:A:114:ALA:CA	0.60	2.26	19	2
1:A:51:LYS:HD2	1:A:52:GLY:N	0.60	2.12	2	1
1:A:107:PHE:CD1	1:A:107:PHE:N	0.60	2.67	8	2
1:A:105:LYS:C	1:A:109:ASP:HB3	0.60	2.16	19	1
1:A:100:ILE:CG2	1:A:101:PRO:HD3	0.60	2.27	1	1
1:A:100:ILE:CD1	1:A:100:ILE:N	0.59	2.58	15	7
1:A:12:LEU:CD2	1:A:12:LEU:N	0.59	2.65	11	4
1:A:54:PHE:CD1	1:A:54:PHE:O	0.59	2.55	7	3
1:A:102:LEU:CD2	1:A:102:LEU:N	0.59	2.65	12	2
1:A:108:LEU:HD12	1:A:109:ASP:OD1	0.59	1.98	12	1
1:A:63:LEU:HG	1:A:63:LEU:O	0.59	1.97	19	1
1:A:55:ASP:O	1:A:97:TYR:CE2	0.59	2.56	20	1
1:A:108:LEU:O	1:A:109:ASP:C	0.59	2.41	19	11
1:A:102:LEU:CD1	1:A:102:LEU:O	0.59	2.51	3	1
1:A:103:LEU:HD21	1:A:110:SER:CB	0.59	2.27	15	2
1:A:12:LEU:HD12	1:A:54:PHE:CD2	0.59	2.32	5	2
1:A:11:VAL:CG2	1:A:36:ALA:HB2	0.59	2.27	11	1
1:A:23:LEU:HD21	1:A:111:GLU:HG2	0.59	1.73	14	1
1:A:13:VAL:HG22	1:A:37:ALA:O	0.59	1.97	16	1
1:A:12:LEU:HD23	1:A:54:PHE:HB2	0.59	1.72	17	2
1:A:105:LYS:HB3	1:A:109:ASP:CB	0.59	2.27	19	1
1:A:56:ILE:HG22	1:A:57:ALA:N	0.59	2.13	8	13
1:A:84:PHE:CE1	1:A:85:ALA:O	0.59	2.56	16	7
1:A:76:ALA:CB	1:A:91:LYS:CE	0.59	2.81	3	1
1:A:71:VAL:CG2	1:A:72:ALA:N	0.59	2.65	9	7
1:A:14:VAL:HG22	1:A:59:ILE:CG1	0.59	2.27	4	1
1:A:95:THR:HG22	1:A:99:ASN:ND2	0.59	2.13	7	1
1:A:20:ILE:CG2	1:A:39:ALA:HA	0.59	2.28	6	8
1:A:93:LEU:C	1:A:93:LEU:HD23	0.59	2.16	11	2
1:A:10:ARG:O	1:A:55:ASP:HB2	0.59	1.96	1	6
1:A:88:TYR:CE1	1:A:90:SER:O	0.59	2.55	1	1
1:A:14:VAL:CG1	1:A:39:ALA:O	0.59	2.51	10	12

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:65:GLY:O	1:A:66:GLU:CG	0.59	2.51	8	5
1:A:105:LYS:HB3	1:A:108:LEU:HD21	0.59	1.75	3	1
1:A:12:LEU:CD2	1:A:36:ALA:HB1	0.59	2.28	3	2
1:A:51:LYS:HD3	1:A:54:PHE:CD1	0.59	2.33	2	1
1:A:93:LEU:HD22	1:A:93:LEU:N	0.59	2.13	9	1
1:A:58:ILE:N	1:A:58:ILE:HD12	0.59	2.13	11	2
1:A:101:PRO:HG2	1:A:114:ALA:HA	0.59	1.73	19	1
1:A:103:LEU:HD11	1:A:110:SER:CB	0.59	2.27	19	1
1:A:85:ALA:CB	1:A:103:LEU:HB3	0.59	2.28	1	1
1:A:113:GLU:O	1:A:115:VAL:N	0.59	2.36	13	3
1:A:14:VAL:HB	1:A:39:ALA:O	0.58	1.97	2	10
1:A:80:VAL:CB	1:A:81:PRO:HD2	0.58	2.28	8	12
1:A:59:ILE:HG22	1:A:68:SER:HA	0.58	1.75	3	4
1:A:93:LEU:HD23	1:A:93:LEU:C	0.58	2.18	5	3
1:A:11:VAL:O	1:A:13:VAL:HG22	0.58	1.97	6	1
1:A:85:ALA:CA	1:A:103:LEU:O	0.58	2.51	3	5
1:A:99:ASN:ND2	1:A:102:LEU:HD13	0.58	2.13	20	1
1:A:90:SER:O	1:A:91:LYS:HB3	0.58	1.96	8	3
1:A:56:ILE:CG2	1:A:83:ILE:CG2	0.58	2.81	18	9
1:A:101:PRO:HB3	1:A:114:ALA:CB	0.58	2.26	20	4
1:A:55:ASP:O	1:A:97:TYR:CZ	0.58	2.56	4	1
1:A:15:GLU:CG	1:A:60:ASP:CB	0.58	2.81	20	2
1:A:54:PHE:CZ	1:A:57:ALA:HB2	0.58	2.32	16	7
1:A:72:ALA:HB1	1:A:84:PHE:CZ	0.58	2.33	19	6
1:A:95:THR:HG22	1:A:97:TYR:HB2	0.58	1.75	11	1
1:A:78:ARG:O	1:A:79:ASN:O	0.58	2.21	7	14
1:A:76:ALA:CB	1:A:91:LYS:NZ	0.58	2.67	3	1
1:A:105:LYS:CD	1:A:105:LYS:N	0.58	2.67	15	2
1:A:54:PHE:CD1	1:A:56:ILE:O	0.58	2.56	14	6
1:A:54:PHE:CD2	1:A:56:ILE:O	0.58	2.55	7	2
1:A:31:LEU:HD23	1:A:33:HIS:HE1	0.58	1.57	11	1
1:A:63:LEU:O	1:A:64:ASP:CB	0.58	2.51	20	15
1:A:48:ILE:HD13	1:A:49:ALA:N	0.58	2.14	8	4
1:A:54:PHE:HE2	1:A:57:ALA:HB2	0.58	1.56	7	3
1:A:100:ILE:HD13	1:A:101:PRO:HD3	0.58	1.74	7	1
1:A:97:TYR:O	1:A:100:ILE:HD11	0.58	1.98	17	2
1:A:23:LEU:HD22	1:A:23:LEU:C	0.58	2.19	17	1
1:A:100:ILE:HG12	1:A:101:PRO:HD2	0.58	1.74	14	2
1:A:12:LEU:HD22	1:A:48:ILE:HB	0.58	1.76	18	1
1:A:16:ASP:O	1:A:18:SER:N	0.58	2.37	8	2
1:A:100:ILE:CG2	1:A:101:PRO:HD2	0.58	2.29	11	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:GLU:CG	1:A:16:ASP:N	0.57	2.67	1	4
1:A:68:SER:C	1:A:69:TYR:CD2	0.57	2.78	1	11
1:A:93:LEU:O	1:A:93:LEU:CD1	0.57	2.51	2	1
1:A:93:LEU:HD21	1:A:102:LEU:HD12	0.57	1.76	12	1
1:A:93:LEU:CD2	1:A:93:LEU:N	0.57	2.67	6	1
1:A:69:TYR:HB2	1:A:71:VAL:HG22	0.57	1.75	20	6
1:A:65:GLY:O	1:A:66:GLU:C	0.57	2.42	19	7
1:A:111:GLU:O	1:A:114:ALA:HB3	0.57	1.99	14	6
1:A:100:ILE:HD12	1:A:101:PRO:HD2	0.57	1.76	20	2
1:A:91:LYS:CG	1:A:91:LYS:O	0.57	2.52	10	1
1:A:112:LEU:C	1:A:112:LEU:HD12	0.57	2.17	20	1
1:A:102:LEU:O	1:A:103:LEU:HB2	0.57	2.00	11	4
1:A:28:LEU:CD2	1:A:33:HIS:N	0.57	2.67	8	1
1:A:48:ILE:O	1:A:54:PHE:CE1	0.57	2.57	9	4
1:A:23:LEU:HD11	1:A:107:PHE:HB2	0.57	1.75	10	1
1:A:58:ILE:CD1	1:A:58:ILE:N	0.57	2.67	14	2
1:A:97:TYR:O	1:A:100:ILE:CG2	0.57	2.52	19	2
1:A:15:GLU:HB3	1:A:20:ILE:HD13	0.57	1.75	12	5
1:A:84:PHE:O	1:A:102:LEU:HB2	0.57	2.00	5	3
1:A:102:LEU:O	1:A:103:LEU:CD2	0.57	2.53	20	5
1:A:93:LEU:CG	1:A:102:LEU:HD22	0.57	2.29	10	1
1:A:108:LEU:HD22	1:A:108:LEU:N	0.57	2.15	6	1
1:A:85:ALA:CB	1:A:103:LEU:O	0.57	2.53	15	14
1:A:76:ALA:HB1	1:A:91:LYS:CE	0.57	2.30	3	2
1:A:71:VAL:HG22	1:A:72:ALA:N	0.57	2.15	8	5
1:A:106:PRO:CD	1:A:110:SER:OG	0.57	2.52	11	1
1:A:60:ASP:OD2	1:A:63:LEU:HD13	0.57	1.98	18	2
1:A:12:LEU:HD13	1:A:48:ILE:CB	0.57	2.30	5	2
1:A:93:LEU:O	1:A:93:LEU:CD2	0.57	2.52	9	5
1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CD2	0.57	2.67	16	3
1:A:16:ASP:OD1	1:A:63:LEU:HD23	0.57	1.99	14	1
1:A:54:PHE:C	1:A:54:PHE:CD1	0.57	2.77	2	3
1:A:80:VAL:CG1	1:A:81:PRO:HD3	0.57	2.30	3	1
1:A:14:VAL:HG13	1:A:37:ALA:HB1	0.57	1.74	14	4
1:A:45:ALA:HB1	1:A:69:TYR:CZ	0.57	2.34	4	1
1:A:61:VAL:HA	1:A:66:GLU:CB	0.57	2.30	9	1
1:A:13:VAL:N	1:A:37:ALA:HB3	0.57	2.15	4	9
1:A:93:LEU:O	1:A:99:ASN:ND2	0.57	2.37	6	4
1:A:61:VAL:O	1:A:61:VAL:CG1	0.57	2.53	9	5
1:A:56:ILE:HD11	1:A:97:TYR:CE2	0.57	2.35	12	2
1:A:105:LYS:CB	1:A:109:ASP:CB	0.56	2.82	19	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:110:SER:O	1:A:112:LEU:N	0.56	2.38	19	2
1:A:61:VAL:HG23	1:A:68:SER:CB	0.56	2.30	2	3
1:A:12:LEU:CD1	1:A:48:ILE:HG22	0.56	2.30	15	2
1:A:45:ALA:O	1:A:48:ILE:CD1	0.56	2.53	3	2
1:A:45:ALA:CB	1:A:69:TYR:CZ	0.56	2.88	4	3
1:A:93:LEU:C	1:A:93:LEU:CD2	0.56	2.73	15	5
1:A:24:ILE:CD1	1:A:37:ALA:O	0.56	2.53	19	8
1:A:101:PRO:CB	1:A:114:ALA:HB2	0.56	2.25	4	2
1:A:88:TYR:CD1	1:A:88:TYR:N	0.56	2.73	18	1
1:A:24:ILE:CG1	1:A:25:GLU:N	0.56	2.68	6	1
1:A:71:VAL:O	1:A:74:ILE:N	0.56	2.38	7	14
1:A:10:ARG:N	1:A:10:ARG:CD	0.56	2.68	19	3
1:A:75:LEU:O	1:A:79:ASN:ND2	0.56	2.39	6	2
1:A:69:TYR:HB2	1:A:71:VAL:HG13	0.56	1.77	8	3
1:A:79:ASN:O	1:A:95:THR:HG22	0.56	2.00	14	1
1:A:83:ILE:CD1	1:A:102:LEU:HD22	0.56	2.31	15	1
1:A:109:ASP:O	1:A:112:LEU:CD2	0.56	2.53	20	2
1:A:14:VAL:CG2	1:A:58:ILE:O	0.56	2.54	15	10
1:A:108:LEU:O	1:A:110:SER:N	0.56	2.38	18	9
1:A:23:LEU:HD11	1:A:107:PHE:CG	0.56	2.35	10	1
1:A:102:LEU:HD13	1:A:103:LEU:HD13	0.56	1.76	11	1
1:A:107:PHE:N	1:A:110:SER:OG	0.56	2.39	11	1
1:A:113:GLU:CG	1:A:114:ALA:N	0.56	2.68	16	1
1:A:61:VAL:N	1:A:86:THR:OG1	0.56	2.38	4	2
1:A:106:PRO:O	1:A:110:SER:CB	0.56	2.53	7	1
1:A:23:LEU:HD21	1:A:107:PHE:CE1	0.56	2.36	1	1
1:A:71:VAL:O	1:A:72:ALA:C	0.56	2.43	13	19
1:A:59:ILE:HB	1:A:84:PHE:CE2	0.56	2.35	3	12
1:A:13:VAL:CB	1:A:24:ILE:HD11	0.56	2.31	5	1
1:A:89:GLY:O	1:A:91:LYS:N	0.56	2.39	10	1
1:A:106:PRO:N	1:A:110:SER:OG	0.56	2.39	11	1
1:A:111:GLU:CG	1:A:112:LEU:N	0.56	2.68	13	1
1:A:89:GLY:O	1:A:90:SER:C	0.56	2.43	2	3
1:A:11:VAL:C	1:A:36:ALA:HB3	0.56	2.21	3	4
1:A:25:GLU:HG2	1:A:35:VAL:HG11	0.56	1.78	17	1
1:A:32:GLY:O	1:A:33:HIS:O	0.56	2.24	7	15
1:A:75:LEU:O	1:A:79:ASN:CB	0.56	2.54	8	4
1:A:84:PHE:O	1:A:102:LEU:CB	0.56	2.54	11	1
1:A:48:ILE:HB	1:A:54:PHE:CE2	0.56	2.35	2	1
1:A:101:PRO:HB3	1:A:114:ALA:HA	0.56	1.78	11	8
1:A:11:VAL:HG12	1:A:13:VAL:HG22	0.55	1.77	1	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:56:ILE:HG23	1:A:83:ILE:CG2	0.55	2.31	4	8
1:A:24:ILE:CG2	1:A:25:GLU:N	0.55	2.69	2	7
1:A:76:ALA:O	1:A:79:ASN:ND2	0.55	2.38	2	10
1:A:80:VAL:CB	1:A:81:PRO:HD3	0.55	2.31	3	1
1:A:9:LEU:HD22	1:A:9:LEU:N	0.55	2.16	10	2
1:A:101:PRO:O	1:A:102:LEU:CD1	0.55	2.54	9	1
1:A:83:ILE:CG1	1:A:102:LEU:HD11	0.55	2.31	6	3
1:A:12:LEU:HD22	1:A:54:PHE:HB3	0.55	1.75	19	1
1:A:103:LEU:CD1	1:A:104:THR:O	0.55	2.54	2	2
1:A:24:ILE:CG2	1:A:38:THR:HG22	0.55	2.21	3	1
1:A:61:VAL:O	1:A:66:GLU:CG	0.55	2.54	10	1
1:A:24:ILE:HG12	1:A:35:VAL:HG12	0.55	1.77	17	1
1:A:34:GLU:O	1:A:35:VAL:CG2	0.55	2.53	1	1
1:A:106:PRO:O	1:A:107:PHE:CB	0.55	2.55	9	2
1:A:71:VAL:HG23	1:A:72:ALA:H	0.55	1.61	13	4
1:A:92:GLY:O	1:A:93:LEU:C	0.55	2.45	17	11
1:A:56:ILE:CD1	1:A:100:ILE:HD12	0.55	2.32	4	1
1:A:101:PRO:HB3	1:A:114:ALA:N	0.55	2.17	5	5
1:A:93:LEU:HD21	1:A:102:LEU:HD22	0.55	1.78	6	1
1:A:34:GLU:O	1:A:35:VAL:O	0.55	2.24	1	8
1:A:46:LEU:C	1:A:46:LEU:HD23	0.55	2.22	1	2
1:A:32:GLY:O	1:A:33:HIS:C	0.55	2.44	5	14
1:A:93:LEU:N	1:A:93:LEU:HD13	0.55	2.16	12	3
1:A:109:ASP:O	1:A:112:LEU:CG	0.55	2.54	17	2
1:A:101:PRO:CG	1:A:114:ALA:HA	0.55	2.32	19	10
1:A:61:VAL:HG13	1:A:61:VAL:O	0.55	2.01	15	5
1:A:69:TYR:N	1:A:69:TYR:CD1	0.55	2.74	10	1
1:A:82:PHE:CE1	1:A:95:THR:CG2	0.55	2.89	14	1
1:A:102:LEU:N	1:A:102:LEU:CD1	0.55	2.70	17	2
1:A:63:LEU:CD1	1:A:64:ASP:OD2	0.55	2.55	19	1
1:A:13:VAL:C	1:A:14:VAL:HG13	0.55	2.21	17	6
1:A:61:VAL:CG1	1:A:86:THR:OG1	0.55	2.55	17	8
1:A:80:VAL:HB	1:A:81:PRO:HD3	0.55	1.79	3	2
1:A:79:ASN:CG	1:A:82:PHE:CE2	0.55	2.80	20	2
1:A:102:LEU:O	1:A:103:LEU:HB3	0.55	2.01	16	10
1:A:80:VAL:HG12	1:A:81:PRO:HD2	0.55	1.78	8	4
1:A:101:PRO:HB2	1:A:114:ALA:N	0.55	2.16	19	1
1:A:15:GLU:CB	1:A:60:ASP:OD2	0.55	2.54	6	1
1:A:54:PHE:HZ	1:A:57:ALA:HB2	0.55	1.61	2	1
1:A:15:GLU:CG	1:A:60:ASP:HB2	0.55	2.32	20	2
1:A:107:PHE:O	1:A:108:LEU:C	0.55	2.45	12	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:66:GLU:O	1:A:66:GLU:CG	0.55	2.54	8	4
1:A:11:VAL:HG23	1:A:36:ALA:HB1	0.55	1.78	11	1
1:A:86:THR:CG2	1:A:88:TYR:CZ	0.55	2.87	15	3
1:A:102:LEU:HD23	1:A:102:LEU:N	0.55	2.16	1	2
1:A:76:ALA:HA	1:A:79:ASN:ND2	0.55	2.17	9	12
1:A:24:ILE:HG23	1:A:25:GLU:N	0.55	2.16	2	9
1:A:103:LEU:HD12	1:A:103:LEU:C	0.55	2.22	15	2
1:A:55:ASP:O	1:A:56:ILE:CG1	0.55	2.54	20	3
1:A:11:VAL:HG22	1:A:13:VAL:CG2	0.55	2.32	7	2
1:A:10:ARG:O	1:A:55:ASP:CB	0.55	2.55	11	3
1:A:94:ASP:O	1:A:95:THR:CB	0.55	2.55	11	1
1:A:15:GLU:OE2	1:A:20:ILE:CD1	0.55	2.55	13	1
1:A:61:VAL:O	1:A:66:GLU:CB	0.55	2.54	5	4
1:A:54:PHE:CE2	1:A:56:ILE:O	0.55	2.60	5	3
1:A:99:ASN:C	1:A:100:ILE:HG23	0.55	2.21	16	1
1:A:61:VAL:CG2	1:A:68:SER:OG	0.54	2.54	1	4
1:A:102:LEU:C	1:A:103:LEU:HG	0.54	2.22	2	1
1:A:90:SER:O	1:A:92:GLY:N	0.54	2.40	4	5
1:A:14:VAL:CA	1:A:39:ALA:O	0.54	2.55	19	9
1:A:81:PRO:HA	1:A:95:THR:HG23	0.54	1.79	5	1
1:A:15:GLU:O	1:A:17:GLU:N	0.54	2.40	9	1
1:A:68:SER:C	1:A:69:TYR:CD1	0.54	2.80	9	2
1:A:31:LEU:HD22	1:A:33:HIS:HE1	0.54	1.61	15	1
1:A:59:ILE:HG22	1:A:68:SER:OG	0.54	2.03	15	2
1:A:86:THR:HG21	1:A:88:TYR:CE2	0.54	2.37	17	2
1:A:83:ILE:HD11	1:A:100:ILE:CG1	0.54	2.31	18	1
1:A:54:PHE:CD1	1:A:54:PHE:C	0.54	2.80	16	6
1:A:14:VAL:HA	1:A:39:ALA:O	0.54	2.03	17	13
1:A:15:GLU:HG3	1:A:60:ASP:CB	0.54	2.32	20	4
1:A:11:VAL:O	1:A:36:ALA:CB	0.54	2.56	14	8
1:A:87:GLY:O	1:A:104:THR:HG21	0.54	2.02	7	1
1:A:14:VAL:O	1:A:15:GLU:CG	0.54	2.55	8	1
1:A:106:PRO:O	1:A:108:LEU:CD2	0.54	2.55	9	1
1:A:12:LEU:HD13	1:A:37:ALA:HB2	0.54	1.80	9	1
1:A:88:TYR:CE1	1:A:91:LYS:N	0.54	2.75	13	1
1:A:15:GLU:HG3	1:A:20:ILE:HG21	0.54	1.79	14	1
1:A:110:SER:O	1:A:113:GLU:CG	0.54	2.56	17	1
1:A:107:PHE:O	1:A:110:SER:CB	0.54	2.55	2	2
1:A:88:TYR:CE2	1:A:90:SER:C	0.54	2.80	16	4
1:A:15:GLU:HG2	1:A:60:ASP:CB	0.54	2.32	10	2
1:A:108:LEU:N	1:A:108:LEU:HD22	0.54	2.18	13	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:ASP:N	1:A:16:ASP:OD1	0.54	2.40	14	1
1:A:76:ALA:HB1	1:A:91:LYS:NZ	0.54	2.16	15	1
1:A:9:LEU:O	1:A:34:GLU:CB	0.54	2.56	3	1
1:A:72:ALA:HB1	1:A:84:PHE:HE2	0.54	1.62	16	6
1:A:20:ILE:CG2	1:A:39:ALA:N	0.54	2.63	10	4
1:A:88:TYR:N	1:A:104:THR:OG1	0.54	2.40	10	1
1:A:14:VAL:CG2	1:A:59:ILE:CG1	0.54	2.84	13	1
1:A:9:LEU:CD2	1:A:9:LEU:N	0.54	2.70	15	2
1:A:99:ASN:ND2	1:A:102:LEU:CD1	0.54	2.71	20	1
1:A:75:LEU:O	1:A:79:ASN:CA	0.54	2.56	16	4
1:A:51:LYS:HE3	1:A:54:PHE:CE1	0.54	2.38	2	1
1:A:14:VAL:HG22	1:A:59:ILE:HG12	0.54	1.78	2	1
1:A:34:GLU:O	1:A:35:VAL:C	0.54	2.45	19	4
1:A:93:LEU:HD21	1:A:102:LEU:CD1	0.54	2.33	12	1
1:A:85:ALA:HB1	1:A:103:LEU:HB3	0.54	1.79	1	1
1:A:59:ILE:O	1:A:68:SER:OG	0.54	2.26	20	3
1:A:41:ARG:O	1:A:45:ALA:CB	0.54	2.56	4	3
1:A:10:ARG:NH2	1:A:11:VAL:HG12	0.54	2.17	7	1
1:A:11:VAL:C	1:A:36:ALA:HB1	0.54	2.23	20	3
1:A:90:SER:OG	1:A:103:LEU:HD12	0.54	2.02	12	1
1:A:86:THR:O	1:A:104:THR:CG2	0.54	2.55	18	1
1:A:13:VAL:O	1:A:14:VAL:CG1	0.54	2.55	13	5
1:A:102:LEU:HG	1:A:102:LEU:O	0.54	2.03	20	3
1:A:47:ASP:O	1:A:51:LYS:CB	0.54	2.56	17	10
1:A:20:ILE:HG23	1:A:38:THR:OG1	0.54	2.03	7	1
1:A:24:ILE:HD12	1:A:37:ALA:O	0.54	2.02	19	3
1:A:83:ILE:CD1	1:A:102:LEU:CD2	0.54	2.85	15	1
1:A:12:LEU:HD11	1:A:54:PHE:CG	0.54	2.38	1	1
1:A:86:THR:N	1:A:103:LEU:O	0.54	2.41	19	5
1:A:13:VAL:HG13	1:A:58:ILE:HD13	0.54	1.79	4	1
1:A:14:VAL:CG1	1:A:37:ALA:HB1	0.54	2.33	14	4
1:A:16:ASP:OD2	1:A:19:MET:CB	0.54	2.56	12	1
1:A:13:VAL:HG23	1:A:37:ALA:O	0.54	2.03	19	2
1:A:108:LEU:C	1:A:108:LEU:CD2	0.54	2.69	19	1
1:A:97:TYR:O	1:A:100:ILE:CG1	0.54	2.56	5	2
1:A:20:ILE:O	1:A:24:ILE:CG2	0.54	2.56	5	1
1:A:47:ASP:O	1:A:51:LYS:N	0.54	2.41	7	4
1:A:105:LYS:NZ	1:A:108:LEU:HD22	0.54	2.18	8	1
1:A:24:ILE:HD13	1:A:38:THR:HG22	0.54	1.80	16	1
1:A:85:ALA:C	1:A:86:THR:HG23	0.53	2.24	1	1
1:A:59:ILE:CG2	1:A:69:TYR:CE2	0.53	2.88	3	6

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:106:PRO:O	1:A:108:LEU:N	0.53	2.41	2	1
1:A:15:GLU:O	1:A:67:PRO:CG	0.53	2.56	7	1
1:A:83:ILE:HG12	1:A:100:ILE:HD11	0.53	1.80	19	1
1:A:105:LYS:HG3	1:A:106:PRO:CD	0.53	2.33	5	1
1:A:9:LEU:HD13	1:A:55:ASP:OD1	0.53	2.02	11	1
1:A:102:LEU:HG	1:A:103:LEU:N	0.53	2.19	12	1
1:A:108:LEU:HD23	1:A:108:LEU:H	0.53	1.63	12	1
1:A:13:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HD12	0.53	1.79	14	1
1:A:34:GLU:O	1:A:35:VAL:CG1	0.53	2.54	6	1
1:A:15:GLU:HG3	1:A:20:ILE:CD1	0.53	2.33	6	2
1:A:99:ASN:HA	1:A:102:LEU:CD2	0.53	2.33	5	1
1:A:88:TYR:CE2	1:A:90:SER:O	0.53	2.61	16	2
1:A:101:PRO:HB3	1:A:114:ALA:CA	0.53	2.33	17	10
1:A:28:LEU:CD1	1:A:33:HIS:O	0.53	2.55	3	2
1:A:9:LEU:HB2	1:A:33:HIS:CD2	0.53	2.38	20	7
1:A:61:VAL:HG22	1:A:66:GLU:HG3	0.53	1.80	7	1
1:A:89:GLY:CA	1:A:103:LEU:HA	0.53	2.34	9	2
1:A:31:LEU:HD12	1:A:31:LEU:N	0.53	2.18	15	1
1:A:104:THR:HG23	1:A:104:THR:O	0.53	2.03	6	2
1:A:23:LEU:HD13	1:A:24:ILE:N	0.53	2.19	17	2
1:A:76:ALA:O	1:A:91:LYS:CE	0.53	2.56	9	1
1:A:107:PHE:HB3	1:A:108:LEU:HD22	0.53	1.79	13	1
1:A:59:ILE:CG1	1:A:84:PHE:CE2	0.53	2.91	16	1
1:A:63:LEU:O	1:A:65:GLY:N	0.53	2.40	19	2
1:A:82:PHE:HZ	1:A:93:LEU:HD12	0.53	1.59	6	1
1:A:23:LEU:CD1	1:A:23:LEU:C	0.53	2.75	10	6
1:A:61:VAL:CB	1:A:68:SER:CB	0.53	2.87	17	2
1:A:80:VAL:O	1:A:95:THR:OG1	0.53	2.27	11	4
1:A:102:LEU:CG	1:A:102:LEU:O	0.53	2.56	20	1
1:A:24:ILE:HD13	1:A:37:ALA:O	0.53	2.04	2	5
1:A:11:VAL:CG1	1:A:11:VAL:O	0.53	2.57	13	2
1:A:108:LEU:O	1:A:112:LEU:CD2	0.53	2.57	7	1
1:A:20:ILE:HG21	1:A:39:ALA:CA	0.53	2.33	10	6
1:A:20:ILE:CG1	1:A:20:ILE:O	0.53	2.57	6	2
1:A:107:PHE:O	1:A:109:ASP:N	0.53	2.41	17	1
1:A:86:THR:CG2	1:A:88:TYR:CE1	0.53	2.91	17	1
1:A:54:PHE:O	1:A:56:ILE:N	0.53	2.42	20	4
1:A:14:VAL:HB	1:A:40:SER:HA	0.53	1.80	11	15
1:A:111:GLU:O	1:A:115:VAL:HG23	0.53	2.04	10	10
1:A:98:SER:O	1:A:99:ASN:O	0.53	2.27	17	13
1:A:16:ASP:OD1	1:A:64:ASP:CB	0.53	2.57	15	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:69:TYR:CD2	1:A:71:VAL:HG22	0.53	2.39	17	1
1:A:101:PRO:CB	1:A:113:GLU:C	0.53	2.77	19	1
1:A:48:ILE:O	1:A:51:LYS:CE	0.53	2.57	2	1
1:A:83:ILE:HG13	1:A:100:ILE:CD1	0.53	2.32	4	3
1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:OD1	0.53	2.42	7	1
1:A:84:PHE:O	1:A:102:LEU:CD1	0.53	2.57	15	2
1:A:116:LEU:O	1:A:116:LEU:HD12	0.53	2.04	14	1
1:A:31:LEU:HD22	1:A:33:HIS:CE1	0.53	2.39	15	1
1:A:10:ARG:HD2	1:A:10:ARG:N	0.53	2.18	19	1
1:A:46:LEU:CD2	1:A:50:ARG:NH1	0.53	2.72	6	1
1:A:71:VAL:O	1:A:73:ASP:N	0.53	2.42	7	6
1:A:106:PRO:C	1:A:107:PHE:CG	0.53	2.82	8	1
1:A:83:ILE:HD11	1:A:100:ILE:HG13	0.53	1.81	18	1
1:A:14:VAL:CG2	1:A:59:ILE:HG12	0.52	2.34	1	6
1:A:56:ILE:CG2	1:A:57:ALA:N	0.52	2.71	20	11
1:A:100:ILE:O	1:A:102:LEU:N	0.52	2.41	13	7
1:A:10:ARG:CZ	1:A:33:HIS:HB3	0.52	2.34	7	1
1:A:88:TYR:CD2	1:A:90:SER:O	0.52	2.61	8	1
1:A:103:LEU:HD13	1:A:105:LYS:CD	0.52	2.33	14	1
1:A:101:PRO:HB3	1:A:113:GLU:O	0.52	2.04	18	1
1:A:93:LEU:HD23	1:A:99:ASN:ND2	0.52	2.19	6	1
1:A:86:THR:OG1	1:A:88:TYR:CD2	0.52	2.57	2	2
1:A:102:LEU:HD13	1:A:102:LEU:O	0.52	2.04	3	1
1:A:99:ASN:O	1:A:100:ILE:C	0.52	2.47	5	3
1:A:15:GLU:CB	1:A:20:ILE:HD13	0.52	2.35	12	2
1:A:83:ILE:HG12	1:A:102:LEU:CD1	0.52	2.33	9	2
1:A:48:ILE:HG12	1:A:49:ALA:N	0.52	2.19	15	1
1:A:73:ASP:O	1:A:76:ALA:HB3	0.52	2.04	6	1
1:A:98:SER:O	1:A:99:ASN:HB2	0.52	2.03	19	10
1:A:51:LYS:CD	1:A:54:PHE:CD1	0.52	2.92	2	1
1:A:14:VAL:N	1:A:58:ILE:O	0.52	2.42	5	7
1:A:79:ASN:HB2	1:A:82:PHE:CE1	0.52	2.40	18	2
1:A:86:THR:HG23	1:A:89:GLY:N	0.52	2.19	9	1
1:A:100:ILE:O	1:A:102:LEU:HD22	0.52	2.03	12	1
1:A:105:LYS:HB3	1:A:106:PRO:CD	0.52	2.35	18	2
1:A:110:SER:O	1:A:111:GLU:C	0.52	2.48	19	11
1:A:61:VAL:HG11	1:A:88:TYR:OH	0.52	2.04	5	1
1:A:93:LEU:N	1:A:93:LEU:CD2	0.52	2.69	14	1
1:A:24:ILE:HG13	1:A:25:GLU:N	0.52	2.19	6	1
1:A:65:GLY:C	1:A:66:GLU:CG	0.52	2.78	10	6
1:A:79:ASN:HB2	1:A:82:PHE:CZ	0.52	2.40	5	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:71:VAL:HG22	1:A:72:ALA:H	0.52	1.64	9	5
1:A:11:VAL:HG12	1:A:13:VAL:CG2	0.52	2.34	1	3
1:A:97:TYR:O	1:A:98:SER:HB2	0.52	2.04	12	15
1:A:69:TYR:CB	1:A:70:PRO:HD2	0.52	2.35	12	15
1:A:79:ASN:HB3	1:A:82:PHE:CE1	0.52	2.39	3	1
1:A:65:GLY:O	1:A:66:GLU:HG3	0.52	2.04	11	3
1:A:23:LEU:HD21	1:A:107:PHE:HB3	0.52	1.81	10	1
1:A:61:VAL:CG2	1:A:61:VAL:O	0.52	2.57	17	1
1:A:100:ILE:HG13	1:A:101:PRO:N	0.52	2.20	19	1
1:A:51:LYS:HE3	1:A:54:PHE:CD1	0.52	2.38	2	1
1:A:23:LEU:HD21	1:A:107:PHE:HB2	0.52	1.81	3	1
1:A:14:VAL:CG2	1:A:59:ILE:HG13	0.52	2.35	13	5
1:A:15:GLU:OE1	1:A:68:SER:N	0.52	2.43	11	1
1:A:16:ASP:OD1	1:A:16:ASP:N	0.52	2.41	12	2
1:A:60:ASP:OD1	1:A:63:LEU:CB	0.52	2.58	6	2
1:A:59:ILE:HD12	1:A:59:ILE:N	0.52	2.19	20	1
1:A:26:ASP:OD1	1:A:27:THR:N	0.52	2.43	1	7
1:A:56:ILE:CG2	1:A:83:ILE:HG22	0.52	2.34	20	6
1:A:105:LYS:CG	1:A:106:PRO:HD2	0.52	2.34	5	1
1:A:99:ASN:C	1:A:100:ILE:HG13	0.52	2.25	7	3
1:A:27:THR:HG22	1:A:28:LEU:N	0.52	2.19	11	1
1:A:56:ILE:HG22	1:A:58:ILE:CD1	0.52	2.34	14	5
1:A:8:ARG:NE	1:A:32:GLY:O	0.52	2.43	6	1
1:A:11:VAL:C	1:A:36:ALA:CB	0.52	2.79	8	9
1:A:109:ASP:HA	1:A:112:LEU:CD1	0.52	2.35	8	8
1:A:28:LEU:CD2	1:A:28:LEU:C	0.52	2.72	7	4
1:A:45:ALA:O	1:A:49:ALA:HB2	0.52	2.04	3	1
1:A:91:LYS:CG	1:A:92:GLY:N	0.52	2.72	5	1
1:A:51:LYS:O	1:A:53:GLN:CG	0.52	2.58	16	1
1:A:56:ILE:CD1	1:A:83:ILE:CD1	0.52	2.88	1	4
1:A:71:VAL:HG23	1:A:72:ALA:N	0.52	2.20	3	6
1:A:12:LEU:O	1:A:57:ALA:HA	0.52	2.05	14	6
1:A:106:PRO:HA	1:A:110:SER:CB	0.52	2.34	15	2
1:A:105:LYS:CB	1:A:106:PRO:HD2	0.52	2.35	7	1
1:A:102:LEU:HD12	1:A:102:LEU:C	0.52	2.24	8	1
1:A:12:LEU:CD1	1:A:54:PHE:CD2	0.52	2.92	12	2
1:A:15:GLU:O	1:A:16:ASP:HB3	0.51	2.05	14	3
1:A:78:ARG:HG3	1:A:79:ASN:N	0.51	2.18	7	5
1:A:92:GLY:O	1:A:93:LEU:O	0.51	2.29	20	6
1:A:15:GLU:O	1:A:16:ASP:C	0.51	2.49	5	1
1:A:23:LEU:CD2	1:A:23:LEU:C	0.51	2.74	7	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:109:ASP:HA	1:A:112:LEU:CD2	0.51	2.33	8	2
1:A:28:LEU:O	1:A:28:LEU:HD12	0.51	2.05	16	3
1:A:55:ASP:O	1:A:97:TYR:OH	0.51	2.29	4	3
1:A:86:THR:O	1:A:89:GLY:N	0.51	2.42	9	2
1:A:56:ILE:CG2	1:A:58:ILE:HD11	0.51	2.35	14	2
1:A:110:SER:O	1:A:113:GLU:N	0.51	2.44	15	1
1:A:12:LEU:CA	1:A:37:ALA:HB3	0.51	2.35	1	2
1:A:35:VAL:O	1:A:35:VAL:HG13	0.51	2.04	2	2
1:A:28:LEU:HD23	1:A:28:LEU:C	0.51	2.26	15	1
1:A:109:ASP:C	1:A:112:LEU:HD21	0.51	2.26	17	1
1:A:79:ASN:ND2	1:A:82:PHE:CE2	0.51	2.78	20	1
1:A:12:LEU:CD1	1:A:54:PHE:CG	0.51	2.93	1	3
1:A:50:ARG:HD2	1:A:50:ARG:N	0.51	2.21	2	8
1:A:85:ALA:O	1:A:86:THR:CB	0.51	2.58	4	1
1:A:9:LEU:CD1	1:A:55:ASP:OD1	0.51	2.58	11	2
1:A:62:ASN:HA	1:A:66:GLU:CG	0.51	2.35	17	1
1:A:94:ASP:OD1	1:A:94:ASP:N	0.51	2.44	18	1
1:A:63:LEU:O	1:A:64:ASP:HB2	0.51	2.05	7	7
1:A:14:VAL:O	1:A:15:GLU:HB3	0.51	2.06	6	2
1:A:61:VAL:HA	1:A:66:GLU:HG3	0.51	1.83	9	1
1:A:27:THR:C	1:A:31:LEU:HD12	0.51	2.26	13	2
1:A:89:GLY:O	1:A:90:SER:O	0.51	2.27	12	7
1:A:10:ARG:NH1	1:A:36:ALA:N	0.51	2.58	7	1
1:A:16:ASP:OD1	1:A:67:PRO:CD	0.51	2.58	9	1
1:A:28:LEU:HD11	1:A:35:VAL:H	0.51	1.66	13	1
1:A:69:TYR:HD2	1:A:71:VAL:HG22	0.51	1.65	17	1
1:A:12:LEU:C	1:A:37:ALA:HB3	0.51	2.26	1	1
1:A:78:ARG:CG	1:A:79:ASN:N	0.51	2.73	7	4
1:A:51:LYS:O	1:A:53:GLN:N	0.51	2.40	13	3
1:A:67:PRO:O	1:A:69:TYR:CE2	0.51	2.64	9	1
1:A:116:LEU:CD1	1:A:116:LEU:O	0.51	2.58	2	1
1:A:79:ASN:OD1	1:A:82:PHE:CE2	0.51	2.63	3	1
1:A:10:ARG:HD3	1:A:10:ARG:N	0.51	2.21	12	3
1:A:13:VAL:O	1:A:20:ILE:HD11	0.51	2.05	4	1
1:A:88:TYR:CG	1:A:88:TYR:O	0.51	2.64	10	1
1:A:44:GLU:O	1:A:47:ASP:N	0.51	2.43	16	2
1:A:57:ALA:O	1:A:58:ILE:CD1	0.51	2.59	17	1
1:A:13:VAL:HB	1:A:24:ILE:CD1	0.51	2.35	5	4
1:A:23:LEU:C	1:A:23:LEU:CD1	0.51	2.77	4	6
1:A:102:LEU:HD22	1:A:102:LEU:N	0.51	2.21	7	1
1:A:97:TYR:CB	1:A:100:ILE:CD1	0.51	2.89	10	2

Continued on next page...



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:31:LEU:HD12	1:A:31:LEU:H	0.51	1.65	15	1
1:A:13:VAL:CG1	1:A:58:ILE:HB	0.51	2.35	12	10
1:A:59:ILE:HG22	1:A:59:ILE:O	0.51	2.06	17	5
1:A:9:LEU:O	1:A:34:GLU:N	0.51	2.43	19	4
1:A:61:VAL:HB	1:A:68:SER:CB	0.51	2.36	17	2
1:A:67:PRO:O	1:A:69:TYR:CD1	0.51	2.64	5	3
1:A:78:ARG:O	1:A:79:ASN:C	0.51	2.49	18	3
1:A:16:ASP:O	1:A:17:GLU:C	0.51	2.50	19	6
1:A:13:VAL:HB	1:A:24:ILE:HD12	0.50	1.82	1	3
1:A:15:GLU:CG	1:A:16:ASP:CG	0.50	2.80	1	1
1:A:59:ILE:CG2	1:A:68:SER:HA	0.50	2.36	1	8
1:A:65:GLY:O	1:A:66:GLU:HB2	0.50	2.06	14	5
1:A:82:PHE:CZ	1:A:93:LEU:CD1	0.50	2.86	5	2
1:A:10:ARG:N	1:A:10:ARG:HD3	0.50	2.20	11	2
1:A:101:PRO:CG	1:A:113:GLU:O	0.50	2.59	19	1
1:A:56:ILE:HD13	1:A:83:ILE:HB	0.50	1.83	11	6
1:A:68:SER:O	1:A:72:ALA:CB	0.50	2.59	2	3
1:A:100:ILE:HG12	1:A:102:LEU:CD1	0.50	2.36	16	1
1:A:85:ALA:CB	1:A:103:LEU:CD1	0.50	2.90	8	1
1:A:82:PHE:CA	1:A:97:TYR:CE2	0.50	2.94	20	1
1:A:93:LEU:HD11	1:A:102:LEU:CD2	0.50	2.37	6	1
1:A:59:ILE:HD13	1:A:69:TYR:HE2	0.50	1.67	2	3
1:A:85:ALA:HA	1:A:103:LEU:O	0.50	2.06	15	4
1:A:11:VAL:CG2	1:A:11:VAL:O	0.50	2.60	4	4
1:A:103:LEU:O	1:A:104:THR:OG1	0.50	2.30	5	1
1:A:86:THR:O	1:A:104:THR:HB	0.50	2.06	13	3
1:A:58:ILE:C	1:A:59:ILE:CG1	0.50	2.79	2	4
1:A:26:ASP:CG	1:A:27:THR:N	0.50	2.65	3	18
1:A:107:PHE:C	1:A:108:LEU:HD23	0.50	2.27	3	1
1:A:15:GLU:C	1:A:40:SER:HB3	0.50	2.26	14	2
1:A:22:MET:HG2	1:A:23:LEU:N	0.50	2.21	8	1
1:A:67:PRO:O	1:A:69:TYR:N	0.50	2.44	18	3
1:A:104:THR:OG1	1:A:105:LYS:N	0.50	2.44	20	3
1:A:76:ALA:HB1	1:A:91:LYS:CD	0.50	2.35	16	1
1:A:101:PRO:CB	1:A:113:GLU:O	0.50	2.60	18	1
1:A:68:SER:HB2	1:A:72:ALA:CB	0.50	2.37	12	4
1:A:13:VAL:C	1:A:14:VAL:CG1	0.50	2.80	2	2
1:A:59:ILE:O	1:A:60:ASP:C	0.50	2.49	16	18
1:A:63:LEU:O	1:A:67:PRO:CD	0.50	2.60	6	2
1:A:106:PRO:HD2	1:A:108:LEU:HD21	0.50	1.83	3	1
1:A:50:ARG:N	1:A:50:ARG:CD	0.50	2.70	4	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:23:LEU:HB2	1:A:107:PHE:CE1	0.50	2.42	12	2
1:A:16:ASP:CB	1:A:20:ILE:HB	0.50	2.37	11	1
1:A:105:LYS:CB	1:A:109:ASP:HB2	0.50	2.36	19	1
1:A:108:LEU:CD1	1:A:109:ASP:N	0.50	2.62	19	2
1:A:13:VAL:O	1:A:37:ALA:O	0.50	2.30	12	14
1:A:15:GLU:O	1:A:16:ASP:HB2	0.50	2.06	10	2
1:A:97:TYR:HB3	1:A:100:ILE:HD13	0.50	1.84	11	1
1:A:28:LEU:CD1	1:A:33:HIS:CB	0.50	2.90	13	1
1:A:63:LEU:HD23	1:A:64:ASP:CB	0.50	2.35	18	1
1:A:101:PRO:CG	1:A:114:ALA:CA	0.50	2.90	19	1
1:A:105:LYS:HB3	1:A:106:PRO:HD2	0.50	1.82	1	2
1:A:108:LEU:O	1:A:112:LEU:HD21	0.50	2.06	7	1
1:A:83:ILE:CD1	1:A:97:TYR:CE2	0.50	2.94	7	1
1:A:48:ILE:O	1:A:51:LYS:NZ	0.50	2.45	2	1
1:A:103:LEU:HD21	1:A:110:SER:HG	0.50	1.67	4	2
1:A:70:PRO:O	1:A:74:ILE:CD1	0.50	2.57	14	5
1:A:74:ILE:HG23	1:A:77:GLU:OE1	0.50	2.07	5	2
1:A:59:ILE:O	1:A:84:PHE:CE1	0.49	2.65	4	2
1:A:108:LEU:O	1:A:112:LEU:HG	0.49	2.07	13	3
1:A:99:ASN:C	1:A:100:ILE:CG1	0.49	2.80	7	3
1:A:69:TYR:HD2	1:A:71:VAL:HG23	0.49	1.67	10	3
1:A:44:GLU:O	1:A:48:ILE:CG2	0.49	2.59	18	2
1:A:23:LEU:O	1:A:23:LEU:CD1	0.49	2.59	12	1
1:A:89:GLY:HA2	1:A:103:LEU:HA	0.49	1.84	17	3
1:A:20:ILE:CG2	1:A:39:ALA:CA	0.49	2.90	6	4
1:A:76:ALA:HA	1:A:79:ASN:OD1	0.49	2.07	7	3
1:A:10:ARG:CD	1:A:10:ARG:N	0.49	2.75	4	1
1:A:97:TYR:N	1:A:97:TYR:CD1	0.49	2.80	11	6
1:A:28:LEU:CD1	1:A:29:CYS:N	0.49	2.61	9	1
1:A:103:LEU:CD1	1:A:105:LYS:HD3	0.49	2.37	14	1
1:A:84:PHE:HB3	1:A:93:LEU:HD11	0.49	1.84	20	1
1:A:24:ILE:CD1	1:A:38:THR:HB	0.49	2.37	6	1
1:A:63:LEU:O	1:A:67:PRO:HD3	0.49	2.08	6	5
1:A:11:VAL:HG13	1:A:33:HIS:CD2	0.49	2.42	10	2
1:A:33:HIS:O	1:A:35:VAL:N	0.49	2.42	4	1
1:A:78:ARG:O	1:A:94:ASP:OD2	0.49	2.30	7	2
1:A:66:GLU:O	1:A:66:GLU:HG3	0.49	2.07	11	1
1:A:46:LEU:O	1:A:46:LEU:HD13	0.49	2.08	13	1
1:A:13:VAL:CG2	1:A:37:ALA:O	0.49	2.59	16	2
1:A:106:PRO:HB2	1:A:107:PHE:CD1	0.49	2.42	6	1
1:A:112:LEU:N	1:A:112:LEU:CD2	0.49	2.69	15	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:GLU:CG	1:A:60:ASP:HB3	0.49	2.37	12	3
1:A:10:ARG:NH2	1:A:33:HIS:CG	0.49	2.79	7	1
1:A:61:VAL:HG11	1:A:86:THR:OG1	0.49	2.07	10	1
1:A:93:LEU:CD2	1:A:102:LEU:CD2	0.49	2.82	14	1
1:A:61:VAL:CA	1:A:68:SER:OG	0.49	2.61	20	2
1:A:23:LEU:CD1	1:A:23:LEU:O	0.49	2.54	1	3
1:A:90:SER:OG	1:A:93:LEU:HD12	0.49	2.06	1	1
1:A:74:ILE:O	1:A:77:GLU:N	0.49	2.45	11	7
1:A:80:VAL:HG23	1:A:81:PRO:HD2	0.49	1.84	17	3
1:A:99:ASN:N	1:A:99:ASN:ND2	0.49	2.58	7	1
1:A:11:VAL:CG1	1:A:33:HIS:CD2	0.49	2.95	10	1
1:A:66:GLU:O	1:A:68:SER:N	0.49	2.43	19	1
1:A:38:THR:O	1:A:39:ALA:O	0.49	2.31	2	3
1:A:27:THR:HG23	1:A:28:LEU:N	0.49	2.23	17	2
1:A:28:LEU:CD1	1:A:28:LEU:C	0.49	2.80	14	5
1:A:77:GLU:CD	1:A:78:ARG:NH1	0.49	2.66	5	1
1:A:116:LEU:C	1:A:116:LEU:HD13	0.49	2.28	7	1
1:A:85:ALA:HB2	1:A:103:LEU:CD1	0.49	2.37	8	1
1:A:51:LYS:O	1:A:53:GLN:HG2	0.49	2.08	16	1
1:A:61:VAL:CG2	1:A:68:SER:HB2	0.49	2.37	17	2
1:A:61:VAL:HG11	1:A:88:TYR:CE2	0.49	2.43	1	1
1:A:76:ALA:O	1:A:79:ASN:OD1	0.49	2.30	7	5
1:A:86:THR:O	1:A:104:THR:OG1	0.49	2.29	5	3
1:A:106:PRO:O	1:A:108:LEU:HD23	0.49	2.08	9	1
1:A:23:LEU:HA	1:A:26:ASP:OD1	0.49	2.07	9	2
1:A:42:MET:HG2	1:A:69:TYR:CD2	0.49	2.43	9	1
1:A:107:PHE:O	1:A:108:LEU:O	0.49	2.31	12	1
1:A:100:ILE:CG1	1:A:101:PRO:CD	0.49	2.90	14	4
1:A:15:GLU:O	1:A:40:SER:CB	0.49	2.59	14	1
1:A:66:GLU:CG	1:A:66:GLU:O	0.49	2.59	14	2
1:A:64:ASP:O	1:A:67:PRO:HD2	0.49	2.07	19	2
1:A:15:GLU:OE1	1:A:20:ILE:HD12	0.49	2.08	18	1
1:A:90:SER:OG	1:A:91:LYS:N	0.49	2.43	1	2
1:A:97:TYR:HB3	1:A:100:ILE:HG12	0.49	1.84	1	3
1:A:56:ILE:CG2	1:A:83:ILE:HB	0.49	2.35	3	4
1:A:23:LEU:CD2	1:A:111:GLU:OE1	0.49	2.61	17	1
1:A:45:ALA:HA	1:A:48:ILE:HG23	0.49	1.83	18	1
1:A:12:LEU:CD1	1:A:54:PHE:HB2	0.49	2.38	20	1
1:A:46:LEU:HD13	1:A:46:LEU:O	0.49	2.07	2	1
1:A:20:ILE:HG23	1:A:39:ALA:HA	0.49	1.84	6	2
1:A:56:ILE:HD11	1:A:100:ILE:HD12	0.49	1.84	4	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:101:PRO:HB3	1:A:113:GLU:C	0.49	2.28	17	4
1:A:28:LEU:HD13	1:A:29:CYS:CA	0.49	2.38	9	1
1:A:61:VAL:HA	1:A:66:GLU:CG	0.49	2.37	9	1
1:A:83:ILE:HG23	1:A:102:LEU:CD1	0.49	2.38	14	1
1:A:66:GLU:CB	1:A:67:PRO:CD	0.49	2.91	19	2
1:A:60:ASP:HA	1:A:85:ALA:O	0.49	2.08	1	2
1:A:28:LEU:HG	1:A:29:CYS:N	0.49	2.23	16	4
1:A:46:LEU:HD13	1:A:46:LEU:C	0.49	2.28	2	1
1:A:86:THR:OG1	1:A:88:TYR:CZ	0.49	2.60	5	1
1:A:86:THR:O	1:A:87:GLY:C	0.49	2.51	20	5
1:A:23:LEU:HD11	1:A:107:PHE:CB	0.49	2.37	10	1
1:A:104:THR:O	1:A:105:LYS:C	0.49	2.50	12	2
1:A:31:LEU:N	1:A:31:LEU:CD1	0.49	2.76	11	1
1:A:10:ARG:O	1:A:54:PHE:O	0.49	2.30	19	3
1:A:101:PRO:HD3	1:A:114:ALA:HA	0.48	1.84	12	6
1:A:50:ARG:CD	1:A:50:ARG:N	0.48	2.75	20	4
1:A:100:ILE:N	1:A:102:LEU:HD23	0.48	2.23	4	1
1:A:41:ARG:O	1:A:45:ALA:HB2	0.48	2.07	17	3
1:A:101:PRO:HG3	1:A:114:ALA:HA	0.48	1.84	5	3
1:A:83:ILE:HG12	1:A:101:PRO:HG2	0.48	1.86	7	1
1:A:9:LEU:N	1:A:9:LEU:CD2	0.48	2.75	10	1
1:A:101:PRO:HG2	1:A:114:ALA:CA	0.48	2.38	19	1
1:A:23:LEU:HD21	1:A:107:PHE:CD2	0.48	2.43	6	1
1:A:91:LYS:O	1:A:93:LEU:N	0.48	2.46	2	2
1:A:9:LEU:HB3	1:A:33:HIS:CD2	0.48	2.42	3	3
1:A:109:ASP:OD1	1:A:110:SER:N	0.48	2.46	19	4
1:A:16:ASP:HB3	1:A:19:MET:CB	0.48	2.38	13	1
1:A:98:SER:O	1:A:99:ASN:C	0.48	2.50	18	3
1:A:19:MET:O	1:A:23:LEU:HD12	0.48	2.08	15	1
1:A:16:ASP:OD1	1:A:20:ILE:CG2	0.48	2.61	17	1
1:A:16:ASP:HB2	1:A:63:LEU:HD21	0.48	1.84	18	1
1:A:105:LYS:CB	1:A:106:PRO:CD	0.48	2.91	18	3
1:A:79:ASN:OD1	1:A:94:ASP:OD1	0.48	2.32	17	2
1:A:99:ASN:CA	1:A:102:LEU:HD21	0.48	2.39	5	1
1:A:10:ARG:N	1:A:55:ASP:OD2	0.48	2.46	7	1
1:A:17:GLU:HA	1:A:39:ALA:CB	0.48	2.39	8	2
1:A:104:THR:O	1:A:105:LYS:O	0.48	2.31	18	2
1:A:12:LEU:HD22	1:A:48:ILE:CB	0.48	2.38	18	1
1:A:109:ASP:OD1	1:A:109:ASP:N	0.48	2.46	1	1
1:A:99:ASN:C	1:A:100:ILE:CD1	0.48	2.79	1	2
1:A:15:GLU:HG3	1:A:60:ASP:HB2	0.48	1.86	20	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:109:ASP:HA	1:A:112:LEU:CG	0.48	2.38	8	2
1:A:97:TYR:CD1	1:A:97:TYR:N	0.48	2.81	10	2
1:A:86:THR:HG23	1:A:88:TYR:H	0.48	1.67	18	1
1:A:108:LEU:C	1:A:108:LEU:HD13	0.48	2.26	19	1
1:A:89:GLY:HA2	1:A:103:LEU:CB	0.48	2.38	2	1
1:A:16:ASP:O	1:A:20:ILE:CG2	0.48	2.62	2	1
1:A:95:THR:CG2	1:A:97:TYR:HB2	0.48	2.38	11	5
1:A:16:ASP:OD2	1:A:64:ASP:OD2	0.48	2.31	8	1
1:A:44:GLU:O	1:A:48:ILE:HG22	0.48	2.07	18	1
1:A:24:ILE:HD13	1:A:38:THR:HB	0.48	1.84	6	1
1:A:102:LEU:O	1:A:102:LEU:CG	0.48	2.62	1	1
1:A:10:ARG:CZ	1:A:34:GLU:OE1	0.48	2.61	2	1
1:A:55:ASP:O	1:A:56:ILE:HG12	0.48	2.09	2	9
1:A:90:SER:HB3	1:A:93:LEU:HD12	0.48	1.83	12	2
1:A:61:VAL:CB	1:A:68:SER:HB3	0.48	2.38	3	2
1:A:58:ILE:C	1:A:59:ILE:CD1	0.48	2.80	16	2
1:A:12:LEU:HG	1:A:48:ILE:CG2	0.48	2.39	13	1
1:A:11:VAL:CG2	1:A:33:HIS:CD2	0.48	2.96	16	1
1:A:111:GLU:O	1:A:115:VAL:HG22	0.48	2.09	5	1
1:A:60:ASP:OD2	1:A:63:LEU:HD22	0.48	2.08	5	2
1:A:83:ILE:HD11	1:A:101:PRO:CG	0.48	2.39	5	1
1:A:91:LYS:HG2	1:A:92:GLY:N	0.48	2.24	5	1
1:A:66:GLU:CD	1:A:66:GLU:N	0.48	2.67	9	1
1:A:15:GLU:HG2	1:A:16:ASP:N	0.48	2.24	19	3
1:A:23:LEU:HD21	1:A:107:PHE:CG	0.48	2.44	20	1
1:A:116:LEU:CD1	1:A:116:LEU:C	0.48	2.82	2	2
1:A:48:ILE:O	1:A:51:LYS:CG	0.48	2.61	2	1
1:A:53:GLN:O	1:A:54:PHE:O	0.48	2.32	12	8
1:A:47:ASP:CG	1:A:51:LYS:NZ	0.48	2.67	4	1
1:A:99:ASN:HA	1:A:102:LEU:HD22	0.48	1.86	4	1
1:A:90:SER:O	1:A:91:LYS:C	0.48	2.51	19	3
1:A:116:LEU:CD2	1:A:116:LEU:C	0.48	2.78	12	1
1:A:56:ILE:CG2	1:A:58:ILE:CD1	0.48	2.92	14	2
1:A:66:GLU:HB3	1:A:67:PRO:CD	0.48	2.39	16	1
1:A:107:PHE:O	1:A:109:ASP:OD1	0.48	2.32	19	1
1:A:83:ILE:HG13	1:A:101:PRO:HD2	0.48	1.86	20	1
1:A:50:ARG:N	1:A:50:ARG:HD2	0.48	2.23	4	7
1:A:13:VAL:HA	1:A:58:ILE:HB	0.48	1.86	9	5
1:A:12:LEU:HD13	1:A:48:ILE:CA	0.48	2.39	5	1
1:A:23:LEU:O	1:A:23:LEU:CD2	0.48	2.58	12	4
1:A:101:PRO:CB	1:A:114:ALA:CA	0.48	2.90	8	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:GLU:OE1	1:A:34:GLU:CA	0.48	2.61	11	1
1:A:47:ASP:O	1:A:51:LYS:HG2	0.48	2.08	11	1
1:A:113:GLU:HG3	1:A:114:ALA:N	0.48	2.22	16	1
1:A:52:GLY:O	1:A:53:GLN:CB	0.48	2.60	20	1
1:A:22:MET:O	1:A:26:ASP:OD1	0.48	2.31	2	4
1:A:23:LEU:HB2	1:A:107:PHE:CZ	0.48	2.43	7	1
1:A:21:ALA:O	1:A:22:MET:C	0.48	2.52	15	7
1:A:53:GLN:OE1	1:A:53:GLN:CA	0.48	2.61	11	1
1:A:80:VAL:O	1:A:82:PHE:CE1	0.48	2.67	13	1
1:A:94:ASP:C	1:A:95:THR:CG2	0.48	2.82	14	1
1:A:97:TYR:CB	1:A:100:ILE:HD12	0.48	2.36	18	1
1:A:99:ASN:O	1:A:102:LEU:HG	0.47	2.09	5	1
1:A:100:ILE:CD1	1:A:101:PRO:HD3	0.47	2.37	7	1
1:A:103:LEU:HD12	1:A:104:THR:H	0.47	1.68	13	2
1:A:61:VAL:O	1:A:61:VAL:HG22	0.47	2.09	5	2
1:A:105:LYS:C	1:A:109:ASP:CB	0.47	2.83	19	1
1:A:13:VAL:CG1	1:A:58:ILE:CG2	0.47	2.92	2	1
1:A:82:PHE:CD1	1:A:82:PHE:N	0.47	2.83	2	5
1:A:14:VAL:C	1:A:15:GLU:CG	0.47	2.81	13	2
1:A:75:LEU:O	1:A:79:ASN:HB3	0.47	2.10	5	4
1:A:109:ASP:O	1:A:112:LEU:CD1	0.47	2.62	7	1
1:A:15:GLU:OE2	1:A:20:ILE:HD13	0.47	2.09	13	1
1:A:23:LEU:CD2	1:A:23:LEU:O	0.47	2.56	10	5
1:A:75:LEU:O	1:A:79:ASN:CG	0.47	2.53	20	3
1:A:15:GLU:O	1:A:40:SER:HB3	0.47	2.09	14	7
1:A:11:VAL:HG23	1:A:36:ALA:HB2	0.47	1.82	11	1
1:A:28:LEU:CD1	1:A:33:HIS:HB2	0.47	2.40	13	1
1:A:13:VAL:HG12	1:A:58:ILE:CB	0.47	2.37	19	1
1:A:101:PRO:CD	1:A:114:ALA:HA	0.47	2.38	1	4
1:A:83:ILE:HG12	1:A:101:PRO:HD2	0.47	1.86	3	1
1:A:18:SER:O	1:A:21:ALA:N	0.47	2.47	15	3
1:A:110:SER:O	1:A:113:GLU:HG3	0.47	2.09	17	1
1:A:28:LEU:CD2	1:A:32:GLY:CA	0.47	2.93	2	1
1:A:66:GLU:O	1:A:66:GLU:HG2	0.47	2.09	9	2
1:A:14:VAL:HG23	1:A:37:ALA:HB1	0.47	1.86	9	1
1:A:47:ASP:O	1:A:51:LYS:HG3	0.47	2.10	11	1
1:A:83:ILE:HD13	1:A:101:PRO:HG2	0.47	1.85	17	1
1:A:108:LEU:CD1	1:A:108:LEU:C	0.47	2.82	20	1
1:A:86:THR:O	1:A:104:THR:CB	0.47	2.63	1	1
1:A:93:LEU:HD11	1:A:99:ASN:HA	0.47	1.86	1	1
1:A:111:GLU:OE1	1:A:112:LEU:HD23	0.47	2.08	2	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:47:ASP:O	1:A:51:LYS:HB2	0.47	2.09	3	12
1:A:61:VAL:CG2	1:A:68:SER:HB3	0.47	2.39	4	2
1:A:86:THR:CG2	1:A:87:GLY:N	0.47	2.78	4	1
1:A:104:THR:O	1:A:105:LYS:HD2	0.47	2.08	5	1
1:A:25:GLU:O	1:A:28:LEU:CD1	0.47	2.63	7	1
1:A:23:LEU:CB	1:A:107:PHE:CE1	0.47	2.97	7	1
1:A:46:LEU:O	1:A:50:ARG:HD2	0.47	2.10	14	1
1:A:77:GLU:HG3	1:A:78:ARG:N	0.47	2.25	14	2
1:A:28:LEU:CD2	1:A:35:VAL:HG13	0.47	2.40	17	1
1:A:60:ASP:OD1	1:A:63:LEU:N	0.47	2.46	6	1
1:A:93:LEU:HD21	1:A:102:LEU:CD2	0.47	2.40	2	1
1:A:55:ASP:OD1	1:A:55:ASP:C	0.47	2.53	7	1
1:A:95:THR:OG1	1:A:96:ARG:N	0.47	2.47	8	1
1:A:16:ASP:OD1	1:A:16:ASP:O	0.47	2.32	10	1
1:A:27:THR:CG2	1:A:28:LEU:N	0.47	2.78	11	2
1:A:15:GLU:OE2	1:A:67:PRO:O	0.47	2.33	11	1
1:A:59:ILE:CG2	1:A:68:SER:OG	0.47	2.62	15	1
1:A:34:GLU:C	1:A:35:VAL:CG2	0.47	2.83	16	1
1:A:28:LEU:C	1:A:28:LEU:CD2	0.47	2.82	18	1
1:A:60:ASP:OD1	1:A:85:ALA:O	0.47	2.33	19	1
1:A:16:ASP:OD2	1:A:64:ASP:OD1	0.47	2.32	20	1
1:A:90:SER:O	1:A:91:LYS:HG2	0.47	2.09	1	1
1:A:53:GLN:O	1:A:54:PHE:C	0.47	2.53	16	6
1:A:112:LEU:O	1:A:116:LEU:HD23	0.47	2.10	17	2
1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CD	0.47	2.77	13	1
1:A:58:ILE:O	1:A:59:ILE:CG1	0.47	2.63	14	1
1:A:108:LEU:C	1:A:112:LEU:HD21	0.47	2.30	18	1
1:A:16:ASP:HB2	1:A:63:LEU:CD2	0.47	2.40	18	1
1:A:99:ASN:O	1:A:100:ILE:HG12	0.47	2.10	19	1
1:A:108:LEU:HD12	1:A:109:ASP:N	0.47	2.25	20	1
1:A:61:VAL:HG11	1:A:88:TYR:HE2	0.47	1.69	2	1
1:A:60:ASP:HB3	1:A:63:LEU:CB	0.47	2.40	2	2
1:A:61:VAL:CA	1:A:68:SER:HB2	0.47	2.40	3	1
1:A:22:MET:SD	1:A:22:MET:O	0.47	2.73	4	1
1:A:99:ASN:CA	1:A:102:LEU:HD22	0.47	2.40	4	1
1:A:21:ALA:O	1:A:24:ILE:N	0.47	2.42	9	2
1:A:79:ASN:OD1	1:A:94:ASP:N	0.47	2.46	5	1
1:A:71:VAL:C	1:A:73:ASP:N	0.47	2.68	7	7
1:A:38:THR:HG23	1:A:38:THR:O	0.47	2.10	9	2
1:A:42:MET:HG2	1:A:69:TYR:CE2	0.47	2.45	9	1
1:A:116:LEU:C	1:A:116:LEU:HD12	0.47	2.30	14	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:GLU:O	1:A:40:SER:OG	0.47	2.33	14	1
1:A:15:GLU:OE2	1:A:60:ASP:OD2	0.47	2.34	15	1
1:A:45:ALA:CB	1:A:69:TYR:OH	0.47	2.63	17	1
1:A:110:SER:C	1:A:112:LEU:N	0.47	2.67	19	1
1:A:13:VAL:O	1:A:14:VAL:CG2	0.47	2.61	19	1
1:A:111:GLU:HG3	1:A:112:LEU:N	0.46	2.25	1	1
1:A:8:ARG:HD2	1:A:32:GLY:O	0.46	2.11	2	1
1:A:93:LEU:CD2	1:A:93:LEU:C	0.46	2.80	2	1
1:A:9:LEU:O	1:A:34:GLU:HB2	0.46	2.10	3	1
1:A:77:GLU:OE2	1:A:78:ARG:NH1	0.46	2.48	5	1
1:A:23:LEU:O	1:A:27:THR:OG1	0.46	2.33	13	2
1:A:93:LEU:HD13	1:A:93:LEU:O	0.46	2.10	13	1
1:A:109:ASP:O	1:A:113:GLU:CG	0.46	2.62	16	1
1:A:89:GLY:HA2	1:A:103:LEU:CA	0.46	2.39	17	2
1:A:58:ILE:HD11	1:A:83:ILE:CG2	0.46	2.40	13	2
1:A:34:GLU:OE1	1:A:34:GLU:HA	0.46	2.10	11	1
1:A:93:LEU:HD22	1:A:102:LEU:HD22	0.46	1.85	17	2
1:A:105:LYS:CE	1:A:113:GLU:OE1	0.46	2.63	2	1
1:A:102:LEU:O	1:A:103:LEU:CG	0.46	2.64	16	2
1:A:20:ILE:O	1:A:20:ILE:CG1	0.46	2.62	5	3
1:A:78:ARG:O	1:A:79:ASN:OD1	0.46	2.33	5	2
1:A:55:ASP:OD1	1:A:56:ILE:N	0.46	2.49	7	1
1:A:62:ASN:HA	1:A:66:GLU:CB	0.46	2.40	8	2
1:A:107:PHE:O	1:A:109:ASP:CG	0.46	2.54	19	1
1:A:40:SER:CB	1:A:67:PRO:HB2	0.46	2.40	6	1
1:A:24:ILE:O	1:A:27:THR:HG22	0.46	2.10	2	1
1:A:48:ILE:O	1:A:51:LYS:HE3	0.46	2.11	2	1
1:A:15:GLU:CB	1:A:60:ASP:HB2	0.46	2.40	2	2
1:A:10:ARG:O	1:A:55:ASP:OD1	0.46	2.33	7	1
1:A:79:ASN:OD1	1:A:93:LEU:HB2	0.46	2.10	15	2
1:A:16:ASP:HB3	1:A:20:ILE:HB	0.46	1.87	11	1
1:A:58:ILE:CD1	1:A:83:ILE:HG22	0.46	2.41	13	1
1:A:47:ASP:O	1:A:51:LYS:HB3	0.46	2.10	17	4
1:A:102:LEU:C	1:A:103:LEU:CD2	0.46	2.81	19	1
1:A:58:ILE:O	1:A:59:ILE:HG13	0.46	2.09	1	4
1:A:97:TYR:HB3	1:A:100:ILE:CG1	0.46	2.41	11	3
1:A:23:LEU:HA	1:A:26:ASP:OD2	0.46	2.10	3	1
1:A:60:ASP:OD1	1:A:61:VAL:N	0.46	2.48	4	1
1:A:78:ARG:C	1:A:79:ASN:CG	0.46	2.73	5	2
1:A:15:GLU:OE2	1:A:63:LEU:HD23	0.46	2.10	7	1
1:A:61:VAL:CA	1:A:66:GLU:HG3	0.46	2.40	9	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:54:PHE:O	1:A:55:ASP:CB	0.46	2.63	19	3
1:A:109:ASP:O	1:A:113:GLU:OE1	0.46	2.33	13	1
1:A:48:ILE:O	1:A:54:PHE:CD2	0.46	2.68	16	1
1:A:101:PRO:N	1:A:102:LEU:HD12	0.46	2.25	17	2
1:A:103:LEU:CD1	1:A:110:SER:HB2	0.46	2.39	19	1
1:A:21:ALA:O	1:A:23:LEU:N	0.46	2.49	11	5
1:A:48:ILE:HA	1:A:54:PHE:CE2	0.46	2.46	4	1
1:A:13:VAL:CB	1:A:24:ILE:CD1	0.46	2.93	5	1
1:A:97:TYR:O	1:A:98:SER:OG	0.46	2.33	7	2
1:A:95:THR:CG2	1:A:99:ASN:ND2	0.46	2.78	7	1
1:A:97:TYR:O	1:A:100:ILE:HG13	0.46	2.11	8	2
1:A:51:LYS:CG	1:A:53:GLN:HG2	0.46	2.40	9	1
1:A:75:LEU:O	1:A:79:ASN:HA	0.46	2.10	19	2
1:A:15:GLU:HG3	1:A:59:ILE:CA	0.46	2.41	11	1
1:A:59:ILE:HG22	1:A:68:SER:CA	0.46	2.40	15	1
1:A:46:LEU:HD21	1:A:50:ARG:NH1	0.46	2.26	6	1
1:A:12:LEU:HA	1:A:37:ALA:CB	0.46	2.40	1	1
1:A:21:ALA:HA	1:A:38:THR:OG1	0.46	2.10	2	2
1:A:68:SER:HB3	1:A:72:ALA:HB3	0.46	1.88	2	1
1:A:24:ILE:HA	1:A:27:THR:OG1	0.46	2.11	8	1
1:A:71:VAL:O	1:A:75:LEU:N	0.46	2.43	15	4
1:A:15:GLU:CG	1:A:20:ILE:HG21	0.46	2.41	14	1
1:A:74:ILE:HA	1:A:77:GLU:CB	0.46	2.40	15	1
1:A:62:ASN:OD1	1:A:66:GLU:OE1	0.46	2.34	18	1
1:A:82:PHE:CZ	1:A:93:LEU:HD21	0.46	2.46	20	1
1:A:12:LEU:CD1	1:A:54:PHE:CD1	0.46	2.99	1	1
1:A:59:ILE:HB	1:A:84:PHE:HE1	0.46	1.70	1	1
1:A:79:ASN:HB3	1:A:94:ASP:O	0.46	2.11	12	2
1:A:12:LEU:HD12	1:A:48:ILE:HG22	0.46	1.88	14	2
1:A:28:LEU:C	1:A:28:LEU:CD1	0.46	2.81	16	5
1:A:103:LEU:HB3	1:A:110:SER:OG	0.46	2.11	8	1
1:A:19:MET:O	1:A:23:LEU:HB3	0.46	2.10	9	1
1:A:23:LEU:C	1:A:26:ASP:OD1	0.46	2.54	9	1
1:A:102:LEU:CG	1:A:103:LEU:N	0.46	2.78	12	1
1:A:16:ASP:OD1	1:A:19:MET:HB3	0.46	2.10	12	1
1:A:15:GLU:HG2	1:A:20:ILE:CD1	0.46	2.40	6	2
1:A:61:VAL:O	1:A:66:GLU:HG3	0.46	2.11	18	1
1:A:15:GLU:HB2	1:A:60:ASP:OD2	0.46	2.11	6	1
1:A:94:ASP:O	1:A:95:THR:HB	0.46	2.11	9	8
1:A:20:ILE:HG21	1:A:39:ALA:HA	0.46	1.87	17	5
1:A:10:ARG:CD	1:A:34:GLU:OE1	0.46	2.64	3	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:ARG:O	1:A:55:ASP:CG	0.46	2.55	7	1
1:A:15:GLU:OE1	1:A:67:PRO:HG2	0.46	2.11	10	1
1:A:81:PRO:O	1:A:82:PHE:CB	0.46	2.61	13	1
1:A:83:ILE:HG23	1:A:102:LEU:HD11	0.46	1.88	14	1
1:A:12:LEU:HD23	1:A:48:ILE:CG2	0.46	2.40	19	1
1:A:107:PHE:O	1:A:108:LEU:HB2	0.46	2.10	1	3
1:A:83:ILE:HD11	1:A:101:PRO:HG3	0.46	1.88	5	1
1:A:113:GLU:O	1:A:114:ALA:C	0.46	2.54	13	3
1:A:59:ILE:C	1:A:84:PHE:HE1	0.46	2.14	10	1
1:A:12:LEU:CD1	1:A:36:ALA:HB1	0.46	2.40	13	1
1:A:12:LEU:HB3	1:A:48:ILE:CG2	0.46	2.40	16	1
1:A:70:PRO:O	1:A:74:ILE:CG1	0.46	2.64	17	2
1:A:60:ASP:O	1:A:65:GLY:O	0.46	2.34	19	1
1:A:65:GLY:O	1:A:67:PRO:N	0.46	2.49	19	1
1:A:93:LEU:HD23	1:A:93:LEU:N	0.46	2.26	6	1
1:A:102:LEU:CD2	1:A:102:LEU:H	0.45	2.24	1	1
1:A:20:ILE:C	1:A:38:THR:OG1	0.45	2.54	7	1
1:A:109:ASP:O	1:A:112:LEU:HG	0.45	2.10	8	4
1:A:109:ASP:CA	1:A:112:LEU:HD11	0.45	2.41	8	1
1:A:79:ASN:OD1	1:A:94:ASP:CG	0.45	2.54	18	4
1:A:59:ILE:O	1:A:60:ASP:O	0.45	2.34	16	2
1:A:108:LEU:O	1:A:109:ASP:O	0.45	2.34	19	1
1:A:12:LEU:HD22	1:A:54:PHE:HB2	0.45	1.82	19	2
1:A:19:MET:SD	1:A:64:ASP:OD2	0.45	2.73	19	1
1:A:102:LEU:HD23	1:A:102:LEU:O	0.45	2.12	1	1
1:A:11:VAL:H	1:A:36:ALA:HB2	0.45	1.70	1	2
1:A:75:LEU:HG	1:A:82:PHE:CE2	0.45	2.45	4	1
1:A:78:ARG:C	1:A:79:ASN:OD1	0.45	2.55	9	2
1:A:16:ASP:OD1	1:A:63:LEU:HG	0.45	2.11	11	1
1:A:103:LEU:CD1	1:A:105:LYS:CD	0.45	2.95	14	1
1:A:25:GLU:HA	1:A:28:LEU:HD23	0.45	1.87	14	2
1:A:60:ASP:OD2	1:A:63:LEU:CD1	0.45	2.64	18	1
1:A:69:TYR:CB	1:A:70:PRO:CD	0.45	2.94	9	4
1:A:79:ASN:HB2	1:A:94:ASP:O	0.45	2.11	9	2
1:A:12:LEU:HD12	1:A:48:ILE:CG2	0.45	2.41	14	1
1:A:59:ILE:HG21	1:A:69:TYR:HE2	0.45	1.71	16	1
1:A:65:GLY:O	1:A:66:GLU:CD	0.45	2.55	17	1
1:A:14:VAL:HG21	1:A:69:TYR:OH	0.45	2.12	2	2
1:A:66:GLU:O	1:A:66:GLU:OE2	0.45	2.35	9	1
1:A:102:LEU:C	1:A:103:LEU:CG	0.45	2.85	16	4
1:A:103:LEU:O	1:A:104:THR:HB	0.45	2.12	12	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:102:LEU:H	1:A:102:LEU:CD2	0.45	2.25	20	2
1:A:56:ILE:CD1	1:A:83:ILE:HB	0.45	2.41	18	1
1:A:93:LEU:N	1:A:93:LEU:CD1	0.45	2.80	1	1
1:A:90:SER:HB3	1:A:93:LEU:CG	0.45	2.42	2	1
1:A:97:TYR:O	1:A:100:ILE:HG12	0.45	2.11	5	1
1:A:93:LEU:O	1:A:99:ASN:CG	0.45	2.55	7	2
1:A:14:VAL:O	1:A:15:GLU:OE2	0.45	2.34	13	1
1:A:103:LEU:HD22	1:A:114:ALA:CB	0.45	2.39	18	1
1:A:15:GLU:HG2	1:A:20:ILE:HB	0.45	1.88	18	1
1:A:15:GLU:CB	1:A:60:ASP:HB3	0.45	2.41	6	1
1:A:58:ILE:HD11	1:A:83:ILE:HG22	0.45	1.88	13	3
1:A:102:LEU:O	1:A:103:LEU:HG	0.45	2.11	2	1
1:A:83:ILE:CG1	1:A:100:ILE:CD1	0.45	2.94	4	2
1:A:44:GLU:O	1:A:45:ALA:C	0.45	2.55	12	7
1:A:9:LEU:HD13	1:A:55:ASP:CG	0.45	2.32	11	1
1:A:108:LEU:HD13	1:A:108:LEU:C	0.45	2.31	20	1
1:A:83:ILE:HA	1:A:102:LEU:HD21	0.45	1.88	6	1
1:A:15:GLU:O	1:A:40:SER:N	0.45	2.50	5	1
1:A:13:VAL:O	1:A:37:ALA:C	0.45	2.55	17	4
1:A:12:LEU:HB2	1:A:56:ILE:O	0.45	2.11	14	4
1:A:61:VAL:O	1:A:62:ASN:ND2	0.45	2.41	11	1
1:A:103:LEU:CD1	1:A:105:LYS:HB2	0.45	2.42	14	1
1:A:16:ASP:O	1:A:17:GLU:CB	0.45	2.64	14	1
1:A:59:ILE:HG12	1:A:84:PHE:CD2	0.45	2.47	16	1
1:A:111:GLU:OE2	1:A:115:VAL:HG21	0.45	2.11	18	1
1:A:91:LYS:HG2	1:A:91:LYS:O	0.45	2.11	2	1
1:A:43:GLN:O	1:A:46:LEU:HB3	0.45	2.12	19	2
1:A:75:LEU:HG	1:A:79:ASN:ND2	0.45	2.27	3	1
1:A:55:ASP:HA	1:A:97:TYR:OH	0.45	2.12	4	1
1:A:94:ASP:C	1:A:95:THR:HG22	0.45	2.32	7	1
1:A:79:ASN:OD1	1:A:94:ASP:OD2	0.45	2.34	8	4
1:A:83:ILE:HG13	1:A:102:LEU:HD11	0.45	1.87	10	2
1:A:15:GLU:OE2	1:A:40:SER:HB2	0.45	2.11	11	1
1:A:13:VAL:HG22	1:A:24:ILE:CD1	0.45	2.41	16	1
1:A:115:VAL:O	1:A:116:LEU:C	0.45	2.55	6	2
1:A:60:ASP:OD2	1:A:63:LEU:HB2	0.45	2.12	3	1
1:A:61:VAL:C	1:A:66:GLU:HA	0.45	2.32	7	1
1:A:14:VAL:CG1	1:A:40:SER:HA	0.45	2.35	19	2
1:A:45:ALA:HB1	1:A:69:TYR:CE1	0.45	2.46	9	1
1:A:69:TYR:O	1:A:73:ASP:OD2	0.45	2.35	20	3
1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:HD1	0.45	2.08	13	2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:19:MET:CG	1:A:20:ILE:N	0.45	2.79	16	1
1:A:100:ILE:HG13	1:A:101:PRO:CD	0.45	2.41	19	1
1:A:81:PRO:HA	1:A:95:THR:OG1	0.45	2.11	1	4
1:A:24:ILE:CG1	1:A:36:ALA:HB1	0.45	2.42	2	1
1:A:45:ALA:HA	1:A:48:ILE:CD1	0.45	2.37	3	1
1:A:10:ARG:O	1:A:55:ASP:N	0.45	2.41	7	1
1:A:8:ARG:CB	1:A:34:GLU:OE1	0.45	2.65	7	1
1:A:104:THR:O	1:A:105:LYS:HB2	0.45	2.13	19	3
1:A:102:LEU:C	1:A:102:LEU:HD12	0.45	2.31	19	1
1:A:83:ILE:CG2	1:A:101:PRO:HG2	0.45	2.40	20	1
1:A:58:ILE:C	1:A:59:ILE:HG13	0.44	2.32	1	4
1:A:90:SER:CB	1:A:93:LEU:HD12	0.44	2.42	2	1
1:A:88:TYR:OH	1:A:91:LYS:HB3	0.44	2.12	4	1
1:A:109:ASP:O	1:A:113:GLU:HB2	0.44	2.12	8	1
1:A:19:MET:SD	1:A:19:MET:N	0.44	2.90	11	1
1:A:22:MET:O	1:A:22:MET:SD	0.44	2.75	12	1
1:A:15:GLU:HA	1:A:60:ASP:OD2	0.44	2.11	12	1
1:A:16:ASP:CG	1:A:64:ASP:HB2	0.44	2.33	15	1
1:A:54:PHE:O	1:A:55:ASP:HB3	0.44	2.12	20	1
1:A:60:ASP:O	1:A:68:SER:OG	0.44	2.34	20	1
1:A:60:ASP:O	1:A:68:SER:HB3	0.44	2.12	1	3
1:A:91:LYS:O	1:A:92:GLY:C	0.44	2.53	2	1
1:A:69:TYR:HB2	1:A:70:PRO:HD2	0.44	1.89	7	2
1:A:28:LEU:HD22	1:A:32:GLY:H	0.44	1.72	8	1
1:A:61:VAL:HA	1:A:66:GLU:HB2	0.44	1.89	9	1
1:A:82:PHE:O	1:A:83:ILE:HG12	0.44	2.12	15	1
1:A:105:LYS:CG	1:A:110:SER:CB	0.44	2.95	6	1
1:A:63:LEU:O	1:A:64:ASP:HB3	0.44	2.12	2	5
1:A:83:ILE:HG13	1:A:100:ILE:CG1	0.44	2.42	4	1
1:A:112:LEU:O	1:A:113:GLU:C	0.44	2.56	17	3
1:A:9:LEU:HD22	1:A:55:ASP:OD1	0.44	2.12	8	1
1:A:66:GLU:O	1:A:66:GLU:CD	0.44	2.55	8	1
1:A:99:ASN:O	1:A:100:ILE:CD1	0.44	2.54	9	1
1:A:82:PHE:O	1:A:83:ILE:CD1	0.44	2.53	10	1
1:A:47:ASP:CG	1:A:48:ILE:N	0.44	2.70	13	1
1:A:101:PRO:HG2	1:A:114:ALA:O	0.44	2.12	19	1
1:A:103:LEU:CD2	1:A:110:SER:OG	0.44	2.55	19	1
1:A:10:ARG:O	1:A:55:ASP:OD2	0.44	2.35	20	1
1:A:54:PHE:O	1:A:55:ASP:HB2	0.44	2.10	11	3
1:A:56:ILE:HG22	1:A:58:ILE:HD12	0.44	1.87	15	3
1:A:104:THR:O	1:A:105:LYS:CB	0.44	2.66	5	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:GLU:HB2	1:A:20:ILE:CD1	0.44	2.43	5	1
1:A:94:ASP:O	1:A:95:THR:OG1	0.44	2.35	5	1
1:A:23:LEU:CG	1:A:107:PHE:CE1	0.44	3.00	7	1
1:A:79:ASN:OD1	1:A:93:LEU:HA	0.44	2.12	7	1
1:A:60:ASP:OD2	1:A:63:LEU:CB	0.44	2.66	8	1
1:A:102:LEU:HD23	1:A:102:LEU:C	0.44	2.33	12	1
1:A:34:GLU:C	1:A:35:VAL:HG23	0.44	2.32	16	2
1:A:58:ILE:C	1:A:59:ILE:HD12	0.44	2.32	20	1
1:A:108:LEU:C	1:A:110:SER:N	0.44	2.68	11	5
1:A:94:ASP:C	1:A:94:ASP:OD1	0.44	2.56	8	1
1:A:88:TYR:C	1:A:90:SER:N	0.44	2.69	10	1
1:A:100:ILE:O	1:A:102:LEU:CD2	0.44	2.66	12	1
1:A:13:VAL:HG12	1:A:58:ILE:CG1	0.44	2.42	14	1
1:A:74:ILE:O	1:A:77:GLU:HG3	0.44	2.13	18	1
1:A:90:SER:O	1:A:91:LYS:HG3	0.44	2.12	19	1
1:A:45:ALA:HB2	1:A:69:TYR:CZ	0.44	2.47	1	3
1:A:59:ILE:HB	1:A:84:PHE:CE1	0.44	2.48	17	2
1:A:84:PHE:O	1:A:102:LEU:HG	0.44	2.13	2	1
1:A:112:LEU:C	1:A:116:LEU:CD2	0.44	2.86	3	1
1:A:61:VAL:CA	1:A:68:SER:HB3	0.44	2.42	7	1
1:A:15:GLU:OE2	1:A:63:LEU:CD2	0.44	2.65	9	1
1:A:88:TYR:O	1:A:89:GLY:C	0.44	2.56	10	1
1:A:51:LYS:O	1:A:52:GLY:C	0.44	2.56	6	5
1:A:13:VAL:CG2	1:A:24:ILE:CD1	0.44	2.88	14	1
1:A:16:ASP:C	1:A:16:ASP:OD1	0.44	2.56	18	1
1:A:9:LEU:HB3	1:A:55:ASP:OD2	0.44	2.11	19	1
1:A:55:ASP:C	1:A:56:ILE:CG1	0.44	2.86	2	1
1:A:20:ILE:CG2	1:A:39:ALA:H	0.44	2.26	16	4
1:A:80:VAL:O	1:A:95:THR:CB	0.44	2.66	3	1
1:A:23:LEU:CD1	1:A:107:PHE:CD1	0.44	2.95	5	1
1:A:80:VAL:HG23	1:A:81:PRO:CD	0.44	2.42	5	2
1:A:61:VAL:C	1:A:66:GLU:HB3	0.44	2.33	9	1
1:A:108:LEU:CD2	1:A:108:LEU:N	0.44	2.81	6	1
1:A:20:ILE:HG12	1:A:20:ILE:O	0.44	2.12	6	1
1:A:61:VAL:CB	1:A:68:SER:OG	0.44	2.65	1	1
1:A:51:LYS:HE3	1:A:53:GLN:CG	0.44	2.42	8	1
1:A:21:ALA:C	1:A:23:LEU:N	0.44	2.71	19	4
1:A:91:LYS:O	1:A:91:LYS:HG3	0.44	2.11	10	1
1:A:15:GLU:HA	1:A:40:SER:HB3	0.44	1.90	11	1
1:A:24:ILE:HD11	1:A:36:ALA:CB	0.44	2.42	12	1
1:A:82:PHE:O	1:A:97:TYR:CG	0.44	2.70	14	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:GLY:O	1:A:103:LEU:HB3	0.44	2.13	16	1
1:A:30:GLU:CA	1:A:30:GLU:OE1	0.44	2.65	1	1
1:A:15:GLU:HG3	1:A:16:ASP:N	0.44	2.28	18	2
1:A:95:THR:O	1:A:97:TYR:N	0.44	2.51	5	1
1:A:10:ARG:HD2	1:A:35:VAL:O	0.44	2.13	7	1
1:A:113:GLU:N	1:A:113:GLU:OE1	0.44	2.51	13	1
1:A:42:MET:O	1:A:46:LEU:HB2	0.44	2.13	17	1
1:A:93:LEU:CD2	1:A:93:LEU:O	0.44	2.65	18	1
1:A:13:VAL:O	1:A:20:ILE:CD1	0.43	2.66	4	1
1:A:100:ILE:N	1:A:102:LEU:CD2	0.43	2.81	7	1
1:A:101:PRO:HG3	1:A:114:ALA:CB	0.43	2.43	10	1
1:A:104:THR:O	1:A:110:SER:OG	0.43	2.36	13	2
1:A:17:GLU:O	1:A:18:SER:C	0.43	2.56	15	1
1:A:74:ILE:O	1:A:77:GLU:HB3	0.43	2.13	15	1
1:A:15:GLU:HB2	1:A:60:ASP:CB	0.43	2.43	1	1
1:A:14:VAL:C	1:A:20:ILE:HD13	0.43	2.32	20	2
1:A:74:ILE:C	1:A:76:ALA:N	0.43	2.71	16	4
1:A:74:ILE:O	1:A:75:LEU:C	0.43	2.56	16	5
1:A:105:LYS:HG3	1:A:106:PRO:HD2	0.43	1.87	5	1
1:A:44:GLU:N	1:A:44:GLU:OE1	0.43	2.51	7	1
1:A:63:LEU:C	1:A:64:ASP:OD1	0.43	2.56	7	1
1:A:80:VAL:O	1:A:95:THR:HB	0.43	2.14	7	1
1:A:116:LEU:CD2	1:A:116:LEU:N	0.43	2.80	9	1
1:A:85:ALA:C	1:A:86:THR:HG22	0.43	2.34	16	1
1:A:89:GLY:O	1:A:90:SER:OG	0.43	2.35	16	1
1:A:91:LYS:O	1:A:91:LYS:CG	0.43	2.65	16	1
1:A:48:ILE:O	1:A:54:PHE:CZ	0.43	2.70	20	1
1:A:15:GLU:HG3	1:A:16:ASP:CG	0.43	2.34	1	1
1:A:14:VAL:O	1:A:59:ILE:HA	0.43	2.13	15	7
1:A:30:GLU:C	1:A:30:GLU:OE1	0.43	2.57	3	1
1:A:10:ARG:O	1:A:55:ASP:HB3	0.43	2.13	4	5
1:A:77:GLU:OE1	1:A:77:GLU:O	0.43	2.36	4	1
1:A:80:VAL:HG23	1:A:81:PRO:N	0.43	2.29	5	2
1:A:106:PRO:HB2	1:A:107:PHE:CE2	0.43	2.48	8	1
1:A:51:LYS:HD2	1:A:51:LYS:N	0.43	2.27	16	1
1:A:45:ALA:O	1:A:49:ALA:N	0.43	2.51	18	1
1:A:61:VAL:O	1:A:66:GLU:HB2	0.43	2.12	5	2
1:A:109:ASP:OD2	1:A:113:GLU:OE2	0.43	2.37	2	2
1:A:16:ASP:O	1:A:17:GLU:CG	0.43	2.66	3	1
1:A:56:ILE:HG23	1:A:83:ILE:HG22	0.43	1.88	20	2
1:A:98:SER:O	1:A:100:ILE:HG13	0.43	2.13	5	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:20:ILE:HA	1:A:23:LEU:HD13	0.43	1.89	7	1
1:A:53:GLN:CG	1:A:54:PHE:N	0.43	2.80	7	1
1:A:16:ASP:OD2	1:A:64:ASP:CG	0.43	2.57	20	1
1:A:11:VAL:O	1:A:36:ALA:HA	0.43	2.14	2	1
1:A:63:LEU:O	1:A:67:PRO:HG3	0.43	2.12	20	3
1:A:99:ASN:O	1:A:100:ILE:HG13	0.43	2.13	7	1
1:A:28:LEU:CD2	1:A:32:GLY:O	0.43	2.55	7	1
1:A:23:LEU:CA	1:A:26:ASP:OD1	0.43	2.67	9	1
1:A:15:GLU:HG2	1:A:60:ASP:O	0.43	2.14	10	1
1:A:109:ASP:O	1:A:113:GLU:HG2	0.43	2.13	16	1
1:A:60:ASP:O	1:A:65:GLY:HA3	0.43	2.14	16	1
1:A:65:GLY:O	1:A:68:SER:N	0.43	2.51	16	1
1:A:65:GLY:C	1:A:67:PRO:HD2	0.43	2.32	19	1
1:A:95:THR:HG23	1:A:97:TYR:H	0.43	1.74	1	1
1:A:58:ILE:O	1:A:59:ILE:HG12	0.43	2.13	2	2
1:A:26:ASP:O	1:A:29:CYS:HB3	0.43	2.14	5	1
1:A:89:GLY:O	1:A:90:SER:HB2	0.43	2.13	5	3
1:A:60:ASP:O	1:A:68:SER:CB	0.43	2.67	8	1
1:A:8:ARG:O	1:A:10:ARG:HD3	0.43	2.13	17	1
1:A:46:LEU:O	1:A:50:ARG:HG2	0.43	2.14	18	2
1:A:60:ASP:O	1:A:65:GLY:C	0.43	2.57	19	1
1:A:60:ASP:HB2	1:A:65:GLY:HA3	0.43	1.89	19	1
1:A:105:LYS:CG	1:A:110:SER:HB2	0.43	2.44	6	1
1:A:91:LYS:C	1:A:93:LEU:N	0.43	2.72	3	2
1:A:61:VAL:HA	1:A:68:SER:HB2	0.43	1.89	3	2
1:A:88:TYR:CZ	1:A:91:LYS:HB3	0.43	2.48	4	1
1:A:34:GLU:O	1:A:35:VAL:HB	0.43	2.13	18	5
1:A:62:ASN:CB	1:A:87:GLY:HA3	0.43	2.44	9	1
1:A:15:GLU:OE2	1:A:40:SER:CB	0.43	2.66	11	1
1:A:33:HIS:O	1:A:34:GLU:O	0.43	2.37	11	1
1:A:90:SER:HB3	1:A:93:LEU:CD1	0.43	2.44	14	1
1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:HD13	0.43	2.28	17	1
1:A:100:ILE:HG12	1:A:101:PRO:N	0.43	2.26	18	1
1:A:46:LEU:O	1:A:49:ALA:N	0.43	2.50	19	1
1:A:85:ALA:C	1:A:103:LEU:O	0.43	2.57	19	1
1:A:112:LEU:CD1	1:A:113:GLU:N	0.43	2.65	20	1
1:A:61:VAL:HG12	1:A:86:THR:HG23	0.43	1.90	4	1
1:A:102:LEU:CD1	1:A:102:LEU:C	0.43	2.87	8	1
1:A:100:ILE:O	1:A:102:LEU:CD1	0.43	2.67	11	1
1:A:68:SER:CB	1:A:72:ALA:HB3	0.43	2.44	12	1
1:A:94:ASP:O	1:A:94:ASP:CG	0.43	2.56	14	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:13:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HD12	0.43	1.89	16	1
1:A:82:PHE:CE2	1:A:93:LEU:HD11	0.43	2.49	17	1
1:A:12:LEU:CD1	1:A:48:ILE:HB	0.43	2.43	3	2
1:A:60:ASP:O	1:A:68:SER:HB2	0.43	2.14	6	3
1:A:74:ILE:O	1:A:77:GLU:HB2	0.43	2.13	7	1
1:A:14:VAL:C	1:A:15:GLU:HG3	0.43	2.34	8	1
1:A:8:ARG:CB	1:A:34:GLU:HB2	0.43	2.44	9	1
1:A:27:THR:HG21	1:A:107:PHE:CD2	0.43	2.48	10	1
1:A:60:ASP:CG	1:A:60:ASP:O	0.43	2.56	12	1
1:A:88:TYR:CE1	1:A:91:LYS:HA	0.43	2.48	13	1
1:A:61:VAL:O	1:A:62:ASN:OD1	0.43	2.37	15	1
1:A:106:PRO:O	1:A:107:PHE:C	0.43	2.57	20	1
1:A:103:LEU:HD23	1:A:104:THR:N	0.43	2.28	5	1
1:A:61:VAL:CA	1:A:66:GLU:CB	0.43	2.97	9	1
1:A:14:VAL:HG22	1:A:59:ILE:HG23	0.43	1.90	12	1
1:A:96:ARG:CD	1:A:96:ARG:N	0.43	2.82	13	1
1:A:15:GLU:HB2	1:A:20:ILE:HB	0.43	1.90	20	1
1:A:84:PHE:CE2	1:A:86:THR:HG23	0.42	2.49	1	1
1:A:105:LYS:HB2	1:A:110:SER:CB	0.42	2.44	3	1
1:A:59:ILE:CG2	1:A:72:ALA:CB	0.42	2.94	8	1
1:A:16:ASP:HB3	1:A:20:ILE:CB	0.42	2.44	11	1
1:A:56:ILE:CD1	1:A:82:PHE:C	0.42	2.87	12	1
1:A:16:ASP:O	1:A:19:MET:N	0.42	2.47	13	1
1:A:51:LYS:C	1:A:53:GLN:N	0.42	2.72	15	2
1:A:9:LEU:CD2	1:A:55:ASP:OD2	0.42	2.61	19	1
1:A:12:LEU:HD22	1:A:48:ILE:HG21	0.42	1.90	4	1
1:A:95:THR:O	1:A:96:ARG:C	0.42	2.57	5	1
1:A:23:LEU:HG	1:A:107:PHE:CE1	0.42	2.49	7	1
1:A:38:THR:CG2	1:A:38:THR:O	0.42	2.67	7	1
1:A:69:TYR:HB2	1:A:71:VAL:CG2	0.42	2.43	16	3
1:A:102:LEU:HD12	1:A:102:LEU:H	0.42	1.74	11	1
1:A:94:ASP:OD1	1:A:94:ASP:O	0.42	2.37	11	1
1:A:18:SER:HA	1:A:21:ALA:HB2	0.42	1.91	15	1
1:A:101:PRO:C	1:A:102:LEU:CD1	0.42	2.81	16	1
1:A:12:LEU:CD1	1:A:54:PHE:CB	0.42	2.95	18	1
1:A:80:VAL:HG13	1:A:81:PRO:N	0.42	2.29	4	4
1:A:27:THR:OG1	1:A:31:LEU:CD1	0.42	2.67	2	1
1:A:74:ILE:O	1:A:76:ALA:N	0.42	2.52	16	2
1:A:11:VAL:HG13	1:A:36:ALA:CB	0.42	2.44	7	1
1:A:61:VAL:C	1:A:66:GLU:HG3	0.42	2.35	9	1
1:A:65:GLY:C	1:A:67:PRO:HD3	0.42	2.35	10	1

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:16:ASP:CG	1:A:19:MET:CB	0.42	2.88	12	1
1:A:47:ASP:HA	1:A:50:ARG:NE	0.42	2.29	14	1
1:A:61:VAL:HA	1:A:68:SER:CB	0.42	2.44	17	3
1:A:20:ILE:O	1:A:23:LEU:HB3	0.42	2.14	15	2
1:A:14:VAL:HG23	1:A:59:ILE:HG23	0.42	1.91	16	1
1:A:91:LYS:HG3	1:A:91:LYS:O	0.42	2.12	16	1
1:A:61:VAL:HA	1:A:68:SER:OG	0.42	2.15	17	2
1:A:100:ILE:HG12	1:A:101:PRO:CD	0.42	2.44	18	1
1:A:10:ARG:HG3	1:A:10:ARG:NH1	0.42	2.29	18	1
1:A:86:THR:C	1:A:88:TYR:N	0.42	2.72	20	1
1:A:110:SER:O	1:A:114:ALA:CB	0.42	2.68	6	1
1:A:40:SER:HB2	1:A:67:PRO:HB2	0.42	1.90	6	1
1:A:12:LEU:HA	1:A:37:ALA:HB3	0.42	1.90	1	1
1:A:89:GLY:O	1:A:90:SER:HB3	0.42	2.14	1	2
1:A:8:ARG:HB3	1:A:34:GLU:CB	0.42	2.45	2	1
1:A:48:ILE:C	1:A:51:LYS:HG2	0.42	2.35	2	1
1:A:15:GLU:O	1:A:67:PRO:HG2	0.42	2.15	3	1
1:A:88:TYR:CD2	1:A:88:TYR:O	0.42	2.73	10	1
1:A:111:GLU:O	1:A:114:ALA:N	0.42	2.52	11	1
1:A:9:LEU:HD12	1:A:55:ASP:OD1	0.42	2.15	12	1
1:A:21:ALA:CB	1:A:38:THR:OG1	0.42	2.68	14	1
1:A:50:ARG:H	1:A:50:ARG:CD	0.42	2.28	14	1
1:A:79:ASN:N	1:A:79:ASN:OD1	0.42	2.52	18	2
1:A:67:PRO:C	1:A:69:TYR:N	0.42	2.73	18	1
1:A:60:ASP:OD2	1:A:67:PRO:HG2	0.42	2.15	6	1
1:A:15:GLU:OE1	1:A:60:ASP:OD1	0.42	2.38	2	1
1:A:16:ASP:O	1:A:17:GLU:HB2	0.42	2.13	9	1
1:A:79:ASN:CB	1:A:94:ASP:O	0.42	2.67	9	1
1:A:103:LEU:HD11	1:A:105:LYS:HB2	0.42	1.91	14	1
1:A:46:LEU:HD11	1:A:50:ARG:CZ	0.42	2.45	16	1
1:A:31:LEU:CD1	1:A:31:LEU:N	0.42	2.82	19	1
1:A:82:PHE:HA	1:A:97:TYR:CE2	0.42	2.49	20	1
1:A:93:LEU:CD1	1:A:102:LEU:HD23	0.42	2.44	6	1
1:A:65:GLY:C	1:A:66:GLU:HG2	0.42	2.35	5	2
1:A:45:ALA:O	1:A:48:ILE:HG12	0.42	2.15	7	2
1:A:45:ALA:O	1:A:49:ALA:CB	0.42	2.67	3	1
1:A:56:ILE:HD13	1:A:83:ILE:CB	0.42	2.43	11	3
1:A:44:GLU:O	1:A:47:ASP:HB2	0.42	2.13	5	3
1:A:12:LEU:HD13	1:A:48:ILE:HA	0.42	1.90	5	1
1:A:83:ILE:CG1	1:A:101:PRO:HG2	0.42	2.44	7	1
1:A:15:GLU:OE1	1:A:64:ASP:HB3	0.42	2.14	10	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:ILE:O	1:A:102:LEU:HG	0.42	2.13	11	1
1:A:109:ASP:N	1:A:109:ASP:OD1	0.42	2.52	12	1
1:A:47:ASP:O	1:A:51:LYS:HD3	0.42	2.14	16	2
1:A:105:LYS:O	1:A:107:PHE:N	0.42	2.51	20	1
1:A:28:LEU:CG	1:A:33:HIS:O	0.42	2.68	3	1
1:A:95:THR:C	1:A:97:TYR:N	0.42	2.72	5	1
1:A:16:ASP:OD1	1:A:64:ASP:CG	0.42	2.57	20	2
1:A:107:PHE:O	1:A:110:SER:HB2	0.42	2.13	2	1
1:A:13:VAL:CG1	1:A:58:ILE:HG21	0.42	2.45	2	1
1:A:106:PRO:O	1:A:107:PHE:CD2	0.42	2.72	4	1
1:A:84:PHE:CG	1:A:85:ALA:N	0.42	2.88	4	2
1:A:84:PHE:H	1:A:102:LEU:HB2	0.42	1.75	5	1
1:A:14:VAL:O	1:A:15:GLU:HG3	0.42	2.14	8	1
1:A:103:LEU:HD21	1:A:113:GLU:OE1	0.42	2.15	9	1
1:A:16:ASP:CG	1:A:19:MET:HB3	0.42	2.35	12	2
1:A:46:LEU:CD2	1:A:46:LEU:C	0.42	2.84	11	1
1:A:24:ILE:O	1:A:28:LEU:HB2	0.42	2.14	13	1
1:A:109:ASP:O	1:A:113:GLU:HG3	0.42	2.15	15	1
1:A:95:THR:HG23	1:A:97:TYR:HB2	0.42	1.90	19	2
1:A:106:PRO:O	1:A:107:PHE:HB3	0.42	2.14	1	1
1:A:12:LEU:CD1	1:A:48:ILE:HA	0.42	2.45	5	1
1:A:89:GLY:HA2	1:A:103:LEU:C	0.42	2.35	9	1
1:A:55:ASP:O	1:A:56:ILE:HD13	0.42	2.15	12	1
1:A:70:PRO:O	1:A:74:ILE:HG12	0.42	2.15	17	1
1:A:12:LEU:CD2	1:A:54:PHE:CB	0.42	2.86	19	2
1:A:9:LEU:HG	1:A:55:ASP:OD1	0.42	2.15	19	1
1:A:105:LYS:HE2	1:A:113:GLU:CG	0.42	2.45	2	1
1:A:105:LYS:HB2	1:A:106:PRO:HD2	0.42	1.92	7	1
1:A:85:ALA:CB	1:A:103:LEU:C	0.42	2.85	8	1
1:A:76:ALA:HB1	1:A:91:LYS:HE2	0.42	1.92	8	1
1:A:16:ASP:OD1	1:A:67:PRO:CG	0.42	2.67	9	1
1:A:16:ASP:OD2	1:A:67:PRO:HG3	0.42	2.15	9	1
1:A:109:ASP:HA	1:A:112:LEU:HG	0.42	1.92	15	1
1:A:18:SER:O	1:A:20:ILE:N	0.42	2.53	15	1
1:A:74:ILE:HA	1:A:77:GLU:HB2	0.42	1.92	15	1
1:A:8:ARG:C	1:A:9:LEU:HD22	0.42	2.34	15	1
1:A:23:LEU:O	1:A:26:ASP:OD1	0.42	2.37	18	1
1:A:112:LEU:O	1:A:116:LEU:HB3	0.42	2.15	20	1
1:A:61:VAL:O	1:A:66:GLU:HB3	0.42	2.15	6	1
1:A:51:LYS:CG	1:A:54:PHE:HB3	0.41	2.45	5	1
1:A:111:GLU:O	1:A:112:LEU:C	0.41	2.58	11	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:89:GLY:C	1:A:90:SER:OG	0.41	2.57	16	2
1:A:28:LEU:HG	1:A:32:GLY:O	0.41	2.15	15	1
1:A:79:ASN:HB2	1:A:94:ASP:OD1	0.41	2.15	15	1
1:A:102:LEU:O	1:A:102:LEU:HD23	0.41	2.15	20	1
1:A:112:LEU:CD1	1:A:112:LEU:C	0.41	2.88	20	1
1:A:56:ILE:HG22	1:A:58:ILE:HD11	0.41	1.92	6	1
1:A:105:LYS:O	1:A:105:LYS:CG	0.41	2.68	4	1
1:A:15:GLU:HG2	1:A:60:ASP:HB3	0.41	1.91	4	1
1:A:25:GLU:HA	1:A:28:LEU:HD12	0.41	1.92	7	1
1:A:16:ASP:OD2	1:A:19:MET:HB3	0.41	2.15	12	1
1:A:8:ARG:HB3	1:A:34:GLU:N	0.41	2.30	12	1
1:A:27:THR:HB	1:A:31:LEU:HD12	0.41	1.92	13	1
1:A:15:GLU:O	1:A:16:ASP:CG	0.41	2.58	15	1
1:A:15:GLU:CB	1:A:20:ILE:HB	0.41	2.45	20	1
1:A:26:ASP:O	1:A:29:CYS:HB2	0.41	2.14	6	2
1:A:90:SER:HB3	1:A:93:LEU:HD11	0.41	1.91	14	1
1:A:99:ASN:O	1:A:100:ILE:O	0.41	2.37	19	1
1:A:101:PRO:HG2	1:A:114:ALA:C	0.41	2.36	19	1
1:A:15:GLU:OE2	1:A:60:ASP:HB2	0.41	2.16	20	1
1:A:15:GLU:OE1	1:A:67:PRO:C	0.41	2.58	11	1
1:A:14:VAL:HG13	1:A:37:ALA:CB	0.41	2.44	14	1
1:A:82:PHE:N	1:A:97:TYR:CD1	0.41	2.88	14	1
1:A:59:ILE:HG12	1:A:84:PHE:CE2	0.41	2.50	16	1
1:A:102:LEU:O	1:A:102:LEU:CD2	0.41	2.69	1	2
1:A:66:GLU:HG3	1:A:66:GLU:O	0.41	2.16	1	1
1:A:79:ASN:HB2	1:A:94:ASP:CG	0.41	2.36	1	1
1:A:91:LYS:O	1:A:91:LYS:HD2	0.41	2.15	1	1
1:A:107:PHE:O	1:A:108:LEU:HB3	0.41	2.15	3	1
1:A:51:LYS:HG2	1:A:54:PHE:HB3	0.41	1.92	5	1
1:A:79:ASN:ND2	1:A:93:LEU:HB2	0.41	2.30	5	1
1:A:19:MET:O	1:A:23:LEU:HB2	0.41	2.15	8	1
1:A:11:VAL:O	1:A:11:VAL:CG2	0.41	2.65	11	1
1:A:70:PRO:O	1:A:74:ILE:HG13	0.41	2.16	12	2
1:A:40:SER:OG	1:A:67:PRO:HB2	0.41	2.16	15	1
1:A:51:LYS:HE3	1:A:53:GLN:CB	0.41	2.46	18	1
1:A:51:LYS:HD2	1:A:53:GLN:N	0.41	2.31	2	1
1:A:75:LEU:C	1:A:79:ASN:ND2	0.41	2.74	7	1
1:A:108:LEU:HD23	1:A:109:ASP:H	0.41	1.74	8	1
1:A:54:PHE:N	1:A:54:PHE:CD1	0.41	2.89	9	1
1:A:61:VAL:HA	1:A:68:SER:HB3	0.41	1.92	11	1
1:A:90:SER:CB	1:A:103:LEU:HD12	0.41	2.46	12	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:105:LYS:HD2	1:A:105:LYS:N	0.41	2.28	15	1
1:A:104:THR:O	1:A:104:THR:CG2	0.41	2.69	17	1
1:A:106:PRO:N	1:A:109:ASP:HB3	0.41	2.31	19	1
1:A:112:LEU:O	1:A:116:LEU:CD2	0.41	2.69	3	1
1:A:86:THR:O	1:A:104:THR:HA	0.41	2.16	4	1
1:A:59:ILE:CG2	1:A:68:SER:HB2	0.41	2.39	5	1
1:A:20:ILE:O	1:A:20:ILE:HG13	0.41	2.16	8	1
1:A:24:ILE:HG21	1:A:38:THR:HG23	0.41	1.91	8	1
1:A:111:GLU:CG	1:A:112:LEU:HD23	0.41	2.40	13	1
1:A:79:ASN:ND2	1:A:93:LEU:CB	0.41	2.84	13	1
1:A:12:LEU:CD2	1:A:54:PHE:HB2	0.41	2.46	16	1
1:A:55:ASP:C	1:A:56:ILE:HG12	0.41	2.36	18	1
1:A:52:GLY:O	1:A:53:GLN:HB2	0.41	2.16	20	1
1:A:85:ALA:C	1:A:86:THR:CG2	0.41	2.89	1	1
1:A:82:PHE:CD1	1:A:83:ILE:N	0.41	2.88	7	2
1:A:13:VAL:CB	1:A:20:ILE:HD11	0.41	2.46	2	1
1:A:48:ILE:O	1:A:51:LYS:HG2	0.41	2.15	2	1
1:A:54:PHE:CE2	1:A:56:ILE:C	0.41	2.94	5	1
1:A:93:LEU:CD2	1:A:102:LEU:HD12	0.41	2.44	12	1
1:A:22:MET:O	1:A:26:ASP:OD2	0.41	2.39	16	1
1:A:108:LEU:C	1:A:112:LEU:CD2	0.41	2.89	18	1
1:A:58:ILE:HG23	1:A:85:ALA:HB3	0.41	1.92	1	1
1:A:51:LYS:HD3	1:A:54:PHE:N	0.41	2.30	2	1
1:A:14:VAL:O	1:A:15:GLU:HG2	0.41	2.16	3	1
1:A:15:GLU:HB3	1:A:20:ILE:CG2	0.41	2.46	5	1
1:A:28:LEU:CD2	1:A:32:GLY:C	0.41	2.90	5	1
1:A:83:ILE:HD11	1:A:101:PRO:HG2	0.41	1.93	8	1
1:A:61:VAL:C	1:A:66:GLU:CB	0.41	2.89	9	1
1:A:77:GLU:CG	1:A:78:ARG:N	0.41	2.84	12	1
1:A:88:TYR:CE1	1:A:91:LYS:CA	0.41	3.03	13	1
1:A:102:LEU:HD13	1:A:102:LEU:HA	0.41	1.78	13	1
1:A:109:ASP:O	1:A:110:SER:C	0.41	2.58	14	1
1:A:16:ASP:OD2	1:A:63:LEU:HB3	0.41	2.16	14	1
1:A:105:LYS:HG2	1:A:105:LYS:O	0.41	2.15	15	1
1:A:18:SER:O	1:A:19:MET:C	0.41	2.56	15	1
1:A:77:GLU:CD	1:A:77:GLU:C	0.41	2.80	15	1
1:A:82:PHE:CE1	1:A:95:THR:HB	0.41	2.51	16	1
1:A:15:GLU:OE1	1:A:60:ASP:CG	0.41	2.59	16	1
1:A:59:ILE:CB	1:A:84:PHE:CE2	0.41	3.04	16	1
1:A:15:GLU:HG3	1:A:60:ASP:HB3	0.41	1.93	17	1
1:A:20:ILE:HG13	1:A:20:ILE:O	0.41	2.14	18	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:ALA:CA	1:A:48:ILE:HG23	0.41	2.46	18	1
1:A:97:TYR:C	1:A:100:ILE:CG2	0.41	2.89	18	1
1:A:83:ILE:CD1	1:A:100:ILE:CD1	0.41	2.83	19	1
1:A:100:ILE:HG13	1:A:101:PRO:HD2	0.41	1.90	19	1
1:A:61:VAL:O	1:A:66:GLU:HG2	0.41	2.16	20	1
1:A:105:LYS:CG	1:A:110:SER:OG	0.41	2.69	6	1
1:A:23:LEU:C	1:A:23:LEU:HD22	0.41	2.28	3	1
1:A:68:SER:CB	1:A:72:ALA:CB	0.41	2.98	12	1
1:A:41:ARG:HG2	1:A:44:GLU:OE2	0.41	2.16	14	1
1:A:82:PHE:O	1:A:97:TYR:CD1	0.41	2.74	14	1
1:A:109:ASP:O	1:A:113:GLU:HB3	0.41	2.16	16	1
1:A:22:MET:O	1:A:22:MET:HG2	0.41	2.16	17	1
1:A:102:LEU:O	1:A:102:LEU:CD1	0.41	2.53	19	1
1:A:23:LEU:O	1:A:27:THR:CG2	0.41	2.69	19	1
1:A:28:LEU:O	1:A:32:GLY:N	0.41	2.54	19	1
1:A:105:LYS:CG	1:A:106:PRO:CD	0.40	2.98	5	1
1:A:83:ILE:HD11	1:A:97:TYR:CD2	0.40	2.51	7	1
1:A:19:MET:O	1:A:23:LEU:CB	0.40	2.69	9	1
1:A:105:LYS:HB2	1:A:109:ASP:HB2	0.40	1.92	19	1
1:A:104:THR:C	1:A:105:LYS:HG3	0.40	2.36	1	1
1:A:16:ASP:CG	1:A:17:GLU:N	0.40	2.75	4	1
1:A:17:GLU:HA	1:A:39:ALA:HB2	0.40	1.93	8	1
1:A:8:ARG:HG3	1:A:34:GLU:OE1	0.40	2.16	9	1
1:A:94:ASP:OD1	1:A:94:ASP:C	0.40	2.58	10	1
1:A:95:THR:CG2	1:A:97:TYR:H	0.40	2.28	11	1
1:A:82:PHE:O	1:A:83:ILE:HG13	0.40	2.17	12	1
1:A:17:GLU:O	1:A:19:MET:N	0.40	2.54	15	1
1:A:28:LEU:HD23	1:A:29:CYS:CA	0.40	2.47	18	1
1:A:53:GLN:O	1:A:55:ASP:N	0.40	2.53	20	1
1:A:56:ILE:HG12	1:A:97:TYR:CE2	0.40	2.52	20	1
1:A:60:ASP:C	1:A:68:SER:OG	0.40	2.60	20	1
1:A:101:PRO:HD3	1:A:113:GLU:O	0.40	2.16	6	1
1:A:15:GLU:HB2	1:A:60:ASP:HB2	0.40	1.94	1	1
1:A:10:ARG:NE	1:A:34:GLU:OE1	0.40	2.55	2	1
1:A:51:LYS:HG2	1:A:53:GLN:HB2	0.40	1.93	4	1
1:A:61:VAL:HG12	1:A:86:THR:HG21	0.40	1.88	4	1
1:A:55:ASP:HA	1:A:97:TYR:HH	0.40	1.76	4	1
1:A:26:ASP:OD2	1:A:107:PHE:CE1	0.40	2.75	8	1
1:A:15:GLU:O	1:A:15:GLU:HG3	0.40	2.16	10	1
1:A:15:GLU:HG3	1:A:59:ILE:HA	0.40	1.93	11	1
1:A:16:ASP:O	1:A:19:MET:HG2	0.40	2.16	11	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:GLU:HG3	1:A:59:ILE:C	0.40	2.36	11	1
1:A:47:ASP:O	1:A:51:LYS:CD	0.40	2.69	16	1
1:A:61:VAL:CB	1:A:68:SER:HB2	0.40	2.45	17	1
1:A:80:VAL:O	1:A:82:PHE:HD1	0.40	1.98	17	1
1:A:86:THR:HG22	1:A:89:GLY:O	0.40	2.14	18	1
1:A:43:GLN:O	1:A:46:LEU:N	0.40	2.54	3	1
1:A:107:PHE:HA	1:A:110:SER:CB	0.40	2.46	5	1
1:A:82:PHE:CE1	1:A:93:LEU:HD11	0.40	2.51	7	1
1:A:51:LYS:CD	1:A:53:GLN:HG2	0.40	2.47	9	1
1:A:106:PRO:HD2	1:A:110:SER:OG	0.40	2.15	11	1
1:A:18:SER:HA	1:A:21:ALA:CB	0.40	2.47	15	1
1:A:65:GLY:C	1:A:66:GLU:HG3	0.40	2.37	6	1
1:A:16:ASP:O	1:A:39:ALA:HA	0.40	2.15	2	1
1:A:61:VAL:CA	1:A:68:SER:CB	0.40	3.00	3	1
1:A:99:ASN:CA	1:A:102:LEU:CD2	0.40	3.00	4	1
1:A:34:GLU:HG3	1:A:35:VAL:HG22	0.40	1.93	9	1
1:A:102:LEU:HD12	1:A:102:LEU:N	0.40	2.29	16	1
1:A:91:LYS:HE3	1:A:91:LYS:O	0.40	2.16	16	1
1:A:75:LEU:HG	1:A:79:ASN:OD1	0.40	2.16	20	1

## 5.2 Torsion angles [i](#)

### 5.2.1 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	109/123 (89%)	67±3 (61±3%)	25±4 (23±4%)	17±2 (16±2%)	<b>0</b>   <b>4</b>
All	All	2180/2460 (89%)	1337 (61%)	502 (23%)	341 (16%)	<b>0</b>   <b>4</b>

All 44 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	82	PHE	20
1	A	69	TYR	20
1	A	100	ILE	20

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	33	HIS	17
1	A	79	ASN	17
1	A	103	LEU	16
1	A	90	SER	15
1	A	99	ASN	14
1	A	15	GLU	14
1	A	35	VAL	12
1	A	106	PRO	12
1	A	93	LEU	11
1	A	98	SER	10
1	A	17	GLU	10
1	A	91	LYS	10
1	A	54	PHE	10
1	A	80	VAL	10
1	A	21	ALA	9
1	A	108	LEU	8
1	A	104	THR	8
1	A	39	ALA	8
1	A	66	GLU	7
1	A	16	ASP	6
1	A	59	ILE	6
1	A	109	ASP	5
1	A	105	LYS	5
1	A	87	GLY	4
1	A	88	TYR	4
1	A	18	SER	3
1	A	34	GLU	3
1	A	114	ALA	3
1	A	60	ASP	3
1	A	68	SER	3
1	A	107	PHE	3
1	A	67	PRO	3
1	A	65	GLY	2
1	A	62	ASN	2
1	A	36	ALA	2
1	A	64	ASP	1
1	A	92	GLY	1
1	A	95	THR	1
1	A	53	GLN	1
1	A	102	LEU	1
1	A	111	GLU	1

### 5.2.2 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	92/105 (88%)	58±4 (63±5%)	34±4 (37±5%)	<b>1</b> <b>8</b>
All	All	1840/2100 (88%)	1167 (63%)	673 (37%)	<b>1</b> <b>8</b>

All 81 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	83	ILE	20
1	A	69	TYR	20
1	A	48	ILE	19
1	A	82	PHE	18
1	A	28	LEU	18
1	A	86	THR	17
1	A	93	LEU	17
1	A	23	LEU	16
1	A	100	ILE	16
1	A	53	GLN	14
1	A	105	LYS	14
1	A	19	MET	14
1	A	91	LYS	13
1	A	10	ARG	13
1	A	80	VAL	13
1	A	20	ILE	12
1	A	55	ASP	12
1	A	22	MET	12
1	A	108	LEU	12
1	A	103	LEU	12
1	A	99	ASN	11
1	A	78	ARG	11
1	A	27	THR	11
1	A	110	SER	11
1	A	29	CYS	10
1	A	34	GLU	10
1	A	60	ASP	10
1	A	90	SER	10
1	A	18	SER	10

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	102	LEU	10
1	A	50	ARG	10
1	A	46	LEU	9
1	A	66	GLU	9
1	A	107	PHE	9
1	A	116	LEU	9
1	A	79	ASN	9
1	A	26	ASP	8
1	A	64	ASP	8
1	A	47	ASP	8
1	A	51	LYS	8
1	A	15	GLU	8
1	A	112	LEU	8
1	A	77	GLU	8
1	A	30	GLU	8
1	A	61	VAL	7
1	A	88	TYR	7
1	A	68	SER	7
1	A	98	SER	6
1	A	9	LEU	6
1	A	8	ARG	6
1	A	111	GLU	6
1	A	44	GLU	5
1	A	109	ASP	5
1	A	71	VAL	5
1	A	38	THR	5
1	A	13	VAL	5
1	A	17	GLU	5
1	A	95	THR	4
1	A	62	ASN	4
1	A	25	GLU	4
1	A	16	ASP	4
1	A	75	LEU	4
1	A	115	VAL	4
1	A	73	ASP	4
1	A	43	GLN	4
1	A	54	PHE	4
1	A	96	ARG	4
1	A	41	ARG	4
1	A	12	LEU	3
1	A	31	LEU	3
1	A	14	VAL	3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	94	ASP	3
1	A	63	LEU	3
1	A	104	THR	3
1	A	35	VAL	2
1	A	56	ILE	2
1	A	113	GLU	2
1	A	59	ILE	2
1	A	11	VAL	1
1	A	42	MET	1
1	A	74	ILE	1

### 5.2.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

### 5.4 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

### 5.5 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

### 5.6 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

### 5.7 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

## 6 Chemical shift validation [i](#)

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 85% for the well-defined parts and 84% for the entire structure.

### 6.1 Chemical shift list 1

File name: input\_cs.cif

Chemical shift list name: *assigned\_chem\_shift\_list\_1*

#### 6.1.1 Bookkeeping [i](#)

The following table shows the results of parsing the chemical shift list and reports the number of nuclei with statistically unusual chemical shifts.

Total number of shifts	1310
Number of shifts mapped to atoms	1310
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	2

#### 6.1.2 Chemical shift referencing [i](#)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction $\pm$ precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	117	$-0.21 \pm 0.10$	None needed ( $< 0.5$ ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	110	$0.10 \pm 0.14$	None needed ( $< 0.5$ ppm)
$^{13}\text{C}'$	115	$-0.21 \pm 0.13$	None needed ( $< 0.5$ ppm)
$^{15}\text{N}$	113	$0.54 \pm 0.20$	Should be applied

#### 6.1.3 Completeness of resonance assignments [i](#)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 85%, i.e. 1115 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1307. 0 out of 22 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	$^1\text{H}$	$^{13}\text{C}$	$^{15}\text{N}$
Backbone	519/535 (97%)	208/213 (98%)	209/218 (96%)	102/104 (98%)
Sidechain	532/705 (75%)	317/407 (78%)	210/272 (77%)	5/26 (19%)

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

	<b>Total</b>	<b><sup>1</sup>H</b>	<b><sup>13</sup>C</b>	<b><sup>15</sup>N</b>
Aromatic	64/67 (96%)	34/36 (94%)	30/30 (100%)	0/1 (0%)
Overall	1115/1307 (85%)	559/656 (85%)	449/520 (86%)	107/131 (82%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 84%, i.e. 1240 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1481. 0 out of 24 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	<b>Total</b>	<b><sup>1</sup>H</b>	<b><sup>13</sup>C</b>	<b><sup>15</sup>N</b>
Backbone	575/605 (95%)	230/241 (95%)	232/246 (94%)	113/118 (96%)
Sidechain	597/802 (74%)	355/464 (77%)	236/307 (77%)	6/31 (19%)
Aromatic	68/74 (92%)	36/40 (90%)	32/32 (100%)	0/2 (0%)
Overall	1240/1481 (84%)	621/745 (83%)	500/585 (85%)	119/151 (79%)

#### 6.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

Mol	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	43	GLN	HB2	3.79	3.30 – 0.80	7.0
1	A	100	ILE	CG2	9.07	24.63 – 10.43	-6.0

#### 6.1.5 Random Coil Index (RCI) plots [i](#)

The image below reports *random coil index* values for the protein chains in the structure. The height of each bar gives a probability of a given residue to be disordered, as predicted from the available chemical shifts and the amino acid sequence. A value above 0.2 is an indication of significant predicted disorder. The colour of the bar shows whether the residue is in the well-defined core (black) or in the ill-defined residue ranges (cyan), as described in section 2 on ensemble composition.

Random coil index (RCI) for chain A:

